Kittel

Fizika trdne snovi

- Študij kristalov ter elektronov v kristalih
- Prve risbe kristala (kvartz) na Kitajskem 11 stol. p.n.š.
- Urejena, periodična struktura
- Osnovni gradniki so atomi oz. skupine atomov
- 1784 Haüy razloži empirično pravilo, da so snovni indeksi vseh ploskev kristala cela števila. Razloži z modelom 3-D periodičnih mrež
- 1912 Laue poda elementarno teorijo uklona x-žarkov na periodičnih strukturah atomov. Experiment: Friedrich and Knipping.
- 1913 W. L. Bragg določi kristalne strukture KCl, NaCl, KBr in KI s pomočjo x-žarkov

Periodične strukture atomov

(Kristal si predstavljam v obliki prostorske, periodične (ponavljajoče) strukture ~~xxxx~~ tako ki jo sestavljajo ponavljajoče se osnovne celice) - paralelepipedi. Vsak paralelepiped si sestavljen iz identične gruče atomov - baza.

Translacijski vektorji in mreža

- Osnovni translacijski vektorji: $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$;

$\vec{R}$ se nanaša na točke mreže (vozlišče)

$$(1) \qquad \vec{R}' = \vec{R} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \quad \text{za} \ \forall\, n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$$

Okolica točke $\vec{R}$ izgleda identična okolici $\vec{R}'$

Množica točk $\vec{R}'$ za vse vrednosti n_1, n_2, n_3 definira mrežo

mreža + baza = kristalna struktura

② Kittel

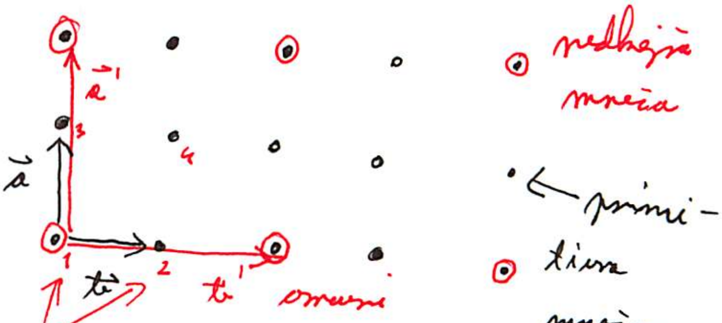
– Primitivni vektorji $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$:

Če poljubni točki $\vec{R}$ in $\vec{R}'$, iz katerih okolica atoma izgleda identična, ustrezata (1) ob ustrezni izbiri celih števil n_1, n_2, n_3.

– ob izbiri primitivnih vektorjev je gostota mrežnih točk maksimalna. Vsaka druga izbira osnovnih vektorjev vodi do mreže z manjšo gostoto

– Primitivna mreža

– Neprimitivna mreža



– Translacijske operacije na mreži

1,2,...,4 baza ob izbiri nadrejene mreže ⇔ osnovnih vektorjev

$$\vec{T} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$$

$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ primitivni transla. vektorji

– Kristalna mreža se pri poljubni translaciji $\vec{T}$ translatira sama vase.

– $\vec{T}$ poveže poljubni točki mreže

Simetrijske operacije:

Primitivni vektorji često služijo za definicijo kristalnih osi

– Točkovne operacije: a.) rotacije okoli fiksne osi

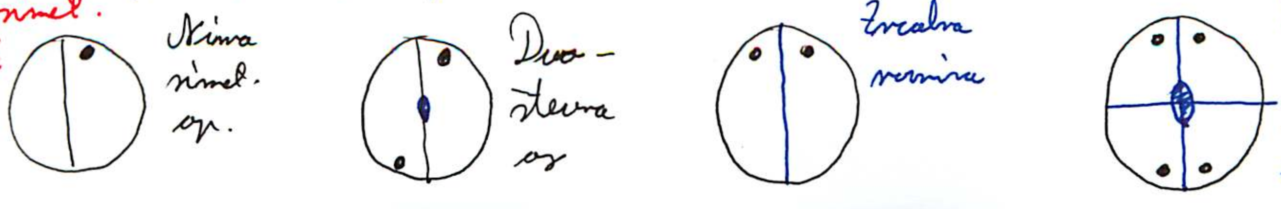
b.) zrcalne ravnine

c.) Inverzija + d.) kombinirane operacije
(nepremična)

Pogoj: – ohraniti se mora vsaj ena točka (pri točkovni operaciji)
(kristalna struktura)

– po operaciji preide mreža sama vase

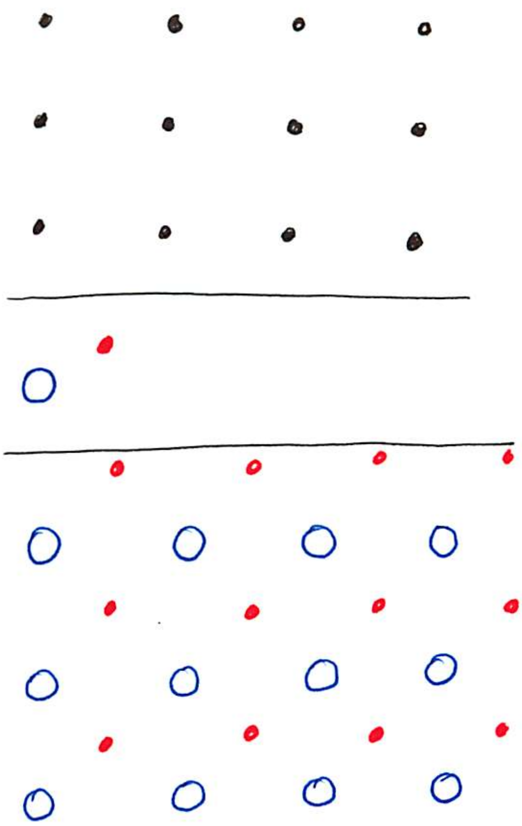
Rot. simet. operacije



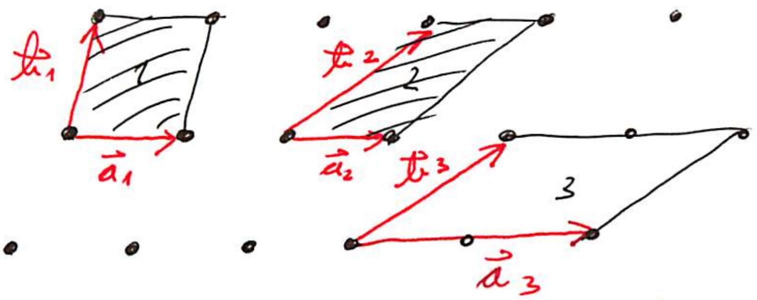
Kittel

Baza in kristalna struktura

- Primitivna mreža:
- Baza, ki vsebuje 2 atoma:
- Kristalna struktura:



Primitivna mreža, primitivna celica:

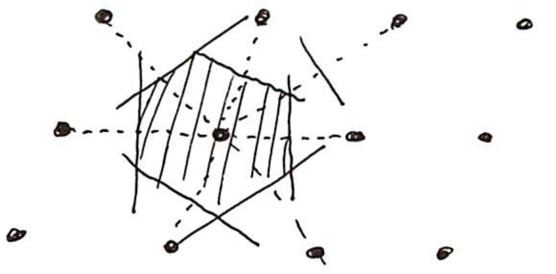


Vsi $\vec{a}_i$ in $\vec{b}_i$ so translacijski vektorji

Le $\vec{a}_1 \vec{b}_1$ in $\vec{a}_2 \vec{b}_2$ so <u>primitivni</u> transl. vektorji

- Paralelograma 1 in 2 ustrezata <u>primitivni osnovni celici</u> (POC)
- Primitivna osnovna celica predstavlja najmanjšo celico po volumnu (površini), s katero lahko preko dovoljenih translacij izpolnimo celoten volumen kristala.
- ⊕ Izbira primitivne celice ni enolična
- Vsaki primitivni osn. celici pripada natanko <u>ena</u> mrežna točka
- Število atomov v POC je enako število <u>atomov v bazi</u>

- Volumen POC: $V_c = (\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ mešani prod.
- Wigner-Seitzova primitivna celica:



Prednosti:

a.) je enolično določena

b.) odraža simetrijo kristalne mreže!

Bravaisove mreže (2d) (rešetke) (3D) – primeri:

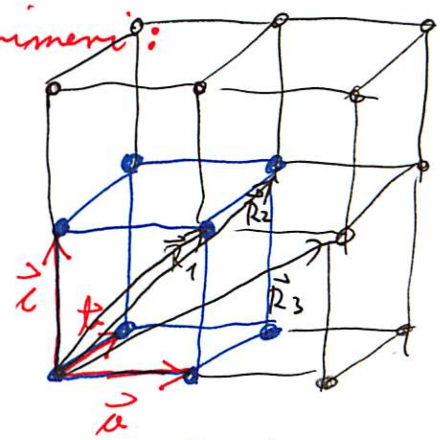
Ashcroft

$\vec{R} = n_1 \vec{a} + n_2 \vec{b} + n_3 \vec{c}$

a)

- Preprosta (simple) kubična mreža

$\vec{a} = (a,0,0)$; $\vec{b} = (0,a,0)$; $\vec{c} = (0,0,a)$



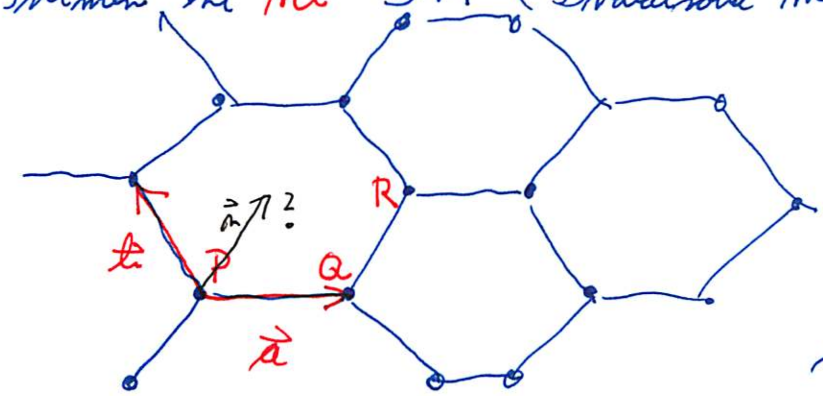
$R_1 = \vec{a} + \vec{c}$

$\vec{R}_2 = \vec{a} + \vec{b} + \vec{c}$

$\vec{R}_3 = 2\vec{a} + \vec{c}$ ....

b.)

- Primer, ki ni BM (Bravaisova mreža)



Razporeditev izgleda identično iz P in R, a drugače iz Q!

Razporeditev iz Q je za 120^0 zarotirana glede na razp. iz P

Torej: $\vec{r} = \vec{a} + \vec{b}$ ni $\in$ mreže!

c.) Telesno centrirana kubična mreža (rešetka) BCC

$\vec a = (a,0,0)$

$\vec b = (0,a,0)$

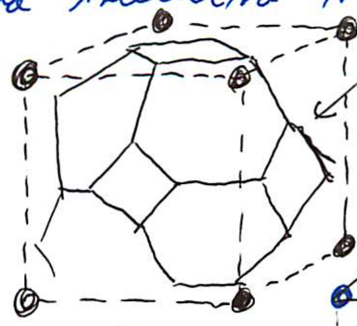
$\vec c = \frac{1}{2}(a,a,a)$

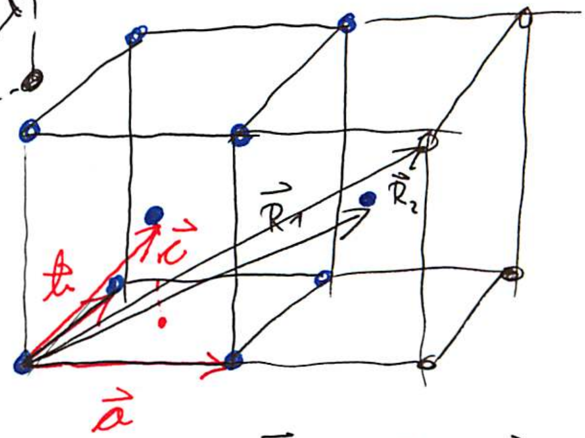
oz. simetr. kombinacija:

$\vec a = \frac{1}{2}(-a,a,a)$

$\vec b = \frac{1}{2}(a,-a,a)$

$\vec c = \frac{1}{2}(a,a,-a)$





$\vec R_1 = \vec c + \vec a$

$\vec R_2 = 2\vec c + \vec a - \vec b$

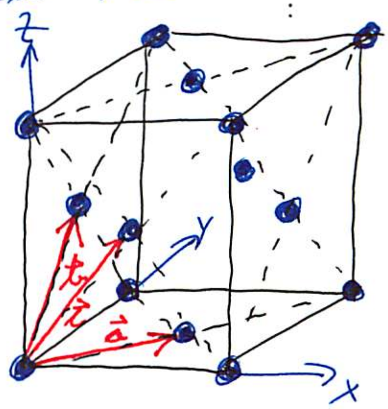
⋮

d.) Ploskovno centrirana kubična mreža FCC

$\vec a = \frac{1}{2}(a,a,0)$

$\vec b = \frac{1}{2}(0,a,a)$

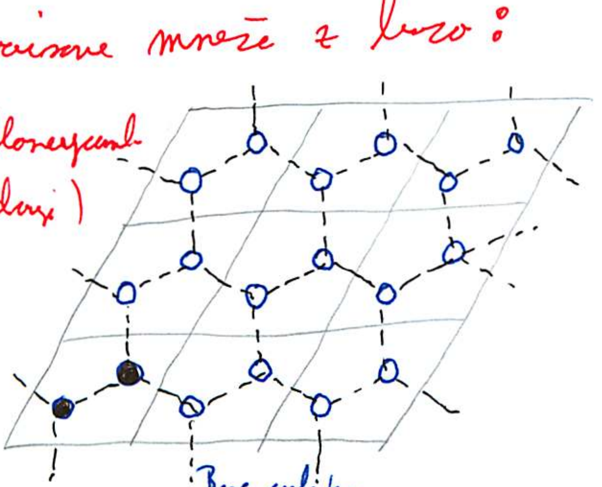
$\vec c = \frac{1}{2}(a,0,a)$



BC, FCC, BCC so primeri monoatomnih Bravaisovih mrež.

Bravaisove mreže z bazo:

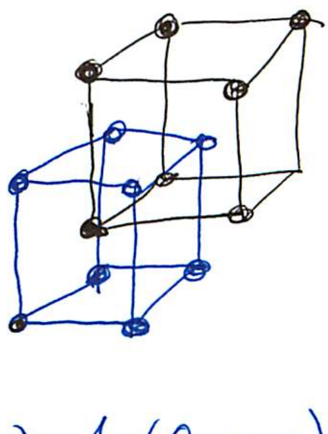
e.) Honeycomb (satovje)



Bravaisova mreža z bazo (dveh atomov)

f.) BCC = BC + baza : $\vec O$, $\frac{1}{2}(a,a,a)$

preprosta kubična mreža

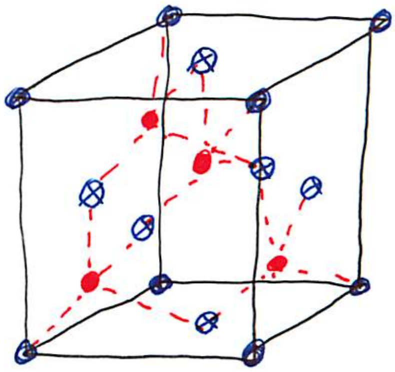


g.) FCC = BC + baza $\vec O$, $\frac{a}{2}(1,1,0)$, $\frac{1}{2}(a,0,a)$, $\frac{1}{2}(0,a,a)$

k.) Diament:

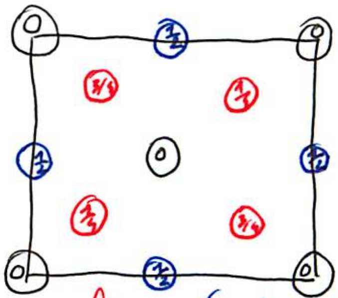
Ploskovno-centrirana rešetka (FCC)

+ Baza $\vec{0}$ in $\frac{1}{4}(a, a, a)$

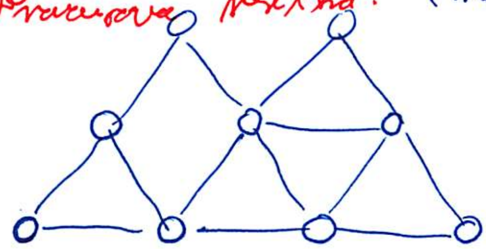


	a [10nm]
C (diamant)	3,57
Si	5,43
Ge	5,66
α-Sn (siv)	6,49

Oznake:



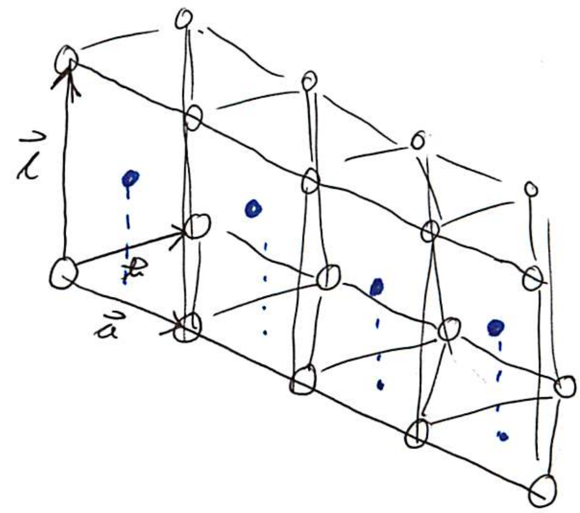
l.) Preprosta heksagonalna Bravaisova rešetka: (simple hexagonal)



$\vec{a} = (a, 0, 0)$

$\vec{b} = (\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a, 0)$

$\vec{c} = (0, 0, c)$



m.) Tesno pakirana heksagonalna: (HCP) Hexagonal closed packed

= Preprosta heksagonalna + baza: $\vec{0}$ ter $\frac{\vec{a}}{3} + \frac{\vec{b}}{3} + \frac{\vec{c}}{2}$

Tedaj: $\boxed{c = \sqrt{\frac{8}{3}}\, a}$

Recipročna mreža: (rešetka)

- sipanje na kristalu
- lastnosti funkcij s periodo (simetrijo) Bravaisove rešetke
- ohranitev gibalne količine (translacijska simetrija)

Definicija:

$\vec{R}$: točke Bravaisove rešetke; (BR)

$e^{i\vec{k}\vec{r}}$: poljubni ravni val (v splošnem nima ~~...~~ periode BR)

$\vec{K}$ pripada vektorjem recipročne rešetke če:

$$e^{i\vec{K}(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{K}\vec{r}}$$

$e^{i\vec{K}\vec{r}}$ je ravni val s periodo BR! $\Rightarrow$ $e^{i\vec{K}\vec{R}} = \underline{1}$

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b}\times\vec{c}}{(\vec{a},\vec{b},\vec{c})} \quad ; \quad \vec{a},\vec{b},\vec{c}: \text{primitivni vektorji}$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c}\times\vec{a}}{(\vec{a},\vec{b},\vec{c})}$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a}\times\vec{b}}{(\vec{a},\vec{b},\vec{c})}$$

$$\Rightarrow \quad \vec{a}_i \vec{A}_j = 2\pi\delta_{ij}; \quad i = x, y, z$$

$$\vec{a}\,\vec{A} = 2\pi; \quad \vec{a}\,\vec{B} = \vec{a}\,\vec{C} = 0 \ \ldots .$$

$$\vec{K} = k_1\vec{A} + k_2\vec{B} + k_3\vec{C}$$

$$\vec{R} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$$

$$\vec{K}\vec{R} = 2\pi(n_1k_1 + n_2k_2 + n_3k_3)$$

Primeri: 3D

BC (Preprosta kubična mreža)

$\vec a = (a,0,0)$; $\vec b = (0,a,0)$; $\vec c = (0,0,a)$

$\vec A = \frac{2\pi}{a}(1,0,0)$; $B = \frac{2\pi}{a}(0,1,0)$; $\vec C = \frac{2\pi}{a}(0,0,1)$

FCC (Ploskovno centrirana kubična mreža)

$\vec a = \frac{1}{2}(0,a,a)$; $\vec b = \frac{1}{2}(a,0,a)$; $\vec c = \frac{1}{2}(a,a,0)$

$\vec A = \frac{4\pi}{2a}(-1,1,1)$; $\vec B = \frac{2\pi}{a}(1,-1,1)$; $\vec C = \frac{2\pi}{a}(1,1,-1)$

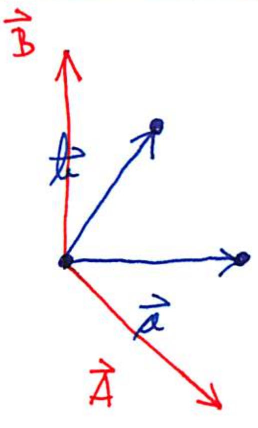
Enaka struktura kot FCC

$\vec a \vec A = 2\pi$; $\vec a \vec B = \vec a \vec C = 0$ ✓

$\vec b \vec B = 2\pi$; $\vec b \vec A = \vec b \vec C = 0$ ✓

$\vec A, \vec B, \vec C$ ustrezajo $\vec a, \vec b, \vec c$ BCC! (po obliki) in obratno!

Primer v 2D:



$\vec a = (a,0)$

$\vec b = \left(\frac{a}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}a\right)$

$\vec A = \frac{\sqrt{3}}{3}\frac{2\pi}{a}(\sqrt{3},-1)$

$\vec B = \frac{2\sqrt{3}}{3}\frac{2\pi}{a}(0,1)$

Volumen primitivne celice v recipročnem prostoru: $V_B = \frac{(2\pi)^3}{V_c}$

Wigner-Seitzova primitivna celica v recipročnem prostoru je Prva Brillouinova cona!

Prva Brillouinova cona

BCC: Rombični dodekaeder

FCC: Prisekan oktaeder

Mrežne ravnine in Millerjevi indeksi

Ashcroft - Mermin

- Mrežna ravnina: ravnina, ki vsebuje vsaj tri nekolinearne točke BR. (Zaradi translacijske simetrije, vsaka mrežna ravnina vsebuje neskončno točk BR). Točke, ki ležijo na izbrani mrežni ravnini tvorijo 2D Bravaisovo mrežo.

- Družina mrežnih ravnin: je množica vzporednih ravnin, ki so v enakih medsebojnih razmakih d. Izbrana družina mrežnih ravnin vsebuje vse točke originalne BR!

Teorem: MR

- Vsaki družini mrežnih ravnin, ki so v razmaku d, ~~takšno~~ ~~pripisana~~ pripadajo vektorji recipročne rešetke, pravokotni na MR. Najkrajši tak vektor ima dolžino $\frac{2\pi}{d}$!

- Velja tudi obratno: za $\forall \vec{K}$ obstaja družina MR, ki je $\perp$ na $\vec{K}$, v razmiku d, kjer je $\frac{2\pi}{d}$ dolžina najkrajšega vekt. recipročne mreže, ki je $\parallel \vec{K}$.

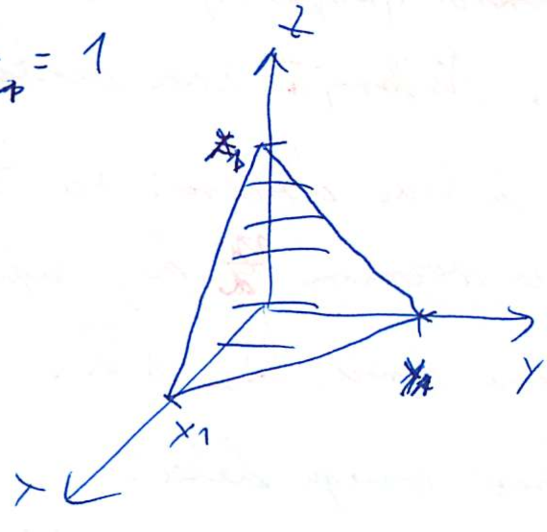
Dokaz prvega dela:

Za $\forall$ družino MR definiramo enotski vektor $\hat{n}$, ki je $\perp$ na MR.

Tedaj je $\vec{K} = \frac{2\pi}{d}\hat{n}$ vektor recipročne mreže. Namreč:

$e^{i\vec{K}\vec{r}}$ je konstanten za vse MR, ki so pravokotne na $\vec{K}$

Enačba ravnine : $\frac{x}{x_1} + \frac{y}{y_1} + \frac{z}{z_1} = 1$



in ima torej enako vrednost na ravninah, ki so v razmaku $\lambda = \frac{2\pi}{k} = d$! Ker družina MR vsebuje ~~tudi~~ vse točke BR, vsebuje tudi točko $\vec{r} = 0$. $\Rightarrow e^{i\vec{K}\vec{r}} = 1$ za $\forall\, \vec{r} = \vec{R}$. Poleg tega je K najmanjši! Za katerikoli manjši K bi dobili ravni val z λ dolžino, ki je večja od $\frac{2\pi}{k} = d$

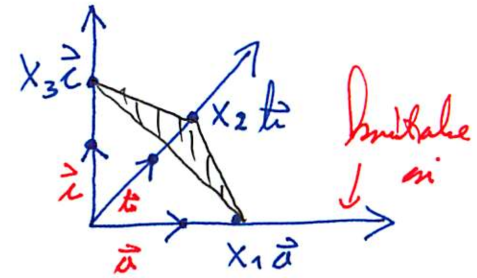
Millerjevi indeksi izbrane mrežne ravnine:

- So koordinate najkrajšega vektorja recipročne mreže, ki je pravokoten na to ravnino, v izvornem koordinatnem sistemu, ki ga določajo izbrani ~~vektorji~~ primitivni vektorji recipročne mreže

Ravnina z M.I. h, k, l je $\perp$ na $\vec{K} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$

Geometrijska interpretacija:

Enačba MR: $\vec{K}\cdot\vec{r} = D$



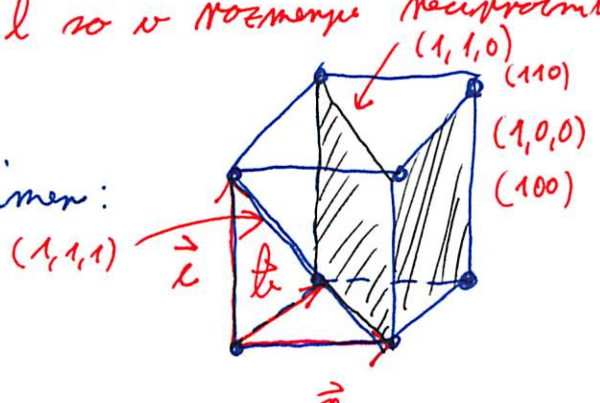
Presečišča MR s koordinatnimi osmi, ki jih določajo primitivni vektorji $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$:

$$X_1 = \frac{D}{2\pi h}\;;\; X_2 = \frac{D}{2\pi k}\;;\; X_3 = \frac{D}{2\pi l}$$

$$h : k : l = \frac{1}{X_1} : \frac{1}{X_2} : \frac{1}{X_3}$$

h, k, l so v razmerju recipročnih vrednosti presečišč MR s kristalnimi osmi.

Primer:



Ravnine: (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)
(100) (010) (001)
so ekvivalentne v sistemu s kubično simetrijo: $\{1,0,0\}$ → $\{100\}$
družina simetrijsko ekvivalentnih ravnin.

Sipanje na kristalu (X-žarki)

- Določanje strukture kristala

Tipične medatomske razdalje v kristalu: $a_0 \sim 10\,nm$

Valovna dolžina EM valovanja $\lambda \lesssim a_0 \Rightarrow$

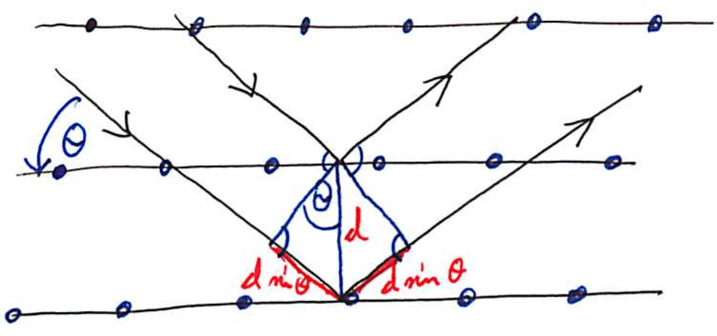
$$\hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} = 12{,}3\ KeV \ ; \ h = 6{,}62 \cdot 10^{-34}\ Js$$

Potrebujemo X- žarke

- Braggovo sipanje: 1913 W.H. in W.L. Bragg
  William Henry William Lorentz (sin)
  1915 sta si delila Nobelovo nagrado!

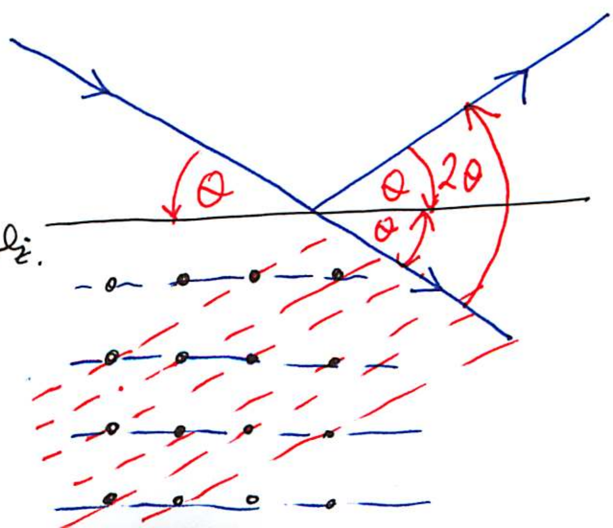
Pogoji:

- X-žarki se odbijejo z mrežnih ravnin po odbojnem zakonu (zrcalno)
- obstaja konstruktivna interferenca odbojev z sosednjih mrežnih ravnin.



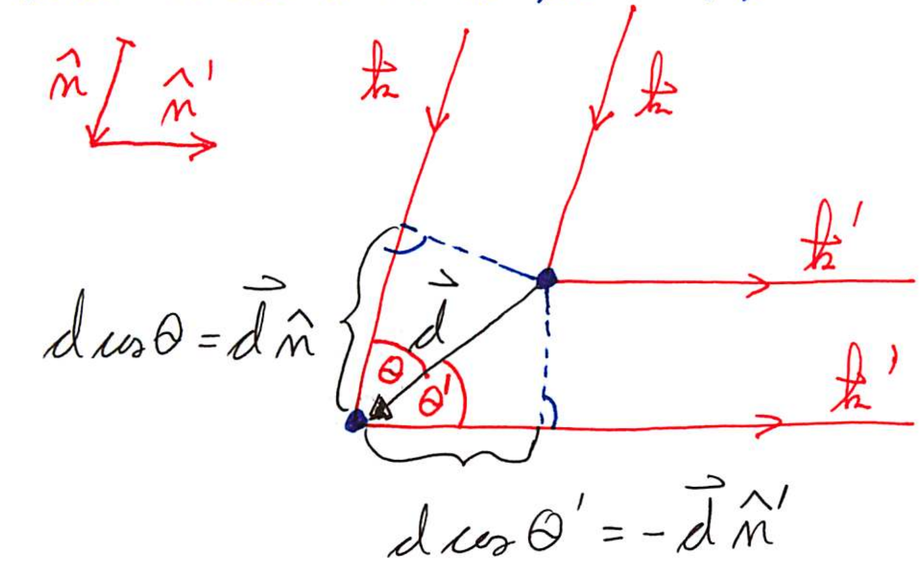
$$2 d \sin\Theta = n\lambda$$

- Problemi
  a.) Opazimo različne rede : n
  b.) X-žarki vsebujejo različne val. dolž.
  c.) Opazimo uklone z različnih MR:



– Von Laue-jeva formulacija (drug pogled)

– Predpostavi, da je kristal sestavljen iz identičnih mikroskopskih objektov (at. ali ionov), ki se nahajajo v točkah B.R. $\vec{R}$ in vsak objekt sipa neodvisno v vseh smereh.



$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\hat{n}$$

$$\vec{k}' = \frac{2\pi}{\lambda}\hat{n}'$$

$$d\cos\theta + d\cos\theta' = \vec{d}(\hat{n} - \hat{n}') = m\lambda$$

$$\vec{d}(\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m \quad (*)$$

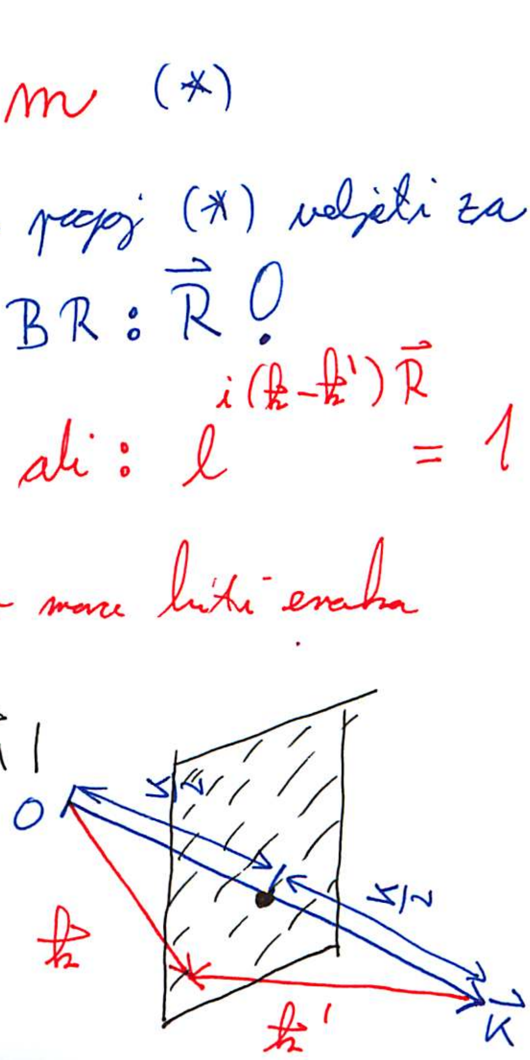
Za konstruktivno interferenco mora pogoj (*) veljati za razmike med poljubnim parom točk BR: $\vec{R}$!

$$\Rightarrow \vec{R}(\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m \quad \text{ali:} \quad e^{i(\vec{k} - \vec{k}')\vec{R}} = 1$$

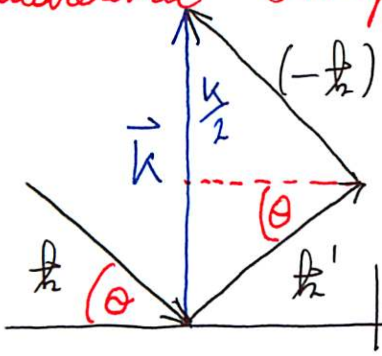
$\Rightarrow \vec{k} - \vec{k}' = \vec{K}$; razlika val. vektorjev mora biti enaka vektorju rec. mreže!

Ker velja $|\vec{k}| = |\vec{k}'| \Rightarrow k = |\vec{k} - \vec{K}|$

$\Rightarrow \vec{k}\vec{K} = \frac{1}{2}K^2$ oz.: $\vec{k}\hat{K} = \frac{1}{2}K$



Ekvivalenca Braggovega in von Laue-jevega pogoja:



$$\vec{K} = \vec{k}' - \vec{k}$$

Bragg

$$|\vec{k}\hat{n}| = k\sin\theta = \frac{K}{2} = \frac{\pi n}{d}$$

$\Downarrow$ Laue

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

$$K = \frac{2\pi n}{d} = nK_0$$

in $K_0 = \frac{2\pi}{d}$ Najkrajši vekt. rec. mr.

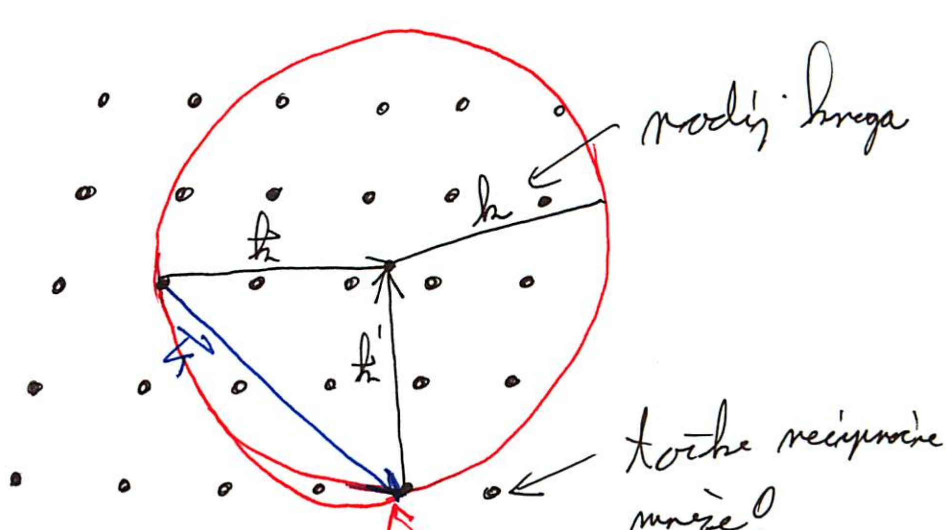
$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Laue-jev pogoj $\vec{k}' - \vec{k} = \vec{K}$ ustreza Braggovem sipanju na družini MR $\perp$ na $\vec{K}$. Red sipanja n ustreza razmerju med izbranim K $\left(\frac{K}{K_0}\right)$ ter najkrajšim K_0!

- Za izbran $\vec{k}$ v splošnem Braggov ali Laue-jev pogoj ne bo izpolnjen. Kako nadomestiti omejitev fiksne izbire $\vec{k}$?

Ewaldova konstrukcija:

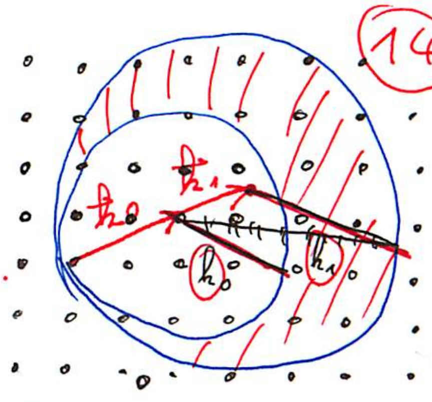
Braggov pogoj je izpolnjen le za tiste točke na krožnici, ki sovpadajo s točkami recipročne mreže.



V splošnem Braggov pogoj ni izpolnjen! Le

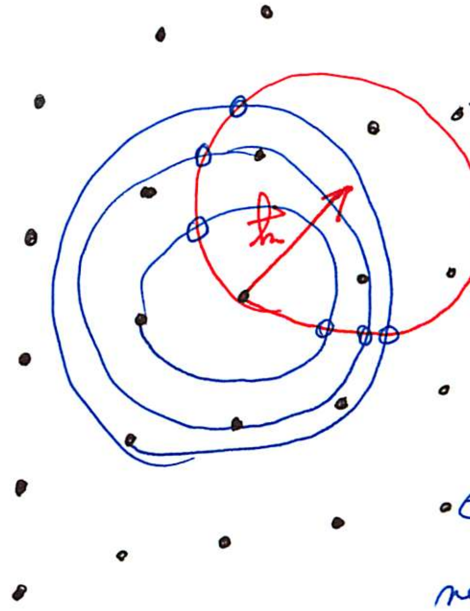
Laue-jeva metoda:

- X žarki z valovnimi dolžinami $[\lambda_1, \lambda_0] \Rightarrow \vec{k}_0 = \frac{2\pi}{\lambda_0}\hat{n}$; $\vec{k}_1 = \frac{2\pi}{\lambda_1}\hat{n}$



Metoda rotirajočega kristala:

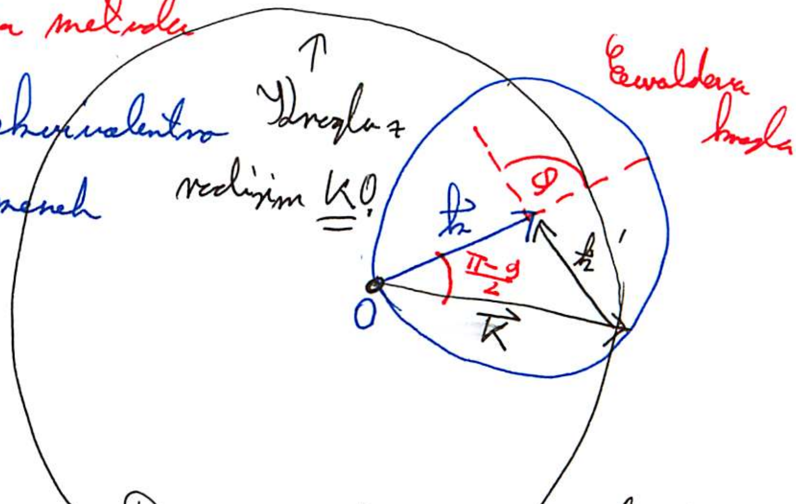
- Monokromatski X-žarki
- Rotacija okoli osi, ki je $\perp$ na ravnino, v kateri leži vektor k.
- Braggov pogoj izpolnjen, ko krogi, na katerih potujejo točke rec. mrež. sekajo Ewaldova krogla



Prašna oz. Debye-Scherrerjeva metoda

- Sipanje na prašnem vzorcu je ekvivalentno rotaciji kristala v vseh možnih smereh
- Pogoj za sipanje $\boxed{K < 2k}$

$$\boxed{K = 2k\sin\frac{\vartheta}{2}}$$



Z meritvijo ϑ pri katerem opazimo Braggovo sipanje, ugotovimo dolžine vseh K, ki so krajši od $2k$.

Geometrijski strukturni faktor

- Osnovni pogoj za sipanje: konstruktivna interferenca sipanih valov z različnih primitivnih celic.
- Vzemi sa, če je kristal sestavljen iz n-atomov v bazi (ni vedno identični atomi) Diamant?

$\vec d_1, \vec d_2, \ldots \vec d_n$: lege sipalcev v primitivni os. celici (baza)

Fazne razlike $\vec d_1 \vec K$, $\vec d_2 \vec K$, ...

Prispevki k amplitudi: $e^{i\vec K(\vec d_1+\vec d_2)}$ (teorija sipanja)

$$S_{\vec K} = \sum_{j=1}^{n} e^{i\vec K \vec d_j}$$; n: št. atomov baze

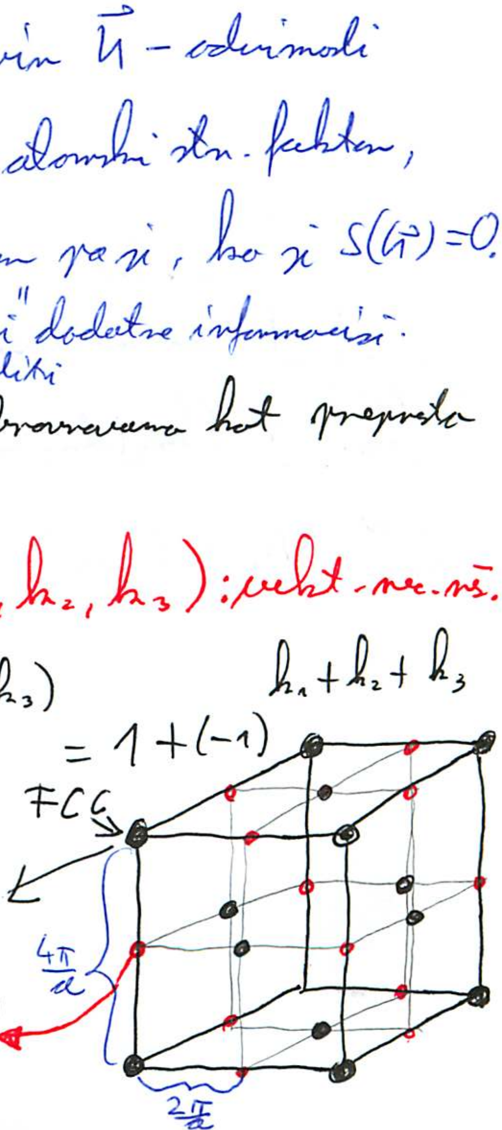
Intenziteta $\propto |S_{\vec K}|^2$; $S_{\vec K}$ predstavlja glavni vir $\vec K$-odvisnosti Braggovega sipanja. Drugi vzroki za $\vec K$ odvisnost: atomski str. faktor, ki je odvisen od notranje strukture iona. Poseben primer pa je, ko je $S(\vec K)=0$. V tem primeru niti notranja str. iona ne more "dati" (nuditi) dodatne informacije.

- BCC = SC + baza (telesno centr. kub. mrežo obravnavamo kot preprosto kubično + baza)

$\vec d_1 = 0$; $\vec d_2 = \frac{a}{2}(1,1,1)$; $\vec K = \frac{2\pi}{a}(k_1, k_2, k_3)$: vekt. rec. mr.

$$S_{\vec K} = 1 + e^{i\vec K \vec d_2} = 1 + e^{i\pi(k_1+k_2+k_3)} = 1 + (-1)^{k_1+k_2+k_3}$$

$$S_{\vec K} = \begin{cases} 2; & k_1+k_2+k_3 = 2n \\ 0; & k_1+k_2+k_3 = 2n+1 \end{cases}$$



	B. R. (sferična simet. baza)	Kristalna struktura Baza orbitalne simetrije
Št. toč. grup.	7 (kristalnih sistemov)	32 (kristalografskih toč. grup)
Št. prost. grup	14 (B. R)	230 prostorskih grup

Sipanje na večatomskem kristalu

- Atomski [illegible] faktor (form factor)

$$S_{\vec{h}} = \sum_{j=1}^{n} f_j(\vec{h})\, e^{i\vec{h}\vec{d}_j}$$

Atomski [illegible] faktor $$f_j(\vec{h}) = -\frac{1}{e}\int d\vec{r}\, e^{i\vec{h}\vec{r}} \rho_j(\vec{r})$$

$\rho_j(\vec{r})$ je elektronska gostota

Klasifikacija Bravaisovih mrež:

- Glede na vse simetrijske operacije, ki ohranjajo razdalje in kote

a.) Translacije za poljubni vektor BR $T_{\vec{R}}$

b.) Operacije, ki ohranjajo vsaj eno točko (fiksno) (Točkovne operacije)

c.) Operacije, ki so sestavljene iz a) in b) *

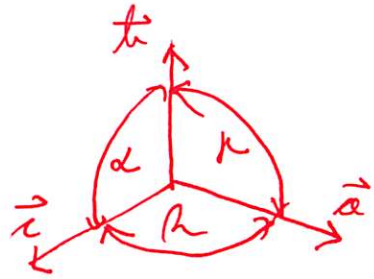
* Izjeme: vijačne osi ter drsne ravnine

Translacijske operacije in Točkovne operacije tvorijo GRUPE!

1.) Upoštevajoče le točkovne grupe

7 kristalnih sistemov * (16b)

2.) Prostorske grupe: točkovne g. + translacije ** (16b)



14 Bravaisovih mrež (mreža) Kittel

SISTEM	ŠT. MREŽ.	SIMBOL	Omejitve na kote in dolžine P.V
Triklinska	1	P	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$, $a \neq b \neq c$
Monoklinska	2	P, C	$\alpha = \gamma = 90° \neq \beta$, $a \neq b \neq c$
Ortorombska	4	P, C, I, F	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$, $a \neq b \neq c$
Tetragonalna	2	P, I	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$, $a = b \neq c$
Kubična	3	SC BCC FCC P, I, F	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$; $a = b = c$
Trigonalna	1	P	$\alpha = \beta = \gamma < 120° \neq 90°$ $a = b = c$
Heksagonalna	1	P	$\alpha = \beta = 90°$; $\gamma = 60°$ $a = b \neq c$

Točkovne operacije tvorijo grupo (množica elementov ter pripisana operacija med elementi) "produkt"!

$G = \{A, B, C, \ldots\}$ če velja:

1.) $AB = C \in G$; $AB \neq BA$ v splošnem. Če velja, je grupa Abelova

2.) $\exists E \in G$; $EA = AE = A \quad \forall A$!

3.) $\exists A^{-1} \in G$; $A^{-1}A = AA^{-1} = E$; $\forall A \; \exists$ inverzni element

4.) $A(BC) = (AB)C$ Produkt je asociativen.

Grupa je točno določena s tablico množenja:

e	a	b
a	b	e
b	e	a

Grupi sta izomorfni, če imata identično tablico množenja

e	C_3	C_3^2
C_3	C_3^2	e
C_3^2	e	e

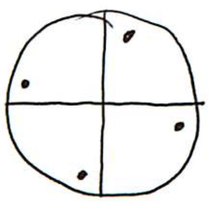
C_3: rotacija za $\frac{2\pi}{3}$

Primeri toč. grup, ki ustrezajo simetrijam B. R.

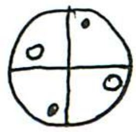
$\boxed{\text{Operacije } C_n, \sigma \text{ ter } S_n = \sigma_h C_n\,!}$

C_n; $n = 2, 3, 4, 6$ Rotacije okoli n-štetnih osi!

n elementov



C_4;

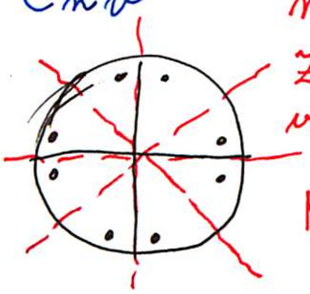


S_4, S_4^3

n – elementov!

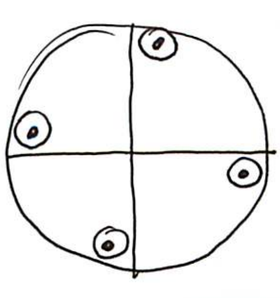
$n = 5$ ter $n > 7$ ni možno!

C_{nv}



n-št. os + zrc. ravnine, ki vsebujejo os

$N = 2n$



n-št. os + zrc. ravnin $\perp$ na os

$N = 2n$ elementov

$S_n = \sigma_h \cdot C_n$ Svoj. sim. element.

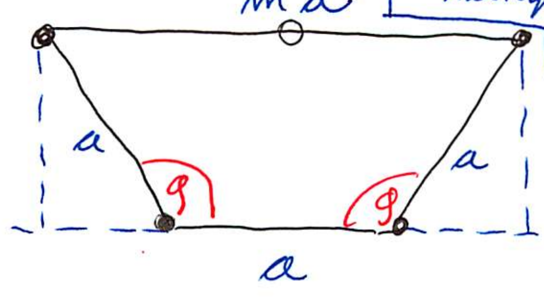
* B.R. pripadata istemu kristalnemu sistemu če sta grupi točk. operacij, ki ohranjata ~~simetrij~~ B.R., izomorfni!

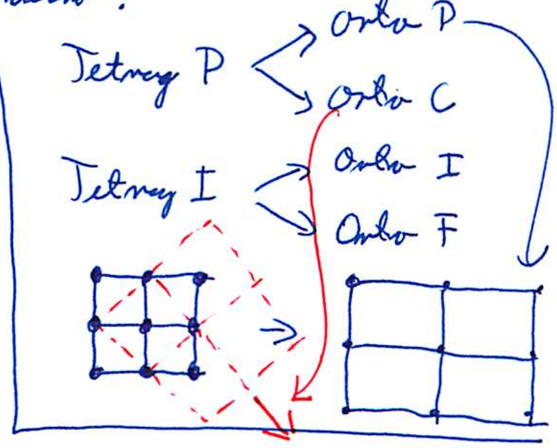
** B.R. ima (pripada) 14 različnim prostorskim grupam (točkovne operacije + translacije). Še več ne moremo uporabljati izomorfizma prost. grup za klasifikacijo. Namreč dve SC BR imata lahko različno dolga P.V. $\vec{a}$ in $\vec{a}'$, pa je vseeno ista kot SC mreža. Definiramo torej:

Dve Bravaisovi mreži sta enaki, če lahko z zvezno deformacijo ene preidemo v drugo in se pri tem ohrani število vseh simetrijskih operacij.

Iz SC pridemo v tetragonalno z spremembo (deformacijo) ene stranice (raztegnemo vzdolž $\vec{a}_3$!). Tako dobimo S tetra. ali P (primitivno). Če raztegnemo BCC ali FCC dobimo Centrirano tetragonalno!

Dovoljene rotacije:





$$ma = a + 2a\cos\varphi$$

$$\cos\varphi = \frac{m-1}{2} = -1,\ -\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{2},\ 1$$

$$\underbrace{\pi \quad \frac{2\pi}{3} \quad \frac{\pi}{2} \quad \frac{\pi}{3}}_{2 \quad 3 \quad 4 \quad 6\ -\ \text{št. osi!}},\ \begin{matrix}0\\2\pi\end{matrix}$$