Mer om krystallstrukturer

Lemma La R være en rotasjons-symmetri av en krystallstruktur M, med vinkel θ. Hvis $R^2 \neq Id$, så må

$$|\cos\theta| \leq \frac{1}{2}.$$

Bevis: La $R(x) = Ax + b$, og la p være rotasjonssenteret for R. Da er for alle $x \in \mathbb{R}^2$:

$$R(p+x) = A(p+x) + b$$

$$= Ax + \underbrace{Ap + b}_{R(p) = p}$$

$$= p + Ax$$

$$\Rightarrow R^2(p+x) = R(p + Ax) = p + A^2x.$$

Sidan $R^2 \neq Id$, må $A^2 \neq I$.

La $c \neq 0$ vara ett element av $Transl(M)$ med minsta positiva norm (dvs. $\|c\| \leq \|c'\|$ för $c' \in Transl(M)$, $c' \neq 0$). Sidan $A^2 \neq I$, må

$Ac \neq \pm c$. Vi har

$$c \in \text{Transl}(m)$$

$$\Rightarrow Ac \in \text{Transl}(m)$$

$$\Rightarrow Ac \pm c \in \text{Transl}(m)$$

$$\|c\|^2 \leq \|Ac \pm c\|^2$$

$$= \|Ac\|^2 \pm 2Ac \cdot c + \|c\|^2$$

$$= 2\|c\|^2 \pm 2Ac \cdot c.$$

$$\Rightarrow \frac{|Ac \cdot c|}{\|c\|^2} \leq \frac{1}{2}.$$

La $$A = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

En direkte utregning gir

$$Ac \cdot c = \cos\theta \cdot \|c\|^2.$$

Så $|\cos\theta| \leq \frac{1}{2}$. //

Teorem La R være en rotasjonssymmetri av en krystallstruktur M. Da har R orden

$$1, 2, 3, 4 \text{ eller } 6.$$

Bevis: (i) Hvis $R^2 = Id$, så har R orden 1 eller 2

(ii) Anta nå $R^2 \neq Id$. La $k \geq 3$ være ordenen til R. Velg $j \geq 1$ slik at $T := R^j$ har rotasjonsvinkel $2\pi/k$. Siden cos er strengt fallende på intervallet $[0, \pi)$, finner vi:

$$\cos\theta \leq \frac{1}{2} = \cos\frac{\pi}{3}$$

$$\Rightarrow \frac{2\pi}{k} = \theta \geq \frac{\pi}{3}$$

$$\Rightarrow k \leq 6.$$

Anta nå $k = 5$. Da har

T^2 notaşiansiniled $\frac{4\pi}{5}$. Mun

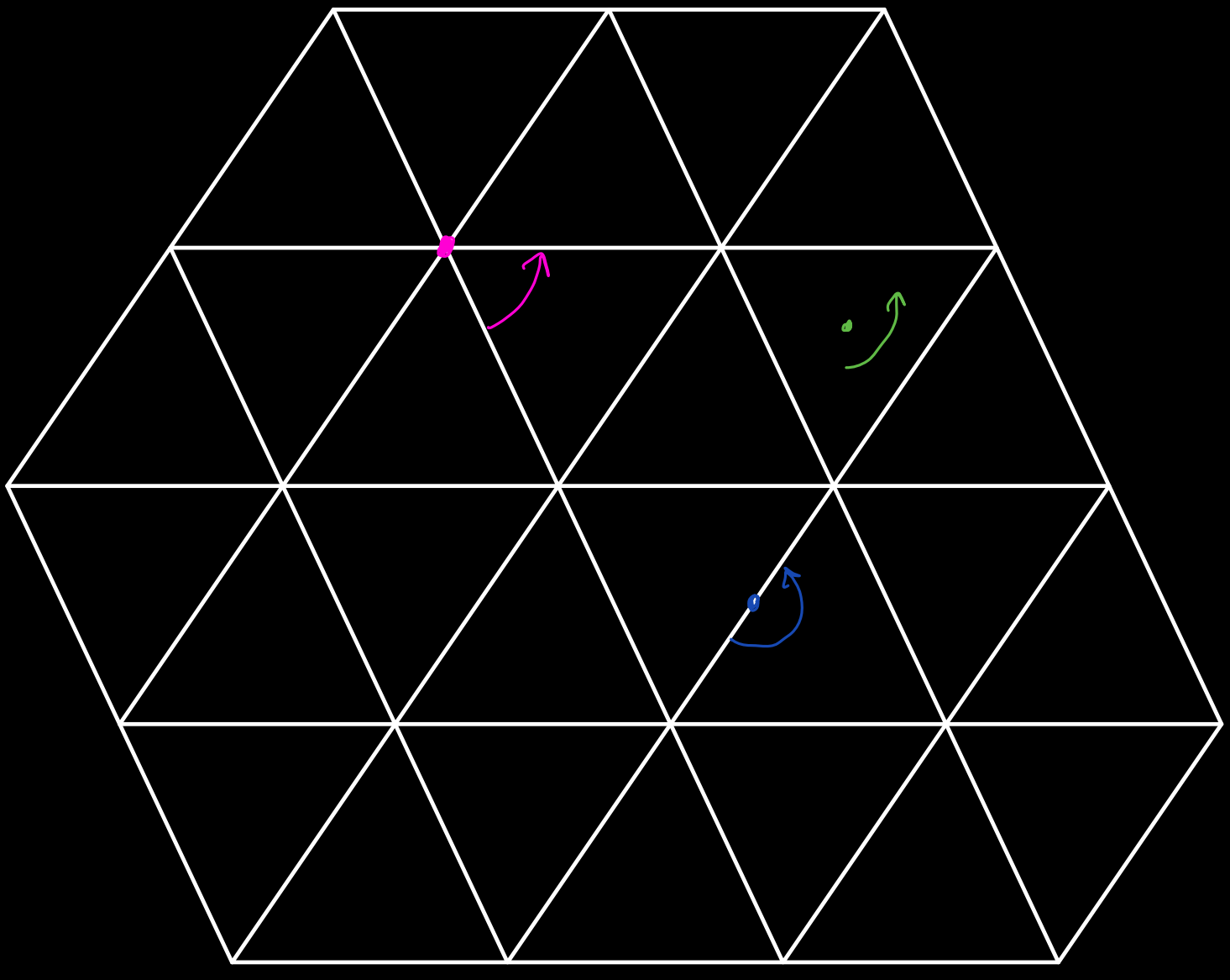
$\frac{4}{5} > \frac{2}{3} \Rightarrow \cos\frac{4\pi}{5} < \cos\frac{2\pi}{3}$

$= -\frac{1}{2}$

$\Rightarrow \left|\cos\frac{4\pi}{5}\right| > \frac{1}{2}$ ⚡

//

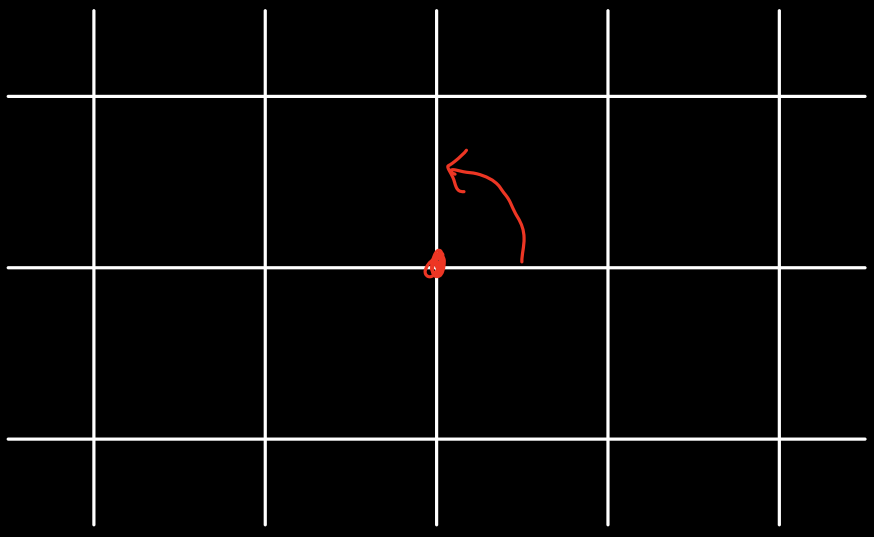
Eksempler på rotasjonssymmetrier



Rotasjonssymmetri av orden 2

Rotasjonssymmetri av orden 3

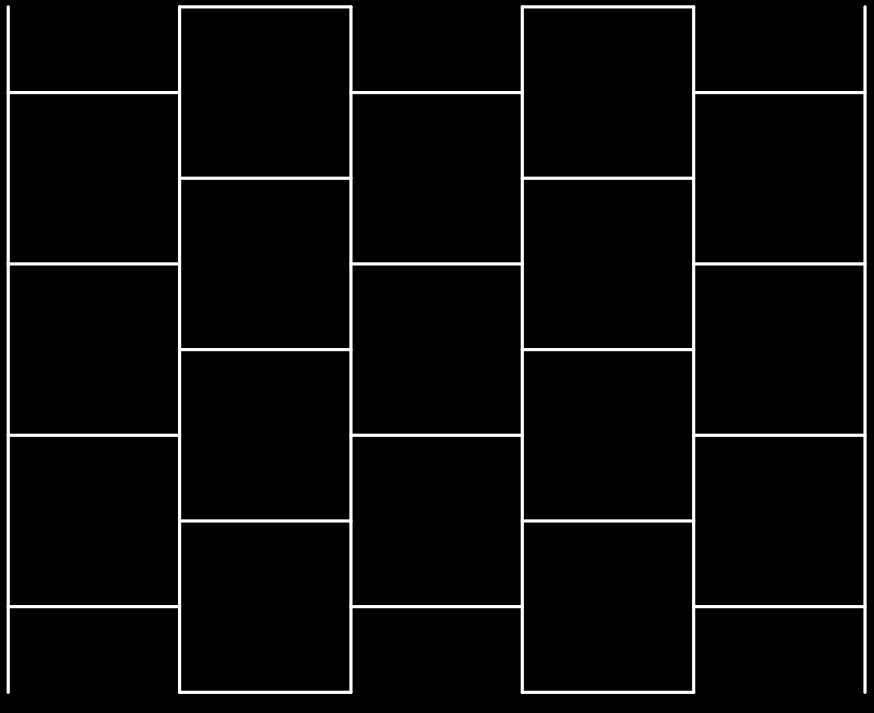
Rotasjonssymmetri av orden 6.

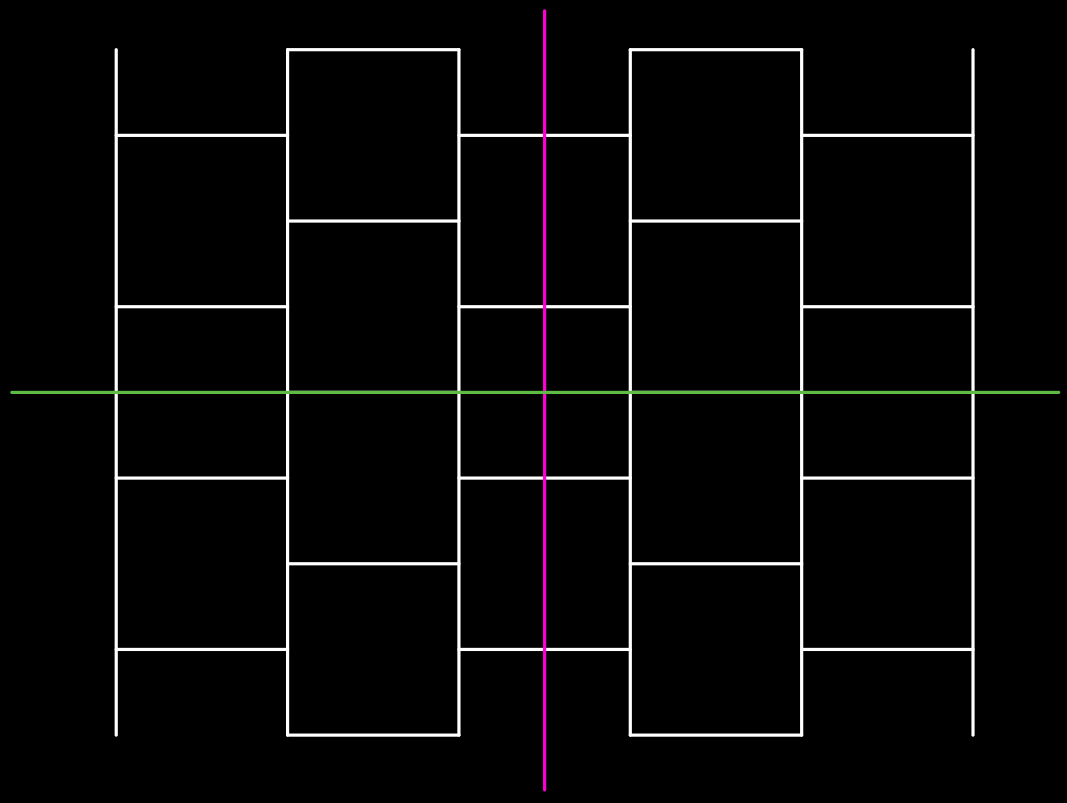


Rotasjonssymmetri av orden 4.

Eksempler på (glide)speilingssymmetrier

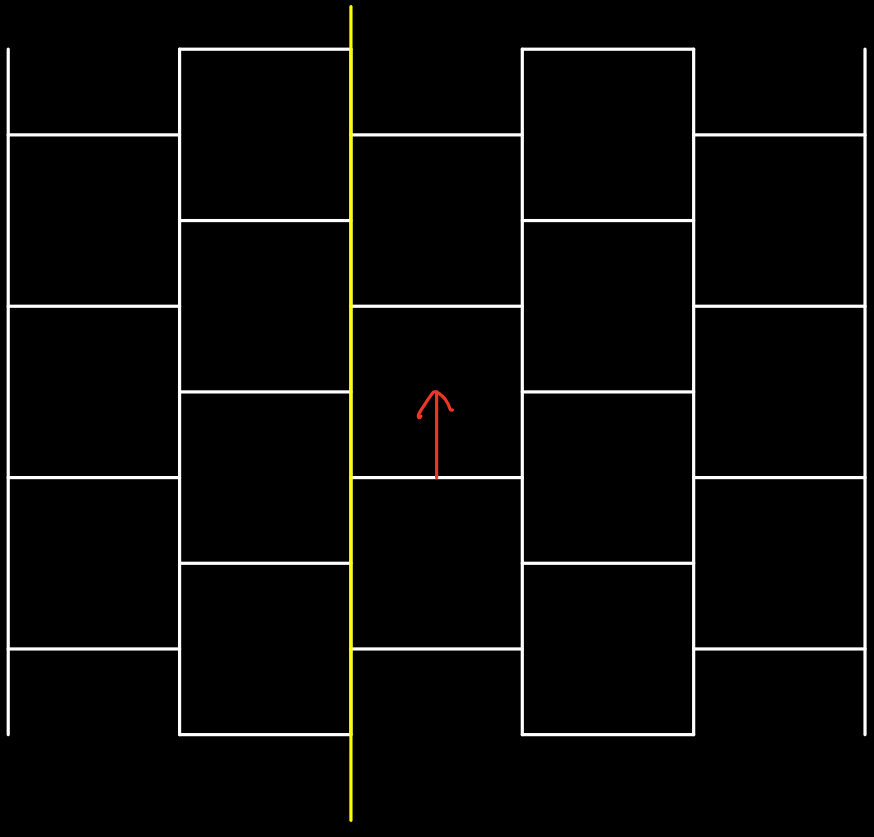
$M =$





Linje for speilingssymmetri

Linje for speilingssymmetri



Linje for glidspeilingssymmetri

Translasjonsvektor

5.1 Vektorer i $\mathbb{R}^3$.

Standardbasis for $\mathbb{R}^3$:

$$i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad k = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Eks:
$$\begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ -1 \end{pmatrix} = 2i + 3j - k.$$

Kryssprodukt (= vektorprodukt):

For $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix}$, $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix}$

definerer vi $v \times w \in \mathbb{R}^3$ ved:

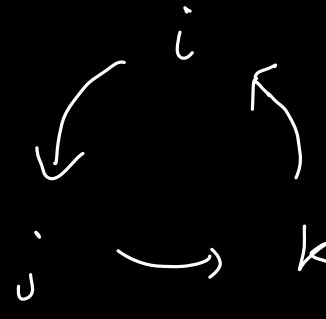
$$v \times w = \begin{vmatrix} i & j & k \\ v_1 & v_2 & v_3 \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix}$$

$$= (v_2 w_3 - v_3 w_2)\, i$$

$$- (v_1 w_3 - v_3 w_1)\, j$$

$$+ (v_1 w_2 - v_2 w_1)\, k.$$

Eks: $i \times j = k$, $j \times k = i$, $k \times i = j$



syklisk permutasjon.

i almindelighet

Advarsel: $(u \times v) \times w \neq u \times (v \times w)$

Eks: $(i \times j) \times j = k \times j = -i$

$i \times (j \times j) = i \times 0 = 0$

Prop: For alle $u, v, w \in \mathbb{R}^3$, $t \in \mathbb{R}$ gjelder:

(i) $(u+v) \times w = u \times w + v \times w$

$u \times (v+w) = u \times v + u \times w$

$(tu) \times v = t \cdot (u \times v) = u \times (tv)$

(ii) $u \times v = -v \times u$

$u \times u = 0$

(iii) $u \cdot (u \times v) = 0 = v \cdot (u \times v)$

(iv) (Jakobi-identiteten)

$$0 = u \times (v \times w) + v \times (w \times u) + w \times (u \times v)$$

(v) $\|u\|^2 \|v\|^2 = (u \cdot v)^2 + \|u \times v\|^2$

<u>Husk</u>: Hvis $u, v \neq 0$, er

$\theta = \angle(u, v)$, $0 \leq \theta \leq \pi$

definert ved

$$\cos\theta = \frac{u \cdot v}{\|u\| \cdot \|v\|}.$$

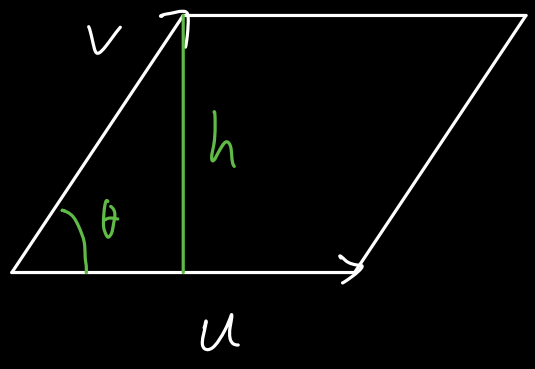
$\Rightarrow$

$$\|u \times v\|^2 = \|u\|^2 \cdot \|v\|^2 \cdot (1 - \cos^2\theta)$$

$$= \sin^2\theta \cdot \|u\|^2 \cdot \|v\|^2$$

$$\Rightarrow \|u \times v\| = \sin\theta \cdot \|u\| \cdot \|v\|.$$

$\sin\theta \geq 0$



$$h = \sin\theta \cdot \|v\|$$

$$\text{Area} = h \cdot \|u\|$$

$$= \sin\theta \cdot \|u\| \cdot \|v\|$$

$$= \|u \times v\|.$$

Def: För $u, v, w \in \mathbb{R}^3$ definierar vi **trippelprodukten**

$$[u, v, w] = u \cdot (v \times w)$$

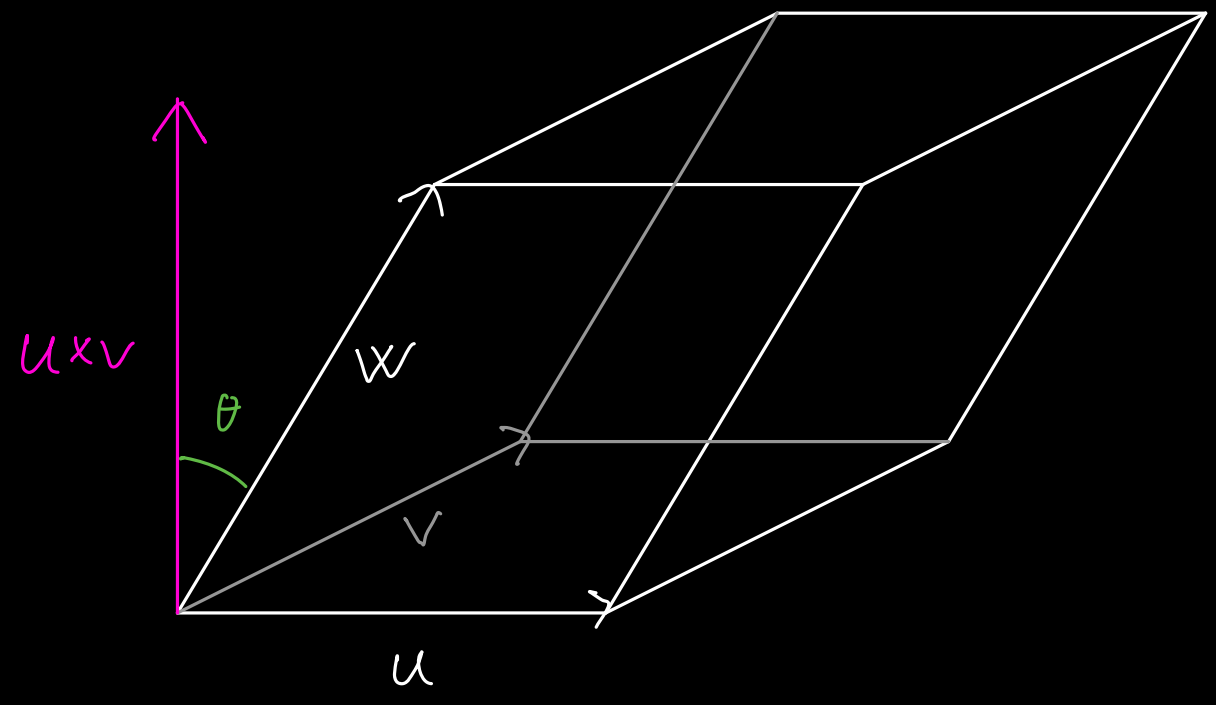
$$= \begin{vmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix}$$

Prop: $u \cdot (v \times w) = (u \times v) \cdot w$

//

Prop: $|u \cdot (v \times w)|$ är volymen av parallelepipeden utspänt av u, v, w.

Bevis:



$$\text{Volum} = h \cdot A$$

$$= |\cos\theta| \cdot \|w\| \cdot \|u \times v\|$$

$$= |(u \times v) \cdot w|$$

$$= |u \cdot (v \times w)| \quad //$$

Prop Hvis A er en 3×3 matrise, er

$$[Au, Av, Aw] = \det(A)\cdot[u, v, w]$$

Bevis: La B være matrisen med søyler u, v, w. Da er AB matrisen med søyler Au, Av, Aw.

$$\Rightarrow [Au, Av, Aw] = \det(AB)$$
$$= \det(A)\cdot\det(B)$$
$$= \det(A)\cdot[u, v, w]. \quad //$$

Prop: Hvis A er en ortogonal 3×3 matrise og $v, w \in \mathbb{R}^3$, så er

$$(Av) \times (Aw) = \underbrace{\det(A)}_{\pm 1} \cdot (v \times w)$$

Bevis: Det er nok å vise at for alle $x \in \mathbb{R}^3$ er

$$x \cdot (Av \times Aw) = \det(A)\left(x \cdot A(v \times w)\right)$$

La $u = A^{-1}x$.

$$x \cdot (Av \times Aw) = Au \cdot (Av \times Aw)$$

$$= \det(A) \left(u \cdot (v \times w) \right)$$

$$= \det(A) \left(\underbrace{Au}_{x} \cdot A(v \times w) \right)$$

//.