

CRISTALOGRAFÍA GEOMÉTRICA

TEMA 5

GRUPOS ESPACIALES

ÍNDICE

- 5.1 Grupos espaciales: Definiciones
- 5.2 Operaciones de simetría de los grupos espaciales
- 5.3 Derivación de los grupos espaciales
- 5.4 Símbolo de los grupos espaciales
- 5.5 Grupos espaciales planos
- 5.6 Posiciones equivalentes generales y especiales
- 5.7 Descripción gráfica de los grupos espaciales

Celia Marcos Pascual

5.1 GRUPOS ESPACIALES. DEFINICIONES

Se pueden definir los grupos espaciales como grupos de transformación del espacio tridimensional homogéneo y discreto en sí mismo.

El principio de homogeneidad de una sustancia en estado cristalino, considerándolo a nivel microscópico, es decir, considerando la atomicidad de la sustancia cristalina, incluye los principios de simetría (la sustancia cristalina contiene un infinito número de puntos iguales por simetría) y de discreción (no todos los puntos de una sustancia cristalina son idénticos).

Estos principios se realizan simultáneamente en la red cristalina. Las condiciones de homogeneidad y discreción determinan que todos los grupos espaciales sean periódicos tridimensionalmente y por lo tanto cristalográficos, con ejes de simetría de órdenes 1, 2, 3, 4 y 6.

Los grupos espaciales contienen al grupo de traslaciones de la red tridimensional como subgrupo, y por ello también pueden definirse los grupos espaciales como grupos en los que las rotaciones propias e impropias van acompañadas de las traslaciones.

5.2 OPERACIONES DE SIMETRÍA DE LOS GRUPOS ESPACIALES

Las operaciones de simetría que contienen los grupos espaciales son:

- rotaciones propias
- rotaciones impropias
- traslaciones
- rotaciones con traslaciones
- reflexiones con traslaciones

El número de elementos de simetría existentes en un grupo espacial es infinito debido a que las traslaciones repiten la celda elemental infinitas veces, pero por lo mismo el grupo espacial queda perfectamente definido a partir de dicha celda.

El número total de grupos espaciales es de 230, los cuales fueron obtenidos en 1890 casi simultáneamente por Federov y Schönflies.

5.3 DERIVACIÓN DE LOS GRUPOS ESPACIALES

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

En cualquier caso hay que tener en cuenta que:

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

En la Figura 5.1 puede observarse la estructura de la hemimorfita ($\text{Zn}_4\text{Si}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$), corresponde al grupo espacial $Imm2$. Está basada en una red rómbica centrada en el interior, I, cuya simetría puntual, mmm , es la del grupo puntual holoédrico de las redes rómbicas. El motivo que se repite en la estructura está coloreado en salmón y tiene la simetría $mm2$, que es un grupo puntual subgrupo del mmm (grupo puntual holoédrico de las redes rómbicas).

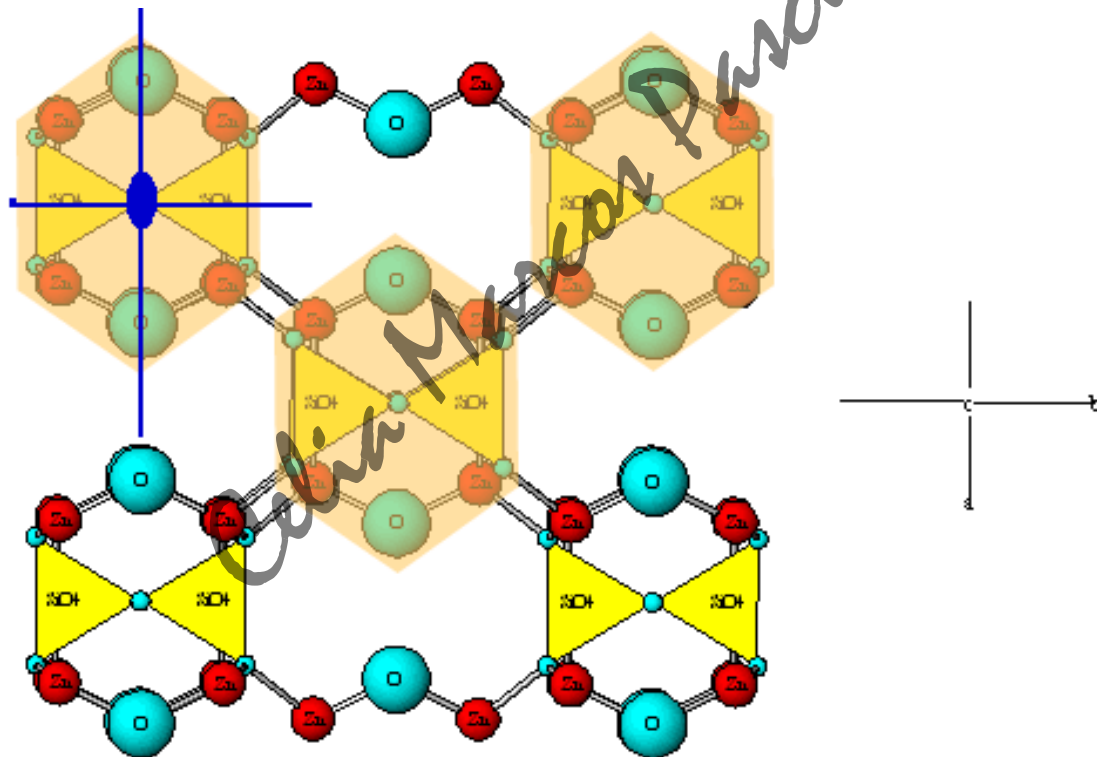


Figura 5.1.- Estructura de la hemimorfita en la que se ha resaltado el motivo que se repite

TIPOS DE GRUPOS ESPACIALES

Hay dos tipos:

- Grupos espaciales simorfos
- Grupos espaciales no simorfos

GRUPOS ESPACIALES SIMORFOS

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

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

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

Tabla 5.1

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

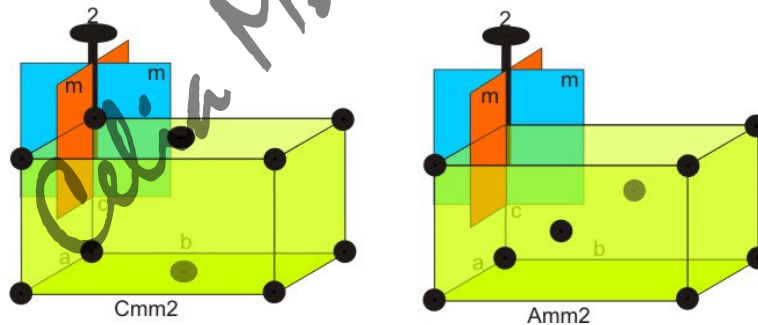


Figura 5.2

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

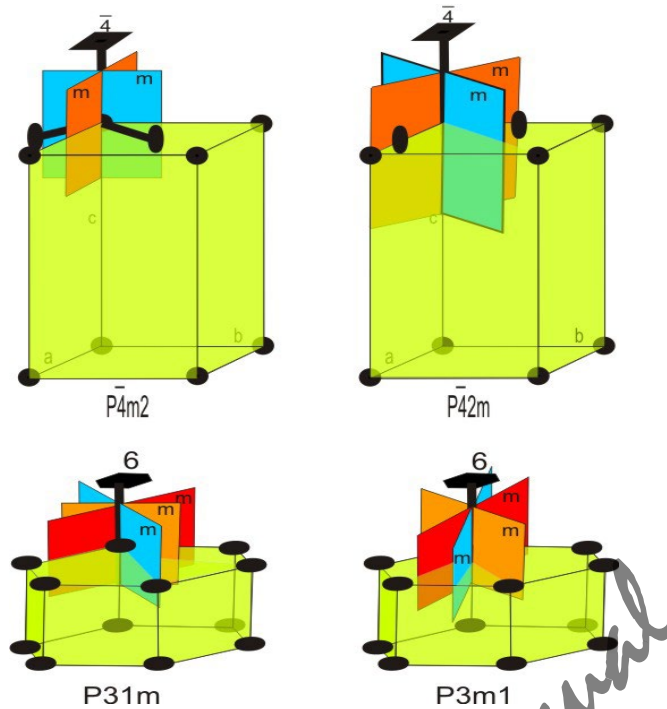


Figura 5.3

- En el espacio de tres dimensiones la idea geométrica de un grupo simorfo es equivalente a colocar los elementos de simetría de un grupo puntual dado sobre los nudos de la red de Bravais compatible con dicha simetría (Figura 5.4).

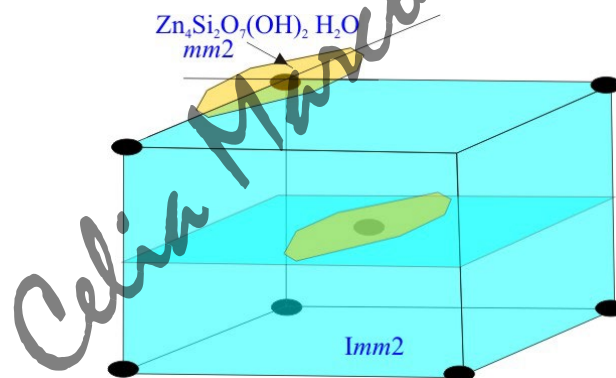
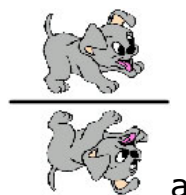


Figura 5.4

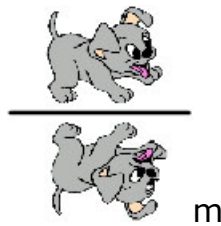
- Se obtienen elementos de simetría con traslación asociada.

En las siguientes Figuras 5.5 a-d puede observarse cómo combinando una red monodimensional



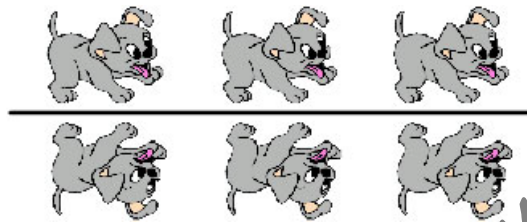
(a)

con un grupo puntual m



(b)

se obtiene el grupo espacial simorfo



(c)

en el que además de la traslación, la identidad y la reflexión, aparece el deslizamiento n



(d)

Figuras 5.5 a-d.- Obtención de grupo espacial simorfo

GRUPOS ESPACIALES NO SIMORFOS

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

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

Sistema cristalino triclinico

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

Tabla 5.2

Sistema cristalino monoclinico

1ª orientación: $c = 2$ y/o -2

	No simorfos	
Simorfos	Hemisimorfos	Asimorfos
3 $P2$	7 Pc	4 $P2_1$
5 $C2$	9 Cc	11 $P2_1/m$
6 Pm	13 $P2/c$	14 $P2_1/c$
8 Cm	15 $C2/c$	
10 $P2/m$		
12 $C2/m$		

2ª orientación: $b = 2$ y/o -2

	No simorfos	
Simorfos	Hemisimorfos	Asimorfos
3 $P2$	7 Pb	4 $P2_1$
5 $B2$	9 Bb	11 $P2_1/m$
6 Pm	13 $P2/b$	14 $P2_1/b$
8 Bm	15 $B2/b$	
10 $P2/m$		
12 $B2/m$		

Tabla 5.3

Sistema cristalino rómbico

	No simorfos	
Simorfos	Hemisimorfos	Asimorfos
	27 $Pcc2$	17 $P222_1$
16 $P222$	28 $Pma2$	18 $P2_12_12$
21 $C222$	30 $Pnc2$	19 $P2_12_12_1$
22 $F222$	32 $Pba2$	20 $C222_1$
23 $I222$	34 $Pnn2$	24 $I2_12_12_1$
25 $Pmm2$	37 $Ccc2$	26 $Pmc2_1$
35 $Cmm2$	39 $Abm2$	29 $Pca2_1$
38 $Amm2$	40 $Ama2$	31 $Pmn2_1$
42 $Fmm2$	41 $Aba2$	33 $Pna2_1$
44 $Imm2$	43 $Fdd2$	36 $Cmc2_1$
47 $Pmmm$	45 $Iba2$	51 $Pmma$
65 $Cmmm$	46 $Ima2$	52 $Pnna$
69 $Fmmm$	48 $Pnnn$	53 $Pmna$
71 Imm	49 $Pccm$	54 $Pcca$
	50 $Pban$	55 $Pbam$

	No simorfos	
Simorfos	Hemisimorfos	Asimorfos
	66 <i>Cccm</i>	56 <i>Pccn</i>
	67 <i>Cmma</i>	57 <i>Pbcm</i>
	68 <i>Ccca</i>	58 <i>Pnnm</i>
	70 <i>Fddd</i>	59 <i>Pmmn</i>
	72 <i>Ibam</i>	60 <i>Pbcn</i>
		61 <i>Pbca</i>
		62 <i>Pnma</i>
		63 <i>Cmcm</i>
		64 <i>Cmca</i>
		73 <i>Ibca</i>
		74 <i>Imma</i>

Tabla 5.4

Sistema cristalino romboédrico

Simorfos	No simorfos	
	Hemisimorfos	Asimorfos
143 <i>P3</i>	158 <i>P3c1</i>	144 <i>P3₁</i>
146 <i>R3</i>	159 <i>P3lc</i>	145 <i>P3₂</i>
147 <i>P$\bar{3}$</i>	161 <i>R3c</i>	151 <i>P3₁12</i>
148 <i>R$\bar{3}$</i>	163 <i>P$\bar{3}$1c</i>	152 <i>P3₁2₁</i>
149 <i>P312</i>	165 <i>P$\bar{3}$c1</i>	153 <i>P3₂12</i>
150 <i>P321</i>	167 <i>R$\bar{3}$c</i>	154 <i>P3₂21</i>
155 <i>R32</i>		
156 <i>P3m1</i>		
157 <i>P31m</i>		
160 <i>R3m</i>		
162 <i>P$\bar{3}$1m</i>		
164 <i>P$\bar{3}$m1</i>		
166 <i>R$\bar{3}$m</i>		

Tabla 5.5

Sistema cristalino hexagonal

	No simorfos	
Simorfos	Hemisimorfos	Asimorfos
168 $P6$	184 $P6cc$	169 $P6_1$
174 $P\bar{6}$	188 $P\bar{6}c2$	170 $P6_5$
175 $P6/m$	190 $P\bar{6}2c$	171 $P6_2$
177 $P622$	192 $P6/mcc$	172 $P6_4$
183 $P6mm$		173 $P6_3$
187 $P\bar{6}m2$		176 $P6_3/m$
189 $P\bar{6}2m$		178 $P6_122$
191 $P6/mmm$		179 $P6_522$
		180 $P6_222$
		181 $P6_422$
		182 $P6_322$
		185 $P6_3cm$
		186 $P6_3mc$
		193 $P6_3/mcm$
		194 $P6_3/mmc$

Tabla 5.6

Sistema cristalino tetragonal

	No simorfos	
Simorfos	Hemisimorfos	Asimorfos
75 $P4$	85 $P4/n$	76 $P4_1$
79 $I4$	100 $P4bm$	77 $P4_2$
81 $P\bar{4}$	103 $P4cc$	78 $P4_3$
82 $I\bar{4}$	104 $P4nc$	80 $I4_1$
83 $P4/m$	108 $I4cm$	84 $P4_2/m$
87 $I4/m$	112 $P\bar{4} 2c$	85 $P4/n$
89 $P422$	116 $P\bar{4} c2$	86 $P4_2/n$
97 $I422$	117 $P\bar{4} b2$	88 $I4_1/a$
99 $P4mm$	118 $P\bar{4} n2$	90 $P42_12$
107 $I4mm$	120 $I\bar{4} c2$	91 $P4_122$
111 $P\bar{4} 2m$	124 $P4/mcc$	92 $P4_12_12$
115 $P\bar{4} m2$	125 $P4/nbm$	93 $P4_222$
119 $I\bar{4} m2$	126 $P4/nnc$	94 $P4_22_12$
121 $I\bar{4} 2m$	140 $I4/mcm$	95 $P4_322$
123 $P4/mmm$		96 $P4_32_12$
139 $I4/mmm$		98 $I4_222$
		101 $P4_2cm$
		102 $P4_2nm$
		105 $P4_2mc$
		106 $P4_2bc$
		109 $I4_1md$
		110 $I4_1cd$
		113 $P\bar{4} 2_1m$
		114 $P\bar{4} 2_1c$
		122 $I\bar{4} 2d$
		127 $P4/mbm$
		129 $P4/nmm$
		130 $P4/ncc$
		131 $P4_2/mmc$
		132 $P4_2/mcm$
		133 $P4_2/nbc$
		134 $P4_2/nnm$
		135 $P4_2/mbc$
		136 $P4_2/mnm$
		137 $P4_2/nmc$
		138 $P4_2/ncm$
		141 $I4_1/amd$
		142 $I4_1/acd$
		128 $P4/mnc$

75	$P4$	85	$P4/n$	76	$P4_1$
79	$I4$	100	$P4bm$	77	$P4_2$
81	$P\bar{4}$	103	$P4cc$	78	$P4_3$
82	$I\bar{4}$	104	$P4nc$	80	$I4_1$
83	$P4/m$	108	$I4cm$	84	$P4_2/m$
87	$I4/m$	112	$P\bar{4}2c$	85	$P4/n$
89	$P422$	116	$P\bar{4}c2$	86	$P4_2/n$
97	$I422$	117	$P\bar{4}b2$	88	$I4_1/a$
99	$P4mm$	118	$P\bar{4}n2$	90	$P42_12$
107	$I4mm$	120	$I\bar{4}c2$	91	$P4_122$
111	$P\bar{4}2m$	124	$P4/mcc$	92	$P4_12_12$
115	$P\bar{4}m2$	125	$P4/nbm$	93	$P4_222$
119	$I\bar{4}m2$	126	$P4/nnc$	94	$P4_22_12$
121	$I\bar{4}2m$	140	$I4/mcm$	95	$P4_322$
123	$P4/mmm$			96	$P4_32_12$
139	$I4/mmm$			98	$I4_122$
				101	$P4_2cm$
				102	$P4_2nm$
				105	$P4_2mc$
				106	$P4_2bc$
				109	$I4_1md$
				110	$I4_1cd$
				113	$P\bar{4}2_1m$
				114	$P\bar{4}2_1c$
				122	$I\bar{4}2d$
				127	$P4/mbm$
				129	$P4/nmm$
				130	$P4/ncc$
				131	$P4_2/mmc$
				132	$P4_2/mcm$
				133	$P4_2/nbc$
				134	$P4_2/nnm$
				135	$P4_2/mbc$
				136	$P4_2/mnm$
				137	$P4_2/nmc$
				138	$P4_2/ncm$
				141	$I4_1/amd$
				142	$I4_1/acd$
				128	$P4/mnc$

Tabla 5.7

Sistema cristalino cúbico

Simorfos	No simorfos	
	Hemisimorfos	Asimorfos
195 $P2\bar{3}$	201 $Pn\bar{3}$	198 $P2_1\bar{3}$
196 $F2\bar{3}$	203 $Fd\bar{3}$	199 $I2_1\bar{3}$
197 $I2\bar{3}$	218 $P\bar{4}3n$	205 $Pa\bar{3}$
200 $Pm\bar{3}$	219 $F\bar{4}3c$	206 $Ia\bar{3}$
202 $Fm\bar{3}$	222 $Pn\bar{3}n$	208 $P4_2\bar{3}2$
204 $Im\bar{3}$	226 $Fm\bar{3}c$	209 $F4\bar{3}2$
207 $P4\bar{3}2$		210 $F4_1\bar{3}2$
209 $F4\bar{3}2$		212 $P4_3\bar{3}2$
211 $I4\bar{3}2$		213 $P4_1\bar{3}2$
215 $P\bar{4}3m$		214 $I4_1\bar{3}2$
216 $F\bar{4}3m$		220 $I\bar{4}3d$
217 $I\bar{4}3m$		223 $Pm\bar{3}n$
221 $Pm\bar{3}m$		224 $Pn\bar{3}m$
225 $Fm\bar{3}m$		225 $Fm\bar{3}m$
229 $Im\bar{3}m$		227 $Fd\bar{3}m$
		228 $Fd\bar{3}c$
		230 $Ia\bar{3}d$

Tabla 5.8

5.4 SÍMBOLO DE LOS GRUPOS ESPACIALES

Existen dos tipos de símbolos.

- Notación de Schoenflies, que es la más antigua de todas.
 - Consiste de una letra mayúscula, característica del tipo del grupo puntual,
 - Puede ir acompañada de uno o más subíndices:
 - uno de ellos numérico
 - el otro una letra minúscula
 - cuando existen ambos se escriben en este orden.
- Notación de Hermann Mauguin (o notación internacional). Consta de:
 - Una letra mayúscula que indica el tipo de red de Bravais.
 - Un conjunto de caracteres, después de la letra mayúscula, que indican elementos de simetría referidos a las direcciones de simetría de la red.
 - Pueden incluir:
 - Barra de quebrado

- denominador es la letra m
- numerador es un número que hace referencia al orden de un eje de rotación.
- Pueden simplificarse algunos símbolos si no da lugar a confusión con otros símbolos.

OBTENCIÓN DEL SÍMBOLO DE LOS GRUPOS ESPACIALES

Para obtener el símbolo de un grupo espacial, de acuerdo a la notación internacional, hay que tener en cuenta:

- las direcciones de simetría de la red plana o tridimensional, según que el grupo espacial sea plano o tridimensional.

Redes	Direcciones de simetría		
	Punto de rotación en el plano	Secundarias	Terciarias
Oblicua			
Rectangular		[10]	[01]
Cuadrada		[10] [01]	[11] [11]
Hexagonal		[10] [01] [11]	[11] [12] [21]

Tabla 5.9.- Direcciones de simetría de la red plana

Sistema cristalino	Direcciones de simetría		
	Primarias	Secundarias	Terciarias
Triclínico	Ninguna		
Monoclínico	[010] ó [001] ó [100]		
Rómbico	[100]	[010]	[001]
Tetragonal	[001]	[100] [010]	[110] [110]
Hexagonal	[001]	[100] [010] [110]	[110] [120] [210]
Romboédrico	[001]	[100] [010] [110]	
Cúbico	[100] [010] [001]	[111] [111] [111]	[110] [110] [011] [011] [101] [101]

Tabla 5.10.- Direcciones de simetría de la red tridimensional

- Se distinguen tres direcciones de simetría:
 - primarias, secundarias y terciarias.
 - En las redes triclínicas no hay ninguna dirección de simetría.
 - En las redes monoclínicas hay una dirección de simetría.
 - En las redes romboédricas hay dos direcciones de simetría, pero hay que tener en cuenta que se elijan ejes hexagonales o romboédricos.
 - En las redes rómbicas, tetragonales, hexagonales y cúbicas hay tres direcciones.
- En el símbolo de los grupos espaciales de los sistemas triclínico y monoclínico sólo hace falta especificar el elemento de simetría existente

(1 o 1 con raya) en el triclínico y el elemento de simetría existente en la única dirección de simetría del monoclinico.

- En el caso de los grupos espaciales del sistema romboédrico hay que especificar los elementos de simetría existentes en las dos direcciones de simetría.
- En el caso de los grupos espaciales de los sistemas rómbico, tetragonal, hexagonal y cúbico hay que especificar los elementos de simetría existentes en las tres direcciones de simetría.
- En el caso de que en alguna de las direcciones de simetría no haya ningún elemento de simetría no se escribe nada.

Cuadro 5.1

En la Tabla 5.11 aparecen los 230 grupos espaciales distribuidos por sistemas cristalinos. Puede observarse que aparece el símbolo abreviado y el completo a continuación, además de un número entre paréntesis a la izquierda del mismo, que corresponde al número de orden en las Tablas Internacionales.

Nº	Symbol	Nº	Symbol	Nº	Symbol	Nº	Symbol	Nº	Symbol
1	$P1$	2	$P\bar{1}$	3	$P2$	4	$P2_1$	5	$C2$
6	Pm	7	Pc	8	Cm	9	Cc	10	$P2/m$
11	$P2_1/m$	12	$C2/m$	13	$P2/c$	14	$P2_1/c$	15	$C2/c$
16	$P222$	17	$P222_1$	18	$P2_12_12$	19	$P2_12_12_1$	20	$C222_1$
21	$C222$	22	$F222$	23	$I222$	24	$I2_12_12_1$	25	$Pmm2$
26	$Pmc2_1$	27	$Pcc2$	28	$Pma2$	29	$Pca2_1$	30	$Pnc2$
31	$Pmn2_1$	32	$Pba2$	33	$Pna2_1$	34	$Pnn2$	35	$Cmm2$
36	$Cmc2_1$	37	$Ccc2$	38	$Amm2$	39	$Abm2$	40	$Ama2$
41	$Aba2$	42	$Fmm2$	43	$Fdd2$	44	$Imm2$	45	$Iba2$
46	$Ima2$	47	$Pmmm$	48	$Pnnn$	49	$Pccm$	50	$Pban$
51	$Pmma$	52	$Pnna$	53	$Pmna$	54	$Pcca$	55	$Pbam$
56	$Pccn$	57	$Pbcm$	58	$Pnnm$	59	$Pmmn$	60	$Pbcn$
61	$Pbca$	62	$Pnma$	63	$Cmcm$	64	$Cmca$	65	$Cmmm$
66	$Cccm$	67	$Cmma$	68	$Ccca$	69	$Fmmm$	70	$Fddd$
71	$Immm$	72	$Ibam$	73	$Ibca$	74	$Imma$	75	$P4$
76	$P4_1$	77	$P4_2$	78	$P4_3$	79	$I4$	80	$I4_1$
81	$P\bar{4}$	82	$I\bar{4}$	83	$P4/m$	84	$P4_2/m$	85	$P4/n$
86	$P4_2/n$	87	$I4/m$	88	$I4_1/a$	89	$P4_22$	90	$P4_2_12$
91	$P4_122$	92	$P4_12_12$	93	$P4_222$	94	$P4_22_12$	95	$P4_322$
96	$P4_32_12$	97	$I4_22$	98	$I4_122$	99	$P4mm$	100	$P4bm$
101	$P4_2cm$	102	$P4_2nm$	103	$P4cc$	104	$P4nc$	105	$P4_2mc$
106	$P4_2bc$	107	$I4mm$	108	$I4cm$	109	$I4_1md$	110	$I4_1cd$
111	$P\bar{4}2m$	112	$P\bar{4}2c$	113	$P\bar{4}2_1m$	114	$P\bar{4}2_1c$	115	$P\bar{4}m2$

116	$P\bar{4}_c2$	117	$P\bar{4}_b2$	118	$P\bar{4}_n2$	119	$I\bar{4}_m2$	120	$I\bar{4}_c2$
121	$I\bar{4}_2m$	122	$I\bar{4}_2d$	123	$P4/mmm$	124	$P4/mcc$	125	$P4/nbm$
126	$P4/nnc$	127	$P4/mbm$	128	$P4/mnc$	129	$P4/nmm$	130	$P4/ncc$
131	$P4_2/mmc$	132	$P4_2/mcm$	133	$P4_2/nbc$	134	$P4_2/nnm$	135	$P4_2/mbc$
136	$P4_2/mnm$	137	$P4_2/nmc$	138	$P4_2/ncm$	139	$I4/mmm$	140	$I4/mcm$
141	$I4_1/amd$	142	$I4_1/acd$	143	$P3$	144	$P31$	145	$P32$
146	$R3$	147	$P\bar{3}$	148	$R\bar{3}$	149	$P312$	150	$P321$
151	$P3_112$	152	$P3_121$	153	$P3_212$	154	$P3_221$	155	$R32$
156	$P3m1$	157	$P31m$	158	$P3c1$	159	$P31c$	160	$R3m$
161	$R3c$	162	$P\bar{3}1m$	163	$P\bar{3}1c$	164	$P\bar{3}m1$	165	$P\bar{3}c1$
166	$R\bar{3}m$	167	$R\bar{3}c$	168	$P6$	169	$P6_1$	170	$P6_5$
171	$P6_2$	172	$P6_4$	173	$P6_3$	174	$P\bar{6}$	175	$P6/m$
176	$P6_3/m$	177	$P622$	178	$P6_122$	179	$P6_522$	180	$P6_222$
181	$P6_422$	182	$P6_322$	183	$P6mm$	184	$P6cc$	185	$P6_3cm$
186	$P6_3mc$	187	$P\bar{6}_m2$	188	$P\bar{6}_c2$	189	$P\bar{6}_2m$	190	$P\bar{6}_2c$
191	$P6/mmm$	192	$P6/mcc$	193	$P6_3/mcm$	194	$P6_3/mmc$	195	$P23$
196	$F23$	197	$I23$	198	$P213$	199	$I2_13$	200	$Pm\bar{3}$
201	$Pn\bar{3}$	202	$Fm\bar{3}$	203	$Fd\bar{3}$	204	$Im\bar{3}$	205	$Pa\bar{3}$
206	$Ia\bar{3}$	207	$P432$	208	$P4_232$	209	$F432$	210	$F4_132$
211	$I432$	212	$P4_332$	213	$P4_132$	214	$I4_132$	215	$P\bar{4}_3m$
216	$F\bar{4}_3m$	217	$I\bar{4}_3m$	218	$P\bar{4}_3n$	219	$F\bar{4}_3c$	220	$I\bar{4}_3d$
221	$Pm\bar{3}m$	222	$Pn\bar{3}n$	223	$Pm\bar{3}n$	224	$Pn\bar{3}m$	225	$Fm\bar{3}m$
226	$Fm\bar{3}c$	227	$Fd\bar{3}m$	228	$Fd\bar{3}c$	229	$Im\bar{3}m$	230	$Ia\bar{3}d$

Tabla 5.11.- Símbolos de los Grupos espaciales. (Nota: Los números que aparecen en las columnas coloreadas en amarillos corresponden al orden en el que aparecen los grupos espaciales en las Tablas Internacionales de Cristalografía)

En las Tabla 5.12 a 5.18 pueden observarse los grupos espaciales ordenados por sistemas cristalinos.

GRUPOS ESPACIALES DEL SISTEMA TRICLÍNICO

Grupo puntual	1	$\bar{1}$
Grupos espaciales	1	2 $P\bar{1}$
Simetría del grupo de Laue	$\bar{1}$	

Tabla 5.12

GRUPOS ESPACIALES DEL SISTEMA MONOCLÍNICO

	2ª orientación: b = 2 y/o -2		
Grupo puntual	2	m	2/m
Grupos espaciales	3 <i>P2</i>	6 <i>Pm</i>	10 <i>P2/m</i>
	4 <i>P2₁</i>	7 <i>Pc</i>	11 <i>P2₁/m</i>
	5 <i>C2</i>	8 <i>Cm</i>	12 <i>C2/m</i>
		9 <i>Cc</i>	13 <i>P2/c</i>
			14 <i>P2₁/c</i>
			15 <i>C2/c</i>
Simetría del grupo de Laue	<i>2/m</i>		

	1ª orientación: c = 2 y/o -2		
Grupo puntual	2	m	2/m
Grupos espaciales	3 <i>P2</i>	6 <i>Pm</i>	10 <i>P2/m</i>
	4 <i>P2₁</i>	7 <i>Pb</i>	11 <i>P2₁/m</i>
	5 <i>B2</i>	8 <i>Bm</i>	12 <i>B2/m</i>
		9 <i>Bb</i>	13 <i>P2/b</i>
			14 <i>P2₁/b</i>
			15 <i>B2/b</i>
Simetría del grupo de Laue	<i>2/m</i>		

Tabla 5.13

GRUPOS ESPACIALES DEL SISTEMA RÓMBICO

Grupo puntual	222	mm2	mmm
Grupos espaciales	16 <i>P222</i>	25 <i>Pmm2</i>	47 <i>Pmmm</i>
	17 <i>P222₁</i>	26 <i>Pmc2₁</i>	48 <i>Pnnn</i>
	18 <i>P2₁2₁2</i>	27 <i>Pcc2</i>	49 <i>Pccm</i>
	19 <i>P2₁2₁2₁</i>	28 <i>Pma2</i>	50 <i>Pban</i>
	20 <i>C222₁</i>	29 <i>Pca2₁</i>	51 <i>Pmma</i>
	21 <i>C222</i>	30 <i>Pnc2</i>	52 <i>Pnna</i>
	22 <i>F222</i>	31 <i>Pmn2₁</i>	53 <i>Pmna</i>
	23 <i>I222</i>	32 <i>Pba2</i>	54 <i>Pcca</i>
	24 <i>I2₁2₁2₁</i>	33 <i>Pna2₁</i>	55 <i>Pbam</i>
		34 <i>Pnn2</i>	56 <i>Pccn</i>
		35 <i>Cmm2</i>	57 <i>Pbcm</i>
		36 <i>Cmc2₁</i>	58 <i>Pnnm</i>
		37 <i>Ccc2</i>	59 <i>Pmmn</i>
		38 <i>Amm2</i>	60 <i>Pbcn</i>
		39 <i>Abm2</i>	61 <i>Pbca</i>
		40 <i>Ama2</i>	62 <i>Pnma</i>
		41 <i>Aba2</i>	63 <i>Cmcm</i>
		42 <i>Fmm2</i>	64 <i> Cmca</i>
		43 <i>Fdd2</i>	65 <i>Cmmm</i>
		44 <i>Imm2</i>	66 <i>Cccm</i>

Grupo puntual	222	mm2	mmm
		45 <i>Iba2</i> 46 <i>Ima2</i>	67 <i>Cmma</i> 68 <i>Ccca</i> 69 <i>Fmmm</i> 70 <i>Fddd</i> 71 <i>Immm</i> 72 <i>Ibam</i> 73 <i>Ibca</i> 74 <i>Imma</i>
Simetría del grupo de Laue	mmm		

Tabla 5.14

GRUPOS ESPACIALES DEL SISTEMA ROMBOÉDRICO

Grupo puntual	3	$\bar{3}$	32	$3m$	$\bar{3}m$
Grupos espaciales	143 <i>P3</i> 144 <i>P3₁</i> 145 <i>P3₂</i> 146 <i>R3</i>	147 <i>P$\bar{3}$</i> 148 <i>R$\bar{3}$</i>	149 <i>P312</i> 150 <i>P321</i> 151 <i>P3₁12</i> 152 <i>P3₁21</i> 153 <i>P3₂12</i> 154 <i>P3₂21</i> 155 <i>R32</i>	156 <i>P3m1</i> 157 <i>P31m</i> 158 <i>P3c1</i> 159 <i>P31c</i> 160 <i>R3m</i> 161 <i>R3c</i>	162 <i>P$\bar{3}$1m</i> 163 <i>P$\bar{3}$1c</i> 164 <i>P$\bar{3}$m1</i> 165 <i>P$\bar{3}$c1</i> 166 <i>R$\bar{3}$m</i> 167 <i>R$\bar{3}$c</i>
Simetría del grupo de Laue	$\bar{3}m$				

Tabla 5.15

GRUPOS ESPACIALES DEL SISTEMA HEXAGONAL

Grupo puntual	6	$\bar{6}$	6/m	622	6mm	$\bar{6} m2$	6/mmm
Grupos espaciales	168 $P6$ 169 $P6_1$ 170 $P6_5$ 171 $P6_2$	174 $P\bar{6}$	175 $P6/m$ 176 $P6_3/m$	177 $P622$ 178 $P6_122$ 179 $P6_522$ 180 $P6_222$ 181 $P6_422$ 182 $P6_322$	183 $P6mm$ 184 $P6cc$ 185 $P6_3cm$ 186 $P6_3mc$	187 $P\bar{6} m2$ 188 $P\bar{6} c2$ 189 $P\bar{6} 2m$ 190 $P\bar{6} 2c$	191 $P6/mmm$ 192 $P6/mcc$ 193 $P6_3/mcm$ 194 $P6_3/mmc$
Simetría del grupo de Laue	6/mmm						

Tabla 5.16

GRUPOS ESPACIALES DEL SISTEMA TETRAGONAL

Grupo puntual	4	$\bar{4}$	4/m	422	4mm	$\bar{4} 2m$	4/mmm
Grupos espaciales	75 $P4$ 76 $P4_1$ 77 $P4_2$ 78 $P4_3$ 79 $I4$ 80 $I4_1$	81 $P\bar{4}$ 82 $I\bar{4}$	83 $P4/m$ 84 $P4_2/m$ 85 $P4/n$ 86 $P4_2/n$ 87 $I4/m$ 88 $I4_1/a$	89 $P422$ 90 $P4_212$ 91 $P4_122$ 92 $P4_1212$ 93 $P4_222$ 94 $P4_2212$ 95 $P4_322$ 96 $P4_3212$ 97 $I422$ 98 $I4_122$	99 $P4mm$ 100 $P4bm$ 101 $P4_2cm$ 102 $P4_2nm$ 103 $P4cc$ 104 $P4nc$ 105 $P4_2mc$ 106 $P4_2bc$ 107 $I4mm$ 108 $I4cm$ 109 $I4_1md$ 110 $I4_1cd$	111 $P\bar{4} 2m$ 112 $P\bar{4} 2c$ 113 $P\bar{4} 2_1m$ 114 $P\bar{4} 2_1c$ 115 $P\bar{4} m2$ 116 $P\bar{4} c2$ 117 $P\bar{4} b2$ 118 $P\bar{4} n2$ 119 $I\bar{4} m2$ 120 $I\bar{4} c2$ 121 $I\bar{4} 2m$	123 $P4/mmm$ 124 $P4/mcc$ 125 $P4/nbm$ 126 $P4/nnc$ 127 $P4/mbm$ 128 $P4/mnc$ 129 $P4/nmm$ 130 $P4/ncc$ 131 $P4_2/mmc$ 132 $P4_2/mcm$ 133 $P4_2/nbc$ 134 $P4_2/nnm$ 135 $P4_2/mbc$ 136 $P4_2/mnm$

Grupo puntual	4	$\bar{4}$	4/m	422	4mm	$\bar{4} 2m$	4/mmm
						122 $I\bar{4} 2d$	137 $P4_2/nmc$ 138 $P4_2/ncm$ 139 $I4/mmm$ 140 $I4/mcm$ 141 $I4_1/amd$ 142 $I4_1/acd$
Simetría del grupo de Laue	4/mmm						

Tabla 5.17

GRUPOS ESPACIALES DEL SISTEMA CÚBICO

Grupo puntual	23	$m\bar{3}$	432	$\bar{4} 3m$	$m\bar{3}m$
Grupos espaciales	195 $P23$	200 $Pm\bar{3}$	207 $P432$	215 $P\bar{4} 3m$	221 $Pm\bar{3}m$
	196 $F23$	201 $Pn\bar{3}$	208 $P4_232$	216 $F\bar{4} 3m$	222 $Pn\bar{3}n$
	197 $I23$	202 $Fm\bar{3}$	209 $F432$	217 $I\bar{4} 3m$	223 $Pm\bar{3}n$
	198 $P2_13$	203 $Fd\bar{3}$	210 $F4_132$	218 $P\bar{4} 3n$	224 $Pn\bar{3}m$
	199 $I2_13$	204 $Im\bar{3}$	211 $I432$	219 $F\bar{4} 3c$	225 $Fm\bar{3}m$
		205 $Pa\bar{3}$	212 $P4_332$	220 $I\bar{4} 3d$	226 $Fm\bar{3}c$
		206 $Ia\bar{3}$	213 $P4_132$		227 $Fd\bar{3}m$
			214 $I4_132$		228 $Fd\bar{3}c$
					229 $Im\bar{3}m$
					230 $Ia\bar{3}d$

Grupo puntual	23	$m\bar{3}$	432	$\bar{4}3m$	$m\bar{3}m$
Simetría del grupo de Laue	$m\bar{3}m$				

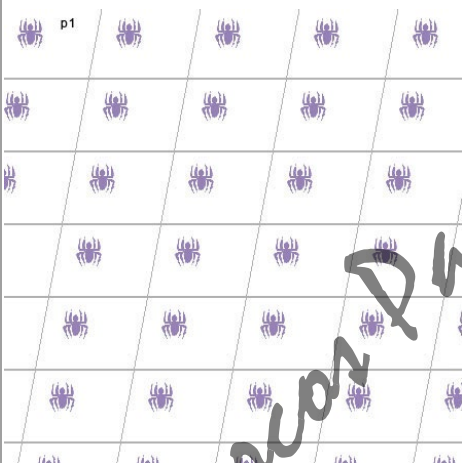
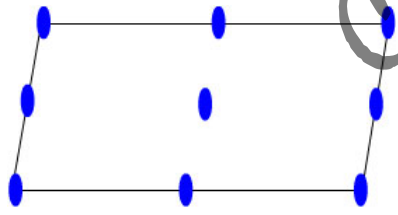
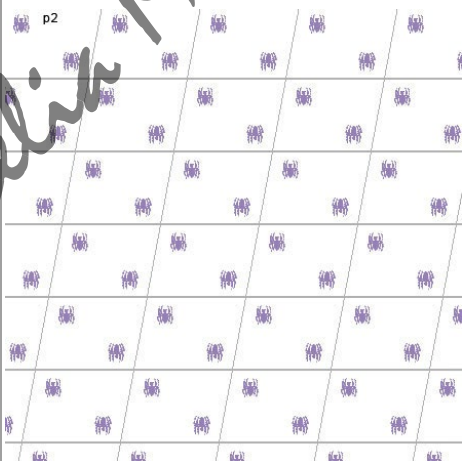
Tabla 5.18

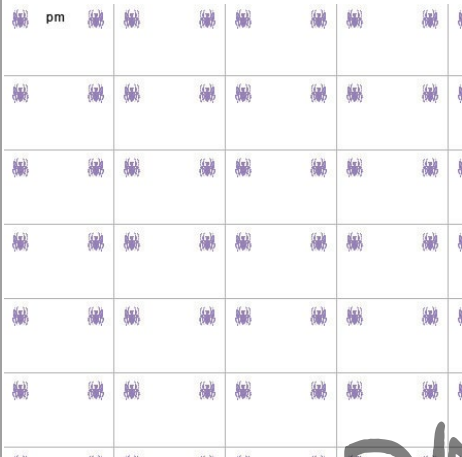
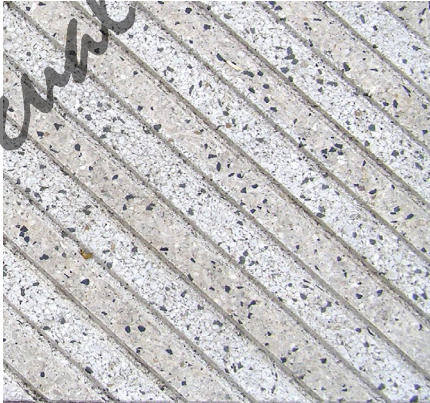
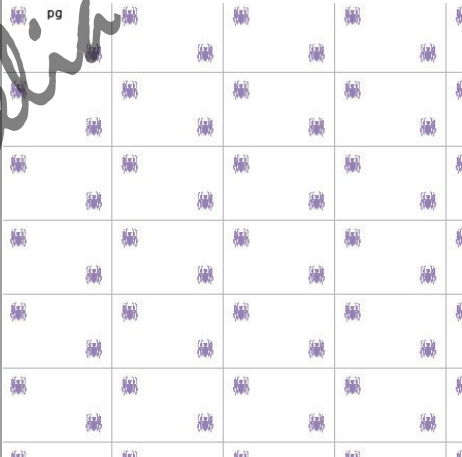
Celia Marcos Pascual

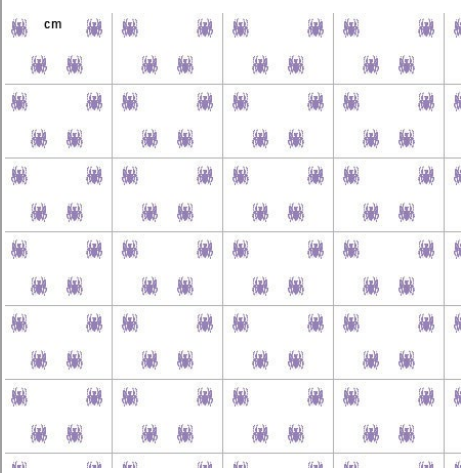
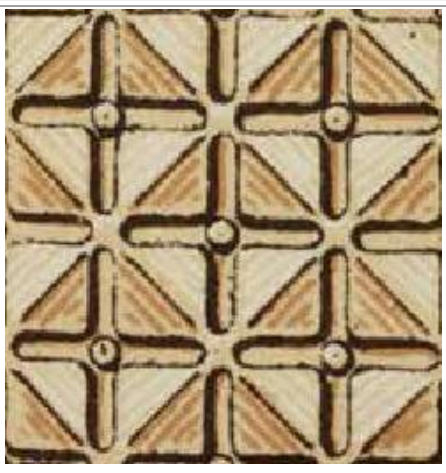
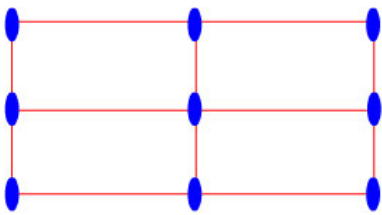
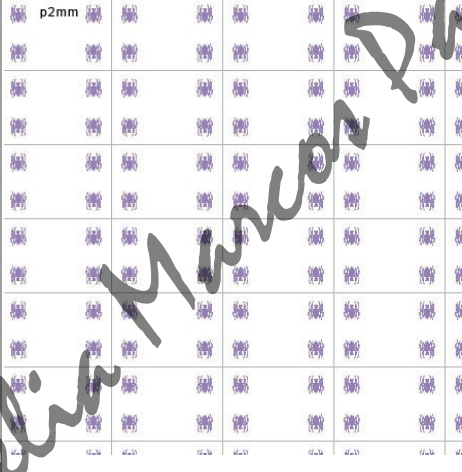
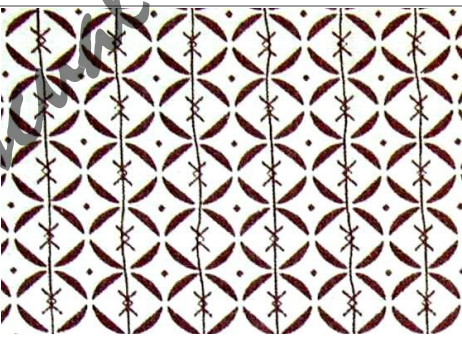
5.5 GRUPOS ESPACIALES PLANOS Y SÍMBOLO

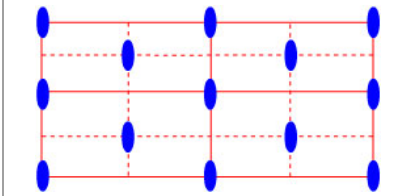
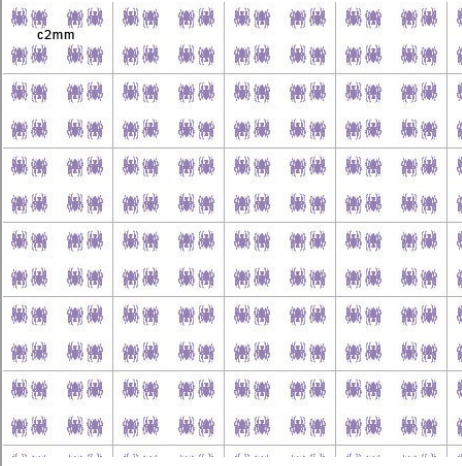
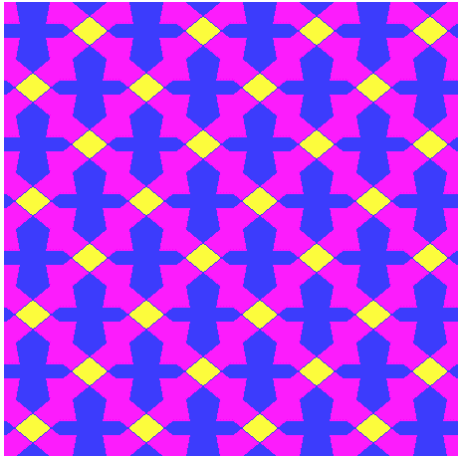
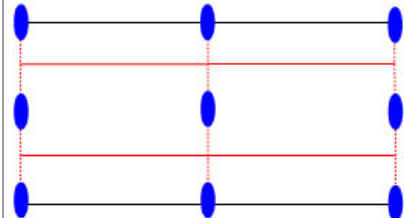
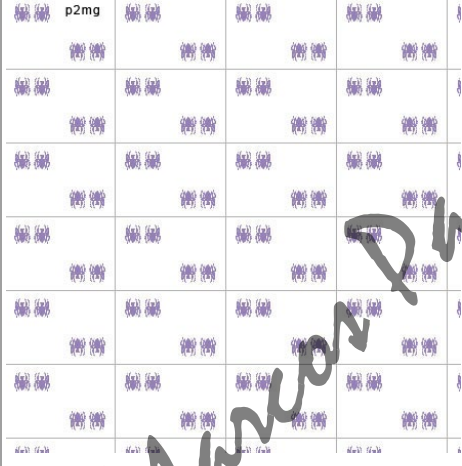
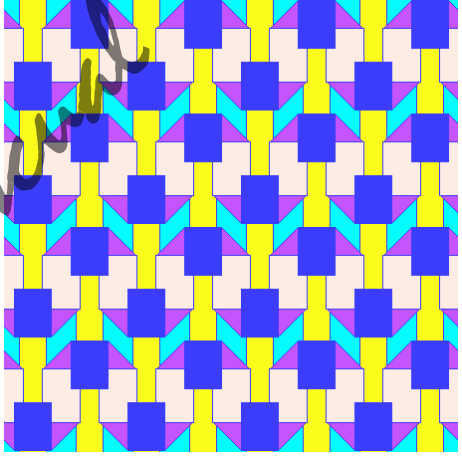
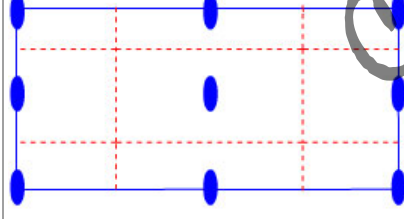
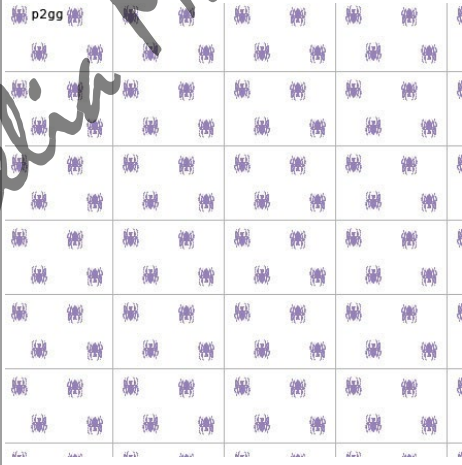
- Los grupos espaciales planos son 17 y corresponden a las redes planas.
- El símbolo de los mismos consiste en una letra minúscula que indica el tipo de red plana (p = primitiva y c = centrada) seguida de una serie de caracteres que consisten en el símbolo de los elementos de simetría asociados a las direcciones de simetría de las redes planas (Tabla 5.9).

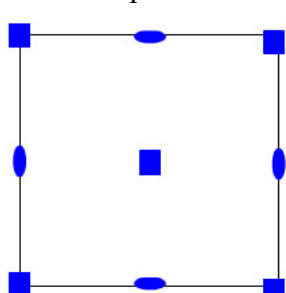
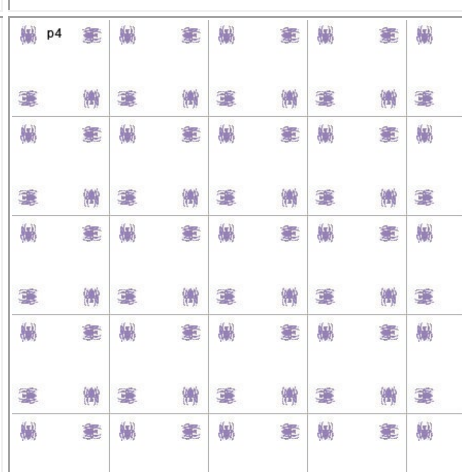
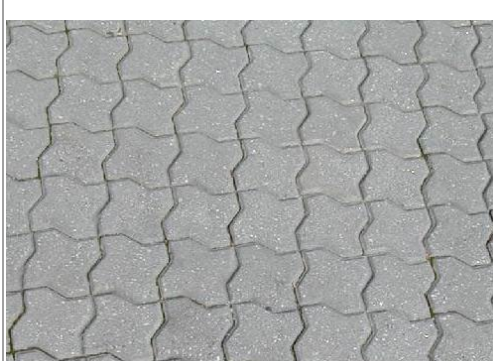
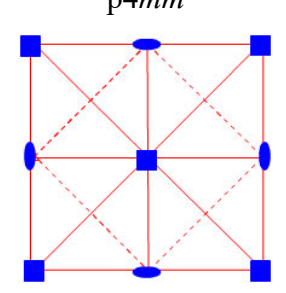
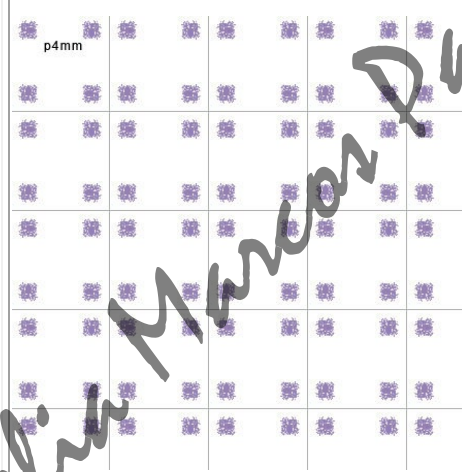
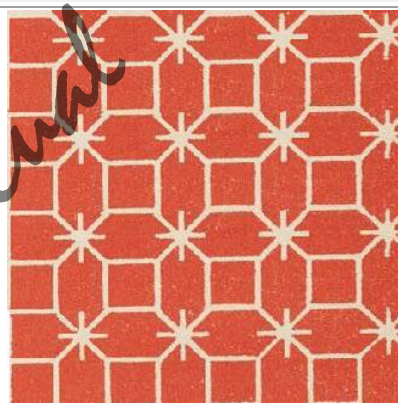
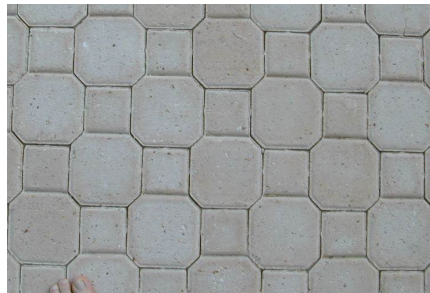
Ejemplos de grupos espaciales planos se pueden ver en la Tabla 5.19

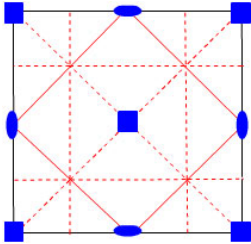
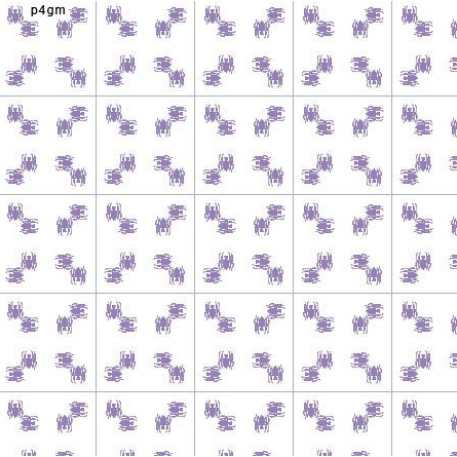
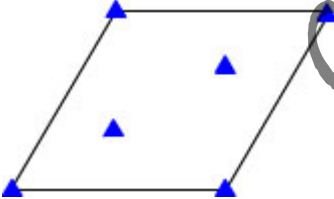
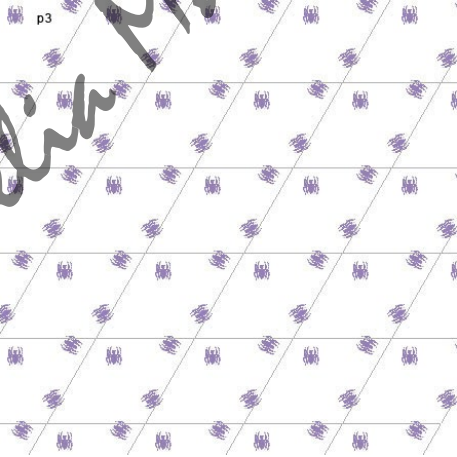
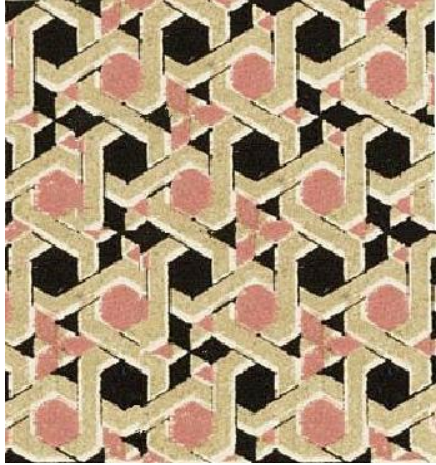
Símbolo y gráfico	Dibujos	Mosaicos, pavimentos, motivos
p1 	p1 	 egipcio
p2 	p2 	 egipcio

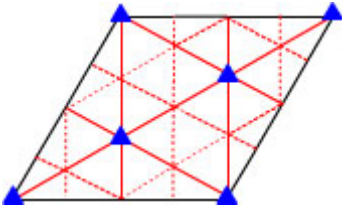
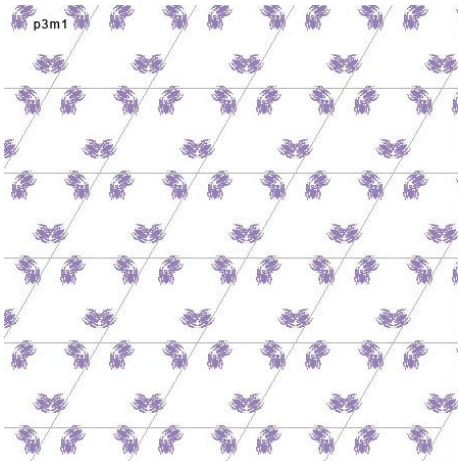
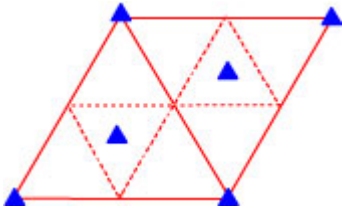
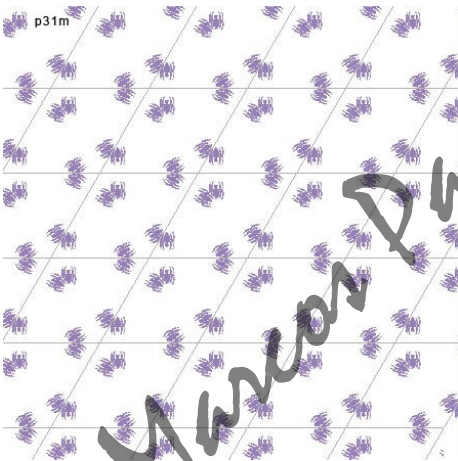
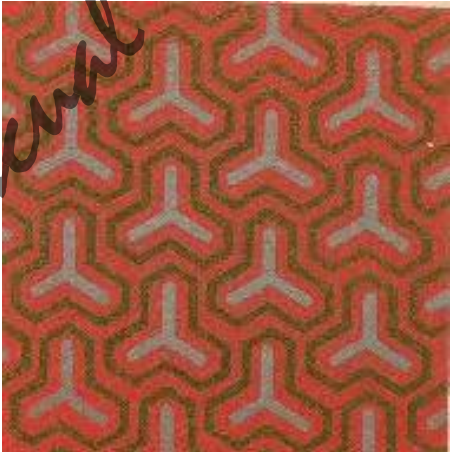
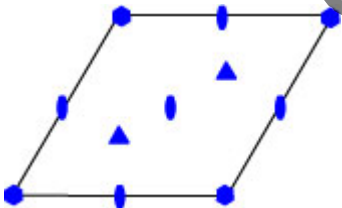
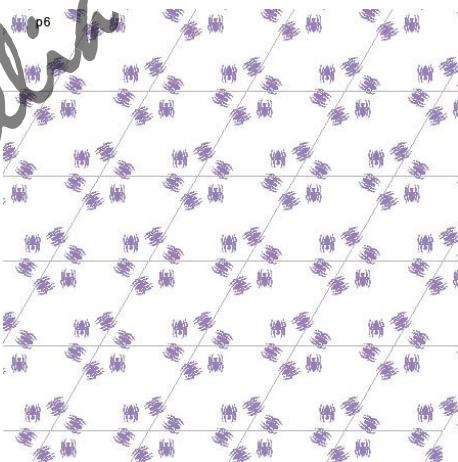
Símbolo y gráfico	Dibujos	Mosaicos, pavimentos, motivos
pm 		 Egipcio  Baldosa acera
pg 		 Damasco de Kent (Inglaterra)

Símbolo y gráfico	Dibujos	Mosaicos, pavimentos, motivos
cm ó cg 		 St. Denis (Francia, siglo XII)
p2mm 		 Egipcio  Baldosa acera

Símbolo y gráfico	Dibujos	Mosaicos, pavimentos, motivos
$c2mm$ ó $c2gg$ 		
$p2mg$ 		
$p2gg$ 		 pavimento

Símbolo y gráfico	Dibujos	Mosaicos, pavimentos, motivos
p4 	p4 	 pavimento
p4mm 	p4mm 	 Motivo persa  pavimento

Símbolo y gráfico	Dibujos	Mosaicos, pavimentos, motivos
p4gm ó p4gg 		 Verja  Baldosa acera
p3 		 Motivo árabe

Símbolo y gráfico	Dibujos	Mosaicos, pavimentos, motivos
$p3m1$ 	$p3m1$ 	 Motivo persa
$p31m$ 	$p31m$ 	 Motivo chino
$p6$ 	$p6$ 	 Motivo persa

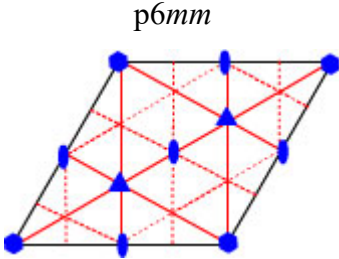
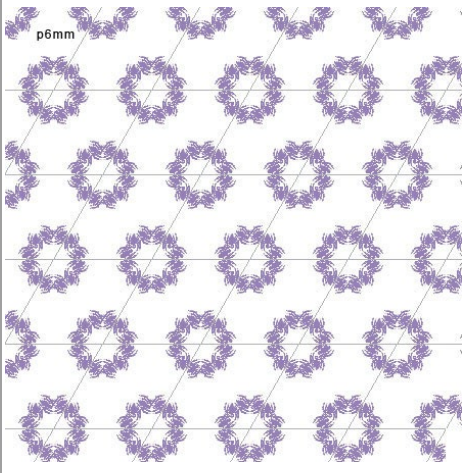
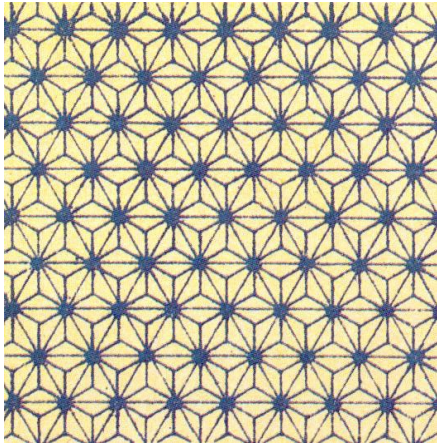
Símbolo y gráfico	Dibujos	Mosaicos, pavimentos, motivos
 $p6mm$	 $p6mm$	 Motivo chino

Tabla 5.19

5.6 POSICIONES EQUIVALENTES

- La existencia de operaciones de simetría en un grupo espacial produce una serie de puntos equivalentes por simetría.
- Conociendo todas las operaciones de un grupo espacial dado se pueden obtener, a partir de cualquier punto, todos los puntos simétricamente iguales a él.
- Al conjunto de puntos así generados se le denomina *sistema puntual regular* del grupo.
- El sistema puntual regular se describe mediante el conjunto de coordenadas de cada uno de los puntos iniciales y las coordenadas de los puntos derivados expresadas en términos de las coordenadas del punto inicial.

Posición general

- Punto no situado sobre ningún elemento de simetría.
- Al conjunto de puntos derivados de él se le denomina *sistema puntual regular de posición general*
- Sus puntos son asimétricos y se les asigna el símbolo de la identidad, 1, porque son equivalentes a sí mismos por el eje monario.

Posición especial (o particular)

- Punto situado sobre algún elemento de simetría
- El número de puntos generados por él se denomina sistema puntual regular de posición especial.
- La multiplicidad es menor que en el caso de la posición general.

- A los puntos en posición especial se les asigna la simetría del elemento sobre el que se encuentran, denominada simetría de posición.

MULTIPLICIDAD

Es el número de puntos de un sistema puntual regular.

UNIDAD ASIMÉTRICA

También denominada *región fundamental* es una parte del espacio que no contiene ningún elemento de simetría y por aplicación de los elementos del grupo espacial se obtiene la celda elemental.

Es útil para interpretar y describir la estructura cristalina.

5.7 DESCRIPCIÓN GRÁFICA DE LOS GRUPOS ESPACIALES

La representación gráfica de los grupos espaciales se realiza, en general, mediante dos proyecciones sobre el plano (001):

1. Elementos de simetría (Figura 5.6),

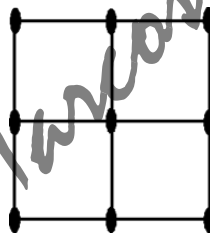


Figura 5.6

- Se adopta el siguiente convenio:
 - La orientación del eje b en el plano de proyección se toma de izquierda a derecha, mientras que la del eje a va de arriba hacia abajo en el plano de proyección.
 - El ángulo entre los ejes a y b es de 90° en los sistemas ortogonales, de 120° en los sistemas hexagonal y romboédrico y de cualquier valor en el triclínico. En el sistema monoclinico existen dos alternativas para la elección de las orientaciones de los ejes, según que sea b o c la dirección de simetría de la red; así en el primer caso los ejes de la celda proyectados serán a y c y el ángulo entre ellos (β) será diferente de 90° , mientras que en el segundo caso serán a y b los ejes proyectados y el ángulo entre ellos (γ) será de 90° .
 - Los planos de simetría correspondientes a una dirección de simetría se dibujan perpendicularmente a dicha dirección de simetría.

Los símbolos de los elementos de simetría pueden observarse en las Tablas 5.20 a 5.23 (adaptados de las Tablas Internacionales de Cristalografía).

Plano o línea de simetría de simetría	Símbolo gráfico	Vector deslizamiento en unidades de vectores de traslación de la red paralelos y perpendiculares al plano de proyecciónal eje	Símbolo impreso
Plano de reflexión o línea de reflexión	————	ninguno	<i>m</i>
Plano de deslizamiento <i>axial</i> o línea de deslizamiento	- - - -	1/2 del vector de red a lo largo de la línea en el plano de proyección 1/2 del vector de red a lo largo de la línea	<i>a, b o c</i> <i>g</i>
Plano de deslizamiento <i>axial</i>		1/2 perpendicular al plano de proyección	<i>a, b o c</i>
Plano de deslizamiento "doble"(sólo en celdas centradas)	- . - . - .	2 vectores de deslizamiento: 1/2 a lo largo de la línea paralela al plano de proyección 1/2 perpendicular al plano de proyección	<i>e</i>
Plano de deslizamiento <i>diagonal</i>	-----	1 vector de deslizamiento con dos componentes: 1/2 a lo largo de la línea paralela al plano de proyección 1/2 perpendicular al plano de proyección	<i>n</i>
Plano de deslizamiento <i>diamante</i> (pares de planos; en celdas centradas solamente)	→ - - - ← - - -	1/4 a lo largo de la línea paralela al plano de proyección, combinado con 1/4 perpendicular al plano de proyección (las flechas indican la dirección paralela al plano de proyección para el que la componente perpendicular es positiva)	<i>d</i>

Tabla 5.20.- Planos de simetría perpendiculares al plano de proyección (3 dimensiones) y líneas de simetría en el plano de la figura (2 dimensiones)

Plano simetría	Símbolo gráfico	Vector deslizamiento en unidades de vectores de traslación de la red paralelo al plano de proyección	Símbolo impreso
Plano de reflexión o línea de reflexión		ninguno	<i>m</i>
Plano de deslizamiento <i>axial</i>		2 vectores de deslizamiento: 1/2 vector de red en la dirección de la flecha	<i>a, b o c</i>

Plano simetría	Símbolo gráfico	Vector deslizamiento en unidades de vectores de traslación de la red paralelo al plano de proyección	Símbolo impreso
Plano de deslizamiento "doble"(sólo en celdas centradas)		2 vectores de deslizamiento: 1/2 en cualquiera de las direcciones de las dos flechas	e
Plano de deslizamiento <i>diagonal</i>		1/2 en la dirección de la flecha	n
Plano de deslizamiento <i>diamante</i> (pares de planos; en celdas centradas solamente)		1/2 en la dirección de la flecha; el vector deslizamiento es 1/4 de una de las diagonales de la celda centrada en las caras	d

Tabla 5.21.- Planos de simetría paralelos al plano de proyección

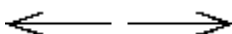
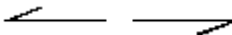
Eje de simetría	Símbolo gráfico	Vector deslizamiento en unidades de vectores de traslación de la red paralelo al eje	Símbolo impreso
Eje binario		ninguno	2
Eje helicoidal "2 sub 1"		1/2	2_1

Tabla 5.22.- Ejes de simetría paralelos al plano de proyección

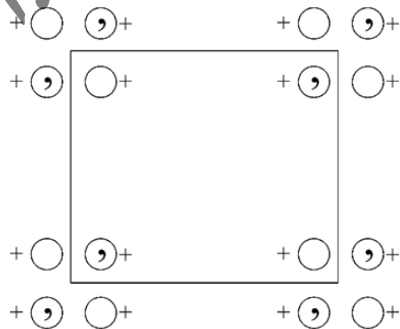
Eje de simetría o punto de simetría	Símbolo gráfico	Vector deslizamiento paralelo al eje helicoidal	Símbolo impreso (elementos parciales entre paréntesis)
Identidad		ninguno	1
Eje binario Punto de rotación binario		ninguno	2
Eje ternario Punto de rotación ternario		ninguno	3
Eje cuaternario Punto de rotación cuaternario		ninguno	4 (2)
Eje senario Punto de rotación senario		ninguno	6 (3, 2)
Centro de simetría o de inversión: 1 con raya		ninguno	$\bar{1}$
Eje ternario de rotación-inversión: 3 con raya		ninguno	$\bar{3} \equiv 3 + \bar{1} (3, \bar{1})$

Eje de simetría o punto de simetría	Símbolo gráfico	Vector deslizamiento paralelo al eje helicoidal	Símbolo impreso (elementos parciales entre paréntesis)
Eje cuaternario de rotación-inversión: 4 con raya		ninguno	$\square(2)$

Celia Marcos Pascual

Eje de simetría o punto de simetría	Símbolo gráfico	Vector deslizamiento paralelo al eje helicoidal	Símbolo impreso (elementos parciales entre paréntesis)
Eje helicoidal senario : “6 sub 3” con centro de simetría		1/2	$6_3/m (\bar{1}, \bar{1}, 3, 2_1, \bar{1})$

Celia Marcos Pascual



4. Sistema cristalino.
5. La simetría puntual del origen, con un símbolo similar al utilizado para los grupos puntuales.
6. La multiplicidad de las posiciones equivalentes, expresado mediante un número.
7. El símbolo de Wyckoff, el cual se expresa mediante una letra del abecedario que indica la simetría de posición de la correspondiente posición equivalente. Las primeras letras del abecedario se asocian con simetría de posición más elevada, mientras que a la simetría de posición más baja se le asignan letras más avanzadas del mismo.
8. Simetría de posición, que expresa la simetría puntual y se simboliza de forma similar a la de los grupos puntuales.
9. Coordenadas de las posiciones equivalentes, tanto las generales como las especiales o particulares.

Ejemplo:

Pmm2	C_{12v}	mm2	Rómbico
Nº 25	pmm2		
Origen	en	mm2	Coordenadas
Posiciones			
Multiplicidad			
Símbolo de Wyckoff			
Simetría de posición			
4	i		x,y,z -x,-y,z x,-y,z -x,y,z
2	h	m..	1/2,y,z 1/2,-y,z
2	g	m..	0,y,z 0,-y,z
2	f	.m.	x,1/2,z -x,1/2,z
2	g	.m.	x,0,z -x,0,z
1	d	mm2	1/2,1/2,z
1	c	mm2	1/2,0,z
1	b	mm2	0,1/2,z
1	a	mm2	0,0,z

Tabla 5.24

ORIGEN DEL SISTEMA DE COORDENADAS

- El origen del sistema de coordenadas en los grupos centrosimétricos se sitúa en el centro de simetría.

- En el caso de los grupos no centrosimétricos no hay una regla especial para la situación del mismo. La posición del origen se sitúa sobre un punto con la simetría de posición más elevada.
- La determinación y descripción de estructuras cristalinas se facilita por la elección de un origen conveniente y su propia identificación.
- Hay varios caminos para determinar la situación y simetría de posición del origen.
 - Uno es inspeccionarlo directamente en los diagramas de los grupos espaciales, en las Tablas Internacionales de Cristalografía (Internacional Tables for X-ray Crystallography, vol. 1).
 - Otro es buscar una posición equivalente especial con coordenadas 0,0,0.

Celia Marcos Pascual