SIECI BRAVAIS

zakładając atomową budowę kryształów można wykazać istnienie 230 różnych grup przestrzennych charakteryzujących symetrię sieci krystalicznych

periodyczność: do grupy symetrii kryształu musi należeć trójwymiarowa grupa translacji T o wektory a, które tworzą pewną trójwymiarową grupę wektorową F

wszystkie wektory translacji muszą być dłuższe od pewnego wektora o długości *d*
- taką grupę F nazywamy *grupą dyskretną*

w każdej trójwymiarowej grupie dyskretnej istnieją takie trzy wektory niewspółlinowe $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$, że dowolny wektor $\mathbf{a}$ można przedstawić jako

$$\mathbf{a} = m_1\mathbf{a}_1 + m_2\mathbf{a}_2 + m_3\mathbf{a}_3$$

dla m_i - całkowitych; wektory $\mathbf{a}_i$ - definiują równoległościan będący *komórką elementarną*

jej wybór nie jest jednoznaczny

komórka prymitywna - komórka elementarna o najmniejszej objętości

sieć krystaliczną można zbudować z (przylegających) komórek elementarnych

wierzchołki równoległościanów tworzących komórki elementarne to
węzły sieci Bravais,* tworzą *sieć Bravais

w ogólności węzły sieci Bravais nie muszą (często nie mogą) być położeniami atomów;
(np. w sieciach z bazą, kryształach molekularnych, białkach,..)

sieci *z bazą* **- przenikające się sieci Bravais**

komórka Wignera-Seitz'a:

= obszar otaczający dany węzeł sieci i zawierający punkty bliższe do danego węzła niż do jakiegokolwiek innego

- **posiada pełną symetrię kryształu**
- **sieć komórek wypełnia cały kryształ**

Symetria sieci Bravais

- **zbiór odbić i obrotów przeprowadzających sieć Bravais w siebie i posiadających punkt nieruchomy – tworzy grupę punktową R;**

- **grupa ta powinna być powinna być też grupą symetrii grupy wektorowej $\mathbf{J}$, charakteryzującej symetrię translacyjną kryształu**

- **każdy element $r \in R$ powinien przeprowadzać**

$$r\mathbf{a} = \mathbf{a}' \in \mathbf{J}$$

warunek wystarczający żeby to zachodziło:

(A1)

$$r\mathbf{a}_i = m_1^i\mathbf{a}_1 + m_2^i\mathbf{a}_2 + m_3^i\mathbf{a}_3$$

przy wszystkich m^i_j - liczbami całkowitymi

dla $\mathbf{a}_i$ - wektorów bazowych

jest to warunek zgodności obrotów i translacji

w 2 wymiarach suma (A1) ma 2 składniki

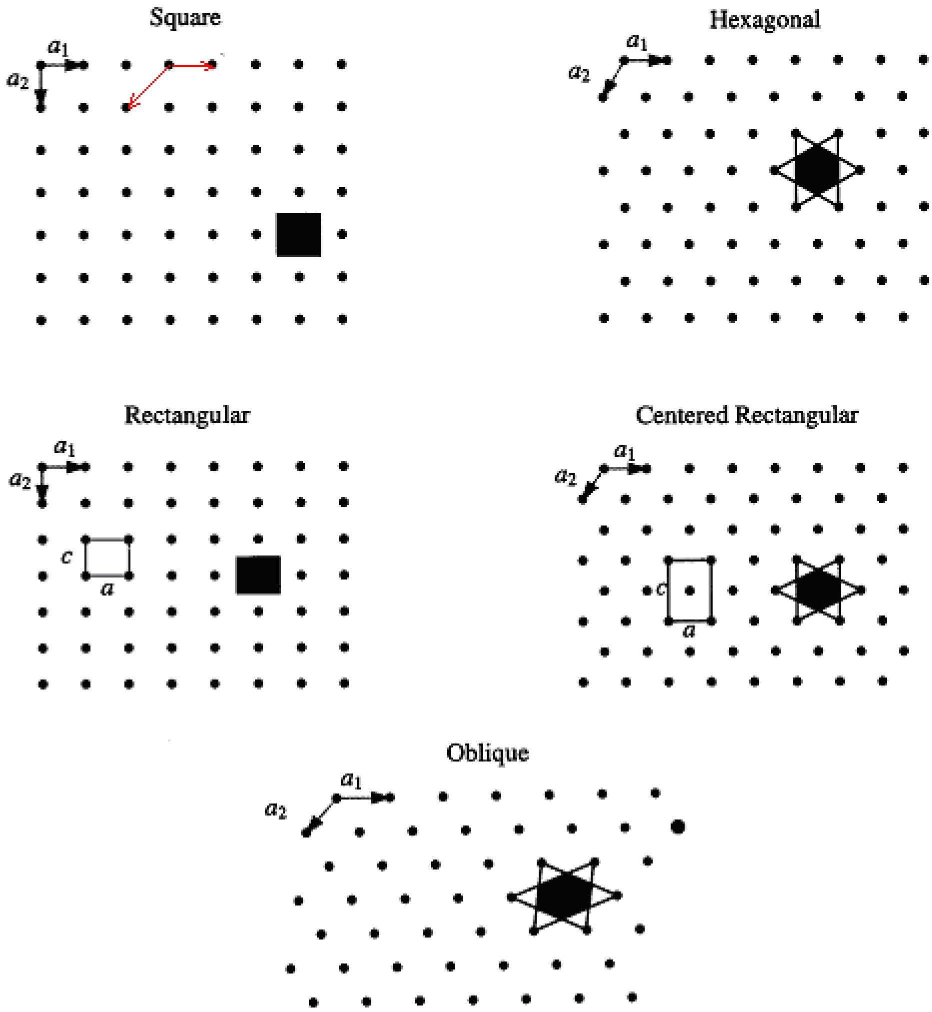
nie każda grupa punktowa może być grupą symetrii dyskretnej, trójwymiarowej lub dwuwymiarowej grupy wektorowej

<u>Rozważmy najpierw sytuację w dwóch wymiarach</u>

(naturalne dla powierzchni kryształów)

jest 5 różnych sieci Bravais w 2D

- **sieć kwadratowa**
  2 odbicia (względem osi 0X i 0Y i diagon.) + obroty o π/4 (C_{4v})
- **sieć prostokątna**
  2 odbicia (względem osi 0X i 0Y) + obroty o π/2 - C_{2v}
- **sieć sześciokątna (heksagonalna)**
  odbicia + obroty o π/3
- **prostokątna centrowana**
- **skośna**
  dowolny wybór 2 wektorów bazowych a_1 i a_2



wybór komórki elementarnej nie jest jednoznaczny, np. dla sieci heksagonalnej

$$\mathbf{a}_1 = a(1,0), \qquad \mathbf{a}_2 = a(\tfrac{1}{2}, \tfrac{\sqrt{3}}{2})$$

lub

$$\mathbf{a}_1 = a(-\tfrac{1}{2}, \tfrac{\sqrt{3}}{2}), \qquad \mathbf{a}_2 = a(\tfrac{1}{2}, \tfrac{\sqrt{3}}{2})$$

(a – odległość między sąsiednimi węzłami)

lub jeszcze inny ...

Grafen - sieć rombowa (ukośna - 60^0) z bazą dwuatomową, lub
sieć heksagonalna z bazą dwuatomową

nanorurki węglowe: - translacja tylko w jednym kierunku (x)
- oś x może być osią obrotu
- możliwe płaszczyzny σ_v

nanorurki chiralne: - przekształcenie śrubowe

Przypadek 3D

pytanie: jakie grupy punktowe mogą być grupami symetrii trójwymiarowej dyskretnej grupy wektorowej?

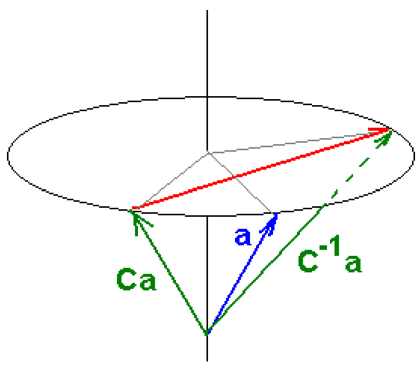
- muszą zawierać inwersję gdyż dla wektora translacji **a**, zawsze istnieje w grupie J wektor -**a**

- jakie obroty mogą zawierać ?

  weźmy dowolny wektor **a** $\in$ J, wówczas wektor

$$C_n\mathbf{a} - C_n^{-1}\mathbf{a}$$

  leży w płaszczyźnie σ, $\perp$ do osi n-krotnej,



zatem J tworzy w płaszczyźnie σ podgrupę dyskretną J'
(gdyż obroty C też tworzą podgrupę)
niech e ≠ 0 będzie najmniejszym wektorem w J'

mamy:

$$\mathbf{v} = c_n\mathbf{e} + c_n^{-1}\mathbf{e} \quad \| \quad \mathbf{e}$$

musi być krotnością wektora e
i | V | ≤ | 2e | ,

zatem

$$c_n\mathbf{e} + c_n^{-1}\mathbf{e} = m\mathbf{e}$$

dla m = 0, ±1, ±2

oczywiście

$$|\mathbf{v}| = 2e\cos(2\pi / n)$$

zatem

$$2\cos(2\pi / n) = m$$

może być tylko spełnione dla n = 1, 2, 3, 4, 6

2cos(2π)=2, 2cos(π)=-2, 2cos(π/2)=0, 2cos(2π/3)=-1, 2cos(π/3)=1

można pokazać, że jeśli w R zawarta jest podgrupa $C_{n>2}$
to R zawiera też σ_V