Grups espacials de simetria

La simetria dels àtoms que constitueixen el cristall es descriu amb un grup de simetria espacial constituit per un subgrup de translació (el reticle) i determinats elements de simetria, que poden incloure elements senzils (centre d'inversió, eixos de gir, pla de reflexió) i d'altres de compostos (eixos helicoidals, plans de lliscament...).

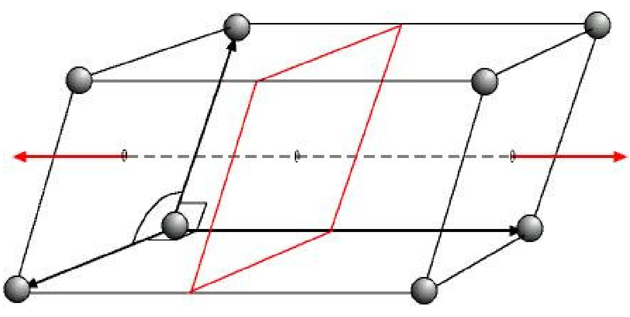
La totalitat de la figura infinita es pot descruire amb aquella part que ocupa la cel·la fonamental (el **motiu**), atés que la resta de l'espai es la repetició periòdica d'aquest. Per tant, únicament cal precissar els elements de simetria de la cel·la fonamental i especificar el tipus de reticle.

En el motiu es pot identificar la **unitat asimètrica**, que és la mínima unitat a partir de la qual es pot generar el motiu per simetria, i la resta del cristall per translacions. El nombre d'unitats asimètriques del motiu es coneix com a **multiplicitat**, i en tots els casos serà el producte de la multiplicitat de la cel·la fonamental per la del grup d'elements de simetria.

La notació dels grups de simetria espacial es fa amb una lletra que identifica el tipus de reticle (majúscula si és tridimensional o minúscula en dues dimensions), seguida de la notació de Herman-Maungin del grup de simetria corresponent.

Per exemple *C2/c, Ibcn,* $I4_2/m$, són possibles notacions de grups de simetria espacial. La lletra identifica el reticle, i l'expresió dels elements de simetria no deixa dubtes respecte del sistema a que pertany el grup. En la majoria dels casos no hi ha dubte de la posició relativa dels elements de simetria respecte dels vectors fonamentals (o dels eixos x, y i z), però en el cas del sistema ròmbic, cal especificar l'ordre que s'utilitza a la notació. Per conveni, la primera part fa referència a l'eix *x*, la segona a *y* i la tercera a *z*. Així, per exemple, la notació *Ibcn* significa que perpendicular a $\vec{a}$ hi ha un pla de lliscament b, perpendicular a $\vec{b}$ un pla c, i perpendicular a $\vec{c}$ un pla n.

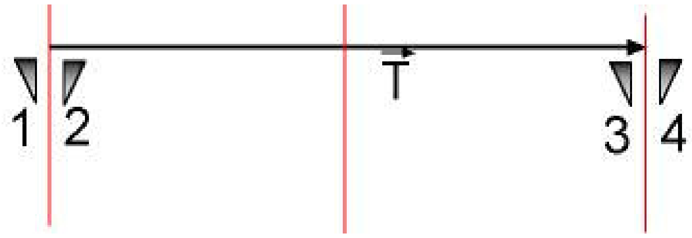
En la resta de sistemes, la pròpia forma del reticle implica una eterminada posició relativa dels elements de simetria. Per exemple en el grup *C2/c*, del sistema monoclínic, la única posició possible per l'exi binari, de manera que sigui compatible amb la simetria del reticle, és paral·lela a $\vec{b}$, i per tant el pla c és perpendicular a $\vec{b}$.



Igualment, en sistemes com el tetragonal o l'hexagonal, la única posició possible per l'eix quaternari o senari, respectivament, és en la direcció de $\vec{c}$

Feixos d’elements de simetria

La pròpia existència de la translació suggereix que un element de simetria no pot estar sol i aïllat, sino que aplicant la translació es repetirà formant un feix d’elements paral·lels. Quan un element de simetria té algun vector del reticle perpendicular, apareixen elements cada mitja translació. Això es pot veure en alguns exemples:



Si hi ha un pla de simetria m i una translació T del cristall perpendicular, apareix un altre pla m al final del vector translació. Suposada una figura 1, per la simetria del primer pla m es forma la figura 2, i aplican T surten les 3 i 4. Es pot veure fàcilment que entre les quatre figures hi ha un tercer pla de simetria m a T/2. Per tant, es pot afirmar que la presència d’un pla m i una translació del reticle perpendicular, genera un pla m cada T/2.

És fàcilment demostrable que aquesta afirmació és vàlida per altres elements de simetria, com els eixos binaris, plans de lliscament, eixos binaris helicoidals, etc.

Grups de simetria espacial bidimensionals

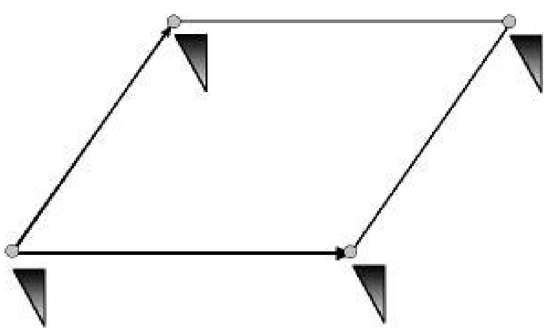
Es demostra que només hi ha 17 grups possibles de simetria espacial en dues dimensions, és a dir que només hi ha 17 maneres possibles d’omplir una superfície plana de manera periòdica. Els elements de simetria possibles, atesa la limitació de dimensions, seras punts de gir (1, 2, 3, 4 i 6), línies de reflexió (m) i línies de lliscament (g).

Per tal de deduir els 17 grups de simetria caldrà partir dels cinc possibles reticles plans i de les simetries compatibles, és a dir les que es derivin dels grups plans amb els elements que ho permetin eventualment convertits en elements compostos amb translació: en aquest cas només les línies de reflexió m podrien ser línies g de lliscament. Per tant, els elements de partida són:

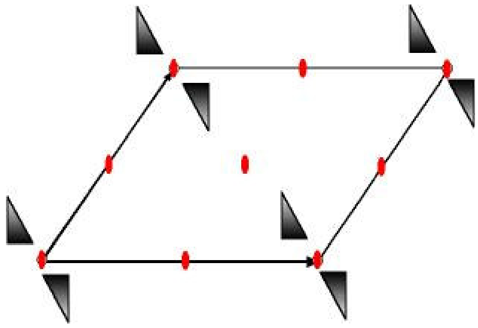
TIPUS DE XARXA	SIMETRIA	RETICLE(S)	SIMETRIA COMPATIBLE
Oblicua	2	p	1, 2
Ortogonal	2mm	p, c	m, 2mm
Quadrada	4mm	p	4, 4mm
Hexagonal	6mm	p	6, 3, 6mm, 3m

Xarxa oblícua $a \neq b$; *γ sense restriccions*

Grups possibles: p1 p2



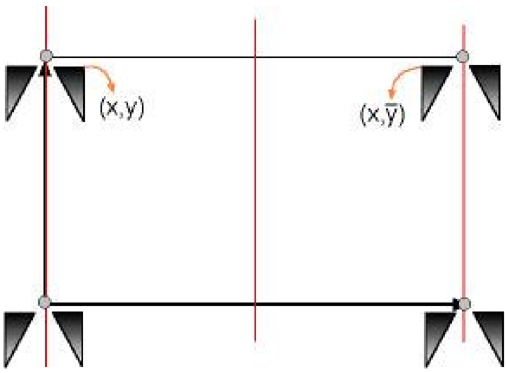
p1, multiplicitat m=1



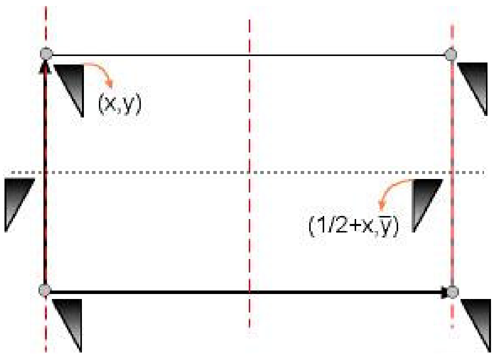
p2, multiplicitat m=2

Xarxa ortogonal $a \neq b$; $\gamma = 90º$ Reticles p i c

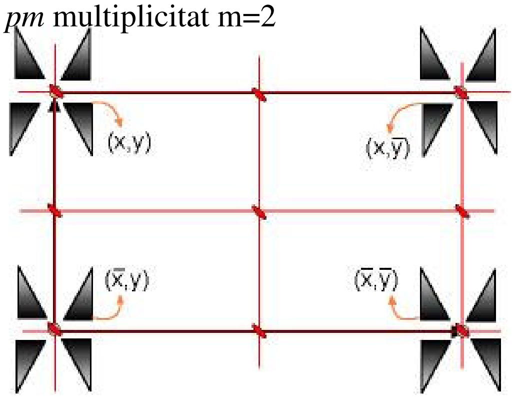
Grups possibles . Reticle p :*pm, pg, pmm, pmg, pgg* Reticle c: *cm, cg, cmm, cmg, cgg*



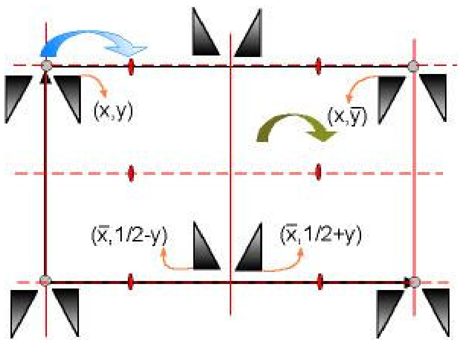
pm multiplicitat m=2



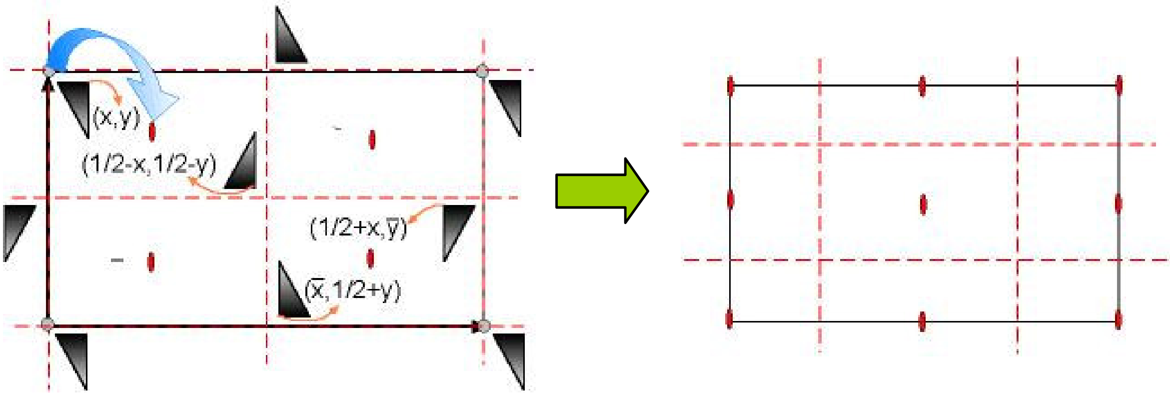
pg multiplicitat m=2



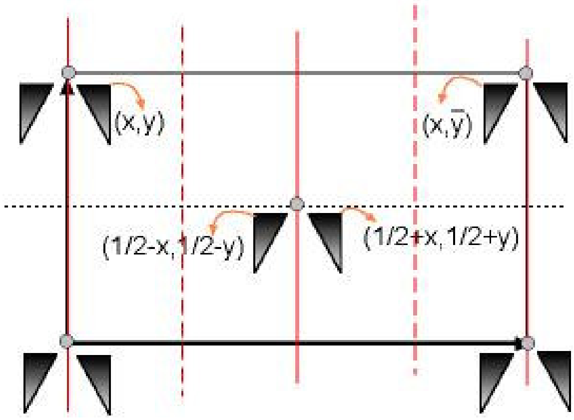
pmm multiplicitat m=4



pmg multiplicitat m=4
cal redefinir l'origen per situar-lo sobre l'element de menys dimensió

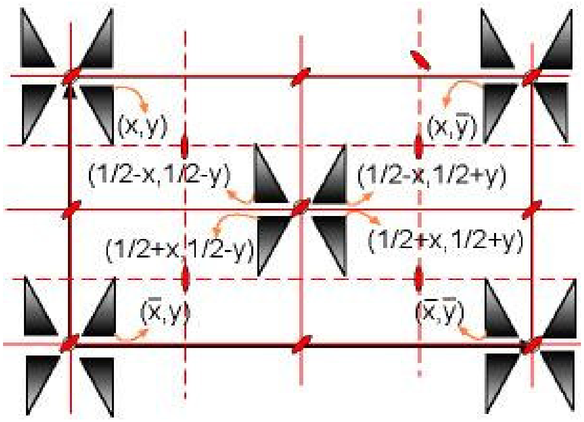


pgg multiplicitat m=4. Cal redefinir l'origen per col·locar-lo sobre un punt de gir binari a (1/4,1/4), amb la qual cosa la projecció habitual del grup queda com la figura de la dreta.



Aquest grup és igual al *cg*, que equivaldria a desplaçar l'origen b/4.

cm multiplicitat m=4 (multiplicitat del reticle=2·multiplicitat de la simetria=2). Existeix una translació a l'interior de la cel·la a/2+b/2.

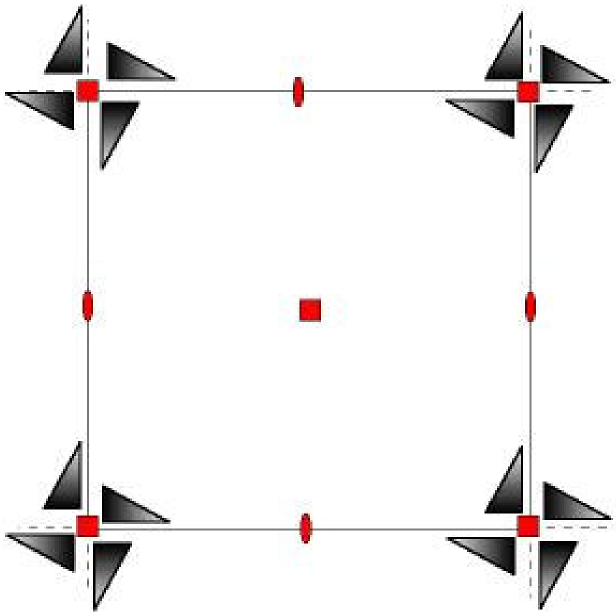


Aquest grup és el mateix que els *cgg* i el *cgm*, que equivaldria a desplaçar l'origen a a/4+b/4 o a b/4, respectivament.

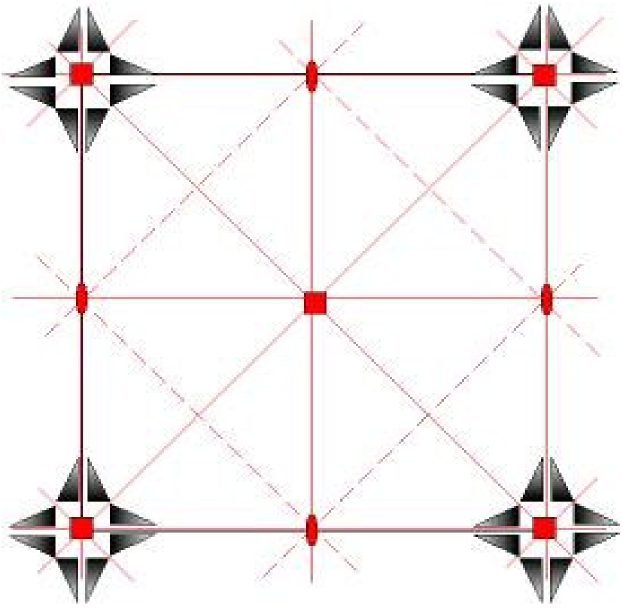
cmm multiplicitat m=8 (4 de la simetria * 2 del reticle). Existeix una translació a l'interior de la cel·la a/2+b/2.

Xarxa quadrada $a = b$; $\gamma = 90º$ Reticle p

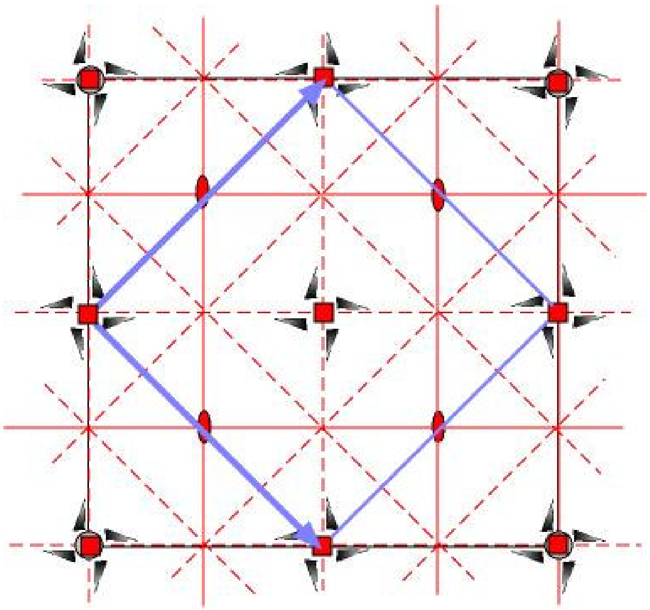
Grups possibles *p4, p4mm, p4mg, p4gg*



p4 multiplicitat m=4



p4mm Multiplicitat m=8
Aquest grup és equivalent al *p4gm*



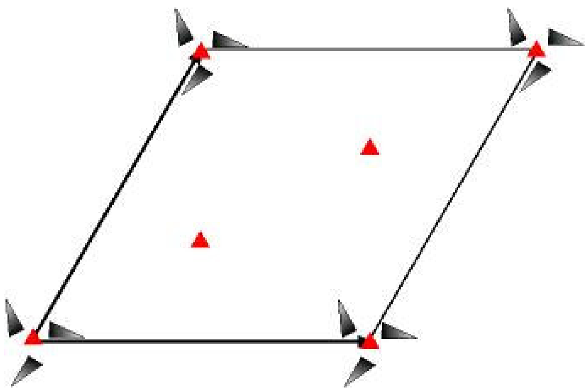
p4gg Multiplicitat m=8

Equival al grup *p4mg*

Del seu desenvolupament se'n dedueix l'existència d'una cel·la fonamental més petita (assenyalada amb vectors de color blau), que és la que s'adopta.

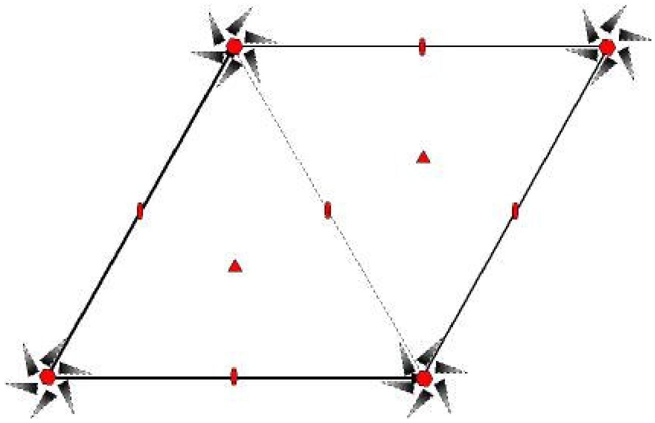
<u>Xarxa hexagonal</u> $a = b$; $\gamma = 60º$ Reticle p

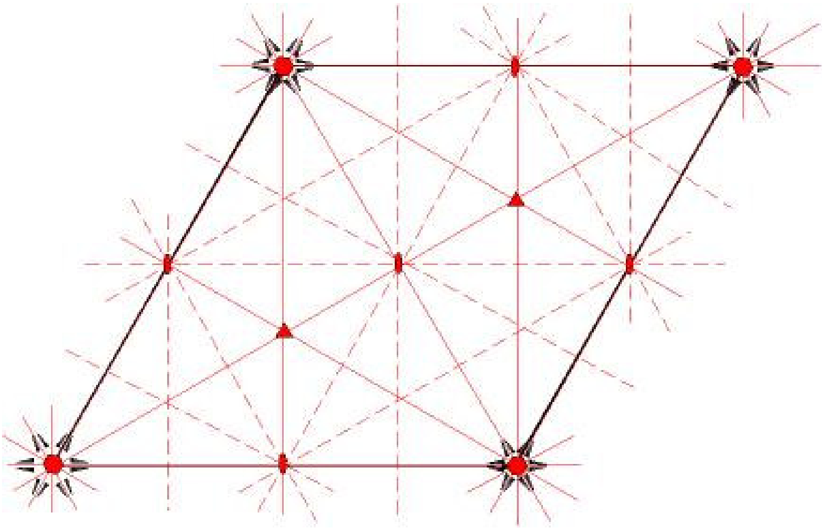
Possibles grups *p6, p3, p6mm, p6mg, p6gg, p3g, p3m* (aquest pot tenir el pla m en dues possicions possibles, i per tant surten dor grups, el p31m i el p3m1)



p3 Multiplicitat m=3

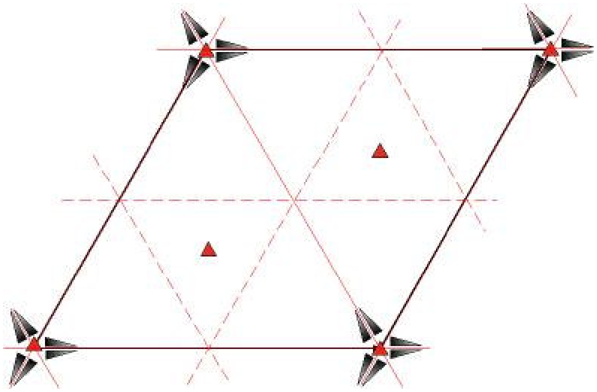
p6 Multiplicitat m=6



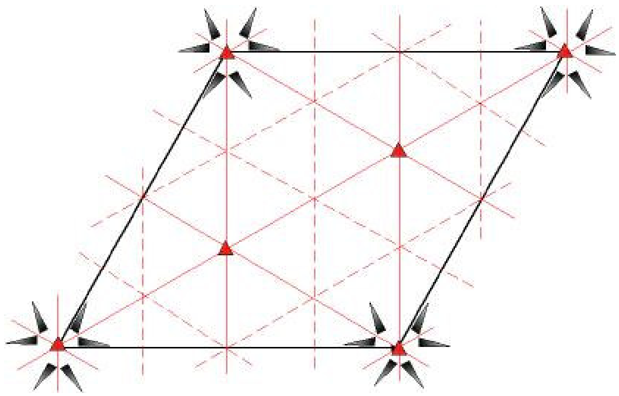


p6mm, equivalent als *p6mg* i *p6gg*

Multiplicitat m=12



p31m   Multiplicitat m=6



p3m1 Multiplicitat m=6

La diferència entre els dos grups és la posició relativa dels plans m, seguint els vectors del reticle en el primer cas, o formant un angle de 30º amb aquests en l'altre. En les notacions es col·loca l'eix monari per diferenciar-los un i altre.