

# Estructura y geometría cristalina

---

principales estructuras cristalinas.

**Redes de Bravais**

**Empaquetamientos HCP / FCC / BCC**

direcciones y planos cristalográficos

**Índices de Miller**

Introducción a análisis de estructuras cristalográficas sencillas

**Difracción de rayos X**

**Fórmula de Bragg**

**Difractogramas de polvo**

**Análisis de estructuras cúbicas**



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

que hay que saber calcular en MatII:

Tracción de empaquetamiento atómico

Densidades (volumétrica, superficial, lineal)

huecos disponibles y su tamaño

Índices dados, identificar direcciones y planos, y viceversa

Asignar clase cristalográfica a un material

Calcular distancias entre planos de una forma

Aplicar Ley de Bragg para identificar las estructuras más

simples



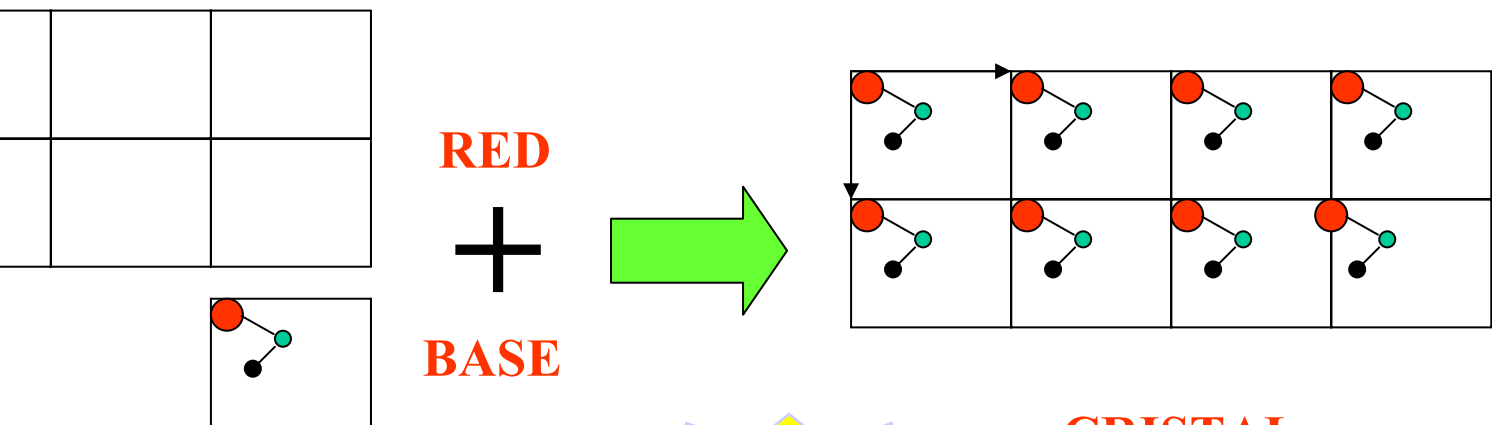
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



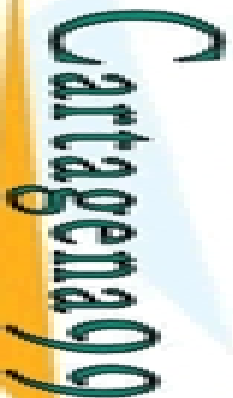
# Estructura y geometría cristalina

La estructura cristalina está formada por **RED + BASE**

Se coloca una base en **TODOS Y CADA UNO** de los puntos de la red



**Muy importante**



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
---  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina



es de Bravais; tres definiciones equivalentes:

- un conjunto infinito enumerable de puntos que tiene exactamente el mismo aspecto cuando se observa desde cualquiera de ellos.

- el conjunto de todos los puntos con vectores de posición que satisfacen:

$$\underline{R} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad \text{donde } \underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$$

vectores cualesquiera no coplanarios y  $n_1, n_2, n_3$  son tres enteros.

- un conjunto infinito enumerable de vectores, no todos coplanarios, cerrado bajo las operaciones de adición y sustracción de vectores.

En estas definiciones, la red se considera tanto como un conjunto de puntos, como un conjunto de traslaciones o un conjunto de vectores. En la práctica no suele haber duda de a cuál de éstas alternativas nos referimos.

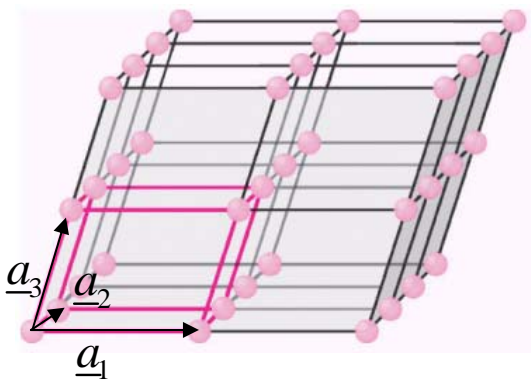
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



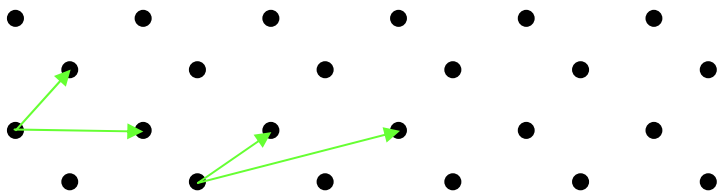
# Estructura y geometría cristalina

Los vectores  $\underline{a}_1, \underline{a}_2, \underline{a}_3$

se denominan **vectores primitivos** y se dice que generan la red.



- los vectores primitivos no son únicos
- hay un número infinito de posibles vectores primitivos:



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

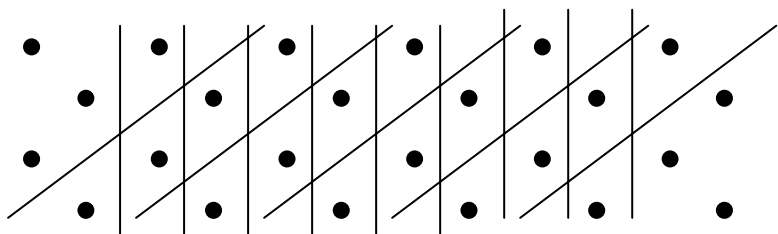
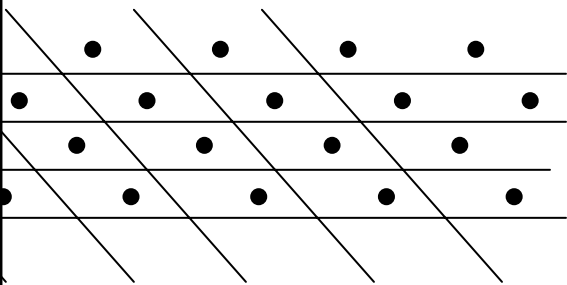


# Estructura y geometría cristalina

**Numero de coordinación** de la red es el número de puntos de la red más próximos a un punto cualquiera de la red

**La unitaria primitiva:** la porción del espacio que, cuando se repite con todos los vectores de la red, cubre (“tesela”) el espacio sin dejar vacíos y sin solaparse con otras copias de ella misma.

Existen infinitas posibilidades de elegir una celda unitaria primitiva para una red de Bravais dada.



# Estructura y geometría cristalina

**celda unitaria primitiva** contiene exactamente **un** punto de red

**celda unitaria** (no primitiva) o **celda unitaria convencional** es porción del espacio que lo tesela completamente al ser trasladada por un **subconjunto** de los vectores de red.

... puede ser más grande que la celda unitaria primitiva y tener la misma simetría que la red de Bravais.

La **primitiva de Wigner-Seitz** es una celda primitiva que posee la simetría completa (es decir, todos los elementos de simetría) de la red de Bravais correspondiente. La celda primitiva de Wigner-Seitz de un tipo de red se define como:

**subconjunto de puntos del espacio que están más próximos al punto de red en cuestión que a cualquier otro.**

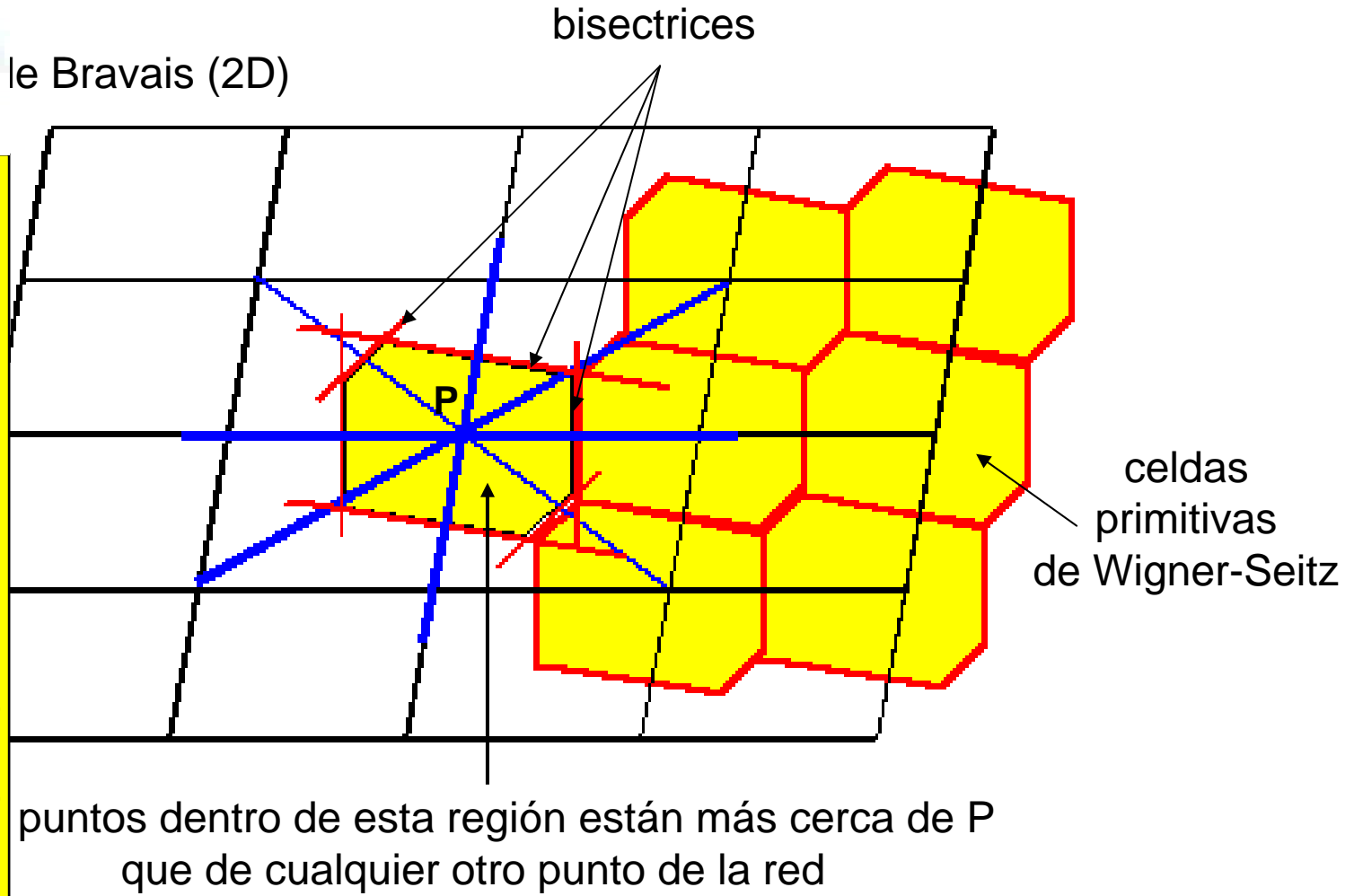


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

Cartagena99



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
---  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70





# Estructura y geometría cristalina

Cartagena99

**Grupo (completo) de simetría** de una estructura (cristalina, mat. puesto, etc.) es un conjunto de operaciones geométricas (traslación, rotación, reflexión, inversión) respecto a las que es invariante y que contiene exclusivamente:

- **Traslaciones por vectores de la red**
- **Operaciones que dejan un punto de la red fijo**
- **Operaciones construidas por aplicación sucesiva de operaciones de los dos tipos anteriores.**

**Grupo espacial** de una estructura es el subgrupo que contiene las traslaciones.

**Grupo puntual** de una estructura es el subgrupo que contiene las operaciones que dejan un punto fijo (rotaciones, reflexiones y reflexiones, + combinaciones de éstas).

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

Las operaciones que dejan un punto fijo son:

## Rotaciones por un múltiplo de $2\pi/n$ alrededor de un eje

- gira un punto o vector de red  $2\pi/n$  alrededor de un eje

## Reflexión en un plano

- refleja un punto o vector de red en un plano

## Inversión (o reflexión en un punto)

- cambia de signo las tres coordenadas de un vector de red

## Rotación-reflexión

- gira y a continuación refleja en un plano perpendicular al eje de giro

## Rotación-inversión

- gira y a continuación invierte un punto o vector (reflexión o inversión en un punto contenido en el eje de rotación)

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

*elemento de simetría"* (en sentido cristalográfico) es el lugar métrico de los puntos que permanecen invariantes por la correspondiente operación del grupo puntual:

**si una estructura (clase) es simétrica respecto a inversión en un punto, este punto (centro de inversión) es un elemento de simetría.**

**si una estructura (clase) es simétrica respecto a un giro de  $2\pi/2$ , el eje de esta rotación (eje binario) es un elemento de simetría.**

**si una estructura (clase) es simétrica respecto a una reflexión en un plano, este plano de reflexión es un elemento de simetría.**

importante: no debe ser confundido con un "elemento del grupo puntual) de simetría" (en sentido de teoría de grupos): un elemento de simetría (cristalográfico) p.ej. un eje ternario, puede tener varios elementos del grupo puntual de simetría de la clase correspondiente.

Los estereogramas de la Tabla I son un modo compacto y muy eficiente de enumerar los elementos de simetría (cristalográficos) de cada una de las 32 clases.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina



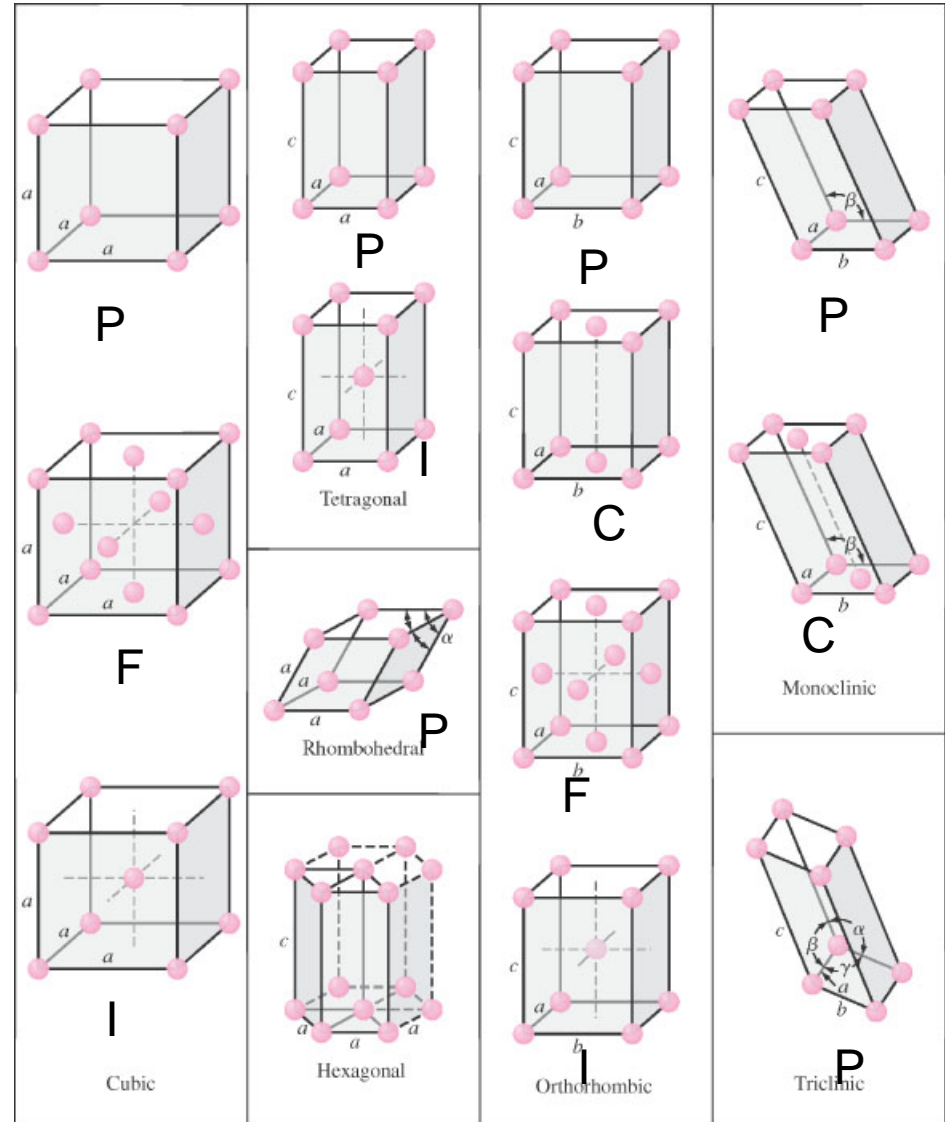
Realizamos las operaciones de simetría espacial, obtenemos las 14 redes de Bravais

Las 14 redes de Bravais (en 3D)

Se pueden clasificar en **siete** sistemas cristalográficos

Los cuales dan lugar a varias (entre 14) redes de Bravais

Trigonal:	3
Ortrógonal:	2
Rhomboédrico:	4
Monoclínico:	2
Trigonal:	1
Trigonal (o trigonal):	1
Trigonal:	1
<b>TOTAL</b>	<b>14</b>



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

Consideramos el grupo puntual se obtienen las 32 clases puntuales  
alométricas o simplemente **clases cristalográficas**

Último, si además consideramos el grupo espacial, se obtienen los  
**grupos espaciales cristalográficos:**

**Red de Bravais**  
(base de simetría esférica)

**Estructuras cristalográficas**  
(base de simetría arbitraria; restringe  
la simetría de la red)

**Clases puntuales: 7**  
("los 7 sistemas cristalográficos")

**32**  
("los 32 grupos puntuales cristalográficos")

**Clases espaciales: 14**  
("las 14 redes de Bravais")

**230**  
("los 230 grupos espaciales")

Los cristalógrafos a veces defienden la existencia de sólo 6 sistemas cristalográficos (ver nota del traductor al pie  
de la pág.46) . Desde el punto de vista de los grupos puntuales de las redes de Bravais no hay duda alguna sobre  
el número de sistemas cristalográficos: 7. Para más detalle, puede consultarse W. Borchard-Ott, *Kristallographie*,  
5ª edición, Springer (2002)



# Estructura y geometría cristalina

Es esencial saber identificar los elementos de simetría de un cristal, de un material compuesto, de un material orientado, etc.

**muy importante**

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
-- --  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



---

# Las clases cristalográficas y sus elementos de simetría



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70





---

En MatII empleamos el término

***" simétrico"***

como

***" invariante respecto a"***

(interpretación habitual en física):

*una estructura cristalina es simétrica respecto a un eje de 90° si, al girarla 90°, no es posible distinguir la estructura resultante de la original*

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



metría (invarianza) es un principio físico ordinariamente potente.

La más fundamental que las leyes de conservación:

Invarianza de las leyes físicas respecto a traslación en el tiempo: implica **conservación de energía**.

Invarianza de las leyes físicas respecto a traslación en el espacio: implica **conservación de cantidad de movimiento**.

Invarianza de las leyes físicas respecto a rotación: implica **conservación de momento angular**.

...

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
-- --  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

La simetría geométrica **determina** en gran medida **la existencia o ausencia de propiedades** físicas y por tanto las posibilidades de aplicación de los materiales

Los materiales pueden tener **ciertas propiedades** sólo si su estructura atómica, molecular, morfológica o su estructura macroscópica cumplen ciertos **requisitos de simetría** (o de falta de simetría, como en el caso de los materiales piezoeléctricos directo e inverso)

El número de **propiedades tensoriales** **el número de componentes** (o de ejes independientes) de la propiedad que son **independientes**, está **determinado por la simetría** del cristal / material

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

## Identificación de la clase cristalográfica

Identificar a qué sistema y a qué clase pertenece un material cristalino, orientado, compuesto, etc., en general:

### Determinar el sistema:

o bien a la vista de las dimensiones y ángulos de la celda básica o unidad equivalente.

o bien con ayuda de la tabla de elementos de simetría característicos (Tabla III)

**Es importante colocar la celda básica o el cristal en los ejes en posición convencional o estándar.**

### Determinar la clase

o con ayuda de la tabla de representaciones estereográficas, (Tabla I)

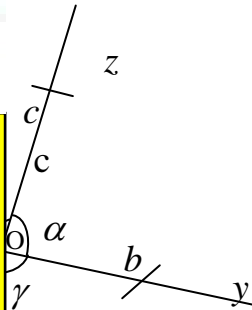
o con ayuda de la Tabla II

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Ejes en sistemas cristalográficos

## Asignación convencional (estándar) de los ejes cristalográficos:

- $x, y, z$  a lo largo de las aristas de la celda (en general no son perpendiculares entre sí, no son cartesianos).
- en los sistemas hexagonal y trigonal se puede introducir un cuarto eje  $u$  coplanario con  $x$  e  $y$  de modo que  $x, y$  y  $u$  forman  $120^\circ$  (ejes de Miller-Bravais)
- ①, ② y ③ son siempre perpendiculares entre sí (cartesianos) y forman un triedro a derechas



Asignación convencional (estándar) de los ejes  $x, y, z$  en los diferentes sistemas cristalográficos es:

$$a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma$$

$Oy$  paralelo a eje de simetría binario;  $a \neq b \neq c \quad \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$

$Ox, Oy, Oz$  paralelos a los tres ejes de simetría binarios;  $a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$Oz$  paralelo al eje de simetría cuaternario;  $a = b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

$Ox, Oy, Oz$  paralelos a las aristas del cubo cuyas diagonales son los ejes de simetría ternarios;

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

$Ox$  paralelo al eje de simetría ternario;  $a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

$Oz$  paralelo al eje de simetría senario;  $a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Ejes en sistemas cristalográficos



## Orientación convencional (estándar) de los ejes cartesianos ①, ② y ③:

Trigonal: ② paralelo a  $Oy$

Trigonal, trigonal y hexagonal : ③ paralelo a  $Oz$ ; ① paralelo a  $Ox$

Rhomboédrico y cúbico: ① paralelo a  $Ox$ ; ② paralelo a  $Oy$ ; ③ paralelo a  $Oz$

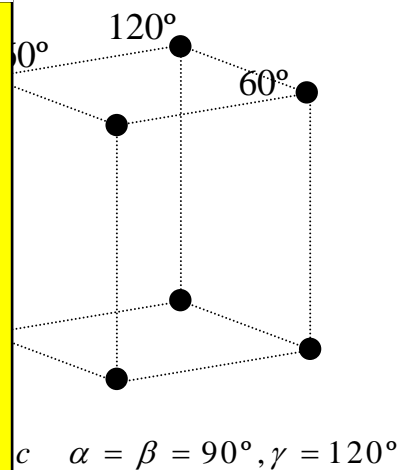
Límite: ③ paralelo a  $Oz$  y ambos coincidentes con un eje de orden  $\infty$

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

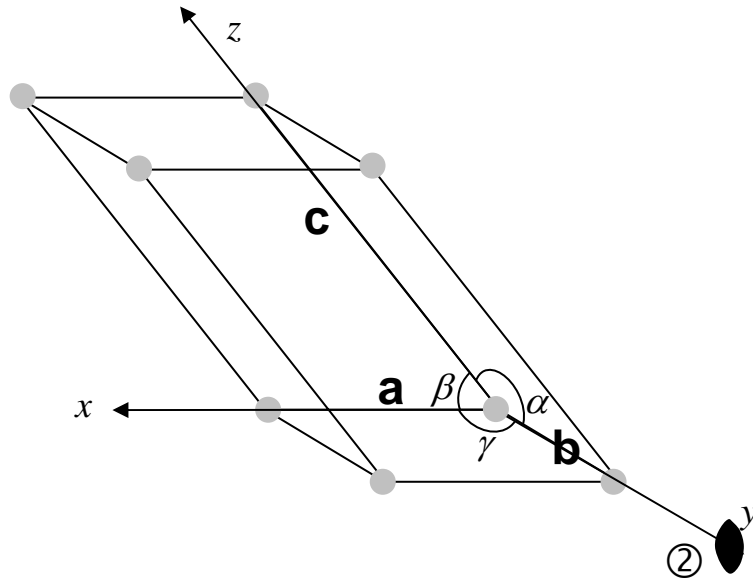


# Ejes en sistemas cristalográficos

ATENCIÓN: EN DOS CASOS, EL TEXTO NO DEFINE CON CLARIDAD LAS O LAS ORIENTACIONES CONVENCIONALES DE LOS EJES.



Los puntos de red del sistema **hexagonal** se representan por los ejes de un prisma recto cuya base es un rombo; la proyección en el plano es un hexágono



Orientación convencional correcta en el sistema **monoclínico** (Int. Union of Crystallography)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ---  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



III, los cálculos se deben llevar a cabo  
MPRE en un sistema cartesiano

en el definido en la transp. anterior

en en otro, rotado respecto al anterior,








**NUNCA** en los ejes cristalográficos  $x, y, z$   
(o que coincidan con los ①, ② y ③)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Elementos de simetría

sistemas cristalográficos, las 32 clases cristalográficas se especifican do los elementos de simetría más característicos, cada elemento se be por medio de un símbolo o notación Internacional estándar <sup>1</sup>.

Elemento de simetría	Símbolo en el estereograma	Símbolo Internacional
Centro de simetría	sin símbolo	$\bar{1}$
Plano especular	línea gruesa o círculo máximo en línea gruesa	$m$
Eje de rotación monario	sin símbolo	1
Eje de rotación binario		2
Eje de rotación ternario		3
Eje de rotación cuaternario		4
Eje de rotación senario		6
Eje de inversión monario $\equiv$ centro de simetría	sin símbolo	$\bar{1}$
Eje de inversión binario $\equiv m \perp$ al eje binario	igual que para $m$	$\bar{2}$ ( $\equiv m$ )
Eje de inversión ternario $\equiv 3$ más centro de simetría		$\bar{3}$
Eje de inversión cuaternario (incluye un eje binario)		$\bar{4}$
Eje de inversión senario $\equiv 3$ más $m \perp$ al eje ternario		$\bar{6}$ ( $\equiv 3 / m$ )

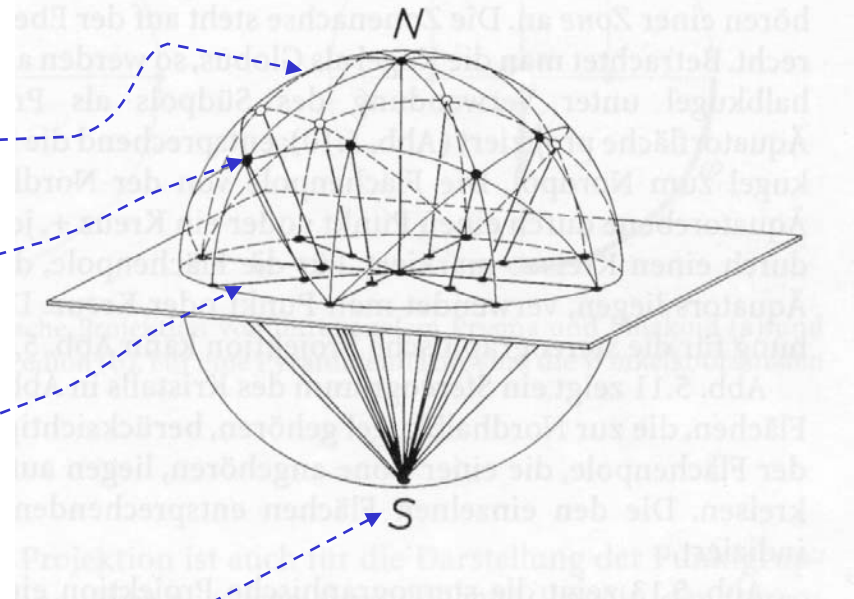
<sup>1</sup>La notación empleada es la más extendida (Internacional) debida a Mauguin y Hermann (Cotton, F. A. "Chemical Applications of Group Theory", 3rd ed. New York: Wiley, p. 379, 1990). Aún se encuentran en algunos textos los símbolos de Schönflies, más antiguos y menos utilizados.





# Estereograma

tablas siguientes<sup>1</sup>, los elementos de simetría de cada clase representados por medio de **estereogramas**<sup>2,3</sup> en los que también se muestran los ejes convencionales  $(x, y, z)$  y  $(x_1 \equiv \textcircled{1}, x_2 \equiv \textcircled{2}, x_3 \equiv \textcircled{3})$ .



invariante) del grupo puntual está representada en la **esfera de referencia**.

Los ejes de los elementos de simetría se representan por sus intersecciones con la esfera de referencia

El diagrama representa la proyección del grupo puntual sobre el plano ecuatorial usando el punto S como foco de la proyección:

<sup>1</sup> *Properties of Crystals*, Oxford Science Publications (1995)  
<sup>2</sup> *Kristallographie*, 6ª edición, Springer (2002)  
<sup>3</sup> Las clases centrosimétricas están recuadradas

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

Las siguientes tablas, las clases **centrosimétricas**  
cúbicas y hexagonales centradas y tetraédricas y octaédricas cuadradas

Las clases de cada sistema cristalográfico son los  
grupos propios del grupo (que es el de mayor  
simetría y aparece en último lugar en la Tabla I) y es la  
clase **holoédrica** u **holoedro**)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

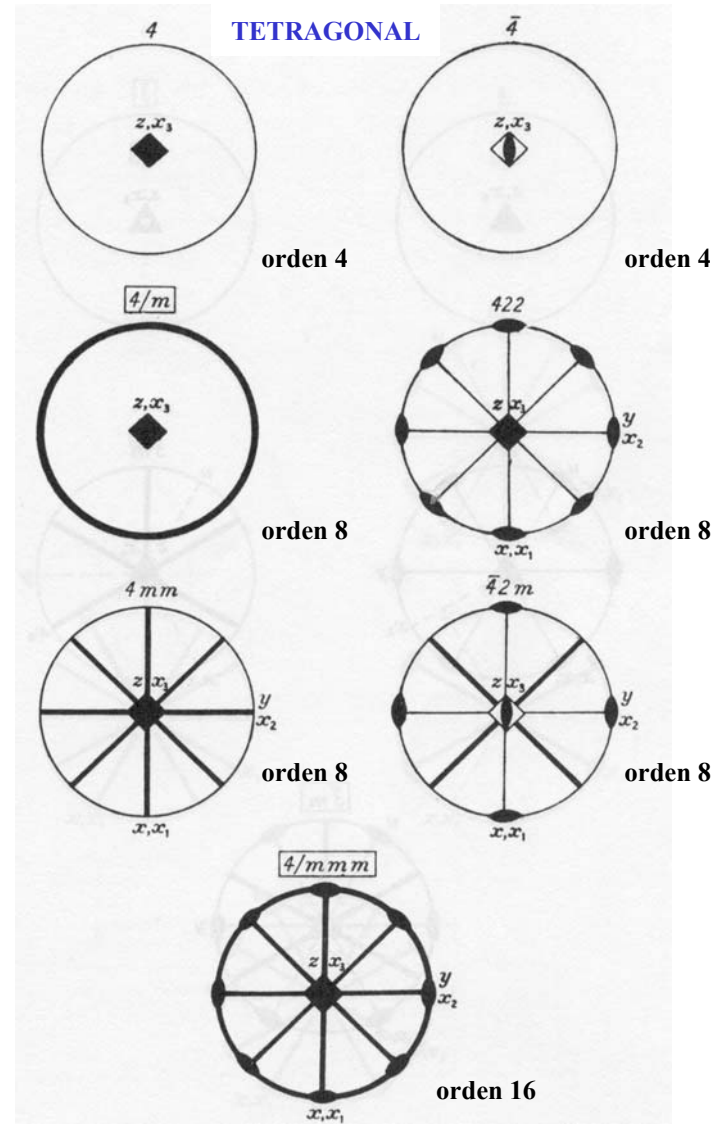
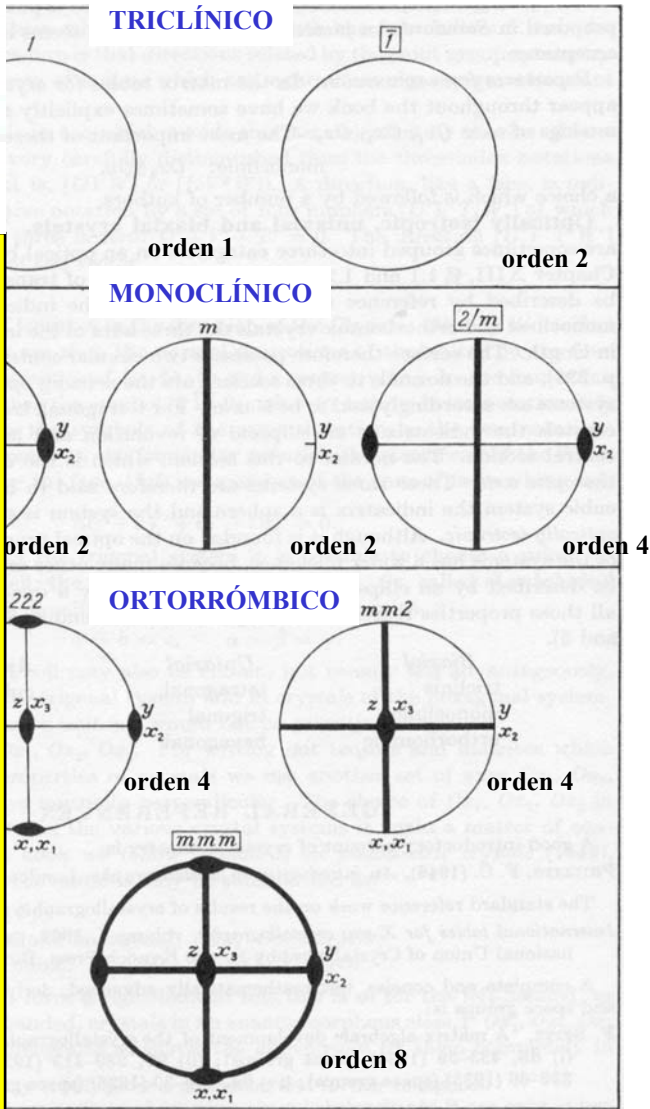
orden de la clase (subgrupo) es el número de elementos de ese grupo o subgrupo

...ales/materiales altamente simétricos pertenecen a clases de orden alto ("*con muchos elementos de simetría*", p.ej. la  $m\bar{3}m$  es de orden 48, es decir, su grupo puntual contiene 48 elementos)

orden de las clases no holoédricas puede ser la mitad (clase **hemiédrica**) o la cuarta parte (clase **trioédrica**) del orden del holoedro

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Clases de simetría de las 32 clases (Tabla I)



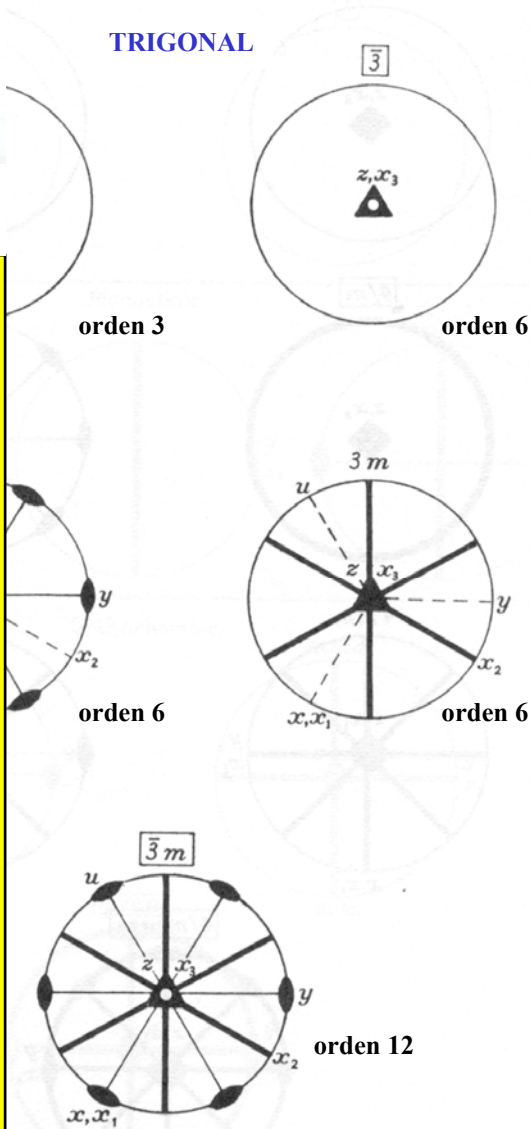
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



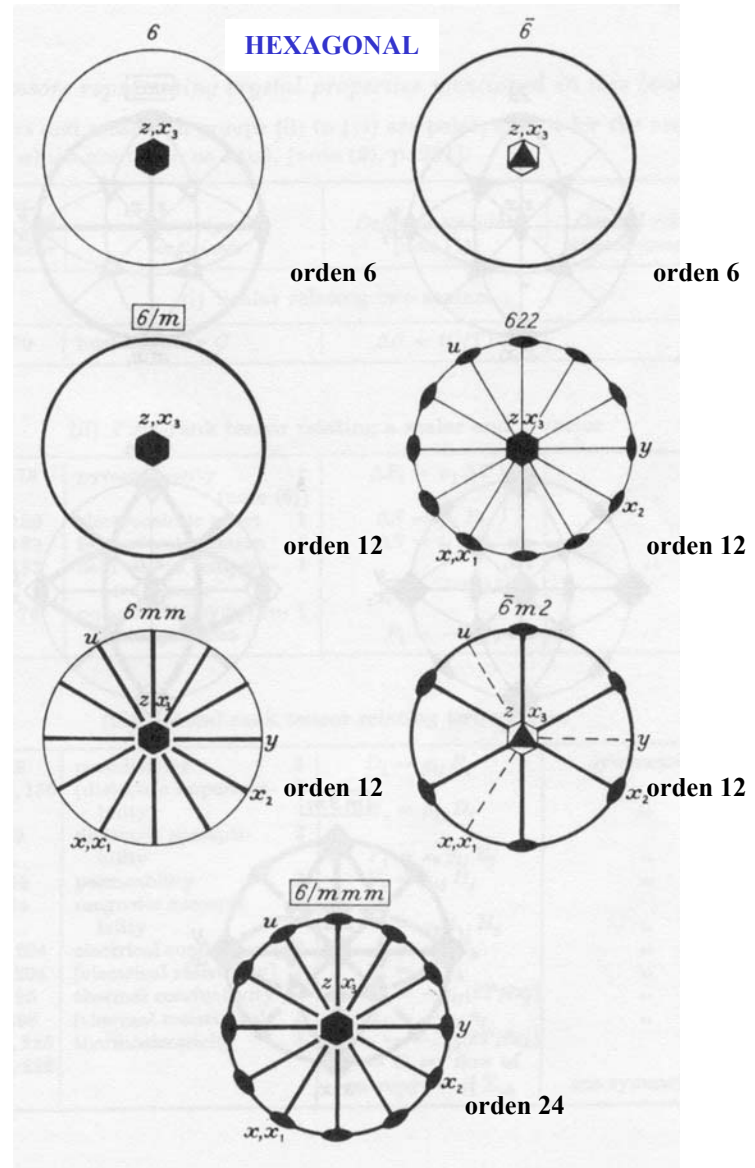


# mentos de simetría de las 32 clases

## TRIGONAL



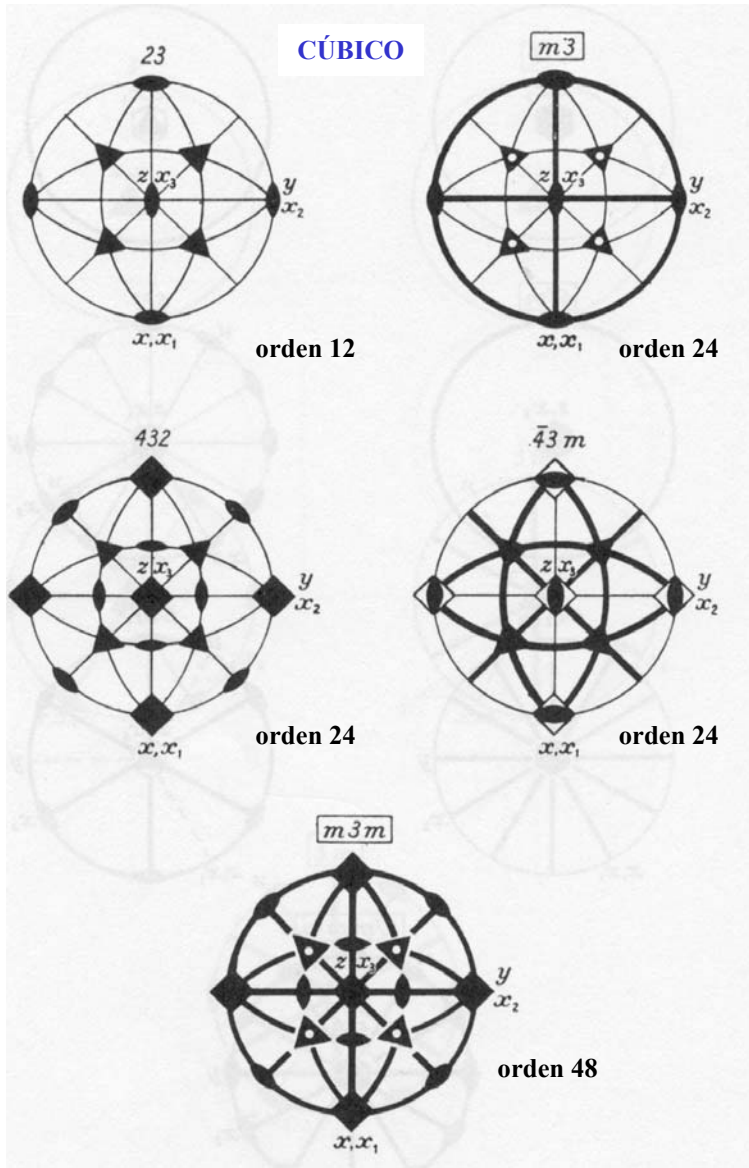
## HEXAGONAL



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# mentos de simetría de las 32 clases

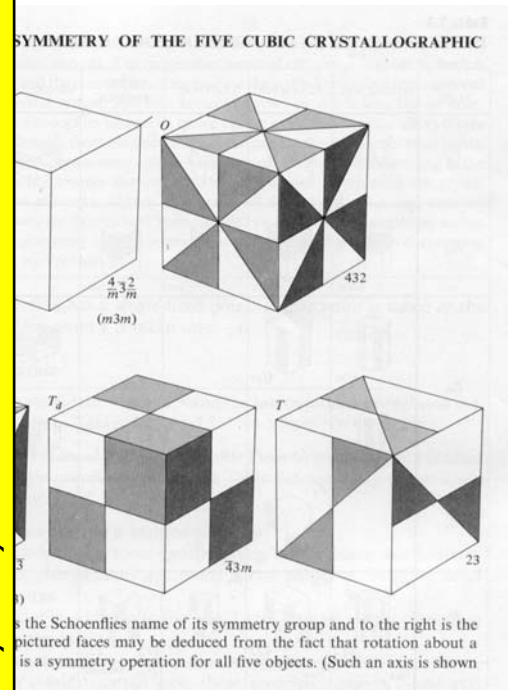


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
-- --  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Clases de simetría de las 32 clases (Tabla II)

Las siguientes tablas visualizan las 32 clases de simetría de cada clase por medio de prismas cuyas caras están coloreadas de manera que pertenecen a la clase correspondiente.<sup>1</sup>



1. Kittel, C., N.D., *Solid State Physics*, Brooks & Cole (1976)

122 Chapter 7 Classification of Bravais Lattices and Crystal Structures

Table 7.3 THE NONCUBIC CRYSTALLOGRAPHIC POINT GROUPS\*

SCHOENFLIES	HEXAGONAL	TETRAGONAL	TRIGONAL	ORTHO-RHOMBIC	MONOCLINIC	TRICLINIC	INTERNATIONAL
$C_n$	$C_6$ 6 	$C_4$ 4 	$C_3$ 3 		$C_2$ 2 	$C_1$ 1 	$n$
$C_{nv}$	$C_{6v}$ 6mm 	$C_{4v}$ 4mm 	$C_{3v}$ 3m 	$C_{2v}$ 2mm 			$nmm$ (n even) $nm$ (n odd)
$C_{nh}$	$C_{6h}$ 6/m  $C_{3h}$ $\bar{6}$ 	$C_{4h}$ 4/m 			$C_{2h}$ 2/m 	$C_{1h}$ ( $\bar{2}$ ) m 	$n/m$
$S_n$		$S_4$ 4 	$S_6$ $(C_{3i})$ 3 			$S_2$ $(C_i)$ $\bar{1}$ 	$\bar{n}$
$D_n$	$D_6$ 622 	$D_4$ 422 	$D_3$ 32 	$D_2$ $(V)$ 222 			$n2'$ (n even) $n2$ (n odd)
$D_{nh}$	$D_{6h}$ 6/mmm  $D_{3h}$ $\bar{6}2m$ 	$D_{4h}$ 4/mmm 		$D_{2h}$ (mmm) $(V_h)$ 2/mmm 			$\frac{n}{2} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (n/mmm)
$D_{nd}$		$D_{2d}$ $(V_d)$ 42m 	$D_{3d}$ ( $\bar{3}m$ ) $\bar{3} \frac{2}{m}$ 				$\bar{n}2m$ (n even) $\bar{n} \frac{2}{m}$ (n odd)

\* Table caption on p. 123.

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70  
 CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70













# os de simetría característicos (Tabla III)

der deducir rápidamente a cuál de los 7 *sistemas* cristalográficos (al de las 32 clases cristalográficas) pertenece un material compuesto material orientado, se identifica cuáles de los siguientes elementos simetría característicos de cada sistema posee el material:

na cristalográfico

Elementos de simetría característicos

<b>cúbico</b>	cuatro	
<b>hexagonal</b>	un	 o un 
<b>tetragonal</b>	un	 o un 
	(¡ojo!, tres  o tres  es cúbico)	
<b>trigonal</b>	un	
	(¡ojo!, un $m \perp$ al eje ternario, es decir, $3 / m \equiv \bar{6}$ es hexagonal)	
<b>ortorrómbico</b>	 y/o $m$ en tres direcciones ortogonales	
<b>monoclínico</b>	 y/o $m$ en una dirección	
<b>triclínico</b>	sólo 1 o $\bar{1}$	

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70





# Ejemplo

la clase *mmm* (grupo de máxima simetría dentro del sistema ortorrómbico):

identidad  
"nada al cristal"  
(pre miembro  
del grupo)

de simetría  
rotacional

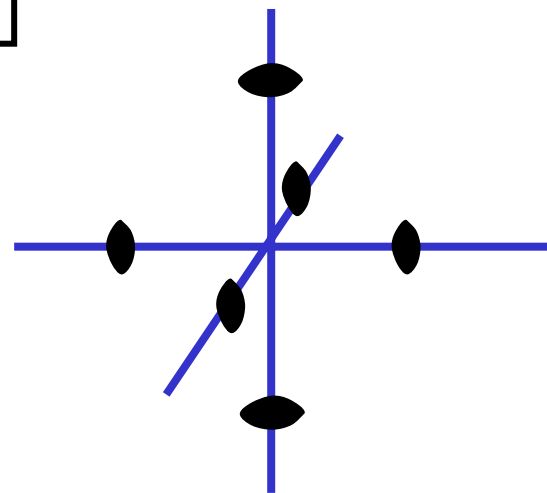
centro de inversión o simetría

tres ejes de simetría  
de rotación binarios

$$\text{Total: } 1+3+1+3=8$$

Esta clase posee 8 elementos (cristalográficos) de simetría; cada uno de ellos genera sólo un elemento del grupo puntual y por tanto su orden es también 8.

Es la clase holoédrica u holoedro del sistema ortorrómbico



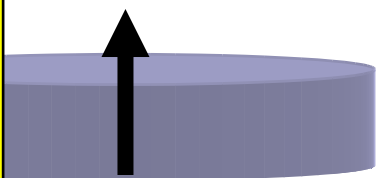
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

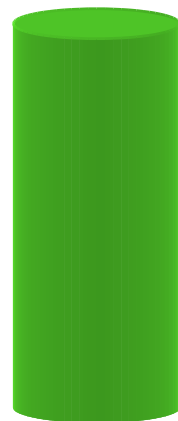


## Grupos límite de simetría

nte, existen materiales **HOMOGENEOS** cuya estructura presenta **simetría no cristalográfica** (**grupos límite o de Curie**, típicamente contienen un eje de orden  $\infty$ ), y no son monocristales.



Un piezoeléctrico PZT, es un material no polarizado, pero al fabricarlo, se le confiere una polarización permanente en una dirección predeterminada. Sus grupos de simetría no cristalográfica.



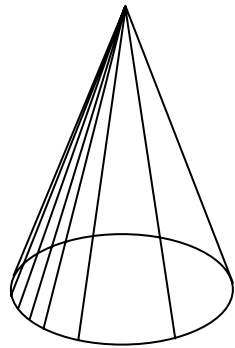
Ejemplo: una fibra textil de PET, se estira durante la fabricación; su módulo elástico en dirección longitudinal es muy elevado. Su tensor de rigidez elástica tiene una **estructura** de simetría no cristalográfica.

# Grupos límite de simetría (Tabla IV)

at II consideramos los 7 grupos de Curie:

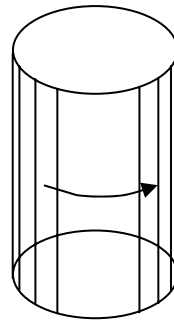
$$\infty m$$

(un eje de orden infinito, más infinitos planos especulares que contienen el eje)



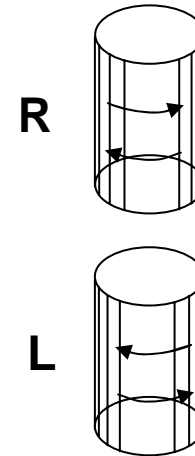
$$\infty / m$$

(un eje de orden infinito, más un plano especular perpendicular al eje)



$$\infty 2$$

(un eje de orden infinito, más infinitos ejes binarios perpendiculares al eje de orden infinito) levógiro L o dextrógiro R "a izquierdas" o "a derechas"

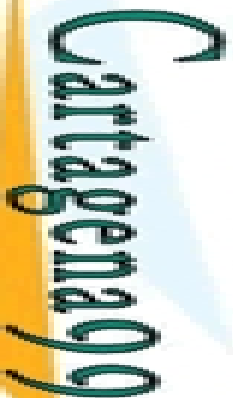


estas figuras representativas pertenecen a las clases y poseen los elementos de simetría característicos de las clases

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Grupos límite de simetría (Tabla IV)



$\infty$

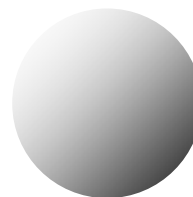
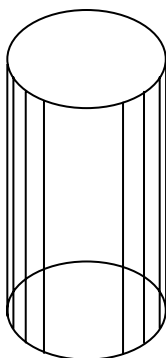
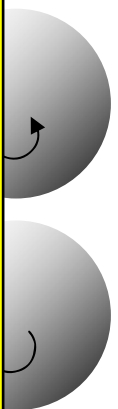
de orden  
nito,  
nitos ejes  
n infinito  
culares al  
e) levógiro L  
rógiro R  
rdas” o “a  
chas”

$\infty / mm$

(un eje de orden infinito,  
más infinitos planos  
especulares  
que contienen el eje,  
más un plano especular  
perpendicular al eje)

$\infty\infty m$

(un eje de orden infinito,  
más infinitos planos  
especulares  
que contienen el eje,  
más infinitos ejes de orden  
infinito  
perpendiculares al primer  
eje, “isótropo”)



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



Muy importante:

Ver el ejercicio **09\_02\_01 entero**

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

--

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Estructura y geometría cristalina

bles estructuras cristalinas.

paquetamientos de átomos = esferas

hexagonal compacto o **HCP** (hexagonal closed packing)

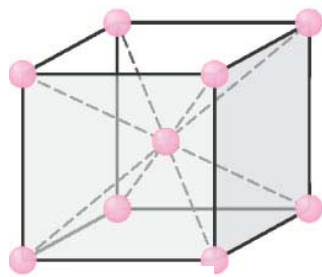
cúbico centrado en las caras o **FCC** (face centered cubic)

cúbico centrado en el cuerpo o **BCC** (body centered cubic)

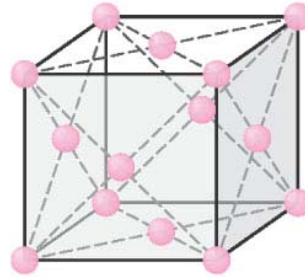
**especialmente importantes en metales, semicond. y cerámicas**

**FCC y HCP son los empaquetamientos más compactos posibles de**

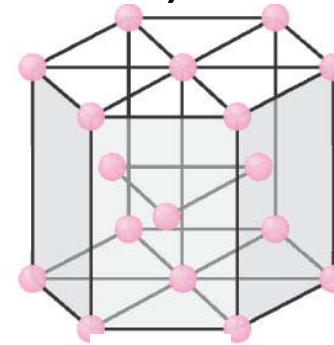
**esferas iguales (con 12 esferas tangentes a una dada)**



BCC



FCC



HCP



# Estructura y geometría cristalina

...les estructuras cristalinas.

...y BCC son redes de Bravais.

• **NO** es compacta, pero **SÍ** es red de Bravais.

• **NO** es red de Bravais, pero **SÍ** es compacta.

• **SÍ** es compacta y **SÍ** es red de Bravais.

• ...y FCC son en cierto sentido muy similares: **pueden**  
**construirse como apilamientos de capas compactas**  
**tridimensionales (con 6 esferas tangentes a una dada en el plano)**

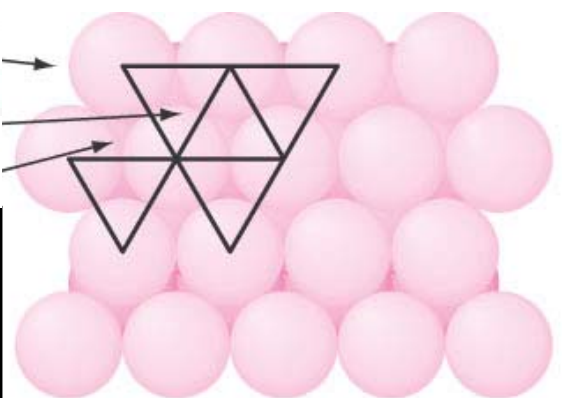


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

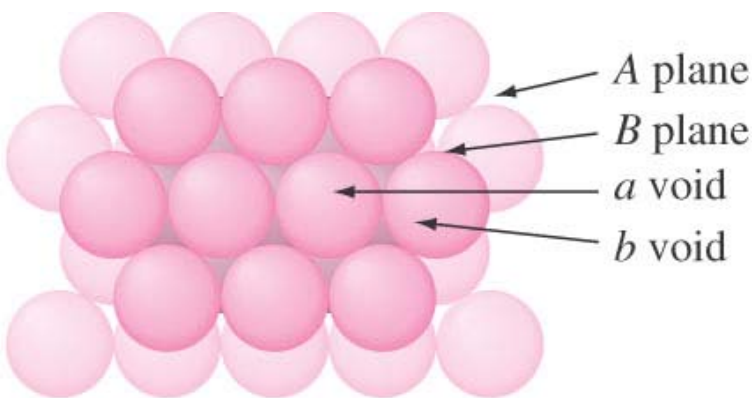




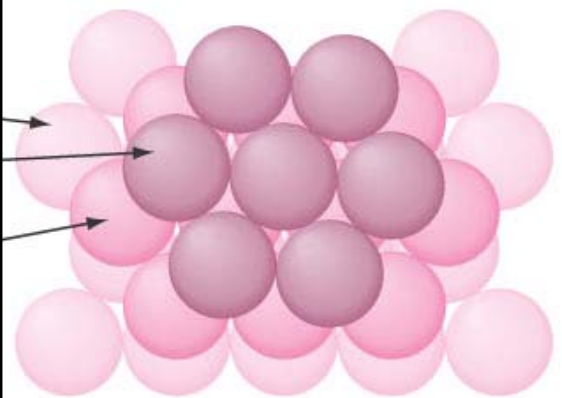
# Estructura y geometría cristalina



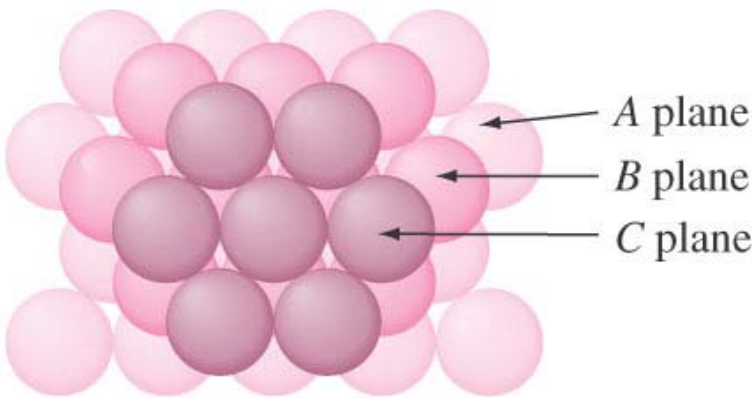
(a)



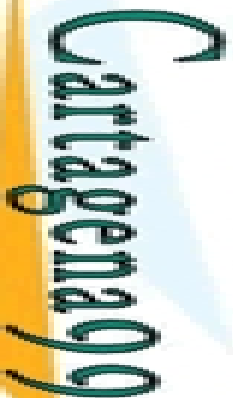
(b)



(c)



(d)



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

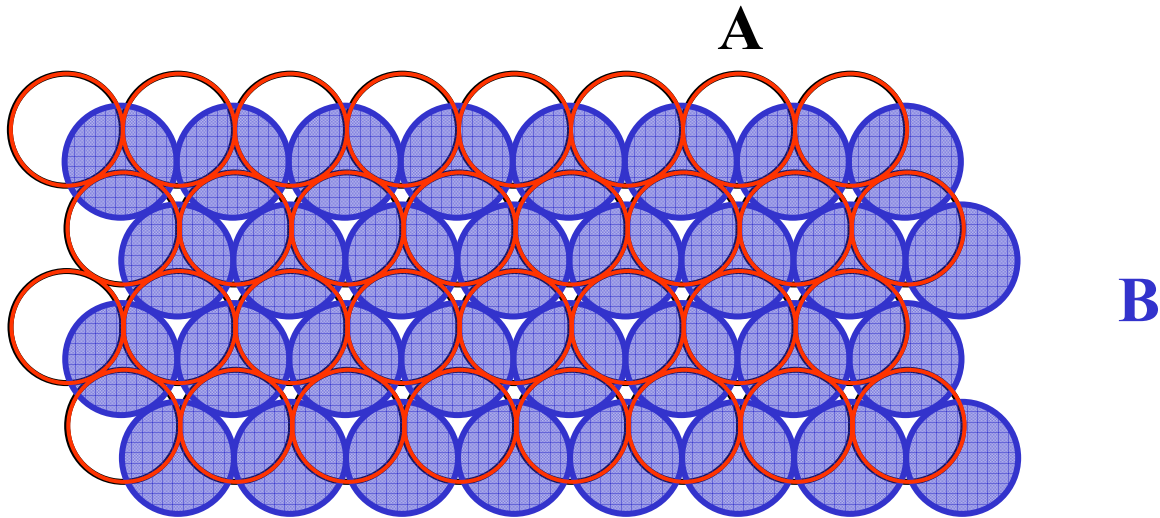


# Estructura y geometría cristalina

principales estructuras cristalinas.

HCP y FCC difieren en la secuencia (orden) de apilamiento:

**A-B-A-B- ... conduce a HCP**



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
-- --  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

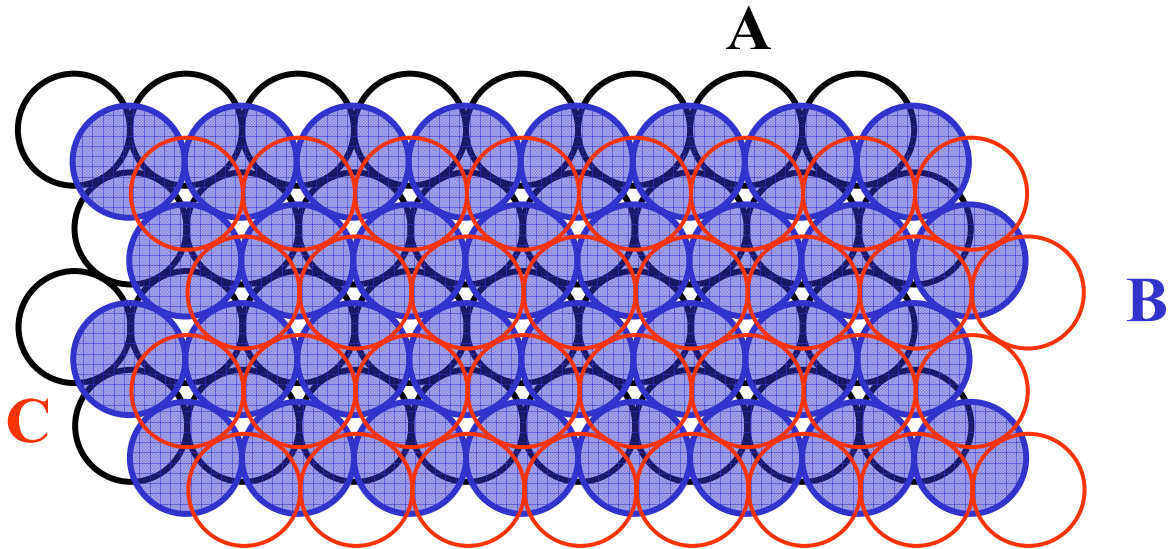


# Estructura y geometría cristalina

principales estructuras cristalinas.

HCP y FCC difieren en la secuencia (orden) de apilamiento:

**A-B-C-A-B-C- ... conduce a FCC**



# Estructura y geometría cristalina

representadas de este modo se ve que HCP y FCC están  
construidas apilando capas compactas 2D

Este es el modo más natural de "mirar" la estructura HCP  
Sin embargo, no se aprecia a primera vista el aspecto "cúbico"  
de la estructura FCC

Para ver la FCC claramente, hay que rotar los planos de  
capas compactas de manera que su normal apunte en la  
dirección  $\langle 111 \rangle$  (forma iguales ángulos con los tres semiejes  
positivos)

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

Cartagena99

HCP y FCC son las estructuras compactas más sencillas

Existen estructuras más complicadas,

que se obtienen p.ej. variando la secuencia:

**se repite A-B-C-B** (llamada “hc” o también “4H”)

**a través de defectos**

**alternancia aleatoria** (el Co es 90% HCP y 10% FCC)

En las estructuras HCP y FCC, las esferas definen o dejan libres

“huecos”, que pueden ser de dos tipos:

**tetraédricos**

**octaédricos**

**Muy importante**

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

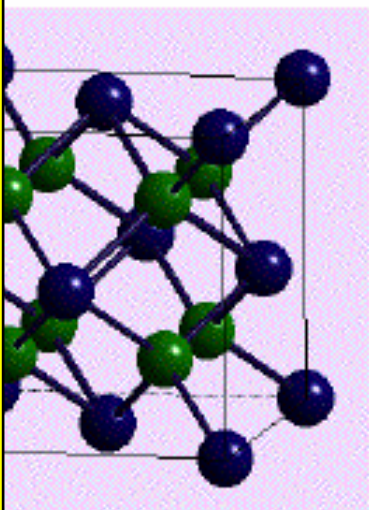


# Estructura y geometría cristalina

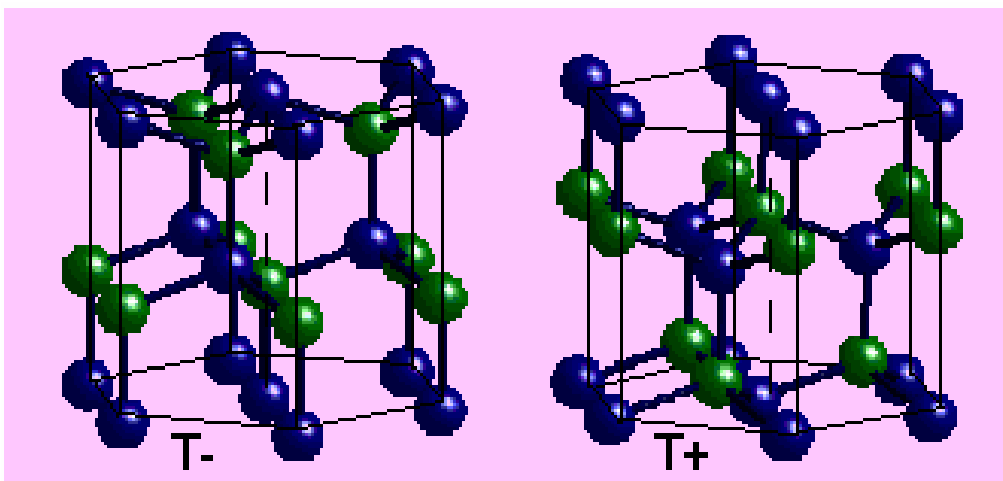
huecos **tetraédricos** de las estructuras FCC y HCP:

en **azul**:  
en **verde**:

átomos de las estructuras FCC y HCP  
huecos tetraédricos de las estructuras FCC y HCP



FCC



HCP

# Estructura y geometría cristalina

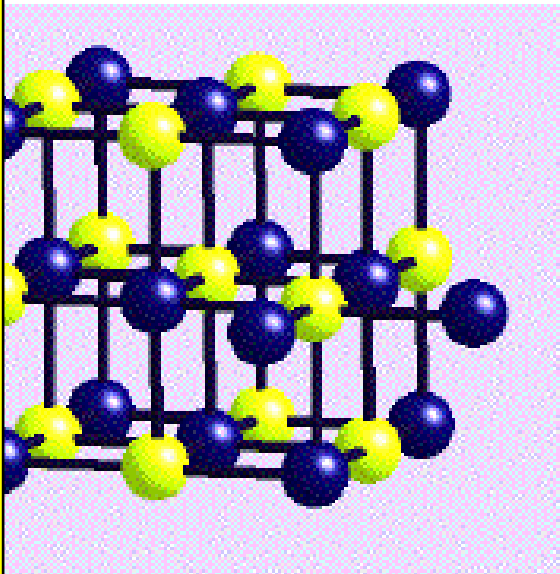
Huecos **octaédricos** de las estructuras FCC y HCP:

en **azul**:

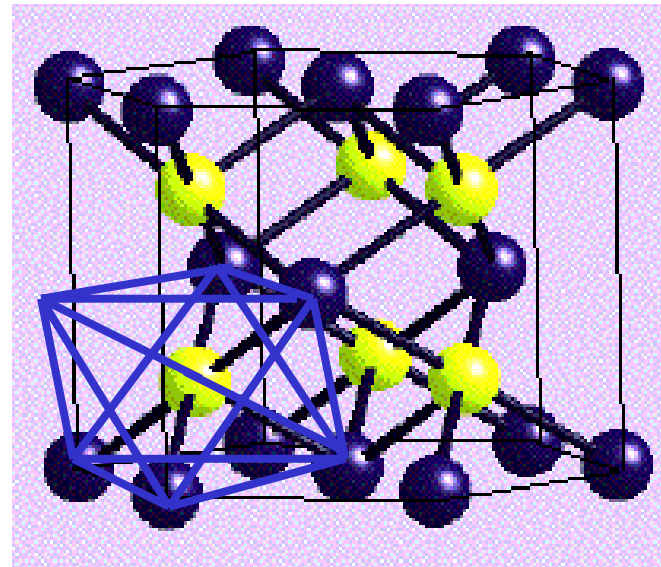
átomos de las redes FCC y HCP

en **amarillo**:

huecos octaédricos de las redes FCC y HCP



FCC

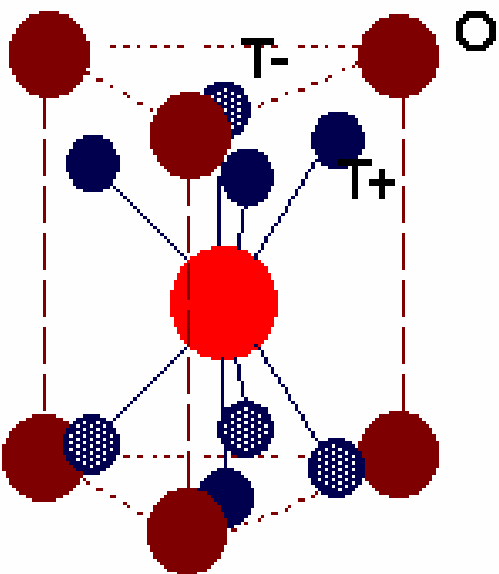


HCP

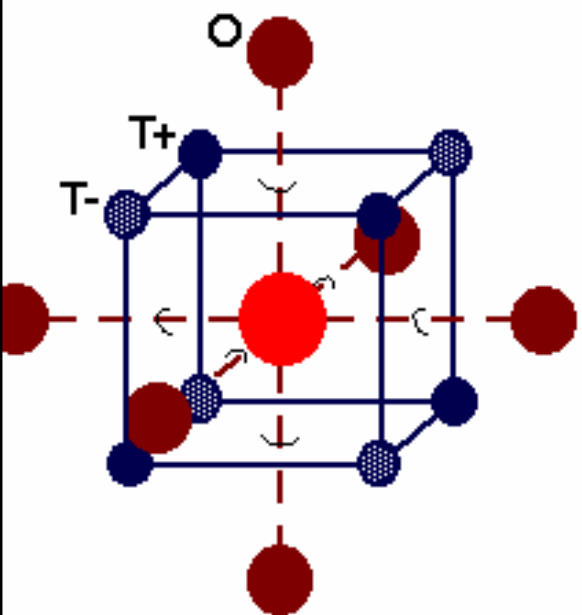


# Estructura y geometría cristalina

Localización de los huecos octaédricos y tetraédricos en torno a una esfera en empaquetamientos compactos:



HCP



FCC

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
---  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



# Estructura y geometría cristalina

huecos son muy importantes porque un gran número de  
puestos inorgánicos ( $\Rightarrow$  mat. cerámicos) forman estructuras

as que:

**Los aniones** (grandes, típicamente oxígeno, azufre) **ocupan los**  
**sitios de una red FCC o HCP**

**Los cationes** (pequeños, típicamente metales, aunque a veces  
pueden ser también aniones) **ocupan algunos o todos los**  
**huecos intersticiales**

Cartagena99

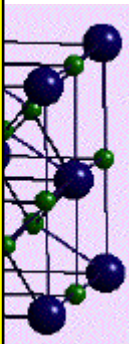
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



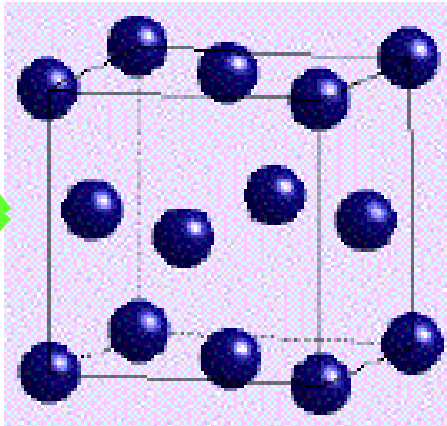
# Estructura y geometría cristalina



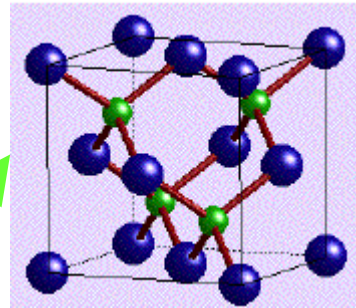
dos los  
édricos)



Si  
los los  
édricos y  
os)

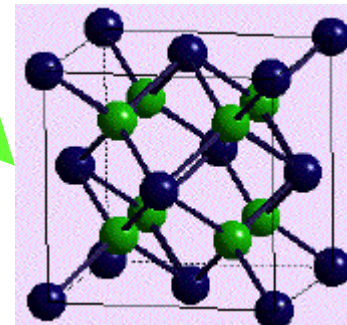


FCC



ZnS

(Zn ocupa la mitad de los huecos tetraédricos, los T<sup>+</sup>)



CaF<sub>2</sub>

(F<sup>-</sup> ocupa todos los huecos tetraédricos)

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

especialmente importantes

en los materiales cerámicos, en particular:

en los silicatos y silicoaluminatos (>75% del mercado de mat.

cerámicos)

- el oxígeno define estructuras compactas
- el silicio y el aluminio ocupan huecos tetraédricos y octaédrico

capítulo 8

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
-- --  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

ciones y direcciones cristalográficas

Para especificar posiciones atómicas se usa (x,y,z) medidas en unidades de distancia a lo largo de los ejes

Para especificar direcciones se usan componentes (como si fuera un vector, pero

- con componentes enteras lo más pequeñas posibles
- sin comas
- signos negativos: barra sobre la componente

$$[1\bar{1}3]$$

direcciones equivalentes: idéntica secuencia de átomos y distancias

direcciones equivalentes forman un tipo  $\langle 100 \rangle$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

os cristalográficos

Para especificar planos cristalográficos se usan los índices de

Miller:

- para el plano cristalográfico deseado **más cercano al origen**
  - se determinan las intersecciones con los ejes
  - se calculan los inversos
  - se multiplican por el denominador mayor
  - signo negativo: barra sobre la componente

(110)

conjunto de planos equivalentes: forma  $\{110\}$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70





# Estructura y geometría cristalina

os cristalográficos hexagonales

en el hexagonal se usan cuatro índices ( $hkil$ )

uno de los tres primeros (generalmente el tercero, por convención) es superfluo (es siempre  $i = -h - k$ )

pero hace manifiesta la simetría hexagonal, que de otro modo es menos evidente

En las direcciones se procede análogamente

Los índices de Miller resultan especialmente útiles en el análisis de estructuras cristalinas por difracción (rayos X, neutrones)

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

La definición cristalográfica de los índices de Miller parece arbitraria a primera vista.

El análisis de estructuras por rayos X y en física de estado sólido se ve inmediatamente la justificación de esta definición.

La definición operativa de los índices de Miller: **son las componentes del vector normal (de la red recíproca) más corto perpendicular al plano que se considera.**

Esta definición obliga sin embargo a introducir la red recíproca, necesaria en Materiales II. Por eso el libro y la asignatura siguen la definición cristalográfica, aunque parezca arbitraria.

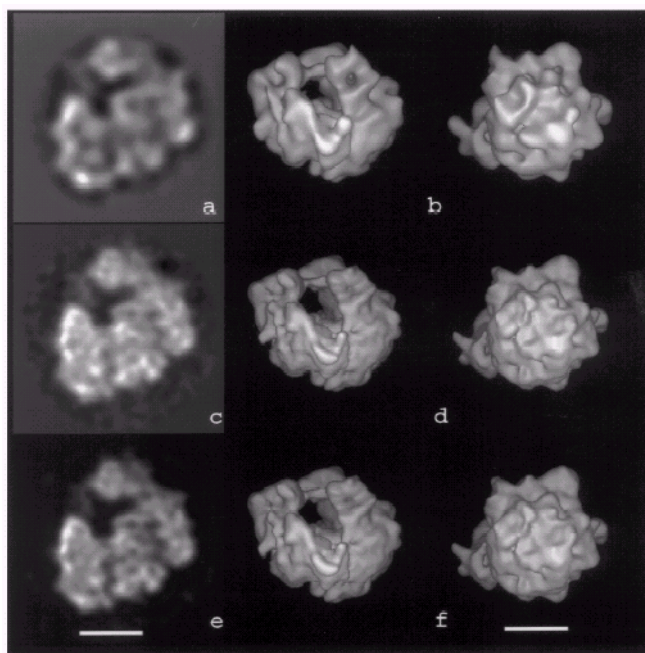
Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
-- --  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

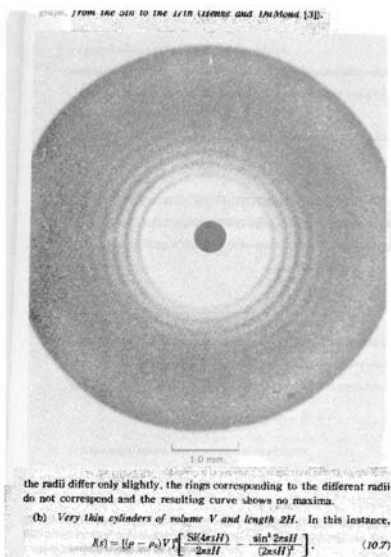


# Estructura y geometría cristalina

ifractografía y la NMR son las dos herramientas básicas para  
 idar estructuras ordenadas (cristalinas, coloidales,  
 iconductores, virus)



reconstrucción 3D de un ribosoma



difractograma de una  
 dispersión coloidal



de la mioglobina

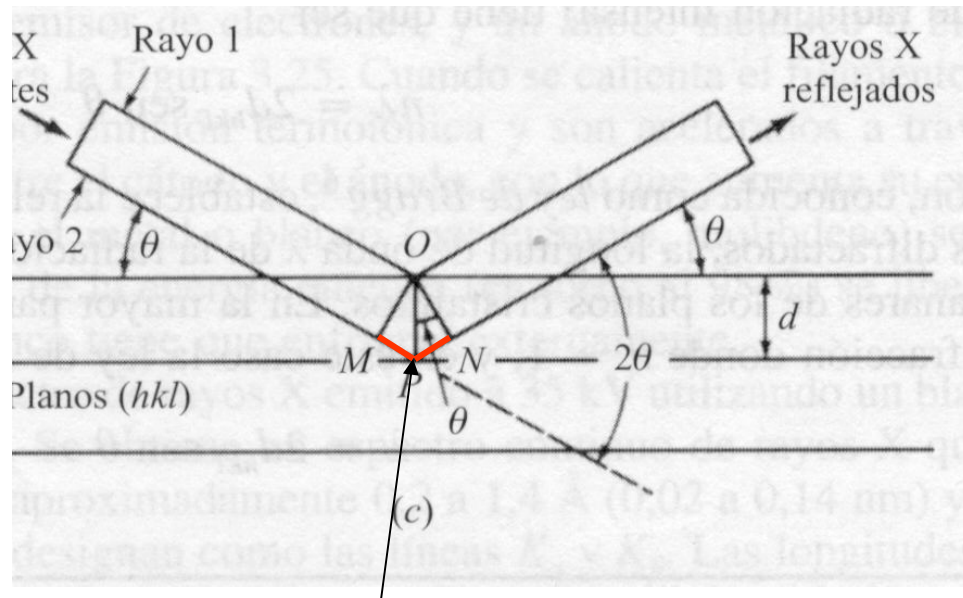


CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

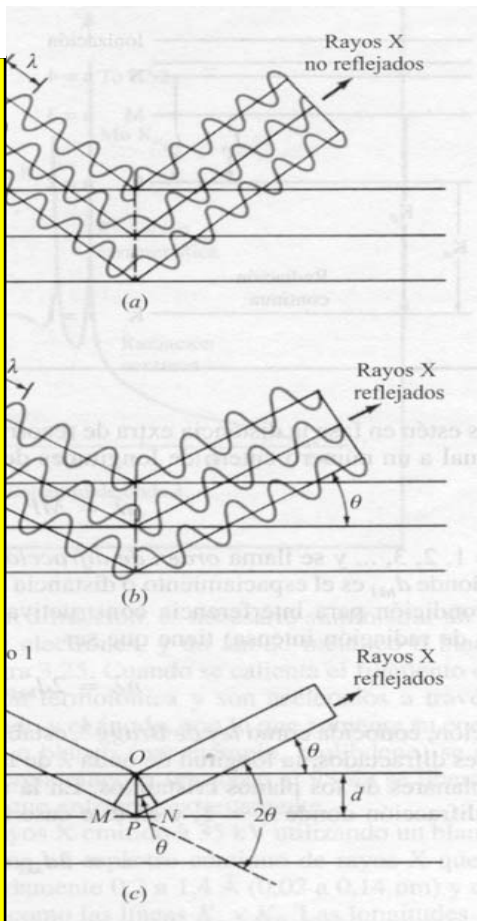
flexión de radiación X en cristales requiere interferencia constructiva:



el camino extra debe ser un múltiplo entero de la longitud de onda:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

**Condición de Bragg** (existe una formulación alternativa debida a von Laue, basada en la red recíproca)



Cartagena99

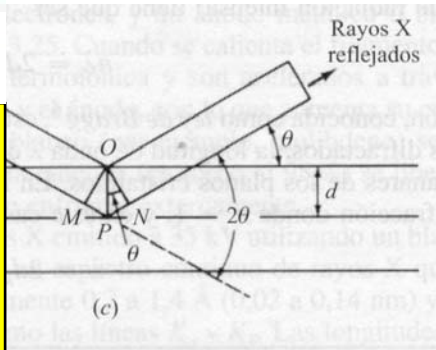
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
 ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
 CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

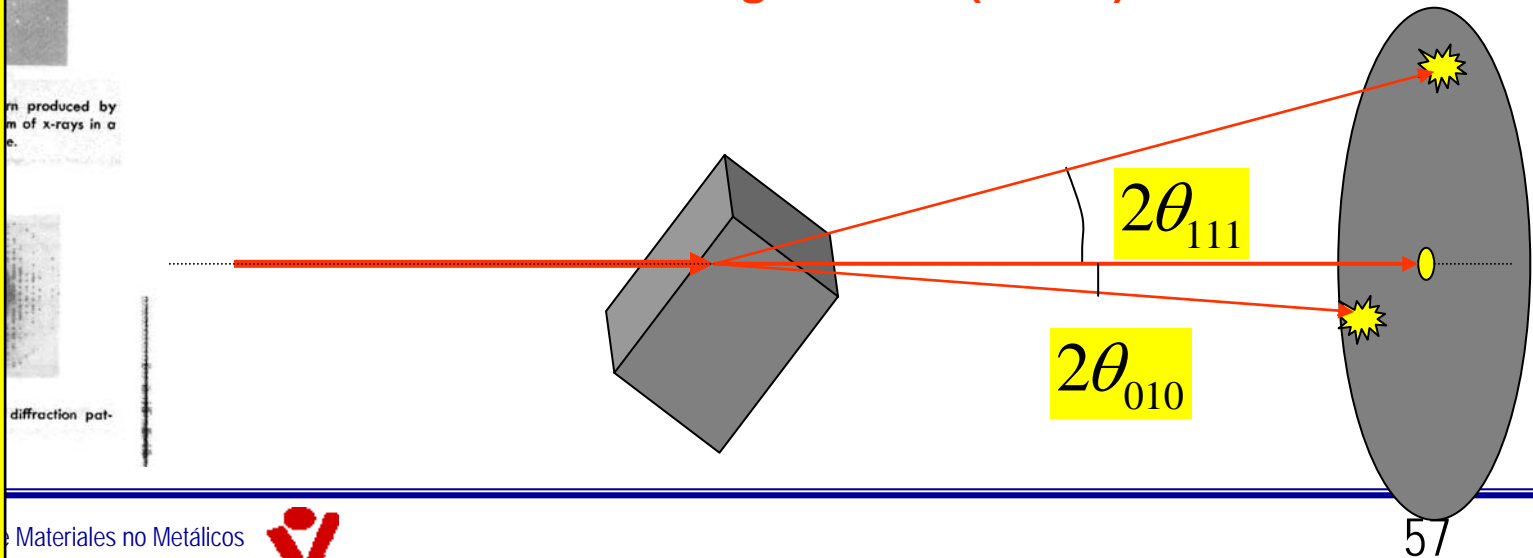
flexión de radiación X en cristales requiere interferencia constructiva:

Cada forma de planos  $\{hkl\}$  producirá un reflejo para un valor determinado del ángulo de incidencia (para un valor fijo de  $n$ ; la reflexión más intensa se obtiene para orden  $n=1$ ; en MatII consideraremos siempre  $n=1$ )



$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

Así se obtiene un **difractograma de (mono)cristal**:





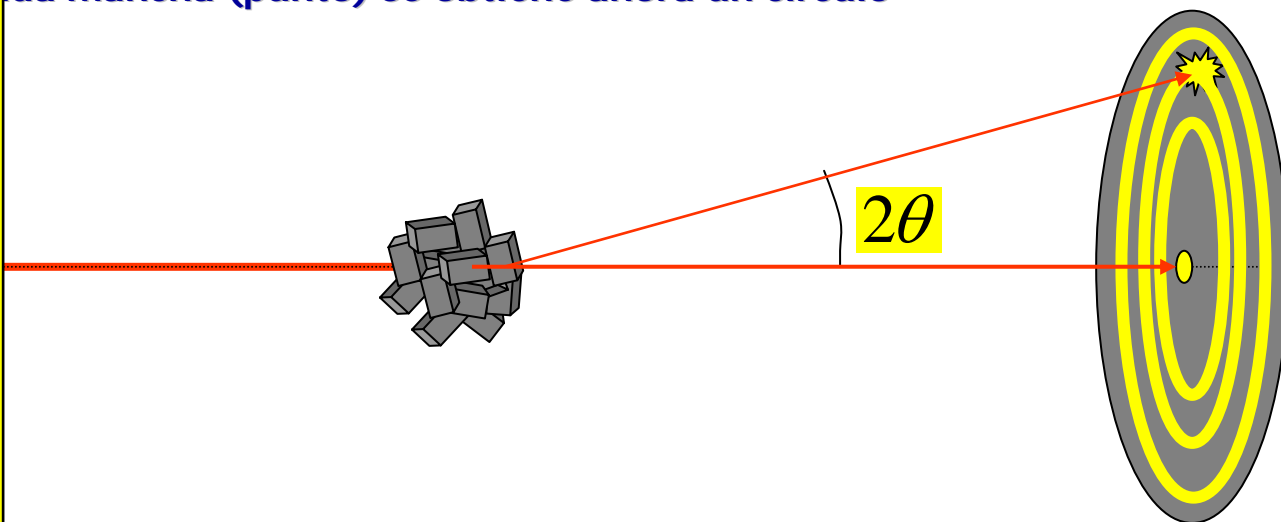
# Estructura y geometría cristalina

**método del difractograma de polvo** se realiza cuando no es posible obtener un monocristal de suficiente tamaño.

La muestra en polvo es una colección de muchos monocristales orientados al azar (en todas las posibles orientaciones)

En lugar de un difractograma de monocristal, rotado en torno al eje definido por el haz de rayos X incidente

En lugar de una mancha (punto) se obtiene ahora un círculo



Cartagena99

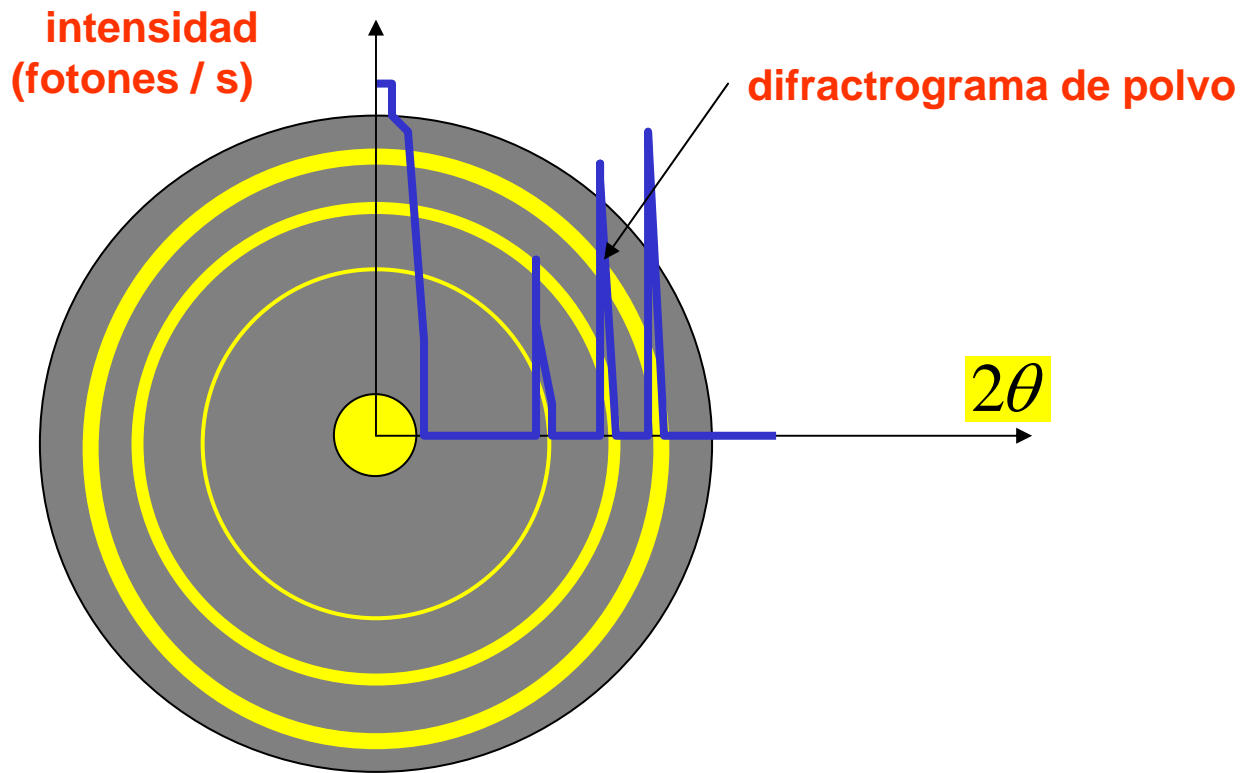
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70





# Estructura y geometría cristalina

mente, se “lee” la densidad óptica (el ennegrecimiento) de la película (o el número de fotones recibidos en una CCD) en función del radio (-> del ángulo)



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



# Estructura y geometría cristalina



... una tercera alternativa (**Método de Laue**) en la cual no se gira el cristal sino se varía la longitud de onda de la radiación X incidente.

... miendo: para buscar "reflejos" (cuando se cumple la condición de Bragg) se pueden seguir tres métodos:

**Método de Laue:** muestra fija, longitud de onda variable

**Método del (mono)cristal:** se gira la muestra, longitud de onda fija

**Método del difractograma de polvo:** se gira la muestra (muchos cristales diminutos), longitud de onda.

... fórmula que aprendemos a continuación es válida para cualquier reflejo obtenido cualquiera de los tres métodos

... tres métodos proporcionan mucha más información (cómo extraerla del difractograma, se sale de los límites de la asignatura)

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
--  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Estructura y geometría cristalina

La distancia entre planos de una forma  $\{hkl\}$  está dada por:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Por lo tanto, los picos del difractograma aparecerán para todos aquellos ángulos que satisfagan:

$$2 \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \sin \theta = n\lambda$$

De donde se puede determinar muy fácilmente la constante de red y algunos detalles cristalográficos, y con más trabajo (FFT 3D) toda la información cristalográfica.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

