| • • | 9.8. Space groups (Tre) #\$ 102 |
|------|--|
| •••• | 9.8.1 Bacin dalia toma |
| o o | |
| • • | Space promp: TI |
| • • | Which carry the crystal into itell |
| • • | |
| • • | Recall, SRalts (Seitz) where Ra denotes point |
| • • | group operations and I translation, an element of th |
| • • | $\{R_{\alpha} \tau\}\vec{r} = R_{\alpha}\vec{r}+\vec{z}$ |
| • • | $PR_{j}(\vec{\tau}) < R_{a}(\vec{\tau}) = PR_{j}R_{a}(R_{j}\vec{\tau}+\vec{\tau})$ |
| • • | $\{R_{a} z\}^{d} = \{E o\}$ |
| • • | $=> \{R_{\perp} \tau \}^{2} = \{R_{\perp} \tau - R_{\perp}, \tau\}$ $\{R_{\perp} \tau \} \{R_{\perp} \tau - R_{\perp}, \tau\} = \{R_{\perp}, R_{\perp}, \tau\}$ $\{R_{\perp} \tau \} \{R_{\perp}, \tau\} = \{R_{\perp}, R_{\perp}, \tau\}$ |
| • • | - 5 E 105 |
| • • | And the translational subgroup T is an ablelian |
| • • | normal subgroup. |
| • • | $\beta \alpha \tau \rangle \beta E t \rangle \beta \alpha \tau \rangle = \cdots \beta E a t \rangle$ another translation. |
| • • | |

| • • | lettice |
|-------|---|
| • • | Bravais |
| • • | $\int T = n_1 t_1 + n_2 t_2$ |
| • • | $t_2 $ |
| • • | |
| • • | · · · · · · • • • • • • • • • • • • • • |
| • • | NOW the SDROO ROOD (SWITCH'S DAVIT Brown |
| • • | per o gr p |
| • • | Symmetry operations and translations. The |
| • • | two parts pose restrictions onto each other |
| • • | |
| • • | Lsee The the is Cherp 5; Bradley & Cracknell) |
| • • | |
| • • | |
| • • | <u>Ίνιο</u> |
| • • | |
| • • | 2D. 4 lattice systems J Bravais Lattices |
| • • | HAN 25 |
| • • | |
| • • | 3 D. 7 Lattice systems 14 Bravais Lattices |
| • • | |
| • • | see figures. |
| • • | |
| • • | |
| • • • | The parallelepiped formed by t, t2. t3 |
| • • | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| • • | is the prinitive unit cell. US. conventional |
| • • | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| • • | cell. |
| • • | |

| ۰ | ۰ | • | ۰ | $ A > 0$ has $-\sum i + 2$ |
|---|---|---|---|---|
| ۰ | ۰ | • | ۰ | |
| ۰ | ۰ | • | ۰ | and the second secon |
| ۰ | ۰ | • | ۰ | and a second |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | |
| ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | $ \cdots $ |
| ۰ | ۰ | • | ۰ | |
| ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | |
| ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | Symmerphic space groups: |
| ۰ | ۰ | ٠ | • | |
| • | • | ۰ | • | |
| • | • | • | • | # > Ralty: R. EA the Bravas lattice |
| • | • | • | • | |
| • | • | • | • | PRAITS - FRAIKNTLAJ - FEIRNJERAILAS |
| ۰ | ۰ | • | ۰ | |
| ۰ | • | • | • | TP P - P |
| ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | TPT a space group. With aptiper chile of |
| ۰ | • | ٠ | • | HSD. ITSESE Can be decempted |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | Ungin Prairigesquere source appear |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | such that To=0. symmerphic. [73] |
| ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | |
| ٠ | ٠ | ٠ | • | $P \cong G_{\mathcal{T}_{1}} \oplus \mathcal{T}_{2} \oplus \mathcal{T}_{3} \oplus \mathcal{T}_{4} \oplus \mathcal$ |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | otherwise non-symmorphic (153) |
| ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | |
| ۰ | ٠ | ٠ | • | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | (Screw axis / glide plane) |
| ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| ۰ | ۰ | ٠ | • | |
| • | • | • | • | |
| • | • | • | • | Mirror + - transletion |
| • | • | • | | |
| • | • | • | • | |
| ۰ | ۰ | ٠ | • | |
| ۰ | ٠ | ٠ | • | |
| ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | As a dual of the real space doctice and unit |
| ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | |
| ۰ | ۰ | ٠ | • | cells, there are |
| ۰ | ۰ | ٠ | • | |
| ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | |

| Reciprocal lattices & Brillouin Zones |
|--|
| |
| Mcinucol lattice vectors 3: |
| |
| $\frac{d}{d_i} \cdot \frac{d}{d_i} = 2\pi\delta_{ij}$ |
| · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| $= \frac{2\pi(t_1 \times t_k)}{123}$ (i.j.k : cyclic perm of 123) |
| $\cdot \cdot $ |
| |
| A recipiocal lattice vector |
| |
| $G_n = n_1 \beta_1 + n_2 \beta_2 + n_3 \beta_3$ |
| · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| Brillouin zone unit cel in the reciprocal space |
| |
| $\hat{A} = \frac{2\pi}{2} (1, 0)$ |
| t_{2} |
| $g_{2} = \frac{-\kappa}{\alpha} (2, \frac{1}{2})$ |
| \cdot |
| the second s |
| First Bullowin zone: \$ \$21 " hopenon-seita |
| |
| · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| x x x |
| |
| what is special about 1st 62? We need to talk |
| about the wes of T |
| |
| |
| Recall 1 is an abelian normal subgroup. T= 2°. |
| all its image and ID. The changed (20202-1) |
| and the second action is a second a condition of the second action of th |
| $\gamma_{i} = -i 2\pi \phi$ |
| $\Lambda(1) = e \qquad P(1) \qquad I \qquad $ |
| |

| Group structure reguines $X(m+n) = X(m)X(n)$ |
|---|
| In physics we take periodic boundary conditions |
| $\mathcal{Z} \xrightarrow{\sim} \mathcal{Z}_{\mathcal{N}}$ |
| $\chi_{\vec{k}} = e^{ik} e^{ikN} = 1 k = \frac{2\pi}{N}$ |
| $\Rightarrow \chi_{k}(\vec{t}) = e^{-i\vec{k}\cdot\vec{t}} \qquad (e^{-i\vec{k}\cdot(N_{1}\vec{t}_{1} + N_{2}\vec{t}_{2} + N_{3}\vec{t}_{3})} = 1)$ |
| $\vec{k} \cdot \vec{t}_i = \frac{2\pi}{\nu_i}$ |
| $7P \vec{k} - \vec{k} = G = (m\vec{k} + mz\vec{k} + mz\vec{k})$ (then |
| $\chi_{-}(\overline{c}) = \chi_{\overline{c}}(\overline{c})$ |
| => 1st BZ conacins all distinct irreps of the |
| translational subgroup k' autsiale of 15+ BZ |
| labels the same irrep as some $\vec{k} = \vec{k} - \vec{G}_m$ |
| inside the 1St B2 |
| · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| Bloch theorem the wave functions transform as |
| irreps of T. the tites |
| $\Psi(\vec{r}-\vec{z}) = \hat{\tau} \cdot \Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{\tau}} \Psi(\vec{r})$ |
| solved by 4,173 = u(r) e itr (Bloch waves) with |
| $u_{i}(\vec{r}) = u_{i}(\vec{r} + \vec{\tau}) \forall \vec{\tau} \in \Lambda$ |
| |
| |

| They are eigenstates of the discrepe translation |
|---|
| operators, (and a Hamiltonain on the lastice) |
| Taking +t- Block wangs & 4th to a basis |
| |
| $\langle \Psi_{\vec{k}}^{\alpha} H \Psi_{\vec{k}'}^{\circ} \rangle = H_{\vec{k}}^{\alpha o} S_{kk'}$ |
| a.b labels stores in the dependency space in |
| the isotypic decomposition of the Hilbert space. |
| Different & (>r irreps) do not couple |
| -> Band structure |
| · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| For a given material the Bloch states can be |
| a voter and we have un torais a torais |
| (Wannier) |
| $\mathcal{G}_{i} = \frac{1}{\sqrt{\nu}} \sum_{\mathbf{r}_{n} \in \mathbf{T}} \phi^{a} (\vec{r} - \vec{r}_{a} - \vec{R}_{n}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_{n}}$ |
| $\begin{aligned} & \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\substack{k \in T}} \phi^{\alpha} \left(\vec{r} - \vec{r}_{a} - \vec{R}_{n} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n}} \\ & \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\substack{k \in T}} \psi^{(k)} \left(\vec{r} - \vec{r}_{a'} - \vec{R}_{n} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n}} \\ & \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\substack{n \in T}} U^{(k)}_{aa} \phi_{a'} \left((\vec{r} - \vec{r}_{a'} - \vec{R}_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n}} \right) \end{aligned}$ |
| $\begin{aligned} \mathcal{G}_{R}^{a} & I_{c}^{a} \mathcal{G}_{c}^{a} = \frac{1}{N^{a}} \sum_{R_{n} \in T} \phi^{a} (\vec{r} - \vec{r}_{a} - \vec{R}_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n}} \\ \mathcal{G}_{R}^{a} (\vec{r}) &= \frac{1}{N^{a}} \sum_{R_{n} \in T} \mathcal{G}_{a}^{a} (\vec{r} - \vec{r}_{a} - \mathbf{R}_{n}) e^{i\vec{k}\cdotR_{n}} \\ \left(\operatorname{iv} \operatorname{fact} \mathcal{G}_{E}^{a} (\mathbf{r}) = \frac{1}{N^{a}} \sum_{n} \sum_{a'} \mathcal{G}_{a}^{a'} \phi_{a'} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{a'} - R_{n}) e^{i\vec{k}\cdotR_{n}} \right) \\ & + \mathfrak{v} \text{ sottisfy orthogonality etc.} \end{aligned}$ |
| $\begin{aligned} & \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n \in T} \phi^{a} (\vec{r} - \vec{r}_{a} - \vec{R}_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n}} \\ & \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n \in T} \mathcal{U}_{aa}^{(k)} \phi_{c'} (r - r_{a'} - R_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n}} \\ & \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n \in T} \mathcal{U}_{aa}^{(k)} \phi_{c'} (r - r_{a'} - R_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n}} \\ & to some fy orthogonality erc. \end{aligned}$ |
| $\begin{aligned} & \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = \frac{1}{n^{2}} \sum_{\mathbf{r} \in \mathbf{r}} \phi^{a} (\vec{r} - \vec{r}_{a} - \vec{R}_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_{n}} \\ & \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = \frac{1}{n^{2}} \sum_{\mathbf{r} \in \mathbf{r}} \mathcal{U}_{aa}^{(k)} \phi_{a'} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{a'} - \mathbf{R}_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\mathbf{R}_{n}} \\ & \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = \frac{1}{n^{2}} \sum_{\mathbf{r} \in \mathbf{r}} \mathcal{U}_{aa}^{(k)} \phi_{a'} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_{a'} - \mathbf{R}_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\mathbf{R}_{n}} \\ & + \sigma \text{ sotisfy orthogonality etc.} \end{aligned}$ Now we consider the point poup part. (rotations etc.) |
| (in fact $\Psi_{\vec{k}}^{a}(\vec{r}) = \frac{1}{N^{a}} \sum_{R_{n} \in T} \phi^{a}(\vec{r} - \vec{r}_{a} - \vec{k}_{n}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{k}_{n}}$ (in fact $\Psi_{\vec{k}}^{a}(r) = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{n} \sum_{a'} U_{aa'}^{(b)} \phi_{a'}(r - r_{a'} - R_{n}) e^{ikR_{n}}$) to scatisfy orthogonality erc. Now we consider the point group part. (rotations etc.) |

| 9.8.2 K-stars and little groups |
|--|
| Defire the lettle group of k, Gk |
| $\forall g \in G_{\vec{k}}, g \circ \vec{k} \equiv \vec{k} i.e. g \cdot \vec{k} = \vec{k} + \vec{G}_{m},$ |
| and $T \subset G_{k} \subset G$. |
| group structure: $ \begin{pmatrix} 0 \forall g_1, g_2 \in G_{2}; g_1, g_2, k = g_1 \cdot (k + G_{m_2}) = k \cdot (\hat{G}_{m_1} + g_1, \hat{G}_{m_2}) \end{pmatrix} $ |
| $= \vec{k} + \vec{G}_{m_s}$ |
| $\bigcirc g_{i}k = k + G_{m} \implies k = g_{i} + f_{i} + G_{m} = g_{i} + G_{m'} / f_{i} = g_{i} + g_{i} + G_{m'} / f_{i} = g_{i} + g_{i} + G_{m'} / f_{i} = g_{i} + g_{i} + g_{i} + g_{i} + g_{i} = g_{i} + g_{i} + g_{i} + g_{i} = g_{i} + $ |
| => Ĵ ⁻ € Ġ Ţ |
| A related concept. Little co-group GK = GK/T |
| factors out the normal translation group T. and $\overline{G}_{k} \subset P = \mathcal{F}_{k} : \mathcal{F}_{k} \mid t \} \in \overline{G}_{k}^{j}$. |
| There are <u>IPI</u> k-vectors in the K-star: F&KIZEGY |
| Examples B2 of a square location |
| $k=0: G_{k} = full space group G.$ $\overline{G_{k}} = full D_{4}$ |
| $K^{*} = \xi \pm k(1, 2) \pm k(2, 1) f$ $G_{k} abses not include C_{k}, C_{2}, etc.$ |
| $\begin{bmatrix} \cdot \\ \cdot \end{bmatrix} = \{k\} G_k = G.$ |

| ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | • • | | • | • | • | • | ٠ | • | ٠ | ٠ | • | | • | • | • | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ |
|---|---|---|---|-----|------|-----|----|------------|-------------|-------------|----------|----------|---------------|-------|--------------|------|-----|---------|-----|--------------|------|-------|--------|------|-------|-----|-------|----|------------|----|---|---|---|
| ۰ | ٠ | ۰ | • | | • | • | ۰ | D | · | • | • | • | • • | • | • | • | • | . 1 | • | • | • | • | • | | • | • | • | • | ٠ | • | ۰ | ٠ | ۰ |
| ٠ | ٠ | ٠ | • | pe | 71.N | Л. | | Ţ | 57 | m | het | y- | •• | - | 3 | с | nl | الع: | ^b9 | rh | Nd | ŝ | • | 5.7 | | • | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | • | ۰ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | • | • | ٠ | • | • | ٠ | • | · · · | • | • | • | • | د با | • | | • | • | • | | • | • | • | ۰ | ۰ | • | ۰ | • | ۰ |
| ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ·/l | 0 | P | oin | NS | • | in | \mathcal{N} | é | 2×0 | ep | τ | ع ا | • | na | ろ | ·T-1 | Ľ | | 871 | nn | æ٦ | Ŋ | _ * | ۰ | ٠ | • | ۰ |
| ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | 0 | • | | | <u>د</u> | • | • • | | • | • | • | • | • | • | ٠ | ۰ | • | | • | ٠ | • | • | • | • | • | 0 | ۰ |
| ٠ | 0 | ۰ | ۰ | • | • | • | F | u | P. | Ċ | لا الد | • | • • | | • | • | • | • | • | • | ۰ | ۰ | • | | • | • | • | • | • | • | ۰ | • | • |
| • | • | • | • | • | • | | | P | oin. | | ہر | ંન | ٩ | h | gh | es? | 7 | 57 | ·m. | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | • | • | • | • | • | | | | ا د | -+(| | . 0 : | e el | 160 | rh | .900 | പ | • | · | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| | | | | | 1 | _1 | · | . ` | ••• | <i>a</i> | | 1. | | | ſ. | | | | | | • | | | | • | | | • | • | | • | • | |
| | • | • | • | 0+ | بقة | 5 | ar | ع | ିଶ | R'N | ία. | ×. | 22 | wT. | 2 | • | • | • | • | • | | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | |
| • | • | • | • | ٠ | | • | • | | ĸ , | (), | • | | • • | | | • | • | • | • | • | 87. | 3 | 1 | | • | • | • | • | ٠ | ٠ | ۰ | • | • |
| ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | / | Ċ | | • | | 50 | sic | d | ew. | nain | 1 | ک . | ?: | <u>.</u> | ĪV | . | G | | • | • | • | • | • | • | ۰ | • | • |
| ٠ | • | • | ٠ | • | • | • 1 | 7. | 0 | * .× | • | ÷ | •0 - | • • | | h . | • | 1 | - | h. | • 0 | • | • | ר י | | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | ٠ | | ٠ | | • | ٠ | ٠ | ٠ | | ers. | : | 3:0 | PC4 · | , c | · | | | se. | ٠ | | | | • | • | | • | • | • | • | • | • |
| ٠ | ٠ | ٠ | • | • | • | • | • | • | + | ٠ | ٠ | • | . i | vote | ș r w | ati | ona | l | + | كلع | ومع | | 50 | C | rys | ta | ll of | f | ap | hy | • | • | • |
| ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | Ô | • | ٠ | • | • • | | • | • | • , | • | • | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | ۰ | ٠ | ٠ |
| ٠ | • | • | l | ine | -/ 1 | ola | næ | | f. | sy | mn | eth U | (, † , | • | d: | ne | 1 | pLa | ine | . <i>i</i> 1 | n, | N | . pa | 7-55 | | e ' | th | μı | ¥ | k | ۰ | • | ٠ |
| ٠ | • | ٠ | - | 0 | | ٠ | • | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | il l | ື ຄ | - | | · h | | | H. | | °C (| r'm O | ر ک | s u | 1 100 | o T | ż | • | • | • | ۰ | • | ۰ |
| ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | · | : r | | • | • | | • | • • | • | • | • | • | | • | • | ð | • | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • |
| ٠ | • | ٠ | • | ٠ | • | • | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • • | • | • | • | ٠ | • | ٠ | • | • | • | • | | • | • | • | ٠ | ٠ | • | ۰ | • | ٠ |
| ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • • | | • | • | • | • | • | • | ٠ | • | • | | • | • | • | • | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ |
| ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | • • | | • | • | • | • | ٠ | • | • | • | • | | • | • | • | • | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ |
| • | ٠ | • | ٠ | ٠ | • | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • • | • | • | • | ٠ | • | ٠ | • | ٠ | • | • | | • | ٠ | • | ٠ | ٠ | • | ۰ | • | • |
| ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | • • | • | • | • | • | • | ٠ | • | ٠ | ٠ | • | | • | • | • | • | • | • | ٠ | ۰ | ٠ |
| ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | • | • • | | • | • | ٠ | • | ٠ | • | ٠ | • | • | | • | • | • | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | • | • | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • • | • | • | • | • | • | ٠ | • | ٠ | ٠ | • | | • | • | • | ٠ | ٠ | • | • | • | ۰ |
| ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | • | • | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | • | • • | | • | • | ٠ | • | ٠ | • | ٠ | • | • | | • | • | • | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • • | • | • | • | • | • | ٠ | • | ٠ | ٠ | • | | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | • | • | ۰ |
| ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | • | • | • | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | • • | | • | • | ٠ | • | ٠ | • | ۰ | ٠ | • | | • | • | • | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ |
| ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • • | | • | • | • | • | ۰ | • | ٠ | ٠ | • | | • | • | • | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | • | ۰ |
| ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | • | • • | | • | • | • | • | • | • | ٠ | ۰ | • | | • | ٠ | • | • | • | • | • | 0 | ۰ |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| | | | | | | | | | | | | • | | | • | | | | | | | | | | | | | | | | | | |
| | | | | • | | | | | • | | • | | | | | | • | • | | | • | | | | • | | | | | | | | |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | • | • | • | • | ٠ | • • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • | | • | • | • | • | ٠ | • | • | • | |
| ٠ | • | ٠ | ۰ | ۰ | • | • | • | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | • • | | • | • | • | • | ٠ | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | • • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | ۰ |
| • | • | • | ۰ | ٠ | • | • | • | ٠ | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • | • | ٠ | • | • | | • | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | • | • | • |
| ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • • | | • | • | • | • | ٠ | • | • | • | • | | • | • | • | • | ۰ | • | ۰ | ٠ | ۰ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • • | | • | • | • | • | ٠ | • | ٠ | • | • | | • | • | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | • | ۰ |

| By con | wontion, the group action on functions has the fi |
|--------|--|
| • • • | $z = \psi(u^{-1}(\vec{k} - \vec{t}))$ |
| whic | h means |
| • • • | $\{d(\overline{t}) \in e^{ik\cdot r} = exp(ik.d(\overline{t}-\overline{t}))$ |
| • • • | = exp(i(dk).(r-t)) |
| • • • | $\varphi \in \varphi_{3}$ |
| • • • | $k \cdot 2 \cdot r = \sum_{ij} k_i d_{ij} \delta_j = \sum_{ij} d_{ji} k_i \delta_j = \delta \cdot (d^{-1}k)$ |
| • • • | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| • • • | . (.lven |
| • • • | $S_{k}(\tau) \Psi_{k}(r) = exp(idk.(r-\tau)) M_{k}(r-\tau)$ |
| • • • | $= \Psi_{ak}(\vec{r}-\vec{z})$ |
| • • • | $(define U_{ak}(\vec{r} - \vec{\tau}) = U_k(d^{-}(\vec{r} - \tau)) = f d(\tau) U_k(r))$ |
| • • • | $\frac{1}{2} = \frac{1}{2} = \frac{1}$ |
| • • • | and $d(t) f(t) = \varphi_{d\beta k}$ |
| • • • | folt) transforms a Bloch Aunction 4K(r) |
| o o o | $A = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right)$ |
| • • • | to an since is the function taken $(=e^{-id\vec{k}\cdot\vec{z}})$ |
| • • • | -> Syklis a representation space for space |
| | froups |
| • • • | |

| • | · · | • | 9 | 8.4. Band comparibility relations |
|---|-----|---|--------|---|
| • | • • | 0 | • | Suppose a k point with dittle group GK. |
| • | • • | • | • | and a neighboring point k+SK with & K+SK |
| • | • • | • | D | If both are general points. GE has no point |
| • | • • | • | • | group part $(G_{\vec{k}} = G_{\vec{k}} + s_{\vec{k}} = T)$ |
| • | • • | • | • | Then all Trieps are 1D. and |
| • | ••• | • | • | $\lim_{k \to \infty} \chi_{k+5k} (F \neq Rnj) = \chi_{k} (F \neq Rnj)$ |
| • | ••• | • | • | Scrisfies continuity. No comparibility issue. |
| • | • • | • | ° D | k a high symmetry point |
| • | ••• | • | • | OGK+SK YGK |
| • | • • | • | • | Q GK+GK C GK |
| • | • • | 0 | • | For case O. all irreps of GK and GK+5 is one-to-one. |
| • | • • | • | • | $\lim_{\delta k \to 0} \mathbb{C}^{k+\delta k} = \mathbb{C}^{k}$, no problem |
| 0 | • • | 0 | • | @ K+6k moves away from the high symmetry lime |
| • | • • | 0 | • | îrreps of GK becomes reducible at Ktsk |
| • | • • | 0 | • | (similar to the case of crystal field |
| • | • • | • | • | |

| • | • | • | • | • | • | • • | di | . . 5 C | us | sea | A. | Pr | ev.X | 2V3 | ly | -) | ••• | ΤĹ | مع | ຸເມ | P P | N4 | 2,99 | Â. | • | • | • | • | • • |
|---|---|-----|-----|----------|----------|-----|------------|--------------------|-------------|------|---------|----------|----------|-------------|------------------|------------------|-------------------------|---------------------|-----------|--------------|-----------------|-------------------|-------------|--------|-------------|----|-------|-----|-----|
| • | • | • | • | • | • | • • | to | | <u>'</u> no | مار | ω | hæ | t | <u>ו</u> רו | ep | 9 | Þ | - 6 | °K+ | sk | • | 00 | cul | • | • | • | • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | īn | + | tre | • | ៍រុះ | rep | ع | ÷ | G | γ γ | 1¢ | 2 St ø | ;¢ł | za | † | ס | Ġ, | :+S | • | 0 | • | • | ••• |
| • | • | • | • | 0 | • | • • | • | • | • | • | • • | ٦¥ | .i (ð | •) | 51 | G |) (| بلار! موزي | 446 | ik İ | ッ ^{ド・} | t2r | ر, : (ع) | • | • | • | • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | ••• | • | • | • | • | • • | • | 0 | • | • | • | • • | 0 | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • • |
| • | • | • | • | Į. | e | ne | ed | +o | • | kno | νW | 4 | ie. | C | iar | àc | ter | 2. | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • • |
| • | 0 | • | • | T | he | - | ماط | ch | بەد | ines | • • | • | 0 | 0 | 0 | 0 | • • | • | د د ۱۵ | • • • | د د . | • | 0 | • | 0 | 0 | 0 | • | • • |
| • | • | • | • | • | K | ſ | PA: | ・ テ.(| r : |) = | Σ | <i>ф</i> | s (| د r ~ | r _A | - i | 2n) | e' | KUK | ν.+ I | д) | • | • | • | • | • | • | • | • • |
| • | ٠ | . S | 340 | læ | τ. œ. | | <i>.</i> , | | ٠ | • | | n • | ٠ | ٠ | • | ٠ | • • | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | μ. | f. ' | סר | <u>•</u> tr | an | s 104 | nOr | • • |
| • | • | • | • | َ د ب | x-b: | tal | • | • | • | • | D 5 | • | | • | 0 | • | | د. | • | • | • | / | ,, _ | · · | • | | 0 | • | • • |
| • | • | • | • | • | المع | ch | \cro | r ct e | 55 | | ŧð | -€ | 6È | • | | . Y | ω; | k(r | .) | <u>un</u> | cha | ang | ea | . D | J | 7 | • | • | • • |
| • | ۰ | • | • | 0 | ۰ | • • | ٥ | ٠ | ۰ | • | • • | ٥ | ٠ | ٠ | • | • | . X | : P | ha | se | . Þ | 4 | Т | • | • | ٠ | 0 | ٠ | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | •••• | • | • | ; -> | د ، | • | • • | • | iqk | 2K.) (P | =. <u>k</u> | + 671 -> TA | ר_ ה ד | | • | • | 0 | • | • • |
| • | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | . 7 | ς (ξ | よって | .}) | ſ. | 1 g [| τζί | φ. | ٢ | - t _A | i | 2n) - |) e | ۰ | ٠ | | د | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | | • • | _ i | <u>र</u> | Ċ | • | • | ••• | X (c | גז | ρ | ۍس ch | | । २८७ | er- | A | • | • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | | ų. | • | Å | ٩ ٩ | メして} | Γ _Α , | r _A (| <u>`</u> <u>a</u> ` | ··/ | الحر | • | 31 | ₽. | • | • | • | • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • | • | 0 | • | • • | • | 0 | if | th | و ۵ | bite | 2 7 | รุท | veve | zal | bac | k | 0 | • | 0 | • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • • |
| • | ٥ | • | • | ٠ | • | • • | ٥ | ٠ | • | • | • • | ٥ | ٥ | ٠ | • | • | • • | ٠ | ۰ | ۰ | 0 | ۰ | ۰ | ۰ | • | ۰ | 0 | ٠ | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • • |
| • | ۰ | ٠ | • | ۰ | ۰ | • • | 0 | ٠ | • | • | • • | ٥ | ۰ | ٠ | • | • | • • | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ۰ | ۰ | • | • | • | • • |
| • | • | • | • | ٠ | ٠ | • • | ٠ | ۰ | • | 0 | • • | ٠ | ٠ | ٠ | 0 | • | • • | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | • | ۰ | • | ۰ | • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • • |
| ۰ | • | • | ٠ | ٠ | • | • • | • | ۰ | • | • | • • | ٠ | ٠ | ٠ | • | • | • • | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | • | ٠ | • | ٠ | • | • | • • |
| ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | • | • • | ۰ | ٠ | • | • | • • | ۰ | ۰ | ٠ | • | • | • • | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ۰ | • | • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • • |
| | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | | |

| • | • | 0 | 0 | 0 | A | 2 | an | era | mple. | we | cons; | der | the | - ba | ud. | sTru | €tu | م | • • |
|---|---|---|---|---|----|------|-------|------------------|--------------------|---|-----------------------|--------------------|-----------------------------|---------------------------|--------|-------|-------------------|----------------|-----|
| • | • | • | • | • | .9 | £ | ให | a she | ve. | • • • | • • | • • • | | • • | • • | • • | • • | • | • • |
| ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | | !. | . (| ~ / `. | • • • | | | • • • | • • • | • • | ••• | • • | • • | ٠ | • • |
| ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | • | • • | • • | • • | • • • | | TBI. | • • • | ിധം | Sup | lottic | ۰ گـ | • • | ۰ | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • • | • • | • • • | k K | A | • • • | • • | ••• | • • | • • | • • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • • | • • | • • • | | \wedge | • • • | | • • | • • | • • | • • | • | • • |
| ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | • | • • | • • | • • | • • • | • • • | • • | | • • | • • | • • | | • • | ٠ | • • |
| ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | • • | 5 G W | ···· | Т А | C | • (* 1 | in fac | + S | roud | . be | P6h | .in | · ~ | • • |
| • | ۰ | • | ٠ | ٠ | • | • • | Pon | | . /. 个 | | • • | 31 | >, | y î | nclud | l: y | Uh. |). | • • |
| • | • | • | • | • | • | Ĩ | şd | ן ניז = | = f E | R_{r} } F | 210 | • 了 | | DGh | = C, | sv xC | -1h | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • • | 0 0 | 0 0 0 | • • • | 0 0 | | · · · | • • | 0 0 | . \$ | 1.5 | r_h | • • |
| ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | • | • | | | | • • • | ••• | • • • | • • | • • | • • | • • | • • | • | • • |
| ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | . (. | he | Bril | Louin | ZONE | (S | • • • | • • | • • | • • | • • | • • | ٠ | • • |
| • | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | • • | • • | • • | • • • | • • • | 0 0 | • • • | | • • | • • | • • | • • | ٠ | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • • | • • | • • • | • • • | • • | • • • | | • • | • • | • • | • • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • • | • • | | · Cith | Cev M | | | • • | • • | • • | • • | • | • • |
| ۰ | • | ۰ | ٠ | ٠ | • | • • | • • | • • | . / | Σ | | Çıh . | | • • | • • | • • | • • | ٠ | • • |
| • | ۰ | • | ۰ | ٠ | • | • • | • • | • • | | Cov | | - 30. | • • | • • | • • | • • | • • | ۰ | • • |
| ٠ | ۰ | • | ۰ | ٠ | • | • • | • • | • • | . \ | l' c | ch / · · · | • • • | • • | • • | • • | • • | • • | • | • • |
| • | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | • • | • • | • • | • • • • • • | • • • | /· · | • • • | • • | • • | • • | • • | • • | ٠ | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • • | • • | • • • | | • • | • • • | | • • | • • | • • | • • | • | • • |
| • | ۰ | • | ٠ | • | • | • • | • • | • • | | • • • | • • | • • • | • • | • • | • • | • • | • • | ۰ | • • |
| • | ۰ | • | ٠ | • | • | • • | I.t. | s ba | inal 8 | tructur | ۹.:. | • • • | | • • | • • | • • | • • | ۰ | • • |
| ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | • | • • | • • | • • | • • • | • • • | 0 0 | • • • | | • • | • • | • • | • • | ٠ | • • |
| ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | • | • • | • • | 20 | • • • | • • • | • • | • • • | • • | ••• | • • | • • | • • | ۰ | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • • | 15 | B_{1u} | B | | · · | A_1 | B ₁₂ | C | : 25 | 5 ² 2f | > ² | • • |
| ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | • | • • | • • | . 10 | B _{2g} | $\begin{array}{c} B_1\\ A_1\\ B_2\end{array}$ | $E' = B_{3w}A$ | $\frac{1u}{\Pi_g}$ | B_1 B_2 | 52g . | • • | • • | • • | ٠ | • • |
| ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | • • | • • | · 🕥 5 | $E_{1u} \\ A_{2u}$ | A_1 | | | $A_1 H B_2 H$ | $\frac{E_{1u}}{A_{2u}}$. | • • | • • | • • | ۰ | • • |
| ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | • | • • | • • | 0 (0 | A_{1g} | A_2 | $E'' \qquad B_2 B_1$ | | A ₁ _A | A _{1g} | • • | • • | • • | ٠ | • • |
| ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | • • | • • | · JuerE | E _{2g} | B_2 | Δ. | B_{2u} | B_1 I | ¹ 2g | • • | • • | • • | ٠ | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | • • | -10 | A_{2u} | A_1 B_1 | A'_1 | . I | B_2 A | A_{2u} | • • | • • | • • | • | • • |
| • | • | • | • | • | • | • • | | -15 | 1 | -1 | $E' = B_1$ | B_{3n} | | | • • | • • | | • | |
| ۰ | ۰ | • | ۰ | ٠ | • | • • | • • | -20 | A_{1g} | A_1 | | | A_1 A | A_{1g} . | • • | • • | • • | ۰ | • • |
| • | ۰ | • | ٠ | ٠ | • | • • | • • | • • | Γ | | K | M | | Γ. | • • | • • | • • | ۰ | • • |
| • | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | • | • • | • • | • • | • • • | • • • | 0 0 | • • • | | • • | • • | • • | • • | • | • • |
| ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | • | • • | • • | • • | • • • | • • • | • • | • • • | • • | • • | • • | • • | • • | ۰ | • • |

| • • • • • | |
|---------------|---|
| • • • • • | And we only consider Pz orbitals (blue bands) |
| • • • • • | |
| • • • • • | (add under Th) others 5 pr. Py are even under Th. |
| • • • • • | |
| | $P_{+} = P_{-}$ |
| • • • • • | \mathcal{A} |
| • • • • • | |
| • • • • • | Cou/Doh |
| • • • • • | 17 -> AI/Aig the orbital character is 1 |
| • • • • • | |
| • • • • • | |
| • • • • • | Characters. |
| • • • • • | $\nabla (\mathbf{x}) = \mathbf{y} \text{for } \mathbf{x} = \mathbf{x}$ |
| • • • • • | $(': C_{ov}, N_{p}, V_{j}) = C_{v}$ |
| • • • • • | |
| • • • • • | $F C_2 C_3^{\pm} C_6^{\pm} \sigma_4 \cdot \sigma_{11}$ |
| • • • • • | |
| • • • • • | |
| • • • • • | Cov Cin |
| • • • • • | $T_{P} = A_{1} + B_{2} = P_{1} + P_{3} (A_{1} + B_{2}) \times A''$ |
| • • • • • | $\simeq A_{a}$, τB_{a} |
| • • • • • | $F = C_2 + C_2 + C_2$ |
| • • • • • | $W = i \frac{2\pi}{3}$ |
| · by f · · · | $a_1 2 = -4$ |
| | $\bullet A = (A + iA)$ |
| | $(\ell^{1} \cup \ell^{2}) \qquad (\ell^{2} \cup \ell$ |
| | · · · · · · · · · · · · · · · · · · · |
| • • • • • | |
| - • • • • • • | M. Crv. E Cr Jdr Jur |
| • • • • • | μ |
| | |
| | $T_{M} = A + B_{2} = P_{1} + l_{2} + l_{2} + l_{2} + l_{2}$ |

| • | • | • | • | • | • | ۍ ر | • | <u>۔</u> | • • | • | ⊋` | K | • | • | • | 211 | ارت | • | nee | وحل | • • • | م | . L | محر | K | .a | .t- | . - | ولمانا | ر | • | • | • |
|---|---|---|---|---|-----|--------|----------------|----------|--------|---|-----|-----|---|---|---|-----|-----|-----|----------|----------|----------------|---|-------------|----------|------------|----|-----|----------------|----------|-----|----|---|---|
| ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | • | • | | י - | ۰ | ۰ | | • | ۰ | ٠ | • | Q | ۰ | • | ۰ | | ٠ | . 7 | • | 。 。 | • | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ۰ |
| ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | • (| 262 | / [•] | . (| -(•h | ۰ | . (| -30 | • | ۰ | ٠ | ch | ar | a.C | te | . | s.t | • | . F | <u> </u> | 、 \ | JN | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | Ē | <u> </u> | • | σh | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | C | 6V | • | . (| • | • | t | • | A | = | : | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | ٠ | ۰ | • | • | • | ۰ | ۰ | • | • | ۰ | • | ۰ | • | ٠ | • | • [| ۰ | • | ~ (| ٠ | B, | .5 | T3 | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • | • | ٠ | ۰ | ۰ | • | • | ۰ | • | ۰ | ٠ | ٠ | • | • | ۰ | • | • | ٠ | • | • | • | ٠ | • | R | ٺ | .T | 1° | • | ۰ |
| • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • | • | ٠ | ۰ | ۰ | • | • | ۰ | • | ۰ | Ċ | • | • | | ۰ | • | ľ | • | 4 °' | ч. | ٦. | ٠ | Ē | ~ | <u> </u> | Т | • | • | ۰ |
| ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | • | ۰ | • | ۰ | ۰ | • | • | • | • | | ۰ | . ເ | 3 | • | - 1 | Ş | ۰ | ۰ |
| ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ٥ | ۰ | ٥ | ۰ | ٥ | ۰ | ۰ | ۰ | ٥ | ۰ | ۰ | ۰ | • | ٥ | • | -1 | • | ۲۰ - | • | ·2 | ٠ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٥ |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | ٠ | ۰ |
| • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • | ٠ | • | ۰ | • | ٠ | • | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | • | • | ۰ | • | ۰ | ٠ | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | • | ۰ | ٠ | ۰ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٥ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٥ | ٠ | ٠ | ٥ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • | • | • | ٠ | ۰ | • | • | ۰ | • | ٠ | ٠ | ٠ | • | • | ٠ | • | • | ٠ | • | • | • | ٠ | ٠ | • | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ۰ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | • | ۰ | ٠ | ۰ |
| ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٥ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | • | ٠ | • | ٠ | ۰ | ۰ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| ۰ | • | • | • | • | • | • | ۰ | • | • | • | ۰ | • | • | • | • | • | • | ۰ | • | ۰ | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | ٠ | ۰ | • | • | • | ۰ | ۰ | • | • | ۰ | • | ۰ | ٠ | • | • | • | ۰ | • | ٠ | ٠ | • | • | ٠ | • | ٠ | ۰ | • | • | • | • | ۰ |
| ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ٠ | • | ٠ | ۰ | ۰ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| • | ٠ | • | ٠ | • | • | ٠ | ٠ | ۰ | • | ٠ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | • | • | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • | ٠ | ٠ | • | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | 0 | ٠ | • | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ٠ | • | ٠ | ۰ | ۰ |
| ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ | ۰ | ٠ | ٠ | ٥ | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | ۰ |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | ۰ |
| • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | • | • | • | | | • | • | | • | • | | • | • | • | • | | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • | • |
| • | • | • | ٠ | ۰ | • | • | • | ۰ | ۰ | • | • | ۰ | • | ۰ | ٠ | • | • | • | ۰ | • | ۰ | ٠ | • | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | ٠ | • | ٠ | • | ۰ |
| • | • | • | ٠ | • | • | • | • | ۰ | • | • | • | • | ٠ | ۰ | ٠ | ٠ | • | • | ۰ | • | ٠ | ٠ | • | • | ٠ | ٠ | ٠ | ۰ | • | • | ٠ | • | ۰ |





(a) Bravais lattice

(b) Reciprocal lattice



PRB 89, 165430 (2014)



| 622 (D ₆) | 6mm (C _{6v}) | б2т (D _{3h}) | E E E | C_2 C_2 σ_h | C_3^{\pm} C_3^{\pm} C_3^{\pm} | $C_{6}^{\pm} \\ C_{6}^{\pm} \\ S_{3}^{\pm}$ | C'_{2i} σ_{di} C'_{2i} | C''_{2i} σ_{vi} σ_{vi} |
|--|--|---|-----------------------|---|--|---|--|---|
| $\begin{array}{ccc} A_1 & \Gamma_1 \\ A_2 & \Gamma_2 \\ B_1 & \Gamma_3 \\ B_2 & \Gamma_4 \\ E_2 & \Gamma_6 \\ E_1 & \Gamma_5 \\ \end{array}$ | $\begin{array}{cccc} A_1 & \Gamma_1 \\ A_2 & \Gamma_2 \\ B_2 & \Gamma_3 \\ B_1 & \Gamma_4 \\ E_2 & \Gamma_6 \\ E_1 & \Gamma_5 \end{array}$ | $ \begin{array}{cccccc} A_{1}' & \Gamma_{1} \\ A_{2}' & \Gamma_{2} \\ A_{1}'' & \Gamma_{3} \\ A_{2}'' & \Gamma_{4} \\ E' & \Gamma_{6} \\ E'' & \Gamma_{5} \end{array} $ | 1 1 1 2 2 | $ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ 2 \\ -2 \\ \end{array} $ | $ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{array} $ | $ \begin{array}{c} 1 \\ 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \end{array} $ | $ \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} $ | $ \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} $ |

 $6/mmm = 622 \otimes \overline{1} (D_{6h} = D_6 \otimes C_i)$

Bradley & Cracknell

| 32 (| D ₃) | 3m (| (C _{3v}) | E E | $C_3^\pm\ C_3^\pm$ | C'_{2i} σ_{di} |
|-----------------|------------------------------------|--|--|-------------|--------------------|----------------------------|
| A_1 A_2 E | $\Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3$ | $\begin{array}{c} A_1 \\ A_2 \\ E \end{array}$ | Γ_1 Γ_2 Γ_3 | 1 1 2 | 1 1 -1 | 1 -1 0 |

 $\overline{3}m = 32 \otimes \overline{1} (D_{3d} = D_3 \otimes C_i)$

| mm2 (C _{2v}) | 222 (D ₂) | E E | C_{2z} C_{2z} | σ_y C_{2y} | $\sigma_x C_{2x}$ |
|---|--|------------------|---|---|--|
| $\begin{array}{ccc} A_1 & \Gamma_1 \\ B_2 & \Gamma_4 \\ A_2 & \Gamma_3 \\ B_1 & \Gamma_2 \end{array}$ | $ \begin{array}{cccc} A & \Gamma_1 \\ B_3 & \Gamma_4 \\ B_1 & \Gamma_3 \\ B_2 & \Gamma_2 \end{array} $ | 1 1 1 1 | $ \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ 1 \\ -1 \end{array} $ | $ \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{array} $ | $ \begin{array}{c} 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{array} $ |

 $mmm = 222 \otimes \overline{1} (D_{2h} = D_2 \otimes C_i)$