

---

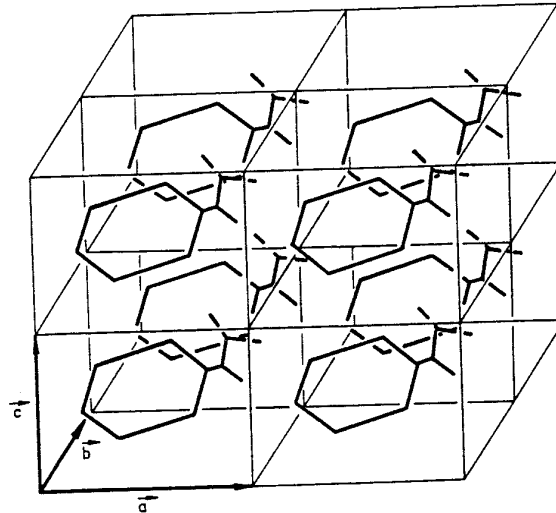
# TEMA 1: GEOMETRÍA Y SIMETRÍA DE UN CRISTAL

## I. REDES CRISTALINAS

El aspecto externo de los cristales, cuyas formas geométricas regulares llamaron la atención desde muy antiguo. Los cristales tienen frecuentemente formas poliédricas características, limitadas por caras planas. Estas caras pueden destruirse o no ser lisas, y no son por tanto importante para una definición moderna de cristal.

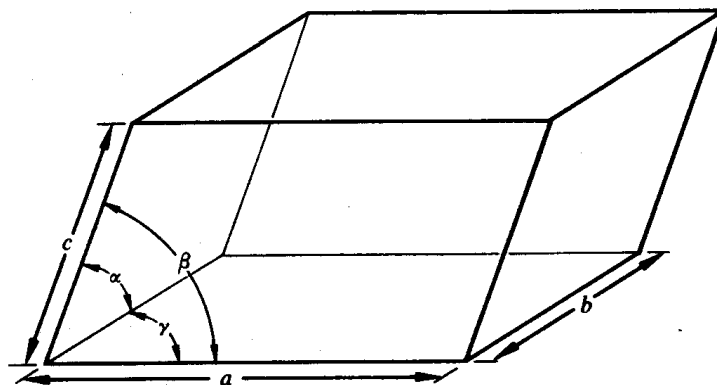
**Cristal** es una composición de átomos dispuestos en un modelo que se repite periódicamente en las tres dimensiones.

En el interior de un cristal, una vez elegido un punto al azar, existe un conjunto de puntos que poseen exactamente los mismos alrededores, y su posición relativa es, respecto del motivo o patrón que se repite, idéntica. A estos puntos se les denomina **puntos reticulares** y a todo el conjunto **retículo espacial**.

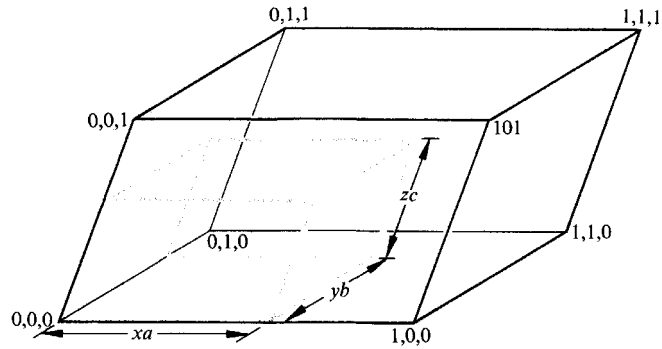


Si se unen mediante líneas rectas los puntos reticulares dividimos el espacio tridimensional en paralelepípedos. La repetición de estos paralelepípedos por traslación desde un punto reticular a otro engendra el retículo.

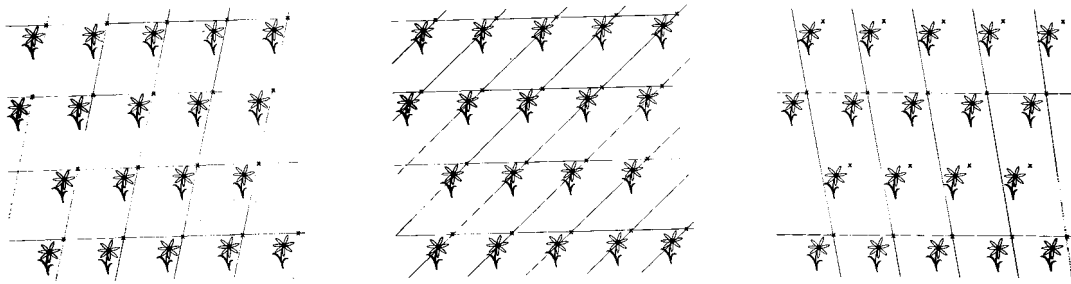
El paralelepípedo que por repetición es capaz de generar todo el cristal denominada **celdilla unidad**. La celdilla unidad es un paralelepípedo constituido por un número finito de átomos que ocupan su volumen. Esta se caracteriza, por seis magnitudes: tres longitudes  $a$ ,  $b$  y  $c$  y tres ángulos  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$  o también por tres vectores no coplanarios  $\vec{a}$ ,  $\vec{b}$  y  $\vec{c}$ .



Estos vectores definen los ejes de un sistema de coordenadas apropiado para la descripción del cristal, pues presenta en numerosos casos ventajas frente a un sistema cartesiano de coordenadas. Las posiciones de un punto dentro de la celdilla unidad son especificada mediante **coordenadas fraccionarias** ( $x/a, y/b, z/c$ ). La variación de estas coordenadas a lo largo de una misma celdilla es de cero a uno. Una de las ventajas del uso de estas coordenadas es que puntos equivalentes poseen coordenadas que difieren en un entero.



La elección de la celdilla unidad no es única, es más, cualquier paralelepípedo cuyas aristas unan puntos reticulares es una celdilla válida. Hay un número infinito de posibilidades de elección. Está permitido incluso tener puntos reticulares en el interior de la celdilla unidad, dando lugar a celdillas centradas frente a las que no los tienen llamadas primitivas. La figura muestra un ejemplo bidimensional.



Se hace necesaria en este punto una clasificación que englobe los diferentes tipos de celdillas unidad. Vamos a ver que la simetría suministra un buen criterio para hacer dicha clasificación. La determinación de los grupos de simetría compatibles con una estructura periódica dará lugar a una clasificación de los cristales.

## II. ELEMENTOS DE SIMETRÍA EN UN CRISTAL

Entendemos por **simetría espacial** el conjunto de transformaciones geométricas que mantienen inalterada una distribución periódica en el espacio.

Para estudiar la simetría utilizando las matemáticas es necesario idealizar los elementos con que trabaja. **El cristal perfecto** es una de estas idealizaciones y se define como un objeto infinito engendrado por la repetición periódica en tres dimensiones de un motivo central, ocupando todo el volumen, que se denomina malla o red.

Para definir una red se necesita un origen y tres vectores linealmente independientes ( $O, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ). Los vectores que repiten el motivo hasta el infinito tienen la forma:  $\mathbf{t} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}$ , siendo  $u, v, w$  tres números cualesquiera pertenecientes al conjunto  $\mathbb{Z}$  de los números enteros. El origen es arbitrario y se puede elegir en cualquier

---

lugar del espacio. Para un cristal perfecto los vectores  $\mathbf{t}$  constituyen un grupo matemático. Este grupo de traslaciones define la red.

La métrica de la red impone restricciones a las operaciones de simetría con independencia de la estructura molecular del sólido. La métrica de un espacio de vectores viene dada de una forma matemáticamente conveniente mediante el **tensor métrico**.

Sean  $\mathbf{r}_1$  y  $\mathbf{r}_2$  dos vectores referidos a la misma base vectorial  $\mathbf{e}_i$  ( $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ ). El producto escalar de estos vectores, se puede expresar como:

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = (x_1\mathbf{e}_1 + y_1\mathbf{e}_2 + z_1\mathbf{e}_3) \cdot (x_2\mathbf{e}_1 + y_2\mathbf{e}_2 + z_2\mathbf{e}_3)$$

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = [x_1 y_1 z_1] \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_1\mathbf{e}_3 \\ \mathbf{e}_2\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_2\mathbf{e}_3 \\ \mathbf{e}_3\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_3\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3\mathbf{e}_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_1\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_1\mathbf{e}_3 \\ \mathbf{e}_2\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_2\mathbf{e}_3 \\ \mathbf{e}_3\mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_3\mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3\mathbf{e}_3 \end{bmatrix}$$

La matriz  $\mathbf{G}$  se denomina tensor métrico del espacio de vectores y el producto escalar puede ser escrito abreviadamente  $\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1^t \mathbf{G} \mathbf{r}_2$ .

La definición del producto escalar no permite calcular la distancia entre dos puntos, el origen y el extremo del vector  $\mathbf{r}_1$ :

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_1^t \mathbf{G} \mathbf{r}_1 = r_1^t r_1 \cos \widehat{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_1} = r_1^t r_1$$

$$r_1 = \sqrt{\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_1} = \sqrt{[\mathbf{r}_1^t \mathbf{G} \mathbf{r}_1]}$$

y también el ángulo entre dos vectores  $\mathbf{r}_1$  y  $\mathbf{r}_2$ :

$$\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1^t \mathbf{G} \mathbf{r}_2 = r_1^t r_2 \cos \widehat{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}$$

$$\cos \widehat{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2} = \frac{\mathbf{r}_1^t \mathbf{G} \mathbf{r}_2}{\sqrt{\mathbf{r}_1^t \mathbf{G} \mathbf{r}_1} \sqrt{\mathbf{r}_2^t \mathbf{G} \mathbf{r}_2}}$$

Así pues la métrica del espacio, distancias y ángulos entre vectores, viene determinada por el tensor  $\mathbf{G}$ .

Consideremos ahora la simetría, Cualquier operación de simetría lleva nuestro objeto a una situación físicamente indistinguible de la original. Las operaciones de simetría se representan matemáticamente mediante matrices, así pues una operación de simetría (puntual) vendrá dada por la siguiente matriz:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

Las operaciones de simetría transforman un vector en otro, de la forma  $\mathbf{r}' = \mathbf{A}\mathbf{r}$ . Si los vectores  $\mathbf{r}$  son vectores de traslación en una red primitiva, referidos la base  $\mathbf{e}_i$ , entonces los elementos de  $\mathbf{A}$  son necesariamente números enteros, cuando están referidos a los ejes propios de la red. Existen además otras restricciones que afectan a los elementos de  $\mathbf{A}$  y que vienen impuestas por el tensor métrico.

Por definición, una operación de simetría no debe cambiar las longitudes ni los ángulos de enlace entre vectores. Así pues debe verificarse la siguiente igualdad:

$$\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}' = \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}$$

$$\mathbf{r}'^t \mathbf{G} \mathbf{r}' = \mathbf{r}^t \mathbf{G} \mathbf{r}$$

teniendo en cuenta que  $\mathbf{r}' = \mathbf{A}\mathbf{r}$  y que  $(\mathbf{A}\mathbf{r})^t = \mathbf{r}^t \mathbf{A}^t$  se deduce que

$$\mathbf{G} = \mathbf{A}^t \mathbf{G} \mathbf{A}$$

Todas las matrices que satisfacen esta relación son operaciones de simetría en la red definida por el tensor métrico  $\mathbf{G}$ . Se deduce inmediatamente que las operaciones de simetría compatibles con una red y por tanto que cumplen la condición de dejar invariante la métrica de la red, se pueden clasificar en dos grandes grupos según la siguiente propiedad. De la igualdad de matrices anterior, aplicando la teoría de determinantes, se deduce:

$$|\mathbf{G}| = |\mathbf{A}^t| |\mathbf{G}| |\mathbf{A}|$$

y teniendo en cuenta que  $|\mathbf{A}^t| = |\mathbf{A}|$  se deduce que  $|\mathbf{A}|^2 = 1$  y por tanto  $|\mathbf{A}| = \pm 1$ .

Esta propiedad permite clasificar las operaciones de simetría, que conservan el volumen de la celda unidad en aquellas cuyo determinante vale +1, que se denominan **operaciones propias, de tipo I o rotaciones** y aquellas cuyo determinante vale -1, que se denominan **operaciones impropias, de tipo II o rotoinversiones**.

Los **elementos de simetría** son las entidades geométricas alrededor de la cuales tienen lugar una o varias operaciones de simetría y se corresponden con el lugar geométrico de los puntos que permanecen invariables por aquellas operaciones. Estos puntos cumplen la condición  $\mathbf{A}\mathbf{r} = \mathbf{r}$  de la cual se deduce  $(\mathbf{A} - \mathbf{I})\mathbf{r} = \mathbf{0}$ . Si se cumple la condición  $|\mathbf{A} - \mathbf{I}| = 0$  se puede obtener una solución distinta de la solución trivial ( $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ ), que representa la posición del elemento de simetría (En algún caso es necesario utilizar  $\mathbf{A}^2$  en vez de  $\mathbf{A}$  como por ejemplo con la inversión).

Las operaciones propias, es decir aquellas con determinante 1 y que se denominan gené-

ricamente rotaciones. El elemento de simetría es el eje de giro, el cual es una recta y generalmente se hace coincidir con el eje Z.

A continuación vamos a deducir la matriz de transformación para un giro de ángulo  $\theta$  respecto a un eje que coincide con el eje Z. El vector  $\mathbf{v}$  se obtiene al girar un ángulo  $\theta$  el vector  $\mathbf{u}$ . Las componentes del vector  $\mathbf{u}$  son:

$$\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3) = (w \operatorname{sen}\phi, w \cos\phi, z)$$

y las del vector  $\mathbf{v}$ :

$$\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3) = (w \cos(\theta + \phi), w \operatorname{sen}(\theta + \phi), z)$$

desarrollando mediante los teoremas de adición:

$$\mathbf{v} = (w \cos\theta \cos\phi - w \operatorname{sen}\theta \operatorname{sen}\phi, w \operatorname{sen}\theta \cos\phi + w \cos\theta \operatorname{sen}\phi, z)$$

$$\mathbf{v} = (u_1 \cos\theta - u_2 \operatorname{sen}\theta, u_2 \operatorname{sen}\theta + u_1 \cos\theta, z)$$

que es equivalente a la expresión matricial:

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\operatorname{sen}\theta & 0 \\ \operatorname{sen}\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}$$

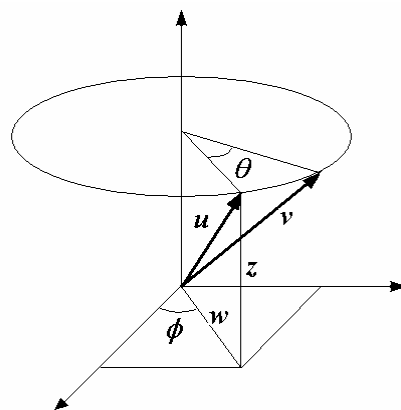
La matriz de transformación para un giro de ángulo será:

$$A = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\operatorname{sen}\theta & 0 \\ \operatorname{sen}\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

El valor del determinante es  $|A| = \cos^2\theta + \operatorname{sen}^2\theta = 1$

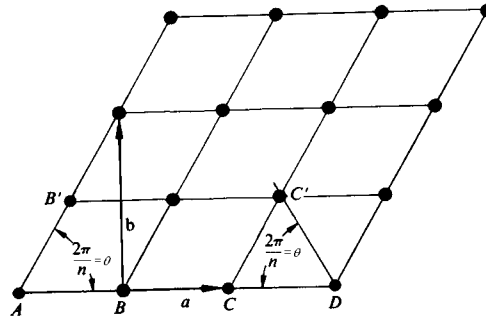
El ángulo  $\theta$  debe ser divisor de  $360^\circ$  ó  $2\pi$  radianes. El número de veces consecutivas que es necesario aplicar el eje de simetría para retornar a la posición inicial se denomina orden del eje n. El ángulo de giro es de  $360^\circ/n$ .

Aunque, en principio, todos los ángulos de giro están permitidos para moléculas aisladas, no todos están permitidos en una red cristalina. La periodicidad tridimensional restringe los órdenes a 1, 2, 3, 4 y 6. Se muestra a continuación una demostración de la afirmación anterior.



En la figura los ejes de rotación de orden  $n$ , perpendiculares al plano del papel y que pasan por los puntos A y D, generan B' a partir del punto B y C' a partir de C. La longitud del segmento AD vale, en general:

$$AD = pa \quad (p \in \mathbb{Z})$$



y el segmento B'C' tiene una longitud:

$$B'C' = AD - 2a \cos \theta$$

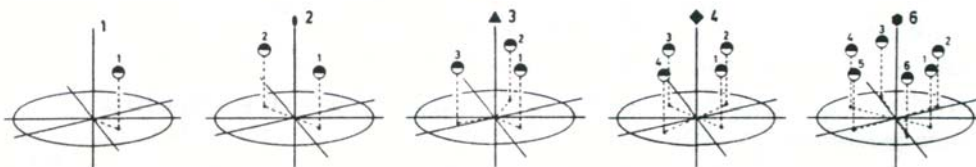
por unir ambos puntos reticular en la dirección del vector  $a$ . Aplicando trigonometría elemental se obtiene la siguiente relación entre ambas longitudes:

$$qa = pa - 2a \cos \theta$$

$$2 \cos \theta = p - q = \text{entero}$$

como  $-1 \leq \cos \theta \leq 1$ , Los posibles valores de  $\theta$  compatibles con la periodicidad de la red son los siguientes:

$2\cos\theta$	$\cos\theta$	$\theta$	$n$	notación
2	1	$360^\circ$	1	1
1	$\frac{1}{2}$	$60^\circ$	6	6
0	0	$90^\circ$	4	4
-1	$-\frac{1}{2}$	$120^\circ$	3	3
-2	-1	$180^\circ$	2	2



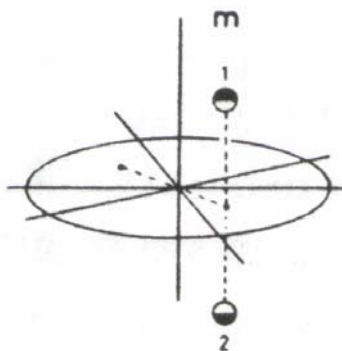
Otra posible demostración, que está basada en la conservación de la traza de una matriz (la suma de los elementos de su diagonal principal) frente a los cambios de sistema de referencia, es la siguiente. La compatibilidad de la operación de simetría con una red periódica exige que las componentes de la matriz referidas a la red sean números enteros. Esta deberá ser un número entero independientemente del sistema de coordenadas de trabajo. En particular cuando trabajamos en un sistema ortogonal y aplicamos una rotación de un ángulo  $\theta$ , la traza vale  $1 + 2 \cos \theta$ ; como esta debe ser un entero llegamos a la misma condición  $2 \cos \theta = \text{entero}$ .

Algunos ejemplos de las matrices que representan rotaciones son las siguientes:

$$R_x(180^\circ) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad R_y(180^\circ) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad R_z(180^\circ) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$R_z(60^\circ) = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad R_z(90^\circ) = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad R_z(120^\circ) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Las operaciones impropias, aquellas cuyo determinante vale -1, se denominan genéricamente reflexiones y el elemento de simetría es el plano de reflexión, cuyo símbolo es  $m$ . Estas operaciones cambian la configuración de los objetos asimétricos.



Algunos ejemplos de las matrices que representan plano de reflexión son:

$$m_{yz} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad m_{xz} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad m_{xy} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad m_{diagonal} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

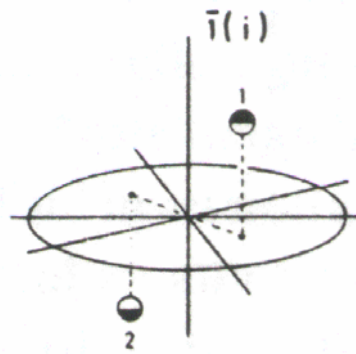
En general, la combinación de rotaciones con la reflexión conduce a nuevos tipos de operaciones impropias los ejes de rotación-reflexión. Los cristalógrafos prefieren el uso de la notación de Hermann-Mauguin (que utiliza ejes de rotación-inversión), frente a la notación usualmente empleada por los espectroscopistas que es la notación de Schönflies (que utiliza ejes de rotación-reflexión).

La combinación de rotación de orden 2 con la reflexión a través de un plano perpendicular al eje conduce a nueva operación impropia, **la inversión**:

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

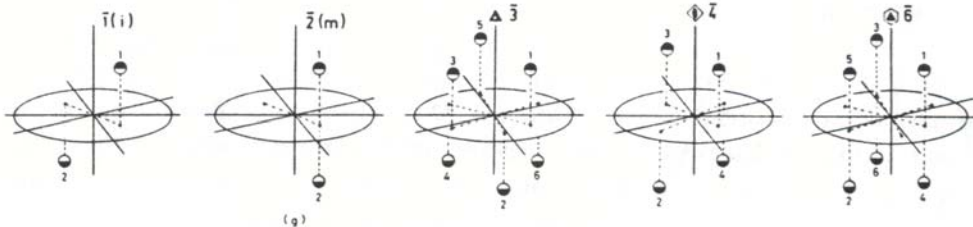
El símbolo para la inversión es  $\bar{1}$ , y el elemento de simetría es **el centro de simetría o**

el centro de inversión.



La combinación de los ejes de rotación con la inversión conduce a las siguientes operaciones denominadas **ejes de rotación-inversión**:

$$\bar{2} \equiv 2 \cdot \bar{1} \equiv m \quad \bar{3} \equiv 3 \cdot \bar{1} \quad \bar{4} \equiv 4 \cdot \bar{1} \quad \bar{6} \equiv 6 \cdot \bar{1}$$



El número de elementos de simetría del motivo de una red no está limitado a uno. Además cada operación de simetría esta representado por una matriz no singular. La aplicación de dos operaciones se expresa a través del producto matricial. El conjunto de operaciones de simetría existentes en una red tiene todas las características de de un grupo matemático: es una operación interna, existe un elemento neutro, para cada elemento del grupo existe su elemento simétrico y posee la propiedad asociativa.

Como las operaciones hasta ahora vistas dejan el punto (0,0,0) inalterado (o lo que es lo mismo todos los elementos de simetría contienen el origen), este grupo recibe el nombre de **grupo puntual**. El término **clase de simetría** es equivalente a grupo puntual.

Hemos introducido 10 grupos de simetría básicos: 1, 2, 3, 4, 6,  $\bar{1}$ ,  $m$ ,  $\bar{3}$ ,  $\bar{4}$ ,  $\bar{6}$  vamos a deducir otros 22 nuevos grupos diferentes también compatibles con la periodicidad de la red. Para ello hemos de considerar la posibilidad de que un grupo puntual posea dos o más ejes de rotación.

Consideremos dos elementos de simetría: el primero una rotación de un ángulo  $\alpha$  respecto a un eje y el segundo una rotación de un ángulo  $\beta$  respecto a otro eje. Sea  $\omega$  el ángulo entre ambos ejes y sin perder generalidad hagamos coincidir el segundo eje con el eje Z de un sistema cartesiano. Es fácil comprobar que la matriz que describe ambas rotaciones puede ser expresada por:



$$\begin{bmatrix} \cos \omega & 0 & \operatorname{sen} \omega \\ 0 & 1 & 0 \\ -\operatorname{sen} \omega & 0 & \cos \omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\operatorname{sen} \alpha & 0 \\ \operatorname{sen} \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \omega & 0 & -\operatorname{sen} \omega \\ 0 & 1 & 0 \\ \operatorname{sen} \omega & 0 & \cos \omega \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \beta & -\operatorname{sen} \beta & 0 \\ \operatorname{sen} \beta & \cos \beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

La traza de la matriz obtenida vale:

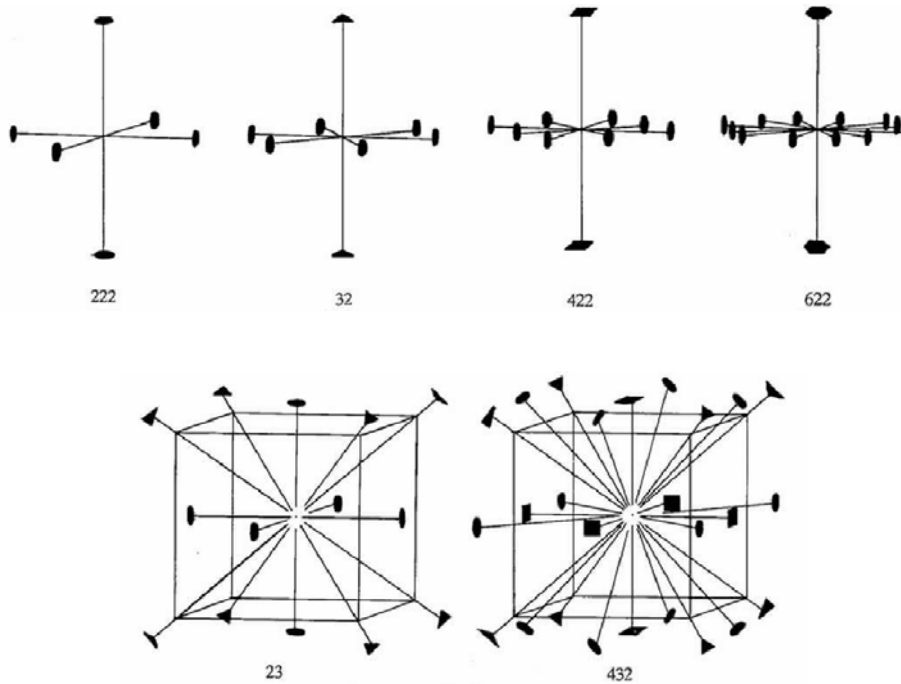
$$\cos^2 \omega (\cos \alpha \cos \beta + 1) + \operatorname{sen}^2 \omega (\cos \alpha + \cos \beta) - 2 \cos^2 \omega (\operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta) + \cos \alpha \cos \beta$$

Como se ha dicho con anteriormente, la traza debe tomar valores enteros para ser compatible con la periodicidad de la red. Además están las limitaciones de las rotaciones anteriormente obtenidas que restringen los valores de los ángulos a  $60^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $120^\circ$ ,  $180^\circ$  y  $360^\circ$ . Asignando a  $\alpha$  y a  $\beta$  todos los valores posibles se obtienen ecuaciones de segundo grado en  $\cos \omega$ . Los resultados aparecen resumidos en la siguiente tabla:

Order of the axes	Trace	$m$	Possible values of $\omega$	Order of the resultant axis	Orientation
2-2	$4 \cos^2 \omega - 1 - m = 0$	+3	$0^\circ, 180^\circ$	1	—
		+2	$30^\circ, 150^\circ, 210^\circ, 330^\circ$	6	010
		+1	$45^\circ, 135^\circ, 225^\circ, 315^\circ$	4	010
		0	$60^\circ, 120^\circ, 240^\circ, 300^\circ$	3	010
		-1	$90^\circ, 270^\circ$	2	010
3-2	$3 \cos^2 \omega - 1 - m = 0$	+2	$0^\circ, 180^\circ$	6	001
		+1	$35^\circ 16', 144^\circ 44', 215^\circ 16', 324^\circ 44'$	4	
		0	$54^\circ 44', 125^\circ 16', 234^\circ 44', 305^\circ 16'$	3	
		-1	$90^\circ, 270^\circ$	2	$1/2 \quad -\sqrt{3}/2 \quad 0$
		+1	$0^\circ, 180^\circ$	4	001
4-2	$2 \cos^2 \omega - 1 - m = 0$	0	$45^\circ, 135^\circ, 225^\circ, 315^\circ$	3	$1/\sqrt{3} \quad -1/\sqrt{3} \quad 1/\sqrt{3}$
		-1	$90^\circ, 270^\circ$	2	$1/\sqrt{2} \quad -1/\sqrt{2} \quad 0$
		0	$0^\circ, 180^\circ$	3	001
6-2	$\cos^2 \omega - 1 - m = 0$	-1	$90^\circ, 270^\circ$	2	$\sqrt{3}/2 \quad -1/2 \quad 0$
		0	$0^\circ, 180^\circ$	3	001
3-3	$9 \cos^2 \omega - 6 \cos \omega - 3 - 4m = 0$	+3	$180^\circ$	1	—
		0	$0^\circ, 109^\circ 28', 250^\circ 32'$	3	001
		-1	$70^\circ 32', 289^\circ 28'$	2	
4-3	$3 \cos^2 \omega - 2\sqrt{3} \cos \omega - 1 - 2m = 0$	+1	$125^\circ 16', 234^\circ 44'$	4	
		-1	$54^\circ 44', 305^\circ 16'$	2	
6-3	$3 \cos^2 \omega - 6 \cos \omega - 1 - 4m = 0$	+2	$180^\circ$	6	001
		-1	$0^\circ$	2	001
4-4	$\cos^2 \omega - 2 \cos \omega - m = 0$	+3	$180^\circ$	1	—
		0	$90^\circ, 270^\circ$	3	$1/\sqrt{3} \quad -1/\sqrt{3} \quad 1/\sqrt{3}$
		-1	$0^\circ$	2	001
6-4	$\cos^2 \omega - 2\sqrt{3} \cos \omega + 1 - 2m = 0$		there are no possible solutions		
6-6	$\cos^2 \omega - 6 \cos \omega + 5 - 4m = 0$	+3	$180^\circ$	1	—
		0	$0^\circ$	3	001

Se han de descartar las repeticiones y los valores de  $\omega = 180^\circ$ . Los resultados muestran combinaciones de ejes que dan los siguientes grupos puntuales:

222    32    422    622    23    432

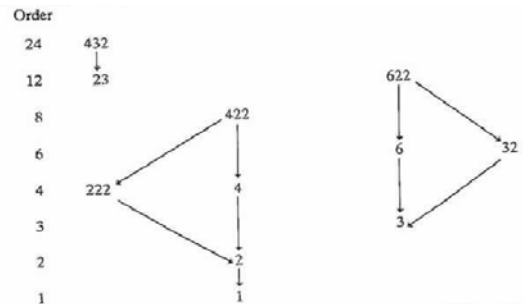


Aplicando la inversión a los cinco grupos puntuales recién deducidos, obtenemos:

$$mmm \quad \bar{3}m \quad 4/mmm \quad 6/mmm \quad m\bar{3} \quad m\bar{3}m$$

Es posible obtener grupos que contengan operaciones impropias pero no contengan a la operación inversión. Para ello debemos partir de los grupos que contienen exclusivamente operaciones propias y obtener subgrupos cuyo número de elementos sea la mitad del original. Hay diez de esos subgrupos que satisfagan esa condición:

Para obtener los grupos puntuales nuevos multiplicamos por la operación inversión todas las operaciones del grupo inicial que no pertenezcan al subgrupo. El conjunto de las operaciones obtenidas de este modo más las pertenecientes al subgrupo, nos da todos los elementos del grupo nuevo. El orden del nuevo grupo es igual que el del inicial.



La deducción de los 10 nuevos grupos se esquematiza en el esquema siguiente:

432	— (23)	—→	$\bar{4}3m$
622	— (6)	—→	$6mm$
622	— (32)	—→	$\bar{6}m2$
422	— (4)	—→	$4mm$
422	— (222)	—→	$\bar{4}2m$
6	— (3)	—→	$\bar{6}$
32	— (3)	—→	$\bar{3}m$
4	— (2)	—→	$\bar{4}$
222	— (2)	—→	$mm2$
2	— (1)	—→	$m$

Hay treinta y dos grupos puntuales compatibles con un espacio tridimensional periódico-

co:

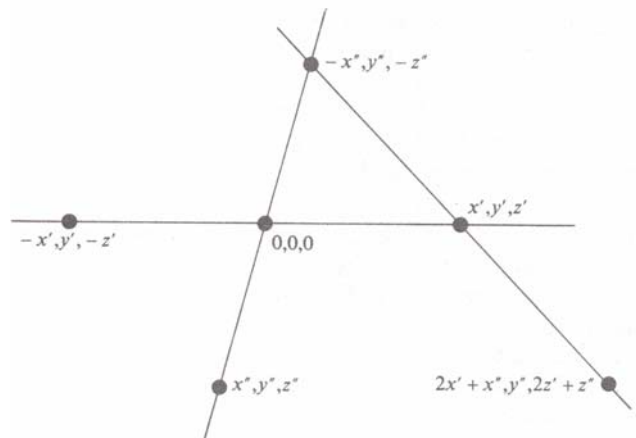
- 11 enantiomórficos: 1, 2, 222, 4, 422, 6, 622, 3, 32, 23, 432.
- 11 centrosimétricos:  $\bar{1}$ , 2/m,  $\bar{3}$ , 4/m, 6/m, mmm,  $\bar{3}m$ , 4/mmm, 6/mmm, m3, m3m.
- 10 ni enantiomórf. ni centros.:  $\bar{4}3m$ , 6mm,  $\bar{6}m2$ , 4mm,  $\bar{4}2m$ ,  $\bar{6}$ , 3m,  $\bar{4}$ , mm2, m.

Los enantiomórficos no contienen ni planos de reflexión ni centro de inversión. Los centrosimétricos poseen centro de inversión, mientras que los 10 restantes poseen planos de reflexión pero no centro de inversión.

### III. REDES DE BRAVAIS. CELDILLAS PRIMITIVAS Y CENTRADAS

Vamos a comprobar que la existencia de elementos de simetría en el cristal va a tener repercusión sobre la elección del tipo de celdilla. Veamos el caso monoclinico.

Elijamos un punto reticular sobre el eje doble y como la elección del primer nodo es arbitraria le asignamos las coordenadas (0, 0, 0). La dirección de ese eje será la que llamemos dirección  $y$  y las dos restantes ortogonales  $x$  y  $z$ . Elijamos otros dos puntos reticulares  $(x', y', z')$  y  $(x'', y'', z'')$ . El eje doble del origen genera los puntos  $(-x', y', -z')$  y  $(-x'', y'', -z'')$ . Como hemos dicho anteriormente los puntos reticulares son idénticos y por tanto por el punto  $(x', y', z')$  debe pasar un eje doble. Este eje doble aplicado sobre  $(-x'', y'', -z'')$  genera el punto  $(2x' + x'', y'', 2z' + z'')$ .



Se pueden generar nuevos puntos reticulares tomando sumas y diferencias de puntos reticulares. Así se pueden obtener:

$$(x', y', z') + (x', y', z') = (2x', 2y', 2z')$$

$$(x'', y'', z'') + (2x', 2y', 2z') = (2x' + x'', 2y' + y'', 2z' + z'')$$

y finalmente:

$$(2x' + x'', 2y' + y'', 2z' + z'') - (2x' + x'', y'', 2z' + z'') = (0, 2y', 0) = (0, n, 0)$$

donde  $2y'$  es un entero. Existen por consiguiente puntos reticulares a lo largo del eje  $y$ . Escogeremos como vector  $\mathbf{b}$  de la celdilla el que uno dos puntos reticulares adyacentes situados sobre este eje.

Si  $n$  es par entonces  $y'$  es un entero y se puede generar un nuevo nodo reticular:

---

$$(x', y', z') + (0, y', 0) = (x', 0, z')$$

y si  $n$  es impar entonces  $2y'$  es un entero y se puede generar:

$$(2x', 2y', 2z') - (0, 2y', 0) = (2x', 0, 2z')$$

Hemos demostrado que o bien el punto  $(x', 0, z')$  o bien el punto  $(2x', 0, 2z')$  son puntos reticulares y por tener coordenada nula en  $y$  están en un plano perpendicular a este eje.

Con un razonamiento semejante se puede demostrar que bien el punto  $(x'', 0, z'')$  o bien el punto  $(2x'', 0, 2z'')$  también son nodos reticulares situados en un plano perpendicular al eje  $y$ .

Conclusión: La presencia de un eje de rotación binario (de orden 2) permite la elección de los ejes de la celdilla unidad de modo que  $\alpha = 90^\circ$  y  $\gamma = 90^\circ$ .

Se pueden demostrar de una manera similar que la presencia de un plano de reflexión permite una elección similar. La elección, en ambos casos, no asegura que la celdilla sea primitiva.

Las restricciones que los elementos ejercen sobre las longitudes y ángulos de la celdilla permiten clasificar a los cristales en siete **sistemas cristalinos**.

Se dice que un cristal es monoclinico o pertenece al sistema **monoclinico** si hay presentes elementos de simetría tales que es posible escoger una celdilla unidad que tenga  $\alpha = 90^\circ$  y  $\gamma = 90^\circ$  sin ninguna otra restricción sobre las dimensiones o ángulos de la celdilla.

Hay dos grupos que no ejercen restricciones sobre las dimensiones de la celdilla, esta propiedad caracteriza al sistema **triclínico**.

La selección de una celdilla tal que  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$  motivada por la presencia de dos ejes binarios perpendiculares o un eje binario y un plano perpendicular al eje o bien dos planos perpendiculares es propio del sistema **ortorrómbico**.

Si el grupo puntual incluye un eje cuaternario de rotación propio o impropio y solo uno ( $4$  ó  $\bar{4}$ ), es posible escoger una celdilla con  $a = b$  y  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . Éste es el sistema **tetragonal**.

La presencia de un eje senario de rotación propio o impropio ( $6$  ó  $\bar{6}$ ), caracteriza al sistema **hexagonal** donde  $a = b$ ,  $\alpha = \beta = 90^\circ$  y  $\gamma = 120^\circ$ .

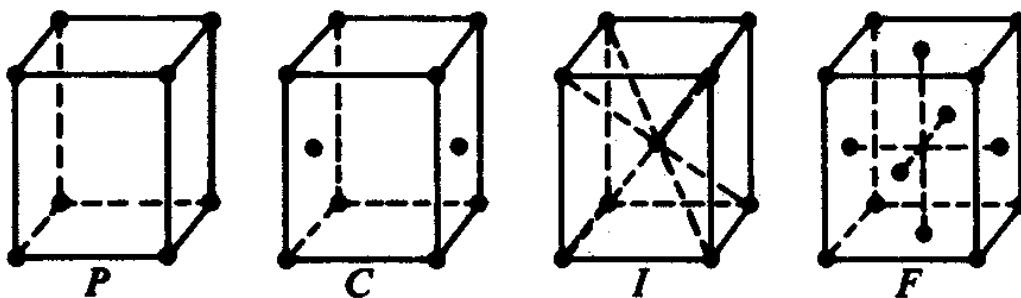
La presencia de un eje de rotación propio o impropio de orden tres ( $3$  ó  $\bar{3}$ ) y sólo uno, caracteriza al sistema **trigonal** donde es posible seleccionar una celdilla unidad con dimensiones  $a = b = c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ . Ésta no es la única elección porque es posible seleccionar una celdilla con dimensiones hexagonales de volumen triple al de la primitiva.

Si el grupo puntual posee cuatro ejes ternarios, el sistema es **cúbico**. Las restricciones

en la celdilla unidad son  $a = b = c$  y  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ .

<i>Sistema cristalino</i>	$n^\circ$	<i>Grupos puntuales</i>
Triclínico	2	$1, \bar{1}$
Monoclínico	3	$2, m, 2/m$
Ortorrómbico	3	$222, mm2, mmm$
Tetragonal	7	$4, \bar{4}, 4/m, 422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$
Hexagonal	7	$6, \bar{6}, 6/m, 622, 6mm, \bar{6}m2, 6/mmm$
Trigonal	5	$3, \bar{3}, 32, 3m, \bar{3}m$
Cúbico	5	$23, m\bar{3}, 432, \bar{4}3m, m\bar{3}m$

Al seleccionar la celdilla unidad basándonos en elementos de simetría, es posible que la celdilla resultante no sea primitiva. El sistema triclínico no presenta restricciones por lo que siempre se puede escoger una celdilla primitiva. En los otros sistemas cristalinos, se suelen encontrar habitualmente celdillas centradas. Se pueden dar cuatro posibilidades: celdilla primitiva P, celdilla centrada en una cara C, celdilla centrada en el cuerpo I y celdilla centrada en todas las caras.



En el sistema monoclínico, es suficiente para describir todos los casos solo dos tipos de centrado en la celdilla, la red primitiva y la centrada en C. La red centrada en A es equivalente a la red centrada en C sin más que intercambiar los vectores  $a$  y  $c$ . La celdilla monoclínica centrada en B puede ser transformada en una celdilla primitiva de volumen mitad, también monoclínica. Para esta transformación basta con definir los nuevos vectores  $a'$ ,  $b'$  y  $c'$  como:

$$a' = \frac{1}{2}(a - c) \quad b' = b \quad c' = \frac{1}{2}(a + c)$$

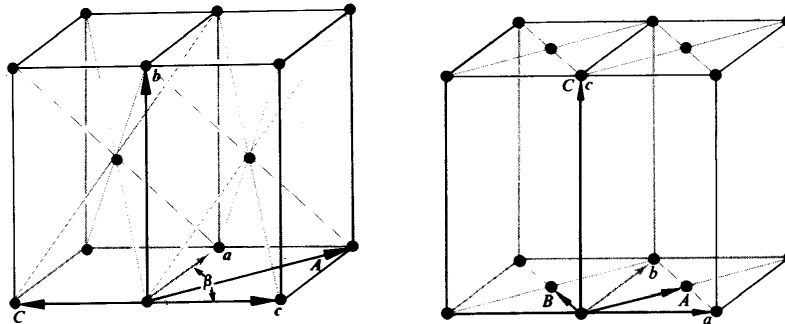
La celdilla monoclínica centrada en I puede ser transformada en una celdilla monoclínica centrada en C mediante la transformación:

$$a' = (a + c) \quad b' = b \quad c' = -c$$

Por último, La celdilla monoclínica centrada en todas las caras (F) puede ser transfor-

mada en una celdilla monoclinica centrada en C mediante la transformación:

$$a' = c \quad b' = b \quad c' = \frac{1}{2}(a + c)$$



Un estudio detallado de las posibilidades de centrado en todos los sistemas cristalinos reduce las posibilidades de los retículos espaciales a catorce, son los **retículos o redes de Bravais**.

<i>Sistema cristalino</i>	<i>Redes de Bravais</i>
Triclínico	P
Monoclínico	P, C
Ortorrómico	P, I, C, F
Tetragonal	P, I
Hexagonal	P
Trigonal	R
Cúbico	P, I, F

Los vectores del grupo de traslación correspondientes a los diversos centrados son: C  $(1/2, 1/2, 0)$ , I  $(1/2, 1/2, 1/2)$ , y F  $(1/2, 1/2, 0)$ ,  $(0, 1/2, 1/2)$ ,  $(1/2, 0, 1/2)$ .

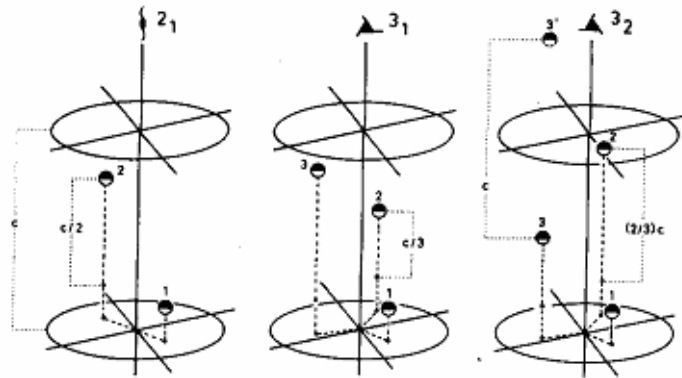
Para asignar correctamente el número de punto reticulares a una celdilla debemos tener en cuenta que los vértices pertenecen a ocho celdillas diferentes y las caras a dos celdillas. Por ejemplo, una celdilla centrada en todas sus caras (F) contiene:  $6 \cdot 1/2 + 8 \cdot 1/8 = 4$  nodos.

#### IV. GRUPOS ESPACIALES

Hay otros dos tipos de elementos de simetría que se producen al combinar los movimientos de rotación o de reflexión con la simetría traslacional del retículo: los ejes en espiral o helicoidales y los planos de deslizamiento.

La operación que describe a un **eje en espiral o helicoidal** es una rotación de  $2\pi/n$  radianes seguida de una traslación de  $p/n$  en la dirección del eje. Viene representada por el símbolo  $n_p$ . Por ejemplo, un eje  $2_1$  implica una rotación de  $180^\circ$  seguida por una trasla-

ción de la mitad de una celdilla unidad paralela al eje. Para un eje  $3_1$  la rotación es de  $120^\circ$  y la traslación es de un tercio de la celdilla unidad, mientras que eje  $3_2$  la rotación es igual a la anterior pero la traslación es ahora de dos tercios de la celdilla unidad.



Los otros ejes helicoidales posibles son:  $4_1, 4_2, 4_3, 6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$ .

La combinación de movimientos de reflexión y traslación da lugar a los **planos de deslizamiento**. La traslación puede ser:

- $a \equiv$  plano cuya traslación es  $\frac{1}{2}[1, 0, 0]$ .
- $b \equiv$  plano cuya traslación es  $\frac{1}{2}[0, 1, 0]$ .
- $c \equiv$  plano cuya traslación es  $\frac{1}{2}[0, 0, 1]$ .
- $n \equiv$  plano cuya traslación es  $\frac{1}{2}[1, 1, 0]$  ó  $\frac{1}{2}[1, 0, 1]$  ó  $\frac{1}{2}[0, 1, 1]$  ó  $\frac{1}{2}[1, 1, 1]^\dagger$ .
- $d \equiv$  plano cuya traslación es  $\frac{1}{4}[1, 1, 0]$  ó  $\frac{1}{4}[1, 0, 1]$  ó  $\frac{1}{4}[0, 1, 1]$  en redes F o  $\frac{1}{4}[1, 1, 1]^\dagger$  en redes I.

A diferencia de las operaciones de simetría puntuales, los ejes helicoidales y los planos de deslizamiento no mantienen ningún punto invariante. Las operaciones de simetría admiten una clasificación en **operaciones de simetría puntual**, aquellas que dejan invariante al menos un punto del espacio y **operaciones de simetría espacial**, aquellas que transforman un objeto conservando su periodicidad, sin dejar ningún punto fijo, es decir, contienen una o varias traslaciones de red. Ambas vienen representadas de manera matricial de la siguiente forma:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

Operación de simetría puntual

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{bmatrix}$$

Operación de simetría espacial

Por ejemplo, la representación matricial de un eje helicoidal eje  $4_2$  sobre el eje  $c$  y la un plano de deslizamiento a perpendicular el eje  $b$  son:

$$4_2 \equiv \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \quad a \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Un grupo cuyos elementos incluyen operaciones de simetría puntual y traslaciones se denomina **grupo espacial**. Surgen de la combinación de los 32 grupos puntuales con las 14 redes de Bravais y dan lugar a 230 disposiciones de puntos en el espacio o lo que es lo mismo las maneras en que objetos idénticos pueden disponerse en el espacio par crear una red infinita. Un grupo espacial se designa por una letra mayúscula que designa el tipo de red (P, C, I, F ó R) seguido por símbolos del grupo puntual donde ejes de rotación y planos de reflexión son ampliados para incluir ejes helicoidales y planos de deslizamiento. En principio la combinación de las redes de Bravais con los grupos espacial daría lugar a sólo 72 grupos espaciales, pero también hay que considerar la posibilidad de sustituir cada una de las rotaciones y reflexiones por los correspondientes ejes en espiral y planos de deslizamiento. En este proceso se deben suprimir los grupos duplicados, cosa que no siempre es evidente.

En el sistema Hermann-Mauguin los grupos puntuales y grupos espaciales son designados por combinaciones de símbolos de elementos de simetría. Unos pocos convenios permiten deducir la estructura completa del grupo. Estos son:

- Cada componente de un símbolo se refiere a una dirección diferente.  $2/m$ ,  $4/m$  ó  $6/m$  son componentes simples.
- La posición de una  $m$  en un símbolo indica la dirección de la normal al plano.
- En el sistema ortorrómbico las tres direcciones son  $x$ ,  $y$ ,  $z$  mutuamente perpendiculares.
- En el sistema tetragonal, el eje cuaternario está en la dirección de  $z$ , la segunda componente se refiere a  $x$  e  $y$ , y la tercera las bisectrices del plano  $xy$ .
- En los sistemas trigonal y hexagonal, la segunda componente se refiere a la direcciones equivalentes en plano normal a los ejes ternarios o senario.
- En el sistema hexagonal, la tercera componente se refiere a las bisectrices de las direcciones especificadas por las segundas componentes.
- Un 3 en la segunda posición denota siempre sistema cúbico y se refiere a las diagonales del cubo. La primera componente se refiere a los ejes del cubo y la tercera a las diagonales de las caras.

Para discutir el efecto de la simetría en el cristal es habitual considerar los efector sobre un punto general arbitrario  $[x, y, z]$ . Las operaciones de simetría actúan sobre este punto produciendo nuevas coordenadas de puntos en posiciones indistinguibles de la inicial.

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} + \frac{1}{2} = \begin{bmatrix} -y \\ x + \frac{1}{2} \\ -z \end{bmatrix} \quad [x, y, z] \xrightarrow{2_1 \parallel b} [\bar{x}, y + \frac{1}{2}, \bar{z}]$$



Se denominan **posiciones equivalentes** todas las ubicaciones equivalentes por las operaciones del grupo espacial de simetría. De forma equivalente diríamos que son todas las transformaciones de coordenadas que realizan las operaciones de simetría espacial. Por ejemplo para el grupo espacial  $P4_2/m$ :

$$\begin{array}{ccccccc}
 [x, y, z] & \xrightarrow{4_2} & [\bar{y}, x, z + \frac{1}{2}] & \xrightarrow{4_2} & [\bar{x}, \bar{y}, z] & \xrightarrow{4_2} & [y, \bar{x}, z + \frac{1}{2}] \\
 \downarrow m & & \downarrow m & & \downarrow m & & \downarrow m \\
 [x, y, \bar{z}] & \xrightarrow{4_2} & [\bar{y}, x, \frac{1}{2} - z] & \xrightarrow{4_2} & [\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}] & \xrightarrow{4_2} & [y, \bar{x}, \frac{1}{2} - z]
 \end{array}$$

Al número de posiciones equivalentes para unas coordenadas dadas se denomina **multiplicidad**. Para un grupo espacial determinado la multiplicidad depende de las coordenadas de la posición, del tipo de red y del número de operaciones de simetría del grupo.

Distinguiamos **posición general** cuando sus coordenadas no están sobre ningún elemento de simetría y **posición especial** cuando se encuentra sobre algún elemento de simetría, ya sea uno o varios. La posición especial reduce la multiplicidad, mientras la posición general retiene la máxima multiplicidad.

$$\begin{array}{ccccccc}
 [x, y, 0] & \xrightarrow{4_2} & [\bar{y}, x, \frac{1}{2}] & \xrightarrow{4_2} & [\bar{x}, \bar{y}, 0] & \xrightarrow{4_2} & [y, \bar{x}, \frac{1}{2}] \\
 \downarrow m & & \downarrow m & & \downarrow m & & \downarrow m \\
 \cancel{[x, y, 0]} & \xrightarrow{4_2} & \cancel{[\bar{y}, x, \frac{1}{2}]} & \xrightarrow{4_2} & \cancel{[\bar{x}, \bar{y}, 0]} & \xrightarrow{4_2} & \cancel{[y, \bar{x}, \frac{1}{2}]}
 \end{array}$$

La simetría espacial permite reproducir la estructura del sólido cristalino a partir de una mínima fracción independiente mediante las operaciones del grupo espacial de simetría. Esta fracción independiente se denomina **unidad asimétrica**. Esta se define como la mínima fracción de la celda unidad a partir de la cual es posible reconstruir la estructura del cristal mediante la aplicación de las operaciones de simetría del grupo espacial. En ocasiones aparece simetría no cristalográfica o pseudo-simetría dentro de la unidad asimétrica.

El grupo puntual de un cristal puede obtenerse siempre a partir del símbolo del grupo espacial sustituyendo los ejes helicoidales por ejes de rotación del mismo orden y los planos de deslizamiento por planos de reflexión. Por ejemplo  $P\bar{4}2_1c$  provienen del grupo puntual  $\bar{4}2m$ .

## V. TABLAS INTERNACIONALES DE CRISTALOGRAFÍA

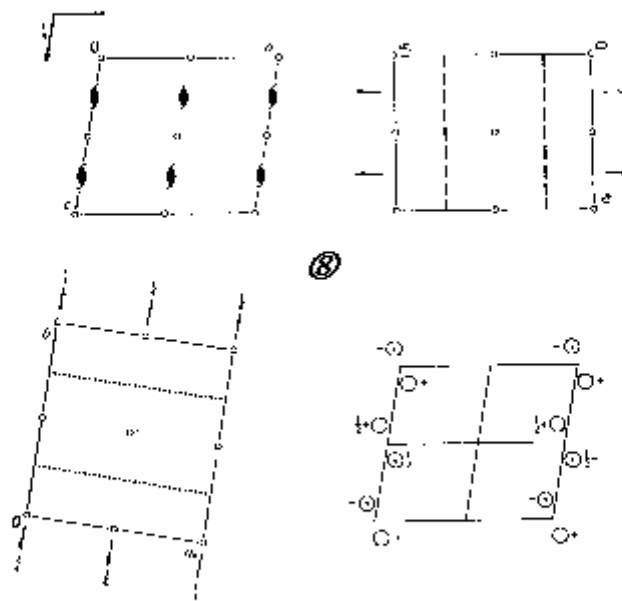
Los científicos interesados en el campo de la cristalografía se agrupan en una asociación, la **Unión Internacional de Cristalografía** (IUCr) con sede en el Reino Unido y que se ocupa de la organización de reuniones científicas, escuelas, edición de libros y publicación de revistas científicas en el tema de la cristalografía. Una de sus tareas ha sido recopilar toda la información sobre las propiedades de simetría de los sólidos cristalinos o cristales.

La información sobre los 230 grupos espaciales, con sus convenios, nomenclatura, bases matemáticas e históricas entre otras informaciones útiles se recogen en el volumen A de la Tablas Internacionales de Cristalografía. Las Tablas Internacionales se encuentran generalmente accesibles y son una herramienta cotidiana para los cristalógrafos, físicos o químicos estructurales.

Como ejemplo mostramos una parte de la información recogida sobre el grupo espacial N° 14. P2<sub>1</sub>/c:

**P2<sub>1</sub>/c** ①      **C<sub>2h</sub>** ②      **2/m** ③      **Monoclinic** ④  
**No. 14** ⑤      **P12<sub>1</sub>/c1** ⑥      **Рідескою симетрию P12/m1** ⑦

UNIQUE AXIS *b*, CELL CHOICE 1



Origin at ⑨

Asymmetric unit  $0 \leq x \leq 1, 0 < y < 1, 0 \leq z \leq 1$  ⑩⑩

Symmetry operations

(1)  $x, y, z$ ; (2)  $x, y+1/2, z$ ; (3)  $x, y, z+1/2$ ; (4)  $x, y+1/2, z+1/2$  ⑩⑩

Generators selected (1);  $r(1,0,0)$ ;  $r(0,1,0)$ ;  $r(0,0,1)$ ; (2); (3) ⑩②

Positions

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

4 e 1 (1)  $x, y, z$  (2)  $x, y+1/2, z$  (3)  $x, y, z+1/2$  (4)  $x, y+1/2, z+1/2$

General:

$h0l : l = 2n$

$0k0 : k = 2n$

$00l : l = 2n$

Special: as above, plus

$hkl : k+l = 2n$

$hkl : k+l = 2n$

$hkl : k+l = 2n$

$hkl : k+l = 2n$

2 d  $\bar{1}$   $1/2, 0, 1/2$   $1/2, 1/2, 0$

2 c  $\bar{1}$   $0, 0, 1/2$   $0, 1/2, 0$

2 b  $\bar{1}$   $1/2, 0, 0$   $1/2, 1/2, 1/2$

2 a  $\bar{1}$   $0, 0, 0$   $0, 1/2, 1/2$

La información que se ofrece es la siguiente:

① Símbolo Hermann-Mauguin corto.

- ② Símbolo Schönflies.
- ③ Grupo puntual.
- ④ Sistema cristalino.
- ⑤ Número de grupo espacial.
- ⑥ Símbolo Hermann-Mauguin completo.
- ⑦ Simetría del Patterson.
- ⑧ Diagramas del grupo espacial
- ⑨ Origen de la celdilla unidad.
- ①⑩ Unidad asimétrica.
- ①① Operaciones de simetría
- ①② Generadores seleccionados.
- ①③ Posiciones equivalentes

Los símbolos utilizados en las proyecciones son los siguientes:

Type of symmetry element	Written symbol	Graphical symbol	
Centre of symmetry	$\bar{1}$	$\bullet$	
		Perpendicular to paper	In plane of paper
Mirror plane	$m$		
Glide planes	$a b c$		
		Glide in plane of paper	Arrow shows glide direction
		..... Glide out of plane of paper	
Rotation	$n$		
	2		
	3		
	4		
	6		
Screw axes	$2_1$		
	$3_1, 3_2$		
	$4_1, 4_2, 4_3$		
	$6_1, 6_2, 6_3, 6_4, 6_5$		
Inversion axes	$\bar{3}$		
	$\bar{4}$		
	$\bar{6}$		

## VI. LA RED RECÍPROCA

El concepto de red recíproca fue introducido por Ewald en 1921. Es un concepto esencial para el estudio de las redes cristalinas y sus propiedades de difracción. La naturaleza del patrón de difracción está gobernada por la periodicidad tridimensional. Se observó que las distancias entre los planos de la red real jugaban un papel importante a la

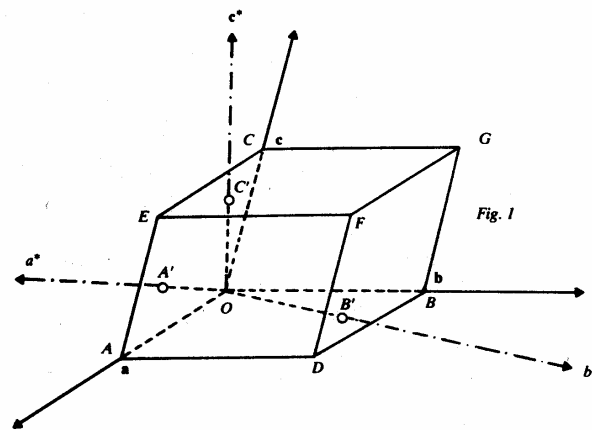
hora de interpretar fenómenos como la difracción. Veremos más adelante que la posición de los puntos en es patrón de difracción va a estar asociado a los nodos de las red recíproca. La red real y la red recíproca van a estar interrelacionadas a través de la operación matemática transformada de Fourier.

Al inicio de este tema hemos definido la red real como el conjunto de un origen y tres vectores básicos no coplanarios,  $(\mathbf{O}, \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c})$ . Formalmente se define igual que la red real mediante un origen y tres vectores básicos,  $(\mathbf{O}, \mathbf{a}^*, \mathbf{b}^*, \mathbf{c}^*)$ . La red recíproca puede deducirse a partir de los vectores de la red real de la siguiente forma:

$$\mathbf{a}^* = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{V} = \frac{Area(\mathbf{b}, \mathbf{c})}{a Area(\mathbf{b}, \mathbf{c}) \cos \phi} = \frac{1}{\mathbf{O}\mathbf{A}'}$$

$$\mathbf{b}^* = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})} = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{V} = \frac{Area(\mathbf{c}, \mathbf{a})}{b Area(\mathbf{c}, \mathbf{a}) \cos \psi} = \frac{1}{\mathbf{O}\mathbf{B}'}$$

$$\mathbf{c}^* = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})} = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{V} = \frac{Area(\mathbf{a}, \mathbf{b})}{c Area(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \cos \xi} = \frac{1}{\mathbf{O}\mathbf{C}'}$$



La red recíproca obedece una serie de propiedades:

- Las dimensiones de estos vectores son de longitudes recíprocas  $[L^{-1}]$ .
- Estos vectores cumplen las siguientes relaciones de ortogonalidad:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* &= 1 & \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}^* &= 0 & \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}^* &= 0 \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* &= 0 & \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* &= 1 & \mathbf{c} \cdot \mathbf{b}^* &= 0 \\ \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}^* &= 0 & \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}^* &= 0 & \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* &= 1 \end{aligned}$$

- Los vectores de la red recíproca son perpendiculares a familias de planos de la red real.

La segunda propiedad, es utilizada por muchos autores para hacer la definición de la red recíproca. En efecto, si adoptamos esta definición podemos escribir hallar el valor del producto del volumen real por el volumen recíproco:

$$V \cdot V^* = [\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})] \cdot [\mathbf{a}^* \cdot (\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*)] = \begin{vmatrix} \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}^* \\ \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}^* \\ \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}^* & \mathbf{c} \cdot \mathbf{b}^* & \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = 1$$

De la relación de volúmenes entre la celdilla real y la recíproca, se puede escribir:

$$\begin{aligned} V \cdot [\mathbf{a}^* \cdot (\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*)] &= 1 \\ V \cdot [\mathbf{b}^* \cdot (\mathbf{c}^* \times \mathbf{a}^*)] &= 1 \\ V \cdot [\mathbf{c}^* \cdot (\mathbf{a}^* \times \mathbf{b}^*)] &= 1 \end{aligned}$$

multiplicando a ambos lados de cada igualdad por  $\mathbf{b} \times \mathbf{c}$ , por  $\mathbf{c} \times \mathbf{a}$  y por  $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$  respectivamente tenemos:

$$\begin{aligned} V \cdot [\mathbf{a}^* \cdot (\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*)] \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) &= \mathbf{b} \times \mathbf{c} \\ V \cdot [\mathbf{b}^* \cdot (\mathbf{c}^* \times \mathbf{a}^*)] \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a}) &= \mathbf{c} \times \mathbf{a} \\ V \cdot [\mathbf{c}^* \cdot (\mathbf{a}^* \times \mathbf{b}^*)] \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) &= \mathbf{a} \times \mathbf{b} \end{aligned}$$

pero el producto escalar posee la propiedad asociativa y podemos escribir:

$$\begin{aligned} V \cdot \mathbf{a}^* \cdot [(\mathbf{b}^* \times \mathbf{c}^*) \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})] &= \mathbf{b} \times \mathbf{c} \\ V \cdot \mathbf{b}^* \cdot [(\mathbf{c}^* \times \mathbf{a}^*) \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})] &= \mathbf{c} \times \mathbf{a} \\ V \cdot \mathbf{c}^* \cdot [(\mathbf{a}^* \times \mathbf{b}^*) \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})] &= \mathbf{a} \times \mathbf{b} \end{aligned}$$

Es fácil demostrar (p. ej. en Análisis Vectorial de S. Simons de la colección Exedra de la editorial Alhambra) la siguiente igualdad  $(\mathbf{p} \times \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{s}) = (\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}) - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{s})(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$  obteniendo:

$$\begin{aligned} V \cdot \mathbf{a}^* \cdot \left[ \underbrace{(\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b})}_1 \underbrace{(\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c})}_1 - \underbrace{(\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c})}_0 \underbrace{(\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{b})}_0 \right] &= \mathbf{b} \times \mathbf{c} \\ V \cdot \mathbf{b}^* \cdot \left[ \underbrace{(\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{c})}_1 \underbrace{(\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a})}_1 - \underbrace{(\mathbf{c}^* \cdot \mathbf{a})}_0 \underbrace{(\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c})}_0 \right] &= \mathbf{c} \times \mathbf{a} \\ V \cdot \mathbf{c}^* \cdot \left[ \underbrace{(\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{a})}_1 \underbrace{(\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{b})}_1 - \underbrace{(\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b})}_0 \underbrace{(\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{a})}_0 \right] &= \mathbf{a} \times \mathbf{b} \end{aligned}$$

obteniéndose las expresiones de los vectores de la red recíproca en función de los vectores de la red real:

$$\begin{aligned}
V \cdot \mathbf{a}^* &= \mathbf{b} \times \mathbf{c} & \mathbf{a}^* &= \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{V} = \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{b} \times \mathbf{c})} \\
V \cdot \mathbf{b}^* &= \mathbf{c} \times \mathbf{a} \Rightarrow & \mathbf{b}^* &= \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{V} = \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{b} \cdot (\mathbf{c} \times \mathbf{a})} \\
V \cdot \mathbf{c}^* &= \mathbf{a} \times \mathbf{b} & \mathbf{c}^* &= \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{V} = \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{c} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})}
\end{aligned}$$

A continuación vamos a calcular los vectores de la red recíproca en función de los de la red real usando el tensor métrico.

El tensor métrico, para el espacio real, se construye con las dimensiones de la celdilla unidad,

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} a^2 & abc \cos \gamma & ac \cos \beta \\ bac \cos \gamma & b^2 & bc \cos \alpha \\ ca \cos \beta & cbc \cos \alpha & c^2 \end{bmatrix}$$

Dado que, podemos encontrar una expresión para el volumen de la celdilla unidad,

$$V^2 = a^2 b^2 c^2 (1 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma)$$

El espacio real y el espacio recíproco son espacios duales y sus tensores métricos cumplen la condición  $\mathbf{G}^* = \mathbf{G}^{-1}$ , y recíprocamente  $\mathbf{G} = \mathbf{G}^{*-1}$ . Por tanto, el tensor métrico de la red recíproca se puede calcular sin dificultad a partir del tensor métrico de la red real:

$$\mathbf{G}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\overbrace{a^* \cdot a^*}^{a^* \cdot a^*}}{b^2 c^2 \text{sen}^2 \alpha} & \frac{\overbrace{a^* \cdot b^*}^{a^* \cdot b^*}}{abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)} & \frac{\overbrace{a^* \cdot c^*}^{a^* \cdot c^*}}{ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta)} \\ \frac{\overbrace{b^* \cdot a^*}^{b^* \cdot a^*}}{abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)} & \frac{\overbrace{b^* \cdot b^*}^{b^* \cdot b^*}}{a^2 c^2 \text{sen}^2 \beta} & \frac{\overbrace{b^* \cdot c^*}^{b^* \cdot c^*}}{a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)} \\ \frac{\overbrace{c^* \cdot a^*}^{c^* \cdot a^*}}{ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta)} & \frac{\overbrace{c^* \cdot b^*}^{c^* \cdot b^*}}{a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)} & \frac{\overbrace{c^* \cdot c^*}^{c^* \cdot c^*}}{a^2 b^2 \text{sen}^2 \gamma} \end{bmatrix}$$

El cálculo de las longitudes de los vectores de base de la red recíproca es inmediato a partir de la interpretación del significado de los términos de la diagonal principal, por tanto:

$$a^* = \frac{bc \text{sen} \alpha}{V} \quad b^* = \frac{ac \text{sen} \beta}{V} \quad c^* = \frac{ab \text{sen} \gamma}{V}$$

Por otra parte, entre espacios duales se cumple la relación:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{a}^* \\ \mathbf{b}^* \\ \mathbf{c}^* \end{bmatrix} = \mathbf{G}^* \begin{bmatrix} \mathbf{a} \\ \mathbf{b} \\ \mathbf{c} \end{bmatrix}$$

De donde se deducen inmediatamente:

$$\mathbf{a}^* = \frac{1}{V^2} \left[ b^2 c^2 \operatorname{sen}^2 \alpha \mathbf{a} + abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) \mathbf{b} + ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) \mathbf{c} \right]$$

$$\mathbf{b}^* = \frac{1}{V^2} \left[ abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) \mathbf{a} + a^2 c^2 \operatorname{sen}^2 \beta \mathbf{b} + a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) \mathbf{c} \right]$$

$$\mathbf{c}^* = \frac{1}{V^2} \left[ ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) \mathbf{a} + a^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) \mathbf{b} + a^2 b^2 \operatorname{sen}^2 \gamma \mathbf{c} \right]$$

Los ángulos entre vectores se deducen también fácilmente, a partir de los productos  $\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^*$ ,  $\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^*$  y  $\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^*$ :

$$\mathbf{b}^* \cdot \mathbf{c}^* = \frac{a^2 bc}{V^2} \underbrace{\operatorname{sen} \beta \operatorname{sen} \gamma \cos \alpha^*}_{\text{módulos y } \cos \alpha^*} = \frac{a^2 bc}{V^2} \underbrace{(\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)}_{\text{de } \mathbf{G}^*}$$

$$\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{c}^* = \frac{ab^2 c}{V^2} \underbrace{\operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \gamma \cos \beta^*}_{\text{módulos y } \cos \beta^*} = \frac{ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta)}{V^2} \underbrace{\quad}_{\text{de } \mathbf{G}^*}$$

$$\mathbf{a}^* \cdot \mathbf{b}^* = \frac{abc^2}{V^2} \underbrace{\operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta \cos \gamma^*}_{\text{módulos y } \cos \gamma^*} = \frac{abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)}{V^2} \underbrace{\quad}_{\text{de } \mathbf{G}^*}$$

Se obtienen las relaciones:

$$\cos \alpha^* = \frac{\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha}{\operatorname{sen} \beta \operatorname{sen} \gamma}$$

$$\cos \beta^* = \frac{\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta}{\operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \gamma}$$

$$\cos \gamma^* = \frac{\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma}{\operatorname{sen} \alpha \operatorname{sen} \beta}$$

Estas relaciones son simétricas para la red real en función de magnitudes de la red recíproca, debido a la característica de espacios duales:

$$V^{*2} = a^{*2} b^{*2} c^{*2} (1 + 2 \cos \alpha^* \cos \beta^* \cos \gamma^* - \cos^2 \alpha^* - \cos^2 \beta^* - \cos^2 \gamma^*)$$

$$a = \frac{b^* c^* \operatorname{sen} \alpha^*}{V^*}; \quad b = \frac{a^* c^* \operatorname{sen} \beta^*}{V^*}; \quad c = \frac{a^* b^* \operatorname{sen} \gamma^*}{V^*}$$

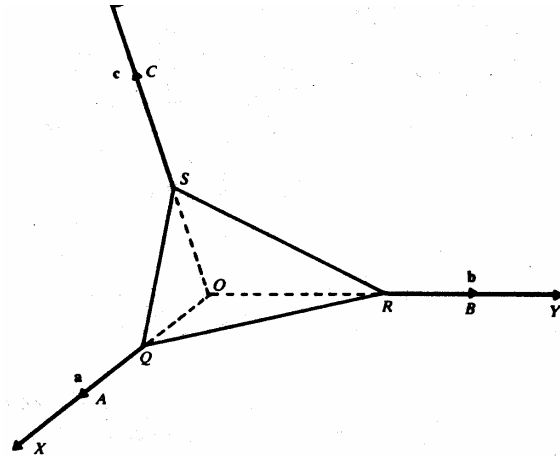
$$\cos \alpha = \frac{\cos \beta^* \cos \gamma^* - \cos \alpha^*}{\operatorname{sen} \beta^* \operatorname{sen} \gamma^*}$$

$$\cos \beta = \frac{\cos \alpha^* \cos \gamma^* - \cos \beta^*}{\operatorname{sen} \alpha^* \operatorname{sen} \gamma^*}$$

$$\cos \gamma = \frac{\cos \alpha^* \cos \beta^* - \cos \gamma^*}{\operatorname{sen} \alpha^* \operatorname{sen} \beta^*}$$

### Índices de Miller

Consideremos la ecuación de un plano en la red real cuyos puntos de corte con los ejes son  $Q(1/h, 0, 0)$ ,  $R(0, 1/k, 0)$  y  $S(0, 0, 1/l)$  donde  $h$ ,  $k$  y  $l$  son números enteros. Para caracterizar al plano son necesarios un punto y dos vectores, tomaremos el punto  $Q(1/h, 0, 0)$  y los vectores  $\overline{QR} = (-1/h, 1/k, 0)$  y  $\overline{QS} = (-1/h, 0, 1/l)$ .



La ecuación del plano es:

$$\pi_{[h,k,l]} = \begin{vmatrix} x - 1/h & y & z \\ -1/h & 1/k & 0 \\ -1/h & 0 & 1/l \end{vmatrix} = \frac{1}{kl} \left( x - \frac{1}{h} \right) + \frac{1}{kz} z + \frac{1}{hl} y = -\frac{1}{hkl} + \frac{1}{kl} x + \frac{1}{hl} y + \frac{1}{kz} z = 0$$

o lo que es lo mismo

$$\pi_{[h,k,l]} = hx + ky + lz = 1$$

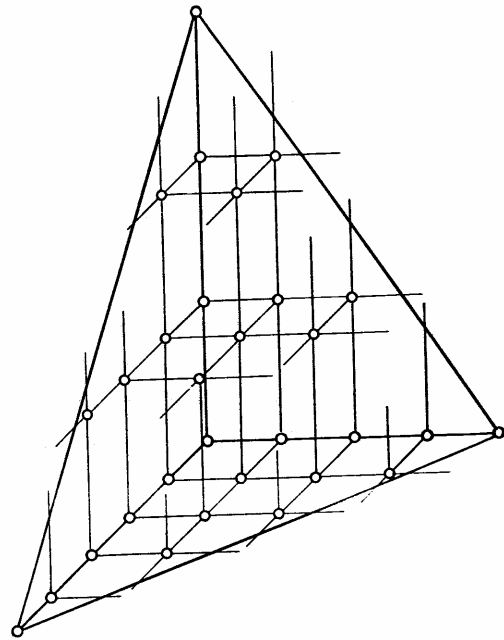
Uno se puede preguntar: ¿Contendrá este plano alguno o varios nodos de la red real? La respuesta nos la da la Teoría de los Números. Si los enteros  $h$ ,  $k$  y  $l$  son primos relativos entre sí, la ecuación diofántica  $hx + ky + lz = 1$  tiene infinitas soluciones enteras.



Puesto que los puntos con coordenadas enteras son nodos de la red real, concluimos que el plano pasa a través de un número infinito de nodos reticulares. A los planos con esta propiedad se les denomina **planos reticulares**.

Los índices (los enteros  $h, k$  y  $l$ ) que caracterizan cada plano de la red real se denominan **índices de Miller**. Denotaremos a este plano por  $(h, k, l)$ .

A continuación vamos a demostrar que uno de los vectores normales de este plano es el vector del espacio recíproco  $\mathbf{h} = (h, k, l) = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*$ .



En efecto, un vector normal  $\mathbf{n}_\pi$  del plano

se puede obtener mediante el producto vectorial de los vectores  $\overline{QR} = (-1/h, 1/k, 0)$  y  $\overline{QS} = (-1/h, 0, 1/l)$  que caracterizaban el plano:

$$\mathbf{n}_\pi = \overline{QR} \times \overline{QS} = \left(-\frac{1}{h}\mathbf{a} + \frac{1}{k}\mathbf{b}\right) \times \left(-\frac{1}{h}\mathbf{a} + \frac{1}{l}\mathbf{c}\right) = -\frac{1}{hl}\mathbf{a} \times \mathbf{c} - \frac{1}{hk}\mathbf{b} \times \mathbf{a} + \frac{1}{kl}\mathbf{b} \times \mathbf{c}$$

pero la definición de red recíproca nos permite escribir:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \times \mathbf{b} &= V \cdot \mathbf{c}^* \\ \mathbf{b} \times \mathbf{c} &= V \cdot \mathbf{a}^* \\ \mathbf{c} \times \mathbf{a} &= V \cdot \mathbf{b}^* \end{aligned}$$

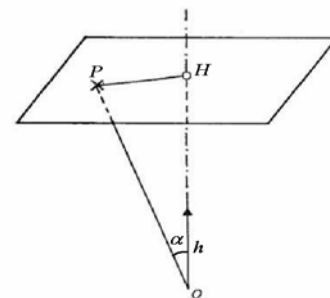
sustituyendo los productos vectoriales por sus valores:

$$\mathbf{n}_\pi = -\frac{1}{hl}\mathbf{a} \times \mathbf{c} - \frac{1}{hk}\mathbf{b} \times \mathbf{a} + \frac{1}{kl}\mathbf{b} \times \mathbf{c} = \frac{V}{hl}\mathbf{b}^* + \frac{V}{hk}\mathbf{c}^* + \frac{V}{kl}\mathbf{a}^* = \frac{V}{\underbrace{hkl}_{\text{constante}}} (h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*)$$

Por último, vamos a calcular la distancia del origen al plano  $[h, k, l]$ . Supongamos un punto arbitrario  $P(x, y, z)$  que pertenece al plano  $[h, k, l]$ . El producto escalar del vector  $\overline{OP}$  y  $\mathbf{h}$  vale

$$\overline{OP} \cdot \mathbf{h} = |\overline{OP}| |\mathbf{h}| \cos \alpha = |\mathbf{h}| d_{hkl}$$

pero podemos calcular ese producto escalar



$$\overline{OP} \cdot \mathbf{h} = (x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c})(h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^*) = hx + ky + lz \stackrel{\text{ecuación del plano}}{=} 1$$

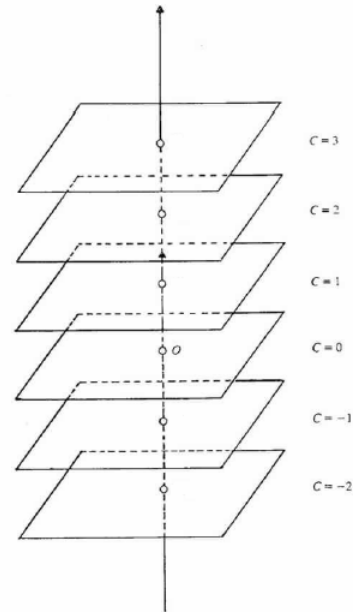
mezclando las dos últimas ecuaciones se obtiene que

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\mathbf{h}|}$$

Es sencillo comprobar que la ecuación

$$hx + ky + lz = C \quad C \in \mathbb{Z}$$

representa una familia de planos paralelos equidistantes entre sí. Para  $C = 1$  tenemos el plano estudiado hasta el momento. Si  $C = 0$ , estaríamos ante un plano paralelo al original que pasa por el origen de coordenadas. La distancia entre ambos planos y por tanto entre dos planos consecutivos de la familia es el recíproco del módulo del vector  $\mathbf{h}$ .



Vamos a calcular esta distancia a través de la expresión:

$$|\mathbf{h}| = \sqrt{\mathbf{h} \cdot \mathbf{h}} = \sqrt{\mathbf{h}^t \mathbf{G}^* \mathbf{h}}$$

donde  $\mathbf{h} = h\mathbf{a}^* + k\mathbf{b}^* + l\mathbf{c}^* = (h, k, l)$ ,

$$G^* = \frac{1}{V^2} \begin{bmatrix} b^2 c^2 \sin^2 \alpha & abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) & ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) \\ abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) & a^2 c^2 \sin^2 \beta & a^2 b c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) \\ ab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) & a^2 b c (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) & a^2 b^2 \sin^2 \gamma \end{bmatrix}$$

y

$$V^2 = a^2 b^2 c^2 (1 + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma)$$

Operando se obtiene la expresión general para la distancia interplanar:

$$d_{hkl} = V [h^2 b^2 c^2 \sin^2 \alpha + k^2 a^2 c^2 \sin^2 \beta + l^2 a^2 b^2 \sin^2 \gamma + 2hlab^2 c (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) + 2hkabc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) + 2kla^2 bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)]^{\frac{1}{2}}$$

La importancia del hecho de que exista, como consecuencia de la periodicidad de la red cristalina, una familia de planos paralelos entre sí, igualmente espaciados y conteniendo idénticas disposiciones atómicas, es que el fenómeno de dispersión de rayos-X por las nubes electrónicas de los átomos del cristal, va a ser explicado mediante una reflexión de los rayos-X en dichos. Es decir, el patrón observado que es el resultado de la interferencia constructiva y destructiva de la radiación electromagnética dispersada por todos

los átomos, va a poder explicado en términos de una reflexión de luz. Por lo tanto cada conjunto de planos va a dar lugar a un haz difractado en una dirección particular del espacio, que denominaremos reflexión y al cual asignaremos los mismos índices  $h, k, l$  que el conjunto de planos que la produce.

A cada familia de planos corresponde un vector de la red recíproca que es perpendicular a los planos de la red real.

Resumiendo, cada tríada de índices de Miller,  $(hkl)$ , corresponde a:

- Un nodo de la red recíproca.
- Un vector de la red recíproca.
- Un plano de la red real.
- Una familia de planos paralelos a la misma distancia interplanar.
- Una reflexión (un haz difractado).

Por último falta considerar el caso de que los índices no sean números enteros primos entre sí. Supongamos que tenemos un vector recíproco

$$\mathbf{h}' = (h', k', l') = (nh, nk, nl) = n(h, k, l) = n\mathbf{h}$$

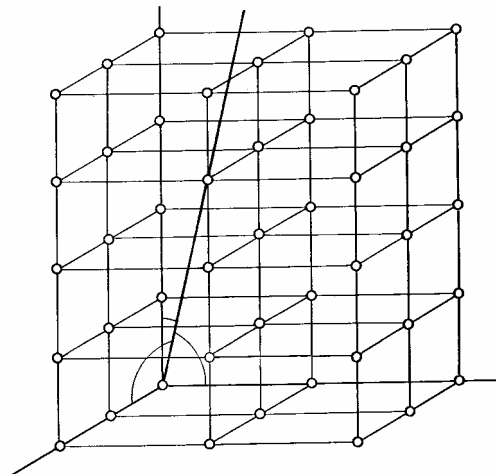
se puede escribir:

$$\frac{1}{\underbrace{n}_{d_{h'k'l'}}} \underbrace{n|\mathbf{h}|}_{|\mathbf{h}'|} = 1$$

Cada nudo de la red recíproca  $(h', k', l')$ , puede asociarse con un conjunto de planos ficticios en el espacio directo cuyos espaciados son  $n$  veces más pequeños que el espacio real. Las distancias interplanares son, en este caso:

$$d_{h'k'l'} = \frac{1}{n} d_{hkl}$$

También es posible identificar una dirección cristalográfica mediante tres índices  $[h, k, l]$ ; es la recta que une el origen con el nodo cuyas coordenadas fraccionarias son  $(h, k, l)$ .



Los planos  $(h, k, l)$  intersecan las líneas  $[h, k, l]$  aunque no son necesariamente perpendiculares.

Enviar comentarios y errores a [aap@sauron.quimica.uniovi.es](mailto:aap@sauron.quimica.uniovi.es)