

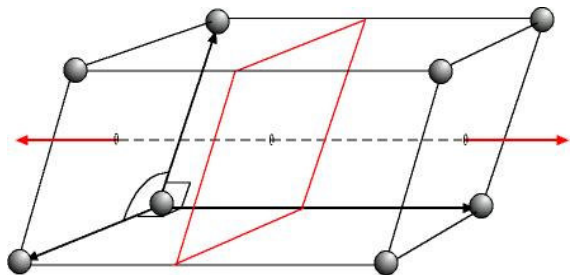
Grupos espaciales en tres dimensiones

Efectuando las combinaciones posibles de los 14 subgrupos de traslación (los 14 retículos de Bravais) con las simetrías de los grupos puntuales correspondientes, con los elementos de simetría eventualmente convertidos en elementos compuestos incorporando traslación (ejes helicoidales y planos de deslizamiento), se puede deducir la existencia de 230 grupos de simetría espacial.

En las Tablas Internacionales de Cristalografía hay el desarrollo de cada uno de los grupos, los subgrupos correspondientes, las coordenadas de la posición general, así como las de las posiciones especiales. Se sugiere al estudiante la consulta de esta bibliografía como complemento de las prácticas correspondientes.

A manera de ejemplo, aquí se hará la deducción de los grupos de simetría espacial del sistema monoclinico. Por eso se ha de partir de los retículos monoclinicos P y C, las características de los cuales son

$$a \neq b \neq c, \quad \alpha = \gamma \neq \beta > 90^\circ$$



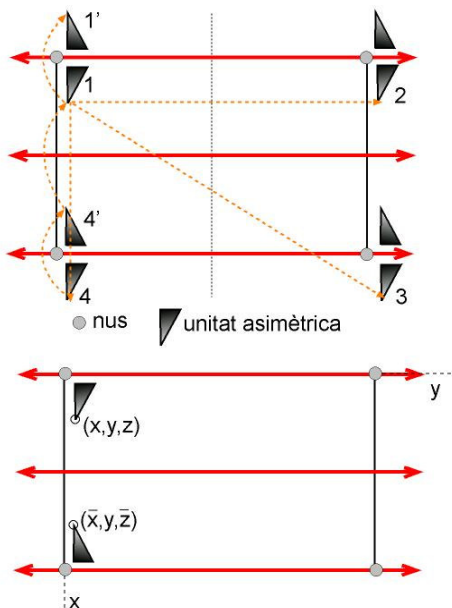
La simetría de esta distribución de nudos es $2/m$, como se ve en la figura. Por tanto, los grupos puntuales compatibles con este retículo son el 2, m y $2/m$. La cual cosa da la siguiente lista de posibles combinaciones a considerar

Retículo P: $P2, Pm, P2/m, P2_1, Pc, P2_1/m, P2/c, P2_1/c$

Retículo C: $C2, Cm, C2/m, C2_1, Cc, C2_1/m, C2/c, C2_1/c$

lista que se ha obtenido de combinar cada retículo con los grupos puntuales compatibles, y seguidamente considerar la posibilidad de que cada uno de los elementos incorpore traslación ($2 \rightarrow 2_1$, y $m \rightarrow c$). De hecho hay que considerar que el plano m, orientado (010) en el monoclinico podría ser c, a o n, pero las tres posibilidades son equivalentes simplemente efectuando un re-etiquetaje de los ejes a y c.

P2



Sobre una proyección (001) de la celda monoclinica se coloca un eje binario en la única posición posible: paralelo a b. Como que la traslación a es perpendicular al eje, habrá un eje cada a/2 (y aunque no queda reflejado en la proyección, también cada c/2). Se coloca la unidad asimétrica (u.a.) **1** asociada a un nudo, y aplicando las traslaciones del retículo se generan las 2, 3 y 4 (una asociada a cada nudo, aunque fuera de la celda). El eje binario hace aparecer la u.a. **1'** por un giro de la **1**, y la **4'** por un giro de la **4**. Entonces, las dos u.a. ubicadas dentro de la celda (**4'** i **1**) se relacionan con el eje binario situado en a/2.

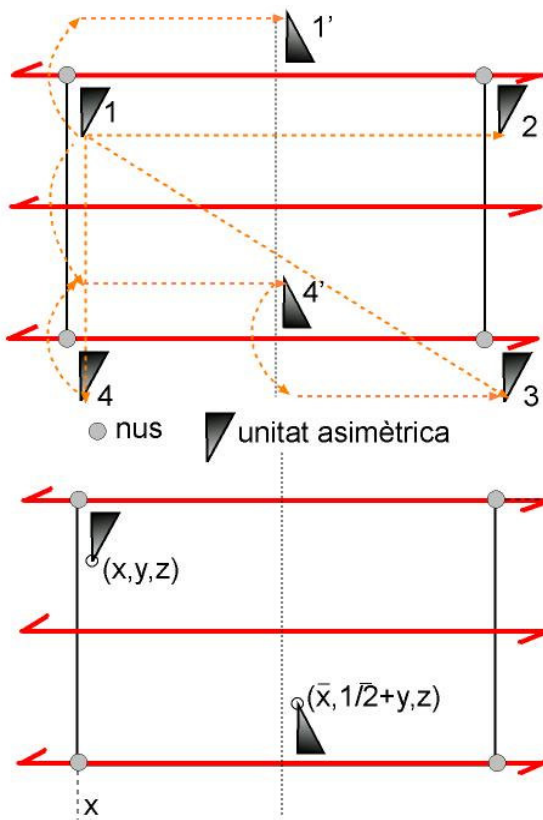
La matriz de la operación que genera un eje binario paralelo a [010] es

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \text{ por tanto el resultado de su aplicación en un punto de la u.a. } (x,y,z)$$

es

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ -z \end{pmatrix}$$

P2'



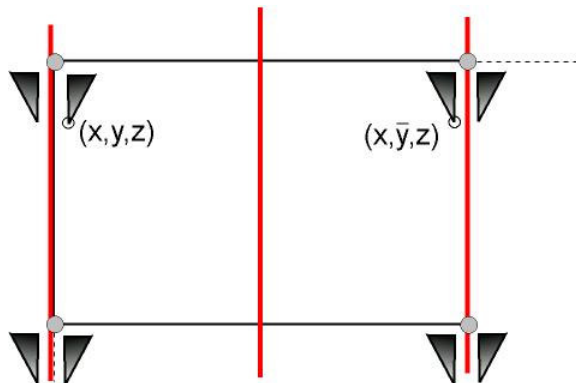
P2₁

Como en el caso anterior, la u.a. **1** se traslada a **2**, **3** y **4**. Por el eje binario helicoidal pasa a **1'**, y la **4** a la **4'**, que a la vez se relaciona con el eje 2₁ con la **3**.

Aplicando al punto (x,y,z) la matriz de transformación del 2₁ paralelo a [010],

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ \frac{1}{2} + y \\ -z \end{pmatrix}$$

operación que se puede ver gráficamente en la figura inferior.

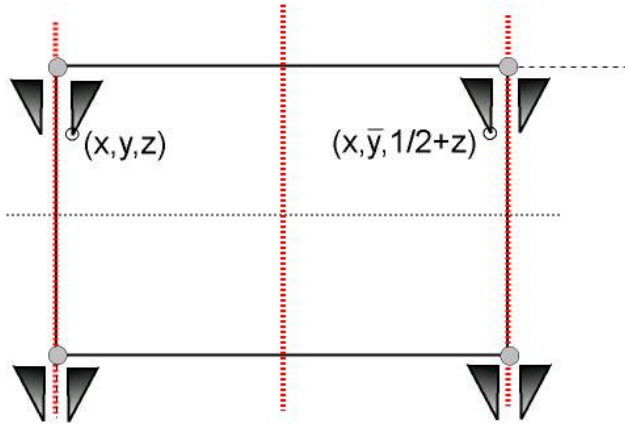


Pm

El proceso es igual que en el caso anterior, para compatibilidad con el retículo, el plano ha de ser perpendicular a *b*.

La operación matricial es

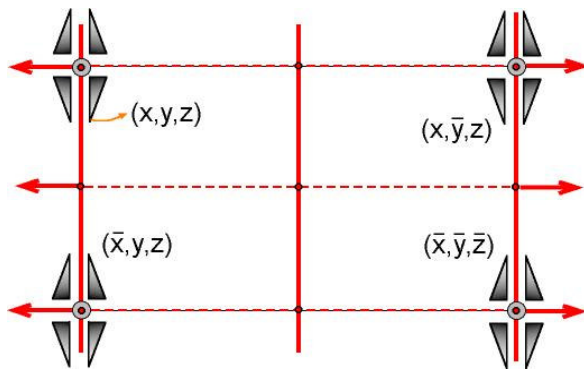
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$$



Pc

El plano c implica una reflexión seguida de una traslación $c/2$, por tanto el punto simétrico del (x,y,z) es

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ 1/2 + z \end{pmatrix}$$



P2/m

La existencia de un plano m y un eje 2 perpendicular, genera un centro de inversión al punto de intersección.

Las operaciones de simetría son las siguientes,

y aplicadas a un punto en posición general (x,y,z) :

- plano m perpendicular a b

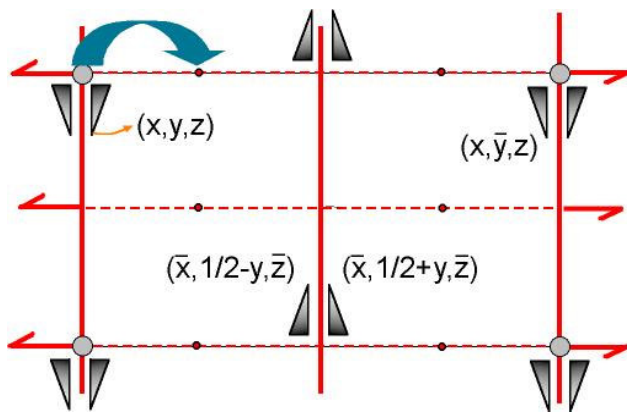
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$$

- eje 2 paralelo a b

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ -z \end{pmatrix}$$

- centro de inversión en $(0,0,0)$

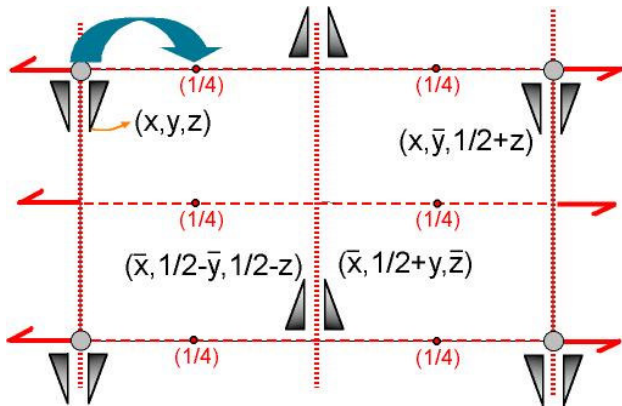
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}$$



$P2_1/m$

En este caso la aplicación del plano m sobre el punto $a(x, y, z)$ da lugar a la imagen $(x, -y, z)$, y aplicando el binario helicoidal al mismo punto se genera el $(-x, 1/2-y, -z)$. A la vez, al reflejar este último con el plano m , aparece el $(-x, 1/2+y, -z)$, que cuando se trata de relacionar con el de partida (x, y, z) se encuentra la presencia de un centro de

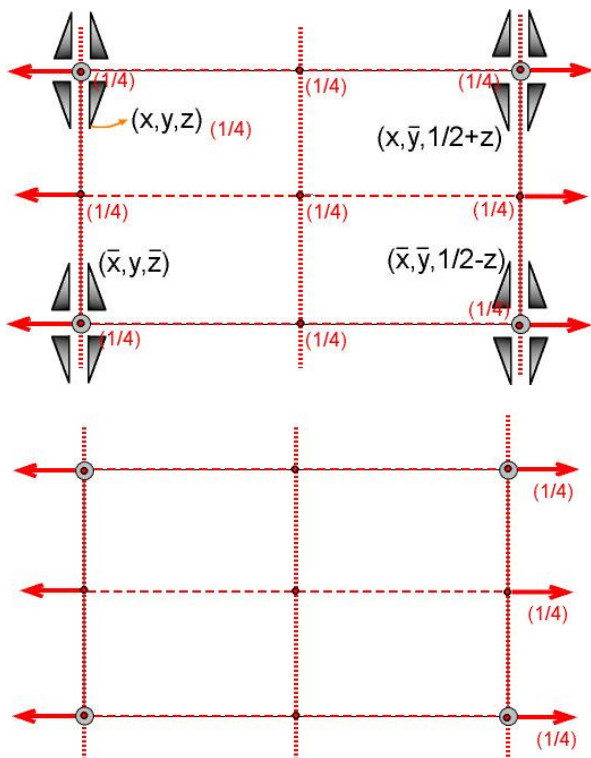
inversión en coordenadas $(1/4, 1/4, 0)$, y por tanto también en la posición equivalente $(0, 1/4, 0)$, donde hay que situar el origen en una redefinición del retículo.



$P2_1/c$

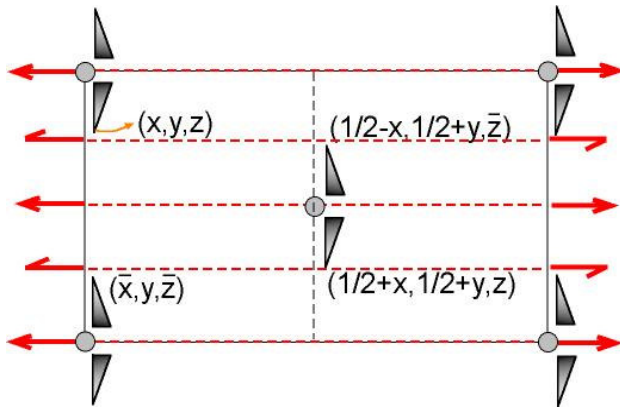
Como en el caso anterior, aplicando el plano de deslizamiento c , la imagen del punto (x, y, z) es $(x, -y, 1/2+z)$, y con el eje binario helicoidal es $(-x, 1/2+y, -z)$. A la vez, aplicando el plano c en este último $(-x, 1/2-y, 1/2-z)$, que a la vez se relaciona con el (x, y, z) para un centro de inversión en $(1/4, 1/4, 1/4)$.

Hay una redefinición del origen en el centro ubicado en $(0, 1/4, 1/4)$.



$P2/c$

Las imágenes del punto (x, y, z) para el plano c y para el eje binario son $(x, -y, 1/2+z)$ y $(-x, y, -z)$, respectivamente. Aplicando el plano c a esta última se genera el punto $(-x, -y, 1/2-z)$, que se relaciona con el primero por un centro de inversión en $(1/2, 1/2, 1/4)$, y por tanto, hay que redefinir el origen en $(0, 0, 1/4)$ del inicial, con lo cual la proyección queda de la siguiente manera



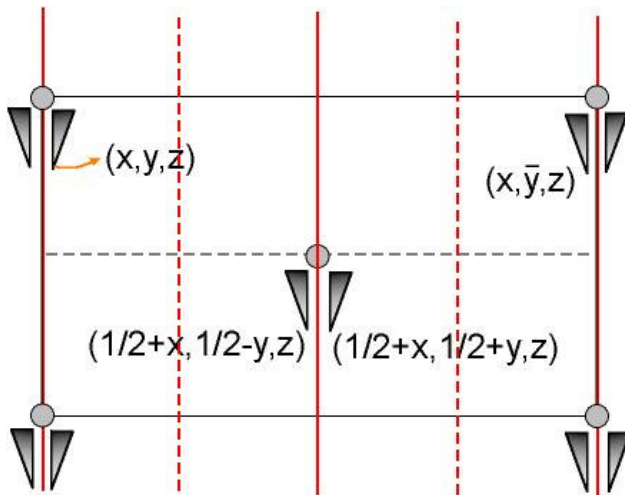
Por lo que respecta a los grupos monoclinicos centrados, los posibles son $C2$, Cm , $C2/m$, $C2_1$, Cc , $C2_1/m$, $C2/c$, $C2_1/c$.

C2

En este retículo hay un nudo en $(1/2, 1/2, 0)$, por tanto, hay una unidad asimétrica (un triángulo) relacionado con el (x, y, z) en $(1/2+x, 1/2+y, z)$.

Aplicando el eje binario en estas dos posiciones, resultan las $(-x, y, -z)$ y $(1/2-x, 1/2+y, -z)$, respectivamente. Esta última se relaciona con la (x, y, z) por un eje binario helicoidal, como se muestra en la figura.

Por tanto, este grupo es equivalente al $C2_1$.

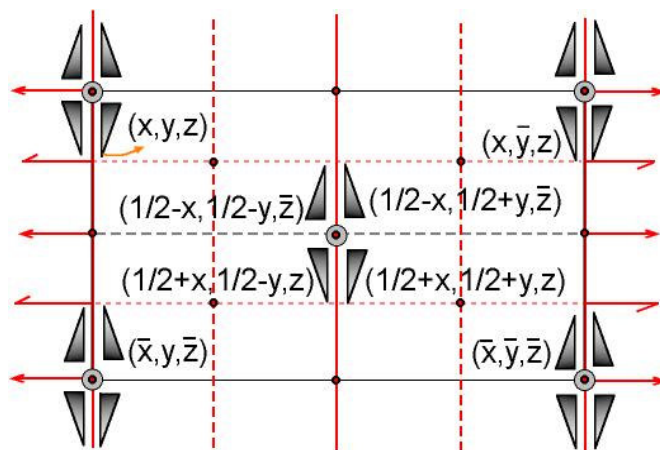


Cm

La aplicación del plano de reflexión m a las unidades (x, y, z) y $(1/2+x, 1/2+y, z)$ se generan las $(x, -y, z)$ y $(1/2+x, 1/2-y, z)$, respectivamente. A la vez, esta última se relaciona con la (x, y, z) por un plano de deslizamiento situado en $b/4$.

Este grupo, de acuerdo con la figura se equivalente al Ca , pero también al Cc , dado que si se convierte el vector a en el c , y al revés, este grupo es el Cc . Hay que recordar que la

asignación de nombres a los vectores es arbitraria, especialmente a los a y c en este caso, que no afectan a la orientación de la simetría.



C2/m

La aplicación del eje binario y del plano m genera un centro de inversión en $(0,0,0)$, y a la vez, el hecho de ser un retículo C da lugar a la aparición de un eje binario helicoidal en $a/4$ y de un

plano de deslizamiento a .

Este grupo es equivalente a los C_{2_1}/m , C_{2_1}/c , C_{2_1}/a , $C_{2/c}$, $C_{2/a}$.