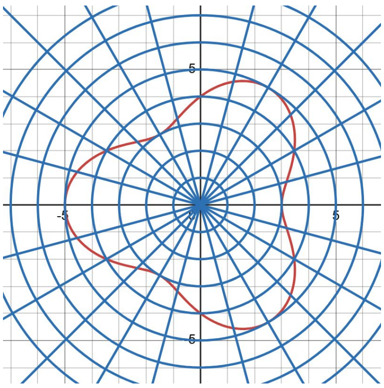
5. (10) Krivulja je zadana jednadžbom u polarnim koordinatama:

$$r = 4 - \cos(3\varphi), \quad -\pi \leq \varphi \leq \pi.$$

Koristeći prikladne argumente skicirajte tu krivulju!
Rješenje. Funkcija $f : [-\pi, \pi] \to \mathbb{R}$, $f(x) = 4 - \cos(3x)$ je parna, pa je stoga krivulja zrcalno simetrična s obzirom na polarnu os, odnosno (uz pretpostavku standardne pozicije polarne osi) dovoljno ju je skicirati u gornjoj poluravnini pa zrcaliti. Nadalje, budući da kosinus poprima vrijednosti između -1 i 1, r poprima vrijednosti između 3 i 5, odnosno krivulja ima točke za svaki polarni kut φ i sve se nalaze između kružnica $r = 3$ i $r = 5$. Funkcija f je periodična s periodom $\frac{2\pi}{3}$, pa je stoga krivulja zatvorena i ima rotacijsku simetriju reda 3 oko ishodišta, odnosno dovoljno ju je skicirati u trećini punog kruga, recimo u rasponu $-\frac{\pi}{3} \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}$. U kombinaciji s prethodnim zaključujemo: Treba skicirati tu krivulju za $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}$, a ostale točke ćemo joj dobiti zrcalnom i rotacijskom simetrijom. Na $[0, \pi/3]$ funkcija f je rastuća, pa dakle za $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{3}$ nam r raste od $f(0) = 3$ do $f(\pi/3) = 5$. Dobije se krivulja kao na slici:



6. (12+8) Neki kristal kristalizira u moonklinskom kristalnom sustavu s parametrima kristalografske (direktne) baze $a = 5{,}679$ Å, $b = 15{,}20$ Å, $c = 6{,}522$ Å, $\alpha = \gamma = 90°$, $\beta = 118{,}43°$.

(a) Izračunajte parametre pripadne recipročne baze a^*, b^*, c^*, α^*, β^*, γ^*. Za kutove α^*, β^*, γ^* ne smijete koristiti eksplicitne formule za njihove kosinuse.

(b) Navedite tri nekolinearne točke (direktne) rešetke koje se nalaze u ravnini smjera $(\bar{1}20)$ najbližoj ishodištu. Izračunajte udaljenost proizvoljne dvije od njih.

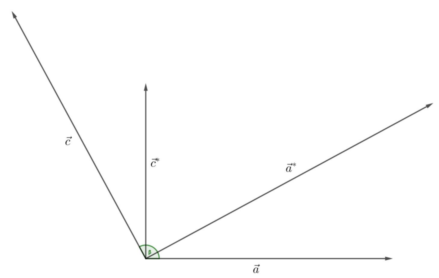
Rješenje.
(a) Budući da je $\alpha = \gamma = 90°$, znači da je $\vec{b} \perp \vec{a}, \vec{c}$ pa je $\vec{b}^*$ istog smjera kao $\vec{b}$, a $\vec{a}^*$ i $\vec{c}^*$ su u ravnini od $\vec{a}$ i $\vec{c}$, dakle je $\vec{b}^* \perp \vec{a}^*, \vec{c}^*$, odnosno $\alpha^* = \gamma^* = 90°$. Volumen jedinične ćelije u direktnom sustavu je, zbog $\vec{b} \perp \vec{a}, \vec{c}$, $V = B \cdot h = (a\,c \sin\beta) \cdot b = 495{,}08802737549\ldots$ Å^3. Koristeći formule izvedene na predavanju imamo

$$a^* = \frac{b\,c \sin\alpha}{V} = \frac{b\,c}{a\,b\,c \sin\beta} = \frac{1}{a \sin\beta} = 0{,}2002\,\text{Å}^{-1},$$

$$b^* = \frac{a\,c \sin\beta}{V} = \frac{a\,c \sin\beta}{a\,b\,c \sin\beta} = \frac{1}{b} = 0{,}06579\,\text{Å}^{-1},$$

$$c^* = \frac{a\,b \sin\gamma}{V} = \frac{a\,b}{a\,b\,c \sin\beta} = \frac{1}{c \sin\beta} = 0{,}1744\,\text{Å}^{-1}.$$

Naposlijetku, skicirajmo ravninu u kojoj su vektori $\vec{a}$ i $\vec{c}$, a na koju je $\vec{b}$ okomit (na slici dolje on, budući da je baza desna, ide ,,u papir“). Koristeći definiciju $\vec{a}^*$ i $\vec{c}^*$ i definiciju vektorskog produkta dobivamo smjerove i orijentacije od $\vec{a}^*$ i $\vec{c}^*$ kao na slici:



Budući da je $\vec{a}^* \perp \vec{c}$ i $\vec{c}^* \perp \vec{a}$, kut između $\vec{a}$ i $\vec{a}^*$ jednak je kutu između $\vec{c}$ i $\vec{c}^*$ i to je jednako $\beta - 90°$, pa slijedi $\beta^* = 90° - (\beta - 90°) = 180° - \beta = 61{,}57°$.
(b) Spomenuta ravnina je ravnina jednadžbe $-x + 2y = 1$. Ona je paralelna z-osi, x-os siječe u točki $M = (-1, 0, 0)$, a y-os siječe u točki $N = \left(0, \frac{1}{2}, 0\right)$. Točka M je točka rešetke, a točka N nije. U ravnini je i svaka točka tipa $(-1, 0, z)$ pa možemo jednu od njih s cjelobrojnim z, primjerice $M' = (-1, 0, 1)$ uzeti kao drugu točku. Kao tre'ca treba nam bilo koja točka rešetke u ravnini koja nije na pravcu MM' ($x = -1$, $y = 0$, $z = t$), primjerice $N' = (1, 1, 0)$. Udaljenost dvije točke je duljina vektora koji ih spaja, što je u slučaju ovih točaka M, M', N' najjednostavnije izračunati za $\vec{MM'} = [0, 0, 1] = \vec{c}$, tj. imamo $|MM'| = c = 6{,}522\,$Å.

5. (20) Simetrije kristalnih struktura su izometrije[1] prostora $V^3(O)$ koje fiksiraju kristalnu rešetku (točke rešetke preslikavaju u točke rešetke). Svaka simetrija može se opisati kao kompozicija $T \circ \hat{A}$ jednog ortogonalnog linearnog operatora $\hat{A} : V^3(O) \to V^3(O)$ i jedne translacije $T : V^3(O) \to V^3(O)$ (translacija je funkcija oblika $T(\vec{v}) = \vec{v} + \vec{t}$ gdje je $\vec{t} \in V^3(O)$ fiksan vektor). Neka je $A \in M_3$ matrica operatora $\hat{A}$ s obzirom na kristalografsku bazu $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ i neka je $T \in M_{3,1}$ matrica koja sadrži koordinate vektora $\vec{t}$ u kristalografskoj bazi. Tada je definirana tzv. proširena matrica simetrije F:

$$\mathcal{F} = \left(\begin{array}{c|c} A & T \\ \hline 0\,0\,0 & 1 \end{array} \right) \in M_4.$$

(a) (3) Koji su mogući iznosi $\det \mathcal{F}$?

(b) (4) Je li

$$\mathcal{G} = \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right)$$

proširena matrica neke simetrije neke kristalne strukture?

(c) (3) Zapišite jednu konkretnu proširenu matricu simetrije rompske kristalne strukture koja nije ni trivijalna (jedinični operator) ni inverzija (centralnja simetrija). Kristalografska baza za rompske kristalne strukture je opća ortogonalna baza ($a \neq b \neq c \neq a$, $\alpha = \beta = \gamma = 90°$).

(d) (10) Odredite proširenu matricu inverznog preslikavanja od F. Je li ona inverzna matrici $\mathcal{F}$?

Ne priznaju se odgovori bez prikladnih argumenata!
Rješenje.
(a) Budući da ortogonalni operatori u ortonormiranim bazama imaju ortogonalne matrice, u ortonormiranoj bazi im je determinanta matrice $+1$ ili -1. Budući da je determinanta invarijanta linearnog operatora, znači da je $\det A = \pm 1$, pa je (razvojem po zadnjem retku) $\det \mathcal{F} = 1 \cdot \det A = \pm 1$.
(b) Budući da je $\det \mathcal{G} = -1$, ne možemo zaključiti da se ne radi o proširenoj matrici simetrije. No, budući da simetrije moraju fiksirati točke rešetke, tj. točke koje imaju cjelobrojne koordinate u kristalografskom koordinatnom

[1] Izometrije su preslikavanja koja čuvaju duljine i kutove.

sustavu preslikavati u točke s cjelobrojnim koordinatama, svi elementi matrica A i T moraju biti cijeli brojevi, što ovdje nije slučaj ($a_{22} = \frac{1}{2}$), dakle $\mathcal{G}$ nije proširena matrica nikoje simetrije nikoje kristalne strukture.

(c) Ako je kristalografska baza ortogonalna, točke rešetke su raspoređene kao vrhovi općih kvadara, tj. u obzir kao ortogonalne komponente simetrija dolaze jedinični operator, centralna simetrija (inverzija), zrcaljenja s obzirom na koordinatne ravnine i rotacije reda 2 oko koordinatnih osi (zapravo i rotoinverzije reda 2 oko koordinatnih osi, no one su ekvivalentne spomenutim zrcaljenjima), a kao translacijska komponenta može se pojaviti bilo koji vektor s cjelobrojnim koordinatama. Stoga je u ovom dijelu točan odgovor samo neka od matrica

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & m \\ 0 & 1 & 0 & n \\ 0 & 0 & 1 & p \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right), \quad \left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 0 & m \\ 0 & -1 & 0 & n \\ 0 & 0 & -1 & p \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right), \quad \left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 0 & m \\ 0 & -1 & 0 & n \\ 0 & 0 & 1 & p \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right),$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 0 & m \\ 0 & 1 & 0 & n \\ 0 & 0 & -1 & p \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right), \quad \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & m \\ 0 & -1 & 0 & n \\ 0 & 0 & -1 & p \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right), \quad \left(\begin{array}{ccc|c} -1 & 0 & 0 & m \\ 0 & 1 & 0 & n \\ 0 & 0 & 1 & p \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right),$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & m \\ 0 & -1 & 0 & n \\ 0 & 0 & 1 & p \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right), \quad \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & m \\ 0 & 1 & 0 & n \\ 0 & 0 & -1 & p \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right).$$

s $m, n, p \in \mathbb{Z}$ (za prve dvije zbog uvjeta zadatka ne dolaze u obzir $m = n = p = 0$).

(d) Po opisu F imamo $F(\vec{v}) = T \circ \hat{A}(\vec{v}) = \hat{A}\vec{v} + \vec{t}$. Stavimo li $\vec{w} = F(\vec{v})$ imamo redom $\hat{A}\vec{v} + \vec{t} = \vec{w}$, $\hat{A}\vec{v} = \vec{w} - \vec{t}$, pa (jer su ortogonalni operatori invertibilni i inverz im je linearan) $\vec{v} = \hat{A}^{-1}(\vec{w} - \vec{t}) = \hat{A}^{-1}\vec{w} - \hat{A}^{-1}\vec{t}$, dakle je F^{-1} kompozicija translacije za vektor $\vec{u} = -\hat{A}^{-1}\vec{t}$ s linearnim operatorom $\hat{A}^{-1}$. Budući da je matrica linearnog operatora od $\hat{A}^{-1}$ s obzirom na neku bazu točno inverz matrice A operatora $\hat{A}$ s obzirom na istu tu bazu, odgovarajuća proširena matrica inverza od F je

$$\mathcal{F}' = \left(\begin{array}{c|c} A^{-1} & U \\ \hline 0\,0\,0 & 1 \end{array}\right),$$

gdje je $U = -A^{-1}T \in M_{3,1}$ matrica koja sadrži koordinate vektora $\vec{u}$ u kristalografskoj bazi. Pomnožimo $\mathcal{F}$ s $\mathcal{F}'$:

$$\left(\begin{array}{c|c} A & T \\ \hline 0\,0\,0 & 1 \end{array}\right) \cdot \left(\begin{array}{c|c} A^{-1} & U \\ \hline 0\,0\,0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & x_T \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & y_T \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & z_T \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \cdot \left(\begin{array}{ccc|c} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} & x_U \\ a'_{21} & a'_{22} & a'_{23} & y_U \\ a'_{31} & a'_{32} & a'_{33} & z_U \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) =$$

(uz oznake $a_{(i)}$ i $a'_{(i)}$ za retke matrice A odnosno A^{-1}, te $a^{(i)}$ i $a'^{(i)}$ za stupce matrice A odnosno A^{-1})

$$= \left(\begin{array}{ccc|c} \langle a_{(1)}, a^{(1)} \rangle & \langle a_{(1)}, a^{(2)} \rangle & \langle a_{(1)}, a^{(3)} \rangle & \langle a_{(1)}, u \rangle + x_T \\ \langle a_{(2)}, a^{(1)} \rangle & \langle a_{(2)}, a^{(2)} \rangle & \langle a_{(2)}, a^{(3)} \rangle & \langle a_{(2)}, u \rangle + y_T \\ \langle a_{(3)}, a^{(1)} \rangle & \langle a_{(3)}, a^{(2)} \rangle & \langle a_{(3)}, a^{(3)} \rangle & \langle a_{(3)}, u \rangle + z_T \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} A\,A^{-1} & A\,U + T \\ \hline 0\,0\,0 & 1 \end{array}\right) =$$

$$= \left(\begin{array}{c|c} I_3 & A\,(-A^{-1}\,T) + T \\ \hline 0\,0\,0 & 1 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|c} I_3 & -T + T \\ \hline 0\,0\,0 & 1 \end{array}\right) = I_4,$$

dakle je $\mathcal{F}' = \mathcal{F}^{-1}$.