CRISTALOGRAFIE:

C3: SISTEME CRISTALOGRAFICE

Conf. Dr. Mihai V. PUTZ

Chemistry Department, West University of Timisoara,
Pestalozzi Street No.16, Timisoara, RO-300115, Romania;
E-mails: mvputz@cbg.uvt.ro or mv_putz@yahoo.com ;
Web: http://www.mvputz.iqstorm.ro

Member of American Chemical Society
Member of European Society of Mathematical Chemistry

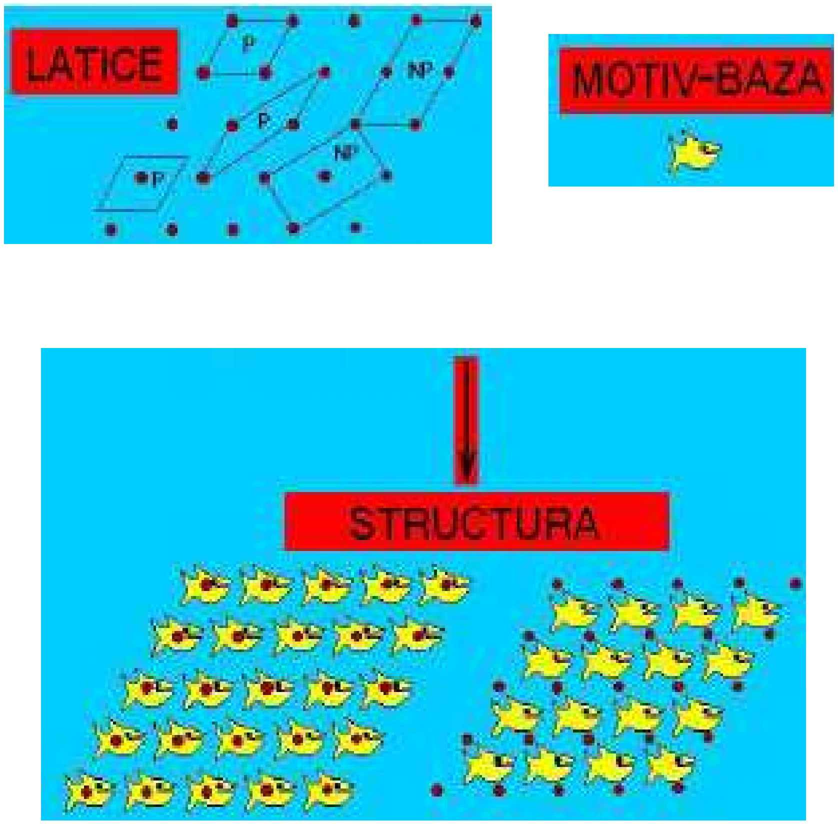
Editor in-Chief of Int. J. Chem. Model. (at NOVA Publishers)
Editor in-Chief of Int. J. Environ. Sci. (at SERIALS Publishers)
Guest Editor & Editor of Int. J. Mol. Sci. (at MDPI Organization)

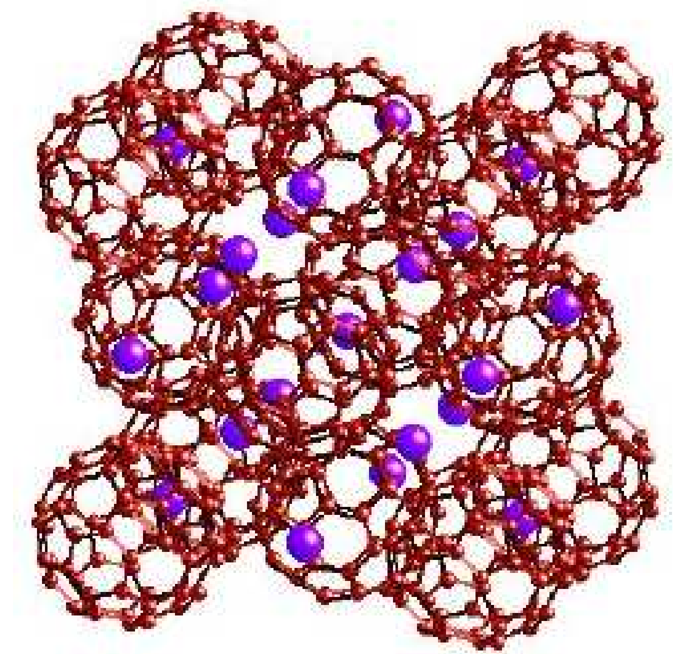
WEST UNIVERSITY OF TIMIŞOARA

WEST UNIVERSITY OF TIMISOARA
FACULTY OF
CHEMISTRY-BIOLOGY-GEOGRAPHY

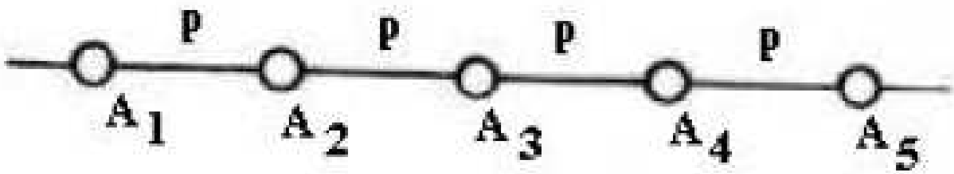
LABORATORY OF COMPUTATIONAL AND STRUCTURAL PHYSICAL CHEMISTRY

Rețele Matematice de Puncte. Cristale Ideale

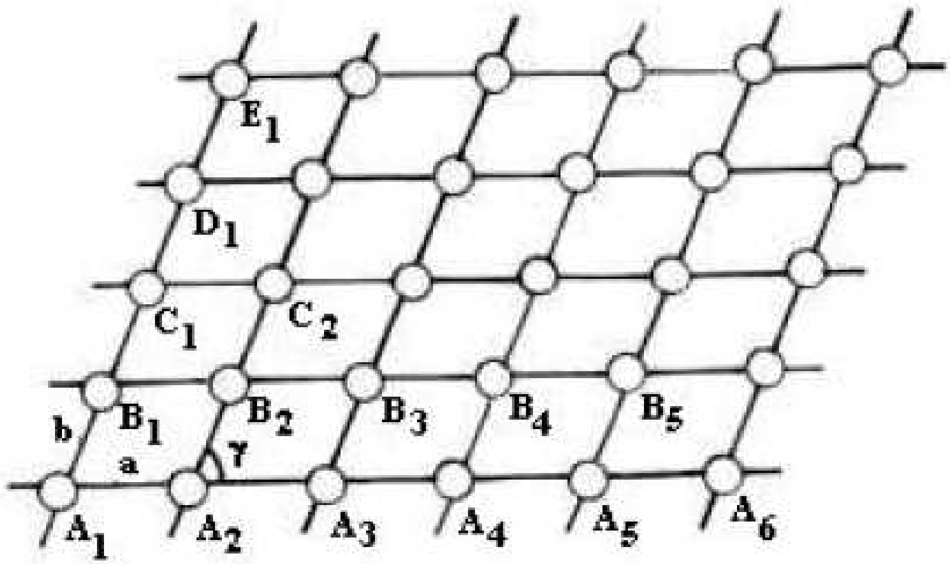




Rețele Matematice de Puncte. Cristale Ideale

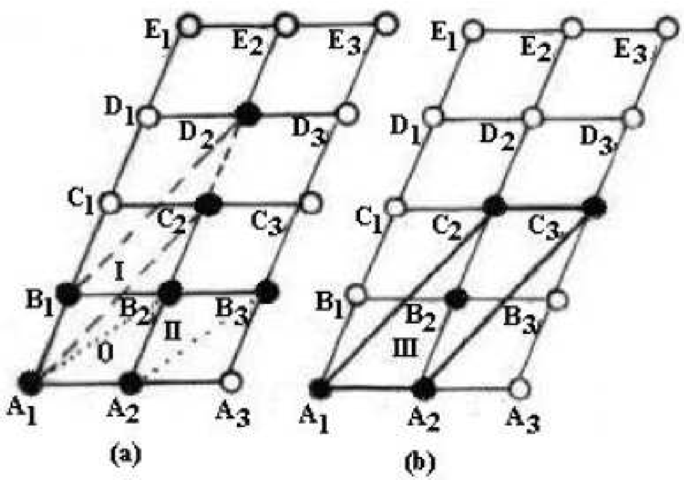


Rețea liniară de puncte, cu p - parametrul şirului reticular.

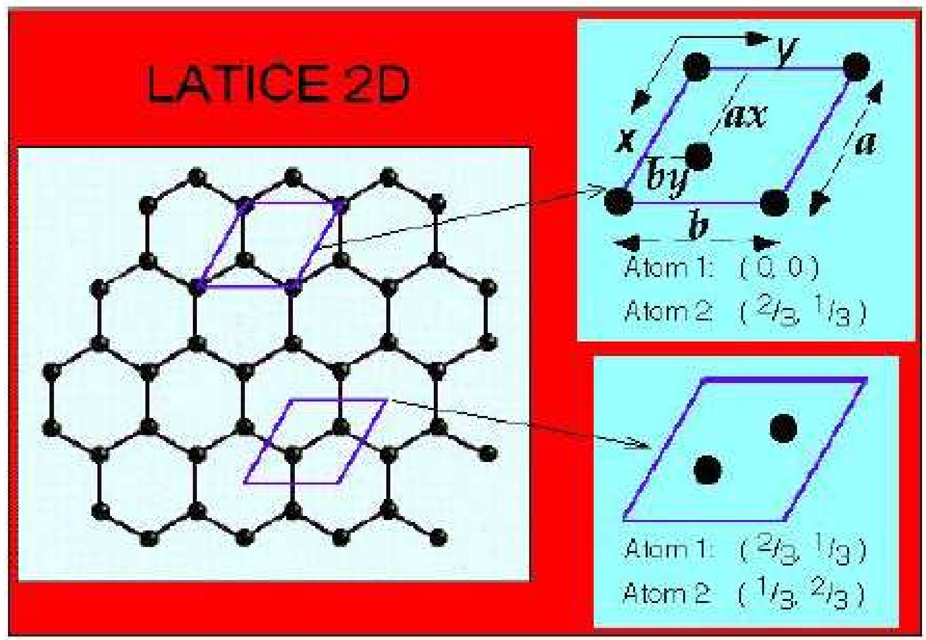


Rețea planară de puncte, cu (a, b şi γ) - parametrii laticei.

Rețea plană de puncte, cu șiruri reticulare (A_1, A_2, A_3, ...), (B_1, B_2, B_3, ...), ...



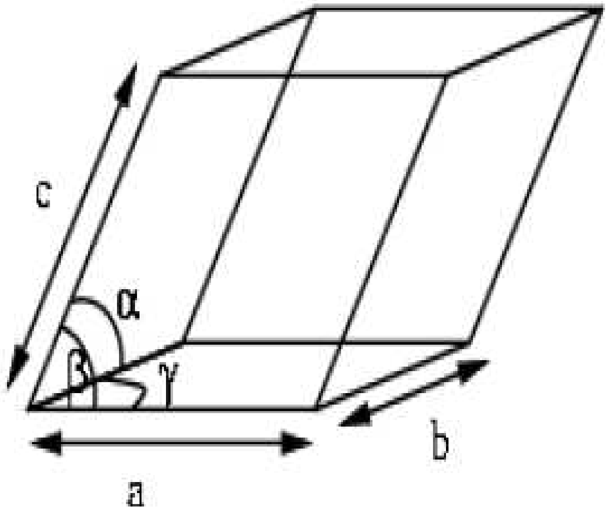
punct efectiv (sau puncte efective)



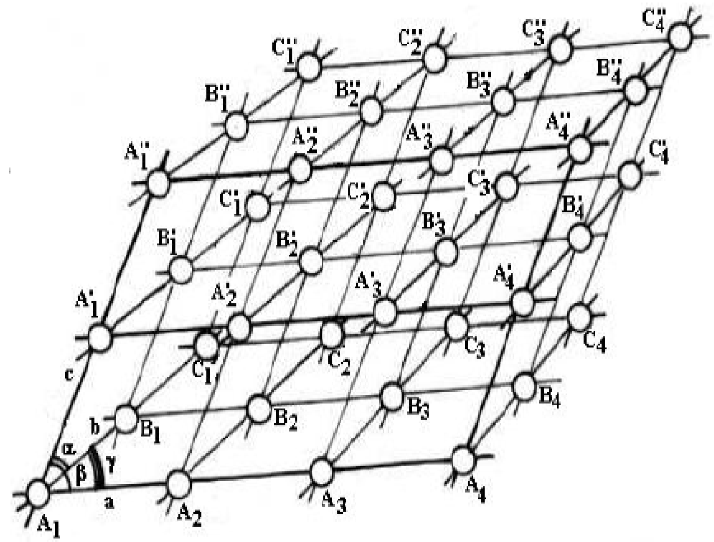
Laticea 2D pentru structura de grafit

Așadar, în judecarea unei celule elementare sau a unei primitive trebuie să se țină seama de două aspecte corelate: nu poate admite axe de simetrie la rotație altele decât cele de ordinele 1, 2, 3, 4 și 6, aspect demonstrat în precedentul capitol, dar, în același timp trebuie să fie capabilă să genereze întreaga latice (și prin urmare și structura) cristalină doar prin translații succesive (periodice).

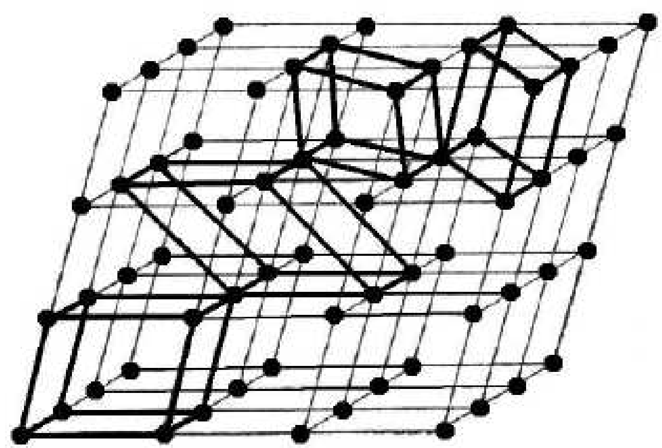
Celula unitate paralelipipedică



și rețeaua spațială ce o generează



Forme diferite ale unor celule unitate tridimensionale ne-primitive.



Totuşi, clasificarea cristalografică a sistemelor de puncte reticulare presupune asumarea câtorva definiţii de bază.

Astfel, se va întelege prin direcție unică o direcție particulară sau, mai precis, o direcție singulară. Prin nici unul dintre elementele de simetrie ale unui poliedru cristalin direcția singulară nu poate fi repetată.

Prin direcţii echivalente sau directii de simetrie echivalente se va înțelege direcţiile confundabile, care se pot obține una din alta printr-o operație de simetrie în raport cu un element de simetrie al poliedrului. De exemplu, axele A^4 ale cubului se transformă una în alta prin reflexia faţă de un plan diagonal.

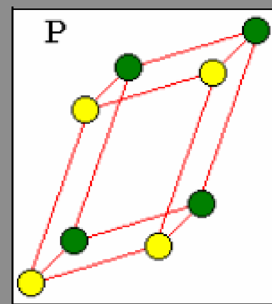
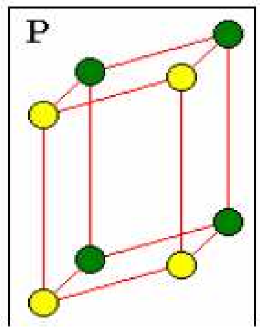
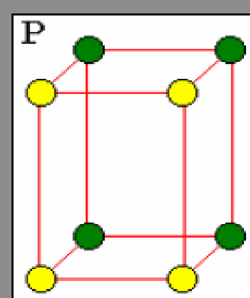
Numărul de direcţii singulare şi axele de simetrie definesc *categoriile cristaline*.

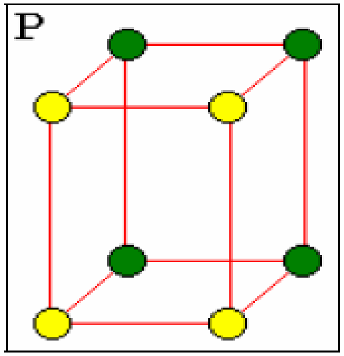
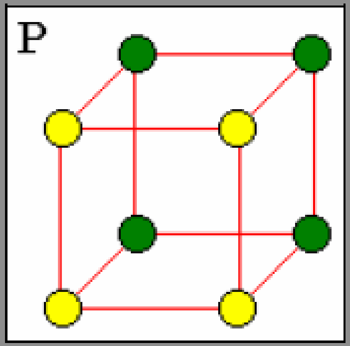
Categoria superioară nu are direcţii singulare şi posedă mai multe axe de simetrie de ordin superior, cazul cubului.

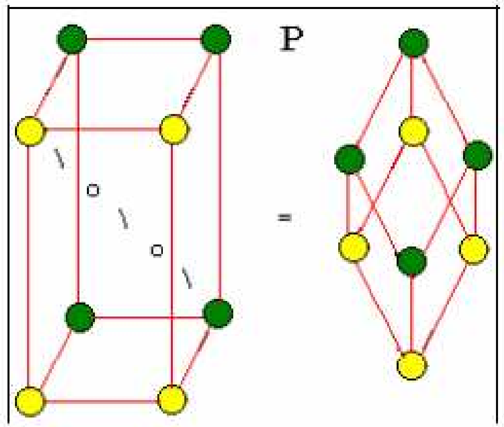
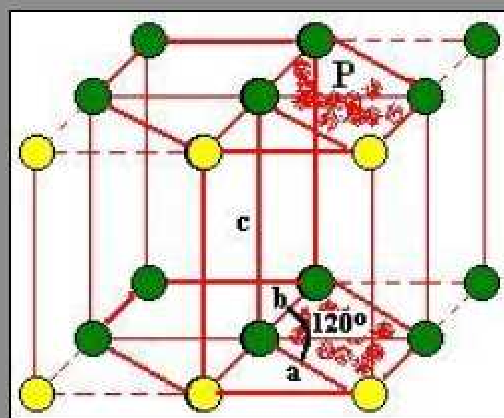
Categoria medie este caracterizată prin existenţa unei singure direcţii particulare, o axa de simetrie de tipul A^3, A^4, sau A^6, corespunzător prismei trigonale, tetragonale sau hexagonale, respectiv.

Categoria inferioară conţine mai multe direcţii singulare şi axe de ordinul 2, cazul prismei rombice.

Sistemele cristaline şi descrierea lor.

Sistemul Cristalografic	Geometria Celulei Primitive	Clasa de Simetrie. Comentarii
Triclinic **a≠b≠c,** **α≠β≠γ**		$\underline{A^1}$ Poliedrul posedă o infinitate de axe de ordinul întâi (monogire). Este paralelipipedul total asimetric. Singura operaţie pe care o admite este identitatea.
Monoclinic **a≠b≠c,** **α=γ=π/2,** **β≠π/2; 2π/3**		$\underline{A^2PC}$ Digira (A^2) este paralelă cu axa oy (b), iar planul de reflexie (P) este paralel cu axa 0z trecând prin centrul de inversie.
Ortorombic **a≠b≠c,** **α=β=γ=π/2**		$\underline{3A^23PC}$ Cele trei digire străpung câte două feţe opuse ale paralelogramului. Intersecţia lor determină centrul de inversie iar planele de reflexie sunt, fiecare, perpendiculare pe o digiră.

Sistemul Cristalografic	Geometria Celulei Primitive	Clasa de Simetrie. Comentarii
Tetragonal **$a=b\neq c$,** **$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$**		<u>$A^4 4A^2 4P\Pi C$</u> Tetragira este perpendiculară pe planul bazelor, în centrul acestora (|| cu 0z). Digirele ies prin mijloacele muchiilor și fețelor laterale (plasate în planul x0y). Planul de reflexie orizontal (Π) este perpendicular pe tetragira A^4 iar planele de reflexie verticale, conțin, fiecare câte o giră.
Cubic **$a=b=c$,** **$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$**		<u>$3A^4 4A^3 6A^2 6P3\Pi C$</u> Tetragonalele trec prin centrele a două fețe opuse. Trigirele coincid cu diagonalele mari ale cubului. Digirele trec prin mijloacele muchiilor opuse a două fețe paralele.

Sistemul Cristalografic	Geometria Celulei Primitive	Clasa de Simetrie. Comentarii
Trigonal **a=b=c,** **$\alpha=\beta=\gamma\neq\pi/2$,** **$\alpha=\beta=\gamma<2\pi/3$**		<u>$A^3 3A^2 3PC$</u> Trigira este coincidentă cu diagonală mare a paralelipipedului primitiv.
Hexagonal **a=b≠c,** **$\alpha=\beta=\pi/2$,** **$\gamma=2\pi/3$**		<u>$A^6 6A^2 6P\Pi C$</u> Celula convențională e prisma dreaptă cu baza romb cu unghiul de 120^0, dar cu simetriile la nivelul prismei hexagonale: sexagira prin fețele centrate opuse, iar cele 6 digire trecând prin fețele și muchiile laterale opuse.

(1)	$a=b=c$;	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	CUBIC sau TESERAL
(2)	$a=b\neq c$;	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	PĂTRATIC sau TETRAGONAL
(3)	$a\neq b\neq c$;	$\alpha=\beta=\gamma=\pi/2$	ORTOROMBIC
(4)	$a=b=c$;	$\alpha=\beta=\gamma\neq\pi/2$	TRIGONAL sau ROMBOEDRIC
(5)	$a=b\neq c$;	$\alpha=\beta=\pi/2$; $\gamma=2\pi/3$	HEXAGONAL
(6)	$a\neq b\neq c$;	$\alpha=\gamma=\pi/2$; $\beta\neq\pi/2\wedge 2\pi/3$	MONOCLINIC
(7)	$a\neq b\neq c$;	$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq\pi/2$	TRICLINIC

După criteriul simetriei caracteristice şi al combinării dintre axele de simetrie, categoriile se împart în sisteme cristalografice.

Categoria superioară are un singur sistem - sistemul cubic.

Categoria medie cuprinde:

- sistemul trigonal sau rombic: o singură axă A^3;
- sistemul tetragonal: o singură axă A^4;
- sistemul hexagonal: o singură axă A^6.

Categoria inferioară se împarte în trei sisteme:

- sistemul ortorombic: mai multe axe de ordinul 2 sau mai multe plane de reflexie;
- sistemul monoclinic: o singură axă A^2, un singur plan de reflexie sau A^2P.
- sistemul triclinic: o infinitate de axe A^1.

Noţiunea de singonie coincide cu aceea de sistem pentru sistemul cubic, pentru cele din categoria inferioară şi pentru cel pătratic (tetragonal).

Noţiunile nu sunt coincidente în cazul sistemelor trigonal şi hexagonal. Cele două sisteme reprezintă o singură singonie deoarece cristalele din aceste sisteme pot fi descrise într-un singur sistem de coordonate, sistemul hexagonal.

Singonia reprezintă aşadar sistemul de coordonate care permite descrierea cristalelor cu o anumită simetrie.

Există prin urmare 7 sisteme cristalografice şi doar 6 singonii.

Pentru fiecare sistem cristalografic se poate identifica celula elementară primitivă – poliedrul care are doar colţurile ocupate cu particule, astfel încât celulei îi aparţine o singură particulă nodală (fiecare colţ fiind comun la 8 poliedri vecini în spaţiu, cota de apartenenţă a particulei la celulă este de 1/8).

Putem remarca faptul că, toţi poliedrii primitivi provin de la cubul deformat-poliedrul cu simetrie maximă.

Astfel, alungirea sau comprimarea cubului după direcţia 0z conduce la prisma pătratică.

Dacă prisma pătratică este alungită după una din direcţiile orizontale se obţie prisma ortorombică.

Prin "apăsarea" a două muchii opuse, paralele cu axa 0z ale prismei ortorombice obţinem poliedrul primitiv hexagonal atunci când $\gamma=2\pi/3$.

Prin "apăsarea" unei feţe z0y din prisma ortorombică se ajunge la prisma monoclinică.

"Presând" muchiile din două colţuri diagonal opuse ale cubului rezultă prisma trigonală şi, în sfârşit, prin deformarea totală a cubului se ajunge la cazul general al prismei triclinice.