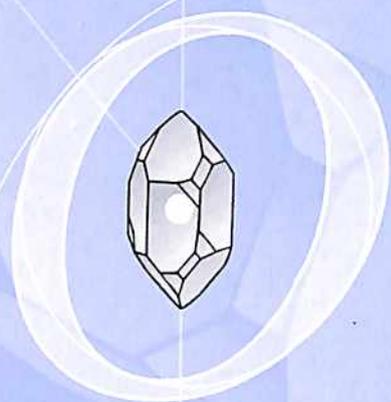


ACADEMIA COLOMBIANA DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES  
COLECCIÓN JULIO CARRIZOSA VALENZUELA No. 9  
COEDICIÓN CON LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Elementos  
Geométricos  
*de la*

CRISTAL



GRAFÍA

Elementos Geométricos *de la*  
Cristalografía

J u a n   d e   D i o s   V a r e l a

ACADEMIA COLOMBIANA DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES  
COLECCIÓN JULIO CARRIZOSA VALENZUELA No. 9  
COEDICIÓN CON LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA



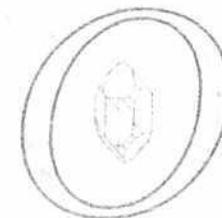
UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE COLOMBIA  
Sede Santafé de Bogotá

*Elementos Geométricos  
de la Cristalografía*

Juan de Dios Varela  
*profesor titular de la Universidad Nacional Ph. D.*

Elementos  
Geométricos  
de la

CRISTAL



GRAFÍA

BOGOTÁ, D.C., COLOMBIA 2000

© *Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*  
Trans. 27 No. 39A - 63 - Tel.: 3680365 - Fax: (571) 368 0365  
Apartado Aéreo 44763 - URL: <http://www.accefyn.org.co>

© Universidad Nacional de Colombia  
Vicerrectoría Sede Santafé de Bogotá  
Tel.: 3165235 - 3165000 ext. 18227  
e-mail: [diracude@bacata.usc.unal.edu.co](mailto:diracude@bacata.usc.unal.edu.co)

© Juan de Dios Varela M.  
e-mail: [juvarela@ciencias.ciencias.unal.edu.co](mailto:juvarela@ciencias.ciencias.unal.edu.co)

Reservados todos los derechos. Este libro no puede ser reproducido total o parcialmente sin autorización.

ISBN: 958-9205-28-3 Obra completa  
ISBN: 958-9205-44-5 Volumen

*Clasificación Dewey: 548.81*

*Materias: Cristalografía geométrica - elementos y sistemas de simetría - grupos de simetría*

Esta obra ha sido posible gracias a la colaboración  
del Ministerio de Educación Nacional

*República de Colombia*

**MINISTERIO DE EDUCACION NACIONAL**



Diseño y Carátula:  
demente  
e-mail: [demente\\_uno@yahoo.com](mailto:demente_uno@yahoo.com)  
Tel.: 3615673 - Santafé de Bogotá D.C.

Impresión:  
Sección de Publicaciones Universidad Nacional de Colombia.  
Tel.: 3165687 - Santafé de Bogotá D. C.

**Printed and Made in Colombia - Impreso en Colombia, 2000**

*A Larissa, Verónica y Luisa*

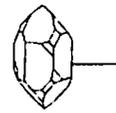


## *Prefacio*

La cristalografía, cuyo origen estuvo asociado al desarrollo empírico de la mineralogía de su tiempo, en el siglo XX ha pasado a ser una ciencia suficientemente independiente, con sus propios fines y métodos, pero a la vez interrelacionada con diversos campos científicos característicos de la contemporaneidad: los de la física, química, biología molecular, metalurgia, mineralogía, la síntesis de nuevos materiales para electrónica, óptica, acústica, la producción masiva de "minerales sintéticos" tales como micas, cuarzos, diamantes y muchos más.

Esta relación multidisciplinaria de la cristalografía, conectada con la práctica de sofisticadas técnicas de investigación, convoca cada vez mayor interés hacia ella por parte de especialistas y estudiantes de diferentes profesiones que, sin embargo, desean recibir en forma breve, clara y accesible las ideas básicas de la cristalografía, necesarias para su aplicación en los problemas del interés de cada quien. Satisfacer en buena medida esta necesidad, como también responder a la ausencia de textos adecuados a nuestras posibilidades y desarrollo, es lo que nos hemos propuesto con el presente trabajo.

Sin duda, las ideas más generales de la cristalografía, necesarias para su comprensión, son las derivadas de la simetría, de su relación geométrica y de la interpretación del espacio, que responden a la concepción de cristales ideales. Cualquier aplicación de la cristalografía a objetos concretos de la realidad, corresponderá a una cierta disgresión de dicha concepción ideal, de cuyas causas nunca podrá responder la cristalografía geométrica. Surgen así las especialidades cristalográficas: la cristalofísica, la cristalquímica, la biocristalografía y otras de las cuales sus objetos y métodos están por fuera de lo que el autor se ha propuesto en esta obra.



## INDICE ANALÍTICO

XI	LISTA DE TABLAS
XIII	LISTA DE FIGURAS
	PRIMERA PARTE
1	TRASCENDENCIA DE LA SIMETRÍA
3	I SIMETRÍA Y ESTRUCTURAL
3	1.1 La Simetría
12	1.2 La Estructura
	SEGUNDA PARTE
19	CRISTALOGRAFÍA MACROSCÓPICA
21	II SISTEMAS CRISTALINOS DE SIMETRÍA
21	2.1 Naturaleza de los Cristales
23	2.2 Red y Sistemas Cristalinos
26	2.3 Ley de Constancia de los Ángulos Diedros de los Cristales
26	2.4 La Proyección Estereográfica
30	2.5 Coordenadas Esféricas y la Red de Vulf
35	2.6 Algunas Soluciones Cristalográficas Sobre la Red de Vulf
39	III ELEMENTOS DE SIMETRÍA
40	3.1 El Centro de Simetría
41	3.2 Planos de Simetría
43	3.3 Ejes de Rotación
46	3.4 Ejes de Inversión y Ejes de Rotación Impropios
49	3.5 Notación y Representación Gráfica de los Elementos de Simetría
53	3.6 Combinación de los Elementos de Simetría

61	<b>IV LOS GRUPOS DE SIMETRÍA CRISTALINA</b>
61	4.1 Sistemas de Puntos Simétricamente Equivalentes
63	4.2 Grupos de Simetría Puntual
69	4.3 Direcciones Unitarias y los Grados de Simetría
73	4.4 Deducción de los Grupos de Puntuales de Simetría Cristalina
85	4.5 Nomenclatura de los Grupos de Simetría Puntual
91	4.6 Proyección Estereográfica de los Grupos Puntuales
95	<b>V MORFOLOGÍA DE LOS CRISTALES E INDICES CRISTALOGRAFICOS</b>
96	5.1 Formas Simples
97	5.2 Formas Simples de baja Simetría
102	5.3 Formas Simples de Simetría Intermedia
107	5.4 Formas Simples de Alta Simetría
109	5.5 Formas Combinadas
112	5.6 Símbolos Cristalográficos
120	5.7 Orientación de los Cristales
	<b>TERCERA PARTE</b>
125	<b>CRISTALOGRAFÍA ESTRUCTURAL O MICROSCÓPICA</b>
127	<b>VI LAS REDES CRISTALINAS Y LA SIMETRÍA TRASLACIONAL</b>
129	6.1 Particularidades de la Red Espacial de los Cristales
130	6.2 La Simetría Traslacional
131	6.3 Los Paralelepípedos de Bravais
137	6.4 Las Redes Bidimensionales de Bravais
141	6.5 Efectos de la Traslación Sobre los Elementos Finitos de Simetría
145	6.6 Los Ejes Helicoidales
152	6.7 Planos de Deslizamiento
158	<b>VII GRUPOS DE SIMETRÍA PLANAR</b>
158	7.1 Algunas Particularidades
161	7.2 Grupos de Simetría Unidimensional $G$ y $G$
163	7.3 Los Grupos de Simetría de los Bordados
167	7.4 Grupos Bidimensionales $G$
172	7.5 Los principios de Simetría de Curie

176	<b>VIII GRUPOS ESPACIALES EN SISTEMAS CRISTALINOS DE BAJA SIMETRÍA</b>
176	8.1 Observaciones Preliminares
178	8.2 Nomenclatura Internacional y Representación Gráfica de los Grupos Espaciales
181	8.3 Sistema o Conjunto de Partes Simétricamente Equivalentes Dentro de una Celda Elemental
184	8.4 Grupos Espaciales del Sistema Triclínico
187	8.5 Grupos Espaciales del Sistema Monoclínico
194	8.6 Grupos Espaciales del Sistema Ortorrómbico
207	<b>IX GRUPOS DE SIMETRÍA INTERMEDIA Y ALTA</b>
207	9.1 Grupos Espaciales del Sistema Tetragonal
218	9.2 Grupos Espaciales del Sistema Trigonal y Hexagonal
227	9.3 Grupos Espaciales del Sistema Cúbico
243	<b>REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>
245	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>



## LISTA DE TABLAS

25	<i>2.1 Sistemas de simetría cristalina</i>
48	<i>3.1 Equivalencia entre ejes de inversión y ejes de rotación impropia</i>
51	<i>3.2 Símbolos y representación gráfica de los elementos de simetría puntual en diferentes sistemas de notación</i>
67	<i>4.1 Elementos del grupo de rotaciones de un triángulo Equilátero</i>
68	<i>4.2 Elementos y sus interacciones en el grupo de simetría de un prisma trigonal</i>
74	<i>4.3 Elementos de los 32 grupos puntuales de simetría cristalina</i>
93	<i>4.4 Proyección estereográfica de los 32 grupos puntuales</i>
94	<i>4.5 Los 32 grupos de simetría cristalina: simbolización, orden y denominaciones</i>
101	<i>5.1 Formas cristalinas simples en sistemas de baja simetría</i>
103	<i>5.2 Formas simples en los sistemas cristalinos de simetría intermedia</i>
108	<i>5.3 Formas simples de alta simetría</i>
121	<i>5.4 Criterios para la orientación de los cristales</i>
133	<i>6.1 Los 14 paralelepípedos de Bravais</i>
140	<i>6.2 Equivalentes de Bravais en el espacio bidimensional</i>
160	<i>7.1 Cantidad de grupos cristalográficos <math>G_5</math>, según la dimensionalidad y grados de homogeneidad del espacio</i>
236	<i>9.1 Elementos de simetría intersustituibles en los grupos espaciales cúbicos</i>
237	<i>9.2 Lista de los 230 grupos espaciales</i>



## LISTA DE FIGURAS

- 4 1.1 Ilustración de las operaciones de rotación y traslación de un objeto simétrico
- 5 1.2 El plano de reflexión y las figuras enantiomorfas
- 23 2.1 La construcción de una red cristalina
- 25 2.2 Los ejes cristalográficos y los parámetros de la red
- 26 2.3 Cristales de cuarzo con diferente morfología ilustrativos de la Ley de la Constancia de los ángulos diedros
- 27 2.4 La proyección en un esfera de las caras de un cristal inscrito en ella
- 27 2.5 Relación entre el plano y la esfera de proyección
- 27 2.6 La proyección estereográfica de una dirección
- 28 2.7 La proyección estereográfica de un plano
- 29 2.8 Proyección gnomónica de las caras de un cristal Las coordenadas esféricas cristalográficas
- 30 2.9 Las coordenadas esféricas cristalográficas
- 31 2.10 Construcción de los paralelos y meridianos de la Red de Vulf
- 33 2.11 Red de Vulf en su dimensión normal
- 32 2.12 Justificación de las dimensiones de la Red de Vulf
- 35 2.13 Hallazgo de una dirección a partir de las coordenadas  $a$  y  $g$
- 36 2.14 El eje de una zona cristalina
- 36 2.15 Ubicación en la Red de Vulf del polo de una zona
- 37 2.16 Medición sobre la Red de Vulf de ángulos entre direcciones y entre planos que se cortan
- 41 3.1 El centro de simetría
- 41 3.2 El antiparalelismo de las caras de un poliedro centrosimétrico

42	3.3 El plano de simetría
42	3.4 Figuras enantiomorfas
43	3.5 Figuras con simetría planar
45	3.6 La imposibilidad del eje $L_5$ en cristales
46	3.7 Acción de los ejes de rotación en los cristales
46	3.8 Figuras geométricas con ejes de rotación de diverso orden
47	3.9 Acción de los ejes de inversión $L_{in}$ y de los ejes de rotación impropia $S_n$
49	3.10 Operación de un eje de rotación impropia $L_i$
52	3.11 La proyección estereográfica de los elementos de simetría de un ladrillo
55	3.12 y 3.13 Ilustraciones del cumplimiento de los teoremas 1 y 2 de combinación de elementos de simetría
57	3.14 a 3.16 Ilustraciones de otras reglas de combinación de elementos de simetría puntual
60	3.17 Los elementos de simetría de un romboedro
62	4.1 Generación de un sistema de posiciones simétricamente equivalentes
68	4.2 Sistema de posiciones simétricamente equivalentes generado por los elementos de simetría de un prisma trigonal
70	4.3 y 4.4 Algunas direcciones unitarias en cristales
79	4.5 Orientación y operación de los elementos de simetría de un tetraedro tetragonal
80	4.6 Disposición y proyección del grupo $L_63L23P$
81	4.7 Relación entre un tetraedro regular y un cubo en el que se inscribe
82	4.8 Disposición espacial de los elementos simetría del grupo $3L24L33PC$
82	4.9 Disposición de los elementos de la clase de simetría cúbica planar
83	4.10 Relación entre un octaedro regular y un cubo en el que se inscribe
84	4.11 Los elementos del grupo de simetría cúbica axial
84	4.12 Los elementos del grupo de simetría cúbica planoaxial

84	4.13 Relación entre octaedro, tetraedro y un cubo
84	4.14 Un cuadrante de la proyección estereográfica de los elementos del grupo planoaxial cúbico
97	5.1 y 5.2 Algunas formas simples de baja simetría
100	5.3 Generación de tetraedros rómbicos enantiomorfos mediante la disminución de la simetría de una bipirámide rómbica
110	5.4 Influencia de la velocidad de crecimiento de las caras sobre la morfología de un cristal
111	5.5 Un cristal de olivino como ejemplo de formas combinadas
112	5.6 Formas combinadas del cuarzo en sus manifestaciones derecha e izquierda
113	5.7 a 5.9 Ilustraciones para establecer la ley de los parámetros racionales e índices de Miller
117	5.10 Los índices de las caras de un cristal paralelas a uno de los ejes cristalográficos
122	5.11 La disposición del eje complementario en los sistemas trigonal y hexagonal
124	5.12 Morfología del cristal de $LiK(SO_4)$
128	6.1 Formación de caras romboédricas en un cristal a partir de "moléculas integrantes" según R.J. Haiiy. Reproducción del dibujo publicado en 1822
129	6.2 Red espacial
130	6.3 Operación de los vectores de simetría traslacional
135	6.4 Relación entre las celdas hexagonal y romboédricas
138	6.5 y 6.6 Selección de retículos (paralelogramas) en un espacio bidimensional
140	6.7 Celdas elementales (equivalentes de Bravais) posibles en un espacio bidimensional

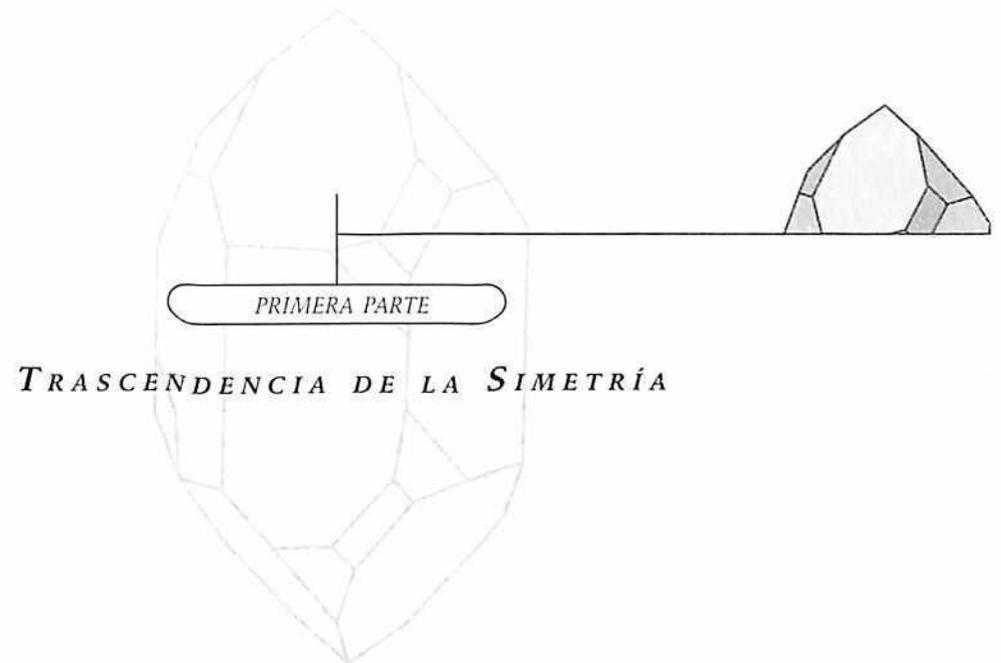
142	6.8 a 6.10 Algunos efectos de traslaciones sobre los elementos puntuales de simetría
145	6.11 y 6.12 Efectos de la traslación perpendicular sobre los ejes de inversión $L_3$ y $L_4$
157	6.13 Una traslación paralela a un eje $L_2$ : el eje helicoidal 21
149	6.14 y 6.15 Los ejes helicoidales 31 y 32
151	6.16 y 6.17 Los ejes helicoidales de orden 4 y 6 respectivamente
153	6.18 Comparación de la acción de un plano $m$ con la de otro de deslizamiento
153	6.19 a 6.22 Diversas combinaciones de planos de simetría
154	6.23 Planos de deslizamiento de un cristal de sal La acción de un plano de deslizamiento tipo $c$
155	6.24 y 6.25 Acción de los planos de deslizamiento de los tipos $n$ y $d$ respectivamente
156	6.26 Combinación de varios tipos de planos de simetría
156	6.27 Relación de los planos $d$ con los ejes 41 y 43
157	6.28 Simbolización gráfica de los elementos de simetría cristalina
163	7.1 El conjunto de grupos espaciales $G_{11}$
165	7.2 Los grupos de simetría de los bordados
166	7.3 Grupos simórficos y asimórficos
168	7.4 Los grupos bidimensionales $G_{20}$
170	7.5 Los grupos bidimensionales $G_2$
171	7.6 Segmentos de sistemas de puntos simétricamente equivalentes, correspondientes a los grupos $G_{22}$ , según M.J. Buerger
174	7.7 y 7.8 Los grupos de simetría infinita de Curie y sus respectivas proyecciones
175	
183	8.1 a. Los retículos (motivos) de una celda bravaisiana del tipo I
183	b. Proyección de estos motivos sobre la base del paralelepípedo de Bravais
183	c. Las coordenadas cristalográficas de algunas posiciones dentro de la celda elemental

184	8.2 El grupo espacial triclinico $P_1$
184	a. Ubicación de los motivos en la celda de Bravais
184	b. Proyección de los elementos de simetría del grupo. El rectángulo en este caso está representando las tres traslaciones primitivas
184	c. El conjunto de posiciones simétricamente equivalentes dentro del volumen de una celda elemental. En este caso el conjunto consta de un elemento
187	8.3 El grupo espacial triclinico $P_1$
187	a. La celda elemental construida sobre los ejes XYZ, con origen en el centro de simetría 1 Recuérdese que $a \neq b \neq c$
187	b. Los centros de simetría reproducidos por efecto de las traslaciones $T_a$ , $T_b$ y $T_c$
187	c. La proyección de los elementos de simetría del grupo
188	8.4 Orientación preferencial del eje de rotación 2 en el grupo monoclinico $P_2$
189	8.5 a. Proyección del grupo $P_2$ sobre el plano 001 y su sistema de puntos simétricamente equivalentes
189	b. Proyección del mismo grupo y de su correspondiente sistema de puntos simétricamente equivalentes sobre el plano 010
189	8.6 El grupo asimórfico $P_{21}$
189	a. Elementos de simetría proyectados sobre el plano 001
189	b. Proyección de los mismos elementos sobre el plano 010
190	8.7 El grupo espacial $C_2$
190	a. Ubicación de los ejes 2 dentro de la celda elemental
190	b. y c. Proyecciones de los elementos de simetría sobre los planos 001 y 010 respectivamente
190	d y e. Los sistemas de posiciones simétricamente equivalentes para las mismas proyecciones

191	8.8 El grupo espacial $Pm$ proyectado sobre los planos 001 y 010
192	8.9 Los grupos espaciales $Cm$ , $Pc$ y $Cc$ proyectados con sus puntos simétricamente equivalentes sobre el plano 001 y de la celda bravaisiana
193	8.10 Grupos espaciales derivados del grupo puntual $2/m$
195	8.11 Posibles orientaciones equivalentes en la celda ortorrómbica
196	8.12 Construcción y proyección del grupo espacial $Pmm2$
197	8.13 Algunos grupos espaciales derivados del grupo puntual $mm2$
199	8.14 Algunos grupos espaciales ortorrómbicos derivados de la simetría bravaisiana de bases centradas
200	8.15 Tres grupos espaciales ortorrómbicos en celda de cuerpo centrado derivados del grupo $mm2$
201	8.16 a. y b. Generación de planos de deslizamiento del tipo $d$ en una celda de caras centradas $F$
201	c. El grupo espacial ortorrómbico simórfico $Fmm2$
203	8.17 El grupo $Fdd2$ , derivado del grupo $Fmm2$
205	8.18 Proyección del grupo ortorrómbico $Fmmm$
205	8.19 Proyección del grupo ortorrómbico $Fddd$
206	8.20 Cuatro grupos espaciales ortorrómbicos derivados del grupo puntual axial $222$
208	9.1 Grupos espaciales tetragonales sencillos con sus respectivos sistemas de puntos simétricamente equivalentes
209	9.2 Interpretación y construcción del grupo $P4/m$
210	9.3 Interpretación y construcción del grupo $I4/m$
212	9.4 El grupo espacial $I41/m$
214	9.5 El grupo espacial $I41m$
215	9.6 Grupos espaciales axiales:
215	a. El grupo $P422$
215	b. El grupo $P41212$ , con sus respectivos sistemas de puntos equivalentes

216	9.7 Los grupos espaciales
216	a. $I422$
216	b. $I4122$
217	9.8 Los grupos espaciales
217	a. $P421c$
217	b. $I4122$
218	9.9 Ilustración del principio de Curie sobre la superposición de las simetrías del motivo y de la red
219	9.10 Comparación de las redes hexagonal y trigonal romboédrica construida sobre una celda de base hexagonal
221	9.11 Posibles orientaciones de los ejes y planos de simetría en una celda trigonal respecto a los ejes $X$ y $Y$ .
221	9.12 Comparación de las proyecciones de los grupos trigonales $P31m$ y $P3m1$
221	9.13 Los grupos espaciales $P31c$ y $P31m$
222	9.14 El grupo trigonal $P3$ y su sistema de puntos simétricamente equivalentes
222	9.15 Los grupos trigonales $P32$ $P3$
223	9.16 Traslaciones complementarias en una celda romboédrica $R$
223	9.17 a. Sistema de puntos simétricamente equivalentes del grupo $R3$ b. Selección de la celda $R3$ y propagación de sus elementos de simetría
224	9.18 Procedimientos previos para la construcción del grupo $R3c$
225	9.19 El grupo $R3c$ , tal como se presenta en las Tablas Internacionales para Cristalografía de Rayos X (1963)
225	9.20 Sistema de posiciones simétricamente equivalentes del grupo $R3c$ , también tomado de las Tablas Internacionales (1963)
226	9.21 Los grupos espaciales
226	a. $P6$

- 226 b.  $P6/m$
- 226 9.22 El grupo hexagonal  $P6122$  y su sistema de puntos equivalentes de simetría
- 226 9.23 El grupo hexagonal  $P6c2$  y su sistema de puntos
- 227 9.24 Cubización del grupo ortorrómbico 222
- 228 9.25 Convenciones gráficas complementarias para la proyección de los grupos espaciales cúbicos
- 229 9.26 El grupo espacial  $P23$
- 229 a. Combinación auxiliar inicial
- 229 b. Proyección completa del grupo
- 229 9.27 El grupo espacial  $Pa3$
- 230 9.28 Indicaciones para la construcción de los grupos cúbicos axiales
- 231 9.29 El grupo  $P432$
- 232 9.30 El grupo  $I432$
- 233 9.31 Un octante del grupo  $F432$
- 234 9.32 El grupo  $P43m$
- 235 9.33 El grupo  $Im3m$





# I

## SIMETRÍA Y ESTRUCTURA

### 1.1 La Simetría

El concepto de simetría, como cualquier otro, se ha desarrollado paulatinamente, tiene su historia. Seguramente, como lo indica la etimología de esta palabra griega, inicialmente denotaba la proporcionalidad y el equilibrio observado en muchas de las expresiones concretas de la naturaleza, o también el término medio de las cosas que observadas desprevenidamente, nos agradan (Weyl, H., 1952). Esta particularidad encontró bien pronto aplicaciones en la arquitectura y en el arte monumental, escultórico y pictórico como manifestación de las proporcionalidades espaciales. La proporcionalidad en el tiempo, como sensación gratificante, la encontramos en la música, en la armonía, término que es prácticamente sinónimo de simetría, de equilibrio.

Mayor concreción del concepto de simetría se encuentra en la geometría, en donde muchas figuras son el resultado de una proporcionalidad adecuada de sus partes entre sí, y de estas con la figura misma. Pero, curiosamente, existen figuras geométricas (polígonos y poliedros) que pueden ser construídos, y descontada

cierta idealización, ser sometidos a movimientos especiales o a la combinación simultánea de algunos de ellos, los cuales, gracias a la simetría, dejan finalmente la figura indistinguible de su situación o estado inicial. Obviamente, todo objeto espacial por asimétrico que sea, encuentra un movimiento, por ejemplo, una rotación de  $360^\circ$  alrededor de un eje, que lo deja indistinguible de su situación inicial. Pero para las figuras geométricas a las que nos referimos existen conjuntos de movimientos diferentes que dejan la forma o el objeto de la figura, indistinguible. Esto supone que en el todo (la figura, por ejemplo un triángulo equilátero), una forma se va sustituyendo a sí misma como resultado de la sustitución de unos de sus elementos constitutivos (en este caso los lados del triángulo se sustituyen unos a otros mediante rotaciones consecutivas de  $120^\circ$ ) por otros, (figura 1.1). Las figuras que permiten o que toleran movimientos de este tipo permaneciendo indistinguibles son simétricas y en cuanto mayor sea el número de tales posibles movimientos mayor será el grado de su simetría.

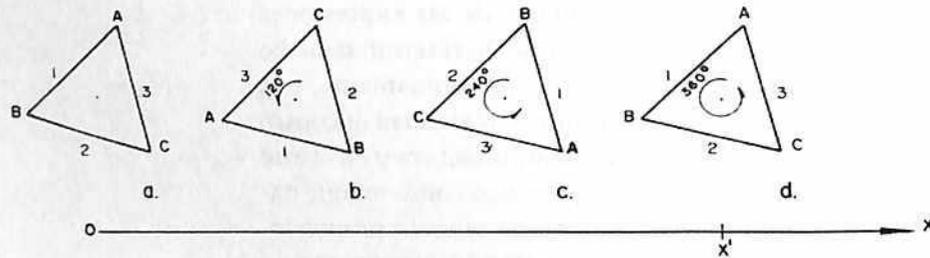


figura 1.1

Ahora nos hemos formado un concepto más preciso de la simetría, como resultado de la experiencia empírica y de su abstracción. El suponer en la figura 1.1, que el triángulo a y el c son indistinguibles, más que la igualdad de las dos figuras, supone la identidad tanto de ellas como de los diversos elementos (lados) que la componen en un todo. En las figuras reales que hayamos construido o en los objetos de la naturaleza, esta igualdad es siempre

aproximada, pero en la abstracción cognoscitiva se puede ser suficientemente estrictos y suponer, entre las figuras consideradas y entre sus elementos constituyentes, la identidad, que para el caso es una coincidencia perfectamente congruente.

Podemos sin embargo construir formas idénticas, como las mostradas en la figura 1.2a, cuyos elementos (caras y aristas) coinciden con una perfecta congruencia, pero que no pueden ser sustituidas indistinguiblemente la una por la otra, ni mediante rotaciones ni traslaciones. No obstante, un observador imaginario en el interior de estos tetraedros, contruídos con triángulos escalenos iguales, que pudiera trasladarse instantáneamente del interior de uno de ellos al del otro, los hallaría idénticos: sus propiedades y relaciones, como por ejemplo, las distancias entre pares de puntos correspondientes serían iguales (una igualdad que, como se dice matemáticamente, se fundamenta en las propiedades topológicas internas del espacio) y, a pesar de ello, las formas totales vistas desde el exterior, como se muestran en la figura 1.2a, no son sustituibles la una por la otra mediante los movimientos de rotación o traslación antes señalados.

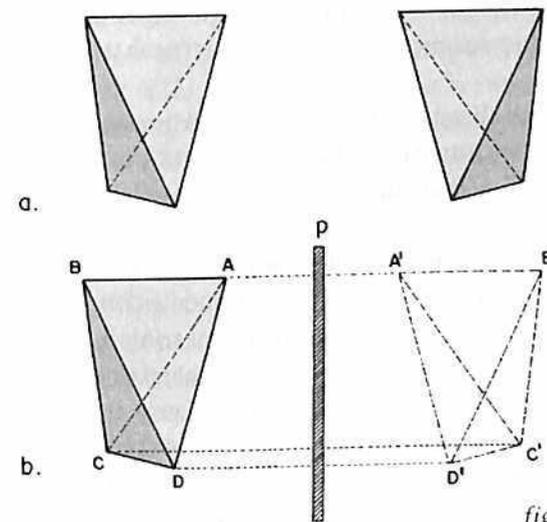


figura 1.2

Podría hasta aquí afirmarse que las formas de la *figura 1.2a* no son simétricas, a menos que haya otro tipo de movimiento u operación que haga posible esa sustitución. Y ciertamente, si por el medio de los dos tetraedros colocamos un espejo plano de doble faz P (plano de simetría), como se muestra en la *figura 1.2b*, entonces cada objeto creará en el espejo su propia imagen, la cual sustituye, o mejor, se superpone sobre el otro objeto coincidiendo con él congruentemente.

El descubrimiento de esta operación o movimiento de reflexión especular es el descubrimiento de una nueva expresión de simetría: la simetría de derecha e izquierda o simetría bilateral. Los objetos que responden a este tipo de simetría se llaman enantiomorfos. El enantiomorfismo es un fenómeno frecuente en la naturaleza y su trascendencia aumenta en la medida que se profundiza en el conocimiento de las formas de organización de la materia y también de su constitución fundamental. Son enantiomorfas las manos de cada persona, la cristalización del cuarzo en sus formas derecha e izquierda, que conducen a la formación de cristales dobles en maclas de penetración, organizadas respectivamente, según las leyes llamadas de Dauphine o delfinado y la brasilera, importantes por la gran diferencia que entre ellos existe en cuanto a sus propiedades piezoeléctricas y ópticas.

La cristalización de sustancias en formas enantiomórficas o isométricas fue descubierta por L. Pasteur desde 1848, al investigar el ácido tartárico (*Karapetians, M. J. y Drakin, S. I., 1974*), y fue él quien propuso entonces el término de disimétricos para los objetos que no podían ser superpuestos congruentemente con su imagen especular. No obstante, hoy la disimetría no puede entenderse como la ausencia total de simetría, aunque sí la supresión de algunas de sus formas. Estos tres tipos de movimientos u operaciones de simetría (las rotaciones, las reflexiones y las traslaciones) con sus combinaciones, son suficientes para deducir los tipos de simetrías

conocidos en los objetos espaciales macroscópicos y que se manifiestan como ciertas regularidades geométricas.

De otra parte, el concepto de simetría se ha formado a través de ideas como la de identidad y movimiento. La identidad es una categoría filosófica. Al respecto queremos subrayar solamente que ella implica, entre objetos idénticos, la igualdad o mejor la invariabilidad de sus propiedades y relaciones características. Pero, por otro lado, la identidad fuera de ser temporal y transitoria, es una categoría contradictoria, pues además de la invariabilidad ya señalada, supone la existencia de diferencias y cambios que, por ejemplo, en nuestro caso de la *figura 1.1*, nos permitirían distinguir los estados de las figuras después de las rotaciones y traslaciones, si tales estados no fueran idénticos.

En la realidad todo está sujeto al cambio permanente, pero esto no niega la posibilidad de la identidad sino que apenas la hace relativa. Entre el cambio y la estabilidad de las propiedades y relaciones de los objetos sobre los que yacen, la simetría así entendida, es una categoría contradictoria que implica simultáneamente la existencia de algo invariante, y a la vez algo en cambio, en movimiento, inseparables lo uno de lo otro. Esta interpretación es la que ha permitido a Ovchinikov (*Ovchinikov, N. F., 1966, p. 204*), definir la simetría en su sentido más amplio, como "la unidad de la conservación y el cambio". En esta definición, por conservación no solamente ha de entenderse la de las magnitudes físicas que luego de determinadas transformaciones permanecen invariantes, y que por cierto siempre están asociadas con algún tipo de simetría, sino también los aspectos invariantes de cada objeto en cuanto a su conformación, propiedades y relaciones.

La simetría es una regularidad de la naturaleza, en la cual la conservación de las cosas, de sus propiedades o de sus relaciones, se encuentra en íntima relación con

los cambios correspondientes. La simetría representa la unidad de la conservación y el cambio por cuanto ella implica simultáneamente la identidad o invariación, aunque relativa, del objeto como también el movimiento o cambio del mismo. Esta idea sustentada no solamente en el campo de las simetrías geométricas, enriquece el concepto de simetría y lo hace aplicable a diversos campos del conocimiento de la naturaleza, de la lógica y de las matemáticas.

En el conocimiento del mundo material se ha puesto mayor atención al movimiento, al cambio permanente de los objetos, a la aparición de fenómenos, a su repetición o desaparición o sustitución por otros y quizá se ha descuidado un tanto la permanencia, la estabilidad y la invarianza de los mismos, sin lo cual el conocimiento sería imposible. Los mayores logros de la ciencia, las leyes más universales de la física, están representadas en el descubrimiento de invariantes, en las leyes o principios de conservación, asociados siempre a nuevos tipos de simetría. Así, la simetría se convierte en un criterio metodológico muy importante para la profundización en el conocimiento de la naturaleza.

Mayor alcance ha encontrado el concepto de simetría dentro de las matemáticas y sus aplicaciones en la física y otras ciencias, donde igualmente tiene validez su contenido. Por ejemplo, la posición de un objeto geométrico puede representarse con la ayuda de números, los cuales tienen sentido en un sistema de coordenadas. En efecto, una serie de números  $X_1, X_2, \dots, X_n$  puede caracterizar no solamente un objeto, una figura, sino también sus relaciones con el sistema. Es bien sabido que si el mismo objeto se representa en otro sistema, se obtendrán otros números  $X'_1, X'_2, \dots, X'_n$ , con los cuales al igual que con los del primer sistema, se pueden construir las funciones, expresiones matemáticas  $f(X_1, X_2, \dots, X_n)$  y  $f(X'_1, X'_2, \dots, X'_n)$  que caracterizan el objeto en cuestión

en cada uno de los sistemas de referencia. El principio de identidad o invariación del objeto se expresa precisamente en la igualdad de las dos características:

$$f(X_1, X_2, \dots, X_n) = f(X'_1, X'_2, \dots, X'_n) \quad (1)$$

En este caso el cambio de sistema de referencia es equivalente a una transformación, importante problema matemático que podemos interpretar como un movimiento que se realiza sobre el objeto. La igualdad de las funciones características representa la invariabilidad del objeto, que no tenía por qué cambiar en sí por el sólo hecho de cambiar de sistema de referencia. Si existen varias transformaciones posibles, es decir, varios conjuntos diferentes de números  $X_1, X_2, \dots, X_n$ , que satisfagan entre sí la condición (1), entonces tendremos un objeto de determinada simetría, la cual, como quedó dicho, sólo se evidencia mediante el movimiento o cambio y la identidad o invariación del objeto, luego de cada movimiento realizado.

Análogamente una función matemática puede representar objetos de la mas variada índole, abstracta o real, y si ella está sujeta a la existencia de invariantes, de leyes de conservación, entonces siempre estará asociada a algún tipo de simetría. En física la conservación de la energía, del impulso, del momento angular, de la carga eléctrica de las partículas, la estabilidad de algunas propiedades de las partículas elementales de materia, siempre están relacionadas con algún tipo de simetría (Feynman, R., 1965). Igualmente en la naturaleza, cualquier tipo de simetría debe corresponder a algún tipo de conservación.

La teoría de grupos es la rama de las matemáticas más relacionada con invariantes y simetrías. En ella en calidad de elementos se pueden tomar números, transformaciones, propiedades o cualquier otro objeto. Un

conjunto de elementos conforma un grupo siempre que cumplan los conocidos postulados de la unidad, asociatividad y de los elementos inversos.

Analizar las transformaciones, dentro de la teoría de grupos, permite una operatividad metodológica para evidenciar nuevos tipos de simetrías, en contraposición a la evidencia de la observación empírica y puramente geométrica de la naturaleza con la que se comenzó a formar la idea de la simetría. Se pueden analizar diversas transformaciones, no solamente en espacios tridimensionales sino en el espacio-tiempo o en espacios de mayor dimensionalidad. Resulta edificante el estudio de los principales logros de la ciencia relacionados con invariantes y simetrías, algunos de los cuales han representado verdaderas revoluciones científicas. Ya mencionamos algunas leyes de conservación en la física, a las que hay que sumar la teoría de la relatividad, la mecánica cuántica y nuevos tipos de simetrías que parecen tener relación con la estabilidad de la materia altamente organizada.

Eugene Wigner, ganador del Premio Nobel de Física en 1963 y gran aportante a las ideas de simetría y sus aplicaciones en la teoría de partículas elementales, distingue tres categorías en las ciencias naturales, según su orden de subordinación: los sucesos, las leyes naturales y los principios de simetría. Con esta afirmación de Wigner, queremos resaltar la importancia que se concede a la simetría en el desarrollo de la ciencia contemporánea. La historia del concepto de simetría ha ido paralela con la profundización que el hombre paulatinamente logra del conocimiento de la naturaleza.

Con el ánimo de relieves en esta breve exposición la trascendencia de la simetría, hemos utilizado con el mismo sentido palabras no completamente equivalentes como identidad, invariación, conservación, lo que no puede absolutizarse siempre. Como que diferenciamos

dos tipos de simetría: uno que podría llamarse teórico o matemático y otro, el de la simetría de ciertos objetos reales, que se puede evidenciar empíricamente mediante las formas de movimiento, como las anteriormente analizadas. Pero las dos caben bien dentro de la definición generalizada de simetría como la unidad del cambio y la conservación o invariación del objeto, cualidad o relación en que se sustenta dicha simetría. Si se trata de un objeto teórico, abstracto o matemático, la simetría se evidencia por la existencia de unas transformaciones y los invariantes que a ellas corresponden. Si en cambio se trata de objetos de la naturaleza, cosas o propiedades de las mismas, entonces la simetría se manifiesta como un reflejo de la estructura de tales objetos, explícita mediante formas concretas de movimiento de los mismos, que los dejan indistinguibles del estado inicial, bien sea en cuanto a su posición, a sus propiedades o a sus relaciones. Así, la conservación, la invariación se apoya en el principio general de la simetría. La simetría es una regularidad de la naturaleza y se explícita en el conocimiento. Sin embargo en la realidad del objeto, que suele ser más compleja que su idealización o modelo, la simetría se manifiesta como una aproximación. En ella no existe una verdadera simetría o asimetría. Por ejemplo, los cristales reales más perfectos, siempre poseen impurezas y defectos que los inclinan de la simetría ideal del grupo que les corresponde. En la naturaleza se observan casos en que la simetría se infringe extremadamente. Así, la simetría de la carga eléctrica en nuestro mundo real se infringe en el sentido de que él está construido fundamentalmente de electrones, mientras que los positrones son una rareza. La materia viva, el ADN, la albúmina y otras, suelen ser internamente asimétricas, aspecto este al que se le atribuye gran importancia en los procesos de intercambio de sustancias e información y se considera como condición indispensable para la aparición y evolución de la vida (*Blundell, T. L., 1976, cap. 19*), elevadísima forma de organización de la materia. En general,

al aumentar el grado de organización o en cuanto más se profundice en la elementalidad de la materia tanto más disminuye su simetría (Vainshtein, B. K., 1979, T. II, p. 160-162, 225-228).

La disimetría observada por L. Pasteur es un aspecto de la infracción de la simetría. Esta idea fue luego desarrollada por P. Curie, quien entiende por disimetría la ausencia de unos u otros elementos de simetría. Pero el número de elementos de simetría ausentes en un determinado caso puede ser muy alto, por lo que en la práctica se opera no con la disimetría sino con la simetría de los objetos.

Un cambio en la simetría de un objeto, y este cambio puede consistir en la ausencia de algunos de sus elementos iniciales, no necesariamente debe interpretarse como la tendencia a su desaparición. En una concepción más general de la simetría, que suponga múltiples formas de su manifestación, la desimetrización debe suponer no solamente la desaparición de unos elementos de simetría, sino la aparición de otras de sus formas. Por este camino se va a la idea de una compensación de la simetría en la naturaleza, a su conservación y a la permanente expectativa por encontrar nuevas expresiones y nuevas formas de movimiento de la materia asociadas con ellas, en la unidad de cambios e invariaciones tanto externos como internos de los objetos.

## 1.2 La Estructura

La estructura es según una definición, "la conexión y relación recíprocas, estables, sujetas a ley, entre las partes y elementos de un todo, de un sistema" (Rosenthal, M., 1965). La estructura de los objetos permanece invariable a pesar de las modificaciones o cambios a que sus partes constituyentes y los objetos mismos están sometidos permanentemente. Es decir, el cambio permanente de unos elementos, por ejemplo, no siempre modifica el

fundamento, la organización de las cosas, sus propiedades, aunque si puede ir acumulando la potencialidad de su transformación radical, de la conversión de un objeto en una estructura diferente.

Esta transformación suele ocurrir en forma de saltos de calidad, o por lo menos de procesos supremamente más rápidos que el proceso de acumulación de los cambios tanto en las partes como en los objetos. La estabilidad de la estructura de un objeto en el tiempo, garantiza la estabilidad de las propiedades y atributos del objeto, que visto de otra manera es un sistema con cierta estabilidad, o estabilidad relativa. La estabilidad y las propiedades físicas de muchas fases cristalinas y su conversión mutua, como en el caso del cuarzo, el carbono y otros, cuyas transiciones dependen de parámetros termodinámicos, son ejemplos ilustrativos de esta afirmación.

La naturaleza se nos manifiesta en diferentes dominios o formas estructurales: las nebulosas, los sistemas solares, la tierra, la corteza terrestre, los minerales, los átomos, las partículas fundamentales. Estos y muchos otros sistemas, incluyendo los sociales, son objeto de la investigación del hombre, gracias a que son sistemas que cuentan con una estructura relativamente estable, lo que a su vez permite que en determinado momento de la teoría puedan tomarse como elementos indivisibles. No obstante, al estudiar las propiedades de cada uno de ellos, es necesario encontrar la relación de tales propiedades con la estructura del objeto. Por ejemplo, los átomos, que al ser propuestos por Demócrito en la antigüedad se consideraron indivisibles, también lo fueron así al revivirse la teoría atómica por Dalton en el siglo XIX, pero muy pronto se prescindió de tal indivisibilidad con la teoría atómico-molecular formulada por Avogadro y Ampere (Dalton, J., 1976, p. 18, 29), pues al conocer mejor las propiedades del átomo se evidenció su estructura compleja. El núcleo atómico es hoy un

objeto de investigación cuya estructura ha resultado difícil de explicar, un sistema de elementos materiales del que todavía no se ha podido formular una teoría suficientemente plausible y coherente con los experimentos.

En general no se ha llegado nunca a uno o unos cuantos objetos simples a partir de los cuales se pueda edificar la naturaleza (lo serán los quarks?). Por esto se afirma que cada objeto siempre es un sistema y para diferenciar estos sistemas de los sistemas conceptuales, con frecuencia se los denomina estructuras. En cualquier estructura se pueden definir diversos sistemas de elementos y de los nexos existentes entre ellos, lo que permite conocer algunos aspectos de la misma. La estructura es pues, la forma como se organizan los sistemas de elementos, para tal efecto considerados indivisibles y discretos, manifestando estabilidad e invariabilidad en el tiempo. Una estructura en la realidad no está aislada, sino que se interrelaciona con otras dando lugar a diferentes niveles de calidad en la materia. La estructura representa el aspecto invariante de un sistema estacionario.

El análisis de la estructura de un objeto debe establecer claramente sus elementos, las relaciones y nexos entre los mismos, las leyes que permiten la existencia y funcionamiento del objeto como sistema estable, la unidad del mismo objeto, es decir, su conservación a pesar de los procesos de cambio internos y externos a que está sometido y que de hecho va acumulando.

Como elemento de un sistema, puede tomarse cualquier objeto indivisible, dentro de la estructura dada, en partes de la misma calidad. Si se trata de la estructura elemental de la materia, entonces sus elementos son partículas discretas con características también discretas. La indivisibilidad y la discreción son características

fundamentales de los elementos de una estructura. Debe recordarse que no cualquier parte de un objeto estructural puede considerarse como su elemento. El elemento sí es una parte de la estructura pero que la define de alguna manera fundamental; por lo tanto, la determinación de los elementos de una estructura no es casual.

Los elementos dentro de un sistema estacionario se interrelacionan, mantienen nexos entre sí. Clarificar el carácter de tales nexos constituye un aspecto importante del conocimiento y de la estructura misma. El nexo tiene lugar entre dos o más cosas y precisamente donde no hay homogeneidad de las mismas, en donde hay incontinuidad o diferencia en cuanto a propiedades o relaciones. Los nexos entre los elementos de un sistema pueden ser de índole diversa, pero suponen siempre movimientos, o bien internos del sistema que determinan los nexos estructurales, o bien movimientos del sistema con respecto a otros, lo que da origen a la formación y transformación de las estructuras y al establecimiento de nexos de tipo genético.

Las estructuras pues, se forman en sistemas estacionarios y estos sistemas son portadores de algún tipo de simetría. Por tal razón, como lo señala Ovchinikov "tiene gran significado la investigación de la simetría interna de un sistema estacionario. Esta investigación permite evidenciar los elementos potenciales de futuras estructuras, predecir la aparición de algunas formaciones que la naturaleza puede convertir de posibles en reales, solamente en un discurrir infinito del tiempo." (*Ovchinikov, N. E., 1965, p. 292*).

La estabilidad de una estructura, formada en un sistema estacionario, está relacionada con la invariabilidad de sus elementos y de los nexos entre ellos, a pesar de los movimientos estructurales. Es decir, esa estabilidad de la estructura, la invariabilidad de los elementos y de los nexos, tienen relación con un determinado tipo

de simetría del sistema. Un cambio en los nexos estructurales conlleva a un nuevo tipo de simetría del sistema estacionario. La aparición de nuevos nexos estructurales supone en el objeto una forma de simetría más generalizada que implica una mayor multiplicidad en las formas de movimiento. Como ya lo indicamos, la concepción más amplia de simetría es la que la interpreta como la unidad del cambio y la invariabilidad del objeto en que se sustenta.

Al estudiar sistemas complejos, el concepto de estructura se hace sinónimo de organización, y la conservación o invariación de la misma depende de la asimilación informativa que esos sistemas puedan tener en la interacción con su ambiente, para introducir los correctivos necesarios.

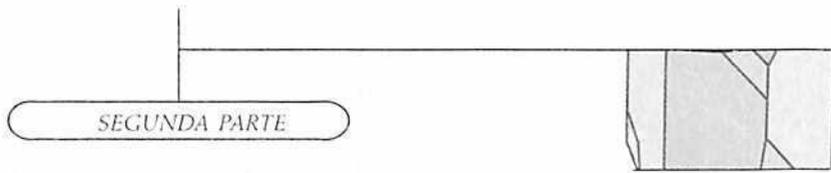
Matemáticamente, la estructura es un concepto abstracto, generalizada con otros como el de conjunto y el de función, que satisfacen determinadas condiciones como las de reflectividad, antisimetría, transitividad, que, en últimas, no son otra cosa que la indivisibilidad, la identidad y la trasponibilidad o indistinguibilidad de los elementos del sistema, características estas que permiten o suponen movimientos internos (estructurales) del sistema (matemáticamente son transformaciones) que, sin embargo lo conservan, lo dejan invariable. La estructura es pues una categoría que en el conocimiento no solamente implica la forma, sino también el contenido del objeto dado.

Al destacar, aunque muy breve y limitadamente, la importancia del concepto de estructura en la naturaleza, queremos finalmente subrayar la estrecha relación de este con el de simetría. La simetría ha encontrado sus expresiones concretas no solamente en la geometría, sino también en las leyes de la física, en la biología, en otros campos de la ciencia y en general se la considera una peculiaridad universal de todas las manifestaciones

concretas de la naturaleza. Precisamente este aspecto de universalidad de la simetría, asociada desde luego a la gran diversidad posible de movimientos de la materia, es la que se expresa en la definición generalizada que hemos acogido. Esta misma idea es la que día a día se somete a prueba, a nuestro entender con éxito, en los campos fronterizos de la ciencia contemporánea. "Si la estructura es el aspecto invariable de un sistema, entonces la simetría es una de las maneras de evidenciar la estructura del sistema dado". Este pensamiento tomado del ya citado Ovchinnikov, señala el valioso carácter heurístico y metodológico que tiene la simetría para la ciencia actual.

Cuando en la investigación se busca conocer sistemas reales, las estructuras se suelen dividir en espaciales, temporales y espacio-temporales. Para los fines que nos hemos propuesto en esta obra, en adelante solo trataremos de estructuras espaciales: los cristales interpretados como un ordenamiento geométrico tridimensional, y las formas de movimientos de sus correspondientes elementos. Estos movimientos no serán otros que rotaciones, reflexiones, traslaciones y combinaciones entre éstos.

Faint, illegible text from the reverse side of the page, appearing as bleed-through.



*CRISTALOGRAFÍA MACROSCÓPICA*



## II

### *SISTEMAS DE SIMETRÍA CRISTALINA*

#### *2.1 Naturaleza de los Cristales*

Los cristales son cuerpos sólidos homogéneos formados por elementos químicos en compuestos o mezclas isomórficas, que en condiciones favorables toman la forma de poliedros con caras planas, aristas, ángulos y vértices característicos de cada material cristalino.

Las formas geométricas de los cristales son determinadas por la regularidad y la simetría con que se disponen los elementos (átomos, iones o moléculas) en una estructura espacial, cuya estabilidad depende fundamentalmente de la intensidad de las fuerzas electrostáticas y moleculares que cohesionan entre sí tales elementos, como también de parámetros termodinámicos.

Además de la regularidad geométrica de los elementos que constituyen los cristales, éstos poseen diversas propiedades físicas que los caracterizan en cada especie particular y cuyo conocimiento es el que ha permitido a la cristalografía tener aplicaciones revolucionarias en diversos campos de la técnica.

La cristalografía surgió como una parte integrante de la mineralogía, necesaria para la caracterización de piedras preciosas y minerales que en muchos casos manifiestan las regularidades geométricas de los cristales macroscópicamente visibles. Con la ayuda de métodos modernos de análisis de las estructuras cristalinas se demuestra que prácticamente todos los compuestos químicos sólidos, incluso inorgánicos, tienen estructura cristalina; de tal manera que la materia sólida que compone la corteza terrestre, además de muchos compuestos sintetizados por el hombre, son en su mayoría cristales.

Entre las diversas propiedades físicas de los cristales sobresalen la elasticidad, el color, el brillo, el grado de dureza y de fragilidad, el grado de transparencia, el índice de refracción de la luz, la luminiscencia, el magnetismo, la dielectricidad, piroelectricidad y piezoelectricidad, los cambios de fase dependientes de parámetros termodinámicos, etc. De otra parte, se consideran propiedades comunes a todos los cristales la homogeneidad y la anisotropía.

Por homogeneidad de los cristales se entiende el hecho de que en todo volumen ocupado por cada uno de ellos se manifiestan cualidades físicas o geométricas iguales, siempre que estas se observen según direcciones correspondientes, paralelas dentro del cristal.

La anisotropía expresa la particularidad de que sus propiedades físicas y geométricas no sean idénticas en lugares diferentes dentro del cristal, si se les observa según direcciones no paralelas. Hay minerales, como la cordierita, que en direcciones diferentes dentro del mismo cristal manifiestan coloraciones distintas, o como la distena que según la dirección que se tome tiene disímiles grados de dureza, resultados estos que se explican por la anisotropía cristalina.

2.2 Red y Sistemas Cristalinos

Determinante en la estructura cristalina y sus propiedades es el ordenamiento geométrico de sus componentes. No obstante, en los cristales reales siempre hay imperfecciones, bien sea en sus características macroscópicas (ausencia de algunas caras, aristas, ángulos o vértices, o en general de formas poliédricas), o bien, defectos e impurezas en el ordenamiento espacial de los motivos o retículos. Sin embargo, la descripción geométrica de los cristales, de sus formas y de la regularidad espacial de sus elementos, se hace idealizando las cualidades arriba señaladas, es decir, sobre modelos de cristales idealmente perfectos.

Para describir el ordenamiento espacial de los átomos, iones o moléculas, denominados en general motivos, retículos o nodos del cristal, es necesario seleccionar tres direcciones no colineales que se intersecten mutuamente en un solo punta 0, llamado origen de las coordenadas XYZ, o también origen de los ejes cristalográficos I, II y III (Figura 2.1). Con respecto a estos ejes se ubican regular o periódicamente los retículos, independientemente de la clase y forma que tengan las partículas que constituyen el cristal. La periodicidad de los retículos a lo largo de las direcciones seleccionadas hace que cuando

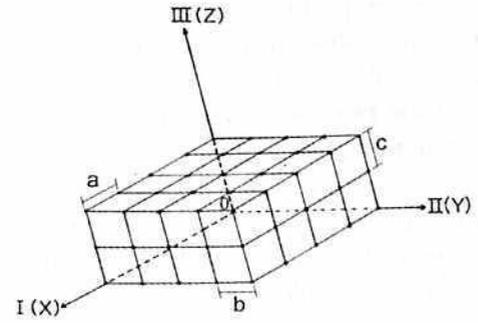


figura 2.1

estas se prolonguen ilimitadamente, la totalidad del espacio así determinado pueda considerarse ocupado por un número infinito de paralelepípedos iguales. Este conjunto de retículos y paralelepípedos en el espacio se denomina red cristalina espacial o simplemente red espacial. Las distancias iguales a lo largo de cada uno de los ejes seleccionados se llaman períodos o parámetros,  $a$ ,  $b$ ,  $c$  respectivamente, mientras que los paralelepípedos se denominan celdas de la red. Si los paralelepípedos satisfacen ciertas condiciones especiales (véase numeral 6.3), entonces se les denomina celdas elementales.

Una red espacial, como la que acaba de definirse, comprende casos límites especiales que consideraremos a continuación. Por ejemplo, una red espacial unidimensional está constituida por una fila, la de los retículos ubicados sobre una recta. En este caso el equivalente de la celda elemental está representado por la distancia mínima entre dos retículos de la fila. La red espacial bidimensional está limitada a un plano que se construye sobre las posiciones de tres motivos que no se hallen sobre una misma fila. Consecuentemente, el equivalente de la celda de este espacio lo constituye un paralelogramo construido sobre los ejes que definen el espacio y con lados iguales a los parámetros de cada una de las correspondientes filas.

A través de cualquier retículo de una red espacial dada, siempre es posible construir una fila paralela a cualquier otra fila de dicha red. Este principio elemental es importante al seleccionar las direcciones de los ejes cristalográficos, pues es conveniente que estos coincidan respectivamente con las direcciones de tres filas de retículos y que a su vez se corten mutuamente en un solo punto. Se acostumbra que el eje I o X esté dirigido hacia el observador, el eje II o Y hacia la derecha y el eje III o Z sea en lo posible vertical. A partir del punto de intersección mutua cada eje tendrá sentidos negativo y

positivo. Este último segmento de cada eje se diferencia gráficamente por su terminación en forma de flecha.

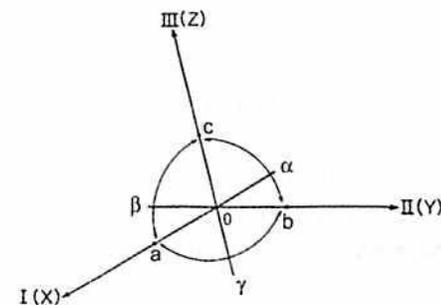


figura 2.2

La posición relativa entre los ejes seleccionados estará perfectamente establecida si se determinan los ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$ , y  $\gamma$  entre los mismos (figura 2.2). La periodicidad de los retículos a lo largo de cada uno de los ejes, es decir, los parámetros  $a$ ,  $b$  y  $c$ , pueden ser diferentes entre sí, como también los ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$ , y  $\gamma$ . Por tanto, existen siete posibilidades de combinar diferentemente las constantes cristalinas  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , dando como resultado siete sistemas de referencia acordes con las redes espaciales de los cristales, los cuales se denominan sistemas de simetría cristalina (tabla 2.1). Estos sistemas también han sido denominados singonías, por algunos autores.

tabla 2.1 Sistemas de Simetría Cristalina

Sistema cristalino	Características de la Celda
Triclínico	$a \neq b \neq c$ ; $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
Monoclínico	$a \neq b \neq c$ ; $\alpha = \gamma = 90^\circ$ ; $\beta \neq 90^\circ$
Ortorrómico	$a \neq b \neq c$ ; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	$a = b \neq c$ ; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cúbico	$a = b = c$ ; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal	$a = b \neq c$ ; $\alpha = \beta = 90^\circ$ , $\gamma = 120^\circ$
Trigonal	$a = b \neq c$ ; $\alpha = \beta = 90^\circ$ , $\gamma = 120^\circ$ , o $a = b = c$ ; $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

### 2.3 Ley de la Constancia de los Ángulos Diedros de los Cristales

La primera ley de la cristalografía fue establecida en 1783 por Romé de L'Isle (1736-1790). Es una ley empírica formulada luego de la constatación en múltiples observaciones del autor, del hecho ya planteado con anterioridad por Nicolaus Steno (1638-1686), de que los ángulos entre caras correspondientes en los cristales de una misma sustancia, son constantes.

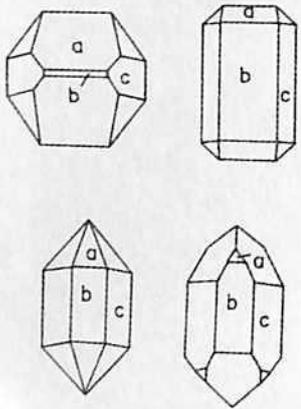


figura 2.3

La figura 2.3 representa algunos cristales de roca con formas diferentes, pero que cumplen siempre con la ley de la constancia de los ángulos diedros, como los formados por las intersecciones de las caras  $ab$ ,  $bc$  y  $ca$ . Estos dibujos han sido tomados del libro de Romé de L'Isle *Cristallographie* (citados por Papov y Shafranovsky, 1972), obra en la que precisamente este autor concluye la primera formulación de la ley de los ángulos diedros y hace numerosísimas consideraciones sobre las formas y los procesos de formación de los cristales en el reino mineral.

Cada material al cristalizar encuentra un ambiente físico que condiciona la rapidez del crecimiento y la forma exterior que pueda tomar el cristal, por lo que pueden faltar o aparecer nuevas caras y aristas, pero los ángulos diedros entre pares correspondientes de estas son siempre constantes. Esta ley, aunque empírica, fue por muchos años el criterio más científico de que dispusieron los gemólogos encargados de certificar la pureza y el tipo de muchas piedras preciosas originales y los instrumentos más difundidos para estos fines fueron los goniómetros.

### 2.4 La Proyección Estereográfica

Como una consecuencia del descubrimiento de la ley de la constancia de los ángulos diedros y las propie-

dades de simetría macroscópicas características de los cristales, se hizo necesaria una forma de representar gráficamente estos elementos de tal manera que se pueda establecer unívocamente la magnitud de los ángulos diedros, las direcciones o ejes significativos, las caras y planos y en general, todos los elementos de simetría que pueda poseer un cristal. Varios sistemas esquemáticos para dicha representación en un plano se han propuesto, pero el más práctico y aceptado universalmente es el de la llamada proyección estereográfica, al cual nos referiremos a continuación.

Supongamos un cristal de forma poliédrica circunscrito por una esfera que llamaremos esfera de proyección (figura 2.4). El centro de la esfera será el centro de proyección y debe coincidir con un punto interior del cristal.

Si cada cara del cristal se traslada paralelamente a sí misma, se encontrará una situación en que cada una de ellas es tangente a la esfera de proyección. Los puntos de tangencia de las caras con la esfera de proyección se denominan polos de las caras, y en general, estos se pueden hallar muy sencillamente si desde el centro de proyección se trazan normales a cada una de las caras del cristal. Las intersecciones de estas normales con la esfera son precisamente los puntos polares.

Ahora supongamos que un plano horizontal  $P$  corta por el centro la esfera de proyección (figura 2.5). La intersección de este plano de proyección con la esfera define un círculo sobre el plano de proyección  $P$ , llamado círculo de proyección, que es el área definitiva donde se han de representar las proyecciones estereográficas de las formas y elementos de simetría del cristal. El eje de la esfera perpendicular al círculo de proyección, denominado eje de proyección, fija dos puntos polares  $N$  y  $S$  (figura 2.6).

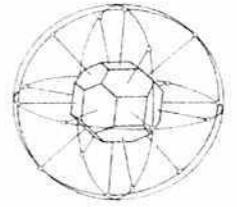


figura 2.4

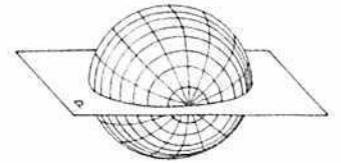


figura 2.5

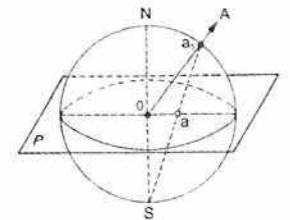


figura 2.6

El polo S se toma como punto de mira. En la misma figura se muestra la proyección estereográfica de una cierta dirección A sobre el círculo de proyección.  $a_1$  es el polo o la intersección de la dirección A con la esfera. Si desde S se mira al punto  $a_1$ , el vector que une estos dos puntos intersectará el plano de proyección en el punto a. Este punto a, representa exactamente la proyección estereográfica de la dirección A. Al generalizar esta experiencia, se puede afirmar que la proyección estereográfica de cualquier dirección en el espacio, da como resultado un punto en el círculo de proyección.

La figura 2.7 muestra la proyección estereográfica del plano R sobre P. Si este plano se prolonga imaginariamente sobre el lado superior del plano P hasta cortar la esfera de proyección, entonces la intersección marcará un gran arco sobre la esfera, del cual se han tomado algunos puntos  $a_1, b_1, c_1, d_1$ . Al obtener desde S la proyección estereográfica de cada uno de ellos sobre el plano de proyección, da como resultado respectivamente los puntos a, b, c y d. Si se tomaran muchos mas puntos sobre el arco de intersección del plano R con la esfera, se evidenciaría un cono, cono de proyección con su vértice en S, el cual intersectaría el plano de la proyección estereográfica P, describiendo también un arco dentro del círculo de proyección. En general, la proyección estereográfica de los planos se representa por arcos sobre el plano de proyección, o por rectas en el caso en que los

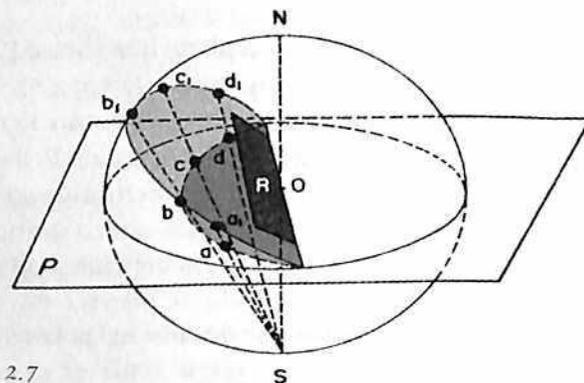


figura 2.7

planos a proyectar sean perpendiculares al plano P. Esta particularidad de la proyección de planos hace incómoda la proyección estereográfica de las caras de los cristales, por lo cual en lugar de éstas se toman únicamente las proyecciones de las normales a dichas caras. La proyección de la normal a un plano se llama proyección gnomónica de ese plano.

Veamos un ejemplo: La figura 2.8a contiene un polígono resultante de la intersección de las caras A, B, C, ...H de un cristal, confinado dentro de una esfera de proyección. Estas caras, para mayor sencillez, las suponemos perpendiculares al plano de corte. De la figura se hace evidente que el plano de corte coincide con el plano del dibujo. A su vez este es perpendicular al plano de proyección P. Los puntos  $a_1, b_1, c_1, \dots, h_1$  son los polos correspondientes a las caras dadas, mientras que los puntos a, b, c, ... h son las proyecciones gnomónicas de las caras del cristal en consideración. Es importante destacar, que si únicamente se dispusiera del punto de mira S, la proyección de los polos ubicados en el hemisferio sur se obtendrían por fuera del círculo de proyección (por ejemplo, el punto  $e'$  en la figura 2.8a). Esta situación se obvia si se toma el polo N como punto de mira sobre los polos a proyectar, similares a  $e_1$ . Para diferenciar las proyecciones de las direcciones que se intersectan con la esfera en el hemisferio norte de las

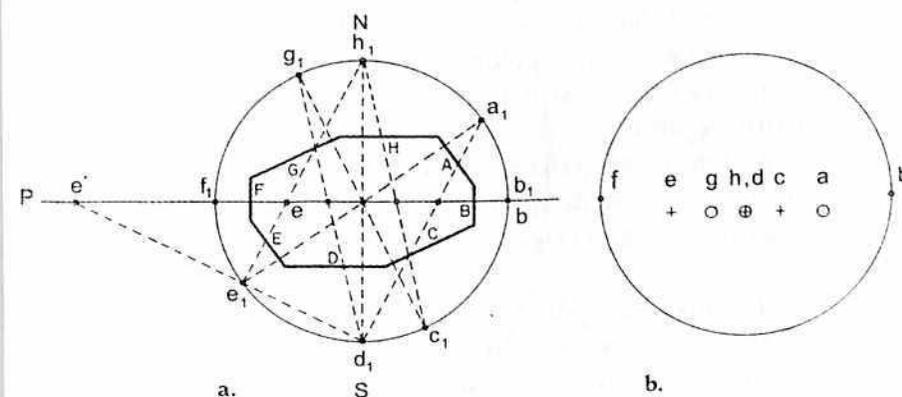


figura 2.8

que lo hacen en el hemisferio sur, las primeras se representan en el círculo de proyección mediante un pequeño círculo y las segundas con una cruz. En la *figura 2.8b*, sobre el plano P se muestran las proyecciones gnomónicas de las caras consideradas en la *figura 2.8a*. Por las particularidades del ejemplo seleccionado, (las caras son normales al plano de corte), todas las caras han resultado proyectadas a lo largo de un diámetro del círculo de proyección. En el centro de este se tiene un círculo con una cruz en su interior, pues con él coinciden las proyecciones de las caras D y H paralelas al plano P.

Es conveniente reiterar que el círculo de la *figura 2.8b* representa la intersección del plano P, perpendicular a la *figura 2.8a*, con la esfera de proyección.

### 2.5 Coordenadas Esféricas y la Red de Vulf

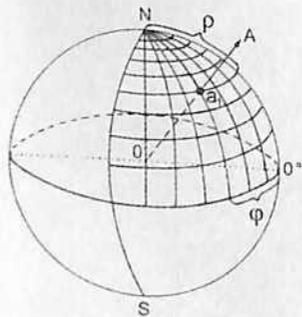


figura 2.9

En un sistema de coordenadas esféricas una dirección en el espacio está unívocamente definida si se conocen los correspondientes valores de las variables angulares  $\varphi$  y  $\rho$ . En la *figura 2.9* se ha tomado arbitrariamente una dirección A en el espacio a partir de un punto O que es también el origen de un sistema de referencia de coordenadas esféricas. Desde este punto se ha trazado con un radio unitario una esfera sobre la que es fácil establecer los valores de  $\varphi$  y  $\rho$  de la dirección dada. Como en el caso de las cartas geográficas, dichas coordenadas angulares se denominan longitud y latitud, respectivamente. La longitud se mide a lo largo de los paralelos, a partir de un meridiano de referencia. En cambio, la latitud en cristalografía se mide como la distancia angular desde un polo de la esfera, a lo largo del meridiano que conduzca hasta el punto dado.

Es importante que al hacer la proyección estereográfica de la dirección A, o de cualquier otro objeto, en el círculo de proyección se puedan establecer con

precisión los valores de las coordenadas que le corresponden. Por este motivo, para mediciones precisas, dicho círculo se sustituye por una red especial. Varios tipos de red han sido propuestos con este fin (red polar, de Fiódorov, de Flint y otras), pero la que ha alcanzado aceptación y utilización universales es la red de Vulf, que en realidad representa la proyección estereográfica de una serie de paralelos y meridianos, trazadas sistemáticamente sobre la esfera de proyección.

El principio para la construcción de una red de Vulf se ilustra en la *figura 2.10*. Sobre una circunferencia dividida, en este caso en intervalos de  $30^\circ$ , se trazan dos diámetros perpendiculares entre sí. Desde el punto  $0^\circ$  se trazan rectas auxiliares hasta los otros puntos divisores de la circunferencia comprendidos entre  $90^\circ$  y  $270^\circ$ ; y desde el punto de  $90^\circ$  sobre la circunferencia, hasta los puntos divisores comprendidos entre  $180^\circ$  y  $360^\circ$ . En esta forma las intersecciones de las líneas auxiliares dividen los diámetros inicialmente trazados en segmentos desiguales, a cada uno de los cuales corresponde un intervalo angular de  $30^\circ$ . La proyección estereográfica de los meridianos de una esfera como la que muestra la *figura 2.5*, se construye como arcos de circunferencias trazados sobre tres puntos: los dos polos y el punto de

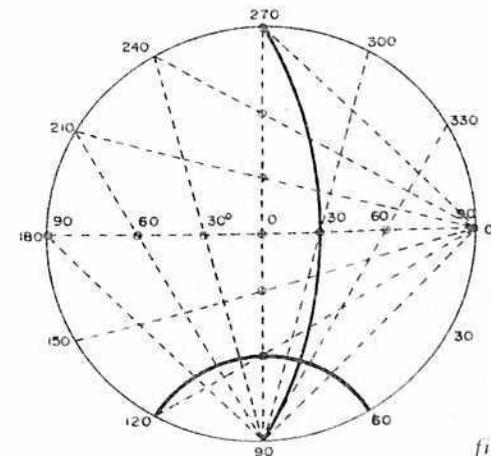


figura 2.10

intersección correspondiente de una línea auxiliar y el diámetro horizontal (véase figura 2.10). Análogamente se trazan los arcos de circunferencia que representan las proyecciones de los paralelos, pero en esta ocasión un punto es la intersección de la línea auxiliar trazada desde  $0^\circ$  con el diámetro vertical y los otros dos equidistan angularmente de los puntos de  $90^\circ$  o de  $270^\circ$ .

La verdadera red de Vulf es una malla de las proyecciones estereográficas de meridianos y paralelos entre los cuales median distancias de dos grados, trazados en una circunferencia de diez centímetros de radio, como la de la figura 2.11, que además de ilustrar se puede utilizar en actividades prácticas, tomando de ella una falsilla o calca en papel semitransparente.

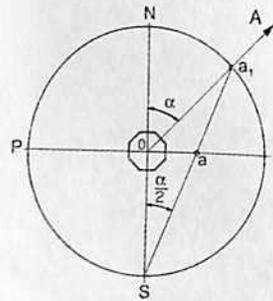
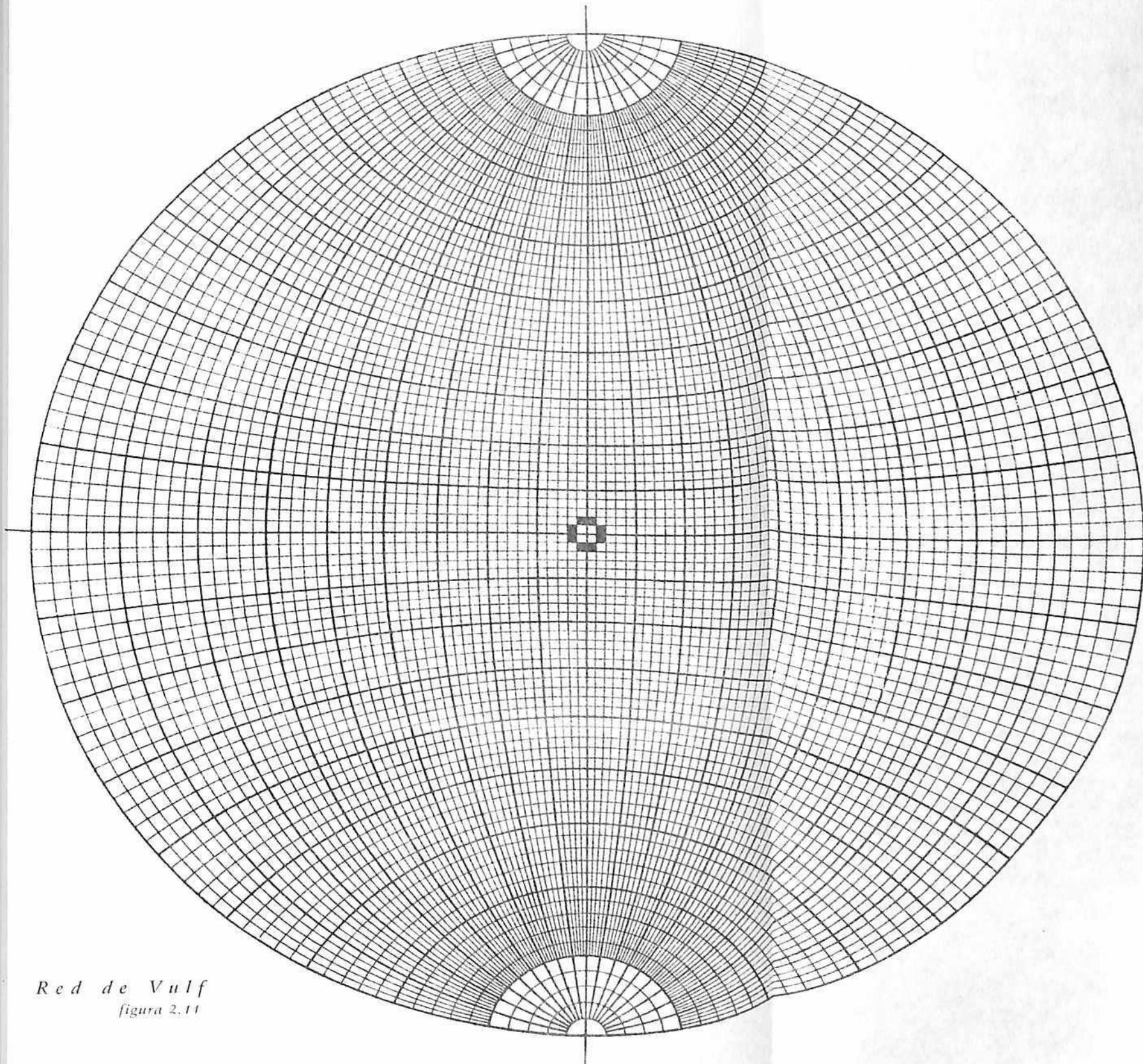


figura 2.12

La bondad de esta dimensión para la red de Vulf queda clara con un breve análisis de la figura 2.12. En ella la dirección A es normal a una de las caras de un cristal cuyo corte vertical se muestra en el centro del dibujo. Esta dirección o vector forma con el eje NS de la esfera de proyección, un ángulo  $\alpha$  y define el polo de proyección  $a_1$ . El vector  $Sa_1$  establece unívocamente sobre el círculo de proyección del plano P, el punto a de proyección gnomónica de la cara dada. Es evidente de la figura la relación

$$Oa = R \operatorname{tg} \frac{\alpha}{2}$$

es decir, la distancia del centro O al punto de la proyección a sobre el círculo de proyección, se halla multiplicando la tangente de  $\frac{\alpha}{2}$  por el valor del radio R. Si este es igual a 10 cm., entonces después de calcular la tangente de  $\frac{\alpha}{2}$  sólo hay que correr la coma de los decimales y la respuesta estará dada en centímetros. De otro lado, 10 cm. de radio para la red de Vulf permiten trabajar holgadamente y obtener un muy buen grado de exactitud.



Red de Vulf  
figura 2.11

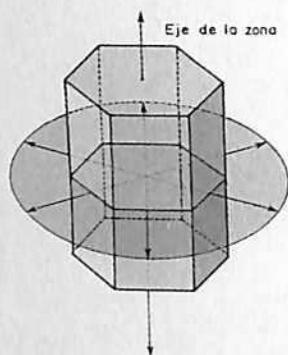


figura 2.14

Antes de explicar la solución de este problema, es necesario decir que se denomina zona de un cristal a cualquier conjunto de caras que se hallen dispuestas paralelamente entre sí, o de otra manera expresado, dichas caras son paralelas a una dirección o eje denominado eje de la zona. El cristal de la figura 2.14 tiene la forma de un prisma hexagonal. El conjunto de sus seis caras laterales son paralelas a una dirección que es la del eje de la zona formada por las mismas caras. A su vez, las normales tomadas a cada una de ellas desde el punto central del cristal, yacen sobre un plano horizontal, de tal manera que sus proyecciones estereográficas serán puntos sobre el arco que representa la proyección estereográfica del plano que las contiene. Es evidente que la dirección a la que son paralelas todas las caras de una zona, es perpendicular al plano que contiene las normales de las mismas.

En términos cristalográficos, y por consiguiente, también cuando se trata de proyecciones, se considera conocida una zona si se establece completamente la dirección a la que son paralelas las caras reales o posibles de un cristal, es decir, si se conoce la dirección en el espacio del eje de la zona.

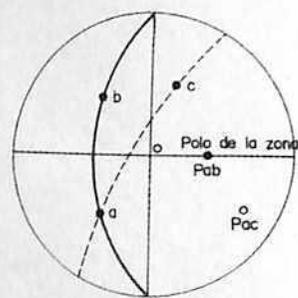


figura 2.15

Ahora veamos el problema propuesto. Supongamos que A y B son las direcciones normales de dos caras de una zona cristalina, cuyas coordenadas esféricas son  $A \rightarrow (135^\circ, 60^\circ)$  y  $B \rightarrow (225^\circ, 60^\circ)$ . Sus proyecciones estereográficas están dadas en la figura 2.15 por los puntos a y b respectivamente. Esta figura se supone lograda sobre un papel auxiliar, siguiendo la metodología expuesta en el problema anterior. Una vez encontradas las proyecciones a y b, se busca y se traza el meridiano de la red de Vulf que contenga dichos puntos. El trazo de este meridiano representa la proyección estereográfica del plano perpendicular a las caras, en donde, como se anotó anteriormente, yacen todas las normales a las caras de la zona. Así pues, los puntos de este arco o meridiano

comprende no solamente las proyecciones gnomónicas de caras reales como a y b, sino también un conjunto infinito de caras posibles que podrían pertenecer a la misma zona. Es bueno también anotar que cada cara de un cristal pertenece, o puede hacerlo, a más de una zona simultáneamente. Obsérvese lo anterior en la figura 2.14, teniendo en cuenta las caras hexagonales, bases del prisma allí dado.

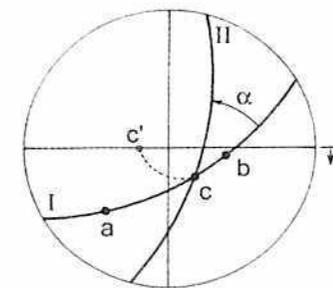
Encontrar la dirección del eje de la zona en consideración es equivalente a hallar el polo del meridiano ya trazado, o sea el punto de proyección de una dirección, equidistante angularmente en  $90^\circ$ , de todas las normales contenidas en el mencionado meridiano. Por lo tanto, este punto polar o dirección de la zona se halla midiendo  $90^\circ$  a partir del punto de intersección del meridiano con un diámetro que lo bisecte. Así se obtuvo el punto Pab de la figura 2.15. Allí también con una línea punteada se muestra otra zona a la que pertenecen las caras A y C cuyo polo es el punto Pac.

### 3) Medición de los ángulos entre dos direcciones y entre dos arcos que se cortan.

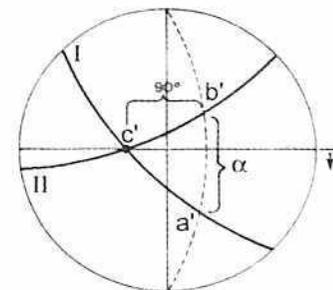
Para medir el ángulo entre dos direcciones arbitrarias cuyas proyecciones estereográficas están representadas en la figura 2.16a por los puntos a y b marcados como siempre en una calca auxiliar, procedemos así:

Concéntricamente sobre una red de Vulf, se gira la calca hasta que los puntos a y b coincidan sobre un solo meridiano; manteniéndose en esta posición se mide a lo largo del mismo meridiano la distancia angular que media entre los dos puntos, contando el número de paralelos comprendidos entre a y b.

Los arcos I y II de la figura 2.16b, son en realidad las proyecciones estereográficas de dos planos arbitrariamente orientados en el espacio, pero que desde luego ambos



a.



b.

figura 2.16

cortan por el centro la esfera de proyección. El ángulo que media entre estos planos será igual al ángulo que hay, entre los arcos que representan sus respectivas proyecciones, y para su medida se gira la calca concéntrica sobre una red de Vulf, hasta que el punto *c* de corte entre los arcos coincida con el diámetro horizontal. Este punto ahora se toma como polo y con respecto a él se halla el plano ecuatorial, es decir, se traza un meridiano que diste  $90^\circ$  de *c*, y sobre éste se mide la distancia angular que hay entre las intersecciones *a'* y *b'* de los arcos dados y el nuevo meridiano.



### III ELEMENTOS DE SIMETRÍA

El concepto de simetría fue analizado suficientemente en el Capítulo I. Allí se subrayó que para las estructuras cristalinas los movimientos o elementos de simetría están limitados a cuatro tipos simples: el centro de simetría o de inversión, el plano de simetría o reflexión, los ejes de rotación y las traslaciones. Además de esto deben considerarse diversas combinaciones o interacciones entre esos mismos elementos. Conviene también recordar que la posibilidad de los movimientos de simetría, aunque sean supuestos, se fundamenta en la existencia o repetición, dentro del objeto simétrico, de partes iguales. Hablando más exactamente, la existencia de partes idénticas que, mediante los movimientos de simetría se sustituyen unos por otros dejando el objeto en cuestión, idéntico a su estado y orientación en el espacio, anteriores al movimiento. Los elementos de simetría son pues, conceptos geométricos auxiliares que de alguna manera implican movimientos mediante los cuales podemos determinar la simetría de un objeto.

La vida cotidiana nos confronta con multitud de objetos finitos que poseen evidentes propiedades de simetría macroscópica: la forma de los árboles, de las

hojas y las flores; el cuerpo de los animales; la regularidad de ciertos polígonos, de torres y pirámides, y muchos más; son objetos cuya simetría se puede descubrir sin emplear movimientos o elementos de traslación, es decir con la ayuda solamente de centros de inversión, planos de reflexión, ejes de rotación y sus correspondientes combinaciones. Los movimientos que llevan implícitos solamente estos elementos de simetría tienen la particularidad de dejar inmóvil por lo menos un punto del objeto, por lo que las simetrías cristalinas que no contienen traslaciones se las denomina simetrías puntuales y en general expresan la repetición de partes idénticas en el orden macroscópico del objeto. En cambio las simetrías que implican traslaciones permiten explicar el orden interno de estructuras infinitas, constituidas por elementos que se repiten indefinidamente y con regularidad espacial.

### 3.1 El Centro de Simetría

El centro de simetría es un punto especial ubicado dentro del objeto que lo posee. Su propiedad fundamental hace que para cualquier otro punto del objeto haya otro igual, equivalente y equidistante del centro de simetría, sobre la recta que los une a los tres.

Analíticamente, si en un sistema de coordenadas XYZ el centro de Simetría se encuentra en el origen del sistema, entonces el punto  $A(x,y)$  tendrá un punto equivalente para los mismos valores negativos  $A'(-x, -y)$ . Este par de puntos están relacionados mediante el centro de simetría  $P(000)$ , o punto  $C$  de la *figura 3.1*, que muestra cómo el punto de intersección mutua de las diagonales de un paralelogramo es un centro de simetría que las divide en partes iguales y que hace a los puntos  $A(xy)$  y  $A(-x,-y)$  completamente equivalentes entre sí. Similarmente ocurre con cualquier otro par de puntos equidistantes de  $C$  a lo largo de una recta como  $B$  y  $B'$ , o  $D$  y  $D'$ .

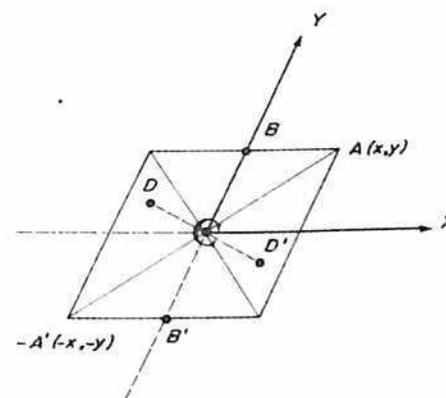


figura 3.1

En los poliedros que poseen centro de simetría las caras siempre forman pares antiparalelos; esto es lo que se ilustra en la *figura 3.2*, donde a uno de estos pares de caras se le ha dibujado una flecha para destacar tal antiparalelismo. Un objeto con simetría puntual no puede poseer más de un centro de simetría.

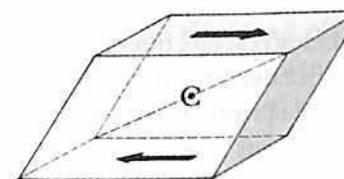


figura 3.2

El centro de inversión lo representaremos auxiliarmente con la letra  $C$ , mientras sistematizamos las notaciones universalmente aceptadas, de Schoenflies y la llamada notación internacional de Hermann-Mauguin\*.

### 3.2 Planos de Simetría

El plano de simetría es el elemento que relaciona especularmente dos partes equivalentes de un objeto simétrico. La relación especular expresa el hecho de que estas partes equivalentes estén ubicadas dentro del objeto simétrico como una parte en sí y su correspondiente imagen reflejada en un espejo, de tal manera que esta última se superponga congruentemente sobre la

\*En calidad de notación auxiliar utilizaremos la que propuso A. Bravais (1811-1865) y que perfeccionó Paul Groth (1845-1927), que tiene la particularidad de dar directamente todos los elementos de simetría.

segunda parte real. Así lo muestra la *figura 3.3*, donde la imagen de la mitad, sector ABCD, de un canaleta, sobre un espejo P vertical que lo divide, coincide congruentemente sobre la segunda parte invisible, posterior al espejo, dando la impresión de que observamos en su totalidad el canaleta.

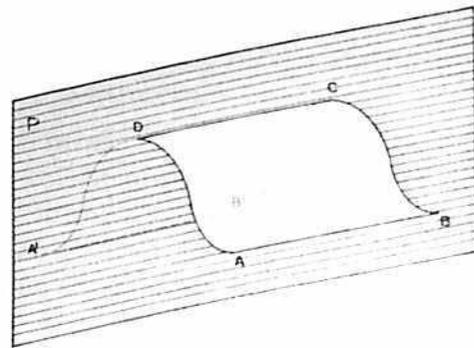


figura 3.3

De igual manera la imagen de la segunda parte, reflejada sobre el mismo espejo, que suponemos de doble faz y suficientemente delgado, debe superponerse congruentemente sobre la primera parte. Como se anotó en el Capítulo I, los objetos que son idénticos topológicamente, pero que no son sustituibles indistinguiblemente el uno por el otro y en cambio pueden ubicarse respecto de un plano de simetría como el objeto y su imagen, se llaman enantiomorfos.

La *figura 3.4* muestra la construcción geométrica de la imagen a partir del objeto, sobre un plano de simetría.

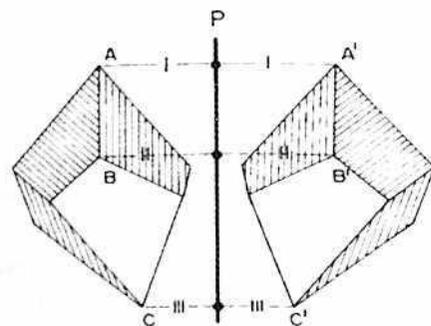


figura 3.4

A la izquierda del plano P se encuentra el objeto, de cuyo contorno se han destacado los puntos A, B, C. La imagen de estos puntos respectivamente se encontrará tomando la normal desde cada uno de ellos hasta el espejo y siguiendo esta recta, a una distancia igual pero del otro lado del espejo, se hallarán los puntos virtuales A', B' y C'; imágenes de los primeros. Análogamente se puede proceder con todos los puntos del espacio ocupado por el objeto, hasta encontrar una imagen idéntica y enantiomorfa del mismo.

En las *figuras 3.5a, b, c, d, e y f*, se observan formas geométricas que poseen planos de simetría cuya huella se ha trazado con líneas gruesas. El rombo y el rectángulo poseen dos planos de simetría que se cortan entre sí perpendicularmente. Por contraste el paralelogramo de la *figura 3.5a*, a pesar de su sencillez, "elegancia" y armonía, no posee planos de reflexión. Un paralelepípedo de tipo ladrillo tiene tres planos de simetría mutuamente perpendiculares, mientras que a un cubo le corresponden nueve: cinco verticales, uno horizontal y cuatro inclinados a 45°.

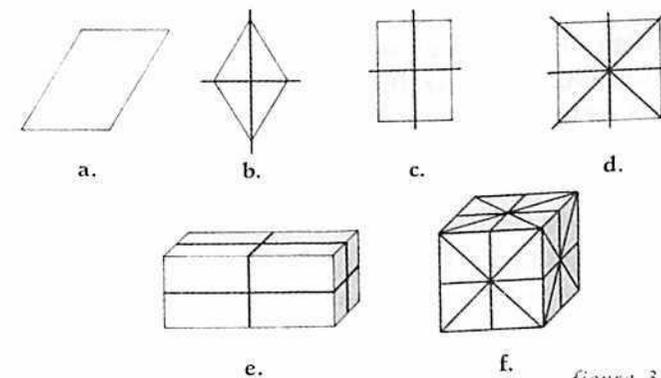


figura 3.5

### 3.3 Ejes de Rotación

Los ejes de rotación son los elementos de simetría que permiten, mediante giros de determinado ángulo,

que las partes idénticas de un objeto se sustituyan mutuamente, dejándolo indistinguible en el espacio, del estado anterior al movimiento. Así pues, los ejes de rotación son las líneas rectas alrededor de las cuales se repiten convenientemente partes idénticas de una figura u objeto.

Representaremos inicialmente los ejes de simetría rotacional con las letras  $L_n$ , donde  $n$  es el número entero que indica el orden del eje, es decir, el número de veces que se repite un motivo alrededor del eje mientras se realiza una rotación de  $360^\circ$ . De tal manera, resulta muy importante saber en cada caso cuál es el ángulo mínimo de rotación  $\alpha$ , necesario para que partes equivalentes de un objeto con simetría rotacional se sustituyan unas por otras. Entonces  $n$  se definirá como

$$n = \frac{360^\circ}{\alpha}$$

Hay objetos que permiten innumerables valores de  $n$ , comenzando desde  $n=1$  hasta  $n=\infty$ , es decir cualquier ángulo de rotación alrededor de un eje deja el objeto indistinguible; tal es el caso de una esfera que gire alrededor de cualquiera de sus diámetros o de un cono que lo haga alrededor de su eje principal. En el primer caso tenemos un número infinito de ejes  $L_\infty$ , mientras que en el segundo sólo existe un eje  $L_\infty$ , de orden infinito. Por el contrario, en las estructuras cristalinas, donde es necesario considerar la discreción microscópica y la regularidad espacial de la estructura, solamente son posibles los ejes  $L_1, L_2, L_3, L_4$  y  $L_6$ . Esta particularidad macroscópica de los cristales no es casual y tiene relación con la presencia de otro elemento de simetría como es el de las traslaciones a lo largo de determinadas direcciones solamente. De tal manera que los ejes  $L_5$  y los de orden  $n$  mayor que 6 no son consistentes con la simetría traslacional de los cristales reales. Veamos esta inconsistencia en el caso de un eje  $L_5$ .

La figura 3.6 comprende un pentágono regular cuyos vértices son equidistantes y, a su vez, los más cercanos motivos del punto 0 de una supuesta estructura cristalina plana. Podemos entonces esperar que por el punto 0 pase un eje  $L_5$  perpendicular al plano del dibujo. Pero por pertenecer todos estos seis motivos a una red plana cristalina, esta siempre ha de poderse dividir en algún tipo de paralelogramos en cuyos vértices se encuentren retículos de la red. De esta manera, al colocar varios de los mismos paralelogramos consecutivamente resultarán filas reticulares que bien pueden ser tomadas en calidad de ejes cristalográficos.

En la figura 3.6 se ha construido uno de tales paralelogramos tomando como base dos lados del pentágono y cuya dimensión a la vez servirá de período de las filas que se establecerán a lo largo de las direcciones  $C_1C_2$  y  $C_2C_3$  respectivamente. Sin embargo, esta construcción como se evidencia en el dibujo, exige que a través del motivo  $C_3$  exista una fila paralela con  $C_1C_2$  con un período igual al de esta, lo que hace necesaria la existencia de otro motivo en el punto  $C_x$ , pues la distancia entre  $C_3$  y  $C_5$  es mayor que  $C_2C_1$ . La introducción del nuevo retículo  $C_x$  hace que los puntos  $C_1, C_2, \dots, C_5$  no sean los más cercanos al del punto 0 como se supuso inicialmente y además genera nuevos tipos de espaciamentos lineales en la red como  $C_xC_5$  y  $C_xC_4$  que difieren de  $C_1C_2$  y  $C_2C_3$  respectivamente. Por esta razón no se satisface la

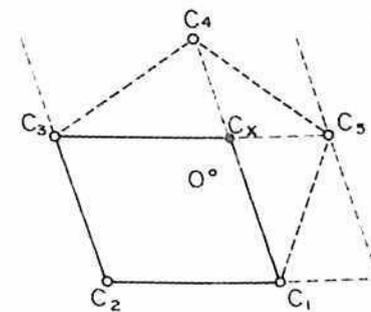


figura 3.6

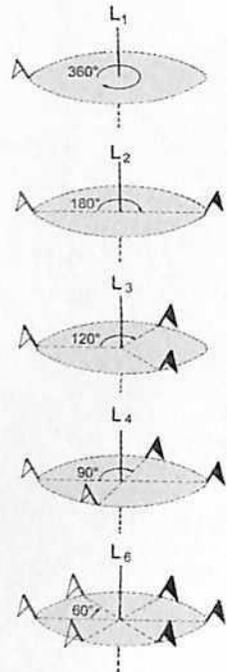


figura 3.7

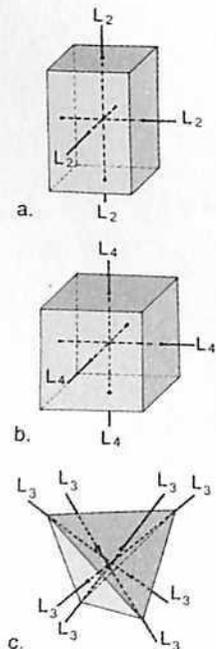


figura 3.8

simetría traslacional propia del ordenamiento microscópico de los cristales, que exige tener a lo largo de cada una de las filas un solo tipo de espaciamiento entre los motivos, un solo tipo de período.

La figura 3.7 tiene por objeto ilustrar el modo de operación de los diversos ejes cristalográficos de rotación simple. En calidad de motivo aquí se ha tomado una pequeña bandera de doble faz: blanco y negro.

Hay objetos simétricos que simultáneamente pueden tener más de un eje de un mismo orden  $n$ . Tal es el caso de los poliedros representados en la figura 3.8. No obstante, no existen simetrías puntuales en las que un poliedro o cualquier objeto en general tenga más de un eje de rotación de sexto orden.

### 3.4 Ejes de Inversión y Ejes de Rotación Impropios

Podría catalogárseles como elementos de simetría complementarios de los anteriores, pues aunque su presencia es real en los sistemas cristalográficos, su modo de operación se puede interpretar como el resultado de la combinación simultánea de diferentes elementos de simetría.

Se llama eje de inversión de orden  $n$  a la combinación simultánea de la rotación de un motivo o parte equivalente de un objeto, en un ángulo  $\alpha = \frac{360^\circ}{n}$  alrededor de una línea recta dada, con reflexiones en un punto central, tal como lo indica la figura 3.9a, y más explícitamente en el segundo caso,  $L_{2i}$ , donde se ha dibujado en punteado la posición que ocuparía el motivo con la simple rotación de  $180^\circ$  para luego ser reflejado en el centro de simetría. Como esta combinación es simultánea, el resultado final es igual a una reflexión en un plano de simetría  $P$ . En los demás casos  $L_{ni}$  de la figura 3.9a, no se han hecho consideraciones de este tipo de

interpretación. Es decir, los ejes de inversión que auxiliarmente representaremos como  $L_{ni}$ , tienen una acción equivalente a la operación simultánea de un eje de rotación  $L_n$  y un centro de simetría  $C$ . En cambio las combinaciones simultáneas de rotaciones en ángulos  $\alpha = \frac{360^\circ}{n}$  alrededor de la línea recta de un eje dado, con reflexiones en un plano de simetría  $P$  perpendicular a dicha recta, se llama eje de rotación impropia y lo representaremos con las letras  $S_n$ , donde  $n$  como en todos los casos de ejes cristalográficos sólo puede tomar los valores 1, 2, 3, 4 ó 6 (Ver figura 3.9b).

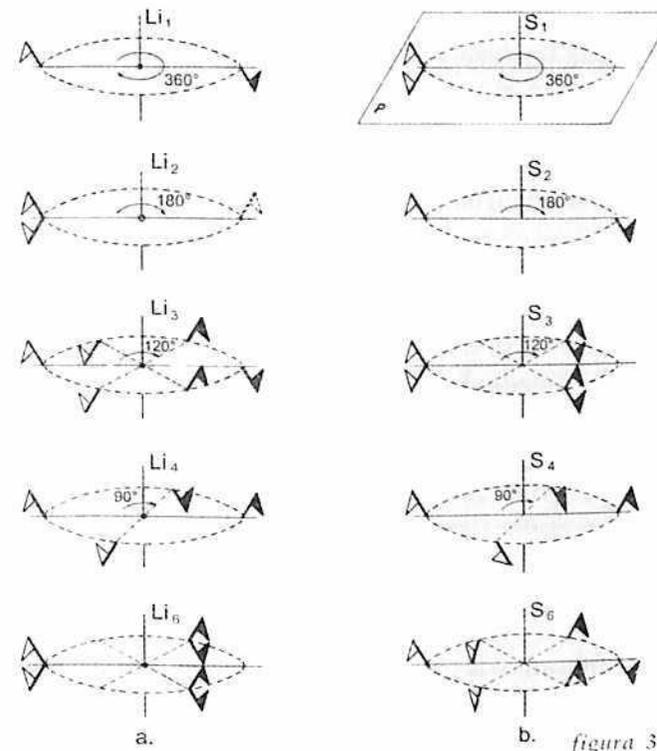


figura 3.9

Es necesario puntualizar, que a pesar de que la interpretación de estos elementos de simetría se hace como una combinación de ejes de rotación  $L_n$  con centros  $C$  o planos  $P$  de simetría, no es obligatoria la existencia particular en el cristal de ejes simples  $L_n$  y de planos  $P$ .

Por esta razón se habla de la combinación simultánea, pues los puntos equivalentes sólo se alcanzan con este tipo de combinación para que estos ejes se puedan considerar como elementos independientes de simetría.

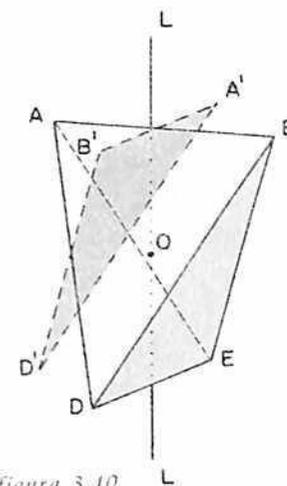
En las columnas primera y segunda de la *tabla 3.1* se indica la equivalencia en elementos de simetría comunes según nuestra notación auxiliar, de los ejes de inversión y de los de rotación impropias respectivamente. La tercera columna muestra la completa equivalencia que existe entre estas dos modalidades de ejes de simetría. Esta es la causa por la cual algunos autores tienen preferencia por una u otra de estas denominaciones, cosa que también puede traer confusión en los recién iniciados en el tema. En lo sucesivo, nos referiremos exclusivamente a los ejes de inversión  $L_n$ , que son los más usados en la nomenclatura cristalográfica de Hermann-Mauguin.

*tabla 3.1 Equivalencia entre los ejes de inversión y los ejes de rotación impropia*

Ejes de inversión $L_n$	Ejes de rotación impropia $S_n$	Relación entre ejes $L_n$ y $S_n$
$L_{11} = C$	$S_1 = P$	$L_1 = S_1$
$L_{12} = P$	$S_2 = C$	$L_2 = S_2$
$L_{13} = L_3C$	$S_3 = L_3P_{\perp}$	$L_3 = S_3$
$L_{14} = L_2$	$S_4 = L_4$	$L_4 = S_4$
$L_{16} = L_3P_{\perp}$	$S_6 = L_3C$	$L_6 = S_6$

Destacamos la particularidad del eje  $L_{14}$  señalado con una flecha sobre el signo de igualdad en la primera columna de la *tabla 3.1*. Esta flecha significa que la existencia de un eje de inversión de cuarto orden siempre implica la presencia de un eje doble de rotación  $L_2$ , sin embargo la presencia de este último no obligatoriamente requiere la presencia del eje  $L_{14}$ . Esta circunstancia con frecuencia dificulta el descubrimiento de los ejes de inversión de cuarto orden en los cristales.

La *figura 3.10* ilustra el modo de operación de un eje  $L_{14}$  sobre la base de un tetraedro tetragonal, que es un poliedro de cuatro caras iguales con forma de triángulos isósceles.  $LL$  es la recta alrededor de la cual pueden ocurrir las rotaciones e implica siempre un eje de segundo orden  $L_2$ . Simultáneamente esta recta, para este caso, es un eje  $L_{14}$  que opera así: mediante rotación de  $90^\circ$  el triángulo  $ABD$  toma la posición  $A'B'D'$ , luego cada punto se refleja en un punto central  $O$  (centro de simetría), con lo cual el triángulo  $A'B'D'$  debe coincidir congruentemente con el triángulo  $BDE$ . Por ejemplo, mediante reflexión en el punto central  $O$ , el punto  $A'$  pasa al punto  $D$ ;  $B'$  al  $E$  y así sucesivamente. De esta manera el tetraedro, después de estas operaciones ocupa una posición indistinguible de la que tenía inicialmente, claro está, si la totalidad de sus puntos integrantes han sido sometidos al mismo tipo de procedimiento.



*figura 3.10*

### 3.5 Notación y Representación Gráfica de los Elementos de Simetría

Hasta ahora se han representado los elementos de simetría con símbolos que hemos llamado auxiliares, así:  $P$  para los planos de simetría;  $C$  para el centro de simetría;  $L_n$  para los ejes de rotación y  $L_m$  para los ejes independientes de inversión ( $L_{14}$  y  $L_{16}$ ). La utilización de esta notación auxiliar, que todavía emplearemos más adelante, fue completada por Bravais (1811-1863) y en nuestro caso tiene un carácter puramente didáctico, pues permite expresar explícitamente la cantidad y tipo de elementos de simetría contenidos en una determinada clase cristalina. No obstante, esta notación no es utilizada por los especialistas en la literatura científica.

Existen dos tipos de notación cristalográfica de los elementos de simetría universalmente aceptados: la notación propuesta por Arthur Moritz Schoenflies (1853-1928) y la llamada notación internacional que propusieron Charles Mauguin (1878-1958) y Carl

Hermann (1898 - 1961), que son las utilizadas en el lenguaje científico. La primera es preferida por los físicos en las descripciones y estudio de las diversas propiedades físicas de los cristales, mientras que la segunda resulta más adecuada para los tratamientos cristalográficos de objetos, especialmente cuando se hacen no solamente al nivel de las simetrías macroscópicas sino que han de llevarse hasta las simetrías espaciales propias de la estructura microscópica del objeto. Las dos notaciones tienen la particularidad, en el caso de combinaciones de diversos elementos de simetría, de expresar un mínimo de tales elementos, apenas el suficiente para poder deducir los demás que estén presentes en el conjunto mediante el conocimiento de las sencillas leyes de combinación que en el siguiente párrafo expondremos brevemente. No obstante, las marcadas preferencias en su utilización, cada uno de los dos sistemas mencionados de notación es suficientemente coherente para ser utilizado en cualquier problema de cristalografía.

La *tabla 3.2* contiene los símbolos de los elementos de simetría hasta ahora considerados en cada sistema de notación y se muestra la representación gráfica de los mismos con respecto a un plano de proyección horizontal. En la última columna de la tabla se indica el número de puntos simétricamente idénticos o equivalentes ubicados adecuadamente en un objeto simétrico para que el elemento de simetría dado tenga lugar. Inversamente, puede interpretarse como el total de puntos generados cuando a un punto inicial se le aplican todos los movimientos simétricos que implica el elemento de simetría dado.

En la notación internacional de Hermann-Mauguin el plano de simetría se representa con la letra minúscula *m* y los ejes de rotación con los números 1, 2, 3, 4 y 6, según el orden de rotación del eje dado, pues como ya se señaló, estos son los únicos órdenes de rotación de los ejes permitidos en cristalografía. Para los ejes de inver-

sión se utilizan los mismos números pero con un signo menos (-) superpuesto a cada uno de ellos. Como se puede observar en la *tabla 3.2* el centro de simetría en este sistema de notación es equivalente al eje de inversión de primer orden  $\bar{1}$ .

En la notación de Schoenflies se emplea la letra mayúscula  $C_n$  para representar los ejes de rotación, donde el subíndice *n* puede tomar los valores 1, 2, 3, 4 ó 6 del orden de la rotación. Con la letra *i* se representa el centro de simetría y algunas veces es utilizada como subíndice auxiliar para diferenciar los ejes de rotación propia de los de rotación impropia. Por ejemplo,  $S_6 = C_{3i}$  ó  $C_{4i} = S_4$ . Nosotros, consecuentemente con lo explicado

*tabla 3.2* Símbolos y representación gráfica de los elementos de simetría puntual en los diferentes sistemas de notación.

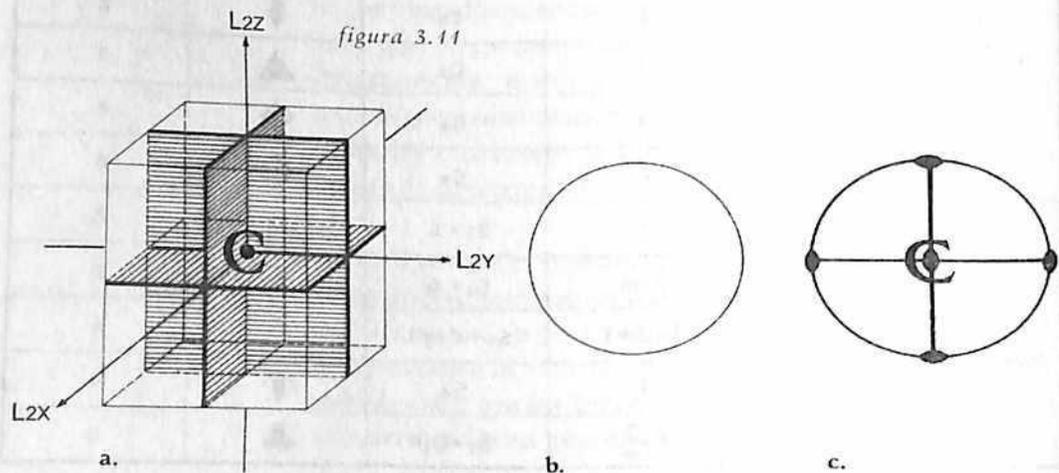
Elementos de Simetría	Notación auxiliar	Notación de Hermann-Mauguin	Notación de Schoenflies	Representación gráfica	Número de puntos repetidos
Centro	C	$\bar{1}$	$\bar{1}$	o	2
Plano	P	m	$\sigma (\sigma_h, \sigma_v)$		2
Ejes de Rotación	L <sub>1</sub>	1	C <sub>1</sub>		1
	L <sub>2</sub>	2	C <sub>2</sub>	◊	2
	L <sub>3</sub>	3	C <sub>3</sub>	▲	3
	L <sub>4</sub>	4	C <sub>4</sub>	◆	4
	L <sub>6</sub>	6	C <sub>6</sub>	⬠	6
Ejes de Inversión	L <sub>1</sub>	$\bar{1}$	$S_2 = \bar{1}$	o	2
	L <sub>2</sub>	$\bar{2} = m$	$S_1 = \sigma$		2
	L <sub>3</sub>	$\bar{3} = 3 + \bar{1}$	$S_6 = C_3 + \bar{1}$	⬠	6
	L <sub>4</sub>	$\bar{4}$	$S_4$	◊	4
	L <sub>6</sub>	$\bar{6} = \frac{3}{m}$	$S_3 = C_3 + \bar{1}$	⬠	6

con motivo de la *tabla 3.1*, utilizaremos exclusivamente como símbolo para los ejes de inversión en la nomenclatura de Schoenflies  $S_n$ . Los planos de simetría se representan con la letra griega  $\delta$  distinguiendo, según la orientación que se le dé al cristal, los planos horizontales  $\delta_h$  y los planos verticales  $\delta_v$ .

En el último renglón de la *tabla 3.2* se destaca la existencia de un eje 3 perpendicular a un plano  $m$ , lo que es equivalente al eje de inversión  $\bar{6}$ . En la notación de Hermann-Mauguin en general un eje de orden  $n$  que es perpendicular a un plano se representa por la relación  $n/m$ , mientras que en la notación de Schoenflies esto mismo se representa por  $C_{nh}$ .

Los elementos de simetría se pueden representar en las proyecciones estereográficas con los simbolismos gráficos contenidos en la *tabla 3.2*, especialmente cuando los planos y ejes son perpendiculares al plano de proyección. Sin embargo, su aplicación no es difícil en los casos en que estos elementos de simetría tienen otra orientación, como en el ejemplo siguiente.

La *figura 3.11a* muestra un poliedro en forma de ladrillo, que contiene 3 planos P, 3 ejes  $L_2$  y un centro de



simetría  $C$ . Estos elementos deben ser proyectados en una red de Vulf cuyo esquema está representado por el círculo de la *figura 3.11b*. En la *figura 3.11c* se muestra el mismo espacio de Vulf con los elementos de simetría ya proyectados. Se supone que para esta proyección se ha orientado el cristal de tal manera que el plano de proyección, es decir, que la red de Vulf coincida con el plano P horizontal. En la proyección de la *figura 3.11c* el centro de simetría  $C$  se ha representado como se indicó en la *tabla 3.2*, pero como en la proyección de los elementos característicos de la simetría macroscópica de los cristales es fácil que ésta se confunda con la proyección de otros elementos, se suele subrayar la presencia del centro de simetría escribiendo una letra  $C$  en el centro de la proyección. Sin embargo, en la representación gráfica de grupos espaciales solamente se utiliza la convención gráfica contenida en la *tabla 3.2* para el centro de simetría (*Ver Capítulo VIII*).

### 3.6 Combinación de los Elementos de Simetría

Es curioso que en los objetos macroscópicos en que se descubren por lo menos dos elementos diferentes de simetría de los que hemos considerado hasta ahora (centro, planos y ejes de simetría), siempre se encontrará un tercero que podrá interpretarse como resultante de la combinación de los dos ya conocidos. Si el objeto es suficientemente simétrico, puede tener más de tres elementos de simetría y entonces al conocer dos de ellos y descubrir un tercero, éste no obligatoriamente ha de ser el resultado de la combinación de los dos primeros, pero en todo caso lo será de la combinación de dos de los elementos de simetría de tal objeto. En tal caso la acción del tercer elemento es igual a la acción de los otros dos en conjunto. La explicación y demostración exacta de esta propiedad de la simetría es dada por la teoría matemática de grupos, cuyos conceptos fundamentales son los de punto y número (*ver por ej. Faure R., et. 1969*).

Como lo indicamos en el Capítulo I, los elementos de simetría y los puntos equivalentes son conceptos que parecieran estar más relacionados con la geometría y su forma más sencilla de operación, que con el movimiento. Pero esta misma forma de operación puede interpretarse mediante el análisis matemático como la transformación de una función. Este tipo de correspondencia entre la geometría y la matemática se denomina isomorfismo, el cual permite ver las dos como diversas interpretaciones de una misma realidad. Nos limitaremos pues, a señalar los principales resultados de la combinación o interacción de los elementos de simetría ya considerados, con la ayuda de una serie de teoremas y de reglas fáciles de comprender, pero que son de gran utilidad práctica.

**Teorema 1**

La línea de intersección de dos planos de simetría siempre coincidirá con un eje de rotación simple, cuyo ángulo elemental de giro  $\alpha = \frac{360^\circ}{n}$  es el doble del ángulo comprendido entre los mismos planos. La acción de este eje es equivalente a la suma de las acciones de los dos planos.

**Demostración**

Los planos  $P_1$  y  $P_2$  de la figura 3.12 son perpendiculares al plano del dibujo y se intersectan bajo un ángulo  $\beta$  en el punto 0. Un punto arbitrario A del motivo  $M$ , mediante reflexión en el plano  $P_1$  se reproduce en  $A_1$  de la imagen  $M_1$  del motivo inicial, la cual a su vez se refleja en el plano  $P_2$ . Finalmente, la acción combinada de los dos planos de simetría reproduce el punto A en  $A_2$  y todo el motivo M en  $M_2$ . R es el radio con el que se ha trazado un arco auxiliar desde el punto 0 de intersección de los planos, pasando por los puntos A considerados. Está claro que la distancia sobre la normal desde A al plano  $P_1$  es igual a la distancia a lo largo de la

normal desde  $A_1$  a  $P_1$ . Análogamente, los puntos  $A_1$  y  $A_2$  son equidistantes con respecto al plano  $P_2$ . En consecuencia los triángulos rectángulos  $An_1O$  y  $A_1n_1O$  son iguales, como también lo son entre sí los triángulos  $A_1n_2O$  y  $A_2n_2O$ . No es difícil ahora establecer que efectivamente la rotación del punto A en un ángulo  $\alpha$  alrededor del punto 0 tiene una acción equivalente a la suma de las acciones de los planos  $P_1$  y  $P_2$ . De otro lado, de la construcción geométrica de la figura 3.12 son evidentes las siguientes igualdades entre ángulos:

$$\begin{aligned} \angle AOn_1 &= \angle A_1On_1 \\ \angle A_1On_2 &= \angle A_2On_2 \\ \angle A_1On_1 + \angle A_1On_2 &= \angle \beta \\ \angle \alpha &= 2\angle A_1On_1 + 2\angle A_1On_2 = \angle 2\beta \end{aligned}$$

que confirman la aseveración del teorema, según la cual el ángulo  $\alpha$  debe ser el doble de  $\beta$ .

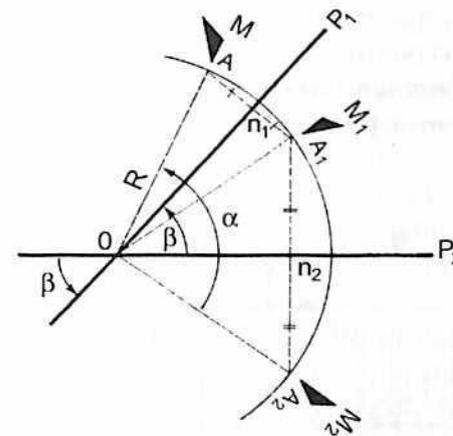


figura 3.12

**Teorema 2 (Teorema de Euler)**

Si dos ejes de simetría se intersectan en un punto, entonces siempre existirá un tercer eje, cuya acción será equivalente a la acción combinada de los dos primeros. Además este tercer eje pasará por el mismo punto en que se intersectan los primeros.

**Demostración**

La figura 3.13 nos permite una demostración simplificada. En ella se representa un prisma tetragonal en el cual ciertamente se tienen dos ejes dobles de rotación:  $L_2^1$  y  $L_2^2$ , los cuales se intersectan en el punto 0. De conformidad con el teorema 1, estos ejes pueden ser interpretados como resultantes de las intersecciones de los planos  $P_1$  y  $P_2$  con  $P_3$ , bajo ángulos de  $90^\circ$ . Debemos encontrar un tercer eje de simetría  $L_n$  que pase por el punto 0 y que tenga una acción equivalente a las de  $L_2^1$  y  $L_2^2$  sumadas. Observemos la acción consecutiva de estos ejes sobre el punto  $A_1$ : el eje  $L_2^1$  reproduce  $A_1$  en  $A_2$  y este punto a su vez, bajo la acción de  $L_2^2$ , se repite finalmente en  $A_3$ . De tal manera la combinación de los ejes da por resultado la repetición de  $A_1$  en  $A_3$ , o en  $A_4$  si se invierte el orden de operación de los ejes: primero  $L_2^2$  y después  $L_2^1$ . Pero este mismo efecto se logra mediante una rotación alrededor del eje  $L_n = L_4$ , que también se intersecta con los ejes iniciales en el punto 0. El orden  $n = 4$  y  $\alpha = 90^\circ$ , en este caso están determinados por el ángulo  $\beta$  entre los planos  $P_1$  y  $P_2$ , que en un prisma tetragonal es de  $45^\circ$ . Al invertir

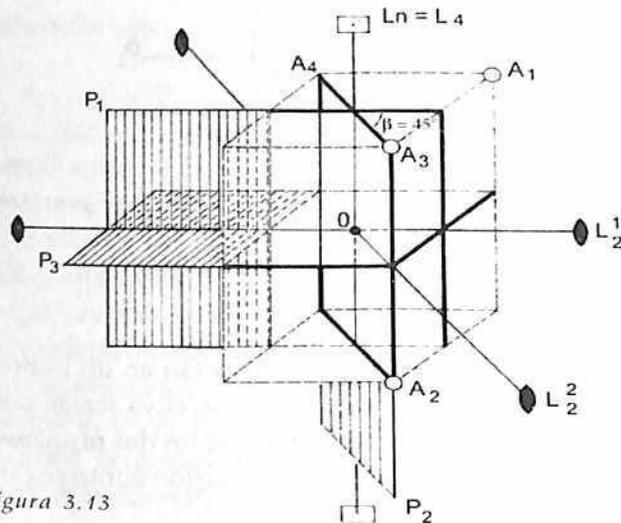


figura 3.13

el orden de operación de  $L_2^1$  y  $L_2^2$ , el sentido del nuevo eje también cambia y entonces el punto  $A_1$  pasa no a  $A_3$  sino a  $A_4$ .

**Teorema 3**

Si se tiene un centro de simetría C y un eje de rotación de orden par  $L_{2n}$ , entonces existe un plano de simetría P perpendicular al eje dado que lo intersecta en el punto C.

**Demostración**

Anotemos inicialmente que todo eje de rotación de orden par siempre lleva implícito un eje doble  $L_2$ , por lo que nos referiremos solamente a éste.

En aras de la sencillez hemos tomado en calidad de motivo una comilla plana de doble faz (blanco y negro), que inicialmente coincide con el plano del dibujo XY en la posición 1 de la figura 3.14a. Por la acción del centro de simetría C el motivo pasa a la posición 2 sobre el mismo plano XY pero cambiando de faz. La consiguiente acción de un eje  $L_2$  que coincide con el eje Y (figura 3.14b), traslada el motivo de la posición 2 a la 3 cambiando nuevamente de faz. Sin embargo el resultado de estas operaciones, en cualquier secuencia, siempre son equivalentes a la operación única de un tercer elemento, un plano de simetría P horizontal XZ, es decir, un plano perpendicular a  $L_2$  con el que se intersecta en el punto C (figura 3.14c). Los ángulos señalados con flechas contrapuestas en cada una de las figuras 3.14 son iguales; de ellas se deduce la igualdad en la figura 3.14c de las distancias de 1 y 3 a  $n_1$ , que es la condición que siempre cumplen el objeto y su imagen en un plano de simetría especular P. En consecuencia, el conjunto total de elementos de este sistema de simetrías por lo menos será  $L_{2n} P \perp C$ . ( $P \perp$  significa que el plano P es perpendicular al  $L_{2n}$ ). Generalizando se puede afirmar que si al analizar

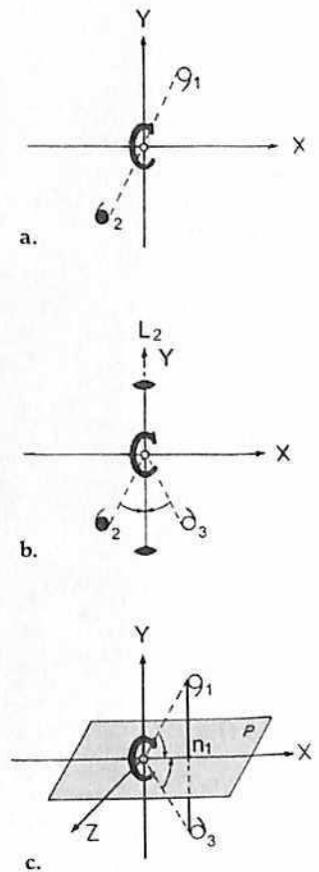


figura 3.14

la simetría puntual de un cristal encontramos dos de estos tres elementos, entonces siempre existirá el tercero, sin importar cuáles de ellos se tomen inicialmente.

Además de los principios de interacción entre los elementos de simetría contenidos en los teoremas anteriores, enunciaremos algunas reglas de utilidad práctica, y que en realidad son resultantes de los mismos teoremas.

**Regla 1 (Consecuencia del Teorema de Euler)**

Si en un cristal existen un eje de rotación de orden  $n$  ( $L_n$ ) y un eje doble de rotación  $L_2$  perpendicular al primero, entonces es posible hallar  $n$  ejes dobles ( $nL_2$ ), dispuestos convenientemente y que cumplen con la misma condición de perpendicularidad al primero en un mismo punto. La figura 3.15 ilustra esta afirmación. En la primera figura, un prisma trigonal en el que se tiene un eje de rotación  $L_3$ , al cual se le ha encontrado un eje perpendicular  $L_2$ . La figura 3.15b indica las tres posibilidades equivalentes en este prisma, para trazar ejes dobles de simetría perpendiculares a  $L_3$ .

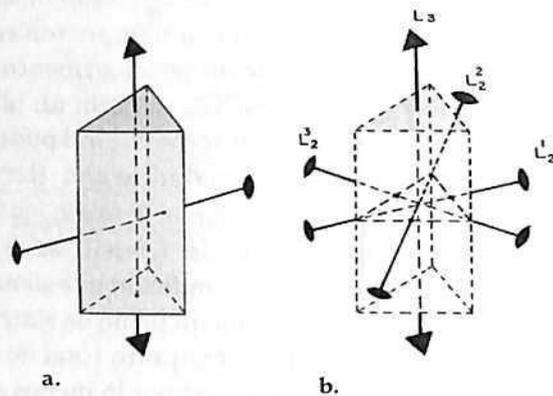


figura 3.15

**Regla 2 (Consecuencia del Teorema 1)**

Si en un cristal existe un eje de orden  $n$  ( $L_n$ ) y un plano de simetría  $P$  que coincide paralelamente con dicho eje  $L_n$ , entonces deben existir en total  $n$  planos  $P$  que cumplen la misma condición de coincidencia con el eje de rotación dado (figura 3.16).

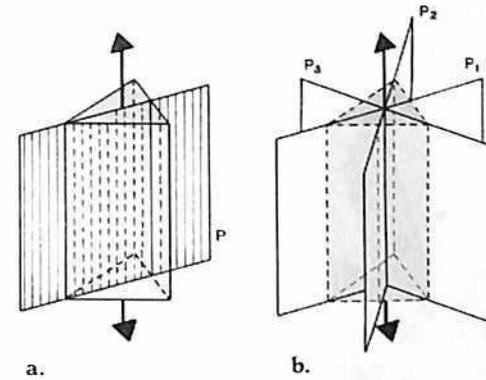


figura 3.16

**Regla 3**

Si un plano de simetría  $P$  coincide con un eje de inversión de orden par  $L_{in}$ , cuyo ángulo de rotación es  $\alpha = \frac{360^\circ}{n}$ , o si perpendicularmente al mismo eje existe un eje doble de rotación  $L_2$ , entonces en cualquiera de los casos habrá  $n/2$  planos paralelos a  $L_{in}$  y simultáneamente otros tantos ejes  $L_2$  perpendiculares al mismo, ubicados por medio de los planos. Entre tanto el ángulo que separa los ejes  $L_2$  de los planos  $P$  es

$$\beta = 90^\circ - \frac{\alpha}{2}$$

El romboedro de la figura 3.17a ciertamente tiene un eje de inversión de orden  $\bar{6}$ , sobre él se pueden hallar ejes dobles y planos de simetría como se muestra en la parte b de la misma figura. En la parte c se observa la proyección estereográfica de este grupo de elementos

de simetría y en ella se aprecian mejor las orientaciones mutuas de los planos y ejes.

Finalmente, anotamos que existen argumentos suficientes para demostrar que en los cristales reales los ejes de simetría, o bien coinciden con filas de retículos de la red, o bien son paralelos a ellas. Análogamente puede afirmarse que las normales a todo plano de simetría también son paralelas o coinciden con filas de retículos de la red.

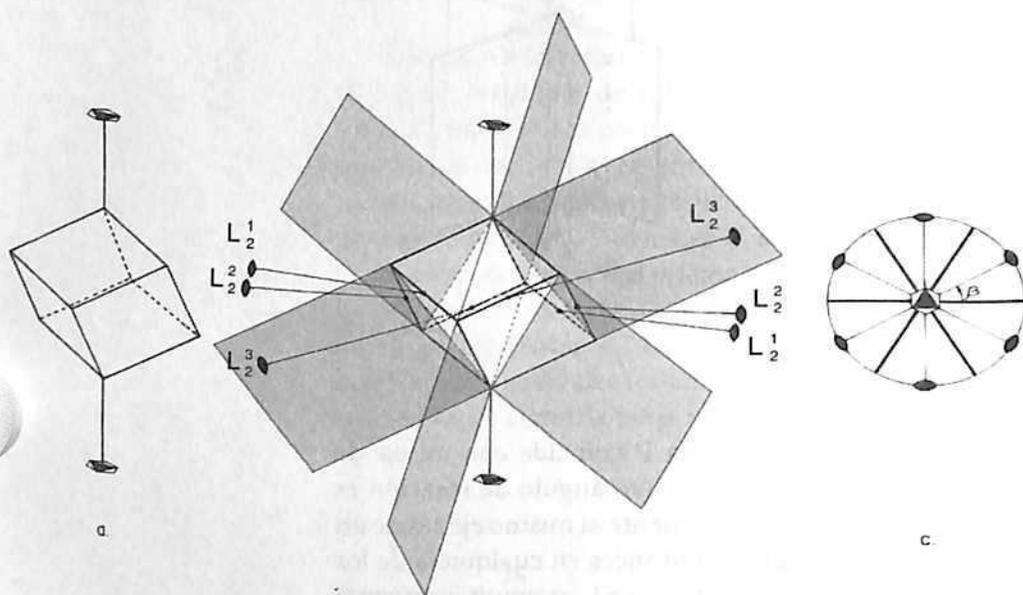


figura 3.17



#### IV LOS GRUPOS DE SIMETRÍA CRISTALINA

##### 4.1 Sistemas de Puntos Simétricamente Equivalentes

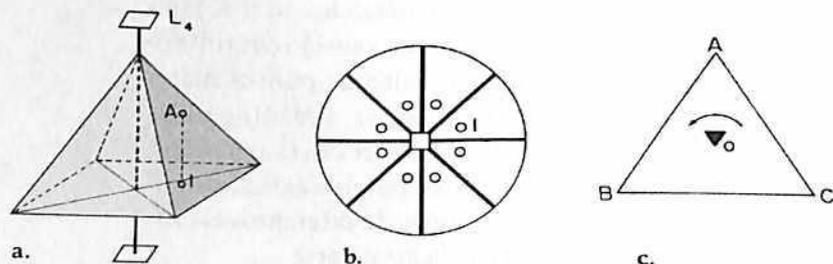
Los aspectos teóricos de la simetría desarrollados en el capítulo anterior tienen como objetos de aplicación inmediata figuras finitas macroscópicas, compuestas de partes supuestamente idénticas que se repiten con alguna regularidad dentro del objeto. De esta realidad material es que se pasa a la abstracción, en la que en últimas, cada parte o cada elemento estructural del objeto lo interpretamos como un punto y al objeto mismo como un conjunto de puntos dispuestos ordenadamente en el espacio.

Sin embargo, debe recordarse que el concepto de punto cristalográfico no siempre coincide con el de punto matemático. En un determinado espacio continuo o discreto, existe un número infinito de puntos matemáticos siempre de una misma clase, indistinguibles entre sí; mientras que en los espacios cristalográficos, que generalmente son discretos, pueden existir simultáneamente conjuntos de puntos de diferentes clases, distinguibles los de una clase de los de otra.

La cristalografía en general estudia no solamente la disposición espacial y las relaciones geométricas entre los puntos o elementos de un objeto, sino también las consecuencias de un determinado ordenamiento o disposición de los mismos y de las relaciones y nexos existentes entre ellos, es decir, las propiedades físicas de los cristales. Por eso muchas veces la abstracción de punto cristalográfico conlleva características de volumen, de orientación, de carga, de masa, de forma o de cualquier otra, según el caso que se tenga.

La figura 4.1b representa la proyección estereográfica de los elementos correspondientes a la simetría de la pirámide tetragonal de la figura 4.1a. Son cuatro planos P verticales que se intersectan a lo largo de una recta, separados por ángulos de  $45^\circ$ , cuya acción según el primer teorema de combinación es equivalente a la de un eje  $L_4$  coincidente con la línea de intersección de los planos, con el eje de la pirámide, en nuestro caso. El punto A es un punto arbitrario sobre una de las caras de la pirámide, el cual se proyecta estereográficamente como el punto 1 en la figura 4.1b. Pero este, con la acción de los elementos de simetría, se reproduce en el objeto dando un total de ocho puntos simétricamente equivalentes. Si por ejemplo, la pirámide se rota  $90^\circ$  alrededor del eje  $L_4$ , ésta, lo mismo que su proyección, tomará una posición indistinguible de la que tenía antes de la rotación, pues se supone que entre estos puntos equivalentes tampoco se puede hacer distinción.

figura 4.1



El conjunto de todos los puntos que se generan mediante la acción de un elemento de simetría, o de un grupo de ellos, a partir de un punto dado, se llama sistema de puntos o posiciones simétricamente equivalentes.

#### 4.2 Grupos de Simetría Puntual

La totalidad de los elementos de simetría que reflejan o caracterizan una determinada distribución de puntos en un espacio, en este caso puntos cristalográficos, se denomina grupo de simetría.

Cuando en el conjunto de los elementos de simetría que caracterizan una cierta distribución, no hay traslaciones a lo largo de alguna dirección del espacio, habrá entonces por lo menos un punto en ese espacio que permanecerá inmóvil a pesar de las rotaciones, inversiones y reflexiones que implican los demás elementos de simetría que tienen lugar en dicho ordenamiento de puntos. Los grupos de simetría que cumplen con esta condición se llaman grupos puntuales de simetría.

Los grupos de simetría puntual son el resultado de las distintas combinaciones o interacciones posibles entre los elementos de simetría macroscópica y cuyos principios fundamentales de combinación analizamos ya en el *parágrafo* 3.8. El número de los grupos de simetría puntual en cristales resulta limitado, como consecuencia de las limitaciones implícitas en el tipo de los elementos de simetría en consideración. Por ejemplo, sólo son permitidos ejes de rotación de orden 1, 2, 3, 4, ó 6. También por el carácter excluyente que algunos elementos de simetría tienen sobre otros, como el existente entre los ejes  $L_4$  y  $L_6$ .

De otra parte, los grupos de simetría puntual pueden ser analizados en abstracto como entes matemáticos. En el primer capítulo ya señalamos cómo la teoría

matemática de grupos es la más relacionada con los problemas de invariantes y simetrías.

Un conjunto de puntos equivalentes lo podemos interpretar como la repetición idéntica de un punto por la acción individual o combinada de un conjunto (grupo) de elementos de simetría. Pero ese mismo conjunto de puntos equivalentes se puede interpretar como el resultado de distintas combinaciones de unos valores excepcionales de las coordenadas espaciales  $X_n Y_n Z_n$ , para los cuales una determinada función  $F$  de tales coordenadas tiene un mismo valor, es decir, el valor de tal función en esos lugares es invariante:

$$F(X_1 Y_1 Z_1) = F(X_2 Y_2 Z_2) = \dots F(X_n Y_n Z_n)$$

En el primer caso, el conjunto de puntos equivalentes se confirma mediante movimientos, aunque sean imaginarios, por tratamientos geométricos. En el segundo, mediante tratamientos puramente matemáticos, transformaciones invariantes de la función. Los dos procedimientos son maneras diferentes de abstraer una misma realidad. Esta correspondencia entre la geometría y el análisis matemático se llama isomorfismo.

En matemáticas se da una definición estricta de lo que es un grupo. Según estas "se denomina grupo al conjunto  $G$  de objetos matemáticos, de elementos diferenciables unos de otros, que cumplen los llamados axiomas de agrupación" (Madelung, E., 1968). Si el número de elementos es finito o infinito, el conjunto conformará, respectivamente, grupos finitos o infinitos.

### Axiomas de agrupación

1. Existe una ley de composición, también llamada ley de cierre, según la cual, a cada par de elementos  $a$  y  $b$  del conjunto  $G$ , dispuestos en un orden determinado,

corresponde un elemento  $c$  del grupo  $G$ . En tal caso se utiliza la igualdad simbólica

$$c = ab$$

que se denomina el producto de los elementos  $a$  y  $b$ . En general los elementos  $ab$  y  $ba$  son diferentes. (Compárese el contenido de este axioma con el de los teoremas de combinación del *parágrafo* 3.7).

2. Existe una ley de asociación, según la cual para cualesquiera que sean los elementos  $a, b, c$  del grupo  $G$ , siempre tiene lugar la igualdad

$$(ab)c = a(bc) = abc.$$

3. Existe un elemento  $e$  del grupo  $G$  tal, que para cualquier otro elemento  $a$  del mismo grupo ha de cumplirse la igualdad

$$ae = a$$

dicho elemento  $e$  se llama la unidad del grupo.

4. Cualquiera que sea el elemento  $a$  del grupo  $G$ , existe un elemento  $a^{-1}$  dependiente de  $a$ , para el cual tiene lugar la igualdad

$$a^{-1}a = e$$

Al elemento  $a^{-1}$  se le da el nombre de elemento inverso de  $a$ .

Cuando en el producto de cualesquiera dos elementos  $a, b$  de un grupo  $G$  existe una ley conmutativa tal que satisface la igualdad

$$ab = ba$$

entonces el grupo G se llama abellano.

El producto de elementos de los grupos de simetría cristalina generalmente no es conmutativo.

Las propiedades de un grupo dado de elementos de simetría suele analizarse en las llamadas tablas de multiplicación, en las que cada renglón y cada columna corresponde a uno de los elementos de simetría que constituyen el grupo, incluyendo el elemento unitario.

### Ejemplos

1. Consideremos el grupo de rotaciones en el sentido indicado por la flecha, del triángulo equilátero de la figura 4.1c alrededor del punto O, que en realidad es el punto de intersección del plano del triángulo con un eje  $L_3$ . Una rotación de  $120^\circ$ , ( $\alpha = 360^\circ/3 = 120^\circ$ ) en la dirección indicada, transpone los vértices del triángulo de  $A \rightarrow B$ ,  $B \rightarrow C$  y  $C \rightarrow A$  simultáneamente, dejándolo indistinguible de su posición inicial, claro está, si no se tienen en cuenta las denominaciones dadas a los vértices con las letras A, B y C.

Llamemos a esto la transformación a, la cual se puede representar así:

$$a = \begin{pmatrix} A & B & C \\ B & C & A \end{pmatrix}$$

Dentro del paréntesis en el renglón superior están los nombres de los vértices y en el inferior se indican las posiciones a donde cada uno de ellos, respectivamente, se traspone mediante la operación de rotación en  $120^\circ$ . También es posible que el triángulo ocupe una posición indistinguible de la inicial, mediante una rotación de  $240^\circ$  en el mismo sentido de la anterior, o de  $120^\circ$  en el sentido contrario. Esta transformación la llamaremos b y se representa de la siguiente manera:

$$b = \begin{pmatrix} A & B & C \\ C & A & B \end{pmatrix}$$

Una tercera transformación consiste en una rotación de  $360^\circ$ , lo que es equivalente a una rotación de cero grados, es decir, los vértices A, B y C permanecen inmóviles. Esta es una transformación unitaria por lo que la identificaremos como e:

$$e = \begin{pmatrix} A & B & C \\ A & B & C \end{pmatrix}$$

Estas son las tres únicas transformaciones, rotaciones, que dejan el triángulo en cuestión, invariante. Ellas conforman un grupo de tercer orden, que expresa la simetría de la figura en las condiciones dadas. a, b y e son pues, los elementos de simetría de este grupo que lacónicamente podemos llamar  $L_3$  en nuestra nomenclatura auxiliar,  $C_3$  según Schoenflies o simplemente 3 en la nomenclatura de Hermann-Mauguin. La tabla 4.1 es la tabla de multiplicación de los elementos de este grupo, cuya construcción se explica a continuación.



tabla 4.1

	e	a	b
e	ee = e	ea = a	eb = b
a	ae = a	aa = b	ab = e
b	be = b	ba = e	bb = a

En los cuadros sombreados se disponen los elementos según los renglones y columnas que les corresponden. En los cuadros blancos se colocan los elementos correspondientes a los productos en el orden indicado. Así  $ba = e$  es el resultado de una rotación de  $120^\circ$  seguida de otra de  $240^\circ$  para un total de  $360^\circ$  que es e. Análogamente pero en orden

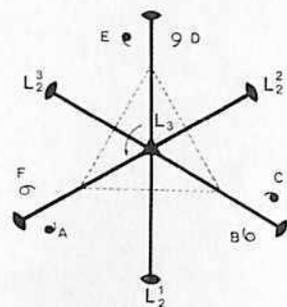


figura 4.2

2. La figura 4.2 representa los elementos de simetría contenidos en la figura 3.15b, vistos a lo largo del eje  $L_3$ . El conjunto de elementos de simetría consta de  $L_3$  y  $3L_2$ . El grupo de simetría correspondiente constará de los elementos e, a y b analizados en el ejemplo anterior, que van implícitos en  $L_3$ , a los que hay que agregar los tres ejes dobles de rotación, los cuales diferenciaremos como  $L_2^1$ ,  $L_2^2$  y  $L_2^3$ . La tabla 4.2 contiene los resultados de las interacciones o productos posibles entre dichos elementos.

tabla 4.2 Multiplicación de los elementos de simetría correspondientes a la figura 4.2

	e	a	b	$L_2^1$	$L_2^2$	$L_2^3$
e	e	a	b	$L_2^1$	$L_2^2$	$L_2^3$
a	a	b	e	$L_2^3$	$L_2^1$	$L_2^2$
b	b	e	a	$L_2^2$	$L_2^3$	$L_2^1$
$L_2^1$	$L_2^1$	$L_2^2$	$L_2^3$	e	a	b
$L_2^2$	$L_2^2$	$L_2^3$	$L_2^1$	b	e	a
$L_2^3$	$L_2^3$	$L_2^1$	$L_2^2$	a	b	e

Veamos en detalle los casos de los productos sombreados en el centro de la tabla 4.2 teniendo para ello la ayuda de la figura 4.2.

a. El producto  $L_2^1 b$  debe ser el resultado de una rotación de  $240^\circ$  alrededor del eje  $L_3$  en el sentido indicado en

la figura, seguida de otra rotación de  $180^\circ$  alrededor de  $L_2^1$  lo cual es equivalente a una rotación de  $180^\circ$  alrededor del eje  $L_2^3$ , es decir  $L_2^1 b = L_2^3$ .

Ciertamente, el motivo A de la Figura 4.2, que es una comilla plana de doble faz, mediante la acción del elemento b se transpone a la posición E y luego por el efecto del elemento  $L_2^1$ , el motivo E se traslada a la posición D; pero este mismo resultado se obtiene con una rotación de  $180^\circ$  alrededor del eje doble  $L_2^3$ , que traslada el motivo A directamente a D. Sustituciones similares ocurren simultáneamente con los demás motivos B, C, ...F, dejando el sistema de puntos equivalentes en una disposición indistinguible de la inicial.

b. El producto  $L_2^1 L_2^1$  da como resultado una rotación de  $360^\circ$  alrededor de  $L_2^1$ , lo que es igual a la unidad e.

c. Mediante el producto  $L_2^3 L_2^3$  el motivo C se traslada a D inicialmente y luego a A. Pero el mismo resultado se obtiene haciendo girar el motivo C  $240^\circ$  alrededor de  $L_3$  en el sentido de la flecha, operación que ya hemos simbolizado como el elemento de simetría b.

Similarmente a lo hecho en estos ejemplos, se puede proceder con los elementos de simetría de la figura 3.16b y muchos más casos. No obstante la comodidad de este tratamiento simbólico de los grupos, preferimos retornar al trabajo directo con los elementos de simetría geométrica, pues seguramente así el material será más accesible a una mayor cantidad de personas interesadas en el tema.

#### 4.3 Direcciones Unitarias y Grados de Simetría

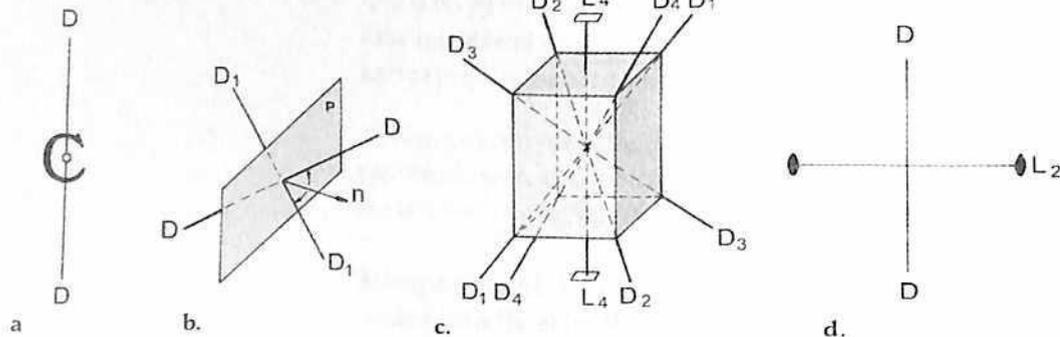
Se denomina dirección unitaria de un cristal aquella que es única, que no se repite dentro de él, ni siquiera

mediante la acción de los elementos de simetría. Las direcciones que se repiten en un cristal mediante la aplicación de elementos de simetría, se llaman direcciones simétricamente equivalentes.

Es importante conocer la cantidad y la manera como las direcciones unitarias pueden estar orientadas con respecto a los elementos de simetría en los cristales.

- Con respecto a los centros de simetría. Un centro de simetría puede estar ubicado, por ejemplo, en la mitad del segmento  $DD$  (figura 4.3a), que representa la orientación de una dirección unitaria, sin que se genere ninguna otra dirección. Esta ubicación del centro de simetría hace que las mitades del segmento se sustituyan mutuamente manteniendo inmodificable su orientación.
- Una dirección unitaria, para que lo continúe siendo en presencia de un plano de simetría  $P$ , debe, o bien ser paralela al plano y coincidir con él, o ser perpendicular al mismo. Por el contrario, una supuesta dirección unitaria  $DD$  inclinada con respecto a un plano  $P$  como se muestra en la figura 4.3b, genera por reflexión una dirección diferente  $D'D'$ , también inclinada y simétricamente equivalente con la inicial. En la figura, el segmento  $n$  representa la normal al plano  $P$ .

figura 4.3



- Las direcciones unitarias con respecto a los ejes de rotación de orden  $n$  deben ser coincidentes con estos; si lo fueran inclinadas, inmediatamente se generarían  $n$  direcciones también inclinadas y simétricamente equivalentes. En la figura 4.3c se ha supuesto que  $D_1D_1$ , la gran diagonal de un prisma tetragonal, es una dirección unitaria. Pero esta es una dirección inclinada respecto al eje central  $L_4$  de dicho prisma. Esta disposición permite la generación de tres direcciones más, simétricamente equivalentes con  $D_1D_1$ , obtenidas mediante la rotación de  $D_1D_1$  con ángulos de  $90^\circ$  alrededor de  $L_4$ . De tal manera se tienen como resultado final las cuatro grandes diagonales del prisma mencionado, las cuales son simétricamente equivalentes pero no unitarias. Si además de lo anterior, el eje  $L_n$  coincide con un plano de simetría  $P$ , entonces una dirección inclinada con relación a  $L_n$  puede repetirse  $2n$  veces.

Las direcciones que son perpendiculares a ejes de rotación  $L_n$  en general generan  $n$  direcciones simétricamente equivalentes, con la excepción de los ejes dobles  $L_2$ , los cuales, como la evidencia la figura 4.3d, al realizar una rotación de  $180^\circ$  sobre el segmento  $DD$  que representa la dirección dada, lo dejan con la orientación inicial.

El número de direcciones unitarias en un cristal está relacionado con la presencia o ausencia de elementos de simetría y con el tipo de estos, cuando los hay. Un cristal, un cuerpo en general, que no posee ningún elemento de simetría, o que posee solamente un centro de inversión, tiene un número infinito de direcciones unitarias, pues cualesquiera dos o más de ellas nunca se podrán relacionar entre sí o repetir en el espacio con la ayuda de ese elemento. Tales direcciones nunca serán simétricamente equivalentes y los objetos que las poseen son completamente asimétricos o de muy baja simetría. Un cristal con forma de ladrillo cuyo conjunto de elementos de simetría puntual está constituido por  $3L_23PC$ ,

tiene tres direcciones unitarias, que coinciden respectivamente con los tres ejes  $L_2$ .

El cubo es un poliedro altamente simétrico, con muchos ejes, planos y centro de simetría. Por esta causa, cualquier dirección que presumamos unitaria, siempre encontrará otras simétricamente equivalentes a la inicial. En el sistema cúbico no hay direcciones unitarias.

Una posición intermedia entre los cristales que tienen varias o muchas direcciones unitarias y los que no poseen ni una sola, la ocupan los cristales que solamente tienen una, como los prismas y pirámides trigonales, tetragonales y hexagonales en los que la dirección unitaria coincide con los ejes  $L_3$ ,  $L_4$  y  $L_6$ , respectivamente.

La particularidad de los cristales de poseer varias, una o ninguna dirección unitaria, ha dado lugar a la diferenciación de tres grados o categorías de la simetría cristalina: baja, intermedia y alta, entre las cuales se distribuyen los siete sistemas cristalinos de relaciones axiales y angulares de la *tabla 1.1*, así:

- a. Cristales de baja simetría. Se caracterizan por no tener ejes de rotación de orden superior a dos y pueden tener varias direcciones unitarias. A esta categoría de simetría pertenecen los sistemas triclinico, monoclinico y ortorrómbico.
- b. Cristales de simetría intermedia. Poseen una sola dirección unitaria que coincide con el único eje de orden superior a dos, el cual también se denomina eje principal del cristal. A esta categoría pertenecen los sistemas trigonal ( $L_3$ ), tetragonal ( $L_4$  ó  $L_{14}$ ) y hexagonal ( $L_6$  ó  $L_{16}$ ).
- c. Para cristales de alta simetría su característica es no poseer direcciones unitarias y tener más de un eje de

orden superior a dos. Está constituida esta categoría únicamente por los cristales del sistema cúbico.

Los sistemas cristalinos de la *tabla 1.1* se diferencian además por los diversos elementos de simetría que pueden tener lugar en cada uno de ellos. La combinación de tales elementos da como resultado un total, para todos los sistemas, de 32 grupos puntuales de simetría cristalina.

#### 4.4 Deducción de los Grupos Puntuales de Simetría Cristalina

Por primera vez los 32 grupos de simetría puntual fueron deducidos teóricamente por Hessel J. F. C. (1796-1872) y posteriormente con mayor sencillez por Galodín (1869), Zonke (1879), Curie, Schoenflies, Vulf y otros (Shafranovsky, I., 1980, T. II.) La metodología utilizada fue siempre la de agregar a unos elementos de simetría, otros que produjeran un efecto similar al del elemento inicial, cosa que no es diferente del contenido del primer axioma de agrupación de los elementos de un grupo.

Los 32 grupos puntuales de los sistemas cristalinos, se distribuyen en siete clases de simetría (no confundir este concepto, ni con los grados de simetría que son tres, ni con los siete sistemas cristalinos): primitiva, central, planar, axial, planoaxial, inversoprimitiva e inversoplanar. (*tabla 4.3*).

#### Grupos de simetría puntual con direcciones unitarias

Suele tomarse como primer criterio para la distribución de los grupos de esta tabla, la presencia o ausencia de direcciones unitarias en los cristales. Luego de establecida la presencia de por lo menos una dirección unitaria, esta ha de combinarse sucesivamente con otros elementos y en esta forma se van generando las nuevas clases de simetría.

tabla 4.3 Elementos de los 32 grupos de simetría cristalina

CATEGORÍA DE LA SIMETRÍA	SISTEMAS CRISTALINOS	CLASES DE SIMETRÍA						
		PRIMITIVA	CENTRAL	PLANAR	AXIAL	PLANOAXIAL	INVERSO-PRIMITIVA	INVERSOPLANAR
BAJA	TRICLINICO	$L_1$	$C_1$	$\bar{1}$				
	MONOCLINICO	$L_2$	$L_2CP$	$\frac{2}{m}$	$m$	$L_2$	$L_2PC$	$P$
	ORTORRÓMBICO			$L_22P$	$mm2$	$3L_2$	$222$	$2/mmm$
MEDIA	TRIGONAL	$L_3$	$L_3C$	$\bar{3}$	$3m$	$L_33L_2$	$L_33L_23PC$	$C_3$
	TETREAGONAL	$L_4$	$L_4CP$	$\frac{4}{m}$	$4mm$	$L_44L_2$	$L_44L_25PC$	$L_4 \rightarrow L_2$
	HEXAGONAL	$L_6$	$L_6CP$	$\frac{6}{m}$	$6mm$	$L_66L_2$	$L_66L_27PC$	$L_6 \rightarrow L_3P$
ALTA	CUBICO	$3L_24L_3$	$3L_24L_33PC$	$m\bar{3}$	$43m$	$3L_44L_36L_2$	$3L_44L_36L_29PC$	$432$

a. Grupos de simetría puntual con direcciones unitarias exclusivamente

Ya señalamos que una dirección unitaria debe coincidir con un único eje de orden permitido  $L_n$ , lo cual solamente es posible en los sistemas de simetría baja e intermedia, con excepción del sistema ortorrómbico, que no tiene un único eje de rotación de orden 2, sino tres a la vez. De esta manera, y consecuentemente con lo analizado en el numeral 3.3, en cuanto a los tipos de ejes de rotación permitidos en cristalografía, se obtienen cinco grupos cuyos conjuntos de elementos de simetría en cada caso consta simplemente de un eje de rotación de orden diferente:  $L_1, L_2, L_3, L_4$  y  $L_6$  (tabla 4.3). La clase de simetría

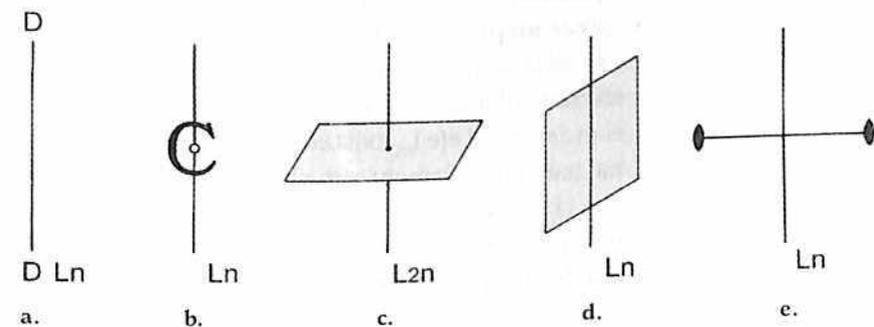
a la que pertenecen estos grupos tan sencillos se denomina primitiva.

El grupo  $L_1$  es propio de los cuerpos completamente asimétricos, que no poseen un solo eje de rotación de primer orden, sino un número infinito de tales. Sin embargo, no se suprime, como tampoco en el caso del sistema ortorrómbico; por el contrario, se mantiene como la expresión de la ausencia de simetría, el cero de la simetría, a partir de la cual ella va en aumento paulatinamente a través de los demás grupos.

b. Grupos de simetría central

A cada una de las direcciones unitarias anteriores, vale la pena decir a cada uno de los ejes  $L_n$ , se agrega un centro de simetría  $C$  (figura 4.4, b), con lo que se obtienen los conjuntos de elementos  $L_1C, L_2C, L_3C, L_4C$  y  $L_6C$ . Sin embargo, el resultado de la interacción entre estos elementos puede producir elementos complementarios. Precisamente la combinación del centro de simetría  $C$  con ejes de rotación de orden par, genera automáticamente un plano perpendicular al eje  $L_{2n}$  correspondiente (figura 4.4c), que lo intersecta exactamente en el punto donde se ubica el centro de simetría. Teniendo en cuenta que el eje

figura 4.4



$L_1$  prácticamente no complementa la simetría del conjunto, se suprime y definitivamente estos grupos se expresan como  $C$ ,  $L_2PC$ ,  $L_3C$ ,  $L_4PC$  y  $L_6PC$  respectivamente en nuestra nomenclatura auxiliar, que permite dar en forma explícita todos los elementos que conforman los grupos. Como la característica común de estos nuevos grupos es la de poseer centro de simetría, la clase a la que pertenecen se ha llamado central.

No hay unanimidad de los tratadistas en cuanto a algunos grupos en la *tabla 4.3*. Así por ejemplo, en el sistema monoclinico, el grupo  $L_2$  con frecuencia es colocado en la clase axial y el grupo  $L_2PC$  en la clase planoaxial. Cosa similar ocurre con otros grupos cuyas posiciones dudosas en la tabla las hemos indicado con letras grises.

El autor propone el ordenamiento mostrado en las *tablas 4.3 y 4.4*, considerándolo conveniente aún por razones nemotécnicas. Así, en la clase primitiva los ejes  $L_n$  son elementos únicos del grupo; en la clase central no puede haber más de un plano, que además debe ser perpendicular a la dirección unitaria; en la clase axial siempre hay más de un eje y en la planoaxial, más de un eje y más de un plano.

### c. Simetría planar

A cada una de las direcciones unitarias iniciales se agrega un plano de simetría  $P$  paralelo y coincidente con ellas, como lo muestra la *figura 4.4d*. Entonces, en concordancia con la regla 2 del *parágrafo 3.7*, según el orden  $n$  del eje  $L_n$  existente como dirección unitaria, habrá no solamente un plano sino  $n$ , que cumplen con la condición de paralelismo y coincidencia con relación a la dirección unitaria dada, la cual también puede interpretarse como eje de intersección mutua

de los  $n$  planos  $P$ . Se obtienen así cinco grupos de la clase planar:  $P$ ,  $L_2P$ ,  $L_3P$ ,  $L_4P$  y  $L_6P$ .

Merece una explicación la ubicación de los primeros grupos de esta clase en la *tabla 4.3*. El grupo  $P$  es el resultado de la interacción de  $L_1$  con un plano paralelo y coincidente  $P$ :  $L_1P = P$  que corresponderá al sistema triclinico. Sin embargo, la existencia de esta simetría planar requiere unas relaciones axiales y angulares diferentes, que son precisamente las del sistema monoclinico. Análogamente la combinación  $L_2P$  no es posible en el sistema monoclinico sino en el ortorrómbico.

### d. Simetría axial

Si perpendicularmente a cualquier eje  $L_n$  de una dirección unitaria se da un eje doble de rotación  $L_2$  (*figura 4.4e*), entonces se generan cuatro grupos que contienen solamente ejes de rotación  $3L_2$ ,  $L_33L_2$ ,  $L_44L_2$  y  $L_66L_2$ , que conforman la clase axial.

### e. Simetría planoaxial

Es la resultante cuando las direcciones unitarias se combinan simultáneamente con un centro de simetría y un plano coincidente con la dirección. Por razones ya explicadas, los ejes de rotación de orden par que corresponden a las direcciones unitarias, en este tipo de combinación, además de los  $n$  planos paralelos  $P$ , contienen otro adicional que es perpendicular al eje dado. Esquemáticamente esta combinación para obtener los grupos planoaxiales la representamos así:

$$\begin{aligned} L_2 + P_{||} + C &= 3L_23PC \\ L_3 + P_{||} + C &= L_33L_23PC \\ L_4 + P_{||} + C &= L_44L_25PC \\ L_6 + P_{||} + C &= L_66L_27PC \end{aligned}$$

El grupo  $L_2PC$  que hemos ubicado en la clase central, también puede obtenerse con una combinación similar

$$L_1 + P_{||} + C = L_2PC$$

#### f. Simetría inversoprimitiva

Está constituida por dos grupos cuyo único elemento de simetría es un eje de inversión en cada caso. Podría esperarse un mayor número de estos grupos, pero como lo indica la primera columna de la *tabla 3.1*, la equivalencia de los ejes de inversión en términos de conjuntos de elementos finitos de simetría, deja solamente dos posibilidades de conjuntos que hasta este momento no hayamos obtenido en las clases ya analizadas:

$$L_{i4} \cong L_2$$

La flecha indica que la equivalencia ésta apenas es unidireccional, es decir, que  $L_{i4}$  siempre implica  $L_2$ , pero que no todo  $L_2$  conlleva un eje  $L_{i4}$ . Finalmente,

$$L_{i6} = L_3L_1$$

#### g. Simetría inversoplanar

Se logran los grupos de esta clase combinando cada uno de los grupos de la simetría inversoprimitiva con un plano  $P$  coincidente con el respectivo eje de inversión. Estas combinaciones no representan dificultad si se tienen en cuenta las equivalencias ya citadas en la columna primera de la *tabla 3.1* y en el contenido de la tercera regla de combinación. Como en casos anteriores, escribimos estas operaciones as:

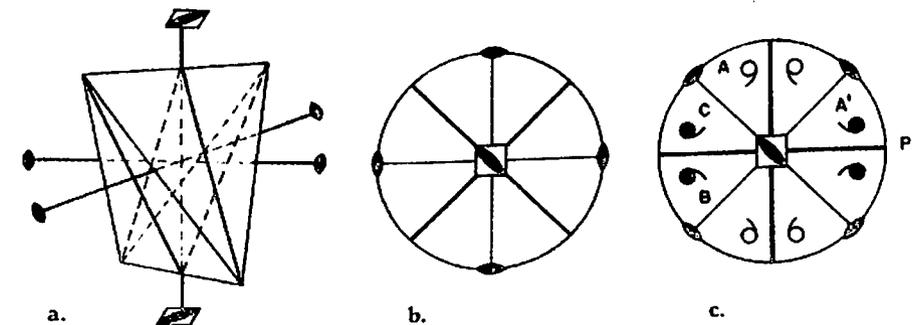
$$L_{i4} (\cong L_2) + P_{||} = L_{i4}2L_22P$$

$$L_{i6} (=L_3P_1) + P_{||} = L_33L_24P$$

En la *figura 4.5* un tetraedro tetragonal, explica bien la posibilidad de los dos ejes perpendiculares a  $L_{i4}$  en el primer grupo, cuando se asume la presencia de un plano  $P$  paralelo y coincidente con el eje de inversión. Conforme lo establecido por la segunda regla de combinación, habrá un total de dos planos que llenan las mismas condiciones por medio de los cuales además aparecen dos ejes dobles de rotación como lo prevé la tercera regla.

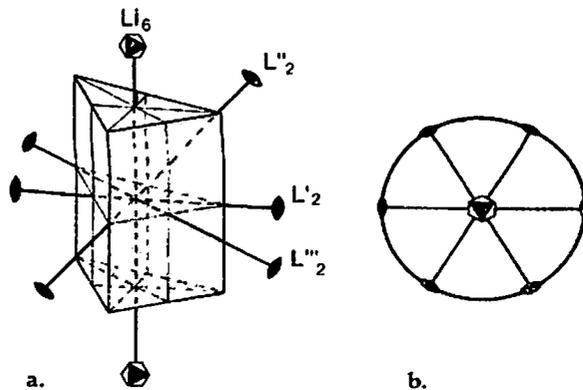
La *figura 4.5a* muestra la disposición de los elementos de simetría en el tetraedro tetragonal, el mismo con el que en principio se explicó el modo de operación de un eje  $L_{i4}$ . La *figura 4.5b* contiene la proyección estereográfica de los mismos elementos y en la *figura 4.5c* se da un ejemplo concreto, ajeno ya a la idea inicial del tetraedro de la operación de los elementos de simetría de este grupo sobre la comilla  $A$  de doble faz que nos sirve de motivo. Ciertamente el motivo que inicialmente ocupa la posición  $A$ , por la acción de  $L_{i4}$  llega a la posición  $B$  a través de  $A'$ . Luego por reflexión en el plano  $P$  ocupa finalmente el lugar  $C$ . Pero esta misma operación se obtiene mediante la rotación alrededor de  $L_2$ , uno de los ejes dobles perpendiculares a  $L_{i4}$  que resultan de la multiplicación  $PL_{i4}$ , y que traslada directamente de la posición  $A$  a  $C$ .

figura 4.5



La *figura 4.6* ilustra análogamente al caso anterior, la disposición y proyección estereográfica de los elementos de simetría del grupo  $L_{16}3L_23P$ . Esto se hace sobre la base de los elementos de simetría de un prisma trigonal, pero que sin embargo en conjunto conforman el grupo inversoplanar del sistema hexagonal.

*figura 4.6*



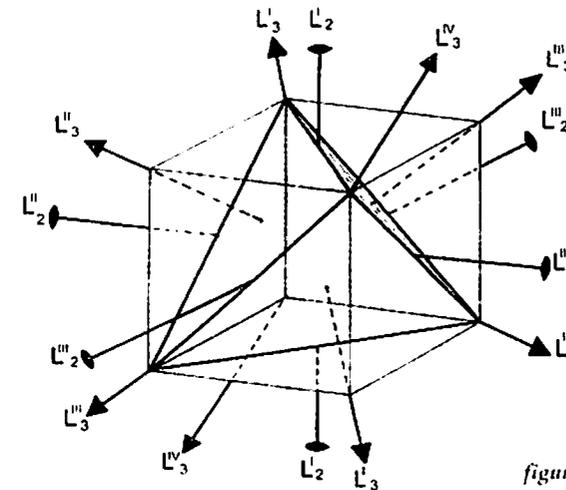
### Grupos de simetría puntual sin direcciones unitarias

Los cristales con alto grado de simetría carecen de direcciones unitarias, pues cualquier dirección que se elija siempre encontrará un elemento de simetría que evidenciará la presencia de otras simétricamente equivalentes. Esta particularidad del alto grado de simetría en cristales, está completamente reflejada en la simetría de algunos poliedros regulares: El tetraedro, limitado por cuatro triángulos equiláteros iguales; el hexaedro (cubo), que tiene seis caras cuadradas iguales y, el octaedro, con ocho triángulos equiláteros también iguales.

#### a. Simetría cúbica primitiva

Para la distribución de los grupos de alta simetría en sus correspondientes clases, se procede en forma casi similar a la de las categorías inferiores. Solo que como

aquí no es posible hallar un eje único, una dirección unitaria, se suele tomar como criterio de partida la mínima cantidad de ejes posibles en un tetraedro cúbico, esto es,  $3L_24L_3$ . Este conjunto de elementos cumple las condiciones de un grupo y se asigna como la clase primitiva para el sistema cúbico.



*figura 4.7*

La *figura 4.7* explica la relación existente entre un tetraedro regular, como el que se ha tomado para definir la clase primitiva cúbica, y un cubo en el que el primero está inscrito; en ella es fácil encontrar las orientaciones de todos los ejes de este grupo.

#### b. Simetría cúbica central

Si al grupo de simetría cúbica primitiva se agrega un centro de Simetría  $C$ , entonces de acuerdo con las normas de combinación, se obtiene un nuevo grupo finito y cerrado, que contiene además tres planos  $P$  perpendiculares respectivamente, a los tres ejes de rotación  $L_2$ :

$$3L_24L_3 + C = 3L_24L_33PC$$

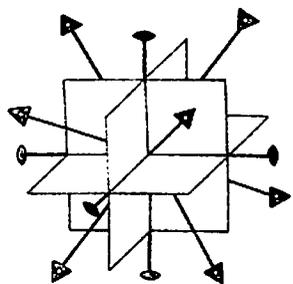


figura 4.8

La figura 4.8 muestra la disposición de estos elementos. El centro de simetría en este dibujo está representado en asociación con los ejes de tercer orden, como ejes  $L_3$ . De ella se evidencian las tres posibles representaciones en la nomenclatura internacional, como se señala en la tabla 4.5.

### c. Simetría cúbica planar

Se obtiene de la multiplicación de cada uno de los ejes  $L_3$  del grupo tetraédrico inicial con planos  $P$  coincidentes con ellos. En estas condiciones cada eje  $L_3$  resulta ser la recta de la mutua intersección de tres planos similares entre los cuales median ángulos de  $120^\circ$ . En total resultan seis planos diferentes que cortan en diagonal todas las caras del cubo tomado como referencia para la orientación de los ejes de la clase primitiva (figura 4.9), los cuales también están cortando en diversas direcciones el tetraedro que hemos supuesto inscrito dentro de dicho cubo.

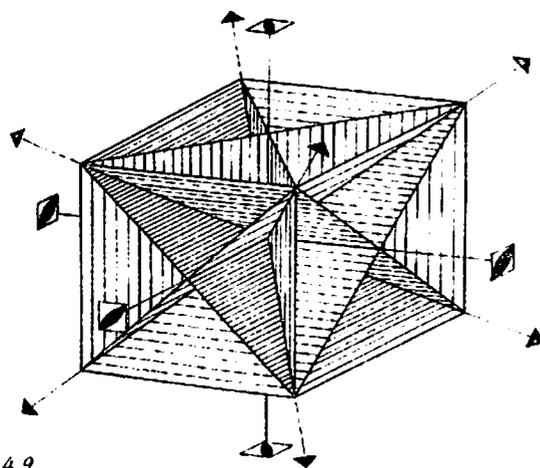


figura 4.9

Al comparar la relación que hay entre un eje  $L_4$  y dos planos perpendiculares que cortan un tetraedro a lo

largo de dicho eje, como se mostró en la figura 4.5, será fácil comprender que ahora cuando no tenemos direcciones unitarias, en el tetraedro regular cortado por seis planos, habrá tres direcciones mutuamente perpendiculares, simétricamente equivalentes mediante la acción de cualquiera de los ejes  $L_3$ , a lo largo de las cuales los planos por pares se cortan en condiciones exactamente iguales a las de la figura 4.5. Es decir, estamos en una situación en la que los ejes dobles de rotación  $L_2$ , que hacen parte del grupo de simetría primitiva, deben sustituirse por ejes de inversión  $L_{i4}$ . En conclusión el grupo planar de alta simetría se obtiene también sobre la base de la mínima simetría de un tetraedro regular y tiene trece elementos (figura 4.9):

$$3L_{i4}4L_36P$$

### d. Simetría cúbica axial

El análisis de las tres clases anteriores de simetría cúbica se fundamentó en las diferentes combinaciones de los elementos finitos de simetría en un tetraedro regular. Esta es la causa para que en la notación de Schoenflies, como lo explicaremos más adelante con mayores detalles, estos grupos se representan por una  $T$  en primer lugar, que significa que estamos ante una simetría derivada de la de un tetraedro regular. En cambio las otras dos clases del sistema cúbico, en esa misma notación, se representan en primer lugar con la letra mayúscula  $O$ , que las relaciona con la simetría de un octaedro regular.

En verdad la clase de simetría cúbica axial contiene en conjunto la máxima cantidad de ejes posibles en este sistema, es decir,  $3L_44L_36L_2$ . Estos elementos se pueden relacionar con la simetría de un octaedro inscrito dentro de un cubo en la forma como se indica en la figura 4.10. Con respecto a este mismo cubo

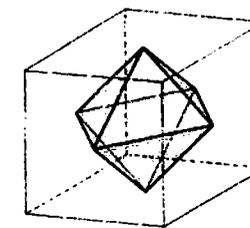


figura 4.10

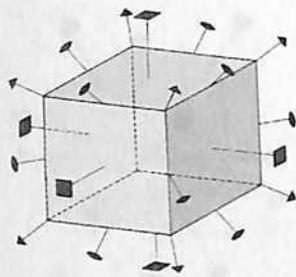


figura 4.11

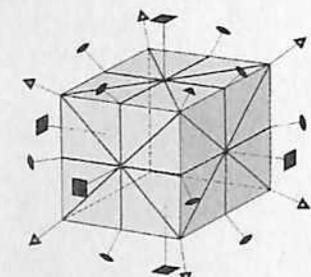


figura 4.12

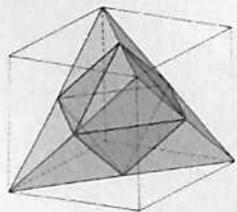


figura 4.13

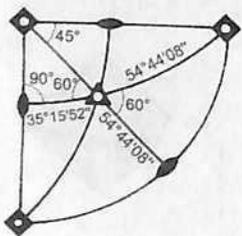


figura 4.14

la orientación y disposición de tales elementos se muestra en la *figura 4.11*, lo cual se representa simplemente como el grupo **O** en la notación de Schoenflies (*tabla 4.5*).

#### e. Simetría cúbica planoaxial

Se obtiene haciendo interactuar el grupo axial anterior con un centro de simetría. El resultado es fácil de prever. Como en el grupo axial en total existen nueve ejes independientes de orden par, de acuerdo con el teorema 3 del *parágrafo 3.7*, cuando cada uno de ellos se multiplica con el centro de simetría reproduce un plano perpendicular al mismo, que desde luego pertenece al nuevo grupo. Así pues, el grupo planoaxial cúbico representa la máxima simetría posible en un cristal y contiene los siguientes elementos:

$$3L_4 4L_3 6L_2 9PC$$

o sea, veintitrés elementos finitos de simetría, que se orientan con relación al cubo de referencia en la forma indicada en la *figura 4.12*.

Dado que los grupos de simetría cúbica puntual se han relacionado con tetraedros y octaedros regulares, es importante recordar la relación dimensional y de orientación mutua entre éstos y un hexaedro (cubo) tomado como referencia (*figuras 4.7 y 4.10*). Igualmente, es necesario clarificar la relación entre el tetraedro y el octaedro que es la que se muestra en la *figura 4.13*, en el trasfondo del cubo mencionado. La *figura 4.14* representa un cuadrante de la proyección estereográfica de la totalidad de planos y ejes posibles en el grupo planoaxial del sistema cúbico cristalino. Allí se indican los ángulos que median entre los diferentes ejes de rotación, válidos para todos los grupos de alta simetría.

### 4.5 Nomenclatura de los Grupos de Simetría Puntual

Existen varios sistemas de notación de los grupos de simetrías, pero de todos ellos dos han tenido aceptación universal y amplia utilización. Estas son las llamadas nomenclaturas de Schoenflies y de Hermann-Mauguin, esta última también se conoce con el nombre de nomenclatura internacional. En la *tabla 3.2* ya se explicó cómo se representan los elementos de simetría en cada uno de estos sistemas. Las notaciones respectivas han de ser pues consecuentes con esas representaciones de los elementos. De otro lado, estas tienen la virtud de contener, para cada grupo, una información muy concisa acerca de los elementos de simetría, pero que es suficiente para que a partir de ella, unívocamente se puedan deducir, apoyados en los principios de combinación, los demás elementos que componen el grupo. Por ejemplo, el grupo axial cúbico, con nuestra representación auxiliar ha incluido toda la fórmula de simetría  $3L_4 4L_3 6L_2$ , mientras que en la notación de Schoenflies se representa por una **O** y en la notación de Hermann-Mauguin por el conjunto de números 432. Veamos cuáles son los más importantes criterios y normas que rigen cada una de estas representaciones.

#### Notación de Schoenflies

- a. Los ejes de rotación propia se representan con una **C**. Por tanto los grupos de simetría baja e intermedia de la clase primitiva, consecuentemente con la *tabla 3.2*, se representan por  $C_n$ , donde n indica el orden de rotación de los ejes respectivos. En la *tabla 4.3* la notación de Schoenflies correspondiente a cada grupo, la hemos incluido en el ángulo inferior derecho de cada posición. Para el grupo cúbico de la clase primitiva se utiliza la letra **T** (tetraédrico) y recuerda que este grupo contiene la mínima cantidad de elementos de simetría en este sistema, que es precisamente

el conjunto de ejes de rotación posibles en un tetraedro regular (figura 4.7).

- b. Existen otros grupos con ejes que se representan por  $C_{nh}$ . La h (de horizontal) en este caso significa que perpendicularmente al eje de rotación  $C_n$ , hay un plano de simetría, que en esta notación se representa por  $\delta_h$ . Sin embargo hay algunas particularidades. Cuando  $n=1$ , la combinación de elementos  $C_1 + \delta_h = \delta_h$ . Este grupo resultante se suele representar por  $C_s$ . Debe recordarse que los grupos de simetría central  $C_{nh}$  con ejes de orden par, implican además de  $C_n$  y  $\delta_h$ , un centro de simetría  $i$ , que no se explicita especialmente en la nomenclatura de Schoenflies, mientras que para los grupos triclinico y trigonal de la misma clase de simetría central si se hace, pero en ellos no existe el plano horizontal

$$\begin{aligned} C_1 + i &= C_i \\ C_3 + i &= C_{3i} \end{aligned}$$

De igual manera el grupo cúbico central (figura 4.8), se representa por  $T_h$ , lo que significa que perpendicularmente a cada eje  $C_2$  de la simetría tetraédrica primitiva hay un plano de simetría  $\delta_h$ , que implica la presencia de un centro de simetría  $i$ , dibujado adecuadamente en la figura mencionada, sobre los ejes  $L_3$ .

- c. La propiedad de interacción entre ejes y planos de simetría expresada en la regla 3 del párrafo 3.7 se refleja en los grupos genéricos  $C_{nv}$ . Un grupo de estos tiene un eje  $C_n$  y  $n$  planos de simetría  $\delta_v$  (verticales) que se intersectan a lo largo del eje indicado. Para  $n=1$  se obtiene sencillamente el plano vertical  $\delta_v$ , el cual nuevamente se representa por  $C_{sv}$ ; por esta razón en la tabla 4.3 este grupo ha sido incluido por el autor en la clase planar, a la que pertenecen los demás grupos  $C_{nv}$ .

El grupo cúbico planar en este sistema de notación se representa por  $T_d$ , la d (diagonal) indica que en este grupo los planos que cortan en diagonal las caras del cubo de referencia (figura 4.9), convierten los ejes  $C_2$  de la simetría tetraédrica primitiva en ejes de rotación impropia  $S_4$ .

- d. Los ejes de rotación impropia (tabla 3.1), generan grupos cuyos respectivos elementos son los propios ejes  $S_n$  (tabla 3.2), sin embargo algunos de ellos tienen equivalencia con otros, por lo cual en la tabla 4.3 se mantiene solamente el grupo  $S_4$  ya que

$$\begin{aligned} S_1 &= \delta_h = C_s \\ S_2 &= i = C_i \\ S_3 &= C_3 + \delta_h = C_{3h} \\ S_6 &= C_3 + i = C_{3i} \end{aligned}$$

- e. Para los grupos de simetría baja e intermedia que poseen más de un eje de rotación, Schoenflies utilizó las notaciones  $D_n$ ,  $D_{nh}$  y  $D_{nd}$ . Los grupos  $D_n$  tienen  $n$  ejes de simetría perpendiculares a un eje  $C_n$  (Regla 1 de combinación). En cambio los grupos  $D_{nh}$ , además de los contenidos de los grupos  $D_n$  tienen un plano de simetría  $\delta_h$  perpendicular al eje  $C_n$ . Con frecuencia se utiliza el símbolo  $V$  cuyos significados son los siguientes:  $V=D_2$  es una combinación de tres ejes  $C_2$  mutuamente perpendiculares (rómbo axial);  $V_h=D_{2h}$  es un conjunto de tres ejes  $C_2$  mutuamente perpendiculares con un plano perpendicular a cada uno de ellos (rómbo planoaxial); y  $V_d=D_{2d}$  es el conjunto de tres ejes  $C_2$  mutuamente perpendiculares y planos diagonales (tetragonal inversoplanar).

En general un grupo  $D_{nd}$  posee un eje  $C_n$ ,  $n$  ejes  $C_2$  perpendiculares a  $C_n$ , y  $n$  planos verticales que bisectan los ángulos mediadores entre los ejes  $C_2$ .

El grupo cúbico axial se representa por la letra O (octaédrico), que como fue explicado contiene el conjunto de todos los ejes de rotación que pueden tener lugar en un octaedro regular (figuras 4.10 y 4.11), en tanto que el grupo planoaxial se expresa mediante  $O_h$ , y que debe interpretarse en el sentido de que perpendicularmente a cada uno de los ejes  $C_2$ , explícito o implícito, hay un plano de simetría  $\delta_h$  que lo intersecta en el centro de simetría obligado  $C_i$ .

### Notación internacional o de Hermann-Mauguin

Los símbolos utilizados en este sistema de notación para representar los elementos de simetría ya fueron indicados con motivo de la construcción de la tabla 3.2. Esta es la notación preferida de los cristalógrafos, pues tiene algunas ventajas prácticas especialmente para describir los grupos espaciales, es decir cuando se consideran además de los elementos de simetría puntual, los que implican traslaciones. Fuera de lo anterior, la notación de Hermann-Mauguin permite orientar los elementos de simetría con respecto a los ejes cristalográficos de cada sistema.

Los criterios fundamentales que han de tenerse en cuenta para descifrar esta notación, que en la tabla 4.3 hemos colocado en el ángulo superior derecho de cada grupo, se exponen a continuación.

- a. Para los sistemas triclinico y monoclinico cuya simetría es baja, es suficiente una posición o componente que se refiere a la dirección unitaria, tomada como orientación principal. Para los otros sistemas de simetría baja e intermedia es suficiente una posición solamente para las clases primitiva, central e inversoprimitiva. De tal manera, en la notación internacional los grupos de simetría primitiva de las dos primeras categorías se representan por los números 1, 2, 3, 4 y 6 respectivamente; mientras que

para los mismos sistemas en la clase central lo hacen las expresiones  $\bar{1}$ ,  $\frac{2}{m}$ ,  $\bar{3}$ ,  $\frac{4}{m}$  y  $\frac{6}{m}$ . El grupo monoclinico planar queda simbolizado con la letra m y los inversoprimitivos tetragonal y hexagonal por  $\bar{4}$  y  $\bar{6}$ . Las fracciones del tipo  $\frac{l}{m}$  en general significan que existe un plano m perpendicular al eje de orden n; cuando n es número par esta expresión lleva implícito un centro de simetría.

- b. En el sistema ortorrómbico los ejes cristalográficos son ortogonales entre sí y se utilizan en la simbolización de grupos hasta tres componentes (posiciones). El grupo representado como mm2 significa que tiene un plano m perpendicular al eje cristalográfico X (primera posición), otro perpendicular a Y y un eje 2 paralelo a Z. Podemos concluir entre tanto, que la posición de un plano m en esta nomenclatura, sirve para indicar la dirección de la normal a dicho plano de simetría. Por consiguiente, cuando se utilizan las tres posiciones en el sistema ortorrómbico, estas están referidas a los ejes cristalográficos del sistema. Con frecuencia esta simbolización de los grupos puntuales se abrevia. Por ejemplo, para el grupo mencionado se puede escribir simplemente mm, pues la presencia del eje 2 se ha de inferir como resultante de la intersección de los planos. Análogamente los grupos 222 y mmm abreviadamente se pueden expresar como 22 y  $\frac{2}{m}$  m respectivamente.
- c. Para el sistema trigonal son suficientes dos posiciones. La primera indica que el eje 3 ó  $\bar{3}$  es paralelo al eje cristalográfico Z, y la segunda, el tipo de elementos, planos o ejes, equivalentes que se distribuyen alrededor del eje unitario, con intermediaciones de 60° o 120°. La referencia de estos elementos con los demás ejes cristalográficos se aclara en el párrafo 5.7 que trata de la orientación de los cristales.

- d. En el sistema hexagonal también pueden ser utilizadas las tres posiciones. Las dos primeras tienen el mismo significado que en el sistema trigonal y la tercera se refiere a las direcciones perpendiculares al eje unitario  $\bar{3}$  ó  $\bar{3}$ , que bisectan los ángulos de  $120^\circ$  o  $60^\circ$  establecidos por la segunda posición. Por ejemplo, el grupo  $\frac{6}{m}$  mm comprende los siguientes elementos de simetría: un eje  $\bar{6}$  con un plano  $m$  perpendicular a él ( $\frac{6}{m}$  de la primera posición), tres planos  $m$  que se cortan mutuamente a lo largo del eje  $\bar{6}$  separados por ángulos de  $120^\circ$  y orientados convenientemente con relación a los ejes cristalográficos usados para este sistema ( $m$  de la segunda posición), y tres planos interpuestos equidistantemente entre los tres primeros ( $m$  de la tercera posición). Es evidente que para estos grupos puntuales la información contenida en la tercera posición no es indispensable y puede utilizarse abreviadamente, limitándose a las dos primeras posiciones, o sea  $\frac{6}{m}$  m para el ejemplo que hemos considerado. Sin embargo, cuando se trate de los grupos espaciales, los cuales se derivan de los grupos de simetría puntual, será indispensable recordar el significado de todas las posiciones de la nomenclatura internacional.
- e. Para el sistema tetragonal también se hace coincidir la primera componente con el eje cristalográfico Z y por tanto ella es ocupada siempre por un  $4$  ó  $\bar{4}$  del eje de simetría correspondiente a un grupo dado. Una segunda posición en la nomenclatura, señala el tipo de elementos que son perpendiculares (planos), o paralelos (ejes) a los ejes cristalográficos X y Y, elementos estos que siempre resultan iguales en este sistema. La tercera posición se refiere a los elementos que caracterizan direcciones perpendiculares a los ejes  $4$  ó  $\bar{4}$ , es decir, direcciones paralelas al plano XY, pero que además están orientados a  $45^\circ$  con relación a los mismos ejes X y Y. Nuestro amable lector ha de estar ya en capacidad de interpretar cual-

quier grupo de este sistema, por ejemplo el inversoplanar  $\bar{4}2m$ , el cual abreviadamente a veces representan como  $\bar{4}m$ , o el planoaxial  $\frac{4}{m}$  mm que en forma más explícita con frecuencia lo escriben así:  $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ . Confronte su interpretación con la *tabla 4.4*.

- f. En el sistema cúbico los grupos de simetría puntual contienen los elementos propios de tetraedros u octaedros regulares, pero relacionados siempre con un cubo de referencia. Por esta razón, de las tres posiciones utilizadas en la nomenclatura de Hermann-Mauguin, la segunda siempre es un tres, que representa los cuatro ejes  $\bar{3}$  dirigidos a lo largo de las grandes diagonales del cubo. La primera componente se refiere a los elementos (planos o ejes) que se pueden caracterizar a lo largo de los ejes cristalográficos del sistema, y la tercera da información sobre los elementos dirigidos según las diagonales de las caras del cubo. A manera de ejemplo, el grupo  $3m$  corresponde a la *figura 4.9*, donde se puede apreciar claramente la disposición de todos los elementos con relación al cubo de referencia.

#### 4.6 Proyección Estereográfica de los Grupos Puntuales

Un complemento de gran utilidad para la comprensión de los grupos de simetría cristalina, es la proyección estereográfica del conjunto de elementos que compone cada uno de ellos. Dicha proyección se hace generalmente procurando que los ejes que corresponden a las direcciones unitarias se orienten perpendicularmente al círculo de proyección. Cuando no hay direcciones unitarias, como en el sistema cúbico, entonces se busca uno de los ejes  $4$  ó  $\bar{4}$ , y en ausencia de ellos, un eje doble de rotación, que coincida con la normal al círculo de proyección. Así se ha construido la *tabla 4.4* de proyecciones estereográficas de los 32 grupos puntuales de simetrías cristalinas, la cual está en completa corres-

pondencia con la de los grupos que hemos propuesto en la *tabla 4.3*.

No obstante lo dicho en cuanto a la orientación de los ejes con relación al círculo de proyección estereográfica, la excepción la constituye el sistema monoclinico, en el cual por convención universal, el único eje posible se proyecta horizontalmente, es decir, se orienta siempre de tal manera que sea paralelo al plano de proyección; en cambio el único plano de simetría posible en los grupos de este sistema se orienta siempre perpendicularmente al citado plano proyección (*tabla 4.4*).

De otro lado, en el proceso histórico del desarrollo de la cristalografía a cada uno de los grupos puntuales se les han dado diversos nombres de igual manera que se han propuesto diferentes tipos de nomenclatura. La que hasta ahora hemos llamado inicialmente nomenclatura auxiliar, en realidad propuesta por Bravais, perfeccionada por Paul von Groth (1843-1927) a finales del siglo XIX, y tiene la virtud, como ya lo hemos comprobado, de incluir explícitamente en una fórmula todos los elementos de simetría. El mismo investigador junto con otros de su época dio a los grupos puntuales los nombres que hemos insertado en la *tabla 4.5*. Estas denominaciones están íntimamente relacionadas con los poliedros que se pueden obtener en cada grupo cuando se da una cara de forma y orientación adecuadas, la cual luego se reproduce simétricamente mediante la operación con todos los elementos del grupo. El número máximo de caras simétricamente equivalentes que pueda tener un poliedro en un grupo dado de simetría, se llama orden del grupo. De tal manera que la *tabla 4.5* contiene, como síntesis de este capítulo, la distribución de los grupos según los sistemas cristalinos, las nomenclaturas de los mismos según Groth, Hermann-Mauguin y Schoenflies; el orden de los grupos y la denominación de los mismos en una de las formas más utilizadas y también propuesta por Groth.

*tabla 4.4* Proyección estereográfica de los 32 grupos puntuales

Categoría	SISTEMAS CRISTALINOS	CLASES DE SIMETRÍA						
		Primitiva	Central	Planar	Axial	Planoaxial	Inverso-primitiva	Inverso-planar
Baja	TRICLINICO							
	MONOCLINICO							
	ORTORROMBICO							
Media	TRIGONAL							
	TETRAGONAL							
	HEXAGONAL							
Alta	CUBICO							

tabla 4.5 Los 32 grupos de simetría cristalina:  
simbolización, orden y denominación

Sistema Cristalino	Símbolo de Groth	Símbolo de Hermann-Mauguin (completo y abreviado)	Símbolo de Schoenflies	Orden del grupo	Nombre del grupo según Groth
Triclínico	$L_1$	1	$C_1$	1	Monoédrico
	C	$\bar{1}$	$C_1 = S_2$	2	Pinacoidal
Monoclínico	$L_2$	2	$C_2$	2	Diédrico axial
	P	m	$C_s = C_{1h}$	2	Diédrico inaxial
	$L_2PC$	$\frac{2}{m}$	$C_{2h}$	4	Prismático
Ortorómbico	$L_22P$	2mm, mm2 mm	$C_{2v}$	4	Rombopiramidal
	$3L_2$	222 22	$D_2 = V$	4	Rombotetraédrico
	$3L_23PC$	$\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ mmm	$D_{2h} = V_h$	8	Rombobipiramidal
Trigonal	$L_3$	3	$C_3$	3	Trigonopiramidal
	$L_3C$	$\bar{3}$	$C_{3i} = S_6$	6	Romboédrico
	$L_33P$	3m	$C_{3v}$	6	Ditrigonopiramidal
	$L_33L_23PC$	$3\frac{2}{m}$ $\bar{3}m$	$D_{3d}$	12	Ditrigonoescalenoédrico
	$L_33L_2$	32	$D_3$	6	Trigono trapezoédrico
Tetraédrico	$L_4$	4	$C_4$	4	Tetragonopiramidal
	$L_4PC$	$\frac{4}{m}$	$C_{4h}$	8	Tetragonobipiramidal
	$L_44P$	4mm 4m	$C_{4v}$	8	Ditetragonopiramidal
	$L_44L_2$	422 42	$D_4$	8	Tetragono trapezoédrico
	$L_44L_25PC$	$\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ $\frac{4}{m}$ mm	$D_{4h}$	16	Ditetragonobipiramidal
	$L_4$	$\frac{4}{4}$	$S_4$	4	Tetragono tetraédrico
Hexagonal	$L_6$	6	$C_6$	6	Hexagonopiramidal
	$L_6PC$	$\frac{6}{m}$	$C_{6h}$	12	Hexagonobipiramidal
	$L_66P$	6mm 6m	$C_{6v}$	12	Dihexagonopiramidal
	$L_66L_2$	622 62	$D_6$	12	Hexagono trapezoédrico
	$L_66L_27PC$	$\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ $\frac{6}{m}$ mm	$D_{6h}$	24	Dihexagonobipiramidal
	$L_6 = L_3P$	$\bar{6}$	$C_{3h}$	6	Trigonobipiramidal
	$L_63L_23P = L_33L_4P$	$\bar{6}m2, \bar{6}2m$	$D_{3h}$	12	Ditrigonobipiramidal
Cúbico	$3L_24L_3$	23	T	12	Tritetraédrico
	$3L_24L_3PC$	$\frac{2}{m} \bar{3}, m\bar{3}$	$T_h$	24	Didodecaédrico
	$3L_44L_36P$	$\bar{4}3m$	$T_d$	24	Hexatetraédrico
	$3L_44L_36L_2$	432	O	24	Trioctaédrico
	$3L_44L_36L_29PC$	m3m	$O_h$	48	Hexaoctaédrico



## V MORFOLOGÍA DE LOS CRISTALES E INDICES CRYSTALOGRAFICOS

Los mejores cristales naturales tienen la propiedad de tomar la forma de poliedros y para cada elemento o compuesto químico en estado cristalino poliedral, los ángulos comprendidos entre caras correspondientes es constante, lo que constituye una característica que permite su identificación. Sin embargo el aspecto general de los cristales de un mismo material puede variar enormemente, pues sobre este influyen fuertemente el ambiente físico y termodinámico, que rodea al cristal durante el proceso de su formación. En tales circunstancias las diferencias principales entre los cristales de una fase cristalina serán exclusivamente de su forma y un análisis, por ejemplo mediante difracción de rayos X, ha de encontrar la estructura de todos ellos prácticamente igual.

El concepto de forma para la caracterización macroscópica de los cristales es importante y ella no está desvinculada de la simetría puntual.

Se distinguen dos tipos de formas poliédricas en los cristales. Uno, el de los cristales que además de su estructura apropiada, tuvieron condiciones de crecimiento tan

favorables que están limitados solamente por caras simétricamente equivalentes e iguales. El segundo tipo de formas, es el de los cristales poliédricos limitados externamente por diferentes tipos de caras simétricas y a veces asimétricas independientes. Un cristal con la forma de un cubo tiene solamente caras (cuadradas) iguales y es un buen ejemplo del primer tipo de formas, y otro cristal de aspecto prismático (posee por lo menos dos tipos de caras diferentes), es un ejemplo del segundo tipo de formas cristalinas. En el primer caso las formas se denominan simples y en el segundo combinadas.

### 5.1 Formas Simples

La forma simple se puede definir de otra manera, teniendo en cuenta el grupo puntual al que pertenece, como el conjunto de caras que se obtienen a partir de un plano reticular cristalográfico dado, (cara real o posible del cristal) sobre el que se aplican todos los movimientos u operaciones de simetría característicos de alguno de los grupos puntuales de simetría cristalina. Tales caras resultantes formarán unas con otras, aristas a lo largo de las rectas de intersección entre las mismas. Es pues suficiente conocer una cara y los elementos de simetría del grupo a que pertenece el cristal, para que un poliedro regular pueda ser construido.

Puede darse el caso particular de que el grupo carezca de elementos de simetría que puedan relacionar una cara con otra, es decir, que el orden del grupo sea igual a uno o que la posición del plano inicial no permita su repetición; en este caso la forma simple consta de una sola cara que se llama monoedro (*figura 5.1b*).

Cuando el conjunto de caras de una forma simple no encierra completamente el espacio ocupado por el cristal, se dice que la forma es abierta, como en el caso de los prismas cuyas bases no se obtienen por operaciones de simetría a partir de las caras laterales. Por el contrario,

cuando la forma encierra totalmente el espacio del cristal, la forma es cerrada. Tal es el caso de los tetraedros, bipirámides y otras más.

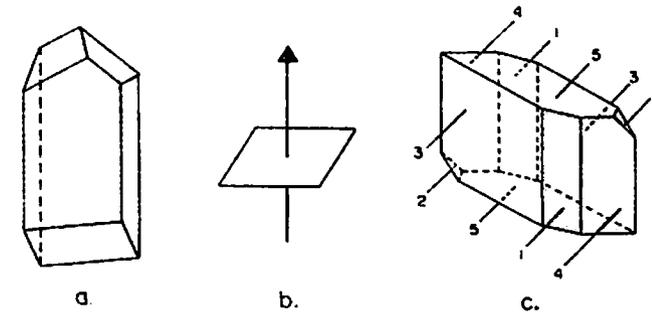


figura 5.1

Las formas simples de los cristales también se clasifican según la posición que tengan sus caras con relación a los ejes y planos de simetría. Una forma se denomina común o de posición general, si sus caras están inclinadas respecto a todos los elementos axiales o planares, y particular o de posición particular, en el caso en que las caras sean perpendiculares o paralelas por lo menos a un eje o plano de simetría. A cada grupo puntual de simetría corresponde una forma simple común y generalmente varias formas simples particulares. No obstante en el sistema cúbico hay excepciones de formas comunes que tienen caras de posición particular, por ejemplo, perpendiculares a algún eje de simetría. Para este sistema cristalográfico la forma simple común, o general, se define como aquella en que sus caras forman, con elementos de simetría iguales, ángulos diferentes.

### 5.2 Formas Simples de Baja Simetría

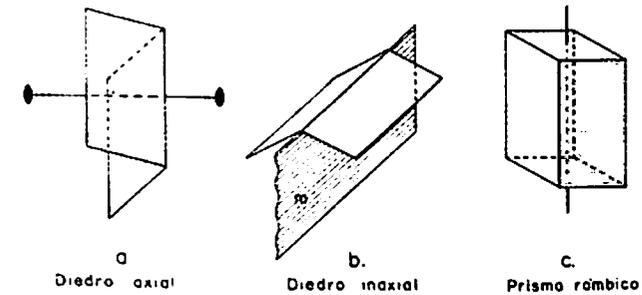
En los sistemas cristalinos de baja simetría son posibles solamente siete tipos de formas simples. En el sistema triclinico encontramos uno para la clase primitiva, ausente de elementos de simetría significativos, razón por la que los cristales a ella pertenecientes están

limitados únicamente por caras monoédricas. La otra forma simple de este sistema tiene posibilidad en el grupo central, cuyo único elemento es un centro de simetría, por medio del cual pueden relacionarse dos caras iguales dispuestas antiparalelamente. Esta forma se denomina pinacoide (*figura 3.2*). En estos casos la forma siempre es común, pues no hay ni ejes ni planos a los que las caras puedan ser paralelas o perpendiculares. Una pinacoide puede ser generada por un eje binario de rotación o por un plano de simetría como forma simple particular. En ese caso las caras son simplemente paralelas y no antiparalelas.

Estas formas, no obstante la bajísima simetría de los grupos con que las hemos asociado, como formas simples comunes, pueden tener lugar como formas simples particulares en cristales pertenecientes a todos los sistemas con excepción del cúbico, en donde en general las formas simples de los grupos con grados de simetría baja e intermedia en su totalidad no encuentran lugar.

La *figura 5.1a* muestra el aspecto de un cristal de ácido de estroncio sorprendentemente carente de elementos de simetría, por lo que su poliedro está compuesto exclusivamente por monoedros. En la parte b de la figura se indica la posibilidad del monoedro como forma particular en el grupo 3 de simetría. La *figura 5.1c* contiene la exterioridad de un cristal de sulfato de cobre encerrado solamente por pinacoides generadas en un centro de simetría, único elemento de su grupo.

En el sistema monoclinico las formas simples comunes son el prisma rómbico y los diedros que como se ilustra en las *figuras 5.2a y 5.2b*, son de dos tipos: axial e inaxial. El prisma rómbico es la forma simple y abierta compuesta por cuatro caras paralelas alternadamente y cuya sección transversal es siempre un rombo (*figura 5.2c*).



*figura 5.2*

Finalmente entre los sistemas de baja simetría, en el ortorrómbico, encontramos como formas simples comunes el tetraedro, la pirámide y la bipirámide ortorrómbicos.

El tetraedro rómbico es una forma cerrada de cuatro caras iguales no paralelas, cada una de las cuales es un triángulo escaleno. Cualquier sección transversal que del mismo se haga da como resultado un rombo.

Existen dos modificaciones de tetraedros rómbicos, que aunque están constituidas por caras iguales, tales modificaciones no coinciden congruentemente la una con la otra, pero en cambio se relacionan entre sí enantiomórficamente, es decir, como un objeto y su imagen especular.

La generación de tetraedros rómbicos enantiomórficos puede interpretarse como un fenómeno de disminución de simetría (*figura 5.3*), partiendo de una bipirámide rómbica, cuyo grupo puntual  $mmm$  se halla proyectado estereográficamente debajo de ella, se toman las caras sombreadas y con ellas se construye el tetraedro de la derecha, para lo cual hay que organizarlas en el orden mostrado en la figura. Análogamente se procede con las caras blancas para obtener el tetraedro de la izquierda. De tal manera los nuevos poliedros se ubican en un grupo de menor simetría,  $222$ , que el de la bipirámide inicial. Obsérvese en la figura la correlación

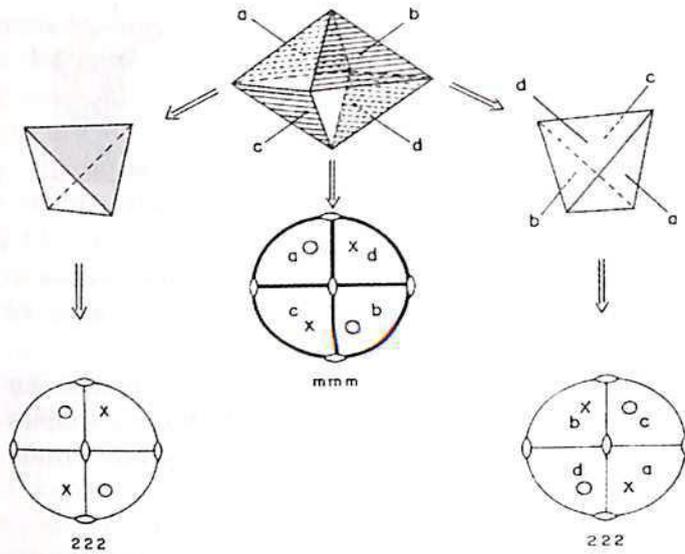


figura 5.3

enantiomórfica en las proyecciones estereográficas de los tetraedros resultantes. Allí mismo se muestran las proyecciones de las caras del tetraedro derecho antes y después de la disminución de simetría.

La pirámide rómbica es una forma simple común y abierta constituida por cuatro caras triangulares de lados desiguales que confluyen en un solo vértice dejando abierta su base de forma rómbica. La bipirámide rómbica está compuesta por dos pirámides iguales a la anterior unidas y correlacionadas en sus bases mediante un plano especular de simetría. En la *tabla 5,1* hemos condensado las principales características de las formas simples de los sistemas cristalinos de baja simetría, incluyendo las proyecciones estereográficas de las mismas.

tabla 5.1 Formas cristalinas simples en los sistemas de baja simetría

SISTEMAS CRISTALOGRAFICOS		TRICLINICO	
		Comunes	Particulares
MONOCLINICO	Comunes	<p>Monocedro Pinacoide</p>	<p>Monocedro Pinacoide</p>
	Particulares	<p>Diedro Inaxial Diedro Axial</p>	<p>Prisma Rómbico</p>
	Comunes	<p>Monocedro Pinacoide</p>	<p>Diedro Inaxial Diedro Axial</p>
	Particulares	<p>Monocedro Pinacoide</p>	<p>Diedro Inaxial Prisma ortorrómbico</p>
ORTORRÓMBICO	Comunes	<p>Prototipo de caras, triangulo isóceles, triangulo escaleno</p>	<p>Tetraedro Rómbico Pirámide Rómbica</p>
	Particulares	<p>Sección transversal rómbica Bipirámide Rómbica</p>	<p>Tetraedro Rómbico Bipirámide Rómbica</p>

### 5.3 Formas Simples de Simetría Intermedia

De las siete formas comunes existentes en los sistemas de baja simetría solamente el monoedro y la pinacoide tienen posibilidad, en los sistemas de simetría intermedia, como formas particulares. En la *tabla 5.2* se han ordenado las formas comunes simples que corresponden a esta categoría de simetría. Estas poseen características afines que permiten analizar algunas de ellas simultáneamente.

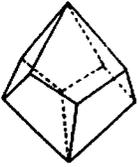
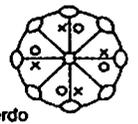
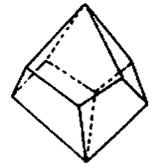
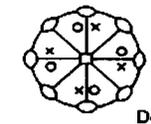
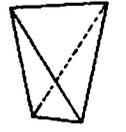
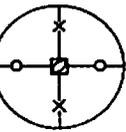
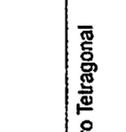
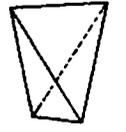
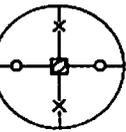
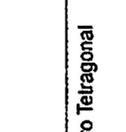
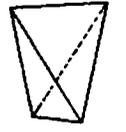
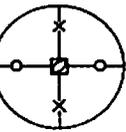
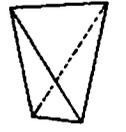
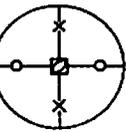
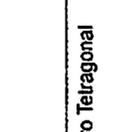
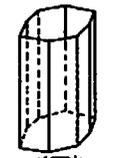
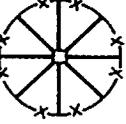
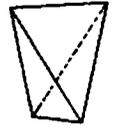
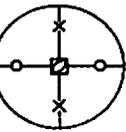
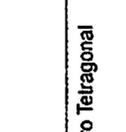
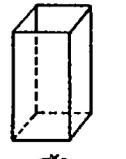
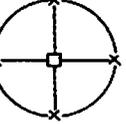
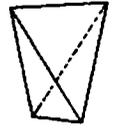
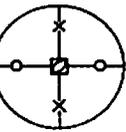
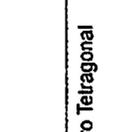
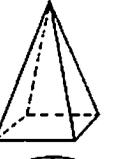
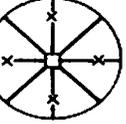
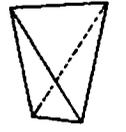
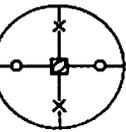
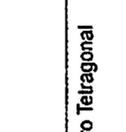
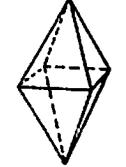
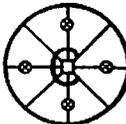
En primer lugar están las series de formas prismáticas, piramidales y bipiramidales en los sistemas trigonal, tetragonal y hexagonal, cuyas secciones transversales, perpendiculares a los ejes de rotación 3, 4 y 6 respectivamente, representan un triángulo equilátero, un cuadrado y un hexágono regular; figuras estas mostradas en la primera columna de la *tabla 5.2*. Se obtienen así las nueve formas simples dibujadas en las filas correspondientes a las figuras antes mencionadas. De las series de formas anteriores de esta categoría se derivan otras similares, con la única diferencia, que cada cara de las anteriores se divide en dos no obligatoriamente iguales, pero manteniendo las mismas características de inclinación o paralelismo con respecto a los elementos de simetría, de las formas originales. Así es como se obtienen las series de prismas ditrigonal, ditetragonal y dihexagonal; las pirámides ditrigonal, ditetragonal y dihexagonal y las bipirámides ditrigonal, ditetragonal y dihexagonal, otras nueve formas simples fáciles de recordar, colocadas correspondientemente en la *tabla 5.2*. Destaquemos finalmente que todas las formas prismáticas son particulares, mientras que las pirámides y bipirámides son formas comunes en algunos casos y en otros particulares.

El conjunto de formas simples de los sistemas de simetría intermedia se completa con otras siete, todas

tabla 5.2 Formas simples de simetría intermedia - Sistema Trigonal -

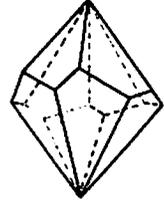
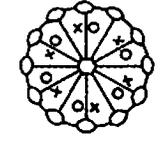
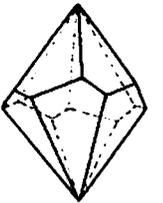
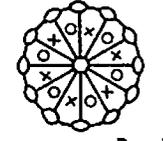
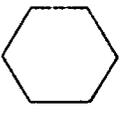
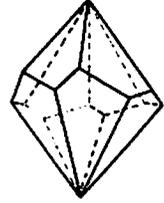
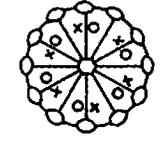
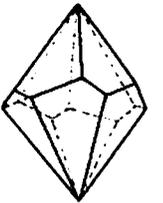
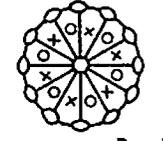
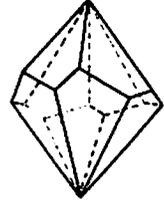
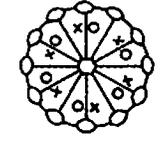
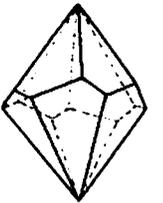
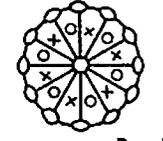
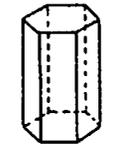
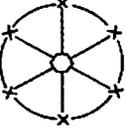
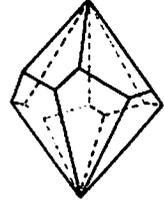
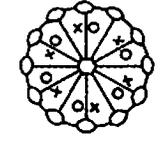
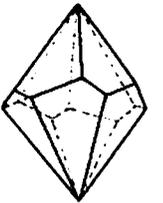
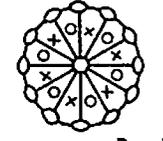
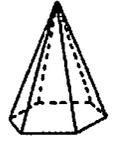
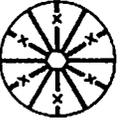
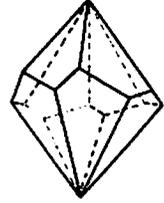
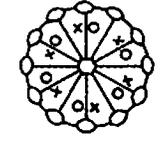
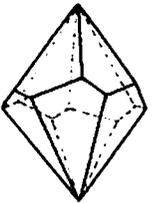
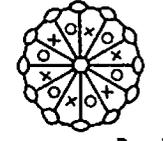
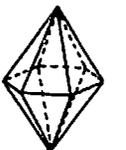
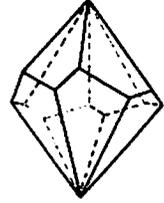
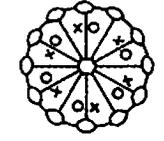
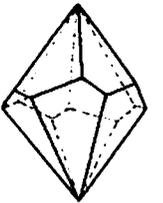
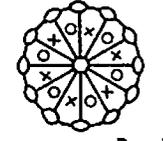
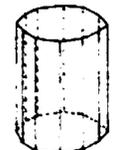
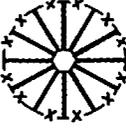
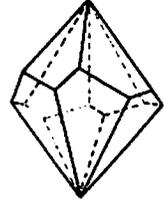
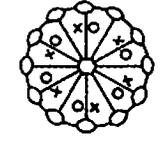
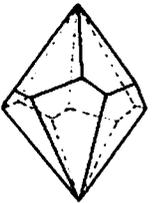
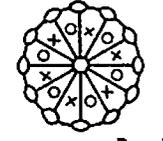
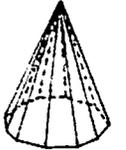
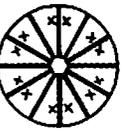
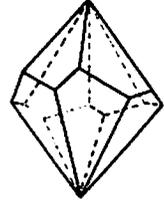
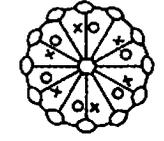
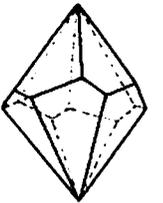
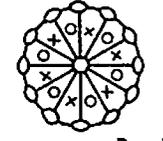
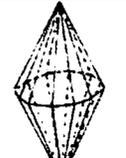
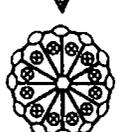
TIPO	CARACTERÍSTICAS DE LAS FORMAS		SISTEMA TRIGONAL			
	FORMAS CERRADAS Y ABIERTAS - SECCION TRANSVERSAL		PARTICULARES	COMUNES		
SISTEMA TRIGONAL	FORMAS CERRADAS Y ABIERTAS - SECCION TRANSVERSAL	Triángulo equilátero	Prisma Trigonal	Pirámide Trigonal	Bipirámide Trigonal	
		Polígono ditrigonal	Prisma Ditrigonal	Pirámide Ditrigonal	Bipirámide Ditrigonal	
	FORMAS CERRADAS - PROTOTIPOS DE CARAS	Rombo	Romboedro	Triángulo Escaleno	Escalenoedro Trigonal	
		Trapezoido	Trapezoidos Trigonalos (enantiomorfos)			
			izquierdo		Derecho	

tabla 5.2 Formas simples de simetría intermedia  
- Sistema Tetragonal -

SISTEMA TETRAGONAL		CARACTERÍSTICAS DE LAS FORMAS	
COMUNES		PARTICULARES	
FORMAS CERRADAS - PROTOTIPOS DE CARAS		FORMAS CERRADAS Y ABIERTAS SECCION TRANSVERSAL	
Trapezoides Tetragonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Triángulo Escaleno  
Trapezoides Tetragonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Triángulo Isósceles  
Trapezoides Tetragonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Tetraedro Tetragonal  
Trapezoides Tetragonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Polígono Ditetragonal  
Trapezoides Tetragonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Prisma Tetragonal  
Trapezoides Tetragonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Pirámide Tetragonal  
Trapezoides Tetragonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Bipirámide Tetragonal  

(continúa)

tabla 5.2 Formas simples de simetría intermedia  
- Sistema Hexagonal -

SISTEMA HEXAGONAL		CARACTERÍSTICAS DE LAS FORMAS	
COMUNES		PARTICULARES	
FORMAS CERRADAS - PROTOTIPO DE CARAS		FORMAS CERRADAS Y ABIERTAS SECCION TRANSVERSAL	
Trapezoides Hexagonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Hexágono Regular 
Trapezoides Hexagonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Polígono Dihexagonal  
Trapezoides Hexagonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Prisma Hexagonal  
Trapezoides Hexagonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Pirámide Hexagonal  
Trapezoides Hexagonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Bipirámide Hexagonal  
Trapezoides Hexagonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Prisma Dihexagonal  
Trapezoides Hexagonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Pirámide Dihexagonal  
Trapezoides Hexagonales (enantiomorfos)	  Izquierdo	  Derecho	Bipirámide Dihexagonal  

comunes y cerradas. El romboedro está relacionado con el sistema trigonal, su único elemento de simetría es el eje de inversión  $\bar{6}$ , que es equivalente a un eje 3 de rotación y un centro de simetría C; consta de seis caras rómbicas iguales, una de las cuales, lo mismo que la proyección estereográfica de la forma se muestran en la *tabla 5.2*.

El tetraedro tetragonal está constituido por cuatro triángulos isósceles iguales que encierran un espacio y se relacionan simétricamente mediante un eje de inversión  $\bar{4}$  y dos ejes 2 de rotación perpendiculares al primero. Su sección transversal siempre es un rectángulo y en casos particulares esta puede resultar cuadrada, si se toma exactamente en la mitad de su altura.

Los escalenoedros trigonal y tetragonal. El primero, como el romboedro anterior tiene como dirección unitaria un eje  $\bar{6}$  pero además de ello dos ejes 2 de rotación perpendiculares al primero. Es una forma de 12 caras iguales opuestas alternadamente, que se obtienen si en una bipirámide trigonal cada una de sus caras se sustituye por dos triángulos escalenos colocados diédricamente con una arista común. Por esta razón lo denominan escalenoedro trigonal. En cuanto al escalenoedro tetragonal, esta es una forma de ocho caras triangulares escalenas que pertenece al grupo puntual  $42m$ . Se obtiene por un procedimiento similar al anterior pero tomando como base un tetraedro tetragonal.

Los trapezoedros trigonal, tetragonal y hexagonal son formas cerradas y enantiomórficas, es decir, existen en modificaciones derecha e izquierda cuyas caras iguales en cada caso son trapecios.

En total en los sistemas de simetría intermedia encontramos 25 nuevas formas cristalinas simples, además del monoedro y el pinacoide ya conocidos en los sistemas de baja categoría, en cuanto a su grado de simetría.

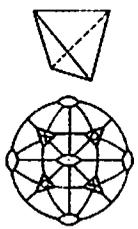
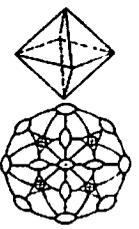
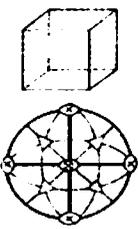
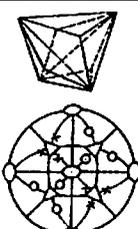
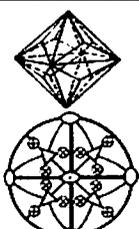
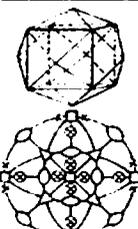
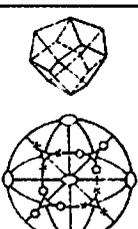
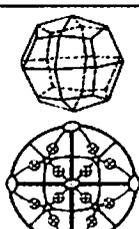
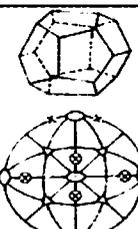
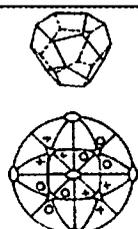
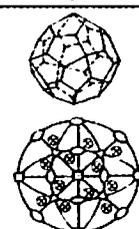
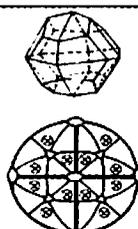
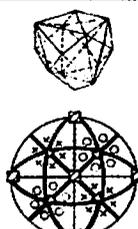
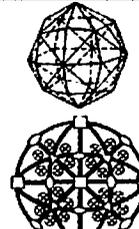
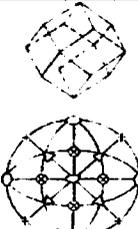
#### 5.4 Formas Simples de Alta Simetría

En el sistema cúbico todas las formas simples son nuevas. No tiene lugar ninguna de las formas analizadas en los sistemas de simetría baja e intermedia. Si bien se habla del tetraedro cúbico, este es muy diferente del tetragonal y del rómbico. Además, todas las formas simples cúbicas son cerradas.

Las denominaciones de las formas altamente simétricas están relacionadas con las formas más sencillas que las originan que son el tetraedro, el hexaedro o cubo y el octaedro regulares. Otro criterio importante es el número de caras que posee la figura. En la *tabla 5.3* se exponen las 15 formas cúbicas originadas en los tres poliedros regulares mencionados; se muestra también el contorno geométrico de las correspondientes caras y la proyección estereográfica de los elementos de simetría y de todas las caras de cada forma. Con un número en el ángulo superior derecho de cada posición se indica la cantidad total de caras. Para simplificar los dibujos de las proyecciones estereográficas de las formas cúbicas se ha suprimido en ellas la representación del centro de simetría, cuando este tiene lugar.

Las caras de un tetraedro o de un octaedro regulares, que son triángulos equiláteros, pueden deformarse convenientemente hasta obtener de cada una de ellas tres caras también triangulares pero que ahora serán isósceles. Las formas resultantes se denominan trigón-tritetraedro y trigón-trioctaedro, con 12 y 24 caras respectivamente. Obsérvese que estos nombres describen muy bien la génesis de estas formas. Análogamente se procede con cada una de las seis caras del cubo, para obtener no tres sino cuatro caras triangulares dando lugar al trigón-tetrahexaedro, con frecuencia llamado simplemente tetrahexaedro, forma de 24 caras.

tabla 5.3 Formas simples de alta simetría  
- Sistema Cúbico -

TETRAEDRICAS		OCTAEDRICAS		HEXAEDRICAS	
Tetraedro Cúbico	 4	Octaedro	 8	Hexaedro (cubo)	 6
Trigón-Tritetraedro	 12	Trigón-Trioctaedro	 24	Tetrahexaedro	 24
Tetraedro-Tritetraedro	 12	Tetraedro-Trioctaedro	 24	Pentagón-Dodecaedro	 12
Pentagón-Tritetraedro	 12	Pentagón-Trioctaedro	 24	Didodecaedro	 24
Hexatetraedro	 24	Hexaoctaedro	 48	Rombododecaedro	 12

También es posible obtener de cada cara del tetraedro u octaedro iniciales tres caras que sean tetrágonos, con lados correspondientes iguales acoplados por pares, o que de cada cara de un cubo se obtengan dos caras en forma de rombo. Así se generan el tetragón-tritetraedro, el tetragón-trioctaedro y el rombododecaedro. Sin mayor dificultad ahora se podrán recordar y comprender las demás formas cúbicas llamadas pentagón-tritetraedro, pentagón-dodecaedro, el pentagón-didodecaedro o simplemente didodecaedro, el hexatetraedro y el hexaoctaedro, este último con 48 caras, la mayor cantidad de ellas que puede tener un poliedro regular delimitado según su simetría cristalina.

De todas las formas cúbicas solamente el pentagón-tritetraedro, el didodecaedro, el hexatetraedro, el pentagón-trioctaedro y el hexaedro son formas comunes. Las demás resultan particulares y pueden tener ocurrencia en diferentes grupos de este sistema cristalográfico de simetría. Obsérvelo en las proyecciones estereográficas de la tabla 5.3.

### 5.5 Formas Combinadas

Muy pocos de los cristales reales han tenido las condiciones óptimas de crecimiento y un tamaño adecuado para que el espacio ocupado por ellos y su simetría externa, su simetría macroscópica, sean caracterizados mediante una forma simple cerrada. Como lo anotara Evgraf Stepanovich Fedorov (1853-1919): "Mientras nos ocupemos de cristales perfectos, estaremos en el campo de una de las ciencias de carácter matemático más exactas, la Cristalografía Teórica. Pero tratándose de las imperfecciones en la formación de cristales, salimos de aquella ciencia para penetrar en otra de carácter más o menos empírico" (citado por Ansheles, O. M., 1952, p.111).

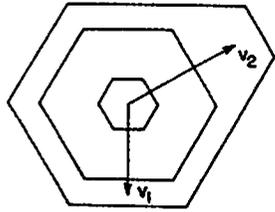


figura 5.4

En la *figura 2.3* mostramos diversos cristales de cuarzo, cuya variedad de aspecto es debida precisamente a las condiciones físicas en que se dió su formación. Hoy sabemos que influyen notoriamente en estos procesos las concentraciones de las soluciones o fundidos y la cantidad de impurezas en ellos; los flujos de las primeras para alimentar el crecimiento de las caras. La velocidad de crecimiento de las caras puede depender además de los flujos de alimentación y de la estructura interna del cristal en formación. La *figura 5.4* muestra cómo un cristal hexagonal creció simétricamente, pero al variar la velocidad de crecimiento de algunas de las caras simétricas la simetría externa se infringe. Estas son, entre otras, las causas más evidentes para que la morfología de los cristales, aún de una misma sustancia, no sea siempre igual.

Cuando un cristal de forma poliédrica tiene mas de un conjunto de caras iguales relacionadas mediante elementos de simetría, se dice que está limitado por una combinación de formas simples.

La descripción morfológica de los cristales es muy importante en mineralogía y lo fue más en el pasado cuando la caracterización de un material cristalino natural se hacía a base de ella, la que a su vez se sustenta en la ley de la constancia de los ángulos diedros entre caras correspondientes.

Ya hemos señalado cómo los cristales concretos que conllevan formas simples abiertas siempre representan una combinación. Por ejemplo, los cristales prismáticos y los piramidales, además de las caras simétricas laterales que componen el prisma o la pirámide, tienen caras diferentes, monoedros o pinacoides, que les sirven de bases. Veamos otro par de ejemplos tomados de la mineralogía.

## 1. El olivino - $\text{SiO}_3(\text{Mg,Fe})_2$

Los cristales mejor formados presentan el aspecto de la *figura 5.5a*, con simetría puntual ortorrómbica del tipo mmm y morfológicamente una combinación compuesta de tres pinacoides, de las que participan las caras 1 (100), 2 (010) y 3 (001) respectivamente, tres prismas rómbicos, cuyos respectivos planos generatrices son los correspondientes alas caras 4 (110), 5 (011) y 6 (101) y, finalmente, la cara 7 (111) que genera una bipirámide rómbica. Entre paréntesis cerca del correspondiente numeral de las caras, de acuerdo con la *figura 5.5a*, hemos colocado los índices cristalográficos de los planos generatrices de cada forma simple, cosa que será considerada

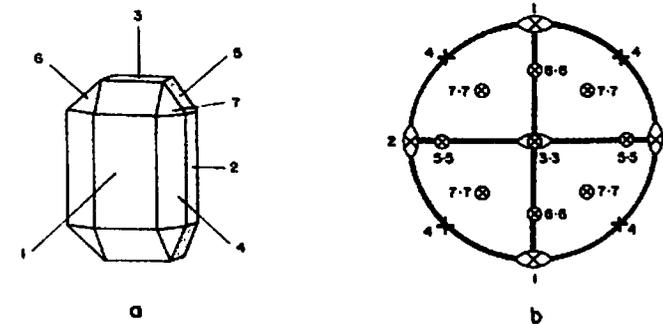


figura 5.5

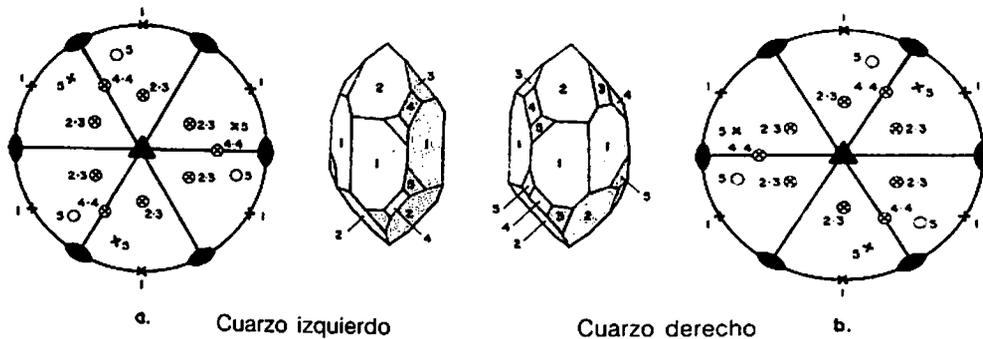
detalladamente en el próximo párrafo.

## 2. El cuarzo - $\text{SiO}_2$

El cuarzo de baja temperatura o cuarzo  $\alpha$  se encuentra en dos modificaciones enantiomórficas, derecho e izquierdo (*figura 5.6*). Su morfología exterior pertenece al grupo de simetría puntual trigonal axial 32, y constituye una combinación de cinco formas simples que a primera vista no son fáciles de determinar.

Estas son de acuerdo con la numeración y las proyecciones estereográficas de la *figura 5.6*: 1 (1010) prisma hexagonal, 2 (10 $\bar{1}$ 1) romboedro, 3 (01 $\bar{1}$ 1) romboedro, 4 (11 $\bar{2}$ 1) bipirámide trigonal y 5 (51 $\bar{6}$ 1) trapezoedro trigonal.

*figura 5.6*



bipirámide trigonal y 5 (51 $\bar{6}$ 1) trapezoedro trigonal.

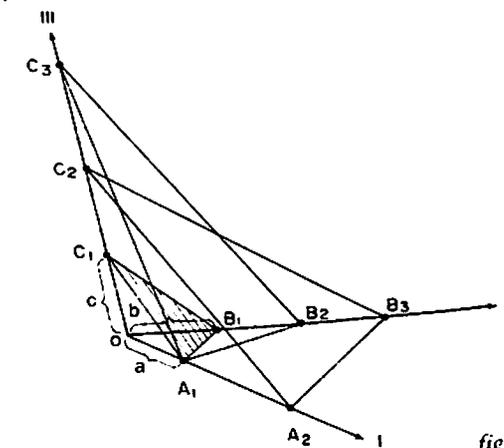
### 5.6 Símbolos Cristalográficos

Los grupos puntuales son la clasificación metodológica y estricta de los diversos tipos de simetría externa que pueden encontrarse en poliedros cristalinos. El desarrollo teórico que condujo a la deducción de los grupos puntuales se fundamentó en muchísimas observaciones y medidas que confirmaron las leyes más antiguas de la cristalografía geométrica: la ley de la constancia de los ángulos diedros, formulada desde 1783 por Romé de L'Isle (1736 - 1790), y la ley de los parámetros racionales de René Just Haüy (1743-1822).

La ley de los parámetros racionales establece que la ubicación, con respecto al origen de los ejes cristalográficos, de las caras que pueden ser observadas en la multiplicidad de cristales de una misma sustancia, se puede caracterizar mediante ciertos números enteros que guardan entre sí relaciones racionales. Esta ley además explica en buena parte la simetría externa de los cristales como resultante del ordenamiento interno de

los motivos reticulares (átomos, iones o moléculas) que lo componen. Las caras de cristales macroscópicos son el resultado del ordenamiento bidimensional de tales motivos, y aunque teóricamente la cantidad posible de ordenamientos planares es infinita, en la práctica son relativamente pocos los que tienen lugar en los cristales reales. Los más frecuentes son los que poseen mayor densidad de retículos por unidad de área y mayor estabilidad según el principio de mínima energía.

Tomemos, en calidad de ejes cristalográficos I, II y III, tres rectas no coplanares, que bien pueden ser tres aristas de un cristal (*figura 5.7*). Entonces las distancias  $OA_1, OA_2, \dots, OA_n, OB_1, OB_2, \dots, OB_n, OC_1, OC_2, \dots, OC_n$  son respectivamente múltiplos enteros de las distancias o parámetros elementales  $a, b$  y  $c$ . Un plano que corte los ejes cristalográficos a distancias  $a, b$  y  $c$  del punto  $O$ , se llamará plano unitario o cara unitaria, cuando se trate de un poliedro debidamente orientado con respecto a los ejes.



*figura 5.7*

Consideremos ahora dos planos (caras posibles) de un cristal con inclinaciones arbitrarias respecto a los ejes de coordenadas cristalográficas I, II y III. Sean estos los planos  $A_1B_2C_3$  y  $A_2B_3C_1$  de la *figura 5.7*. Las distancias  $OA_1, OB_2, OC_3, OA_2, OB_3, OC_1$  son los parámetros

respectivos de los planos dados. La relación entre parámetros correspondientes de esos planos se puede escribir, según las indicaciones de la figura:

$$\frac{OA_2}{OA_1} : \frac{OB_2}{OB_1} : \frac{OC_2}{OC_1} = p : q : r \quad (5.1)$$

donde p, q y r resultan ser números enteros y generalmente no muy grandes, del orden de diez.

Ciertamente la expresión (5.1) puede ser escrita de la siguiente manera:

$$\frac{2OA_1}{OA_1} : \frac{3OB_1}{2OB_1} : \frac{2OC_1}{3OC_1} = 2 \frac{3}{2} : \frac{2}{3} = 12 : 9 : 4 = p : q : r$$

o sea que la relación de los parámetros de corte sobre cada uno de los ejes cristalográficos, de dos planos o caras de un cristal es igual a la relación entre números enteros y comparativamente pequeños.

**Los símbolos de las caras o índices de Miller**

La ley de los parámetros racionales permite caracterizar la ubicación de cada cara o plano de un cristal con respecto a los ejes de coordenadas, mediante un conjunto de tres números enteros p, q y r. Así lo propuso Christian S. Weiss (1780-1856) en 1818.

Si una cara no corta uno o algunos ejes por estar muy alejada, se traslada paralelamente a si misma hacia el origen de coordenadas hasta que se produzca el corte. Con este movimiento no se altera la relación de sus parámetros con los del plano unitario a, b, c.

Pero William Miller (1801-1880) propuso en 1839 una nomenclatura más cómoda, que explicaremos con ayuda de la figura 5.8.

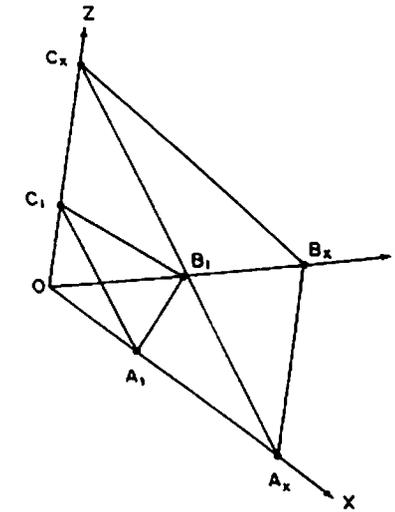


figura 5.8

La cara OA<sub>1</sub>, OB<sub>1</sub> y OC<sub>1</sub> se toma como unidad, entonces de acuerdo con la expresión (5.1)

$$\frac{OA_x}{OA_1} : \frac{OB_x}{OB_1} : \frac{OC_x}{OC_1} = p : q : r$$

La propuesta de Miller consistió en tomar como índices para caracterizar el plano A<sub>x</sub>B<sub>x</sub>C<sub>x</sub>, no la relación de los números enteros p:q:r, sino la relación de sus inversos:

$$\frac{1}{\frac{OA_x}{OA_1}} : \frac{1}{\frac{OB_x}{OB_1}} : \frac{1}{\frac{OC_x}{OC_1}} = \frac{OA_1}{OA_x} : \frac{OB_1}{OB_x} : \frac{OC_1}{OC_x} = h : k : l \quad (5.2)$$

Los números h, k, l son siempre números enteros pequeños, son los llamados índices de Miller, que caracterizan el plano del cristal A<sub>x</sub>B<sub>x</sub>C<sub>x</sub> con relación a la cara unitaria A<sub>1</sub> B<sub>1</sub> C<sub>1</sub>, es decir con los parámetros elementales de la red a lo largo de los ejes X, Y y Z respectivamente. Los índices de Miller generalmente se escriben dentro de un paréntesis circular (hkl).

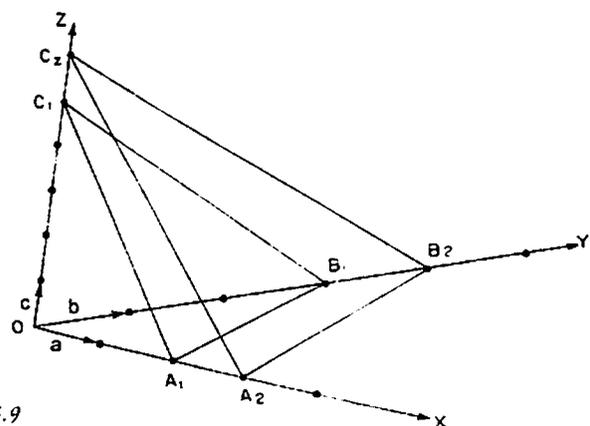


figura 5.9

Ejemplo: En la figura 5.9 la red plana  $A_1 B_1 C_1$  tiene los siguientes parámetros:  $OA_1 = 2a$ ,  $OB_1 = 3b$ ,  $OC_1 = 5c$ . Con respecto a ellos podemos encontrar los índices de Miller ( $hkl$ ) para la red plana  $A_2 B_2 C_2$ . Efectivamente, de acuerdo con lo indicado en el dibujo, se toma la siguiente relación, de la cual, luego de reducirla a común denominador, se obtiene:

$$\frac{OA_1}{OA_2} : \frac{OB_1}{OB_2} : \frac{OC_1}{OC_2} = \frac{2}{3} : \frac{3}{4} : \frac{5}{6} = 8 : 9 : 10 = (8910)$$

El resultado de la relación entre dos planos reticulares con respecto a los ejes cristalográficos obtenida en el ejemplo anterior, lleva implícito otro plano, el que corresponde a la cara unitaria que, contiene los índices de Miller (111). Un ejercicio complementario fácil es el de obtener los índices de Miller para la cara unitaria de un cristal, a partir de la expresión (5.2). De esta misma expresión se deduce el hecho de que los planos que son paralelos a un eje de coordenadas cristalográficas tiene el índice correspondiente a dicho eje, igual a cero, pues si por ejemplo un plano es paralelo al eje Y, este no será cortado por el plano en cuestión en ninguna parte y por lo tanto el segmento  $OB_x$  de la expresión 5.2 será igual a infinito obteniéndose para el índice k la relación  $\frac{OB_1}{\infty} = 0$ . En forma análoga se puede demostrar que un

plano que corta el eje X siendo paralelo a los ejes Y y Z, tiene el símbolo (100) y las que corten similarmente a Y y Z se representarán por (010) y (001) respectivamente como se indica en la figura 5.10. Las caras pinacoidales con cada una de las anteriores, tendrán los mismos números como índices, pero en virtud de este caso los cortes de los ejes se realizan en la parte negativa del correspondiente eje; a los respectivos índices o números, se les coloca encima una rayita (signo menos). En la figura 5.10 los símbolos de tales caras están escritos puntualmente.

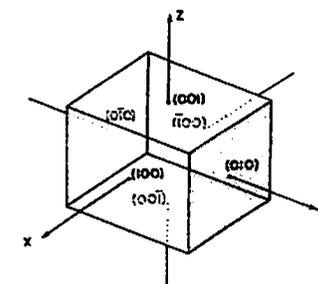


figura 5.10

Con lo anterior, en forma brevísima hemos explicado la interpretación y la información que los índices de Miller pueden contener acerca de la orientación espacial de cada uno de los posibles planos reticulares que limitan exteriormente un cristal o que tienen lugar internamente en forma de conjuntos o familias de planos paralelos y equidistantes, a cada uno de los cuales corresponden los mismos símbolos. Esto es posible en la realidad de todos los cristales gracias al ordenamiento interno y a la simetría con que los motivos se organizan espacialmente. No obstante, el proceso de indexación cristalográfica en cada caso concreto, es materia de ciertas técnicas ya tradicionales y otras más modernas con ayuda de la computación.

### Los índices de las aristas. Direcciones en un cristal

La arista de un cristal para el cual ya se han elegido los ejes de coordenadas cristalográficas, es equivalente a una dirección que se elija en el espacio representado por el sistema de coordenadas dado. Para comprobar lo anterior es suficiente trasladar tal arista paralelamente a sí misma hasta que pase por el origen de las coordenadas. Así, para un punto arbitrario que seleccionemos sobre esta dirección, se podrán hallar los valores de sus correspondientes coordenadas (X, Y, Z). Estos valores se pueden relacionar respectivamente con los parámetros

de la arista, que son números también enteros y relativamente pequeños:

$$\frac{X}{a} : \frac{Y}{b} : \frac{Z}{c} = r : s : t \quad (5.3)$$

La relación (5.3) que expresa los índices de una dirección o de una arista de un cristal, en esencia es la misma (5.1) que da como resultado los mismos índices de Weiss. Los índices de las aristas generalmente se escriben dentro de un paréntesis rectangular [rst], y como en el caso de los índices de Miller, no deben tener multiplicadores comunes, sino que deben expresar la relación más simple entre ellos.

Si a los índices de una cara (hkl) se les cambia el signo, se obtendrá otra cara ( $\bar{h}\bar{k}\bar{l}$ ) paralela y contrapuesta a la primera, por lo que las dos tendrán una normal común  $N_{hkl}$ , a la cual no tiene sentido cambiarle los signos de los índices. Similarmente los símbolos o índices [rst] y  $[\bar{r}\bar{s}\bar{t}]$  representan una misma arista.

Cuando dos planos ( $h_1k_1l_1$ ) y ( $h_2k_2l_2$ ) se cortan entre sí, forman una arista [rst] que en realidad lo que determina es la dirección de la zona a la que pertenecen los planos dados. Se puede demostrar analíticamente (véase Fabregat, F.J., 1971) que entre estos tres conjuntos de índices existe la siguiente relación:

$$r : s : t = (k_1l_2 - l_1k_2) : (l_1k_2 - h_1l_2) : (h_1k_2 - k_1h_2) \quad (5.4)$$

Existe una regla nemotécnica que facilita obtener los paréntesis del lado derecho de la ecuación (5.4), que son en verdad los valores de r, s y t. Consiste en cumplir los siguientes pasos:

a. Escribir doblemente los índices de cada uno de los planos o caras:

$$\begin{array}{ccc} h_1 & k_1 & l_1 \\ h_2 & k_2 & l_2 \end{array}$$

b. Se suprimen la primera y la última columna de los índices así agrupados, y de tal manera se obtiene:

$$\begin{array}{cc} k_1 & l_1 \\ k_2 & l_2 \end{array} \quad \begin{array}{cc} h_1 & k_1 \\ h_2 & k_2 \end{array}$$

c. Con los índices de esta distribución se realizan las multiplicaciones cruzadas que se indican a continuación y se toma la diferencia de los productos indicados, comenzando por la izquierda:

$$\begin{array}{ccc} k_1 & l_1 & h_1 \\ k_2 & l_2 & h_2 \end{array} \quad \begin{array}{ccc} l_1 & h_1 & k_1 \\ l_2 & h_2 & k_2 \end{array}$$


---


$$(k_1l_2 - l_1k_2) : (l_1h_2 - h_1l_2) : (h_1k_2 - h_2k_1)$$

Con un procedimiento similar, a partir de los índices de dos aristas se obtienen los índices de una cara paralela a ellas (y que las contiene).

Sean las aristas  $[r_1s_1t_1]$  y  $[r_2s_2t_2]$ , entonces

$$\begin{array}{ccc|ccc} r_1 & s_1 & t_1 & r_1 & s_1 & t_1 \\ r_2 & s_2 & t_2 & r_2 & s_2 & t_2 \end{array}$$


---


$$h : k : l = (s_1t_2 - s_2t_1) : (t_1r_2 - r_1t_2) : (r_1s_2 - r_2s_1)$$

### 5.7 Orientación de los Cristales

La orientación de los cristales consiste en la elección de la cara unitaria y los ejes cristalográficos. Esta no es una tarea trivial pues aunque la simetría puntual expresa propiedades macroscópicas de los cristales, ella no está desligada del ordenamiento microscópico. Por ejemplo, los ejes de simetría 2, 3, 4, 6,  $\bar{4}$ ,  $\bar{6}$  deben coincidir o ser paralelos con filas reticulares de la red cristalina. También puede afirmarse que las normales a los planos de simetría  $m$  son paralelas a otras filas, las cuales pueden a su vez ser aristas reales o posibles del cristal.

De otra parte, para poder comparar o contraponer los resultados de diferentes investigaciones cristalográficas de un mismo material cristalino, es necesario tener normas para la selección correcta de los ejes cristalográficos de los cristales, de tal manera que los elementos de simetría constituyan un grupo puntual correspondiente con los parámetros de red del sistema al que pertenece (ver tabla 1.1).

Como normas generales, los ejes cristalográficos de un cristal deben ser paralelos a ejes de simetría o a las normales de planos de simetría, si es que el número de ejes de simetría no es suficiente; o paralelos a aristas del cristal si no son suficientes ni los ejes ni los planos de simetría. Los ejes X, Y y Z siempre deben ser considerados en sus direcciones positivas y negativas a partir del punta 0, origen del sistema de referencia cristalográfica. Las direcciones positivas se eligen de tal manera que al mirar desde el extremo positivo de Z, la rotación desde X hacia Y sea en contra de las manecillas del reloj. Para los sistemas de simetría intermedia los ejes 3, 4, 6,  $\bar{4}$ ,  $\bar{6}$  se hacen coincidir con el eje Z. En la tabla 5.4 tomada de Vainshtein (1979, T. I), se indican las principales peculiaridades de la orientación de los cristales en cada uno de los siete sistemas cristalográficos.

tabla 5.4 Orientación de los cristales

		Orientación de los ejes	Posición de caras unitarias	Comentarios
SISTEMAS CRISTALINOS	Triclinico	 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	 $a_0 \neq b_0 \neq c_0$	El eje Z se toma paralelo al eje de la zona más desarrollada y se coloca verticalmente.
	Monoclinico	 $\beta \neq \alpha = \gamma = 90^\circ$	 $a_0 \neq b_0 \neq c_0$	El eje Y se hace coincidir con el único eje $L_2$ o perpendicularmente al plano $m$ . La orientación de $L_2$ siempre es horizontal.
	Ortorombico	 $\beta = \alpha = \gamma = 90^\circ$	 $a_0 \neq b_0 \neq c_0$	El eje Z siempre coincide con un eje doble de rotación.
	Tetragonal	 $\beta = \alpha = \gamma = 90^\circ$	 $a_0 = b_0 \neq c_0$	El eje Z siempre se hace coincidir con la dirección unitaria de $L_4$ o $L_{4'}$ , y se orienta verticalmente.
	Trigonal y Hexagonal	 $\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$	 $a_0 = b_0 \neq c_0$	En la orientación hexagonal el cuarto eje se dirigirá verticalmente y deberá coincidir o con el eje $L_3$ o $L_{3'}$ , $L_6$ o $L_{6'}$ . La cara tiene dos posibilidades de orientación: $(01\bar{1}1)$ o $(11\bar{2}1)$ .
	Cúbico	 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	 $a_0 = b_0 = c_0$	Los ejes cristalográficos se hacen coincidir con los tres ejes $L_4$ , o con los tres $L_6$ , o en ausencia de estos, coincidirán con tres ejes $L_2$ .



incierta en una primera observación la determinación exacta de ellos. La precisión en este caso se logrará mediante cálculos y técnicas especiales de medición.

- Monoedro (0001) .1.
- Monoedro (000 $\bar{1}$ ) .2.
- Prisma Hexagonal (10 $\bar{1}$ 0) .3.
- Pirámide Hexagonal (10 $\bar{1}$ 1) .4.
- Pirámide Hexagonal (hk $\bar{1}$ l) .5.

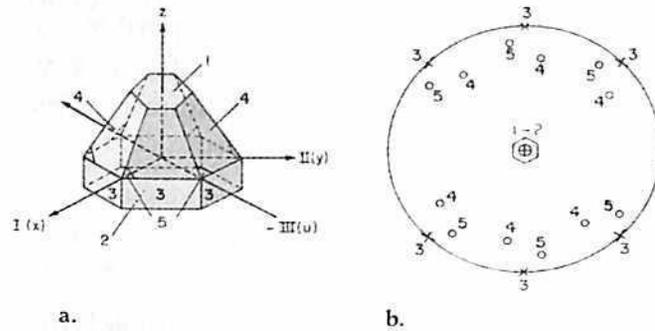
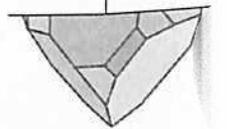


figura 5.12

TERCERA PARTE

CRISTALOGRAFÍA GEOMÉTRICA  
ESTRUCTURAL





VI  
**LAS REDES CRISTALINAS Y  
LA SIMETRÍA TRASLACIONAL**

La red espacial cristalina está constituida, idealmente, por la disposición perfectamente ordenada en el espacio, de los retículos o elementos que componen el cristal. La idea de que los cristales están formados por pequeñas partículas, que son como los ladrillos con los que se construyen los cuerpos cristalinos, no es nueva y pertenece a los mismos fundadores de la cristalografía como ciencia.

Christian Huyghens (1629-1695), para explicar las propiedades ópticas y morfológicas de la calcita, supuso que esta estaba constituida por partículas elipsoidales bien ordenadas romboédricamente.

La figura 6.1 es original de la obra *Traité de Cristallographie* de René Just Haüy (1743-1822). Con ella el autor explicaba la formación de cristales romboédricos a partir de "moléculas integrantes" que él suponía tenían en este caso forma cúbica y que ocupaban completamente el espacio. Estas moléculas debían ser muy pequeñas, tan pequeñas que si se dividiesen más allá de su tamaño, se infringiría la naturaleza de la sustancia cristalina.

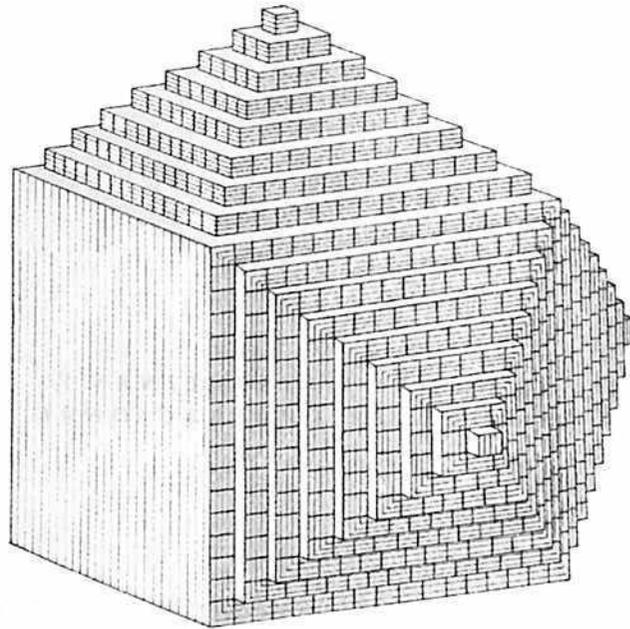


figura 6.1

Haüy también utilizó el término estructura para denominar los arreglos de "moléculas" y su ubicación relativa dentro de los cristales (Shafranovsky, I. I., 1978, T. I). Suponía además, que las "moléculas integrantes" eran de tres tipos: tetraédricas (cuatro caras), prismas trigonales (cinco caras) y cúbicas (seis caras). Esta hipótesis explicaba satisfactoriamente el fenómeno de exfoliación, que es la forma característica como muchos cristales se fracturan dejando siempre dos superficies planas paralelas. No obstante, otras propiedades físicas como la compresibilidad y la dilatación de los cristales contrariaban la idea de Haüy de un apilamiento compacto de los poliedros elementales o "moléculas integrantes". Para obviar esta dificultad L. A. Seeber (1793-1895), físico alemán, propuso colocar en el centro de las moléculas integrantes poliédricas, átomos esféricos. Las pequeñas dimensiones de estos y la distancia entre aquellas, podían explicar los cambios que

se producen en los materiales cristalinos bajo la acción de la presión o de variaciones de la temperatura.

Los anteriores fueron algunos de los momentos que condujeron a la introducción del concepto cristalográfico de red espacial, el cual se atribuye a Seeber y que finalmente L. Sohncke (1842-1897) y P. H. Groth (1843-1927) afianzaron como una generalización abstracta, como un sistema de puntos en el espacio, llamados nodos.

### 6.1 Particularidades de la Red Espacial de los Cristales

Con fundamento en la ciencia contemporánea, se habla del estado cristalino, entendiéndose por este un estado de equilibrio termodinámico de un cuerpo sólido. Dado que una misma sustancia sólida, con una composición química fija, puede tener diversos estados de equilibrio termodinámico, se dice que dicha sustancia puede encontrarse en diferentes fases cristalinas y a cada una de ellas corresponde una estructura distinta o polimórfica, que no es otra cosa que la manera como los retículos (átomos, moléculas o iones) se organizan en el espacio y se establecen los nexos y relaciones entre ellos, en concordancia con las leyes fisicoquímicas que las rigen, manteniéndose invariantes en cuanto a su forma y propiedades para cada fase dada.

Para la cristalografía geométrica es importante la estructura como ordenamiento espacial y las posibilidades de movimiento que su simetría conlleva. Desde este punto de vista el análisis de la estructura siempre está asociado con una red espacial como la que consideramos en el numeral 2.2 del capítulo II.

La figura 6.2 representa un segmento de una red espacial infinita, la cual puede imaginarse como un gran número de planos reticulares dispuestos paralelamente a iguales distancias entre ellos. De otra parte, como ya

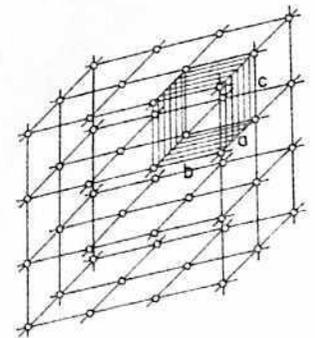


figura 6.2

se observó en el segundo capítulo, una red espacial también puede interpretarse como un espacio ocupado completamente por paralelepípedos iguales en forma y tamaño, cada uno de los cuales se puede caracterizar por la dimensión de sus lados o parámetros  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , a lo largo de tres ejes no colineales con un origen común, y por los ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , que se establecen entre los mismos ejes. Sin embargo, en una misma red espacial es posible construir diversos modelos de paralelepípedos con los que se puede ocupar la totalidad del espacio. En la misma figura 6.2 se destaca uno de estos paralelepípedos.

### 6.2 La Simetría Traslacional

Si se conocen la forma y las dimensiones  $a$ ,  $b$  y  $c$  de un paralelepípedo de aquellos que pueden colmar totalmente un espacio, entonces para la red espacial constituida por ellos, que siempre se supone infinita, los ejes cristalográficos  $X$ ,  $Y$  y  $Z$  se pueden considerar originados, por ejemplo, en cualquiera de los vértices del paralelepípedo (figura 6.3). Ahora podemos observar que los desplazamientos simples, o la combinación de estos, a lo largo de los mencionados ejes en distancias iguales a múltiplos enteros de  $b$ ,  $a$  o  $c$ , respectivamente,

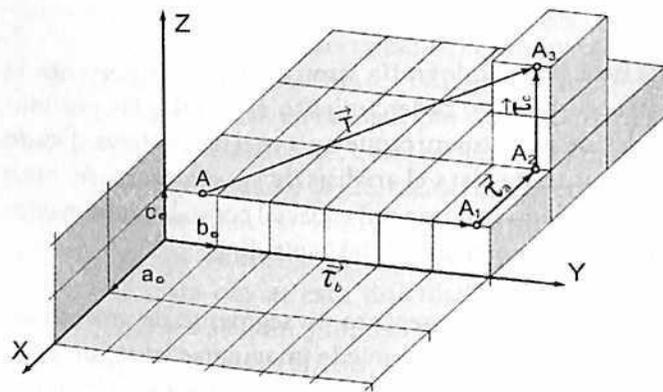


figura 6.3

dejan al paralelepípedo en general, o a cualquiera de sus puntos en particular que se tomen como referencia inicial, en una situación indistinguible de la configuración original. En la figura 6.3 se indican algunos ejemplos que ilustran esta afirmación. Es suficiente recordar que la red es infinita para comprender que todo el entorno para cualquier objeto u observador, si le fuera posible, sería idéntico al que se tenía antes del desplazamiento indicado.

La propiedad fundamental que tienen algunos desplazamientos o traslaciones de dejar una estructura en un estado indistinguible del que poseía antes de tal movimiento, es la misma que caracteriza a los elementos de simetría analizados en el capítulo tercero. De tal manera concluimos que la traslación, entendida como el desplazamiento a lo largo de  $X$ ,  $Y$  o  $Z$  en distancias iguales a múltiplos enteros de  $a$ ,  $b$  o  $c$ , respectivamente, es un nuevo elemento de simetría, que se diferencia de los anteriormente considerados, en que mediante su operación ningún punto del espacio permanece inmóvil, mientras que con los primeros, por lo menos un punto no se mueve. Esto explica por qué no hay sino 32 grupos de simetría puntual, en cambio los grupos de simetría espacial, como veremos posteriormente, son muchísimo más numerosos, pues son en realidad el resultado de las diferentes combinaciones posibles de aquellos con los desplazamientos que permite este nuevo elemento de simetría.

### 6.3 Los Paralelepípedos de Bravais

Fue M. L. Frankenheim (1801-1869) quien en 1835 afirmó que solamente eran posibles 15 familias o tipos de paralelepípedos, que distribuidos entre los siete sistemas cristalográficos, permiten ocupar totalmente el espacio y satisfacer a la vez los requerimientos que imponen los elementos de simetría, incluida, claro está, la traslación. Para esto, siempre es necesario considerar



Es decir, la simetría de la celda debe corresponder a la de todo el sistema de puntos.

2. El número de aristas iguales y el de ángulos rectos entre las mismas aristas de la celda, debe tender al máximo posible.
3. Manteniendo las condiciones anteriores, el volumen del paralelepípedo seleccionado debe ser mínimo.

Si se satisfacen simultáneamente estos criterios, la celda de Bravais se denomina celda elemental y sus dimensiones  $a_0$ ,  $b_0$  y  $c_0$ , parámetros elementales.

Las 14 celdas de Bravais se dividen en cuatro tipos, universalmente representados por letras mayúsculas así:

- P** Celdas primitivas, poseen retículos de la red espacial solamente en los vértices de su paralelepípedo.
- C** Celdas de bases centradas, que además de los retículos de una celda primitiva tienen dos más, uno en el centro de cada base o cara paralela al plano XY. Eventualmente, las caras centradas pueden ser las que son paralelas al plano YZ o XZ y en tal caso la celda se representa por las letras A y B respectivamente.
- I** Celdas de volumen o cuerpo centrado, en las cuales el paralelepípedo además de los retículos correspondientes a una celda primitiva tiene uno más en el centro de su cuerpo.
- F** Celdas de caras centradas, como su nombre lo dice, en el centro de todas las caras del poliedro de Bravais hay un retículo, además de los ocho que corresponden a una celda primitiva.

Las catorce celdas así tipificadas, se distribuyen en los siete sistemas cristalográficos, como lo muestra la *tabla 6.1*. Es conveniente precisar que la única celda hexagonal se representa como un prisma hexagonal de bases centradas la cual puede también interpretarse como integrado por tres prismas primitivos P, como la que se muestra en contorno punteado en la *tabla 6.1*. De otra parte, con alguna frecuencia la celda primitiva del sistema trigonal se designa con la letra R (romboédrica). Esta celda también puede describirse sobre los ejes de un sistema hexagonal, para lo cual se toma de partida una celda hexagonal doblemente centrada, como la de la *figura 6.4a*, para luego obtener el romboedro de la *figura 6.4b*. En la misma tabla se indica punteadamente una celda hexagonal subdividida que recuerda esta interpretación de R.

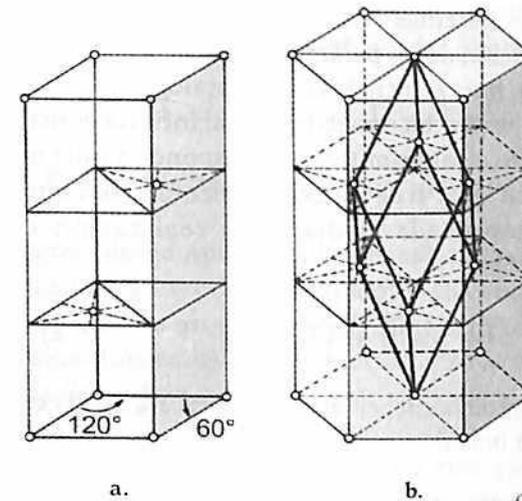


figura 6.4

A las celdas de Bravais también se les suele llamar grupos traslacionales, pues cada una de ellas, en su respectiva red espacial, define las direcciones y la magnitud de los desplazamientos que le están permitidos a cada uno de los motivos o nodos que componen el sistema correspondiente de puntos equivalentes. En las

celdas primitivas o de tipo P, las traslaciones solamente son permitidas en las direcciones paralelas a los ejes cristalográficos y en las distancias ya señaladas como múltiplos enteros de los parámetros elementales  $a_0$ ,  $b_0$  y  $c_0$ . En este caso una red infinita permanecerá indistinguible de su estado inicial, después de un grupo generalizado de traslaciones de este tipo, la cual puede representarse como el vector  $\vec{T}$  resultante de la suma de sus componentes, (figura 6.3), que son las traslaciones parciales a lo largo de los ejes cristalográficos:

$$\vec{T} = \pm m \vec{\tau}_a \pm n \vec{\tau}_b \pm p \vec{\tau}_c \quad (6.1)$$

siendo m, n y p, cero o números enteros, positivos o negativos.

Por las celdas primitivas de Bravais se diferencian los siete sistemas cristalinos, pues ellas contienen la información de los parámetros elementales y de los ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  entre los ejes cristalográficos indicados en la tabla 2.1. En una red espacial infinita construida a partir de celdas primitivas, corresponde a cada nodo un volumen igual al de la celda elemental, cosa que puede ser comprobada mediante la realización de una traslación:

$$\vec{T}_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \vec{\tau}_a + \frac{1}{2} \vec{\tau}_b + \frac{1}{2} \vec{\tau}_c \quad (6.2)$$

luego de la cual el retículo aparecerá en el centro de la celda inicial.

Las celdas de bases centradas suponen, además de las traslaciones que conllevan las celdas primitivas, traslaciones en la dirección diagonal de sus caras centradas con una componente traslacional:

$$\vec{T}_d = \frac{1}{2} \vec{\tau}_a \pm \frac{1}{2} \vec{\tau}_b \quad (6.3)$$

Al volumen de las celdas elementales de este tipo, corresponden dos nodos.

Las celdas del tipo I, también tienen una correspondencia de dos nodos a su propio volumen, y el conjunto de sus traslaciones está constituido por las traslaciones de una celda primitiva de su sistema cristalográfico más las que van en la dirección de una gran diagonal dentro del cuerpo de su correspondiente paralelepípedo, definidas por:

$$\vec{T}_d = \frac{1}{2} \vec{\tau}_a \pm \frac{1}{2} \vec{\tau}_b \pm \frac{1}{2} \vec{\tau}_c \quad (6.4)$$

Por último, las celdas de tipo F en promedio, albergan cuatro retículos en su volumen y permiten traslaciones complementarias de los nodos diagonalmente hasta el centro de todas sus caras, y en cada caso la componente de traslación también es igual a la semisuma de dos vectores, que dan para esta, tres posibilidades diferentes:

$$\vec{T}_d = \frac{\tau_a \pm \tau_b}{2}, \vec{T}_d = \frac{\tau_a \pm \tau_c}{2} \quad \text{ó} \quad \vec{T}_d = \frac{\tau_b \pm \tau_c}{2} \quad (6.5)$$

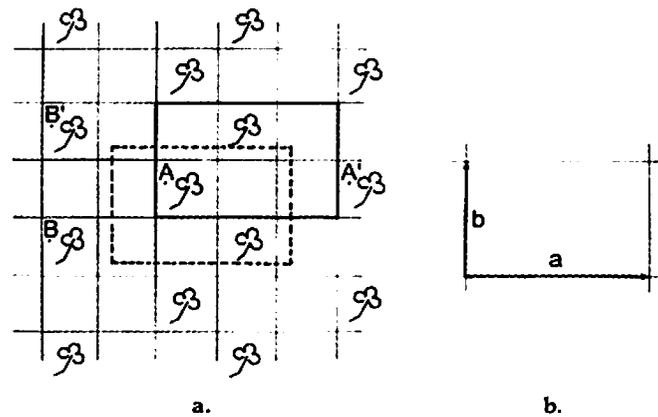
#### 6.4 Las Redes Bidimensionales de Bravais

A manera de ejemplo, intentemos aplicar las traslaciones posibles y los criterios expuestos en el numeral anterior al caso de un espacio bidimensional, como el del decorado (un embaldozado o el estampado de una tela) de la figura 6.5a.

Es fácil observar que la celda, en este caso un paralelogramo como el de la figura 6.5b, no depende del punto que se tome como inicial. Ella expresa más bien la periodicidad con que se repite en el espacio un motivo, independientemente de la complejidad de este. Precisamente la repetición periódica de un mismo motivo a lo largo de una dirección, es el fundamento de una de las principales propiedades del estado cristalino, su homogeneidad. Pero la homogeneidad de los cristales reales

implica la equivalencia del motivo que se repite, no solamente en el sentido geométrico sino también en cuanto a sus relaciones físicas. Esto significa que, por ejemplo el punto A de la *figura 6.5a* tiene un ámbito completamente igual al del punto A' y si en ellos se colocaran átomos de la misma naturaleza, las fuerzas que actuarían, lo mismo que sus correspondientes vecindarios deberán ser idénticos.

figura 6.5



Análogamente los puntos B y B' también son equivalentes lo mismo que cada par de puntos que se alcanzan mediante las traslaciones a o b que conlleva la celda plana elegida (*figura 6.5b*), y que podemos asimilar a una celda primitiva de Bravais para un espacio bidimensional. ¿Cuántos tipos de celdas de Bravais son posibles en un espacio bidimensional?

Sobre el sistema de puntos de la *figura 6.6* se han trazado varios de los innumerables paralelogramos que pueden tomarse como celdas. Estos se diferencian por la forma y el tamaño. Las celdas A, B, y C tienen igual tamaño (área), y se las puede llamar primitivas ya que solamente poseen retículos en los vértices, o por lo menos se pueden hacer coincidir con estos como lo indica la celda punteada B. En la figura igualmente se puede

observar que al área de las celdas primitivas corresponde a un solo retículo. La celda D en cambio tiene un área mayor que las anteriores y contiene un retículo más que aquellas. En general el número de retículos complementarios indica cuántas veces es mayor una celda no primitiva con respecto a esta última, tratándose claro está de un solo sistema de puntos equivalentes en un plano.

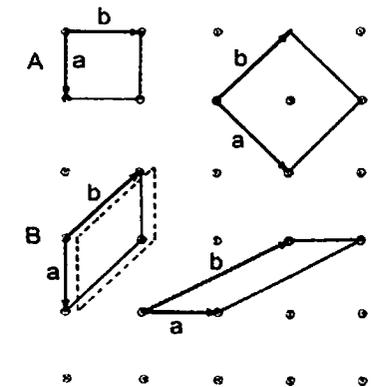


figura 6.6

Al seleccionar celdas primitivas, no todas resultan igualmente cómodas para caracterizar la red. Por esto se prefiere aquella que esté construída sobre los vectores mínimos de traslación  $|\vec{a}_{\min}| \leq |\vec{b}_{\min}|$  y que su tamaño sea el menor posible. Para el sistema de puntos considerado en la *figura 6.6* la celda bidimensional primitiva (en general ella se representa con la letra minúscula p), también llamada celda fundamental, de acuerdo con los criterios anteriores, debe ser la señalada con la letra A.

Pueden darse sistemas de puntos equivalentes de redes planas en los que las filas reticulares se intersecten bajo ángulos diferentes de 90° que varían desde 60° en adelante y los vectores de traslación a y b pueden ser iguales o desiguales entre sí. De la combinación cristalográfica de estas variantes se ha concluído que

solamente existen cinco tipos de celdas fundamentales o equivalentes planos de Bravais (esta última denominación es sugerencia del autor). para las redes espaciales bidimensionales (figura 6.7). Estas celdas satisfacen correspondientemente las condiciones contenidas en la tabla 6.2.

tabla 6.2 Equivalentes de Bravais en el espacio bidimensional

Nombre	Relación de Parámetros	Angulo entre Ejes
1. Red oblicua	$ \vec{a}  \neq  \vec{b} $	$\gamma \neq 90^\circ \neq 120^\circ$
2. Red ortorrómbica (rectangular)	$ \vec{a}  \neq  \vec{b} $	$\gamma = 90^\circ$
3. Red ortorrómbica centrada (tipo c)	$ \vec{a}  \neq  \vec{b} $	$\gamma = 90^\circ$
4. Red cuadrada (tetragonal)	$ \vec{a}  =  \vec{b} $	$\gamma = 90^\circ$
5. Red hexagonal	$ \vec{a}  =  \vec{b} $	$\gamma = 120^\circ$

Estas cinco redes tienen diferentes elementos de simetría puntual que pueden comprobarse sobre la misma figura 6.7 así: para la red oblicua un eje 2 perpendicular al plano; para la red ortorrómbica y ortorrómbica centrada el grupo de elementos es el mm2; para la tetragonal 4mm y para la hexagonal 6mm. Todos los ejes de

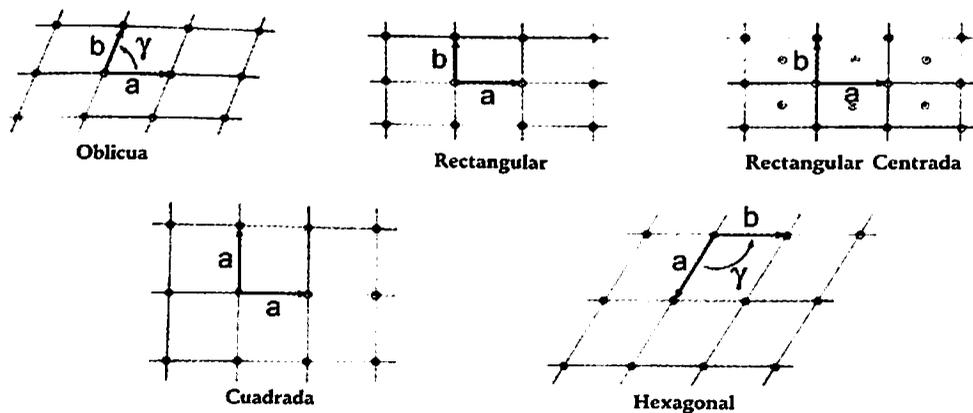


figura 6.7

rotación y los planos de simetría son siempre perpendiculares al plano de la red pues cualquier transformación u operación que no mantenga la red sobre el plano dado será incompatible en este caso.

### 6.5 Efectos de la Traslación Sobre los Elementos Finitos de Simetría

La traslación, lo hemos afirmado ya, es un elemento de simetría cuya validez se sustenta en la periodicidad y en la infinitud de la red. En el numeral 3.7 se analizaron los efectos mutuos o de combinación entre los elementos finitos de simetría. Tanto allá como aquí, lo que puede esperarse siempre es el cumplimiento del axioma de la teoría de grupos, en el sentido de que el producto de dos elementos de un grupo es un tercer elemento también perteneciente al grupo y cuya acción suele ser equivalente a las acciones sumadas de los elementos generadores. Veamos ahora los principales resultados de la interacción de la traslación con los elementos finitos de simetría.

#### I. Con el centro de simetría.

Sea T un determinado vector de traslación, que representa la distancia y la dirección en que debe desplazarse un observador desde cualquier punto, tomado dentro de la red espacial, para encontrar otro punto simétricamente equivalente al anterior\*. Cuando se considera la combinación de un centro de simetría C con esta traslación T, el resultado es la aparición de un nuevo centro de simetría sobre la misma línea de desplazamiento pero exactamente a una distancia igual a la mitad de la magnitud de la traslación, es decir en el punto  $\frac{T}{2}$ . Esta aseveración, como las sucesivas de este numeral, la sustentaremos mediante la evidencia de modelos gráficos.

\*Esta equivalencia es geométrica en el caso que nos ocupa de la cristalografía geométrica, pero tratándose de un cristal concreto, la equivalencia de las posiciones o puntos inicial y final, debe ser además física. Si por ejemplo el punto representa un retículo caracterizado por un determinado entorno de fuerzas y vecindad, luego de realizarse la traslación debe encontrarse otro retículo igual al inicial con un ambiente idéntico.

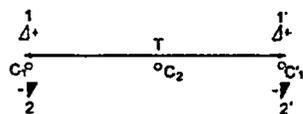


figura 6.8

La figura 6.8 explica lo concerniente al centro de simetría y la traslación. Ciertamente, el motivo 1, un triángulo de doble faz, es simétricamente equivalente con 2, y esta relación se cumple a través del centro de simetría  $C_1$ . Luego de una traslación T encontramos una relación idéntica a la anterior pero entre los motivos  $1'$  y  $2'$  cumplida por el centro de simetría  $C_1'$ . Pero de otra parte, los motivos 2 y  $1'$ , como también  $2'$  y 1 se corresponden, respectivamente, como simétricamente equivalentes, para lo cual se hace necesaria la existencia del centro de simetría  $C_2$ , ubicado exactamente en la mitad de T.

## 2. Con los ejes y planos de simetría

Las traslaciones de ejes, como también las de planos de simetría, tienen dos posibilidades especiales, a las que se puede reducir cualquier otra por eventual que ella sea. Se trata de las traslaciones paralelas y perpendiculares a estos elementos finitos de simetría.

Una traslación T perpendicular a un eje de simetría de orden par (figura 6.9), genera en la mitad de la misma un nuevo eje de simetría de orden 2. En la figura, el eje  $L_{2n}$  relaciona los motivos a y b. Luego, mediante la traslación T se logra una configuración idéntica alrededor del eje  $L'_{2n}$  pero las dos configuraciones resultan relacionadas entre sí mediante el nuevo eje  $L''_2$ . Análogamente,

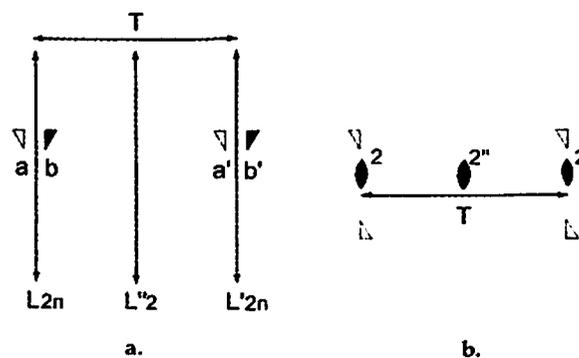


figura 6.9

una traslación T perpendicular a un plano de simetría m genera en la mitad de esta un nuevo plano m. Obsérvese la figura 6.19, por ejemplo.

Como se estableció en el numeral 6.2, la existencia de ejes de simetría está definida por el tipo de celda de Bravais que justamente se adecúa con la red espacial. Pero las celdas de Bravais implican la posibilidad de por lo menos tres traslaciones. Por eso es conveniente considerar las traslaciones de los ejes 3, 4 y 6, según las direcciones perpendiculares, como lo exigen sus respectivas celdas, lo que trae como consecuencia la aparición de un nuevo eje del correspondiente orden en el centro del polígono base de cada celda. Las figuras 6,10 ilustran esta situación, pero requieren algunas observaciones.

La figura 6.10a es el resultado de las traslaciones impuestas por las aristas de la base de una celda rectangular, sobre un eje original 2, que genera otro eje 2 en el centro del rectángulo, lo mismo que en la mitad de las indicadas traslaciones T.

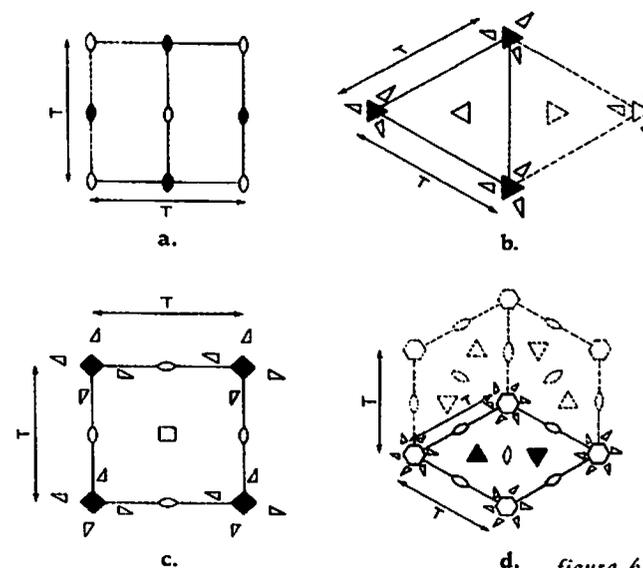


figura 6.10

En la *figura 6.10b* se ha tomado como base de la celda trigonal un triángulo equilátero que es igual a la mitad de la base de una celda tomada en ejes hexagonales y completada en líneas punteadas. En esta forma la aplicación de las traslaciones sobre un eje de rotación 3 genera otro del mismo orden pero situado en el centro del triángulo inicial. Esta misma celda hexagonal, igual a dos triángulos equiláteros como el anterior (complemento punteado en la *figura 6.10b*) es, de otro lado, apenas una tercera parte de una celda primitiva, mas no celda de Bravais, cuya base es un hexágono regular (*figura 6.10d*), en el centro del cual se reproduce otro eje 6, luego de las traslaciones T que conlleva la base de la mencionada celda primitiva. Además, los ejes 4 y 6 llevan implícitos ejes dobles de rotación, lo que justifica la aparición de nuevos ejes 2 en la mitad de las correspondientes traslaciones. Análogamente un eje 6 implica simultáneamente un eje 3, lo cual genera dos ejes 3 (resaltados en la figura) para una celda hexagonal esta sí de Bravais, o seis nuevos ejes de orden 3 para la totalidad de la celda de base hexagonal completado con líneas punteadas en la *figura 6.10d*.

Es muy conveniente observar también los efectos de la traslación perpendicular a los ejes de inversión  $\bar{3}$  y 4. A propósito de la *tabla 3.2* anotamos que el eje de inversión  $\bar{3}$  es un elemento de simetría que tiene una acción equivalente a la de un eje 3 más la de un centro de simetría 1 y desde luego ha de tener lugar en redes espaciales a las que corresponda una celda de Bravais posible de describir en ejes hexagonales. La *figura 6.11a* es la representación esquemática del eje  $\bar{3}$  (perpendicular al plano del dibujo, pero en general esta misma situación se representa solamente por el triángulo negro con el círculo blanco inscrito en él) y la *figura 6.11b* pone de manifiesto que la traslación en este caso actúa separadamente sobre 3 y  $\bar{1}$  en concordancia con los efectos arriba analizados para cada uno de estos elementos.

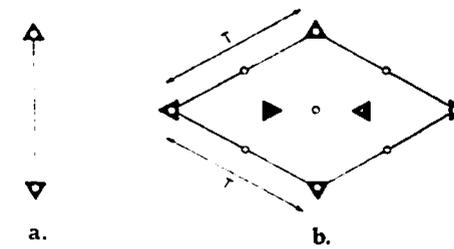


figura 6.11

Similarmente, como un eje de inversión  $\bar{4}$  siempre lleva implícito un eje doble de rotación (mas no a la inversa: un eje 2 no implica un eje  $\bar{4}$ ), el resultado de las traslaciones perpendiculares a él es lo que se muestra en la *figura 6.12*.

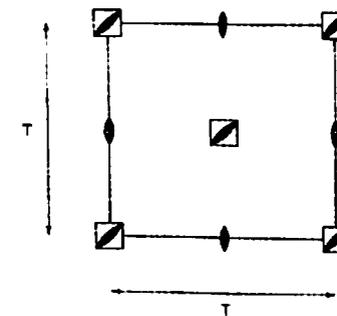


figura 6.12

## 6.6 Los Ejes Helicoidales

La combinación de ejes de rotación y traslaciones T paralelas a estos dan como resultado los llamados ejes helicoidales, más numerosos en cantidad, pero como aquellos, solamente pueden ser de orden n igual a 2, 3, 4 ó 6. De igual manera que en el caso del giro de tornillos, al considerar ejes helicoidales ha de diferenciarse el sentido izquierdo o derecho de las rotaciones.

Los ejes helicoidales de orden n tienen la particularidad de acompañar la correspondiente rotación a su alrededor en un ángulo  $\alpha = \frac{360^\circ}{n}$  con un desplazamiento simultáneo t a lo largo del mismo eje, denominado el paso del eje helicoidal. Al completarse una rotación de

360° alrededor de un eje helicoidal, la longitud total de los  $n$  desplazamientos  $t$  tendrá que ser igual a la traslación total  $T$  o a un número entero de ellas, es decir

$$nt = sT \quad (6.6)$$

donde  $n$  y  $s$  deben ser números enteros tales que cumplan con la condición

$$n \geq s \geq 1 \quad (6.7)$$

Si a un eje helicoidal de orden  $n$  corresponde un determinado  $s$ , entonces el valor del paso  $t$  en términos del valor de la traslación total  $T$  será:

$$t = \frac{sT}{n} \quad (6.8)$$

y como  $s$  tiene valores entre 1 y  $n$ , serán posibles  $n$  valores diferentes del paso para ejes helicoidales.

Los ejes helicoidales se representan, como en el caso de los ejes de rotación simple, por el número de orden  $n$ , pero seguido de un subíndice que nos indicará el sentido de la rotación y la magnitud del paso. Por ejemplo, los ejes helicoidales  $4_1$  y  $4_3$  tienen la misma magnitud de paso pero se diferencian entre sí por el sentido de la rotación: el segundo en el sentido del movimiento de las manecillas del reloj y el primero en el sentido inverso (figura 6.16). La interpretación completa de la información que conllevan este par de números ha de quedar clara, para todos los casos posibles, en los siguientes párrafos e ilustraciones de este numeral.

La figura 6.13a muestra un eje de rotación doble, a lo largo del cual, luego de una traslación completa  $T$  encontramos una situación idéntica a la inicial. La combinación simultánea de estos dos elementos de simetría, genera un eje helicoidal  $2_1$  cuya acción se indica en la figura 6.13b. En la parte inferior de cada una de las figuras

se muestra la representación estereográfica de los motivos y de los ejes sobre un plano de proyección perpendicular a estos. Estas proyecciones permiten hallar muy rápidamente la diferencia de efectos en los dos casos. Una rotación de 180° seguida de la traslación  $T$  en el primer caso, tratándose de una red infinita, dejan los motivos nuevamente en la base de una celda (un cubo en este caso) idéntica a la anterior, por lo que en su proyección estereográfica a los motivos no se les anota nada, pues se supone que ellos están ubicados exactamente en el plano de proyección, el cual a la vez coincide con el plano de la base de la celda. En cambio, para el eje helicoidal de la segunda figura su acción es diferente: una rotación de 180°, en cualquier sentido, simultánea con una traslación  $\frac{T}{2}$ , sobre el motivo que inicialmente se encontraba al lado izquierdo y al nivel del plano de proyección, lo deja unívocamente del lado derecho a una altura igual a la mitad de la de la celda. Por eso al motivo de la derecha en la proyección se le anota  $\frac{1}{2}$ , que es la justificación de la explicación anterior, pues se ha elevado con respecto al plano de proyección en la mitad del parámetro de la correspondiente traslación  $T$ .

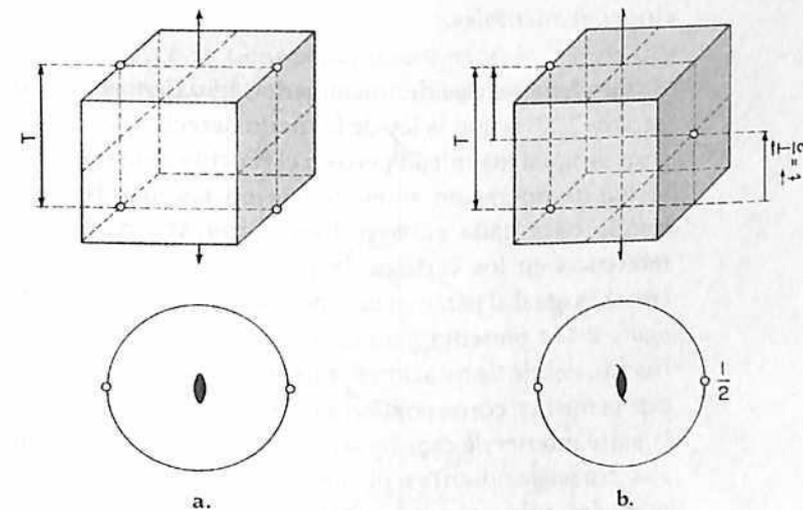


figura 6.13

Es conveniente anotar de una vez, que en este tipo de proyecciones, como en las que tendremos mas adelante para los grupos espaciales, las coordenadas en la dirección perpendicular al plano de proyección, para un determinado punto, se dan en fracciones del correspondiente parámetro de la celda primitiva elemental de Bravais, paralelo al eje de proyección. Es posible encontrar casos en que convenga considerar valores negativos para estas coordenadas, cosa que se puede hacer sin inconvenientes, solamente es necesario recordar que ahora el motivo no se encontrará sobre el plano de proyección sino por debajo de él, precisamente a una distancia igual a la fracción del parámetro que se indique. Para el caso de la *figura 6.13b*, también sería válido colocarle al motivo proyectado al lado derecho  $-\frac{1}{2}$ .

Subrayamos que para los ejes helicoidales de segundo orden, el sentido de la rotación de  $180^\circ$ , derecha o izquierda, no cambian el resultado; los dos son equivalentes e indistintamente se representan como  $2_1$ . No ocurre lo mismo con los demás ejes helicoidales donde hay que diferenciar el sentido del giro y tener en cuenta la altura de la celda fundamental en términos de traslaciones elementales.

Ejes helicoidales de tercer orden hay dos: el  $3_1$  con giros de  $120^\circ$  según la ley de la mano derecha y el  $3_2$  con giros de igual magnitud pero en el sentido contrario. Su forma de operación se evidencia en las *figuras 6.14*, donde para cada caso se han dispuesto nodos de referencia en los vértices de prismas trigonales cuya altura es igual al parámetro  $c_0$  de una celda elemental. La *figura 6.14a* presenta para la comparación el funcionamiento del eje de rotación  $3$ , mientras que las partes b y c de la misma, corresponden a la operación de  $3_1$  y  $3_2$ . En la parte inferior de cada figura de operación se muestran sus correspondientes proyecciones estereográficas tomadas sobre el plano 001 de la celda prismática seleccionada.

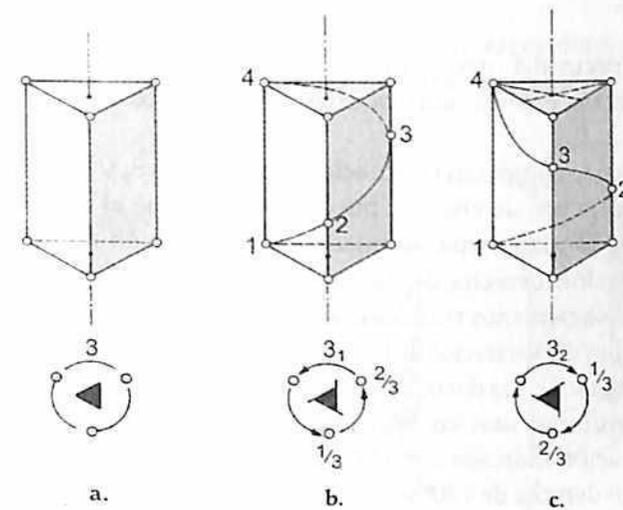


figura 6.14

En general en las proyecciones los ejes helicoidales, con la excepción de los de segundo orden, se representan con polígonos regulares aspidados. El número de lados del polígono, de la misma manera que lo indicamos a propósito de la *tabla 3.2*, expresa el orden del eje y las aspadas indican que es helicoidal y además el sentido de la rotación.

La *figura 6.15* tiene otra presentación de los ejes  $3_1$  y  $3_2$  en la que se han dispuesto convenientemente uno

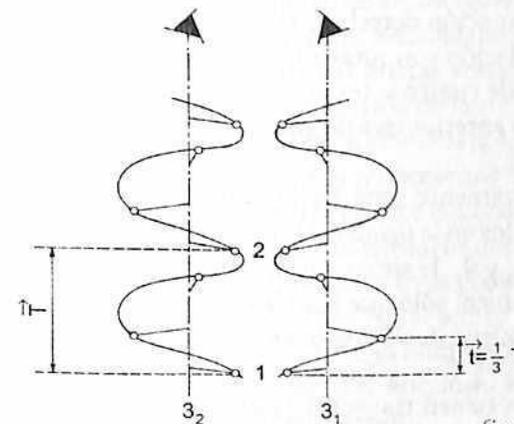


figura 6.15

respecto del otro para evidenciar más claramente la relación enantiomórfica existente entre los dos.

Si se comparan las rotaciones de los ejes  $3_1$  y  $3_2$ , desde otro punto de vista, se puede observar que el eje  $3_2$  de rotación izquierda, se puede tomar también como de rotación derecha de  $120^\circ$  pero acompañada con un desplazamiento traslacional no de una tercera parte de  $T$  sino de dos tercios de la misma, que como ya anotamos es igual a  $c_0$ ; es decir, la unidad estructural señalada con el número uno en la figura 6.14c puede alcanzar la posición marcada con el número 3 mediante una rotación derecha de  $120^\circ$  y una traslación positiva de  $\frac{2}{3}T$ . A la vez, teniendo en cuenta que las unidades estructurales 1 y 4 son completamente equivalentes, dentro de una red infinita, podemos interpretar la posición 3 de la misma figura, como alcanzada a partir del retículo 4 mediante una rotación de  $120^\circ$  a la derecha, acompañada simultáneamente de una traslación negativa de  $\frac{1}{3}T$ . Por esta razón algunos autores en lugar de nuestra ya convenida nomenclatura para los ejes helicoidales utilizan por ejemplo  $3_1$  y  $3_{-1} = 3_2$ . Estas pequeñas variaciones de interpretación no dan nada nuevo en el caso de los ejes helicoidales de tercer orden, donde al fin y al cabo los dos casos pueden ser aplicados dentro de los límites de una sola celda de altura igual a  $c_0$ , bien sea como rotación derecha y traslación de  $\frac{1}{3}T$  o de  $\frac{2}{3}$  de esa traslación con rotación izquierda. En cambio, para los ejes de cuarto y sexto órdenes una argumentación como la anterior será de gran utilidad.

Ciertamente, será fácil comprender los casos contemplados en la figura 6.16, pues para los ejes de cuarto orden  $4_1$  y  $4_3$ , la situación es análoga a la de los ejes de tercer orden, sólo que aquí las rotaciones son derechas en magnitud de  $90^\circ$  pero con traslaciones simultaneas de  $\frac{1}{4}T$  y  $\frac{3}{4}T = -\frac{1}{4}T$  respectivamente. Estos dos movimientos tienen trayectorias que se relacionan mutua-

mente como un objeto con su imagen especular o sea que también son enantiomorfas entre sí.

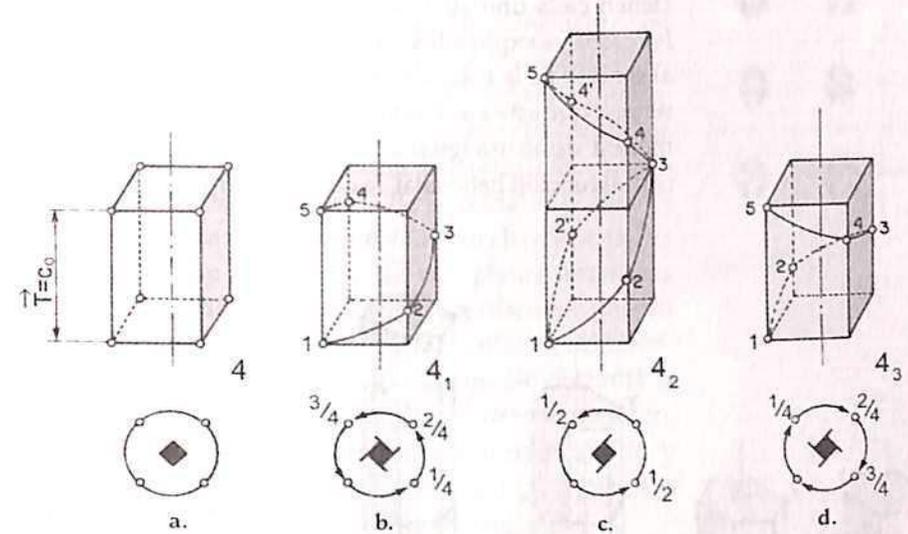


figura 6.16

Por su parte al eje  $4_2$  corresponde una traslación de  $\frac{2}{4}T$  con giros de derecha e izquierda de  $90^\circ$ , ya que como en el caso de los ejes  $2_1$ , es indiferente el sentido de rotación para un resultado igual. Esta última afirmación parece paradójica cuando se observa solamente un prisma como el de la figura 6.16c, pero si pensamos en un espacio infinito ocupado totalmente con celdas elementales de forma prismática tetragonal de altura igual a  $c_0$ , entenderemos que, gracias a los ejes helicoidales  $4_2$ , todas ellas tendrán en la mitad de sus aristas verticales una unidad estructural sin que el sentido de la rotación altere el resultado. La otra particularidad del eje  $4_2$  consiste en que en la dirección del eje son necesarias traslaciones dobles de  $T$  para encontrar puntos equivalentes, es decir se necesita una celda fundamental de doble altura con relación a la que inicialmente se haya podido tomar como paralelepípedo de Bravais. Así el punto 1 (figura 6.16c) en la dirección del eje tiene su homólogo equivalente en el punto 5 o en cualquier otro lugar que diste de él  $2nT$ , siendo  $n$  un número entero.

La figura 6.17 contempla todos los casos de ejes helicoidales de sexto orden. Los pares  $6_1$ ,  $6_5$ ,  $6_2$  y  $6_4$  mantienen cada uno su relación enantiomórfica como en los casos ya explicados. El eje  $6_3$  también resulta neutro al sentido de la rotación, como en los casos  $2_1$  y  $4_2$ . Obsérvese que este eje además de requerir una celda fundamental de altura igual a  $3c_0$ , cumple simultáneamente con su función helicoidal, la de un eje triple de rotación 3.

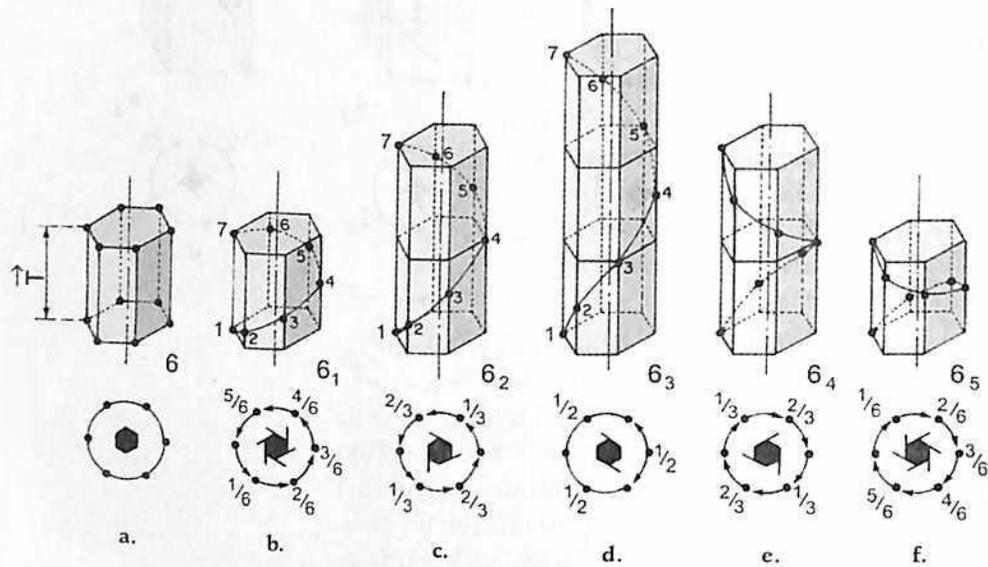


figura 6.17

### 6.7 Planos de Deslizamiento

Los planos de deslizamiento son los nuevos elementos de simetría resultantes de la combinación simultánea de planos de reflexión especular  $m$  (figuras 6.18b y 6.19) con traslaciones  $T$  paralelas a este mismo plano, posibles o permitidas por la simetría de una determinada red espacial.

Existen tres planos de deslizamiento, denominados planos de deslizamiento de tipo a, b y c, cuya acción consiste en la reflexión en un plano  $m$ , coincidente con el mismo plano de deslizamiento, y la combinación simultánea con una traslación paralela, correspondientemente, al eje X, Y o Z pero en una magnitud igual a la mitad de la traslación elemental  $T$  determinada por los correspondientes parámetros de la celda primitiva de Bravais en dicha red (figura 6.18a). Es claro que por la naturaleza de su operación, los tres planos anteriores son similares y las magnitudes de sus traslaciones pueden ser iguales, como en el caso de celdas cúbicas, o diferentes para otros sistemas cristalográficos. No obstante la diferenciación según la dirección del desplazamiento, es muy útil para una mejor orientación en el espacio, y además facilita su diferenciación cuando tales planos se presentan gráficamente, como su proyección.

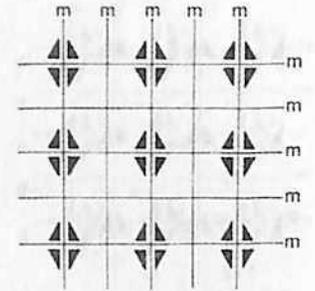


figura 6.19

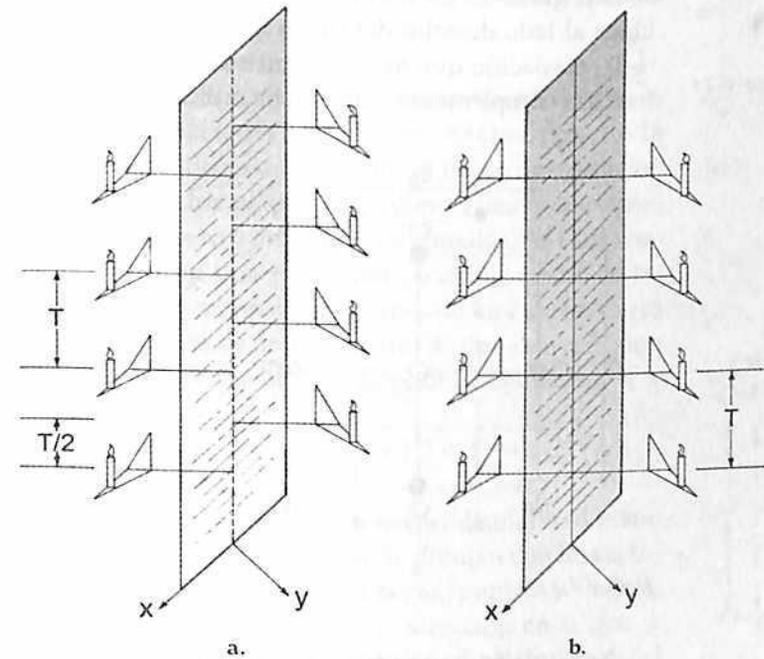


figura 6.18

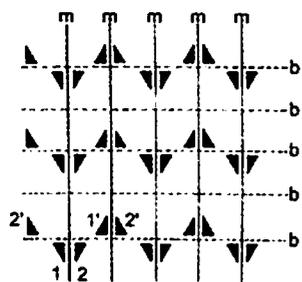


figura 6.20

Efectivamente, cuando los planos son perpendiculares al plano de proyección se utilizan líneas interrumpidas para representar los planos de tipo a y b (figuras 6.20 y 6.21) y una línea punteada para el plano c (figuras 6.22 y 6.23b). En las figuras mencionadas precisamente se muestran diversas combinaciones entre estos nuevos elementos de simetría y sus efectos repetitivos o de propagación de un motivo, generalmente señalado con el número uno, el cual se toma como punto de partida.

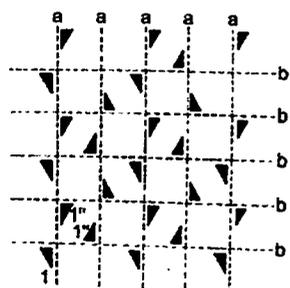


figura 6.21

En la figura 6.23a se muestra la ubicación y justificación de planos de deslizamiento de tipo a y b, verticales dentro de una celda cúbica elemental del cristal de NaCl. En la parte b de la figura se explica una vez más la acción de un plano vertical del tipo c: el motivo que inicialmente se encuentra sobre el plano del dibujo es reflejado y desplazado simultáneamente a lo largo del eje Z, que en este caso suponemos perpendicular al plano de la página. Como resultado final el motivo inicial se ubica al lado derecho del plano c a una altura igual a  $\frac{1}{2}T_c$ , traslación que normalmente se simboliza con la fracción simplemente, como se ha indicado en la figura.

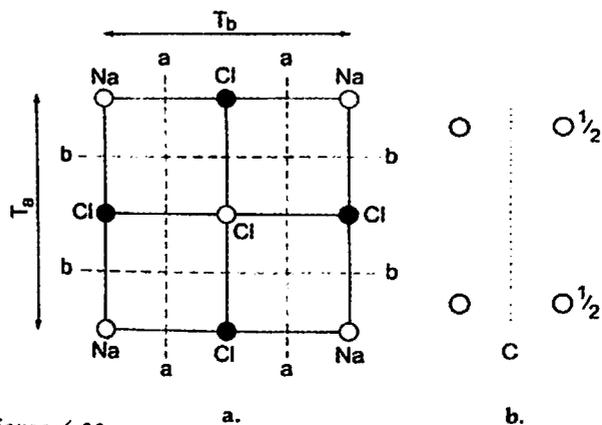


figura 6.23

Fuera de los anteriores, existen otros dos tipos de planos de deslizamiento. El plano de tipo n, que es el

que combina una reflexión con dos desplazamientos simultáneos como los anteriores, paralelos a cualquier par de ejes cristalográficos y al mismo plano de reflexión. Es decir, un plano de deslizamiento de tipo n se obtiene cuando la reflexión se combina con cualquiera de las siguientes traslaciones:

$$\vec{t} = \frac{1}{2}(\vec{T}_a + \vec{T}_b), \quad \vec{t} = \frac{1}{2}(\vec{T}_a + \vec{T}_c) \quad \text{ó} \quad \vec{t} = \frac{1}{2}(\vec{T}_b + \vec{T}_c)$$

donde  $\vec{T}_a$ ,  $\vec{T}_b$  y  $\vec{T}_c$  son las traslaciones elementales en las direcciones de X, Y y Z respectivamente. La figura 6.24 ilustra la operación de un plano n sobre la base de una celda de cristal del llamado hierro  $\alpha$  que es cúbica de cuerpo centrado. La unidad estructural 1 reflejada en el plano n sufre una traslación  $\vec{t} = \frac{1}{2}(\vec{T}_a + \vec{T}_c)$ , con lo que el motivo alcanza una posición equivalente, en el centro de la celda, a la altura de  $\frac{1}{2}$  como se indica en la figura. Estos planos de deslizamiento, cuando son verticales con respecto al plano del dibujo se representan por una línea interrumpida de puntos y rayas.

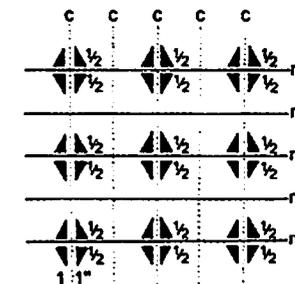


figura 6.22

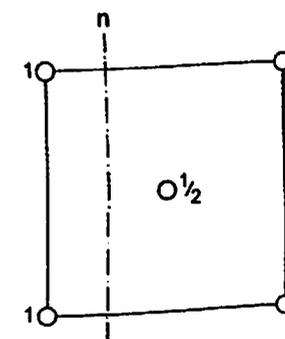


figura 6.24

Finalmente, los planos de deslizamiento de tipo d, son característicos, aunque no exclusivos, de la estructura del diamante, tienen un modo de operación parecido al de los planos n, conllevan dos traslaciones simultáneas, pero a diferencia de aquellos, las traslaciones se hacen en una magnitud no de un medio en las direcciones correspondientes, sino de un cuarto. O sea que en los planos de deslizamiento de tipo d, la reflexión se combina con una de las traslaciones siguientes:

$$t = \frac{1}{4}(T_a + T_b), \quad t = \frac{1}{4}(T_a + T_c) \quad \text{ó} \quad t = \frac{1}{4}(T_b + T_c)$$

Estos planos cuando son perpendiculares al plano de una representación gráfica, se dibujan con líneas interrumpidas consistentes en rayas, puntos y flechas, donde estas últimas indican la dirección en la que la repetición del motivo se hace con el crecimiento del parámetro. En la figura 6.25, el motivo inicial marcado

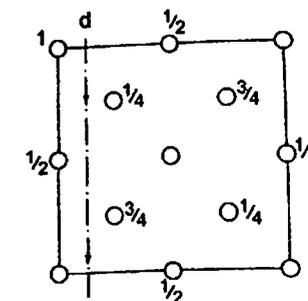


figura 6.25

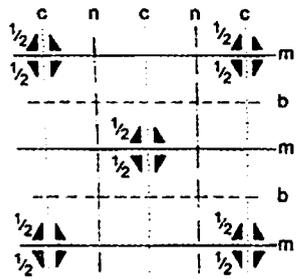


figura 6.26

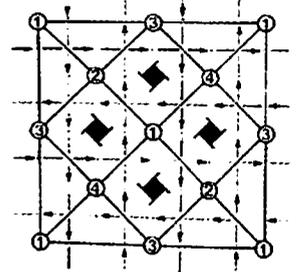


figura 6.27

con el número 1, se encuentra al nivel del plano del dibujo, pero por efecto de sucesivas operaciones del plano d se va elevando a alturas de  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  y  $\frac{3}{4}$  finalmente 1, este último es equivalente al punto inicial.

La figura 6.26 muestra una combinación de planos m, b, n y c y sus efectos. La figura 6.27 ilustra la proyección de los planos m y d perpendiculares al plano 001 de una celda cristalina de diamante. Los números entre los círculos indican el orden de ascenso de los motivos reticulares según se estén relacionando con los ejes helicoidales  $4_1$  ó  $4_3$ . Obsérvese que la disposición anti-paralela de los planos de tipo d genera ejes helicoidales cuaternarios enantiomórficos, relacionados mediante los planos m.

En el cuadro de la figura 6.28 se sintetizan las formas convencionales de representación gráfica de todos los ejes y planos de simetría, no solamente para cuando están orientados verticalmente sino para cualquier otra posición.

figura 6.28 Simbolización gráfica de los elementos de simetría cristalina.

Verticales	Horizontales	Inclinados	EJES DE SIMETRÍA
2  6 2 <sub>1</sub> 6 <sub>1</sub> 3  6 <sub>2</sub> 3 <sub>1</sub> 6 <sub>3</sub> 3 <sub>2</sub> 6 <sub>4</sub> 4  6 <sub>5</sub> 4 <sub>1</sub> $\bar{1}$ 4 <sub>2</sub> $\bar{3}$ 4 <sub>3</sub> $\bar{4}$ $\bar{6}$	2 2 <sub>1</sub> 4 4 <sub>1</sub> 4 <sub>2</sub> 4 <sub>3</sub> $\bar{4}_y$ $\bar{4}_x$	2 2 <sub>1</sub> 3 3 <sub>1</sub> 3 <sub>2</sub>	
m a,b c n d	m a b n d	m a,b n,d	PLANOS DE SIMETRÍA



## VII GRUPOS DE SIMETRÍA LONGITUDINAL Y PLANAR

### 7.1 Algunas Particularidades

*\*Por unidad estructural o motivo puntual no siempre debe entenderse un punto matemático, sino que puede ser el retículo real de la red, con cierta extensión material y forma simétrica, expresada esta última mediante grupos de elementos de simetría que no impliquen traslación.*

Para la determinación de los grupos cristalográficos espaciales son factores fundamentales la simetría puntual de la unidad estructural o motivo\* y las traslaciones permitidas en la correspondiente simetría de la red infinita, constituida por motivos idénticos. Este último factor está contenido en el concepto geométrico de celda de Bravais para el espacio tridimensional, o sus equivalentes, en los subespacios de una y dos dimensiones.

Los grupos espaciales al incorporar la simetría traslacional, necesariamente implican la infinitud de la red, o dicho en un sentido más general, la infinitud y homogeneidad del espacio. De otra parte, el espacio puede ser conceptualmente continuo o discreto, y en los dos casos, en él existe un número infinito de puntos simétricamente equivalentes, sin embargo, para el primer caso de un continuum de tales puntos, la magnitud de las traslaciones puede variar indiscriminadamente desde  $T = 0$ , hasta valores tan grandes como se quiera. Por el contrario, en el segundo caso, no todos los puntos son simétricamente equivalentes y por ello las traslaciones posibles

son de magnitud finita, desde un valor mínimo  $T_{\min} = k_0$ , (constante en cada red espacial y en cada coordenada) hasta cualquier valor de número entero multiplicado por la misma constante  $k_0$ , y esto no es otra cosa que la periodicidad, propia además, de un espacio de homogeneidad discreta.

Suelen presentarse como ejemplos de mayor evidencia, para un espacio continuo, el concepto de espacio euclidiano vacío, y del espacio discreto, la estructura de una sustancia cristalina, tomada en su interpretación microscópica, cuando se manifiestan su naturaleza atómica y la condición geométrica y física de la discreción material.

En cristalografía, es pues importante el espacio discreto cuyo número  $p$  de dimensiones es igual a tres, como máximo. De él pueden derivarse subespacios bidimensionales, cuando  $p=2$ , y unidimensionales cuando  $p=1$ . El espacio puede también caracterizarse por el número  $s$  de dimensiones independientes que son homogéneas y que por lo tanto permiten traslaciones. Las cantidades  $p$  y  $s$  pueden relacionarse entre sí de tal manera que  $p \geq s$ .

Si un espacio tridimensional es completamente homogéneo (sin importar que su homogeneidad sea o no, discreta), entonces  $s=3$ , es decir, permite traslaciones en todas sus  $p$  dimensiones. También puede ocurrir que este espacio en general no sea homogéneo, pero que algunos de sus subespacios sí lo sean, y entonces  $s=2$  ó  $s=1$  corresponden a la homogeneidad bidimensional o planar y unidimensional o longitudinal, respectivamente. Finalmente, cuando  $s=0$  no hay lugar para ningún tipo de traslación, el espacio es completamente heterogéneo y la simetría sólo tiene lugar exclusivamente al nivel del retículo individual de cada punto del espacio.

Abstractamente representamos el conjunto de los grupos de simetría en un espacio dado como  $C_r^p$ . El

\*La demostración de que solamente son posibles estos grupos para las dimensionalidades señaladas la obtuvimos, pero afirmamos que ellas han sido desarrolladas por Schoenflies, Delone y otros.

número de estos puede ser infinito y variará según los valores que tomen  $p$  y  $s$ . En la *tabla 7.1* se indica el número de grupos posibles para los casos de dimensionalidad y grados de homogeneidad que nos interesan en cristalografía\*. El procedimiento matemático de la deducción de estos grupos no lo hemos considerado dentro de los objetivos de este manual; sin embargo, algunos comentarios pueden ser útiles para una mejor comprensión de su significación.

*tabla 7.1 Cantidad de grupos cristalográficos  $G_s^p$  según la dimensionalidad y grados de homogeneidad del espacio.*

Dimensionalidad del espacio $p$	$s$ : grados de homogeneidad			
	3	2	1	0
3	230	80	75	32
2	—	17	7	10
1	—	—	2	2

Por ejemplo, en el espacio tridimensional,  $p = 3$ , un motivo estructural también tridimensional, puede caracterizarse por la presencia de uno o varios elementos de simetría y/o la combinación mutua entre los mismos. Pero si entre estos elementos de simetría no se incluye ningún tipo de traslación,  $s = 0$ , entonces las diversas combinaciones posibles entre tales elementos no superará las 32 variantes de los grupos de simetría puntual que ya conocemos para objetos tridimensionales. Es decir, existen 32 grupos del tipo  $G_0^3$ .

Si un motivo tridimensional dispone de homogeneidad espacial solamente en una dimensión,  $s = 1$ , entonces a lo largo de ella el espacio será periódico (homogeneidad discreta), y en esta dirección la traslación  $T = k_0$  o sus múltiplos, son posibles, mientras que en las otras no.

La combinación de esta traslación con los 32 grupos de simetría puntual da como resultado 75 grupos diferentes del tipo  $G_1^3$ . Son los llamados grupos cilíndricos, o también grupos espirales, que describen la simetría de un espacio tridimensional en el cual un retículo o motivo puede repetirse periódicamente solamente en una de sus dimensiones. Estos grupos son adecuados para la descripción de objetos alargados, como cadenas, varillas, complejos moleculares poliméricos, etc., en los cuales los elementos de simetría más frecuentes son los ejes de rotación de diverso orden, ejes helicoidales, planos  $m$  y planos de deslizamiento paralelos a la dirección espacial homogénea.

Similarmente, existe un conjunto de 80 grupos  $G_2^3$  de simetría, grupos llamados foliares, que corresponden a las posibilidades de motivos tridimensionales cuando disponen de un espacio con doble periodicidad, como paredes, pisos, telas, membranas, capas cristalinas a nivel atómico y molecular como ocurre en los filosilicatos y el grafito.

Finalmente, cuando  $p=3$  y  $s=3$ , tenemos los 230 grupos espaciales  $G_3^3$  que corresponden a las redes cristalinas tridimensionales, y que fueron deducidos por Arthur Moritz Schoenflies (1853 - 1928) y por Evgraf Stepanovich Fiódorov (1853 - 1919) independientemente el uno del otro, en el comienzo de los años 90 del siglo XIX, grupos estos que son los que describen las simetrías posibles para retículos tridimensionales en el espacio discreto y homogéneo en sus tres dimensiones. De ellos nos ocuparemos más detalladamente luego de analizar los subespacios obtenidos, cuando  $p=2$  y  $p=1$ .

## 7.2 Grupos de Simetría Unidimensional $G_0^1$ y $G_1^1$

Inicialmente podemos considerar el conjunto especial consistente en un grupo de simetría  $G_0^0$ , que es la

simetría de un punto matemático adimensional, sin análogo a sí mismo en un espacio completamente heterogéneo.

Más interesante resulta considerar un espacio unidimensional no homogéneo. Entonces los grupos de simetría conforman el conjunto  $G_0^1$ , que serán los grupos cristalográficos puntuales para tal espacio, pues los elementos de traslación no son posibles. Supongamos que el motivo puntual (local) es un segmento de cierta longitud. Entonces en este espacio es posible una operación unitaria de simetría 1, que dejará el motivo indistinguible de su situación inicial, la cual consiste en cualquier rotación de  $360^\circ$  sobre el motivo. Pero además de la anterior operación, es también posible sobre este motivo realizar una inversión  $\bar{I}$  en su punto central\*. No habiendo mas operaciones de simetría posibles en este subespacio, el conjunto  $G_0^1$  consta de dos grupos puntuales (tabla 7.1).

\*Esta inversión coincide en este caso particular con una reflexión en un plano  $m$ , perpendicular al motivo longitudinal, dividiéndole en dos partes iguales.

El conjunto  $G_1^1$  también consta de dos grupos solamente. Veamos su sentido. Se trata de un subespacio unidimensional homogéneo y discreto. La discreción es precisamente la causa de la periodicidad a lo largo de su única dimensión y es la que hace que los puntos que integran la recta de ese espacio no sean todos simétricamente equivalentes entre sí. Por tanto, para cada punto A elegido arbitrariamente sobre dicha recta (figura 7.1a), se encontrará un punto simétricamente equivalente A', solamente después de avanzar una cierta distancia finita  $\vec{T} = \vec{a}$ , a lo largo de la recta. La repetición continua de esta operación, da como resultado una recta infinita y periódica de puntos, tal como se ilustra en un segmento de ella en la figura 7.1b, la cual conforma un grupo infinito de traslaciones unidimensionales. Es conveniente anotar que en esta recta infinita, además de la traslación mínima  $\vec{T} = \vec{a}$  son posibles muchas mas, las del tipo  $\vec{T}_n = n\vec{a}$ , donde n es un número entero, que pueden siempre interpretarse como productos sucesivos o

interacciones entre el equivalente unidimensional de la celda de Bravais, que es el parámetro a en este caso, y el elemento de traslación  $\vec{T}$ . Sobre los puntos simétricamente equivalentes de la recta mencionada, cabe otra operación de simetría, la de inversión en los centros de simetría C (figura 7.1c), que constituye junto con las traslaciones anteriores el conjunto  $G_1^1$ .

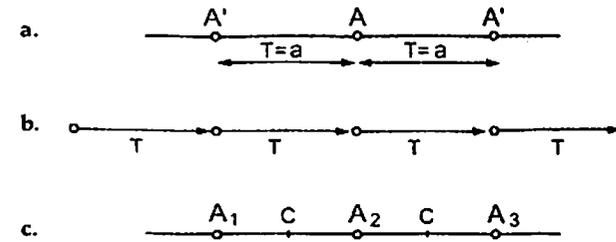


figura 7.1

### 7.3 Los Grupos de Simetría de los Bordados

Un bordado puede mirarse como un motivo plano de cierta extensión, que se repite recurrentemente a lo largo de una dimensión. Los bordados tienen mucho en común con los grupos  $G_0^1$  y  $G_1^1$  pero también diferencias. Veámoslas rápidamente:

1) La simetría puntual del motivo de un bordado será más rica que la de un punto abstracto común similar a cualquiera de los considerados en la figura 7.1, pues debe ocupar cierta área.

2) Cada motivo se repite en una dirección manteniendo la unidad nodal a lo largo de la dimensión en que se forma el bordado, cosa que limita el tipo de elementos de simetría puntual que pueden ser contenidos en el motivo.

3) Se mantiene el elemento de traslación unidimensional. El análisis de los grupos de bordados es, por lo

demás, un buen ejercicio para iniciarse en los grupos espaciales.

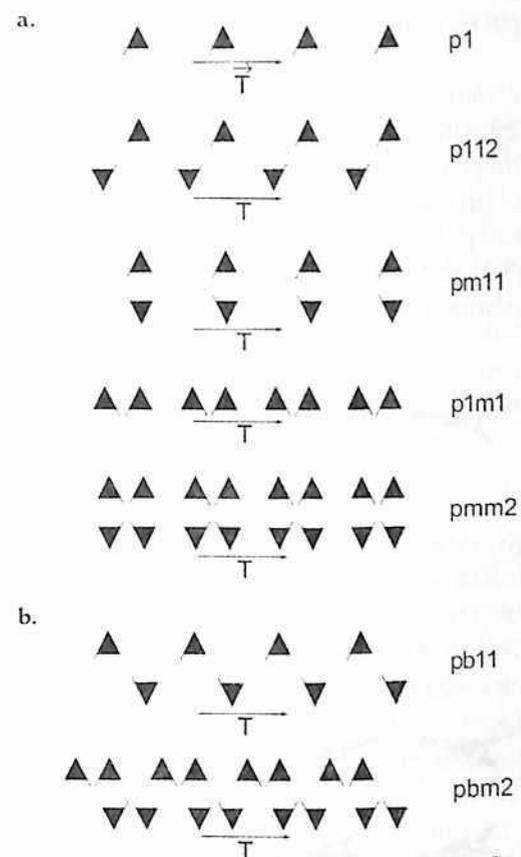
Los grupos uní y bidimensionales se llaman grupos espaciales menores y sus respectivas "celdas", equivalentes de Bravais, se representan con letras minúsculas, en contraposición a las celdas de Bravais en los grupos de simetría infinita tridimensional, que se representan con mayúsculas. Como en el espacio unidimensional no hay sino una celda equivalente de Bravais, el intervalo  $a$ , entonces todos los grupos espaciales son de simetría primitiva, y en el sistema internacional de nomenclatura (de Hermann-Mauguin), comienzan con la letra minúscula  $p$  seguida de tres índices cuyas posiciones se refieren a las direcciones espaciales de los ejes cristalográficos, así: el primer índice después de la letra  $p$  se relaciona con el eje  $X$  que debe coincidir en nuestro caso con el plano del bordado; el segundo índice se relaciona con el eje  $Y$  que coincide con la recta de las traslaciones, y el tercero, lleva información relacionada con el eje  $Z$ , siempre perpendicular al plano del bordado.

Para satisfacer las señaladas condiciones de los bordados, en la tercera posición de índices sólo podrá colocarse como elemento significativo de simetría un eje doble de rotación y en la primera y segunda posiciones, planos de simetría. Estos elementos, sin la traslación, se combinan y dan cuatro grupos puntuales:  $1$ ,  $2$ ,  $m$  y  $mm2$ . Si estos grupos puntuales se combinan con el elemento de traslación, siempre implícito en la celda de Bravais, se obtienen cinco grupos espaciales, así:

$p111$  (abreviadamente se escribe  $p1$ ), que es un grupo exclusivamente de las traslaciones de un motivo asimétrico, o sea que su simetría puntual es  $1$ .

$p112$ ,  $pm11$ ,  $p1m1$  y  $pmm2$ , son grupos cuyos elementos de simetría se clarifican en la *figura 7.2a*. Los grupos espaciales planos, como los anteriores, que

no contienen ni ejes helicoidales ni planos de deslizamiento, se llaman grupos simórficos. Pero en los bordados pueden tener lugar dos grupos asimórficos:  $pb11$  y  $pbm2$ , también ilustrados en la *figura 7.2b*, en los cuales intervienen planos de deslizamiento.



*figura 7.2*

Más estrictamente, el carácter de los grupos cristalográficos simórficos y asimórficos se establece así: si se tienen dos grupos de operaciones de simetría  $T$  y  $M$ , se puede obtener un tercer grupo  $G$ , como resultado de la multiplicación de los primeros, del cual a veces es posible sustraer un subgrupo cuyos elementos constituyen nuevas operaciones de simetría que no van a coincidir

con la de ninguno de los elementos de los grupos iniciales y que pueden existir independientemente dentro del nuevo grupo  $G$ . En cristalografía los grupos que son simplemente el producto de otros grupos, como  $TM$ , se llaman asimórficos, mientras que aquellos subgrupos no triviales e independientes que se deriven de la multiplicación de grupos iniciales, se llaman simórficos.

Ilustramos lo anterior con un bonito ejemplo (figura 7.3), tomado de Vainshtein y otros (1979, I.I). Tómese sobre un plano el grupo de traslaciones unidimensionales  $T_1$  de un motivo puntual, el gato. Este es un grupo infinito, pero puede representarse con sus elementos básicos  $T_1 = (0, t)$ , donde  $t$  es la traslación cuya repetición genera los demás elementos del grupo:  $2t, 3t, \dots$  (figura 7.3a).

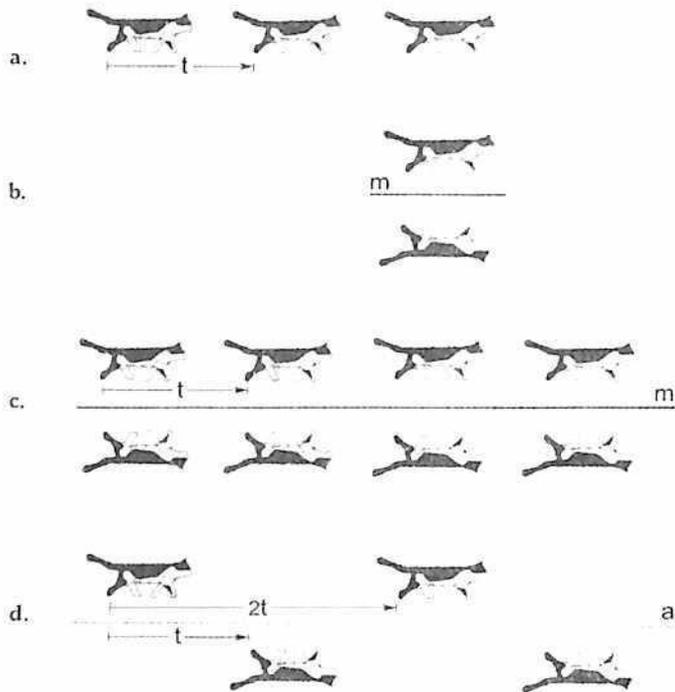


figura 7.3

Este grupo se multiplica con el grupo puntual de reflexiones  $M = (e, m)$  de la figura 7.3b, de tal manera que la línea de reflexión sea paralela con el eje de traslaciones. Entonces se obtiene:

$$G = T_1 M = (0, t, 2t, \dots) (e, m) \\ = (0e, te, 2te, \dots, 0m, tm, 2tm, \dots)$$

Este nuevo grupo  $G$ , que es simórfico, es decir, conserva todo el complejo de elementos de simetría (ejes y planos) de su respectivo grupo puntual, está representado en la figura 7.3c, pero de él se puede extraer un nuevo elemento de simetría  $a = tm$ , que corresponde a un plano de deslizamiento, también paralelo a la línea de las traslaciones (figura 7.3d). El subgrupo de todos los elementos  $tm$ , que generan planos de deslizamiento de tipo b, o ejes de tipo  $2_1$ , constituyen grupos asimórficos.

#### 7.4 Grupos Bidimensionales $G_s^2$

En el numeral 6.4 se establecieron las celdas equivalentes planas de Bravais y se indicaron los elementos de simetría, ejes y planos, perpendiculares a una red bidimensional, que condicionan el carácter de las traslaciones implícitas en tales celdas. Complementado lo anterior con un procedimiento analítico de la homogeneidad del espacio bidimensional, surgen los grupos  $G_s^2$ .

#### Grupos $G_0^2$

Un espacio plano con estructura completamente inhomogénea no permite traslaciones en ninguna dirección, ya que cada punto o motivo resulta único, y desde el punto de vista cristalográfico se podrá caracterizar exclusivamente por la simetría local (puntual) de dicho motivo. Cabe recordar una vez más, que aquí la noción de punto (motivo) cristalográfico no siempre coincide con la noción de punto matemático. Los posibles elementos de simetría y sus diversas combinaciones

contenidas en un motivo bidimensional, constituyen los grupos puntuales planos, que como se indicó en la *tabla 7.1* tienen 10 posibilidades. N. V. Belov (1891-1982), propuso la *figura 7.4*, en la que con "ganchos" y "pétalos" ilustra claramente cuáles son los elementos de simetría que componen cada uno de estos grupos, que en la nomenclatura internacional se expresan como 1, 2, 3, 4, 6, m, mm2, 3m, 4mm y 6mm.

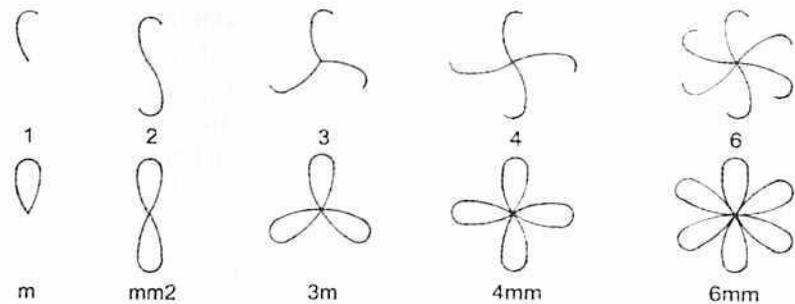


figura 7.4

### Grupos $G_1^2$

El espacio unidimensional puede interpretarse como un subespacio del plano, en donde la homogeneidad permite traslaciones solamente en una dimensión. De otro lado, la diversidad máxima de la simetría puntual de los motivos planos que se repiten mediante traslaciones colineales, no supera y no puede ser diferente de los cinco grupos anotados en el numeral 7.3, que al ser combinados con el único equivalente unidimensional de una celda de Bravais, produce los mismos siete grupos analizados en el numeral anterior, es decir, los grupos de simetría de los bordados son los mismos grupos  $G_1^2$  que figuran en la *tabla 7.1*.

### Grupos $G_2^2$

El mayor interés de los grupos bidimensionales lo suscitan los grupos  $G_2^2$ , cuya comprensión es un buen

preámbulo al estudio de los grupos tridimensionales, de los que nos ocuparemos en el siguiente capítulo. Un espacio bidimensional homogéneo y discreto ha de permitir dos traslaciones no colineales mediante las cuales un punto o un motivo plano se multiplica generando un sistema de doble periodicidad, una red plana. La red plana, en un espacio de las características anteriores, puede contener uno o varios elementos de simetría que conducen a las diversas posibilidades de agrupación  $G_2^2$ . Metodológicamente, estos grupos se obtienen como resultado de la interacción de las simetrías puntuales del motivo que se repite (*figura 7.4*), con las traslaciones implícitas en las que hemos denominado celdas planas equivalentes de Bravais (*figura 6.7*), de lo cual se obtienen 13 grupos simórficos (*figura 7.5a*). Finalmente, al sustituir algunos planos de simetría m por planos de deslizamiento, así:

- pm11  $\rightarrow$  pb11
- pmm2  $\rightarrow$  pma2  $\rightarrow$  pba2
- p4mm  $\rightarrow$  p4bm

se obtienen cuatro nuevos grupos que son asimórficos (*figura 7.5b*), para un total de 17 grupos espaciales bidimensionales. Paralelamente con la representación gráfica de estos grupos (*figura 7.5*), presentamos en la *figura 7.6* los correspondientes segmentos de sistemas de puntos equivalentes, propuesta por Buerger 1956, en los que con áreas sombreadas hemos indicado la manera de seleccionar los equivalentes planos de Bravais.

Por último señalemos que los grupos bidimensionales son de gran utilidad. Ellos permiten la descripción de la proyección sobre cualquier plano de las estructuras cristalinas y de cualquiera de sus secciones, o de las de una distribución de densidad electrónica en un objeto físico (átomos, iones), por ejemplo; también es significativa su aplicación en el arte, dibujo textil y otros.

Es indispensable aquí subrayar la paulatina subordinación de los grupos de menor a los de mayor simetría, aspecto éste generalizado en el principio de Curie.

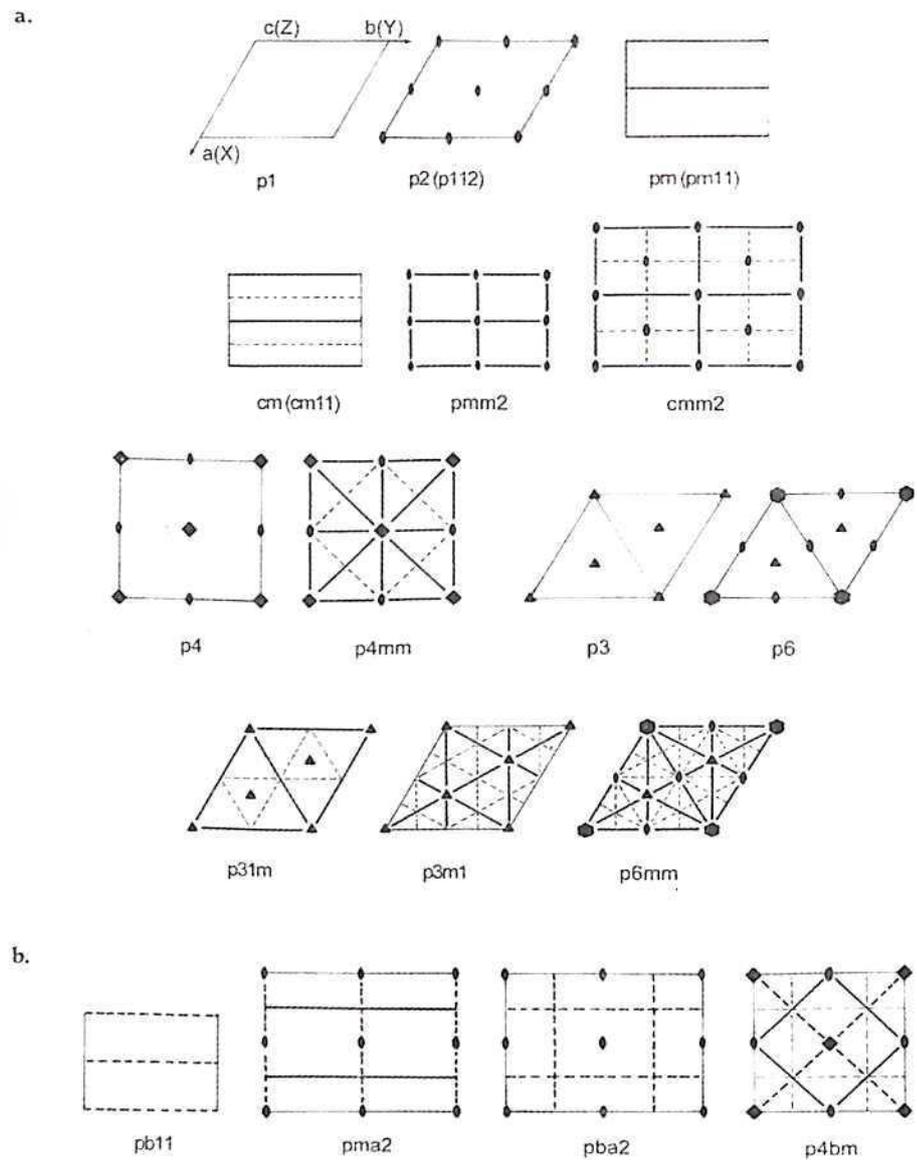


figura 7.5

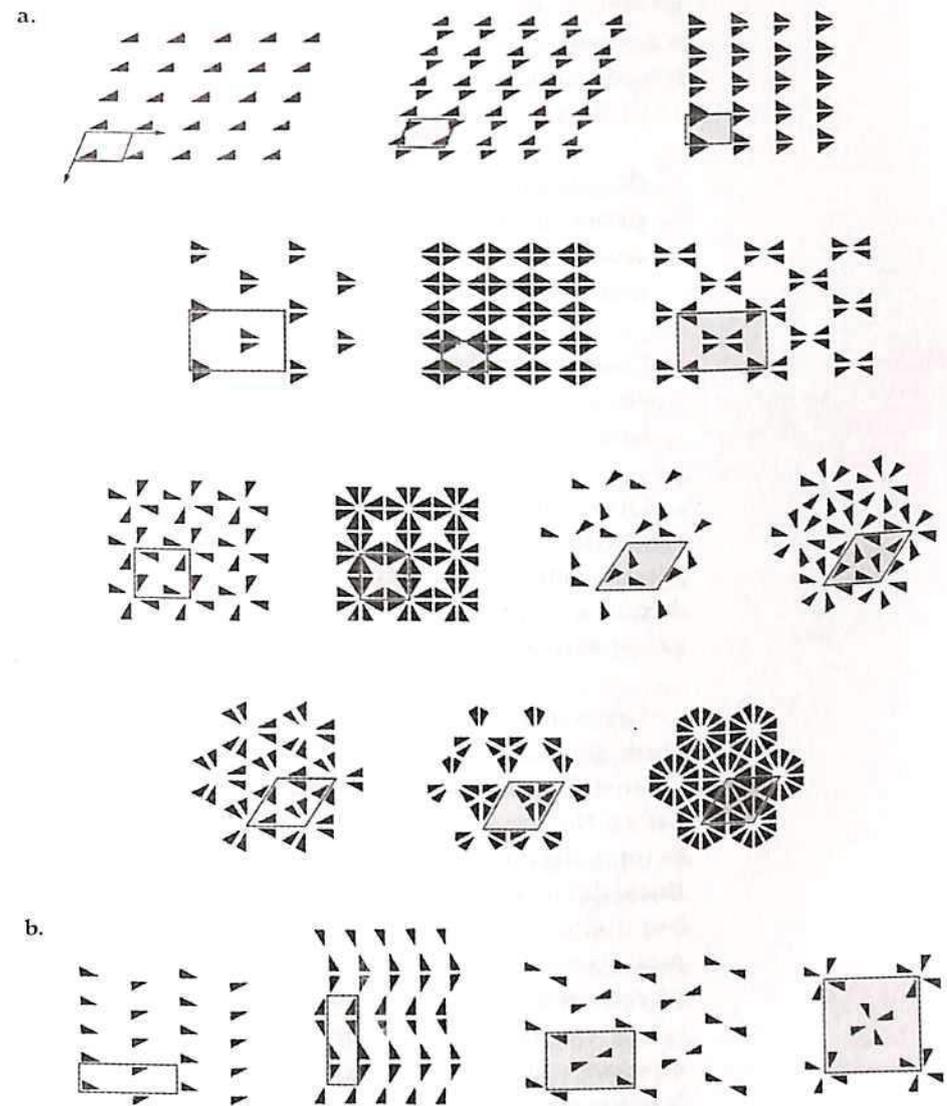


figura 7.6

### 7.5 Los Principios de Simetría de Curie

En física y muchos otros campos del conocimiento, es importante analizar la influencia de la simetría sobre las propiedades de cualquier objeto. Pero esto es apenas un aspecto del problema dialéctico de la simetría en el conocimiento teórico general. Un principio general al respecto fue formulado en 1894 por Pierre Curie (1859-1906), de la siguiente manera:

Cuando determinadas causas originan determinados efectos, entonces los elementos de simetría de dichas causas deben manifestarse en los efectos por ellas engendradas.

Cuando en cualquier fenómeno se halle determinada disimetría, entonces esta disimetría debe revelarse también en las causas que lo generan.\*

Observamos que es común diferenciar los términos *asimetría*, como la ausencia de simetría, mientras que por *disimetría* suele entenderse una perturbación, un defecto, generalmente una disminución de algún grado o clase de simetría.

Como una consecuencia del principio de Curie se puede afirmar que todos los elementos de simetría de un cristal, lo deben ser también de sus propiedades físicas. No obstante, para evitar equivocaciones a los lectores, digamos que la mayoría de las propiedades físicas de los cristales son generalizadas como observables macroscópicos y el cristal se interpreta como un medio continuo y homogéneo. En estas circunstancias no son sustanciales las diferencias entre ejes de rotación y ejes helicoidales o entre planos de simetría especular y planos de deslizamiento. Por consiguiente, la simetría de las propiedades macroscópicas de un cristal se determina no por los elementos del grupo espacial de

la simetría del cristal dado, sino por la de su correspondiente grupo de simetría puntual.

El contenido del principio de Curie, arriba interpretado, en realidad había sido formulado anteriormente, en 1885, por F. E. Neumann (1798 - 1895) y se conoce también como el principio de Neumann, citado en el libro de Vainshtein y otros, *Cristalografía Moderna* (1980, T. IV, p. 34):

El grupo de simetría de cualquier propiedad física de un cristal, debe incluir los elementos de simetría del grupo puntual del cristal.

La disimetría de la que habla Curie, puede entenderse, según lo dicho arriba, como una simetría perturbada. Tal perturbación puede ser el resultado de una acción exterior sobre el cristal (esfuerzo, deformación, variaciones termodinámicas que conlleven a cambios, de fase, etc.), que modifican su simetría puntual. De esta manera, por ejemplo, los 32 grupos puntuales del espacio cristalino tridimensional pueden derivarse como subgrupos a partir del grupo  $m\bar{3}m$  mediante la disminución paulatina (o perturbaciones sucesivas) de su simetría. Análogamente hemos constatado la mutua subordinación jerárquica de todos los grupos de la *tabla 7.1*, teniendo en cuenta nada más que la homogeneidad de las dimensiones del espacio.

Curie también demostró que existen siete grupos puntuales de simetría infinita que ilustramos con la simetría y posibilidades de rotación de los cuerpos de la *figura 7.7*. Su característica fundamental es poseer por lo menos un eje de rotación de orden infinito, así las cosas, cada uno de los 32 grupos puntuales puede en realidad interpretarse como un subgrupo de por lo menos uno de estos siete grupos de Curie. Por ejemplo, la *figura 7.7a*, ilustra el grupo simbolizado simplemente con el signo  $\infty$ , es un cono rotatorio (destrógiro o

\*Enunciados citados en el libro de Sircin y Shaskélskaya, 1979, p. 179. Traducción del autor.

levógiro), que permanece indistinguible después de cualquier rotación alrededor de su eje que coincide con el eje  $\infty$ , fuera de lo cual no posee más elementos de simetría. Todos los ejes cristalográficos 6, 4, 3, 2 y 1, permiten ser interpretados como subgrupos de este grupo infinito de Curie. En cambio, la figura 7.7e, que es un cilindro sin rotación, posee la simetría del grupo  $\infty/mmm$ , que contiene un eje no polar del orden  $\infty$ , un número infinito de planos de simetría  $m$  paralelos a tal eje, un plano especular  $m$  perpendicular al eje  $\infty$  y un número infinito de ejes de rotación de orden 2, perpendiculares al eje  $\infty$ .

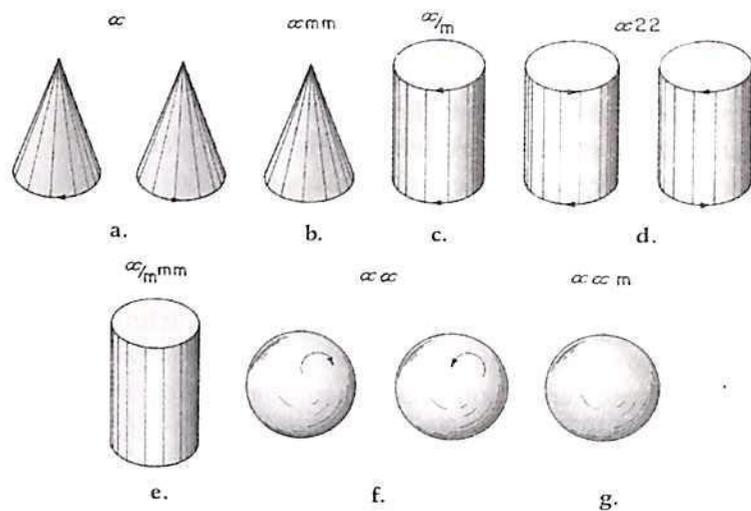


figura 7.7

Cinco grupos de Curie pueden tener lugar en medios anisotrópicos que tienen una dirección unitaria coincidente con el eje  $\infty$ . Estos grupos en la notación internacional se representan como  $\infty$ ,  $\infty mm$ ,  $\infty 22$ ,  $\infty/m$  y  $\infty/mmm$ . Convencionalmente las proyecciones estereográficas verticales y laterales de estos cinco grupos, se muestran en la figura 7.8. Los otros dos grupos  $\infty\infty$ ,  $\infty\infty m$ , describen medios isotrópicos. De los siete grupos, tres tienen centro de simetría:  $\infty/m$ ,  $\infty/mmm$ ,  $\infty\infty m$  y

algunos tienen manifestaciones enantiomórficas, como bien puede observarse en la figura 7.7.

Finalmente indiquemos un ejemplo más, ilustrativo del principio de Curie. En un medio ópticamente isotrópico e inactivo, cualquier dirección que sea inaxial, no es especial, posee la máxima simetría y se describe, según el principio de Curie, como una superposición de los elementos de simetría del medio y de un cilindro inmóvil  $\infty/mmm$  orientado según una dirección buscada. Entonces esta dirección tendrá una simetría que se determina como un subgrupo común de los dos grupos y que corresponderá a la orientación dada del medio o cristal, y la del cilindro.

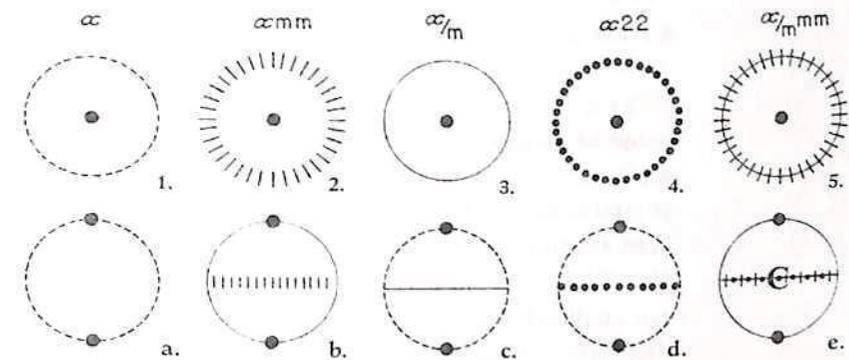


figura 7.8



## VIII GRUPOS ESPACIALES EN SISTEMAS CRISTALINOS DE BAJA SIMETRÍA

### 8.1 Observaciones Preliminares

La situación de mayor interés para la cristalografía, como se deduce de la *tabla 7.1*, corresponde al espacio discreto, tridimensional y totalmente homogéneo, en el cual todos los elementos de simetría y sus posibles combinaciones se expresan mediante los 230 grupos del tipo  $G_3$ . Los casos de los espacios unidimensional y planar analizados en el capítulo anterior, en realidad pueden interpretarse como subespacios derivados de este.

Schoenflies y otros demostraron, que efectivamente todos los grupos de simetría de un espacio tridimensional, homogéneo y discreto, los llamados grupos espaciales, reflejan una triple periodicidad que corresponde a las respectivas traslaciones paralelas a los ejes cristalográficos, o a diversas combinaciones de las mismas.

El grupo de tales traslaciones, representado usualmente como

$$T_3 = \{t_1, t_2, t_3\} = \{t_x, t_y, t_z\} = \{ma, nb, pc\} \quad (8.1)$$

genera a partir de un punto cristalográfico dado, un sistema de puntos equivalentes distribuidos tridimensional y periódicamente. Es decir, genera una red espacial tan grande como se quiera, por lo que idealmente se le toma como infinita. En la expresión (8.1)  $m$ ,  $n$  y  $p$  son constantes que pueden tomar el valor de cualquier número entero; mientras que  $a$ ,  $b$  y  $c$  representan la métrica concreta de las traslaciones elementales sobre los ejes cristalográficos: son pues los parámetros de la red, o lo que es lo mismo, las aristas del poliedro de Bravais correspondiente a cada caso.

Cuando se estudian cristales de morfología definida, podemos observar su simetría exterior o macroscópica, la cual siempre estará relacionada con alguno de los 32 grupos puntuales. Pero también es posible, gracias a las técnicas modernas de difracción de rayos X, neutrones y electrones, microanálisis y otras, conocer su simetría interior o simetría microscópica, la cual permite describir cómo están relacionados los elementos básicos (átomos, iones, moléculas, etc.), constituyentes de la estructura de los cristales en cuestión. Esta microsimetría estará relacionada con algunos de los 230 grupos espaciales, los cuales a su vez siempre tendrán una íntima correspondencia con la simetría macroscópica.

La deducción de los grupos espaciales es un proceso fundamentado en la propiedad de los grupos llamada de composición o de cierre (*ver numeral 4.2*). Pero como en cristalografía un punto o un motivo reticular puede tener cierta extensión y cierta simetría puntual, lo correcto es partir de los 32 grupos puntuales y luego hacer interactuar cada uno de estos con el o los grupos traslacionales de Bravais permitidas en cada caso, según el sistema cristalino al que pertenezca un cristal dado.

En estos últimos capítulos no pretendemos realizar una deducción exhaustiva de la totalidad de los grupos espaciales, pero sí dar la nomenclatura y criterios

indispensables en cada clase de simetría puntual y en cada sistema cristalino para poder interpretar y consultar los textos en que se hallan ampliamente desarrollados, representados y catalogados estos grupos, como en las Tablas Internacionales publicadas por The International Union of Crystallography, o para interpretar adecuadamente cualquier aplicación que se relacione con estos tipos de simetría.

Históricamente la deducción de estos grupos fue obra de varios investigadores. Leonhar Sohncke (1842-1897) en 1879 obtuvo 65 grupos espaciales solamente, mientras que hacia 1890 Evgraf Stepánovich Fiódorov (1853-1919) y en 1891 Arthur Moritz Schoenflies (1853-1928), independientemente el uno del otro, obtuvieron la solución definitiva de los 230 grupos espaciales, que a veces también se llaman grupos de Fiódorov. Actualmente, información complementaria de la que se proporciona aquí, puede consultarse en los trabajos de Buerger J., 1963; International Tables, 1969; Zagalskaya I., 1976; Vainshtein B., 1979; citados en la Bibliografía, entre otros.

## 8.2 Nomenclatura Internacional y Representación Gráfica de los Grupos Espaciales

Para la representación gráfica de los grupos espaciales el procedimiento es similar al seguido para los grupos bidimensionales. Se toma como plano de proyección la base de la respectiva celda o paralelepípedo de Bravais, que desde luego siempre puede ser un paralelogramo, el cual implica el grupo de traslaciones posibles según el tipo (P, C, I o F) de celda elemental considerada (tabla 6.1). Por esta razón la denominación de los grupos espaciales en la nomenclatura de Hermann-Mauguin, se inicia con una de las letras mayúsculas arriba señaladas y con ello se da información del grupo traslacional correspondiente. A continuación se expresa la nomenclatura del grupo de elementos de simetría puntual con el que ha de interactuar el grupo de traslaciones.

Por ejemplo, en el sistema ortorrómbico, el grupo puntual  $mmm$  al combinarse con su correspondiente celda primitiva de Bravais P, produce el grupo espacial  $Pmmm$ . Sin embargo, cada una de las letras  $m$ , que representan planos de simetría especular, pueden ser sustituidas por las letras  $a, b, c, n$  (o  $d$ , en celdas de otros sistemas cristalinos), que representan los diversos tipos de planos de deslizamiento. Así, de la combinación inicial de  $mmm$  con la celda P de Bravais, se obtienen los siguientes grupos espaciales ortorrómbicos no equivalentes entre sí:

$Pmmm$   $Pnmm$   $Pccm$   $Pbam$   $Pmma$   $Pnna$   $Pmna$   $Pcca$   
 $Pbam$   $Pccn$   $Pbcm$   $Pnmm$   $Pmmn$   $Pbcn$   $Pbca$   $Pnma$

Similarmente, los ejes de rotación de orden 2, 3, 4, ó 6, de los grupos puntuales, en las combinaciones con los diversos grupos de traslación, en principio pueden ser sustituidos por ejes helicoidales de su mismo orden. De tal manera de las 14 celdas de Bravais combinadas con los 32 grupos puntuales se obtienen los 230 grupos espaciales independientes entre sí.

Por el contrario, si se conoce cualquiera de los grupos espaciales, fácilmente se determinará el grupo puntual con el cual está relacionado. Para esto ha de suprimirse todo tipo de traslación, en primer lugar las que implican las letras mayúsculas que representan las celdas de Bravais; y luego sustituyendo los planos de deslizamiento por planos especulares de simetría  $m$ , como también los ejes helicoidales por ejes de rotación de su respectivo orden. Así, a manera de ejemplo, se evidencia que los grupos espaciales  $I4,md$  y  $P6,mc$  están relacionados con los grupos de simetría puntual  $4mm$  y  $6mm$  respectivamente.

La simbología de los grupos espaciales, tanto como la de los grupos de simetría puntual, especialmente en el sistema de notación internacional de Hermann-Mauguin,

está configurada de tal manera que siempre es posible establecer la totalidad de elementos de simetría, incluyendo las traslaciones, y además, la ubicación relativa entre tales elementos.

La representación gráfica de los grupos espaciales constituye una forma evidente de establecer la ubicación relativa de todos los elementos de simetría de un cristal y tiene gran utilidad para la solución de problemas concretos de la cristalografía, como son la determinación de distancias entre átomos, iones y moléculas; cálculo de energías de enlace entre los mismos, orden de multiplicidad de un retículo, etc.

Para representar gráficamente un grupo espacial es necesario elegir adecuadamente el origen de coordenadas o de los ejes cristalográficos. A pesar de que ello es un hecho arbitrario en un espacio discreto que consideramos infinito, pero para unificar criterios y el lenguaje entre especialistas, se hace indispensable tener algunas normas comúnmente aceptadas, fuera de las que ya hemos señalado, por ejemplo, con motivo de la *tabla 2.1*. Para cada sistema cristalino hay particularidades en la orientación de los ejes y en la selección del origen de las coordenadas (*ver numeral 5.7*), que han de utilizarse para la representación y aplicación práctica de los grupos de simetría espacial.

Por convenios internacionales, como origen de coordenadas debe tomarse el punto más simétrico. En este sentido el punto debe tener la menor cantidad posible de grados de libertad, es decir, ha de ser claramente establecido y fijado con relación a los elementos de simetría macroscópica. De aquí se desprende una cierta jerarquía de prioridades entre los elementos de simetría puntual para ser preferidos como origen de coordenadas. Si existen en el grupo centros de simetría, estos tendrán prelación sobre los ejes dobles de rotación y, estos a su vez primarán sobre los planos. Por lo anterior, con

frecuencia, luego de establecer el paralelogramo de proyección de algunos grupos espaciales y de representar sus diferentes elementos de simetría, se hace necesario su desplazamiento para ubicarlos sobre el origen más adecuado (*figura 8.13*).

### *8.3 Sistema o Conjunto de Puntos Simétricamente Equivalentes Dentro de una Celda Elemental*

Vale la pena recordar cómo la proyección gnomostereográfica de las caras de un cristal macroscópico que conforman una forma simple, dan como resultado en el círculo de proyección una serie de puntos mutuamente relacionados mediante los elementos de simetría del grupo puntual que le corresponde. En este caso es suficiente conocer la posición en la proyección de alguno de estos puntos y a partir de él será posible unívocamente, encontrar todos los demás. Pero allí es necesario tener en cuenta que tales puntos no representan nada materialmente concreto fuera de ser la proyección estereográfica de la línea normal a la respectiva cara del poliedro cristalino: sin embargo, sobre el círculo de proyección los puntos que representan las caras de una forma simple son, en ese contexto, un conjunto de posiciones simétricamente equivalentes. Entre estos ejemplos, puede haber sistemas de un solo elemento, como el que representa la proyección estereográfica de la forma simple llamada monoedro, llegando hasta el sistema de 48 puntos simétricamente equivalentes de la proyección del trigónhexaoctaedro.

En forma similar, cuando se trata de los grupos espaciales, sobre un paralelogramo de proyección, que en realidad representa la base de su correspondiente celda de Bravais, se pueden proyectar los elementos de simetría existentes en la estructura cristalina dada, y mediante la acción de estos obtener las reproducciones que un punto, según su posición, puede lograr dentro de los límites del volumen de la celda elemental de Bravais.

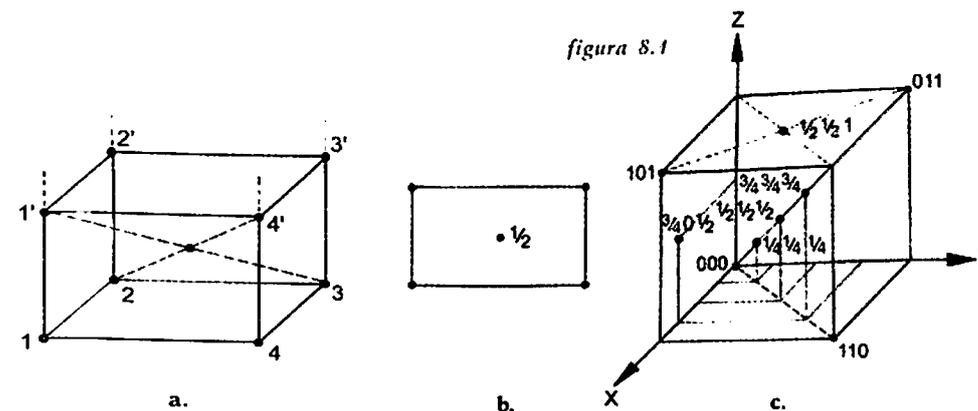
En los grupos espaciales estos puntos sí pueden representar las posiciones que ocupan elementos constitutivos de la estructura, idénticos tanto geoméricamente como por sus propiedades físicas, por ejemplo, átomos, iones o moléculas. El número de posiciones simétricamente equivalentes en un sistema espacial en principio es ilimitado, pero en los límites de una celda elemental puede ir desde uno hasta valores muy superiores a 48.

Las posiciones o puntos también se clasifican en comunes y particulares. Las posiciones comunes son asimétricas, es decir, no se ubican sobre ningún elemento de simetría puntual, mientras que los particulares sí lo hacen. Sin embargo, los puntos ubicados sobre elementos de microsimetría no se consideran de posición particular sino común. Por lo demás, los elementos de microsimetría no impiden la ubicación sobre ellos de retículos o partículas con cualquier tipo de simetría puntual. Los sistemas de posiciones comunes simétricamente equivalentes, en un grupo espacial dado, contienen un mayor número de ellas en comparación con el número de posiciones particulares de un sistema de ellas para el mismo grupo espacial. El orden de un grupo espacial es igual al número de posiciones comunes que conforman el correspondiente sistema de ellas dentro del volumen de una celda elemental. La concepción de los sistemas de posiciones es de gran utilidad, pues generalmente entre el orden de estos y las fórmulas de composición de la sustancia cristalina suele haber una relación de multiplicidad expresada en números enteros.

En cada sistema de puntos simétricamente equivalentes es importante el número de grados de libertad. Si el sistema no posee grados de libertad se llama invariante y la posición de cada punto se encuentra severamente fijada por los elementos de macrosimetría. Tal es el caso del punto especial de reflexión en los ejes de inversión.

Un sistema de puntos que tienen uno, dos o tres grados de libertad se llama respectivamente, monovariante, divariante o trivariante. El caso más frecuente en los cristales reales es el de los sistemas de puntos equivalentes trivariantes.

La posición de cada punto de un sistema se expresa en fracciones racionales de los parámetros de la celda elemental, a lo largo de su respectivo eje cristalográfico. Por este motivo en las representaciones gráficas, los puntos de un sistema dado pueden ir acompañadas de una fracción numérica (figura 8.1), lo que significa que ese punto se encuentra sobre o bajo el plano de la proyección, según sea el signo + ó -, a una distancia igual a la indicada pero medida en fracciones del parámetro elemental  $c_0$ . Por ejemplo, el retículo central de una celda elemental ortorrómbica del tipo I, mostrada en la figura 8.1a, tendrá a su lado la cifra 1/2, en tanto que la proyección de los motivos reticulares de los vértices de la celda no requieren anotación especial, ya que los motivos dispuestos en los vértices del rectángulo de proyección (figura 8.1b) corresponden perfectamente con los retículos indicados con las cifras 1, 2, 3 y 4 en la figura 8.1a; o con los marcados con 1', 2', 3' y 4' ya que estos se pueden tomar como ubicados en la base de la celda elemental superpuesta sobre la celda dibujada en la misma figura 8.1a. En la figura 8.1c, se observan algunos puntos con

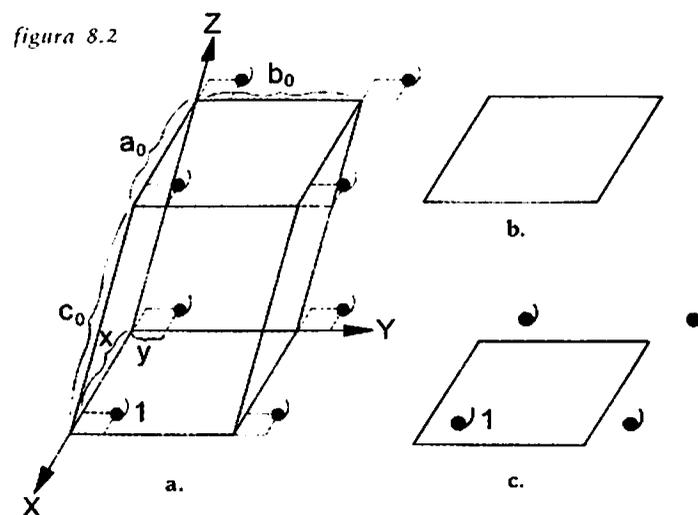


sus correspondientes coordenadas expresadas en fracciones de los parámetros de la celda elemental.

#### 8.4 Grupos Espaciales del Sistema Triclínico

Dado el bajísimo grado de simetría del sistema triclínico, él solamente tiene dos grupos puntuales ( $1$  y  $\bar{1}$ ), las traslaciones permitidas están representadas únicamente por el grupo primitivo de Bravais. Las posibilidades de interacción del grupo traslacional  $P$ , con cada uno de los grupos puntuales triclínicos, da como resultado un grupo espacial respectivamente.

En la nomenclatura internacional de Hermann-Mauguin son suficientes dos posiciones para representar cada uno de estos grupos así:  $P1$  para el grupo espacial derivado del grupo puntual  $1$ , y  $P\bar{1}$  para el grupo puntual pinacoidal. Esto, no obstante que como regla general en la nomenclatura internacional se utilizan cuatro posiciones: la primera que indica siempre el tipo de celda traslacional de Bravais y las otras tres que guardan alguna relación de los elementos de simetría con los ejes cristalográficos  $X$ ,  $Y$  y  $Z$ . En su oportunidad puntualizaremos mas detalladamente sobre este aspecto.



La figura 8.2a muestra la posición de una celda triclínica primitiva orientada con relación a los ejes cristalográficos  $X$ ,  $Y$  y  $Z$ . El motivo reticular con la forma de una comilla negra, señalado con el número 1, está situado en la posición correspondiente a las coordenadas  $(x, y, 0)$  y genera, mediante traslaciones del tipo (6.1) implícitas en el grupo primitivo de Bravais, una red tridimensional infinita de motivos idénticos al original. En la figura 8.2b, que representa la huella perimétrica de la base de la celda (un paralelogramo en el plano  $XY$ ), se ha proyectado la totalidad de elementos de simetría del grupo  $P1$ , que no son otros que las líneas continuas y suaves que representan las traslaciones paralelas a los ejes cristalográficos, en distancias mínimas iguales a sus correspondientes parámetros  $a_0$ ,  $b_0$ , o  $c_0$ . La representación gráfica de los elementos de simetría del mencionado grupo, en este caso coincide con la huella perimétrica. En la figura 8.2c, sobre la huella del plano de proyección se ilustra cómo a partir del motivo distinguido con el número 1 se genera, en este caso, únicamente mediante las operaciones de traslación propias del grupo, un sistema de puntos o posiciones simétricamente equivalentes. Obsérvese que para el caso dado el sistema de puntos equivalentes dentro de la celda elemental consta de una sola unidad. No es difícil concluir que a partir de la representación gráfica de la figura 8.2c siempre es posible reconstruir unívocamente la figura 8.2a. Por último señalemos que en principio se puede tomar como base de proyección cualquiera de las caras de la celda elemental que yacen sobre los planos  $XZ$  o  $YZ$ . Para el caso que acabamos de analizar estas otras posibilidades resultan similares a la primera, con la diferencia de que las dimensiones del paralelogramo serán distintas en cada caso. Para muchos otros grupos espaciales las diferencias pueden ser mas significativas. No obstante, por las convenciones establecidas en cuanto a la manera de orientar los cristales y sus ejes, en las referencias bibliográficas siempre se supone una disposición de ejes y proyecciones

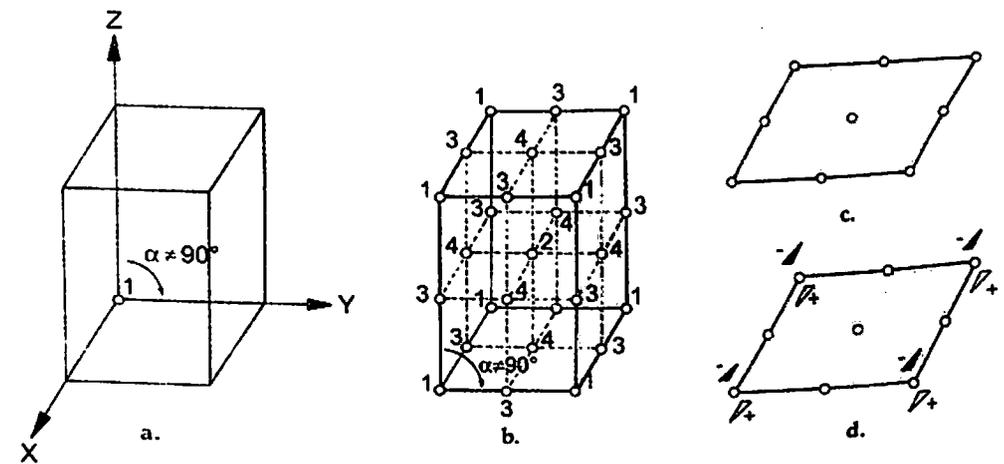
como la de la *figura 8.2*, a menos que se especifique otra circunstancia.

Al efectuar un tratamiento similar con el grupo espacial  $P\bar{1}$ , su contenido resulta mas interesante. Esto es lo que se muestra en la *figura 8.3*: en la parte a. la orientación de la celda primitiva con origen de coordenadas en uno de sus puntos "más simétricos" que es un centro de simetría. El efecto de la interacción de las traslaciones con el centro de simetría del origen de las coordenadas señalado con el número 1 (ver el numeral 6.5), hace que éste se reproduzca dentro de los límites de la celda elemental como lo muestra la *figura 8.3b*. En total 8 centros de simetría que se pueden contabilizar así:  $8/8=1$ , correspondientes a los vértices de la celda y marcados en la *figura 8.3b* con el número 1; uno del centro de la celda, marcado con el número 2;  $12/4=3$ , marcados con un 3 y que corresponden a los centros de las aristas de la celda, y,  $6/2=3$  de los centros de las caras, distinguidos con un 4. La parte c de la figura es la representación gráfica del grupo espacial  $P1$ , y finalmente en la *figura 8.3d* sobre la representación gráfica del grupo, se muestra la generación de un sistema de posiciones comunes simétricamente equivalentes. Dentro de los límites de una celda elemental este sistema consta de dos posiciones, es decir, el orden de este grupo es dos. Esto puede comprobarse operando con los elementos de simetría mostrados con toda evidencia en la *figura 8.3b*.

Para mayor comprensión de la representación indicada en la *figura 8.3d*, debemos agregar que, si por ejemplo, el triángulo blanco positivo estuviera ligeramente por encima del plano del paralelogramo de proyección, entonces el triángulo negro negativo que hemos dibujado dentro de aquel, estaría ligeramente por debajo del citado plano, es decir, por fuera de la celda elemental. En cambio el motivo + al reflejarse en el centro de simetría ubicado en el centro de la celda, se reproducirá

negativamente, ligeramente por debajo de la base superior de dicha celda, es decir, dentro del volumen de esta misma. En realidad es esta posición exactamente a la que corresponde el triángulo negro negativo dibujado dentro del paralelogramo en la *figura 8.3d*. Los dos grupos espaciales triclínicos resultan simórficos, pues no contienen elementos de microsimetría con desplazamientos como planos de deslizamiento y ejes helicoidales.

figura 8.3



### 8.5 Grupos Espaciales del Sistema Monoclínico

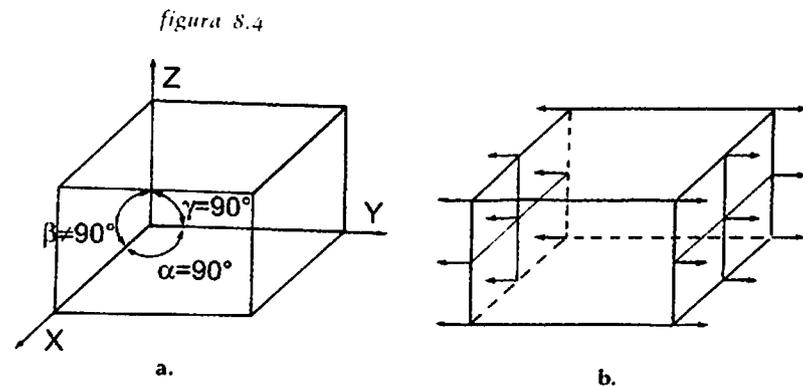
En este sistema cristalino el ángulo  $\beta$  difiere de  $90^\circ$ , por lo que se ha convenido preferencialmente orientar el cristal (ver numeral 5.7) y sus celdas elementales de tal manera que la proyección de sus grupos espaciales resulte sobre sus caras rectangulares (planos 100 ó 001), mientras que si se proyecta el grupo sobre el plano 010, en la celda éste resultará ser un paralelogramo.

La aplicación de las diversas opciones de combinación de las celdas bravaisianas con los grupos puntuales pertenecientes a este sistema produce un total de 13 grupos espaciales independientes. Para la designación abreviada de estos grupos en la nomenclatura internacional,

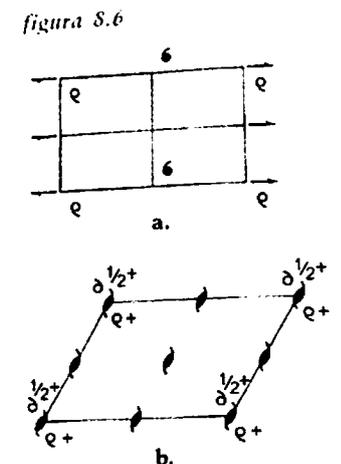
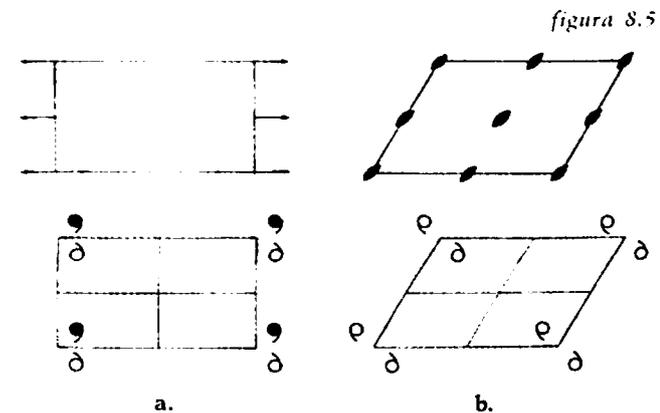
también son suficientes dos posiciones: la primera para el grupo de traslación y la segunda para el grupo puntual o sus derivaciones. Sin embargo, algunas veces pueden utilizarse las cuatro posiciones, aunque en este sistema no es mucha la nueva información que ellas puedan contener. Por ejemplo, en la *figura 8.5a*, que representa la proyección sobre el plano 001, en notación completa se expresará como P121, en tanto que la *figura 8.5b*, que representa la proyección sobre el plano 010 de la celda, se expresa como P112. No obstante lo anterior, las dos representaciones en la notación monoclinica abreviada se engloban como el grupo P2.

### Grupos derivados del grupo puntual 2

Este grupo puntual multiplicado por el grupo traslacional primitivo, da como resultado el grupo simórfico P2, representado tridimensionalmente en la *figura 8.4b*. Ciertamente el origen de coordenadas debe tomarse sobre un punto del único elemento de simetría puntual, el eje doble de rotación 2, como se indica en las *figuras 8.4a* y *8.4b*. Este eje de rotación se orienta de tal manera que coincida paralelamente con el eje cristalográfico Y. Así, las traslaciones paralelas a los ejes X y Z producen sobre el eje 2 efectos de degeneración (reproducción múltiple) como se analizó en el numeral 5.6 y como se muestra en la *figura 8.4b*.



La representación gráfica de los elementos de simetría de este grupo espacial puede hacerse proyectando sus elementos de simetría sobre el plano XY de la celda (*figura 8.5a*), o sobre el paralelogramo del plano XZ (*figura 8.5b*). Estas dos proyecciones en la *figura 8.5* están acompañadas en la parte inferior, de sus respectivos sistemas de posiciones simétricamente equivalentes, cuyo máximo orden es también 2. Para mejor comprensión, las posiciones equivalentes se han representado por motivos asimétricos planos de doble faz, los cuales al girar 180° alrededor de un eje paralelo al plano del dibujo y coincidente con él, cambiarán de faz, pero si la rotación se hace alrededor de un eje perpendicular al plano del dibujo, entonces el motivo no cambiará de faz.



Con el grupo traslacional primitivo del sistema monoclinico es posible también la interacción de un eje helicoidal igualmente de orden 2. Así se obtiene el nuevo grupo espacial P2<sub>1</sub>. Su construcción es similar a la del grupo P2. Su representación en la *figura 8.6a* corresponde a una proyección sobre el plano 001 y la *figura 8.6b* para la proyección sobre el plano 010. En aras de la brevedad, sobre las mismas proyecciones se han dibujado los motivos que representan los correspondientes sistemas de posiciones comunes simétricamente equivalentes.

El grupo puntual 2 con el paralelepípedo bravasiano de bases centradas C produce el grupo espacial C2, cuya distribución tridimensional de los elementos de simetría se muestra la figura 8.7a. El grupo C, además de las traslaciones propias de un grupo primitivo, conlleva una mas en la dirección de la diagonal del plano 001 de la celda, exactamente con una magnitud de desplazamiento igual a la mitad de dicha diagonal:

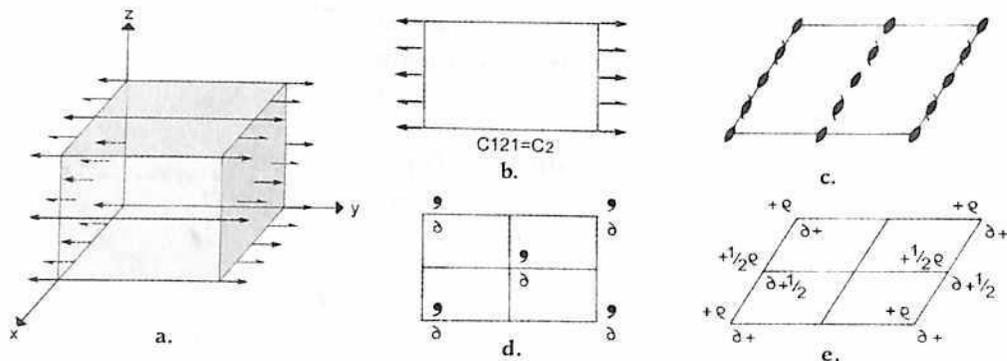
$$Td = \frac{1}{2}X + \frac{1}{2}Y \quad (8.2)$$

En el caso de tomar las traslaciones iguales a

$$Td = \frac{1}{2}Y + \frac{1}{2}Z \quad \text{ó} \quad Td = \frac{1}{2}X + \frac{1}{2}Z \quad (8.3)$$

los grupos resultantes se denominarán A2 o B2 respectivamente (ver el numeral 6.3). Para explicar la construcción del grupo C2, partimos de una celda como la de la figura 8.4a, a la que le agregamos la traslación (8.2). El origen de coordenadas lo hemos tomado también en un punto sobre el eje 2 de rotación, paralelo y coincidente con el eje cristalográfico Y. Los efectos de las traslaciones completas a lo largo de X y Z reproducen un sistema de ejes de rotación como el de la figura 8.4b, pero a estos deben agregarse los efectos de la traslación (8.2) sobre el eje inicial de rotación doble. Esta traslación es precisamente la causante de la aparición de los ejes

figura 8.7

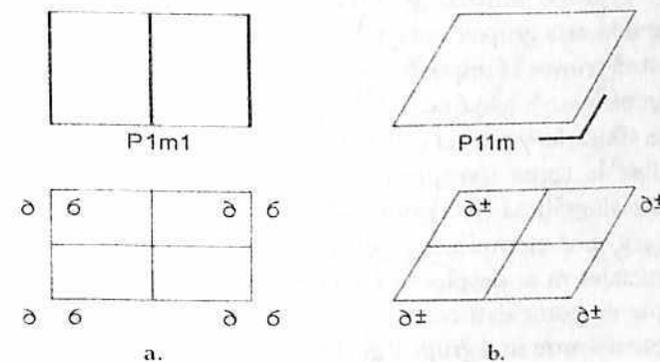


helicoidales 2<sub>1</sub>, también paralelos al eje Y e intercalados con los ejes de rotación 2 (figura 8.7a). La figura 8.7b contiene la proyección de estos ejes sobre el plano XY (001), y en la figura 8.7c, la proyección de los mismos ejes sobre el plano XZ. Debajo de cada una de ellas hemos representado sus respectivos sistemas de puntos simétricamente equivalentes.

### Grupos espaciales derivados de los grupos puntuales m y $\frac{2}{m}$

De la multiplicación del grupo puntual m con los grupos traslaciones P y C se derivan cuatro grupos espaciales: Pm, Pc, Cm y Cc. El primero de ellos se ilustra en la figura 8.8 siguiendo la metodología ya expuesta para las proyecciones en los planos XY y XZ, con sus correspondientes sistemas de puntos simétricamente equivalentes. El plano m ocupa en la notación completa o bien la segunda posición o bien la tercera, para simbolizar el hecho de ser perpendicular al eje cristalográfico Y o Z respectivamente. Pero si estas posiciones están ocupadas por cifras correspondientes a ejes, entonces estos serán paralelos a los ejes cristalográficos X o Z respectivamente. De otra parte, en ambos casos los sistemas de puntos equivalentes simétricamente, tienen como máximo orden para posiciones comunes 2, como era de esperarse.

figura 8.8



La figura 8.9 contiene la representación gráfica de los demás grupos espaciales derivados del grupo puntual  $m$  en proyección sobre el plano 001, y sobre los mismos se muestra la propagación de un motivo reticular de posición común en términos del volumen de una celda elemental (ver la simbolización y representación de planos en la figura 6.28).

Si en las representaciones de la figura 8.9 se suprimen los círculos que simbolizan el motivo que se repite, queda la representación gráfica simple de cada grupo espacial. Obsérvese también cómo las traslaciones correspondientes a la base centrada generan planos de deslizamiento de tipo a, que se intercalan con los planos  $m$  (figura 8.9a), y de tipo n alternados con los planos  $c$  que han sustituido los planos  $m$  del grupo puntual original para formar el grupo espacial  $Cc$  (figura 8.9c).

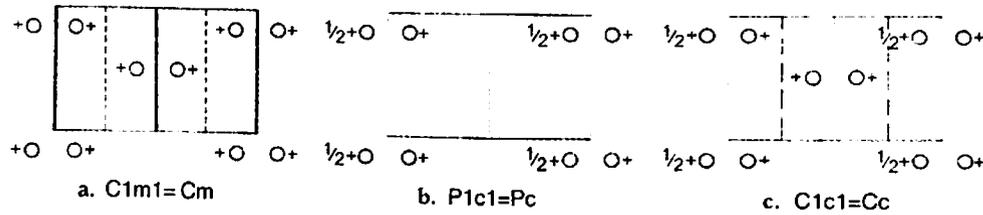


figura 8.9

El grupo puntual  $\frac{2}{m}$  con las traslaciones permitidas genera seis grupos espaciales (figura 9.10). Respecto a estos grupos es importante subrayar algunos aspectos. En primero lugar, que todos estos grupos tienen centro de simetría, y por ser este el punto más simétrico sobre ellos se toma siempre el origen de las coordenadas cristalográficas. Esta prioridad en la selección del origen, hace, por ejemplo, que en el grupo  $P\frac{2}{m}$  los planos iniciales  $m$  se desplacen hacia el interior de la celda y que no coincidan con las caras virtuales de ésta, cosa que sí ocurre en el grupo  $P\frac{2}{m}$ . En las figuras 8.10g,h se han

hecho dos proyecciones complementarias para los grupos  $C\frac{2}{m} \vee C\frac{2}{c}$  sobre el plano 010, las cuales seguramente son de utilidad en esta etapa de familiarización con los grupos espaciales y su interpretación.

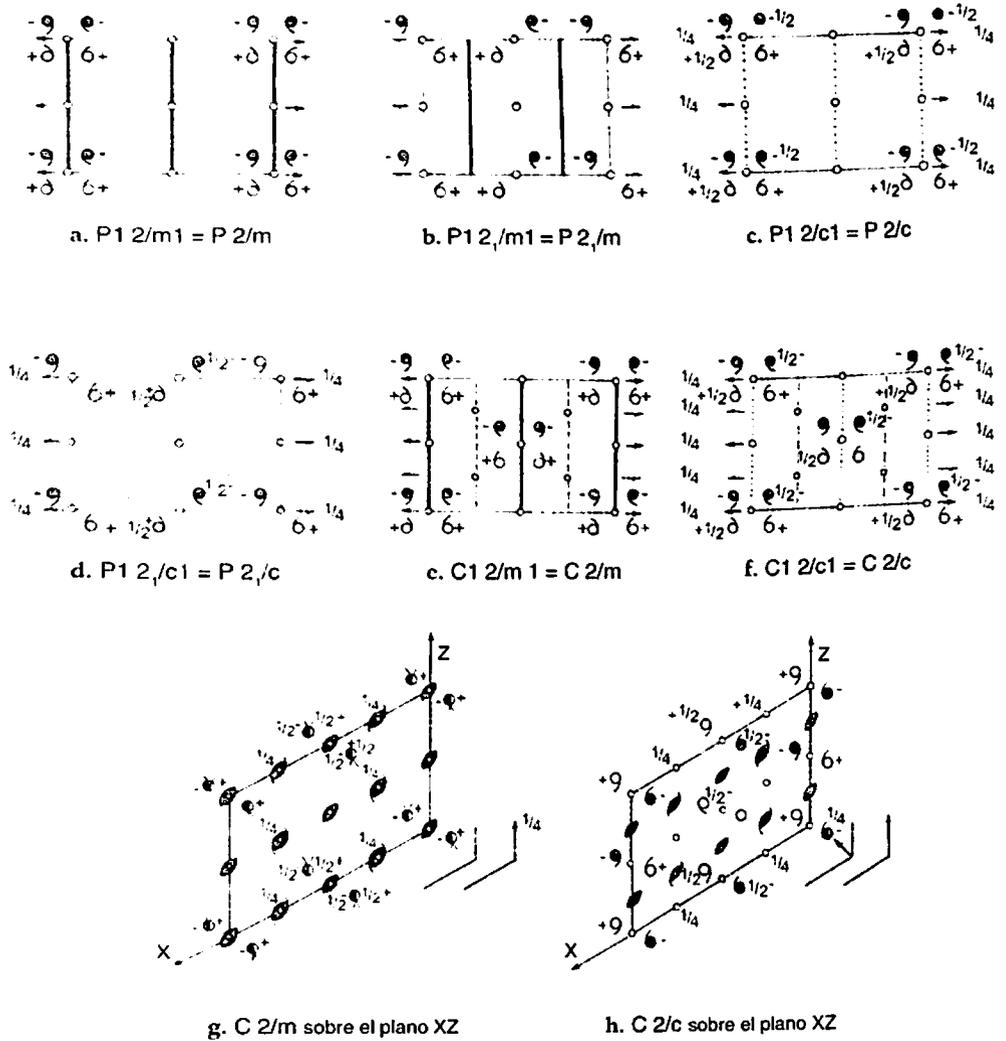


figura 8.10

### 8.6 Grupos Espaciales del Sistema Ortorrómico

Se compone este conjunto de 59 grupos espaciales, producto de la combinación de cada uno de los tres grupos puntuales  $mm2$ ,  $222$  y  $mmm$ , con los cuatro tipos de grupos traslacionales existentes en el sistema. La notación, en la nomenclatura internacional de estos grupos espaciales, requiere la utilización de las cuatro posiciones, relacionadas con el sistema de ejes cristalográficos a la manera anteriormente indicada. No teniendo como objetivo la presentación de la totalidad de los grupos espaciales, en lo sucesivo nos limitaremos a mostrar algunos ejemplos de los que consideremos más significativos.

#### Grupos espaciales derivados del grupo $mm2$

El grupo puntual  $mm2$  con la celda P en definitiva produce el grupo  $Pmm2$  y otros tres más (tabla 9.2), pues aunque de las sustituciones de los elementos de simetría puntual por sus correspondientes elementos de microsimetría (ejes helicoidales y planos de deslizamiento), resulta una mayor cantidad de grupos, en realidad varios de ellos son equivalentes entre sí y esto debe interpretarse como si a la celda elemental inicial con sus elementos de simetría, se le diera una nueva orientación con respecto a los ejes cristalográficos, cosa que en el sistema ortorrómico consistiría en una rotación de  $90^\circ$ , tal como se indica en la figura 8.11. Por ejemplo, de la sustitución de un plano m, por planos de deslizamiento se obtiene:

$$\begin{aligned} Pmm2 \rightarrow Pmc... &= Pcm... \\ Pma... &= Pbm... \\ Pmn... &= Pnm... \end{aligned}$$

La sustitución de los dos planos m por planos de deslizamiento en el mismo grupo, también genera grupos espaciales mutuamente equivalentes, de los cuales en

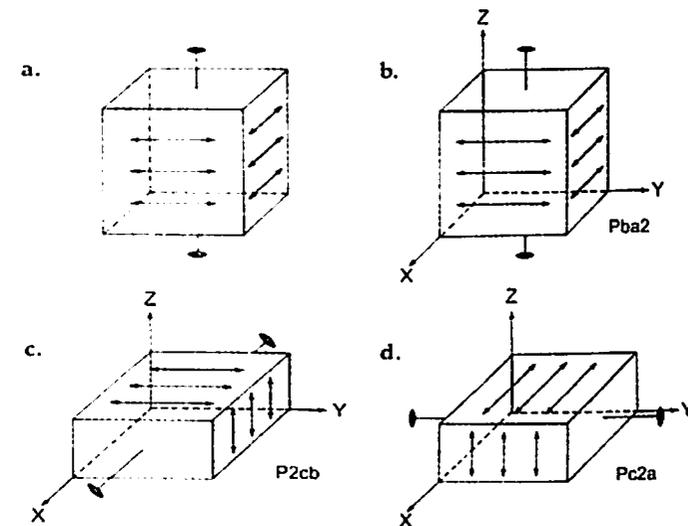


figura 8.11

fin de cuentas, como grupos independientes solamente resultan tres grupos espaciales con planos de deslizamiento iguales

$$\begin{aligned} Pmm2 \rightarrow Pcc &= Pc_1c_2 = pc_2c_1 \\ &Pba... \\ &Pnm... \end{aligned}$$

y tres con planos de deslizamiento diferentes

$$\begin{aligned} Pca &= Pbc... \\ Pnc &= Pcn... \\ Pna &= Pbn... \end{aligned}$$

para un total de diez grupos resultantes de la interacción de  $mm2$  con el grupo primitivo de Bravais. El primero  $Pmm2$ , que no contiene sino elementos de simetría puntual en las tres últimas posiciones de su nomenclatura, es simórfico, los otros nueve no lo son.

### Construcción gráfica del grupo Pmm2

La figura 8.12a representa los ejes cristalográficos, para el caso, ortogonales. Con respecto a ellos se deben orientar los elementos de simetría puntual para luego proyectarlos sobre el plano XY (001).

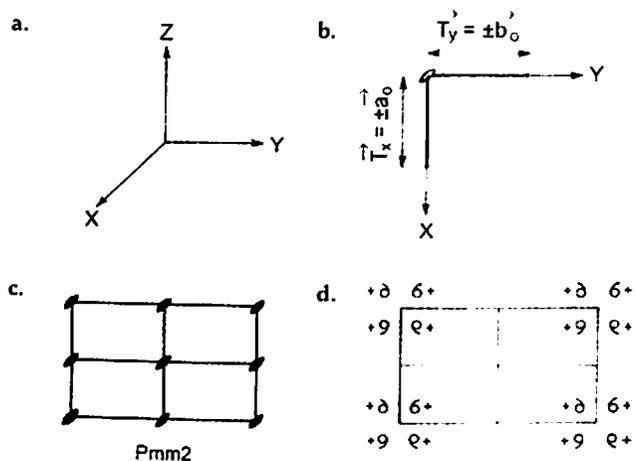


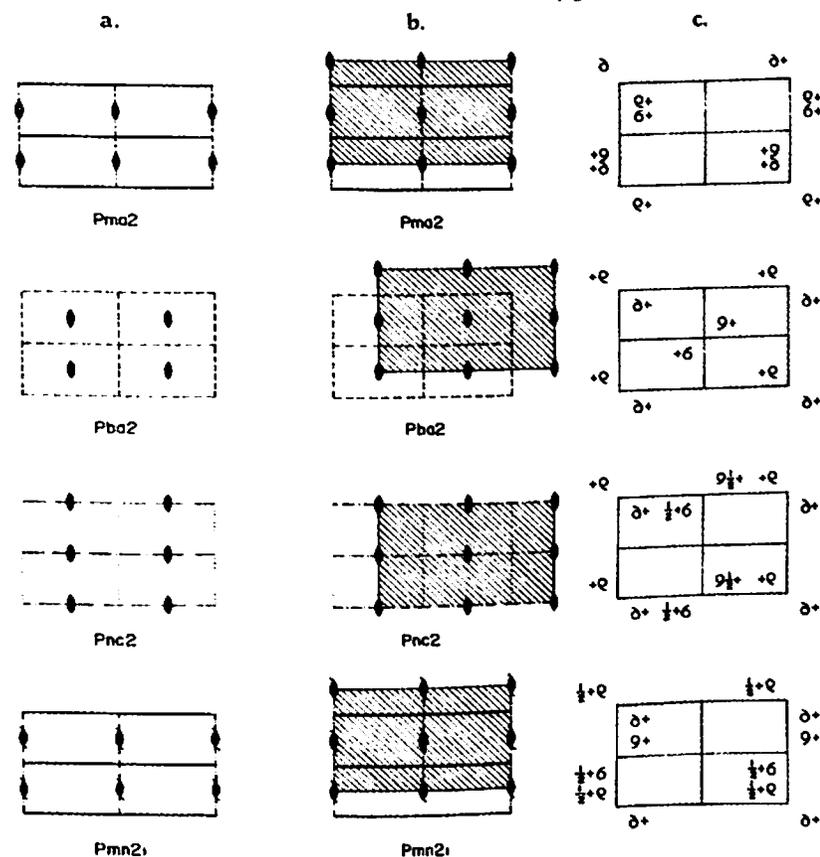
figura 8.12

El primer plano m, es decir el representado por la segunda posición de la nomenclatura del grupo espacial en cuestión, debe ser paralelo al plano ZY, pues debe cortar perpendicularmente el eje X. Este plano se proyecta en la figura 8.12b con un segmento de línea gruesa de dimensión igual a  $b_0$  sobre el eje Y. Análogamente se proyecta sobre el eje X otro segmento de línea gruesa de dimensión longitudinal igual al parámetro  $a_0$  de la celda elemental, el cual representa el segundo plano m, el de la tercera posición en Pmm2, que es un plano paralelo y coincidente con el plano XZ. Como resultado de la intersección de estos dos planos ortogonales, en el origen de las coordenadas se establece un eje 2 de rotación que coincide con el eje Z (figura 8.12b). Ahora, sobre estos elementos de simetría deben actuar todas las traslaciones implicadas en el grupo P. De todas ellas las que producen

efectos significativos de reproducción de los elementos de simetría, dentro de los límites de una celda elemental, son las traslaciones paralelas a los ejes X y Y, cuyo resultado se muestra en la figura 8.12c, que es la representación completa del grupo Pmm2. En la figura 8.12d se presenta la disposición del correspondiente sistema de posiciones comunes simétricamente equivalentes, cuyo orden es cuatro.

Por procedimientos similares al que acabamos de enunciar, se construyen los demás grupos, algunos de los cuales presentamos en la figura 8.13a. Para el grupo Pmm2 el origen de coordenadas coincide con un punto

figura 8.13



tomado sobre un eje 2 de rotación simple, que para ese caso resulta ser el elemento más aconsejable (porque un punto sobre un eje solamente tiene un grado de libertad, mientras que el punto que se toma sobre un plano, tendrá dos), cuando no existen centros de simetría. Cuando esto no ocurre, como en los grupos representados en la figura 8.13a, el origen debe desplazarse tal como la indican las partes sombreadas en la figuras 8.13b, que son correspondientemente las representaciones correctas de estos grupos. A la derecha de la figura se presentan los respectivos sistemas de puntos comunes simétricamente equivalentes.

Con las celdas de bases centradas el mismo grupo mm2 produce siete grupos espaciales (tabla 9.2) que no serán de difícil interpretación si se toman en cuenta las traslaciones complementarias del tipo (8.3):

$$T_c = \frac{1}{2}T_a + \frac{1}{2}T_b = t_a \times t_b \quad (8.4)$$

$$T_a = \frac{1}{2}T_b + \frac{1}{2}T_c = t_b \times t_c \quad (8.5)$$

Cada una de las anteriores traslaciones debe interpretarse como el producto o la acción simultánea de dos traslaciones mutuamente perpendiculares sobre los elementos de simetría de algún grupo puntual inicial. Así el primer plano m, que es perpendicular al eje X, bajo el influjo de la traslación  $t_b$  que es paralela a él, genera un nuevo plano, de deslizamiento, paralelo a la dirección del desplazamiento, es decir un plano de tipo b. Este nuevo plano, como efecto de la acción de  $t_a$  que es perpendicular a él, será desplazado en una cuarta parte del parámetro  $a_0$ . Cosa igual es la que ocurre con el segundo plano m. La intersección normal de dos planos de deslizamiento del mismo tipo como b y a, n y n, produce ejes dobles de rotación simple, resultantes de la intersección entre sí de los planos m (grupo Cmm2). La intersección normal de un plano c con un plano m, produce un eje también de segundo orden pero helicoidal,

el cual se alterna con el eje 2 del corte mutuo entre los planos mm (ver el grupo Amm2 en la figura 8.14). Esta construcción hace que haya plena equivalencia entre algunos grupos espaciales, y esta puede expresarse así:

$$Cmm2 = Cma2 = Cba2$$

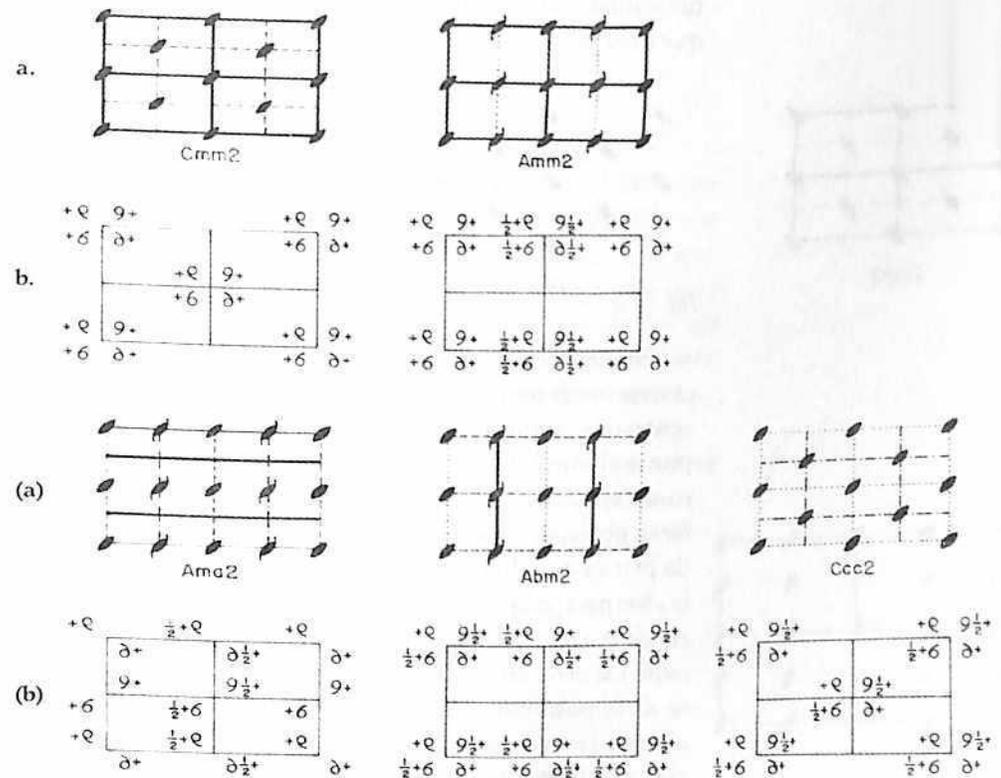
Se encuentran otras equivalencias similares a la anterior, cuando se sustituyen en el grupo inicial planos m por planos de deslizamiento:

$$Ccc2 = Cnc2 = Cnn2$$

$$Cmc2_1 = Cmn2_1 = Cca2_1 = Cna2_1$$

$$Ama2 = Bbm2, \text{ pero en cambio puede comprobarse que } Ama2 \neq Abm2$$

figura 8.14



La figura 8.14 representa varios grupos de los arriba considerados. Al observar dicha representación se evidencian claramente equivalencias como las siguientes:

$$\begin{aligned} \text{Abm2} &= \text{Abc2} = \text{Abc2}_1 \\ \text{Ccc2} &= \text{Cnc2} = \text{Ccn2} = \text{Cnn2}, \text{ etc.} \end{aligned}$$

La celda elemental de cuerpo centrado I, tiene sus particularidades derivadas de la traslación dirigida a lo largo de su gran diagonal (figura 8.1c), traslación ésta que se expresa así:

$$T_1 = \frac{1}{2}T_a + \frac{1}{2}T_b + \frac{1}{2}T_c = t_a \times t_b \times t_c \quad (8.6)$$

La acción de  $t_a \times t_b$  ya fue analizada y gracias a ella se obtienen nuevos planos y ejes. Análogamente de la combinación total de mm2 con I, se obtienen los tres grupos que ilustra la figura 8.15

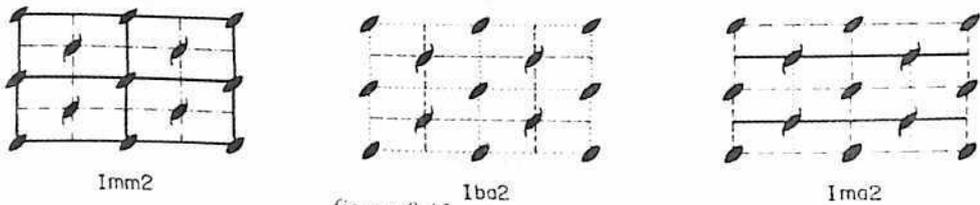


figura 8.15

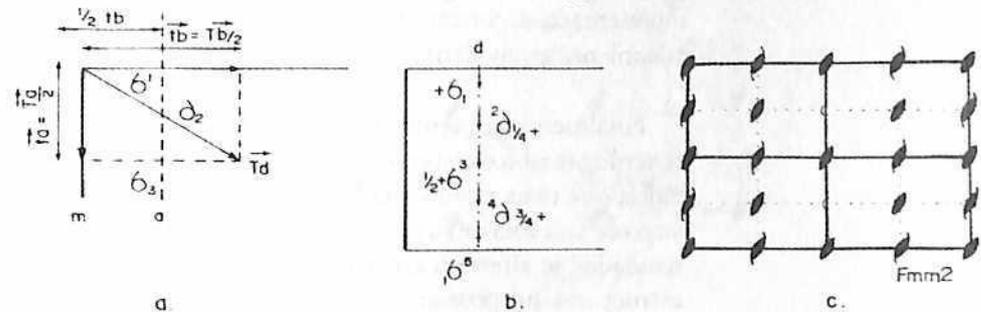
Finalmente, veamos el efecto del grupo F de traslaciones, representado por una celda elemental de caras centradas, sobre los elementos de simetría del grupo puntual mm2. En primer lugar se debe subrayar que es característica de todos los grupos espaciales ortorrómicos obtenidos con el grupo F de Bravais, la alternación de planos de diferente naturaleza o sentido, o también la alternación de diferentes ejes. Esto es una consecuencia de la acción simultánea de varios vectores de traslación. De otro lado es llamativo que en este tipo de celda se da la posibilidad de generar planos de tipo d que se alternan con otros del mismo tipo, pero que se diferencian por tener direccionalidades opuestas (figura 8.19).

Para la construcción del grupo Fmm2 supongamos que sobre el plano m de la figura 8.16a actúa la traslación  $T_d$ , correspondiente a una cara centrada. Esta traslación es inclinada respecto al plano m, pero puede descomponerse en  $t_b = \frac{T_b}{2}$  que es paralela al plano, y  $t_a = \frac{T_a}{2}$ , que es perpendicular al mismo plano inicial m. La componente  $t_a$  genera un nuevo plano paralelo a m pero desplazado en  $\frac{1}{2}t_a = \frac{T_a}{4}$ , mientras que la componente  $t_b$  convierte este nuevo plano en plano de deslizamiento de tipo a. Ahora un motivo como el señalado con el número 1, bajo la acción de  $t_a$ , en el plano a se reflejará su imagen y se desplazará en  $\frac{1}{2}t_a = \frac{T_a}{4}$  paralelamente al plano a, hasta alcanzar la posición marcada con el número 2, y luego de otra reflexión del mismo estilo llega a la posición 3 y así sucesivamente. Si lo anterior se combina simultáneamente con una traslación  $t_{cb} = \frac{1}{2}T_c$ , entonces se está considerando en realidad una traslación total del tipo

$$T_d = \frac{1}{4}T_a + \frac{1}{4}T_b + \frac{1}{4}T_c = \frac{t_a \times t_b \times t_c}{2}$$

con lo que las posiciones 1, 2, 3 y 4, etc., de la figura 8.16a se desplazarán paralelamente a la dirección positiva del eje Z, así:  $\frac{1}{4}+$ ,  $\frac{1}{2}+$ ,  $\frac{3}{4}+$ , 1 (figura 8.16b), y lo que inicialmente se consideró como un plano de tipo a pero con deslizamiento igual a  $\frac{T_a}{4}$ , se ha convertido en un plano de deslizamiento del tipo d. Si ahora se parte nuevamente de la posición marcada con el número 1+,

figura 8.16



que está ligeramente levantado sobre el plano de proyección, y avanzamos en la dirección indicada por las flechas del nuevo plano d, con cuatro operaciones consecutivas de reflexión, se alcanzará la posición 5, la cual es completamente equivalente con la posición inicial 1. De tal manera que los planos d aparecen como derivados del plano inicial m, sobre el que actúan las traslaciones propias de la celda F, mas concretamente de las traslaciones implícitas en las caras centradas C y B. Pero como las caras A también tienen una componente traslacional  $t_{ca} = \frac{1}{2}T_c$ , en realidad sobre el plano m de la *figura 8, 16a* actúa la traslación

$$T_d + T_{ca} + T_{cb} = T_c$$

la cual convierte el plano d de la *figura 8, 16b* en un plano de deslizamiento de tipo c como los de la *figura 8, 16c*, que corresponde al grupo espacial Fmm2.

Los planos d solamente pueden cortarse o intersecarse bajo ángulos de  $90^\circ$ , con planos del mismo tipo d, de tal forma que de dicha intersección sólo puedan surgir ejes 2 ó  $2_1$ . El primero, cuando los planos impongan al eje resultante un aporte de desplazamiento positivo  $+\frac{T}{4}$  y el otro un aporte negativo  $-\frac{T}{4}$ ; el segundo cuando los aportes de cada uno de los planos d tengan el mismo signo para un desplazamiento total de  $\frac{T}{2}$ , el cual acompañará la rotación de  $180^\circ$ . Esta es pues la razón para que del grupo simórfico Fmm2 solamente se derive un grupo mas, el Fdd2 (*figura 8, 17* sobre el cual a la vez se ha representado su correspondiente sistema de puntos simétricamente equivalentes).

Finalmente anotemos que los planos d sólo pueden tener lugar en los sistemas cristalinos con ejes ortogonales; que tales planos tienen una direccionalidad a lo largo de una sola de sus diagonales y, que tales direccionalidades se alternan antiparalelamente dentro de las estructuras que poseen este elemento de microsimetría.

La *figura 8, 17* está construída sobre un rectángulo, cuyos lados por conveniencia se han parcelado en ocho partes iguales. Los planos iniciales se han designado como  $d'_1$  y  $d''_1$ , y se ha introducido el motivo reticular de posición común marcado con el número 1. A partir de este motivo se realiza la ubicación de los otros puntos simétricamente equivalentes que se encuentran a lo largo de cada uno de los planos d inicialmente dados. Además, por el carácter de direccionalidad que se le ha asignado a estos planos, la cual se indica con flechas, la intersección de ellos en el origen genera un eje doble de rotación, pero desplazado una octava parte de cada una de las traslaciones  $T_1$  y  $T_2$ , para ocupar la posición en la proyección marcada con el número 2. Mediante una rotación de  $180^\circ$  alrededor de este eje, el motivo 1 ocupa la posición 3. Ahora bien, si este motivo 3 se relaciona con el número 4, se observará que tal relación es la que puede dar un plano de deslizamiento de tipo d, paralelo a  $d'_1$  pero de dirección opuesta en cuanto a su línea de acción. Este nuevo plano se ha designado como  $d'_2$ , para

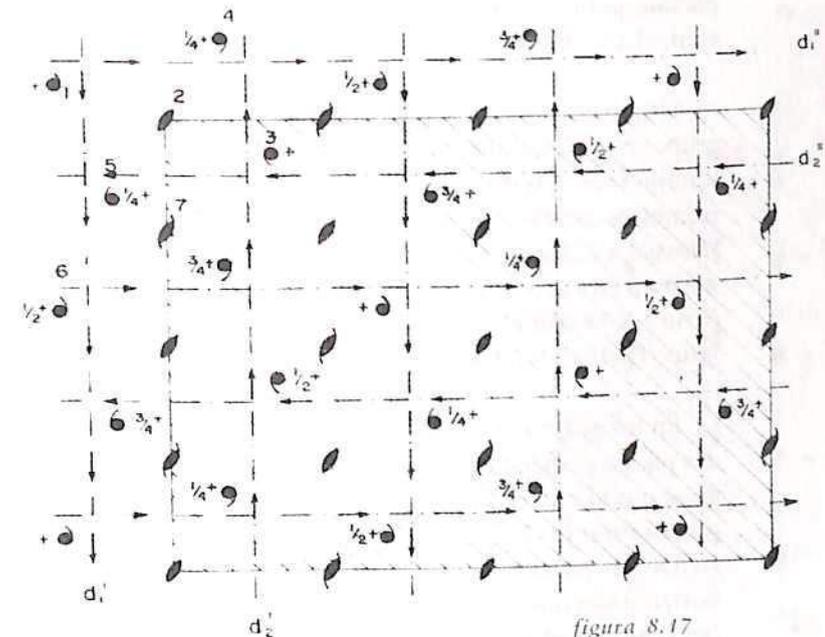


figura 8.17

diferenciarlos de alguna manera. Análogamente, la relación del motivo 3 con el número 5 exige la existencia del plano  $d_2''$ , antiparalelo a  $d_1''$  y sucesivamente con la misma metodología se pueden construir los demás planos de tipo d.

También se pueden correlacionar el motivo 3 con el número 6 y se hallará un eje helicoidal de segundo orden en la posición 7. De esta manera en los centros de los rectángulos demarcados por los planos d se alternan ejes 2 de rotación con ejes helicoidales  $2_1$ . Entre tanto es bueno observar que si las flechas de los planos d a lo largo del perímetro de los pequeños rectángulos que ellos circunscriben, tienen una dirección continuada de rotación, entonces el eje circunscrito será helicoidal. En cambio si la dirección de estas flechas resulta contrapuesta, el eje será de rotación simple.

Por último, dadas las reglas ya conocidas para la selección del origen de las coordenadas, el grupo se desplazará para ocupar definitivamente como su proyección, el área sombreada en la figura 8.17.

No siendo nuestro objetivo agotar la totalidad de los grupos espaciales sino dar criterios para su explicación e interpretación, terminamos lo relativo a los grupos ortorrómbicos con algunos ejemplos derivadas de los grupos puntuales 222 y mmm, y a propósito, nos parece interesante en este momento comparar el grupo Fmmm de la figura 8.18 con el grupo Fmm2 de la figura 8.16c y el grupo Fddd de la figura 8.19 con el Fdd2 de la figura 8.17.

En los grupos de las figuras mencionadas, se tienen dos planos perpendiculares cuya intersección genera ejes de segundo orden. Es apenas lógico esperar que en los grupos  $Fmmm = F \frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$  y  $Fddd = F \frac{2}{d} \frac{2}{d} \frac{2}{d}$  se tenga una situación parecida, pero enriquecida con los ejes horizontales que se producen con las intersecciones del tercer plano, el horizontal, con los dos primeros y los

efectos que sobre estos producen las traslaciones del grupo F. Además debe tenerse en cuenta la presencia de los centros de simetría propios de las combinaciones  $\frac{2}{m}$  y semejantes. Compárense las figuras 8.16c con la 8.18 y la figura 8.17 con la 8.19.

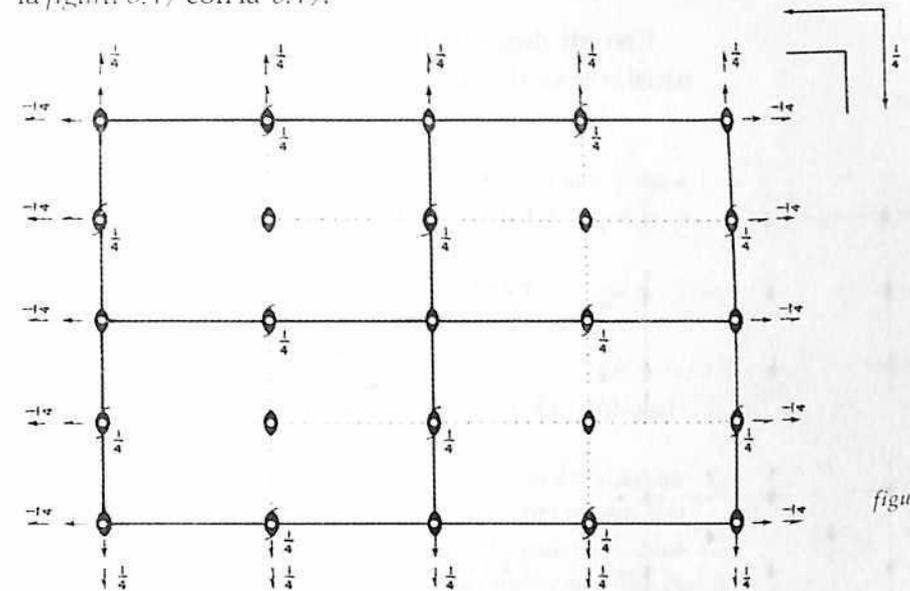


figura 8.18

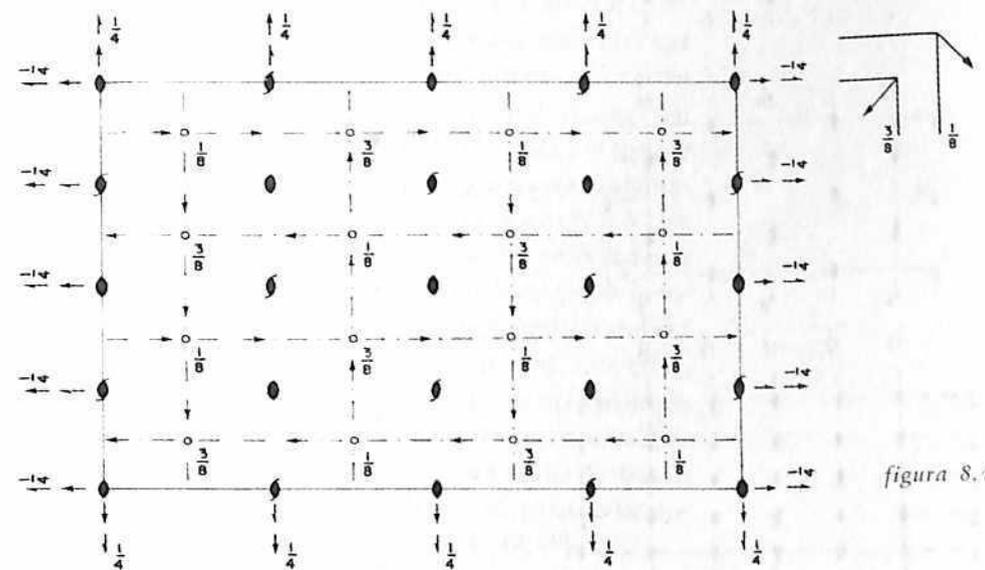
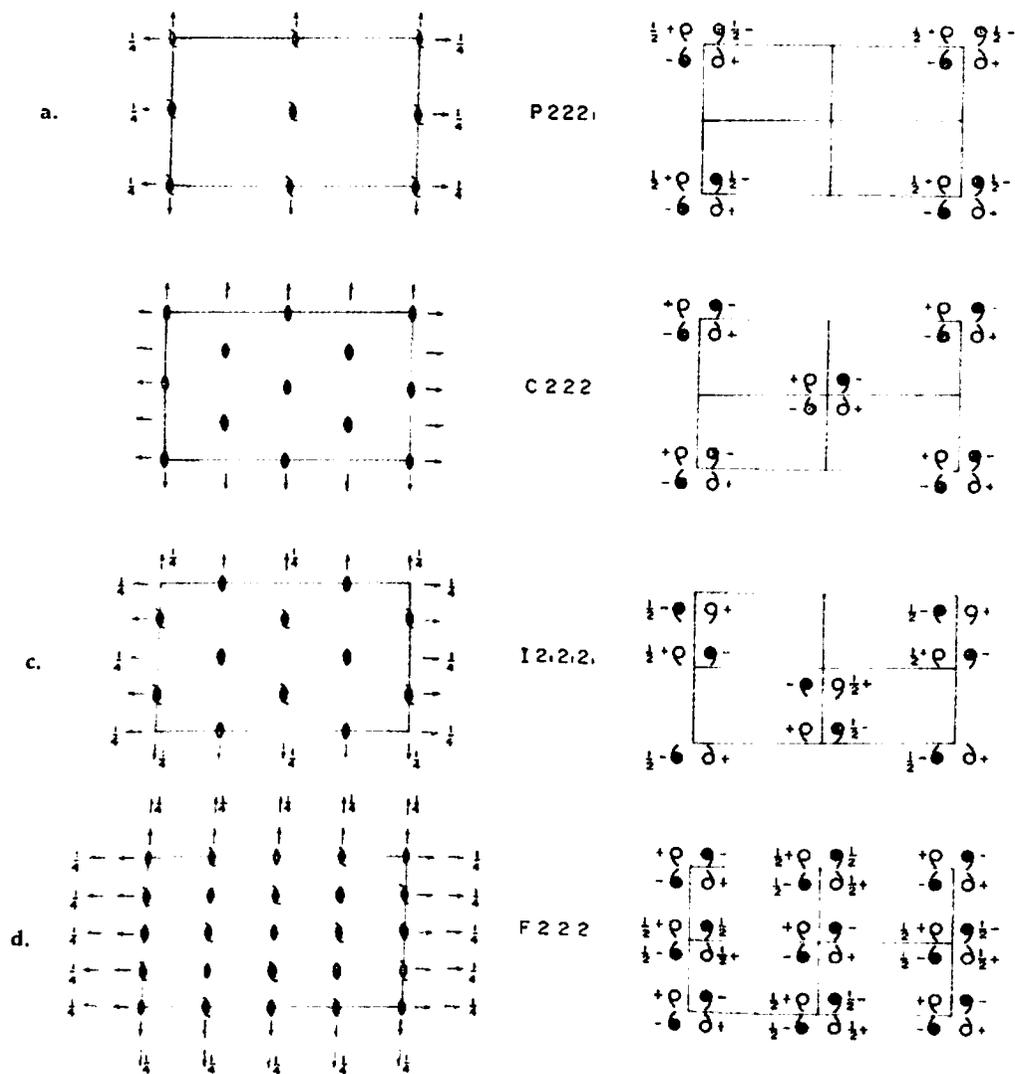


figura 8.19

En la figura 8.20 se presentan cuatro grupos axiales ortorrómbicos en diferentes tipos de celda traslacional: a) P222, b) C222, c) I2<sub>1</sub>2<sub>1</sub>2, y d) F222, acompañados de sus respectivos sistemas de posiciones comunes simétricamente equivalentes.

Con esto damos fin al capítulo relativo a los grupos espaciales de los sistemas cristalográficos de baja simetría.

figura 8.20



## IX GRUPOS ESPACIALES DE SIMETRÍA INTERMEDIA Y ALTA

### 9.1 Grupos Espaciales del Sistema Tetragonal

Las cuatro posiciones de la nomenclatura internacional para los grupos espaciales del sistema tetragonal, también se consideran en dirección de izquierda a derecha pero con el siguiente significado para cada una de ellas: la primera, como en todos los grupos espaciales, está relacionada con el tipo de red de Bravais que le corresponde: la segunda posición está relacionada esta vez con el eje cristalográfico Z, paralelamente al cual en este sistema siempre se incluye un eje cuaternario, o en su defecto, un eje 2; la tercera posición indica el tipo de elemento de simetría (ejes o planos) que están orientados paralelamente a los ejes cristalográficos X y Y, los cuales siempre tienen igual significación en el sistema tetragonal. Finalmente, la cuarta posición porta la información relativa a los elementos de simetría, también mutuamente equivalentes en este sistema, que están dirigidos paralelamente a las diagonales del cuadrado del plano de proyección. No obstante lo anterior, se considera que para las combinaciones de sus celdas de Bravais con la clase tetragonal primitiva, son suficientes las dos primeras posiciones, como en P4, P4<sub>2</sub>, I4, P4<sub>1</sub>, etc.

La combinación de los dos paralelepípedos tetragonales de Bravais con sus siete grupos puntuales produce en total 66 grupos espaciales. Muchos de tales grupos son de muy fácil interpretación, como los de la *figura 9.1*, que en su parte inferior los muestra acompañados de sus correspondientes distribuciones de posiciones simétricamente equivalentes. Las lunas partidas de la *figura 9.1c* significan que sobre una misma posición del dibujo coinciden las proyecciones de dos retículos de la red, a los que hemos diferenciado con signos + y -, pues sus coordenadas en la dirección del eje Z son de igual magnitud pero antisimétricas.

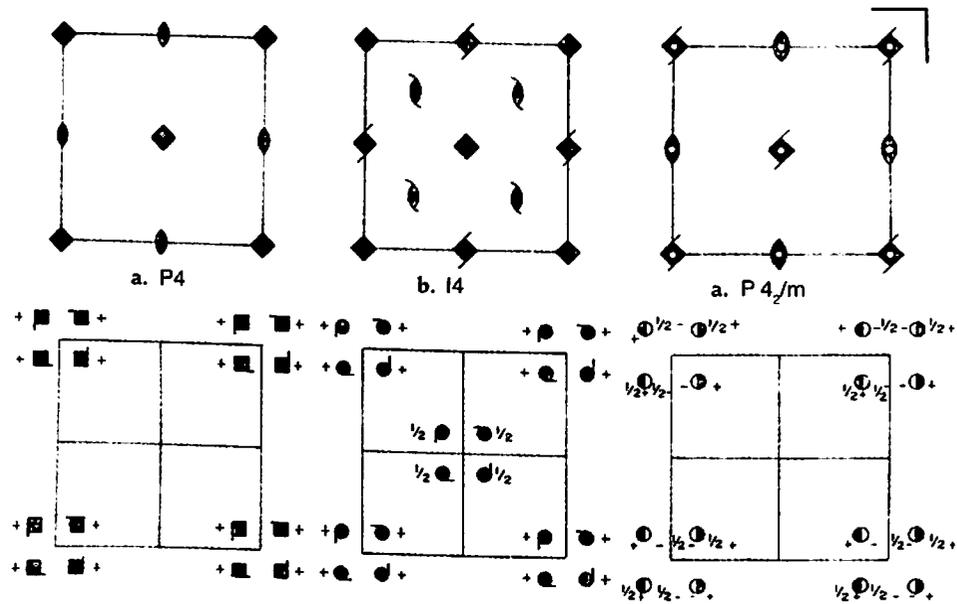


figura 9.1

Consideremos ahora el grupo espacial  $P\frac{4}{m}mm$ . Sobre la huella básica de una celda tetragonal, tomamos como punto de partida y origen de coordenadas el centro de simetría resultante de la intersección  $\frac{4}{m}$ , al cual aplicamos el grupo P de traslaciones (*figura 9.2a*). Como resultado de esta operación obtenemos el sistema central mostrado en la *figura 9.2b*. Sobre este sistema se introducen los

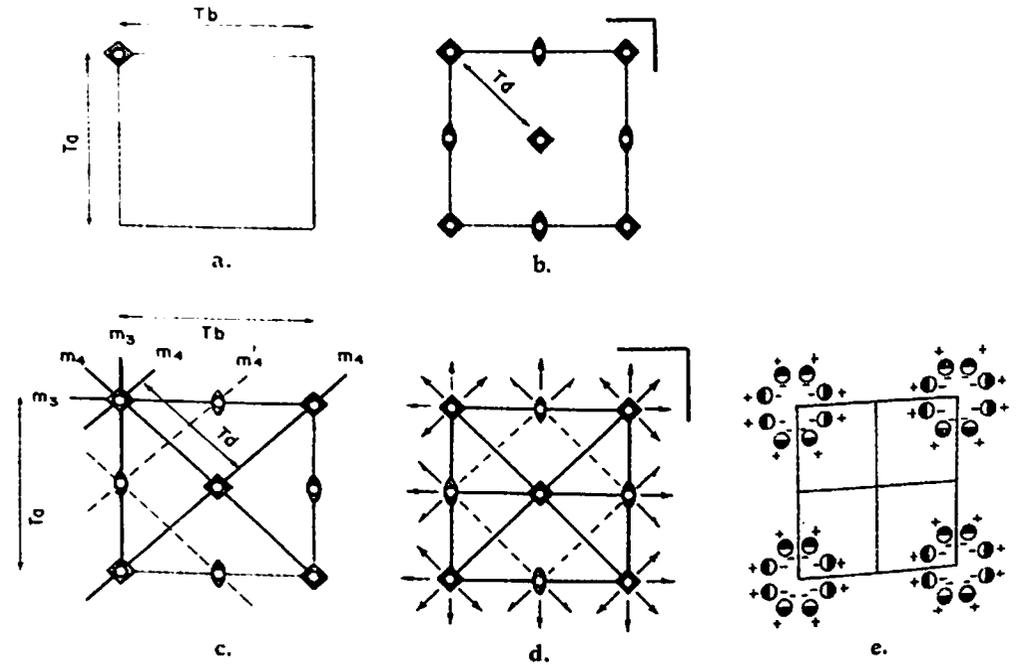


figura 9.2

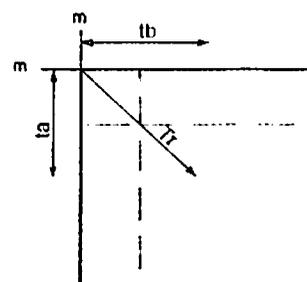
planos de simetría  $m$  correspondientes a la tercera y cuarta posiciones de la designación del grupo, según la nomenclatura internacional. Tales planos los hemos indicado respectivamente como  $m_3$  y  $m_4$ . Los primeros se reproducen como se indicó en el numeral 6.5, bajo la acción de las traslaciones  $T_a$  y  $T_b$  perpendiculares a dichos planos, mientras que para los planos  $m_4$  actúa una traslación oblicua respecto a los ejes X y Y,  $T_d = \frac{T_a + T_b}{2}$ , pero a la vez perpendicular a los mismos planos  $m_4$ . Esta operación  $T_d$  traslada los planos  $m_4$  al centro de la respectiva celda de Bravais y debe reproducir otro plano  $m'_4$  en la mitad de su camino. Fuera de lo anterior, este nuevo plano recibe la acción de las componentes de las traslaciones  $T_a$  y  $T_b$  paralelas a él, es decir, la acción de las traslaciones  $\frac{T_a}{2}$  y  $\frac{T_b}{2}$  respectivamente, por lo cual la acción definitiva sobre los nuevos planos  $m'_4$  los convierte en planos de tipo a ó b, así:

$$m'_4 \equiv a \equiv b$$

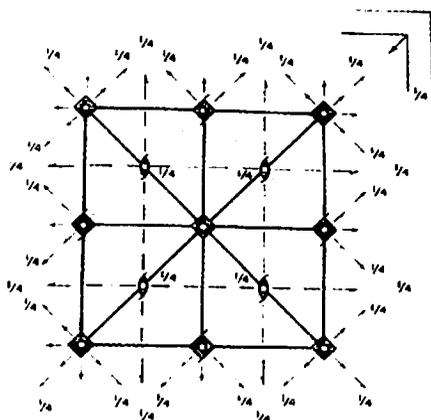
que se alternan paralelamente con los planos  $m$ , de simetría especular. La *figura 9.2d* muestra la representación gráfica completa del grupo espacial  $P_{\bar{m}}^4 mm$  con origen de coordenadas en los centros de simetría generados por  $\frac{4}{m}$ . Los ejes binarios horizontales de rotación simple y helicoidales resultan de las diversas intersecciones de los planos verticales con el plano horizontal  $m$ . El correspondiente sistema de puntos simétricamente equivalentes lo representa la *figura 9.2e*.

Con un procedimiento similar al anterior se puede deducir o construir el grupo  $I_{\bar{m}}^4 mm$  de la *figura 9.3b*, en el que la traslación  $T_1 = \frac{1}{2}T_a + \frac{1}{2}T_b + \frac{1}{2}T_c = t_a + t_b + t_c$ , es diferente de la traslación oblicua  $T_d$  del caso anterior. En virtud de esto, en lugar de los planos de tipo a y b, se

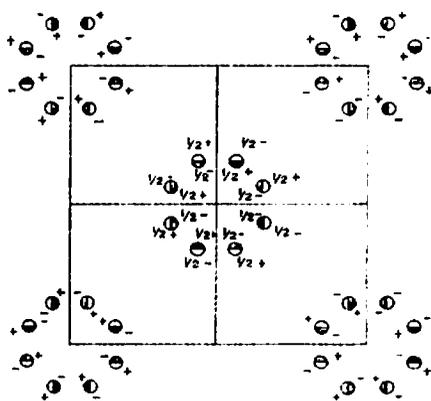
figura 9.3



a.



b.



c.

obtienen planos de tipo c, que se alternan con planos  $m$  paralelos a ellos, según la cuarta posición de la nomenclatura del grupo. Por su parte, los planos  $m$  de la tercera y segunda posiciones, también se intercalan alternadamente con planos de tipo n separados entre sí por una distancia igual a una cuarta parte del parámetro elemental correspondiente (*figura 9.3a*). Todos los ejes son resultantes de las interacciones entre diversos planos mutuamente perpendiculares.

La *figura 9.3a* indica cómo bajo la acción de la traslación  $T_1$  sobre los planos  $m$ , se generan los planos de deslizamiento de tipo n. La parte b de la misma figura muestra la proyección completa del grupo en cuestión, y la parte c su correspondiente sistema de puntos simétricamente equivalentes.

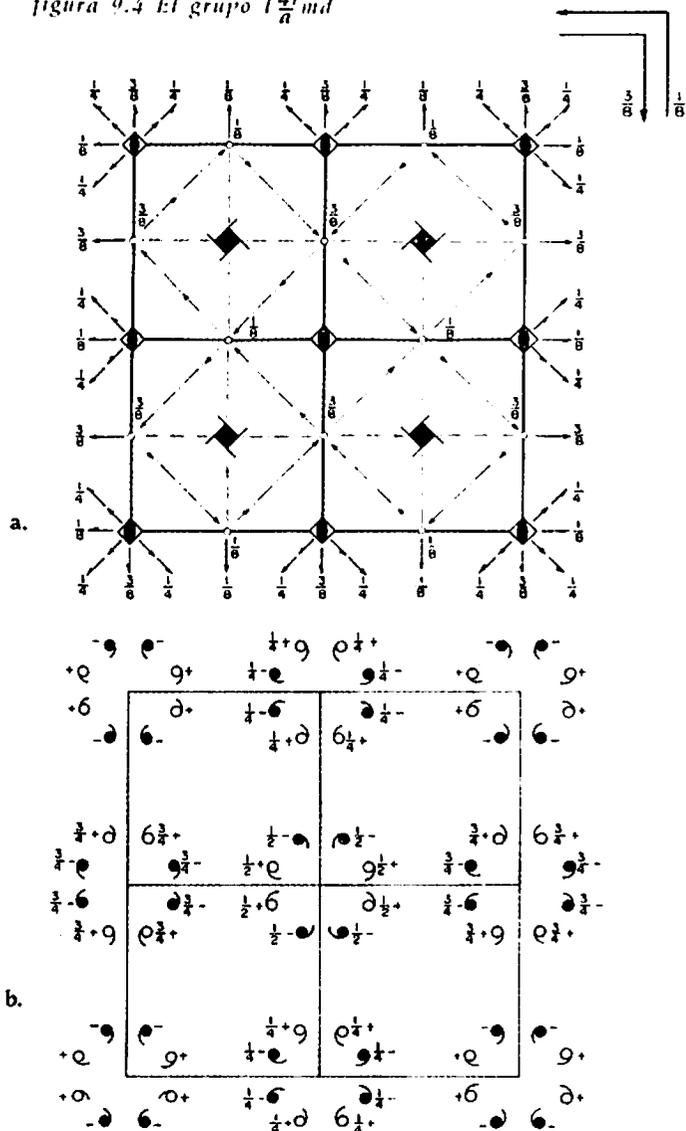
Conocida la construcción del grupo  $P_{\bar{m}}^4 mm = P_{\bar{m}}^4 2 2$ , se demuestra (Zagalskaya y Litvinskaya, 1976) que el plano  $m$  de la segunda posición para una celda primitiva P, solamente puede ser sustituido por planos n, mientras que el plano  $m$  de la tercera posición puede ser sustituido por planos de tipo b, c ó n, y el de la cuarta posición por planos b que alternan con planos  $m$ , o por planos n que en su caso se alternan con planos de tipo c. El resultado es una familia de 16 grupos espaciales derivados, así, del grupo  $P_{\bar{m}}^4 mm$ :

- $P_{\bar{m}}^4 mm, P_{\bar{m}}^4 mc, P_{\bar{n}}^4 mm, P_{\bar{n}}^4 mc,$
- $P_{\bar{m}}^4 cm, P_{\bar{m}}^4 cc, P_{\bar{n}}^4 cm, P_{\bar{n}}^4 cc,$
- $P_{\bar{m}}^4 bm, P_{\bar{m}}^4 bc, P_{\bar{n}}^4 bm, P_{\bar{n}}^4 bc,$
- $P_{\bar{m}}^4 nm, P_{\bar{m}}^4 nc, P_{\bar{n}}^4 nm, P_{\bar{n}}^4 nc.$

El grupo de traslaciones I, en la celda tetragonal admite planos  $m$  alternados con planos n (lo mismo que en la *figura 9.3b*), o la sustitución de planos a alternados con planos b. En la tercera posición los planos  $m$  se alternan con planos n ó se sustituyen por planos c, en

cuyo caso éstos se alternan con planos de tipo b. y, finalmente, en la cuarta posición de este grupo tetragonal resultan los planos m con "identidad de derecho" con los planos n ( $m \equiv n$ ), los cuales se alternan respectivamente con planos c, estos últimos a su vez tienen igualdad de prioridad en su ocurrencia con planos de tipo b ( $c \equiv b$ ). El

figura 9.4 El grupo  $I_{\frac{4}{a}}^4 md$



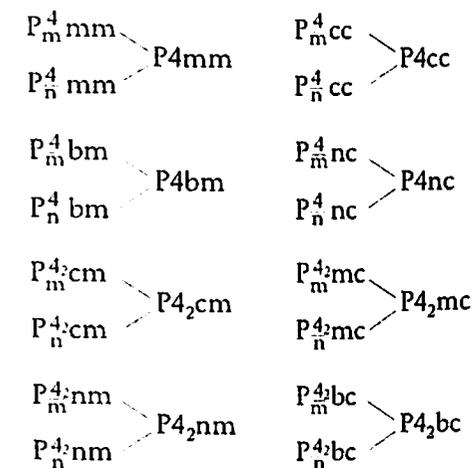
plano m de la cuarta posición también puede sustituirse por un plano d. el cual se alterna consigo mismo pero con direcciones opuestas (ver la figura 9.4a). De esa manera se obtiene otra familia de cuatro grupos espaciales:

$$I_{\frac{4}{m}}^4 mm, I_{\frac{4}{m}}^4 cm, I_{\frac{4}{a}}^4 md, I_{\frac{4}{a}}^4 cd.$$

Obsérvese que en la figura 9.4a del grupo  $I_{\frac{4}{a}}^4 md$ , simultáneamente se dan los ejes helicoidales  $4_1$  y  $4_3$ , entre los cuales hay, como bien se sabe, una relación enantiomórfica, la cual puede explicarse, por ejemplo, como la reflexión de cualquiera de ellos en el plano m que se desee, entre los de su vecindad.

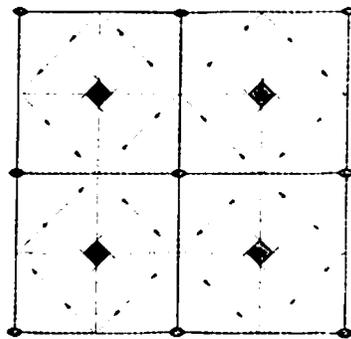
Ahora bien, conociendo las familias de grupos espaciales derivados de  $P_{\frac{4}{m}}^4 mm$  y de  $I_{\frac{4}{m}}^4 mm$ , fácilmente se pueden obtener las familias de los grupos  $P4mm$  y de  $I4mm$ , cosa que se logra suprimiendo en los primeros los planos horizontales y por ende los centros de simetría que ellos implican. Las nuevas familias tendrán exactamente un número de grupos igual a la mitad del número de los primeros.

Así se evidencia, para los grupos P, indicados en la siguiente lista:



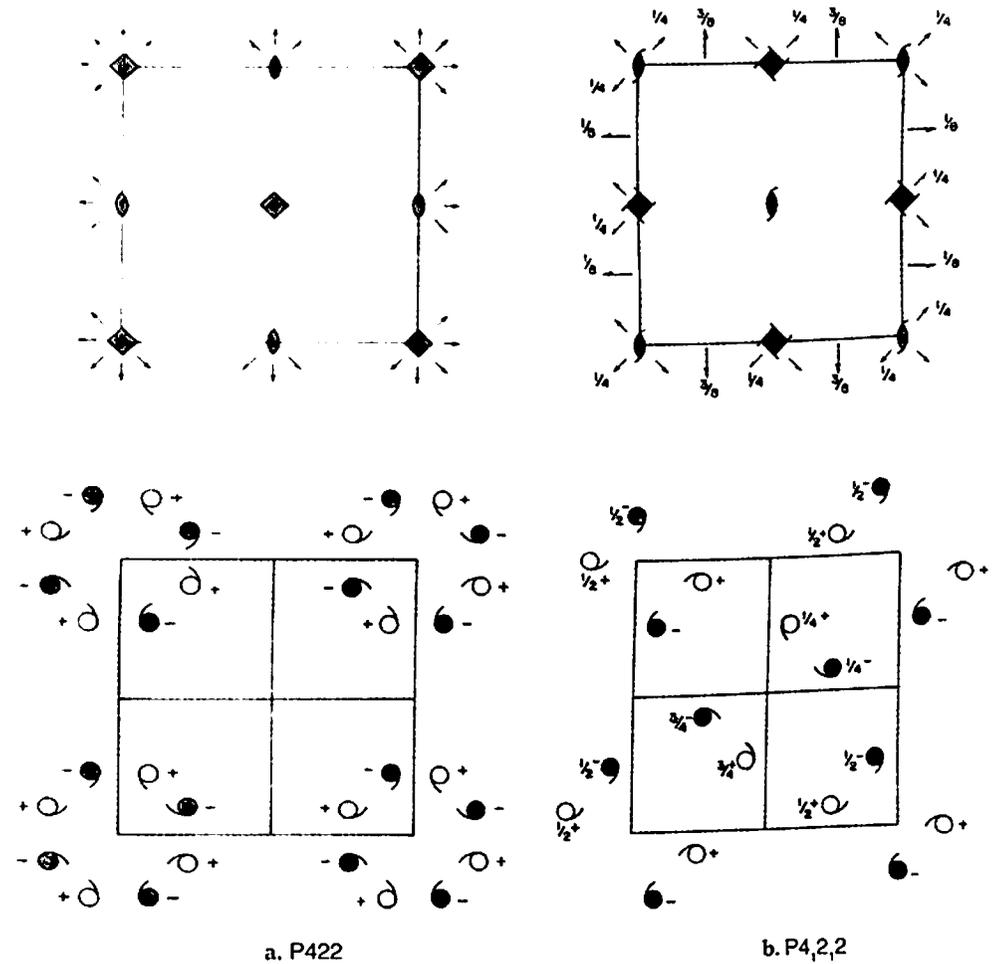
De manera similar, de los cuatro grupos de la familia  $I\frac{4}{m}mm$  se obtienen los grupos  $I4mm$ ,  $I4_1md$ . La *figura 9.5* es precisamente la representación gráfica del grupo  $I4_1md$  derivado del primero mediante la sustitución de  $m$  por  $d$ , permitida en la cuarta posición, como ya se ha señalado. Compárese este grupo con la *figura 9.4a* y se observará que no faltan sino los planos horizontales, y desde luego, todos los ejes horizontales y los centros de simetría surgidos de la intersección de los planos y ejes verticales con los planos horizontales, en esta vez ausentes. Por la misma razón desaparecen los ejes de inversión 4 y permanecen en su lugar únicamente ejes binarios de rotación simple.

figura 9.5



Los grupos puntuales  $422$  y  $42m$  en combinación con los grupos traslacionales  $P$  e  $I$  generan otras familias de grupos espaciales, cuya interpretación no será difícil mediante la sustitución de los ejes de rotación de la primera y segunda posiciones en el grupo puntual, por diversos ejes helicoidales permitidos, tal como se pueden observar en la *tabla 9.2* de los grupos espaciales dada al final de este capítulo. Para terminar, presentamos la representación gráfica de los grupos  $P422$  y  $P4_12_12$  (*figura 9.6*),  $I422$  e  $I4_12_12$  (*figura 9.7*), como ejemplo de grupos espaciales tetragonales de origen axial, y los grupos  $P4_1c$  e  $I4_1d$  como grupos espaciales de origen inversoplanar (*figura 9.8*), todos acompañados de sus correspondientes sistemas de puntos simétricamente equivalentes.

figura 9.6



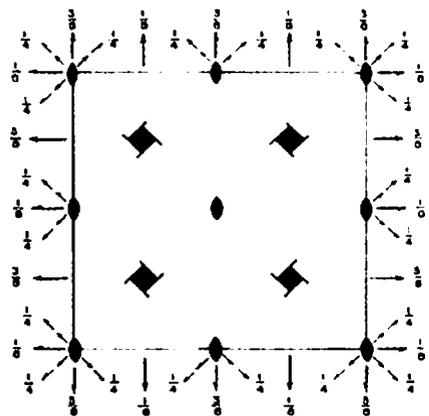
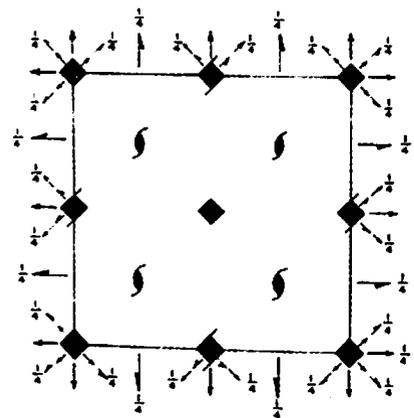
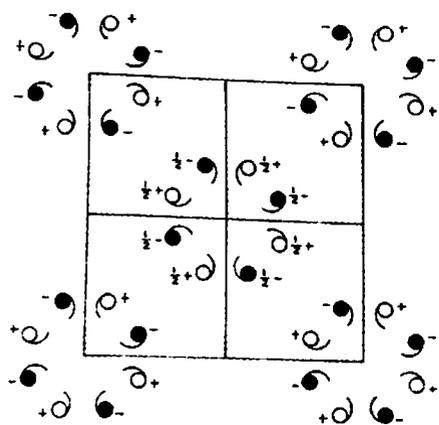
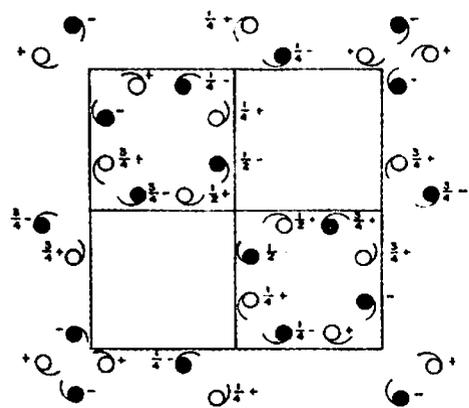


figura 9.7



a.  $I4_{22}$



b.  $I4_{22}$

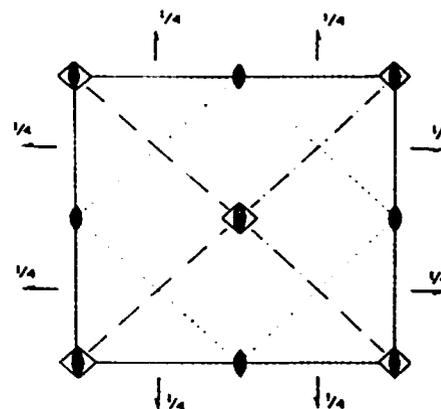
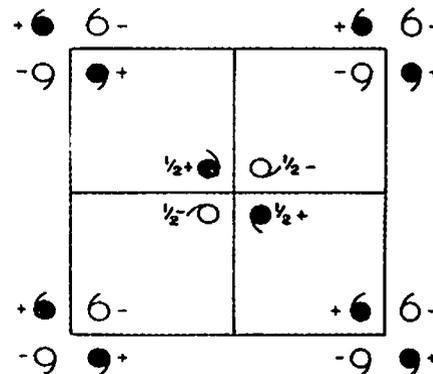
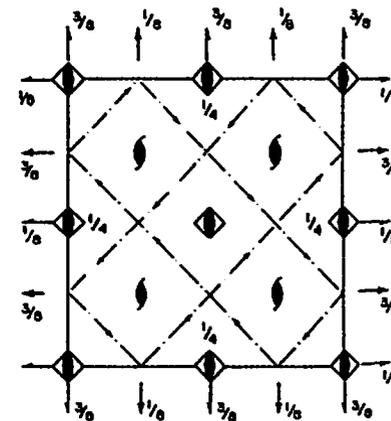
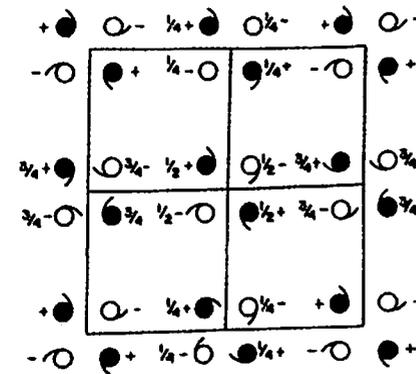


figura 9.8



a.  $P\bar{4}2_1c$



b.  $I\bar{4}2d$

## 9.2 Grupos Espaciales de los Sistemas Trigonal y Hexagonal

En el *parágrafo 6.4* se indicó la posibilidad de describir la simetría trigonal romboédrica R sobre el esquema de tres celdas hexagonales de Bravais, mediante la introducción en cada una de ellas de dos retículos complementarios a los que corresponden en una celda primitiva (*figura 6.4*). Estos nuevos retículos deben ser de naturaleza idéntica a los que ocupan los vértices de las mencionadas celdas, pues todos en su conjunto deben integrar un solo sistema de posiciones simétricamente equivalentes. En esta forma se puede esperar que cada posición de estas contenga los elementos de simetría del grupo puntual correspondiente.

Es indudable que la obtención de la simetría trigonal R a partir de celdas con simetría hexagonal, representa una disminución de la simetría axial desde 6 a 3 ó  $\bar{3}$ . Cabe aquí reiterar que los grupos traslacionales de Bravais, tienen como propiedad fundamental propagar la simetría del motivo reticular a todo su correspondiente espacio cristalino. Pero lo anterior debe siempre complementarse con el principio de Curie, según el cual la simetría de un cristal consta de los elementos de simetría que son comunes a la simetría puntual del motivo y a la simetría de la red. Por tanto, la simetría puntual de una red de Bravais que interactúa con una figura puntual debe ser o igual o mayor que la de ésta. Por ejemplo, en el espacio bidimensional de la *figura 9.9a*, se observa que el motivo reticular tiene una simetría mm2. En la parte b de la misma figura la simetría de la red es 4mm, mayor que la del motivo reticular; en cambio la propagación del motivo en el espacio cristalino (interacción o superposición de los dos), deja vigente un conjunto con simetría mm2, igual a la del motivo y menor que la de la red inicial (*figura 9.9c*).

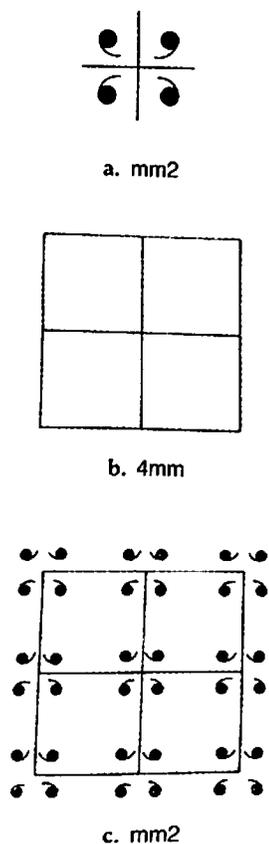
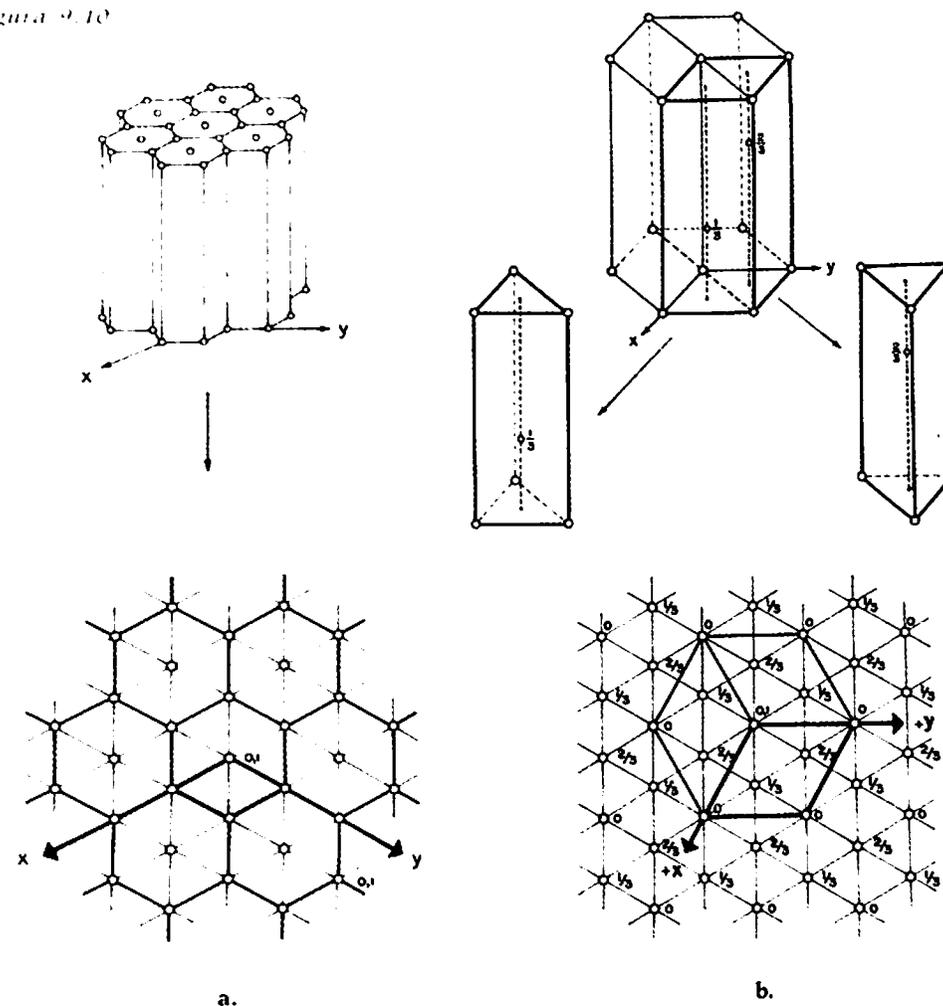


figura 9.9

Para nuestros sistemas cristalinos en cuestión, ciertamente, como lo ilustra la *figura 9.10a*, una red con simetría típicamente hexagonal se puede obtener ordenando prismas hexagonales de bases centradas, con las cuales es posible llenar completamente todo el espacio. La proyección de los motivos reticulares de los prismas, realizadas sobre una malla de triángulos equiláteros, coincide con el plano basal de los mismos prismas, produce un sistema de posiciones simétricamente equivalentes ubicados en todos los vértices de los triángulos

figura 9.10



de la malla. Dos triángulos de éstos con un lado común constituyen la proyección de una celda bravaisiana hexagonal, tal como se remarca en la parte inferior de la figura 9.10a, donde también se muestran las direcciones de los ejes cristalográficos X y Y.

Con un procedimiento similar (figura 9.10b), se obtiene la proyección de los motivos reticulares de una red romboédrica, sobre los vértices de una malla de triángulos regulares, pero esta vez tendremos motivos no solamente al nivel del plano basal de los prismas trigonales, sino también a alturas alternadas de  $1/3$  y  $2/3$  del parámetro  $c$  de la celda elemental correspondiente, lo que hace imposible la permanencia de los ejes de rotación de orden 6. Gracias a esta interpretación algunos cristalógrafos reconocidos (Buerger, Zagalskaya y otros), no toman el romboedro como celda elemental de Bravais, mientras que otros (Flint, Vainshtein), lo incluyen directamente como tal. Nosotros, con un sentido didáctico y pnetotécnico, en la tabla 6.1 hemos incluido las dos interpretaciones. Lo cierto es que por acuerdo internacional para la proyección de todos los grupos espaciales del sistema trigonal, se utiliza el rombo de la base de la celda hexagonal bravaisiana, aunque en la nomenclatura de Hermann-Mauguin sí se considera indispensable, para los grupos correspondientes, la utilización de la letra R en lugar de la P respectiva de la única celda hexagonal de Bravais.

A propósito de la nomenclatura, es bueno señalar que no obstante lo dicho en el parágrafo 4.5 con relación a la suficiencia de dos posiciones como máximo para la designación de los grupos puntuales trigonales, en la notación internacional de algunos grupos espaciales no romboédricos derivados de las simetrías puntuales  $3m$ ,  $32$  y  $\bar{3}m$ , se suelen utilizar cuatro posiciones, de las cuales una de las dos últimas siempre será 1. Con ello se diferencian las dos posibles orientaciones que pueden tener los elementos de simetría (planos o ejes) con respecto a

los ya indicados (figura 9.11), ejes X y Y. Si los planos o ejes coinciden con éstos (figura 9.11a), su nomenclatura ocupará el cuarto lugar y la tercera será un 1. Si los elementos de simetría se orientan de tal manera que bisectan los ángulos de  $60^\circ$  de la celda (figura 9.11b), las posiciones anteriores se cambian de lugar.

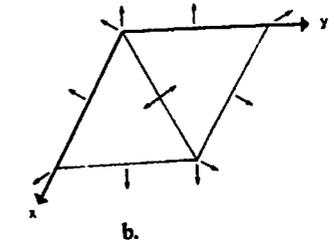
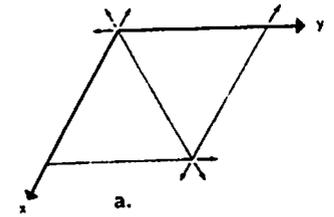
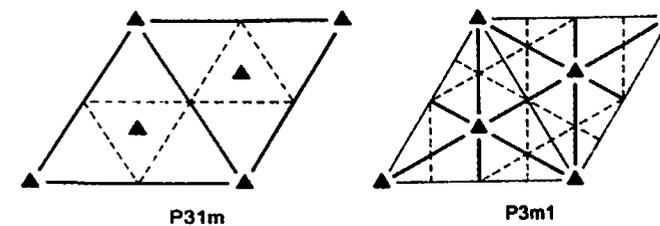


figura 9.11

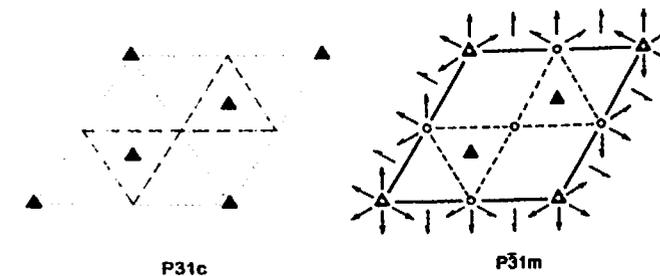
En la figura 9.12 puede apreciarse la diferencia entre los grupos  $P31m$  y  $P3m1$ , que paradójicamente podrían pensarse iguales. Esta diferencia surge de los efectos de los vectores traslacionales sobre los planos  $m$  en cada caso. Obsérvese que en ambos grupos existen traslaciones oblicuas respecto a las normales de los planos  $m$ , por lo que estos resultan siempre alternados con planos de deslizamiento del tipo a.

figura 9.12



Por analogía con otros casos, los planos de deslizamiento del tipo c que ocupan la tercera y cuarta posiciones se alternarán con planos  $n$ , o ejes 2 podrán alternarse con ejes helicoidales  $2_1$ , como se ejemplariza en la figura 9.13 para los grupos  $P31c$  y  $P\bar{3}1m$ .

figura 9.13



Para los grupos espaciales trigonales derivados de las clases de simetría primitiva y central el procedimiento es más sencillo. Son suficientes dos posiciones en la nomenclatura y su proyección se realiza sobre la celda de ejes hexagonales constituida por dos prismas triangulares con una cara común (figura 9.14a) y con retículos solamente en sus vértices. La proyección de este sistema se muestra en la figura 9.14b y en la parte c de la misma, su respectivo conjunto de posiciones simétricamente equivalentes. La figura 9.15 representa la propagación de la simetría en otros grupos espaciales de este tipo, más exactamente para los grupos  $P3_2$  y  $P\bar{3}$ .

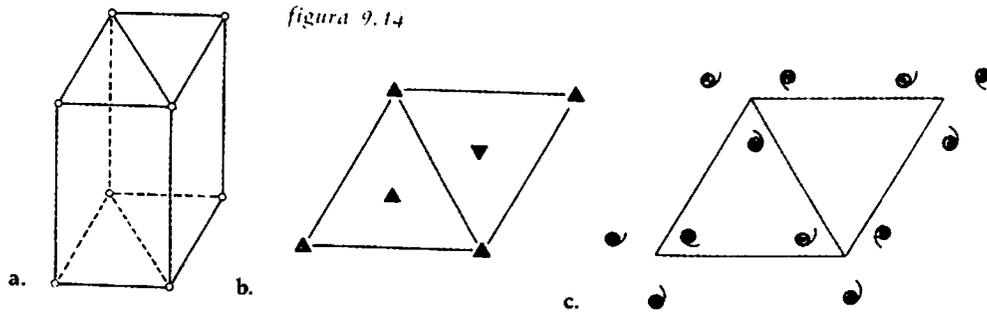


figura 9.14

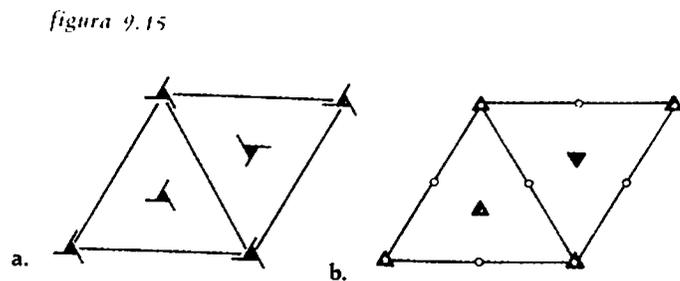


figura 9.15

En cuanto a la simetría romboédrica debe complementariamente anotarse lo siguiente: la existencia de dos retículos más dentro de los límites de la celda de ejes hexagonales a la altura de  $c/3$  y  $2c/3$ , conlleva unas direcciones de traslación oblicuas, adicionales a las ya implícitas  $t_a$ ,  $t_b$  y  $t_c$  en la celda primitiva hexagonal. En

la figura 9.16 estas direcciones se han resaltado con líneas gruesas y flechadas. Dentro de los límites de una celda. En la misma figura se indica esta traslación como  $T_R$ .

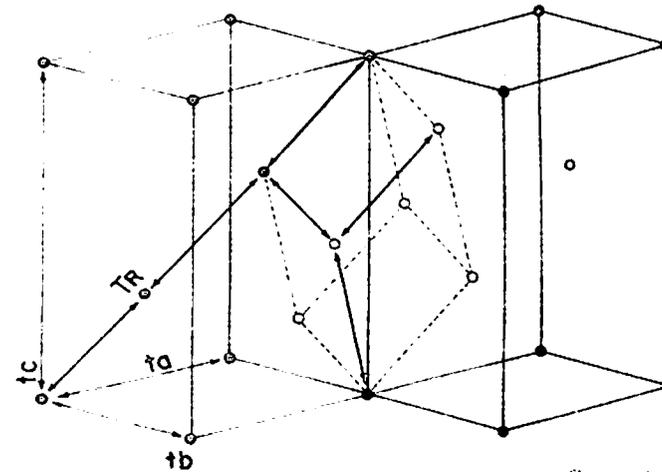


figura 9.16

Las particularidades traslacionales de la simetría R exigen para su proyección en ejes hexagonales una celda de mayor volumen que el de la tercera parte de un prisma hexagonal. Esto justifica en la figura 9.17b esa forma de selección de la celda y la ubicación de los elementos de

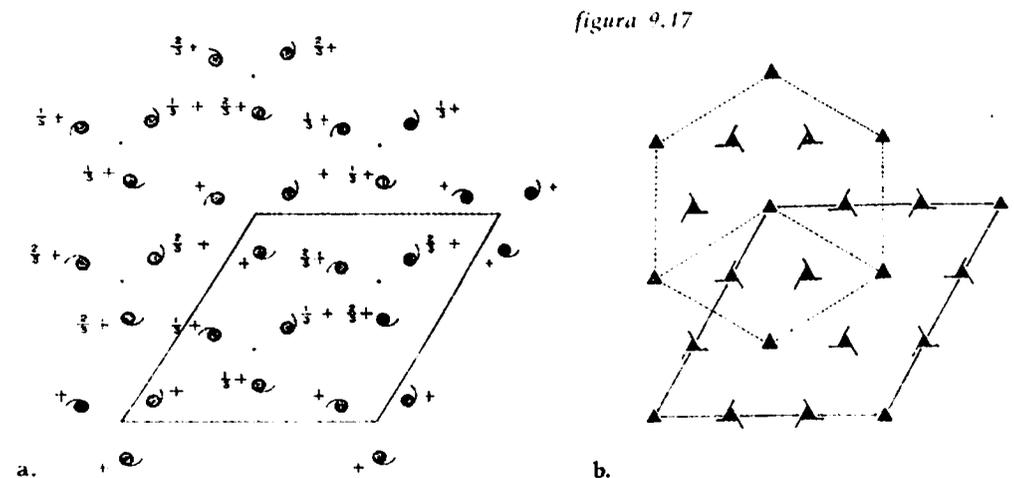


figura 9.17



Finalmente, en las figuras 9.21 a 9.23 se pueden observar algunos ejemplos de grupos espaciales del sistema hexagonal, algunos con sus correspondientes conjuntos de posiciones simétricamente equivalentes, los cuales no deben constituir dificultad para su interpretación, si se tienen en cuenta las diversas anotaciones contenidas en los capítulos anteriores y en el presente, respecto al sistema hexagonal.

figura 9.21

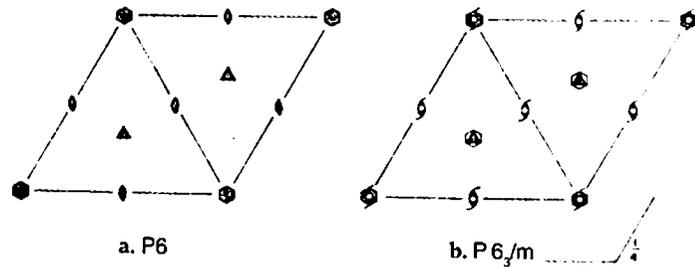


figura 9.22

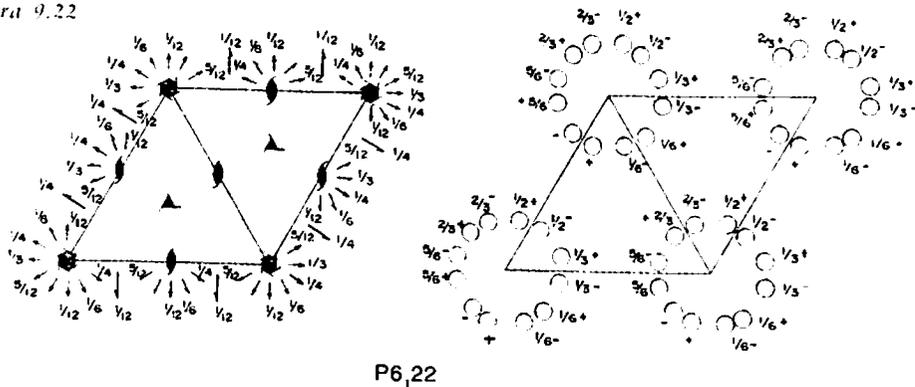
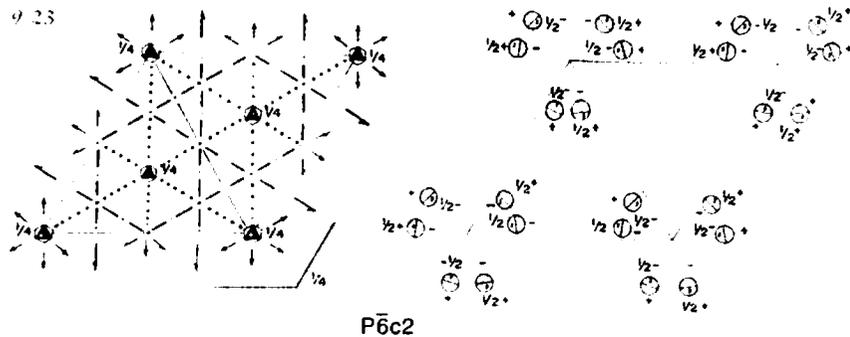


figura 9.23



### 9.3 Grupos Espaciales del Sistema Cúbico

Este sistema es isométrico y no posee direcciones unitarias. Los grupos espaciales del sistema cúbico pueden derivarse a partir de los grupos puntuales ortorrómicos  $mmm$  y  $222$  ó de los tetragonales  $4mm$ ,  $422$  y  $\bar{4}2m$  a los que se somete a un proceso de cubización mediante la introducción de un nuevo elemento: un eje 3 de rotación simple que guarde igual inclinación con respecto a las tres aristas de coordinación en las respectivas celdas elementales. La figura 9.24 indica cómo se introduce uno de estos cuatro ejes en el grupo  $222$  para obtener el grupo cúbico puntual  $23$ .

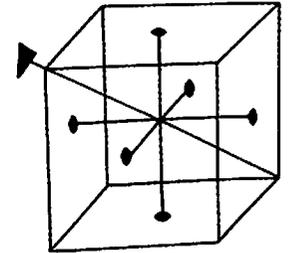


figura 9.24

La existencia en el grupo de este nuevo elemento con las condiciones de inclinación señaladas, exige la equivalencia mutua de los ejes cristalográficos XYZ. Así se puede explicar el origen de los cinco grupos puntuales cúbicos:

Grupos Originales	Grupos cúbicos resultantes
$222$	$23$
$mmm$	$m\bar{3}$
$422$	$432$
$42m$	$\bar{4}32$
$4mm$	$m\bar{3}m$

Sobre estos grupos han de operar, según la metodología seguida en los sistemas anteriores, los grupos traslacionales del sistema cúbico P, I y F. Esta interpretación de los grupos puntuales cúbicos facilita, como se verá a continuación, la construcción de sus correspondientes grupos espaciales teniendo como punto de partida los grupos espaciales originales de simetría intermedia. No obstante, como lo demuestra Buerger (Buerger, M. J. 1963), entendiéndolo el significado de la obtención por cubización del grupo  $23$ , a partir de él, se pueden derivar la mayoría de los demás grupos espaciales cúbicos.

La representación gráfica de los grupos espaciales cúbicos suele contener varios elementos de simetría con orientaciones inclinadas respecto del plano de proyección. Las convenciones para la representación gráfica de estos elementos inclinados fueron incluidas en la *figura 6.28*, la cual complementamos más detalladamente en la *figura 9.25*.

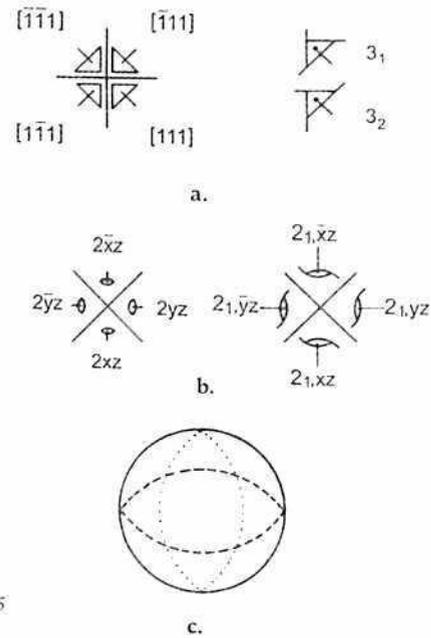


figura 9.25

En las gráficas de los grupos cúbicos se acostumbra mostrar también los ejes helicoidales ternarios y oblicuos, los cuales generalmente surgen de la interacción de los ejes ternarios de rotación simple pero oblicuos, con las traslaciones primitivas a lo largo de los ejes de coordenadas X, Y ó Z, obviamente no paralelas a los ejes de orden 3. Compárese esta situación con la de la proyección del grupo R3 analizada en 9.2, con la particularidad de que la celda R para este caso es un cubo. Veamos la formación de algunos grupos espaciales del sistema isométrico.

### Los grupos P23 y Pa3

Se parte del grupo espacial ortorrómbico P222 para el cual, por conveniencia, en la *figura 9.26a* hemos supuesto una base de proyección con traslaciones iguales  $T_x = T_y$ . Sobre esta gráfica se ha introducido un eje oblicuo  $\beta$  cuya orientación es normal a la cara (111) de un octaedro regular. Este mismo eje multiplicado con el grupo de traslaciones P se reproduce como eje helicoidal oblicuo izquierdo  $\beta_1$  y derecho  $\beta_2$ . Luego, mediante la acción sobre ellos de todos los ejes dobles del grupo inicial P222, se obtiene la totalidad de ejes ternarios que complementan la cubización del grupo inicial y que constituye el grupo P23 tal como lo representa la *figura 9.26b*.

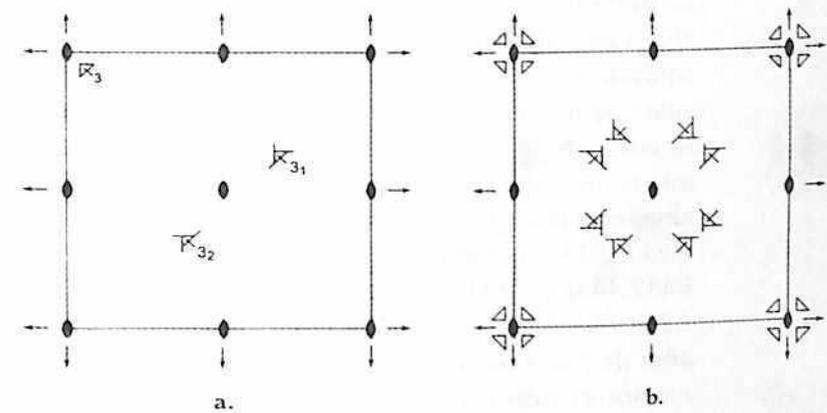


figura 9.26

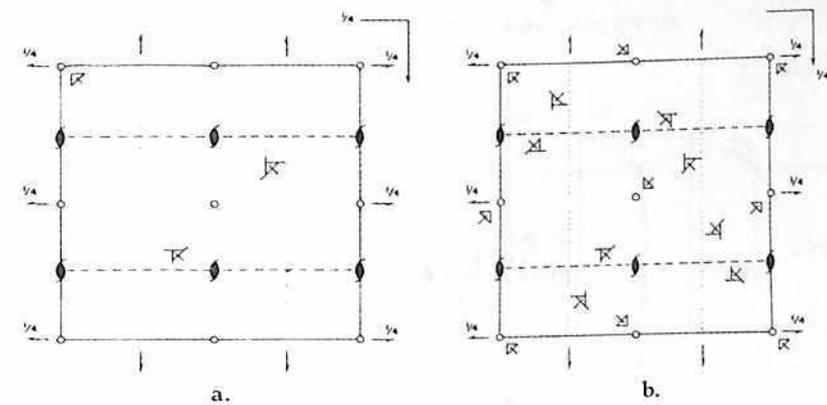


figura 9.27

Por un procedimiento similar al anterior, de un pseudogrupo  $Pbca$ , derivado del grupo ortorrómbico  $mmm$ , luego de su cubización mediante la introducción de ejes ternarios oblicuos de rotación (figura 9.27a), se puede generar el grupo espacial cúbico  $Pa\bar{3}$  de la figura 9.27b.

### Los grupos cúbicos axiales

Para la construcción de los grupos cúbicos derivados del grupo puntual 432, éste debe interpretarse como una modificación del grupo 23 obtenido con ayuda de la figura 9.24, pues al agregar un eje cuaternario de rotación simple, todos los ejes del conjunto deben orientarse mutuamente como lo señala la figura 9.28a. En la parte b de esta figura puede observarse cómo bajo la acción consecutiva de los ejes 3 y 2 el punto marcado con la cifra 1 pasa al lugar marcado con el número 3, lo cual es equivalente a una sola rotación de  $90^\circ$  alrededor del eje cuaternario. La posición diagonal de los ejes binarios de rotación simple mostrados en la figura 9.28a, hace que al interactuar éstos con los grupos traslacionales  $P$ ,  $I$  y  $F$ , se alternen a lo largo de  $Z$  cada  $\frac{c}{4}$  con ejes helicoidales  $2_1$  (figura 9.28c). Puede pues, considerarse que los grupos  $P432$ ,  $I432$  y  $F432$ , cuyos respectivos gráficos (figuras 9.29 a 9.31), al igual que los dos siguientes, tomados de la obra de Buerger antes citada, se construyen como modificaciones del grupo  $P23$ , como se indicó anteriormente, complementados, claro está, con los movimientos exigidos por los respectivos grupos de traslación.

figura 9.28

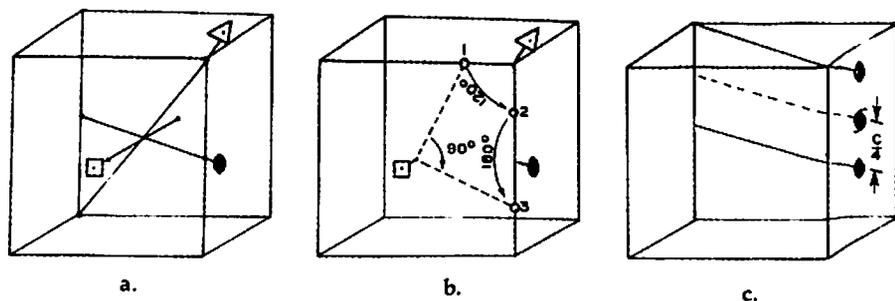


figura 9.29

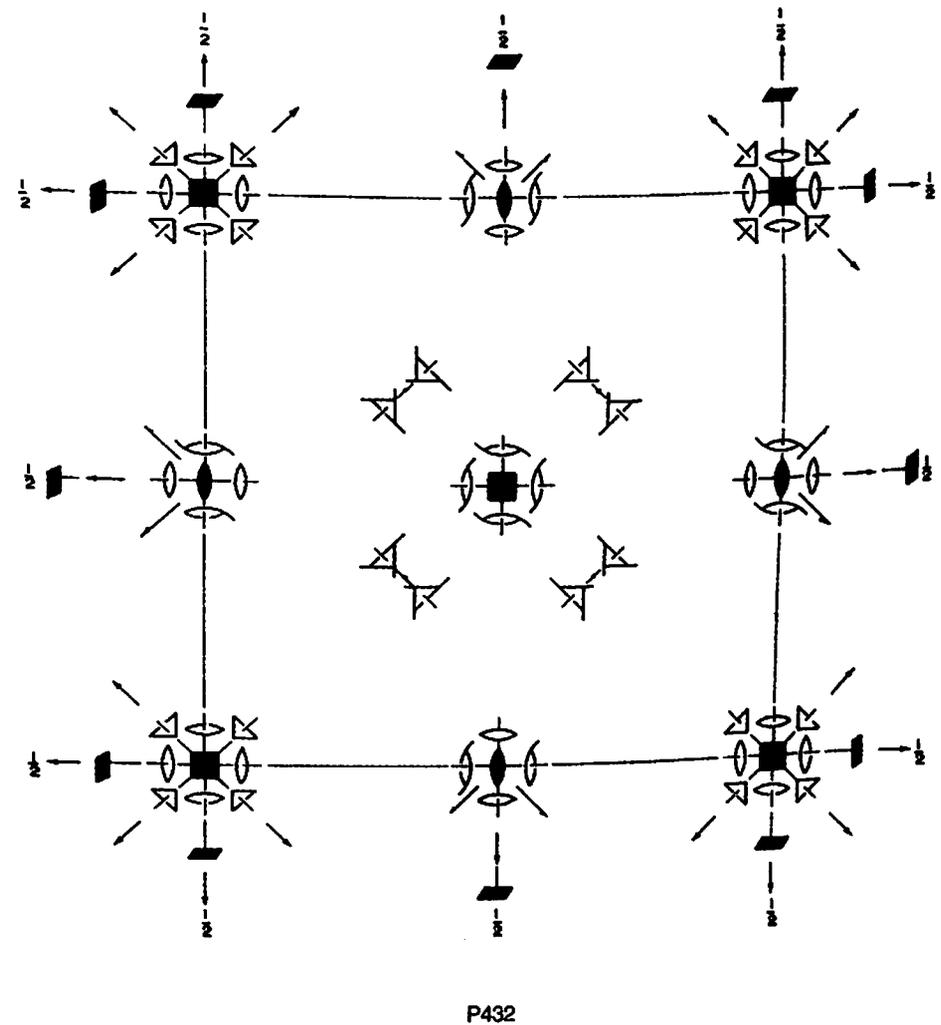
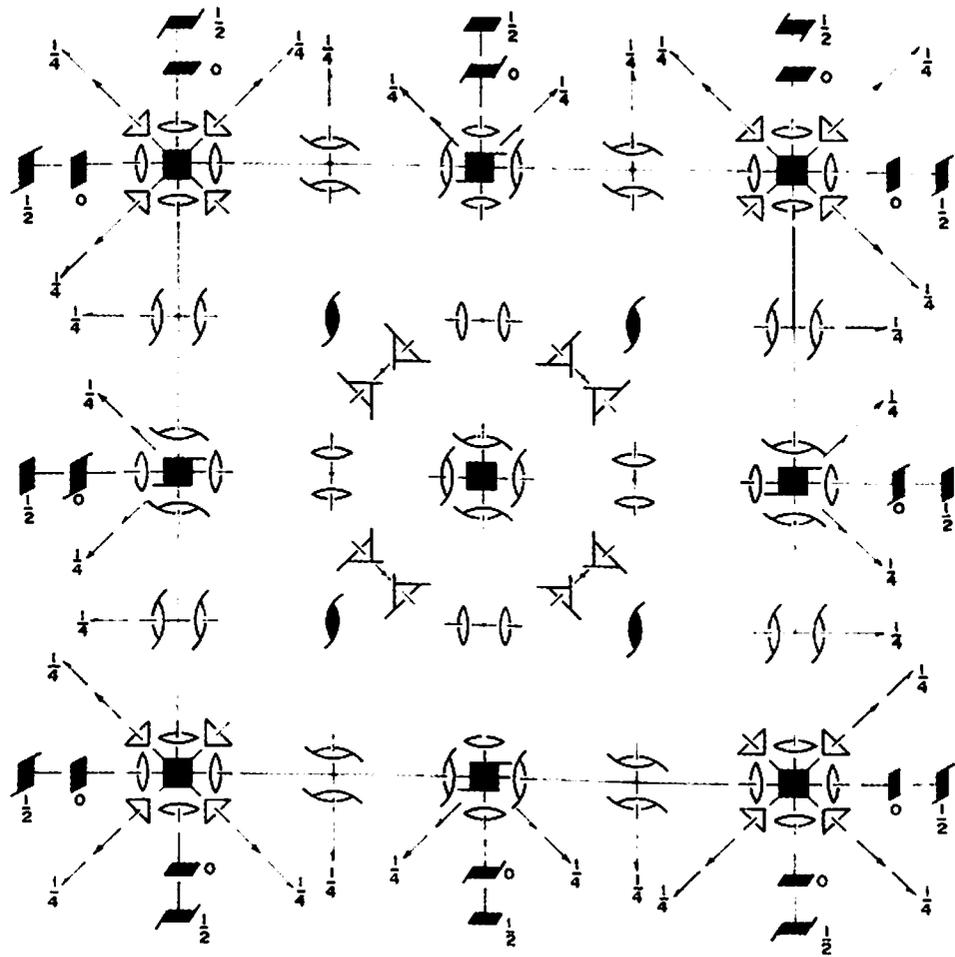
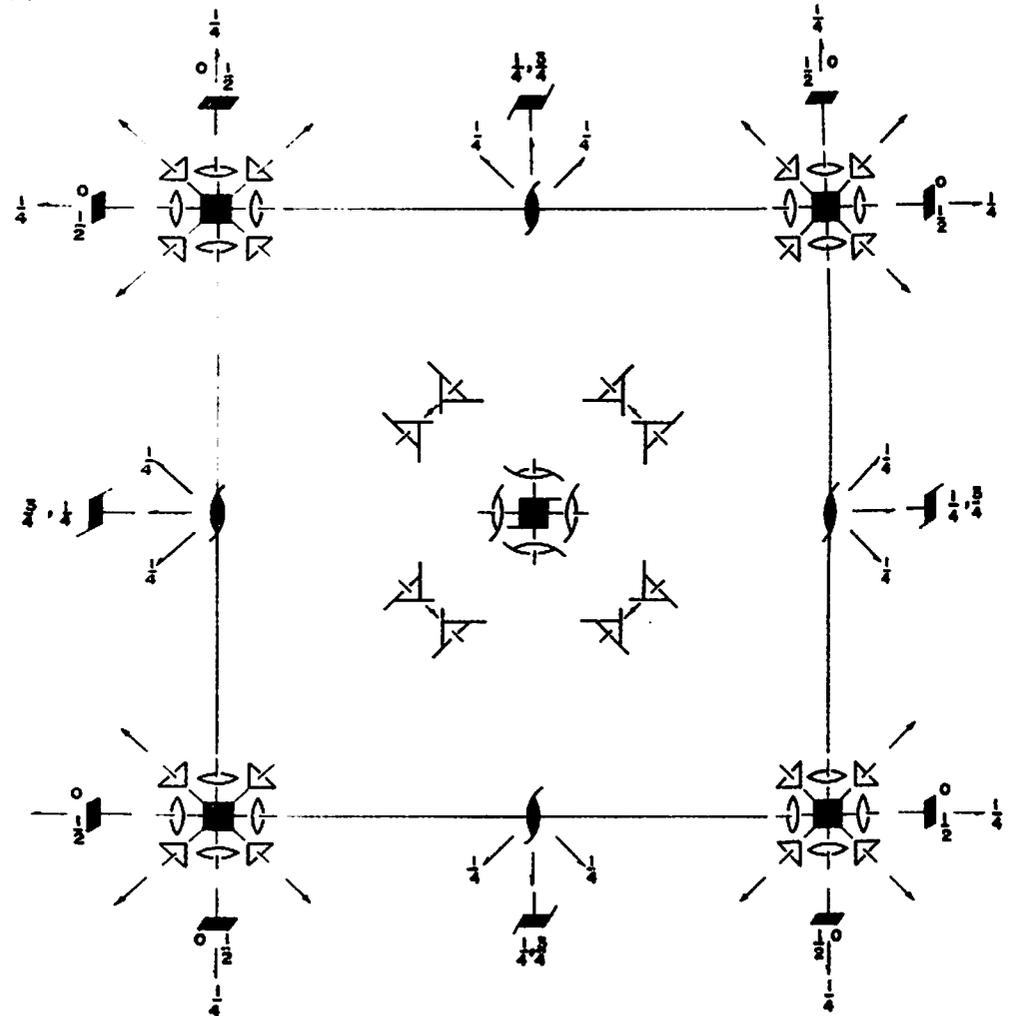


figura 9.30



Grupo I432

figura 9.31

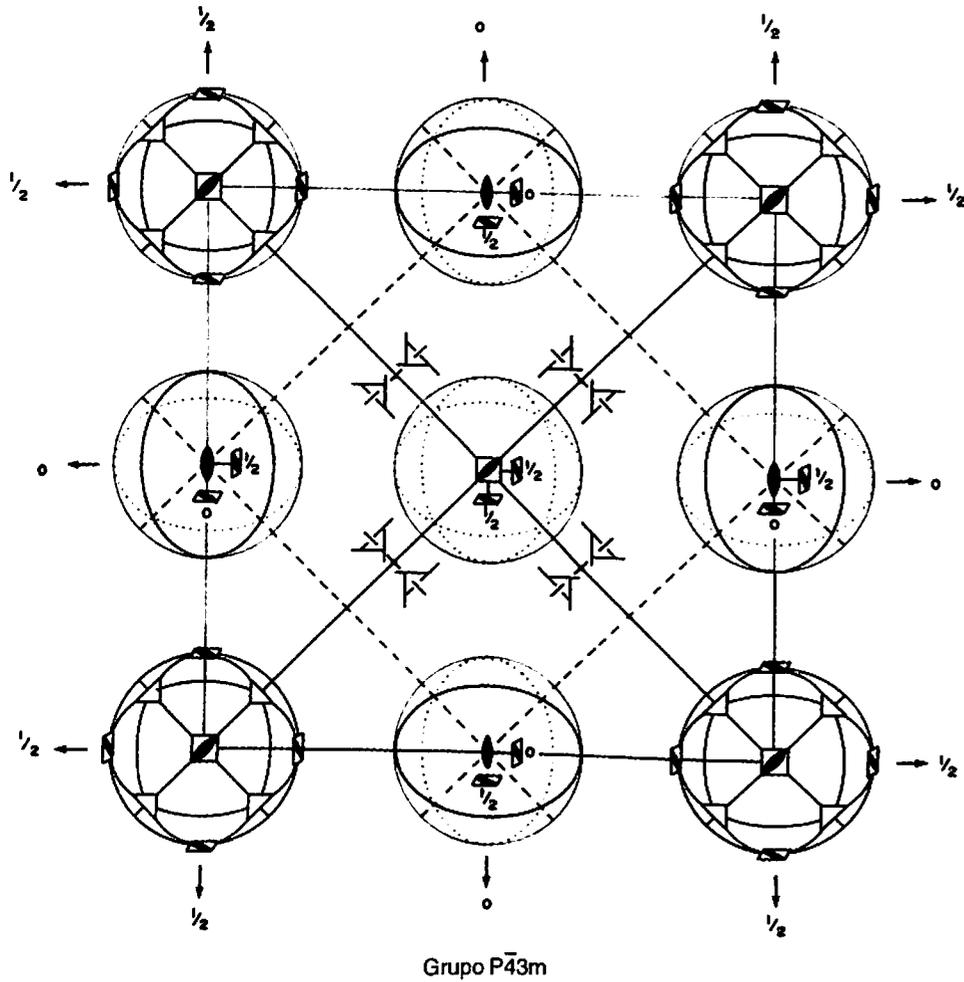


Grupo F432

**Los grupos espaciales cúbicos con simetría planar o central**

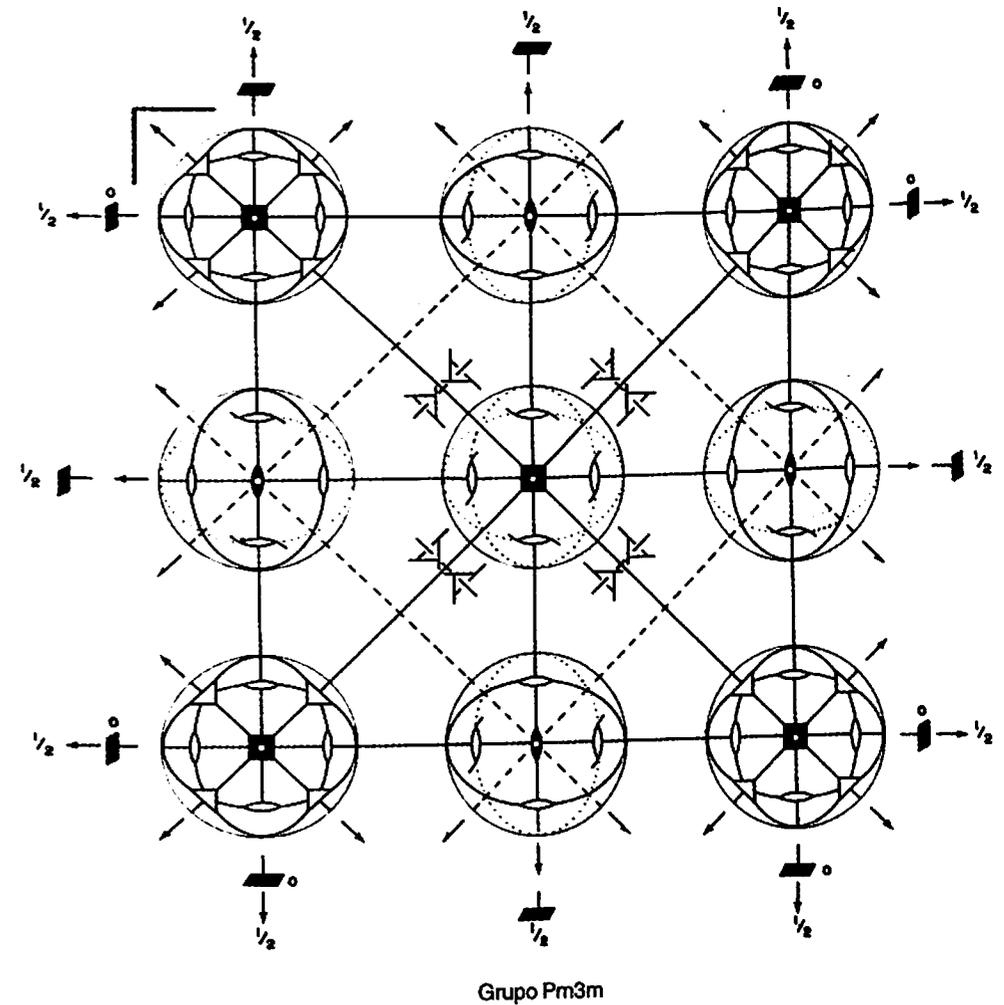
Otra manera de derivar el grupo puntual  $\bar{4}3m$ , es la de agregar al grupo 23 un plano especular con el que coincidan simultáneamente los ejes de órdenes 2 y 3 de rotaciones simples. La interacción mutua entre todos estos elementos de simetría convierte los ejes 2 en ejes 4. Estos nuevos planos de simetría especular, con orientación diagonal dentro de la celda elemental, se alternan con planos de deslizamiento, como se muestra en la figura 9.32 correspondiente al grupo  $P\bar{4}3m$ .

figura 9.32



Finalmente el grupo  $m\bar{3}m$  también se puede derivar del grupo puntual 432 agregándole centros de simetría, y según las posiciones que éstos ocupen dentro de la celda elemental, se obtendrán diversos grupos espaciales de esta clase. Por ejemplo, si el grupo  $P432$  interactúa con un centro de simetría que tenga las coordenadas 000, entonces se obtiene un grupo  $Pm\bar{3}m$  (figura 9.33). Estas mismas coordenadas para el centro de simetría aplicadas a los grupos  $I432$  y  $F432$  producen respectivamente los nuevos grupos  $Im\bar{3}m$  y  $Fm\bar{3}m$ . Por lo demás,

figura 9.33



debe recordarse que en el sistema cúbico, conociendo los grupos espaciales básicos, de ellos se pueden derivar los demás que son permitidos por la simetría cristalográfica espacial, mediante las sustituciones de unos elementos de simetría por otros, tal como lo hemos sintetizado en la *tabla 9.1*, según la posición que corresponda a un elemento en la nomenclatura internacional.

*tabla 9.1 Elementos de simetría intersustituibles en los grupos cúbicos.*

Tipo de Celda	Elementos de simetría sustituibles por los demás de su respectiva columna				
	m en la primera posición Grupos T	m en la primera posición Grupos O	2 en la primera posición Grupos T	4 en la primera posición Grupos O	m en la tercera posición Grupos O
P	n,a	n	2 <sub>1</sub>	4 <sub>1</sub> , 4 <sub>3</sub> , 4 <sub>2</sub>	n
I	a	a	2 <sub>1</sub>	4 <sub>1</sub>	d
F	d	d		4 <sub>1</sub>	c

Así por ejemplo, podemos esperar los siguientes grupos espaciales F derivados del grupo octaédrico m3m:

Fm3m, Fd3m, Fm3c y Fd3c

Por último, en la *tabla 9.2* presentamos la lista completa de los 230 grupos espaciales en el orden numérico acordado internacionalmente y sus expresiones, en las nomenclaturas de mayor aceptación y empleo en la literatura científica.

*tabla 9.2 Lista de los 230 grupos cristalográficos especiales - continúa*

Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin	Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin
<b>Sistema triclinico</b>					
1	C <sub>1</sub> <sup>1</sup>	P1	22	D <sub>2</sub> <sup>7</sup>	F222
2	C <sub>i</sub> <sup>1</sup>	P $\bar{1}$	23	D <sub>2d</sub> <sup>8</sup>	I222
<b>Sistema monoclinico</b>					
3	C <sub>2</sub> <sup>1</sup>	P2	24	D <sub>2</sub> <sup>9</sup>	I2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>
4	C <sub>2</sub> <sup>2</sup>	P2 <sub>1</sub>	25	C <sub>2v</sub> <sup>1</sup>	Pmm2
5	C <sub>2</sub> <sup>3</sup>	C2 (B2)	26	C <sub>2v</sub> <sup>2</sup>	Pmc2 <sub>1</sub>
6	C <sub>s</sub> <sup>1</sup>	Pm	27	C <sub>2v</sub> <sup>3</sup>	Pcc2
7	C <sub>s</sub> <sup>2</sup>	Pc (Pb)	28	C <sub>2v</sub> <sup>4</sup>	Pma2
8	C <sub>s</sub> <sup>3</sup>	Cm (Bm)	29	C <sub>2v</sub> <sup>5</sup>	Pca2 <sub>1</sub>
9	C <sub>s</sub> <sup>4</sup>	Cc (Bb)	30	C <sub>2v</sub> <sup>5</sup>	Pnc2
10	C <sub>2h</sub> <sup>1</sup>	P $\frac{2}{m}$	31	C <sub>2v</sub> <sup>7</sup>	Pmn2 <sub>1</sub>
11	C <sub>2h</sub> <sup>2</sup>	P $\frac{2_1}{m}$	32	C <sub>2v</sub> <sup>8</sup>	Pba2
12	C <sub>2h</sub> <sup>3</sup>	C $\frac{2}{m}$ (B $\frac{2}{m}$ )	33	C <sub>2v</sub> <sup>9</sup>	Pna2 <sub>1</sub>
13	C <sub>2h</sub> <sup>4</sup>	P $\frac{2}{c}$ (P $\frac{2}{b}$ )	34	C <sub>2v</sub> <sup>10</sup>	Pnn2
14	C <sub>2h</sub> <sup>5</sup>	P $\frac{2_1}{c}$ (P $\frac{2_1}{b}$ )	35	C <sub>2v</sub> <sup>11</sup>	Cmm2
15	C <sub>2h</sub> <sup>6</sup>	C $\frac{2}{c}$ (B $\frac{2}{b}$ )	36	C <sub>2v</sub> <sup>12</sup>	Cmc2 <sub>1</sub>
<b>Sistema ortorrómbico</b>					
16	D <sub>2</sub> <sup>1</sup>	P222	37	C <sub>2v</sub> <sup>13</sup>	Ccc2
17	D <sub>2</sub> <sup>2</sup>	P222 <sub>1</sub>	38	C <sub>2v</sub> <sup>14</sup>	Amm2
18	D <sub>2</sub> <sup>3</sup>	P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2	39	C <sub>2v</sub> <sup>15</sup>	Abm2
19	D <sub>2</sub> <sup>4</sup>	P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>	40	C <sub>2v</sub> <sup>16</sup>	Ama2
20	D <sub>2</sub> <sup>5</sup>	C222 <sub>1</sub>	41	C <sub>2v</sub> <sup>17</sup>	Aba2
21	D <sub>2</sub> <sup>6</sup>	C222	42	C <sub>2v</sub> <sup>18</sup>	Fmm2
			43	C <sub>2v</sub> <sup>19</sup>	Fdd2
			44	C <sub>2v</sub> <sup>20</sup>	Imm2
			45	C <sub>2v</sub> <sup>21</sup>	Iba2
			46	C <sub>2v</sub> <sup>22</sup>	Ima2

tabla 9.2 Lista de los 230 grupos cristalográficos especiales - continúa

Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin	Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin
47	$D_{2h}^1$	<i>Pmmm</i>	66	$D_{2h}^{20}$	<i>Crcm</i>
48	$D_{2h}^2$	<i>Pnmm</i>	67	$D_{2h}^{21}$	<i>Cmma</i>
49	$D_{2h}^3$	<i>Pccm</i>	68	$D_{2h}^{22}$	<i>Ccca</i>
50	$D_{2h}^4$	<i>Pban</i>	69	$D_{2h}^{23}$	<i>Fmmm</i>
51	$D_{2h}^5$	<i>Pmma</i>	70	$D_{2h}^{24}$	<i>Fddd</i>
52	$D_{2h}^6$	<i>Pnna</i>	71	$D_{2h}^{25}$	<i>Immm</i>
53	$D_{2h}^7$	<i>Pmna</i>	72	$D_{2h}^{26}$	<i>Ibam</i>
54	$D_{2h}^8$	<i>Pcca</i>	73	$D_{2h}^{27}$	<i>Ibca</i>
55	$D_{2h}^9$	<i>Pbam</i>	74	$D_{2h}^{28}$	<i>Imma</i>
56	$D_{2h}^{10}$	<i>Pccn</i>		<b>Sistema tetragonal</b>	
57	$D_{2h}^{11}$	<i>Pbcm</i>	75	$C_4^1$	<i>P4</i>
58	$D_{2h}^{12}$	<i>Pnmm</i>	76	$C_2^2$	<i>P4_1</i>
59	$D_{2h}^{13}$	<i>Pmmm</i>	77	$C_4^3$	<i>P4_2</i>
60	$D_{2h}^{14}$	<i>Pbcn</i>	78	$C_4^4$	<i>P4_3</i>
61	$D_{2h}^{15}$	<i>Pbca</i>	79	$C_4^5$	<i>I4</i>
62	$D_{2h}^{16}$	<i>Pnma</i>	80	$C_4^6$	<i>I4_1</i>
63	$D_{2h}^{17}$	<i>Cmcm</i>	81	$S_4^1$	$\bar{P}4$
64	$D_{2h}^{18}$	<i>Cmca</i>	82	$S_4^2$	$\bar{I}4$
65	$D_{2h}^{19}$	<i>Cmmm</i>	83	$C_{4h}^1$	$P\frac{4}{m}$
66	$D_{2h}^{20}$	<i>Cccm</i>	84	$C_{4h}^2$	$P\frac{4_2}{m}$
67	$D_{2h}^{21}$	<i>Cmma</i>	85	$C_{4h}^3$	$P\frac{4}{n}$
68	$D_{2h}^{22}$	<i>Ccca</i>	86	$C_{4h}^4$	$P\frac{4_2}{n}$
69	$D_{2h}^{23}$	<i>Fmmm</i>	87	$C_{4h}^5$	$I\frac{4}{m}$
70	$D_{2h}^{24}$	<i>Fddd</i>	88	$C_{4h}^6$	$I\frac{4_1}{a}$
71	$D_{2h}^{25}$	<i>Immm</i>	89	$D_4^1$	<i>P422</i>

tabla 9.2 Lista de los 230 grupos cristalográficos especiales - continúa

Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin	Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin
90	$D_4^2$	<i>P42_12</i>	115	$D_{2d}^5$	$\bar{P}4m2$
91	$D_4^3$	<i>P4_122</i>	116	$D_{2d}^6$	$\bar{P}4c2$
92	$D_4^4$	<i>P4_12_12</i>	117	$D_{2d}^7$	$\bar{P}4b2$
93	$D_4^5$	<i>P4_222</i>	118	$D_{2d}^8$	$\bar{P}4n2$
94	$D_4^6$	<i>P4_22_12</i>	119	$D_{3d}^9$	$\bar{I}4m2$
95	$D_4^7$	<i>P4_322</i>	120	$D_{2d}^{10}$	$\bar{I}4c2$
96	$D_4^8$	<i>P4_32_12</i>	121	$D_{2d}^{11}$	$\bar{I}42m$
97	$D_4^9$	<i>I422</i>	122	$D_{2d}^{12}$	$\bar{I}42d$
98	$D_4^{10}$	<i>I4_122</i>	123	$D_{4h}^1$	$P\frac{4}{m}mm$
99	$C_{4v}^1$	<i>P4mm</i>	124	$D_{4h}^2$	$P\frac{4}{m}cc$
100	$C_{4v}^2$	<i>P4bm</i>	125	$D_{4h}^3$	$P\frac{4}{n}bm$
101	$C_{4v}^3$	<i>P4_2cm</i>	126	$D_{4h}^4$	$P\frac{4}{n}nc$
102	$C_{4v}^4$	<i>P4_2nm</i>	127	$D_{4h}^5$	$P\frac{4}{m}bm$
103	$C_{4v}^5$	<i>P4cc</i>	128	$D_{4h}^6$	$P\frac{4}{m}nc$
104	$C_{4v}^6$	<i>P4nc</i>	129	$D_{4h}^7$	$P\frac{4}{n}mm$
105	$C_{4v}^7$	<i>P4_2mc</i>	130	$D_{4h}^8$	$P\frac{4}{n}cc$
106	$C_{4v}^8$	<i>P4_2bc</i>	131	$D_{4h}^9$	$P\frac{4_2}{m}mc$
107	$C_{4v}^9$	<i>I4mm</i>	132	$D_{4h}^{10}$	$P\frac{4_2}{m}cm$
108	$C_{4v}^{10}$	<i>I4cm</i>	133	$D_{4h}^{11}$	$P\frac{4_2}{n}bc$
109	$C_{4v}^{11}$	<i>I4_1md</i>	134	$D_{4h}^{12}$	$P\frac{4_2}{n}nm$
110	$C_{4v}^{12}$	<i>I4_1cd</i>	135	$D_{4h}^{13}$	$P\frac{4_2}{m}bc$
111	$D_{2d}^1$	$\bar{P}42m$	136	$D_{4h}^{14}$	$P\frac{4_2}{m}nm$
112	$D_{2d}^2$	$\bar{P}42c$	137	$D_{4h}^{15}$	$P\frac{4_2}{n}mc$
113	$D_{2d}^3$	$\bar{P}42_1m$	138	$D_{4h}^{16}$	$P\frac{4_2}{n}cm$
114	$D_{2d}^4$	$\bar{P}42_1c$	139	$D_{4h}^{17}$	$I\frac{4}{m}mm$

tabla 9.2 Lista de los 230 grupos cristalográficos especiales - continúa

Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin	Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin
140	$D_{4h}^{18}$	$I \frac{4}{m} cm$	164	$D_{3d}^3$	$P\bar{3}m1$
141	$D_{4h}^{19}$	$I \frac{4_1}{a} md$	165	$D_{3d}^4$	$P\bar{3}c1$
142	$D_{4h}^{20}$	$I \frac{4_1}{a} cd$	166	$D_{3d}^5$	$R\bar{3}m$
Sistema hexagonal - Subsistema trigonal			167	$D_{3d}^6$	$R\bar{3}c$
143	$C_3^1$	$P3$	Sistema hexagonal		
144	$C_3^2$	$P3_1$	168	$C_6^1$	$P6$
145	$C_3^3$	$P3_2$	169	$C_6^2$	$P6_1$
146	$C_3^4$	$R3$	170	$C_6^3$	$P6_5$
147	$C_{3i}^1$	$P\bar{3}$	171	$C_6^4$	$P6_2$
148	$C_{3i}^2$	$R\bar{3}$	172	$C_6^5$	$P6_4$
149	$D_3^1$	$P312$	173	$C_6^6$	$P6_3$
150	$D_3^2$	$P321$	174	$C_{3h}^1$	$P\bar{6}$
151	$D_3^3$	$P3_112$	175	$C_{6h}^1$	$P \frac{6}{m}$
152	$D_3^4$	$P3_121$	176	$C_{6h}^2$	$P \frac{6_3}{m}$
153	$D_3^5$	$P3_212$	177	$D_6^1$	$P622$
154	$D_3^6$	$P3_221$	178	$D_6^2$	$P6_122$
155	$D_3^7$	$R32$	179	$D_6^3$	$P6_522$
156	$C_{3v}^1$	$P3m1$	180	$D_6^4$	$P6_222$
157	$C_{3v}^2$	$P31m$	181	$D_6^5$	$P6_422$
158	$C_{3v}^3$	$P3c1$	182	$D_6^6$	$P6_322$
159	$C_{3v}^4$	$P31c$	183	$C_{6v}^1$	$P6mm$
160	$C_{3v}^5$	$R3m$	184	$C_{6v}^2$	$P6cc$
161	$C_{3v}^6$	$R3c$	185	$C_{6v}^3$	$P6_3cm$
162	$D_{3d}^1$	$P\bar{3}1m$	186	$C_{6v}^4$	$P6_3mc$
163	$D_{3d}^2$	$P\bar{3}1c$	187	$D_{3h}^1$	$P\bar{6}m2$

tabla 9.2 Lista de los 230 grupos cristalográficos especiales

Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin	Número del grupo en las tablas internacionales	Nomenclatura de Schoenflies	Nomenclatura internacional o de Hermann-Mauguin
188	$D_{3h}^2$	$P\bar{6}c2$	211	$O_5$	$I432$
Subsistema hexagonal			212	$O_6$	$P4_332$
189	$D_{3h}^3$	$P\bar{6}2m$	213	$O_7$	$P4_132$
190	$D_{3h}^4$	$P\bar{6}2c$	214	$O_8$	$I4_132$
191	$D_{6h}^1$	$P \frac{6}{m} mm$	215	$T_d^1$	$P\bar{4}3m$
192	$D_{6h}^2$	$P \frac{6}{m} cc$	216	$T_d^2$	$F\bar{4}3m$
193	$D_{6h}^3$	$P \frac{6_3}{m} cm$	217	$T_d^3$	$I\bar{4}3m$
194	$D_{6h}^4$	$P \frac{6_3}{m} mc$	218	$T_d^4$	$P\bar{4}3n$
Sistema cúbico			219	$T_d^5$	$F\bar{4}3c$
195	$T^1$	$P23$	220	$T_d^6$	$I\bar{4}3d$
196	$T^2$	$F23$	221	$O_h^1$	$Pm3m$
197	$T^3$	$I23$	222	$O_h^2$	$Pn3n$
198	$T^4$	$P2_13$	223	$O_h^3$	$Pm3n$
199	$T^5$	$I2_13$	224	$O_h^4$	$Pn3m$
200	$T_h^1$	$Pm3$	225	$O_h^5$	$Fm3m$
201	$T_h^2$	$Pn3$	226	$O_h^6$	$Fm3c$
202	$T_h^3$	$Fm3$	227	$O_h^7$	$Fd3m$
203	$T_h^4$	$Fd3$	228	$O_h^8$	$Fd3c$
204	$T_h^5$	$Im3$	229	$O_h^9$	$Im3m$
205	$T_h^6$	$Po3$	230	$O_h^{10}$	$Ia3d$
206	$T_h^7$	$Ia3$			
207	$O_1$	$P432$			
208	$O_2$	$P4_232$			
209	$O_3$	$F432$			
210	$O_4$	$F4_132$			



## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ANSHELES, O. M. Principios de Cristalografía. *Universidad de Leningrado, Leningrado, 1952 (en ruso).*
2. BLUNDEL, T. L., JOHNSON, L. N. Protein Crystallography. *Academic Press, New York, 1976.*
3. BUERGER, Martin J. Elementary Crystallography. *John Wiley and Sons, New York, 1963.*
4. DALTON, John; AVOGADRO, Amadeo; AMPERE, André-Marie. Teoría atómico-molecular. *Universitaria, Buenos Aires, 1976.*
5. FAURE, R.; KAUFMANN, A.; DENIS-PAPIN, M. Matemáticas modernas *Parainfo, Madrid, 1969.*
6. FEYNMAN, Richard. The Character of Physical Law. *Cox and Wyman, London, 1965.*
7. International Tables for X-ray Crystallography VI. *Published for the International Union of Crystallography. Kynoch Press, Birmingham, 1979.*
8. KARAPETIANTS, M. J.; DRAKIN, S. I. Estructura de la sustancia. *Mir, Moscú, 1974.*
9. MADELUNG, E. El Aparato matemático de la física. *Nauka, Moscú, 1968 (en ruso).*
10. OVCHINOKOV, Nikoali F. L. os principios de conservación. *Nauka, Moscú, 1966 (en ruso).*
11. POPOV, G. M.; SHAFRANOVSKY, I. I. Cristalografía. *Escuela Superior, Moscú, 1972 (en ruso).*



12. SHAFRANOVSKY, Ilarion I. Historia de la Cristalografía, T. I. Desde la antigüedad hasta el comienzo del siglo XIX. *Nauka, Leningrado, 1978 (en ruso).*

13. SHAFRANOVSKY, Ilarion I. Historia de la Cristalografía, T. II. El siglo XIX. *Nauka, Leningrado, 1980.*

14. SHUVALOV, L. A., et. al. Cristalografía Moderna. T. IV Propiedades Físicas de los cristales. *Nauka, Moscú, 1981 (en ruso).*

15. SIROTIN Yu I.; SHASKOLSKAYA M. P. Fundamentos de Cristalografía. *Nauka, Moscú, 1979 (en ruso).*

16. VAINSHEIN, B. K.; FRIDKIN, V. M.; INDENBOM, V. Cristalografía Moderna, T. II. La estructura de los cristales. *Nauka, Moscú, 1979 (en ruso).*

17. WEYL, Hermann. *Symmetry. Princeton University, 1952.*

18. ZAGALSKAYA, Yu. G.; LITVINSKAYA, G. P. Microcristalografía Geométrica. *Universidad de Moscú, Moscú, 1976 (en ruso)*

## BIBLIOGRAFÍA

ANSHELES, O. M. Método abreviado para la determinación de los símbolos de las caras de los cristales. *Real Sociedad Española de Historia Natural, T. V., Madrid, 1930.*

BELOV, Nicolai V. Método de clases para la deducción de los grupos espaciales de simetría. *Trabajos del Instituto de Cristalografía de la Academia de Ciencias de la URSS, sexta entrega, 1951.*

BERMUDEZ, Polonio Joaquín. Método de Difracción de Rayos X. *Pirámide, Madrid, 1981.*

BETEJTIN, A. F. Mineralogía. *Literatura Geológica, Moscú, 1950 (en ruso).*

BOLDIREV, A. K. Cristalografía. *Editorial Kubuc, Leningrado, 1930 (en ruso).*

CORNELIUS, S.; HURLBUT Jr. Manual de Mineralogía de Dana. *Reverté, Barcelona, 1981.*

CHORNOV, A. A.; et. al. Cristalografía Moderna, T. III. La formación de los cristales. *Nauka, Moscú, 1980.*

DOBROVOLSKY, Vsevolod B. Mineralogía. *Prosvescheñie, Moscú, 1974 (en ruso).*

DUCROS, Pierre; LAJZEROWICZ, Bonnetali Janine. Problemas de Cristalografía. *Paraninfo, Madrid, 1968.*

FABREGAT, Francisco J. Cristalografía Geométrica. *UNAM, México, 1974.*

FLINT, Eugueni. Principios de Cristalografía, *Ed. Paz, Moscú, 1966.*

FRANK-KAMENIETSKY, V. A.; DUBOV, Piotr H.; SHAFRANOVSKY, Ilarion I. Simetría Clásica. *Universidad de Leningrado, 1984.*

FRANK-KAMENIETSKY, V. A.; DUBOV, Piotr H.; SHAFRANOVSKY, Ilarion I. Simetría Generalizada. *Universidad de Leningrado, 1984.*

GODOVIKOV, Alexander A. Mineralogía. *Niedra, Moscú, 1983.*

GUMILIEVSKY, Serguei A.; KIRSHON, Valentina M.; LUGOVSKI, Guerman P. Cristalografía y Mineralogía. *Escuela Superior, Moscú, 1972.*

KOSLOVA, Olga G. Crecimiento y Morfología de los Cristales. *Universidad de Moscú, Moscú, 1980 (en ruso).*

KOSTOV, Ivan. Cristalografía. *Mir, Moscú, 1965 (en ruso).*

LEITWEIN, F.; ZOMMER-KULACHEVSKY, Ch. Cristalografía. *Escuela Superior, Moscú, 1968 (en ruso).*

LIPSON, M.; STEEPLE, M. Interpretation of X-ray Powder Diffraction Patterns. *Macmillan, London, 1970.*

LLERAS CODAZZI, Ricardo. Los minerales de Colombia. *Imprenta Nacional, Bogotá, 1927.*

MAKIEVSKY, Vladimir A. Morfología de los Cristales. *Niedra, Leningrado, 1983 (en ruso).*

NARDOV, Vladimir V. Guía Práctica de Cristalografía Geométrica. *Universidad de Leningrado, 1974 (en ruso).*

ORMONT, Boris F. Introducción a la Físico-química y Cristaloquímica de semiconductores. *Escuela Superior, Moscú, 1983 (en ruso).*

PENKALA, Tadeusz. Ensayos de Cristalografía. *Jimia, Leningrado, 1974 (en ruso).*

PERELOMOVA, N.; TAGUIEVA, M. Problemas de Cristalografía. *Mir, Moscú, 1975.*

SANDS, Donald E. Introducción a la Cristalografía. *Barcelona, Reverté, 1971.*

SARANCHINA, Galina M.; KOZHEVNIKOV, Vladimir N. El Método de Fedorov. *Niedra, Leningrado, 1985 (en ruso).*

SCHMEIL, Otto; PARDILLO, Francisco. Elementos de mineralogía. *Gustavo Gili, Barcelona, 1926.*

TOROPOV, Nikita A.; BULAK, Lidia N. Cristalografía y Mineralogía. *Ed. de Literatura sobre construcción, Leningrado, 1972 (en ruso).*

SIROTIN Y. I., SHAKOLSKAYA M. P. Fundamentos de Cristalografía. *Nauka, Moscú, 1979 (en ruso).*

SHUBNIKOV, A. B. Cristalografía óptica. *Academia de Ciencias de la URSS, Moscú, 1950 (en ruso).*

SUSHINSKY, P. P. Cristalografía. *Editorial del Estado, Moscú, 1923.*

VAINSHTEIN, B. K. Cristalografía Moderna, T. I. La Simetría de los Cristales. Métodos de Cristalografía Estructural. *Nauka, Moscú, 1979.*

YUSHKIN, Nikolai P.; SHAFRANOVSKY, Ilarion I.; YANULOV, Kiril P. Las leyes de la simetría en la mineralogía. *Nauka, Leningrado, 1987 (en ruso).*

ZORKY, Nikolai P. Simetría de Moléculas y Estructuras Cristalinas. *Universidad de Moscú, Moscú, 1986.*



PUBLICACIONES DE LA ACADEMIA COLOMBIANA  
DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES

**COLECCIÓN JORGE ALVAREZ LLERAS**

- Volumen 1- Mora-Osejo, L.E. 1987. Estudios morfológicos, autoecológicos y sistemáticos en Angiospermas. 1/16. 196 pp, 75 figs.
- Volumen 2- Murillo, M.T. & M.A. Harker. 1990. Helechos y plantas afines de Colombia. 1/16. 326 pp, 145 figs.
- Volumen 3- Lozano-Contreras, G. 1994. Las Magnoliaceae del Neotrópico 1/16, 148 pp, 46 figs.
- Volumen 4- Eslava Ramírez, J.A. 1994. Aspectos relacionados con la erupción del volcán Nevado del Ruiz. 1/16, 174 pp, 46 figs.
- Volumen 5- Rocha de Campos, M. 1994. Diversidad en Colombia de los cangrejos del género *Neostrengeria*. 1/16 iv + 144 pp, 47 figs.
- Volumen 6- Mora-Osejo, L. E. & Ii. Sturm. 1994. Estudios ecológicos del páramo y del bosque altoandino, cordillera Oriental de Colombia. Tomos 1 y 2, 1/16, 716 pp, 190 figs.
- Volumen 7- Díaz, J.M., J. Garzón-Ferreira & S. Zea. 1995. Los arrecifes coralinos de la isla de San Andrés, Colombia, estado actual y perspectivas para su conservación. 1/16, 152 pp, 15 figs, 14 tablas, 9 fotografías.
- Volumen 8- Eslava Ramírez, J.A. 1995. Régimen de la presión atmosférica en Colombia. 1/16, 152 pp, 94 figs, 59 tablas.
- Volumen 9- Donato, J.Ch., L. E. González & C. L. Rodríguez. 1996. Ecología de dos sistemas acuáticos de páramo. 1/16, 168 pp, 53 figs, 14 tablas, 9 fotografías.
- Volumen 10- Andrade-C. M., G. Amat & F. Fernández. (Eds.) 1996. Insectos de Colombia - Estudios escogidos. 1/16, 544 pp, 145 figs, tablas y mapas.
- Volumen 11- González, F. 1998. Inventario preliminar de gases de efecto invernadero en Colombia, 1990, Fuentes y sumideros. 1/16, xiv + 174 pp, 108 figs, tablas y gráficas.
- Volumen 12- Díaz-Piedrahita, S. & J. Cuatrecasas. 1999. Asteráceas de la flora de Colombia, Senecioneae I, géneros *Dendrophorbium* y *Pentacalia*. 1/16, 392 pp, 110 figs, 24 mapas.
- Volumen 13- Amat, Germán; Andrade-C., M. Gonzalo & Fernández, Fernando. 1999. Insectos de Colombia. 1/16, 438 pp. + tablas, figuras y mapas.
- Volumen 14- Rodríguez, H. & F González. Opciones para la reducción de emisiones de gases de efecto invernadero (GEI) en Colombia. 1/16, 262 pp.
- Volumen 15- Rodríguez, H. & F González. Portafolio colombiano de proyectos para el MDL. - Sector Energía- 1/16, 164 pp.
- Volumen 16- Espinosa, Baquero A. 2001. Erupciones históricas de los volcanes colombianos. 1/16, 292 pp.
- Volumen 17- Mora Osejo L. E. 2001. Contribución al estudio comparativo de la conductancia y de la transpiración foliar de especies de plantas del páramo. 1/16.

**COLECCIÓN ENRIQUE PEREZ ARBELAEZ**

- Volumen 1- Memorias del seminario en conmemoración del centenario de Erwin Schrödinger. 1987, 1/16, 221 pp.
- Volumen 2- Díaz-Piedrahita, S. & A. Lourteig. 1989. Génesis de una flora. 1/16, vii. + 362 pp, 35 figs.
- Volumen 3- Cubillos, G., F.M. Poveda & J.L. Villaveces. 1989. Historia epistemológica de la Química. 1/16, 128 pp.
- Volumen 4- Hernández de Alba, G. & A. Espinosa. 1991. Tratados de minería y estudios geológicos de la época colonial, 1616-1803, 1/16 xii + 92 pp, 1 fig.
- Volumen 5- Díaz-Piedrahita, S. (ed.) 1991. Jasé Triana, su vida, su obra y su época. 1/16, viii + 188 pp, 73 figs.
- Volumen 6- Díaz-Piedrahita, S. 1991. La Botánica en Colombia, hechos notables en su desarrollo. 1/16, x + 126 pp. 30 figs, (reimpreso 1997).
- Volumen 7- Mantilla, L.C. & S. Díaz-Piedrahita. 1992. Fray Diego García, su vida y su obra científica en la Expedición Botánica. 1/16, xv + 284, 14 figs. (reimpreso 1995).
- Volumen 8- Arias de Greiff, J. 1993. Historia de la Astronomía en Colombia. 1/16, 200 pp, 32 figs.

- Volumen 9- Lértora Mendoza, C. 1995. Fuentes para el estudio de las ciencias exactas en Colombia. 1/16, 316 pp.
- Volumen 10- Gauss, C. F. 1995. Disquisitiones Arithmeticae. Traductores: H. Barrantes, M. Josephy & A. Ruiz Zúñiga. 1/16, 540 pp.
- Volumen 11- Murillo Quinche, L.M. 1997. Obra selecta. 1/16, x + 188 pp, 29 figs, 4 mapas.
- Volumen 12- Romero Beltrán, A. 1997. La investigación de las dolencias infecciosas en la historia. 1/16, xiv + 540 pp.
- Volumen 13- Barrantes, H. & A. Ruiz. 1998. La historia del Comité Interamericano de Educación Matemática. 1/16, x + 198 pp. (español e inglés). Edición electrónica paralela.
- Volumen 14- Díaz-Piedrahita, S. Los dos Mutis y Matis. Orígenes de la anatomía vegetal y la sinanterología en América. 1/16 (en prensa)

#### COLECCIÓN JULIO CARRIZOSA VALENZUELA

- Volumen 1- Castillo, G. 1992. Física Cuántica, teoría y aplicaciones. Tomo I, 1/16, xxxii + 410, 77 figs.
- Volumen 2- Bernal de Ramírez, I. 1993. Análisis de alimentos. 1/16, xviii + 314 pp, 28 figs. (reimpreso 1998).
- Volumen 3- Castillo, G. 1994. Física Cuántica, teoría y aplicaciones. Tomo II. 1/16, xx + 406 pp, 49 figs.
- Volumen 4- Cáceres, D. (ed.). 1995. Creando ciencia crean docencia. 1/16, 140 pp, 38 figs.
- Volumen 5- Romero, C.M. & L.H. Blanco. 1996. Tópicos de Química Básica. 1/16, 240 pp, 56 figs.
- Volumen 6- Peña, G. & M. Pinto. 1996. Mamíferos más comunes en sitios precerámicos de la sabana de Bogotá. 1/16, 98 pp, 1 mapa, 6 dibujos a color, 18 láminas y 48 gráficos.
- Volumen 7- López, C. 1998. Mecánica Newtoniana. 1/16, 280 pp, 69 figs.
- Volumen 8- Charris, C. J., De Castro K., R. & J. Varela B. 2000. Fundamentos Análisis Complejo de una variable. 1/16, 384 pp.
- Volumen 9- Varela, J. 2000. Elementos Geométricos de la Cristalografía. 1/16, 272 pp, 17 tablas, 146 figs.

#### COLECCIÓN MEMORIAS

- Volumen 1- (1994) Memorias del Seminario Nacional "El quehacer teórico y las perspectivas holista y reduccionista. 1/16, viii + 184 pp.
- Volumen 2- (1994) Memorias del Seminario Konrad Lorenz sobre Etología. 1/16, iv + 38 pp.
- Volumen 3- (1995) Memorias del Seminario-taller sobre Alta Montaña Colombiana. 1/16, 116 pp.
- Volumen 4- (1996) Memorias del Primer Congreso Nacional de Neurocomputación. 1/16, xiv + 184 pp.
- Volumen 5- (1996) Memorias del Primer Congreso Nacional de sobre Cambio Climático. 1/16, 138 pp, 9 figs.
- Volumen 6- (1996) Memorias del Coloquio "Ciencia, tecnología y cultura". 1/16, xii + 198 pp.
- Volumen 7- (1996) Memorias de la III Escuela de verano en Geometría Diferencial, ecuaciones diferenciales parciales y análisis numérico. 1/16, xiv + 174 pp.
- Volumen 8- (1996) Memorias del Seminario de Ciencia Teórica. 1/16, xv + 170 pp.
- Volumen 9- (1997) Memorias del Seminario en conmemoración de los 440 años del nacimiento de René Descartes. 1/16, xii + 174 pp.

#### EDICIONES ESPECIALES

- Francisco José de Caldas, su vida, su personalidad, su obra y el descubrimiento de la hipsometría. 1958. 1116 refilado. 94 pp.
- Alexander von Humboldt en Colombia. Extractos de sus diarios. 1982. Arias de Greiff, J. (ed.). 1/8 refilado. 286 pp., 20 figs.
- Status and problems of Science in Latin America and the Caribbean. 1990. Guardiola, M.L., J.L. Villaveces & G. Violini (eds.). 1/16, 542 pp.
- Science in Latin America and the Caribbean and its role in regional development. 1992. Hamende, A., M.H. Hassan, J.L. Villaveces & G. Violini (eds.) 1/16, 2 vols. 824 pp.
- El cambio global, ciencia para entender el mañana. 1998. Lozano, J. (ed.), carta, 322 pp. Figs, mapas y gráficos.
- Tradición Académica. Diccionario Biográfico y Bibliográfico de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, 1/16, x + 434 pp.

Las anteriores publicaciones pueden ser solicitadas directamente a la Academia, Apartado 44763, Bogotá, D.C., Fax (571) 2443186 Tel. (571) 3414805 Trans. 27 No. 39A - 63/67 - E.Mail: [accefyn@org.co](mailto:accefyn@org.co)

Se ofrecen en venta o mediante intercambio por publicaciones similares.  
Mayor información a través de Internet: URL: <http://www.accefyn.org.co>

Elementos Geométricos de la *Cristalografía*



UNIVERSIDAD  
**NACIONAL**  
DE COLOMBIA

Sede Santafé de Bogotá

