

14  
2ej



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA  
DE MEXICO**

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
CUAUTITLAN**

**"OPERACIONES DE SIMETRIA MEDIANTE ALGEBRA  
GEOMETRICA APLICADAS A GRUPOS  
CRISTALOGRAFICOS"**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

**INGENIERO QUIMICO**

**P R E S E N T A :**

**JORGE DANIEL MARTINEZ GUTIERREZ**

ASESOR: DR. JAIME KELLER TORRES

MEXICO, D. F.

1996

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**

**TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AVENIDA DE  
MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLAN  
UNIDAD DE LA ADMINISTRACION ESCOLAR  
DEPARTAMENTO DE EXAMENES PROFESIONALES

U. N. A. M.  
FACULTAD DE ESTUDIOS  
SUPERIORES CUAUTITLAN

ASUNTO: VOTOS APROBATORIOS



Departamento de  
Exámenes Profesionales

DR. JAIME KELLER TORRES  
DIRECTOR DE LA FEB-CUAUTITLAN  
P R E S E N T E .

AT'N: Ing. Rafael Rodríguez Ceballos  
Jefe del Departamento de Exámenes  
Profesionales de la F.E.S. - C.

Con base en el art. 28 del Reglamento General de Exámenes, nos permitimos comunicar a usted que revisamos la TESIS TITULADA:  
"Operaciones de Simetría Mediante Álgebra Geométrica  
Aplicadas a Grupos Cristalográficos"

que presenta el pasante: Martínez Gutiérrez Jorge Daniel  
con número de cuentas: 8406809-5 para obtener el TÍTULO de:  
Ingeniero Químico

Considerando que dicha tesis reúne los requisitos necesarios para ser discutida en el EXAMEN PROFESIONAL correspondiente, otorgamos nuestro VOTO APROBATORIO.

A T E N T A M E N T E .  
"POR MI RAZA HABLARA EL ESPIRITU"  
Cuautitlán Izcalli, Edo. de Mex., a 8 de Enero de 1996

PRESIDENTE	<u>Dr. Jaime Keller Torres</u>	
VOCAL	<u>I.Q. Jorge Martínez Peniche</u>	
SECRETARIO	<u>Q. Jesús Fernández Madrigal</u>	
PRIMER SUPLENTE	<u>Dra. Suemi Rodríguez Romo</u>	
SEGUNDO SUPLENTE	<u>Q. Ofelia Vega Vázquez</u>	

A Dios:

A quien debo todo.

*A la Memoria de mi hermano Jesús*

*A mis Padres:*

*Por todo el Apoyo, Educación y  
Formación que me han dado.*

*A mis Hermanos*

A quienes me dirigieron y apoyaron en este trabajo:

Dr. Jaime Keller Torres (Asesor de Tesis)

Dr. Zwiagniew Ozewickz Katz

Dr. Adán Rodríguez

Dr. David Hestenes

I.2. Jorge Martínez Peniche

I.2. Adolfo Obaya Valdivia

## Contenido:

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1 Concepto de Simetría</b>	<b>5</b>
<b>2 Introducción al Algebra Geométrica</b>	<b>17</b>
<b>Algebras de Clifford</b>	<b>19</b>
La base	20
Producto interno y producto externo	22
<b>Algebra Vectorial</b>	<b>25</b>
Algebra vectorial del plano	26
El bivector	26
Producto de vectores	28
División en componentes	31
Componentes paralelos y perpendiculares	31
El bivector y los números complejos	33
<b>Algebra Vectorial del Espacio</b>	<b>34</b>
La base	34
El trivector	34
Suma de bivectores	35
Producto interno de un vector y un bivector	37
dualidad del producto cruz y el producto externo	38

<b>3 Operaciones de Simetría Mediante el Algebra Geométrica</b>	<b>39</b>
<b>Elementos de Simetría en los Objetos</b>	<b>41</b>
<b>Sistemas de Notación</b>	<b>42</b>
<b>Identidad</b>	<b>43</b>
<b>Rotaciones</b>	<b>44</b>
Algebra geométrica del cuadrado	48
<b>Reflexiones</b>	<b>51</b>
Ejemplos complementarios	58
<b>Inversión</b>	<b>61</b>
<b>Rotación Impropia</b>	<b>65</b>
<b>Traslación</b>	<b>67</b>
<b>Operaciones Helicoidales y de Desplazamiento</b>	<b>68</b>
<b>Simetría Múltiple en los Objetos</b>	<b>71</b>

<b>4 Aplicaciones a la Cristalografía</b>	<b>73</b>
<b>Cristales</b>	<b>75</b>
La restricción cristalográfica	76
<b>Los Siete Sistemas Cristalinos</b>	<b>79</b>
Sistema de Notación	81
Sistema triclinico	82
Sistema monoclinico	82
Sistema ortorrómbico	84
Sistema tetragonal	85
Sistema cúbico	86
Sistemas trigonal y hexagonal	89
<b>Los 32 Grupos Cristalográficos Puntuales</b>	<b>93</b>
Sistema triclinico	95
Sistema monoclinico	96
Sistema ortorrómbico	100
Sistema tetragonal	103
Sistema trigonal	105
Sistema hexagonal	106
Sistema cúbico	106
<b>Las 14 Redes de Bravais</b>	<b>107</b>
<b>Los 230 Grupos Espaciales</b>	<b>109</b>
Sistema de notación	111
Sistema triclinico	112
Sistema monoclinico	115

Grupo puntual $\bar{2}$	115
Grupo puntual $\bar{2}$	104
Grupo puntual $\underline{2}$	123
<b>Sistema ortorrómbico</b>	<b>125</b>
Grupo puntual $\underline{222}$	126
Grupo puntual $\underline{222}$	128
Grupo puntual $\underline{222}$	130
<b>Sistema tetragonal</b>	<b>125</b>
Grupo puntual $\underline{4}$	125
Grupo puntual $\underline{4}$	125
Grupo puntual $\underline{444}$	126
Grupo puntual $\underline{422}$	126
Grupo puntual $\underline{422}$	127
Grupo puntual $\underline{422}$	128
Grupo puntual $\underline{422}$	129
<b>Sistema trigonal</b>	<b>132</b>
Grupo puntual $\underline{3}$	132
Grupo puntual $\underline{3}$	132
Grupo puntual $\underline{32}$	133
Grupo puntual $\underline{32}$	123
Grupo puntual $\underline{32}$	134
<b>Sistema hexagonal</b>	<b>135</b>
Grupo puntual $\underline{6}$	135
Grupo puntual $\underline{6}$	135
Grupo puntual $\underline{666}$	136
Grupo puntual $\underline{622}$	136
Grupo puntual $\underline{622}$	136
Grupo puntual $\underline{622}$	136

Grupo puntual $\bar{622}$	137
Grupo puntual $\underline{622}$	137
<b>Sistema cúbico</b>	<b>138</b>
Grupo puntual $\underline{23}$	138
Grupo puntual $\underline{23}$	138
Grupo puntual $\underline{432}$	139
Grupo puntual $\underline{432}$	140
Grupo puntual $\underline{432}$	140
<b>Conclusiones</b>	<b>142</b>
<b>Referencias</b>	<b>146</b>

## **Introducción**

**D**entro de una carrera con un campo de estudio tan vasto e interrelacionado como lo es la carrera de Ingeniería Química surgen hacia el estudiante las más diversas ramas de interés para enfocar y desarrollar tanto su ejercicio, inquietud y realización profesional. Resultan ser innumerables dichas ramas de interés, solo por mencionar algunas, estas pueden ir desde el planteo, análisis, diseño y realización de procesos o plantas de manufactura de cualquier producto sea a nivel casero, laboratorio o industrial; hasta los más insospechados aspectos de la química pura sea teórica o aplicada de donde nacen las ideas y conceptos que entendidos, optimizados y llevados a gran escala siempre han sido la base del desarrollo científico y tecnológico en aras del bien del hombre.

**E**l presente trabajo se enfoca hacia el estudio de la ciencia del estado sólido. Esta ciencia a diferencia de las del estado gaseoso y líquido sentimos que aún está en sus primeros estadios de desarrollo. Por esto gran parte de esta ciencia se realiza a nivel teórico sin dejar de ser importante. Por solo mencionar un ejemplo pensemos en los semiconductores que tanto han influido en el desarrollo de la radio, televisión, computadoras- su influencia cada vez más acentuada en nuestra vida- y los superconductores, inventos que caracterizan el desarrollo tecnológico de los siglos XX y XXI. Estos semiconductores al inicio de silicio nacieron de la teoría de "huecos" y otras como la teoría de "bandas".

**U**na de tales ramas del estudio de la ciencia del estado sólido es el estudio de los sistemas cristalinos así como el estudio de los grupos

puntuales y espaciales cristalográficos, es decir la "cristalografía". Dichos estudios y su enfoque matemático ya no son ciencia nueva ,pero en este trabajo vamos ha dar nuevos enfoques al estudio de la cristalografía tanto en su desarrollo como en su fundamento matemático. Estos nuevos enfoques surgen del álgebra geométrica. Esta álgebra geométrica es solo una parte de lo que son las álgebras de Clifford que es la materia de los nuevos avances en el desarrollo de las herramientas matemáticas para describir y desarrollar los últimos conceptos venideros de la ciencia actual. Las álgebras de Clifford se han desarrollado y evolucionado vastamente en las últimas décadas a tal grado que sus conceptos van desde los más fundamentales del álgebra geométrica que pueden ser enseñados a nivel medio superior; hasta las más desarrolladas teorías relativistas del electrón y las teorías de norma aplicadas a la gran unificación de las fuerzas fundamentales de la naturaleza.

**E**l objetivo del nacimiento y desarrollo de esas álgebras no fue por el afán de incrementar por incrementar los anales de la matemática, sino por ser herramientas más sencillas y generales , es decir más poderosas, para atacar y describir los retos científicos de nuestro tiempo. Así pues, en este trabajo estudiaremos gran parte de la cristalografía, pero desde el punto de vista del álgebra geométrica. Para lo cual en el capítulo 2 explicaremos algunos conceptos básicos del álgebra geométrica que se aplicarán en los capítulos 3 y 4. En el capítulo 3 estudiaremos las operaciones de simetría en general, claro siempre desde el punto de vista del álgebra geométrica. En el capítulo 4 estudiaremos las aplicaciones de las operaciones de simetría hacia el desarrollo de los siete sistemas cristalinos, los 32 grupos puntuales y los

230 grupos espaciales todos necesarios para la identificación y descripción exacta de un cristal de la mayoría de los materiales cristalinos. Hemos dicho la mayoría porque últimamente se han descubierto y preparado materiales de estructura "cuasicristalina" cuyo planteamiento y descubrimiento mencionamos en el capítulo 4, pero su análisis y caracterización salen del alcance de este trabajo.

Las operaciones de simetría que son los conceptos fundamentales en este trabajo se explican de una manera general y aplicable a cualquier objeto, en particular a obras pictóricas y arquitectónicas a lo largo del capítulo 1. Aunque, en los capítulos 3 y 4 los objetos de su aplicación son radicalmente diferentes la intención del capítulo 1 es presentar los conceptos básicos y generales de la simetría porque el campo de estudio, aplicación, así como implicaciones físicas, filosóficas y estéticas del concepto de simetría va más allá de sus aplicaciones en la ciencia del estado sólido.

## **Capítulo 1**

### **Concepto de Simetría**

**T**odos tenemos una idea intuitiva más o menos clara de lo que significa la palabra *simetría*. La palabra simetría tiene dos acepciones en el lenguaje corriente. En el primer sentido, *simétrico* significa algo así como bien proporcionado, bien equilibrado, y *simetría* indica esa especie de concordancia entre varias partes por la cual éstas concurren a integrarse en un todo. Nos resulta muy fácil distinguir entre una figura geométrica simétrica de otra que no lo sea. También las figuras simétricas resultan ser más atractivas para nuestros sentidos que las antisimétricas, debilidad, que al parecer compartimos con la Madre Naturaleza; desde los copos de nieve hasta las galaxias, pasando por los cristales, hojas de los árboles, nuestros cuerpos, etc. La mayoría de los objetos naturales presentan patrones simétricos más o menos evidentes. Sin embargo, sabemos que un concepto intuitivo de un término no es suficiente para convertirlo en un concepto útil en la ciencia. Para ello, tenemos que sustituir la noción intuitiva por una definición rigurosa. La definición de simetría que se suele usar y que emplearemos de aquí en adelante es la propuesta por el matemático Herman Weyl, y en esencia esta dice que: Un objeto es simétrico si se le puede hacer algo de manera tal que una vez que se le ha hecho se ve igual que antes de que se le hiciera. Así, por ejemplo si se toma un copo de nieve y se le hace girar 60 grados alrededor de un eje perpendicular al plano del copo, al final de la operación el copo se verá exactamente igual, lo cual significa, que de acuerdo con la definición de Weyl, que el copo es simétrico.

La definición científica de simetría es lo que se conoce como una definición operacional porque se basa en una operación. En el ejemplo anterior la operación fue una rotación y además estudiaremos las operaciones de reflexión, identidad, inversión y translación. Dichas operaciones son operaciones espaciales de simetría; pero puede ocurrir que las operaciones adecuadas que revelan una cierta simetría no sean espaciales, sino de tipo más abstracto. Esto sucede, por ejemplo en un cuadro del artista holandés Maurits C. Escher (fig 1-1), en el cuál la operación que revela la simetría subyacente consiste en el intercambio de demonios por ángeles simultáneamente con el del color negro por el blanco.

**E**l concepto de simetría parece ser un concepto estético innato del hombre dado que desde sus primeras manifestaciones artísticas hasta las últimas y más complejas corrientes estéticas la simetría ha estado presente de alguna u otra forma.

La manifestación artística en el hombre se considera como una necesidad a cualquier nivel y cuando no somos artistas expertos y queremos aventurarnos a realizar algo estético por lo regular nos basamos de manera inconsciente en el concepto de simetría. El hombre primitivo no tenía un acervo cultural ni un marco de referencia estético, ni escuelas ni tendencias y comenzó a realizar pequeñas pero valiosas obras de arte, representando por lo general el estilo de vida de aquella época. Esto lo podemos apreciar en las pinturas rupestres tanto de las cuevas de Altamira en España como en las de Lascaux en Francia que datan de alrededor de 10,000 años atrás. Tal

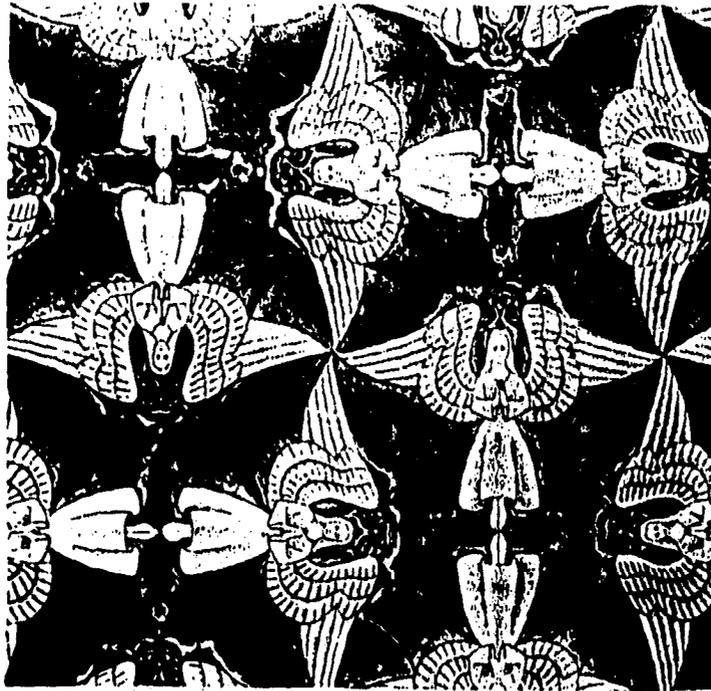


Figura 1-1. Estudio de la división regular del plano con ángeles y diablos  
M.C. Escher, 1941.

vez el concepto de simetría nació en el hombre al observar la simetría existente en los cuerpos humanos de sus compañeros y animales del medio, e incluso al observar su rostro reflejado en un estanque de agua tranquila, etc.

**A**ntes de seguir adelante queremos hacer énfasis en lo que es la llamada simetría bilateral. Esta clase de simetría es a la que comúnmente estamos acostumbrados, es decir a la simetría de derecha e izquierda. Esta clase de simetría es la que nos resulta evidente en la estructura de animales superiores, obras de arte y especialmente en el cuerpo humano. Esta simetría se basa en la reflexión de una figura respecto a un plano que la divide en dos partes, y si puede superponerse sobre sí misma por reflexión en dicho plano. Desde los primeros estadios de nuestra formación académica se nos enseñó a trazar ejes de simetría en diversas figuras de la vida diaria, es decir, trazamos los planos de reflexión antes mencionados. El concepto de simetría bilateral parece ser el concepto simétrico mejor reconocido por el hombre tanto por simple sentido común y desde sus primeras manifestaciones artísticas.

Aprovecho para ilustrar algunas formas de la simetría bilateral en el arte empleando elementos del arte prehispánico. En este arte no parece haber mucha tendencia hacia la pintura y de las relativamente pocas pinturas realizadas y que se han conservado hasta nuestros días solo parecen destacar

los murales de Bonampak de la cultura Maya central pertenecientes al periodo al periodo clásico tardío (700-800 d.C.). Por tal razón y para mostrar el concepto de simetría bilateral en el arte prehispánico emplearemos elementos arquitectónicos y escultóricos, pero refiriéndonos a vistas bidimensionales de estos. Comenzaremos con la famosa pirámide de los nichos (fig. 1-2) en el Tajín en Veracruz que data del periodo clásico (300-800 d.C.); cuyos profundos huecos suman, junto con la puerta misma del santuario, un total de 365, relacionados evidentemente con los días del calendario solar. Al pararse frente a este edificio podemos notar la evidente simetría bilateral, donde el plano de reflexión sube desde la mitad de la arista frontal de la base de la pirámide hasta la mitad de la arista frontal superior del santuario dividiendo en dos partes a la puerta de este y a la escalera de la pirámide. La pirámide del Tajín parece ser una obra arquitectónica más evolucionada que la más famosa pirámide del sol en Teotihuacan (fig. 1-3) que tiene casi la misma área de la base que la pirámide de Keops en Egipto, pero la mitad de la altura de esta, y data del periodo preclásico o formativo en su etapa superior ( 200 a.C-100 d.C. ). La parte frontal de la pirámide del sol que apunta hacia en este presenta el mismo patrón simétrico bilateral que en la pirámide de los nichos. También las partes oeste, norte y sur de la pirámide de Teotihuacan cada una presenta simetría bilateral salvo por algunos pequeños detalles. Existen mucho más ejemplos de esta simetría bilateral en la arquitectura prehispánica, tal como el templo I de Tikal en Guatemala (fig 1-4), El Castillo o templo de Kukulcán en Yucatán México (fig.1-5) - que nos ofrece el imponente espectáculo de luces y sombras aludiendo al descenso de Kukulcán en los

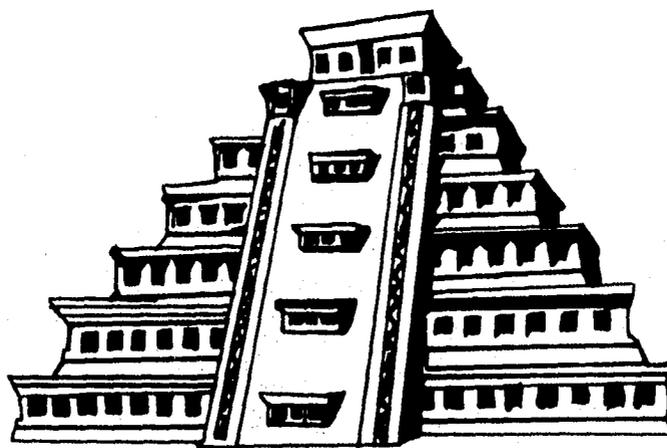


Figura 1-2. Pirámide de los nichos. El Tajín Veracruz

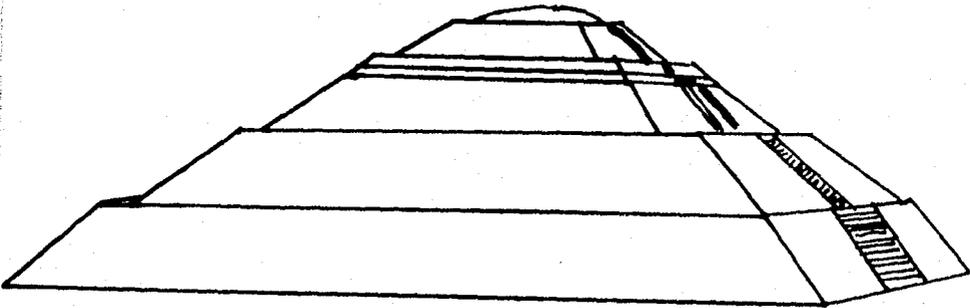


Figura 1-3. Pirámide del Sol, Teotihuacán México

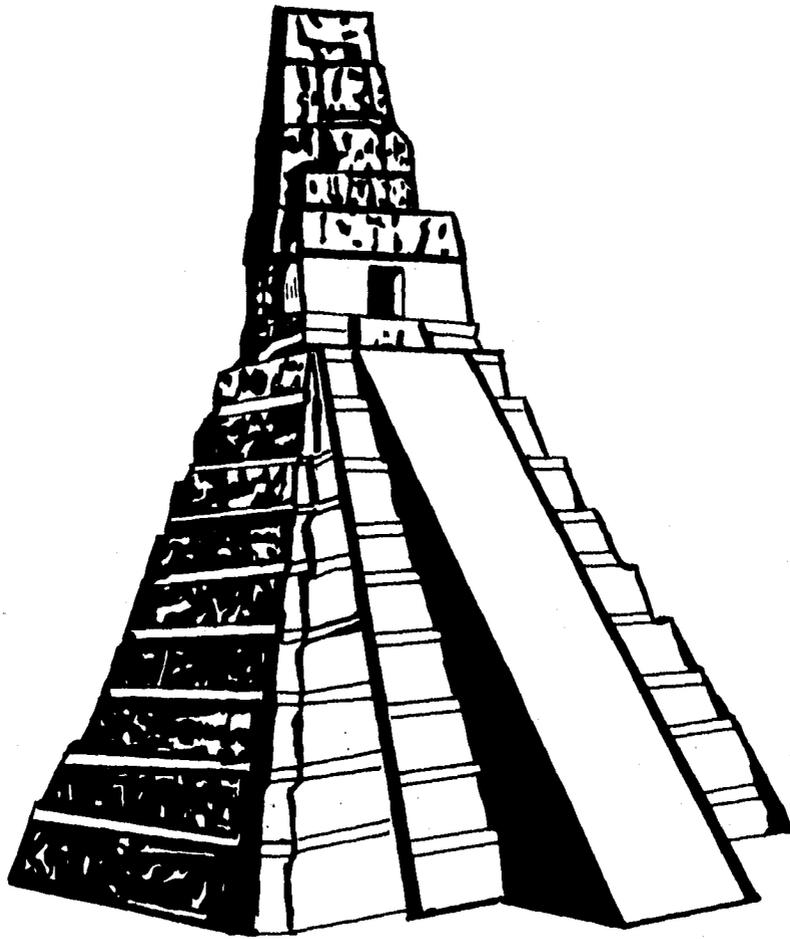


Figura 1-4. Templo I. Tikal Guatemala

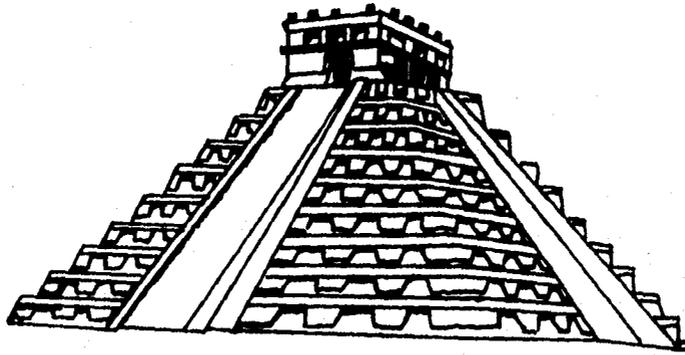


Figura 1-5. Templo de Kukulán. Yucatan México

equinoccios de primavera y otoño- ,etc.

En la escultura y cerámica prehispánica también encontramos numerosos ejemplos donde la noción de simetría bilateral se hace presente, como en las numerosas estelas mayas de Copán en Honduras.

Otra última, pero menos estudiada y desarrollada faceta de la simetría bilateral se encuentra en la música. Pensamos que la dificultad de asociar un patrón simétrico a la música es que la percibimos por medio del oído y no por la vista como las demás artes plásticas. Y siento que se necesita de mucha instrucción musical y educación del oído para establecer un patrón de simetría en la música, además los diferentes sonidos transcurren en un cierto intervalo de tiempo a diferencia de una obra de apreciación visual que podemos contemplar por horas y especular y determinar un cierto patrón simétrico existente. Un buen ejemplo de simetría en una obra musical considero que es la *Toccata y Fuga en Re Menor* de Johann Sebastian Bach en sus compases del 1 al 7 donde presenciamos todo un desbordante torrente musical. En esta obra y en el intervalo mencionado se tocan las mismas notas , claro en diferente tono y simultáneamente tanto con la mano derecha como con la izquierda. Y además el concepto de simetría bilateral se puede apreciar visualmente en la partitura mediante un plano independiente de la posición de la líneas del pentagrama (fig. 1-6). Todos los músicos estarán de acuerdo que por debajo del elemento emocional en la música hay un fuerte elemento formal.

The image displays a musical score for a piece by J.S. Bach, consisting of two parts: a Toccatta and a Fuga. The score is written on a grand staff with three systems of staves. The first system includes a treble clef staff with a key signature of one flat (B-flat) and a common time signature (C). The second system continues the notation with a treble clef staff and a bass clef staff. The third system shows the continuation of the piece, with a treble clef staff and a bass clef staff. The notation includes various musical symbols such as notes, rests, and dynamic markings, characteristic of Baroque keyboard music.

Figura 1-6. Toccatta y Fuga en Re menor. J.S. Bach

Como se mencionó anteriormente la simetría bilateral es la simetría de derecha e izquierda, pero ¿que es lo que define la diferencia entre derecha e izquierda? Esta pregunta parece ser de carácter estrictamente filosófico cuya respuesta podría abarcar volúmenes completos. Afortunadamente existen fenómenos en la naturaleza que aparentan una cierta preferencia hacia la derecha o hacia la izquierda que podemos utilizar como marco de referencia. Como ejemplos de ello podemos citar a los caracoles marinos cuyas conchas helicoidales se enrollan hacia la derecha y el arrollamiento a la izquierda solo se encuentra en proporciones menores. Tanto las enredaderas y bacterias helicoidales se enredan en su mayoría también hacia la derecha, aunque se pueden encontrar muy pocos ejemplares que se enrollan a la izquierda. Las proteínas y cadenas de DNA hacia la izquierda se catalogan como fenómenos muy raros en la naturaleza. Por otro lado los aminoácidos en su mayoría presentan quiralidad hacia la izquierda. Un ejemplo de absoluta preferencia hacia la izquierda se encuentra en la partícula elemental llamada neutrino en el que la dirección de su espín apunta siempre en sentido contrario a la dirección de su movimiento. Ver figura 1-7. En 1957 un física, Madame Chien-Shiung Wu , realizó un celeberrimo experimento mostrando un patrón natural infalible determinar la diferencia entre derecha e izquierda. El experimento consistió en observar los electrones emitidos durante el decaimiento radioactivo de una muestra de núcleos de cobalto 60, enfriados a una temperatura muy baja y rodeados por una espira de alambre a lo largo de la cual fluía una corriente eléctrica. Al hacer el experimento Madame Wu encontró que se

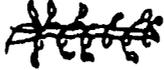
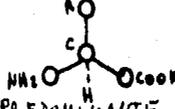
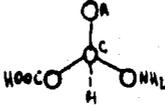
EJEMPLO	IZQUIERDA	DERECHA
CADACOLLES HELICINALES		 PREDOMINANTE
ENLARGADERAS		 PREDOMINANTE
BACTERIAS HELICINALES		 PREDOMINANTE
DNA	HOY RARO EN LA NATURALEZA	
AMINOACIDOS	 PREDOMINANTE	
CORRIENTES QUIRALES EN ATOMOS	NO SE ENCUENTRA EN LA NATURALEZA	
NEUTRINO HELICINAL		NO SE ENCUENTRA EN LA NATURALEZA

Figura 1-7. Algunos ejemplos de la preferencia natural por la derecha o por la izquierda.

emitían más electrones en la dirección de la espira desde la cual la corriente eléctrica parece fluir en el sentido de las manecillas de un reloj que en la dirección opuesta. Al invertir la dirección del movimiento de la corriente eléctrica en la espira, era de esperarse que deberían de emitirse más electrones en la dirección contraria a las de las manecillas del reloj. Y esto *no es lo que sucede*. Se siguen emitiendo más electrones en el sentido de las manecillas del reloj. Podemos concluir entonces que para este caso la naturaleza tiene una preferencia hacia el sentido de la derecha y tal vez podríamos emplear este resultado para definir formalmente la diferencia entre la izquierda y derecha.

**L**a simetría bilateral, aunque no siempre lo notamos, se define por una operación: la *reflexión* especular. Como ya vimos en todos los ejemplos anteriores esta operación consiste en llevar a coincidir a una figura consigo misma mediante una o más reflexiones con respecto a un plano de reflexión (comúnmente llamado eje de simetría).

Las otras operaciones de simetría (identidad, rotación, inversión y translación) resultan un poco menos evidentes y las explicaremos en los párrafos siguientes. Para ejemplificar cada operación también emplearemos algunas obras artísticas y arquitectónicas del mundo antiguo.

La operación de *identidad* consiste en no hacerle nada al objeto y el resultado de esta es el objeto mismo así; a objeto tal como un complicado

glifo maya (fig. 1-8) que aparente no tener simetría bilateral ni operacional le podemos asociar una operación de simetría. Aunque parece ser que la identidad tiene poco sentido, en capítulos posteriores encontraremos algunas justificaciones de su razón de ser.

Remontándonos hasta la cultura asiria antecesora de lo que hoy es medio oriente veamos el dibujo sumero de la figura 1-9. Los dos hombres con cabeza de águila surgen el uno del otro mediante una *rotación* de 180 grados sobre un eje paralelo al plano del dibujo. Esto significa que el dibujo es simétrico porque al final de la rotación se ve igual que antes de efectuar la operación. El ala inclinada es la derecha en la figura de la izquierda, y la izquierda en la figura de la derecha y tal efecto también se observa en la posición de las manos y de los pies. Esta operación de simetría se puede aplicar a las pirámides de Keops, Kefrén y Micerinos pero solo rotando 90° por operación.

Más compleja aún resulta la operación de *inversión* que consiste en tomar todos los puntos de un objeto, llevarlos hacia su centro y luego alejarlos la misma distancia hacia el otro lado y si el objeto parece inalterado, entonces este tiene un centro de inversión. Al menos en las obras de arte que hasta ahora conozco no encuentro un ejemplo claro para ilustrar esta operación, pero un buen ejemplo sería el de un cubo o un octaedro (fig. 1-10). Esto no significa que sea menos importante solo que se ajusta mejor al los estudios de geometría y estereoquímica que a los de estética y apreciación del arte.



Figura 1-8. Glifos Mayas de una vasija de cacao.

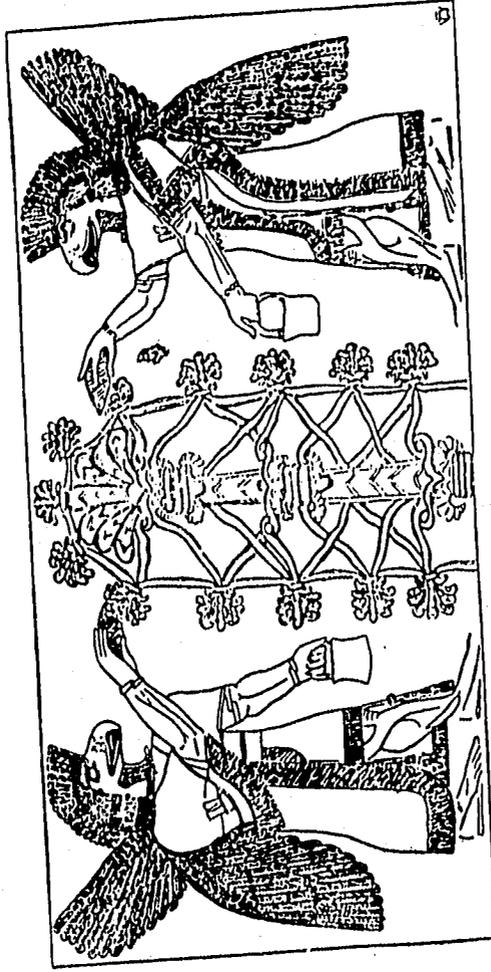


Figura 1-9. Dibujo súmero para ilustrar la operación de rotación. Véase la hoja por atrás y contra la luz para apreciar mejor el efecto de la operación.

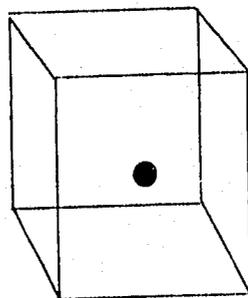
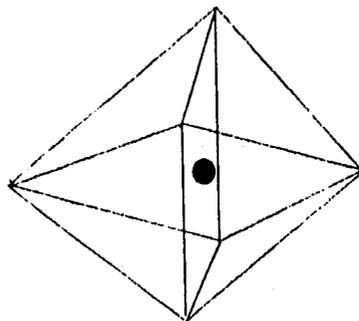
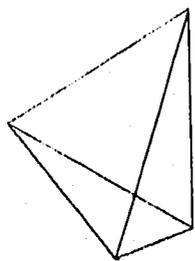


Figura 1-10 Centro de inversión

La operación de *translación* es una operación un tanto aparte de las anteriores dado que para esta no se requiere de un elemento fijo dentro del objeto de interés para llevar a cabo la operación. Estos elementos son: eje de rotación, plano de reflexión y centro de inversión para la rotación, reflexión e inversión respectivamente. A pesar de esto, creemos que la translación es una operación muy fácil de entender. Consiste en " trasladar " un objeto hacia una u otras posiciones equidistantes obteniendo una imagen inalterada de este. Una figura que es invariante respecto de una translación muestra lo que en el arte ornamental se llama "razón infinita", esto es, repetición con un ritmo espacial regular. Un excelente ejemplo es el palacio de Quetzalcóatl en Teotihuacan (fig. 1-11), en que destacan las figuras que adornan los tableros y taludes que muestra el traslado puro; pero debe notarse que la translación básica cubre el doble de la distancia entre figura y figura, pues las figuras de serpiente emplumada y la otra deidad se alternan. Aventurándonos un poco más allá podríamos decir que la translación es el patrón simétrico más importante de la música dado que al ejecutar en una melodía, un *rondó*<sup>1</sup> por ejemplo, estamos trasladando notas musicales que se repiten en el tiempo determinado por el tipo de compás, cubriendo distancias dobles, triples, etc. Ósea que la operación de simetría en la música no es *espacial* como las operaciones anteriores, sino que es una operación *temporal*.

---

<sup>1</sup> Un *rondó* es una forma musical que consta de un tema que se repite con alterancia con otros o sobre un segundo tema.

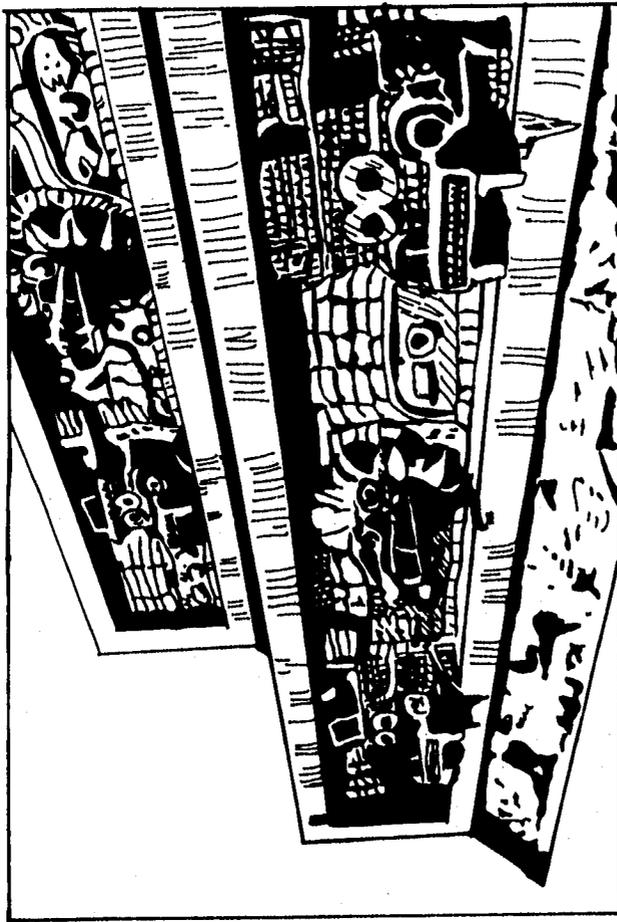


Figura 1-11. Templo de Quetzalcoatl. Teotihuacán México

**E**l campo de estudio y aplicación de la simetría es sumamente vasto. Tanto que va desde el arte, la cristalografía y la simetría molecular hasta los fundamentos de muchas leyes de la naturaleza incluyendo a la cosmogonía y las teorías de la gran unificación.

Este trabajo solo se enfoca a los fundamentos de la simetría y sus aplicaciones a cristales y moléculas. Solo en éste capítulo hablare de algunas otras no menos interesantes ramas del estudio de la simetría (cuyo profundo análisis esta fuera de los alcances y objetivos de esta tesis), aunque a mi juicio algunas más complejas.

En la física suelen existir simetrías que sólo se ponen en evidencia mediante operaciones muy abstractas, que no podemos imaginar en términos de conceptos accesibles a nuestros sentidos. ¿Qué significa que una ley física sea simétrica? Si usamos la definición de Weyl es claro su significado: simplemente, que existe por lo menos una operación que, una vez aplicada a la ley en cuestión, la deja igual que antes de que la aplicáramos. Como dicen los físicos, la ley es invariante frente a la susodicha operación. El ejemplo más claro es la llamada "invariancia traslacional", que consiste en la invariancia de las leyes de la física al ir de un lugar a otro- esto es, al aplicarles una translación- y que significa, en pocas palabras que las leyes son las mismas en cualquier lugar del espacio( lo cual pone de manifiesto una simetría del espacio mismo). Ejemplos de

esto son los sistemas inerciales , la conservación del impulso lineal que también es consecuencia de la simetría translacional y el momento angular que se origina de la simetría rotacional. En esos casos las operaciones- translación y rotación- son más o menos claras dado que son espaciales. Un ejemplo más complicado son las fuerzas nucleares. Estas fuerzas permanecen iguales si se intercambian protones por neutrones y viceversa. La simetría entre protones y neutrones no se hizo evidente sino hasta hace poco debido a que la operación de intercambiar protones por neutrones no es ni espacial ni temporal.

En todos los ejemplos anteriores, las simetrías son fáciles de medir porque "están ahí, por así decirlo, y solo tenemos que medirlas. Cuando esto ocurre , decimos que las simetrías son *manifiestas*, esto es que son evidentes e inmediatamente detectables. Pero podría ocurrir - y ocurre - que un conjunto de leyes simétricas diera lugar a un fenómeno que no percibiéramos como obviamente simétrico. Este fenómeno, desde luego, solo sería asimétrico en apariencia, pues en el fondo, poseería ciertas simetrías no evidentes. En este caso decimos que la simetría está *oculta*, o mejor dicho que ha ocurrido una *ruptura espontánea de la simetría*.

## **Capítulo 2**

### **Introducción al álgebra geométrica**

**U**na álgebra es el estudio de la combinación de un conjunto de objetos matemáticos bajo dos operaciones llamadas adición y multiplicación.

La geometría trata con un conjunto de objetos tales como : puntos, líneas, planos, volúmenes, etc. Y para poder formar una álgebra necesitamos seleccionar algunos de estos y formar un conjunto para el cuál se puedan dar las reglas de la multiplicación y de la suma. El resultado será una álgebra de objetos geométricos.

Existen al menos cuatro clases de tales objetos que se pueden usar para este propósito: vectores, formas ( o vectores covariantes), formas twistadas y vectores twistados (o twistores). Nuestro énfasis principal estará en el uso de los vectores para construir una álgebra geométrica. Las ideas que llevaron a la noción de los vectores se remontan a Hamilton, Gibbs, y Heaviside en el siglo pasado. De hecho, tanto Hamilton como Gibbs construyeron una álgebra cuando ellos definieron las multiplicaciones de vectores en el análisis vectorial de Gibbs o en la teoría de los cuaterniones de Hamilton, y ambas álgebras solo eran aplicables para un espacio tridimensional. El análisis vectorial de Gibbs no puede ser generalizado para menos o más de tres dimensiones. Los cuaterniones como los presentó Hamilton pueden usarse para un espacio de dos dimensiones (cuaterniones reales), para uno de tres dimensiones (cuaterniones complejos) y para uno de cuatro dimensiones en forma de biquaterniones.

Una mejor aproximación se inició cuando Grassmann descubrió el producto externo de vectores para generar un esquema más flexible el cuál

llamamos álgebra de Grassmann. (1862).

Fue unos años más adelante cuando W.C. Clifford estudió la unión de los productos externo e interno como una álgebra completa la cuál se conoce como álgebra de Grassmann-Clifford. Las álgebras de Grassmann y Clifford pueden desde luego usarse para otros objetos matemáticos aparte de los vectores, por ejemplo formas o twistores o para conjuntos de entidades no geométricas, etc. Sorprendentemente el uso histórico de las álgebras de Grassmann y Clifford, a pesar de su utilidad, no comenzó sino hasta la llegada de la mecánica cuántica a final de los años 20's de este siglo. E incluso en ese entonces eran usadas para la representación de una colección tal de objetos por matrices hecha por M. Proca en 1930 y también por G. Juvet en 1930. A. Mercier las uso también para estudiar el teorema de relatividad de Lorentz en 1934 y termodinámica en 1935. El hizo un análisis del espacio-tiempo usando esta álgebra y lo aplicó al electromagnetismo. Luego paso un segundo periodo de casi veinte años hasta que comenzó un renacimiento gradual comenzado por M. Riesz, P.K. Rasevski, S. Teitler y D. Hestenes en el periodo de 1945 a 1955. En los últimos veinte años han aparecido más de cien artículos aplicando estas álgebras a la teoría de Dirac, electromagnetismo, partículas elementales, curvatura del espacio-tiempo y sus técnicas matemáticas.

## Álgebras de Clifford

Como se mencionó en los párrafos anteriores, las álgebras de Clifford tienen un vasto campo de aplicación, sin embargo en esta sección nos

enfocaremos al estudio del álgebra geométrica que es una de las tantas álgebras de Clifford. El término de álgebra geométrica lo ideó el mismo W.C. Clifford. Hoy, la mayoría de las personas que estudian y desarrollan esta álgebra se refieren a ella como una álgebra de Clifford aunque David Hestenes prefiere hablar de álgebra geométrica y emplear otro tipo de notación. En este trabajo empleo el término de álgebra geométrica porque considero que es más ilustrativo para analizar las operaciones de simetría, pero empleo la notación hasta ahora convencional.

Una álgebra de Clifford es un álgebra asociativa sobre los reales para un espacio euclidiano  $R^n$  conteniendo réplicas de  $R$  y  $R^n$  y por lo tanto cumple las siguientes condiciones:

- (a)  $x^2 = |x|^2$  para todos los vectores  $x$  en  $R^n$
- (b) esta álgebra es generada por el espacio euclidiano  $R^n$
- (c) no es generada por cualquier subespacio propio de  $R^n$

Esta álgebra es única y es llamada el álgebra de Clifford  $Cl_n$  de  $R^n$ . En una base ortonormal  $e_1, e_2, \dots, e_n$  de  $R^n$  la condición (a) puede ser reemplazada por las relaciones  $e_i^2 = 1$  y  $e_i e_j = -e_j e_i, i \neq j$

### La base

Para evitar confusiones de aquí en adelante y antes de continuar es muy importante de diferenciar entre los conceptos de dimensiones de un espacio vectorial y las dimensiones de un álgebra de Clifford. Esto es, para un espacio

vectorial de dos dimensiones  $\Rightarrow \mathbb{R}^2$ , es decir un plano, y para un espacio  $\mathbb{R}^3$  hay álgebras de 4 y 8 dimensiones (elementos de la base) respectivamente según la regla de  $2^n$  dimensiones de un álgebra de Clifford donde  $n$  representa al número de dimensiones espaciales. También es necesario diferenciar entre la base del espacio vectorial y la base del álgebra. La base del espacio vectorial son los vectores que lo definen y la base del álgebra son los elementos diferentes que generan al álgebra.

Todos los productos de dos, tres, ...,  $n$  diferentes elementos de la base de una álgebra de Clifford  $Cl_n$  generan un espacio vectorial lineal de  $2^n$  dimensiones. Existe un término de éste espacio vectorial llamado el escalar(s) igual al producto por sí mismo de cualquier elemento de la base.

Los elementos de la base son llamados (dando lugar a confusión) vectores (v). Los productos de dos diferentes de ellos son llamados tensores (B), los productos de tres diferentes de ellos tensores (T) y así sucesivamente. Es mejor (y así lo haremos de aquí en adelante) llamarlos escalares (s), vectores (v), bivectores (B), trivectores (T), ..., y al producto de cualquiera diferente de ellos pseudoescalares (P). Es muy importante aclarar que en álgebra un vector es un número direccionado y en geometría es un segmento de línea direccionado.

Un elemento en  $Cl_n$  es una suma de un escalar, vector, bivector, ..., y un  $n$ -vector, en otras palabras es la suma de los  $k$ -vectores,  $k = 0, 1, 2, \dots, n$ , cada uno en un subespacio  $Cl_n^k$  teniendo como base  $e_{i_1, i_2, \dots, i_k}, 1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq n$ . Más

precisamente, los elementos de la base son :

$k$	$\dots$	$e_{i_1 i_2 \dots i_k}$
0	1	
1	$e_i$	$1 \leq i \leq n$
2	$e_{ij} = e_i e_j$	$1 \leq i < j \leq n$
.		
.		
n	$e_{12\dots n}$	

Así por ejemplo, el elemento  $Cl_3^1$  es el vector del álgebra geométrica en tres dimensiones y el elemento  $Cl_3^2$  es el bivector de tal álgebra en dos dimensiones.

La suma de los subespacios  $Cl_n^k$  con una  $k$  par será denotada por  $Cl_n^{(0)}$ , mientras que  $Cl_n^{(1)}$  se refiere a una  $k$  impar.

**Producto interno y producto externo.**

En una álgebra de Clifford el producto de dos elementos cualquiera de la base tiene una parte simétrica y una antisimétrica:

$$ab = \frac{1}{2}(ab + ba) + \frac{1}{2}(ab - ba)$$

y se llama producto interno o producto punto a la parte:

$$a \cdot b \equiv \frac{1}{2}(ab + ba)$$

y se le llama producto externo o producto cuña:

$$a \wedge b \equiv \frac{1}{2}(ab - ba)$$

por lo tanto el producto total o el producto geométrico es:

$$ab = a \cdot b + a \wedge b$$

Esto, de una manera más formal lo podemos expresar así: si dos elementos  $a$  en  $CI_n^i$  y  $b$  en  $CI_n^j$  se multiplican, entonces su producto  $ab$  está en la suma directa:

$$CI_n^{i+j} + CI_n^{i+j-2} + \dots + CI_n^{i-j}$$

Entonces, al componente  $CI_n^{i+j}$  se le llama *producto externo*  $a \wedge b$  y al componente  $CI_n^{i-j}$  se le llama *producto interno*  $a \cdot b$ . El producto externo es asociativo, es decir,  $(a \wedge b) \wedge c = a \wedge (b \wedge c)$ . Y en un sentido gradual el producto interno también es conmutativo, esto es,  $a \wedge b = (-1)^{ij} b \wedge a$  para  $a \in CI_n^i, b \in CI_n^j$ . Por ejemplo si  $x$  es un vector y  $B$  un bivector, entonces:

$$Bx = B \cdot x + B \wedge x = \frac{1}{2}(Bx - xB) + \frac{1}{2}(Bx + xB)$$

o también:

$$\begin{aligned} B \wedge (B \cdot x) &= \frac{1}{2} (B(B \cdot x) + (B \cdot x)B) \\ &= \frac{1}{4} (B^2 x - Bx B + Bx B + x B^2) = \frac{1}{4} (B^2 x - x B^2) \end{aligned}$$

Por otro lado tenemos:

$$\begin{aligned} (B \wedge B) \cdot x &= \frac{1}{2} ((B \wedge B)x - x(B \wedge B)) \\ &= \frac{1}{2} (B^2 x - x B^2) \end{aligned}$$

y entonces:

$$\frac{1}{2} (B \wedge B) \cdot x = B \wedge (B \cdot x).$$

Para ilustrar como se genera el espacio vectorial lineal a partir de los productos entre los elementos de la base de un álgebra de Clifford analicemos el caso del álgebra  $Cl_2$  tomando dos vectores unitarios ortonormales  $e_1$  y  $e_2$  y por supuesto al escalar 1. Con estos elementos los productos posibles son:

$$(1)(1) = 1$$

$$e_1 e_1 = e_1^2 = 1$$

$$e_2 e_2 = e_2^2 = 1$$

$$e_1(1) = e_1$$

$$e_2(1) = e_2$$

$$e_1 \wedge e_2 = e_1 e_2 = \text{bivector} = \text{un plano}$$

y por simplicidad denotaremos al bivector  $e_1 e_2$  como  $e_{12}$ . Así hemos obtenido los cuatro elementos del álgebra del plano obedeciendo la condición  $2^n$ , para nuestro caso  $2^2 = 4$  elementos o sea un escalar (1), dos vectores ( $e_1$  y  $e_2$ ) y un bivector ( $e_{12}$ ). Esta álgebra tiene la siguiente tabla de multiplicación:

	$e_1$	$e_2$	$e_{12}$
$e_1$	1	$e_{12}$	$e_2$
$e_2$	$-e_{12}$	1	$-e_1$
$e_{12}$	$-e_1$	$e_2$	-1

Sobre la naturaleza, características e interpretación geométrica del bivector entraremos en detalle en párrafos posteriores. Cabe mencionar también que la unidad obtenida en este ejemplo no es la cantidad  $|1|$ , sino que es el 1 del álgebra<sup>1</sup>.

## Álgebra Vectorial

Desde las primeras líneas de este capítulo se viene hablando de un álgebra geométrica, es decir un tratamiento algebraico de puntos, líneas, planos, volúmenes, etc. y del uso de los vectores para construir tal álgebra con el objeto de llevar a cabo las operaciones básicas de simetría. Y dado que los

<sup>1</sup> Esto lo podemos comprender mejor haciendo una comparación con el álgebra ordinaria por ejemplo cuando dejamos a  $x$  en una ecuación donde se encuentra "dividiendo" dejamos en su lugar a un 1. Este es el 1 del álgebra ordinaria.

elementos del álgebra geométrica se definen mediante vectores resulta indispensable analizar algunos conceptos del álgebra vectorial.

### Álgebra vectorial del plano

Como vimos en el ejemplo anterior un espacio vectorial  $\mathbb{R}^2$  tiene una base que consiste de dos vectores unitarios perpendiculares  $e_1$  y  $e_2$ . Esta álgebra es tetradimensional y sus dimensiones son según la regla de  $2^n$ : un escalar, dos vectores y un bivector. Más adelante también analizaremos al álgebra vectorial del espacio.

### El bivector

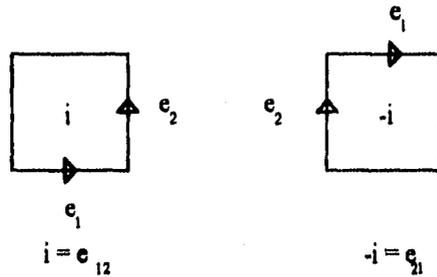
El producto externo de dos vectores es un *bivector* porque si tomamos dos vectores unitarios perpendiculares  $e_1$  y  $e_2$  que obedecen las reglas de multiplicación:

$$\begin{array}{l} e_1^2 = e_2^2 = 1 \quad \text{que corresponde a } |e_1|^2 = |e_2|^2 = 1 \\ e_1 e_2 = -e_2 e_1 \quad \quad \quad e_1 \perp e_2 \end{array}$$

y calculamos el cuadrado de  $e_1 e_2$  hacemos:

$$(e_1 e_2)^2 = -e_1^2 e_2^2 = -1$$

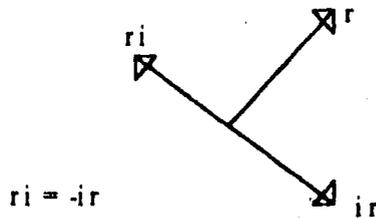
Dado que el cuadrado del producto  $e_1 e_2$  es negativo, concluimos que  $e_1 e_2 = e_{12}$  no es ni un escalar ni un vector. El producto  $e_{12}$  es una nueva clase de unidad, llamada *bivector del plano* que representa el área plana orientada de un cuadrado de lados  $e_1$  y  $e_2$  como se muestra a continuación:



El cuadrado de un bivector del plano es un escalar y podemos establecer lo siguiente: una condición necesaria y suficiente para que un bivector sea un plano es que su cuadrado sea un escalar. Un bivector arbitrario B elevado al cuadrado, o sea  $B^2$  da la suma de un escalar  $B \cdot B$  y un tetra vector  $B \wedge B$ .

Si se multiplica el vector  $r = x e_1 + y e_2$  por el bivector unitario  $e_{12}$  y se obtiene otro vector  $r e_{12} = x e_2 - y e_1$  el cual es perpendicular a  $r$  el mapeo  $r \rightarrow r e_{12}$  es una vuelta hacia la izquierda, y el efecto de dos de estas vueltas ( $e_{12} \cdot e_{12}$ ) invierte el sentido de la posición original, lo que llamaríamos una vuelta en "U". El bivector unitario  $e_{12}$  comparte la propiedad básica de la raíz cuadrada de -1, es decir  $i = \sqrt{-1}$  y por esto planteamos la ecuación  $i = e_{12}$ . Sin embargo, se debe de notar que  $i$  anticonmuta con  $e_1$  y  $e_2$ , y por esto  $i$  anticonmuta con cualquier vector

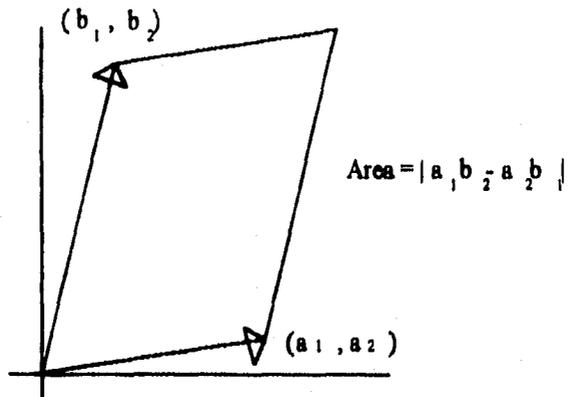
en el plano  $e_1, e_2$ , gráficamente lo podemos mostrar así:



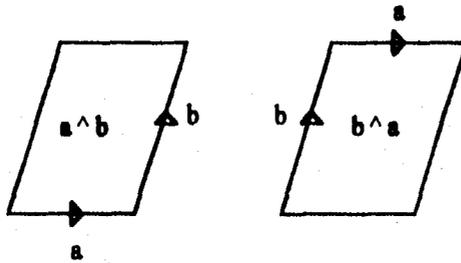
para  $r = xe_1 + ye_2$ .

### Productos de vectores

Dos vectores  $a = a_1e_1 + a_2e_2$  y  $b = b_1e_1 + b_2e_2$  se pueden multiplicar para dar lugar al producto escalar  $a \cdot b = a_1b_1 + a_2b_2$  o el producto vectorial  $a \wedge b = (a_1b_2 - a_2b_1)e_{12}$  representando el área orientada del paralelogramo de lados  $a$  y  $b$ . El área ordinaria es el valor absoluto del bivector  $|a \wedge b| = |a_1b_2 - a_2b_1|$ . Como se muestra a continuación:



Los dos vectores  $a$  y  $b$  determinan un paralelogramo. El paralelogramo puede considerarse como una clase de producto geométrico de sus lados:



Los bivectores  $a \wedge b$  y  $b \wedge a$  tienen la misma magnitud, pero diferente sentido de rotación. Esto se puede expresar simplemente escribiendo:

$$a \wedge b = -b \wedge a$$

Y el nuevo producto de los vectores  $a$  y  $b$  es la suma:

$$ab = a \cdot b + a \wedge b$$

del escalar  $a \cdot b$  y el bivector  $a \wedge b$ . La regla conmutativa  $a \cdot b = b \cdot a$  junto con la regla anticonmutativa  $a \wedge b = -b \wedge a$  implica una relación entre  $ab$  y  $ba$ . Esto es:

$$ba = a \cdot b - a \wedge b$$

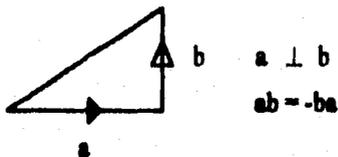
Los dos vectores  $a$  y  $b$  son colineales cuando conmutan, es decir  $ab = ba$ , ó  $a_1 b_2 = a_2 b_1$ . Para dos vectores perpendiculares  $a$  y  $b$  tenemos:

$$|a+b|^2 = |a|^2 + |b|^2 \quad \text{ó} \quad (a+b)^2 = a^2 + b^2$$

Dado que en general:

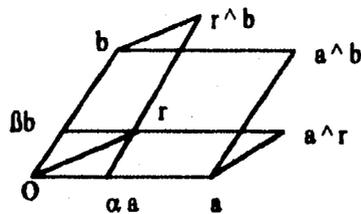
$$(a+b)^2 = a^2 + ab + ba + b^2$$

los dos vectores  $a$  y  $b$  son perpendiculares:



## División en componentes

Para dividir un vector  $r$  en componentes paralelas a  $a$  y  $b$  tenemos que determinar los coeficientes  $\alpha$  y  $\beta$  en la descomposición  $r = \alpha a + \beta b$ . Analizando la siguiente figura encontramos las razones de las áreas orientadas de los paralelogramos de lados  $a, b$  y  $r$ .



Dado que  $r \wedge b = \alpha(a \wedge b)$  y  $a \wedge r = \beta(a \wedge b)$  entonces se deduce que:

$$r = \frac{r \wedge b}{a \wedge b} a + \frac{a \wedge r}{a \wedge b} b$$

## Componentes paralelos y perpendiculares

Para obtener el componente de  $a$  en la dirección de  $b$ , cuando los dos vectores forman un ángulo  $\phi$  se tiene que este componente paralelo  $a_{||}$  es un múltiplo escalar del vector unitario  $b/|b|$  es decir que:

$$a_{||} = |a| \cos \phi \frac{b}{|b|} = |a||b| \cos \phi \frac{b}{(|b|^2)}$$

En otras palabras el componente paralelo  $a_{||}$  es el producto escalar  $a \cdot b = |a||b| \cos \phi$  multiplicado por el vector  $b^{-1} = \frac{b}{(|b|^2)}$  llamado el inverso

de  $b$ . Esto es:

$$a_{||} = (a \cdot b) \frac{b}{(|b|^2)} = (a \cdot b) b^{-1}$$

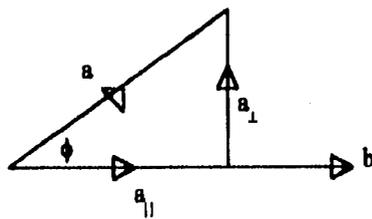
El componente perpendicular  $a_{\perp}$  está dado por la diferencia :

$$a_{\perp} = a - a_{||} = a - (a \cdot b) b^{-1} = (a b - a \cdot b) b^{-1} = (a \wedge b) b^{-1}$$

y puede mostrarse que:

$$(a \wedge b) b^{-1} = b^{-1} (b \wedge a)$$

La disposición y orientación los componentes del vector  $a$  es así:



### El bivector y los números complejos

Entendemos por un *número complejo* una expresión del tipo  $z = x + yi$  donde  $x$  e  $y$  son números reales e  $i$  es el bivector unitario, tal que  $i^2 = -1$ . El hecho de que  $i^2 = -1$  es solo una versión aritmética del hecho geométrico obvio de que la suma de dos ángulos rectos  $\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2}$  es un ángulo recto  $\pi$ . El producto de un número complejo  $z = x + iy$  y el bivector unitario  $i$  da como resultado una vuelta hacia la izquierda  $iz = ix - y$ , y como acabamos de mencionar, el efecto de dos de estas vueltas hacia la izquierda ( $i \cdot i$ ) es el de cambiar hacia la dirección opuesta original ( $-1$ ), esto es, una media vuelta del *plano complejo*. Se debe de notar que estas vueltas se llevan a cabo en el plano complejo  $C$ . Al número real  $x$  se le llama la parte real  $Re(z)$  del número complejo  $z = x + iy$ . Si esta parte real es cero, entonces el número complejo es un bivector puro y por lo tanto el número real  $y$  es la parte pura  $Pu(z)$  del número complejo  $z = x + iy$ .

## Álgebra Vectorial del Espacio

Pasemos ahora a analizar algunos de los conceptos anteriores en un espacio vectorial de tres dimensiones.

### La Base

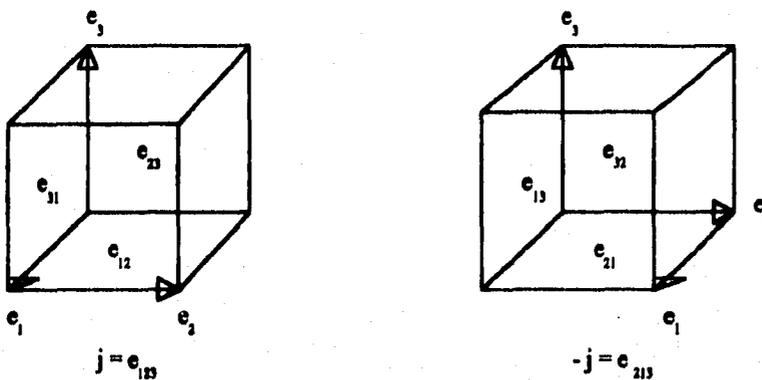
El espacio vectorial tridimensional  $R^3$  tiene una base que consiste de tres vectores unitarios perpendiculares  $e_1, e_2, e_3$ . Esta álgebra vectorial es el álgebra real *asociativa* generada por el conjunto  $e_1, e_2, e_3$ , satisfaciendo las relaciones  $e_i^2 = 1$  y  $e_i e_j = -e_j e_i$  para  $i \neq j$ . Esta álgebra vectorial es una álgebra octadimensional y según la regla de  $2^n$  tiene la siguiente base:

1	escalar
$e_1, e_2, e_3$	vectores
$e_{23}, e_{31}, e_{12}$	bivectores
$e_{123}$	trivector

### El Trivector

El trivector unitario nacido en esta álgebra es el resultado del producto  $e_1 e_2 e_3$ , que por simplicidad lo denotaremos como  $e_{123}$ . Al trivector también se le suele llamar *director* y este representa un volumen

orientado en  $\mathbb{R}^3$  y en el caso del trivector unitario  $j = e_{123}$  se trata del volumen orientado de un cubo de aristas  $e_1, e_2$  y  $e_3$ , cuyas caras que lo generan son los productos:  $e_{31}, e_{23}$  y  $e_{12}$ . Si invertimos el orden del producto  $e_1 e_2 e_3$  por  $e_2 e_1 e_3$  obtenemos la orientación contraria  $-j = e_{213}$  cuyos productos generadores son  $e_{13}, e_{32}$  y  $e_{21}$  como se muestra a continuación:

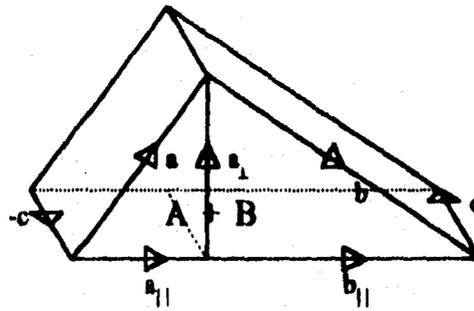


Así entonces, un elemento cualquiera de el álgebra del espacio se define en forma general como la suma:  $\alpha + a + jb + j\beta$  que es la suma de un escalar  $\alpha$ , un vector  $a$ , un bivector  $jb$  y un trivector  $j\beta$ .

### Suma de Bivectores

Tal como para los vectores, la suma de bivectores satisface las mismas reglas para la suma de los números reales. La interpretación geométrica de la

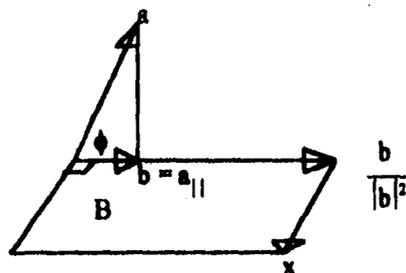
suma de bivectores se aprecia más fácilmente si los bivectores se expresan en términos del producto externo con un factor vectorial común. En tres dimensiones esto es siempre posible porque dos planos cualquiera serán paralelos o se intersectarán a lo largo de una línea común. Algebraicamente hablando si tenemos un bivector  $A$  y a otro bivector  $B$ , sea  $A = a \wedge c = -c \wedge a$  y  $B = b \wedge c$ , donde  $c$  es un vector en la línea común. Entonces  $A + B = a \wedge c + b \wedge c = (a + b) \wedge c$ . El significado geométrico de esto se muestra en la siguiente figura:



y la suma de los dos bivectores  $A + B$  será la base del prisma, es decir otro bivector o plano orientado cuya área es la suma de las áreas de los bivectores  $A$  y  $B$ .

## Producto interno de un vector y un bivector

Para ilustrar este concepto tomemos un bivector  $B$  y un vector  $a$  con un ángulo  $\phi$  fuera del plano del bivector como se muestra en la figura:



Sea  $b$  la proyección de  $a$  en el plano de  $B$ , entonces  $|b| = |a| \cos \phi$ . El producto interno  $x = a \cdot b$  del vector  $a$  y el bivector  $B$  es un vector  $x$  en plano de  $B$ , tal que:

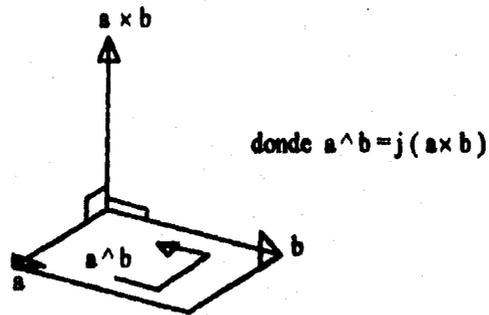
$$(a) \quad |x| = |B||b|$$

$$(b) \quad x \perp b \text{ y } b \wedge x \uparrow \uparrow B$$

De la figura anterior podemos notar que  $a_{||} = b$  y  $a_{\perp} = a - a_{||}$  y dado que  $a \cdot B = -B \cdot a$  entonces  $a \cdot b = a_{||} B$  y  $a \wedge b = a_{\perp} B$  ósea que  $a_{||}$  es el componente interno y  $a_{\perp}$  es el componente externo.

## La dualidad del producto cruz y el producto externo

Si tomamos a un vector  $a = a_1e_1 + a_2e_2 + a_3e_3$  y un bivector  $A = a_1e_{23} + a_2e_{31} + a_3e_{12}$  escribiéndolo como  $A = ja$ , con las mismas coordenadas se dice que son duales si el uno con el otro. Esto significa que el producto externo  $a \wedge b$  entre los dos vectores  $a$  y  $b$  es dual al *producto cruz*  $a \times b = e_1(a_2b_3 - a_3b_2) + e_2(a_3b_1 - a_1b_3) + e_3(a_1b_2 - a_2b_1)$ , geoméricamente esto lo podemos apreciar en la siguiente figura:



## Capítulo 3

### Operaciones de Simetría Mediante

### el Álgebra geométrica

**E**n los dos capítulos anteriores hemos presentado algunos conceptos de simetría y algunos fundamentos del álgebra geométrica. En este capítulo formularemos las operaciones de simetría mediante el empleo de los fundamentos del álgebra geométrica del capítulo 2 de una manera más formal que como se hizo en el capítulo 1. El darle un enfoque matemático a las operaciones de simetría y su aplicación a grupos cristalográficos no es ciencia nueva, ya data desde hace tiempo, generalmente mediante un tratamiento matricial de tales operaciones. Sin embargo, muchas personas creemos que la aplicación del álgebra geométrica al tratamiento de las operaciones de simetría resulta más sencillo, práctico e innovador que como se ha venido haciendo hasta ahora. Esto no significa que nos desligaremos por completo de todos los fundamentos y aplicaciones que hasta ahora se han realizado, al contrario, emplearemos una buena cantidad de ellos y en medida de lo posible estaremos haciendo algunas comparaciones entre ambos tratamientos.

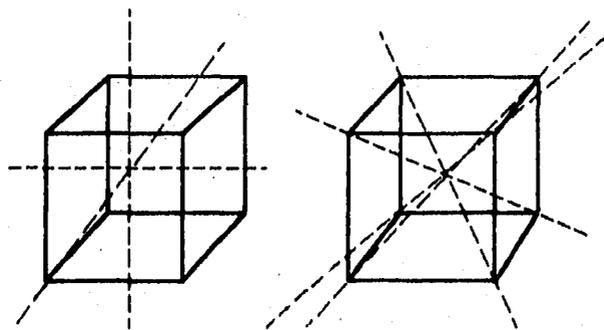
Antes de comenzar las aplicaciones a cristales ejemplificaremos algunos conceptos con moléculas simples ó figuras geométricas sencillas, ya que creo que resultaría un poco más fácil que entrar de lleno con los cristales.

**E**l análisis detallado de la simetría se denomina *teoría de grupos*. Buena parte de la teoría de grupos es una recopilación sistemática de *sentido común* sobre las simetrías de los objetos, y este fundamento de

sentido común nunca debe olvidarse. Sin embargo, dado que la teoría de grupos es sistemática, sus reglas se pueden aplicar de una forma mecánica y directa, y en algunos casos se obtienen resultados inesperados. En la mayoría de los casos, la teoría de grupos proporciona un método simple y directo para llegar a conclusiones útiles con un mínimo de cálculo, aspecto que destaca entre las demás campos de estudio de la fisicoquímica.

## Elementos de Simetría en los Objetos

Como se comentó en el primer capítulo algunos objetos son más simétricos que otros. Por ejemplo, una esfera es más simétrica que un cubo, porque parece la misma después de haberla rotado un ángulo cualquiera con respecto a cualquier diámetro (por esto, para los griegos la esfera era el objeto más perfecto), mientras que un cubo parece el mismo solamente si se rota ángulos de  $90^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $270^\circ$  o  $360^\circ$  sobre ejes que pasan por el centro de sus caras o ángulos de  $120^\circ$ ,  $240^\circ$  o  $360^\circ$  sobre ejes que pasan por vértices opuestos:



Es importante notar que aunque estamos ahora dando un formalismo mayor a los conceptos de simetría expuestos en el capítulo 1 seguimos y seguiremos basándonos en la definición de simetría de H. Weyl.

A cada operación de simetría le corresponde un *elemento de simetría*: estos son puntos, líneas y planos con respecto a los cuales se realiza la operación de simetría. Los objetos se pueden clasificar en *grupos de simetría* identificando todos sus elementos de simetría, por ejemplo los ejes de rotación mostrados en la figura anterior o un plano de simetría bilateral.

Hemos visto que hay cuatro tipos de operaciones de simetría simples: identidad, rotación, reflexión e inversión ( y consecuentemente existen cuatro elementos de simetría ) que dejan al menos un punto inalterado y que dan lugar a los *grupos puntuales* . Al tratar a los cristales (Cap. 4) se verá que la simetría derivada de la translación de objetos a través del espacio da lugar a los *grupos espaciales*.

## Sistemas de Notación

En el estudio de las operaciones de simetría y la teoría de grupos existen los sistemas de notación internacional o de Hermann-Mauguin y el de Schoenflies, y además yo introduciré el del álgebra geométrica. El sistema de Schoenflies es más común para el análisis de moléculas individuales , y el sistema internacional se usa casi exclusivamente en el análisis de simetría cristalina.

El hecho de introducir otro sistema nuevo de notación no es un afán de complicar más las cosas ,sino de dar más continuidad a las ideas presentadas en el capítulo anterior. En lo particular no vemos gran inconveniente en que existan tres tipos de notación para una misma cosa siempre y cuando los conceptos sean y estén bien claros, porque solo es cuestión de conocer los sistemas de notación y mentalmente "traducirlos"<sup>1</sup>

,<sup>2</sup>.

## Identidad

Esta operación consiste en no hacer nada y el elemento correspondiente es el objeto mismo. Puesto que todo objeto (llámese molécula o cristal) es indistinguible de si mismo si nada se realiza sobre él, concluimos que todo objeto posee al menos esta simetría.

La importancia de la identidad radica en que a fin de cuentas lo que buscamos al efectuar una o varias operaciones de simetría sobre cualquier objeto es llegar a la imagen original de aquel objeto, es decir que la identidad sea el resultado final de esas operaciones.

En la notación del álgebra geométrica la identidad se escribe como:

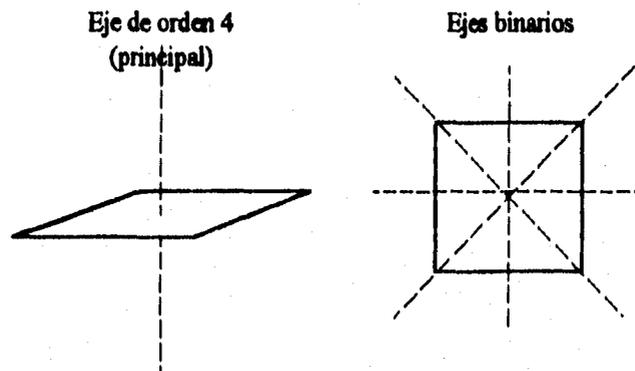
$$id = 1 \quad (3-1)$$

<sup>1</sup>De hecho en el álgebra geométrica también hay discrepancias - incluso pocas - en cuestión de notación , pero en este trabajo nos alineamos con la notación más aceptada y usada a nivel internacional.

<sup>2</sup>En cuestión de notación no se escapa el caso de materias tan desarrolladas como la física clásica y demás ramas de la física, por ejemplo, donde la notación cambia radicalmente entre los textos americanos y de Europa occidental en contraste con los de la ex-URSS y de Europa oriental.

## Rotaciones

Las rotaciones se efectúan con sobre un *eje de simetría* (el elemento correspondiente). Si una rotación de  $360^\circ/n$  deja inalterado al objeto en cuestión se dice que este tiene un *eje de simetría de orden n*. Un objeto puede tener varios ejes de rotación ya sea sobre el plano o sobre el espacio y el (o los) que tiene mayor valor de  $n$  se denomina eje principal. Esto significa que un cuadrado hay un eje de orden cuatro o sea un eje de rotaciones de  $90^\circ$  perpendicular al plano de rotación, que es el mismo plano del cuadrado; y cuatro ejes de orden dos o binarios- es decir, rotaciones de  $180^\circ$ - que rotan al plano del cuadro sobre el espacio. El primero es perpendicular al plano del cuadrado y los otros cuatro están en el mismo plano:



De igual forma un triángulo posee un eje de orden 3 y tres ejes binarios. Por otro lado, una circunferencia tiene un solo eje de orden infinito y un

numero infinito de ejes binarios (todos los diámetros posibles), y la esfera tiene un número infinito de ejes de orden infinito.

En el álgebra geométrica la operación de rotación de una figura plana alrededor de un eje consiste en la transformación de un vértice  $x_k$  (o vector asociado a este) en su vecino  $x_{k+1}$ . Esto se logra al aplicar los elementos  $R$  y  $R^{-1}$ , tales que  $R, R^{-1} \in Cl$  sobre el vector  $x_k$  de manera que  $x_k, x_{k+1} \in Cl$ . Esta operación se expresa como:

$$x_{k+1} = R x_k R^{-1} \quad (3-2)$$

que equivale a dos productos de Clifford uno entre  $R^{-1}$  y  $x_k$ , y el otro entre  $R$  y  $x_k$ . Y en esta discusión trataremos a las rotaciones de orden 6 y más adelante como ejemplo numérico a las de orden 4.

Dado que es necesario introduciremos el siguiente lema que no es nada fácil de demostrar:

$$R x_k = x_k R^{-1} \quad (3-3)$$

para obtener:

$$R^{-1} x_k R = x_k R R = x_k R^2 \quad (3-4)$$

En ambos casos el repetir seis veces esta operación de simetría regresa a cada vértice a su posición original. En el primer caso se satisface la ecuación del operador :

$$R^6 = id \quad (3-5)$$

Esta relación implica que las potencias de  $R$  forman un grupo con seis elementos diferentes  $R, R^2, R^3, R^4, R^5$  y  $R^6 = id$ . Este grupo, el grupo de simetría rotacional del hexágono, o de cualquier grupo isomórfico a el , se llama un (o el) grupo cíclico de orden 6 comúnmente denotado por  $C_6$ .

El grupo  $C_6$  es un grupo finito, llamado así porque tiene un número finito de elementos (seis en este caso). El orden de un grupo es el número de elementos que contiene. El elemento  $R$  se dice que es un *generador* de  $C_6$  porque el grupo entero se puede generar a partir de  $R$  mediante la operación del grupo. Esto es algo así como los elementos de la base de un álgebra. El grupo  $C_6$  está completamente determinado por la condición  $R^6 = id$  ( y se entiende que las potencias menores de  $R$  no son iguales a la identidad) sobre su generador debido a que un grupo es un conjunto de generadores y relaciones . Una *relación de un grupo* es una condición cualquiera sobre su generador y un conjunto de relaciones que determina completamente a un grupo se llama *presentación del grupo*. Nuestro grupo  $C_6$  tiene como único generador a  $R$  y como única relación a  $R^6 = id$  y por lo tanto su única presentación es también  $R^6 = id$ .

Según lo estudiado en el capítulo anterior no debemos de pasar por alto que la operación  $R^{-1} \times R$  se aplica sobre una componente escalar, dos vectoriales y otra bivectorial porque la operación es sobre un plano de dos dimensiones.

En el álgebra geométrica las rotaciones de vectores en el plano equivalen al producto de un vector  $a$  por un vector unitario  $b$ , es decir,  $ab = a \cdot b + a \wedge b$ ; pero como lo vimos en el último apartado del capítulo 2, es mejor expresar la rotación de vectores mediante un mapeo unitario de espinores. Siendo así, una rotación en un plano es:

$$z = \exp[2\pi e_{12}/n] \quad (3-6)$$

o en nuestro caso:

$$z = \exp[2\pi e_{12}/6] = \exp[\pi e_{12}/3] \quad (3-7)$$

donde  $e_{12}$  es el bivector unitario para el plano de rotación que es el plano complejo. Recuerdese que un plano generado por  $e_1$  y  $e_2$  puede ser mapeado en un plano complejo o sea  $e_{12} \rightarrow i$ .

Según las ecuaciones (3-2), (3-3) y (3-4) al operador  $R$  le corresponde un grupo  $z \equiv R^2$ , por lo que la relación del operador  $R^6 = 1$  corresponde a la relación del grupo:

$$z^6 = id \quad (3-8)$$

que es también la identidad, pero en el plano de los complejos.

Para cada grupo rotacional finito hay un grupo de mapeos con el doble de elementos debido a los dos sentidos posibles de la rotación lo que podemos escribir como:

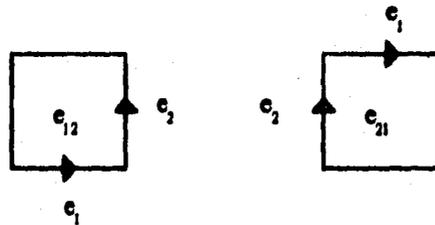
$$R^6 = \pm 1 \quad (3-9)$$

que es la presentación de lo que se conoce como el *grupo dicitlico* de orden 12 generado por  $R$ , denotado por  $2C_6$ .

El grupo cíclico no asigna una orientación a las rotaciones y dado que es imposible medir cantidades vectoriales, bivectoriales, etc sin una orientación para ellas, las rotaciones y las demás operaciones de simetría deben de ser orientadas. La orientación de las rotaciones en términos del grupo de la ec. (3-6) está dada por el bivector seleccionado, ya sea  $e_{12}$  o  $-e_{21}$ .

### Álgebra geométrica del cuadrado

Para ejemplificar los conceptos anteriores de la rotación desarrollaremos algo del álgebra geométrica del cuadrado pensando que se pudiera tratar de una molécula de ciclobutano por ejemplo, o de un plano un un cristal de NaCl. Para las rotaciones del cuadrado alrededor de un eje perpendicular al plano de rotación tenemos un grupo cíclico  $C_4 = R, R^2, R^3$  y  $R^4 = id$  y el grupo de la ecuación (3-6) tendrá los generadores  $z, z^2, z^3$  y  $z^4$ . También existirá un grupo dicitlico  $2C_4$  de orden 8. Comencemos el estudio en la dirección de  $e_{12}$  y recordemos que :



entonces:

$$z = \exp[2\pi e_{12}/4] = \exp[\pi e_{12}/2] \quad (3-10)$$

Desarrollando a  $z$  según la fórmula de Euler:

$$z = \cos \frac{\pi}{2} + e_{12} \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} \quad (3-11)$$

Como  $\cos \frac{\pi}{2} = 0$  y  $\operatorname{sen} \frac{\pi}{2} = 1$ , se obtiene que:

$$z = e_{12} \quad (3-12)$$

por lo tanto los generadores de  $z$  para las rotaciones del cuadrado en el sentido de  $e_{12}$  son:

$$\begin{aligned} z &= e_{12} \\ z^2 &= e_{12}^2 = -1 \\ z^3 &= e_{12}^3 = e_{21} = -e_{12} \\ z^4 &= e_{12}^4 = 1 \end{aligned}$$

y el grupo  $C_4$  para esta orientación se define como:

$$C_4 = \{\pm e_{12}, \pm 1\} \quad (3-13)$$

De manera análoga, las rotaciones en el sentido  $e_{21}$  se hacen así:

$$z = \cos \frac{\pi}{2} - e_{21} \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} \quad (3-14)$$

lo que implica:

$$z = e_{21} = -e_{12} \quad (3-15)$$

y los generadores de  $z$  para esta orientación son:

$$\begin{aligned} z &= -e_{12} \\ z^2 &= -e_{12}^2 = 1 \\ z^3 &= -e_{12}^3 = e_{12} \\ z^4 &= -e_{12}^4 = -1 \end{aligned}$$

y su grupo cíclico es:

$$C_4 = \{\pm e_{12}, \pm 1\} \quad (3-16)$$

En este caso particular los grupos cíclicos para ambas orientaciones coinciden con el grupo dicíclico:

$$2C_4 = \{\pm e_{12}, \pm 1\} \quad (3-17)$$

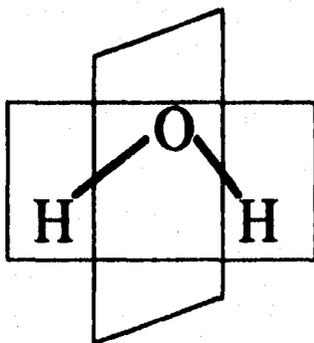
Aparentemente las ecuaciones (3-13) y (3-16) son idénticas en su forma de expresarse, sin embargo, notamos que cada generador del grupo  $z$  de una orientación tiene la misma magnitud que su respectivo de la orientación de sentido inverso, pero con signo opuesto ; y al momento de generalizar tales ecuaciones parecen ser idénticas. Así,  $1 = id$  y  $-1 = -id$  lo que quiere decir que la identidad se puede alcanzar mediante las rotaciones hacia una dirección o hacia la otra.

Es un hecho que  $1, -1, e_{12}$  y  $-e_{21} \in Cl$ . Si estamos de acuerdo con esto concluimos que el álgebra geométrica, que a fin de cuentas es un álgebra de Clifford, es más general que el álgebra ordinaria a la que tanto estamos acostumbrados porque "engloba" en un mismo tratamiento tanto a los números reales como a los números complejos.

## Reflexiones

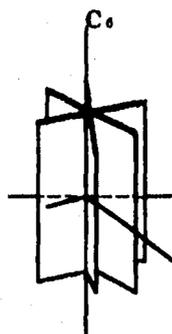
Las reflexiones se hacen sobre un *plano de simetría* o *plano especular*. Si una reflexión en un plano que pasa a través del objeto en cuestión lo deja

aparentemente inalterada, se dice que tiene un plano de simetría. Cuando el plano contiene al eje principal, se denomina *vertical*. La molécula de  $H_2O$  tiene dos planos de simetría verticales como se muestra en la siguiente figura:



Plano vertical de la molécula de agua

y de igual manera el  $\text{NH}_3$  tiene tres de estos planos verticales. Cuando el plano de simetría es perpendicular al eje principal, se denomina *horizontal*. La molécula de benceno tiene un eje principal  $C_6$  y un plano especular horizontal (además de otros elementos). Cuando un plano especular es vertical (o sea que contiene al eje principal) y bisecta al ángulo formado por dos ejes  $C_2$  perpendiculares al eje principal, se denomina plano *diedral*. En la siguiente figura se muestran tanto los elementos de simetría rotacional y reflexiva en el benceno.



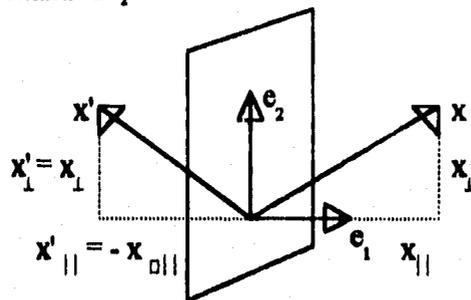
Planos especulares verticales y ejes de rotación en el benceno

En el sentido matemático la reflexión significa transportar a los vectores asignados a los vértices o puntos que forman al objeto en cuestión a través del plano de reflexión. Y antes de proseguir tenemos que advertir que desde sus orígenes, los conceptos geométricos nacieron en tres dimensiones, conceptos que se desarrollaron en la teoría de la geometría

euclidiana a la que tanto estamos acostumbrados. En esta teoría se establece que un espacio euclidiano  $R$  pertenece a otro de manera que  $R \in R^1 \in R^3$ . Sin embargo, en el álgebra geométrica no es necesario que un espacio esté embebido en otro de dimensión mayor.

Para el tratamiento matemático de las reflexiones nos basaremos en algunos conceptos del capítulo 2 y en la siguiente figura que ilustra la reflexión de  $x = x_{||} e_1 + x_{\perp} e_2$  con respecto a un plano horizontal relativo

a  $e_1$ , que contiene a  $e_2$ :



Aquí, se refleja el vector  $x$  sobre un plano para dar lugar al vector  $x'$ . Como se puede apreciar el vector  $x$  tiene una componente paralela y otra perpendicular, o sea:

$$x = x_{||} + x_{\perp} \quad (3-18)$$

y al efectuarse la reflexión se obtiene:

$$x' = -x_{||} + x_{\perp} = -e_1 x_{||} \quad (3-19)$$

De esto, podemos hacer tres observaciones importantes:

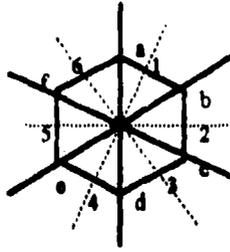
- 1)  $x_1$  permanece inalterado en la reflexión.
- 2) Aunque se ha realizado una reflexión en el espacio generado por  $e_1, e_2$  y  $e_3$ , el vector  $x$  al reflejarse pasa solo sobre una línea paralela a  $e_2$  del plano de reflexión. El "plano de reflexión", en nuestro ejemplo es el plano  $e_{12}$ , que solo es necesario porque históricamente buscamos que exista un plano perpendicular a  $e_1$ . De hecho, en la figura no se trazó al vector  $e_3$ , por las razones anteriores.
- 3) el vector  $x$  inicialmente se encuentra en el plano  $e_{12}$  y después de la reflexión, en la forma de  $x'$ , se encuentra de nuevo en el plano  $e_{12}$ .

De manera más formal se define la reflexión como la aplicación de los elementos  $-H$  y  $H$  sobre el vector  $x$  para dar lugar a  $x'$ , o sea:

$$x' = -HxH \quad (3-20)$$

Físicamente  $H$  significa mapear al vector  $x$  a un plano complejo y  $-H$  significa mapear al vector desde el plano complejo hasta la posición  $x'$ .

También las reflexiones de un objeto o molécula forman un grupo de simetría con sus respectivas relaciones y presentaciones. Para estudiar a este grupo emplearemos de nuevo el caso del hexágono que bien pudiera ser una molécula de benceno. En este podemos insertar doce planos de reflexión tanto entre vértices opuestos y a la mitad de los lados opuestos, así:

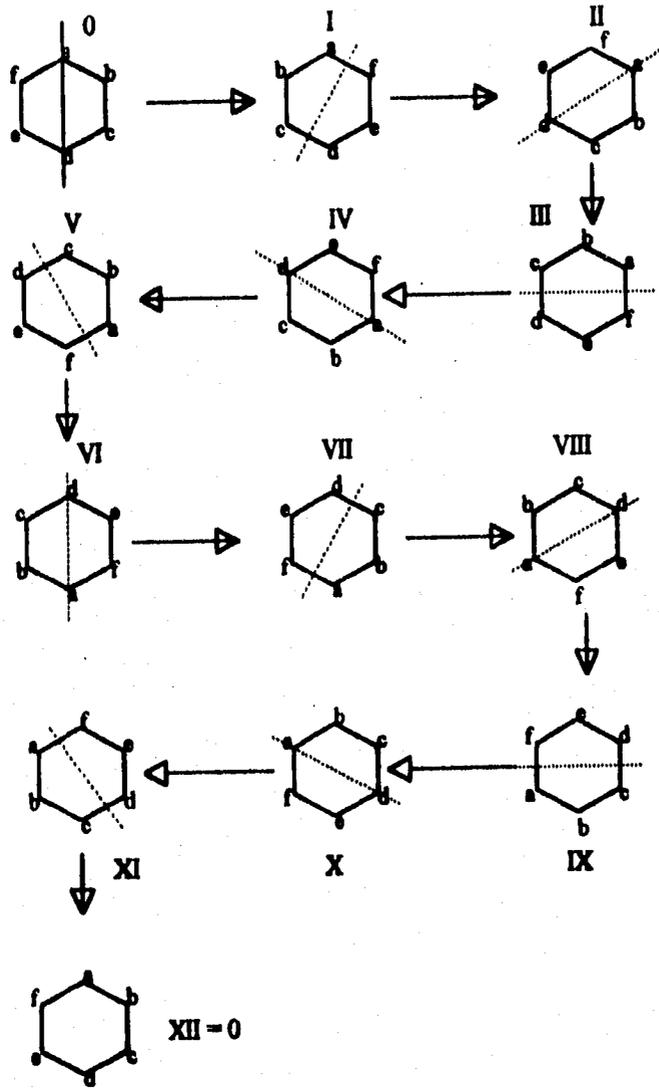


Las reflexiones sobre estos planos generan al grupo  $H_{12}$  donde :

$$H^{12} = id \quad (3-21)$$

y está formado por doce elementos o potencias diferentes de  $H$ . En la figura de la página siguiente se muestran los doce elementos de este grupo, o sea las doce reflexiones posibles sobre los planos situados en los ejes de simetría de un hexágono. En la figura por simplificación se representan los planos con líneas y en cada estructura se traza el plano de reflexión que da lugar a la estructura siguiente. Cada una de estas estructuras es una potencia de  $H$  y es interesante ver que las líneas de los planos pueden hacerla también de ejes de rotación del tipo  $C_2$ ; pero lo más importante es que las reflexiones sobre planos entre los vértices generan al grupo rotacional  $2C_6$ . Si tomamos a la estructura 0 y luego seguimos el orden de estructuras II, IV, VI, VIII, X, XII concluimos que hemos formado al grupo  $C_6$  en la dirección de  $e_{21}$ . En el caso contrario si seguimos el orden de  $e_{12}$ , es decir, X, VIII, VI, IV, II, XII, obtenemos a la contraparte de  $C_6$  y como sabemos ambos casos forman a  $2C_6$ . Por lo tanto damos el grupo  $2C_6$  es un subgrupo de  $H_{12}$ .

Las reflexiones en el hexágono



Si continuamos analizando a las estructuras "pares" nos damos cuenta que sobre una dirección dada una reflexión es equivalente a dos rotaciones.

Ahora bien, ¿ que ocurre con las reflexiones que dan lugar a las estructuras "nones" ?... . Lo que pasa con ellas es que son el complemento del grupo  $2C_6$  para formar a  $H_{12}$ . El hecho de que este grupo de reflexiones tenga más elementos que el de rotaciones estriba en las definiciones mismas de esas operaciones de simetría. Según la definición de rotación , esta transforma a un vértice  $x_k$  en su vecino  $x_{k+1}$  pasando solamente de vértice en vértice y no por ningún punto intermedio entre ellos. Y sin embargo, la reflexión tiene un grado de libertad más que es poder realizarse sobre un plano situado entre dos vértices. El lector observador se habrá dado cuenta de que las ecuaciones (3-2) y (3-20) son prácticamente iguales y esa es la justificación matemática de que el grupo  $2C_6$  sea un subgrupo de  $H_{12}$  , lo que implica la simplificación extrema de poder describir a dos operaciones de simetría mediante una misma operación del álgebra geométrica.

Al igual que las rotaciones, las reflexiones también pueden tener una orientación determinada. Esta clase de orientación es un poco más complicada de entender que para la rotación. Para entender la orientación en las reflexiones pensemos en que cada plano de simetría es como un espejo, con un lado opaco y el otro "plateado" en el que se reflejará el objeto en cuestión; y según la orientación del " lado plateado " será la orientación de la reflexión; es decir , no es igual considerar que algo pasa de arriba de lo

plateado hacia abajo ó que pase de abajo hacia arriba de lo plateado. En esta figura siempre se considera que la reflexión en un sentido forzosamente se acompaña con una reflexión de todo lo del otro lado en el otro sentido y el grupo solo es  $H_{12}$  por definición. En las estructuras de la página anterior todos los vértices son iguales, aunque tengan una letra asignada, esto es solo para resaltar el efecto de la reflexión; en esa figura el lado plateado va rotando en el sentido de las manecillas del reloj.

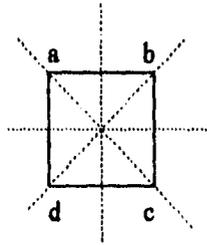
### Ejemplos Complementarios

El objeto de esta sección es presentar algunos ejemplos relacionados con los tópicos anteriores que no se hicieron en su momento para no complicar el texto e "indigestar" al lector; y el estudio de estos ejemplos al igual que los anteriores es importante para asimilar de manera clara la operación de reflexión.

#### a) Planos de reflexión en otros polígonos

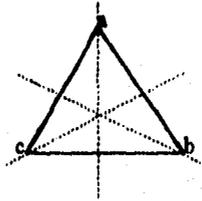
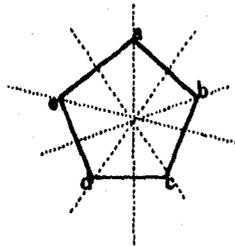
Los elementos del grupo  $H_{12}$  para el hexágono se mostraron gráficamente. En este se pueden trazar tres planos de reflexión sobre los ejes entre vértices opuestos y otros tres entre los puntos medios de lados opuestos, o sea seis planos de reflexión.

En el cuadrado ocurre algo similar: se tienen los siguientes 4 planos:

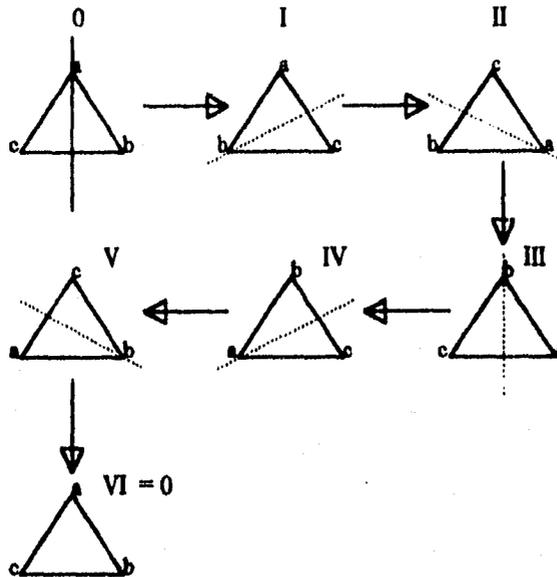


Que dan lugar al grupo  $H_8$  y tiene como subgrupo a  $2C_4$

Pero en polígonos de número de vértices impar tales como el triángulo y el pentágono solo podemos trazar planos de un vértice hacia el punto medio del lado opuesto, así:



y se puede pensar de primera instancia - sobretodo para el triángulo- que en estos polígonos  $2C_3 = H_{10}$  y  $2C_3 = H_6$ . Pero esto no ocurre así, y lo podemos ver gráficamente para el triángulo:

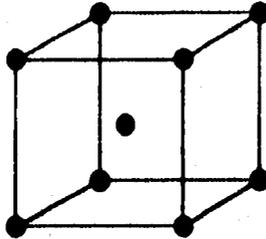


donde podemos ver que existen los grupos rotacionales en el orden 0,II,IV,VI y IV,II,VI , es decir el grupo  $2C_3$  , y las estructuras I y V como complemento para dar lugar a  $H_6$ . Aunque ya no lo ilustraremos lo anterior es válido también para el pentágono y para cualquier polígono regular.

**b) El plano de reflexión y la tercera dimensión**

Se ha hablado ya de que en el álgebra geométrica no es necesario que un espacio esté embebido en otro de dimensión mayor. Según esto, dijimos que la reflexión de un vector sobre un plano era en realidad la reflexión de

este solo sobre una línea de ese plano. También la reflexión de algo se puede hacer solo sobre puntos(cerodimensionales) del plano. Un buen ejemplo para esto es una estructura cristalina metálica, la estructura cúbica centrada en el cuerpo. Dicha estructura la tienen los metales alcalinos : Li, Na, K, Rb, y Cs. La estructura es:



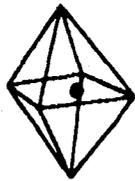
Estructura bcc (body cubic centered)

Si consideramos a los átomos como partículas puntuales, al trazar cualquier plano de simetría sobre esta estructura la dejamos inalterada, y al reflejarse los átomos pasan solo por puntos del plano de reflexión.

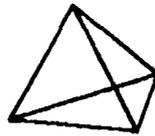
## Inversión

La inversión ( símbolo  $F$  ) se realiza sobre un *centro de inversión*. Para explicar esta operación de simetría en un objeto imaginemos que se toma cada punto del objeto en cuestión y se mueven hacia su centro de inversión y luego se alejan la misma distancia hacia el otro lado, obviamente dejando inalterado en apariencia al objeto.

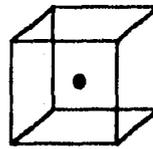
Para esta operación existe un único centro de inversión (c.i.) para un objeto dado, aunque no todos los objetos poseen un centro de inversión. Este es el caso de los polígonos regulares de número impar de vértices o del tetraedro, si se trata de los poliedros regulares. He aquí algunos ejemplos:



octaedro  
tiene c.i.



tetraedro  
no tiene c.i.

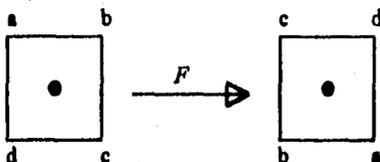


cubo  
tiene c.i.

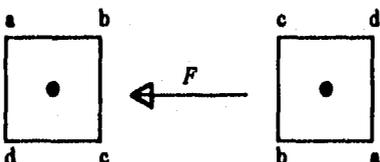
Para llegar a la identidad vía la inversión solo son necesarias dos operaciones, una es llevar el objeto a la forma invertida y la otra es llevar esta forma a la original independientemente del número de vértices, lados y caras que tenga el objeto, claro siempre y cuando exista en él un centro de inversión. Por esto el grupo de la inversión siempre será un grupo de dos elementos para cualquier objeto o sea  $\{F, F^2 = id\}$  y lo designaremos como grupo  $F_n$  donde "n" hará alusión a los lados del polígono y características del poliedro según sea el caso.

A pesar de lo anterior la inversión contiene elementos de los respectivos grupos rotacionales y de reflexión. Por ejemplo en un cuadrado

se puede realizar la siguiente inversión:



que es equivalente a dos rotaciones y dos reflexiones. Si hacemos otra inversión para llegar a la identidad :



se generan dos rotaciones y dos reflexiones más dando lugar a un grupo  $C_4$  y solo cuatro reflexiones de un grupo  $H_4$ , porque el centro de inversión actúa solamente como un plano entre vértices y no como un plano a la mitad entre lados opuestos. Como solo se generan cuatro reflexiones y no el grupo completo no podemos decir que en general, las reflexiones sean un subgrupo de la inversión. En el caso de las rotaciones el eje de rotación pasa por el centro de inversión por lo que se obtienen todas las rotaciones de  $C_4$ , pero en un solo sentido y el grupo cíclico  $C_4$  es un subgrupo de  $2C_4$  y consecuentemente subgrupo de  $F_4$ . Por lo tanto las rotaciones también pueden generar a la inversión.

Matemáticamente la inversión se expresa como:

$$F A F \quad (3-22)$$

con  $A F = -F A$  y  $F^2 = 1$

donde  $A$  no es un solo vector, sino todo el conjunto de vectores asociados a cada punto, vectores que tienen origen en el centro de inversión de nuestro objeto. Esto no quiere decir que la inversión equivale al total de las reflexiones individuales a través de cada punto del objeto porque aunque se puede trazar un número infinito de planos que contengan al centro de inversión, solo algunos de ellos pasan por los ejes de simetría, y un plano para ser plano de reflexión forzosamente debe de pasar por un eje de simetría. En el caso de los vectores colineales con los ejes de simetría si existen la operaciones de reflexión que forman el subgrupo de  $F_n$ .

Visualizar la orientación en la inversión para establecer un grupo  $2F_n$  resulta sumamente difícil, incluso más difícil que para la reflexión. En la reflexión se habló de un lado plateado y otro opaco del plano de reflexión, pero como el centro de inversión es solo un punto, no podemos marcar diferencia sobre él y por lo tanto el cualquier grupo de inversión es solo  $F_n$  por definición.

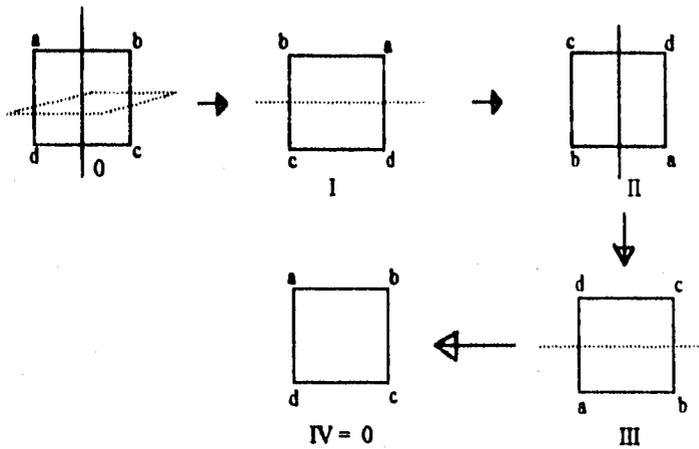
## Rotación Impropia

Esta operación también llamada rotación-reflexión o rotación-inversión resulta más complicada que las anteriores porque es una operación compuesta producto de dos operaciones de simetría. La rotación impropia cuyo símbolo es  $S_n$  consiste en realizar una rotación seguida de una reflexión sobre un plano horizontal, es decir, un plano perpendicular al eje de rotación. El orden "n" de la rotación impropia es el mismo que el del eje de rotación del objeto en cuestión.

Matemáticamente la rotación impropia consiste en llevar a un vértice  $x_k$  a la posición vecina  $x_{k+1}$  mediante la rotación y luego llevar a  $x_{k+1}$  mediante la reflexión a la posición  $x_{k+2}$ . Lo que podemos expresar como:

$$x_{k+2} = S^{-1} x_k S \quad (3-23)$$

Para ilustrar el concepto de rotación impropia veamos la figura que se muestra a continuación. En las estructuras I y III las líneas punteadas indican



planos de reflexión y la línea sólida que atraviesa a las estructuras 0 y II indican ejes de rotación. En la estructura 0 vemos que para poder aplicar las rotaciones impropias solo se puede emplear un eje  $C_2$ , si se empleara un eje  $C_4$  el plano de reflexión perpendicular a este eje sería paralelo al plano del cuadrado y no se podrían realizar las operaciones de reflexión; esto significa que las rotaciones impropias serán de orden 2. Las estructuras II y IV son el resultado de las rotaciones impropias  $S_2$ .

A estas operaciones de simetría también se les puede asignar una orientación determinada por el sentido de rotación del eje dando lugar a un grupo  $2S_2$  o  $2S_2$  para el caso de nuestro ejemplo.

## Traslación

Ya hemos estudiado las operaciones de identidad, rotación, reflexión, inversión y rotación impropia en las que el o los elementos de simetría correspondiente(s) siempre se encuentra(n) dentro del objeto en cuestión. Además, algo muy importante de estas cuatro operaciones es que al aplicarse siempre dejan al menos a un punto fijo e inalterado, es decir son operaciones de puntos de simetría. Sin embargo, la translación es una operación de simetría totalmente diferente a las demás porque no deja ningún punto fijo e inalterado. A pesar de esto la translación es una de las operaciones de simetría más importantes en el estudio de los grupos cristalográficos y espaciales en la química del estado sólido.

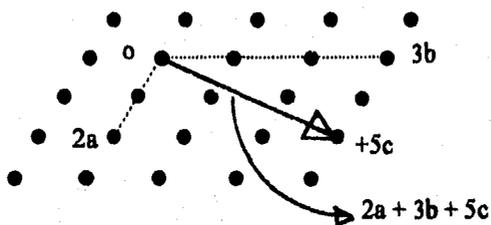
La translación consiste en llevar a un punto o puntos sobre una dirección y distancia dadas. El elemento de simetría para la translación es un vector precisamente llamado *vector de translación primitiva* cuyo número de componentes dependerá del número de dimensiones del espacio donde se realiza la translación. Si en la operación intervienen dos o más de estos vectores es necesario que sean paralelos entre sí en la dirección dada para dejar al objeto inalterado después de la operación.

El vector de translación se define de la siguiente forma:

$$t_n = n_1 a + n_2 b + n_3 c \quad (3-24)$$

donde  $n$ , es cualquier número entero (negativo, positivo o cero) y  $a, b$ , y  $c$  son los vectores escogidos tales que  $a$  y  $b$  no sean colineales y  $c$  no sea coplanar al plano  $ab$ . Los vectores  $a, b$ , y  $c$  surgen del mismo origen y sirven

como ejes de referencia. Los puntos de la malla están dados por los puntos finales de cada vector de la ec. ( 3-24 ). Para ilustrar este concepto veamos la siguiente figura:



donde por simplicidad se ha proyectado la malla tridimensional.

## Operaciones Helicoidales y de Desplazamiento

Además de las operaciones de simetría que ya hemos estudiado existen dos operaciones aún más complicadas y son las operaciones helicoidales y de desplazamiento. Las primeras son una combinación de rotación con

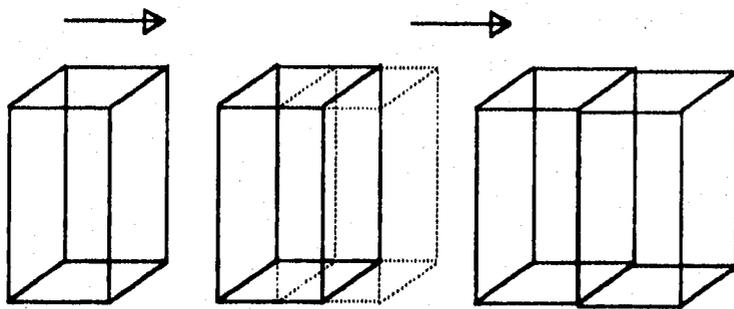
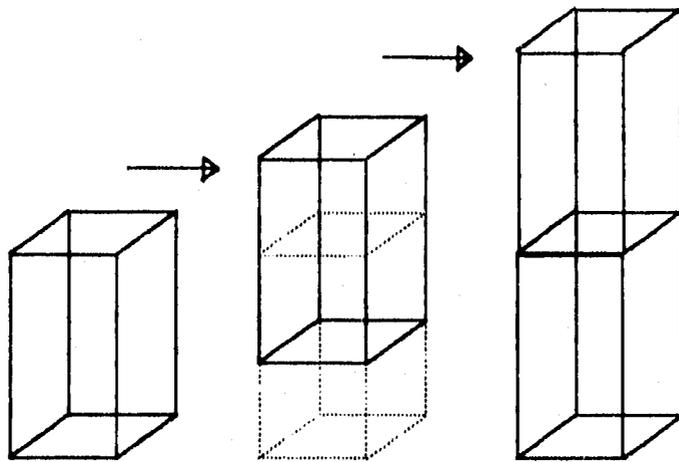
translación y las segundas son una combinación de reflexión con translación. Las operaciones o bien rotaciones helicoidales se pueden definir mediante la siguiente ecuación:

$$\tau = R + t \quad (3-25)$$

Las operaciones de deslizamiento se definen mediante:

$$\rho = H + t \quad (3-26)$$

Esto significa que dichas operaciones se realizan de manera simultánea y no podemos identificar por separado a cada operación fundamental de estas operaciones compuestas. Esto es, una rotación helicoidal sería algo así como ir atornillando algo, es decir, conforme se rota se traslada. Para las operaciones, o bien, reflexiones de deslizamiento ocurre algo muy análogo. Para ilustrar estas nuevas operaciones de simetría veamos las siguientes figuras donde se representan rotaciones helicoidales y reflexiones de deslizamiento, ambas de orden 2:

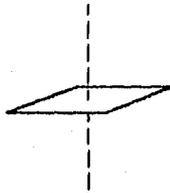


## Simetría Múltiple en los Objetos

A lo largo de este capítulo hemos estudiado las operaciones de identidad, rotación, reflexión e inversión de forma separada, pero siempre una operación de simetría implica la existencia de una u otras operaciones más al aplicar un solo elemento de simetría (eje de rotación, plano de reflexión y centro de inversión) a un objeto. Como a la mayoría de los objetos simétricos se les puede aplicar más de un elemento de simetría, resulta que un objeto de simetría aparentemente simple puede tener una gran cantidad de grupos de simetría. Para ilustrar esto retomemos el ya clásico ejemplo del cuadrado. En la siguiente figura se muestran las simetrías para cada elemento de simetría en el cuadrado.

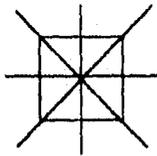
**Elemento(s) de simetría**

**Grupos de simetría**



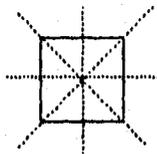
eje de rotación de  
orden 4 (principal)

$2C_4, F_2, id$



cuatro ejes de  
rotación binarios

4 grupos  $2C_2$  (uno por cada eje),  
 $H_2, id$



cuatro planos de  
reflexión

$H_2, 2C_4, id$



centro de inversión

$F_2, C_4, id$

## Capítulo 4

### Aplicaciones a la cristalografía

**H**emos explicado ya las operaciones de identidad, rotación, reflexión, inversión y translación mediante el álgebra geométrica y dado ejemplos de ellas con figuras y moléculas. Ahora en éste capítulo nuestro objetivo es clasificar a los cristales en base a las simetrías que poseen. Las simetrías de un cristal dependen solamente de la posición de sus átomos y no de la naturaleza física de ellos. De hecho, en los cristales existen vibraciones térmicas y otros tipos de "desorden" como en las aleaciones por ejemplo, que dan lugar a estructuras "promedio" y sin embargo , podemos asignar ciertas simetrías a un cristal porque no lo hacemos a nivel local.

En los cristales que son tridimensionales siempre se manifiesta la simetría múltiple porque poseen varios elementos de simetría. La forma de los cristales de cualquier compuesto, metal o aleación pertenece a uno de los siete sistemas cristalinos. Cada sistema cristalino es una estructura que posee ciertos elementos de simetría y al efectuar las operaciones correspondientes sobre tales elementos se obtienen los 32 grupos cristalográficos y los 230 grupos espaciales. Cada grupo cristalográfico tiene sus propios grupos espaciales y a su vez cada sistema cristalino tiene sus grupos cristalográficos. Para dar la clasificación completa de un cierto cristal es necesario dar su grupo espacial, grupo cristalográfico y sistema cristalino al que pertenece.

## Cristales

Macroscópicamente definimos a un cristal como un sólido de composición química uniforme formado por caras planas las cuales forman ángulos precisos entre cada una de ellas. Esta no es una definición rigurosa, de hecho solo puede definirse considerando la naturaleza microscópica de los cristales. La característica importante que hace diferente a los cristales de los demás sólidos es que se forman de átomos o grupos de átomos que se repiten regularmente en tres dimensiones. Ejemplos de ello son las sales o compuestos predominantemente iónicos como el NaCl o sal común.<sup>1</sup>

Antes de continuar es necesario definir lo que es una malla. Esta se define como un arreglo infinito de puntos en el espacio, en el cual cada punto es idéntico a los que lo rodean. La forma más simple de generar ese arreglo es mediante la propiedad de invarianza translacional, que es la característica fundamental de todos los cristales.

Matemáticamente un cristal se puede describir mediante el volumen de un paralelepípedo formado por los vectores  $a$ ,  $b$ ,  $c$ . El volumen se genera por el producto  $a \wedge b \wedge c$ . Al trasladarse este volumen mediante el vector de translación se llena el espacio y se genera la malla. A una región en el espacio, con volumen  $a \wedge b \wedge c$  se le llama *celda unitaria*.

---

<sup>1</sup> El NaCl nos brinda un sencillo y excelente ejemplo de la estructura de un cristal. Al aplastar un "grano" de sal notamos que los fragmentos tienden a adoptar forma cúbica y al aplastar otro fragmento observamos el mismo comportamiento y así sucesivamente. La tendencia de la forma cúbica de los granos "macroscópicos" de sal es un reflejo de su estructura cristalina.

Volviendo al concepto físico de los cristales, la estructura de ellos o *estructura cristalina* consiste en la asociación de un grupo de átomos a cada punto de la malla. Este grupo de átomos se conoce como la *base* de la estructura por esto, una estructura cristalina está hecha de una malla y una base. En otras palabras, la estructura cristalina se obtiene mediante la repetición en el espacio, de una celda unitaria y los átomos de ella.

### La Restricción Cristalográfica.

Los siete sistemas cristalinos surgen al aplicar rotaciones propias e impropias a los ejes de la celda unitaria o vectores de translación de la malla. Tanto estas rotaciones y todas las demás rotaciones en cristalografía solo pueden ser de orden  $n = 1, 2, 3, 4$  y  $6$  debido a que no se pueden construir celdas unitarias que juntas llenen el espacio sin dejar huecos empleando otros valores para  $n$ . A esta restricción se le conoce como *la restricción cristalográfica*. Para ilustrar esto en la página siguiente emplearemos figuras en el plano de los órdenes de simetría rotacional antes mencionados aunque estemos hablando de llenar el espacio porque a fin de cuentas el volumen de la celda unitaria se puede considerar como una proyección de área.

Esta restricción va más allá de la cristalografía, esto es, para llenar el espacio con figuras planas proyectadas solamente es posible con figuras de simetría rotacional de orden  $1, 2, 3, 4, 6$ ; se trate o no de polígonos

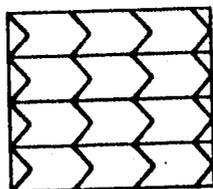
regulares. En la vida diaria se pueden observar muchos ejemplos de esta restricción en los ladrillos de orden 2, los mosaicos de orden 2, 4 o 6, en el adoquín de los pisos, etc, pero no existen paredes cubiertas solo de mosaicos en forma de pentágonos regulares o de polígonos regulares de más de seis lados sin dejar huecos entre ellos. La existencia de simetría rotacional de orden 5 en los cristales comenzó a estudiarse y cuestionarse desde 1978 dando lugar a sorprendentes resultados. En un principio los estudios fueron meramente teóricos empleando los famosos mosaicos de Penrose que son arreglos de rombos que llenan el espacio de una manera "cuasiperiódica" con simetría rotacional de orden 5. Posteriormente se realizaron simulaciones por computadora de los patrones de difracción de rayos X que producirían los hipotéticos cristales. Estos patrones de difracción se asemejaban mucho más a los patrones producidos por sustancias cristalinas que a los producidos por sustancias amorfas. Según este resultado se planteó que la malla de los hipotéticos cristales era también cuasiperiódica por lo que a este tipo de cristales se les dio el nombre de "cuasicristales". Lo que faltaba ahora era probar su existencia material y en 1984 se obtuvieron los primeros cuasicristales. Esto se logró al enfriar súbitamente una aleación de aluminio, hierro y cobre. Este material cristaliza en forma de dodecaedros regulares que tienen simetría rotacional de orden 5. Los dodecaedros no pueden llenar el espacio sin dejar huecos, pero en este material los dodecaedros forman un arreglo espacial cuasiperiódico.

Orden

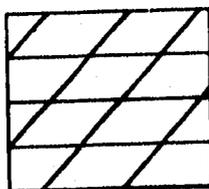
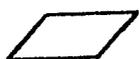
Elemento

En conjunto

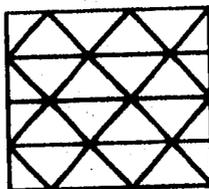
1



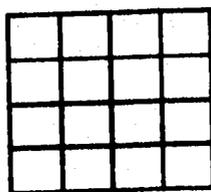
2



3



4

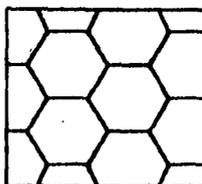


Orden

Elemento

En conjunto

6



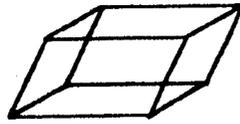
Stamp: INSTITUTO TECNOLÓGICO DE AERONÁUTICA Y ESPACIO, INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN AERONÁUTICA Y ESPACIO, INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN AERONÁUTICA Y ESPACIO, INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN AERONÁUTICA Y ESPACIO

## Los Siete Sistemas Cristalinos

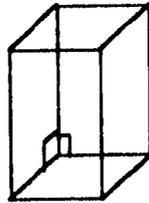
Como se dijo antes, los siete sistemas cristalinos: triclinico, monoclinico, ortorrómbico tetragonal, cúbico, trigonal, y hexagonal que se muestran en la página siguiente surgen al aplicar rotaciones propias e impropias en el sentido de  $e_{12}$  a los ejes de la celda unitaria o vectores de translación de la malla que generan ciertas restricciones sobre los ejes y/o los ángulos interaxiales de la celda unitaria; y tales restricciones a su vez determinan la forma del sistema cristalino en cuestión. Para apreciar el efecto de las operaciones de simetría sobre los ejes a, b y c las operaciones se aplican a un punto de coordenadas (x, y, z) de la celda unitaria al cual se le puede asociar un vector (r) de posición desde el origen situado por conveniencia en un punto de la malla. Las componentes de este vector r son xa, yb, zc, o sea :

$$r = xa + yb + zc \quad (4-1)$$

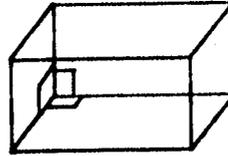
Los siete sistemas cristalinos



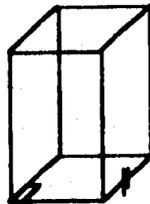
Triclínico



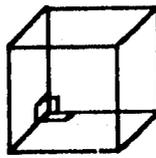
Monoclínico



Ortorrómbico



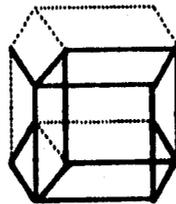
Tetragonal



Cúbico



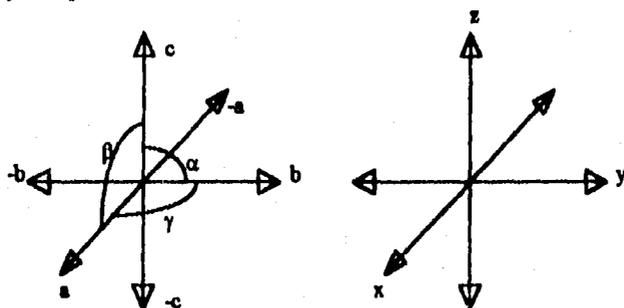
Trigonal



Hexagonal

y esta forma del vector  $r$  es con la que siempre empezaremos a aplicar las operaciones de simetría.

Las direcciones de los vectores  $a, b, c$ , los ángulos interaxiales  $\alpha, \beta, \gamma$  y los ejes de coordenadas se definen así:



### Sistema de Notación

Para escribir las ecuaciones que describen las operaciones de simetría en los distintos sistemas cristalinos emplearemos la siguiente notación que es la misma empleada en el capítulo anterior salvo que más específica.

Para las rotaciones emplearemos a  $R_{nk}^{-1}$  y  $R_{nk}$  donde "n" indica el número de la operación del grupo aplicado y "k" indica el eje de la celda unitaria empleado como eje de rotación. Por ejemplo la tercera rotación de un grupo  $2C_4$  aplicado a un vector  $r$  donde el eje de rotación es el eje  $a$  la escribimos como:  $R_{3a}^{-1}$  o  $R_{3a}$  es decir la rotación de  $270^\circ$ .

Para las rotaciones impropias emplearemos a  $S_{nk}^{-1}$  y  $S_{nk}$  donde "n" indica el número de la rotación del grupo aplicado y "k" indica el eje de la celda unitaria que es perpendicular al plano de reflexión.

Para las reflexiones emplearemos a  $-H_{nk}$  y  $H_{nk}$  donde "n" también indica el número de la operación del grupo aplicado, y en este caso "k" indica el eje de la celda unitaria que es perpendicular al plano de reflexión.

### Sistema Triclínico

Este sistema resulta de no aplicar ninguna rotación sobre los ejes de la celda unitaria y solo existen las simetrías  $id$  o  $F$ . Entonces no surge restricción alguna para los ejes y ángulos interaxiales, o sea:

$$a \neq b \neq c \quad ; \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma$$

Las operaciones para este sistema cristalino solo son:

$$id \ r = xa + yb + zc \quad (4-2)$$

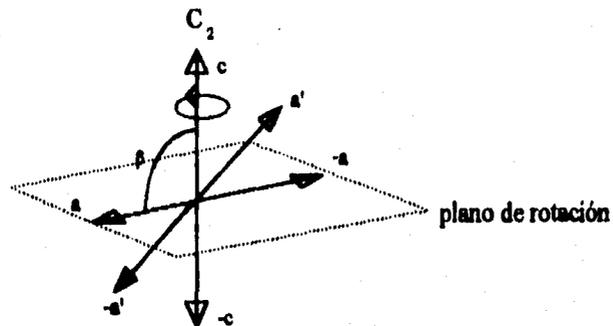
$$F \ r = -xa - yb - zc \quad (4-3)$$

### Sistema Monoclínico

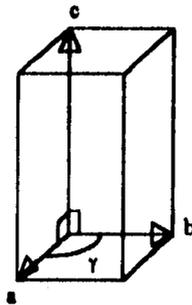
Para obtener este sistema se aplica una operación  $2C_2$  ya sea al plano perpendicular al eje c o al eje b, o una reflexión  $H_2$  sobre un plano perpendicular al eje c o al eje b dependiendo de cuál eje designemos como el principal. La convención del sistema monoclínico originado al designar al eje c como principal es la más usada por los físicos del estado sólido y la

otra forma es usada por los cristalógrafos. De aquí en adelante usaremos la primera convención.

Para ilustrar las restricciones que impone la aplicación del grupo  $2C_2$  sobre el eje  $c$  (principal) de la celda unitaria analicemos la siguiente figura:



Aquí, para transformar  $a$  en  $-a$  se requiere una rotación de  $180^\circ$  alrededor del eje  $c$  y necesariamente  $a$  y  $c$  deben ser perpendiculares, de no ser así, el vector  $a$  saldría del plano de rotación transformándose en un vector  $a'$ . Esta condición también es necesaria para  $b$ , es decir  $b \perp c$ , pero no necesariamente  $a$  y  $b$  deben ser perpendiculares. Y la forma del sistema monoclinico obtenido es la siguiente:



donde  $a \neq b \neq c$  ;  $\alpha = \beta = 90^\circ$  ;  $\gamma \neq 90^\circ$ . Las operaciones de las rotaciones  $2C_2$  sobre los ejes c y b son :

$$R_{1c}^{-1} r R_{1c} = -xa - yb + zc \quad (4-4)$$

$$R_{1c}^{-1} r R_{1c} = -xa + yb - zc \quad (4-5)$$

respectivamente.

Con respecto a las reflexiones  $H_2$  tenemos:

$$-H_{1c} r H_{1c} = xa + yb - zc \quad (4-6)$$

$$-H_{1b} r H_{1b} = xa - yb + zc \quad (4-7)$$

porque el plano de reflexión es perpendicular al eje c.

### Sistema Ortorrómbico

Este sistema surge al aplicar a la celda unitaria dos rotaciones  $2C_2$ , uno sobre el eje a y otro sobre el eje b, o dos reflexiones  $H_2$  cuyos planos de reflexión son perpendiculares a los ejes a y b.

Para los ejes de rotación sobre los ejes a y b las operaciones correspondientes son:

$$R_{1a}^{-1} \text{ r } R_{1a} = xa - yb - zc \quad (4-8)$$

$$R_{1b}^{-1} \text{ r } R_{1b} = -xa + yb - zc \quad (4-9)$$

y las reflexiones son las siguientes:

$$-H_{1a} \text{ r } H_{1a} = -xa + yb + zc \quad (4-10)$$

$$-H_{1b} \text{ r } H_{1b} = xa - yb + zc \quad (4-11)$$

Por la misma razón que se explicó en el sistema monoclinico el primer eje de rotación implica que  $a \perp c$ ,  $a \perp b$  y el otro eje implica que  $b \perp c$  y  $b \perp a$ . Por otro lado no hay ninguna restricción para la magnitud de los ejes porque no existe un intercambio de las magnitudes de los ejes. Esto lo explicaremos con más detalle en el siguiente sistema cristalino. Entonces para el sistema ortorrómbico tenemos:

$$a \neq b \neq c \quad ; \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

### Sistema Tetragonal

En este caso se consideran las restricciones impuestas por la aplicación de una rotación  $2C_4$  o una rotación impropia  $2S_4$ . Por convención se elige al eje c como el eje de rotación, entonces los ejes a y b deben ser perpendiculares al eje c. Las rotaciones de orden 4 implican que +a se mueva hacia +b, +b hacia -a, -a hacia -b y -b hacia +a; por lo que también a y b deben ser perpendiculares entre sí ; y para que la celda

unitaria quede inalterada en apariencia los ejes a y b forzosamente deben tener la misma magnitud. Esta condición también es necesaria para aplicar el grupo  $2S_4$ , que además transforma a +c en -c y viceversa. Para ilustrar el intercambio de coordenadas escribiremos todas las rotaciones y rotaciones impropias, aunque solo es necesaria una operación de cada tipo para definir a este sistema:

$$R_{1c}^{-1} \text{ r } R_{1c} = -ya + xb + zc \quad (4-12)$$

$$R_{2c}^{-1} \text{ r } R_{2c} = -xa - yb + zc \quad (4-13)$$

$$R_{3c}^{-1} \text{ r } R_{3c} = ya - xb + zc \quad (4-14)$$

$$S_{1c}^{-1} \text{ r } S_{1c} = -ya + xb - zc \quad (4-15)$$

$$S_{2c}^{-1} \text{ r } S_{2c} = -xa - yb + zc \quad (4-16)$$

$$S_{3c}^{-1} \text{ r } S_{3c} = ya - xb - zc \quad (4-17)$$

Las restricciones que definen la forma del sistema tetragonal son:

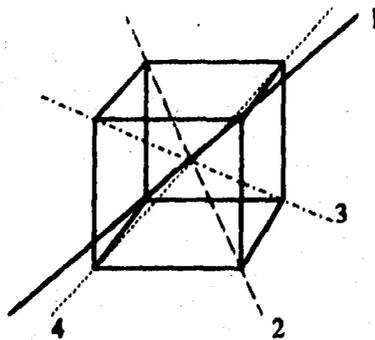
$$a = b \neq c \quad ; \quad \alpha = \beta = \gamma$$

y por supuesto el eje c puede ser mayor o menor que a = b.

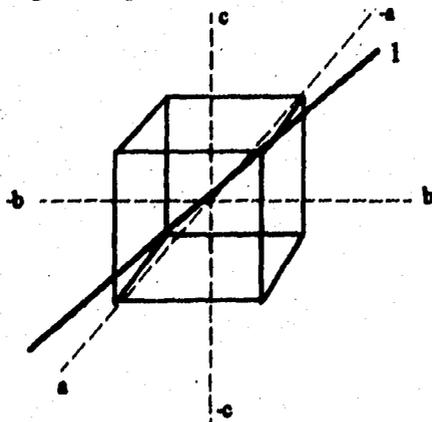
### Sistema Cúbico

Este sistema cristalino es el sistema con la simetría más alta. Para definir a este sistema no es suficiente el criterio de que todos los ejes tengan la misma magnitud y todos los ángulos interaxiales sean de  $90^\circ$  porque la simetría es el factor determinante en la definición de un sistema cristalino.

Sorprendentemente los elementos de simetría que determinan este sistema no son los tres ejes  $C_4$  perpendiculares entre sí que saltan a la vista, sino los 4 ejes  $C_3$  que corresponden a las diagonales en el cuerpo de la celda unitaria cúbica como se muestran en la siguiente figura:



Para obtener las operaciones de simetría en este sistema para el eje 1 nos basamos en la siguiente figura:



aunque para una mejor visualización del efecto de estas rotaciones es altamente recomendable emplear modelos tridimensionales.

Para el eje 1 las operaciones son:

$$R_{11}^{-1} \text{ r } R_{11} = za + xb + yc \quad (4-18)$$

$$R_{21}^{-1} \text{ r } R_{21} = ya + zb + xc \quad (4-19)$$

teniendo siempre presente que las rotaciones tienen el sentido de  $e_{12}$ .

Para el eje 2:

$$R_{12}^{-1} \text{ r } R_{12} = ya - zb - xc \quad (4-20)$$

$$R_{22}^{-1} \text{ r } R_{22} = -za + xb - yc \quad (4-21)$$

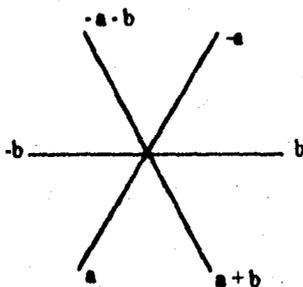
Las operaciones para los ejes 3 y 4 ya no las escribiremos, pero se obtienen de la misma forma que para los ejes 1 y 2. Al obtener las ecuaciones (4-18)-(4-21) se puede ver que existe un intercambio mutuo de coordenadas entre los tres ejes lo que implica que estos deben tener la misma magnitud y por la razón explicada en sistemas anteriores los tres ejes deben ser perpendiculares entre sí. De esta forma surge el sistema cúbico definido por:

$$a = b = c \quad ; \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

## Sistemas Trigonal y Hexagonal

Hemos dejado el estudio de estos dos sistemas al último porque ambos presentan ciertas complicaciones que no existen en los sistemas cristalinos anteriores.

Estudiemos primero al sistema hexagonal. Este sistema cristalino se define al aplicar una operación  $2C_6$  o una operación  $2S_6$ . La primera complicación se debe a que para poder definir a este sistema cristalino es necesario emplear 4 ejes, tres en el plano de rotación y otro como eje de rotación. En la siguiente figura se definen los ejes sobre el plano de rotación para el sistema hexagonal:



lo que complica un poco la obtención de las ecuaciones para las respectivas operaciones de simetría. Aunque estemos empleando un sistema de ejes hexagonal hay que aclarar que la celda unitaria de este sistema no es un prisma hexagonal sino un paralelepípedo y al juntar tres paralelepípedos

formamos un prisma hexagonal. Y como vimos en la sección de la restricción cristalográfica un espacio se puede llenar sin dejar huecos con prismas hexagonales.

Las ecuaciones de las dos primeras rotaciones son:

$$R_{1c}^{-1} r R_{1c} = x(a+b) - ya + zc \quad (4-22)$$

$$R_{2c}^{-1} r R_{2c} = xb + y(-a-b) + zc \quad (4-23)$$

Aunque un poco más complicado, existe también un intercambio en las coordenadas de los ejes  $a$  y  $b$  que impone que  $a$  y  $b$  tengan la misma magnitud. Además, como el eje de rotación es el eje  $c$  implica que  $a \perp c$  y  $b \perp c$  y el ángulo  $\gamma$  entre  $a$  y  $b$  debe ser de  $120^\circ$ . Entonces el sistema cristalino hexagonal se define mediante:

$$a = b \neq c \quad ; \quad \alpha = \beta = 90^\circ \quad ; \quad \gamma = 120^\circ$$

Con respecto al sistema trigonal actualmente se considera como un caso particular del sistema hexagonal. Siendo las mismas condiciones para sus ejes y ángulos.

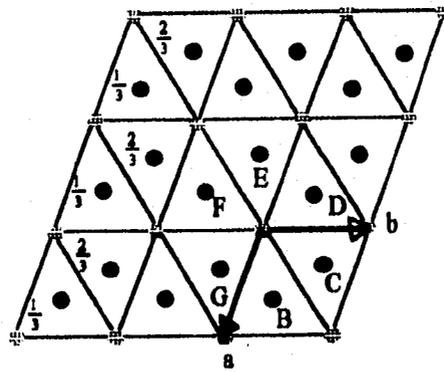
Existen básicamente dos formas para definir a los sistemas cristalinos. Uno es usar la simetría del cristal (como lo hemos hecho aquí); y el otro que es usar la simetría de la malla. En el último caso tenemos una malla hexagonal de simetría 6 que da lugar al sistema cristalino hexagonal. El otro sistema en este esquema es el llamado *sistema cristalino romboédrico (o rómbico)* en el cual existe la simetría de orden 3, pero no la de orden 6. En

esta forma de definición de los sistemas cristalinos no existe el sistema trigonal, aunque el número total de sistemas sigue siendo siete. Entonces consideraremos por separado a los sistemas hexagonal y trigonal ; y al romboédrico como un caso especial del trigonal.

Ahora describiremos la celda unitaria del sistema romboédrico. Las condiciones en sus ejes y ángulos son:

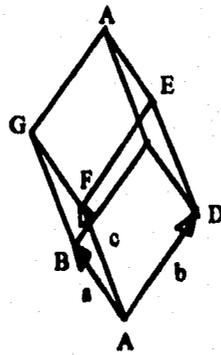
$$a = b = c \quad ; \quad \alpha = \beta = \gamma$$

donde la operación  $3C$ , hace iguales los ángulos y ejes. Para desarrollar a este sistema cristalino comenzamos tomando y centrando una malla hexagonal. El concepto de "centrar" será discutido más adelante. En la figura (a) de la página siguiente se muestra una malla en proyección con los ejes  $a$  y  $b$  marcados y se añaden nuevos puntos a las posiciones  $(2/3, 1/3, 1/3)$  y  $(1/3, 2/3, 2/3)$ ; en la celda unitaria que está abajo y a la derecha esos puntos se marcan con "B" y "C" respectivamente. Esos puntos se han añadido de manera tal que el conjunto resultante total de puntos (la malla hexagonal original más los nuevos puntos) tenga simetría trigonal y no tenga ya más simetría hexagonal. Una vez hecho esto , se puede elegir una celda unitaria romboédrica como se indica en la figura (b) donde las letras mayúsculas de A a G, marcan las posiciones originales de los puntos



(a)

en la figura (a).



(b)

## Los 32 Grupos Cristalográficos Puntuales

En el capítulo 3 discutimos las operaciones de simetría y su notación. En esta sección del capítulo 4 vamos a considerar lo que ocurre cuando se combinan varias de estas operaciones. Por ejemplo, ¿cuál es el resultado cuando se combina una operación de rotación con otras perpendiculares al eje principal de la primera, o con reflexiones?. Esas combinaciones de operaciones de simetría son las que nos permiten describir la simetría de los objetos tridimensionales.

En esta sección mostraremos como se determinan los 32 *grupos cristalográficos puntuales*, también mediante el álgebra geométrica. La palabra "*cristalográficos*" implica que en estos grupos solo se permiten rotaciones de  $2\pi/n$  donde  $n = 1, 2, 3, 4$  y  $6$ . Esta restricción sobre los valores de " $n$ " da como resultado a 32 grupos puntuales y por eso normalmente los 32 grupos cristalográficos puntuales se conocen como los "*32 grupos puntuales*". La palabra puntual significa que todas las operaciones de simetría actúan sobre un punto en común que se mantiene fijo durante la aplicación de las operaciones. Este punto es llamado "*el origen*". La palabra "*grupo*" significa una colección o conjunto de operaciones de simetría. El conjunto de operaciones de simetría para cada grupo puntual (cristalográfico o no) forma un grupo matemáticamente hablando. Hay que destacar que el concepto de grupo puntual también resulta importante para moléculas aisladas, pero la única diferencia es que para las moléculas no existe ninguna restricción para las rotaciones.

Existen varias razones para estudiar a los grupos puntuales. Primero, nos permiten clasificar a los diferentes cristales. Históricamente, el estudio de los cristales comenzó con el estudio de sus caras externas.

Caracterizándolos con direcciones normales a sus caras y llevándolas hacia un solo punto se encontró que cualquier cristal pertenece a una de las 32 clases cristalinas. Cada una de esas clases cristalinas corresponden a uno de los 32 grupos puntuales. Segundo, los objetos finitos que se pueden describir mediante uno de los 32 grupos puntuales puede añadirse a la malla de puntos para obtener algunos grupos espaciales, como se mostrará en la siguiente sección. Tercero, las operaciones de simetría que posee un objeto molécula o cristal pueden describirse simplemente por medio de un símbolo. De este símbolo un científico del estado sólido puede determinar todas las operaciones de simetría. Cuarto, todo grupo espacial tiene uno de los 32 grupos cristalográficos puntuales asociado con él (el grupo puntual del grupo espacial, normalmente se llama grupo puntual del cristal). Esto es importante en muchas áreas de la ciencia del estado sólido. Por ejemplo, la mayoría de los aspectos macroscópicos simétricos de las propiedades físicas de los sólidos están relacionadas con el grupo puntual.

Los 32 grupos puntuales los obtendremos de las mismas operaciones simples de simetría que se discutieron en el capítulo anterior tal como lo hicimos con los sistemas cristalinos. Por ejemplo, tomaremos al sistema tetragonal y determinaremos que reflexiones y rotaciones pueden añadirse a las operaciones de simetría que definen a ese sistema. Esto se hará con cada sistema cristalino y de esa manera se obtendrán los 32 grupos

cristalográficos puntuales. La ventaja importante de este método es que para obtener los grupos espaciales lo haremos de manera muy similar.

### Sistema Triclínico

En la sección anterior vimos que las operaciones de simetría  $id$  y  $F$  no imponen restricciones sobre los ejes de la celda unitaria y sus ángulos, dando lugar al sistema triclinico. Cualquier objeto, cristal o molécula que solo posee la operación de identidad, se dice que pertenece al grupo puntual 1.

Si un objeto, cristal, etc se describe por las dos operaciones  $id$  y  $F$  el grupo puntual se denomina como  $1F$  lo que significa que hay dos operaciones de simetría que aplicadas al objeto en cuestión lo dejan inalterado en apariencia y las operaciones son  $id$  y  $F$ . Como este grupo puntual se define como  $1F = \{id, F\}$  entonces el grupo puntual es de orden 2 y por consecuencia el grupo puntual 1 es de orden 1.

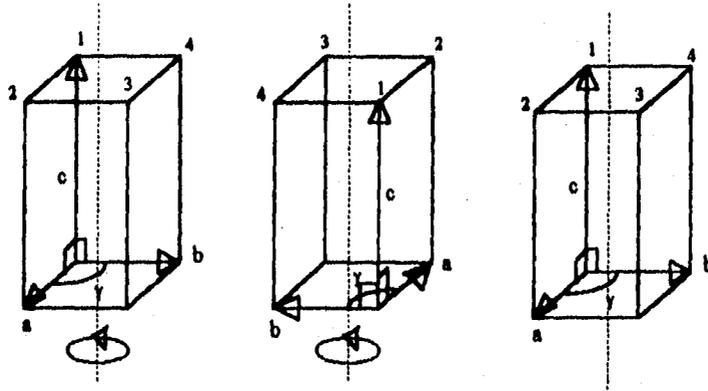
El grupo puntual que tiene la simetría de la malla del respectivo sistema cristalino se le conoce como el "grupo puntual holohédrico", y este tiene el mayor número de operaciones de simetría. Para el sistema triclinico el grupo puntual holohédrico es el grupo  $1F$ .

Antes de seguir adelante es necesario remarcar que un grupo cristalográfico puntual es un conjunto o colección de operaciones de simetría que se pueden aplicar a un objeto y una operación de simetría es una operación aislada que aplicada a un objeto lo deja inalterado.

Regresando al sistema triclinico, no le podemos agregar más operaciones de simetría. La adición de operaciones  $2C_2$  o  $2H_2$  nos llevaría al sistema monoclinico, o sea que solo hay dos grupos puntuales "compatibles" con la simetría del sistema triclinico.

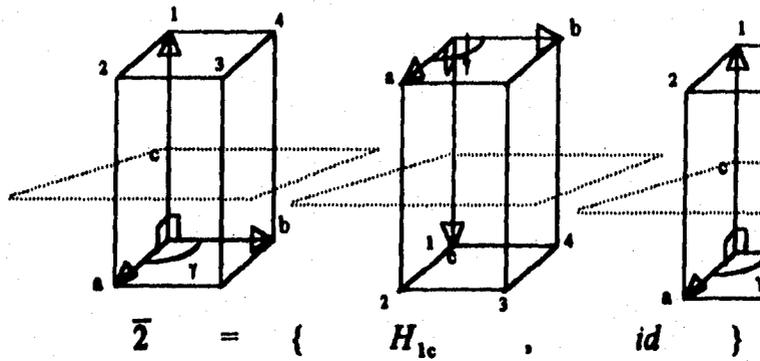
### Sistema monoclinico

En la sección anterior vimos que las operaciones de simetría  $2C_2$  y  $H_2$  dan lugar a un sistema de ejes monoclinico. Ahora, cualquier objeto que pueda describirse por una sola operación  $2C_2$  es compatible con la simetría del sistema monoclinico y pertenece al grupo puntual 2. Este grupo puntual 2 es de orden dos porque se define mediante dos operaciones de simetría así:  $2 = \{R_{1c}, R_{2c}\}$ , o bien  $2 = \{R_{1c}, id\}$ . De la misma manera, los objetos, cristales o moléculas descritos por las operaciones de reflexión  $H_2$  pertenecen al grupo puntual  $\bar{2}$  definido como  $\bar{2} = \{H_1, H_2\}$  o bien  $\bar{2} = \{H_1, id\}$  también de orden 2. Estos dos grupos puntuales los podemos visualizar para el grupo 2 así:



$$2 = \{ H_{1c}, id \}$$

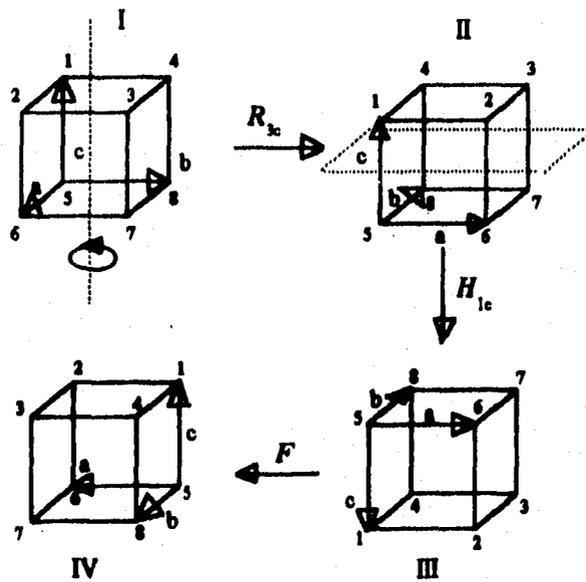
y para el grupo  $\bar{2}$  :



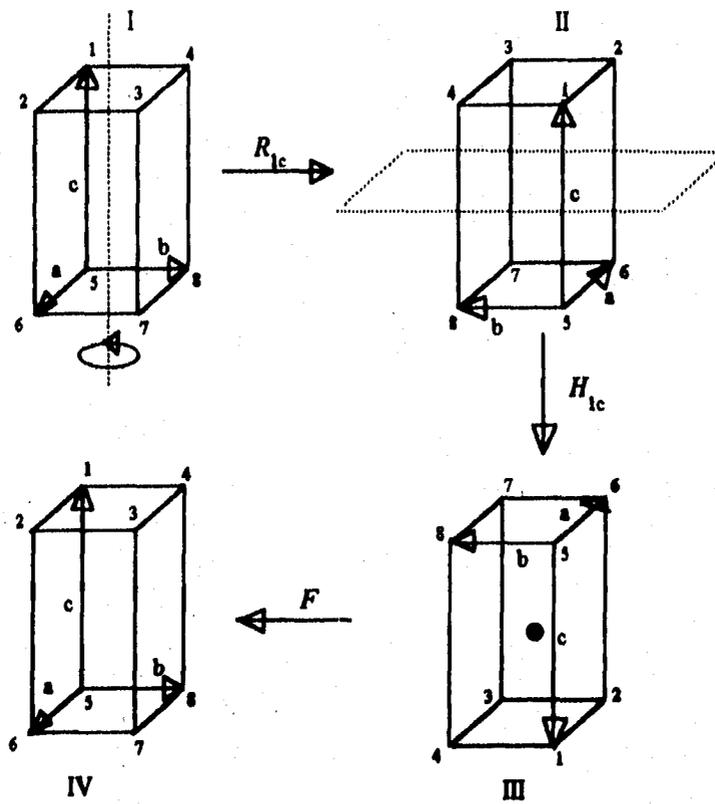
$$\bar{2} = \{ H_{1c}, id \}$$

Si nos preguntamos si hay algún o algunos otros grupos puntuales que no impongan nuevas condiciones sobre el sistema de ejes y ángulos del sistema cristalino monoclinico, vemos claramente que si se añaden otras 2

rotaciones  $2C_2$  tendríamos las condiciones necesarias del sistema ortorrómbico. Sin embargo, podemos añadir una rotación impropia  $2S_2$  que en términos de operaciones de simetría simples la podemos definir como una rotación  $2C_2$  seguida de una operación  $H_2$ . Ahora, solo para el caso particular de la rotación impropia de orden 2 esta es equivalente a la inversión a través de un centro. Esto lo podemos ejemplificar comparando las operaciones de simetría entre un cubo y una estructura monoclinica. Para el cubo las rotaciones sobre el eje con dirección equivalente al eje "c" del sistema monoclinico son rotaciones de orden 4. En la siguiente figura se aplica al cubo una de estas rotaciones seguida de la reflexión correspondiente así:



y vemos que la estructura IV no es la misma que la identidad para un cubo con una simetría rotacional de orden 4. Para un sistema monoclinico tenemos las siguientes operaciones mostradas gráficamente como sigue:

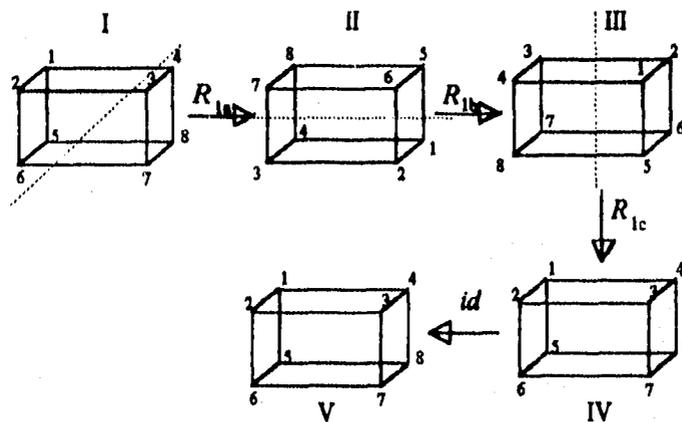


Y vemos que al aplicar las operaciones que definen al grupo  $2\bar{2}$  obtenemos que la estructura I es equivalente a la estructura IV. Además, la estructura III equivale a haber realizado una sola operación de inversión sobre la estructura I y tenemos que aplicar otra inversión sobre la estructura III para obtener la estructura original.

Entonces encontramos otro grupo puntual de rotación-reflexión de orden 2 simbolizado por  $2\bar{2}$  y definido como un grupo puntual de orden 4 así:  $2\bar{2} = \{R_x, H_x, F, id\}$ .

### Sistema Ortorrómbico

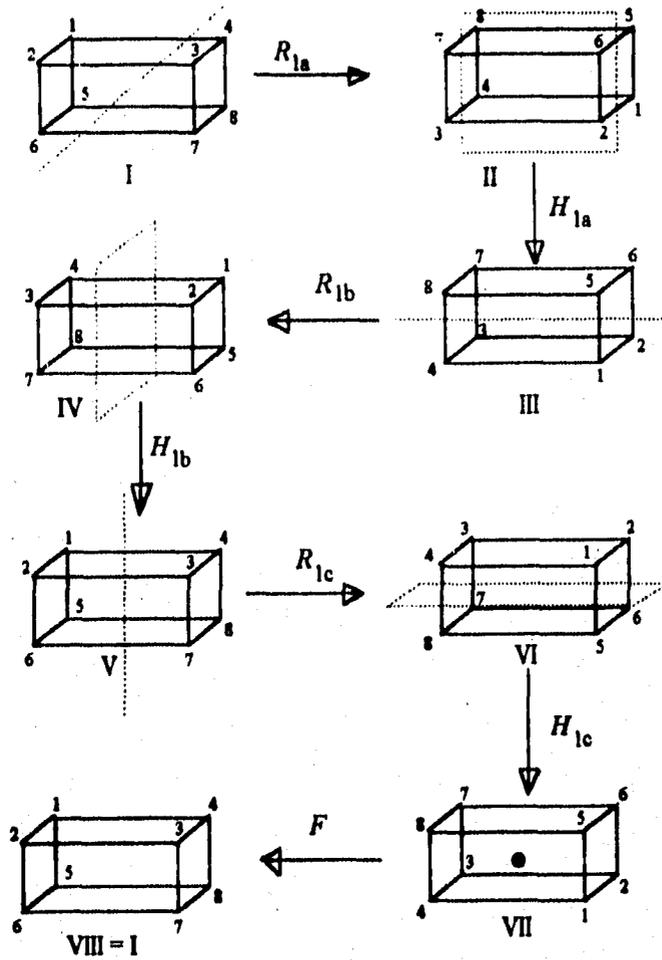
Como se vio anteriormente las características de este sistema cristalino surgen de dos ejes de rotación de orden 2 y dos planos de reflexión aplicados a los ejes y ángulos de la celda unitaria. Con objeto de encontrar algún grupo puntual de este sistema salta a la vista inmediatamente aplicar las rotaciones  $2C_2$  sobre los ejes en las direcciones de a, b, y c obteniendo un grupo puntual de tres rotaciones de orden 2 o sea un grupo puntual 222. Este grupo de orden 4 se define así:  $222 = \{R_a, R_b, R_c, id\}$  Las operaciones de este grupo las podemos representar de la siguiente forma:



donde hemos utilizado la secuencia de ejes de rotación:  $a \rightarrow b \rightarrow c$  y también hemos desarrollado en borrador todas las secuencias posibles tales como:  $c \rightarrow a \rightarrow b$ ,  $b \rightarrow c \rightarrow a$ , etc obteniendo siempre el mismo resultado final para este grupo puntual  $\bar{2}22$ .

Dado lo anterior se viene a la mente un grupo definido por tres reflexiones sobre planos perpendiculares a los ejes  $a$ ,  $b$  y  $c$ , pero no es posible dado que al aplicar dichas reflexiones en cualquier orden sobre el sistema ortorrómbico nunca logramos obtener la identidad. Entonces ahora lo que tenemos que hacer es buscar combinaciones de operaciones de simetría. Una de tales combinaciones que nos es útil esta dada por una rotación  $2C_2$  seguida de dos reflexiones sobre los planos perpendiculares a los ejes  $a$  y  $b$ , es decir un grupo  $\bar{2}22$  definido como  $\bar{2}22 = \{ H_{1a}, H_{1b}, R_{1c}, id \}$  de orden 4.

La forma más sistemática de combinar rotaciones simples con reflexiones simples es empleando la rotación impropia y es posible obtener otro grupo puntual para este sistema cristalino mediante tres rotaciones impropias. Al aplicar tales operaciones llegamos a una estructura que al aplicarle una inversión nos lleva a la identidad y obtenemos un grupo ahora de orden 8 cuyos elementos son 3 rotaciones, 3 reflexiones, una inversión y la identidad. A este nuevo grupo lo definimos como  $\underline{222} = \{ R_{1a}, H_{1a}, R_{1b}, H_{1b}, R_{1c}, H_{1c}, F, id \}$ . Gráficamente las operaciones de este grupo puntual se muestran como sigue:



### Sistema Tetragonal

Este sistema al igual que el cúbico presentan las simetrías más altas con respecto a los demás sistemas cristalinos, por eso en estos sistemas se

obtienen más grupos puntuales que para los demás sistemas. Para el sistema tetragonal los ejes  $a$  y  $b$  tienen la misma magnitud al igual que sus respectivos ángulos interaxiales  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ . Para simplificar la obtención de los grupos cristalográficos puntuales del sistema tetragonal impondremos las condiciones  $a = b \neq c$  y  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$  lo que se puede representar físicamente como un prisma cuadrangular de base  $a \wedge b$ .

El primer grupo puntual de este sistema cristalino sin duda es el que surge de cuatro rotaciones sobre el eje  $c$ . Este grupo de orden 4 lo definiremos como  $4 = \{R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, id\}$ . También otro grupo puntual muy sencillo es el de cuatro rotaciones impropias que se definen como  $\underline{4} = \{S_{1c}, S_{2c}, S_{3c}, id\}$  de orden 4.

Las restantes operaciones que se pueden aplicar al sistema cristalino tetragonal resultan ser combinaciones apropiadas de reflexiones simples y rotaciones  $2C_2$  con las rotaciones  $2C_4$  y  $2S_4$ .

Por razones de espacio ya no desarrollaremos los restantes grupos puntuales del sistema tetragonal, pero los definiremos y enlistaremos a continuación incluyendo a los dos anteriores:

$$4 = \{R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, id\}$$

$$\underline{4} = \{S_{1c}, S_{2c}, S_{3c}, id\}$$

$$4\bar{4} = \{R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, F, S_{1c}, S_{2c}, H_{1c}, id\}$$

$$422 = \{R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, R_{1a}, R_{2a}, R_{1b}, R_{2b}, id\}$$

$\overline{422} = \{ R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, H_{1b}, H_{2b}, H_{1d}, H_{2d}, id \}$  donde  $H_{1d}$  es una reflexión sobre un plano diagonal que bisecta al ángulo formado entre los ejes a y b.

$$\underline{422} = \{ R_{1c}, R_{1a}, R_{2a}, H_{1d}, H_{2d}, S_{1c}, S_{2c}, id \}$$

$$\underline{422} = \{ R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, R_{1a}, R_{2a}, R_{1b}, R_{2b}, F, S_{1c}, S_{2c}, H_{1c}, H_{1b}, H_{2b} \}$$

### Sistema Trigonal (Romboédrico)

Para este sistema cristalino se requieren una operación 3 o una  $\bar{3}$ . De nuevo, podemos agregarle operaciones de simetría tal como lo hicimos para el sistema tetragonal obteniendo los siguientes grupos puntuales. Antes de eso hay que recordar que en el sistema cristalino romboédrico existe un eje adicional llamado el eje hexagonal y que los ejes a, b, y c se encuentran en el mismo plano. El eje hexagonal es perpendicular a dicho plano. En la notación de las ecuaciones de esos sistemas cristalinos emplearemos al subíndice "h" para indicar el eje hexagonal. Los grupos puntuales entonces son:

$$\bar{3} = \{ R_{1h}, R_{2h}, id \}$$

$$\underline{\bar{3}} = \{ R_{1h}, R_{2h}, F, S_{1h}, S_{2h}, id \}$$

$$32 = \{ R_{1h}, R_{2h}, R_{1a}, R_{1b}, R_{1c}, id \}$$

$$\bar{3}2 = \{ R_{1h}, R_{2h}, H_{1a}, H_{1b}, H_{1c}, id \}$$

$$\underline{\bar{3}}2 = \{ R_{1h}, R_{2h}, F, S_{1h}, S_{2h}, H_{1a}, H_{1b}, H_{1c}, id \}$$

## Sistema Hexagonal

Los grupos puntuales para el sistema cristalino hexagonal muy similares a los del sistema tetragonal son:

$$6 = \{ R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, R_{4c}, R_{5c}, id \}$$

$$\underline{6} = \{ R_{1a}, R_{2b}, H_{1c}, S_{1a}, S_{1b}, id \}$$

$$\overline{666} = \{ R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, R_{4c}, R_{5c}, F, S_{1d_1}, S_{1d_2}, S_{1a}, S_{1b}, H_{1c}, id \}$$

$$622 = \{ R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, R_{4c}, R_{5c}, R_{1a}, R_{1b}, R_{1a+b}, R_{1d_1}, R_{1d_2}, R_{1d_3}, id \}$$

$$622 = \{ R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, R_{4c}, R_{5c}, H_{1a}, H_{1b}, H_{1a+b}, H_{1d_1}, H_{1d_2}, H_{1d_3}, id \}$$

$$\overline{622} = \{ R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, R_{4c}, R_{5c}, H_{1c}, S_{1d_1}, S_{2d_2}, H_{1a}, H_{1b}, H_{1a+b}, id \}$$

$$\underline{622} = \{ R_{1c}, R_{2c}, R_{3c}, R_{4c}, R_{5c}, H_{1a}, H_{1b}, H_{1a+b}, H_{1d_1}, H_{1d_2}, H_{1d_3}, F, S_{1d_1}, S_{2d_2}, S_{1a}, S_{1b}, H_{1c}, H_{1a}, H_{1b}, H_{1a+b}, H_{1d_1}, H_{1d_2}, H_{1d_3}, id \}$$

## Sistema Cúbico

El sistema cristalino cúbico es un poco más difícil de tratar que los sistemas anteriores porque en él no existe un solo eje principal. El sistema cristalino se define por cuatro ejes de rotación de orden 3 todos formando ángulos iguales con cualquier otro ( $109^\circ 28'$ ). Lo que nosotros queremos ver es qué operaciones de simetría se le pueden añadir manteniendo la estructura del sistema cúbico. Los grupos puntuales de este sistema son:

$$23 = \{ R_{11}, R_{21}, R_{31}, R_{12}, R_{22}, R_{32}, R_{13}, R_{23}, R_{33}, R_{14}, R_{24}, id \}$$

para los siguientes grupos puntuales con el fin de abreviar las ecuaciones, escribiremos solo  $23$  en lugar de toda la ecuación anterior. Entonces los restantes grupos puntuales son:

$$\underline{23} = \{23, F, S_{11}, S_{21}, S_{12}, S_{22}, S_{13}, S_{23}, S_{14}, S_{24}, H_{1a}, H_{1b}, H_{1c}, id\}$$

para continuar simplificando las ecuaciones ya no escribiremos cada operación simple sino el número, tipo y orden de ellas así:

$$432 = \{23, 6C_2, 6C_4, id\} \text{ de orden } 24$$

$$\underline{43\bar{2}} = \{23, 6H_2, 6S_4, id\} \text{ de orden } 24$$

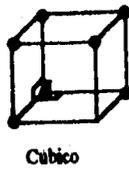
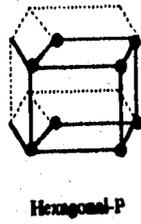
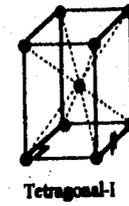
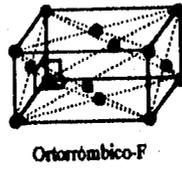
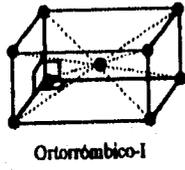
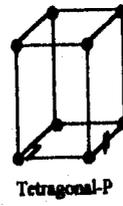
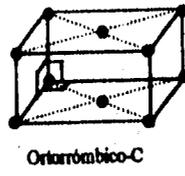
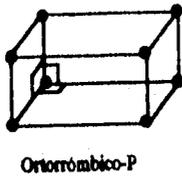
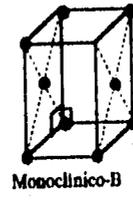
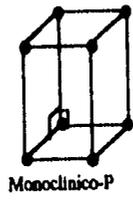
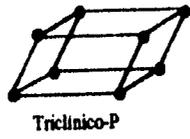
$$\underline{432} = \{23, 6C_2, 6C_4, F, 8S_6, 3H_1, 6H_2, 6S_4, id\} \text{ de orden } 48$$

## Las 14 Redes de Bravais

El objeto de esta sección es mostrar que solo hay 14 mallas distintas que llenan todo el espacio. Estas mallas se conocen ya sea como las 14 mallas espaciales o de más comúnmente como las 14 redes de Bravais.

Como se vio anteriormente existen siete sistemas cristalinos que combinados con la idea de mallas primitivas obtenemos un total de siete redes de Bravais. Aunque como las mallas hexagonal y trigonal son equivalentes en realidad son seis. Estas mallas a las que denominamos de tipo "P", definen las celdas unitarias primitivas en cada caso.

Las 14 redes de Bravais



Las otras ocho redes de Bravais surgen al tomar cada una de las seis redes primitivas, o bien, redes P y pensar en ¿ qué ocurre cuando otros puntos de la malla se añaden en ciertos lugares, a lo que conocemos como "centrado"? Al realizar lo anterior obtenemos ocho mallas de las cuales siete de ellas pueden ser centradas en el cuerpo, centradas en todas las caras ó centradas solo en una cara denominadas respectivamente como I, F, y, A, B, o C. La octava malla es una malla nueva llamada romboédrica P, que como vimos anteriormente es un caso particular del sistema trigonal.

La razón de ser, así como las características propias de cada malla se pueden demostrar de la misma forma en que lo hicimos para cada sistema cristalino. Hacer esto rebasa los límites de este trabajo. Creemos que solo es necesario conocer de forma muy general cada una de estas mallas para entender a los grupos espaciales. Las 14 redes o mallas de Bravais se muestran a continuación.

## Los 230 Grupos Espaciales

Un cristal se puede describir en diferentes niveles de detalle según se requiera. A este cristal le podemos asignar un grupo cristalino o más aún una red de Bravais. Si queremos profundizar más, nos debemos preguntar a qué grupo de los 32 grupos puntuales pertenece nuestro cristal. Ya hemos tratado con la simetría con respecto a un punto fijo en el cristal y con la simetría del espacio o de las redes de Bravais. Con objeto de describir completamente al cristal debemos de combinar esos dos aspectos y también

con las operaciones helicoidales y de deslizamiento. Esto significa que debemos estudiar a los grupos espaciales. Un grupo espacial es un conjunto de operaciones de simetría que transforma a un cristal u objeto simétrico periódico en el mismo. El grupo de operaciones que forman al grupo espacial deben formar un grupo en el sentido matemático; y ciertamente debe de incluir las operaciones de translación primitiva de la malla, así como otras operaciones de simetría.

Como vimos en el capítulo anterior las operaciones helicoidales y de deslizamiento que involucran una translación menor que la primitiva pero combinadas con la rotación y reflexión. Estas operaciones determinan una importante clasificación de los grupos espaciales, esto es, los grupos espaciales "*simórficos y asimórficos*". Un grupo espacial simórfico es aquél que queda totalmente definido por operaciones de simetría que actúan sobre un punto en común y no involucran ni operaciones helicoidales, ni de deslizamiento. Cuando es necesario especificar un grupo espacial con por lo menos una operación helicoidal o de deslizamiento, decimos que se trata de un grupo espacial asimórfico. El método de obtención de los 230 grupos espaciales es la misma forma que como lo hicimos para los 32 grupos puntuales salvo que involucrando siempre a la translación primitiva o a la operaciones helicoidales y de deslizamiento. El análisis de esos grupos espaciales también se hará sistema por sistema cristalino, aunque al principio profundizaremos más y daremos ejemplos para una buena asimilación de los conceptos. Gradualmente iremos reduciendo el desarrollo detallado de los grupos espaciales.

## Sistema de notación

Este sistema de notación para los 230 grupos espaciales sigue los lineamientos anteriores, solo ahora hay que especificar un poco más.

La notación para cada operación de simetría es la misma, solo que ahora agregamos la translación. Esta la escribimos como  $t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}$  lo que significa la translación en la dirección del respectivo eje en sus dos sentidos.

La simbología de cada grupo espacial proviene del respectivo grupo puntual y se añade una letra que indica la red de Bravais a la que pertenece el grupo espacial. Se añaden también algunos subíndices que significan rotaciones helicoidales. Para señalar las operaciones de deslizamiento se emplean letras que indican el eje sobre el cual se realiza dicha operación. La letra "d" significa un eje diagonal. Así por ejemplo en el grupo espacial  $P4_122 = \{n( r_{1c}, R_{1a}, R_{1b}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, id )\}$  P indica que el grupo espacial tiene una red de Bravais primitiva, el 4 indica un eje de rotación de orden cuatro al igual que el 2 indica ejes de rotación de orden 2.

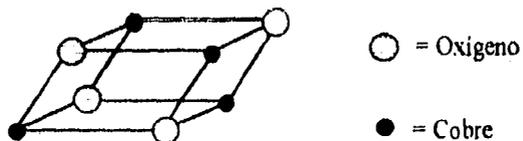
Consecuentemente vemos que el grupo espacial pertenece al sistema cristalino tetragonal. El subíndice 1 indica una rotación helicoidal. n indica un número "n" de veces que se realizan las operaciones para llenar el espacio.

## Sistema triclinico

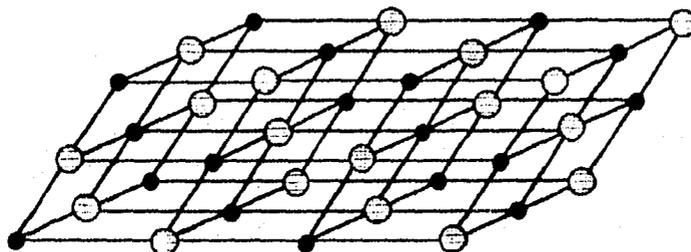
Ya hemos visto que para este sistema cristalino solo existe una red espacial, la red primitiva  $P$ . Además también sabemos que este sistema solo posee los dos grupos puntuales  $1$  y  $1F$  y que las rotaciones de orden mayor a 1 no existen; lo que implica que no se pueden aplicar rotaciones helicoidales ni reflexiones de deslizamiento.

Con las premisas anteriores y según la mecánica expuesta anteriormente para obtener grupos espaciales nos damos cuenta que solo hay dos grupos espaciales debido a que solo hay dos grupos puntuales que se pueden combinar con la operación de translación primitiva. Sabemos que para realizar tal combinación necesitamos tomar un objeto, compuesto o cristal que tengan la simetría del respectivo grupo puntual en cuestión y asociarlo con cada punto de la red espacial obteniendo la estructura cristalina. Para que los conceptos sean más claros, en medida de lo posible ilustraremos a los grupos espaciales con ejemplos de materiales que pertenecen al grupo espacial en cuestión.

Para obtener nuestro primer grupo espacial enfoquémonos en una de las formas cristalinas del óxido cúprico ( $\text{CuO}$ ) que cristaliza en forma triclinica llamada tenorita (otro ejemplo de óxido cúprico cristalino es la paramelaconita que cristaliza en forma cúbica). La celda unitaria de la tenorita tiene la siguiente estructura:

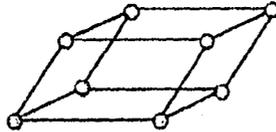


Esta estructura tiene la simetría del grupo puntual  $1$  porque solo se le puede aplicar la identidad o su equivalente grupo  $2C_1$ . Para obtener el grupo espacial tenemos que asociar la celda unitaria de la tenorita con los puntos de la red espacial. esto se vería de la siguiente forma:

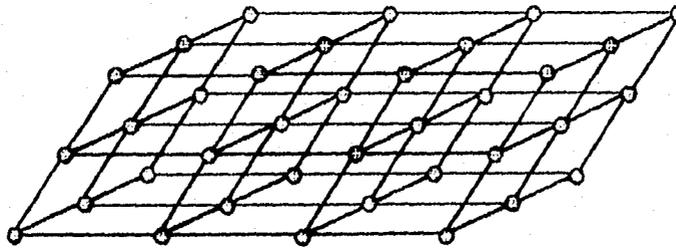


donde vemos claramente que aparece la simetría translacional primitiva, aunque de una forma alterna porque se alternan en cualquier dirección tanto los átomos de cobre y oxígeno. Además se puede notar que cada punto de la estructura cristalina posee la misma simetría del grupo  $1$ . Entonces este es el grupo espacial  $P1$  de naturaleza simórfica y se define como  $P1 = \{n(id, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c})\}$  de orden 3. La ecuación anterior significa que tomamos al objeto de simetría  $P1$  le aplicamos la identidad y la translación un número "n" de veces a lo largo de las direcciones  $\pm a$ ,  $\pm b$  y  $\pm c$ ; y la magnitud de "n" es de la misma magnitud del eje de la celda unitaria sobre el cuál se aplica la translación.

El otro grupo puntual del sistema triclínico también da lugar a otro grupo espacial. Para ilustrar esto pensemos en un elemento metálico hipotético que cristalizara en forma triclínica - porque no sabemos de alguno conocido que cristalice de tal forma - cuya celda unitaria tuviese la siguiente estructura:



Tal estructura cumple con la simetría del grupo  $1\bar{1}$  porque acepta un centro de inversión. Entonces el grupo espacial correspondiente surge de localizar una de estas estructuras en cada punto de la red espacial obteniéndose la siguiente estructura cristalina:



Donde también se hace presente la simetría translacional primitiva sin ser alterna. A este grupo espacial lo llamamos  $P1\bar{1}$  definido como:

$$PIF = \{n(id, F, t_{x_2}, t_{x_3}, t_{x_4})\}$$

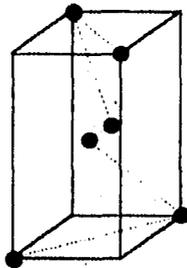
### Sistema monoclinico

En el sistema monoclinico existen dos redes espaciales, P y B (primer tipo) o C (segundo tipo). Como para este sistema se permiten las rotaciones de orden 2 se le pueden aplicar por lo tanto operaciones helicoidales y de deslizamiento (operaciones asimórficas). Para encontrar los 13 grupos espaciales del sistema monoclinico lo haremos aplicando operaciones simórficas y asimórficas según sea posible a cada grupo puntual de este sistema cristalino.

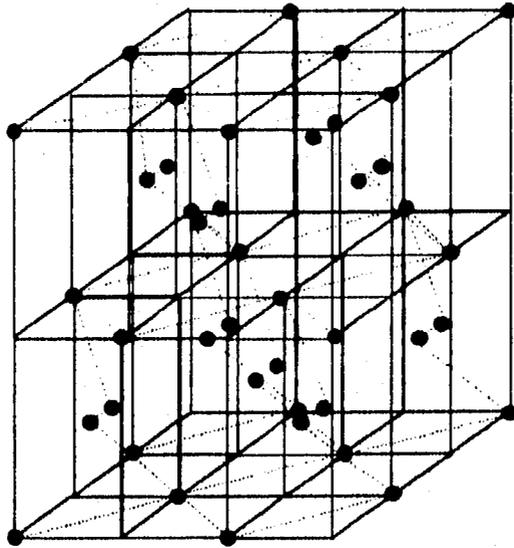
Tanto algunos de los grupos espaciales del sistema monoclinico y otros grupos espaciales los continuaremos ejemplificando con materiales hipotéticos por dos razones. Primera, apenas estamos aprendiendo a obtener grupos espaciales y es necesario hacerlo con objetos simples para una buena asimilación de los conceptos. Segunda, La mayoría de los compuestos que adoptan forma cristalina por lo general tienen una composición o disposición espacial compleja, aunque conforme analicemos grupos espaciales más complejos necesariamente tendremos que analizar tales compuestos.

### Grupo puntual 2

Este grupo puntual tiene tres grupos espaciales. El primero de ellos o bien el tercer grupo espacial se obtiene localizando a un objeto de simetría monoclinica y que solo acepte dos operaciones de rotación de orden 2. Considérese entonces a un elemento hipotético no metálico "L" que formara cadenas  $L_2$  y cristalizara de manera monoclinica cuya estructura fuera la siguiente:



en la que no hay que pensar que los átomos en el centro están sobre las caras como fuera en una red tipo B, sino que están casi en el centro de la celda unitaria. Usamos este ejemplo también para ilustrar que una estructura cristalina dada todos los átomos o grupos de átomos tienen que coincidir por fuerza con los puntos de la red espacial, de hecho las líneas punteadas en la figura representan los enlaces entre los átomos de L y no las líneas sólidas, aunque hay ocasiones en que si coinciden todos los átomos o grupos de ellos con todos los puntos de la red y también las líneas entre los puntos de la red con las direcciones de los enlaces como en los ejemplos del sistema triclinico. Vemos también que no se pueden aplicar planos de reflexión, solo ejes de rotación de orden 2. La estructura cristalina de este material se vería así:

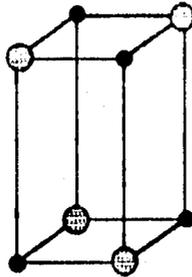


Y así obtenemos el grupo espacial denominado P2 definido como:

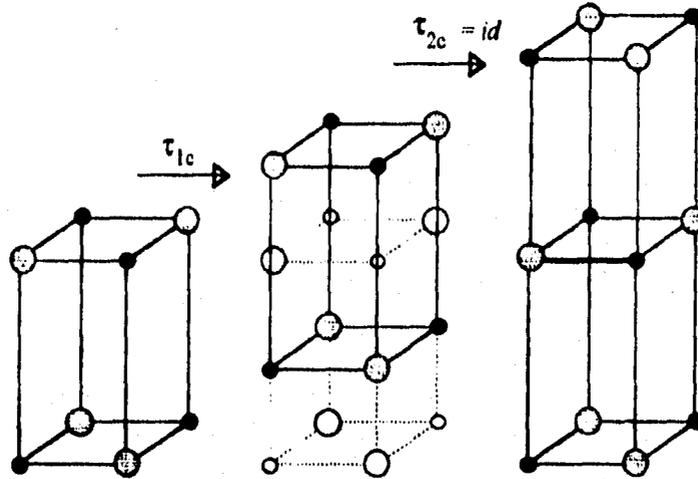
$$P2 = \{ n(R_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id) \}$$

Aunque no tenemos información sobre la existencia de este cristal ni idea de que patrón de difracción produciría creemos que es muy buen ejercicio plantear este tipo de estructuras hipotéticas. De hecho la búsqueda de materiales con estructura cuasicristalina surgió de plantear modelos hipotéticos de tales cristales, comenzó la búsqueda y no fué infructuosa, ya que ahora se conocen muchas aleaciones, por ejemplo, que presentan estructura cuasicristalina.

Ahora buscaremos un grupo espacial asimorfo de este grupo puntual. Para ello pensemos en un objeto o material al que se le puedan aplicar operaciones helicoidales, es decir combinaciones de rotación con translación y tenga la siguiente estructura:



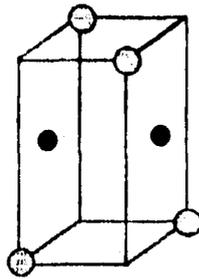
Este sistema acepta dos operaciones helicoidales sobre un eje paralelo al eje c. Cada una de estas operaciones rotará a la celda unitaria un ángulo de  $180^\circ = 2\pi/2$  y la trasladará sobre la dirección del eje c la mitad de la altura de la celda. Mediante translación primitiva en las otras dos direcciones es posible completar la estructura cristalina del material. Lo anterior da lugar al cuarto grupo espacial llamado  $P2_1$ . Las operaciones helicoidales las podemos visualizar como se mostrará a continuación, pero antes es muy importante aclarar que las operaciones helicoidales se aplican sobre la celda unitaria y una vez hecho esto asignamos los correspondientes átomos o grupos de ellos según la estructura del material en cuestión. Explicamos esto porque la simetría translacional primitiva con respecto a sus átomos que presentan la mayoría de los materiales es alternada pero con respecto a los puntos y ejes que definen a la celda unitaria es translacional continua. Las operaciones se pueden entonces representar así:



y la definición de este grupo espacial es la siguiente:

$$P2_1 = \{ n( \tau_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

El siguiente grupo espacial que se nos viene a la mente ahora es análogo al grupo espacial P2 pero con una red monoclinica B. Para obtenerlo pensemos ahora en un compuesto iónico de composición  $ML_2$  con la siguiente estructura de celda unitaria :



○ = L = anión

● = M = catión

En esa celda unitaria también podemos observar que solamente se aceptan ejes de rotación, ningún otro elemento de simetría salvo la identidad se le puede aplicar. La estructura cristalina que produce la translación de esta celda unitaria es fácil de imaginar, dibujar o visualizar. De tal manera se obtiene el quinto grupo espacial llamado B2 y definido por el siguiente grupo de operaciones:

$$B2 = \{ n(R_{1c}, t_{xa}, t_{xb}, t_{xc}, id) \}$$

y el equivalente grupo al rotar sobre el eje b (segundo tipo) es :

$$C2 = \{ n(R_{1b}, t_{xa}, t_{xb}, t_{xc}, id) \}$$

Es muy importante tener presente que tanto el grupo espacial P2 como el B2 o C2 son grupos espaciales simórficos.

### Grupo puntual $\bar{2}$

Ahora vamos a estudiar los grupos espaciales provenientes del grupo puntual  $\bar{2}$  del sistema monoclinico. Los grupos espaciales de este grupo

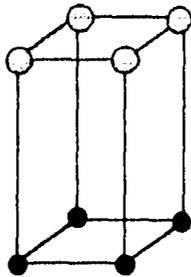
puntual en esencia provienen de las operaciones simórficas y asimórficas de reflexión sobre un plano perpendicular al eje c. Estos grupos espaciales son los grupos espaciales sexto, séptimo, octavo y noveno de los 230 grupos espaciales; y obviamente involucran tanto a la red P y B del sistema cristalino monoclinico.

El sexto grupo espacial es muy simple, solo consiste en las correspondientes operaciones de reflexión sobre un plano perpendicular al eje c en un objeto que tenga la simetría de la celda unitaria de la red espacial P del sistema monoclinico y luego trasladar la celda unitaria un número "n" de veces en las direcciones de  $\pm a$ ,  $\pm b$  y  $\pm c$ . Este grupo espacial simórfico se conoce como el grupo  $P\bar{2}$  que se define mediante la ecuación:

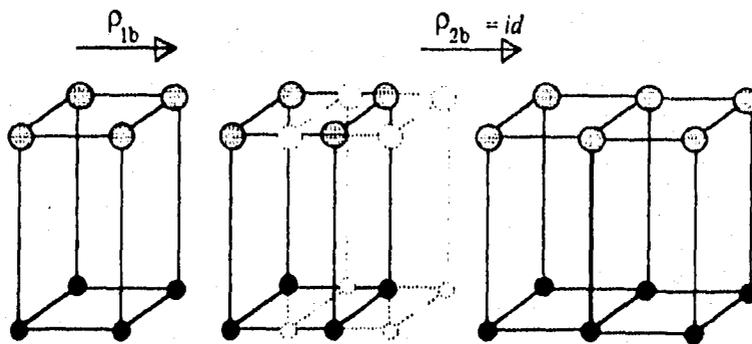
$$P\bar{2} = \{ n(H_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$$

El séptimo grupo espacial es un grupo que involucra operaciones de deslizamiento que para ilustrarlas mejor analizaremos más a fondo al séptimo grupo espacial de naturaleza asimórfica. Las operaciones de deslizamiento involucradas en este grupo espacial se llevan a cabo sobre un plano de reflexión perpendicular al eje b y junto con las operaciones de translación primitiva damos lugar a la estructura cristalina de este grupo espacial.

Bien, consideremos a un material cuya celda unitaria sea la siguiente:



al aplicarle la operación de deslizamiento veriamos lo siguiente:



y el grupo espacial asimórfico queda definido así:

$$Pb = \{n(\rho_b, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

El octavo grupo espacial es un grupo espacial simórfico similar al sexto grupo espacial salvo que en el octavo tratamos con una red espacial monoclinica B o C. Entonces las ecuaciones de este grupo espacial son:

$$B\bar{2} = \{ n(H_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$$

y

$$C\bar{2} = \{ n(H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$$

El noveno grupo espacial y último del grupo puntual  $\bar{2}$  es asimórfico y muy análogo al séptimo, pero sobre una red espacial B o C. Las ecuaciones del noveno grupo espacial son:

$$Bb = \{ n(\rho_b, t_{2a}, t_{2c}, id) \}$$

y

$$Cb = \{ n(\rho_c, t_{2a}, t_{2b}, id) \}$$

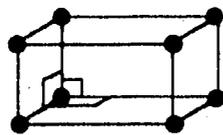
### Grupo puntual 2

Este grupo puntual del sistema cristalino monoclinico da lugar a los grupos espaciales del 10 al 15. De estos solo los grupos décimo y décimo segundo son grupos espaciales simórficos, los demás son asimórficos. La mecánica para obtener los grupos espaciales de este grupo puntual es la misma que para los dos anteriores. Como las operaciones de este grupo puntual son rotaciones impropias, es decir aplicar una rotación seguida de una reflexión, para obtener los respectivos grupos espaciales asimórficos al efectuar una rotación impropia esta consistirá en una rotación helicoidal seguida de una reflexión simple; una rotación simple seguida de una reflexión de deslizamiento o una rotación helicoidal seguida de una reflexión de deslizamiento. Entonces los grupos espaciales del décimo al decimoquinto son :

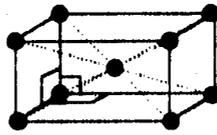
Décimo	$P_{\underline{2}} = \{ n( S_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$
Decimoprimer	$P_{\underline{2}1} = \{ n( r_{1c}, H_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$
Decimosegundo	$B_{\underline{2}} = \{ n( S_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$
	$C_{\underline{2}} = \{ n( S_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$
Decimotercero	$P_{\underline{2}b} = \{ n( R_{1c}, \rho_{1b}, t_{2a}, t_{2c}, id ) \}$
Decimocuarto	$P_{\underline{2}1b} = \{ n( r_{1c}, \rho_{1b}, t_{2a}, id ) \}$
Decimoquinto	$B_{\underline{2}b} = \{ n( R_{1c}, \rho_{1b}, t_{2a}, t_{2c}, id ) \}$
	$C_{\underline{2}b} = \{ n( R_{1b}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$

## Sistema ortorrómbico

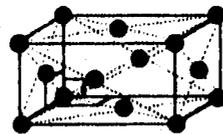
Para este sistema cristalino existen cuatro redes espaciales P, I, F, y C, A o B. Como se muestran a continuación:



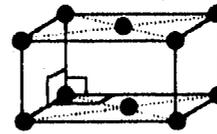
ortorrómbico-P



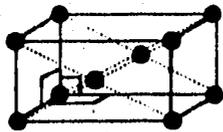
ortorrómbico-I



ortorrómbico-F



ortorrómbico-C



ortorrómbico-A



ortorrómbico-B

y para obtener los respectivos grupos espaciales lo haremos grupo por grupo puntual tal como lo hicimos para el sistema monoclinico. Para este

sistema cristalino cuya simetría es menos restringida que la de los dos sistemas anteriores no presentaremos ejemplos e ilustraciones. El no dar ejemplos de materiales ya sea reales o hipotéticos para el sistema ortorrómbico estriba tanto en la gran cantidad de grupos espaciales (68) que hay para este sistema cristalino; y porque pensamos que de los siete sistemas cristalinos y sus respectivas redes espaciales por su geometría y simetría el sistema cristalino ortorrómbico es el más fácil de comprender y mentalmente de visualizar. Además a estas alturas ya se han estudiado en detalle estructuras de grupos espaciales de los sistemas triclinico y monoclinico. De hecho en los sistemas tetragonal y cubico presentaremos ejemplos de algunos materiales "reales" que caen en determinados grupos espaciales de esos sistemas cristalinos.

### Grupo puntual 222

El 16<sup>vo</sup> grupo espacial es simórfico y muy fácil de comprender, se trata de una celda unitaria ortorrómbica primitiva que se rota sobre tres ejes  $C_2$  y se traslada en las tres direcciones del espacio (y sus respectivos sentidos) para dar lugar a la estructura cristalina. Este grupo espacial se define como:

$$P222 = \{ n( R_{1a}, R_{1b}, R_{1c}, t_{1a}, t_{1b}, t_{1c}, id ) \}$$

El 17<sup>vo</sup> grupo espacial es asimórfico y difiere del anterior en que se lleva a cabo una rotación helicoidal sobre el eje  $c$ . Este grupo espacial se define como

$$P222_1 = \{n(R_{1a}, R_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

Los grupos espaciales  $18^{avo}$ ,  $19^{avo}$  y  $20^{avo}$ , también asimórficos se definen respectivamente así:

$$P2_2, 2_2 = \{n(\tau_{1a}, \tau_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, id)\}$$

$$P2_2, 2_1 = \{n(\tau_{1a}, \tau_{1b}, \tau_{1c}, id)\}$$

$$C222_1 = \{n(R_{1a}, R_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

Los grupos espaciales del  $21^{avo}$  al  $23^{avo}$  son simórficos y se define de la siguiente forma:

$$C222 = \{n(R_{1a}, R_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$F222 = \{n(R_{1a}, R_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$I222 = \{n(R_{1a}, R_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

El  $24^{avo}$  y último grupo espacial del grupo puntual 222 del sistema ortorrómbico es de naturaleza asimórfica es igual que el grupo espacial número 19 salvo que este es para una red espacial I, es decir:

$$I2_2, 2_1 = \{n(\tau_{1a}, \tau_{1b}, \tau_{1c}, id)\}$$

El lector se ha podido dar cuenta de que algunos grupos espaciales son equivalentes en sus operaciones que los conforman y definen salvo que son para otras redes espaciales de un mismo sistema cristalino.

### Grupo puntual $\overline{222}$

Los grupos espaciales de este grupo puntual son:

$$25^{\text{vo}} \overline{P222} = \{n(H_{1a}, H_{1b}, R_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$$

$$26^{\text{vo}} \overline{P2c2}_1 = \{n(H_{1a}, \rho_{1c}, \tau_{1c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

$$27^{\text{vo}} Pcc2 = \{n(\rho_{1c}, \rho_{2c}, R_{1c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

$$28^{\text{vo}} \overline{P2a2} = \{n(H_{1a}, \rho_{1a}, R_{1c}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$$

$$29^{\text{vo}} Pca2_1 = \{n(\rho_{1c}, \rho_{1a}, \tau_{1c}, t_{zb}, id)\}$$

$$30^{\text{vo}} Pnc2 = \{n(\rho_{1d_1}, \rho_{1c}, R_{1c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

donde  $d_1$  implica que la reflexión se lleva a cabo sobre un plano perpendicular a una diagonal en la celda unitaria.

$$31^{\text{vo}} \overline{P2n2}_1 = \{n(H_{1a}, \rho_{1d_1}, \tau_{1c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

$$32^{\text{vo}} Pba2 = \{n(\rho_{1b}, \rho_{1a}, R_{1c}, t_{zc}, id)\}$$

$$33^{\text{vo}} Pna2_1 = \{n(\rho_{1d_1}, \rho_{1a}, \tau_{1c}, t_{zb}, id)\}$$

$$34^{vo} \text{ Pnn}2 = \{n(\rho_{1a}, \rho_{1b}, R_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$35^{vo} \text{ C}\bar{2}22 = \{n(H_{1a}, H_{1b}, R_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$36^{vo} \text{ C}\bar{2}c2_1 = \{n(H_{1a}, \rho_{1c}, \tau_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, id)\}$$

$$37^{vo} \text{ Ccc}2 = \{n(\rho_{1c}, \rho_{2c}, R_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, id)\}$$

$$38^{vo} \text{ A}\bar{2}22 = \{n(H_{1c}, H_{1b}, R_{1a}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$39^{vo} \text{ Ab}\bar{2}2 = \{n(\rho_{1b}, H_{1c}, R_{1a}, t_{\pm a}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$40^{vo} \text{ A}\bar{2}a2 = \{n(H_{1c}, \rho_{1a}, R_{1a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$41^{vo} \text{ Ab}a2 = \{n(\rho_{1b}, \rho_{1a}, R_{1c}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$42^{vo} \text{ F}\bar{2}22 = \{n(H_{1a}, H_{1b}, R_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$43^{vo} \text{ F}\bar{2}22 = \{n(R_{1a}, H_{1a}, R_{1b}, H_{2b}, R_{1c}, F, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$44^{vo} \text{ I}\bar{2}22 = \{n(H_{1a}, H_{1b}, R_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$45^{vo} \text{ Iba}2 = \{n(\rho_{1b}, \rho_{1a}, R_{1c}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$46^{vo} \text{ I}\bar{2}a2 = \{n(H_{1a}, \rho_{1a}, R_{1c}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

Grupo puntual 222

Los grupos espaciales de este grupo puntual son:

$$47^{\text{vo}} \text{ P222} = \{n(S_{1a}, S_{1b}, S_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$48^{\text{vo}} \text{ Pnnn} = \{n(R_{1a}, \rho_{1a}, R_{1b}, \rho_{1b}, R_{1c}, \rho_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$49^{\text{vo}} \text{ Pcc2} = \{n(R_{1c}, \rho_{1c}, R_{2c}, \rho_{2c}, R_{1c}, H_{1c}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$50^{\text{vo}} \text{ Pban} = \{n(R_{1b}, \rho_{1b}, R_{1a}, \rho_{1a}, R_{1d}, H_{1d}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$51^{\text{vo}} \text{ P22a} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, R_{1c}, H_{1c}, R_{1a}, \rho_{1a}, t_{\pm b}, id)\}$$

$$52^{\text{vo}} \text{ Pnna} = \{n(R_{1d}, H_{1d}, R_{1d}, H_{1d}, R_{1a}, \rho_{1a}, id)\}$$

$$53^{\text{vo}} \text{ P2na} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1d}, H_{1d}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, t_{\pm b}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$54^{\text{vo}} \text{ Pcca} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, R_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, t_{\pm b}, id)\}$$

$$55^{\text{vo}} \text{ Pba2} = \{n(\tau_{1b}, \rho_{1b}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, R_{1c}, H_{1c}, t_{\pm c}, id)\}$$

$$56^{\text{vo}} \text{ Pccn} = \{n(\tau_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1c}, \rho_{1c}, R_{1a}, H_{1a}, t_{\pm a}, t_{\pm b}, id)\}$$

$$57^{\text{vo}} \text{ Pbc2} = \{n(\tau_{1b}, \rho_{1b}, \tau_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1c}, H_{1c}, t_{\pm a}, id)\}$$

- 58<sup>avo</sup>  $\underline{Pnn2} = \{n(\tau_{1d}, \rho_{1d}, \tau_{1d}, \rho_{1d}, R_c, H_c, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$
- 59<sup>avo</sup>  $\underline{P22n} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, \tau_{2c}, H_{2c}, R_{1c}, H_{1d}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$
- 60<sup>avo</sup>  $\underline{Pbcn} = \{n(\tau_{1b}, \rho_{1b}, R_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1c}, H_{1d}, t_{za}, id)\}$
- 61<sup>avo</sup>  $\underline{Pbca} = \{n(\tau_{1b}, \rho_{1b}, \tau_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, id)\}$
- 62<sup>avo</sup>  $\underline{Pn2a} = \{n(\tau_{1b}, \rho_{1d}, \tau_{1c}, H_{1c}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, id)\}$
- 63<sup>avo</sup>  $\underline{C2c2} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1c}, H_{1c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$
- 64<sup>avo</sup>  $\underline{C2ca} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, t_{zb}, id)\}$
- 65<sup>avo</sup>  $\underline{C222} = \{n(S_{1a}, S_{1b}, S_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$
- 66<sup>avo</sup>  $\underline{Ccc2} = \{n(R_{1c}, \rho_{1d}, R_{2c}, \rho_{2d}, R_{1c}, H_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$
- 67<sup>avo</sup>  $\underline{C22a} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, R_{1c}, H_{1c}, R_{1a}, \rho_{1a}, t_{zb}, id)\}$
- 68<sup>avo</sup>  $\underline{Ccca} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, R_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, t_{zb}, id)\}$
- 69<sup>avo</sup>  $\underline{F222} = \{n(S_{1a}, S_{1b}, S_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$
- 70<sup>avo</sup>  $\underline{Fddd} = \{R_{1a}, \rho_{1d}, R_{1b}, \rho_{1d}, R_{1c}, \rho_{1d}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id\}$
- 71<sup>avo</sup>  $\underline{I222} = \{n(S_{1a}, S_{1b}, S_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$

$$72^{avo} \underline{Iba2} = \{n(\tau_{1b}, \rho_{1b}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, R_{1c}, H_{1c}, t_{1c}, id)\}$$

$$73^{avo} \underline{Ibca} = \{n(\tau_{1b}, \rho_{1b}, \tau_{1c}, \rho_{1c}, \tau_{1a}, \rho_{1a}, id)\}$$

$$74^{avo} \underline{I22a} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, R_{1c}, H_{1c}, R_{1a}, \rho_{1a}, t_{1b}, id)\}$$

## Sistema tetragonal

Para este sistema cristalino hay siete grupos puntuales y dos redes de Bravais. P e I. Combinando estos siete grupos puntuales con las dos redes de Bravais y tomando en cuenta a las operaciones asimórficas, encontramos que hay 68 grupos espaciales tetragonales.

### Grupo puntual 4

Para este grupo puntual sus grupos espaciales son:

$$75^{\text{vo}} P4 = (R_{4c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)$$

$$76^{\text{vo}} P4_1 = (r_{4c}, t_{2a}, t_{2b}, id)$$

$$77^{\text{vo}} P4_2 = (r_{4c}, r_{4b}, t_{2b}, id)$$

$$78^{\text{vo}} P4_3 = (r_{4c}, r_{4a}, r_{4b}, id)$$

$$79^{\text{vo}} I4 = (R_{4c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)$$

$$80^{\text{vo}} I4_1 = (r_{4c}, t_{2a}, t_{2b}, id)$$

### Grupo puntual 4

Este grupo puntual solo tiene los dos siguientes grupos espaciales.

$$81^{\text{vo}} \underline{P4} = \{ S_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id \}$$

$$82^{\text{vo}} \underline{I4} = \{ S_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id \}$$

### Grupo puntual 444

Los grupos espaciales de este grupo puntual son:

$$83^{\text{vo}} \overline{P4} = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$$

$$84^{\text{vo}} \overline{P4}_2 = \{ n(\tau_{1a}, \tau_{1b}, H_{1c}, t_{2c}, id) \}$$

$$85^{\text{vo}} \overline{P4}_a = \{ n(R_{1c}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$$

$$86^{\text{vo}} \overline{P4}_{2a} = \{ n(\tau_{1a}, \tau_{1b}, \rho_{1d}, t_{2c}, id) \}$$

$$87^{\text{vo}} \overline{I4} = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$$

$$88^{\text{vo}} \overline{I4}_{1a} = \{ n(\tau_{1c}, \rho_{1a}, t_{2b}, id) \}$$

### Grupo puntual 422

Los grupos espaciales de este grupo puntual son:

$$89^{\text{vo}} \overline{P422} = \{ n(R_{1c}, R_{1a}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$$

$$90^{\text{vo}} \overline{P42}_1 = \{ n(R_{1c}, \tau_{1a}, R_{1b}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$$

$$91^{\text{vo}} \text{ P4}_1 22 = \{ n( \tau_{1c}, R_{1a}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$92^{\text{vo}} \text{ P4}_1 2_1 2_1 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{1a}, \tau_{1b}, id ) \}$$

$$93^{\text{vo}} \text{ P4}_2 22 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, R_{1a}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$94^{\text{vo}} \text{ P4}_2 2_1 2 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{1a}, R_{1b}, t_{2b}, id ) \}$$

$$95^{\text{vo}} \text{ P4}_3 22 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, R_{1a}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$96^{\text{vo}} \text{ P4}_3 2_1 2 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, \tau_{1a}, R_{1b}, t_{2b}, id ) \}$$

$$97^{\text{vo}} \text{ I4} 22 = \{ n( R_{1c}, R_{1a}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$$

$$98^{\text{vo}} \text{ I4}_1 22 = \{ n( \tau_{1c}, R_{1a}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

### Grupo puntual $\overline{422}$

Los grupos espaciales de este grupo puntual son:

$$99^{\text{vo}} \text{ P}\overline{4}22 = \{ n( R_{1c}, H_{1a}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$$

$$100.- \text{ P4b}\overline{2} = \{ n( R_{1c}, H_{1a}, \rho_{1b}, t_{2a}, t_{2c}, id ) \}$$

$$101.- \text{ P4}_2 \overline{c2} = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, H_{1a}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$102.- P4_2 n\bar{2} = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, H_{1a}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$103.- P4cc = \{ n( R_{1c}, \rho_{1c}, \rho_{2c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$104.- P4nc = \{ n( R_{1c}, \rho_{1d}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$105.- P4_2 \bar{2}c = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, H_{1a}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$106.- P4_2 bc = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \rho_{1b}, \rho_{1c}, t_{2a}, id ) \}$$

$$107.- I4\bar{2}\bar{2} = \{ n( R_{1c}, H_{1a}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$$

$$108.- I4c\bar{2} = \{ n( R_{1c}, \rho_{1c}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$109.- I4_2 \bar{2}d = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, H_{1a}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$110.- I4_1 cd = \{ n( \tau_{1c}, \rho_{1c}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

Grupo puntual 422

$$111.- P4\bar{2}\bar{4} = \{ n( S_{1c}, R_{1b}, H_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$$

$$112.- P4_2 c = \{ n( S_{1c}, R_{1b}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$113.- P4\bar{2}_1 \bar{4} = \{ n( S_{1c}, \tau_{1b}, H_{1c}, t_{2a}, t_{2c}, id ) \}$$

$$114.- P4\bar{2}_1 c = \{ n( S_{1c}, \tau_{1b}, \rho_{1c}, t_{2a}, id ) \}$$

$$115.- \text{P}\underline{4}\bar{2}2 = \{n(S_{1c}, H_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$116.- \text{P}\underline{4}c2 = \{n(S_{1c}, \rho_{1c}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$117.- \text{P}\underline{4}b2 = \{n(S_{1c}, \rho_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

$$118.- \text{P}\underline{4}c2 = \{n(S_{1c}, \rho_{1d}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$119.- \text{I}\underline{4}\bar{2}2 = \{n(S_{1c}, H_{1b}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$120.- \text{I}\underline{4}c2 = \{n(S_{1c}, \rho_{1c}, R_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$121.- \text{I}\underline{4}2\bar{4} = \{n(S_{1c}, R_{1b}, H_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$122.- \text{I}\underline{4}2d = \{n(S_{1c}, R_{1b}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

**Grupo puntual 422**

$$123.- \text{P}\underline{4}22 = \{n(S_{1c}, S_{1b}, S_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$124.- \text{P}\underline{4}cc = \{n(S_{1c}, R_{1c}, \rho_{1c}, R_{2c}, \rho_{2c}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$125.- \text{P}\underline{4}_n b2 = \{n(R_{1c}, \rho_{1d}, R_{1b}, \rho_{1b}, R_{1a}, H_{1a}, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

$$126.- \text{P}\underline{4}_n 2_n c = \{n(R_{1c}, \rho_{1d}, R_{1b}, \rho_{1b}, R_{1a}, \rho_{1a}, t_{2c}, id)\}$$

$$127.- \text{P4b2} = \{n(S_{1c}, \tau_{1b}, \rho_{1b}, S_{1a}, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

$$128.- \text{P4nc} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, \tau_{1c}, \rho_{1d}, R_{1c}, \rho_{2c}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$129.- \text{P4}_{n22} = \{n(R_{1c}, \rho_{1d}, \tau_{1b}, H_{1b}, R_{1a}, H_{1a}, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

$$130.- \text{P4}_{ncc} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, \tau_{1b}, \rho_{1b}, R_{1a}, \rho_{1a}, t_{2c}, id)\}$$

$$131.- \text{P4}_{2c} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, \tau_{2c}, H_{2c}, R_{1b}, H_{1b}, R_{1c}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$132.- \text{P4}_{c2} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, \tau_{2c}, H_{2c}, R_{1c}, \rho_{1c}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$133.- \text{P4}_{2nbc} = \{n(\tau_{1c}, H_{1d}, \tau_{2c}, H_{2d}, R_{1b}, \rho_{1b}, R_{1c}, \rho_{1c}, id)\}$$

$$134.- \text{P4}_{2n2} = \{n(\tau_{1c}, H_{1d}, \tau_{2c}, H_{2d}, R_{1b}, \rho_{1d}, R_{1a}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$135.- \text{P4}_{2bc} = \{n(\tau_{1c}, H_{1d}, \tau_{2c}, H_{2d}, \tau_{1b}, \rho_{1b}, R_{1a}, \rho_{1c}, t_{2a}, id)\}$$

$$136.- \text{P4}_{n2} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, \tau_{2c}, H_{2c}, \tau_{1b}, \rho_{1d}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, id)\}$$

$$137.- \text{P4}_{2n2c} = \{n(\tau_{1c}, H_{1d}, \tau_{2c}, H_{2d}, \tau_{1b}, H_{1b}, R_{1a}, \rho_{1c}, t_{2a}, id)\}$$

$$138.- \text{P4}_{2nc2} = \{n(\tau_{1c}, H_{1d}, \tau_{2c}, H_{2d}, \tau_{1c}, \rho_{1c}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$139.- \text{I422} = \{n(S_{1c}, S_{1b}, S_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$140.- \text{I4c2} = \{n(\tau_{1c}, H_{1c}, R_{1c}, \rho_{1c}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$141.- \underline{I4_{2a}2d} = \{n(\tau_{1c}, H_{1a}, \tau_{2c}, H_{2a}, R_{1b}, H_{1b}, R_{1a}, \rho_{d_a}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$142.- \underline{I4_{2a}cd} = \{n(\tau_{1c}, H_{1a}, \tau_{2c}, H_{2a}, R_{1c}, H_{1c}, R_{1a}, \rho_{d_a}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

### Sistema Trigonal

Como se vio anteriormente algunos sistemas trigonales se pueden describir por medio de un celda romboédrica. Para este sistema cristalino hay dos redes de Bravais, la primitiva y la romboédrica denotadas como P y R respectivamente. También hay cinco grupos puntuales que nos llevan a 35 grupos espaciales trigonales.

#### Grupo puntual 3

Los grupos espaciales de este grupo puntual son:

$$143.- P3 = \{ n(R_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id) \}$$

$$144.- P3_1 = \{ n(\tau_{1c}, t_{za}, t_{zb}, id) \}$$

$$145.- P3_2 = \{ n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, t_{za}, t_{zb}, id) \}$$

$$146.- R3 = \{ n(R_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id) \}$$

#### Grupo puntual 3

$$147.- P\bar{3} = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id) \}$$

$$148.- R\bar{3} = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id) \}$$

Grupo puntual 32

$$149.- P312 = \{n(R_{1c}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$150.- P321 = \{n(R_{1c}, R_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$151.- P3_{1,12} = \{n(\tau_{1c}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$152.- P3_{1,21} = \{n(\tau_{1c}, R_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$153.- P3_212 = \{n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$154.- P3_221 = \{n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, R_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$155.- R32 = \{n(R_{1c}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

Grupo puntual  $3\bar{2}$

$$156.- P3\bar{2}1 = \{n(R_{1c}, H_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$157.- P31\bar{2} = \{n(R_{1c}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$158.- P3c1 = \{n(R_{1c}, \rho_{1a}, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

$$159.- P31c = \{n(R_{1c}, \rho_{1b}, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

$$160.- R3\bar{2} = \{n(R_c, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$161.- R3c = \{n(R_{1c}, \rho_{1b}, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

Grupo puntual 32

$$162.- P3\bar{1}2 = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$163.- P3\bar{1}c = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1b}, \rho_{1b}, t_{2a}, t_{2c}, id)\}$$

$$164.- P3\bar{2}1 = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$165.- P3c\bar{1} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1b}, \rho_{1a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$166.- P3\bar{2} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$167.- P3c = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1a}, \rho_{1a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

## Sistema hexagonal

Los sistemas espaciales hexagonales son muy similares a los tetragonales. Para este sistema cristalino solo existe la red P. También tiene siete grupos puntuales y como consecuencia de ello 27 grupos espaciales.

### Grupo puntual 6

$$168.- P6 = \{n(R_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$$

$$169.- P6_1 = \{n(\tau_{1c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

$$170.- P6_3 = \{n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, \tau_{4c}, \tau_{5c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

$$171.- P6_2 = \{n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

$$172.- P6_4 = \{n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, \tau_{4c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

$$173.- P6_5 = \{n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, t_{za}, t_{zb}, id)\}$$

### Grupo puntual 6

$$174.- P6 = \{n(H_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id)\}$$

Grupo puntual  $\overline{666}$

175.-  $P\overline{6} = \{ n( R_{1c}, H_{1c}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id ) \}$

176.-  $P\overline{6}_3 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, H_{1c}, t_{za}, t_{zb}, id ) \}$

Grupo puntual 622

177.-  $P622 = \{ n( R_{1c}, R_{1b}, R_{1a}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id ) \}$

178.-  $P6,22 = \{ n( \tau_{1c}, R_{1b}, R_{1a}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id ) \}$

179.-  $P6_3,22 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, \tau_{4c}, \tau_{5c}, R_{1b}, R_{1a}, t_{za}, t_{zb}, id ) \}$

180.-  $P6_2,22 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, R_{1b}, R_{1a}, t_{za}, t_{zb}, id ) \}$

181.-  $P6_4,22 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, \tau_{4c}, R_{1b}, R_{1a}, t_{za}, t_{zb}, id ) \}$

182.-  $P6_3,22 = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, R_{1b}, R_{1a}, t_{za}, t_{zb}, id ) \}$

Grupo puntual  $\overline{622}$

183.-  $P\overline{622} = \{ n( R_{1c}, H_{1b}, H_{1a}, t_{za}, t_{zb}, t_{zc}, id ) \}$

184.-  $P6cc = \{ n( R_{1c}, \rho_{1c}, \rho_{2c}, t_{za}, t_{zb}, id ) \}$

$$185.- P6_3c\bar{2} = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_3, \rho_{1c}, R_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$186.- P6_2\bar{2}c = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, R_{1b}, \rho_{1a}, t_{2b}, id ) \}$$

Grupo puntual  $\bar{6}22$

$$187.- P\bar{6}22 = \{ n( R_{1c}, H_{1c}, H_{1b}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$$

$$188.- P6c2 = \{ n( R_{1c}, H_{1c}, \rho_{1c}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$$

$$189.- P\bar{6}2\bar{2} = \{ n( R_{1c}, H_{1c}, H_{1a}, R_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$$

$$190.- P6_2c = \{ n( R_{1c}, H_{1c}, H_{1a}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

Grupo puntual  $622$

$$191.- P\bar{6}22 = \{ n( R_{1c}, H_{1c}, R_{1b}, H_{1c}, R_{1a}, H_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id ) \}$$

$$192.- P\bar{6}cc = \{ n( R_{1c}, H_{1c}, R_{1b}, \rho_{1b}, R_{1a}, \rho_{1a}, t_{2c}, id ) \}$$

$$193.- P6_3c\bar{2} = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_3, R_{1c}, \rho_{1c}, R_{1a}, H_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

$$194.- P6_2\bar{2}c = \{ n( \tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_3, R_{1b}, H_{1b}, R_{1a}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id ) \}$$

### Sistema cúbico

En el sistema cristalino cúbico existen tres redes de Bravais, P, F, e I, y cinco grupos puntuales quienes combinados con los elementos asimórficos se obtienen 36 grupos espaciales cúbicos.

#### Grupo puntual 23

$$195.- P23 = \{n(R_{1c}, R_{11}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$196.- I23 = \{n(R_{1c}, R_{11}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$197.- F23 = \{n(R_{1c}, R_{11}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$198.- P2_13 = \{n(\tau_{1c}, R_{11}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$199.- I2_13 = \{n(\tau_{1c}, R_{11}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

#### Grupo puntual 23

$$200.- P\bar{2}3 = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{11}, H_{11}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$201.- Pn\bar{3} = \{n(R_{1c}, \rho_{1c}, R_{11}, H_{11}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$202.- F\bar{2}3 = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{11}, H_{11}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$203.- \underline{F2_d}3 = \{n(R_{1a}, \rho_{1d}, R_{1c}, H_{1a}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$204.- \underline{123} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{11}, H_{11}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$205.- \underline{Pa}3 = \{n(\tau_{1c}, \rho_{1c}, R_{11}, H_{11}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$206.- \underline{Ia}3 = \{n(\tau_{1c}, \rho_{1c}, R_{11}, H_{11}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

Grupo puntual 432

$$207.- \underline{P4}32 = \{n(R_{1c}, R_{11}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$208.- \underline{P4_2}32 = \{n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, R_{11}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$209.- \underline{F4}32 = \{n(R_{1c}, R_{11}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$210.- \underline{F4_1}32 = \{n(\tau_{1c}, R_{11}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$211.- \underline{I4}32 = \{n(R_{1c}, R_{11}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id)\}$$

$$212.- \underline{P4_3}32 = \{n(\tau_{1c}, \tau_{2c}, \tau_{3c}, R_{11}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$213.- \underline{P4_1}32 = \{n(\tau_{1c}, R_{11}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

$$214.- \underline{I4_1}32 = \{n(\tau_{1c}, R_{11}, R_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, id)\}$$

Grupo puntual 432

215.-  $P43\bar{2} = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

216.-  $F43\bar{2} = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

217.-  $I43\bar{2} = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

218.-  $P43n = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

219.-  $F43c = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, \rho_{1c}, t_{2a}, t_{2b}, id) \}$

220.-  $I43d = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, id) \}$

Grupo puntual 432

221.-  $P432 = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, H_{1l}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

222.-  $P4_n 3n = \{ n(R_{1c}, H_{1d}, R_{1l}, H_{1l}, R_{1b}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

223.-  $P43n = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, H_{1l}, R_{1b}, \rho_{1d}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

224.-  $P4_n 32 = \{ n(R_{1c}, \rho_{1d}, R_{1l}, H_{1l}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

225.-  $F432 = \{ n(R_{1c}, H_{1c}, R_{1l}, H_{1l}, R_{1b}, H_{1b}, t_{2a}, t_{2b}, t_{2c}, id) \}$

$$226.- \underline{F43c} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{11}, H_{11}, R_{1b}, \rho_{1c}, t_{1a}, t_{1b}, id)\}$$

$$227.- \underline{F4_d32} = \{n(R_{1c}, \rho_{1d}, R_{11}, H_{11}, R_{1b}, H_{1c}, t_{1a}, t_{1b}, t_{1c}, id)\}$$

$$228.- \underline{F4_d3c} = \{n(R_{1c}, \rho_{1d}, R_{11}, H_{11}, R_{1b}, \rho_{1b}, t_{1a}, t_{1c}, id)\}$$

$$229.- \underline{1432} = \{n(R_{1c}, H_{1c}, R_{11}, H_{11}, R_{1b}, H_{1b}, t_{1a}, t_{1b}, t_{1c}, id)\}$$

$$230.- \underline{1a3d} = \{n(\rho_{1a}, \rho_{1b}, R_{1c}, H_{1c}, R_{1b}, \rho_{1d}, t_{1a}, t_{1c}, id)\}$$

## **Conclusiones**

**U**na vez terminado este trabajo solo nos resta pensar en sus implicaciones y aplicaciones, así como hacer un recuento del mismo.

Se han expuesto y analizado algunos conceptos del álgebra geométrica, las operaciones de simetría desde sus fundamentos así como el concepto de simetría. Se ha hecho una conjunción de las operaciones de simetría con el álgebra geométrica. Y lo más importante, se ha dado una aplicación de tal conjunción de conceptos a una rama clásica del estudio de la teoría del estado sólido. Esta aplicación resulta ser nueva, es decir una contribución al conocimiento, lo que es el objetivo primordial de realizar una tesis.

**L**o realizado en esta tesis abre el camino hacia la aplicación del álgebra geométrica al estudio de otras ramas del estudio de la teoría del estado sólido, dado que comienza desde el establecimiento de los primeros fundamentos de lo que es esta ciencia nueva, como puede ser el estudio de superconductores y cuasicristales por solo citar algunos ejemplos.

Las álgebras de Clifford a las cuales pertenece dicha álgebra geométrica tienen una aplicación casi ilimitada como se mencionó al principio. Actualmente se realizan congresos internacionales sobre esta materia donde acuden científicos del más alto nivel y se tratan los más diversos tópicos de aplicación de estas álgebras. También existen muchos artículos internacionales respecto a la aplicación de la álgebras de Clifford,

incluso nuestra Facultad tiene el orgullo de publicar una revista internacional sobre los avances en las aplicaciones de tales álgebras.

**R**egresando al punto central de esta tesis podemos decir que la aplicación del álgebra geométrica a la cristalografía simplifica en gran medida el estudio de la cristalografía en comparación con su método clásico de estudio. Por ejemplo, una simplificación es usar operadores en lugar de las clásicas matrices.

Además en esta tesis se han presentado absolutamente todos los grupos espaciales con sus respectivas operaciones de simetría y siempre con una exposición detallada con un lenguaje simple de los conceptos, lo que no hemos visto en los textos clásicos de este tema. También hemos hecho un énfasis especial en la representación gráfica de la mayoría de los conceptos presentados como es el caso de las operaciones de simetría y su significado físico, el desarrollo de algunos grupos puntuales y espaciales; así como conceptos de celda unitaria, malla, y estructura cristalina. Todo esto ha sido con el fin de una buena y clara asimilación de los conceptos dado que los seres humanos somos seres muy "visuales".

**E**n esta tesis siempre se tienen presentes los nuevos avances de la cristalografía y sus aplicaciones como es el caso de los cuasicristales sin pasar por alto los avances en la álgebras de Clifford aplicadas, ya que siempre los avances de esta tesis han sido supervisados por personas del más alto nivel en la materia.

Para terminar creemos que de esta tesis se pueden explotar muchas cosas, para incrementar el campo de estudio de la cristalografía.

## Referencias :

[1] *Space Groups for Solid State Scientists*. Gerald Burns, A.M. Glazer.  
Segunda Edición. Academic Press. 346 pp. 1990.

[2] *The Handedness of the Universe*. Roger A. Hegstrom , Dilip K.  
Kondepudi. *Scientific American* January 1990, pp 98-105

[3] *Principio y fin del Universo*. Cuarta parte: *La Simetría en la  
Naturaleza*. Christine Allen , Miguel A. Herrera. *Ciencia y Desarrollo*  
num. 84 Enero-Febrero 1989.

[4] *Fisicoquímica* P.W. Atkins. Addison Wesley. Tercera Edición.  
Oxford 1985.

[5] *L'algèbre vectorielle*. Gaston Casanova. Presses Universitaires de  
France. Primera Edición 1976.

[6] Clical, Software and User Manual. Pertti Lounesto, Risto Mikkola, Vesa Vierros. Helsinki University of Technology Institute of Mathematics, Research Reports. August 1987.

[7] Química Inorgánica. Principios de Estructura y reactividad. James E. Huheey. HARLA. 950 pp. Segunda Edición.

[8] G.E. Sobczyk, Noncommutative Extensions of Number : an Introduction to Clifford's Geometric Algebra. XXIV National Congress of the Mexican Mathematical Society. Oaxtepec, Morelos, Mexico November 1991.

[9] D. Hestenes, New Foundations for Classical Mechanics. D. Reidel Publ. Co., Dordrecht 1986.

[10] D. Hestenes and G. Sobczyk, Clifford Algebra to Geometric Calculus : A Unified Language for Mathematics and Physics. D. Reidel Publ. Co., Dordrecht, 1985.

[11] La Simetría Herman Weyl. Editorial Nueva Visión, Buenos Aires, 1958. 132 pp.

[12] Matemática de las simetrías discretas de la física. O.A. Sánchez Valenzuela. *Ciencia* (1991) **42**, pp 125-140.

[13] Fisicoquímica. Gilbert W. Castellan. Fondo Educativo Interamericano. Segunda Edición. Maryland University 1971. 836 pp.

[14] Física del estado sólido. P.V. Pavlov, A.F. Jojlov. Editorial Mir Moscú. U.R.S.S. 1985. 432 pp.

[15] Microclusters. Michael A. Duncan and Dennis H. Rouvray. *Scientific American*. December 1989, pp 60-65

[16] The Structure of Quasicrystals. Peter W. Stephens and Alan I. Goldman. *Scientific American*. April 1991, pp 24-31

[17] Escher's Metaphors. Doris Schattschneider. *Scientific American*.

November 1994, pp 48-53

[18] La teoría de grupos aplicada a la química. F. Albert Cotton. Ed.

Limusa. Primera Edición 1977. 452 pp.

[19] Compendio de Arte Prehispánico. Paul Gendrop. Ed. Trillas. Primera

Edición 1987. 202 pp.

[20] Group theory and quantum mechanics. Tinkham. Ed. Mc Graw Hill.

Primera Edición 1967. 320 pp.

[21] Solid State Physics. G. Burns. Ed. Academic Press N.Y. Primera

Edición 1985. 653 pp.

[22] Really, your lattices are all primitive, Mr. Bravais!. Sidney F. A.

Kettle. *Journal of Chemical Education*. December 1993, pp 959-963

[23] *Chemical Education and Spatial Ability*. Hans-Dieter Barke. *Journal of Chemical Education*. December 1993. pp 968-971.

[24] *Can introduction to a Pre-metric Electrodynamics*. Bernard Jancewicz. Apuntes. University of Wroclaw Poland. April 1994 72pp.