



Sólidos cristalinos

Química Analítica Inorgánica

¿Qué son los cristales?

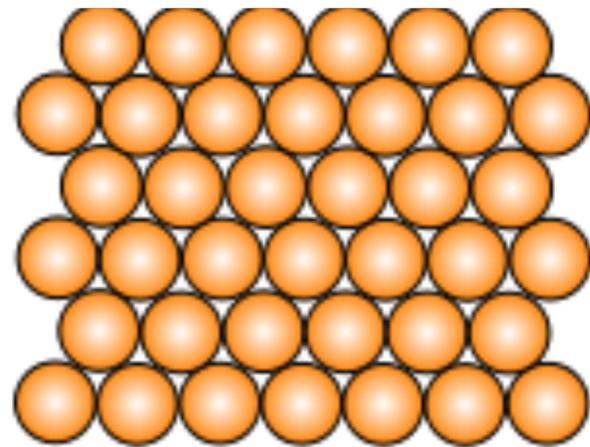
Material sólido, cuyos constituyentes (átomos, moléculas o iones), se encuentran arreglados en una estructura altamente ordenada, formando una red cristalina que se extiende en todas las direcciones.

Usualmente son identificados por su forma geométrica, que consiste en caras planas con orientaciones específicas y características

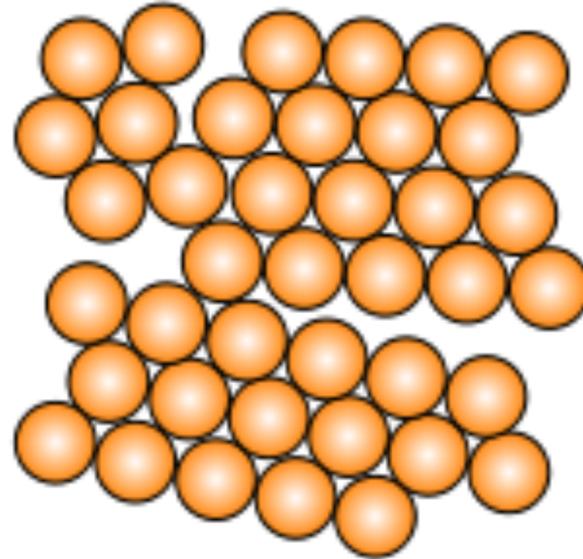


- No todos los sólidos son cristales
- Cristalización del agua - policristales - policristalino
- Cada cristal (que conforma el policristal) tiene arreglo periódico
- Sólidos que no son cristalinos ni policristalinos son sólidos amorfos o vítreos, o no cristalinos

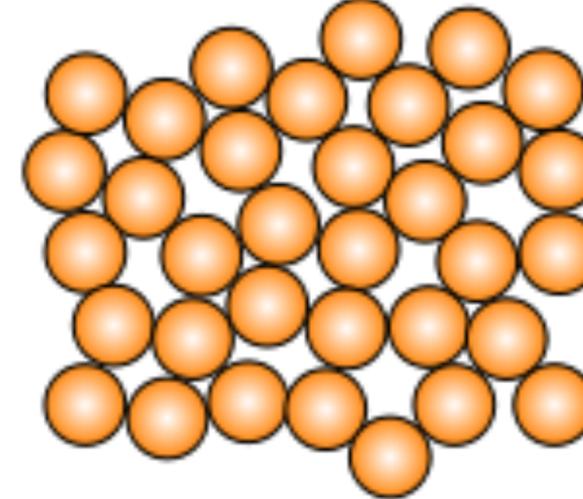
Monocristalinos



Policristalinos

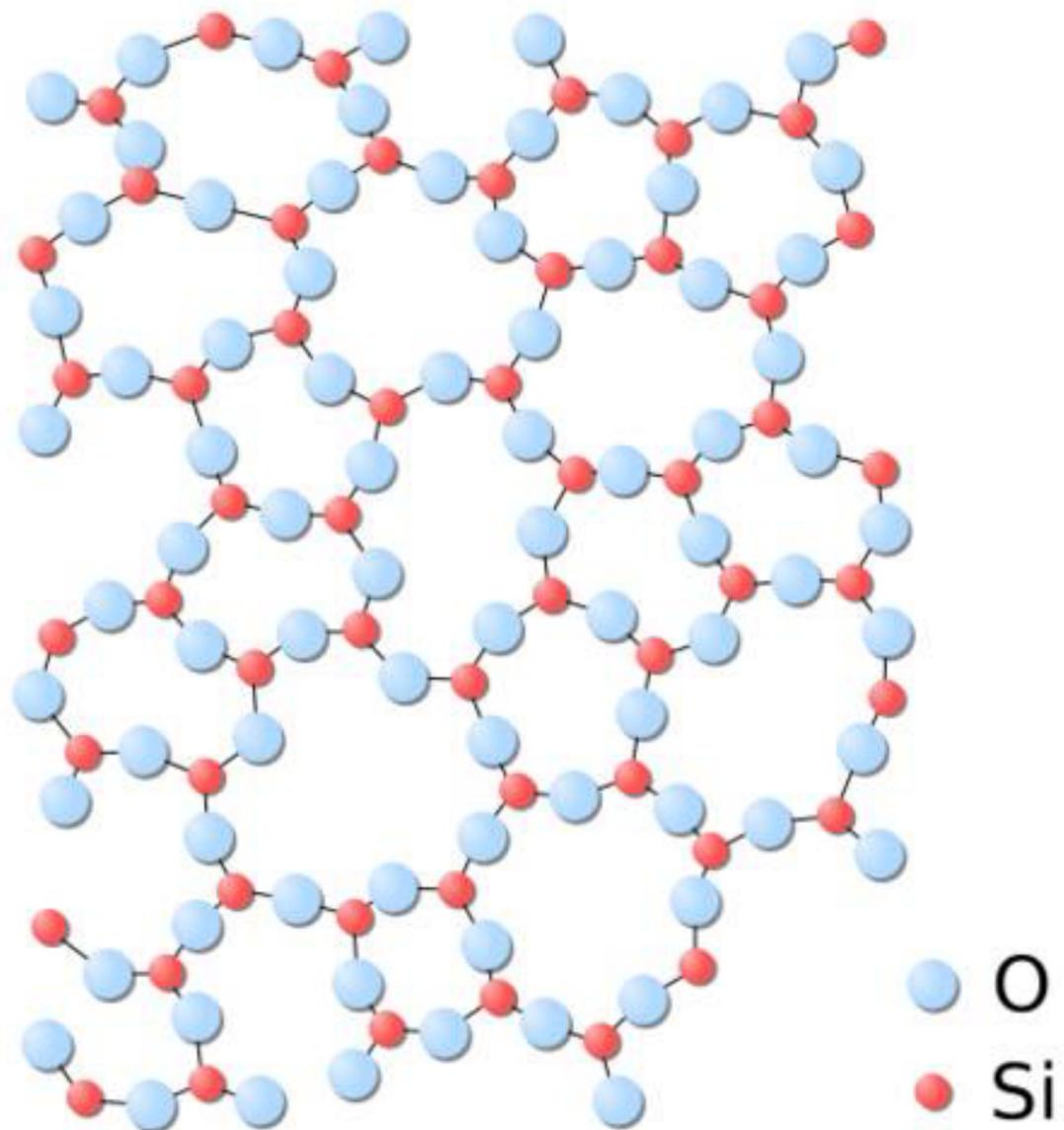


Amorfos



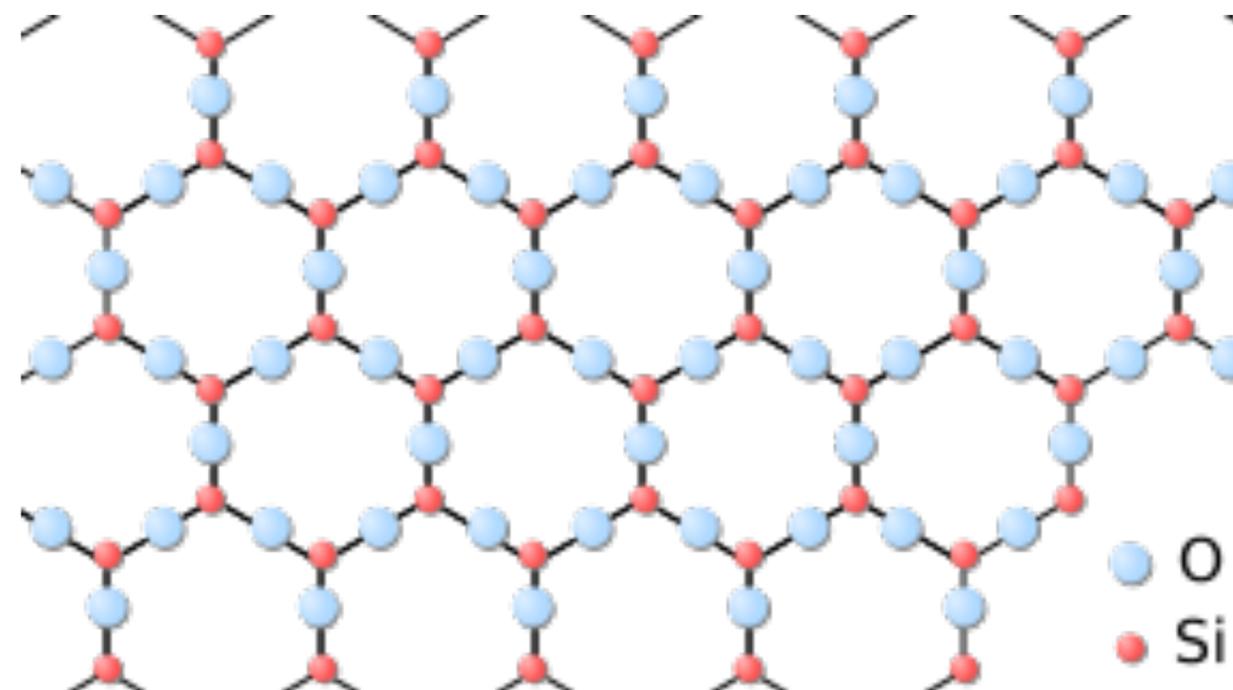
No todos los compuestos químicos con la misma composición son cristales

Vidrio

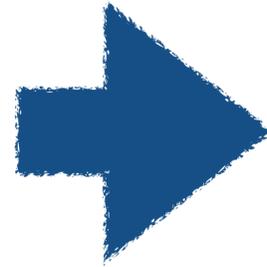
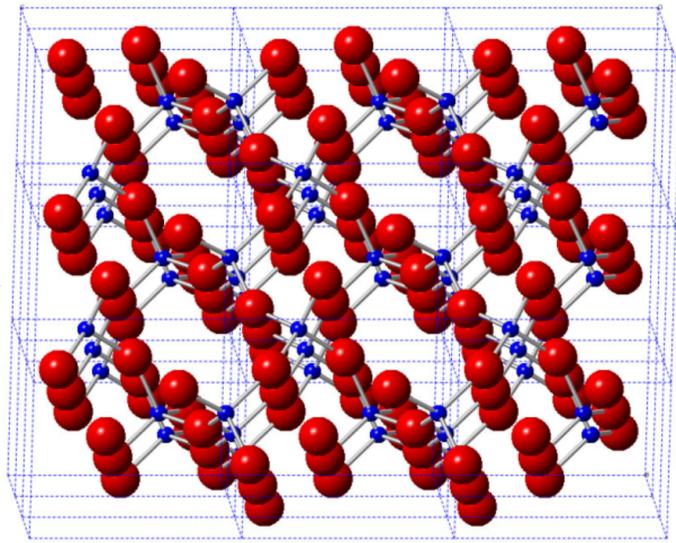
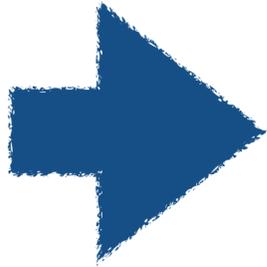
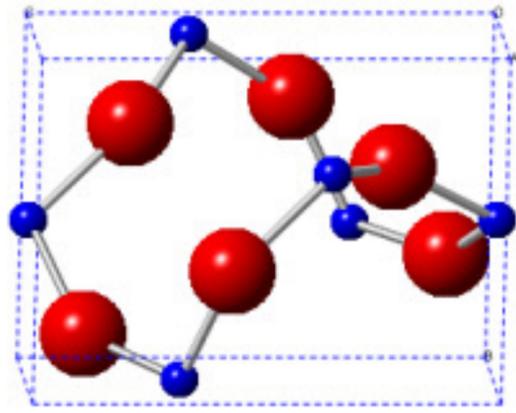


vs

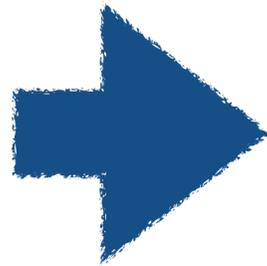
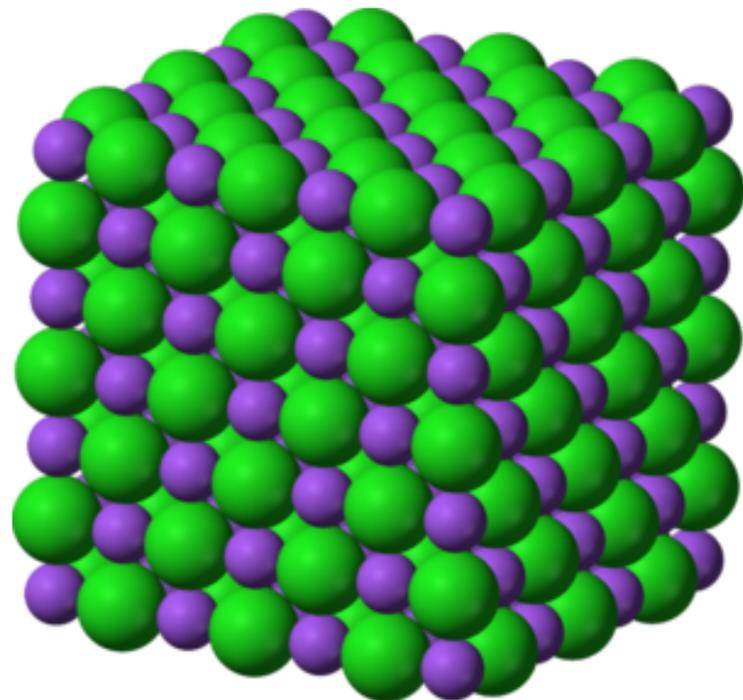
Cuarzo



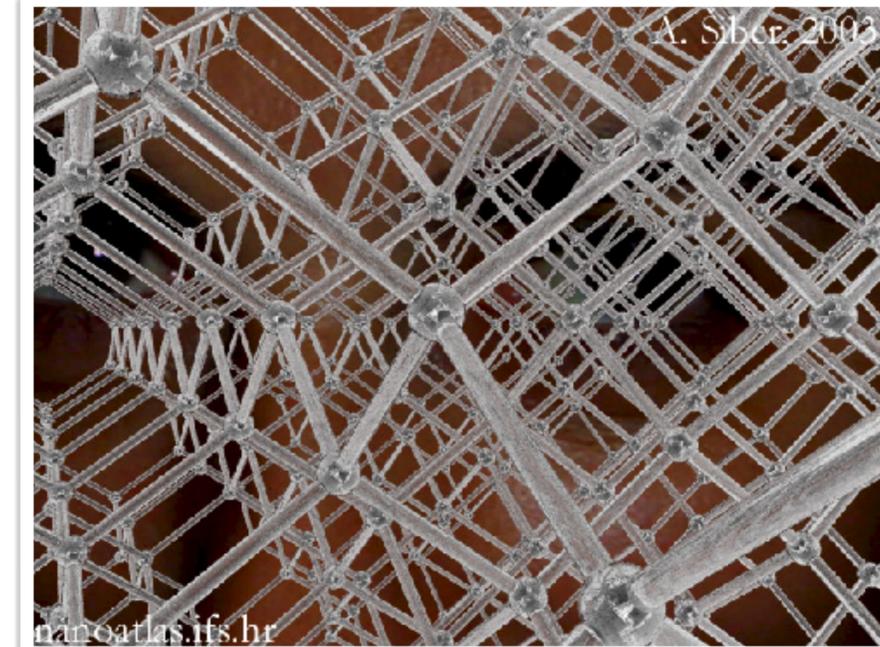
SiO₂



NaCl



Estructura cristalina



En mineralogía y cristalografía, la estructura cristalina es un arreglo único de átomos, iones o moléculas en un líquido o sólido cristalino.

Describe una estructura altamente ordenada

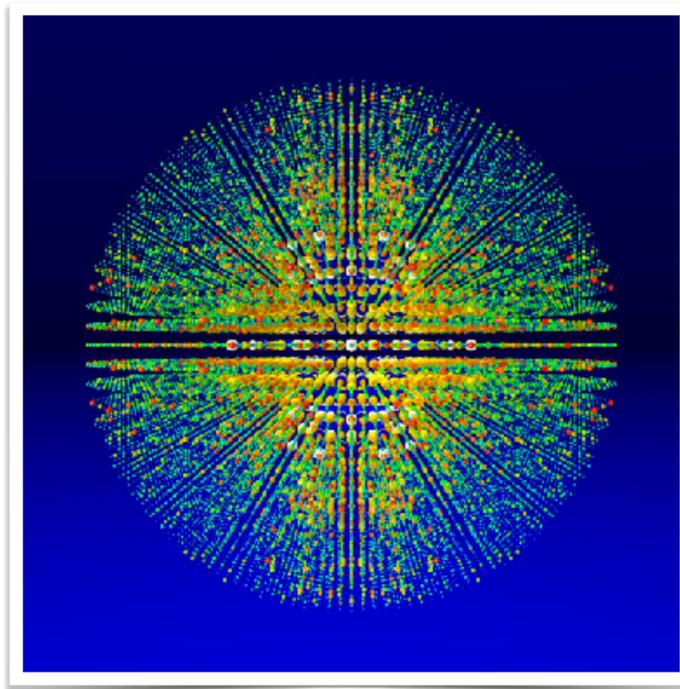


Se da por la naturaleza intrínseca de los constituyentes para formar patrones simétricos

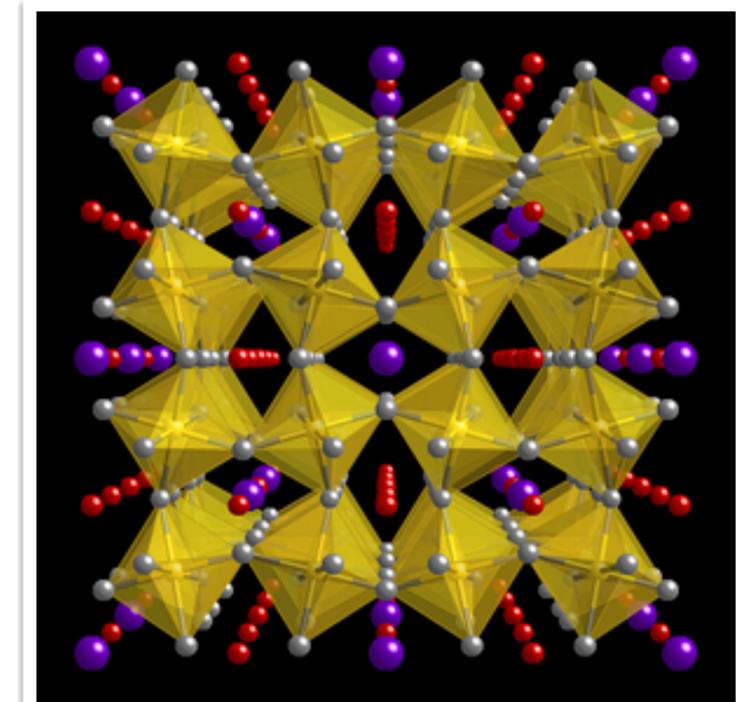
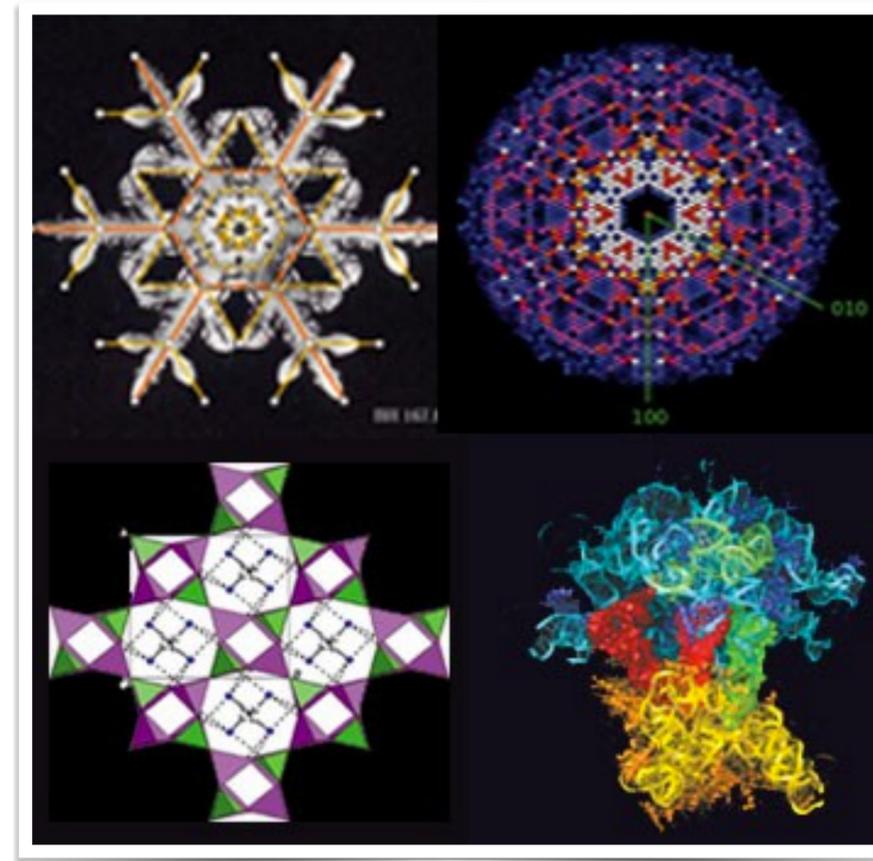
Cristalografía



Es la ciencia experimental de determinar el arreglo de átomos, iones, moléculas en sólidos cristalinos



Patrón en 3D

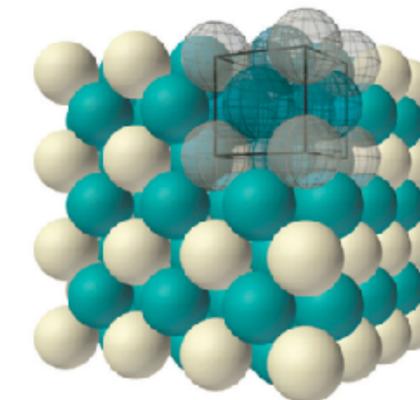
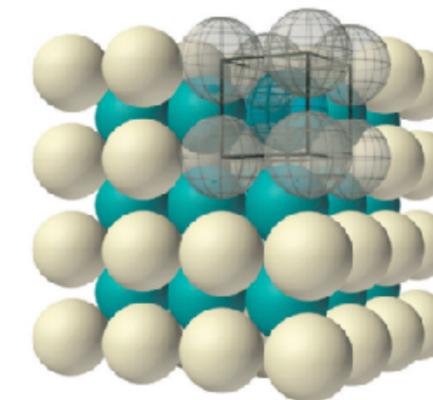
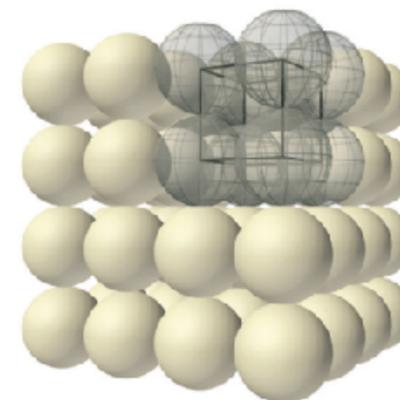
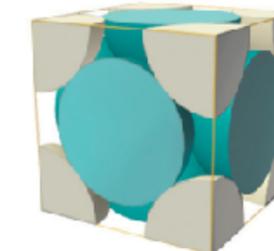
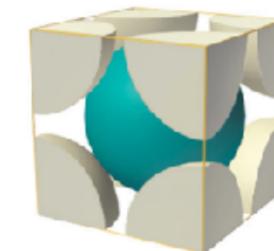
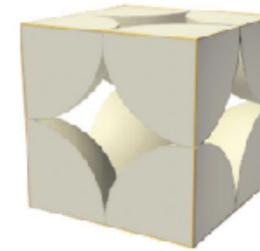
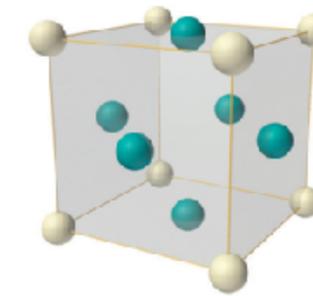
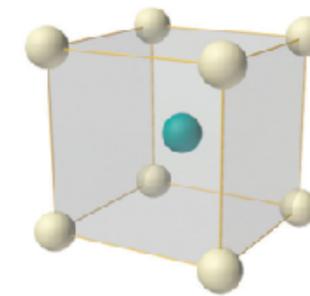
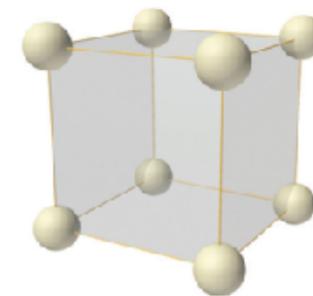
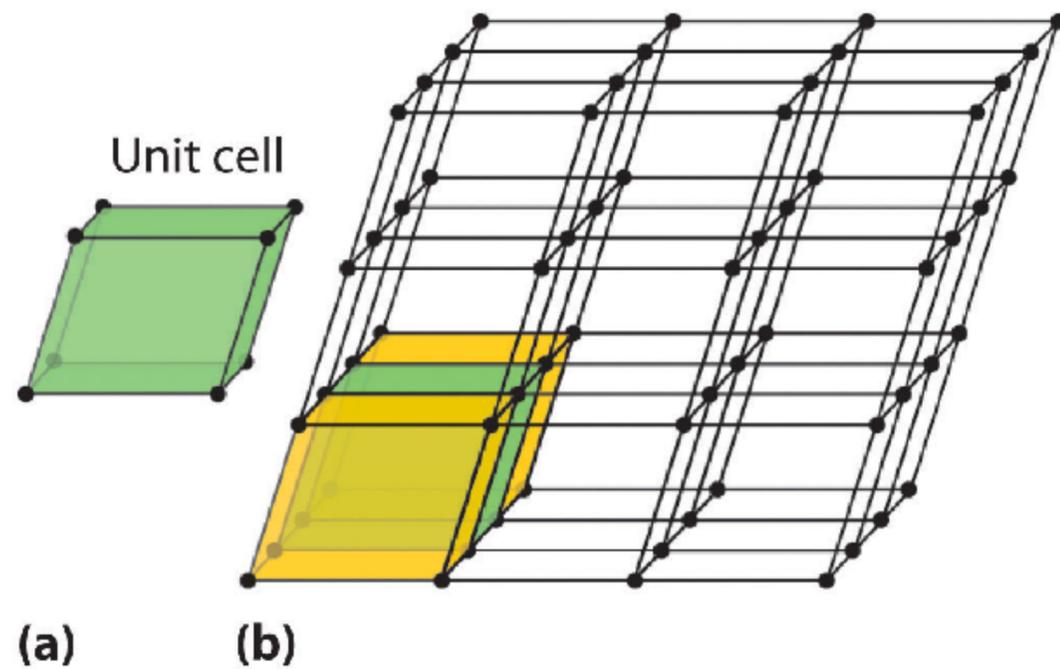


Perovskita, $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$

La estructura cristalina está caracterizada por su

Celda Unidad

Es la estructura más pequeña que por traslación se repite en todo el cristal



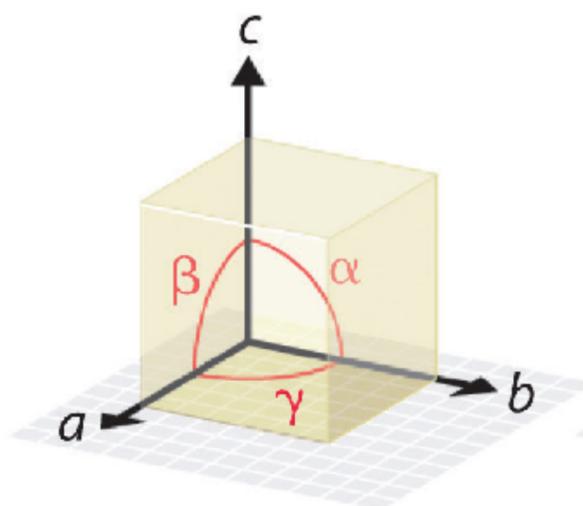
(a) Simple cubic

(b) Body-centered cubic

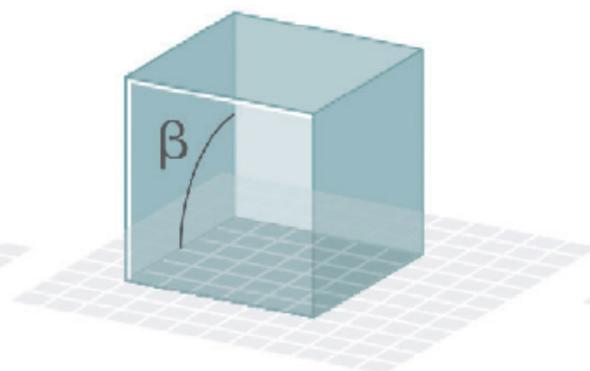
(c) Face-centered cubic

Hay 7 tipos diferentes de celdas unidades

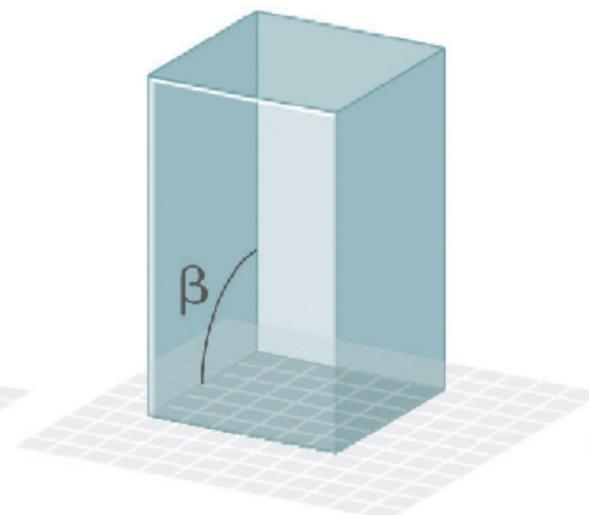
Difieren en los tamaños relativos de los bordes y de los ángulos entre ellos



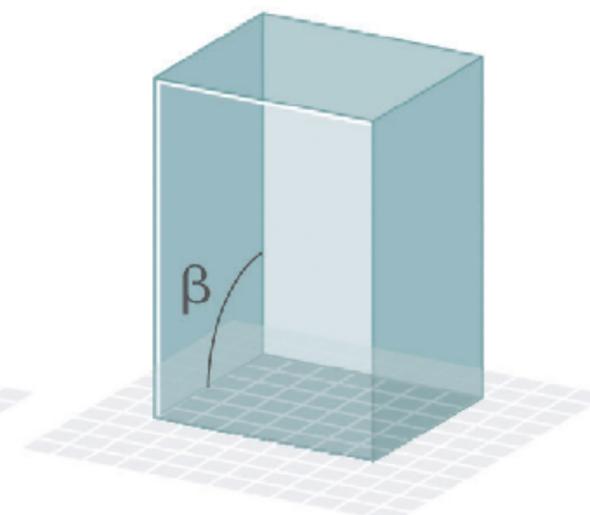
Edges and angles



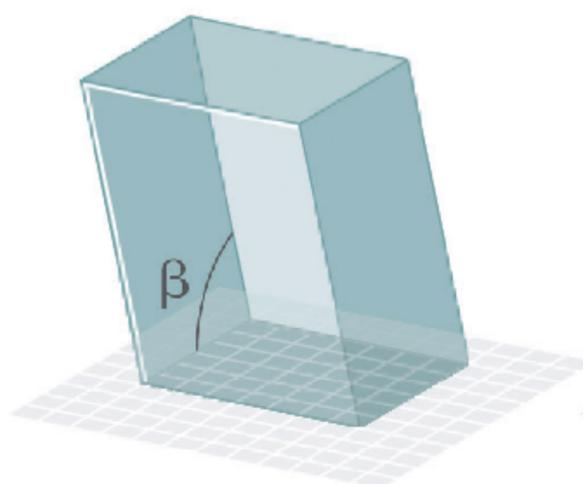
Cubic
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



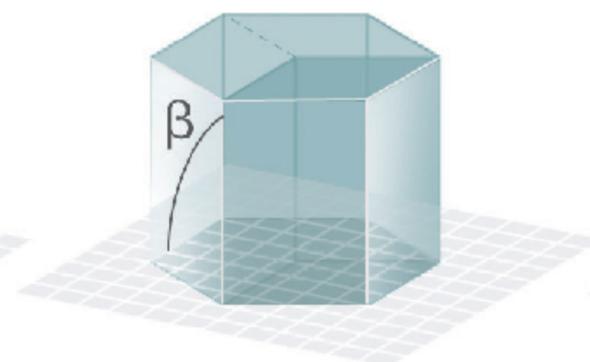
Tetragonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



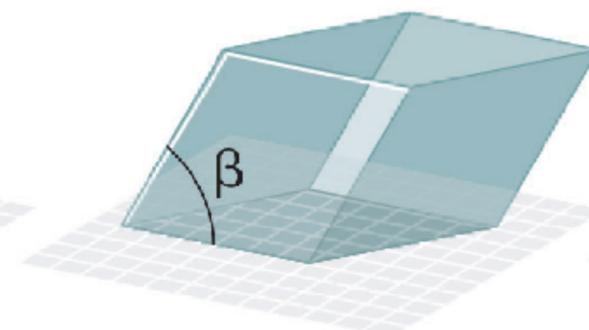
Orthorhombic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



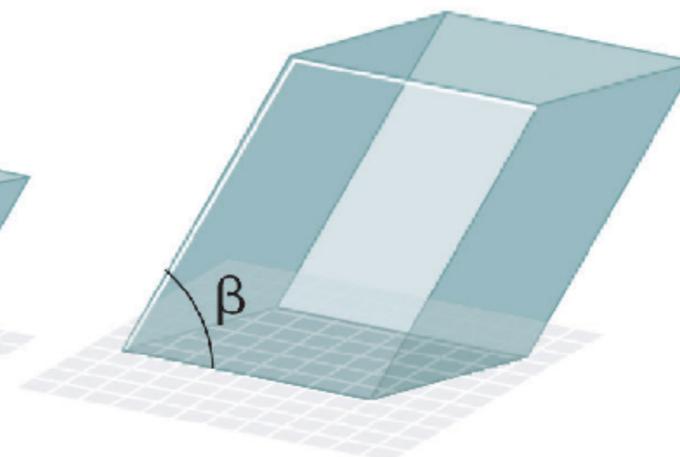
Monoclinic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$



Hexagonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

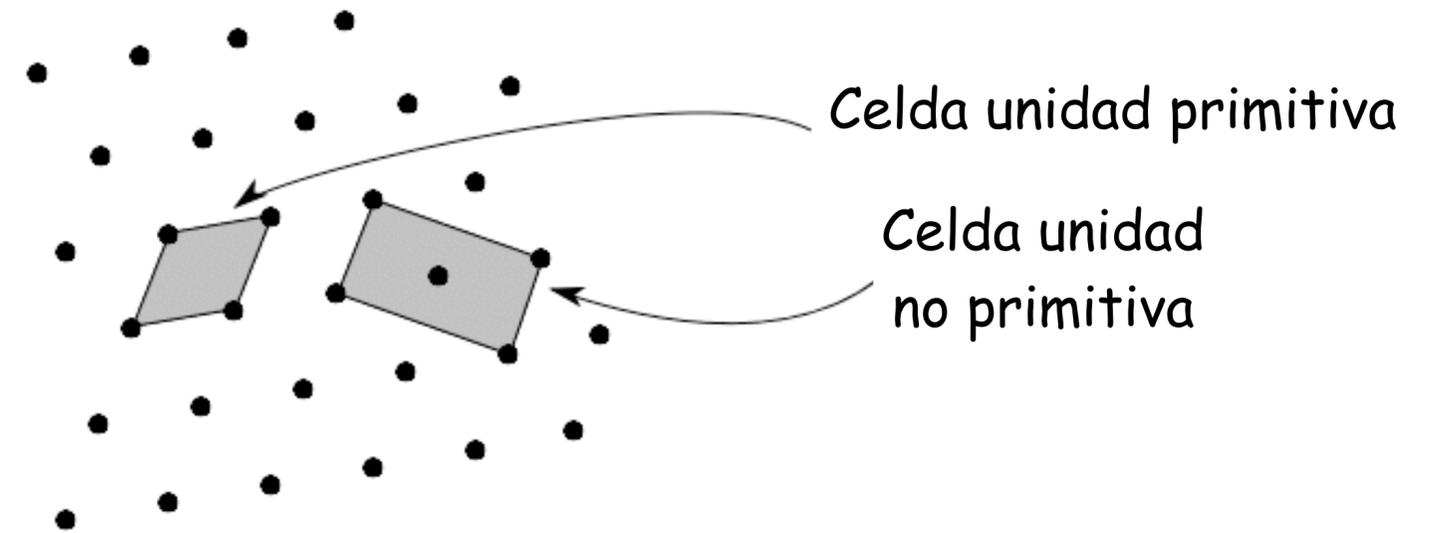
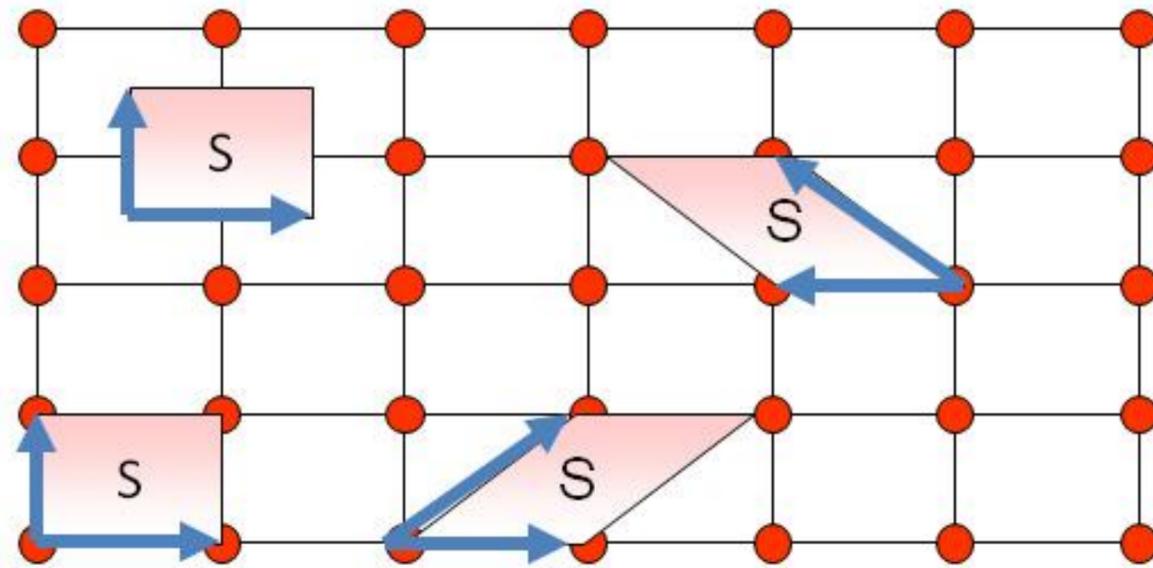


Rhombohedral
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



Triclinic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Para un mismo patrón: hay muchas opciones de celdas unidad



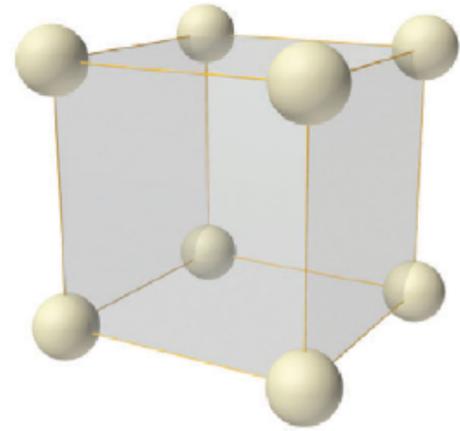
Celda centrada:

está permitido tener puntos reticulares (átomos, moléculas, iones) dentro de la celda

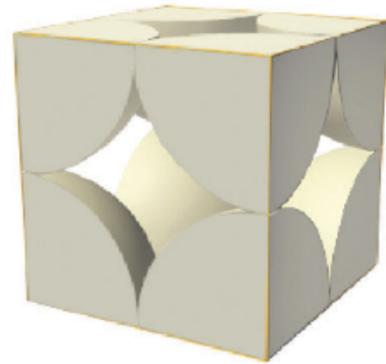
Celda primitiva:

celda con puntos reticulares únicamente en los vértices

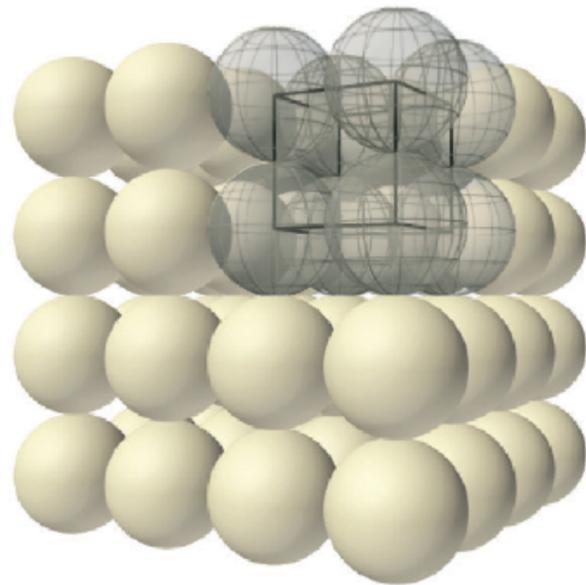
Los tres tipos de celda unidad cúbicas



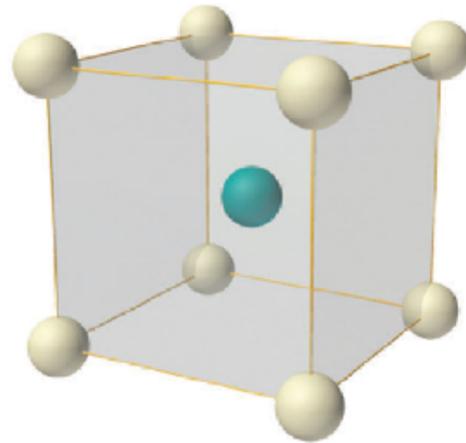
Si la celda unidad cúbica contiene 8 componentes (átomos, moléculas o iones), localizados en las esquinas, entonces la celda se llama:



Cúbica Simple



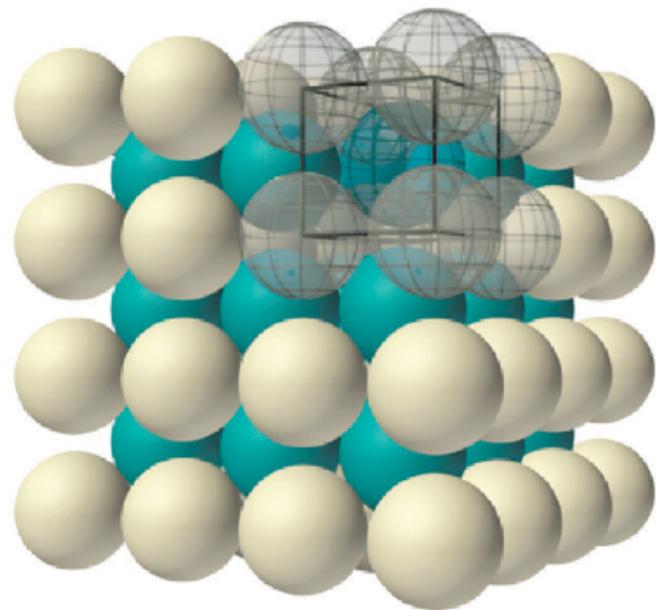
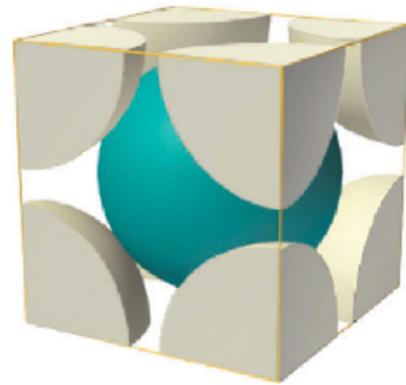
(a) Simple cubic



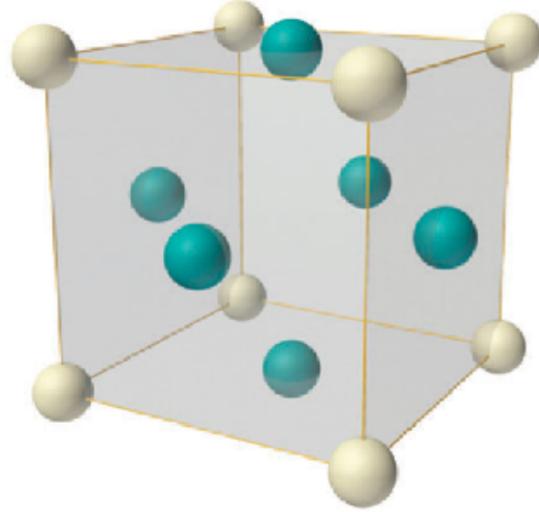
Si la celda unidad además contiene un componente idéntico en el centro del cubo, entonces, la celda se llama:

Cúbica Centrada en el Cuerpo

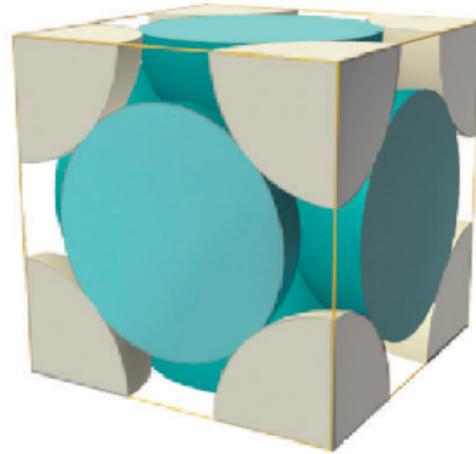
o bcc
de body-centered cubic



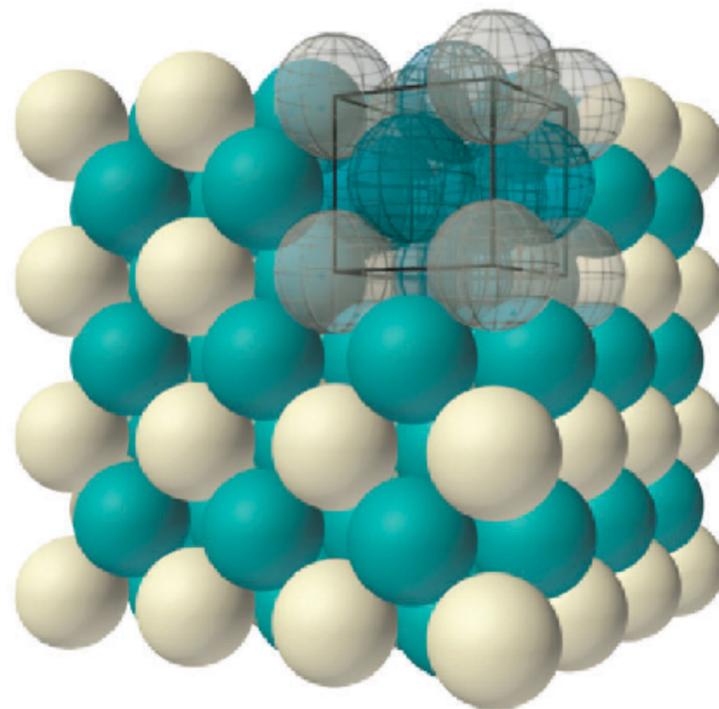
(b) Body-centered cubic



Si hay components en el centro de cada cara, además de los de las esquinas, entonces la celda unidad se llama:



Cúbica Centrada en las Caras



o fcc
de face-centered cubic

(c) Face-centered cubic

Retículos o redes de Bravais

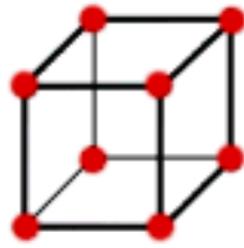
Cuando seleccionamos una celda unidad basándonos en elementos de simetría, podemos obtener celdas no primitivas (o sea centradas)

Hay 7 sistemas cristalinos (ya los vimos)

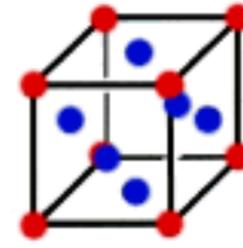
Extendiendo a estos sistemas la posibilidad de tener celdas no primitivas - hay 14 retículos espaciales

Se llaman retículos de Bravais porque fueron deducidos por Bravais en 1848

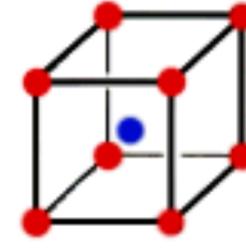
Retículos o redes de Bravais



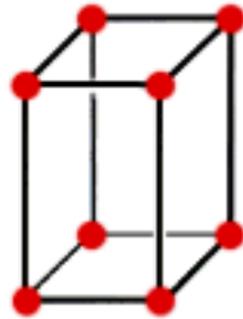
Simple cubic



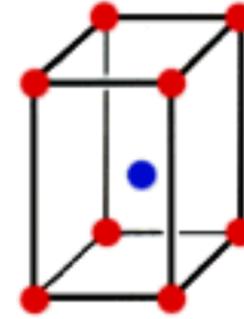
Face-centered cubic



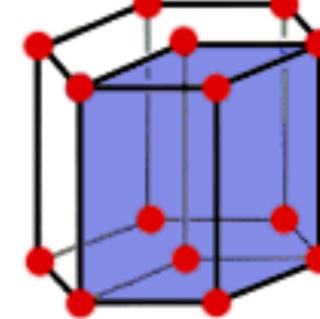
Body-centered cubic



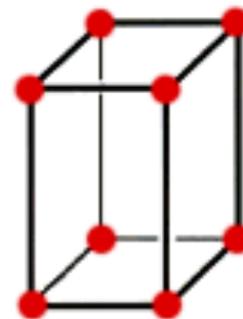
Simple tetragonal



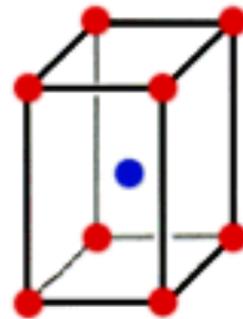
Body-centered tetragonal



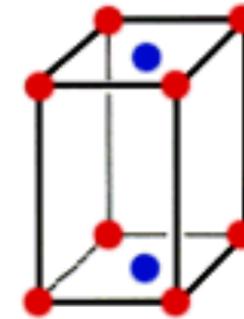
Hexagonal



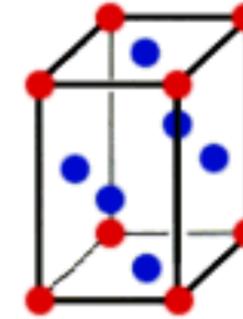
Simple orthorhombic



Body-centered orthorhombic



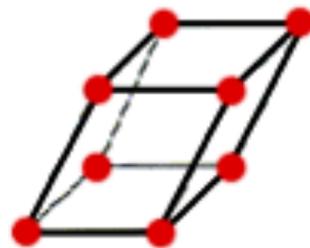
Base-centered orthorhombic



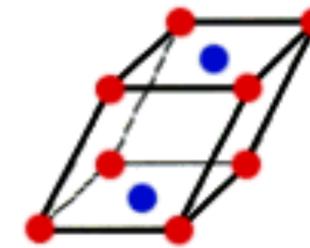
Face-centered orthorhombic



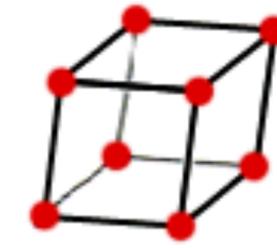
Rhombohedral



Simple Monoclinic



Base-centered monoclinic



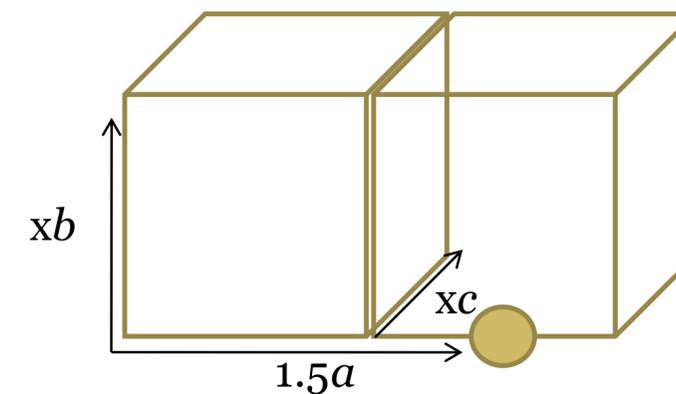
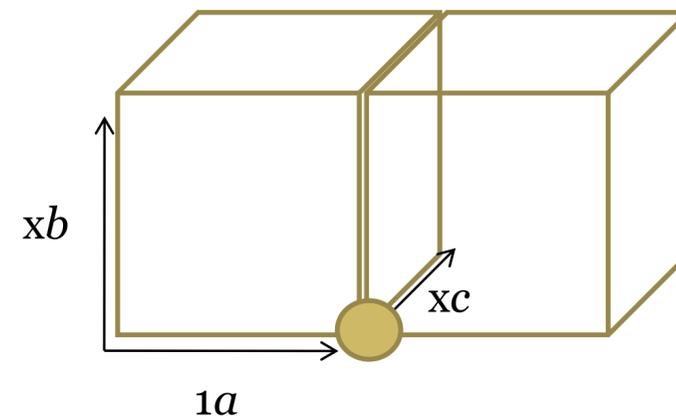
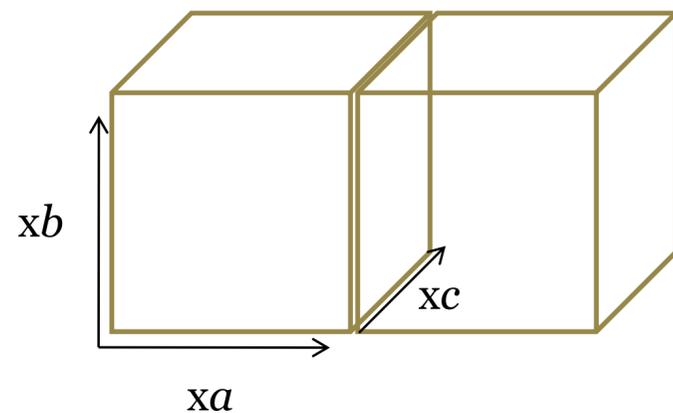
Triclinic

Coordenadas Fraccionarias

- La ubicación de un punto dentro de una celda unidad se puede especificar mediante 3 coordenadas fraccionarios x , y , z
- Se sitúa el punto x , y , z en el origen $(0,0,0)$ y avanzamos una distancia x_a , x_b y x_c

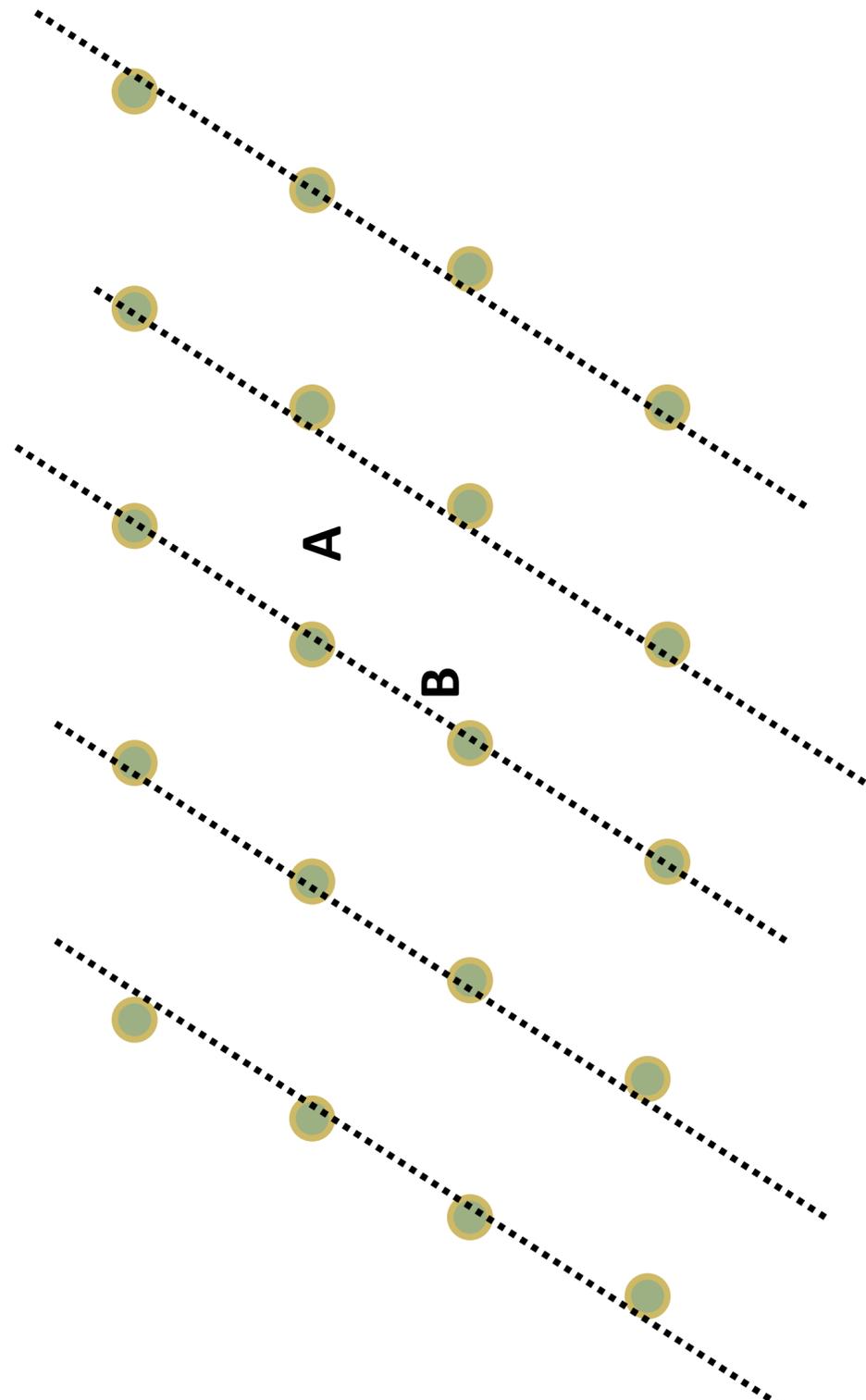
Si una de las coordenadas es exactamente 1, el punto entonces ha cruzado toda la celda unidad

Si una de las coordenadas excede el valor 1, el punto entonces se encuentra en la celda unidad siguiente



Planos e índices cristalinos

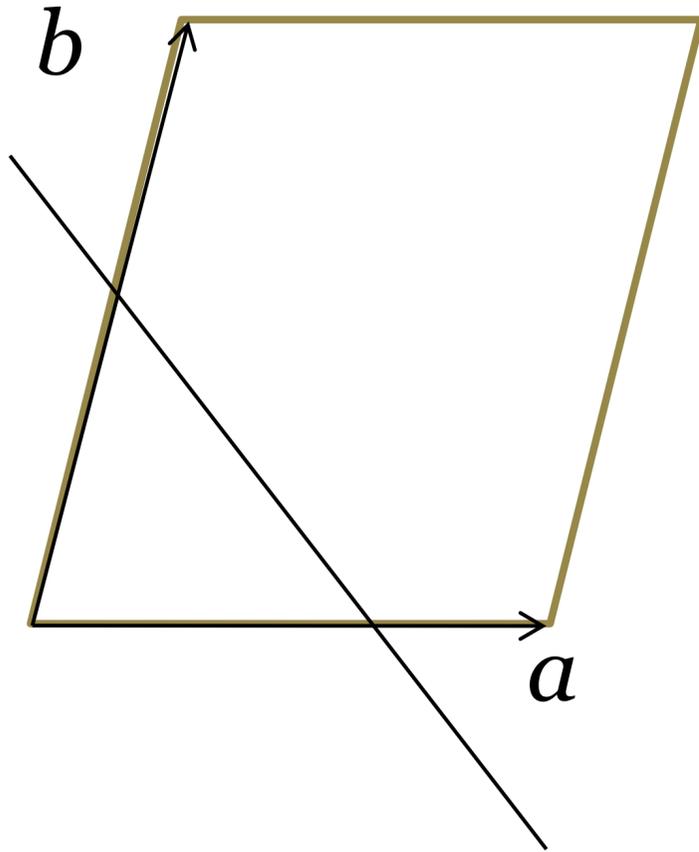
Son una notación en cristalografía para los planos en un cristal o red de Bravais



Todos los planos dibujados corresponden a planos de átomos idénticos

Representan el apilamiento de capas de moléculas

Requisito: 2D el plano debe pasar por dos puntos, en 3D el por 3 puntos mínimo



- Plano que intercepta al eje a en $2/3$, al b en $1/2$ y al c en infinito
- Los recíprocos de estos números son $3/2$, 2 y 0 , estos números se utilizan para caracterizar un plano
- El plano con intersecciones $1/3$, $1/4$, infinito (índices $3, 4, 0$) es paralelo al anterior

Cuando tenemos números fraccionarios, debemos multiplicar por un factor común para obtener números enteros

Los únicos planos importantes en cristalografía son aquellos que tienen índices racionales (cocientes enteros)

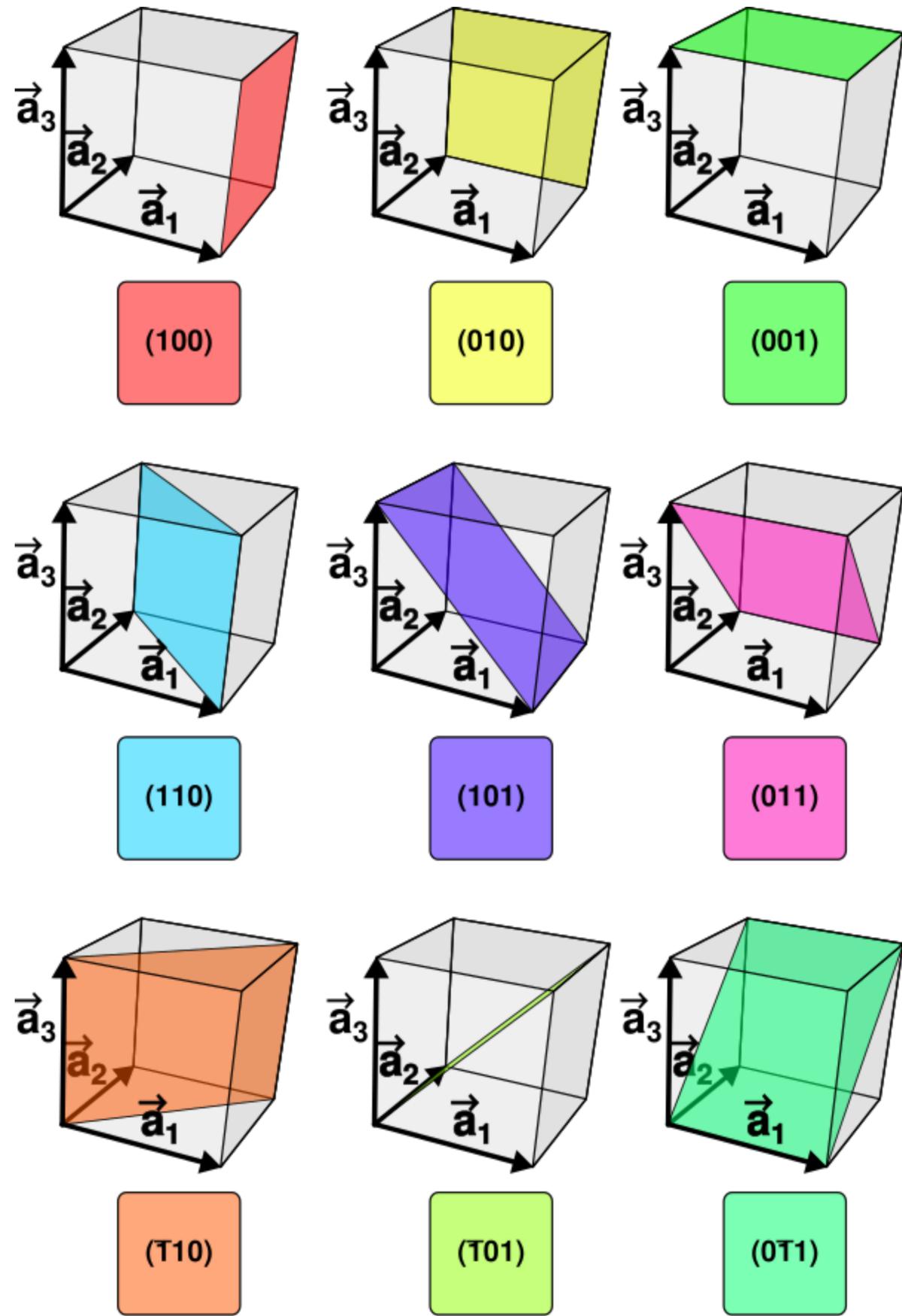
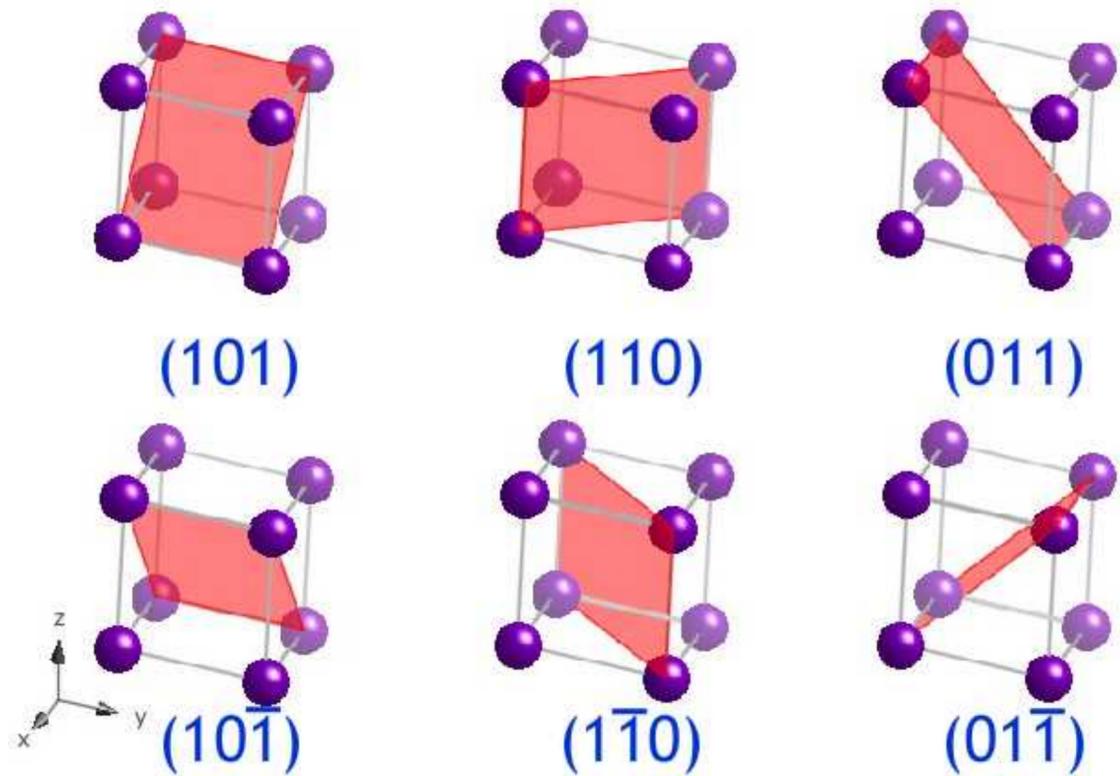
Los planos con intersecciones racionales pasan por puntos reticulares (átomos, moléculas, iones)

Entonces, una familia de planos de red está determinada por tres números enteros h, k, l

Índices de Miller

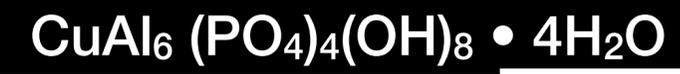
Se escriben como (hkl) y denotan el set de planos que son equivalentes (hkl) por simetría

El estudio de la geometría de los planos cristalinos es esencial para interpretar los fenómenos de difracción de rayos X

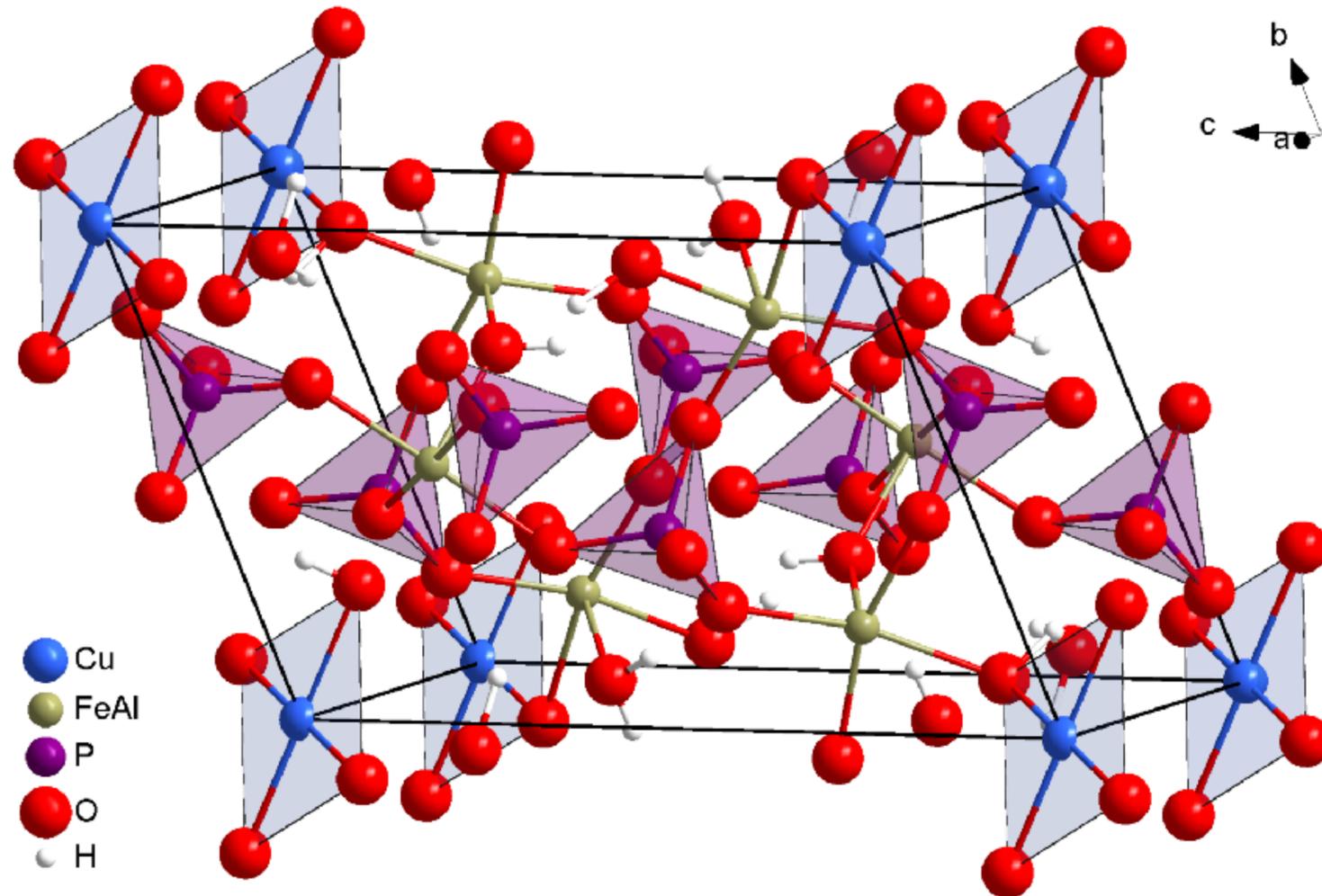


Turquesa

Sistema cristalino: triclínico



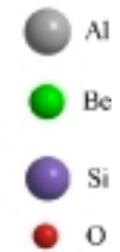
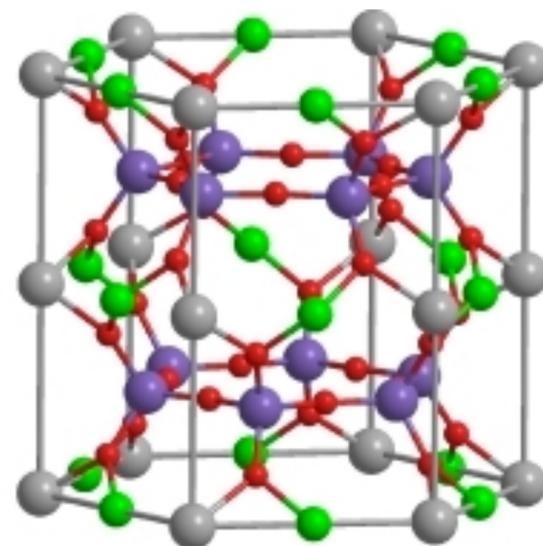
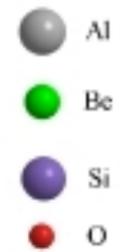
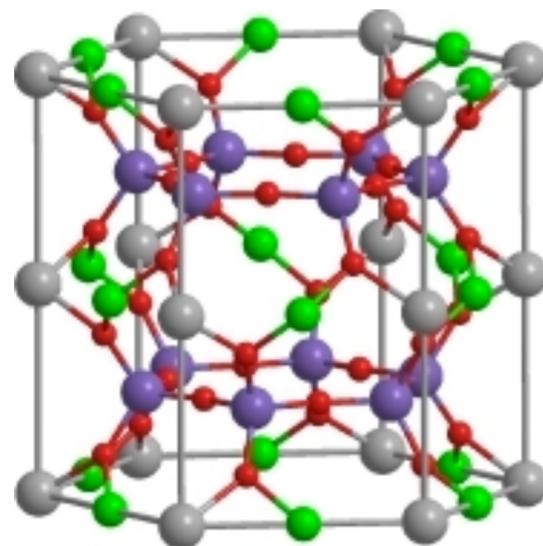
Variante:
Ahelyte - $(\text{Fe,Zn})\text{Al}_6 (\text{PO}_4)_4 (\text{OH})_8 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$



Berílio



Sistema cristalino: hexagonal



<http://geology.com/minerals/beryl.shtml>

http://openi.nlm.nih.gov/detailedresult.php?img=2386531_894_2008_299_Fig16_HTML&req=4