

Εισαγωγή στην κρυσταλλογραφία

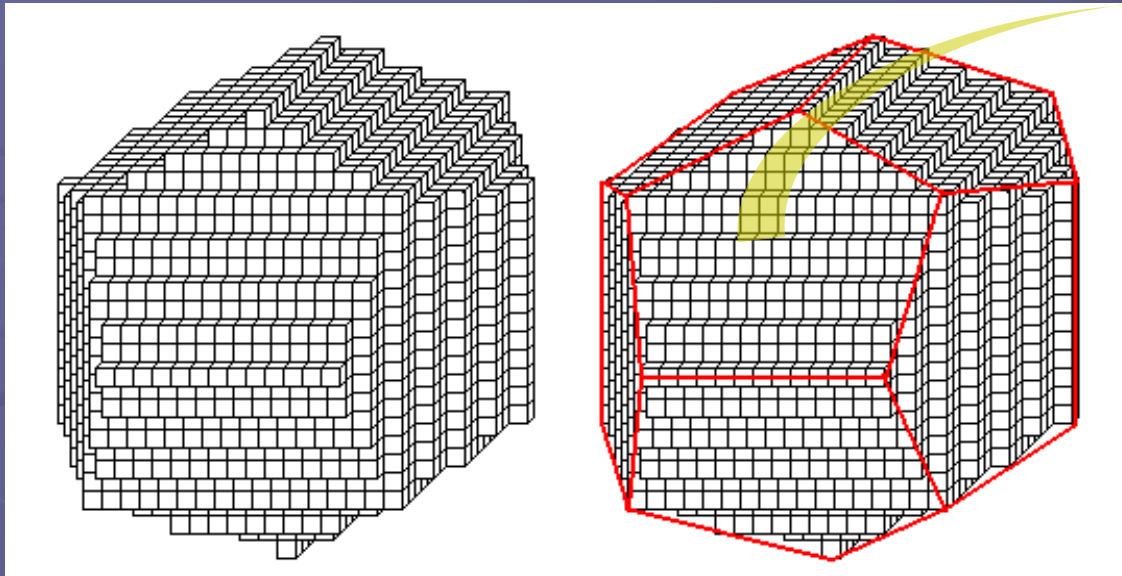
Συμμετρία και κρυσταλλικά συστήματα

Ηλίας Χατζηθεοδωρίδης
2003/2007/2011

Στην παρούσα διάλεξη τα περισσότερα
σχήματα έχουν σχεδιαστεί από τον συγγραφέα.
Οι φωτογραφίες είναι από το internet και
κάποια ασπρόμαυρα σχέδια ή πίνακες από το βιβλίο του
C. Klein, Mineral Science, 22nd Edition, Wiley.

Συμμετρία και τύποι συμμετρίας

Εσωτερική δομή των κρυστάλλων



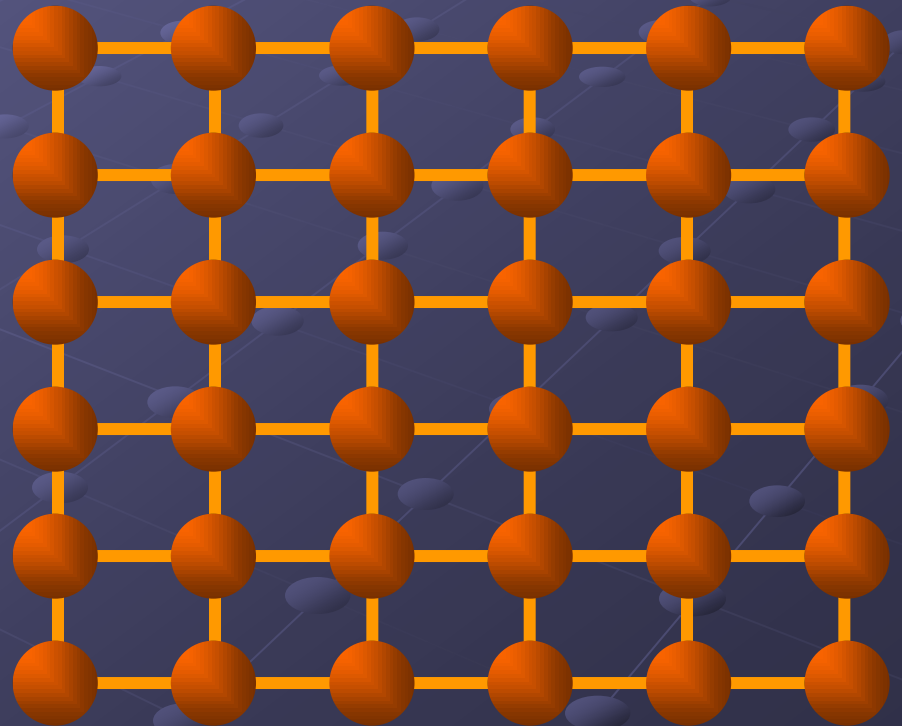
- Όπως είπε ο Haüy, υπάρχει μια **εσωτερική δομή** στους κρυστάλλους
- Σήμερα την δομή αυτή την καταλαβαίνουμε από την **περιοδική επανάληψη** στον χώρο μονάδων υλικού (π.χ. άτομα) που τις ονομάζουμε **κυψελίδες**
- Η επανάληψη των κυψελίδων στον χώρο καταλήγει στο **εξωτερικό σχήμα** των κρυστάλλων που βλέπουμε
- Οι επαναλαμβανόμενες μονάδες μπορεί να είναι:
 - Μόρια, όπως π.χ. το μόριο του νερού H_2O στον πάγο
 - Ανιόντα, όπως $(\text{CO}_3)^{2-}$, $(\text{SiO}_4)^{4-}$, $(\text{PO}_4)^{3-}$
 - Κατιόντα ή απλά άτομα, όπως Ca^{2+} , Mg^{2+} , Fe^{2+} , Fe^{3+}

Τι είναι συμμετρία;

Η συστηματική αναπαραγωγή
όμοιων χαρακτηριστικών στη **μία**,
στις **δύο** ή στις **τρεις διαστάσεις**
λέγεται πως έχει συμμετρία.

Παράδειγμα

Συμμετρία στις δύο
διαστάσεις με περιοδική
τοποθέτηση όμοιων
αντικειμένων (σφαιρών) σε
ίσες αποστάσεις μεταξύ
τους.



Αριθμητικό ανάλογο των πράξεων συμμετρίας

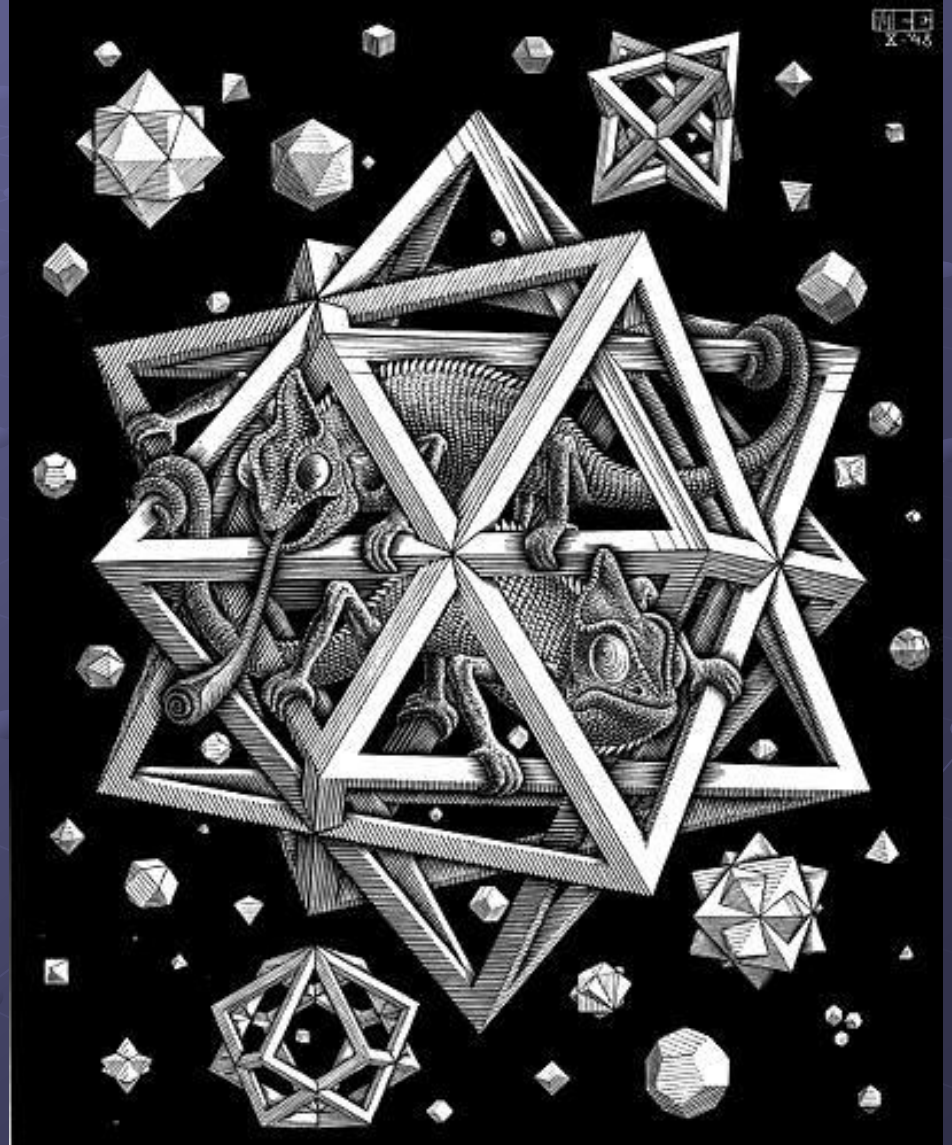
- Στην άλγεβρα έχουμε
 - $1=1 \rightarrow$ ισότητα ή ταυτότητα
 - $1+2 = 2+1 \rightarrow$ αντιμετάθεση όρων
- Επίσης με τις πράξεις της άλγεβρας μπορούμε να παράγουμε οποιονδήποτε αριθμό
 - Με την πρόσθεση με σύμβολο το $+$ $\rightarrow 1+1=2$, ή $1+1+1=3$, ή $1+2=3$
 - Με τον πολλαπλασιασμό με σύμβολο το $\times$ $\rightarrow 1\times 0=0$, ή $1\times 1=1$, ή ακόμη $2\times 2=4$ κτλ.
 - Υπάρχει επίσης και η πράξη της ισότητας που συμβολίζεται με το ίσον $=$
- Κάτι ανάλογο περιμένουμε και στην κρυσταλλογραφία αλλά με άλλες πράξεις που έχουν γεωμετρική έννοια, κυρίως στον χώρο

Συμμετρία στην τέχνη

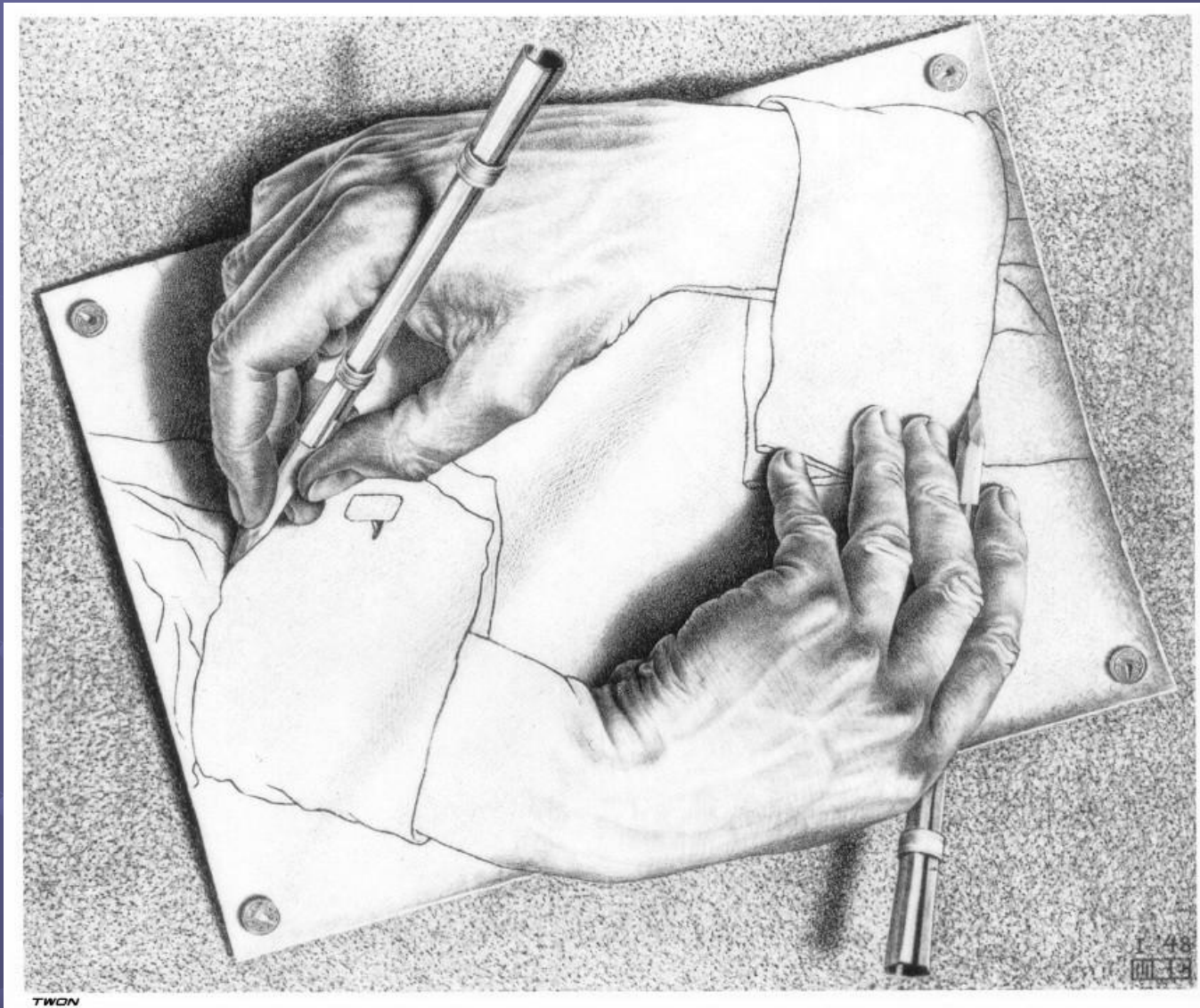


M.C. Escher

(1898-1972)

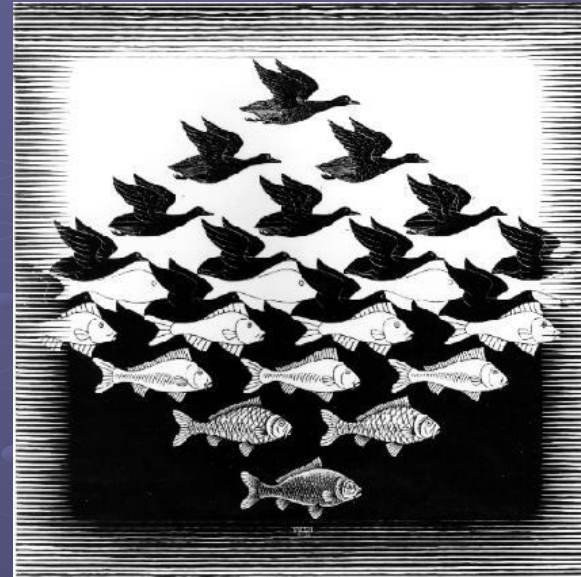
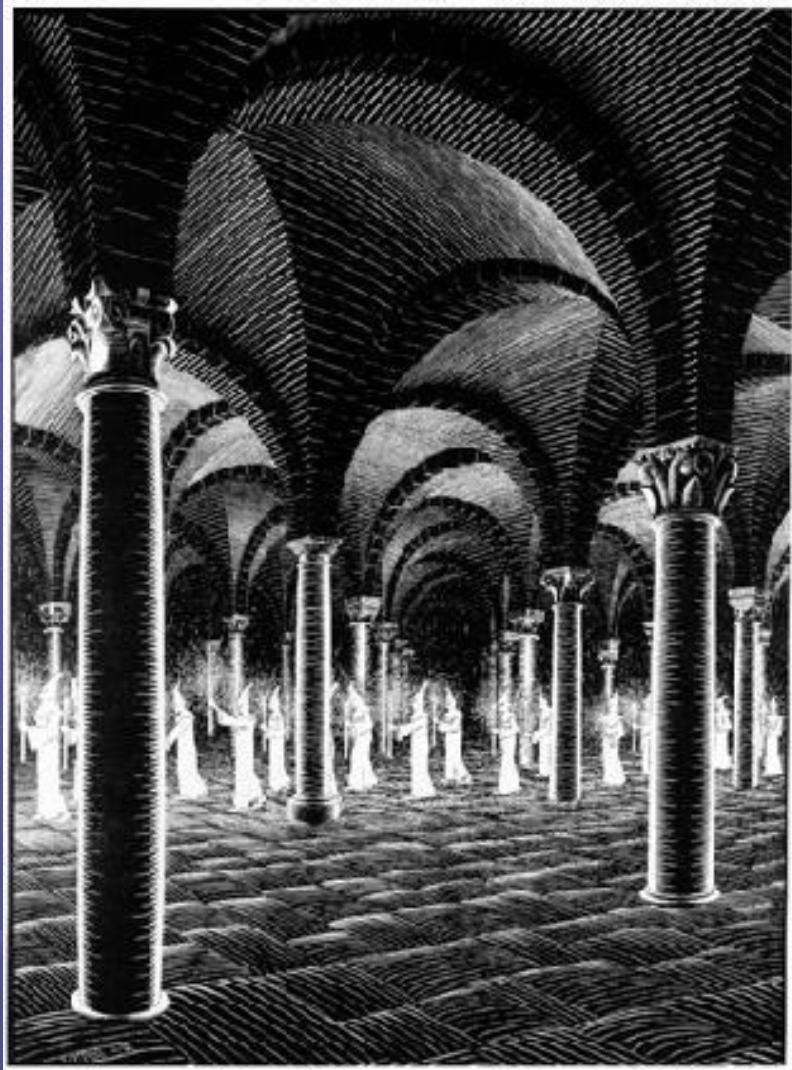


Έκφραση συμμετρίας στην τέχνη

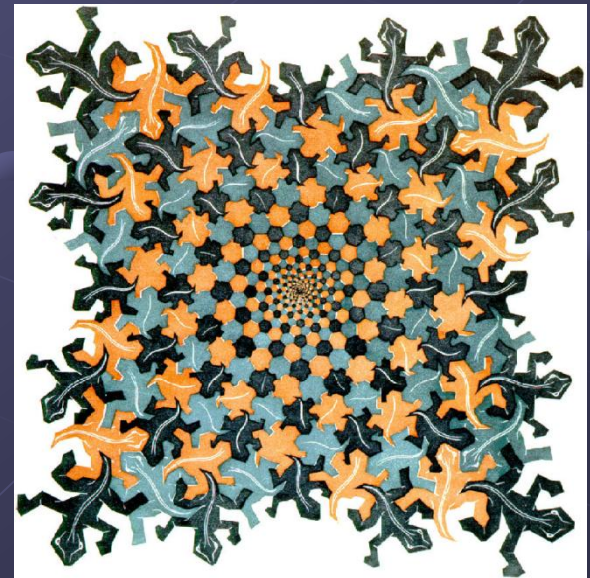


M.C. Escher

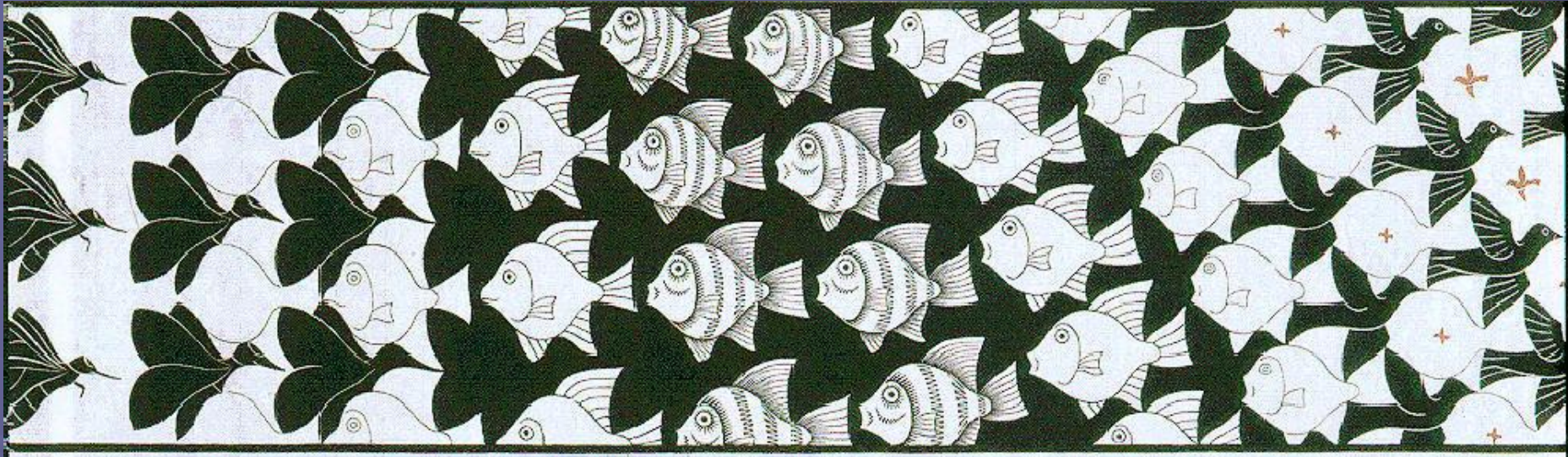
Εμβάθυνση της συμμετρίας στην τέχνη



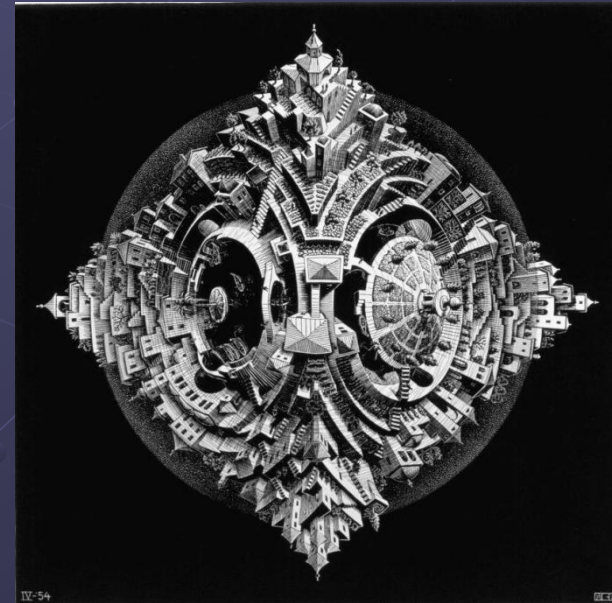
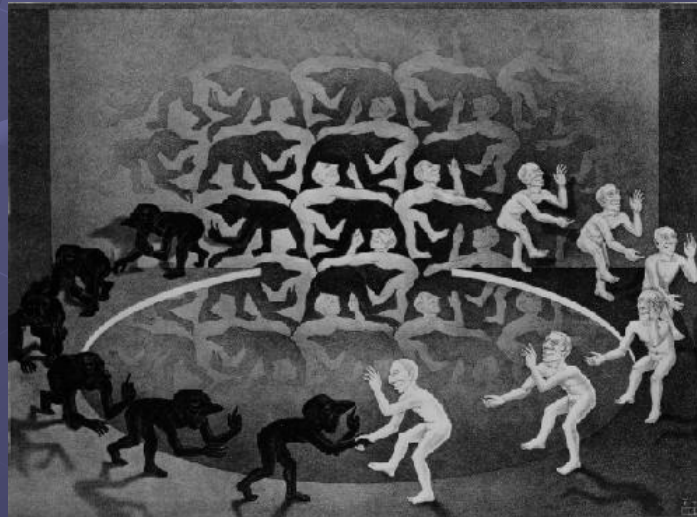
M.C. Escher



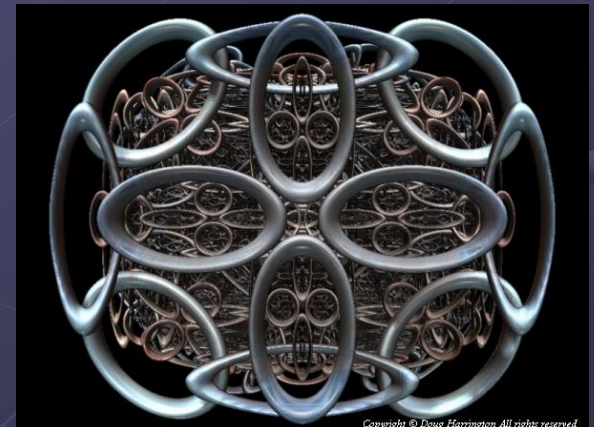
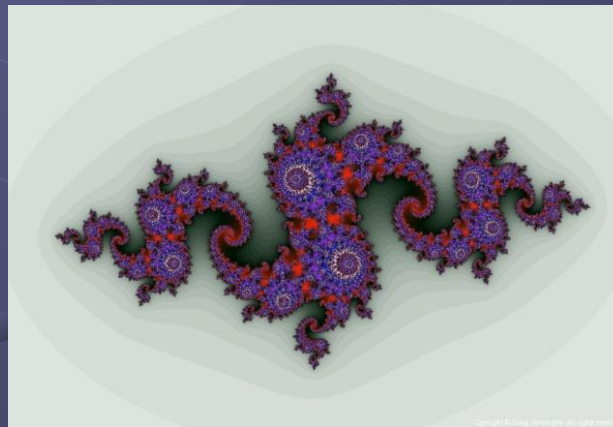
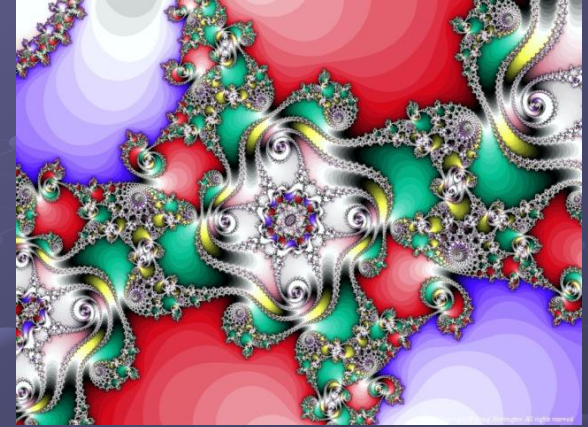
Περισσότερη συμμετρία στην τέχνη



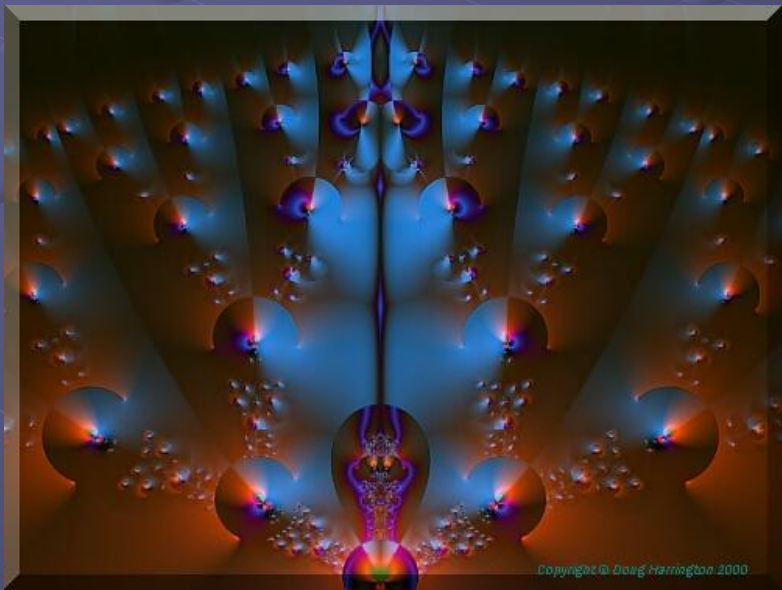
M.C. Escher



Συμμετρία με μαθηματικά (fractals)



Περισσότερη συμμετρία στα μαθηματικά



Περιγραφή των κρυστάλλων

- Από το εξωτερικό τους σχήμα
- Από την εσωτερική τους
συμμετρία

Εξωτερικό σχήμα κρυστάλλων

- 7 Συστήματα Κρυστάλλωσης
με βάση το σύστημα συντεταγμένων
- 32 μοναδιαίοι συνδυασμοί: Σημειο-ομάδες (point groups) ή Κρυσταλλικές τάξεις
με βάση τα στοιχεία συμμετρίας (άξονες, σημεία, επίπεδα) και τους συνδυασμούς αυτών (πράξεις) με μοναδιαίο αποτέλεσμα.

Τα επτά (7) συστήματα κρυστάλλωσης

Με βάση το σύστημα
συντεταγμένων

Κρυσταλλικές κλάσεις/συστήματα

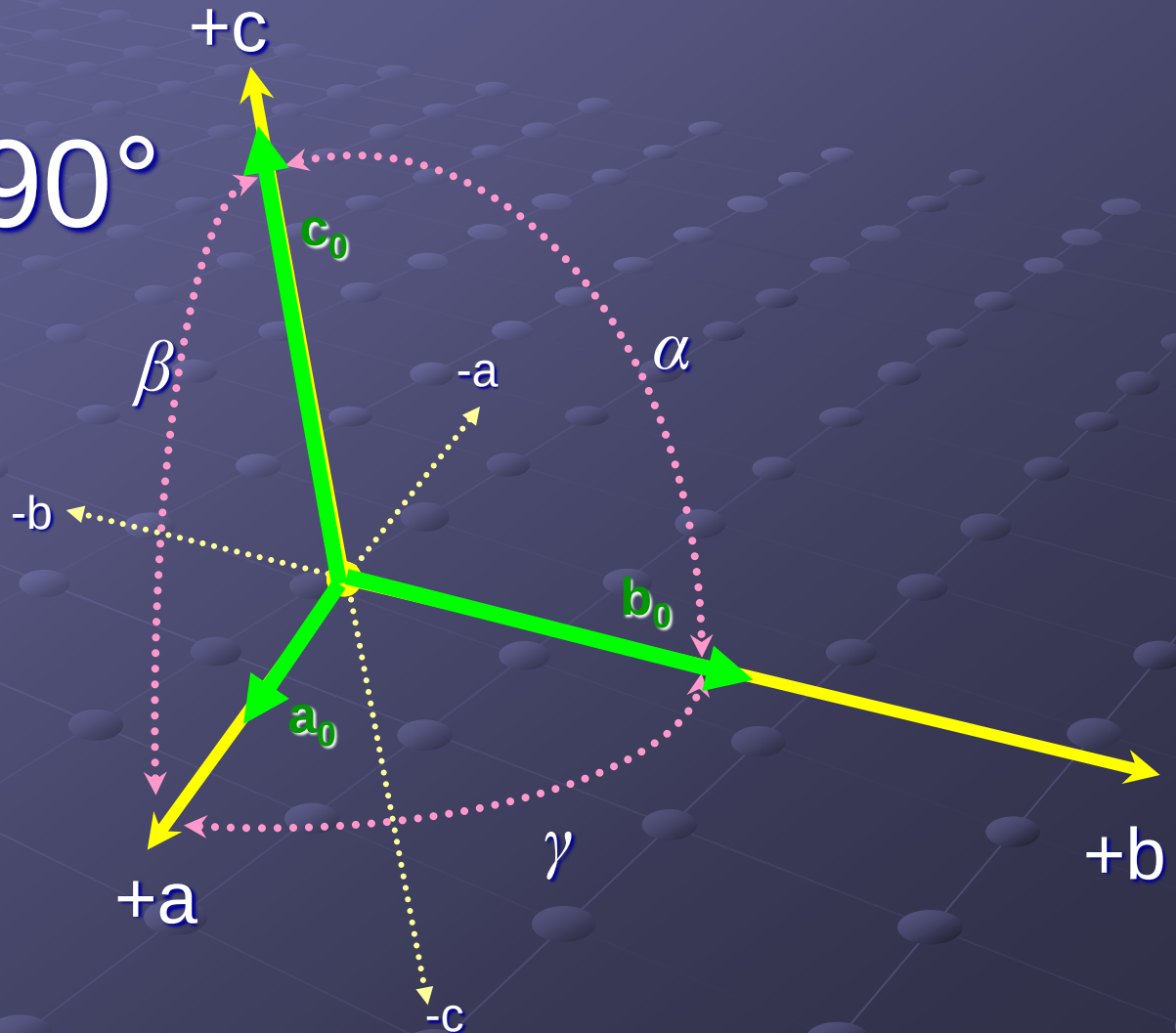
- Τρικλινές σύστημα
 - Μονοκλινές σύστημα
 - Ορθορομβικό σύστημα
 - Τετραγωνικό σύστημα
 - Εξαγωνικό σύστημα
 - Τριγωνικό σύστημα
 - Ισομερές κυβικό σύστημα
- Κατά την αμερικάνικη ταξινόμηση τα δύο συστήματα κατατάσσονται σαν υποσυστήματα του εξαγωνικού

7 κρυσταλλικά συστήματα $\Rightarrow$ 32 point groups

Τρικλινές σύστημα

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



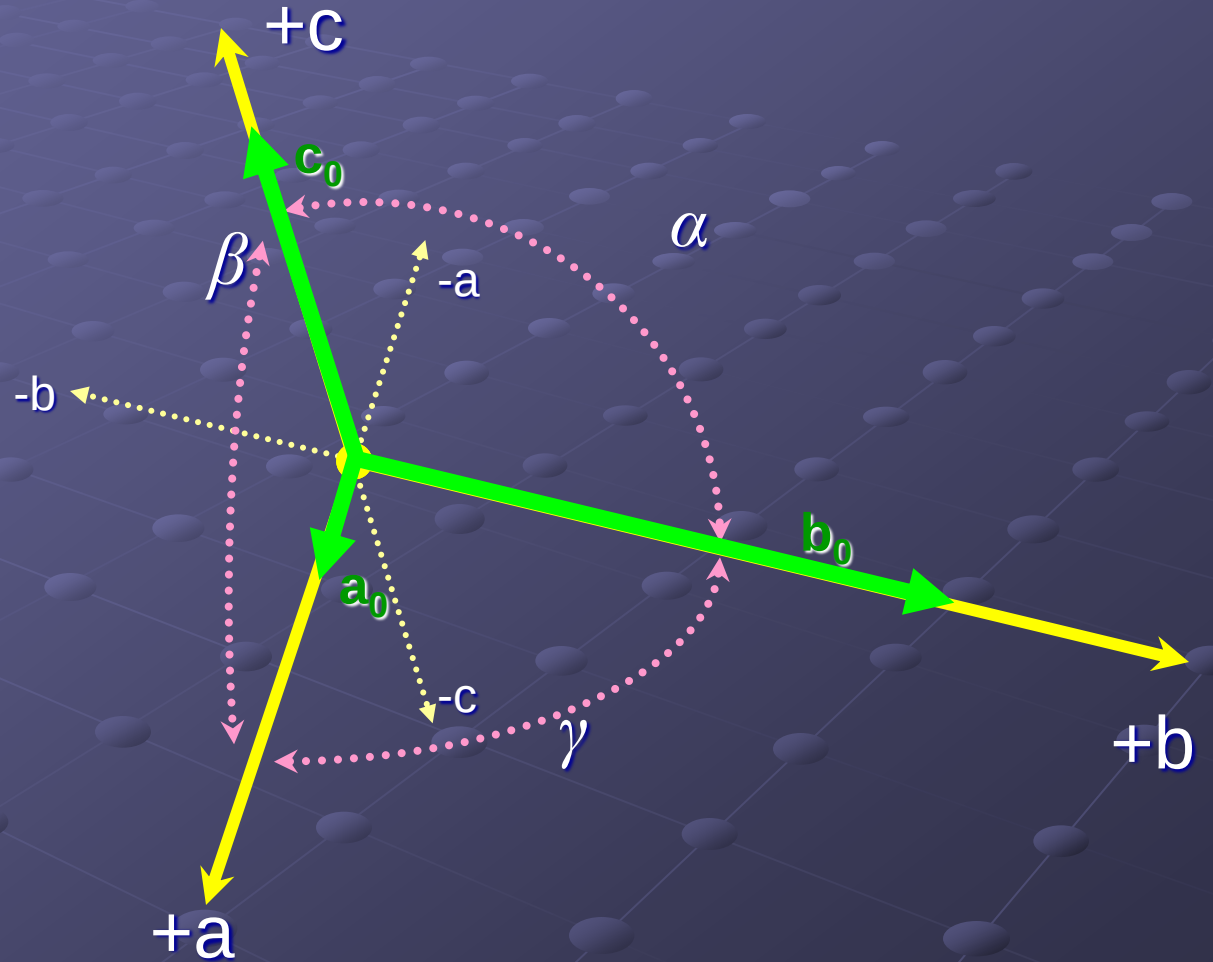
1 = Καμμία συμμετρία
1 = A_1

Μονοκλινές σύστημα

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

$$\beta \neq 90^\circ$$



$$2 = 1A_2$$

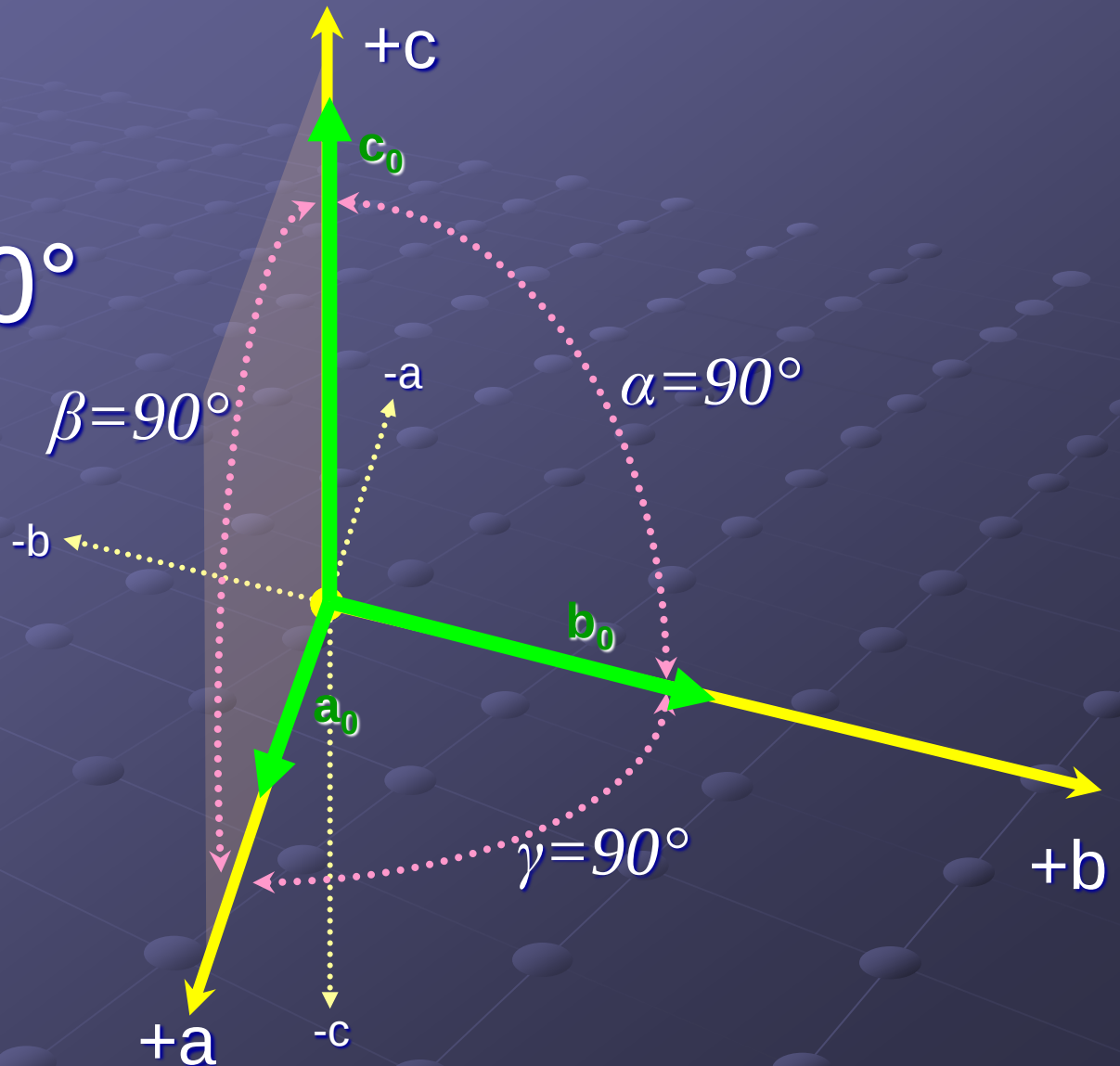
$$m=m$$

$$2/m = I, 1A_2, m$$

Ορθορομβικό σύστημα

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



$$222 = 3A_2$$

$$mm2 = 1A_2, 2m$$

$$2/m \ 2/m \ 2/m = I, 3A_2, 3m$$

Τετραγωνικό σύστημα

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$4 = 1A4$$

$$4- = 1A-4$$

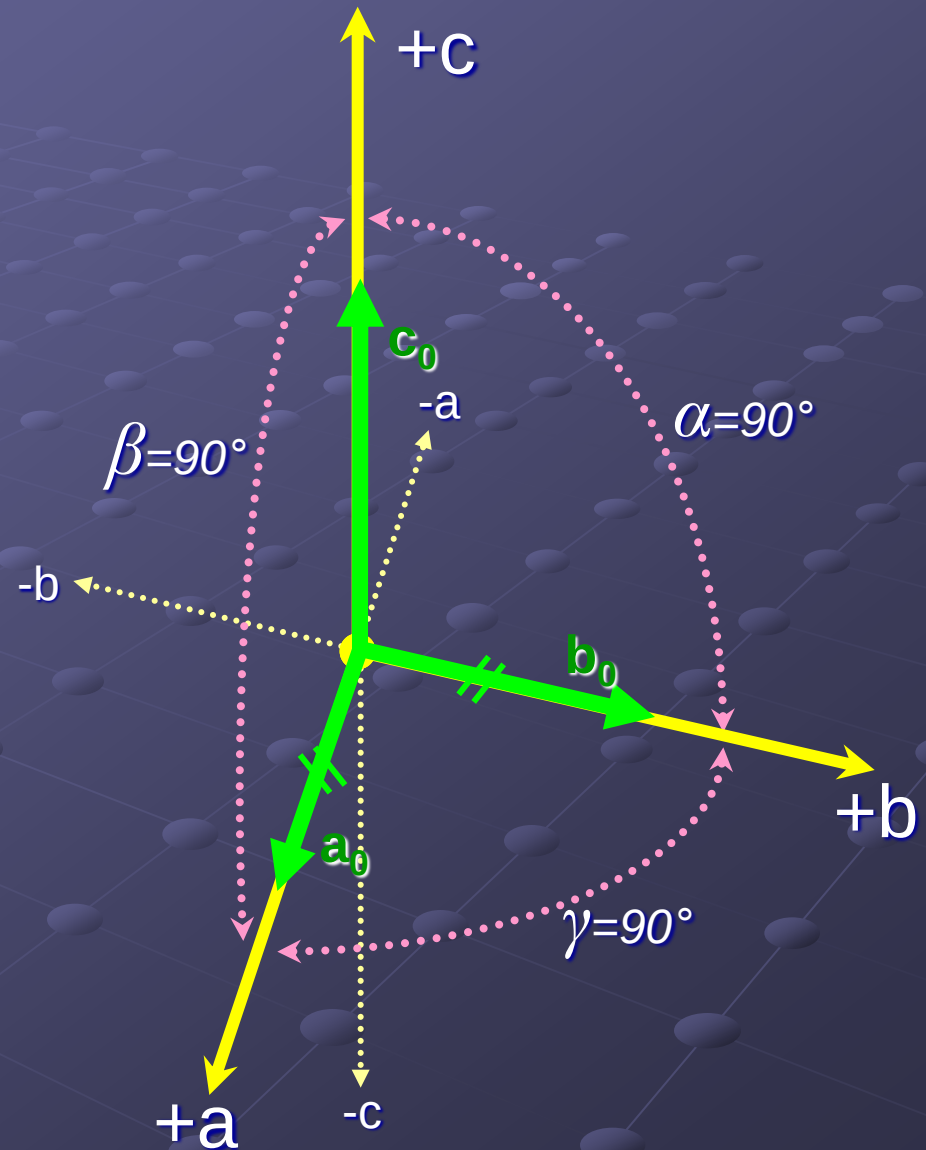
$$4/m = I, 1A4, m$$

$$422 = 1A4, 4A2$$

$$4mm = 1A4, 4m$$

$$4-2m = 1A-4, 2A2, 2m$$

$$4/m \ 2/m \ 2/m = I, 1A4, 4A2, 5m$$

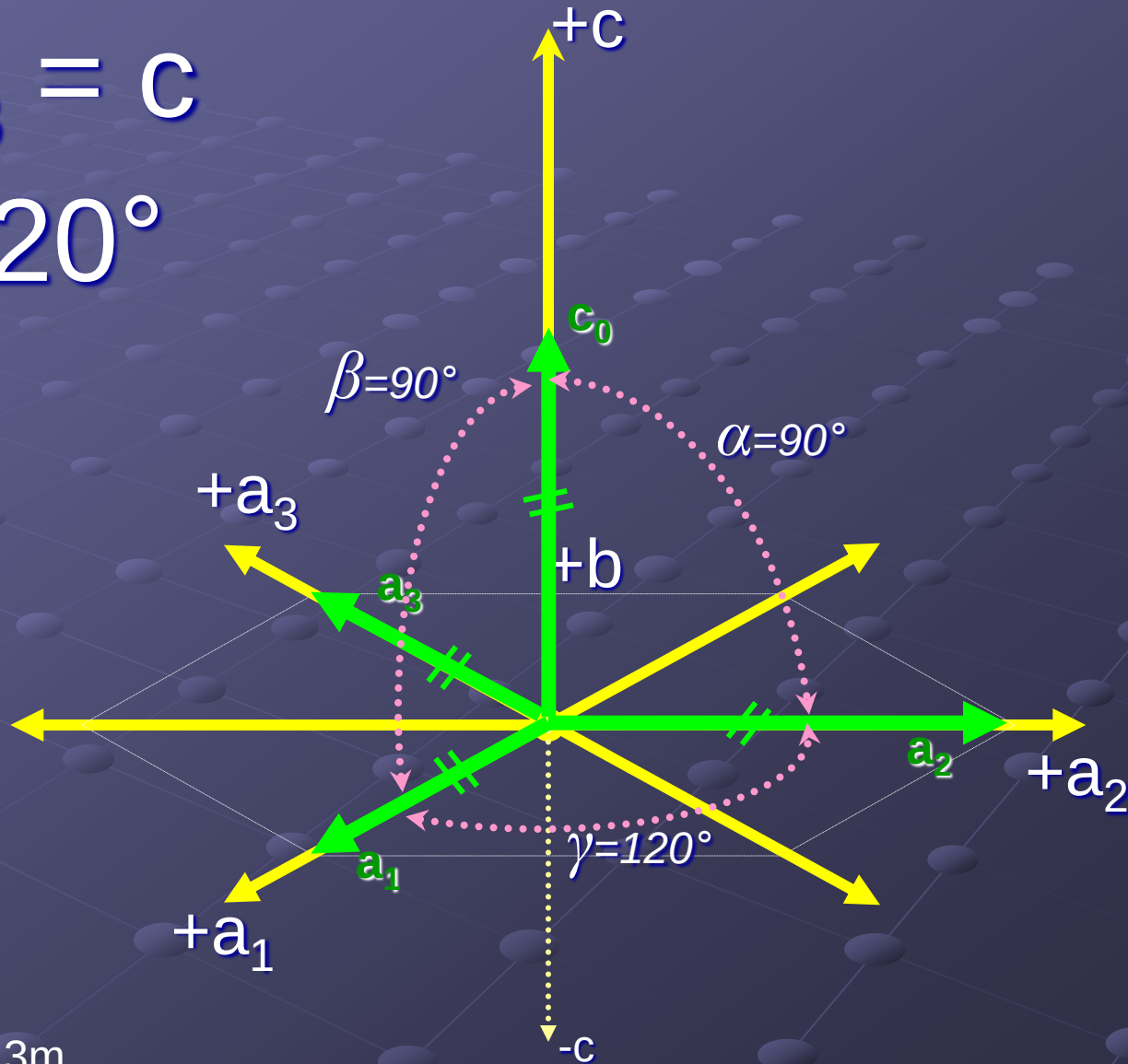


Τριγωνικό (ρομβοεδρικό) σύστημα

$$a_1 = a_2 = a_3 = c$$

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = 120^\circ$$

$$\beta = \alpha = 90^\circ$$



$$3 = 1A3$$

$$3^- = 1A-3 (i+1A3)$$

$$32 = 1A3, 3A2$$

$$3m = 1A3, 3m$$

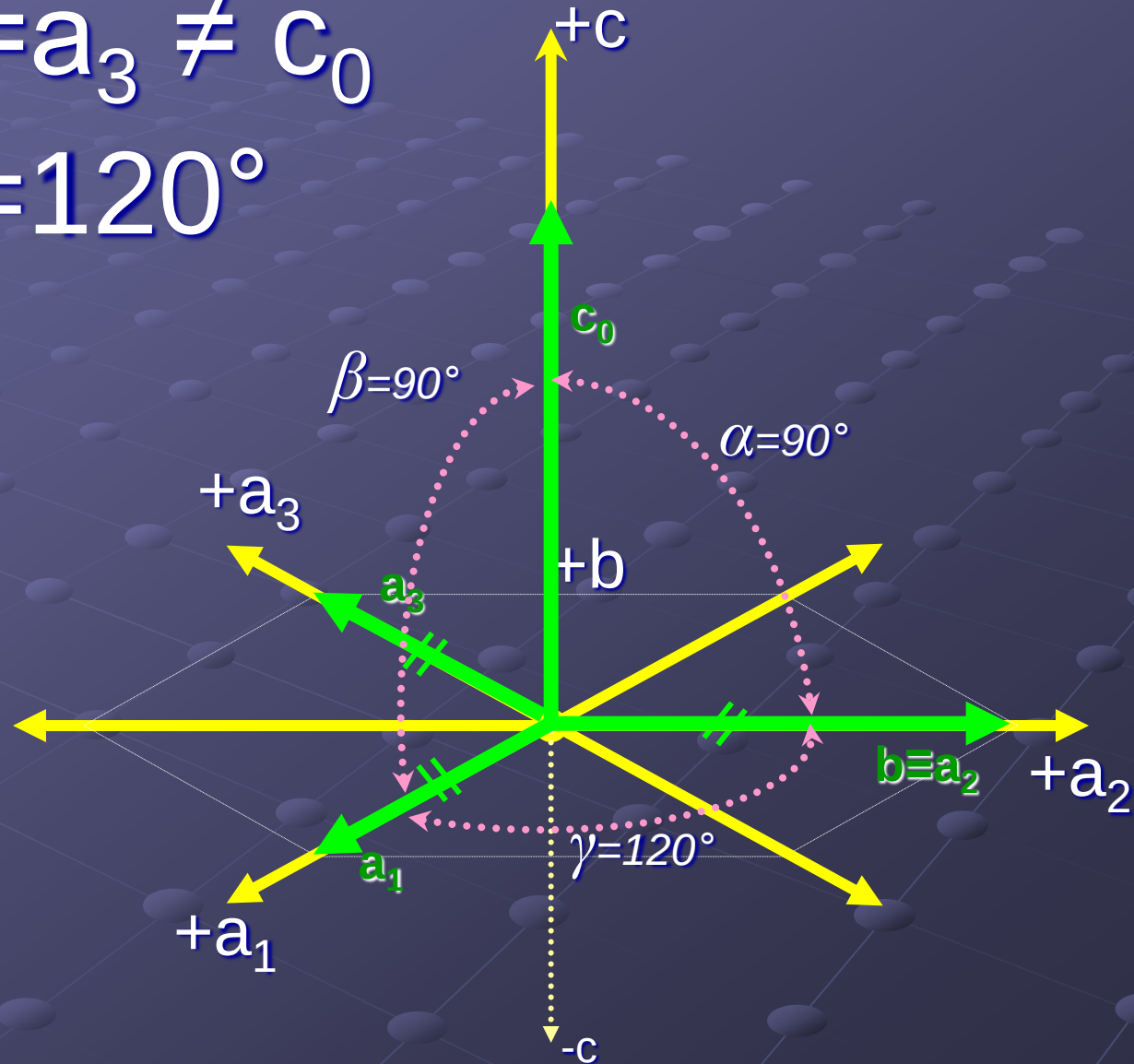
$$3-2/m = 1A-3 (=i+1A3), 3A2, 3m$$

Εξαγωνικό σύστημα

$$a_1 = (a_2 \equiv b) = a_3 \neq c_0$$

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = 120^\circ$$

$$\beta = \alpha = 90^\circ$$



$6 = 1A6$
 $6- = 1A-6 (=1A3 + m)$
 $6/m = I, 1A6, m$
 $622 = 1A6, 6A2$
 $6mm = 1A6, 6m$
 $6-m2 = 1A-6 (=1A3+m), 3A2, 3m$
 $6/m \ 2/m \ 2/m = I, 1A6, 6A2, 7m$

Κυβικό (ισομετρικό) σύστημα

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

$$6/m2/m2/m = i, 1A_6, 6A_2, 7m$$

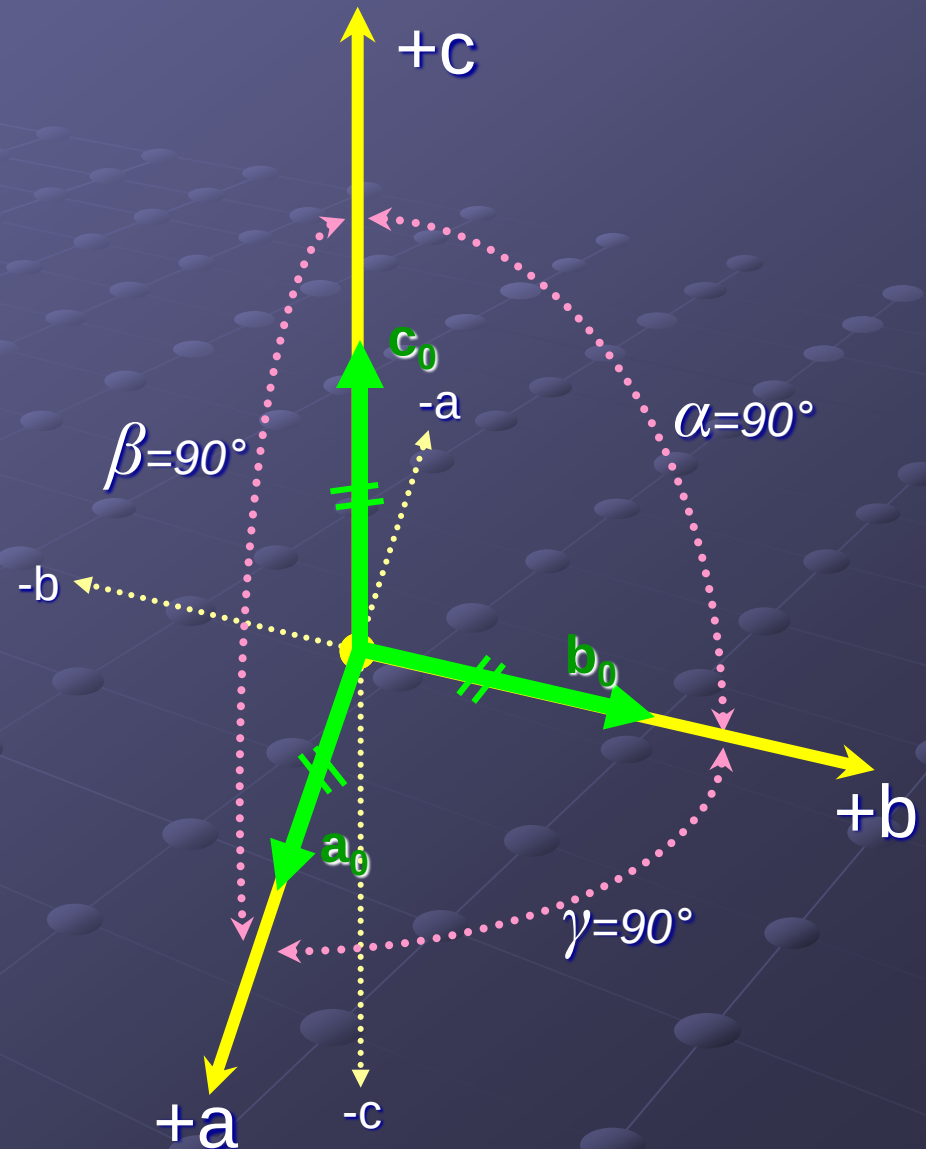
$$23 = 3A_2, 4A_3$$

$$2/m\bar{3} = 3A_2, 3m, 4\bar{A}_3$$

$$432 = 3A_4, 4A_3, 6A_2$$

$$\bar{4}3m = 3\bar{A}_4, 4A_3, 6m$$

$$4/m\bar{3}2/m = 3A_4, 4\bar{A}_3, 6A_2, 9m$$

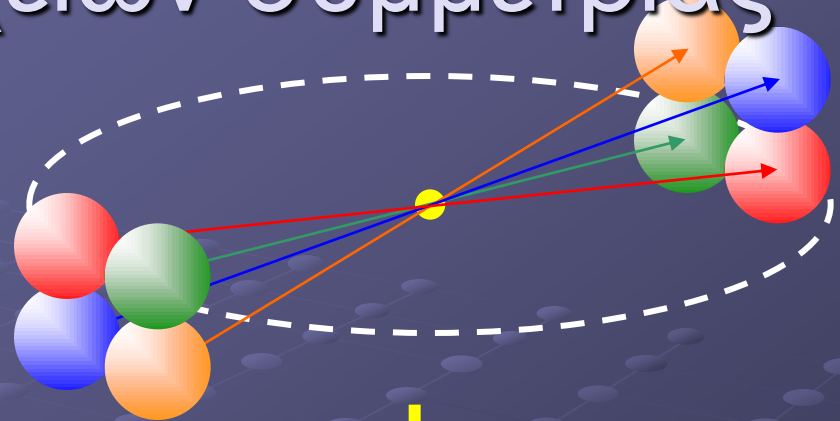




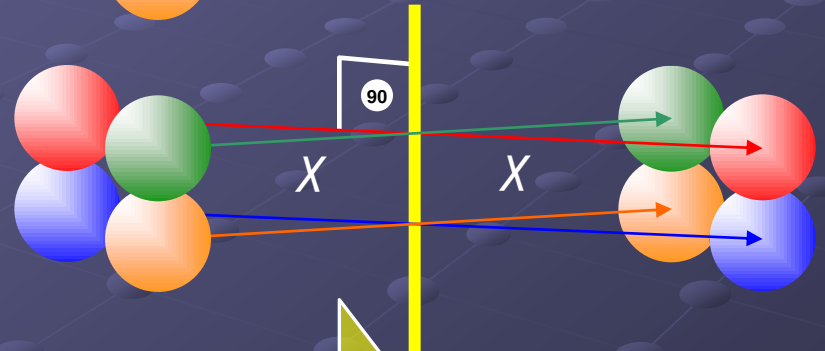
Στοιχεία συμμετρίας και Πράξεις συμμετρίας

Βασικοί τύποι στοιχείων συμμετρίας

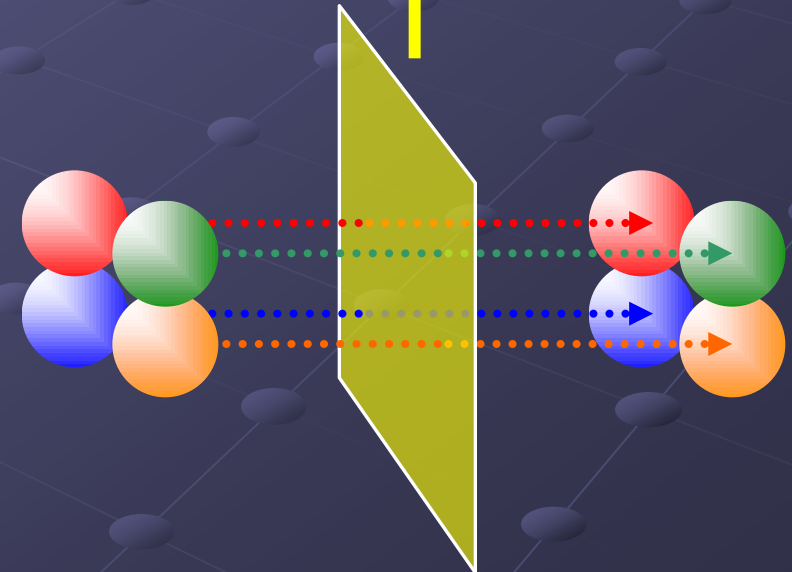
- Συμμετρία σε σχέση με ένα **σημείο**



- Συμμετρία σε σχέση με **ευθεία γραμμή**



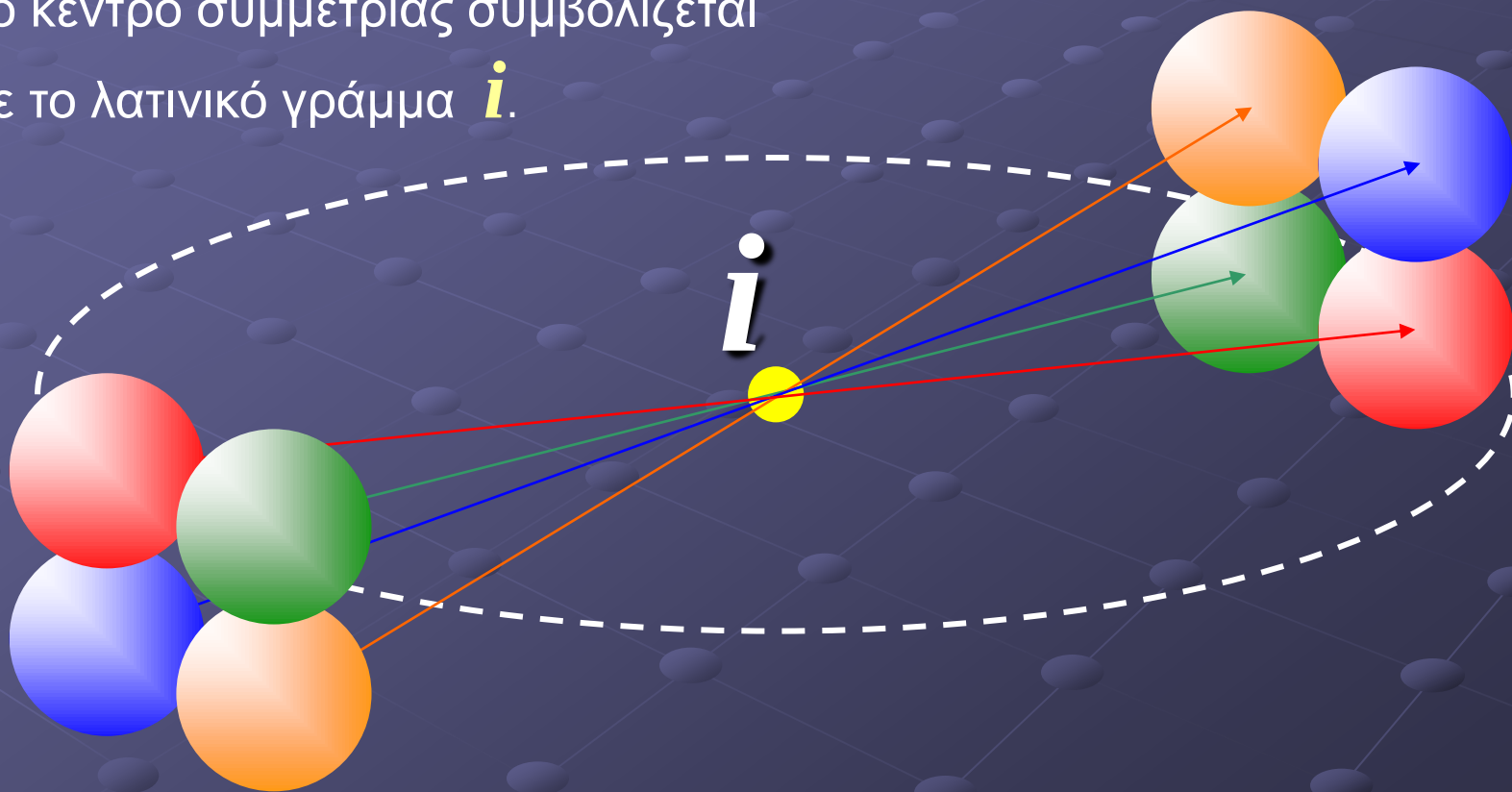
- Συμμετρία σε σχέση με ένα **επίπεδο**



Συμμετρία σε σχέση με σημείο

Ένα σημείο είναι ένα **κέντρο συμμετρίας** όταν όλα τα σημεία που βρίσκονται σε ίσες αποστάσεις από αυτό, αλλά σε αντίθετες κατευθύνσεις, είναι ισοδύναμα.

Το κέντρο συμμετρίας συμβολίζεται με το λατινικό γράμμα ***i***.

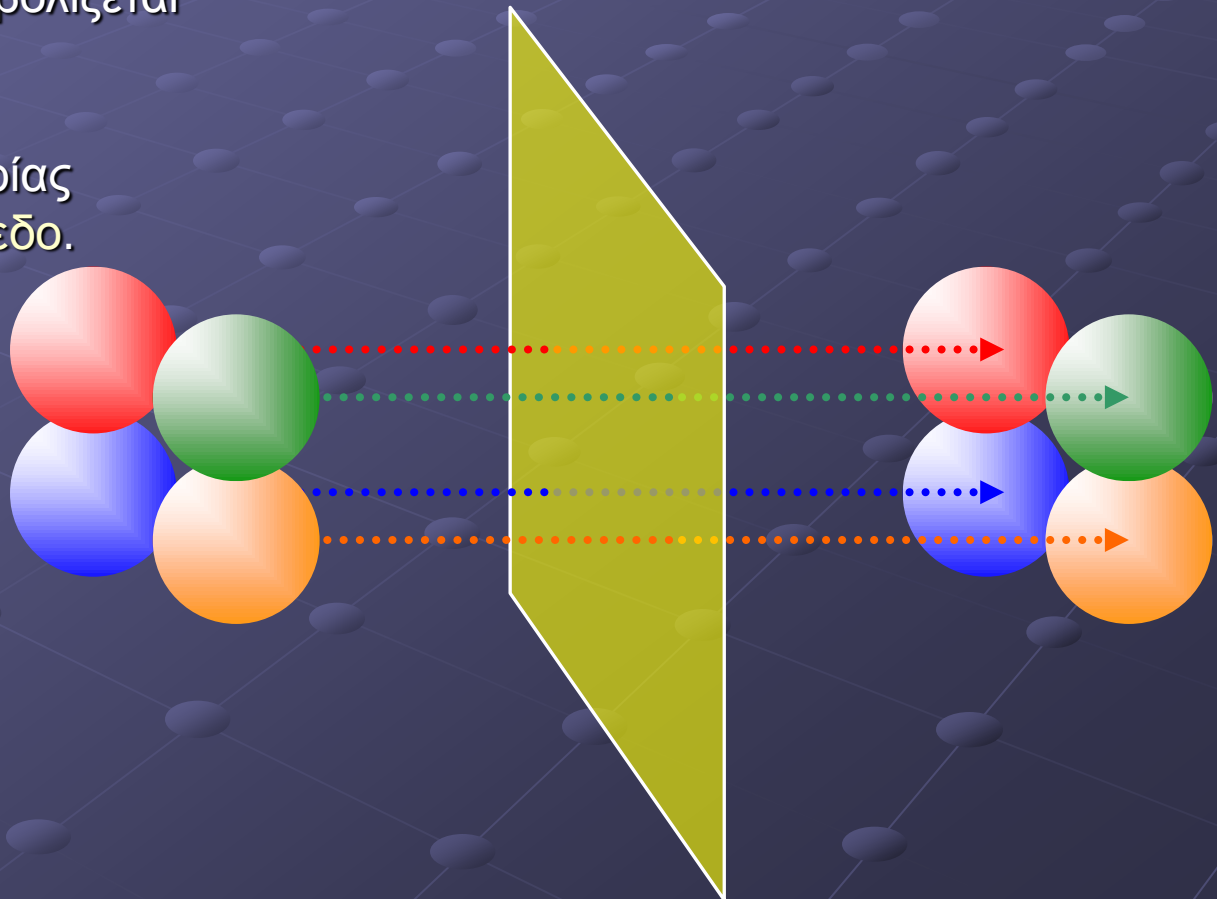


Συμμετρία σε σχέση με **επίπεδο**

Εάν από ένα σημείο φέρουμε κάθετο σε ένα επίπεδο και σε ίση απόσταση από την άλλη μεριά του επιπέδου συναντήσουμε ισότιμο σημείο, τότε λέμε πως το επίπεδο αυτό είναι ένα **επίπεδο συμμετρίας**.

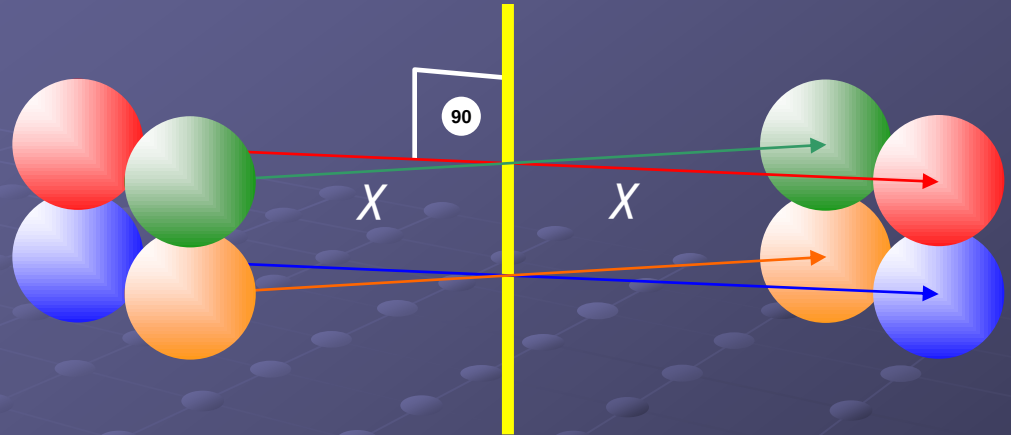
Το επίπεδο συμμετρίας συμβολίζεται με το λατινικό γράμμα ***m***.

Επίσης, το επίπεδο συμμετρίας λέγεται και **κατοπτρικό επίπεδο**.



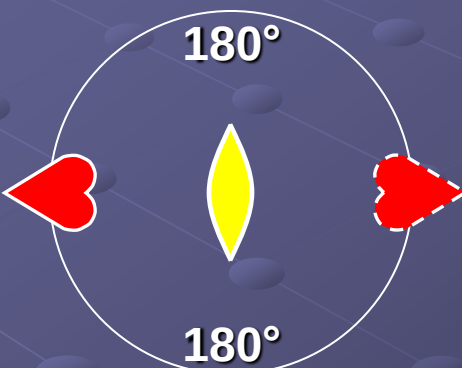
Συμμετρία σε σχέση με ευθεία

Η ευθεία λέγεται και **άξονας συμμετρίας** και συμβολίζεται με τον αντίστοιχο αριθμό ή σύμβολο όπως αυτό φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.

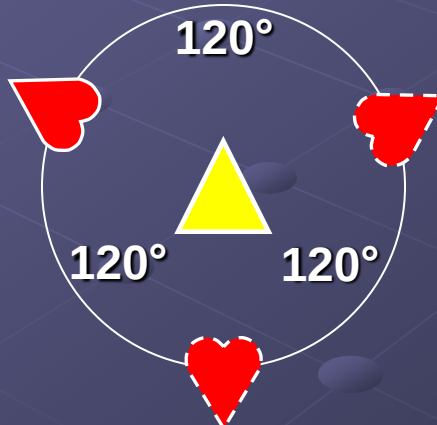


Οι τέσσερεις τύποι αξόνων συμμετρίας

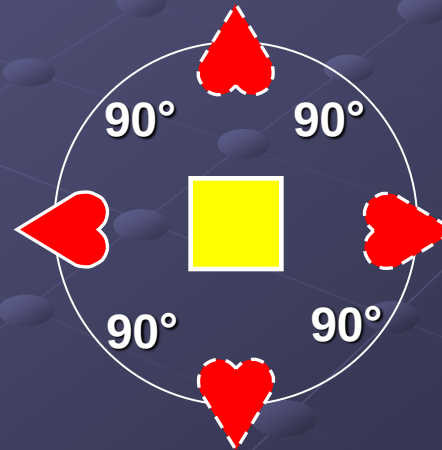
Διπλός (2)



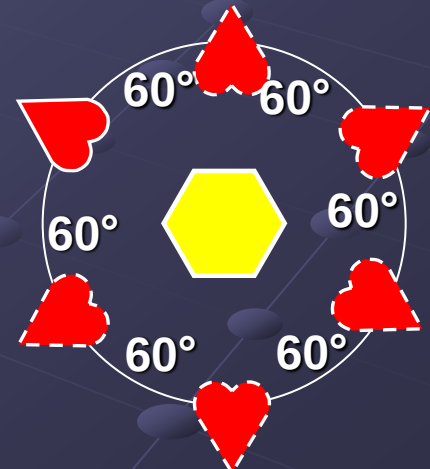
Τριπλός (3)



Τετραπλός (4)



Εξαπλός (6)



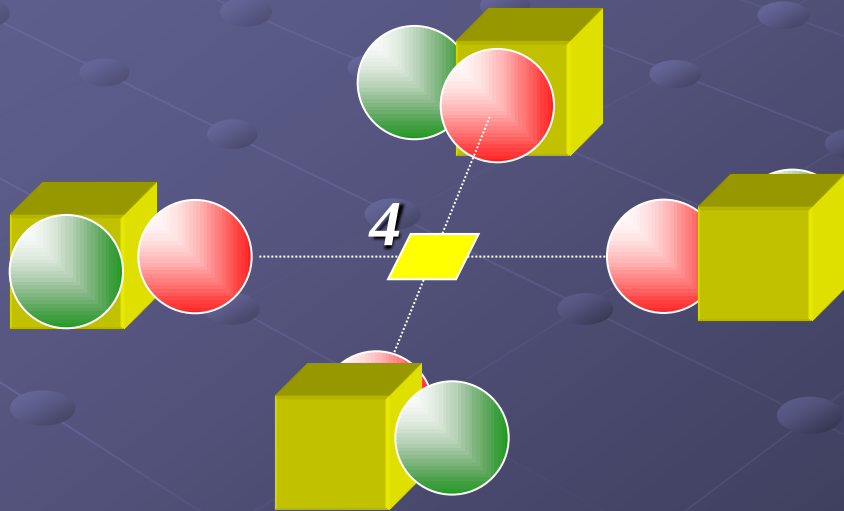
Άξονας συμμετρίας 360°, δεν υφίσταται, αλλά απλά σημαίνει ανυπαρξία συμμετρίας.

Άξονες συμμετρίας (συμμετρία με βάση την ευθεία)

Η γεωμετρική κίνηση που απαιτείται για να φέρει ένα σημείο ώστε να ταυτιστεί με άλλο σημείο ίδιου είδους, ονομάζεται **πράξη συμμετρίας**

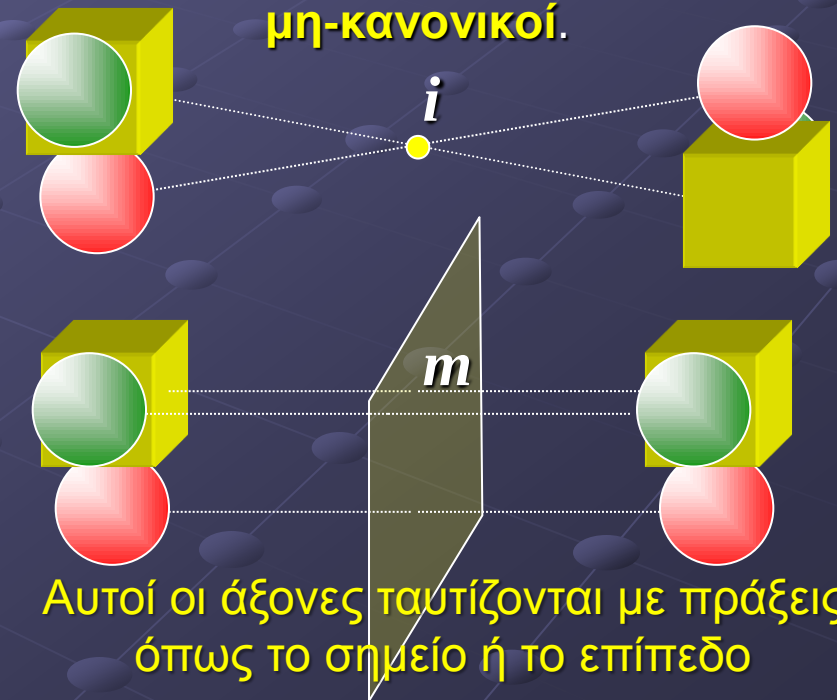
Πράξεις συμμετρίας **πρώτου είδους** ονομάζονται αυτές που δεν αλλάζουν τον σχετικό προσανατολισμό του αντικειμένου.

Αυτοί οι άξονες λέγονται και **κανονικοί**.

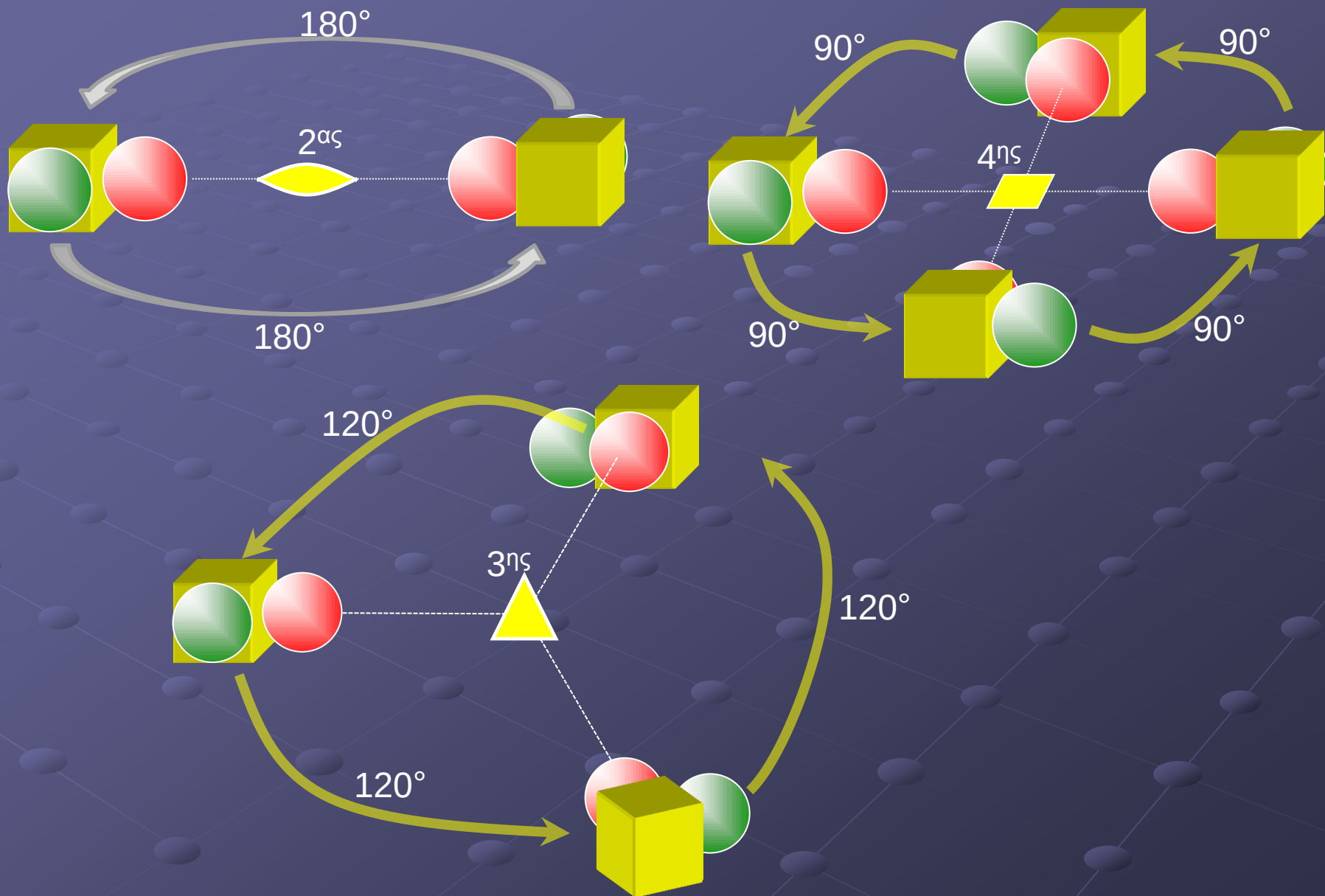


Πράξεις συμμετρίας **δεύτερου είδους** ονομάζονται αυτές που αλλάζουν τον σχετικό προσανατολισμό του αντικειμένου.

Αυτοί οι άξονες λέγονται και **μη-κανονικοί**.



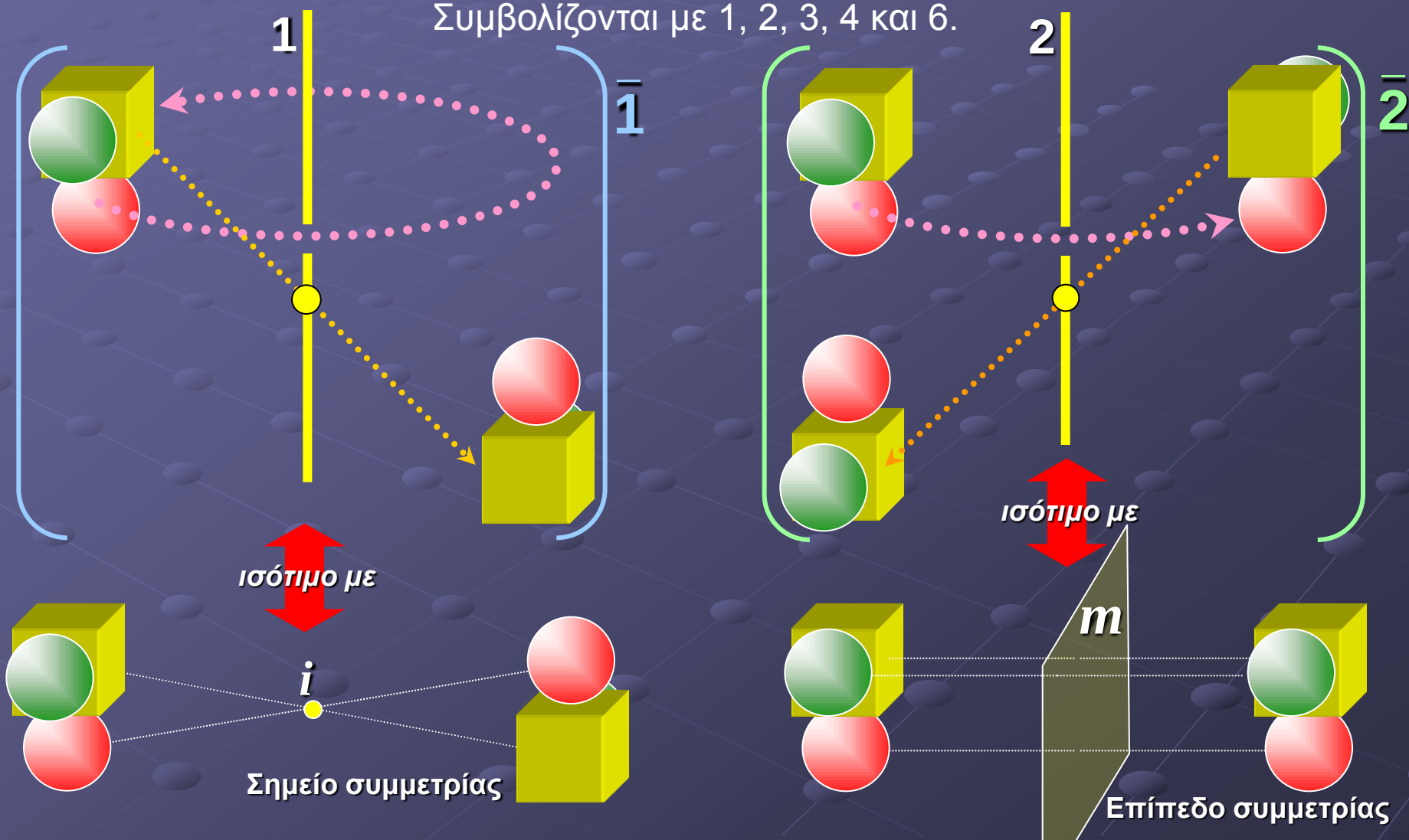
Κανονικοί άξονες συμμετρίας



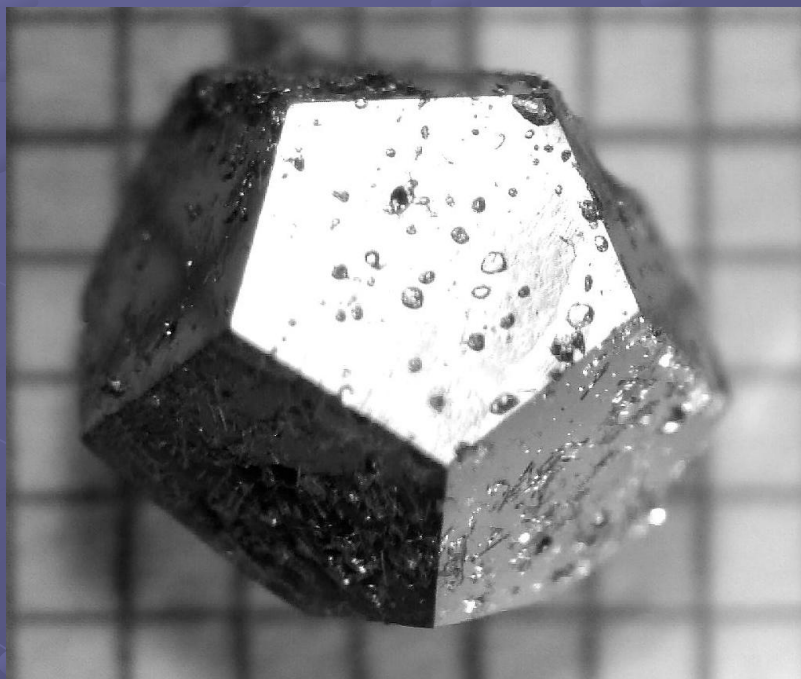
Μη-κανονικοί άξονες συμμετρίας

Είναι όλοι οι κανονικοί (1, 2, 3, 4, 6) αλλά με μία επιπλέον αναστροφή του αντικειμένου κατά σημείο που ανήκει στον άξονα.

Συμβολίζονται με $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ και $\bar{6}$.



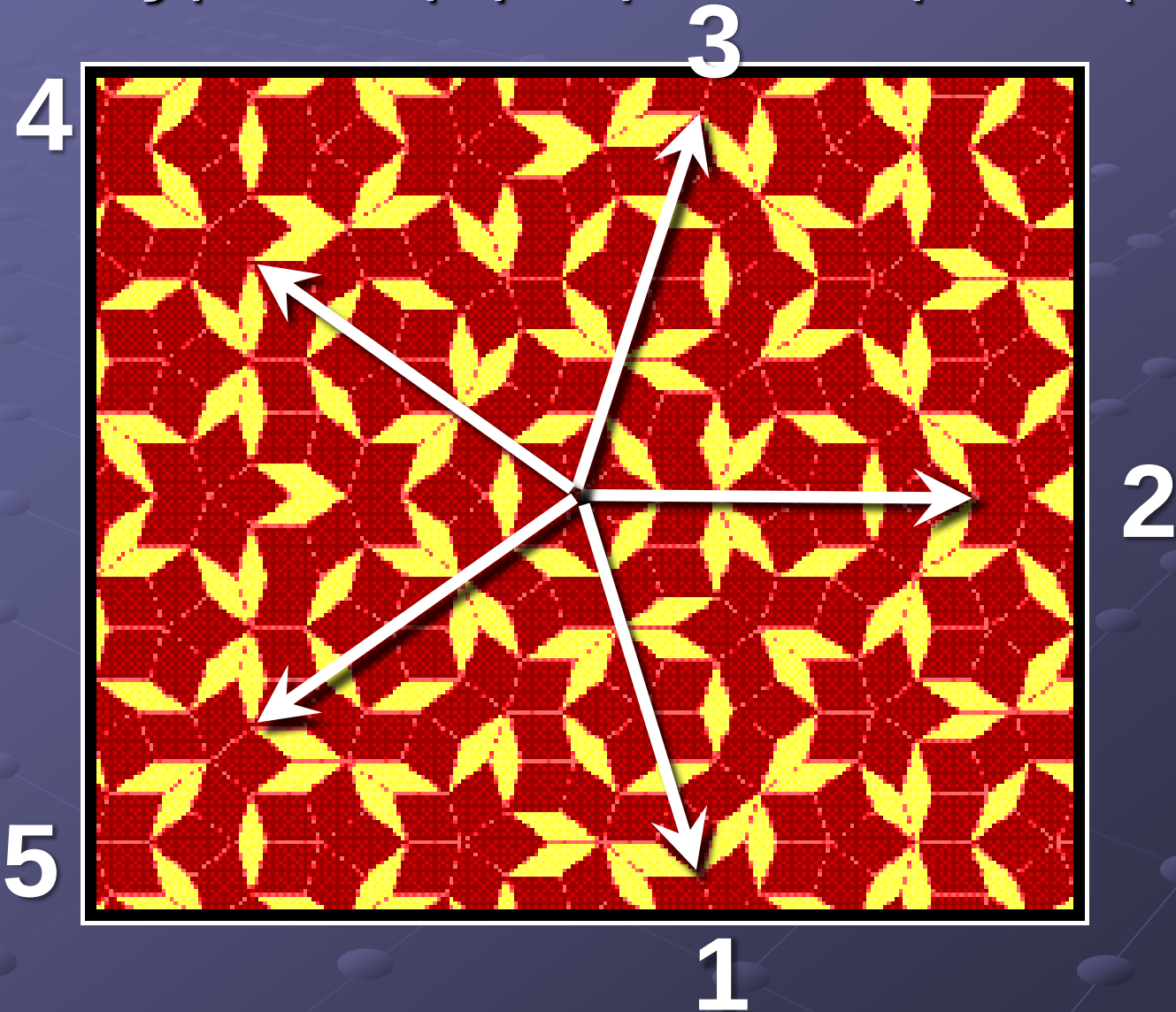
**Δεν υπάρχει άξονας 5^{ης},
και από 7^{ης} και πάνω στην φύση**



**Υπάρχει όμως 5^{ης} σε
τεχνητούς κρυστάλλους!**

Κράμα Al-Pd-Re σχηματίζει
κρυστάλλους με άξονα 5^{ης}
τάξης

Πλακίδια του Roger Penrose: Πλήρης κάλυψη επιφάνειας με ένα μη-περιοδικό τρόπο (1984)



Συνδυασμοί (πράξεις) στοιχείων συμμετρίας

Τα βασικά στοιχεία συμμετρίας είναι δέκα: $6, 4, 3, 2, 1, \bar{6}, \bar{4}, \bar{3}, \bar{2} = m, \bar{1} = i$

Συνδυασμοί των παραπάνω δίνουν τα κρυσταλλικά συστήματα που παρατηρούνται στα κρυσταλλικά υλικά.

Όλοι οι κρύσταλλοι έχουν μερικά από τα παραπάνω
10 βασικά στοιχεία συμμετρίας,
αλλά απεριόριστο αριθμό του στοιχείου συμμετρίας 1.

Η εξωτερική συμμετρία κάθε κρυστάλλου
πρέπει να αντιστοιχεί σε:

- Έναν από τους πέντε κανονικούς άξονες (1, 2, 3, 4 και 6)
- Έναν από τους πέντε μη-κανονικούς άξονες ($\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}$ και $\bar{6}$)
- Έναν από τους συνδυασμούς των παραπάνω, αυτούς που δεν οδηγούν σε απεριόριστο αριθμό επαναλήψεων αλλά σε 32 μοναδιαίους συνδυασμούς, τις 32 κρυσταλλικές τάξεις.

Οι 32 Κρυσταλλικές Τάξεις

(Σημειο-ομάδες)

Οι 32 κρυσταλλικοί συνδυασμοί σημείου

- Οι **συνδυασμοί στοιχείων συμμετρίας** που μπορούν να περάσουν από ένα σημείο λέγονται «point groups»
- **Μόνο 32** τέτοιοι συνδυασμοί είναι δυνατοί

Οι 32 σημειο-ομάδες (κρυσταλλικές τάξεις)

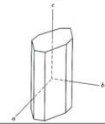
	α/α	Στοιχεία συμμετρίας	Σελίδα		α/α	Στοιχεία συμμετρίας	Σελίδα
Τριώνιες	1		3	Εξαγωνικό	16	1	3
	2		3		17	1 , 1 ,	3
Μονοκλινές	3	1	3		18	1 , 3+3	3
	4	1	3		19	1 , 3+3	3
	5	1 , 1 ,	3		20	1 , 3+3 , 1 , 3+3 ,	3
Ρομβικό	6	3	3		21	1	3
	7	1 , 3	3		22	1	3
	8	3 , 3 ,	3	Τετραγωνικό	23	1 , 1 ,	3
Τριγωνικό	9	1	3		24	1 , 2+2	3
	10	1 ,	3		25	1 , 2+2	3
	11	1 , 3	3		26	1 , 2 , 2	3
	12	1 , 3	3		27	1 , 1 , 2+2 , 2+2 ,	3
	13	1 , 3 , 3 ,	3		28	4 , 3	3
	14	1 , 1	3	Κυβικό	29	3 , 3 , 4 ,	3
	15	1 , 3 , 1 , 3	3		30	3 , 4 , 6	3
					31	3 , 4 , 6	3
					32	3 , 4 , 6 , , 3 , 6	3

Άλλοι συμβολισμοί και ονοματολογίες

Κρυσταλλικό Σύστημα	Κρυσταλλική Κλάση	Πράξεις συμμετρίας	Κρυσταλλικό Σύστημα	Κρυσταλλική Κλάση	Πράξεις συμμετρίας
Τρικλινές	$\bar{1}$	none	Εξαγωνικό	$\bar{3}$	$1\bar{A}_3$
Μονοκλινές	2	i		$\bar{3}2$	$1\bar{A}_3 (= i + 1A_3)$
	m	$1A_2$		$3m$	$1A_3, 3A_2$
	$2/m$	$1m$		$\bar{3}2/m$	$1A_3, 3m$
Ορθορομβικό	222	$i, 1A_2, 1m$			$1\bar{A}_3, 3A_2, 3m$
	$mm2$	$3A_2$			$(1\bar{A}_3 = i + 1A_3)$
	$2/m2/m2/m$	$1A_2, 2m$		6	$1A_6$
Τετραγωνικό	4	$i, 3A_2, 3m$		$\bar{6}$	$1\bar{A}_6 (= 1A_3 + m)$
	$\bar{4}$	$1A_4$		$6/m$	$i, 1A_6, 1m$
	$4/m$	$1\bar{A}_4$		622	$1A_6, 6A_2$
	422	$i, 1A_4, m$		$6mm$	$1A_6, 6m$
	$4mm$	$1A_4, 4A_2$		$\bar{6}m2$	$1\bar{A}_6, 3A_2, 3m$
	$\bar{4}2m$	$1A_4, 4m$			$(1\bar{A}_6 = 1A_3 + m)$
	$4/m2/m2/m$	$1\bar{A}_4, 2A_2, 2m$	Κυβικό (Ισομετρικό)	$6/m2/m2/m$	$i, 1A_6, 6A_2, 7m$
		$i, 1A_4, 4A_2, 5m$		23	$3A_2, 4A_3$
				$2/m\bar{3}$	$3A_2, 3m, 4\bar{A}_3$
					$(1\bar{A}_3 = 1A_3 + i)$
				432	$3A_4, 4A_3, 6A_2$
				$\bar{4}3m$	$3A_4, 4A_3, 6m$
				$4/m\bar{3}2/m$	$3A_4, 4A_3, 6A_2, 9m$
					$(1\bar{A}_3 = 1A_3 + i)$

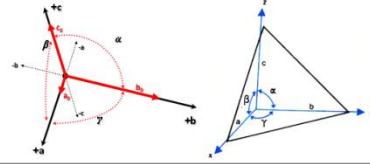
Παραδείγματα κρυσταλλικών συστημάτων (5 από τα 32)

Μονοκλινές



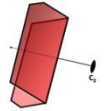
$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$$



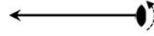
3

Όνομα τάξης:
Σφηνοειδής
Μονοκλινής ημιμορφία

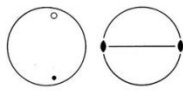


Στοιχεία συμμετρίας:
1

Σχήματα στοιχείων συμμετρίας:

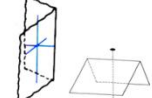


Στερεογραφική προβολή:



Σύμβολα Herman-Mauguin:
2

Γενική μορφή:



Παραδείγματα ορυκτών:



Ουροφάνης ($\text{Ca}(\text{UO}_2)_2[\text{HSiO}_4] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$)



Ρεμοντίτης ($\text{Na}_2(\text{La,Ce})(\text{CO}_3)_2$)



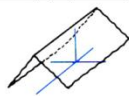
Βρουσίτης ($\text{CaHPO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)



Υδροαλουμίτης ($\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH}) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)

4

Όνομα τάξης:
Διόκτα
Μονοκλινής ημιμορφία II είδους



Παραδείγματα ορυκτών:



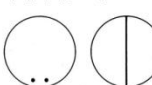
Ανταγορίτης ($[\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}]_2[\text{OH}]_2[\text{Si}_2\text{O}_5]$)

Στοιχεία συμμετρίας:
1

Σχήματα στοιχείων συμμετρίας:

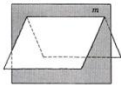


Στερεογραφική προβολή:



Σύμβολα Herman-Mauguin:
m

Γενική μορφή:



Αλλοισίτης ($\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH}) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)



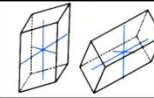
Μιαργουρίτης (Ag_5Sb_3)



Νεπτουνίτης ($\text{Na}_2\text{KLi}[\text{Fe}^{2+}, \text{Mn}^{2+}]_2\text{Ti}_2[\text{Si}_4\text{O}_{13}]$)

5

Όνομα τάξης:
Πρίσμα
Μονοκλινής ολομορφία



Παραδείγματα ορυκτών:



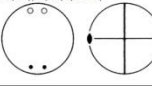
Γύψος ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$)

Στοιχεία συμμετρίας:
1, 1

Σχήματα στοιχείων συμμετρίας:

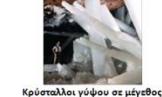


Στερεογραφική προβολή:



Σύμβολα Herman-Mauguin:
2/m

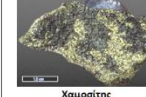
Γενική μορφή:



Κρύσταλλοι γύψου σε μέγεθος μεγαλύτερο ενός ανθρώπου!



Αυγίτης ($\text{Ca}, \text{Na}(\text{Mg}, \text{Fe}, \text{Al}, \text{Ti})(\text{Si}, \text{Al})_2\text{O}_6$)



Χαμοσίτης ($\text{Fe}^{2+}, \text{Mg}_{1-x}\text{AlFe}^{3+}_x\text{Si}_{4-x}\text{AlO}_{10}(\text{OH})_2$)

7

Όνομα τάξης:
Ρομβική πυραμίδα
Ρομβική ημιμορφία

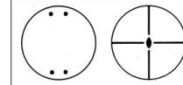
Στοιχεία συμμετρίας:

1, 3

Σχήματα στοιχείων συμμετρίας:



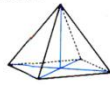
Στερεογραφική προβολή:



Σύμβολα Herman-Mauguin:

mm2

Γενική μορφή:



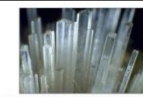
Παραδείγματα ορυκτών:



Κοβαλτίτης CoAsS



Εναργίτης Cu_3AsS_4



Ναπόλιθος $\text{Na}_2[\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}]\cdot 2(\text{H}_2\text{O})$



Πρενίτης $\text{Ca}_2\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{10}(\text{OH})_2$

8

Όνομα τάξης:
Ρομβική αμφιπυραμίδα
Ρομβική ολομορφία

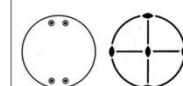
Στοιχεία συμμετρίας:

3, 3

Σχήματα στοιχείων συμμετρίας:



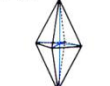
Στερεογραφική προβολή:



Σύμβολα Herman-Mauguin:

2/m 2/m 2/m (mmm)

Γενική μορφή:



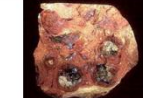
Παραδείγματα ορυκτών:



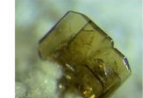
Αραγωνίτης CaCO_3



Βαρίτης BaSO_4

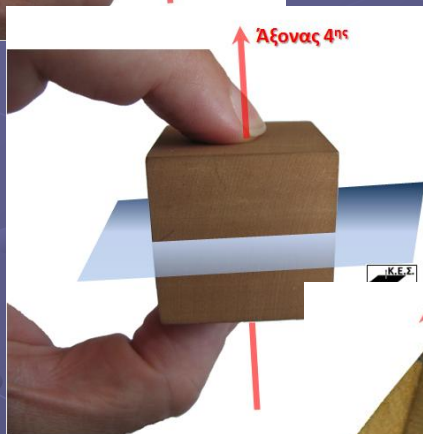
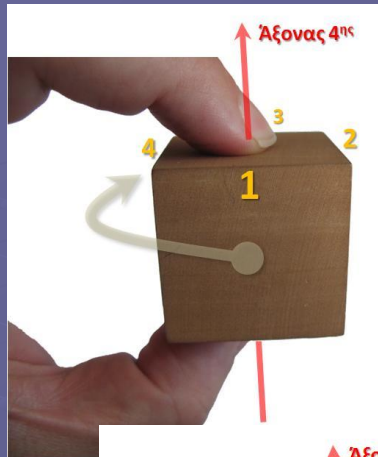


Βαμίτης $\text{AlO}(\text{OH})$

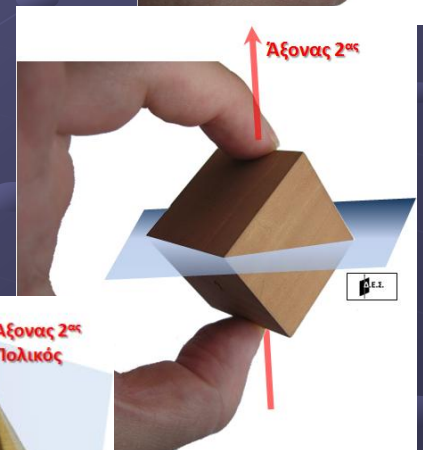
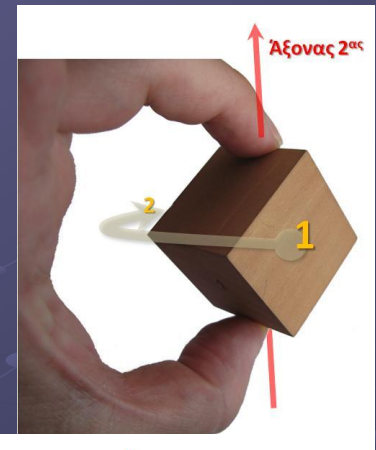


Φαγιαλίτης $\text{Fe}^{2+}_2\text{SiO}_4$

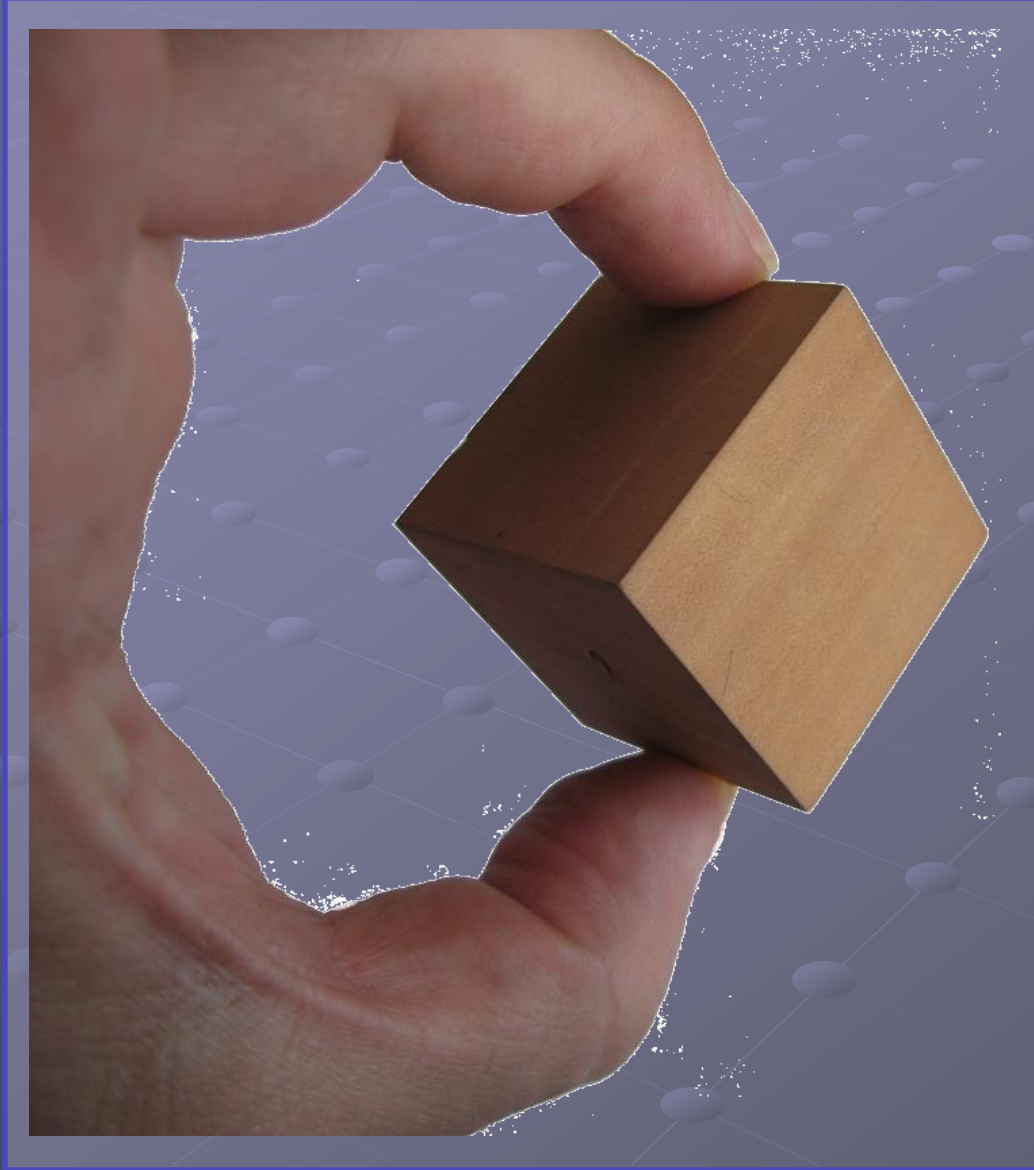
Χρήση των στοιχείων συμμετρίας



KANENA	Κανένα στοιχείο συμμετρίας¶
Z	Κέντρο συμμετρίας¶
P	Άξονας 2 ^{ος} Πολικός¶
●	Άξονας 2 ^{ος} ¶
▲	Άξονας 3 ^{ος} – μη κανονικός¶
▲	Άξονας 3 ^{ος} Πολικός¶
▲	Άξονας 3 ^{ος} ¶
○	Άξονας 4 ^{ος} – μη κανονικός¶
P	Άξονας 4 ^{ος} Πολικός¶
■	Άξονας 4 ^{ος} ¶
⬡	Άξονας 6 ^{ος} – μη κανονικός¶
P	Άξονας 6 ^{ος} Πολικός¶
⬡	Άξονας 6 ^{ος} ¶
Ε.Σ.	Επίπεδος Συμμετρίας¶
Κ.Ε.Σ.	Κύριο Επίπεδο Συμμετρίας¶ (Επίπεδο κάθετο στον άξονα μεγαλύτερης τάξης)¶
Δ.Ε.Σ.	Δευτερεύον Επίπεδο Συμμετρίας¶ (Επίπεδο που περιέχει τον άξονα μεγαλύτερης τάξης)¶



Πρακτική εξάσκηση με ξύλινα μοντέλα κρυστάλλων



Εσωτερική συμμετρία κρυστάλλων

● Πλέγματα Bravais

Βασικά πλέγματα που ο συνδυασμός τους συνθέτει πολυπλοκότερες κατασκευές.

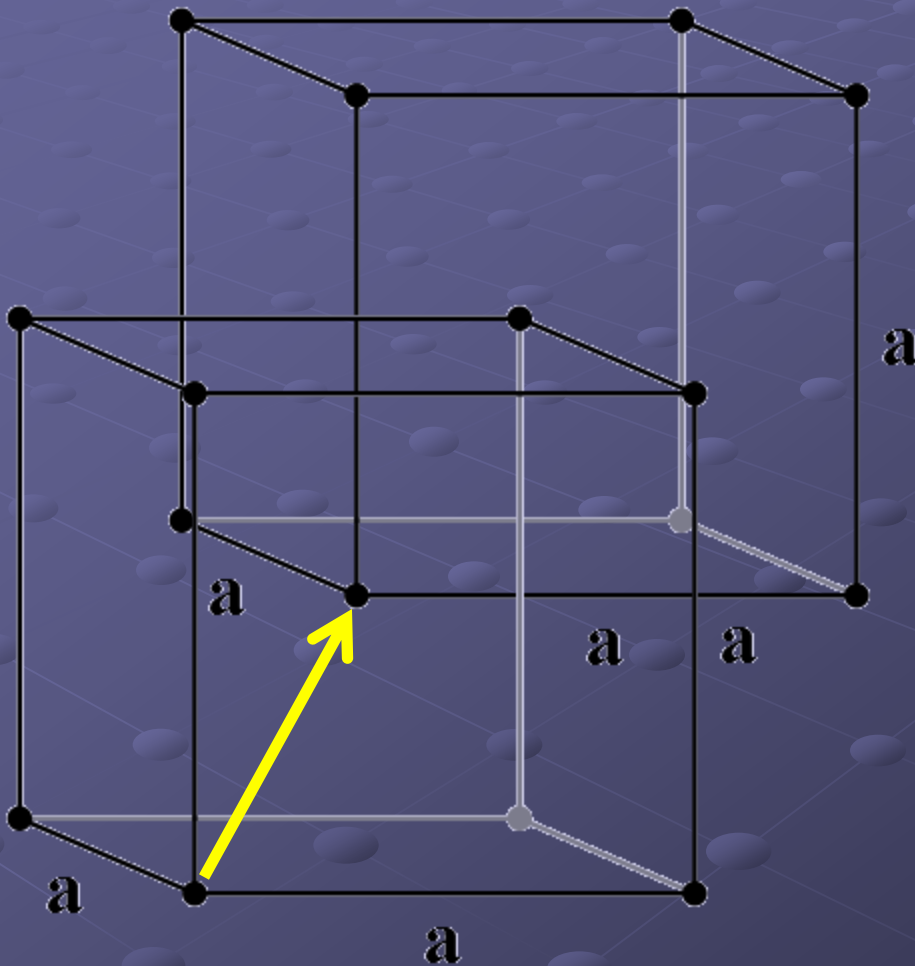
● Χωρο-ομάδες (space groups)

με βάση άλλα στοιχεία συμμετρίας, όπως ολίσθηση σε άξονα ή σε επίπεδο, μεταφορά ή περιστροφή σε άξονα (και συνδυασμούς)

Πλέγματα *Bravais*

Μοναδιαίες,
βασικές κυψελίδες
(primitive cells), με
τα άτομά τους
(μαύρες σφαίρες),
αντιγράφονται και
μετατοπίζονται στον
τρισδιάστατο
χώρο (κατά το
κίτρινο διάνυσμα).

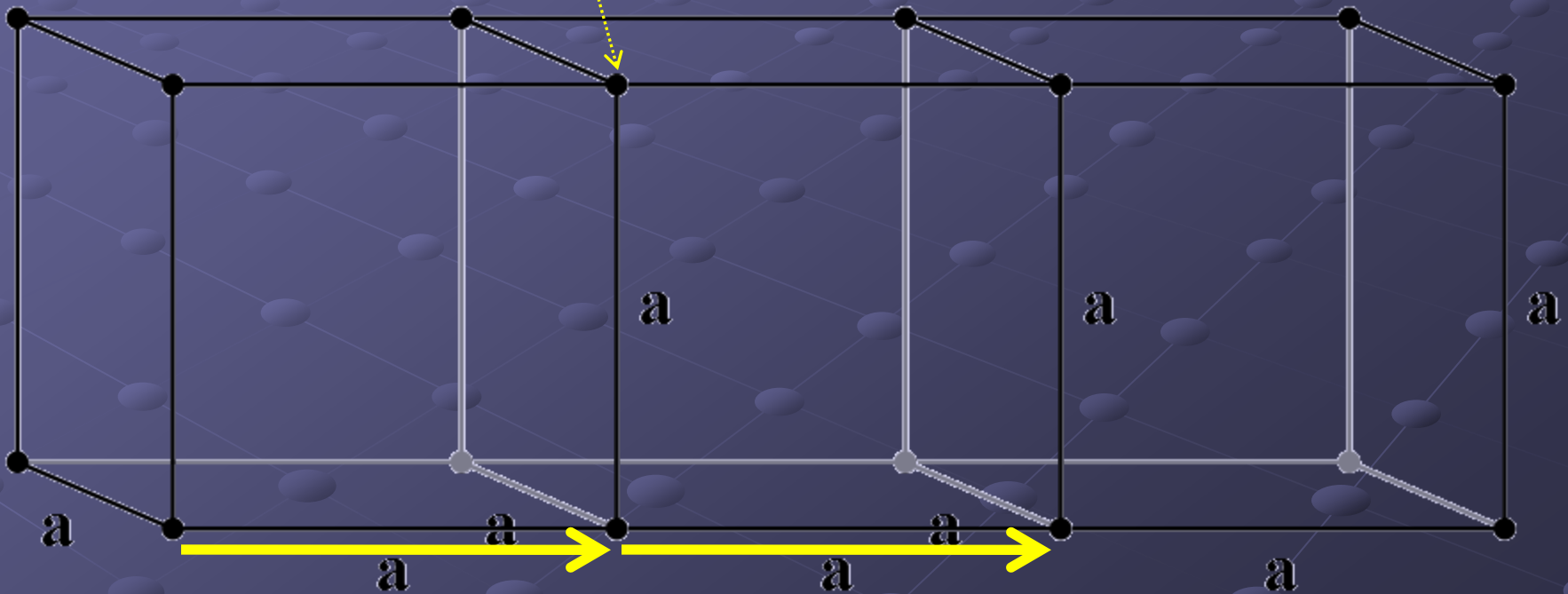
Έτσι σχηματίζεται ο
κρύσταλλος.



Πλέγμα Bravais: μια απλή περίπτωση

Στην παρακάτω περίπτωση κάθε κυψελίδα από μόνη της έχει οκτώ άτομα (ένα στην κάθε μία από τις 8 κορυφές). Ωστόσο, στο κρύσταλλο κάθε κυψελίδα περιέχει $8 \times \frac{1}{8} = 1$ άτομο, γιατί τα άλλα άτομα τα παρέχουν οι γειτονικές κυψελίδες.

Εδώ, δεν έχουμε δύο άτομα μαζί αλλά μόνο ένα



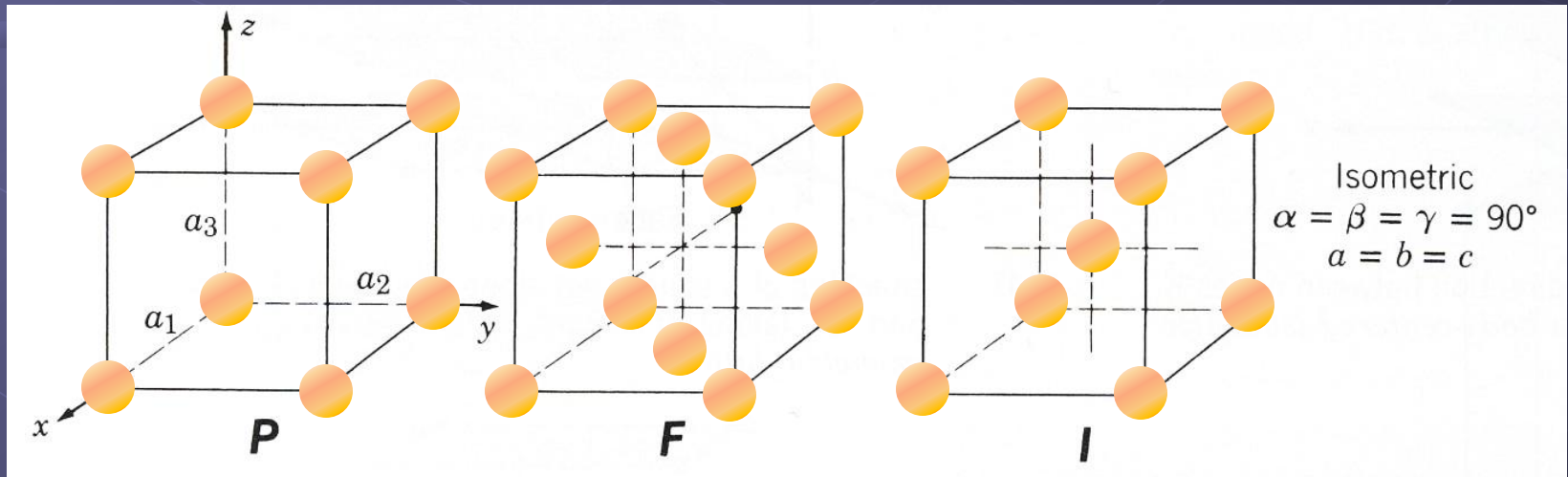
Πλέγματα *Bravais*: μοναδιαίες κυψελίδες του κυβικού

Τρία από τα 14 πλέγματα: τα πλέγματα του κυβικού.

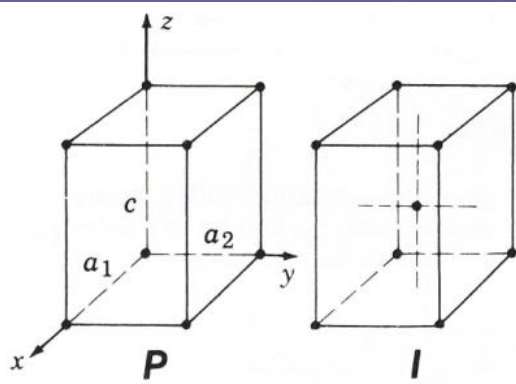
P: απλό πλέγμα, με άτομα μόνο στις κορυφές

F: εδροκεντρωμένο πλέγμα, με άτομα και στο κέντρο κάθε έδρας, επιπλέον των κορυφών

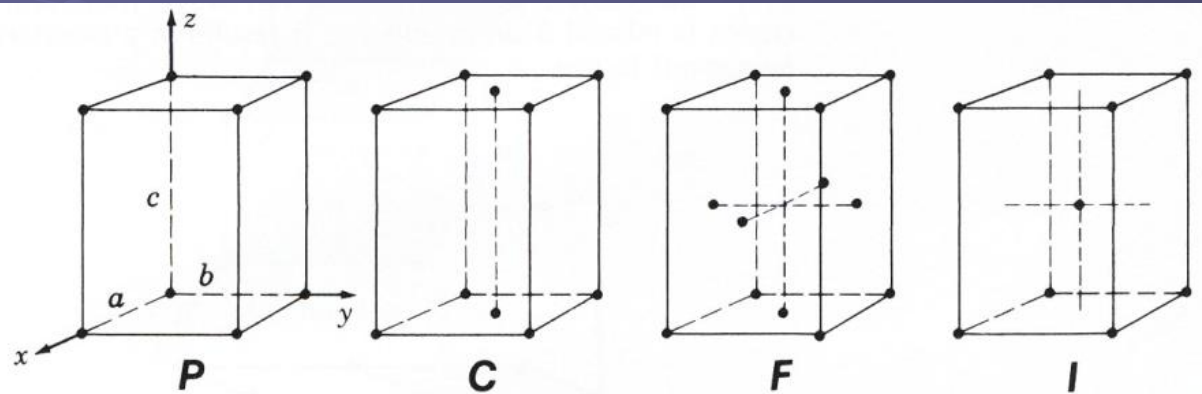
I: χωροκεντρωμένο πλέγμα, με άτομα στο μέσο του κύβου, επιπλέον των κορυφών



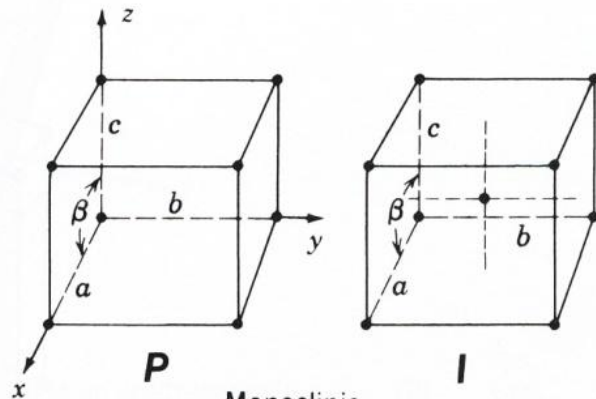
Τα υπόλοιπα 11 Πλέγματα *Bravais*



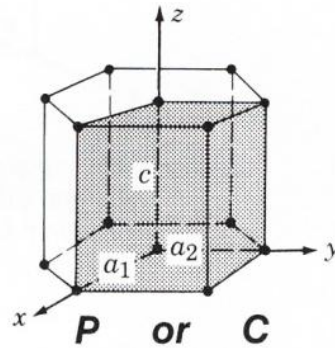
Tetragonal
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ; a = b (\neq c)$



Orthorhombic
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ (a \neq b \neq c)$



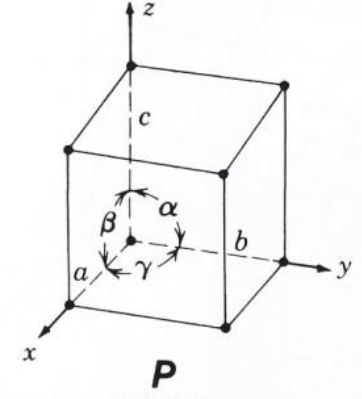
Monoclinic
 $\alpha = \gamma = 90^\circ (\neq \beta; a \neq b \neq c)$



Hexagonal
 $\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ;$
 $a = b (\neq c)$

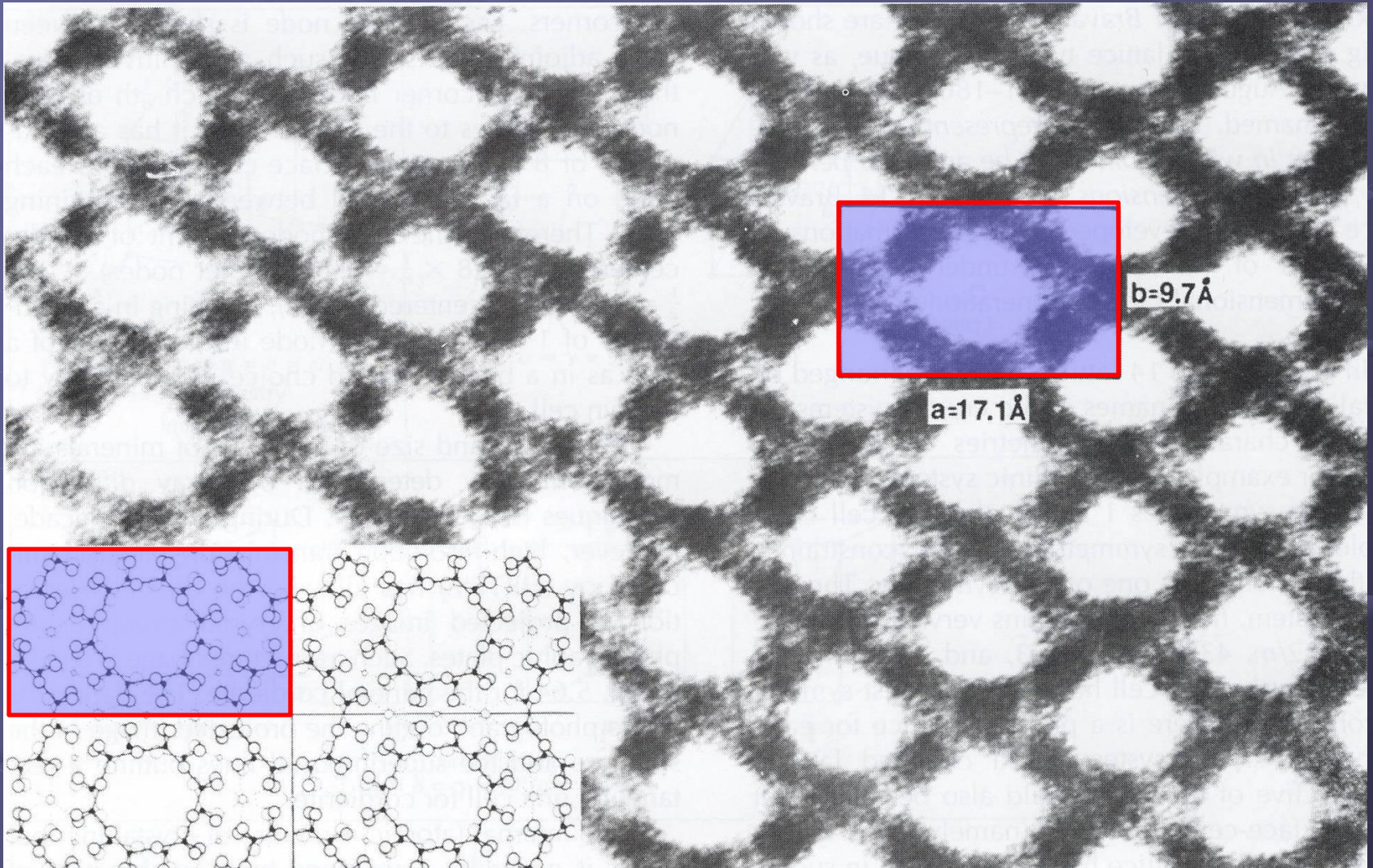


Rhombohedral
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ;$
 $a = b = c$



Triclinic
 $(\alpha \neq \beta \neq \gamma; a \neq b \neq c)$

HRTEM κορδιερίτη



Χωρο-ομάδες (space groups)

Συνδυάζοντας τις **32 σημειο-ομάδες** (point groups) με τα **14 πλέγματα Bravais** δημιουργούμε **230** μοναδιαίους γεωμετρικούς συνδυασμούς που τους ονομάζουμε **χωρο-ομάδες** (space groups).

Ο παραπάνω συνδυασμός περιλαμβάνει κινήσεις (ολισθήσεις) πάνω σε:

- **ευθείες γραμμές:** ολίσθηση ανά συγκεκριμένη απόσταση
- **σε επίπεδα:** δημιουργία ειδώλου με καθρέπτη και ολίσθηση αυτού
- **σε άξονες περιστροφής:** περιστροφή και ολίσθηση

230 Χωρο-ομάδες

Για κάθε μία από τις
32 κρυσταλλικές
τάξεις (crystal class)
 αντιστοιχεί ένα
 σύνολο διακριτών
χωρο-ομάδων
 (space group), στο
 σύνολό τους 230.

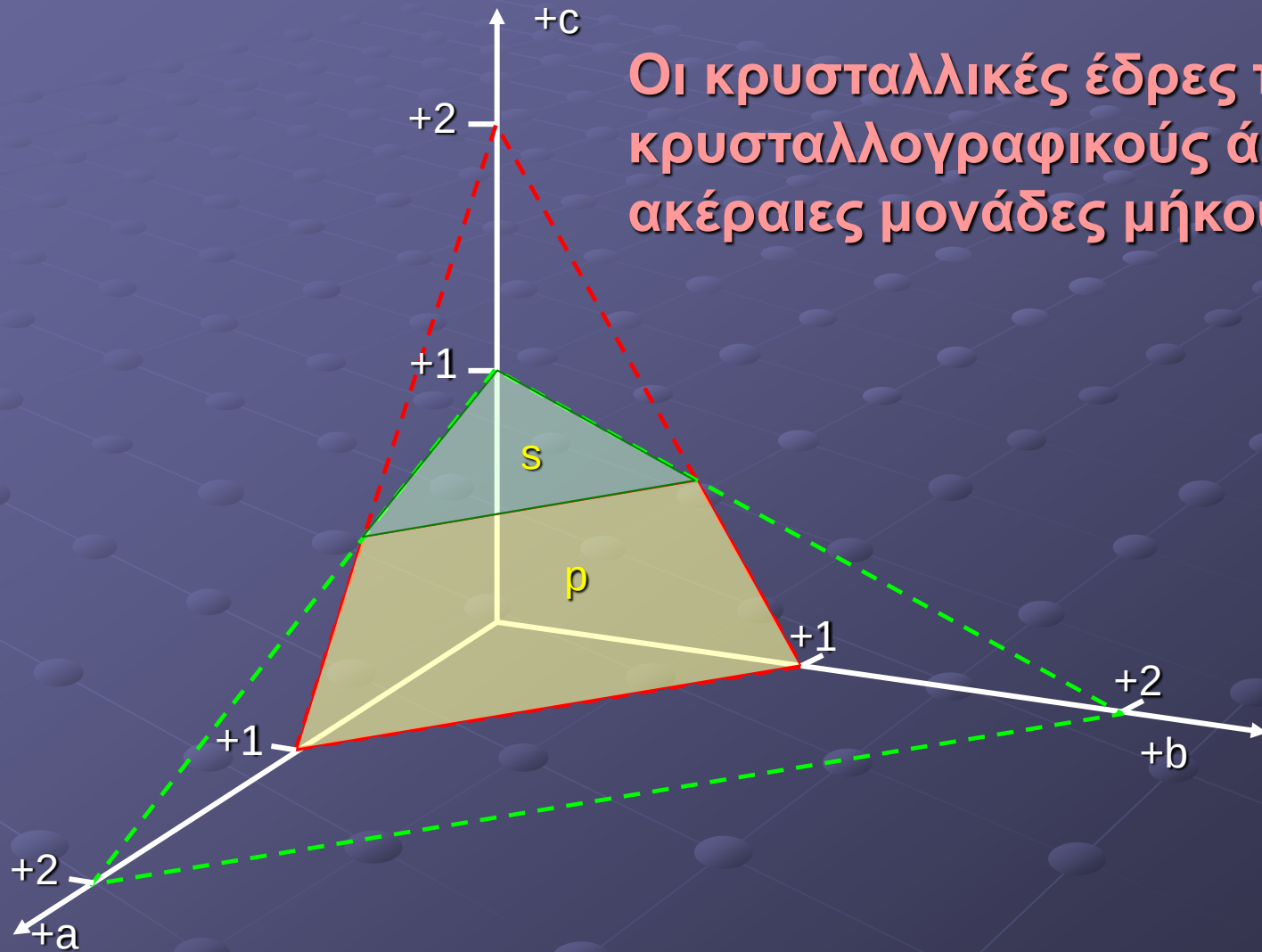
Crystal Class	Space Group
1	$P1$
$\bar{1}$	$P\bar{1}$
2	$P2, P2_1, C2$
m	Pm, Pc, Cm, Cc
$2/m$	$P2/m, P2_1/m, C2/m, P2/c, P2_1/c, C2/c$
222	$P222, P222_1, P2_12_12, P2_12_12_1, C222_1, C222, F222, I222, I2_12_12_1$
$mm2$	$Pmm2, Pmc2_1, Pcc2, Pma2, Pca2_1, Pnc2, Pmn2_1, Pba2, Pna2_1, Pnn2, Cmm2, Cmc2_1, Ccc2, Amm2, Abm2, Ama2, Aba2, Fmmc, Fdd2, Imm2, Iba2, Ima2$
$2/m2/m2/m$	$P2/m2/m2/m, P2/n2/n2/n, P2/c2/c2/m, P2/b2/a2/n, P2_1/m2/m2/a, P2/n2_1/n2/a, P2/m2/n2_1/a, P2_1/c2/c2/a, P2_1/b2_1/a2/m, P2_1/c2_1/c2/n, P2/b2_1/c2_1/m, P2_1/n2_1/n2/m, P2_1/m2_1/m2/n, P2_1/b2/c2_1/n, P2_1/b2_1/c2_1/a, P2_1/n2_1/m2_1/a, C2/m2/c2/m, C2/m2/c2_1/a, C2/m2/m2/m, C2/c2/c2/m, C2/m2/m2/a, C2/c2/c2/a, F2/m2/m2/m, F2/d2/d2/d, I2/m2/m2/m, I2/b2/a2/m, I2/b2/c2/a, I2/m2/m2/a$
4	$P4, P4_1, P4_2, P4_3, I4, I4_1$
$\bar{4}$	$P\bar{4}, I\bar{4}$
$4/m$	$P4/m, P4_2/m, P4/n, P4_2/n, I4/m, I4_1/a$
422	$P422, P4_212, P4_122, P4_12_12, P4_222, P4_22_12, P4_322, P4_32_12, I422, I4_122$
$4mm$	$P4mm, P4bm, P4_2cm, P4_2nm, P4cc, P4nc, P4mc, P4bc, I4mm, I4cm, I4_1md, I4_1cd$
$\bar{4}2m$	$P\bar{4}2m, P\bar{4}2c, P\bar{4}2_1m, P\bar{4}2_1c, P\bar{4}m2, P\bar{4}c2, P\bar{4}b2, P\bar{4}n2, I\bar{4}m2, I\bar{4}c2, I\bar{4}2m, I\bar{4}2d$
$4/m2/m2/m$	$P4/m2/m2/m, P4/m2/c2/c, P4/n2/b2/m, P4/n2/n2/c, P4/m2_1/b2/m, P4/m2_1/n2/c, P4/n2_1/m2/m, P4/n2_1/c2/c, P4_1/m2/m2/c, P4_2/m2/c2/m, P4_2/n2/b2/c, P4_2/n2/n2/m, P4_2/m2_1/b2/c, P4_2/m2_1/n2/m, P4_1/n2_1/m2/c, P4_2/n2_1/c2/m, I4/m2/m2/m, I4/m2/c2/m, I4_1/a2/m2/d, I4_1/a2/c2/d$
3	$P3, P3_1, P3_2, R3$
$\bar{3}$	$P\bar{3}, R\bar{3}$
32	$P312, P321, P3_112, P3_121, P3_212, P3_221, R32$
$3m$	$P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c$
$\bar{3}2/m$	$P\bar{3}1m, P\bar{3}1c, P\bar{3}m1, P\bar{3}c1, R\bar{3}m, R\bar{3}c$
6	$P6, P6_1, P6_5, P6_2, P6_4, P6_3$
$\bar{6}$	$P\bar{6}$
$6/m$	$P6/m, P6_3/m$
622	$P622, P6_122, P6_522, P6_222, P6_422, P6_322$
$6mm$	$P6mm, P6cc, P6_3cm, P6_3mc$
$\bar{6}m2$	$P\bar{6}m2, P\bar{6}c2, P\bar{6}2m, P\bar{6}2c$
$6/m2/m2/m$	$P6/m2/m2/m, P6/m2/c2/c, P6_3/m2/c2/m, P6_2/m2/m2/c$
23	$P23, F23, I23, P2_13, I2_13$
$2/m\bar{3}$	$P2/m\bar{3}, P2/n\bar{3}, F2/m\bar{3}, F2/d\bar{3}, I2/m\bar{3}, P2_1/a\bar{3}, I2_1/a\bar{3}$
432	$P432, P4_232, F432, F4_132, I432, P4_332, P4_132, I4_132$
$\bar{4}3m$	$P\bar{4}3m, F\bar{4}3m, I\bar{4}3m, P\bar{4}3n, F\bar{4}3c, I\bar{4}3d$
$4/m\bar{3}2/m$	$P4/m\bar{3}2/m, P4/n\bar{3}2/n, P4_2/m\bar{3}2/n, P4_2/n\bar{3}2/m, F4/m\bar{3}2/m, F4/m\bar{3}2/c, F4_1/d\bar{3}2/m, F4_1/d\bar{3}2/c, I4/m\bar{3}2/m, I4_1/a\bar{3}2/d$

Νόμοι της κρυσταλλογραφίας.

Οι νόμοι της κρυσταλλογραφίας έχουν σαν αποτέλεσμα να μπορούμε να εκφράζουμε τις μακροσκοπικές σχέσεις μεταξύ των εδρών ενός κρυστάλλου.

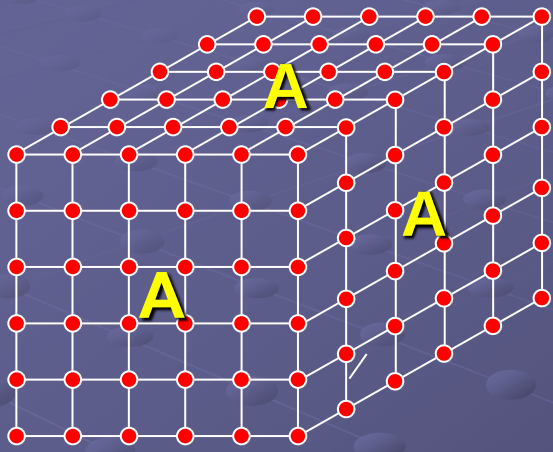
1ος νόμος της κρυσταλλογραφίας (νόμος του Haüy)

Οι κρυσταλλικές έδρες τέμνουν τους κρυσταλλογραφικούς άξονες σε ακέραιες μονάδες μήκους



2ος νόμος της κρυσταλλογραφίας (νόμος του Bravais)

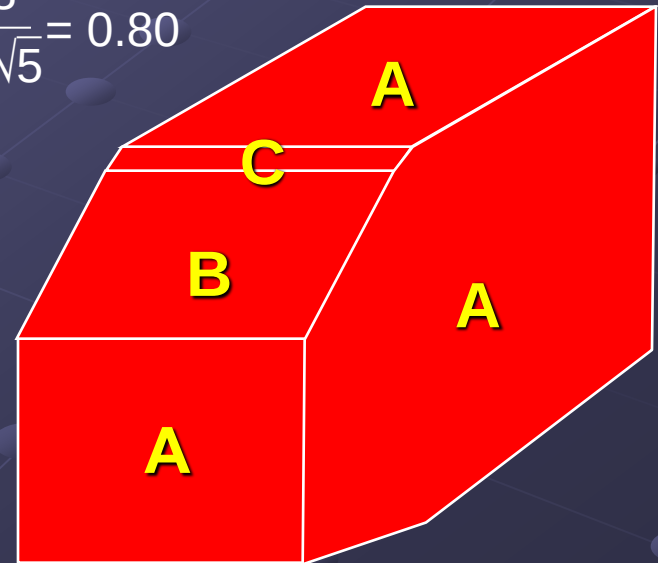
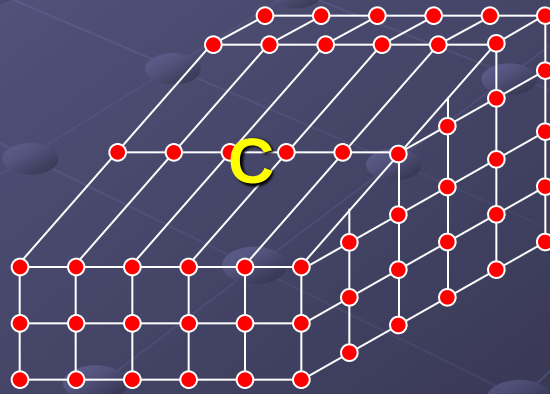
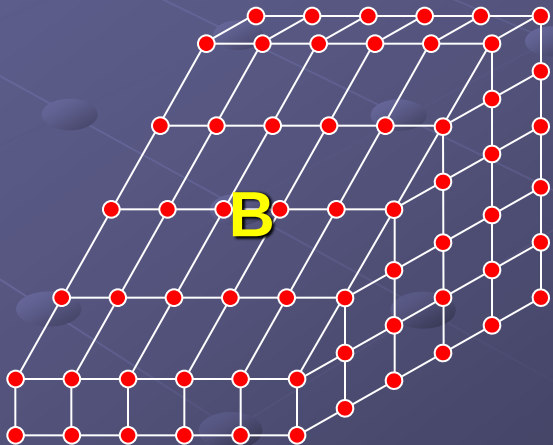
Συχνότερη εμφάνιση (και κατ' επέκταση μεγαλύτερο εμβαδόν)
έχουν οι κρυσταλλικές έδρες που είναι παράλληλες σε κρυσταλλικά
επίπεδα με μεγάλη πυκνότητα σε άτομα



$$A = \frac{\text{Άτομα}}{\text{εμβαδόν}} = \frac{6 \times 6}{5 \times 5} = 1.44$$

$$B = \frac{\text{Άτομα}}{\text{εμβαδόν}} = \frac{6 \times 5}{5 \times 4\sqrt{2}} = 1.06$$

$$C = \frac{\text{Άτομα}}{\text{εμβαδόν}} = \frac{6 \times 3}{5 \times 2\sqrt{5}} = 0.80$$



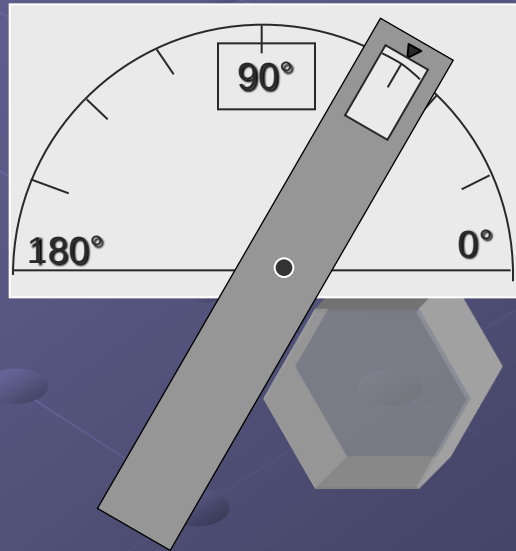
Νόμος σταθερότητας των γωνιών

Οι σχετικές γωνίες μεταξύ όμοιων ζευγαριών εδρών σε ένα κρύσταλλο είναι πάντα σταθερές και ίσες με αυτές ενός τέλειου, ιδεατού κρυστάλλου (Nicolaus Steno, 1669).

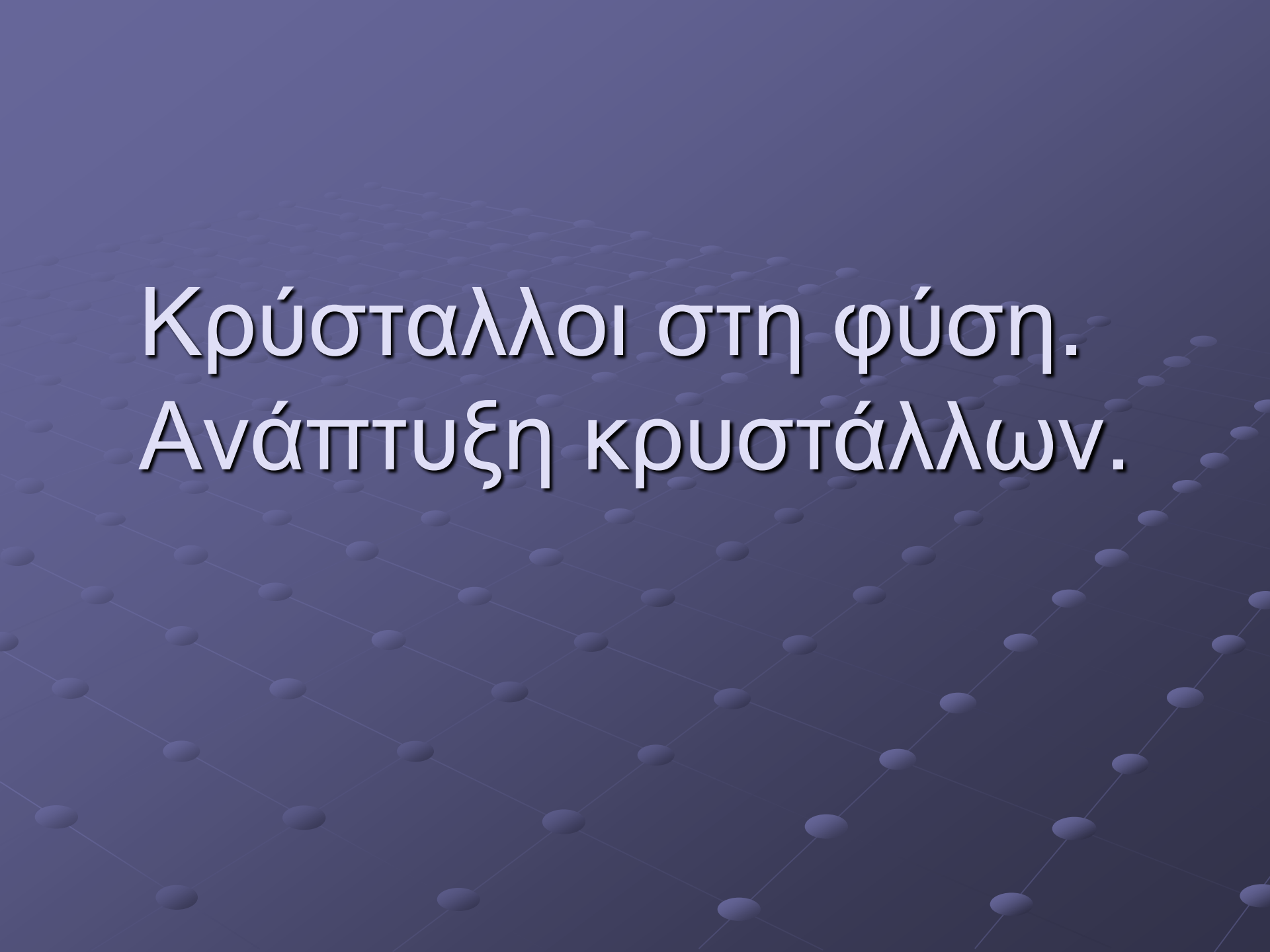
- Εάν από το κέντρο ενός οποιοδήποτε κρυστάλλου φέρουμε κάθετες ευθείες προς τις έδρες του, η γωνίες που σχηματίζουν αυτές οι ευθείες είναι και οι ζητούμενες.
- Αυτές οι γωνίες πρέπει να είναι σταθερές για ίδιους κρυστάλλους και μεταξύ ομοειδών ζευγαριών εδρών.
- Τέλος, αυτές οι γωνίες μετρώνται με τα γωνιόμετρα (όργανα που βασίζονται στην ανάκλαση μιας δέσμης φωτός στην επιφάνεια των εδρών).

Χρήση γωνιομέτρου

Περιστρέφουμε τον κρύσταλλο κατά τον άξονά του (ή το οπτικό σύστημα του γωνιομέτρου) και μετράμε την γωνία μεταξύ δύο θέσεων με μέγιστη ανάκλαση Φωτός.



Για μεγάλους κρυστάλλους, καθώς και για τα μοντέλλα του εργαστηρίου, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ένα απλό γωνιόμετρο όπως αυτό στα αριστερά.



Κρύσταλλοι στη φύση. Ανάπτυξη κρυστάλλων.

Γιατί υπάρχουν οι κρύσταλλοι

- Τα άτομα έχουν την ιδιότητα εάν βρεθούν κοντά να αναζητούν θέσεις στις οποίες η ενέργεια του συστήματος μειώνεται για τις δεδομένες συνθήκες.
- Σε αυτές τις θέσεις σταθεροποιούνται σχετικά και η κινητικότητά τους μειώνεται.
- Οι θέσεις αυτές είναι γεωμετρικά κατανεμημένες έτσι ώστε εάν ξεκινώντας από ένα άτομο και προς κάποια διεύθυνση βρούμε μετά από συγκεκριμένη απόσταση ένα άλλο άτομο, τότε επεκτείνοντας την ευθεία αυτή προς την ίδια διεύθυνση και σταματώντας στην ίδια απόσταση θα δούμε και πάλι άλλο ένα ίδιο άτομο.
- Στις τρεις διαστάσεις, η περιοδικότητα αυτή των ατόμων σχηματίζει τον κρύσταλλο.
- Ο κρύσταλλος τελικά είναι ένα φυσικό σώμα, που έχει ύλη/άτομα που είναι περιοδικά ταξινομημένα στο χώρο.
- Αυτή η περιοδική ταξινόμηση δίνει πολλές ιδιότητες στο υλικό σώμα που τελικά σχηματίζεται (φυσικές, χημικές, μηχανικές κτλ).

Κρύσταλλοι στην φύση

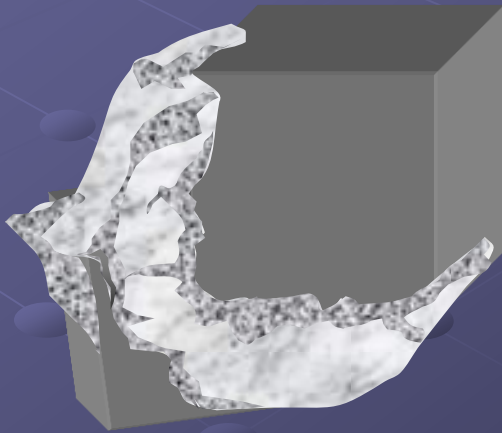
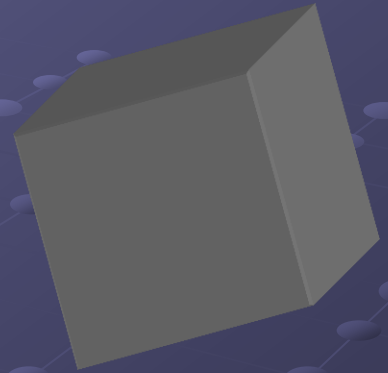
Τα κρυσταλλικά υλικά έχουν την ίδια χημική σύσταση σε όλη την μάζα τους. Οστόσο, οι γεωμετρικές μορφές που παρουσιάζονται στην φύση διαφέρουν ανάλογα με τον βαθμό κρυστάλλωσής τους:



**Ανεδρικοί
κρύσταλλοι**



**Ολοεδρικοί
κρύσταλλοι**



**Υποεδρικοί
κρύσταλλοι**

Αν-, υπο-, ολο- σημαίνουν αντίστοιχα: χωρίς, μερικώς και πλήρως εμφανιζόμενες έδρες (επίπεδες κρυσταλλικές επιφάνειες)

Ανάπτυξη των κρυστάλλων

Σε τέλεια ανεπτυγμένους κρυστάλλους, που πλησιάζουν τις ιδεατές γεωμετρικές κατασκευές τους, όμοιες έδρες ή όμοια στοιχεία συμμετρίας πρέπει να βρίσκονται στην ίδια απόσταση από το κέντρο του κρυστάλλου.

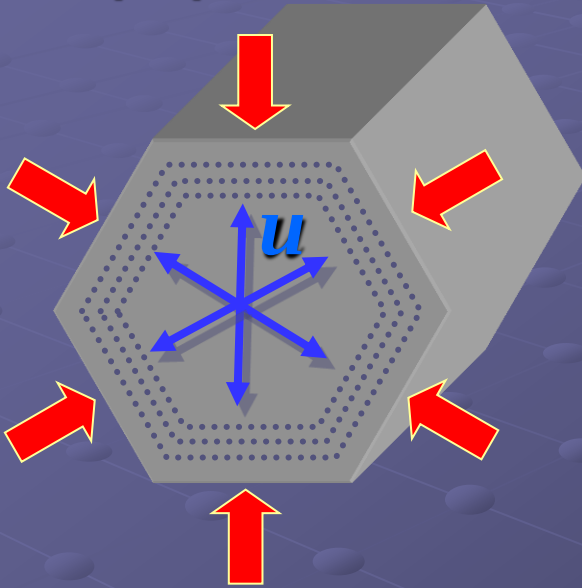
Αυτό δεν συμβαίνει γιατί συνήθως η ροή χημικού υλικού είναι από μία κατεύθυνση και οι έδρες που βρίσκονται προς αυτή την κατεύθυνση δέχονται περισσότερο υλικό για να αναπτυχθούν.

Ο όγκος του κρυστάλλου μεγαλώνει γρηγορότερα από αυτή την πλευρά και οι αντίστοιχες έδρες αναπτύσσονται πιο γρήγορα. Γεωμετρικά αυτό σημαίνει ότι η απόσταση αυτής της έδρας από το κέντρο του κρυστάλλου μεγαλώνει ενώ το εμβαδό της μικραίνει. Παράλληλα, το εμβαδόν των γειτονικών της εδρών μεγαλώνει.

Αυτό συμβαίνει γιατί όλοι οι κρύσταλλοι είναι κλειστά γεωμετρικά σχήματα και μία έδρα περιβάλλεται από άλλες έδρες που σχηματίζουν γωνίες μικρότερες των 180° και οι οποίες περιορίζουν γεωμετρικά την ανάπτυξη της περιεχόμενης έδρας ώστε αυτή να μειώνεται σε εμβαδόν.

Παράδειγμα ανάπτυξης κρυστάλλου

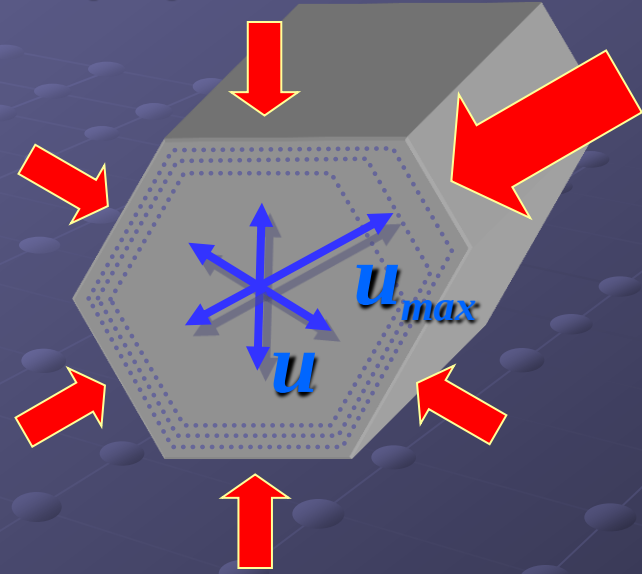
Ομοιόμορφη
τροφοδοσία υλικού



Η τροφοδοσία υλικού είναι η ίδια από όλες τις κατευθύνσεις, έτσι, όλες οι όμοιες έδρες είναι:

- ίσες μεταξύ τους, και
- σε ίσες αποστάσεις από το κέντρο του κρυστάλλου

Ανομοιόμορφη
τροφοδοσία υλικού



Η τροφοδοσία υλικού είναι μεγαλύτερη από την κατεύθυνση του μεγάλου κόκκινου βέλους, έτσι:

- η αντίστοιχη έδρα απομακρύνεται γρηγορότερα από το κέντρο του κρυστάλλου
- η ίδια έδρα μειώνεται σε εμβαδό
- οι γειτονικές της έδρες μεγαλώνουν σε εμβαδό

Ωστόσο, σε όλες τις περιπτώσεις, οι σχετικές γωνίες των εδρών παραμένουν σταθερές.