

TEMA 5

Sesión 5.2

OBJETIVO:

Comprender los conceptos de posiciones equivalentes generales y especiales. Conocer la forma de representar gráficamente la posición de los átomos de un material en estado cristalino en el espacio y su simetría, así como la simbología usada en la información publicada sobre las estructuras y simetría de los minerales.

MATERIAL:

Lapicero, goma de borrar, folios o libreta de trabajo, papel cebolla, regla, cartabón, escuadra, transportador de ángulos, calculadora.

ACTUACIÓN:

- 1ª) Visualizar la forma de presentar la información sobre la posición de los átomos de un material en estado cristalino en el espacio y su simetría dentro del apartado Material de clase: Contenidos en línea de Cristalografía o Material para instalar en el PC o en el portátil (Tema 5, apartado 5.7).
- 2ª) a) Observar detenidamente la representación gráfica de los elementos de simetría del grupo espacial $P4_2/mnm$ (Figura 1) al que pertenece el rutilo.

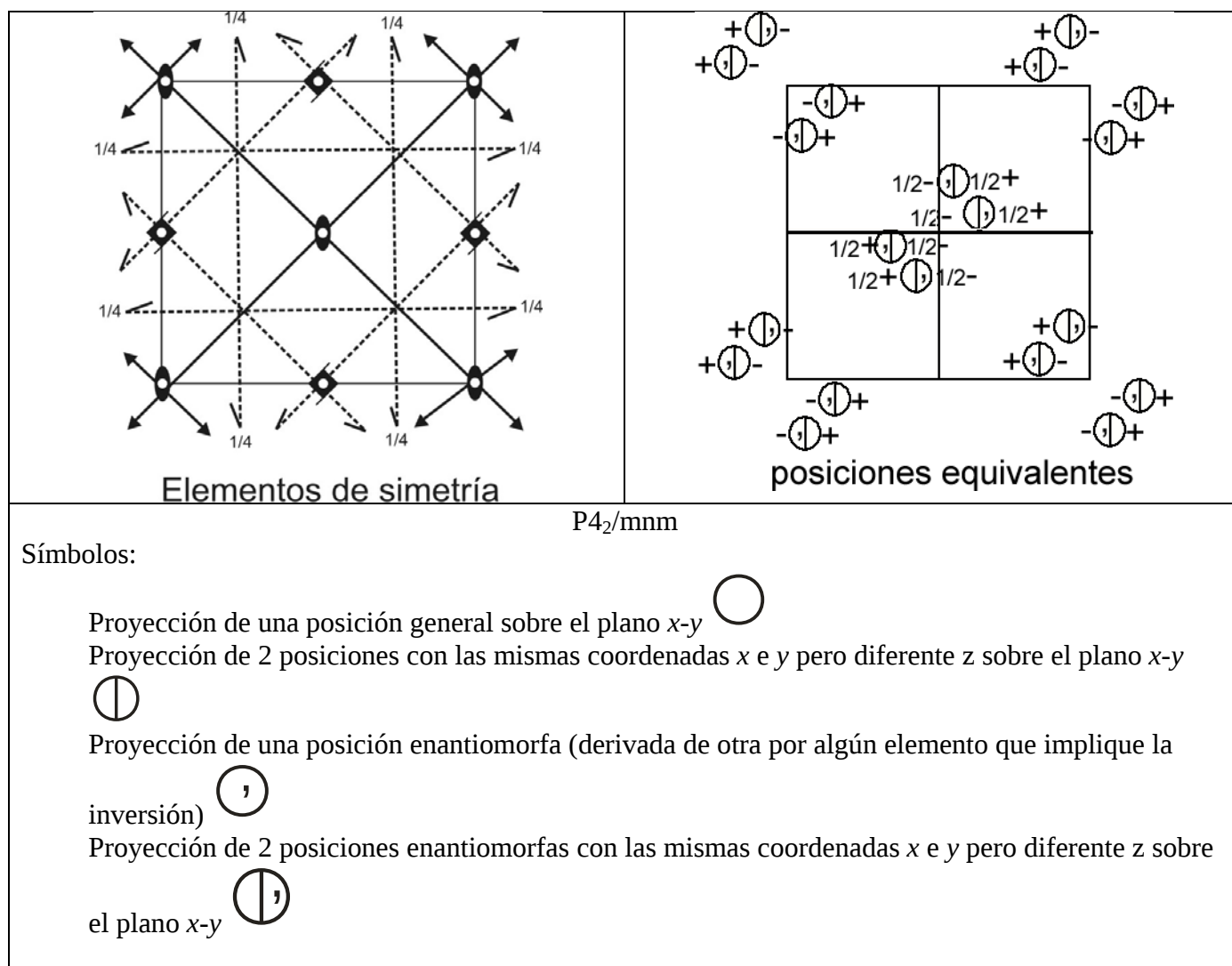


Figura 1

- b) Proyectar en el esquema 1 de la Tabla 1 los átomos del rutilo (TiO_2) cuyas coordenadas se proporcionan en dicha Tabla 1.

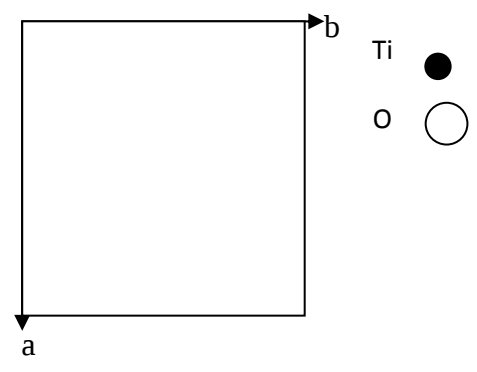
átomo	coordenadas		multiplicidad	Letra de Wyckoff	Simetría de posición
Ti	0,0,0 $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			a	m.mm
O	x,x,0 $\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}$ -x,-x,0 X=0,3			f	m.2m

Tabla 1

En la misma tabla se proporciona la simetría de posición y la letra de Wyckoff de las diferentes posiciones de los átomos de Ti y O. Tanto la simetría de posición como la letra de Wyckoff representan lo mismo, es decir, los elementos de simetría sobre los que se encuentran los átomos. El símbolo utilizado para especificar dicha simetría es similar al de los grupos puntuales, expresado por los símbolos de los elementos de simetría asociados a las direcciones de simetría (primarias, secundarias, terciarias), en función del sistema cristalino. El grupo de la simetría de posición es isomorfo a un subgrupo del grupo puntual al que pertenece al que pertenece el grupo espacial bajo consideración. Ejemplo: El grupo de simetría m.2m es isomorfo al grupo puntual mm_2 , subgrupo del grupo puntual $4/mmm$ al que pertenece el grupo espacial $P4_2/mnm$ del rutilo.

Observar que los átomos de titanio ocupan posiciones cuya letra de Wyckoff es la **a** y simetría de posición m.mm, mientras que los átomos de oxígeno ocupan posiciones cuya letra de Wyckoff es la **f** y simetría de posición m.2m. Tanto en un caso como en el otro aparece un punto en la segunda posición del símbolo, se refiere a la segunda dirección de simetría. Así para la letra de Wyckoff **a** la simetría de posición m.mm, indica que la posición del átomo se encuentra sobre 3 planos de simetría, el primero perpendicular a **c** (es decir, plano paralelo al papel), los otros dos perpendiculares a las direcciones terciarias $[1\bar{1}0]$ (es decir, a las direcciones intermedias entre los ejes **a** y **b**) y. Para la letra de Wyckoff **f** la primera m de la simetría de posición m.2m es perpendicular a **c**, el eje binario paralelo al eje **b** y el otro plano es perpendicular a la dirección terciaria $[1\bar{1}0]$ y equivalente $[110]$.

- Relacionar la posición de los átomos proyectados de vuestro esquema, tanto los titanios como los oxígenos, con la posición de los elementos de simetría, y observar que todos los átomos se encuentran sobre algún elemento de simetría (**posiciones especiales o particulares**).
- Observar en la proyección de las posiciones equivalentes de la Figura 1, uno de los aspectos que podría mostrar vuestra proyección si hubiera posiciones generales (tanto de titanios como de oxígenos), es decir, de aquellas que no están situadas sobre ningún elemento de simetría.
- Fijarse en uno y contar el número de ellos generados por los elementos de simetría del grupo espacial para obtener la **multiplicidad**. A modo de ejemplo, fijarse en la posición general etiquetada con el número 1 y observar que el número de posiciones obtenidas al aplicarle los elementos de simetría del grupo espacial es 8.
- Contar el número de átomos de titanio y/o de oxígeno que se encuentran en posición especial para obtener la **multiplicidad** de uno y otro tipo. Para ello, fijarse en uno y contar el número de ellos generados por los elementos de simetría del grupo espacial.