

Tratado de física de materiales

Jesús Moral Aranda

March 24, 2025

Contents

1	Introducción	3
2	Grupos de simetría en solidos cristalinos	4
2.1	Introducción	4
2.2	Introducción a grupos	4
2.2.1	Grupos	4
2.2.2	Subgrupos	5
2.2.3	Grupos cíclicos	6
2.2.4	Cosets. Teorema de Lagrange	8
2.2.5	Relación de conjugación. Subgrupos normales y grupo cociente	10
2.2.6	Subgrupos normales	10
2.2.7	Grupo cociente	11
2.2.8	Homomorfismos	12
2.2.9	Representaciones	13
2.2.10	Acciones de grupo sobre conjuntos	13
2.3	Grupos puntuales cristalográficos	15
2.4	Grupos espaciales cristalográficos	17
2.4.1	Red cristalina	17

Chapter 1

Introducción

Chapter 2

Grupos de simetría en solidos cristalinos

2.1 Introducción

Los átomos de un sólido que se acomodan formando estructuras periódicas, simétricas y ordenadas en el espacio, pueden ser modelizados mediante grupos de simetría. De manera que determinar el grupo de simetría de un arreglo de átomos permite capturar la información sobre las posiciones de los átomos en una red y determinar sus propiedades en función de las posiciones de los constituyentes de la red.

Una operación de simetría es una transformación del espacio afín \mathbb{R}^3 que preserva distancias y ángulos que deja el patrón del cristal inalterado. La simetría del patrón del cristal es entonces entendido como la colección de operaciones de simetría del patrón.

- Si se aplican dos operaciones de simetría sucesivamente, el patrón queda inalterado. Por tanto la composición de operaciones de simetría es de nuevo una operación de simetría.

- Toda operación de simetría tiene su operación de simetría inversa.

Estas observaciones muestran que el conjunto de operaciones de simetría que compatibles con la estructura de la red, respecto a la composición de operaciones de simetría, tiene estructura de grupo.

2.2 Introducción a grupos

2.2.1 Grupos

Definición 1 Un grupo es un conjunto G provisto de una ley de composición interna:

$$G \times G \rightarrow G$$

$$(g, h) \mapsto gh$$

con las siguientes propiedades:

1. Asociatividad:

$$g(hk) = (gh)k, \quad \forall g, h, k \in G.$$

2. Existencia del elemento neutro:

$$\exists e \in G \quad eg = ge = g, \quad \forall g \in G.$$

3. Existencia de elementos inversos:

$$\forall g \in G, \quad \exists g^{-1} \in G \quad g^{-1}g = gg^{-1} = e.$$

Definición 2 Un grupo $G = \{g_1, g_2, \dots, g_n\}$ es **finito** si $|G| = n$, $n < \infty$. De lo contrario se dice que es infinito.

Definición 3 El orden de g , denotado por $|g|$, es el menor entero positivo n tal que:

$$g^n = e$$

Si no existe tal entero n , decimos que g tiene orden infinito.

Notación. Si k es un entero no negativo y $g \in G$ escribiremos

$$g^k = \underbrace{g \cdots g}_k, \quad g^{-k} = \underbrace{g^{-1} \cdots g^{-1}}_k,$$

siendo $g^0 \equiv e$. Nótese que esta notación no es ambigua, debido a la asociatividad del producto de un número arbitrario de elementos. Con la notación anterior, para todo $i, j \in \mathbb{Z}$ se verifica:

$$g^i g^j = g^{i+j}$$

Alternativamente, cuando la ley de composición interna sea una suma ($+$: $G \times G \rightarrow G$, $+(a,b)=a+b$) se puede usar la notación aditiva. Esto es, la asociatividad se expresa como $(a + b) + c = a + (b + c)$, el elemento inverso de g como $-g$ y elemento neutro e , como $g+e=e+g=g$. Además en esta notación, $g+g+g=3g$, en vez de g^3 .

Ejemplo: El grupo puntual de simetría $6 = \{1, 2, 3^+, 3^-, 6^+, 6^-\}$. Donde el elemento n es una rotación de $\frac{2\pi}{n}$, $n \in \{1, 2, 3, 6\}$. El $2=2^+ = 2^-$ es su propio inverso, donde $'^+'$ y $'^-'$, indica sentidos de rotación horario y antihorario respectivamente. Las rotaciones son aplicaciones $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ o $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$, que son elementos clave de los grupos de simetría.

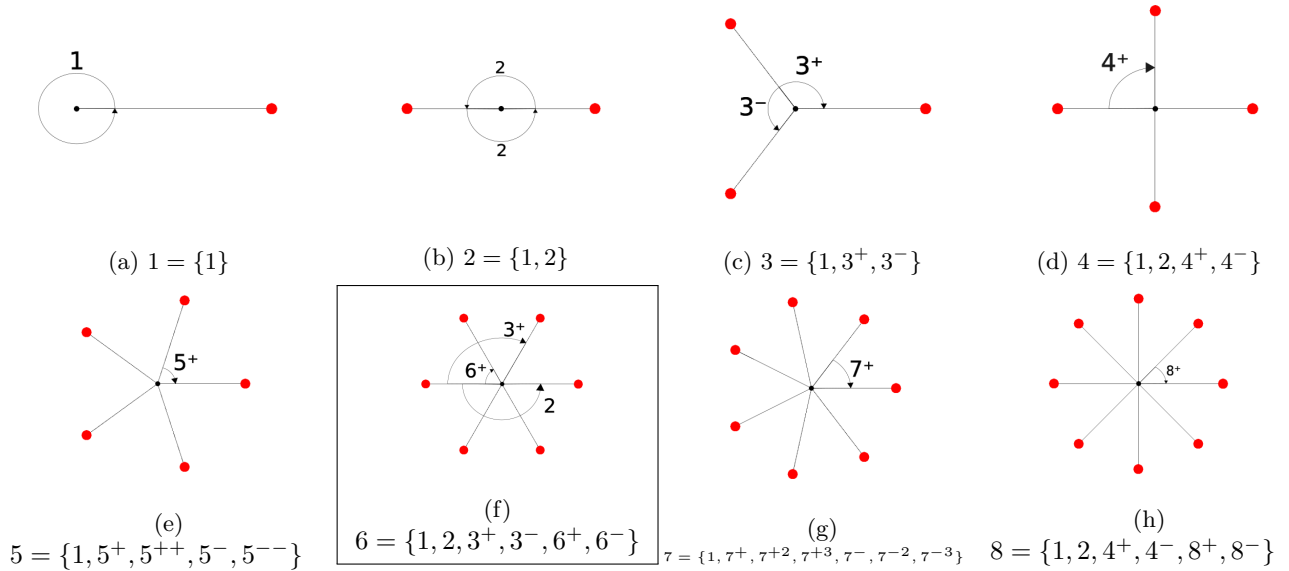


Figure 2.1: Grupos de rotaciones para ángulos de 2π , π , $2\pi/3$, $\pi/2$, $2\pi/5$, $\pi/3$, $2\pi/7$, $\pi/4$

□

2.2.2 Subgrupos

Definición 4 Un subgrupo H de un grupo G , denotado como $H \leq G$, es un subconjunto $H \subset G$ que es un grupo con el producto heredado de G .

Definición 5 Para cualquier $g \in G$

$$\langle g \rangle = \{ g^k \mid k \in \mathbb{Z} \}$$

Si $G = \{g_1, \dots, g_n\}$ es finito, la secuencia infinita $\{g^0, g^1, \dots, g^n, \dots, g^m\}$, necesariamente tiene al menos dos elementos tales que $g^n = g^j$ $0 \leq j < n$. Más esquemáticamente nos podemos convencer de esto, al notar que es imposible una biyección entre ambos conjuntos:

$$\begin{array}{ccccccc} \{g_1 & \dots & g_n\} & & & & \\ \uparrow & \uparrow & \uparrow & \nwarrow & \nwarrow & & \\ \{g^0 & \dots & g^n & \dots & g^m & \dots & \} \end{array}$$

De $g^n = g^j$ con $0 \leq j < n$, se sigue que $g^{n-j} = e = g^0$. Por tanto, $j = 0$ y así $g^n = e$. Esto quiere decir que si G es finito, puedes coger cualquier elemento de este y el orden del elemento también es finito.

Además, los elementos g^k , para $k = 1, \dots, n-1$, son todos distintos, ya que cada g^k está en correspondencia uno a uno con los elementos de un subconjunto de G , y $k = n$ es la primera potencia que se repite. Más específicamente, se cumple que:

$$\begin{aligned} \langle g^k \rangle &= \{e, g^1, \dots, g^{k-1}\} = H \leq G \\ g^i = g^j &\Leftrightarrow i \equiv j \pmod{n} \Leftrightarrow i - j \equiv 0 \pmod{n}. \end{aligned}$$

2.2.3 Grupos cíclicos

Definición 6 Un grupo se denomina grupo cíclico de orden n , C_n si:

$$C_n = \{e, g, g^2, g^3, \dots, g^{n-1}\} \quad \text{con el producto} \quad \forall i, j \quad g^i g^j = g^{i+j \bmod n}$$

Por tanto $\forall g \in G$, $\langle g \rangle$ es subgrupo cíclico de G . Si además se cumple que $\langle g \rangle = G$, entonces G es generado por un solo elemento y G es grupo cíclico.

Los grupos cíclicos poseen importantes propiedades que facilitan el análisis de los mismos. Si G es un grupo cíclico de orden n entonces:

1. para cada divisor d de n , existe exactamente un subgrupo de orden d , dado por:

$$H = \langle g^{n/d} \rangle.$$

Esto significa que todos los subgrupos de G son también cíclicos.

2. el orden de cualquier elemento g^k está dado por:

$$|g^k| = \frac{n}{\gcd(k, n)}.$$

Por lo tanto, el orden de cualquier elemento divide al orden del grupo.

Ejemplo: El grupo puntual $6mm = \{1, m_{12}, m_{21}, m_{1-1}, m_{11}, m_{10}, m_{01}, 2, 3^+, 3^-, 6^+, 6^-\}$, además de rotaciones contiene reflexiones, otro tipo de operación de simetría típico de los grupos puntuales. Los productos entre operaciones de simetría se pueden organizar como en la tabla 2.1.

Además a cada operación de simetría le podemos asociar un elemento de simetría, que es un elemento geométrico asociado con una operación de simetría. Como se muestra en la figura 2.2.

La relación grupo-subgrupo para $6mm$ se puede representar gráficamente como en la figura 2.3. Se puede observar que los ordenes de los subgrupos son los divisores del orden del grupo.

El grupo $6mm$ no es cíclico, uno se puede convencer de esto al notar que el producto de rotaciones son rotaciones, pero no así el producto de reflexiones. De modo que necesitas al menos de una rotación y una reflexión para generar todo el grupo. Sin embargo los subgrupos 6 , 3 , 2 de rotaciones, al igual que m , sí son cíclicos.

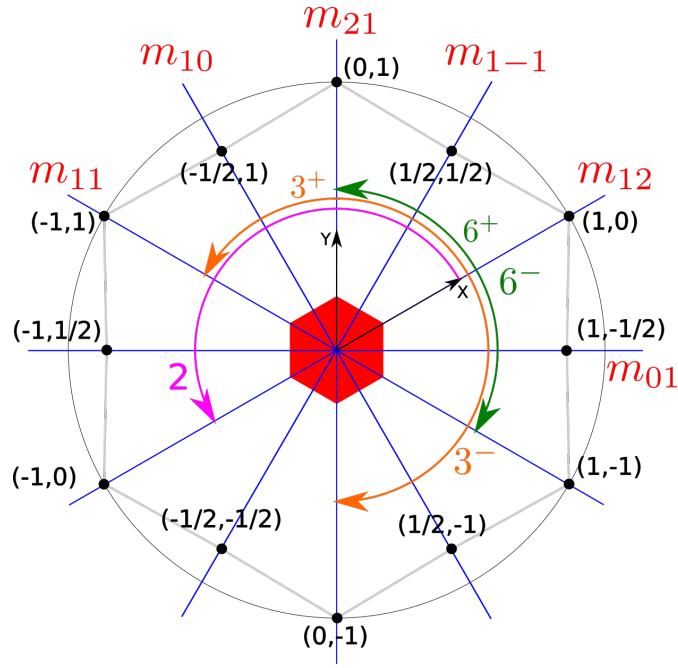


Figure 2.2: Elementos de simetría de 6mm

6mm	1	2	3 ⁺	3 ⁻	6 ⁺	6 ⁻	m ₁₂	m ₂₁	m ₁₋₁	m ₁₁	m ₁₀	m ₀₁
1	1	2	3 ⁺	3 ⁻	6 ⁺	6 ⁻	m ₁₂	m ₂₁	m ₁₋₁	m ₁₁	m ₁₀	m ₀₁
2	2	1	6 ⁻	6 ⁺	3 ⁻	3 ⁺	m ₁₀	m ₀₁	m ₁₁	m ₁₋₁	m ₁₂	m ₂₁
3 ⁺	3 ⁺	6 ⁻	3 ⁻	1	2	6 ⁺	m ₂₁	m ₁₁	m ₁₀	m ₁₂	m ₀₁	m ₁₋₁
3 ⁻	3 ⁻	6 ⁺	1	3 ⁺	6 ⁻	2	m ₁₁	m ₁₂	m ₀₁	m ₂₁	m ₁₋₁	m ₁₀
6 ⁺	6 ⁺	3 ⁻	2	6 ⁻	3 ⁺	1	m ₁₋₁	m ₁₀	m ₂₁	m ₀₁	m ₁₁	m ₁₂
6 ⁻	6 ⁻	3 ⁺	6 ⁺	2	1	3 ⁻	m ₀₁	m ₁₋₁	m ₁₂	m ₁₀	m ₂₁	m ₁₁
m ₁₂	m ₁₂	m ₁₀	m ₁₁	m ₂₁	m ₀₁	m ₁₋₁	1	3 ⁻	6 ⁻	3 ⁺	2	6 ⁺
m ₂₁	m ₂₁	m ₀₁	m ₁₂	m ₁₁	m ₁₋₁	m ₁₀	3 ⁺	1	6 ⁺	3 ⁻	6 ⁻	2
m ₁₋₁	m ₁₋₁	m ₁₁	m ₀₁	m ₁₀	m ₁₂	m ₂₁	6 ⁺	6 ⁻	1	2	3 ⁻	3 ⁺
m ₁₁	m ₁₁	m ₁₋₁	m ₂₁	m ₁₂	m ₁₀	m ₀₁	3 ⁻	3 ⁺	2	1	6 ⁺	6 ⁻
m ₁₀	m ₁₀	m ₁₂	m ₁₋₁	m ₀₁	m ₂₁	m ₁₁	2	6 ⁺	3 ⁺	6 ⁻	1	3 ⁻
m ₀₁	m ₀₁	m ₂₁	m ₁₀	m ₁₋₁	m ₁₁	m ₁₂	6 ⁻	2	3 ⁻	6 ⁺	3 ⁺	1

Table 2.1: Tabla de multiplicación de 6mm

Los subgrupos de 6mm son:

$$mm2 \equiv mm2_1, mm2_2, mm2_3$$

$$6mm = \{1, 2, 3^+, 3^-, 6^+, 6^-, m_{12}, m_{21}, m_{1-1}, m_{11}, m_{10}, m_{01}\}$$

$$mm2_1 = \{1, 2, m_{1-1}, m_{11}\}$$

$$6 = \{1, 6^+, 3^+, 2, 3^-, 6^-\}$$

$$mm2_2 = \{1, 2, m_{10}, m_{12}\}$$

$$mm2_3 = \{1, 2, m_{21}, m_{01}\}$$

$$3m \equiv 3m_1, 3m_2$$

$$3m_2 = \{1, 3^+, 3^-, m_{12}, m_{21}, m_{11}\}$$

$$m \equiv \{1, m_{12}\}, \{1, m_{21}\}, \{1, m_{11}\}, \{1, m_{1-1}\}, \{1, m_{10}\}, \{1, m_{01}\}$$

$$3m_1 = \{1, 3^+, 3^-, m_{1-1}, m_{10}, m_{01}\}$$

$$3 = \{1, 3^+, 3^-\}$$

$$2 = \{1, 2\}$$

$$1 = \{1\}$$

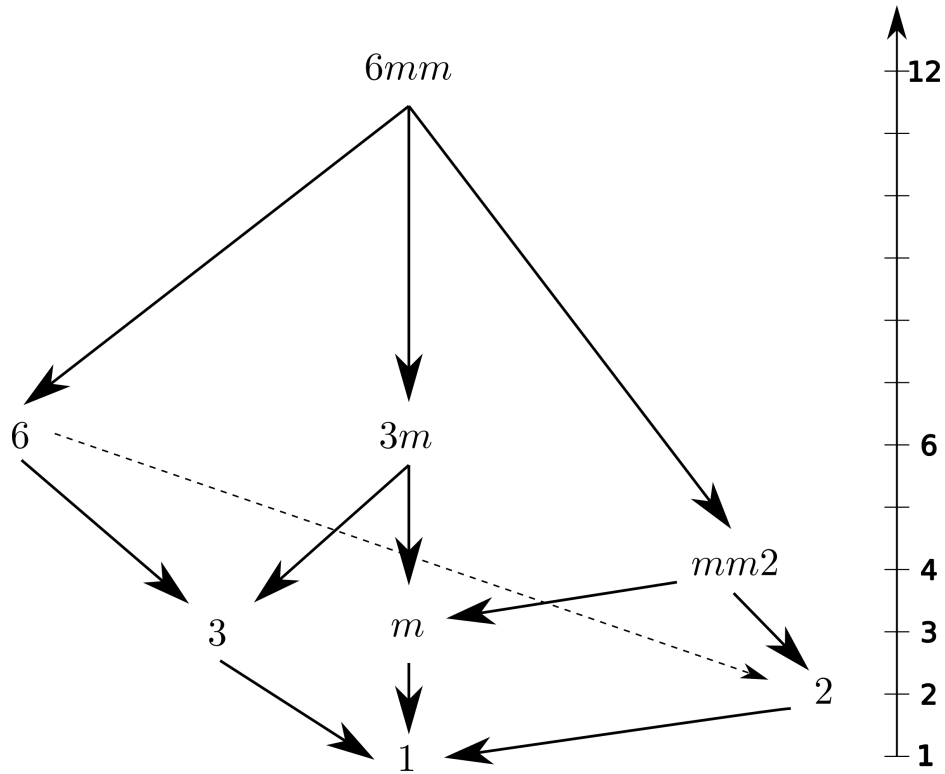


Figure 2.3: Diagrama Grupo-Subgrupo de 6mm

□

2.2.4 Cosets. Teorema de Lagrange

Definición 7 Si H es un subgrupo de un grupo G , definimos el **coset** (por la izquierda) asociado a un elemento cualquiera $a \in G$ como el conjunto

$$aH \equiv \{ah \mid h \in H\}.$$

El coset por la derecha Ha se define de forma análoga. Es inmediato probar que:

1. El coset aH coincide con H si y solo si $a \in H$,
2. Si $a \notin H$, la unidad e no pertenece a aH , de esto se sigue que el único coset de H que es subgrupo es el propio H .
3. Si G es finito, H y aH tienen el mismo número de elementos para todo $a \in G$, es decir:

$$|aH| = |H|.$$

La propiedad fundamental de los cosets es la siguiente:

Proposición: Sea H subgrupo de un grupo G , y sean a, b elementos de G . Entonces los correspondientes cosets aH , bH , o son iguales, o son disjuntos.

Demostración. En efecto, supongamos que $aH \cap bH \neq \emptyset$, y sea $g \in aH \cap bH$. Por definición de coset, existen dos elementos $h_1, h_2 \in H$ tales que

$$g = ah_1 = bh_2.$$

Entonces los cosets aH y bH son iguales, ya que

$$bH = a(h_1h_2^{-1})H = aH$$

en virtud de la primera propiedad 1 de los cosets (nótese que $h_1h_2^{-1} \in H$, al ser este conjunto un subgrupo).

□

En virtud de la proposición anterior, si H es un subgrupo cualquiera de un grupo (finito o infinito) G entonces G es una *unión disjunta de cosets* asociados al subgrupo H (es decir los cosets forman una partición de G). Si G (y,

por tanto, H) es finito, esto quiere decir que existen m elementos $a_1, \dots, a_m \in G$ tales que $a_i H \cap a_j H = \emptyset$ para todo $i \neq j$ y

$$G = \bigcup_{i=1}^m a_i H.$$

Al ser los cosets $a_i H$ disjuntos y $|a_i H| = |H|$, de la ecuación anterior se sigue que

$$|G| = m|H|.$$

Esto demuestra el siguiente teorema, probado por vez primera por Lagrange:

Teorema 1 Si G es un grupo finito y H es un subgrupo de G , el orden de H divide al de G .

Definición 8 Si G es un grupo finito y H es un subgrupo de G , el **índice** de H , $i(H)$, es el número de cosets de H , es decir (en virtud de la demostración del teorema de Lagrange) el cociente $|G|/|H|$.

De este teorema se sigue, que un grupo finito G de orden primo n es equivalente (es decir, isomorfo; cf. secciones siguientes) a C_n . Por que del teorema de Lagrange se sigue que G no posee subgrupos propios (es decir, distintos de $\{e\}$ y del propio G). Si $|G| > 1$ y $g \neq e$ es un elemento cualquiera de G , el conjunto

$$\{e, g, \dots, g^{m-1}\}, \quad \text{con } m = o(G),$$

es un subgrupo de G de orden $m > 1$, de donde se sigue que $m = n$. Por tanto

$$G = \{e, g, \dots, g^{n-1}\}$$

es equivalente a C_n , al ser $g^n = e$. En el ejemplo anterior los subgrupos de orden 2 y 3 eran cíclicos.

Para obtener la descomposición en cosets, se comienza eligiendo \mathcal{H} como el primer coset (con representante e). A continuación, se selecciona un elemento $g_2 \in \mathcal{G}$ con $g_2 \notin \mathcal{H}$ como representante del segundo coset $g_2 \mathcal{H}$. Para el tercer coset, se requiere un elemento $g_3 \in \mathcal{G}$ con $g_3 \notin \mathcal{H}$ y $g_3 \notin g_2 \mathcal{H}$. Si en cierta etapa los cosets $\mathcal{H}, g_2 \mathcal{H}, \dots, g_m \mathcal{H}$ han sido definidos pero no agotan \mathcal{G} , se elige un elemento g_{m+1} que no está contenido en la unión $\mathcal{H} \cup g_2 \mathcal{H} \cup \dots \cup g_m \mathcal{H}$ como representante del siguiente coset.

Ejemplo:

$$G = \textcolor{red}{6mm} = \{1, 2, 3^+, 3^-, 6^+, 6^-, m_{12}, m_{21}, m_{1-1}, m_{11}, m_{10}, m_{01}\}$$

$$H = \textcolor{blue}{6} = \{1, 6^+, 3^+, 2, 3^-, 6^-\} \quad \textcolor{blue}{16} = \{1, 6^+, 3^+, 2, 3^-, 6^-\} \quad m_{12}\textcolor{blue}{6} = \{m_{12}, m_{21}, m_{1-1}, m_{11}, m_{10}, m_{01}\}$$

$$\textcolor{red}{6mm} = \textcolor{blue}{6} \cup m\textcolor{blue}{6}$$

$$\textcolor{red}{6} = \textcolor{blue}{3} \cup 2\textcolor{blue}{3}$$

$$\textcolor{red}{6} = \textcolor{blue}{2} \cup 3\textcolor{blue}{2}$$

$$H = \textcolor{blue}{3m} = \{1, 3^+, 3^-, m_{12}, m_{21}, m_{11}\} \quad \textcolor{blue}{13m} \quad \textcolor{blue}{23m} = \{2, 6^+, 6^-, m_{1-1}, m_{10}, m_{01}\}$$

$$\textcolor{red}{6mm} = \textcolor{blue}{3m} \cup \textcolor{blue}{23m}$$

$$H = \textcolor{blue}{mm2} = \{1, 2, m_-, m_|\}$$

$$3^+\textcolor{blue}{mm2} = \{3^+, 6^-, m_-, m_|\} \quad 3^-\textcolor{blue}{mm2} = \{3^-, 6^+, m_-, m_|\}$$

$$\textcolor{red}{6mm} = \textcolor{blue}{mm2} \cup 3^+\textcolor{blue}{mm2} \cup 3^-\textcolor{blue}{mm2}$$

2.2.5 Relación de conjugación. Subgrupos normales y grupo cociente

Definición 9 Dados dos elementos a, b de un grupo G , se dice que b está **conjugado** con a si b es la imagen de a bajo la conjugación por algún elemento del grupo, es decir si

$$b = gag^{-1}$$

para algún $g \in G$. Escribiremos en tal caso $b \sim a$.

Es fácil ver que la relación \sim definida de este modo es una **relación de equivalencia**, es decir $\forall a, b, c \in G$ se cumple:

1. $a \sim a$ (reflexividad)
2. $b \sim a \iff a \sim b$ (simetría)
3. $a \sim b, b \sim c \implies a \sim c$ (transitividad)

Definición 10 La clase de conjugación de $a \in G$ es la clase de equivalencia bajo la conjugación a la que pertenece dicho elemento, es decir el conjunto $[a]$ dado por:

$$[a] = \{gag^{-1} \mid g \in G\}.$$

Nótese que, por definición:

$$b \in [a] \iff b \sim a. \quad b \in [a] \leftrightarrow [a] = [b]$$

Esto sugiere que las clases de conjugación también producen una partición de G .

Teorema 2 Un grupo cualquiera G es la unión disjunta de sus clases de conjugación. En otras palabras,

$$[a] \cap [b] \neq \emptyset \implies [a] = [b].$$

Demostración. En efecto,

$$c \in [a] \cap [b] \implies c \sim a, c \sim b \iff b \sim c, c \sim a \implies b \sim a \iff [a] = [b].$$

□

Como veremos un aspecto importante de los elementos conjugados en los grupos de simetría, es que comparten muchas propiedades, como el orden o el tipo de operación de simetría. Como consecuencia, las operaciones de simetría conjugadas tienen el mismo tipo de elementos geométricos.

Ejemplo: Las clases de conjugación permite distinguir los tipos de rotaciones y de reflexiones. Las rotaciones en cambio si se separan en función del ángulo de rotación, no distinguiendo el sentido de la rotación.

Pero las reflexiones solo se distinguen entre ellas por como están conjugadas con las demás reflexiones. Siendo que si un eje de reflexión esta relacionado con otro por una rotación de 6^\pm , entonces estos dos son equivalentes o conjugados. Por ejemplo en $[m_{12}]$, $6^+ m_{12} 6^- = m_{21} \rightarrow m_{12} \sim m_{21}$. Lo mismo para $[m_{1-1}]$.

$$[1] = \{1\} \quad [2] = \{2\} \quad [3] = \{3^+, 3^-\} \quad [6^+] = \{6^+, 6^-\} \quad [m_{12}] = \{m_{12}, m_{21}, m_{11}\} \quad [m_{10}] = \{m_{1-1}, m_{10}, m_{01}\}$$

□

2.2.6 Subgrupos normales

Definición 11 Un subgrupo H de un grupo G es normal ($H \triangleleft G$) si:

$$gHg^{-1} = H, \quad \forall g \in G.$$

Equivalentemente, H es un subgrupo normal si y solo si

$$gH = Hg, \quad \forall g \in G.$$

La expresión gHg^{-1} denota el conjunto de todos los elementos de la forma ghg^{-1} con $h \in H$, es decir:

$$gHg^{-1} = \{ghg^{-1} \mid h \in H\}.$$

Si se cumple que $gHg^{-1} = H$ para todo $g \in G$, significa que H es invariante bajo conjugación, lo que caracteriza a los subgrupos normales.

Propiedades de los subgrupos normales:

1. Si \mathcal{G} y \mathcal{H} están generados por un conjunto de elementos, entonces basta con verificar la condición de normalidad solo para los generadores. Es decir, si verificamos que:

$$g_i h g_i^{-1} \in \mathcal{H}$$

para cada generador g_i de \mathcal{G} y de \mathcal{H} , entonces la propiedad se extiende a todos los elementos de \mathcal{G} .

2. Un subgrupo H de un grupo G es normal si y solo si

$$h \in H \implies [h] \in H.$$

En otras palabras, un subgrupo $H \subset G$ es normal si y solo si H es la unión de clases de conjugación completas de G .

2.2.7 Grupo cociente

Si H es un subgrupo de un grupo G , parece natural definir un producto entre los cosets (por la izquierda) de H mediante la fórmula

$$aH \cdot bH = (ab)H.$$

¿Es esta definición correcta? Para que lo sea debemos comprobar que depende exclusivamente de los cosets aH y bH , y no de los elementos a y b que se han seleccionado implícitamente para describir dichos cosets. En otras palabras, debemos comprobar que

$$aH = a'H, \quad bH = b'H \implies aH \cdot bH = a'H \cdot b'H.$$

o equivalentemente:

$$aH = a'H, \quad bH = b'H \implies (ab)H = (a'b')H.$$

Para ello, nótese en primer lugar que

$$aH = a'H \iff a' = ah_1, \quad bH = b'H \iff b' = bh_2 \quad \text{con } h_1, h_2 \in H.$$

Por tanto,

$$(a'b')H = (ah_1bh_2)H,$$

que, en general es distinto de $(ab)H$.

Por lo que acabamos de ver, la condición necesaria y suficiente para que el producto “natural” de cosets esté bien definido es que se cumpla la condición, es decir:

$$(ah_1bh_2)H = (ab)H \iff ah_1bh_2 \in abH \iff b^{-1}h_1bh_2 \in H, \quad \forall b \in G, \quad \forall h_1, h_2 \in H.$$

$$b^{-1}h_1bh_2 \in H, \quad \forall b \in G, \quad \forall h_1, h_2 \in H. \quad (2.1)$$

Esta condición se cumple automáticamente si el subgrupo H es normal; de hecho, (2.1) es equivalente al carácter normal de H , como se deduce sin más que tomar $h_2 = e$. Por tanto, el producto de cosets de un subgrupo H está bien definido si y solo si H es normal.

Supongamos, en vista de lo anterior, que el subgrupo H es *normal*, y definamos el producto de cosets de H por $aH \cdot bH = (ab)H$. Es fácil comprobar entonces que el conjunto:

$$G/H = \{aH \mid a \in G\}$$

cuyos elementos son los cosets (por la izquierda) de H es un grupo respecto del producto que acabamos de definir. En efecto:

1. La propiedad asociativa es consecuencia de la asociatividad del producto en H :

$$(aH)(bH) \cdot cH \equiv (aH)((bc)H) = (a(bc))H = ((ab)c)H = ((ab)H) \cdot cH \equiv (aH \cdot bH)(cH).$$

2. La unidad de G/H es el subgrupo H , ya que

$$H \cdot aH \equiv eH \cdot aH \equiv (ea)H = aH, \quad \forall a \in G.$$

3. $(aH)^{-1} = a^{-1}H$.

Teniendo esto ya en consideración podemos definir el grupo cociente:

Definición 12 Si H es un subgrupo normal de un grupo G , el grupo cociente de G por H es el conjunto G/H de los cosets (por la izquierda) de H con el producto $aH \cdot bH = (ab)H$.

- Si G es un grupo finito, por el teorema de Lagrange G/H es un grupo finito de orden:

$$|G/H| = \frac{|G|}{|H|}$$

Ejemplo: Grupos Cociente de $6mm$. Lo primero es darse cuenta de que solo podemos dar los grupos cociente de subgrupos normales. Por ejemplo de 6 y 3.

$$6mm/6 \cong \mathbb{Z}_2$$

$$6mm/6 = \{6, m_{12}6\},$$

$$6 = \{1, 6^+, 3^+, 2, 3^-, 6^-\}, \quad m_{12}6 = \{m_{12}, m_{21}, m_{1-1}, m_{11}, m_{10}, m_{01}\}.$$

.	6	$m_{12}6$
6	6	$m_{12}6$
$m_{12}6$	$m_{12}6$	6

$$6mm/3 \cong V_4$$

$$6mm/3 = \{3, 23, m_{12}3, m_{1-1}3\},$$

$$3 = \{1, 3^+, 3^-\}, \quad 23 = \{2, 6^+, 6^-\},$$

$$m_{12}3 = \{m_{12}, m_{11}, m_{21}\}, \quad m_{1-1}3 = \{m_{1-1}, m_{10}, m_{01}\}.$$

.	3	23	$m_{12}3$	$m_{1-1}3$
3	3	23	$m_{12}3$	$m_{1-1}3$
23	23	3	$m_{1-1}3$	$m_{12}3$
$m_{12}3$	$m_{12}3$	$m_{1-1}3$	3	23
$m_{1-1}3$	$m_{1-1}3$	$m_{12}3$	23	3

2.2.8 Homomorfismos

Definición 13 Un homomorfismo entre dos grupos G y G' es una aplicación $\varphi : G \rightarrow G'$ que verifica

$$\varphi(gh) = \varphi(g)\varphi(h), \quad \forall g, h \in G.$$

Un isomorfismo es un homomorfismo biyectivo, y un automorfismo es un isomorfismo de un grupo G en sí mismo. En otras palabras, un homomorfismo es una aplicación $G \rightarrow G'$ que preserva el producto, y por tanto la estructura de grupo. En particular, dos grupos son isomorfos, $G \cong G'$, si son totalmente equivalentes desde el punto de vista de la teoría de grupos, constituyendo dos realizaciones distintas del mismo grupo abstracto, un cambio de etiquetas.

Proposición: Sea $\varphi : G \rightarrow G'$ un homomorfismo. Entonces se verifica:

1. $\varphi(e) = e'$, siendo e' la unidad de G' .
2. $\varphi(g^{-1}) = \varphi(g)^{-1}$, $\forall g \in G$.

Demostración.

1) Si $g \in G$ se tiene

$$\varphi(g) = \varphi(ge) = \varphi(g)\varphi(e) \implies \varphi(e) = e'.$$

2) Utilizando el apartado anterior se tiene

$$\varphi(g)\varphi(g^{-1}) = \varphi(gg^{-1}) = \varphi(e) = e' \implies \varphi(g^{-1}) = \varphi(g)^{-1}.$$

2.2.9 Representaciones

Definición 14 Sea G un grupo, y V un espacio vectorial complejo de dimensión finita. Una representación lineal de G en el espacio vectorial V es un homomorfismo $D : G \rightarrow GL(V)$. La dimensión de V como espacio vectorial se denomina dimensión de la representación D . Una representación se dice fiel si es inyectiva.

Definición 15 Sea V un espacio vectorial (de dimensión finita o infinita, real o complejo), y definamos:

$$GL(V) = \{f : V \rightarrow V \mid f \text{ lineal e invertible}\}.$$

Nótese que, por las propiedades de los homomorfismos, si D es una representación de G entonces

$$D(e) = I, \quad D(g^{-1}) = D(g)^{-1},$$

siendo $I : V \rightarrow V$ la aplicación identidad.

Definición 16 Una representación matricial de un grupo G es un homomorfismo $D : G \rightarrow GL(n, \mathbb{R})$.

Si $V = \mathbb{R}^n$ se identifica normalmente $GL(\mathbb{R}^n)$ con $GL(n, \mathbb{R})$, equiparando una aplicación lineal $A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ con su matriz en la base canónica de \mathbb{R}^n . Mediante esta identificación, podemos considerar las representaciones matriciales como un caso particular de las lineales.

$$GL(n, \mathbb{R}) = \{A \in M_{n \times n}(\mathbb{R}) \mid A \text{ es invertible}\},$$

De modo que podemos asociar a las operaciones de simetría de los grupos puntuales y espaciales con matrices de la aplicación lineal.

Ejemplo: Sea $D : 6mm \rightarrow GL(3, \mathbb{R})$ la representación matricial del grupo puntual $6mm$, asignamos a cada operación de simetría su correspondiente matriz:

$$\begin{aligned} D(1) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(3^+) &= \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(3^-) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(2) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ D(6^+) &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(6^-) &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(m_{110}) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(m_{100}) &= \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ D(m_{010}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(m_{1-10}) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(m_{120}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & D(m_{210}) &= \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

□

2.2.10 Acciones de grupo sobre conjuntos

Definición 17 Definición. Una acción de grupo de un grupo G sobre un conjunto $\Omega = \{\omega \mid \omega \in \Omega\}$ asigna a cada par (g, ω) un objeto $\omega' = g(\omega)$ de Ω tal que se cumplen las siguientes condiciones:

(i) Aplicar dos elementos g y g' del grupo consecutivamente tiene el mismo efecto que aplicar el producto $g'g$, es decir,

$$g'(g(\omega)) = (g'g)(\omega).$$

(Nótese que los elementos del grupo actúan desde la izquierda sobre los objetos en Ω , por lo que en un producto de dos o más elementos del grupo, estos se aplican de derecha a izquierda).

(ii) Aplicar el elemento identidad e de G no tiene efecto sobre ω , es decir,

$$e(\omega) = \omega, \quad \forall \omega \in \Omega.$$

Se dice que el objeto ω es movido a $g(\omega)$ por g .

Definición. Dos objetos $\omega, \omega' \in \Omega$ pertenecen a la misma órbita bajo G si existe $g \in G$ tal que $\omega' = g(\omega)$.

El conjunto

$$\mathcal{G}(\omega) := \{g(\omega) \mid g \in G\}$$

de todos los objetos en la órbita de ω se llama la órbita de ω bajo G .

El conjunto

$$S_G(\omega) := \{g \in G \mid g(\omega) = \omega\}$$

de los elementos del grupo que no mueven el objeto ω es un subgrupo de G llamado el *estabilizador* de ω en G .

Ejemplo: Acción de $6mm$ sobre los vértices de un hexágono, órbitas y estabilizadores.

$$6mm = \{1, 2, 3^+, 3^-, 6^+, 6^-, m_{12}, m_{21}, m_{1-1}, m_{11}, m_{10}, m_{01}\}$$

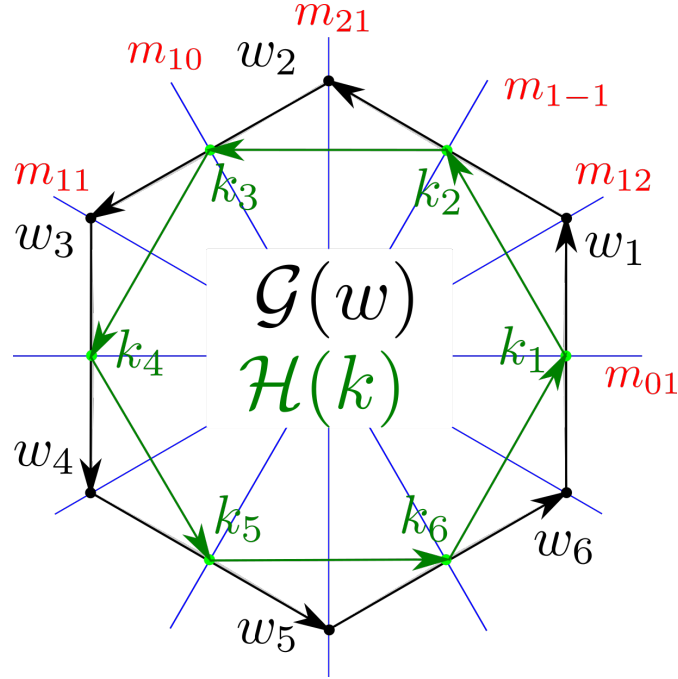


Figure 2.4: dos orbitas de 6mm

-Acción sobre los vértices de un hexágono.

Consideremos dos conjuntos de puntos distintos.

$$\Omega = \{\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6\}.$$

$$\beta = \{k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6\}.$$

Definimos una acción de grupo de $6mm$ sobre Ω y β haciendo que cada elemento de $6mm$ (rotación o reflexión) *mueva* un vértice ω_i a la posición correspondiente (por ejemplo, una rotación de 60° lleva $\omega_1 \mapsto \omega_2$, $\omega_2 \mapsto \omega_3$, etc., y una reflexión puede fijar un vértice y permutar los restantes).

-Órbita de un vértice.

Tomemos un vértice concreto, por ejemplo ω_1 . Dado que $6mm$ contiene rotaciones que abarcan todos los vértices (60° , 120° , etc.), la *órbita* de ω_1 es todo el conjunto de vértices:

$$\mathcal{G}(\omega) = \{\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, \omega_5, \omega_6\}.$$

Lo mismo para

$$\mathcal{H}(k) = \{k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6\}.$$

-Estabilizador de un vértice.

En el caso de la orbita de w , los estabilizadores son:

$$S_{6mm}(\omega) = \{1, m_{12}, m_{21}, m_{11}\},$$

En cambio para la orbita de k , los estabilizadores son los otros tipos de ejes

$$S_{6mm}(k) = \{1, m_{1-1}, m_{01}, m_{10}\},$$

□

2.3 Grupos puntuales cristalográficos

Para determinar que el número de grupos puntuales compatibles con la periodicidad de una red son exactamente 32, podemos seguir la recomendación de Kant y Platón para el método de todo saber en general. Debemos satisfacer dos leyes trascendentales de la razón, la de homogeneidad y la de especificación. La primera nos manda que, atendiendo a las semejanzas de las cosas, concibamos clases, y que a su vez, unifiquemos estas en especies y las especies en géneros. En cambio la ley de especificación exige que distingamos bien las especies unificadas en un concepto de género, guardándonos de dar cualquier salto¹.

Del infinito número de grupos puntuales que se pueden generar a partir de las rotaciones de $\frac{2\pi}{n}, n \in \mathbb{Z}^+$. Cabe restringir las rotaciones a $\{1, 2, 3, 4, 6\}$. La restricción a estas rotaciones es debido a la restricción cristalográfica, es decir, al problema de teselar el espacio:

Sea $R \in SO(3)$ la representación matricial de la rotación de ángulo $\frac{2\pi}{n}, n \in \mathbb{Z}^+$. Al ser una transformación ortogonal $R_{ik}R_{jk} = \delta_{ij}$ y eligiendo de manera conveniente los ejes, se sigue que las matrices de rotación tienen la forma:

$$R_{ij} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

La traza de una matriz se define como la suma de sus elementos diagonales:

$$\text{Tr}(R) = R_{ij}\delta_{ij}, \quad \longrightarrow \quad \text{Tr}(R) = 1 + 2 \cos \theta.$$

Seleccionando una base base de vectores, que generen la red², no necesariamente una base ortogonal ni unitaria, podemos notar que la traza es invariante transformaciones .

$$\tilde{X} = PX \quad \leftrightarrow \quad \tilde{R} = PRP^{-1} \quad \leftrightarrow \quad \text{Tr}(\tilde{R}) = \text{Tr}(R) = 1 + 2\cos\theta$$

En la base de la red, los puntos son del estilo $(z_1, z_2) \in \mathbb{Z}^2$. La operación de rotación debe mapear cada punto de la red en otro punto de la red. Necesariamente las entradas de la matriz de rotación en esta base son enteros. Y por tanto la traza. Por tanto:

$$1 + 2\cos\theta = z, \quad z \in \mathbb{Z}$$

$$\cos \theta = \frac{z-1}{2} \quad \leftrightarrow \quad -1 \leq \frac{z-1}{2} \leq 1 \quad -2 \leq z-1 \leq 2 \quad \leftrightarrow \quad -1 \leq z \leq 3$$

$$\begin{aligned} z = -1 &\Rightarrow \cos \theta = -1, & \theta &= \frac{2\pi}{2} + k2\pi \\ z = 0 &\Rightarrow \cos \theta = -\frac{1}{2}, & \theta &= \pm \frac{2\pi}{3} + k2\pi. \\ z = 1 &\Rightarrow \cos \theta = 0, & \theta &= \pm \frac{2\pi}{4} + k2\pi. \\ z = 2 &\Rightarrow \cos \theta = \frac{1}{2}, & \theta &= \pm \frac{2\pi}{6} + k2\pi. \\ z = 3 &\Rightarrow \cos \theta = 1, & \theta &= k\frac{2\pi}{1}. \end{aligned}$$

Cada rotación propia no trivial en tres dimensiones fija un único subespacio de \mathbb{R}^3 (eje de rotación). Cada una de estas rotaciones actúa como una rotación ordinaria en dos dimensiones en el plano ortogonal a este eje. Por tanto, con rotaciones en 2D se puede decir lo mismo. De manera similar, se puede demostrar que las rotoinversiones permitidas son $\bar{1}, \bar{2}, \bar{3}, \bar{4}$ y $\bar{6}$.

Acudiendo a argumentos geométricos más elaborados, se pueden construir los 32 grupos puntuales [5, pp. 11-14 y Appendix 1.B].

Sin embargo, ya obtenidos los 32 grupos, se podría pensar en demostrar la existencia y unicidad por contradicción, en vez de con un enfoque 'constructivista' como el anterior. Así es, se propone la existencia de un conjunto de n elementos, con estructura de grupo puntual cristalográfico diferente al resto y al encontrar que este necesariamente es uno de los 32 (Figura 2.5), se llega a una contradicción. Por tanto, lo que se había supuesto como verdadero (que existe un grupo puntual 33) es de hecho falso.

Si suponemos $P_{33} = \{1, p_1, p_2, \dots, p_n\}$ el grupo puntual cristalográfico 33. Por ser cristalográfico sus elementos se componen por tanto de rotaciones, rotoinversiones (de ángulo 1,2,3,4,6) y reflexiones. Es decir, no cabe encontrar ninguna operación de simetría nueva, no ya contenida en los 32 grupos. Si es P_{33} un grupo nuevo, sus elementos deben de ser una combinación de los de los grupos $m\bar{3}m$ y $6/mmm$. Esto se entiende al observar la figura 2.5 y darse cuenta que son los dos

¹Arthur Schopenhauer, Sobre la cuádruple raíz del principio de razón suficiente, Capítulo 1: "El método".

²Una red se puede definir como un conjunto de puntos o pares ordenados (m, n, r) tal que sus coordenadas respecto de una base son números enteros:

$$L_p = \{m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2 + r\vec{a}_3 \mid m, n, r \in \mathbb{Z}\}$$

únicos supergrupos. Por tanto podemos coger las operaciones de simetría en forma matricial de estos (teniendo en cuenta que están en diferentes bases³).

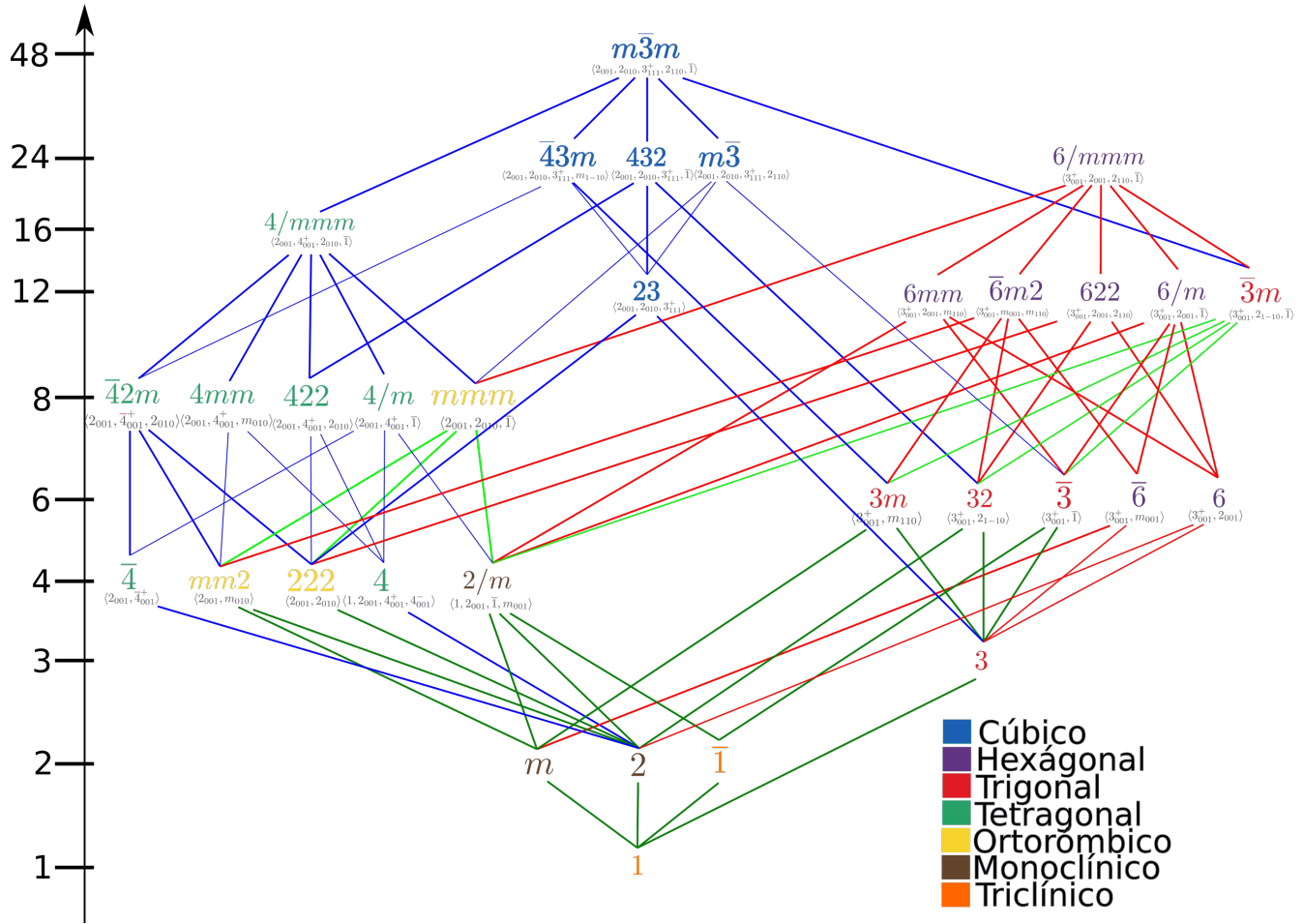


Figure 2.5: Relación grupo-subgrupo para los 32 grupos puntuales

De la unión de $m\bar{3}m$ y $6/mmm$, P_{33} puede ser una combinación de los 59 elementos⁴ (los elementos comunes de ambos grupos se presentan en verde):

$$m\bar{3}m \cup 6/mmm = \{1, -1, 2_{[100]}, 2_{[010]}, 2_{[001]}, 2_{[110]}, 2_{[1\bar{1}0]}, 2_{[101]}, 2_{[\bar{1}0,1]}, 2_{[011]}, 2_{[0\bar{1}\bar{1}]}, 2_{[210]}, 2_{[120]}\}$$

$$\begin{aligned} & 3_{[111]}^+, 3_{[111]}^-, 3_{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}^+, 3_{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}^-, 3_{[\bar{1}\bar{1}1]}^+, 3_{[\bar{1}\bar{1}1]}^-, 3_{[\bar{1}1\bar{1}]}^+, 3_{[\bar{1}1\bar{1}]}^-, 3_{[001]}^+, 3_{[001]}^- \\ & 4_{[100]}^+, 4_{[100]}^-, 4_{[010]}^+, 4_{[010]}^-, 4_{[001]}^+, 4_{[001]}^- \\ & 6_{[001]}^+, 6_{[001]}^- \\ & m_{(100)}, m_{(010)}, m_{(001)}, m_{(110)}, m_{(1\bar{1}0)} \\ & m_{(101)}, m_{(\bar{1}01)}, m_{(011)}, m_{(0\bar{1}\bar{1})} \\ & m_{(120)}, m_{(210)} \\ & 3_{[111]}^+, 3_{[111]}^-, 3_{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}^+, 3_{[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]}^-, 3_{[\bar{1}\bar{1}1]}^+, 3_{[\bar{1}\bar{1}1]}^-, 3_{[\bar{1}1\bar{1}]}^+, 3_{[\bar{1}1\bar{1}]}^- \\ & 3_{[001]}^+, 3_{[001]}^- \\ & 4_{[100]}^+, 4_{[100]}^-, 4_{[010]}^+, 4_{[010]}^-, 4_{[001]}^+, 4_{[001]}^- \\ & 6_{[001]}^+, 6_{[001]}^- \} = \langle 2_{001}, 2_{010}, 2_{110}, \bar{1}, 3_{111}^+ \rangle \cup \langle 2_{001}, 2_{110}, \bar{1}, 3_{001}^+ \rangle \end{aligned}$$

³https://www.cryst.ehu.es/cgi-bin/cryst/programs/nph-point_genpos?table=1

⁴Ya que el 1 es el elemento identidad y siempre está contenido en el grupo. En total se forman $\sum_{n=1}^{59} \binom{59}{n} = 5.76e+17$ conjuntos, no todos necesariamente tienen estructura de grupo evidentemente.

Al evaluar los conjuntos que se forman tanto con elementos de ambos conjuntos por separado y como combinación de elementos de ellos se llega al hecho de que **sí** se forman nuevos grupos. Sin ir más lejos. veamos esto en los grupos de orden 2. Los ya conocidos de orden 2 son:

$$\bar{1} = \{1, \bar{1}\} = \left\{ I, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad 2 = \{1, 2_{010}\} = \left\{ I, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad m = \{1, m_{010}\} = \left\{ I, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right\}$$

Sin embargo, se pueden formar al menos 17 grupos distintos. Por ejemplo 4 de estos:

$$\left\{ I, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} = \{1, m_{001}\} \quad \left\{ I, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} = \{1, m_{010}\} \quad \left\{ I, \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} = \{1, m_{100}\} \quad \left\{ I, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} = \{1, 2_{110}\}$$

Nos podemos convencer de esto notando que la condición de grupo, para conjuntos de dos matrices, es de hecho bastante laxa. Basta con que la matriz que no es la identidad sea su propio elemento inverso.

Vemos por tanto que si existen nuevos grupos diferentes (aún pudiendo pertenecer a la misma clase de conjugación) a los 32 ya conocidos, con perfecto sentido. Ya que los elementos que los componen son operaciones de simetría válidas.

Por tanto llegamos a una contradicción, P_{33} es cristalográfico $\wedge (P_{33} \notin \mathcal{P} = \{P_1, P_2, \dots, P_{32}\} \leftrightarrow P_{33}$ no es cristalográfico). Por tanto P_{33} no es cristalográfico. Solo cabe decir que un grupo es cristalográfico si es uno de los 32, aún habiendo más grupos puntuales que contienen operaciones de grupos cristalográficos y que por tanto satisfacen las condiciones de periodicidad de una red.

2.4 Grupos espaciales cristalográficos

Una operación de grupo espacial cristalográfico es una isometría que mapea un patrón cristalino sobre sí mismo. Dado que las isometrías son invertibles y la composición de dos isometrías deja el patrón cristalino invariante como un todo si las dos isometrías individuales lo hacen, las operaciones de grupo espacial forman un grupo \mathcal{G} , llamado un *grupo espacial cristalográfico*.

Una operación de grupo espacial se compone de una transformación lineal del espacio vectorial subyacente y una traslación. Una vez que se ha elegido un sistema de coordenadas, las operaciones de grupo espacial se representan convenientemente como pares matriz–columna (W, \mathbf{w}) , donde W es la parte lineal y \mathbf{w} la *parte de traslación*, y un punto con coordenadas \mathbf{x} se mapea a $W\mathbf{x} + \mathbf{w}$.

Una traslación es un par matriz–columna de la forma (I, \mathbf{w}) , donde I es la matriz unidad y todas las traslaciones tomadas juntas forman el subgrupo de traslación \mathcal{T} de \mathcal{G} . El subgrupo de traslación es un grupo infinito que forma un subgrupo de \mathcal{G} . El grupo cociente \mathcal{G}/\mathcal{T} es un grupo finito que es isomorfo con el grupo de partes lineales de \mathcal{G} vía la aplicación $(W, \mathbf{w}) \mapsto W$, que simplemente omite la parte de traslación. Estos grupos que contienen las partes lineales $\mathcal{P} = \{\mathbf{W} \mid (\mathbf{W}, \mathbf{w}) \in \mathcal{G}\}$ son los grupos puntuales cristalográficos ya analizados en la sección anterior.

2.4.1 Red cristalina

En este sentido cabe representar un patrón cristalino con el concepto matemático de red. Un conjunto de puntos $X \in \mathbb{R}^3$, es un cristal si y solo si L es discreto y $\text{sym}(L)$ ⁵ es grupo espacial cristalográfico. Más concreto, dada la base $\mathbb{B} = \{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mid \mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c} \in \mathbb{R}^3\}$, se define una red L como el conjunto de puntos tal les que:

$$L = \{ (l, m, n)_{\mathbb{B}} \mid l, m, n \in \mathbb{Z} \}$$

Los vectores de traslación de un patrón cristalino forman una red con base de red $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ en el sentido de la definición anterior. Por definición, una red está determinada por una base de red. Sin embargo, obsérvese que toda red tridimensional o bidimensional tiene infinitas bases.

Una red L puede utilizarse para subdividir \mathbb{R}^3 en celdas de volumen finito que todas tengan la misma forma. La idea es definir un subconjunto adecuado C de \mathbb{R}^3 tal que los traslados de C mediante los vectores en L cubran \mathbb{R}^3 sin superponerse. Tal subconjunto C se denomina celda unidad de L :

$$C = \{ (x, y, z)_{\mathbb{B}} \mid 0 \leq x, y, z < 1 \}$$

En este sentido, el grupo puntual describe las simetrías de la celda unitaria que se mantienen cuando se ignoran las traslaciones.

⁵ $\text{sym}(X)$ denota el grupo de isometrías del espacio euclidiano que dejan X invariante.

Ejemplo:

Bibliography

- [1] Artemio González López. *Simetrías y Grupos en Física: Notas de curso*. Madrid, enero de 2014.
- [2] Mois I. Aroyo (Ed.). *International Tables for Crystallography, Volume A: Space-Group Symmetry*. Sixth Edition, Wiley, 2014.
- [3] Bilbao Crystallographic Server. Disponible en: <https://www.cryst.ehu.es>.
- [4] Joseph A. Gallian. *Contemporary Abstract Algebra*. Ninth Edition, Cengage Learning, 2017.
- [5] C. Giacovazzo (Ed.). *Fundamentals of Crystallography*. Oxford University Press, 2002.