



UNCUYO
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE CUYO



**FACULTAD
DE INGENIERÍA**

“CRISTALOGRAFÍA”

MATERIALES

Prof. Titular: Dra. Ing. María J. Santillán

Prof. Adjunto: Dr. Ing. Claudio Careglio



CRISTALOGRAFIA

Ciencia que se dedica al estudio y resolución de estructuras cristalinas.

- **Geométrica:**

Forma externa: Hábito

- **Estructural:**

Disposición de átomos, moléculas o constituyentes

- **Química:**

Tipo de estructura- Interacción entre enlaces

- **Física:**

Respuesta a cristales ante estímulos

Los estudios de la estructura interna se apoyan fuertemente en el análisis de los patrones de [difracción](#) que surgen de una muestra cristalina al irradiarla con un haz de [rayos X](#), [neutrones](#) o [electrones](#). La [estructura cristalina](#) también se puede estudiar por medio de [microscopía electrónica](#). Uno de sus objetivos es conocer la posición relativa de los [átomos](#), [iones](#) y [moléculas](#) que los constituyen y sus patrones de repetición o empaquetamiento, es decir, su estructura tridimensional

Estudiar cristalografía en Flatland



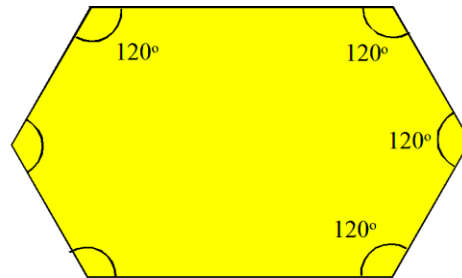
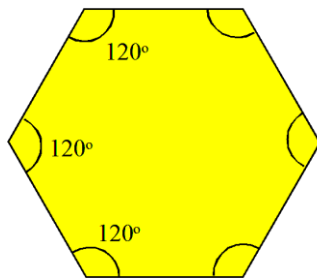
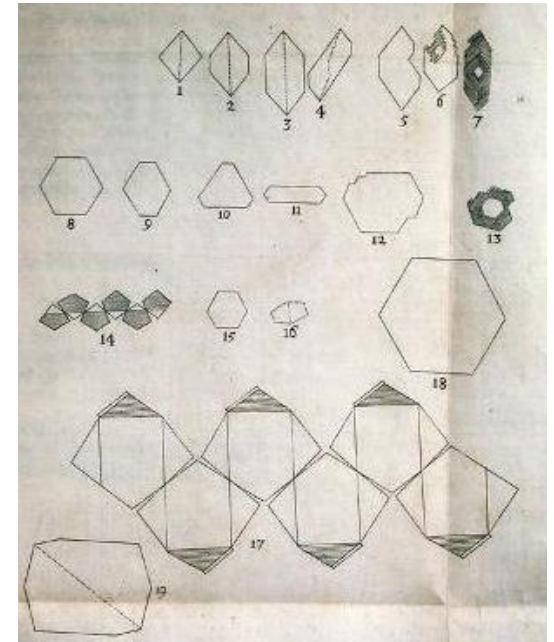
Antecedentes

padre de la [geología](#)

- Nicolás Steno (1638 – 1686) médico, naturalista y teólogo.

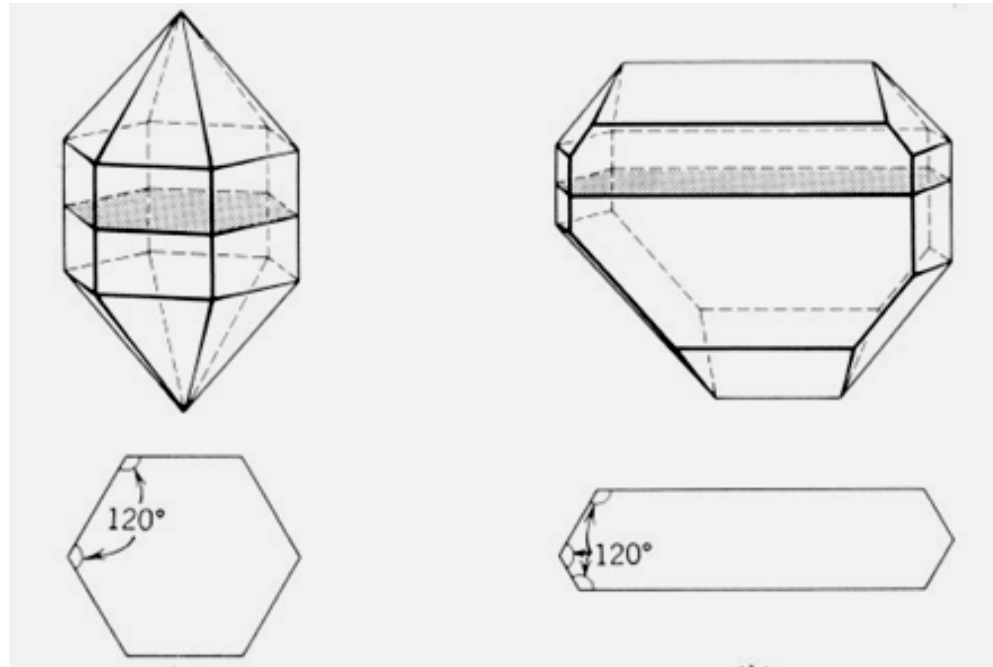
Discurso preliminar de una disertación sobre los cuerpos sólidos de manera natural contenidos en un sólido

- Estudió cristales de cuarzo y enunció la “**Ley de la constancia de ángulos interfaciales.**”



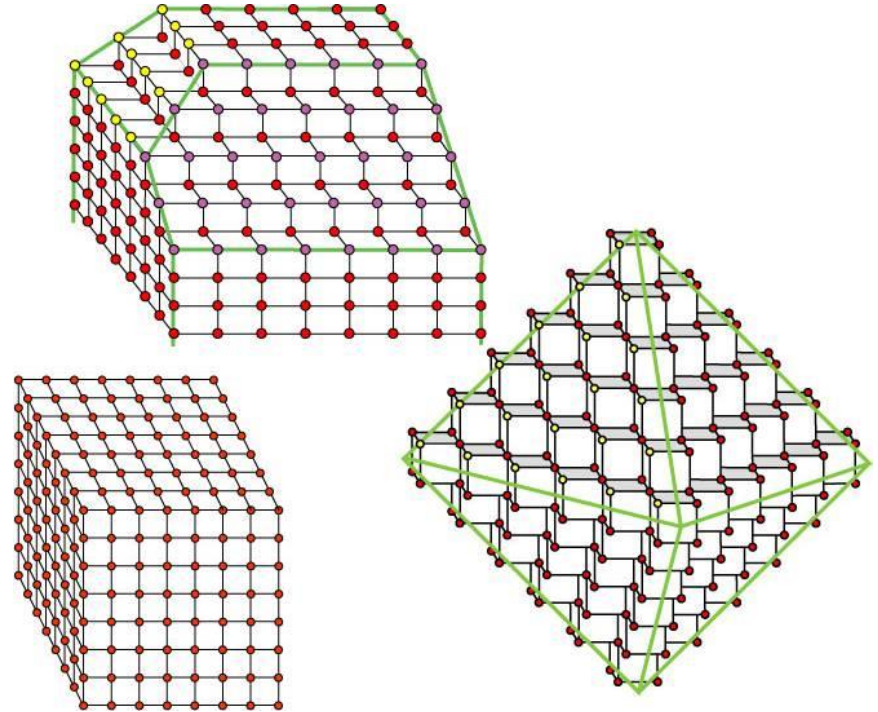
Ley de Steno de Ángulos Interfaciales

- Los ángulos entre las caras equivalentes (homólogas) de los cristales de la misma sustancia medidos a la misma T y P son constantes, independientemente del tamaño o forma del cristal.



Modelos cristalinos de Haüy

- René J. Haüy (1743-1822) demostró que la forma cristalina externa de un mineral (morfología) era un reflejo de su orden interno.



conclusión de que todas las moléculas de calcita tenían la misma forma y que era solo cuando se unían que se producían diferentes estructuras.



Ley de la racionalidad de Haüy

- Las aristas intersección de tres caras de un cristal permite definir un sistema de ejes de coordenadas.
- La distancia “a” que una cuarta cara corta a cada eje se la considera la unidad de medida sobre este eje. Toda las restantes caras cortan a dichos ejes a una distancia cuya razón con las longitudes definidas como unidad son números racionales y en general sencillos

$$X_1/X_2=Y_1/Y_2:h:k$$



MATERIALES pueden ser...

CRISTALINOS

- METALES
- COMPUESTOS IÓNICOS
- COMPUESTOS COMPLEJOS COV.-ION.
- SÓLIDOS COVALENTES
 - COVALENTE PURO
 - SÓLIDOS MOLECULARES

NO CRISTALINOS (AMORFOS)

- VIDRIOS INORGÁNICOS
- POLÍMEROS
- GELES



Constitución de los Materiales

Estructura:

Disposición de elementos estructurales (no implica orden necesariamente) y tipo de elementos estructurales.

Elementos estructurales → átomos o moléculas

→ Propiedades de los materiales

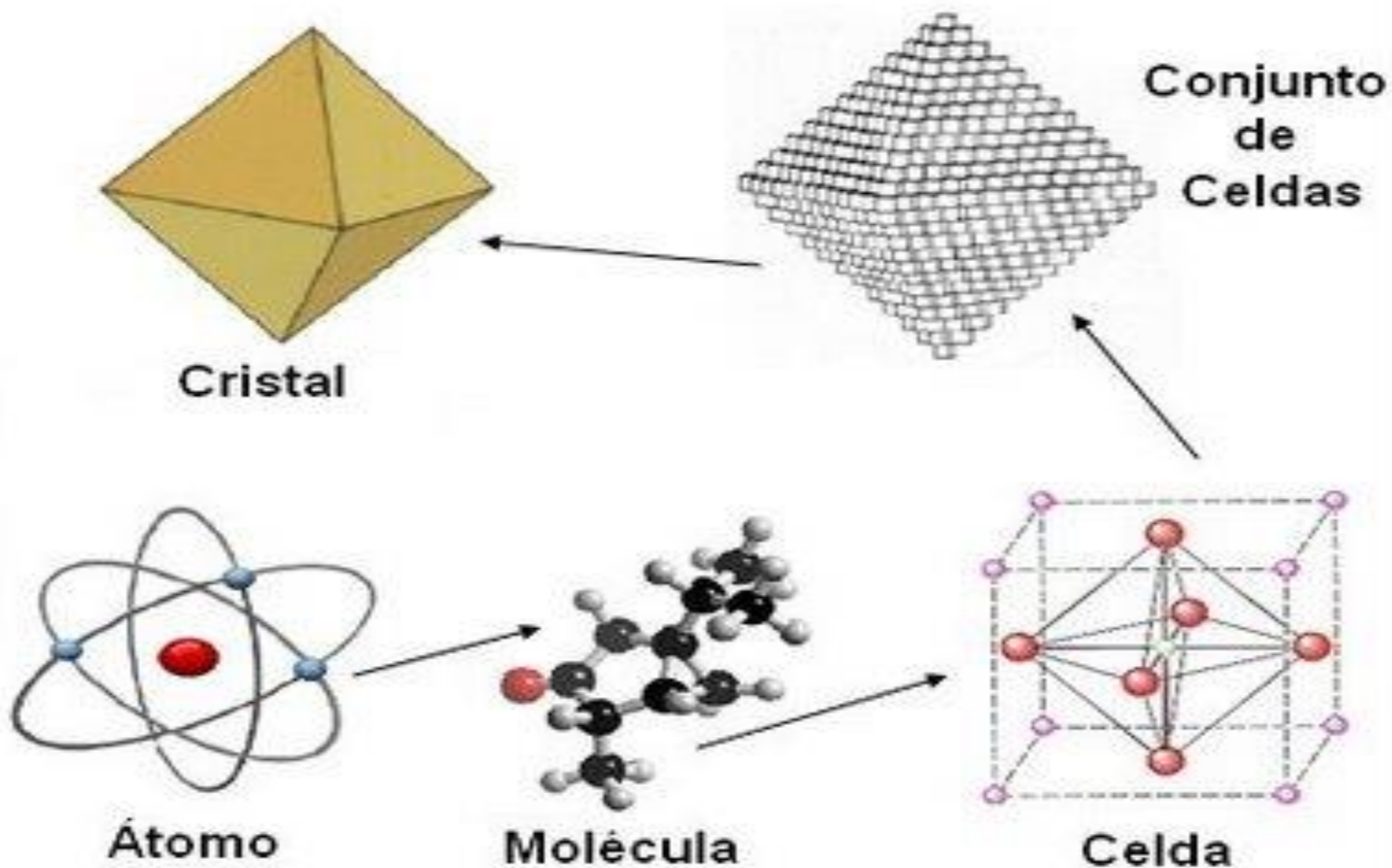
Estructura



estructura cristalina + composición química



Formación de un Cristal



Materiales Cristalinos

CONCEPTOS IMPORTANTES

- CELDA unitaria** { Elemento mas pequeño representativo de la simetría de la red. (MALLA) .
- SISTEMA CRISTALINO** { Tipos diferenciales de geometría de celda unitaria
- ESTRUCTURA CRISTALINA** { Tipos diferentes de celdas posibles
- REDES DE BRAVAIS** { Representación espacial por yuxtaposición de celdas unitarias



FORMA Y HÁBITO

- **HÁBITO**: morfología externa. Limitado por el medio. Es una combinación de formas y depende de la velocidad de crecimiento del cristal
- **FORMA**: conjunto de caras generadas por simetría. Se origina desde lo geométrico y lo simétrico.

A tiempo infinito, el hábito es la manifestación de caras que crecen a menor velocidad



Conceptos importantes

Celda unitaria: zona formada por dos vectores de traslación, no colineales, que al trasladarla en los vectores de traslación de la red, cubre todo el plano.

Celda primitiva: en 3D define un volumen que si se desplaza usando R llena todo el volumen sin superponerse ni dejar huecos. Un nodo por celda (no es única).

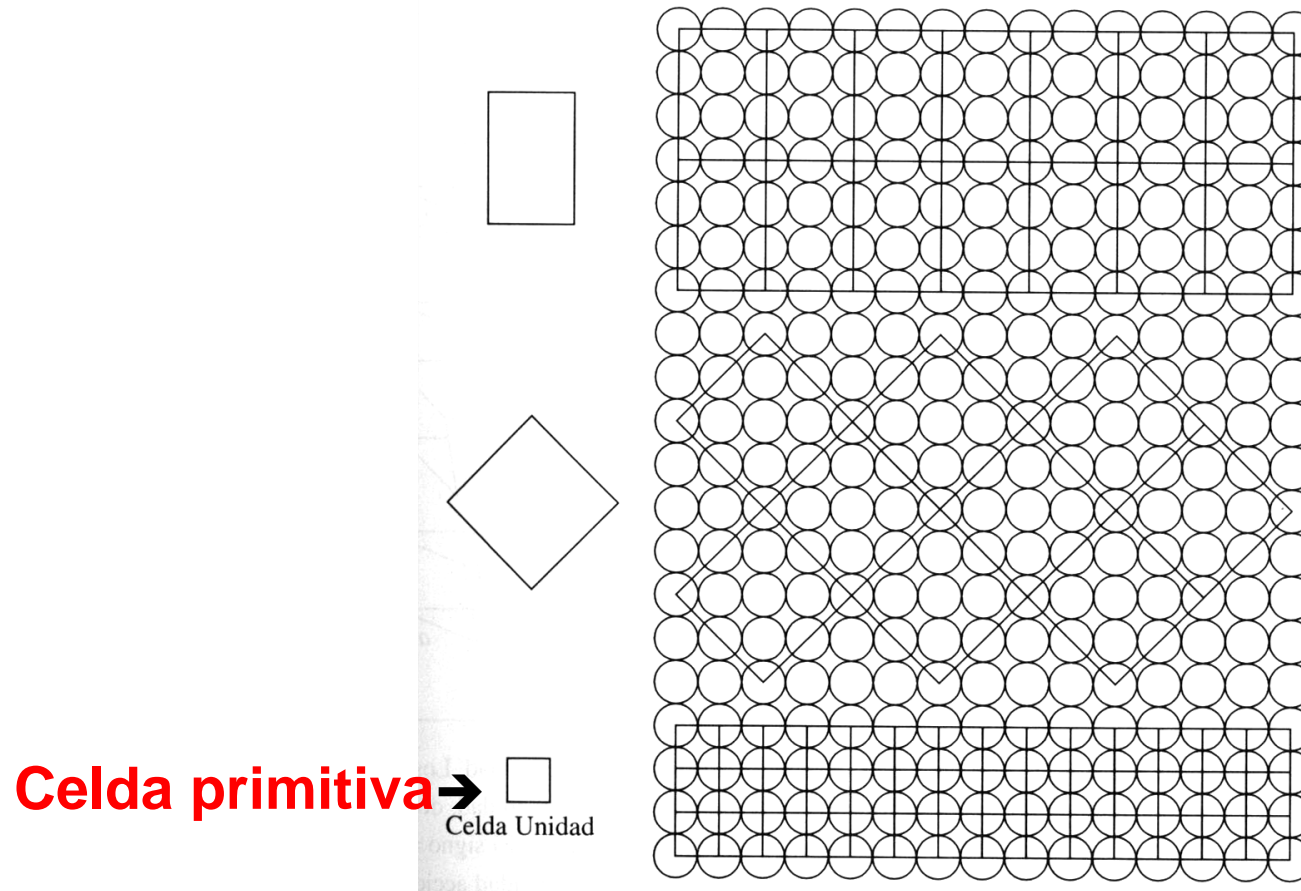
Vectores primitivos: vectores de traslación que generan una celda primitiva.

Algunas PRIMITIVAS, otras NO PRIMITIVAS



Celda unitaria vs Celda primitiva

CELDA UNITARIA



Celda unitaria

Unidad mas pequeña que puedo repetir o desplazar en todas las direcciones para construir la RED, que refleja toda la simetría de la red.

Descripta :

- Parámetros de red : a, b, c.
- Angulos entre parámetros de red : α , β , γ .

**LA CELDA UNIDAD ES GENERALMENTE MAYOR
QUE LA CELDA PRIMITIVA**



Redes de Bravais

- Disposición infinita de puntos discretos cuya estructura es invariante si hago una operación de simetría

5 redes en 2D

- Hexagonal
- Cuadrangular
- Rectangular
- Rectangular centrado
- Oblicua



14 redes en 3D

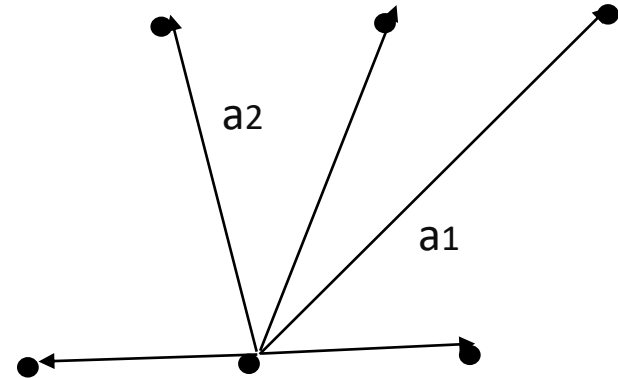


7 sistemas cristalinos



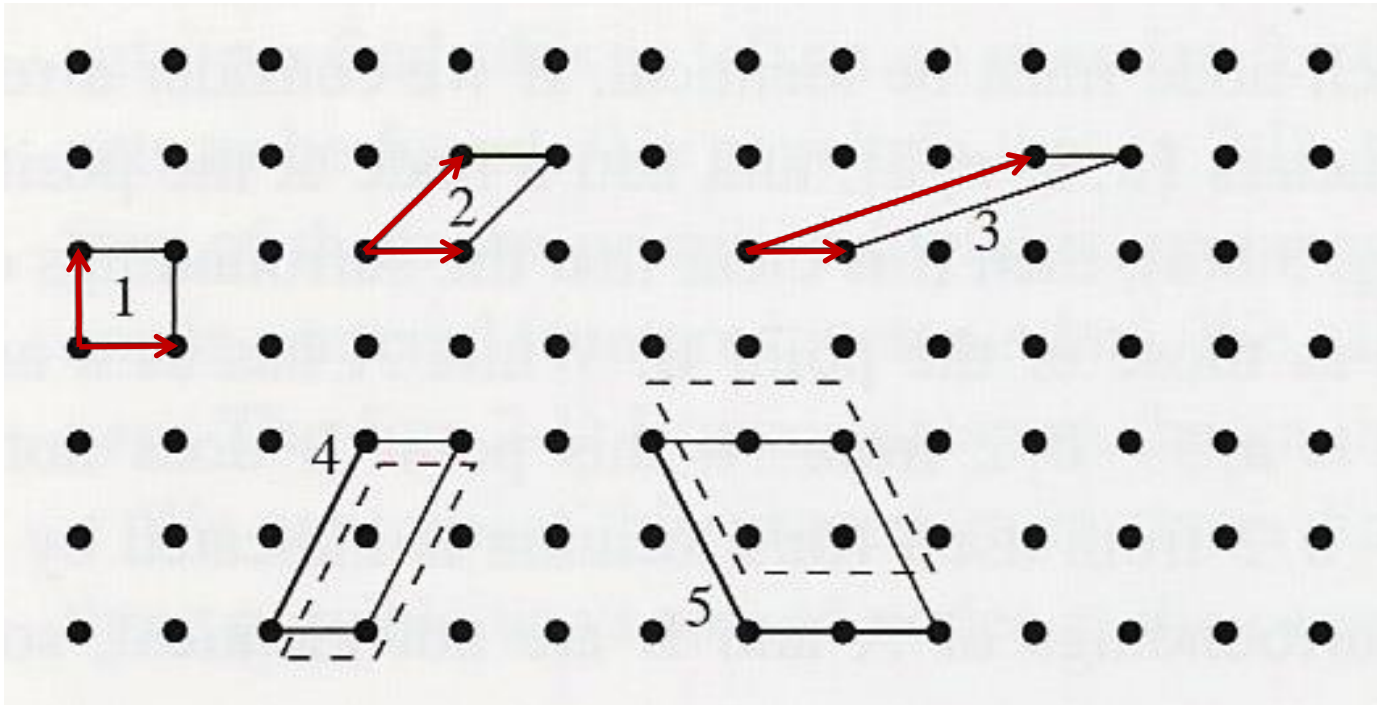
REDES DE BRAVAIS (red de puntos)

- Arreglo infinito de puntos con orientación y disposición tal que se ven iguales desde cualquier punto del arreglo.
- Consiste de todos los puntos con vector posición R



REDES DE BRAVAIS (red de puntos)

- Arreglo infinito de puntos con orientación y disposición tal que se ven iguales desde cualquier puntos del arreglo.



- Invariación al trasladar la red con un vector cualquiera que une a dos puntos de la misma.
- Entorno idéntico de cada punto.



DEFINICIÓN

- Las **Redes de Bravais**, son paralelepípedos que constituyen la menor subdivisión de una red cristalina que conserva las características generales de toda la retícula.
- Por simple traslación puede reconstruirse el sólido cristalino completo.

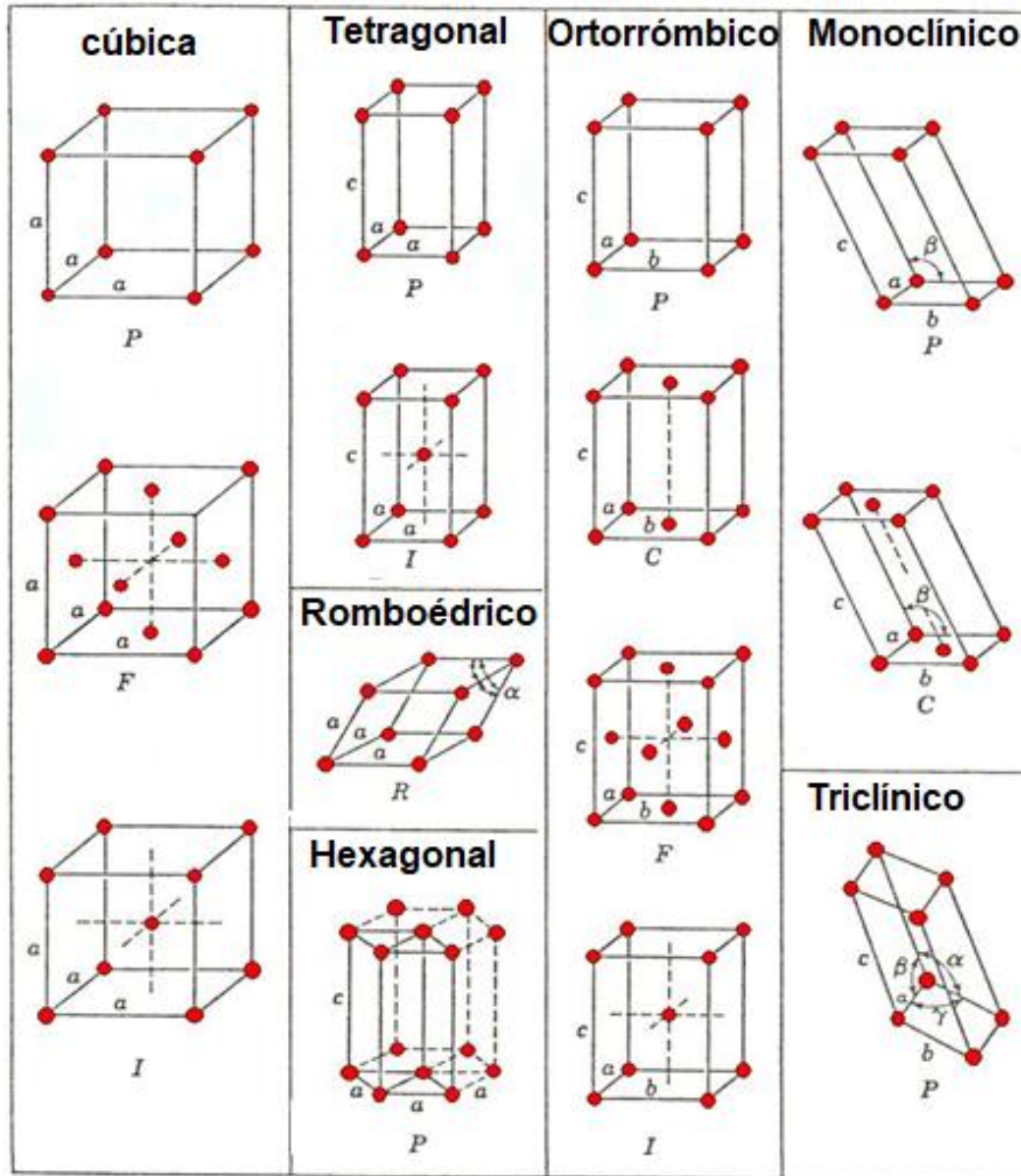
¿Cualquier arreglo periódico de puntos es una Red de Bravais?

- Invariancia al trasladar la red en un vector cualquiera que une a dos puntos de la misma.
- Entorno idéntico de cada punto.

Algunas PRIMITIVAS, otras NO PRIMITIVAS



REDES en 3D

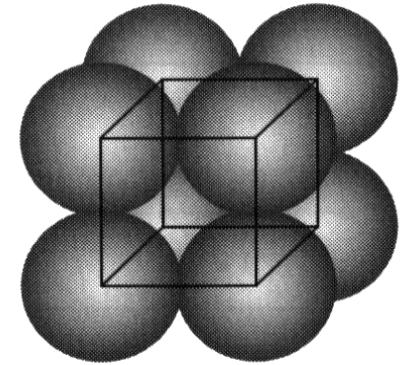
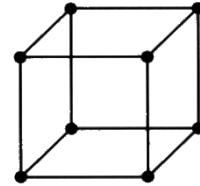
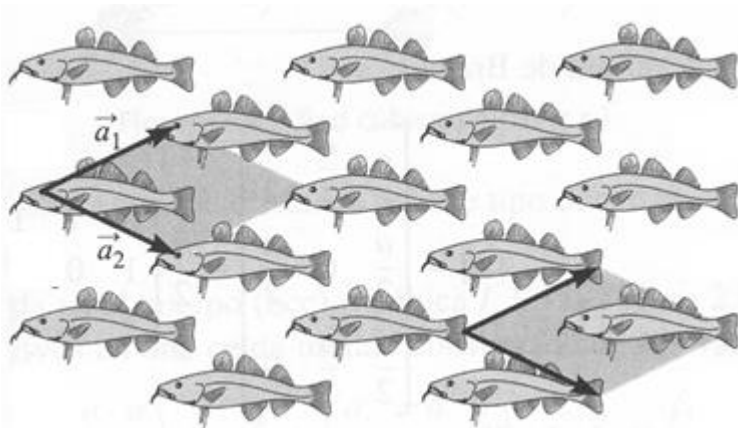


Para determinar la estructura cristalina elemental es necesario establecer las posiciones en la celda de los átomos o moléculas que forman el sólido cristalino.

- **P:** Celda primitiva. Los puntos reticulares sólo en los vértices del paralelepípedo.
- **F:** Celda centrada en las cara, que tiene puntos reticulares en las caras, además de en los vértices. Si sólo tienen puntos reticulares en las bases, se designan con las letras A, B o C según sean las caras que tienen los dos puntos reticulares.
- **I:** Celda centrada en el cuerpo que tiene un punto reticular en el centro de la celda, además de los vértices.
- **C:** Primitiva con ejes iguales y ángulos iguales ó hexagonal doblemente centrada en el cuerpo, además de los vértices.



ESTRUCTURAS CRISTALINAS



$$\mathbf{E.C. = RB + BASE}$$

Red de Bravais: Marca puntos de idéntico contenido

Celdilla: Paralelogramo definido por a_1 a_2

Base estructural: el pez

Estructura cristalina: red + base

