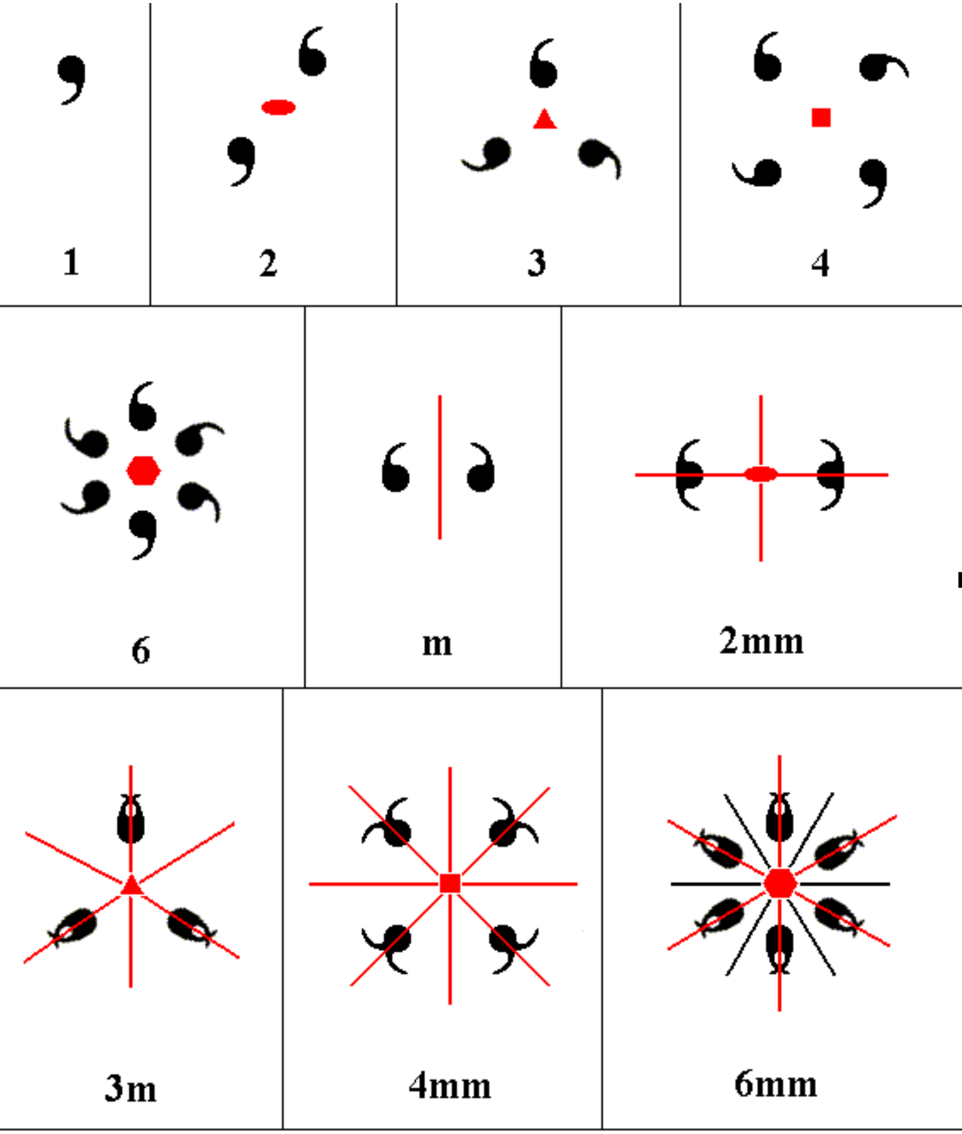
GMG-106 – Cristalografia Fundamental

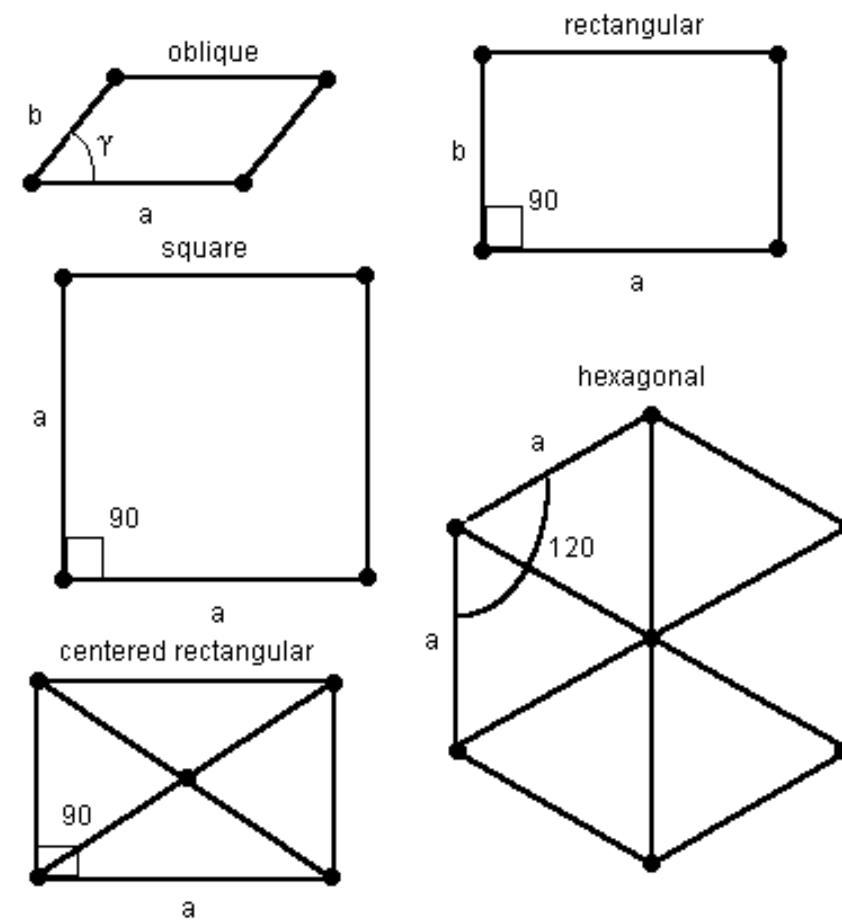
Retículos Espaciais, Celas de Bravais e Grupos Espaciais

Das últimas aulas...



The Ten Planar Point Groups

+



<u>= 17 grupos planares</u>

Novos elementos de simetria

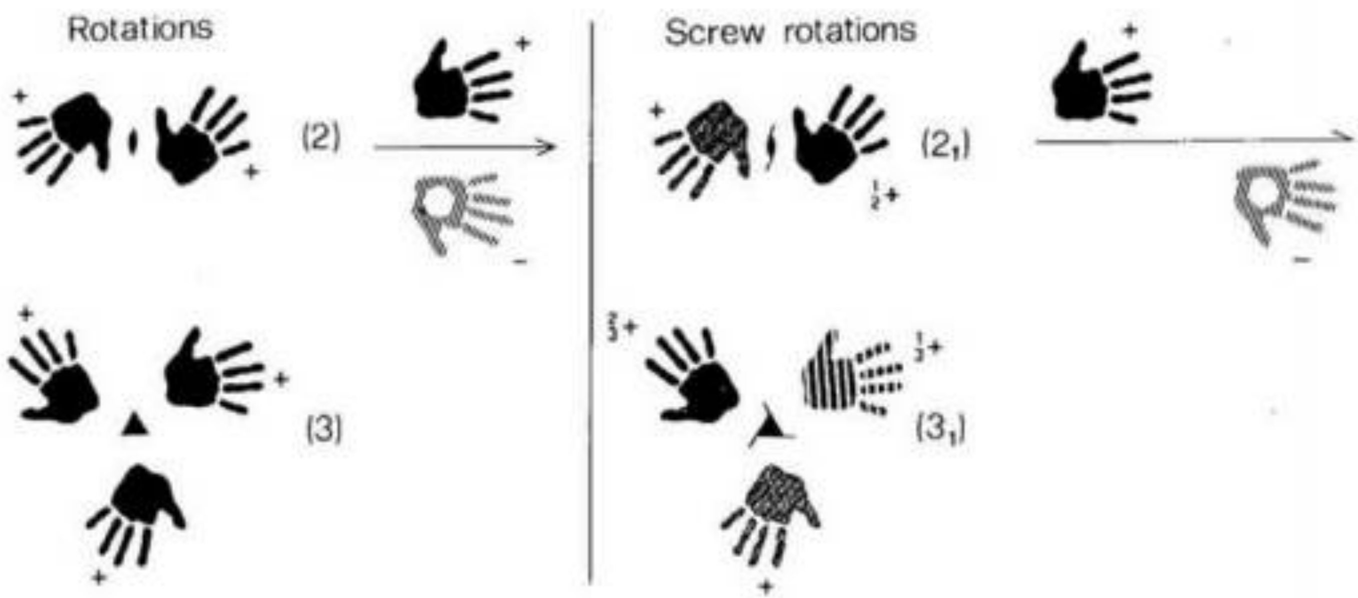


Fig. 2. Symmetry operations of the first kind (examples).

Novos (e velhos) elementos de simetria

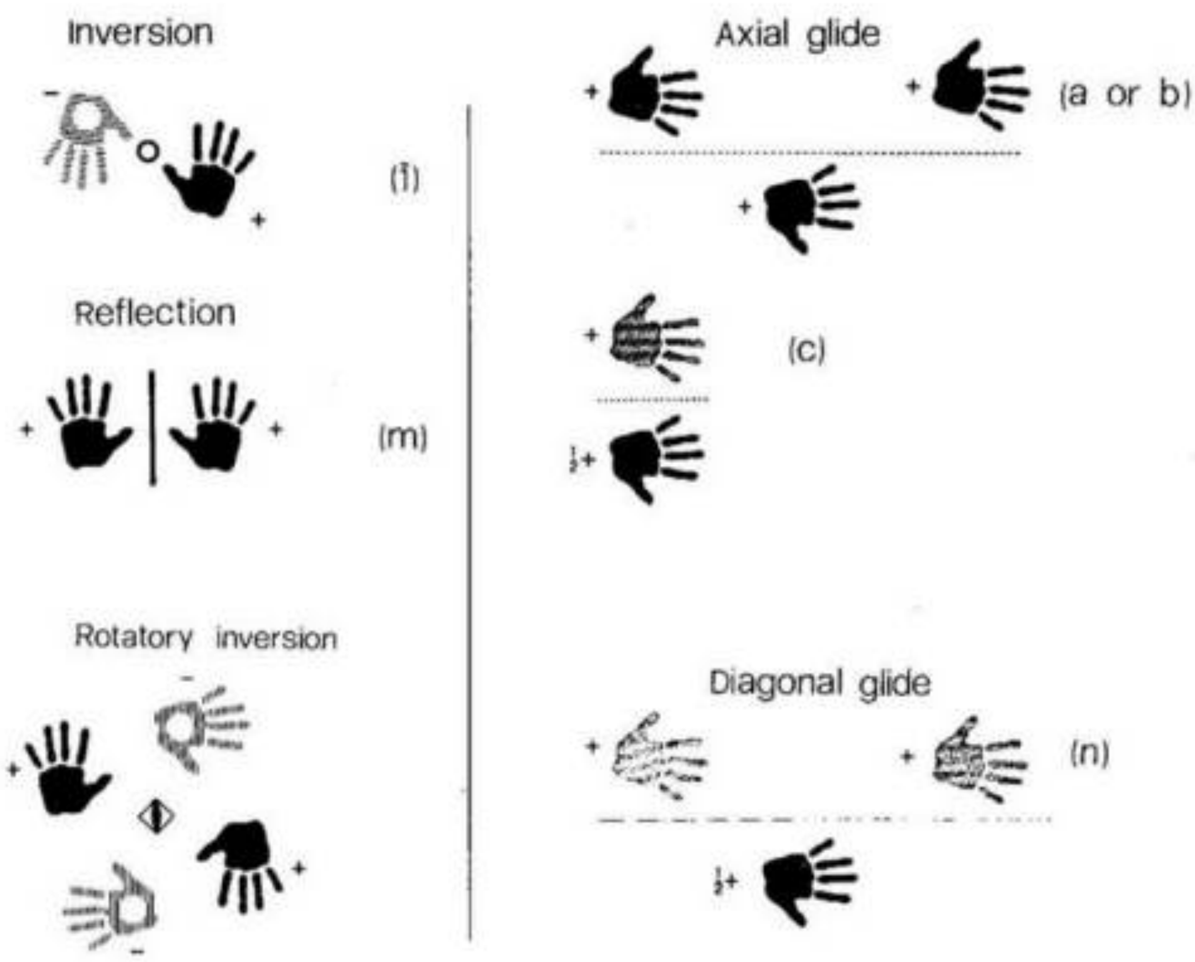
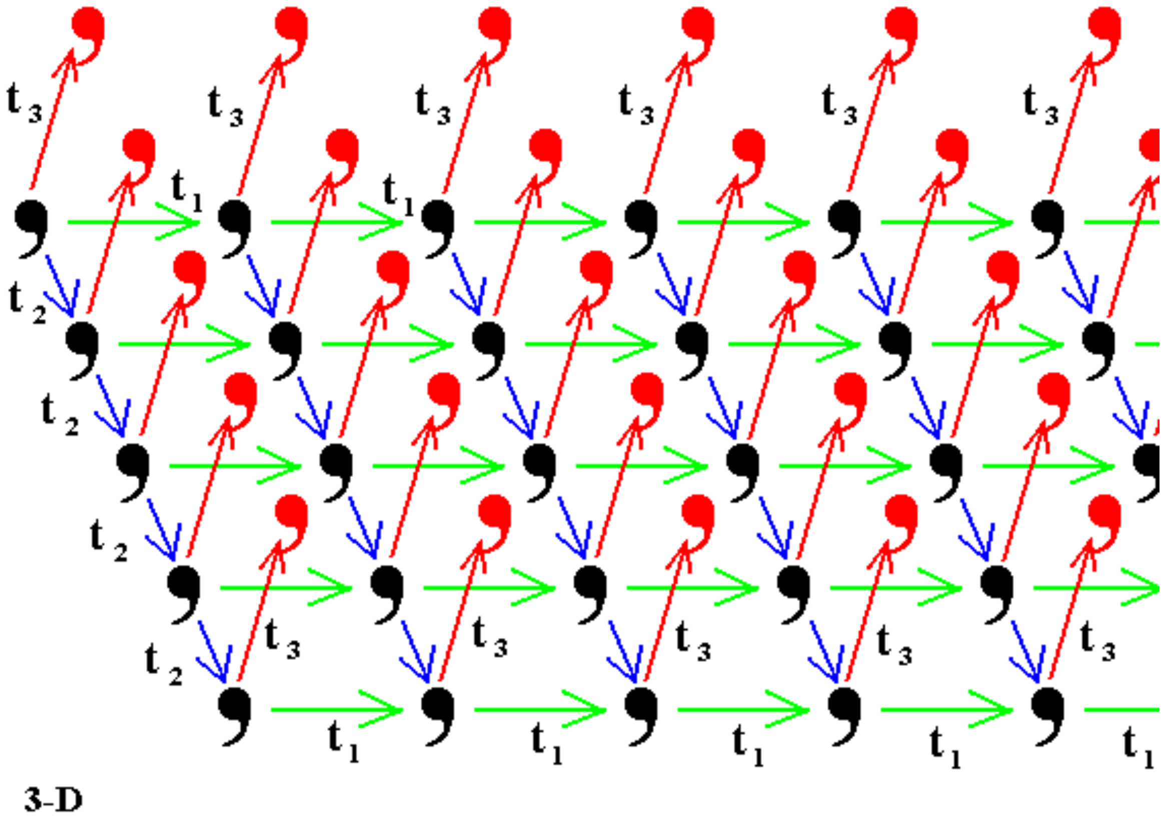


Fig. 3. Symmetry operations of the second kind.

Transição 2D – 3D



- Retículos espaciais

Quantas possibilidades?

- Bravais provou que há apenas 14 possibilidades de arranjar pontos no espaço!

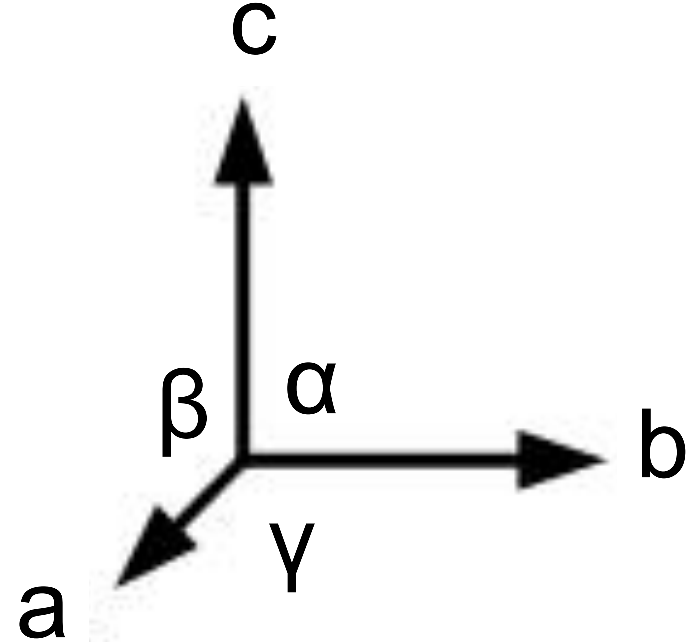
- São chamados de retículos de Bravais

As **Celas de Bravais** podem ser:

- **P** (primitivas) – nós (pontos equivalentes) só nos vértices (conteúdo em nós = 1);
- **I** (de corpo centrado) – nós no centro da cela e nos vértices (conteúdo em nós = 2);
- **F** (de faces centradas) – nós no centro das faces e nos vértices (conteúdo em nós = 4);
- **A**, **B** ou **C** – nós no centro de um par de faces (pinacóide) e nos vértices (conteúdo em nós = 2).

Parâmetros

- α = ângulo no plano a, c
- β = ângulo no plano y, z
- γ = ângulo no plano x, y



Retículos de Bravais

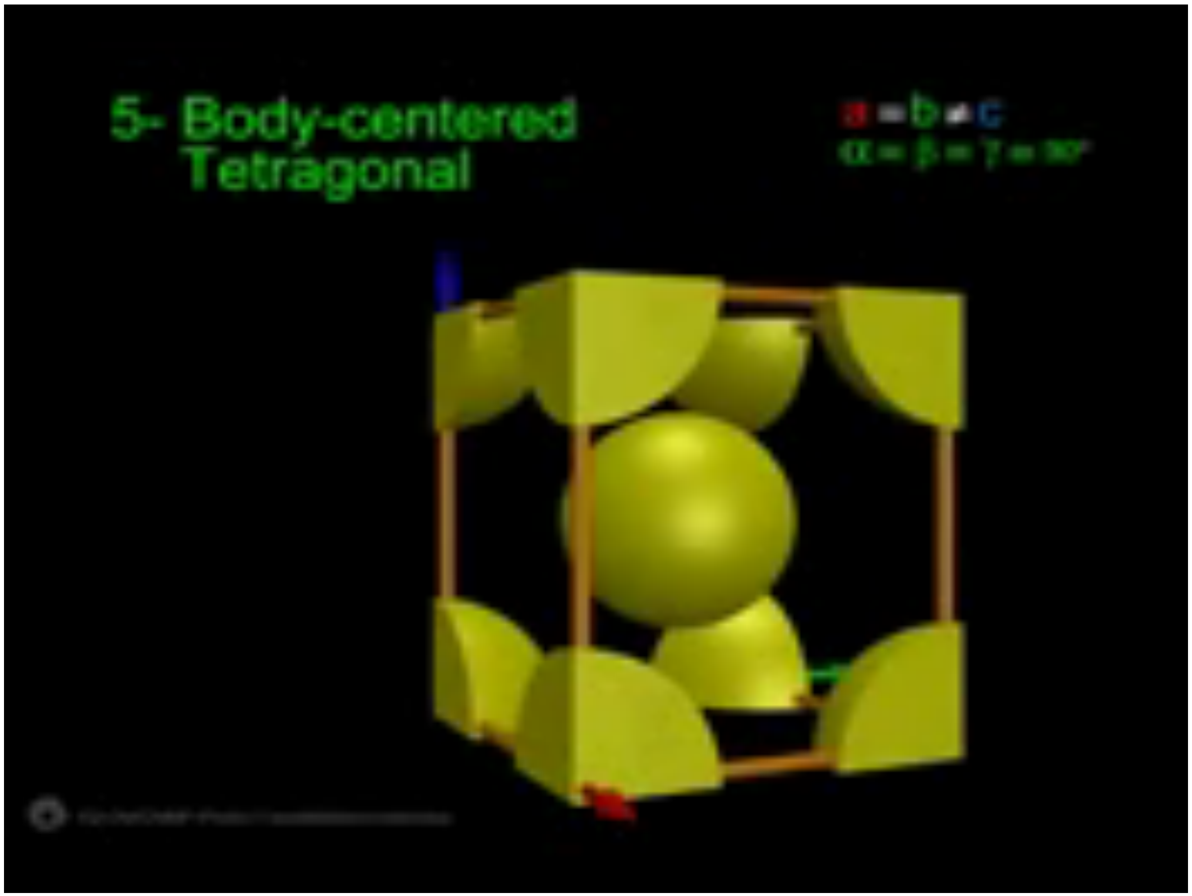
- Retículos do sistema cúbico P, I e F

Retículos de Bravais

- Retículos do sistema tetragonal P e I

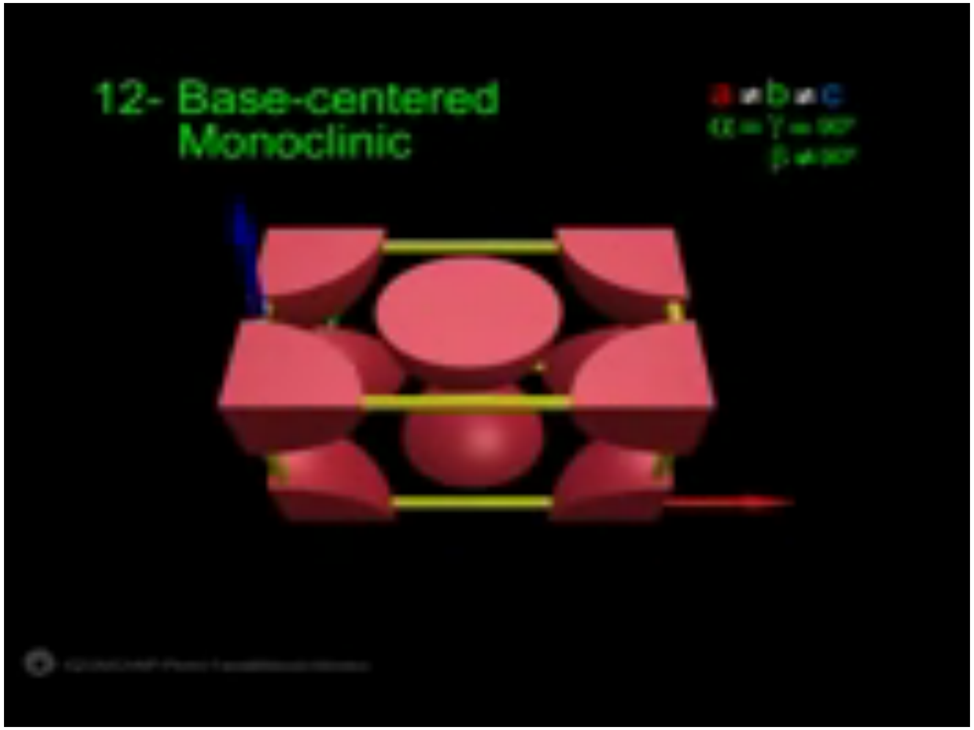
Retículos de Bravais

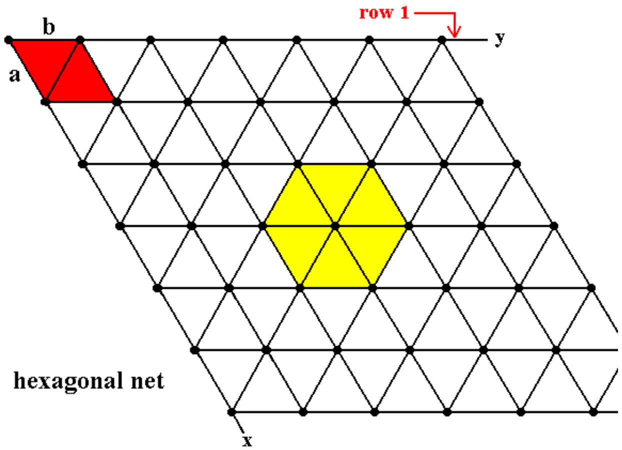
- Retículos do sistema ortorrômbico P, I, F, C



Retículos de Bravais

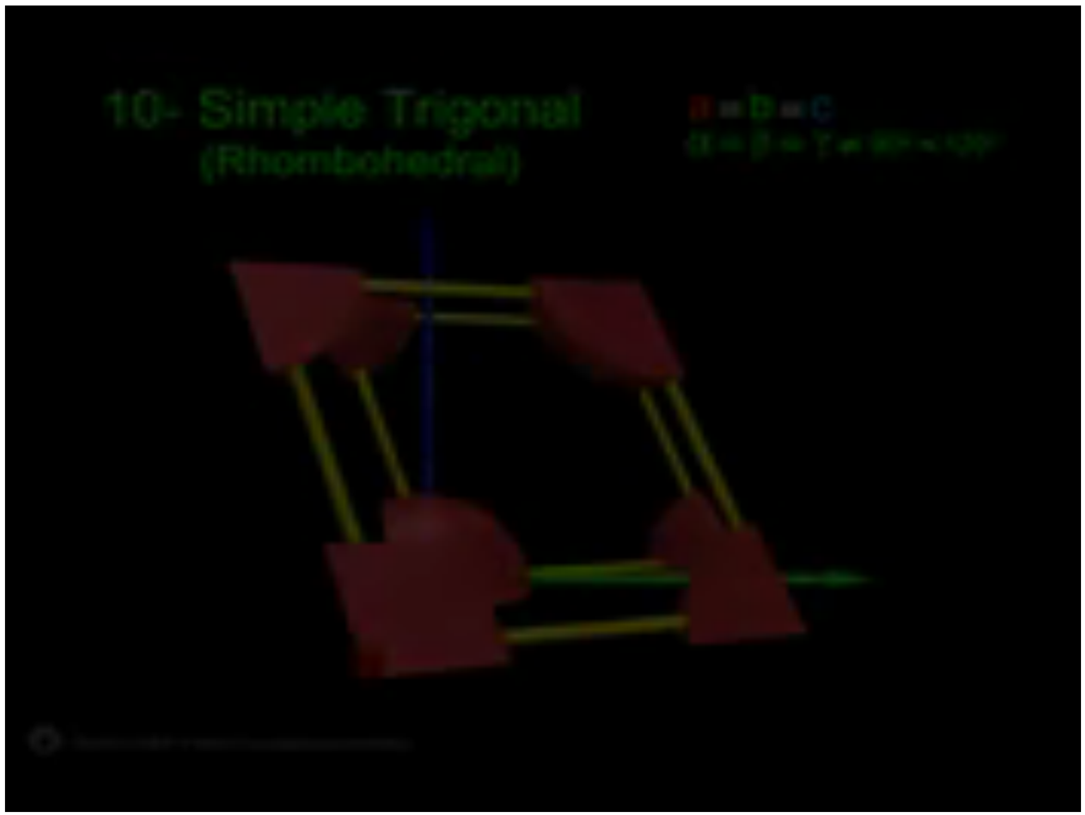
- Retículos do sistema hexagonal P





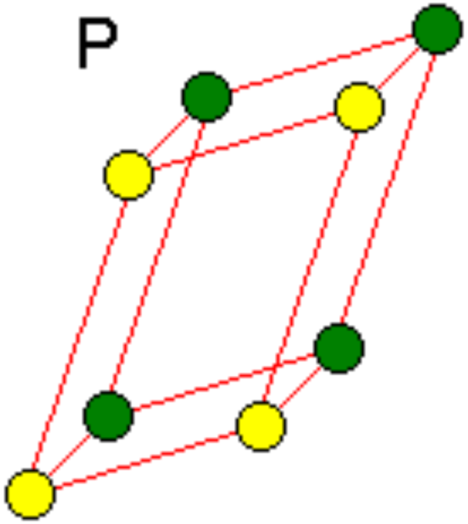
Retículos de Bravais

- Sistema monoclínico P e C

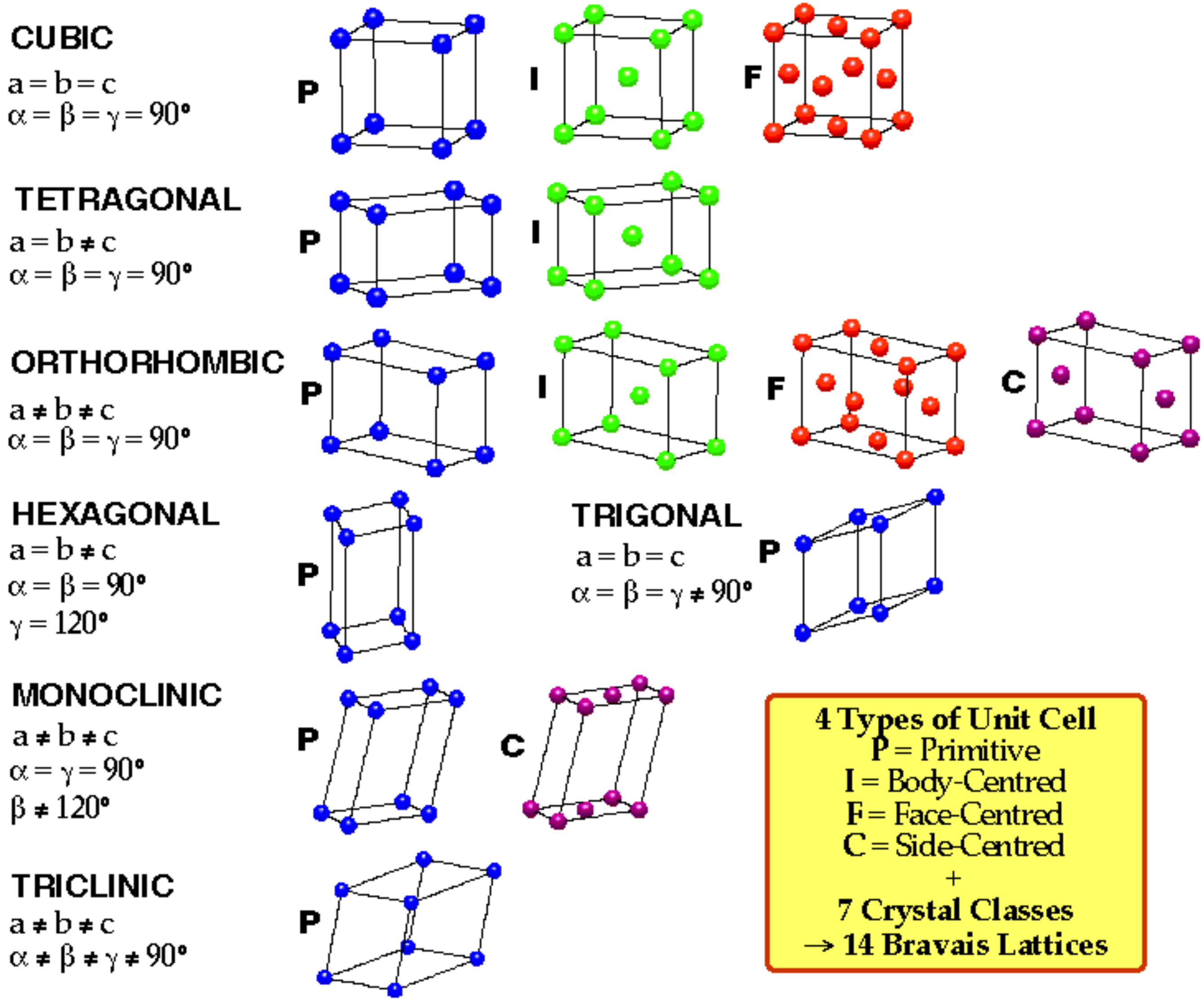


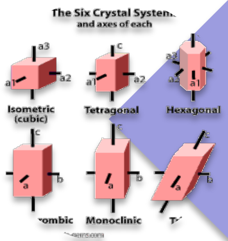
Retículos de Bravais

- Sistema triclínico só tem cela P



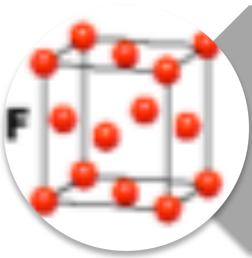
As 14 Celas de Bravais distribuidas segundo os 7 Sistemas Cristalinos





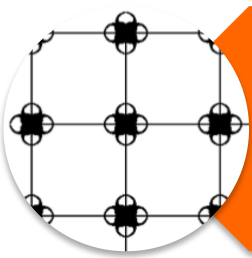
7 Sistemas Cristalinos

+



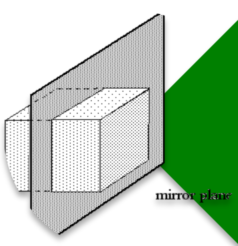
14 Celas de Bravais

+

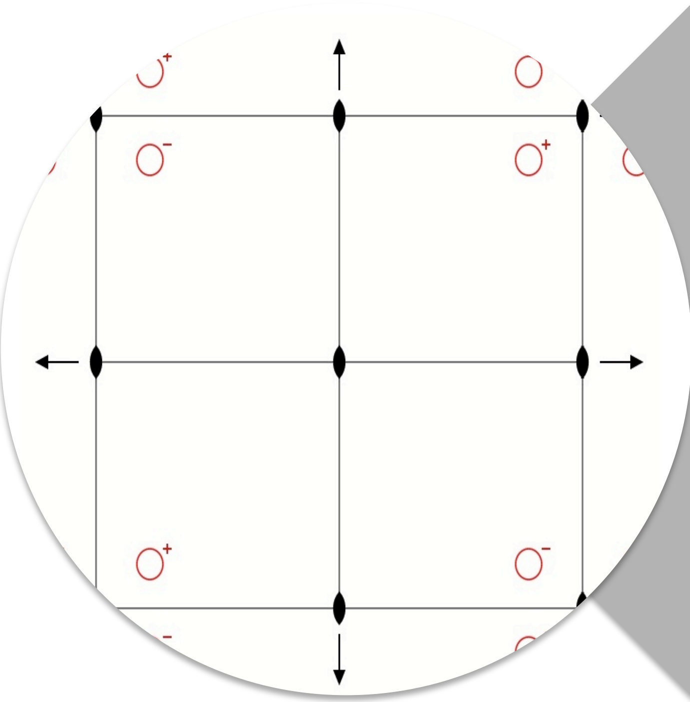


32 Classes cristalinas

+



Operações de Simetria



230 Grupos Espaciais

230 grupos espaciais

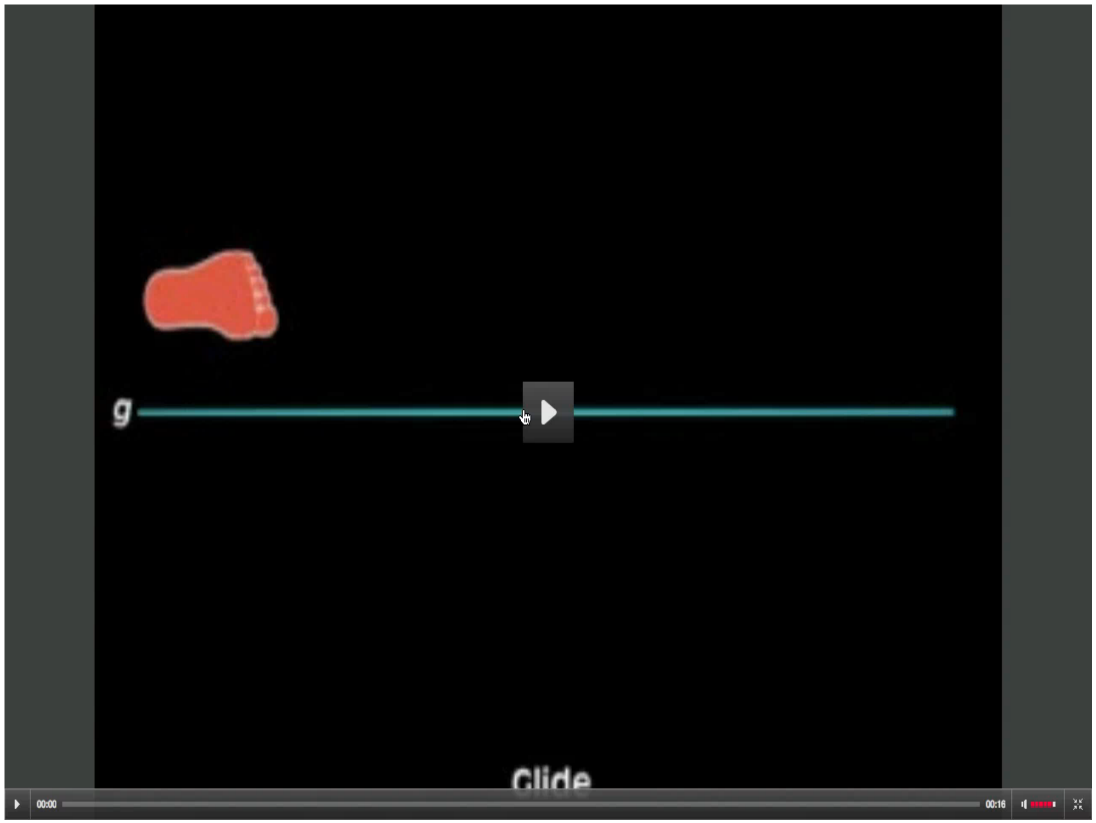
- Contêm operações de simetria adicionais às já estudadas
- Planos deslizantes (tipos a, b, c, n, d)
- Eixos helicoidais

Grupos Espaciais: são a combinação das 14 Celas (ou redes) de Bravais com os 32 Grupos Pontuais, que representam a simetria do motivo. Resultado: 230 Grupos Espaciais.

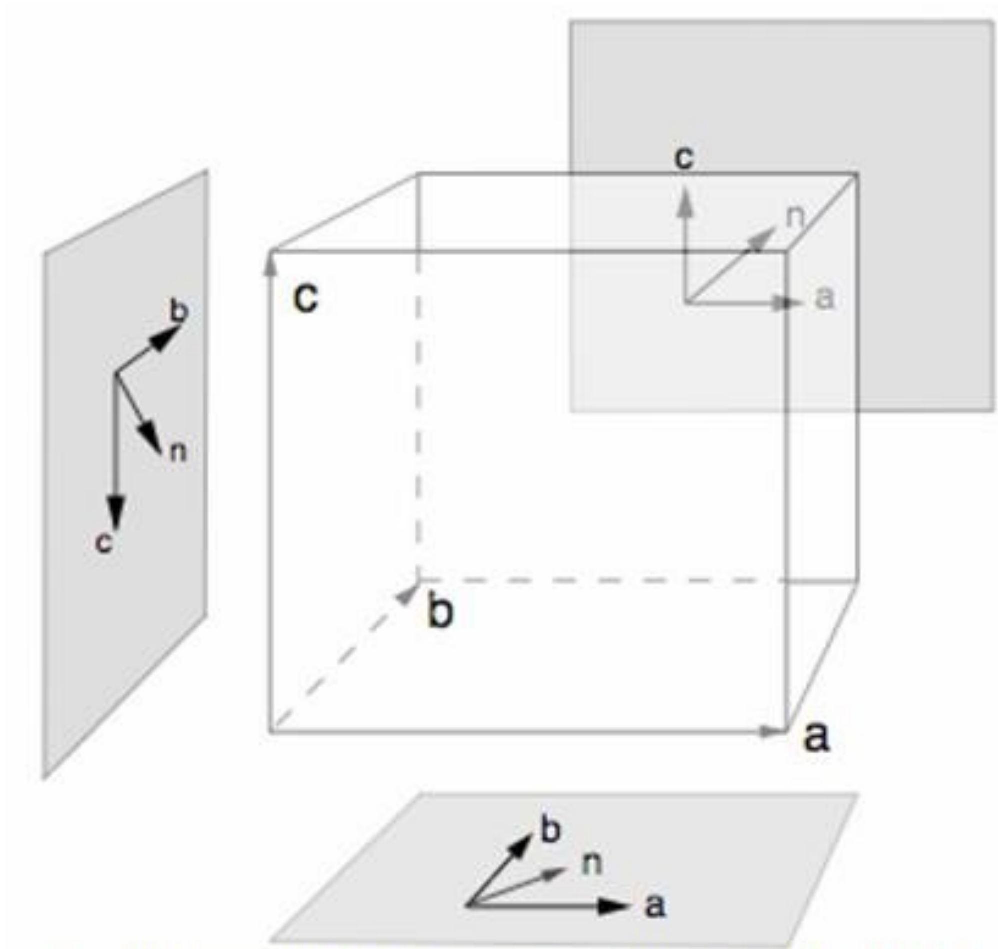
Para os Grupos Espaciais: além dos elementos de simetria dos Grupos Pontuais (Eixos próprios 1, 2, 3, 4 e 6; Eixos impróprios 3, 4 e 6; plano – m; e centro – i) – elementos que combinam:

- reflexão com translação = **planos deslizantes**: **a**,**b**,**c**,**n** e **d**; e
- rotação com translação = **eixos helicoidais**: $\mathbf{2_1}$, $\mathbf{3_1}$, $\mathbf{3_2}$, $\mathbf{4_1}$, $\mathbf{4_2}$, $\mathbf{4_3}$, $\mathbf{6_1}$, $\mathbf{6_2}$, $\mathbf{6_3}$, $\mathbf{6_4}$, $\mathbf{6_5}$

Planos deslizantes



Bloco-diagrama dos planos deslizantes em uma cela ortorrômbica



Planos deslizantes: combinam meia unidade de translação em uma determinada direção com reflexão. São designados segundo as direções em que operam.

Numa cela do sistema ortorrômbico:

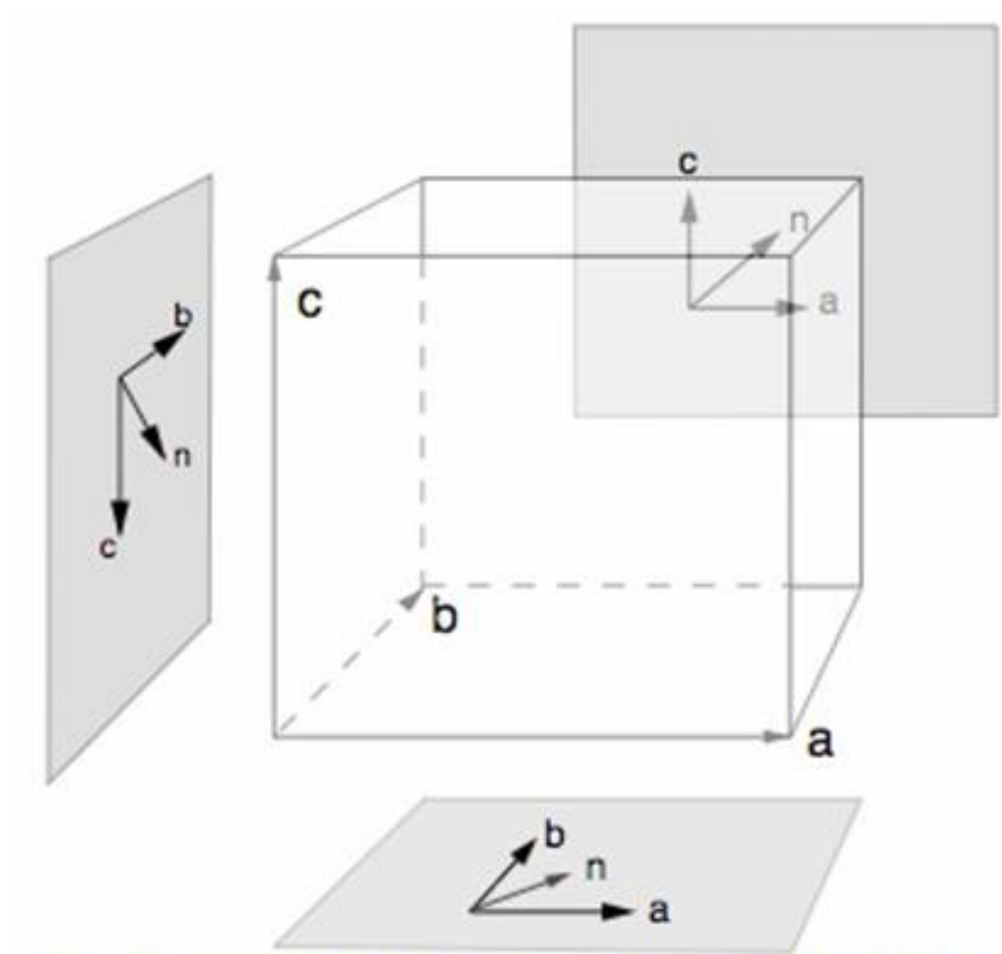
- // aos planos (100): planos deslizantes **b**, **c**, **n**
- // aos planos (010): planos deslizantes **a**, **c**, **n**
- // aos planos (001): planos deslizantes **a**, **b**, **n**

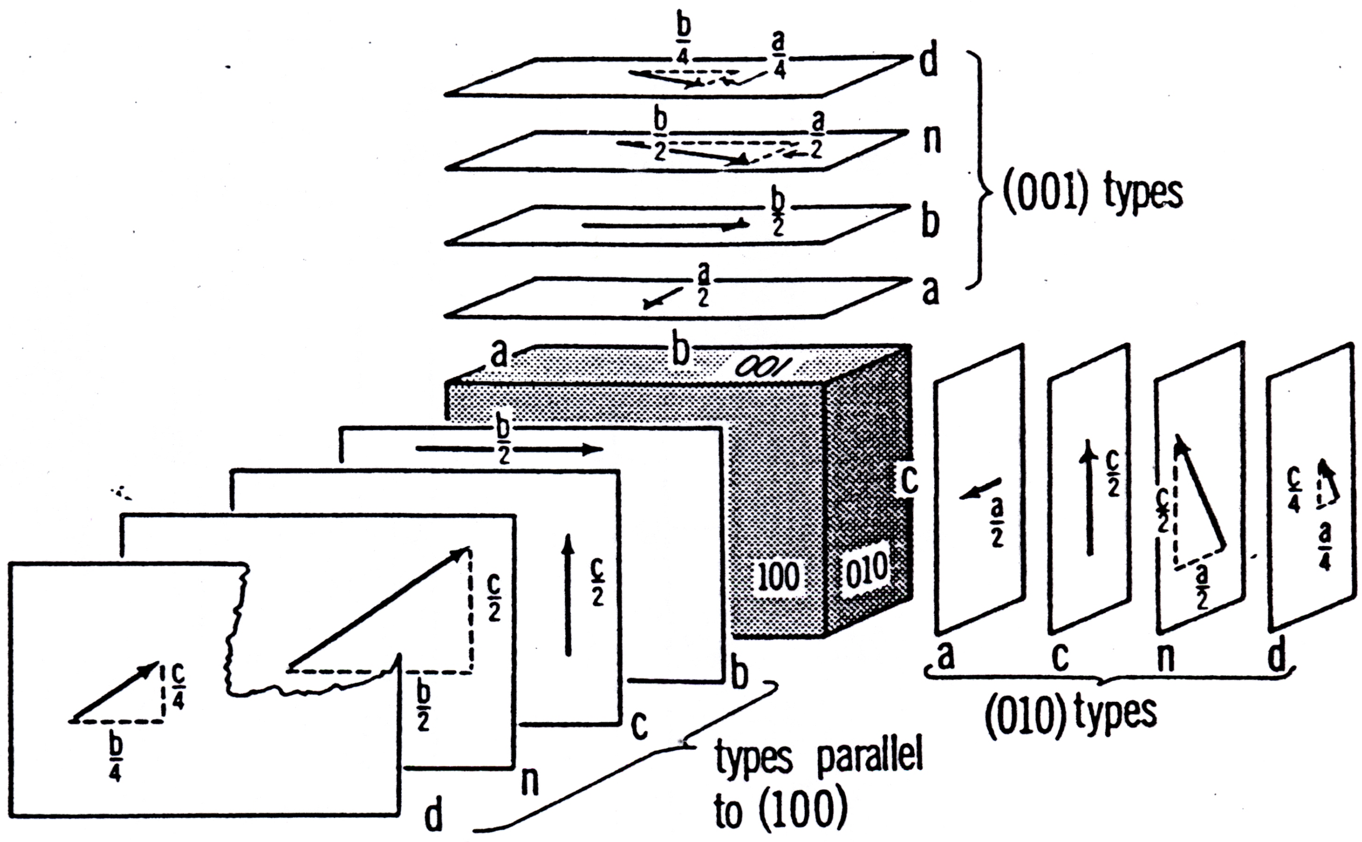
a, **b**, **c**: direções de translação paralelas aos eixos cristalográficos a, b e c;

Planos **n**: combinam t/2 em uma direção com t/2 em outra; Ex: nos planos (100): **n** = **b**+**c**; nos planos (010): **n** = **a**+**c**

Planos **d** (de diamante): somente nos sistemas cúbico e tetragonal: t/4 em uma direção, combinado com t/4 em outra.

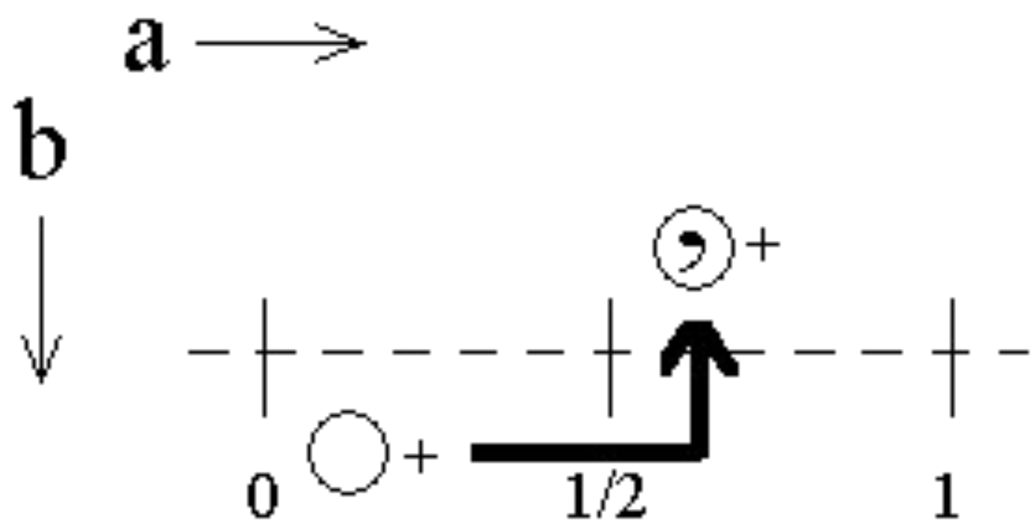
Bloco-diagrama dos planos deslizantes em uma cela ortorrômbica





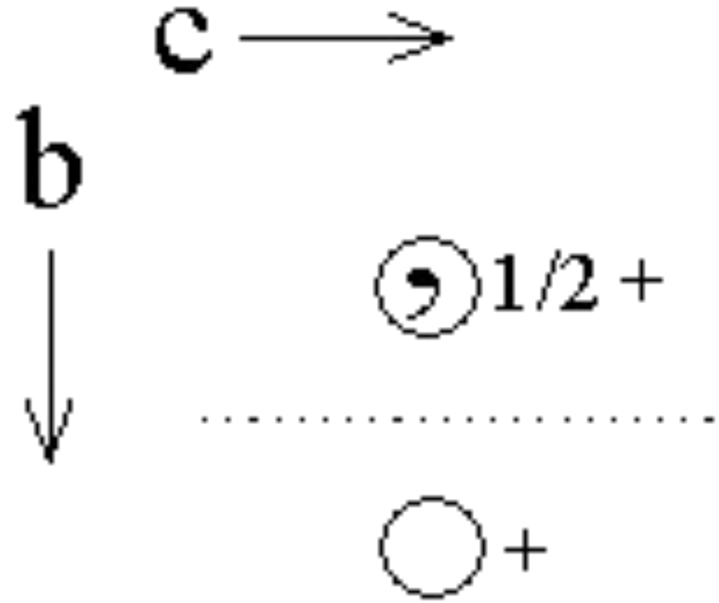
(001) types
d
n
b
a
001
100
010
types parallel to (100)
(010) types

Plano deslizante **a**, vertical, com vetor de translação contido no plano de projeção: notar indicação de objeto direito (círculo vazio) x objeto esquerdo (círculo com "girino")



Projeção em (001)

Plano deslizante **a**, vertical, com vetor de translação normal ao plano de projeção



Projeção em (100)

Eixos helicoidais

Rotação + Translação

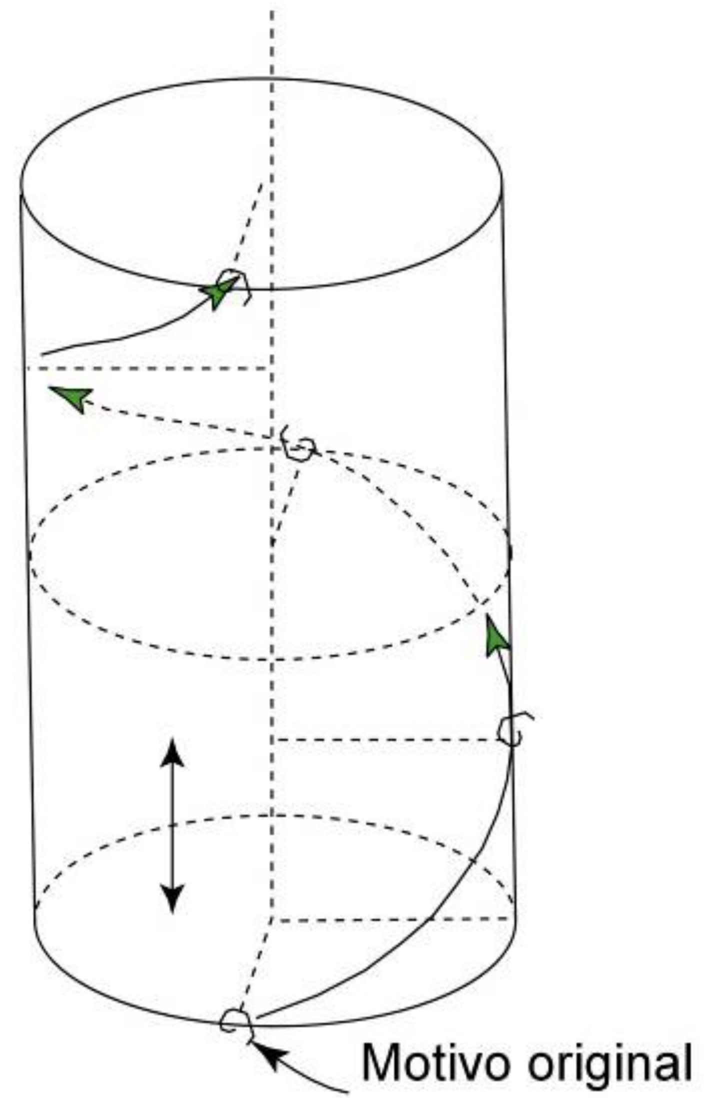
Exemplos: 2_1 – 1/2 unidade de translação
3_1 – 1/3 da unidade de translação
3_2 – 2/3 da unidade de tranlação
4_1 – 1/4 da unidade de translação
4_2 – 2/4 = 1/2 da unidade de translação
6_1 – 1/6 da unidade de translação
6_5 – 5/6 da unidade de translação, etc

Por convenção: a operação dos eixos deve ser sempre representada como <u>anti-horária</u>.

Eixos helicoidais:

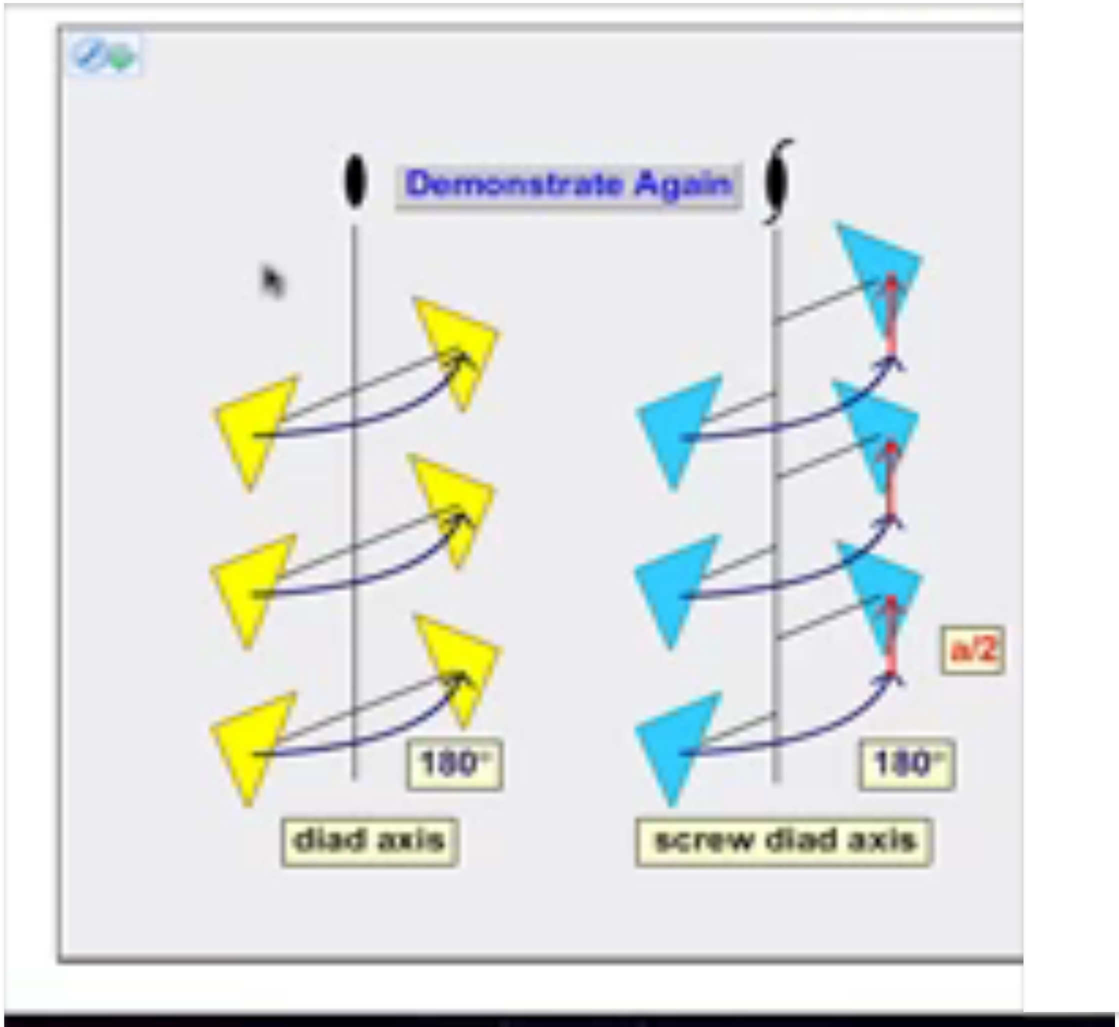
esquema genérico
da operação

eixo $\mathbf{X_n}$: rotação de
$\theta = 360^{\circ} / X$, combinado
com translação de n/X,
no sentido <u>anti-horário</u>



Eixos Helicoidais

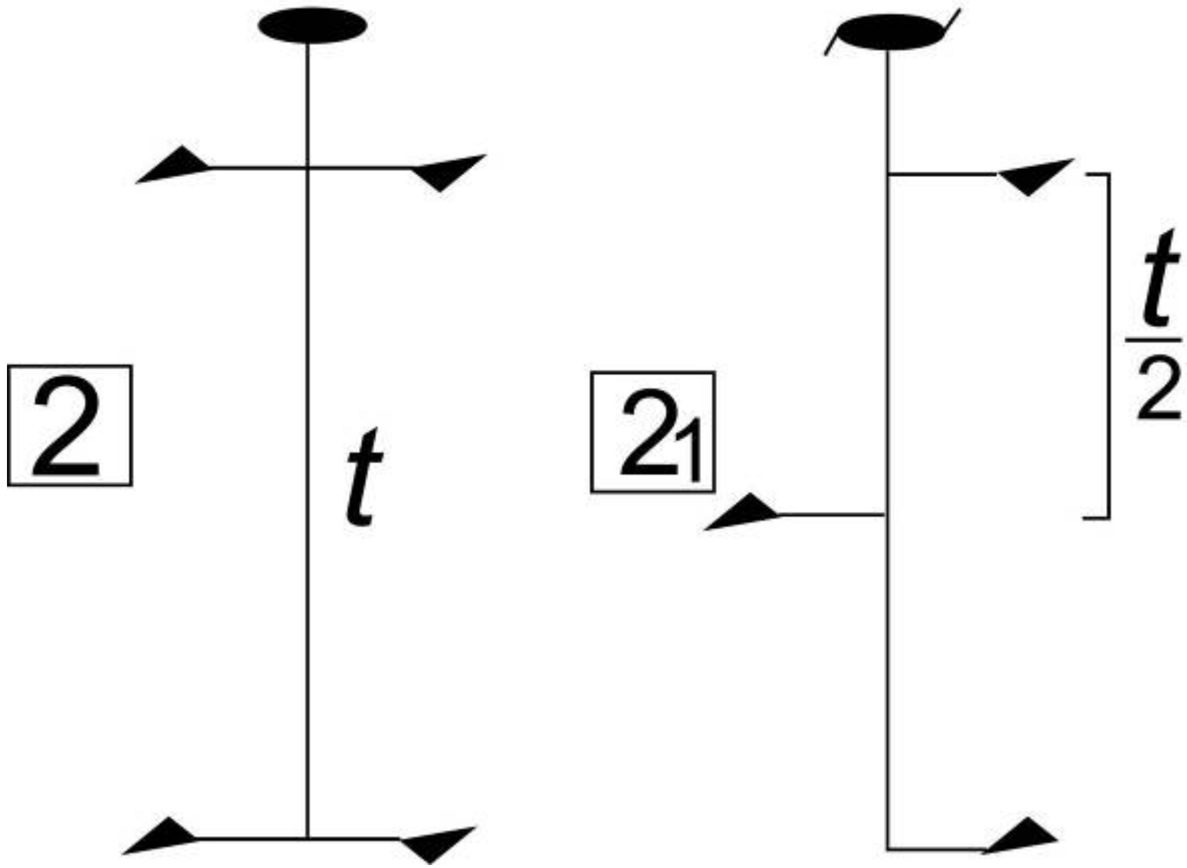
- 2_1



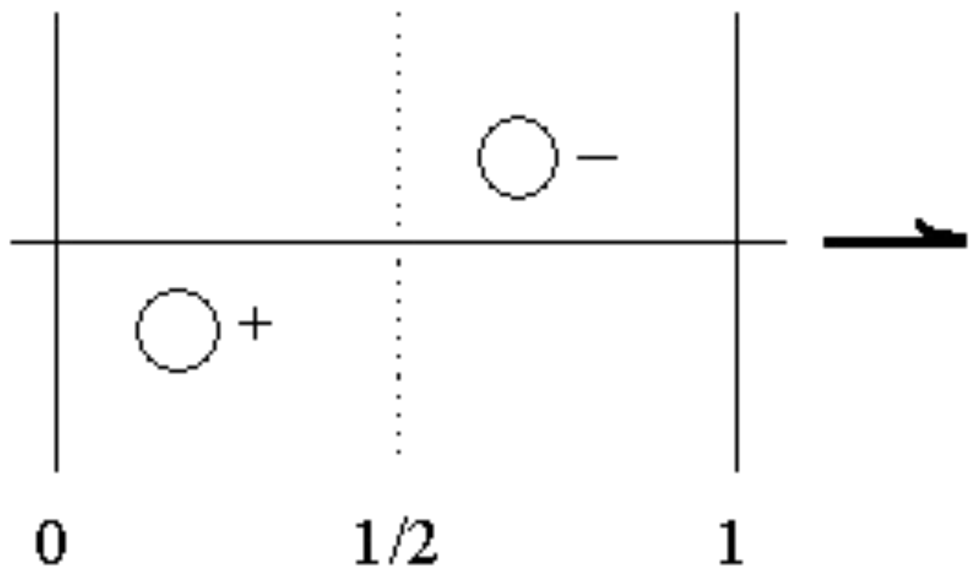
Exemplo:

eixo simples **2** e
eixo helicoidal $\mathbf{2_1}$

$X_n = 2_1$
$\theta = 360º / 2 = 180º$
translação = ½ t

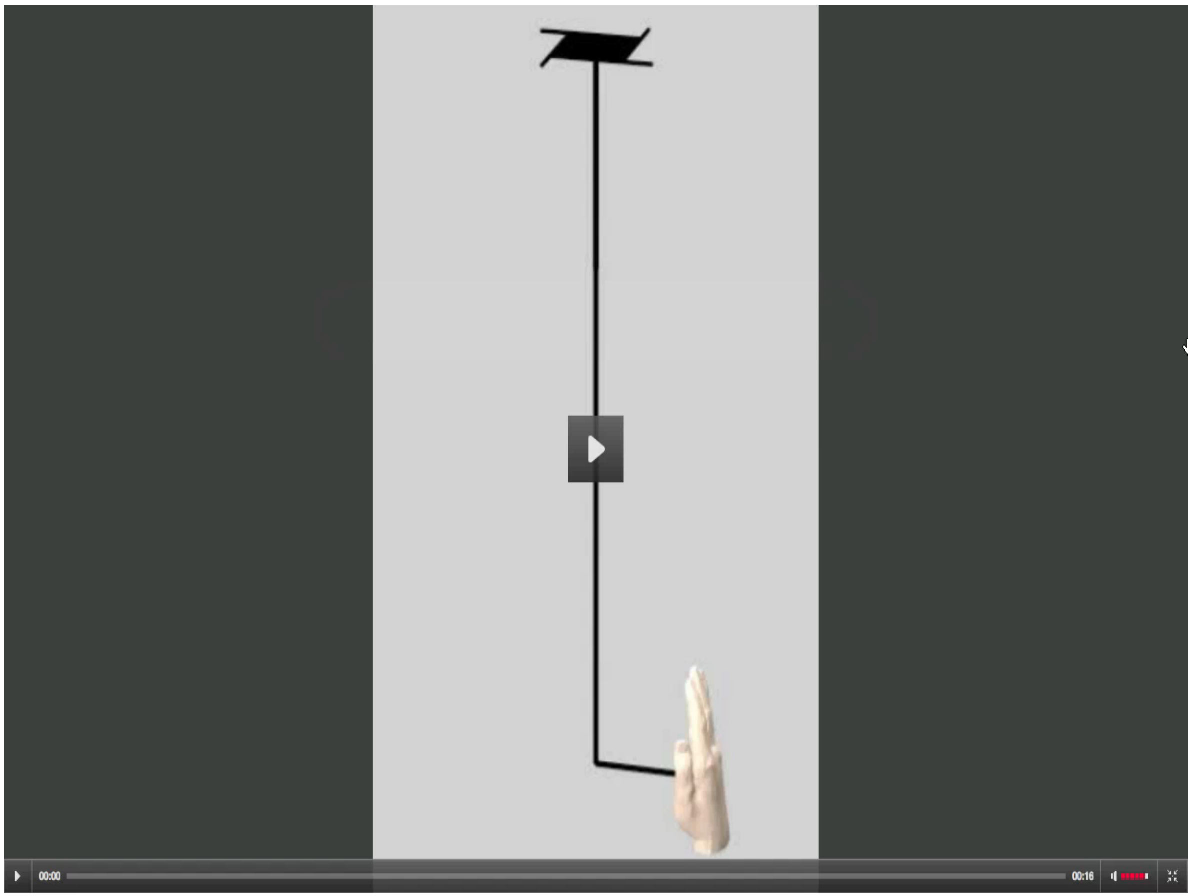


Eixo helicoidal $\mathbf{2_1}$ contido no plano de projeção:



Eixos helicoidais

- Exemplo 4_1



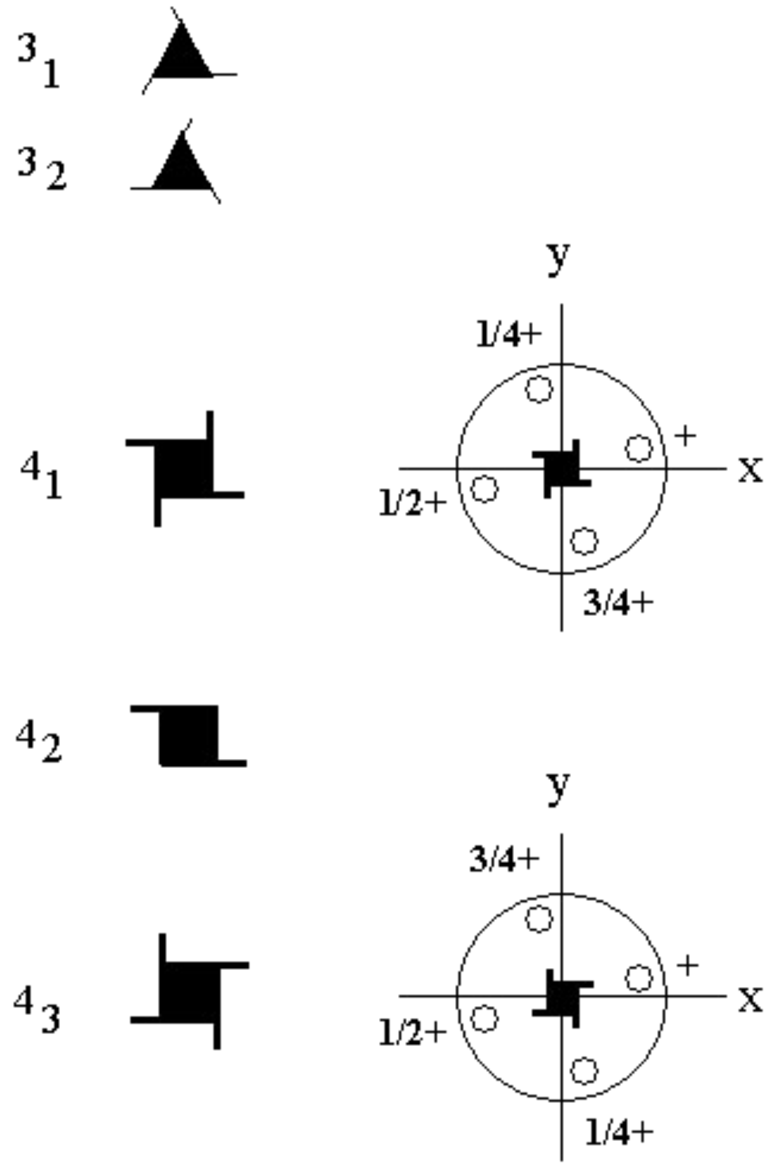
Pares de eixos helicoidais **enantiomorfos**: são imagens especulares um do outro: 3_1 e 3_2, 4_1 e 4_3, 6_1 e 6_5, 6_2 e 6_4.

No caso dos pares enantiomorfos: aquele com numeral maior pode ser entendido como equivalente ao seu par de numeral menor, mas com rotação invertida, ou seja: no sentido horário.

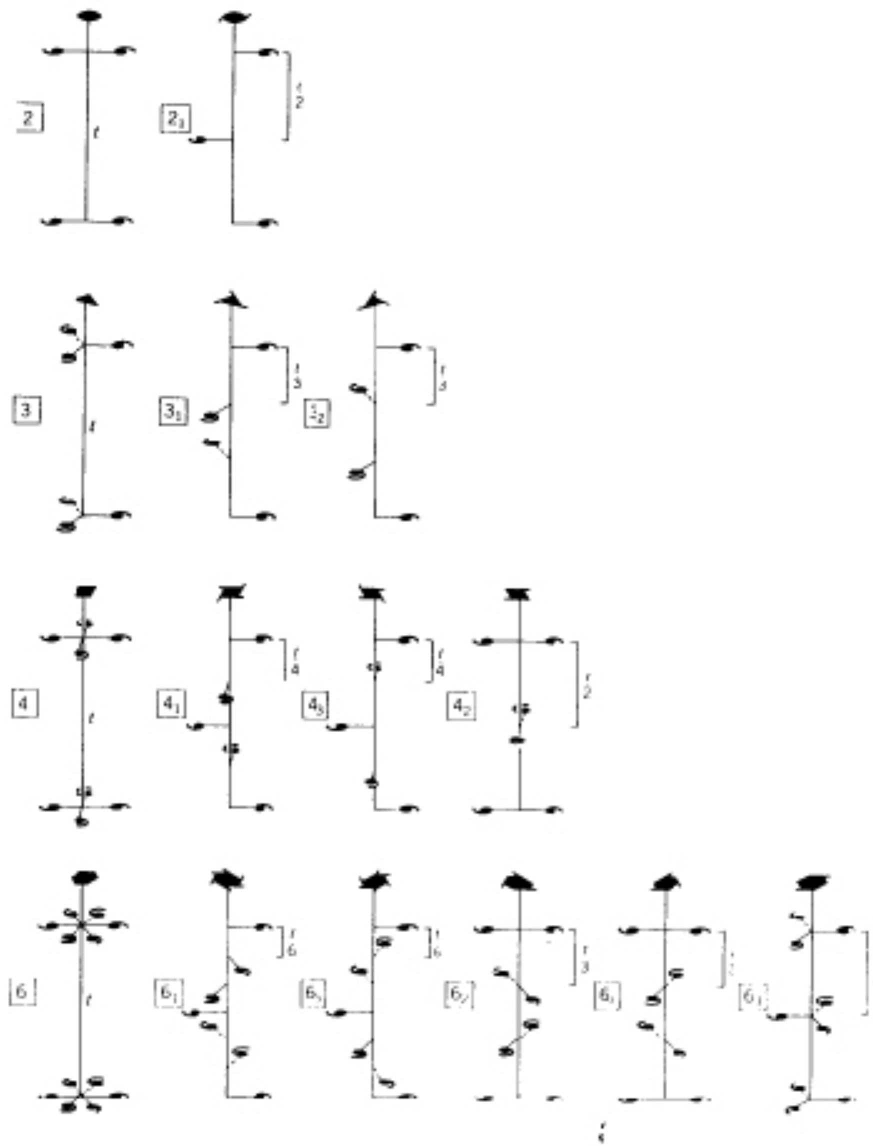
$3_2 = 3_1$, mas com sentido de rotação invertido.

Exemplos de eixos helicoidais:

3_1, 3_2, 4_1, 4_2 e 4_3



Os eixos helicoidais:



Combinações das celas de Bravais e grupos pontuais: a nomenclatura de Hermann-Mauguin para os Grupos Espaciais

O "código" de cada Grupo Espacial consiste de:

- O tipo de cela que serve como base para a distribuição dos pontos equivalentes no retículo: P, I, F, C (ou A ou B);

- O Grupo Pontual que representa a simetria do motivo, reduzido aos nós; este parâmetro define o sistema cristalino;

- Os eixos helicoidais e planos deslizantes que substituem eixos e planos simples no Grupo Pontual.

Exemplos de Grupos Espaciais no Sistema Ortorrômbico:

Cela **P** + Grupo Pontual **mm2** = **Pmm2** (Grupo Espacial <u>simples</u>)

Grupos derivados por substituição de **m** por **a**, **b**, **c** ou **n** e de **2** por $\mathbf{2_1}$ no Grupo Espacial Simples:

Pmc2_1; Pcc2; Pma2; Pca2_1; Pnc2; Pmn2_1; Pba2; Pna2_1; Pnn2

No total, são 73 Grupos Espaciais Simples (combinações diretas entre os tipos de celas e os Grupos Pontuais), e 133 Grupos Espaciais derivados destes = 230 Grupos Espaciais possíveis.

Leitura do código dos Grupos Espaciais – exemplos:

- $P2/n2_1/n2/a$: cela P (primitiva, fator de multiplicidade = 1), sistema ortorrômbico, eixo **2** // **x** com plano deslizante **n** ⊥; eixo helicoidal $\mathbf{2_1}$ // **y** com plano deslizante **n** ⊥; eixo **2** // **z** com plano deslizante **a** ⊥;

- $I4_1md$: cela I (de corpo centrado, fator de multiplicidade = 2), sistema tetragonal, eixo helicoidal $\mathbf{4_1}$ na direção **z**, planos **m** ⊥ direção **y** ($\mathbf{a_1}$ e $\mathbf{a_2}$) e planos deslizantes **d** ⊥ **z** (a 45º de $\mathbf{a_1}$ e $\mathbf{a_2}$);

- $R\bar{3}2/c$: cela R (romboédrica, fator de multiplicidade = 1), sistema trigonal, eixo impróprio $\mathbf{\bar{3}}$ // **z**, eixos **2** // **x** **(**$\mathbf{a_1}$**,** $\mathbf{a_2}$ e $\mathbf{a_3}$**)**, com planos deslizantes **c** ⊥.

Notação

1) Motivo posição do motivo em relação à cela (lado positivo de z)

2) Altura em relação à z (z + ½ - plano deslizante, eixo helicoidal)

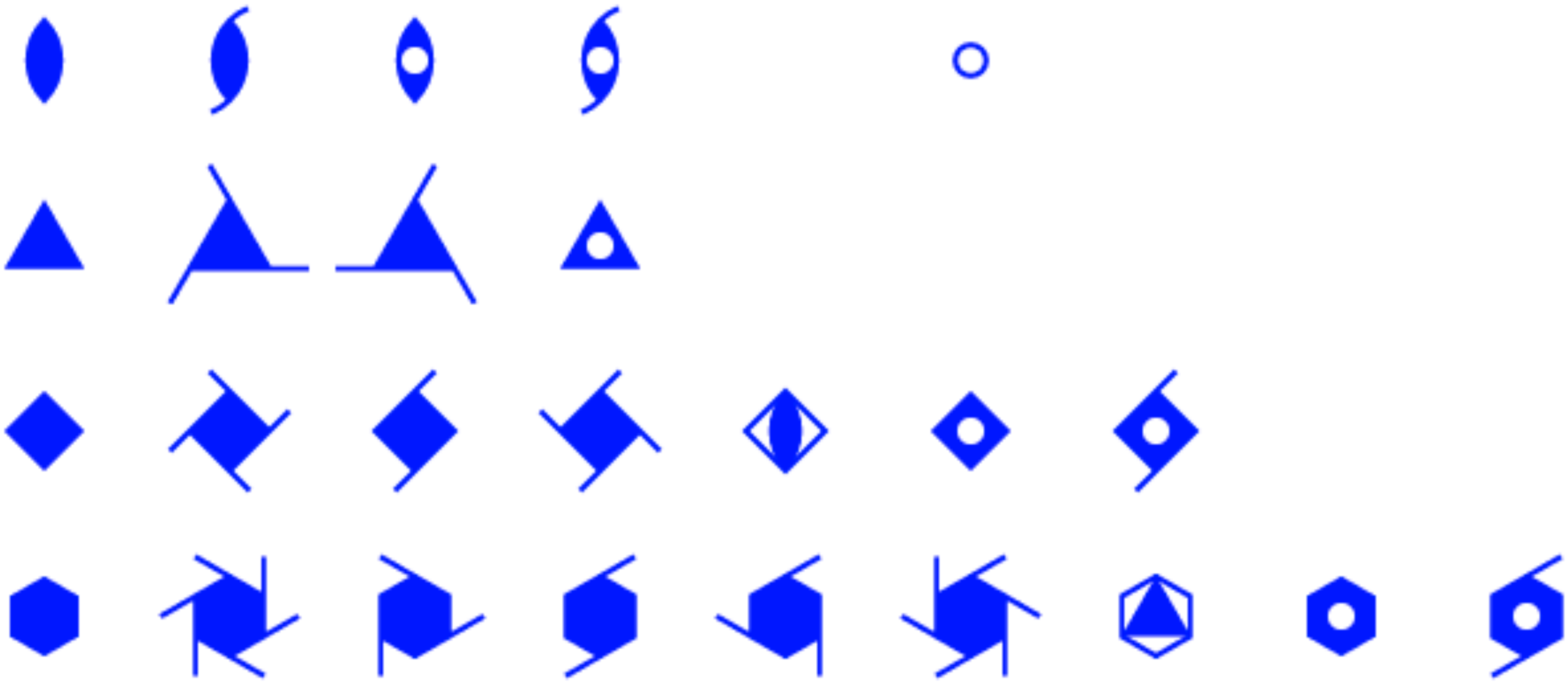
3) Símbolo ganha vírgula quando refletido ou invertido

4) Mesma operação de 2, porém com deslocamento de ¼

5) Operação de simetria gera símbolos sobrepostos

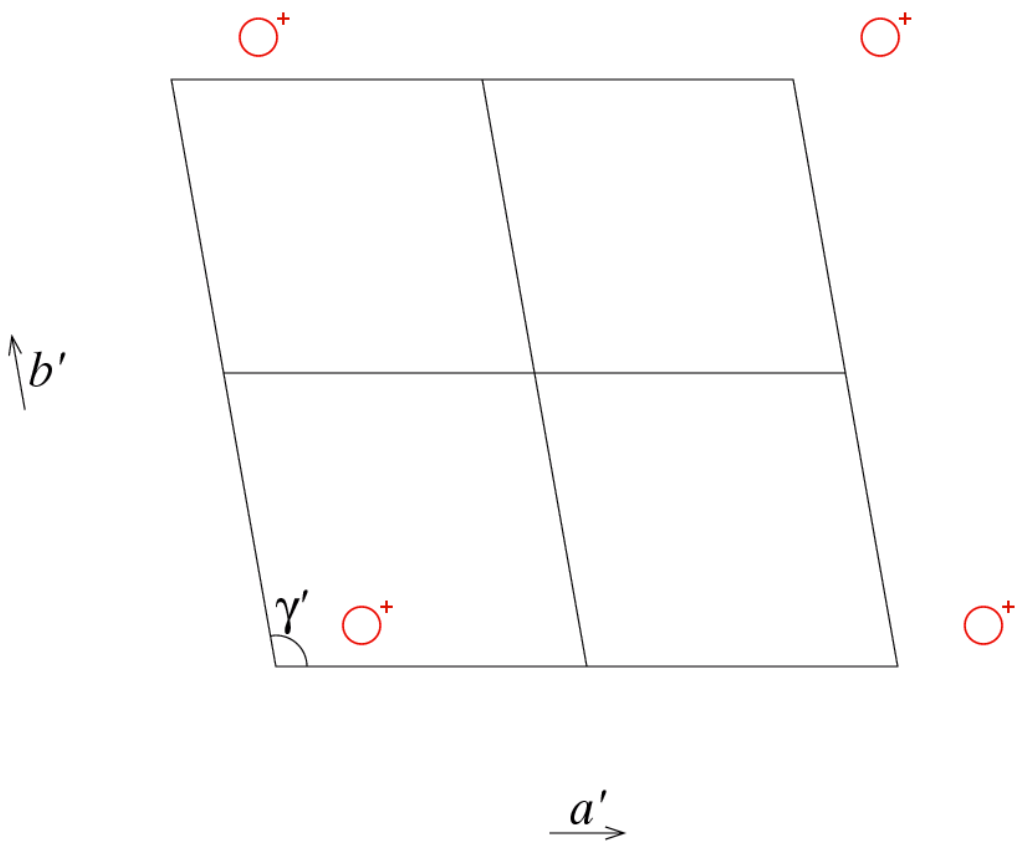
Notação

Eixos perpendiculares ao plano de projeção



Exemplo de representação de Grupo Espacial nas Tabelas Internacionais de Cristalografia: P1

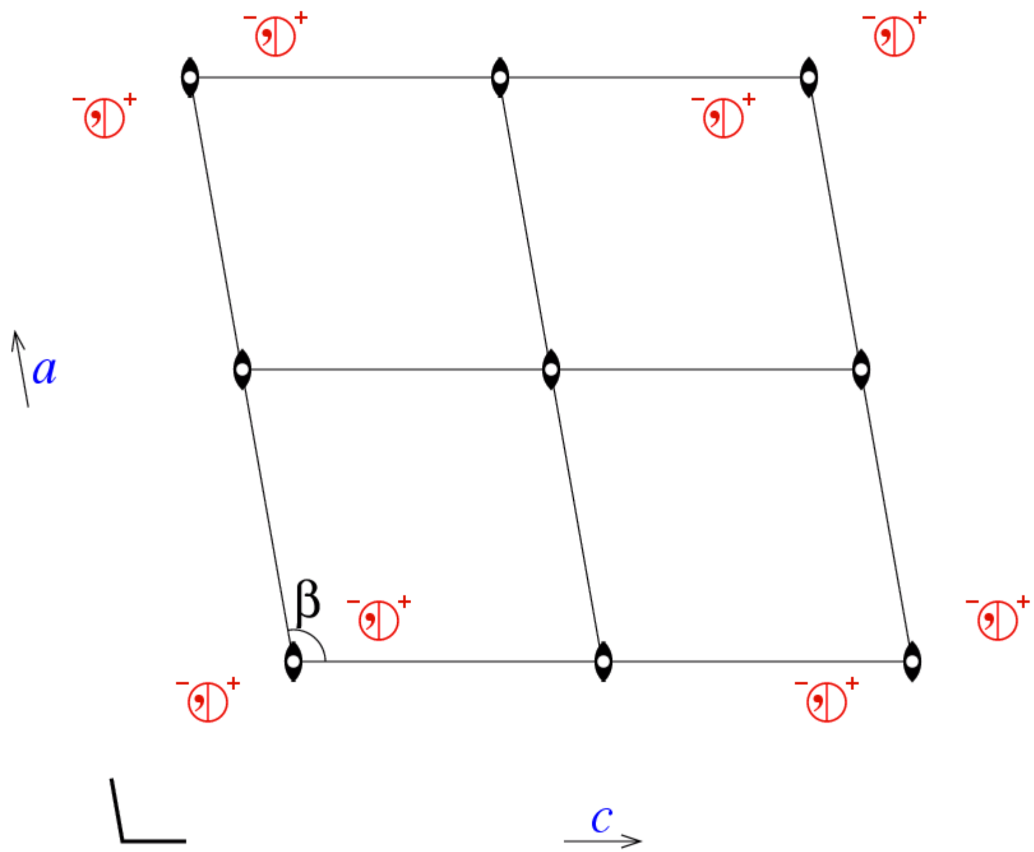
*P*1   *P* 1   1   No. 1



1   x, y, z

Exemplo de representação de Grupo Espacial nas Tabelas Internacionais de Cristalografia: P2/m Obs: b vertical, // E_2!

*P*2/*m* *P* 1 2/*m* 1 2/*m* No. 10



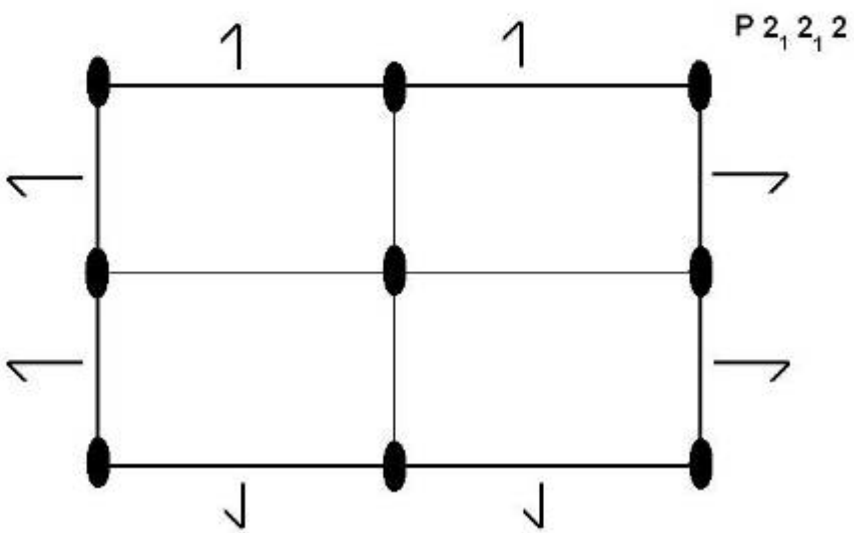
1 x, y, z

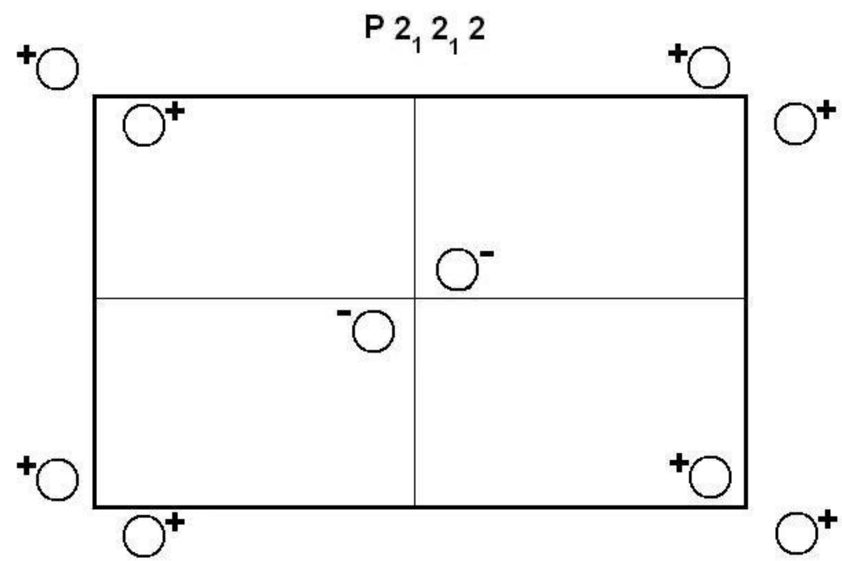
2 $\bar{x}, y, \bar{z}$

3 $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$

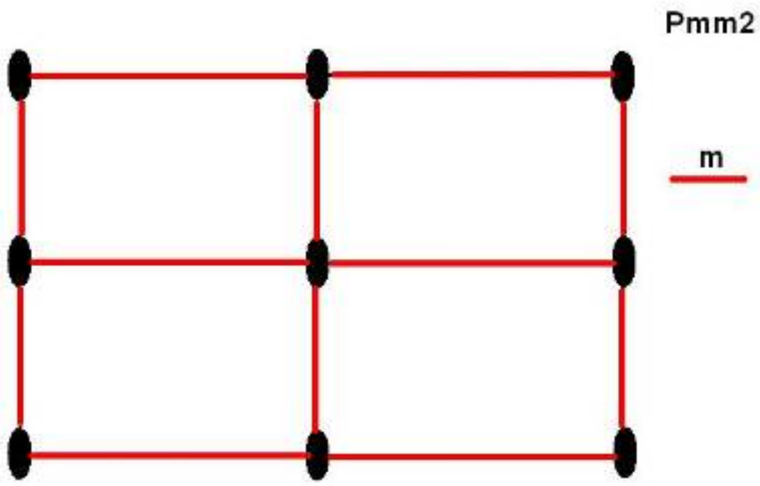
4 $x, \bar{y}, z$

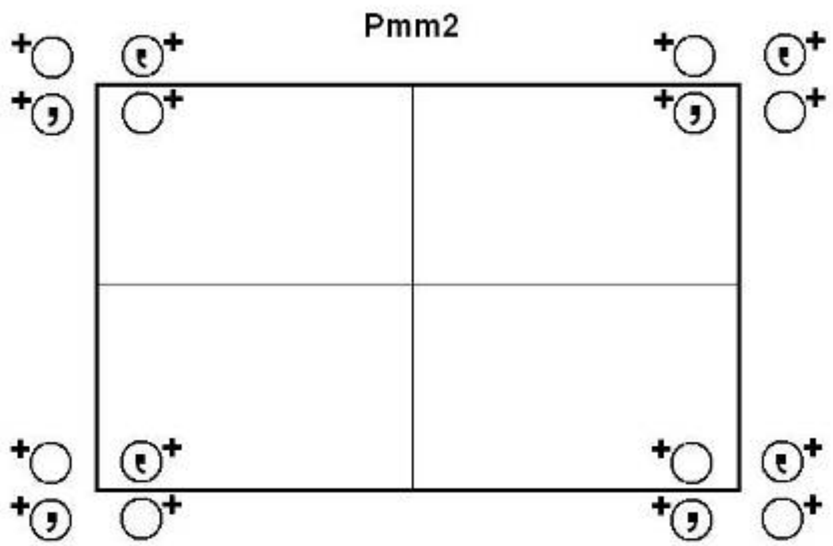
Exemplo de representação de Grupo Espacial: $P2_12_12$



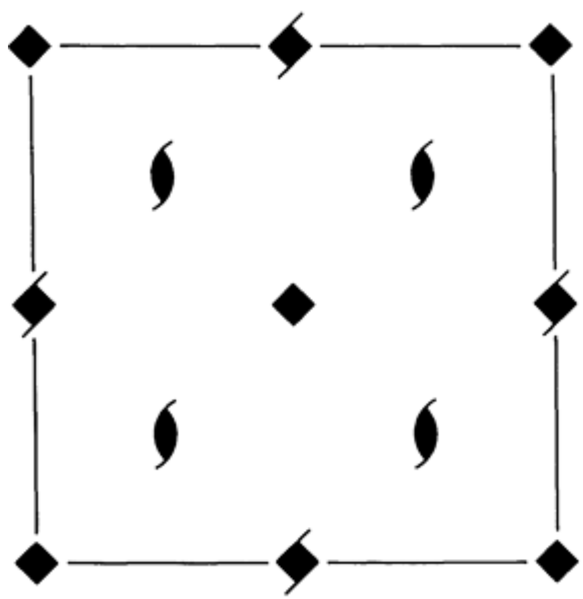


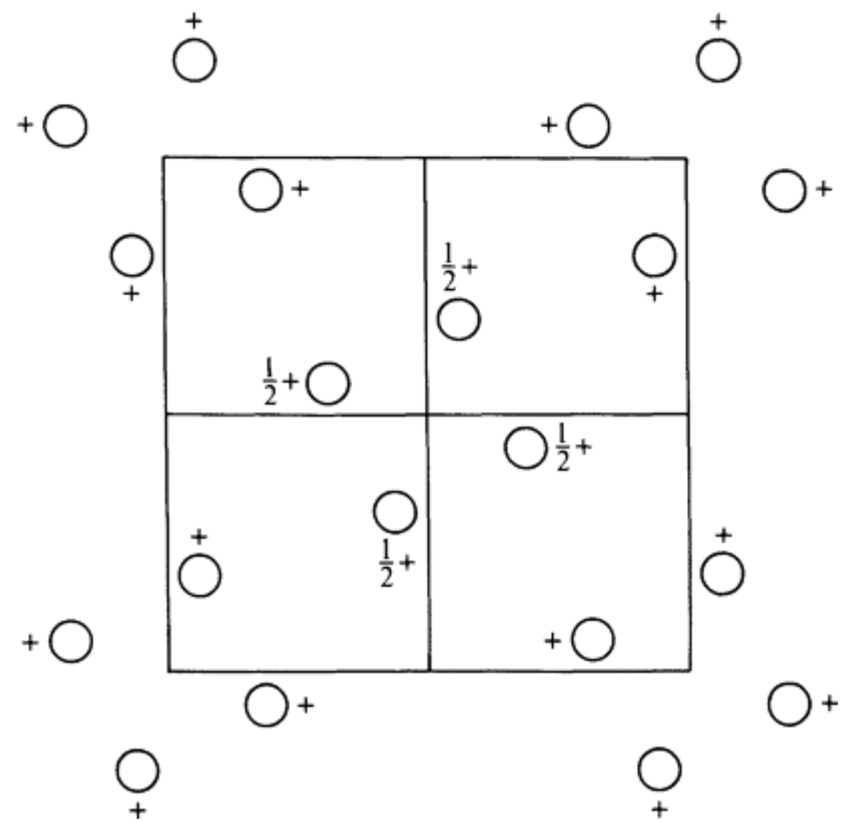
Exemplo de representação de Grupo Espacial: Pmm2



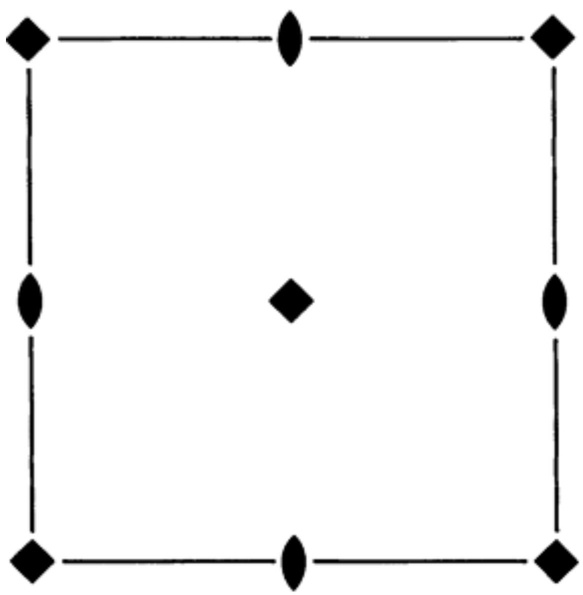


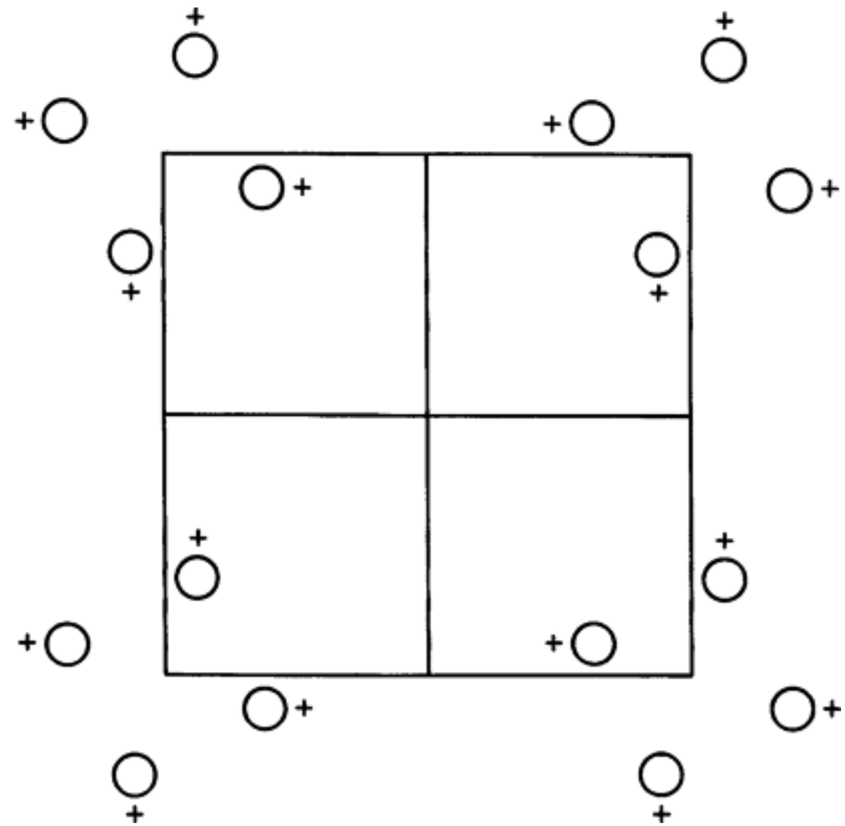
Exemplo de representação de Grupo Espacial: I4



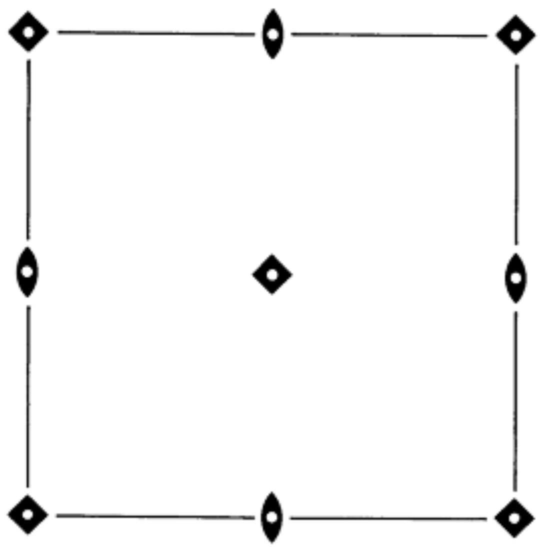


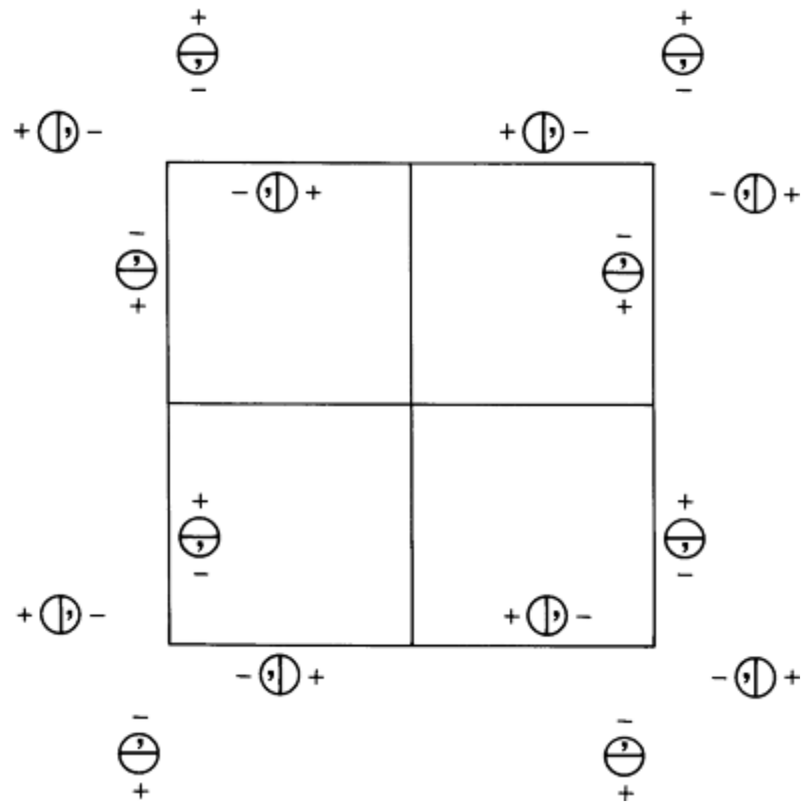
Exemplo de representação de Grupo Espacial: P4





Exemplo de representação de Grupo Espacial: P4/m





Correção de figura