Expresión matricial de las operaciones de simetría

Cada una de las operaciones de simetría se puede describir como una transformación de ejes de coordenadas, de tal manera que las coordenadas de la imagen de un punto se pueden encontrar aplicando la correspondiente matriz de los cosenos directores entre los dos sistemas (el original y el correspondiente a la transformación).

Si los ejes son *x*, *y* y *z*, después de aplicar la operación de simetría, se han transformado en los *x'*, *y'* y *z'*, los cosenos directores son los que corresponden a esta tabla

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

donde R_{ij} (i,j=1,2,3) son los cosenos de los ángulos entre el primer sistema de ejes y el transformado, así por ejemplo R_{23} es el coseno entre el segundo eje original y el tercero después de aplicar la transformación.

De esta manera, las coordenadas de un punto (x,y,z) y las de la su imagen (x',y',z') se relacionan por la matriz R y el vector que posiciona el elemento de simetría, que depende de la posición del elemento y de su orden:

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

obviamente, si el elemento de simetría que da lugar a la transformación está en el origen de coordenadas, $x_o=y_o=z_o=0$. Para un elemento de orden 2 (planos de simetría, ejes binarios y centros de inversión) el vector vale $(2x_0,2y_0,2z_0)$.

Simetría respecto de un plano (m): reflexión

Se pueden considerar diversas orientaciones posibles de los planos de reflexión, en la figura se han representado algunas como ejemplo: (001),(010), (100) y (110).

En el caso de la orientación (001), los ejes *x* y *y* quedan invariados, mientras que el *z* pasa a -*z*, y el -*z* a *z*. Por tanto, la matriz de cosenos directores entre los dos sistemas de ejes (el original y el transformado) es

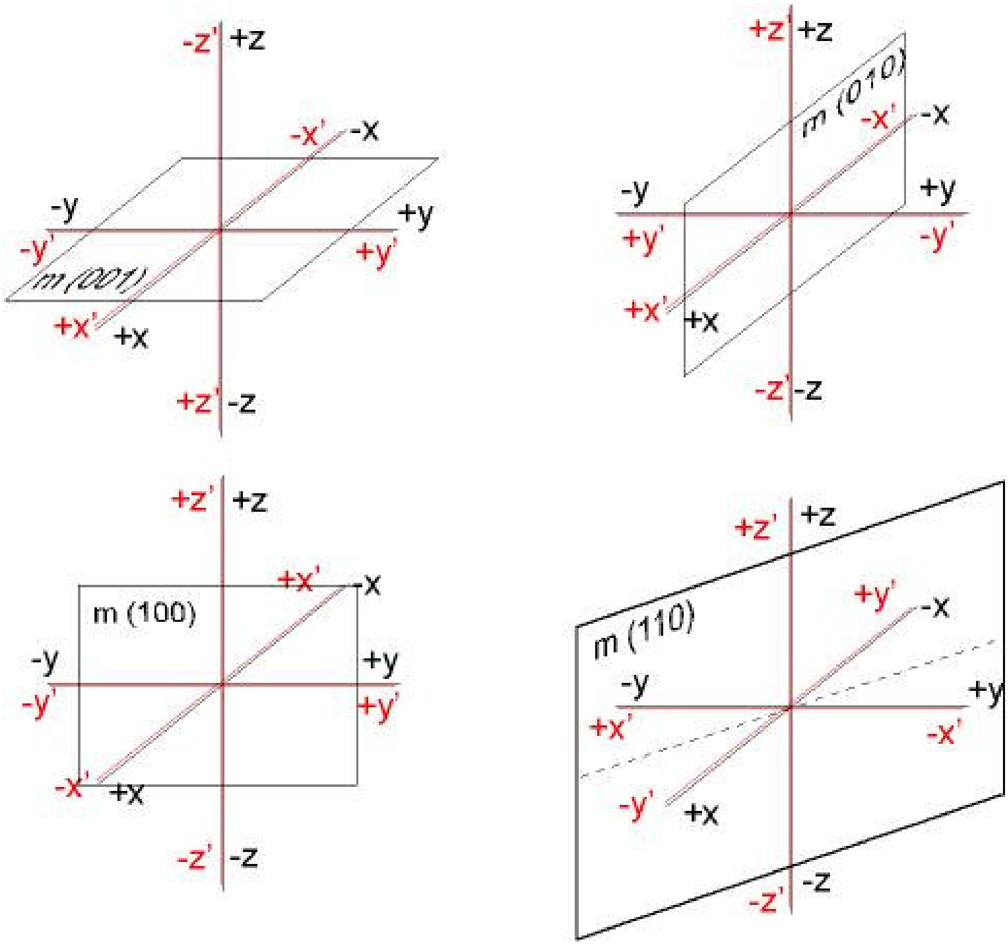
$$\begin{pmatrix} \cos 0^o & \cos 90^o & \cos 90^o \\ \cos 90^o & \cos 0^o & \cos 90^o \\ \cos 90^o & \cos 90^o & \cos 180^o \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Igualmente, para un plano m orientado paralelamente a (010) la matriz de transformación es

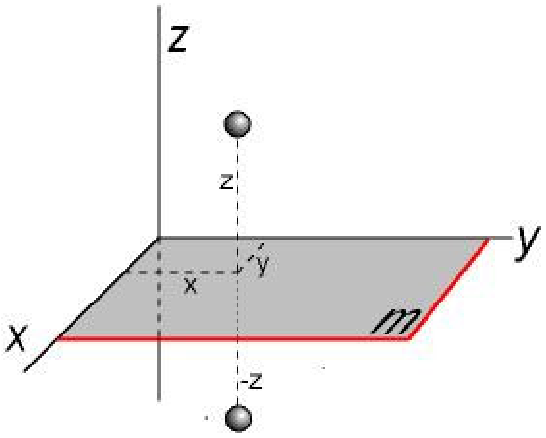
$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ para un plano m en orientación (100) será

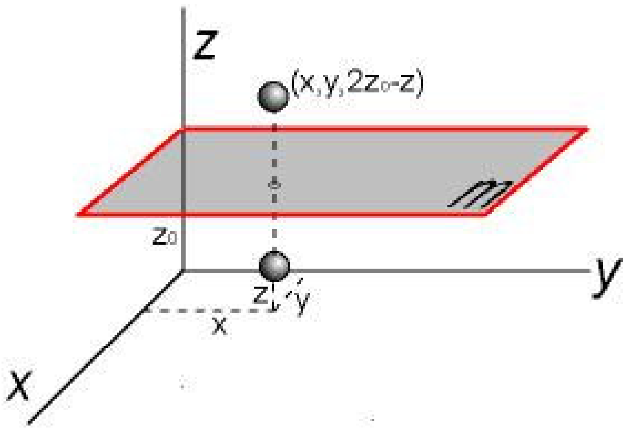
$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

y para un plano paralelo a (110), en que el eje *x'* pasa a coincidir con -*y*, y *y'* con -*x*, mientras que el *z* no varia, la matriz es



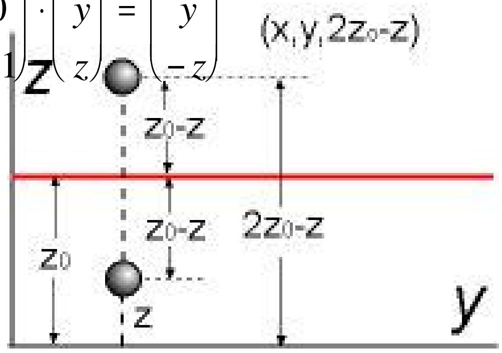
$$\begin{pmatrix} \cos 90^o & \cos 1\ldots \\ \cos 180^o & \cos\ldots \\ \cos 90^o & \cos\ldots \end{pmatrix}$$





La imagen de un punto (x,y,z) para un plano m orientado paralelamente a (001) que pasa por el origen se puede calcular con el producto siguiente:

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



y si el plano de reflexión está a una altura z_o,

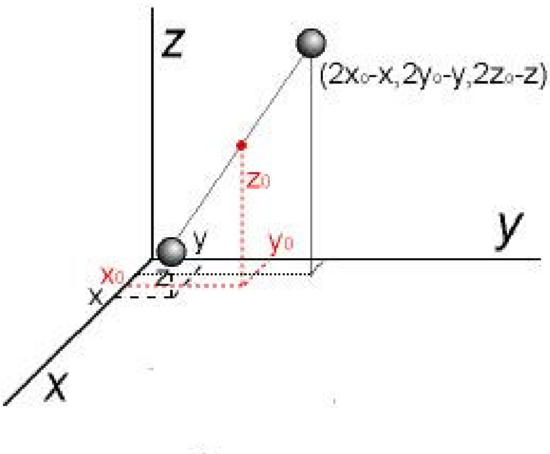
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2z_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ 2z_0 - z \end{pmatrix}$$

La tercera coordenada del punto imagen se comprende con facilidad si se analiza en una sección *zy*.

Simetría respecto de un punto (centre de inversión)

En el caso del centro de inversión ubicado en el origen, las partes positivas de los ejes transformados coinciden con las negativas de los originales. Por tanto, la matriz de transformación es

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

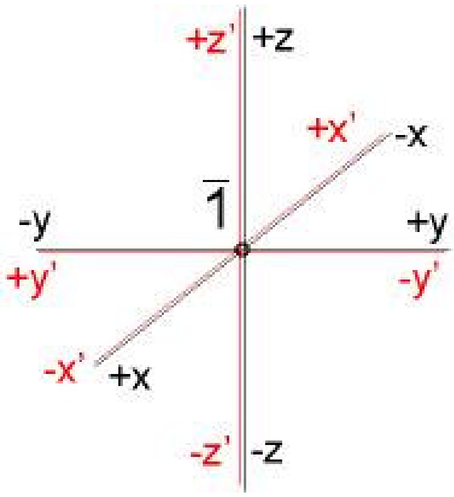


Y la imagen de un punto (x,y,z) es

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

Si el centro de inversión está a (x_o,y_o,z_o), entonces la imagen está en

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



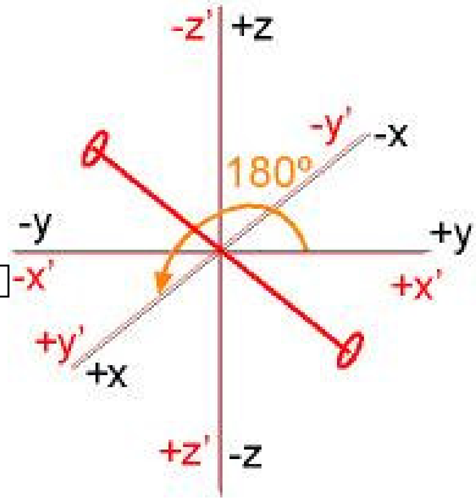
Simetría respecto de un eje: ejes de giro

Los posibles ordenes de los ejes de simetría en un medio periódico como el cristal son 1, 2, 3, 4 y 6. Las matrices de transformación se deducen como en los casos de los planos m y del centro de inversión.

Así, la matriz de transformación del eje monario (de orden1), que gira 360º, es tal que deja cualquier punto invariante, como imagen de el mismo.

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

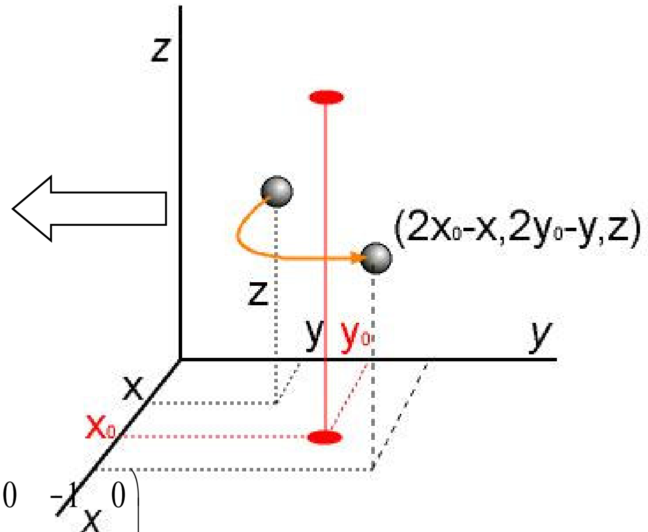
Para un eje binario (giro de 180º) la matriz depende de la orientación respecto de los ejes cristalográficos. Las matrices para algunas de las posibles orientaciones son



eje paralelo a [100] $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

eje paralelo a [010] $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

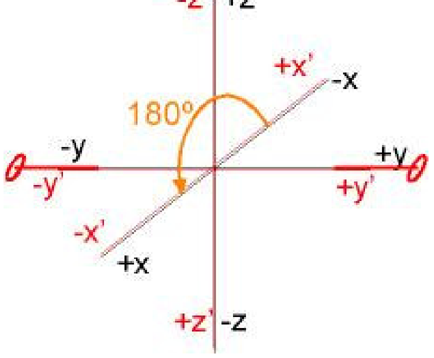
eje paralelo a [001] $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$



eje paralelo a [110] $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

eje paralelo a $[1\bar{1}0]$ $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

y así sucesivamente.



En los casos en que el eje no pase por el origen, hay que añadir el correspondiente vector. Suponiendo un eje binario paralelo a *c*, situado en $x_{0,}$ y_0, la matriz de transformación es la siguiente, a la que hay que sumar el vector de posicionamiento del eje

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

En los casos de ejes de orden superior a dos (3, 4 o 6), hay más operaciones hasta llegar de nuevo a la identidad (la posición de partida), de manera que por ejemplo en el cas del eje ternario, se trata de un operador de simetría de orden tres porque hacen falta tres operaciones para volver a la posición original, es decir un giro de 120º, la siguiente aplicación implica un giro de 240º y la tercera uno de 360º. Por tanto, las correspondientes matrices de transformación son (para un eje ternario paralelo a [001]) y considerando un sistema ortogonal de ejes:

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

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

a los cuales habría que añadir el correspondiente vector de posicionamiento si el eje no está situado en el origen.

En el caso de un eje cuaternario, que pasa por el origen, paralelo a [001], las matrices de las correspondientes operaciones de giro de 90º son:

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

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

en las simetrías de los cristales se pueden encontrar ejes cuaternarios orientados en las tres direcciones fundamentales [001] en los sistemas tetragonal y cúbico, y [100] y [010] en el sistema cúbico. Las correspondientes matrices de transformación en cada caso son fácilmente deducibles a partir de lo que se ha desarrollado hasta aquí.

Elementos complejos de simetría

Ejes de rotación e inversión

Los elementos complejos implican una operación que se puede descomponer en dos operaciones sencillas, así los *ejes de reflexión* comportan una rotación de acuerdo con el orden del eje, seguida de una reflexión; y los *ejes de inversión*, la rotación es seguida de una inversión. Se demuestra que todos los ejes de rotación tienen equivalencia en ejes de inversión. También es demostrable que las operaciones de simetría de todos los ejes de inversión excepto el cuaternario, equivalen a otras operaciones sencillas.

Por ejemplo, la operación de un binario de inversión paralelo a *c*, situado en el origen comporta un giro de 180º seguido de una inversión, es decir

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

la matriz resultante del producto de las dos operaciones es la que se había deducido para un plano m perpendicular a *c*, y como consecuencia se puede afirmar que

$$\overline{2} \equiv m$$

Similarmente se demuestra que $\overline{3} \equiv 3 + \overline{1}$, que $\overline{6} \equiv 3/m$.

En el caso del único eje propio de inversión, el cuaternario, las matrices de transformación para un eje paralelo a *c* son

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

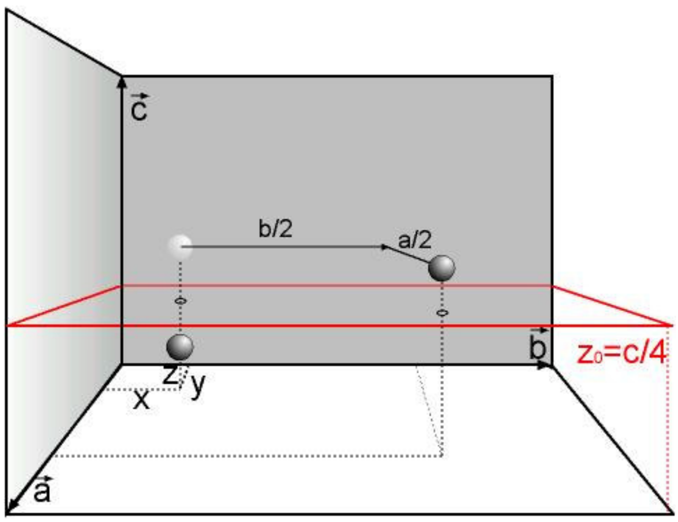
segunda operación ; $R_1 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = R_2$

en este caso se comprueba que esta matriz equivale a la operación de un eje binario paralelo a *c*, es decir, que el eje binario es un subgrupo de simetría del cuaternario de inversión tercera operación $R_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = R_3$

cuarta operación $R_3 \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

Ejes helicoidales

Las operaciones de estos elementos se pueden descomponer en un giro seguido de una traslación paralela al eje. Por tanto, las correspondientes matrices de transformación de estos ejes helicoidales serán el producto de la rotación por el vector traslación que corresponda.

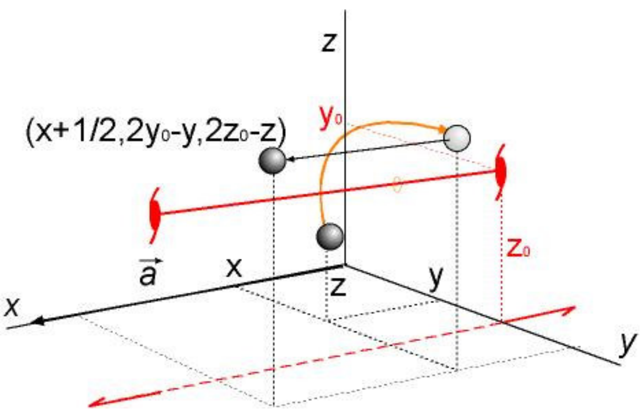


Por ejemplo, un eje binario helicoidal paralelo a *a* implicará un giro de 180º seguido de una traslación *a/2*, y la transformación es la matriz más el vector traslación asociado

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

así por ejemplo, las coordenadas de la imagen de un punto (x,y,z) para un eje binario helicoidal paralelo a *a*, que pasa por y_0 y z_0 son

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



Planos de deslizamiento

Son elementos que implican una reflexión, seguida de una traslación paralela al plano. A modo de ejemplo, la transformación de un punto (x,y,z) por un plano de deslizamiento **a** orientado (010), ubicado en b/4, es

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

o para un plano **n** orientado (001) situado a una altura z_0=0,25, como se muestra en la figura:

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