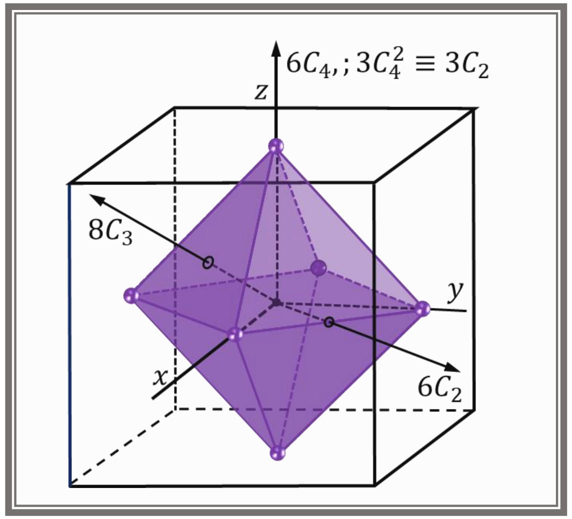
Teoria de grupos aplicada a moléculas e sólidos - PGF5261

Grupos e tensores aplicados à ciência dos materiais - 4300409



Lucy V. C. Assali

Instituto de Física
Universidade de São Paulo

Aula 3 – 31/03

1º Semestre/2023

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

Elemento	*Operação*	*Resultado*
Plano de Simetria	Reflexão no plano	plano $(x, y) \Rightarrow$ objeto em $z \rightarrow -z$
Centro de Simetria (centro de inversão)	Inversão através de um centro (origem)	objeto em $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z)$
Eixo próprio	Rotação ao redor do eixo	Eixo $\hat{e}$: $(2\pi)/n$ em torno de $\hat{e}$
Eixo impróprio	Roto-reflexão (rotação seguida de reflexão)	Eixo $\hat{e}$: $(2\pi)/n$ em torno de $\hat{e}$ + reflexão no plano $\perp$ ao eixo de rotação

Sistemas moleculares (finitos): elementos de simetria e operações

Nomenclatura

Elemento	*Operação*	*Notação de Schoenflies (mais comum)*
Plano de Simetria	Reflexão no plano	$\sigma\ (\sigma_h, \sigma_\mathrm{v}, \sigma_d)$
Centro de Simetria (centro de inversão)	Inversão através de um centro (origem)	i
Eixo próprio	Rotação ao redor do eixo	C_n: $(2\pi)/n$ é o ângulo para a simetria de rotação
Eixo impróprio	Roto-reflexão (rotação seguida de reflexão)	S_n: $(2\pi)/n$ é o ângulo para a simetria de roto-reflexão

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Notação Padrão de Schoenflies

- E = identidade
- C_n = rotação própria de $(2\pi)/n$
- σ = reflexão num plano
- σ_h = reflexão num *plano horizontal* (plano que passa pela origem e é perpendicular ao eixo de simetria de rotação de maior ordem)
- σ_{v} = reflexão num *plano vertical* (plano que contém o eixo de simetria de rotação de maior ordem)
- σ_d = reflexão num *plano diagonal* (plano que contém o eixo de simetria de maior ordem e é bissetor dos eixos C_2 perpendiculares ao eixo de simetria em questão ⇒ caso particular de σ_{v})
- S_n = rotação imprópria de $(2\pi)/n$
- i = $S_2 = C_2\sigma_h$ inversão

sempre $\sigma^2 = \mathrm{E}$, ou seja,
$\sigma^n = \sigma$, se n ímpar e
$\sigma^n = \mathrm{E}$, se n par.

sempre $i^2 = \mathrm{E}$, ou seja,
$i^n = i$, se n ímpar e
$i^n = \mathrm{E}$, se n par

$\Longrightarrow$ m aplicações sucessivas $= C_n^m$
$\Longrightarrow$ sempre $C_n^n = \mathrm{E}$
$\Longrightarrow$ $C_n^{n+1} = C_n$; $C_n^{n+2} = C_n^2$; ...

Se $\exists\ C_n$ e $\sigma \perp C_n \Rightarrow \exists\ S_n$.
Por outro lado, pode existir S_n sem que exista C_n e σ.

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Rotações impróprias

n aplicações sucessivas de S_n $\Longrightarrow$ $S_n^n = (C_n\sigma)\ldots(C_n\sigma) = C_n^n\sigma^n$ $\Longrightarrow C_n^n = \mathrm{E}$ e se ***n par*** $\sigma^n = \mathrm{E}$ $\Rightarrow$ $S_n^n = \mathrm{E}$

$\Longrightarrow S_n^{n+1} = S_n; S_n^{n+2} = S_n^2; \ldots$

$\Longrightarrow S_n^m = C_n^m$ se m par

Neste caso, por exemplo, como expressa-se o conjunto $\{S_6, S_6^2, S_6^3, S_6^4, S_6^5, S_6^6\}$?

$S_6^6 \to \mathrm{E}$

$C_6^2\sigma^2 = C_6^2 = C_3$

$C_6^3\sigma^3 = C_2\sigma = i$

$C_6^4\sigma^4 = C_6^4 = C_3^2$

$\Longrightarrow \{S_6, C_3, i, C_3^2, S_6^5, \mathrm{E}\}$

$\Downarrow$

contém C_3, C_3^2 e $\mathrm{E} \Rightarrow$ operações do eixo de rotação C_3

$\therefore$ se $\exists\ S_6 \Rightarrow \exists\ C_3$

$\boxed{\Longrightarrow \boldsymbol{n} \text{ par } \Rightarrow \exists\ \boldsymbol{S_n} \Rightarrow \exists\ \boldsymbol{C_{n/2}}}$

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Rotações impróprias

n aplicações sucessivas de S_n $\Longrightarrow$ $S_n^n = (C_n\sigma)\ldots(C_n\sigma) = C_n^n\sigma^n$ $\Longrightarrow C_n^n = \mathrm{E}$ e se ***n* ímpar** $\sigma^n = \sigma$ $\Rightarrow$ $S_n^n = \sigma\ (\neq \mathrm{E})$

$\Longrightarrow \sigma$ é um plano de simetria

e C_n é um eixo de simetria

$$\boxed{\Longrightarrow \boldsymbol{n}\ \textbf{ímpar}\ \Rightarrow \exists\, \boldsymbol{S_n} \Rightarrow \exists\, \boldsymbol{C_n}\ \textbf{e}\ \exists\, \boldsymbol{\sigma} \perp \boldsymbol{C_n}}$$

Neste caso, por exemplo, como expressa-se o conjunto $\{S_5, S_5^2, S_5^3, S_5^4, S_5^5, S_5^6, S_5^7, S_5^8, S_5^9, S_5^{10}\}$?

$$C_5\sigma \quad C_5^2 \quad C_5^3\sigma \quad C_5^4 \quad \sigma \quad C_5 \quad C_5^2\sigma \quad C_5^3 \quad C_5^4\sigma \quad \mathrm{E}$$

e $S_5^{11} = C_5\sigma = S_5$

$\Longrightarrow$ $S_5 \neq S_5^{10}$

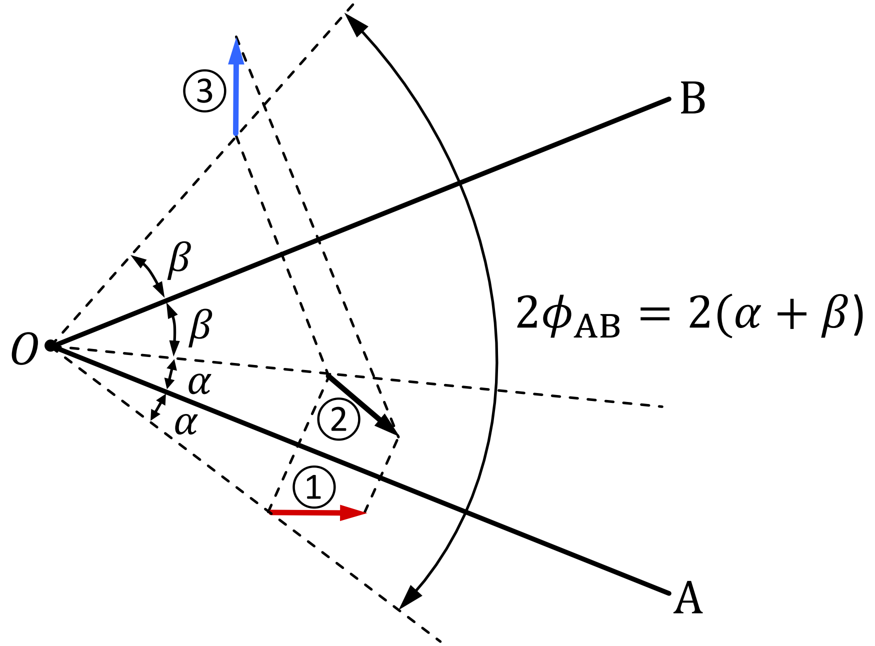
$$\boxed{\Longrightarrow \boldsymbol{n}\ \textbf{ímpar}\ \Rightarrow \boldsymbol{S_n}\ \textbf{gera}\ \boldsymbol{2n}\ \textbf{operações diferentes:}\ \boldsymbol{S_n}\ \textbf{até}\ \boldsymbol{S_n^{2n}} = \mathbf{E}}$$

$$\Longrightarrow S_n^{2n+1} = S_n;\ S_n^{2n+2} = S_n^2;\ \ldots$$

Relações Gerais entre Operações e Elementos de Simetria

Operações sucessivas (produto)

1. O produto de duas rotações próprias deve ser uma rotação própria.
2. O produto de duas reflexões nos planos A e B que se interseptam, formando um ângulo ϕ_{AB}, é equivalente a uma rotação de $2\phi_{\mathrm{AB}}$ em torno do eixo O definido pela intersecção de A com B:



Reflexão em $\mathrm{A} \Longrightarrow$ ① ⇨ ②
Reflexão em $\mathrm{B} \Longrightarrow$ ② ⇨ ③

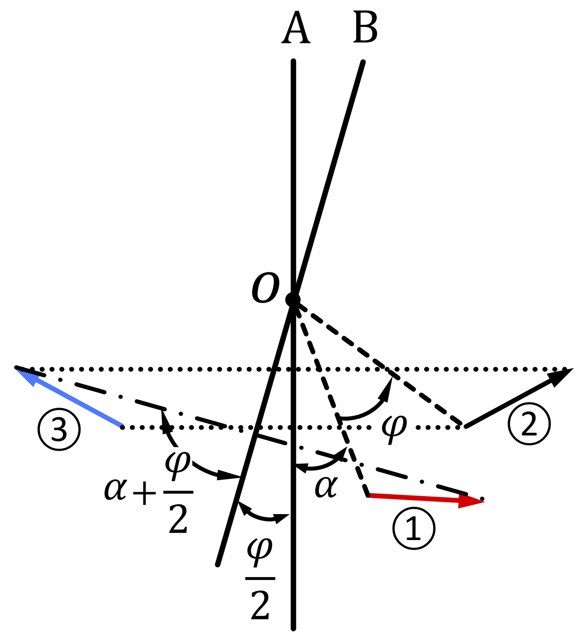
$\Longrightarrow$ rotação de $2\phi_{\mathrm{AB}} = 2(\alpha + \beta)$ em torno de $O \Longrightarrow$ ① ⇨ ③

$\Rightarrow$ duas reflexões produzindo uma rotação

Relações Gerais entre Operações e Elementos de Simetria

Operações sucessivas (produto)

3. O produto de uma rotação de um ângulo φ e uma reflexão em um plano A que contém o eixo de rotação O é uma reflexão em outro plano B, que contém o eixo de rotação O, e forma um ângulo de $\frac{\varphi}{2}$ com o plano A (metade do ângulo de rotação).



Rotação de φ em torno de O $\Longrightarrow$ ①⇨②

Reflexão em A (que contém O) $\Longrightarrow$ ②⇨③

$\Longrightarrow$ reflexão em B (que contém O e $\measuredangle\mathrm{AB} = \frac{\varphi}{2}$) $\Longrightarrow$ ① ⇨ ③

$\Rightarrow$ *rotação e reflexão produzindo uma reflexão*

Lucy V. C. Assali

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Relações Gerais entre Operações e Elementos de Simetria

Operações sucessivas (produto)

4. Uma rotação em torno de um eixo próprio de ordem par $(2n)$ e uma reflexão em relação a um plano perpendicular ao eixo em questão dá lugar a um centro de inversão $\Longrightarrow C_{2n}^{n}\sigma = \sigma C_{2n}^{n} = C_2\sigma = \sigma C_2 = i \;\Longrightarrow\; C_2 i = iC_2 = \sigma$.

Relações importantes

$\Longrightarrow n$ ímpar $\Longrightarrow$ $S_n^n = C_n^n\sigma^n = \sigma$

$\sigma^n = \sigma$

$i^n = i$

$\Longrightarrow n$ par $\Longrightarrow$ $\sigma^n = \mathrm{E}$ e $\exists\, S_n \Longrightarrow \exists\, C_{n/2}$

$i^n = \mathrm{E}$

$S_n^n = \mathrm{E}$

$$C_n^n = \mathrm{E};\; C_n^{n+1} = C_n;\; C_n^{n+2} = C_n^2$$

$$C_{2n}^{n}\sigma = \sigma C_{2n}^{n} = C_2\sigma = \sigma C_2 = i$$

$$iC_2 = C_2 i = \sigma$$

$$C_n\sigma = \sigma C_n = S_n$$

$$iC_n = S_n = C_n i$$

Quaisquer dois dos elementos de simetria σ_h, S_n, C_n $(n =$ par$)$ implicam no terceiro.

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Relações Gerais entre Operações e Elementos de Simetria

Comutação

Pares de operações que sempre comutam:

1. Todas rotações em torno do mesmo eixo;
2. Reflexões em planos perpendiculares entre si;
3. A inversão e qualquer reflexão ou rotação;
4. Duas rotações C_2 sobre eixos perpendiculares;
5. Rotação e reflexão num plano perpendicular ao eixo de rotação $\Longrightarrow$ resulta numa rotação imprópria.

Grupos pontuais cristalográficos (32)

Grupos de *rotações simples* $\Longrightarrow$ há um único eixo de rotação de ordem maior que a dos outros;
Grupos de *alta simetria* $\Longrightarrow$ há mais de um eixo de rotação de maior ordem;
Grupos das *moléculas lineares* $\Longrightarrow$ são inconsistentes com a simetria translacional dos sólidos e serão vistos separadamente.
Grupos das *moléculas de altíssima simetria* $\Longrightarrow$ são inconsistentes com a simetria translacional dos sólidos.

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Grupos Pontuais

- *Grupos de rotações simples (notação de Schoenflies)*

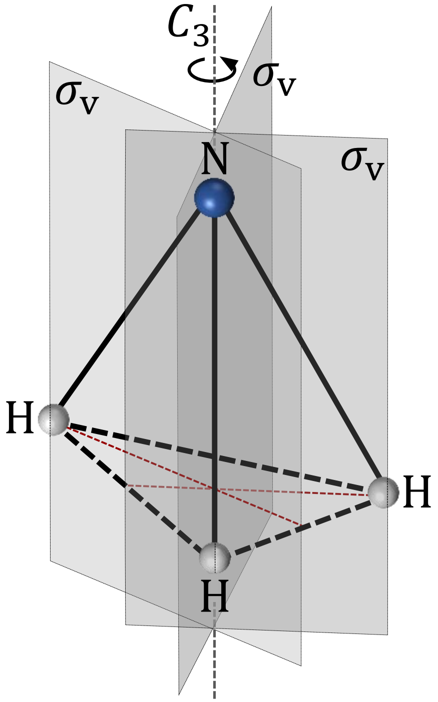
1. C_n $\Longrightarrow$ simetria consiste somente de rotações próprias C_n e são grupos *abelianos cíclicos* de ordem n. *Exemplo*: o grupo C_4 possui apenas os elementos $\{C_4, C_4^2 = C_2, C_4^3 = (C_4)^{-1}, C_4^4 = \mathrm{E}\}$. Pode-se provar que as possíveis simetrias rotacionais que são compatíveis com a simetria translacional das redes cristalinas são as rotações de $2\pi/n$, $n = 1,2,3,4,6 \Rightarrow C_1, C_2, C_3, C_4$ e C_6. Grupos de ordem n.
2. $C_{n\mathrm{v}}$ $\Longrightarrow$ eixo C_n e n planos de reflexão σ_{v} que contêm o eixo C_n ("verticais" $\Rightarrow$ paralelos ao eixo rotacional da molé-cula) $\Rightarrow$ $C_{2\mathrm{v}}, C_{3\mathrm{v}}, C_{4\mathrm{v}}$ e $C_{6\mathrm{v}}$. Grupos de ordem $2n$.
3. C_{nh} $\Longrightarrow$ eixo C_n e um plano de reflexão σ_h (plano horizontal) no plano da molécula $\Rightarrow C_{1h}, C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}$ *e* C_{6h}. O grupo $C_{1h} = \{E, \sigma_h\}$ é também conhecido como grupo C_s. Os grupos C_{nh} *com* n *par* incluem a simetria de inversão (operação i). Grupos de ordem $2n$.
4. S_n $\Longrightarrow$ eixo de rotação imprópria de ordem n par, pois se n ímpar, são idênticos aos $C_{nh} \Rightarrow$ S_2, S_4 e S_6, cada qual incluindo o grupo $C_{n/2}$ como subgrupo. O grupo $S_2 = \{E, i\}$ é também conhecido como grupo C_i. Grupos de ordem n.
5. D_n $\Longrightarrow$ n eixos duplos (ou de ordem 2) perpendiculares ao eixo principal C_n. *Exemplo*: $n = 2$ $\Rightarrow$ eixo principal é C_2, mas como o grupo é D_2, existem 2 eixos C_2 que são perpendiculares ao eixo principal $\Longrightarrow$ grupo D_2 tem três eixos C_2 mutuamente ortogonais. Grupos de ordem $2n$.
6. D_{nd} $\Longrightarrow$ elementos de D_n mais planos diagonais de reflexão σ_d, bissetores dos eixos duplos perpendiculares ao eixo principal de rotação de maior ordem. Grupos de ordem $4n$.
7. D_{nh} $\Longrightarrow$ elementos de D_n mais a reflexão num plano horizontal $\sigma_h \Rightarrow D_{nh}$ possui o dobro de elementos de simetria em relação a D_n. Grupos de ordem $4n$.

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

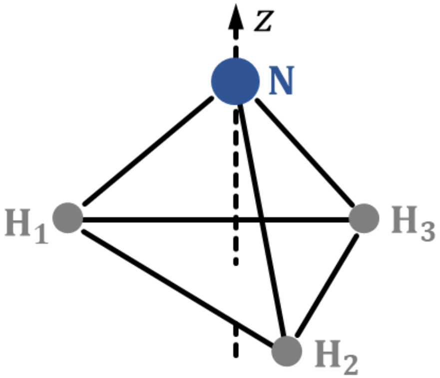
Grupos Pontuais

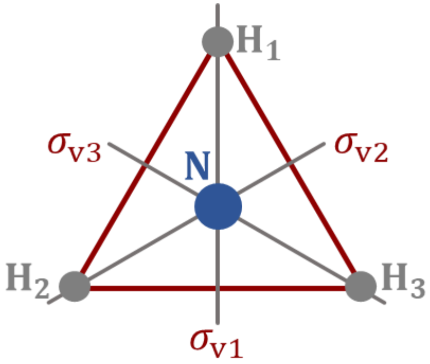
- *Grupos de rotações simples (notação de Schoenflies)*

Quando há um eixo de rotação C_n e um plano de reflexão contendo-o, devem haver n planos de reflexão, formando ângulos de $\frac{2\pi}{2n}$ entre si e que contêm o eixo C_n. *Exemplo:* amônia $\Longrightarrow$ tem um eixo de rotação C_3 e 3 planos σ_{v}, formando ângulos de $\pi/3$ entre si, e que contêm o eixo C_3.



- Rotação própria de $2\pi/3$ em torno de z $\Longrightarrow$ C_3
- Rotação própria de $2(2\pi/3)$ em torno de z $\Longrightarrow C_3^2$
- Rotação própria de $3(2\pi/3)$ em torno de z $\Longrightarrow C_3^3 = \mathrm{E}$
- 3 Reflexões σ_{v} em planos que contém o eixo z (planos paralelos ao eixo C_3) com $\measuredangle = 2\pi/3$
- Sem eixos impróprios

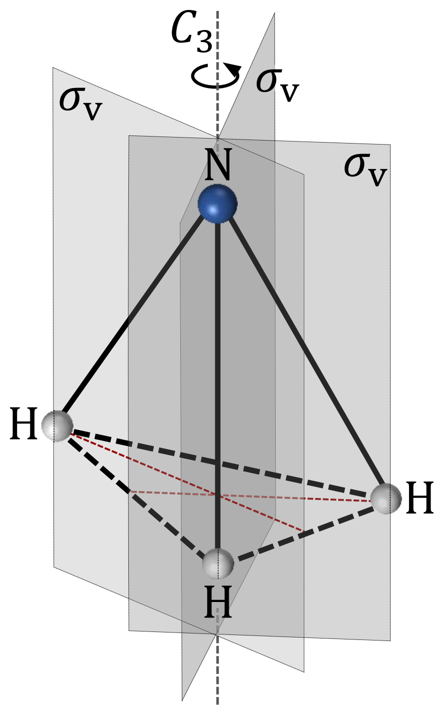




Grupo ?

Teoria de grupos: exercício 1

Molécula de amônia ⟹



1. Encontrar o grupo da molécula;
2. Encontrar a ordem do grupo;
3. Confeccionar a tabela de multiplicação;
4. Esse grupo é cíclico? Explicar!
5. Esse grupo é abeliano? Explicar!
6. Encontrar as classes do grupo.

Entregar até terça-feira dia 11 de abril

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Grupos Pontuais

- *Grupos de alta simetria (notação de Schoenflies)*

1. T $\Longrightarrow$ 12 rotações próprias que levam um tetraedro regular em si. É o menor dentre os grupos de alta simetria.
2. T_d $\Longrightarrow$ elementos de T mais reflexões $\Longrightarrow$ 24 operações. *Exemplo*: $\mathrm{CH_4}$.
3. T_h $\Longrightarrow$ elementos de T mais reflexões e centro de inversão, resultando em 24 operações $\Rightarrow$ formado pelo produto direto do grupo T com o grupo C_i.
4. O $\Longrightarrow$ 24 rotações próprias que levam um cubo ou um octaedro regular em si.
5. O_h $\Longrightarrow$ elementos de O mais reflexões e centro de inversão, resultando em 48 operações $\Rightarrow$ formado pelo produto direto do grupo O com o grupo C_i. É o maior dentre os grupos pontuais.

Obs.: preste atenção que alguns dos grupos pontuais compartilham seus nomes com operações de simetria.

- *Grupos das moléculas lineares (notação de Schoenflies)*

1. $C_{\infty \mathrm{v}}$ $\Longrightarrow$ completa simetria rotacional sobre o eixo molecular e simetria de reflexão em qualquer plano vertical contendo o eixo molecular.
2. $D_{\infty h}$ $\Longrightarrow$ tem os elementos de $C_{\infty \mathrm{v}}$ mais um plano de reflexão horizontal e eixos C_2 contidos nele, que passam pelo centro da molécula (inversão). *Exemplos*: moléculas diatômicas homonucleares e moléculas lineares centro-simétricas.

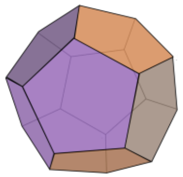
Lucy V. C. Assali

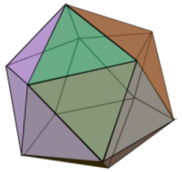
Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Grupos Pontuais

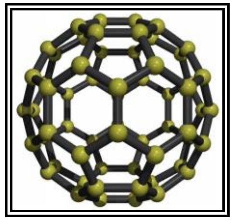
➢ *Grupos das moléculas de altíssima simetria (notação de Schoenflies)*

I_h $\Longrightarrow$ grupo de um *dodecaedro* (12 faces que são pentágonos regulares e 20 vértices) ou o de um *icosaedro* (20 faces triangulares e 12 vértices) ⇒ grupo de altíssima simetria ⟹ 120 operações com os seguintes eixos e planos:





- 6 eixos S_{10}, cada qual com as operações S_{10}, $S_{10}^2 = C_5$, S_{10}^3, $S_{10}^4 = C_5^2$, $S_{10}^5 = S_2 = i$, $S_{10}^6 = C_5^3$, S_{10}^7, $S_{10}^8 = C_5^4$, S_{10}^9 e E.
- 10 eixos S_6, cada qual com as operações S_6, $S_6^2 = C_3$, $S_6^3 = S_2 = i$, $S_6^4 = C_3^2$, S_6^5 e E, onde E e i já contidas nas operações dos eixos S_{10}.
- 6 eixos C_5 colineares com os eixos S_{10} e as operações são C_5, C_5^2, C_5^3, C_5^4, que já estão contidas nas operações do eixo S_{10}.
- 10 eixos C_3 colineares com os eixos S_6 e as operações C_3 e C_3^2 já estão contidas nas operações de S_6.
- 15 eixos C_2.
- 15 planos σ que contêm dois eixos C_2 e dois eixos C_5.



Recentemente, ficou comprovada a existência de uma molécula formada por 60 átomos de carbono, o C_{60}, onde átomos de carbono estão dispostos numa estrutura de gaiola quase esférica, com 12 pentágonos e 20 hexágonos.

Seguiram-se descobertas de outras moléculas com menor ou maior número de átomos de carbono, incluindo o C_{20}, onde os átomos de carbono se localizam nos vértices de um dodecaedro composto de 12 pentágonos regulares. Esta família de moléculas é denominada genericamente de *fullerenos*. O C_{60} e o C_{20} possuem a simetria do grupo I_h, sendo exemplos de sistemas que apresentam as simetrias mais altas conhecidas na natureza.

Teoria de grupos: simetria e grupos de simetria

Classificação dos 32 grupos pontuais cristalográficos tridimensionais de acordo com o sistema cristalino

Número	Símbolo de Schoenflies	Símbolo Internacional	Sistema cristalino
1	C_1	1	Triclínico
2	$C_i\ (S_2)$	$\bar{1}$	
3	$C_s\ (C_{1h})$	m	Monoclínico
4	C_2	2	
5	C_{2h}	$2/m$	
6	C_{2v}	mm	Ortorômbico
7	D_2	222	
8	D_{2h}	mmm	
9	C_4	4	Tetragonal
10	S_4	$\bar{4}$	
11	C_{4h}	$4/m$	
12	C_{4v}	$4mm$	
13	D_{2d}	$\bar{4}2m$	
14	D_4	422	
15	D_{4h}	$4/mmm$	
16	C_3	3	Romboédrico
17	S_6	$\bar{3}$	
18	C_{3v}	$3m$	
19	D_3	32	
20	D_{3d}	$\bar{3}m$	
21	C_{3h}	$\bar{6}$	Hexagonal
22	C_6	6	
23	C_{6h}	$6/m$	
24	D_{3h}	$\bar{6}m2$	
25	C_{6v}	$6mm$	
26	D_6	622	
27	D_{6h}	$6/mmm$	
28	T	23	Cúbico
29	T_h	$m3$	
30	T_d	$\bar{4}3m$	
31	O	432	
32	O_h	$m3m$	

$\Rightarrow$ Redes de Bravais

Lucy V.C. Assali

Sólidos ideais: rede e vetores de translação

Uma rede cristalina é definida, primeiramente, por um arranjo periódico de pontos, ou seja, uma rede de pontos abstracta, dada por três vetores de translação *primitivos* $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, de modo que o arranjo de pontos no espaço pareça o mesmo, tanto visto de uma posição $\vec{r}$ como de uma posição $\vec{r}'$, dadas por

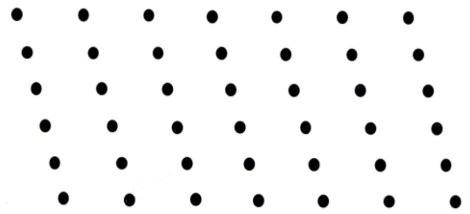
$$\boxed{\vec{r}' - \vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \text{ com } n_1, n_2, n_3 = \text{n}^{\underline{os}} \text{ inteiros}}$$

$$\boxed{\vec{r}' - \vec{r} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 = \vec{T}}$$

$$\boxed{\vec{T} \Longrightarrow \text{ vetores de translação da rede}}$$

$$\boxed{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \Longrightarrow \text{vetores primitivos de translação}}$$

→ o conjunto de pontos $\vec{r}'$ define a rede cristalina



Rede = arranjo periódico regular de pontos no espaço

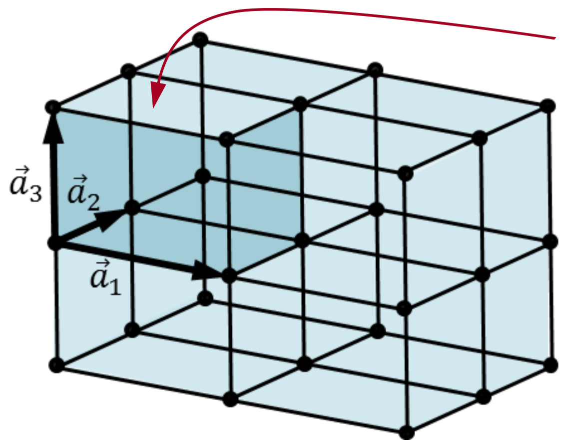
Lucy V.C. Assali

Sólidos ideais: rede e vetores de translação

A definição dos vetores primitivos de translação $\{\vec{a}_i\}$ garante que não existe nenhuma célula com *volume* (*área*) menor que o definido por estes vetores, que poderia servir como bloco elementar para a construção da rede.

Em três (duas) dimensões os vetores de translação primitivos formam um paralelepípedo (paralelograma), chamado **célula primitiva**. Uma translação da rede é definida como uma operação que desloca o paralelepípedo (paralelograma) paralelamente a si mesmo, através dos vetores de translação da rede, preenchendo todo o espaço:

$$\left.\begin{array}{l} 2\mathrm{D} \Rightarrow \vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 \\ 3\mathrm{D} \Rightarrow \vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \end{array}\right\} \quad n_1, n_2, n_3 = \text{n}^{\text{os}} \text{ inteiros}$$

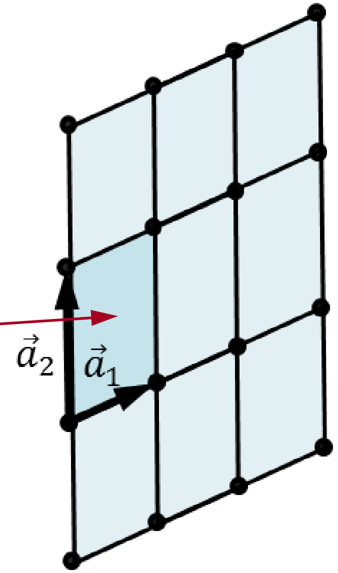


O volume da célula primitiva é definido pelos vetores primitivos:

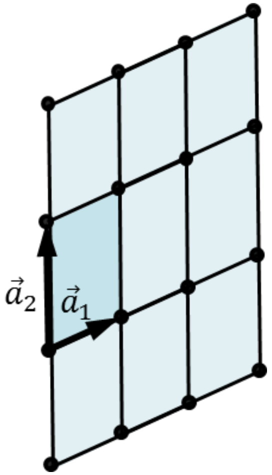
$$V = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3|$$

A área da célula primitiva é definida pelos vetores primitivos:

$$A = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$$

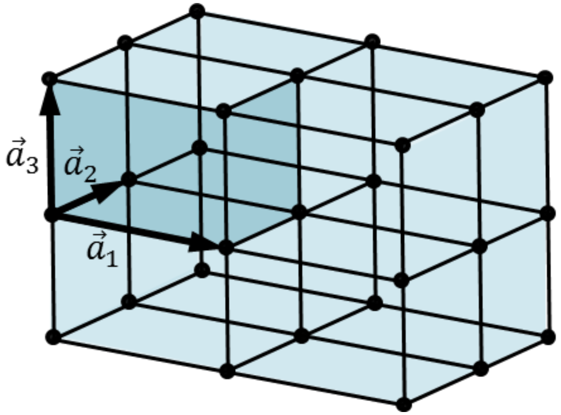


Sólidos ideais: rede e vetores de translação



***Contando os pontos da rede*:** Em duas dimensões, a célula primitiva é um paralelogramo e cada uma das células primitivas que podemos obter contém 4 vértices e cada vértice é compartilhado com 4 células primitivas vizinhas. Portanto, o número de pontos da rede na célula primitiva é $1/4 \times 4 = 1$.

***Contando os pontos da rede*:** Em três dimensões, a célula primitiva é um paralelepípedo que contém 8 vértices e cada vértice é compartilhado com 8 células primitivas vizinhas. Portanto, o número de pontos da rede na célula primitiva é $1/8 \times 8 = 1$.



Sólidos ideais: rede e vetores de translação

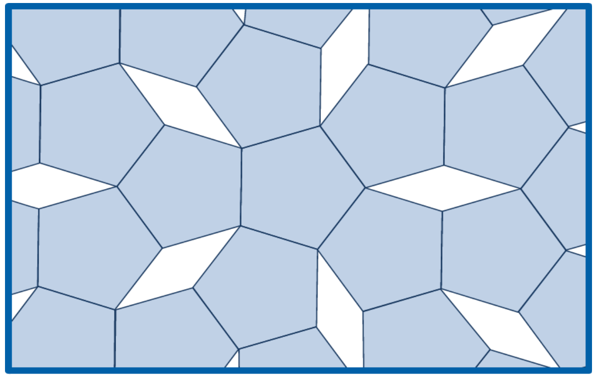
As redes matemáticas definidas pelos vetores

$$\left.\begin{array}{l} 2\text{D} \Rightarrow \vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 \\ 3\text{D} \Rightarrow \vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \end{array}\right\} n_1, n_2, n_3 = \text{n}^{\text{os}} \text{ inteiros}$$

são chamadas ***Redes de Bravais***.

Além das operações de simetria de translação, que transformam as redes nelas mesmas, existem as operações de simetria pontuais: rotações, inversões e reflexões. Em torno de certos pontos especiais, no interior da célula primitiva, é possível a aplicação de operações de simetria pontuais que transformam a rede de pontos nela mesma.

Obrigando que essa simetria rotacional esteja associada com a simetria translacional da rede, obtemos que as possíveis rotações que são compatíveis com as translações e passíveis, portanto, de pertencer às redes cristalinas, são as rotações de $2\pi/n,\ n = 1{,}2{,}3{,}4{,}6$. Elas dão origem a figuras geométricas com simetrias de 3ª ordem (triângulos), 4ª ordem (quadrados e retângulos) e de 6ª ordem (hexágonos). Simetrias de 5ª e 7ª ordens não podem ser combinadas com a periodicidade translacional da rede.



Um eixo de simetria de 5ª ordem não pode existir em uma rede porque não é possível preencher todo o espaço da rede mediante uma arrumação contínua de pentágonos

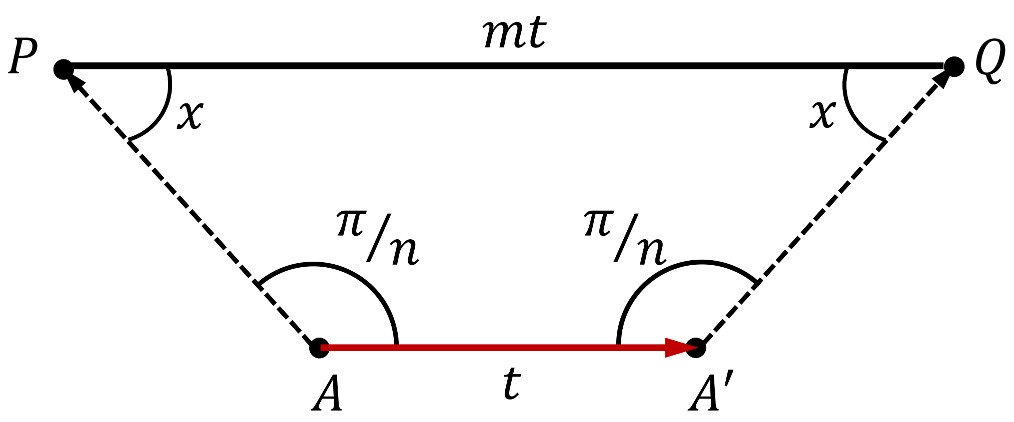
Lucy V. C. Assali

Sólidos ideais: rede e simetria pontual

Sejam:

A e $A' \Rightarrow$ pontos da rede separados por um vetor de translação $\vec{T}$ $\left(|\vec{T}| = t\right)$

R e $R^{-1} \Rightarrow$ rotações do vetor $\vec{T}$ de um ângulo $\frac{\pi}{n}$ ao redor de A e A', levando aos pontos *da rede* P e Q $\Longrightarrow \overline{PQ} = mt, m =$ número inteiro



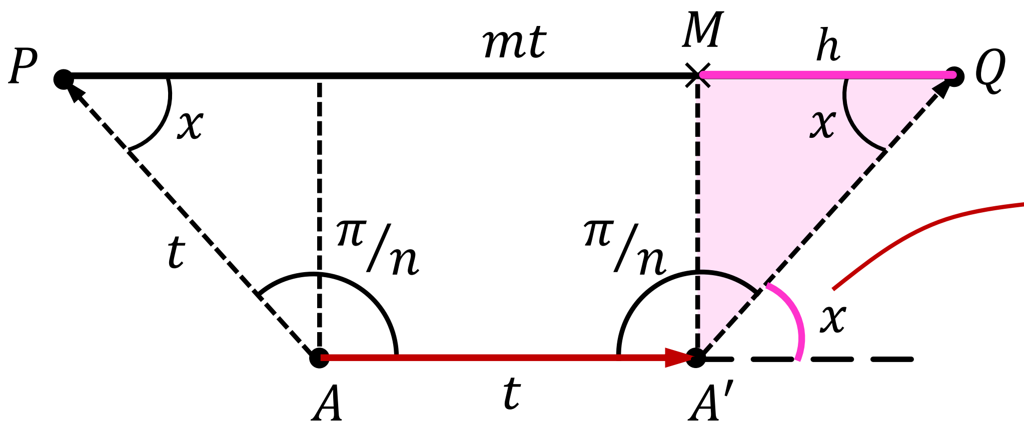
$$\sum \measuredangle = 2\pi = 2x + 2\left(\frac{\pi}{n}\right) \Longrightarrow \boxed{x = \pi - \frac{\pi}{n}}$$

Sólidos ideais: rede e simetria pontual

$$\overline{PQ} - \overline{AA'} = mt - t = 2h \longrightarrow h = \frac{t(m-1)}{2}$$

$$\blacktriangle\ MQA' \;\rightarrow\; \cos x = \frac{h}{t} = \frac{(m-1)}{2} = \cos\left(\pi - \frac{\pi}{n}\right) = -\cos\left(\frac{\pi}{n}\right) \Longrightarrow \boxed{\cos\left(\frac{\pi}{n}\right) = \frac{(1-m)}{2}}$$

$$-1 \leq \frac{(1-m)}{2} \leq 1 \;\Rightarrow -1 \leq m \leq 3 \;\Rightarrow m = \{-1,0,1,2,3\} \therefore \cos\left(\frac{\pi}{n}\right) = 1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, -1$$



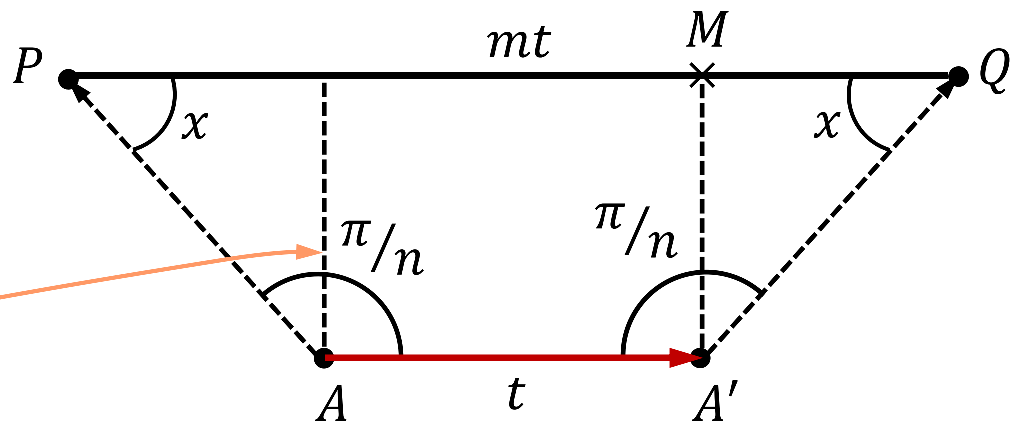
$$x = \pi - \frac{\pi}{n}$$

Sólidos ideais: rede e simetria pontual

$$\overline{PQ} - \overline{AA'} = mt - t = 2h \longrightarrow h = \frac{t(m-1)}{2}$$

$$\blacktriangle\ MQA' \rightarrow \cos x = \frac{h}{t} = \frac{(m-1)}{2} = \cos\left(\pi - \frac{\pi}{n}\right) = -\cos\left(\frac{\pi}{n}\right) \Longrightarrow \boxed{\cos\left(\frac{\pi}{n}\right) = \frac{(1-m)}{2}}$$

$$-1 \leq \frac{(1-m)}{2} \leq 1 \ \Rightarrow -1 \leq m \leq 3 \ \Rightarrow m = \{-1,0,1,2,3\} \therefore \cos\left(\frac{\pi}{n}\right) = 1, \frac{1}{2}, 0, -\frac{1}{2}, -1$$



$$\frac{\pi}{n} = \frac{2\pi}{1}, \frac{2\pi}{6}, \frac{2\pi}{4}, \frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{2}$$

$\Rightarrow$ só rotações de $2\pi/n$ com $n = 1,2,3,4,6$ são compatíveis com as operações de translação da rede.