

Jornada Docente sobre Cristalografía y Crecimiento de Cristales



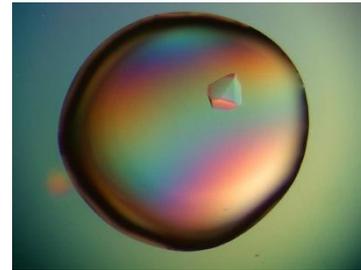
Unidad 2: Materiales sólidos y elementos de Cristalografía

- ❖ 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 TOPACIO



CRISTAL DE RUTIL



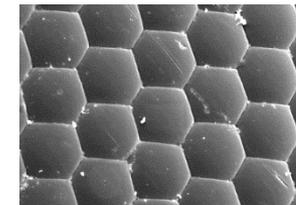
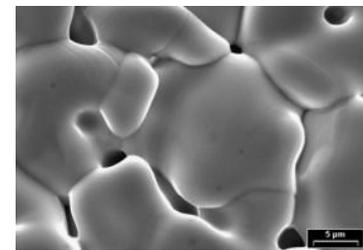
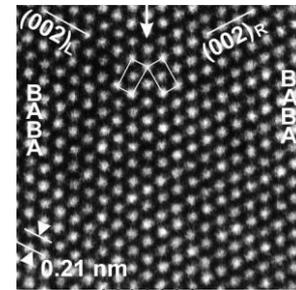
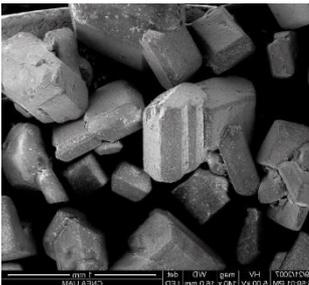
CRISTAL DE PRISTA



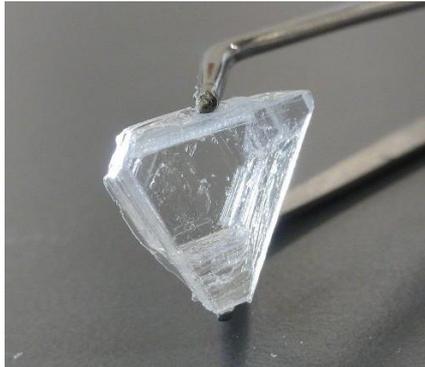
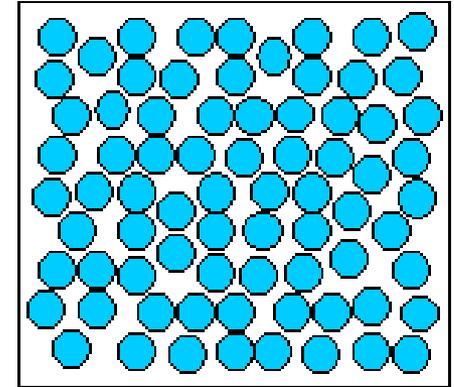
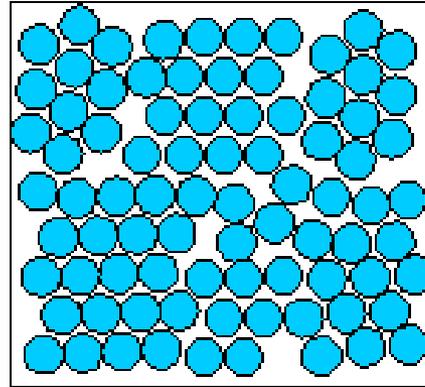
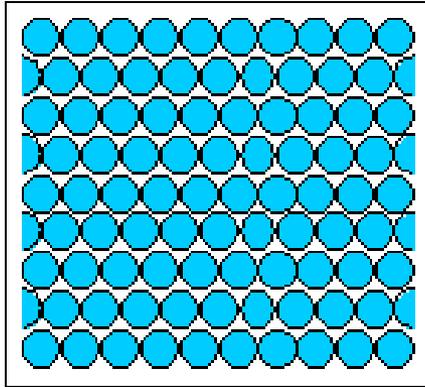
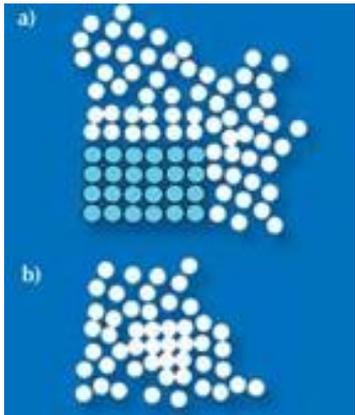
CRISTAL DE SULFATO DE COBRE



CRISTAL DE FLUORITA

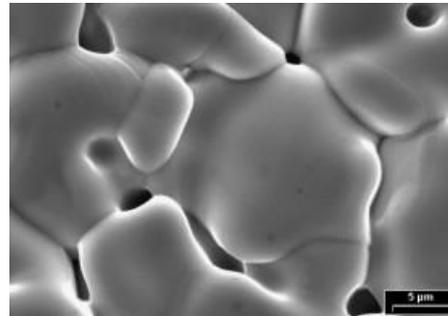


Al enfriarse un líquido o un gas algunos materiales solidifican...

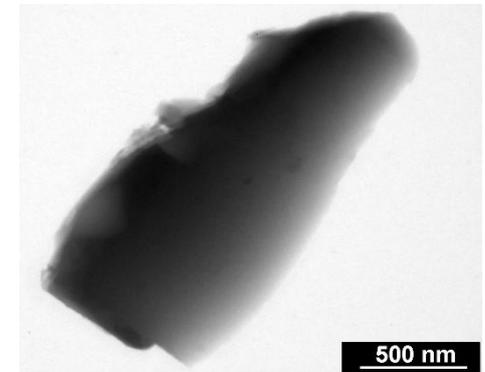


...como monocristales
(todos ordenados en
la misma dirección)

... otros forman
policristales

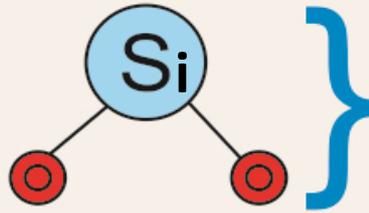


Bariloche Sábado 4 de Junio 2011
Partícula de vidrio



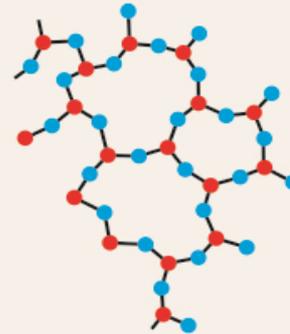
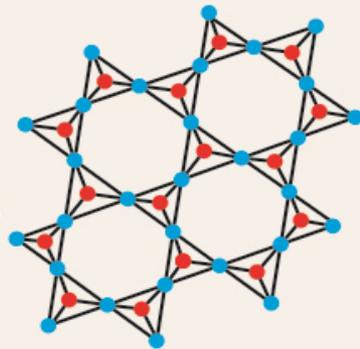
... y otros como
amorfo o VIDRIOS

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)

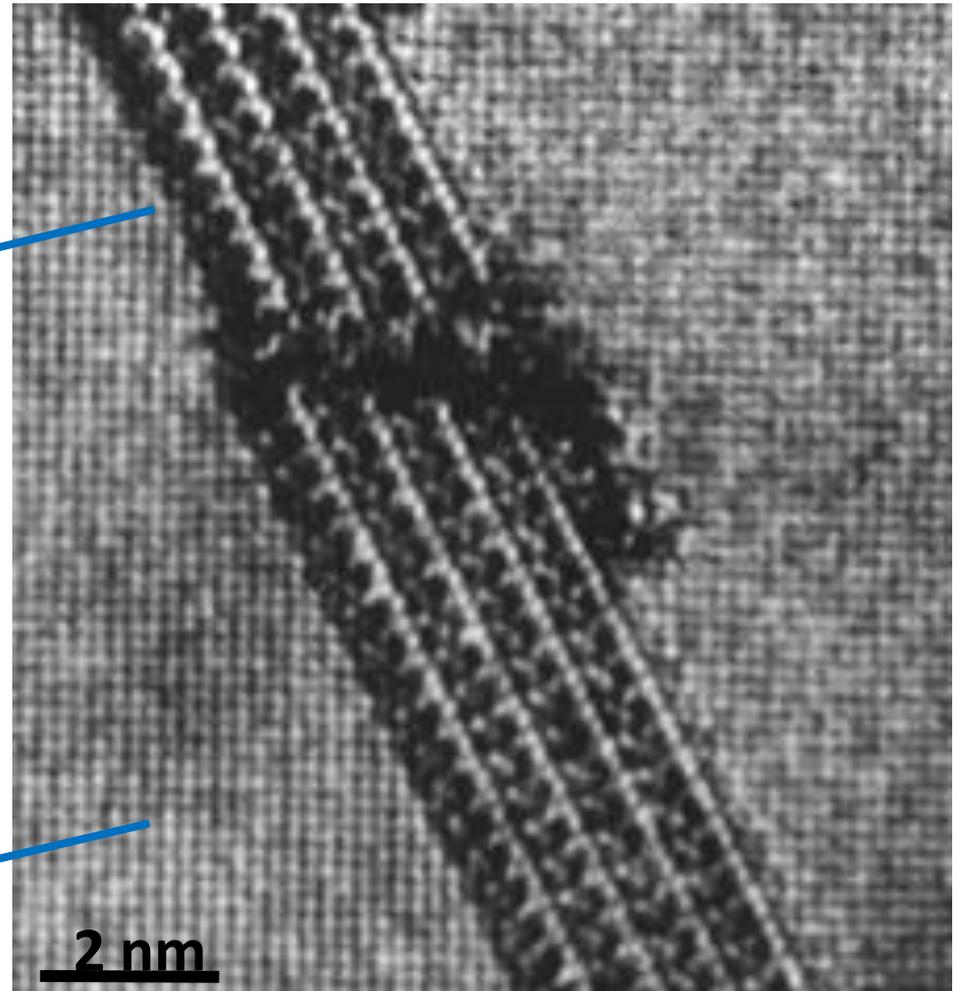
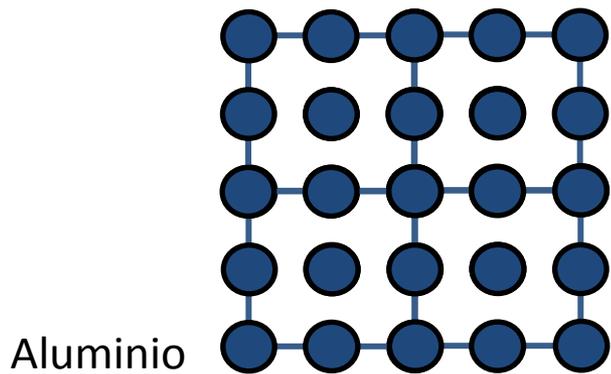
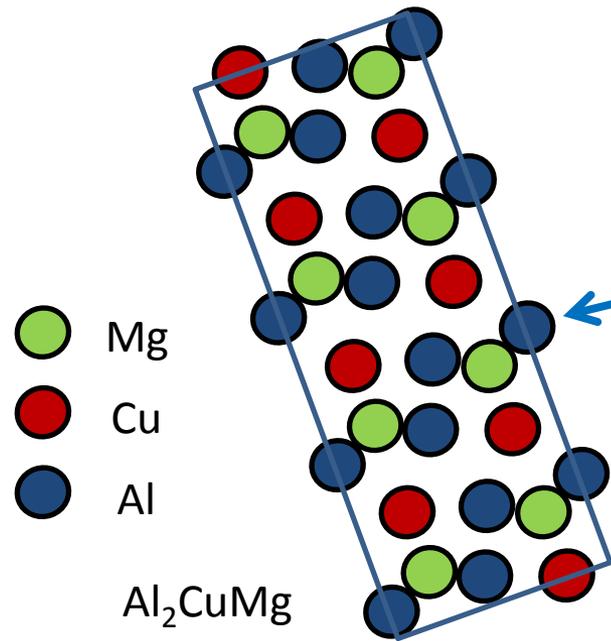
Cuando el SiO_2 se organiza **ordenadamente**, de un modo repetido en todas direcciones, se forma **el cristal llamado Cuarzo**.



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



Este orden ahora se puede ver con microscopios electrónicos!!

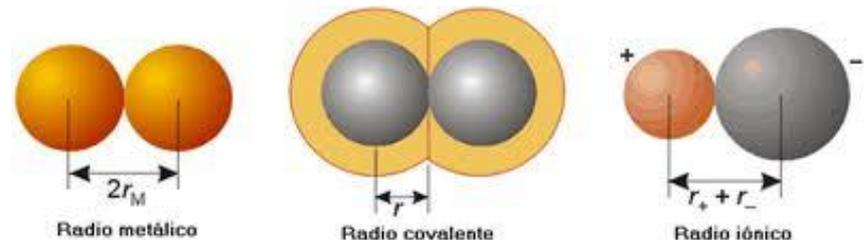
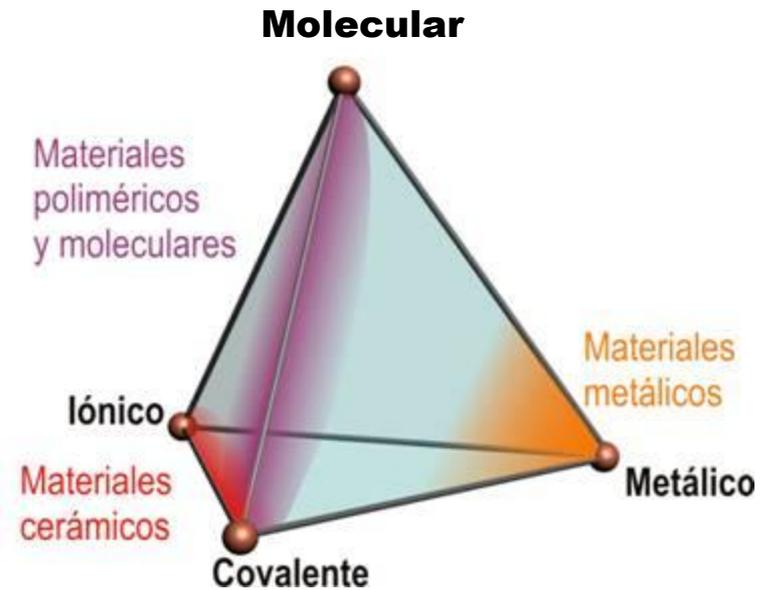


Cortesía Alfredo Tolley (CAB)

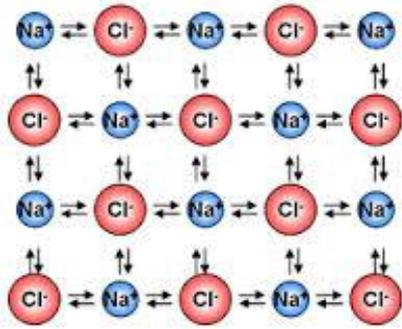
Precipitado de fase S (Al_2CuMg) en matriz de aluminio

Sólidos: estructura cristalina

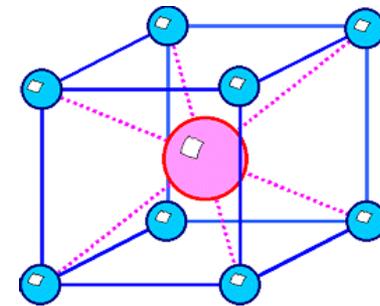
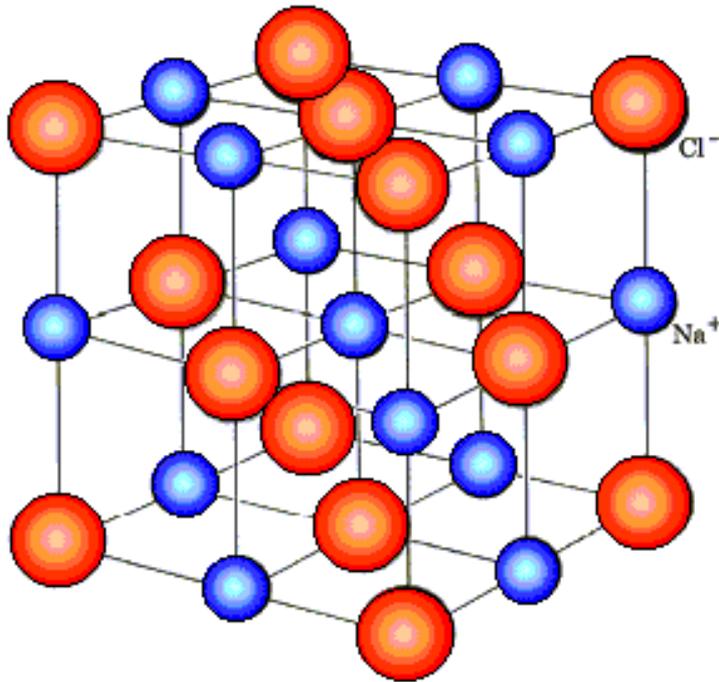
- ¿Cómo se forma un sólido?
- Tipos de enlaces químicos:
 - Sólidos iónicos; NaCl, CaO, CsAu
 - Sólidos metálicos; Na, Fe, otros metales y aleaciones
 - Sólidos covalentes; C, SiO₂, GaAs.
 - Sólidos Moleculares: N₂, CO₂, S₈.



IÓNICO: Cloruro de Sodio (NaCl)

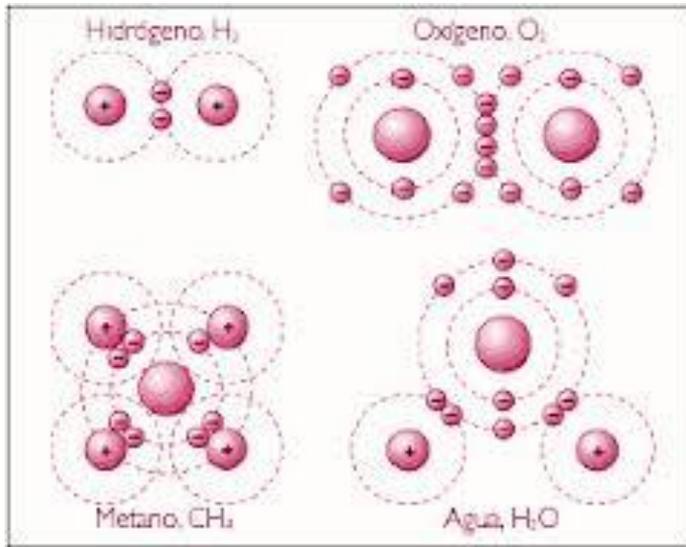


Primera estructura
resuelta por
difracción de rayos X
(W.L. Bragg, 1913)

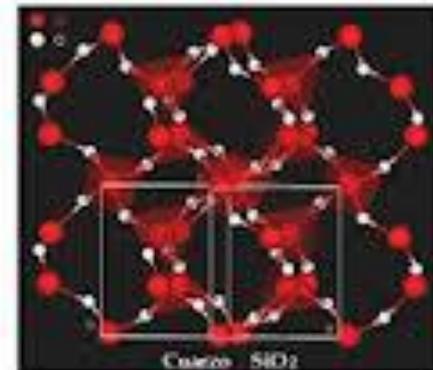
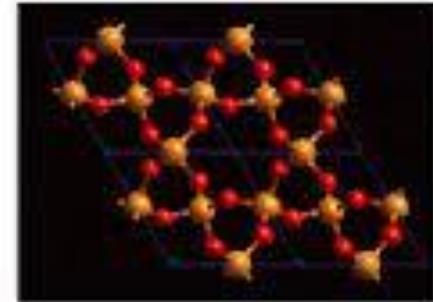
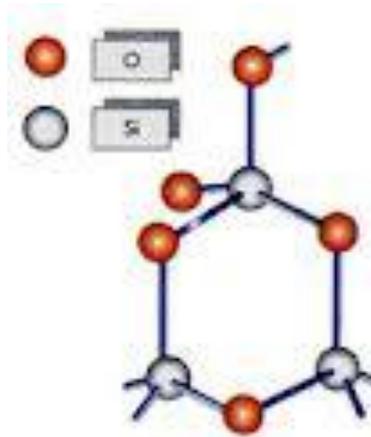
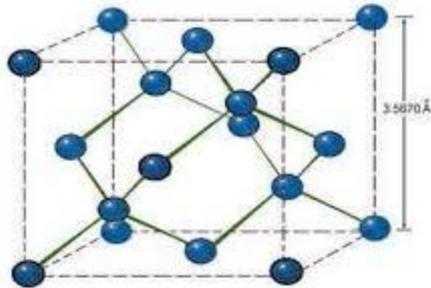


CsCl, o AlNi

COVALENTE: ¿enlace o cristal?



Enlace químico

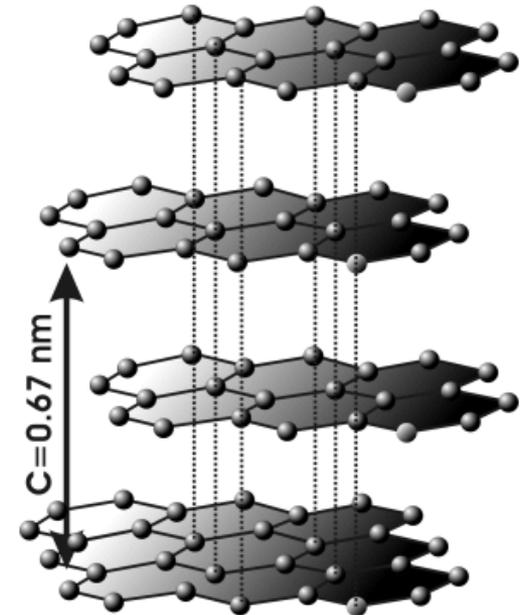
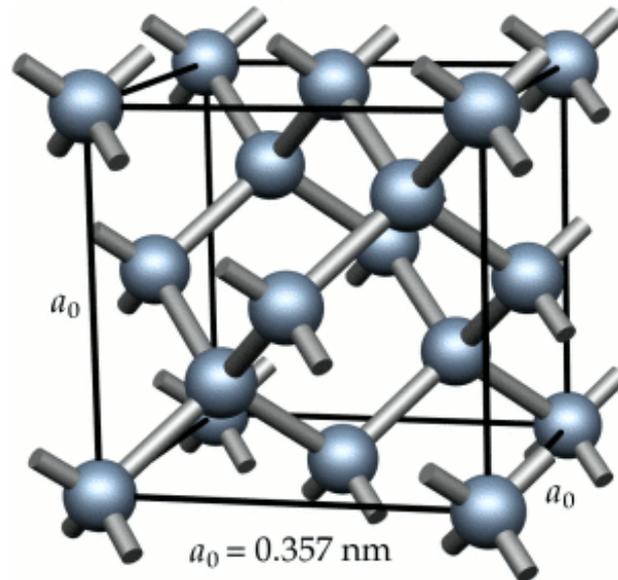


Cristal de cuarzo

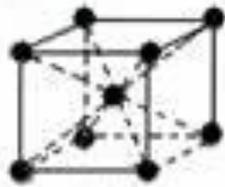
COVALENTE Diamante vs. Grafito

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

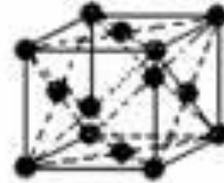
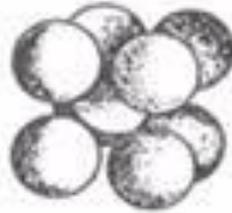
El diamante es más duro y transparente.
El grafito es mejor conductor y lubricante.



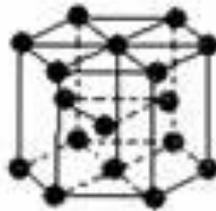
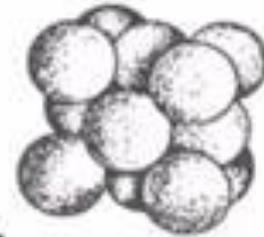
METÁLICO: estructuras compactas



a) Cúbica centrada en el cuerpo



b).- Cúbica centrada en las caras



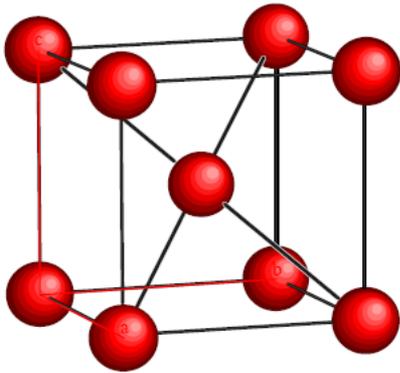
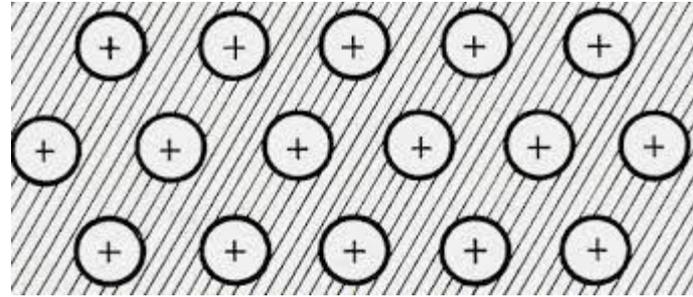
c) Hexagonal compacta



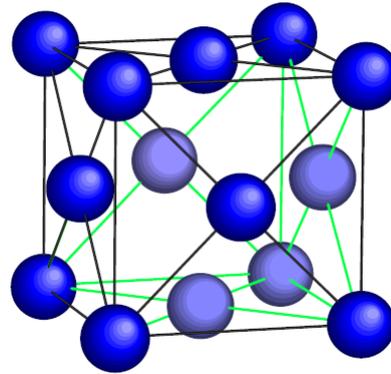
Fig. 1 La mayor parte de los metales puros en estado sólido forman una de las siguientes redes cristalinas simétricas: cúbica centrada en el cuerpo, cúbica centrada en las caras y hexagonal compacta.

METÁLICO:

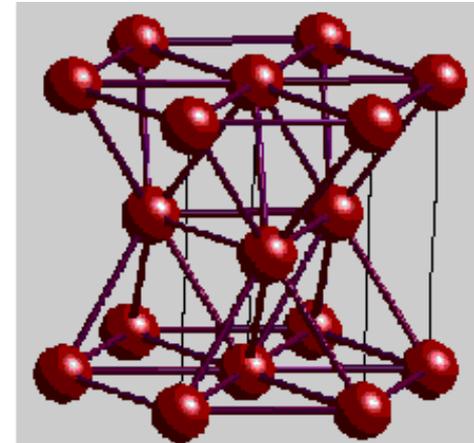
metales
estructuras
compactas



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

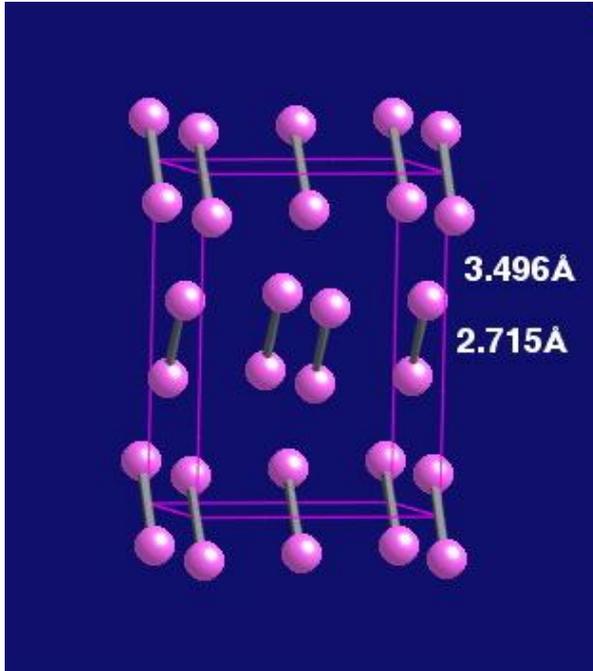


FCC
(Ca, Ni, Cu, Al)



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

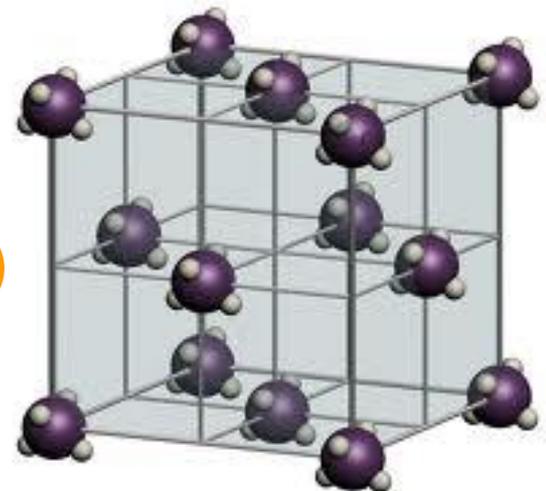
MOLECULAR: Iodo



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

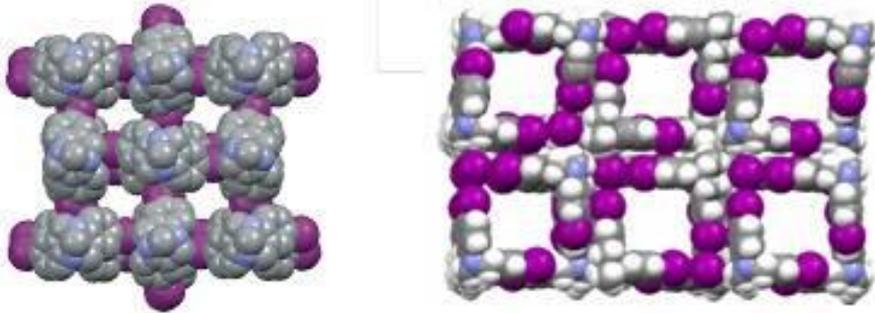
Las moléculas se unen entre sí por fuerzas de Van de Waals. Las distancias intermoleculares son mayores que las distancias de enlace covalente, aprox. 3.5\AA .

Celda unitaria del metano (CH_4)



MOLECULAR

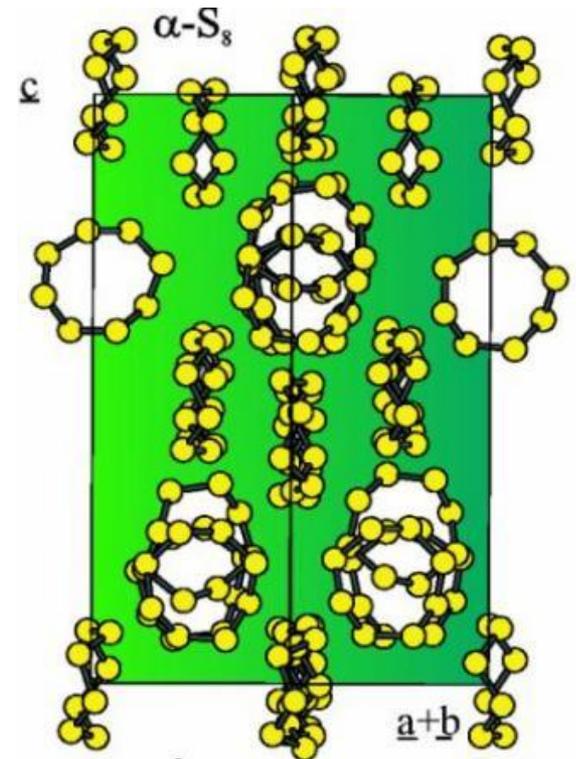
Crystal engineering



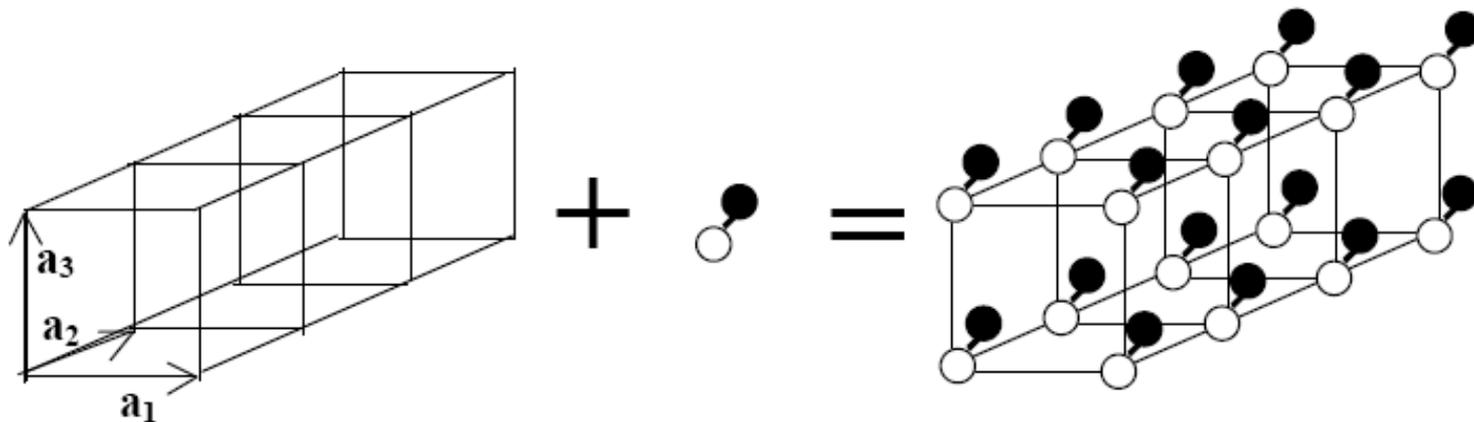
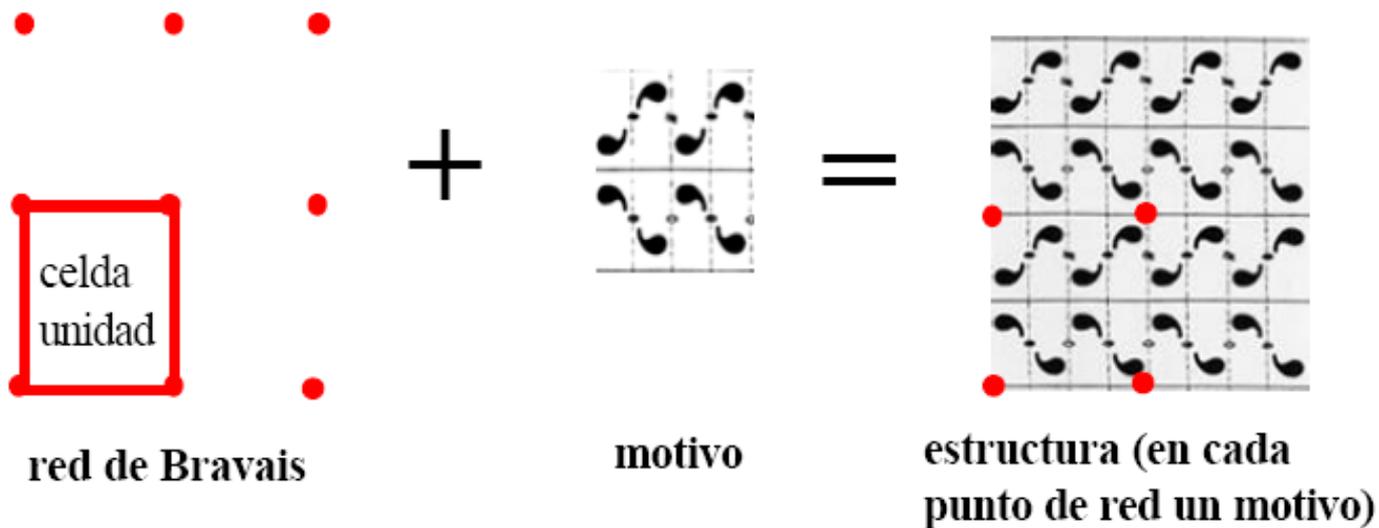
http://www.unizar.es/liquid_crystals/index.php?seccion=sorg

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

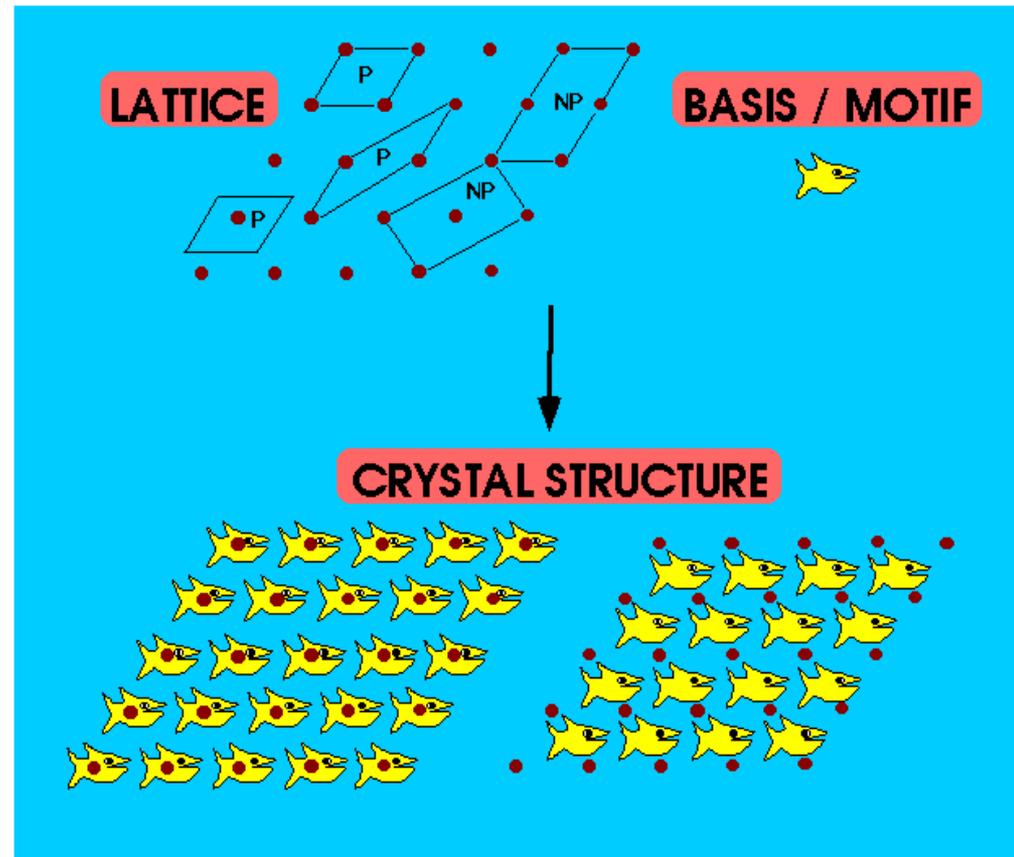


Estructura cristalina



Algunas definiciones básicas

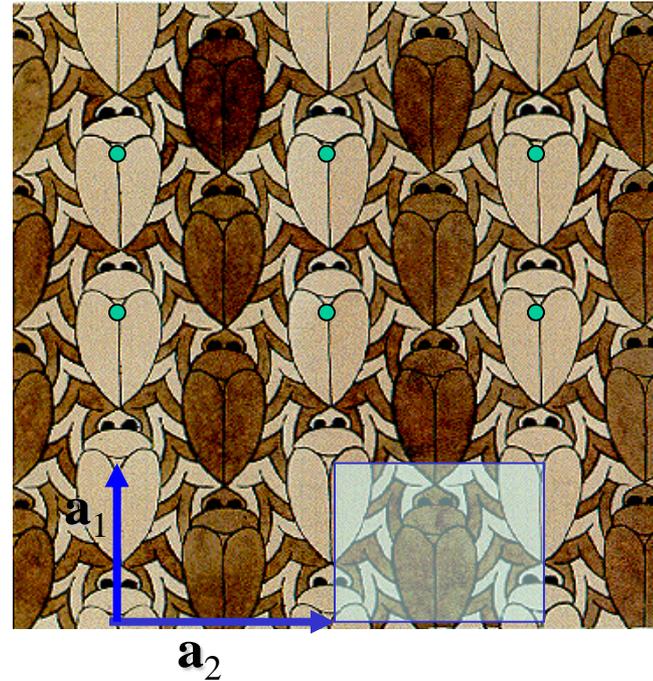
- **RED** = arreglo infinito de puntos en el espacio, donde *cada punto tiene un entorno idéntico a los otros.*
- **ESTRUCTURA CRISTALINA**
 - arreglo periódico de átomos (o moléculas) en un cristal (sólido)
 - Puede ser descripta asociando a cada punto de red un grupo de átomos llamado **BASE (MOTIVO)**



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

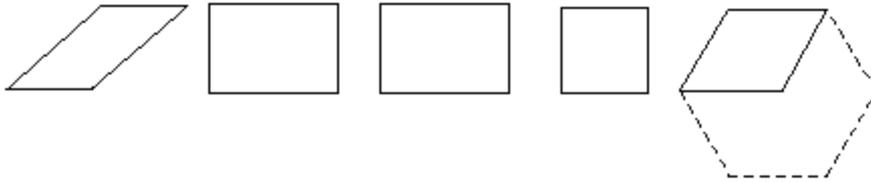
Algunas definiciones básicas

- **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



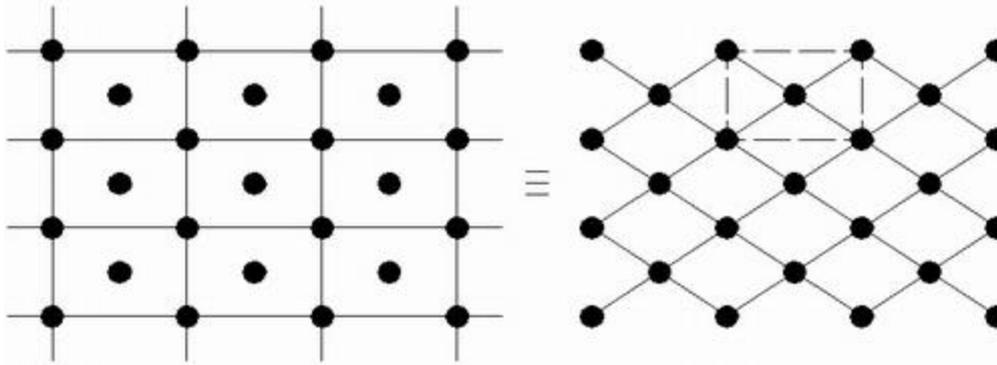
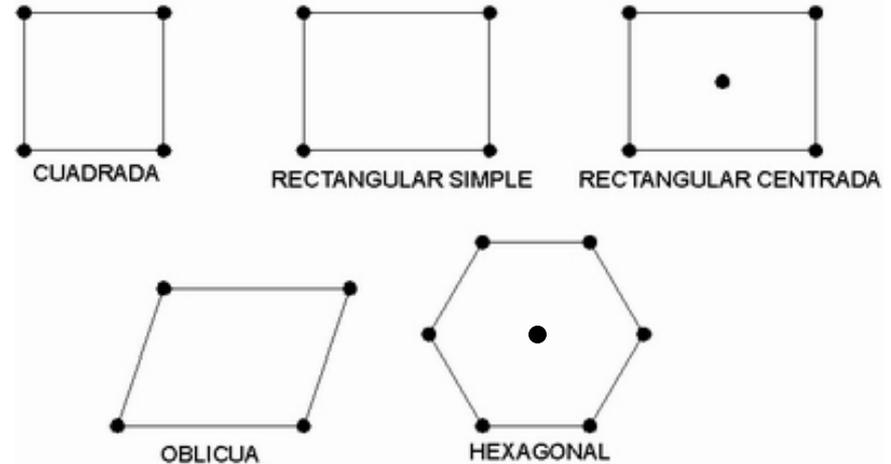
(*) El esquema de traslación (repetición) está definido por 3 vectores en 3-D y por dos vectores en 2-D (REDES DE BRAVAIS)

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	$a = b, \alpha = 120^\circ$

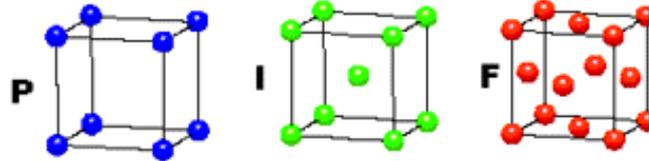


Las redes planas rectangular centrada y rómbica son idénticas.

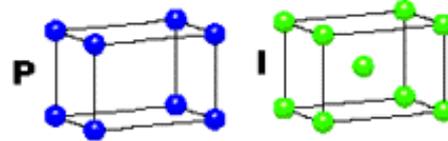
Redes de Bravais: 3-D

7 sistemas cristalinos

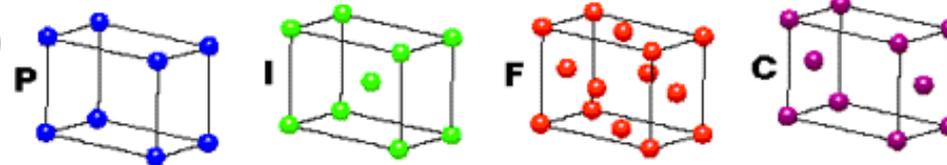
CÚBICO
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



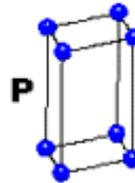
TETRAGONAL
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



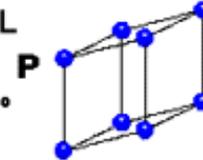
ORTORÓMBICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



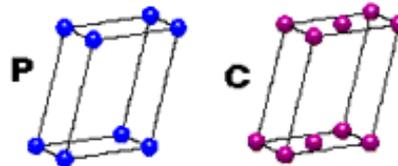
HEXAGONAL
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma = 120^\circ$



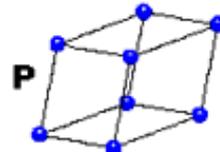
TRIGONAL
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



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

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.

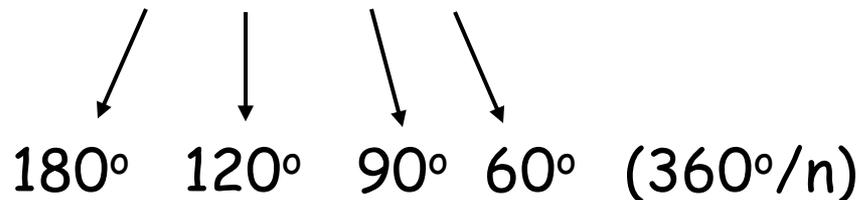
Elementos de simetría

- 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.