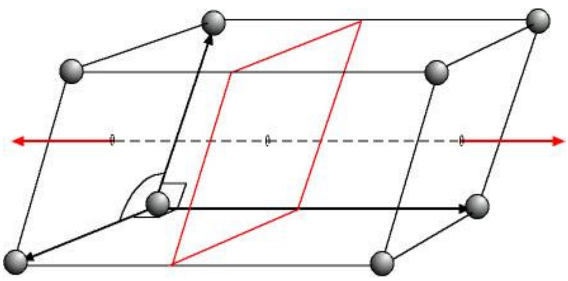
Grups espacials en tres dimensions

Efectuant les convinacions possible dels 14 subgrups de translació (els 14 reticles de Bravias) amb les simetries dels grups puntuals corresponents, amb els elements se simetria eventualment convertits en elements compostos incorporant translació (eixos helicoidals i plans de lliscament), es pot deduir l'existència de 230 grups de simetria espacial.

A les Taules Internacionals de Cristal·lografia hi ha el desenvolupament de cada un dels grups, els subgrups correponents, les coordenades de la posició general, així com les de les posicions especials. Es suggereix a l'estudiant la consulta s'aquesta bibliografia com a complement de les pràctiques corresponents.

A manera d'exemple, aquí es farà la deducció dels grups de simetria espacial del sistema monoclínic. Per això s'ha de partir dels reticles monoclínics P i C, les característiques dels quals són

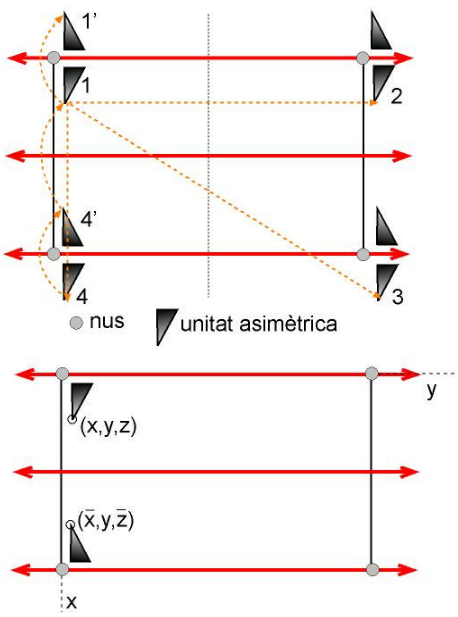
$$a \neq b \neq c, \quad \alpha = \gamma \neq \beta > 90º$$



La simetria d'aquesta distribució de nusos és 2/m, com es veu a la figura. Per tant, els grups puntuals compatibles amb aquest reticle són el 2, m i 2/m. La qual cosa dóna la següent llista de possibles combinacions a considerar

Reticle P: *P2, Pm, P2/m,* $P2_1$, *Pc,* $P2_1/m$, *P2/c,* $P2_1/c$
Reticle C: *C2, Cm, C2/m,* $C2_1$, *Cc,* $C2_1/m$, *C2/c,* $C2_1/c$
llista que s'ha obtingut de combinar cada reticle amb els grups puntuals compatibles, i seguidament considerar la possibilitat de cada cada un dels elements incorporin translació (2–> 2_1, i m–>c). De fet cal considerar que el m pla, orientat (010) en el monoclínic podria ser c, a o n, però les tres possibilitats són equivalents simplement efectuant un re-etiquetatge dels eixos a i c.

P2



Sobre una projecció (001) de la cel·la monoclínica es col·loca un eix binari en la única posició possible: paral·lel a *b*. Com que la translació *a* és perpendicular a l'eix, hi haurà un eix cada a/2 (i encara que no queda reflectit a la projecció, també cada c/2). Es col·loca la unitat asimètrica (u.a.) **1** associada a un nus, i aplicant les translacions del reticle es generen les 2, 3 i 4 (una associada a cada nus, encara que fora de la cel:la). L'eix binari fa aparèixer la u.a.**1'** per un gir de la **1**, i la 4' per un gir de la **4**. Alhora, les dues u.a. ubicades dins de la cel·la (**4'** i **1**) es relacionen amb l'eix binari situat a a/2.

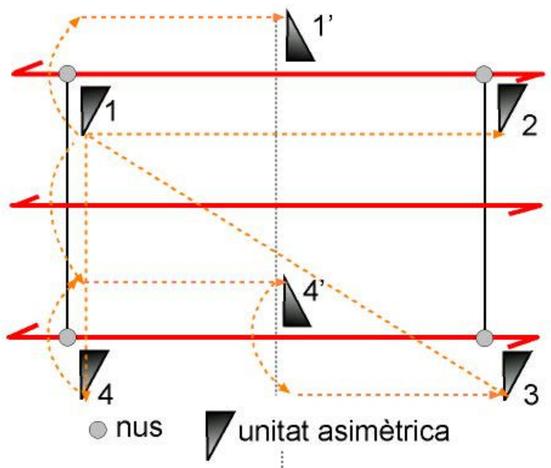
La matriu de l'operació que genera un eix binari paral·lel a [010] és

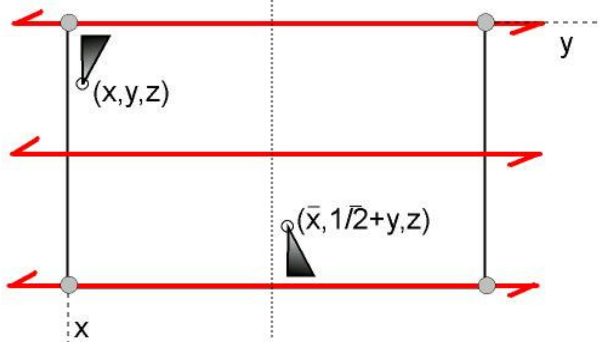
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

, per tant el resultat de la seva aplicació a un punt de la u.a. (x,y,z) és

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

P2'





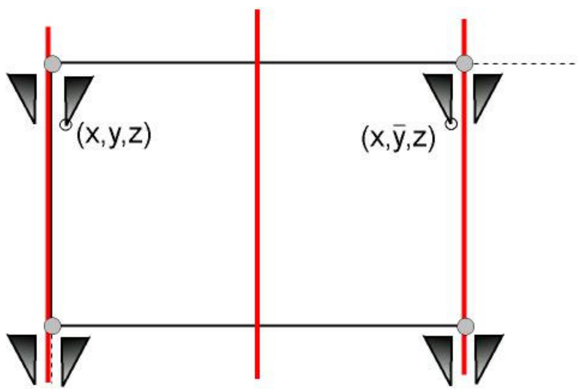
$P2_1$

Com en el cas anterior, la u.a. **1** es trasllada a **2**, **3** i **4**. Per l'eix binari helicoidal passa a **1'**, i la **4** a la **4'**, que alhora es relaciona amb l'eix 2_1 amb la **3**.

Aplicant al punt (x,y,z) la matriu de transformació del 2_1 paral·lel a [010],

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

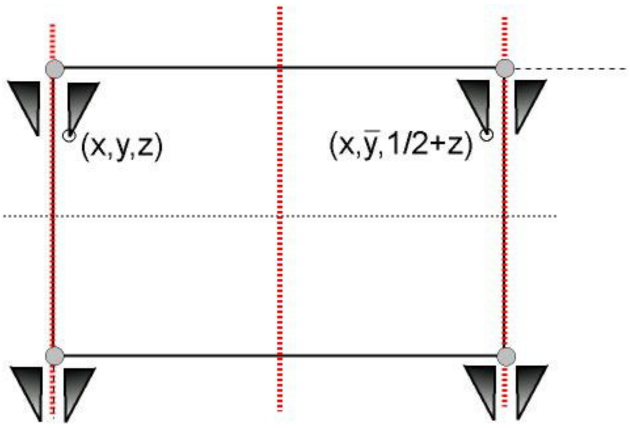
operació que es pot veure gràficament a la figura inferior.



Pm

El procés és igual que en el cas anterior, per compatibilitat amb el reticle, el pla ha de ser perpendicular a *b*.

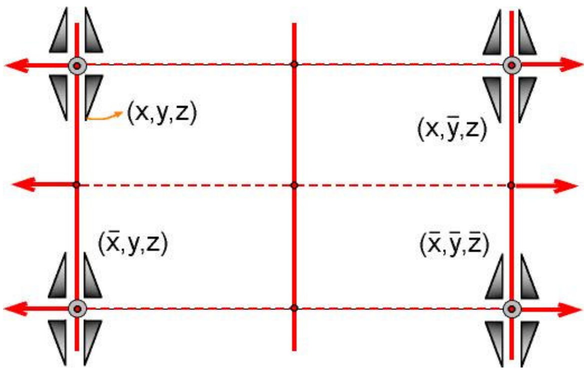
L'operació matricial és $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$



Pc

El pla c implica una reflexió seguida d'una translació c/2, per tant el punt simètric del (x,y,z) és

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



P2/m

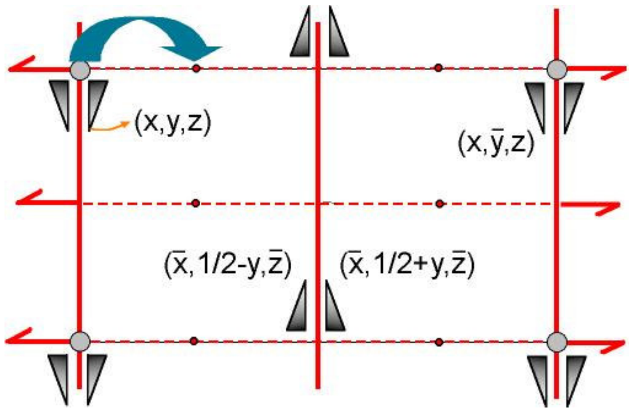
L'existència d'un pla m i un eix 2 perpendicular, genera un centre d'inversió al punt d'intersecció.

Les operacions de simetria són les següents, i aplicades a un punt en posició general (x,y,z):

- pla m perpendicular a *b* $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -y \\ z \end{pmatrix}$

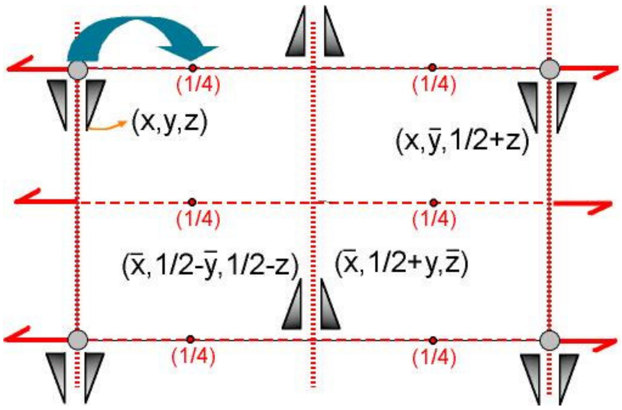
- eix 2 paral·lel a *b* $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ y \\ -z \end{pmatrix}$

- centre d'inversió a (0,0,0) $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}$



P2_1/m

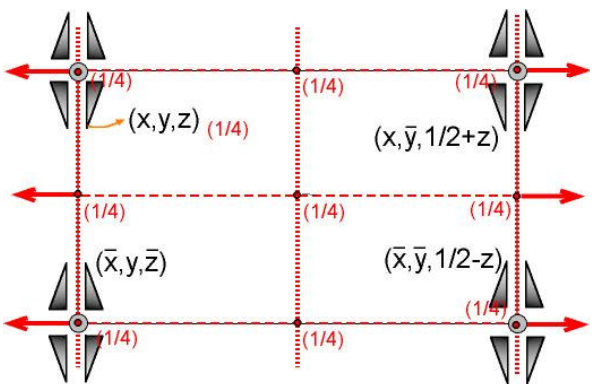
En aquest cas l'aplicació del pla m sonre el punt a (x,y,z) dóna lloc la imatge (x,-y,z), i aplicant el binari helicoidal al mateix punt es genera el (-x,1/2-y,-z). Alhora, en reflextir aquest darrer amb el pla m, apareix el (-x,1/2-y,-z), que quan es tracta de relacionar amb el de partida (x,y,z) es trova la presència d'un centre d'inversió a coordenades (1/4,1/4,0), i per tant també a la posició equivalen (0,1/4,0), on cal situar l'origen en una redefinició del reticle.



P2_1/c

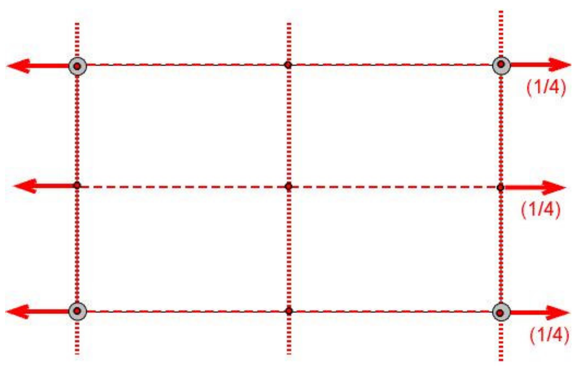
Com en el cas anterior, aplicant el pla de lliscament c, la imatge del punt (x,y,z) és (x,-y,1/2+z), i amb l'eix binari helicoidal és (-x,1/2+y,-z). A la vegada, aplicant el pla c a aquest darrer (-x,1/2-y,1/2-z), que alhora es relaciona amb el (x,y,z) per un centre d'inversió a (1/4,1/4,1/4).

Cal una redefinició de l'origen al centre ubicat a (0,1/4,1/4).

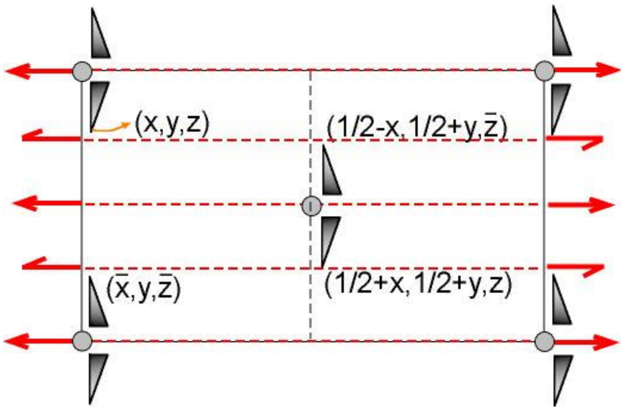


P2/c

Les imatges del punt (x,y,z) pel pla c i per l'eix binari són (x,-y,1/2+z) i (-x,y,-z), respectivament. Aplicant el pla c a aquesta darrera es genera el punt (-x,-y,1/2-z), que es relaciona amb el primer per un centre d'inversió a (1/2,1/2,1/4), i per tant, cal redefinir l'origen a (0,0,1/4) del inicial, amb la qual cosa la projecció queda de la següent manera

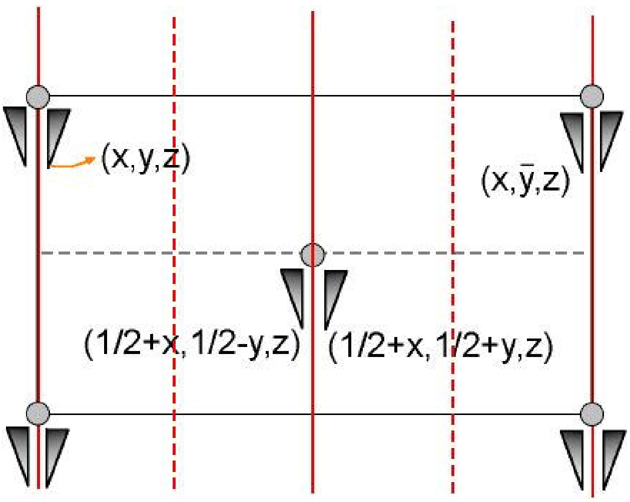


Pel que fa als grups monoclínics centrats, els possibles són *C2, Cm, C2/m, $C2_1$, Cc, $C2_1$/m, C2/c, $C2_1$/c*.



C2

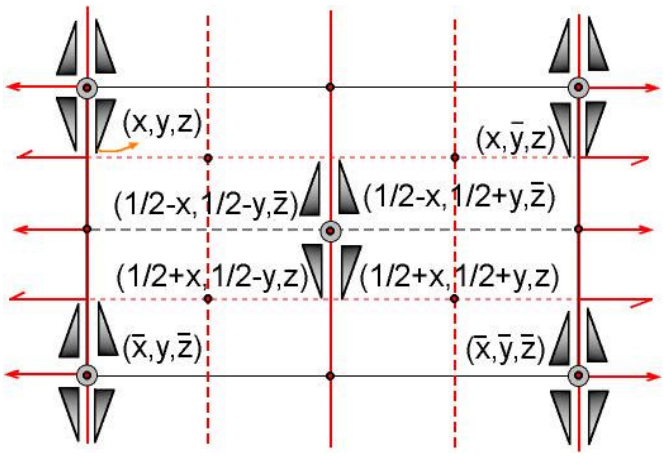
En aquest reticle hi ha un nus a (1/2,1/2,0), per tant, hi ha una unitat asimètrica (un triangle) relacionat amb el (x,y,z) a (1/2+x,1/2+y,z).
Aplicant l'eix binari a aquestes dues posicions, en resulten les (-x,y,-z) i (½-x,1/2+y,-z), respectivament. Aquesta darrera es relaciona amb la (x,y,z) per un eix binari helicoidal, com es mostra a la figura. Per tant, aquest grup és equivalent al $C2_1$.



Cm

L'aplicació del pla de reflexió m a les unitats (x,y,z) i (½+x,1/2+y,z) es generen les
(x,-y,z) i (½+x,1/2-y,z), respectivament. Alhoram aquesta darrera es relaciona amb la (x,y,z) per un pla de lliscament a situat a b/4.

Aquest grup, d'acord amb la figura és equivalent al Ca, però també al Cc, atès que si es converteixen el vector *a* en el *c*, i a l'inrevés, aquest grup és el Cc. Cal recordar que la assignació de noms als vectors és arbitrària, especialment als *a* i *c* en aquest cas, que no afecten a l'orientació de la simetria.



C2/m

L'aplicació de l'eix binari i del pla m genera un centre d'inversió a (0,0,0), i alhora, el fet de ser un reticle C dóna lloc a l'aparició d'un eix binari helicoidal a *a*/4 i d'un pla de lliscament a.

Aquest grup és equivalent als $C2_1$/m, $C2_1$/c, $C2_1$/a, C2/c, C2/a.