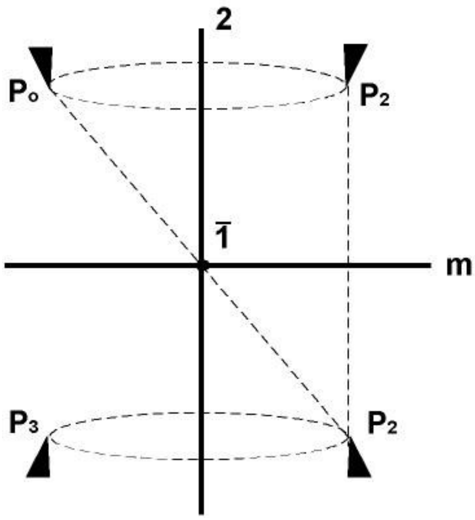
GRUPS PUNTUALS

Existeixen algunes relacions entre elements de simetria que poden ser útils a l'hora de deduir quins són els conjunts d'aquest que formen grup.

1.- Tots els elements de simetria d'un grup finit s'han de tallar en un únic punt, i si hi ha centre d'inversió, aquest és el punt comú.

De fet, si no es tallessin en un únic punt, el grup de simetria no seria finit, perque l'aplicació successiva d'elements de simetria sense un punt comú generaria una figura infinita.



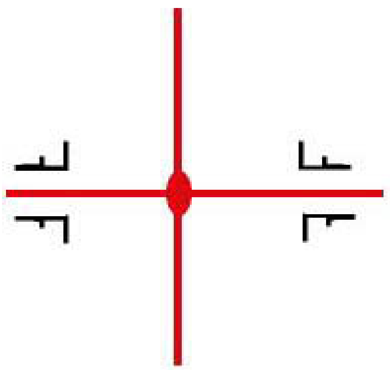
2.- Si hi ha un eix de simetria d'ordre parell i un pla de simetria perpendicular, a l'intersecció es genera un centre d'inversió. I suposada l'existència de dos d'aquests elements, se'n dedueix el tercer

Suposem un eix d'ordre 2 i un pla m perpendicular. La figura P_0 es relaciona amb la P_1 pel gir de l'eix binari, i aquesta amb la P_2 per la reflexió del pla m. Alhora, les figures P_0 i P_2 estan relacionades per un centre d'inversió situat a la intersecció de 2 i m. I la simètrica de P_2 per l'eix binari (P_3) es relaciona amb P_0 pel pla m i amb P_1 pel centre.

3.- Si un grup només té un eix de simetria, qualsevol pla de simetria del grup ha de ser necessàriament perpendicular o contenir l'eix.

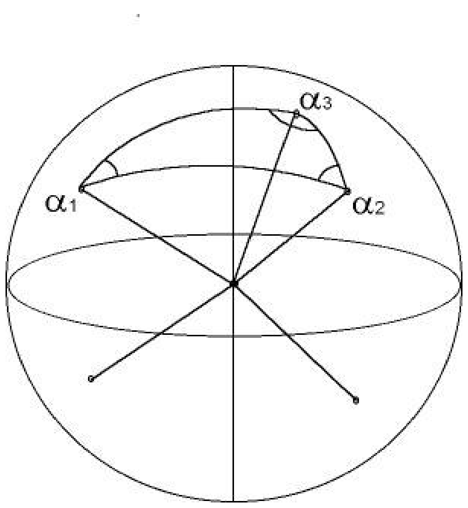
Si no fos així i existís un pla formant un cert angle diferent de 90º amb l'eix, l'aplicació del pla generaria un segon eix, simètric de l'anterior i formant el mateix angle amb el pla.

4.- Si un pla de simetria conté un eix d'ordre n, existen n plans que contenen l'eix formant entre ells angles de π/n.



Es suggereix a l'estudiant comprovar gràficament en cada un dels casos possibles: dibuixar la traça d'un pla de simetria i un eix d'ordre n inclós en ell. Dibuixar una figura relativament asimètrica (una F, per exemple) i aplicar la simetria del pla m i de l'eix fins que no apareguin altres Fs. Aleshores, comprovar l'existència d'altres plans de simetria del conjunt de Fs. L'exemple correspon a un pla m i un eix binari.

5.- Existeix un nombre limitat de formes de combinar diversos eixos de simetria en un grup puntual. Suposem un grup que conté només eixos de simetria, que si es perllonguen fins intersectar una esfera amb centre en el punt comú a tots els eixos, determinarn una sèrie de punts, els quals formaran triangles esfèrics que ompliran tota la superfície de l'esfera.



Sembla llògic pensar que els angles estaran relacionats amb l'ordre de l'eix d'aquell punt, atés que el conjutn ha de ser simètric entre els propis eixos, de manera que en general es pot dir que

$$\alpha_i = \pi/n_i$$

En geometria esfèrica, la suma dels angles d'un triangle ha de ser superior a 180º, i per tant

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 > \pi \quad \text{i} \quad \pi/n_1 + \pi/n_2 + \pi/n_2 > \pi$$

dividint per π, $1/n_1 + 1/n_2 + 1/n_2 > 1$

Les úniques solucions d'aquesta equació són

n_1 qualsevol, $n_2=n_3=2$; $n_1=2$, $n_2=n_3=3$; i $n_1=4$, $n_2=3$, $n_3=2$

a més de la solució 5, 3, 2, que no té sentit en els medis periòdics perquè no hi eixos d'ordre 5.

Per tant, les possibles convinacions d'eixos són 222, 322, 422, 622, 432, 332 (això **NO SÓN** necessàriament notacions de grups puntuals).

Grups d'operacions de simetria

La simetria d'un cristall no ha d'incloure necessàriament tots els elements de simetria possibles, sinò únicament alguns d'aquests, que a més a més, han de ser compatibles entre ells, la qual cosa vol dir que *tinguin estructura de grup*.

Per això han de cumplir algunes condicions:

- que sigui tancat, és a dir que l'aplicació (producte) de dues de les operacions de simetria no en generi una tercera que no sigui del grup. Per exemple, un eix binari i un pla de simetria perpendicular no formen grup perquè en aplicar les operacions del gir binari (180º) i la reflexió, es genera un centre d'inversió. És a dir, el centre d'inversió apareix com a conseqüència de l'existència de l'eix binari i el pla m (que per altre banda ja s'ha explicat anteriorment). Per tant, si que formen grup un eix binari, un pla m perpendicular i un centre d'inversió a la intersecció.

- el grup ha de contenir l'operació inversa de cada una d'elles. L'aplicació del gir en sentit contrari, o un altre reflexió en el cas dels plans m, o un altre inversió en el cas del centre de simetria són les respectives operacions inverses de cada un d'ells.

- el grup ha de contenir l'element neutre, que deixi invariable una figura (que no modifiqui les coordenades d'un punt). Aquest és l'eix monari, que cal considerar que forma part de tots els grups.

- que l'operació de multiplicació d'operacions tingui les propietats conmutativa i associativa. Es suggereix que l'estudiant efectui aquesta comprovació.

Grups puntuals bidimensionals

Es pot deduir els possibles grups de simetria puntual en dues dimensions, partint del fet que els possibles elements en el pla (considerant la disminución de dimensions de 3 a 2) són

a) punts de gir d'ordre 1, 2, 3, 4 i 6
b) línia de reflexió m

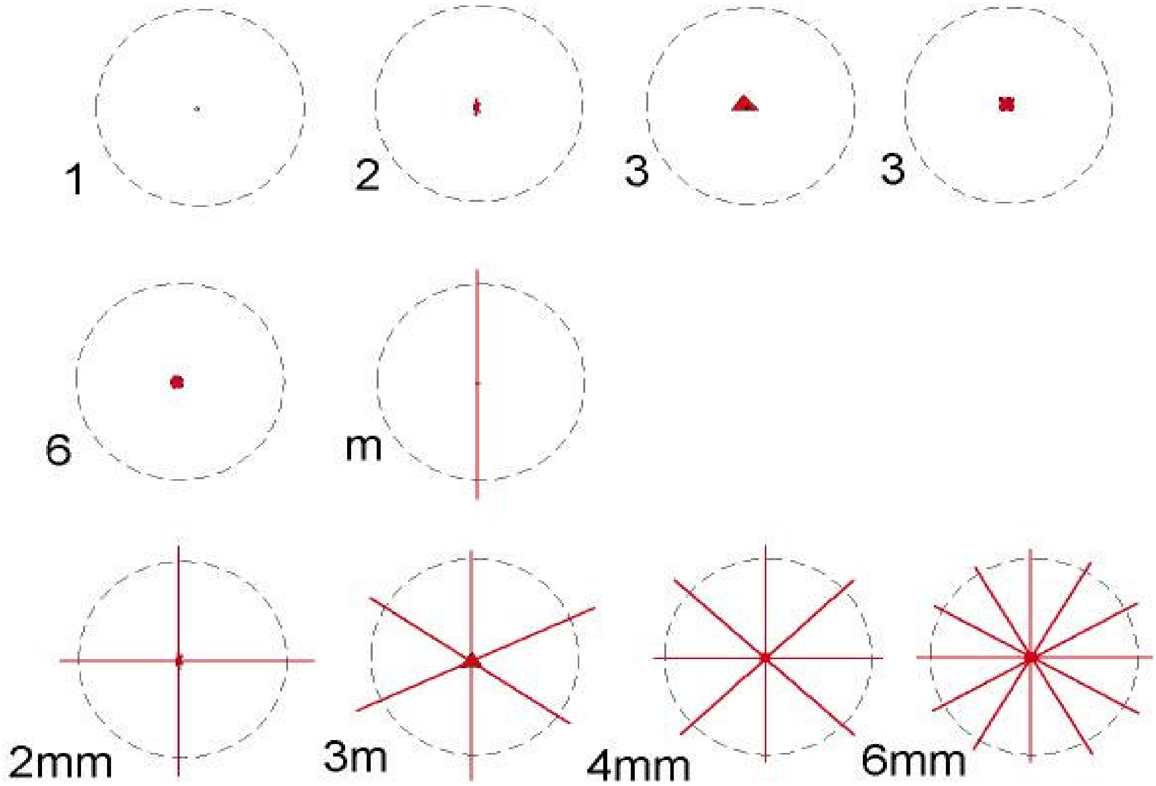
(no es considera el centre d'inversió perquè en dues dimensions equival a un punt de gir binari)

Les combinacions possibles són

- cada un dels elements per sí sol (1, 2, 3, 4, 6 i m)
- els resultats de combinar els punts de gir amb la línia de reflexió

1 + m –> m (ja existent)
2 + m –> 2mm
3 + m –> 3m
4 + m –> 4mm
6 + m –> 6mm

La qual cosa dóna un total de 10 grups puntual bidimensionals, que s'han representat a continuació.



Grups puntuals tridimensionals

De similar manera, es possible deduir l'existència de 32 grups puntuals en tres dimensions**.**

Aquesta deducció no es fa en aquests apunts per raó d'oportunitat i perquè queda clarament fóra de l'abast del curs.

Es suggereix a l'estudiant que busqui en alguns dels llibres recomanats a la bibliografia les projeccions dels 32 grups de simetria puntual i es familiaritzi amb ells.

Sistemes cristal·lins

Els 32 grups puntuals s'agrupen en diversos sistemes cristal·lins per la presència de determinada combinació d'eixos, el que en podrien dir "la característica simètrica" del sistema.
Més endavant es podrà comprovar que cada sistema es caracteritza per una determinada cel·la fonamental, que respon a la simetria del sistema, no obstant, ara és possible aquesta classificació sobre la base de les característiques simètriques.

Si s'agrupen els grups puntuals per la simetria comú es poden trovar una sèrie de grups que tots tenen un únic eix quaternari, o un únic eix ternari, o binari, etc. Si es parteix de la mínima simetria, per exemple un sol eix quaternari, es pot proposar un esquema deductiu que permet arrivar a la resta de grups de idèntica característica simètrica.

Per exemple pels grups aun un sol eix d'ordre 4:
- Si al grup 4 s'hi afegeix un centre d'inversió es genera el grup 4/m
- Si al 4 s'hi afegeix un eix binari (en la única possició possible, segons s'ha demostrat anteriorment), en genera el grup 422
- Si al 4 s'hi afegeix un pla que contingui l'eix, dóna el grup 4mm
- I si al 422 s'hi afegeix un centre d'inversió, apareix el grup 4/mmm

En el cas de la simetria de 4rt ordre, existeix també l'eix quaternari d'inversió $\overline{4}$, que es pot combinar amb un eix binari perpendicular (o un pla que el contingui) per donar el grup $\overline{4}2m$.

Aquest esquema deductiu es pot repetir amb el grup 23, amb el 3, amb el 6..., i cada conjunt de grups puntuals (amb algunes excepcions que es ocmentaran) consitueix un *sistema cristal·lí*, de manera que finalment es clasifiquen en SET sistemes cristal·lins:

- **cúbic**, partint del grup 23
- **tetragonal**, partint dels grups 4 i $\bar{4}$
- **trigonal**, partint del grup 3
- **hexagonal**, partint del grup 6
- **ròmbic**, partint del grup 222
- **monoclínic**, partint del grup 2
- i **triclínic**, partint del grup 1.

Obviament, en els casos de baixa simetria (ordres 2 i 1), l'esquema no s'acompleix totalment, i per exemple, si l'esquema s'aplica a la simetria binaria:

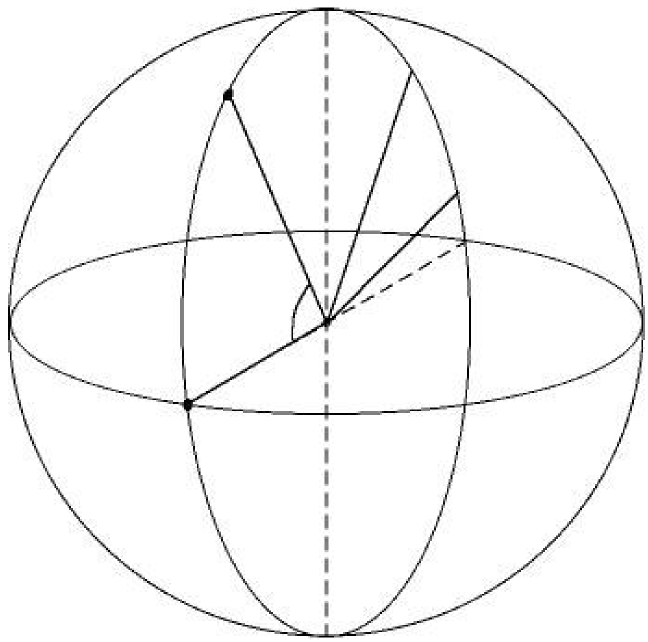
- 2 (grup del sistema monoclínic)
- 2 + $\bar{1}$ –> 2/m (grup del sistema monoclínic)
- 2 + 2 –> 222 (grup del sistema ròmbic)
- 2 + m –> 2mm(grup del sistema ròmbic)
- 222 + $\bar{1}$ –> mmm (grup del sistema ròmbic)

(Històricament va existir la "singonia" digonal - que responia a l'esquema anterior -, i que es dividia en dos sistemes, ròmbic i monoclínic, caracteritzats per la presència de tres i un eixos d'ordre 2, respectivament).

REPRESENTACIÓ GRÀFICA DELS CRISTALLS: PROJECCIÓ ESTEREOGRÀGICA

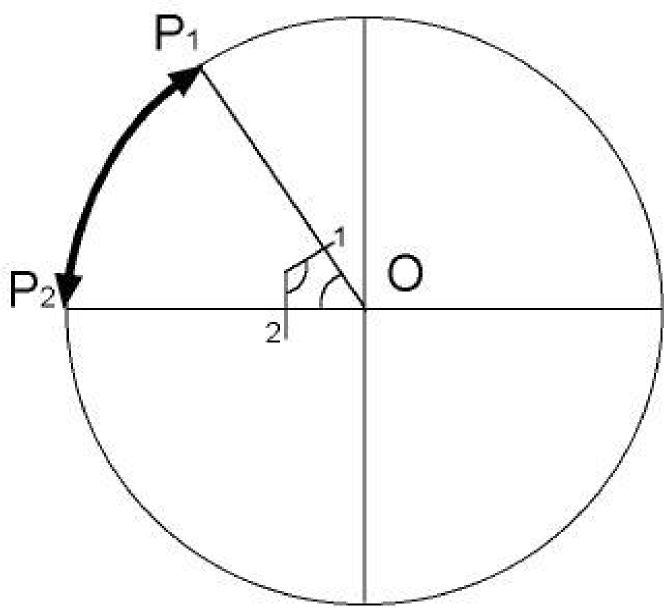
Per representar tant la simetria del grup puntual com les cares del cristall cal recorrer a una projecció que mantingui els angles entre cares i permeti efectual càlculs a partir d'aquests. Això s'aconsegueix amb una projecció esfèrica, la qual alhora es projecta sobre el pla equatorial de l'esfera prenent com a punts de vista els pols N i S, segons convingui: és el que es coneix com a *projecció estereogràfica.*

Projecció esfèrica



Es projecten els elements (ideals - eixos, plans, etc.- i reals - cares-) sobre una esfera concèntrica amb el punt comú de tots els elements de simetria (centre). La projecció es fa de dues maneres possibles:

a) perllongant els elements ideals (eixos de referència, plans i eixos de simetria) fins la seva intersección amb l'esfera de projecció (esfera polar). D'aquesta manera els eixos es representen per punts i els plans per cercles màxims.



b) projectant els vectors recíprocs en el cas de les cares (els vectors perpendiculars a les cares), de manera que aquestes es representen per punts a l'esfera polar.

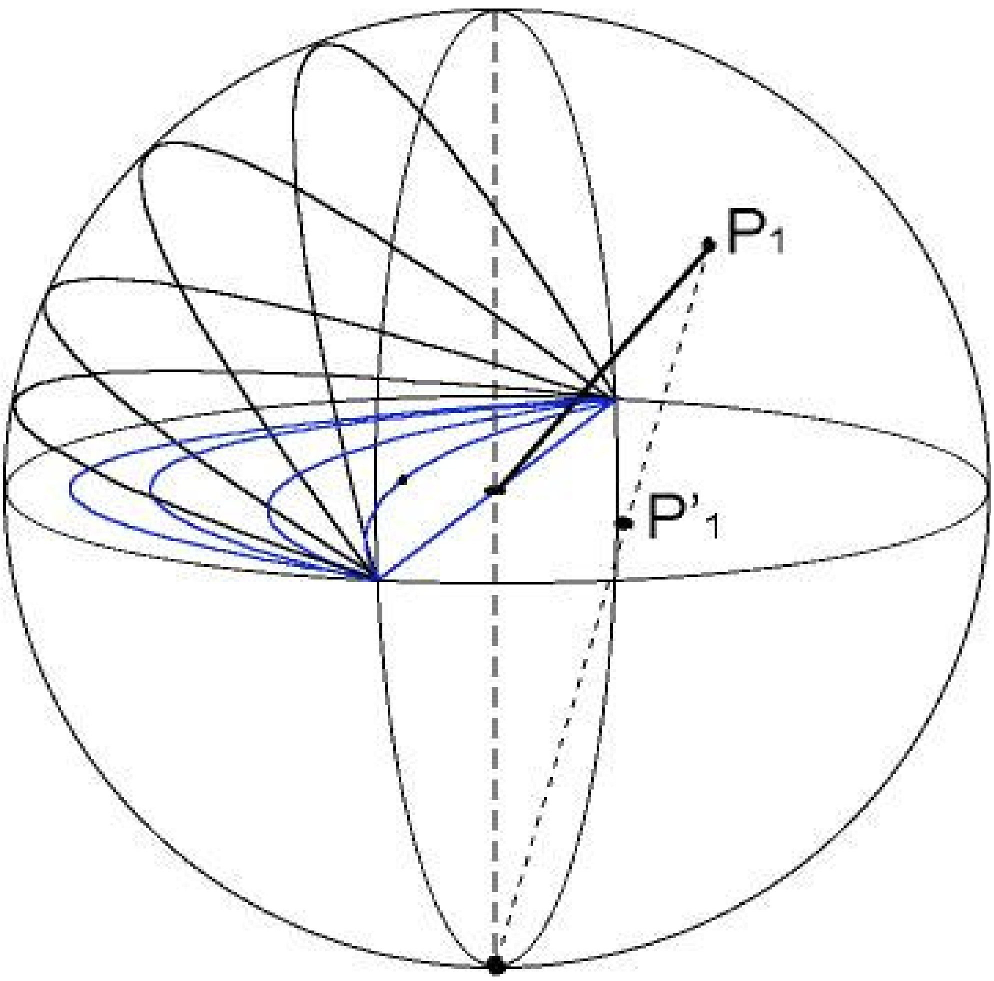
En la figura s'ha representat l'esfera polar i les línies de projecció d'alguns vectors de cares que són paral·leles a una direcció comú, per tant, totes quedes projectades sobre un cercle màxim, i a més a més, es conserven els angles entre els vectors (suplementaris dels angles diedres entre les cares), com es pot veure al cercle màxim de la part inferior.

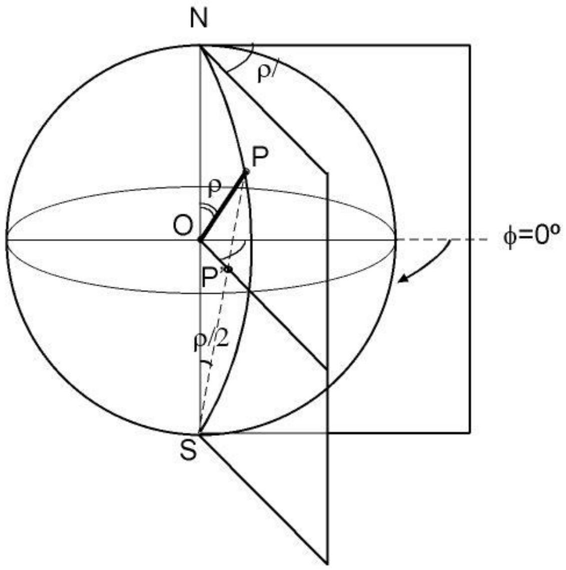
Projecció estereogràfica

Consisteix en la projecció de cada un dels hemisferis de l'esfera polar sobre el cercle equatorial, prenent com a punt de vista, el pol S per la projecció de l'hemisferi nord, i el N per la projecció de l'hemosferi nord .

A la figura següent s'han representat una sèrie de cercles màxims i les seves projeccions (en blau), de manera que els cercles que passen pels pols N i S (meridians, per similitud amb el geoide) queden projectats com a diàmetres del cercle equatorial.

D'altra banda, el punt P_1 es projecta com el P'_1, resultat de la intersecció amb el cercle equatorial de la recta que l'uneix amb el pol S (usat en aquest cas com a punt de vista).



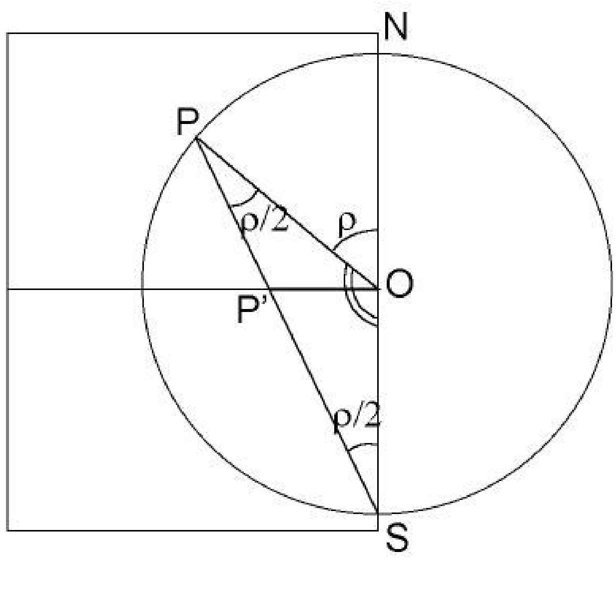


Coordenades esfèriques

Sobre l'esfera polar, cada punt es situa per dues coordenades, similars a la latitud i longitud terreestres utilitzades en geolgrafia. En aquest cas, el punt P es caracteritza per

- una coordenada φ, que és l'angle que forma el meridià que el conté amb un que es pren com origen. Per conveni es compte en sentit horari, com indica la fletxa de la figura.
- una coordenada ρ que és l'angle que forma la recta OP amb l'eix N-S, que per conveni es comença a comptar des del pol N.

Per construcció, l'angle OSP' val ρ/2, per tant, el segment OP' és fàcilment calculable en funció del radi de l'esfera de projecció.

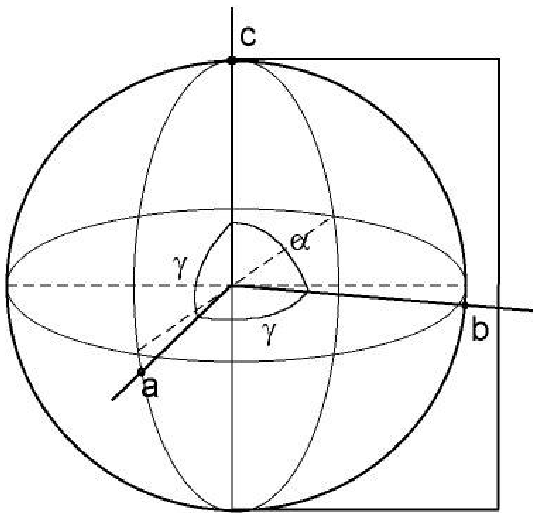


En efecte, si es dibuixa la secció de l'esfera pel meridià que conté el pol projectat P, es veu que el triangle OPS és isòsceles, i con que la coordenada de P és ρ, l'angle O val 180-ρ, i els P i S ρ/2. Per tant, i considerant el triangle OP'S (rectangle per construcció), es pot calcular que

$$OP' = OS \cdot tag(\rho/2),$$

essent OS el radi amb el que s'ha dibuixat l'esfera de projecció i, per tant, el cercle de la projecció estereogràfica.

Projecció dels cristalls



Per tal d'orientar degidament els cristalls i que les diverses projeccions siguin comparables, existeixen algunes normes respecte la seva orientació en l'esfera polar:

- l'eix *c* es fa coincidir amb el pol N
- l'eix *b* es projecta sobre el meridià d'origen de coordenades (situat sempre a l'esquerra), de manera que ϕ=0º, mentre que ρ depén de l'angle que forma amb *c*, és a dir α.
- l'eix *a* queda determinat per la possició dels altres dos, en qualsevol cas $\phi=\gamma$, ι $\rho=\beta$.

Resumidament:

	ϕ	ρ
a	γ	β
b	0≡	α
c	–	0≡

Formes cristal·lines

Un forma cristal·lina és un conjunt de cares relacionades per la simetria d'un grup puntual. La forma d'un cristall, per tant, està formada per una o vàries formes cristal·lines, obviament corresponents al grup puntual del cristall. La notació d'un forma cristal·lina és:

$\{hkl\}$, essent (hkl) la cara generadora.

El nombre de cares que té una determinada forma depes de dos factors:
- de la simetria del grup puntual: sembla llògic pensar que les formes del grups d'elevada simetria tindran més cares que els d'ordre molt baix.

Una cara generadora en una orientació general en el grup 6, per exemple, dóna lloc a cinc cares més, de manera que la forma té un total de sis cares. La mateixa cara, en igual orientació, en el grup 2, genera un altre cara, i la forma té dues cares.

- de l'orientació de la cara generadora respecte dels elements de simetria. Una cara orietada perpendicularment a un eix senari no genera altres cares, mentre que la mateixa cara en posició general en genera cinc més.

És possible fer un càlcul del nombre de cares que apareixen a patir d'una cara generadora en posició general, per un grup puntual determinat: s'ha vist que un eix d'ordre n genera (n-1) noves cares, per tant, si en un grup hi ha p eixos d'ordre n, es generaran p(n-1) noves cares. Per tant, tenint en compte els eixos de simetria d'un grup, el nombre de cares generades a partir d'una determinada és:

$$m = 1 + p_1(n_1 - 1) + p_2(n_2 - 1) + \ldots = 1 + \sum p_i(n_i - 1)$$

si el grup conté plans de simetria o centre d'inversió, aquest nombre s'ha de multiplicar per dos.

Aquest nombre es coneix com *multiplicitat del grup*.

Si la cara generadora és perpendicular a un pla m, la multiplicitat per aquesta serà la meitat de la general del grup, i si és perpendicular a un eix d'odre n, la seva multiplicitat serà la del grup dividida per n. I en el cas de perpendicularitat simultàniament a un eix d'ordre n i un pla, la multiplicitat d'aquesta serà la del grup dividida per 2·m.