Grupos espaciales de simetría

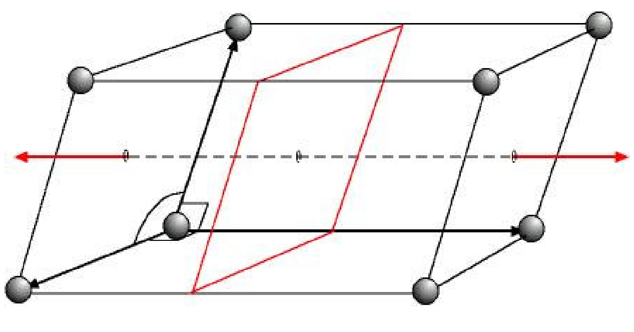
La simetría de los átomos que constituyen el cristal se describe con un grupo de simetría espacial constituido por un subgrupo de traslación (el retículo) y determinados elementos de simetría, que pueden incluir elementos sencillos (centro de inversión, ejes de giro, plano de reflexión) y otros de compuestos (ejes helicoidales, planos de deslizamiento...).

La totalidad de la figura infinita se puede describir como aquella parte que ocupa la celda fundamental (el **motivo**), dado que el resto del espacio es la repetición periódica de este. Por tanto, únicamente hay que precisar los elementos de simetría de la celda fundamental y especificar el tipo de retículo.

En el motivo se puede identificar la **unidad asimétrica**, que es la mínima unidad a partir de la cual se puede generar el motivo por simetría, y el resto del cristal por traslaciones. El número de unidades asimétricas del motivo se conoce como **multiplicidad**, y en todos los casos será el producto de la multiplicidad de la celda fundamental por la del grupo de elementos de simetría.

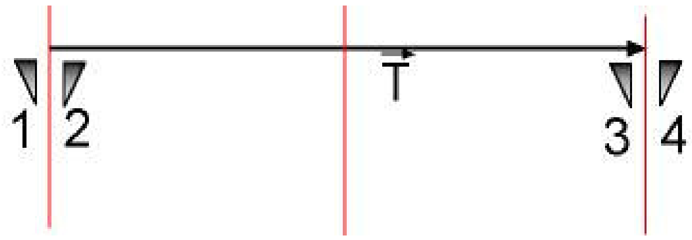
La notación de los grupos de simetría espacial se hace con una letra que identifica el tipo de retículo (mayúscula si es tridimensional o minúscula en dos dimensiones), seguida de la notación de Herman-Maungin del grupo de simetría correspondiente.

Por ejemplo *C2/c, Ibcn,* $I4_2/m$, son posibles notaciones de grupos de simetría espacial. La letra identifica el retículo, y la expresión de los elementos de simetría no deja dudas respecto del sistema al que pertenece el grupo. En la mayoría de los casos no hay duda de la posición relativa de los elementos de simetría respecto de los vectores fundamentales (o de los ejes x, y y z), pero en el caso del sistema rómbico, hay que especificar el orden que se utiliza en la notación. Por convenio, la primera parte hace referencia al eje *x*, la segunda al *y* y la tercera al *z*. Así, por ejemplo, la notación *Ibcn* significa que perpendicular a $\vec{a}$ hay un plano de deslizamiento b, perpendicular a $\vec{b}$ un plano c, y perpendicular a $\vec{c}$ un plano n.



En el resto de sistemas, la propia forma del retículo implica una determinada posición relativa de los elementos de simetría. Por ejemplo en el grupo *C2/c*, del sistema monoclínico, la única posición posible para el eje binario, de manera que sea compatible con la simetría del retículo, es paralela a $\vec{b}$, y por tanto el plano c es perpendicular a $\vec{b}$.

Igualmente, en sistemas como el tetragonal o el hexagonal, la única posición posible para el eje cuaternario o senario, respectivamente, es en la dirección de $\vec{c}$



Grupos de elementos de simetría

La propia existencia de la traslación sugiere que un elemento de simetría no puede estar solo y aislado, sino que aplicando la traslación se repetirá formando un grupo de elementos paralelos. Cuando un elemento de simetría tiene algún vector del retículo perpendicular, aparecen elementos cada media traslación. Esto se puede ver en algunos ejemplos:

Si hay un plano de simetría m y una traslación T del cristal perpendicular, aparece otro plano m al final del vector traslación. Supuesta una figura 1, por la simetría del primer plano m se forma la figura 2, y aplicando T salen las figuras 3 y 4. Se puede ver fácilmente que entre las cuatro figuras hay un tercer plano de simetría m en T/2. Por tanto, se puede afirmar que la presencia de un plano m y una traslación del retículo perpendicular, genera un plano m cada T/2.

Es fácilmente demostrable que esta afirmación es válida para otros elementos de simetría, como los ejes binarios, planos de deslizamiento, ejes binarios helicoidales, etc.

Grupos de simetría espacial bidimensionales

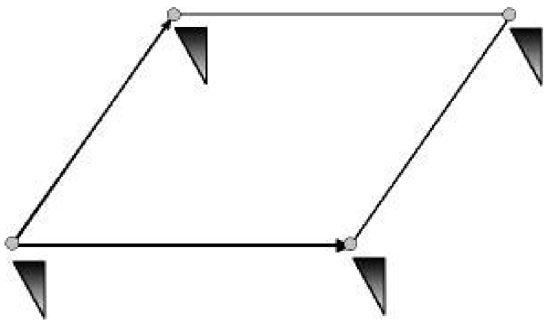
Se demuestra que solo hay 17 grupos posibles de simetría espacial en dos dimensiones, es decir que solo hay 17 maneras posibles de llenar una superficie plana de manera periódica. Los elementos de simetría posibles, dada la limitación de dimensiones, serán puntos de giro (1, 2, 3, 4 y 6), líneas de reflexión (m) y líneas de deslizamiento (g).

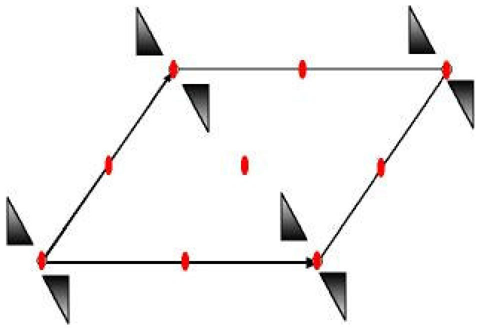
Para deducir los 17 grupos de simetría habrá que partir de los cinco posibles retículos planos y de las simetrías compatibles, es decir las que se derivan de los grupos planos con los elementos que lo permitan eventualmente convertidos en elementos compuestos con traslación: en este caso solo las líneas de reflexión m podrían ser líneas g de deslizamiento. Por tanto, los elementos de partida son:

TIPOS DE RED	SIMETRÍA	RETÍCULO(S)	SIMETRÍA COMPATIBLE
Oblicua	2	p	1, 2
Ortogonal	2mm	p, c	m, 2mm
Cuadrada	4mm	p	4, 4mm
Hexagonal	6mm	p	6, 3, 6mm, 3m

<u>Red oblicua</u> $a \neq b$; γ *sin restricciones*

Grupos posibles: p1 p2



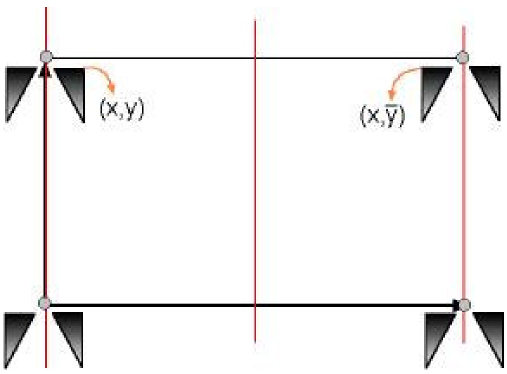


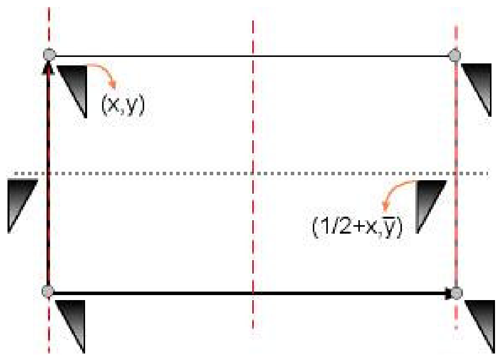
p1, multiplicidad m=1

p2, multiplicidad m=2

<u>Red ortogonal</u> $a \neq b$; $\gamma = 90º$ Retículos p y c

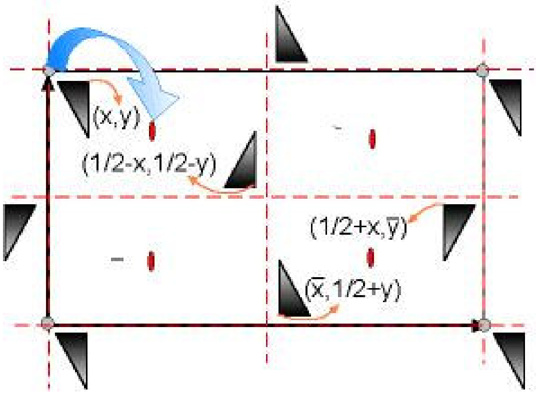
Grupos posibles . Retículo p :*pm, pg, pmm, pmg, pgg* Retículo c: *cm, cg, cmm, cmg, cgg*

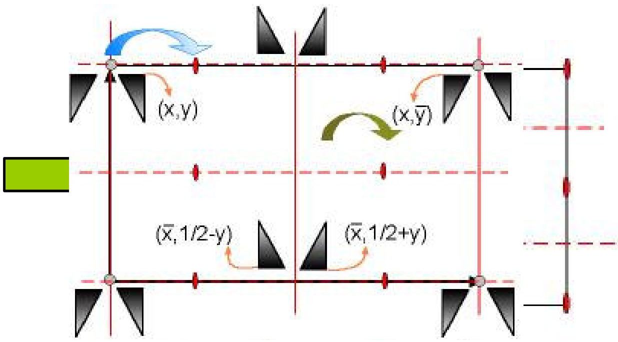




pm multiplicidad m=2

pg multiplicidad m=2

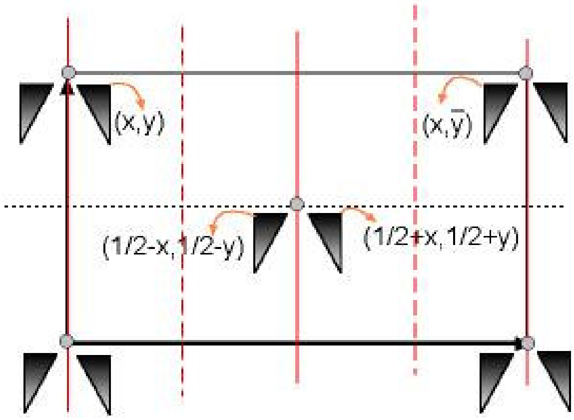




pm

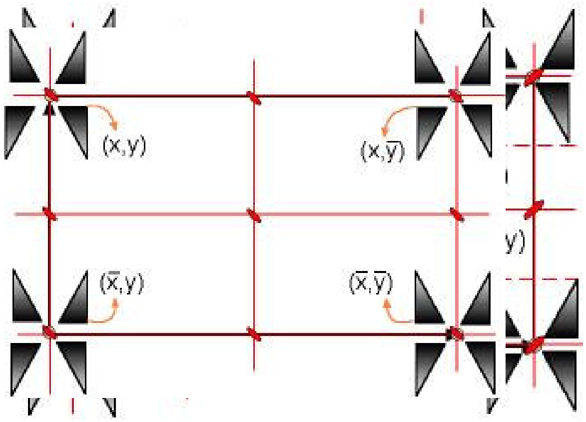
m multiplicidad m=4

pmg multiplicidad m=4
hay que redefinir el origen para situarlo sobre el elemento de menos dimensión



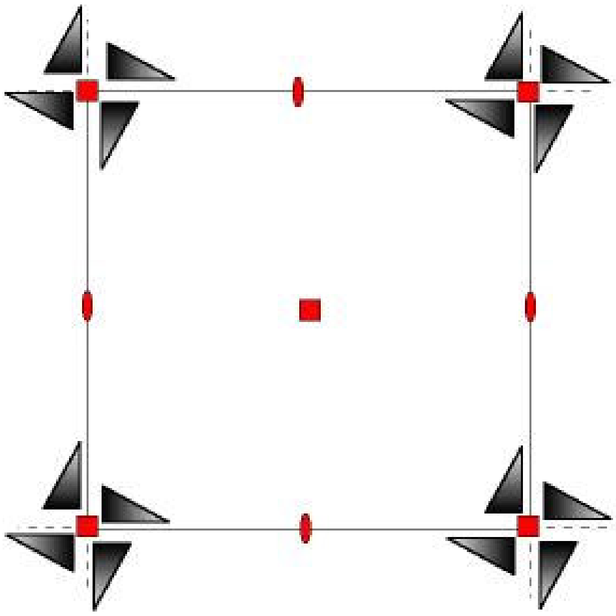
pgg multiplicidad m=4. Hay que redefinir el origen para colocarlo sobre un punto de giro binario a (1/4,1/4), con lo cual la proyección habitual del grupo queda como la figura de la derecha.

Este grupo es igual al *cg*, que equivaldría a desplazar el origen b/4.



cm multiplicidad m=4 (multiplicidad del retículo=2·multiplicidad de la simetría=2). Existe una traslación en el interior de la celda a/2+b/2.

Este grupo es el mismo que los *cgg* y el *cgm*, que equivaldría a desplazar el origen a a/4+b/4 o a b/4, respectivamente.

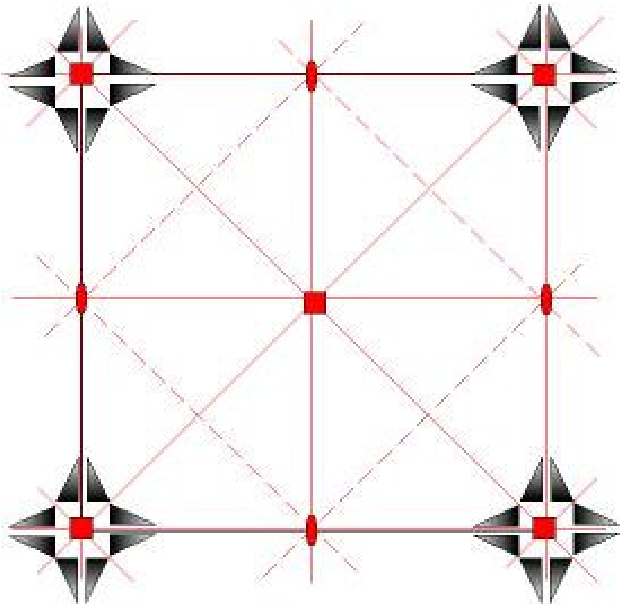


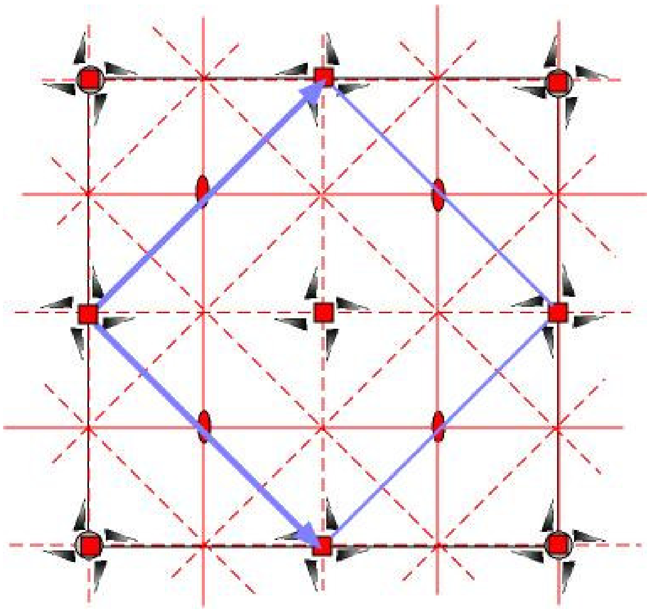
cmm multiplicidad m=8 (4 de la simetría * 2 del retículo). Existe una traslación en el interior de la celda a/2+b/2.

<u>Red cuadrada</u> $a = b$; $\gamma = 90º$ Retículo p

Grupos posibles *p4, p4mm, p4mg, p4gg*

p4 multiplicidad m=4

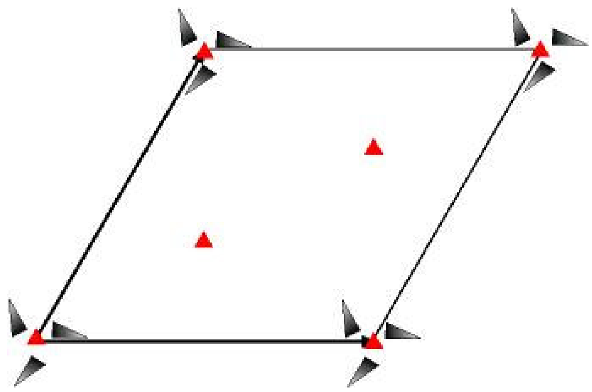




p4mm   Multiplicidad m=8
Este grupo es equivalente al *p4gm*

p4gg Multiplicidad m=8

Equivale al grupo *p4mg*

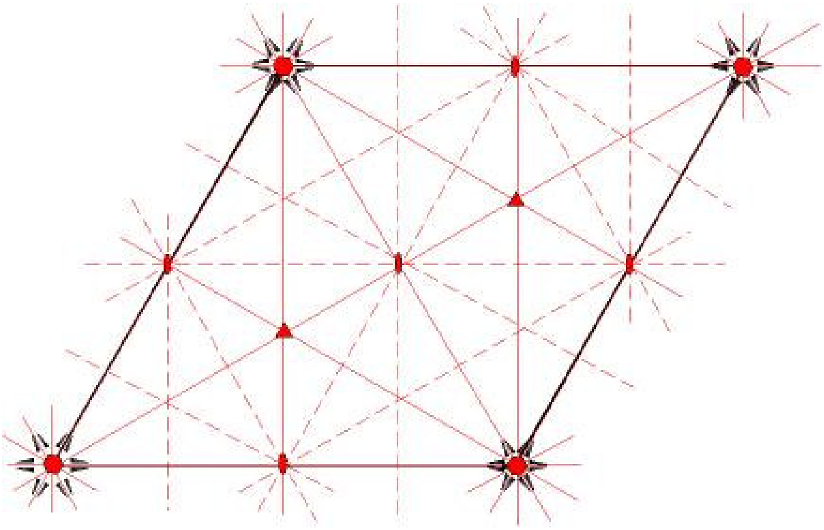


De su desarrollo se deduce la existencia de una celda fundamental más pequeña (señalada con vectores de color azul), que es la que se adopta.

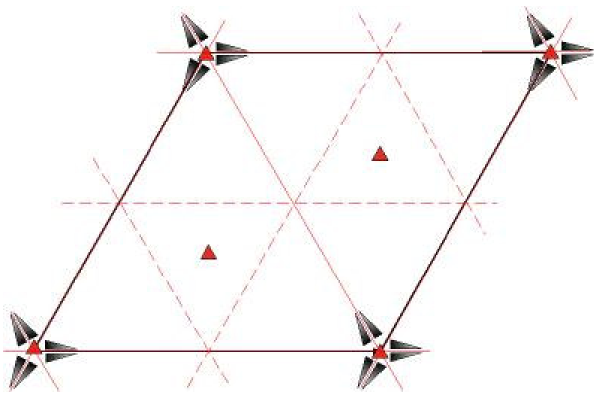
<u>Red hexagonal</u> $a = b$; $\gamma = 60º$ Retículo p

Posibles grupos *p6, p3, p6mm, p6mg, p6gg, p3g, p3m* (este puede tener el plano m en dos posiciones posibles, y por tanto salen dos grupos, el p31m y el p3m1)

p3   Multiplicidad m=3

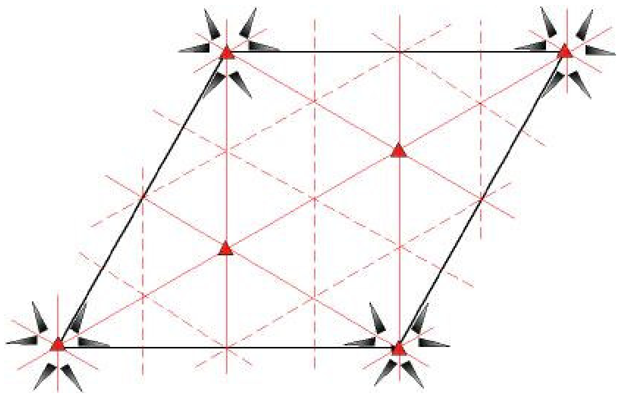


p6   Multiplicidad m=6

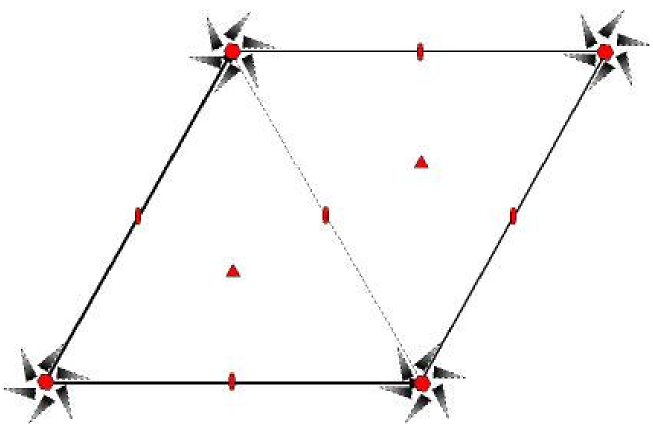


p6mm, equivalente a los *p6mg* y *p6gg*

Multiplicidad m=12



p31m   Multiplicidad m=6



p3m1 Multiplicidad m=6

La diferencia entre los dos grupos es la posición relativa de los planos m, siguiendo los vectores del retículo en el primer caso, o formando un ángulo de 30º con estos en el otro. En las notaciones se coloca el eje monario para diferenciarlos un y otro.