Expresió matricial de les operacions de simetria

Cada una de les operacions de simetria es pot descriure com una transformació d'eixos de coordenades, de tal manera que les coordenades de la imatge d'un punt es poden trovar aplicant la coresponent matriu dels cosinus directors entre els dos sistemes (l'original i el corresponent a la transformació).

Si els eixos són *x*, *y* i *z*, després d'aplicar l'operació de simetria, s'han transformat en els *x', y'* i *z'*, els cosinus directors són els que corresponen a aquesta taula

	x	*y*	*z*
x'	R_{11}	R_{12}	R_{13}
y'	R_{21}	R_{22}	R_{23}
z'	R_{31}	R_{32}	R_{33}

on R_{ij} (i,j=1,2,3) són els cosinus dels angles entre el primer sistema d'eixos i el transformat, així per exemple R_{23} és el cosinus entre el segon eix original i el tercer després d'aplicar la transformació.

D'aquesta manera, les coordenades d'un punt (x,y,z) i les de la seva imatge (x',y',z') es relacionen per la matriu R i el vector que posiciona l'element de simetria, que depen de la posició de l'element i del seu ordre:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{pmatrix}$$

obviament, si l'element de simetria que dóna lloc a la transformació està en el origen de coordenades, $x_o=y_o=z_o=0$. Per un element d'ordre 2 (plans de simetria, eixos binari i centres d'inversió) el vector val $(2x_0,2y_0,2z_0)$.

Simetria respecte d'un pla (m): reflexió

Es poden considerar diverses orientacions possibles dels plans de reflexió, a la figura se n'han representat algunes com exemple: (001),(010), (100) i (110).

En el cas de l'orientació (001), els eixos *x* i *y* queden invariants, mentre que el *z* passa a -*z*, i el -*z* a *z*. Per tant, la matriu de cosinus directors entre els dos sistemes d'eixos (l'original i el transformat) és

$$\begin{pmatrix} \cos 0^o & \cos 90^o & \cos 90^o \\ \cos 90^o & \cos 0^o & \cos 90^o \\ \cos 90^o & \cos 90^o & \cos 180^o \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

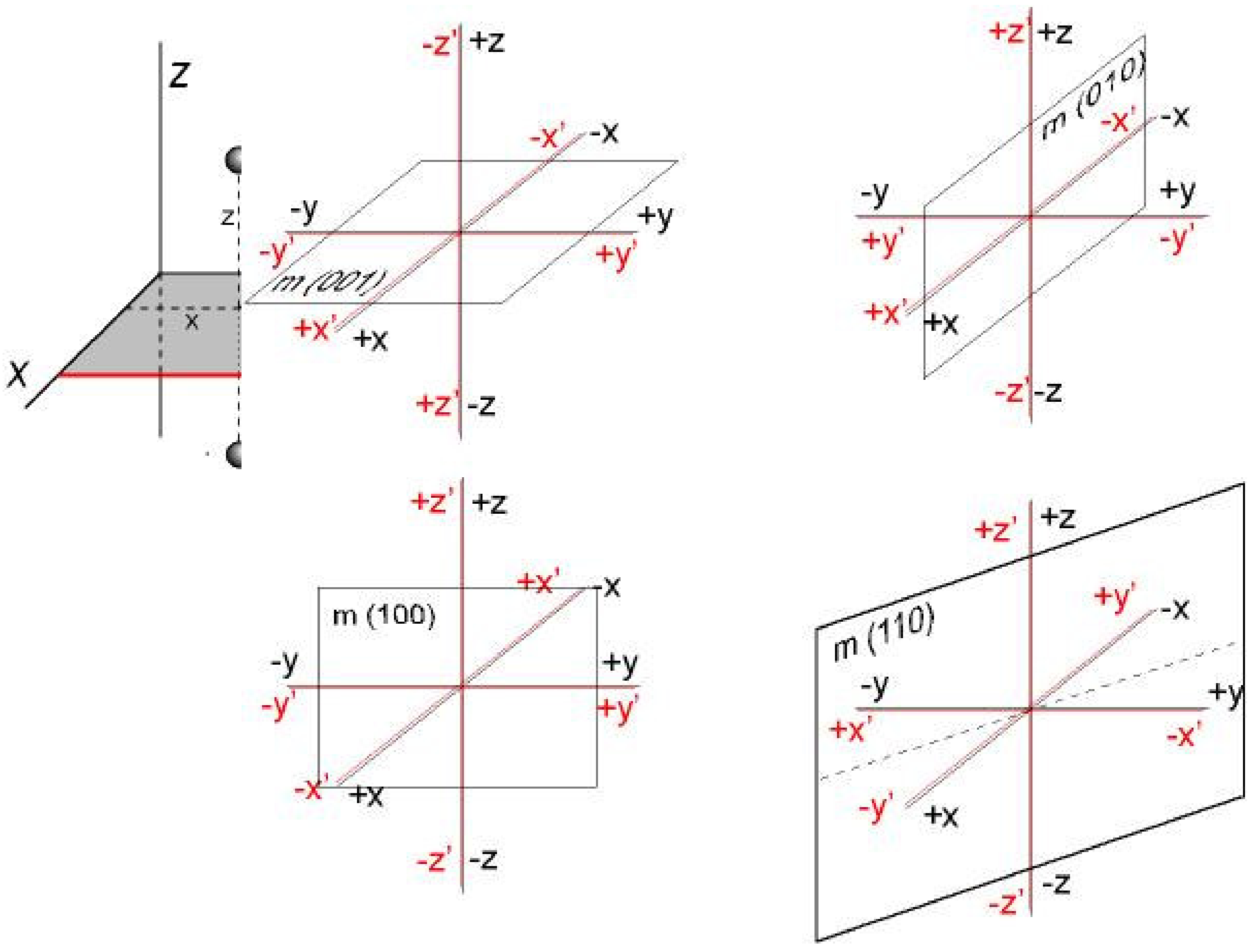
Igualment, per un pla m orientat paral·lelament a (010) la matriu de transformació és

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$ per un pla m en orientació (100) serà

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

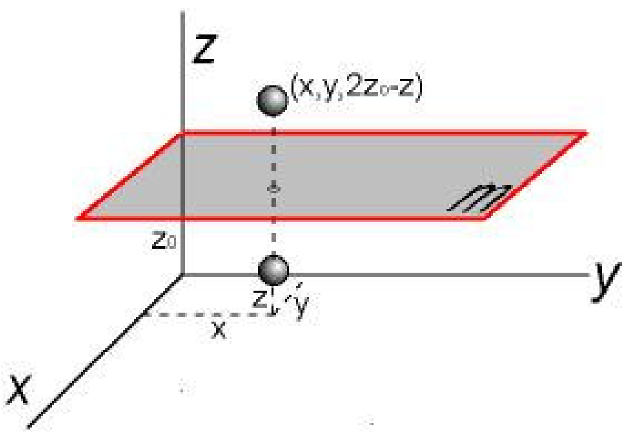
i per un pla paral·lel a (110), en que l'eix *x'* passa a coincidir amb -*y*, i *y'* amb -*x*, mentre que el *z* no varia, la matriu és

$$\begin{pmatrix} \cos 90^o & \cos 180^o & \cos 90^o \\ \cos 180^o & \cos 90^o & \cos 90^o \\ \cos 90^o & \cos 90^o & \cos 0^o \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



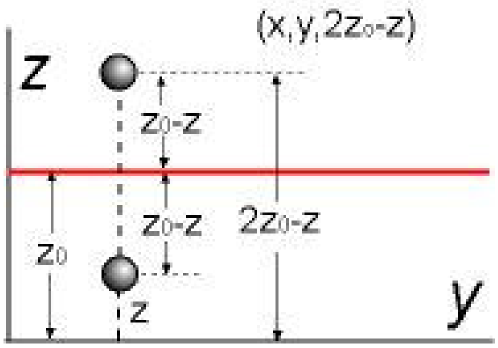
La imatge d'un punt (x,y,z) per un pla m ororientat paral·lelament a (001) que passa per l'origen es pot calcular amb el producte següent:

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



i si el pla de reflexió està a una alçada $z_{o,}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2z_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ 2z_0 - z \end{pmatrix}$$



La tercera coordenada del punt imatge es compren amb facilitat si s'analitza en una secció *zy*.

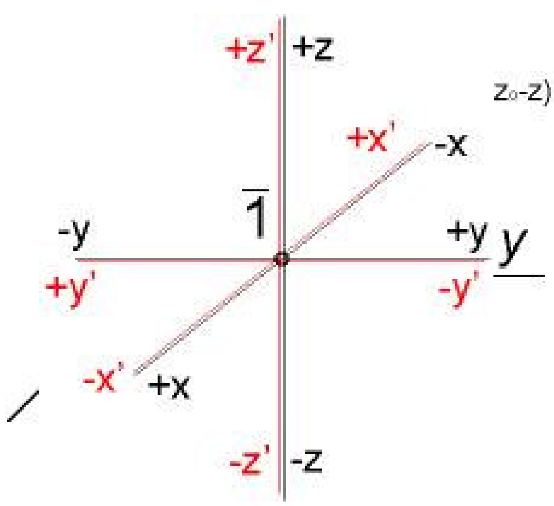
Simetria respecte d'un punt (centre d'inversió)

En el cas del centre d'inversió ubicat a l'origen, les parts positives dels eixos transformats coincideixen amb les negatives dels originals. Per tant, la matriu de transformació és

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

I la imatge d'un punt (x,y,z) és

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



Si el centre d'inversió està a (x_o,y_o,z_o), aleshores la imatge està a

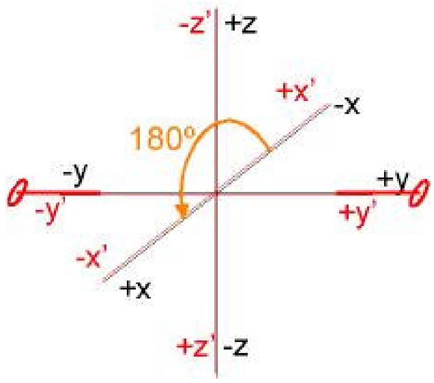
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2x_0 \\ 2y_0 \\ 2z_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x_0 - x \\ 2y_0 - y \\ 2z_0 - z \end{pmatrix}$$

Simetria respecte d'un eix: eixos de gir

Els possibles ordres dels eixos de simetria en un medi periòdic com el cristall són 1, 2, 3, 4 i 6. Les matrius de transformació es dedueixen com en els casos dels plans m i del centre d'inversió.

Així, la matriu de transformació de l'eix monari (d'ordre1), que gira 360º, és tal que deixa qualsevol punt invariant, com imatge d'ell mateix.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

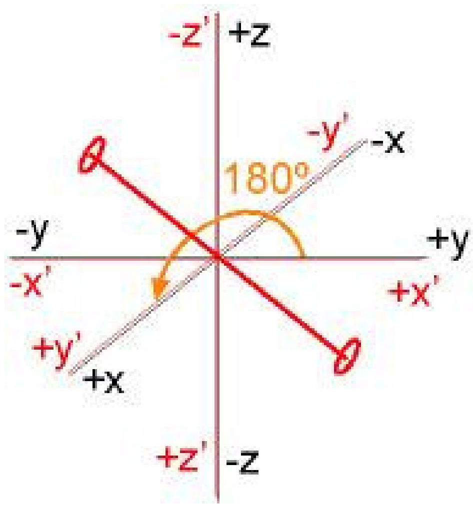


Per un eix binari (gir de 180º) la matriu depen de l'orientació respecte dels eixos cristal·logràfics. Les matrius per algunes de les possibles orientacions són

eix paral·lel a [100] $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

eix paral·lel a [010] $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

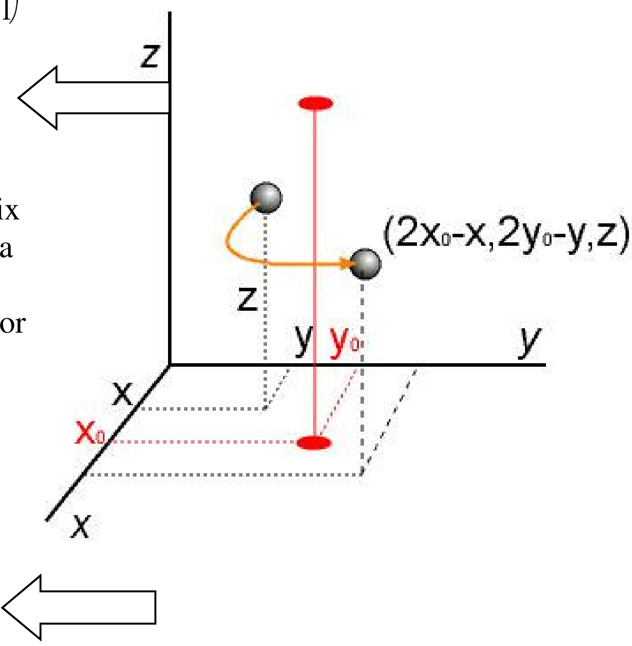
eix paral·lel a [001] $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$



eix paral·lel a [110] $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

eix paral·lel a $[1\bar{1}0]$ $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

i així successivament.



En els casos en que l'eix no passi per l'origen, cal afegir el corresponent vector. Suposat un eix binari paral·lel a *c*, situat a x_0, y_0, la matriu de transformació és la següent, a la que cal sumar el vector de posicionament de l'eix

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2x_0 \\ 2y_0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

En els casos d'eixos d'ordre superior a dos (3, 4 o 6), hi ha més operacions fins arrivar de nou a la identitat (la posició de partida), de manera que per exemple en el cas de l'eix ternari, es tracta d'un operador de simetria d'ordre tres perque cales tres operacions per tornar a la posició original, és a dir un gir de 120º, la següent aplicació implica un gir de 240º i la tercera un de 360º. Per tant, les corresponents matrius de transformació són (per un eix ternari paral·lel a [001]) i considerant un sistema ortogonal d'eixos:

120º $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$; 240º $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$; 360º

$$\begin{pmatrix} 1 & O & O \\ O & 1 & O \\ O & O & 1 \end{pmatrix}$$

a les quals caldria afegir el corresponent vector de posicionament si l'eix no està situat a l'origen.

En el cas d'un eix quaternari, que passa per l'origen, paral·lel a [001], les matrius de les corresponents operacions de gir de 90º són:

$$90^{\circ} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} ;\ 180^{\circ} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} ;\ 270^{\circ} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} ;\ 360^{\circ}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

en les simetries dels cristalls es poden trovar eixos quaternaris orientats en les tres direccions fonamentals [001] en els sistemes tetragonal i cúbic, i [100] i [010] en el sistema cúbic. Les corresponents matrius de transformació en cada cas són fàcilment deduïbles a partir del que s'ha desenvolupat fins aquí.

Elements complexes de simetria

Eixos de rotació i inversió

Els elements complexes impliquen una operació que es pot descomposar en dues operacions senzilles, així els *eixos de reflexió* comporten una rotació d'acord amb l'ordre de l'eix, seguida d'una reflexió; i els *eixos d'inversió*, la rotació és seguida d'una inversió. Es demostra que tots els eixos de rotació tenen equivalència en eixos d'inversió. També és demostrable que les operacions de simetria de tots els eixos d'inversió excepte el quaternari, equivalen a altres operacions senzilles.

Per exemple, l'operació d'un binari d'inversió paral·lel a *c*, situat en l'origen comporta un gir de 180º seguit d'una inversió, és a dir

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

la matriu resultant del producte de les dues operacions és la que s'havia deduït per un pla m perpendicular a *c*, i com a conseqüència es pot afirmar que

$$\bar{2} \equiv m$$

Similarment es demostra que $\bar{3} \equiv 3 + \bar{1}$, que $\bar{6} \equiv 3/m$.

En el cas de l'únic eix propi d'inversió, el quaternari, les matrius de transformació pel un eix paral·lel a *c* són

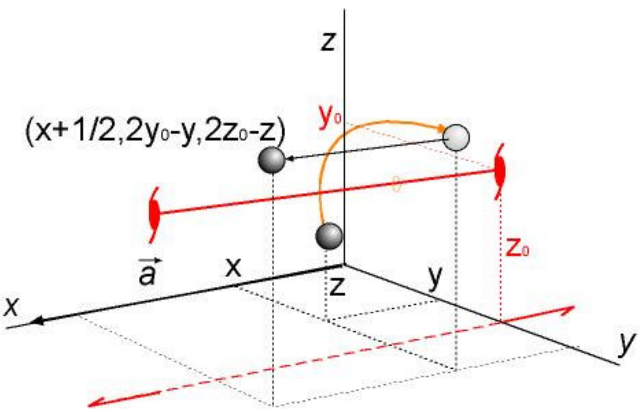
primera operació $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = R_1$;

segona operació ; $R_1 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = R_2$

en aquest cas es comprova que aquesta matriu equival a l'operació d'un eix binari paral·lel a *c*, és a dir, que l'eix binari és un subgrup de simetria del quaternari d'inversió

tercera operació $R_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = R_3$

quarta operació $R_3 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$



Eixos helicoidals

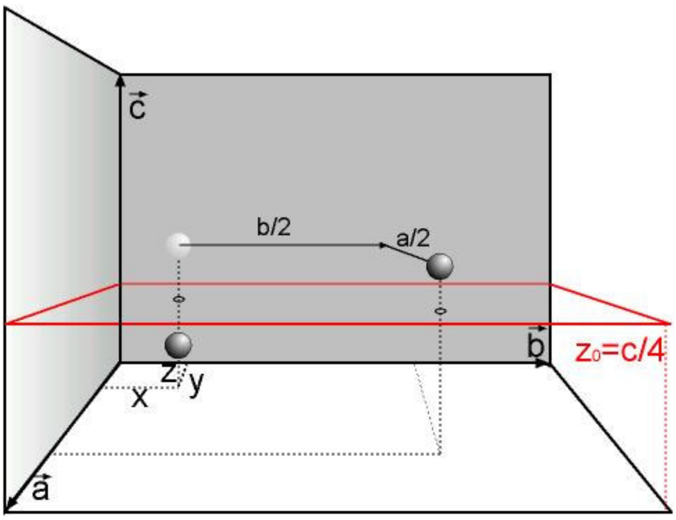
Les operacions d'aquests elements es poden descomposar en un gir seguit d'una translació paral·lela a l'eix. Per tant, les corresponents matrius de transformació d'aquests eixos helicoidals seran el producte de la rotació pel vector translació que correspongui.

Per exemple, un eix binar helicoidal paral·lel a *a* implicarà un gir de 180º seguit d'una translació *a/2*, i la transformació és la matriu més al vector translació associat

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ 0\\ 0\end{pmatrix},$$

així per exemple, les coordenades de la imatge d'un punt (x,y,z) per un eix binari helicoidal paral·lel a *a*, que passa per y_0 i z_0 són

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ 0\\ 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\ 2y_0\\ 2z_0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}x+\frac{1}{2}\\ 2y_0 - y\\ 2z_0 - z\end{pmatrix}$$



Plans de lliscament

Son elements que impliquen una reflexió, seguida d'una translació paral·lela al pla. A tall d'exemple, la transformació d'un punt (x,y,z) per un pla de lliscament **a** orientat (010), ubicat a b/4, és

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\ 0\\ \frac{1}{2}\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\ 2 * \frac{1}{4}\\ 0\end{pmatrix}$$

o

per un pla **n** orientat (001) situat a una alçada z_0=0,25, com es mostra a la figura:

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}\\ 0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0\\ 0\\ 2 * \frac{1}{4}\end{pmatrix},$$