

## 2.2 Simetría en los sólidos cristalinos

Observación:  
Distribución de las  
caras en los cristales



Sentido de  
proporción y  
equilibrio geométrico

Simetría externa de los cristales permite:

- Placer estético
- Identificación de sustancias
- Estudio de propiedades de compuestos en estado sólido

Para clasificar los sólidos según simetría:

- elementos de simetría
- operaciones de simetría

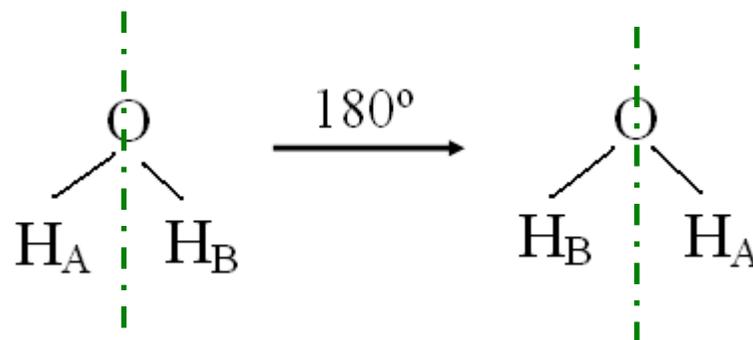


### Operación de simetría:

Operación llevada a cabo en una molécula o cristal, que origina una nueva orientación de aquella que la hace indistinguible y superponible a la orientación original.

La operación de simetría es rotación en  $180^\circ$ .

El elemento de simetría es el eje alrededor del cual se rota la molécula.



### Elemento de simetría:

Es una entidad geométrica (línea, plano o punto) con respecto a la cual se pueden realizar una o más operaciones de simetría.

### Simetría puntual:

Al menos un punto de la molécula (centro de gravedad) permanece inalterado durante las operaciones de simetría.

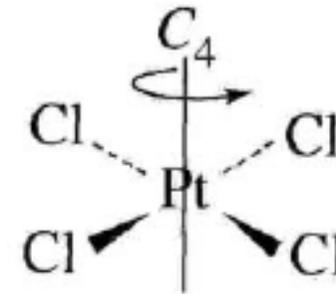
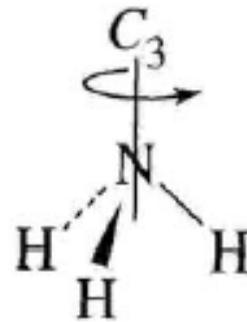
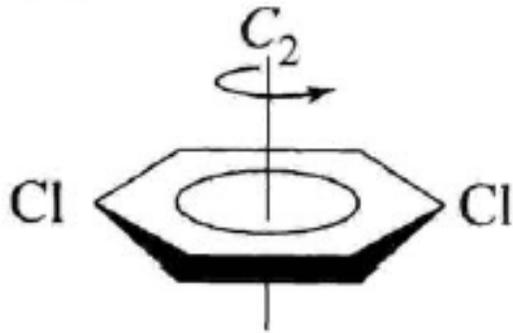
# Operaciones de simetría

Cinco tipos:

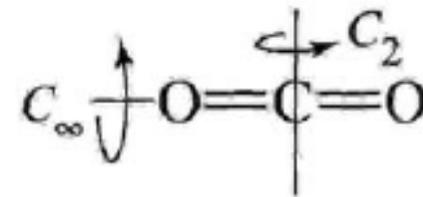
- Rotación propia ( $C_n$ )
- Reflexión a través de un plano de simetría ( $\sigma$ )
- Inversión de un centro de simetría ( $i$ )
- Rotación impropia ( $S_n$ )
- Identidad (E)

# Rotación propia ( $C_n$ )

- Rotación del objeto en un ángulo  $2\pi/n$  alrededor de un eje de simetría.
- En la rotación de una molécula de agua en  $180^\circ$ , el símbolo es  $C_2$ .



Una molécula puede tener varios ejes de simetría.



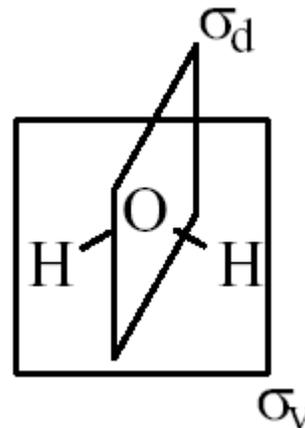
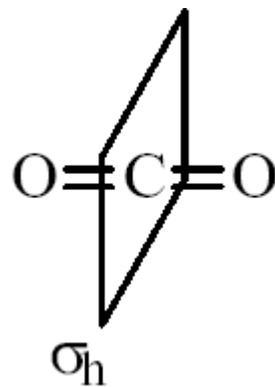
## Reflexión a través de un plano de simetría ( $\sigma$ )

- Intercambio de puntos a través del plano, a puntos opuestos y equidistantes.
- El elemento de simetría es un plano.

$\sigma_h$ : plano perpendicular al eje principal

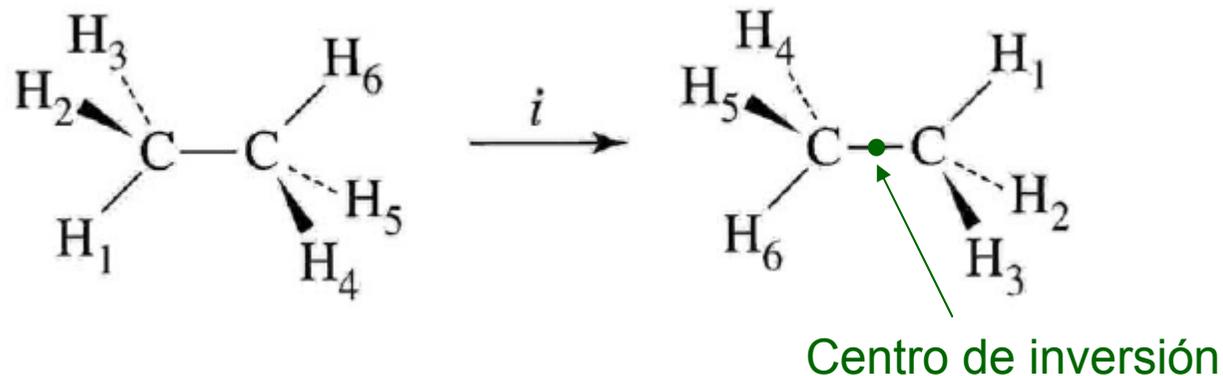
$\sigma_v$ : plano que incluye al eje principal

$\sigma_d$ : plano diedro



## Inversión de un centro de simetría (i)

- Inversión de puntos a través del centro de gravedad.
- Si se traza una línea recta desde un átomo a través del centro de la molécula, y se encuentra un átomo idéntico, y esto ocurre para todos los átomos de la moléculas, esta posee un **centro de inversión**.



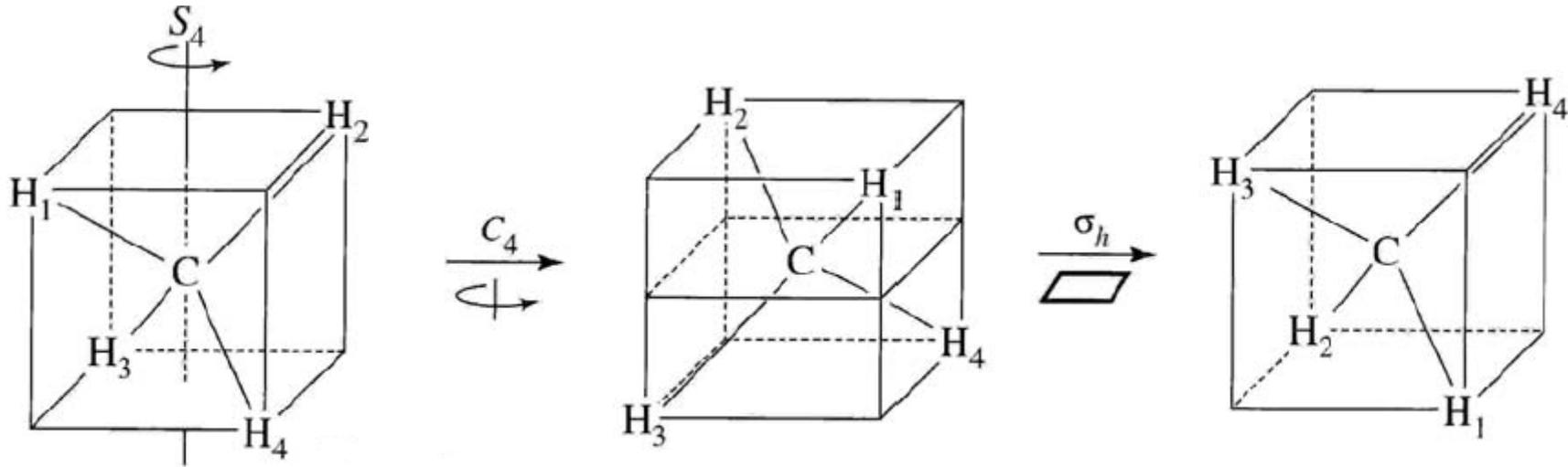
El elemento de simetría es un punto: el centro de inversión.

# Rotación Impropia ( $S_n$ )

Rotación del objeto en  $2\pi/n$ , seguida por reflexión en el plano perpendicular al eje de rotación.

Las operaciones de reflexión y rotación dan el mismo resultado, independientemente del orden en que se realizan.

Ej: metano (molécula tetraédrica)



Rotación en  $90^\circ$  (NO es operación de simetría)

Reflexión a través del plano horizontal

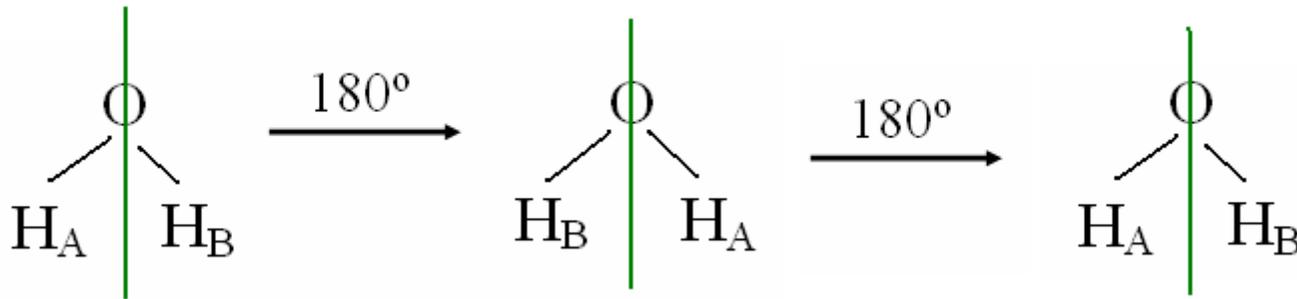
Molécula superponible a la original

## Operación Identidad (E)

- Deja a la molécula sin cambios en una configuración idéntica a la original.
- Toda molécula tiene al menos esta operación de simetría.

Sucesivas operaciones de simetría pueden dar como resultado la operación identidad.

Ej: Rotar la molécula de agua dos veces alrededor del eje  $C_2$  da como resultado una configuración idéntica.



$$C_2 \cdot C_2 = C_2^2 = E$$

# Grupos puntuales

- Un grupo puntual es una colección de elementos de simetría de una molécula u objeto.
- Los grupos puntuales se aplican a estructuras cristalinas, moléculas e incluso a la distribución electrónica de los átomos, es decir, de los orbitales atómicos, moleculares y cristalinos.

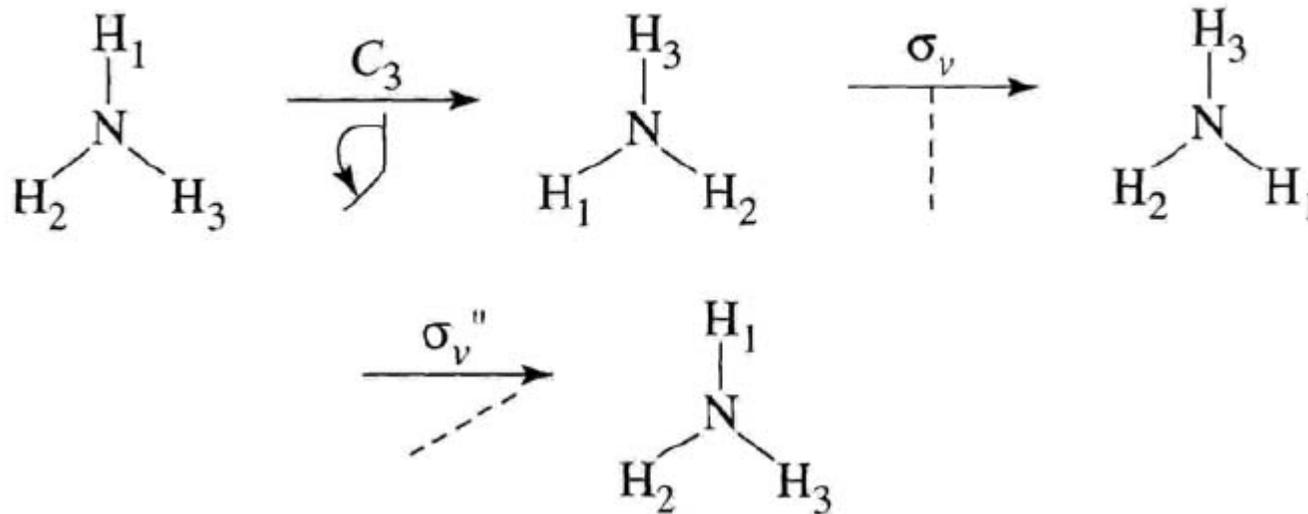
Tres categorías de grupos puntuales:

- C
- D
- grupos especiales

Ej.: molécula de  $\text{NH}_3$

Conjunto de operaciones de simetría:

- E
- $C_3$
- $C_3^2$
- $\sigma_v$
- $\sigma_v'$
- $\sigma_v''$

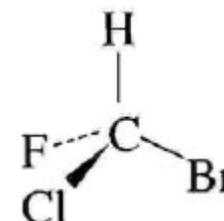


Grupo puntual:  $C_{3v}$

## Algunos grupos puntuales

### Grupo puntual $C_1$

- La única operación de simetría es E
- $\Rightarrow$  posee un eje de rotación  $C_1$



### Grupo puntual $C_{\infty v}$

- Posee un eje de rotación de orden  $\infty$  (como  $CO_2$ )
- Posee un número infinito de planos  $\sigma_v$ , pero ningún plano  $\sigma_h$  o centro de inversión.
- Ej.: especies diatómicas asimétricas (HF, CO) o poliatómicas lineales (HCN)

## Grupo puntual $C_s$

- El único elemento de simetría es un plano  $\sigma$
- Ej: HSD

## Grupo puntual $D_{\infty h}$

- Especies diatómicas simétricas (ej.  $H_2$ ) y poliatómicas lineales que contienen un centro de simetría (ej.  $CO_2$ ) poseen un plano  $\sigma_h$  además de un eje  $C_\infty$  y un número infinito de planos  $\sigma_v$ .

## Grupos especiales

- Clasifican moléculas altamente simétricas
  - $T_d$ : moléculas tetraédricas
  - $O_h$ : moléculas cúbicas y octaédricas

# Símbolos de Schonflies

	Grupo de punto	Elementos de simetría
Grupos C	$C_1$	E
	$C_s$	Plano de simetría
	$C_i$	Centro de inversión
	$C_n$	Eje de rotación de orden n
	$C_{nv}$	Eje de rotación de orden n; n planos verticales de simetría
	$C_{nh}$	Eje de rotación de orden n; plano de simetría perpendicular al eje $C_n$
	$C_{\infty v}$	Aplicable a moléculas lineales no simétricas; el eje $C_{\infty}$ coincide con el eje internuclear; planos verticales
Grupos D	$D_n$	Eje $C_n$ ; ejes $nC_2$ perpendiculares al eje $C_n$
	$D_{nh}$	Eje $C_n$ ; ejes $nC_2$ perpendiculares al eje $C_n$ ; un plano de simetría perpendicular al eje $C_n$
	$D_{nd}$	Eje $C_n$ ; ejes $nC_2$ perpendiculares al eje $C_n$ ; planos de simetría diedros
	$D_{\infty h}$	Aplicable a moléculas simétricas; eje $C_{\infty}$ ; ejes $\infty C_2$ perpendiculares al eje $C_{\infty}$ ; plano de simetría perpendicular al eje $C_{\infty}$
Grupos especiales	$T_d$	Un conjunto de cuatro ejes $C_3$ ; un conjunto de tres ejes $S_4$ ; un conjunto de seis planos diedros de simetría
	$O_h$	Un conjunto de tres ejes $C_4$ ; un conjunto de cuatro ejes $C_3$ ; un conjunto de seis planos, cada uno con un eje $C_4$ y bisectando dos de los ángulos formados por los otros ejes $C_4$
	$I_h$	Contiene todos los elementos de $O_h$ ; seis ejes $C_5$

# Simetría en Cristales

- Los elementos de simetría y las operaciones de simetría en cristales son los mismos que los de las moléculas aisladas.
  - ⇒ Clasificación de sólidos
  - ⇒ Forma de la celda unitaria
- Para describir los grupos de punto en cristales se no utilizan los símbolos de Schoenflies, sino los de Hermann-Mauguin (Símbolos Cristalográficos Internacionales)
- Eje de rotación binario, ternario, cuaternario, senario: 2, 3, 4, 6
- Ejes de rotación secundarios binarios, ternarios, cuaternarios, senarios: 2, 3, 4, 6
- Elemento identidad:  $\bar{1}$
- Centro de simetría:  $\bar{1}$
- Plano de simetría: m

# Grupo puntual de un cristal

- Simetría del eje principal
- Ej.: 4  $\Rightarrow$  hay un eje cuaternario de simetría a lo largo del eje C1, eje principal.
- Si existe un plano de simetría que es perpendicular el eje principal, los dos símbolos se asocian (4/m).
- Siguen los símbolos para ejes secundarios, si los hay, y otros planos de simetría.

Sistema	Símbolo del grupo de punto de Hermann-Mauguin	Símbolo del grupo de punto de Schoenflies	m	2	3	4	6	$\bar{1}$	$\bar{2}$	$\bar{3}$	$\bar{4}$	$\bar{6}$
Triclínico	1	C1										
	$\bar{1}$	C1						1				
Monoclínico	2	C2		1								
	m	Cs	1						1			
	2/m	C2h	1	1				1	1			
Orotorrómbico	222	D2		3								
	mm2	C2v	2	1					2			
	mmm	D2h	3	3				1	3			
Tetragonal (cada grupo de punto tiene un eje 4 o $\bar{4}$ )	4	C4				1						
	$\bar{4}$	S4									1	
	4/m	C4h	1			1		1	1		1	
	422	D4		4		1						
	4mm	C4v	4			1			4			
	$\bar{4}2m$	D2d	2	2					2		1	
	4/mmm	D4h	5	4		1		1	5		1	
Romboédrico (trigonal) (cada grupo de punto tiene un eje ternario)	3	C3			1							
	$\bar{3}$	C3i								1		
	32	D3		3	1							
	3m	C3v	3		1				3			
	$\bar{3}m$	D3d	3	3					3	1		
Hexagonal (cada grupo de punto tiene un eje 6 o $\bar{6}$ )	6	C6					1					
	$\bar{6}$	C3h	1									1
	6/m	C6h	1				1	1	1	1		1
	622	D6		6			1					
	6mm	C6v	6				1		6			
	$\bar{6}m2$	D3h	4	3					4			1
	6/mmm	D6h	7	6			1	1	7	1		1
Cúbico (cada grupo de punto tiene cuatro ejes ternarios)	23	T		3	4							
	m3	Th	3	3					3	4		
	432	O		6	4	3						
	$\bar{4}3m$	Td	6		4				6		3	
	m3m	Oh	9	6		3			9	4	3	

# Grupos espaciales

Grupos  
puntuales



Operaciones de simetría  
asociados aun punto de red

Grupos  
espaciales



Operaciones de simetría  
de grupos puntuales a  
redes infinitas

+

posibilidad de  
simetría  
traslacional