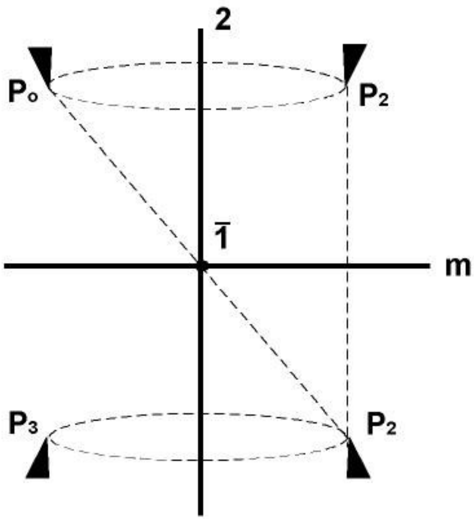
# GRUPOS PUNTUALES

Existen algunas relaciones entre elementos de simetría que pueden ser útiles a la hora de deducir cuales son los conjuntos de estos que forman grupo.

**1.-** Todos los elementos de simetría de un grupo finito se han de cortar en un único punto, y si hay centro de inversión, este es el punto común.

De hecho, si no se cortaran en un único punto, el grupo de simetría no sería finito, porque la aplicación sucesiva de elementos de simetría sin un punto común generaría una figura infinita.



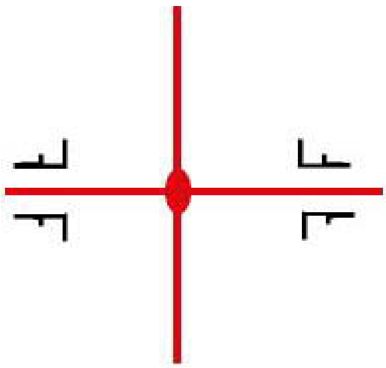

**2.-** Si hay un eje de simetría de orden par y un plano de simetría perpendicular, en la intersección se genera un centro de inversión. Y supuesta la existencia de dos de estos elementos, se deduce el tercero

Supongamos un eje de orden 2 y un plano m perpendicular. La figura $P_0$ se relaciona con la $P_1$ por el giro del eje binario, y esta con la $P_2$ por la reflexión del plano m. A la vez, las figuras $P_0$ y $P_2$ están relacionadas por un centro de inversión situado en la intersección de 2 y m. Y la simétrica de $P_2$ por el eje binario ($P_3$) se relaciona con $P_0$ por el plano m y con $P_1$ por el centro.

**3.-** Si un grupo solo tiene un eje de simetría, cualquier plano de simetría del grupo ha de ser necesariamente perpendicular o contener el eje.

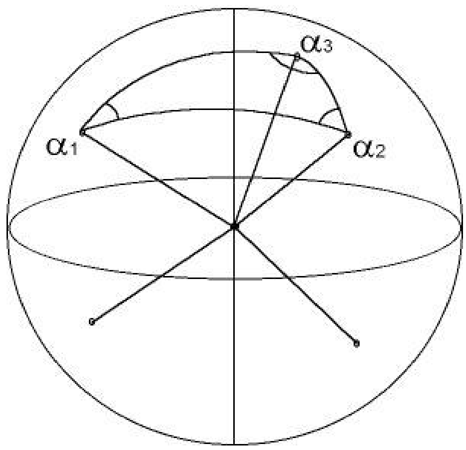
Si no fuera así i existiera un plano formando un cierto ángulo diferente de 90º con el eje, la aplicación del plano generaría un segundo eje simétrico del anterior y formando el mismo ángulo con el plano.

**4.-** Si un plano de simetría contiene un eje de orden n, existen n planos que contienen el eje formando entre ellos ángulos de $\pi/n$.



Se sugiere al estudiante comprobar gráficamente en cada uno de los casos posibles: dibujar el trazo de un plano de simetría y un eje de orden n incluido en el. Dibujar una figura relativamente asimétrica (una F, por ejemplo) y aplicar la simetría del plano m y del eje hasta que no aparezcan otras Fs. Entonces, comprobar la existencia de otros planos de simetría del conjunto de Fs. El ejemplo corresponde a un plano m y un eje binario.

**5.-** Existe un número limitado de formas de combinar diversos ejes de simetría en un grupo puntual. Supongamos un grupo que contiene solo ejes de simetría, que si se alargan hasta intersectar una esfera con centre en el punt común a todos los ejes, determinaran una serie de puntos, los cuales formaran triángulos esférico que llenaran toda la superficie de la esfera.




Parece lógico pensar que los ángulos estarán relacionados con el orden del eje de aquel punto, dado que el conjunto ha de ser simétrico entre los propios ejes, de manera que en general se puede decir que

$$\alpha_i = \pi/n_i$$

En geometría esférica, la suma de los ángulos de un triangulo ha de ser superior a 180º, y por tanto

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 > \pi \quad \text{y} \qquad \pi/n_1 + \pi/n_2 + \pi/n_2 > \pi$$

dividiendo por π, $\quad 1/n_1 + 1/n_2 + 1/n_2 > 1$

Las únicas soluciones de esta ecuación son

$n_1$ cualquiera $n_2=n_3=2$; $n_1=2$, $n_2=n_3=3$; i $n_1=4$, $n_2=3$, $n_3=2$

además de la solución 5, 3, 2, que no tiene sentido en los medios periódicos porqué no hay ejes de orden 5.

Por tanto, las posibles combinaciones de ejes son 222, 322, 422, 622, 432, 332 (esto **NO SON** necesariamente notaciones de grupos puntuales).

**Grupos de operaciones de simetría**

La simetría de un cristal no ha de incluir necesariamente todos los elementos de simetría posibles, sino únicamente algunos de estos, que además, han de ser compatibles entre ellos, la cual cosa quiere decir que *tengan estructura de grupo*.

Por eso han de cumplir algunas condiciones:

- que sea cerrado, es decir que la aplicación (producto) de dos de las operaciones de simetría no genere una tercera que no sea del grupo. Por ejemplo, un eje binario y un plano de simetría perpendicular no forman grupo porqué al aplicar las operaciones del giro binario (180º) y la reflexión, se genera un centro de inversión. Es decir, el centro de inversión aparece como consecuencia de la existencia del eje binario y el plano m (que por otro lado ya se ha explicado anteriormente). Por tanto, si que forman grupo un eje binario, un plano m perpendicular y un centro de inversión en la intersección.

- el grupo ha de contener la operación inversa de cada una de ellas. La aplicación del giro en sentido contrario, o otra reflexión en el caso de los planos m, o otra inversión en el caso del centro de simetría son las respectivas operaciones inversas de cada un de ellas.

- el grupo ha de contener el elemento neutro, que deje invariable una figura (que no modifique las coordenadas de un punto). Este es el eje monario, que hay que considerar que forma parte de todos los grupos.

- que la operación de multiplicación de operaciones tenga las propiedades conmutativa y asociativa. Se sugiere que el estudiante efectúe esta comprobación.

**Grupos puntuales bidimensionales**

Se pueden deducir los posibles grupos de simetría puntual en dos dimensiones, partiendo del hecho que los posibles elementos en el plano (considerando la disminución de dimensiones de 3 a 2) son

a) puntos de giro de orden 1, 2, 3, 4 y 6
b) línea de reflexión m

(no se considera el centro de inversión porqué en dos dimensiones equivale a un punto de giro binario)

Las combinaciones posibles son

- cada un de los elementos por sí solo (1, 2, 3, 4, 6 y m)
- los resultados de combinar los puntos de giro con la línea de reflexión

1 + m –> m (ya existente)
2 + m –> 2mm
3 + m –> 3m
4 + m –> 4mm
6 + m –> 6mm

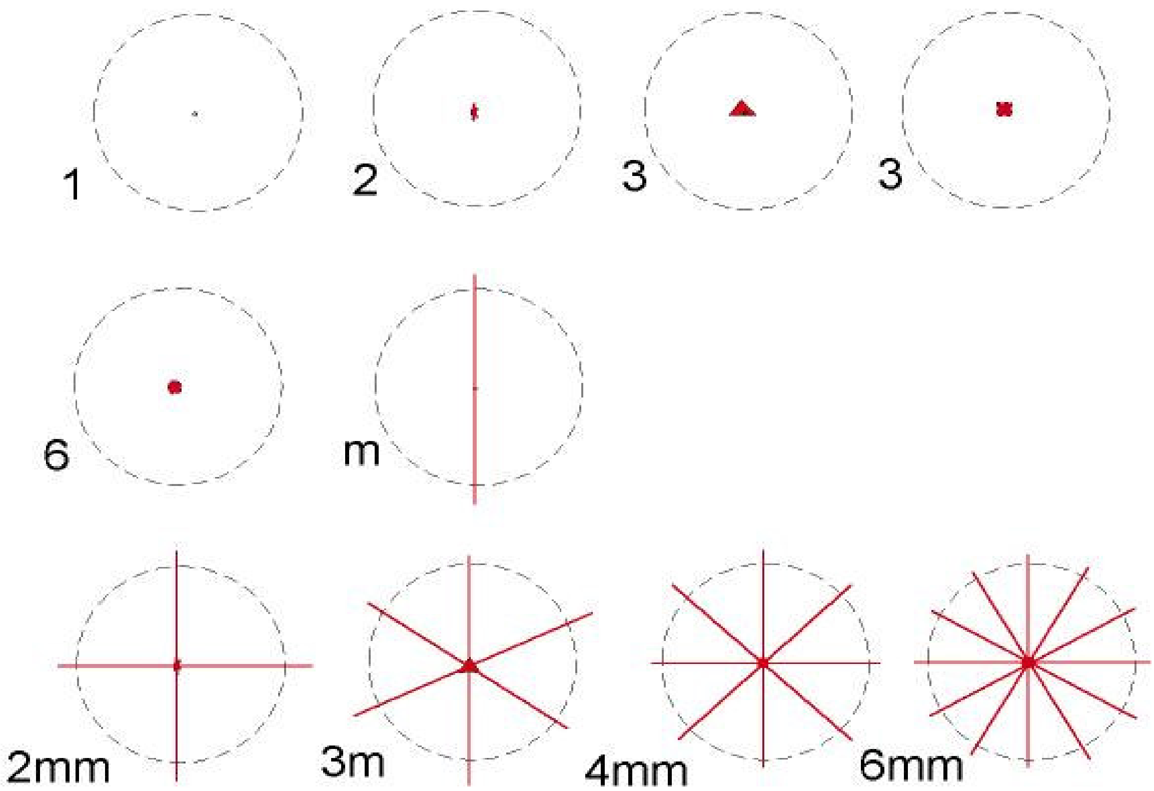
La cual cosa da un total de 10 grupos puntuales bidimensionales, que se han representado a continuación.

**Grupos puntuales tridimensionales**

De manera similar, es posible deducir la existencia de 32 grupos puntuales en tres dimensiones**.**

Esta deducción no se hace en estos apuntes por razón de oportunidad y porqué queda claramente fuera del alcance del curso.

Se sugiere al estudiante que busque en algunos de los libros recomendados en la bibliografía las proyecciones de los 32 grupos de simetría puntual y se familiarice con ellos.



**Sistemas cristalinos**

Los 32 grupos puntuales se agrupan en diversos sistemas cristalinos por la presencia de determinada combinación de ejes, lo que se podría llamar “la característica simétrica” del sistema.
Más adelante se podrá comprobar que cada sistema se caracteriza por una determinada celda fundamental, que responde a la simetría del sistema, no obstante, ahora es posible esta clasificación sobre la base de las características simétricas.

Si se agrupan los grupos puntuales por la simetría común se pueden encontrar una serie de grupos que todos tienen un único eje cuaternario, o un único eje ternario, o binario, etc. Si se parte de la mínima simetría, por ejemplo un solo eje cuaternario, se puede proponer un esquema deductivo que permite llegar al resto de grupos de idéntica característica simétrica.

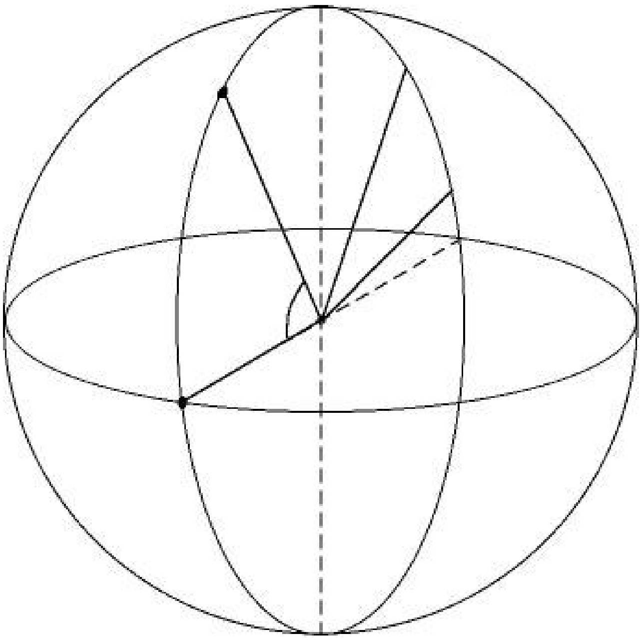
Por ejemplo para los grupos con un solo eje de orden 4:
- Si al grupo 4 se añade un centro de inversión se genera el grupo 4/m
- Si al 4 se le añade un eje binario (en la única posición posible, según se ha demostrado anteriormente), se genera el grupo 422
- Si al 4 se le añade un plano que contiene el eje, da el grupo 4mm
- Y si al 422 se le añade un centro de inversión, aparece el grupo 4/mmm

En el caso de la simetría de 4º orden, existe también el eje cuaternario de inversión $\overline{4}$, que se puede combinar con un eje binario perpendicular (o con un plano que lo contenga) para dar el grupo $\overline{4}2m$.

Este esquema deductivo se puede repetir con el grupo 23, con el 3, con el 6..., y cada conjunto de grupos puntuales (con algunas excepciones que se comentarán) constituyen un *sistema cristalino*, de manera que finalmente se clasifican en SIETE sistemas cristalinos:

- **cubico**, partiendo del grupo 23
- **tetragonal**, partiendo de los grupos 4 y $\overline{4}$
- **trigonal**, partiendo del grupo 3
- **hexagonal**, partiendo del grupo 6
- **rómbico**, partiendo del grupo 222

- **monoclínico**, partiendo del grupo 2
- y **triclínico**, partiendo del grupo 1.



Obviamente, en los casos de baja simetría (ordenes 2 y 1), el esquema no se cumple totalmente, y por ejemplo, si el esquema se aplica a la simetría binaria:

- 2 (grupo del sistema monoclínico)
- 2 + $\overline{1}$ –> 2/m (grupo del sistema monoclínico)
- 2 + 2 –> 222 (grupo del sistema rómbico)
- 2 + m –> 2mm( grupo del sistema rómbico)
- 222 + $\overline{1}$ –> mmm (grupo del sistema rómbico)

(Históricamente existió la "singonia" digonal - que respondía al esquema anterior -, y que se dividía en dos sistemas, rómbico y monoclínico, caracterizados por la presencia de tres y un ejes de orden 2, respectivamente).

## REPRESENTACIÓN GRÁFICA DE LOS CRISTALES: PROYECCIÓN ESTEREOGRÁFICA

Para representar tanto la simetría del grupo puntual como las caras del cristal hay que recorrer a una proyección que mantenga los ángulos entre caras y permita efectuar cálculos a partir de estos. Esto se consigue con una proyección esférica, la cual a la vez se proyecta sobre el plano ecuatorial de la esfera tomando como puntos de vista los polos N y S, según convenga: es lo que se conoce como *proyección estereográfica.*

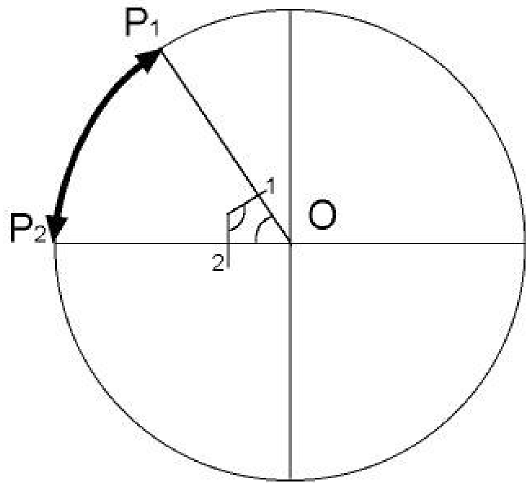
### Proyección esférica

Se proyectan los elementos (ideales - ejes, planos, etc.- y reales - caras-) sobre una esfera concéntrica con el punto común de todos los elementos de simetría (centro). La proyección se hace de dos maneras posibles:

a) alargando los elementos ideales (ejes de referencia, planos y ejes de simetría) hasta su intersección con la esfera de proyección (esfera polar). De esta manera los ejes se representan por puntos y los planos por círculos máximos.

b) proyectando los vectores recíprocos en el caso de las caras (los vectores perpendiculares a las caras), de manera que estas se representan por puntos en la esfera polar.

En la figura se ha representado la esfera polar y  las líneas de proyección de algunos vectores de caras que son paralelas a una dirección común, por tanto, todas quedan proyectadas sobre un circulo máximo, y además, se conservan los ángulos entre los vectores (suplementarios de los ángulos diedros entre las caras), como se puede ver en el circulo máximo de la parte inferior.

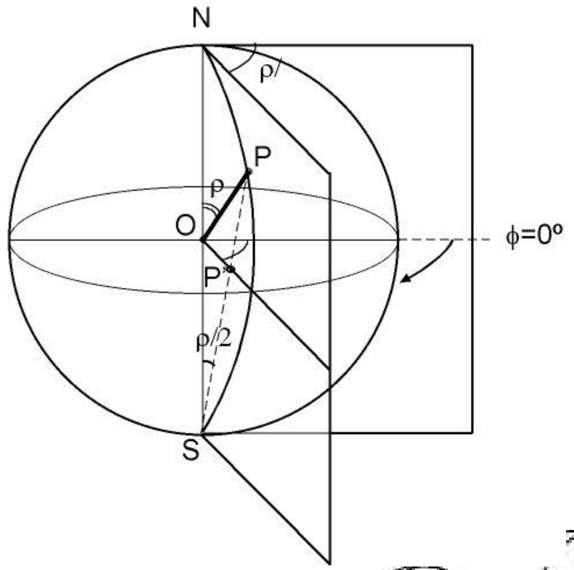


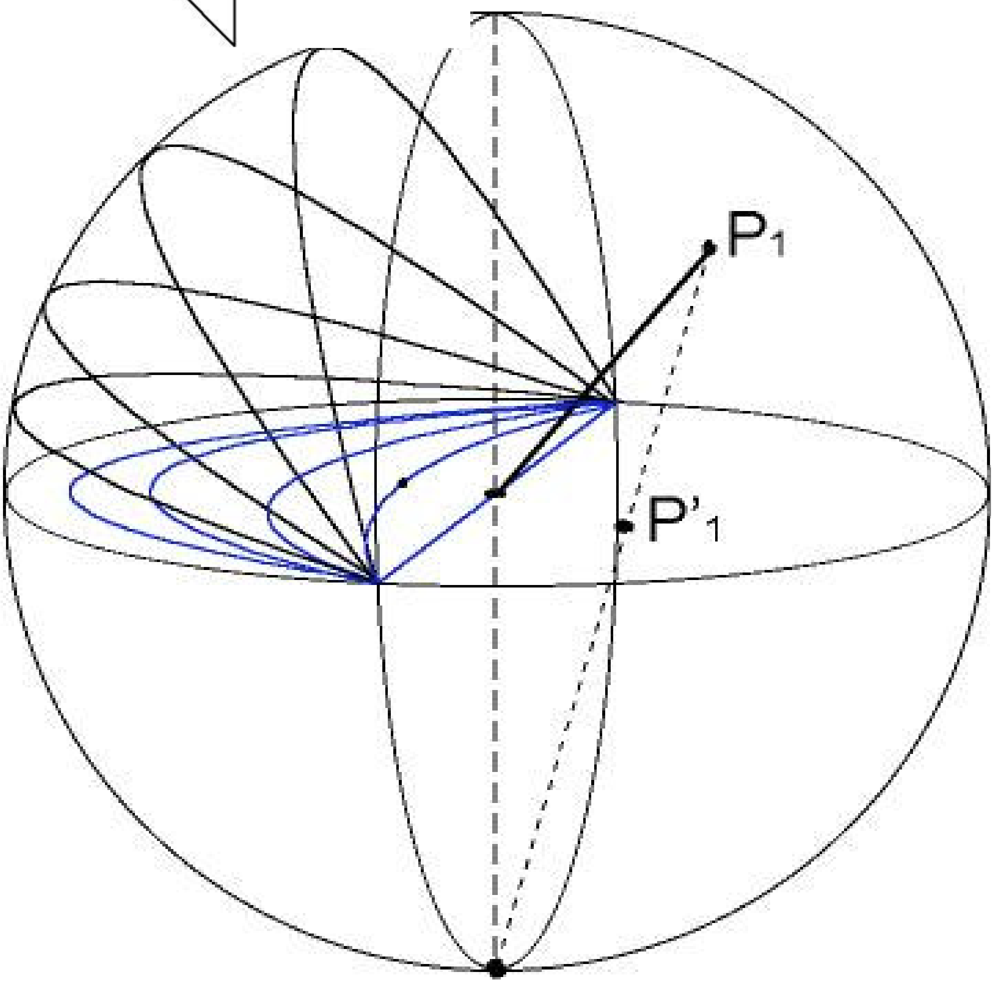

**Proyección estereográfica**

Consiste en la proyección de cada uno de los hemisferios de la esfera polar sobre el circulo ecuatorial, tomando como punto de vista, el polo S para la proyección del hemisferio norte, y el N para la proyección del hemisferio sur .

En la figura siguiente se han representado una serie de círculos máximos y sus proyecciones (en azul), de manera que los círculos que pasan por los polos N y S (meridianos, por similitud con el geoide) quedan proyectados como  diámetros del circulo ecuatorial.

Por otro lado, el punto $P_1$ se proyecta como el $P'_1$, resultado de la intersección con el circulo ecuatorial de la recta que lo une con el polo S (usado en este caso como punto de vista).



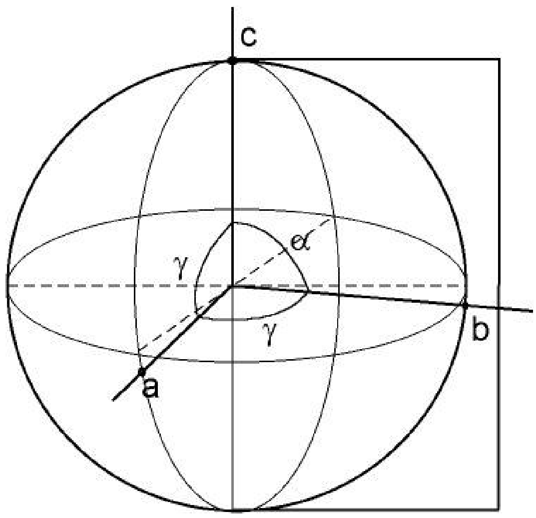




**Coordenadas esféricas**

Sobre la esfera polar, cada punto se sitúa por dos coordenadas, similares a la latitud y longitud terrestres utilizadas en geografía. En este caso, el punto P se caracteriza por

- una coordenada $\phi$, que es el ángulo que forma el meridiano que lo contiene con uno que se toma como origen. Por convenio se cuenta en sentido horario, como indica la flecha de la figura.

- una coordenada $\rho$ que es el ángulo que forma la recta OP con el eje N-S, que por convenio se comienza a contar desdel polo N.

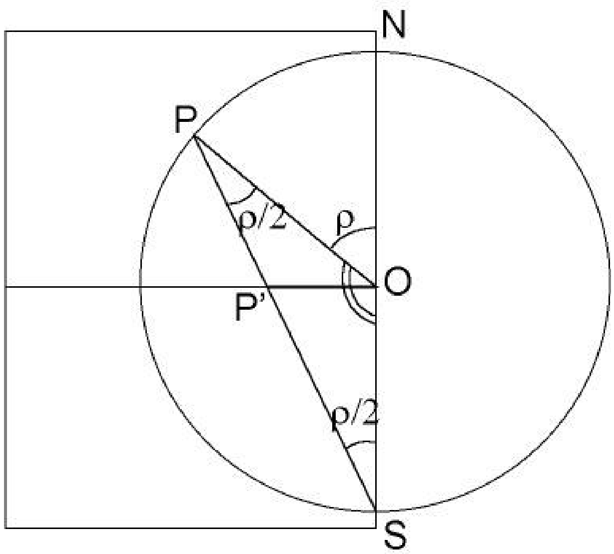



Por construcción, el ángulo OSP' vale $\rho/2$, por tanto, el segmento OP' es fácilmente calculable en función del radio de la esfera de proyección.

En efecto, si se dibuja la sección de la esfera para el meridiano que contiene el polo proyectado P, se ve que el triangulo OPS es isósceles, y como la coordenada de P es $\rho$, el ángulo O vale 180-$\rho$, y los P y S $\rho/2$. Por tanto, y considerando el triangulo OP'S (rectángulo por construcción), se puede calcular que

$$OP' = OS \cdot tag(\rho/2),$$

siendo OS el radio con el que se ha dibujado la esfera de proyección y, por tanto, el circulo de la proyección estereográfica.




**Proyección de los cristales**

Para orientar debidamente los cristales y que las diversas proyecciones sean comparables, existen algunas normas respecto a su orientación en la esfera polar:

- el eje *c* se hace coincidir con el polo N

- el eje *b* se proyecta sobre el meridiano de origen de coordenadas (situado siempre a la izquierda), de manera que $\phi$=0º, mientras que $\rho$ depende del ángulo que forma con *c*, es decir $\alpha$.
- el eje *a* queda determinado por la posición de los otros dos, en cualquier caso $\phi=\gamma$, ι $\rho=\beta$.

Resumiendo:

| | $\phi$ | $\rho$ |
|---|---|---|
| **a** | $\gamma$ | $\beta$ |
| **b** | 0≡ | $\alpha$ |
| **c** | – | 0≡ |

**Formas cristalinas**

Una forma cristalina es un conjunto de caras relacionadas por la simetría de un grupo puntual. La forma de un cristal, por tanto, está formada por una o varias formas cristalinas, obviamente correspondientes al grupo puntual del cristal. La notación de una forma cristalina es:

$\{hkl\}$ ,  siendo (hkl) la cara generadora.

El número de caras que tiene una determinada forma depende de dos factores:
- de la simetría del grupo puntual: parece lógico pensar que las formas de los grupos de elevada simetría tendrán más caras que las de orden muy bajo.

Una cara generadora en una orientación general en el grupo 6, por ejemplo, da lugar a cinco caras más, de manera que la forma tiene un total de seis caras. La misma cara, en igual orientación, en el grupo 2, genera otra cara, y la forma tiene dos caras.

- de la orientación de la cara generadora respecto de los elementos de simetría. Una cara orientada perpendicularmente a un eje senario no genera otras caras, mientras que la misma cara en posición general genera cinco más.

Es posible hacer un cálculo del número de caras que aparecen a partir de una cara generadora en posición general, por un grupo puntual determinado: se ha visto que un eje de orden n genera (n-1) nuevas caras por tanto, si en un grupo hay p ejes de orden n, se generarán p(n-1) nuevas caras. Por tanto, teniendo en cuenta los ejes de simetría de un grupo, el número de caras generadas a partir de una determinada es:

$$m = 1 + p_1(n_1 - 1) + p_2(n_2 - 1) + \ldots = 1 + \sum p_i(n_i - 1)$$

si el grupo contiene planos de simetría o centros de inversión, este número se ha de multiplicar por dos.

Este número se conoce como *multiplicidad del grupo*.

Si la cara generadora es perpendicular a un plano m, la multiplicidad para esta será la mitad de la general del grupo, i si es perpendicular a un eje de orden n, su multiplicidad será la del grupo dividida por n. Y en el caso de perpendicularidad simultáneamente a un eje de orden n y un plano, la multiplicidad de esta será la del grupo dividida por 2·m.