

ELEMENTI DI SIMMETRIA PUNTUALE

Per prima cosa bisogna definire un sistema di coordinate.

Come sistema di riferimento si deve scegliere una terna di assi che possa descrivere il reticolo nel modo più conveniente possibile, questi vengono definiti come assi cristallografici. I tre assi non sono necessariamente perpendicolari.

Avremo quindi 3 vettori di ripetizione che definiamo con le lettere a, b, c , che vanno lungo le direzioni cristallografiche x, y e z , e gli angoli che formano tra di loro che sono: alfa quello formato da b e c , beta quello tra a e c , e gamma quello tra a e b .

In genere in cristallografia si usa una terna di assi destrorsa cioè l'orientazione descritta dalla mano destra associando a al pollice, b all'indice e c al medio.

SIMMETRIA

La simmetria è una regolarità (non in traslazione), intorno a un punto di riferimento, degli elementi geometrici che costituiscono i cristalli (facce, spigoli, vertici).

Questa regolarità (o ripetizione di elementi equivalenti), si può mettere in evidenza mediante operazioni di simmetria. Esse possono essere:

- ***Rotazione*** rispetto ad un asse;
- ***Riflessione*** rispetto ad un piano;
- ***Inversione*** rispetto ad un punto.

La ***rotazione*** collega parti (o oggetti) ***congruenti*** cioè sovrapponibili nello spazio: destro con sinistro, sinistro con sinistro.

La ***riflessione*** e l'***inversione*** collegano parti (o oggetti) ***incongruenti***, o ***speculari***, o ***enantiomorfi***, cioè non sovrapponibili nello spazio: destro con sinistro e viceversa.

N.B: L'***inversione*** è l'operazione che collega parti o oggetti diametralmente opposti, ed avviene rispetto ad un punto detto ***centro di inversione*** o ***centro di simmetria***.

N.B: ***Assi di rotazione, piani di simmetria, centro di simmetria*** sono gli ***elementi di simmetria***.

ROTAZIONE

La simmetria si può mettere in evidenza per rotazione.

L'angolo di rotazione Alfa di cui ruota l'oggetto intorno all'asse di rotazione (o ***gira*** = l'operatore cioè quello che mi esegue l'operazione della rotazione è detta ***GIRA***, quindi ce ne saranno di diversi tipi a seconda dell'angolo che dovremo applicare per ogni rotazione) per ricoprire se stesso è dato da:

$$\alpha = 360^\circ / n$$

n è l'***ordine dell'asse*** di rotazione (numero di volte che l'oggetto ricopre se stesso nell'arco di 360°). Quindi l'angolo di rotazione Alfa dipende da quanto vale n .

Nei cristalli la disposizione ordinata e periodica degli atomi fa sì che ***gli unici valori di n permessi*** sono:

1,2,3,4,6

Solo questi e nessun altro.

Si hanno così assi di ordine:

- 1 (gira);***
- 2 (digira);***
- 3 (trigira);***
- 4 (tetragira);***
- 6 (esagira).***

Questa nomenclatura è il modo di chiamare questi operatori i quali ognuno di essi definisce una operazione di simmetria, di ordine 1,2,3,4,6.

Esistono anche altri modi per chiamarli.

n, ordine dell'asse	$\alpha(^{\circ}) = 360^{\circ}/n$	nome dell'asse simbolo
1	360°	identità
2	180°	digira
3	120°	trigira
4	90°	tetragira
6	60°	esagira

OPERAZIONI DI PRIMO E SECONDO TIPO

Operazioni del primo tipo: rotazione

Rotazione di ordine 1, 2, 3, 4 e 6 sono rotazioni che non mi alterano il mio oggetto che sarà sovrapponibile dopo aver compiuto la rotazione. I simboli per rappresentare la rotazione sono i numeri o i simboli della tabella.

Operazioni del secondo tipo: riflessione e inversione

L'oggetto finale non è sovrapponibile all'oggetto iniziale dopo le operazioni di riflessione e inversione. Il simbolo per rappresentare il piano di riflessione è indicato con la lettera *m* (sta per mirror ovvero specchio in inglese), invece per il centro di inversione lo possiamo indicare con la lettera *i* oppure con un **I** con un trattino sopra (il trattino è un *meno* difatti si legge meno 1).

ROTAZIONI COMPATIBILI CON I RETICOLI CRISTALLINI

I cristalli vengono chiamati in questo modo perché la materia si ripete ordinatamente in modo periodico, quindi attraverso un vettore di traslazione possiamo riprodurre le posizioni degli atomi all'interno del cristallo.

Se ci sono operazioni di simmetria nel cristallo, anche gli operatori di simmetria dovranno ripetersi periodicamente, quindi il vettore traslazione che io applico al mio oggetto (atomo) lo applico anche all'operatore di simmetria.

Esempio astratto

Abbiamo una traslazione orizzontale dal punto A al punto A' di un modulo τ (A). Se noi immaginiamo che in A abbiamo anche un operatore di rotazione perpendicolare allo schermo, nel punto A, il vettore di traslazione mi traslerà l'operatore di simmetria nel punto A'.

Sia α l'angolo generico (può essere di qualsiasi misura) di un punto di rotazione applicato nel nodo A.

Qualsiasi oggetto intorno a questo punto ruotato di α dovrà riprodursi. Se io prendo in considerazione la linea che unisce A ad A' e lo ruoto di α gradi otterrò una linea di stesso modulo τ al quale vertice troverò un punto che denomino B.

Stessa cosa faccio partendo da A': prendo il mio vettore di traslazione e lo ruoto di α gradi e ottengo di nuovo il mio vettore di traslazione, lungo τ , ma ovviamente con direzione differente e all'estremo opposto otterrò un nuovo punto che chiamerò B'.

Essendo che la direzione che congiunge B e B' parallela alla direzione che congiunge A con A', allora se questo è un filare (la linea che congiunge A con A') ed è un motivo periodico, allora anche questo (la linea che congiunge B con B') deve essere un filare parallelo a quel motivo periodico, quindi tra B e B' ci deve stare un numero n intero di volte τ , e in questo disegno sarà due volte τ .

Quindi:

I punti B e B' devono trovarsi sullo stesso filare parallelo ad AA'.
Inoltre matematicamente possiamo dire che:

$$BB' = mAA' = m\tau$$

Dove m è un numero intero, positivo o negativo, 0 compreso.

Da questo schema che è stato creato possiamo fare altre considerazioni. Ad esempio se considero delle direzioni perpendicolari al mio segmento BB' che partono dai punti A e da A', ottengo i segmenti AC e A'C'.

In questo modo creo un punto di riferimento anche per gli angoli. Avendo ottenuto dei triangoli rettangoli, un angolo varrà sicuramente 90° mentre l'altro angolo sarà necessariamente $180^\circ - \alpha$. Quindi so quanto vale quell'angolo se so quanto vale α .

Se le cose stanno così significa che:

$$BB' = BC + CC' + C'B' = AA' + 2\tau \cos(180-\alpha) = \tau + 2\tau \cos(180-\alpha)$$

Ma io so che:

$$BB' = m\tau$$

Quindi:

$$BB' = \tau + 2\tau \cos(180-\alpha)$$

Ma:

$$\cos(180-\alpha) = -\cos\alpha$$

$$m\tau = \tau - 2\tau\cos\alpha$$






Quindi:

$$m = 1 - 2\cos\alpha$$

$$\boxed{\cos\alpha = \frac{1-m}{2}} \quad \cos\alpha = \frac{M}{2}$$

($\cos\alpha$: tra +1 e -1)

L'equazione permette di calcolare i possibili valori dell'angolo di rotazione α .

M	$\cos \alpha$	α°	Ordine (n) e simbolo
2	1	360	1 
1	$\frac{1}{2}$	60	6 
0	0	90	4 
-1	$-\frac{1}{2}$	120	3 
-2	-1	180	2 

Questa dimostrazione impone che solo **5 tipi di rotazione** siano **possibili nei cristalli**, questo vale anche per le roto riflessioni e le roto inversioni. Si noti però che gli ordini di rotazione non accettati per i cristalli sono **però possibili per le molecole isolate**.

Non si può riempire il piano completamente con soli pentagoni. Quindi la **pentagira non è compatibile con il reticolo**. E neppure le gire con $n > 6$. Né si può riempire il piano completamente con soli ottagoni. Questo causerebbe in uno e nell'altro caso dei vuoti.

PROIEZIONE STEREOGRAFICA

Si tratta di riportare nel piano un oggetto tridimensionale.

Considero un oggetto costituito da facce di vario colore (gialle, blu e rosse). Partendo da ogni faccia immagino di avere una linea perpendicolare alla faccia. Se immaginiamo di avere questo oggetto racchiuso in una sfera, è possibile disegnare sulla superficie della sfera i punti di intersezione dei poli per ogni faccia. Ad ogni punto di intersezione posso dargli un nome, usando una terna di numeri racchiusi tra parentesi quadre, che ne determina appunto la direzione cristallografica. Quindi noi avremo tanti punti neri sulla superficie della sfera quante direzioni ci sono perpendicolare alle facce del nostro oggetto.

Quindi ricapitolando: una forma geometrica può essere rappresentata dalla proiezioni dei poli delle facce che lo compongono (**proiezione sferica**). Si congiunge il centro del cristallo con il centro di ogni faccia prolungando questi segmenti (poli) si va ad intersecare la superficie sferica ottenendo così dei punti sulla superficie sferica quante sono le facce del cristallo.

La proiezione sferica però non è molto pratica quindi la nostra soluzione è la **proiezione stereografica** in cui ciascuno di queste intersezione che sono sulla superficie della sfera, le riportiamo sul singolo piano che sarà il **piano equatoriale** della sfera. Se noi consideriamo la linea nord-sud questo piano sarà perpendicolare a questa linea e la taglierà a metà.

Tagliando perfettamente a metà la sfera, delimiterò la massima circonferenza della sfera, e su quel cerchio massimo andremo a riportare tutti i punti che ci sono sulla superficie della sfera facendo un accorgimento particolare cioè andrò a congiungere ogni punto della superficie con il polo estremo, cioè un punto collocato nell'emisfero Nord verrà collegato con il polo Sud. Quando vado a tracciare questa linea immaginaria, la linea andrà a intersecare il cerchio massimo in un punto al suo interno e quella è la mia proiezione stereografica. La stessa cosa può essere individuata per qualsiasi altro punto.

Essendo la sfera simmetrica sopra e sotto è giusto che vada a dare un'opportuna nomenclatura per i punti equivalenti dell'emisfero Nord e dell'emisfero Sud poiché avranno la stessa proiezione.

Quindi ciascun polo può essere trasferito sul piano equatoriale via una proiezione stereografica.

Alla fine l'oggetto che mi resta è un cerchio con una serie di punti che rappresentano le proiezioni stereografiche dei poli delle facce.

Quindi si ottiene un semplice diagramma che rappresenta una figura geometrica complessa, al quale bordo si possono trovare dei punti che rappresenterebbero i poli che sono orizzontali, i punti invece al centro rappresentano i poli verticali.

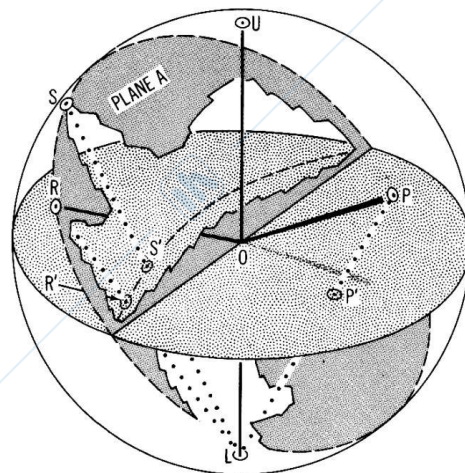
PROIEZIONE STEREOGRAFICA DI UN PIANO

Immaginiamo un piano A che passa dal centro della sfera e quindi andrò a intersecare infiniti punti lungo il contatto tra il piano e la sfera. Per ciascuno di questi punti posso fare la proiezione stereografica.

Se io lo faccio per tutti punti inizio a delineare sul mio disegno un arco, che rappresenta la traccia di un piano che interseca la mia sfera ad un angolo, l'angolo che forma la traccia con l'asse perpendicolare.

Per mettere il mio oggetto dentro una sfera e fare la proiezione stereografica uso gli angoli tra le facce il goniometro.

Quindi attraverso operazioni matematiche ben precise posso rappresentare gli angoli in due dimensioni.



....

ROTOINVERSIONE

È una “doppia” operazione di simmetria costituita da:

1. Una rotazione di α gradi intorno all'asse;
2. Inversione rispetto al centro.

Avvengono in contemporanea, sono operazioni di simmetria combinate!

Si simboleggiano ponendo il segno - sul simbolo dell'asse.

Esempi e esercizi!!

Abbiamo:

- **Rotoinversione di ordine 1;**
- **Rotoinversione di ordine 2:** corrisponde a una riflessione lungo l'asse verticale;
- **Rotoinversione di ordine 3:** bisogna applicarla 6 volte per ritornare all'oggetto originale e quindi si ottengono 6 oggetti.
- **Rotoinversione di ordine 4:**
- **Rotoinversione di ordine 6:** equivalente a dire che abbiamo una rotoinversione di ordine 3 e una riflessione orizzontale o c'è cioè perpendicolare all'asse di rotazione.

COMBINAZIONE DEGLI ELEMENTI DI SIMMETRIA

Considerando gli elementi di simmetria:

- **Assi di ordine 1, 2, 3, 4 e 6;**
- **Piano m;**
- **Assi di rotoinversione di ordine 1, 3, 4, 6.** Non parliamo di asse di rotoinversione di ordine 2 perché equivale a un piano di riflessione quindi equivale al piano m. Non parliamo di inversione perché l'inversione equivale all'asse di rotoinversione di ordine 1.

In uno stesso cristallo si possono trovare più elementi di simmetria. Le combinazioni possibili non sono infinite ma sono esattamente **32** dedotte da Hessel per la prima volta nel 1830, e vengono chiamate **classi cristalline o gruppi puntuali** (puntuali perché questi operatori abbinati coincideranno tutti in un punto idealmente noi pensiamo a centro del nostro cristallo, ma non è necessariamente così).

SIMBOLEGGIATURA DELLE CLASSI CRISTALLINE

Notazione di Hermann – Mauguin.

Per gli assi si usano i numeri dell'ordine dell'asse 1 2 3 4 6 e 1 3 4 6.

Per i piani si usa la lettera m.

- **Se un asse ortogonale a un piano** : $2/m$, $4/m$ (la stanghetta non sta per fratto ma per perpendicolare, l'asse di rotazione è perpendicolare al piano m).
- **Se il piano passa per l'asse**: $3m$, $4m$ (l'asse di rotazione è contenuta nel piano, quindi il piano passa dall'asse).
- **Se un piano è ortogonale ad un altro**: mm
- **Se un asse è ortogonale a un altro asse**: **32** (questo significa che avremo 3 volte una rotazione di ordine 2).

reticolo	DIREZIONE DI SIMMETRIA (posizione nel simbolo di Hermann-Mauguin)		
	primaria	secondaria	terziaria
Triclinico	nessuna		
Monoclinico	[010] ('asse unico b') [001] ('asse unico c')		
Ortorombico	[100]	[010]	[001]
Tetragonale	[001]	$\left\{ \begin{matrix} [100] \\ [010] \end{matrix} \right\}$	$\left\{ \begin{matrix} [1\bar{1}0] \\ [110] \end{matrix} \right\}$
Esagonale	[001]	$\left\{ \begin{matrix} [100] \\ [010] \\ [1\bar{1}0] \end{matrix} \right\}$	$\left\{ \begin{matrix} [1\bar{1}0] \\ [120] \\ [2\bar{1}0] \end{matrix} \right\}$
Romboedrico (assi esagonali)	[001]	$\left\{ \begin{matrix} [100] \\ [010] \\ [1\bar{1}0] \end{matrix} \right\}$	
Romboedrico (assi romboedrici)	[111]	$\left\{ \begin{matrix} [1\bar{1}0] \\ [01\bar{1}] \\ [10\bar{1}] \end{matrix} \right\}$	
Cubico	$\left\{ \begin{matrix} [100] \\ [010] \\ [001] \end{matrix} \right\}$	$\left\{ \begin{matrix} [111] \\ [1\bar{1}\bar{1}] \\ [1\bar{1}1] \\ [11\bar{1}] \end{matrix} \right\}$	$\left\{ \begin{matrix} [1\bar{1}0] [110] \\ [01\bar{1}] [011] \\ [10\bar{1}] [101] \end{matrix} \right\}$

I piani di simmetria sono rappresentati per le loro normali; se asse di simmetria e la normale ad un piano di simmetria sono parallele si rappresentano separati con una barra, es. $2/m$

Simboli compatti

I simboli degli assi di simmetria vengono soppressi tanto quanto sia possibile, es. $2/m2/m2/m \rightarrow mmm$

Un centro di simmetria non viene mai espresso direttamente tranne che per -1; la presenza o assenza può essere inferita dal simbolo del gruppo spaziale

CLASSI ACCORPATE AI 7 SISTEMI

Le classi sono distribuite nei sistemi in base alle massime operazioni di simmetria compatibili con i reticoli di Bravais.

SISTEMA TRICLINO

Nel sistema triclino avremo solo due classi la classe I e $-I$, ammettono lo stesso schema di croce assiale $a \neq b \neq c$ e lo stesso tipo di rapporto parametrico $a:b:c$.

La classe I prevede solo l'identità. Quindi una faccia unica a fine se stessa, non vi sarà mai un'altra faccia identica in un altro lato del cristallo.

Nella classe $-I$ per ciascuna di queste facce bisogna prevedere che nella parte diametralmente opposte ci sia una faccia identica però ovviamente girata.

SISTEMA MONOCLINO

Per il sistema monoclinico abbiamo tre classi: 2 , m , $2/m$, la presenza di questi elementi di simmetria impone una scelta diversa della croce assiale: $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta > 90^\circ$ (Beta deve essere diverso da 90° , può essere maggiore o minore in base a come vengono presi Alfa e Gamma) e il rapporto parametrico è sempre del tipo $a:b:c$.

- Nella classe 2 abbiamo solo la rotazione di ordine 2 .
- Nella classe m abbiamo solo un piano di riflessione.
- Nella classe $2/m$ abbiamo una rotazione di ordine 2 e un piano perpendicolare.

Attenzione che nel sistema monoclinico l'asse di rotazione di ordine 2 sarà sempre orizzontale, negli altri si metterà verticale di maggior ordine.

SISTEMA ORTOROMBICO

Abbiamo tre classi: mm , 222 , mmm è opportuno scegliere una croce assiale ortogonale $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ mentre rimane valido $a:b:c$.

I termini mm , 222 , mmm , sono simboli compatti. Attenzione che la classe mm la si può rappresentare come $2\ mm$ o $m2m$ o $mm2$, a seconda di dove vado a collocare la digira (se lungo l'asse a lungo l'asse b o lungo l'asse c).

La classe 222 prevede una digira lungo l'asse x (a), una digira lungo l'asse y (b) e una digira lungo l'asse z (c).

La classe mmm è il simbolo compatto della classe $2/m$, $2/m$, $2/m$, quindi prevede tre piani perpendicolari e tre digire perpendicolari ai piani.

Scelta degli assi: Le digire (o le normali ai piani m) sono assunte come assi cristallografici.

SISTEMA TETRAGONALE

Cristalli con *tetragira* ($n=4$).

Le classi sono: **4, 4m, 4/m, 4/mmm** (si può anche vedere come 4/m, 2/m, 2/m), **42** (equivale anche alla classe 422), **4, 42m**.

La croce assiale deve essere del tipo $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ e il rapporto parametrico deve essere **a:a:c**.

Scelta degli assi: La tetragira è presa come asse z; gli altri due assi x e y, sono presi nel piano ortogonale.

SISTEMA TRIGONALE E SISTEMA ESAGONALE

In entrambe i sistemi si ha una croce assiale del tipo $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ e con rapporto parametrico **a:a:c**.

Nel *sistema trigonale* abbiamo cristalli con *trigire* ($n=3$). Abbiamo le classi: **3, 3m, 32, 3, 3m**.

Nel *sistema esagonale* abbiamo cristalli con *esagira* ($n=6$). Abbiamo le classi: **6, 6m, 6/m, 6/mmm, 62, 6, 62m**

La classe 6/mmm equivale alla classe 6/m, 2/m, 2/m. La classe 62 si può rappresentare come 622. La classe 6m si può rappresentare come 6mm.

SISTEMA CUBICO

Nel sistema cubico le cinque classi sono tutte caratterizzate dalla presenza di **quattro trigire** (corrispondenti alle diagonali del cubo).

La loro simboleggiatura è diversa dalle precedenti il simbolo 3 è sempre al secondo posto.

Abbiamo: **23, 432, 43m, m3, m3m**.

In questo sistema sia croce assiale con costanti $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ e rapporto parametrico **a:a:a**.

MINERALI COMUNI IN FUNZIONE DELLE CLASSI CRISTALLINE

Forma cristallina: Insieme delle facce che coesistono per la presenza di determinati elementi di simmetria. Simbolo $\{hkl\}$.

Esempio: il cubo $\{100\}$; il romboedro $\{1011\}$.

Per dare un simbolo alla forma cristallina vengono usate le parentesi graffe; esse sono usate per parlare dell'insieme delle facce che sono simmetriche in una determinata classe.

Data la faccia (100) del cubo ne esistono altre cinque equivalenti per un totale di 6 che costituiscono la forma di simbolo $\{100\}$.

Forma generale: È la forma cristallina di ciascuna classe che corrisponde al simbolo $\{hkl\}$, dove h, k e l, devono essere diversi tra di loro. Esempio: nel cubico la forma 111 non è una forma generale, perché la faccia 111, quindi nella direzione 111 nella rappresentazione stereografica è la direzione della trigira quindi significa che il polo di quella faccia corrisponde a una trigira, quindi non è una forma generale (per essere una forma generale il polo non può coincidere con nessun operatore di simmetria).

Forme speciali: Tutte le forme che si generano da una faccia il cui polo coincide con qualche operatore di simmetria sono forme speciali.

Una forma può non essere trovata da sola in un cristallo di minerale, possono esserci varie forme.

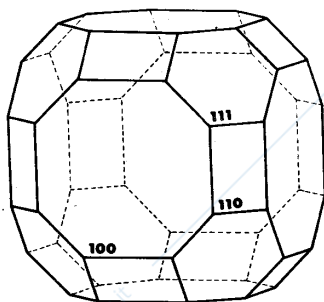


Fig. 75 - Combinazione di $\{100\}$, $\{110\}$, $\{111\}$ nella classe $m\bar{3}m$.

Le 26 facce di questo modello sono rappresentabili mediante i simboli delle 3 facce (111), (100), (100), legate alle altre equivalenti dagli elementi di simmetria. Quindi si ha una combinazione delle tre forme $\{100\}$, $\{110\}$, $\{111\}$ nella classe $m\bar{3}m$.

La forma dominante impartisce l'aspetto tipico o *abito*.

FORMA CRISTALLOGRAFICA

Insieme di facce generate attraverso l'operazione degli elementi di simmetria (gruppo puntuale), su una determinata faccia.

1. Forma risultante dipende da:

- Gruppo puntuale;
- Posizione della faccia.

2. Hanno nomi specifici:

- **Pedione**: Faccia singola.
- **Pinacoide**: Sono due facce parallele tra di loro. Si può ottenere un pinacoide attraverso un'inversione oppure con un asse che sia parallelo alle due facce.
- **Sfenoide**: Se l'asse di rotazione interseca le due facce allora esse necessariamente formeranno uno spigolo. Richiede che ci sia una digira.
- **Doma**: È molto simile allo sfenoide, la differenza è che nel doma c'è un piano di simmetria.
- **Prisma**: Combinazione di doma e sfenoide insieme, si crea un oggetto che ha facce intorno a una direzione cioè il prisma. Il Prisma non è un oggetto chiuso, per avere un oggetto chiuso bisogna avere un prisma e un pinacoide.

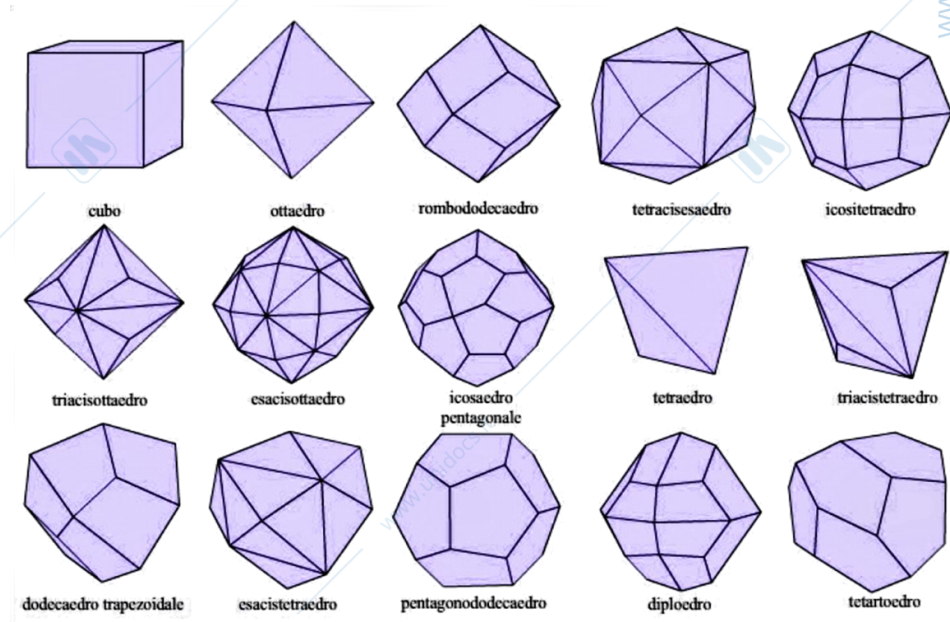
Esempio: Prisma esagonale e proiezione stereografica del prisma esagonale dove le facce sono verticali quindi parallele all'asse di rotazione 6 quindi ogni 60° si otterrà un polo.

- **Piramide**: Se i poli invece non sono orizzontali ma sono un po' inclinati verso l'alto, la proiezione stereografica non li colloca nel cerchio esterno, ma all'interno, quindi le facce perpendicolari a questi poli sono le facce che configurano la piramide. La piramide è un oggetto aperto, per chiudere la piramide è necessario un pedione.

3. I cristalli naturali combinano più di una forma:

- Forme aperte e chiuse;
- Forme Generali $\{hkl\}$, e speciali $\{100\}$, $\{hhl\}$.

4. Una faccia viene assegnata come notazione la più semplice.



CROCE ASSIALE A 4 ASSI

Per i sistemi trigonale e esagonale è opportuno introdurre un quarto asse W nel piano xy , perché facce della stessa forma abbiano gli stessi indici.

W è a 120° da x e 120° da y . W cresce positivamente allontanandosi da x e y .

Quindi in questi sistemi ci saranno quattro indici (**hkil**) *indici di Miller - Bravais*.

L'indice i è necessariamente negativo perché w è tra x e y .

Disegno

Si notano i segmenti che sono il rapporto tra la faccia fondamentale e le interseche di una determinata faccia come AB . Quindi avremo: a/h , $-a/i$, a/k .

Mettiamo solo a perché il vettore è sempre lo stesso, a è uguale ad i nell'esagonale.

È possibile calcolare la relazione trigonometrica tra questi indici:

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{a}{h} \cdot \frac{\bar{a}}{i} \sin 60^\circ + \frac{1}{2} \cdot \frac{a}{k} \cdot \frac{\bar{a}}{i} \sin 60^\circ = \frac{1}{2} \cdot \frac{a}{h} \cdot \frac{a}{k} \sin 120^\circ$$

$$-\frac{a^2}{2hi} \sin 60^\circ - \frac{a^2}{2ki} \sin 60^\circ = \frac{a^2}{2hk} \sin 120^\circ$$

$$-\frac{1}{i} \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{k} \right) = \frac{1}{hk} \quad -hk \left(\frac{1}{h} + \frac{1}{k} \right) = i \quad \left(-\frac{hk}{h} - \frac{hk}{k} \right) = i \quad -h - k = i$$

$$\mathbf{h + k + i = 0}$$

Se non fa 0 non è una faccia possibile nell'esagonale!

Quindi se voglio passare da una nomenclatura da tre indici a quattro indici bisogna calcolarsi i . Questo serve per distinguere certe forme particolari dalle altre che sono presenti nel trigonale e nell'esagonale, quindi per distinguerle è meglio usare 4 indici. Quando ho 4 indici racchiusi tra parentesi tonde o graffe, stiamo parlando o di una faccia del trigonale o dell'esagonale o di una forma del trigonale o dell'esagonale.

ROTOTRASLAZIONI

Considerando che un asse di rototraslazione di ordine n e periodo un periodo di elevazione s , dopo n operazioni di rototraslazione si sarà fatto una rotazione completa di 2π (360°) è una traslazione pari a ns .

Quindi ciò che succede è che si applica la traslazione alla rotazione.

Quindi il punto iniziale e il punto finale raggiunto dopo n rototraslazioni, devono essere distanziati da un multiplo di vettori di traslazione τ .

$$ns = m\tau$$

Il vettore non può essere della lunghezza che vogliamo essere una frazione della periodicità e avrà anche a che fare con l'ordine della rotazione. Quindi scelta una rotazione di un certo ordine la traslazione sarà una frazione di quell'ordine.

Si ottengono così i possibili valori dei periodi di elevazione:

$$s = (m/n)\tau$$

τ sarà il nostro vettore di traslazione.

Esempi: Per una rototraslazione di ordine 3 le possibilità sono: $(1/3)\tau$, $(2/3)\tau$, $(3/3)\tau$, $(4/3)\tau$, $(5/3)\tau$, $(6/3)\tau$.

Ma solo i primi due termini sono significativi.

Rototraslazione di ordine 2 ($n=2$): elicodigira

SLITTOPIANI: PIANI DI RIFLESSIONE CON SCORRIMENTO

Riflessione combinata con una traslazione.

Lo slittopiano ci collega oggetti enantiomorfi (destri e sinistri)

Gli slittopiani si simboleggiano con lettere che indicano la **direzione dello scorrimento**:

- **a, b, c**: Riflessione con scorrimento di $\tau_1/2$, $\tau_2/2$, $\tau_3/2$
- **n**: riflessione con scorrimento $(\tau_1 + \tau_2)/2$ (piani di scorrimento diagonali)
- **d**: riflessione con scorrimento $(\tau_1 \pm \tau_2)/4$. Piani di scorrimento diamante quando lo scorrimento sarà di un quarto.

Attenzione a come sono collocati i piani, la disposizione del piano, la diamo con la nomenclatura degli indici di Miller, che è la posizione del piano. Il nome dell'operatore riguarda la traslazione non come è collocato il piano.

Questo serve a collocare gli atomi nella cella unità, perché da una cella un'altra mi sposto con i vettori di traslazione ma se devo passare dal vertice della cella all'interno e non vado o al centro della Cella o al centro delle facce ho bisogno di questi operatori in più che mi permettono di raggiungere le posizioni intermedie e questo lo ottengo con le **elicogire** e gli **slittopiani**.

	Simbolo	Traslazione
Piano di riflessione	<i>m</i>	nessuna
Slittopiano assiale	<i>a</i>	$a/2$
	<i>b</i>	$b/2$
	<i>c</i>	$c/2$
Slittopiano diagonale	<i>n</i>	$\frac{a+b}{2}, \frac{b+c}{2}, \frac{a+c}{2}$ $\frac{a+b+c}{2}$ *
Slittopiano a "diamante"	<i>d</i>	$\frac{a \pm b}{4}, \frac{b \pm c}{4}, \frac{a \pm c}{4}$
		$\frac{a \pm b \pm c}{4}$ *

* solo nei sistemi cubico e tetragonale

GRUPPI SPAZIALI TRIDIMENSIONALI

Se nello spazio tridimensionale si associano a ciascuno dei 14 reticoli di Bravais gli elementi di simmetria compatibili fin qui descritti:

- Piani di riflessione: m ;
- Assi di rotazione: $1, 2, 3, 4, 6$;
- Centro di inversione: i ;
- Assi di rotoinversione: 4 ;
- Elicogire: $2_1, 3_1, 3_2, 4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$;
- Piani di riflessione con scorrimento a, b, c, n, d .

Si hanno **230** combinazioni possibili, dette **gruppi spaziali**.

Questo importantissimo risultato (**un cristallo non può che avere la simmetria di uno dei 230 gruppi spaziali**) è una sofisticazione che arrivò a circa fine '800 tra il 1885 e il 1894 indipendentemente da 3 studiosi:

1. Il russo Federov;
2. Il tedesco Schoenflies;
3. L'inglese Barlow.

Essi ci sono arrivati indipendentemente e poi si sono confrontati. All'epoca non si sapeva come fosse organizzata la materia e non sapevano qual'era l'utilità del loro lavoro.

Rappresenta il punto di arrivo di una ricerca sulla organizzazione spaziale di punti iniziata con Bravais nel 1848. L'importanza ai fini strutturali fu compresa solo nel 1919.

SIMBOLEGGIATURA DEI GRUPPI SPAZIALI

La prima lettera maiuscola indica il tipo di reticolo; seguono le lettere che indicano gli elementi di simmetria essenziali:

- **P2₁/m**: reticolo primitivo, caratterizzato da una elicodigira e un piano di riflessione m normale.
- **P4₂cm**: reticolo primitivo con una elicotetragira con componente 2/4τ, un piano m ed uno slittopiano c.
- **Ibam**: reticolo a corpo centrato con tre piani di riflessione ortogonali di cui due slittopiani a e b.

Per ricavare il gruppo puntuale dal gruppo spaziale si deve eliminare il simbolo del reticolo di Bravais ed eliminare le componenti di scorrimento dagli elementi di simmetria:

- Elicogire → assi di rotazione;
- Slittopiani → piano m.

Ad esempio:

$$C2/c \rightarrow 2/m$$

$$Pban \rightarrow mmm$$

Tutte le informazioni sui gruppi spaziali di interesse cristallografico sono sintetizzate nei volumi delle tavole cristallografiche.

VOLUME DELLA CELLA

E' importante misurare il volume della cella, perché il volume della cella unita insieme alla massa della sua formula, sapendo questi due dati è possibile calcolare la massa molecolare. Avendo la massa molecolare e il volume si può calcolare la densità. Questo dato deve essere uguale a quello che si trova tramite l'esame a diffrazione.

$$\mathbf{V} = \mathbf{a} \bullet (\mathbf{b} \wedge \mathbf{c})$$

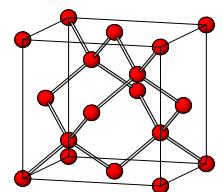
$$V = a b c \sin\alpha \sin\beta \sin\gamma$$

Esempi:

- **Monoclino**: $V = abc \sin\beta$
- **Esagonale**: $V = abc \sin\gamma = a^2c \sin 120^\circ = \sqrt{3}/2 a^2c$

Esempio diamante: La struttura del diamante (C) è contenuta nelle seguenti informazioni:

- **Gruppo spaziale** = Fd3m: reticolo cubico a facce centrate con slittopiano d;
- $a_0 = 3,57 \text{ \AA}$: lato della cella elementare;
- **C (0,0,0)**: coordinate dell'atomo di carbonio posto nell'origine della cella.



E' sufficiente conoscere le coordinate di un atomo di C per ricavare la posizione di tutti gli altri atomi grazie al gruppo spaziale.