

Corso di Mineralogia



DEFINIZIONE DI MINERALE

- **Corpo solido naturale con composizione chimica definita**
- **Stato Solido – Cristallino**
- **Amorfo**
- **Atomi disposti in modo ordinato e periodico**
- **Anisotropia – Isotropia**

Composto chimico naturale allo stato solido, dotato cioè di un reticolo cristallino omogeneo, periodico, anisotropo e tridimensionale.

- **Legge Costanza angoli diedri (Romè de l'Isle, 1783)**
- **Legge razionalità degli indici (Hauy, 1786) molecola integrante**
- **14 reticoli di traslazione (Bravais, metà 1848)**
- **230 Gruppi Spaziali (Fedorov, Schoenflies, Barlow) 1890**

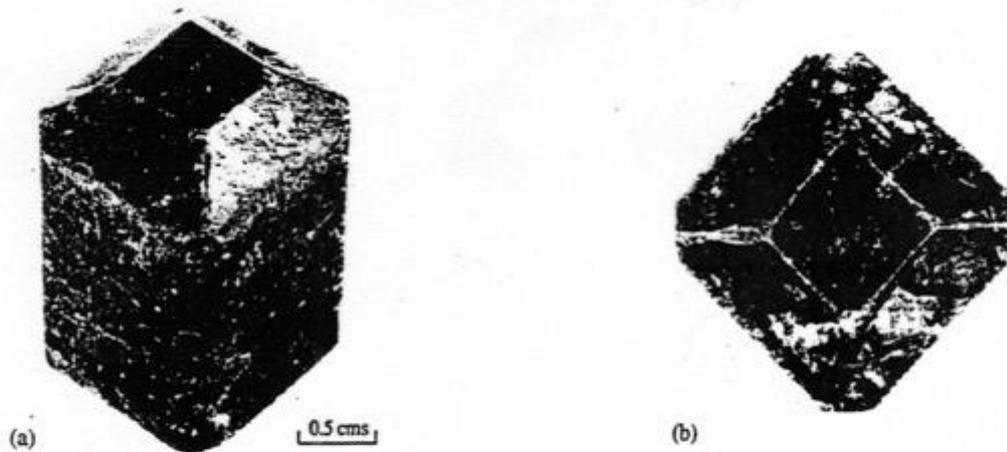


Figure 1.2. These two photographs illustrate the symmetry of the external shape, or morphology, of a well-developed crystal of the tetragonal mineral vesuvianite, $\text{Ca}(\text{Mg,Fe})_2\text{Al}_4(\text{SiO}_4)_5(\text{Si}_2\text{O}_7)_2(\text{OH,F})_4$. (a) A general view of the crystal showing the 4-fold axis and mirror planes. (b) A view of the crystal looking down the 4-fold axis. The orientations of the faces are related by the same symmetry elements which describe the atomic distribution.

SIMMETRIA DI TRASLAZIONE:

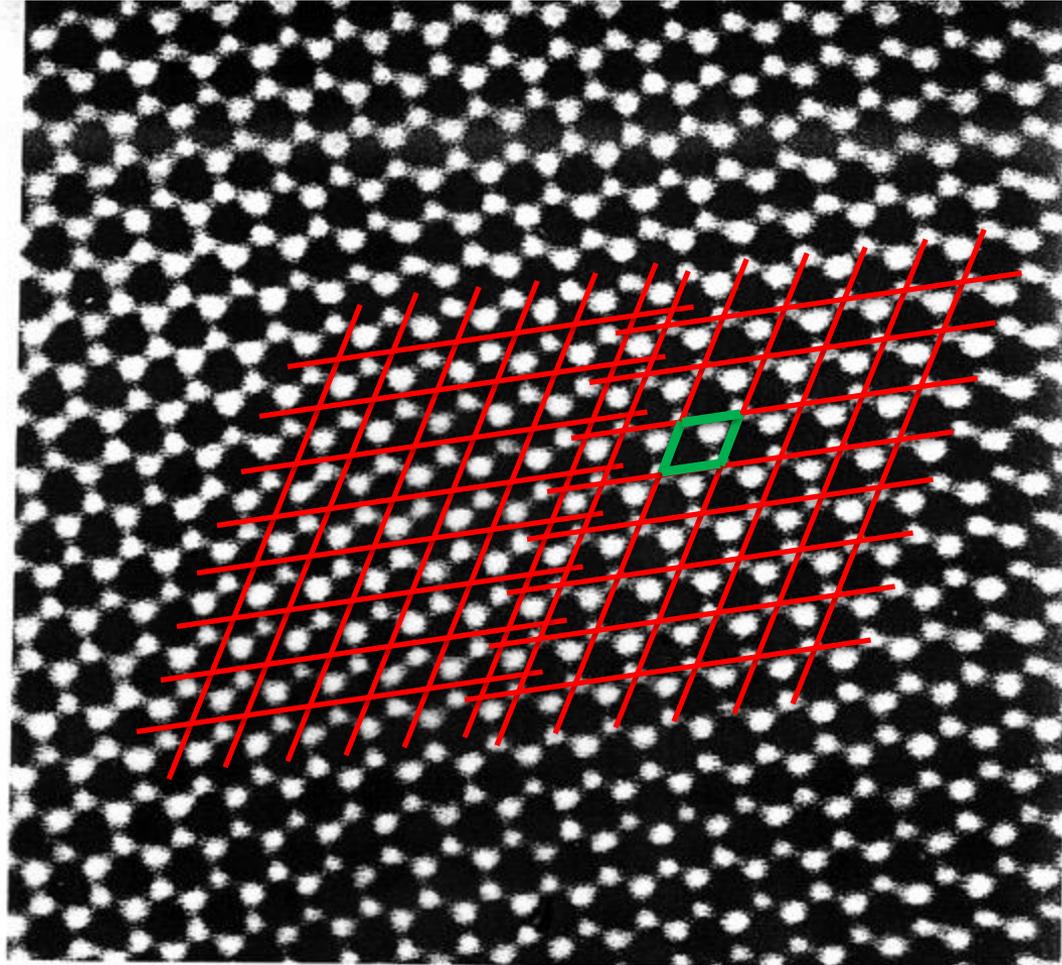


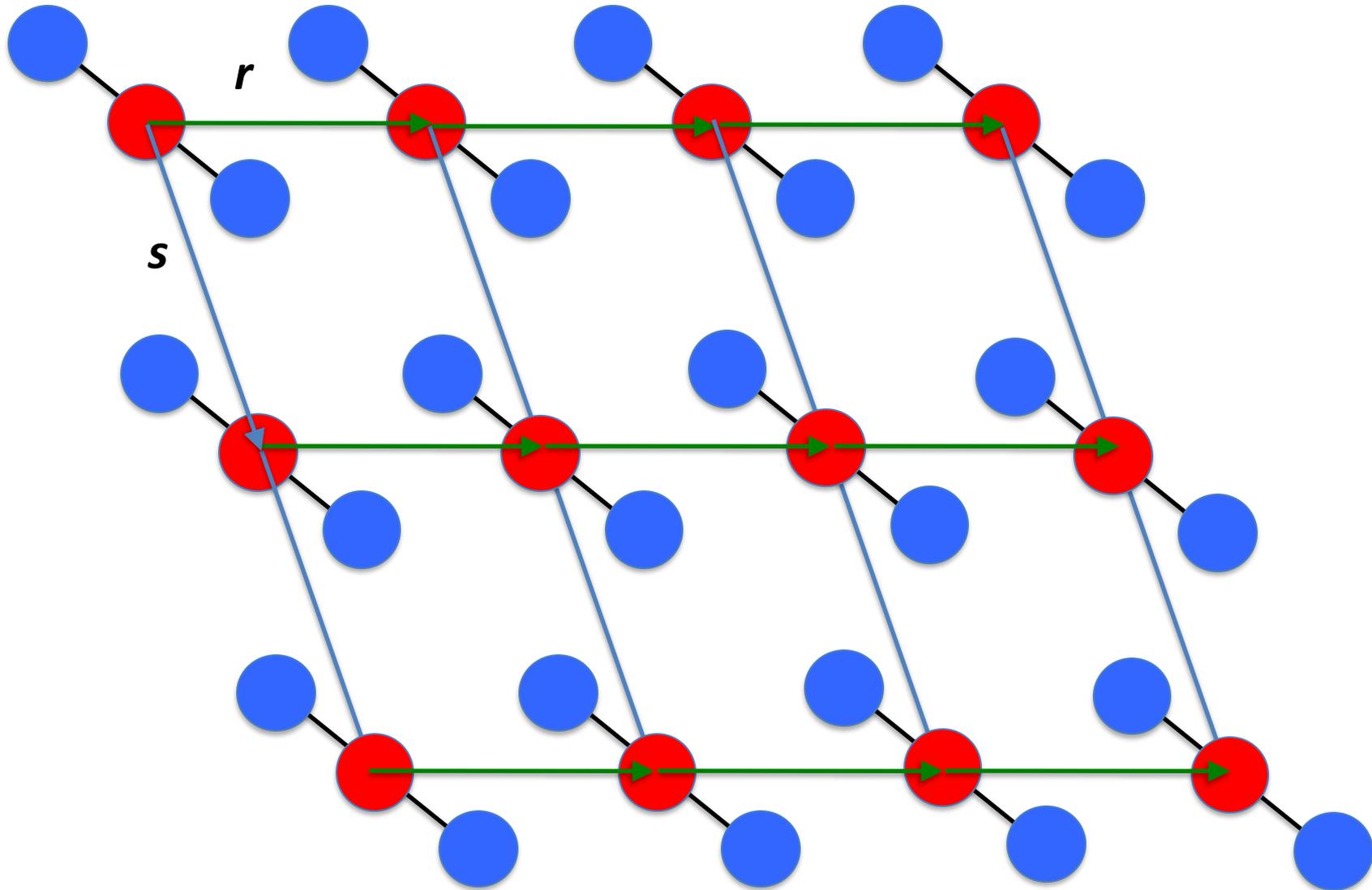
Figure 1.1. This image of the crystal structure of the mineral cordierite, ($Mg_2Al_4Si_7O_{18}$) has been taken with a high resolution transmission electron microscope. It is a projection, through a very thin ($\sim 200 \text{ \AA}$) slice, of the atomic distribution, the black spots representing hollow channels through the structure while the white spots can be equated with the regions of high atomic density, arranged around the channels in 6-fold rings. It is shown here to illustrate some aspects of the periodicity and symmetry of crystalline materials. (Scale: The distance between the black spots is $\sim 9.7 \text{ \AA}$ or 0.97 nm .)

Una simmetria è un'operazione che muove o trasforma un oggetto lasciandone però inalterato l'aspetto.

**SIMMETRIA DI TRASLAZIONE:
ripetizione periodica secondo una direzione.**

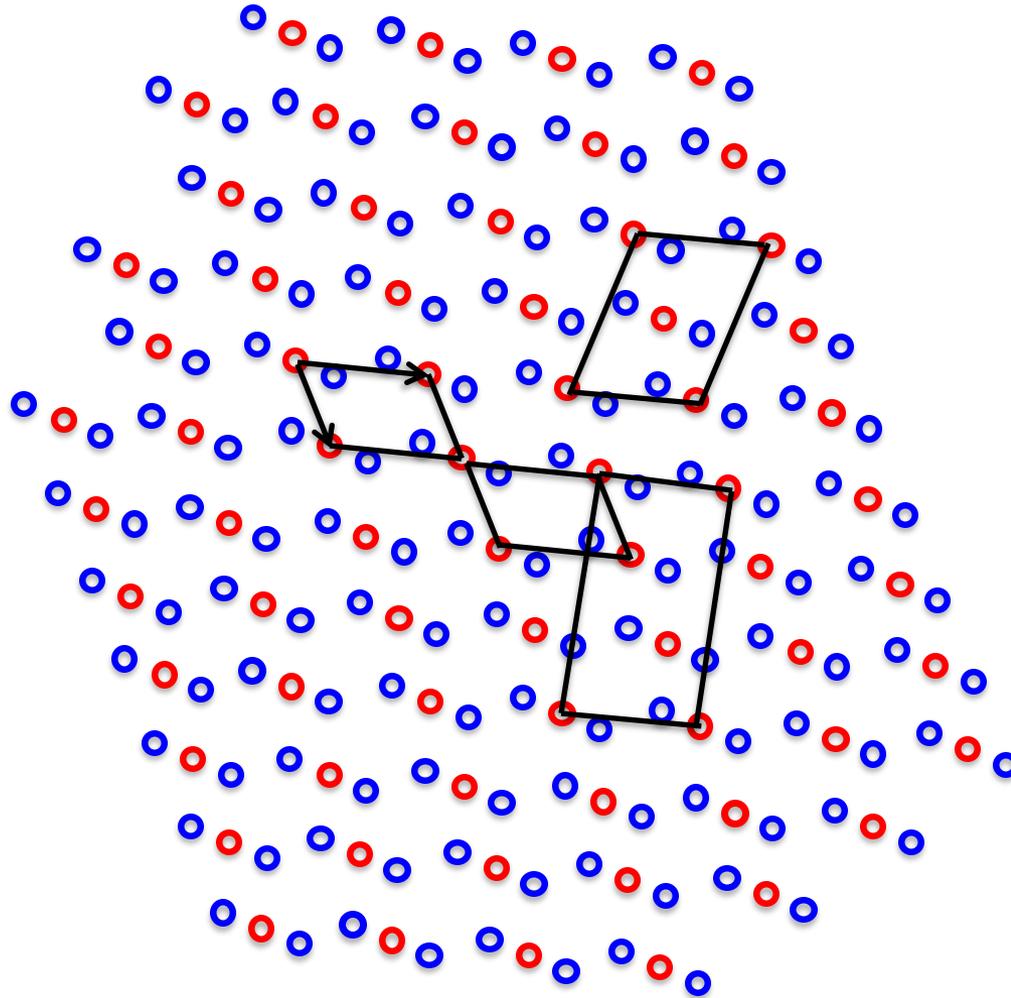
SIMMETRIA DI TRASLAZIONE: motivo strutturale

- A
- B



SIMMETRIA DI TRASLAZIONE : scelta della maglia elementare

- A
- B

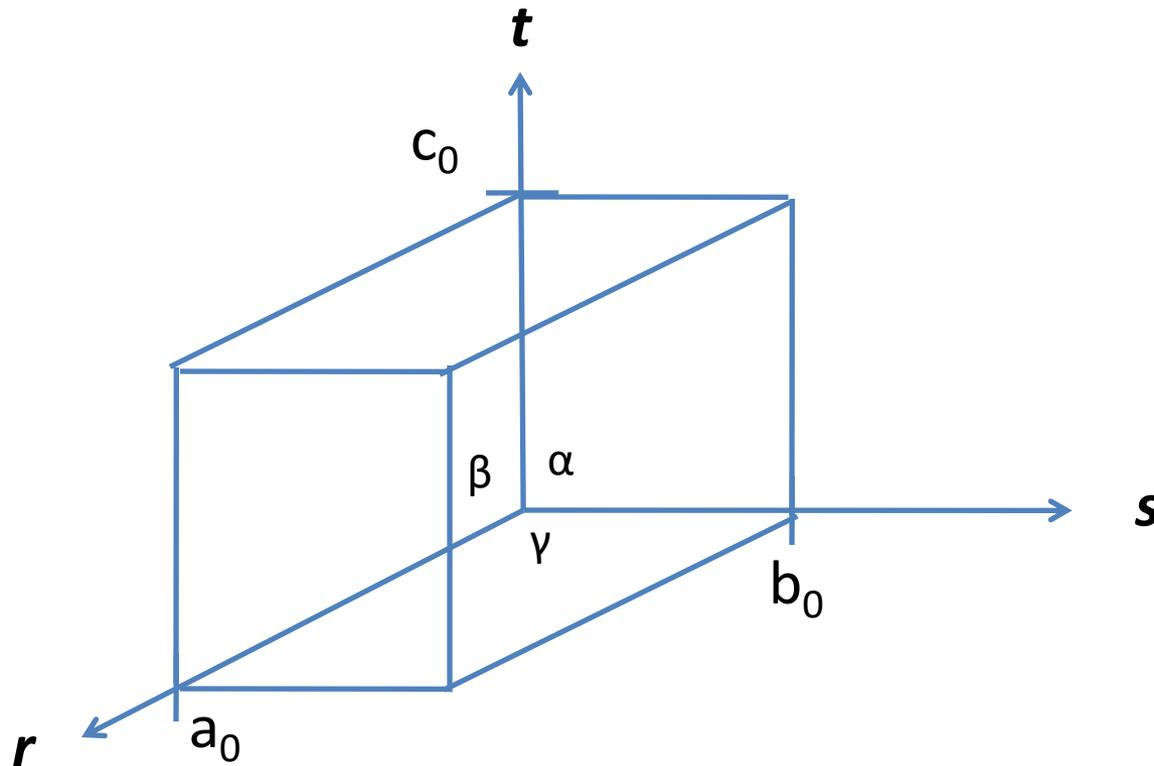


Maglia Elementare basata sui due più corti periodi di traslazione.

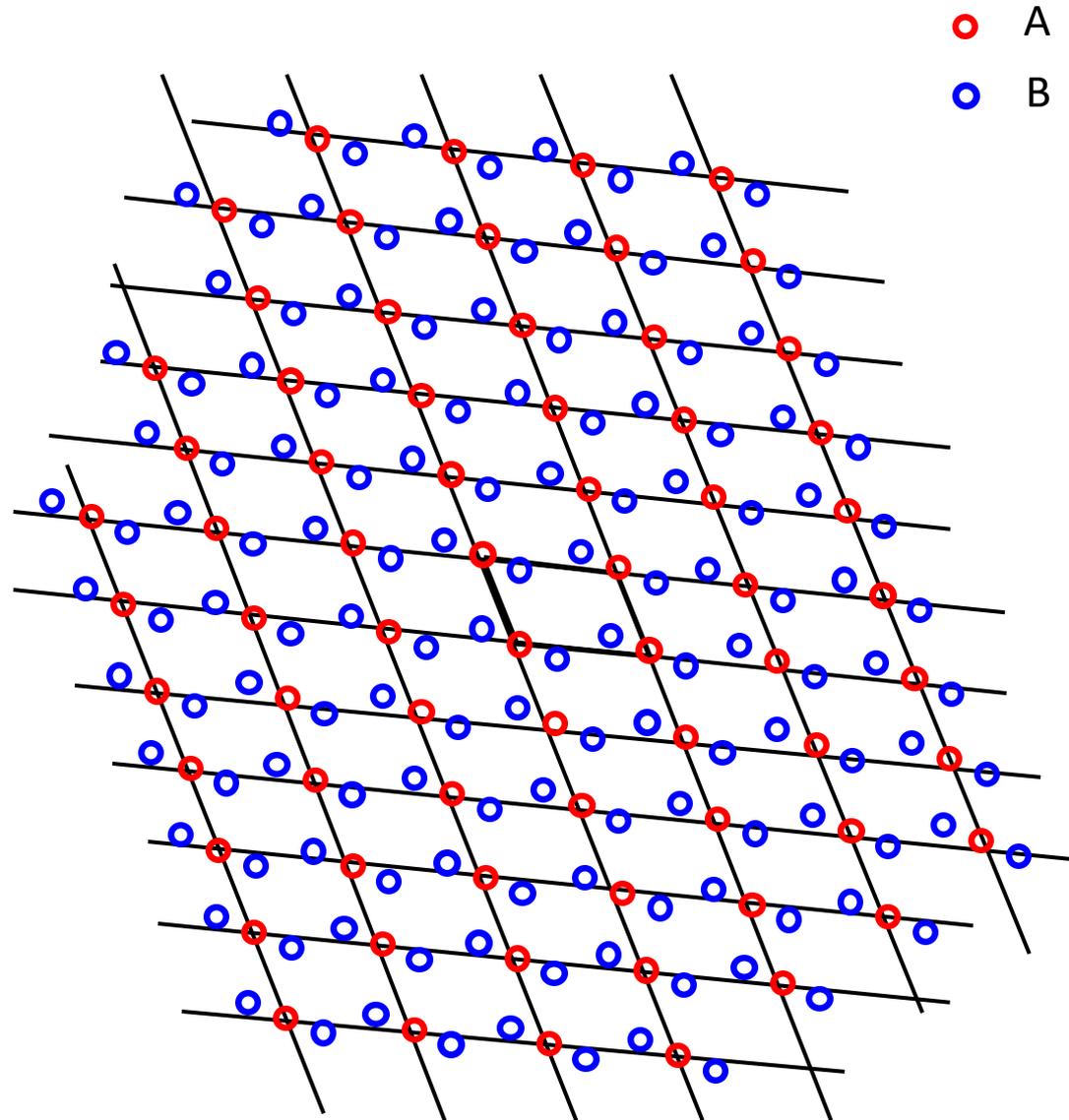
La maglia elementare viene descritta dai due periodi di traslazione secondo \mathbf{r} e \mathbf{s} e dall'angolo tra i due vettori. I moduli di \mathbf{r} e \mathbf{s} vengono chiamati rispettivamente a_0 e b_0 , mentre l'angolo tra i due γ .

Se considero anche la terza direzione di traslazione \mathbf{t} , il suo modulo si chiamerà c_0 e gli angoli tra $\mathbf{r}^{\wedge}\mathbf{t}$ e $\mathbf{s}^{\wedge}\mathbf{t}$ si chiameranno rispettivamente β e α .

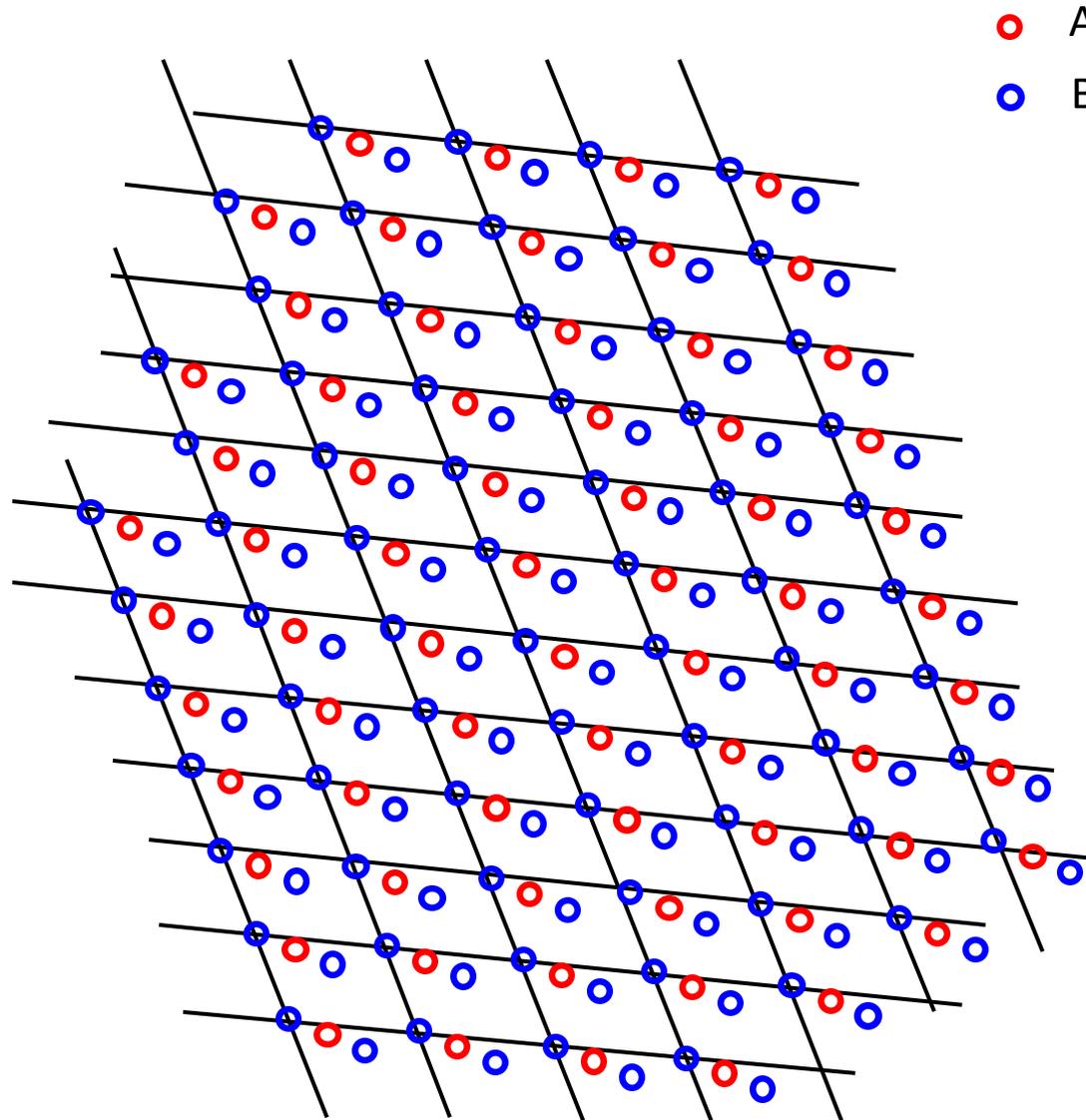
Si passa in questo modo dalla maglia elementare alla cella elementare.



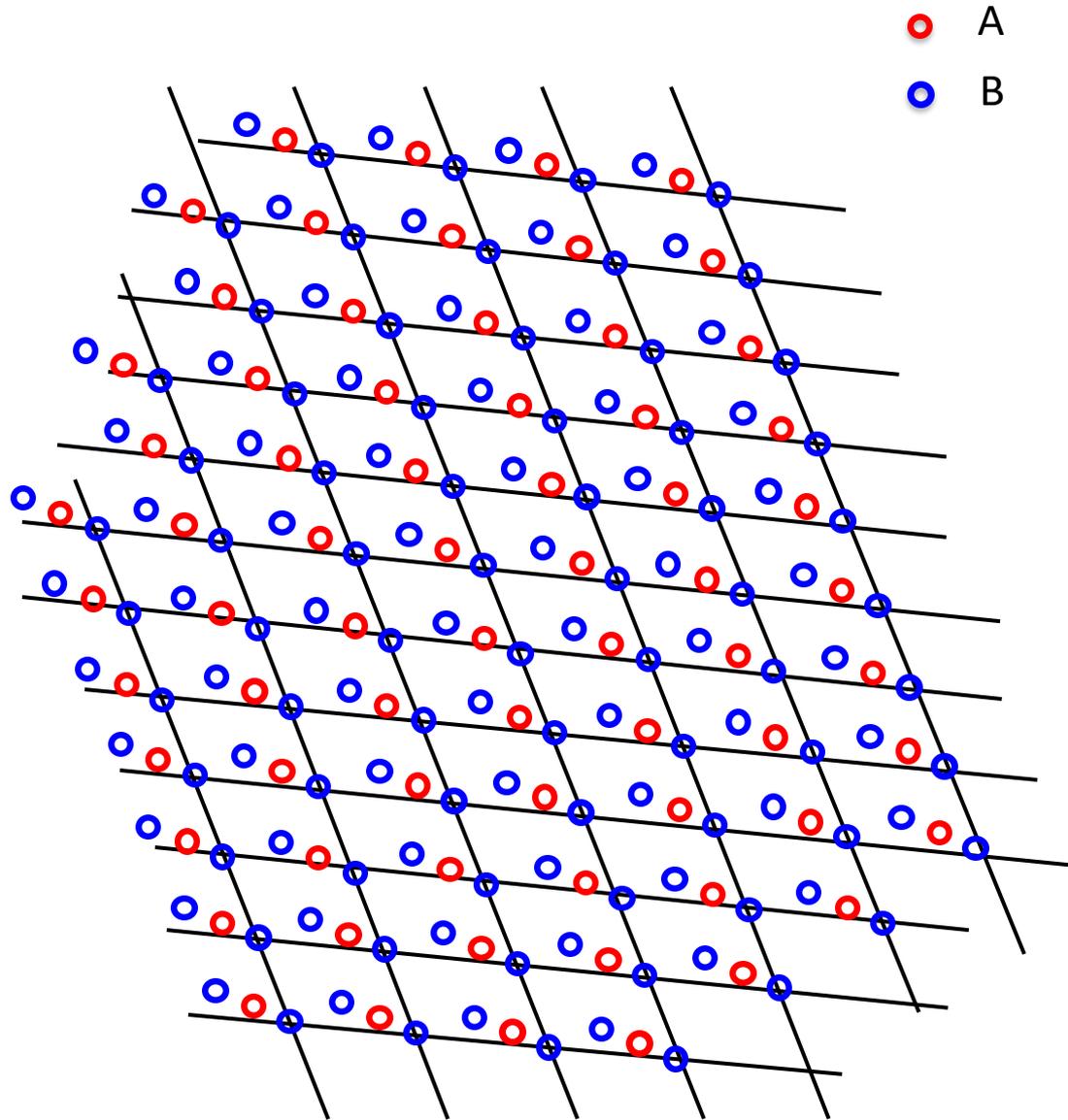
SIMMETRIA DI TRASLAZIONE: il reticolo di traslazione.



SIMMETRIA DI TRASLAZIONE: il reticolo di traslazione.

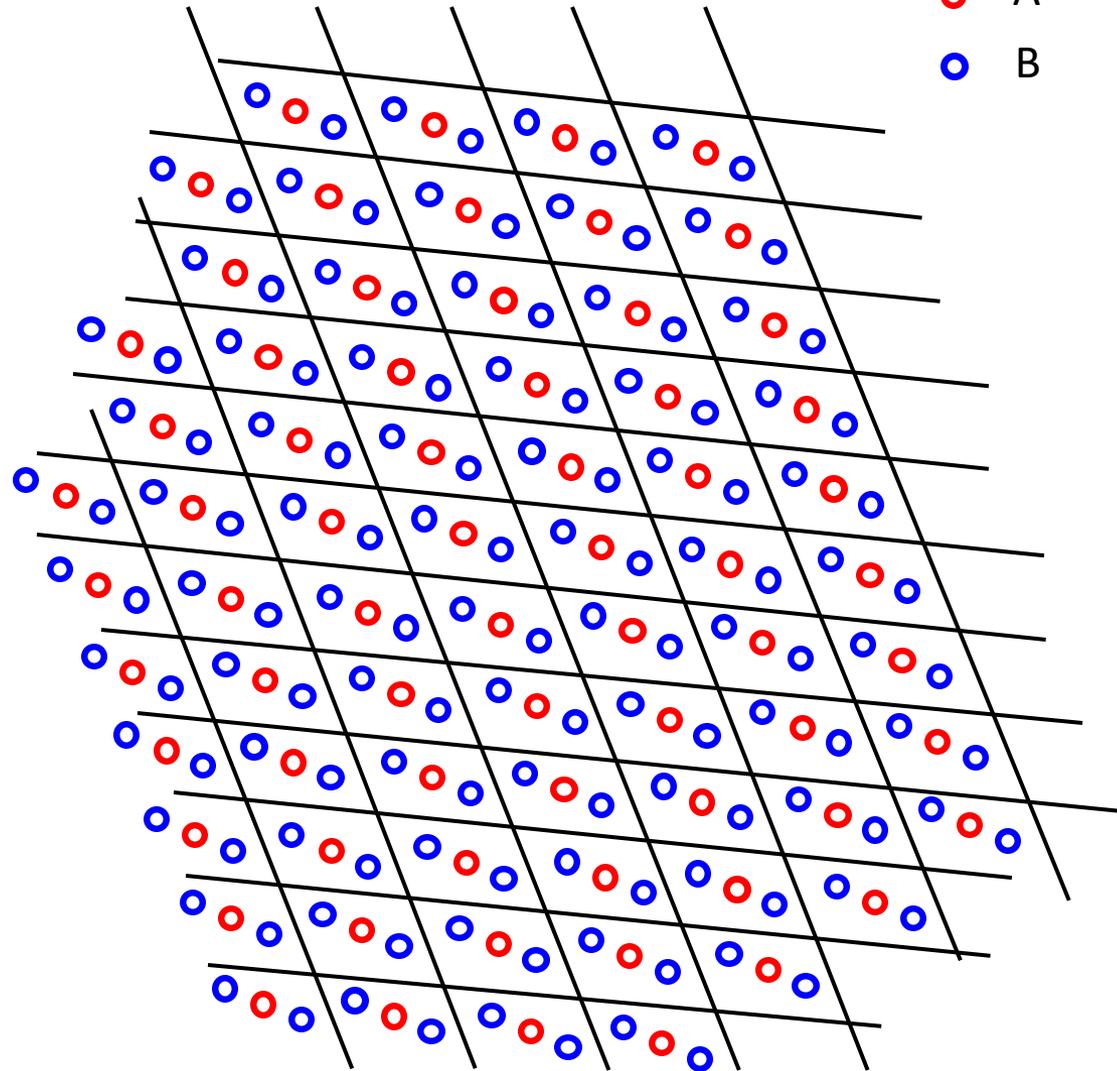


SIMMETRIA DI TRASLAZIONE: il reticolo di traslazione.



SIMMETRIA DI TRASLAZIONE: il reticolo di traslazione.

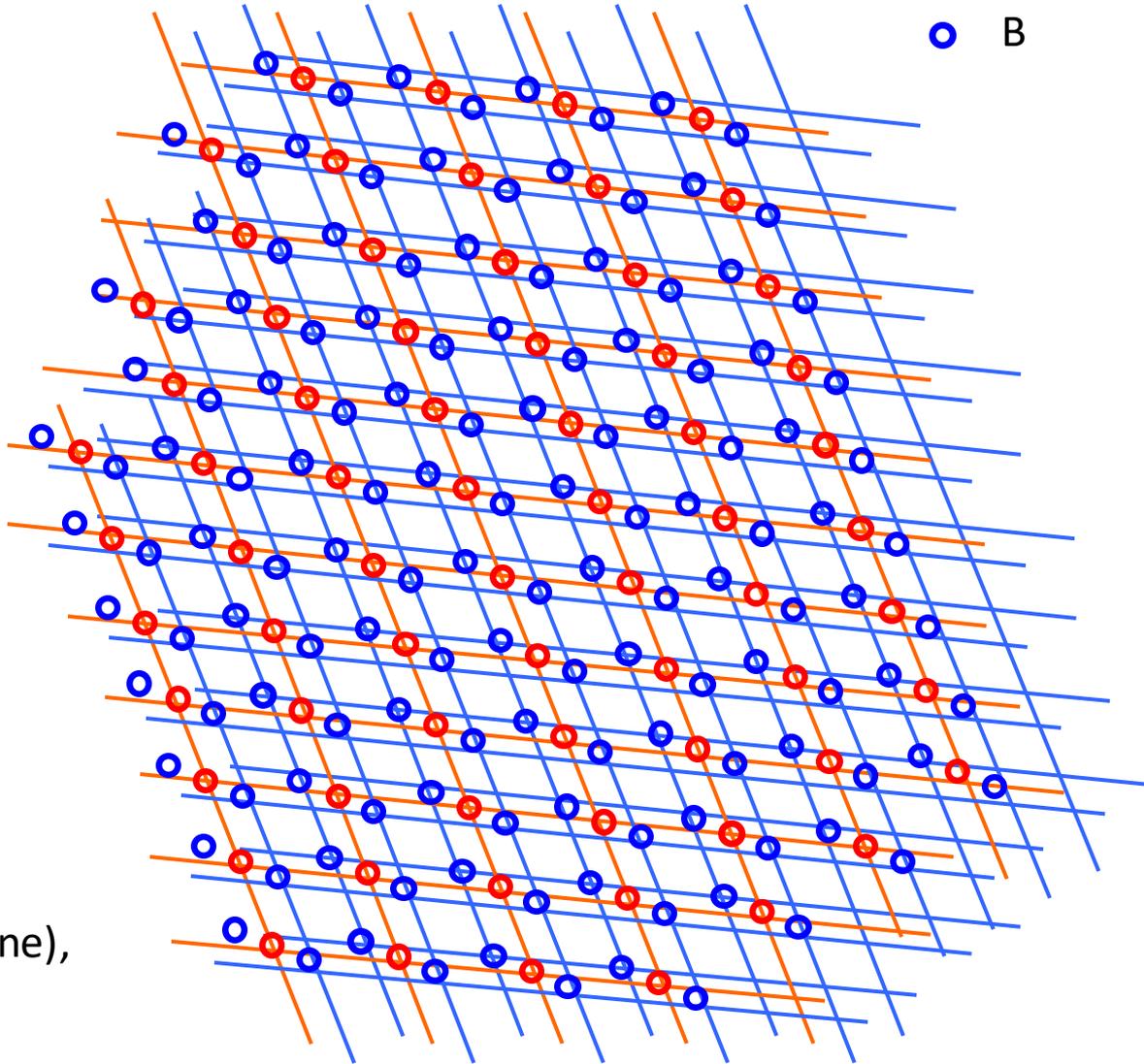
- A
- B



Omogeneo,
Periodico,
Anisotropo
e, se individuo
una terza
traslazione t non
complanare con
 r e s , anche
tridimensionale.

Reticoli uguali e compenetrati.

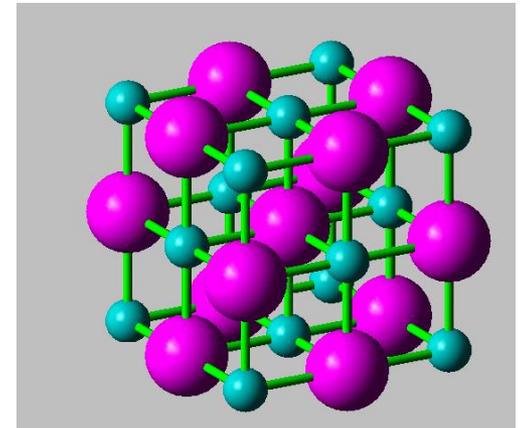
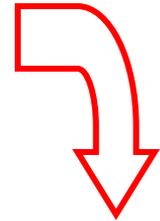
○ A
○ B



Un reticolo viene preso come riferimento (origine), gli altri vengono riferiti al primo.

Cosa sono i cristalli

A livello *macroscopico* un cristallo ben formato è caratterizzato da *forme geometriche regolari*, con facce, spigoli e vertici che ne determinano la forma esterna o habitus.....



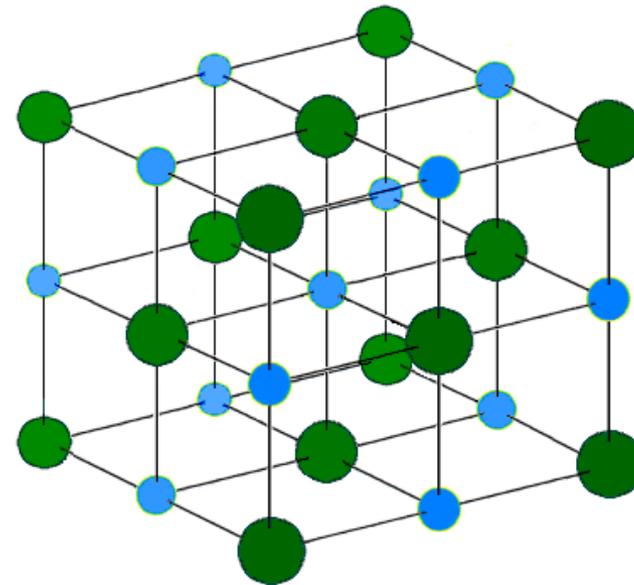
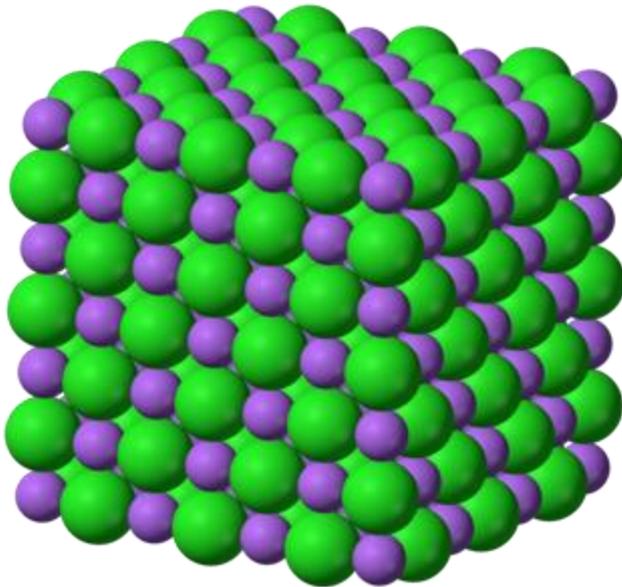
... la morfologia è strettamente collegata con la struttura interna (microscopica)



Cosa sono i cristalli

La struttura interna di un cristallo è caratterizzata da una disposizione degli atomi nello spazio che si ripete a intervalli regolari lungo più direzioni (*periodicità*). L'impalcatura tridimensionale che così si realizza viene chiamata *reticolo cristallino*.

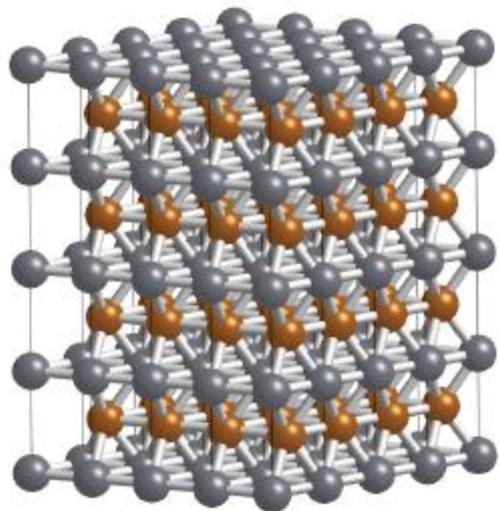
NaCl



Cosa sono i cristalli

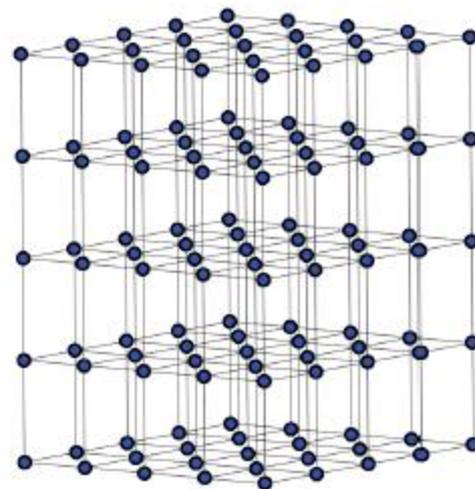


Nodo reticolare



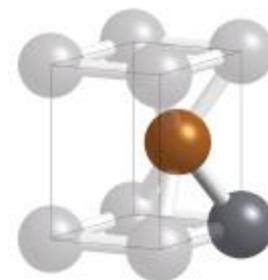
Struttura

=



Reticolo

⊗



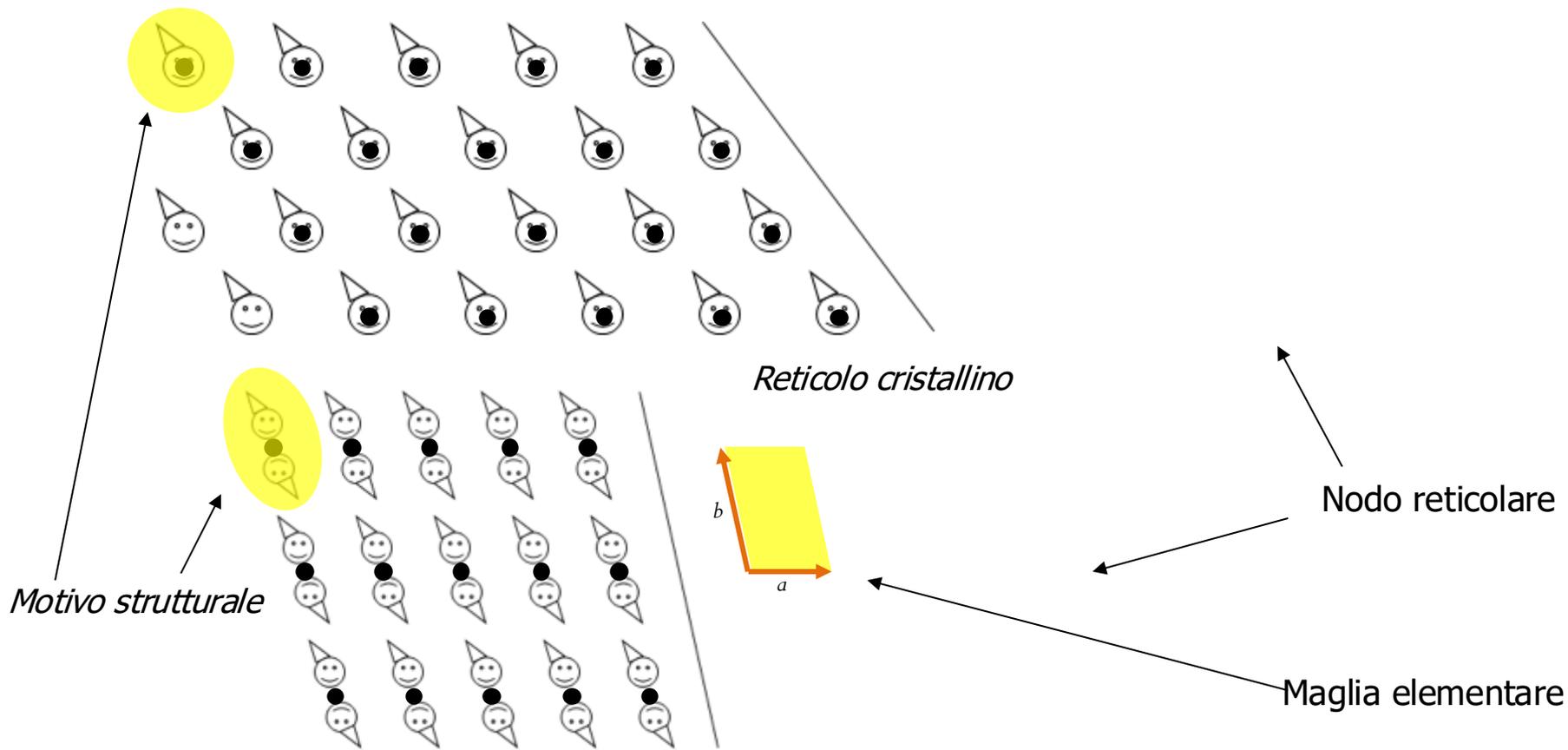
Motivo

Più precisamente la struttura di un cristallo può essere descritta come *combinazione di un reticolo geometrico costituito da nodi + un motivo che consiste di atomi o ioni*, che si ripete per traslazione in corrispondenza o in prossimità dei *nodi reticolari*, i quali hanno tutti un *intorno identico*.

Cosa sono i cristalli

Esempi in 2D

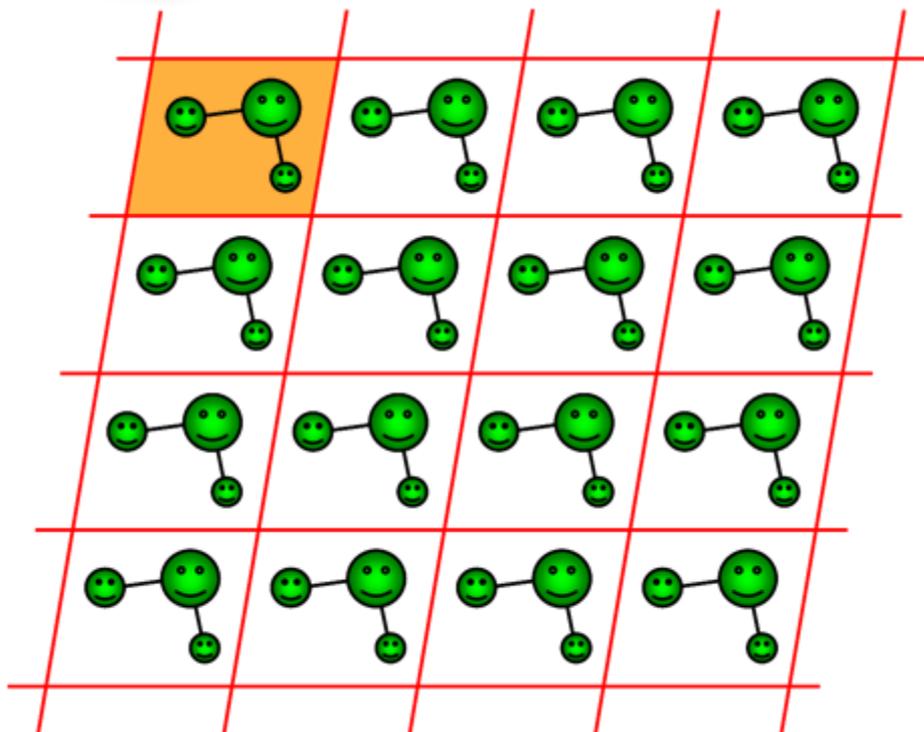
Reticolo cristallino



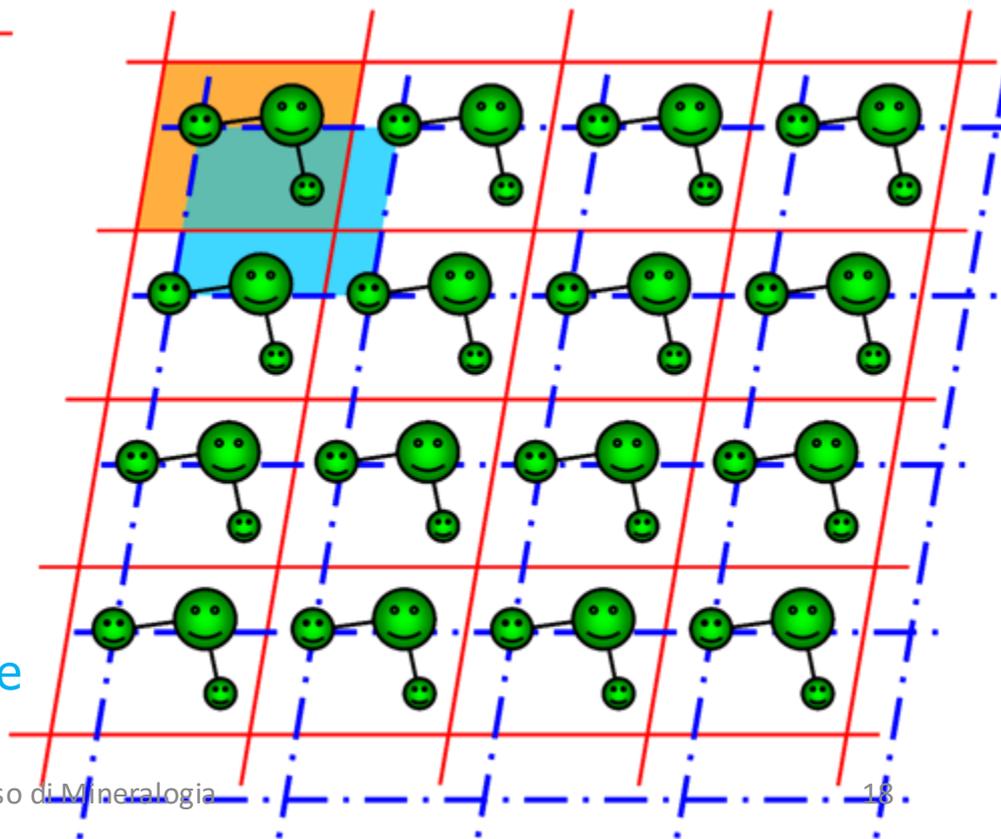
Il motivo che si ripete può anche consistere di più *unità relazionate da semplici trasformazioni geometriche* chiamate *operazioni di simmetria*.

E' possibile individuare una *maglia elementare*, contenente il *motivo strutturale*, che traslata in due direzioni, genera l'intera struttura.

Cosa sono i cristalli



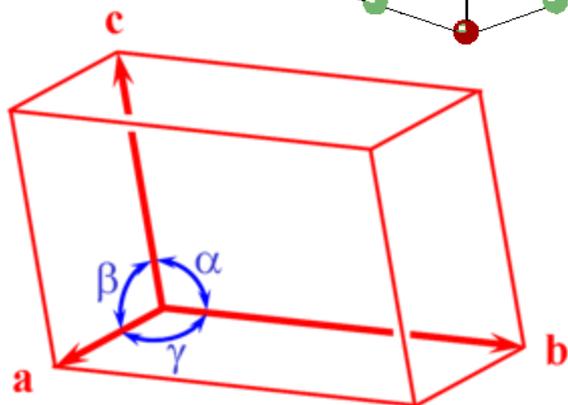
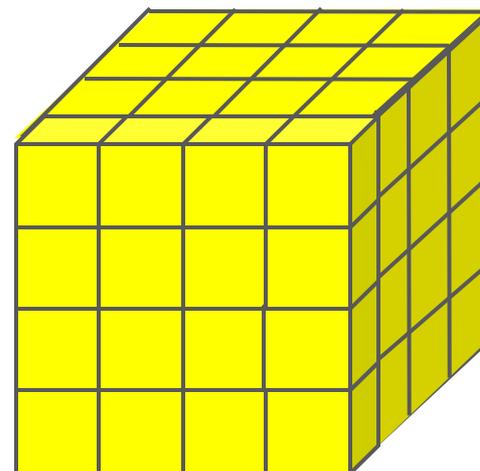
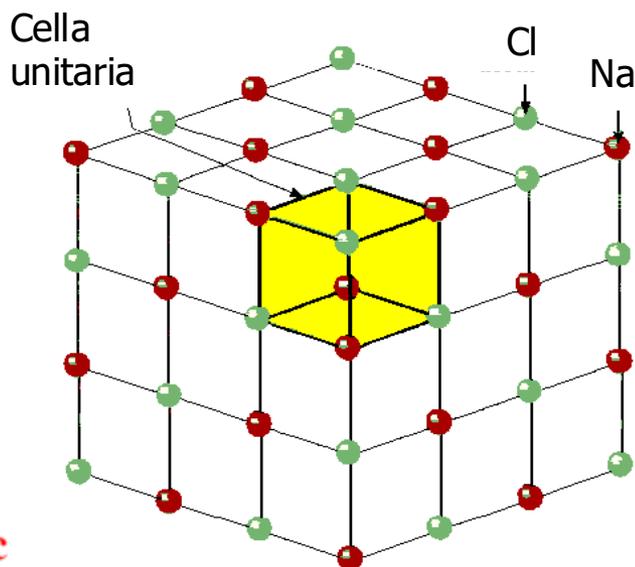
Nel reticolo cristallino, tutte le *maglie elementari* hanno la stessa forma, dimensione e contenuto.



In genere, *l'origine della maglia elementare può essere scelta arbitrariamente*. Nella figura di fianco, forma e contenuto della maglia elementare sono gli stessi della figura in alto.

Cosa sono i cristalli

In tre dimensioni si parla di *cella elementare*, che rappresenta la *più piccola porzione di volume del reticolo* che, traslata parallelamente a se stessa, *ricostruisce l'intero cristallo*.



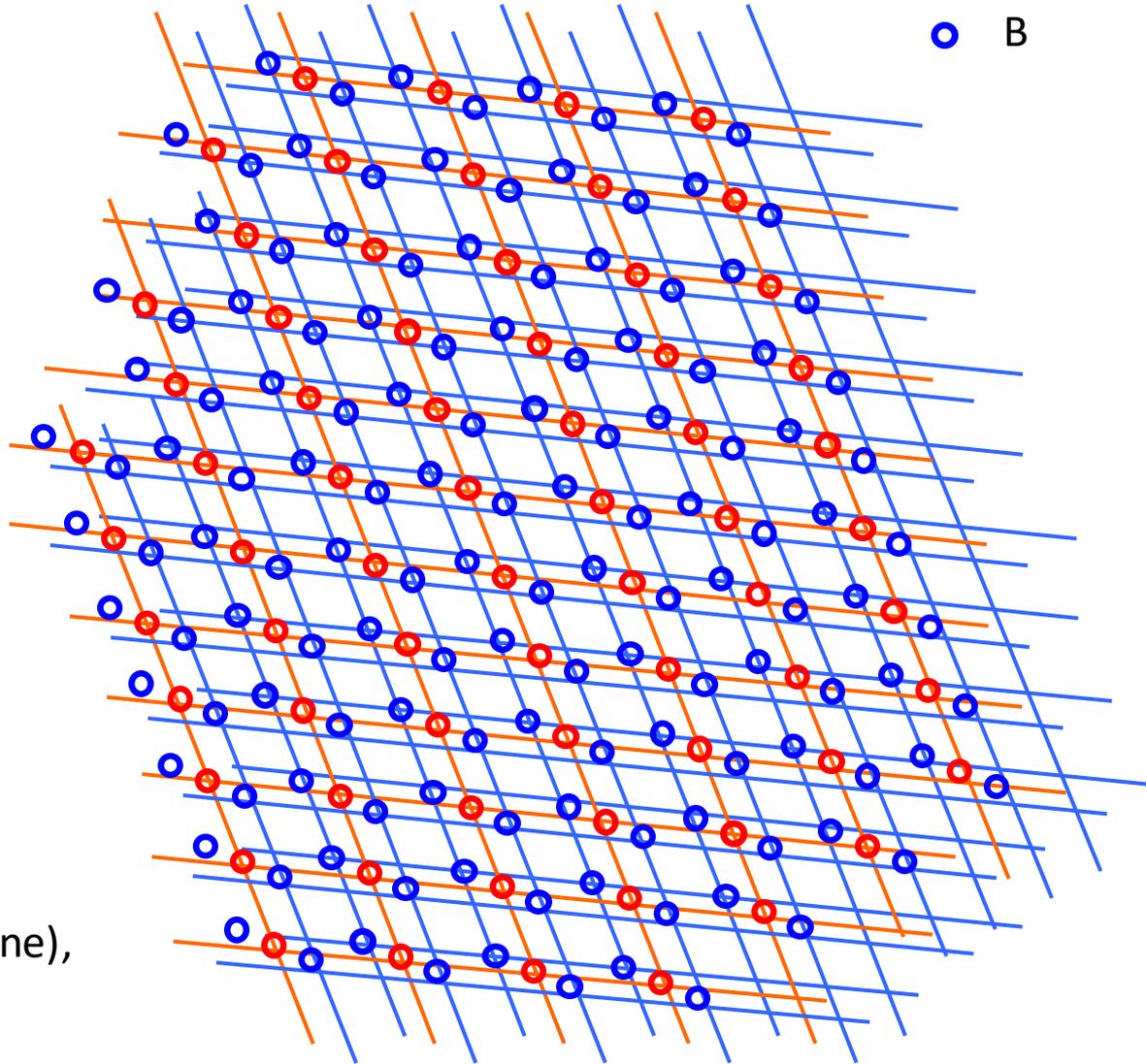
Per descrivere completamente la cella elementare occorre specificare un totale di **sei** quantità scalari, che sono chiamati **parametri reticolari** e si indicano con i simboli:

a, b, c lunghezze degli spigoli

α, β, γ angoli tra gli spigoli

Reticoli uguali e compenetrati.

○ A
○ B



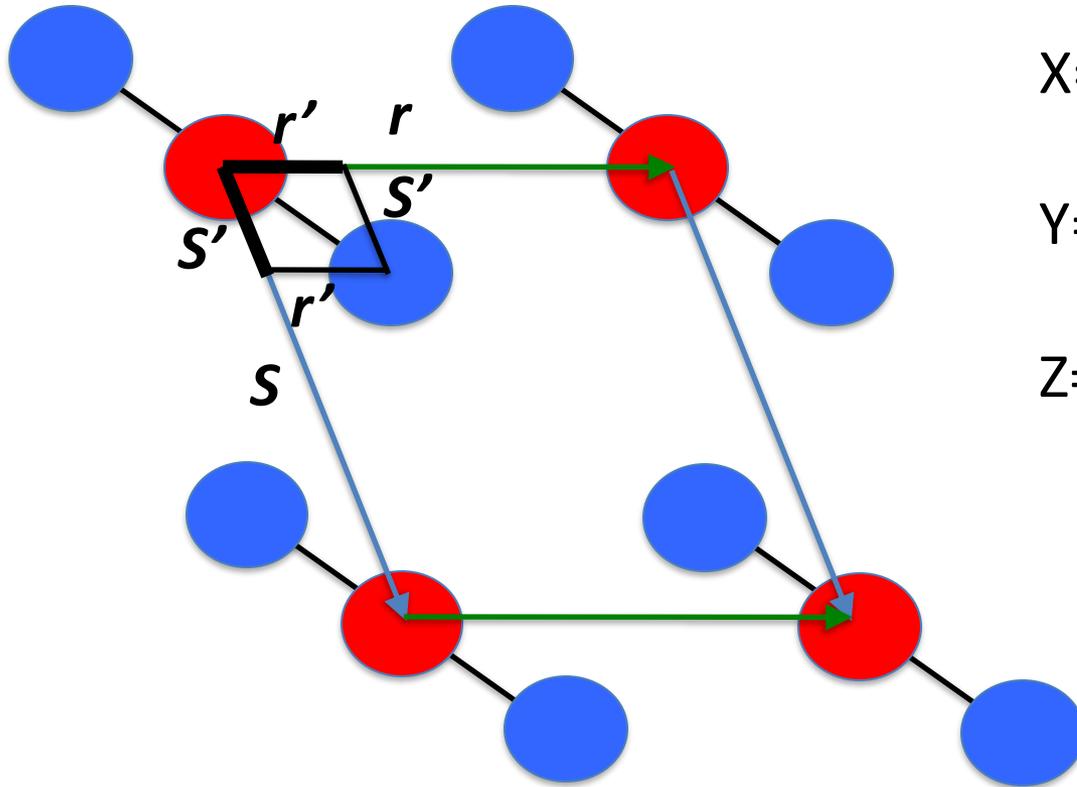
Un reticolo viene preso come riferimento (origine), gli altri vengono riferiti al primo.

Posizioni atomiche

$$X=r'/r$$

$$Y=s'/s$$

$$Z=t'/t$$



Reticolo di traslazione.

NODO: vertice delle maglie del reticolo.

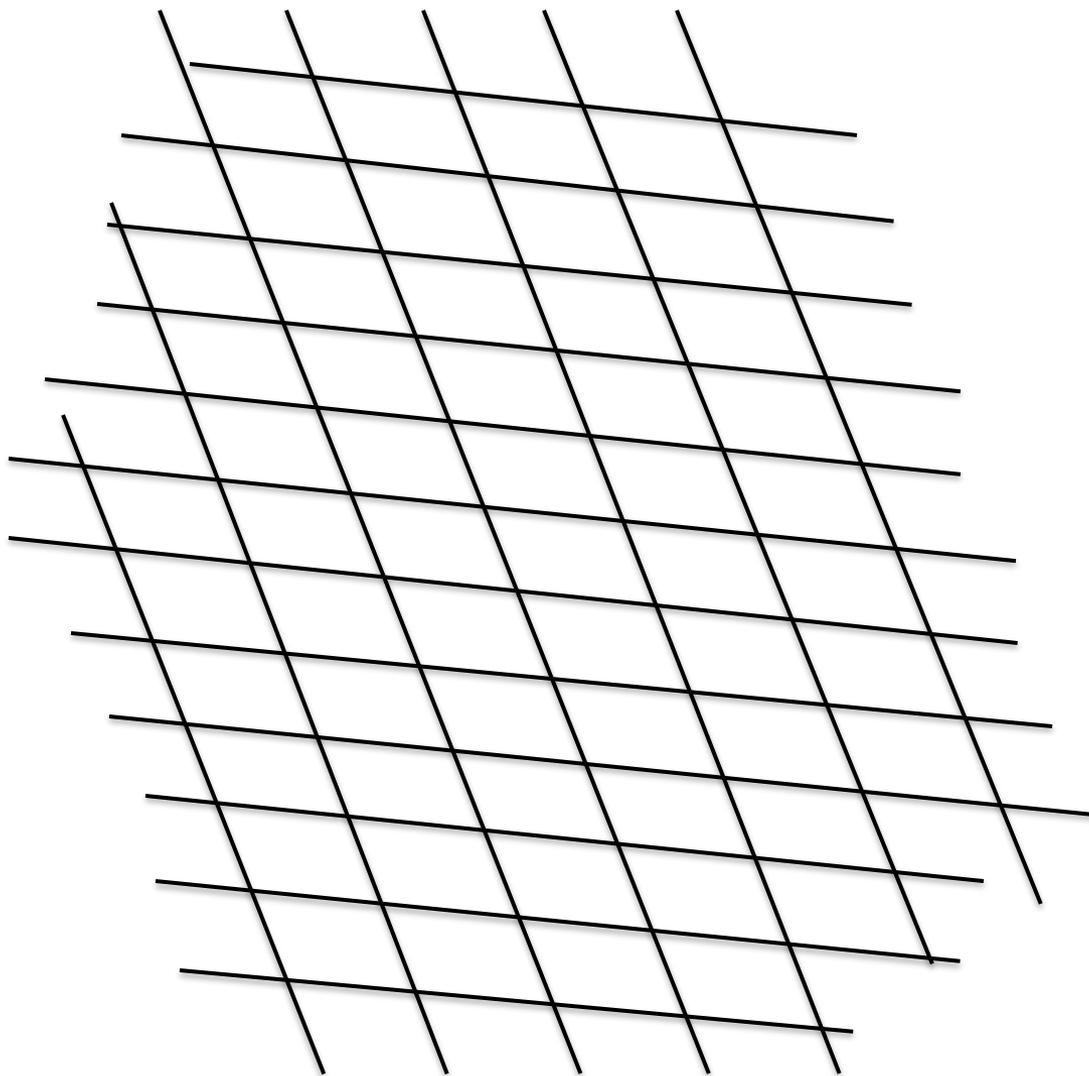
I nodi sono tutti equivalenti.

Nodi disposti lungo una retta costituiscono i **FILARI** reticolari.

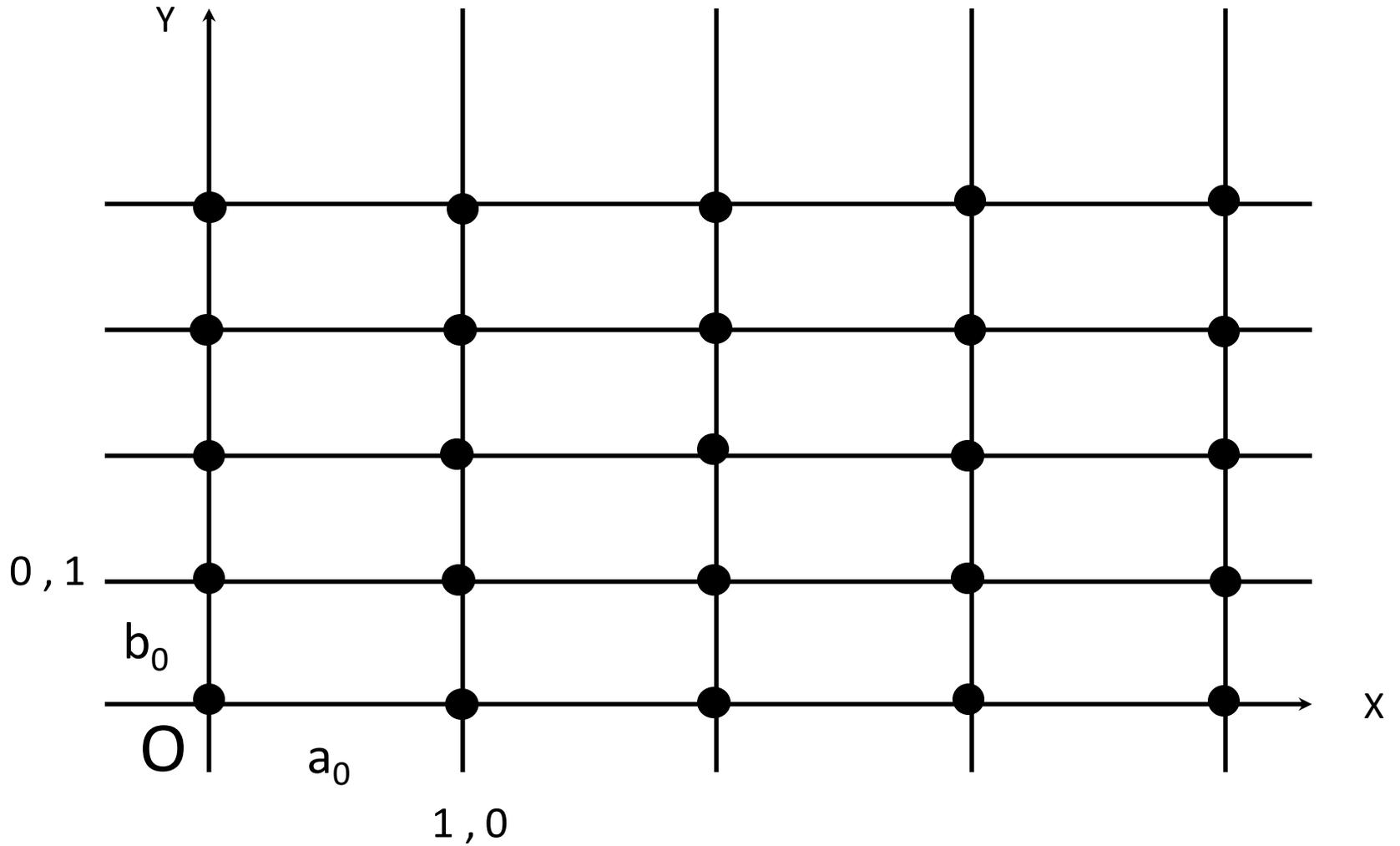
Filari reticolari paralleli sono equivalenti.

Un insieme di nodi e filari costituisce il **PIANO RETICOLARE**.

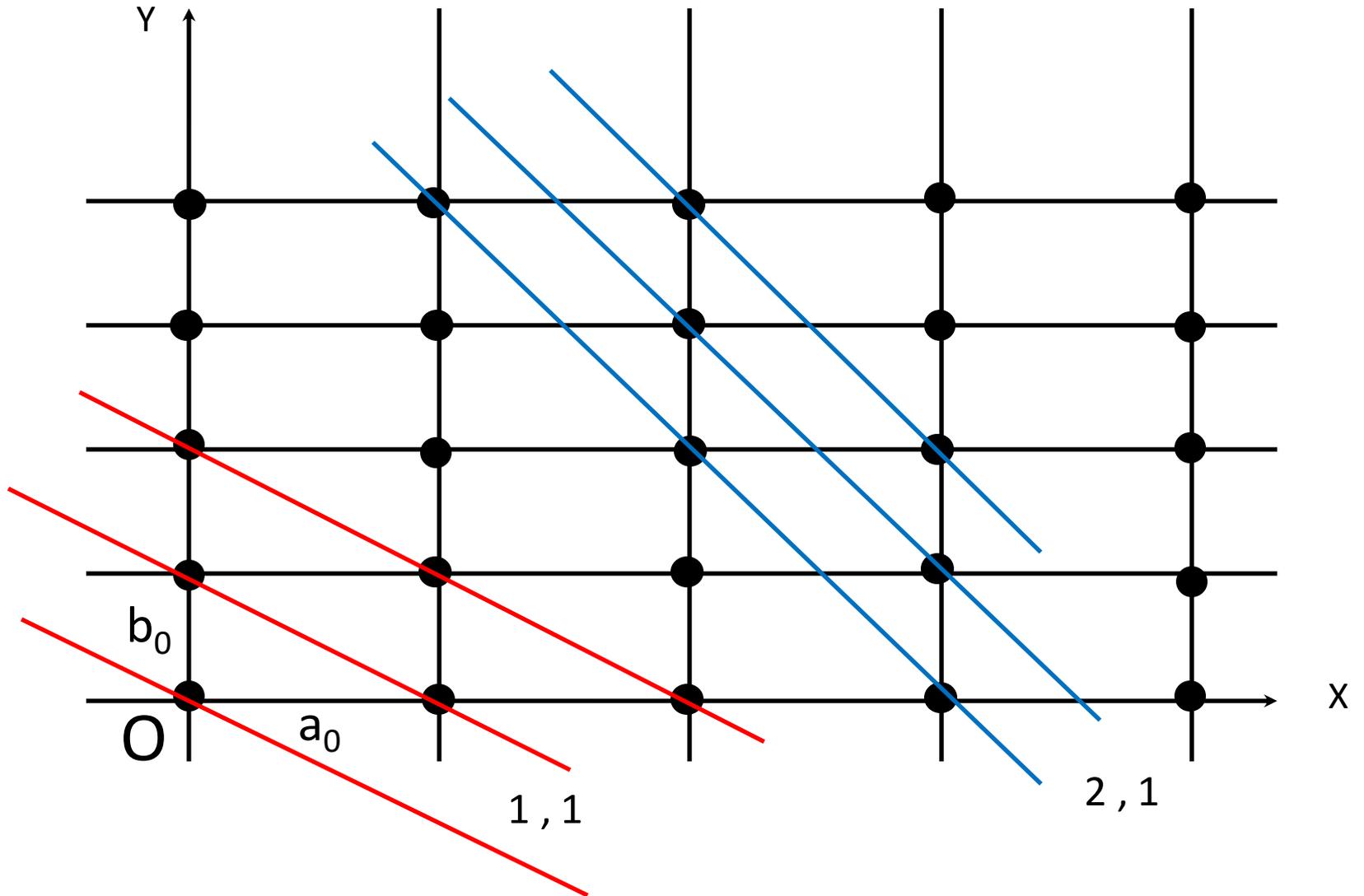
I piani reticolari possono essere identificati mediante un tripletto di indici (h, K, l) .

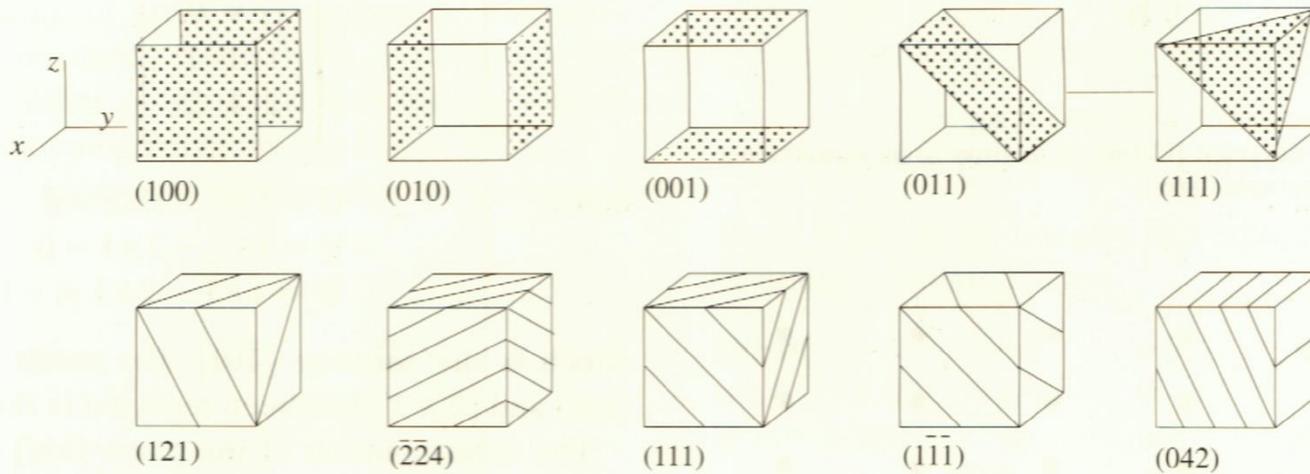
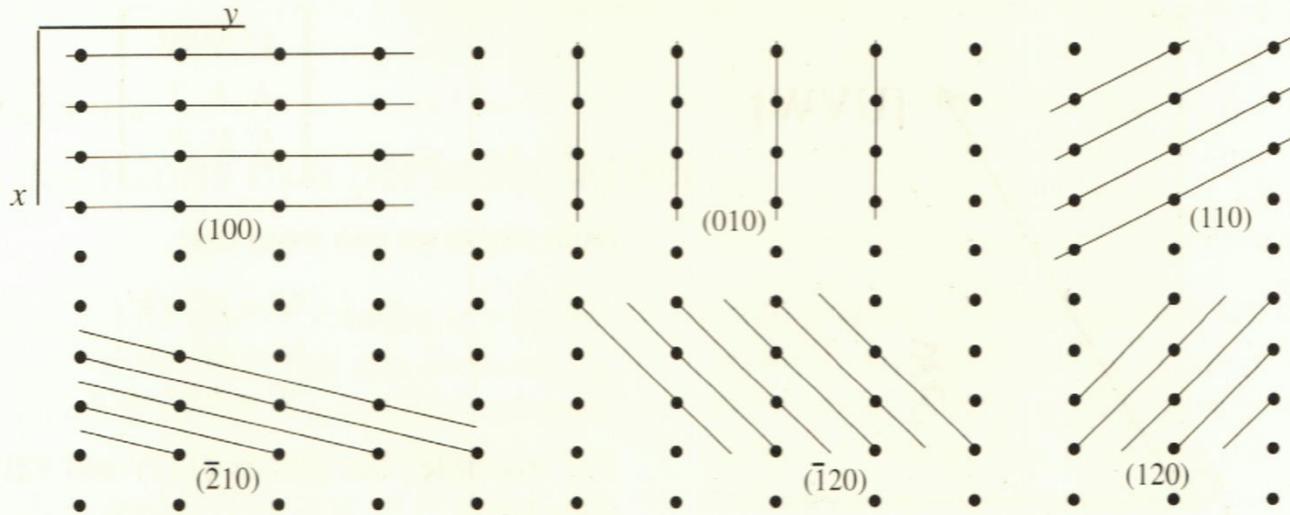


Indici dei Piani: $h=a_0/a'$ $k=b_0/b'$ $l=c_0/c'$



Indici dei Piani: $h=a_0/a'$ $k=b_0/b'$ $l=c_0/c'$



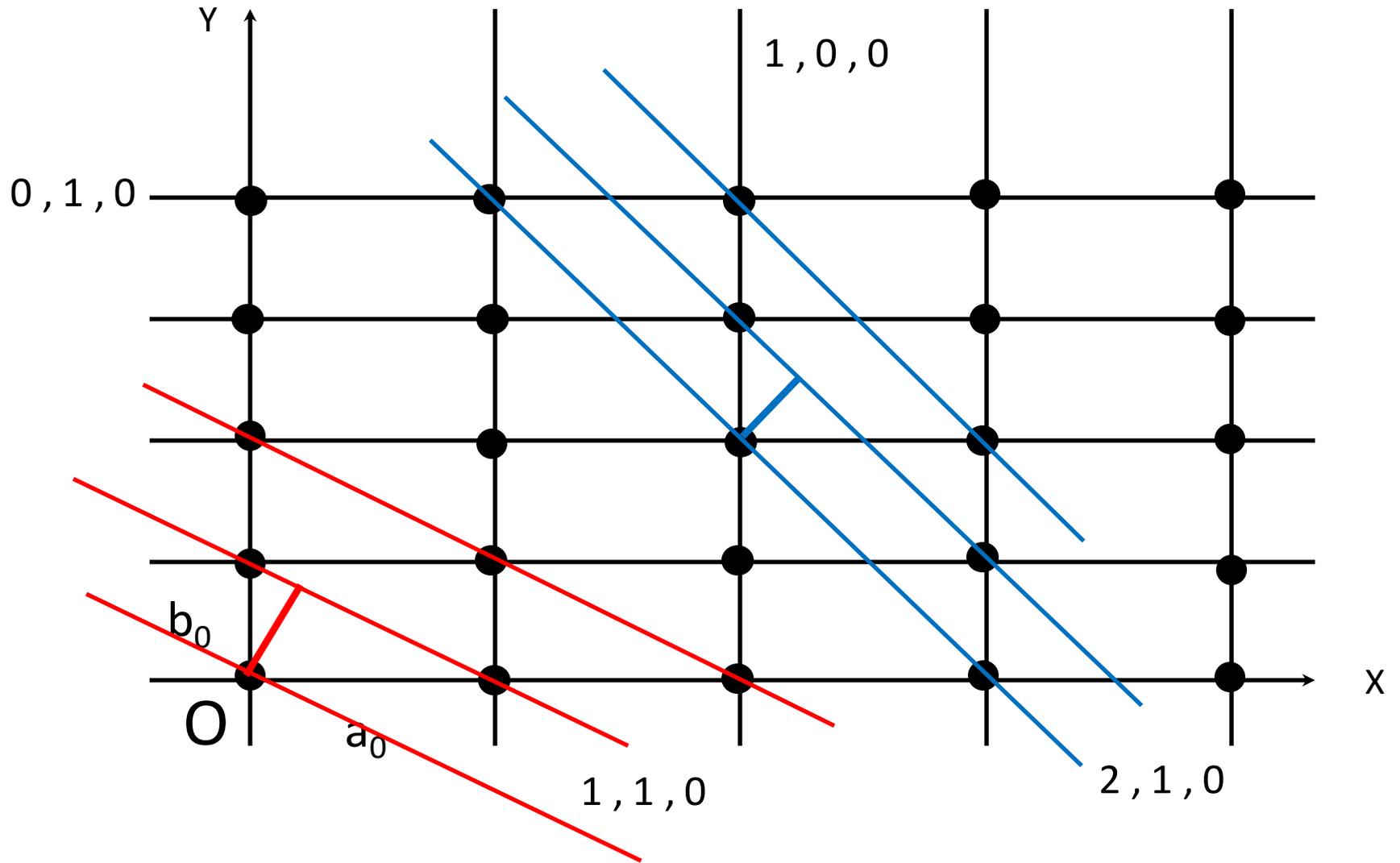


Examples of lattice planes and their Miller indices.

Proprietà dei Reticoli

- Filari paralleli hanno lo stesso periodo di traslazione.
- Piani reticolari paralleli hanno la stessa densità reticolare (numero di nodi per unità di superficie).
- La distanza tra due piani reticolari paralleli si chiama distanza interplanare.
- Maggiore è la distanza interplanare, più semplici sono gli indici dei piani reticolari e maggiore è la densità reticolare.

Indici dei Piani: $h=a_0/a'$ $k=b_0/b'$ $l=c_0/c'$



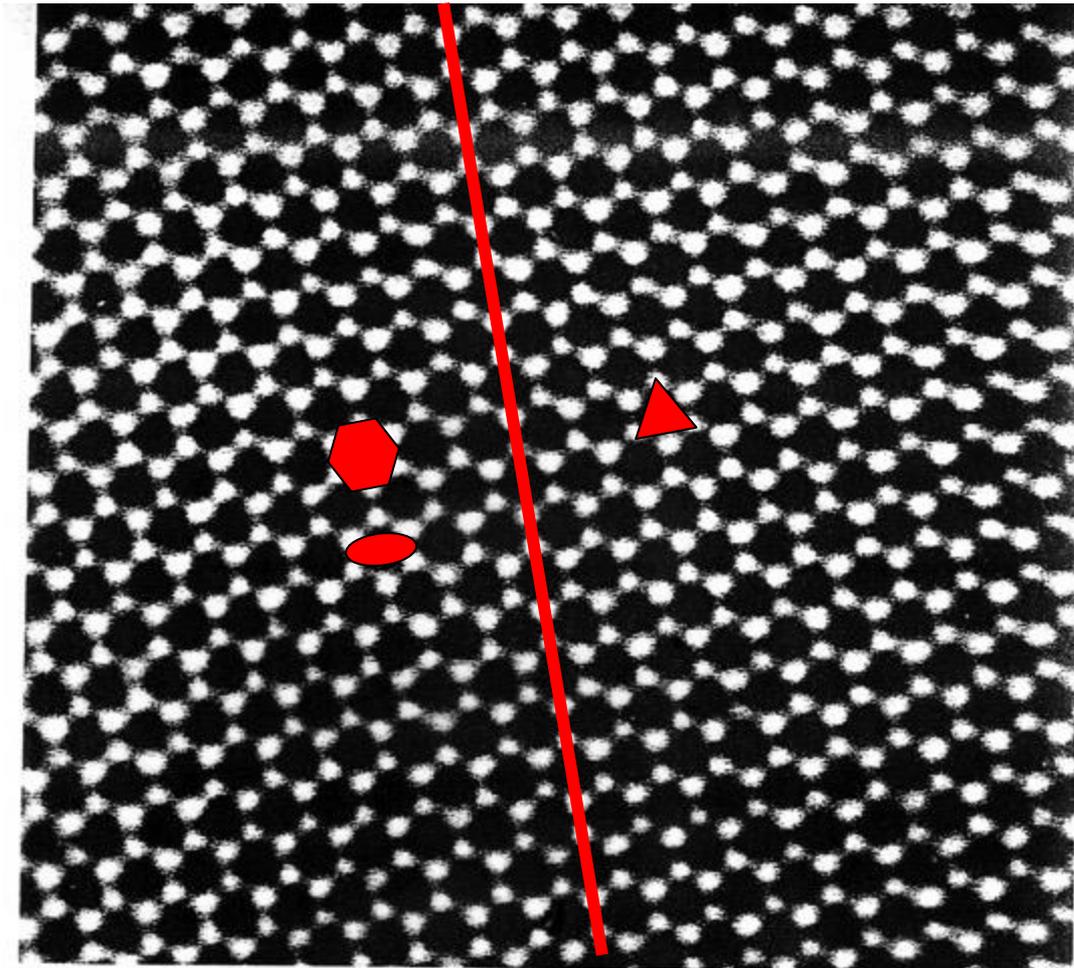
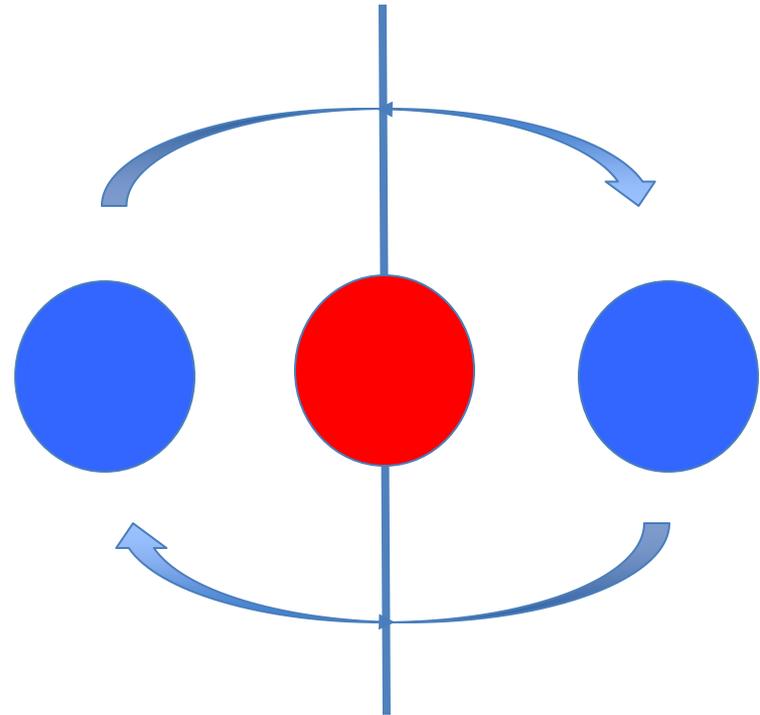
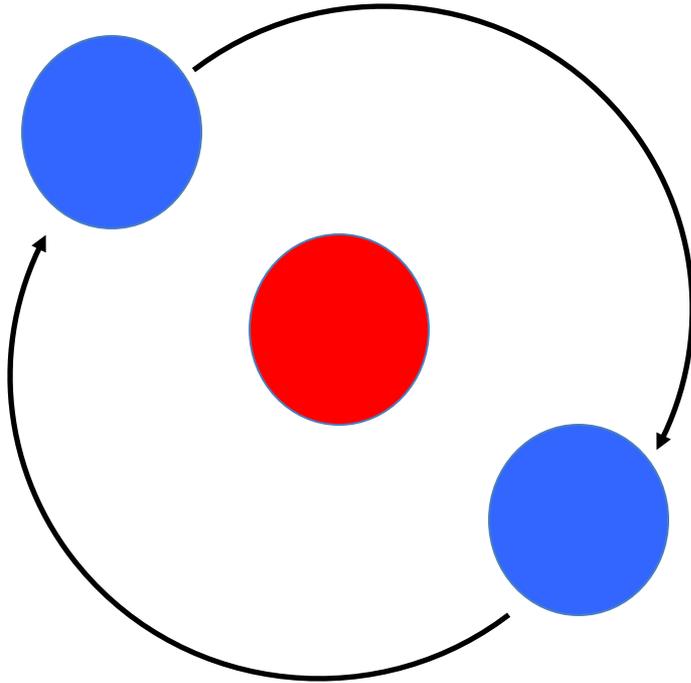


Figure 1.1. This image of the crystal structure of the mineral cordierite, ($Mg_2Al_4Si_7O_{18}$) has been taken with a high resolution transmission electron microscope. It is a projection, through a very thin ($\sim 200 \text{ \AA}$) slice, of the atomic distribution, the black spots representing hollow channels through the structure while the white spots can be equated with the regions of high atomic density, arranged around the channels in 6-fold rings. It is shown here to illustrate some aspects of the periodicity and symmetry of crystalline materials. (Scale: The distance between the black spots is $\sim 9.7 \text{ \AA}$ or 0.97 nm .)

Una simmetria è un'operazione che muove o trasforma un oggetto lasciandone però inalterato l'aspetto.

**SIMMETRIE DI ROTAZIONE E RIFLESSIONE:
rotazione rispetto un asse o riflessione
rispetto un piano o un punto.**

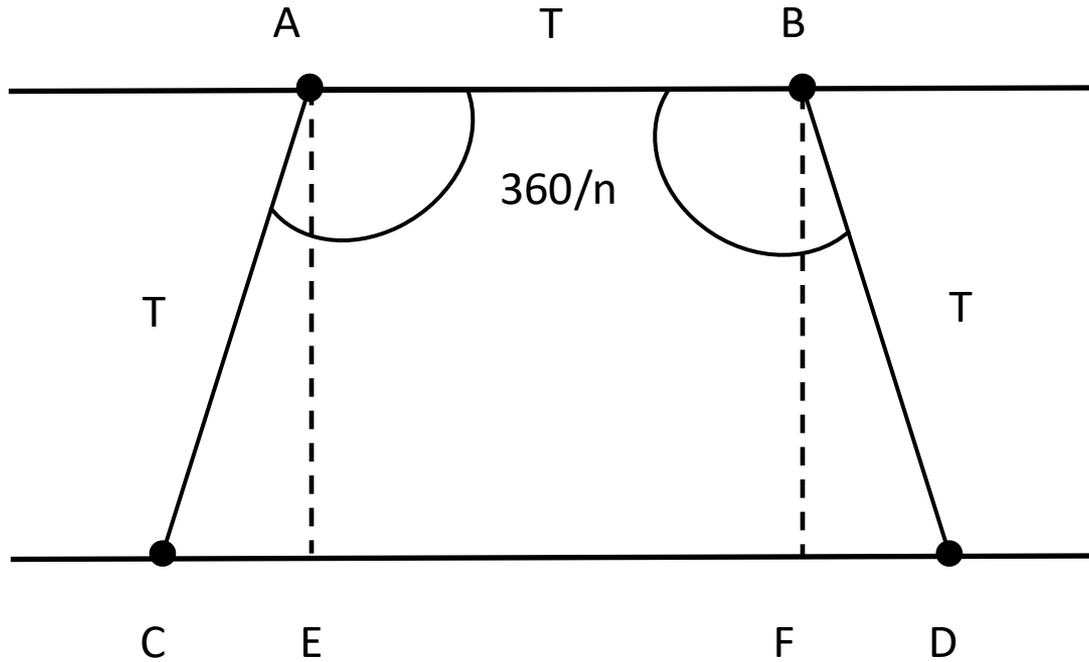
Asse di simmetria: rotazione di $360/n$

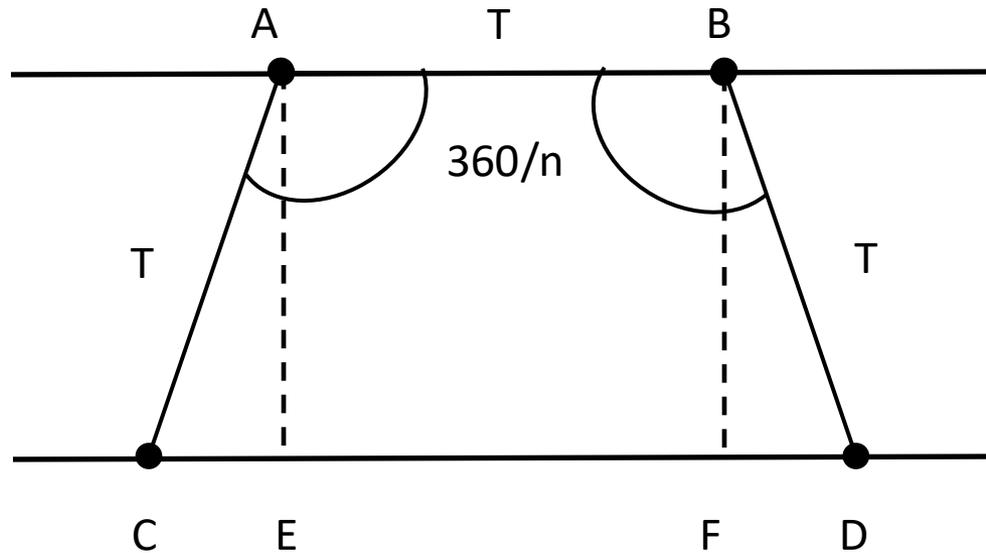


Nel presente caso $n=2$ e pertanto l'angolo di rotazione è 180°

Che tipi di asse di simmetria saranno compatibili con il reticolo di traslazione?

Che tipo di assi di simmetria sono compatibili con il reticolo cristallino?





$$CE = (pT - T)/2 = T(p-1)/2$$

$$CE = T \cos(180 - 360/n) = -T \cos(360/n)$$

$$-T \cos(360/n) = T(p-1)/2$$

$$\cos(360/n) = (1-p)/2$$

$$-1 \leq \cos \phi \leq 1$$

$$-1 \leq (1-p)/2 \leq 1$$

$$-1 \leq p \leq 3$$

$$-1 \leq p \leq 3$$

$$\cos(360/n) = (1-p)/2$$

p	$\cos \frac{360^\circ}{n}$	$\frac{360^\circ}{n}$	n	<i>Asse di simmetria</i>
-1	1	360°	1	Nessun asse di simmetria (asse di ordine uno)
0	$\frac{1}{2}$	60°	6	Asse senario
1	0	90°	4	Asse quaternario
2	$-\frac{1}{2}$	120°	3	Asse ternario
3	-1	180°	2	Asse binario

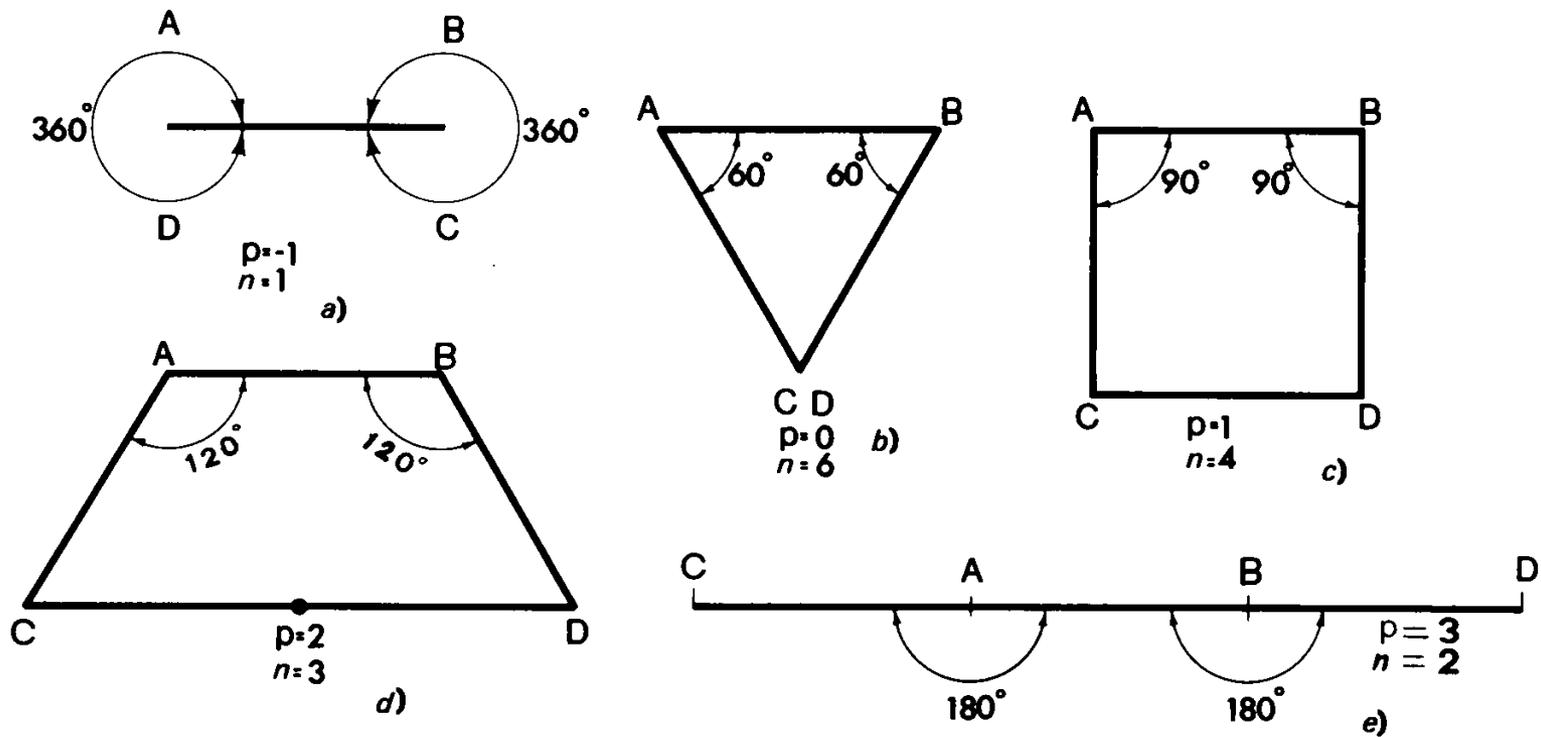


Fig. 39.8 Come degenera il trapezoido della fig. 39.7 in relazione all'ordine dell'asse di simmetria: a) asse 1; b) asse 6; c) asse 4; d) asse 3; e) asse 2.

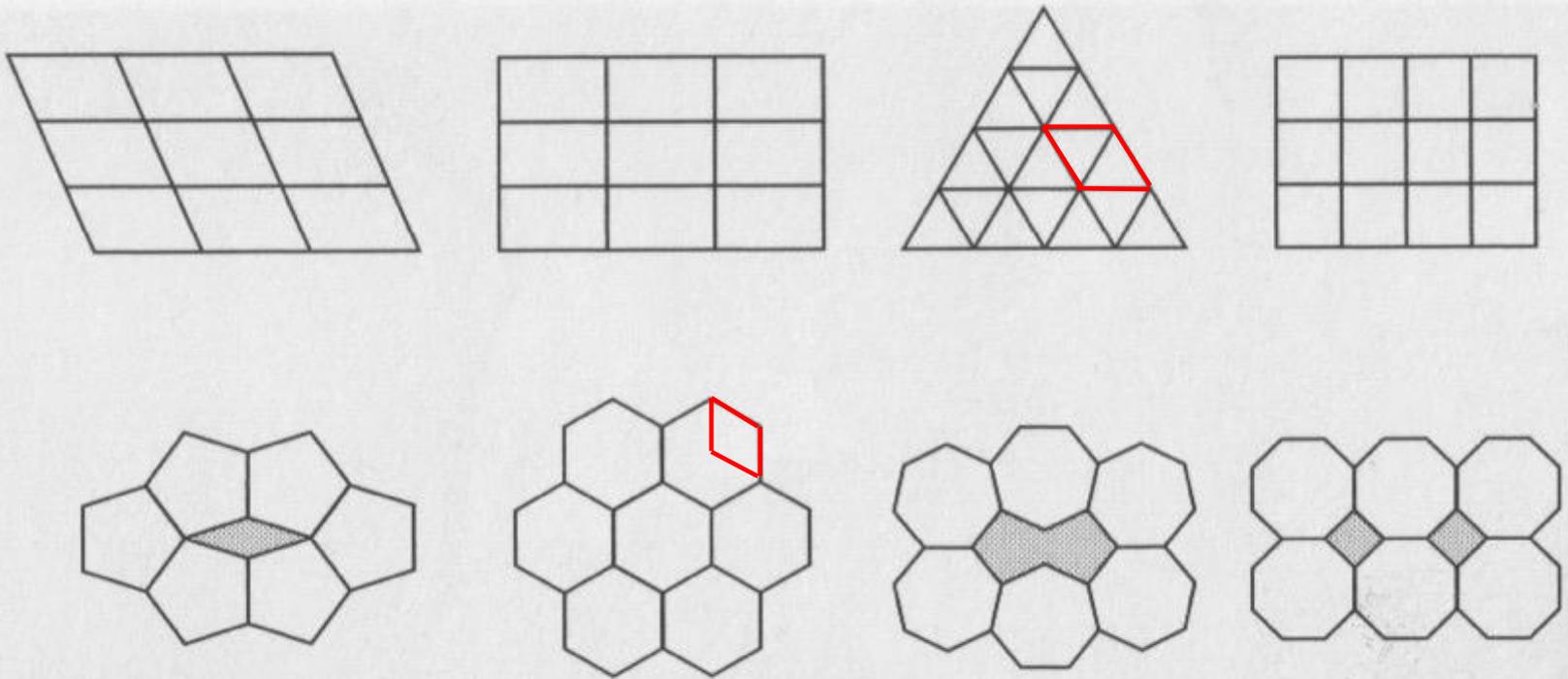
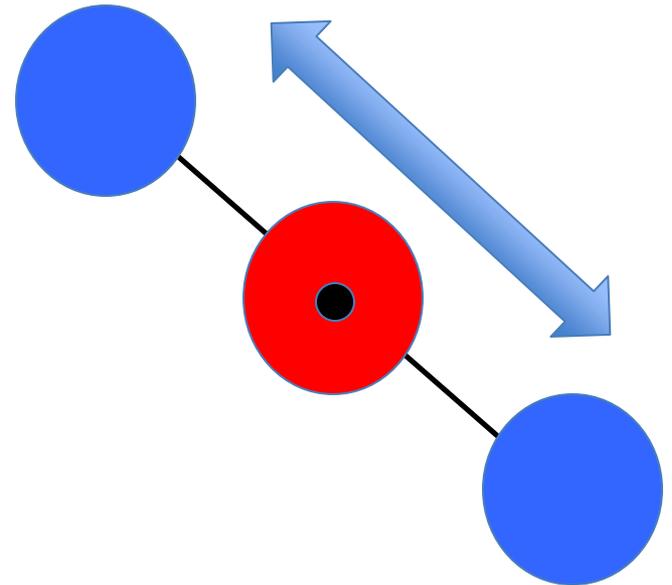
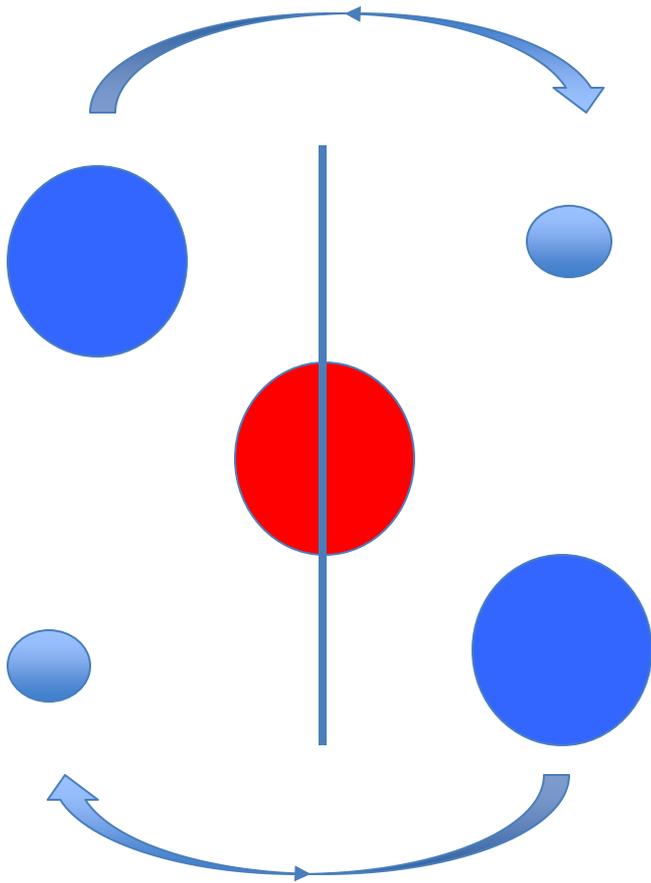
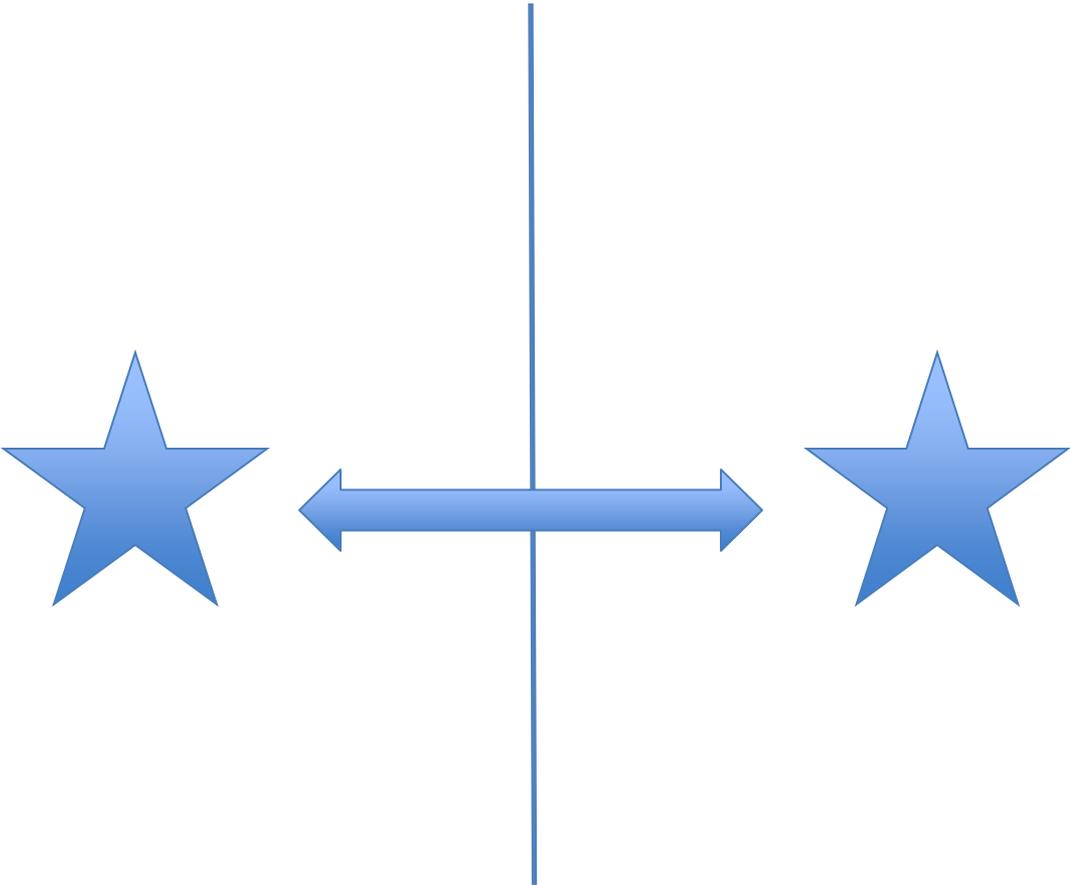


Fig. 3.10 Coverage of a surface with polygons. Note that gaps (shaded areas) exist within pentagons, heptagons and octagons.

Centro di simmetria: -1



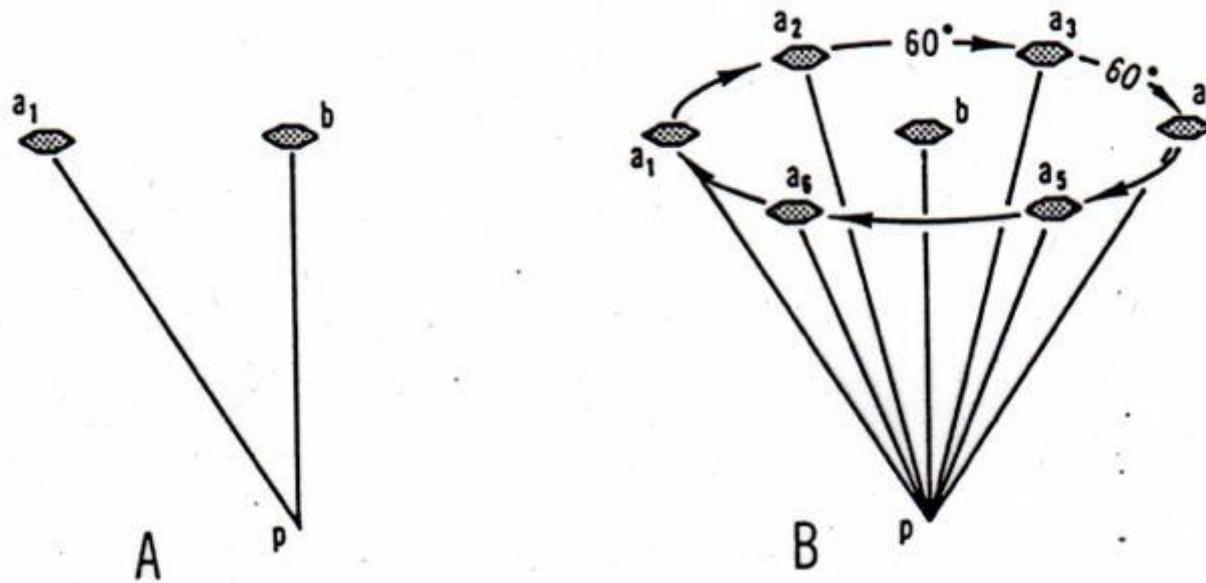
Piano di Simmetria: m

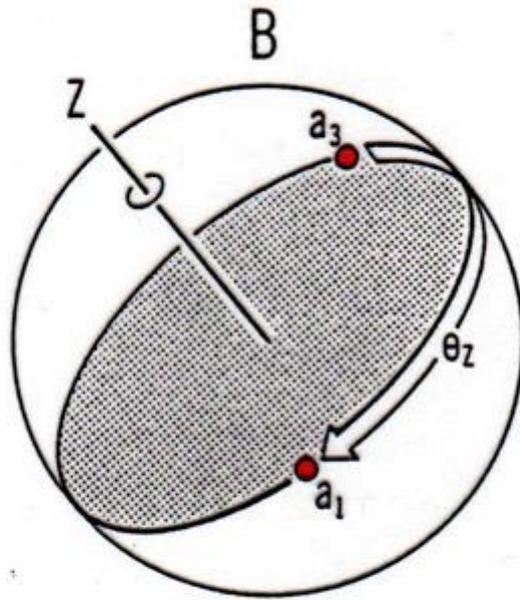
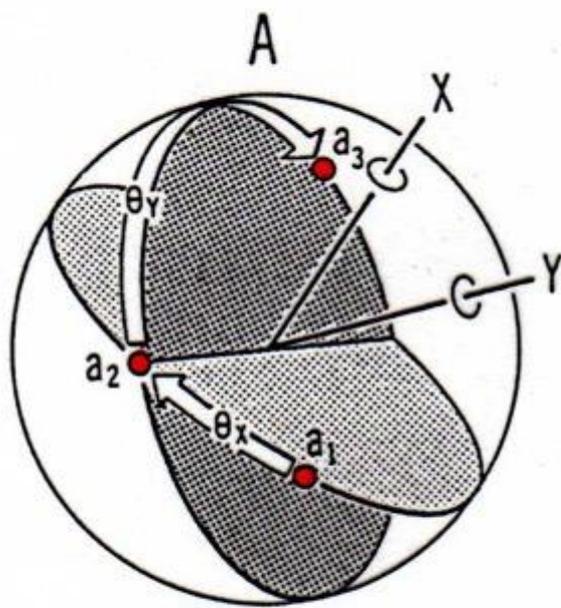


Proprietà di assi, piani e centro di simmetria

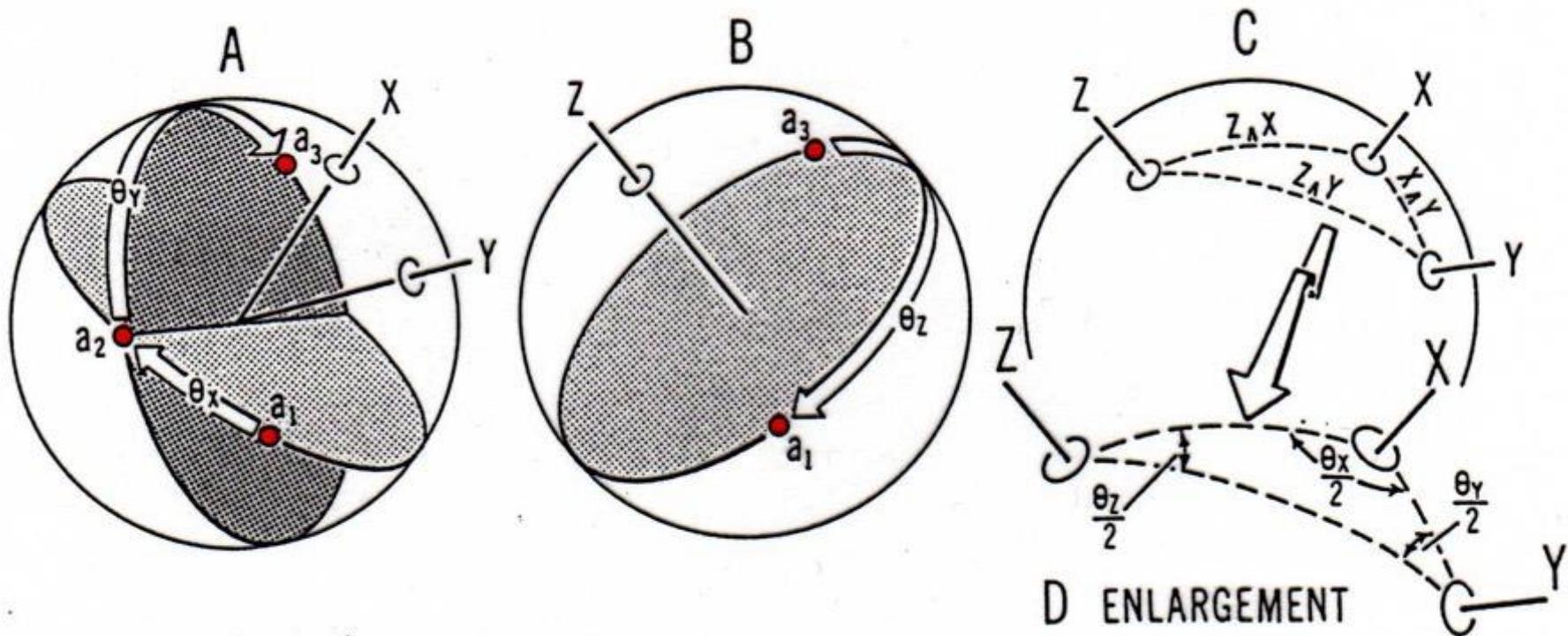
- Assi di simmetria: paralleli a filari reticolari e perpendicolari a piani reticolare.
- Piani di simmetria: paralleli a piani reticolari.
- Centro di simmetria: coincidente con i nodi del reticolo (solitamente a metà dei lati o al centro della cella elementare).

Combinazione di assi di simmetria





2 2 2	2 2 3	2 2 4
2 2 6	2 3 3	2 3 4
2 3 6	2 4 4	2 4 6
2 6 6	3 3 3	3 3 4
3 3 6	3 4 4	3 4 6
3 6 6	4 4 4	4 4 6
4 6 6	6 6 6	



Z^X , X^Y e Z^Y sono gli angoli tra gli assi X, Y e Z

$\theta_x/2$, $\theta_y/2$, $\theta_z/2$ sono la metà degli angoli di rotazione tipici degli assi X, Y e Z.
Ossia 90° , 60° , 45° e 30° rispettivamente per gli assi 2, 3, 4 e 6.

$$\cos X \wedge Y = \frac{\cos \theta_z/2 + (\cos \theta_x/2)(\cos \theta_y/2)}{(\sin \theta_x/2)(\sin \theta_y/2)} \quad (\text{Eq. 1-4})$$

$$\cos Y \wedge Z = \frac{\cos \theta_x/2 + (\cos \theta_y/2)(\cos \theta_z/2)}{(\sin \theta_y/2)(\sin \theta_z/2)} \quad (\text{Eq. 1-5})$$

$$\cos X \wedge Z = \frac{\cos \theta_y/2 + (\cos \theta_x/2)(\cos \theta_z/2)}{(\sin \theta_x/2)(\sin \theta_z/2)} \quad (\text{Eq. 1-6})$$

2 2 2	2 2 3	2 2 4
2 2 6	2 3 3	2 3 4
2 3 6	2 4 4	2 4 6
2 6 6	3 3 3	3 3 4
3 3 6	3 4 4	3 4 6
3 6 6	4 4 4	4 4 6
4 6 6	6 6 6	

$$\cos X \wedge Y = \frac{\cos \theta_z/2 + (\cos \theta_x/2)(\cos \theta_y/2)}{(\sin \theta_x/2)(\sin \theta_y/2)} \quad (\text{Eq. 1-4})$$

$$\cos Y \wedge Z = \frac{\cos \theta_x/2 + (\cos \theta_y/2)(\cos \theta_z/2)}{(\sin \theta_y/2)(\sin \theta_z/2)} \quad (\text{Eq. 1-5})$$

$$\cos X \wedge Z = \frac{\cos \theta_y/2 + (\cos \theta_x/2)(\cos \theta_z/2)}{(\sin \theta_x/2)(\sin \theta_z/2)} \quad (\text{Eq. 1-6})$$

Supponiamo di avere il tripletto 2 2 2, essendo tutti assi binari la metà dell'angolo tipico di rotazione è 90°. Sostituendo nella prima equazione otteniamo:

$$\cos (X \wedge Y) = [\cos 90 + (\cos 90) * (\cos 90)] / [(sen 90) * (sen 90)]$$

$$\cos (X \wedge Y) = [0 + (0 * 0)] / [1 * 1] = 0$$

Il coseno di un angolo è uguale a 0 quando l'angolo è 90°, e quindi l'angolo formato tra gli assi X e Y è di 90°, ossia i due assi sono tra loro perpendicolari.

$$\cos X \wedge Y = \frac{\cos \theta_z/2 + (\cos \theta_x/2)(\cos \theta_y/2)}{(\sin \theta_x/2)(\sin \theta_y/2)} \quad (\text{Eq. 1-4})$$

$$\cos Y \wedge Z = \frac{\cos \theta_x/2 + (\cos \theta_y/2)(\cos \theta_z/2)}{(\sin \theta_y/2)(\sin \theta_z/2)} \quad (\text{Eq. 1-5})$$

$$\cos X \wedge Z = \frac{\cos \theta_y/2 + (\cos \theta_x/2)(\cos \theta_z/2)}{(\sin \theta_x/2)(\sin \theta_z/2)} \quad (\text{Eq. 1-6})$$

Supponiamo di avere il tripletto 6 6 6, essendo tutti assi senari la metà dell'angolo tipico di rotazione è 30°. Sostituendo nella prima equazione otteniamo:

$$\cos (X^{\wedge}Y) = [\cos 30 + (\cos 30) * (\cos 30)] / [(sen 30) * (sen 30)]$$

$$\cos (X^{\wedge}Y) = [\sqrt{3}/2 + (\sqrt{3}/2 * \sqrt{3}/2)] / [1/2 * 1/2] = [\sqrt{3}/2 + 3/4] / [1/4] =$$

$$\cos (X^{\wedge}Y) = [0.87+0.75]/(0.25) = 1.62/0.25 = 6.48$$

Il coseno di un angolo non può essere >1 e pertanto il tripletto non è compatibile con il reticolo di traslazione.

$$\cos X \wedge Y = \frac{\cos \theta_z/2 + (\cos \theta_x/2)(\cos \theta_y/2)}{(\sin \theta_x/2)(\sin \theta_y/2)} \quad (\text{Eq. 1-4})$$

$$\cos Y \wedge Z = \frac{\cos \theta_x/2 + (\cos \theta_y/2)(\cos \theta_z/2)}{(\sin \theta_y/2)(\sin \theta_z/2)} \quad (\text{Eq. 1-5})$$

$$\cos X \wedge Z = \frac{\cos \theta_y/2 + (\cos \theta_x/2)(\cos \theta_z/2)}{(\sin \theta_x/2)(\sin \theta_z/2)} \quad (\text{Eq. 1-6})$$

TABLE 1-1

Compatible Trios of Symmetry Axes and Their Required Interaxial Angles

<i>X</i>	<i>Y</i>	<i>Z</i>	<i>X</i> \wedge <i>Y</i>	<i>X</i> \wedge <i>Z</i>	<i>Y</i> \wedge <i>Z</i>
2	2	2	90°	90°	90°
3	2	2	90°	90°	60°
4	2	2	90°	90°	45°
6	2	2	90°	90°	30°
4	3	2	54°44'	45°	35°16'
2	3	3	54°44'	54°44'	70°32'

2 2 2 2 2 3 2 2 4

2 2 6 2 3 3 2 3 4

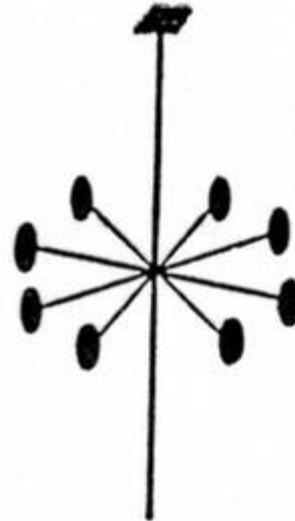
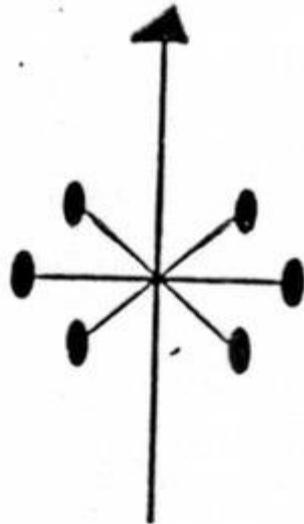
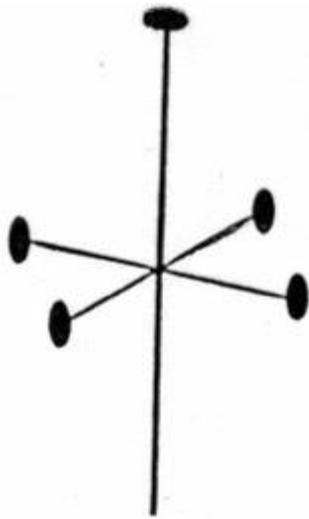
2 3 6 2 4 4 2 4 6

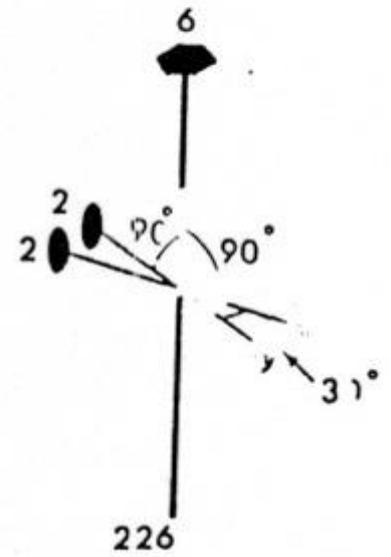
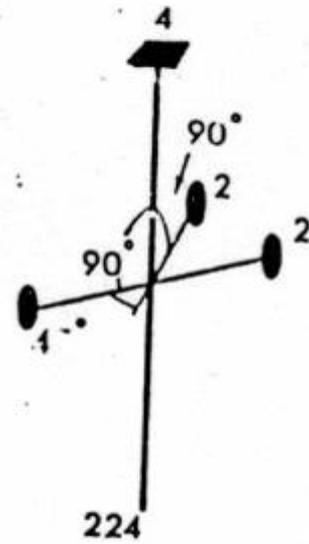
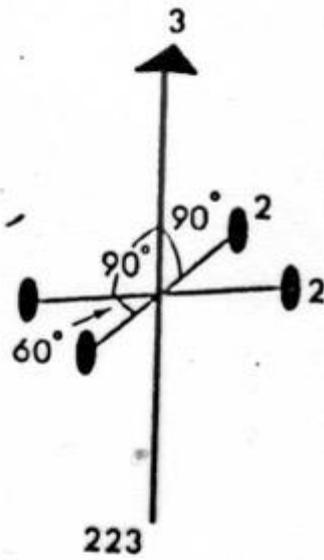
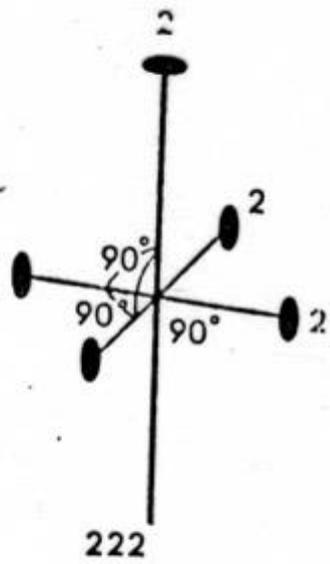
2 6 6 3 3 3 3 3 4

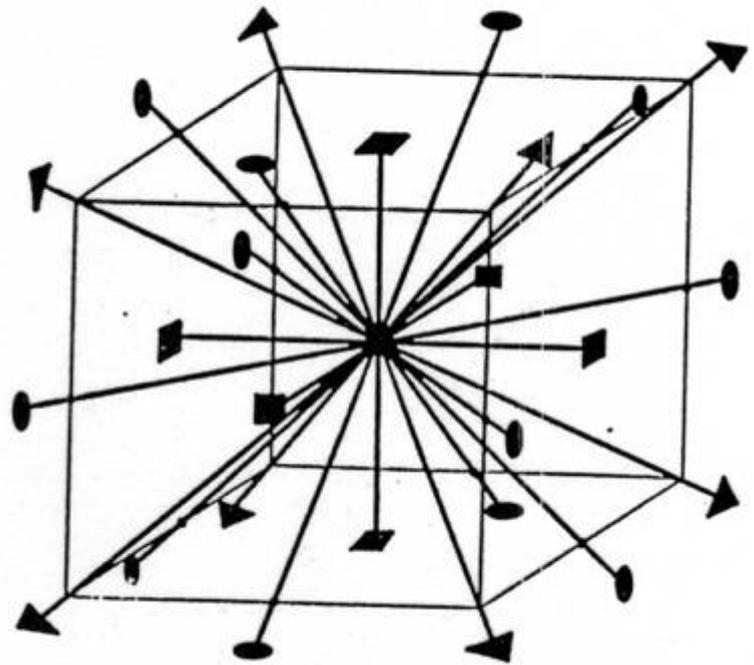
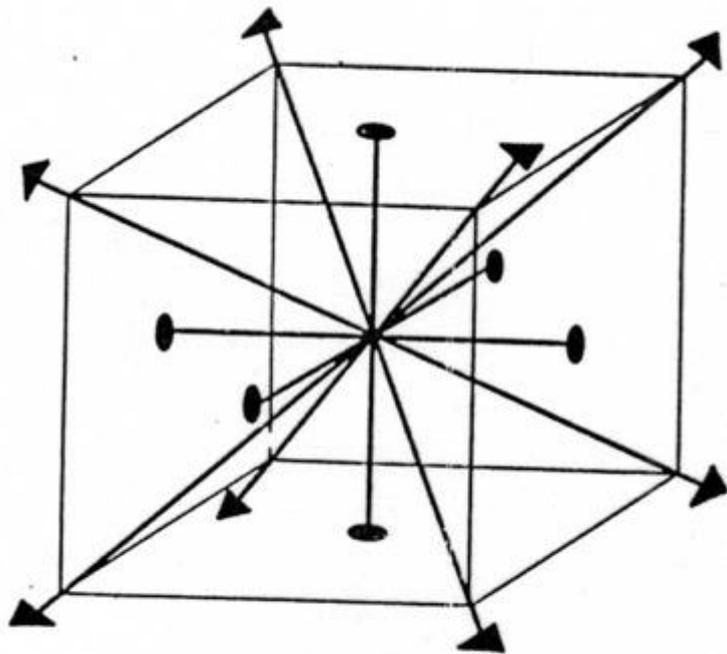
3 3 6 3 4 4 3 4 6

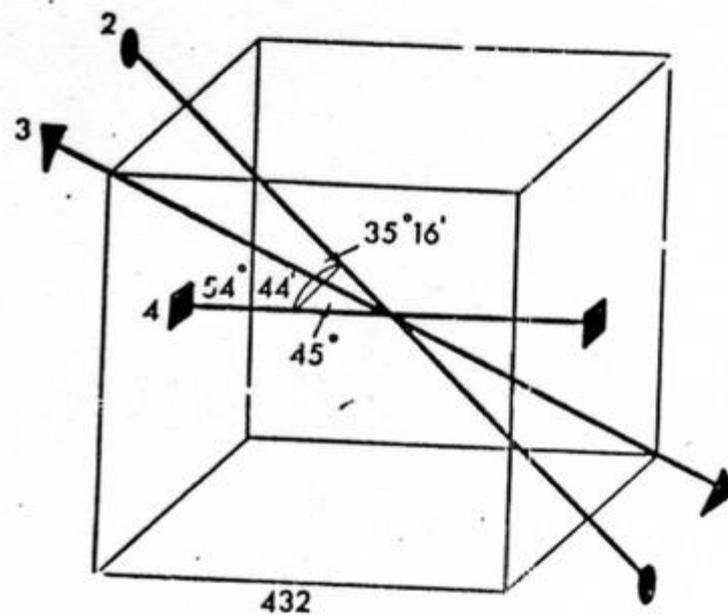
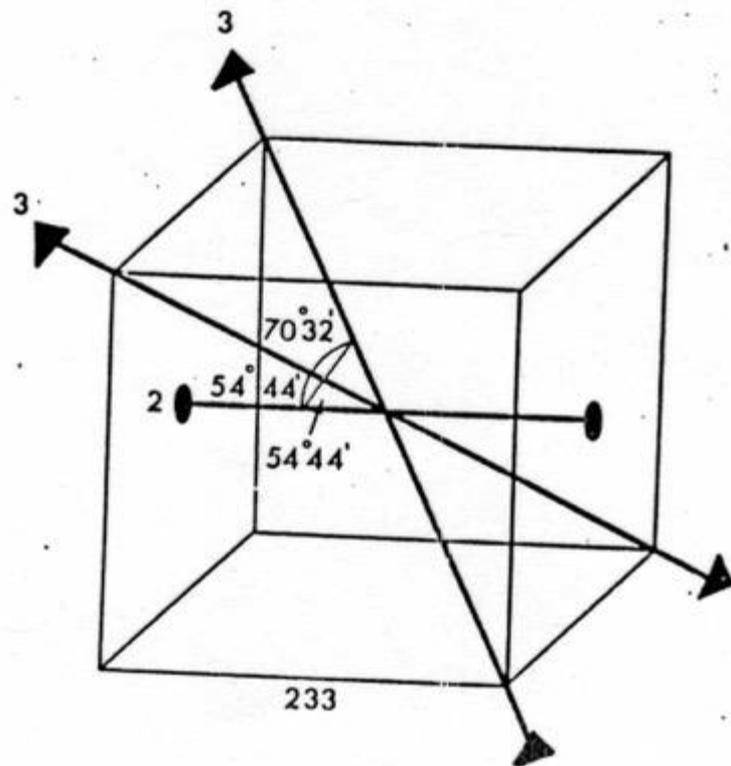
3 6 6 4 4 4 4 4 6

4 6 6 6 6 6









Il numero delle combinazioni possibili dei diversi elementi di simmetria NON E' ILLIMITATO.

In base al grado di simmetria i cristalli vengono ordinati in:

3 gruppi cristallini

Considerando la cella elementare, i moduli dei tre assi (a_0 , b_0 , c_0) potranno presentare le seguenti caratteristiche a seconda del tipo di asse/assi di simmetria presenti:

Se gli assi sono di ordine minore o uguale a 2

Tutti e tre diversi: $a_0 \neq b_0 \neq c_0$ 1, 2, e tripletto 2 2 2

Se c'è un asse di ordine superiore a 2 ossia assi di ordine 3, 4, 6

Due uguali e diversi dal terzo: $a_0 = b_0 \neq c_0$ 3, 4, 6 e relativi tripletti 3 2 2, 4 2 2, 6 2 2

Ed infine quando sono presenti due particolari combinazioni di assi

Tutti e tre uguali: $a_0 = b_0 = c_0$ tripletti 4 3 2 e 2 3

Questo definisce i tre **GRUPPI** di simmetria, rispettivamente:

TRIMETRICO, DIMETRICO e MONOMETRICO

Il numero delle combinazioni possibili dei diversi elementi di simmetria NON E' ILLIMITATO.

In base al grado di simmetria i cristalli vengono ordinati in:

3 gruppi cristallini

7 sistemi cristallini

Gli angoli tra gli assi (α , β e γ), che dipendono dal tipo di assi di simmetria presenti, permettono di definire i **7 SISTEMI** di simmetria.

GRUPPI	SISTEMI	SIMMETRIA ASSIALE
TRIMETRICO $a_0 \neq b_0 \neq c_0$ $a : b : c$	Triclino ($\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$)	1
	Monoclino ($\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$)	2
	Rombico ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)	222
DIMETRICO $a_0 = b_0 \neq c_0$ $a : a : c$	Tetragonale ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)	4 422
	Trigonale ($\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$)	3 32
	Esagonale ($\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 60^\circ$)	6 622
MONOMETRICO $a_0 = b_0 = c_0$ $a : a : a$	Cubico ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)	23
		432

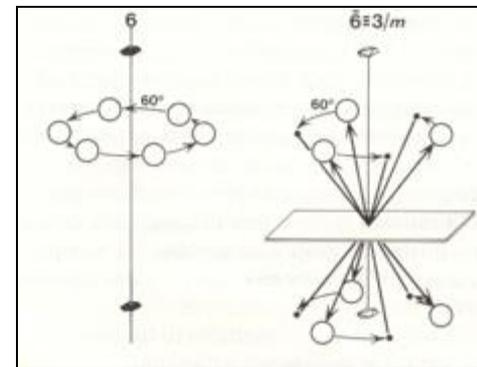
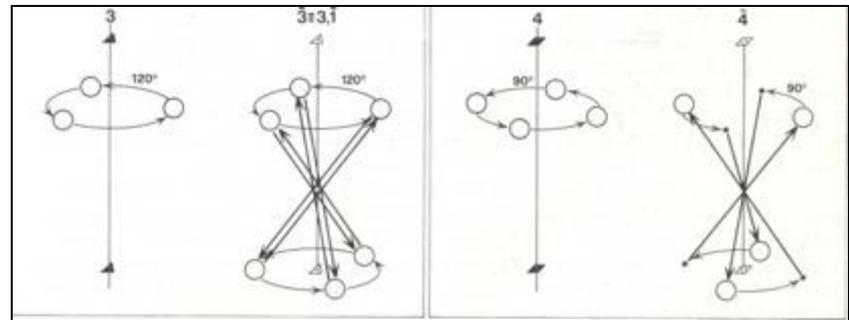
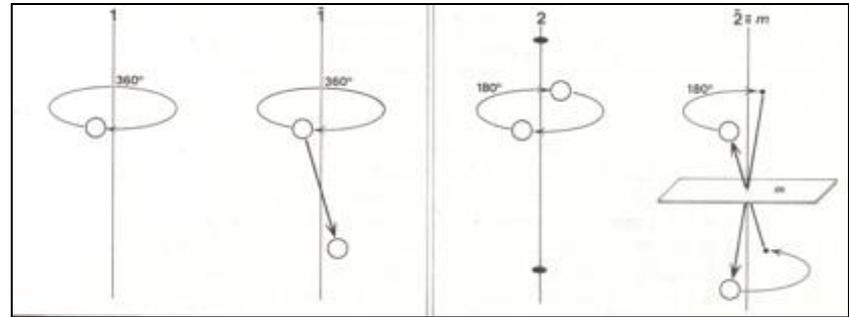
ASSI DI INVERSIONE

E' la combinazione di un asse di simmetria con il centro di simmetria.

- Un asse di ordine dispari equivale alla combinazione dello stesso asse con il centro di simmetria.

- Un asse di ordine pari (escluso l'asse 4) equivale alla combinazione di un asse di ordine metà più il piano di simmetria normale all'asse.

- L'asse di ordine 4, non è equivalente alla combinazione di altri elementi, ma è in subordine asse di ordine 2.



Il numero delle combinazioni possibili dei diversi elementi di simmetria NON E' ILLIMITATO.

In base al grado di simmetria i cristalli vengono ordinati in:

3 gruppi cristallini

7 sistemi cristallini

32 classi cristalline o gruppi di simmetria puntuali

Le 32 Classi Cristalline:

gruppi di simmetria puntuali, ossia tutti gli operatori di simmetria passano per un punto.

Tabella 16.1
SIMMETRIA COMPLETA DI CIASCUNA CLASSE

	ORDINE n DELL'ASSE	1	2	3	4	6	
ASSOCIAZIONI DI ASSI DI SIMMETRIA (assi singoli o tripletti) n \bar{n} (n, \bar{n}) (*)		A 1	B 2 $\frac{2}{m} \bar{1}$	D 3 id.	E 4 $\frac{(4, \bar{4})}{m} \bar{1}$	F 6 $\frac{(6, \bar{6}, \bar{3})}{m} \bar{1}$	
	$n2 \bar{2}$ $n\bar{2} \bar{2} = nmm$ $\bar{n} \bar{2} 2 = \bar{n}m2$ $(n, \bar{n}) (2, \bar{2}) (2, \bar{2})$			C 2 22 2 mm id. $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \bar{1}$	3 222 3 mmm $\bar{3} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \bar{1}$ id.	4 2222 4 mmmm 4 mm 22 $\frac{(4, \bar{4})}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \bar{1}$	6 222222 6 mmmmmm $\bar{6} mmm 222$ $\frac{(6, \bar{6}, \bar{3})}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \bar{1}$
233 $(2, \bar{2}) \bar{3} \bar{3}$ 432 $\bar{4} 3 \bar{2} = \bar{4} 3m$ $(4, \bar{4}) \bar{3} (2, \bar{2})$			222 3333 $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \bar{3} \bar{3} \bar{3} \bar{3} \bar{1}$ 444 3333 222222 $\bar{4} \bar{4} \bar{4} 3333 mmmmmm$ $\frac{(4, \bar{4})}{m} \frac{(4, \bar{4})}{m} \frac{(4, \bar{4})}{m} \bar{3} \bar{3} \bar{3} \bar{3} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m} \bar{1}$	G	Sistemi A triclino D trigonale G cubico B monoclino E tetragonale C rombico F esagonale		
				(*) Un asse di simmetria di ordine n , contemporaneamente semplice e d'inversione, è anche asse d'inversione per tutti gli ordini sottomultipli di n ; per esempio: $(6, \bar{6}) = (6, \bar{6}, \bar{3}, \bar{2}, \bar{1}) = \frac{(6, 6, 3)}{m} \bar{1}$. Il simbolo «id.» indica che la classe è uguale a quella elencata sopra nella stessa colonna.			

Forma delle maglie elementari

Compatibilmente con la simmetria di rotazione (assi (1)-2-3-4-6) e di riflessione (piano e centro), le maglie elementari, possono avere le forme di quadrilateri regolari.

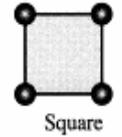
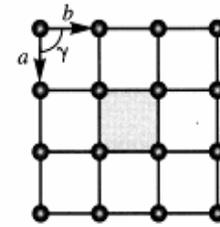
Si definiscono **P**rimitive quelle che hanno nodi solo ai vertici, mentre saranno **C**entrate quelle che hanno un nodo anche al centro della maglia.

Compatibilmente con la simmetria di rotazione e di riflessione, le forme possibili delle maglie elementari sono:

Asse 4

Quadrata

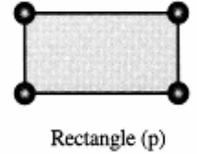
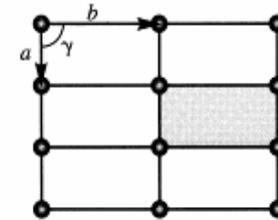
Square
 $a = b$
 $\gamma = 90^\circ$



Tripletto
 2 2 2
 o
 m m m

Rettangolare

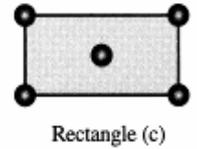
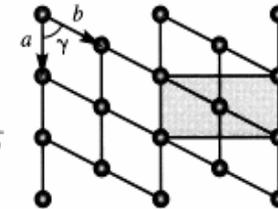
Rectangle
 $a \neq b$
 $\gamma = 90^\circ$



Tripletto
 2 2 2
 o
 m m m

Rettangolare centrata

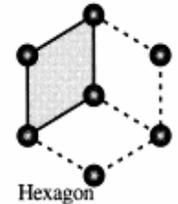
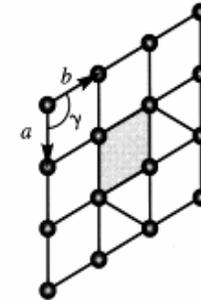
Diamond
 $a \neq b$
 $\cos \gamma = \frac{a}{2b}$



Asse 3 o 6

Esagonale

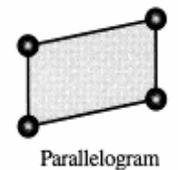
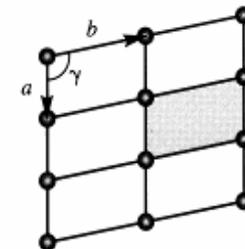
Hexagonal
 $a = b$
 $\gamma = 120^\circ$



Asse 2 o 1

Obliqua

Oblique
 $a \neq b$
 $\gamma \neq 90^\circ$



Le 5 maglie elementari e gli elementi di simmetria entro la cella elementare.

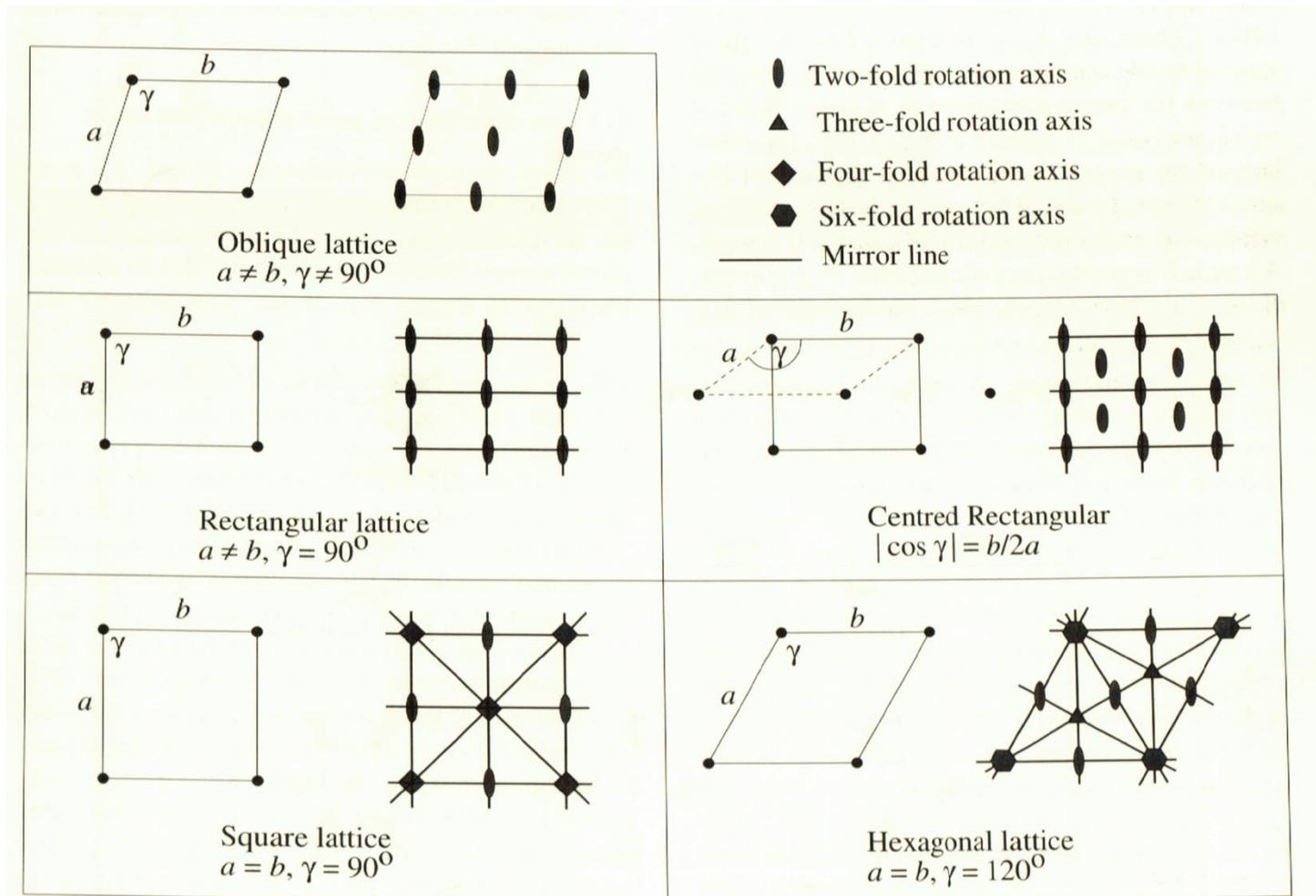


Figure 1.6. The five two-dimensional lattices, and the symmetry of the distribution of lattice points in each. In each case a single unit cell is shown on the left, and the symmetry elements within the cell are shown in the figure on the right.

Il numero delle combinazioni possibili dei diversi elementi di simmetria NON E' ILLIMITATO. In base al grado di simmetria i cristalli vengono ordinati in:

3 gruppi cristallini

7 sistemi cristallini

32 classi cristalline o gruppi puntuali di simmetria

14 reticoli Bravaisiani

Applicando alle maglie il terzo vettore di traslazione otteniamo i:

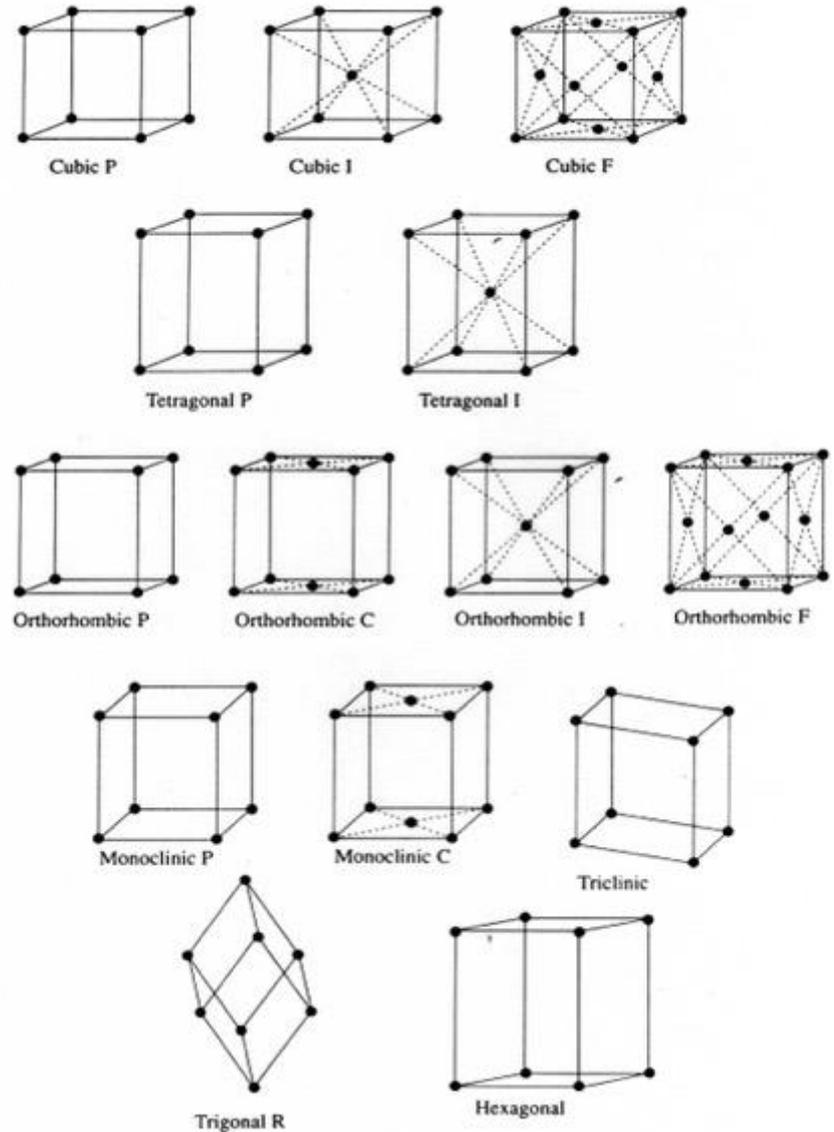
14 RETICOLI BRAVAISIANI

La derivazione dei reticoli richiede i seguenti passaggi:

- 1) Definizione della posizione degli elementi di simmetria entro le maglie piane
- 2) Definizione di un vettore di traslazione al di fuori dal piano della maglia da assumere come terzo lato.

I reticoli bravaisiani descrivono i vari tipi di celle elementari possibili nei cristalli. Vi sono 7 reticoli primitivi e 7 non primitivi (primitivo (**P**) = nodi solo ai vertici; **C** = a base centrata; **I** = a corpo centrato; **F** = a facce centrate).

I reticoli primitivi sono basati su celle elementari a forma di parallelepipedo rispecchianti il sistema di simmetria del cristallo.



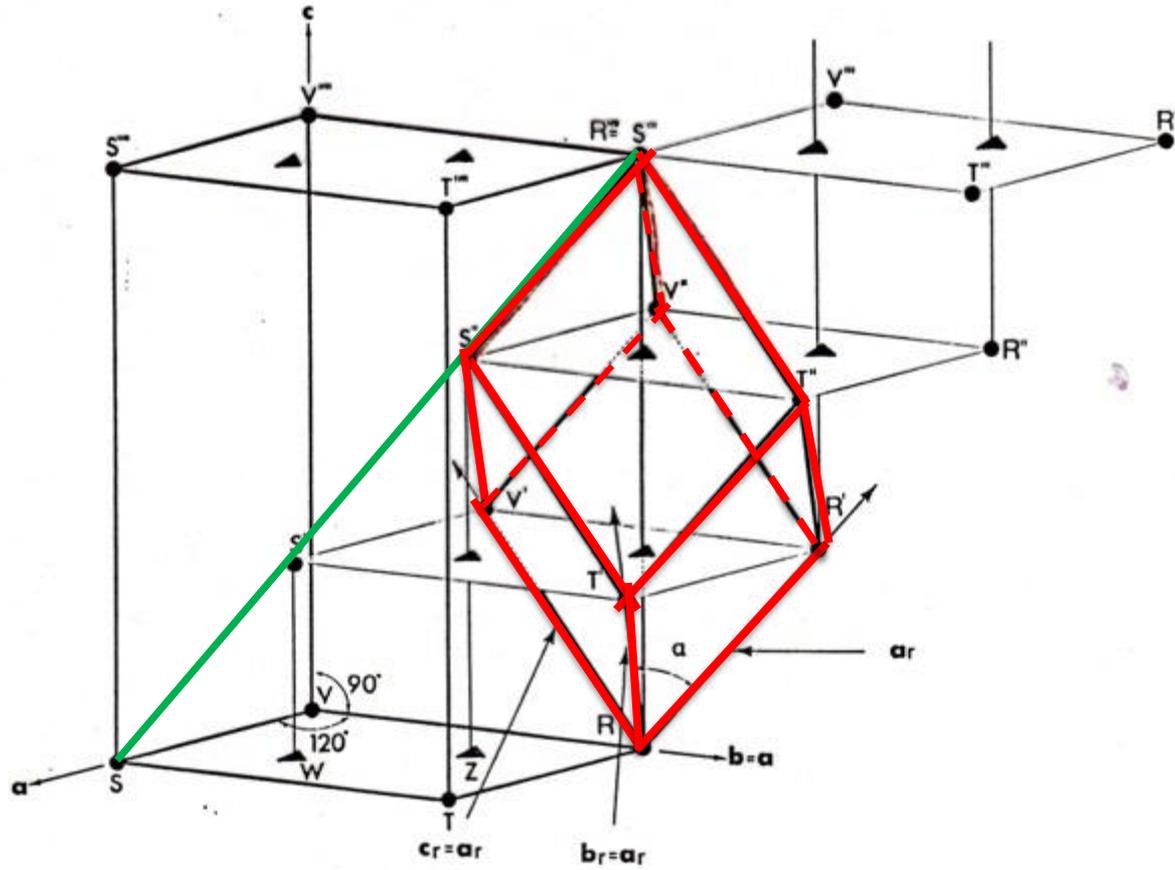


Fig. 40.3 Derivazione della cella elementare romboedrica (v. testo).

Gli angoli tra gli assi (α , β e γ), che dipendono dal tipo di assi di simmetria presenti, permettono di definire i **7 SISTEMI** di simmetria e le relative simmetrie di traslazione.

GRUPPI	SISTEMI	SIMMETRIA ASSIALE	SIMMETRIA TRASLAZIONE
TRIMETRICO $a_0 \neq b_0 \neq c_0$ $a : b : c$	Triclino ($\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$)	1	P
	Monoclino ($\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$)	2	P, C
	Rombico ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)	222	P, C, I, F
DIMETRICO $a_0 = b_0 \neq c_0$ $a : a : c$	Tetragonale ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)	4 422	P, I
	Trigonale ($\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$)	3 32	P, R
	Esagonale ($\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 60^\circ$)	6 622	(P)
MONOMETRICO $a_0 = b_0 = c_0$ $a : a : a$	Cubico ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$)	23 432	P, I, F

Associazione della traslazione con la rotazione

ELICOGIRE

Con un operatore di simmetria semplice, posizione iniziale e finale sono coincidenti, mentre con le elicogire, posizione iniziale e finale non sono più coincidenti, ma equivalenti per traslazione.

La componente di traslazione associata alla rotazione deve essere una frazione del periodo di traslazione nella direzione dell'asse. La componente di traslazione associata alla rotazione è definita da: mT/n con $m < n$ entrambi numeri interi (T = traslazione, n ordine dell'asse di rotazione).

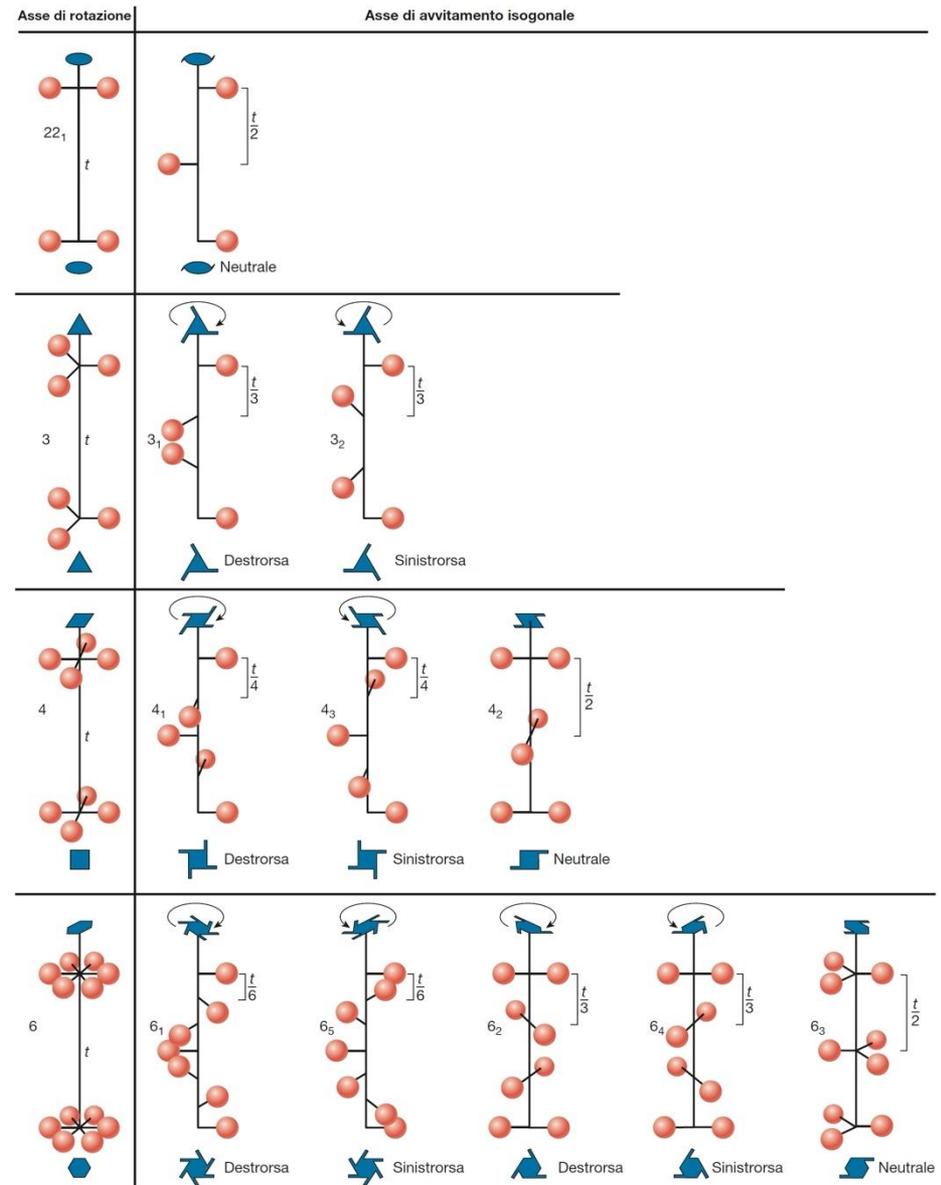
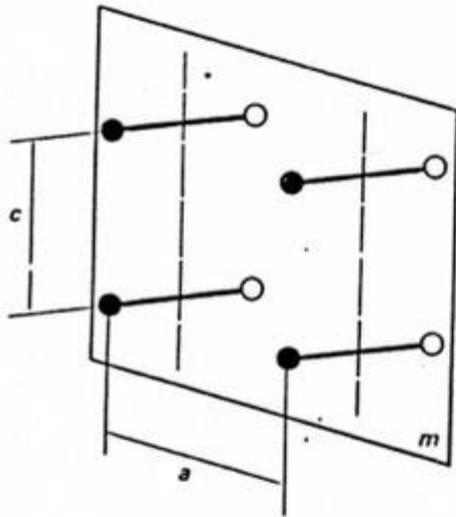


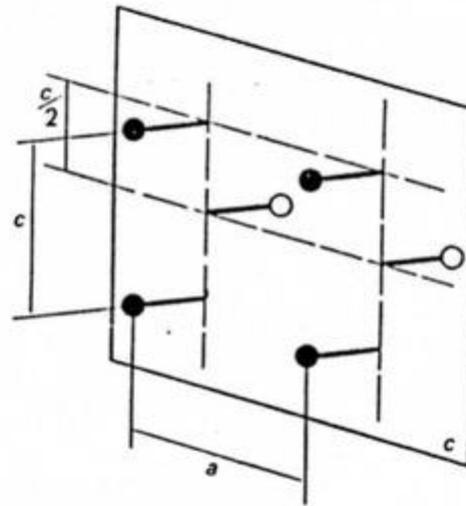
Figura 5.27 In questa figura vengono rappresentate graficamente le operazioni combinate di rotazione e traslazione (elicogire) su motivi, qui rappresentati con una sfera. Le sfere possono rappresentare atomi, ioni o gruppi ionici interni a una struttura cristallina. I simboli grafici internazionali per queste operazioni sono disegnati in prospettiva nella parte superiore dell'elicogira e in pianta alla base. Le frecce circolari indicano il verso della rotazione. (Adattata da *International Tables for Crystallography* 1983, vol. A.)

Associazione della traslazione con la riflessione:

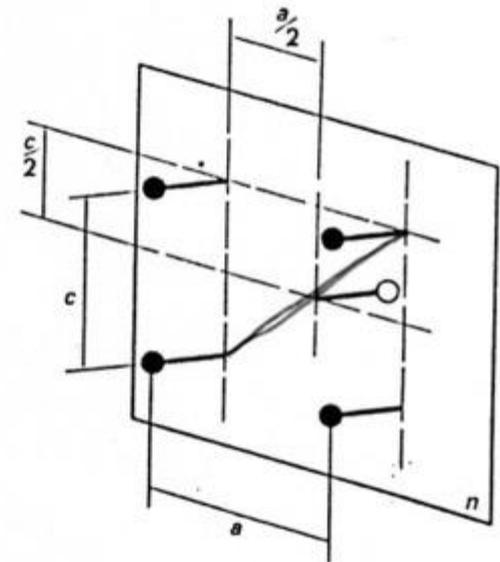
SLITTOPIANI



a)



b)



c)

Il numero delle combinazioni possibili dei diversi elementi di simmetria **NON E' ILLIMITATO**. In base al grado di simmetria i cristalli vengono ordinati in:

3 gruppi cristallini

7 sistemi cristallini

32 classi cristalline o gruppi puntuali di simmetria

14 reticoli Bravaisiani

230 gruppi spaziali

I 230 Gruppi Spaziali

Rappresentano le possibili associazioni coerenti di operatori di simmetria, capaci di portare in coincidenza un atomo con altri ad esso equivalenti, formanti un insieme ordinato, omogeneo, periodico, anisotropo, quale è un cristallo dal punto di vista della sua struttura.

Nei gruppi spaziali, oltre alle operazioni di rotazione e riflessione, troviamo elicogire, slittopiani e i tipi di reticolo.

Mentre nelle 32 Classi cristalline (o puntuali) gli operatori di simmetria passano tutti per un punto, nei gruppi spaziali sono distribuiti nella cella elementare.

CLASSI	SIMBOLO DELLE CLASSI	SIMBOLI DEI GRUPPI SPAZIALI SECONDO LA NOTAZIONE INTERNAZIONALE
Triclina pediale	1	P1
Triclina pinacoidale	$\bar{1}$	P $\bar{1}$
Monoclina sfenoidica	2	P2, P2 ₁ , C2
Monoclina domatica	m	Pm, Pc, Cm, Cc
Monoclina prismatica	$\frac{2}{m}$	P $\frac{2}{m}$, P $\frac{2}{m}$, C $\frac{2}{m}$, P $\frac{2}{c}$, P $\frac{2}{c}$, C $\frac{2}{c}$
Rombica bisfenoidica	222	P222, P22 ₂ , P2 ₂ 2, P2 ₂ 2, C222, C222, P222, I222, I2 ₂ 2,
Rombica piramidale	mm2	Pmm2, Pmc2 ₁ , Pcc2, Pma2, Pca2 ₁ , Pnc2, Pmn2 ₁ , Pba2, Pna2 ₁ , Pnn2, Cmm2, Cmc2 ₁ , Ccc2, Amm2, Abm2, Ama2, Aba2, Fmm2, Fdd2, Imm2, Iba2, Ima2
Rombica bipiramidale	mmm	Pmmm, Pnmn, Pccm, Pban, Pnma, Pnaa, Pmna, Pcca, Pbam, Pbcm, Pnmm, Pmna, Pbcn, Pbca, Pama, Cmcm, Cmca, Cmmm, Cccm, Cmna, Ccca, Fmmm, Fddd, Immm, Ibam, Ibcn, Imma
Tetragonale piramidale	4	P4, P4 ₁ , P4 ₂ , P4 ₃ , I4, I4 ₁
Tetragonale bisfenoidica	$\bar{4}$	P $\bar{4}$, I $\bar{4}$
Tetragonale bipiramidale	$\frac{4}{m}$	P $\frac{4}{m}$, P $\frac{4}{m}$, P $\frac{4}{n}$, P $\frac{4}{n}$, I $\frac{4}{m}$, I $\frac{4}{n}$
Tetragonale trapezoedrica	422	P422, P42 ₂ , P4 ₁ 22, P4 ₂ 2, P4 ₁ 22, P4 ₂ 2, P4 ₂ 2, P4 ₂ 2,
Ditetragonale piramidale	4mm	P4mm, P4bm, P4 ₂ cm, P4 ₂ nm, P4 ₂ cc, P4 ₂ nc, P4 ₂ mc, P4 ₂ bc, I4mm, I4cm, I4 ₂ md, I4 ₂ cd
Tetragonale scalenoedrica	$\bar{4}2m$	P $\bar{4}2m$, P $\bar{4}2c$, P $\bar{4}2_1m$, P $\bar{4}2_1c$, P $\bar{4}2m2$, P $\bar{4}2c2$, P $\bar{4}2_12$, P $\bar{4}2_1n2$, I $\bar{4}2m2$, I $\bar{4}2c2$, I $\bar{4}2m$, I $\bar{4}2d$
Ditetragonale bipiramidale	$\frac{4}{m}mm$	P $\frac{4}{m}mm$, P $\frac{4}{m}cc$, P $\frac{4}{n}bm$, P $\frac{4}{n}nc$, P $\frac{4}{m}bm$, P $\frac{4}{m}nc$, P $\frac{4}{n}mm$, P $\frac{4}{n}cc$, P $\frac{4}{m}mc$, P $\frac{4}{m}cm$, P $\frac{4}{n}bc$, P $\frac{4}{n}nm$, P $\frac{4}{m}bc$, P $\frac{4}{m}nm$, P $\frac{4}{n}mc$, P $\frac{4}{n}cm$, I $\frac{4}{m}mm$, I $\frac{4}{m}cm$, I $\frac{4}{n}md$, I $\frac{4}{n}cd$
Trigonale piramidale	3	P3, P3 ₁ , P3 ₂ , R3
Trigonale romboedrica	$\bar{3}$	P $\bar{3}$, R $\bar{3}$
Trigonale trapezoedrica	32	P312, P321, P3 ₁ 2, P3 ₂ 1, P3 ₁ 2, P3 ₂ 1, R32
Ditrigonale piramidale	3m	P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c
Ditrigonale scalenoedrica	3m	P31m, P31c, P3m1, P3c1, R3m, R3c
Esagonale piramidale	6	P6, P6 ₁ , P6 ₂ , P6 ₃ , P6 ₄ , P6 ₅
Trigonale bipiramidale	$\bar{6}$	P $\bar{6}$
Esagonale bipiramidale	$\frac{6}{m}$	P $\frac{6}{m}$, P $\frac{6}{m}$
Esagonale trapezoedrica	622	P622, P6 ₂ 2, P6 ₃ 2, P6 ₄ 2, P6 ₅ 2, P6 ₆ 2
Diesagonale piramidale	6mm	P6mm, P6cc, P6 ₂ cm, P6 ₂ mc
Ditrigonale bipiramidale	6m2	P6m2, P6c2, P62m, P62c
Diesagonale bipiramidale	$\frac{6}{m}mm$	P $\frac{6}{m}mm$, P $\frac{6}{m}cc$, P $\frac{6}{m}cm$, P $\frac{6}{m}mc$
Tetraedricapentagonododecaedrica	23	P23, F23, I23, P2 ₁ 3, I2 ₁ 3
Diacisdodecaedrica	m3	Pm3, Pn3, Fm3, Fd3, Im3, Pa3, Ia3
Pentagonoicositetraedrica	432	P432, P4 ₂ 32, F432, F4 ₂ 32, I432, P4 ₃ 32, P4 ₂ 32, I4 ₃ 32
Esacistetraedrica	$\bar{4}3m$	P $\bar{4}3m$, F43m, I43m, P43n, F43c, I43d
Esaciottaedrica	m3m	Pm3m, Pn3n, Pm3n, Pa3m, Fm3m, Fm3c, Fd3m, Fd3c, Im3m, Ia3d

Gruppi spaziali “preferiti” rispetto ad altri dai cristalli. Sono circa 40 i gruppi spaziali mai riscontrati nei cristalli studiati.

P $\frac{2_1}{c}$	9 %		
F $m3m$	8 %		
P nma	5 %	R $\bar{3}m$	3 %
P $2_12_12_1$	4 %	P $m3m$	3 %
P $\frac{6}{m}mc$	4 %	Altri (220)	54 %
F $d3m$	4 %		<hr/> 100 %
P 2_1	3 %		
C $\frac{2}{c}$	3 %		



Acquamarina