Universidade de São Paulo

Instituto de Química de São Carlos

Departamento de Química e Física Molecular

Projeção Estereográfica

e

Notação de Schoenflies

SQM 409 - Cristalografia

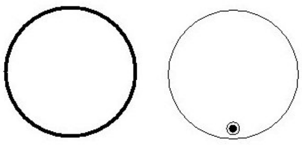
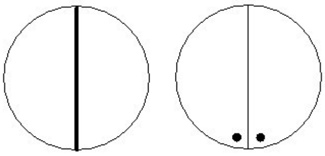
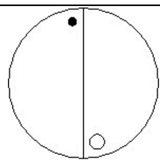
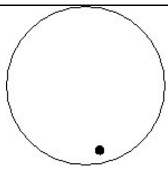
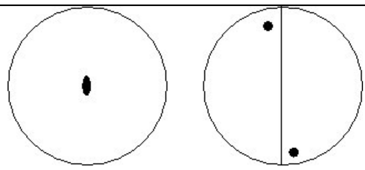
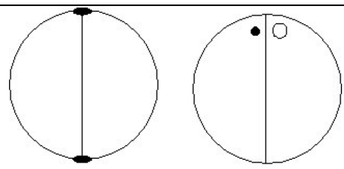
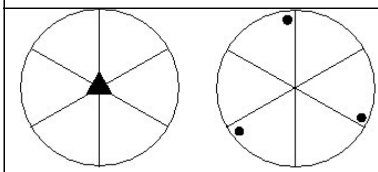
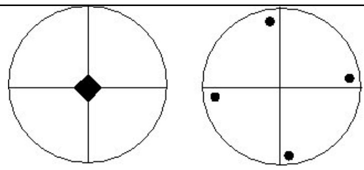
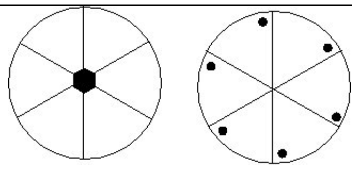
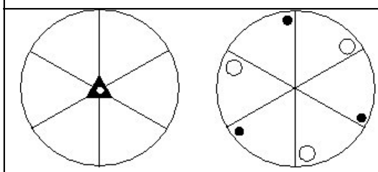
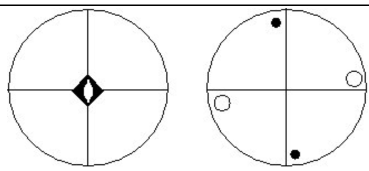
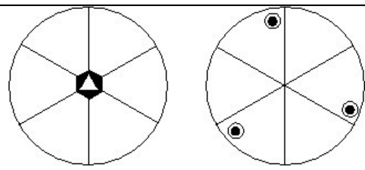
Prof. Dr. Maria Teresa do Prado Gambardella

1. Projeção Estereográfica

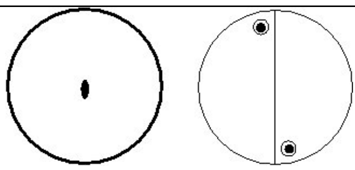
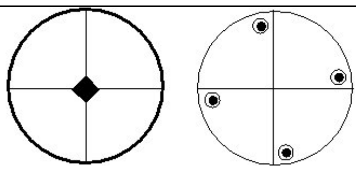
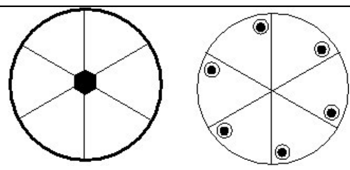
A projeção estereográfica é um método prático de representar, no plano, elementos planares e lineares situados no espaço, com preservação dos ângulos e das suas relações angulares.

Podemos usar a projeção estereográfica para representar a relação entre os elementos de simetria e os identipontos para os 32 grupos pontuais.

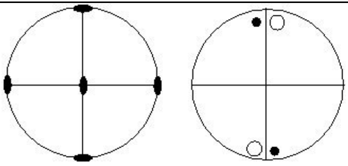
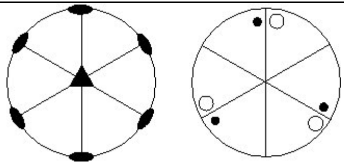
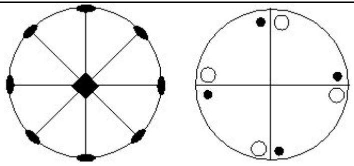
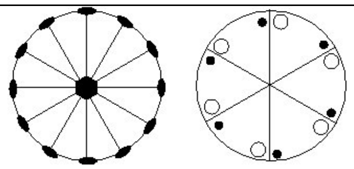
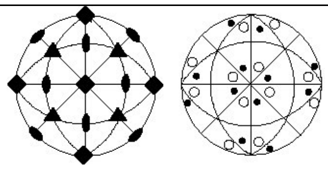
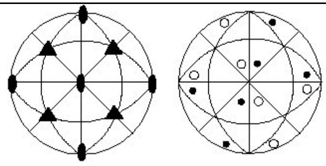
Os 10 elementos básicos de simetria:

 m	 m	 $\bar{1}$
 1	 2	 2
 3	 4	 6
 $\bar{3}$	 $\bar{4}$	 $\bar{6}$

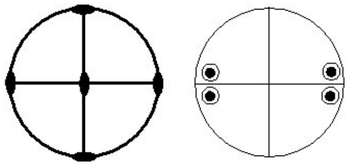
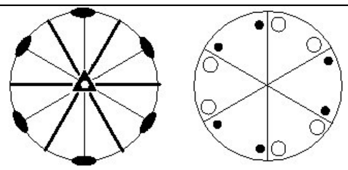
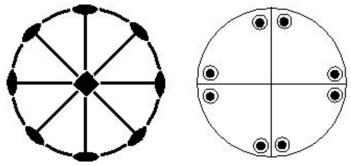
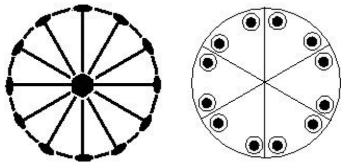
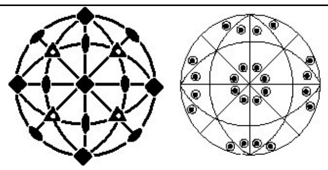
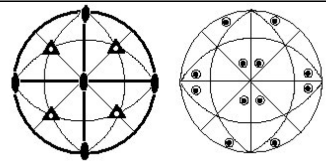
Combinação de um eixo de rotação com centro de inversão:

 2/m	 4/m	 6/m

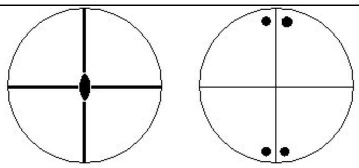
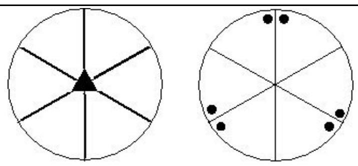
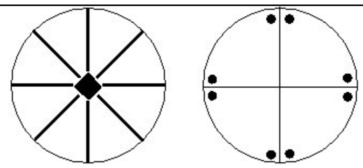
Combinação de três eixos de rotação:

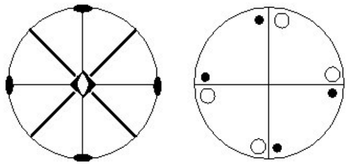
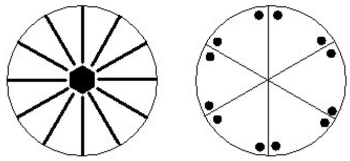
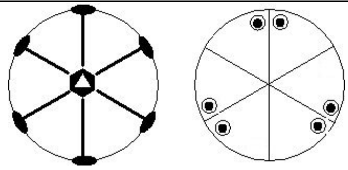
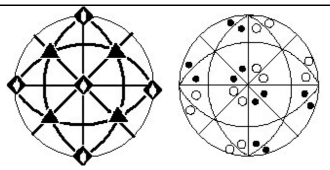
 222	 32	 422
 622	 432	 23

Combinação de três eixos de rotação com centro de inversão:

 mmm	 $\bar{3}m$	 4/mmm
 6/mmm	 $m\bar{3}m$	 $m\bar{3}$

Combinação de 1 eixo de rotação e dois eixos de rotoinversão:

 2mm	 3m	 4mm

 $\bar{4}m2$	 6mm	 $\bar{6}m2$
 $\bar{4}3m$		

2. Notação de Schoenflies

Os 32 grupos pontuais podem também ser representados pela notação de Schoenflies usada principalmente por espectroscopistas.

A equivalência entre a notação de Schoenflies e a notação Herman-Mauguin, usada em cristalografia, e dada na Tabela 1.

Nesta notação C_n representa os grupos que possuem apenas um eixo de rotação (1, 2, 3, 4, 6), C_i e C_s representam respectivamente o centro de inversão e o plano de simetria (reflexão em alemão é spiegelung).

O eixo de rotoinversão de ordem 3 é representado por C_{3i}, porque o eixo de rotação 3 mais o centro de inversão gera a rotoinversão de ordem 3.

Quando a simetria possui um eixo de rotação com um plano horizontal (2/m, 4/m e 6/m) é representada por C_{nh} (C_{2h}, C_{4h} e C_{6h}). O eixo de rotoinversão de ordem 6 apresenta uma simetria equivalente a 3/m e é representado por C_{3h}.

O eixo de rotoinversão de ordem 4 é representado por S_4. Schoenflies utiliza a rotoreflexão ao invés da rotoinversão. Os demais rotoreflexão já foram representados (rotoreflexão de ordem 1 = C_s, rotoreflexão de ordem 2= C_i, rotoreflexão de ordem 3 = C_{3h} e rotoreflexão de ordem 6 = C_{3i}).

Um eixo de rotação com dois eixos de ordem 2 perpendiculares (222, 32, 422 e 622) é representado por D_n (D_2, D_3, D_4 e D_6).

Adicionando um plano perpendicular ao eixo principal em D_n, a representação passa a ser D_{nh} (D_{2h}, D_{4h}, D_{6h}). O grupo $\bar{6}m2$ fica D_{3h}.

Os grupos que apresentam planos na vertical (2mm, 3m, 4mm e 6mm) são representados por C_{nv} (C_{2v}, C_{3v}, C_{4v} e C_{6v}).

Os grupos que apresentam um plano na bissetriz entre dois eixos de ordem 2 ($\bar{4}m2$ e $\bar{3}m$) são representados por D_{nd} (D_{4d} e D_{3d}).

Os grupos 432, 23, $m\bar{3}m$, $m\bar{3}$ e $\bar{4}3m$ recebem a letra correspondente ao poliedro gerado associado às posições relativas de plano, ou seja, respectivamente O, T, O_h, T_h e T_d.

Tabela 1. Equivalência entre as notações de Schoenflies e Hermann-Mauguin

m	$\bar{1}$	1	2	3	4	6	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
C_s	C_i	C_1	C_2	C_3	C_4	C_6	C_{3i}	S_4	C_{3h}

2/m	4/m	6/m
C_{2h}	C_{4h}	C_{6h}

222	32	422	622	432	23
D_2	D_3	D_4	D_6	O	T

mmm	3m	4/mmm	6/mmm	$m\bar{3}m$	$m\bar{3}$
D_{2h}	D_{3d}	D_{4h}	D_{6h}	O_h	T_h

2mm	$\bar{3}m$	4mm	$\bar{4}m2$	6mm	$\bar{6}m2$	$\bar{4}3m$
C_{2v}	C_{3v}	C_{4v}	D_{2d}	C_{6v}	D_{3h}	T_d