

## Las especies minerales y su simetría espacial

por J. L. BRIANSÓ \* y C. MIRAVITLLES \*\*

### RESUMEN

En el presente trabajo se estudia la simetría que poseen 739 especies minerales, distribuidas por sistemas cristalinos. Se realiza asimismo, el estudio de dicha simetría dentro de cada uno de los grupos minerales de acuerdo con la clasificación de Berry-Mason.

### SUMMARY

In the present work, the symmetry of 739 mineral species, classified into crystalline systems, are studied. The study of their symmetry within each mineral group according to the Berry-Mason classification is also carried out.

### INTRODUCCIÓN

NOWACKI y DONNAY (1954) y PERUCAUD (1973), realizaron un estudio sobre la frecuencia de aparición de los grupos espaciales en las especies minerales. El estudio de PERUCAUD se limitaba a los sistemas monoclinico y rómbico y además sólo incluían en sus estadísticas 153 especies minerales. Dado el interés que presenta la simetría como condicionante de las propiedades físicas de los cristales por un lado, y por otro el carácter centrosimétrico o no centrosimétrico de la estructura para los problemas que se derivan de los cálculos de resolución estructural, es interesante el estudio de la frecuencia de distribución de grupos espaciales entre las especies minerales.

En el trabajo de PERUCAUD anteriormente citado tenemos la siguiente distribución (Tabla 1):

Los autores del presente trabajo han realizado una serie de gráficas que recogen la distribución de minerales por sistemas cristalinos (seis en total al haber agrupado los sistemas hexagonal y romboédrico en uno solo), y dentro de cada una de ellas se marcan los grupos espaciales cuya frecuencia es más alta (más de cinco especies minerales).

En la fig. 1, tenemos representados la distribución de 64 especies minerales triclinicas por grupos espa-

GRUPO	MINERAL	ORGÁNICO	TOTAL
Pmc <sub>21</sub>	0	2	2
Pca <sub>21</sub>	2	16	18
Pmn <sub>21</sub>	7	4	11
Pbn <sub>21</sub> (Pna <sub>21</sub> )	4	11	15
P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>	21	123	144
P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub>	2	35	37
P222 <sub>1</sub>	1	3	4
P2 <sub>1</sub> /c	90	265	355
P2 <sub>1</sub> /m	17	17	34
P2 <sub>1</sub>	9	118	127

Tabla 1.—Frecuencia de aparición de grupos espaciales rómbicos y monoclinicos, en compuestos minerales y orgánicos, de acuerdo con PERUCAUD (1973).

ciales, P 1 y P  $\bar{1}$ . La proporción de miembros en el grupo centrosimétrico P  $\bar{1}$  es muy superior a la del no centrosimétrico P 1 (relación aproximada 7: 1). (fig. 1).

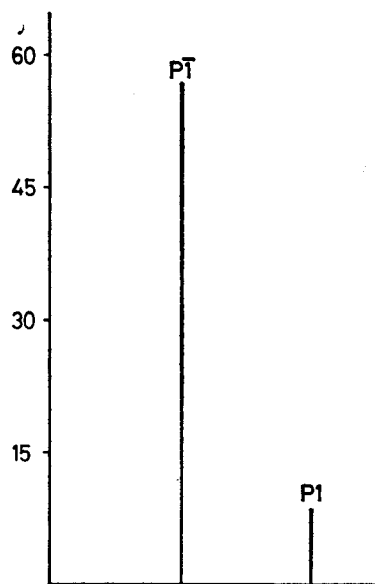


FIG. 1.—Distribución de especies minerales por grupos espaciales triclinicos.

\* Departamento de Cristalografía y Mineralogía de la Universidad Autónoma de Barcelona.

\*\* Sección de Cristalografía del Instituto "Jaime Almera" de Investigaciones Geológicas del C.S.I.C. (Barcelona).

En los siguientes sistemas cristalinos las posibilidades de combinación de redes con elementos de simetría son más amplias que en el sistema triclinico, por lo tanto hemos de esperar con encontrarnos con más grupos espaciales entre los cuales van a distribuirse las restantes especies minerales.

El número de minerales monoclinicos utilizados en la fig. 2 es 174. Del estudio de dicha gráfica vemos que el número de compuestos minerales centrosimétricos es mucho más elevado que el de los no centrosimétricos. Dentro de los primeros aparecen destacados los grupos espaciales:  $P2_1/c$ ,  $C2/m$  y

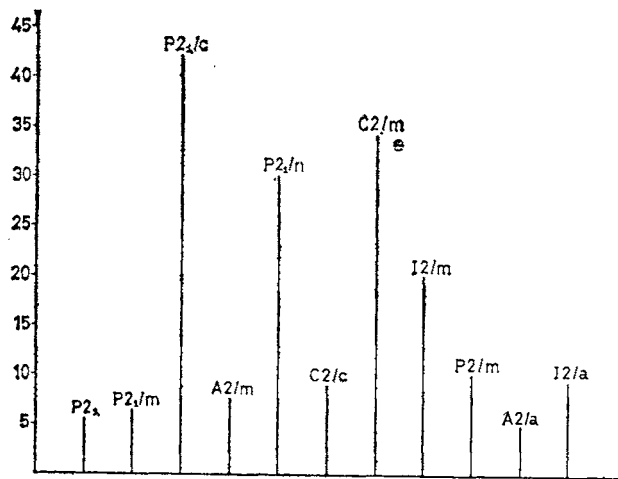


FIG. 2. — Distribución de especies minerales por grupos espaciales monoclinicos.

$I2/m$ . Con una frecuencia de aparición superior a cinco sólo encontramos el grupo  $P2_1$ , dentro de los grupos con carácter no centrosimétrico (fig. 2).

Una distribución parecida a la anterior la encontramos entre las especies minerales rómbicas. Sobre un total de 104 minerales, 10 cristalizan en grupos exentos de centro de simetría (grupos espaciales

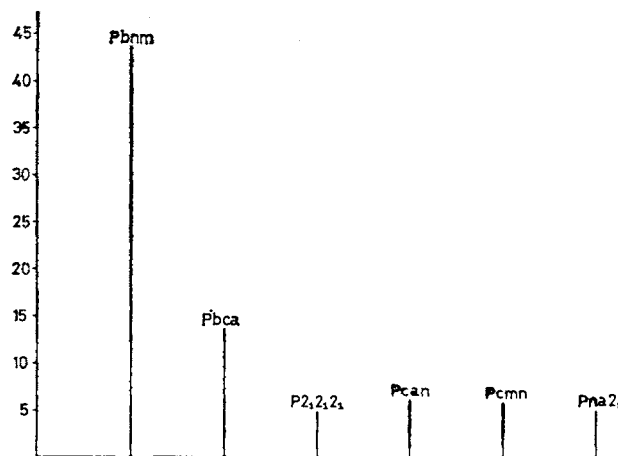


FIG. 3. — Distribución de especies minerales por grupos espaciales rómbicos.

$P2_12_12_1$  y  $Pna2_1$ ) los otros minerales lo hacen siempre con simetría centrada. De estos últimos grupos el más numeroso es el  $Pbnm$ . En la fig. 3 recogemos lo anteriormente señalado.

En el sistema tetragonal, la distribución de grupos es más uniforme que en los casos anteriores. Los 79 minerales se reparten entre 7 grupos espaciales, de los cuales 5 proceden de la clase holoédrica y de la clase paramórfica, siendo los grupos más numerosos los:  $P4_2/mmm$  y el  $I4/mnm$ . Los grupos sin centro de simetría son los:  $P\bar{4}2_1m$  y el  $P4_12_12$ . Estos grupos y los restantes aparecen en la fig. 4.

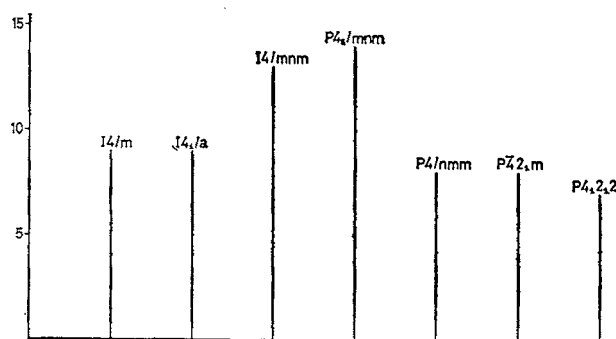


FIG. 4. --- Distribución de especies minerales por grupos espaciales tetragonales.

En la fig. 5, tenemos representada la distribución de los grupos espaciales más frecuentes de las especies que cristalizan en los sistemas Hexagonal y Romboédrico.

Lo mismo que en las figuras anteriores aparece clara la preponderancia de los grupos centrosimétricos sobre los no centrosimétricos. En el sistema hexagonal el grupo más frecuente es el  $P6_3/mmc$  y entre los romboédricos el  $R\bar{3}m$ . Gran número de especies minerales aparecen con grupos asignados de forma imprecisa o incluso sin grupo espacial fijo, por lo que hemos añadido la columna con interrogante como

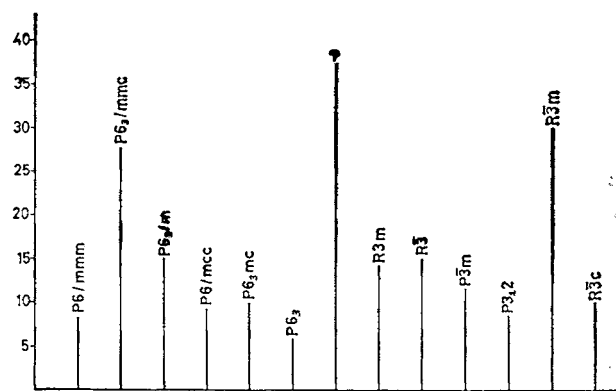


FIG. 5. — Distribución de especies minerales por grupos espaciales hexagonales y romboédricos.

muestra de toda la labor de investigación que aún puede desarrollarse dentro de este campo. Señalamos finalmente que el número de especies minerales relacionadas es de 189.

La fig. 6, se refiere a las especies cúbicas, con un total de 129 especies minerales. Los grupos derivados de la holodría son mayoritarios tal como demuestra el número de minerales que cristalizan de acuerdo con la simetría espacial de  $Fd\bar{3}m$  y  $Fm\bar{3}m$ . Así pues lo mismo que en los sistemas cristalinos anteriores el carácter centrosimétrico predomina sobre el no centrosimétrico.

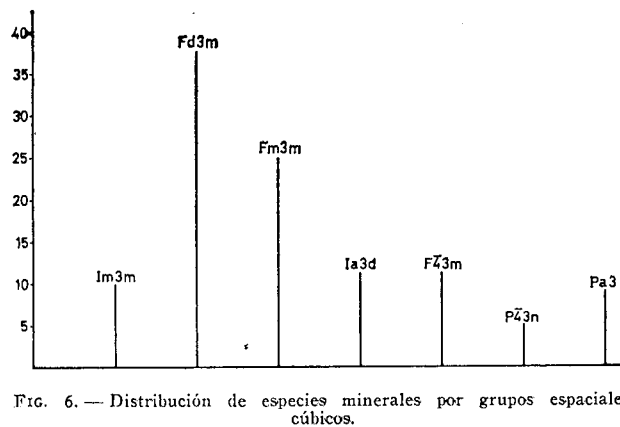


FIG. 6. — Distribución de especies minerales por grupos espaciales cúbicos.

Si en vez de establecer las distribuciones de grupos espaciales por sistemas cristalinos, estudiamos la distribución de grupos espaciales centrosimétricos y no centrosimétricos por grupos minerales, siguiendo la clasificación mineralógica dada por Berry-Mason, obtenemos, barajando 187 especies minerales, la tabla 2 que presentamos a continuación.

Clase	Simetría	0	10	20	30	40	50	Total	
ELEMENTOS NATIVOS	n.c.	[Bar chart showing 0 bars]						0	11
	c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						11	11
SULFUROS	n.c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						7	32
	c.	[Bar chart showing 1 bar at 10, 1 bar at 20, 1 bar at 30]						25	32
OXIDOS, HIDROXIDOS	n.c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						2	25
	c.	[Bar chart showing 1 bar at 10, 1 bar at 20, 1 bar at 30]						23	25
HALOGENUROS	n.c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						0	7
	c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						7	7
CARBONATOS, NITRATOS, BORATOS	n.c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						0	18
	c.	[Bar chart showing 1 bar at 10, 1 bar at 20]						18	18
SULFATOS, CROMATOS, MOLIBDATOS, WOLFRAMATOS	n.c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						1	16
	c.	[Bar chart showing 1 bar at 10, 1 bar at 20]						15	16
FOSFATOS, ARSENIATOS, VANADATOS	n.c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						0	16
	c.	[Bar chart showing 1 bar at 10, 1 bar at 20, 1 bar at 30]						16	16
SILICATOS	n.c.	[Bar chart showing 1 bar at 10]						10	62
	c.	[Bar chart showing 1 bar at 10, 1 bar at 20, 1 bar at 30, 1 bar at 40, 1 bar at 50]						52	62
								187	

Tabla 2. — Estadística de simetría para 187 especies minerales, clasificadas por clases minerales de acuerdo con BERRY-MASON (n.c. = no centrosimétrico; c = centrosimétrico).

## CONCLUSIONES

De acuerdo con las figs. 1 a la 6 tenemos que de las 739 especies minerales, 139 cristalizan en grupos espaciales no centrosimétricos y 600 lo hacen en grupos con centro de simetría. Ello representa que aproximadamente el 19 % de los minerales tienen clases puntuales tridimensionales no centrosimétricas (tetraedrias, hemiedrias hemimórficas y enantiomórficas), y el resto alrededor del 81 %, proceden de las clases holodricas y hemiedricas paramórficas.

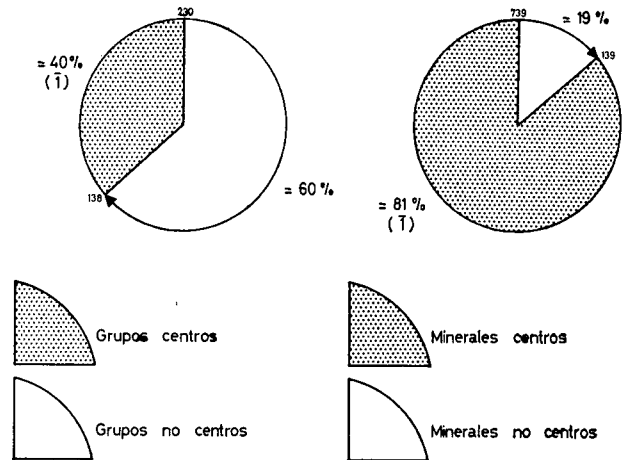


FIG. 7. — Estadística de grupos espaciales centro y no centrosimétricos y de especies minerales centro y no centrosimétricas.

Por otro lado, de acuerdo con las tablas Internacionales de Cristalografía vol. I, de 230 grupos espaciales posibles, 138 no son centrosimétricos mientras que sólo 92 poseen centro de simetría.

De todo ello se deduce, fig. 7, que ambas estadísticas están invertidas, pues a mayor número de gru-

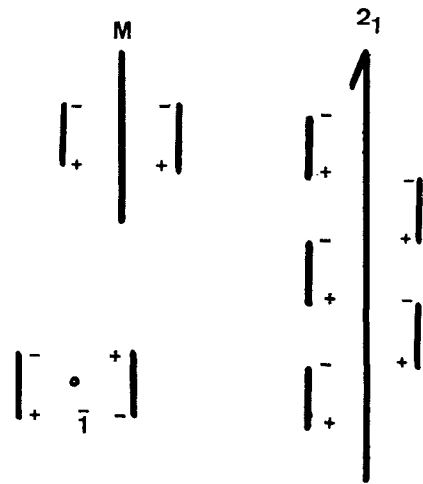


FIG. 8. — Disposición de cargas eléctricas de acuerdo con diversos elementos de simetría.

pos espaciales no centrosimétricos corresponden menor número de especies minerales no centrosimétricas.

Las posibles causas de dicha estadística son las siguientes:

1.º La naturaleza parece preferir una disposición lo más simétrica posible. El centro de simetría condiciona un ensamblaje más simple y estable.

2.º En los cristales iónicos, la neutralidad del campo eléctrico hace necesaria la existencia del centro de simetría del eje helicoidal (fig. 8).

3.º En los cristales metálicos e iónicos los grupos espaciales son los  $Fm\bar{3}m$ ,  $Im\bar{3}m$  y  $PG_3/mcm$  que son precisamente los que dan estructuras más compactas (74 %, 69 %, 74 % del volumen de la celda elemental ocupada).

4.º Los cristales iónicos, al ser una alternancia de cargas positivas y negativas, pueden presentar si-

metría más alta. En cambio en los cristales covalentes al poseer enlaces dirigidos, estas direcciones de enlace condicionan la simetría en el sentido de reducirla, perdiendo por tanto el cristal elemento de simetría, entre ellos el centro de simetría.

#### BIBLIOGRAFÍA

BERRY-MASON (1959). -- Mineralogy. W. H. Freeman and Co. San Francisco (USA).

DONNAY, DONNAY, COX, KENNARD, KING (1963). -- Crystal data. Determinative Tables.

International Tables for X-ray Crystallography (1952).

NOWACKI, y DONNAY (1954). -- Crystal data, classification of substances by space groups and their identification from cell dimensions.

PÉRUCAUD (1973). -- Tesis Doctoral, París, C.N.R.S. - A.O. 8779.

---

Recibido para su publicación: diciembre 1975.