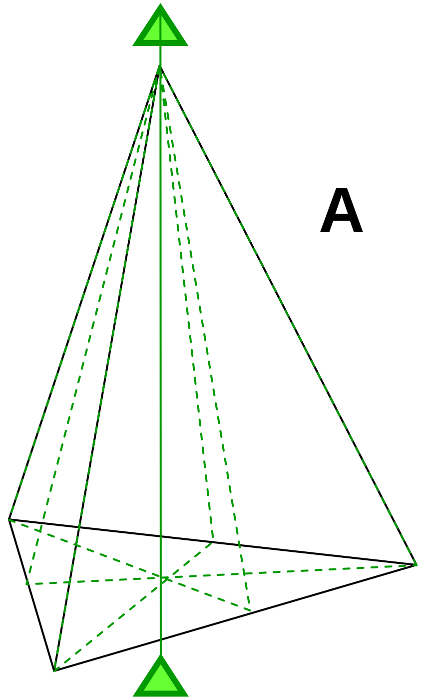
Problema 03_03_01

Para una pirámide de base triangular equilátera, determinar:

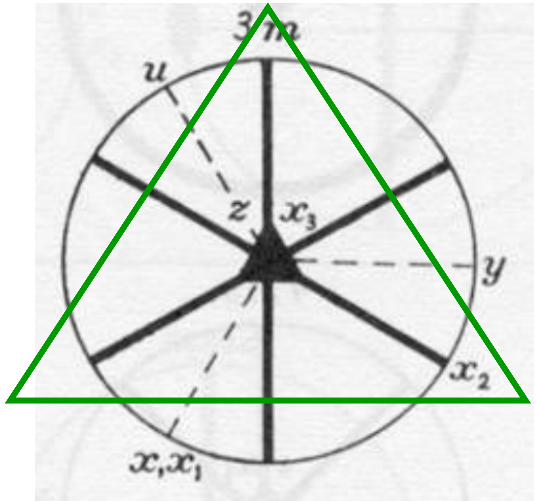
- a qué clase cristalográfica pertenece
- enumerar los elementos cristalográficos de simetría
- dibujar los ejes convencionales y cartesianos
- enumerar los elementos del grupo puntual de simetría
- verificar el orden del grupo
- escribir la tabla del producto de este grupo
- verificar que cumple los axiomas de grupo

Problema 03_03_01

Puesto que la base es un triángulo equilátero, la pirámide tiene un eje ternario perpendicular a la misma, y tres planos de simetría (figura A). Estos son los elementos cristalográficos de simetría. Pertenece por tanto a la clase $3m$ (comprobarlo en la tabla de estereogramas en 03_01_01.pdf). La orientación de los ejes convencionales y cartesianos (dibujados en la proyección sobre la base) es la de la figura B.



A



B

Problema 03_03_01

Los elementos del grupo puntual de simetría y su acción sobre un punto arbitrario de coordenadas (x,y,z) aparecen en la siguiente tabla:

	elemento cristalográfico de simetría	elemento del grupo de simetría	matriz de representación $\underset{\sim}{M}$	$\underset{\sim}{M} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$	notas
1	$3_z \equiv 3_c \equiv 3_{[0001]}$	3_c^1	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \bar{y} \\ x-y \\ z \end{pmatrix}$	
2		3_c^2	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} y-x \\ \bar{x} \\ z \end{pmatrix}$	
3		$3_c^3 \equiv E$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$	elemento unidad
4	$m_x \equiv m_a \equiv m_{(\bar{2}110)}$	m_x	$\begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} y-x \\ y \\ z \end{pmatrix}$	el subíndice en $m_{(\bar{2}110)}$ identifica el plano por sus índices de Miller

Problema 03_03_01

nota importante: las coordenadas (x,y,z) están medidas a lo largo de los ejes convencionales, en general NO CARTESIANOS, y que en este caso forman un ángulo de 120º. Para las coordenadas cartesianas se usan exclusivamente los símbolos x_1, x_2, x_3.

	elemento cristalográfico de simetría	elemento del grupo de simetría	matriz de representación $\underset{\sim}{M}$	$\underset{\sim}{M} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$	notas
5	$m_y \equiv m_b \equiv m_{(1\bar{2}10)}$	m_y	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} x \\ x-y \\ z \end{pmatrix}$	
6	$m_u \equiv m_{(11\bar{2}0)}$	m_u	$\begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -y \\ -x \\ z \end{pmatrix}$	

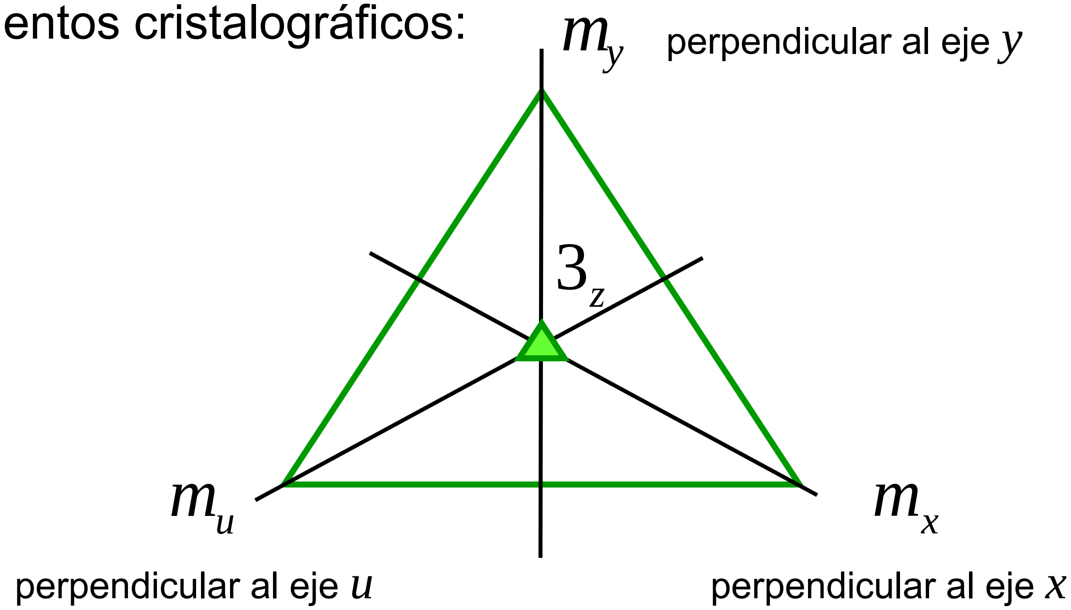
En total 6 elementos → orden del grupo es 6. Mientras que elementos cristalográficos sólo hay 4:

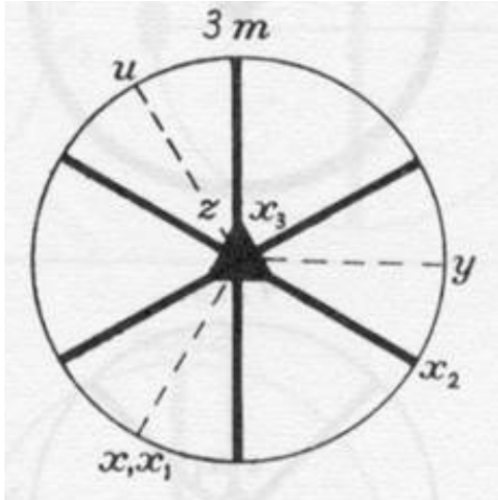
$\boxed{3_z \equiv 3_c \equiv 3_{[0001]}}$ $\quad$ $\underbrace{\boxed{m_y \equiv m_{(1\bar{2}10)}} \quad \boxed{m_x \equiv m_{(\bar{2}110)}} \quad \boxed{m_u \equiv m_{(11\bar{2}0)}}}_{\text{generan 1 cada uno}}$

genera 3 elementos del grupo

Problema 03_03_01

Elementos cristalográficos:





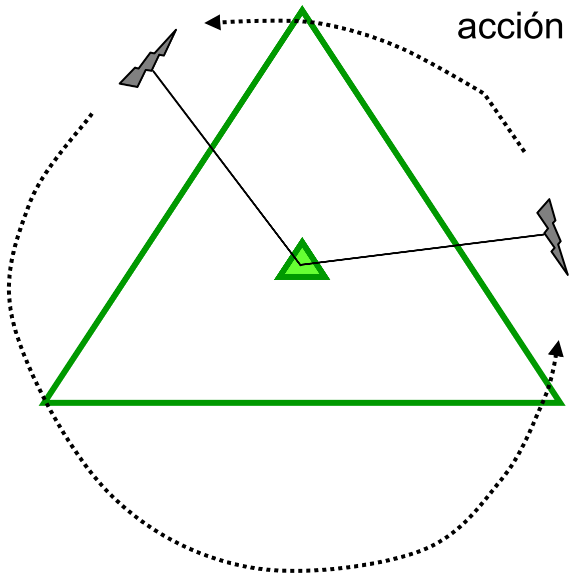
El "producto" del grupo corresponde:

- en términos físicos (geométricos) a realizar dos operaciones de simetría una tras otra (el orden importa, en general no son grupos abelianos)
- como grupo abstracto, al producto de las matrices de representación.

Como ejemplo, realizamos el producto de los elementos 1 y 2: $3_c^2 \cdot 3_c^1$

Problema 03_03_01

Para visualizar el resultado se coloca en un punto arbitrario cualquier figura no simétrica p.ej. ésta: 



O bien se realiza el producto de las matrices de representación

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ \bar{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$3_c^2 \qquad\qquad 3_c^1 \qquad\qquad E$$

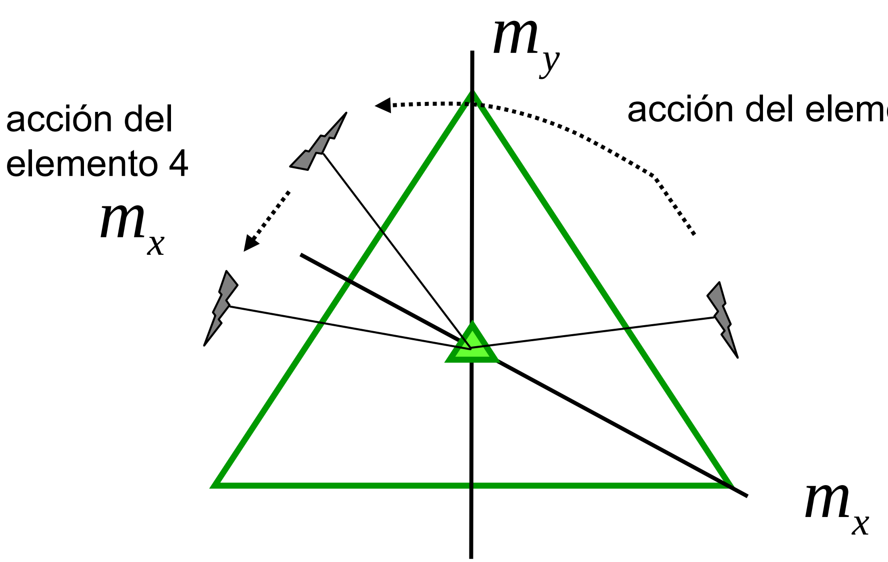
El resultado de las dos acciones nos devuelve a la posición inicial. Por tanto, el producto de estos dos elementos es:

$$3_c^2 \cdot 3_c^1 = E \longleftarrow$$

importante: los factores del producto se ordenan de derecha a izquierda de acuerdo con el orden en que actúan

Problema 03_03_01

El producto de los elementos 1 y 4: $m_x \cdot 3_c^1$



O bien se realiza el producto de las matrices de representación

$$\begin{pmatrix} \bar{1} & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \bar{1} & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & \bar{1} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$m_x \qquad 3_c^1 \qquad m_y$$

El resultado es igual que una reflexión en el plano m_y (elemento 5)

Por tanto, el producto de estos dos elementos es:

$$m_x \cdot 3_c^1 = m_y$$

Problema 03_03_01

Procediendo de esta manera para todos los productos (son 36) se construye la tabla de multiplicación. Por convención, el factor que opera primero, el que aparece más a la derecha en el producto, se coloca en la fila superior:

elementos mutuamente inversos

$\cdot$	E	3_c^1	3_c^2	m_x	m_y	m_u
E	E	3_c^1	3_c^2	m_x	m_y	m_u
3_c^1	3_c^1	3_c^2	E	m_u	m_x	m_y
3_c^2	3_c^2	E	3_c^1	m_y	m_u	m_x
m_x	m_x	m_y	m_u	E	3_c^1	3_c^2
m_y	m_y	m_u	m_x	3_c^2	E	3_c^1
m_u	m_u	m_x	m_y	3_c^1	3_c^2	E

este elemento es su propio inverso

Se satisfacen los axiomas de grupo:

- el producto está definido
- existe un elemento unidad único
- el producto de dos elementos sigue perteneciendo al grupo (en la tabla no aparecen elementos que no pertenezcan al grupo)
- cada elemento tiene un inverso (en todas las filas/columnas aparece la unidad sólo una vez)
- es asociativo (no es evidente, hay que comprobarlo con la tabla)