



ELEMENTI SIMETRIJE, KRISTALNE STRUKTURE

Mineralogija ZOK

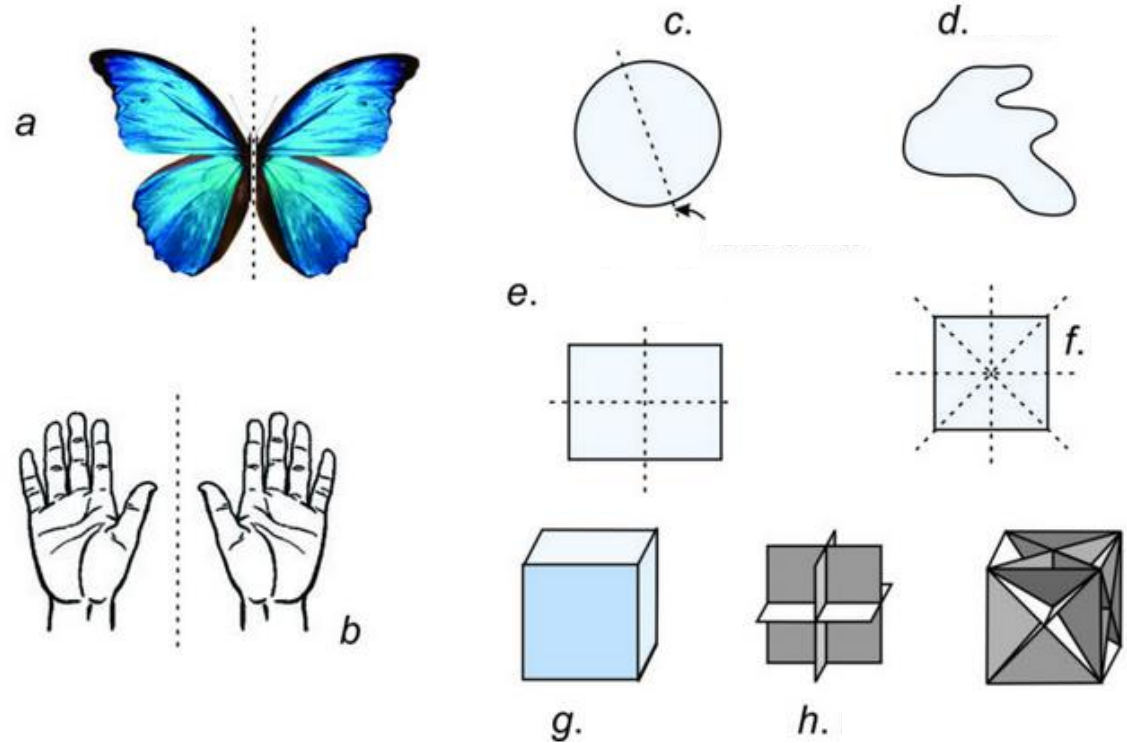
Prof. dr. sc. Nenad Tomašić

Sadržaj

- elementi simetrije kristalnih poliedara
- kristalna struktura
- Bravaisove rešetke
- prostorne grupe

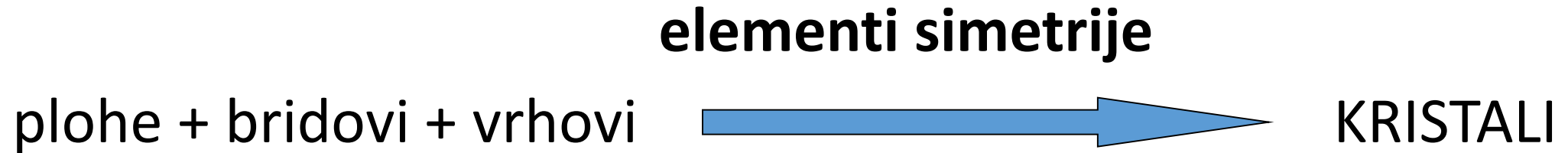
Simetrija

- mnoge stvari i pojave u prirodi pokazuju simetričnost
- vrlo često se doima kako dijelovi biljaka i životinja kao da se međusobno ogledaju u zrcalu
- to je slučaj i s kristalima, a posljedica je pravilne unutarnje građe



*Slika preuzeta od [Dexter Perkins](#) pod [licencom](#)

Simetrija kristala



- elementi simetrije = točka, linija ili ravnina koja ostaje nepromijenjena nakon operacije simetrije
- operacije simetrije → operacije ponavljanja

OPERACIJE I ELEMENTI SIMETRIJE

1. Preslikavanje preko centra simetrije

→ centar simetrije (c, i, $\bar{1}$)

2. Preslikavanje preko ravnine simetrije

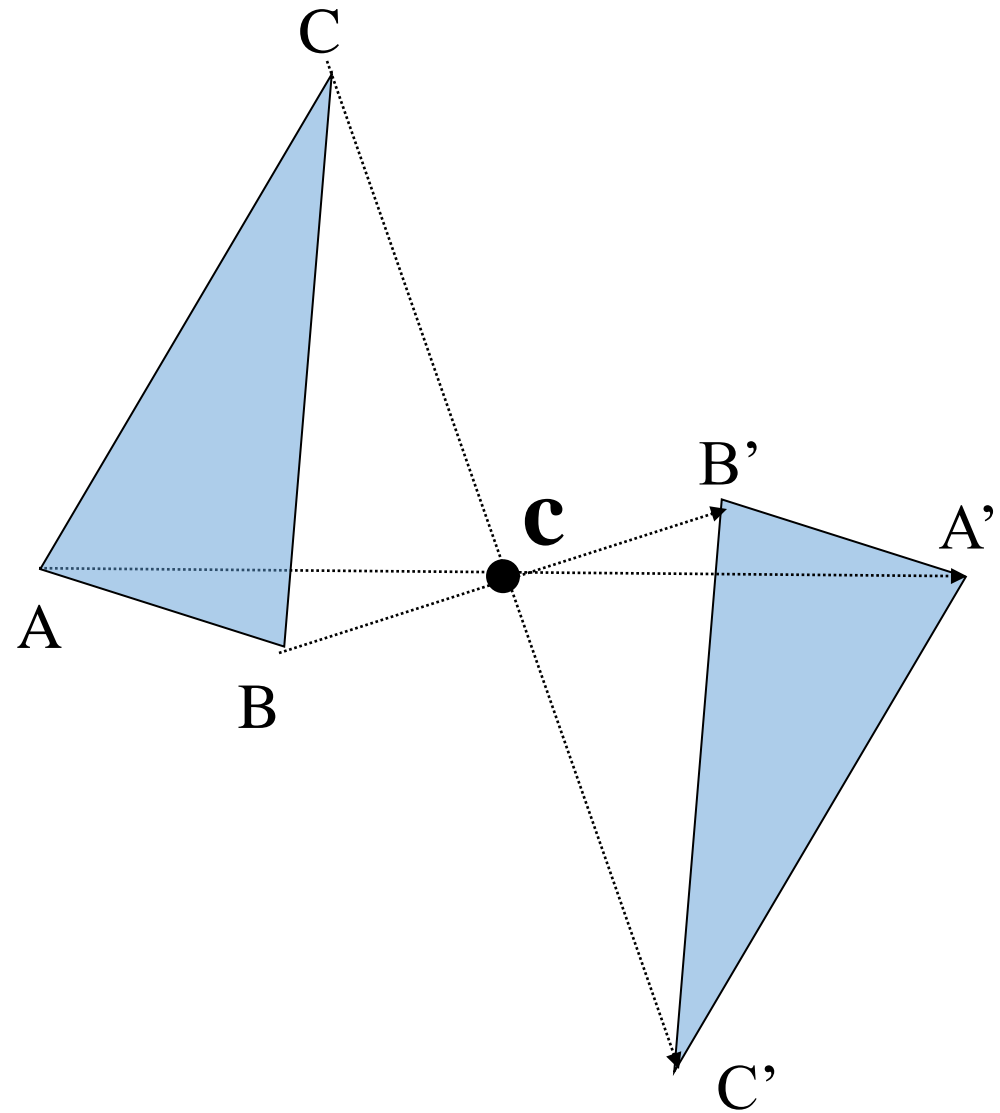
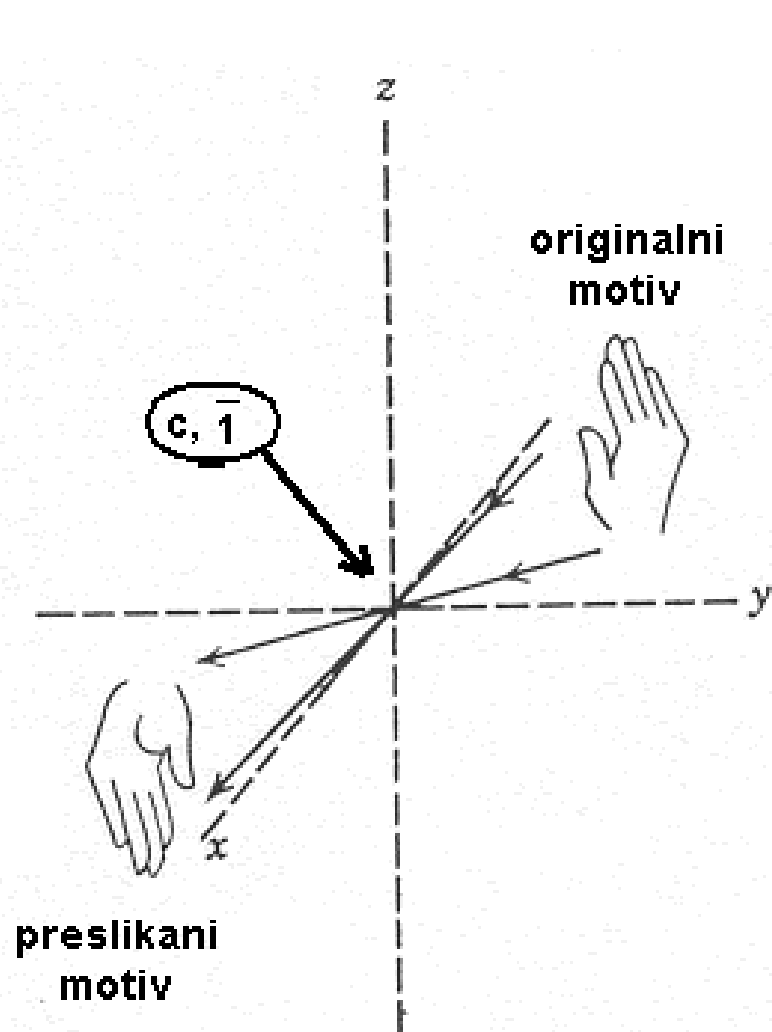
→ ravnina simetrije (P, m)

3. Rotacija

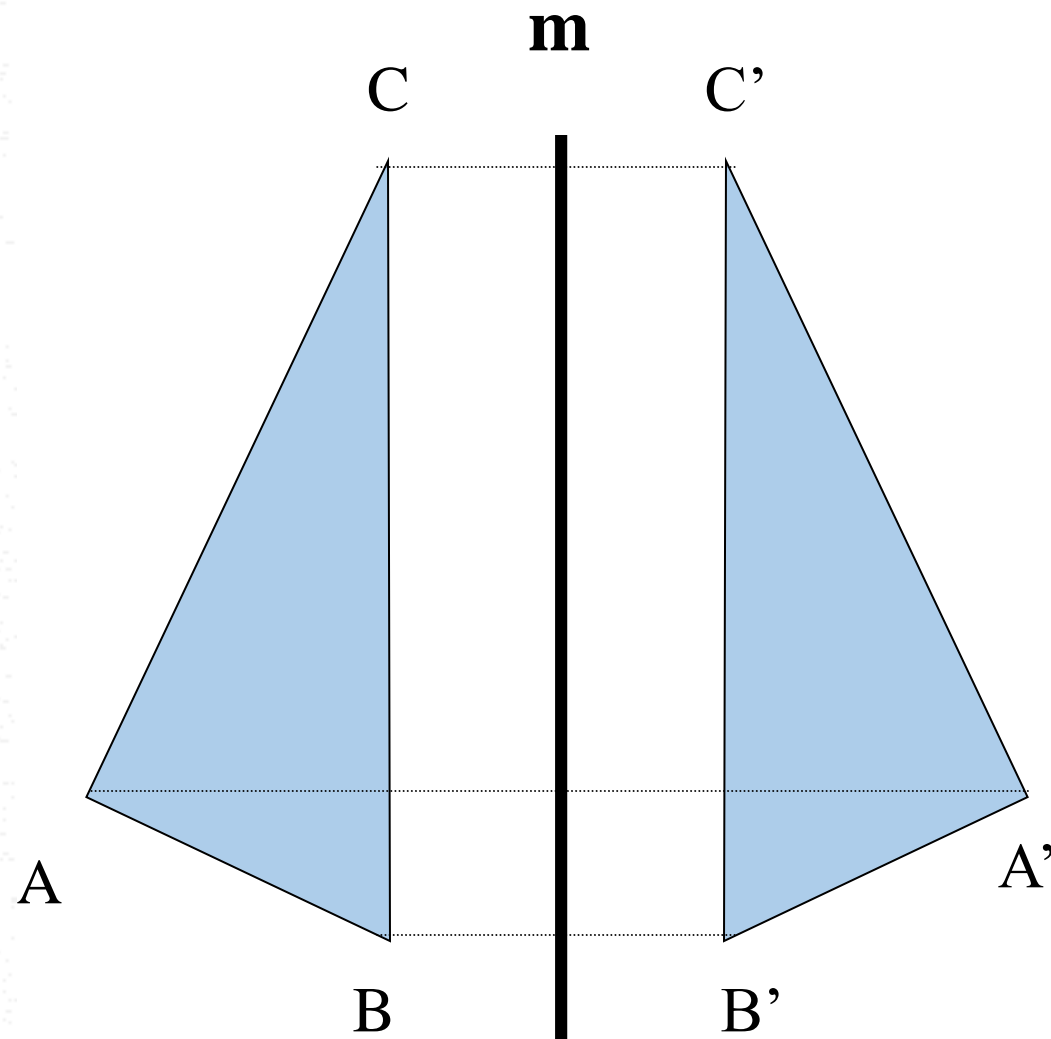
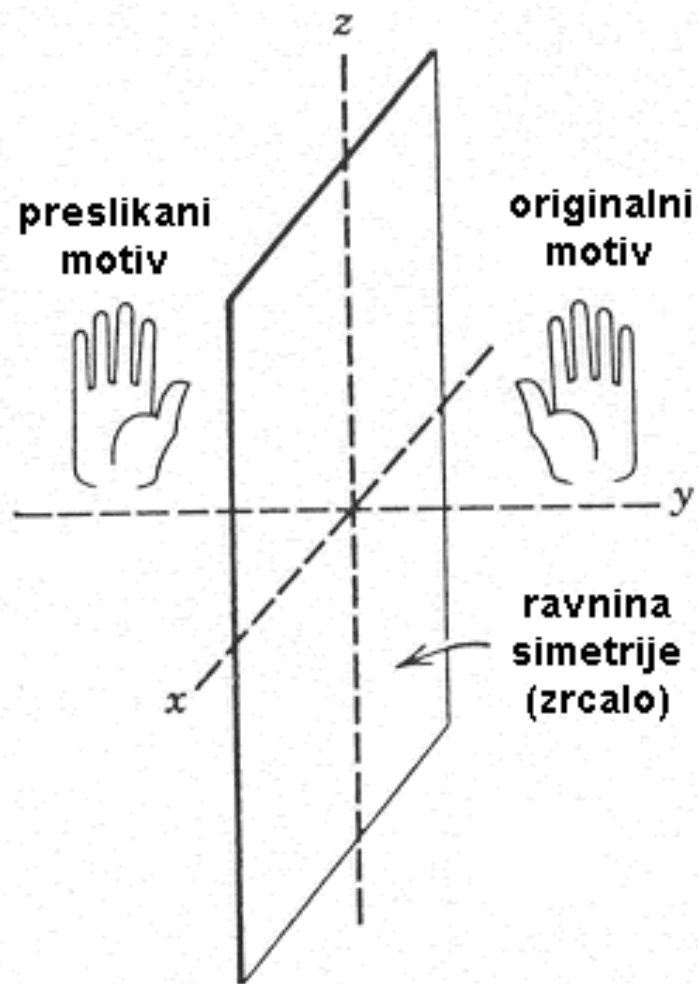
→ osi simetrije (L^2, L^3, L^4, L^6

2, 3, 4, 6)





Preslikavanje preko centra simetrije



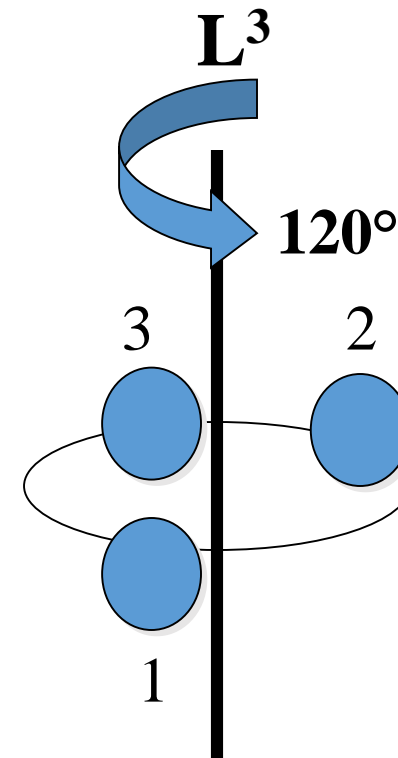
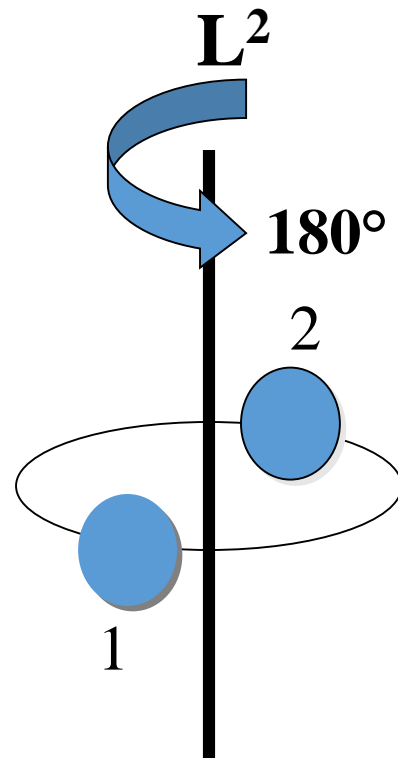
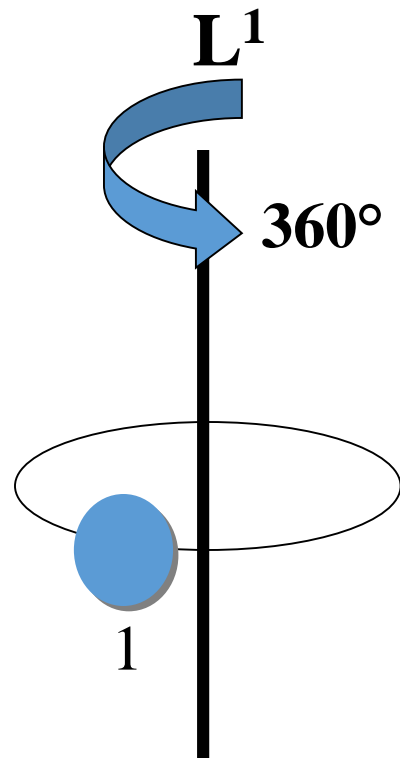
Preslikavanje preko ravnine simetrije



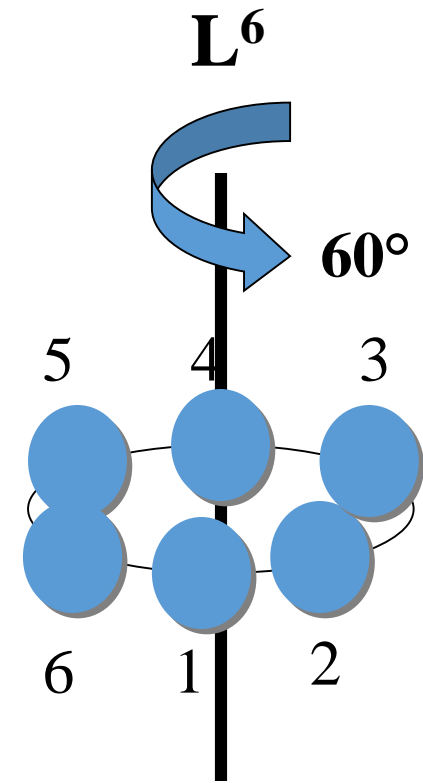
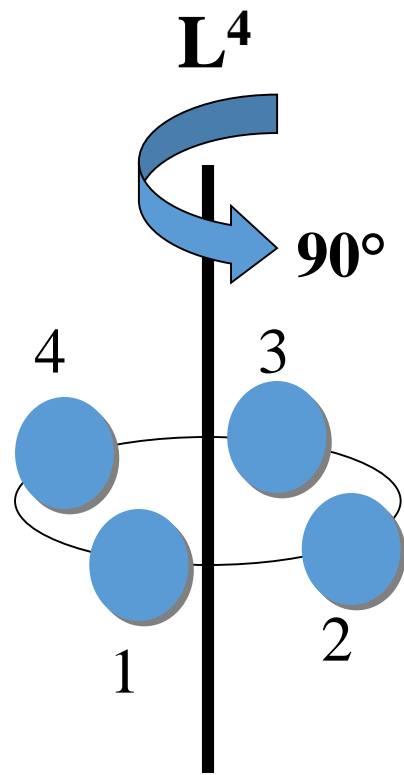
Rotacija

Naziv osi	Kut rotacije	Oznaka	Simbol
Monogira	360°	$L^1, 1$	
Digira	180°	$L^2, 2$	
Trigira	120°	$L^3, 3$	
Tetrigira	90°	$L^4, 4$	
Heksagira	60°	$L^6, 6$	

Osi simetrije



Osi simetrije



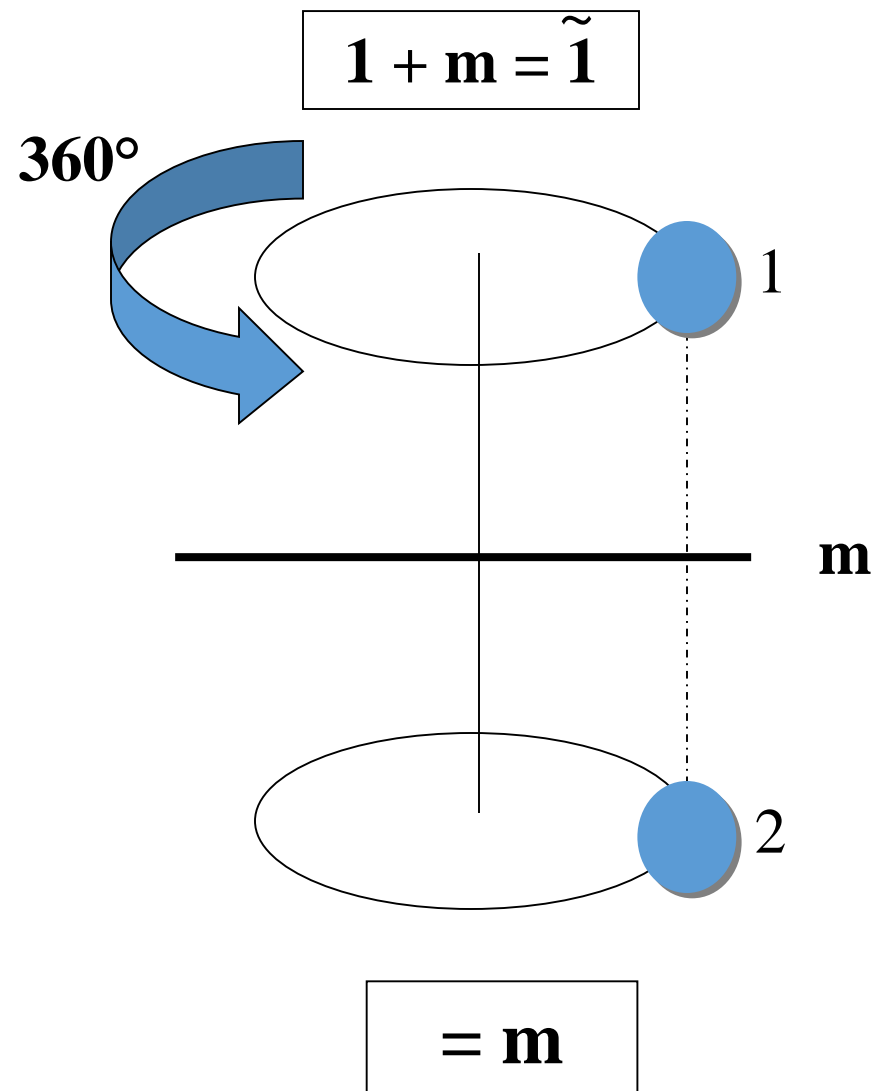
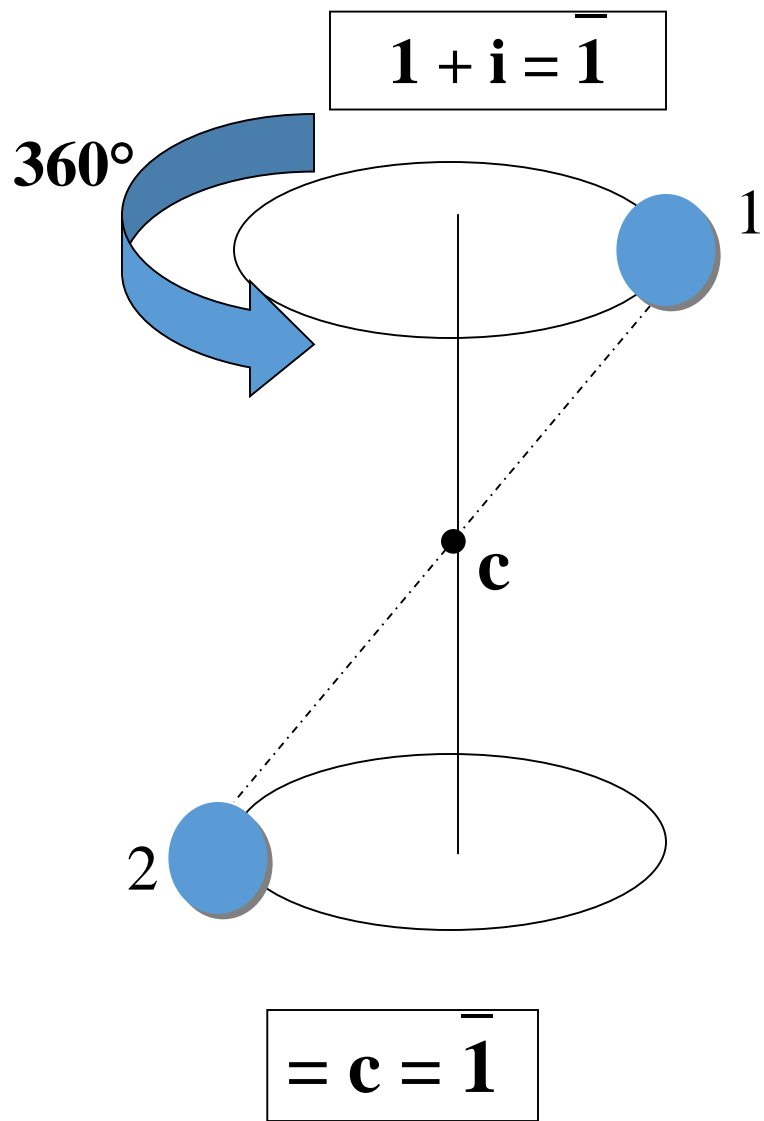
Složeni elementi simetrije

1. os simetrije + centar simetrije
→ ROTOINVERZNA OS
2. os simetrije + ravnina simetrije
→ ROTOREFLEKSNA OS

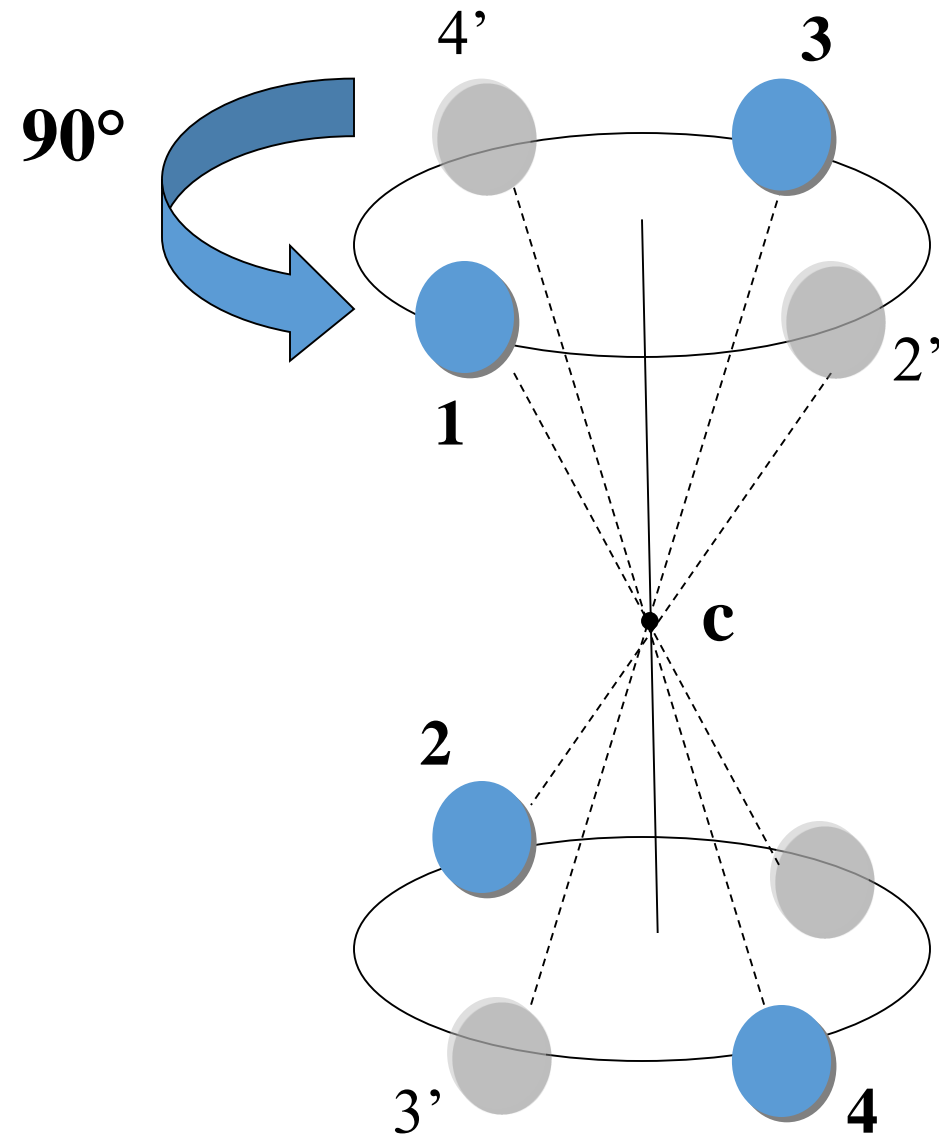
Složeni elementi simetrije - označavanje

Rotoinverzne osi		Rotorefleksne osi	
$1 + i$	$\bar{1}$	$1 + m$	$\tilde{1}$
$2 + i$	$\bar{2}$	$2 + m$	$\tilde{2}$
$3 + i$	$\bar{3}$	$3 + m$	$\tilde{3}$
$4 + i$	$\bar{4}$	$4 + m$	$\tilde{4}$
$6 + i$	$\bar{6}$	$6 + m$	$\tilde{6}$

Primjeri složenih osi



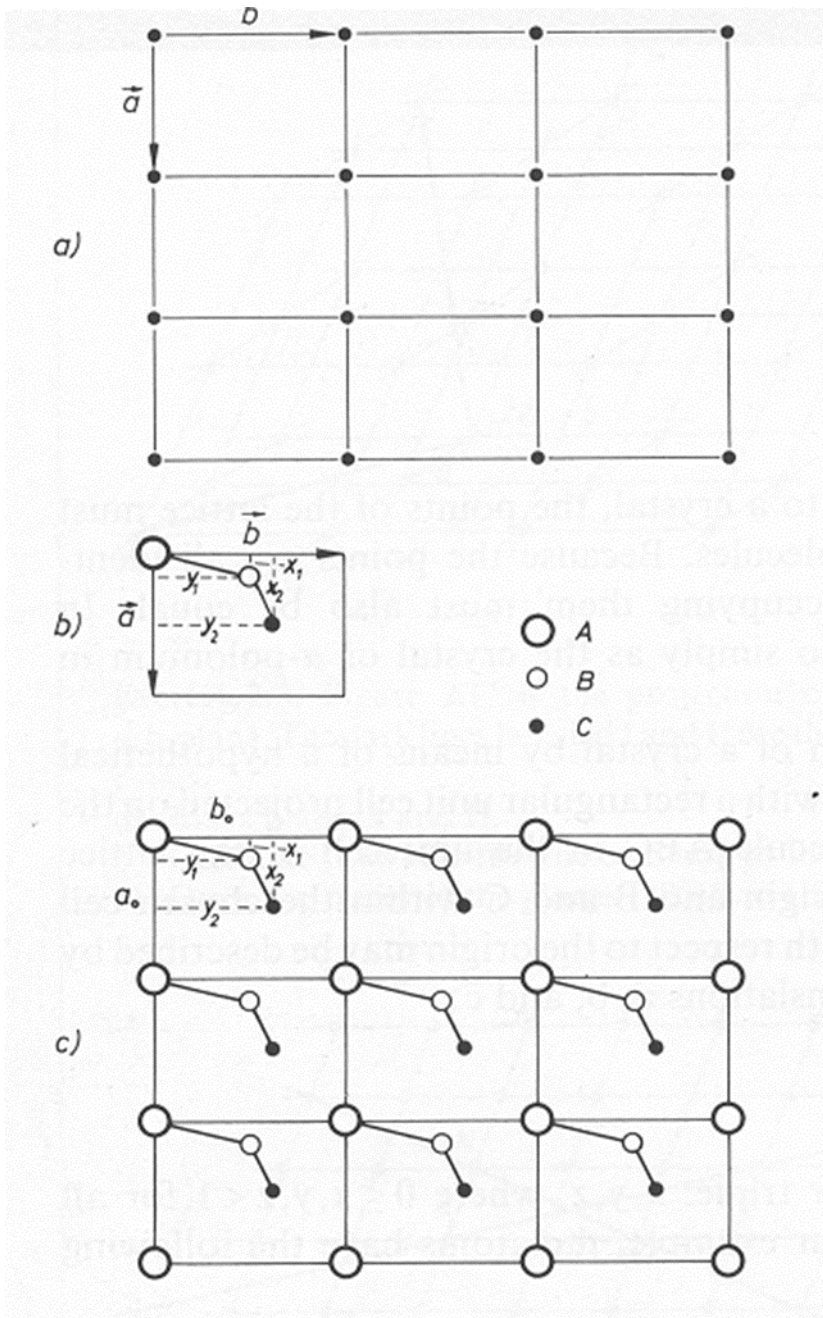
Primjeri složenih osi



$$4 + i = \bar{4}$$

Kristalna struktura

- za definiranje kristalne strukture nekog materijala potrebno je poznavati dimenzije jedinične ćelije i sadržaj te ćelije (vrsta i položaj atoma)
- u pravilu se ćelija prikazuje u projekciji $xy0$ ravnine
- ishodište je gornjem lijevom kutu
- položaj atoma unutar ćelije određen je koordinatama x, y, z koje su izražene u dijelovima perioda identičnosti duž kristalografskih osi a, b, c
- $0 \leq x, y, z < 1$
- $Z =$ broj formulskih jedinki u jediničnoj ćeliji



ćelija

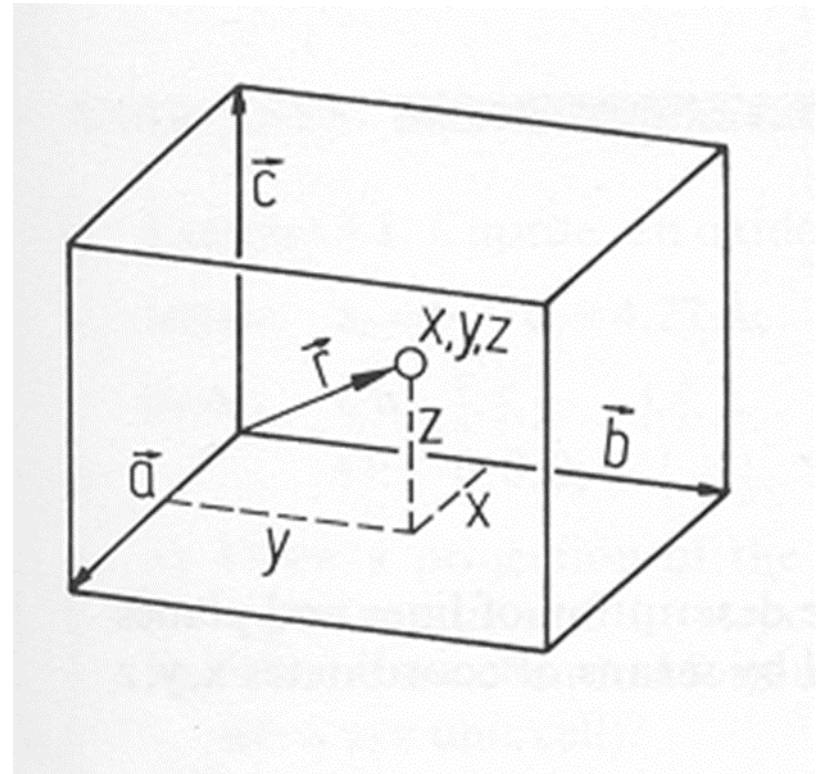
+

sadržaj

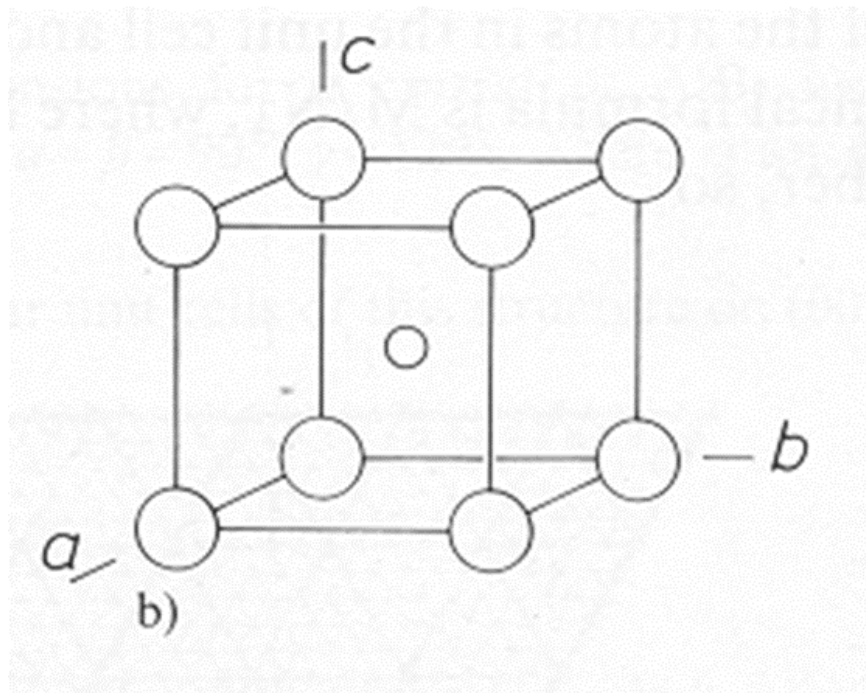
=

struktura

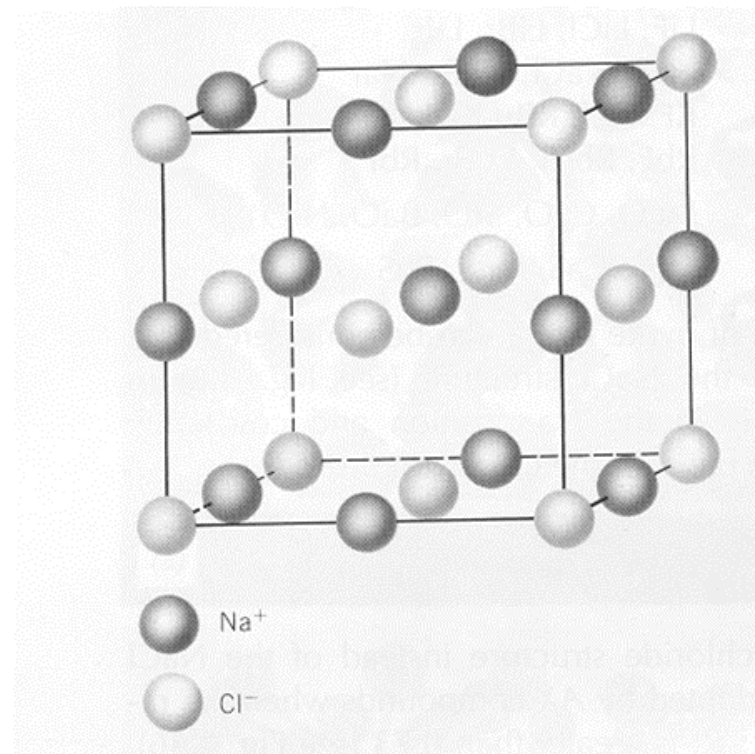
Koordinate atoma



Broj formulskih jedinki (Z)



CsI
Z=1



NaCl
Z=4

Bravaisove rešetke

- jedinične ćelije mogu imati različite oblike ovisno o parametrima jedinične ćelije tj. o sustavu u kojem je materijal kristalizirao
- ćelije se mogu razlikovati i po centriranosti tj. broju čvorova u jediničnoj ćeliji
- Bravais je pokazao da postoji ukupno 14 različitih ćelija koje predstavljaju jedinih 14 mogućih načina periodičnog ponavljanja točaka u prostoru

Bravaisove rešetke

- tipovi prostornih rešetki prema tipu jedinične ćelije usporedivi s 32 točkaste grupe (kristalne klase)
- Bravaisove rešetke (Bravais, 1811.-1863.)
- postoji **14** načina na koje je moguće ispuniti prostor pomoću trodimenzionalne periodične mreže točaka
- tipovi rešetka su poredani prema kristalnom sustavu

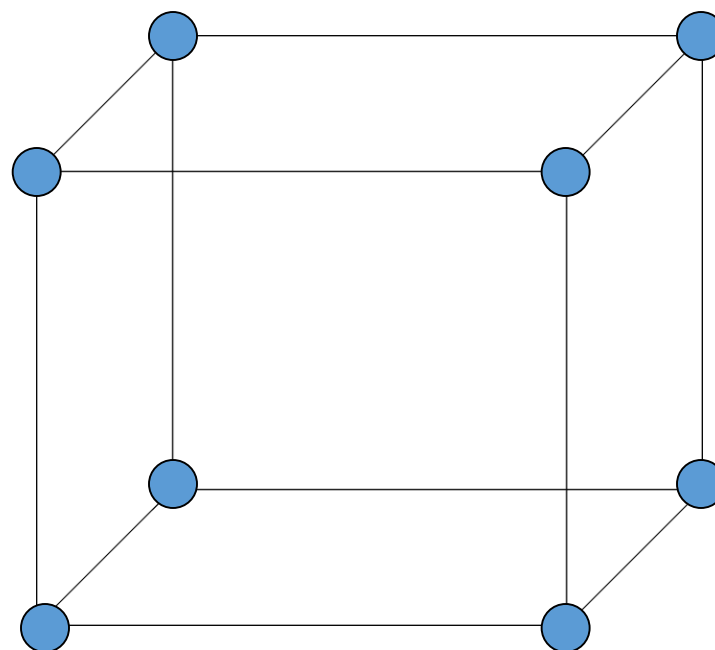
Tipovi jediničnih ćelija

Primitivna ćelija

Oznaka: P

*Broj identičnih točaka
(čvorova):*

$$8 \times 1/8 = 1$$



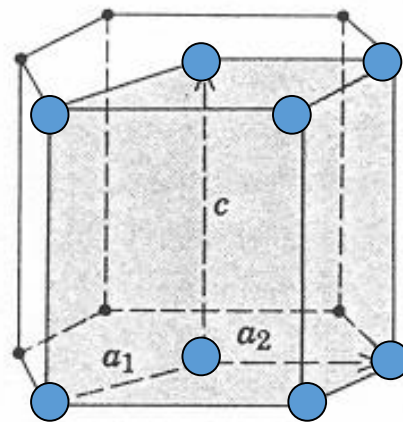
Tipovi jediničnih ćelija

Primitivna ćelija

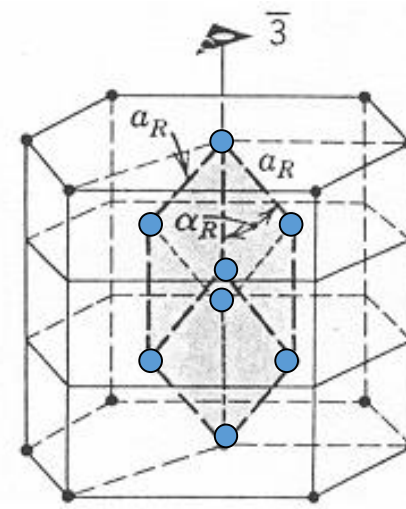
Oznaka: **P**

Broj identičnih točaka
(čvorova):

$$8 \times 1/8 = 1$$



P (heksagonska)



R (romboedrijska)

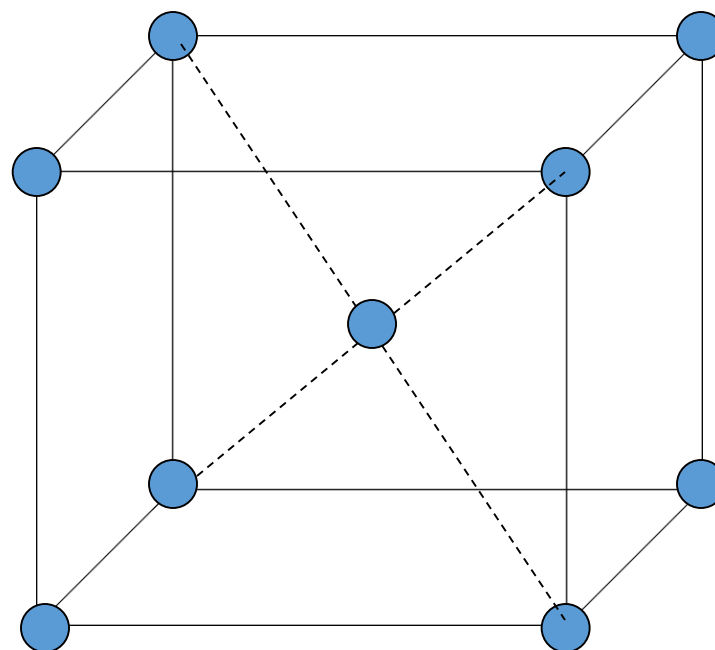
Tipovi jediničnih ćelija

**Volumno-
centrirana ćelija**

Oznaka: I

*Broj identičnih točaka
(čvorova):*

$$1 + 8 \times 1/8 = 2$$



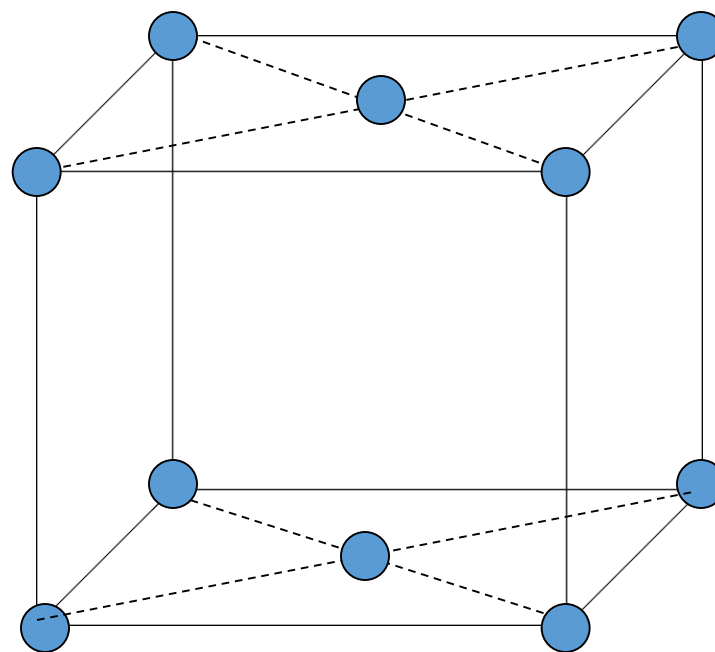
Tipovi jediničnih ćelija

**Plošno-centrirana
ćelija po paru
ploha**

Oznaka: A, B, C

*Broj identičnih točaka
(čvorova):*

$$2 \times 1/2 + 8 \times 1/8 = 2$$



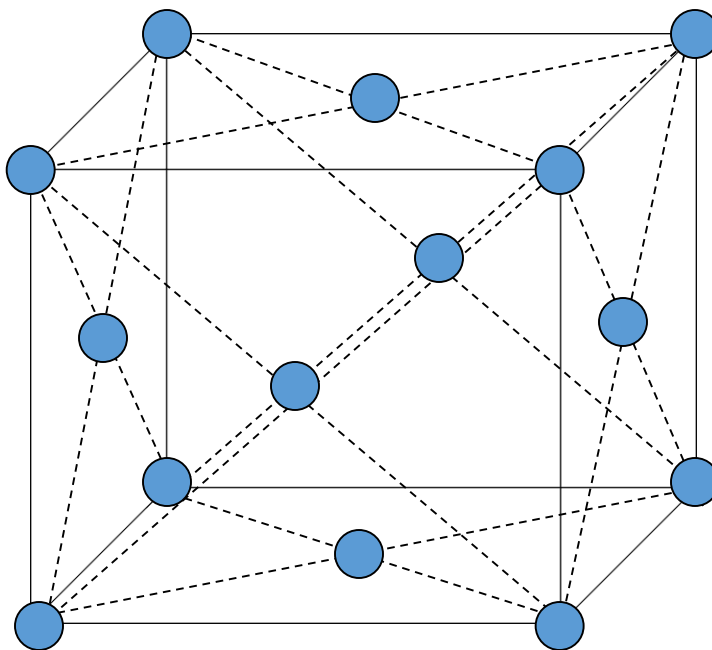
Tipovi jediničnih ćelija

Plošno- centrirana ćelija

Oznaka: F

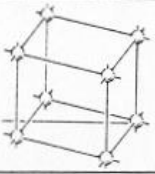
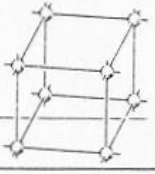
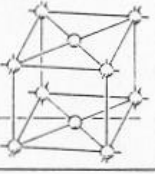
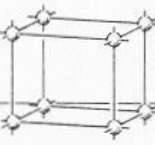
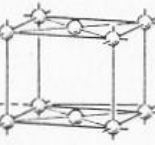
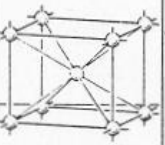
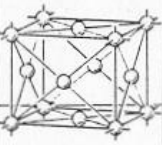
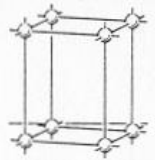
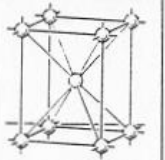
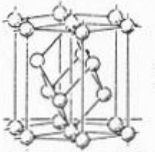
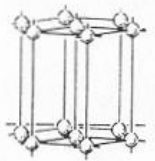
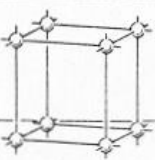
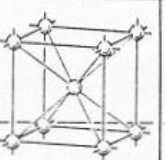
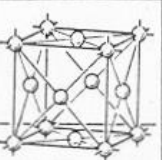
*Broj identičnih točaka
(čvorova):*

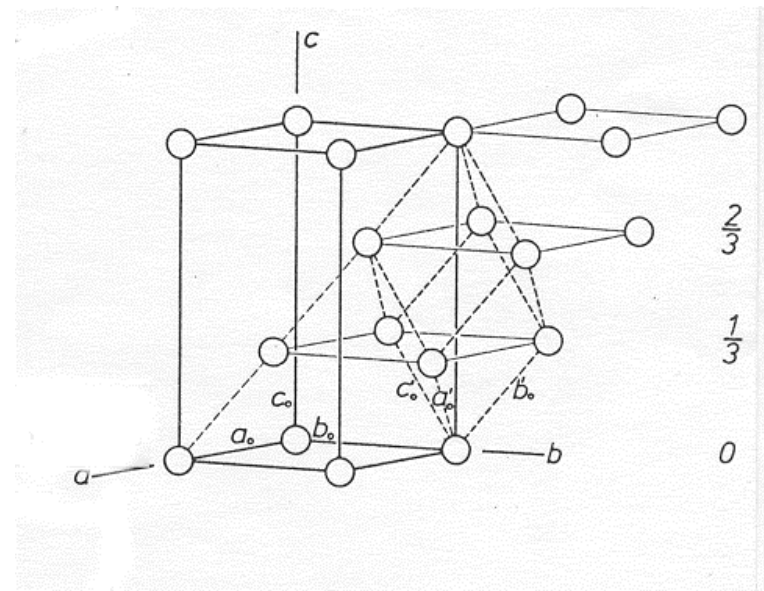
$$6 \times 1/2 + 8 \times 1/8 = 4$$



Bravaisove rešetke - nastavak

Tip rešetke	Broj čvorova u ćeliji	Koordinate čvorova
P	1	0,0,0
A	2	0,0,0; 0,1/2,1/2
B	2	0,0,0; 1/2,0,1/2
C	2	0,0,0; 1/2,1/2,0
I	2	0,0,0; 1/2,1/2,1/2
F	4	0,0,0; 0,1/2,1/2; 1/2,0,1/2; 1/2,1/2,0
R	1 ili 3	0,0,0 0,0,0; 2/3,1/3,1/3; 1/3,2/3,2/3

Sustav	P	C	I	F
Triklinski				
Monoklinski				
Rompski				
Tetragonski				
Trigonski				
Heksagonski				
Kubični				



Simetrija na razini strukture

- atomi u kristalnim strukturama su pravilno tj. simetrično raspoređeni (postoje elementi simetrije)
- Simetrija u strukturi:
 - osnovni elementi simetrije
 - elementi simetrije fine strukture

1. **Osnovni elementi simetrije:** ravnina simetrije (m), osi simetrije (obične (2,3,4,6), rotoinverzne i rotorefleksne), centar simetrije

2. **Elementi simetrije fine strukture**

- ravnine s klizanjem (klizne ravnine)
- vijčane (helikoidalne) osi

Elementi simetrije fine strukture

1. Ravnine s klizanjem = preslikavanje preko ravnine simetrije (zrcaljenje) + translacija paralelno s ravninom simetrije
2. Vijčane osi = rotacija za određeni kut + translacija paralelno s osi simetrije

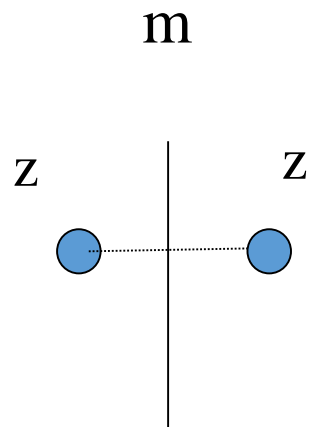
Prikaz elemenata simetrije u strukturi

- elementi su prikazani svojim simbolima
- promatra se djelovanje elemenata na pojedini strukturni motiv (čvor, atom), kojeg preslikavamo iz njegovog početnog položaja
- svaki atom ima svoje relativne koordinate x , y i z koje imaju vrijednost između 0 i 1 perioda identičnosti a_0 , b_0 i c_0
- budući da je prikaz dvodimenzionalan, promjene koordinata x i y tijekom operacija simetrije uočavamo na samom prikazu, dok koordinatu z pišemo pored atoma

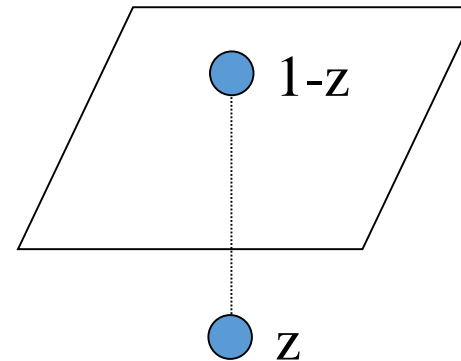
Ravnine simetrije

1. Obična ravnina simetrije

Vertikalna



Horizontalna

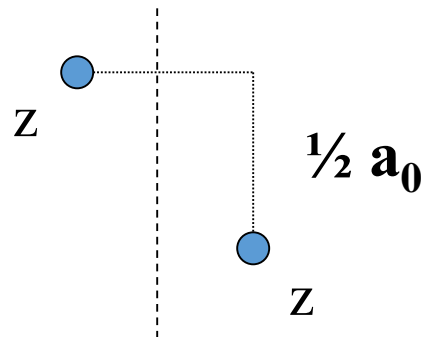


2. Ravnine s klizanjem: a, b, c, n i d ravnina s klizanjem (klizna ravnina)

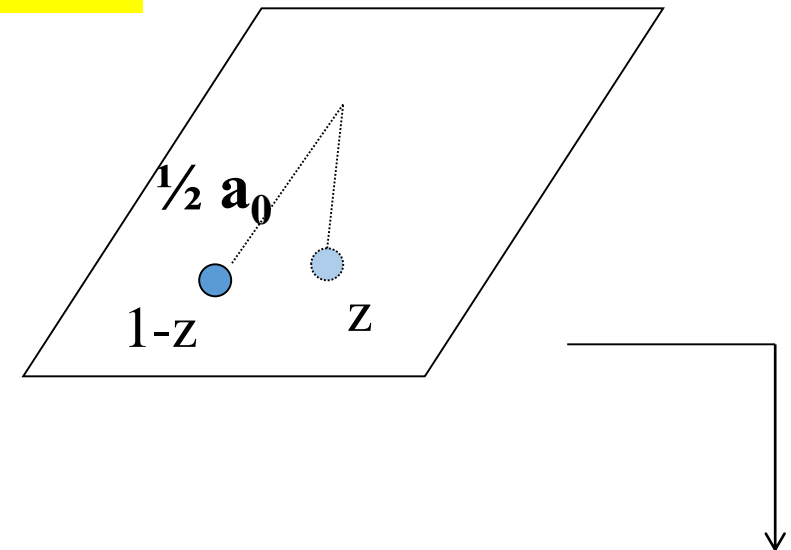
- njihova simetrijska operacija sastoji se od zrcaljenja i određenog pomaka duž nekog smjera paralelnog s ravninom simetrije (pomak ovisi o vrsti klizne ravnine)

a ravnina s klizanjem

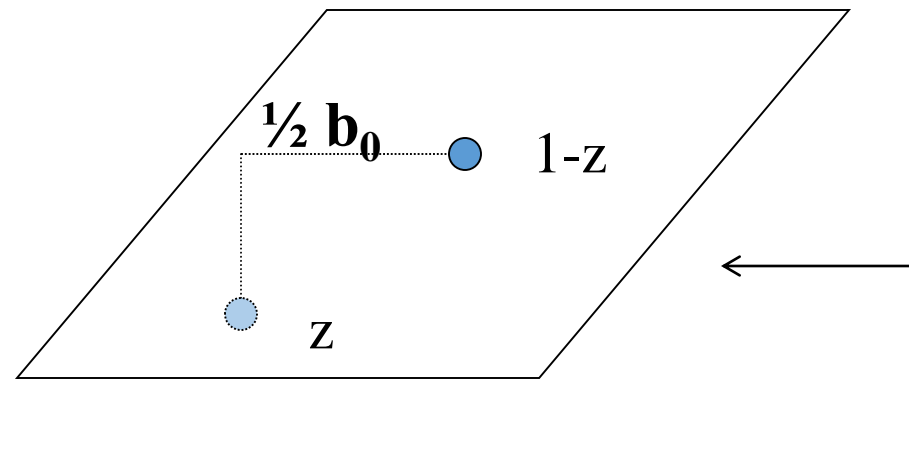
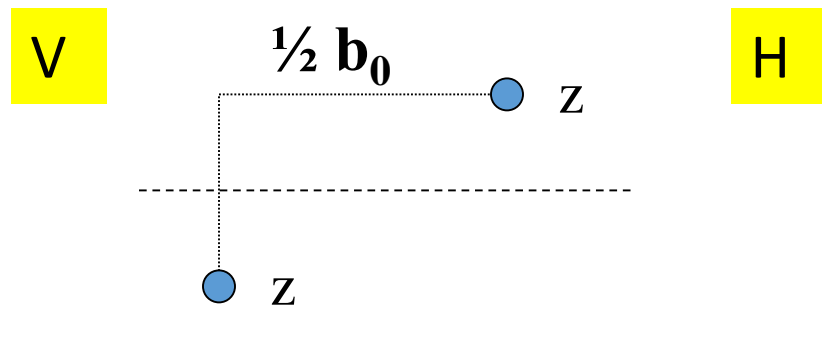
Vertikalna



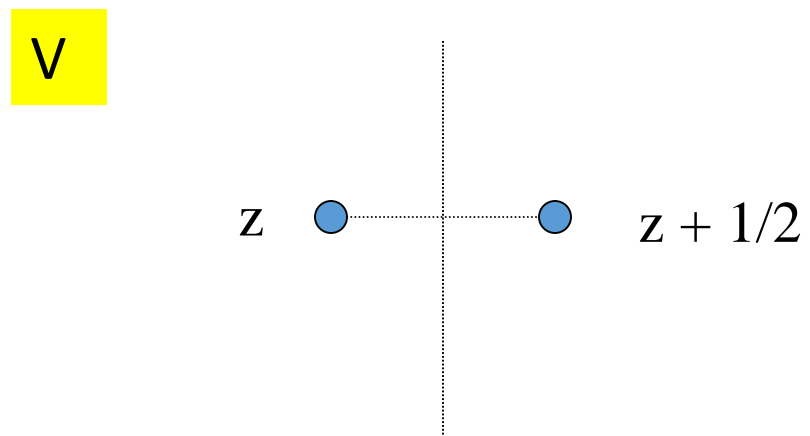
Horizontalna



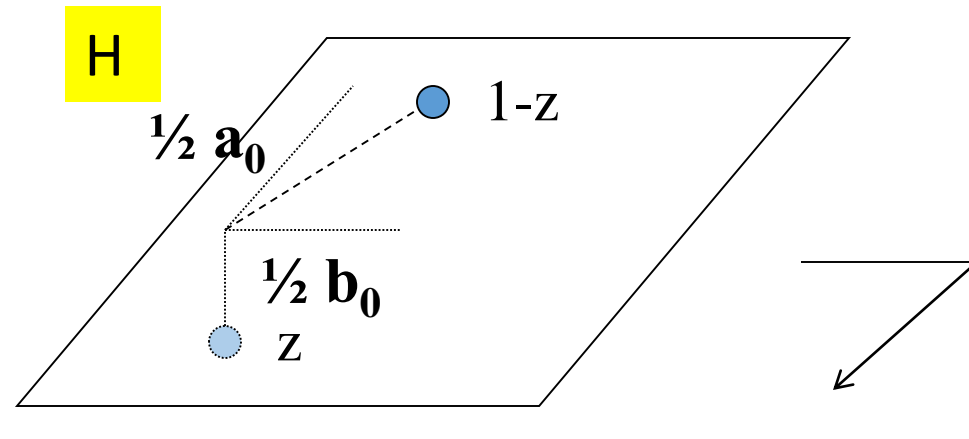
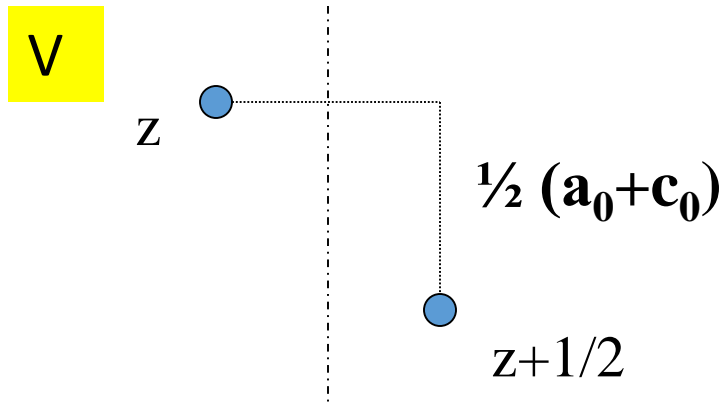
b ravnina s klizanjem



c ravnina s klizanjem



n ravnina s klizanjem (dijagonalna)



Mogućnosti dijagonalnih ravnina s klizanjem:

$$\frac{1}{2} (a_0+b_0)$$

$$\frac{1}{2} (a_0+c_0)$$

$$\frac{1}{2} (b_0+c_0)$$

$$\frac{1}{2} (a_0+b_0+c_0)$$

d dijamentna ravnina s klizanjem (tetragonski i kubični sustav)

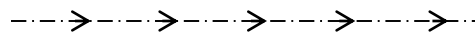
Mogućnosti dijagonalnih ravnina s klizanjem:

$$\frac{1}{4} (a_0 + b_0)$$

$$\frac{1}{4} (a_0 + c_0)$$

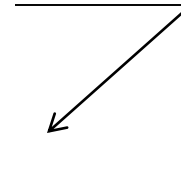
$$\frac{1}{4} (b_0 + c_0)$$

$$\frac{1}{4} (a_0 + b_0 + c_0)$$



V

H

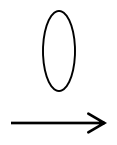

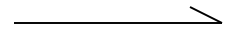
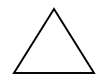
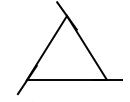
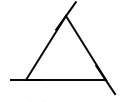
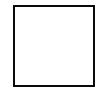
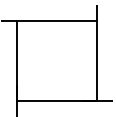
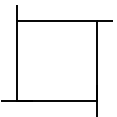
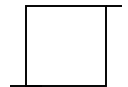

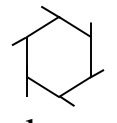
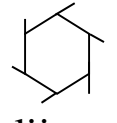
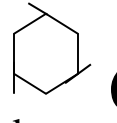
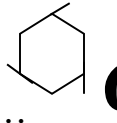
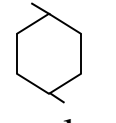


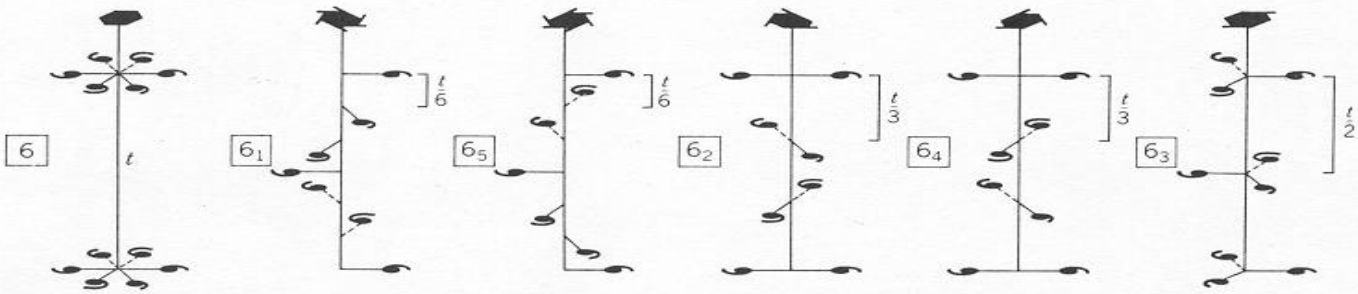
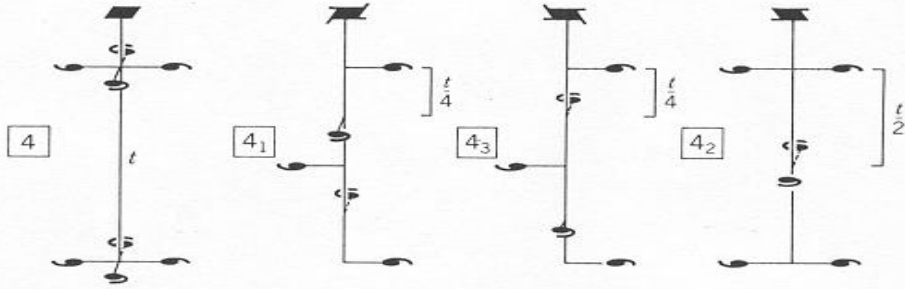
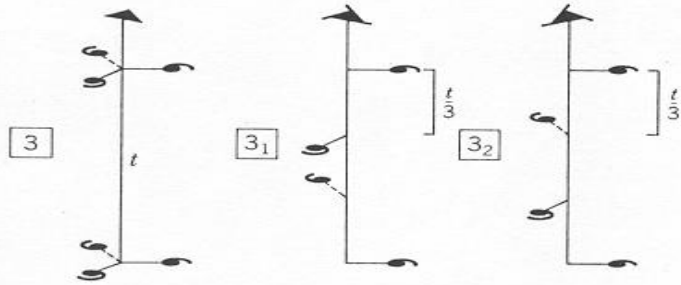
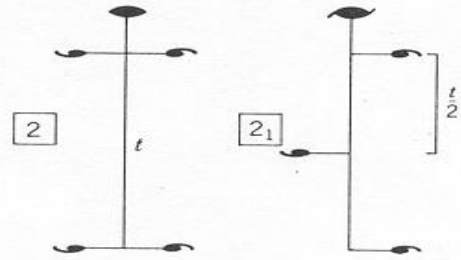
Simbol	Ravnina simetrije	Grafički simbol		Tip translacije
		Okomita na ravninu projekciju	Paralelna s ravninom projekcije	
m	Ravnina simetrije			nema
a, b	Ravnina simetrije s klizanjem			$a/2$ duž [100] ili $b/2$ duž [010]
c			nema	$c/2$ duž osi c
n	Dijagonalna ravnina s klizanjem			$a/2 + b/2$; $a/2 + c/2$; $b/2 + c/2$; $a/2 + b/2 + c/2$ (tetragonski i kubični sustav)
d	Dijamantna ravnina s klizanjem			$a/4 + b/4$; $a/4 + c/4$; $b/4 + c/4$; $a/4 + b/4 + c/4$ (tetragonski i kubični sustav)

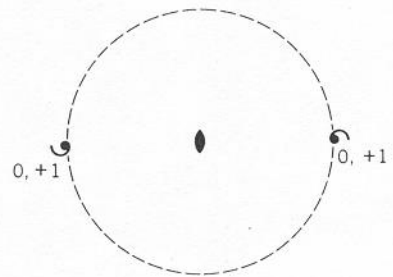
Vijčane osi

- njihova simetrijska operacija sastoji se od zakreta za neki određeni kut i od pomaka duž osi (translacije) za određeni dio periode identičnosti
- koliki je zakret odnosno pomak ovisi o vrsti osi
- u strukturama te osi mogu ići jedino duž smjerova paralelnih s onima duž kojih na kristalima idu obične osi simetrije

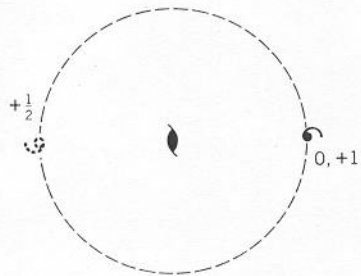
Vijčane osi

α	τ	Vijčane osi
180° 	$\tau/2$	2 ₁  
120° 	$\tau/3$	3 ₁  desna 3 ₂  lijeva
90° 	$\tau/4$	4 ₁  desna 4 ₃  lijeva 4 ₂  neutralna
60° 	$\tau/6$	6 ₁  desna 6 ₅  lijeva 6 ₂  desna 6 ₄  lijeva 6 ₃  neutralna

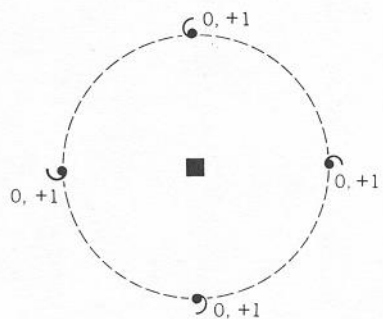
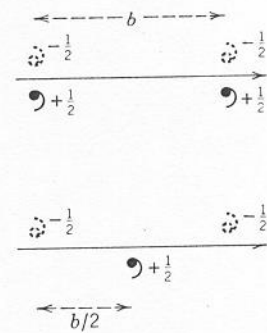




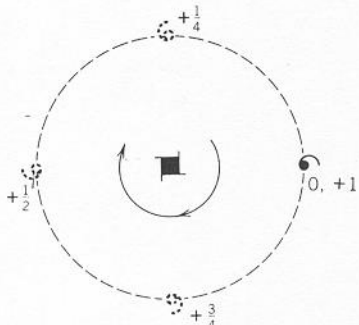
2



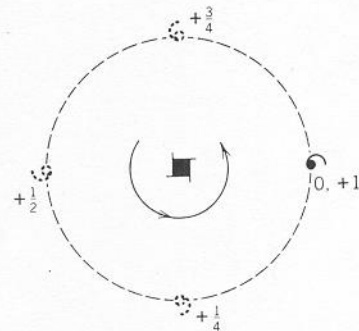
2₁



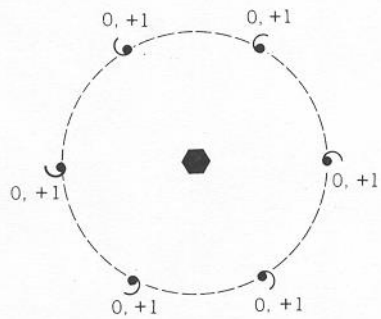
4



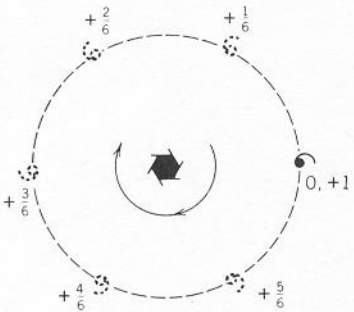
4₁ desna



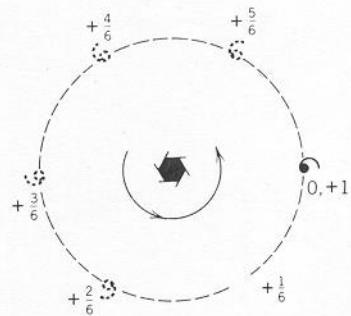
4₃ lijeva



6



6₁ desna



6₅ lijeva

Prostorne grupe

- kompletan skup simetrijskih operacija u kristalnoj rešetki ili grupa simetrijskih operacija uključujući i translacije u rešetki naziva se PROSTORNOM GRUPOM
- način na koji motiv (npr. atom) može biti raspoređen u prostoru u homogenoj mreži
- 14 Bravaisovih rešetki + 32 točkaste grupe
= **230 prostornih grupa**
- predstavljaju 230 mogućih načina na koji se neki motiv može periodično ponoviti u prostoru

Obilježja prostornih grupa

- Zasnovane na 14 Bravaisovih rešetki
- Izogonalne s 32 točkaste grupe (kristalna razreda)

Označavanje prostornih grupa:

1. Simbol za tip Bravaisove rešetke

+

2. Oznaka za točkina grupu (tj. kristalni razred/klasu)

Označavanje prostornih grupa

Npr. $P 2/m 2/m 2/m$

$P 4/m 2/m 2/m$

$F 4/m \bar{3} 2/m$

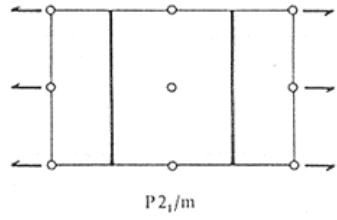
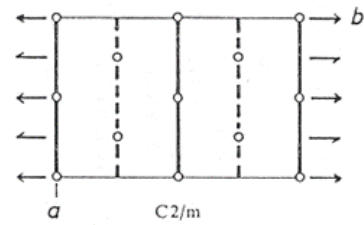
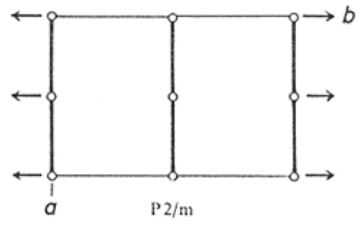
Skraćeno: $Pmmm$

$P4/mmm$

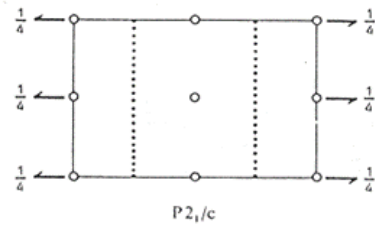
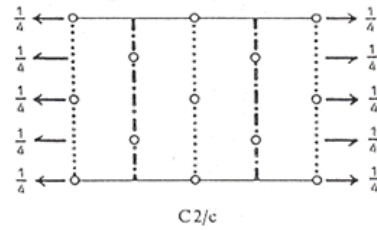
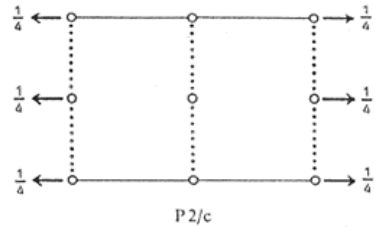
$Fm\bar{3}m$

Izvod prostornih grupa – monoklinski sustav

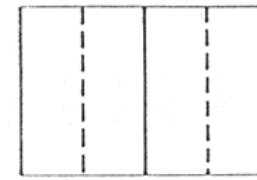
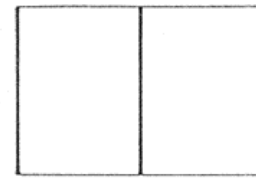
- možemo kombinirati dvije Bravaisove rešetke (P i C) s tri točkine grupe ($2/m$, 2 , m), a obične elemente simetrije možemo zamijeniti s onima koji uključuju translaciju
- elementi simetrije ponavljaju se u pravilu nakon svakih pola periode



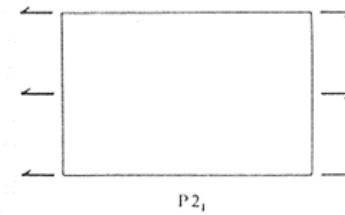
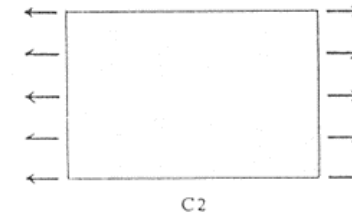
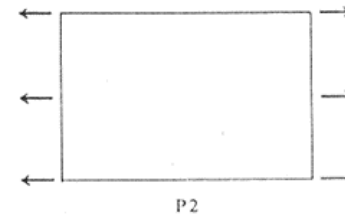
—



a Space groups of point group $2/m$



b Space groups of point group m



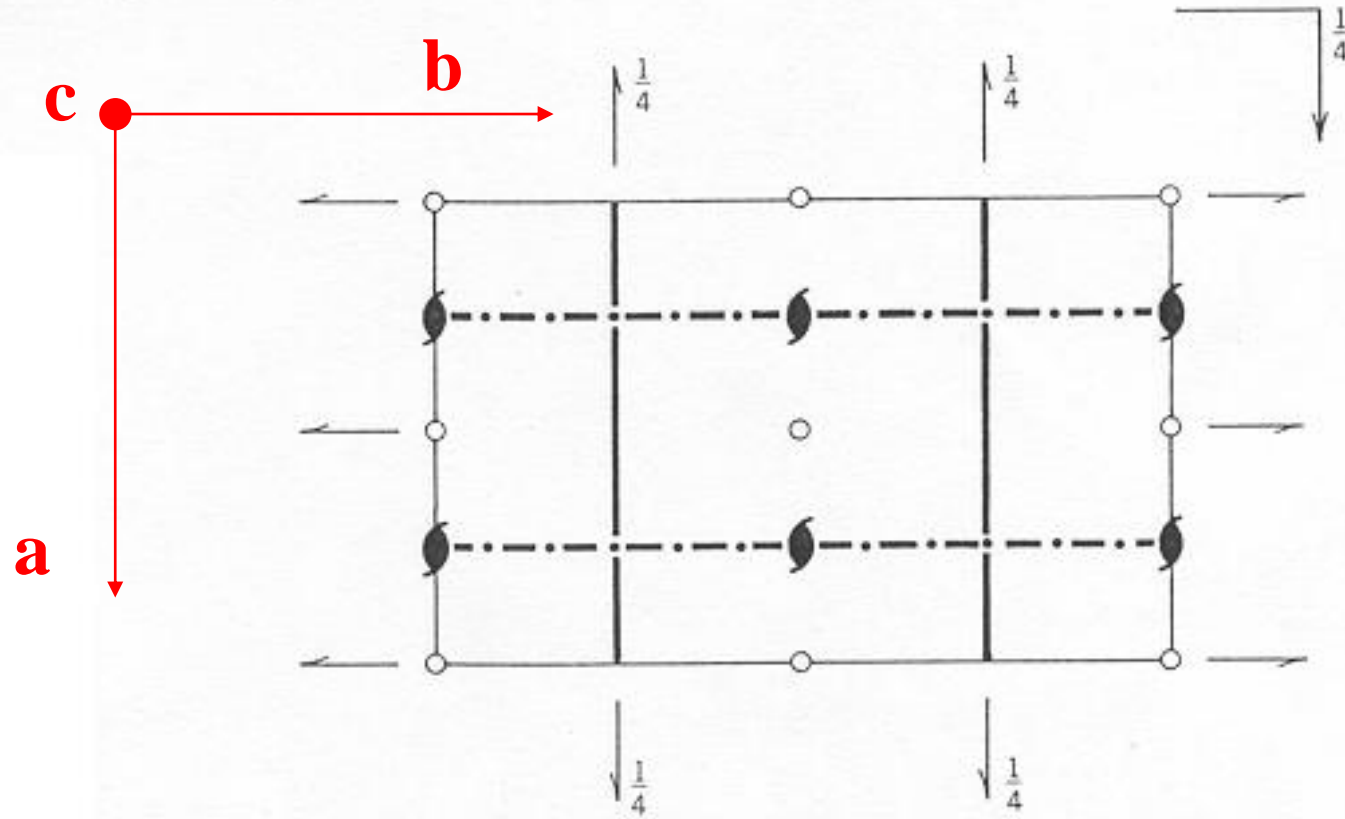
c Space groups of point group 2

Prikaz prostornih grupa

- Orijehtacija kao i kristalografske osi
- Prikaz je dvodimenzionalan
- Ishodište je u gornjem lijevom kutu
- Motivi (atomi) su prikazani kružićima, te imaju koordinate x , y i z
- Elementi simetrije su naznačeni odgovarajućim simbolima

$P2_1/n 2_1/m 2_1/a$

$P n m a$



Broj točaka u ćeliji

Broj točaka u ćeliji ovisi o:

1. Vrsti i broju elemenata simetrije u prostornoj grupi
2. Početnom položaju atoma u odnosu na elemente simetrije

Broj ekvivalentnih točaka u jediničnoj ćeliji naziva se
MULTIPLICITET

EKVIVALENTNE TOČKE – sve točke u ćeliji povezane prisutnim elementima simetrije

Položaj atoma u ćeliji

- OPĆI POLOŽAJ – točka se nalazi mimo elemenata simetrije
- SPECIJALNI POLOŽAJ – točka se nalazi na nekoj od osi simetrije ili ravnini simetrije
- **multiplicitet za opći položaj = broj ploha opće forme u odgovarajućoj klasi × broj čvorova u Bravaisovoj rešetki**

$$Cmca \rightarrow 2 \times 8 = 16$$

Ako se točka nalazi na centru simetrije, običnoj osi ili ravnini simetrije, smanjuje mu se multiplicitet.

PRIMJER

$P2_1/n 2_1/m 2_1/a$

0,1	0,2	0,3
x	y	z
a	b	c

$P n m a$

