

Clase 8. Los grupos espaciales

The combination of all symmetry elements including the translation symmetry elements yields only 230 combinations.

These combinations are called "space groups".

The correct determination of the space group is absolutely necessary for the determination of the crystal structure.

Space groups	Symmetry elements
Centrosymmetric	Translation, rotational axis, mirror planes, center of inversion and combinations
Non-centrosymmetric	Translation, rotational axis, mirror planes and combinations
Chiral	Translation, rotational axis and combinations

Grupo Espacial

Definition: The complete set of translational and point symmetry elements in a crystal structure.

14 Bravais Lattices + 32 Point Groups = 73 space groups

Replace rotation axes with screw axes
and mirror planes with glide planes = 157 new space groups.

Total = 230 Grupos espaciales

permiten describir completamente el espacio tridimensional.

Existen sólo 230 formas de empaquetamiento cristalino

NOMENCLATURA

The symbol consists of a letter defining the Bravais lattice followed by a set of symbols, each describing the symmetry about a unique axis.

Example $P2_1/c$ P - indicates a monoclinic primitive lattice
 $2_1/c$ - indicates a 2_1 screw axis along b and a c -glide perpendicular to the b - axis.

The point group can be obtained by replacing the screw with a proper rotation and the c -glide with a mirror plane

$$2_1/c \equiv 2/m$$

Example $C mca$ shortened symbol for $C 2/m 2/c 2/a$
point group $2/m 2/m 2/m$ (mmm)

c -centered orthorhombic lattice

Mirror plane $\perp a$

c -glide $\perp b$

a -glide $\perp c$.

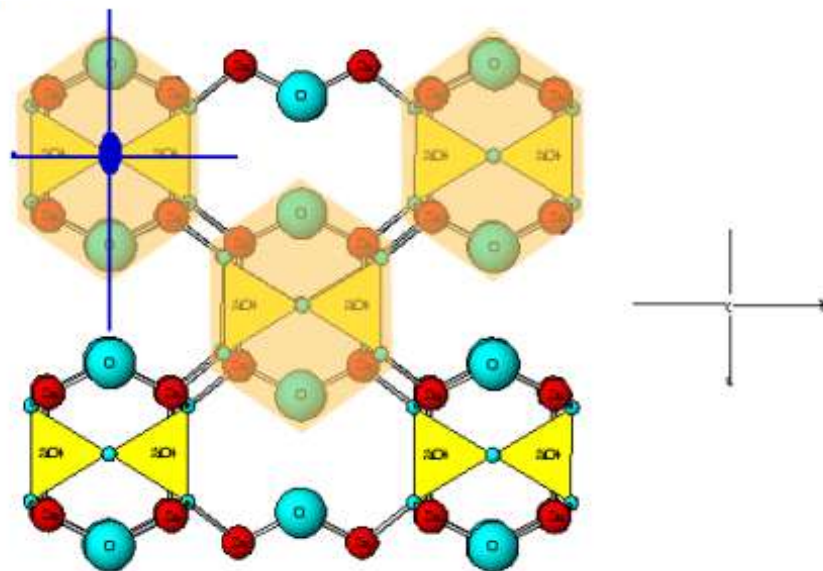
Obtención de los Grupos Espaciales

Los métodos para derivar los grupos espaciales pueden ser geométricos, combinatorios o de teoría de grupos.

En cualquier caso hay que tener en cuenta que:

1. Una red de Bravais es una disposición de puntos matemáticos que tienen posición pero no magnitud ni forma. Para cada sistema cristalino las posibles redes espaciales poseen la simetría del grupo puntual holoédrico.
2. La materia en estado cristalino está constituida por iones, átomos o moléculas, que se asocian con cada uno de los nudos de la red de Bravais, es decir, el grupo puntual del motivo que se repite por el grupo de traslaciones de la red tiene que ser el del grupo puntual holoédrico de la red o un subgrupo del mismo.

En la Figura 5.1 puede observarse la estructura de la hemimorfita ($Zn_4Si_2O_7(OH)_2 \cdot H_2O$), corresponde al grupo espacial $Imm2$. Está basada en una red rómbica centrada en el interior, I , cuya simetría puntual, mmm , es la del grupo puntual holoédrico de las redes rómbicas. El motivo que se repite en la estructura está coloreado en salmón y tiene la simetría $mm2$, que es un grupo puntual subgrupo del mmm (grupo puntual holoédrico de las redes ortorrómbicas)



Holoédrico: que permite desarrollar el máximo número de caras que permite la simetría puntual.

GRUPOS ESPACIALES SIMORFOS

Tipo de grupos espaciales que se obtiene de manera simple combinando cada uno de los 32 grupos puntuales con cada una de las redes de Bravais compatibles con ellos.

- o En total son 66 más 7. En la Tabla 5.1 se puede observar el número de grupos espaciales simorfos correspondientes a cada sistema cristalino.

Sistema cristalino	Nº grupos puntuales	Nº redes Bravais	Nº grupos simorfos
Cúbico	5	3	15
Tetragonal	7	2	14 + 2
Romboédrico	5	2	10 + 3
Hexagonal	7	1	7 + 1
Rómbico	3	4	12 + 1
Ortorrómbico	3	2	6
Triclínico	3	1	2

Tabla 5.1

- Estos 7 aparecen debido a que varían las relaciones geométricas entre los elementos de simetría del grupo y la red, consecuencia de que:
 - Las redes de Bravais centradas en las bases (A, B o C) posean una dirección especial (Figura 5.2).

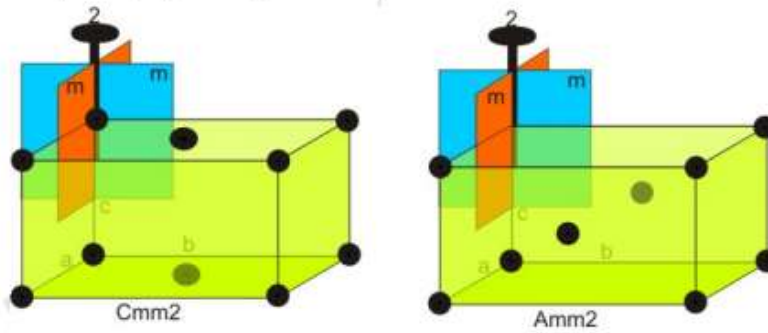


Figura 5.2

- La simetría puntual del grupo no sea la holoédrica y entonces la red presente diversas orientaciones respecto a los elementos de simetría del grupo (Figura 5.3).

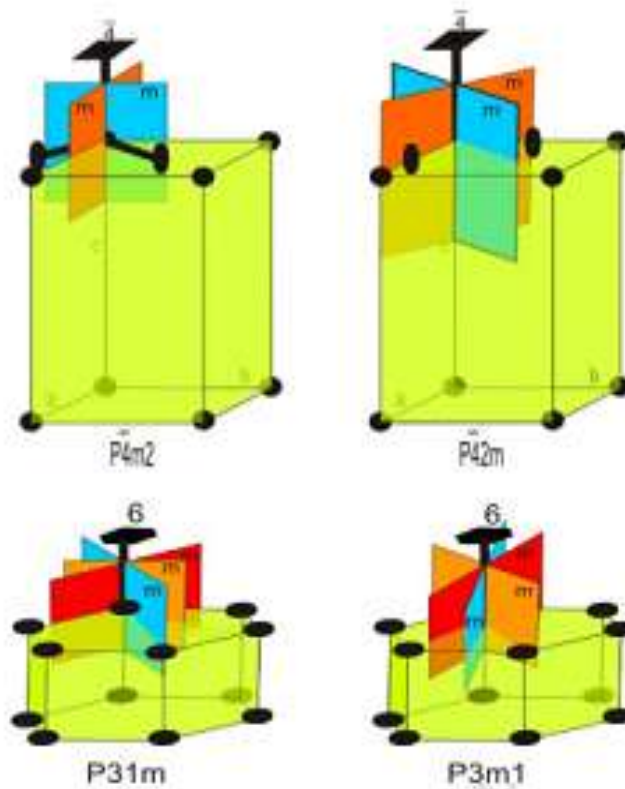


Figura 5.3

- En el espacio de tres dimensiones la idea geométrica de un grupo simorfo es equivalente a colocar los elementos de simetría de un grupo puntual dado sobre los

nudos de la red de Bravais compatible con dicha simetría (Figura 5.4).

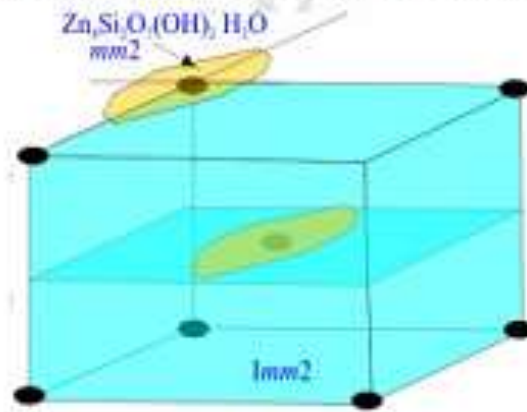


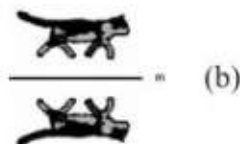
Figura 5.4

- o se obtienen elementos de simetría con traslación asociada.
- o En la Figura 5.5 puede observarse como combinando una red monodimensional (a) con un grupo puntual m (b) se obtiene el grupo espacial simorfo (c) en el que además de la traslación t , la identidad y el plano de reflexión ha aparecido el plano de deslizamiento (d).

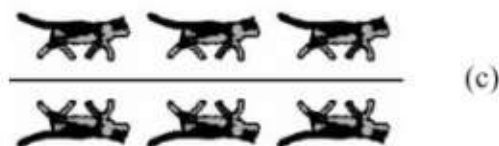
En las siguientes figuras puede observarse como combinando una red monodimensional (a)



con un grupo puntual m (b)



se obtiene el grupo espacial simorfo (c) en el que además de la traslación t , la identidad y el plano de reflexión



ha aparecido el plano de deslizamiento n (d).

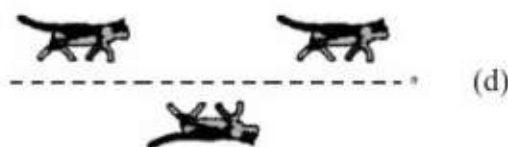


Figura 5.5

GRUPOS ESPACIALES NO SIMORFOS

Son aquellos que se derivan de los simorfos cuando en ellos consideramos una traslación múltiple, pues aparecen elementos de simetría con traslación asociada, no presentes en los grupos simorfos. En total son 157.

En las Tablas 5.2 a 5.8 se presentan los grupos espaciales simorfos y no simorfos correspondientes a cada sistema cristalino.

Sistema cristalino triclinico

Simorfos		No simorfos	
		Hemisimorfos	Asimorfos
1	$P1$		
2	$P-1$		

Tabla 5.2

Sistema cristalino monoclinico

1ª orientación: $c = 2$ y/o -2

Simorfos		No simorfos	
		Hemisimorfos	Asimorfos
3	$P2$	7	Pc
5	$C2$	9	Cc
6	Pm	13	$P2/c$
8	Cm	15	$C2/c$
10	$P2/m$		
12	$C2/m$		

2ª orientación: $b = 2$ y/o -2

Simorfos		No simorfos	
		Hemisimorfos	Asimorfos
3	$P2$	7	Pb
5	$B2$	9	Bb
6	Pm	13	$P2/b$
8	Bm	15	$B2/b$
10	$P2/m$		
12	$B2/m$		

Tabla 5.3

Sistema cristalno rómbico

		No simorfos	
Simorfos		Hemisimorfos	Asimorfos
			17 $P222_1$
		27 $Pcc2$	18 $P2_12_12$
		28 $Pma2$	19 $P2_12_12_1$
		30 $Pnc2$	20 $C222_1$
		32 $Pba2$	24 $I2_12_12_1$
16	$P222$	34 $Pnn2$	26 $Pmc2_1$
21	$C222$	37 $Ccc2$	29 $Pca2_1$
22	$F222$	39 $Abm2$	31 $Pmn2_1$
23	$I222$	40 $Ama2$	33 $Pna2_1$
25	ortorrómbicas)	41 $Aba2$	36 $Cmc2_1$
35	$Cmm2$	43 $Fdd2$	51 $Pmma$
38	$Amn2$	45 $Iba2$	52 $Pnna$
42	$Fmm2$	46 $Ima2$	53 $Pmna$
44	$Imm2$	48 $Pnnn$	54 $Pcca$
47	$Pmmm$	49 $Pccm$	55 $Pbam$
65	$Cmmm$	50 $Pban$	56 $Pccn$
69	$Fmmm$	66 $Cccm$	57 $Pbcm$
71	Imm	67 $Cmma$	58 $Pnmm$
		68 $Ccca$	59 $Pmnm$
		70 $Fddd$	60 $Pbcn$
		72 $Ibam$	61 $Pbca$
			62 $Pnma$
			63 $Cmcm$

		64 $Cmca$
		73 $Ibca$
		74 $Imma$

Tabla 5.4

Sistema cristalino Ortorrómbico

Simorfos	No simorfos	
	Hemismorfos	Asimorfos
143 $P3$	158 $P3c1$	144 $P3_1$
146 $R3$	159 $P31c$	145 $P3_2$
147 $P-3$	161 $R3c$	151 $P3_112$
148 $R-3$	163 $P-31c$	152 $P3_121$
149 $P312$	165 $P-3c1$	153 $P3_212$
150 $P321$	167 $R-3c$	154 $P3_221$
155 $R32$		
156 $P3m1$		
157 $P31m$		
160 $R3m$		
162 $P-31m$		
164 $P-3m1$		
166 $R-3m$		

Tabla 5.5

Sistema cristalino hexagonal

Simorfos	No simorfos	
	Hemismorfos	Asimorfos
168 $P6$	184 $P6cc$	169 $P6_1$
174 $P-6$	188 $P-6c2$	170 $P6_5$
175 $P6/m$	190 $P-62c$	171 $P6_2$
177 $P622$	192 $P6/mcc$	172 $P6_4$
183 $P6mm$		173 $P6_3$
187 $P-6m2$		176 $P6_3/m$
189 $P-62m$		178 $P6_122$
191 $P6/mmm$		179 $P6_522$
		180 $P6_222$
		181 $P6_422$
		182 $P6_322$
		185 $P6_3cm$
		186 $P6_3mc$
		193 $P6_3/mcm$
		194 $P6_3/mmc$

Tabla 5.6

Sistema cristalino tetragonal

Simorfos	No simorfos	
	Hemismorfos	Asimorfos
75 $P4$	85 $P4/n$	76 $P4_1$
79 $I4$	100 $P4bm$	77 $P4_2$
81 $P-4$	103 $P4cc$	78 $P4_3$
82 $I-4$	104 $P4nc$	80 $I4_1$
83 $P4/m$	108 $I4cm$	84 $P4_2/m$
87 $I4/m$	112 $P-42c$	85 $P4/n$
89 $P422$	116 $P-4c2$	86 $P4_2/n$
97 $I422$	117 $P-4b2$	88 $I4_1/a$
99 $P4mm$	118 $P-4n2$	90 $P42_12$
107 $I4mm$	120 $I-4c2$	91 $P4_122$
111 $P-42m$	124 $P4/mcc$	92 $P4_12_12$
115 $P-4m2$	125 $P4/nbm$	93 $P4_222$
119 $I-4m2$	126 $P4/nnc$	94 $P4_22_12$
121 $I-42m$	140 $I4/mcm$	95 $P4_322$
123 $P4/mmm$		96 $P4_32_12$
139 $I4/mmm$		98 $I4_122$
		101 $P4_2cm$
		102 $P4_2nm$
		105 $P4_2mc$
		106 $P4_2bc$
		109 $I4_1md$
		110 $I4_1cd$
		113 $P-2_1m$
		114 $P-42_1c$
		122 $I-42d$
		127 $P4/mbm$
		129 $P4/nmm$
		130 $P4/ncc$
		131 $P4_2/mmc$
		132 $P4_2/mcm$
		133 $P4_2/nbc$
		134 $P4_2/nm$
		135 $P4_2/mbc$
		136 $P4_2/mnm$
		137 $P4_2/nmc$
		138 $P4_2/nem$
		141 $I4_1/amd$
		142 $I4_1/acd$
		128 $P4/mnc$

Tabla 5.7

Sistema cristalino cúbico

Simorfos	No simorfos	
	Hemismorfos	Asimorfos
195 $P2_3$	201 $Pn-3$	198 $P2_13$
196 $F2_3$	203 $Fd-3$	199 $I2_13$
197 $I2_3$	218 $P-43n$	205 $Pa-3$
200 $Pm-3$	219 $F-43c$	206 $Ia-3$
202 $Fm-3$	222 $Pn-3n$	208 $P4_232$
204 $Im-3$	226 $Fm-3c$	209 $F432$
207 $P432$		210 $F4_132$
209 $F432$		212 $P4_332$
211 $I432$		213 $P4_132$
215 $P-43m$		214 $I4_132$
216 $F-43m$		220 $I-43d$
217 $I-43m$		223 $Pm-3n$
221 $Pm-3m$		224 $Pn-3m$
225 $Fm-3m$		225 $Fm-3m$
229 $Im-3m$		227 $Fd-3m$
		228 $Fd-3c$
		230 $Ia-3d$

Tabla 5.8

5.4 SÍMBOLO DE LOS GRUPOS ESPACIALES

Existen dos tipos de símbolos.

1. Notación de Schoenflies, que es la más antigua de todas.
 - o Consiste de una letra mayúscula, característica del tipo del grupo puntual,
 - o Puede ir acompañada de uno o más subíndices:
 - o uno de ellos numérico
 - o el otro una letra minúscula
 - o cuando existen ambos se escriben en este orden.
2. Notación de Hermann Mauguin (o notación internacional). Consta de:
 - Una letra mayúscula que indica el tipo de red de Bravais.
 - Un conjunto de caracteres, después de la letra mayúscula, que indican elementos de simetría referidos a las direcciones de simetría de la red.
 - Pueden incluir:
 - o Barra de quebrado
 - o denominador es la letra m
 - o numerador es un número que hace referencia al orden de un eje de rotación.
 - Pueden simplificarse algunos símbolos si no da lugar a confusión con otros símbolos.