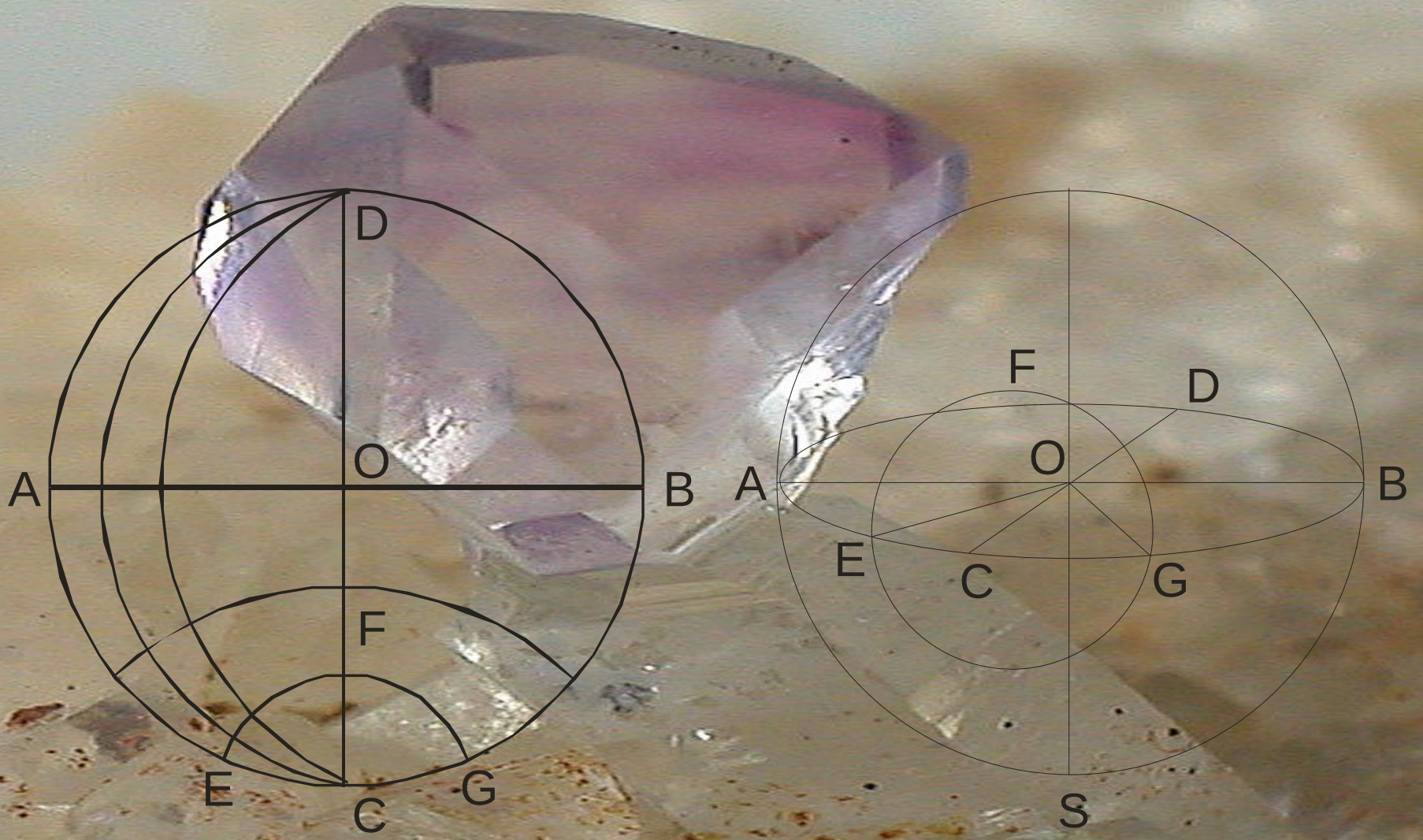
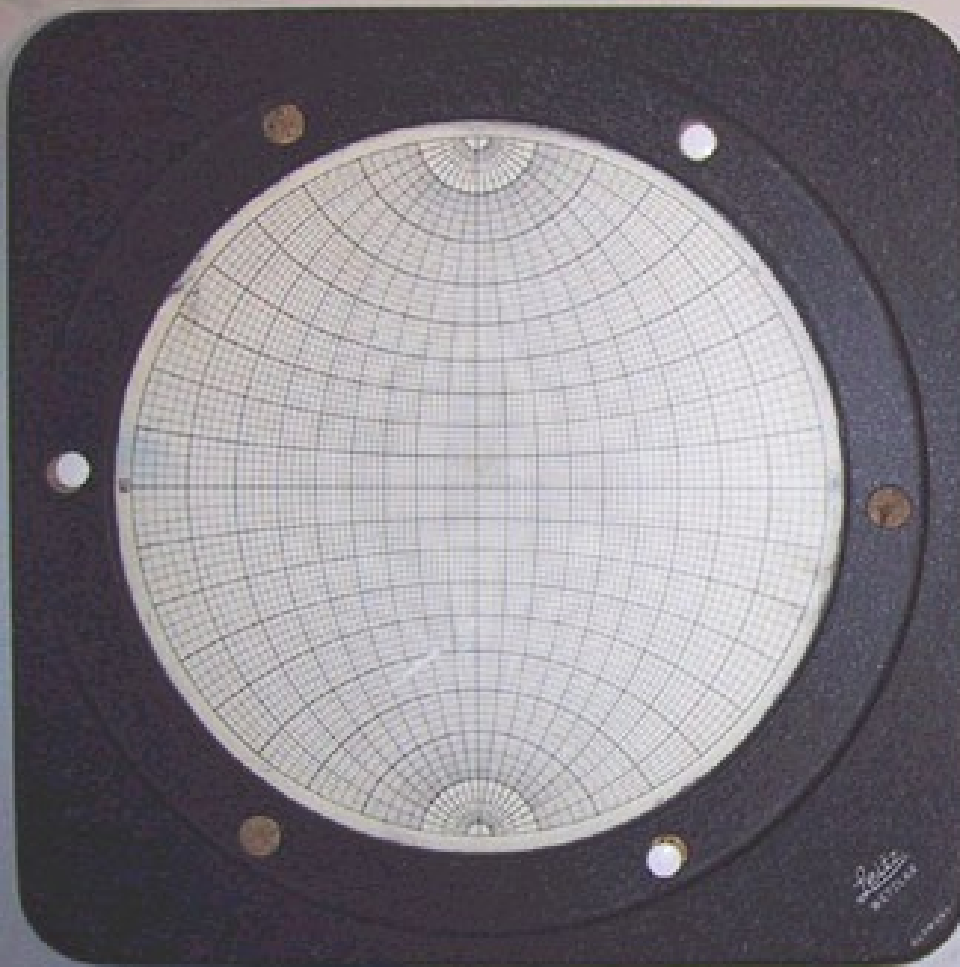


WULFF-OVA MREŽA - KONSTRUKCIJA



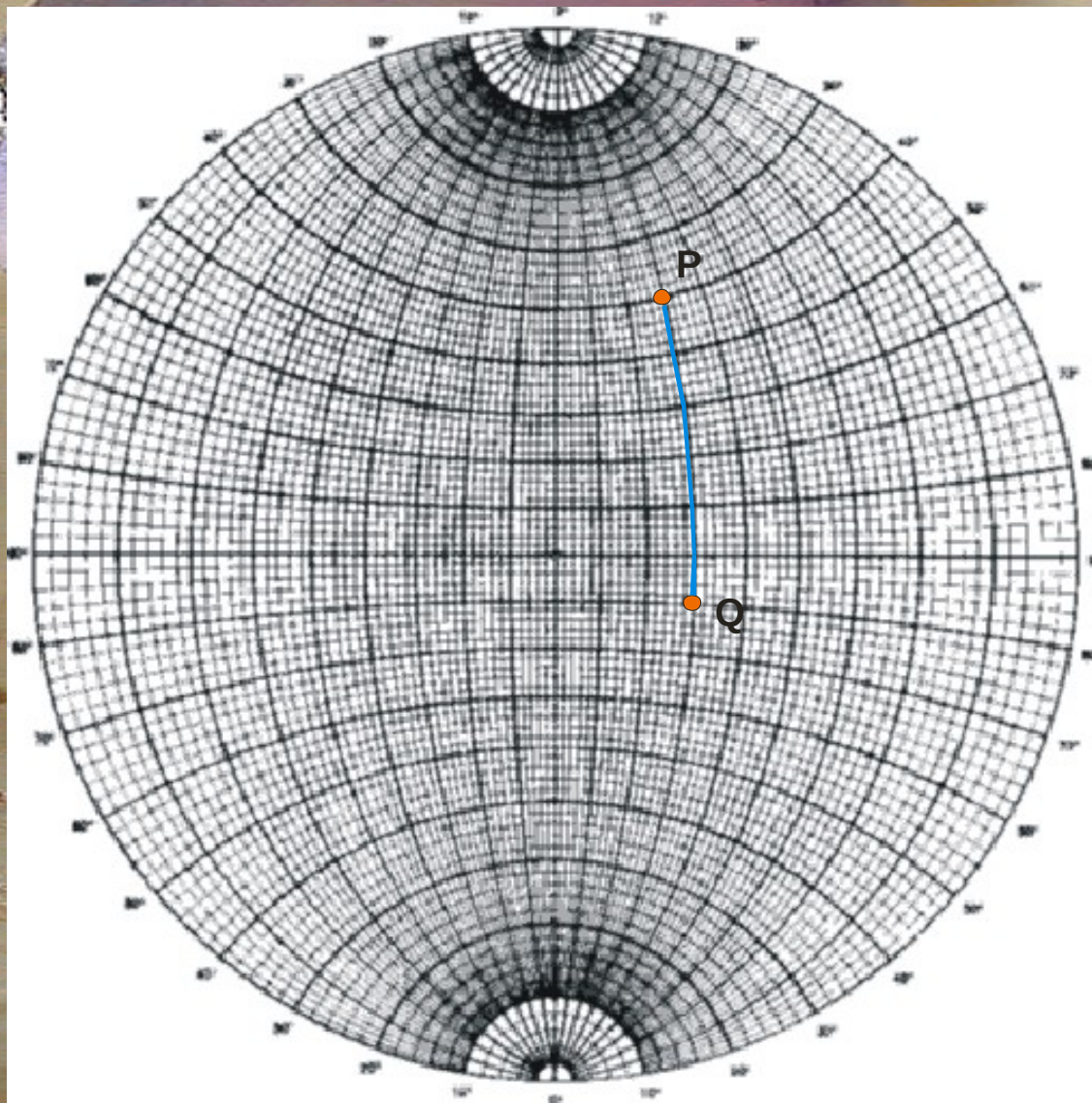
WULFF-OVA MREŽA



UPORABA WULFF-OVE MREŽE

1. KOT MED DVEMA POLOMA

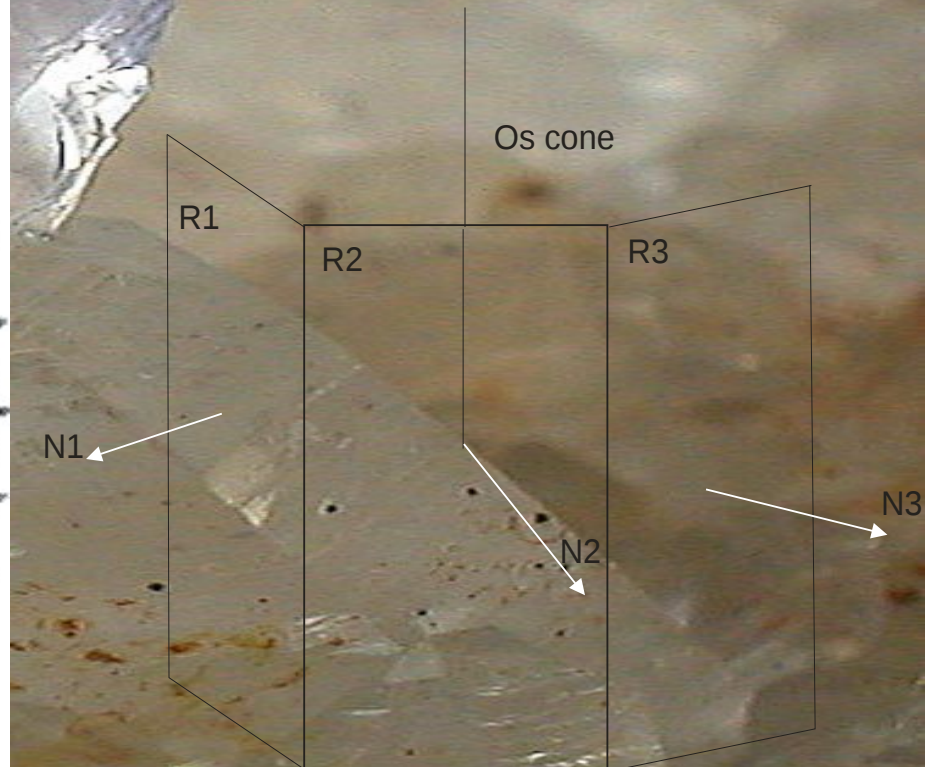
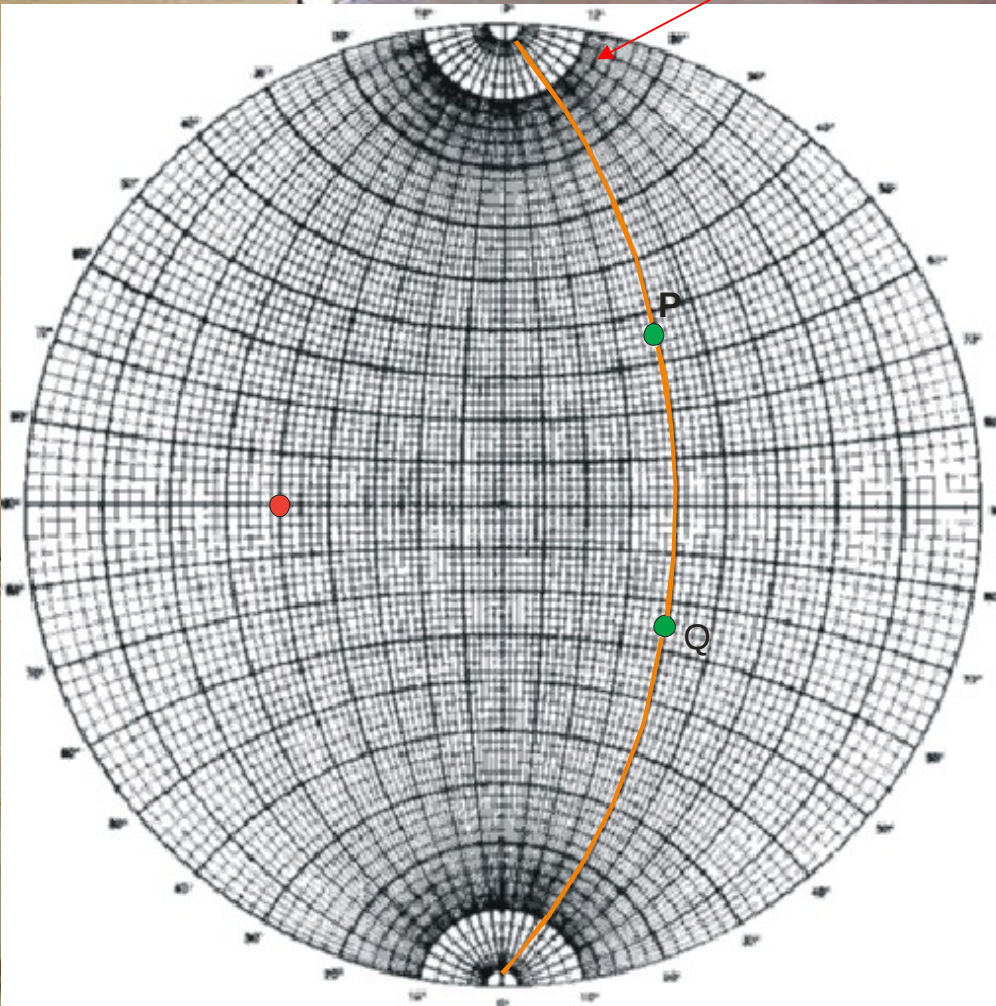
pol - presečišče pravokotnice na kristalno ploskev s kroglo okoli kristala



2. POL CONE

cona - cono določa set kristalnih ploskev (ravnin), ki se sečejo v vzporednih robovih (premicah). Smer teh premic imenujemo conska os.

krog cone - krožnica, ki gre skozi pole ploskev iste cone



ZUNANJA SIMETRIJA KRISTALOV

OSNOVNI SIMETRIJSKI ELEMENTI

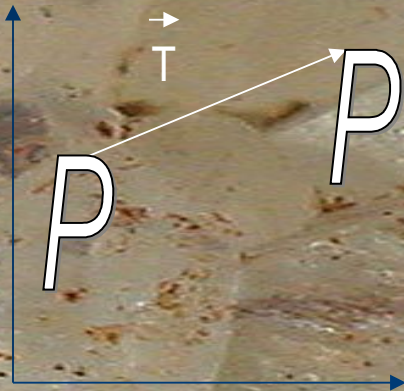
Simetrijska operacija - premik kristalne mreže ali kristala v prostoru **BREZ** deformacije kristalne mreže (kristala)

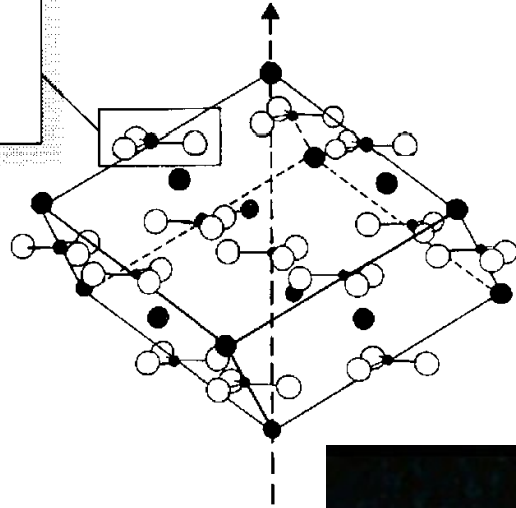
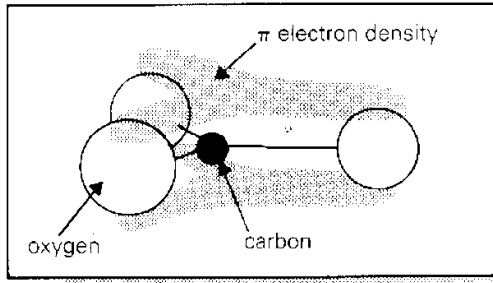
NOTRANJA UREJENOST

Notranjo urejenost kristala predstavlja motiv ali vzorec (t.j. skupina atomov), ki se ponavlja v mreži (t.j. periodična razporeditev točk v prostoru).

Mreža vsebuje translacijsko komponento notranje ureditve.

Motiv ali vzorec vsebuje določeno simetrijo, ki se izraža v **ZUNANJI OBLIKI** kristala!





- Ca
- O
- Si
- ↑ crystallographic z symmetry axis (triad)

- (a) light vibrating this way can polarize π orbital—high refractive index
- (b) light vibrating this way cannot polarize π orbital and experiences lower refractive index



ZUNANJA SIMetriJA

SIMetriJSKI ELEMENTI (brez translacije)

Simetrijski element = geometrično mesto (pozicija) ki pripomore k vizualizaciji simetrije neke urejene strukture.

Simetrijska operacija je dejanje ki ga izvedemo (glede na simetrijski element), da pridobimo sliko izvirnega motiva.

Simetrijski elementi:

- center simetrije
- osi simetrije
- ravnine simetrije

Simetrijske operacije:

- inverzija (skozi center simetrije)
- rotacija (okoli osi simetrije)
- zrcaljenje (preko ravnine simetrije)

ROTACIJA

Rotacija za kot α okoli imaginarne osi tvori lahko še enega ali več motivov.

Os simetrije je premica okoli katere motiv vrtimo, pri čemer se motiv lahko ponovi enkrat ali večkrat pri rotaciji za cel krog (360°).

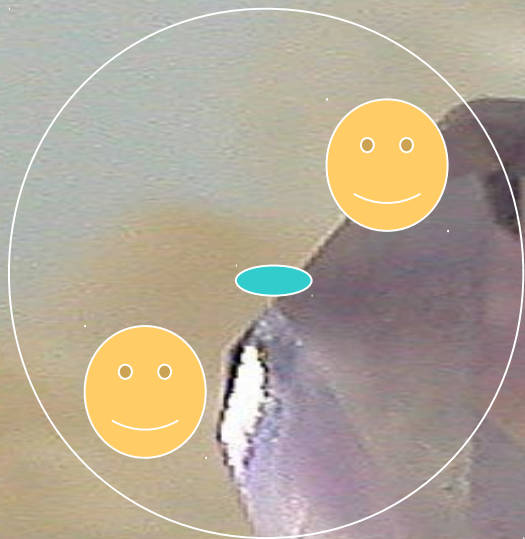
Za neodvisne objekte se lahko motiv pri vrtenju okoli osi simetrije ponovi n -krat ($n=1- \infty$).

Kadar moramo upoštevati tudi notranjo simetrijo in translacijo (kristali) je n lahko le 1, 2, 3, 4 in 6!

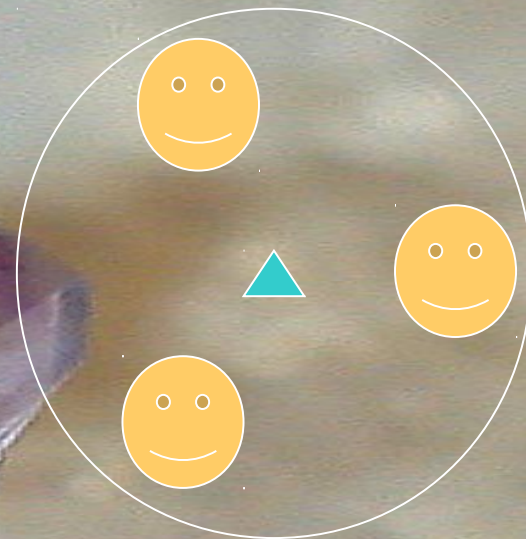
Osi simetrije, ki jih lahko opazujemo pri kristalih so sledeče:

eno števna (rotacija 360°)	1
dvo števna (rotacija 180°)	2
tro števna (rotacija 120°)	3
štiri števna (rotacija 90°)	4
šest števna (rotacija 60°)	6

Pet, ter sedem ali več števne osi simetrije v kristalih niso možne!



Dvoštevna os simetrije (2)



Troštevna os simetrije (3)



Štirištevna os simetrije (4)



Šestštevna os simetrije (6)

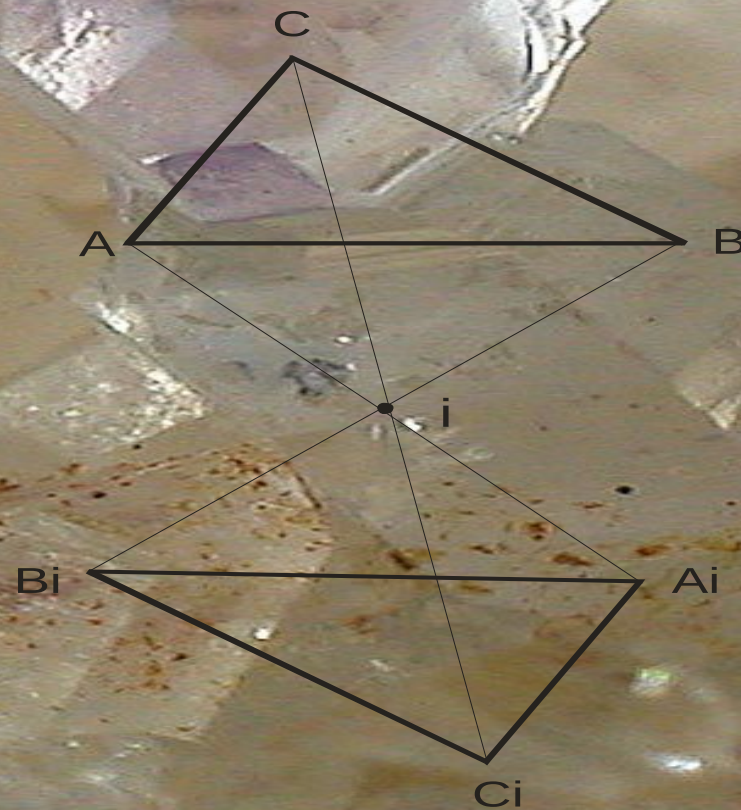
INVERZIJA

ali zrcaljenje skozi točko - center inverzije
ali center (središče) simetrije - i

Originalnega vzorca in inverzne slike ne moremo prekriti s translacijo!

Slika je zrcalna slika izvirnega objekta.

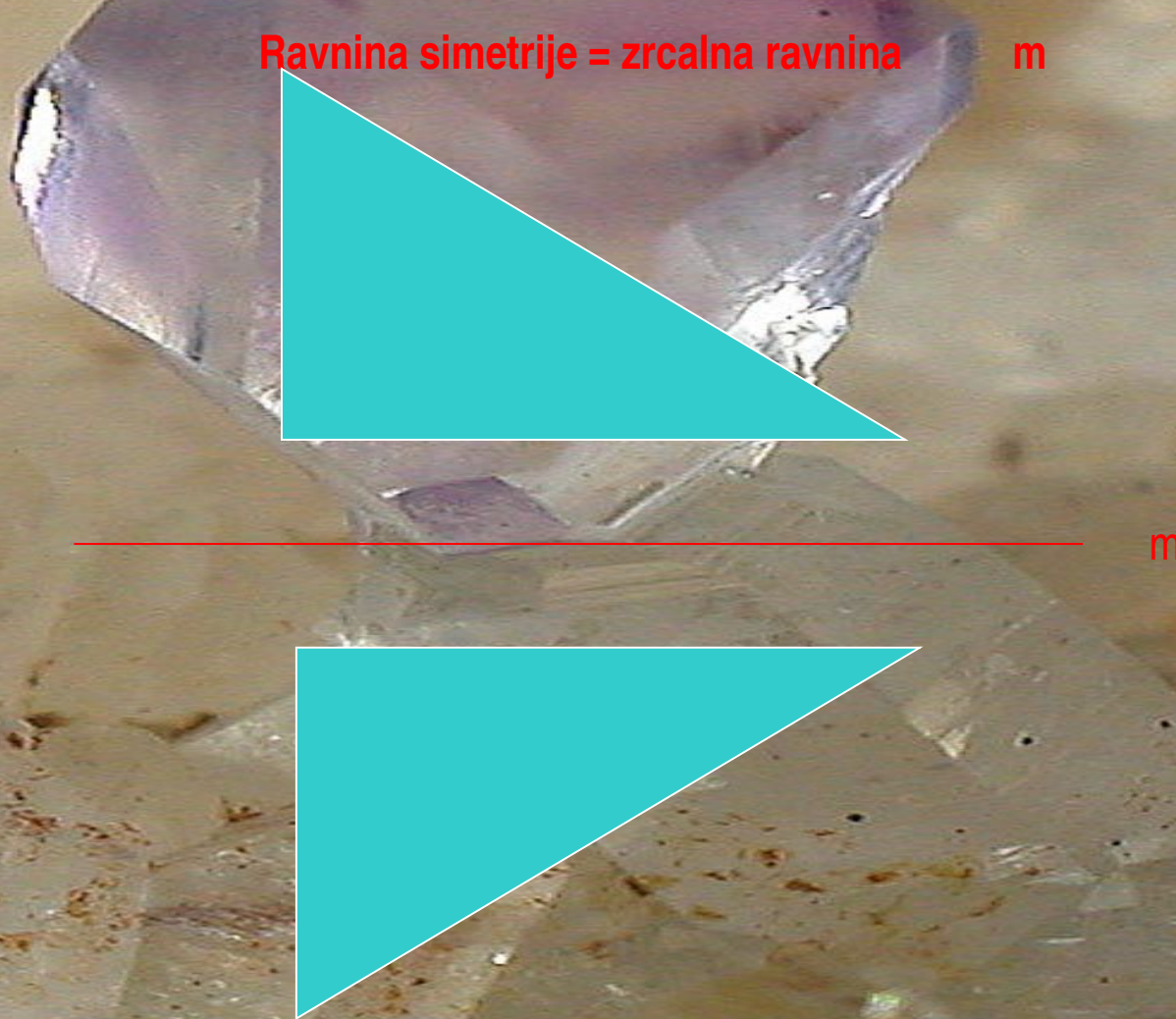
Taka objekta imenujemo **ENANTIOMORFA**.



ZRCALJENJE PREKO RAVNINE

Zrcaljenje preko ravnine simetrije ustreza kombinaciji rotacije za 180° in zrcaljenju skozi center simetrije.

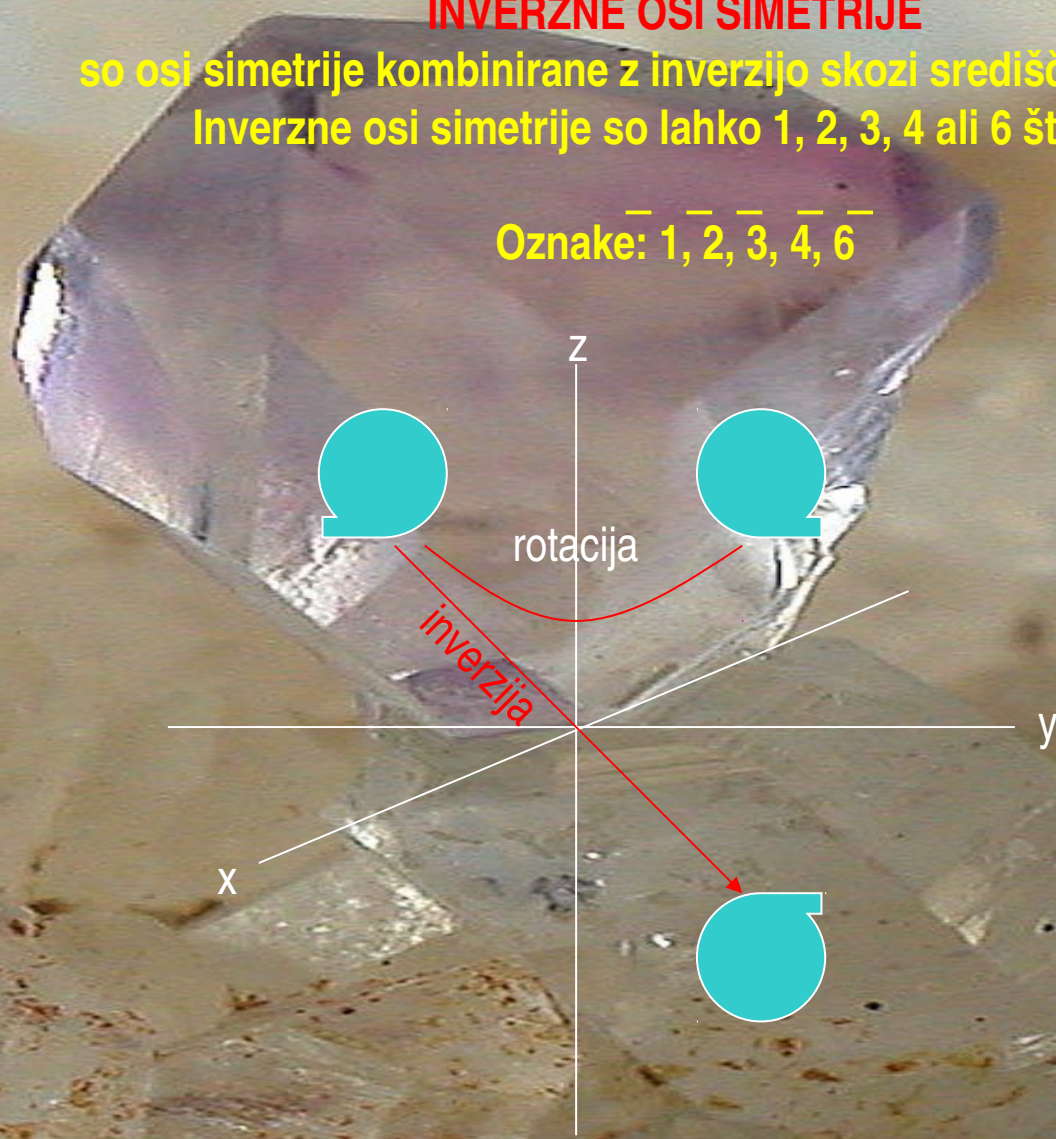
Ravnina simetrije = zrcalna ravnina m

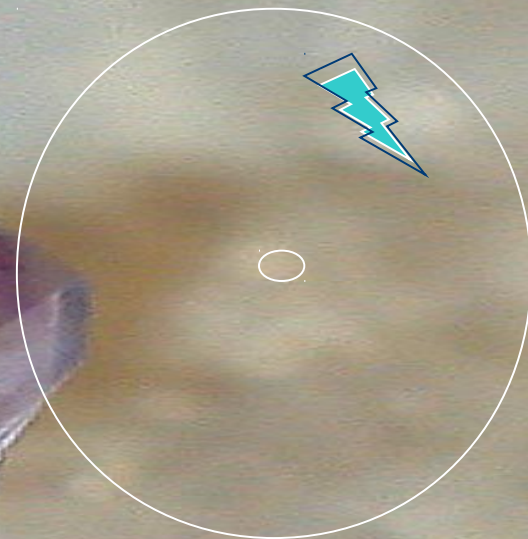
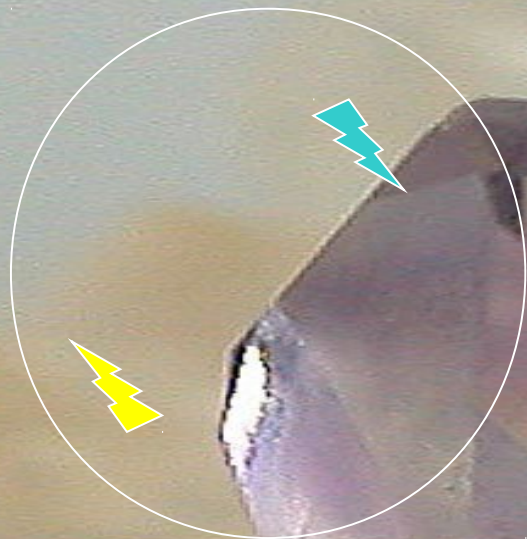


INVERZNE OSI SIMETRIJE

so osi simetrije kombinirane z inverzijo skozi središče simetrije.
Inverzne osi simetrije so lahko 1, 2, 3, 4 ali 6 šteвне.

Oznake: $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{6}$





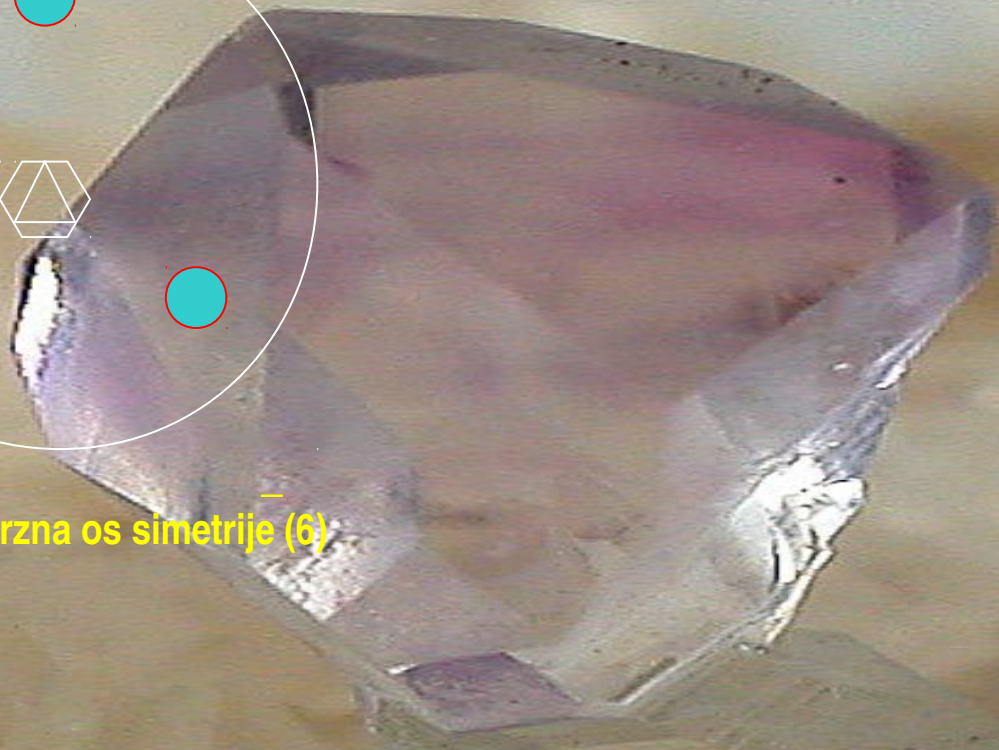
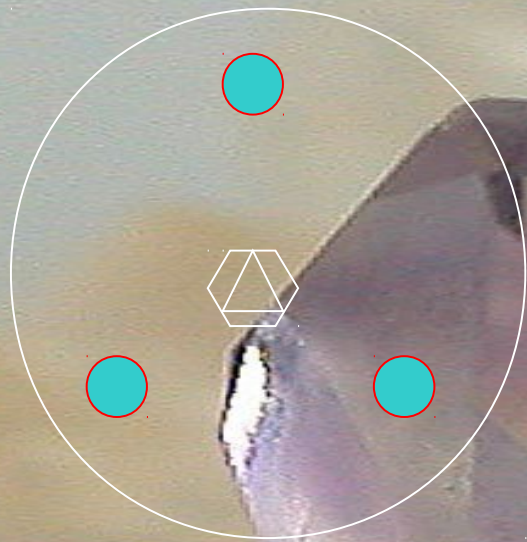
Enoštevna inverzna os simetrije (1)

Dvoštevna inverzna os simetrije (2)



Troštevna inverzna os simetrije (3)

Štirištevna inverzna os simetrije (4)



šestštevna inverzna os simetrije ($\bar{6}$)

ZDRUŽLJIVE KOMBINACIJE SIMETRIJSKIH ELEMENTOV

1) KOMBINACIJE SIMETRIJSKIH OSI

Kombiniramo lahko različne osi simetrije in tako generiramo pravilne tridimenzionalne vzorce.

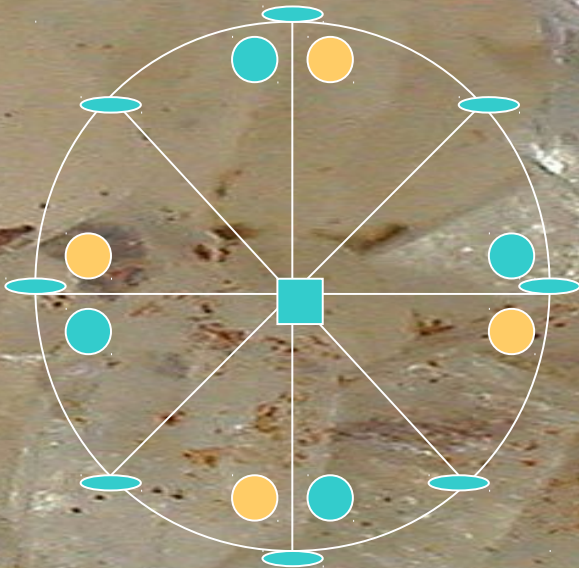
Pri kombinaciji osi simetrije moramo paziti, da je kombinacija simetrično konsistentna in ne generira neskončnega števila novih setov simetrijskih osi.

Npr.: Če se dve 4-števni osi simetrije sekata pod ostrim kotom delujeta druga na drugo in pri tem ustvarita neskončen set osi.

Da se temu izognemo, se osi simetrije lahko sekajo le pod kotom 90° ali (le v kubičnem sistemu) $54^\circ 44''$.

Vsi simetrijski operatorji se **MORAJO SEKATI V ISTI TOČKI!**

Primer kombinacije 4 in 6 števnih osi in nanju pravokotne 2 števnih osi

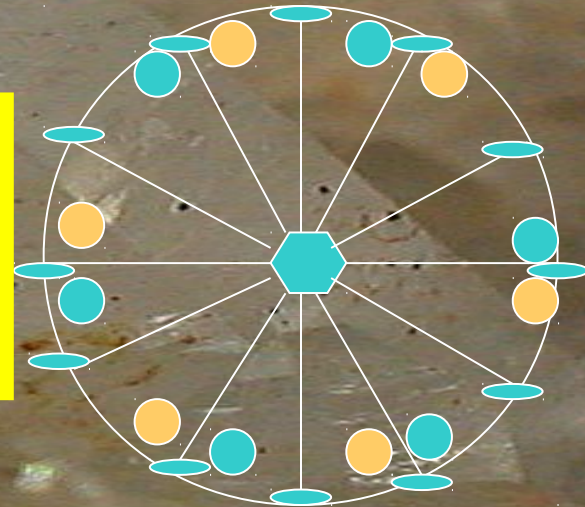


Dobimo kombinaciji:

422 in 622.

Druge združljive kombinacije so še:

222, 32, 23 in 432



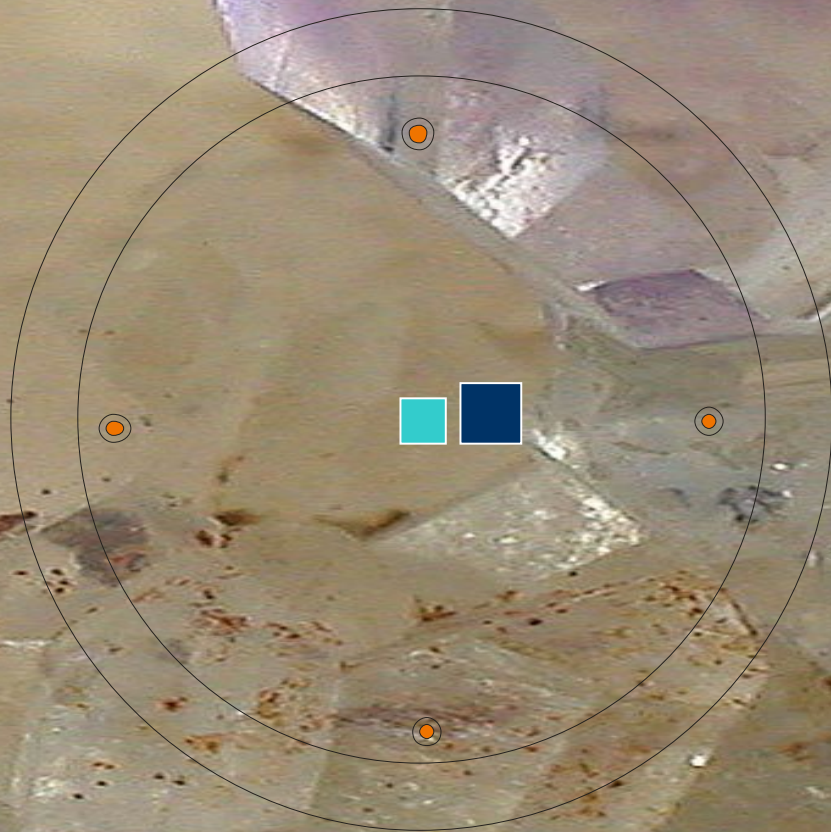
2) KOMBINACIJE SIMETRIJSKIH OSI Z RAVNINAMI SIMETRIJE

Osnovno pravilo: Ravnine simetrije v kristalih so pravokotne na ali vzporedne osem simetrije v kristalu.

Primer kombinacij $4/m$, $6/m$

$4/m$

$6/m$

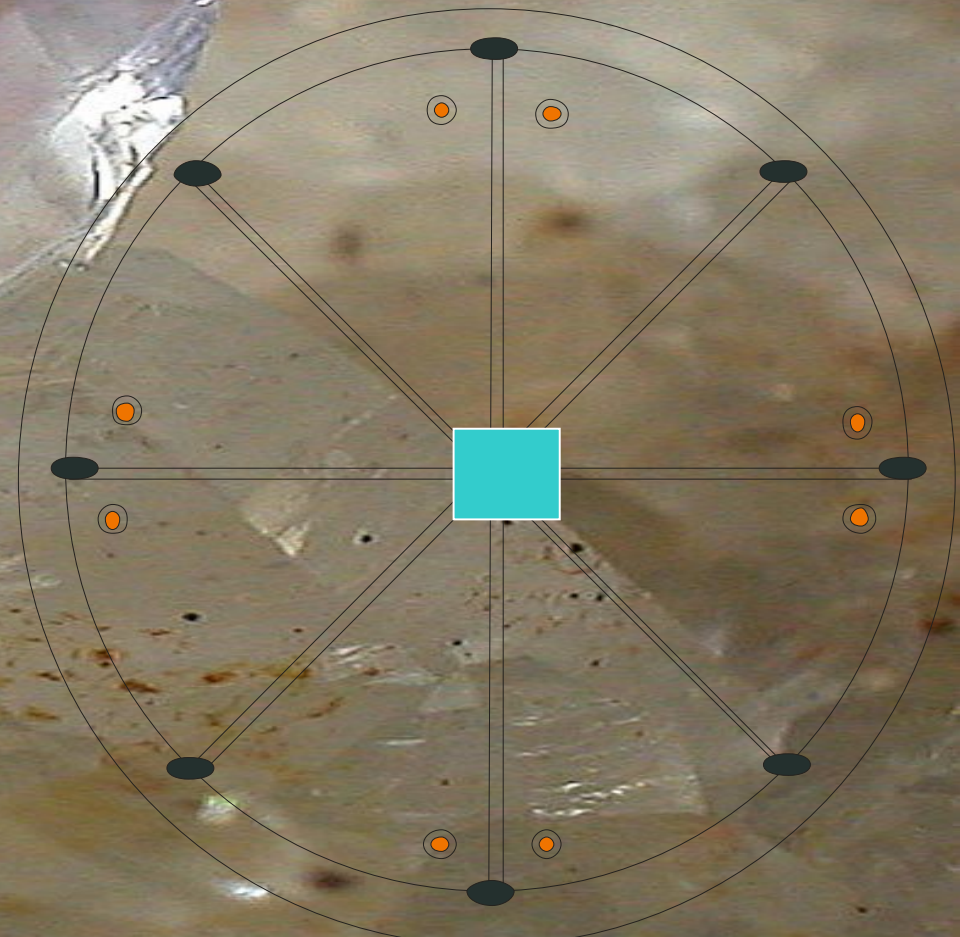
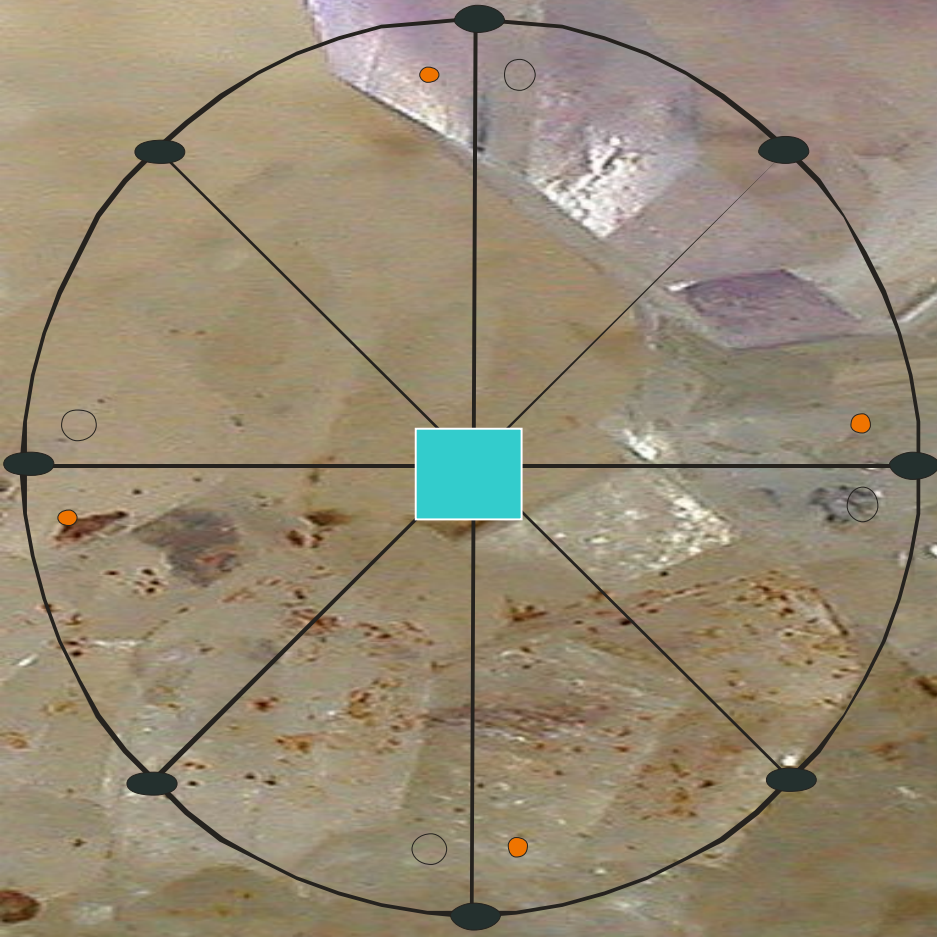


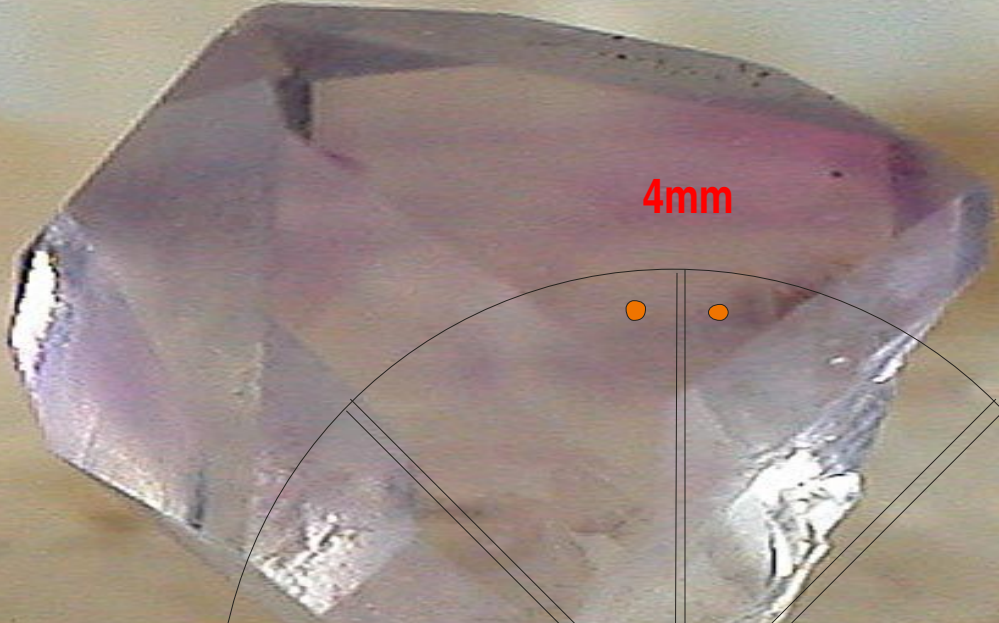
Mogoče so še kombinacije:
2/m in 3/m

Primer: 422, 4/m 2/m 2/m, 4mm

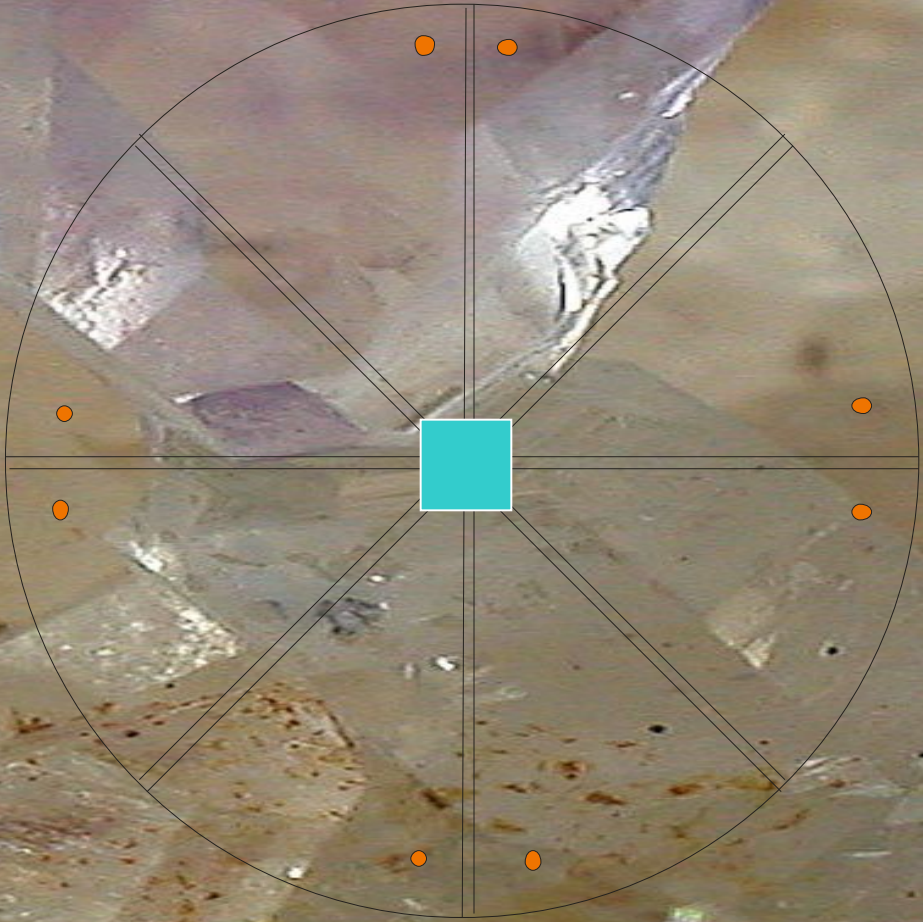
422

4/m2/m2/m=4/mmm





4mm



ZAKONITOSTI PRESEČIŠČ RAVNIN SIMETRIJE

Dve ravnini simetrije se sekata v premici, ki je dvoštevna os simetrije.

Tri ravnine simetrije se sekajo v premici, ki je troštevna os simetrije.

Štiri ravnine simetrije se sekajo v premici, ki je štirištevna os simetrije.

Šest ravnin simetrije se seka v premici, ki je šestštevna os simetrije.

Vse opisane simetrijske operacije so lahko opazovane na površini kristala, vendar so posledica notranje urejenosti kristala - strukture.

32 TOČKOVNIH GRUP = SIMETRIJSKIH RAZREDOV

32 možnih unikatnih kombinacij simetrijskih elementov:

Herman-Maugin - ovi = mednarodni simboli

Naraščanje rotacijske simetrije →

	1	2	3	4	6
Samo os simetrije					
Inverzna os simetrije	$\bar{1}=i$	$\bar{2}=m$	$\bar{3}=3+i$	$\bar{4}$	$\bar{6}=3/m$
Kombinacija simetrijskih osi		222	32	422	622
Ena os simetrije s pravokotno ravnino simetrije		2/m	$3/m=\bar{6}$	4/m	6/m
Ena os simetrije z vzporednimi ravninami simetrije		2mm=mm	3m	4mm	6mm
Inverzna os simetrije z osjo simetrije in ravnino simetrije			$\bar{3}2/m$	$\bar{4}2m$	$\bar{6}2m$
Tri osi simetrije in nanje pravokotne ravnine simetrije		$2/m2/m2/m$ mmm		$4/m2/m2/m$ 4/mmm	$6/m2/m2/m$ 6/mmm
Dodatne simetrijske operacije v kubičnih kristalih		23		$432=43$ $\bar{4}3m$	$4/m\bar{3}2/m$ m3m
		$2/m\bar{3}=m\bar{3}$			



KRISTALOGRAFSKE OSI

Pri opisovanju zunanjih oblik notranje simetrije uporabimo sistem treh (ali štirih) referenčnih osi - KRISTALOGRAFSKIH OSI.

Kristalografske osi pri opisovanju zunanje simetrije izberemo vzporedno robovom ali ploskvam kristala. Pri taki izbiri kristalografske osi sovpadajo tudi z osmi simetrije in/ali ravninami simetrije oz. so nanje pravokotne.

Za nekatere kristale obstaja več možnosti za izbiro kristalografskih osi, če jih izbiramo le na osnovi zunanje simetrije.

IDEALNA IZBIRA KRISTALOGRAFSKIH OSI:

Kristalografske osi morajo biti vzporedne robovom, enote na oseh pa proporcionalne dolžinam robov osnovne celice.

OSNOVNA CELICA - najmanjša ponavljajoča se enota kristalne mreže (strukture)