Grupe simetrija i kristalografija

Vukonić, Paola

Sveučilište u Rijeci
Fakultet za matematiku
Preddiplomski sveučilišni studij Matematika

Paola Vukonić

Grupe simetrija i kristalografija

Završni rad

Rijeka, kolovoz 2022.

Sveučilište u Rijeci
Fakultet za matematiku
Preddiplomski sveučilišni studij Matematika

Paola Vukonić

Grupe simetrija i kristalografija

Završni rad

Mentor: mr. sc. Ines Radošević Medvidović

Rijeka, kolovoz 2022.

Sadržaj

Sažetak

Ovaj rad ću započeti uvođenjem osnovnih pojmova iz teorije grupa kao što su primjerice definicija grupe, cikličke grupe te grupe permutacija, a koji su nam potrebni za shvaćanje glavnog pojma ovog rada, simetrije, i kako bi ujedno razumijeli koncept grupe simetrija određenog skupa te ga na kraju mogli primijeniti u posebnoj grani kemije, kristalografiji.
Drugi dio rada posvećen je kristalografiji, gdje ću definirati pojam jedinične ćelije kristalne rešetke, koja predstavlja najmanju jedinicu kristala, čijim nizanjem duž koordinatnih osi prostora dobijemo cijeli kristal. Zatim ću se baviti kristalnom strukturom te kristalnim sustavima po kojima se može kategorizirati svaki kristal na osnovi duljina bridova njegove jedinične ćelije te mjera kutova između tih bridova. U kristalne sustave također se mogu klasificirati i trodimenzionalne Bravaisove rešetke. Nadalje, uvest ću pojam točkinih grupa kod kojih sam naziv navodi na grupu koja kao elemente sadrži simetrije koje fiksiraju jednu točku kristala, a naposlijetku će biti riječ i o prostornim grupama, odnosno grupama koje sadrže sve simetrije kristala.

Ključne riječi: simetrija, grupe simetrija, kristalografija, Bravaisove rešetke, točkine grupe, prostorne grupe

1 Uvod

Postojanje simetrije vidljivo je svugdje oko nas, od flore i faune, u laticama cvijeća i krilima leptira, do umjetnosti, glazbe i arhitekture. Vremenom, simetrija ili nedostatak iste, postaje intrigantan pojam ne samo na makroskopskoj, već i na mikroskopskoj razini kada se počinje promatrati prisutna simetrija u određenim molekulama. No, pojmu simetrije možemo pristupiti i matematički kroz grupe simetrija, čija važnost tada izlazi iz matematičkih okvira primjenom u raznim granama prirodnih znanosti. Nama će posebno biti zanimljiva kristalografija, grana kemije koja proučava građu i svojstva kristala. Promatranjem mnogobrojnih kristala vidljivo je svima zajedničko svojstvo simetrije. Sama struktura kristala ovisi o prisutnosti različitih simetrija, te kako bismo ju razumjeli, nužno je proučavati simetrične operacije koje predstavljaju važan dio već spomenute teorije grupa koja će nam biti glavni alat za shvaćanje i određivanje simetrije kristala. Matematičar i astronom Johannes Kepler prvi matematički opisuje kristal. Pita se zašto snježne pahulje uvijek imaju šest vrhova, a ne pet ili sedam vrhova. Kristalografija je procvijetala nakon njegovog opažanja te se njegov rad o šesterokutnim kristalima snijega smatra prvim korakom u otkriću zakona o stalnosti kutova među plohama kristala o čemu će u nastavku biti riječ. Kasnijim otkrićima, među kojima je već spomenuto otkriće zakona stalnosti kutova, pokazalo se je da je vanjski oblik kristala vezan s njegovom unutrašnjom strukturom, tj. rasporedom molekula i atoma samog kristala. Tada se, tristo godina nakon Keplerovog rada, napretkom rendgenske kristalografije uočava heksagonski raspored strukturnih jedinica koji naposlijetku određuju geometriju kristala leda, odnosno pahulje snijega. Otkrićem rendgenskih zraka odredila se je i unutrašnja građa raznih bioloških molekula kao što su DNA, inzulin, penicilin, vitamin B12 i mnoge druge. Također, odredila se je unutrašnja građa ribosoma bakterija i ljudi, čije su kristalne strukture od posebne važnosti pri dizajniranju novih antibiotika čiji je cilj uništavanje ribosoma u štetnim bakterijama, a da se ujedno zaštite oni u ljudskim stanicama. S obzirom na do sada iznimne uspjehe, možda se upravo u polju kristalografije krije ključ za daljnji napredak u medicini te ostalim prirodnim znanostima. No, prije svega je potrebno uvesti osnovne pojmove iz teorije grupa kako bismo razumjeli grupe simetrija te kako bi naposlijetku vidjeli njihovu važnost kroz primjenu u kristalografiji.

Slika 1: Kristal leda
(Preuzeto iz [21].)

2 Teorija grupa

Za početak definirajmo neke osnovne pojmove koji će nam trebati u nastavku rada.

Definicija 2.1 Uređena trojka $(V, +, \cdot)$ je *vektorski prostor* nad poljem $\mathbb{F}$ ako je $(V, +)$ Abelova grupa te ako za preslikavanje $\cdot\ :\ \mathbb{F} \times V \to V$ (*vanjsko množenje*) vrijedi, $\forall a,\ b \in V,\ \forall \lambda,\ \mu \in \mathbb{F}$:

1.) $\lambda \cdot (a + b) = \lambda \cdot a + \lambda \cdot b$ (*distributivnost u odnosu na zbrajanje u* V);

2.) $(\lambda + \mu) \cdot a = \lambda \cdot a + \mu \cdot a$ (*distributivnost u odnosu na zbrajanje u* $\mathbb{F}$);

3.) $(\lambda \cdot \mu) \cdot a = \lambda \cdot (\mu \cdot a)$ (*kvaziasocijativnost*);

4.) $1 \cdot a = a$.

Definicija 2.2 Vektor $\lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2 + \cdots + \lambda_n v_n \in V,\ n \in \mathbb{N}$, naziva se *linearna kombinacija* vektora $v_1,\ v_2, \ldots,\ v_n$ s koeficijentima $\lambda_1,\ \lambda_2, \ldots,\ \lambda_n$.
Za skup vektora iz V, $\{v_1,\ v_2, \ldots,\ v_n\}$, kažemo da je *linearno nezavisan* ako $\lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2 + \cdots + \lambda_n v_n = \overrightarrow{0} \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n = 0$.

Definicija 2.3 Neka je V vektorski prostor nad poljem $\mathbb{F}$. Za skup $G \subseteq V$ kažemo da je *skup izvodnica* ili *generatora* za V ako se svaki vektor iz V može zapisati kao konačna linearna kombinacija vektora iz G, tj. ako za svaki $v \in V$ postoji $n \in \mathbb{N}$ i vektori $v_1, \ldots,\ v_n \in G$ takvi da je $v = \lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2 + \cdots + \lambda_n v_n,\ \lambda_1, \ldots,\ \lambda_n \in \mathbb{F}$. Tada kažemo da G *generira* ili *razapinje* prostor V.

Definicija 2.4 *Baza* vektorskog prostora V je svaki linearno nezavisan skup izvodnica.

Definicija 2.5 Neka je V vektorski prostor nad poljem $\mathbb{F}$, $L \neq \emptyset$. Tada je L *vektorski potprostor* od V, $L \leqslant V$, ako je i sam vektorski prostor u odnosu na iste operacije zbrajanja i množenja definirane na V.

Definicija 2.6 Neka su V i W vektorski prostori nad istim poljem $\mathbb{F}$. Preslikavanje $f\ :\ V \to W$ naziva se *linearni operator* ako vrijedi:

1.) $f(x + y) = f(x) + f(y),\ \forall x,\ y \in V$ (*aditivnost*);

2.) $f(\alpha x) = \alpha f(x),\ \forall x \in V,\ \forall \alpha \in \mathbb{F}$ (*homogenost*).

Definicija 2.7 Potprostor $L \leqslant V$ zovemo *invarijantan potprostor* obzirom na operator f ako vrijedi $f(L) \subseteq L$.

Definicija 2.8 Neka je U vektorski prostor nad poljem $\mathbb{R}$ i $s\ :\ U \times U \to \mathbb{R}$ preslikavanje (skalarno množenje) koje zadovoljava:

1.) $s(a, b) = s(b, a)$ (*komutativnost*);

2.) $s(\alpha a, b) = \alpha s(a, b)$ (*kvaziasocijativnost*);

3.) $s(a + b, c) = s(a, c) + s(a, b)$ (*distributivnost*);

4.) $a \neq \overrightarrow{0} \Rightarrow s(a, a) > 0$ (*pozitivna definitnost*);

za svaki izbor vektora $a,\ b,\ c \in U$ i skalara $\alpha \in \mathbb{R}$.
Uređeni par (U, s) nazivamo *unitarni prostor* nad poljem $\mathbb{R}$.

Neka je U unitaran prostor nad poljem $\mathbb{R}$, $a \in U$. Tada je dobro definiran broj $||a|| := \sqrt{(a, a)}$ koji nazivamo *norma* vektora a.

Osnovne definicije iz teorije matrica kao što su definicija matrice, kvadratne matrice i regularne matrice moguće je pronaći u [1] (str. 331-353).

Sada, neka je $f : V \to V$ linearni operator, F matrica operatora f u nekoj bazi B od V te F' matrica istog operatora u bazi B' od V. Tada je odnos matričnih zapisa linearnog operatora f dan sa $F' = T^{-1} \cdot F \cdot T$, gdje je T matrica prijelaza iz baze B u bazu B'.

Definicija 2.9 Neka su $A,\ B$ kvadratne matrice reda n. Kažemo da je matrica A *slična* matrici B ako postoji regularna kvadratna matrica reda n, T, takva da je $B = T^{-1} \cdot A \cdot T$.

Definicija 2.10 *Trag* kvadratne matrice $A = [a_{ij}]$ reda n je zbroj elemenata na glavnoj dijagonali, odnosno $TrA = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn}$.

Napomena 2.1 Matrični zapisi istog linearnog operatora u različitim bazama od V su slične matrice koje imaju jednak trag.

Potrebno je još definirati i neke osnovne pojmove iz teorije grupa.

2.1 Grupe

Definicija 2.11 Neka je G neprazan skup. *Binarna operacija* $\circ$ na skupu G je svako preslikavanje iz $G \times G$ u G.

Definicija 2.12 Uređeni par $(G, \circ)$ gdje je G neprazan skup, a $\circ$ binarna operacija na G zovemo *grupa* ako vrijedi:

$$\begin{aligned} &1.)\ (\forall a,\ b,\ c \in G)\ a \circ (b \circ c) = (a \circ b) \circ c; \\ &2.)\ (\exists e \in G)\ (\forall a \in G)\ t.d.\ a \circ e = e \circ a = a; \\ &3.)\ (\forall a \in G)\ (\exists a^{-1} \in G)\ t.d.\ a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e. \end{aligned}$$

Svojstvo 1.) iz definicije grupe naziva se asocijativnost. Element e iz svojstva 2.) nazivamo neutralnim elementom ili neutralom, a element a^{-1} iz svojstva 3.) inverznim elementom elementa a.

Definicija 2.13 Ako vrijedi $a \circ b = b \circ a,\ \forall a,\ b \in G$, kažemo da je $(G, \circ)$ *komutativna* ili *Abelova grupa.*

Napomena 2.2 Grupu $(G, \circ)$ ćemo nadalje skraćeno zapisivati kao G.

Definicija 2.14 Ako je G konačan skup, kažemo da je G konačna grupa te se tada $|G|$ zove *kardinalni broj* ili *red grupe* G. Inače G nazivamo beskonačnom grupom.

Definicija 2.15 Neka su $(G, \circ)$ i $(H, *)$ grupe te neka je zadano preslikavanje $f : G \to H$. Tada kažemo da je f *homomorfizam* sa G u H ako vrijedi $f(a \circ b) = f(a) * f(b),\ \forall a,\ b \in G$.

Razlikujemo injektivni homomorfizam koji nazivamo *monomorfizam*, surjektivni homomorfizam nazivamo *epimorfizam*, a bijektivni homomorfizam, *izomorfizam* te tada kažemo da su grupe G i H izomorfne ($G \cong H$).

2.2 Podgrupe

Definicija 2.16 Neka je G grupa, $H \subseteq G$, $H \neq \emptyset$. Kažemo da je H *podgrupa* od G ako je H grupa s obzirom na istu binarnu operaciju, odnosno ako vrijedi:

$$
\begin{aligned}
&1.)\ (\forall a,\ b \in H)\ a \circ b \in H;\\
&2.)\ 1_G \in H;\\
&3.)\ a \in H \Rightarrow a^{-1} \in H;
\end{aligned}
$$

te tada pišemo $H \leqslant G$.
Kako je $H \subseteq G$ asocijativnost se naslijeđuje iz G.

Teorem 2.1 (Kriterij za podgrupe)**.** *Neka je G grupa, $H \subseteq G$, $H \neq \emptyset$. H je podgrupa od G ako i samo ako za $a,\ b \in H \Rightarrow a \circ b^{-1} \in H$.*

Dokaz. Pretpostavimo da je $H \leqslant G$. Tada koristeći svojstva 1.) i 3.) iz definicije podgrupe slijedi $a,\ b \in H,\ \exists b^{-1} \in H \Rightarrow a \circ b^{-1} \in H$. Obratno, pretpostavimo da vrijedi $a,\ b \in H \Rightarrow a \circ b^{-1} \in H$. Znamo da je $H \neq \emptyset$ pa $\exists a \in H \Rightarrow a \circ a^{-1} \in H \Rightarrow 1_G \in H$. Nadalje, $1_G,\ a \in H \Rightarrow 1_G \circ a^{-1} \in H \Rightarrow a^{-1} \in H$. Sada iz $a,\ b \in H \Rightarrow a,\ b^{-1} \in H \Rightarrow a \circ (b^{-1})^{-1} \in H \Rightarrow a \circ b \in H$. Dakle, $H \leqslant G$. ■

2.3 Cikličke grupe

Definicija 2.17 Neka je $(G, \circ)$ grupa, $a \in G$. Definiramo *potencije* $a^n,\ n \in \mathbb{N}$:

$$
\begin{aligned}
&n = 1 \Rightarrow a^1 = a;\\
&n \geqslant 2 \Rightarrow a^n = a^{n-1} \circ a.
\end{aligned}
$$

Definicija 2.18 Neka je G grupa, $S \subseteq G$. Najmanja podgrupa od G koja sadrži skup S označava se sa $\langle S \rangle$ i zove se podgrupa koja generira podskup S.
Elementi skupa S zovu se *generatori* ili *izvodnice* podgrupe $\langle S \rangle$.

Definicija 2.19 Neka je G grupa, $a \in G$. Podgrupa $\langle a \rangle = \{a^k \mid k \in \mathbb{Z}\}$ generirana jednim elementom zove se *ciklička grupa* generirana sa a.

Definicija 2.20 Neka je $a \in G$. Najmanji $k \in \mathbb{N}$ takav da vrijedi $a^k = 1_G$ nazivamo *red elementa* a i pišemo $|a| = k$. Kažemo da je element a beskonačnog reda ako takav k ne postoji.

Napomena 2.3 Cikličke grupe koje sadrže n elemenata označavat ćemo sa C_n.

Teorem 2.2. *Neka je G ciklička grupa. Tada vrijedi:*
(i) ako je G beskonačna grupa, onda je $G \cong \mathbb{Z}$*;*
(ii) ako je G konačna grupa, $|G| = n$*, onda je* $G \cong \mathbb{Z}_n$*.*

Dokaz moguće vidjeti u [2].

Napomena 2.4 Iz prethodnog teorema slijedi da su cikličke grupe istog reda izomorfne budući da je svaka izomorfna sa $\mathbb{Z}$ ili $\mathbb{Z}_n$ te da vrijedi tranzitivnost relacije $\cong$.

Definiciju pravilnog poligona moguće je pronaći u [22] (str. 109).

Napomena 2.5 Svakom pravilnom poligonu P_n, gdje n označava broj strana poligona tako da je $n \geqslant 3$, možemo opisati kružnicu čije središte, O, uzmemo kao središte poligona.

Neka je zadan skup rotacija R jednakostraničnog trokuta za kut θ oko O pri čemu je $\theta \in \{0°,\ 120°,\ 240°\}$, odnosno $S_1 = \{R(0°),\ R(120°),\ R(240°)\}$.
Skup S_1 je tada grupa s obzirom na kompoziciju rotacija pri čemu je neutral $id = R(0°)$. Označimo rotaciju za kut od 120° sa r_1. Sada S_1 možemo zapisati kao $S = \{r_1^0,\ r_1^1,\ r_1^2\}$, pri čemu potencije $r_1^n,\ n \in \{0,\ 1,\ 2\}$, označavaju rotiranje za 120° n puta.
Sada možemo promatrati skup rotacija kvadrata za θ oko O, $\theta \in \{0°,\ 90°,\ 180°,\ 270°\}$, pa imamo $S_2 = \{R(0°),\ R(90°),\ R(180°),\ R(270°)\}$. Analogno, S_2 možemo zapisati kao $S = \{r_2^0,\ r_2^1,\ r_2^2,\ r_2^3\}$, gdje je r_2 rotacija za kut od 90°.
Vidimo da je grupa S_1 generirana elementom r_1, a grupa S_2 elementom r_2, tj. $S_1 = \langle r_1 \rangle$ i $S_2 = \langle r_2 \rangle$. Kako su obje grupe generirane jednim elementom zaključujemo da su to cikličke grupe koje ćemo označavati sa C_3 i C_4, respektivno.
Dakle, C_n označava grupu generiranu rotacijom pravilnog poligona P_n za kut od $\frac{360°}{n}$ oko O.

2.4 Grupe permutacija

Definicija 2.21 Neka je $\Omega \neq \emptyset$. Bijektivna preslikavanja $g : \Omega \to \Omega$ nazivamo *permutacije* skupa Ω.

Definicija 2.22 Neka je $\Omega = \{\alpha_1, \ldots, \alpha_n\},\ |\Omega| = n \in \mathbb{N}$. Skup $S(\Omega) = \{g : \Omega \to \Omega \mid g\ \textit{je bijekcija}\}$ je grupa, s obzirom na kompoziciju funkcija, koja se naziva *simetrična grupa* na Ω.

Simetričnu grupu možemo označavati i sa $S_{|\Omega|}$, tj. S_n te tada vrijedi $|S(\Omega)| = n!$.

Definicija 2.23 Za $G \leqslant S(\Omega)$ kažemo da je *permutacijska grupa* na Ω.

2.5 Grupe simetrija

Neka je $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ te neka je za $x,\ y \in \Omega$ definirana euklidska udaljenost $d(x,y)$ sa

$$d(x,y) = \sqrt{\sum_{i=1}^{3}(x_i - y_i)^2}.$$

Definicija 2.24 Preslikavanje $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ za koje vrijedi $d(f(X), f(Y)) = d(X,Y)$, $\forall X,\ Y \in \mathbb{R}^3$ nazivamo *izometrijom* prostora $\mathbb{R}^3$.

Teorem 2.3. *Skup svih izometrija prostora $\mathbb{R}^3$ je grupa, s obzirom na kompoziciju funkcija, koju nazivamo grupa izometrija prostora $\mathbb{R}^3$, $\mathcal{I}(\mathbb{R}^3)$.*

Dokaz moguće vidjeti u [17].

Napomena 2.6 Svaka izometrija f prostora $\mathbb{R}^3$ je bijekcija.

Propozicija 2.1. *$\mathcal{I}(\mathbb{R}^3)$ je podgrupa grupe $S(\mathbb{R}^3)$.*

Dokaz moguće vidjeti u [17].

Definicija 2.25 Neka je f izometrija prostora $\mathbb{R}^3$. Točka $X \in \mathbb{R}^3$ naziva se *fiksna točka* izometrije f ako je $f(X) = X$.

Nadalje ćemo promatrati izometrije prostora $\mathbb{R}^3$ koje su netrivijalne, tj. različite od identitete.

Definicija 2.26 *Zrcaljenje* ili *refleksija* s obzirom na ravninu $\Pi \subseteq \mathbb{R}^3$ je preslikavanje $\Omega_\Pi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ za koje vrijedi $\Omega_\Pi(X) = X'$, gdje je $X,\ X' \in \mathbb{R}^3$, a točka X' takva da je pravac XX' okomit na Π te $|XS| = |X'S|$, pri čemu je S sjecište pravca XX' i ravnine Π.

Neka je Π ravnina prostora $\mathbb{R}^3$. Tada vrijedi $\Omega_\Pi\Omega_\Pi(X) = X,\ \forall X \in \mathbb{R}^3$ pa je zrcaljenje s obzirom na ravninu Π involucija.

Definicija 2.27 *Rotacija* oko pravca $p \subseteq \mathbb{R}^3$ za kut θ je preslikavanje $R_p : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ za koje vrijedi $|XO| = |R_p(X)O|$ te da je kut između XO i $R_p(X)O$ jednak θ, pri čemu je O sjecište pravca p i ravnine okomite na p kojoj pripada X.

Matrični zapis operatora rotacije oko z-osi je

$$\begin{bmatrix} cos\theta & -sin\theta & 0 \\ sin\theta & cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Propozicija 2.2. *Skup svih rotacija oko z-osi je podgrupa grupe $\mathcal{I}(\mathbb{R}^3)$ i naziva se specijalna ortogonalna grupa reda tri, $SO(3)$.*

Dokaz moguće vidjeti u [17].

Definicija 2.28 *Translacija* za vektor $\overrightarrow{v} \in \mathbb{R}^3$ je preslikavnje $T_{\overrightarrow{v}} : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ tako da je $r_{T_{\overrightarrow{v}}(X)} = r_X + \overrightarrow{v}, \ X \in \mathbb{R}^3$.

Vrijedi $T_{\overrightarrow{0}} = id$ te tada translaciju nazivamo trivijalnom.

Propozicija 2.3. *Skup svih translacija prostora, $T_{\mathbb{R}^3}$, je podgrupa grupe $\mathcal{I}(\mathbb{R}^3)$.*

Dokaz moguće vidjeti u [17].

Definicija 2.29 Neka je $O \in \mathbb{R}^3$ proizvoljna točka. *Centralna simetrija* je preslikavanje $S_O : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ za koje vrijedi $S_O(X) = X'$, za $X, \ X' \in \mathbb{R}^3$, tako da je točka O polovište dužine XX'. Tada se O naziva *centar simetrije.*

Napomena 2.7 U kristalografiji ćemo centralnu simetriju zvati inverzija.

Definicija 2.30 *Klizno zrcaljenje* ili *klizna simetrija* je kompozicija zrcaljena s obzirom na ravninu $\Pi \subseteq \mathbb{R}^3$ i translacije duž pravca paralelnog sa Π.

Definicija 2.31 *Rotorefleksija* je kompozicija rotacije oko pravca $p \subseteq \mathbb{R}^3$ za kut θ i zrcaljenja s obzirom na ravninu $\Pi \subseteq \mathbb{R}^3$ koja je okomita na p.

Definicija 2.32 *Rotoinverzija* je kompozicija rotacije oko pravca $p \subseteq \mathbb{R}^3$ za kut θ i centralne simetrije gdje je $O \in p$.

Definicija 2.33 *Vijčana simetrija* je kompozicija rotacije oko pravca $p \subseteq \mathbb{R}^3$ za kut θ i translacije duž pravca p. Pravac p zove se *vijčana os.*

Neka je $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$. U nastavku uvodimo definiciju simetrije na skupu Ω.

Definicija 2.34 Neka je $\sigma \in S(\Omega)$. Ako za permutaciju σ vrijedi $d(\sigma(x), \sigma(y)) = d(x, y), \ \forall x, \ y \in \Omega$, tada se ona naziva *simetrija* na skupu Ω.

Označimo sa $T(\Omega)$ skup svih simetrija na skupu Ω. Prema kriteriju za podgrupe možemo pokazati da vrijedi $T(\Omega) \leqslant S(\Omega)$. Uzmimo $\sigma, \tau \in T(\Omega)$. Tada kako je σ simetrija vrijedi $d(\sigma\tau^{-1}(x), \sigma\tau^{-1}(y)) = d(\tau^{-1}(x), \tau^{-1}(y))$. Sada, kako je τ simetrija imamo $d(\tau^{-1}(x), \tau^{-1}(y)) = d(\tau\tau^{-1}(x), \tau\tau^{-1}(y)) = d(x, y), \ \forall x, \ y \in \Omega$. Time smo pokazali da je $T(\Omega)$ podgrupa simetrične grupe na Ω.

Definicija 2.35 Grupa $T(\Omega)$ naziva se *grupa simetrija* na skupu Ω.

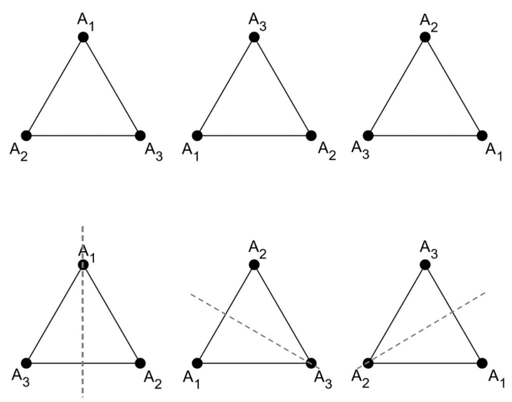
Primjer 2.1 Neka je T jednakokračan trokut s vrhovima A, B, C. Tada grupa simetrija od T sadrži identitetu i zrcaljenje s obzirom na pravac CP, gdje je P polovište dužine $\overline{\text{AB}}$.

2.5.1 Diedralne grupe

Definicija 2.36 Grupa simetrija pravilnog poligona P_n, gdje je n broj strana poligona tako da je $n \geqslant 3$, naziva se *diedralna grupa* D_n.

Možemo reći da elementi grupe D_n preslikavaju dva susjedna vrha pravilnog poligona P_n u dva susjedna vrha i to tako da čuvaju udaljenost između svih parova vrhova od P_n. Vrhove tog poligona ćemo označiti sa $A_1,\ A_2, \dots,\ A_n$ u smjeru suprotno od kazaljke na satu. Kako smo već spomenuli, svakom pravilnom poligonu P_n možemo opisati kružnicu čije središte, O, uzmemo kao središte poligona.
Osim identitete, u grupi D_n još imamo rotaciju R za kut $\frac{360°}{n}$ oko O koja vrh A_k preslika u vrh A_{k+1}. R tada možemo zapisati kao $R = \left(\begin{smallmatrix} A_1 & A_2 & \cdots & A_n \\ A_2 & A_3 & \cdots & A_1 \end{smallmatrix}\right)$.
Ako promatramo kompoziciju od $n,\ n \in \mathbb{N}$, rotacija zaključujemo da vrijedi
$R^n = 1_{S_n}$, tj. tada se svaki vrh preslika u sebe samoga pa možemo reći da je red od R jednak n.
Neka je sada A_1 fiksan vrh. Zrcaljenje Ω s obzirom na pravac koji prolazi središtem O i vrhom A_1, OA_1, tada je također element grupe D_n. Možemo pisati $\Omega = \left(\begin{smallmatrix} A_1 & A_2 & \cdots & A_n \\ A_1 & A_n & \cdots & A_2 \end{smallmatrix}\right)$ te tada vrijedi $\Omega^2 = 1_{S_n}$ iz čega slijedi da je Ω reda 2.
Odredimo još i broj elemenata diedralne grupe D_n. Neka $\sigma \in D_n$ preslikava vrh A_1 u A_k. Kako je vrh A_2 susjedan vrhu A_1, A_2 se može preslikati u A_{k-1} ili A_{k+1} pa kako za svaki od n vrhova pravilnog poligona postoje dvije mogućnosti, ukupno imamo $2n$ mogućnosti iz čega slijedi da grupa D_n ima $2n$ elemenata.
Primjetimo sada da se svi elementi grupe D_n mogu zapisati kao $R^i\Omega^j,\ i = 0,\ 1, \dots,\ n-1,\ j = 0,\ 1$.

Primjer 2.2 Neka je zadan jednakostraničan trokut, odnosno P_3. Odredimo elemente grupe D_3 pri čemu znamo da će ona sadržavati šest elemenata. U D_3 imamo rotacije za kut od $\frac{360°}{3},\ 2 \cdot \frac{360°}{3},\ 3 \cdot \frac{360°}{3}$, tj. $120°,\ 240°,\ 360°$ oko O te zrcaljenja s obzirom na pravce $A_1O,\ A_2O$ i A_3O. Dakle, grupu simetrija jednakostraničnog trokuta možemo zapisati kao $D_3 = \{id,\ R,\ R^2,\ \Omega,\ R\Omega,\ R^2\Omega\}$.
Neka je sada zadan kvadrat P_4 kojemu želimo odrediti grupu simetrija D_4. Tada imamo da je $D_4 = \{id,\ R,\ R^2,\ R^3,\ \Omega,\ R\Omega,\ R^2\Omega,\ R^3\Omega\}$.



Slika 2: Elementi grupe D_3

2.5.2 Ravninske kristalografske grupe

U nastavku rada ćemo se detaljnije baviti prostornim grupama, a sada uvodimo dvodimenzionalni analogon, odnosno ravninske kristalografske grupe. Neka nam je zadan neki osnovni uzorak u ravnini čije ponavljanje u ravnini nazivamo ornament. Particija skupa S je familija nepraznih, međusobno disjunktnih podskupova tog skupa čija je unija cijeli skup S. Tada je popločavanje ravnine particija te ravnine. Sada se pitamo na koliko različitih načina možemo popločiti ravninu osnovnim uzorkom pomoću izometrija ravnine, tj. zrcaljenja, translacija, rotacija i kliznih zrcaljenja. Različitih grupa simetrije kojima možemo popločiti ravninu osnovnim uzorkom postoji 17 i tih 17 grupa su poznate kao *ravninske kristalografske grupe*. Standardna notacija sastoji se od četiri simbola, gdje je prvi slovo p ili c ovisno je li pripadna jedninična ćelija primitivna ili centrirana (objašnjeno u nastavku). Drugi simbol je broj n koji označava rotaciju najvećeg reda. Lijevi rub jedinične ćelije nazivamo *x-os*. Od preostala dva simbola prvi označuje da je os simetrije okomita na x-os, a drugi da os simetrije zatvara kut α sa x-osi, gdje α ovisi o n pa je tada $\alpha = 180°$ za $n = 1$ ili $n = 2$, $\alpha = 45°$ za $n = 4$ te $\alpha = 60°$ za $n = 3$ ili $n = 6$. Ukoliko se radi o osi zrcaljenja tada pišemo m, ako je prisutna os kliznog zrcaljenja koristimo oznaku g, a ukoliko ne postoji takva os simetrije pišemo 1. Najčešće se koriste skraćeni nazivi ravninskih kristalografskih grupa pa tako na primjer puni naziv pm glasi $p1m1$.

Sljedeća tablica sadrži puni i skraćeni naziv svih 17 ravninskih kristalografskih grupa kao i njihov osnovni uzorak.

Puni naziv	**Skraćeni naziv**	**Osnovni uzorak**
$p1$	$p1$	paralelogram
$p211$	$p2$	paralelogram
$p1m1$	pm	četverokut
$p2mm$	pmm	četverokut
$p1g1$	pg	četverokut
$p2gg$	pgg	četverokut
$p2mg$	pmg	četverokut
$c1m1$	cm	romb
$c2mm$	cmm	romb
$p4$	$p4$	kvadrat
$p4mm$	$p4m$	kvadrat
$p4gm$	$p4g$	kvadrat
$p3$	$p3$	šesterokut
$p3m1$	$p3m1$	šesterokut
$p31m$	$p31m$	šesterokut
$p6$	$p6$	šesterokut
$p6mm$	$p6m$	šesterokut

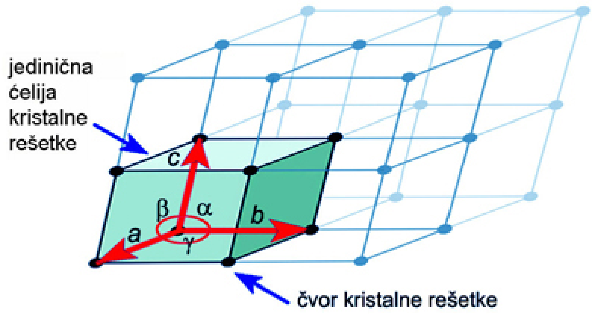
Tablica 1: Ravninske kristalografske grupe

3 Kristalografija

Prvi zapisi o kristalima javljaju se još u Babilonu, drevnoj Indiji i drevnoj Kini, no tek u 17. stoljeću počinje značajan napredak u kristalografiji. U to vrijeme geolog Niels Stensen otkriva zakon koji će kasnije postati poznat kao Stenoov zakon kristalografije. Naime, promatrajući kristale kvarca ustanovio je da su kutovi između pojedinih ploha u svakom kristalu kvarca jednaki, bez obzira na izgled pojedinog kristala. 1772. godine mineralog Jean-Baptiste L. Romé de l'Isle potvrđuje teoriju Stensena te ju proširuje na sve kristale iste tvari, odnosno pokazuje da su kutovi između odgovarajućih ploha kristala neke tvari konstantni. To svojstvo kristala naziva se zakon stalnosti kutova, tj. Stenoov zakon. Minerolog René-Just Haüy smatra se začetnikom moderne kristalografije. Haüy je prvi uočio periodičnost unutarnje građe kristala, odnosno da su dijelovi kristala nastali njegovim usitnjavanjem također kristali istih karakteristika, tj. istog geometrijskog oblika te da i kod njih vrijedi Stenoov zakon iz čega zaključuje da je geometrijski oblik kristala vezan uz njegovu unutrašnju geometrijsku strukturu. Dakle, vanjski geometrijski oblik kristala u vezi je s rasporedom njegovih strukturnih jedinica, molekula ili atoma.
Kristal je geometrijsko tijelo pravilnog unutrašnjeg rasporeda koji nastaje procesom kristalizacije, a kristalografija je znanost koja proučava kristale, njihovu građu i karakteristike. Svaki se kristal sastoji od trodimenzionalno pravilno raspoređenih strukturnih jedinica čiji raspored daje karakteristična svojstva i oblik kristala. Strukturu kristala opisujemo jediničnim ili elementarnim ćelijama koje predstavljaju najmanje jedinice kristala te sadrže najmanji mogući broj strukturnih jedinica. Paralelnim nizanjem takvih jediničnih ćelija u prostoru uzduž tri koordinatne osi nastaje cijeli kristal. Možemo to vizualizirati tako da za primjer uzmemo natrijev klorid koji kristalizira u kubičnom kristalnom sustavu (kasnije su opisani kristalni sustavi te posebno kubični kristalni sustav) te je tada njegova jedinična ćelija "manja" kocka čijim nizanjem u prostoru nastaje "veća" kocka.
Važan utjecaj na kristalografiju imalo je i otkriće rendgenskih zraka kojima se omogućio pogled u unutrašnju građu kristala i pomoću kojih se odredila kristalna struktura biološki važnih molekula kao na primjer inzulina, hormona koji regulira razinu šećera u krvi, što je omogućilo njegovu sintezu u laboratoriju i što je naposljetku imalo veliki utjecaj u medicini.

3.1 Struktura kristala

Kao prostor kristala uzimamo euklidski prostor $\mathbb{R}^3$ pri čemu njegove elemente poistovjećujemo sa stvarnom pozicijom strukturnih jedinica kristala. Fiksiramo bazu $B = \{\vec{a},\ \vec{b},\ \vec{c}\}$ pripadnog vektorskog, tj. realnog unitarnog prostora tako da paralelepiped razapet elementima baze predstavlja jediničnu ćeliju. Norme vektora baze označavamo sa $a,\ b,\ c$ te one predstavljaju duljinu bridova paralelepipeda. Baza se također bira tako da cijeli kristal dobijemo translacijama jedinične ćelije za cjelobrojne linearne kombinacije vektora baze.



Slika 3: Jedinična ćelija kristalne rešetke
(Preuzeto iz [15].)

Definicija 3.1 Neka je $B = \{\vec{a},\ \vec{b},\ \vec{c}\}$ baza prostora $\mathbb{R}^3$ i $O \in \mathbb{R}^3$ ishodište. *Vektorska rešetka* određena bazom B je skup $L = \{n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c} \mid n_1,\ n_2,\ n_3 \in \mathbb{Z}\}$. Pripadna *točkovna rešetka* je skup $P = \{T \in \mathbb{R}^3 \mid (\exists v \in L)\ v = \overrightarrow{OT}\} = \{(n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{R}^3 \mid n_1,\ n_2,\ n_3 \in \mathbb{Z}\}$.
Sada jediničnu ćeliju možemo definirati kao skup svih točaka paralelepipeda, $T = (x, y, z)$, za koje vrijedi da su $x,\ y$ i z nenegativni brojevi manji od jedan, odnosno $U = \{T \in \mathbb{R}^3 \mid \overrightarrow{OT} = x\vec{a} + y\vec{b} + z\vec{c},\ x,\ y,\ z \in [0,\ 1\rangle\}$.

Volumen jednične ćelije je tada mješoviti produkt vektora baze, odnosno $V = (\vec{a},\ \vec{b},\ \vec{c}) = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$.
Elementi, tj. vektori iz L nazivaju se *translacijski vektori*, a vektorska rešetka L još se naziva i *prostorna Bravaisova rešetka*.
Pojam rešetke je nešto širi nego što je ovdje opisano te su tada dozvoljene i racionalne linearne kombinacije vektora baze pa razlikujemo kristalografsku i primitivnu bazu.

Definicija 3.2 Neka je $B = \{\vec{a},\ \vec{b},\ \vec{c}\}$ baza. Kažemo da je B *kristalografska baza* za vektorsku rešetku L ako su sve cjelobrojne linearne kombinacije te baze sadržane u L. Kristalografska baza B je *primitivna* ako se svaki element iz L može zapisati kao cjelobrojna linearna kombinacija vekora baze i tada se vektori baze nazivaju *primitivni traslacijski vektori*.

Neka je B kristalografska baza. Tada je svaki vektor vektorske rešetke linearna kombinacija vektora baze s racionalnim koeficijentima. S druge strane, ako je B primitivna baza, tada su svi koeficijenti vektora iz vektorske rešetke cjelobrojni.

Napomena 3.1 Vrijedi da za svaku vektorsku rešetku postoji beskonačno mnogo primitivnih baza.

Definicija 3.3 Kažemo da je jedinična ćelija *jednostavna* ili *primitivna* ako je baza B koja razapinje tu jediničnu ćeliju primitivna. U suprotnom kažemo da je centrirana.

Svaki kristal je određen elementima simetrije, tj. središtem simetrije, osi simetrije te ravninom simetrije. *Središte simetrije* je točka u središtu kristala koja dijeli na pola sve prostorne dijagonale kristala. Pravac kojem pripada središte kristala oko kojeg možemo zakretati kristal za određeni broj stupnjeva nakon čega se kristal nalazi u početnom položaju nazivamo *os simetrije.* Os simetrije još nazivamo os rotacije. Ravninu koja dijeli neki kristal na dva dijela tako da je jedan dio zrcalna slika drugog dijela nazivamo *ravnina simetrije.*

Teorem 3.1 (Kristalografska restrikcija)**.** *Svaka rotacija koja se nalazi u grupi simetrija rešetke je reda* $1,\ 2,\ 3,\ 4$ *ili* 6.

Dokaz. Pretpostavimo da se rotacija, R, oko neke osi nalazi u grupi simetrija rešetke. Tada je kristalna rešetka L invarijantna za R, odnosno $Rv \in L,\ \forall v \in L$. Odaberimo bazu $\{\overrightarrow{a},\ \overrightarrow{b},\ \overrightarrow{c}\}$ prostora $\mathbb{R}^3$ tako da ona bude primitivna (možemo zbog napomene 3.1). Tada, kako svi $v \in L$ imaju cjelobrojne koordinate, elementi matrice pridružene operatoru R su također cjelobrojni pa slijedi da je i trag te matrice cjelobrojan. Naime, vrijedi da matrični zapisi istog operatora u različitim bazama imaju isti trag, tj. neka je F matrični zapis nekog operatora, tada je $F' = T^{-1}FT$ zapis istog operatora u drugoj bazi te kako vrijedi $Tr(XY) = Tr(YX),\ \forall X,\ Y \in M_n(\mathbb{F})$, imamo $Tr(F') = Tr(T^{-1}FT) = Tr(TT^{-1}F) = Tr(F)$. Sada odredimo matrični zapis operatora R u bazi u kojoj se z-os podudara s osi rotacije. Matrični zapis operatora R je tada

$$\begin{bmatrix} cos\alpha & -sin\alpha & 0 \\ sin\alpha & cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

gdje je $\alpha = \frac{360^\circ}{n}$. Slijedi da je $Tr(R) = 2cos\alpha + 1 \in \mathbb{Z}$, tj. $cos\alpha \in \{-1,\ -\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{2},\ 1\}$. Dakle, R je rotacija reda $1,\ 2,\ 3,\ 4$ ili 6. ■

Sada po prethodnom teoremu razlikujemo *digiru* ili os rotacije drugog reda, *trigiru* ili os rotacije trećeg reda, *tetragiru* ili os rotacije četvrtog reda te *heksagiru* ili os rotacije šestog reda.
Svaki kristal sadrži os rotacije prvog reda te već spomenuti centar simetrije pa ih tako svaki kristalni sustav, koje uvodimo u nastavku, sadrži kao element simetrije te ih stoga nećemo posebno navoditi.

3.2 Kristalni sustavi

Ranije smo vidjeli da su bridovi jedinične ćelije razapeti vektorima $\overrightarrow{a},\ \overrightarrow{b},\ \overrightarrow{c}$ i tada ti vektori određuju koordinatne osi koje se nazivaju *osi kristalne rešetke*, koje međusobno zatvaraju kutove $\alpha,\ \beta,\ \gamma$, te je njima definiran koordinatni sustav u prostoru koji nazivamo *kristalni sustav.* Postoji sedam kristalnih sustava koji predstavljaju sedam pogodnih koordinatnih sustava koji služe za opisivanje pozicije strukturnih jedinica kristala.

Kubični kristalni sustav
Jedinična ćelija u ovom kristalnom sustavu je kocka.
Vrijedi:

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

Karakteristični elementi simetrije, po kojima prepoznajemo o kojem kristalnom sustavu je riječ, kubičnog sustava su četiri trigire, a od ostalih elemenata simetrije imamo šest digira, tri tetragire i devet ravnina simetrije.

Tetragonski kristalni sustav
Jedinična ćelija je pravilna četverostrana prizma.
Vrijedi:

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

Tetragonski kristalni sustav prepoznajemo po jednoj tetragiri. Elementi simetrije još su i četiri digire te četiri ravnine simetrije.

Rombski kristalni sustav
Još se naziva i ortorombski. Bridovi jedinične ćelije su međusobno okomiti te je duljina svaka dva brida različita.
Vrijedi:

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

Rombski sustav je prepoznatljiv po tri međusobno okomite digire ili jednoj digiri koju sadrže dvije međusobno okomite ravnine simetrije. Od ostalih elemenata simetrije još imamo tri ravnine simetrije koje su međusobno okomite.

Monoklinski kristalni sustav
Jedan brid jedinične ćelije okomit je na ostala dva brida te je duljina svaka dva brida različita.
Vrijedi:

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

Karakteristični elementi simetrije su jedna digira ili jedna ravnina simetrije.

Triklinski kristalni sustav
Nikoja dva brida jedinične ćelije nisu okomita te su su svi bridovi različite duljine.
Vrijedi:

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

Triklinski sustav nema elemenata simetrije.

Heksagonski kristalni sustav
Dva brida jedinične ćelije su jednake duljine te zatvaraju kut od 120°, a treći brid je okomit na njih.
Vrijedi:

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$

Prepoznajemo ga po jednoj heksagiri. Od ostalih elemenata simetrije imamo šest digira te sedam ravnina simetrije.

Trigonski kristalni sustav
Nikoja dva brida jedinične ćelije nisu okomita, no svi bridovi su jednake duljine.
Vrijedi:

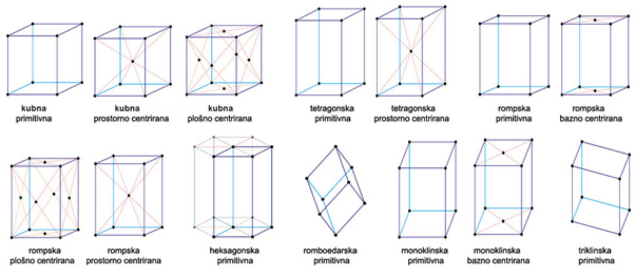
$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

Od karakterističnih elementa simetrije imamo jednu trigiru, a od ostalih elemenata tri digire i četiri ravnine simetrije.

3.3 Bravaisove rešetke

Francuski kemičar Auguste Bravais 1849. godine otkriva da svi kristali imaju jednu od 14 mogućih različitih konstrukcija prostornih rešetki koje imaju naziv (trodimenzionalne) Bravaisove rešetke. Svaku od tih 14 rešetki možemo svrstati u jedan od sedam kristalnih sustava.
Rešetku određenu primitivnom kristalografskom bazom nazivamo *jednostavnom* ili *primitivnom Bravaisovom rešetkom* koja se označava sa P. Ukoliko imamo rešetku kod koje se samo u sredini dvije nasuprotne strane jedinične ćelije nalazi strukturna jedinica označavamo je sa C. Slovom F označavamo rešetku kod koje se u sredini svake strane jedinične ćelije nalazi strukturna jedinica i nazivamo je *plošno centrirana Bravaisova rešetka*. Zatim, ako se u središtu svake jedinične ćelije rešetke nalazi strukturna jedinica imamo *prostorno* ili *volumno centriranu Bravaisovu rešetku* koju označavamo sa I.
U kristalnim sustavima imamo sljedeće tipove Bravaisovih rešetki:

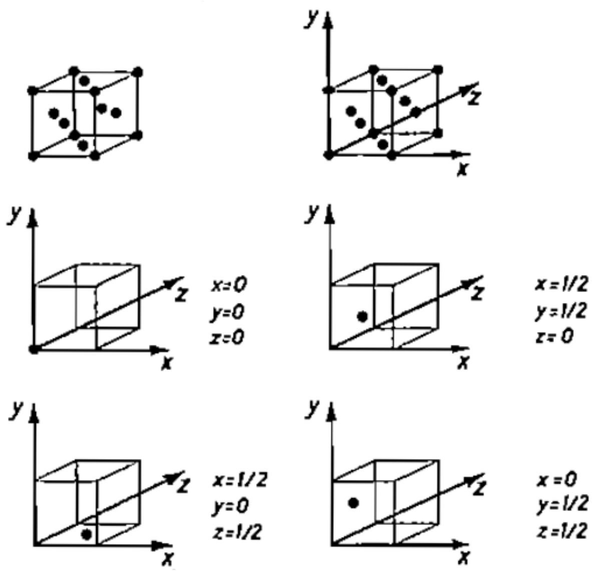
Kubični: P, F, I
Tetragonski: P, I
Rompski: P, C, F, I
Monoklinski: P, C
Triklinski: P
Heksagonski: P
Trigonski: P



Slika 4: Bravaisove rešetke
(Preuzeto iz [15].)

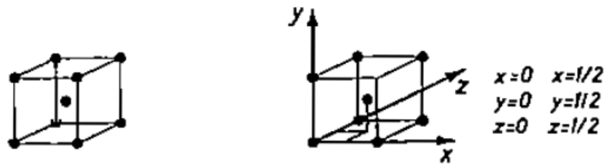
Bravaisovu rešetku određuje jedinična ćelija koja je određena duljinom brida jedinične ćelije, a, koordinatama strukturnih jedinica u prostoru i brojem strukturnih jedinica koje pripadaju toj ćeliji.

Primjer 3.1 Srebro i bakar kristaliziraju u kubičnom kristalnom sustavu s plošno centriranom Bravaisovom rešetkom. Dakle, jedinična ćelija je kocka na čijim se vrhovima nalazi atom srebra/bakra, tj. ukupno imamo osam takvih atoma te se u sredini svake od šest ploha kocke nalazi još jedan atom srebra/bakra, tj. ukupno imamo šest takvih atoma. Svaki od osam atoma na vrhovima jedinične ćelije ujedno pripada osam jediničnih ćelija pa $\frac{1}{8}$ svakog takvog atoma pripada jednoj ćeliji. Tada, od osam takvih atoma, jednoj ćeliji pripada jedan atom (8 atoma $\cdot \frac{1}{8} = 1$ atom). Zatim, svaki od šest atoma u sredini ploha jedinične ćelije pripada dvjema jediničnim ćelijama pa svakoj jediničnoj ćeliji pripadaju tri atoma (6 atoma $\cdot \frac{1}{2} = 3$ atoma). Sada vidimo da jediničnoj ćeliji plošno centrirane Bravaisove rešetke pripadaju četiri atoma. Ukoliko jediničnu ćeliju promatramo u koordinatnom sustavu možemo odrediti koordinate jednog atoma na vrhu $(0, 0, 0)$ i tri atoma na plohama koje određuju taj vrh $a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, $a(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $a(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$.



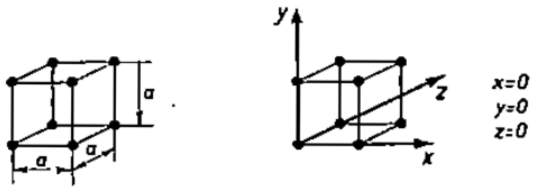
Slika 5: Plošno centrirana kubična Bravaisova rešetka
(Preuzeto iz [5].)

Primjer 3.2 Željezo kristalizira u kubičnom kristalnom sustavu s volumno centriranom Bravaisovom rešetkom, tj. jedinična ćelija je kocka koja na svakom od osam vrhova ima atom željeza te se jedan atom željeza nalazi još i u središtu jedinične ćelije. Atom koji se nalazi u središtu pripada samo toj ćeliji. Tada, prateći postupak opisan u prethodnom primjeru, zaključujemo da jediničnoj ćeliji volumno centrirane Bravaisove rešetke pripadaju dva atoma čije su koordinate $(0,0,0)$, $a(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2})$.



Slika 6: Volumno centrirana kubična Bravaisova rešetka
(Preuzeto iz [5].)

Primjer 3.3 Jedinična ćelija primitivne kubične Bravaisove rešetke je kocka koja na svakom vrhu ima jedan atom iz čega slijedi da je takva jedinična ćelija određena jednim atomom čije su koordinate $(0,0,0)$.



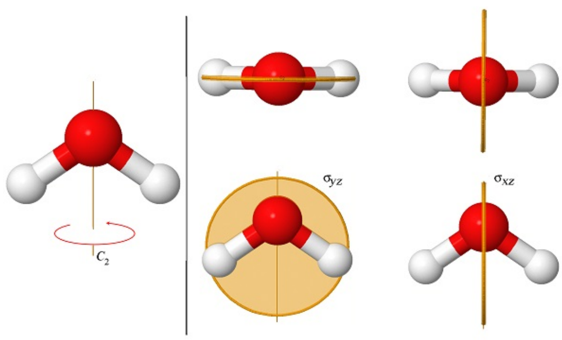
Slika 7: Primitivna kubična Bravaisova rešetka
(Preuzeto iz [5].)

3.4 Točkine grupe

Za svaki objekt može se odrediti odgovarajući broj simetrija. Grupe simetrija čiji elementi fiksiraju jednu točku objekta nazivaju se *točkine grupe*.
Postoje dva sustava oznaka korištenih za označavanje točkinih grupa, Schönfliesov i Hermann-Mauguinov (internacionalni) sustav oznaka koji sadrže podatke elemenata simetrije određenog objekta. U Schönfliesovoj nomenklaturi (S) identiteta je označena sa C_1, a u Hermann-Mauguinovoj nomenklaturi (HM) sa 1 te se navedene oznake ujedno koriste i za označavnje točkinih grupa objekata kod kojih je jedini prisutan element simetrije identiteta.
U S os simetrije n-tog reda označavamo C_n, a n je ekvivalentna oznaka u HM sustavu gdje n, prema teoremu kristalografske restrikcije, poprima vrijednosti 1, 2, 3, 4 ili 6 pa imamo C_1, C_2, C_3, C_4 ili C_6. Jedini element simetrije sadržan u točkinoj grupi C_n je os C_n. Sada možemo reći da uvedena grupa C_1 sadrži rotaciju za 360° koja je ujedno i identiteta.
Nadalje, oznakom S_n označavamo os rotoinverzije n-tog reda u S te sa $\overline{n}$ u HM. U

HM sustavu ponajprije navodimo os rotacije/rotoinverzije najvećeg reda koju nazivamo *glavnom osi rotacije/rotoinverzije.* U HM os simetrije n-tog reda i na nju okomitih n osi simetrija drugog reda se označava kao $n2$ ukoliko je n neparan te sa $n22$ ukoliko je n paran, a u S se koristi oznaka D_n.
Zatim, središte inverzije označavamo oznakom C_i u S te sa $\overline{1}$ u HM te tada grupa C_i osim identitete sadrži i inverziju.
Oznaka zrcalne ravnine u HM je m, a u S σ, gdje razlikujemo horizontalnu zrcalnu ravninu σ_h ako je ravnina okomita na os rotacije ili vertikalnu zrcalnu ravninu σ_v ako ravnina sadrži os rotacije, te tada točkinu grupu čiji su elementi identiteta i zrcalna ravnina označavamo C_s.
Oznaka za os n-tog reda okomitu na zrcalnu ravninu σ_h u HM je $\frac{n}{m}$, a u S C_{nh} te oznaka za os n-tog reda paralelnu s n zrcalnih ravnina σ_v je u HM nm kada je n neparan te nmm kada je n paran, osim za $n = 2$ kada pišemo $mm2$, a u S C_{nv}.
Os n-tog reda okomitu na zrcalnu ravninu σ_h i n osi drugog reda označavamo u HM sa $\frac{n}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$ kada je n paran te $\overline{x}m2$ kada je n neparan, gdje je $x = 2 \cdot n$, a u S D_{nh}.
Točkinu grupu koja sadrži n zrcalnih ravnina koje sijeku glavne osi u HM označujemo sa $\overline{n}m$ za neparne n te $\overline{x}2m$ za parne, gdje je $x = 2 \cdot n$, a u S sa D_{nd}. Zrcalne ravnine su tada dijagonalne i označavamo ih σ_d.

Primjer 3.4 Molekule možemo razvrstati u točkine grupe s obzirom na njihove karakteristične operacije i elemente simetrije. Promatrajmo molekulu vode. Elementi simetrije zadane molekule su dvije vertikalne ravnine simetrije te jedna digira pa tada, koristeći Schönfliesov zapis, točkinu grupu označavamo C_{2v}, a u Hermann-Mauguinovom zapisu ista je označena sa $mm2$.



Slika 8: Točkina grupa molekule vode
(Preuzeto iz [20].)

Napomena 3.2 Translacija nije element točkinih grupa s obzirom da ona nema fiksnih točaka.

U nastavku se bavimo kristalografskim točkinim grupama, tj. točkinim grupama kristala. Svaka takva točkina grupa definira kristalnu klasu, tj. skup svih kristala sa zajedničkom točkinom grupom. Primjenom teorema kristalografske restrikcije dobijemo 32 kristalografske točkine grupe koje se mogu svrstati u sedam kristalnih sustava. Razlikujemo dvije različite vrste točkinih grupa, točkine grupe prve vrste

(kiralne) i točkine grupe druge vrste. Možemo još razlikovati i centrosimetrične (Laueove grupe) te polarne točkine grupe. Točkine grupe koje se sastoje isključivo od rotacija nazivaju se *kiralne* te razlikujemo jedanaest takvih grupa od kojih imamo pet cikličkih grupa C_1, C_2, C_3, C_4, C_6 (HM: 1, 2, 3, 4, 6), četiri diedralne grupe D_2, D_3, D_4, D_6 (HM: 222, 32, 422, 622) te grupu rotacija tetraedra T (HM: 23) i grupu rotacija oktaedra O (HM: 432). Grupa T sadrži četiri trigire koje su međusobno okomite i tri digire koje su također međusobno okomite, a grupa O tri međusobno okomite tetragire, tri međusobno okomite trigire te šest digira.
Točkinu grupu nazivamo *centrosimetričnom* ako ona sadrži inverziju te postoji jedanaest takvih. *Polarna točkina grupa* sadrži elemente koji fiksiraju više od jedne točke kristala.
Dodavanjem inverzije $\overline{1}$ grupi C_1 dolazimo do centrosimetrične grupe C_i koja je ciklička te generirana elementom $\overline{1}$, a dodavanjem grupi C_3 dobijemo centrosimetričnu grupu C_{3i}.
Ukoliko grupi C_2 dodamo $\overline{4}$ dolazimo do cikličke grupe S_4 generirane sa $\overline{4}$.
Sada, umjesto inverzije, dodajmo cikličkim grupama prve vrste zrcaljenje m s obzirom na ravninu koja je okomita na os rotacije, tj. σ_h. Tada, dodavanjem u grupu C_1 dobivamo posljednju cikličku grupu druge vrste C_s generiranu elementom m. Zatim, redom iz grupa C_2, C_3, C_4, C_6 dobijemo grupe C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}.
U slučaju dodavanja grupama C_2, C_3, C_4, C_6 zrcaljenje m s obzirom na ravninu koja sadrži os rotacije, tj. σ_v dolazimo do grupa C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}.
Postupak sada možemo ponoviti za diedralne grupe prve vrste pa tako dodavanjem inverzije $\overline{1}$ u grupu D_3 dolazimo do centrosimetrične grupe D_{3d}, a dodavanjem $\overline{4}$ grupi D_2 dobijemo grupu D_{2d}.
Dodamo li zrcaljenje m s obzirom na ravninu koja je okomita na os rotacije redom grupama D_2, D_3, D_4, D_6 dobivamo grupe D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{6h} te kako se dodavanjem zrcaljenja σ_v podrazumijeva dodavanje σ_h taj slučaj nije potrebno razmatrati.
Preostaje nam još dodati zrcaljenje u grupe T i O čime dobijemo grupe T_h (HM: $\frac{2}{m}\overline{3}$), T_d (HM: $\overline{4}3m$) i O_h (HM: $\frac{4}{m}\overline{3}\frac{2}{m}$) od kojih T_h sadrži sve elemente koji se nalaze u T te još četiri σ_v ravnine i središte inverzije, grupa T_d također sadrži sve elemente iz T uz dodatak šest σ_d ravnina, a O_h uz elemente prisutne u O sadrži i devet zrcalnih ravnina.

U sljedećoj tablici navedene su točkine grupe razvrstane u sedam kristalnih sustava, zapisane u Schönfliesovom i Hermann-Mauguinovom sustavu, te njihovi redovi, gdje su crvenom bojom označene kiralne grupe, plavom bojom centrosimetrične grupe, a one grupe koje sadrže * su polarne.

Kristalni sustav	**Točkine grupe (S zapis)**	**Točkine grupe (HM zapis)**	**Red točkine grupe**
Triklinski	C_1*	1*	1
	C_i	$\bar{1}$	2
Monoklinski	C_2*	2*	2
	C_s*	m*	2
	C_{2h}	$\frac{2}{m}$	4
Rombski	D_2	222	4
	C_{2v}*	$mm2$*	4
	D_{2h}	$\frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	8
Tetragonski	C_4*	4*	4
	S_4	$\bar{4}$	4
	D_4	422	8
	C_{4h}	$\frac{4}{m}$	8
	C_{4v}*	$4mm$*	8
	D_{2d}	$\bar{4}2m$	8
	D_{4h}	$\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	16
Trigonski	C_3*	3*	3
	C_{3i}	$\bar{3}$	6
	D_3	32	6
	C_{3v}*	$3m$*	6
	D_{3d}	$\bar{3}m$	12
Heksagonski	C_6*	6*	6
	C_{3h}	$\bar{6}$	6
	D_6	622	12
	C_{6h}	$\frac{6}{m}$	12
	C_{6v}*	$6mm$*	12
	D_{3h}	$\bar{6}m2$	12
	D_{6h}	$\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$	24
Kubični	T	23	12
	O	432	24
	T_h	$\frac{2}{m}\bar{3}$	24
	T_d	$\bar{4}3m$	24
	O_h	$\frac{4}{m}\bar{3}\frac{2}{m}$	48

Tablica 2: Klasifikacija točkinih grupa u kristalne sustave

3.5 Prostorne grupe

Grupa koja sadrži sve simetrije nekog kristala naziva se *prostorna grupa*. Kombiniranjem 14 Bravaisovih rešetki i 32 kristalografske točkine grupe zajedno s dodatnim operacijama, kliznim zrcaljenjem i vijčanom simetrijom, javlja se 230 prostornih grupa, odnosno načina na koji se neka strukturna jedinica može periodički ponavljati u prostoru. Od postojećih prostornih grupa njih 73 dobijemo kombinacijom Bravaisovih rešetki i točkinih grupa bez uvođenja dodatnih simetrija te takve prostorne grupe nazivamo *simorfnima*. Tada, preostalih 157 nazivamo *nesimporfnima* te za izvod kojih su nam potrebne dodatne spomenute simetrije. Prostorne grupe označavamo takozvanim simbolom prostorne grupe $Xefg$, gdje X označava Bravaisovu rešetku, a efg točkinu grupu uz dodatak oznaka dodatnih simetrija ukoliko one postoje.

Primjer 3.5 Promotrimo kristalni sustav sa samo dvije prostorne grupe, tj. triklinski sustav kod kojeg imamo jedino P Bravaisovu rešetku pa za sada imamo prostorne grupe $Pefg$. Kako u triklinskom sustavu imamo dvije točkine grupe 1 i $\overline{1}$ dolazimo do prostornih grupa $P1$ i $P\overline{1}$.

Kako zrcaljenje, translacija, rotacija i rotoinverzija nisu jedine prisutne simetrije, nego se uvodi i klizno zrcaljenje te vijčana simetrija, javljaju se novi elementi simetrije, *klizna ravnina* i *vijčana os*. Vijčana os je označena sa n_m, gdje je n red rotacije, a $\frac{m}{n} \cdot a$ određuje pomak u smjeru vektora baze $\overrightarrow{a}$. Tada je vijčana digira označena sa 2_1 pri čemu je rotacija reda dva, a pomak $\frac{a}{2}$.
Nadalje, ako imamo kompoziciju zrcaljenja s translacijom za pola perioda a, b ili c, ovisno duž koje osi translatiramo, kliznu ravninu označavamo respektivno sa a, b ili c. Kliznu ravninu nazivamo *dijagonalnom* i označavamo sa n ukoliko translatiramo za pola perioda duž dijagonale između dvije osi, tj. imamo translaciju za $x \cdot \overrightarrow{a} + y \cdot \overrightarrow{b} + z \cdot \overrightarrow{c}$ pri čemu barem dva od $x, \ y, \ z$ iznose $\frac{1}{2}$ te je treći jednak ili 0 ili $\frac{1}{2}$.
Zatim, dijagonalna klizna ravnina za četvrtinu perioda se naziva *dijamantnom* i označava sa d, odnosno tada imamo translaciju za $x \cdot \overrightarrow{a} + y \cdot \overrightarrow{b} + z \cdot \overrightarrow{c}$ pri čemu barem dva od $x, \ y, \ z$ iznose $\frac{1}{4}$ te je treći jednak ili 0 ili $\frac{1}{4}$. Prostorne grupe se mogu rasporediti u kristalne sustave pa smo tako vidjeli da u triklinskom sustavu imamo 2, zatim u monklinskom 13, u trigonskom 25, u heksagonskom imamo njih 27, u kubičnom 36, rombskom 59 te tetragonskom njih 68.
Prostorne grupe također mogu biti kiralne i centrosimetrične.
Dakle, ukoliko imamo prostornu grupu iz njenog zapisa možemo odrediti tip Bravaisove rešetke i točkine grupe kristala. Prilikom određivanja točkinih grupa prisutne oznake kliznih ravnina u prostornim grupama kao $a, \ b, \ c, \ n$ i d zamijene se sa m, a oznake vijčanih osi kao npr. 2_1 i 3_2 zamijene se sa 2 i 3, respektivno.

4 Zaključak

Razvijanju kristalografije doprinijelo je mnoštvo znanstvenika od kojih su najveći doprinos ostvarili Stensen, Romé de l'Isle, Bravais te Haüy koji se smatra začetnikom polja kristalografije. Tada se pojam simetrije, do onda proučavan na makroskopskom nivou, proširuje na mikroskopski svijet. Kako je glavna ideja ovog rada primijeniti znanje dobiveno iz teorije grupa na polje kristalografije, bilo je potrebno uvesti neke od temeljnih pojmova tog područja kao što je termin grupe, zatim cikličke grupe te grupe permutacija kako bi naposlijetku uveli grupe simetrija nekog skupa koje sadrže simetrije istog.
Nakon uvođenja osnovnih pojmova teorije grupa preostaje vidjeti kakav utjecaj ona ima na kristalografiju. Opisali smo kristalnu strukturu tako da smo uveli pojam trodimenzionalne vektorske rešetke, odnosno prostorne Bravaisove rešetke, koja predstavlja skup svih cjelobrojnih linearnih kombinacija vektora baze koji razapinju jediničnu ćeliju. Zatim smo definirali pojmove centra simetrije, osi simetrije i ravnine simetrije kristala koje nazivamo elementima simetrije. Vidjeli smo da je svaki kristal određen elementima simetrije te da se svi kristali mogu klasificirati u sedam kristalnih sustava od kojih svaki sadrži karakteristične elemente simetrije po kojima je prepoznatljiv. Svaki kristal posjeduje grupu simetrija koja korespondira jednoj od 230 prostornih grupa. Takve grupe sadrže sve simetrije određenog kristala te iz njih možemo odrediti pripadnu točkinu grupu, a time i kristalni sustav kojemu kristal pripada kao i tip Bravaisove rešetke koji može biti primitivan ili centriran. Točkine grupe su grupe koje fiksiraju jednu točku prostora za čije označavanje uvodimo Schönfliesovu i Hermann-Mauguinovu nomenklaturu. Njima se mogu odrediti pojedina svojstva molekula pa tako možemo reći da su određene molekule kiralne ako su njihove točkine grupe kiralne grupe.
Koncepti kao što su kristalni sustavi, Bravaisove rešetke, točkine i prostorne grupe olakšavaju klasifikaciju kristala na osnovu karakterističnog svojstva kojeg je relativno jednostavno odrediti, a to svojstvo je simetrija.

Popis slika

Popis tablica

5 Literatura

[1] Horvatić, K.: *Linearna algebra*, Prirodoslovno-matematički fakultet Zagreb - Matematički odsjek, Zagreb, 1995.

[2] Krešić-Jurić, S.: *Algebarske strukture*, Prirodoslovno-matematički fakultet Split - Odjel za matematiku, Split, 2009.

[3] Bilješke s kolegija Algebarske strukture, Fakultet za matematiku Sveučilišta u Rijeci, 2021.

[4] Baumslag, B. - Chandler, B.: *Theory and problems of group theory*, McGraw-Hill, New York, 1968.

[5] Filipović, I. - Lipanović, S.: *Opća i anorganska kemija*, Školska knjiga, Zagreb, 1979.

[6] Cotton, F. A.: *Chemical applications of group theory*, John Wiley & Sons, New York, 1990.

[7] Schwarzenbach, D.: *Crystallography*, John Wiley & Sons, New York, 1993.

[8] Müller, U.: *Symmetry Relationships between Crystal Structures*, Oxford University Press, Oxford, 2013.

[9] Schattschneider, D.: *The plane symmetry groups: their recognition and notation*, Bell Laboratories, New York, 1978.

[10] Brückler, F. M.: *Rešetke*, Prirodoslovno-matematički fakultet Zagreb, Matematički odsjek, Zagreb, 2008.

[11] Brückler, F. M.: *Kristalografske točkine grupe*, Prirodoslovno-matematički fakultet Zagreb, Matematički odsjek, Zagreb, 2018.

[12] Antunović, A: *Teorija grupa i kristalografija*, Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku - Odjel za matematiku, Osijek, 2011.

[13] Fjellvåg, H.: *Symmetry-operations, point groups, space groups and crystal structure*, Department of Chemistry, University of Oslo, 1994.

[14] Hahn, T.: *International Tables for Crystallography*, Springer, Dordrecht, 2005.

[15] Sikirica, M.: *Mala škola kristalografije*, Digitalni udžbenik
URL: $http: //eskola.chem.pmf.hr/udzbenik/u104/Kristalografija.htm_Toc37856269$
(19.3.2022.)

[16] URL: $https: //www2.math.upenn.edu/\ mlazar/math170/notes07.pdf$
(9.3.2022.)

[17] URL:
$https://mathematiciansworld.files.wordpress.com/2016/08/isometries-of-r3.pdf$ (15.3.2022.)

[18] URL: $https://unlcms.unl.edu/cas/physics/tsymbal/teaching/SSP-927/Section\ 01\_Crystal\ Structure.pdf$ (2.4.2022.)

[19] URL: $http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/misc/pointgrp.htm$ (14.5.2022.)

[20] URL: $https://chem.libretexts.org/$ (17.6.2022.)

[21] URL: $https://pixels.com/featured/real-snowflake-2018-12-183w-alexey-kljatov.html$ (16.7.2022.)

[22] Polonijo, M. i dr.: *Euklidski prostori*, Prirodoslovno-matematički fakultet Zagreb - Matematički odsjek i Fakultet za matematiku Sveučilišta u Rijeci

[23] Geogebra
URL: $https://www.geogebra.org/$