

1.-La Cristalografía

La Cristalografía es la ciencia que se ocupa de los sólidos cristalinos y describe su estructura interna, es decir, como están distribuidos los átomos en su interior. También estudia la morfología de los cristales. Una parte importante de la Cristalografía es la simetría, tanto la que se encuentra a nivel del ordenamiento atómico (simetría espacial), como la que aparece a nivel macroscópico en la morfología de los cristales (simetría puntual).

La Cristalografía experimentó un desarrollo muy importante como consecuencia del descubrimiento, a principios del s. XX, de la difracción de los rayos X por parte de los cristales, un fenómeno que permite determinar su estructura interna. La difracción de rayos X se ha convertido en una herramienta imprescindible en muchos ámbitos de la ciencia como por ejemplo en Geología, Química y Biología. Por ejemplo, la estructura química del ADN se conoce gracias a esta técnica.

2.-Simetría

El concepto simetría hace referencia a la coincidencia de motivos estructurales o morfológicos a través de operaciones matemáticas denominadas operaciones de simetría, estas operaciones se agrupan en elementos de simetría.

La simetría puntual y la simetría espacial son los dos niveles en los se produce la simetría en los sólidos cristalinos. La simetría puntual permite describir las formas poliédricas de cristales idealizados mientras que la simetría espacial se aplica a la descripción de la estructura interna de los cristales (el medio cristalino).

La simetría puntual se describe a través de elementos de simetría que se cruzan en un único punto, el cual no ve alterada su posición por aplicación de las operaciones que incluyen los diversos elementos de simetría. Los elementos de simetría puntual relacionan por ejemplo las caras iguales de los cristales idealizados que están repetidas un cierto número de veces.

La descripción de la simetría (tanto la puntual como la espacial) se realiza a través de varias nociones conceptuales que de menor a mayor grado jerárquico son: operaciones, elementos, grupos y sistemas de simetría.

3.- Operaciones de simetría

Una operación de simetría puntual relaciona dos elementos geométricos idénticos (caras, aristas o vértices) de un poliedro mediante una operación matemática. Las operaciones de simetría puntual se pueden resumir en dos: rotaciones alrededor de un eje y rotaciones combinadas con una inversión respecto al origen (cambio de signo de las tres coordenadas del espacio).

Las operaciones de simetría espacial relacionan posiciones atómicas idénticas mediante una operación matemática (rotaciones, inversiones, traslaciones) o combinaciones de ellas.

El medio cristalino es periódico (es decir, se puede describir a partir de la repetición de una unidad de volumen básica, la celda unidad) y fruto de esta periodicidad las rotaciones de las operaciones de simetría espacial no pueden ser de cualquier valor. Las rotaciones permitidas están restringidas a ángulos de 60, 90 o múltiplos de ellos. La morfología de los cristales de los sólidos cristalinos es una manifestación externa de su simetría interna a nivel atómico y por eso las rotaciones de las operaciones de simetría puntual también deben obedecer las mismas restricciones.

4.-Elementos de simetría puntual

Los elementos de simetría son conjuntos de operaciones de simetría que se pueden reducir a una única operación de simetría aplicada iterativamente un número finito de veces hasta que el elemento geométrico de partida regresa a su posición inicial. Este número finito de veces se denomina orden del elemento de simetría.

Los elementos de simetría se pueden reducir a dos tipos: ejes de rotación (que contienen una determinada rotación aplicada iterativamente) y ejes de rotación-inversión (que contienen una determinada rotación seguida de inversión aplicada iterativamente).

Ejes de rotación	Notación o símbolo escrito	Símbolo gráfico	Operación aplicada iterativamente (rotación)	Orden
monario	1		360°	1
binario	2		180°	2
ternario	3		120°	3
cuaternario	4		90°	4
senario	6		60°	6
Ejes de rotación-inversión	Notación o símbolo escrito	Símbolo gráfico	Operación aplicada iterativamente (rotación + inversión)	Orden
centro de inversión	$\bar{1}$		360° + inversión	2
plano de reflexión	m		180° + inversión	2
ternario	$\bar{3}$		120° + inversión	6
cuaternario	$\bar{4}$		90° + inversión	4
senario	$\bar{6}$		60° + inversión	6

Cabe señalar que el eje binario de rotación-inversión equivale a un plano de reflexión y prácticamente siempre se denomina así; se trata de un elemento de simetría que se comporta como un espejo y que contiene la reflexión (entendida como operación de simetría) aplicada iterativamente dos veces. Otro caso particular es el eje senario de rotación-inversión que equivale a un eje de rotación ternario combinado con un plano de reflexión perpendicular a él.

La simetría espacial se elabora también a través de elementos de simetría que incluyen las mismas operaciones que en simetría puntual añadiendo además la traslación como posible operación.

5.-Grupos de simetría puntual

Los grupos de simetría puntual son conjuntos de elementos de simetría. Estos conjuntos los presentan los cristales idealizados de los diferentes sólidos cristalinos y se visualizan muy convenientemente en ellos. No todas las combinaciones de elementos de simetría son posibles y por eso hay un número finito de grupos puntuales, 32:

sistema triclinico	sistema monoclinico	sistema rómbico	sistema tetragonal	sistema trigonal	sistema hexagonal	sistema cúbico
1	2		4	3	6	23
$\bar{1}$	m		$\bar{4}$	$\bar{3}$	$\bar{6}$	
	2/m		4/m		6/m	m3
		222	422	32	622	432
		mm2	4mm	3m	6mm	
			$\bar{4}2m$	$\bar{3}m$	$\bar{6}m2$	$\bar{4}3m$
		mmm	4/mmm		6/mmm	m $\bar{3}$ m

La notación de los grupos de simetría puntual tiene sus propias normas para cada sistema cristalino y siempre consiste en combinaciones de números que hacen referencia a ejes de rotación o de rotación-inversión y la letra m que denota la presencia de planos de reflexión. Para algunos grupos aparece una barra oblicua (/) que siempre indica una relación de perpendicularidad entre un eje de simetría y un plano de reflexión.

La multiplicidad de un grupo puntual es el número de operaciones de simetría que contienen globalmente todos sus elementos de simetría. Hay grupos puntuales de baja simetría, con un único elemento de simetría que incluso puede contar con una única operación de simetría, en el otro extremo hay grupos puntuales de alta simetría con varios elementos de simetría puntual que globalmente pueden sumar hasta un máximo de 48 operaciones de simetría. Dentro de cada sistema cristalino, el grupo de mayor simetría se conoce como la holoedría del sistema. La holoedría contiene todas las operaciones de simetría del resto de grupos puntuales de su sistema cristalino.

6.-Sistemas cristalinos.

Los diversos grupos de simetría puntual se agrupan en sistemas cristalinos y se definen un total de 7. Para cada sistema cristalino, sus diversos grupos de simetría comparten una simetría mínima, de menor a mayor simetría los 7 sistemas cristalinos son:

-sistema triclinico: sólo consta de dos grupos de simetría puntual que comparten una simetría mínima consistente en un eje monario (que puede ser de rotación, o de rotación-inversión y en este último caso nos referimos a él como centro de inversión).

-sistema monoclinico: consta de tres grupos de simetría puntual que comparten una simetría mínima consistente en un eje binario (que puede ser de rotación, o de rotación-inversión y en este último caso nos referimos a él como plano de reflexión).

-sistema rómbico: consta de tres grupos de simetría puntual que comparten una simetría mínima consistente en tres ejes binarios (que pueden ser de rotación, o de rotación-inversión y en este último caso nos referimos a ellos como planos de reflexión).

-sistema tetragonal: consta de siete grupos de simetría puntual que comparten una simetría mínima consistente en un eje cuaternario (que puede ser de rotación, o de rotación-inversión).

-sistema trigonal: consta de cinco grupos de simetría puntual que comparten una simetría mínima consistente en un eje ternario de rotación.

-sistema hexagonal: consta de siete grupos de simetría puntual que comparten una simetría mínima consistente en un eje senario (que puede ser de rotación, o de rotación-inversión).

-sistema cúbico: consta de cinco grupos de simetría puntual que comparten una simetría mínima consistente en cuatro ejes ternarios de rotación.

A nivel de simetría espacial se mantiene la división en siete sistemas cristalinos y cada sistema lleva asociado un determinado modelo de celda unidad con algunas restricciones sobre los valores de los vectores que la definen.

7. Formas cristalinas

Las formas idealizadas de los cristales son poliedros formados por elementos geométricos (caras, aristas y vértices) que tienen que respetar la simetría interna de su correspondiente ordenamiento atómico interno. Son el tipo de poliedros mostrados en Quiztallography. Si todas las caras de un cristal idealizado tienen la misma forma y tamaño son equivalentes por simetría, y en este caso se dice que el cristal es una forma simple. En cambio, si hay más de un conjunto de caras, relacionadas por simetría dentro de cada conjunto pero no relacionables por simetría entre conjuntos diferentes, se dice que el cristal es una forma compuesta y que presenta tantas formas como conjuntos de caras diferentes tenga.

Si una cara de un cristal se encuentra en una posición general, cada una de las operaciones de simetría del grupo puntual del cristal generará una cara equivalente, de manera que la forma cristalina incluirá un grupo de caras equivalentes formado por tantas caras como multiplicidad tenga el grupo puntual. En cambio, si la cara se encuentra en una posición especial (es decir, sobre algunos elementos de simetría) no se generarán tantas caras equivalentes.

8.-El cristal real

Una de las consecuencias del ordenamiento interno de los sólidos cristalinos es la formación de cristales. Los cristales se forman cuando en el proceso de crecimiento cristalino (debido por ejemplo a la solidificación de un magma, o a la precipitación de los solutos de un fluido hidrotermal) se reúnen las condiciones adecuadas de tiempo, espacio y estabilidad química. Es habitual que las condiciones ideales no se produzcan, de forma que a veces el crecimiento de un cristal no acaba dando lugar a un sólido delimitado por caras planas, o sólo se forman algunas de ellas, o a menudo su desarrollo relativo puede ser muy desigual.

A pesar del posible grado de desigual desarrollo de las caras de un cristal, el ángulo entre dos caras concretas es siempre el mismo para un determinado sólido cristalino. Además, para un determinado cristal algunas caras pueden simplemente no aparecer y esto puede originar morfologías cristalinas diferentes para un mismo sólido cristalino, sin embargo los cristales de una misma sustancia cristalina presentan siempre la misma simetría (cuando consideramos sus cristales idealizados) independientemente de las caras que presenten.

Para algunos minerales es característica la formación de cristales con determinadas morfologías: por ejemplo el diamante (C) y la magnetita (FeFe_2O_4) forman octaedros y la halita (NaCl), la fluorita (CaF_2) y la pirita (FeS_2) forman típicamente cubos, aunque este último mineral a veces forma cristales en forma de pentadodecaedro.

Otra de las consecuencias del ordenamiento interno de los sólidos cristalinos es la aparición de la exfoliación como propiedad mecánica en algunos de ellos. La exfoliación consiste en la rotura de un cristal a favor de superficies planas. Solamente presentan exfoliación las sustancias cristalinas que internamente tienen planos de enlaces débiles. Los sólidos cristalinos que tienen planos de enlaces débiles en varias orientaciones presentan en consecuencia exfoliación en varias direcciones. En algunos casos, para minerales con tres o más direcciones de exfoliación, un fragmento de cristal puede quedar completamente limitado por planos de exfoliación definiendo un sólido de exfoliación que siempre es una de las posibles formas de crecimiento cristalino del mineral. Un ejemplo clásico de sólido de exfoliación es el romboedro, común en muchos carbonatos como la calcita (CaCO_3), la dolomita ($\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$) o la rodocrosita (MnCO_3), otro ejemplo típico es la exfoliación octaédrica de la fluorita (CaF_2).