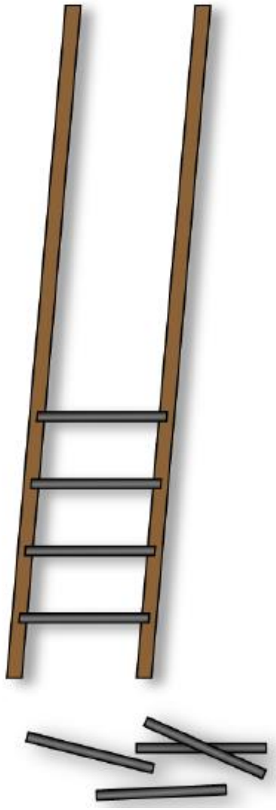
INTRODUÇÃO A CRISTALOGRAFIA APLICADA À DIFRAÇÃO DE ELÉTRONS PARA MATERIAIS SÓLIDOS

Aula 5 – “Operações de Simetria_Parte 2”

Simetria



4. Step: Space groups complete symmetry	230
3. Step: Crystal classes crystallographic PG	32
2. Step: Bravais lattices primitive + centered	14
1. Step: Crystal systems metric + symmetry of the UC	7

Elementos e operações de simetria translacional

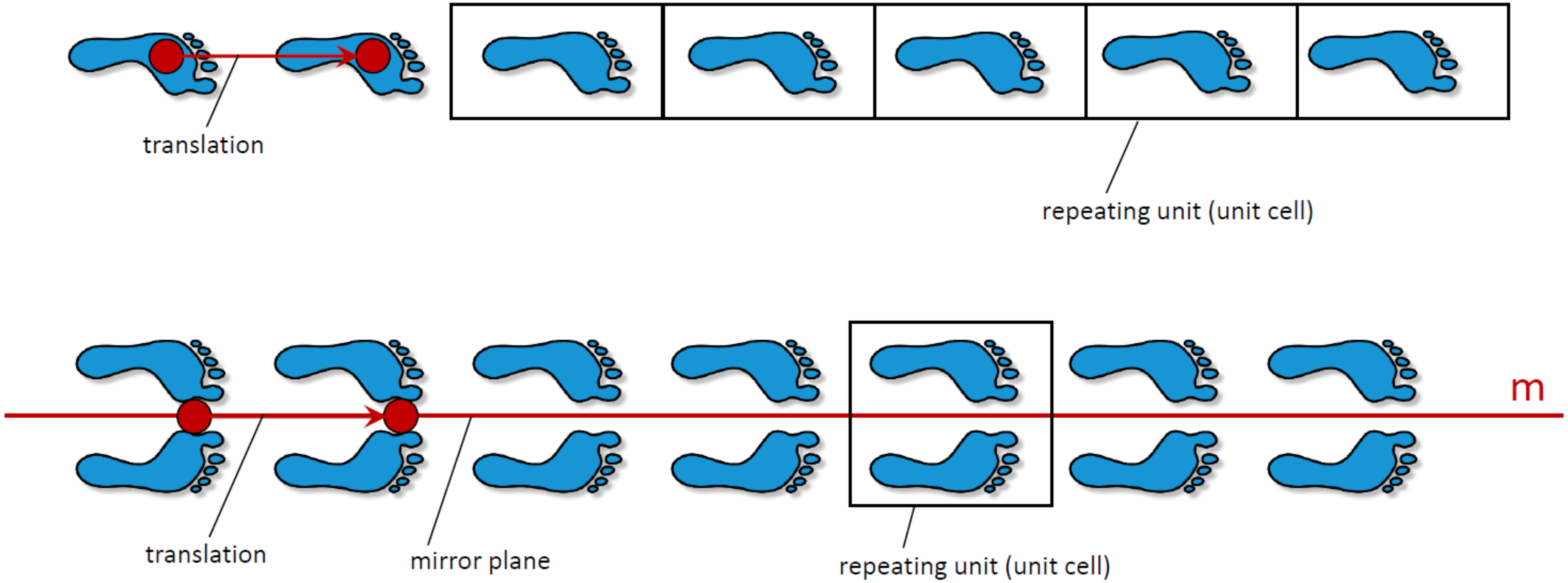
1) Translação (em unidades de comprimentos da célula unitária).

2) Screw axis.

3) Glide planes.

Elementos e operações de simetria translacional

1) Translação



Elementos e operações de simetria translacional

1) Translação

- “Translação pura” é caracterizada por um vetor de translação “t”
- Esse vetor é limitado ao vetores de rede e, se presente, ao vetor de centramento.
- Ex: t(1,0,0); t(1/2,1/2,1/2)
- $r' = r + t$

Elementos e operações de simetria translacional

2) Screw axis

- Combinação de rotação + translação:

Screw axis n_m ; onde m<n;

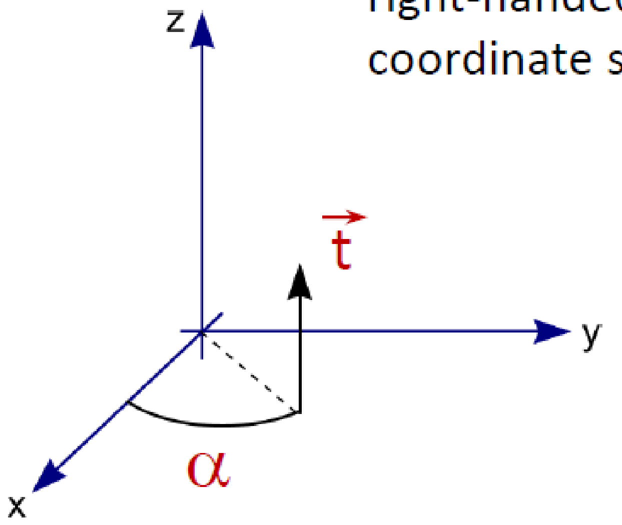
i) rotação em um ângulo $\alpha = 360°/n$

n= ordem do eixo de rotação

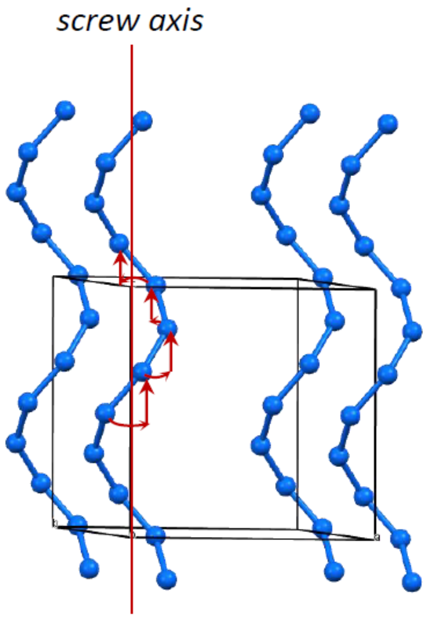
ii) Translação de “m/n” do eixo da célula unitária paralela ao eixo da screw axis

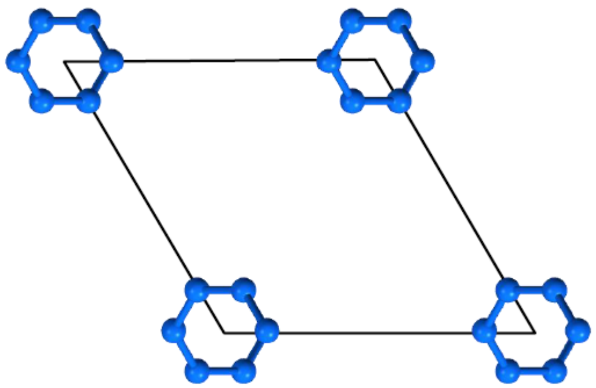
Elementos e operações de simetria translacional

2) Screw axis



right-handed
coordinate system





$\vec{t}$ = translation element = m / n

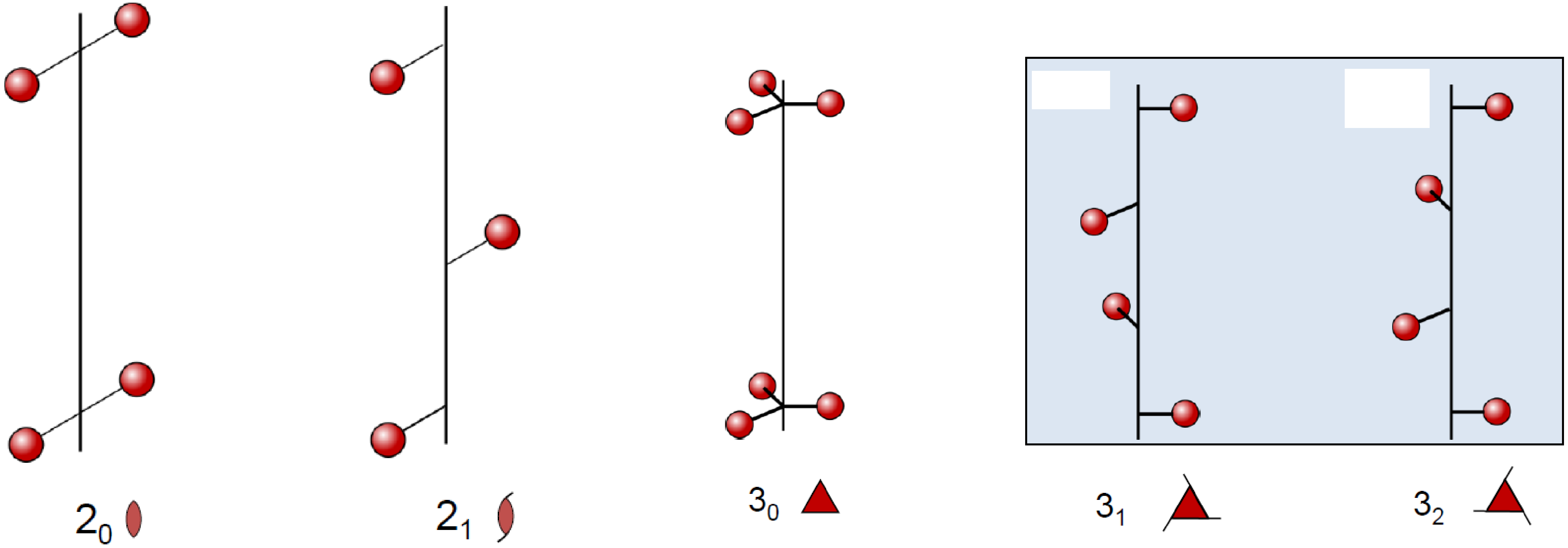
α = rotation angle

→ (a) rotation by 360°/6 = 60°
(b) translation by $^{1}/_{6}$ of the unit cell

→ 6-fold screw axis → 6_1 → translational component = 1/6

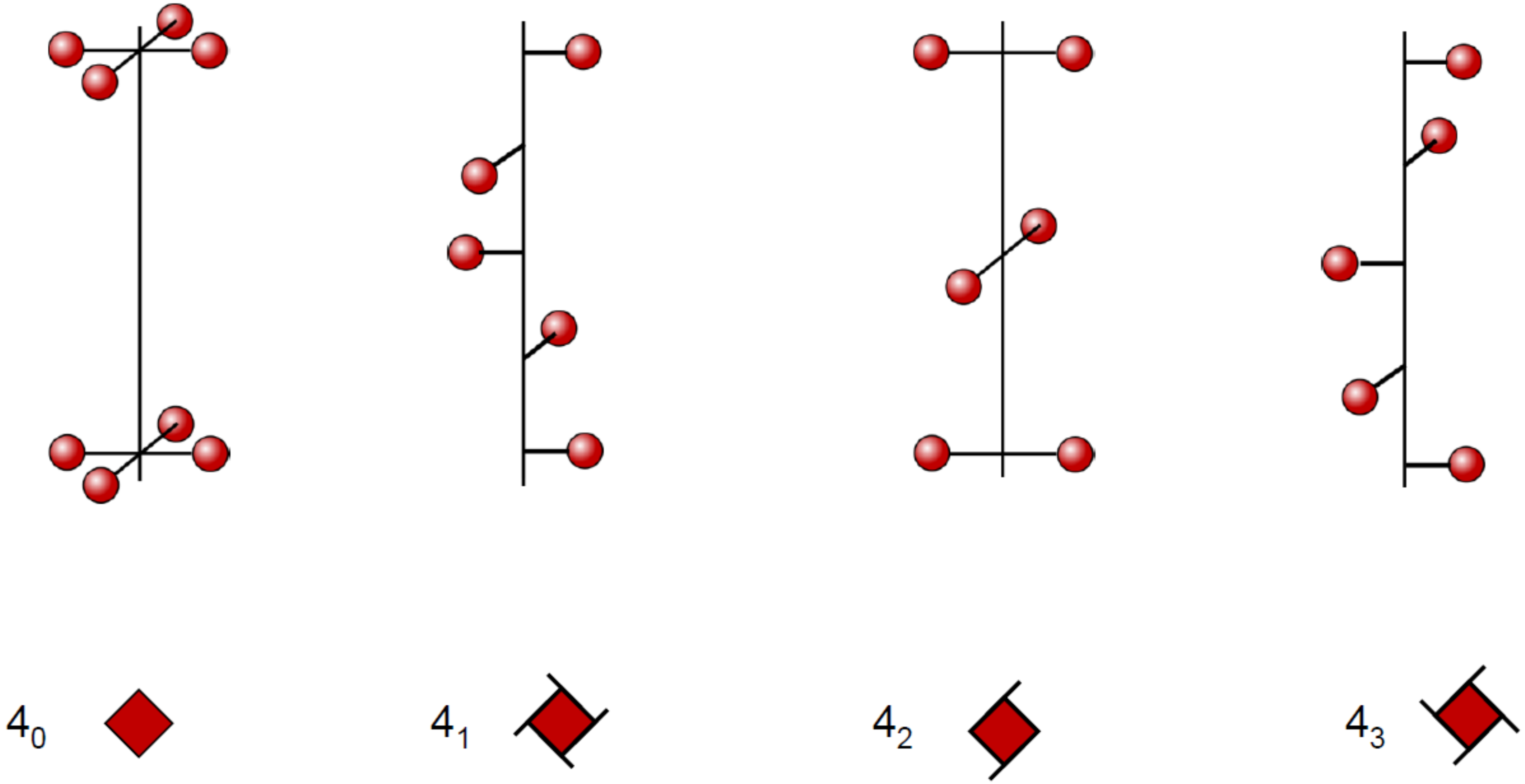
Elementos e operações de simetria translacional

2) Screw axis



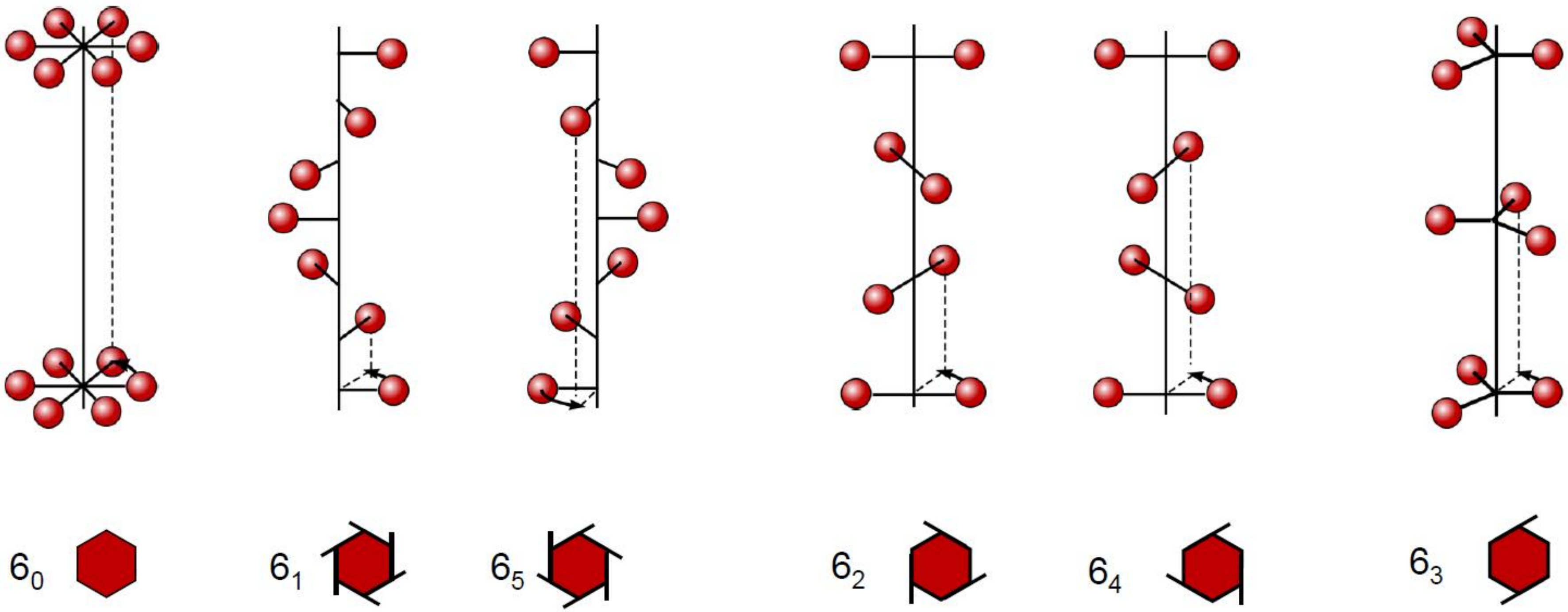
Elementos e operações de simetria translacional

2) Screw axis



Elementos e operações de simetria translacional

2) Screw axis



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

- Operação de simetria

  Glide reflection

i) Reflexão em um plano de espelho

ii) Translação por ½ ou ¼ da célula unitária

Elemento de simetria

glide plane

a,b,c,n,d

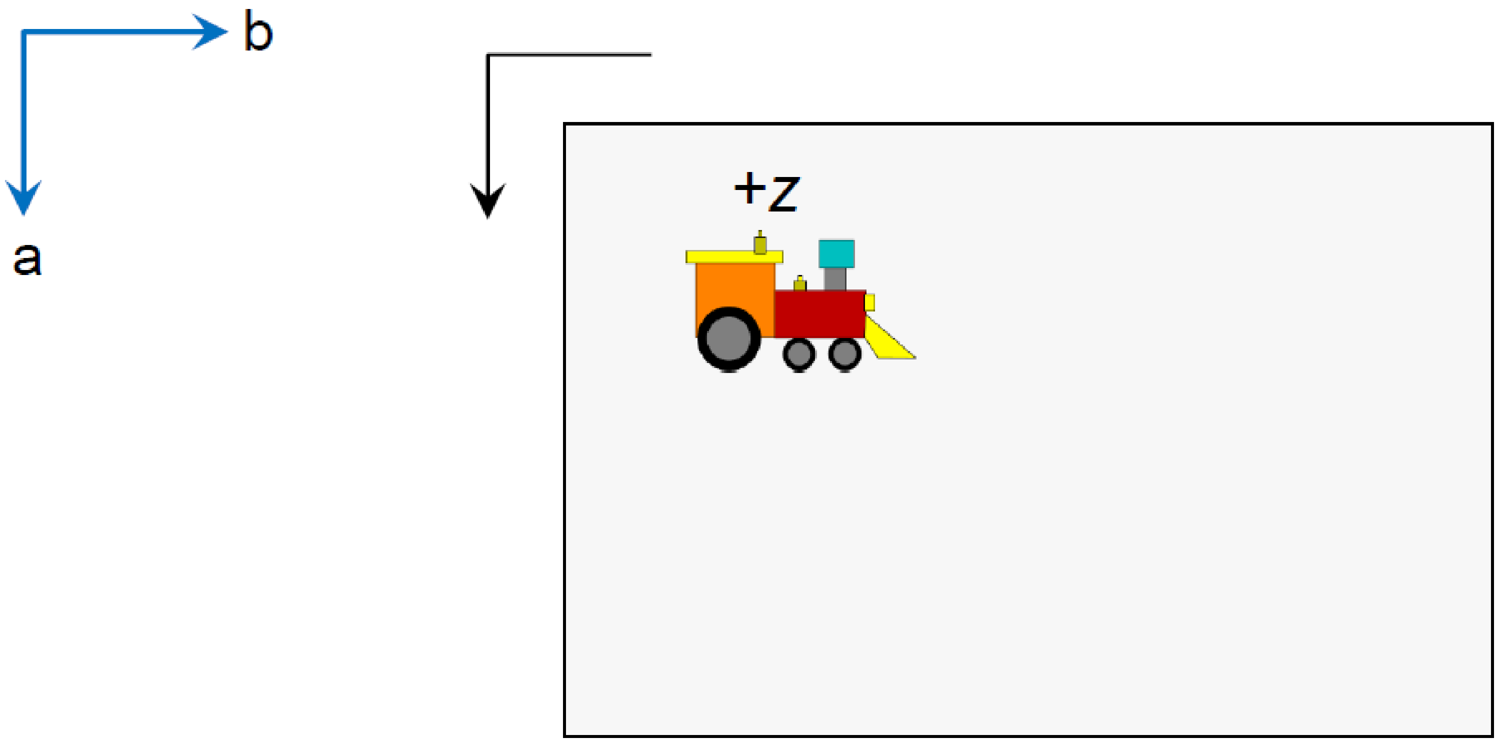
↓

os caracteres indicam a direção da translação.

Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

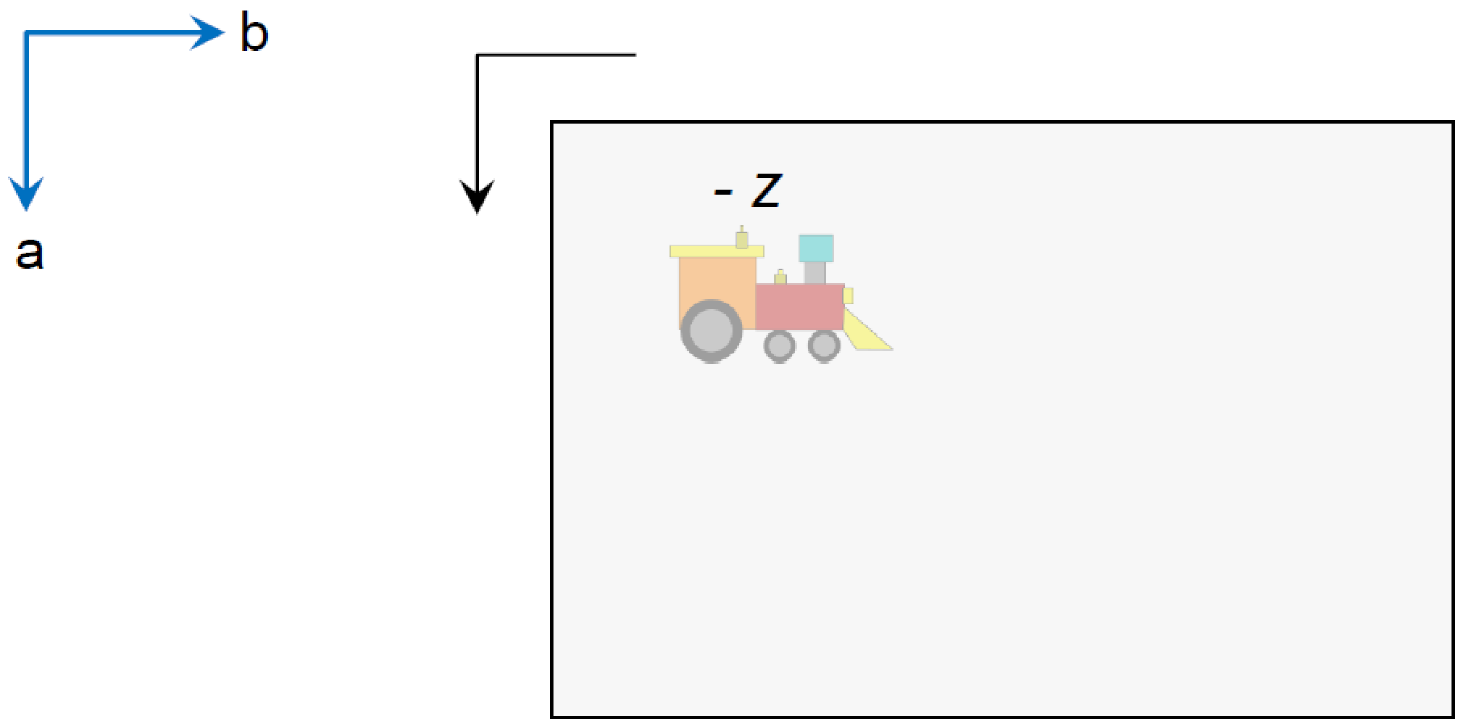
- Ex: glide plane “a” → direção de translação = a → x+1/2



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

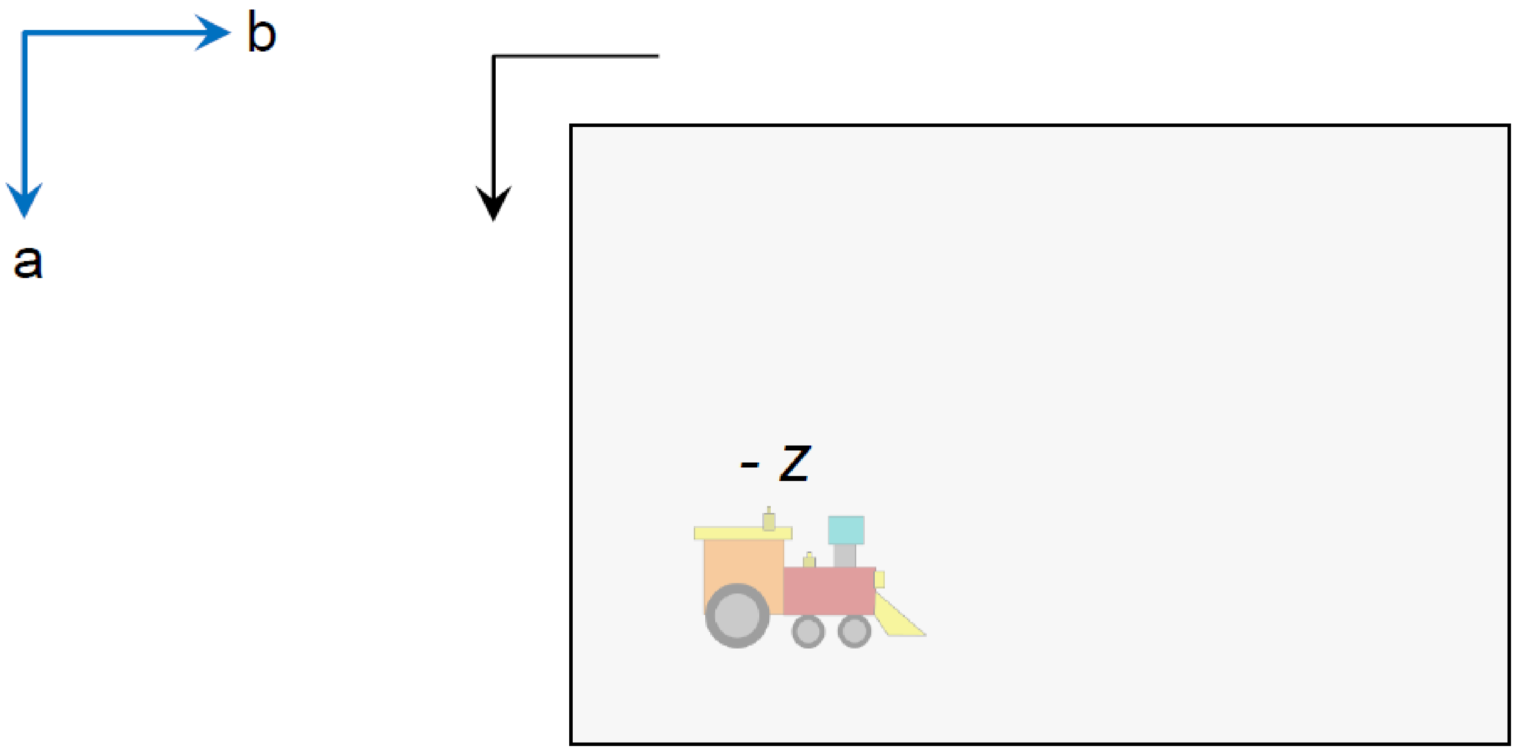
- Ex: glide plane “a” → direção de translação = a → x+1/2



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

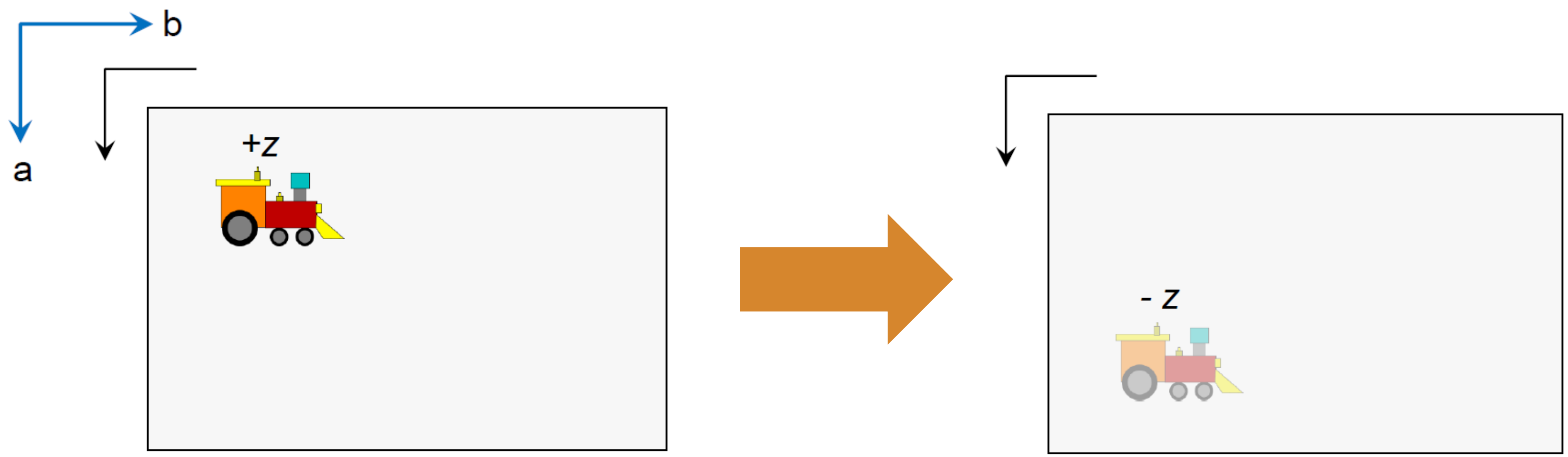
- Ex: glide plane “a” → direção de translação = a → x+1/2



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

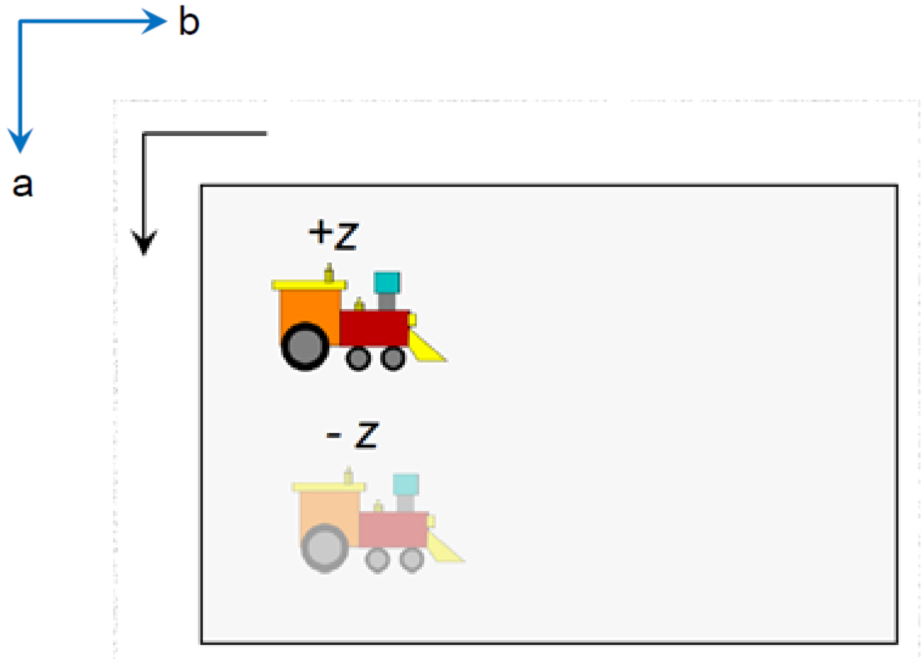
- Ex: glide plane “a” → direção de translação = a → x+1/2



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

- Ex: glide plane “a” → direção de translação = a → x+1/2

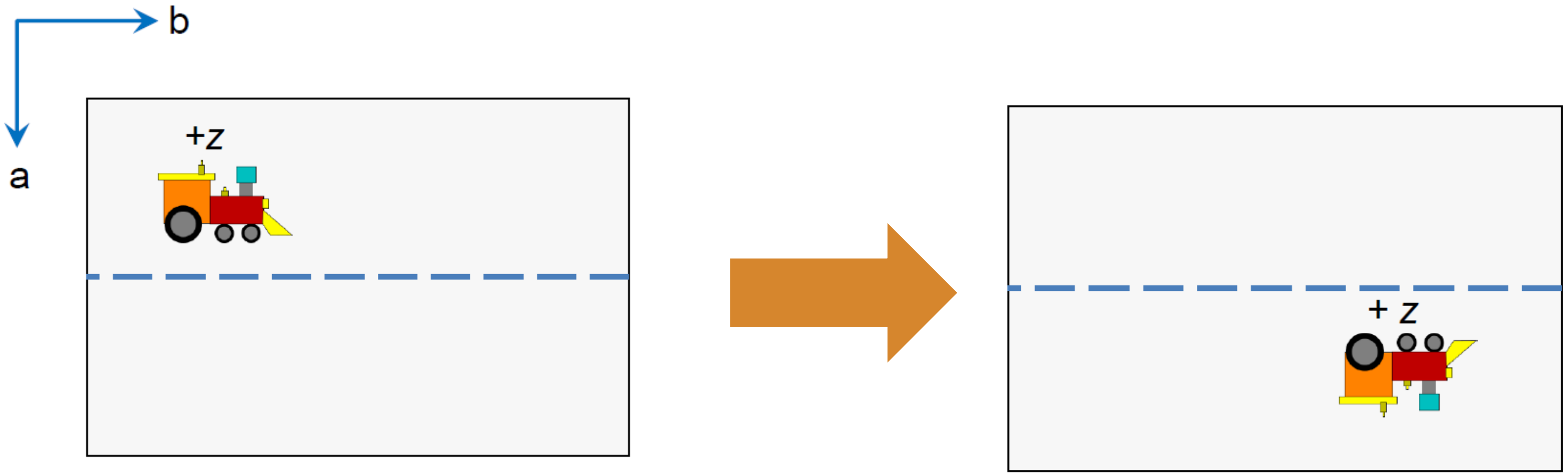


Note que os objetos
são relacionados simetricamente
por um glide plane “a” com
o espelho perpendicular
ao eixo c.

Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

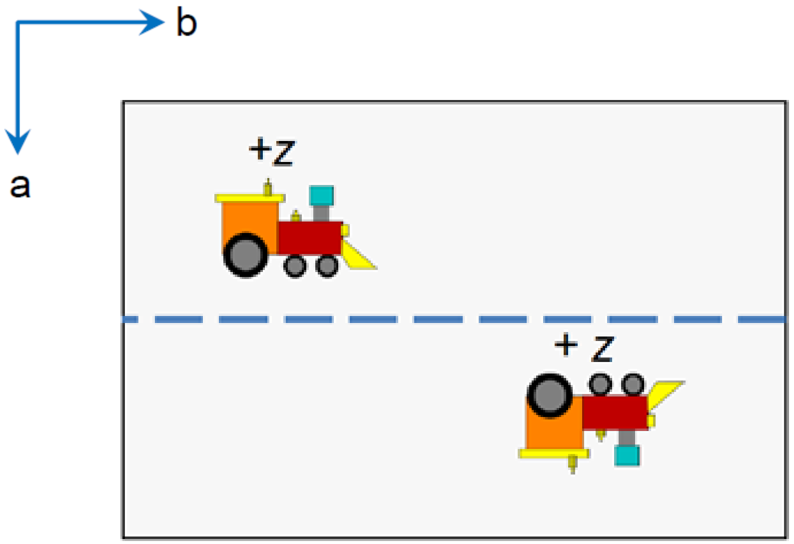
- Ex: glide plane “b” → direção de translação = b → y+1/2



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

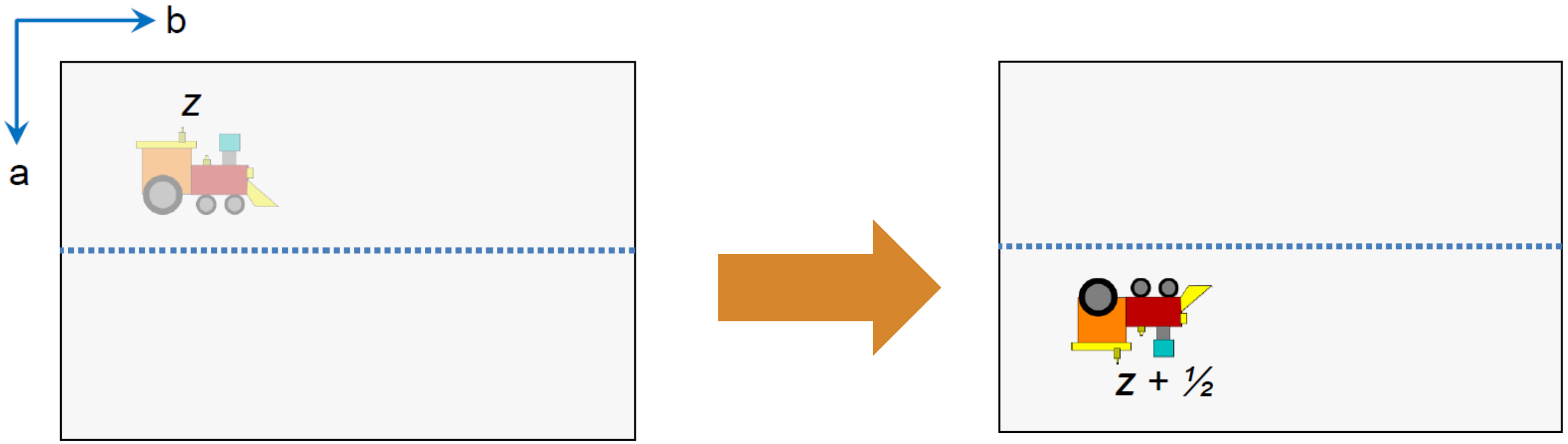
- Ex: glide plane “b” → direção de translação = b → y+1/2



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

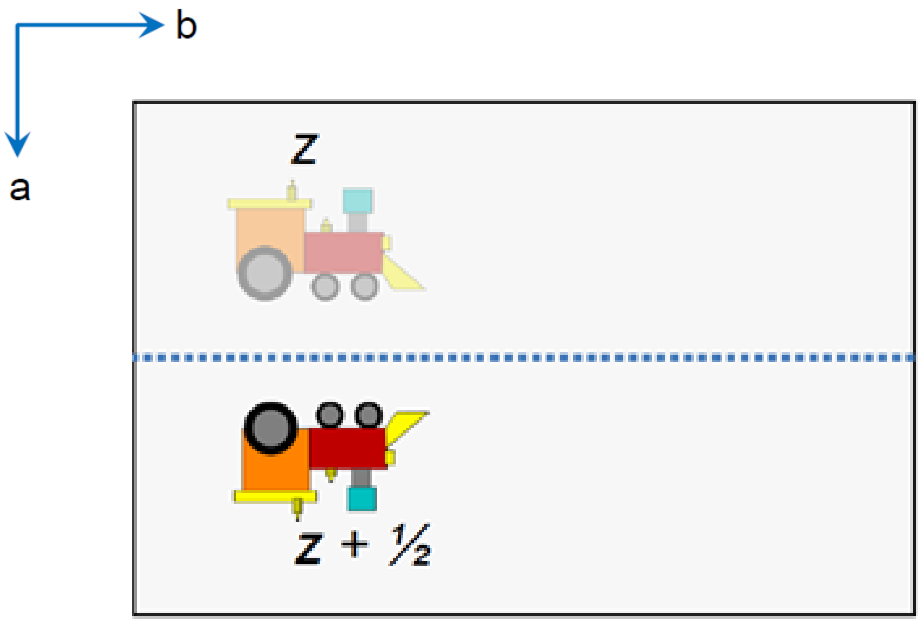
- Ex: glide plane “c” → direção de translação = c → z+1/2



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

- Ex: glide plane “c” → direção de translação = c → z+1/2



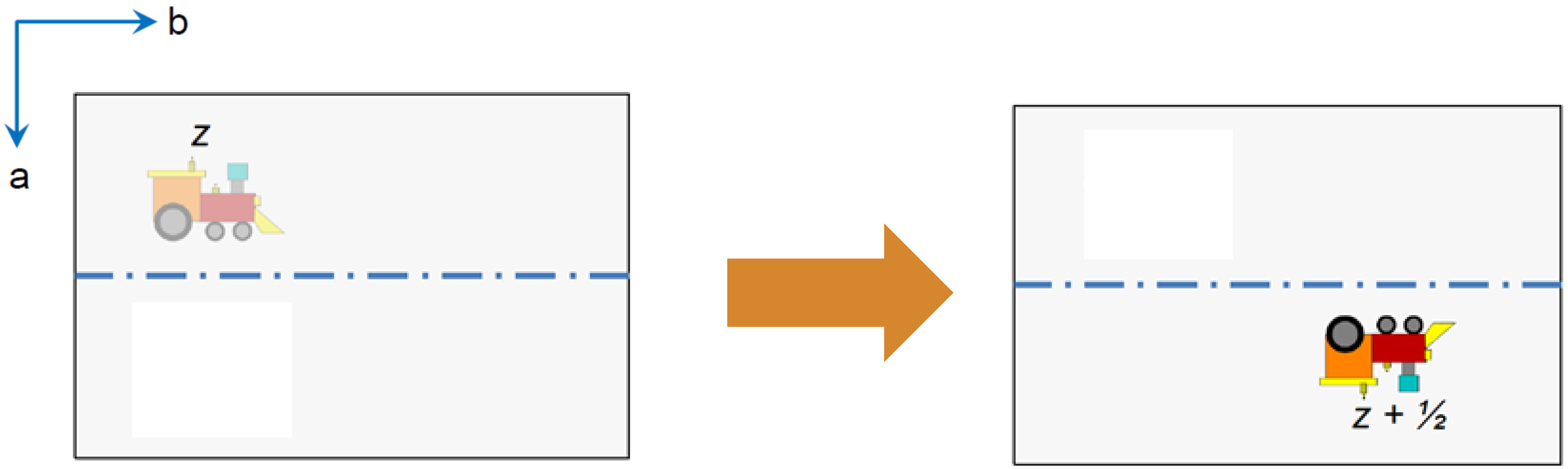
Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

- Ex: glide plane “n” → direção de translação = diagonal

→y+1/2

→z+1/2



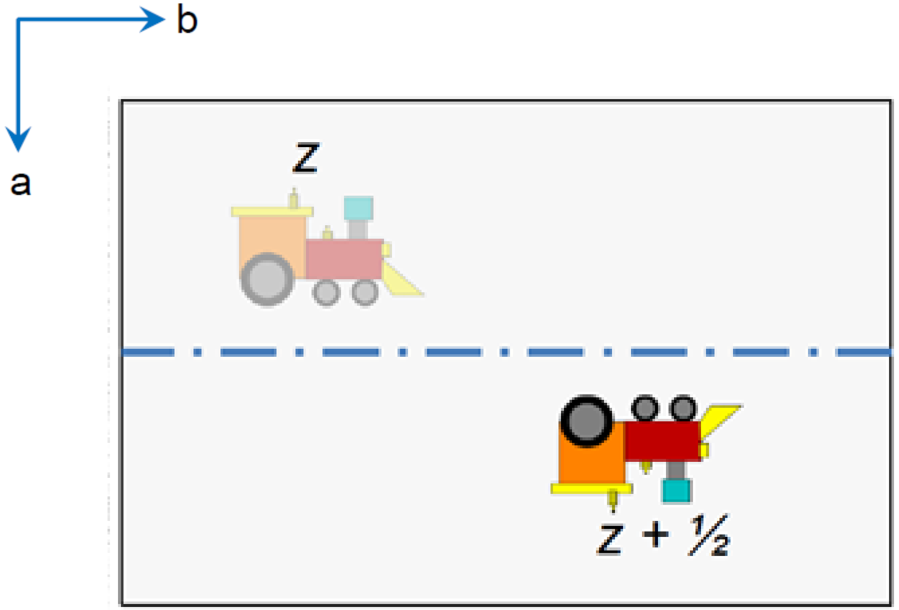
Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

- Ex: glide plane “n” → direção de translação = diagonal

→y+1/2

→z+1/2



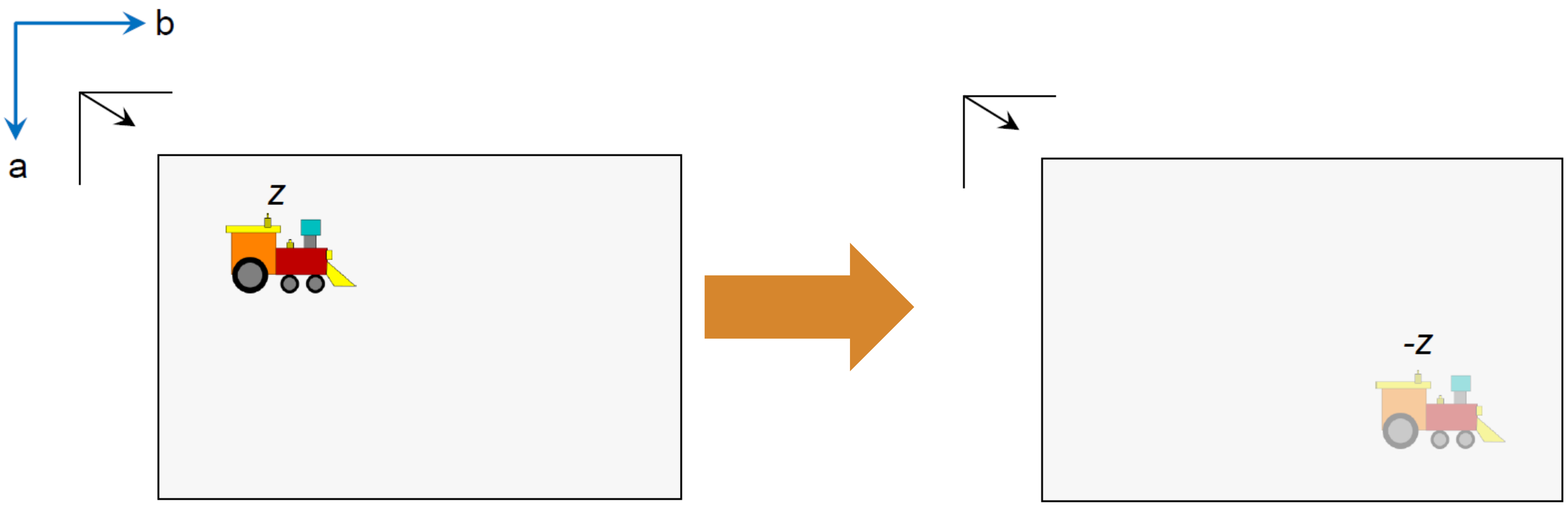
Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

- Ex: glide plane “n” → direção de translação = diagonal

→x+1/2

→y+1/2



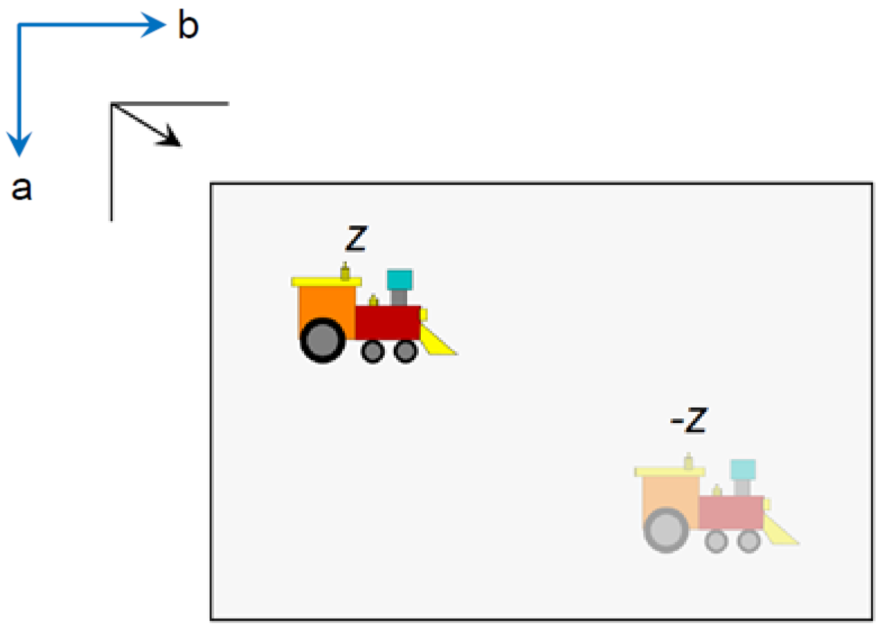
Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

- Ex: glide plane “n” → direção de translação = diagonal

→x+1/2

→y+1/2



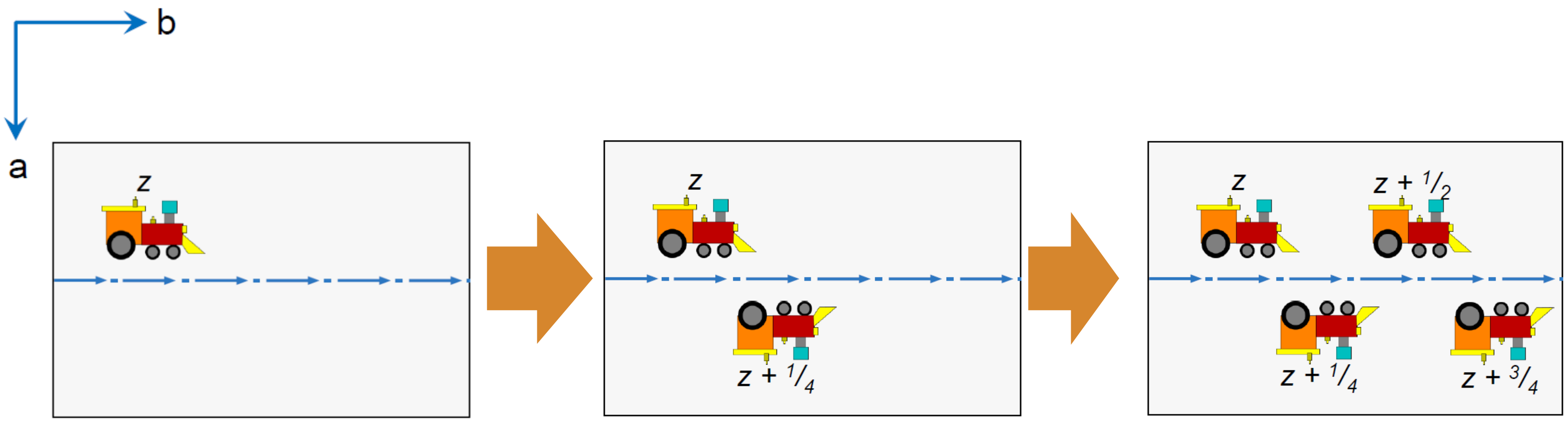
Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

- Ex: glide plane “d” → direção de translação = diagonal do diamante

→y+1/4

→z+1/4



Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

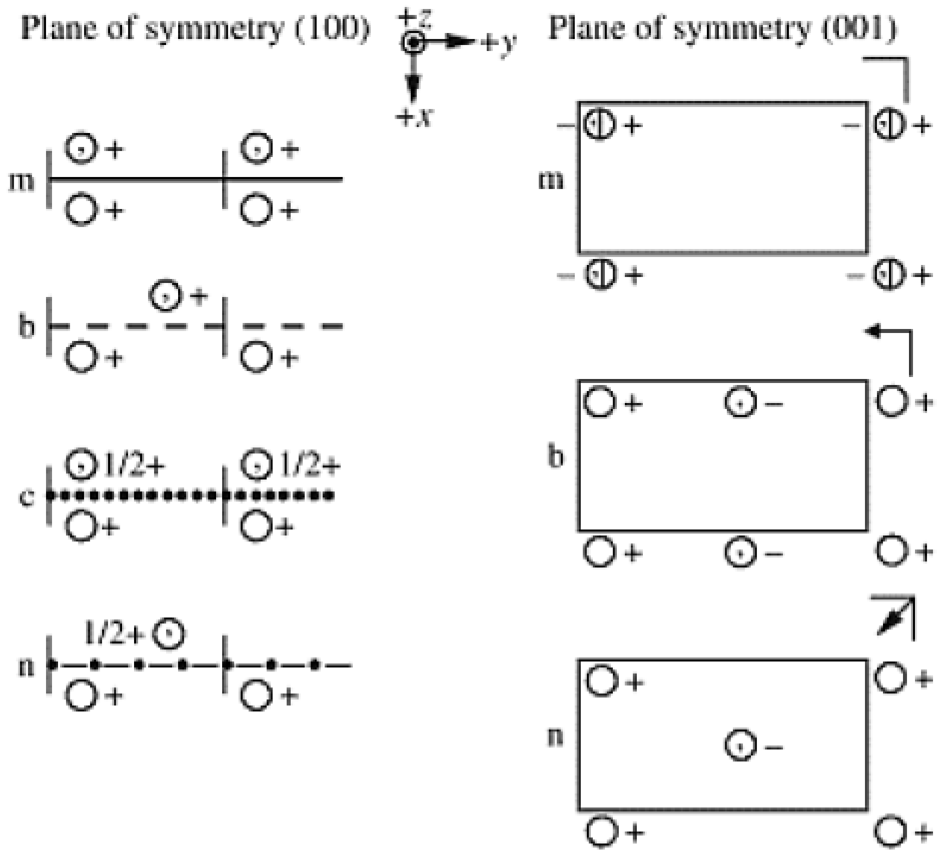
Table 8.1. Different types of mirror and glide planes, their symbols and glide vectors. Glide vectors with a (†) symbol are only possible in cubic and tetragonal systems.

Name	Symbol	Glide vector(s)
mirror	m	none
axial glide	a	$\mathbf{a}/2$
	b	$\mathbf{b}/2$
	c	$\mathbf{c}/2$
diagonal glide	n	$\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$
		$\mathbf{I}$ (†)
diamond glide	d	$(\mathbf{a} \pm \mathbf{b})/4$, $(\mathbf{b} \pm \mathbf{c})/4$, $(\mathbf{c} \pm \mathbf{a})/4$
		$(\mathbf{a} \pm \mathbf{b} \pm \mathbf{c})/4$ (†)

Elementos e operações de simetria translacional

3) Glide planes

Fig. 8.15. Graphical symbols for glide planes perpendicular (left) and parallel (right) to the plane of the drawing (figure reproduced from Fig. 1.17 in *Introduction to Conventional Transmission Electron Microscopy*, M. De Graef, 2003, Cambridge University Press).



Plane groups and Space groups

- Quando combinamos operações de simetria pontuais com translações, criamos novos grupos de simetria.

- No caso de cristais em 3D, as combinações de:

- 14 redes de Bravais (translações puras)
- 32 Grupos pontuais
- Screw and glide symmetry

- Geram os 230 grupos espaciais.

Plane groups and Space groups

- As pessoas que derivaram as 230 possíveis combinações de operações de simetria:

-Federov (1891, Rússia)

-Schonflies (1891, Alemanha)

-Barlow (1894, Inglaterra)

Qualquer cristal estará classificado em um desses 230 grupos.

São os chamados *Space groups*

Em 2D → *17 Plane groups*

Space groups

International Tables for Crystallography
Volume A: Space-group symmetry

Edited by Th. Hahn

Space groups

- Conjunto dos elementos de simetria (e seus respectivas operações), que descrevem por completo o arranjo espacial periódico em 3 dimensões.

- Nomenclatura

'Generators'

symmetry elements with respect to 3 given viewing directions

$P\ c\ a\ 2_1$ (orthorhombic)

2_1 screw axis || **c**

glide plane $a \perp$ **b**

glide plane $c \perp$ **a**

Bravais type

Space groups

"Crystallographic viewing directions"

	crystal system	*viewing directions*		
	triclinic	—		
	monoclinic	*b* (*c*)		
	orthorhombic	*a*	*b*	*c*
a = b	tetragonal	*c*	*a*	[110]
a = b	trigonal	*c*	*a*	[210]
a = b	hexagonal	*c*	*a*	[210]
	cubic	*a*	[111]	[110]

Space groups

- Derivando o point group (ou crystal class) a partir do space group:

-Retire o símbolo do centramento (ex: P, I, F, C, A e B).

-Converta todas as operações de simetria com componentes translacinoais para suas respecitivas operações pontuais (ex; glide→mirror; screw axis→rotation)

Ex: $Pca2_1$ → qual o grupo pontual desse cristal?

R: mm2

Ex: $P2_1/n$ →

crytal class= 2/m

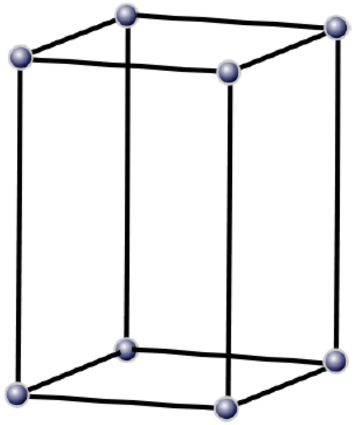
Space groups

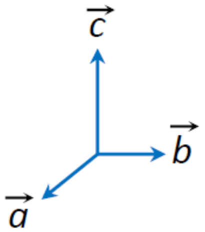
- Sistema cristalino→crystal class→space group

tetragonal → $\boxed{c \quad a \quad [110]}$ → viewing directions tetragonal system

a = b

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$





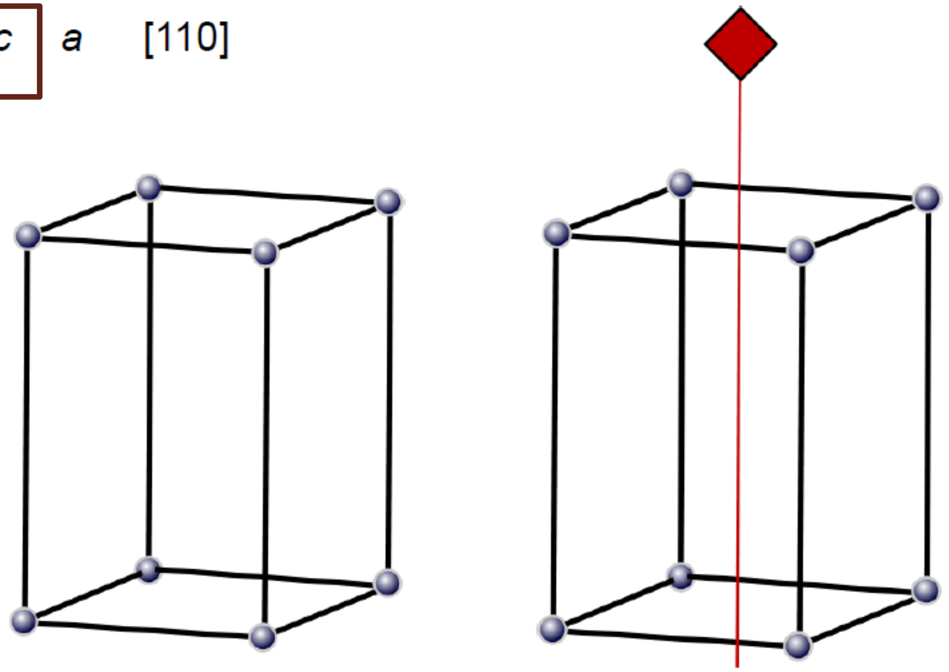
Space groups

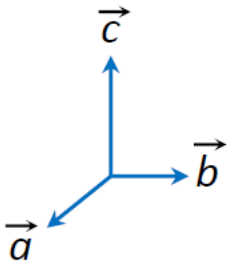
- Sistema cristalino→crystal class→space group

tetragonal → $\boxed{c}$ *a* [110]

a = b

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$





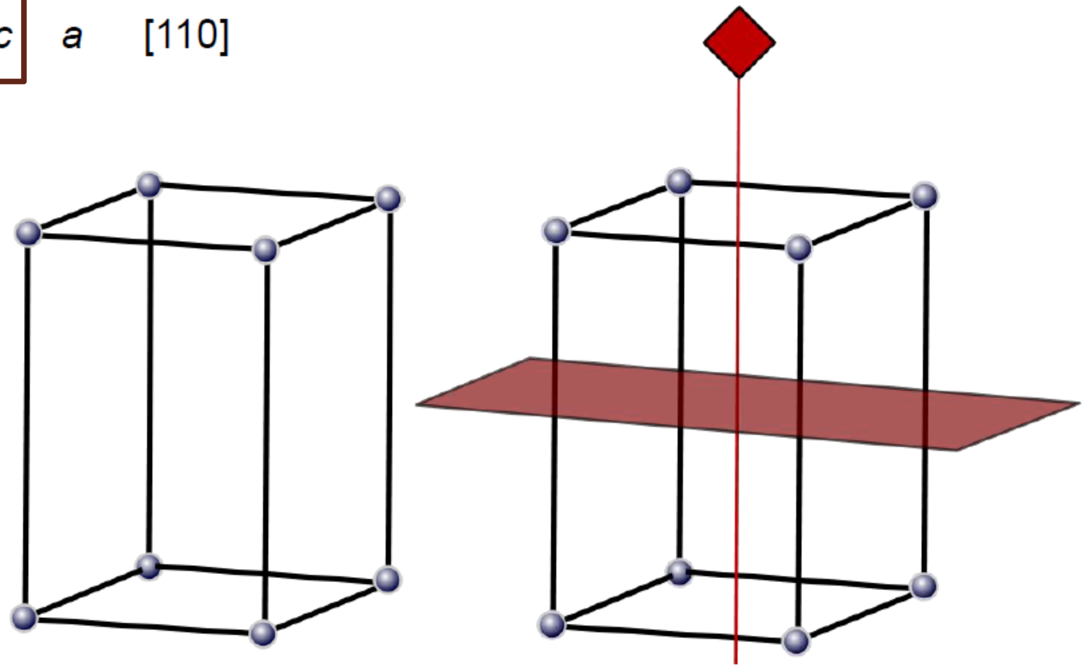
Space groups

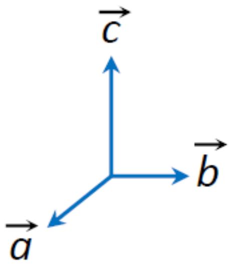
- Sistema cristalino→crystal class→space group

tetragonal → $\boxed{c}$ a [110]

a = b

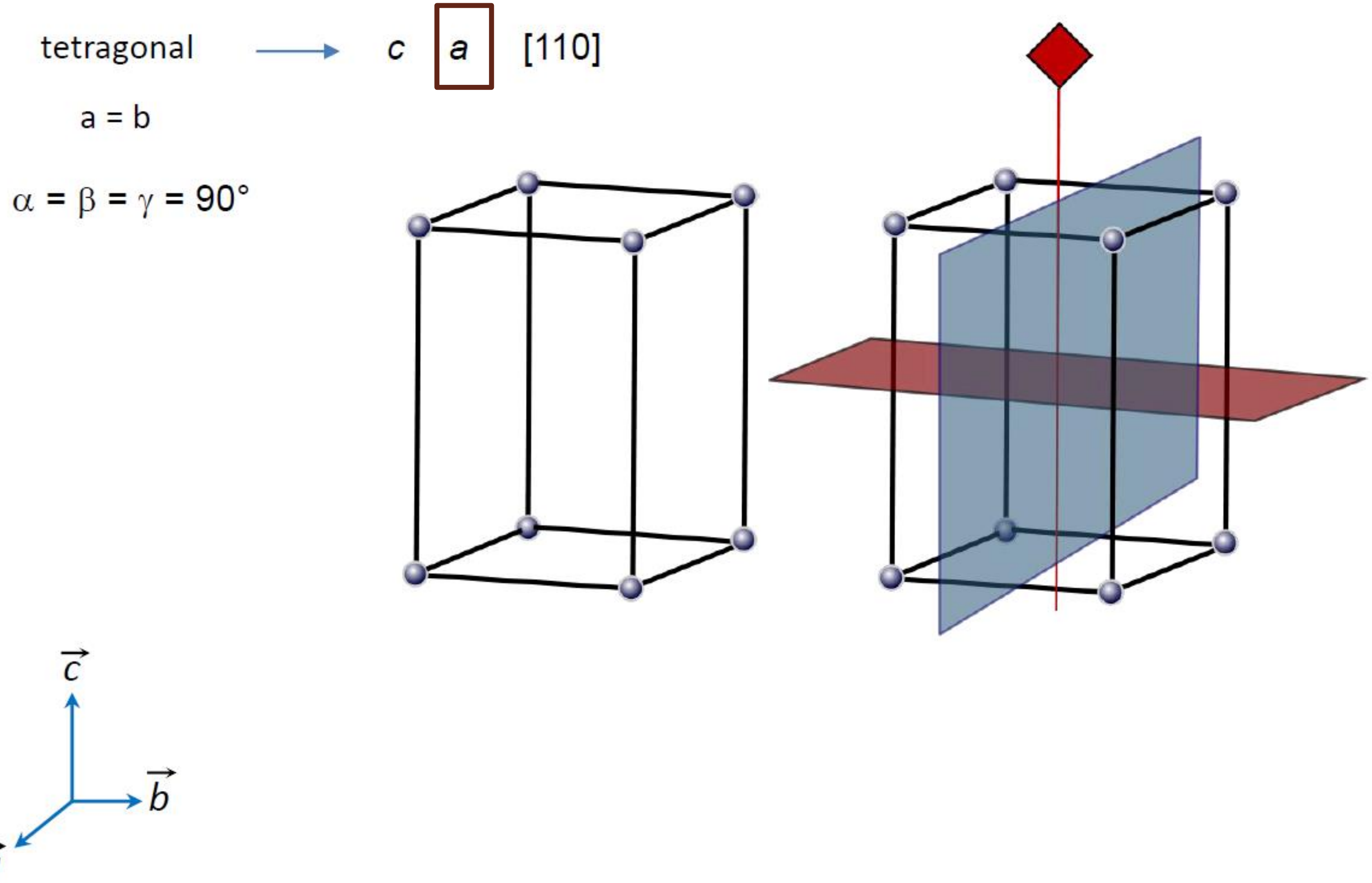
$\alpha = \beta = \gamma = 90°$





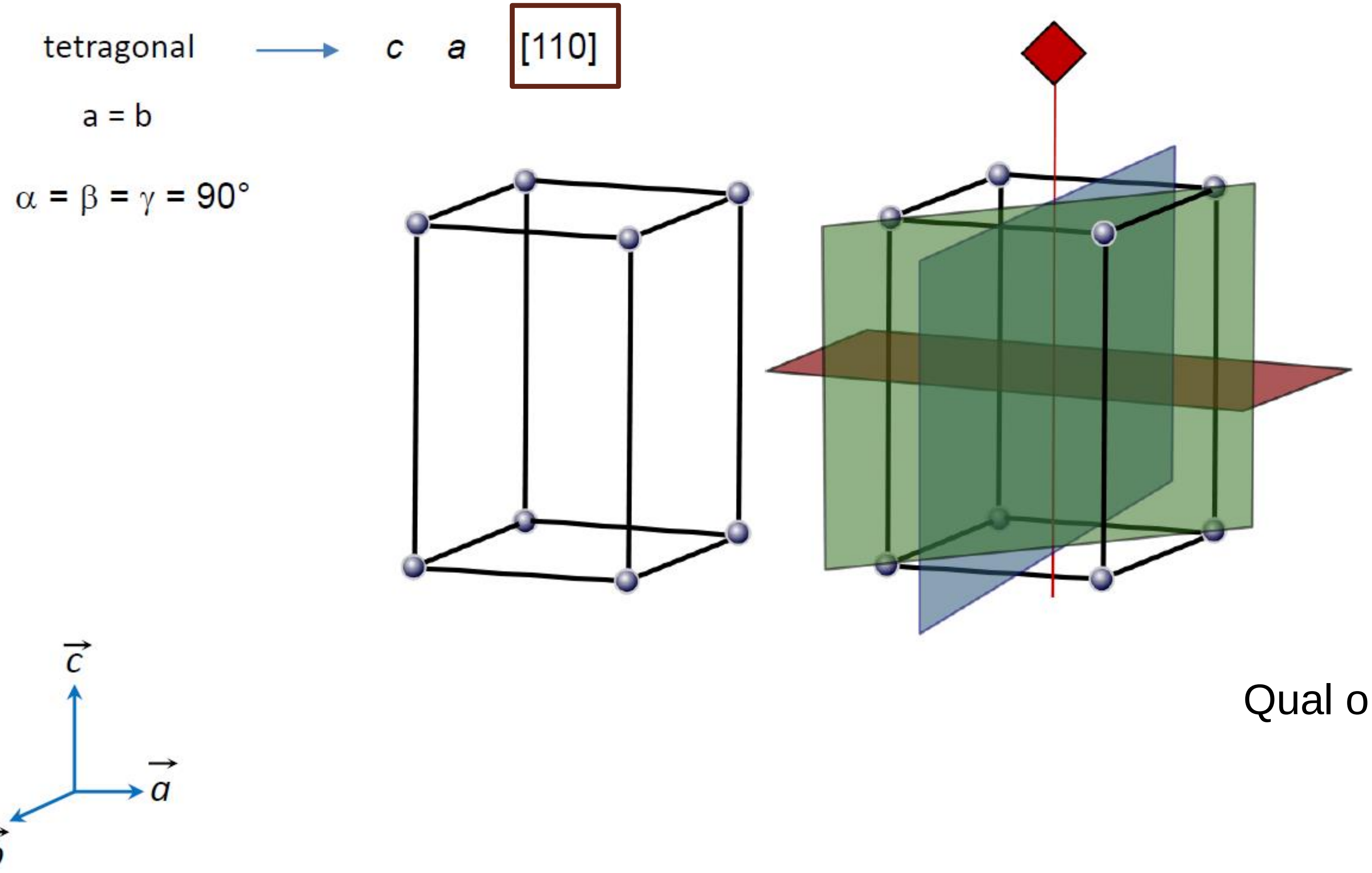
Space groups

- Sistema cristalino→crystal class→space group



Space groups

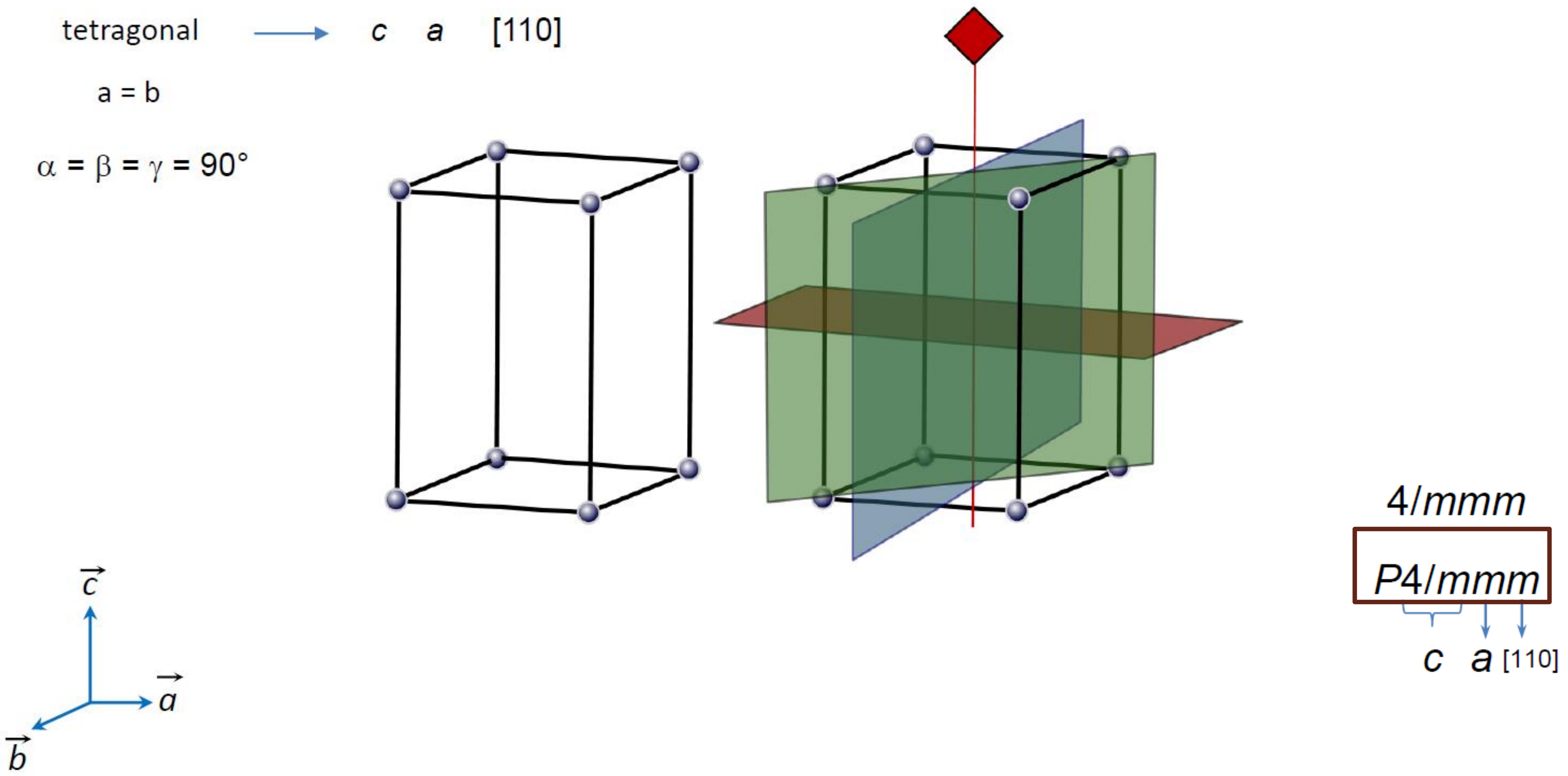
- Sistema cristalino→crystal class→space group



Qual o Space group?

Space groups

- Sistema cristalino→crystal class→space group



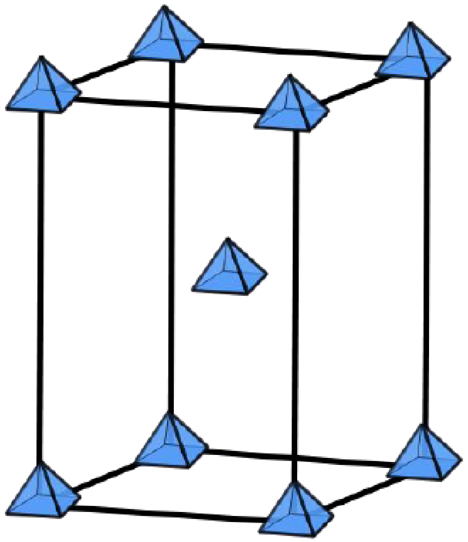
Space groups

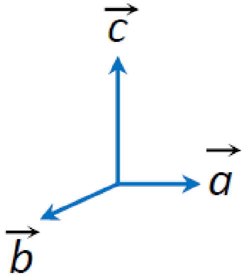
- Qual o space group?

tetragonal → c a [110]

a = b

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$





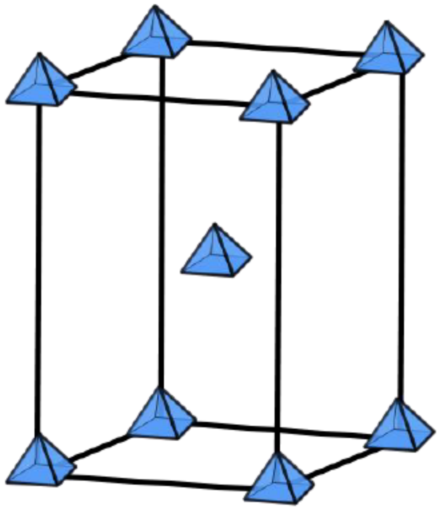
Space groups

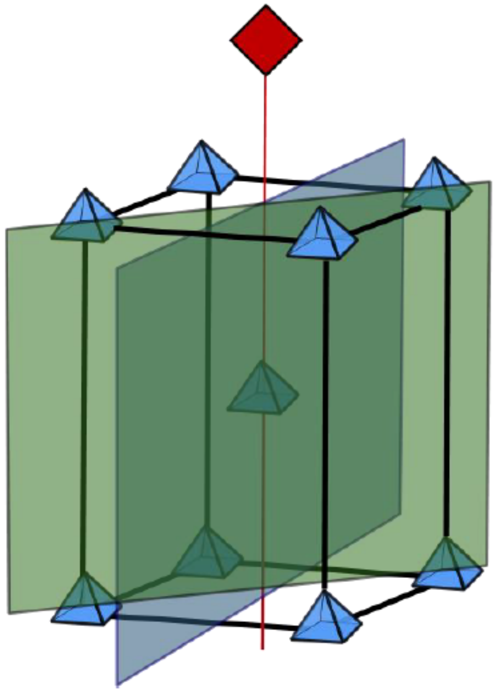
- Qual o space group?

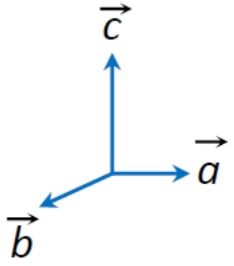
tetragonal $\longrightarrow$ *c* *a* [110]

a = b

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$







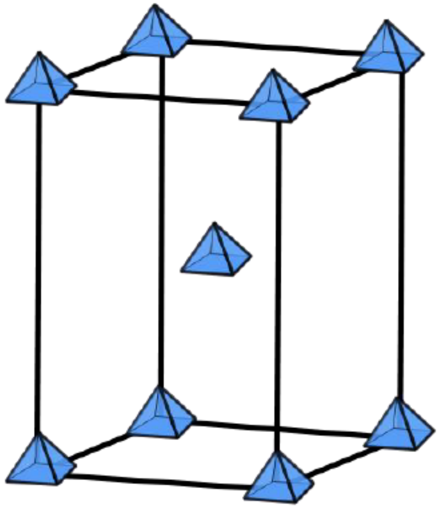
Space groups

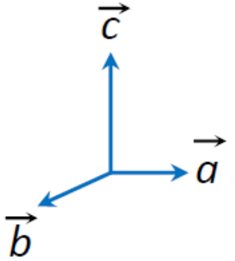
- Qual o space group?

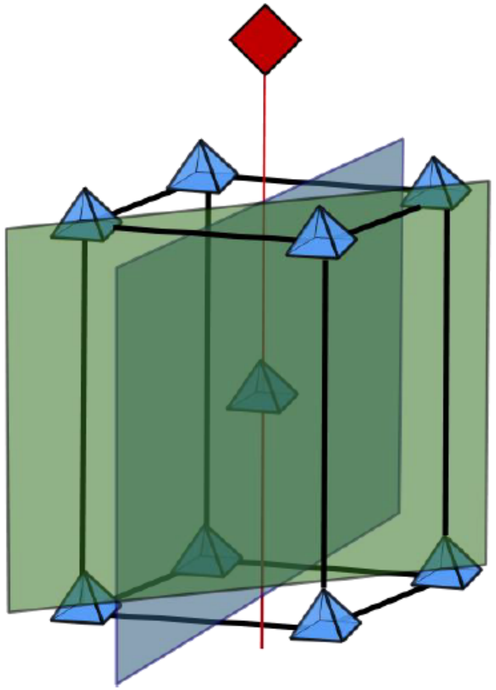
tetragonal → *c* *a* [110]

a = b

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$







$4mm$

$I4mm$

↓ ↓ ↓

c *a* [110]

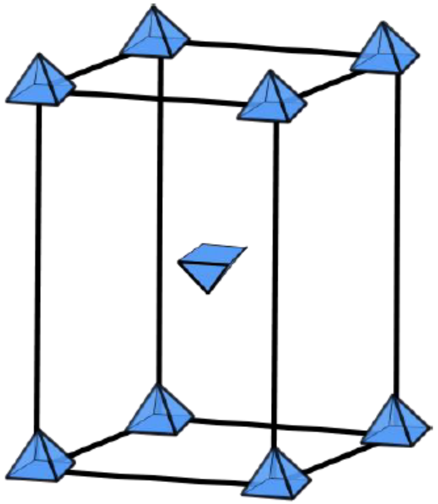
Space groups

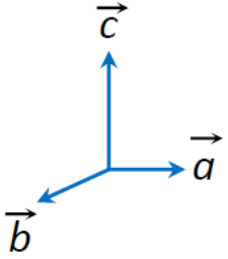
- Qual o space group?

tetragonal $\longrightarrow$ *c* *a* [110]

a = b

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$





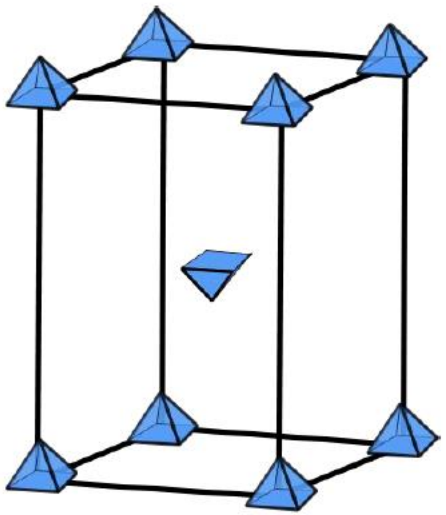
Space groups

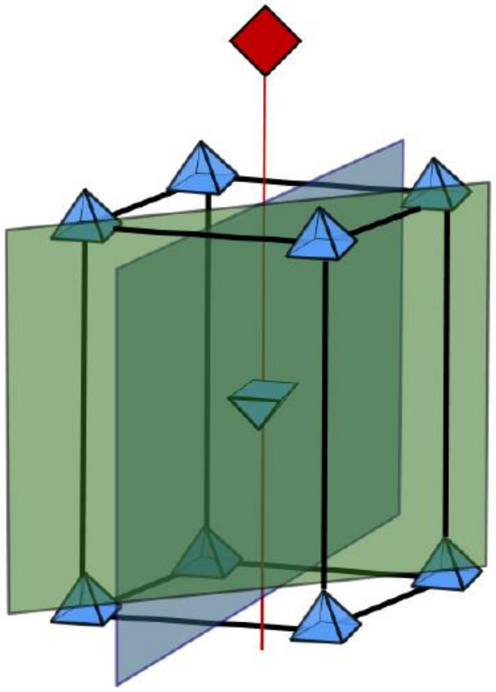
- Qual o space group?

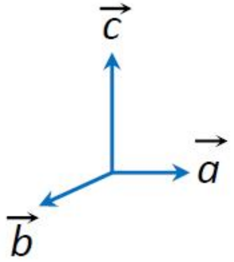
tetragonal ⟶ *c* *a* [110]

a = b

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$







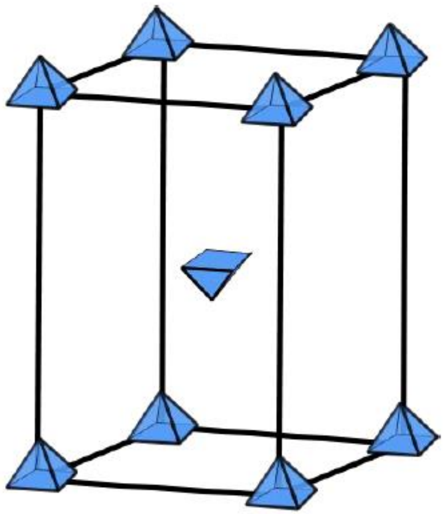
Space groups

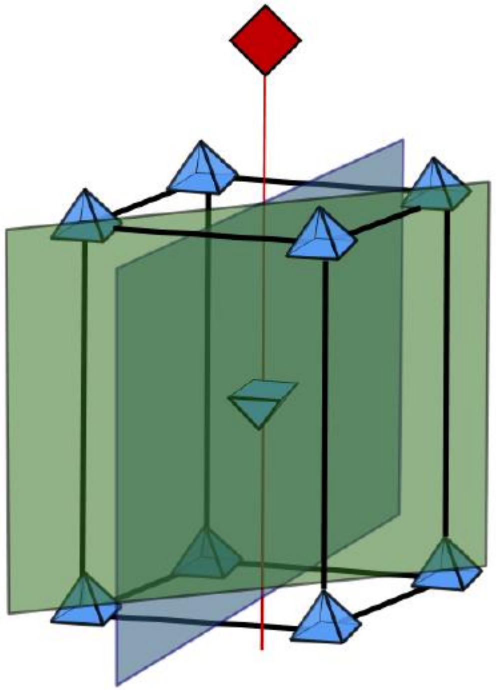
- Qual o space group?

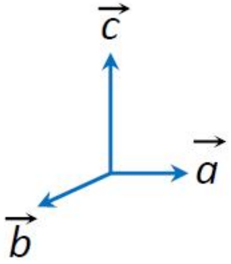
tetragonal → *c* *a* [110]

$a = b$

$\alpha = \beta = \gamma = 90°$







4mm

P4mm

↓ ↓ ↓

c *a* [110]

Space groups

- Software para montar estruturas cristalinas e plotar elementos de simetria:

-Mercury

(https://www.ccdc.cam.ac.uk/Community/csd-community/freemercury/)

-VESTA

(http://jp-minerals.org/vesta/en/)

Space groups

- Além do software, você precisará do arquivo .cif das fases que queira analisar.

- Esse arquivo pode ser encontrado em diversas bases como:

-ICSD (Inorganic Crystal Structure Database)

-COD (Crystallographic Open Database)

Você pode ter acesso a essas e outras bases de dados pela USP.