

Descrittori quantitativi della geometria cristallina: assi, piani ed indici.

- Assi di cella (con angoli interassiali)
- Reticolo di Bravais
- Simmetria puntuale (classi)
- Simmetria spaziale

Come individuare generiche direzioni, piani, assi (anche in sistemi non ortogonali)?

Attribuiremo 'coordinate' (terne di numeri, per lo più interi) ad enti geometrici i più disparati:

Es: Diagonale di corpo di un cubo	$\langle 111 \rangle$
Forma del cubo	$\{100\}$
Forma di un ottaedro	$\{111\}$

Passaggi logici fondamentali:

- Definire esattamente la cella ed il reticolo di Bravais.
- Utilizzare coerentemente celle e descrittori diversi, eventualmente conoscendo come passare da cella a cella e tra relativi descrittori
- P.es. Trigonale - Esagonale
- P.es. Romboedrico con α speciale: \implies Cubico F o Cubico I

Definizioni:

ZONA:

Collezione di facce o piani in un cristallo le cui intersezioni sono parallele.

ASSE DI ZONA:

La direzione comune alle intersezioni di piani di una ZONA

Qualsiasi direzione in un cristallo può essere un ASSE DI ZONA, quindi i concetti di ASSE DI ZONA e DIREZIONE sono sinonimi.

Esempio: Matita (prisma esagonale):

Le facce laterali hanno intersezioni tutte parallele tra di loro, costituiscono una ZONA, con ASSE lungo la direzione di allungamento della matita.

N.B. Il numero di facce che appartengono ad una ZONA non è limitato:

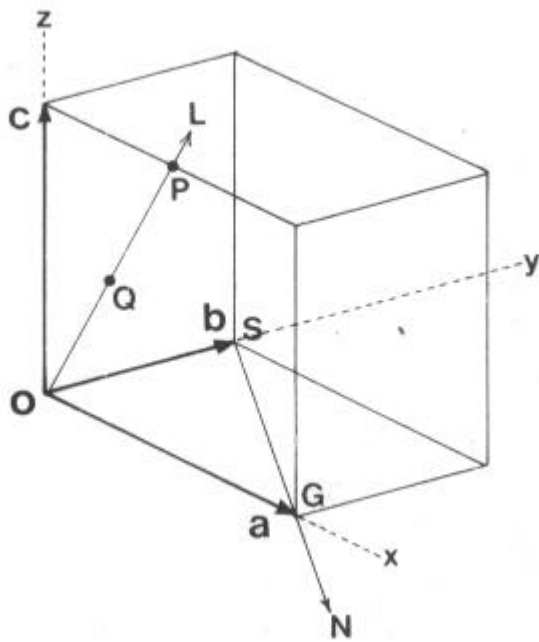
Un prisma retto a sezione dodecagonale ha 12 facce in ZONA

Oppure:

Per un prisma retto di tipo ortorombico, facce diverse (di diversa estensione, simmetria e natura) sono in ZONA tra loro, a seconda che si scelga la DIREZIONE x , y o z .

Problema:

Come individuare in modo univoco una DIREZIONE?



- Si voglia caratterizzare la direzione OL.
- Si prende una retta passante per l'origine della cella unitaria.
- Si individua un punto P sulla direzione OL, tale che $|OP|$ non sia nullo.
- Si individuano le coordinate frazionarie (degli assi di cella a, b e c) del punto P. In questo caso P è in $\frac{1}{2}, 0, 1$.
- Si rinormalizzano queste coordinate ad interi tali che i rapporti vengano mantenuti e le si inserisce tra parentesi QUADRE: $[1\ 0\ 2]$
- $[102]$ è il SIMBOLO per la DIREZIONE OL

E se avessimo scelto il punto Q, piuttosto che P (che era arbitrario...)?

- Q ha coordinate $\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{2}$; normalizzando, si ha ancora $[102]$

Esempio: Calcolare il simbolo della direzione SN

- Mettendo l'origine in S, N ha coordinate $1, -1, 0$, cioè $[1-10]$
- (One, Bar One, Zero: Bar One è Uno SOPRASEGNATO)

Le DIREZIONI nei cristalli sono vettori, i cui componenti in termini dei vettori di base (della cella unitaria) sono, p.es.:

$$\text{per OL: } \mathbf{r}_{102} = 1\mathbf{a} + 0\mathbf{b} + 2\mathbf{c}$$

$$\text{per SN: } \mathbf{r}_{1-10} = 1\mathbf{a} - 1\mathbf{b} + 0\mathbf{c}$$

Una DIREZIONE generale si indica con $[uvw]$ e corrisponde a:

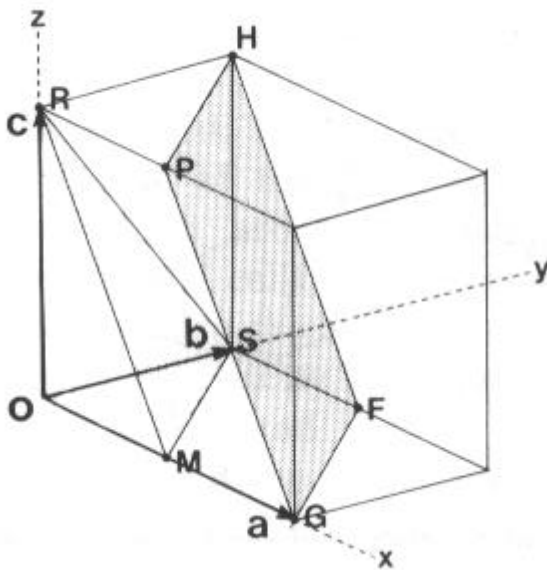
$$\mathbf{r}_{uvw} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$$

Con questa notazione, i vettori di base (\mathbf{a} , \mathbf{b} e \mathbf{c}) si indicano spesso con:

$$\mathbf{a} \text{ (asse x)} = [100] \quad \mathbf{b} \text{ (asse y)} = [010] \quad \mathbf{c} \text{ (asse z)} = [001]$$

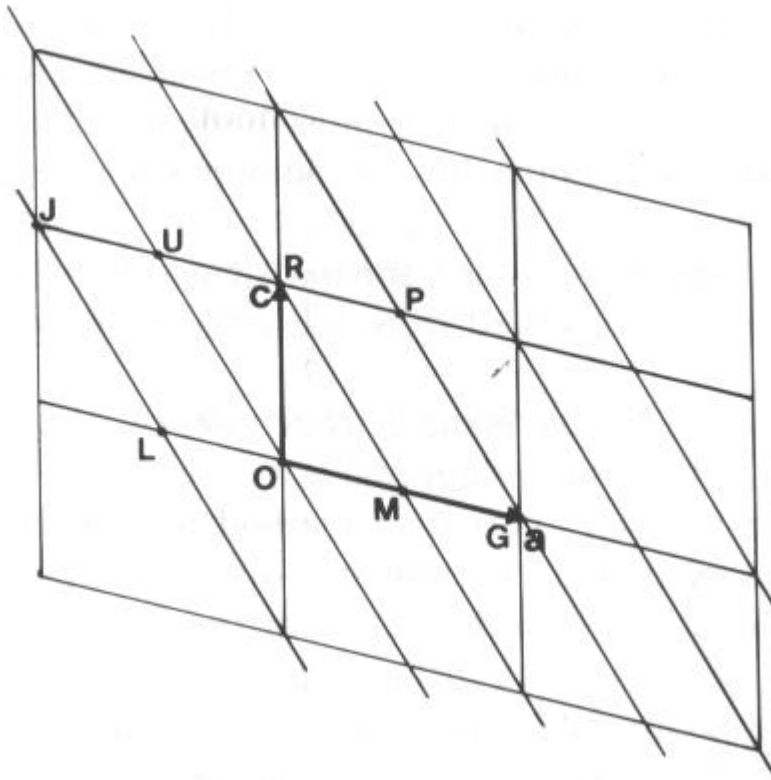
Problema:

Come individuare in modo univoco un PIANO?



Il piano NON deve passare per l'origine.

- Che simbolo assegnamo al piano RMS (che si estende in modo infinito nel cristallo...)? Il triangolo RMS è solamente la porzione contenuta nella cella unitaria della figura.
- Stiamo assegnando un simbolo non ad un PIANO, ma ad una FAMIGLIA di PIANI PARALLELI, come RMS e HFPG (e quello che passa per l'origine!).



Piani paralleli diversi intersecano origini di celle diverse, ma hanno identiche inclinazioni e corrispondono a traslazioni reticolari.

- Per RMS, individuare le intercette sugli assi ($\frac{1}{2}\mathbf{a}$, \mathbf{b} , \mathbf{c})
- In termini frazionari = $\frac{1}{2}$, 1, 1
- Individuare i RECIPROCI: 2, 1, 1; inserirli in parentesi TONDE (211)
- (211) è l'indice di Miller del piano RMS

E per il piano HFPG?

- Estendendo il piano oltre i limiti di cella: ($1\mathbf{a}$, $2\mathbf{b}$, $2\mathbf{c}$)
- In termini frazionari = 1, 2, 2
- Reciproci: 1, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, che, normalizzati ad interi, danno (211)

E per il piano all'origine?

- Intersezioni in 0, 0, 0: Indice di Miller indeterminato ($\infty\infty\infty$)

E per un piano dall'altra parte dell'origine (JL)?

Intersezioni in $-\frac{1}{2}\mathbf{a}$, $-\mathbf{b}$, $-\mathbf{c}$ Indice di Miller (-2-1-1), cioè (211)

Gli indici di Miller (hkl) di un generico piano si derivano dalle posizioni delle intercette frazionarie sui diversi assi del primo piano della famiglia:

Intercette in: a/h , b/k , c/l

La famiglia di piani (hkl) contiene il primo piano con intercette a/h , b/k , c/l

Un secondo piano parallelo ha intercette $2a/h$, $2b/k$, $2c/l$

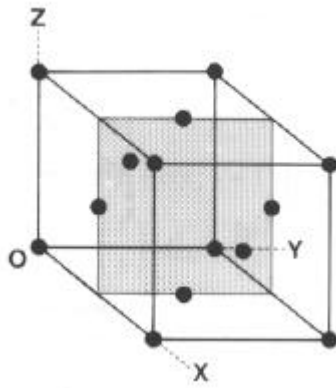
Ovvero: Si incontrano h piani nel passare da un vertice della cella al vertice successivo lungo **a**.

Analogamente si incontrano k piani lungo **b** e l piani lungo **c**.

Gli indici di Miller si applicano anche a FACCE di poliedri (o cristalli macroscopici)

- Convenzionalmente, l'origine è al centro del cristallo.
- L'intercetta sarà a diversi milioni di passi di cella (in funzione delle dimensioni del cristallo).
- I rapporti delle intercette frazionarie saranno comunque esprimibili da numeri INTERI: Indici di Miller di una faccia saranno quelli della famiglia cui la faccia appartiene!
- Collegamento con la *legge degli indici razionali* (Haüy!)
- Quando un piano è in ZONA con una direzione, la sua intercetta con essa è infinita.
- Per la faccia frontale di un prisma retto (z verticale), l'intercetta è in n, ∞, ∞ , i cui reciproci sono $1/n, 0, 0$: indici di Miller (100)

Generalmente, gli indici di Miller sono interi primi tra loro. In qualche caso usare dei multipli comuni permette di individuare specificatamente un piano all'interno di una famiglia (per reticoli non primitivi...)



- Cubico F: Il piano indicato ha intercette $\frac{1}{2}$, ∞ , ∞ ed indici di Miller (200).
- La famiglia di piani con indici (100) deriva dalla normalizzazione di intercette del tipo (n00).
- (100) e (200) indicano due piani specifici, paralleli tra loro, che descrivono piani fisici differenti.
- Facce esterne di cristalli non soffrono di questa ambiguità.

Uso dei simboli di asse di zona e di indici di Miller per descrivere simbolicamente la simmetria dei cristalli.

Esempio per sistema cubico:

assi coordinati: $x = [100]$; $y = [010]$; $z = [001]$

(assi nel verso negativo) $-x = [-100]$; $-y = [0-10]$; $-z = [00-1]$

Ma gli assi sono intercambiabili ed equivalenti per simmetria:
 $[100]$; $[010]$; $[001]$; $[-100]$; $[0-10]$; $[00-1]$ = $\langle 100 \rangle$

In parentesi TRIANGOLARI si individuano tutte le varianti per simmetria (scambi e permutazioni incluse)

Collettivamente,

- Le 4 diagonali di corpo del cubo si esprimono con $\langle 111 \rangle$, di cui esistono 8 varianti:
[111]; [-111]; [1-11]; [11-1]; [-1-11]; [-11-1]; [1-1-1]; [-1-1-1]
- I 12 assi binari (spigolo a spigolo) sono inclusi in $\langle 110 \rangle$
- Per una direzione generica $\langle uvw \rangle$ ci sono 48 varianti

Si possono raggruppare in FORME {parentesi graffe} indici di Miller di piani **equivalenti** per simmetria:

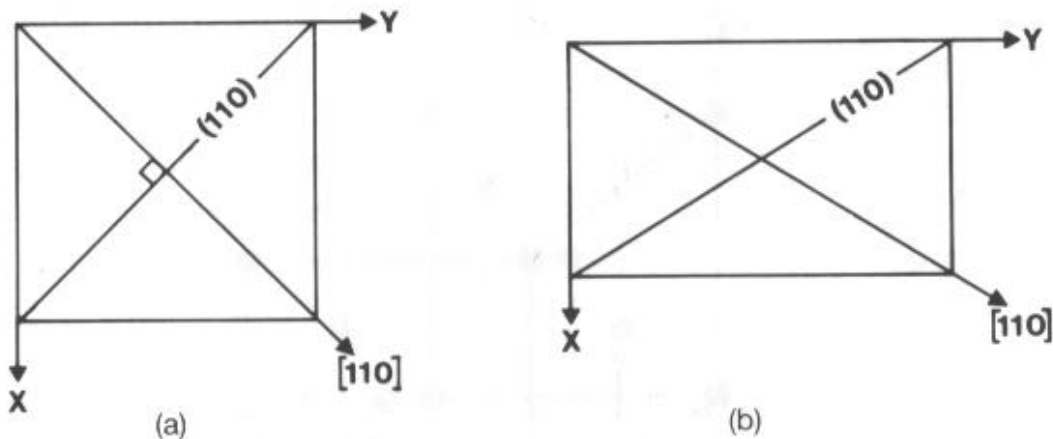
{100} è la collezione di 6 facce o piani: Forma del CUBO

{111} è la collezione di 8 facce o piani: Forma dell'OTTAEDRO

Se da {111} tolgo il centro di simmetria, rimangono quattro facce: (111); (1-1-1); (-11-1); (-1-11): forma del TETRAEDRO

SOLAMENTE in cristalli cubici vale la regola che direzioni $[uvw]$ sono perpendicolari a piani (uvw) .

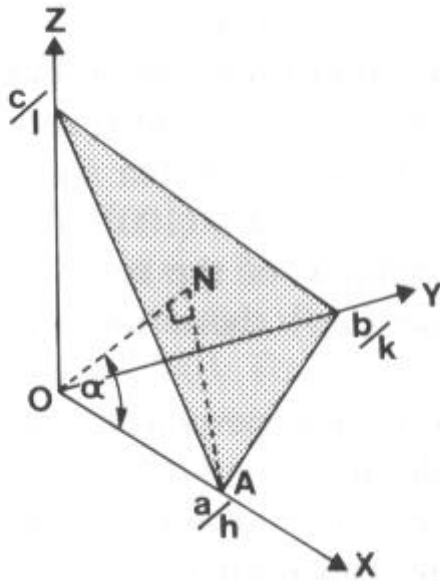
- **In generale questo NON è vero:**



(anche esistono casi speciali: (100) e [100] in sistemi RETTI)

DISTANZE INTERPLANARI: Indici di Miller e di Laue

La distanza che separa due piani contigui (misurata lungo la normale ad essi) si può calcolare sapendo che, per un piano di indici (hkl), essa coincide con la sua distanza dall'origine (dove passa un altro piano!):



- Distanza da O = $|ON|$;
- Angolo AON = α ;
- Angolo ONA = 90° per costruzione

- $|OA| \cos \alpha = |ON|$
- $(a/h) \cos \alpha = d_{hkl}$
- $\cos \alpha = (h/a) d_{hkl}$

- Analogamente:
- $\cos \beta = (k/b) d_{hkl}$
- $\cos \gamma = (l/c) d_{hkl}$

Per assi ortogonali: $\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$ (Pitagora)

$$(h/a)^2 d_{hkl}^2 + (k/b)^2 d_{hkl}^2 + (l/c)^2 d_{hkl}^2 = 1$$

Per un cristallo cubico: $1/d_{hkl}^2 = 1/a^2 * (h^2+k^2+l^2)$

I concetti di piano reticolare e di distanza interplanare sono alla base della definizione di reticolo reciproco e dell'equazione di Bragg:

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta$$

dove n è l'ordine di una riflessione, λ è la lunghezza d'onda della radiazione incidente, d_{hkl} è la separazione tra i piani riflettenti e θ è l'angolo di incidenza e riflessione.

Nella legge di Bragg è fondamentale distinguere tra piani *reticolari* e piani *riflettenti*:

- Tranne nel caso di reticoli NON primitivi, gli **indici di Miller** NON hanno fattori comuni;
- Piani riflettenti distinti POSSONO avere indici con fattori comuni, detti **indici di Laue (indicati SENZA parentesi...)**;
- Che relazione esiste fra gli indici di Miller e quelli di Laue?

Per il piano reticolare (111) posso avere fisicamente più riflessioni:

1. Prim'ordine: $1\lambda = 2d_{111} \sin \theta_1$
2. Second'ordine: $2\lambda = 2d_{111} \sin \theta_2$
3. Etc... $n\lambda = 2d_{111} \sin \theta_n$

Per ogni ordine di riflessione, posso riscrivere la relazione di Bragg:

$$1\lambda = 2(d_{111}/n) \sin \theta_n$$

- Ovvero: riflessioni di ordine n possono essere viste come riflessioni del prim'ordine di piani (reticolari non esistenti) con distanza interplanare (d_{111}/n) (indici di Laue nnn)
- Piani di tipo 222 non sono piani reticolari, ma solo uno su due passa per i nodi del reticolo
- Per abitudine, in esperimenti di diffrazione, si tende a dimenticare la distinzione tra (hkl) ed hkl . Il riflesso $2h,2k,2l$ è comunemente inteso come quello derivante dal piano hkl ($n = 2$) o, il che è equivalente, dal piano 'fittizio' $2h,2k,2l$ per $n=1$
- In reticoli NON primitivi: I piani (100) e (200) sono ambedue piani reticolari distinti; I riflessi 100 e 200 derivano da interferenza per $n = 1$ e $n = 2$ della stessa distanza d_{100} (o, il che è equivalente, da distanze distinte d_{100} e d_{200} (ma questa volta i piani (200) non sono fittizi!))

Relazioni matematiche tra enti geometrici dei cristalli:

- **La legge di ZONA (o legge di Weiss):**

Se un piano (hkl) giace in una zona $[uvw]$ (ovvero, se la direzione $[uvw]$ è parallela al piano (hkl) , allora

$$hu + kv + lw = 0$$

- **Asse di zona come intersezione tra due piani:**

La linea di intersezione tra due piani in una zona $(h_1k_1l_1)$ e $(h_2k_2l_2)$ costituisce l'asse di zona $[uvw]$, dove:

$$u = (k_1l_2 - k_2l_1); v = (l_1h_2 - l_2h_1); w = (h_1k_2 - h_2k_1);$$

Mnemonicamente:

		M1	M2	M3		
h_1	k_1	l_1	h_1	k_1	l_1	
h_2	k_2	l_2	h_2	k_2	l_2	
	u	v	w			

$$u = \det(M1) = +k_1l_2 - k_2l_1, \text{ etc.}$$

- **Piano parallelo a due direzioni:**

Date due direzioni $[u_1v_1w_1]$ e $[u_2v_2w_2]$, il piano parallelo ad ambedue si costruisce in modo analogo con:

		M1	M2	M3		
u_1	v_1	w_1	u_1	v_1	w_1	
u_2	v_2	w_2	u_2	v_2	w_2	
	h	k	l			

$$h = \det(M1) = +v_1w_2 - v_2w_1, \text{ etc.}$$

• **La regola dell'addizione:**

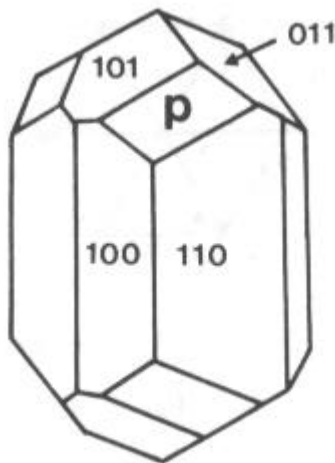
Siano dati due piani $(h_1k_1l_1)$ e $(h_2k_2l_2)$ che giacciono in una zona. L'indice di Miller di *qualsiasi* altro piano (HKL) in zona con questi piani è dato da:

$$H = (mh_1 + nh_2); \quad K = (mk_1 + nk_2); \quad L = (ml_1 + nl_2),$$

con m e n interi (piccoli);

Ovvero: (HKL) è combinazione lineare di $(h_1k_1l_1)$ e $(h_2k_2l_2)$

Esempio:



Problema:

Determinare l'indice di Miller del piano P, che giace sia nella zona determinata da (100) e (011) , che in quella determinata da (110) e (101) .

L'indice di Miller di P deve essere ottenibile come combinazione lineare sia della prima coppia che della seconda:

$$\begin{array}{llll} \text{A tentativi:} & (101) + (110) & = (211) & (m=1, n=1) \\ & (011) + 2(100) & = (211) & (m=1, n=2) \end{array}$$

Indicizzazione nei sistemi trigonale ed esagonali:

I reticoli romboedrici ed esagonali sono basati sull'impilamento di reticoli planari esagonali in sequenza ABCABC... (romboedrico) o AAA.. (esagonale semplice).

Per convenzione, gli strati esagonali stanno alla 'base' della cella (assi **a** e **b**), mentre l'asse **c** ne è perpendicolare, e parallelo alla direzione di impilamento.

Si possono usare almeno TRE diverse celle di riferimento:

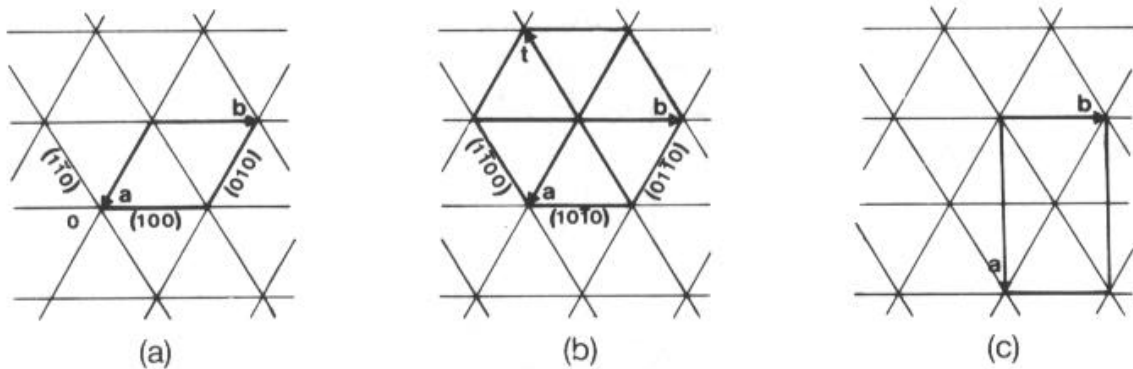


Fig. 5.8. Hexagonal net of the hexagonal *P* lattice showing (a) primitive hexagonal unit cell with the traces of the six prism faces indexed $\{hkl\}$, (b) hexagonal (four-index) unit cell with the traces of the six prism faces indexed $\{hkil\}$, (c) orthohexagonal (*Base* or *C-centred*) unit cell.

Come in (a): *cella esagonale primitiva*, con assi **a** e **b** di lunghezza uguale e con angolo $\gamma = 120^\circ$. Questa scelta semplice NON rivela la simmetria esagonale del reticolo.

P.es., le facce laterali (equivalenti per simmetria! – forma $\{100\}$) di un prisma esagonale retto hanno indici di Miller del tipo:

(100), (010), (1-10) (più le centrosimmetriche),

facendole sembrare di tipo e natura diverse!

Per superare questa apparente incongruenza, si introduce un QUARTO asse (NON indipendente!), chiamato u , a 120° sia da x che da y .

I quattro assi di Miller-Bravais x, y, u, z sono definiti da vettori di cella $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{t}, \mathbf{c}$, e implicano indici di Miller-Bravais di tipo $(hkil)$

Si introduce così una *cella esagonale primitiva a 4 assi* (b) con indici $(hkil)$ o $(hk.l)$, dove, **per costruzione**, $\mathbf{h} + \mathbf{k} + \mathbf{i} = \mathbf{0}$, ovvero $\mathbf{i} = -(\mathbf{h} + \mathbf{k})$

- **La forma {10-10}** comprende **(10-10), (01-10); (1-100) (più le centrosimmetriche!)**
- **La forma {10.0}** comprende: **(10.0), (01.0); (1-1.0) (più le centrosimmetriche!)**

La terza scelta, © prevede una cella ortoesagonale (ortorombica con $a/b = \sqrt{3}$), che non evidenzia la simmetria esagonale del reticolo, ma può essere usata quando piccole distorsioni dall'idealità fanno scendere la simmetria da vera esagonale a reale ortorombica.

Anche per gli assi di zona si usano 4 indici (simboli di Weber), del tipo $[UVTW]$, tale per cui $U + V + T = 0$

Come si passa da $[uvw]$ a $[UVTW]$?

$$U = 1/3 (2u-v); \quad V = 1/3 (2v-u); \quad T = -U+V; \quad W = w$$

Con questa convenzione, gli assi x, y ed u si trasformano in:

$$x = [2-1-10]; \quad y = [-12-10]; \quad u = [-1-120];$$

La trasformazione inversa da $[UVTW]$ a $[uvw]$ si ottiene con:

$$u = (U-T); \quad v = (V-T); \quad w = W;$$

Con gli indici di Miller-Bravais (piani) e simboli di Weber (assi), la legge di Weiss diventa:

$$\mathbf{hU + kV + iT + IW = 0}$$

In conclusione, un simbolo del tipo (111) per un sistema trigonale od esagonale può significare più cose, a seconda che il riferimento sia:

- la cella primitiva esagonale (tipo a);
- la cella ortoesagonale C (centrata in **ab**) (tipo c);
- la cella esagonale a 4 assi (tipo b), e significa (11-21), ovvero (11.1)

Trasformazioni di cella, di indici di Miller e di simboli di zona:

NON SOLO per i sistemi trigonali ed esagonali sono necessarie relazioni geometriche che trasformano celle, indici e simboli vari, dato che, p.es., alcune scelte convenzionali possono non essere adottate da tutti;

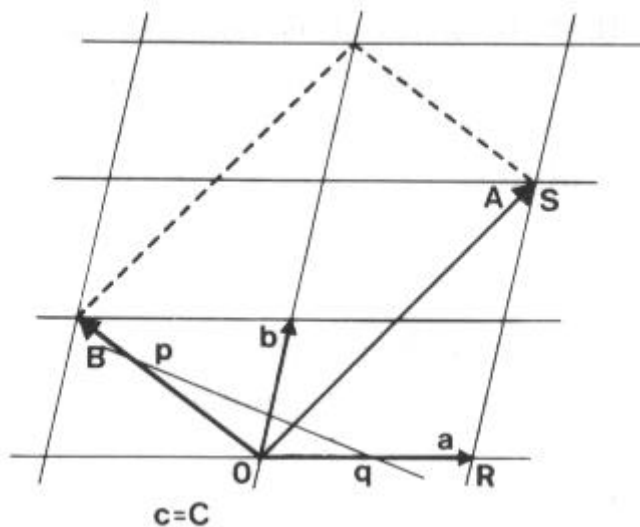
Es. storico:

per anni l'asse unico del sistema monoclinico era **c**, (non **b**)

Es. comune: Uso di Monoclinico I, al posto di Monoclinico C

Ci aiuta in queste trasformazioni *l'algebra matriciale*.

Esempio:



Due diverse celle possono descrivere il reticolo bidimensionale della figura (immaginata con il terzo asse perpendicolare al foglio):

I cella: **a, b, c**

II cella: **A, B, C**

Ovviamente: **c = C**

Ma come sono correlati a,b con A, B?

Per costruzione: $\mathbf{A} = \mathbf{a} + 2\mathbf{b}$ e $\mathbf{B} = -\mathbf{a} + \mathbf{b}$

Ovvero: $\mathbf{A} = 1\mathbf{a} + 2\mathbf{b} + 0\mathbf{c}$
 $\mathbf{B} = -1\mathbf{a} + 1\mathbf{b} + 0\mathbf{c}$
 $\mathbf{C} = 0\mathbf{a} + 0\mathbf{b} + 1\mathbf{c}$

In termini matriciali:

Per VETTORI COLONNA:

$$\begin{array}{l} |\mathbf{A}| \\ |\mathbf{B}| \\ |\mathbf{C}| \end{array} = \begin{array}{l} | \quad 1 \quad 2 \quad 0 | \\ | -1 \quad 1 \quad 0 | \\ | \quad 0 \quad 0 \quad 1 | \end{array} \begin{array}{l} | \mathbf{a} | \\ | \mathbf{b} | \\ | \mathbf{c} | \end{array}$$

Matrice M

Per VETTORI RIGA:

$$|\mathbf{A} \ \mathbf{B} \ \mathbf{C}| = |\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}| \begin{array}{l} | \quad 1 \quad -1 \quad 0 | \\ | \quad 2 \quad 1 \quad 0 | \\ | \quad 0 \quad 0 \quad 1 | \end{array}$$

Matrice Trasposta M^T

Per la I cella (\mathbf{abc}), siano (hkl) e $[uvw]$ piani ed assi;

Per la II cella (\mathbf{ABC}), siano (HKL) e $[UVW]$ piani ed assi;

Trasformazione degli indici di Miller (hkl) in (HKL):

Il piano generico di traccia pq sia il primo piano fuori dall'origine:

Per definizione, pq ha intercette a/h su \mathbf{a} , A/H su \mathbf{A} , b/k su \mathbf{b} , etc.

Ma: h è anche il numero di piani che sono intercettati lungo il vettore \mathbf{a}

H è il numero di piani intercettati lungo \mathbf{A} ; etc.

h è il numero di piani intercettati lungo \mathbf{a} (da O a R)

$2k$ è il numero di piani intercettati lungo $2\mathbf{b}$ (da R a S)

Quindi, il numero di piani intercettati lungo $\mathbf{1a} + \mathbf{2b}$ (da O a S) è $h+2k$; dato che $\mathbf{A} = \mathbf{1a} + \mathbf{2b}$, H è proprio $h+2k$;

$$\begin{aligned} \text{Si deriva pertanto:} \quad H &= 1h + 2k + 0l \\ K &= -1h + 1k + 0l \\ L &= 0h + 0k + 1l \end{aligned}$$

Gli indici di Miller si trasformano in modo **UGUALE** agli assi di cella.

Si adotta la convenzione di usare VETTORI-RIGA per gli indici:

$$\begin{array}{l} \text{Per Indici di Miller (piani)} \end{array} \quad (HKL) = (hkl) \quad \left| \begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 0 & | \\ 2 & 1 & 0 & | \\ 0 & 0 & 1 & | \end{array} \right|$$

matrice $T = M^T$

Trasformazione delle zone o direzioni [uvw] in [UVW]:

Preso un generico vettore $\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} = U\mathbf{A} + V\mathbf{B} + W\mathbf{C}$

$$\mathbf{r} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} = U(\mathbf{1a} + \mathbf{2b} + \mathbf{0c}) + V(-\mathbf{1a} + \mathbf{1b} + \mathbf{0c}) + W(\mathbf{0a} + \mathbf{0b} + \mathbf{1c})$$

e riordinando:

$$\begin{aligned} u &= 1U + -1V + 0W \\ v &= 2U + 1V + 0W \\ w &= 0U + 0V + 1W \end{aligned}$$

Le direzioni si trasformano in modo UGUALE agli assi di cella, se usiamo VETTORI-COLONNA:

Per Direzioni

$$\begin{array}{ccc|ccc|ccc} (u) & & & 1 & -1 & 0 & & (U) & & & & \\ (v) & = & & 2 & 1 & 0 & & (V) & & & & \\ (w) & & & 0 & 0 & 1 & & (W) & & & & \end{array} \quad \text{matrice } T = M^T$$

La STESSA matrice T collega:

- Indici di Miller, famiglie di piani, **dalla I alla II cella** [righe]
- e direzioni, assi, zone **dalla II alla I cella** [colonne]

Le trasformazioni inverse sono date dalle matrici INVERSE

L'inversa della matrice T è T⁻¹:

$$\text{INV} \begin{array}{ccc|ccc} 1 & -1 & 0 & & & \\ 2 & 1 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 1 & & & \end{array} \quad \text{è} \quad 1/3 \begin{array}{ccc|ccc} 1 & 1 & 0 & & & \\ -2 & 1 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 3 & & & \end{array}$$

matrice T => matrice T⁻¹

Per cui:

$$(hkl) = (HKL) \quad 1/3 \begin{array}{ccc|ccc} 1 & 1 & 0 & & & \\ -2 & 1 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 3 & & & \end{array}$$

e

$$\begin{array}{ccc|ccc|ccc} (U) & & & 1 & 1 & 0 & & (u) & & & & \\ (V) & = & 1/3 & -2 & 1 & 0 & & (v) & & & & \\ (W) & & & 0 & 0 & 3 & & (w) & & & & \end{array}$$

Nota: Il determinante della matrice T è det(T) = 3;
 ciò significa che la cella II, generata dalla I secondo:
 (ABC)_{colonna} = T(abc)_{colonna} ha un volume 3 volte superiore!

Ricapitolando:

$$\begin{array}{ll} (ABC)_{\text{colonna}} = T(abc)_{\text{colonna}} & (abc)_{\text{colonna}} = T^{-1}(ABC)_{\text{colonna}} \\ (HKL)_{\text{riga}} = (hkl)_{\text{riga}} T & (hkl)_{\text{riga}} = (HKL)_{\text{riga}} T^{-1} \\ (UVW)_{\text{colonna}} = T^{-1}(uvw)_{\text{colonna}} & (uvw)_{\text{colonna}} = T(UVW)_{\text{colonna}} \end{array}$$

Trasformazione speciale:
da romboedrico ad assi equinclinati: $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ (a, a, a) in
esagonale non primitivo $\mathbf{R}: \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ ($90, 90, 120$)

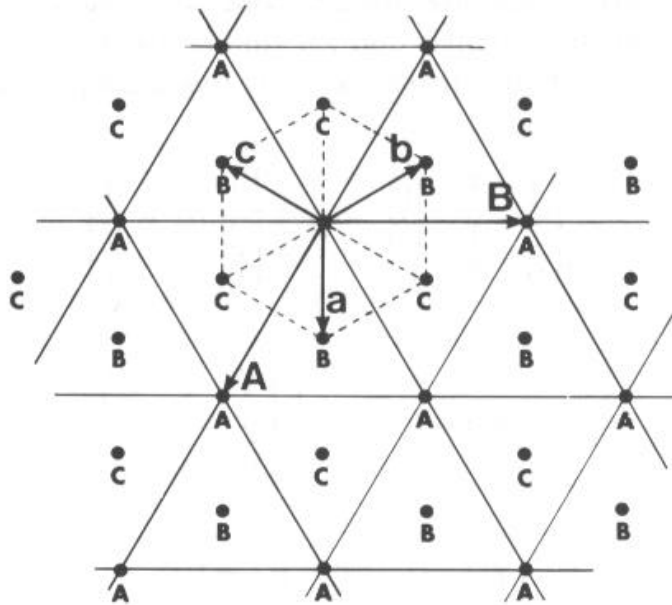


Fig. 5.10. A plan view of the hexagonal layers of lattice points, A, B and C, in the rhombohedral lattice. The rhombohedral unit cell and the triple hexagonal unit cell are outlined.

$$\text{Matrice } T = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{Matrice } T^{-1} = \begin{vmatrix} 2/3 & -1/3 & -1/3 \\ 1/3 & 1/3 & -2/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{vmatrix}$$

$$(HKL) = (hkl) \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{vmatrix} \quad \begin{matrix} (u) \\ (v) \\ (w) \end{matrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{vmatrix}$$

$$(hkl) = (HKL) \begin{vmatrix} 2/3 & -1/3 & -1/3 \\ 1/3 & 1/3 & -2/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{vmatrix} \quad \begin{matrix} (U) \\ (V) \\ (W) \end{matrix} = \begin{vmatrix} 2/3 & -1/3 & -1/3 \\ 1/3 & 1/3 & -2/3 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 \end{vmatrix} \quad \begin{matrix} (u) \\ (v) \\ (w) \end{matrix}$$