



Curso “Cristalogénesis Biológica”:

Elementos de Simetría Cristalina

María Eugenia Mendoza Álvarez

Instituto de Física – BUAP

Viernes 18 de mayo de 2012

Contenido

- Conceptos básicos
- Simetría cristalina
- Formas cristalinas
- Hábito
- Polimorfos de lizosima

Conceptos básicos

- Simetría*
- Visión general: proporción, balance, armonía

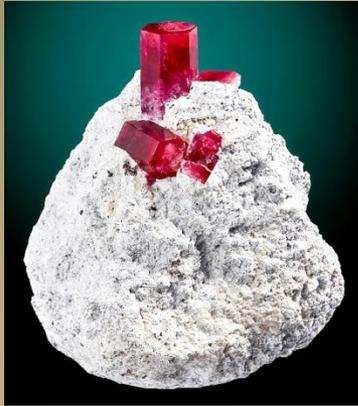


belleza



Belleza mineral

Berilo



Calcita/Fluorita



Muscovita/Aguamarina



Esmeralda

- **Visión geométrica***

Estudio de las *propiedades del espacio* que son *invariantes* bajo un *grupo* dado de *transformaciones*.



Espacio: *1D* *2D* *3D*

*Evariste Galois(1811-1832), Felix Klein (1849-1925)

Objeto simétrico

- Posee al menos dos orientaciones indistinguibles (invariantes)



- El intercambio de las orientaciones del objeto se realiza mediante **rotaciones, reflexiones o inversiones**



- La simetría del objeto se define en términos de **elementos de simetría y operaciones de simetría**

Transformaciones asociadas a la invariancia: elementos y operaciones de simetría

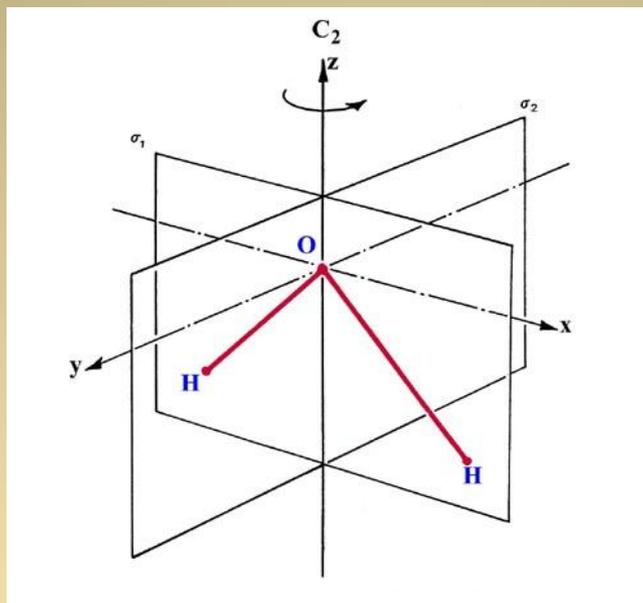
- Elemento de simetría: Entidad geométrica (puntos, líneas y planos) respecto de los cuales se realiza la operación de simetría asociada.
- Operación de simetría: Movimiento que realizado sobre un objeto conduce a una configuración indistinguible a la inicial.

Tabla de elementos de simetría puntual y su operación asociada

Elemento	Operación
El objeto mismo	Identidad
Punto: centro de inversión	Inversión
Línea: eje de rotación	Rotación
Plano: plano de reflexión (espejo)	Reflexión
Línea/reflexión: eje de rotación + espejo	Rotación seguida de Reflexión

Sitio interactivo recomendado: <http://symmetry.otterbein.edu/>

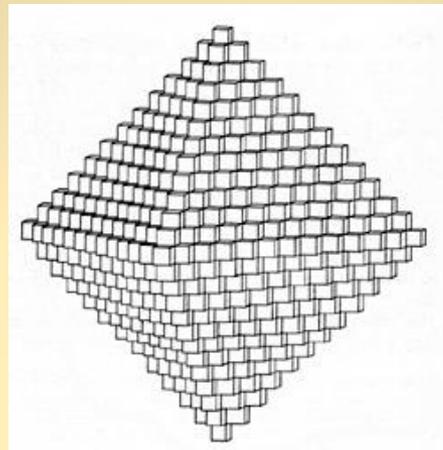
Ejemplo: elementos de simetría en la molécula del agua



C_2 eje de rotación de 180°
 σ_1 plano de reflexión 1
 σ_2 plano de reflexión 2
 $\sigma_1 \perp \sigma_2$

Simetría cristalina

- Cristal ideal: **arreglo periódico** de átomos, iones o moléculas en 3D
- La periodicidad o traslación es una característica fundamental en la descripción de un cristal.



Elementos de simetría asociados a la traslación

Ejes de rotación con traslación \rightarrow ejes helicoidales

Planos de reflexión con traslación \rightarrow planos con deslizamiento

EJES HELICOIDALES

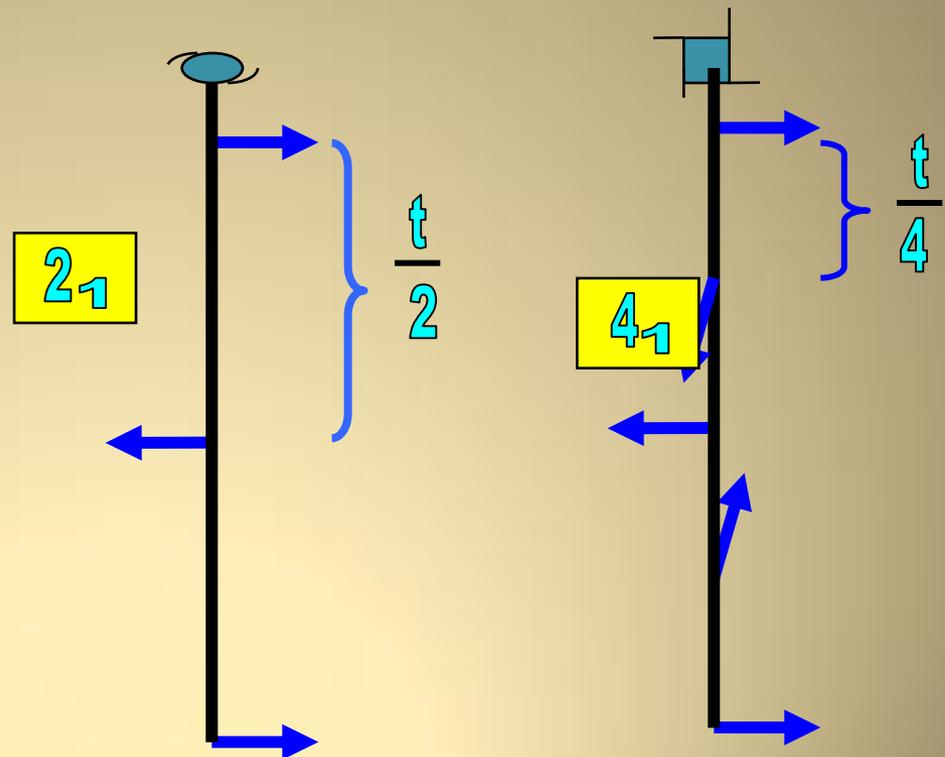
Elementos de simetría exclusivos del espacio tridimensional

Operación: rotación seguida de una traslación fraccionaria paralela al eje.

Símbolos de Hermann-Mauguin:

N_m donde
N es el orden del eje
m es el subíndice asociado
a la traslación

m/N traslación fraccionaria



Los ejes helicoidales y los planos con deslizamiento (Notación Hermann-Mauguin)

Los once ejes helicoidales

2_1

3_1

3_2

4_1

4_2

4_3

6_1

6_2

6_2

6_3

6_4

6_5

Los seis planos con deslizamiento

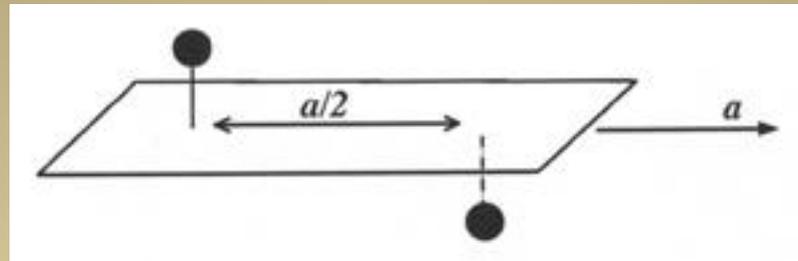
m

a b c

d

n

Plano con deslizamiento en la dirección a



ELEMENTOS DE SIMETRIA 3-D: EJE DE INVERSION (DE ROTOINVERSION O IMPROPIO)

(Consiste en la operación de giro seguida de una inversión)

En un medio periodico pueden existir ejes de inversion de orden 1 2 3 4 6

Elementos de simetría que operan en un plano y a partir de los cuales generamos los grupos puntuales planos



1 2 3 4 6 m

Elementos de simetría que operan en tres dimensiones y a partir de los cuales generamos los grupos puntuales tridimensionales

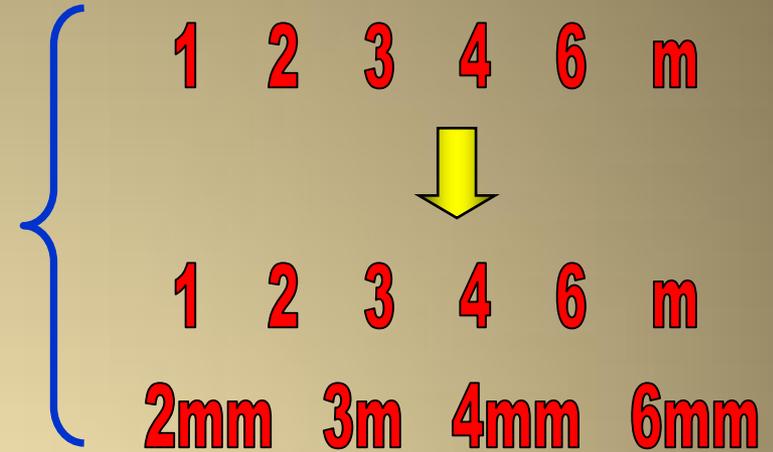


1 2 3 4 6 m i $\bar{3}$ $\bar{4}$ $\bar{6}$

GRUPOS PUNTUALES TRIDIMENSIONALES

Son las posibles combinaciones de los elementos de simetría compatibles con el medio periódico que pueden operar en tres dimensiones

Antes con los elementos de simetría que operan en un plano formamos los grupos puntuales planos



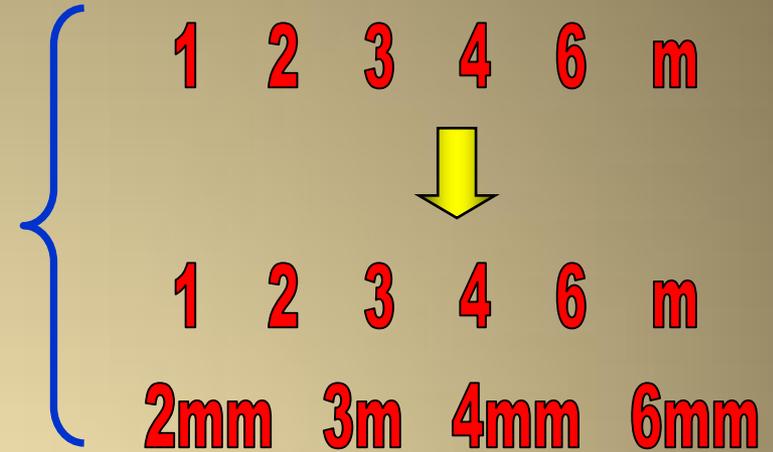
Del mismo modo con los elementos de simetría que operan en tres dimensiones podemos formar los grupos puntuales tridimensionales



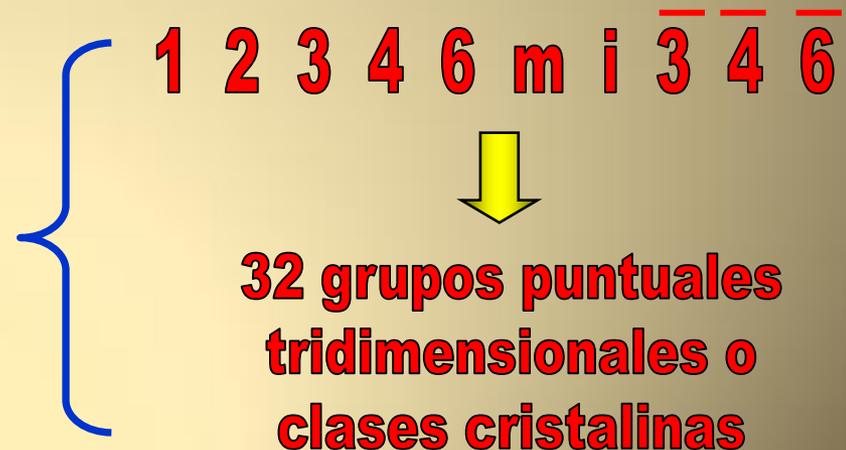
GRUPOS PUNTUALES TRIDIMENSIONALES

Son las posibles combinaciones de los elementos de simetría compatibles con el medio periódico que pueden operar en tres dimensiones

Antes con los elementos de simetría que operan en un plano formamos los grupos puntuales planos



Del mismo modo con los elementos de simetría que operan en tres dimensiones podemos formar los grupos puntuales tridimensionales



GRUPOS PUNTUALES TRIDIMENSIONALES

(CLASES CRISTALINAS)

SISTEMA CRISTALINO	SIN CENTRO	CON CENTRO
Triclinico	1	$\bar{1}$
Monoclinico	2, $\bar{2}$ (= m)	2/m
Ortorrombico c	222, 2mm	2/m 2/m 2/m
Tetragonal	4, $\bar{4}$, 422, 4mm, $\bar{4}2m$	4/m, 4/m 2/m 2/m
TRIGONAL O ROMBOEDRICO	3, 32, 3m	$\bar{3}$, $\bar{3}$ 2/m
Hexagonal	6, $\bar{6}$, 622, 6mm, $\bar{6}2m$	6/m, 6/m 2/m 2/m
Cubico c	23, 432, $\bar{4}3m$	2/m $\bar{3}$, 4/m $\bar{3}$ 2/m

LAS 32 CLASES DE CRISTALINAS O DE SIMETRIA SE CLASIFICAN EN SIETE SISTEMAS CRISTALINOS QUE AGRUPON A LAS CLASES QUE POSEEN DETERMINADOS ELEMENTOS DE SIMETRIA

Triclinico *Clases que poseen como minimo un eje monario y como maximo un centro*

Monoclinico *Clases que poseen como minimo un elemento de simetria binaria y como maximo dos.*

Ortorrombico *Poseen como mínimo tres elementos de simetría binaria y como máximo seis*

TRIGONAL O ROMBOEDRICO *Las que poseen un eje ternario*

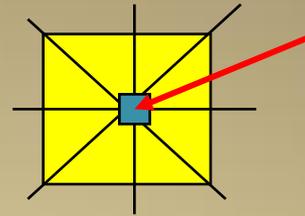
Hexagonal *Las que poseen un eje senario*

Cubico *Las que poseen cuatro ejes ternarios*

GRUPOS PUNTUALES TRIDIMENSIONALES

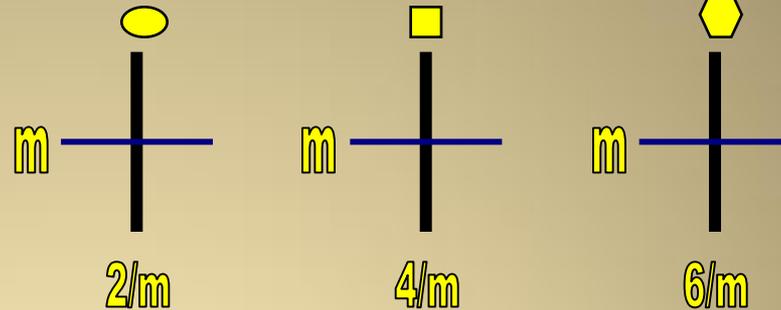
(CONTINUACION)

La palabra puntual indica que todos los elementos de simetría convergen en un punto



Punto en que convergen los elementos de simetría y que permanece inmóvil

La expresión $2/m$, $4/m$, $6/m$ indica que existe un plano de simetría perpendicular a un eje binario, cuaternario o senario respectivamente



Dentro de cada sistema hay una clase que posee el máximo número de elementos de simetría. A esta clase se la llama

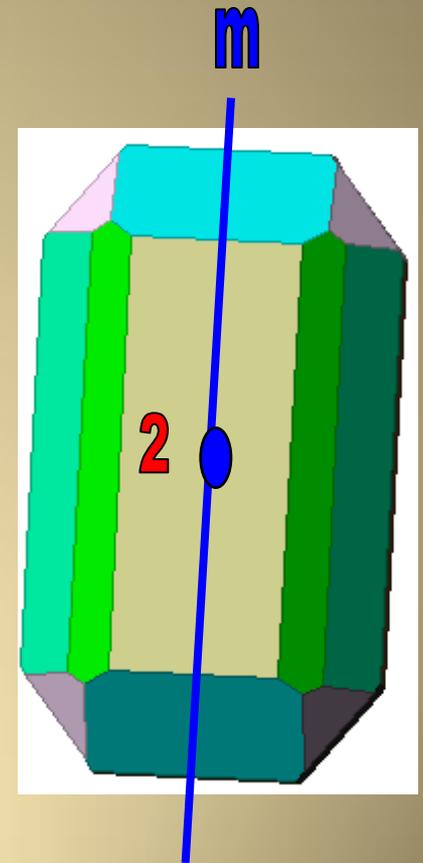
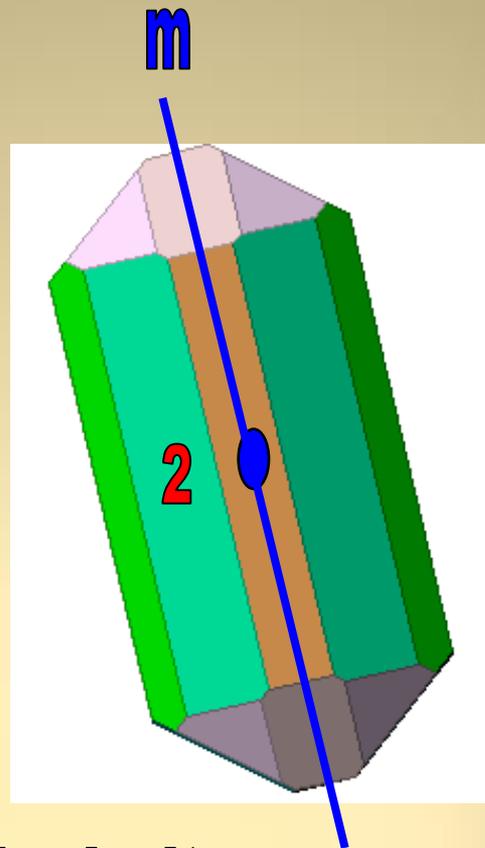
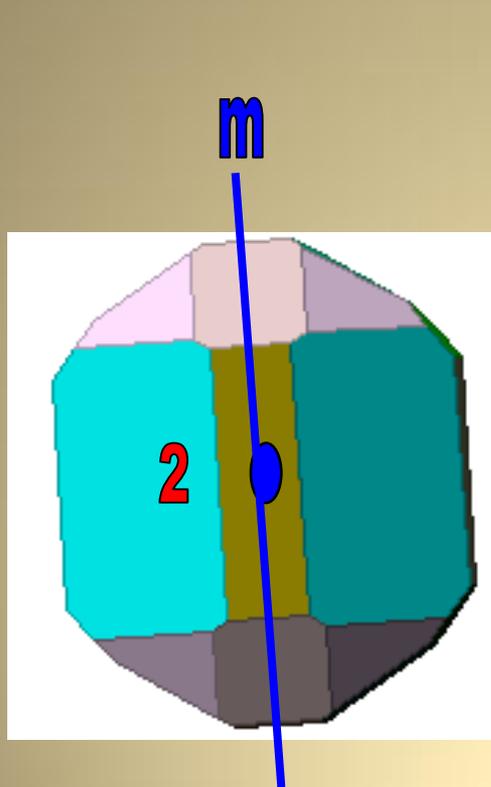
HOLOEDRIA

Ejemplos: Rombico $2/m$ $2/m$ $2/m$ Tetragonal $4/m$ $2/m$ $2/m$

CLASES CRISTALINAS

BIPIRAMIDE ROMBICA

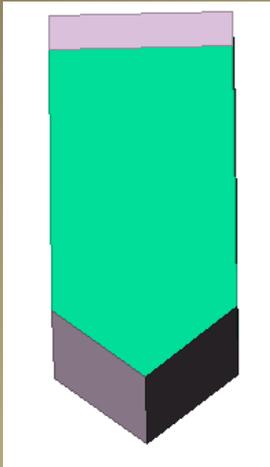
Clase $2/m \ 2/m \ 2/m$



ejemplo: **Anglesita**

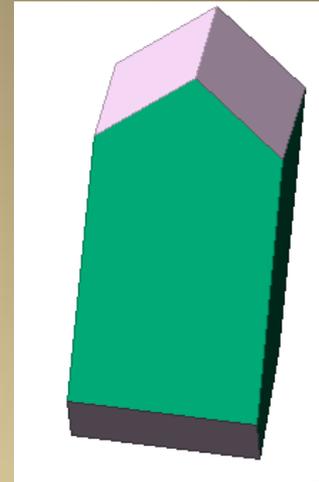


CLASES CRISTALINAS

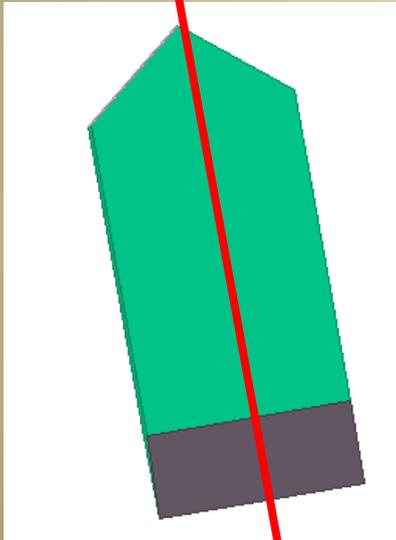


CLASE 2mm

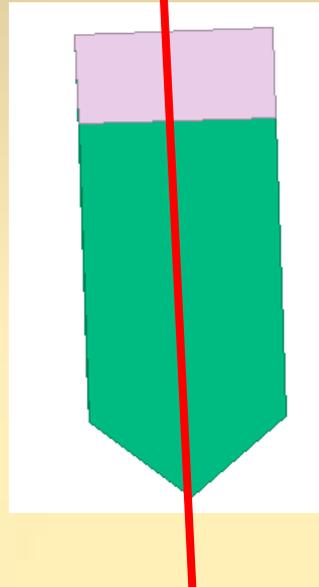
Prisma Rombico



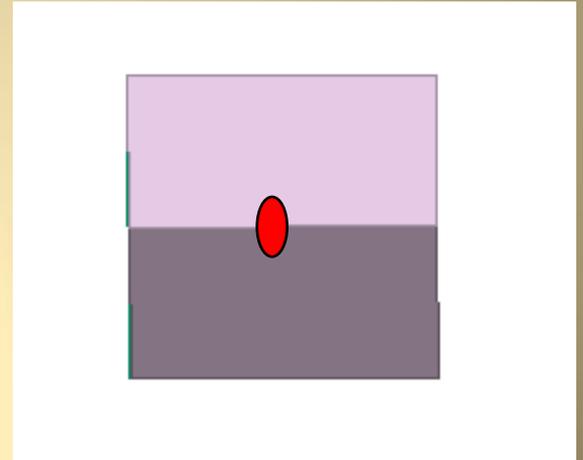
m



m



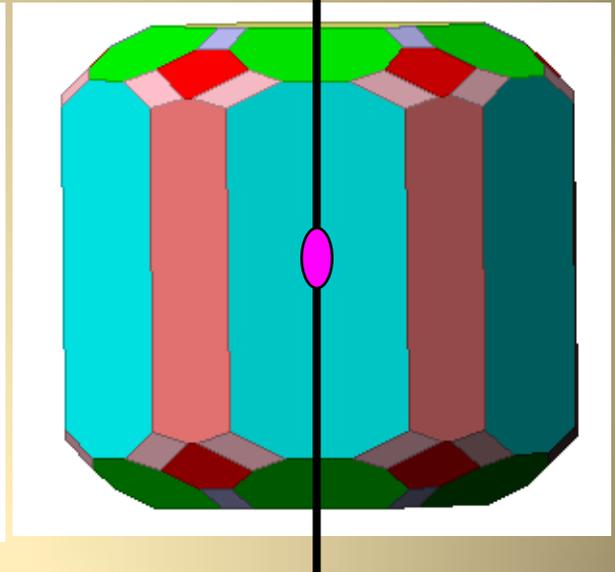
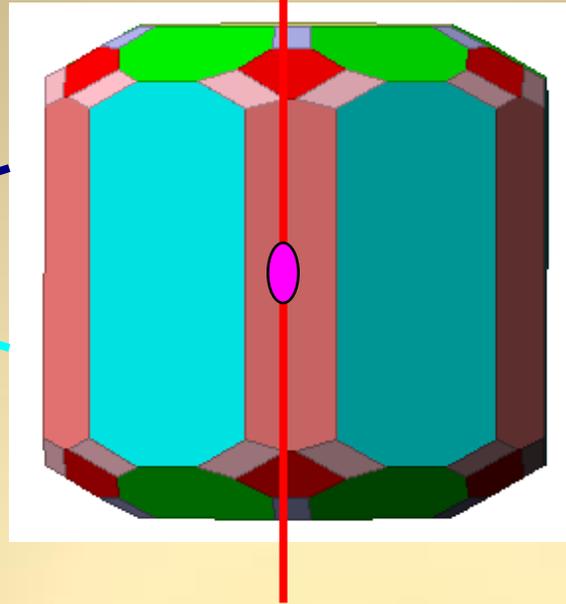
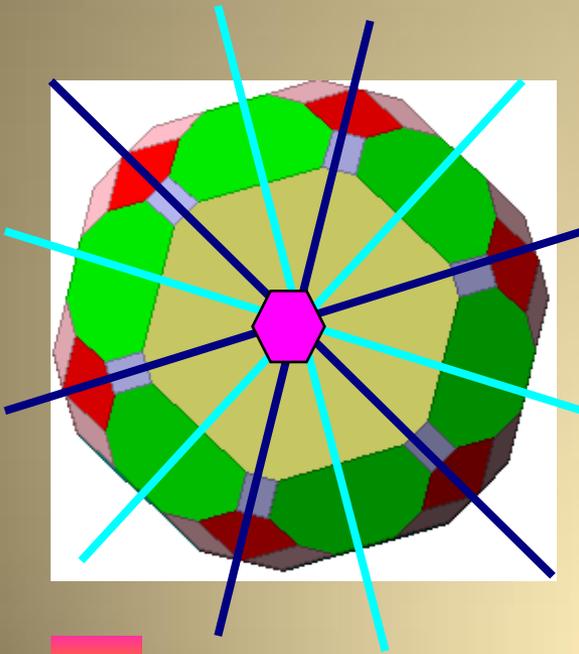
2



CLASES CRISTALINAS

CLASE $6/m \ 2/m \ 2/m$

Bipiramide hexagonal



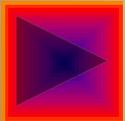
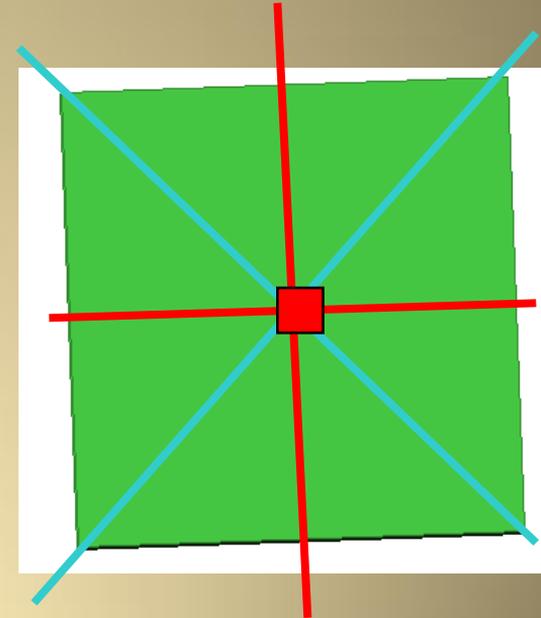
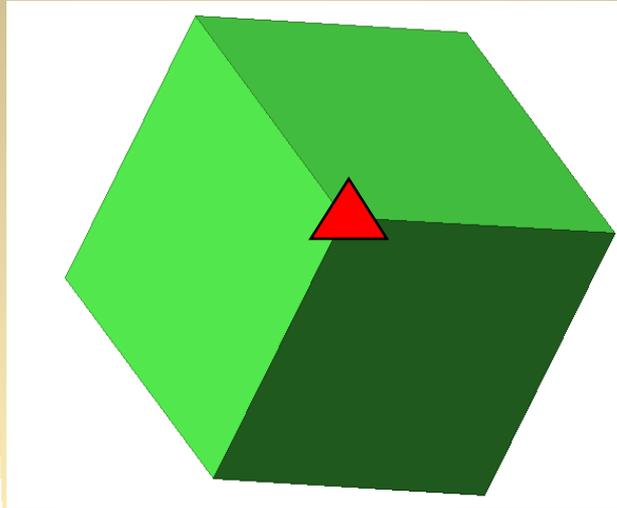
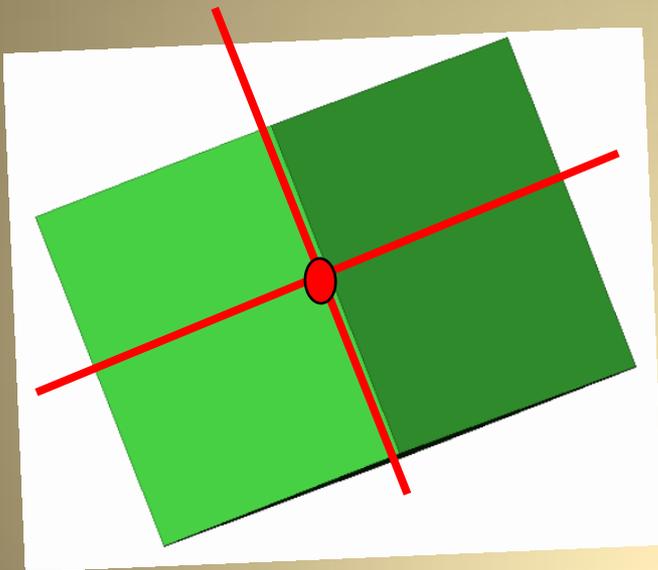
ejemplo: **Berilo**



CLASES CRISTALINAS

CLASE $4/m\bar{3}2/m$

CUBO



ejemplo: **GALENA**

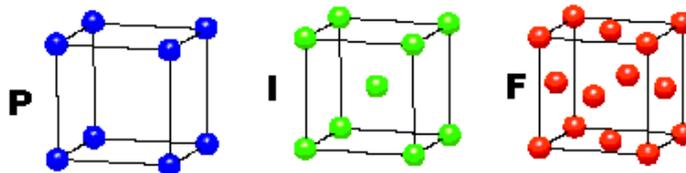
LAS CATORCE REDES TRIDIMENSIONALES DE BRAVAIS

Con sus longitudes y ángulos axiales, agrupadas en los siete sistemas cristalinos (representan sus holloedrias)

CUBICO

$$a = b = c$$

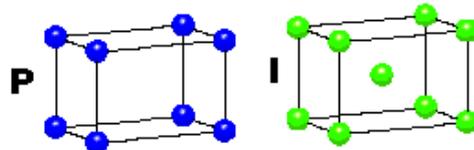
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



tetragonal

$$a = b \neq c$$

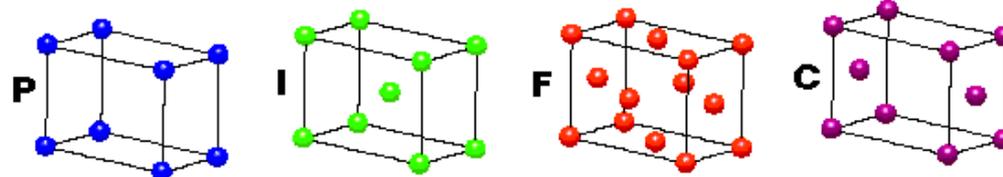
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Ortorrombico

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$

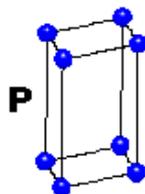


Hexagonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ$$

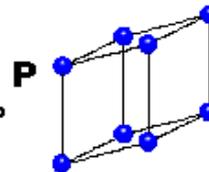
$$\gamma = 120^\circ$$



Trigonal

$$a = b = c$$

$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$

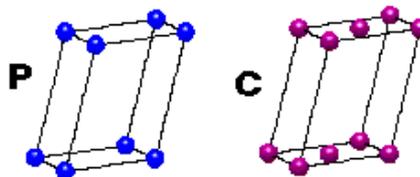


Monoclinico

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha = \gamma = 90^\circ$$

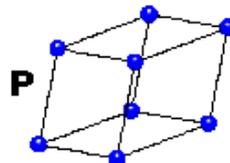
$$\beta \neq 120^\circ$$



Triclinico

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Cuatro tipos de celda unidad

P = Primitiva

I = Centrada en el cuerpo

F = Centrada en las caras

C = Centrada en dos caras



GRUPOS ESPACIALES TRIDIMENSIONALES

Son las diversas formas en que los motivos (átomos, moléculas) pueden distribuirse en el espacio tridimensional de una forma homogénea

SON 230

¿Cómo se generan?

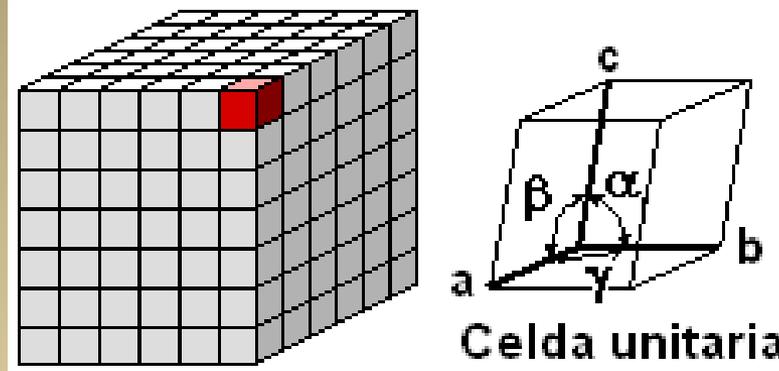
Motivo + Red = ESTRUCTURA CRISTALINA

32 CLASES DE SIMETRÍA PUNTUAL + 14 REDES DE BRAVAIS = 230 GRUPOS ESPACIALES

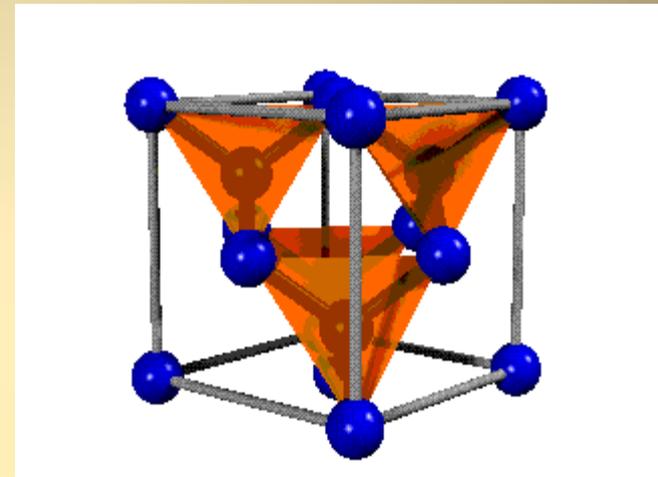
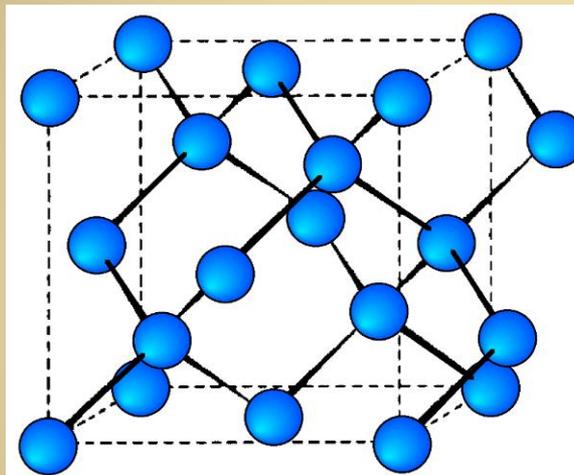
(CON LA SIMETRÍA CARACTERÍSTICA DE TRASLACION)

(Los 230 grupos espaciales vienen recogidos en las tablas internacionales de Rayos X)

La celda unitaria



Celda unitaria
del diamante



Índices de Miller

- Conjunto de números enteros $h k l$ que permiten establecer la **orientación** de un **plano o dirección** en el cristal.

- Notación:

(hkl) plano

$[hkl]$ dirección

Formas cristalinas

- Forma: Conjunto de caras cristalinas relacionadas entre sí por la simetría



el número de caras en una forma depende la simetría del cristal

- ***Forma General***: contiene caras que interceptan todos los ejes cristalográficos a diferentes longitudes, símbolo: $\{hkl\}$
- ***Forma Especial***: todas las otras formas

“Crystallography and Crystal Chemistry” F.D. Bloss, Holt, Rinehart and Winston, Inc. New York (1971).

Formas asociadas a las 32 clases cristalinas

- Enlace a webmineral.com/crystall.shtml

Hábito cristalino

- La morfología que tiene un cristal debido al desarrollo relativo de sus formas
- Depende de:
 - estructura interna
 - condiciones de crecimiento
 - espacio disponible para crecer, etc.

Tipos de hábito

- Acicular: tipo aguja



Natrolita (silicato de Na, Al hidratado)

- Hojuela: elongado y plano



Kianita (silicato de Al)

- Bloque: tipo caja



Oligoclasa (silicato de Na, Ca, Al)

- Equant: 3 ejes “iguales”
⊥ a través del cristal



Fluorita (fluoruro de Ca)

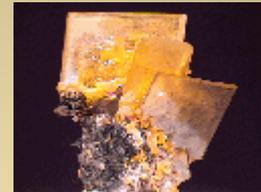
Tipos de hábito (cont.)

- Fibroso: más delgado que el acicular



Okenita

- Lamelar: delgado y plano



Wulfenita

- Tabular: grueso y plano



- Prismático: elongado y grueso



Indicolita

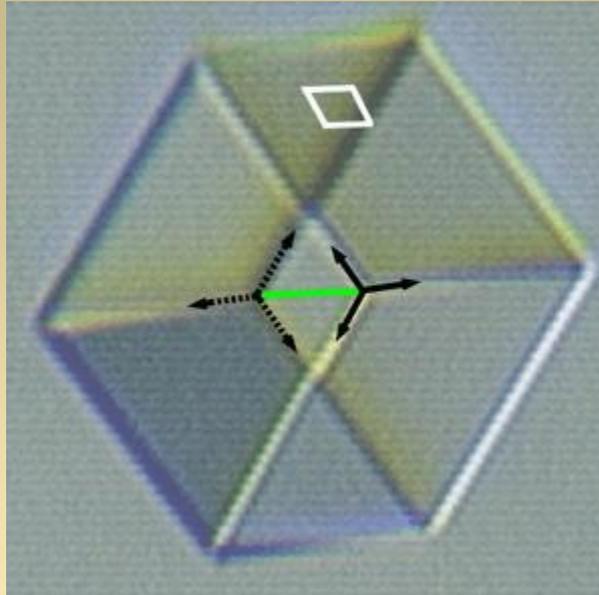
Hábitos particulares: la nieve

				
Simple Prisms	Solid Columns	Sheaths	Scrolls on Plates	Triangular Forms
				
Hexagonal Plates	Hollow Columns	Cups	Columns on Plates	12-branched Stars
				
Stellar Plates	Bullet Rosettes	Capped Columns	Split Plates & Stars	Radiating Plates
				
Sectorial Plates	Isolated Bullets	Multiply Capped Columns	Skeletal Forms	Radiating Dendrites
				
Simple Stars	Simple Needles	Capped Bullets	Twin Columns	Irregulars
				
Stellar Dendrites	Needle Clusters	Double Plates	Arrowhead Twins	Rimed
				
Fernlike Stellar Dendrites	Crossed Needles	Hollow Plates	Crossed Plates	Graupel

Types of Snowflakes ... SnowCrystals.com



¿Y los cristales biológicos?

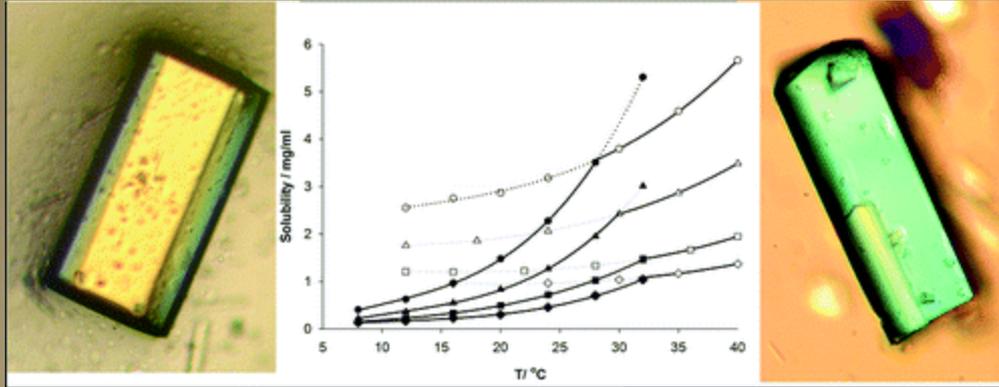


insulina

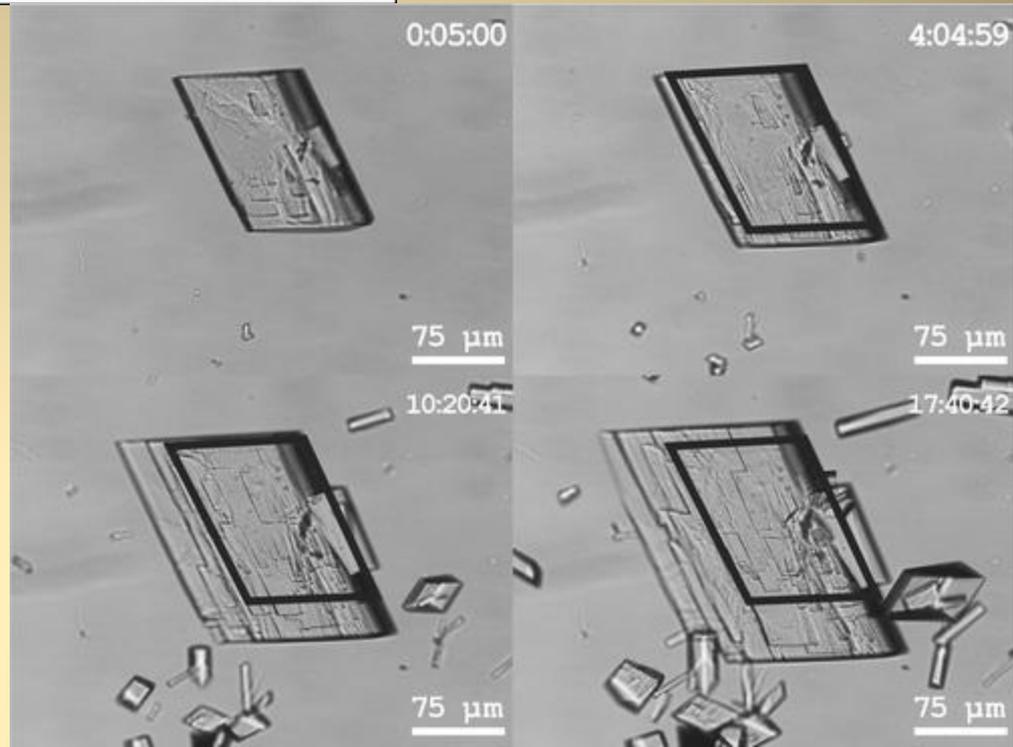
Polimorfos de la lizosima

Sistema cristalino	Clase cristalina	Parámetros de celda	Hábito
Tetragonal	422	$a = 77.06 \text{ \AA}$ $c = 37.22 \text{ \AA}$	{101}{110} Simétricamente equivalentes ↓ Crecimiento no polar
Ortorrómbico	222	$a = 51.26 \text{ \AA}$ $b = 59.79 \text{ \AA}$ $c = 29.95 \text{ \AA}$	
Monoclínico	2		(010) (0 -1 0) Relacionados por simetría ↓ Crecimiento polar a lo largo del eje b
Triclínico	1		$(h k l)$ y $(-h -k -l)$ No están relacionados por simetría ↓ Crecimiento polar en todas direcciones

Hábito cristalino



Ortorrómbica



Plantillas para armar modelos
de las formas cristalinas que
presenta la lisozima

webmineral.com/crystall.shtml

Clase cristalina 222

KystalShaper Net

<http://webmineral.com>

Instructions:

1. Print on Heavy Paper
Card Stock for best
results

2. Cut Along Lines

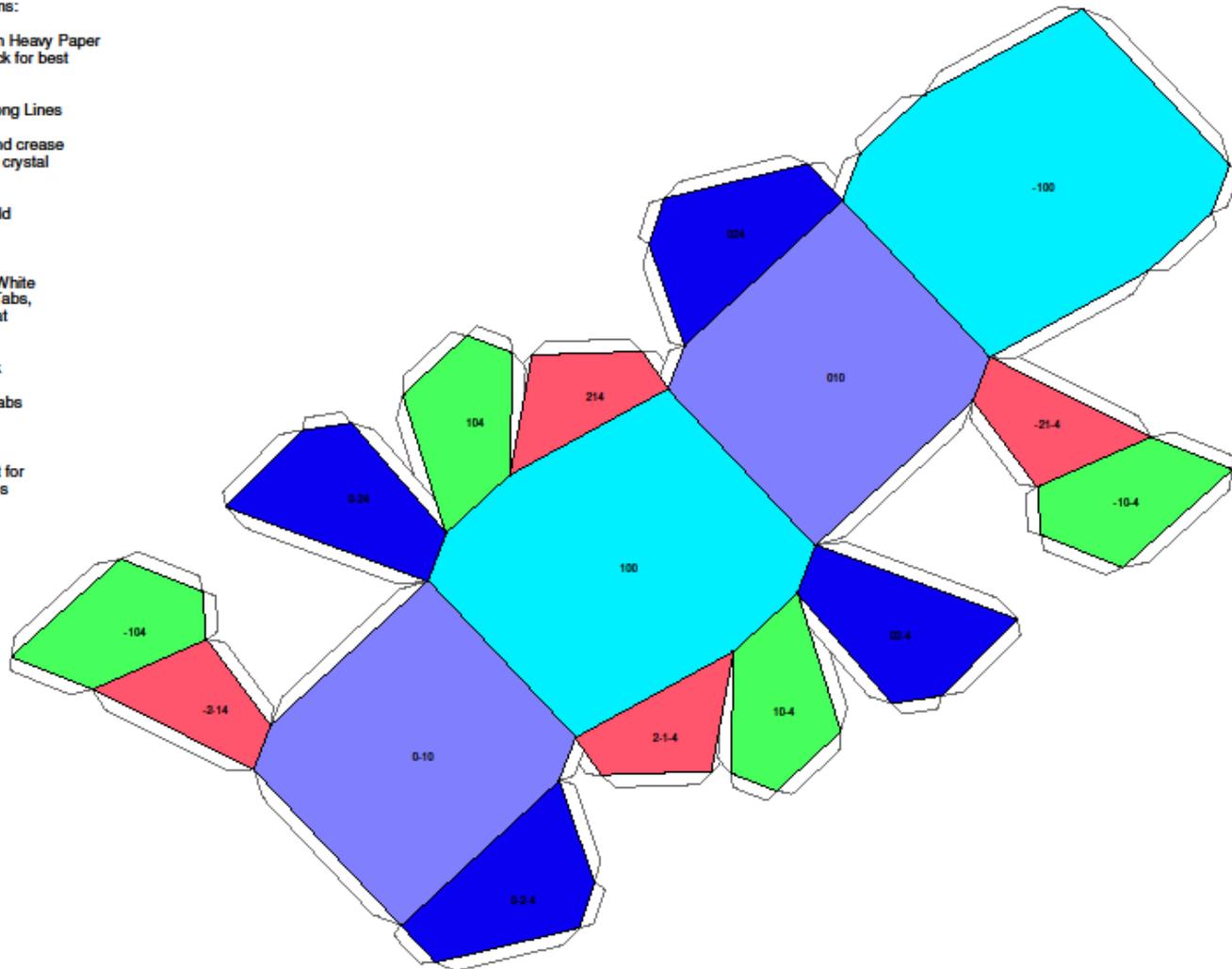
3. Fold and crease
Tabs and crystal
faces

4. Test fold
crystal to
check fit

5. Apply White
Glue on Tabs,
one pair at
a time
using
Toothpick

6. Hold Tabs
Together
until Dry

7. Repeat for
Each Tabs



Clase cristalina 2

KrytalShaper Net

<http://webmineral.com>

Instructions:

1. Print on Heavy Paper
Card Stock for best
results

2. Cut Along Lines

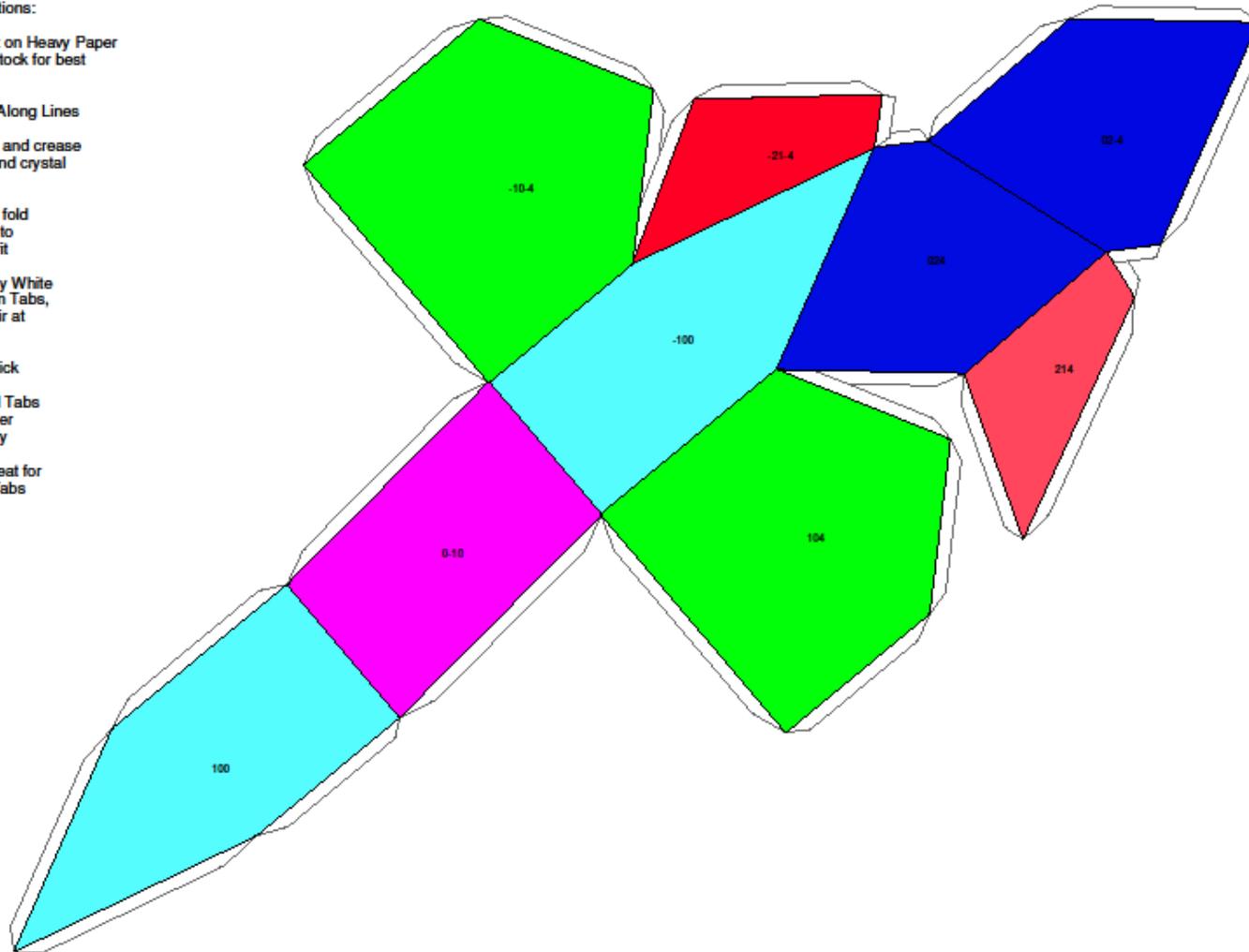
3. Fold and crease
Tabs and crystal
faces

4. Test fold
crystal to
check fit

5. Apply White
Glue on Tabs,
one pair at
a time
using
Toothpick

6. Hold Tabs
Together
until Dry

7. Repeat for
Each Tabs



Clase cristalina 1

KrytalShaper Net

<http://webmineral.com>

Instructions:

1. Print on Heavy Paper
Card Stock for best
results

2. Cut Along Lines

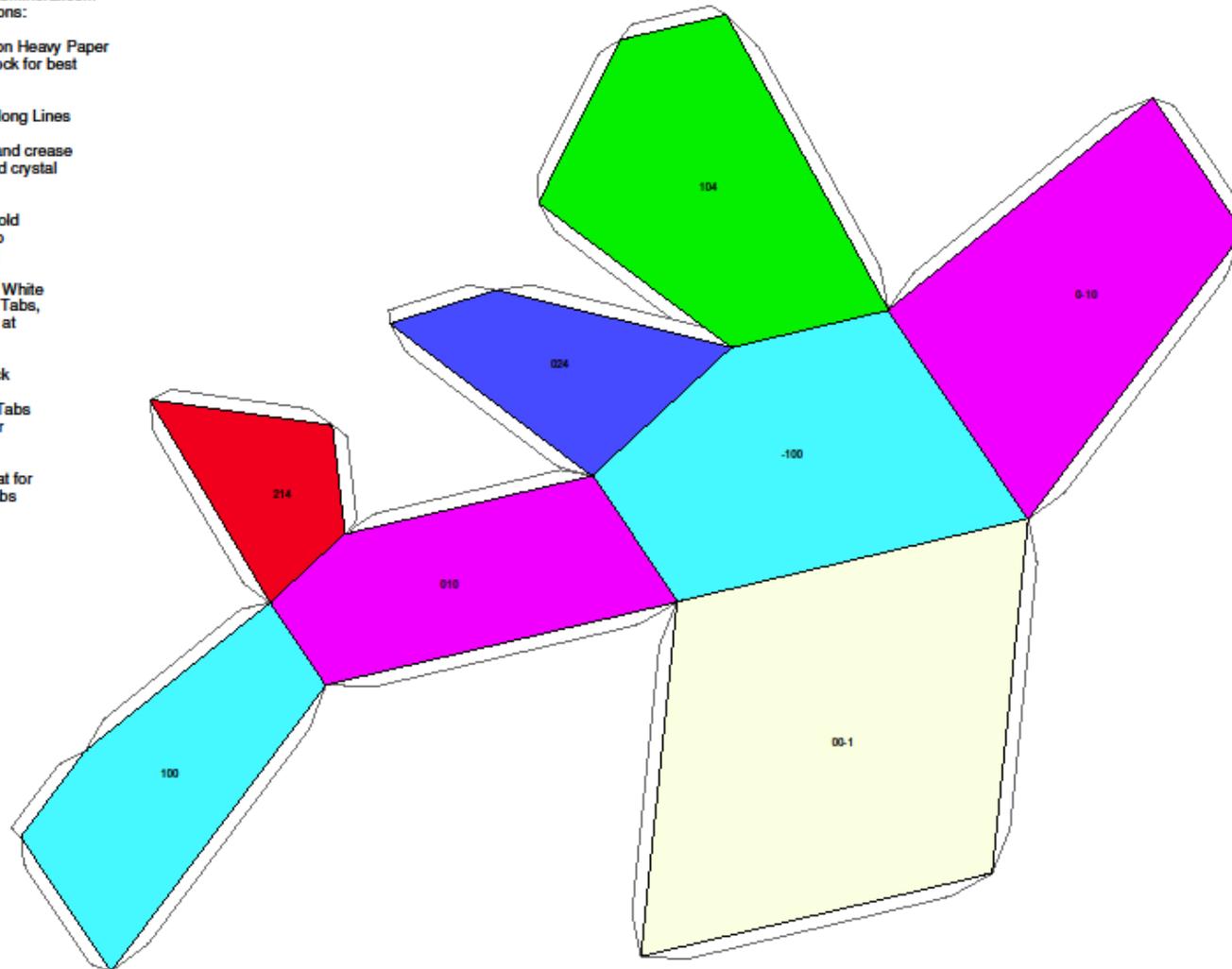
3. Fold and crease
Tabs and crystal
faces

4. Test fold
crystal to
check fit

5. Apply White
Glue on Tabs,
one pair at
a time
using
Toothpick

6. Hold Tabs
Together
until Dry

7. Repeat for
Each Tabs



Sumario

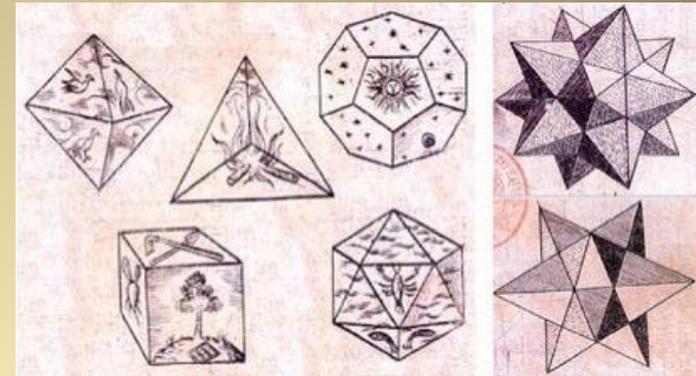
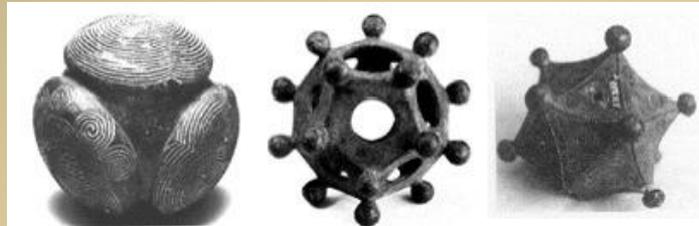
- Los descriptores de la simetría cristalina son:
 - la clase cristalina (\Rightarrow elementos de simetría presentes)
 - el sistema cristalino
 - los parámetros de la celda unitaria
 - la red de Bravais (\Rightarrow modo de traslación)
 - el grupo espacial

Disfruten la exploración del espacio ...

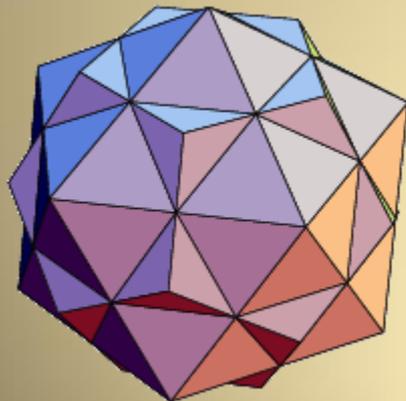
.. como lo hicieron
en el Neolítico



... durante el
Imperio Romano ...



.. en tiempos
de Kepler ...



.... como hoy

... donde ciencia y arte convergen



Salvador Dalí (1904-1989)
Artista surrealista multifacético

www.salvador-dali.org