Dr. Raucsik Béla: Ásványtan leckesorozat
4. lecke

A kristályosztályok; belső szimmetriák, tércsoportok

Az olvasólecke célja: a kristályosztályok áttekintése, a kristályok belső szerkezetének, szimmetriájának megismerése. *Átlagos olvasási idő:* 45 perc.

Az előző leckében megismerkedtünk a kristályformákkal, valamint a kristályformák és a szimmetriaelemek kapcsolatával. Tekintsük most azt át, hogy a kristályok belső felépítését milyen szimmetriák határozzák meg és ezek hogyan kapcsolódnak a külső morfológiához, a kristályformákhoz.

Mik a kristályosztályok?

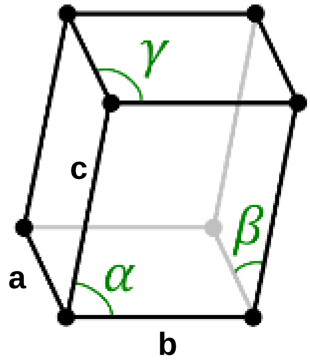
Korábban láttuk, hogy a kristályok jellemzője a térrácsszerkezet, azaz különböző tömegpontok jól definiálható helyeken, rácspontokban helyezkednek el. Ezt úgy is megfogalmazhatjuk, hogy a rács pontok rendezett halmaza, amely adott (**R**) transzlációkra (vagyis a pontok halmazának önmagával párhuzamos eltolásaira) invariáns, azaz a transzláció eredményeként önnmagával fedésbe kerül. Tehát az aktuális transzlációk összessége adja a rács valós, belső alap-szimmetriáját. Mivel a transzlációkkal a rács mindig fedésbe kerül önmagával, ezért ***a rács végtelen kiterjedésű***.

Jelöljük most a rács térbeli szimmetrikus transzlációjának egységvektorait **a**, **b**, **c**-vel! Ekkor, az **R =** *u***a** + *v***b** + *w***c**, ahol *u*, *v* és *w* egész számok.

Az **a**, **b**, **c** egységvektorok a rács paraméterei, ezért őket rácsparamétereknek, vagy másként ***rácsállandók***nak nevezzük. A rácsparamétereket jelölésekor a vektorok hossza mellett az általuk bezárt (α, β, γ) szögeket is meg kell adni. Hagyományosan az α a **b** és **c**, a β az **a** és **c**, míg γ az **a** és **b** vektorok által bezárt szög. A rácsállandók így kijelölik a kristály térbeli koordinátarendszerét. Az egyes koordinátarendszerek egyértelműen definiálnak egy-egy ***kristályrendszer***t. Az a paralellepipedon, melynek élei irányát és hosszát a rácsparaméterek definiálják, az ***elemi cella***. Az elemi cella kezdőpontja tetszőlegesen bármely rácspont lehet, hiszen a rácsot végül az elemi cellák végtelen számú transzlációjával építjük fel. Úgy is megfogalmazhatjuk, hogy ***az elemi cella a kristályrácsnak az a legkisebb része, amely még vagy már rendelkezik a rácsszerkezet tulajdonságaival.***
Az **a**, **b**, és **c** sorrendjét konvenció szerint jobbsodrásúnak választjuk. A rácsállandók egymáshoz való viszonya alapján a következőképpen definiáljuk a rácsok koordinátarendszereit:

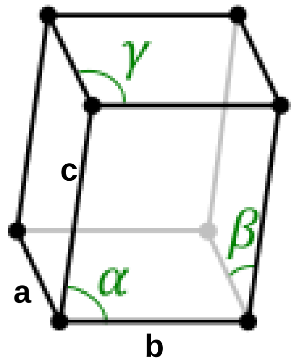
1. **Triklin** rendszer:

a ≠ b ≠ c és α ≠ β ≠ γ ≠ 90°



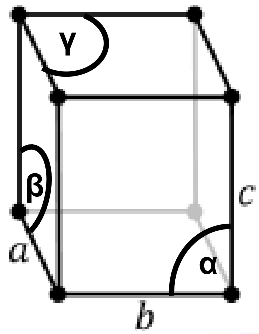
2. **Monoklin** rendszer:

a ≠ b ≠ c és α = γ = 90; β ≠ 90°



3. **Rombos** rendszer:

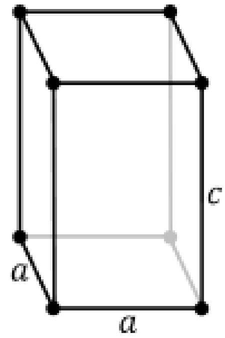
a ≠ b ≠ c és α = β = γ = 90°



Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

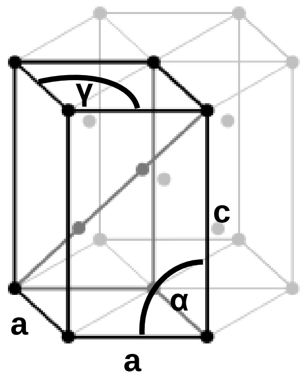
4. ***Tetragonális*** rendszer:

a = a ≠ c és α = β = γ = 90°



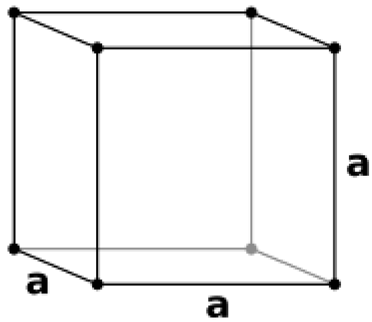
5. ***Trigonális*** és ***hexagonális*** rendszer:

a = a ≠ c és α = β = 90° és γ = 120°



6. ***Köbös*** rendszer:

a = a = a és α = β = γ = 90°



A hét kristályrendszeren belül a szimmetriaelemek lehetséges kombinációi 32 kristályosztályt, azaz pontcsoportot definiálnak. Az egyes kristályosztályokat a rájuk jellemző legnagyobb lapszámú (bonyolultságú) kristályformáról nevezték el.

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

Kristály-rendszer	Szimmetriaelemek	Pontcsoport	Kristályosztály
Triklin	-	1	pedionos
	i	$\bar{1}$	véglapos
Monoklin	$1A_2$	2	szfenoidos
	1m	m	dómás
	i; $1A_2$; 1m	2/m	prizmás
Rombos	$3A_2$	222	diszfenoidos
	$1A_2$; 2m	mm2 (2mm)	piramisos
	i; $3A_2$; 3m	2/m2/m2/m	dipiramisos
Tetragonális	$1A_4$	4	piramisos
	$1\bar{A}_4$	$\bar{4}$	diszfenoidos
	i; $1A_4$; 1m(h)	4/m	dipiramisos
	$1A_4$; $4A_2$	422	trapezoéderes
	$1A_4$; 4m(v)	4mm	di~ piramisos
	$1\bar{A}_4$; $2A_2$; 2m(v)	$\bar{4}$2m	szkalenoéderes
	i; $1A_4$; $4A_2$; 5m(1h+4v)	4/m2/m2/m	di~ dipiramisos
Trigonális	$1A_3$	3	piramisos
	i; $1\bar{A}_3$	$\bar{3}$	romboéderes
	$1A_3$; $3A_2$	32	trapezoéderes
	$1A_3$; 3m(v)	3m	di~ piramisos
	i; $1\bar{A}_3$; $3A_2$; 3m(v)	$\bar{3}$2/m	di~ szkalenoéderes
Hexagonális	$1A_6$	6	piramisos
	$1\bar{A}_6$	$\bar{6}$ (3/m)	trigonális dipiramisos
	i; $1A_6$; 1m(h)	6/m	dipiramisos
	$1A_6$; $6A_2$	622	trapezoéderes
	$1A_6$; 6m(v)	6mm	di~ piramisos
	$1\bar{A}_6$; $3A_2$; 3m(v)	$\bar{6}$m2 (3/mm2)	ditrigonális dipiramisos
	i; $1A_6$; $6A_2$; 7m(1h+6v)	6/m2/m2/m	di~ dipiramisos
Köbös (szabályos, tesszerális, izometrikus)	$3A_2$; $4A_3$	23	tetraéderes pentagondodekaéderes
	i; $4\bar{A}_3$; $3A_2$; 3m	2/m$\bar{3}$	diakiszdodekaéderes
	$3A_4$; $4A_3$; $6A_2$	432	pentagonikozitetraéderes
	$3\bar{A}_4$; $4A_3$; 6m	$\bar{4}$3m	hexakisztetraéderes
	i; $4\bar{A}_3$; $3A_4$; $6A_2$; 9m	4/m$\bar{3}$2/m	hexakiszoktaéderes

Magyarázat: i=inverziós pont; m=tükörsík; m(h)=vízszintes tükörsík; m(v)=függőleges tükörsík
A_2=digír; A_3=trigír; A_4=tetragír; A_6=hexagír; $\bar{A}_3$=inverziós hexagiroid; $\bar{A}_4$=inverziós tetragiroid; $\bar{A}_6$=3/m

A 32 kristályosztályba (pontcsoportra) tagolódó kristályrendszerek az őket definiáló szimmetriakészlettel

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

Tipp: Az érdeklődők megismerkedhetnek a csoportelmélet matematikai hátterével az alábbi linkek és videóleckék segítségével:

http://math.unideb.hu/media/pongracz-andras/oktatasi-anyagok/csopelmEA.pdf

http://elmfiz.elte.hu/~bantay/csopelm/csopelm_bev.pdf

https://www.youtube.com/watch?v=zkADn-9wEgc

https://www.youtube.com/watch?v=g7L_r6zw4-c

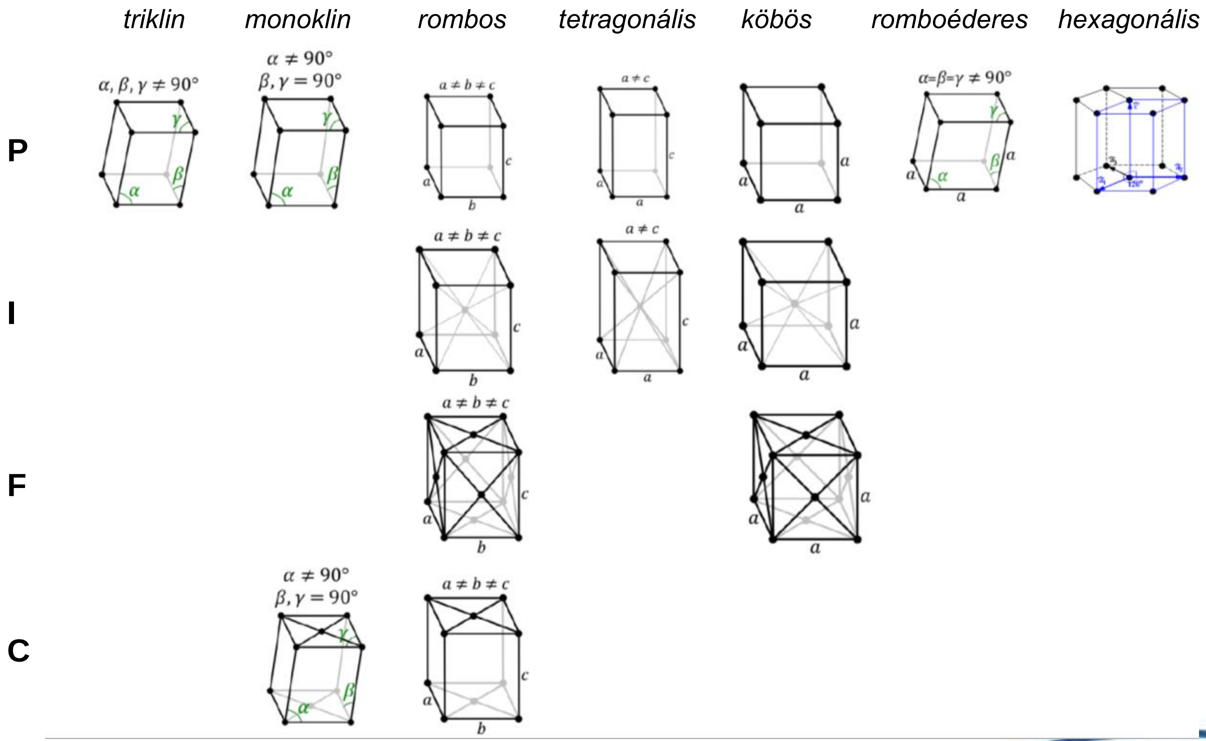
Eddig a kristályok külső morfológiájának leírásával, osztályozásával foglalkoztunk, továbbá megismerkedtünk azokkal a térbeli koordinátarendszerekkel, amelyekkel mindez szemléletessé tehető és eljutottunk az elemi cella forgalmáig. Ahhoz, hogy felépítsünk egy kristályt, tömegpontokat (anyagi tulajdonságokkal bíró részecskéket) kell „elhelyeznünk" egy rács adott koordinátájú pontjaiban. Ez azzal a következménnyel jár, hogy a kristályok belső szimmetriájával is meg kell ismerkednünk.

A kristályok belső szimmetriája

Az elemi cellán belüli identikus rácspontok kapcsolatát a ***belső szimmetriák*** adják meg. A 32 kristályosztálynál (vagy pontcsoportnál) korábban megismert szimmetriaelemek megtalálhatók a belső szimmetriák között, vagyis az elemi cellán belül is lehetnek olyan identikus rácspontok, melyek kapcsolatát kizárólag az előbbi (külső) szimmetriák valamelyike fejezi ki. ***Ha a külső szimmetriaelemek kombinálódnak az elemi cellán belüli transzlációval, akkor a transzlációs/belső szimmetriák írják le az identikus rácspontok helyét.*** Egy kristály külső morfológiáján a transzlációs szimmetriák transzlációmentesként mutatkoznak. ***A szimmetriaelemeket koordinátatranszformációjuk határozza meg.*** Ez megadja az x,y,z koordinátájú rácsponttal identikus rácspontok koordinátáit.

1. A belső szimmetriák első csoportját a ***centrálás*** alkotja, amelynek leírása Bravais nevéhez fűződik. A centrálást nagybetűkkel jelöljük. A nem centrált rácsot primitívnek nevezzük, ennek jele P, jellemzője, hogy kizárólag a cella csúcsain vannak tömegpontok. A lapon centrált rács jele megegyezik a megfelelő kristálytani tengely irányában lévő lap betűjével, azaz ebben az esetben A-, B- és C-centrálásról beszélünk. Ha a cella valamennyi lapjánal közepén egy-egy tömegpont, akkor lapon centrált, azaz F-centrált elemi cellát kapunk. Ha a cella csúcsain kívül a térbeli középpontjában van egy tömegpont, akkor I-centrált elemi celláról van szó.

Auguste Bravais portréja
https://en.wikipedia.org/wiki/Auguste_Bravais#/media/File:Bravais2.gif



A 14 lehetséges Bravais-féle elemi cella.
https://en.wikipedia.org/wiki/Bravais_lattice

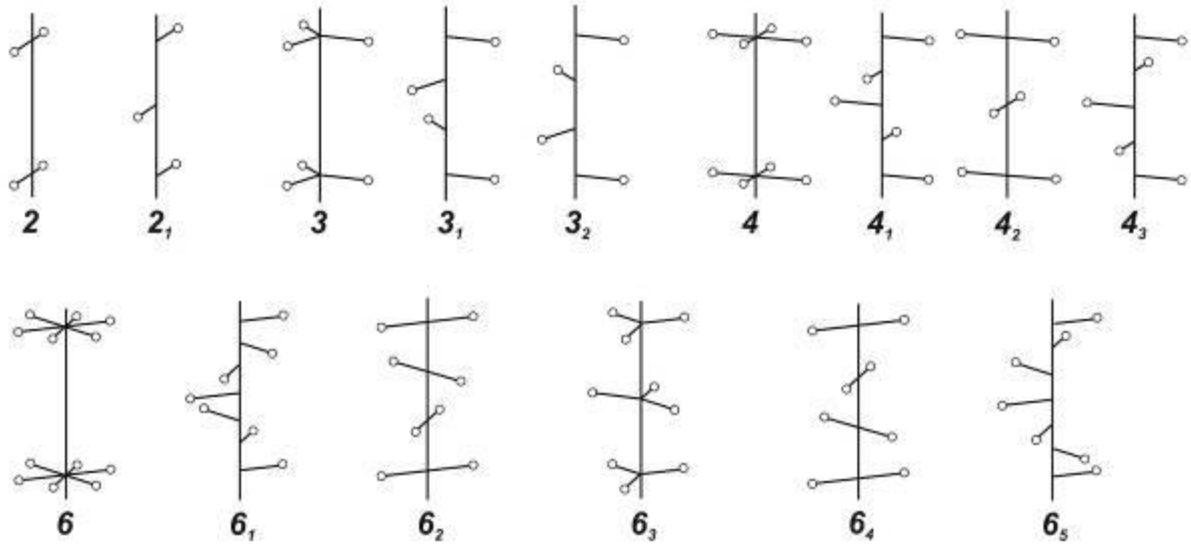
Centrált rácsokban az x,y,z koordinátájú ponttal identikus

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

rácspont(ok) koordinátái a következők:

A	**x**	**y±1/2**	**z±1/2**
B	**x±1/2**	**y**	**z±1/2**
C	**x±1/2**	**y±1/2**	**z**
I	**x±1/2**	**y±1/2**	**z±1/2**
F	**x** **x±1/2** **x±1/2**	**y±1/2** **y** **y±1/2**	**z±1/2** **z±1/2** **z**

2. Ha a rácspontokat a **2**, **3**, **4**, **6** forgástengelyek bármelyikének és a transzlációnak (**τ**) a kombinációja írja le, az együttes szimmetriát ***helikogír***nek, vagy ***csavartengely***nek nevezzük. Általános alakban $\mathbf{X_y}$ azt jelenti, hogy a forgatás 360/**X** fokkal egyenlő, miközben a transzláció mértéke **y/X** egység a csavartengely mentén. Azaz például a 2_1 csavartengely 360/2 = 180°-os elforgatásnak és 1/2 léptékű transzlációnak felel meg.

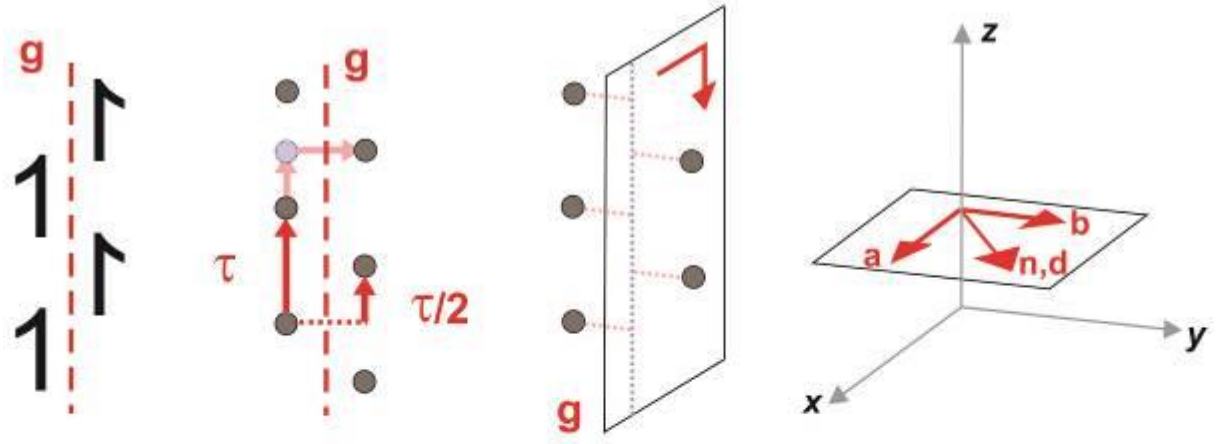


A lehetséges helikogírek.
Figyeljük meg, hogy a 3_1 és a 3_2, továbbá a 4_1 és 4_3, valamint a 6_1 és 6_5, és a 6_2 és 6_4 helikogír a tömegpontok tükörképi elrendeződését eredményezi, azaz egymás enantiomorf párjai!

3. Ha az identikus rácspontok viszonyát az **m** tükörsík és a **τ** transzláció együttese írja le, a szimmetriát ***síklatásos tükörsík***nak (**g**) nevezzük.

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

A síklatásos tükörsíkokat a transzláció iránya és nagysága szerint *a*-, *b*-, *c*-, *n*- és *d*-vel jelöljük. Az *a*, *b*, *c* rendre az **x**, **y**, **z** tengelyek irányában, *n* és *d* a tükör síkját meghatározó két tengely "átlójában" síklat **τ**-val. Az *n* és *d* összetett szimmetriaelemnek tekinthető, mert mindig csak több, különböző síkú *n,* vagy *d* együttese lehetséges. A *n*-t meghatározó transzlációk értéke (**a**±**b**)/2 vagy (**b**±**c**)/2 vagy (**c**±**a**)/2 vagy (**a**±**b**±**c**)/2, míg *d*-re ugyanez (**a**±**b**)/4 vagy (**b**±**c**)/4 vagy (**c**±**a**)/4 vagy (**a**±**b**±**c**)/4.



A síklatásos tükörsíkok által végzett műveletek értelmezése.

Tipp: A csavartengelyek és síklatásos tükörsíkok működésének jobb megértését segíthetik elő az alábbi videóleckék:

https://www.youtube.com/watch?v=5UbMFiK3LY0

https://www.youtube.com/watch?v=5XwZj0m8zEQ

https://www.youtube.com/watch?v=C8wZdLV6u-4

https://www.youtube.com/watch?v=RO76r154PB0

https://www.youtube.com/watch?v=WuZVV2jtkKo

A pontcsoportok és a Bravais-rácsok, azaz a külső és a belső szimmetriaelemek kombinációjával kapjuk a 230 lehetséges tércsoportot.

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

Vegyünk néhány egyszerű esetet! A monoklin rendszerben a következő 13 tércsoport lehetséges:

P2	P2$_1$	C2			
Pm	Pc	Cm	Cc		
P2/m	P2$_1$/m	C2/m	P2/c	P2$_1$/c	C2/c

A tércsoport-jelölés első helyén a cella centráltságát jelző nagybetű áll. Látható, hogy esetünkben 8 primitív és 4 C-centrált cella van. Ezt követi a megfelelő szimmetriaművelet jelölése. Az első sorban a **2** és a **2$_1$** érték szerepel, magyarán a digír és a **2$_1$** helikogír jele. Ez azt jelenti, hogy ebben a három tércsoportban csak forgási szimmetria létezik, két esetben egyszerű, egy esetben csavartengelynek megfelelő. A második sor 4 tércsoportjában az **m** és a **c** jelet találjuk, ami azt mutatja, hogy bennük kizárólag sík szerinti szimmetria van, két esetben normál tükörsík, két esetben pedig **c** síklatásos tükörsík. Végül a harmadik sor 6 tércsoprtjában a **2** és a **2$_1$** tengelyek, valamint az **m** és a **c** síkok törtjellel elválasztva szerepelnek, ami azt jelzi, hogy az adott gírre merőleges helyzetű a tükörsík, vagy a csúszósík. Ha most eltekintünk a transzlációs műveletektől, tehát a centrálástól, a csavartengelyektől és a csúszósíkoktól, akkor azt látjuk, hogy a monoklin rendszerben három pontcsoport lehetséges: a 2, az m és a 2/m pontcsoport, rendre az egyes sorokban.

A többi 217 lehetséges tércsoportnál analóg a jelölés, tehát nyilvánvaló, hogy a tércsoportok jelöléséből konvertálhatók a megfelelő pontcsoportok a transzlációs szimmetriák elhagyásával.

Tipp: A legtöbb ember számára problémás a tércsoportok mögött megbúvó térbeli geometria áttekintése. Megkönnyíthetik a megértést az alábbi videóleckék:

https://www.youtube.com/watch?v=NaRjGfq19GE

https://www.youtube.com/watch?v=qDGDU9S36RU

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu

Hasznos olvasnivalók a kristálytan témájában:

Koch, S., Sztrókay, K. (1986): Ásványtan. Tankönyvkiadó, Budapest.
http://mek.oszk.hu/04700/04799/pdf/asvanytan1.pdf

Pápay, L. (2006): Kristálytan, ásvány-, kőzettan. JATEPress, Szeged.

Szakáll, S. (2011): Ásvány- és kőzettan alapjai. E-tananyag, Miskolci Egyetem.
https://regi.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tamop425/0033_SCORM_MFFAT6101/adatok.html

Putnis, A. (1992): Introduction to Mineral Science. Cambridge University Press, Cambridge.

Önellenőrző kérdések (kristályosztályok, belső szimmetriaelemek, tércsoportok):

1. Mi definiálja egyértelműen az egyes kristályosztályokat?
2. Mi jellemzi az egyes kristályrendszerek koordinátarendszereit?
3. Mi az elemi cella és hogyan kapcsolódik a kristályrendszerek koordinátarendszereihez?
4. Mi a centrálás?
5. Milyen transzlációs szimmetriaműveletek vannak?

Szegedi Tudományegyetem
Cím: 6720 Szeged, Dugonics tér 13.
www.u-szeged.hu
www.szechenyi2020.hu