Bol. Soc. Geol. Mexicana, v. 31, n. 1, p. 1-10, 1968 (1970)

LOS ELEMENTOS DE SIMETRIA DE UN GRUPO ESPACIAL

Francisco J. Fabregat-Guinchard *

RESUMEN

Se presenta el procedimiento de Wondratschek y Neubüser para determinar los elementos de simetría de un grupo espacial a partir de las posiciones atómicas generales que comporta. Con él se pueden precisar la naturaleza y la posición, tanto de los operadores de orientación cuanto de los de posición.

INTRODUCCION

La red de espinela $MgAl_2O_4$ es cúbica de caras centradas. Contiene $Z = 8$, esto es, 8 moléculas por cada celda elemental. Su grupo espacial es *F d 3 m* (O_h^7 de Schönfliess), como se muestra en la Figura 1.

La representación de la estructura se esquematiza cual se ve en la Figura 2. En la parte izquierda se halla la dotación de simetría del grupo *F d 3 m* (Núm. 227 de las Tablas Internacionales); en la parte derecha su adaptación al caso de la estructura de la espinela. En esta representación se dibuja la proyección ortogonal de una celda elemental sobre su plano de base *x*, *y*, con las coordenadas propias de la posición de cada átomo (las de su centro) en representación gráfica, la altura a que están indícase mediante fracciones de la dimensión *z*, considerada ésta como unidad.

Tanto en este ejemplo de espinela cuanto en el caso general, las posibles posiciones de los puntos en una red espacial, se hallan restringidas por sus elementos de simetría. Unos de esos puntos están en posición general y otros en posiciones especiales por coincidir con alguna de las operaciones de simetría. Todos estos puntos posibles, representados por sus coordenadas *x*, *y*, *z* se hallan catalogados en las Tablas Internacionales, para cada uno de los grupos espaciales, y a ellos se han de ajustar las disposiciones atómicas de las estructuras que les correspondan, cual acontece en el ejemplo citado.

* *Investigador Titular de Tiempo Completo, Instituto de Geología, Universidad Nacional Autónoma de México.*

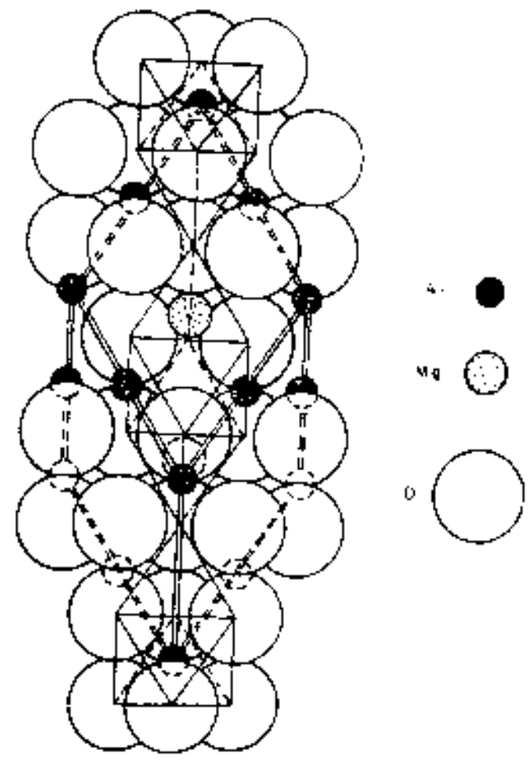

FIG. 1. Proyección de la estructura de espinela.

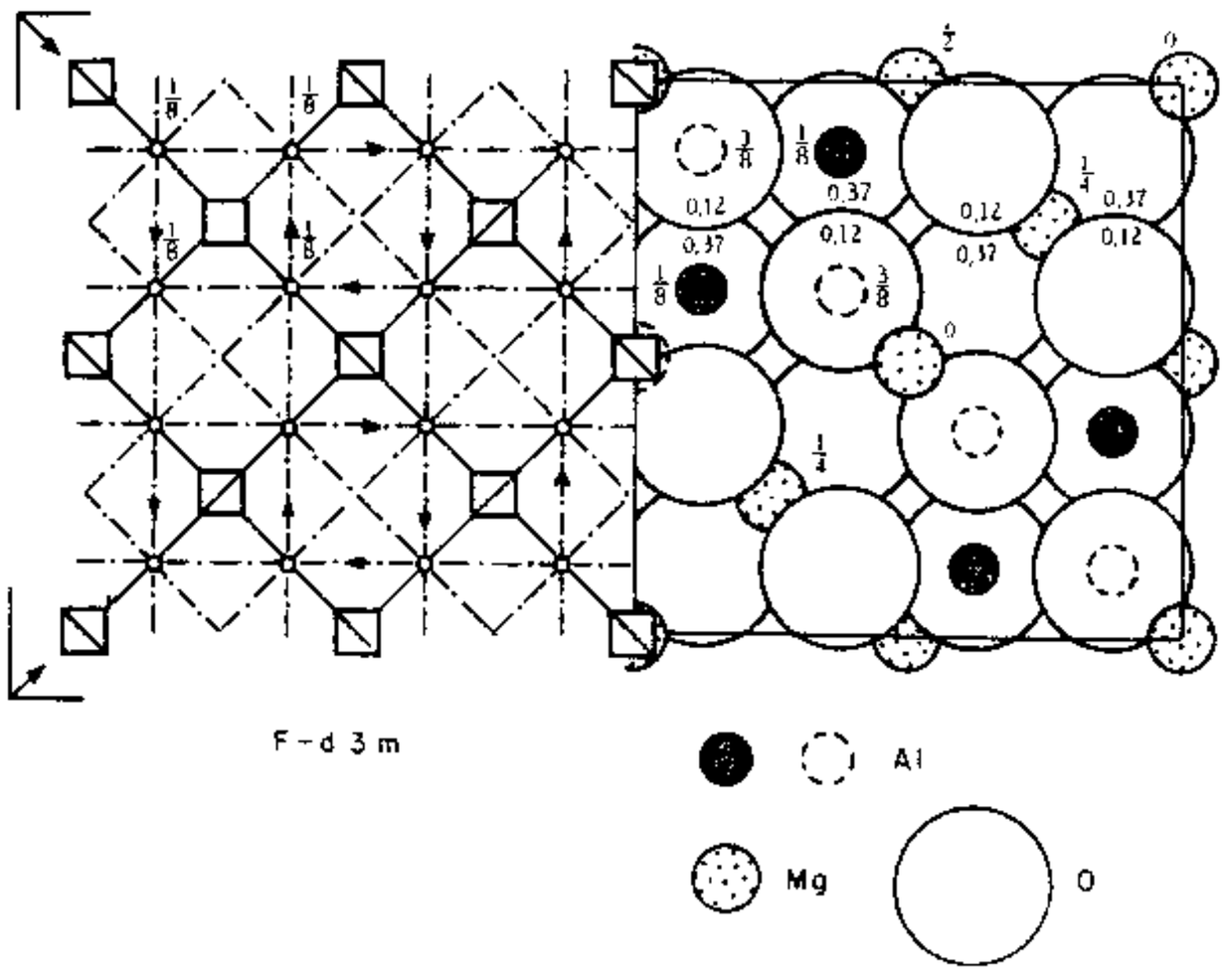

FIG. 2. Espinela. Grupo de simetría F-d3m (O_h^7 de Schoenfliess). Posiciones del O'' $(\frac{3}{8}\ \frac{3}{8}\ \frac{3}{8})$ y las 32 correspondientes por simetría. Posiciones Mg. (O O O) y las 8 posiciones correspondientes. Posiciones del Al. $(\frac{5}{8}\ \frac{5}{8}\ \frac{5}{8})$ y las 16 posiciones correspondientes.

Wondratschek y Neubüser (1967) indican un procedimiento basado en cálculos de algebra lineal para determinar los elementos de simetría de un grupo espacial, a partir de las posiciones atómicas generales, que aquí se pretende vulgarizar exponiéndolo paralelamente a un ejemplo.

PLANTEO DEL PROBLEMA

Las posiciones generales de x, y, z se dan en la forma siguiente:

$$x \rightarrow r_1 + a_{11}\,x + a_{12}\,y + a_{13}\,z$$

$$y \rightarrow r_2 + a_{21}\,x + a_{22}\,y + a_{23}\,z$$

$$z \rightarrow r_3 + a_{31}\,x + a_{32}\,y + a_{33}\,z$$

La matriz del elemento de simetría que repite al punto x, y, z es:

$$(M) = \left\| \begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & r_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & r_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & r_3 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right\| = (A, r)$$

DETERMINACION DEL ELEMENTO DE SIMETRIA PUNTUAL

Para determinar el elemento de simetría puntual F se prescinde de la componente de traslación, y se tienen en cuenta:

— la diagonal principal $\mathrm{diag}(A) = a_{11} + a_{22} + a_{33}$

— el valor del determinante $\det(A)$

Estos dos valores condicionan F en la tabla:

Diag(A)	3	−1	0	1	2	−3	1	0	−1	−2
Det(A)	1	1	1	1	1	−1	−1	−1	−1	−1
F	1	2	3	4	6	$\bar{1}$	m	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$

Según las Tablas Internacionales, (A) puede ser uno de los 4 tipos:

I.

$$(A) = \begin{Vmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{Vmatrix}$$

II.

$$\overset{a/}{(A)} = \begin{Vmatrix} \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & 0 \end{Vmatrix} \qquad \overset{b/}{(A)} = \begin{Vmatrix} 0 & 0 & \pm 1 \\ 0 & \pm 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 \end{Vmatrix} \qquad \overset{c/}{(A)} = \begin{Vmatrix} 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{Vmatrix}$$

III.

$$\overset{a/}{(A)} = \begin{Vmatrix} 0 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 0 \end{Vmatrix} \qquad \overset{b/}{(A)} = \begin{Vmatrix} 0 & \pm 1 & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \\ \pm 1 & 0 & 0 \end{Vmatrix}$$

IV.

$$(A) = \begin{Vmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{Vmatrix}$$

con uno de los $a_{ik} = 0$ (i, k = 1, 2) y los otros ± 1

DETERMINACION DEL ELEMENTO DE SIMETRIA ESPACIAL

Se indaga por la Tabla 1, a partir de los datos obtenidos.

Abreviaturas:

DIREC. — Dirección del eje o de la normal al plano de simetría.
VECT. — Componente de traslación (vector helicoidal o traslación del deslizamiento).
COOR. — Coordenadas de un punto del elemento de simetría.

TABLA 1.—Tabla para la determinación de simetría espacial.

Tipo de matriz	Elemento de simetría puntual, F.		
I	1		DIREC. — — VECT. — (r_1, r_2, r_3) COOR. — —
	$\bar{1}$		(centro) DIREC. — — VECT. — — COOR. — $(r_1/2, r_2/2, r_3/2)$
	2		(un $a_{ii} = +1$; los otros dos $a_{kk} = -1$ $(k \neq i)$ DIREC. — $a = q$, para $i = 1$ $b = q$, para $i = 2$ $c = q$, para $i = 3$ VECT. — $r_i q$ COOR. — $(r_1/2, r_2/2, r_3/2)$
	m		(dos $a_{ii} = +1$; el otro $a_{kk} = -1$ $(k \neq 1)$ DIREC. — a, para $k = 1$ b, para $k = 2$ c, para $k = 3$ VECT. — $\frac{1}{2}((1+a_{11})r_1 a + (1+a_{22})r_2 b + (1+a_{33})r_3 c)$ COOR. — $(r_1/2, r_2/2, r_3/2)$
II	2	a	DIREC. — $[b + a_{23} c] = q$ VECT. — $\frac{1}{2}(r_2 + a_{23} r_3)\ q$ COOR. — $\frac{1}{2}\ (r_1, 0, -a_{23}\ r_2 + r_3)$
		b	DIREC. — $[a_{31} a + c] = q$ VECT. — $\frac{1}{2}\ (r_3 + a_{31}\ r_1) = q$ COOR. — $\frac{1}{2}\ (-a_{31}\ r_3 + r_1, r_2, 0)$
		c	DIREC. — $[a + a_{12} b] = q$ VECT. — $\frac{1}{2}\ (r_1 + a_{12} r_2) = q$ COOR. — $\frac{1}{2}\ (0, -a_{12} r_1 + r_2, r_3)$

TABLA 1.—Tabla para la determinación de simetría espacial.
(continuación)

m	a	DIREC. —	$[0\ 1\ -a_{23}]$
		VECT. —	$\frac{1}{2}\ (r_2 + a_{23}r_3)\ (b + a_{23}c) + r_1 a$
		COOR. —	$\frac{1}{2}\ (0,\ 0,\ -a_{23}r_2 + r_3)$
	b	DIREC. —	$[-a_{31}\ 0\ 1)$
		VECT. —	$\frac{1}{2}(r_3 + a_{31}r_1)\ (c + a_{31}a) + r_2\ b$
		COOR. —	$\frac{1}{2}(-a_{31}r_3 + r_1,\ 0,\ 0)$
	c	DIREC. —	$[1\ -a_{12}\ 0]$
		VECT. —	$\frac{1}{2}\ (r_1 + a_{12}r_2)\ (a + a_{12}b) + r_3\ c$
		COOR. —	$\frac{1}{2}\ (0,\ -a_{12}r_1 + r_2,\ 0)$
4	a	DIREC. —	$[1\ 0\ 0]$
		VECT. —	$r_1 a$
		COOR. —	$\frac{1}{2}\ (0,\ r_2 + a_{23}r_3,\ a_{32}r_2 + r_3)$
	b	DIREC. —	$[0\ 1\ 0]$
		VECT. —	$r_2 b$
		COOR. —	$\frac{1}{2}\ (a_{13}r_3 + r_1,\ 0,\ r_3 + a_{31}r_1)$
	c	DIREC. —	$[0\ 0\ 1]$
		VECT. —	$r_3 c$
		COOR. —	$\frac{1}{2}\ (r_1 + a_{12}r_2,\ a_{21}r_1 + r_2,\ 0)$
	Si los productos en a/ $a_{32}r_1$, en b/ $a_{13}r_2$, en c/ $a_{21}r_3$ fuesen (con n entero):		
			$(4n + 1)/4$, el eje sería 4_1
			$(4n + 3)/4$, el eje sería 4_3
			$(4n + 2)/4$, el eje sería 4_2
$\bar{4}$	a	DIREC. —	$[1\ 0\ 0]$
		VECT. —	—
		COOR. —	$\frac{1}{2}\ (r_1,\ r_2 + a_{23}r_3,\ a_{32}r_2 + r_3)$
	b	DIREC. —	$[0\ 1\ 0]$
		VECT. —	—
		COOR. —	$\frac{1}{2}\ (a_{13}r_3 + r_1,\ r_2,\ r_3 + a_{31}r_1)$

TABLA 1.—Tabla para la determinación de simetría espacial.
(continuación)

		c	DIREC. — [O O 1] VECT. — — COOR. — $\frac{1}{2}(r_1 + a_{12}r_2, a_{21}r_1 + r_2, r_3)$
III	3	a	DIREC. — $a_{32}\,a + a_{13}\,b + a_{21}\,c = q$ VECT. — $\frac{1}{3}(a_{32}r_1 + a_{13}r_2 + a_{21}r_3)\,q$ Si el vector fuese (con n entero): $q(3n + 1)/3$, el eje sería 3_1 $q(3n + 2)/3$, el eje sería 3_2 COOR. — $\frac{1}{3}(r_1 - a_{21}r_2, r_2 - a_{32}r_3 - a_{13}r_1)$
		b	DIREC. — $a_{23}a + a_{31}\,b + a_{12}\,c = q$ VECT. — $\frac{1}{3}(a_{23}r_1 + a_{31}r_2 + a_{12}r_3)\,q$ Si el vector fuese (con n entero): $q(3n + 2)/3$, el eje sería 3_1 $q(3n + 1)/3$, el eje sería 3_2 COOR. — $\frac{1}{3}(r_1 - a_{31}r_3, r_2 - a_{12}r_1, r_3 - a_{23}r_2)$
	$\bar{3}$	a	DIREC. — $-[a_{32}, a_{13}, a_{21}]$ VECT. — — COOR. — $\frac{1}{2}(r_1 - a_{21}r_2 + a_{13}r_3, a_{21}r_1 + r^{r}$ $- a_{32}r_3, - a_{13}r_1, + a_{32}r_2 + r_3)$
		b	DIREC. — $-[a_{23}, a_{31}, a_{12}]$ VECT. — — COOR. — $\frac{1}{2}(r_1 + a_{12}r_2 - a_{31}r_3, - a_{12}r_1 + r_2$ $+ a_{23}r_3, a_{31}r_1 - a_{23}r_2 + r_3)$
IV	2		DIREC. — $(1 + a_{11} + a_{12})a + (1 + a_{22} + a_{21})b = q$ VECT. — $\frac{1}{2}((1 + a_{11} - a_{21})r_1 + (1 + a_{22} - a_{12})r_2)\,q$ COOR. — $r_1/2, r_2/2, r_3/2)$
	m		DIREC. — $1 + a_{22} - a_{12}, 1 + a_{11} - a_{21}, 0$ VECT. — $\frac{1}{2}(((1 + a_{11})r_1 + a_{12}r_2)a +$ $(a_{21}r_1 + (1 + a_{22})r_2)b + 2\,r_3\,c)$ COOR. — $r_1/2, r_2/2, 0$

TABLA 1.—Tabla para la determinación de simetría espacial.
(continuación)

3	DIREC. — [O O 1] VECT. — r_3c COOR. — $\frac{1}{3}[(1 - a_{22})r_1 + a_{12}r_2, a_{21}r_1 + (1 - a_{11})r_2, O]$ Si el producto $a_{21}r_3$ fuese (con n entero): $(3n + 1)/3$, se tendría un eje 3_1 $(3n + 2)/3$, se tendría un eje 3_2
6	DIREC. — [O O 1] VECT. — r_3c COOR. — $a_{11}r_1 + a_{12}r_2, a_{21}r_1 + a_{22}r_2, O$ Si el producto $a_{21}r_3$ fuese (con n entero): $(6n + 1)/6$, el eje sería 6_1 $(6n + 2)/6$, el eje sería 6_2 $(6n + 3)/6$, el eje sería 6_3 $(6n + 4)/6$, el eje sería 6_4 $(6n + 5)/6$, el eje sería 6_5
$\overline{3}$	DIREC. — [O O 1] VECT. — — COOR. — $a_{11}r_1 + a_{12}r_2, a_{21}r_1 + a_{22}r_2, r_3/2$
$\overline{6}$	DIREC. — [O O 1] VECT. — — COOR. — $\frac{1}{3}((1 - a_{22})r_1 + a_{12}r_2, a_{21}r_1 + (1 - a_{11})r_2, \frac{3}{2} r_3)$

EJEMPLO

PLANTEO DEL PROBLEMA.—Uno cualesquiera de los puntos en posición general del grupo espacial $P6_122$ (Núm. 178 de las Tablas Internacionales, p. 285) es $y - x, y, \frac{1}{2} - z$.

$$O\, r_1 + a_{11}\,(-x) + a_{12}\,(+y) + a_{13}\,(O)$$

$$O\, r_2 + a_{21}\,(O) + a_{22}\,(+y) + a_{23}\,(O)$$

$$\frac{1}{2}\, r_3 + a_{31}\,(O) + a_{32}\,(O) + a_{33}\,(-z)$$

La matriz del operador de simetría a que está sometido es

$$(A,r) = \left\| \begin{array}{ccc|c} -a_{11} & +a_{12} & 0 & 0 \\ 0 & +a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a_{33} & \frac{1}{2} r_s \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right\|$$

con $a_{11} = a_{33} = -1$

$a_{12} = a_{22} = +1$

$r_s = \frac{1}{2}$ como componente de traslación, y los demás términos 0.

DETERMINACIÓN DEL ELEMENTO DE SIMETRÍA PUNTUAL F.—Se calculan:

$$\det(A) = \left\| \begin{array}{ccc} -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{array} \right\| = +1$$

$$\mathrm{diag}(A) = (-1 + 1 - 1) = -1$$

El valor de F, según la Tabla 1, es

$$\begin{array}{ll} \mathrm{diag}(A) & = -1 \\ \det(A) & = +1 \\ \hline & F = \quad 2 \end{array}$$ eje binario de rotación

El tipo de matriz al que pertenece es el IV.

$$(A) = \left\| \begin{array}{ccc} -1 & +1 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{array} \right\|$$

EL ELEMENTO DE SIMETRÍA ESPACIAL, SEGÚN LA TABLA I.—Dirección del eje:

$$(1 - 1 + 1)a + (1 + 1 + 0)b = a + 2b = q$$

la dirección será la [1 2 0]

Vector helicoidal: $\frac{1}{2}\,((1\ -1\ -0)0 + (1\ +1\ -1)0)(a + 2b) = 0$

luego, el eje es binario de rotación.

El eje pasa por el punto: $< \frac{0}{2}, \frac{0}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} > = <0, 0, \frac{1}{4} >$

TRABAJOS CITADOS

WONDRATSCHECK, H. y NEUBÜSER, J., 1967, *Determination of the symmetry elements in a space group from the "General Positions" listed in International Tables for x-ray Crystalography, Vol. 1:* Acta Cryst., v. 23, p. 349-352.

THE INTERNATIONAL UNION OF CRYSTALLOGRAPHY, 1952, *International Tables for x-ray Crystalography:* Kyoch Press, Birmingham, v. I-III, pasim.