

Jornada Docente sobre Cristalografía y Crecimiento de Cristales



Unidad 2: Materiales sólidos y elementos de Cristalografía

- ❖ Clasificaciones de los materiales sólidos. Uniones químicas.
- ❖ Definición de Estructura Cristalina. Orden periódico.
- ❖ Rol de las simetrías en la Cristalografía.

¿Cuáles de las siguientes imágenes corresponden a cristales?



obsidiana



CRISTAL DE CUARZO

CRISTAL DE TOPAZIO



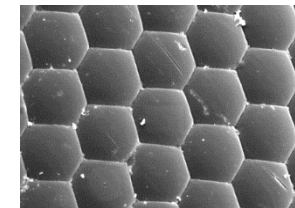
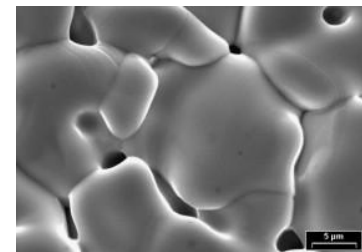
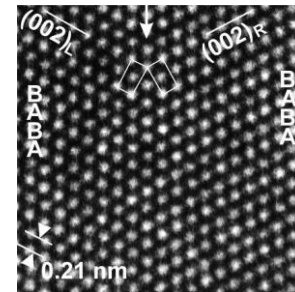
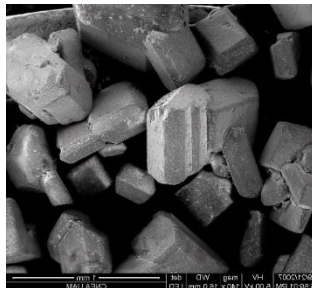
CRISTAL DE RUTILO

CRISTAL DE PRISMA

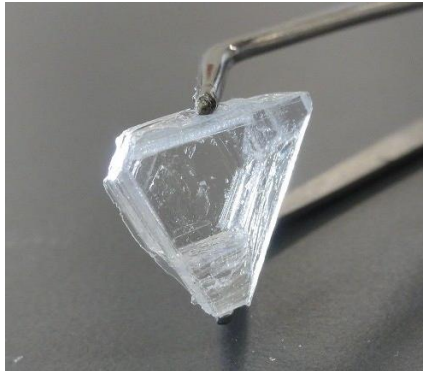
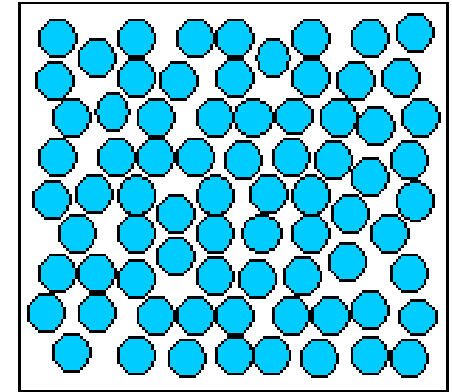
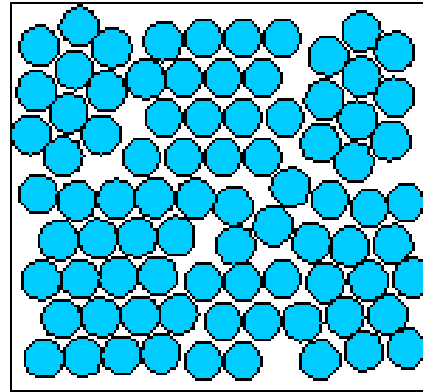
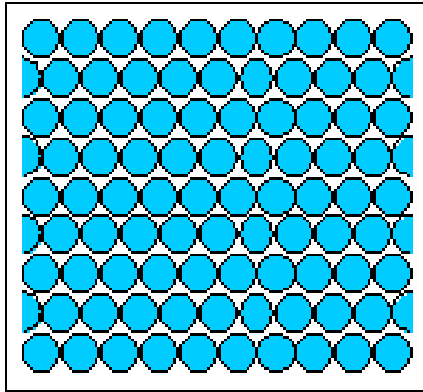
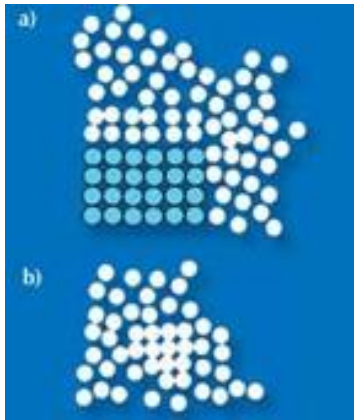


CRISTAL DE SULFATO DE COBRE

CRISTAL DE FLUORITA

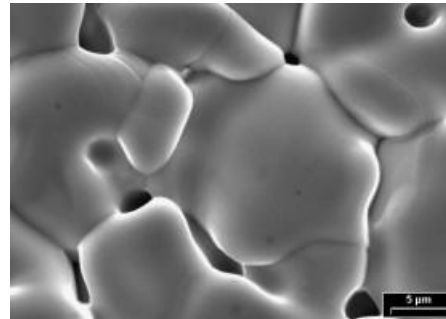


Al enfriarse un líquido o un gas algunos materiales solidifican...

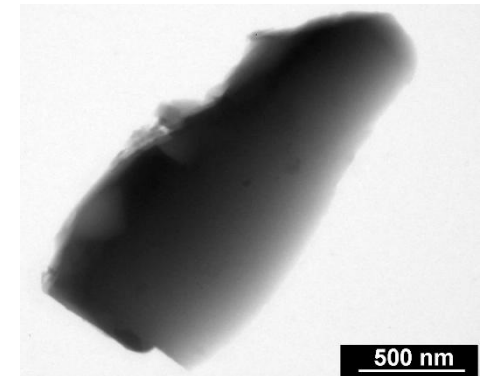


...como monocristales
(todos ordenados en
la misma dirección)

... otros forman
policristales

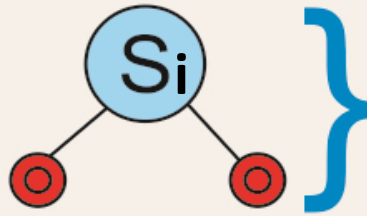


Bariloche Sábado 4 de Junio 2011
Partícula de vidrio



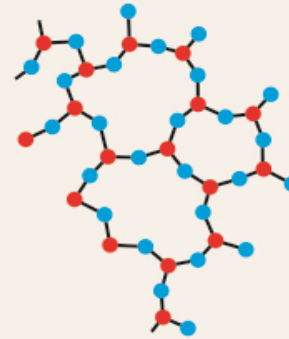
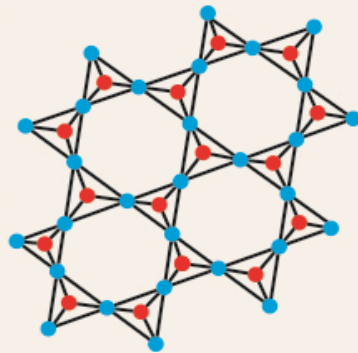
... y otros como
amorfo o VIDRIOS

No existen las “copas de cristal”



Esta es una representación de una molécula de una sustancia muy común en la Tierra: el Óxido de Silicio (SiO_2)

Cuando el SiO_2 se organiza **ordenadamente**, de un modo repetido en todas direcciones, se forma **el cristal llamado Cuarzo**.

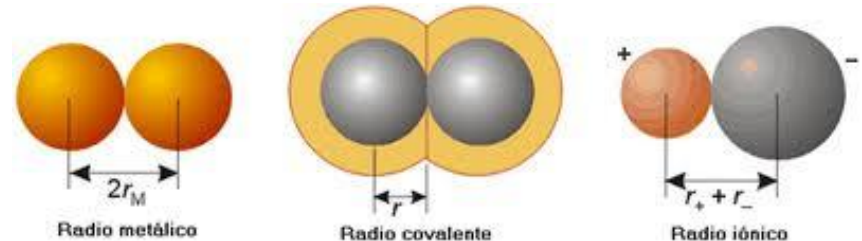
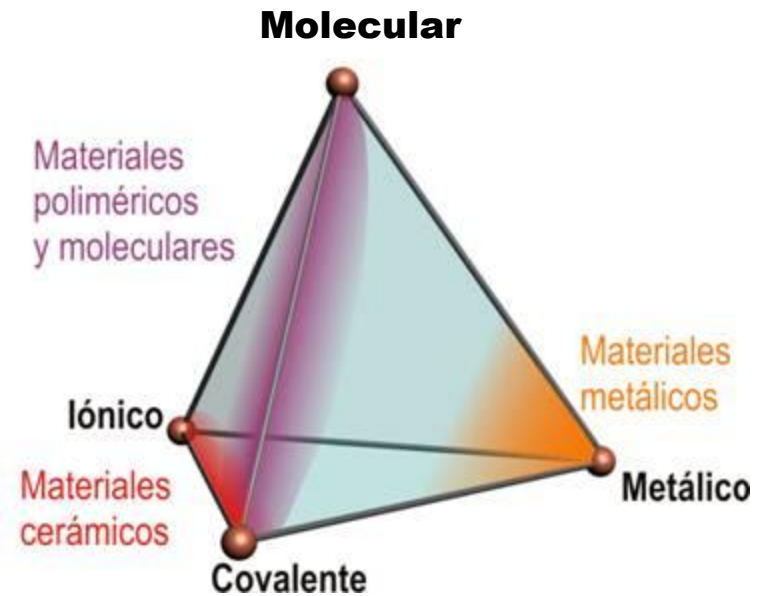


En cambio, cuando el SiO_2 se distribuye en un modo **desordenado**, se forma... **vidrio ;que no es un cristal!**

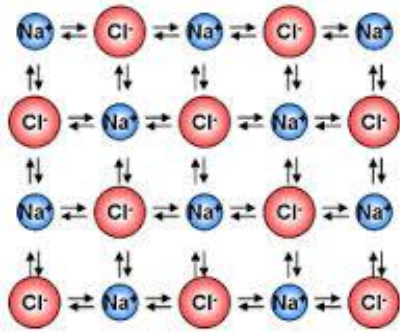


Sólidos: estructura cristalina

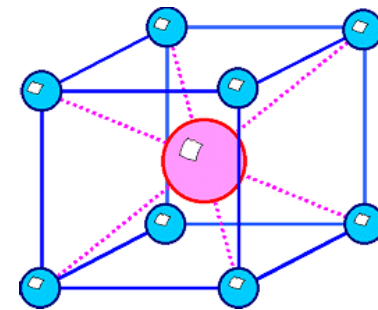
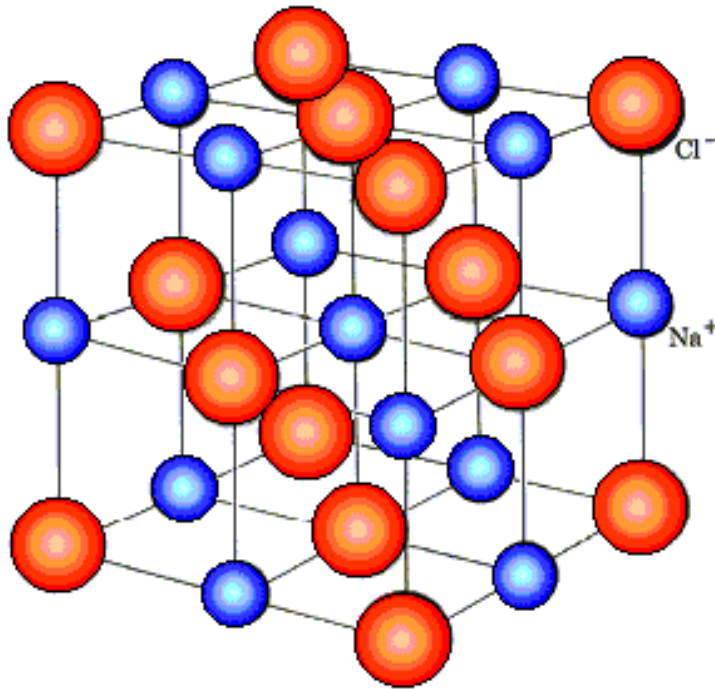
- ¿Cómo se forma un sólido?
- Tipos de enlaces químicos:
 - Sólidos iónicos; NaCl, CaO, CsAu
 - Sólidos metálicos; Na, Fe, otros metales y aleaciones
 - Sólidos covalentes; C, SiO₂, GaAs.
 - Sólidos Moleculares: N₂, CO₂, S₈.



IÓNICO: Cloruro de Sodio (NaCl)

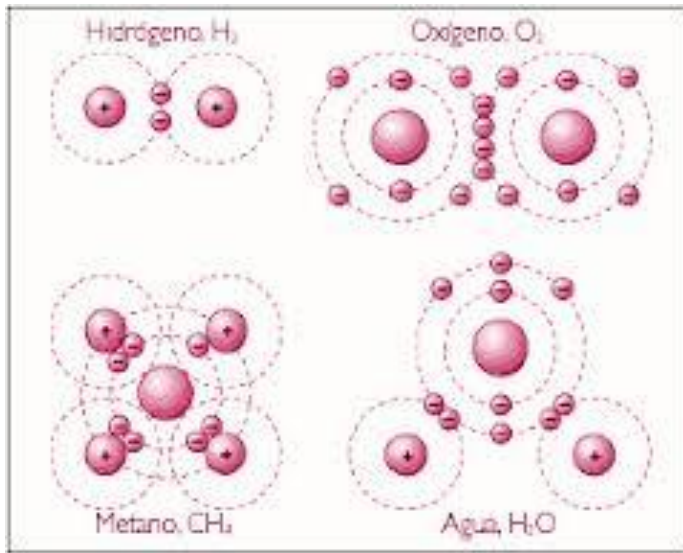


Primera estructura
resuelta por
difracción de rayos X
(W.L. Bragg, 1913)

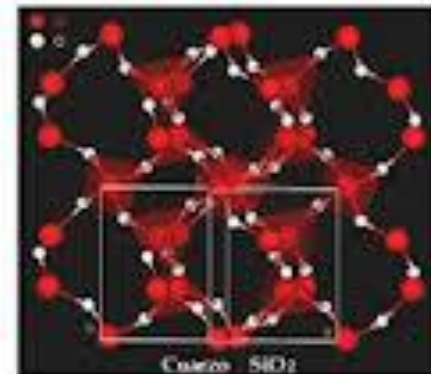
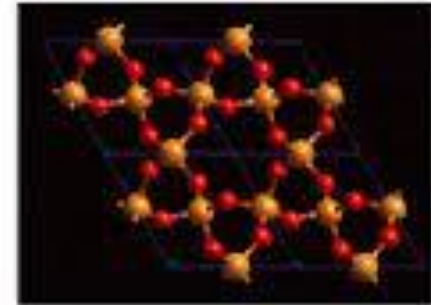
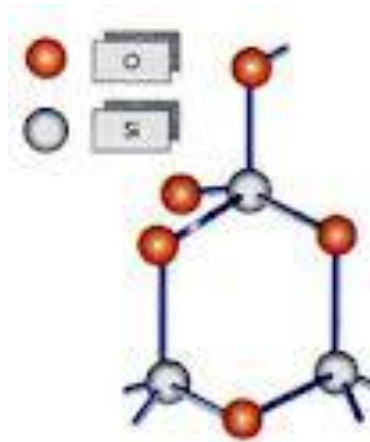
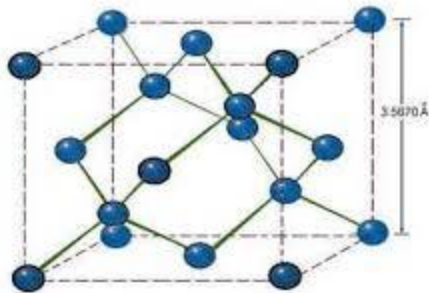


CsCl, o AlNi

COVALENTE: ¿enlace o cristal?



Enlace químico

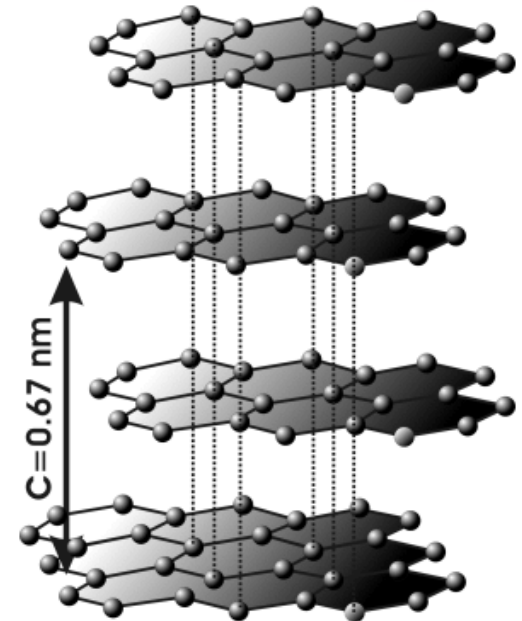
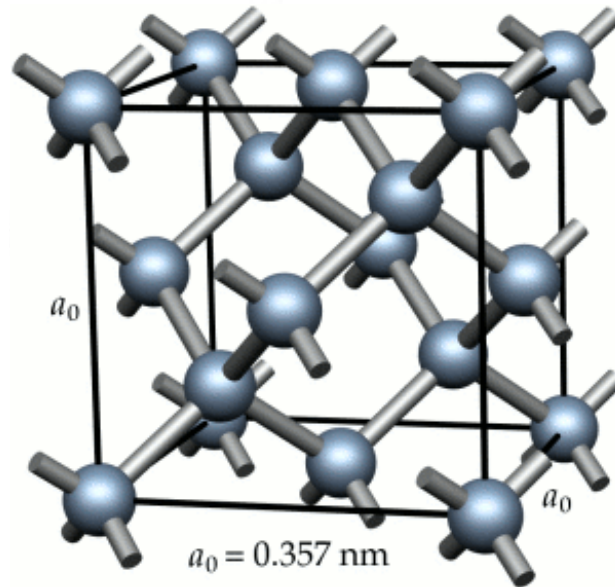


Cristal de cuarzo

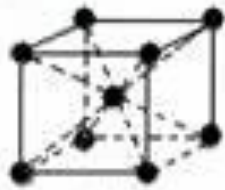
COVALENTE Diamante vs. Grafito

El diamante y el grafito son dos formas del carbono, pero tienen propiedades físicas muy distintas.

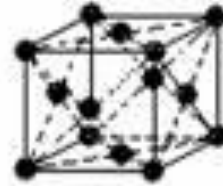
El diamante es más duro y transparente.
El grafito es mejor conductor y lubricante.



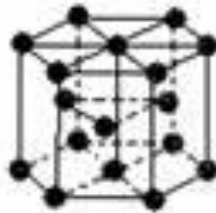
METÁLICO: estructuras compactas



a) Cúbica centrada en el cuerpo



b).- Cúbica centrada en las caras

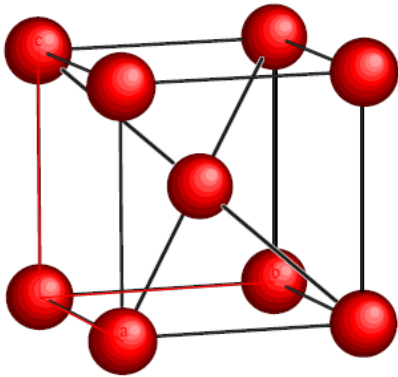
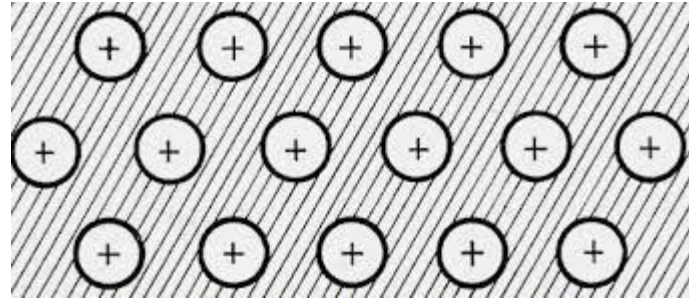


c) Hexagonal compacta

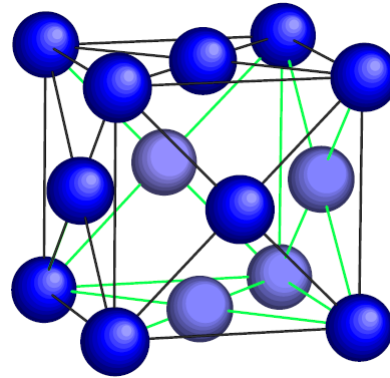
Fig. 1 La mayor parte de los metales puros en estado sólido forman una de las siguientes redes cristalinas simétricas: cúbica centrada en el cuerpo, cúbica centrada en las caras y hexagonal compacta.

METÁLICO:

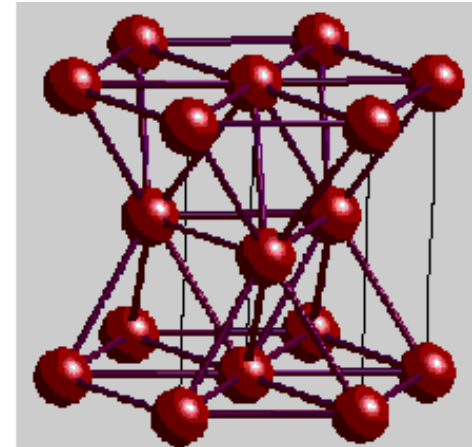
metales
estructuras
compactas



BCC
(Cr, Fe, Mn, Ag, etc)

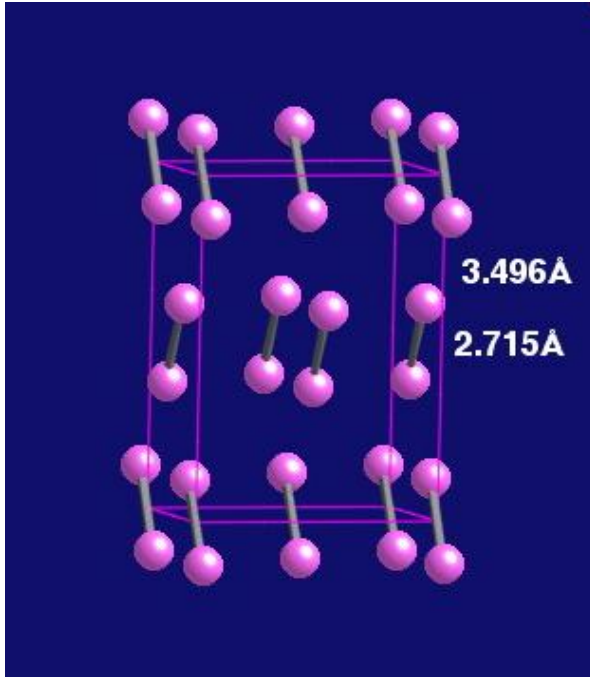


FCC
(Ca, Ni, Cu, Al)



HCP
(Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr)

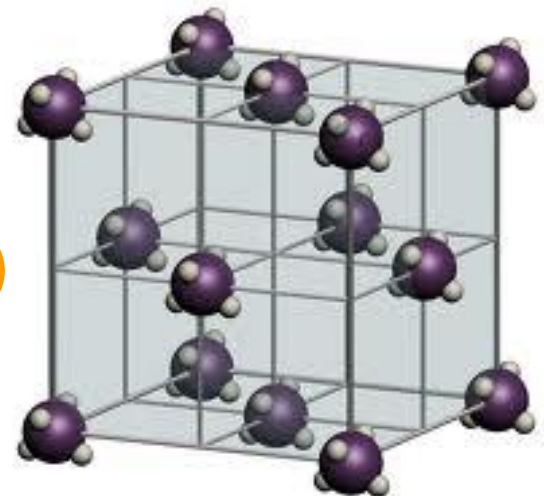
MOLECULAR: Iodo



Celda unitaria del I_2 : Estructura molecular compuesta por moléculas con una distancia I - I de 2.7Å, que corresponde a un enlace covalente.

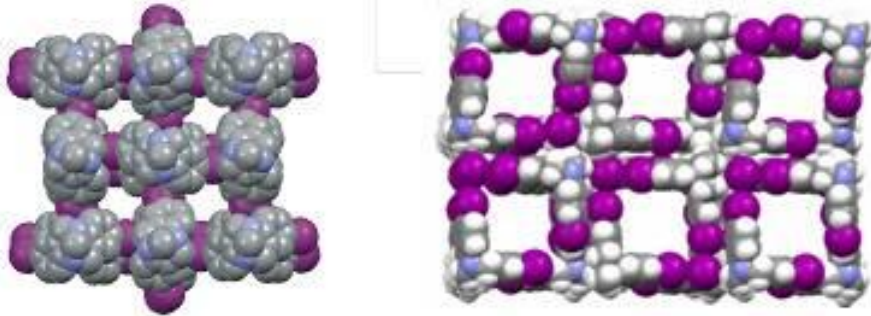
Las moléculas se unen entre sí por fuerzas de Van de Waals. Las distancias intermoleculares son mayores que las distancias de enlace covalente, aprox. 3.5Å.

Celda unitaria del metano (CH_4)



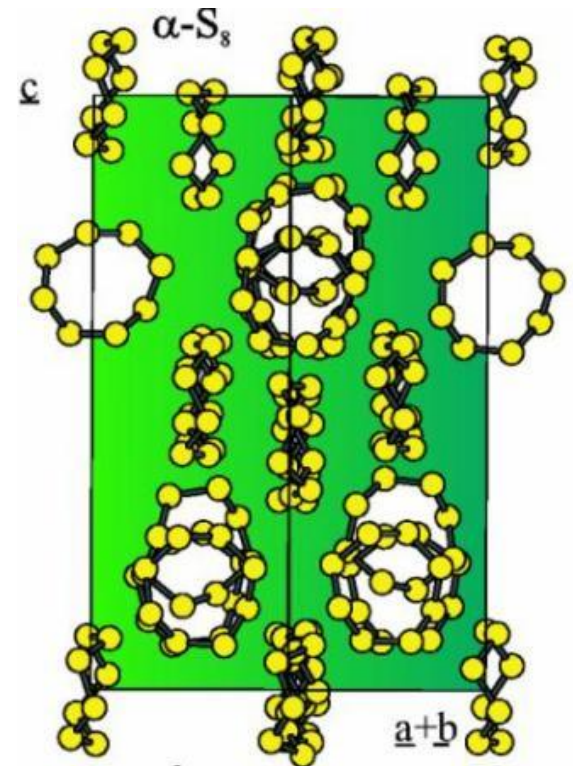
MOLECULAR

Crystal engineering



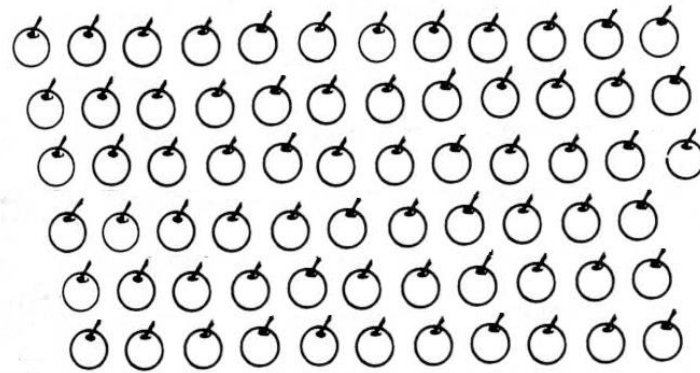
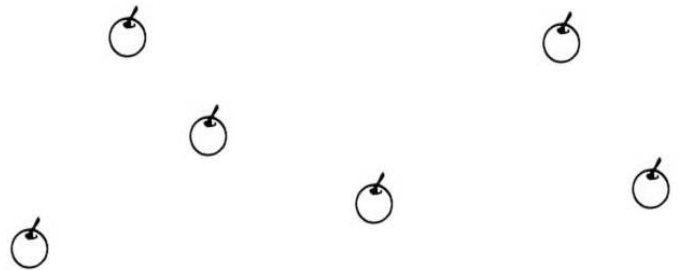
http://www.unizar.es/liquid_crystals/index.php?seccion=sorg

Materiales funcionales
Autoorganizados –
Universidad de Zaragoza



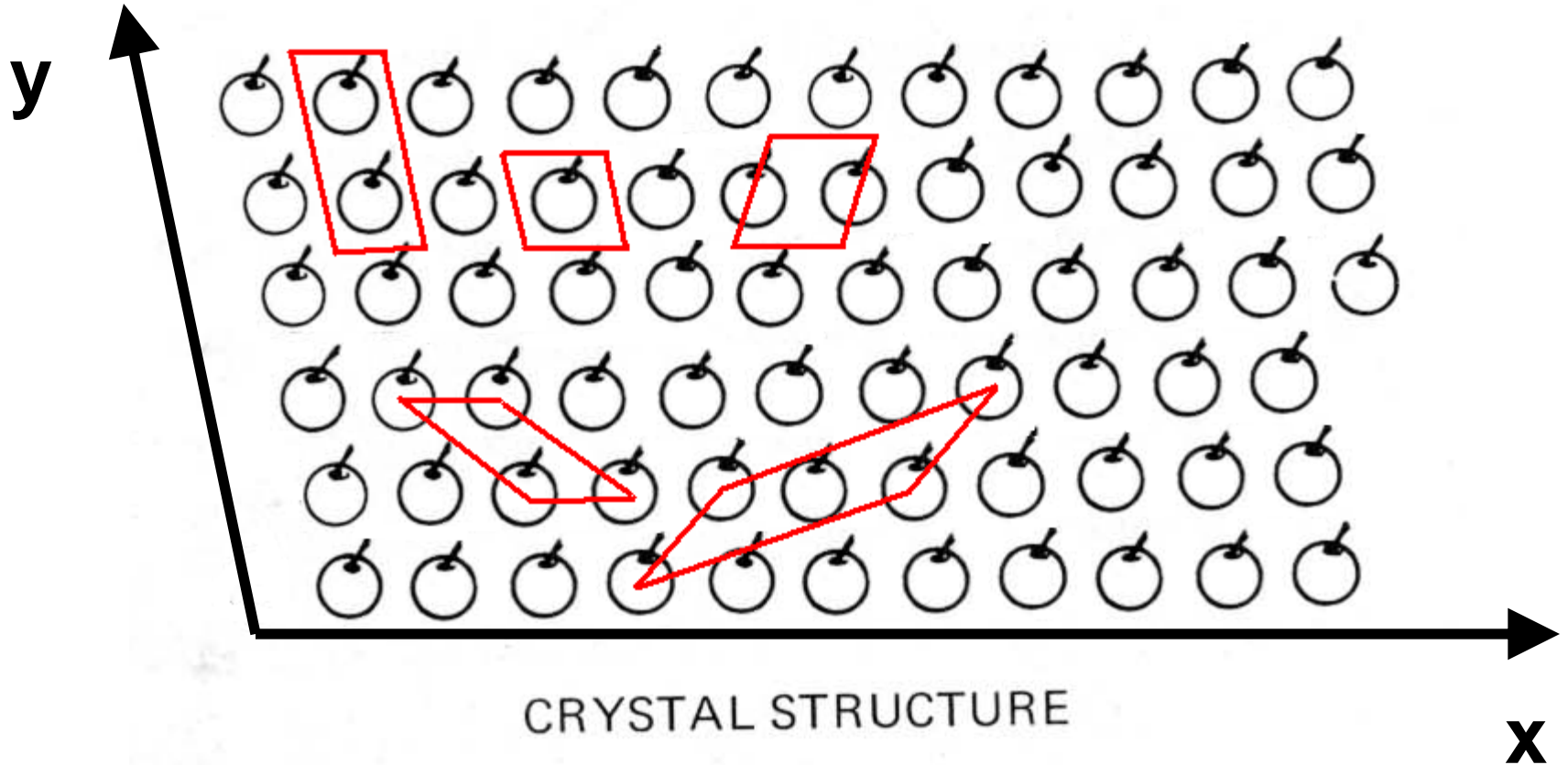
Modelo molecular simple y flexible para los cristales alpha -, beta - y gamma - S₈
Departamento de Física, Comisión Nacional de Energía Atómica, Buenos Aires

¿Cómo acomodar manzanas?

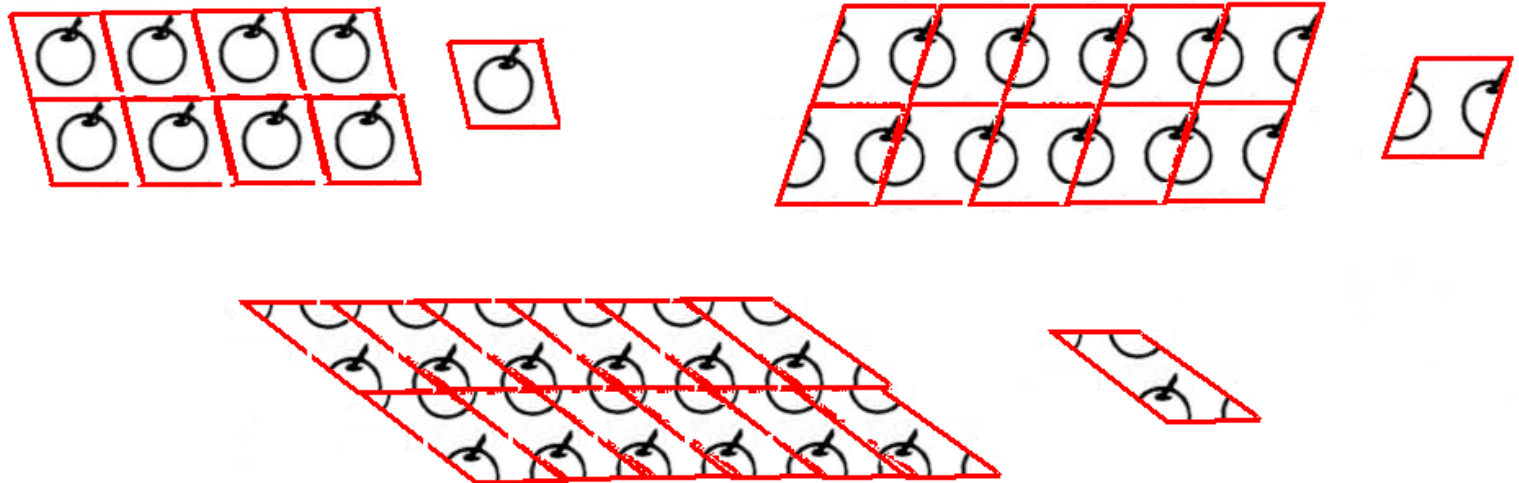


CRYSTAL STRUCTURE

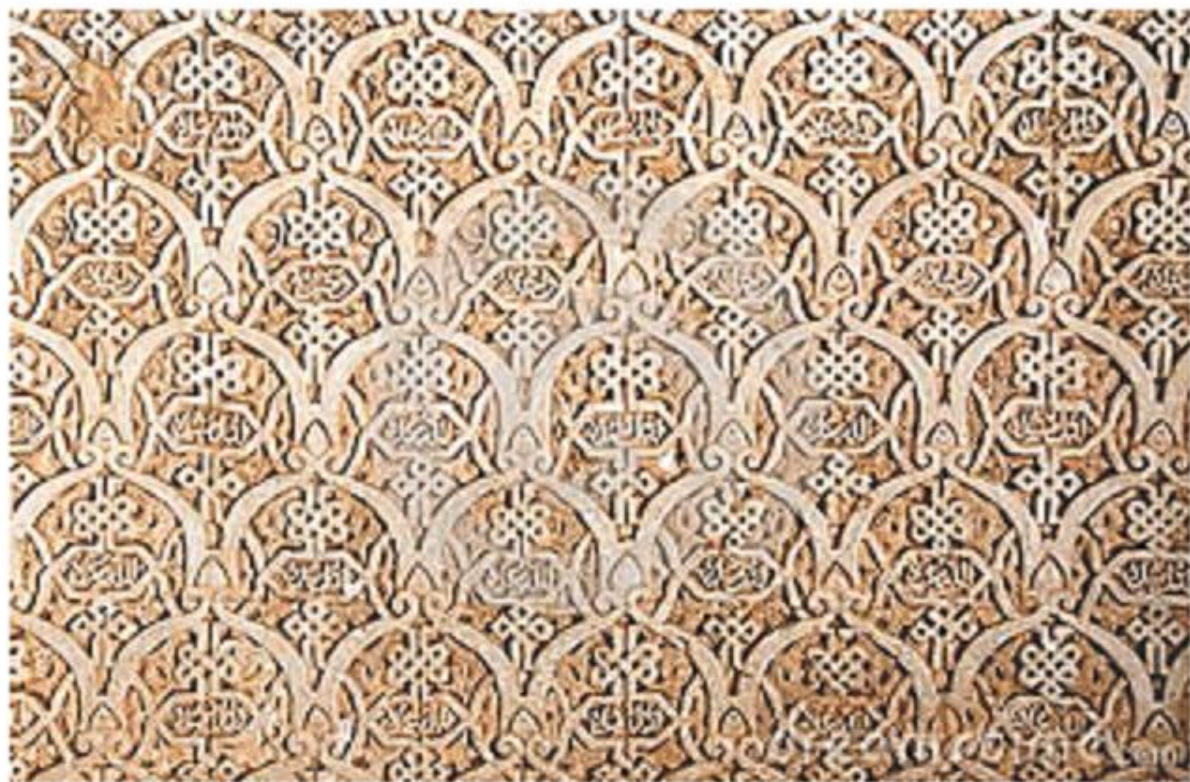
¿Cómo describir el arreglo? (1)



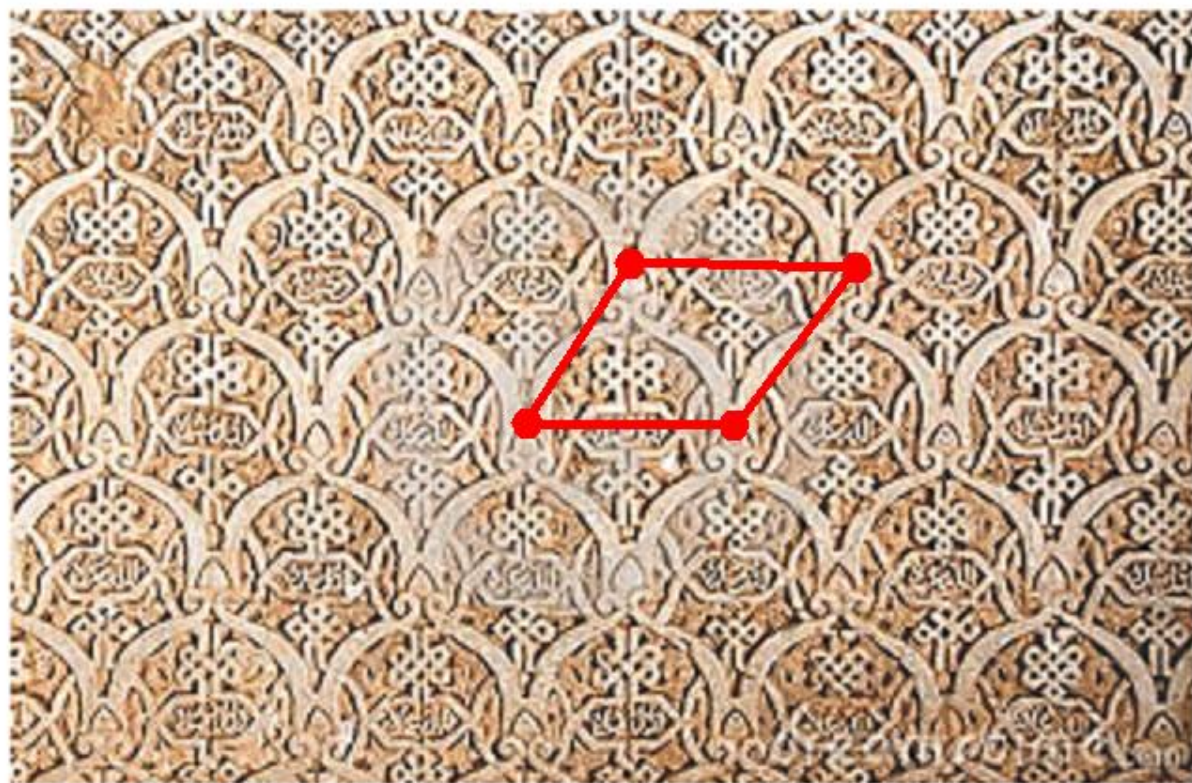
¿Cómo describir el arreglo? (2)



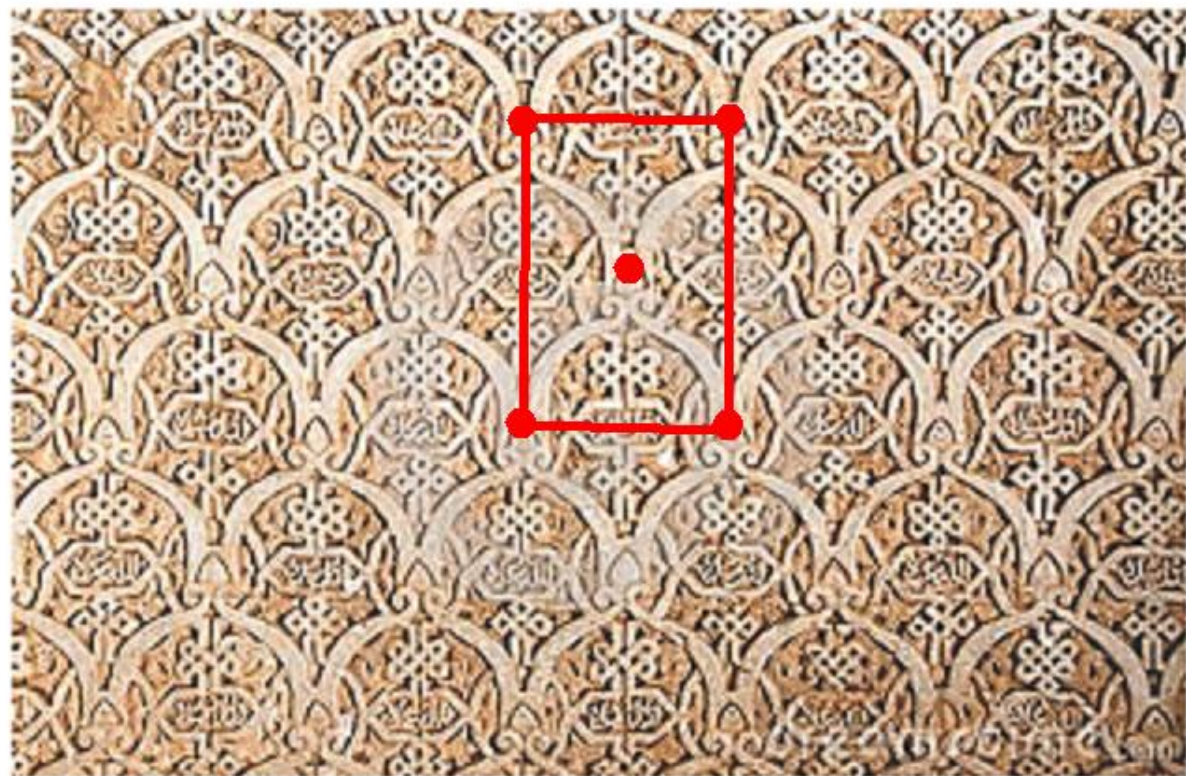
Un paseo por la Alhambra (1)



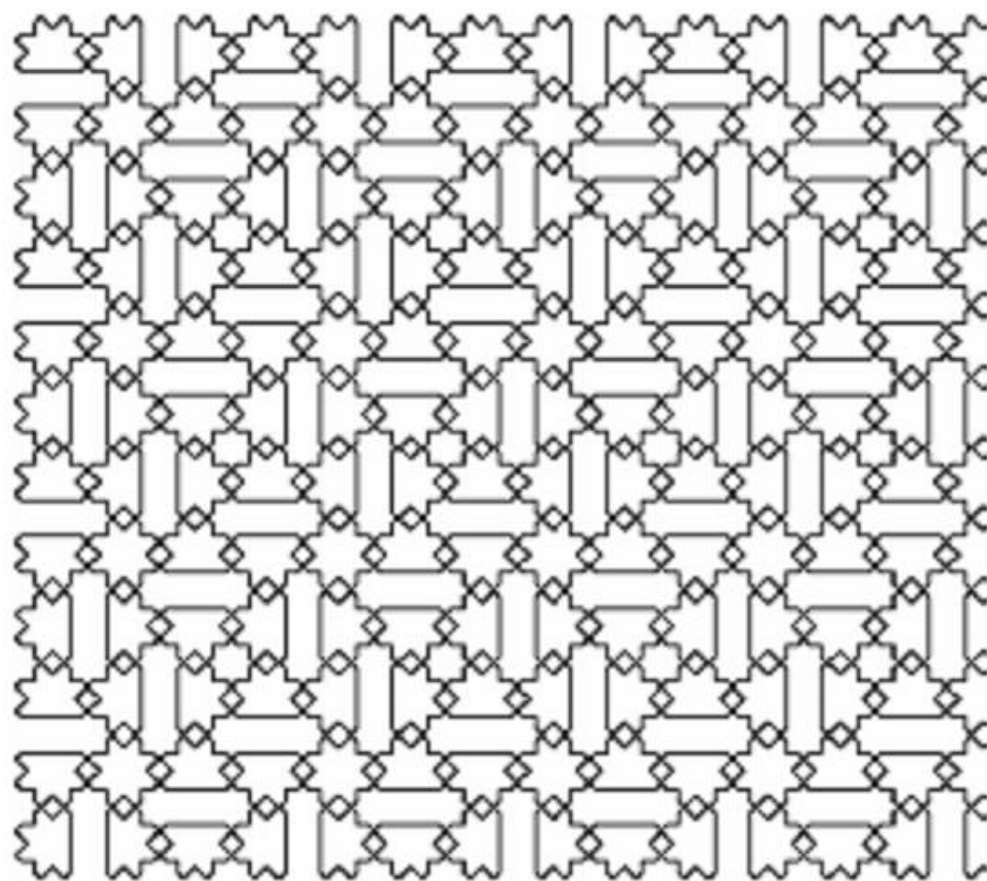
Un paseo por la Alhambra (1)



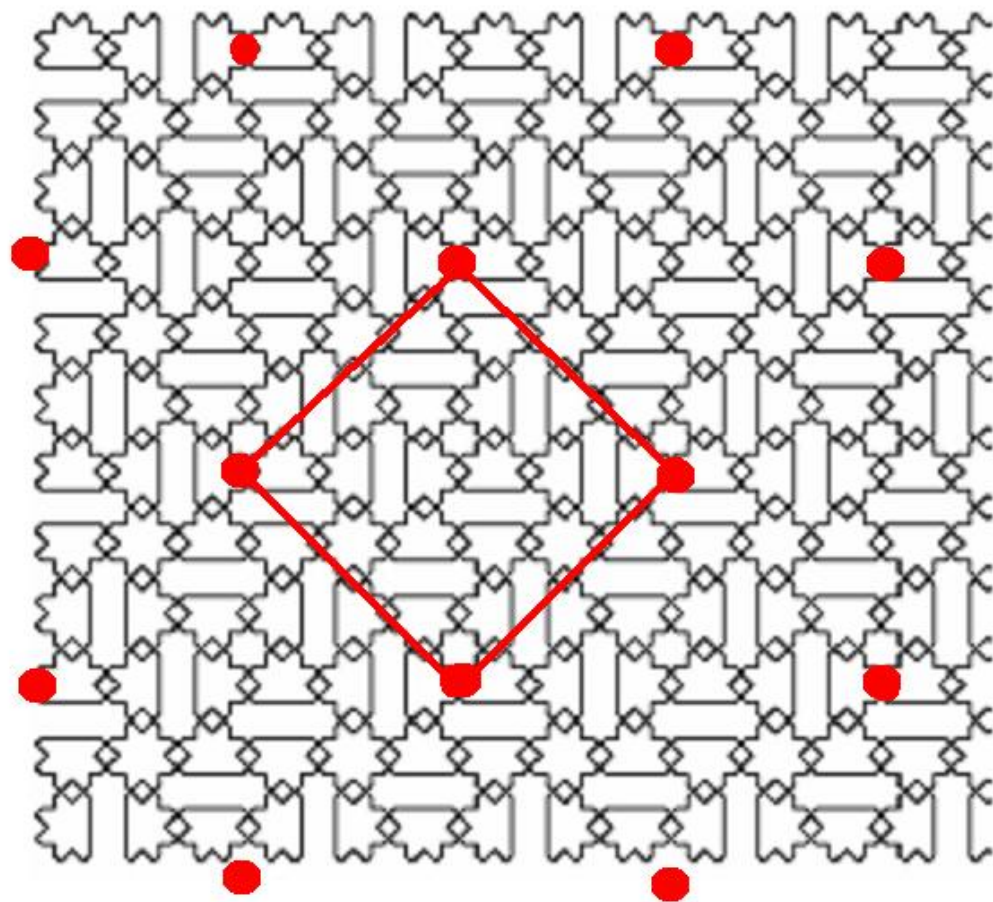
Un paseo por la Alhambra (1)



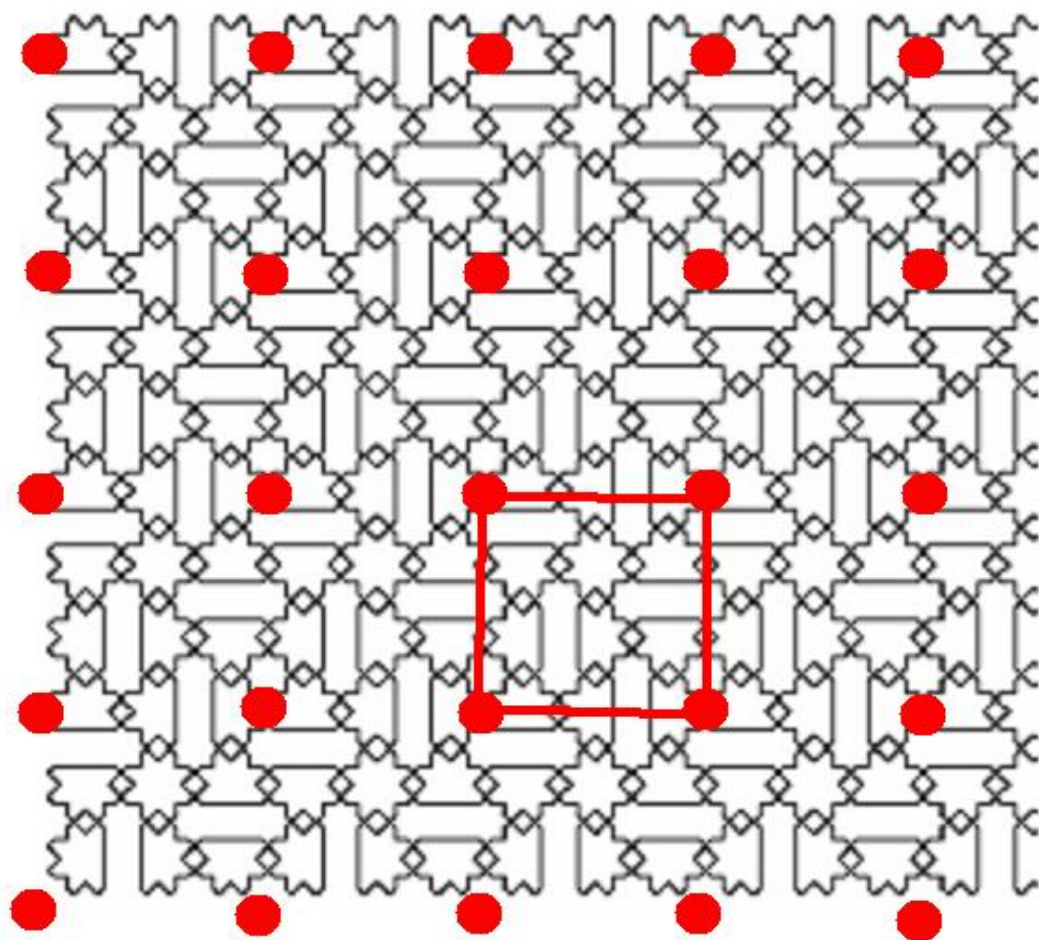
Un paseo por la Alhambra (2)



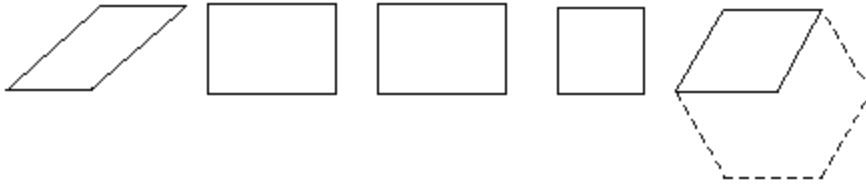
Un paseo por la Alhambra (2)



Un paseo por la Alhambra (2)

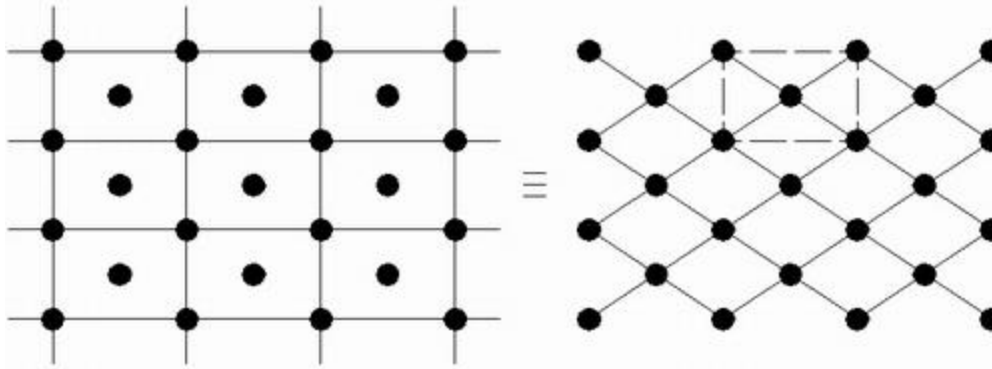
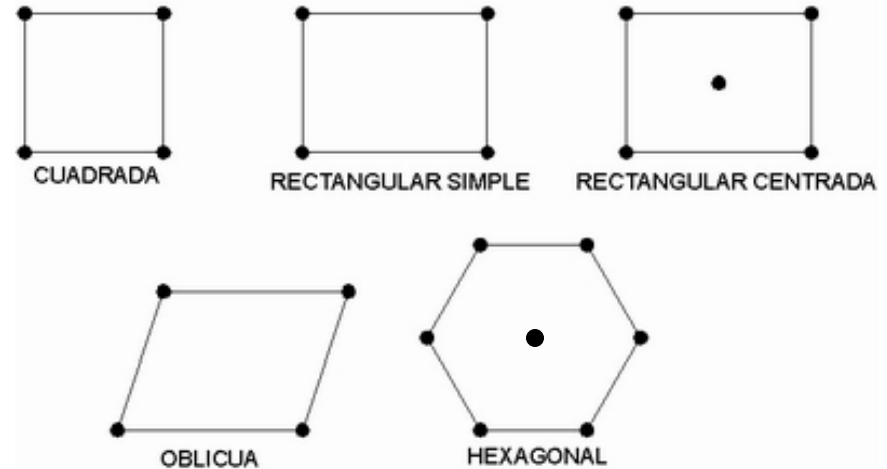


Redes de Bravais: 2-D



La elección de la celda unitaria busca que exhiba la simetría de la red cristalina

oblicua	p	$a \neq b, \alpha \neq 90^\circ$
rectangular	p	$a \neq b, \alpha = 90^\circ$
rectangular	c	$a \neq b, \alpha = 90^\circ$
cuadrada	p	$a = b, \alpha = 90^\circ$
hexagonal	p	$a = b, \alpha = 120^\circ$

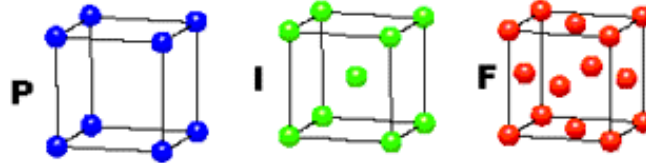


Las redes planas rectangular centrada y rómbica son idénticas.

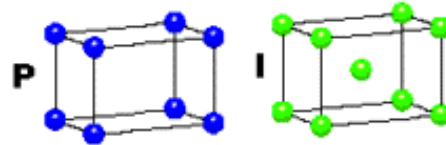
Redes de Bravais: 3-D

7 sistemas
cristalinos

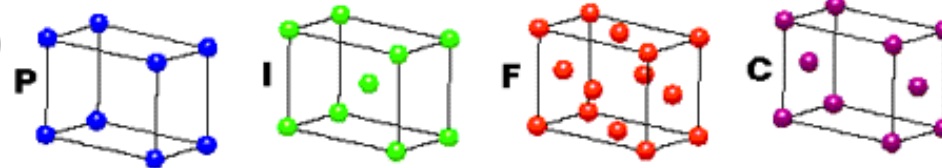
CÚBICO
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



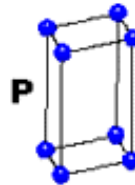
TETRAGONAL
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



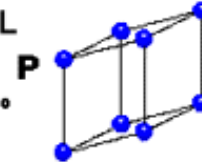
ORTORÓMBICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



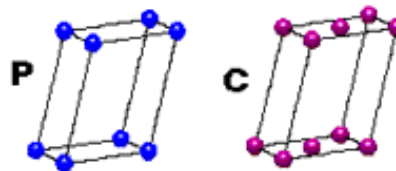
HEXAGONAL
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma = 120^\circ$



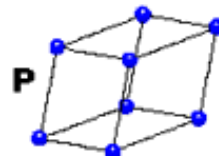
TRIGONAL
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



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



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



Las elección de la celda unitaria busca que exhiba la simetría de la red cristalina

Tipos de celdas:

- P = Primitiva
- I = Centrada en interior
- F = Centrada en todas las caras
- C = Centrada en dos caras

14 redes de Bravais

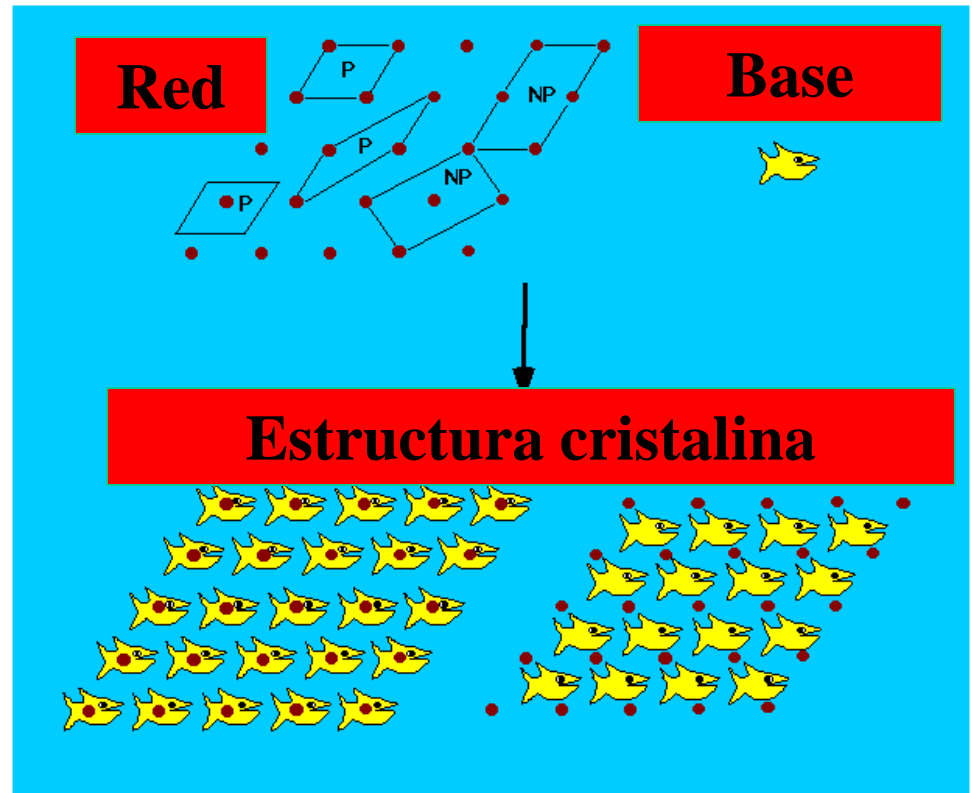
Resumen de definiciones básicas (1)

- **CELDA UNITARIA** = componente más pequeño de un cristal que por traslación puede reproducir todo el cristal.
- **CELDA PRIMITIVA (P)** celda unitaria que contiene un sólo punto de red



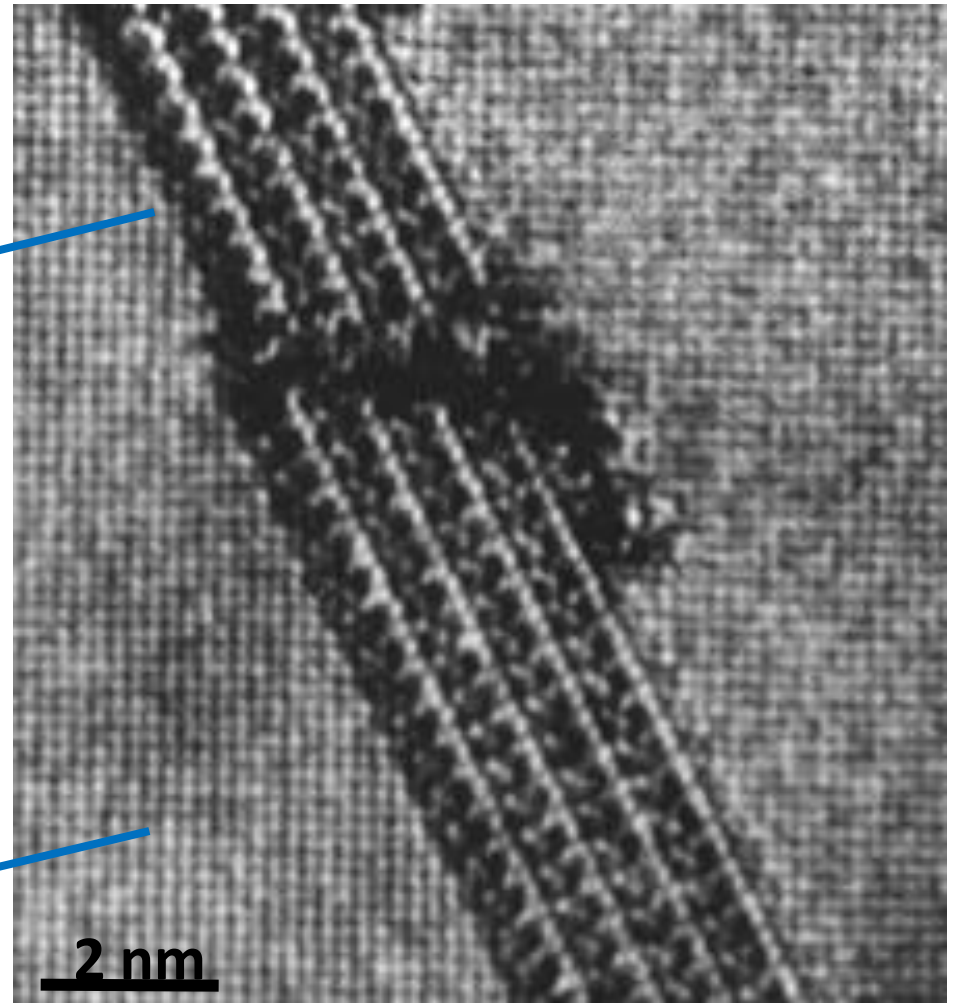
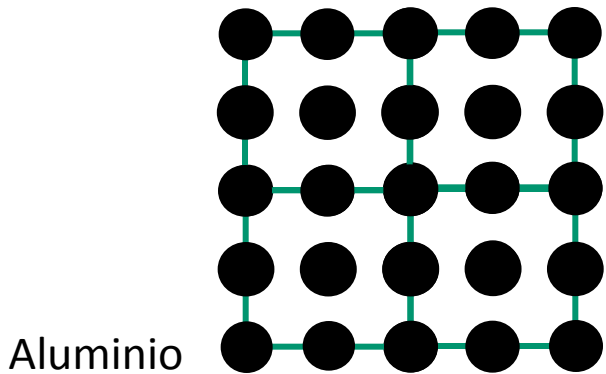
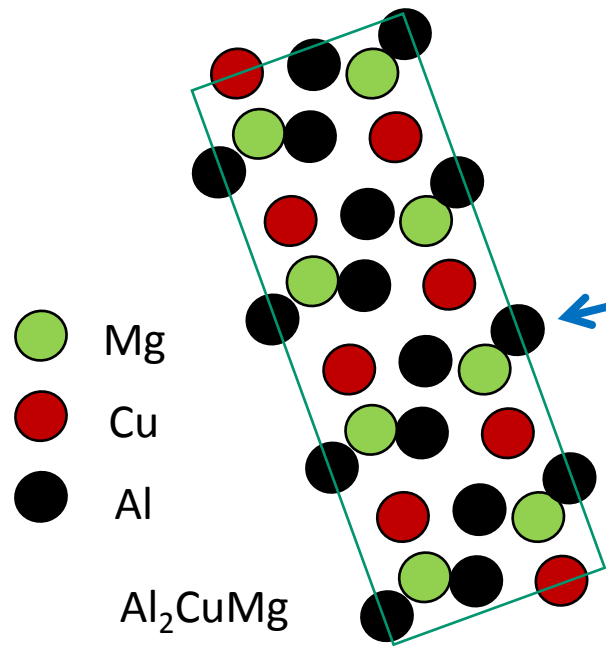
Resumen de definiciones básicas (2)

- **RED** = arreglo infinito de puntos en el espacio, donde *cada punto tiene un entorno idéntico a los otros*.
- **ESTRUCTURA CRISTALINA**
 - arreglo periódico de átomos (o moléculas) en un cristal (sólido)
 - Puede ser descripta asociando a cada punto de red un grupo de átomos llamado **BASE (MOTIVO)**



- No confundir átomos con puntos de la red
- Los puntos de la red no caen necesariamente en el centro de algún átomo

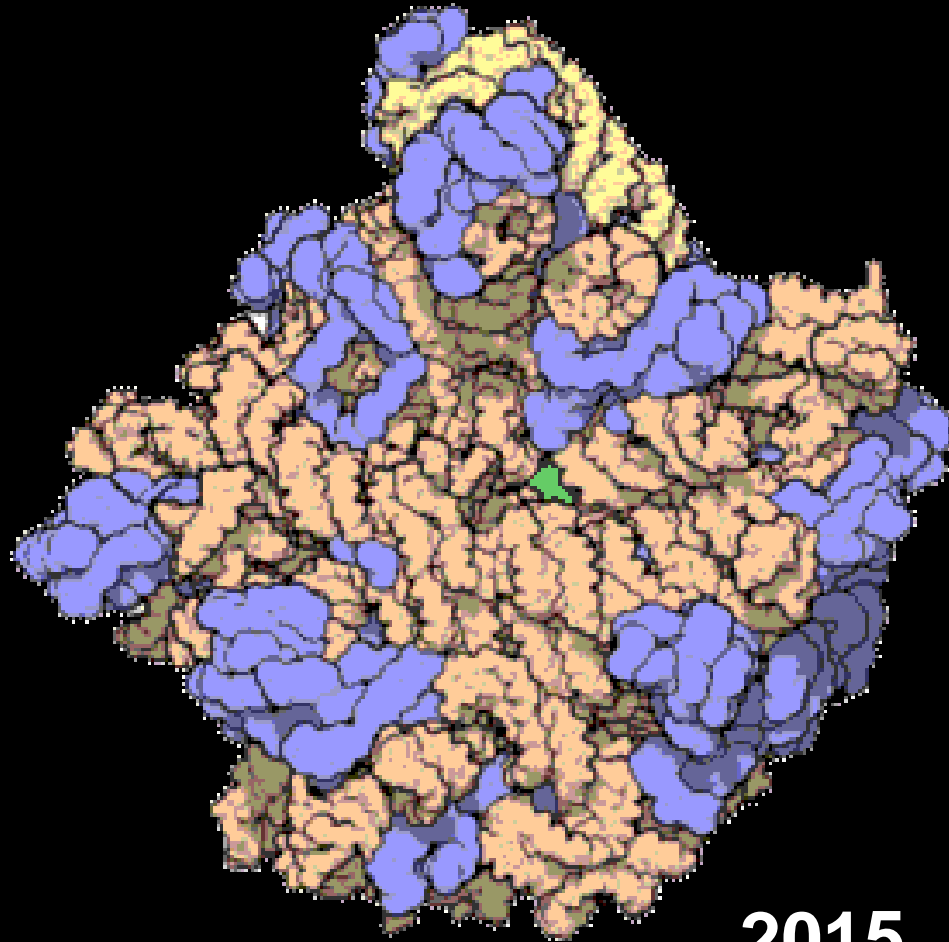
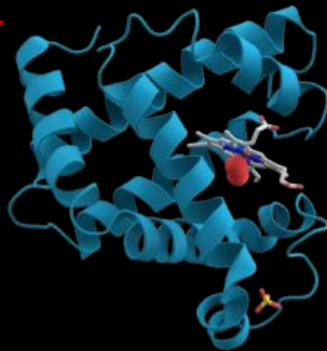
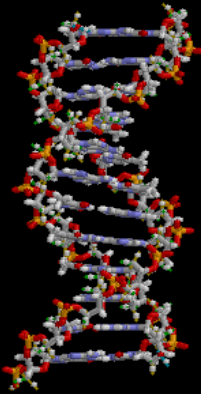
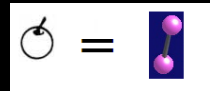
Este orden ahora se puede ver con microscopios electrónicos



Cortesía Alfredo Tolley (CAB)

Precipitado de fase S (Al_2CuMg) en matriz de aluminio

Evolución de las “manzanitas”

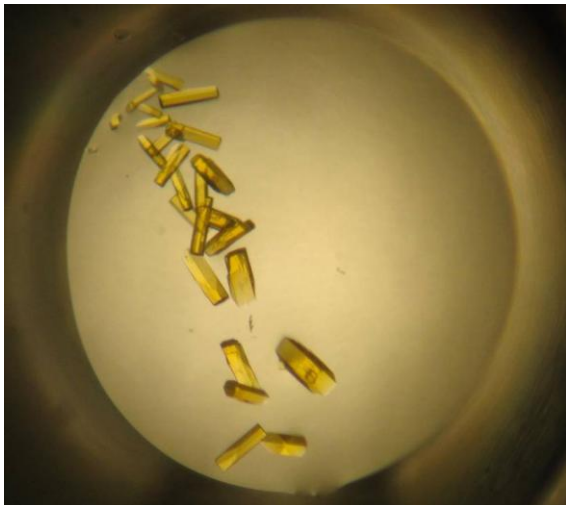
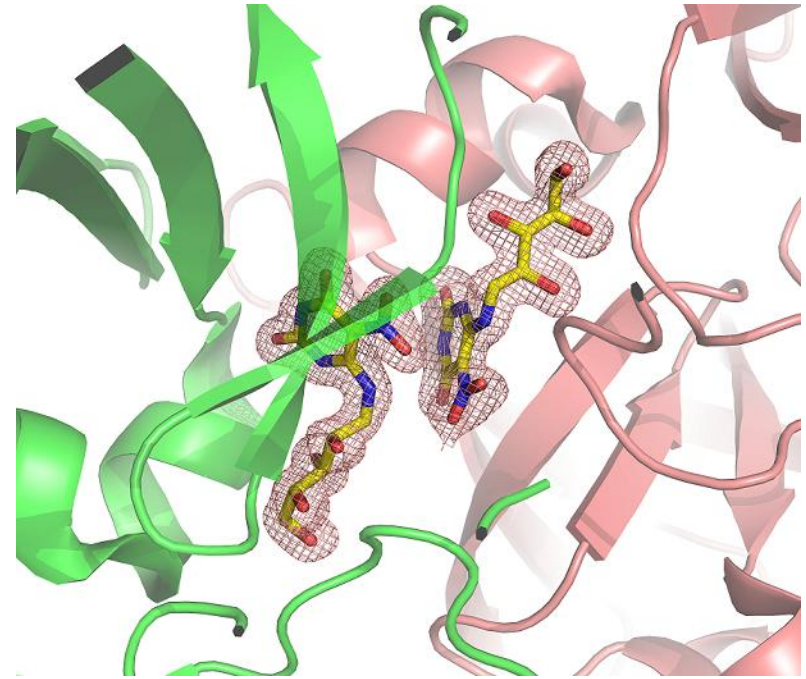
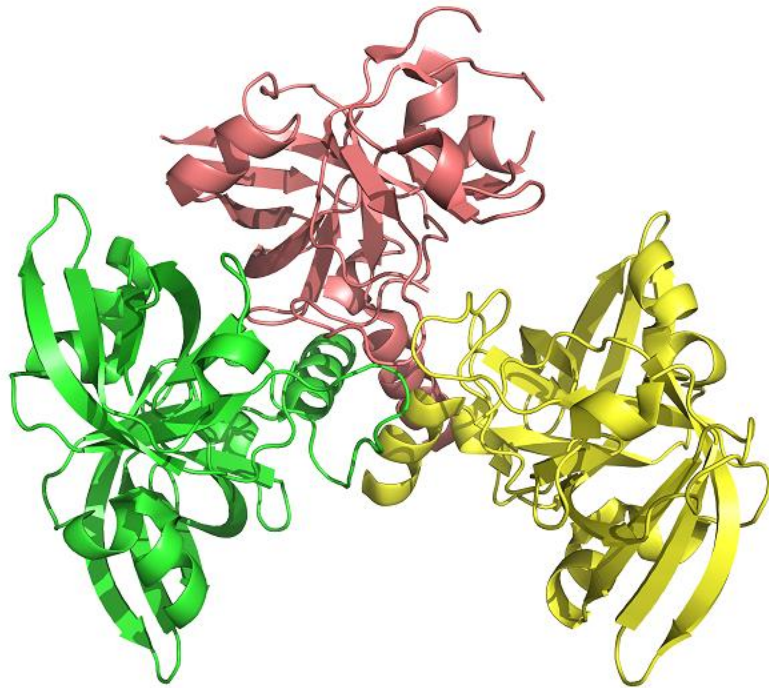


1913

2015



Hecho en casa – Instituto Leloir



Riboflavina sintasa: cataliza la biosíntesis de riboflavina (vitamina B2) en la bacteria patógena *Brucella abortus*.

PM: 66.000 Daltons (5000 átomos!)

Celda unitaria: 70Å x 90Å x 100Å

La proteína es trimérica; cada color representa a una cadena distinta.

Simetrías en los sólidos cristalinos

- Simetrías de traslación

7 sistemas cristalinos \longrightarrow 14 redes de Bravais

- Grupos puntuales (32)

Clases cristalinas (Clases de Laue)

Un grupo puntual es un conjunto de elementos de simetría que operan sobre una red espacial y que contienen por lo menos un punto que permanece inmóvil: rotaciones, inversiones, reflexiones o combinaciones de estas operaciones.

Los grupos puntuales se clasifican dentro de los 7 sistemas cristalinos.

- Grupos espaciales (230)

Se obtienen cuando se consideran todas las simetrías del cristal, incluyendo translaciones. Nuevas simetrías: ejes helicoidales y planos de deslizamiento.

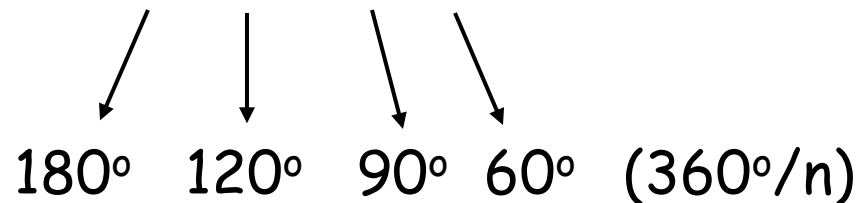
Elementos de simetría

- Inversión ($\bar{1}$)
- Plano de reflexión (m)

- Plano de deslizamiento (a, b, c, n, d)

Combinación de una reflexión con una translación.

- Ejes de rotación ($2, 3, 4, 6$) y rotación-inversión ($\bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$)


180° 120° 90° 60° (360°/n)

- Ejes helicoidales ($2_1 ; 3_1 ; 3_2 ; 4_1 ; 4_2 ; 6_1 ; 6_2 ; 6_3 ; 6_4 ; 6_5$)

Combinación de una rotación con una translación.

Una muy buena y didáctica presentación en castellano

- <http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/>