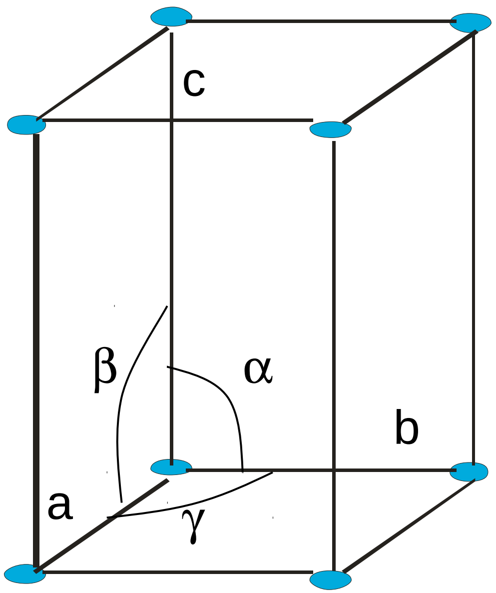
Triklinske prostorske mreže

točkovna simetrija -1

translacija klinomreže z vektorjem c, ki ne oklepa kota 90° z nobenim od vektorjev v ravnini.

P



IZBIRA OSNOVNE CELICE

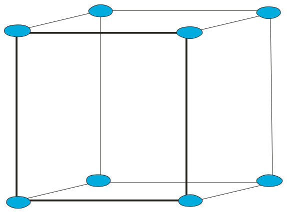
1) robovi celice morajo (kjer se le da) sovpadati z eno od osi simetrije

2) Če je mogoče naj bodo robovi korelirani z mrežno simetrijo

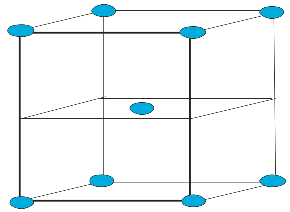
3) Izberemo najmanjšo (reducirano) celico, ki izpolnjuje pogoja 1) in 2).

Osnovne celice za 14 možnih tipov prostorskih mrež

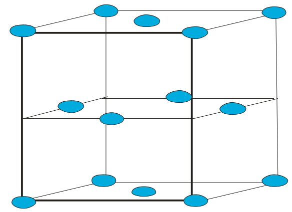
Kubične



P

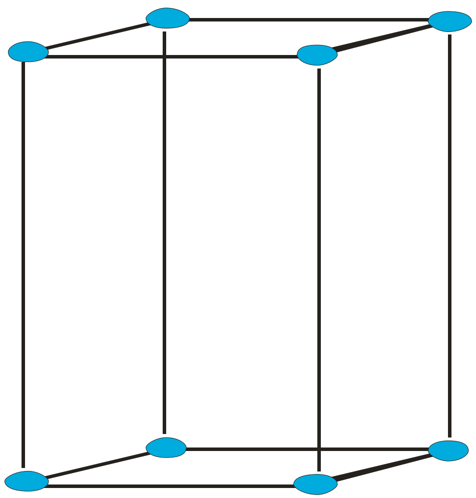


I

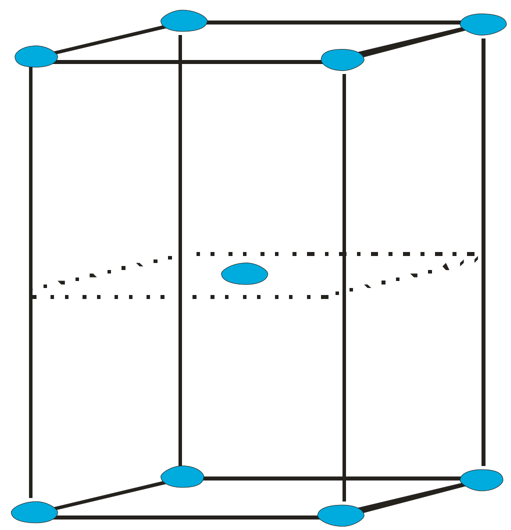


F

Tetragonalne

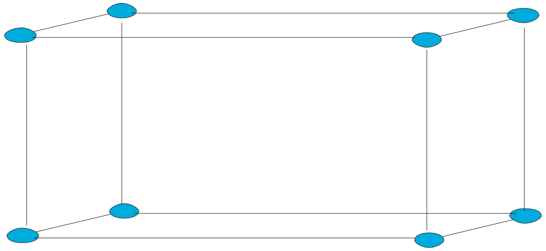


P

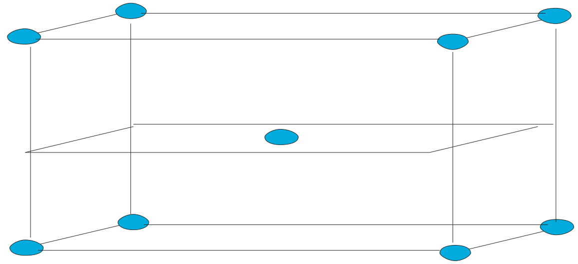


I

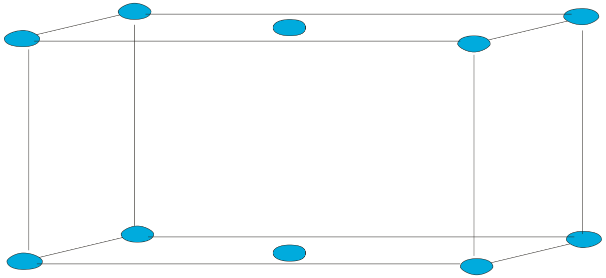
Ortorombske



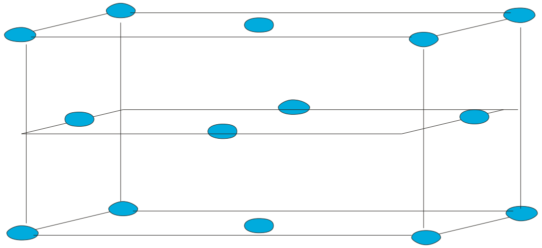
P



I

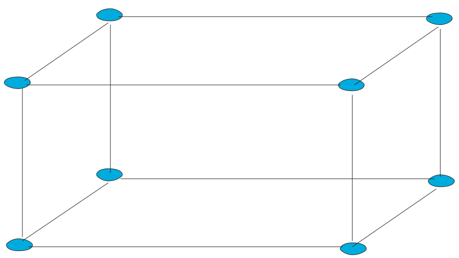


C

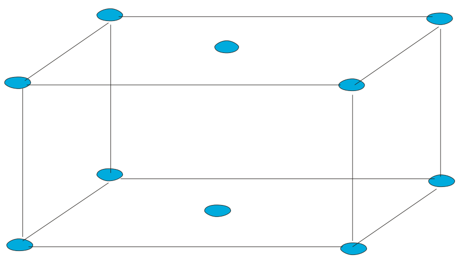


F

Monoklinski

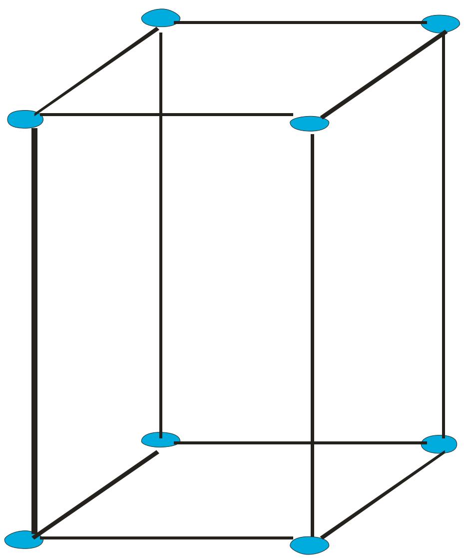


P



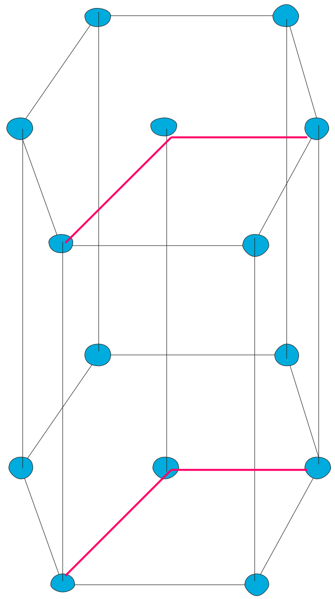
C

Triklinska

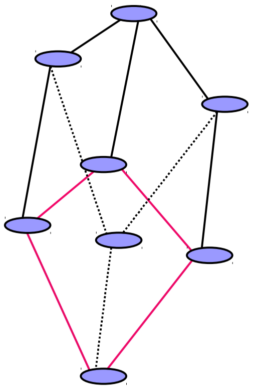


P

Heksagonalna in romboedrična



P



R

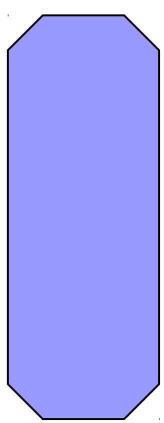
NOTRANJA SIMETRIJA – PROSTORSKE GRUPE

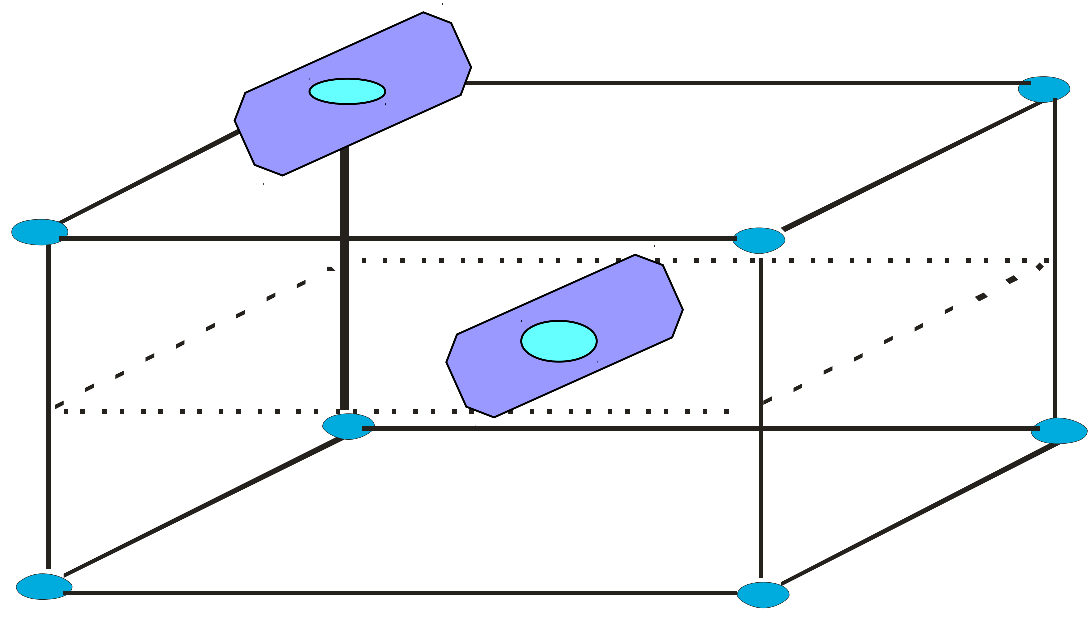
V vsakem kristalnem sistemu možne prostorske mreže vsebujejo najvišjo stopnjo simetrije tega razreda (so holosimetrične).

Kristali pa izkazujejo tudi nižjo simetrijo. Razlog za to je **simetrija translacijskega objekta** (združbe atomov ali ionov, ki se translacijsko ponavlja skozi mrežo), ki je lahko nižja od simetrije osnovne celice.

Primer: struktura hemimorfita temelji na **telesno centrirani ortorombski mreži I**, s simetrijo **2/m 2/m 2/m**, skupina atomov, ki predstavlja translacijski objekt pa ima simetrijo **mm2**.

$Zn_4Si_2O_7(OH)2*H_2O$





Preproste prostorske grupe

Simetrija prostorske mreže predstavlja prostorsko grupo.

Prostorsko grupo opišemo:

1) s tipom prostorske mreže in

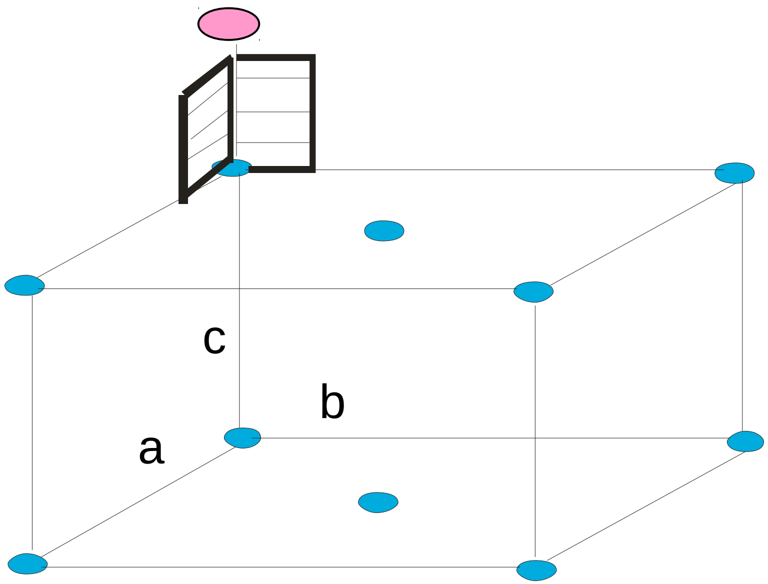
2) s simetrijo translacijskega objekta

***Triklinske*:** **P 1; P $\bar{1}$**

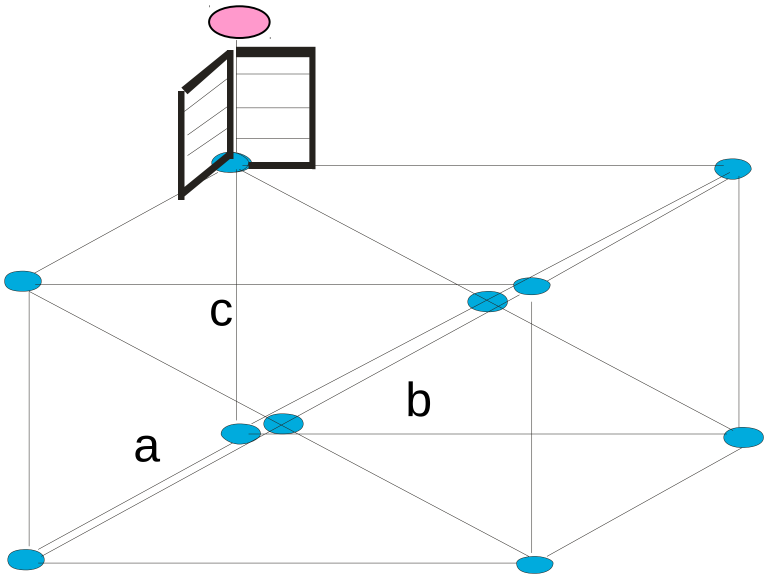
***Monoklinske*:** **P 2; P m; P 2/m**
C 2; C m; C 2/m

Ortorombske:

P 222; P mm2; P 2/m 2/m 2/m
C 222; C mm2; A mm2; C 2/m 2/m 2/m
F 222; F mm2; F 2/m 2/m 2/m
I 222; I mm2; I 2/m 2/m 2/m



C mm2

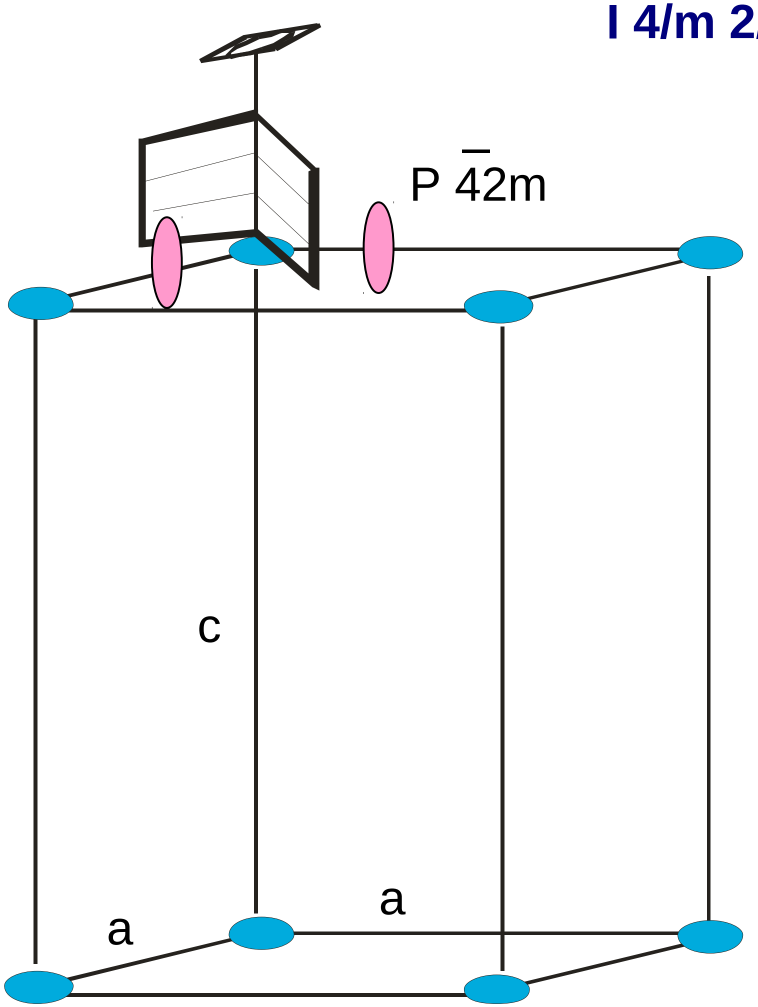


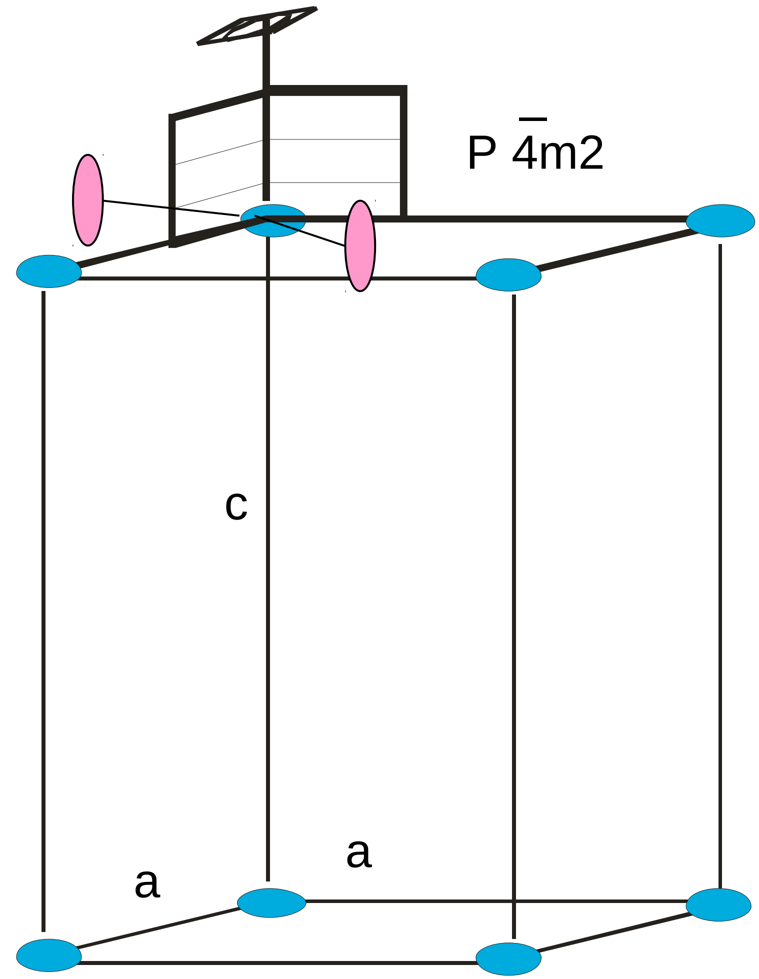
A mm2

***Tetragonalne*:**

P 4; P $\bar{4}$; P 4/m; P 422; P 4mm; P $\bar{4}$2m; P $\bar{4}$m2
P 4/m 2/m 2/m

I 4; I $\bar{4}$; I 4/m; I 422; I 4mm; I $\bar{4}$2m; I $\bar{4}$m2
I 4/m 2/m 2/m

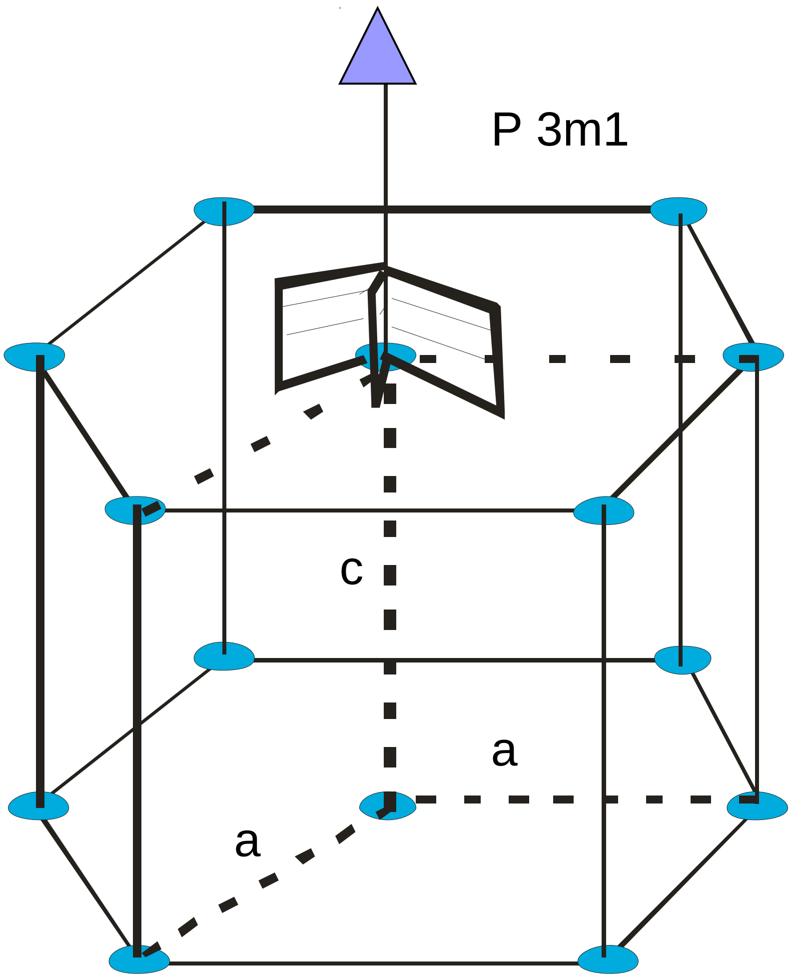


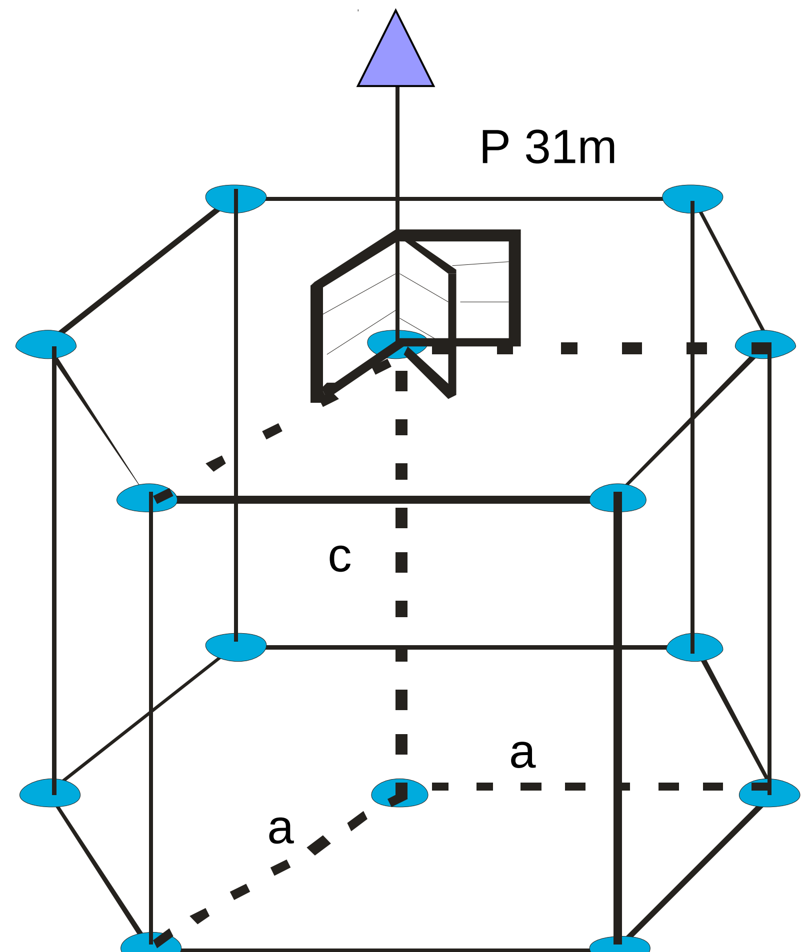


Trigonalne: P 3; P 3; P 312; P 321; P 3m1; P 31m

P $\bar{3}$1 2/m; P $\bar{3}$ 2/m 1

R $\bar{3}$; R 3; R 32; R $\bar{3}$m; R 3 2/m





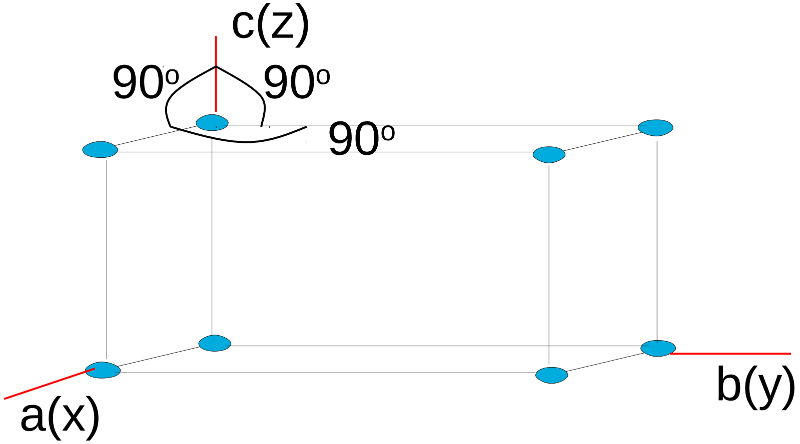
Heksagonalne: **$P\,6$; $P\,\bar{6}$; $P\,6/m$; $P\,622$; $P\,6mm$; $P\,\bar{6}m2$; $P\,\bar{6}2m$**
$P\,6/m\,2/m\,2/m$

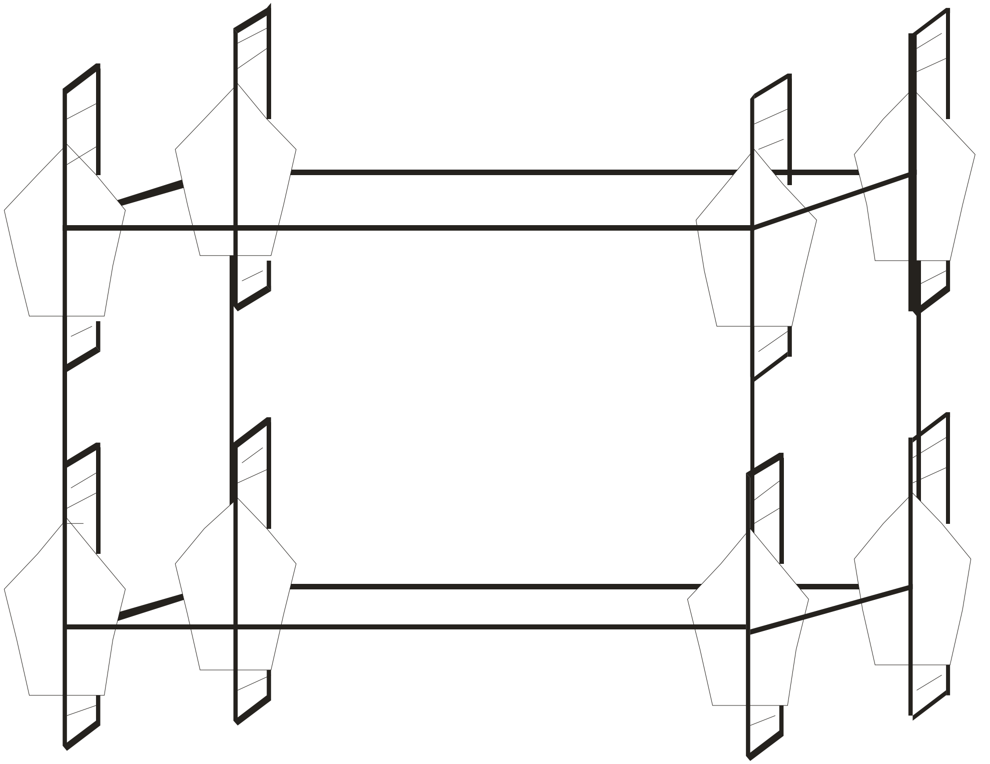
Kubične: **$P\,23$; $P\,2/m\,\bar{3}$; $P\,432$; $P\,\bar{4}3m$; $P\,4/m\,\bar{3}\,2/m$**

$I\,23$; $I\,2/m\,\bar{3}$; $I\,432$; $I\,\bar{4}3m$; $I\,4/m\,\bar{3}\,2/m$

$F\,23$; $F\,2/m\,\bar{3}$; $F\,432$; $F\,\bar{4}3m$; $F\,4/m\,\bar{3}\,2/m$

Redko pripada simetrija translacijskega objekta nižjesimetrijskemu sistemu kot simetrija osnovne celice.





Primer na sliki pripada monoklinskemu sistemu, čeprav so koti α, β in γ enaki 90º.

Rotacijsko-translacijska simetrija

10 simetrijskih elementov v 32 simetrijskih razredih (točkovnih grupah) predstavlja čisto rotacijsko simetrijo.

Čisto translacijsko simetrijo vsebuje 14 različnih tipov prostorskih mrež.

Znotraj kristala so atomi razporejeni tako, da njihove preslikave ustrezajo simetrijski operaciji, ki kombinira rotacijo in translacijo.

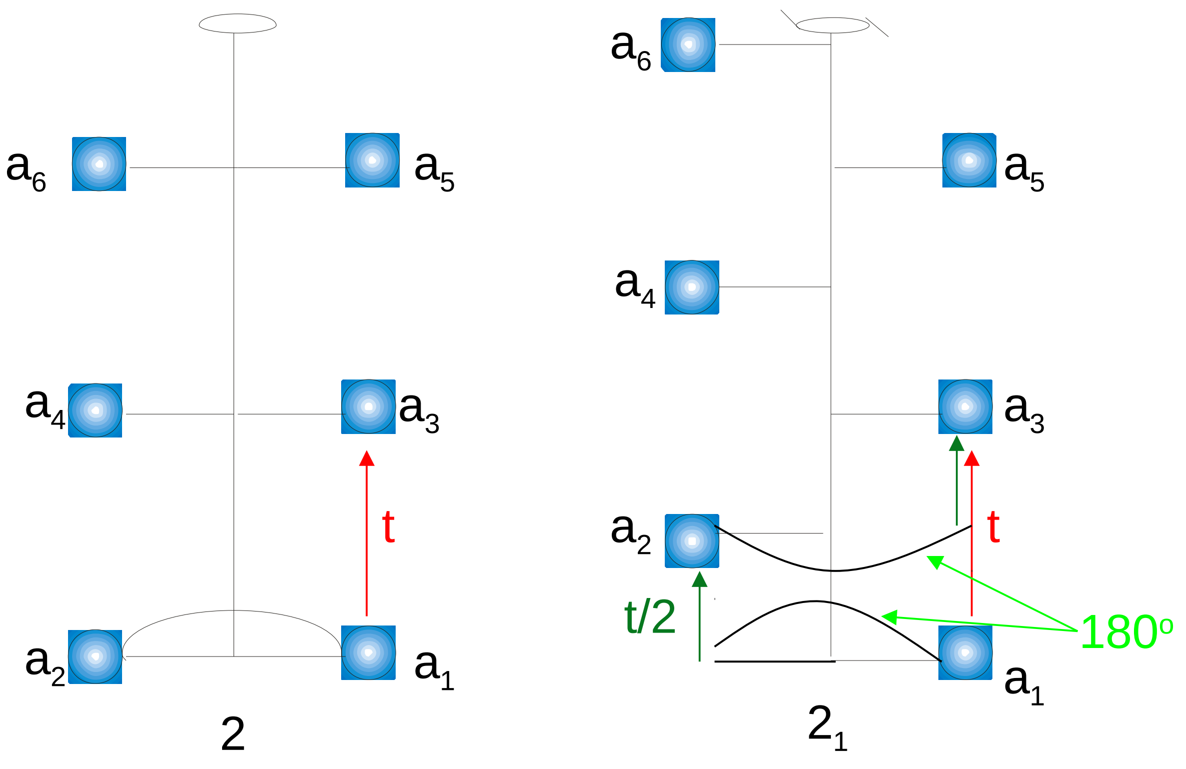
Simetrijski elementi takih operacij so vijačne osi simetrije in drsne ravnine simetrije.

Vijačne osi simetrije

V kristalu je set ekvivalentnih atomov a1, a2, a3, ..., povezanih preko simetrijske operacije, ki vključuje:

1) rotacijo okoli 2-, 3-, 4- ali 6-števne osi in

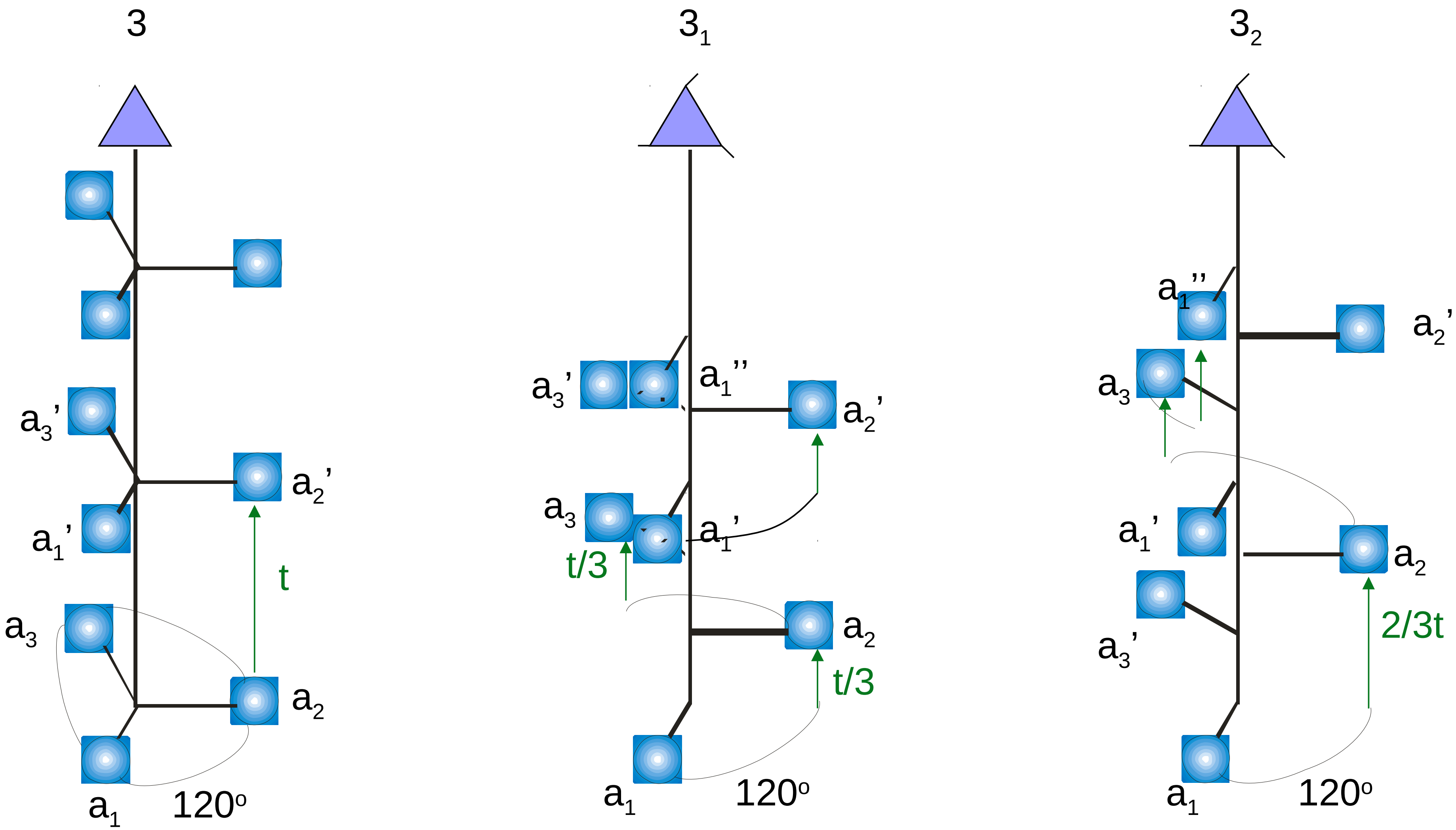
2) translacijo vzporedno z osjo simetrije.



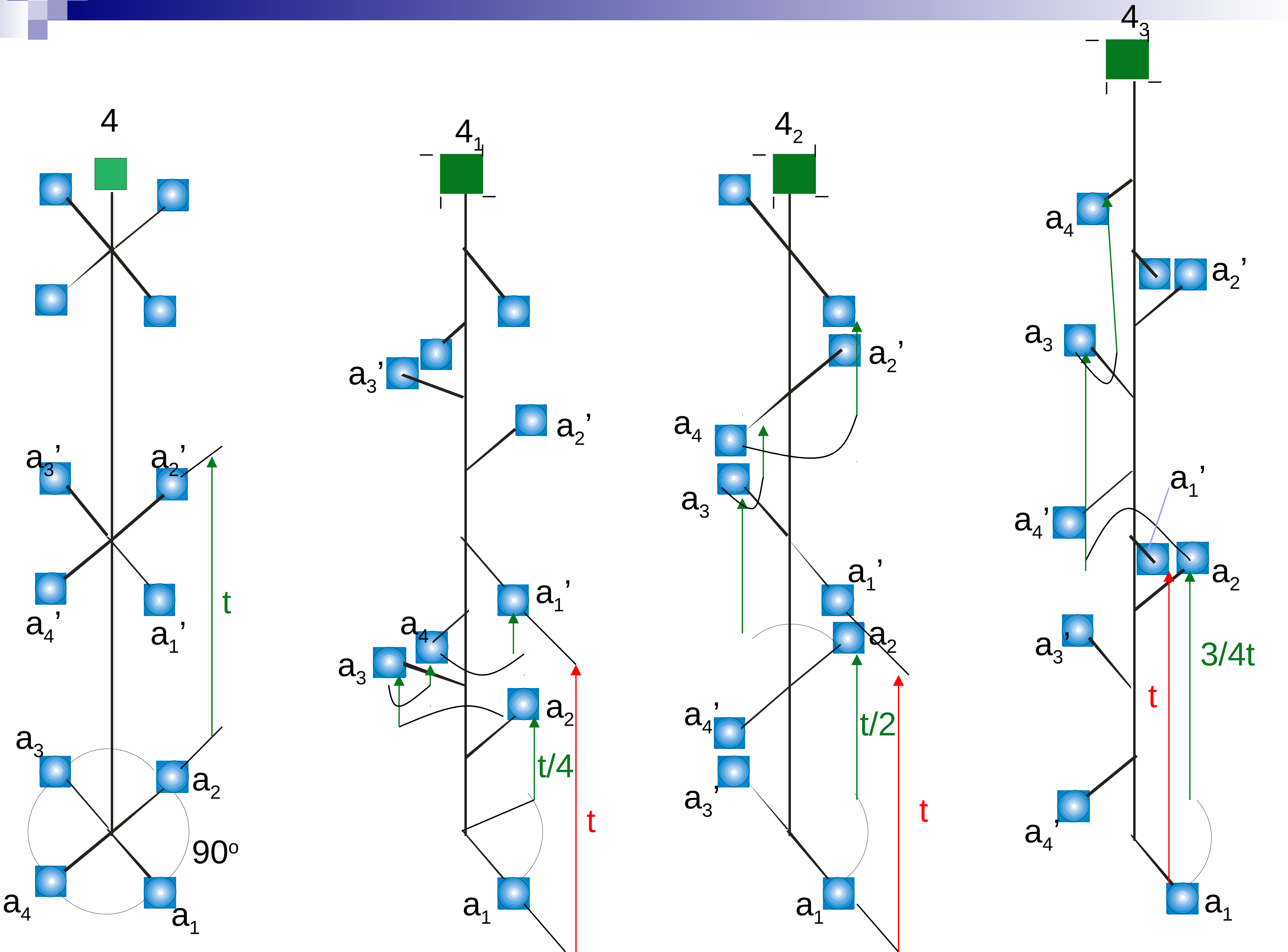
2_1-dvoštevna vijačna os simetrije:

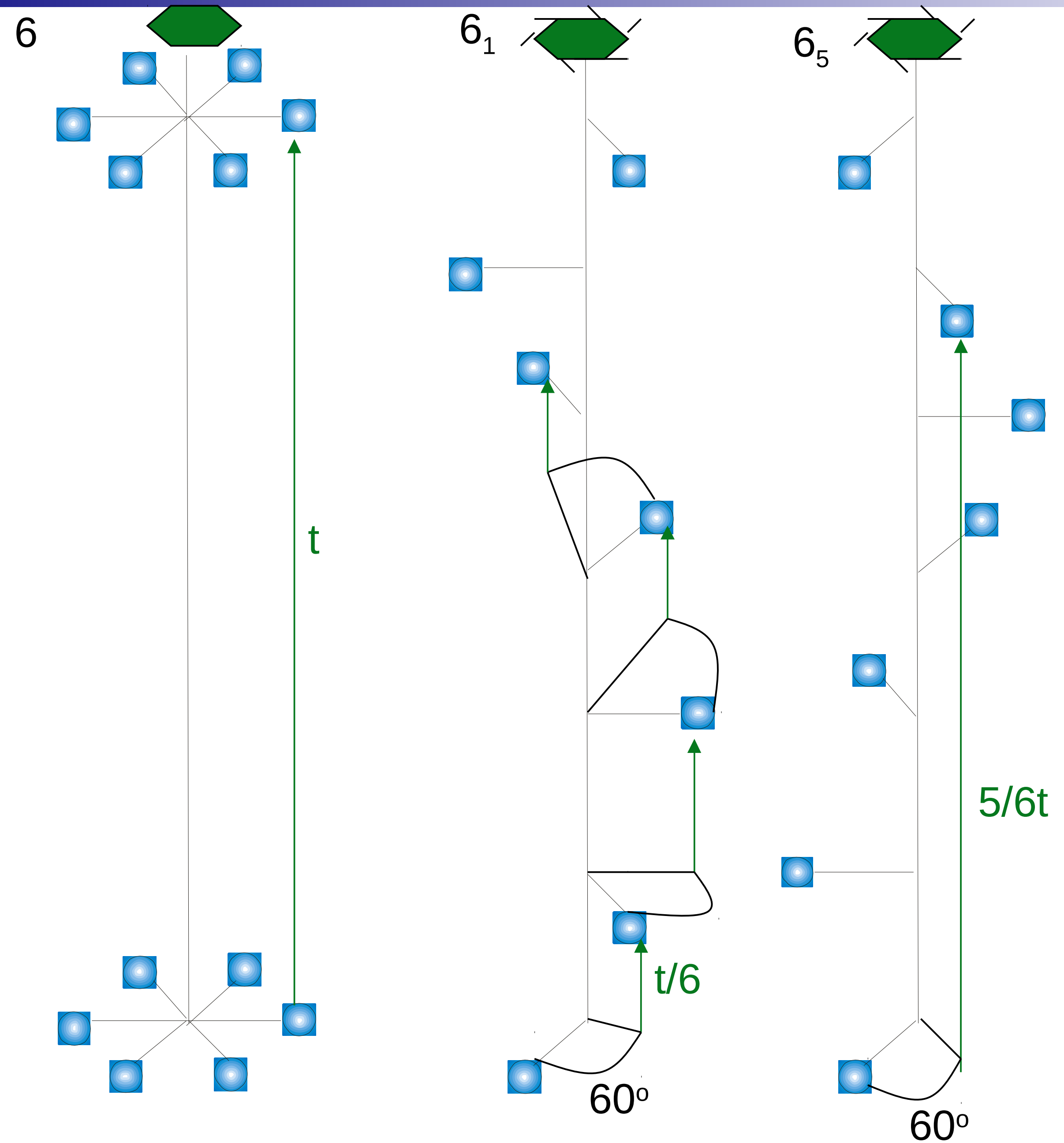
rotacija za 180^o

translacija za t/2

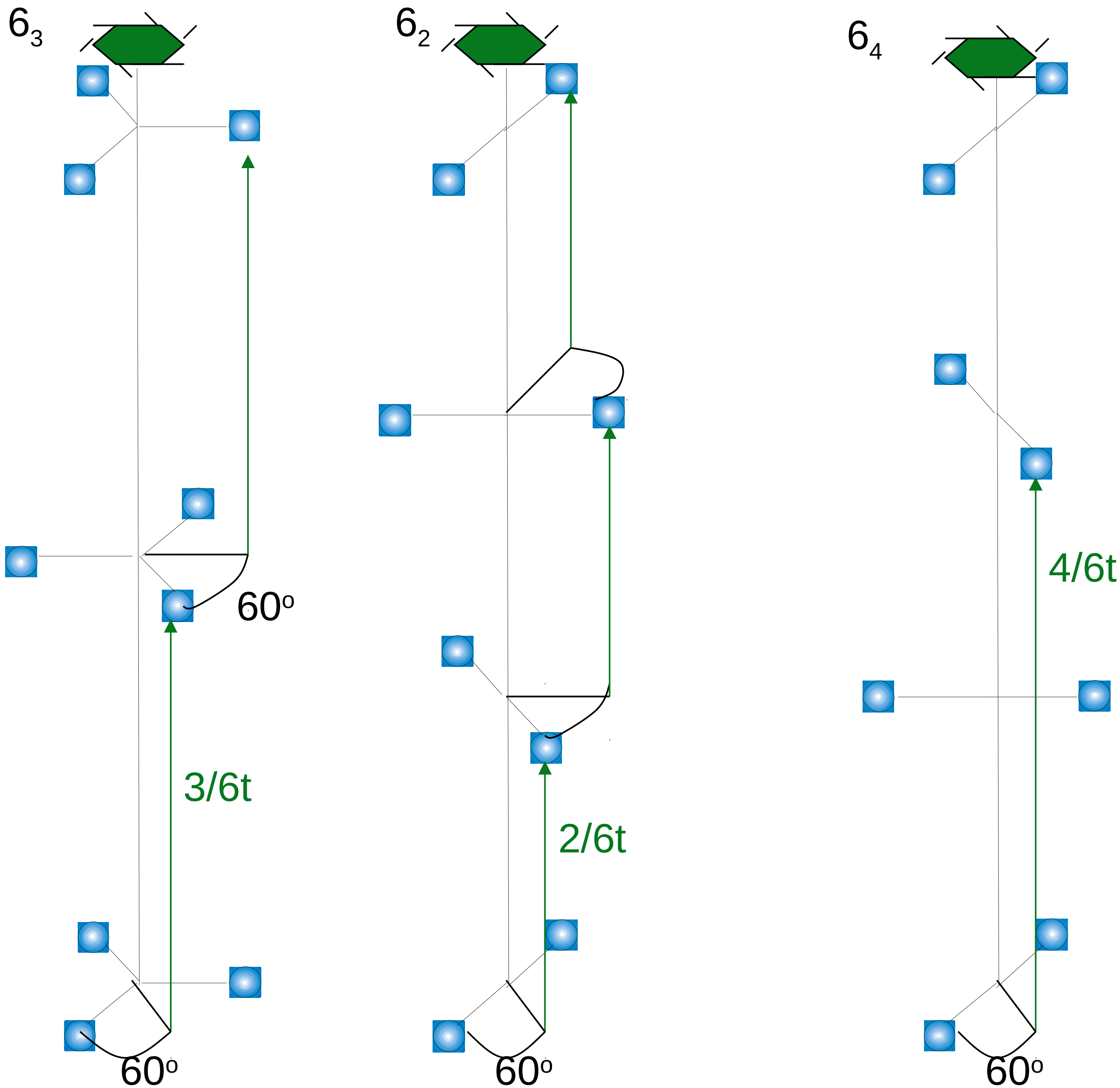


3
3_1
3_2
a_1
a_2
a_3
a_1'
a_2'
a_3'
a_1''
t
t/3
2/3t
120°


4
4_1
4_2
4_3
a_1
a_2
a_3
a_4
a_1'
a_2'
a_3'
a_4'
90°
t
t/4
t/2
3/4t



6
6_1
6_5
t
t/6
5/6t
60°
60°



6_3
6_2
6_4
60°
3/6t
2/6t
4/6t
60°
60°
60°

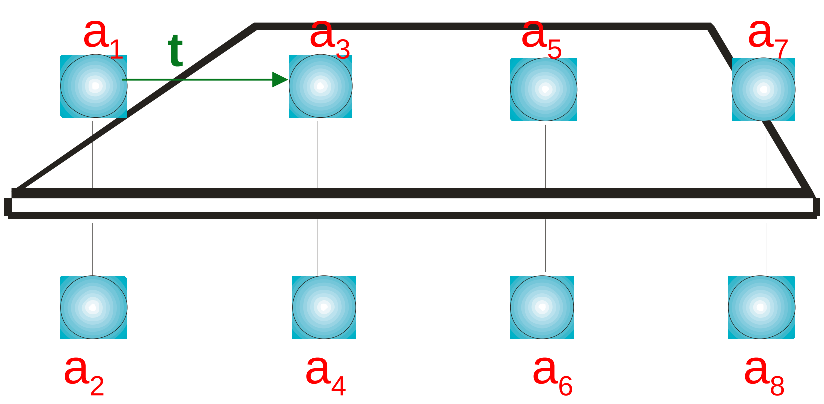
Drsne ravnine simetrije

Simetrijska operacija ki jo predstavlja drsna ravnina simetrije vsebuje:

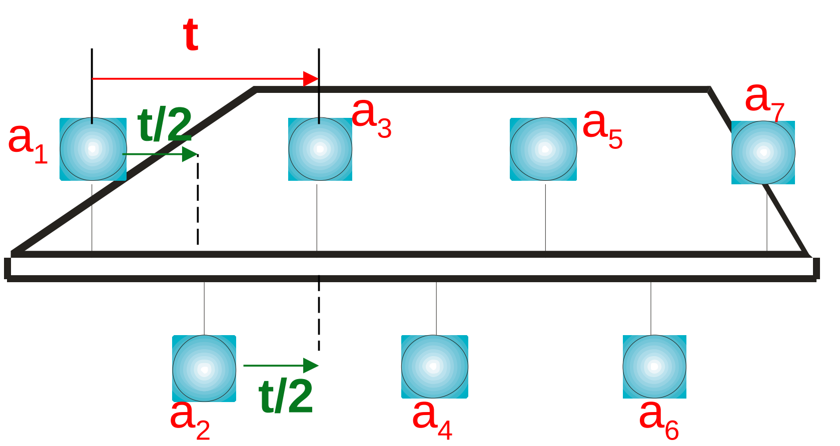
1) zrcaljenje preko ravnine simetrije in

2) translacijo vzporedno ravnini simetrije
(v smeri in za zamik, ki ju določa drsna komponenta).

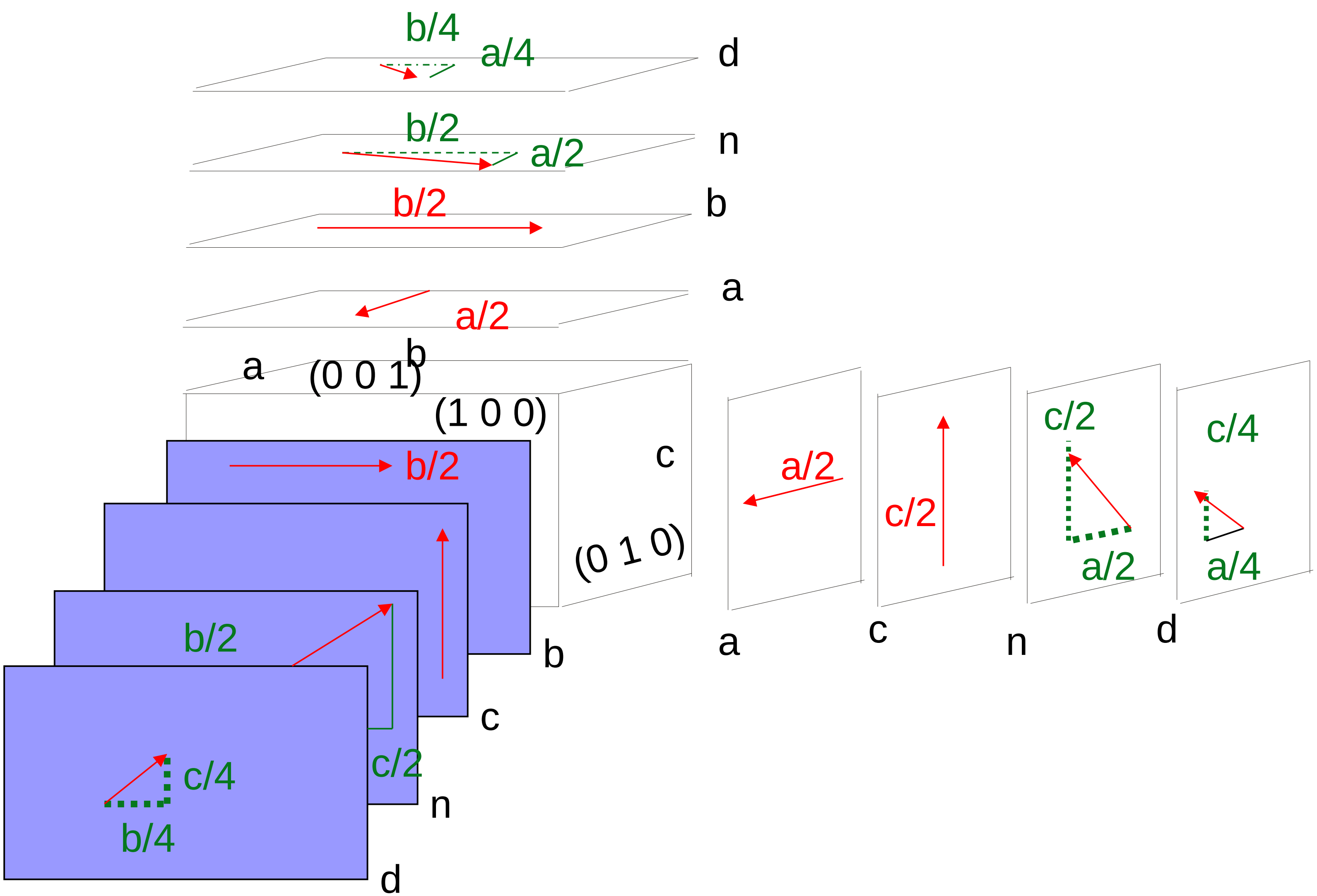
Ravnina simetrije



Drsna ravnina simetrije



Možni tipi drsnih ravnin simetrije vzporedno ploskvam: (1 0 0), (0 1 0), (0 0 1)



230 prostorskih grup

Translacijski objekt lahko poleg simetrijskih elementov, ki pripadajo 32 prostorskim grupam vsebuje tudi vijačne osi simetrije in zrcalne ravnine simetrije.

Upoštevajoč vse možne kombinacije vseh simetrijskih elementov in tipov osnovnih celic v vseh simetrijskih razredih dobimo namesto prej naštetih 73 preprostih prostorskih grup skupaj 230 prostorskih grup.

Prostorske grupe so natančno opisane v International Tables for X-ray crystallography, Vol.1

TRIKLINSKE

P 1 P -1

MONOKLINSKE

P 2 P 21 C 2 P M P C
C M C C P 2/M P 21/M C 2/M
P 2/C P 21/C C 2/C

ORTOROMBSKE

P 2 2 2 P 2 2 21 P 21 21 2 P 21 21 21 C 2 2 21
C 2 2 2 F 2 2 2 I 2 2 2 I 21 21 21 P M M 2
P M C 21 P C C 2 P M A 2 P C A 21 P N C 2
P M N 21 P B A 2 P N A 21 P N N 2 C M M 2
C M C 21 C C C 2 A M M 2 A B M 2 A M A 2
A B A 2 F M M 2 F D D 2 I M M 2 I B A 2
I M A 2 P M M M P N N N P C C M P B A N
P M M A P N N A P M N A P C C A P B A M
P C C N P B C M P N N M P M M N P B C N
P B C A P N M A C M C M C M C A C M M M
C C C M C M M A C C C A F M M M F D D D
I M M M I B A M I B C A I M M A

TETRAGONALNE

P 4 P 41 P 42 P 43 I 4
I 41 P -4 I -4 P 4/M P 42/M
P 4/N P 42/N I 4/M I 41/A P 4 2 2
P 4 21 2 P 41 2 2 P 41 21 2 P 42 2 2 P 42 21 2
P 43 2 2 P 43 21 2 I 4 2 2 I 41 2 2 P 4 M M
P 4 B M P 42 C M P 42 N M P 4 C C P 4 N C
P 42 M C P 42 B C I 4 M M I 4 C M I 41 M D
I 41 C D P -4 2 M P -4 2 C P -4 21 M P -4 21 C
I -4 M 2 P -4 C 2 P -4 B 2 P -4 N 2 P -4 M 2
I -4 C 2 I -4 2 M I -4 2 D P 4/M M M P 4/M C C
P 4/N B M P 4/N N C P 4/M B M P 4/M N C P 4/N M M
P 4/N C C P 42/M M C P 42/M C M P 42/N B C P 42/N N M
P 42/M B C P 42/M N M P 42/N M C P 42/N C M I 4/M M M
I 4/M C M I 41/A M D I 41/A C D

TRIGONALNE

P 3 P 31 P 32 R 3 P -3
R -3 P 3 1 2 P 3 2 1 P 31 1 2 P 31 2 1
P 32 1 2 P 32 2 1 R 3 2 P 3 M 1 P 3 1 M
P 3 C 1 P 3 1 C R 3 M R 3 C P -3 1 M
P -3 1 C P -3 M 1 P -3 C 1 R -3 M R -3 C

HEKSAGONALNE

P 6 P 61 P 65 P 62 P 64
P 63 P -6 P 6/M P 63/M P 6 2 2
P 61 2 2 P 65 2 2 P 62 2 2 P 64 2 2 P 63 2 2
P 6 M M P 6 C C P 63 C M P 63 M C P -6 M 2
P -6 C 2 P -6 2 M P -6 2 C P 6/M M M P 6/M C C
P 63/M C M P 63/M M C

KUBIČNE

P 2 3 F 2 3 I 2 3 P 21 3 I 21 3
P M 3 P N 3 F M 3 F D 3 I M 3
P A 3 I A 3 P 4 3 2 P 42 3 2 F 4 3 2
F 41 3 2 I 4 3 2 P 43 3 2 P 41 3 2 I 41 3 2
P -4 3 M F -4 3 M I -4 3 M P -4 3 N F -4 3 C
I -4 3 D P M 3 M P N 3 N P M 3 N P N 3 M
F M 3 M F M 3 C F D 3 M F D 3 C I M 3 M
I A 3 D

Ekvivalentne pozicije

Vsaka točka ali mesto v strukturi kristala skupaj z vsemi točkami, ki so z njo povezane preko simetrijskih elementov predstavlja set simetrično ekvivalentnih točk ali pozicij.

Število ekvivalentnih pozicij v osnovni celici je odvisno od:

1) narave in števila simetrijskih elementov v prostorski grupi

2) položaja začetne pozicije glede na simetrijske elemente

Posebna (specialna) pozicija - sovpada s katerim od simetrijskih elementov

Splošna pozicija - ne sovpada z nobenim od simetrijskih elementov

Za vsako posebno in splošno pozicijo so v International Tables for X-ray crystallography, Vol.1 našteti sledeči podatki:

1) število ekvivalentnih točk

2) Wyckoff-ovo oznako (a,b,c,d,e,f,g,h,i,....-višja črka, manj simetrijskih elementov v poziciji)

3) točkovno simetrijo v tej poziciji

4) koordinate ekvivalentnih pozicij

Število ekv. poz., Wyckoff. št., točk. sim.			Koordinate ekvivalentnih pozicij
8	i	1	x,y,z; -x,-y,z; ½+x, ½-y,-z; ½-x, ½+y,-z; -x,-y,-z; x,y,-z; ½-x, ½+y,z; ½+x, ½-y,z;
4	h	m	x,y, ½; -x,-y, ½; ½+x,½-y, ½; ½-x, ½+y, ½;
4	g	m	x,y,0; -x,-y,0; ½+x,½-y, 0; ½-x, ½+y, 0;
4	f	2	0, ½,z; 0, ½,-z; ½,0,z; ½,0,-z;
4	e	2	0,0,z; 0,0,-z; ½, ½,z; ½,½,-z;
2	d	2/m	0, ½,½; ½,0,½;
2	c	2/m	0, ½,0; ½,0,0;
2	b	2/m	0,0, ½; ½,½,½;
2	a	2/m	0,0,0; ½,½,0;

Schoenflies-ove oznake

V Schoenflies-ovih oznakah so točkovne skupine označene s simbolom, sestavljenim iz črke in podpisanega indeksa, prostorske skupine pa imajo poleg oznake točkovne skupine še nadpisan indeks, ki loči prostorske skupine, ki pripadajo isti točkovni simetriji.

Pomen simbolov točkovnih skupin:

Črka *O* (oktaeder) označuje, da ima skupina simetrijo oktaedra (ali kocke), z (*Oh*) ali brez (*O*) inverznih osi simetrije.

Črka *T* (tetraeder) označuje skupino, ki ima simetrijo tetraedra. *Td* vključuje inverzne osi simetrije, *T* jih izključuje, *Th* pa predstavlja *T* s centrom simetrije.

***Cn* (cikličen) označuje skupino z *n*-števno os simetrije. *Cnh* je *Cn* z ravnino simetrije pravokotno na os simetrije. *Cnv* je *Cn* z ravninami simetrije vzporednimi osi simetrije**

_Sn_ (_Spiegel_, nemško-ogledalo (ravnina simetrije)) označuje skupino, ki ima le _n_-števno os simetrije in nanjo pravokotno ravnino simetrije.

_Dn_ (dvoštevno) označuje skupino z _n_-števno osjo simetrije in dvoštevnimi osmi pravokotnimi nanjo. _Dnh_ ima tudi ravnino simetrije pravokotno na _n_-števno os. _Dnv_ ima poleg elementov _Dn_, še ravnine simetrije vzporedne _n_-števni osi.

Primer:

Točkovna skupina:	T_h	$2/m\ \bar{3}$
Vsebuje prostorske skupine:	T_h^1	P 2/m -3
	T_h^2	P 2/n -3
	T_h^3	F 2/m -3
	T_h^4	F 2/d -3
	T_h^5	I 2/m -3
	T_h^6	P 21/a -3
	T_h^7	I 21/a -3