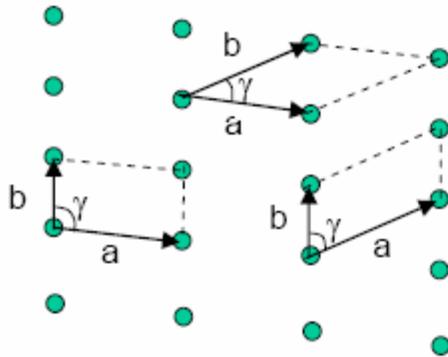


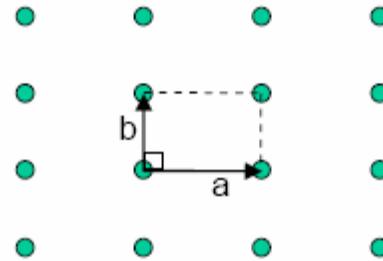
Трансляционная симметрия двумерных решеток

Двумерная решетка Браве – трансляции вида: $\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b}$, $n_{1,2} \in \mathbb{Z}$; их концы – *узлы решетки*. Векторы \mathbf{a} , \mathbf{b} – *основные векторы трансляций*.

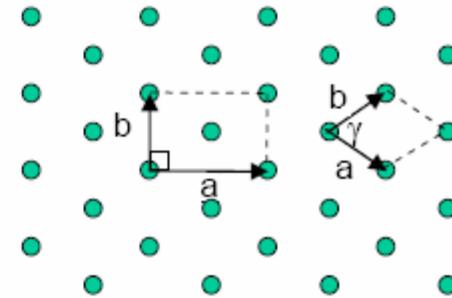
- Существует *5 типов* двумерных решеток Браве:



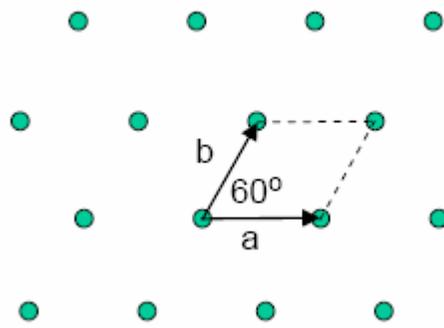
косоугольная



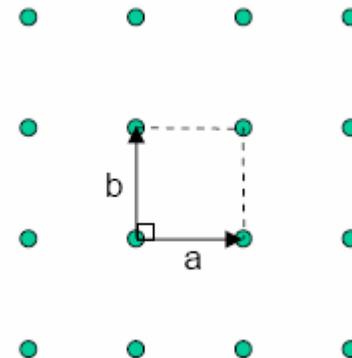
прямоугольная
примитивная



прямоугольная центрированная
(\Leftrightarrow ромбическая)

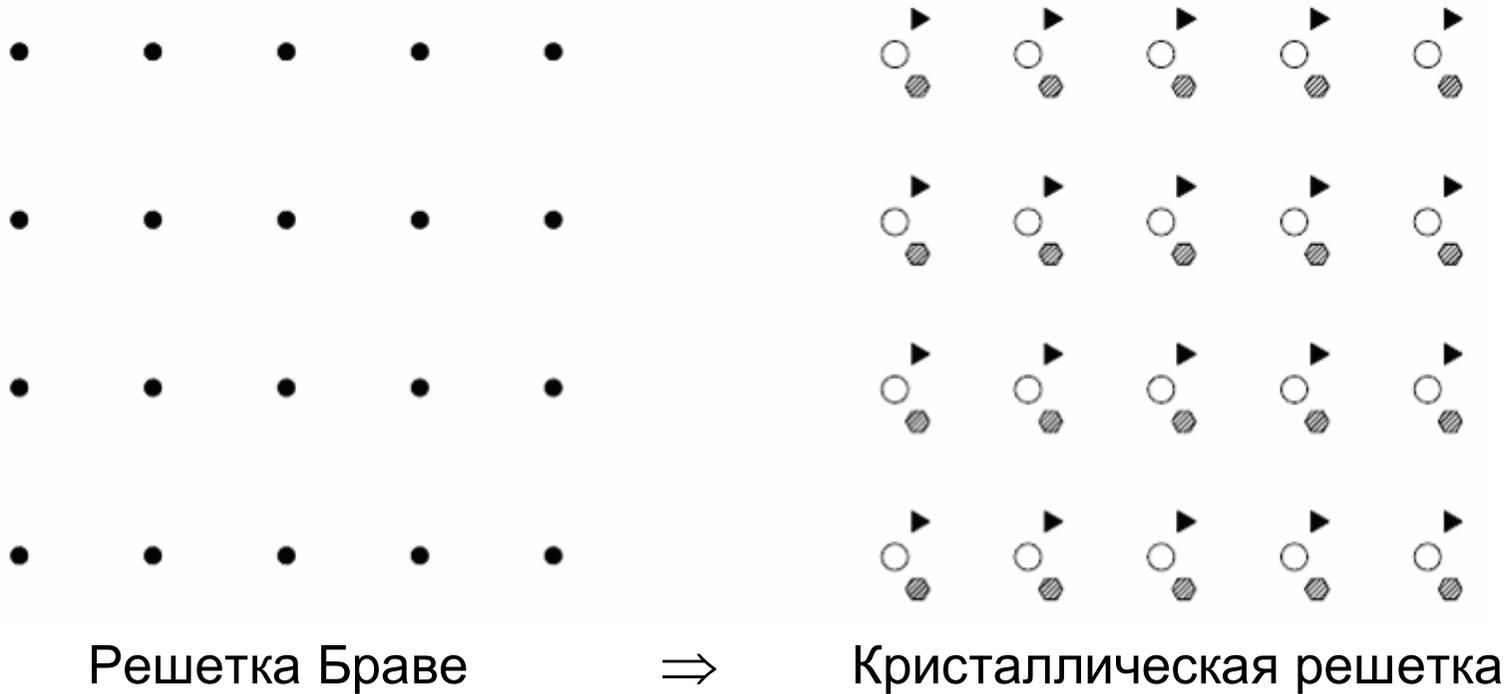


гексагональная



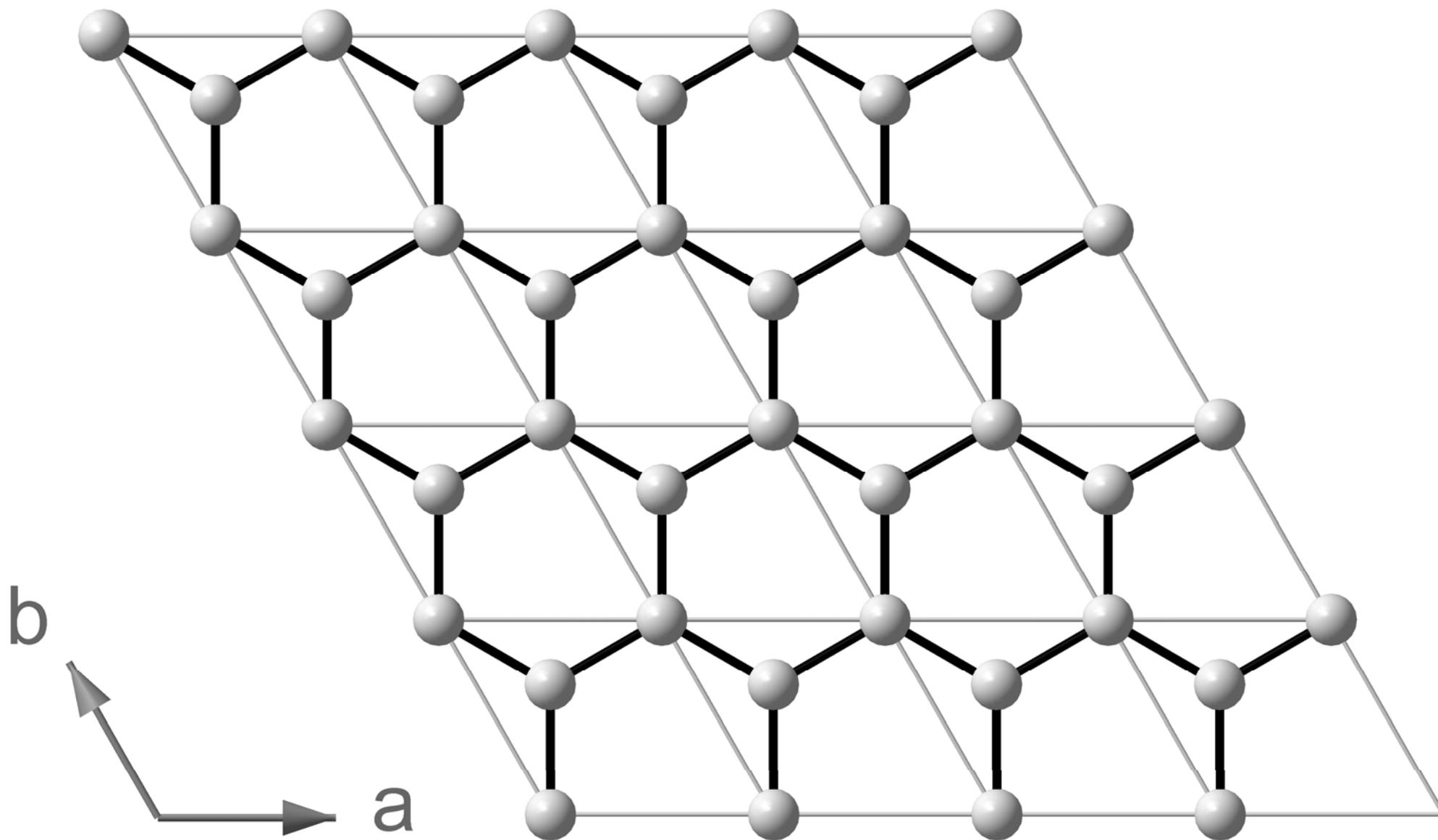
квадратная

- Решетка Браве является *математической моделью*, отражающей *трансляционную симметрию* кристалла.
- В общем случае решетка Браве не совпадает с *кристаллической решеткой*, а ее узлы не соответствуют атомам:

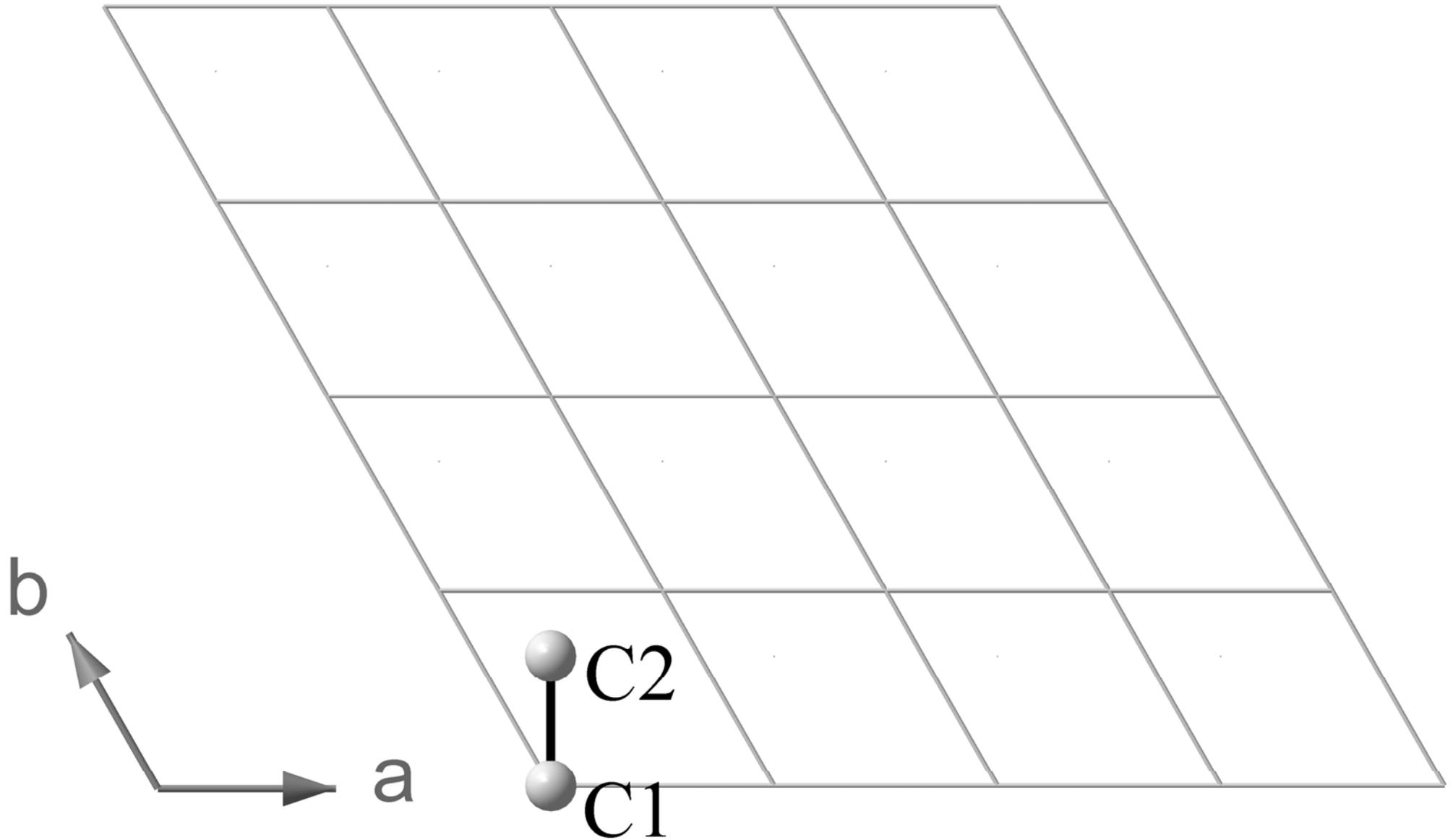


- Параллелограмм, построенный на основных векторах трансляций \mathbf{a} , \mathbf{b} , называется *элементарной ячейкой*.
- *Базис элементарной ячейки* задается положениями $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$ всех содержащихся в ней трансляционно-неэквивалентных атомов

Пример: графитовый слой, кристаллическая решетка:



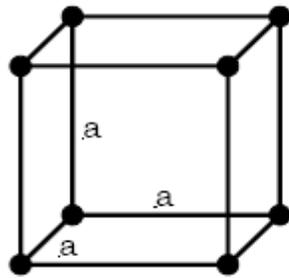
Пример: графитовый слой, решетка Браве и базис $\{\mathbf{r}_{C1}, \mathbf{r}_{C2}\}$:



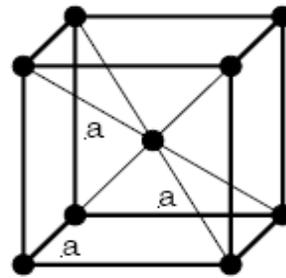
Трансляционная симметрия трехмерных решеток

Трехмерная решетка Браве – трансляции вида $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$, $n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}$, $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ – основные векторы трансляций.

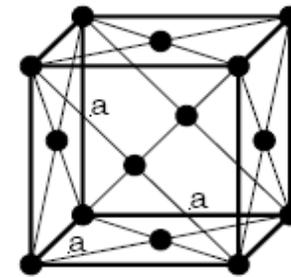
- Существует *14 типов* трехмерных решеток Браве:



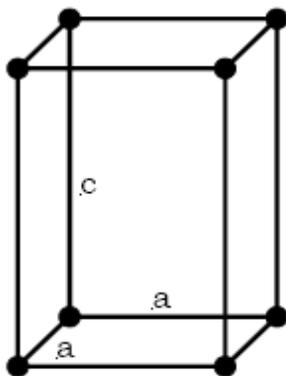
Simple
Cubic (P)



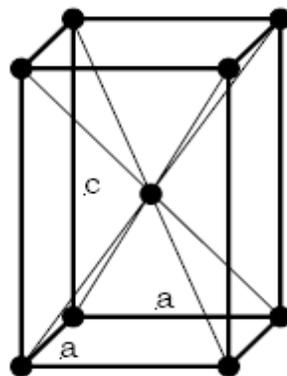
Body-Centered
Cubic (I)



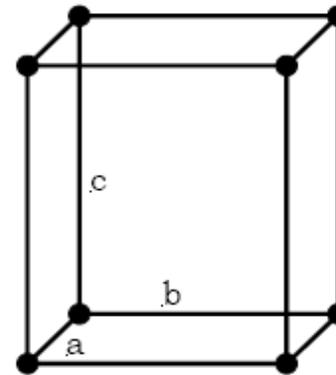
Face-Centered
Cubic (F)



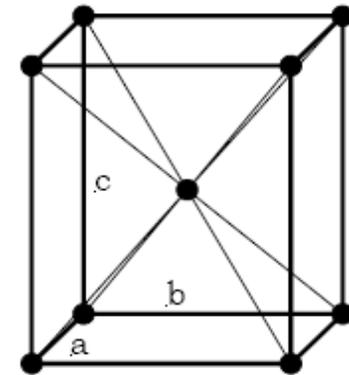
Simple
Tetragonal (P)



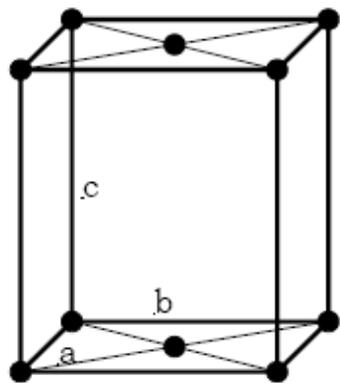
Body-Centered
Tetragonal (I)



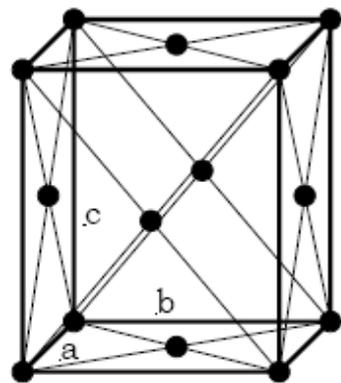
Simple
Orthorhombic
(P)



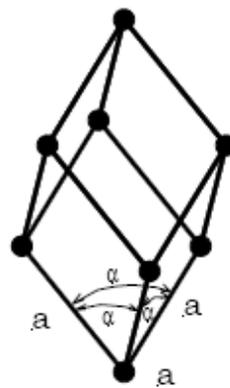
Body-Centered
Orthorhombic
(I)



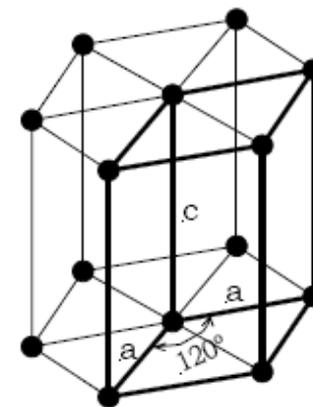
Base-Centered
Orthorhombic
(C)



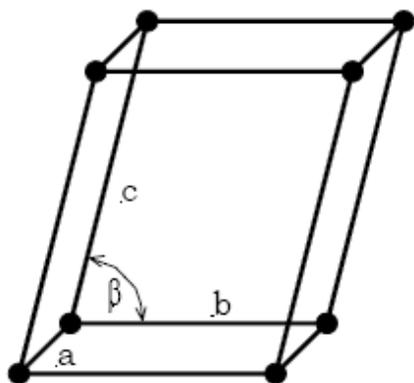
Face-Centered
Orthorhombic
(F)



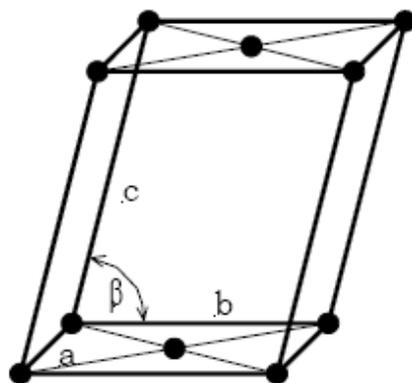
Rhombohedral
(R)



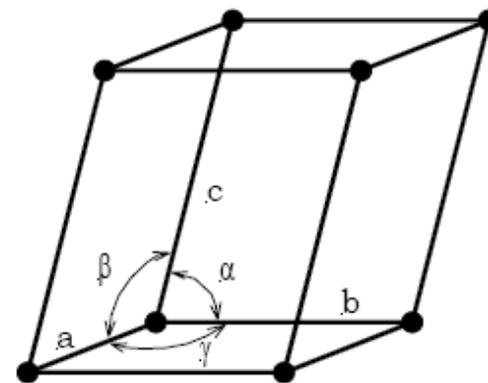
Hexagonal
(H)



Simple Monoclinic
(P)

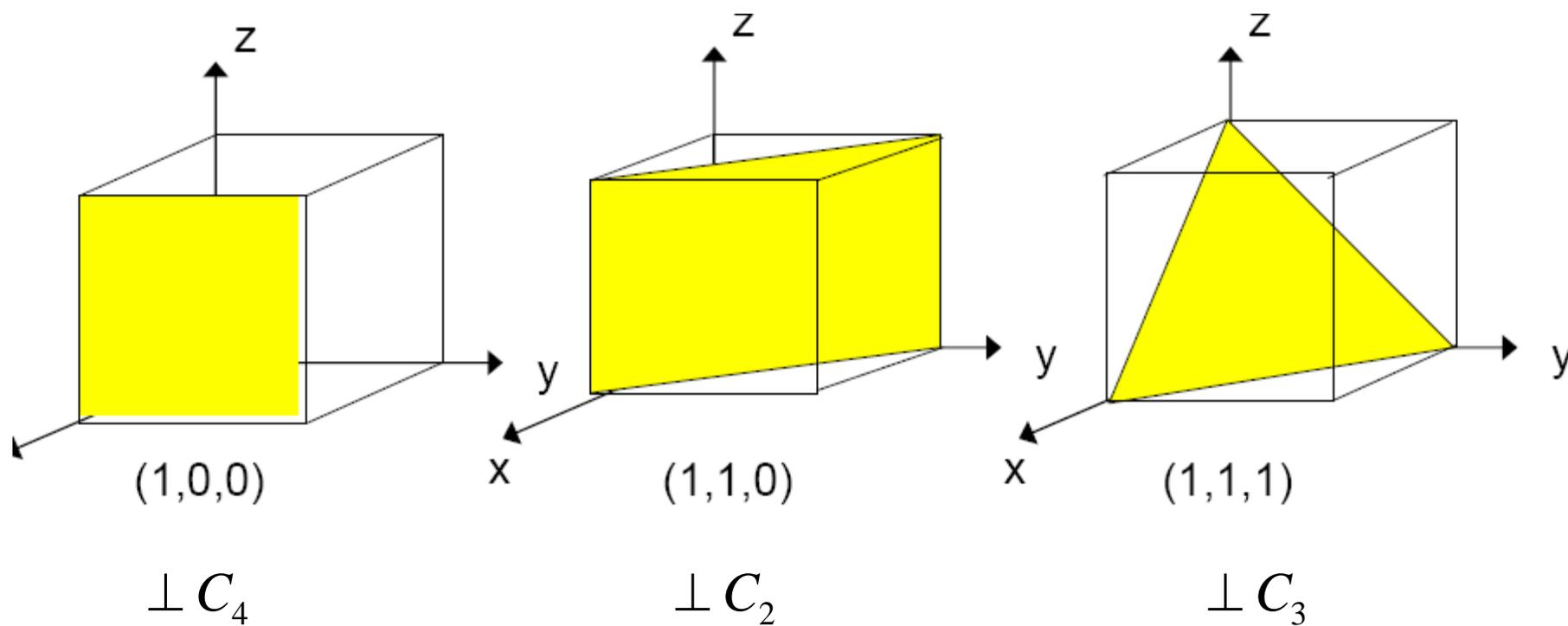


Base-Centered
Monoclinic (C)

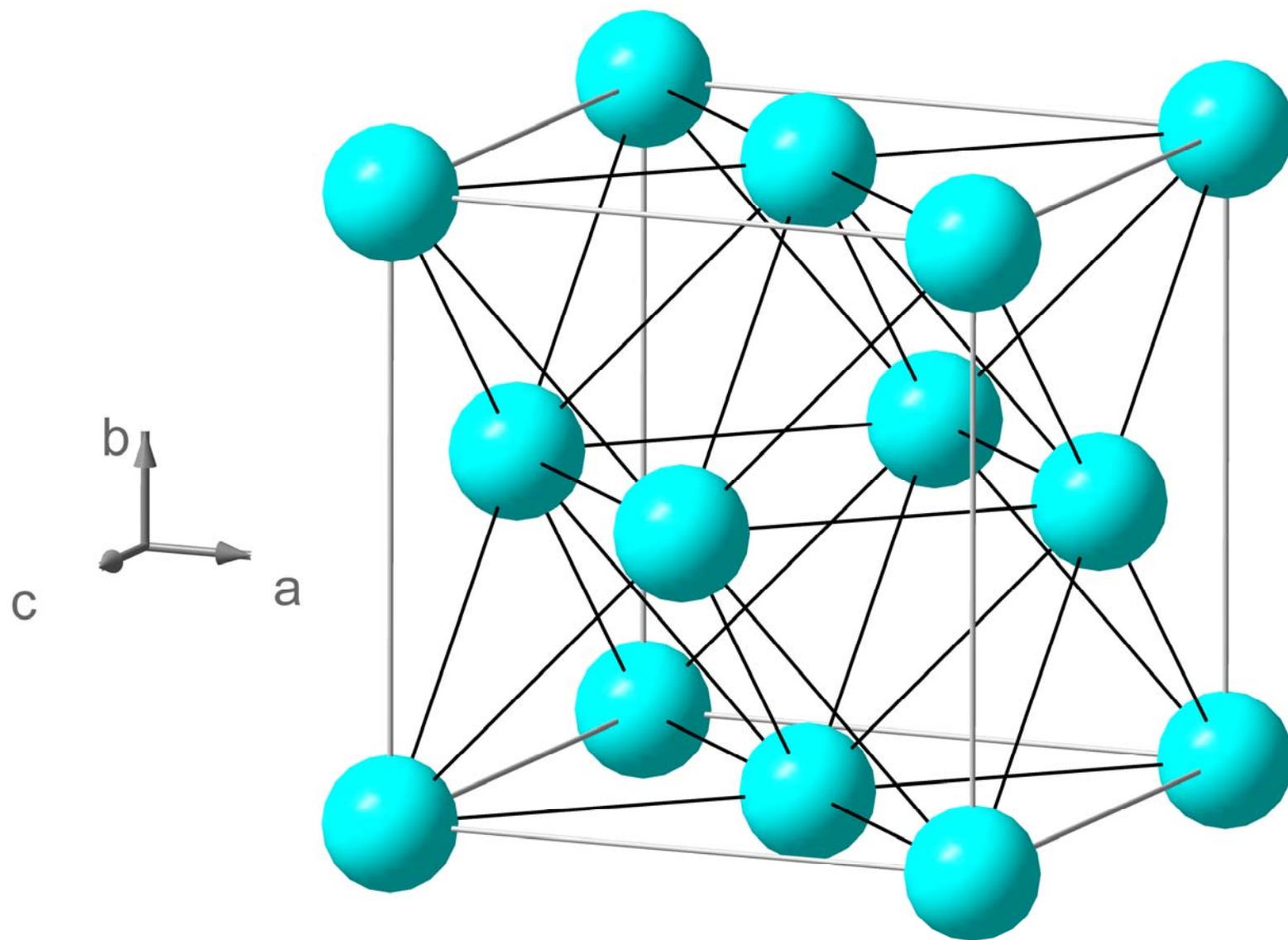


Triclinic (P)

Кристаллические плоскости и индексы Миллера

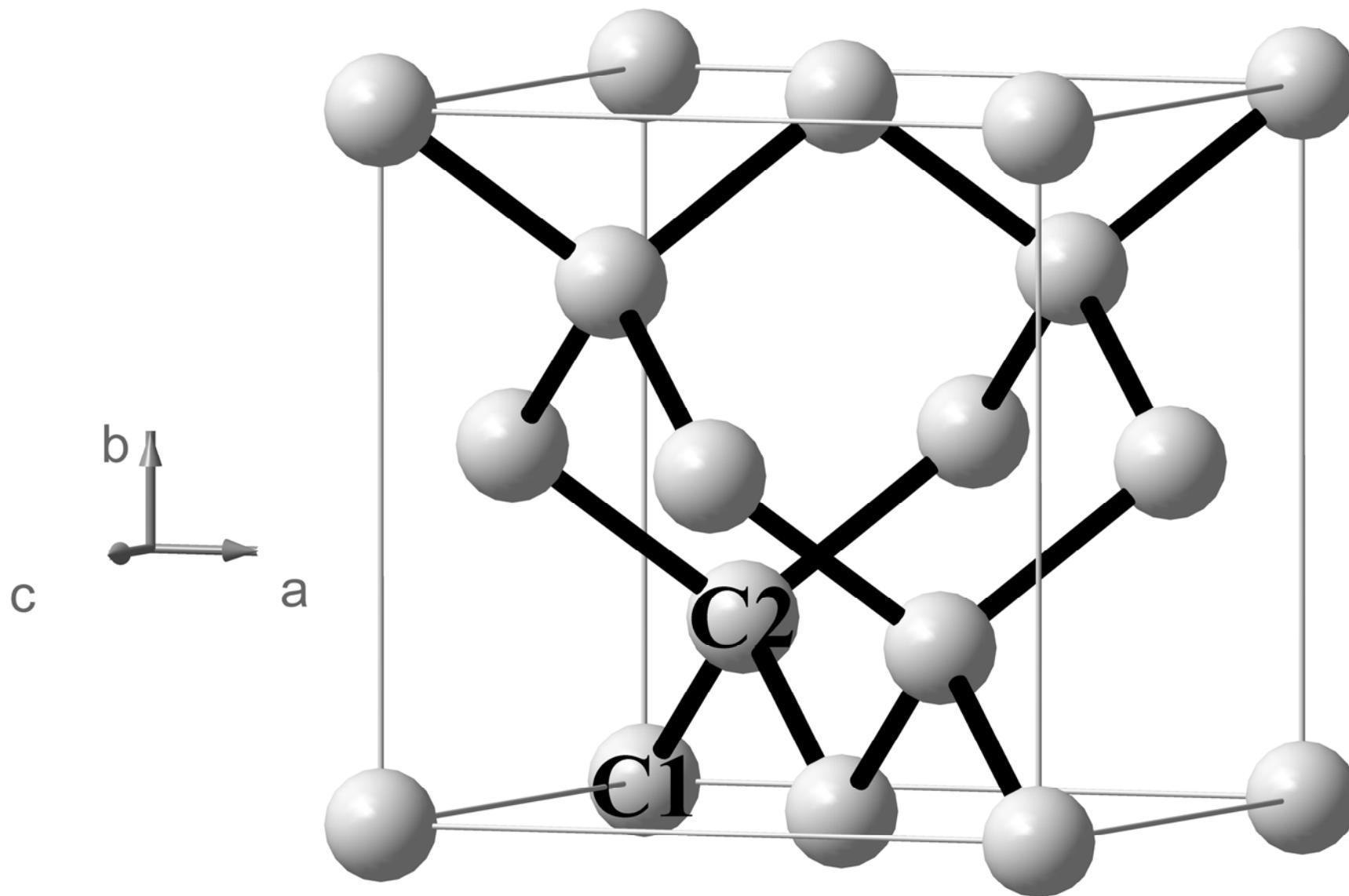


Пример: медь



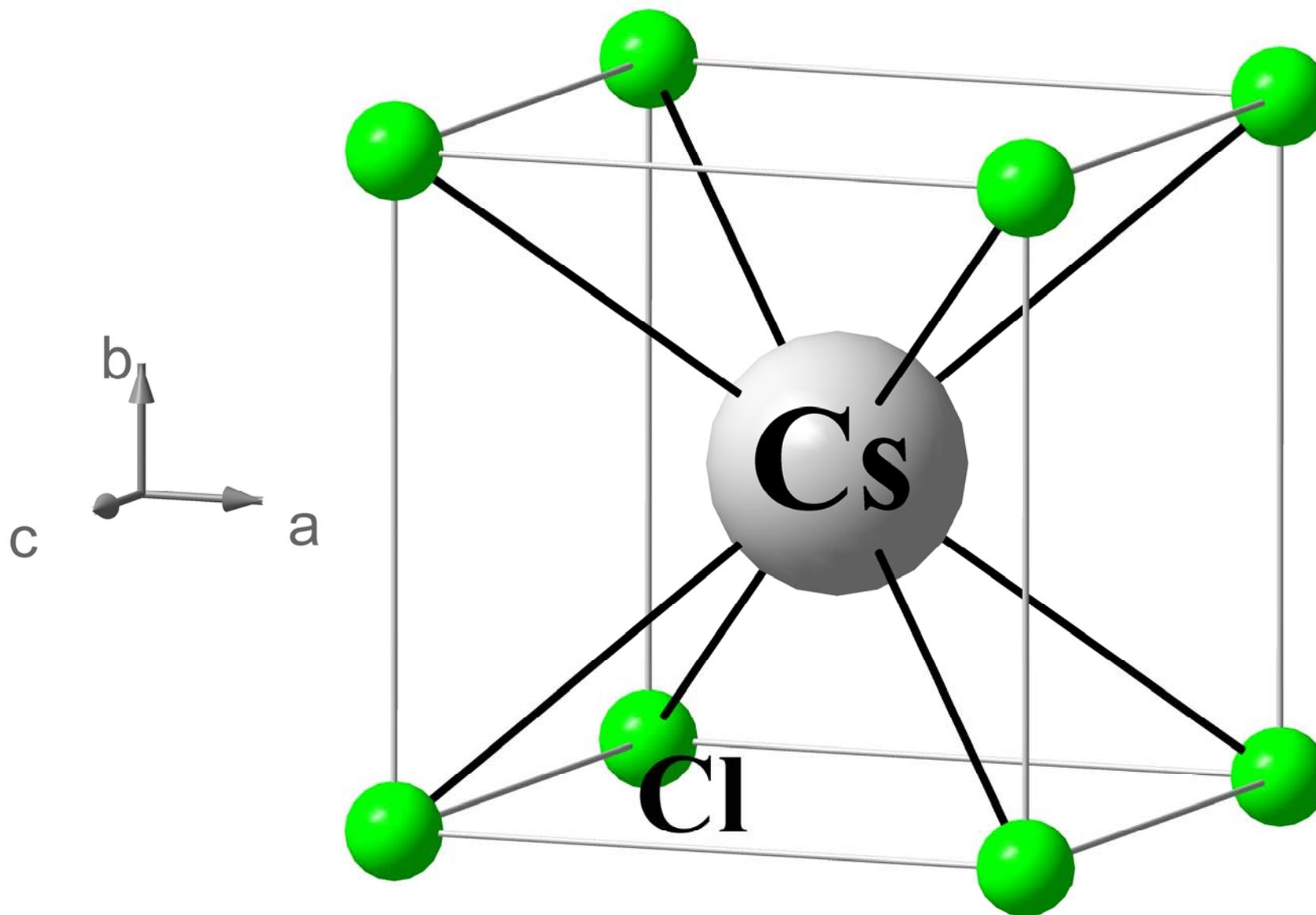
ГЦК решётка с тривиальным базисом $\{\mathbf{r}_{\text{Cu}}\}$

Пример: алмаз



ГЦК решётка с двухатомным базисом $\{\mathbf{r}_{C1}, \mathbf{r}_{C2}\}$

Пример: хлорид цезия



ОЦК решётка с двухатомным базисом $\{\mathbf{r}_{\text{Cl}}, \mathbf{r}_{\text{Cs}}\}$

Трансляционная симметрия бесконечного кристалла

Мы рассматриваем трансляции вида $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}$, $n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}$:

$$\mathfrak{t}_{\mathbf{R}_n} \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}_n = \mathbf{r} + n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}, \quad n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}. \quad (123)$$

Они образуют группу, являющуюся *прямым произведением* трех «одномерных» трансляционных групп с элементами вида,

$$\mathfrak{t}_{n_1\mathbf{a}} \mathbf{r} = \mathbf{r} + n_1\mathbf{a}, \quad n_1 \in \mathbb{Z}, \quad (1)$$

$$\mathfrak{t}_{n_2\mathbf{b}} \mathbf{r} = \mathbf{r} + n_2\mathbf{b}, \quad n_2 \in \mathbb{Z}, \quad (2)$$

$$\mathfrak{t}_{n_3\mathbf{c}} \mathbf{r} = \mathbf{r} + n_3\mathbf{c}, \quad n_3 \in \mathbb{Z}. \quad (3)$$

в следующем смысле: любая трансляция вида (123) может быть реализована как три последовательные трансляции (1), (2), (3), *произведенные в произвольном порядке* (очевидно, они коммутируют):

$$\mathfrak{t}_{\mathbf{R}_n} = \mathfrak{t}_{n_1\mathbf{a}} \circ \mathfrak{t}_{n_2\mathbf{b}} \circ \mathfrak{t}_{n_3\mathbf{c}}$$

Эта группа изоморфна *прямому произведению* трех групп целых чисел:

$$\{\mathfrak{t}_{\mathbf{R}_n}\} \leftrightarrow \mathbb{Z} \otimes \mathbb{Z} \otimes \mathbb{Z} = \{n_1, n_2, n_3\}, \quad n_{1,2,3} \in \mathbb{Z}$$

Возьмем произвольную функцию трех переменных $\psi(x, y, z) = \psi(\mathbf{r})$ и определим действие оператора трансляции:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}_n} \psi(\mathbf{r}) \stackrel{def}{=} \psi(\mathfrak{t}_{\mathbf{R}_n}^{-1} \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) = \psi(\mathbf{r} - n_1 \mathbf{a} - n_2 \mathbf{b} - n_3 \mathbf{c})$$

Мы задали представление $\{\hat{T}_{\mathbf{R}_n}\}$ группы трансляций $\{\mathfrak{t}_{\mathbf{R}_n}\}$.

Беря в качестве $\psi(\mathbf{r})$ плоские волны, будем иметь:

$$\hat{T}_{\mathbf{R}_n} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)) = \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n) \cdot \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})$$

Таким образом, плоские волны преобразуются по одномерным представлениям $\Gamma_{\mathbf{k}}$ группы трансляций $\{\mathfrak{t}_{\mathbf{R}_n}\}$ с характеристиками:

$$\chi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}_n) = \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n), \quad \mathbf{k} \in \mathbb{R}^3$$

Как мы видим, теперь в качестве характеристики типа трансляционной симметрии возникает волновой вектор \mathbf{k} . Принято говорить, что вектор \mathbf{k} пробегает значения в обратном пространстве нашей решетки.