VOLUMEN 48
XXXI Verano De la Ciencia
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Estructuras Minerales y Moleculares Vistas a Través de la Teoría de Grupos

Mineral and Molecular Structures Viewed Through Group Theory

Héctor Gabriel Salazar Pedroza[1], Juan Carlos García Colín[1], Diego Macías Gutiérrez [2], Alejandra Menéndez González[1], Edgar Angeles Moreno[1], Adán Ulises Quiroga Almaguer[1]
[1]Departamento de Ingeniería en Minas, Metalurgia y Geología, Universidad de Guanajuato
[2]Departamento de Matemáticas, Universidad de Guanajuato
hg.salazar@ugto.mx

Resumen

Se analiza la relación que existe entre minerales, moléculas y la teoría de grupos para exhibir las estructuras algebraicas presentes en sus simetrías. Se emplea la teoría de grupos como fundamento para proponer una clasificación alternativa a la clasificación estructural de minerales y moléculas.

Palabras clave: cristalografía; teoría de grupos; simetría molecular; sistemas cristalinos; grupos espaciales; mineralogía.

Introducción

La simetría es una de las características más reconocibles presentes en la naturaleza, que permite identificar patrones para clasificar estructuras y establecer relaciones entre la forma de un objeto y sus propiedades. En las ciencias naturales, la simetría es una herramienta útil para comprender el comportamiento de los sistemas físicos y químicos. Las propiedades de una molécula, la forma en que un cristal interactúa con la luz o la manera en que un mineral presenta determinadas características mecánicas están relacionadas con la organización espacial de sus componentes. Para describir estas regularidades se requiere un lenguaje capaz de representar matemáticamente las simetrías de una estructura.

La teoría de grupos, una rama del álgebra abstracta, proporciona este lenguaje matemático. Una de sus aplicaciones más importantes se encuentra en el estudio de simetrías. En el caso de las moléculas, las operaciones de simetría permiten describir la disposición espacial de los átomos y agrupar las diferentes posibilidades geométricas mediante grupos puntuales. En los cristales, la relación entre simetría y teoría de grupos adquiere una mayor complejidad debido a que sus estructuras están formadas por arreglos periódicos que se extienden en tres dimensiones. La combinación entre las operaciones de simetría y la repetición espacial conduce a los grupos cristalográficos, que permiten clasificar las estructuras cristalinas y relacionarlas con propiedades físicas observables. De esta manera, la teoría de grupos establece un puente entre la matemática abstracta y la descripción de sistemas reales. El estudio de las simetrías permite comprender cómo el orden microscópico determina características que pueden observarse a escala macroscópica, mostrando la estrecha relación entre geometría, estructura y propiedades de la materia.

Este trabajo se organiza en diferentes secciones que permiten avanzar desde los fundamentos matemáticos hasta sus aplicaciones. Las primeras tres secciones posteriores a esta introducción conforman el marco teórico, donde se presentan los conceptos fundamentales de teoría de grupos, la relación entre simetría y estructuras moleculares, así como los principios básicos de cristalografía y grupos cristalográficos. Posteriormente, se presenta la sección de metodología, en la que se describe el enfoque utilizado para analizar y relacionar los conceptos matemáticos con las estructuras estudiadas. A continuación, se exponen los resultados obtenidos y, finalmente, se presentan las conclusiones derivadas del análisis realizado.

VOLUMEN 48
XXXI Verano De la Ciencia
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Teoría de grupos

La teoría de grupos es una rama de las matemáticas que se encarga del estudio de la simetría y a su vez del concepto abstracto de una estructura algebraica llamada *grupo*. La teoría de grupos tiene múltiples aplicaciones en física, desde conceptos como la conductividad eléctrica, la ductilidad, el punto de fusión y hasta las propiedades ópticas de un material son analizados matemáticamente usando la teoría de grupos; por otro lado, en mecánica cuántica y química los grupos son relevantes al estudiar estructuras cristalinas y minerales, los cuales se conforman de una red periódica de átomos. Brindaremos las definiciones y construcciones matemáticas necesarias para entender la propuesta de clasificación de minerales y moléculas, así como algunas conjeturas obtenidas en el proceso.

Definición. Sean G un conjunto no vacío junto y $\circ\colon G \times G \to G$ una operación binaria.

1. La dupla $(G,\circ)$ es un *grupo* si satisface las siguientes cuatro propiedades:
   i) *Cerradura*: $a \circ b \in G$ para todo $a, b \in G$.
   ii) *Asociatividad*: $(a \circ b) \circ c = a \circ (b \circ c)$ para todo $a, b, c \in G$.
   iii) *Existencia de elemento neutro*: existe $e \in G$ tal que $e \circ a = a \circ e = a$ para todo $a \in G$.
   iv) *Existencia de elementos inversos*: para todo $a \in G$ existe $a^{-1} \in G$ tal que $a \circ a^{-1} = a^{-1} \circ a = e$.
   Notemos que el inverso del elemento neutro e siempre es él mismo, ya que trivialmente satisface $e \circ e = e$.
2. Un grupo $(G,\circ)$ es *abeliano* si para cualesquiera dos elementos a y b de G se cumple $a \circ b = b \circ a$.
3. Consideremos un grupo $(G,\circ)$ y un subconjunto $H \subseteq G$. Si $(H,\circ)$ es también un grupo, entonces decimos que $(H,\circ)$ es un *subgrupo* de $(G,\circ)$.

Definición. Sean $(G,\circ)$ y $(H,*)$ grupos.

1. Una función $\varphi\colon G \to H$ es un *homomorfismo* si para todo $g_1, g_2 \in G$ se cumple
$$\varphi(g_1 \circ g_2) = \varphi(g_1) * \varphi(g_2).$$
2. Una función $\varphi\colon G \to H$ es un *isomorfismo* si es un homomorfismo biyectivo.
3. Decimos que $(G,\circ)$ y $(H,*)$ son *isomorfos* si existe algún isomorfismo $\varphi\colon G \to H$.

Cuando dos grupos son isomorfos, podemos pensar que son "iguales", que son el mismo grupo, ya que sus elementos, aunque puedan ser objetos matemáticos de naturaleza distinta, se comportan del mismo modo respecto a sus respectivas operaciones,

Algunos ejemplos de estos conceptos son:

1. El conjunto $\mathbb{Z} = \{0,1,-1,2,-2,3,-3,\dots\}$ de los números enteros y la operación $+$ (suma) conforman un grupo, el elemento neutro del grupo es el 0 (cero) y el inverso de un entero n es $-n$. En particular, es un grupo abeliano.
2. El conjunto $\mathbb{Q}^\times = \left\{\frac{m}{n} \,\middle|\, m,n \in \mathbb{Z}, m \neq 0, n \neq 0\right\}$ de los números racionales no nulos y la operación $*$ (multiplicación) conforman un grupo, el elemento neutro del grupo es el 1 (uno) y el inverso del número $\frac{m}{n}$ es $\frac{n}{m}$. Este grupo también es abeliano.
3. El conjunto $2\mathbb{Z} = \{0,2,-2,4,-4,6,-6,\dots\}$ de los números enteros *pares* y la operación $+$ forman un subgrupo de $(\mathbb{Z},+)$. Además, $(\mathbb{Z},+)$ y $(2\mathbb{Z},+)$ son isomorfos, ya que la función $\varphi\colon \mathbb{Z} \to 2\mathbb{Z}$ dada por $\varphi(n) = 2n$ es un isomorfismo.
4. Todo grupo $(G,\circ)$ con elemento neutro e tiene el subgrupo $(\{e\},\circ)$, al que se le conoce como *grupo trivial*. Por ejemplo, $(\{0\},+)$ es el subgrupo trivial de $(\mathbb{Z},+)$ y $(\{1\},*)$ es un subgrupo trivial de $(\mathbb{Q}^\times,*)$.
5. Todos los grupos triviales son isomorfos: si $(\{e_1\},\circ)$ y $(\{e_2\},*)$ son los subgrupos triviales de dos grupos distintos, entonces la función $\varphi\colon \{e_1\} \to \{e_2\}$ dada por $\varphi(e_1) = e_2$ ciertamente es un isomorfismo. Esta observación nos permite hablar del "grupo trivial" sin especificar de qué grupo es subgrupo.

Notemos que en el ejemplo 1 el conjunto $\mathbb{Z}$ de los números enteros, que conforma el grupo, es un conjunto infinito. A los grupos cuyo conjunto asociado es infinito se les denomina *grupos infinitos*. Así, los grupos de los ejemplos 1 y 2 son abelianos e infinitos. Por otra parte, los grupos que tienen un conjunto asociado con un número finito de elementos se llaman *grupos finitos*. El grupo trivial es un grupo finito.
Dado un conjunto finito G, la expresión $|G|$ denota la *cardinalidad* de dicho conjunto, es decir, el número de elementos del conjunto G. Si, además, $(G,\circ)$ es un grupo para alguna operación binaria $\circ$, entonces a la cardinalidad $|G|$ se le denomina *orden del grupo* $(G,\circ)$. El concepto de *orden* se puede aplicar también a elementos de un grupo. Para esto, consideremos un grupo $(G,\circ)$ y sea $a \in G$. Definimos el *orden de* a, denotado como $ord(a)$, como el mínimo entero positivo n tal que $a^n = a \circ a \circ a \circ \ldots \circ a = e$. Si no existe tal n, decimos que a tiene orden infinito.

De ahora en adelante, para referirnos a un grupo mencionaremos únicamente el conjunto asociado a dicha dupla, obviando la operación de la misma. Por ejemplo, diremos "el grupo G" en lugar de "el grupo $(G,\circ)$".

El siguiente teorema es de amplia relevancia en los grupos finitos:

Teorema: Si G es un grupo finito y H es un subgrupo de G, entonces $|H|$ divide a $|G|$, es decir, $\frac{|G|}{|H|}$ es un número entero positivo.

Este teorema resulta de gran utilidad, pues restringe los tamaños que pueden tener los subgrupos de un grupo dado, por ejemplo, en un grupo de orden 8, solo podemos tener subgrupos de orden 1, 2, 4 u 8.

Definición. Sean G un grupo y X un subconjunto de G. El *subgrupo generado por* X, denotado $\langle X\rangle$, es el menor subconjunto de G que satisface:

1) $e \in \langle X\rangle$.
2) Si $g \in X$, entonces $g, g^{-1} \in \langle X\rangle$.
3) Si $g_1, g_2, \ldots, g_n \in \langle X\rangle$, entonces $g_1 \circ g_2 \circ g_3 \circ \ldots \circ g_n \in \langle X\rangle$.

Ahora, veamos algunas las familias de grupos finitos que son relevantes para nuestro estudio:

- Grupos cíclicos C_n. Grupos de orden n, abelianos y generados por un solo elemento g:
  $$C_n = \{e, g, g^2, \ldots, g^{n-1}\} = \langle g\rangle.$$
  En particular, podemos representar el grupo trivial como C_1.

- Grupos diédricos D_n. Grupos de orden $2n$ de simetrías de n-ágonos regulares, generados por dos elementos a y b que satisfacen además las siguientes condiciones:
  $$D_n = \langle\, a, b \mid a^n = b^2 = (ba)^2 = e \,\rangle.$$

- 4-grupo de Klein V_4. Es un grupo abeliano de cuatro elementos, cuyos elementos distintos del elemento identidad e tienen orden 2, es decir,
  $$V_4 = \{e, a, b, c \mid a^2 = b^2 = c^2 = e,\ ab = c\}.$$

La última familia relevante para nuestro estudio requiere una definición más detallada, que se presenta a continuación.

Grupos finitos de permutaciones

Sea $\mathbb{N}$ el conjunto de los números naturales, es decir, $\mathbb{N} = \{0,1,2,3,\ldots\}$. Identificaremos cada número natural n con el conjunto de números naturales menores que n. Por ejemplo, $5 = \{0,1,2,3,4\}$. De este modo, cada número natural n es también un conjunto y satisface $|n| = n$.

ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Definición. Sea X un conjunto no vacío.

1) Una *permutación de* X es una función biyectiva de X sobre sí mismo.
2) El conjunto S_X de todas las permutaciones de X junto con la composición de funciones $\circ: S_X \times S_X \to S_X$ forman el *grupo simétrico sobre* X.
3) Para todo $x \in X$ y todo $\sigma \in S_X$, la *órbita de* x *bajo la acción de* σ es el conjunto
$$Orb_\sigma(x) = \{\sigma^n(x) \mid n \in \mathbb{N}\}.$$

Si $X = \{x_0, x_1, \dots, x_{n-1}\}$ es un conjunto finito no vacío de n elementos, S_n y S_X son isomorfos, con el isomorfismo $\varphi: S_n \to S_X$ dado por $\varphi(n) = x_n$. Así, podemos pensar que S_n y S_X son el mismo grupo al identificar los elementos de X con los elementos de n: 0 con $x_0 = \varphi(0)$, 1 con $x_1 = \varphi(1)$, y así sucesivamente. Cuando $n \geq 3$, S_n no es abeliano.

Para todo $\sigma \in S_n$ y todo $i \in n$, $Orb_\sigma(i)$ es un *ciclo*, es decir, existe un número natural $k_i \in [1, n]$ tal que $\sigma^{k_i}(i) = i$. Si $k_i = 1$, decimos que i es un *punto fijo* de σ. Representamos cada σ como un producto de ciclos, omitiendo puntos fijos, utilizando la siguiente notación, que será explicada por medio de un ejemplo: consideremos el grupo S_9 y sea $\rho = (0\ 4\ 8\ 5)(3\ 7) \in S_9$. El ciclo $(0\ 4\ 8\ 5)$ representa $Orb_\rho(0)$ y el ciclo $(3\ 7)$ representa $Orb_\rho(3)$, es decir, esta notación indica, de manera muy breve y directa, que $\rho(0) = 4$, $\rho^2(0) = \rho(4) = 8$, $\rho^3(0) = \rho(8) = 5$ y $\rho^4(0) = \rho(5) = 0$, que $\rho(3) = 7$ y $\rho^2(3) = \rho(7) = 3$, y que, al haber sido omitidos, 1, 2 y 6 son los puntos fijos de ρ, por lo que , $\rho(1) = 1$, $\rho(2) = 2$ y $\rho(6) = 6$.

Un subgrupo relevante de S_n es el *subgrupo alternante* A_n, que consiste en todos los elementos de S_n cuyos ciclos tienen longitud par.

Finalmente, enunciamos un teorema que nos permitirá vincular las simetrías de los cristales con los grupos que hemos mencionado.

Teorema. Todo grupo G es isomorfo a un subgrupo de S_G.

Este teorema nos garantiza que cualquier grupo puede ser visto como un grupo de permutaciones. En particular, si G es finito de orden n, entonces es isomorfo a un subgrupo de S_n. Por ejemplo, C_n es isomorfo al subgrupo generado por la permutación $\rho = (0\ 1\ 2\ \cdots n-1) \in S_n$, y V_4 es isomorfo al subgrupo de S_8 que contiene a los siguientes elementos de orden 2: $(0\ 2)(1\ 3)(4\ 6)(5\ 7)$, $(0\ 5)(1\ 4)(2\ 7)(3\ 6)$ y $(0\ 7)(1\ 6)(2\ 5)(3\ 4)$.

La teoría de grupos y su relación con las moléculas

La teoría de grupos aplicado en las ciencias relacionadas con estructuras, como la química, geología o la mineralogía, permite conocer y predecir propiedades químicas y físicas, como:

- La quiralidad.
- La polaridad.
- Determinar los enlaces químicos y visualizar los orbitales moleculares.
- La absorción de la luz una polarización determinada y qué transiciones espectroscópicas pueden excitarse si lo hace.
- Los movimientos vibracionales de la molécula para la predicción de bandas en espectroscopia Raman e IR.

Al analizar moléculas, se les conoce como operación de simetría y cada operación de simetría tiene un elemento de simetría correspondiente, que es el eje, plano, línea o punto con respecto al cual se lleva a cabo la operación de simetría. El elemento de simetría está formado por todos los puntos que permanecen en la misma posición cuando se realiza la operación de simetría (Cotton & Wilkinson, 1996).

Una molécula puede presentar diferentes elementos de simetría y, mediante el uso de las matemáticas, estos pueden analizarse y relacionarse con la teoría de grupos, ya que cada operación de simetría corresponde a un elemento del grupo. La siguiente tabla describe la similitud entre elementos de simetría y teoría de grupo.

ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

***Tabla 1**. La teoría de grupos extrapolada a operaciones de simetría.*

Elemento de simetría	Símbolo	Operación de simetría asociada	Teoría de grupos	Descripción
Identidad	E	Identidad	Elemento identidad (e)	No produce ningún cambio en la molécula. Toda molécula posee este elemento de simetría.
Eje de rotación	C_n	Rotación de $360°/n$	Elemento generador de un grupo cíclico (C_n^k)	La molécula gira alrededor de un eje y permanece indistinguible de su configuración original.
Plano de simetría	σ	Reflexión	Elemento de orden 2 (involución)	La molécula se refleja respecto a un plano. Puede ser horizontal (σ_h), vertical (σ_v) o diagonal (σ_d).
Centro de inversión	i	Inversión	Elemento de orden 2 (involución)	Cada punto (x, y, z) se transforma en $(-x, -y, -z)$ con respecto a un punto central.
Eje de rotación impropia	S_n	Rotación impropia	Composición de operaciones $S_n = C_n\sigma_h$	Consiste en una rotación de $360°/n$ seguida de una reflexión en un plano perpendicular al eje de rotación.

Los movimientos se pueden describir como operaciones de simetría propias, que son las que pueden llevarse a cabo físicamente sobre una molécula (la identidad y las rotaciones (C_n)) y las operaciones de simetría impropias que corresponden a las reflexiones, las inversiones y las rotaciones impropias solo pueden concebirse de manera abstracta. Estas operaciones derivan en grupos puntuales descritos con detalle más adelante.

La extrapolación de la teoría de grupos con la descripción geométrica de una molécula puede llevarse a cabo mediante dos notaciones. Una de ellas es la notación de Schönflies y es la preferida en química molecular debido a que considera a una molécula como un conjunto de átomos finitos y la segunda es la notación de Hermann–Mauguin, donde se consideran a los cristales como patrones infinitos en tres dimensiones, esta es la estándar internacional en cristalografía para describir tanto grupos puntuales como grupos espaciales (Vallance, 2022).

En primer lugar, la notación de Schönflies apoya en la descripción de operaciones aplicadas a una molécula y se utiliza en la descripción geométrica de las estructuras de Lewis y las moléculas generadas en la química de coordinación. En este sentido, la química de coordinación describe moléculas conocidas como complejo, los cuales están formados por un átomo o ion metálico central (que actúa como ácido de Lewis) rodeado por un grupo de moléculas o iones llamados *ligandos* (que actúan como bases de Lewis). Estas moléculas toman determinadas estructuras de ordenamiento debido al número de coordinación.

El número de coordinación es la cantidad exacta de átomos donadores de los ligandos que están unidos directamente al metal central. Esto determina la geometría del complejo (lineal, tetraédrica, octaédrica, entre otras). Lo anterior se puede ejemplificar en la Figura 1, donde los conjuntos finitos determinan estructuras geométricas simples con operaciones limitadas al ordenamiento donde a) es estructura de Lewis y b) un complejo con número de coordinación de 6 (Hurlbut, 1978, Huheey et al., 1997).

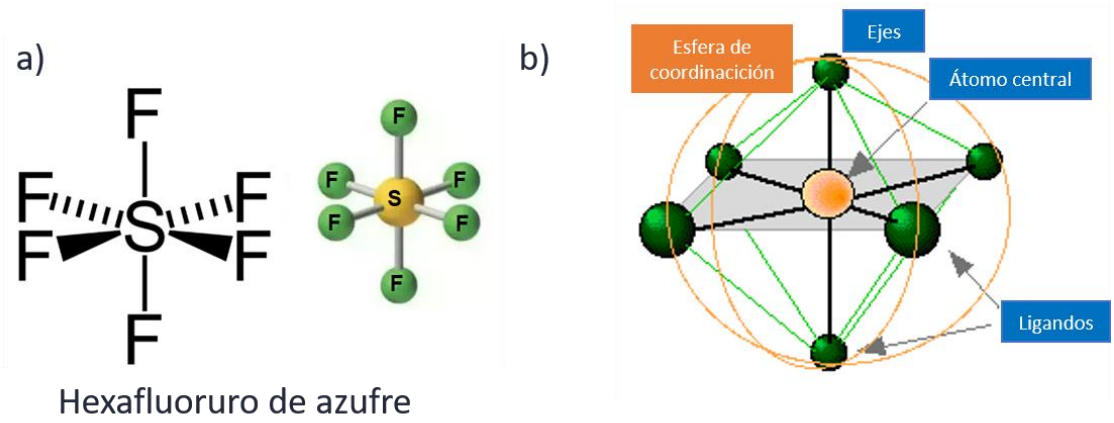


Figura 1. Moléculas consideradas conjuntos finitos.

Las moléculas descritas como grupos finitos de átomos no presentan complicaciones en sus estructuras debido a que el número de coordinación determina el número de átomos o iones vecinos más próximos que rodean directamente al átomo central dentro de la estructura y por ende, las operaciones de simetría descritas con la notación de Schönflies y la extrapolación a la teoría de grupos. Sin embargo, no hay que olvidar que se pueden encontrar hasta 32 grupos puntuales. En la siguiente tabla se describen algunos ejemplos de la equivalencia entre notaciones y como puede extrapolarse a la teoría de grupos, relacionada con las operaciones y geometría aplicadas a moléculas. En secciones posteriores del texto se describe la fundamentación de la cristalografía y la notación Hermann–Mauguin (Vallance, 2022).

***Tabla 2**. "Equivalencia geométrica" entre Schönflies y Hermann-Mauguin.*

Sistema cristalino	Schönflies	Hermann-Mauguin	Descripción
Triclínico	C_1	1	Sólo la identidad (E); no posee otros elementos de simetría.
	C_i	$\bar{1}$	Centro de inversión (i).
Monoclínico	C_2	2	Un eje de rotación de orden 2 (C_2).
	C_s	m	Un plano de simetría (σ).
	C_{2h}	$2/m$	Un eje C_2, un plano espejo perpendicular y un centro de inversión.
Ortorrómbico	D_2	222	Tres ejes de rotación C_2 mutuamente perpendiculares.
	C_{2v}	$mm2$	Un eje C_2 y dos planos espejo verticales.
	D_{2h}	mmm	Tres ejes C_2, tres planos espejo y un centro de inversión.

En los ejemplos anteriores se han descrito moléculas como conjuntos finitos. Sin embargo, para determinar las estructuras más complejas como ocurre en los minerales, es necesario comprender la fundamentación de la organización de la materia en tres dimensiones. En la siguiente sección se describe la fundamentación básica.

Fundamentos cristalográficos: redes de Bravais, simetría y grupos cristalográficos

Cristalografía y organización interna de los cristales

La cristalografía es la disciplina que estudia la forma, la estructura interna y la simetría de los cristales. Aunque a simple vista un cristal puede reconocerse por sus caras planas o por su apariencia geométrica, su característica principal se encuentra a escala microscópica: sus átomos, iones o moléculas están organizados de manera ordenada y repetitiva en el espacio. Por esta razón, la forma externa de un cristal puede entenderse como una expresión visible de su estructura interna (Nesse, 2017; Wenk & Bulakh, 2016).

Esta organización no solo define la geometría del cristal, sino también muchas de sus propiedades físicas. La dureza, la exfoliación, la conductividad eléctrica, el comportamiento óptico y la manera en que un mineral se rompe dependen, en gran medida, de cómo están acomodadas sus partículas internas. Así, la cristalografía permite relacionar la estructura microscópica de un material con propiedades que pueden observarse o medirse a escala macroscópica.

Red cristalina, motivo y celda unitaria

Para describir el orden interno de los cristales se utiliza el concepto de red cristalina. Una red cristalina puede imaginarse como un conjunto ideal de puntos que se repiten periódicamente en las tres dimensiones del espacio. Cada punto posee un entorno equivalente al de los demás, por lo que representa una posición estructural repetida dentro del cristal.

Sin embargo, la red por sí sola es solo un modelo geométrico. Para formar una estructura cristalina real, a cada punto de la red se le asocia un motivo, que puede ser un átomo, un ion, una molécula o un grupo de ellos. En palabras sencillas, la red indica dónde se repite algo, mientras que el motivo indica qué es lo que se repite. La combinación de red y motivo da como resultado la estructura cristalina completa (Wenk & Bulakh, 2016).

La parte más pequeña que, al repetirse, permite construir todo el cristal se llama celda unitaria. Esta celda funciona como un módulo básico que se desplaza en diferentes direcciones para generar la estructura completa. Se describe mediante tres ejes cristalográficos, llamados a, b y c, y tres ángulos entre ellos, llamados α, β y γ. La relación entre estos ejes y ángulos permite clasificar los cristales en distintos sistemas cristalinos (Aroyo, 2016).

Sistemas cristalinos y redes de Bravais

Los sistemas cristalinos son categorías que describen la geometría básica de la celda unitaria. En cristalografía se reconocen siete sistemas: isométrico, tetragonal, ortorrómbico, hexagonal, trigonal, monoclínico y triclínico. El sistema cúbico tiene tres ejes iguales y perpendiculares; el tetragonal tiene dos ejes iguales y uno diferente; el ortorrómbico posee tres ejes distintos, pero todos perpendiculares; el hexagonal presenta una geometría con 120° en el plano basal; el trigonal se caracteriza por un eje principal de orden tres; el monoclínico tiene un ángulo oblicuo; y el triclínico posee la menor simetría, ya que sus ejes y ángulos son diferentes (Nesse, 2017).

Aunque los sistemas cristalinos describen la forma general de la celda, también es necesario considerar cómo se distribuyen los puntos dentro de ella. Para ello se emplean las redes de Bravais, que representan todas las formas geométricamente posibles e independientes en que una red puede repetirse en tres dimensiones.

En total existen 14 redes de Bravais, derivadas de la combinación entre los siete sistemas cristalinos y los distintos tipos de centrado (Aroyo, 2016).

El centrado indica en qué posiciones aparecen puntos equivalentes dentro de la celda. Una celda primitiva, simbolizada con P, tiene puntos solo en los vértices; una celda centrada en el cuerpo, simbolizada con I, añade un punto en el centro; una celda centrada en las caras, simbolizada con F, contiene puntos en cada cara; una celda centrada en una base, simbolizada con A, B o C, añade puntos en un par de caras opuestas; y la red romboédrica, simbolizada con R, se utiliza en ciertas estructuras del sistema trigonal. De esta manera, el sistema cristalino describe la geometría de la celda, mientras que la red de Bravais describe la forma en que los puntos equivalentes se repiten dentro de ella.

Simetría cristalina: elementos y operaciones

Además de la repetición espacial, los cristales se clasifican por su simetría. En términos generales, la simetría es la propiedad que permite mover una figura o estructura sin que su apariencia cambie. Por ejemplo, si una figura se gira y después del giro se ve igual, posee simetría rotacional. En los cristales, esta simetría no se limita a la forma externa, sino que también refleja el orden interno de sus componentes (Putnis, 1992).

Los principales elementos de simetría son los ejes, los planos y los centros. Un eje de simetría es una línea alrededor de la cual puede girarse la estructura para obtener una posición equivalente. Un plano de simetría es una superficie imaginaria que divide al cristal en dos partes relacionadas como un objeto y su reflejo en un espejo. Un centro de simetría es un punto que relaciona posiciones opuestas dentro de la estructura: por cada punto existe otro equivalente al lado contrario y a la misma distancia.

Las operaciones de simetría más importantes son la rotación, la reflexión, la inversión y la rotoinversión. La rotación consiste en girar el cristal alrededor de un eje. En cristales periódicos solo son posibles los ejes de orden 1, 2, 3, 4 y 6, porque estos permiten llenar el espacio de manera repetitiva. El número del eje indica cuántas veces la estructura coincide consigo misma durante una vuelta completa de 360°: el eje 2 repite cada 180°, el 3 cada 120°, el 4 cada 90° y el 6 cada 60°. La reflexión ocurre mediante un plano espejo; la inversión relaciona puntos opuestos respecto a un centro; y la rotoinversión combina una rotación con una inversión posterior (Aroyo, 2016; Nesse, 2017).

Grupos puntuales y notación Hermann-Mauguin

Cuando se reúnen todas las operaciones de simetría que mantienen fijo al menos un punto del cristal, se obtiene un grupo puntual. Estos grupos no consideran traslaciones, es decir, no describen todavía cómo se repite la celda en el espacio, sino únicamente la simetría local u orientacional. En cristalografía existen 32 grupos puntuales, también conocidos como clases cristalinas, que representan todas las combinaciones posibles de rotaciones, reflexiones, inversiones y rotoinversiones compatibles con la periodicidad cristalina (Aroyo, 2016).

Para nombrarlos se utiliza principalmente la notación de Hermann–Mauguin. Esta notación funciona como un lenguaje abreviado de la simetría. Los números 1, 2, 3, 4 y 6 indican ejes de rotación. El 1 representa una coincidencia después de 360°; el 2, cada 180°; el 3, cada 120°; el 4, cada 90°; y el 6, cada 60°. Estos números no indican necesariamente cuántas caras visibles tiene el cristal, sino cuántas posiciones equivalentes aparecen durante una vuelta completa.

La letra m proviene de mirror, “espejo” en inglés, y representa un plano de reflexión. Una barra sobre un número, como $\bar{1}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$ o $\bar{6}$, indica una rotoinversión; en particular, $\bar{1}$ equivale a un centro de inversión. La diagonal / expresa una relación perpendicular entre elementos de simetría. Por ejemplo, $2/m$ significa que existe un eje binario acompañado por un plano espejo perpendicular a él. En símbolos como 222, cada número representa un eje binario en una dirección distinta; en mmm, las tres letras indican tres planos espejo orientados en direcciones diferentes y perpendiculares entre sí.

Los 32 grupos puntuales se distribuyen entre los siete sistemas cristalinos de la siguiente manera: en el sistema triclínico se encuentran 1 y $\bar{1}$; en el monoclínico, 2, m y $2/m$; en el ortorrómbico, 222, $mm2$ y mmm;

VOLUMEN 48
XXXI Verano De la Ciencia
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

en el tetragonal, 4, $\bar{4}$, $4/m$, 422, $4mm$, $\bar{4}\,2m$ y $4/mmm$; en el trigonal, 3, $\bar{3}$, 32, $3m$ y $\bar{3}m$; en el hexagonal, 6, $\bar{6}$, $6/m$, 622, $6mm$, $\bar{6}\,m2$ y $6/mmm$; y en el isométrico, 23, $m\bar{3}$, 432, $\bar{4}\,3m$ y $m\bar{3}\,m$. Esta clasificación es importante porque ciertas propiedades físicas, como la piezoelectricidad o algunos comportamientos ópticos, dependen directamente de la simetría puntual del cristal.

Grupos espaciales y simetría tridimensional

Para describir completamente un cristal no basta con conocer su grupo puntual, ya que los cristales están formados por celdas que se repiten periódicamente en el espacio. Cuando las operaciones puntuales se combinan con las traslaciones de la red cristalina, se obtiene el concepto de grupo espacial. Los grupos espaciales describen la simetría tridimensional completa de un cristal, incluyendo tanto la orientación de sus elementos de simetría como la forma en que estos se repiten de una celda a otra (Cullity & Stock, 2014; Aroyo, 2016).

Los grupos espaciales también incorporan operaciones que no aparecen en los grupos puntuales, como los ejes helicoidales y los planos de deslizamiento. Un eje helicoidal combina una rotación con un desplazamiento paralelo al eje; por ejemplo, 2_1 representa una rotación de 180° acompañada por una traslación de media celda. Un plano de deslizamiento combina una reflexión con una traslación paralela al plano. Estas operaciones permiten relacionar posiciones equivalentes ubicadas en celdas vecinas.

En total existen 230 grupos espaciales tridimensionales. Estos surgen de combinar las 14 redes de Bravais, los 32 grupos puntuales y las operaciones con traslación. Su importancia es fundamental en técnicas como la difracción de rayos X, porque permiten interpretar patrones de difracción, identificar fases minerales, determinar parámetros de celda y reconstruir la posición de los átomos dentro de una estructura cristalina (Cullity & Stock, 2014).

Metodología

Si una celda unitaria tiene n vértices y los enumeramos del 0 al $n-1$, entonces cualquier operación de simetría que le apliquemos corresponde a un elemento de S_n. Por ejemplo, consideremos la celda unitaria del sistema trigonal, que es un prisma cuyas caras superior e inferior son triángulos equiláteros y sus caras laterales son rectángulos. Este prisma tiene 6 vértices, que procedemos a enumerar del 0 a 5. Sea $\rho = (0\ 1\ 2)(3\ 4\ 5)$. Al aplicar ρ a la enumeración de los vértices obtenemos una rotación del prisma de 120° en sentido de las manecillas del reloj, como se muestra en la Figura 2. Esta rotación corresponde a una isometría directa o movimiento rígido de orden 3 de esta celda unitaria.

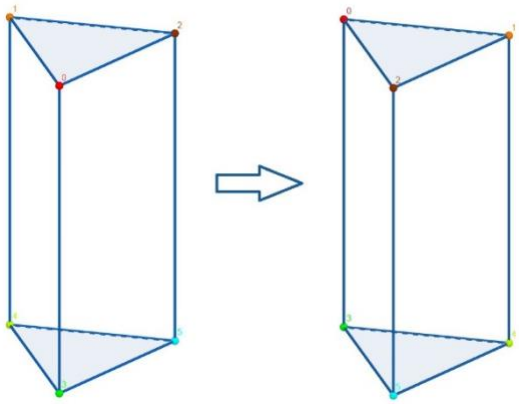


Figura 2. Rotación de 120° generada por la permutación $\rho = (0\ 1\ 2)(3\ 4\ 5)$.

VOLUMEN 48
XXXI Verano De la Ciencia
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Si, en cambio, consideramos la permutación $\mu = (0\ 3)(1\ 4)(2\ 5)$, al aplicarla a los vértices del prisma obtenemos una reflexión de "espejo" respecto a un plano que pasa por la mitad del prisma y es paralelo a las caras triangulares, como se muestra en la Figura 3. Esta reflexión, de orden 2, no corresponde a un movimiento rígido del prisma.

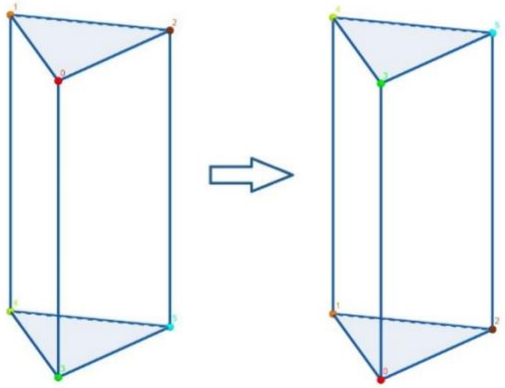


Figura 3. Reflexión respecto a un plano generada por la permutación $\mu = (0\ 3)(1\ 4)(2\ 5)$.

Después de la etapa documental de este proyecto, se obtuvieron modelos de las celdas unitarias y de todas las clases pertenecientes a cada uno de los siete sistemas cristalinos en el sitio web https://webmineral.com/help/Forms.shtml, se imprimieron en papel opalina y se ensamblaron (Figura 4 a Figura 10), todo esto con la finalidad de analizar las simetrías de los modelos cristalinos. Disponer de estas figuras facilitó su análisis para determinar sus grupos de movimientos rígidos.

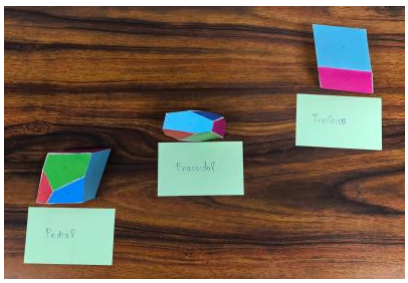


Figura 4. Modelos del sistema triclínico.

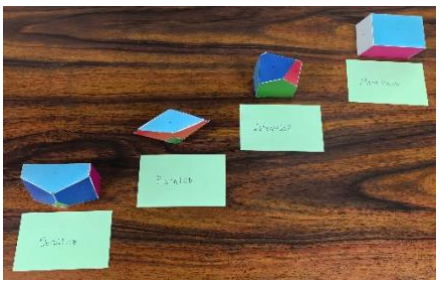


Figura 5. Modelos del sistema monoclínico.

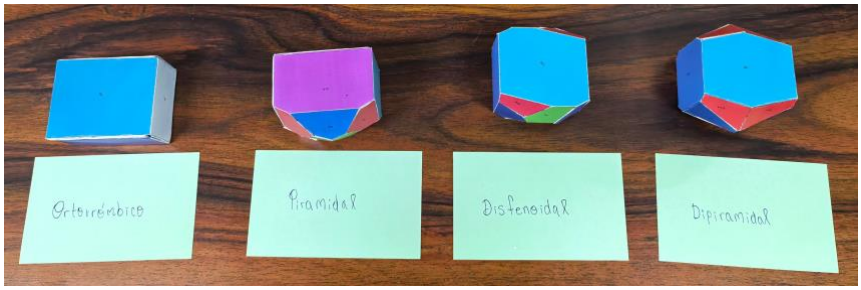


Figura 6. Modelos del sistema ortorrómbico.

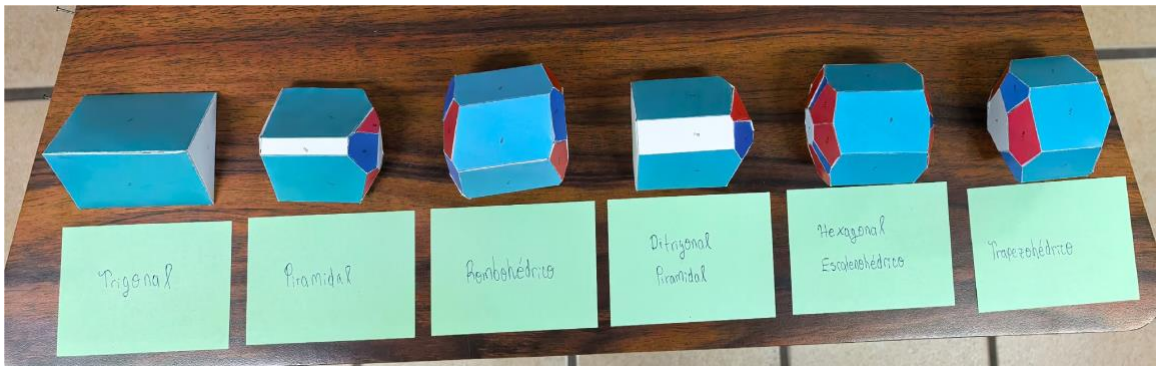


Figura 7. Modelos del sistema trigonal.



Figura 8. Modelos del sistema tetragonal.

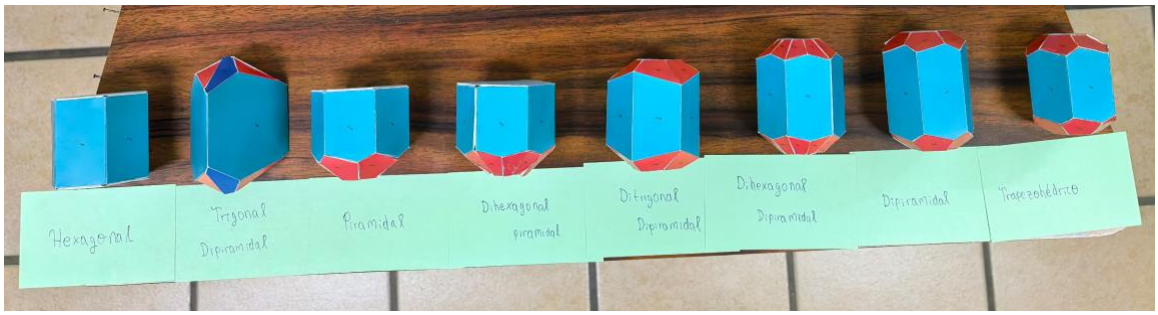


Figura 9. Modelos del sistema hexagonal.

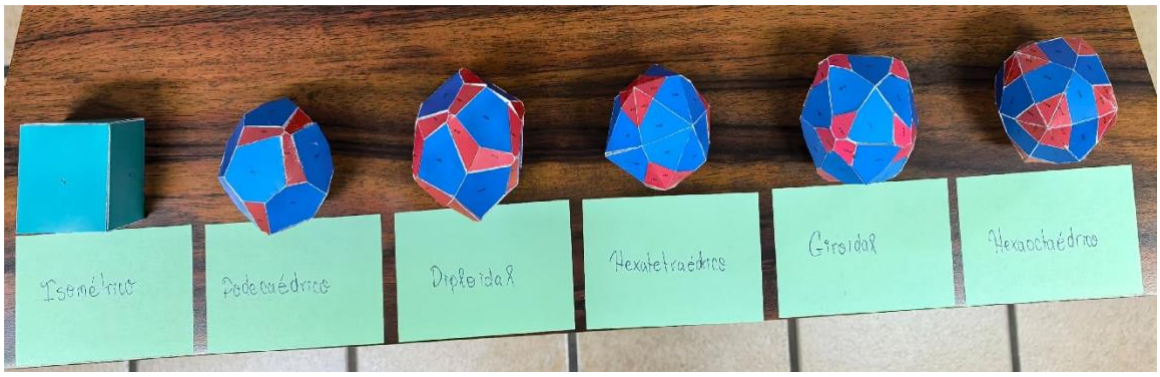


Figura 10. Modelos del sistema isométrico.

Resultados

Por medio de la inspección directa de los modelos de papel construidos (Figura 4 a Figura 10) se determinaron los grupos de movimientos rígidos de cada sistema cristalino y sus clases. Los resultados se presentan a continuación (Tabla 3 a Tabla 9).

***Tabla 3**. Sistema triclínico.*

Clase	Grupo asociado
Celda unitaria	C_1
Pedial	C_1
Pinacoidal	C_1

***Tabla 4**. Sistema monoclínico.*

Clase	Grupo asociado
Celda unitaria	C_2
Domático	C_1
Esfenoidal	C_2
Prismático	C_2

***Tabla 5**. Sistema trigonal.*

Clase	Grupo asociado
Celda unitaria	D_3
Piramidal	C_3
Romboédrico	C_3
Ditrigonal Piramidal	C_3
Trapezoédrico	D_3
Hexagonal Escalenoédrico	D_3

***Tabla 6**. Sistema ortorrómbico.*

Clase	Grupo asociado
Celda unitaria	V_4
Piramidal	C_2
Disfenoidal	V_4
Dipiramidal	V_4

***Tabla 7**. Sistema hexagonal.*

Clase	Grupo asociado
Celda unitaria	D_6
Trigonal Dipiramidal	C_3
Piramidal	C_6
Dipiramidal	D_6
Ditrigonal Dipiramidal	D_3
Dihexagonal Piramidal	C_6
Trapezoédrico	C_6
Dihexagonal Dipiramidal	D_6

***Tabla 8**. Sistema tetragonal.*

Clase	Grupo asociado
Celda unitaria	D_4
Disfenoidal	C_2
Piramidal	C_4
Dipiramidal	C_4
Escalenoédrico	V_4
Ditetragonal Piramidal	C_4
Trapezoédrico	D_4
Ditetragonal Dipiramidal	D_4

***Tabla 9**. Sistema isométrico.*

Clase	Grupo asociado
Celda unitaria	S_4
Dodecaédrico	A_4
Diploidal	A_4
Hextetraédrico	A_4
Giroidal	S_4
Hexoctaédrico	S_4

Conclusiones

Los resultados obtenidos muestran que los grupos de movimientos rígidos asociados a las celdas unitarias caracterizan a su sistema cristalino, ya que cada clase de un sistema cristalino tiene asociado el mismo grupo asociado a su celda unitaria o un subgrupo de éste, y cada una de estas siete celdas tiene un grupo asociado distinto. Es por esto que la clasificación propuesta en este trabajo está basada en los grupos asociados a las celdas unitarias de cada sistema cristalino:

1) Triclínico: C_1
2) Monoclínico: C_2
3) Trigonal: D_3
4) Ortorrómbico: V_4
5) Hexagonal: D_6
6) Tetragonal: D_4
7) Isométrico: S_4

Llevar a cabo un análisis similar para proponer una clasificación de los sistemas cristalinos con base en los grupos completos de simetría resulta bastante más complicado y probablemente requiera herramientas computacionales que permitan analizar la complejidad de los grupos espaciales y de sus relaciones de subgrupos.

Bibliografía/Referencias

Aroyo, M. I. (Ed.). (2016). *International tables for crystallography* (Vol. A, 6th ed.): *Space-group symmetry*. Wiley.

Cotton, F. A., & Wilkinson, G. (1996). *Química inorgánica básica*. Limusa.

Cullity, B. D., & Stock, S. R. (2014). *Elements of X-ray diffraction* (3rd ed.). Pearson.

De León, M., & Timón, A. (2016). *Las matemáticas de los cristales*. Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC).

Dummit, D. S., & Foote, R. M. (2003). *Abstract algebra* (3rd ed.). John Wiley & Sons.

García Ruiz, J. M. (2015). *Cristales. Un mundo por descubrir*. Consejo Superior de Investigaciones Científicas.

Hilton, H. (1908). *Mathematical crystallography and the theory of groups of movements*. Clarendon Press. https://archive.org/details/mathematicalcry03hiltgoog/page/n4/mode/2up

Huheey, J. E., Keiter, E. A., & Keiter, R. L. (1997). *Química inorgánica: Principios de estructura y reactividad* (4.ª ed.). Alfaomega.

Hurlbut, C. S. (1978). *Manual de mineralogía de Dana* (2.ª ed.). Editorial Reverté.

Marcos, C. (2022). *Crystallography. Introduction to the Study of Minerals*. Springer.

Nesse, W. D. (2017). *Introduction to mineralogy* (3rd ed.). Oxford University Press.

Ohl, B. (2022). *Miller indices for crystal directions and planes*. MSE Student. https://msestudent.com/miller-indices/

Oxford Instruments. (s. f.). *Basic concepts of crystallography*. EBSD. https://www.ebsd.com/ebsd-explained/basic-concepts-of-crystallography

Peck, D., & Delventhal, E. (2021). *Miller indices*. Mindat. https://www.mindat.org/article.php/2727/Miller%2BIndices

Perkins, D. (2020). *Mineralogy*. Open Educational Resources. https://opengeology.org/Mineralogy/

Putnis, A. (1992). *Introduction to mineral sciences*. Cambridge University Press.

Tilley, R. J. D. (2006). *Crystals and crystal structures*. John Wiley & Sons.

Vallance, C. (2022). *Symmetry*. Chemistry LibreTexts. https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Symmetry_(Vallance)

Webmineral. (s. f.). *Crystal forms*. https://webmineral.com/help/Forms.shtml

Wenk, H.-R., & Bulakh, A. (2016). *Minerals: Their constitution and origin* (2nd ed.). Cambridge University Press.