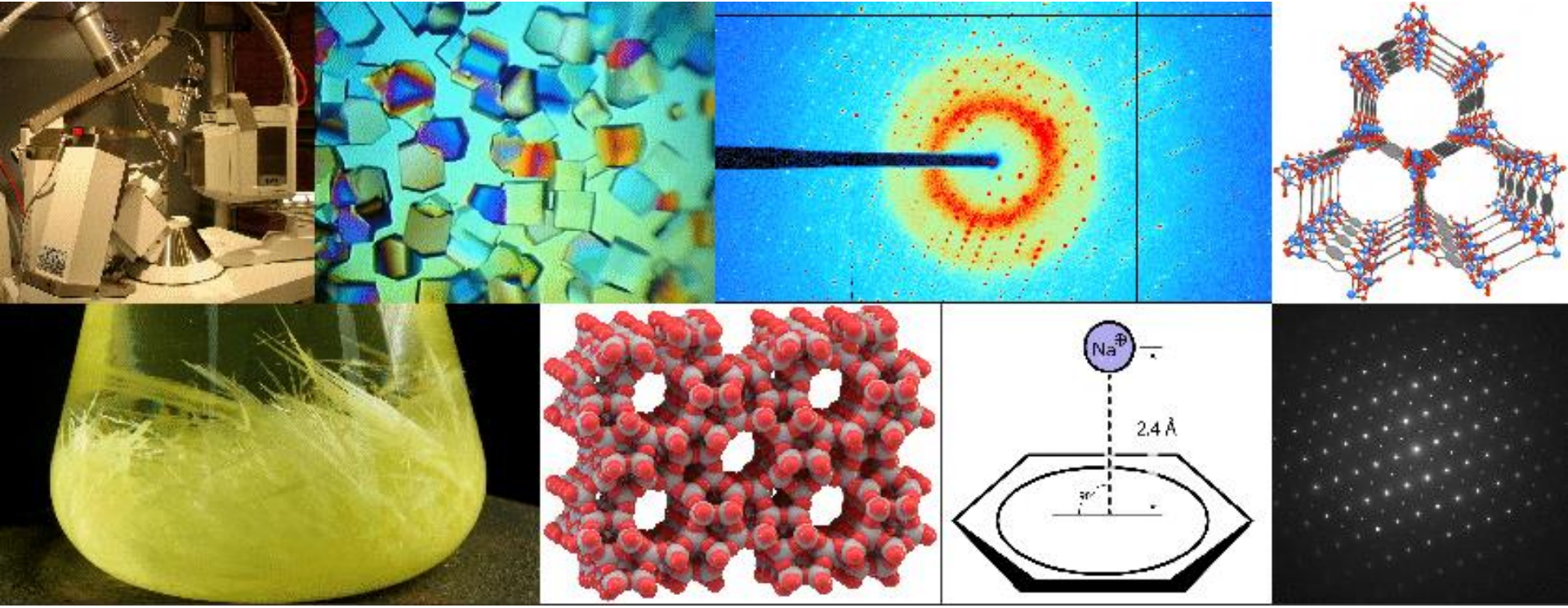


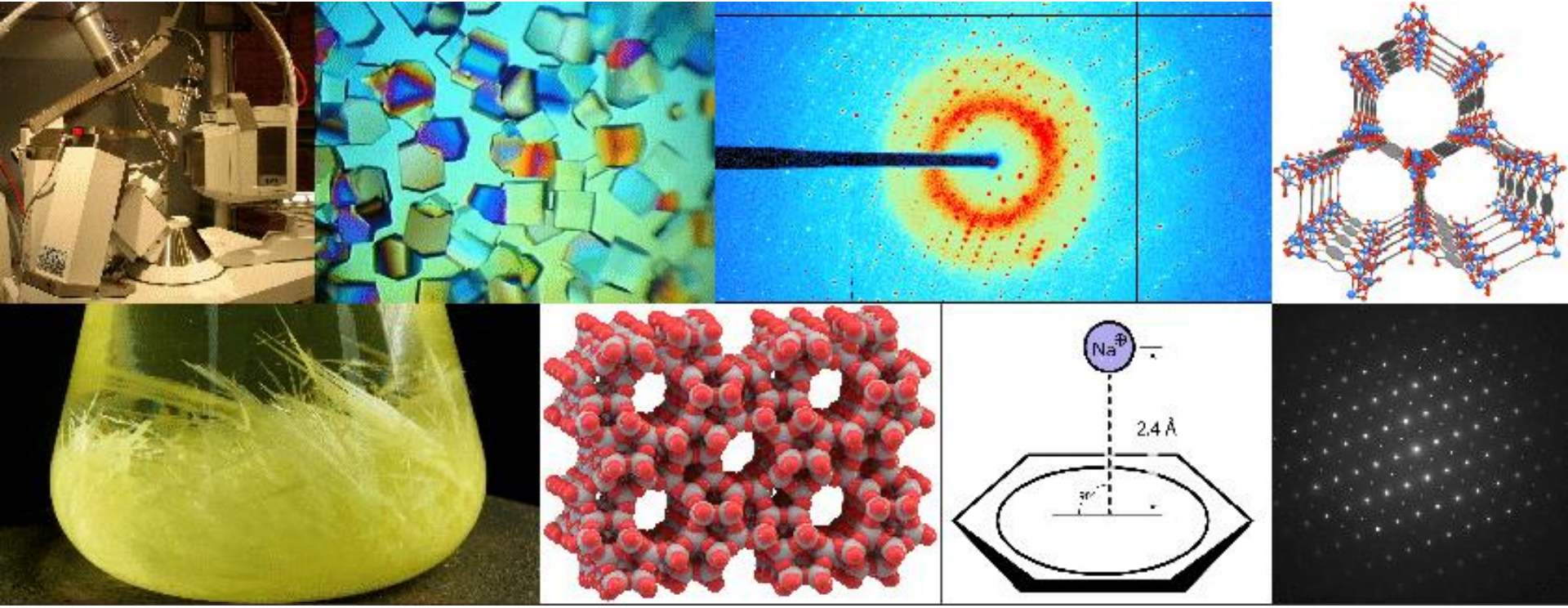
Materia Optativa de Grado y Postgrado | 2do CUATRIMESTRE 2023

CRISTALOGRAFÍA

Fundamentos y Aplicaciones

Florencia Di Salvo | Sebastián Suárez

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN, UBA



Materia Optativa de Grado y Postgrado | 2do CUATRIMESTRE 2023

SIMETRIA EN CRISTALES I

Florencia Di Salvo | Sebastián Suárez

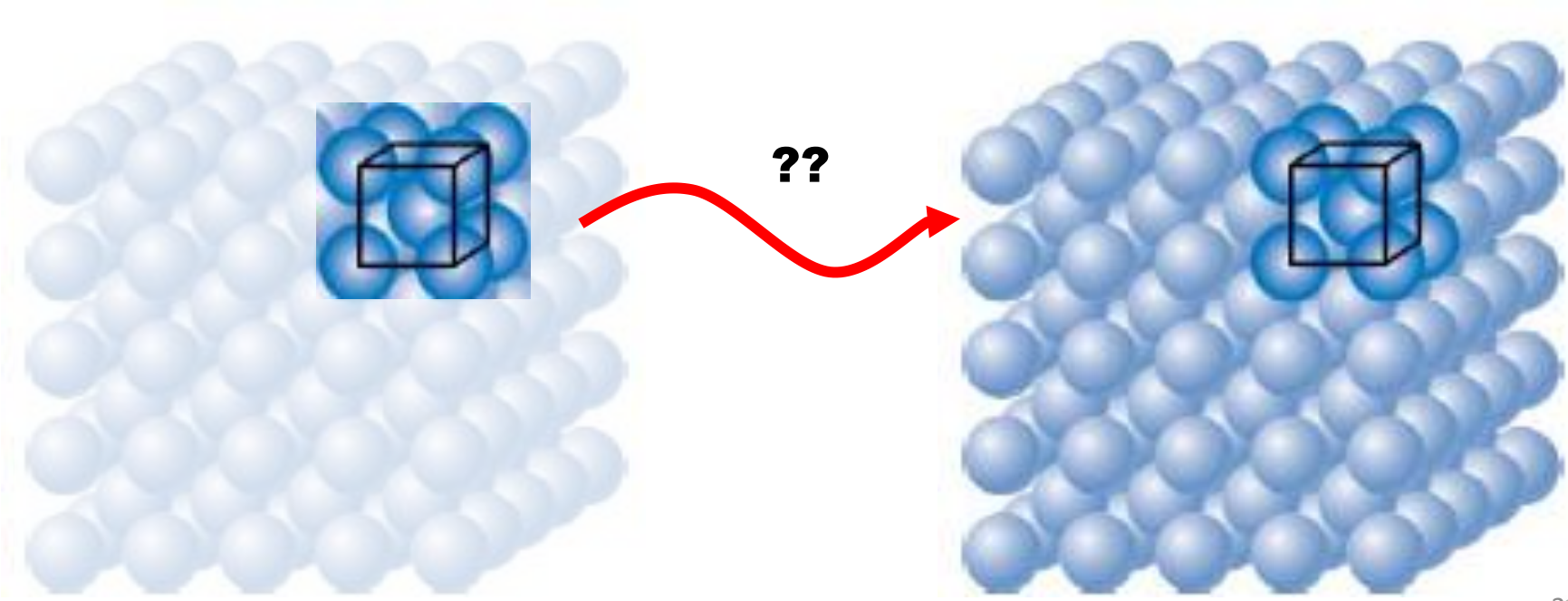
Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN, UBA

MOTIVACION y objetivos de la clase

Para poder comprender la periodicidad de los sólidos cristalinos, debemos conocer las REGLAS DE SIMETRÍA

Para conocer la **naturaleza y el orden de la periodicidad** en los cristales, debemos aprender cuáles son las **operaciones** por la cuales la repetición del **MOTIVO BÁSICO** de cristal da lugar al **CRISTAL PROPIAMENTE DICHO**

¿cómo podemos hacer para lograr describir todo el cristal a partir del motivo básico?

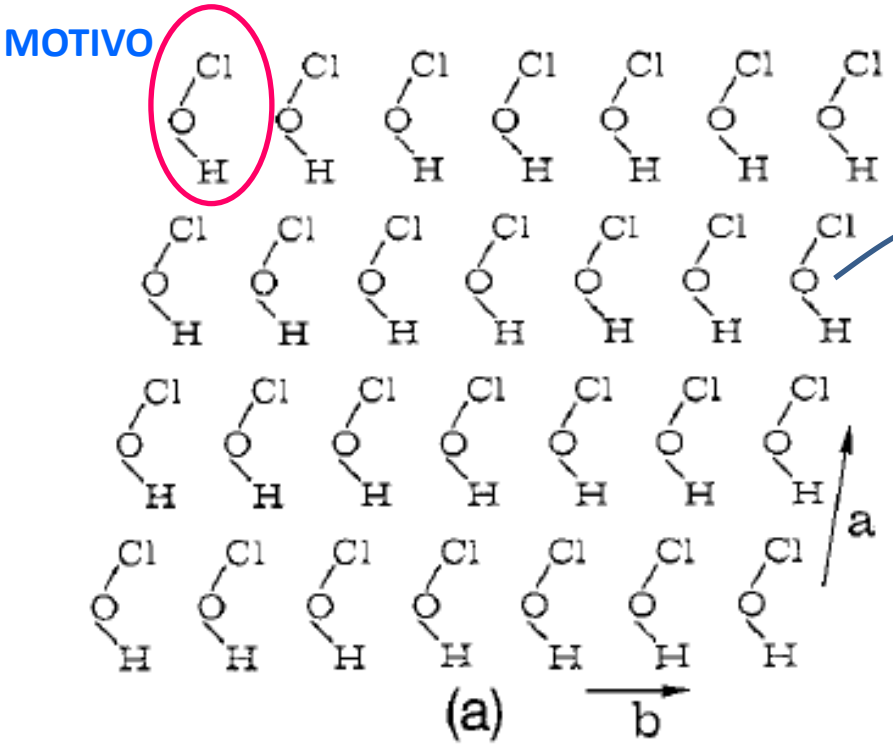


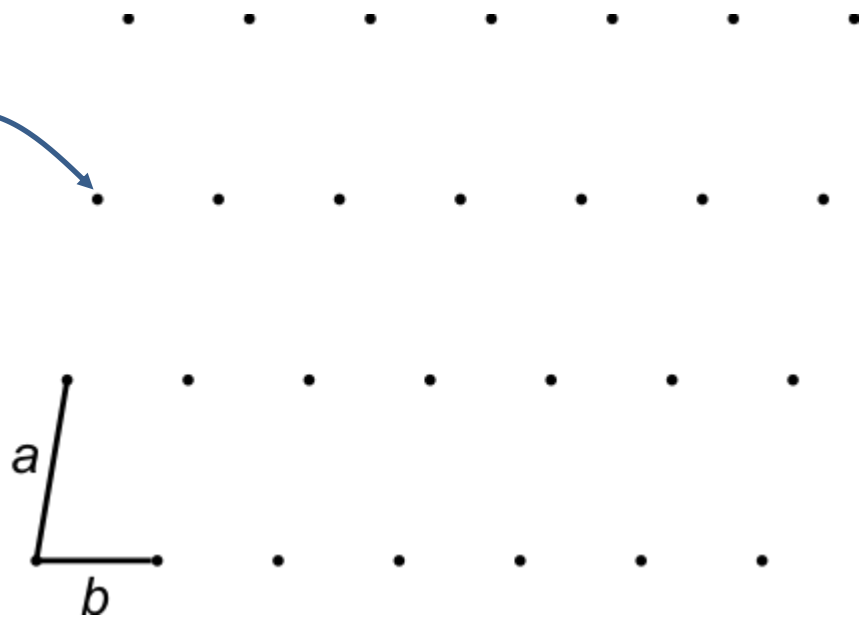
REDES

DEFINICIÓN de RED: corresponde a un arreglo infinito de puntos ubicados de forma tal que el ENTORNO DE CADA PUNTO es idéntico al ENTORNO DE CADA UNO DE LOS OTROS PUNTOS DE LA RED

REDES

Podemos llegar a la **DEFINICIÓN de RED** cpartiendo de un PATRON, dado por la repetición de un MOTIVO, el cual puede ser un átomo, ión, molécula. El MOTIVO corresponde a la "UNIDAD" del PATRON. Se puede situar a ese MOTIVO en los puntos de intersección de esta "GRILLA IMAGINARIA" que describe la REDA la grilla la llamamos RED y a las intersecciones puntos de la RED





La repetición de ese MOTIVO da lugar a un PATRÓN

RED: es "la grilla" sobre la cual esta determinado el patrón dado por el MOTIVO. y es obtenida considerando el centro de gravedad de la molécula de HOCl

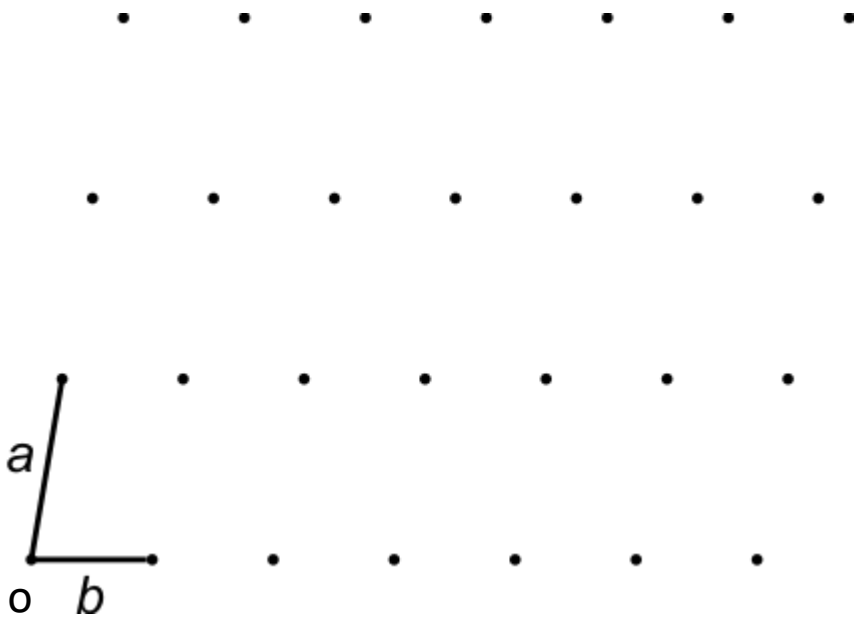
Ejemplo. Red 2D de HOCl (ácido hipocloroso): la red 2D se construye a partir de desplazar el motivo (HOCl) en intervalos a y b

REDES

Se puede definir cualquier punto de la red mediante el vector: $Q_{u,v} = ua + vb$

$\boldsymbol{a}$ y $\boldsymbol{b}$ son vectores y u y $v \in \boldsymbol{Z}^{+}\ \boldsymbol{Z}^{-}$

RED 2D



CELDAS

RED 2D

Elección arbitraria de la celda unidad

CELDAS

Se puede definir cualquier punto de la red mediante el vector: $Q_{u,v} = ua + vb$

ECUACIÓN 1

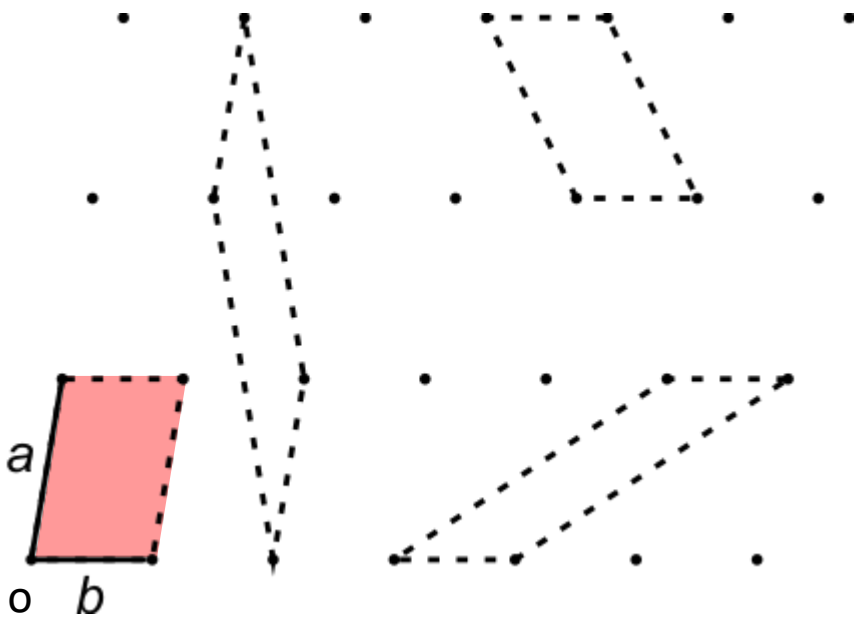
$\boldsymbol{a}$ y $\boldsymbol{b}$ son vectores y u y $v \in Z^{+}\ Z^{-}$

El paralelogramo que se define por $\boldsymbol{a}$ y $\boldsymbol{b}$ (vectores básicos de la red) = **celda unidad**

RED 2D

CELDAS

RED 2D

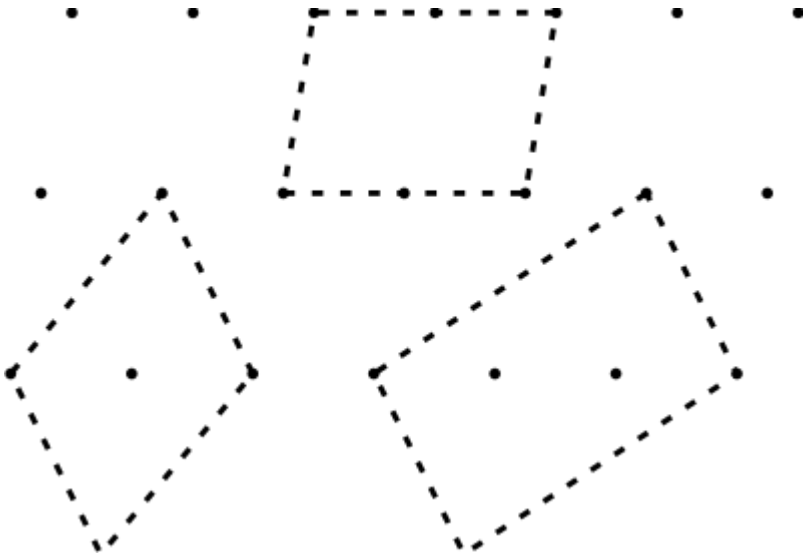


Elección arbitraria de la celda unidad

$$\boldsymbol{Q}_{u,v} = u\boldsymbol{a} + v\boldsymbol{b}$$

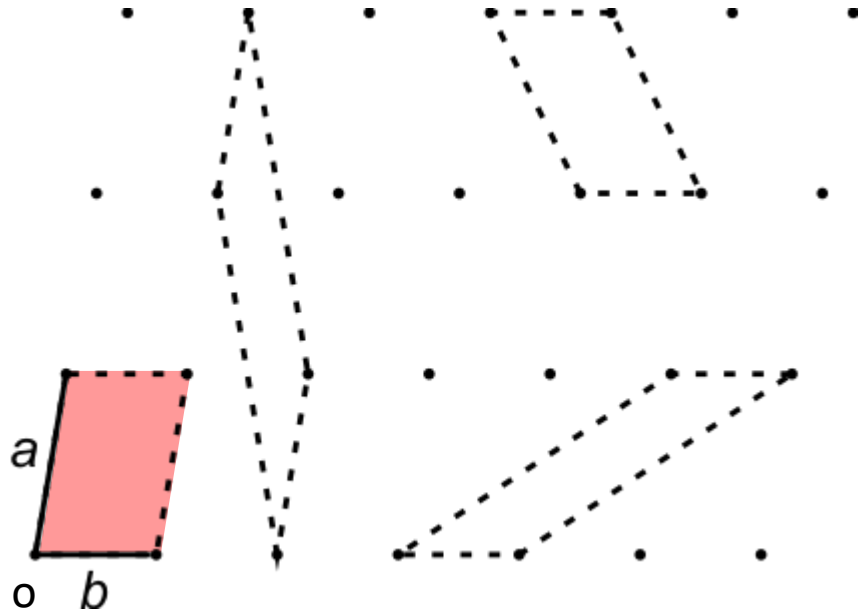
(con diferentes u y v)

CELDAS



Para estas celdas sigue valiendo la ec. 1
pero u y v ya no necesariamente son enteros

RED 2D



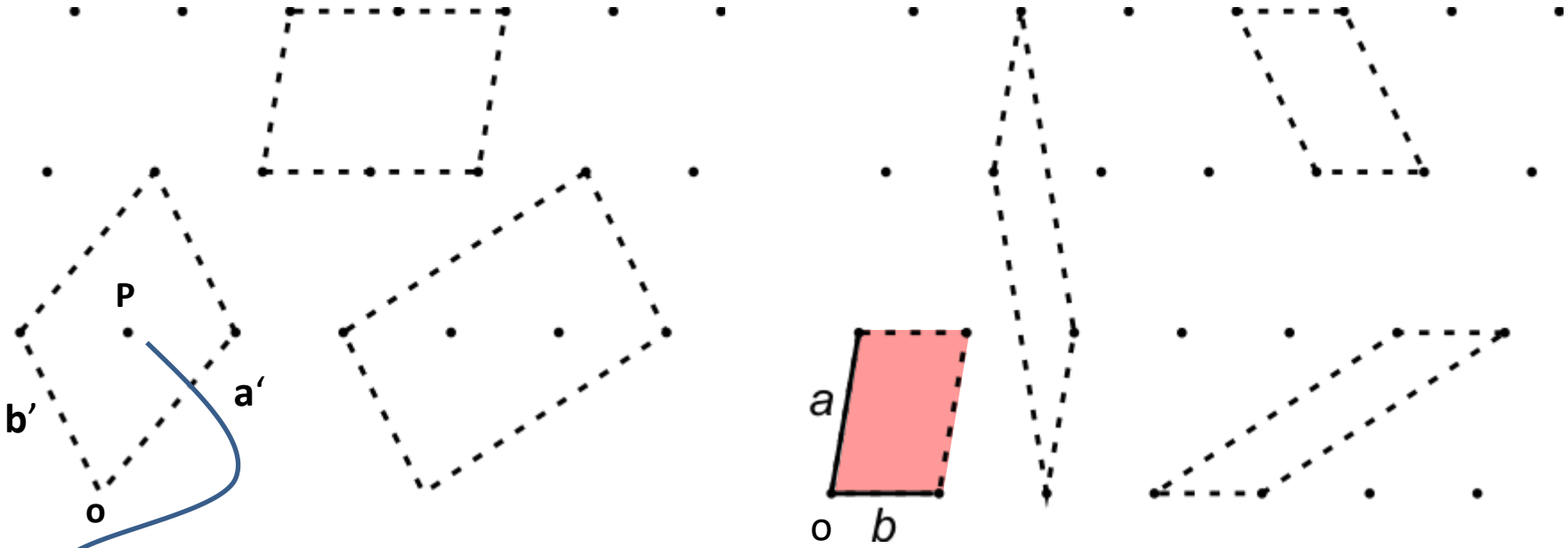
Elección arbitraria de la celda unidad

$$\boldsymbol{Q}_{u,v} = u\boldsymbol{a} + v\boldsymbol{b}$$

(con diferentes u y v)

CELDAS

RED 2D



P = 1/2**a**' + 1/2**b**'

Elección arbitraria de la celda unidad

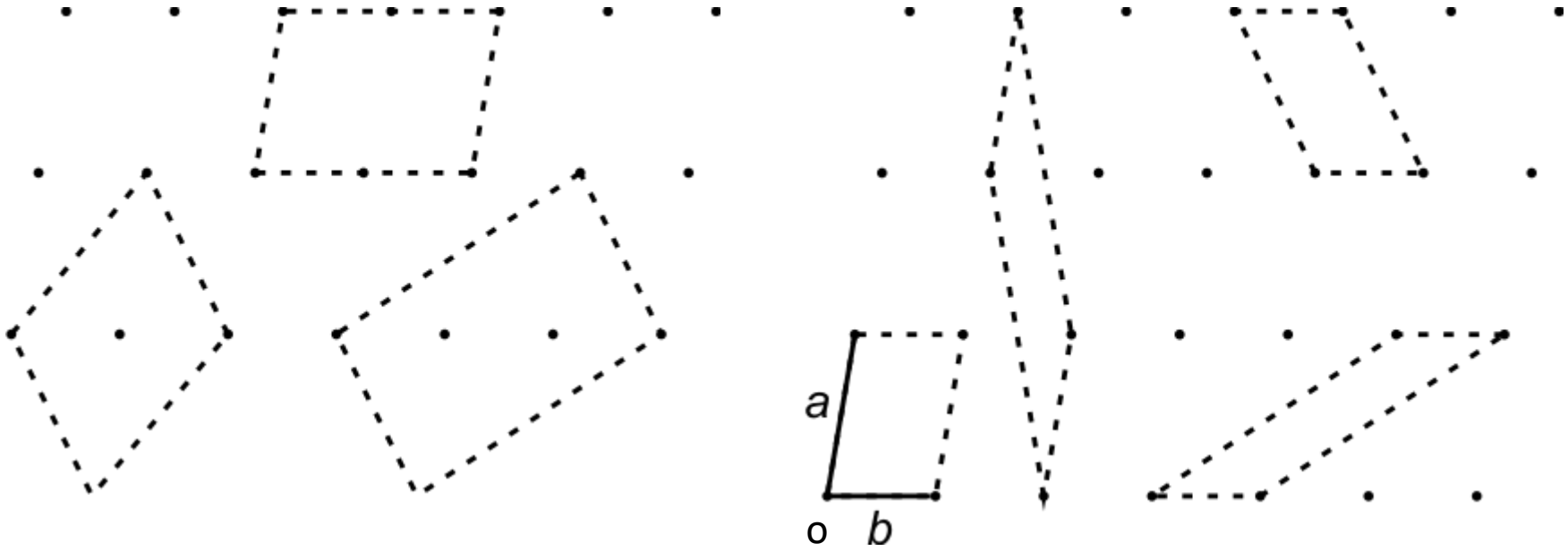
$$Q_{u,v} = ua + vb$$

(con diferentes u y v)

CELDAS

Caracterización de las diferentes celda unidad posible: por cantidad de puntos de la red que contienen (no olvidar de contar bien!)

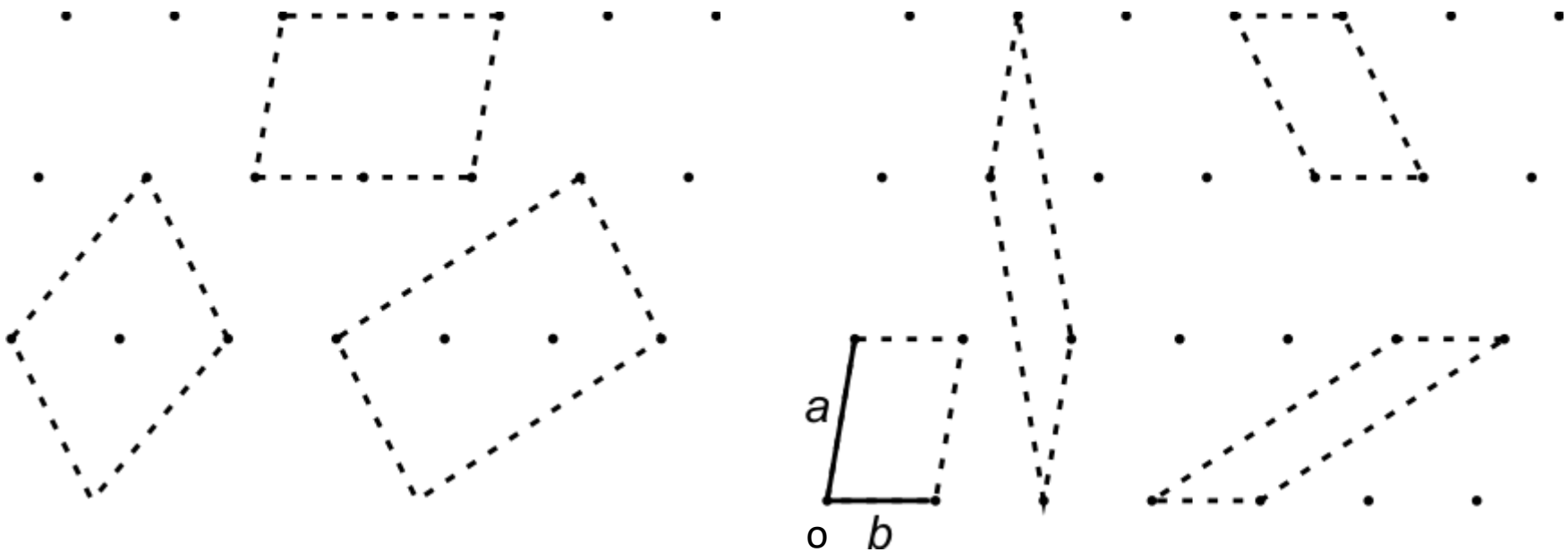
RED 2D



CELDAS

Caracterización de las diferentes celda unidad posible: por cantidad de puntos de la red que contienen (no olvidar de contar bien!)

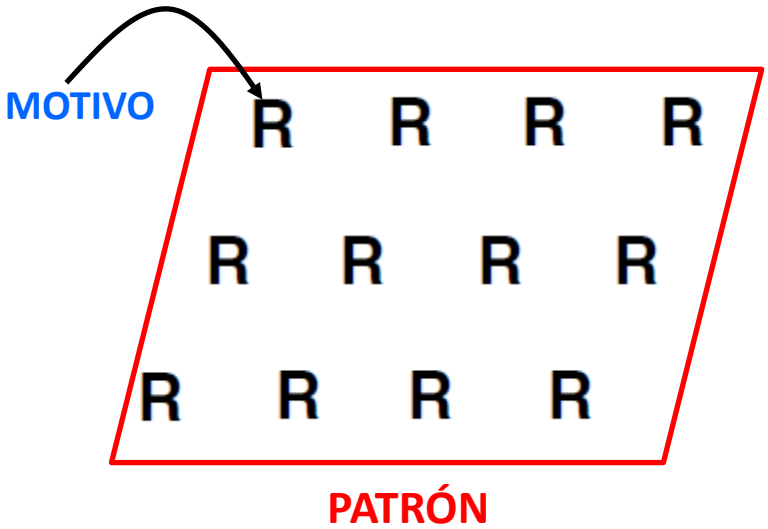
RED 2D

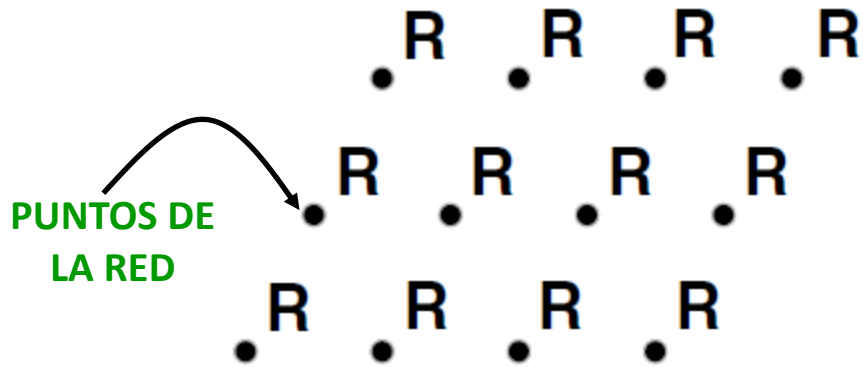


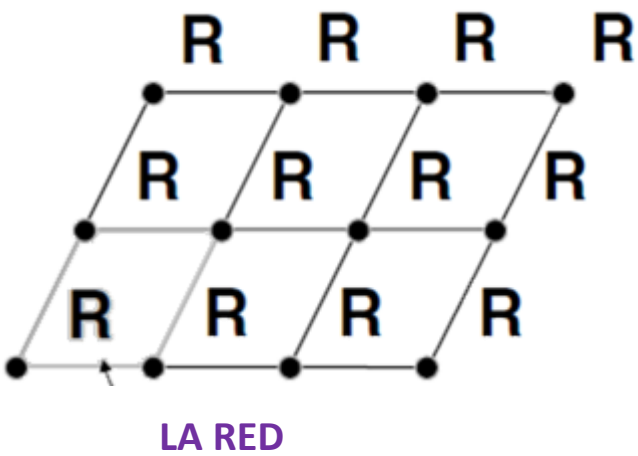
DEFINICIÓN de CELDA PRIMITIVA: corresponde a la celda unidad que contiene SOLO UN PUNTO de la red. Las que contienen más de un punto se denominan **múltiples** o **centradas**.

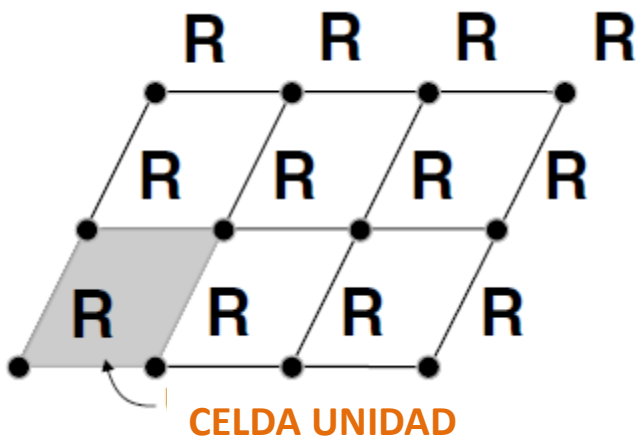
¿Cuál/cuáles de estas serían celdas primiti

REDES y CELDAS. Ejemplo

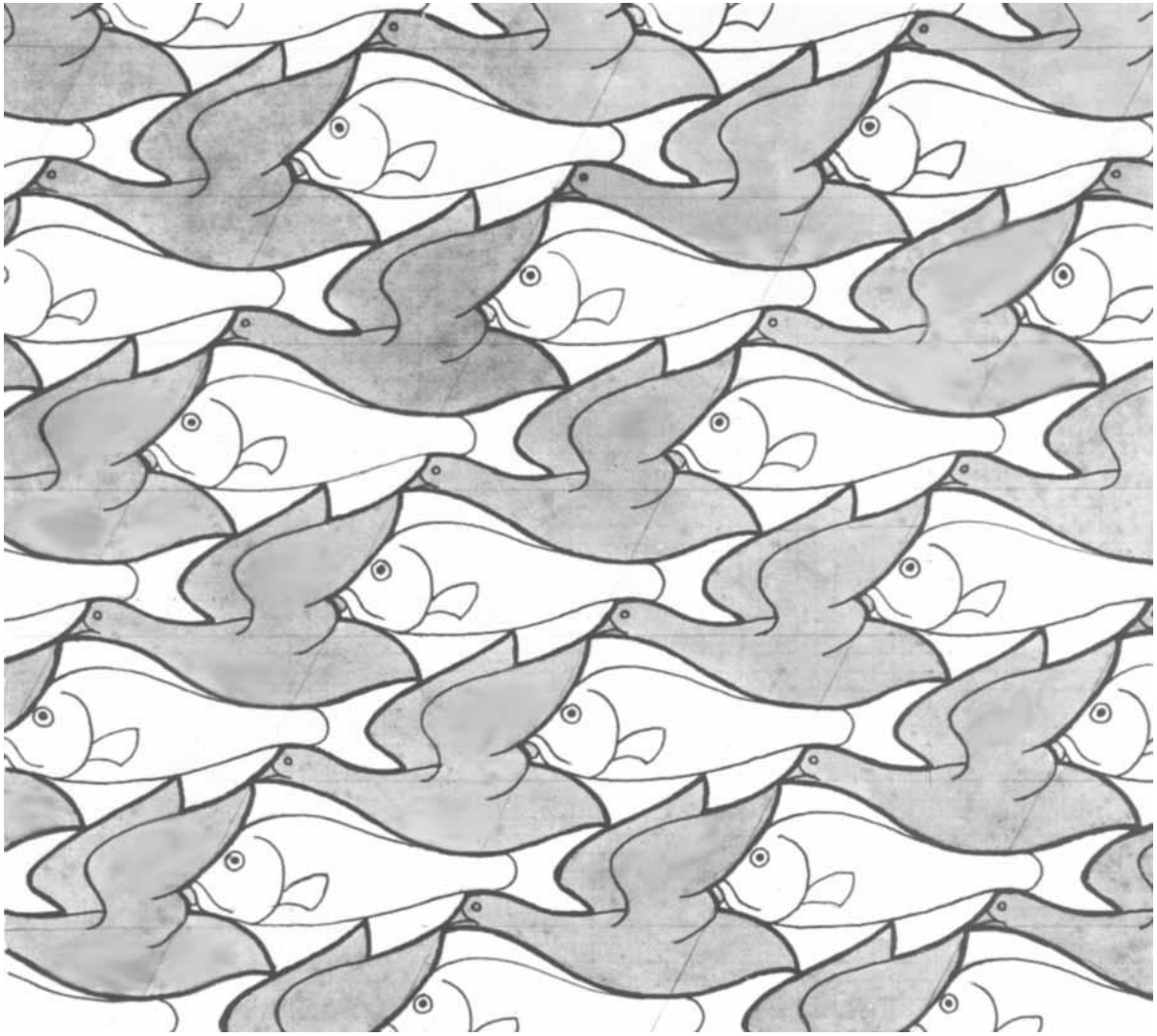


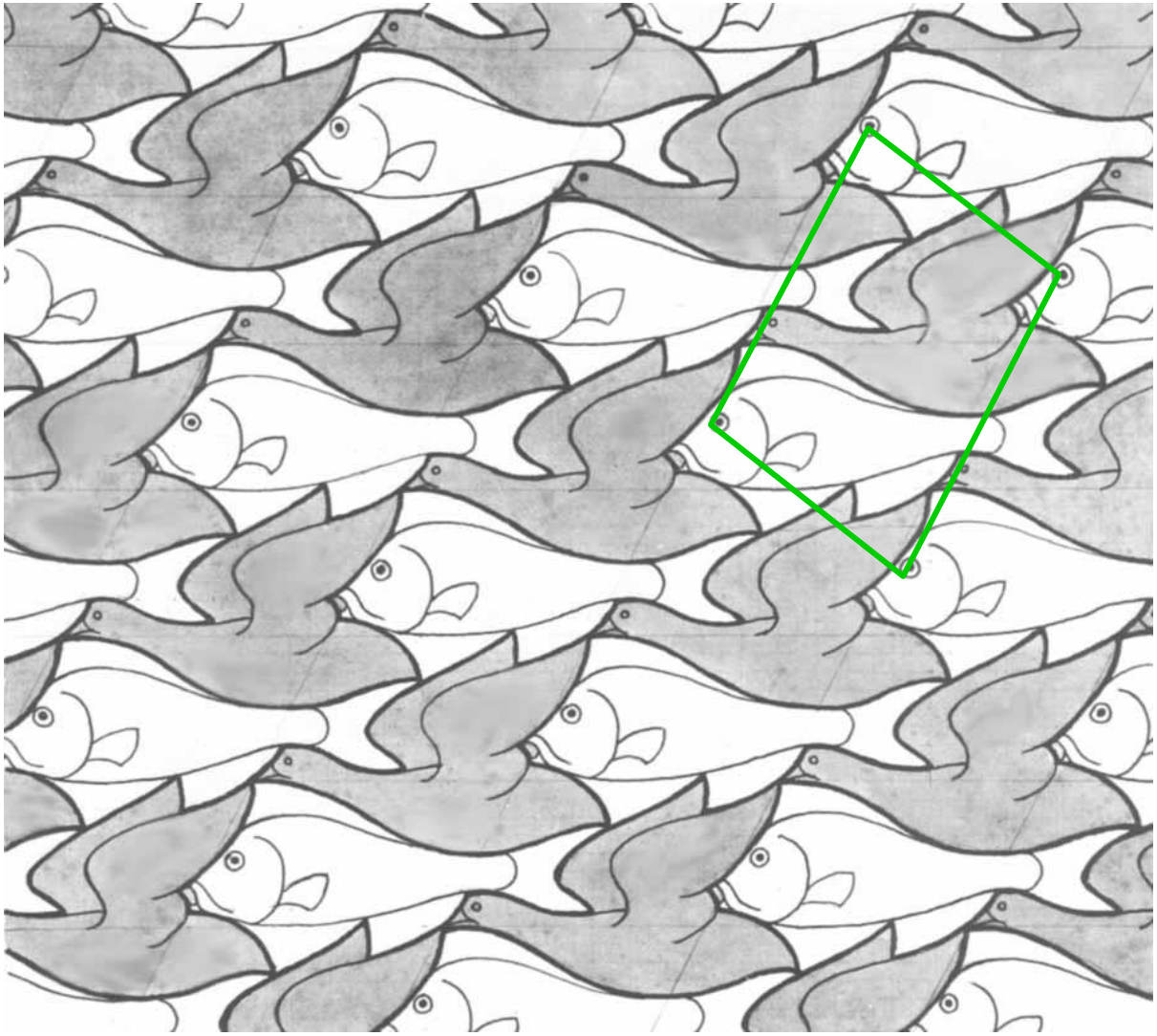


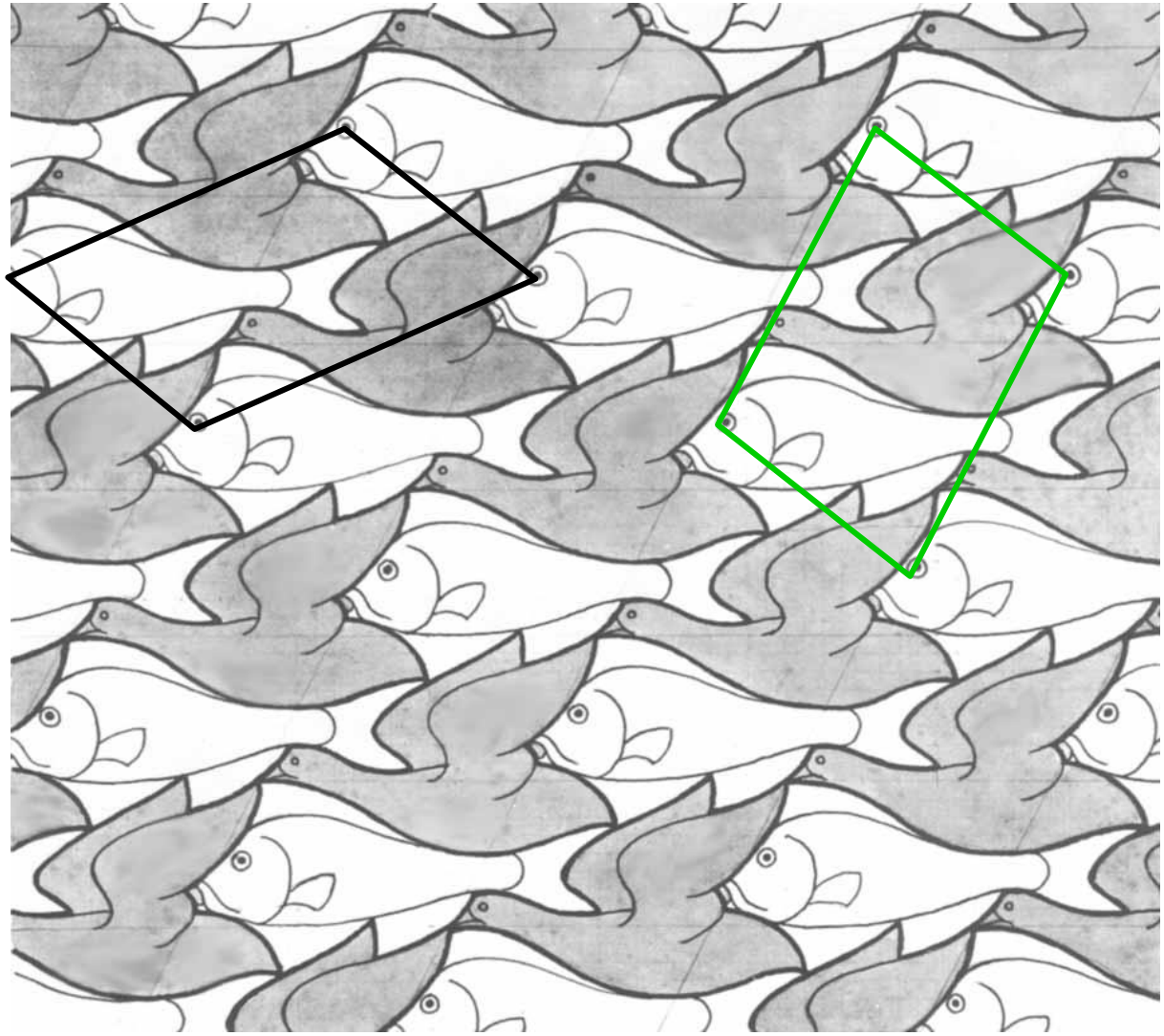


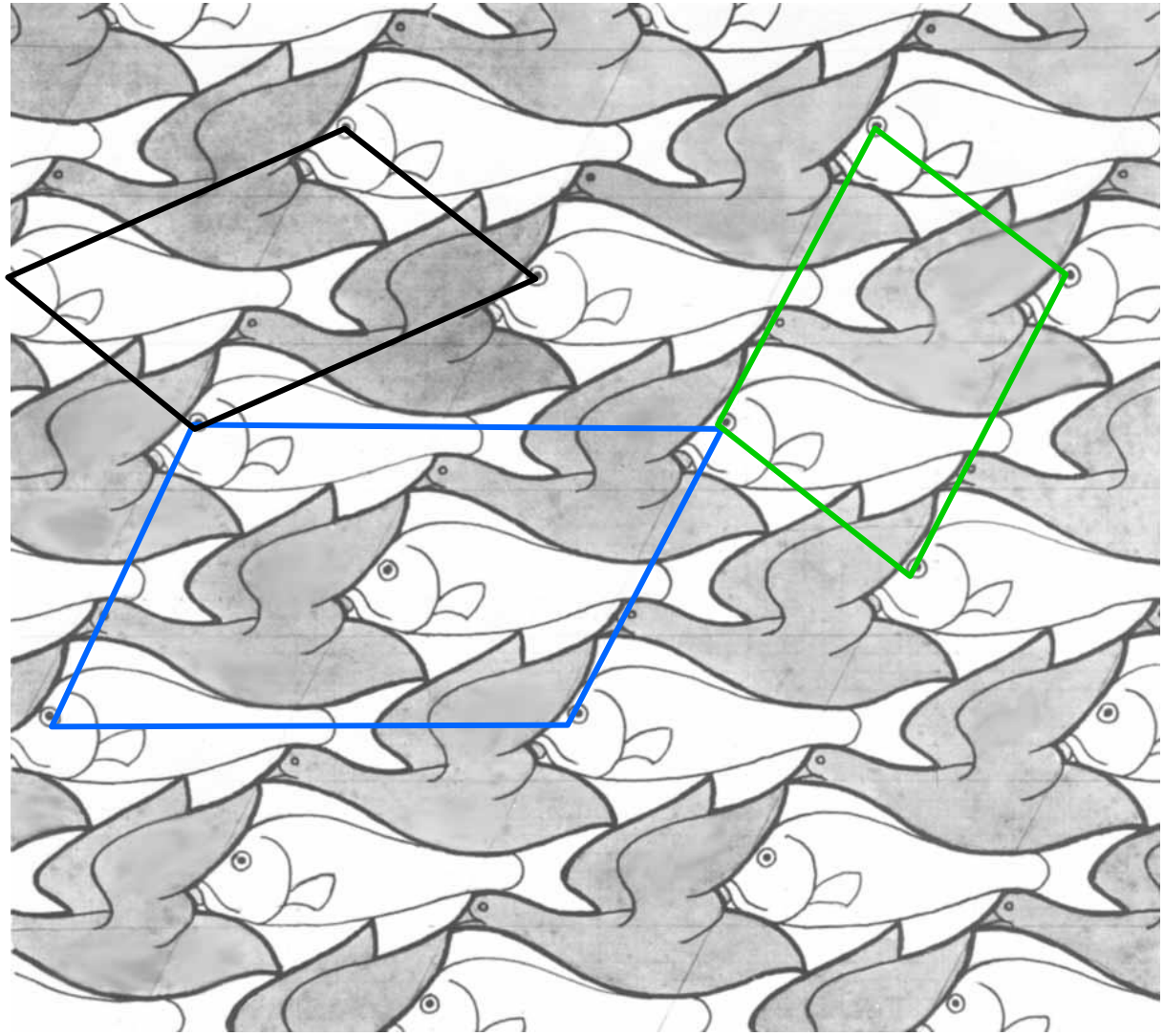


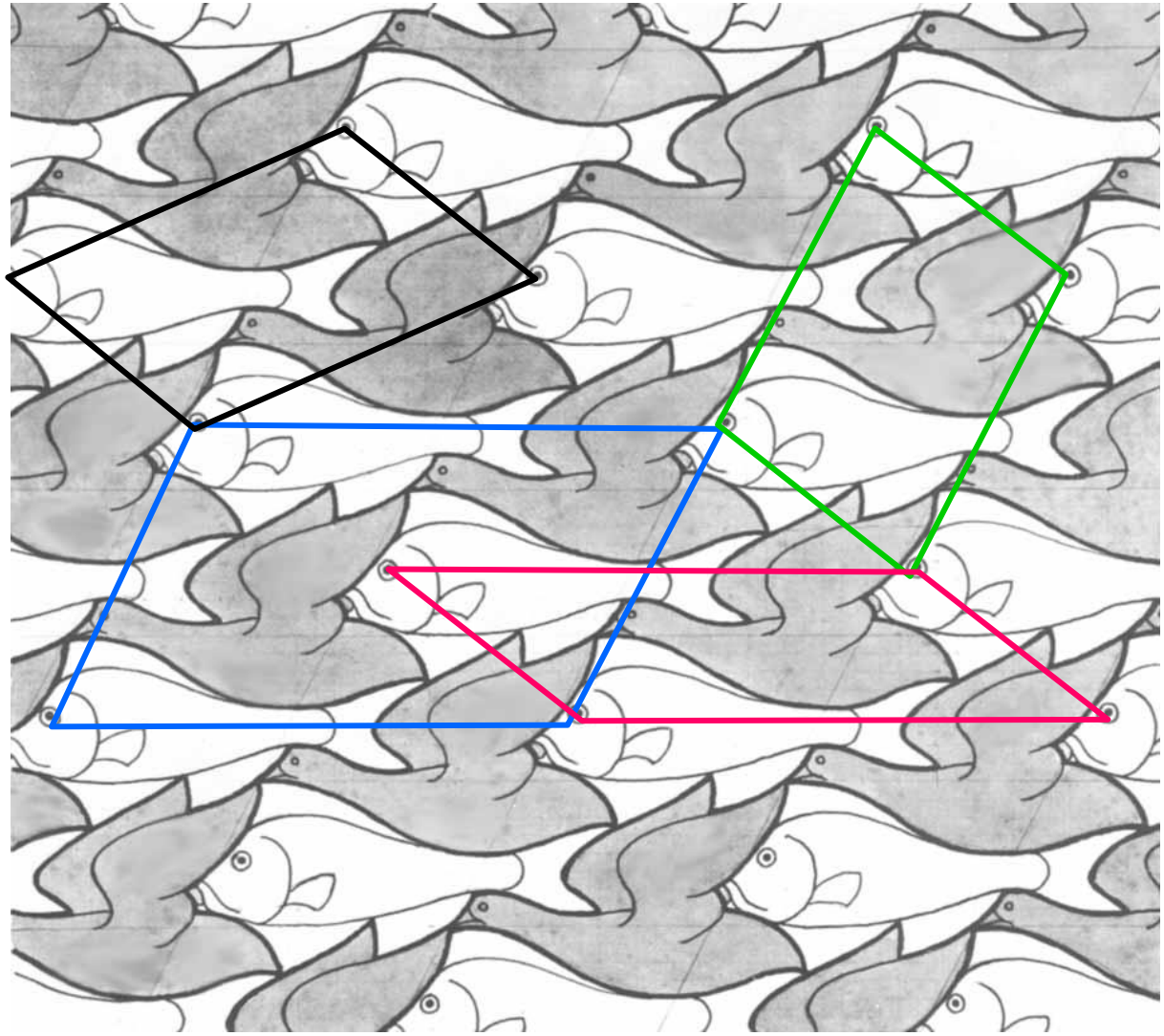
EJEMPLO DE CELDAS en 2D





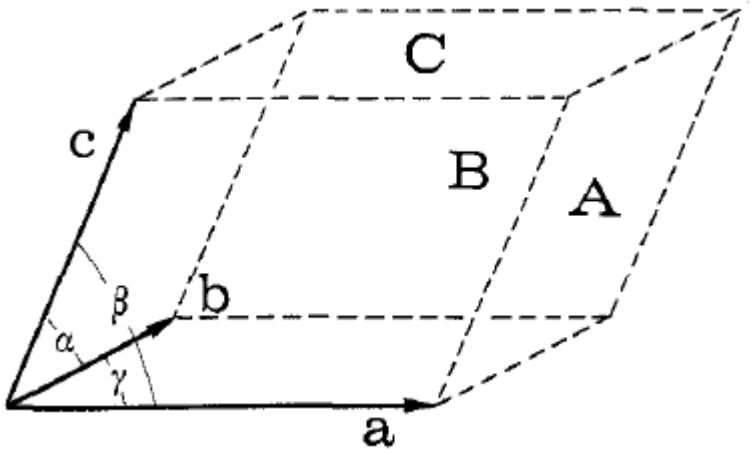






CELDAS (ahora en 3D)

RED 3D



Se puede definir cualquier punto de la red mediante el vector: $\boldsymbol{Q}_{u,v,w} = u\boldsymbol{a} + v\boldsymbol{b} + w\boldsymbol{c}.$

ECUACIÓN 2

El paralelepípedo que se define por ***a*** , ***b*** y ***b*** (vectores básicos de la red) = **celda unidad**

x y z = ejes cristalográficos
α β γ = ángulos

A B C = caras
Si la celda es primitiva, $u\ v\ w \in \boldsymbol{Z}^{+}\ \boldsymbol{Z}^{-}$
Si la celda es múltiple, $u\ v\ w \in \boldsymbol{Q}$

$$\boldsymbol{V} = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}$$

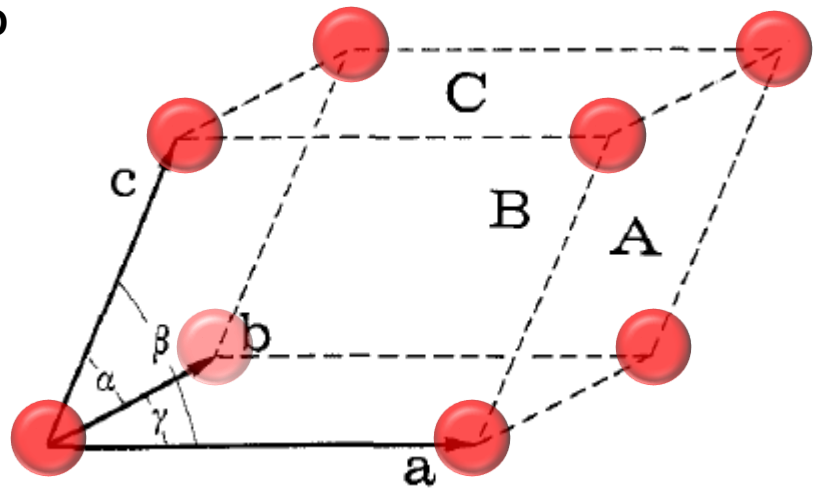
Producto vectorial

Producto escalar

Orientación: "regla de la mano derecha"

CELDAS (ahora en 3D)

RED 3D



Se puede definir cualquier punto de la red mediante el vector: $\boldsymbol{Q}_{u,v,w} = u\boldsymbol{a} + v\boldsymbol{b} + w\boldsymbol{c}.$

ECUACIÓN 2

El paralelepípedo que se define por ***a*** , ***b*** y ***b*** (vectores básicos de la red) = **celda unidad**

X Y Z = ejes cristalográficos
α β γ = ángulos

A B C = caras
Si la celda es primitiva, $u\ v\ w \in \boldsymbol{Z}^{+}\ \boldsymbol{Z}^{-}$
Si la celda es múltiple, $u\ v\ w \in \boldsymbol{Q}$

$$\boldsymbol{V} = \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} \times \boldsymbol{c}$$

Producto escalar

Producto vectorial

¿La de la imagen qué tipo de celda es?

Orientación: "regla de la mano derecha"

CELDAS (ahora en 3D)

RED 3D

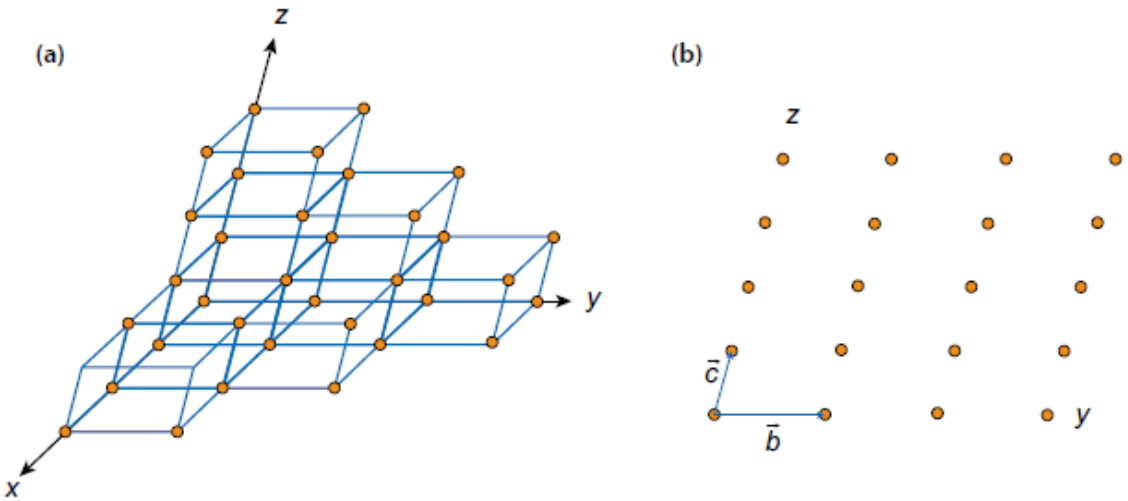
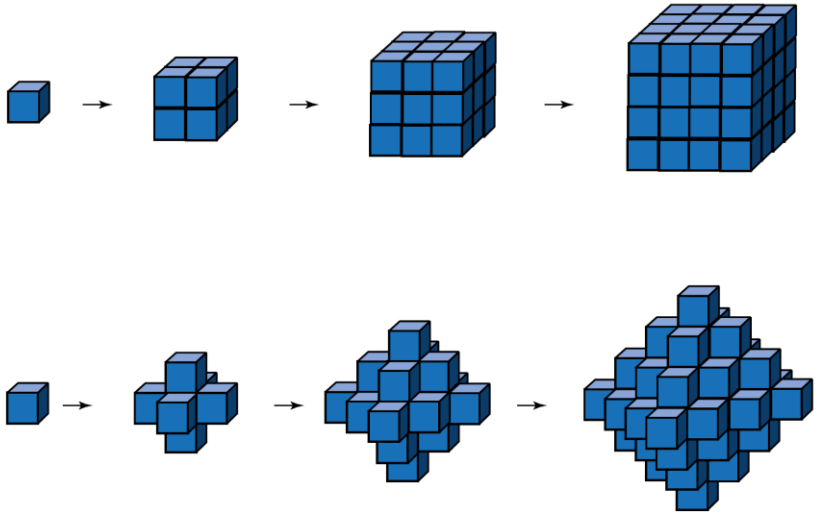


Fig. 1.34 (a) Lattice points can be interpreted as connection points between unit cells. (b) Restriction to two dimensions and removal of the boundaries of the unit cells leads to the "naked" lattice

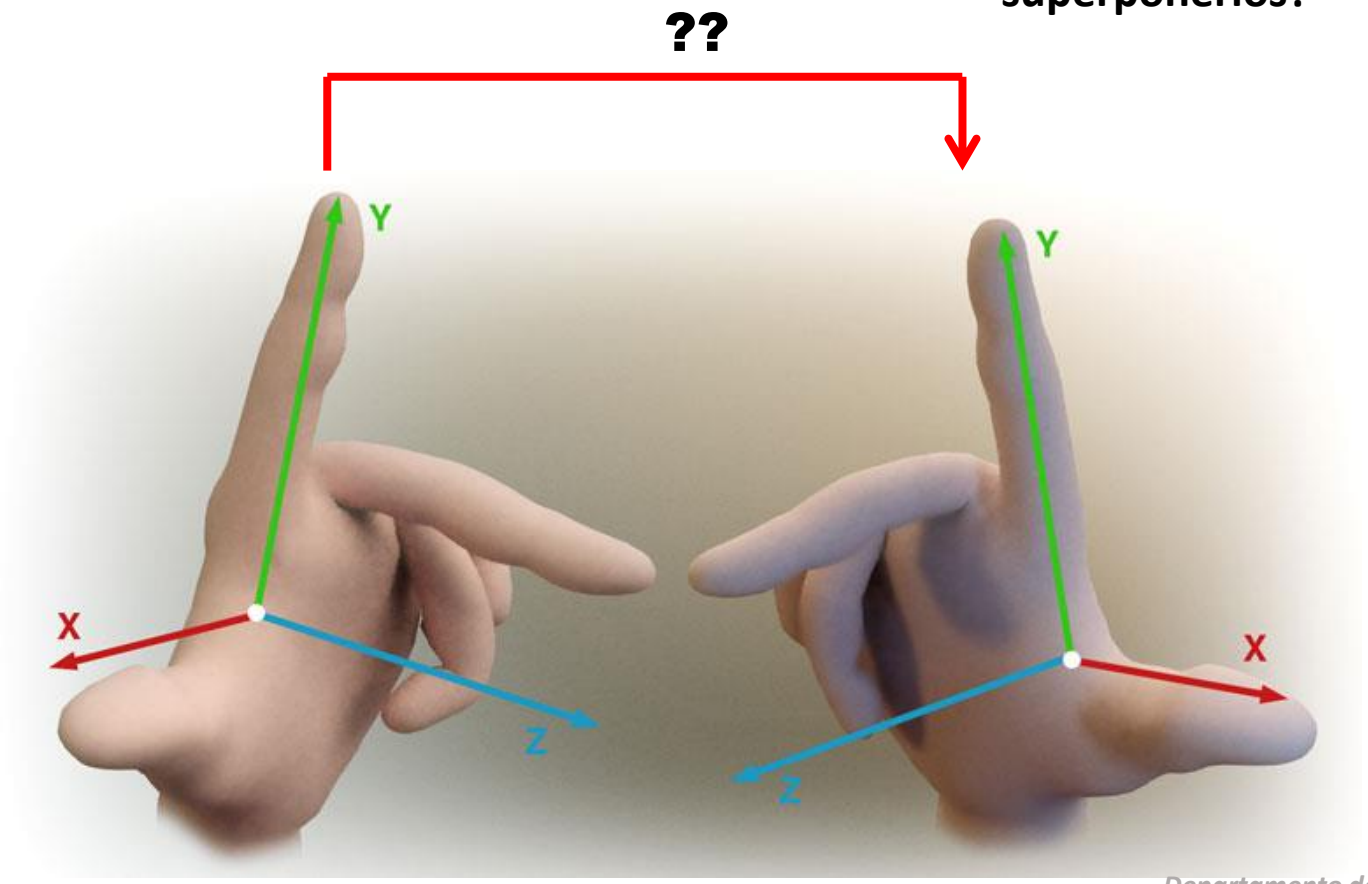


Sólo traslación!

Simetría en los cristales

MOTIVACIÓN. Para poder comprender la periodicidad de los sólidos cristalinos, debemos conocer las REGLAS DE SIMETRÍA

Vamos más allá…dado dos objetos enantiomorfos, **¿cómo podemos hacer para lograr superponerlos?**



Enantiomorfos: objetos con imagen especular no superponible
Enantiómeros: moléculas con imagen especular no superponible (típicamente aquellas que poseen un centro quiral)

Simetría en los cristales

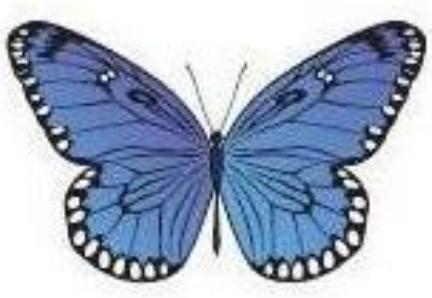
MOTIVACIÓN. Para poder comprender la periodicidad de los sólidos cristalinos, debemos conocer las REGLAS DE SIMETRÍA

RESPUESTA. Aprender a cerca de la "Teoría de las transformaciones isoméricas"

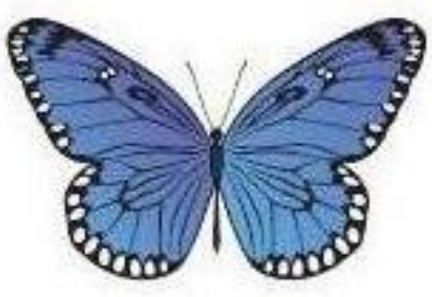
Simetría en los cristales

DEFINICIONES DE UTILIDAD.

- **Objetos congruentes**. Son aquellos que cada punto de uno de ellos corresponde a un punto del otro y además, se cumple que la distancia entre dos puntos es igual a la distancia entre los dos puntos equivalentes en el otro objeto. Como consecuencia, los correspondientes ángulos también serán iguales.



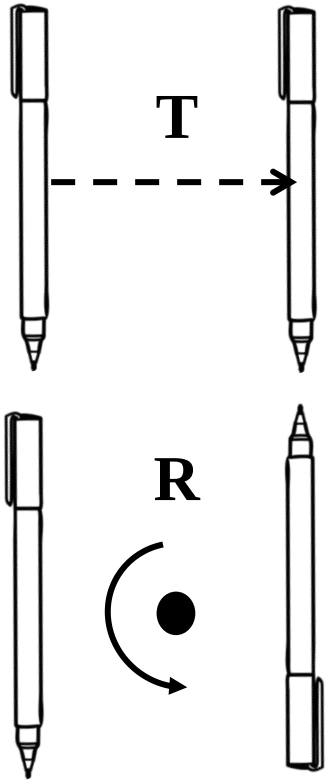
  - **Congruencia Directa.** La correspondencia de ángulos tiene el mismo signo.



  - **Congruencia Opuesta.** La correspondencia de ángulos tiene los signos opuestos.

Simetría en los cristales

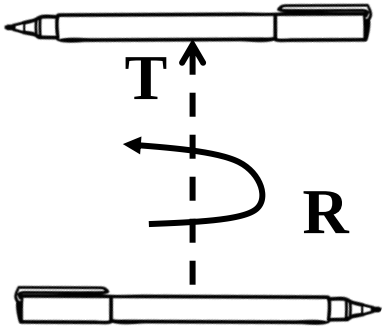
- **Objetos congruentes**. Son aquellos que cada punto de uno de ellos corresponde a un punto del otro y además, se cumple que la distancia entre dos puntos es igual a la distancia entre los dos puntos equivalentes en el otro objeto. Como consecuencia, los correspondientes ángulos también serán iguales.



- **Congruencia Directa.** La correspondencia de ángulos tiene el mismo signo. => Para este tipo de congruencia, un objeto puede hacerse **coincidir** con el otro a través de **movimientos** convenientes durante los cuales éste se comporta como un cuerpo rígido. Estos movimientos son:

1. TRASLACION – 2. ROTACIÓN – 3. ROTO-TRASLACIÓN

(o MOV. de TORNILLO)



Simetría en los cristales

- **Congruencia Opuesta.** ⇒ Los objetos se dicen que son **enantiomorfos.** En ese caso uno de los objetos coincidirá con el otro a través de las siguientes operaciones:

1. INVERSIÓN: operación de simetría con respecto a un punto
2. REFLEXIÓN: operación de simetría con respecto a un plano
3. ROTO-INVERSIÓN: producto de la rotación alrededor de un eje por la inversión con respecto un punto del eje
4. PLANO DE DESPLAZAMIENTO: producto de la reflexión por la traslación paralela al plano de reflexión
5. ROTO-REFLEXIÓN: producto de la rotación por la reflexión con respecto al plano perpendicular al eje de rotación

Elementos de Simetría

DEFINICIÓN

Si luego de la aplicación de una **operación de simetría** todas las propiedades del sistema permanecen iguales, la operación será entonces una **OPERACIÓN de SIMETRÍA**. Los **ELEMENTOS de SIMETRÍA** son **puntos, ejes o planos** con respecto a los cuales las operaciones de simetría son ejecutadas.

INCORPORANDO NOMENCLATURA

: representa a un objeto

: representa al enantiomorfo del objeto representado por un círculo (renglón anterior)

El + : indica sobre el plano de la hoja/pizarrón

El – : indica debajo del plano de la hoja/pizarrón

+ _ : indica que ambos objetos están ubicados uno encima del otro

Elementos de Simetría

- **EJE DE SIMETRÍA ROTACIONAL**. Un dado sistema presenta un **EJE de ROTACIÓN de ORDEN n**, cuando todas las propiedades del espacio permanecen inalteradas luego de una rotación de 2π/**n** alrededor de un eje. Estos ejes son representados con el número **n**

- **EJE DE ROTOTRASLACIÓN** (o de movimiento de tornillo). Un dado sistema presenta un **EJE de ROTOTRASLACIÓN de ORDEN n CON UN COMPONENTE TRASLACIONAL DE ORDEN t**, cuando todas las propiedades del espacio permanecen inalteradas luego de una rotación de 2π/**n** alrededor de un eje y una traslación **t** a lo largo del mismo.

- **EJES DE INVERSIÓN.** Un dado sistema presenta un **EJE de INVERSIÓN de ORDEN n**, cuando todas las propiedades del espacio permanecen inalteradas luego de ejecutar el producto de una rotación de 2π/**n** alrededor de un eje por la inversión con respecto a un punto localizado en el correspondiente eje. Estos ejes son representados con el número $\bar{\mathbf{n}}$ **("n barra" o "menos n").**

- **EJE DE ROTOREFLEXIÓN.** Un dado sistema presenta un **EJE de ROTOREFLEXIÓN de ORDEN n**, cuando todas las propiedades del espacio permanecen inalteradas luego de ejecutar el producto de una rotación de 2π/**n** alrededor de un eje por la reflexión con respecto al plano normal al correspondiente eje. Estos ejes son representados con el número $\tilde{\mathbf{n}}$**.** El efecto de aplicar los ejes $\tilde{1}$, $\tilde{2}$, $\tilde{3}$, $\tilde{4}$ y $\tilde{6}$ coincide con los ejes de inversión en general de un orden diferente => $\tilde{n}$ no suelen considerarse y sí se consideran sus equivalentes de inversión . <u>NOTAR QUE</u>: $\tilde{1} = \mathrm{m}$, $\tilde{2} = \bar{1}$, $\tilde{3} = \bar{6}$, $\tilde{4} = \bar{4}$ y $\tilde{6} = \bar{3}$.

- **PLANOS DE REFLEXIÓN CON COMPONENTES DE TRASLACIÓN (GLIDES)**. Un dado sistema presenta ESTE OPERADOR, cuando todas las propiedades de una mitad del espacio son idénticas a las de la otra mitad del espacio, cuando se aplica la operación del producto de la reflexión a través de un plano por la traslación paralela a dicho plano.

Elementos de Simetría

- OBSERVACIONES A DESTACAR:

$\tilde{1} = \mathrm{m}$, $\tilde{2} = \bar{1}$, $\tilde{3} = \bar{6}$, $\tilde{4} = \bar{4}$ y $\tilde{6} = \bar{3}$ (ya mencionadas)

Eje rotacional de orden 4 es al mismo tiempo un eje rotacional de orden 2

Eje rotacional de orden 6 es al mismo tiempo un eje rotacional de orden 2 y de orden 3

La dirección del eje $\bar{1}$ es irrelevante dado que la operación coincide con la inversión con respecto a un punto

El eje $\bar{2}$ es equivalente a un plano de reflexión (m) perpendicular al mismo

El eje $\bar{3} = 3\bar{1}$ ($\bar{3}$ es equivalente al producto de un eje rotacional 3 por una inversión)

El eje $\bar{4} = 2$ ($\bar{4}$ es equivalente un eje de rotación 2)

El eje $\bar{6} = 3/m$ ($\bar{6}$ es equivalente al producto de un eje rotacional 3 por una reflexión con respecto al plano normal al mismo)

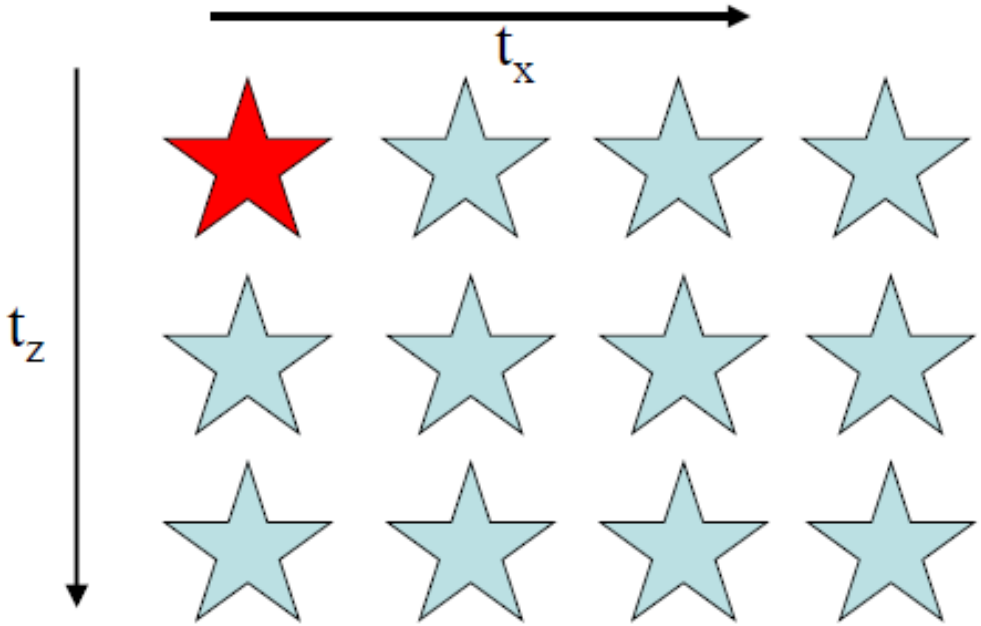
Elementos de Simetría

RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE

- **Operaciones de simetría SIN TRASLACIÓN**
  - **REFLEXIÓN (espejo)**
  - **INVERSIÓN (centro de simetría)**
  - **ROTACIÓN**
  - **PLANO DE DESPLAZAMIENTO (en inglés glide)**

TRASLACIÓN

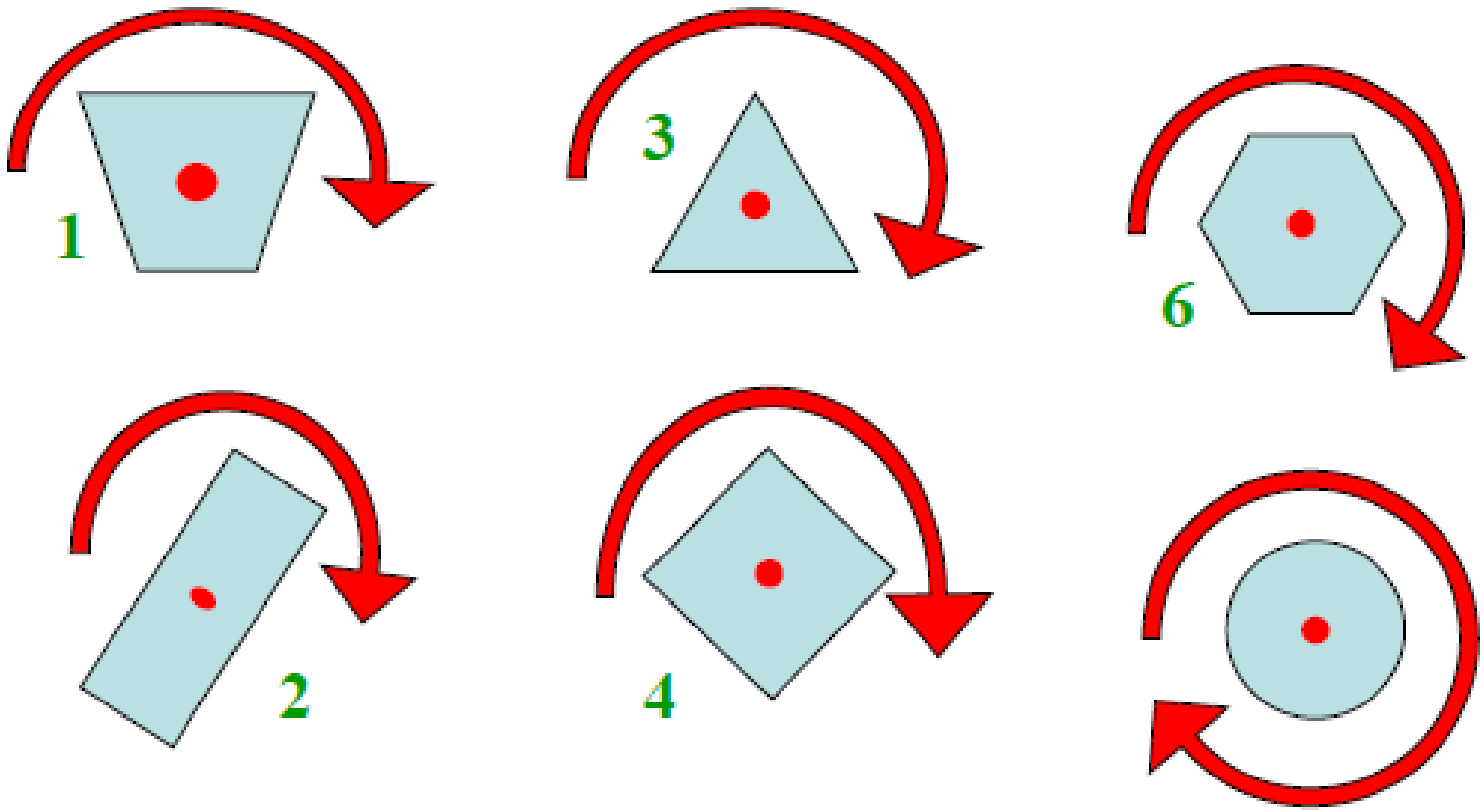
Operación que genera un patrón regular a intervalos idénticos. En 3D, la traslación se indica como x, y, z



Elementos de Simetría

RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE

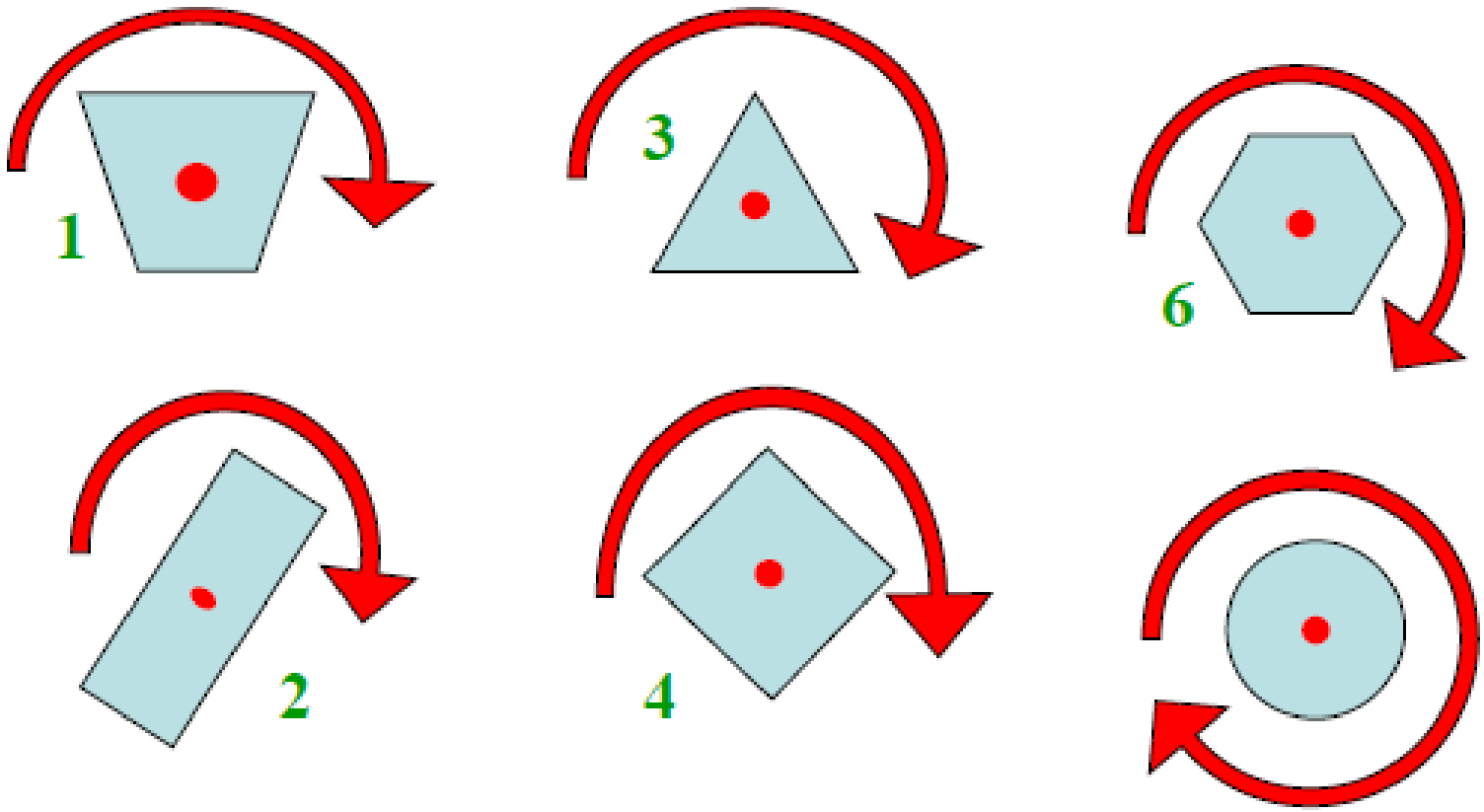
ROTACIÓN La simetría rotacional se expresa como un todo con el número n comprendido entre 1 y ∞. El n representa el número de veces que el motivo se repite en una rotación de 360 ° (2π).



Elementos de Simetría

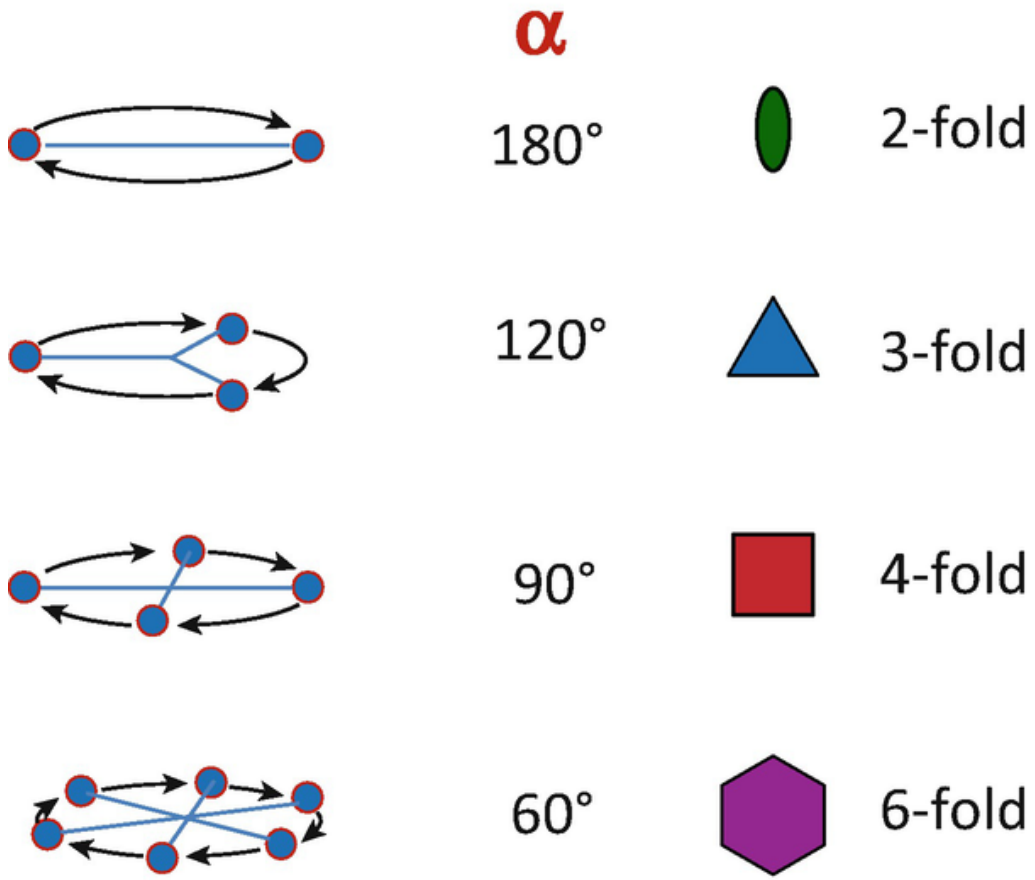
RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE

ROTACIÓN Si la rotación produce patrones donde **se conserva** el motivo original, ambos, el objeto generado por rotación y el original, son **congruentes**.



Elementos de Simetría

RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE: SIMBOLOGÍA PARA LA ROTACIÓN

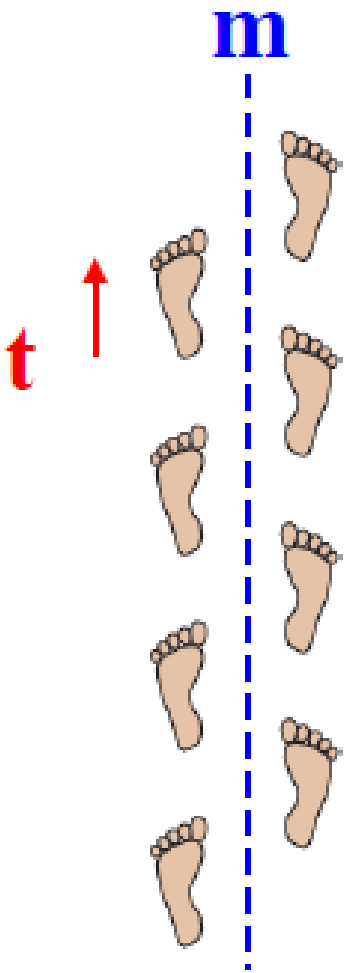


n = 2, 3, 4, 6

Elementos de Simetría

RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE

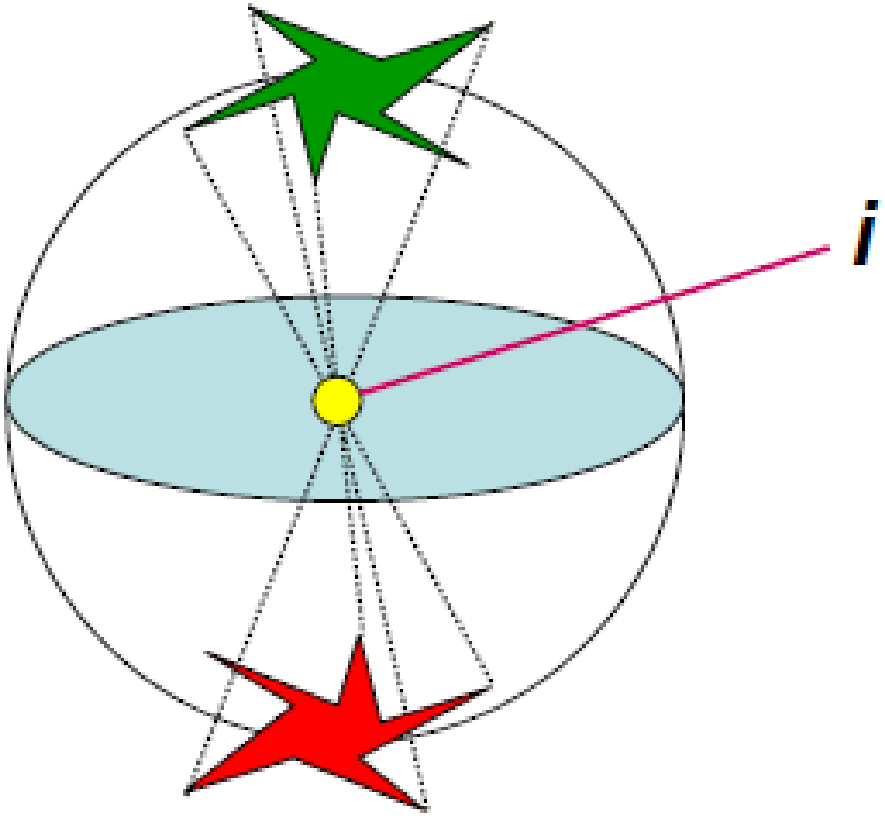
PLANO DE DESPLAZAMIENTO Es una operación de DOS pasos: **reflexión** seguida de **translación**.



Elementos de Simetría

RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE

INVERSION La inversión produce un **objeto invertido** a través de un **centro de inversión (i)**.

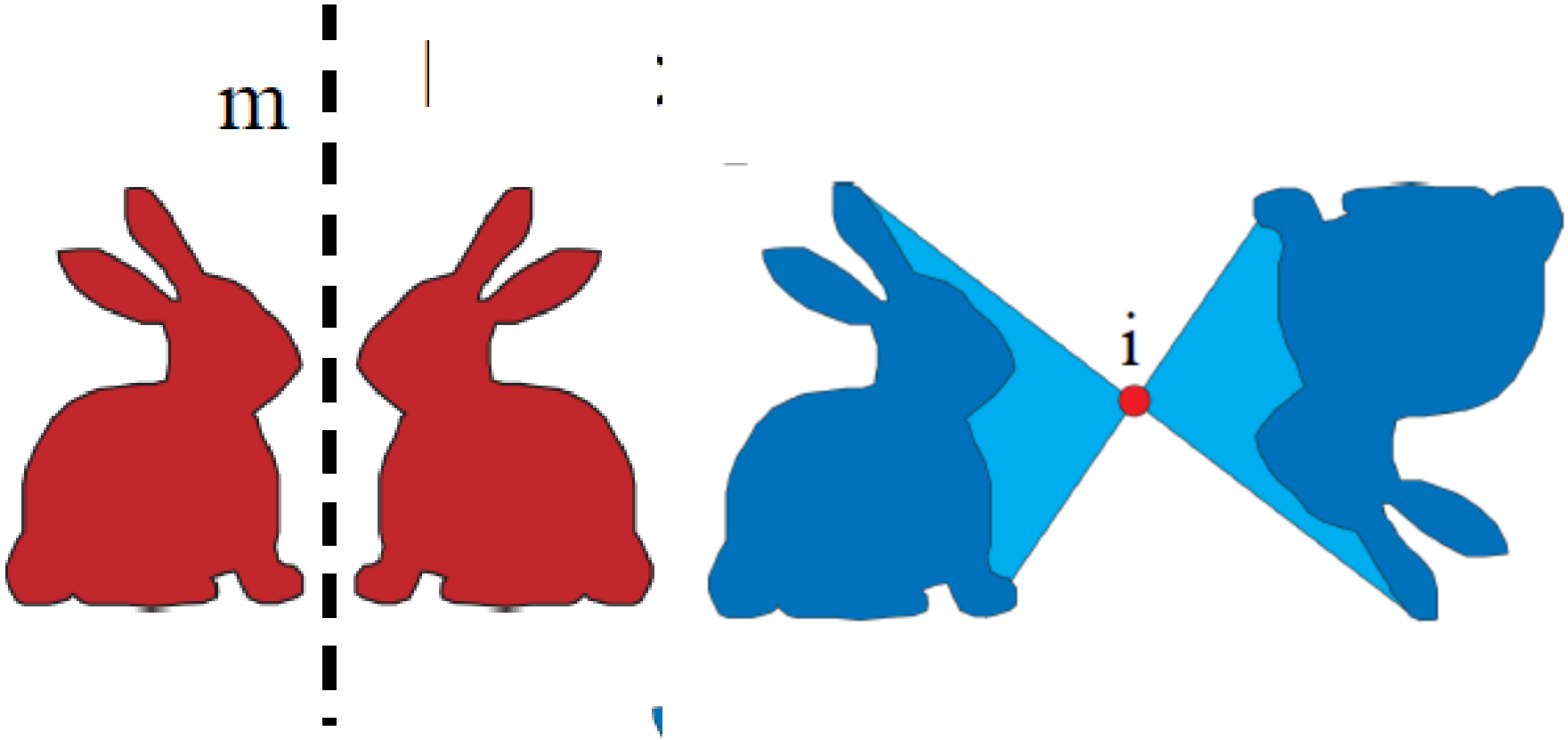


¿Esta operación es congruente o genera un par enantiomórfico?

Elementos de Simetría

RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE

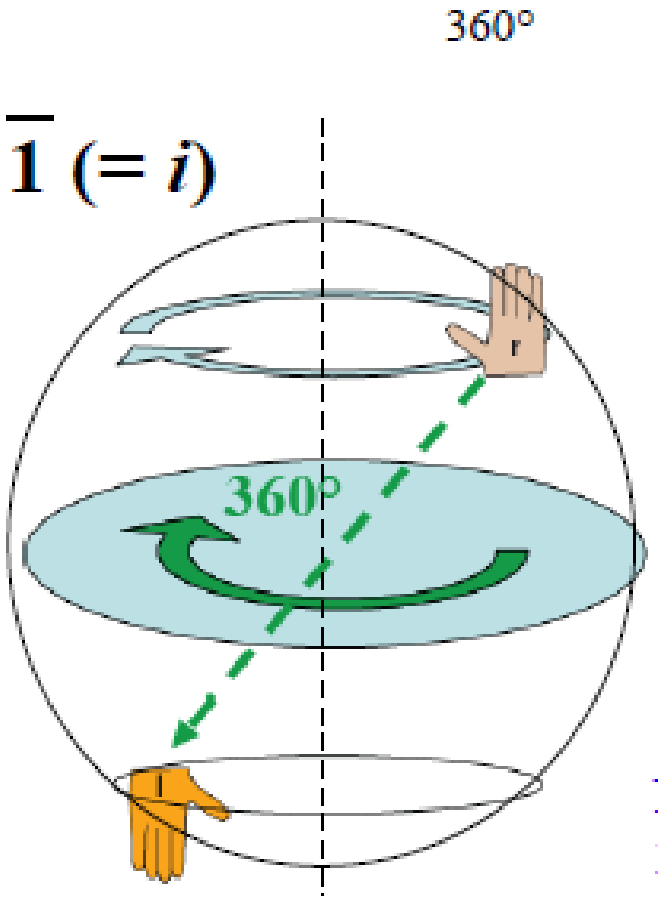
REFLEXIÓN vs. INVERSIÓN Ejemplo en 2D



Elementos de Simetría

RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE

ROTOINVERSION. Ejemplo combinación de rotación e inversión.



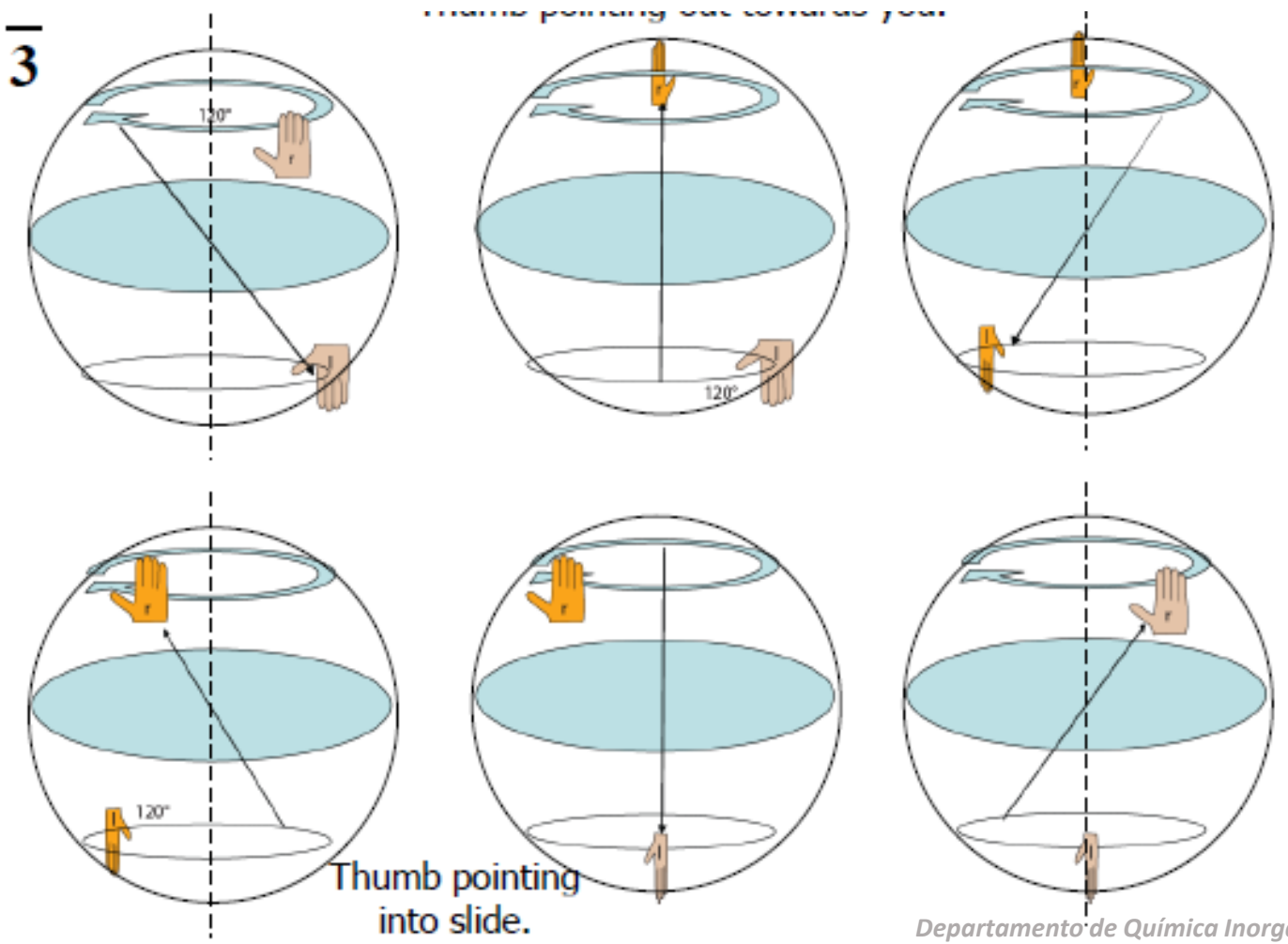
Notar que en 2D la **rotación** resulta en **pares congruentes**.

Pero en 3D la **rotoinversión** genera **pares enantiomorfos**

Elementos de Simetría

RESUMIENDO Y EJEMPLIFICANDO GRAFICAMENTE

ROTOINVERSION. Ejemplo combinación de rotación e inversión.

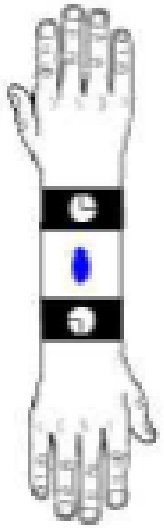


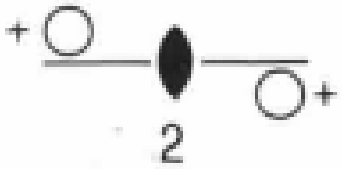
Elementos de Simetría

INCORPORANDO NOMENCLATURA

Eje de rotación ***2***

Eje a lo largo de z



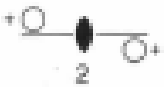


Operación:
(x, y, z) -> (-x, -y, z)

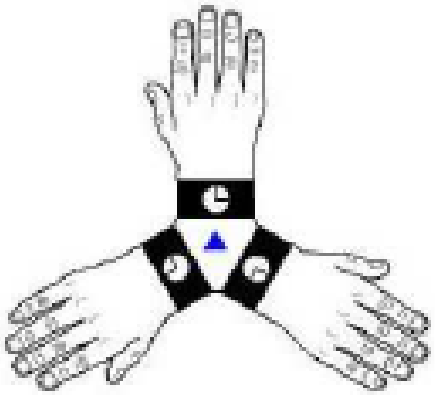
Elementos de Simetría

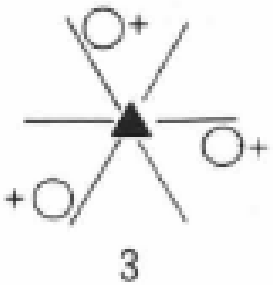
INCORPORANDO NOMENCLATURA

Eje de rotación ***3***



Eje a lo largo de z



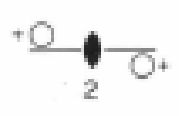


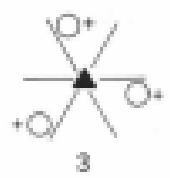
Operación:
(x, y, z)
(xcos120+ysen120, -xsen120+ycos120, z)
(xcos240+ysen240, -xsen240+ycos240, z)

Elementos de Simetría

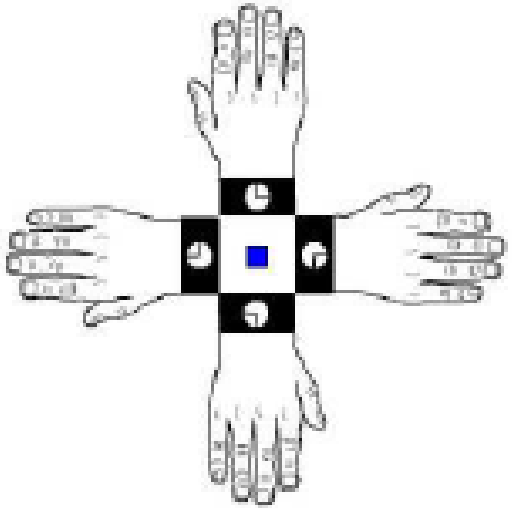
INCORPORANDO NOMENCLATURA

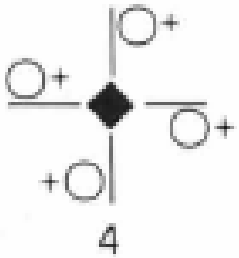
Eje de rotación ***4***





Eje a lo largo de z



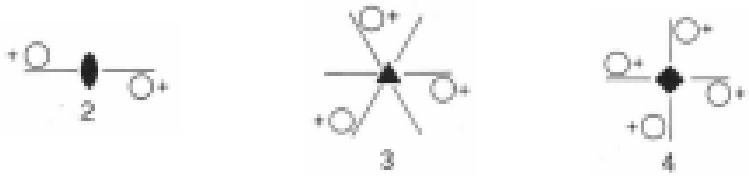


Operación:
(x, y, z) -> (-y, x, z)
(-x, -y, z)
(y, -x, z)

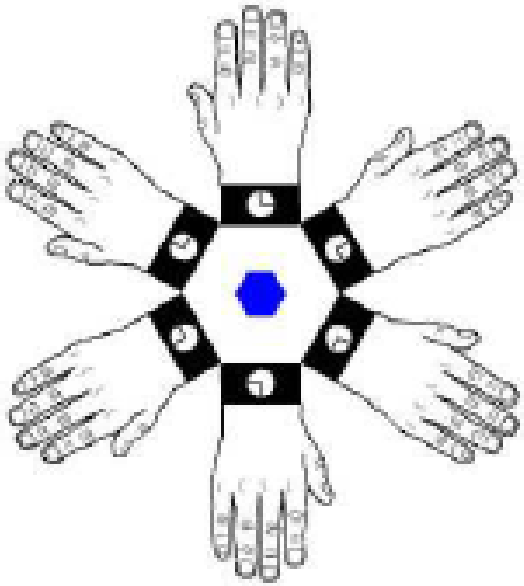
Elementos de Simetría

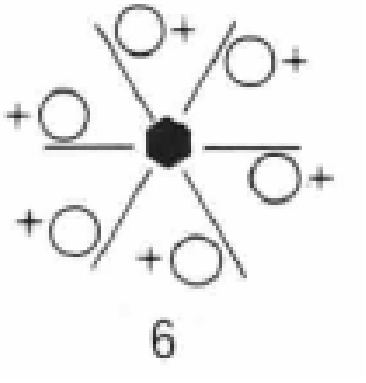
INCORPORANDO NOMENCLATURA

Eje de rotación *6*

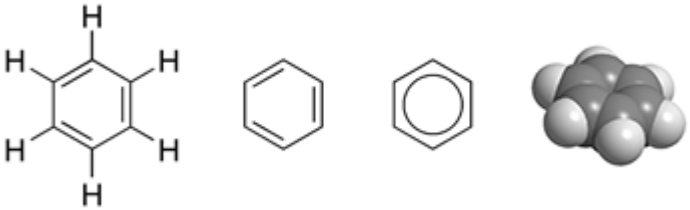


Eje a lo largo de z





Operación:
Tarea para el hogar

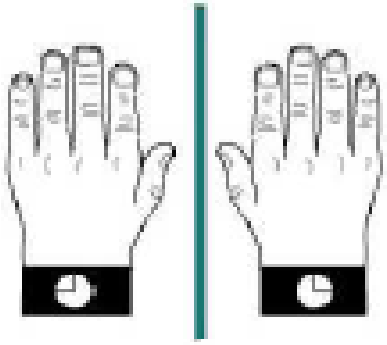


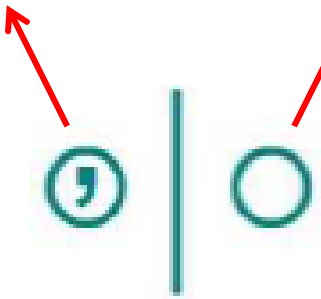
Elementos de Simetría

INCORPORANDO NOMENCLATURA

Plano de simetría *m*

Plano perpendicular al eje "x"





(x, y, z) -> (-x, y, z)

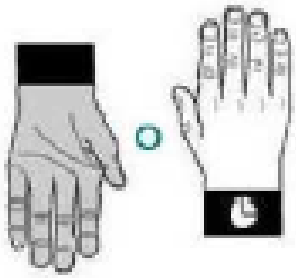
Elemento de simetría impropio

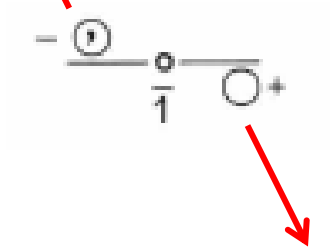
Elementos de Simetría

INCORPORANDO NOMENCLATURA

Centro de inversión $\bar{1}$

ENANTIOMORFO





(x, y, z) -> (-x, -y, -z)

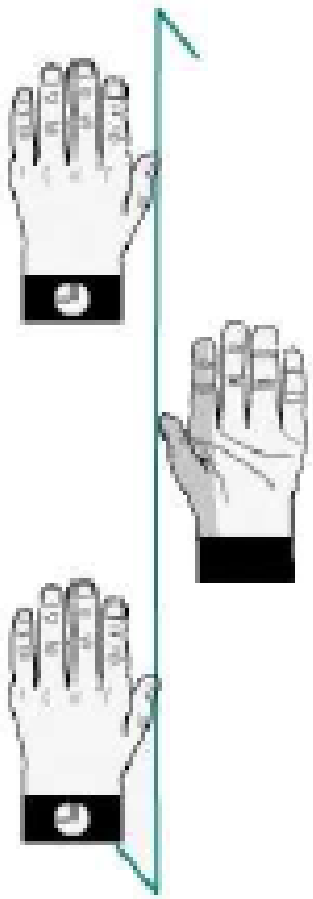
OBJETO

Elemento de simetría impropio

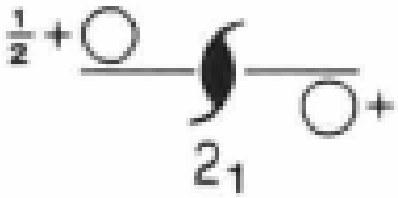
Los ejes de inversión se representan como “n barra” o “menos n”. Y representan el producto de la rotación en 2π/n al rededor del eje por la inversión a un punto sobre el eje

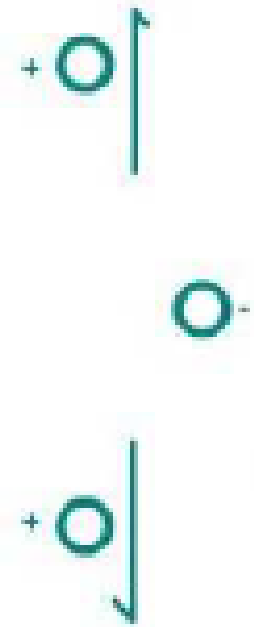
Elementos de Simetría

INCORPORANDO NOMENCLATURA



Eje de rototraslación 2_1





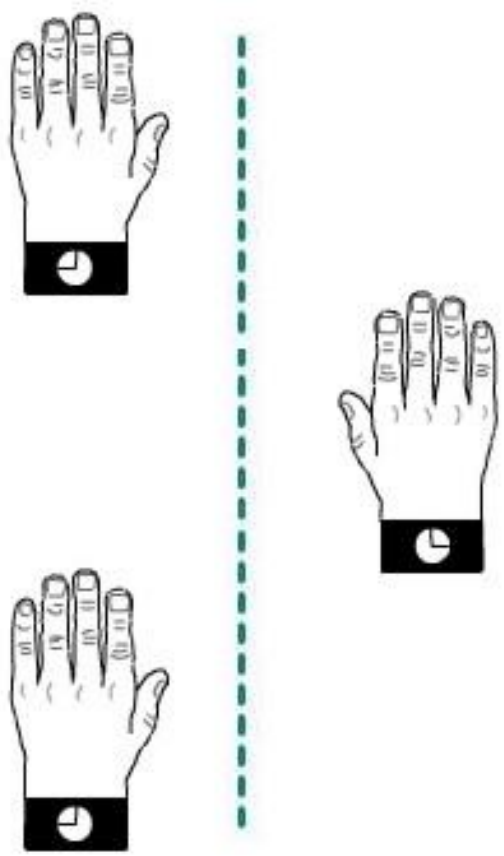
Operación:

x, y, z -> -x, y+1/2, -z

Elementos de Simetría

INCORPORANDO NOMENCLATURA

Plano de desplazamiento



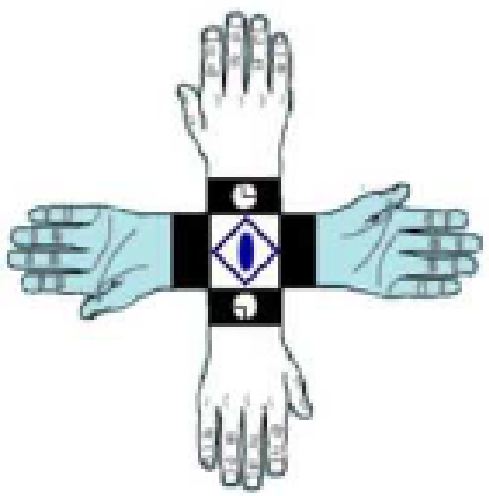
Herman-Mauguin Símbolo	Eje ⊥ al plano con deslizamiento	Vector Desplazamiento
a	b or c	a/2
b	a or c	b/2
c	a or b	c/2
n*	a b c	b/2+c/2 a/2+c/2 a/2+b/2
d**	a b c	b/4+c/4 a/4+c/4 a/4+b/4

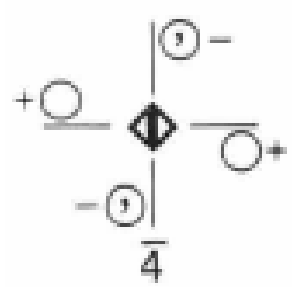
Elementos de Simetría

INCORPORANDO NOMENCLATURA

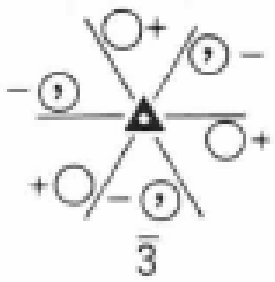
Eje de roto-inversión

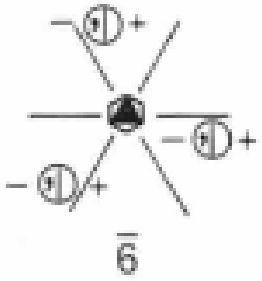
Eje a lo largo de z





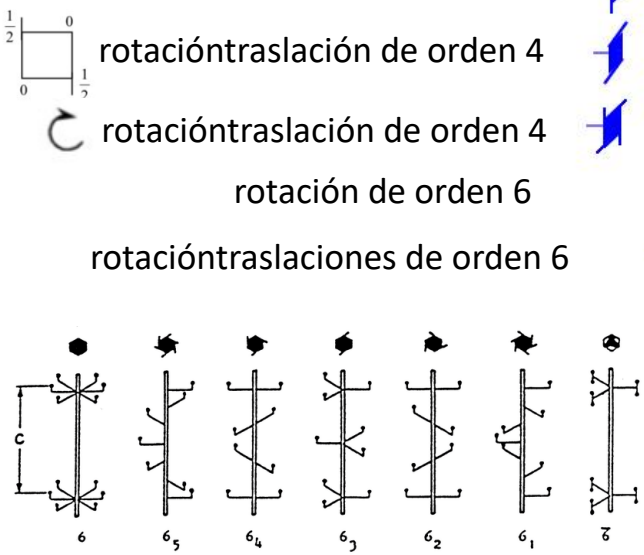
Operación:
(x, y, z) -> (y, -x, -z)
(-x, -y, z)
(-y, x, -z)





Elementos de Simetría

	Graphic symbol	Num. symbol	Graphic symbol	Num. symbol
	None	1		$\bar{1}$
rotación de orden 2		2		$2/m$
rotacióntraslación de orden 2		2_1		$2_1/m$
rotación de orden 3		3		$\bar{3}$
rotacióntraslación de orden 3		3_1		$\bar{4}$
rotacióntraslación de orden 3		3_2		$4/m$
rotación de orden 4		4		$4_2/m$
rotacióntraslación de orden 4		4_1		$\bar{6}$
rotacióntraslación de orden 4		4_2		$6/m$
rotacióntraslación de orden 4		4_3		$6_3/m$
rotación de orden 6		6		m
rotacióntraslaciones de orden 6		6_1		a,b,c
		6_2		a,b,c
		6_3		n
		6_4	1/8	d
		6_5	3/8	d



rotoinversion axis	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
rotoinversion operation	rotate 360° and invert	rotate 180° and invert	rotate 120° and invert	rotate 90° and invert	rotate 60° and invert

Rotoinversiones

Elementos de Simetría

Rotoinversiones

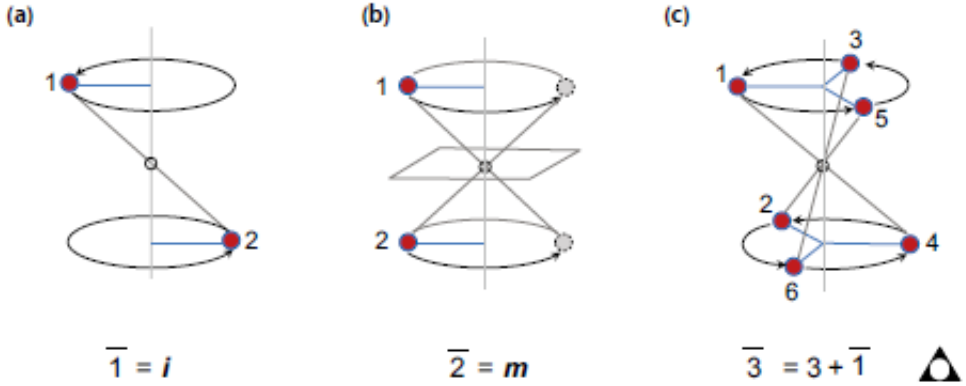
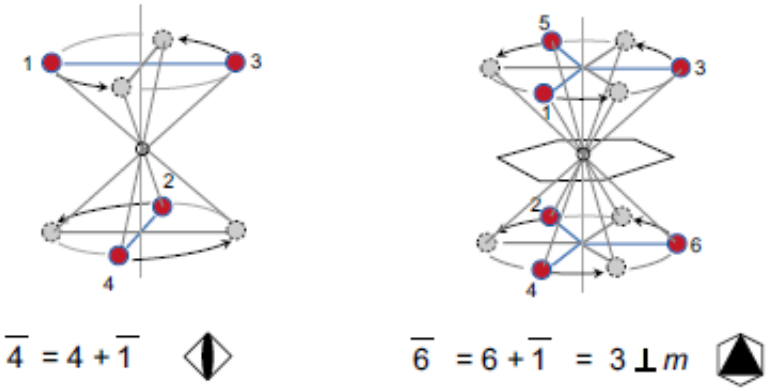


Fig. 3.15 Point patterns (red spheres) showing a rotoinversion axis of the order 1, 2, and 3

rotoinversion axis	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
rotoinversion operation	rotate 360° and invert	rotate 180° and invert	rotate 120° and invert	rotate 90° and invert	rotate 60° and invert

Fig. 3.16 The rotoinversions of orders 4 and 6, illustrated by point patterns. A six-fold rotoinversion axis automatically contains a mirror plane perpendicular to the rotoinversion axis



Elementos de Simetría

Rotoinversiones

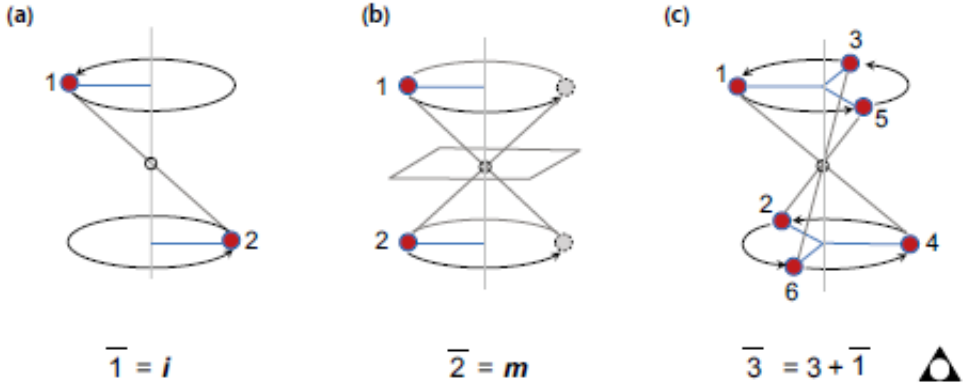
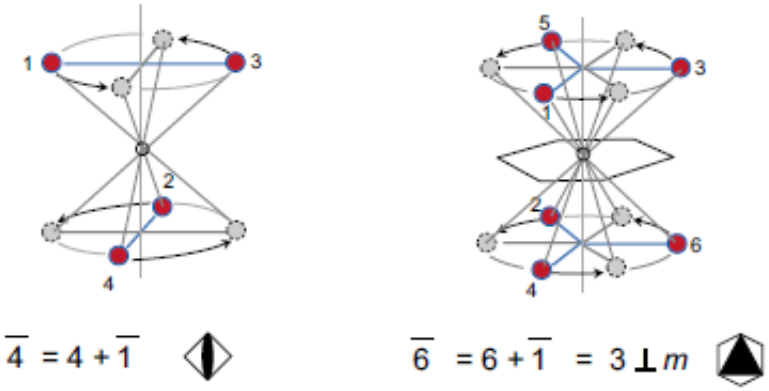


Fig. 3.15 Point patterns (red spheres) showing a rotoinversion axis of the order 1, 2, and 3

rotoinversion axis	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
rotoinversion operation	rotate 360° and invert	rotate 180° and invert	rotate 120° and invert	rotate 90° and invert	rotate 60° and invert

Fig. 3.16 The rotoinversions of orders 4 and 6, illustrated by point patterns. A six-fold rotoinversion axis automatically contains a mirror plane perpendicular to the rotoinversion axis



Elementos de Simetría

(d) Symmetry axes normal to the plane of projection (three dimensions) and symmetry points in the plane of the figure (two dimensions)

Symmetry axis or symmetry point	Graphical symbol‡	Screw vector of a right-handed screw rotation in units of the shortest lattice translation vector parallel to the axis	Printed symbol (subelements in parentheses)
Identity	None	None	1
Twofold rotation axis Twofold rotation point (two dimensions)		None	2
Twofold screw axis: '2 sub 1'		$\frac{1}{2}$	2_1
Threefold rotation axis Threefold rotation point (two dimensions)		None	3
Threefold screw axis: '3 sub 1'		$\frac{1}{3}$	3_1
Threefold screw axis: '3 sub 2'		$\frac{2}{3}$	3_2
Fourfold rotation axis Fourfold rotation point (two dimensions)		None	4 (2)
Fourfold screw axis: '4 sub 1'		$\frac{1}{4}$	4_1 (2_1)
Fourfold screw axis: '4 sub 2'		$\frac{1}{2}$	4_2 (2)
Fourfold screw axis: '4 sub 3'		$\frac{3}{4}$	4_3 (2_1)
Sixfold rotation axis Sixfold rotation point (two dimensions)		None	6 (3,2)
Sixfold screw axis: '6 sub 1'		$\frac{1}{6}$	6_1 $(3_1,2_1)$
Sixfold screw axis: '6 sub 2'		$\frac{1}{3}$	6_2 $(3_2,2)$
Sixfold screw axis: '6 sub 3'		$\frac{1}{2}$	6_3 $(3,2_1)$
Sixfold screw axis: '6 sub 4'		$\frac{2}{3}$	6_4 $(3_1,2)$
Sixfold screw axis: '6 sub 5'		$\frac{5}{6}$	6_5 $(3_2,2_1)$
Centre of symmetry, inversion centre: '1 bar' Reflection point, mirror point (one dimension)		None	$\bar{1}$
Inversion axis: '3 bar'		None	$\bar{3}$ $(3,\bar{1})$
Inversion axis: '4 bar'		None	$\bar{4}$ (2)
Inversion axis: '6 bar'		None	$\bar{6} \equiv 3/m$
Twofold rotation axis with centre of symmetry		None	$2/m$ $(\bar{1})$
Twofold screw axis with centre of symmetry		$\frac{1}{2}$	$2_1/m$ $(\bar{1})$
Fourfold rotation axis with centre of symmetry		None	$4/m$ $(\bar{4},2,\bar{1})$
'4 sub 2' screw axis with centre of symmetry		$\frac{1}{2}$	$4_2/m$ $(\bar{4},2,\bar{1})$
Sixfold rotation axis with centre of symmetry		None	$6/m$ $(\bar{6},\bar{3},3,2,\bar{1})$
'6 sub 3' screw axis with centre of symmetry		$\frac{1}{2}$	$6_3/m$ $(\bar{6},\bar{3},3,2_1,\bar{1})$

† Notes on the 'heights' h of symmetry points $\bar{1}$,$\bar{3}$,$\bar{4}$, and $\bar{6}$:
(1) Centres of symmetry $\bar{1}$ and $\bar{3}$, as well as inversion points $\bar{4}$ and $\bar{6}$ on $\bar{4}$- and $\bar{6}$-axes parallel [001], occur in pairs at 'heights' h and $h + \frac{1}{2}$. In the space-group diagrams only one fraction h is given, *e.g.* $\frac{1}{4}$ stands for $h = \frac{1}{4}$ and $\frac{3}{4}$. No fraction means $h = 0$ and $\frac{1}{2}$. In *cubic* space groups, however, *both* fractions are given for vertical $\bar{4}$-axes, including $h = 0$ and $\frac{1}{2}$.
(2) Symmetries $4/m$ and $6/m$ contain vertical $\bar{4}$- and $\bar{6}$-axes; their $\bar{4}$- and $\bar{6}$-inversion points coincide with the centres of symmetry. This is not indicated in the space-group diagrams.
(3) Symmetries $4_2/m$ and $6_3/m$ also contain vertical $\bar{4}$- and $\bar{6}$-axes, but their $\bar{4}$- and $\bar{6}$-inversion points alternate with the centres of symmetry; *i.e.* $\bar{1}$-points at h and $h + \frac{1}{2}$ interleave with $\bar{4}$- or $\bar{6}$-points at $h + \frac{1}{4}$ and $h + \frac{3}{4}$. In the tetragonal and hexagonal space-group diagrams only *one* fraction for $\bar{1}$ and *one* for $\bar{4}$ or $\bar{6}$ are given. In the cubic diagrams *all four* fractions are listed for $4_2/m$; *e.g.* $Pm\bar{3}n$ (No. 223): $\bar{1}$: $0,\frac{1}{2}$; $\bar{4}$: $\frac{1}{4},\frac{3}{4}$.

(e) Symmetry axes parallel to the plane of projection

Symmetry axis	Graphical symbol†	Screw vector of a right-handed screw rotation in units of the shortest lattice translation vector parallel to the axis	Printed symbol (subelements in parentheses)
Twofold rotation axis		None	2
Twofold screw axis: '2 sub 1'		$\frac{1}{2}$	2_1
Fourfold rotation axis		None	4 (2)
Fourfold screw axis: '4 sub 1'		$\frac{1}{4}$	4_1 (2_1)
Fourfold screw axis: '4 sub 2'		$\frac{1}{2}$	4_2 (2)
Fourfold screw axis: '4 sub 3'		$\frac{3}{4}$	4_3 (2_1)
Inversion axis: '4 bar'		None	$\bar{4}$ (2)
Inversion point on '4 bar'-axis			$\bar{4}$-point

in cubic space groups only

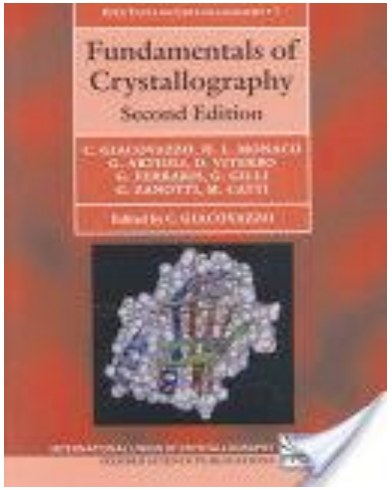
† Symbols for horizontal symmetry axes are given outside the unit cell of the space-group diagrams. *Twofold* axes always occur in pairs, at 'heights' h and $h + \frac{1}{2}$ above the plane of projection; here, a fraction h attached to such a symbol indicates two axes with heights h and $h + \frac{1}{2}$. No fraction stands for $h = 0$ and $\frac{1}{2}$. The rule of pairwise occurrence is not valid for the horizontal *fourfold* axes in cubic space groups; here, *all* heights are given, including $h = 0$ and $\frac{1}{2}$. This applies also to the horizontal $\bar{4}$-axes and the $\bar{4}$-inversion points located on these axes.

(f) Symmetry axes inclined to the plane of projection (in cubic space groups only)

Symmetry axis	Graphical symbol†		Screw vector of a right-handed screw rotation in units of the shortest lattice translation vector parallel to the axis	Printed symbol
Twofold rotation axis		parallel to a face diagonal of the cube	None	2
Twofold screw axis: '2 sub 1'		parallel to a face diagonal of the cube	$\frac{1}{2}$	2_1
Threefold rotation axis		parallel to a body diagonal of the cube	None	3
Threefold screw axis: '3 sub 1'		parallel to a body diagonal of the cube	$\frac{1}{3}$	3_1
Threefold screw axis: '3 sub 2'		parallel to a body diagonal of the cube	$\frac{2}{3}$	3_2
Inversion axis: '3 bar'		parallel to a body diagonal of the cube	None	$\bar{3}$

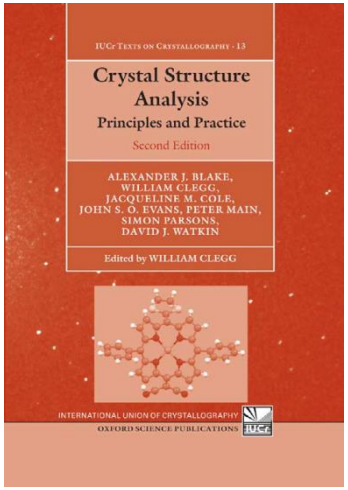
† Dots mark intersection points of axes with the plane at $h = 0$. In some cases the intersection points are obscured by symbols of symmetry elements with height $h \geq 0$; examples: $Fd\bar{3}$ (203), origin choice 2; $Pn\bar{3}n$ (222), origin choice 2; $Pm\bar{3}n$ (223); $Im\bar{3}m$ (229); $Ia\bar{3}d$ (230).

Referencias y bibliografía



Fundamentals of Crystallography.
IUCr Book Series
Edited by Carmelo Giacovazzo

Crystal Structure Analysis
Principles and Practice
IUCr Book Series
Edited by William Clegg



Material web

http://www.crystallographiccourseware.com/SpaceGroupSymmetry/ThreeDSymmetryElements.html

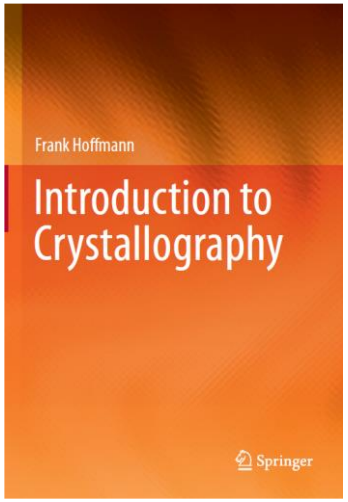
http://www.fempatrimoni.cat/www-crista/CASTELLA/index_es.htm#

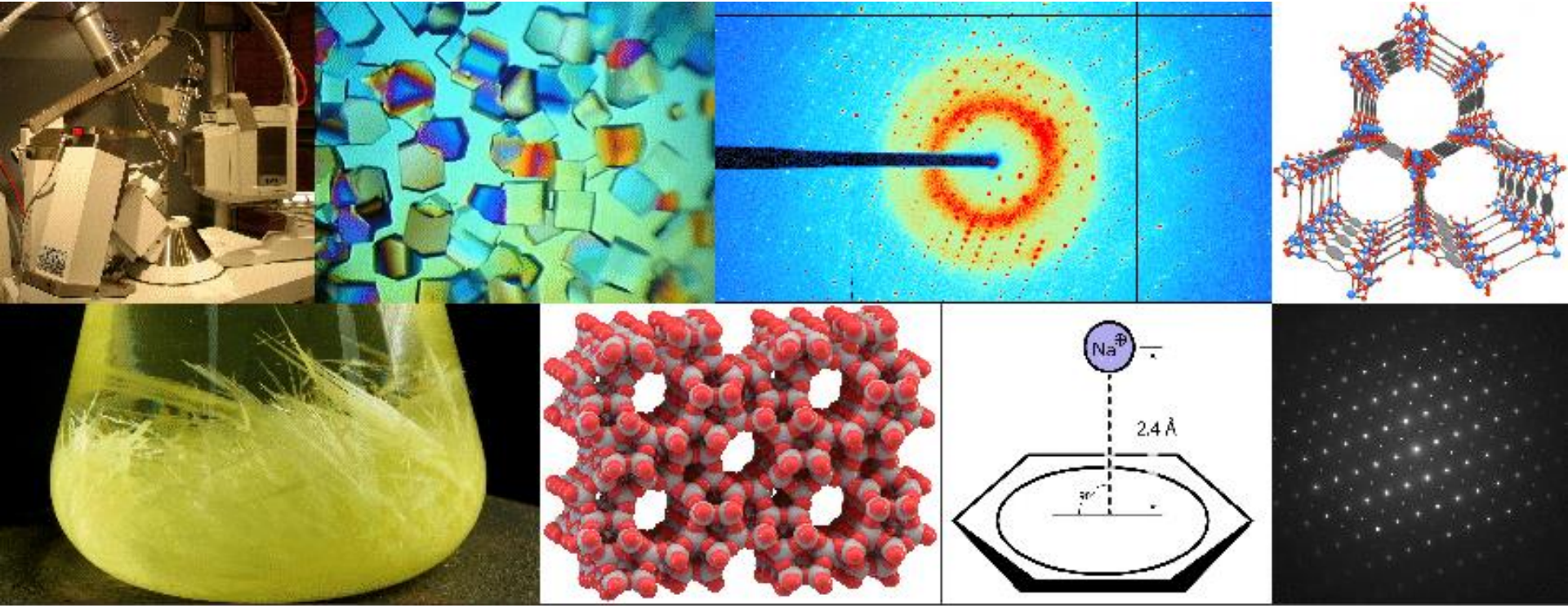
http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/misc/symbols.htm

http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/parte_03_1-en.html

http://www.iucr.org/resources/symmetry-font

Introduction to Crystallography
Frank Hoffmann
Springer
2020





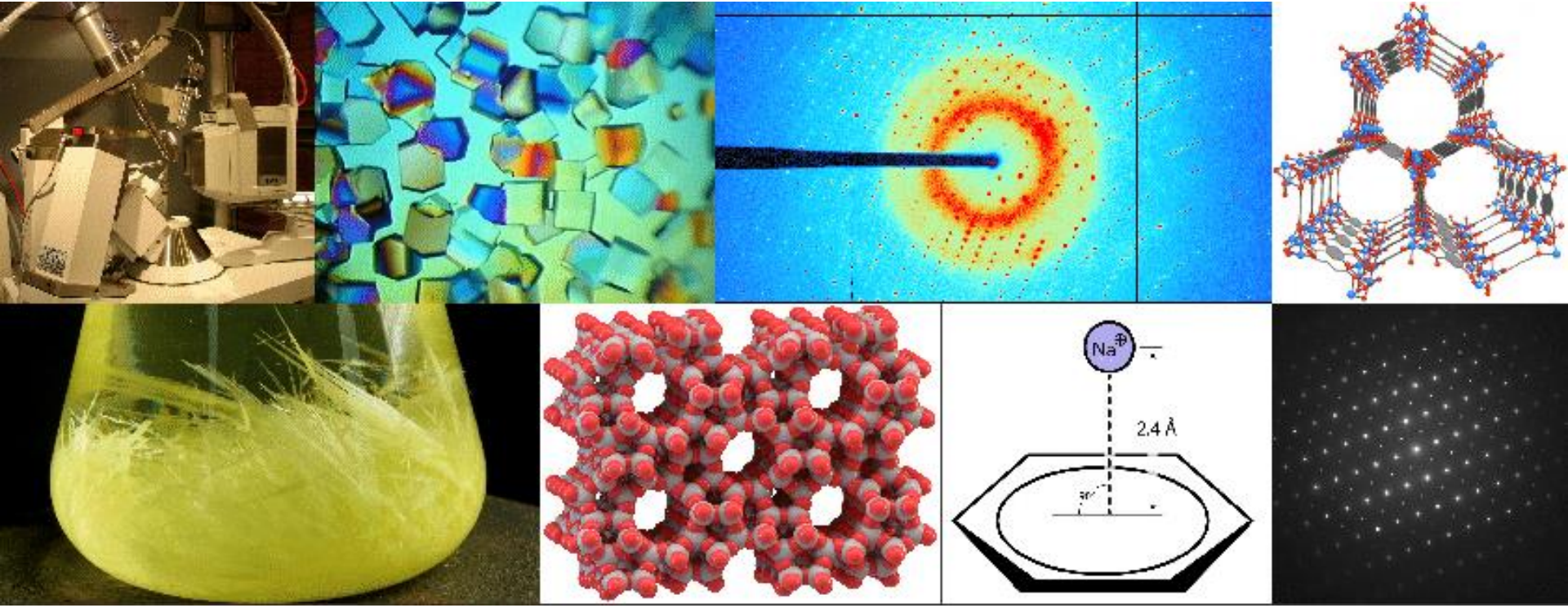
Materia Optativa de Grado y Postgrado | 2do CUATRIMESTRE 2023

CRISTALOGRAFÍA

Fundamentos y Aplicaciones

Florencia Di Salvo | Sebastián Suárez

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN, UBA



Materia Optativa de Grado y Postgrado | 2do CUATRIMESTRE 2023

SIMETRIA EN CRISTALES II

Florencia Di Salvo | Sebastián Suárez

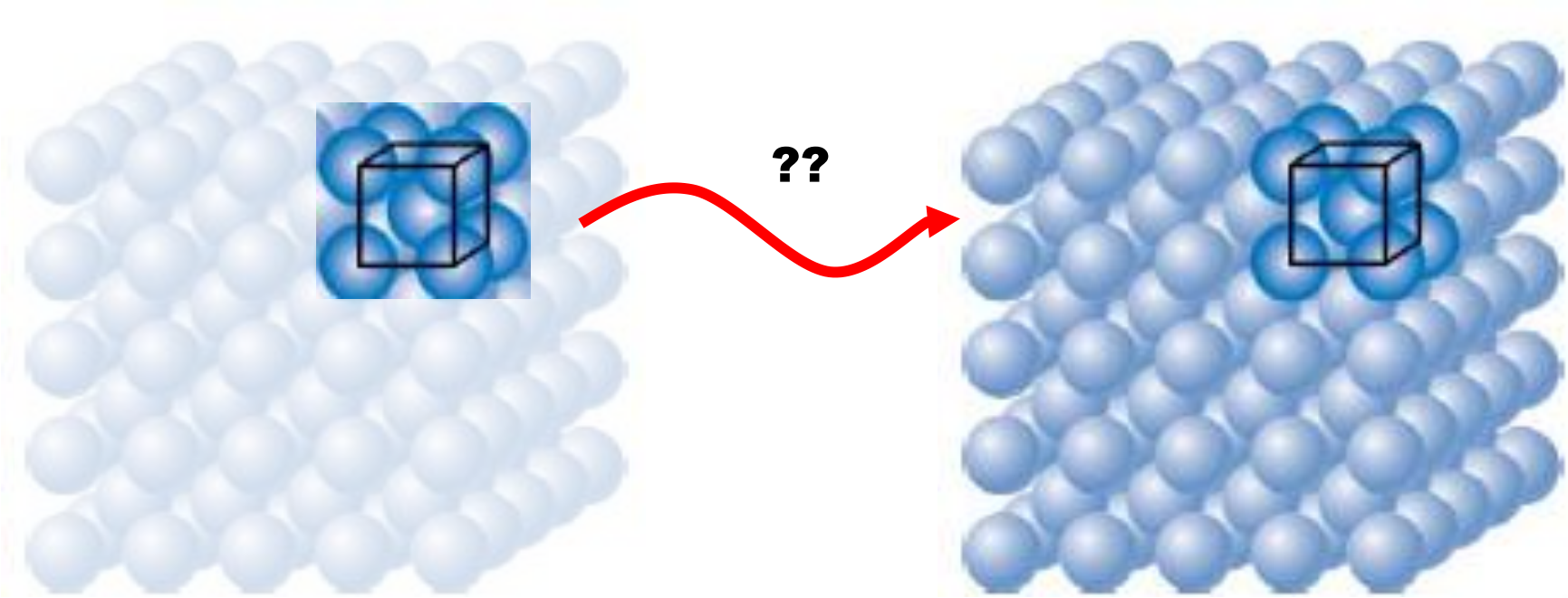
Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN, UBA

MOTIVACION y objetivos de la clase

Para poder comprender la periodicidad de los sólidos cristalinos, debemos conocer las REGLAS DE SIMETRÍA

Para conocer la **naturaleza y el orden de la periodicidad** en los cristales, debemos aprender cuáles son las **operaciones** por la cuales la repetición del **MOTIVO BÁSICO** de cristal da lugar al **CRISTAL PROPIAMENTE DICHO**

¿cómo podemos hacer para lograr describir todo el cristal a partir del motivo básico?



VOLVEMOS A redes y celdas

Los 7 sistemas cristalinos

Clasificación de las celdas unidades:

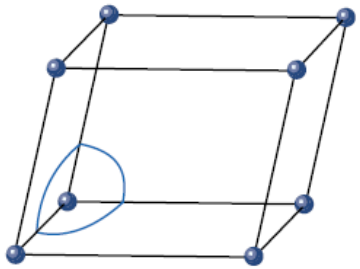
- Todas son paralelepípedos.
- Por su métrica (ángulos y dimenciones de los lados), el número de diferentes celdas unidades es limitado → 7
- Todos los cristales del mundo pueden ser clasificados según estas 7 celdas unidades
- Nombres de los sistemas: Triclinico, Monoclinic, Ortorrómbico, Tetragonal, Trigonal, Hexagonal, Cúbico

Table 1.1 The seven crystal systems, their restrictions concerning the metric, and their maximal symmetry

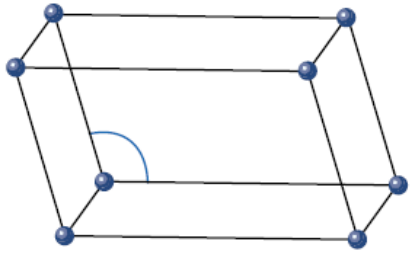
Crystal system	Restrictions concerning the		Maximal symmetry
	Length of axes	Angles of the cell	
Triclinic	*None*[a]	*None*[a]	$\bar{1}$
Monoclinic	*None*[a]	$\alpha = \gamma = 90°$	$2/m$
Orthorhombic	*None*[a]	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	mmm
Tetragonal	$a = b$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	$4/mmm$
Trigonal	$a = b$	$\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$	$\bar{3}/m$
Hexagonal	$a = b$	$\alpha = \beta = 90°, \gamma = 120°$	$6/mmm$
Cubic	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90°$	$m\bar{3}m$

VOLVEMOS A redes y celdas

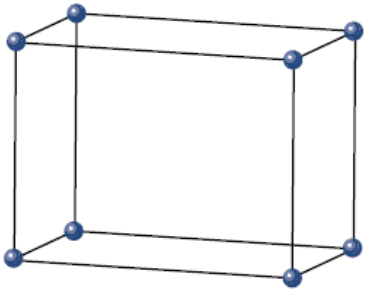
Las 7 celdas unidades primitivas o los tipos de redes de los 7 sistemas cristalinos



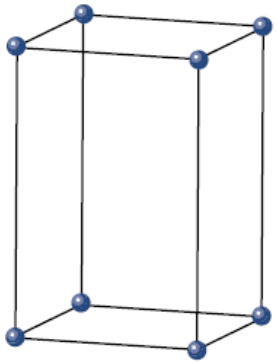
triclinic



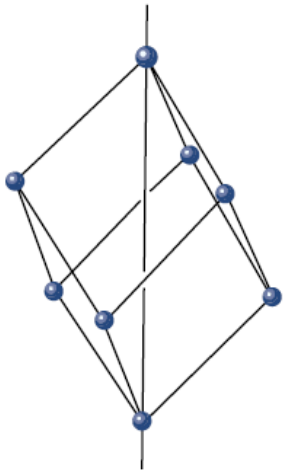
monoclinic



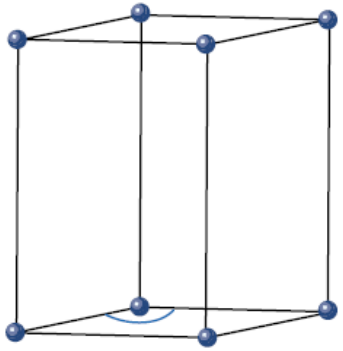
orthorhombic



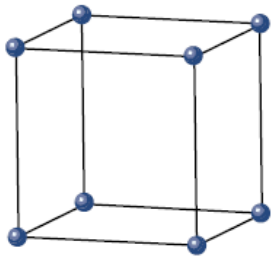
tetragonal



trigonal
(rhombohedral)



trigonal / hexagonal



cubic

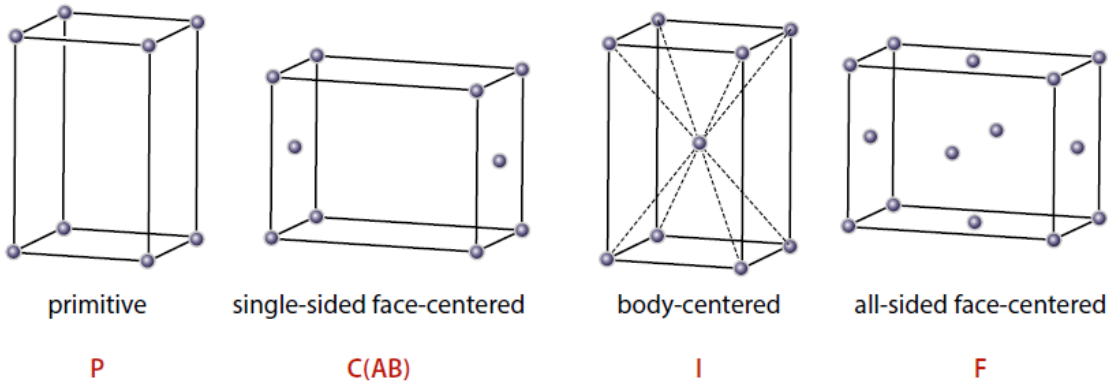
VOLVEMOS A redes y celdas

Las 14 redes de Bravais → todos los tipos de redes

No siempre la mejor opción para describir una red es utilizar la celda primitiva
Si se agregan puntos a la red se obtienen **"las celdas centradas"**
De las combinaciones posibles → se obtiene 14 redes se llaman "Redes de Bravais"

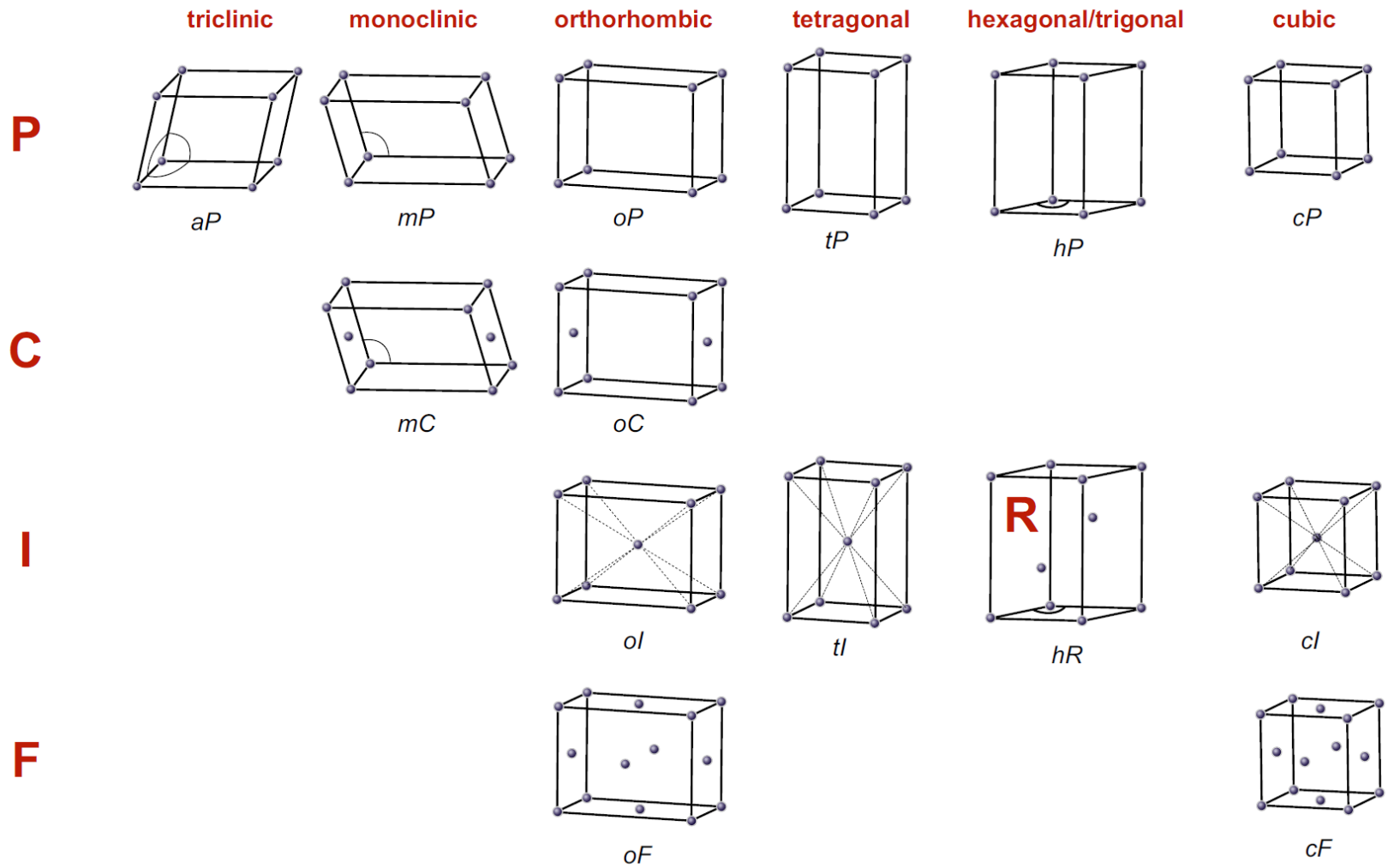
Resumiendo:

- Celda **primitiva** es aquella con un solo punto de la red, se simboliza con **letra P**
- Cuando hay un punto adicional de la red en el **centro de una sola cara (centrada en una sola cara)**, se simboliza con la letra de la cara en donde está ubicado ese punto: **A, B, C**. Por convención se usa la **C**, pero se entiende que hay 3 redes equivalentes
- Cuando hay un punto adicional de la red en el **centro de la celda (centrada en el cuerpo)** , se simboliza con **letra I (*inside*)**
- Cuando hay un puntos adicionales de la red en el **centro de cada una de las caras (centrada en las caras)**, se simboliza con la **letra F** (***face***)



VOLVEMOS A redes y celdas

Las 14 redes de Bravais → todos los tipos de redes



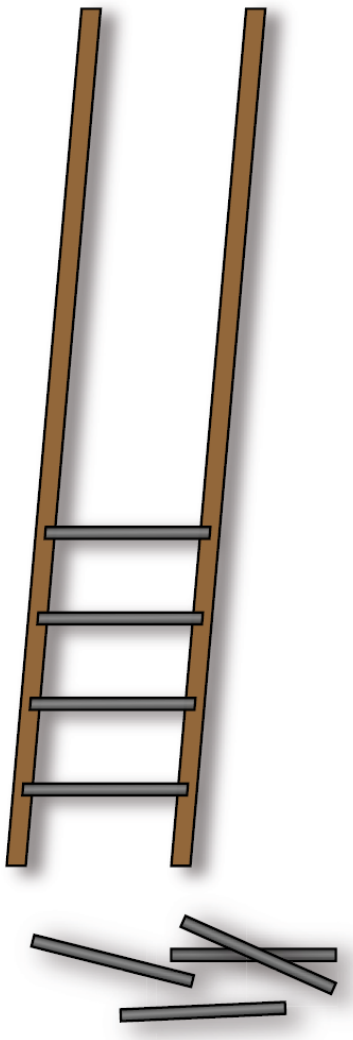
Redes de Bravais

Basandonos en celdas espaciales para describir la simetría en 3D, encontramos las **14 redes de Bravais**

Elemento de simetría requerido	Sistema cristalino	Red de Bravais	Restricciones sobre la celda (en las condiciones mencionadas en la transparencia anterior)
Ninguno	Tricínico	Primitiva (P)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Eje 2 ó plano espejo	Monoclínico	Primitiva (P) Centrada en la cara C (C)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^o \neq \beta$
Combinación de tres ejes 2 mutuamente perpendiculares	Ortorrómbico	Primitiva (P) Centrada en la cara C (C) Centrada en el cuerpo (I) Centrada en las caras (F)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
Un eje 3	Trigonal	Primitiva (P) [Centrada R (R)]	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^o$ [$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^o, \gamma = 120^o$]
Un eje 6	Hexagonal	Primitiva (P)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^o$ $\gamma = 120^o$
Un eje 4	Tetragonal	Primitiva (P) Centrada en el cuerpo (I)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
Cuatro ejes 3	Cúbico	Primitiva (P) Centrada en el cuerpo (I) Centrada en las caras (F)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$

ESTUDIO SISTEMATIZADO DE LOS CRISTLAES

Fig. 3.1 We already climbed two of the four steps on the step ladder to fully systematize crystals. Ready for the next level!



4. level: space groups complete symmetry	230
3. level: crystal classes crystallogr. point groups	32
2. level: Bravais lattices primitive & centered	14
1. level: crystal systems metric & symmetry of the UC	7

=> Descripción del cristal sólo usando la traslación como elemento de simetría

Grupos puntuales de simetría

Grupo puntual de simetría: se considera a todos aquellos que no implican traslación

Para 3D hay 32 GRUPOS PUNTUALES DE SIMETRÍA (también llamadas clases cristalinas)

- **Ya vimos los 5 elementos de simetría que existen para describir objetos**

- Identidad – plano espejo – ejes de rotación – centros de inversión - rotoinversiones

- **Sumamos combinación de elementos de simetría en 3D**
  - a. Eje de rotación paralelo a un espejo
    - Mismo que 2D
    - 2 || m = 2mm
    - 3 || m = 3m, también 4mm, 6mm
  - b. Eje de rotación ⊥ espejo
    - 2 ⊥ m = 2/m
    - 3 ⊥ m = 3/m, también 4/m, 6/m
  - c. Otras combinaciones de rotación+*m* son imposibles
  - d. Combinación de rotaciones
  - 2 + 2 a 90° → 222 (tercer 2 requerido por combinación)
  - 4 + 2 at 90° → 422 (" " ")
  - 6 + 2 at 90° → 622 (" " ")

- **Como en 2D, el número de posibles combinaciones está limitada por:**

  la incompatibilidad y la redundancia

- **Solo hay 22 posibles combinaciones en 3D , que cuando se combinan a su vez con los 10 elementos originales de las 3D, se obtienen los 32 grupos puntuales en 3D**

Grupos puntuales de simetría

Cada patrón 3D conforma solo uno de estos grupos. Esto incluye el cristal, y cada uno de sus puntos.

Increasing Rotational Symmetry →					
Rotation axis only	1	2	3	4	6
Rotoinversion axis only	$\bar{1}$ (= *i*)	$\bar{2}$ (= m)	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$ (= 3/m)
Combination of rotation axes		222	32	422	622
One rotation axis ⊥ mirror		2/m	3/m (= $\bar{6}$)	4/m	6/m
One rotation axis || mirror		2mm	3m	4mm	6mm
Rotoinversion with rotation and mirror			$\bar{3}$ 2/m	$\bar{4}$ 2/m	$\bar{6}$ 2/m
Three rotation axes and ⊥ mirrors		2/m 2/m 2/m		4/m 2/m 2/m	6/m 2/m 2/m
Additional Isometric patterns		23 2/m $\bar{3}$		432 $\bar{4}$3m	4/m $\bar{3}$ 2/m

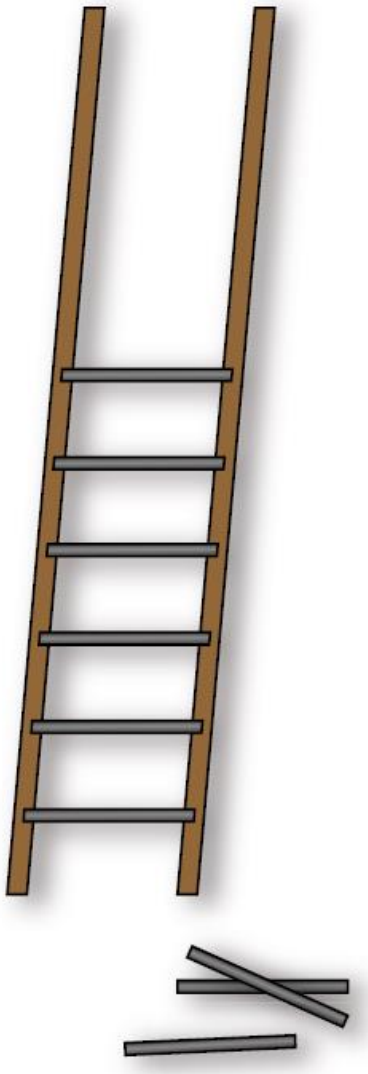
Grupos puntuales + sistemas cristalinos

Ahora reagrupamos los **32 grupos puntuales** por **sistema cristalino (14)**.

Crystal System	No Center	Center
Triclinic	1	$\bar{1}$
Monoclinic	2, $\bar{2}$ (= m)	2/m
Orthorhombic	222, 2mm	2/m 2/m 2/m
Tetragonal	4, $\bar{4}$, 422, 4mm, $\bar{4}$2m	4/m, 4/m 2/m 2/m
Hexagonal	3, 32, 3m 6, $\bar{6}$, 622, 6mm, $\bar{6}$2m	$\bar{3}$, $\bar{3}$ 2/m 6/m, 6/m 2/m 2/m
Isometric	23, 432, $\bar{4}$3m	2/m $\bar{3}$, 4/m $\bar{3}$ 2/m

ESTUDIO SISTEMATIZADO DE LOS CRISTLAES

Fig. 3.19 We are ready to climb up another step on our stepladder - the conquest of the crystal classes



4. level: space groups complete symmetry	230
3. level: crystal classes crystallogr. point groups	32
2. level: Bravais lattices primitive & centered	14
1. level: crystal systems metric & symmetry of the UC	7

=> Descripción del cristal sumando varios elementos de simetría

Grupos espaciales

Recordemos que…

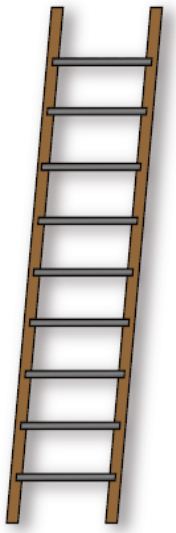
- Definimos los **7 sistemas de cristalinos**
- Pasamos a las **14 redes de Bravais**, que describen las 14 posibilidades de arreglos de puntos de la red cuando nos restringimos sólo a la **traslación** como elemento de simetría.
- Descontando la simetría interna traslacional y considerando los elementos de: **inversión, rotación, reflexión, espejo y rotoinversión**, se observa que existen básicamente **32 tipos diferentes de simetría**, que se pueden utilizar para describir los cristales: las 32 clases de cristales o grupos puntuales cristalográficos
- **Si se combina todos los grupos puntuales de simetría (inversión, rotación, reflexión, espejo y rotoinversión) con la simetría de traslación pura de todas las redes posibles y los elementos de simetría con componentes traslacionales** (planos con deslizamiento planos y ejes de tornillo), obtenemos exactamente **230 arreglos diferentes o tipos de patrones en tres dimensiones (“Grupos Espaciales”)**.
- Esto se mostró casi simultáneamente y independientemente por los dos científicos Schoenflies y Fedorov.
- **El número de posibles tipos de simetría depende de la dimensionalidad del espacio => para 3D es 230 => para 2D es 17**

Arthur Moritz Schoenflies
Alemania 1853-1928

Evgraf Fedorov
Rusia 1853-1919

ESTUDIO SISTEMATIZADO DE LOS CRISTLAES

Fig. 5.30 The last rungs of the ladder lead us to the final level of the systematization of crystal structures

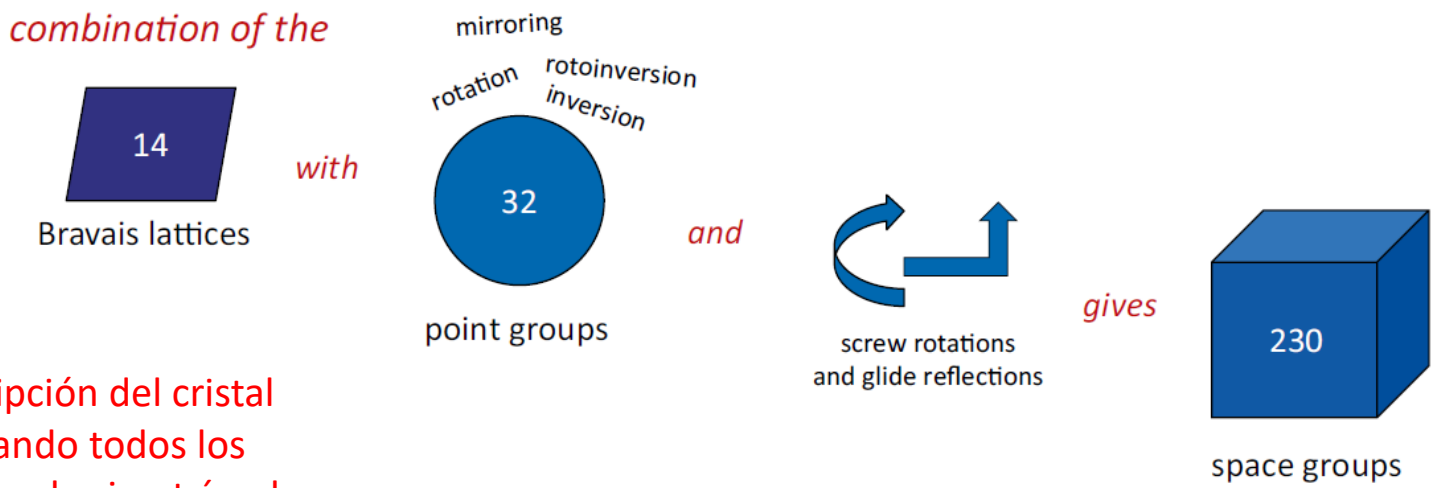


4. level: space groups — 230
complete symmetry

3. level: crystal classes — 32
crystallogr. point groups

2. level: Bravais lattices — 14
primitive & centered

1. level: crystal systems — 7
metric and symmetry of the UC



=> Descripción del cristal considerando todos los elementos de simetría y las redes

Fig. 5.31 How the different symmetry levels lead to the 230 space groups

Grupos espaciales

Table 5.1 Dependence of the number of crystal systems, Bravais lattices, and space groups on the dimensionality of "space"

	1	2	3	4	5	6
Crystal systems	1	4	7	40	59	251
Bravais lattices	1	5	14	74	189	841
Space groups	2	17	230	4894	222,097	28,927,915 (+ x)[a]

[a]The number given refers to the number of space groups without consideration of the enantiomorphic pairs; the correct determination of the number including all enantiomorphic pairs is still pending

Grupos espaciales

Las Tablas Internacionales de Cristalografía (la Biblia de los Cristalógrafos”) contiene una
Listado de los 17 grupos espaciales en 2D y los 230 grupos espaciales en 3D en el Volumen A

El término **grupo espacial** se puede definir de manera relativamente simple como un conjunto de elementos de simetría, junto con sus respectivas operaciones de simetría, que describe completamente el un arreglo espacial de un patrón periódico en 3D (o 2D)

Algunas definiciones más…

MOTIVO: la parte fundamental de un diseño simétrico; cuando se repite, genera todo el patrón

OPERACIÓN: es una acción que reproduce el motivo y así, permite crear el patrón

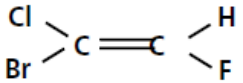
ELEMENTO: es una operación localizada en un punto particular del espacio

- **OPERACIONES DE SIMETRÍA PROPIAS**: son aquellas que relacionan objetos referidos a **congruencias directas** (ej: ejes propios de simetría)
- **OPERACIONES DE SIMETRÍA IMPROPIAS**: son aquellas que relacionan objetos referidos a **congruencias opuestas** (ej: ejes impropios de simetría)

ELEMENTOS DE SIMETRÍA en 2D - Ejemplos

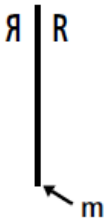
OBJETO ASIMÉTRICO

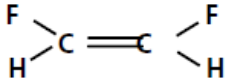
(1)



1

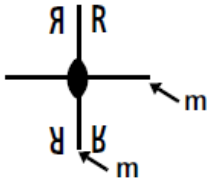
bromochlorofluoroethene

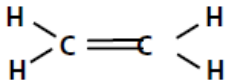
(2) 



m

cis -difluoroethene

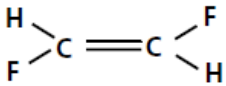
(3) 



2mm

ethene

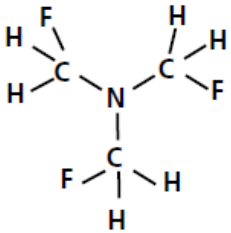
(4)



2

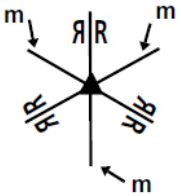
trans -difluoroethene

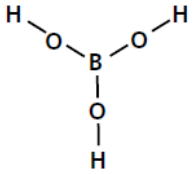
(5)



3

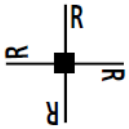
trifluoralkylammonia

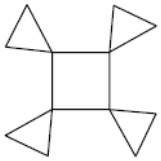
(6) 



3m

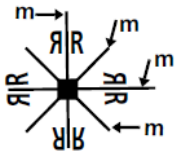
boric acid

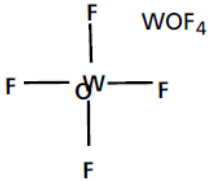
(7) 



4

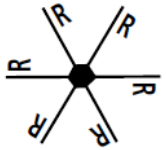
(4) - rotane, $C_{12}H_{16}$

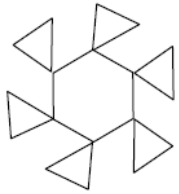
(8) 



4mm

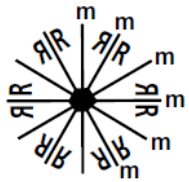
tungsten oxyfluoride

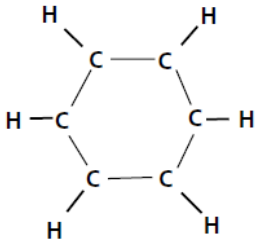
(9) 



6

(6) - rotane, $C_{18}H_{24}$

(10) 



6mm

benzene

ELEMENTOS DE SIMETRÍA en 2D - Ejemplos

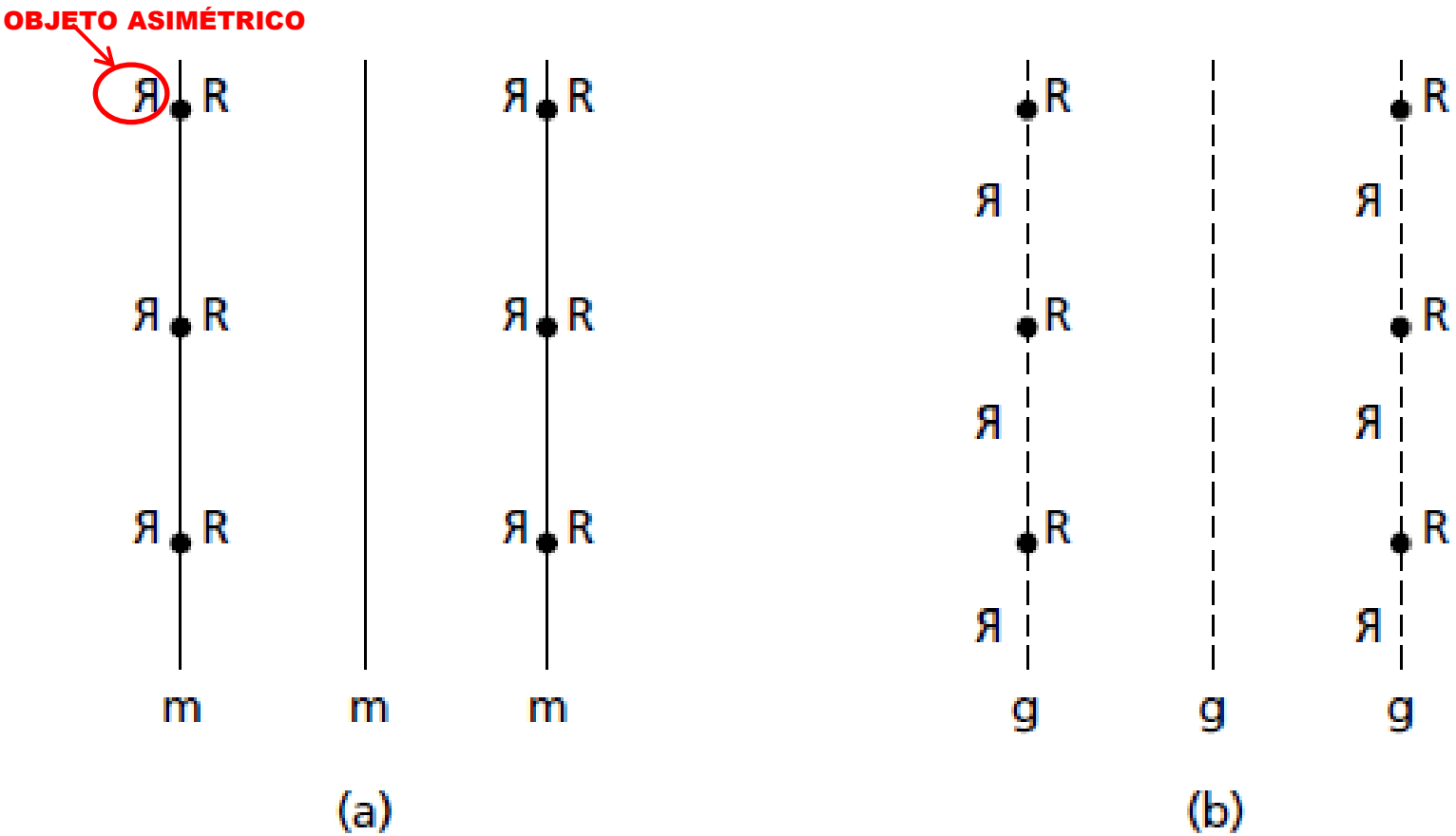
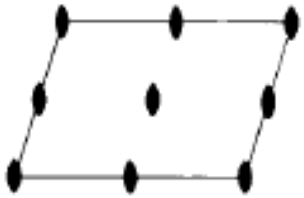


Fig. 2.5. Patterns with (a) reflection symmetry and (b) glide-reflection symmetry. The mirror lines (m) and glide lines (g) are indicated.

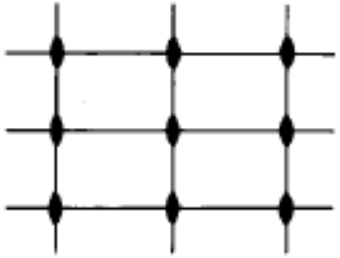
GRUPOS ESPACIALES DE SIMETRÍA EN 2D

The oblique *p*-lattice



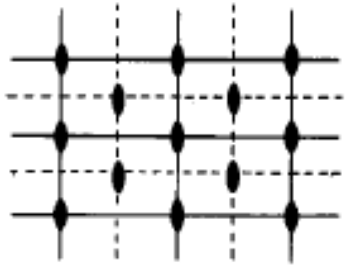
*p*2

The rectangular *p*-lattice



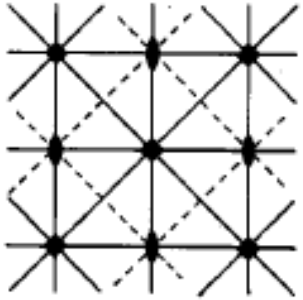
*p*2*mm*

The rectangular *c*-lattice

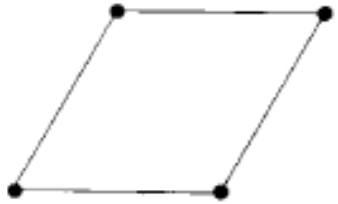


*c*2*mm*

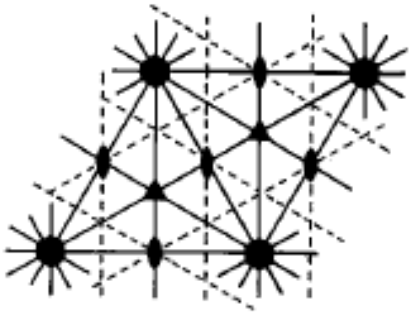
The square *p*-lattice



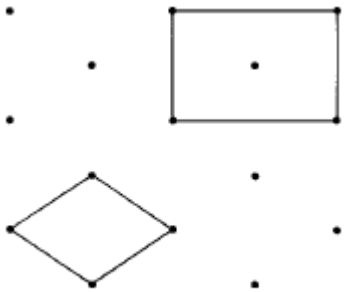
*p*4*mm*



The hexagonal *p*-lattice



*p*6*mm*



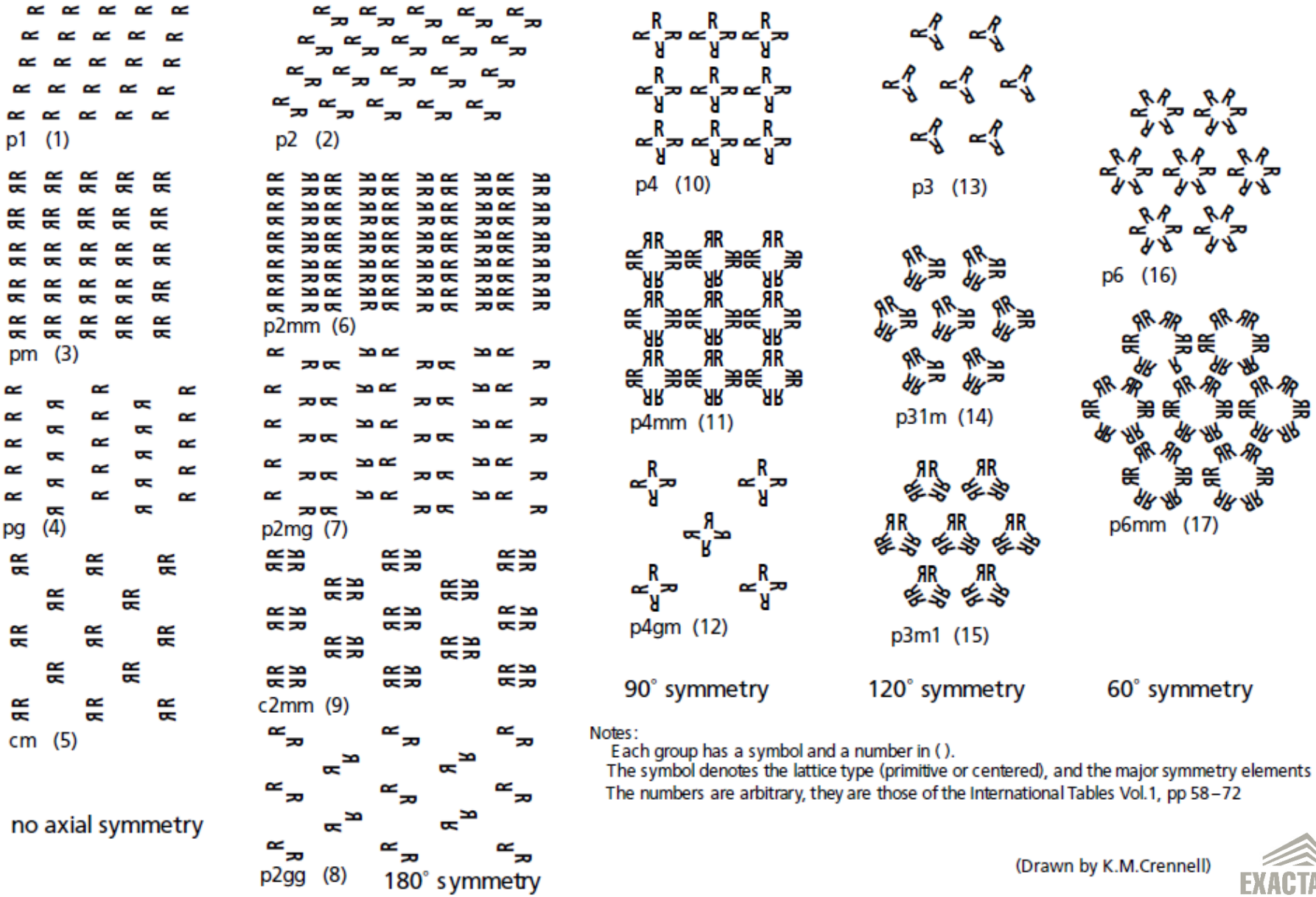
(b)

Para la red rectangular centrada, hay dos alternativas para la celda unidad (rómbica *o* diamante).

SIMETRÍA y REDES en PATRONES 2D

(a)

The Seventeen Plane Groups



Notes:
Each group has a symbol and a number in ( ).
The symbol denotes the lattice type (primitive or centered), and the major symmetry elements
The numbers are arbitrary, they are those of the International Tables Vol.1, pp 58–72

(Drawn by K.M.Crennell)

GRUPOS ESPACIALES DE SIMETRÍA EN 2D → 17

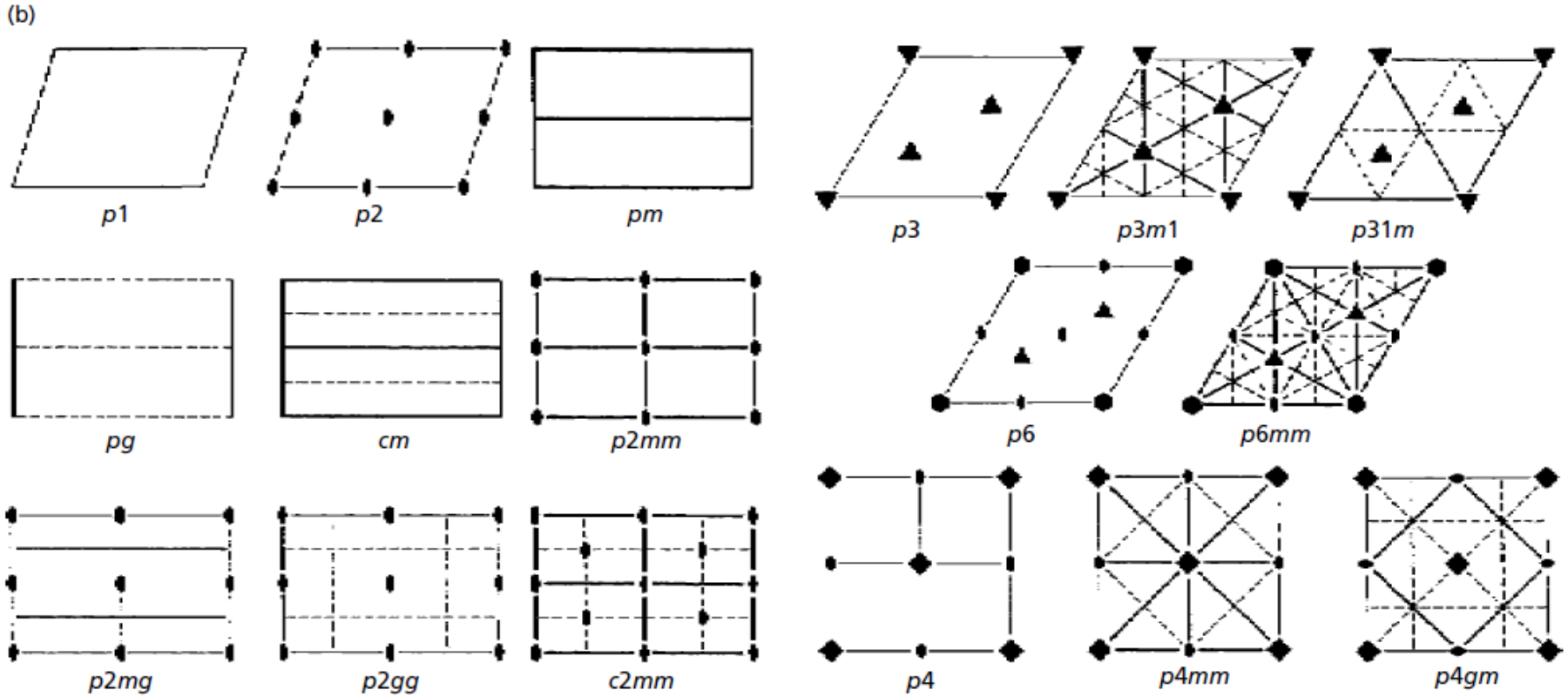


Fig. 2.6. (a) The seventeen plane groups (from *Point and Plane Groups* by K. M. Crennell). The numbering 1–17 is that which is arbitrarily assigned in the International Tables. Note that the 'shorthand' symbols do not necessarily indicate all the symmetry elements which are present in the patterns, (b) The symmetry elements outlined within (conventional) unit cells of the seventeen plane groups, heavy solid lines and dashed lines represent mirror and glide lines respectively (from *Manual of Mineralogy* 21st edn, by C. Klein and C. S. Hurlbut, Jr., John Wiley, 1999).

DIAGRAMA DE FLUJO PARA IDENTIFICAR LOS GRUPOS PUNTUALES 2D

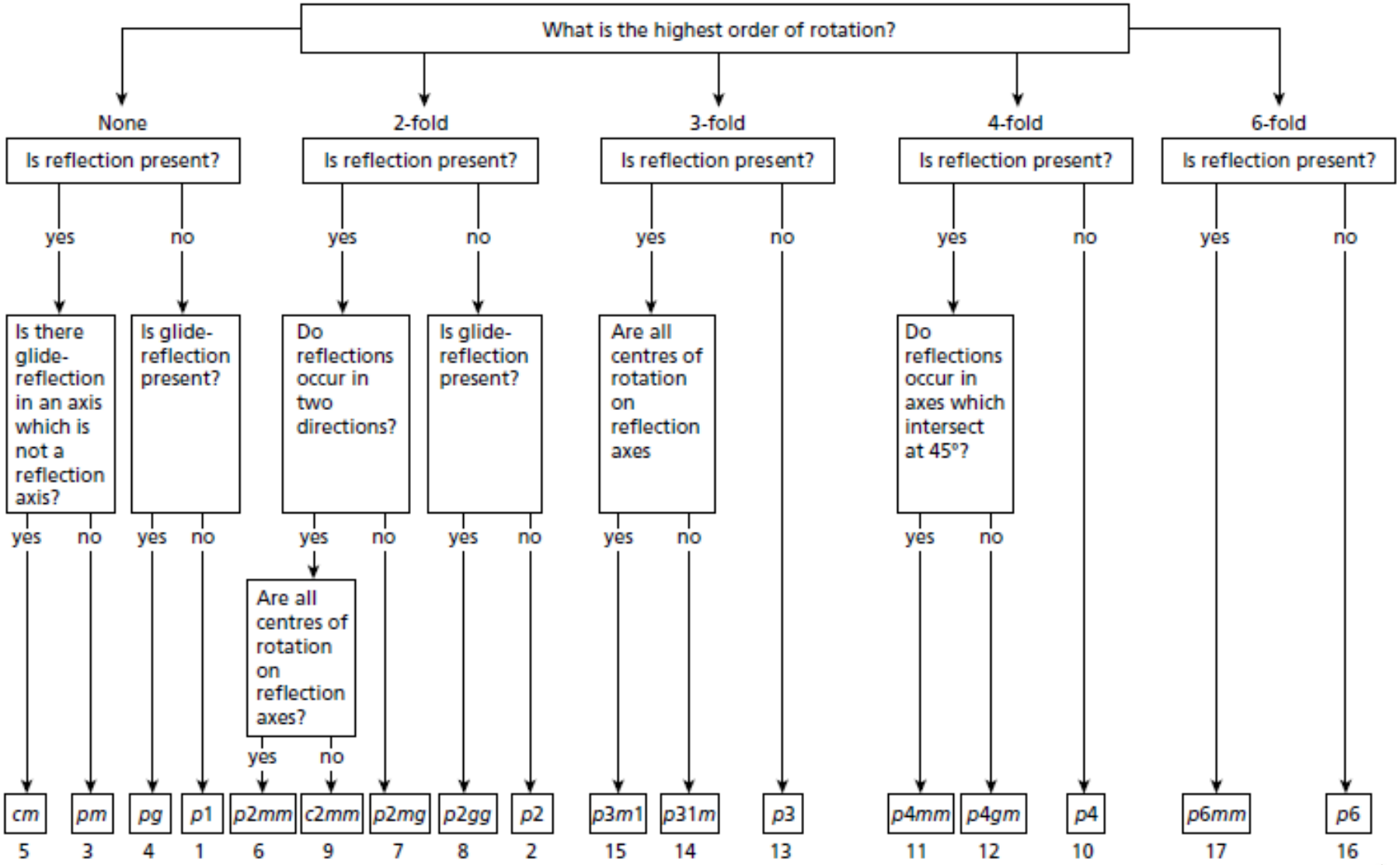
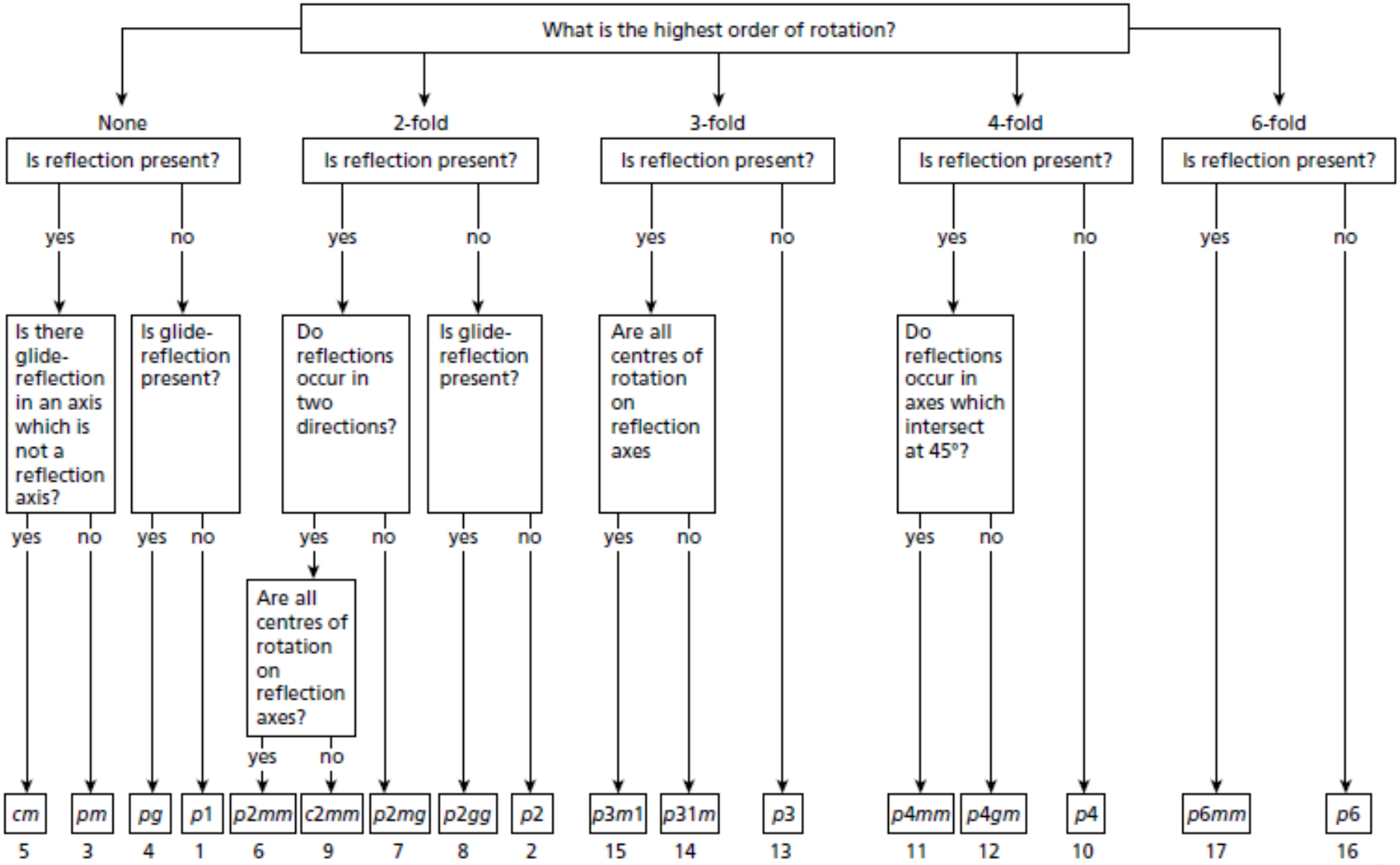


DIAGRAMA DE FLUJO PARA IDENTIFICAR LOS GRUPOS PUNTUALES 2D

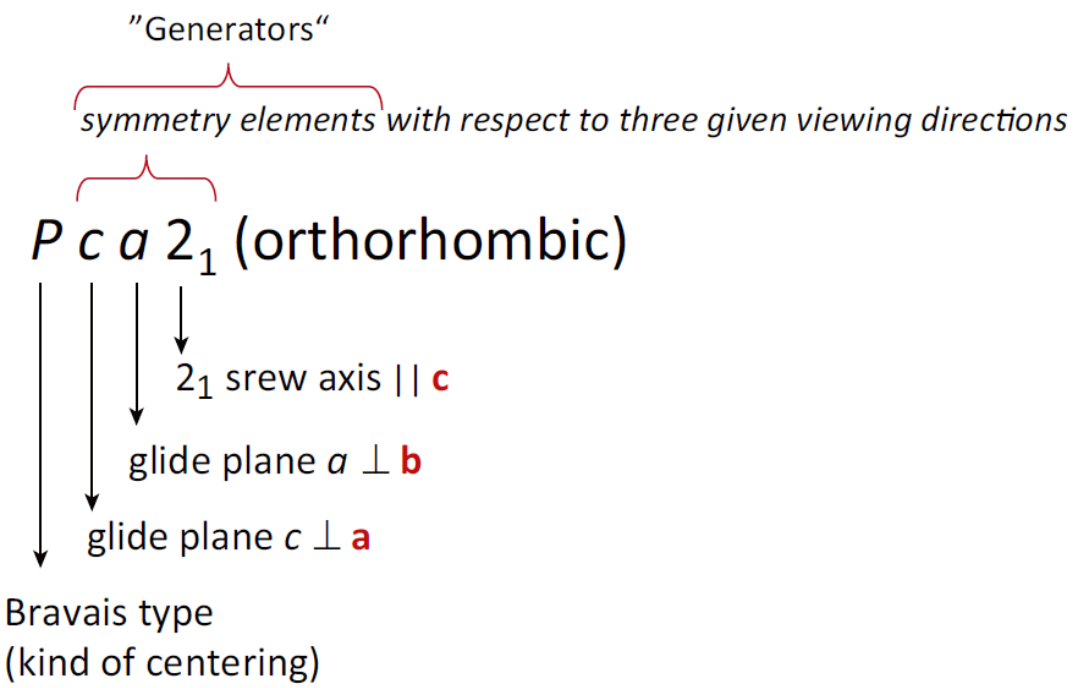


Grupos espaciales (GE) en 3D

¿Cómo se construye?

- Consta de un **máximo de cuatro símbolos** por cada GE
- El símbolo del grupo espacial siempre comienza con el **tipo de red de Bravais** (P, C, F)
- Los siguientes tres símbolos especifican elementos de simetría con respecto a tres direcciones dadas, que varían según el sistema cristalino.
- Tener en cuenta que todas las letras del símbolo de grupo espacial están en cursiva, pero todos los números están derechos

Ejemplo



Cómo reconocer la clase del cristal de un dado grupo espacial?

•Cúbico – el segundo símbolo se simetría será 3 o –3 (ej. Ia3, Pm3m, Fd3m)

•Tetragonal – el primer símbolo se simetría será siempre un 4, (-4), 4_1, 4_2 o 4_3 (ej. $P4_12_12$, I4/m, P4/mcc)

•Hexagonal – el primer símbolo se simetría será siempre un 6, (-6), 6_1, 6_2, 6_3, 6_4 o 6_5 ej. P6mm, $P6_3$/mcm)

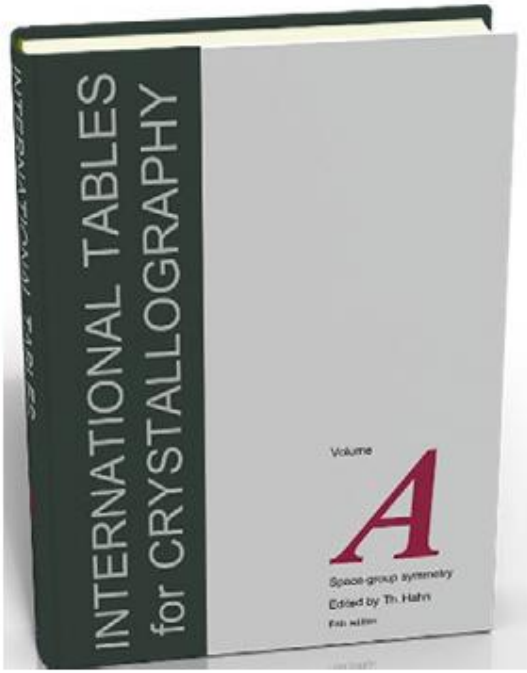
•Trigonal – el primer símbolo se simetría será siempre un 3, (-3) 3_1 o 3_2 (ej. P31m, R3, R3c, P312)

•Ortorrómbico – los 3 símbolos que le siguen al descriptor de la red serán planos espejo o espejo con desplazamiento, o ejes de rotación o tornillo de orden 2 (ej. Pnma, $Cmc2_1$, Pnc2)

•Monoclínico – al descriptor de la red le seguirán planos espejos simples, espejo con desplazamiento, o ejes de rotación o tornillo de orden 2 o un símbolo de eje o plano (i.e. Cc, P2, $P2_1$/n)

•Triclínico – el descriptor de la red será seguido por 1 o (-1).

GRUPOS ESPACIALES DE SIMETRÍA EN 3D → 230



Crystal system	Point group	Space groups
Triclinic	$\boxed{1}$	P1
	$\bar{1}$	$P\bar{1}$
Monoclinic	$\boxed{2}$	P2, $P2_1$, C2
	m	Pm, Pc, Cm, Cc
	2/m	P2/m, $P2_1/m$, C2/m, P2/c, **$P2_1/c$**, C2/c
Orthorhombic	$\boxed{222}$	P222, **$P222_1$**, **$P2_12_12$**, **$P2_12_12_1$**, **$C222_1$**, C222, F222, I222, $I2_12_12_1$
	mm2	Pmm2, $Pmc2_1$, Pcc2, $Pma2_1$, $Pca2_1$, $Pnc2_1$, $Pmn2_1$, Pba2, $Pna2_1$, Pnn2, Cmm2, $Cmc2_1$, Ccc2, Amm2, Abm2, Ama2, Aba2, Fmm2, **Fdd2**, Imm2, Iba2, Ima2
	mmm	Pmmm, **Pnnn**, Pccm, **Pban**, Pmma, **Pnna**, Pmna, **Pcca**, Pbam, **Pccn**, Pbcm, Pnnm, Pmmn, **Pbcn**, **Pbca**, Pnma, Cmcm, Cmca, Cmmm, Cccm, Cmma, **Ccca**, Fmmm, **Fddd**, Immm, Ibam, **Ibca**, Imma
Tetragonal	$\boxed{4}$	P4, **$P4_1$**, $P4_2$, **$P4_3$**, I4, **$I4_1$**
	$\bar{4}$	$P\bar{4}$, $I\bar{4}$
	4/m	P4/m, $P4_2/m$, **P4/n**, **$P4_2/n$**, I4/m, **$I4_1/a$**
	$\boxed{422}$	P422, **$P42_12$**, $P4_122$, **$P4_12_12$**, **$P4_222$**, **$P4_22_12$**, **$P4_322$**, **$P4_32_12$**, I422, **$I4_122$**
	4mm	P4mm, P4bm, $P4_2cm$, $P4_2nm$, P4cc, P4nc, $P4_2mc$, $P4_2bc$, I4mm, I4cm, $I4_1md$, **$I4_1cd$**
	$\bar{4}m$	$P\bar{4}2m$, $P\bar{4}2c$, $P\bar{4}2_1m$, **$P\bar{4}2_1c$**, $P\bar{4}m2$, $P\bar{4}c2$, $P\bar{4}b2$, $P\bar{4}n2$, $I\bar{4}m2$, $I\bar{4}c2$, $I\bar{4}2m$, $I\bar{4}2d$
	4/mmm	P4/mmm, P4/mcc, **P4/nbm**, **P4/nnc**, P4/mbm, P4/mnc, **P4/nmm**, **P4/ncc**, $P4_2/mmc$, $P4_2/mcm$, **$P4_2/nbc$**, **$P4_2/nnm$**, $P4_2/mbc$, $P4_2/mnm$, **$P4_2/nmc$**, **$P4_2/ncm$**, I4/mmm, I4/mcm, **$I4_1/amd$**, **$I4_1/acd$**
Trigonal–hexagonal	$\boxed{3}$	P3, $P3_1$, $P3_2$, R3
	$\bar{3}$	$P\bar{3}$, $R\bar{3}$
	$\boxed{32}$	P312, P321, **$P3_112$**, **$P3_121$**, **$P3_212$**, **$P3_221$**, R32
	3m	P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c
	$\bar{3}m$	$P\bar{3}1m$, $P\bar{3}1c$, $P\bar{3}m1$, $P\bar{3}c1$, $R\bar{3}m$, $R\bar{3}c$
	$\boxed{6}$	P6, **$P6_1$**, **$P6_5$**, $P6_3$, **$P6_2$**, **$P6_4$**,
	$\bar{6}$	$P\bar{6}$
	6/m	P6/m, $P6_3/m$
	$\boxed{622}$	P622, **$P6_122$**, **$P6_522$**, **$P6_222$**, **$P6_422$**, **$P6_322$**
	6mm	P6mm, P6cc, $P6_3cm$, $P6_3mc$
	$\bar{6}m$	$P\bar{6}m2$, $P\bar{6}c2$, $P\bar{6}2m$, $P\bar{6}2c$
	6/mmm	P6/mmm, P6/mcc, $P6_3/mcm$, $P6_3/mmc$
Cubic	$\boxed{23}$	P23, F23, I23, **$P2_13$**, $I2_13$
	$m\bar{3}$	$Pm\bar{3}$, **$Pn\bar{3}$**, $Fm\bar{3}$, **$Fd\bar{3}$**, $Im\bar{3}$, **$Pa\bar{3}$**, **$Ia\bar{3}$**
	$\boxed{432}$	P432, **$P4_232$**, F432, **$F4_132$**, I432, **$P4_332$**, **$P4_132$**, $I4_132$
	$\bar{4}3m$	$P\bar{4}3m$, $F\bar{4}3m$, $I\bar{4}3m$, $P\bar{4}3n$, $F\bar{4}3c$, **$I\bar{4}3d$**
	$m\bar{3}m$	$Pm\bar{3}m$, **$Pn\bar{3}n$**, $Pm\bar{3}n$, **$Pn\bar{3}m$**, $Fm\bar{3}m$, $Fm\bar{3}c$, **$Fd\bar{3}m$**, **$Fd\bar{3}c$**, $Im\bar{3}m$, **$Ia\bar{3}d$**

EXACTAS UBA

Grupos espaciales

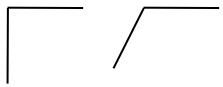
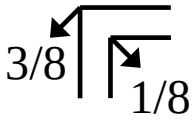
Recordamos nomenclatura y agregamos nueva

P: primitiva
A, B, C: centradas en base A, B o C
F: centrada en la/s cara/s
I: Centrada en el cuerpo
R: Romohedral

Planos de simetría (normales al plano de proyección)	**Símbolo**	**Translación**	**símbolo**
		ninguna	*m*
Glide plane		1/2 along line	*a*, *b*, or *c*
Glide plane		1/2 normal to plane	*a*, *b*, or *c*
Double glide plane		1/2 along line & 1/2 normal to plane	*e*
Diagonal glide plane		1/2 along line & 1/2 normal to plane	*n*
Diamond glide plane		1/4 along line & 1/4 normal to plane	*d*

Grupos espaciales

Recordamos nomenclatura y agregamos nueva

Plano de simetría (paralelo al plano de proyección)	**Símbolo**	**Traslación**	**símbolo**
Reflection plane		ninguno	*m*
Glide plane		1/2 along arrow	*a*, *b*, or *c*
Double glide plane		1/2 along either arrow	*e*
Diagonal glide plane		1/2 along the arrow	*n*
Diamond glide plane		1/8 or 3/8 along the arrows	*d*

Grupos espaciales

Recordamos nomenclatura y agregamos nueva

Elemento de simetría	Símbolo gráfico	Traslación	Símbolo
identidad	Ninguno	Ninguno	1
2-fold ⊥ hoja		Ninguno	2
2-fold en hoja		Ninguno	2
2 sub 1 ⊥ hoja		1/2	2_1
2 sub en hoja		1/2	2_1
3-fold		Ninguno	3
3 sub 1		1/3	3_1
3 sub 2		2/3	3_2
4-fold		Ninguno	4
4 sub 1		1/4	4_1
4 sub 2		1/2	4_2
4 sub 3		3/4	4_3
6-fold		Ninguno	6
6 sub 1		1/6	6_1
6 sub 2		1/3	6_2
6 sub 3		1/2	6_3

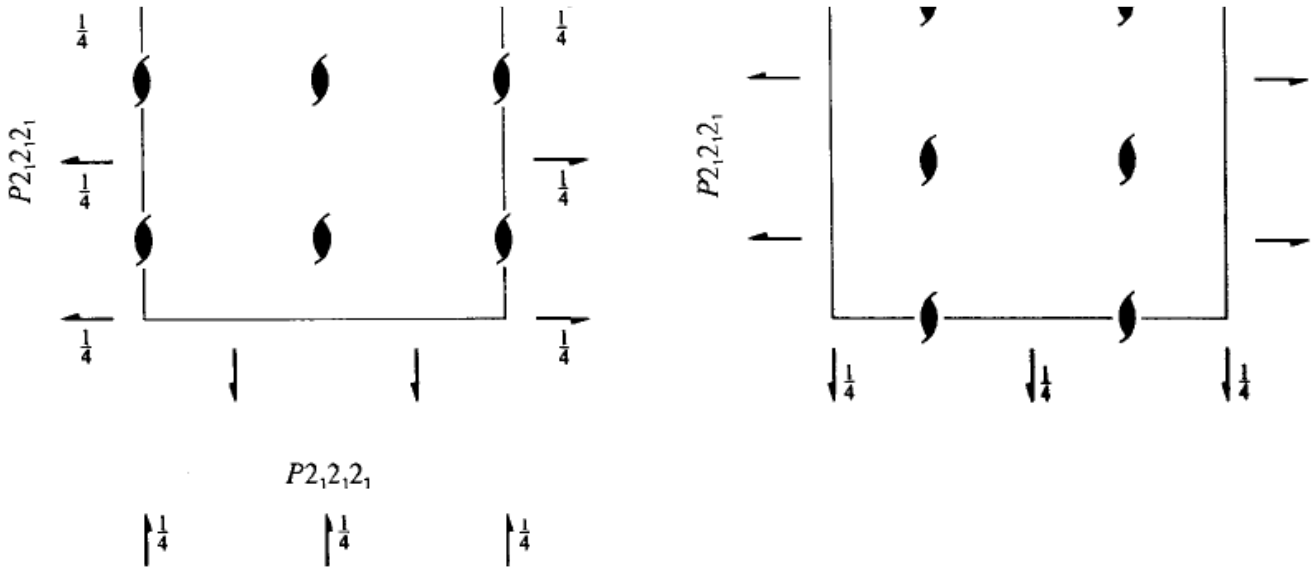
Elemento de simetría	Símbolo gráfico	Traslación	Símbolo
6 sub 4		2/3	6_4
6 sub 5		5/6	6_5
Inversion		Ninguna	1
3 barra		Ninguna	3
4 barra		Ninguna	4
6 barra		Ninguna	6 = 3/*m*
2-fold e inversión		Ninguna	2/*m*
2 sub 1 e inversión		Ninguna	$2_1/m$
4-fold e inversión		Ninguna	4/*m*
4 sub 2 e inversión		Ninguna	$4_2/m$
6-fold e inversión		Ninguna	6/*m*
6 sub 3 e inversión		Ninguna	$6_3/m$

■ EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$	D_2^4	222	Orthorhombic
No. 19	$P2_12_12_1$		Patterson symmetry $Pmmm$

Símbolo corto del grupo espacial en la notación de Hermann-Mauguin



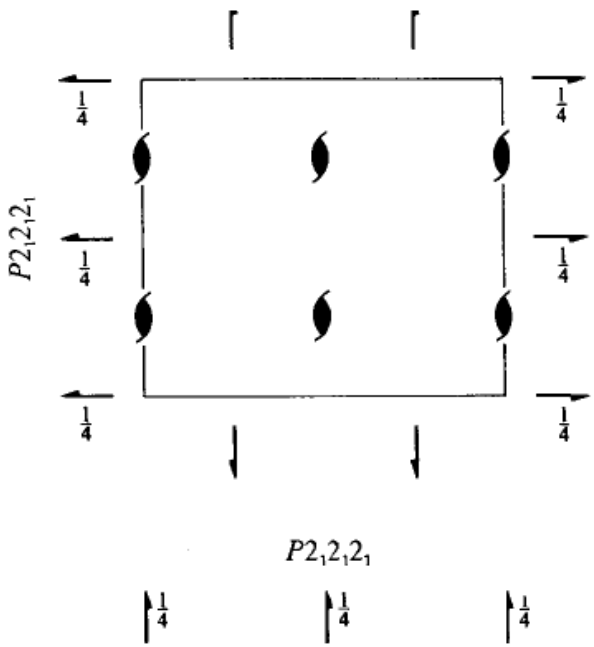
EJEMPLOS

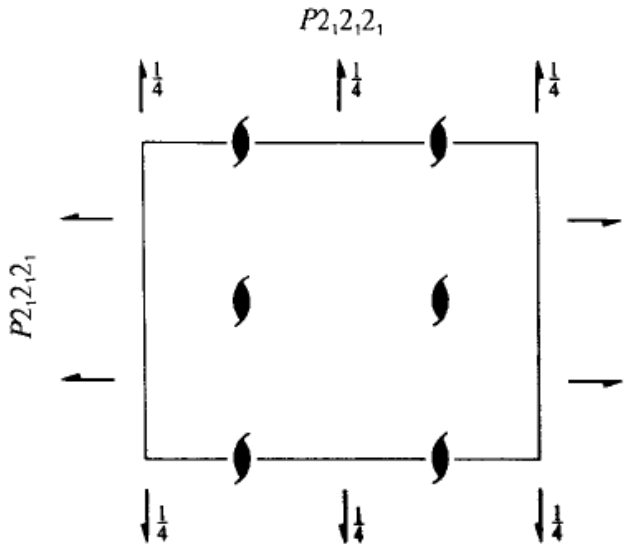
Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$ $\boxed{D_2^4}$ 222 Orthorhombic

No. 19 $P2_12_12_1$ Patterson symmetry $Pmmm$

Schoenflies symbol (D_2)





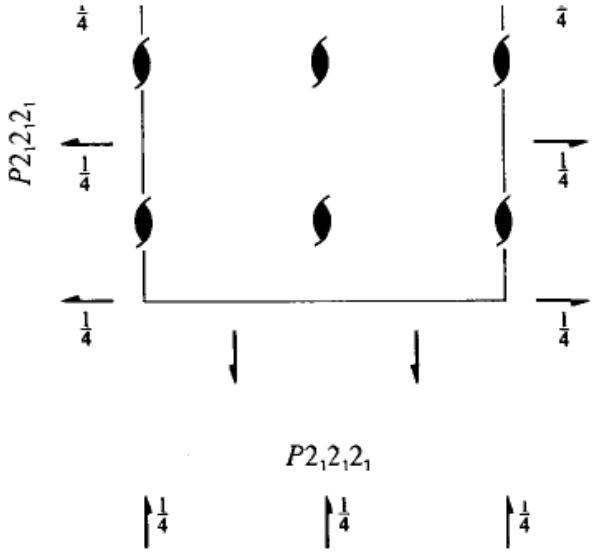
EJEMPLOS

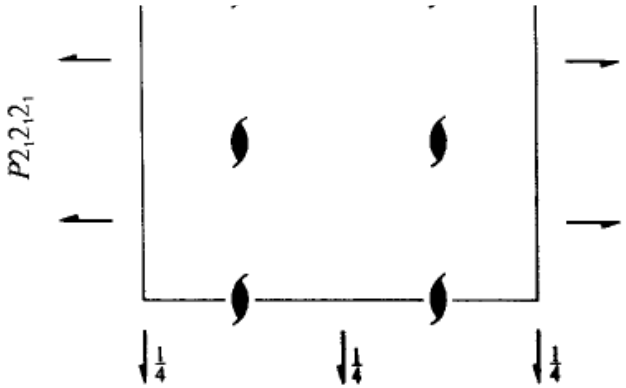
Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$ D_2^4 $\boxed{222}$ Orthorhombic

No. 19 $P2_12_12_1$ Patterson symmetry $Pmmm$

Símbolo corto de Hermann-Mauguin del **grupo puntual** correspondiente al grupo espacial.



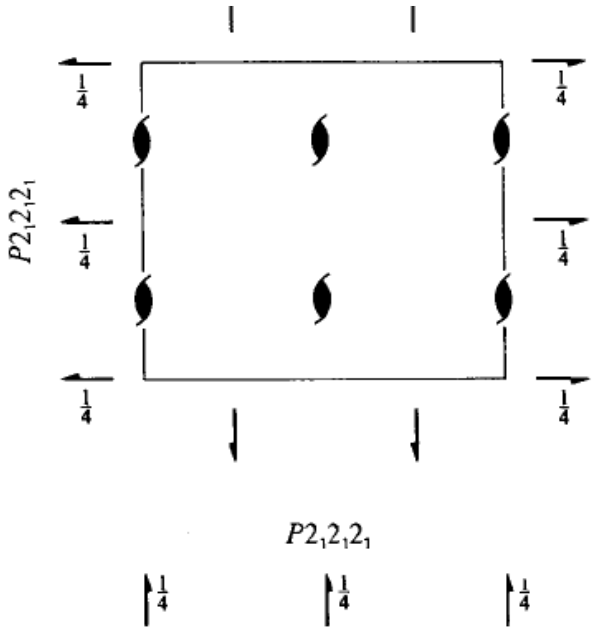


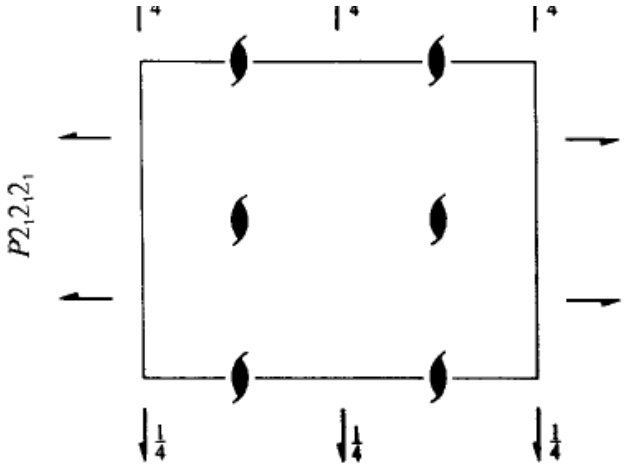
EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$	D_2^4	222	Orthorhombic
No. 19	$P2_12_12_1$		Patterson symmetry $Pmmm$

Nombre del sistema cristalino.



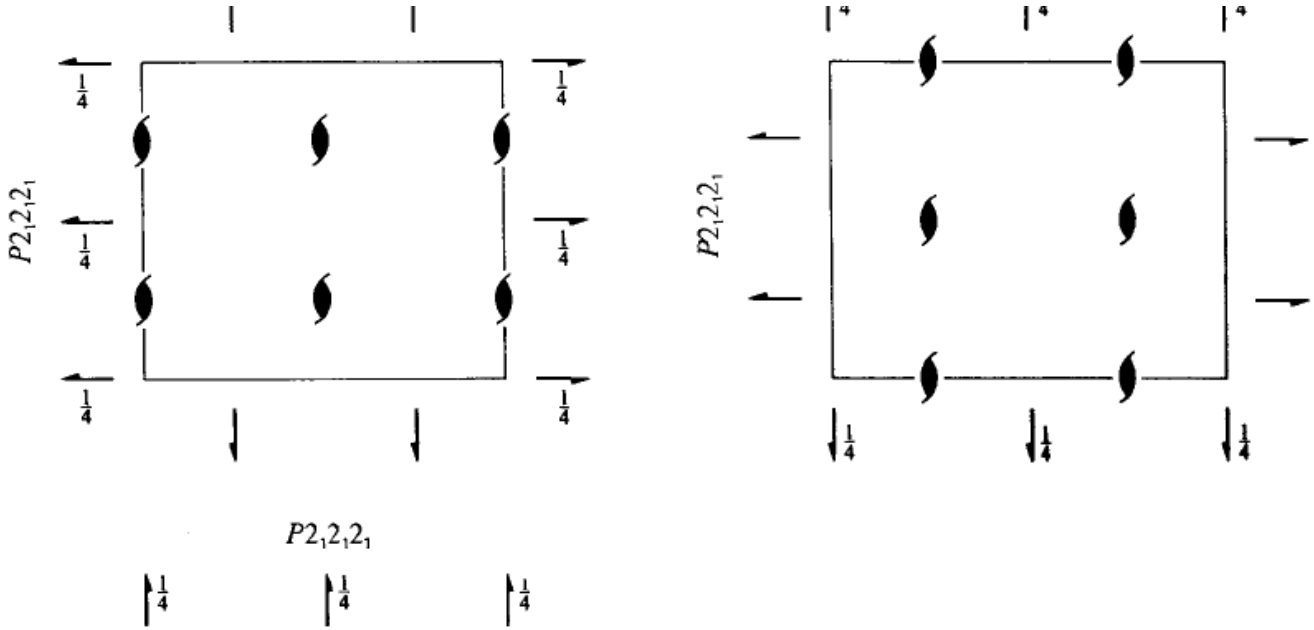


EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$	D_2^4	222	Orthorhombic
No. 19	$P2_12_12_1$		Patterson symmetry $Pmmm$

Número secuencial en las tablas (desde Edición de 1952).

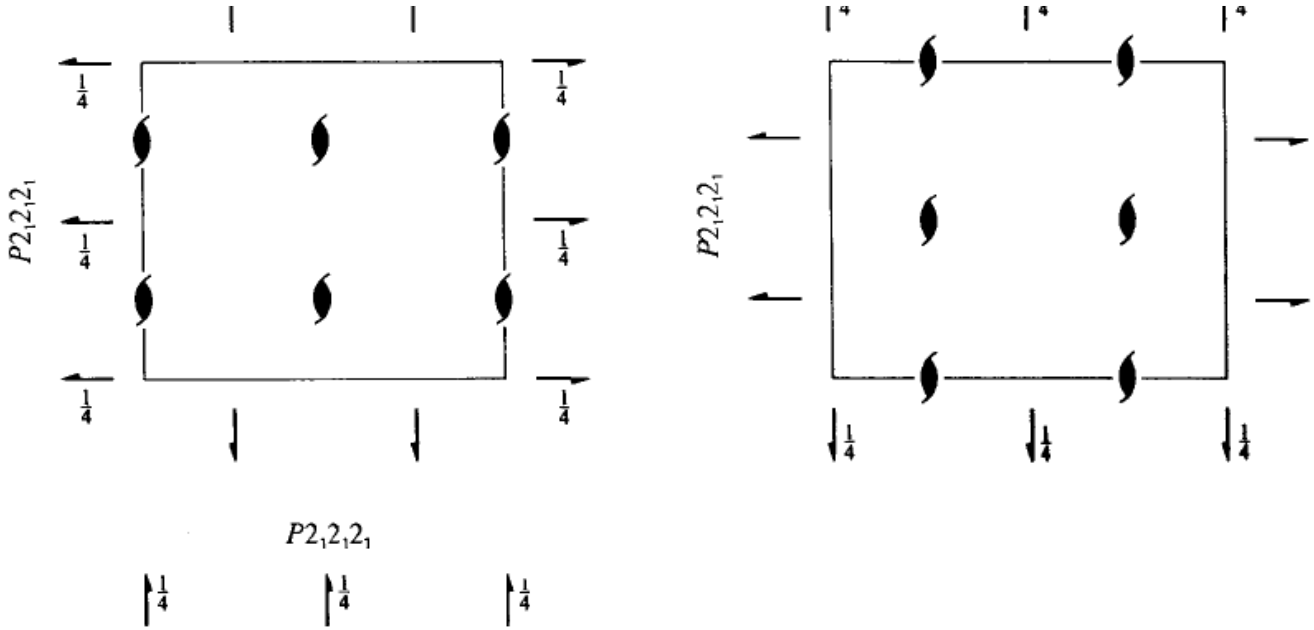


EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$	D_2^4	222	Orthorhombic
No. 19	$\boxed{P2_12_12_1}$		Patterson symmetry $Pmmm$

Símbolo del grupo espacial completo en notación H-M



EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

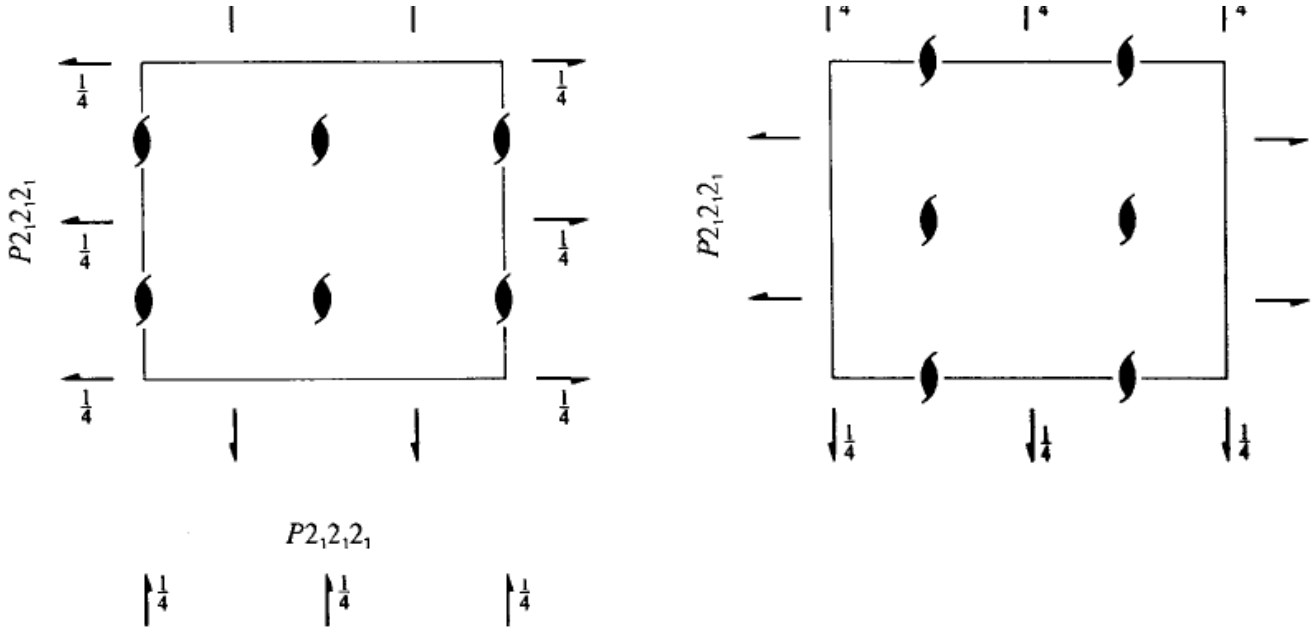
$P2_12_12_1$	D_2^4	222	Orthorhombic
No. 19	$P2_12_12_1$		Patterson symmetry $Pmmm$
$P2/c$	C_{2h}^4	$2/m$	Monoclinic
No. 13	$P112/a$		Patterson symmetry $P112/m$
$Pbca$	D_{2h}^{15}	mmm	Orthorhombic
No. 61	$P\ 2_1/b\ 2_1/c\ 2_1/a$		Patterson symmetry $Pmmm$
$P4_2/nbc$	D_{4h}^{11}	$4/mmm$	Tetragonal
No. 133	$P\ 4_2/n\ 2/b\ 2/c$		Patterson symmetry $P4/mmm$

EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$	D_2^4	222	Orthorhombic
No. 19	$P2_12_12_1$		Patterson symmetry $Pmmm$

Grupo espacial del mapa de Patterson (veremos más adelante)



■ EJEMPLOS

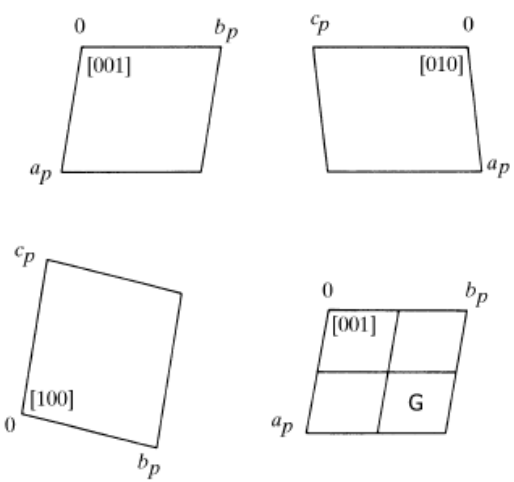
Int'l Tables for Crystallography

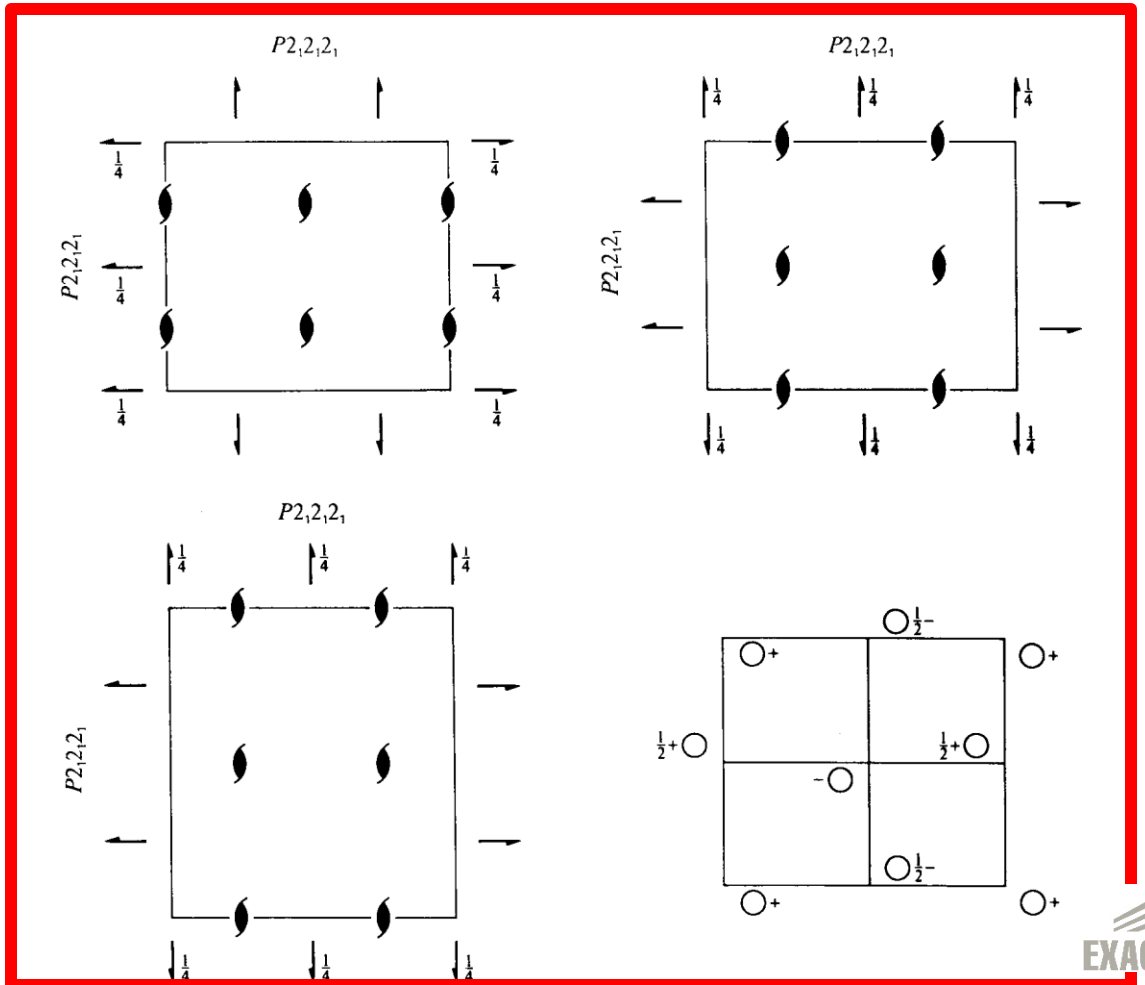
$P2_12_12_1$ D_2^4 222 Orthorhombic

No. 19 $P2_12_12_1$ Patterson symmetry $Pmmm$

Diagramas de grupo espacial

Diagramas de operaciones de simetría





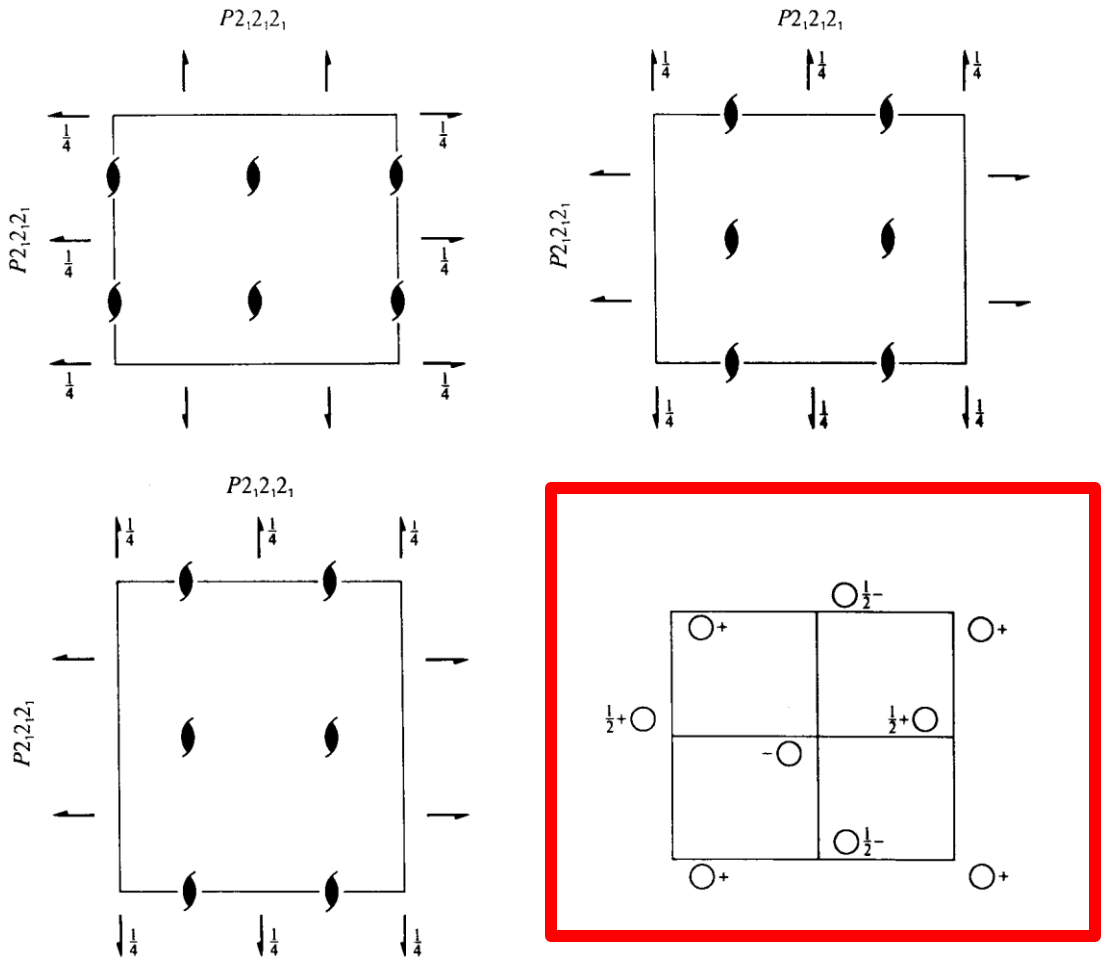
EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$ D_2^4 222 Orthorhombic

No. 19 $P2_12_12_1$ Patterson symmetry $Pmmm$

Diagramas de posiciones equivalentes

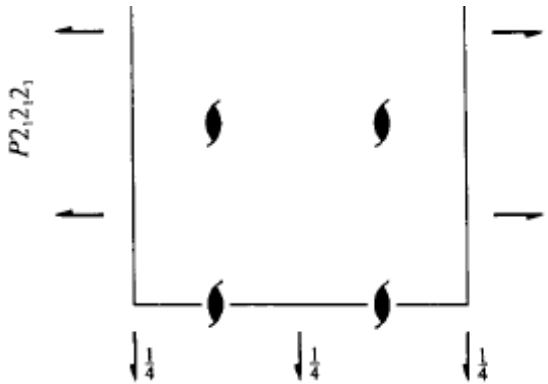


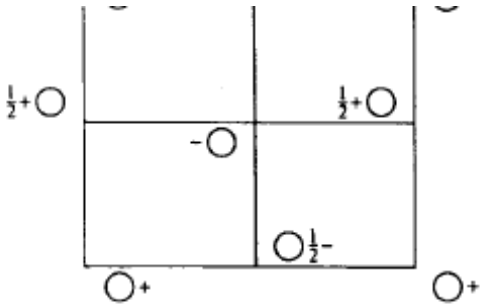
EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$ D_2^4 222 Orthorhombic

No. 19 $P2_12_12_1$ Patterson symmetry $Pmmm$





Origin at midpoint of three non-intersecting pairs of parallel 2_1 axes

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{2}$; $0 \le y \le \frac{1}{2}$; $0 \le z \le 1$

Symmetry operations

(1) 1 (2) $2(0,0,\frac{1}{2})$ $\frac{1}{4},0,z$ (3) $2(0,\frac{1}{2},0)$ $0,y,\frac{1}{4}$ (4) $2(\frac{1}{2},0,0)$ $x,\frac{1}{4},0$

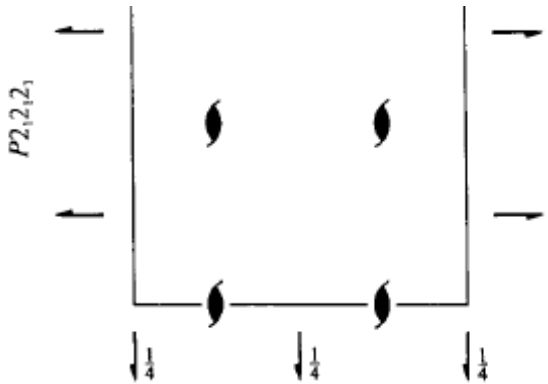
Posición del origen de la celda respecto a las operaciones de simetría.

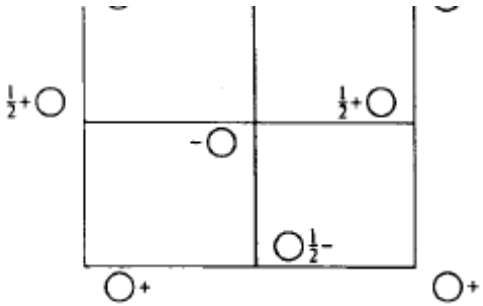
EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$ D_2^4 222 Orthorhombic

No. 19 $P2_12_12_1$ Patterson symmetry $Pmmm$





Origin at midpoint of three non-intersecting pairs of parallel 2_1 axes

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{2}$; $0 \le y \le \frac{1}{2}$; $0 \le z \le 1$

Symmetry operations

(1) 1 (2) $2(0,0,\frac{1}{2})$ $\frac{1}{4},0,z$ (3) $2(0,\frac{1}{2},0)$ $0,y,\frac{1}{4}$ (4) $2(\frac{1}{2},0,0)$ $x,\frac{1}{4},0$

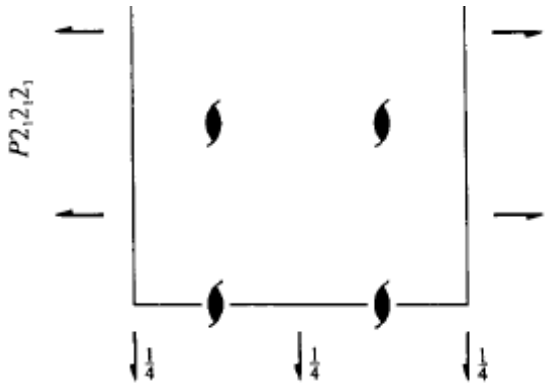
Mínima porción de la celda unidad que reconstruye la celda utilizando la simetría.

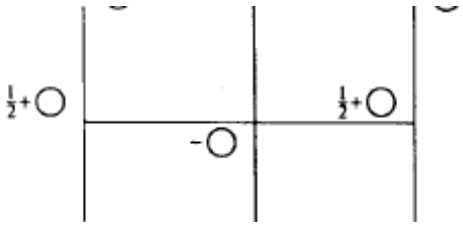
EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

$P2_12_12_1$ D_2^4 222 Orthorhombic

No. 19 $P2_12_12_1$ Patterson symmetry $Pmmm$





Operaciones de simetría (excluyendo traslaciones) que generan las posiciones equivalentes.

Origin at midpoint of three non-intersecting pairs of parallel 2_1 axes

Asymmetric unit $0 \le x \le \frac{1}{2}$; $0 \le y \le \frac{1}{2}$; $0 \le z \le 1$

Symmetry operations

(1) 1 (2) $2(0,0,\frac{1}{2})$ $\frac{1}{4},0,z$ (3) $2(0,\frac{1}{2},0)$ $0,y,\frac{1}{4}$ (4) $2(\frac{1}{2},0,0)$ $x,\frac{1}{4},0$

EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

CONTINUED No. 19 $P2_12_12_1$

Continuación de la página anterior. Número y símbolo resumido de H-M

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates				
4	a	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	(4) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}$	$h00: h=2n$ $0k0: k=2n$ $00l: l=2n$

Symmetry of special projections

Along [001] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{a}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$
Origin at $\frac{1}{4},0,z$

Along [100] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$
Origin at $x,\frac{1}{4},0$

Along [010] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{c}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{a}$
Origin at $0,y,\frac{1}{4}$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $P112_1$ ($P2_1$, 4) 1; 2
[2] $P12_11$ ($P2_1$, 4) 1; 3
[2] $P2_111$ ($P2_1$, 4) 1; 4

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $P2_12_12_1$ ($\mathbf{a}'=3\mathbf{a}$ or $\mathbf{b}'=3\mathbf{b}$ or $\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (19)

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $Pbca$ (61); [2] $Pnma$ (62); [2] $P4_12_12$ (92); [2] $P4_32_12$ (96); [3] $P2_13$ (198)

EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

Operaciones de simetría utilizadas para generar todas las operaciones del grupo espacial (incluyendo traslaciones)

CONTINUED

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates				Reflection conditions
							General:
4	a	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	(4) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}$	$h00$: $h=2n$ $0k0$: $k=2n$ $00l$: $l=2n$

Symmetry of special projections

Along [001] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{a}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$
Origin at $\frac{1}{4},0,z$

Along [100] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$
Origin at $x,\frac{1}{4},0$

Along [010] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{c}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{a}$
Origin at $0,y,\frac{1}{4}$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $P112_1$ ($P2_1$, 4) 1; 2
[2] $P12_11$ ($P2_1$, 4) 1; 3
[2] $P2_111$ ($P2_1$, 4) 1; 4

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $P2_12_12_1$ ($\mathbf{a}'=3\mathbf{a}$ or $\mathbf{b}'=3\mathbf{b}$ or $\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (19)

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $Pbca$ (61); [2] $Pnma$ (62); [2] $P4_12_12$ (92); [2] $P4_32_12$ (96); [3] $P2_13$ (198)

EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

Posiciones equivalentes:
Coordenadas de posiciones general y especiales

CONTINUED

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates			
4	a	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	(4) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}$

Reflection conditions

General:

$h00: \; h=2n$
$0k0: \; k=2n$
$00l: \; l=2n$

Symmetry of special projections

Along [001] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{a}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$
Origin at $\frac{1}{4},0,z$

Along [100] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$
Origin at $x,\frac{1}{4},0$

Along [010] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{c}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{a}$
Origin at $0,y,\frac{1}{4}$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $P112_1$ ($P2_1$, 4) 1; 2
[2] $P12_11$ ($P2_1$, 4) 1; 3
[2] $P2_111$ ($P2_1$, 4) 1; 4

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $P2_12_12_1$ ($\mathbf{a}'=3\mathbf{a}$ or $\mathbf{b}'=3\mathbf{b}$ or $\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (19)

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $Pbca$ (61); [2] $Pnma$ (62); [2] $P4_12_12$ (92); [2] $P4_32_12$ (96); [3] $P2_13$ (198)

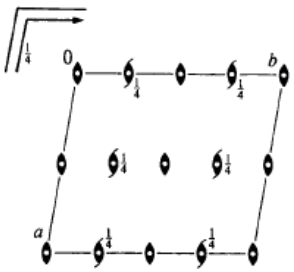
EJEMPLOS

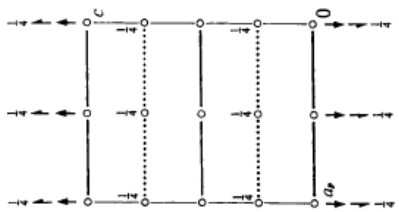
Int'l Tables for Crystallography

$C2/m$	C_{2h}^{3}	$2/m$	Monoclinic
No. 12	$A112/m$	Patterson symmetry	

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$; (2); (3)

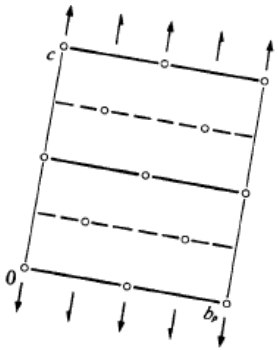
UNIQUE AXIS c, CELL CHOICE 1

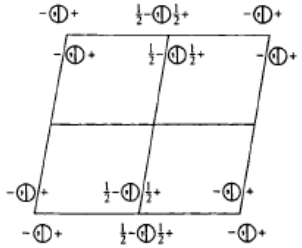




Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates			
			$(0,0,0)+$	$(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})+$		
8	j	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},\bar{y},z$	(3) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$	(4) $x,y,\bar{z}$





4	i	m	$x,y,0$	$\bar{x},\bar{y},0$
4	h	2	$\frac{1}{2},0,z$	$\frac{1}{2},0,\bar{z}$
4	g	2	$0,0,z$	$0,0,\bar{z}$
4	f	$\bar{1}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2},\frac{3}{4},\frac{1}{4}$
4	e	$\bar{1}$	$0,\frac{1}{4},\frac{1}{4}$	$0,\frac{3}{4},\frac{1}{4}$
2	d	$2/m$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$	
2	c	$2/m$	$\frac{1}{2},0,0$	
2	b	$2/m$	$0,0,\frac{1}{2}$	
2	a	$2/m$	$0,0,0$	

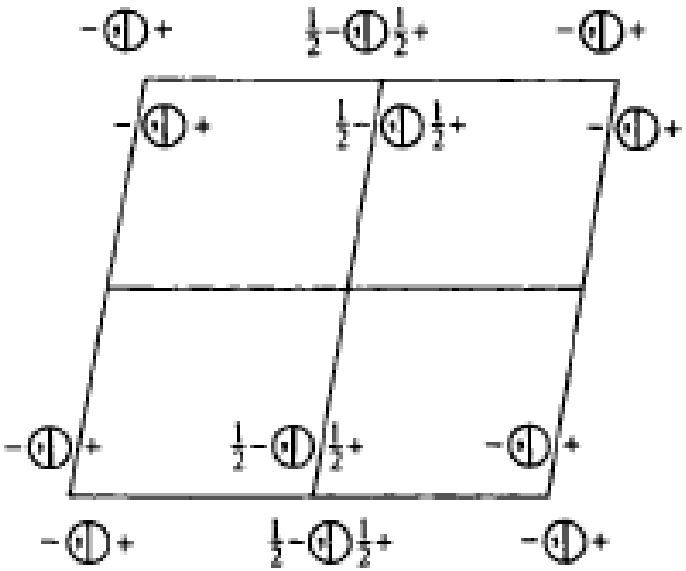
EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; $t(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates			
			$(0,0,0)+$	$(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2})+$		
8	j	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},\bar{y},z$	(3) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$	(4) $x,y,\bar{z}$
4	i	m	$x,y,0$	$\bar{x},\bar{y},0$		
4	h	2	$\frac{1}{2},0,z$	$\frac{1}{2},0,\bar{z}$		
4	g	2	$0,0,z$	$0,0,\bar{z}$		
4	f	$\bar{1}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2},\frac{3}{4},\frac{1}{4}$		
4	e	$\bar{1}$	$0,\frac{1}{4},\frac{1}{4}$	$0,\frac{3}{4},\frac{1}{4}$		
2	d	$2/m$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$			
2	c	$2/m$	$\frac{1}{2},0,0$			
2	b	$2/m$	$0,0,\frac{1}{2}$			
2	a	$2/m$	$0,0,0$			



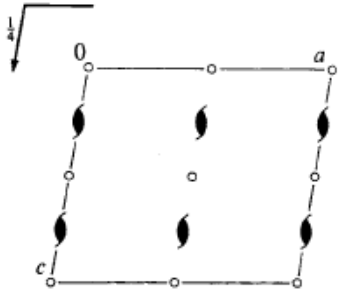
EJEMPLOS

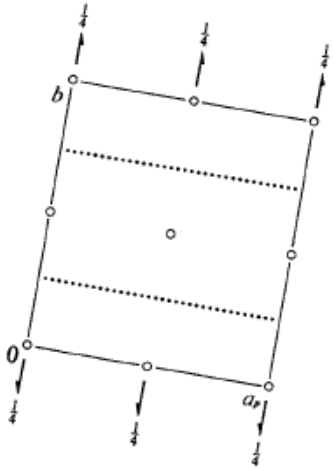
Int'l Tables for Crystallography

$P2_1/c$ $\quad C_{2h}^5$ $\quad 2/m$ $\quad$ Monoclinic

No. 14 $\quad P12_1/c1$

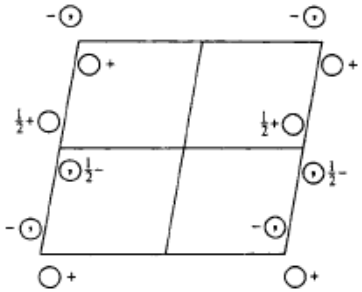
UNIQUE AXIS b, CELL CHOICE 1





Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates			
4	e	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},\bar{y},\bar{z}$	(4) $x,\bar{y}+\frac{1}{2},z+\frac{1}{2}$
2	d	$\bar{1}$	$\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$		
2	c	$\bar{1}$	$0,0,\frac{1}{2}$	$0,\frac{1}{2},0$		
2	b	$\bar{1}$	$\frac{1}{2},0,0$	$\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}$		
2	a	$\bar{1}$	$0,0,0$	$0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$		



EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

Simetría de las proyecciones a lo largo de direcciones relevantes.

CONTINUED

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates				Reflection conditions
							General:
4	a	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	(4) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}$	$h00$: $h=2n$ $0k0$: $k=2n$ $00l$: $l=2n$

Symmetry of special projections

Along [001] $p2gg$	Along [100] $p2gg$	Along [010] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{a}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$	$\mathbf{a}'=\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$	$\mathbf{a}'=\mathbf{c}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{a}$
Origin at $\frac{1}{4},0,z$	Origin at $x,\frac{1}{4},0$	Origin at $0,y,\frac{1}{4}$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $P112_1$ ($P2_1$, 4) 1; 2
[2] $P12_11$ ($P2_1$, 4) 1; 3
[2] $P2_111$ ($P2_1$, 4) 1; 4

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $P2_12_12_1$ ($\mathbf{a}'=3\mathbf{a}$ or $\mathbf{b}'=3\mathbf{b}$ or $\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (19)

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $Pbca$ (61); [2] $Pnma$ (62); [2] $P4_12_12$ (92); [2] $P4_32_12$ (96); [3] $P2_13$ (198)

EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

Condiciones de existencia de intensidad: para ver el jueves.

CONTINUED

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates			
4	a	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	(4) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}$

Reflection conditions

General:

$h00: \; h=2n$
$0k0: \; k=2n$
$00l: \; l=2n$

Symmetry of special projections

Along [001] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{a}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$
Origin at $\frac{1}{4},0,z$

Along [100] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$
Origin at $x,\frac{1}{4},0$

Along [010] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{c}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{a}$
Origin at $0,y,\frac{1}{4}$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $P112_1$ ($P2_1$, 4) 1; 2
[2] $P12_11$ ($P2_1$, 4) 1; 3
[2] $P2_111$ ($P2_1$, 4) 1; 4

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $P2_12_12_1$ ($\mathbf{a}'=3\mathbf{a}$ or $\mathbf{b}'=3\mathbf{b}$ or $\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (19)

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $Pbca$ (61); [2] $Pnma$ (62); [2] $P4_12_12$ (92); [2] $P4_32_12$ (96); [3] $P2_13$ (198)

EJEMPLOS

Int'l Tables for Crystallography

CONTINUED

Relación de grupo-subgrupo y grupo-supergrupo con otros grupos espaciales.

Generators selected (1); $t(1,0,0)$; $t(0,1,0)$; $t(0,0,1)$; (2); (3)

Positions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry			Coordinates				Reflection conditions
							General:
4	a	1	(1) x,y,z	(2) $\bar{x}+\frac{1}{2},\bar{y},z+\frac{1}{2}$	(3) $\bar{x},y+\frac{1}{2},\bar{z}+\frac{1}{2}$	(4) $x+\frac{1}{2},\bar{y}+\frac{1}{2},\bar{z}$	$h00$: $h=2n$ $0k0$: $k=2n$ $00l$: $l=2n$

Symmetry of special projections

Along [001] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{a}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{b}$
Origin at $\frac{1}{4},0,z$

Along [100] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{b}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{c}$
Origin at $x,\frac{1}{4},0$

Along [010] $p2gg$
$\mathbf{a}'=\mathbf{c}$ $\mathbf{b}'=\mathbf{a}$
Origin at $0,y,\frac{1}{4}$

Maximal non-isomorphic subgroups

I [2] $P112_1$ ($P2_1$, 4) 1; 2
[2] $P12_11$ ($P2_1$, 4) 1; 3
[2] $P2_111$ ($P2_1$, 4) 1; 4

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $P2_12_12_1$ ($\mathbf{a}'=3\mathbf{a}$ or $\mathbf{b}'=3\mathbf{b}$ or $\mathbf{c}'=3\mathbf{c}$) (19)

Minimal non-isomorphic supergroups

I [2] $Pbca$ (61); [2] $Pnma$ (62); [2] $P4_12_12$ (92); [2] $P4_32_12$ (96); [3] $P2_13$ (198)

EJEMPLOS

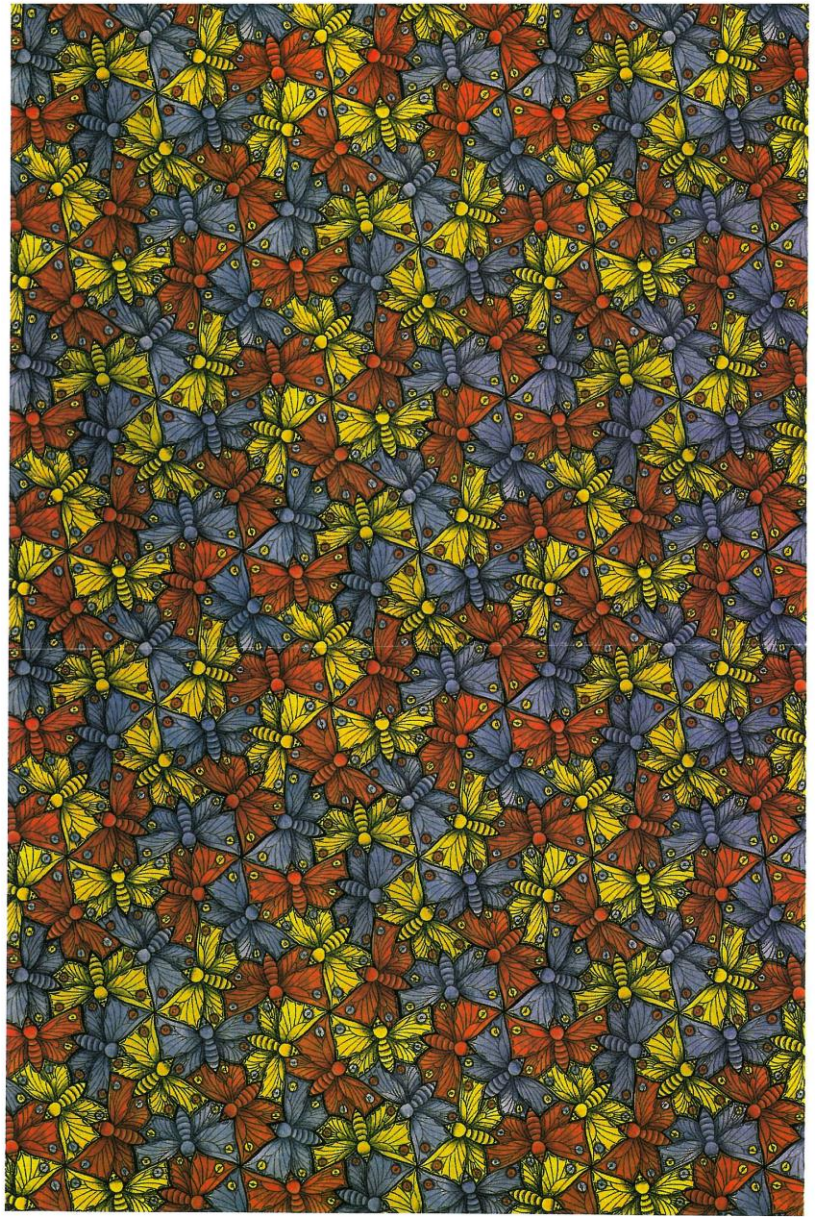
En la **Figura 1** se observa el patrón de Escher #70 “Mariposa”, el cual contiene mariposas rojas, amarillas y azules. Notar que son idénticas a menos del color (cualquier imperfección encontrada puede considerarse como un defecto menor realizado por el pintor). Responder lo siguiente completando sobre la imagen que se adjunta:

a) Ignorando el color, determinar todos los elementos de simetría, indicar la celda unidad y determinar el “grupo espacial 2D”.

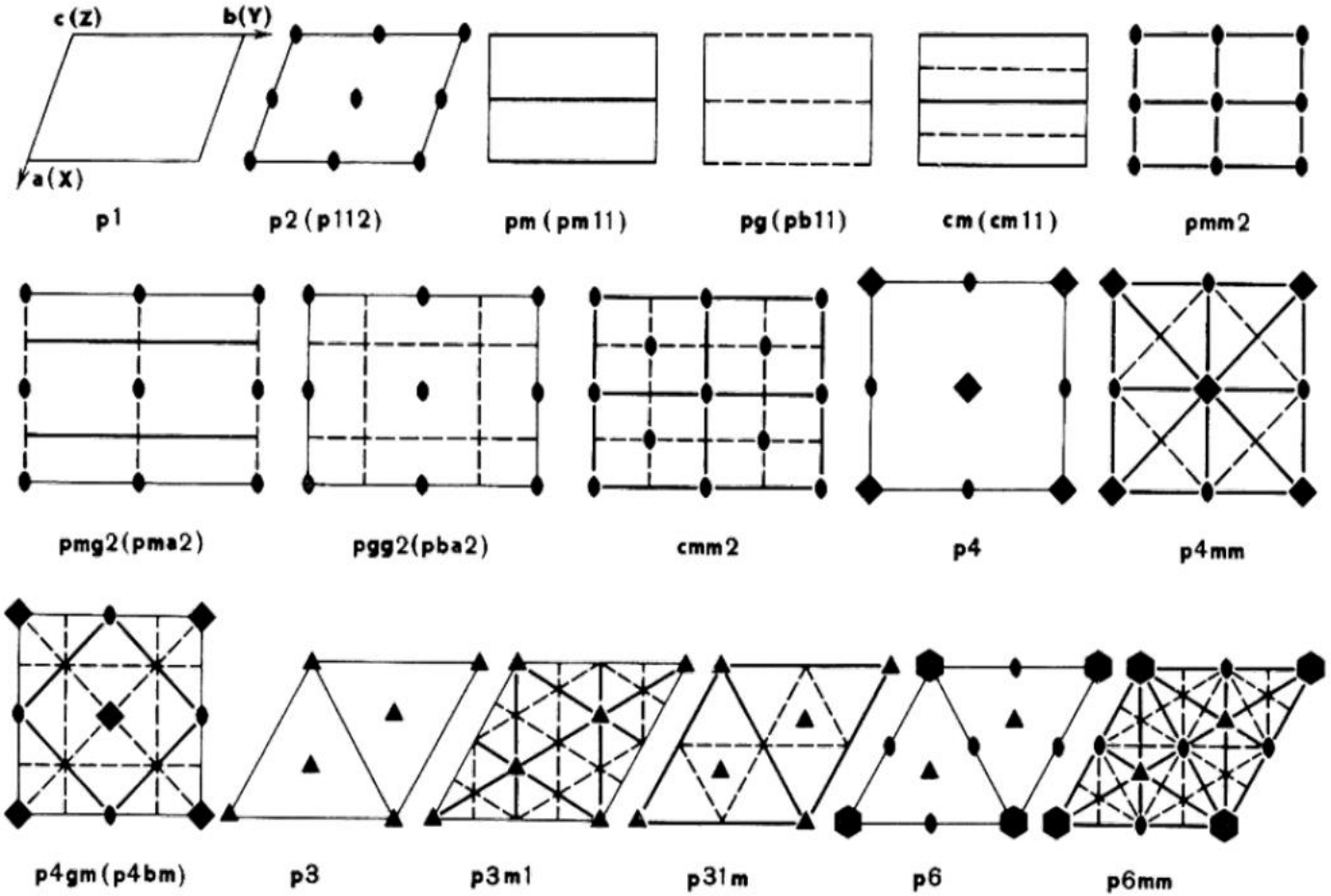
b) Considerando el color de la imagen, determinar lo mismo que se pregunta en a).

c) ¿Existe algún cambio en relación a la simetría y los elementos de simetría entre lo determinado en a) y b)?

d) ¿Qué relación geométrica hay entre la celda unidad determinada en a) y b)?



Symmetry Elements of the 2D Space Groups



Unit cell edge

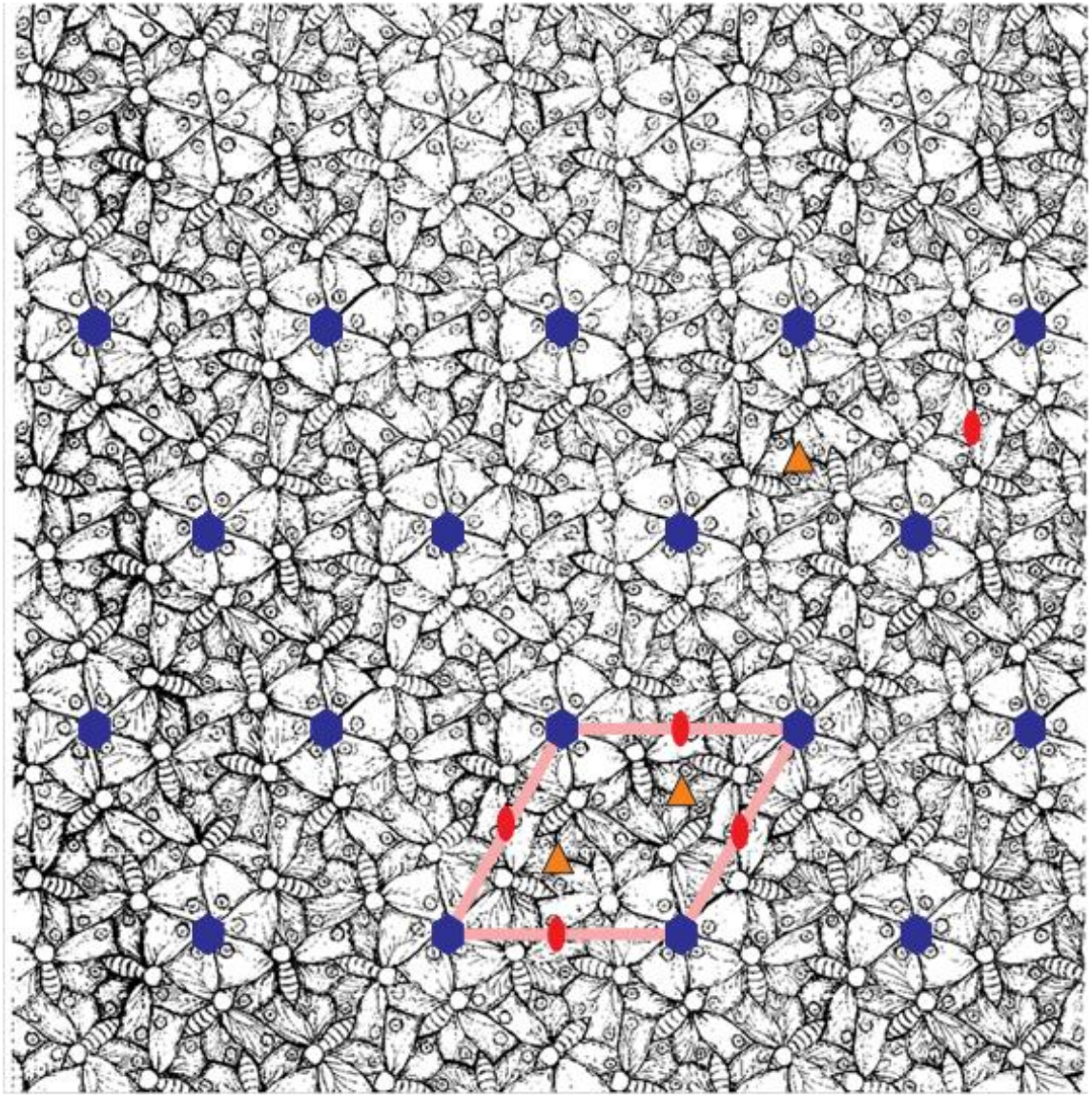
mirror line

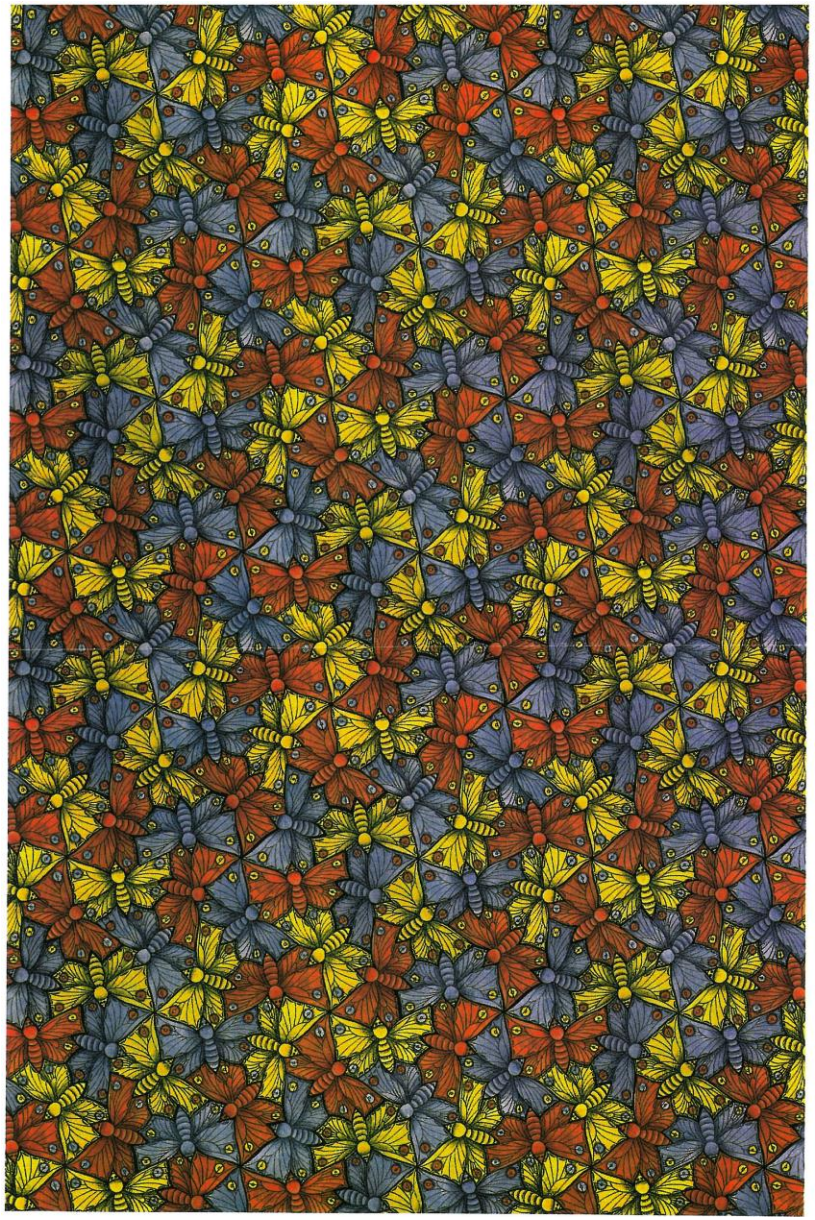
glide line

2, 3, 4, 6 – fold axes

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

EJEMPLOS





EJEMPLOS - Respuestas

En la **Figura 1** se observa el patrón de Escher #70 "Mariposa", el cual contiene mariposas rojas, amarillas y azules. Notar que son idénticas a menos del color (cualquier imperfección encontrada puede considerarse como un defecto menor realizado por el pintor). Responder lo siguiente completando sobre la imagen que se adjunta:

a) Ignorando el color, determinar todos los elementos de simetría, indicar la celda unidad y determinar el "grupo espacial 2D".

→ p6

b) Considerando el color de la imagen, determinar lo mismo que se pregunta en a).

→ p3

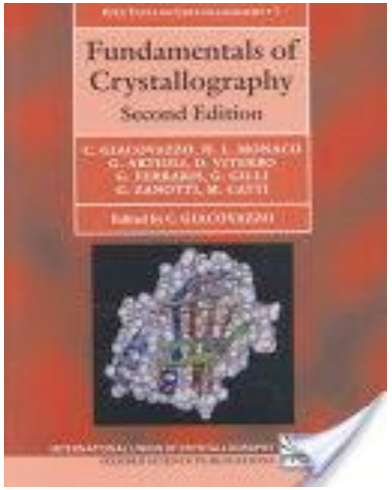
c) ¿Existe algún cambio en relación a la simetría y los elementos de simetría entre lo determinado en a) y b)?

Sí

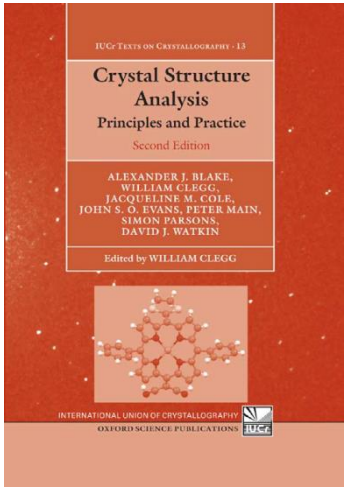
d) ¿Qué relación geométrica hay entre la celda unidad determinada en a) y b)?

La celda de color es 3 veces la celda en B&N

Referencias y bibliografía



Fundamentals of Crystallography.
IUCr Book Series
Edited by Carmelo Giacovazzo



Crystal Structure Analysis
Principles and Practice
IUCr Book Series
Edited by William Clegg

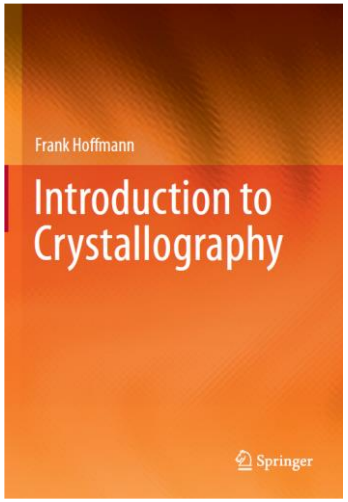
Material web

http://www.crystallographiccourseware.com/SpaceGroupSymmetry/ThreeDSymmetryElements.html

http://www.fempatrimoni.cat/www-crista/CASTELLA/index_es.htm#

http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/misc/symbols.htm

http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/parte_03_1-en.html

http://www.iucr.org/resources/symmetry-font

Introduction to Crystallography
Frank Hoffmann
Springer
2020