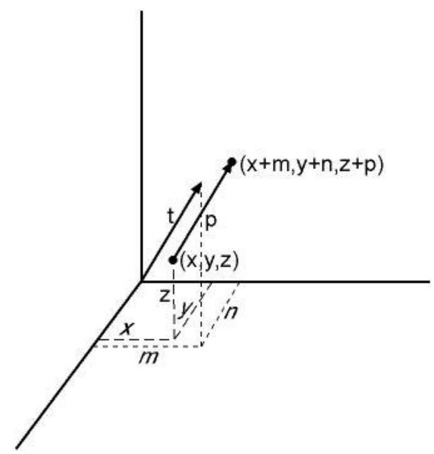
SIMETRÍA INFINITA

Al considerar el cristal como un medio periódico en el cual un grupo de átomos (el motivo) se repite en las tres dimensiones del espacio, de manera que entre dos puntos homólogos de dos motivos cualesquiera es posible imaginar un vector traslación, se ha considerado el cristal como un medio infinito. La simetría de este medio, periódico e infinito ha de ser necesariamente diferente de la que se ha estudiado para el cristal considerado como una masa homogénea (de propiedades vectoriales discontinúas, hay que recordarlo), por bien que compatibles entre ellas. En este apartado se estudiará la simetría del modelo microscópico del cristal, es decir la simetría de las posiciones de los átomos.

Traslación

Entre los elementos de simetría de este medio aparece inmediatamente la traslación como característica del propio medio. Y como tal ha de ser considerada uno de los elementos de simetría. Este se representa por un vector (recordad los primeros capítulos) que indican la dirección, el sentido y la magnitud de la traslación.



Si el vector traslación tiene por coordenadas (m,n,p), al aplicar este a un punto (x,y,z) quedará como:

$$\vec{t}^{\,(m,n,p)}(x, y, z) \rightarrow (x + m, y + n, z + p)$$

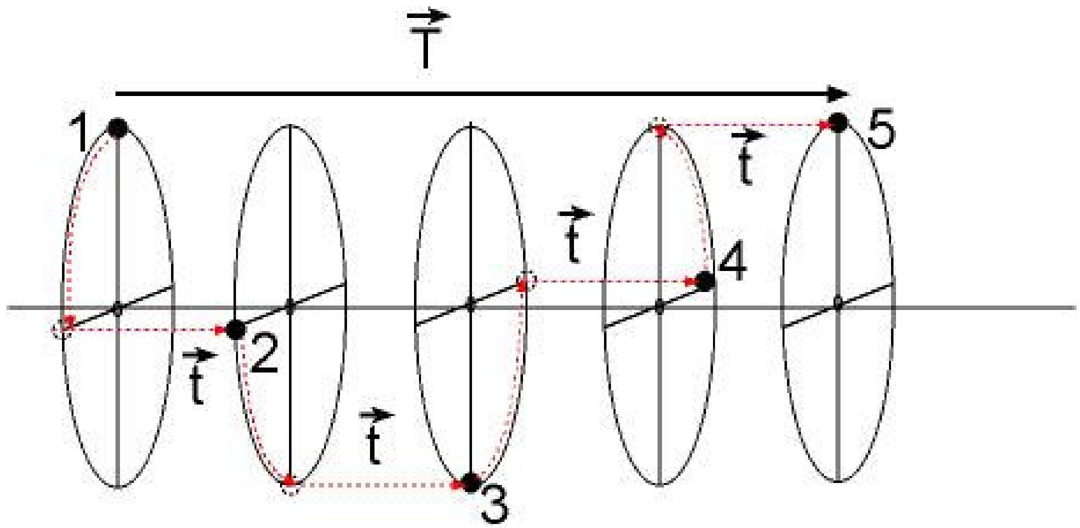
Ejes helicoidales

Son elementos compuestos de simetría resultado de combinar un eje de rotación con una traslación paralela al eje, la operación de los cuales consiste en un giro seguido de una traslación. Obviamente, la traslación asociada al eje helicoidal ha de ser compatible con la traslación del cristal paralela al eje (que es, hay que recordarlo, elemento de simetría del cristal). Esto implica que para un eje helicoidal de orden n, después de n operaciones sobre un punto, este quede como si se le hubiera aplicado la traslación del cristal paralela al eje (o un múltiplo de esta). Es decir, que se ha de cumplir que

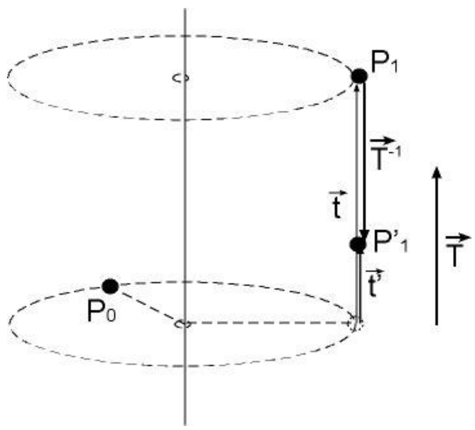
$$n\vec{t} = k\vec{T} \qquad (1)$$

siendo n el orden del eje, t la traslación asociada al eje, k un número entero y T la traslación del cristal paralela al eje. Gráficamente se puede representar de la siguiente manera:

En la siguiente figura se han representado los movimientos sobre un punto 1 de un eje helicoidal de orden 4, con una traslación asociada t. Del punto 1 se pasa al 2, y de este al 3, y así sucesivamente, de manera que después de cuatro operaciones, los puntos 1 y 5 están



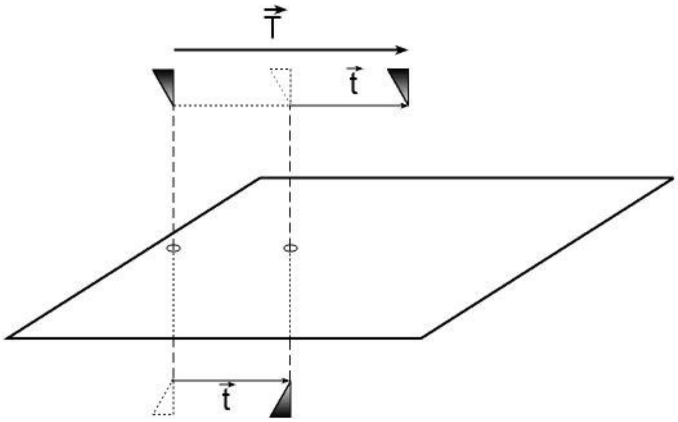
relacionados por la traslación del cristal T, paralela al eje.



Se ha de cumplir que t sea más pequeña que T. Si fuese t > T, y se admite que T es un elemento de simetría del retículo, se genera una traslación t'< T, como se demuestra en la siguiente figura.

Sea T la traslación del cristal paralela al eje helicoidal, y se supone una traslación asociada al eje t>T. Si se aplica la operación del eje al punto P0, el simétrico es el P1. Como T es un elemento de simetría del cristal, a P1 se le puede aplicar T^{-1}, y aparece el punto P'1, que está relacionado con el P0 por el eje helicoidal con una traslación t'<T.

Por tanto, de la expresión (1), si t<T, se deduce que $0 \leq k < n$, y por tanto quedan limitados los posibles ejes helicoidales, la notación de los cuales es n_k , según la siguiente tabla:



orden (n)	k	t	notación
2	1	$\frac{1}{2}\vec{T}$	2_1
3	1, 2	$\frac{1}{3}\vec{T}, \frac{2}{3}\vec{T}$	$3_1, 3_2$
4	1, 2, 3	$\frac{1}{4}\vec{T}, \frac{2}{4}\vec{T}, \frac{3}{4}\vec{T}$	$4_1, 4_2, 4_3$
6	1, 2, 3, 4, 5	$\frac{1}{6}\vec{T}, \frac{2}{6}\vec{T}, \frac{3}{6}\vec{T}, \frac{4}{6}\vec{T}, \frac{5}{6}\vec{T},$	$6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$

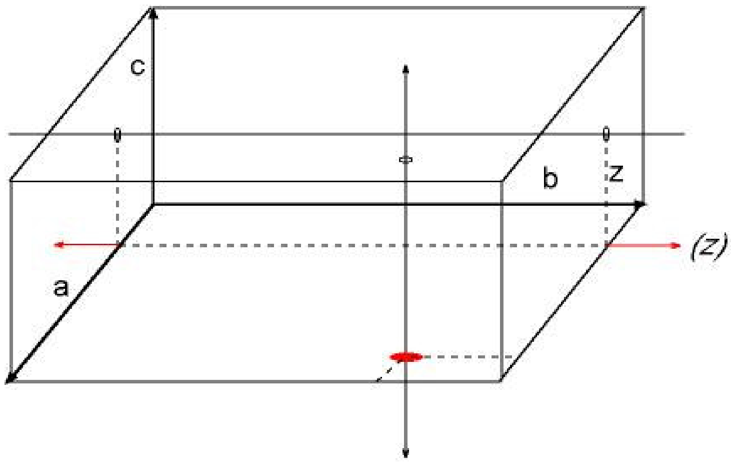
Planos de deslizamiento

Son operaciones complejas de simetría que implican una reflexión en un plano, seguida de una traslación paralela al plano, que es ½ o 1/4 de alguna de las traslaciones paralelas al plano.

Las notaciones que se utilizan hacen referencia a la dirección de la traslación asociada al plano, como se indica en la tabla siguiente.

notación	**t**	**orientación posible**
a	a/2	(001), (010)
b	b/2	(001), (100)
c	c/2	(100), (010)

n	(a/2+b/2), (a/2+c/2), (b/2+c/2)	(001), (010) y (100), respectivamente
d	a/4+b/4, a/4+c/4, c/4+b/4	

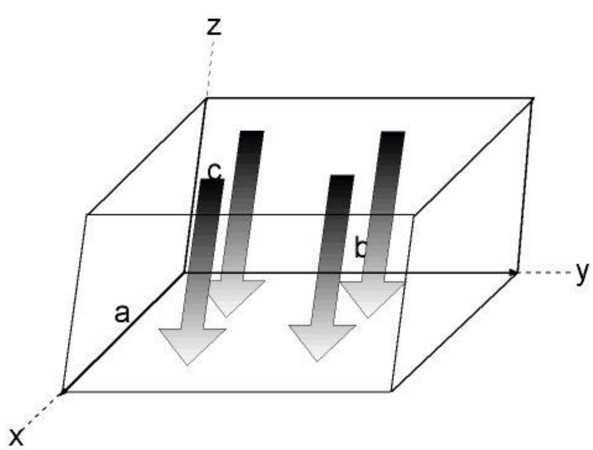


Representación gráfica

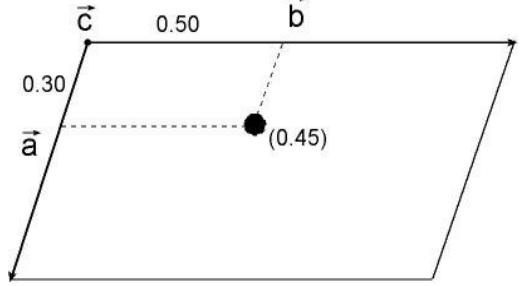
En simetría espacial se suele proyectar el contenido (real -átomos- y ideal -simetría-) de la celda fundamental sobre una de las caras de esta, normalmente la (001), es decir la formada por a y b, siguiendo la dirección de c. De esta manera todo el volumen de la celda queda proyectado en el interior del paralelogramo que definen a y b, mientras que el vector c queda proyectado como un punto.

Las coordenadas que se utilizan son parciales, es decir, las coordenadas relativas tomando a, b y c como unidad en cada caso.

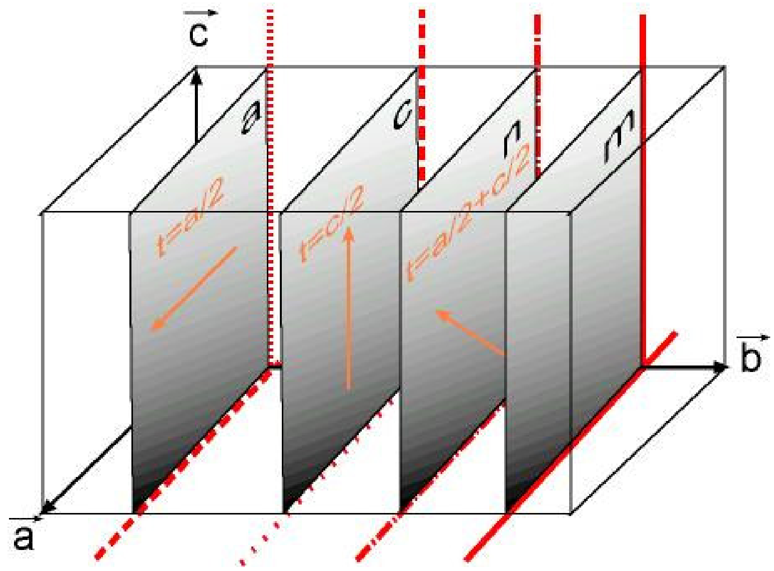
Así, un punto de coordenadas (0.3, 0.5, 0.45) como el que se ha proyectado en la figura está en 0.30·a, 0.50·b, y 0.45·c. En la proyección las coordenadas x e y se pueden leer sobre los ejes, la coordenada z hay que especificarla al lado del elemento proyectado. Normalmente, si es cero no se indica y se da por sobreentendido.



Para proyectar un eje, si está en la dirección de c se representa como un punto, en el cual se ha de indicar el tipo de eje de acuerdo con las notaciones normalmente utilizadas. Si el eje es paralelo al plano de proyección, queda como una línea, en la cual se indica el tipo de eje y la altura (la coordenada z) a la que se encuentra el eje.



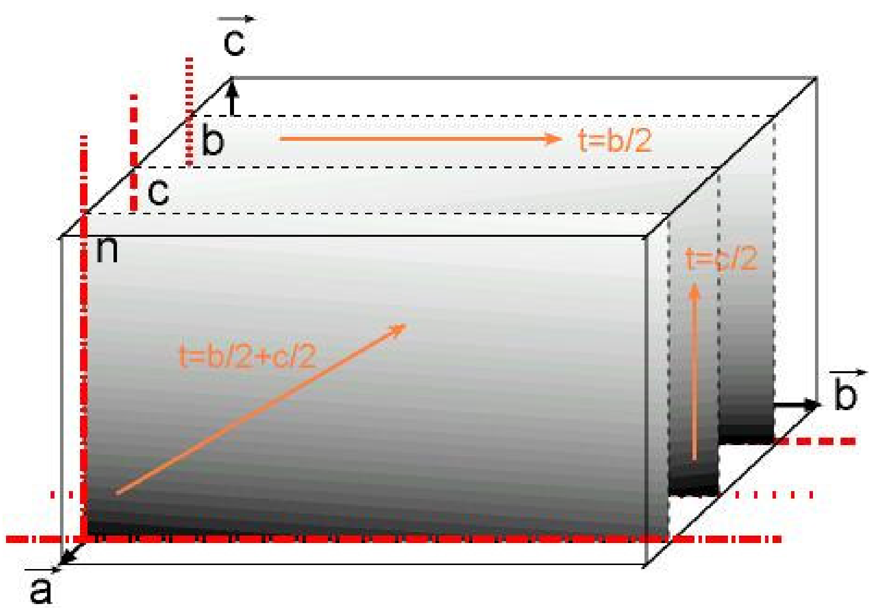
Los planos de simetría se proyectan de la misma



manera, pero el resultado es, o bien una línea, o bien ocupan la totalidad del paralelogramo de proyección (la cara *a-b*). En cada caso hay que utilizar una simbología que indique clara e inequívocamente cual es la traslación asociada al plano. Es decir, hay que indicar si se trata de un plano a, b, c o n. Por eso se unen los símbolos tal como se indica en las siguientes figuras, en las que se han representado las proyecciones imaginarias (los planos no pueden tener existencia tal como han sido representados) de diversos planos de simetría (reflexión y deslizamiento) paralelos a (100), (010) y (001), respectivamente.

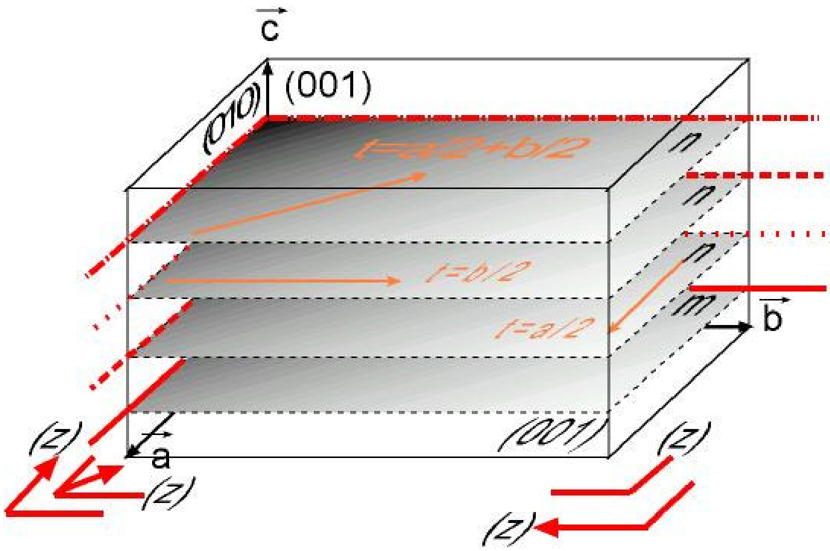
Los planos m siempre se representan con una línea continúa, excepto cuando se proyectan sobre la totalidad del plano de proyección, mientras que los otros se representan de manera diversa según sea el plano en el cual se proyectan. En las figuras siguientes está la proyección de planos con orientaciones diversas sobre diversos planos de la celda fundamental.

Proyección de planos de simetría orientados paralelamente a (100) sobre los planos (001) y (010).



Proyección de los planos de simetría orientados paralelamente a (010), sobre los planos (100) y (001).

Proyección de planos de simetría orientados paralelamente a (001) sobre los tres planos fundamentales de la celda, (100), (010) y (001). En la proyección sobre (001) hay que anotar las correspondientes coordenadas de altura z.

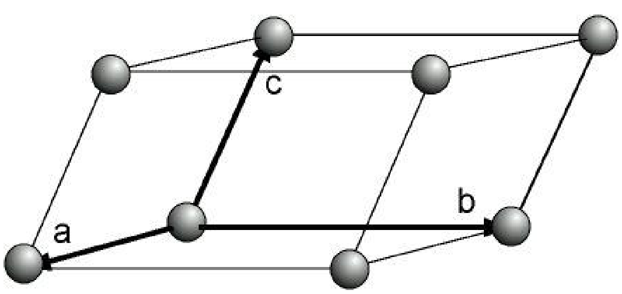


RETÍCULOS

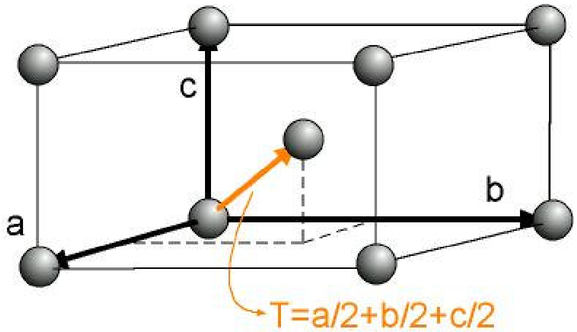
Al definir microscópicamente el cristal se dedujeron unos vectores fundamentales (los más pequeños posibles que permiten expresar cualquier otro como combinación lineal de ellos), que a la vez configuraban una celda fundamental (ver capítulo de periodicidad).

Las celdas fundamentales pueden tener diversas formas y tamaños, y se caracterizan por tres vectores fundamentales *a, b* y *c*, y los ángulos que forman entre ellos α, β y γ. Según los módulos relativos de los tres vectores y de los ángulos entre ellos, la celda tiene una u otro simetría. Seguidamente se estudiarán las posibles celdas fundamentales en función de estos parámetros y se clasificaran de acuerdo con su simetría en alguno de los siete sistemas cristalinos.

Además, hay que señalar la posibilidad de utilizar celdas múltiples cuando la distribución de nudos así lo aconseja, especialmente para una mejor claridad de visualización de su simetría.



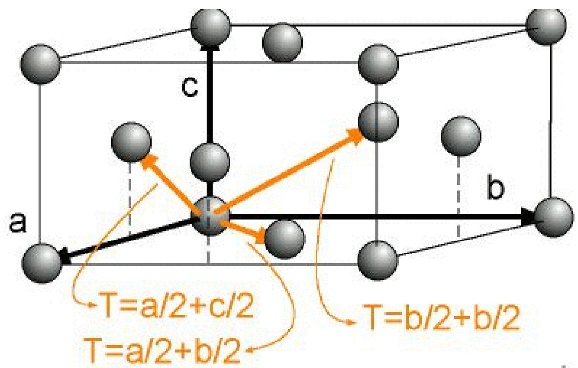
La celda, tal como se ha definido hasta ahora es una celda **simple**, formada por nudos en cada uno de sus vértices y por tanto con una multiplicidad igual a uno. Si se evalúa cuantos nudos hay en el interior de la celda representada en la figura, se llegará a la conclusión que la contribución de cada uno de los ocho que hay en los vértices suma la unidad.



Pero se admitirá la existencia de celdas **múltiples**, es decir celdas que contienen más de un nudo, y que por tanto, los vectores que las definen no son necesariamente los más pequeños posibles, la cual cosa lleva a la existencia de vectores traslación del retículo en el interior de la celda. Estos son algunos ejemplos.

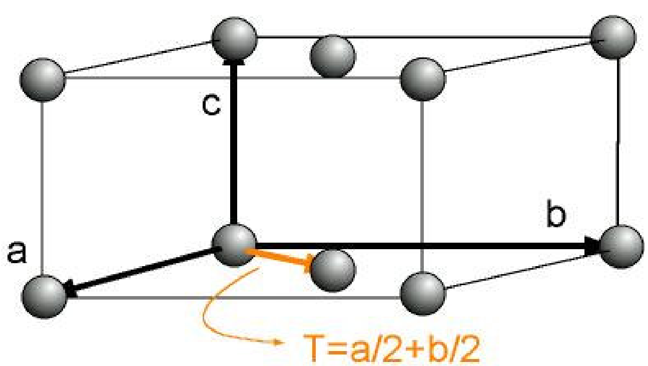
Celda C:

Esta celda tiene nudos en los vértices, pero también en las posiciones (0.5, 0.5, 0), es decir en el centre de la cara definida por *a* y *b*, (001). Esta es una celda múltiple, que se llama C, y su multiplicidad es dos: un nudo correspondiente a las fracciones de los que ocupan los vértices, y otro en las dos mitades de los que centran las caras (001) de la celda. Igualmente se podrían definir celdas múltiples A y B, con nudos en los centros de las caras correspondientes.



Celda I

Celda con nudos en los vértices y otro nudo en posición (0.5, 0.5, 0.5), la cual cosa implica la existencia de un vector traslación del retículo que va desde (0,0,0) a (0,5, 0.5, 0.5). Su multiplicidad es dos, las fracciones de nudos de los vértices (8·1/8) y el nudo central.



Celda F

Celda múltiple con nudos en los vértices y en el centro de todas las caras de la celda fundamental, es decir en posiciones
(0.5, 0, 0.5), (0, 0.5, 0.5) i (0.5, 0.5, 0),

la cual cosa implica la existencia de tres vectores del retículo menores que los fundamentales de esta celda.

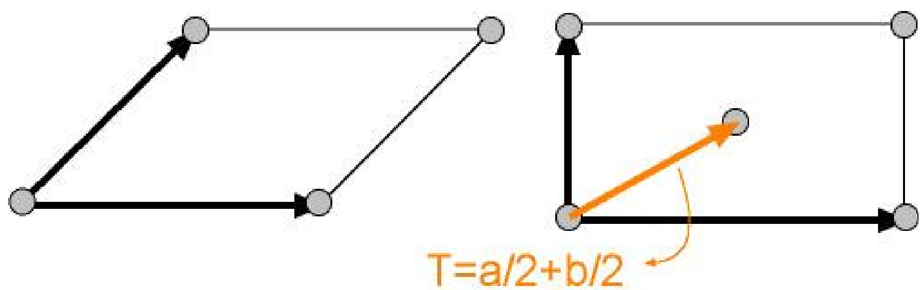
Igualmente, en dos dimensiones se pueden definir las celdas simples y una múltiple con un nudo en el centro del paralelogramo.

Tipos de retículos

El conjunto de nudos que definen un retículo posee cierta simetría, por tanto, las posibles combinaciones de los vectores fundamentales y de los ángulos entre ellos dan lugar a distribución de nudos con diversas simetrías, que han de permitir su clasificación en sistemas cristalinos. De esta manera es posible deducir la existencia de cinco retículos bidimensionales y 14 en tres dimensiones (que son los llamados retículos de Bravais).

Retículos bidimensionales

En este caso la deducción es sencilla porqué solo se dispone de dos vectores (*a* y *b*) y el ángulo que forman entre ellos (γ). Esto limita extraordinariamente las posibilidades. Los vectores a y b pueden tener módulos iguales o diferentes, mientras que al ángulo γ se le puede dar cualquier valor o los que tienen significación especial en Cristalografía, es decir los ángulos de giro de los ejes posibles. Estos son 180º, 90º, 120º y 60º. Por razones evidentes se ha de descartar el ángulo de 180º (daría vectores en la misma dirección), mientras que 120º y 60º son suplementarios y hace falta seleccionar únicamente uno (60º). Por tanto, las posibles redes han de salir de la tabla siguiente:

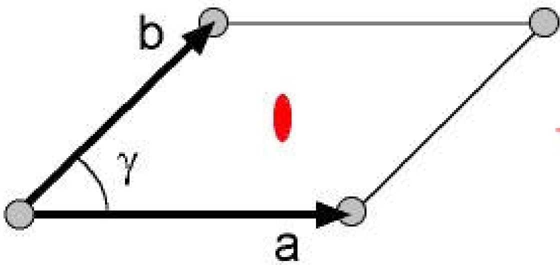
Vectores	Ángulo	Simetría	Celda	Retículo
$a \neq b$				
	γ sin limitaciones	2	p	oblicuo
$a \neq b$	$\gamma = 90º$	2mm	p	ortogonal
$a \neq b$	$\gamma = 60º$	2		

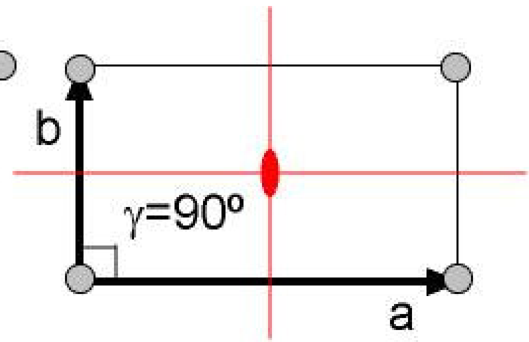
$a = b$	γ sin limitaciones	2mm	c	ortogonal
$a = b$	$\gamma = 90º$	4mm	p	cuadrado
$a = b$	$\gamma = 60º$	6mm	p	hexagonal

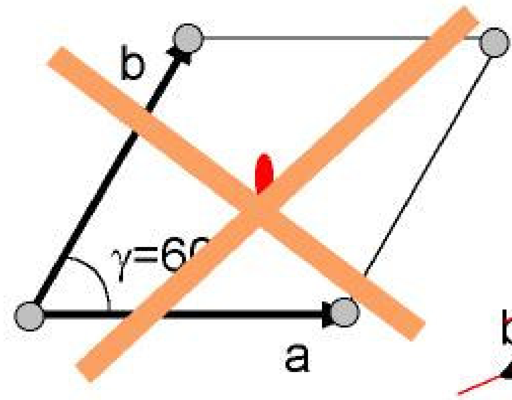
Se puede ver fácilmente que el retículo con $a \neq b$ y $\gamma = 60º$ no tiene más simetría que el primer caso en que γ puede tener cualquier valor, por tanto, el caos con $\gamma = 60º$ es un caso particular del primero y no representa un retículo nuevo, de nuevas características y simetría. La cual cosa limita los posibles retículos diferentes en dos dimensiones a cinco.

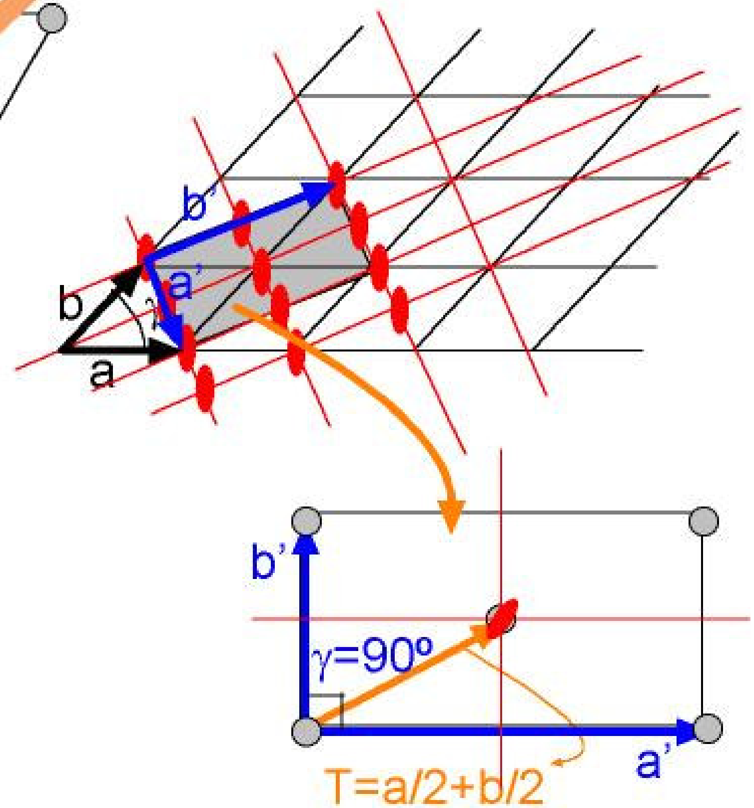
En la siguiente figura se han representado las seis posibilidades, señalando la que no representa una nueva celda, y dibujando diversas celdas en el caso del ortogonal centrada y del hexagonal, a fin de facilitar la comprensión de la simetría del conjunto de nudos. En el caso del retículo ortogonal centrado, se definen unos nuevos vectores fundamentales a'y b', y por tanto se definen como

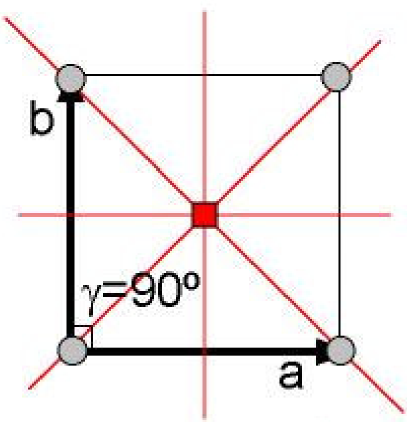
$a \neq b; \quad \gamma = 90º$, aunque existe una traslación interna del retículo T=a/2+b/2.

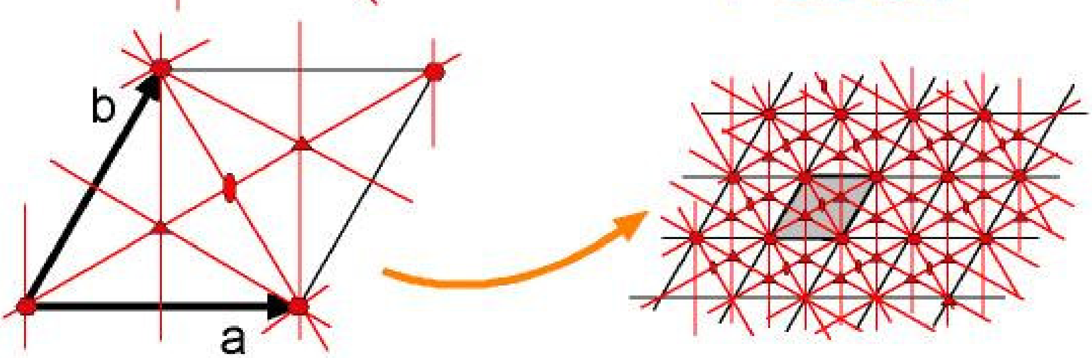

b
γ
a


b
γ=90º
a


b
γ=60
a


b'
a'
b
a
b'
γ=90º
a'
T=a/2+b/2


b
γ=90º
a


b
a

Retículos tridimensionales o de Bravais

Por razones de espacio y oportunidad no se hace la deducción de las 14 posibilidades de retículos en tres dimensiones, y se anima al estudiante a leer los correspondientes capítulos de algunos de los libros de Cristalografía sugeridos en la bibliografía de la asignatura.

En todo caso, a continuación se hace una lista de los 14 retículos de Bravais, con sus características, simetría y sistema cristalino al cual pertenecen.

SISTEMA	SIMETRÍA	RETÍCULO(S)	vectores fundamentales	ángulos entre vectores
Triclínico	$\bar{1}$	P	$a \neq b \neq c$	*sin restricciones*
Monoclínico	*2/m*	P, C	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma \neq \beta > 90^{o}$
Rómbico	*mmm*	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$
Tetragonal	*4/mmm*	P, I	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^{o}$
Trigonal	$\bar{3}m$	R	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma$
Hexagonal	*6/mmm*	P	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^{o} \neq \gamma = 120^{o}$
Cúbico	$m\bar{3}m$	P, I, F	$a = b = c$	$\alpha = \gamma = \beta = 90^{o}$

Hay que resaltar que el signo "diferente" significa que no hay limitaciones, es decir que en estos casos, el ángulo puede tener cualquier valor, incluyendo los especiales. Esto quiere decir que puede existir una celda triclínica ortogonal, no obstante, la simetría del cristal seguirá siendo triclínica porqué el contenido de la celda tendrá esta simetría, independientemente de la forma del retículo.

Hace falta que las simetrías del retículo (distribución de nudos) y del contenido (distribución de átomos) sean compatibles, y eso quiere decir que la simetría del retículo *ha de incluir* la de los átomos, no al revés.