CRISTALOGRAFÍA GEOMÉTRICA

TEMA 2

PERIODICIDAD, REDES CRISTALINAS, SÍMBOLOS Y NOTACIONES

ÍNDICE

2.1 TRASLACIÓN

Es la distancia, a la que se repite el motivo en la estructura cristalina, paralela e idénticamente a lo largo de una dirección dada (Figura 2.1).

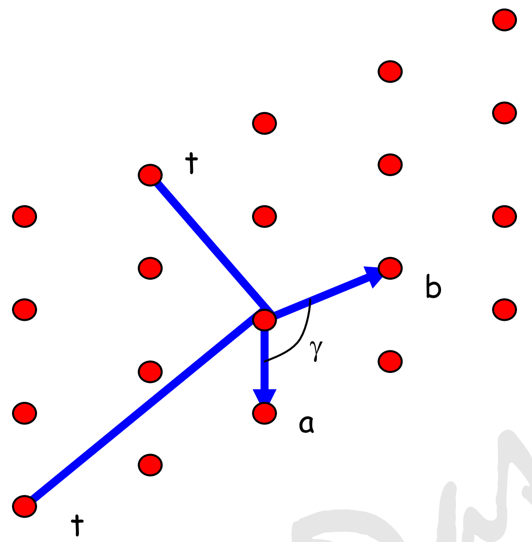


FIGURA 2.1

Debido a ello, y como esta repetición monótona del motivo constituye la característica fundamental de un cristal, el medio cristalino puede abstraerse de su contenido material y tratarlo únicamente en función de las traslaciones presentes.

Esta abstracción constituye lo que se llama **teoría de las redes cristalinas.**

- La **traslación** es una **transformación**, es decir una **operación de simetría**.
- Es la operación de simetría más simple e inherente a la estructura cristalina, por eso se le denomina **simetría trivial**.
- La traslación se representa por un vector llamado **vector de traslación**:
    - se define por su dirección y módulo.
- **Traslaciones fundamentales** o unidad son las traslaciones más pequeñas en las tres direcciones del espacio, respectivamente,
    - sus módulos se representan por **a**, **b** y **c,**
        - se les asigna el valor unidad.
    - Este trío de traslaciones constituye el sistema de coordenadas de la red.
        - Se les denomina constantes reticulares debido a que sus valores son fijos para un cristal
        - se expresan por los módulos mencionados - **a**, **b** y **c**- y por los ángulos entre ellos α, β y γ

2.2 RED CRISTALINA

Definiciones:

1. Es una representación tridimensional del motivo que se repite en la estructura cristalina
   - En la Figura 2.2 se muestra a una imagen de la estructura del mineral cordierita tomada (con un microscopio electrónico de transmisión[1] (TEM) (en A. Putnis, 1992: Introduction to Mineral Sciences, Cambridge University Press). En ella, las manchas negras representas huecos y cada mancha blanca representa una región con alta densidad electrónica y podría corresponderse con cada uno de los tetraedros imaginarios en los que los vértices estarían ocupados por oxígeno y el centro por silicio. La distancia entre dos manchas negras equivalentes es de 9,7 Å.

---

[1] **Microscopio electrónico de transmisión**

Un **microscopio electrónico de transmisión** es un microscopio que utiliza un haz de electrones para visualizar un objeto debido a que la potencia amplificadora de un microscopio óptico está limitada por la longitud de onda de la luz visible. Debido a que los electrones tienen una longitud de onda mucho menor que la de la luz pueden mostrar estructuras mucho más pequeñas. Las partes principales de un microscopio electrónico son:

- **Cañón de electrones**, que emite los electrones que chocan contra el espécimen, creando una imagen aumentada.
- **Lentes magnéticas** para crear campos que dirigen y enfocan el haz de electrones, ya que las lentes convencionales utilizadas en los microscopios ópticos no funcionan con los electrones.
- **Sistema de vacío** es una parte muy importante del microscopio electrónico. Debido a que los electrones pueden ser desviados por las moléculas del aire, se debe hacer un vacío casi total en el interior de un microscopio de estas características.
- **Placa fotográfica o pantalla fluorescente** que se coloca detrás del objeto a visualizar para registrar la imagen aumentada.
- **Sistema de registro** que muestra la imagen que producen los electrones, que suele ser una computadora.

Los microscopios electrónicos de transmisión pueden aumentar un objeto hasta un millón de veces.

Obtenido de

"http://es.wikipedia.org/wiki/Microscopio_electr%C3%B3nico_de_transmisi%C3%B3n"

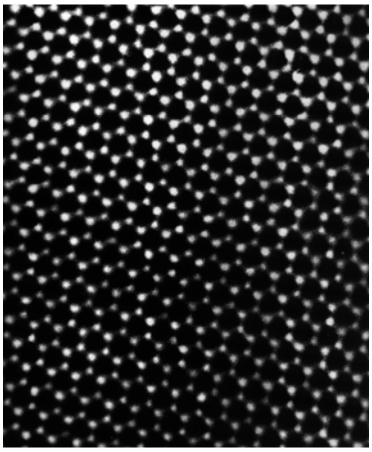


FIGURA 2.2

2. Representación tridimensional de la simetría traslacional de la estructura cristalina.
3. Disposición de nudos a lo largo de tres direcciones.
4. Conjunto de planos reticulares paralelos e idénticos, debido a que la extensión de la red es infinita. En este caso, a este conjunto de planos lo denominaremos familia de planos (hkl).

Red monodimensional

Es una disposición de nudos a lo largo de una dirección, como la de la Figura 2.3.

FIGURA 2.3

Red bidimensional

Es una disposición de nudos a lo largo de dos direcciones, como la de la Figura 2.4.

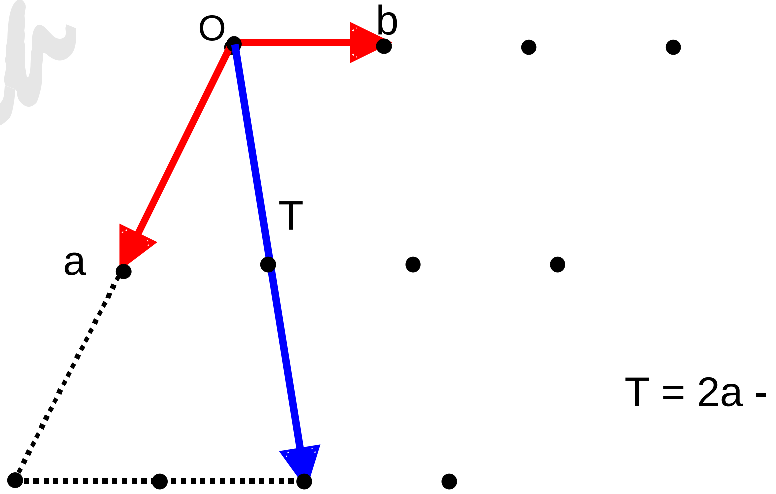


FIGURA 2.4

2.3 REDES PLANAS

Hay 5 redes planas. Las relaciones entre las traslaciones fundamentales y el ángulo entre ellas puede apreciarse en la Tabla 2.1:

Red	Parámetros de red	
Oblicua	$a \neq b$	$\gamma \neq 90º$
Cuadrada	$a = b$	$\gamma = 90º$
Rectangular	$a \neq b$	$\gamma = 90º$
Hexagonal	$a = b$	$\gamma = 60º$ ó $120º$
Rómbica	$a = b$	$\gamma \neq 90º$, $60º$ ó $120º$

Tabla 2.1

2.4 REDES ESPACIALES

- Son 14 y se denominan redes de Bravais.
- Se obtienen por apilamiento de las redes planas.
- Pueden ser primitivas y múltiples.
  - Las primitivas se simbolizan por P.
  - Las múltiples pueden ser:
    - centradas en las bases (A, B ó C),
    - centradas en las caras (F)
    - centradas en el interior (I)
  - Se denominan según sean las relaciones entre las traslaciones fundamentales y el ángulo entre ellas, como figuran en la Tabla 2.2

Red	Tipo	Parámetros de red	
Triclínica	P	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90º$
Monoclínica	P, A (B,C)	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90º \neq \beta$
Rómbica	P, I, F, A (B,C)	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90º$
Tetragonal	P, I	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90º$
Hexagonal	P	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90º$ $\gamma = 60º$ ó $120º$
Romboédrica	P	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90º$ $\gamma = 60º$ ó $120º$
Cúbica	P, I, F	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90º$

Tabla 2.2

2.5 ORIGEN DE LA RED

Es un punto de la red elegido como punto inicial en la descripción de una red.

Puede elegirse en cualquier posición de la estructura cristalina y no necesita coincidir con ningún átomo o ión.

2.6 CELDA ELEMENTAL

Es un paralelepípedo limitado por las traslaciones fundamentales no coplanares en una red y constituye la parte más pequeña característica del cristal.

- Celda elemental primitiva

  Celda que contiene un nudo de la red.

- Celda elemental múltiple

  Celda que contiene más de un nudo de la red.

Ejemplos de ellas pueden observarse en la Figura 2.5.

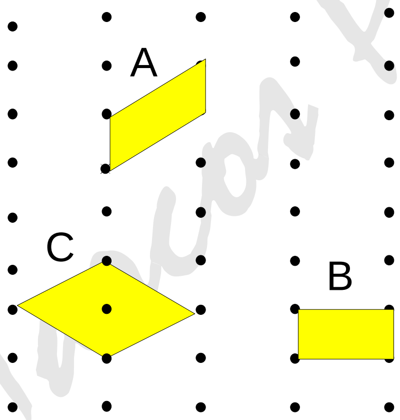
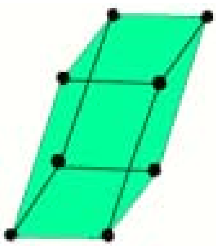
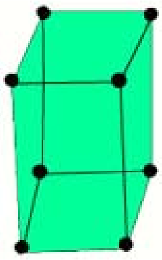
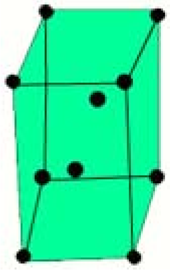
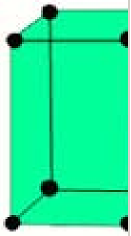
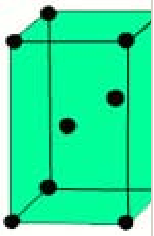
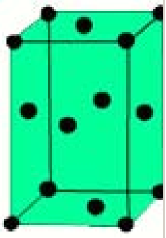
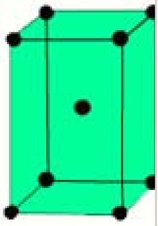
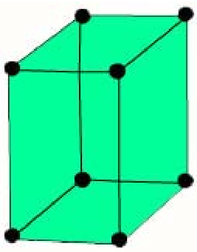
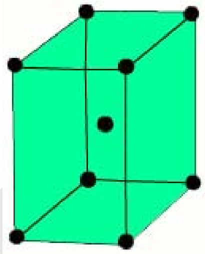
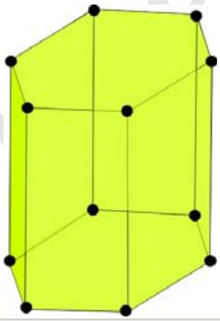
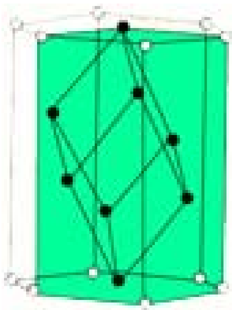


FIGURA 2.5.- Las celdas A y B son primitivas y la B es múltiple

Las celdas elementales (Tabla 2.3) son 14 y se denominan como las correspondientes redes de Bravais

Celda	Tipo	Parámetros de celda	
Triclínica	Primitiva P 	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^{o}$

<table>
<tr><td>Monoclínic</td><td colspan="2">Primitiva P
</td><td colspan="2">Centrada en las bases A (B,C)
</td><td>a ≠ b ≠ c</td><td>α = γ = 90º ≠ β</td></tr>
<tr><td>Rómbica</td><td>Primitiva P
</td><td>Centrada en interior I
</td><td>Centrada en las F
</td><td>Centrada en bases A (B,C)
</td><td>a ≠ b ≠ c</td><td>α = β = γ = 90º</td></tr>
<tr><td>Tetragonal</td><td colspan="2">Primitiva P
</td><td colspan="2">Centrada en el interior I
</td><td>a = b ≠ c</td><td>α = β = γ = 90º</td></tr>
<tr><td>Hexagonal</td><td colspan="4">Primitiva P
</td><td>a = b ≠ c</td><td>α = β = 90º
γ = 60º ó 120º</td></tr>
<tr><td>Romboédri</td><td colspan="4">Primitiva P
</td><td>a = b ≠ c</td><td>α = β = 90º
γ = 60º ó 120º</td></tr>
</table>

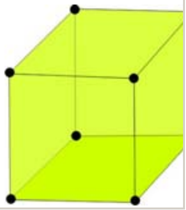
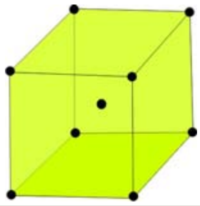
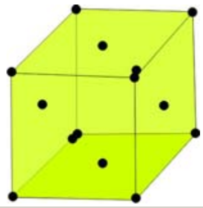
Cúbica	Primitiva P 	Centrada en el interi 	Centrada en las cara 	a = b = c	α = β = γ = 90º

Tabla 2.3

2.7 CELDA UNIDAD

Celda apropiada primitiva o múltiple, seleccionada de acuerdo a unos requisitos.

2.8 PARÁMETROS DE CELDA

Son las traslaciones fundamentales a, b, c y los ángulos entre ellas α, β y γ (ver Figura 2.6)

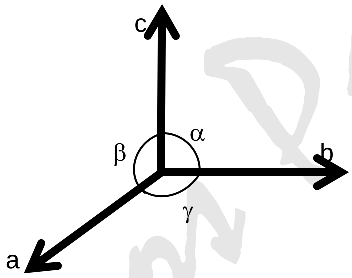


FIGURA 2.6

2.9 VOLUMEN DE CELDA

Viene dado por la expresión:

$$V = abc\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$$

Ecuación 2.1

2.10 PROPIEDADES DE LA RED CRISTALINA

- La red debe caracterizarse por las mismas propiedades que los materiales en estado cristalino, ya que éstos pueden tratarse con el concepto de red.
- Dichas propiedades son:
    - **Homogeneidad**

      En una red todos los nudos son equivalentes, no se distinguen entre ellos. La distribución de nudos alrededor de uno dado es la misma, independientemente del nudo tomado como referencia (en la Figura 2.7 el nudo 0 coloreado en azul o el coloreado en rojo).

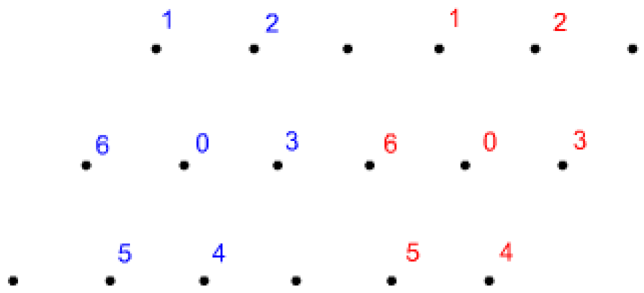


FIGURA 2.7

- **Anisotropía**

  En la red todos los nudos son equivalentes, pero la distancia de un nudo a sus vecinos no es constante, depende de la dirección que se tome para medir dicha distancia.

  Ejemplo: La distancia desde el origen O a cualquier otro nudo a su alrededor (A, B o C) no es la misma.

  OA<OB>OC

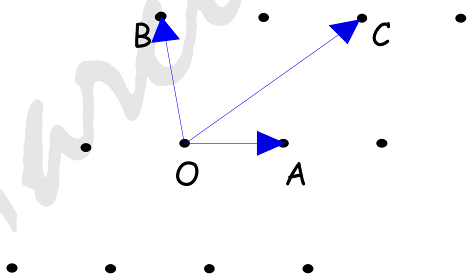


FIGURA 2.8

- **Simetría**

  La aplicación de una traslación (simetría trivial) *b* a un nudo O tomado como origen genera otros nudos 1, 2 equivalentes a él (ver Figura 2.9).

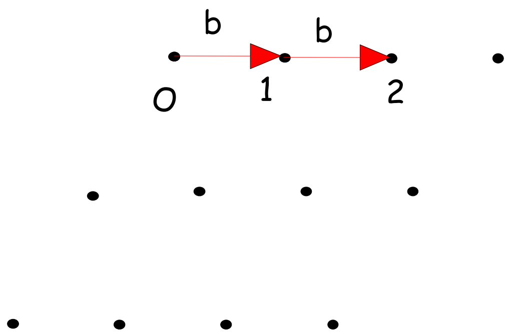
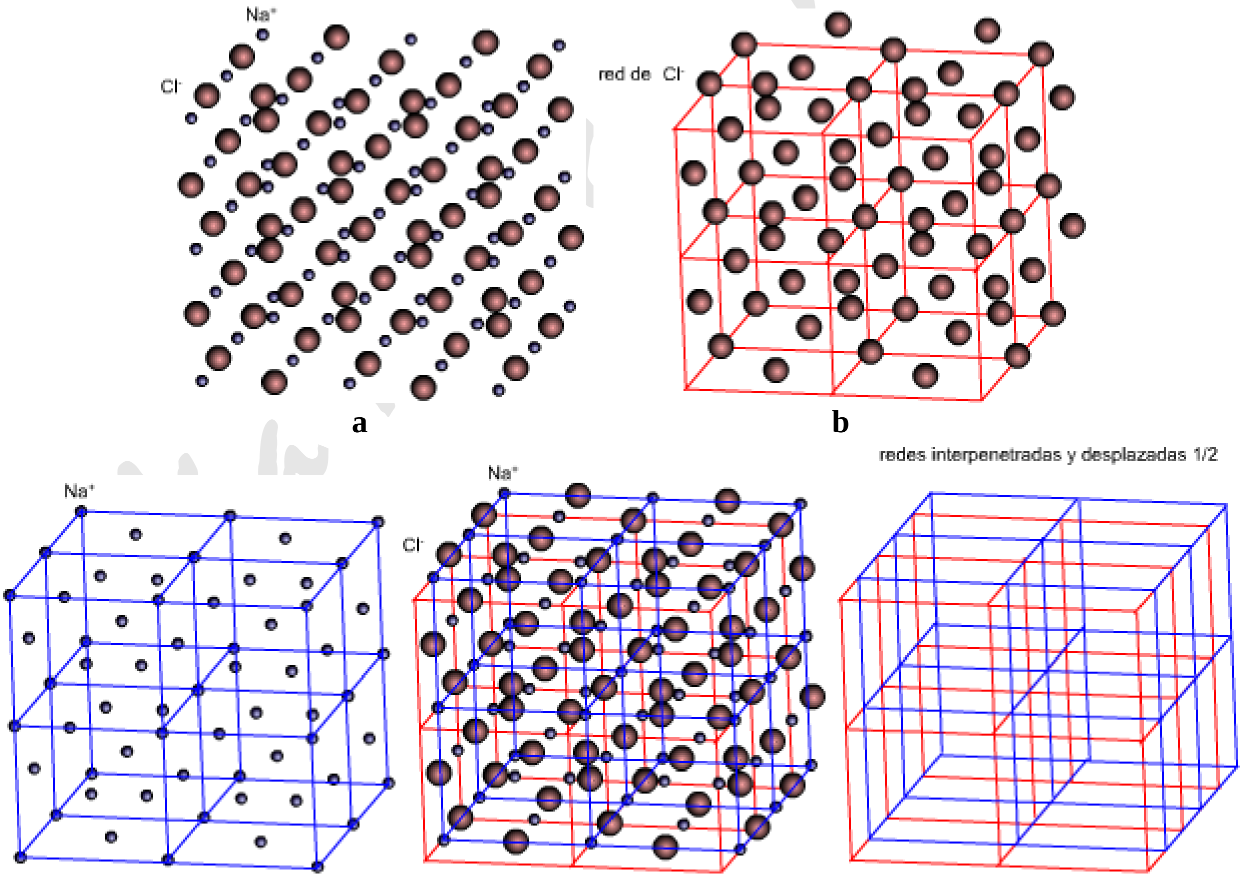


FIGURA 2.9

2.11 EL CRISTAL COMO REDES PARALELAS INTERPENETRADAS

- El cristal, en realidad, está formado por un número infinito de redes paralelas y de dimensiones constantes, interpenetradas entre sí.
    - En el **NaCl** (Figura 2.10 a) se pueden considerar dos redes:
        1. una la formada a partir de los iones Cl^-, tomando este ión como motivo de repetición (Figura 2.10 b).
        2. la otra formada a partir de los iones Na^+, tomando este ión como motivo de repetición (Figura 2.10 c).
        - o Ambas son idénticas en dimensiones y son paralelas, pero una de ellas está desplazada 1/2 de la traslación, en las tres dimensiones del espacio, respecto de la otra (Figura 2.10 d y e).
- Sin embargo, el cristal queda definido por una única red, tanto daría describirlo mediante la red de los iones cloro (nudos y entramado verde), como la de los iones sodio (nudos y entramado marrón).



c d e

FIGURA 2.10

2.12 ELEMENTOS DE LA RED: NUDO

- Es un punto equivalente por la traslación.
- El nudo de la red cristalina sustituye al motivo que se repite en la estuctura cristalina.
    - En la red cristalina existen puntos, además de los nudos.
- Los puntos no son equivalentes y se sitúan entre los nudos.
    - Los átomos en la estructura cristalina pueden ocupar la posición de un nudo o de un punto, considerando el concepto de red.
- La posición de un nudo puede especificarse mediante una traslación **t**:

$$\mathbf{t} = \mathrm{m}\boldsymbol{a} + \mathrm{n}\boldsymbol{b} + \mathrm{p}\boldsymbol{c}$$

Ecuación 2.2

m, n y p son las coordenadas de un nudo de la red referidas a un nudo que se toma como origen del sistema de coordenadas, definido por **a**, **b** y **c**.

- La posición de un punto B cualquiera como el de la Figura 2.11 se puede especificar por el vector:

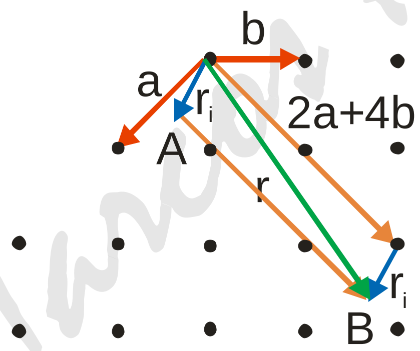


FIGURA 2.11

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_i + \mathrm{m}\boldsymbol{a} + \mathrm{n}\boldsymbol{b} + \mathrm{p}\boldsymbol{c}$$

Ecuación 2.11

r es la distancia entre el punto B y el origen.

$\mathbf{r}_i$ es la distancia entre el punto A y el origen. Viene definida por:

$$\mathbf{r}_i = x_i\boldsymbol{a} + y_i\boldsymbol{b} + z_i\boldsymbol{c}$$

Ecuación 2.4

x_i, y_i y z_i son las coordenadas del punto definido por $\mathbf{r}_i$ y son tres números positivos menores que la unidad. Todos los puntos definidos por r_i ocupan un espacio limitado por las traslaciones fundamentales, es decir, constituyen la celda elemental. Este espacio llena todo el espacio cristalino aplicándole las traslaciones fundamentales.

El punto B queda especificado por el vector

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_i + (2\mathbf{a}+4\mathbf{b})$$

Ecuación 2.5

2.13 ELEMENTOS DE LA RED: FILA RETICULAR

- Es una disposición de nudos a lo largo de una dirección.
    - Una dirección de red es, por lo tanto, una dirección que contiene nudos.
    - Cada par de nudos de la red define una fila reticular.

SÍMBOLO DE FILA RETICULAR

- Son las coordenadas p, q y r de un nudo de la red, contiguo a otro nudo tomado como origen
    - se escriben entre corchetes, [pqr],
    - describen totalmente a la fila reticular.
- Se denominan filas fundamentales de la red a las filas con símbolos [100], [010] y [001],

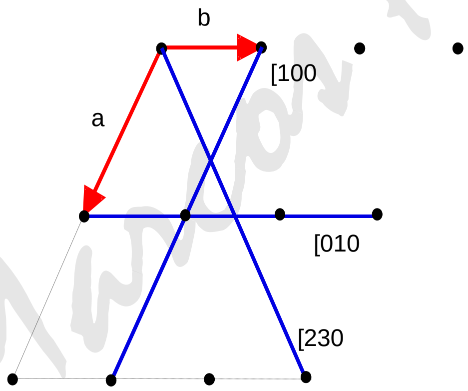


FIGURA 2.12

- son paralelas respectivamente a las traslaciones fundamentales ***a***, ***b*** y ***c***.
    - Definen las aristas de la celda elemental de la red

2.14 ELEMENTOS DE LA RED: PLANO RETICULAR

Es una disposición de nudos a lo largo de dos direcciones.

- Cada trío de nudos no dispuestos en una misma dirección de la red definen un plano reticular.

SIMBOLO DE UN PLANO RETICULAR

Parámetros de Weiss

- Son las intersecciones de un plano reticular con las traslaciones fundamentales.

Índices de Miller

- Serie de tres números enteros positivos o negativos entre paréntesis, (hkl), que se refieren a las intersecciones de un plano con las traslaciones fundamentales.
    - Cuando aparece un número negativo se sitúa una rayita encima de él; ejemplo: $(\bar{1}20)$ y se lee uno menos, dos, cero.
    - Si aparecen números de 2 dígitos se ponen separados por comas; ejemplo: (10,2,2).

El plano más próximo al origen de una familia de planos y que pase por tres nudos, uno en cada fila fundamental de la red, es aquél cuyas coordenadas son:

A=H*a*, B=K*b* y C=L*c*

donde:

H, K y L son las intersecciones del plano con las filas fundamentales, es decir los **parámetros de Weiss**

a, *b* y *c* son las traslaciones fundamentales.

El número de planos existentes entre el plano con coordenadas A, B y C y el origen de la red viene dado por el producto HxKxL=N.

Los cocientes N/H=h, N/K=k y N/L=l, son números enteros y se denominan índices de Miller. Son los inversos de los parámetros de Weiss.

En la Figura 2.13 se muestra el plano AB, paralelo al eje cristalográfico *c*, por lo que sus índices de Miller son (320)

- Los planos cristalinos que cortan a los tres ejes de coordenadas de la red se simbolizan por (hkl).
    - El más sencillo es el (111).

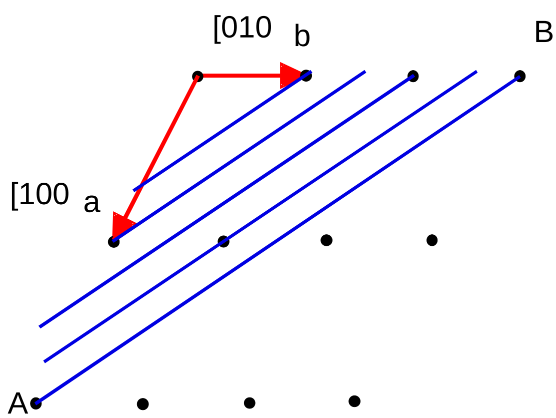


FIGURA 2.13

- Los planos que cortan a dos ejes y son paralelos al tercero se simbolizan por (hk0), (h0l) y (0kl), según que sean parelos al eje *c*, al *b* o al *a*, respectivamente.
    - Los más sencillos son los planos (110), (101) y (011).
- Los planos que cortan a un eje y son paralelos a los otros dos se simbolizan por (h00), (0k0) y (00l).
    - Los planos de símbolo más sencillo son (100), (010) y (001) y se les denomina planos fundamentales.
        - Definen las caras de la celda elemental de la red.
- Los planos con mayor densidad de nudos son los que tienen índices de Miller más simples y constituyen caras cristalinas.

LEY DE ÍNDICES RACIONALES

Ya desde antiguo, al estudiar los cristales se descubrió que para determinadas caras los índices podían expresarse por números enteros simples o por ceros. Se trata de la **ley de los índices racionales.**

2.15 ESPACIADO RETICULAR

- Es la distancia entre los planos de una familia de planos (ver Figura 2.14).
- Se mide sobre la perpendicular a los planos de la familia.
- El espaciado de una familia de planos (hkl) se simboliza por $\mathbf{d}_{hkl}$ y es característico de cada familia.

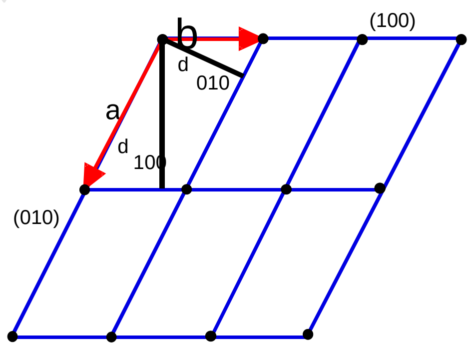


FIGURA 2.14

- Está relacionado con las constantes reticulares y con los índices de Miller mediante una expresión, que para el caso más general es:

$$
\begin{aligned}
1/d^2_{hkl} = {} & 1/(1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma-2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma). \\
& (h^2/a^2)\,\mathrm{sen}^2\alpha+(k^2/b^2)\,\mathrm{sen}^2\beta+(l^2/c^2)\,\mathrm{sen}^2\gamma+ \\
& +(2kl/bc)(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)+ \\
& +(2hl/ac)(\cos\gamma\cos\alpha-\cos\beta)+ \\
& +(2hk/ab)(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)
\end{aligned}
$$

Ecuación

2.16 PLANOS TAUTOZONALES

- Conjunto de planos no paralelos que se caracterizan por tener una arista común, es decir, son paralelos a una dirección cristalográfica denominada eje de zona y cuyo símbolo es [uvw].

  En la Figura 2.15 pueden observarse algunas familias de planos paralelas al eje *c* (perpendicular al plano de la pantalla).

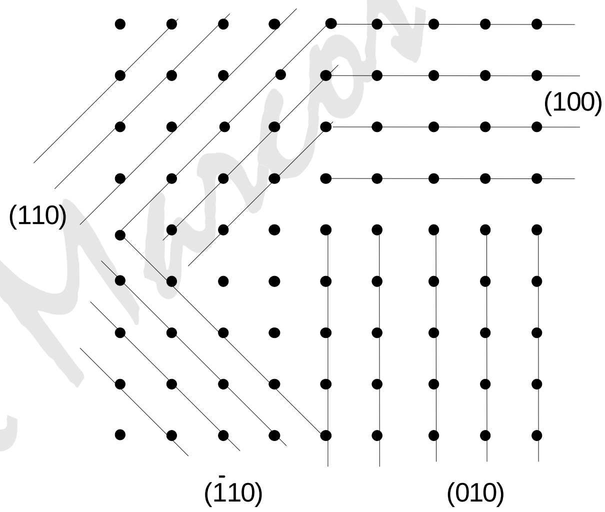


FIGURA 2.15

También se puede observar que cada conjunto de planos paralelos, idénticos e igualmente distanciados tienen el mismo símbolo y la misma densidad reticular.

- La condición para que un plano (hkl) sea paralelo a un eje [uvw] viene dada por la **ley de zonas de Weiss**:

$$hu + kv + lw = 0$$

Ecuación 4

- Si dos planos (hkl) y (h'k'l') pertenecen a la misma zona o lo que es lo mismo, son paralelos a la misma dirección cristalográfica [uvw] debe cumplirse:

$$hu + kv + lw = 0$$
$$h'u + k'v + l'w = 0$$

Ecuación 5

Resolviendo ambas ecuaciones se obtiene el símbolo del eje de zona.

$$u = hl' - lk'$$
$$v = lh' - hl'$$
$$w = hk' - kl'$$

Ecuación 6

2.17 CARA CRISTALINA

Es la manifestación en el cristal de planos que se caracterizan por poseer la mayor densidad reticular plana y como índices de Miller números sencillos.

Ejemplo: En la Figura 2.16 pueden apreciarse diferentes superficies planas numeradas, limitando el cristal de pirita, que son caras cristalinas.

FIGURA 2.16

2.18 ARISTA DE UN CRISTAL

Es la manifestación en el cristal de una fila reticular que se caracteriza por poseer la mayor densidad reticular lineal y tener el símbolo de eje más sencillo.

En la imagen de cristal de yeso (Figura 2.17) se ha remarcado con trazo discontinuo rojo alguna arista.

FIGURA 2.17

2.19 DENSIDAD RETICULAR

- Densidad reticular lineal

  Es el número de nudos por unidad de longitud.

  Es el inverso del módulo del vector de traslación.

  Las filas de índices de Miller más sencillos son las que tienen mayor densidad de nudos. Estas son: [100], [010] y [001]

- Densidad reticular plana

  Es el número de nudos por unidad de superficie.

  Es el inverso del área,

$$1/\mathbf{S}_{hkl}$$

Ecuación 7

$$\mathbf{S}_{hkl} = \mathbf{V}_{hkl}/\mathbf{d}_{hkl}$$

Ecuación 8

  Los planos de mayor densidad reticular son los que tienen un espaciado mayor.

- Densidad reticular espacial

  Es el número de nudos por unidad de volumen. Es el inverso del volumen,

$$\rho_{hkl} = 1/\mathbf{V}_{hkl}$$

Ecuación 9

$$\rho_{hkl} = 1/\mathbf{S}_{hkl} = \mathbf{d}_{hkl}/\mathbf{V}_{hkl}$$

Ecuación 10

2.20 RED RECÍPROCA

- Es, como su nombre indica, la recíproca de la red cristalina o red directa.
  - Se obtiene de la siguiente manera (ver Figura 2.15):
    - Se toma un punto cualquiera de la red directa como origen de la nueva red,
    - se trazan las perpendiculares a los planos fundamentales de la red directa -(100), (010) y (001)- es decir, se trazan los espaciados interplanares d_{100}, d_{010} y d_{001} que se toman como ejes de coordenadas de la red recíproca.
    - Sobre cada uno de ellos se toman traslaciones proporcionales al inverso del espaciado de los planos correspondientes
- Los parámetros de red se simbolizan con *

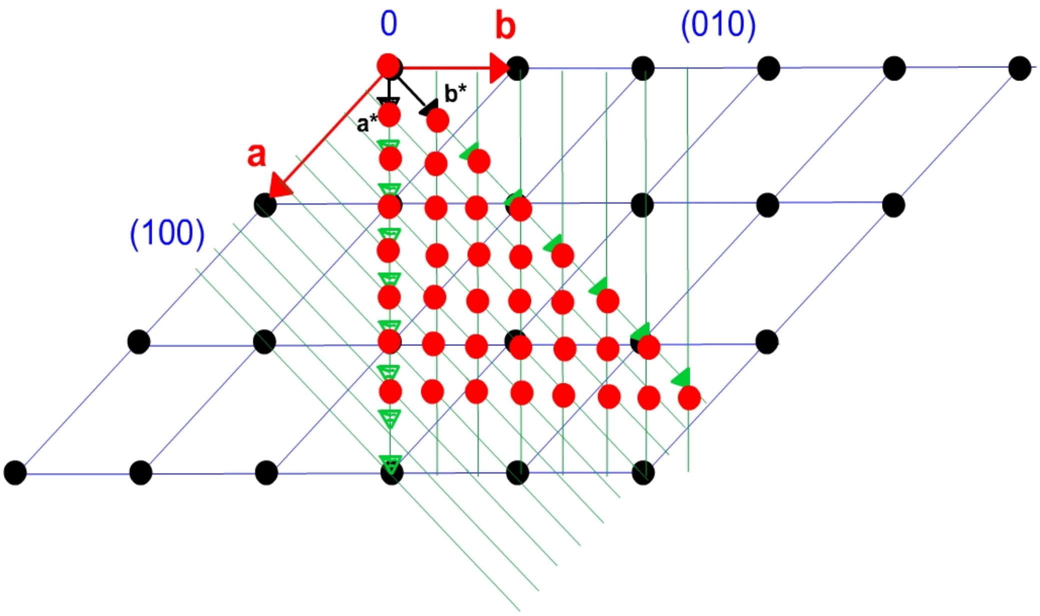
$$\boldsymbol{a^*} = 1/d100$$

$$\mathbf{b^*} = 1/d010$$

$$\mathbf{c^*} = 1/d001$$

Ecuación 11

  - El eje **a***, simbolizado por [100]* es perpendicular al plano (100) de la red directa.
  - El eje **b***, simbolizado por [010]* lo es del plano (010).
  - El eje **c***, simbolizado por [001]* del plano (001).



También podríamos haberla dibujado en un lugar diferente, para ello simplemente tendríamos que haber trasladado el nudo de la red directa elegido como origen de la red recíproca a otro sitio y a partir de él haber procedido como lo hemos hecho y el resultado sería el siguiente:

FIGURA 2.15

De manera general, cada una de las filas reticulares de la red recíproca es perpendicular a un plano reticular específico de la red directa.

- La red recíproca tiene una celda elemental definida por las traslaciones fundamentales recíprocas, anteriormente definidas.
- Su volumen es el inverso del volumen de la celda elemental de la red directa.
- Si **a**, **b** y **g** son los ángulos fundamentales de la red directa y A, B y C son los ángulos diedros entre los planos fundamentales de dicha red, los ángulos fundamentales de la red recíproca correspondientes vienen dados por:

$$\boldsymbol{\alpha^*} = 180 - A$$
$$\boldsymbol{\beta^*} = 180 - B$$
$$\boldsymbol{\gamma^*} = 180 - C$$

Ecuación 12

- Las relaciones entre las traslaciones de la red directa y la red recíproca son:

$$\mathbf{a^*} = (1/V)\boldsymbol{bc}\,\mathrm{sen}\alpha$$
$$\mathbf{b^*} = (1/V)\boldsymbol{ca}\,\mathrm{sen}\beta$$
$$\mathbf{c^*} = (1/V)\boldsymbol{a}\mathbf{b}\,\mathrm{sen}\gamma$$

Ecuación 13

2.21 RELACIONES ENTRE LA RED DIRECTA Y LA RECÍPROCA

Una de las características de la red recíproca es poseer la misma simetría que la red directa, cuando se considera la métrica de la red.

- A cada red directa le corresponde una sóla red recíproca.
- Toda red recíproca posee la misma simetría que la red directa de la que procede.
- Una red recíproca deriva de la red directa primitiva por giro de 90º alrededor del nudo tomado como origen.
- Si la red directa es de caras centradas, su recíproca será centrada en el interior.
- Si la red directa es centrada en el interior, su recíproca será de caras centradas.
- Si la red directa es centrada en las bases, su recíproca también lo es.
- Si la red directa es primitiva su recíproca también lo es.
- La red directa es homogénea, por el contrario, la red recíproca no lo es. En la red directa todos los nudos son equivalentes y el origen puede tomarse en cualquier nudo, mientras que en la red recíproca existe un origen y los nudos no son intercambiables.

- La red recíproca está formada por familias de filas reticulares, que son perpendiculares a planos de la red directa, y por familias de planos reticulares que son perpendiculares a filas reticulares de la red directa.
- Los planos de una misma familia en la red recíproca no son equivalentes entre sí, al contrario de lo que ocurre en la red directa.

Existen 14 tipos de redes directas (redes de Bravais) y 14 tipos de redes recíprocas.