“Simetrias Cristalinas”

Esmerindo Bernardes

IFSC, USP

18 de maio de 2020

Conteúdo I

Sólido

- Ordenamento de curto alcance:

Sólido

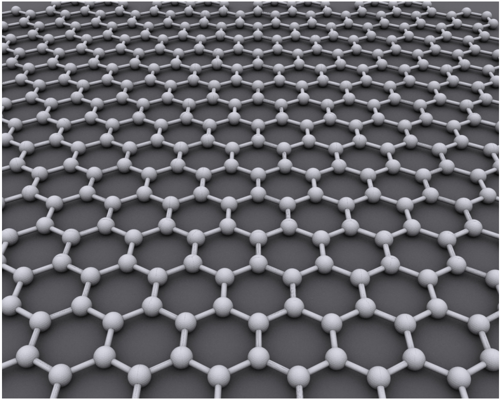
- Ordenamento de curto alcance:

Sólido

- Ordenamento de curto alcance:

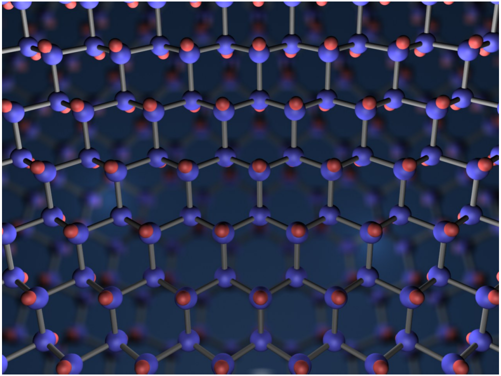
Cristal ideal

- Ordenamento de longo alcance:



Cristal ideal

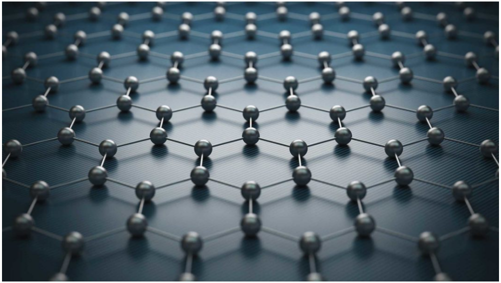
- Ordenamento de longo alcance:



- Invariância translacional: rede cristalina.

Cristal ideal

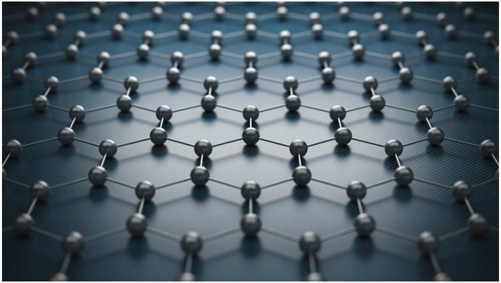
- Ordenamento de longo alcance:



- Invariância translacional: rede cristalina.
- Invariância por rotações, reflexões e inversões.

Cristal ideal

- Ordenamento de longo alcance:



- Invariância translacional: rede cristalina.
- Invariância por rotações, reflexões e inversões.
- Rotação+translação e translação+reflexão.

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T},\ t_n = n_i\mathbf{a}_i$

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \; t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T},\ t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T},\ t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \ t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \; t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \; t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T},\ t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \ t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$)

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T},\ t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$)
  - existem 32 no total

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \; t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$)
  - existem 32 no total
  - formam as classes cristalinas

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \ t_n = n_i\mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma\mathbf{E}$)
  - existem 32 no total
  - formam as classes cristalinas
- Grupo espacial G: deslocamentos rígidos

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T},\ t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$)
  - existem 32 no total
  - formam as classes cristalinas
- Grupo espacial G: deslocamentos rígidos
  - existem 230 no total

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \; t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$)
  - existem 32 no total
  - formam as classes cristalinas
- Grupo espacial G: deslocamentos rígidos
  - existem 230 no total
  - Simórficos: $G \supset P_e$, (sem *screw-rotations* e *glide-reflections*)

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \;\; t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$)
  - existem 32 no total
  - formam as classes cristalinas
- Grupo espacial G: deslocamentos rígidos
  - existem 230 no total
  - Simórficos: $G \supset P_e$, (sem *screw-rotations* e *glide-reflections*)
  - Não-simórficos: $G \not\supset P_e$ (existem 157)

Grupos de simetria

- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T}, \; t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$)
  - existem 32 no total
  - formam as classes cristalinas
- Grupo espacial G: deslocamentos rígidos
  - existem 230 no total
  - Simórficos: $G \supset P_e$, (sem *screw-rotations* e *glide-reflections*)
  - Não-simórficos: $G \not\supset P_e$ (existem 157)

Grupos de simetria

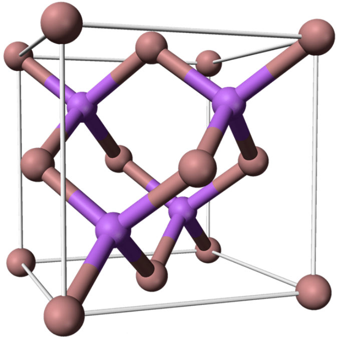
- Grupo das translações $t_n \in \mathbf{T},\ t_n = n_i \mathbf{a}_i$
  - não mantém pontos fixos
- Grupo holohedral: grupo pontual P
  - mantém um ou mais pontos fixos
  - transformações ortogonais
  - existem apenas sete
  - formam os sistemas cristalinos
- Grupo das direções equivalentes: $P_e \subset P$
  - direções fisicamente equivalentes ($\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$)
  - existem 32 no total
  - formam as classes cristalinas
- Grupo espacial G: deslocamentos rígidos
  - existem 230 no total
  - Simórficos: $G \supset P_e$, (sem *screw-rotations* e *glide-reflections*)
  - Não-simórficos: $G \not\supset P_e$ (existem 157)

Resumo

sistema	Bravais	P	ordem	classes
Triclínico	1	C_i	2	C_1
Monoclínico	2	C_{2h}	4	C_2, C_s
Rômbico	4	D_{2h}	8	D_2, C_{2v}
Trigonal	1	D_{3d}	12	C_3, C_{3v}, D_3, S_6
Tetragonal	2	D_{4h}	16	C_4, S_4, D_4, C_{4v}, C_{4h}, D_{2d}
Hexagonal	1	D_{6h}	24	C_6, C_{6h}, C_{6v}, D_3, D_{3h}, D_6
Cúbico	3	O_h	48	T, O, T_h, T_d
7	14	7		32

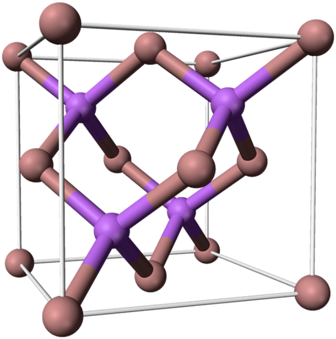
Zincoblende + Wurtizita

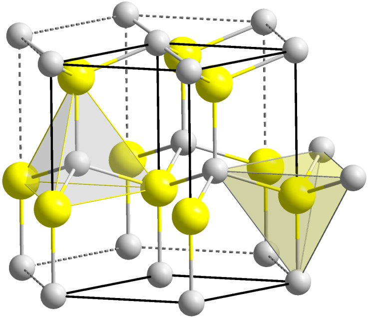
- **Zincoblende**: $G = F\bar{4}3m$, $P = T_d$ (24), $P_e = T_d$ (24)



Zincoblende + Wurtzita

- **Zincoblende**: $G = F\bar{4}3m$, $P = T_d$ (24), $P_e = T_d$ (24)

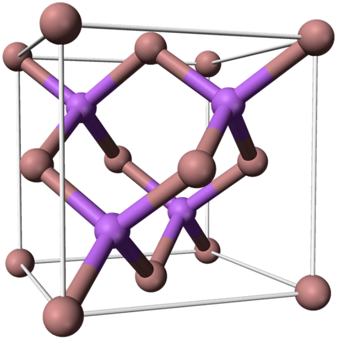


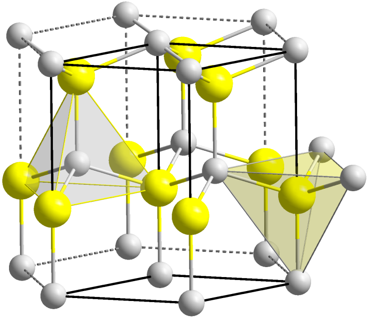


- **Wurtzita**: $G = P6_3mmc$, $P = D_{6h}$ (24), $P_e = C_{6v}$ (12)

Zincoblende + Wurtzita

- **Zincoblende**: $G = F\bar{4}3m$, $P = T_d$ (24), $P_e = T_d$ (24)





- **Wurtzita**: $G = P6_3mmc$, $P = D_{6h}$ (24), $P_e = C_{6v}$ (12)

Conteúdo I

Bravais

- Rede direta:

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$
- Rede recíproca (dual):

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$
- Rede recíproca (dual):
  - vetores primitivos $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, $\mathbf{b}_i = \frac{\pi}{\Omega_0} \sum_{j,m} \varepsilon_{ijm} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_m$

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$
- Rede recíproca (dual):
  - vetores primitivos $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, $\mathbf{b}_i = \frac{\pi}{\Omega_0} \sum_{j,m} \varepsilon_{ijm} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_m$
  - mesma simetria da rede direta

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$
- Rede recíproca (dual):
  - vetores primitivos $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, $\mathbf{b}_i = \dfrac{\pi}{\Omega_0} \sum_{j,m} \varepsilon_{ijm} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_m$
  - mesma simetria da rede direta
  - vetores de onda $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i \mathbf{b}_i$, $\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\,\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j} = 1$

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$
- Rede recíproca (dual):
  - vetores primitivos $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, $\mathbf{b}_i = \dfrac{\pi}{\Omega_0} \sum_{j,m} \varepsilon_{ijm} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_m$
  - mesma simetria da rede direta
  - vetores de onda $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i \mathbf{b}_i$, $\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\,\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j} = 1$
  - primeira zona de Brillouin: $\mathbf{k} \cdot \dfrac{\mathbf{K}}{2} = \left\| \dfrac{\mathbf{K}}{2} \right\|^2$ (Bragg), $\mathbf{K} = \sum_{i=1}^{3} m_i \mathbf{b}_i$

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$
- Rede recíproca (dual):
  - vetores primitivos $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, $\mathbf{b}_i = \frac{\pi}{\Omega_0} \sum_{j,m} \varepsilon_{ijm} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_m$
  - mesma simetria da rede direta
  - vetores de onda $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i \mathbf{b}_i$, $\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\,\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j} = 1$
  - primeira zona de Brillouin: $\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{K}}{2} = \left\| \frac{\mathbf{K}}{2} \right\|^2$ (Bragg), $\mathbf{K} = \sum_{i=1}^{3} m_i \mathbf{b}_i$
- Estrutura cristalina = Rede + Base

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$
- Rede recíproca (dual):
  - vetores primitivos $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, $\mathbf{b}_i = \dfrac{\pi}{\Omega_0} \sum_{j,m} \varepsilon_{ijm} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_m$
  - mesma simetria da rede direta
  - vetores de onda $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i \mathbf{b}_i$, $\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\,\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j} = 1$
  - primeira zona de Brillouin: $\mathbf{k} \cdot \dfrac{\mathbf{K}}{2} = \left\|\dfrac{\mathbf{K}}{2}\right\|^2$ (Bragg), $\mathbf{K} = \sum_{i=1}^{3} m_i \mathbf{b}_i$
- Estrutura cristalina = Rede + Base

Bravais

- Rede direta:
  - arranjo regular de pontos $\mathbf{r} = \sum_{i=1}^{3} x_i \mathbf{a}_i$
  - vetores primitivos $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \Omega_0$
  - grupo das translações T, $\bar{\mathbf{r}} = \tau_R \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{R}$, $\mathbf{R} = \sum_{i=1}^{3} n_i \mathbf{a}_i$
  - grupo holohedral P, $\bar{\mathbf{a}}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ji} \mathbf{a}_j$, $\bar{x}_i = \sum_{j=1}^{3} \alpha_{ij} x_j$
- Rede recíproca (dual):
  - vetores primitivos $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$, $\mathbf{b}_i = \frac{\pi}{\Omega_0} \sum_{j,m} \varepsilon_{ijm} \mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_m$
  - mesma simetria da rede direta
  - vetores de onda $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i \mathbf{b}_i$, $\mathrm{e}^{\,\mathrm{i}\,\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j} = 1$
  - primeira zona de Brillouin: $\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{K}}{2} = \left\| \frac{\mathbf{K}}{2} \right\|^2$ (Bragg), $\mathbf{K} = \sum_{i=1}^{3} m_i \mathbf{b}_i$
- Estrutura cristalina = Rede + Base

Conteúdo I

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathscr{B} = \{\mathbf{R}_n\}, \ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \ n_i \in \mathbb{N}$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\}, \ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}, \ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\}, \ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}, \ P \subset O(3)$
    - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
    - grupo das direções equivalentes

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G,\ \alpha \in P_e,\ \tau \in T,\ R \in \mathcal{B},\ V \notin \mathcal{B}$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G,\ \alpha \in P_e,\ \tau \in T,\ R \in \mathcal{B},\ V \notin \mathcal{B}$
  - $E(3) \supset G \supset T$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\}, \ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}, \ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G, \ \alpha \in P_e, \ \tau \in T, \ R \in \mathcal{B}, \ V \notin \mathcal{B}$
  - $E(3) \supset G \supset T$
  - Simórficos (73): $V(\alpha) = 0, \ \{\alpha|\tau_R\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_0\}$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G,\ \alpha \in P_e,\ \tau \in T,\ R \in \mathcal{B},\ V \notin \mathcal{B}$
  - $E(3) \supset G \supset T$
  - Simórficos (73): $V(\alpha) = 0,\ \{\alpha|\tau_R\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_0\}$
  - Não-simórficos (157): $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G,\ \alpha \in P_e,\ \tau \in T,\ R \in \mathcal{B},\ V \notin \mathcal{B}$
  - $E(3) \supset G \supset T$
  - Simórficos (73): $V(\alpha) = 0,\ \{\alpha|\tau_R\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_0\}$
  - Não-simórficos (157): $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$
    - $V(\alpha) = \frac{n_1}{m}\mathbf{a}_1 + \frac{n_2}{m}\mathbf{a}_2 + \frac{n_3}{m}\mathbf{a}_3,\ n_i \in \{0, 1, \ldots, m-1\},\ m \in \{2, 3, 4, 5, 6\}$

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\}$, $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, $n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$, $P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G$, $\alpha \in P_e$, $\tau \in T$, $R \in \mathcal{B}$, $V \notin \mathcal{B}$
  - $E(3) \supset G \supset T$
  - Simórficos (73): $V(\alpha) = 0$, $\{\alpha|\tau_R\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_0\}$
  - Não-simórficos (157): $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$
    - $V(\alpha) = \frac{n_1}{m}\mathbf{a}_1 + \frac{n_2}{m}\mathbf{a}_2 + \frac{n_3}{m}\mathbf{a}_3$, $n_i \in \{0, 1, \ldots, m-1\}$, $m \in \{2, 3, 4, 5, 6\}$
    - *screw rotation*: $\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$, com α uma rotação

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G,\ \alpha \in P_e,\ \tau \in T,\ R \in \mathcal{B},\ V \notin \mathcal{B}$
  - $E(3) \supset G \supset T$
  - Simórficos (73): $V(\alpha) = 0,\ \{\alpha|\tau_R\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_0\}$
  - Não-simórficos (157): $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$
    - $V(\alpha) = \frac{n_1}{m}\mathbf{a}_1 + \frac{n_2}{m}\mathbf{a}_2 + \frac{n_3}{m}\mathbf{a}_3,\ n_i \in \{0, 1, \ldots, m-1\},\ m \in \{2, 3, 4, 5, 6\}$
    - *screw rotation*: $\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$, com α uma rotação
    - *glide reflection*: $\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$, com α uma reflexão

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
  - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
  - grupo das direções equivalentes
  - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G,\ \alpha \in P_e,\ \tau \in T,\ R \in \mathcal{B},\ V \notin \mathcal{B}$
  - $E(3) \supset G \supset T$
  - Simórficos (73): $V(\alpha) = 0,\ \{\alpha|\tau_R\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_0\}$
  - Não-simórficos (157): $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$
    - $V(\alpha) = \frac{n_1}{m}\mathbf{a}_1 + \frac{n_2}{m}\mathbf{a}_2 + \frac{n_3}{m}\mathbf{a}_3,\ n_i \in \{0, 1, \ldots, m-1\},\ m \in \{2, 3, 4, 5, 6\}$
    - *screw rotation*: $\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$, com α uma rotação
    - *glide reflection*: $\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$, com α uma reflexão

Grupo Espacial

- Rede vazia: $\mathcal{B} = \{\mathbf{R}_n\},\ \mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N}$
- Grupo das translações: $T = \{\tau_R : \tau_{R_n}\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\}$
- Grupo das rotações (ou pontual): $P = \{\alpha : \alpha\mathbf{R}_m \in \mathcal{B}\},\ P \subset O(3)$
    - grupo holohedral ou holossimétrico
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
    - grupo das direções equivalentes
    - cristal = rede vazia + base
- Grupo espacial: $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} \in G,\ \alpha \in P_e,\ \tau \in T,\ R \in \mathcal{B},\ V \notin \mathcal{B}$
    - $E(3) \supset G \supset T$
    - Simórficos (73): $V(\alpha) = 0,\ \{\alpha|\tau_R\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_0\}$
    - Não-simórficos (157): $\{\alpha|\tau_{R+V(\alpha)}\} = \{\mathbb{1}|\tau_R\}\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$
        - $V(\alpha) = \frac{n_1}{m}\mathbf{a}_1 + \frac{n_2}{m}\mathbf{a}_2 + \frac{n_3}{m}\mathbf{a}_3,\ n_i \in \{0, 1, \ldots, m-1\},\ m \in \{2, 3, 4, 5, 6\}$
        - *screw rotation*: $\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$, com α uma rotação
        - *glide reflection*: $\{\alpha|\tau_{V(\alpha)}\}$, com α uma reflexão

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} \in T$, $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\} \in P$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} \in T$, $\{\alpha|\mathbf{0}\} \in P$
- Ação: $\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$, $\{\alpha|\mathbf{R}\}\,\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} \in T$, $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\} \in P$
- Ação: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}$, $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\left\{\beta\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\beta\alpha\middle|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\right\}$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} \in T$, $\{\alpha|\mathbf{0}\} \in P$
- Ação: $\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$, $\{\alpha|\mathbf{R}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\{\beta|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\beta\alpha|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\}$
  - Não-Abeliano: $\{\alpha|\mathbf{0}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\alpha\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} \in T$, $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\} \in P$
- Ação: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}$, $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\left\{\beta\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\beta\alpha\middle|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\right\}$
  - Não-Abeliano: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\alpha\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\alpha\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} \in T$, $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\} \in P$
- Ação: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}$, $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\left\{\beta\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\beta\alpha\middle|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\right\}$
  - Não-Abeliano: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\alpha\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\alpha\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}^{-1} = \left\{\alpha^{-1}\middle|-\alpha^{-1}\mathbf{R}\right\}$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} \in T$, $\{\alpha|\mathbf{0}\} \in P$
- Ação: $\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$, $\{\alpha|\mathbf{R}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\{\beta|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\beta\alpha|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\}$
  - Não-Abeliano: $\{\alpha|\mathbf{0}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\alpha\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}| - \alpha^{-1}\mathbf{R}\}$
- Normalizador: $\{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{S}\}$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} \in T,\ \left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\} \in P$
- Ação: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\},\ \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\left\{\beta\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\beta\alpha\middle|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\right\}$
  - Não-Abeliano: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\alpha\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\alpha\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}^{-1} = \left\{\alpha^{-1}\middle| -\alpha^{-1}\mathbf{R}\right\}$
- Normalizador: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}^{-1} = \left\{\mathbb{1}\middle|\alpha\mathbf{S}\right\}$
  - Subgrupo invariante (ou normal): $gTg^{-1} = T,\ g \in G$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} \in T$, $\{\alpha|\mathbf{0}\} \in P$
- Ação: $\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$, $\{\alpha|\mathbf{R}\}\,\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\{\beta|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\beta\alpha|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\}$
  - Não-Abeliano: $\{\alpha|\mathbf{0}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\alpha\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}|-\alpha^{-1}\mathbf{R}\}$
- Normalizador: $\{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{S}\}$
  - Subgrupo invariante (ou normal): $gTg^{-1} = T,\ g \in G$
  - *Cosets*: $C_g = \{gT\} = \{Tg\}, g \in G$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} \in T,\ \{\alpha|\mathbf{0}\} \in P$
- Ação: $\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\},\ \{\alpha|\mathbf{R}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\{\beta|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\beta\alpha|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\}$
  - Não-Abeliano: $\{\alpha|\mathbf{0}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\alpha\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}| - \alpha^{-1}\mathbf{R}\}$
- Normalizador: $\{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{S}\}$
  - Subgrupo invariante (ou normal): $gTg^{-1} = T,\ g \in G$
  - *Cosets*: $C_g = \{gT\} = \{Tg\}, g \in G$
- Grupo fator: $G/T = \{C_\alpha\}$,

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} \in T, \ \left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\} \in P$
- Ação: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}, \ \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\left\{\beta\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\beta\alpha\middle|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\right\}$
  - Não-Abeliano: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\alpha\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\alpha\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}^{-1} = \left\{\alpha^{-1}\middle|-\alpha^{-1}\mathbf{R}\right\}$
- Normalizador: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}^{-1} = \left\{\mathbb{1}\middle|\alpha\mathbf{S}\right\}$
  - Subgrupo invariante (ou normal): $gTg^{-1} = T, \ g \in G$
  - *Cosets*: $C_g = \{gT\} = \{Tg\}, g \in G$
- Grupo fator: $G/T = \{C_\alpha\}$,
  - elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} \in C_\alpha, \ \forall R, S \in T$ para cada $\alpha \in P$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} \in T$, $\{\alpha|\mathbf{0}\} \in P$
- Ação: $\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$, $\{\alpha|\mathbf{R}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\{\beta|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\beta\alpha|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\}$
  - Não-Abeliano: $\{\alpha|\mathbf{0}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\alpha\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}|-\alpha^{-1}\mathbf{R}\}$
- Normalizador: $\{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{S}\}$
  - Subgrupo invariante (ou normal): $gTg^{-1} = T$, $g \in G$
  - *Cosets*: $C_g = \{gT\} = \{Tg\}, g \in G$
- Grupo fator: $G/T = \{C_\alpha\}$,
  - elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} \in C_\alpha$, $\forall R, S \in T$ para cada $\alpha \in P$
  - multiplicação: $C_\alpha C_\beta = C_\gamma$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} \in T$, $\{\alpha|\mathbf{0}\} \in P$
- Ação: $\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$, $\{\alpha|\mathbf{R}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\{\beta|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\beta\alpha|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\}$
  - Não-Abeliano: $\{\alpha|\mathbf{0}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\alpha\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}| - \alpha^{-1}\mathbf{R}\}$
- Normalizador: $\{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{S}\}$
  - Subgrupo invariante (ou normal): $gTg^{-1} = T,\ g \in G$
  - *Cosets*: $C_g = \{gT\} = \{Tg\}, g \in G$
- Grupo fator: $G/T = \{C_\alpha\}$,
  - elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} \in C_\alpha$, $\forall R, S \in T$ para cada $\alpha \in P$
  - multiplicação: $C_\alpha C_\beta = C_\gamma$
    - $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{S}'\}\{\alpha'|\mathbf{R}'\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{U}\}\{\gamma|\mathbf{U}'\}$, $\gamma = \alpha\alpha'$, $\mathbf{U} = \mathbf{R} + \mathbf{S}$, $\mathbf{U}' = \alpha(\mathbf{R}' + \mathbf{S}')$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} \in T, \ \{\alpha|\mathbf{0}\} \in P$
- Ação: $\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}, \ \{\alpha|\mathbf{R}\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\{\beta|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\beta\alpha|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\}$
  - Não-Abeliano: $\{\alpha|\mathbf{0}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\alpha\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{R}\}\{\alpha|\mathbf{0}\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\alpha^{-1}| - \alpha^{-1}\mathbf{R}\}$
- Normalizador: $\{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\}^{-1} = \{\mathbb{1}|\alpha\mathbf{S}\}$
  - Subgrupo invariante (ou normal): $gTg^{-1} = T, \ g \in G$
  - *Cosets*: $C_g = \{gT\} = \{Tg\}, g \in G$
- Grupo fator: $G/T = \{C_\alpha\}$,
  - elementos: $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} \in C_\alpha, \ \forall R, S \in T$ para cada $\alpha \in P$
  - multiplicação: $C_\alpha C_\beta = C_\gamma$
    - $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\mathbf{S}'\}\{\alpha'|\mathbf{R}'\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{U}\}\{\gamma|\mathbf{U}'\}, \ \gamma = \alpha\alpha', \ \mathbf{U} = \mathbf{R} + \mathbf{S}, \ \mathbf{U}' = \alpha(\mathbf{R}' + \mathbf{S}')$

Grupo espacial simórfico: propriedades

- Elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} \in T, \ \left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\} \in P$
- Ação: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}, \ \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\mathbf{r} = \alpha\mathbf{r} + \mathbf{R}$ (não-linear)
- Multiplicação: $\left\{\beta\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\beta\alpha\middle|\beta\mathbf{R} + \mathbf{S}\right\}$
  - Não-Abeliano: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\alpha\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\alpha\mathbf{R}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{0}\right\}$
  - Comutatividade: $\alpha\mathbf{R} = \mathbf{R}$ (eixo de rotação)
- Inverso: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}^{-1} = \left\{\alpha^{-1}\middle|-\alpha^{-1}\mathbf{R}\right\}$
- Normalizador: $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}^{-1} = \left\{\mathbb{1}\middle|\alpha\mathbf{S}\right\}$
  - Subgrupo invariante (ou normal): $gTg^{-1} = T, \ g \in G$
  - *Cosets*: $C_g = \{gT\} = \{Tg\}, g \in G$
- Grupo fator: $G/T = \{C_\alpha\}$,
  - elementos: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} \in C_\alpha, \ \forall R, S \in T$ para cada $\alpha \in P$
  - multiplicação: $C_\alpha C_\beta = C_\gamma$
    - $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}'\right\}\left\{\alpha'\middle|\mathbf{R}'\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{U}\right\}\left\{\gamma\middle|\mathbf{U}'\right\}, \ \gamma = \alpha\alpha', \ \mathbf{U} = \mathbf{R} + \mathbf{S}, \ \mathbf{U}' = \alpha(\mathbf{R}' + \mathbf{S}')$

Conteúdo I

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, \; n_i \in \mathbb{N}, \; 0 \leq n_i < N_i$

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ \ n_i \in \mathbb{N},\ \ 0 \leq n_i < N_i$
  - Abeliano: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|n_1\mathbf{a}_1\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_2\mathbf{a}_2\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_3\mathbf{a}_3\right\}$

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N},\ 0 \leq n_i < N_i$
  - Abeliano: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|n_1\mathbf{a}_1\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_2\mathbf{a}_2\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_3\mathbf{a}_3\right\}$
  - Periodicidade: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{a}_i\right\}^{N_i} = \left\{\mathbb{1}\middle|N_i\mathbf{a}_i\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{0}\right\}$

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N},\ 0 \leq n_i < N_i$
  - Abeliano: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|n_1\mathbf{a}_1\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_2\mathbf{a}_2\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_3\mathbf{a}_3\right\}$
  - Periodicidade: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{a}_i\right\}^{N_i} = \left\{\mathbb{1}\middle|N_i\mathbf{a}_i\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{0}\right\}$
- Ação em (auto)funções: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \lambda(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N},\ 0 \leq n_i < N_i$
  - Abeliano: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|n_1\mathbf{a}_1\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_2\mathbf{a}_2\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_3\mathbf{a}_3\right\}$
  - Periodicidade: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{a}_i\right\}^{N_i} = \left\{\mathbb{1}\middle|N_i\mathbf{a}_i\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{0}\right\}$
- Ação em (auto)funções: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \lambda(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$
  - Autovetores: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\ \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ (Bloch)

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N},\ 0 \leq n_i < N_i$
  - Abeliano: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|n_1\mathbf{a}_1\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_2\mathbf{a}_2\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_3\mathbf{a}_3\right\}$
  - Periodicidade: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{a}_i\right\}^{N_i} = \left\{\mathbb{1}\middle|N_i\mathbf{a}_i\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{0}\right\}$
- Ação em (auto)funções: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \lambda(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$
  - Autovetores: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\ \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ (Bloch)
  - Autovalores: $\lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}},\ \lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{R})$ (primeira zona)

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N},\ 0 \le n_i < N_i$
  - Abeliano: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|n_1\mathbf{a}_1\}\{\mathbb{1}|n_2\mathbf{a}_2\}\{\mathbb{1}|n_3\mathbf{a}_3\}$
  - Periodicidade: $\{\mathbb{1}|\mathbf{a}_i\}^{N_i} = \{\mathbb{1}|N_i\mathbf{a}_i\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{0}\}$
- Ação em (auto)funções: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \lambda(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$
  - Autovetores: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\ \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ (Bloch)
  - Autovalores: $\lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}},\ \lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{R})$ (primeira zona)
  - Números quânticos: $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i\mathbf{b}_i,\ k_i = \dfrac{m_i}{N_i},\ 0 \le m_i < N_i,\ \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N},\ 0 \leq n_i < N_i$
  - Abeliano: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|n_1\mathbf{a}_1\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_2\mathbf{a}_2\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_3\mathbf{a}_3\right\}$
  - Periodicidade: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{a}_i\right\}^{N_i} = \left\{\mathbb{1}\middle|N_i\mathbf{a}_i\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{0}\right\}$
- Ação em (auto)funções: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \lambda(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$
  - Autovetores: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\ \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ (Bloch)
  - Autovalores: $\lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}},\ \lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{R})$ (primeira zona)
  - Números quânticos: $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i\mathbf{b}_i,\ k_i = \frac{m_i}{N_i},\ 0 \leq m_i < N_i,\ \mathbf{a}_i\cdot\mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$
- Representações irredutíveis (Irreps): (k_1, k_2, k_3)

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N},\ 0 \leq n_i < N_i$
  - Abeliano: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|n_1\mathbf{a}_1\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_2\mathbf{a}_2\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|n_3\mathbf{a}_3\right\}$
  - Periodicidade: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{a}_i\right\}^{N_i} = \left\{\mathbb{1}\middle|N_i\mathbf{a}_i\right\} = \left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{0}\right\}$
- Ação em (auto)funções: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \lambda(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$
  - Autovetores: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\ \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ (Bloch)
  - Autovalores: $\lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}},\ \lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{R})$ (primeira zona)
  - Números quânticos: $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i\mathbf{b}_i,\ k_i = \dfrac{m_i}{N_i},\ 0 \leq m_i < N_i,\ \mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$
- Representações irredutíveis (Irreps): (k_1, k_2, k_3)

Translações

- $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3,\ n_i \in \mathbb{N},\ 0 \leq n_i < N_i$
  - Abeliano: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\} = \{\mathbb{1}|n_1\mathbf{a}_1\}\{\mathbb{1}|n_2\mathbf{a}_2\}\{\mathbb{1}|n_3\mathbf{a}_3\}$
  - Periodicidade: $\{\mathbb{1}|\mathbf{a}_i\}^{N_i} = \{\mathbb{1}|N_i\mathbf{a}_i\} = \{\mathbb{1}|\mathbf{0}\}$
- Ação em (auto)funções: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \lambda(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r})$
  - Autovetores: $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},\ \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{R})$ (Bloch)
  - Autovalores: $\lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}},\ \lambda_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = \lambda_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{R})$ (primeira zona)
  - Números quânticos: $\mathbf{k} = \sum_{i=1}^{3} k_i\mathbf{b}_i,\ k_i = \dfrac{m_i}{N_i},\ 0 \leq m_i < N_i,\ \mathbf{a}_i\cdot\mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$
- Representações irredutíveis (Irreps): (k_1, k_2, k_3)

Rotações

- $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\alpha^{-1}\mathbf{S}\right\}$

Rotações

- $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\alpha^{-1}\mathbf{S}\}$
- Invariante: $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$

Rotações

- $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\alpha^{-1}\mathbf{S}\}$
- Invariante: $\mathbf{k} \cdot (\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}$
  - $\mathbf{k} \cdot (\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k}) \cdot (\alpha^{-1}(\alpha\mathbf{r})) = (\alpha^{-1}\mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}$

Rotações

- $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\alpha^{-1}\mathbf{S}\right\}$
- Invariante: $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
  - $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot(\alpha^{-1}(\alpha\mathbf{r})) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
- Base: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

Rotações

- $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\alpha^{-1}\mathbf{S}\}$
- Invariante: $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
  - $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot(\alpha^{-1}(\alpha\mathbf{r})) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
- Base: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- Simórficos: $G \supset P,\ \alpha \in P,\ \mathbf{R},\mathbf{S} \in T$

Rotações

- $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\alpha^{-1}\mathbf{S}\}$
- Invariante: $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
  - $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot(\alpha^{-1}(\alpha\mathbf{r})) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
- Base: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- Simórficos: $G \supset P$, $\alpha \in P$, $\mathbf{R},\mathbf{S} \in T$
- $\{\alpha|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

Rotações

- $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\alpha^{-1}\mathbf{S}\}$
- Invariante: $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
  - $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot(\alpha^{-1}(\alpha\mathbf{r})) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
- Base: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- Simórficos: $G \supset P,\ \alpha \in P,\ \mathbf{R},\mathbf{S} \in T$
- $\{\alpha|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
  - $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\left(\{\alpha|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}\right) = \{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\alpha^{-1}\mathbf{S}\}\psi_{\mathbf{k}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(\alpha\mathbf{k})\cdot\mathbf{S}}\{\alpha|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}$

Rotações

- $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\alpha^{-1}\mathbf{S}\right\}$
- Invariante: $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
  - $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot(\alpha^{-1}(\alpha\mathbf{r})) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
- Base: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- Simórficos: $G \supset P,\ \alpha \in P,\ \mathbf{R},\mathbf{S} \in T$
- $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
  - $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left(\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}\right) = \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\alpha^{-1}\mathbf{S}\right\}\psi_{\mathbf{k}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(\alpha\mathbf{k})\cdot\mathbf{S}}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}$
- Não-simórficos: $G \not\supset P,\ \alpha \in P,\ \mathbf{R},\mathbf{S} \in T,\ \mathbf{V}(\alpha) \notin T$

Rotações

- $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\{\alpha|\mathbf{R}\} = \{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\alpha^{-1}\mathbf{S}\}$
- Invariante: $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
  - $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot(\alpha^{-1}(\alpha\mathbf{r})) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
- Base: $\{\mathbb{1}|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- Simórficos: $G \supset P,\ \alpha \in P,\ \mathbf{R},\mathbf{S} \in T$
- $\{\alpha|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
  - $\{\mathbb{1}|\mathbf{S}\}\left(\{\alpha|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}\right) = \{\alpha|\mathbf{R}\}\{\mathbb{1}|\alpha^{-1}\mathbf{S}\}\psi_{\mathbf{k}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(\alpha\mathbf{k})\cdot\mathbf{S}}\{\alpha|\mathbf{R}\}\psi_{\mathbf{k}}$
- Não-simórficos: $G \not\supset P,\ \alpha \in P,\ \mathbf{R},\mathbf{S} \in T,\ \mathbf{V}(\alpha) \notin T$

Rotações

- $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\} = \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\alpha^{-1}\mathbf{S}\right\}$
- Invariante: $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
  - $\mathbf{k}\cdot(\alpha\mathbf{r}) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot(\alpha^{-1}(\alpha\mathbf{r})) = (\alpha^{-1}\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}$
- Base: $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
- Simórficos: $G \supset P,\ \alpha \in P,\ \mathbf{R},\mathbf{S} \in T$
- $\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\alpha\mathbf{k}}(\mathbf{r})$
  - $\left\{\mathbb{1}\middle|\mathbf{S}\right\}\left(\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}\right) = \left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\left\{\mathbb{1}\middle|\alpha^{-1}\mathbf{S}\right\}\psi_{\mathbf{k}} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(\alpha\mathbf{k})\cdot\mathbf{S}}\left\{\alpha\middle|\mathbf{R}\right\}\psi_{\mathbf{k}}$
- Não-simórficos: $G \not\supset P,\ \alpha \in P,\ \mathbf{R},\mathbf{S} \in T,\ \mathbf{V}(\alpha) \notin T$

Conteúdo I

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$
- Grupo pontual: $P = \{\alpha : \alpha\alpha^T = \mathbb{1}\}$

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$
- Grupo pontual: $P = \{\alpha : \alpha\alpha^T = \mathbb{1}\}$
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$
- Grupo pontual: $P = \{\alpha : \alpha\alpha^T = \mathbb{1}\}$
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
- Grupo de simetria de $\mathbf{k}$: $P(\mathbf{k}) = \{\alpha \in P : \alpha\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$
- Grupo pontual: $P = \{\alpha : \alpha\alpha^T = \mathbb{1}\}$
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
- Grupo de simetria de $\mathbf{k}$: $P(\mathbf{k}) = \{\alpha \in P : \alpha\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$
- *Little co-group*: $P_e(\mathbf{k}) = \{\gamma \in P_e : \gamma\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$, $\|P_e\| = m \left\|P_e(\mathbf{k})\right\|$

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$
- Grupo pontual: $P = \{\alpha : \alpha\alpha^T = \mathbb{1}\}$
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
- Grupo de simetria de $\mathbf{k}$: $P(\mathbf{k}) = \{\alpha \in P : \alpha\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$
- *Little co-group*: $P_e(\mathbf{k}) = \{\gamma \in P_e : \gamma\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$, $\|P_e\| = m \left\|P_e(\mathbf{k})\right\|$
- *Little group*: $G(\mathbf{k}) = \left\{\left\{\gamma \middle| \mathbf{R} + \mathbf{V}(\gamma)\right\} : \gamma \in P_e(\mathbf{k}),\ \mathbf{R} \in T\right\}$

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$
- Grupo pontual: $P = \{\alpha : \ \alpha\alpha^T = \mathbb{1}\}$
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
- Grupo de simetria de $\mathbf{k}$: $P(\mathbf{k}) = \{\alpha \in P : \alpha\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$
- *Little co-group*: $P_e(\mathbf{k}) = \{\gamma \in P_e : \gamma\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}, \ ||P_e|| = m \left\|P_e(\mathbf{k})\right\|$
- *Little group*: $G(\mathbf{k}) = \left\{\left\{\gamma \middle| \mathbf{R} + \mathbf{V}(\gamma)\right\} : \gamma \in P_e(\mathbf{k}), \ \mathbf{R} \in T\right\}$
- $G \supset G(\mathbf{k}) \supset T$

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$
- Grupo pontual: $P = \{\alpha : \alpha\alpha^T = \mathbb{1}\}$
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
- Grupo de simetria de $\mathbf{k}$: $P(\mathbf{k}) = \{\alpha \in P : \alpha\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$
- *Little co-group*: $P_e(\mathbf{k}) = \{\gamma \in P_e : \gamma\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$, $\|P_e\| = m\left\|P_e(\mathbf{k})\right\|$
- *Little group*: $G(\mathbf{k}) = \left\{\left\{\gamma\middle|\mathbf{R} + \mathbf{V}(\gamma)\right\} : \gamma \in P_e(\mathbf{k}),\ \mathbf{R} \in T\right\}$
- $G \supset G(\mathbf{k}) \supset T$

Os grupos

- Grupo das translações: $T = \{\mathbf{R}, \mathbf{S}, \ldots\}$
- Grupo pontual: $P = \{\alpha : \alpha\alpha^T = \mathbb{1}\}$
- Grupo cristalino: $P_e \subset P$
- Grupo de simetria de $\mathbf{k}$: $P(\mathbf{k}) = \{\alpha \in P : \alpha\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$
- *Little co-group*: $P_e(\mathbf{k}) = \{\gamma \in P_e : \gamma\mathbf{k} \equiv \mathbf{k}\}$, $\|P_e\| = m\left\|P_e(\mathbf{k})\right\|$
- *Little group*: $G(\mathbf{k}) = \left\{\left\{\gamma\middle|\mathbf{R} + \mathbf{V}(\gamma)\right\} : \gamma \in P_e(\mathbf{k}),\ \mathbf{R} \in T\right\}$
- $G \supset G(\mathbf{k}) \supset T$

C. J. Bradley, A. P. Cracknell
The Mathematical Theory os Symmetry in Solids
Clarendon, 1972.

G. L. Bir, G. E. Pikus
Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors
Willey, 1974.

S. L. Altmann
Rotations, Quaternions, and Double Groups
Dover, 1986.

R. Enderlein, N. J. M. Horing
Fundamentals of Semiconductor Physics and Devices
World, 1997.

Jin-Quan Chen, Jialun Ping, Fan Wang
Group Representation Theory for Physicists
World, 2002.

R. L. Liboff
Primer for Point and Space Groups
Springer, 2004.

T. Hahn (Ed.)
International Tables for Crystallography. Volume A: Space-group Symmetry
Springer, 2005.

M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio
Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter
Springer, 2008.