SIMETRIA

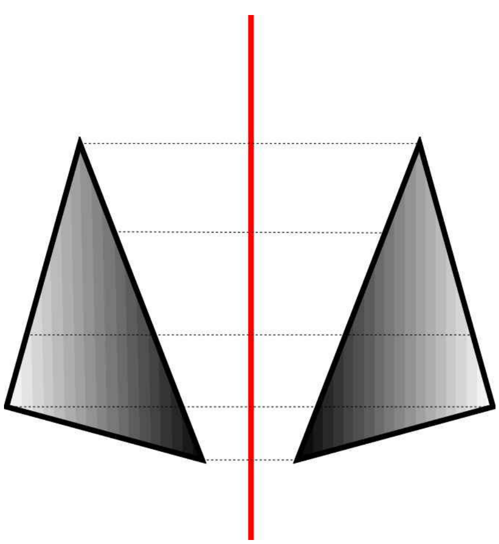
La pròpia idea de periodicitat porta implícita la idea (si més no intuitiva) de que ha d'existir certa simetria en els cristalls. De fet, la pròpia translació és un element de simetria, per be que només es apreciable quan es considera l'escala atòmica (relaciona grups d'àtoms - el motiu -). Per tant, segons es consideri el model microscòpic (a escala atòmica) o macroscòpic de cristall, la translació es contemplarà com element de simetria o no, respectivament.

El model macroscòpic del cristall el considera una massa homogènia i, per tant, la translació no formarà part dels elements de simetria. Mentre que en el model microscòpic, els vectors translació relacionen punts homòlegs en els conjunts d'àtoms que formen el cristall.

La simetria que descriu el model macroscòpic s'anomena **simetria puntual o finita**, mentre que la que descriu el model microscòpic, **simetria espacial o infinita**.

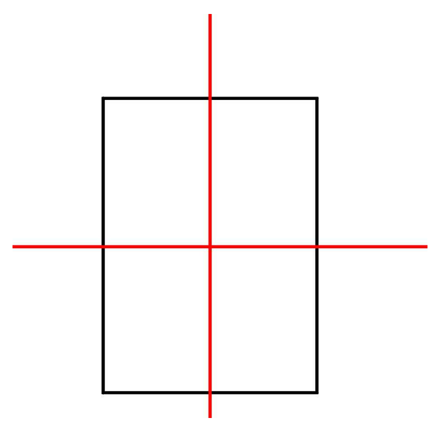
Pel que fa a la **SIMETRIA FINITA** o puntual es pot considerar la simetria respecte d'un pla, d'un eix o d'un punt, i les combinacions entre aquests operadors.

Simetria respecte d'un pla



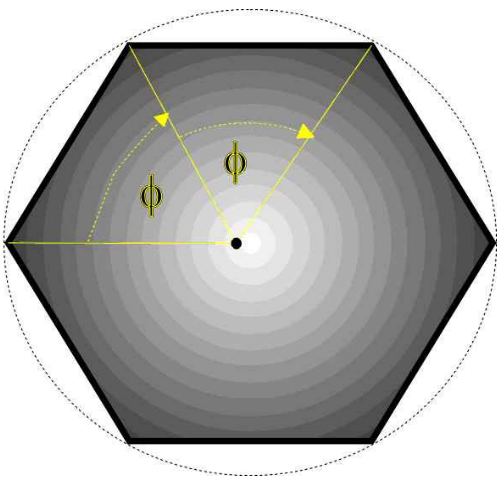
Dos objectes són simètrics respecte d'un pla quan totes les rectes que uneixen parelles de punts homòlegs en un i altre són perpendiculars al pla i aquests determina en totes elles segments iguals.

Un objecte poseeix simetria respecte d'un pla quan aquest compleix l'anterior condición per a dues meitats de l'objecte.



En Cristal·lografia s'utilitza la notació de Herman-Maugin, en la qual el pla de simetria (o pla de reflexió) es descriu com **m**.

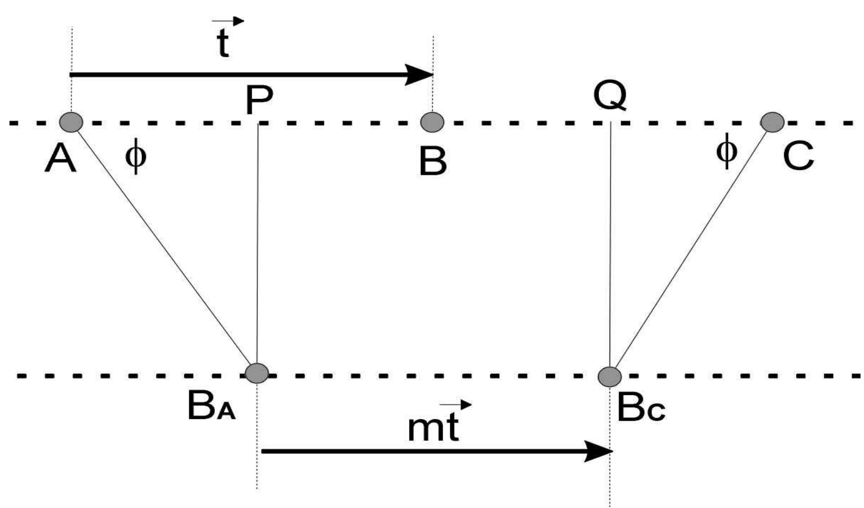
Simetria respecte d'una recta (eix de simetria)



En aquest tipus de simetria, els punts homòlegs de la figura descriuen arcs iguals, en el mateix sentit al voltant d'un eix. Si el gir val $2\pi/n$, es diu que l'eix de simetria és d'ordre **n**. En la notació de Herman-Maugin, la notació dels eixos es fa amb el número de l'ordre **n**.

El fet que el cristall sigui un medi periòdic limita els possibles ordres de eixos de simetria a 1, 2, 3, 4 i 6, fet que es pot demostrar a partir dels conceptes de periodicitat explicats anteriorment.

Suposada una filera reticular com la de la figura amb els nusos A, B i C, on la translació al llarg de la filera és $\vec{t}$. Si en el nus A hi ha un eix de simetria, en aplicació del postulat reticular, a cada nus hi haurà un eix de simetria igual.



L'eix del nus A relaciona el nus B amb un altre situat a B_A, i el que passa per C relacionarà el nus B amb el B_C, ambdós girant un angle ϕ. Per construcció, els nusos B_A i B_C formen part d'una filera paral·lela a l'anterior (ABC), i per tant els nusos estaran separats per una translació múltiple de la que relaciona els nusos A i B, és a dir $m\vec{t}$, essent *m* un nombre enter (en la figura *m*=1).

Pels punts B_A i B_C s'hi fan perpendiculars que intersecten la filera ABC als punts P i Q. Per construcció els triangles AP B_A i AQB_C són rectangles i per tant

$$AP = CQ = a \cdot \cos\phi$$

també es compleix que $PQ = m\vec{t}$ i com que CA=AP+PQ+QC substituint queda

$$2 \cdot \vec{t} = 2 \cdot \vec{t} \cdot \cos\phi \quad \text{i dividint per 2a} \qquad 1 = \cos\phi + m/2 \; (1)$$

el cosinus de qualsevol angle té valors entre +1 i -1, els valors extrems de *m* es poden calcular fent

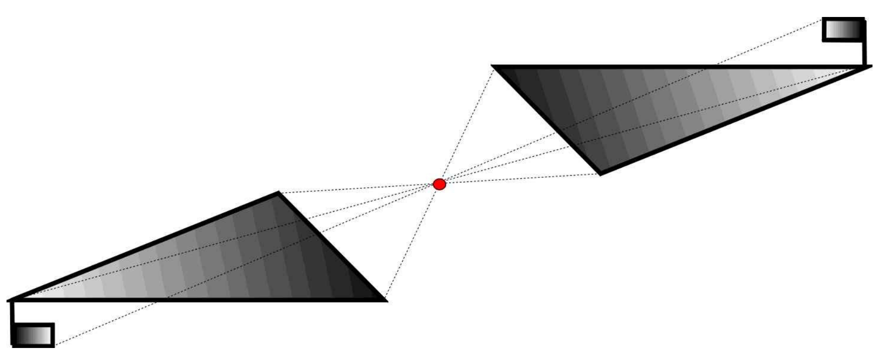
$$1 = 1 + m/2 \qquad \text{d'on} \quad m=0$$

i $$1 = -1 + m/2 \qquad \text{d'on} \quad m=4$$

Per tant, en l'entorn dels valors 1 i -1 del cosinus *m* pren els valors 0, 1, 2, 3 o 4 (cal recordar que *m* és un nombre enter). Així dons, substituint els valors possibles de *m* en l'equació *(1)* es pot conèixer els possibles angles de gir, i per tant, els possibles ordres dels eixos:

per *m*=0, l'angle val 0º o 360º, i l'ordre de l'eix és 1
per *m*=1, l'angle val 60º, i l'ordre de l'eix és 6
per *m*=2, l'angle val 90º, i l'ordre de l'eix és 4
per *m*=3, l'angle val 120º, i l'ordre de l'eix és 3, i
per *m*=4, l'angle val 180º, i l'ordre de l'eix és 2

És a dir, que els eixos possibles en un medi periòdic són 1, 2, 3, 4 i 6.



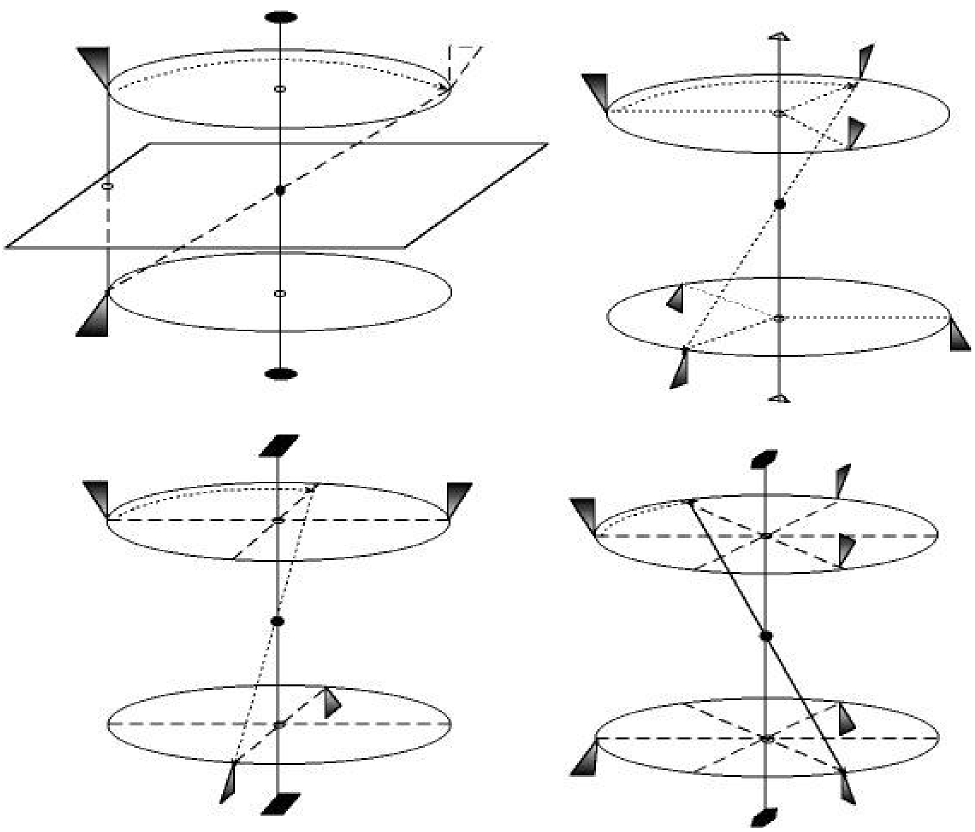
Simetria respecte d'un punt
(centre d'inversió o de simetria)

Dues figures són simètriques respecte d'un punt quan les rectes que uneixen punts homòlegs d'ambdues es tallen en aquest punt, el qual hi determina segments iguals

Elements compostos de simetria

Existeixen altres elements de simetria, l'operació dels quals implica l'aplicació successiva de dos moviments corresponents a dos elements senzills de simetria (els anteriorment explicats). Així es poden deduir **eixos d'inversió** i **eixos de reflexió**. En un i altre cas, l'operació consisteix en un gir (d'acord amb l'ordre de l'eix) seguit d'una inversió o una reflexió, respectivament.

Es demostra que tots els eixos de reflexió tenen equivalència amb eixos d'inversió, per tant es deduiran només aquests darrers. A la següent figura s'ha representat els moviments dels eixos binari, ternari, quaternari i senari d'inversió, aplicats a una figura triangular. Es pot apreciar que s'acompleixen les següents equivalències:



$$\bar{2} \rightarrow m$$

$$\bar{3} \rightarrow 3 + \bar{1}$$

$$\bar{4} \rightarrow \textit{no te equivalencia}$$

$$\bar{6} \rightarrow 3/m$$

De fet, l'eix quaternari d'inversió equival a un quaternari de reflexió, però per conveni només s'utilitza el d'inversió.

En resum, els possibles elements de simetria puntual són

eixos de gir **1, 2, 3, 4** i **6**
pla de simetria **m**
centre d'inversió $\bar{1}$
eix d'inversió $\bar{4}$

per be que sovint s'usen les notacions $\bar{3}$ *i* $\bar{6}$ per indicar les corresponents equivalències.

VEGEU LA PÀGINA **http://161.116.85.21/crista/elements2D.htm**

PELS MOVIMENTS DELS ELEMENTS DE SIMETRIA EN DUES DIMENSIONS