

Universidade de São Paulo
Instituto de Química de São Carlos
Departamento de Química e Física Molecular

Grupos Espaciais

SQM 409 - Cristalografia

Prof. Dr. Maria Teresa do Prado Gambardella

1. Grupos Espaciais

As combinações dos retículos de Bravais com os grupos pontuais, para cada um dos sistemas cristalinos, mais as substituições possíveis dos eixos e planos pelos eixos helicoidais e planos com deslizamento dão origem aos 230 grupos pontuais.

Sistema Cristalino	14 Retículos de Bravais	32 Grupos Pontuais	Grupos Espaciais
Triclínico	P	$1 \quad \bar{1}$	2
Monoclínico	$P \quad C$	$2 \quad m \quad 2/m$	13
Otorrômbico	$P \quad C \quad (A,B) \quad I \quad F$	$222 \quad 2mm \quad mmm$	59
Tetragonal	$P \quad I$	$4 \quad \bar{4} \quad 4/m \quad 4mm \quad 422 \quad \bar{4}2m \quad 4/mmm$	68
Cúbico	$P \quad I \quad F$	$23 \quad m\bar{3} \quad 432 \quad 43m \quad m\bar{3}m$	36
Hexagonal	P	$6 \quad \bar{6} \quad 6m \quad 6mm \quad 622 \quad \bar{6}m2 \quad 6/mmm$	27
Trigonal	$P \quad (R)$	$3 \quad \bar{3} \quad 3m \quad 32 \quad \bar{3}m$	25
7 sistemas	14 retículos	32 grupos	230 grupos

Nomenclatura compreende: tipo do retículo: P, I, F, C (ou A ou B), R e simetria.

Sistema Triclínico:

1	P	P1
$\bar{1}$		P $\bar{1}$

Sistema Monoclínico ($\beta \neq 90^\circ$):

2	P C	P2 P2 ₁ C2
m		Pm Pc Cm Cc
2/m		P2/m P2 ₁ /m P2/c P2 ₁ /c C2/m C2/c

Sistema Ortorrômbo:

222	P C I F	P222 P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ P2 ₁ 2 ₁ 2 P222 ₁ C222 C222 ₁ I222 I2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ F222
mmm		Pmmm Pmma Pmmn Pmna Pnma Pnnm Pnnn Pnna Pccn Pccm Pcca Pbac Pbam Pban Pbcn Pbcm Cmmm Cccm Cmma Cmcn Cmca Ccca Immm Ibam Ibca Fmmm Fddd
mm2		Pmm2 Pma2 Pnc2 Pcc2 Pba2 Pnn2 Pmc2 ₁ Pna2 ₁ Pmn2 ₁ Pca2 ₁ Cmm2 Ccc2 Cmc2 ₁ Imm2 Ima2 Iba2 Fmm2 Fdd2

Sistema Tetragonal:

4	P I	P4 P4 ₁ P4 ₂ P4 ₃ I4 I4 ₁
$\bar{4}$		P $\bar{4}$ I $\bar{4}$
4/m		P4/m P4 ₂ /m P4/n P4 ₂ /n I4/m I4 ₁ /a
422		P422 P4 ₂ 12 P4 ₁ 22 P4 ₁ 2 ₁ 2 P4 ₂ 22 P4 ₂ 2 ₁ 2 P4 ₃ 22 P4 ₃ 2 ₁ 2 I422 I4 ₁ 22
4/mmm		P4/mmm P4/mcc P4/nbm P4/nnc P4/mbm P4/mnc P4/nmm P4/ncc P4 ₂ /mmc P4 ₂ /mcm P4 ₂ /nbc P4 ₂ /nnm P4 ₂ /mbc P4 ₂ /nmc P4 ₂ /ncm I4/mmm I4/mcm I4 ₁ /amd I4 ₁ /acd
4mm		P4mm P4bm P4 ₂ cm P4 ₂ nm P4cc P4nc P4 ₂ mc P4 ₂ bc I4mm I4cm I4 ₁ md I4 ₁ cd
$\bar{4}m2$		P $\bar{4}2m$ P $\bar{4}2c$ P $\bar{4}2_1m$ P $\bar{4}2_1c$ P $\bar{4}m2$ P $\bar{4}c2$ P $\bar{4}b2$ P $\bar{4}n2$ I $\bar{4}m2$ I $\bar{4}c2$ I $\bar{4}2m$ I $\bar{4}2d$

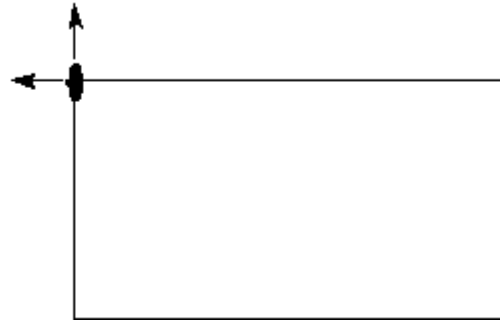
2. Como representar os grupos espaciais

Para exemplificar como representar os grupos espaciais daremos alguns exemplos.

Exemplo 1: grupo espacial P222 (projeção no plano ab)

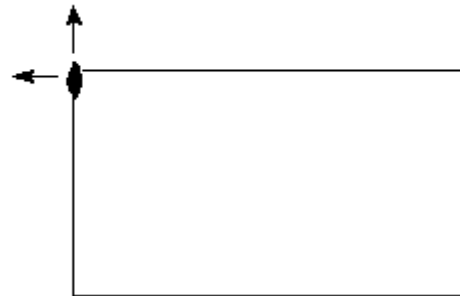
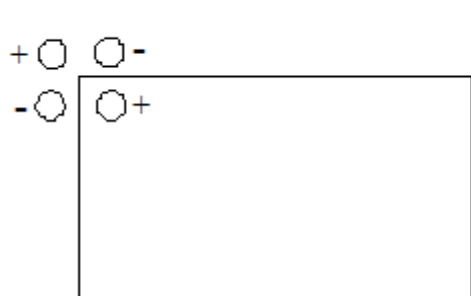
1º Passo: identificar o sistema e caracterizar a simetria

- sistema ortorrômbico, $a \neq b$, $\gamma = 90^\circ$, simetria 222 na origem

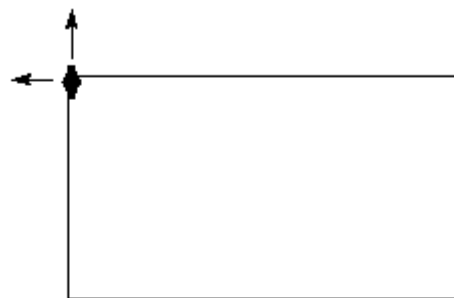
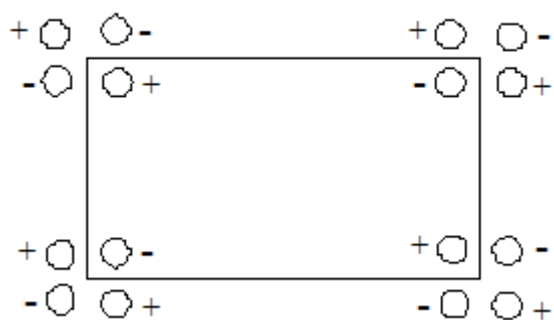


- posição inicial x y z (quadrante positivo)

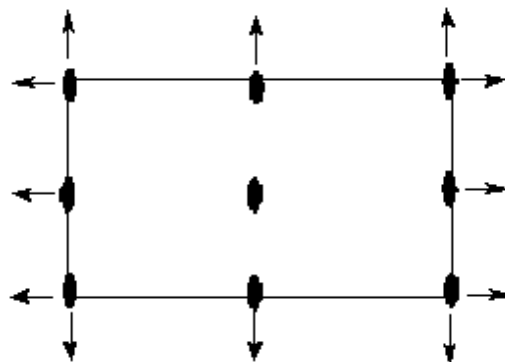
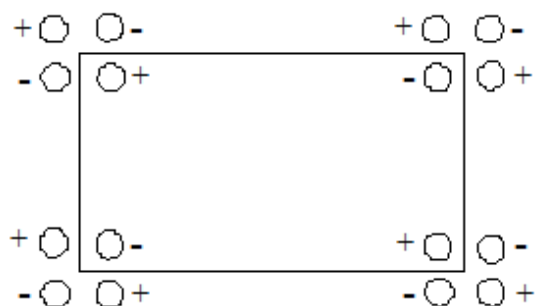
2º Passo: aplicar os operadores de simetria



3º Passo: completar a projeção dos pontos gerados pois a mesma simetria da origem se repete nos demais vértices.



4º Passo: completar os elementos de simetria presentes



5º Passo: determinar as coordenadas das posições gerais

4 $x y z$, $-x y -z$, $-x -y z$, $x -y -z$

6º Passo: identificar as posições especiais possíveis e substituir os valores nas posições gerais para obter o número de posições geradas em cada posição especial.

Sobre cruzamentos 222

1 222 0 0 0

1 222 1/2 0 0

1 222 0 1/2 0

$1 \quad 222 \quad 1/2 \ 1/2 \ 0$
 $1 \quad 222 \quad 0 \ 0 \ 1/2$
 $1 \quad 222 \quad 1/2 \ 0 \ 1/2$
 $1 \quad 222 \quad 0 \ 1/2 \ 1/2$
 $1 \quad 222 \quad 1/2 \ 1/2 \ 1/2$

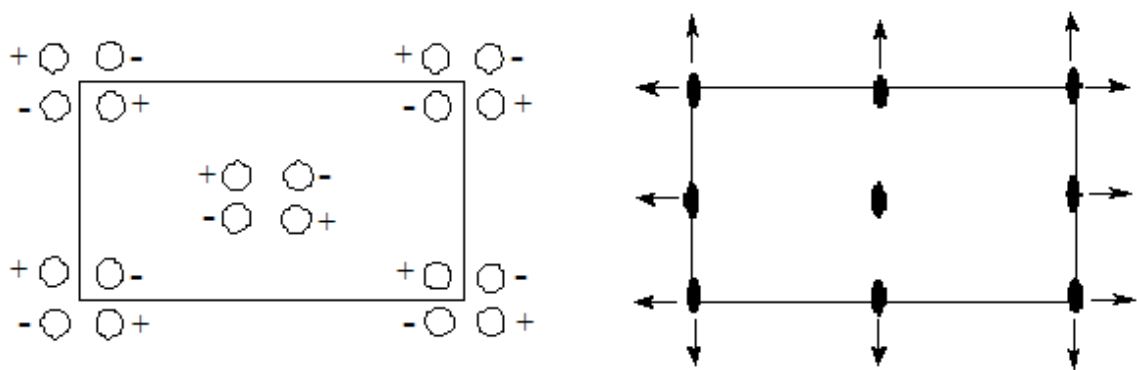
Sobre eixos de ordem 2

$2 \quad 2 \quad 0 \ 0 \ z, \quad 0 \ 0 \ -z$
 $2 \quad 2 \quad x \ 0 \ 0, \quad -x \ 0 \ 0$
 $2 \quad 2 \quad 0 \ y \ 0, \quad 0 \ -y \ 0$
 $2 \quad 2 \quad 1/2 \ 0 \ z, \quad 1/2 \ 0 \ -z$
 $2 \quad 2 \quad 0 \ 1/2 \ z, \quad 0 \ 1/2 \ -z$
 $2 \quad 2 \quad 1/2 \ y \ 0, \quad 1/2 \ -y \ 0$
 $2 \quad 2 \quad x \ 1/2 \ 0, \quad -x \ 1/2 \ 0$
 $2 \quad 2 \quad 1/2 \ 1/2 \ z, \quad 1/2 \ 1/2 \ -z$
 $2 \quad 2 \quad 0 \ y \ 1/2, \quad 0 \ -y \ 1/2$
 $2 \quad 2 \quad x \ 0 \ 1/2, \quad -x \ 0 \ 1/2$
 $2 \quad 2 \quad 1/2 \ y \ 1/2, \quad 1/2 \ -y \ 1/2$
 $2 \quad 2 \quad x \ 1/2 \ 1/2, \quad -x \ 1/2 \ 1/2$

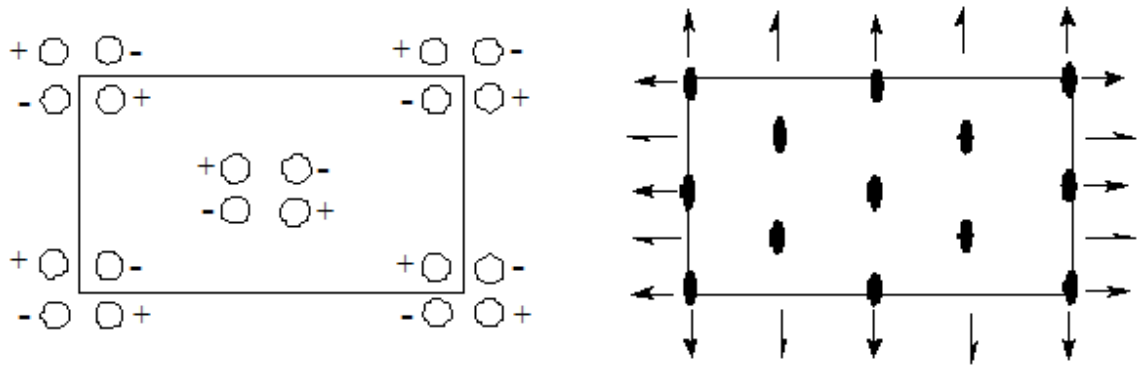
Exemplo 2: grupo espacial C222 (projeção no plano ab)

1º ao 4º Passo: são os mesmos do grupo espacial P222.

5º Passo: repetir a simetria da origem na centragem, lembrando que retículo C implica numa translação $(1/2 \ 1/2 \ 0)$.



6º Passo: identificar os elementos de simetria responsáveis pela centragem



7º Passo: determinar as posições gerais

Olhando dentro da célula vemos que são 8 posições gerais, que podemos apresentar de duas formas:

$$(000, 1/2 \ 1/2 \ 0) +$$

$$8 \ x \ y \ z, -x \ y \ -z, -x \ -y \ z, x \ -y \ -z$$

ou

$$8 \ x \ y \ z, -x \ y \ -z, -x \ -y \ z, x \ -y \ -z, 1/2+x \ 1/2+y \ z, 1/2-x \ 1/2+y \ -z, 1/2-x \ 1/2-y \ z, 1/2+x \ 1/2-y \ -z$$

8º Passo: identificar as posições especiais possíveis e substituir os valores nas posições gerais para obter o número de posições geradas em cada posição especial.

Sobre cruzamentos 222

2 222 0 0 0, 1/2 1/2 0

2 222 1/2 0 0, 0 1/2 0

2 222 0 0 1/2, 1/2 1/2 1/2

2 222 1/2 0 1/2, 0 1/2 1/2

Sobre eixos de ordem 2

4 2 0 0 z, 0 0 -z, 1/2 1/2 z, 1/2 1/2 -z

4 2 0 1/2 z, 0 1/2 -z, 1/2 0 z, 1/2 0 -z

4 2 x 0 0, -x 0 0, 1/2+x 1/2 0, 1/2-x 1/2 0

4 2 x 0 1/2, -x 0 1/2, 1/2+x 1/2 1/2, 1/2-x 1/2 1/2

4 2 0 y 0, 0 -y 0, 1/2 1/2+y 0, 1/2 1/2-y 0

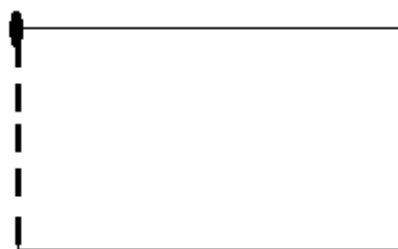
4 2 0 y 1/2, 0 -y 1/2, 1/2 1/2+y 1/2, 1/2 1/2-y 1/2

4 2 1/4 1/4 z, 1/4 3/4 -z, 3/4 3/4 z, 3/4 1/4 -z

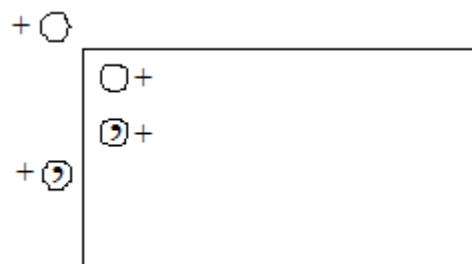
Exemplo 3: grupo espacial Ama2 (projeção no plano ab, origem 1 a 2)

1º Passo:

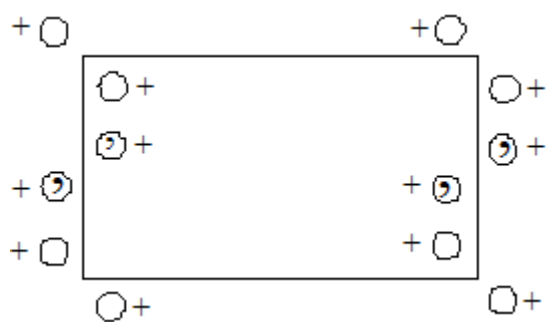
sistema ortorrômbico, $a \neq b$, $\gamma = 90^\circ$, simetria 1a2 na origem (o plano m não passa pela origem)



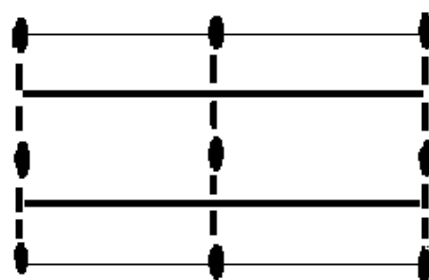
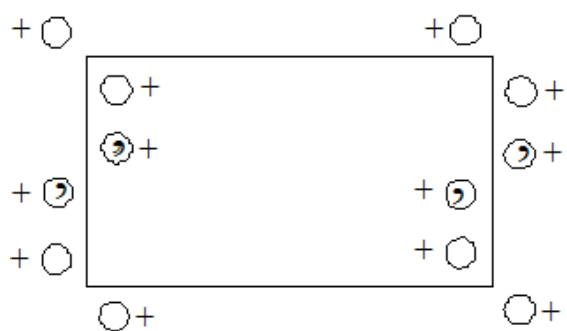
2º Passo



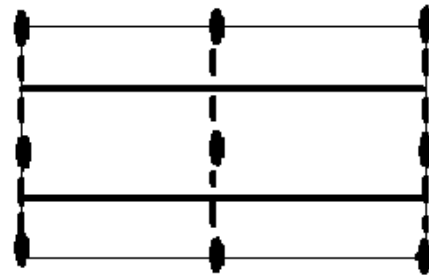
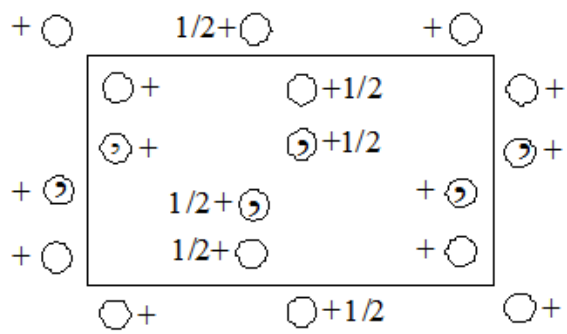
3º Passo



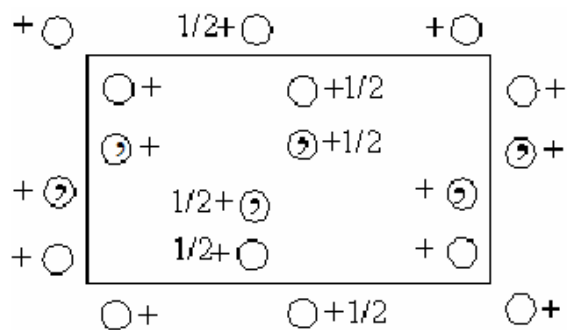
4º Passo



5º Passo



6º Passo



7º Passo: posições gerais

$$(0 \ 0 \ 0, 0 \ 1/2 \ 1/2) +$$

$$8 \ x \ y \ z, -x \ -y \ z, 1/2-x \ y \ z, 1/2+x \ -y \ z$$

8º Passo: posições especiais

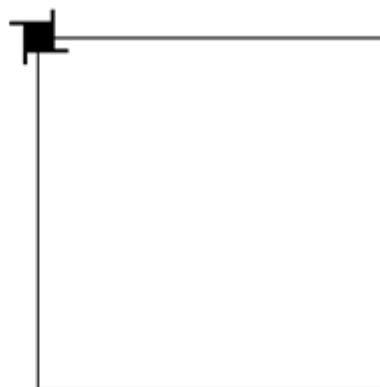
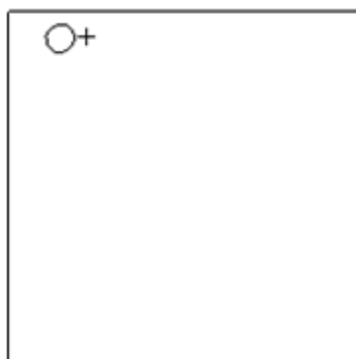
$$4 \ m \ 1/4 \ y \ z, 3/4 \ -y \ z$$

$$4 \ 2 \ 0 \ 0 \ z, 1/2 \ 0 \ z$$

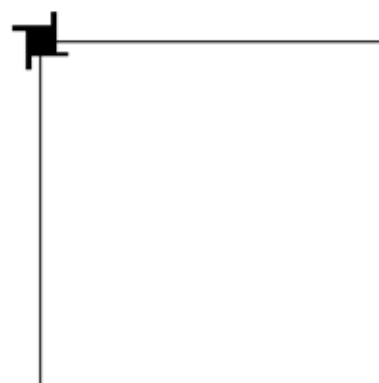
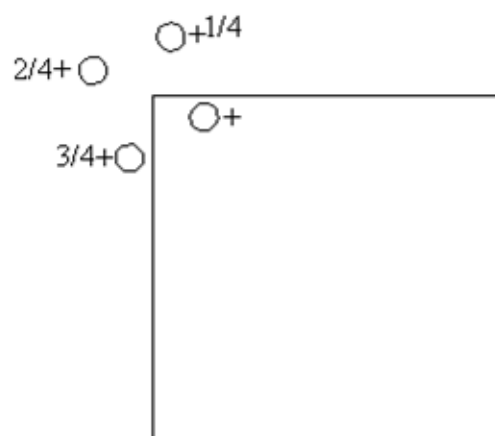
Exemplo 4: grupo espacial $P4_1$ (projecção no plano ab)

1º Passo

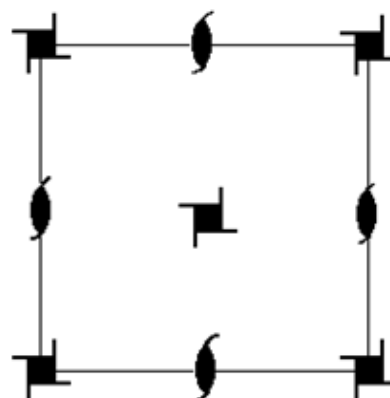
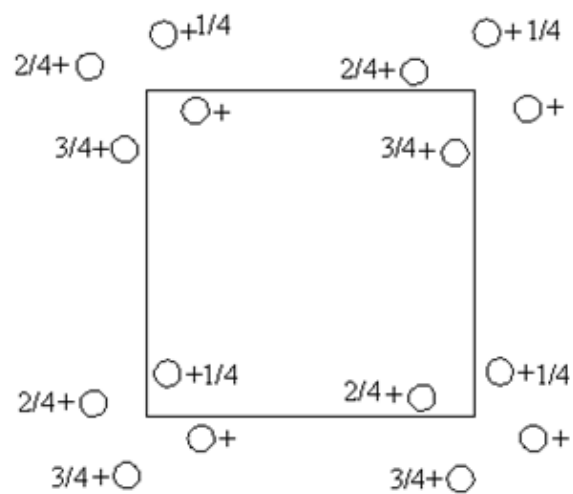
sistema tetragonal, $a = b$, $\gamma = 90^\circ$, simetria 114_1 na origem



2º Passo



3ºe 4º Passo



5º Passo: posições gerais

$4 \ x \ y \ z, \ -y \ x \ 1/4+z, \ -x \ -y \ 1/2+z, \ y \ -x \ 3/4 +z$

6º Passo: posições especiais

Não tem posições especiais porque só tem simetria com translação.

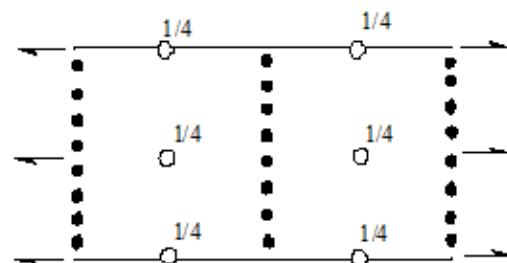
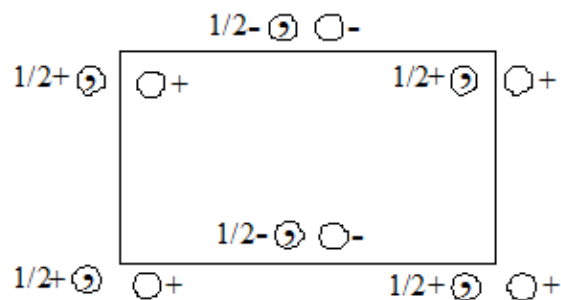
Exemplo 5: grupo espacial $P12_1/c1$ (projecção no plano ab)

1º Passo

sistema monoclinico, $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \beta \neq 90^\circ$, simetria $12_1/c1$

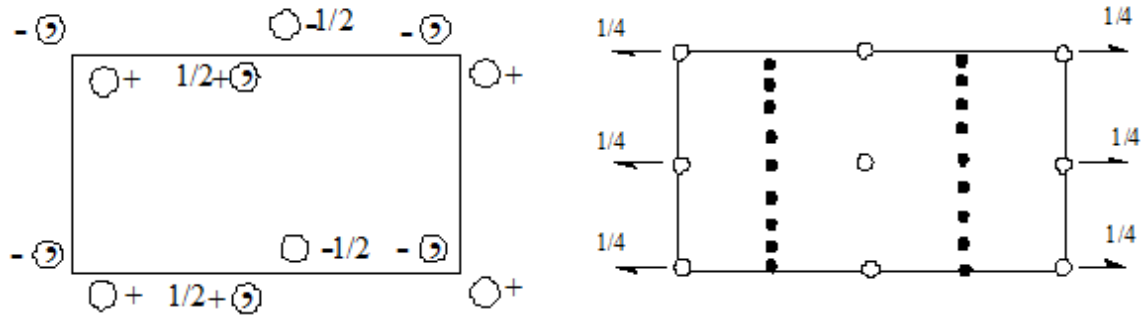


2º, 3º e 4º Passo



Como podemos observar o centro de inversão aparece fora da origem e em $0 \frac{1}{4} \frac{1}{4}$. Devemos então recomeçar colocando o centro de inversão na origem.

Refazendo a nova projeção com o centro de inversão na origem fica:



5º Passo: posições gerais

4 $x y z, -x -y -z, x \frac{1}{2}-y \frac{1}{2}+z, -x \frac{1}{2}+y \frac{1}{2}-z$

6º Passo: posições especiais

Sobre centros de inversão

$2 \bar{1} \quad 000, 0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

$2 \bar{1} \quad \frac{1}{2} 00, \frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$

$2 \bar{1} \quad 0 \frac{1}{2} 0, 00 \frac{1}{2}$

$2 \bar{1} \quad \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0, \frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$