

Reticoli di Bravais e sistemi cristallini

Come in 2D, anche in 3D si individuano un **motivo**, che si ripete in modo periodico nello **spazio** e un **reticolo** (disposizione di punti, ciascuno che possiede lo stesso intorno per simmetria).

Nello spazio 3D esistono elementi di simmetria *traslazionale* che non sono possibili in 2D:

- in 2D: linea di scorrimento
- in 3D: piano di scorrimento (*glide plane*)
- in 3D: asse di rotazione elicogiro (*asse screw*)

Quindi, la descrizione delle diverse disposizioni possibili sarà più complessa (e non facilmente deducibile come in 2D)

Il procedimento logico utilizzato in 2D è comunque lo stesso.

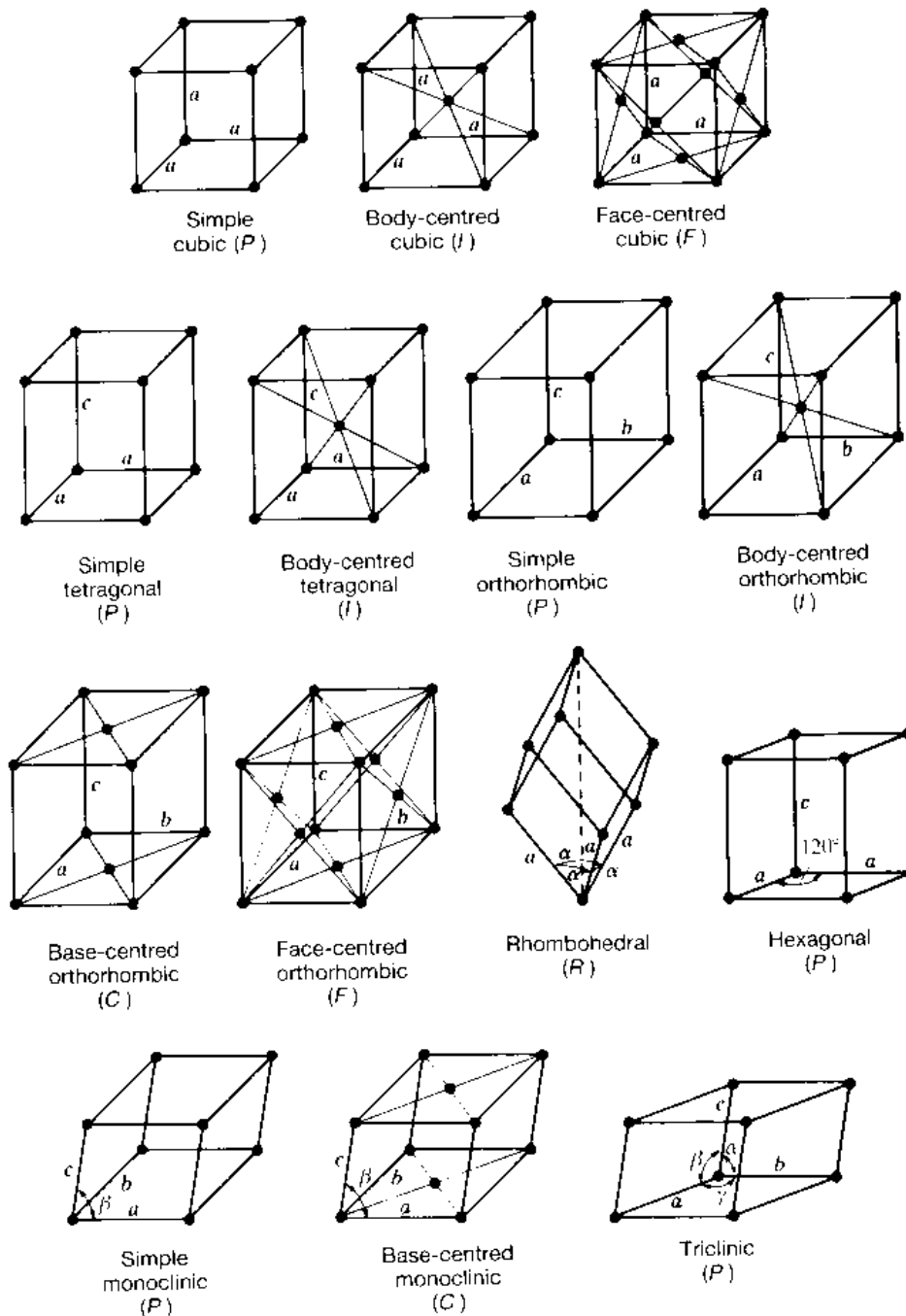
- Ci saranno 'poliedri di base' che definiranno delle unità di ripetizione ed il reticolo 3D;
- Ci sarà un numero finito di combinazioni di elementi di simmetria 3D (gruppi spaziali).

Il lavoro sistematico (geometrico) è stato iniziato da Frankenheim (1835) che ha proposto 15 reticoli 3D differenti.

Bravais ha dimostrato (1848) che due di essi erano 'identici', analoghi 3D dei reticoli planari a base rombica o a base rettangolare centrata.

I reticoli 3D possibili, indipendenti, sono solo 14!

Reticoli di Bravais



- Ogni reticolo è caratterizzato da vettori di base \mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c} .
- Normalmente si indicano le loro lunghezze a , b e c e gli angoli interassiali α , β e γ .
- N.B. α è l'angolo opposto ad \mathbf{a} , β opposto a \mathbf{b} , γ opposto a \mathbf{c} .
- Tipicamente si usa un sistema di riferimento destrorso, in modo che $V = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})$ sia positivo.

Reticolo Cubico	$a = b = c;$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Reticolo Tetragonale	$a = b \neq c;$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Reticolo Ortorombico	$a \neq b \neq c;$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Reticolo Romboedrico	$a = b = c;$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Reticolo Esagonale	$a = b \neq c;$	$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$
Reticolo Monoclino	$a \neq b \neq c;$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \quad \beta \neq 90^\circ$
Reticolo Triclino	$a \neq b \neq c;$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma = 90^\circ$

\neq significa *non necessariamente uguale a*

Le celle **P** sono **P**rimitive

un punto reticolare per cella unitaria: $8 \times 1/8 = 1$

Le celle **I** sono a corpo centrato (**I**nnnerzentrierte)

due punti reticolari per cella unitaria: $8 \times 1/8 + 1 \times 1 = 2$

Le celle **F** sono a facce centrate (**F**ace-centered)

quattro punti reticolari per cella unitaria: $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$

Le celle **C** sono a base centrata (opposta a **c**)

Due punti reticolari per cella unitaria: $8 \times 1/8 + 2 \times 1/2 = 2$

Analogamente per basi centrate **A** e **B** (due punti reticolari).

I 14 reticoli di Bravais si possono ottenere per impilamento dei diversi (5) reticoli planari:

- Il cubico ed il tetragonale da reticoli planari quadrati **P** uno sull'altro (**P**) o sfalsati (di $1/2, 1/2, 1/2$ per **I**; di $1/2, 1/2, 0$ per **F**)
- Gli ortorombici **P** ed **I** da reticoli planari rettangolari **P**
- Gli ortorombici **C** ed **F** da reticoli planari rettangolari **C**
- I monoclino e triclini da reticoli planari obliqui (risp. *eclissati* o *parzialmente sfalsati*)

- Il romboedrico e l'esagonale da reticoli planari esagonali (con vettore di traslazione $1/3, 2/3, z$ o *eclissati*, risp.)

Sequenza AAA: reticolo esagonale **P**

Sequenza ABC: reticolo romboedrico **R**

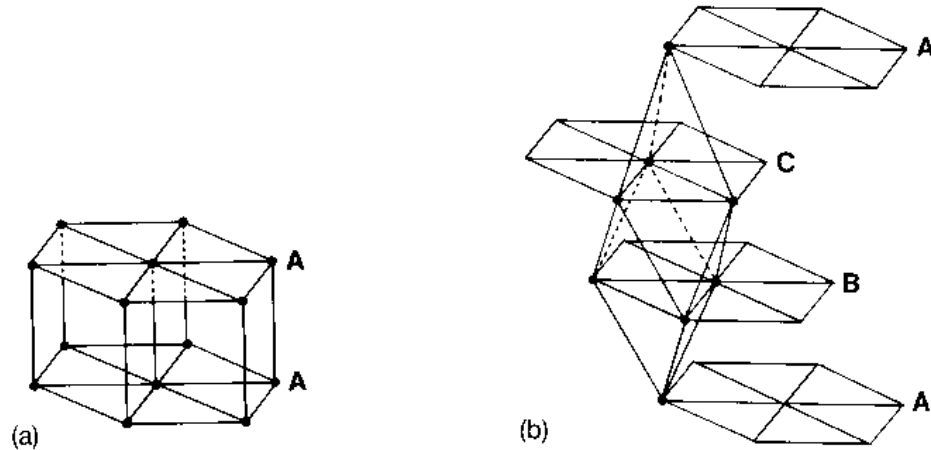
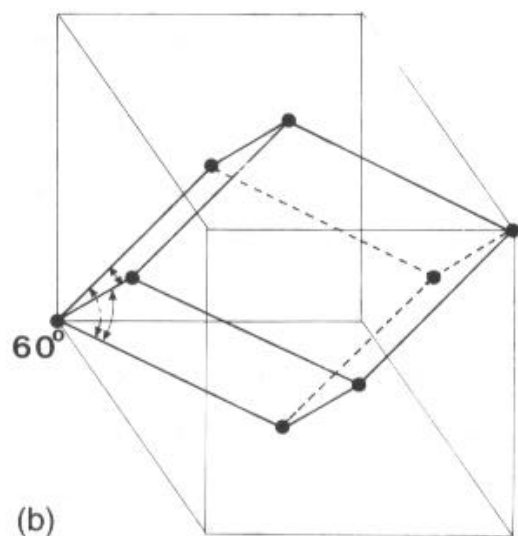
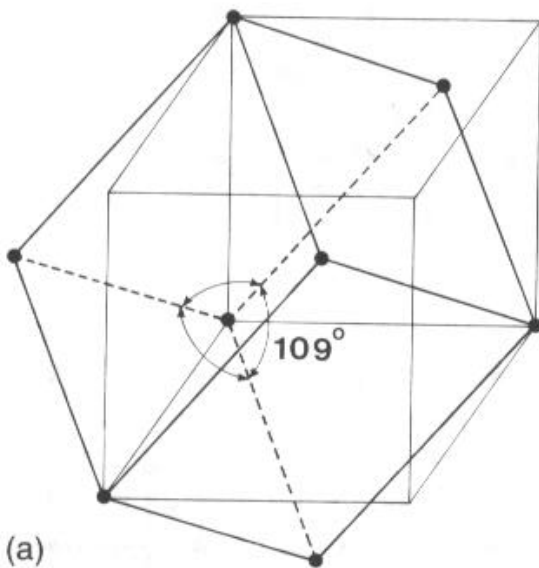


Fig. 3.3. Stacking of hexagonal layers of lattice points in (a) the hexagonal lattice and (b) the rhombohedral lattice.

Casi romboedrici *speciali*:

- $\alpha = 90^\circ$ reticolo cubico **P**
- $\alpha = 60^\circ$ reticolo cubico **F**
- $\alpha = 109.47^\circ$ reticolo cubico **I**



Perché non esiste un reticolo di simmetria ortorombica **A**?
 Perché è equivalente ad un reticolo ortorombico **C**.
 (basta *rinominare* gli assi...)

Perché non esiste un reticolo di simmetria monoclina **A**?
 Perché è equivalente ad un reticolo monoclino **C**.
 (basta *scambiare a* con *c*)

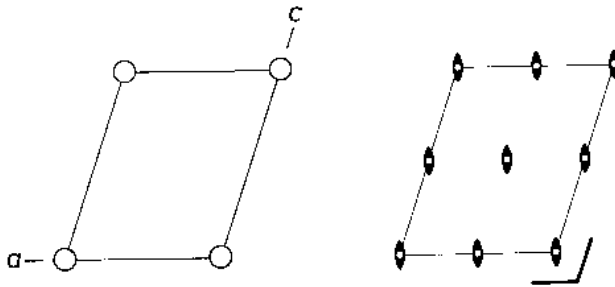


Fig. 6.25. The monoclinic P-lattice and its symmetry elements projected onto $x, 0, z$ (\circ lattice point with $y=0$)

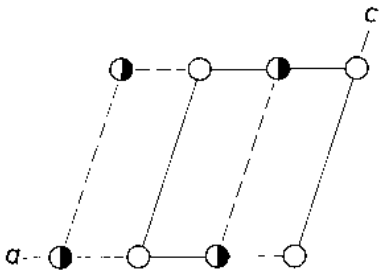


Fig. 6.26. The monoclinic C-lattice projected on $x, 0, z$ (\bullet represents a lattice point with $y = \frac{1}{2}$)

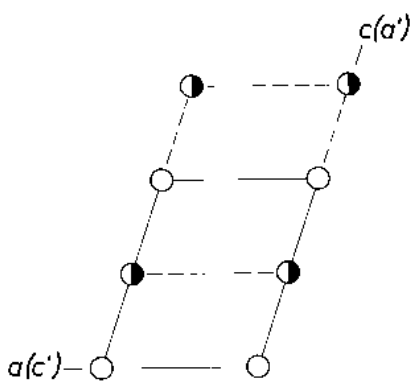


Fig. 6.27. The monoclinic A-lattice (a_0, b_0, c_0) can, by interchanging a and c , be converted to a monoclinic C-lattice (a'_0, b_0, c'_0)

Perché non esiste un reticolo di simmetria monoclina **B**?
 Perché è equivalente ad un reticolo monoclinico **P** di $\frac{1}{2}$ volume.
 (basta *combinare* gli assi **a** e **c**)

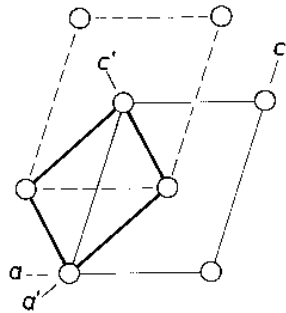


Fig. 6.28. The monoclinic B-lattice (a_0, b_0, c_0) can be converted to a smaller monoclinic P-lattice (a'_0, b_0, c'_0)

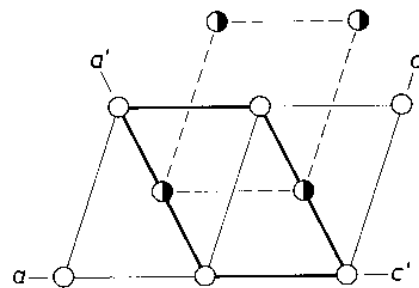


Fig. 6.29. The monoclinic I-lattice (a_0, b_0, c_0) can be converted to a monoclinic C-lattice (a'_0, b_0, c'_0)

Perché non esiste un reticolo di simmetria monoclina **I**?
 Perché è equivalente ad un reticolo monoclinico **C**.
 (basta *combinare* gli assi **a** e **c**)

Perché non esiste un reticolo di simmetria monoclina **F**?
 Perché è equivalente ad un reticolo monoclinico **C** di $\frac{1}{2}$ volume

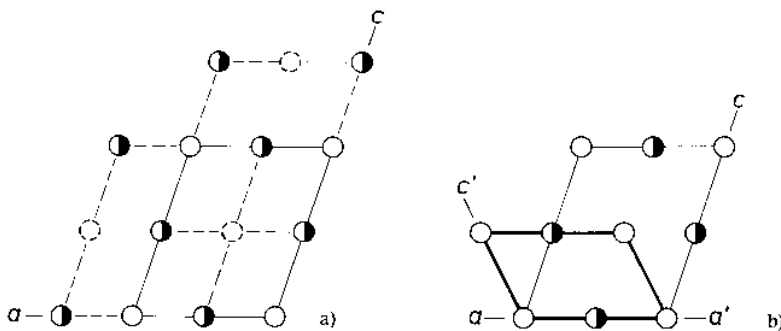


Fig. 6.30a,b. The development of the monoclinic F-lattice **a**. The monoclinic F-lattice (a_0, b_0, c_0) can be converted to a monoclinic C-lattice (a'_0, b_0, c'_0) **b**

Perché non esiste un reticolo di simmetria tetragonale **F**?
 Perché è equivalente ad un reticolo tetragonale **I** di $\frac{1}{2}$ volume

La simmetria dei 14 reticoli di Bravais

- Le 'celle unitarie' di Bravais sono le 'molecole integranti' definite da Haüy.
- Quindi, l'aspetto e la forma macroscopica 'osservabile' dei cristalli dipenderà dalla forma e simmetria dei reticoli di Bravais.
- La simmetria di ogni reticolo è una simmetria *puntuale*, determinata dall'insieme di piani ed assi di simmetria: tale collezione si chiama *gruppo di simmetria puntuale*.

La (co)presenza e natura di diversi elementi è determinata da regole di mutua compatibilità:

- P.es. due assi binari ortogonali ne generano un terzo ortogonale ad ambedue.
- Esistono regole di autoconsistenza (gruppo matematico)

Il gruppo di simmetria puntuale *prescinde* dalla centratura del reticolo, ovvero i reticoli cubici **P**, **F** ed **I** appartengono alla stesso **sistema cristallino**.

Il concetto (storico) di **sistema cristallino** è essenzialmente di carattere morfologico e solo secondariamente strutturale.

I **7** sistemi cristallini sono caratterizzati dai diversi raggruppamenti determinati dalla simmetria puntuale dei **14** reticoli di Bravais:

- Cubico, Tetragonale, Ortorombico, Monoclino, Triclino.
- Dal **reticolo** Esagonale si possono generare due **sistemi**: Trigonale ed Esagonale.
- Dal **reticolo** Romboedrico si genera unicamente un **sistema** Trigonale; tale reticolo può *alternativamente* essere *descritto* da un **reticolo** Esagonale con centratura **R** (sistema Trigonale!).

Tutti i reticoli posseggono centri di inversione.
 La struttura cristallina potrebbe non averne.
 Quindi simmetria del reticolo, sistema cristallino e gruppo di simmetria puntuale possono non coincidere
 (ma avere relazioni di gruppo-sottogruppo)

Sistema cristallino	Reticolo di Bravais	Minima simmetria richiesta
Cubico	P, I, F	4 assi ternari a 109.47°
Tetragonale	P, I	1 asse quaternario (4 o -4)
Ortorombico	P, C, I, F	3 assi binari a 90°
Trigonale	Hex P, R	1 asse ternario (3)
Esagonale	P	1 asse senario (6 o -6)
Monoclino	P, C	1 asse binario (2) o piano (m = -2)
Triclino	P	Nessuna