# CRISTALOGRAFIE:

## C6: GRUPURI PUNCTUALE


**Conf. Dr. Mihai V. PUTZ**

*Chemistry Department, West University of Timisoara,*
*Pestalozzi Street No.16, Timisoara, RO-300115, Romania;*
*E-mails: mvputz@cbg.uvt.ro or mv_putz@yahoo.com ;*
*Web: http://www.mvputz.iqstorm.ro*

*Member of American Chemical Society*
*Member of European Society of Mathematical Chemistry*

*Editor in-Chief of Int. J. Chem. Model. (at NOVA Publishers)*
*Editor in-Chief of Int. J. Environ. Sci. (at SERIALS Publishers)*
*Guest Editor & Editor of Int. J. Mol. Sci. (at MDPI Organization)*

## Formule de Simetrie. Clase de Simetrie

cinci clase ciclice: (1) $A^1$; (2) $A^2$; (3) $A^3$; (4) $A^4$; (5) $A^6$

formulele claselor axiale

$A^n + nA^2 = A^n nA^2$

(6) $A^2 + 2A^2 = 3A^2$
(7) $A^3 + 3A^2 = A^3 3A^2$
(8) $A^4 + 4A^2 = A^4 4A^2$
(9) $A^6 + 6A^2 = A^6 6A^2$

tetragiroida este singura axă de simetrie self-consistentă

(10) $A_4^2$

formulele de simetrie ale claselor centrate:

$A^n + C = A^n \Pi C$

(11) $A^1 + C = C$
(12) $A^2 + C = A^2 \Pi C$
(13) $A^3 + C = A^3 C$
(14) $A^4 + C = A^4 \Pi C$
(15) $A^6 + C = A^6 \Pi C$

Girele se pot asocia şi cu planele de reflexie perpendiculare sau paralele. Se obțin astfel formulele de simetrie ale claselor planare.

$$(16) \quad A^1 + \Pi = P$$

$$(17) \quad A^3 + \Pi = A^3\Pi$$

($A^n$) combinată cu un plan de reflexie paralel

$$(18) \quad A^2 + P = A^2 2P$$

$$(19) \quad A^3 + P = A^3 3P$$

$$(20) \quad A^4 + P = A^3 4P$$

$$(21) \quad A^6 + P = A^4 6P$$

$$(22) \quad A_4^2 + P = A_4^2 2P$$

Asocierea axei de simetrie principale cu axele de simetrie binare, planele de reflexie şi, atunci când este posibil, cu centrul de inversie conduce la clasele de simetrie plan+axiale ale căror formule de simetrie sunt:

$$(23) \quad A^2 + A^2 + P = 3A^2 3PC$$

$$(24) \quad A^3 + A^2 + P + C = A^3 3A^2 3PC$$

$$(25) \quad A^3 + A^2 + P + \Pi = A^3 3A^2 3P\Pi$$

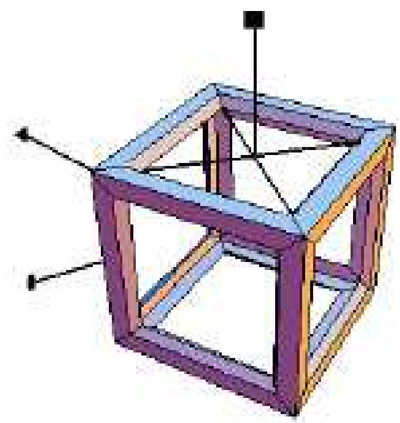
$$(26) \quad A^4 + A^2 + P + \Pi = A^4 4A^2 4P\Pi C$$

$$(27) \quad A^6 + A^2 + P + \Pi = A^6 6A^2 6P\Pi C$$

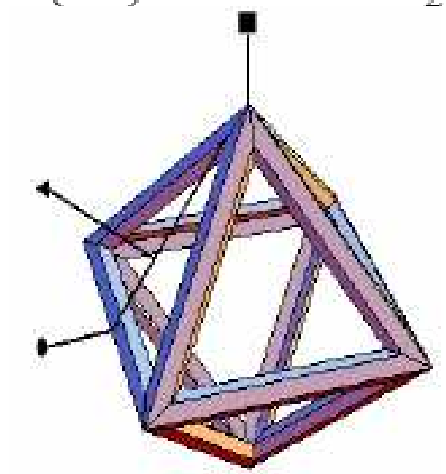
Formulele de simetrie deduse până acum conțin o singură axă principală ($A^n$, $n \geq 3$). Teoria grupurilor demonstrează că, în poliedrii cristalini, este posibilă o unică asociere a unor axe de ordin superior: $4A^3$. O astfel de asociere nu apare niciodată singură ci numai alături de di-gire sau tetra-gire şi conduce la clasele speciale de simetrie.

În absența centrului de inversie, alături de planele de reflexie paralele (P), grupul $4A^3$ implică tetra-giroide ($A_4^2$) astfel că formula obținută va fi:

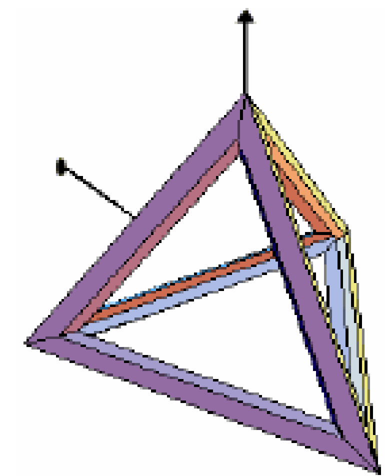
T (28) $4A^3 3A_2$



O (29) $3A^4 4A^3 6A_2$



$T_d$ (30) $3A_4^2 4A^3 6P$



Implicarea centrului de inversie conduce la ultimele două formule posibile:

(31) $T_h$ $4A^3 3A^2 3\Pi C$

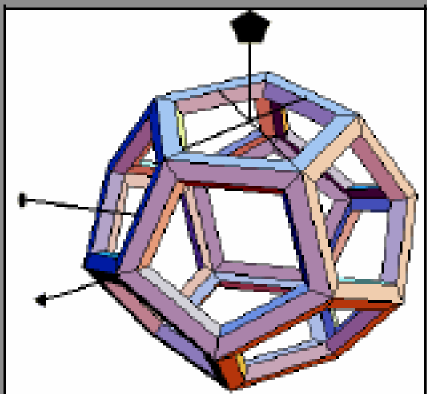
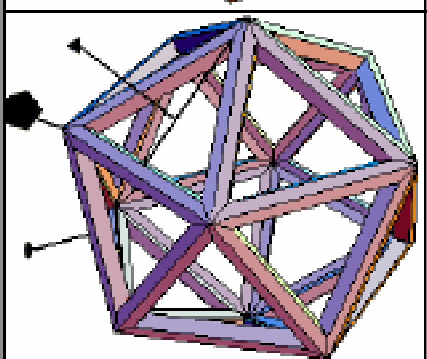
(32) $O_h$ $3A^4 4A^3 6A^2 6P 3\Pi C$

# Notația Schoenflies

| Element de Simetrie | Operațiile de Simetrie Asociate | |
|---|---|---|
| Centru de inversie (C) | i | Transformarea de inversie |
| Giră ($A^n$) | $C_n$ | Rotația (pozitivă în sens orar) cu unghiul de $2\pi/n$ radiani, cu n număr natural. |
| | $C_n^p$ | Rotația (pozitiva în sens orar) cu unghiul $2p\pi/n$ radiani, cu n natural si p intreg. |
| Giroidă ($A_n$) | $S_n$ | Rotație cu unghiul $2\pi/n$ radiani urmată de reflexie în planul perpendicular pe axa de rotație. |
| Plan de oglindire (P,Π) | $\sigma_h$ | Reflexia orizontală – în planul ce trece prin origine şi este perpendicular pe axa principală de rotație. |
| | $\sigma_v$ | Reflexia verticală – în planul ce trece prin origine şi conține axa principala de rotație. |
| | $\sigma_d$ | Reflexia diagonală sau diedrală – un caz special al reflexiei verticale $\sigma_v$, dar față de planul ce bisectează în plus şi unghiul dintre axele $A^2$ perpendiculare pe axa principală de rotație. |
| - | E | Transformarea identică |

*Tipurile, notația Schoenflies și caracterizarea grupurilor punctuale*

| Tipul | Notația | Caracteristica |
|---|---|---|
| Grupuri cu un sigur element de simetrie | $C_1$ | doar E |
| | $C_s$ | E si $\sigma$ |
| | $C_i$ | E si i |
| | $C_n$ | E si $C_n$ |
| | $S_n$ | n=2k, k natural |
| Grupuri cu mai mult de un element de simetrie | $D_n$ | $C_n$ și n $C_2 \perp C_n$ |
| | $C_{nh}$ | $C_n$ și $\sigma \perp C_n$ |
| | $C_{nv}$ | $C_n$ și două sau mai multe $\sigma$ ($\Pi$) ce conțin $A^n$ ($C_n$). |
| | $D_{nd}$ | $C_n$, n $C_2 \perp C_n$, n plane diedrale paralele cu $A^n$ ($C_n$) și care bisectează unghiurile dintre cele n axe $\perp A^n$ ($C_n$) |
| | $D_{nh}$ | $C_n$, n$C_2 \perp C_n$, și $\sigma \perp C_n$ |
| Grupuri speciale | $C_{\infty v}$ | structuri liniare fără i |
| | $D_{\infty h}$ | structuri liniare cu i |
| | $T_d$ | grupuri tetraedrice, include $T_h$ și T |
| | $O_h$ | grupuri octaedrice, include O |
| | $I_h$ | grupuri icosaedrice, include I |

<table>
<tr><th rowspan="2">Poliedrul Platonic</th><th colspan="3">Număr de</th><th rowspan="2">Operații de Simetrie</th></tr>
<tr><th>f</th><th>v</th><th>m</th></tr>
<tr><td></td><td>12</td><td>20</td><td>30</td><td rowspan="2">i). Axele prin centrul fețelor (la dodecaedru) / varfurilor (la icosaedru) opuse: $12C_5$, $12S_{10}$, $12C_5^2$, $12S_{10}^3$, $i$;<br>ii). Axele bisectoare prin muchiile opuse: $15C_2$;<br>iii). Axele prin vârfuri (la dodecaedru) / centrul fețelor (la icosaedru) opuse: $20S_6$, $20C_3$;<br>iv). Planuri conținând câte 2 axe $C_2$ şi 2 axe $C_5$: $15\sigma_h$ .<br>Total:<br>$I_h=\{O, i, 12S_{10}, 12S_{10}^3, 20S_6, 15\sigma_h\}$;<br>Rotatii pure:<br>$I=\{E, 12C_5, 12C_5^2, 20C_3, 15C_2\}$ .</td></tr>
<tr><td></td><td>20</td><td>12</td><td>30</td></tr>
</table>

*Cele 32 de clase-grupuri cristalografice în notația Schoenflies*

| **Simetria de Grup** | | **Ordinul de Rotație** | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| ***Combinarea Elementelor*** | ***Descrierea de Grup*** | ***1*** | ***2*** | ***3*** | ***4*** | ***6*** |
| $C_n$ | Ciclic | $C_1^*$ | $C_2$ | $C_3$ | $C_4$ | $C_6$ |
| $\exists n\sigma_v \supset C_n$ | Ciclic cu plane verticale | | $C_{2v}$ | $C_{3v}$ | $C_{4v}$ | $C_{6v}$ |
| $\sigma_h \perp C_n$ | Ciclic cu plane orizontale | $C_s^*$ | $C_{2h}$ | $C_{3h}$ | $C_{4h}$ | $C_{6h}$ |
| $i, S_{2n}$ | Rotație improprie | | $C_i$ | | $S_4$ | $S_6$ |
| $\exists nC_2$ axe $\perp C_n$ | Diedral | | $D_2$ | $D_3$ | $D_4$ | $D_6$ |
| $\exists$ $nC_2$ axe $\perp C_n$ & $n\sigma_d$ | Diedral cu plane între axe | | $D_{2d}$ | $D_{3d}$ | | |
| $\exists$ ($nC_2$ axe & $\sigma_h$)$\perp C_n$ | Diedral cu plane orizontale | | $D_{2h}$ | $D_{3h}$ | $D_{4h}$ | $D_{6h}$ |
| Grupurile Speciale | Grupuri cubice | T | $T_h$ | O | $T_d$ | $O_h$ |

# Notația Internațională (Hermann-Mauguin)

De exemplu, notația internațională compactă de simetrie (notația Hermann-Mauguin) utilizează combinațiile dintre axele de simetrie (notate cu X=1, 2, 3, 4, 6) şi a planelor de reflexie (notate cu "*m*", de la englezescul "mirror"=oglindă). Scrierea acestor simboluri compacte urmează câteva convenții simple:

i). $\boxed{X/m}$ reprezintă un plan de oglindire perpendicular pe axa de rotație de ordinul X;

ii). $\boxed{Xm}$ reprezintă în schimb un plan de oglindire ce conține axa de ordinul X;

iii). $\boxed{X2}$ reprezintă o axa de ordinul 2 (o diadă) perpendiculară pe axa de ordinul X.

iv). apariția numărului $\boxed{3}$ se referă la patru trigire egal înclinate pe care orice sistem cubic trebuie să le posede.

v). $\boxed{mm}$ reprezintă două plane de reflexie reciproc perpendiculare;

vi). $\boxed{mmm}$ reprezintă trei plane de reflexie mutual perpendiculare;

vii). $\boxed{X/mm}$ reprezintă axa de ordinul X conținută într-unul din planele (perpendiculare) de oglindire cu direcția axei, la rîndul său, perpendiculară pe celălalt plan;

viii). $\boxed{4/mmm}$ şi $\boxed{6/mmm}$ sunt grupurile cu simetria cea mai înaltă, şi sunt echivalente cu grupurile 4/*mm* si 6/*mm*, respectiv, al treilea simbol „*m*" referindu-se la un extra-set de plane de oglindire verticale.

## Scrierea acestor simboluri compacte urmează cateva conventii simple:

**i)** se identifică *elementele de simetrie existente*: rotații şi plane de reflexie în special;

**ii)** se identifică *axele de rotație unice*, acelea care nu se pot obține din alte elemente de simetrie;

**iii)** se scriu în ordine consecutivă, începând de la cel mai mare, ordinele corespunzătoare axelor de rotație unice;

**iv)** se scrie câte un „*m*” pentru fiecare plan unic (în sensul anterior) de reflexie;

**v)** dacă vreuna din axele unice de rotație este perpendiculară pe vreun plan unic de reflexie se vor scrie alăturat, dar separate de simbolul „/”.