Universidade de São Paulo

Instituto de Química de São Carlos

Departamento de Química e Física Molecular

Simetria Externa

SQM 409 - Cristalografia

Prof. Dr. Maria Teresa do Prado Gambardella

1. **Simetria Externa**

O conceito de simetria surge naturalmente associado a vocábulos tais como: equilíbrio, proporção, padrão, regularidade, harmonia, beleza, ordem e perfeição. Podemos encontrar simetrias sob as mais diversas formas e em diferentes locais, em objetos vivos ou inanimados.

A palavra simetria vem do grego e quer dizer justa proporção.

Podemos dizer que é a correspondência, em grandeza, forma e posição relativa de partes situadas em lados opostos de um plano médio, ou, ainda, que se acham distribuídas em volta de um centro ou um eixo; harmonia resultante de certas combinações e proporções regulares. A simetria externa é, portanto, resultante de certas combinações e proporções regulares relacionadas por um **plano**, um **ponto** ou um **eixo**.

É importante lembrar que qualquer que seja o operador de simetria (plano, ponto ou eixo) ele deve passar pelo centro geométrico do objeto. Os pontos relacionados pela operação de simetria recebem o nome de **identipontos**.

1.1 Simetria segundo um plano

A simetria segundo um plano acontece quando o objeto pode ser dividido por um plano imaginário em duas metades que são imagem especulares, ou, em outras palavras qualquer ponto de uma metade se repete do lado oposto do plano em igual distância.

O operador de simetria é denominado **plano de simetria** e representado pela letra ***m*** (do inglês mirror).

Tomemos como exemplo um retângulo. Podemos traçar quatro planos que dividem o retângulo em metades quantitativamente iguais, Figura 1.

Destes quatro planos apenas dois, os planos 3 e 4, são planos de simetria. Como comprovar esta afirmação?

Usemos o conceito de que as metades geradas devem ser imagem especulares uma da outra. Pegando uma das metades obtidas pelos planos 1 e 2 e encostando em um espelho veríamos uma imagem diferente do retângulo (Figura 2a), já com os planos 3 ou 4 a imagem gerada seria a do retângulo original (Figura 2b).

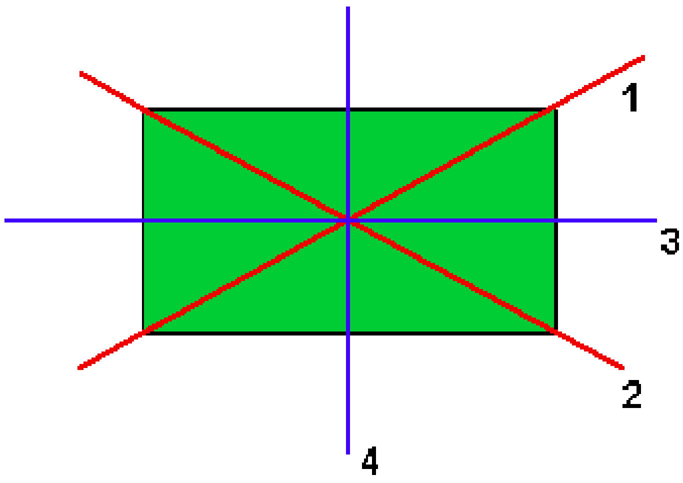


Figura 1. Retângulo mostrando 4 planos que o dividem em partes iguais quantitativamente.

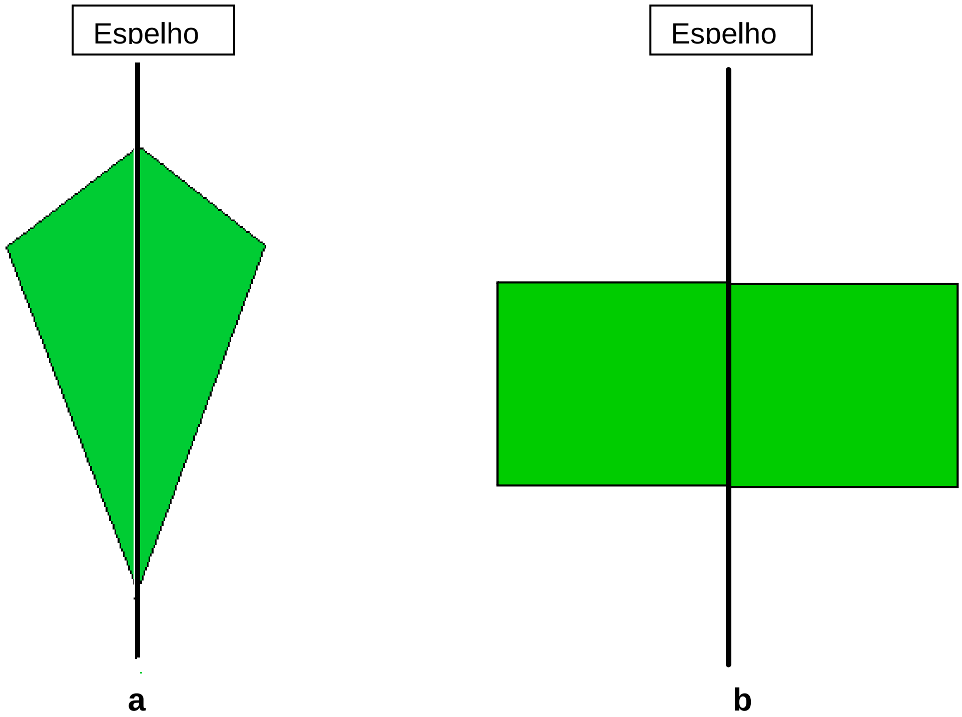
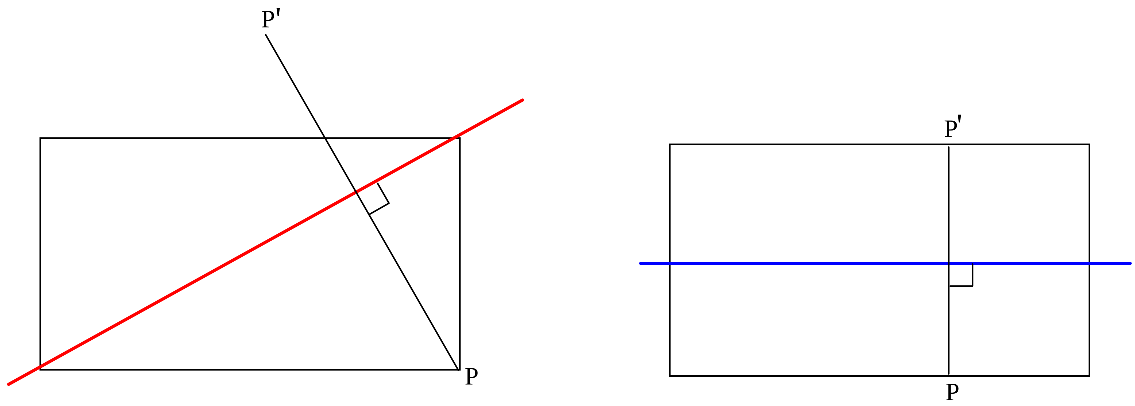


Figura 2. Imagens geradas através de um espelho a) usando a metade obtida dos planos 1 e 2, b) usando a metade obtida dos planos 3 e 4.

Usemos agora o conceito de que qualquer ponto de uma metade se repete do lado oposto do plano em igual distância. Isto apenas é verdade para o caso dos planos 3 e 4 (Figura 3).



a **b**

Figura 3 Repetição do ponto P através da perpendicular ao plano: a) pontos P e P´ não são equivalentes, b) pontos P e P´ são equivalentes.

Podemos lançar aqui uma pergunta: e a figura geométrica fosse um quadrado? A resposta é simples, como no quadrado os quatro lados são iguais, os quatro planos traçados seriam planos de simetria.

Estes exemplos nos mostram que um objeto pode apresentar mais de um plano de simetria. Muitos objetos apresentam mais de um plano de simetria. Uma esfera perfeita possui um número infinito de plano de simetria pelo fato de que qualquer plano que atravesse o seu centro, independente da orientação, a dividirá em metades “idênticas”. O mesmo vale para um círculo ou um cilindro.

1.2 Simetria segundo um ponto

Um objeto possui simetria segundo um ponto, se eqüidistante deste ponto, em direções opostas, motivos idênticos são encontrados.

Este ponto necessariamente coincide com o centro geométrico do objeto e é chamado **centro de simetria** (ou centro de inversão) representado pela letra ***i.***

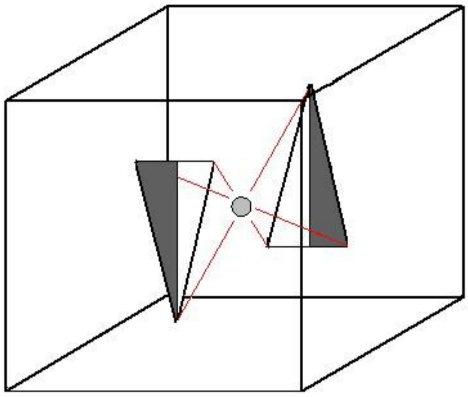
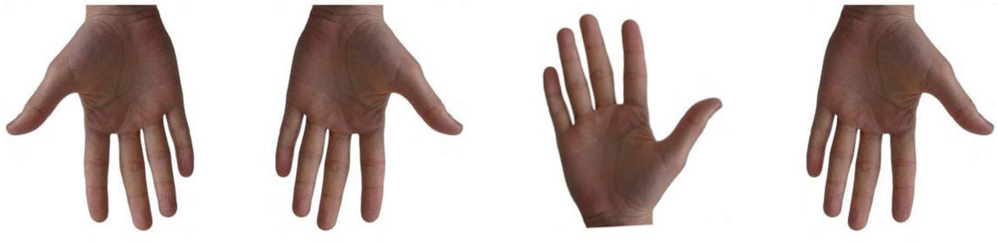


Figura 4. Exemplo de centro de simetria.

Observação: Os dois elementos de simetria apresentados, plano de simetria e centro de simetria, geram identipontos não superponíveis, enantiomeros. O objeto e a sua imagem são denominados pares enantiomorfo.

A Figura 5 mostra a simetria gerada a partir da mão direita usando um plano de simetria e um centro de simetria. Nos dois casos a imagem gerada corresponde a mão esquerda.



(a) (b)

Figura 5. Par enantiomorfo (a) plano de simetria, (b) centro de simetria.

As moléculas quirais podem ser um exemplo de par enantiomorfo que pode ser obtido através de um plano de simetria. A Alanina é um exemplo de molécula quiral, suas duas formas espelhadas são chamadas enatiomeros (Figura 6).

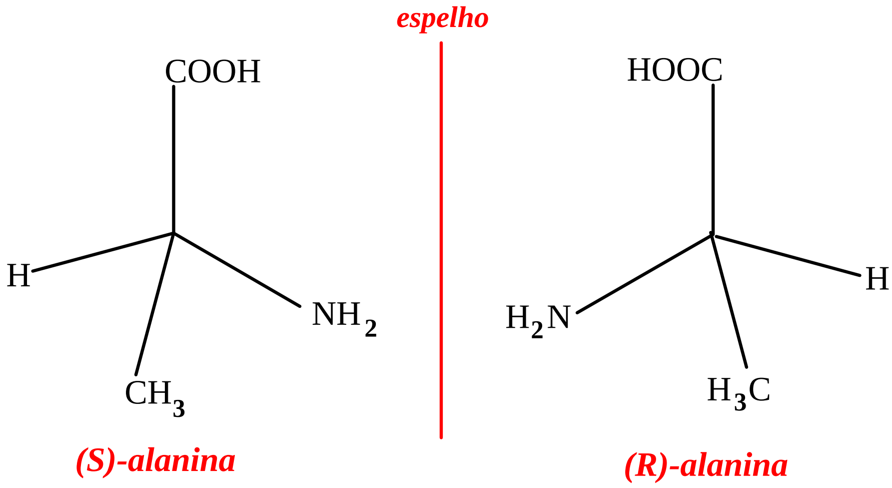


Figura 6. Formas S e R da alanina.

1.3 Simetria segundo um eixo

O eixo de simetria é uma linha imaginária que passa pelo centro geométrico do objeto e os motivos se repetem através de giros em torno desta linha, tantas vezes quanto necessário até completar 360^o.

Sendo ***n*** a **ordem do eixo** e $\boldsymbol{\theta}$ o **ângulo de giro**, se a operação de simetria se repete até completar 360^o, então:

$$\theta = 360^o/\mathbf{n}$$

1.3.1 Eixos de rotação próprios

Os eixos de rotação próprios são aqueles onde a repetição se dá apenas pena rotação e os identipontos gerados são superponíveis.

Na Tabela 1 temos os valores de n, θ e o número de identipontos gerado por cada eixo de simetria e na Figura 7 as operações de simetria.

Tabela 1. Valores de n, θ *e número de identipontos*

n	$\boldsymbol{\theta}$	identipontos
1	360^0	1
2	180^0	2
3	120^0	3
4	90^0	4
6	60^0	6

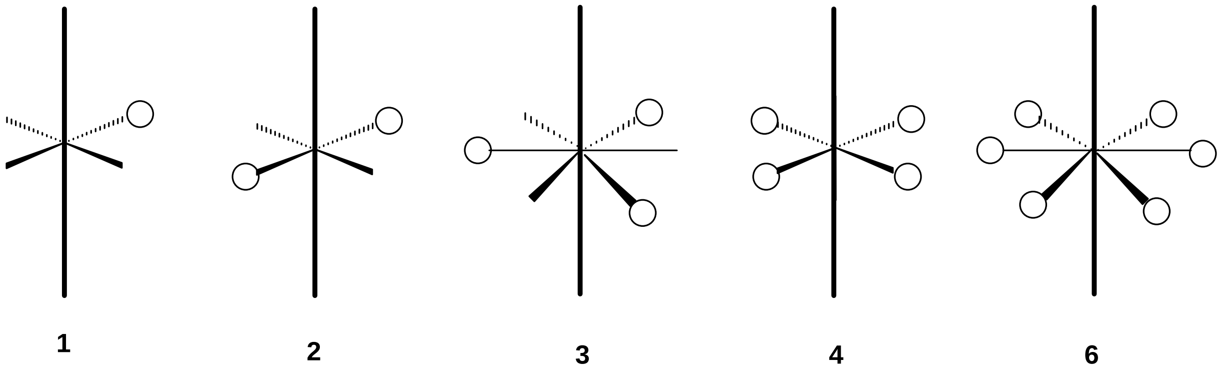


Figura 7. Eixos de rotação próprios.

Exemplos para os eixos de rotação 1, 2, 3, 4 e 6 são mostrados na Figura 8.

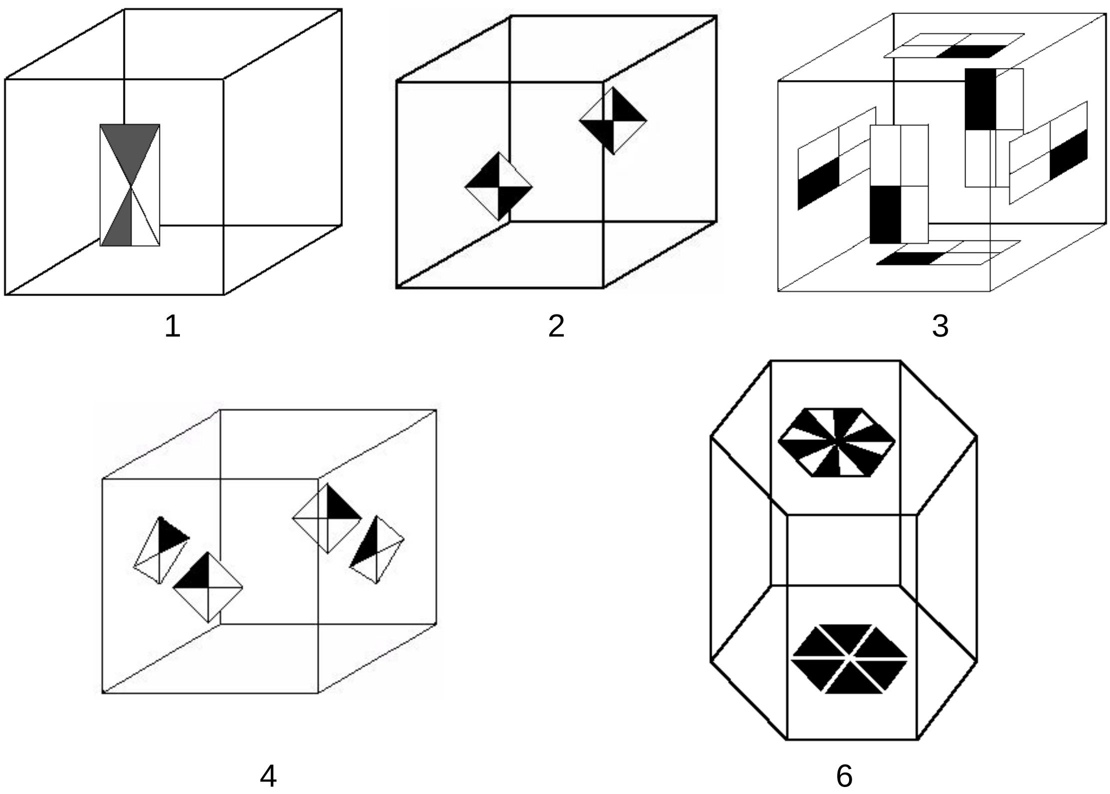


Figura 8. Exemplos de eixos de rotação próprios.

Na Tabela 1 não aparece eixo de simetria de ordem 5 nem de ordem superior a 6. Temos então duas perguntas:

- Na natureza existem eixos de ordem 5 e superiores a 6?
- Na cristalografia existem eixos de ordem 5 e superiores a 6?

A resposta para a primeira pergunta é sim, podemos pensar em uma estrela de 5 pontas, num pentágono (figura geométrica de 5 lados), etc.

A resposta para a segunda pergunta é não.

Para entender porque não vamos recordar a definição de cristal: um **sólido homogêneo** que possui **ordem interna tridimensional** que, sob condições favoráveis, pode manifestar-se externamente por superfícies limitantes, planas e lisas.

Para garantir o sólido homogêneo com ordem tridimensional apenas os eixos de ordem 1, 2, 3, 4 e 6 são possíveis. O ângulo interno do pentágono regular, 108^0, não satisfaz estas condições, veja a Figura 9. O mesmo vale para as das figuras geométricas com mais de seis lados. Portanto, eixos de ordem 5 ou superior a 6 não são possíveis em um cristal.

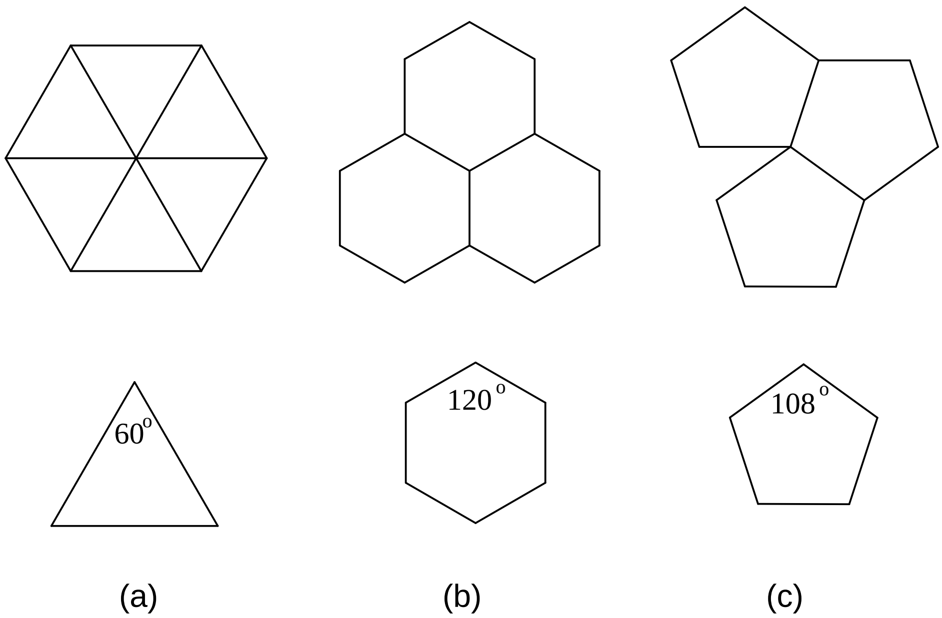


Figura 9. Arranjo de figuras geométricas com eixo de rotação perpendicular a página: (a) triângulos, (b) pentágonos, (c) hexágonos.

1.3.2 Eixos de rotação impróprios

Os eixos de rotação impróprios são aqueles onde a repetição se dá não apenas pela rotação e os identipontos gerados não são superponíveis, ou seja, geram pares enantiomorfos.

Eixos de rotoinversão

Os eixos de roto-inversão combinam a rotação com uma inversão e a operação de simetria é uma rotação seguida de inversão (Figura 9).

São representados por $\bar{n}$.

Observando as simetrias mostradas na Figura 10, podemos ver que:

- embora a inversão seja uma das etapas da operação de simetria, nos operadores de ordem impar a inversão aparece na simetria final;

- a simetria gerada pelo eixo de rotoinversão de ordem 1 é a mesma da gerada pelo centro de simetria;

- a simetria gerada pelo eixo de rotoinversão de ordem 2 é a mesma da gerada pelo plano de simetria.

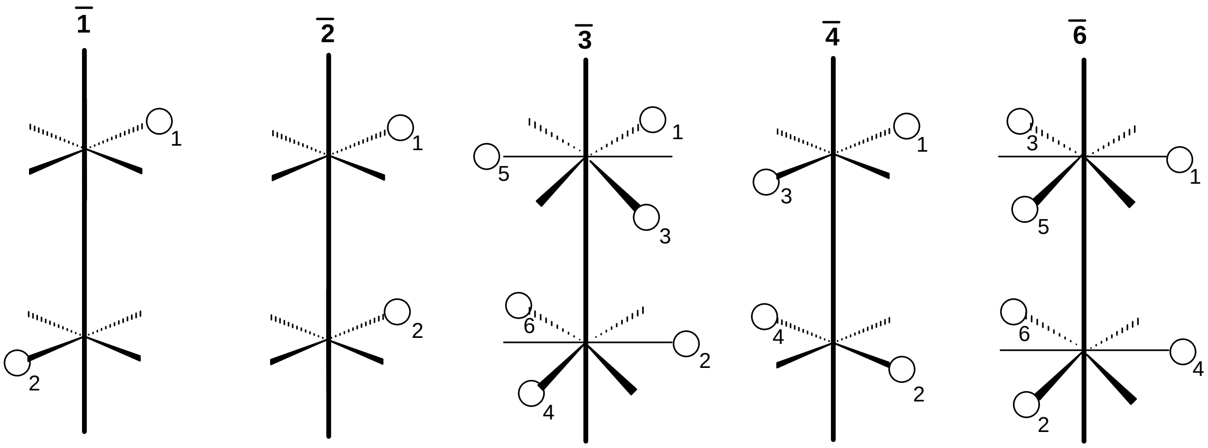
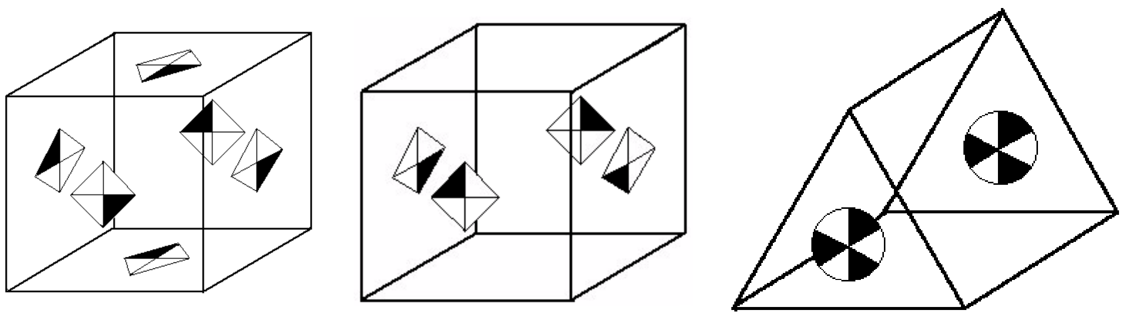


Figura 10. Eixos de rotoinversão.

Exemplos para os eixos de rotoinversão são mostrados na Figura 11.



$\bar{3}$ $\bar{4}$ $\bar{6}$

Figura 12. Exemplos de simetria de rotoinversão.

Eixos de rotoreflexão

Os eixos de rotoreflexão combinam a rotação com uma reflexão e a operação de simetria é uma rotação seguida de reflexão paralela ao eixo (Figura 12).

São representados por $\tilde{n}$.

Observando a Figura 12 vemos que existe equivalência entre as simetrias geradas pelos eixos de rotoinversão e rotoreflexão não surgindo nenhuma simetria nova.

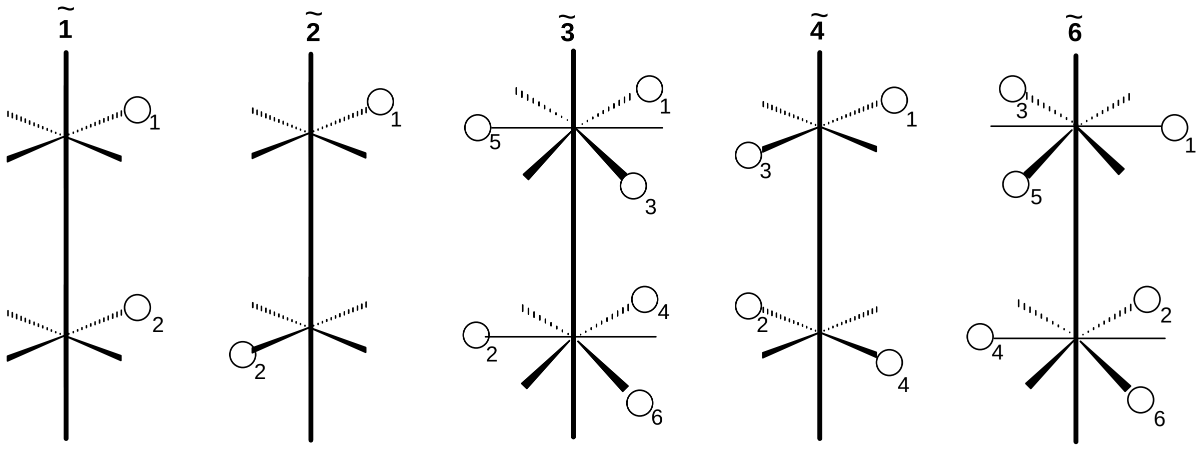


Figura 12. Eixos de rotoreflexão.