Universidad Nacional Autónoma de México

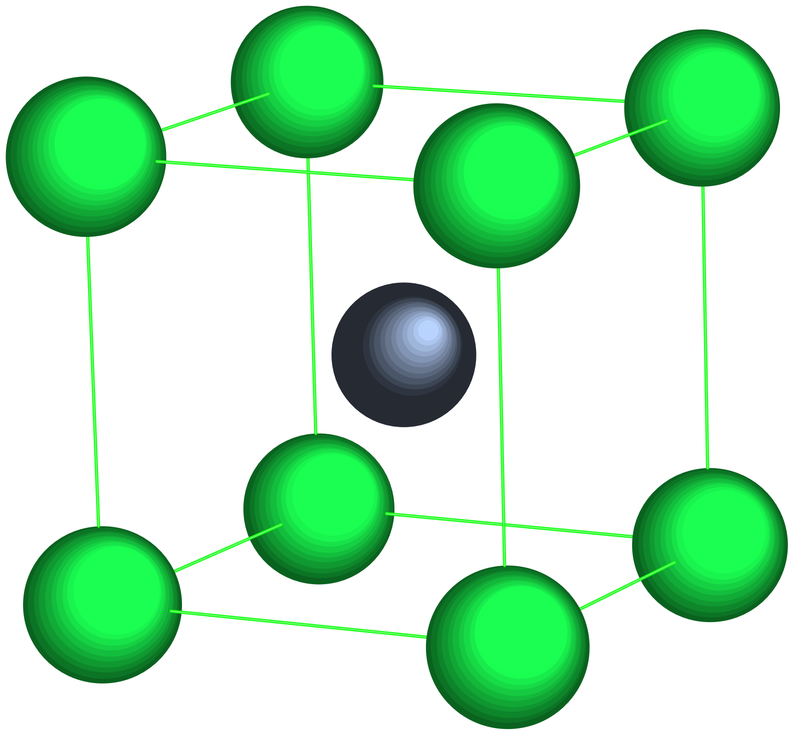
Facultad de Química

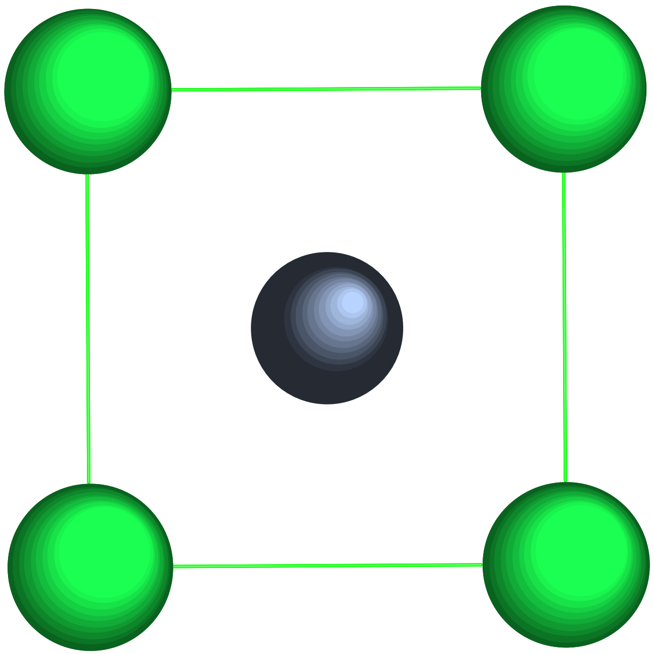
Química del Estado Sólido

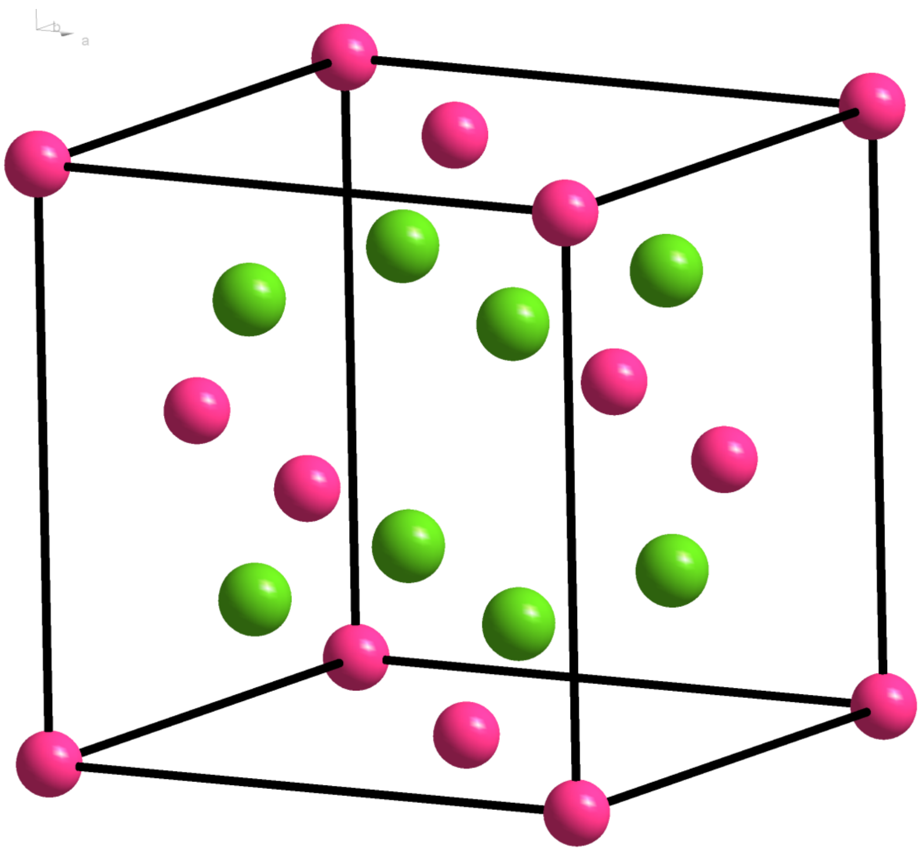
4. Coordenadas atómicas, planos y direcciones

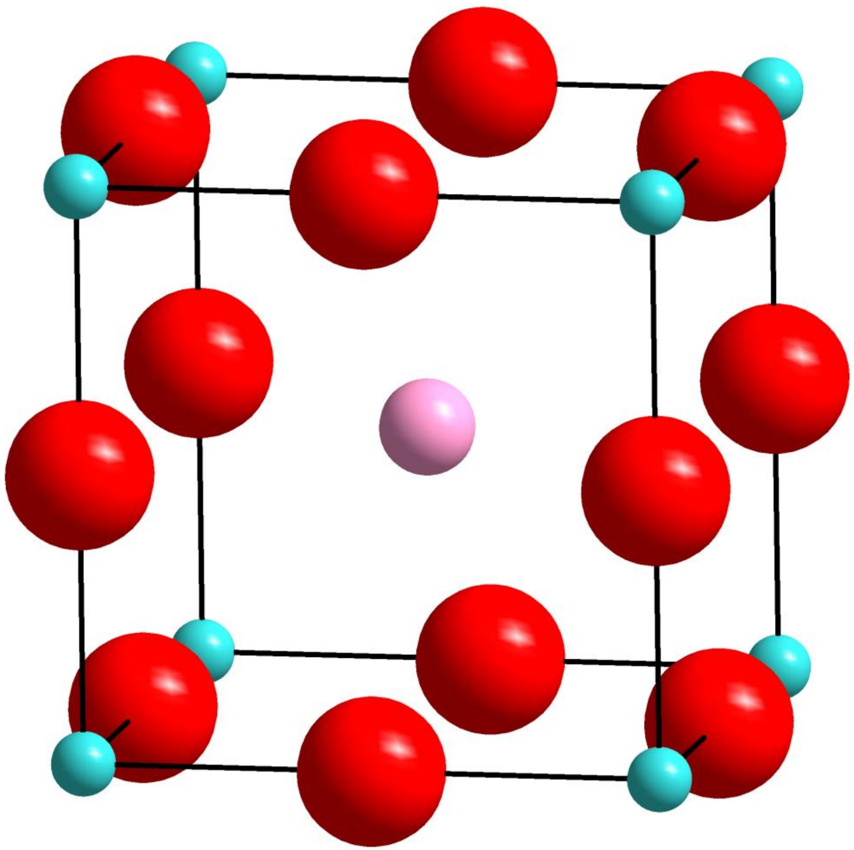
Víctor Fabián Ruiz Ruiz.

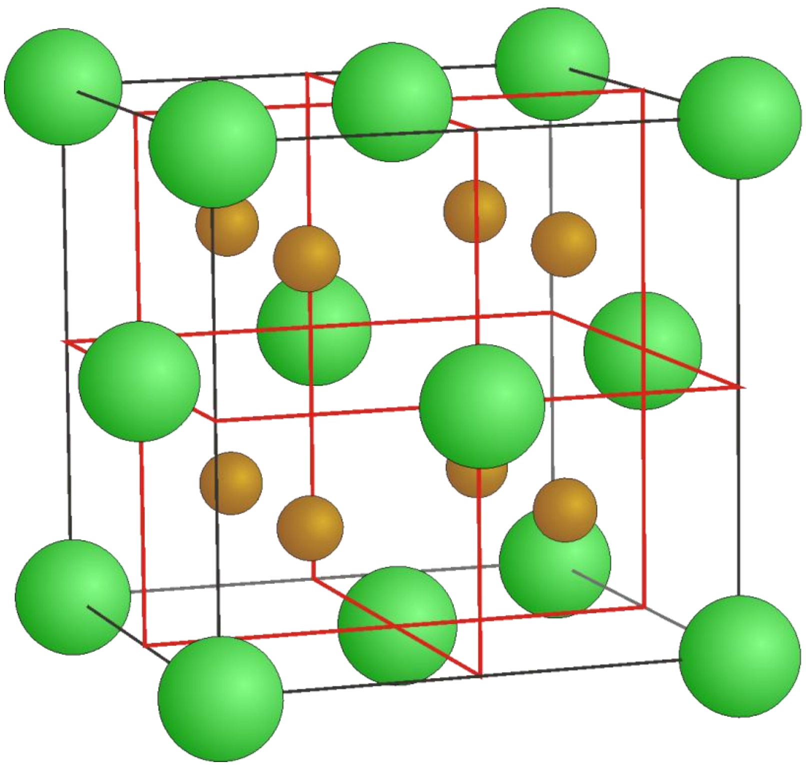
COORDENADAS ATÓMICAS

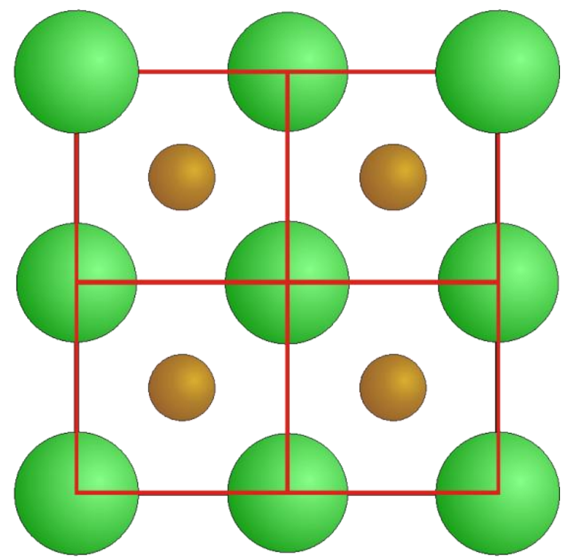


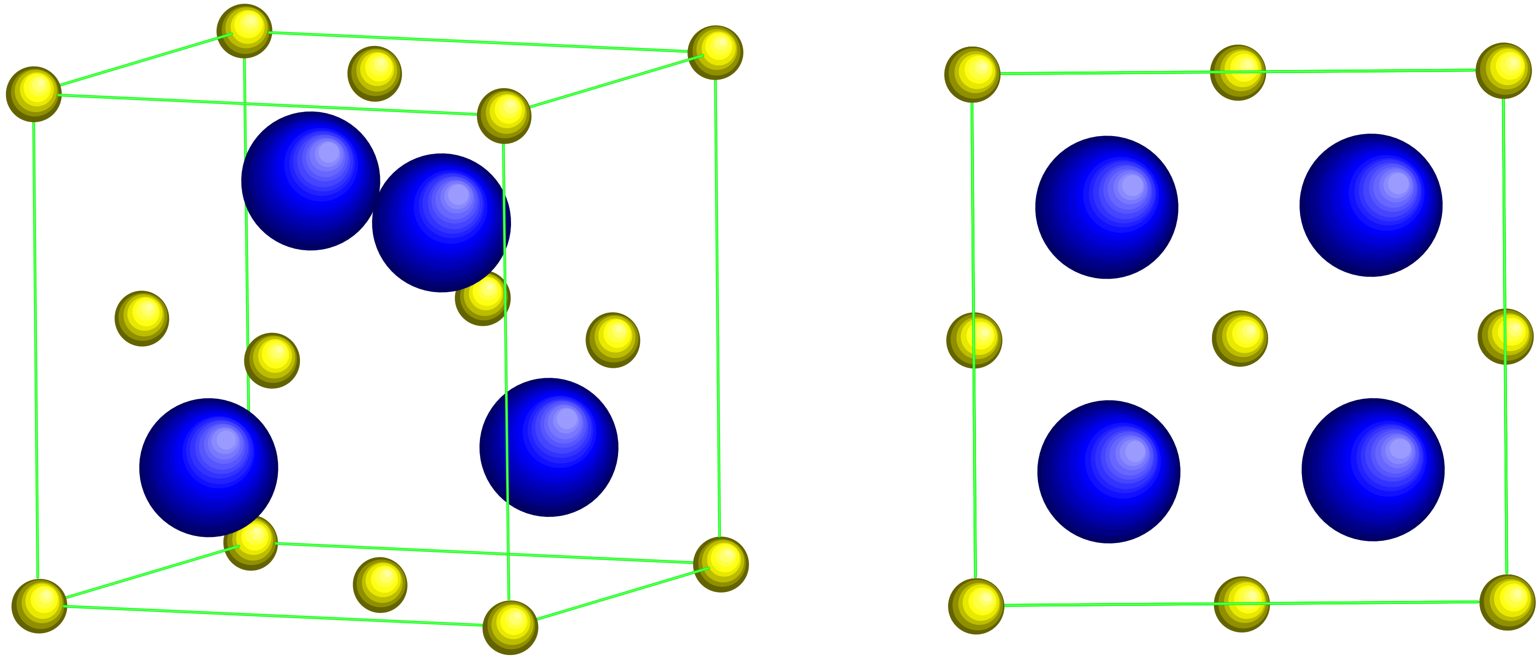


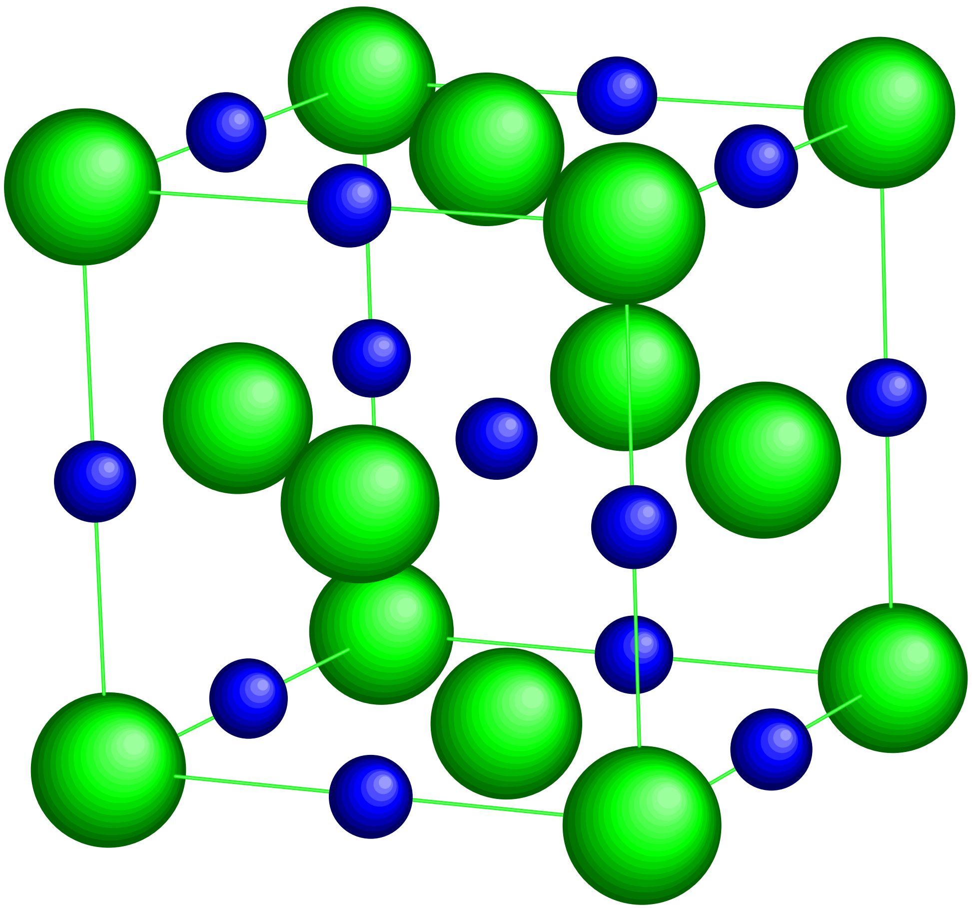

b
a

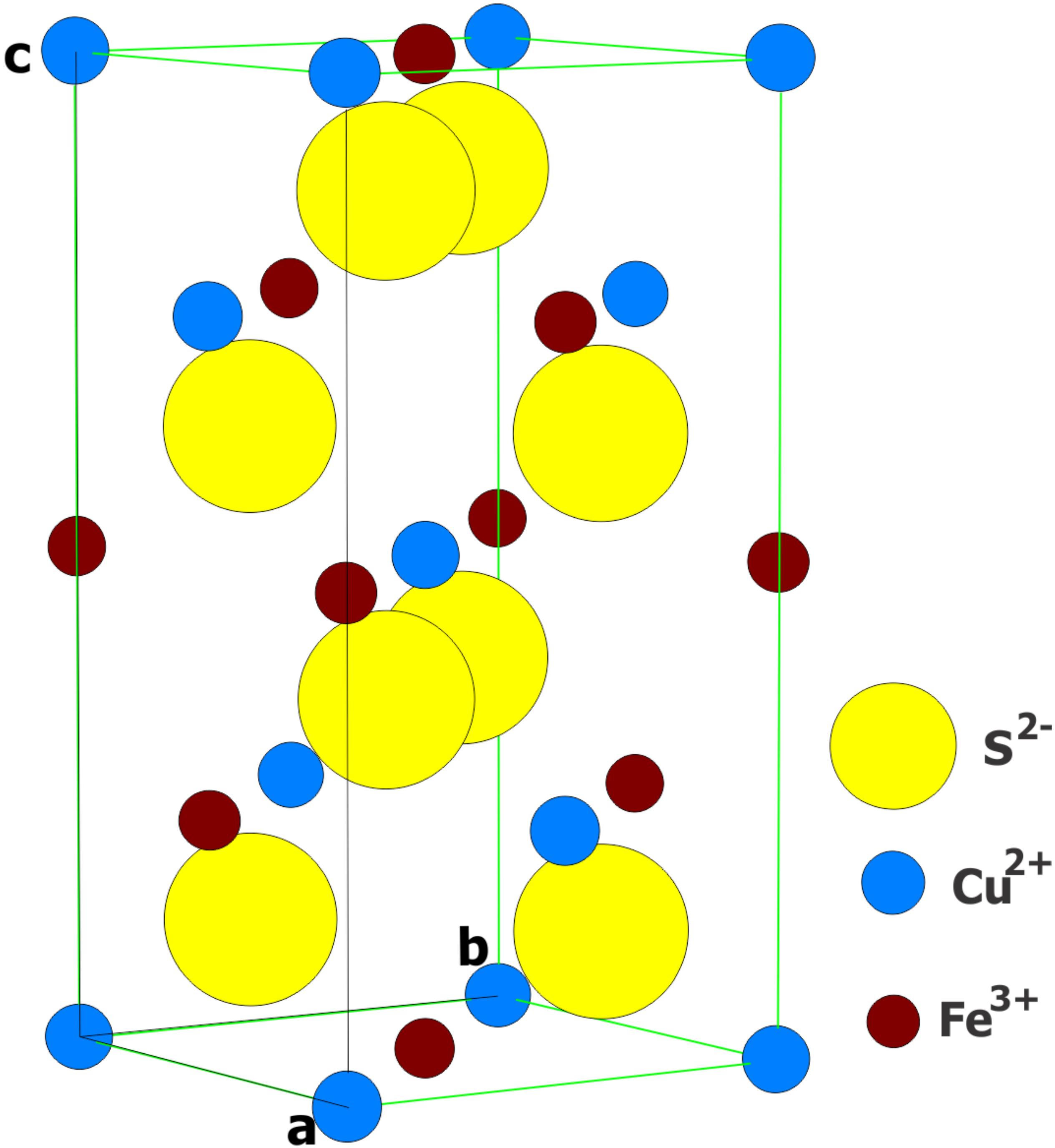






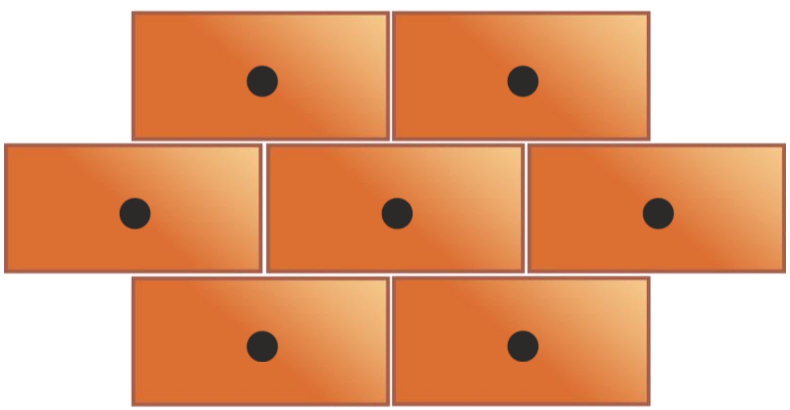





c
b
a
S2-
Cu2+
Fe3+

CONCEPTO DE RED

Un cristal consiste de un arreglo infinito de unidades en tres dimensiones. Debido a que la naturaleza de la unidad constituyente no afecta la periodicidad, se puede remplazar la unidad por un punto y representar así la periodicidad. El arreglo de puntos obtenidos se conoce como **red** (*lattice*).



Estructura cristalina = Red + Base

CONCEPTO DE RED

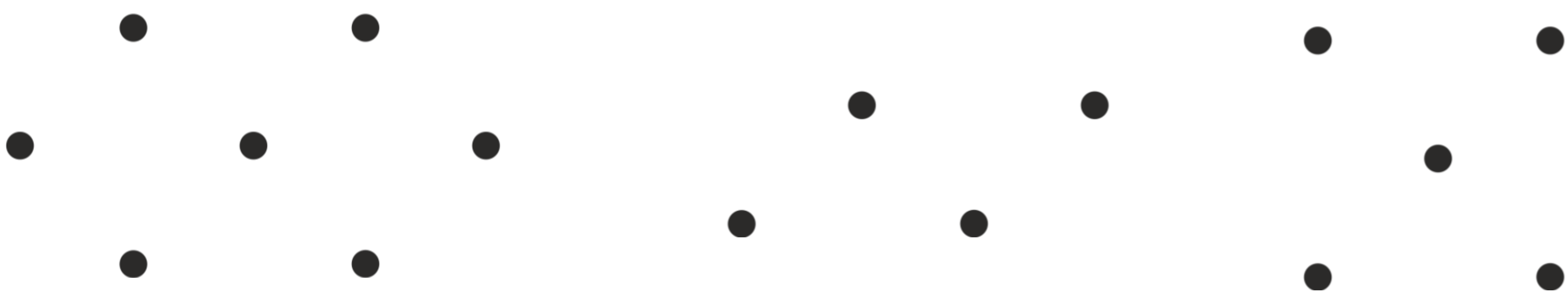
Un cristal consiste de un arreglo infinito de unidades en tres dimensiones. Debido a que la naturaleza de la unidad constituyente no afecta la periodicidad, se puede remplazar la unidad por un punto y representar así la periodicidad. El arreglo de puntos obtenidos se conoce como **red** (*lattice*).

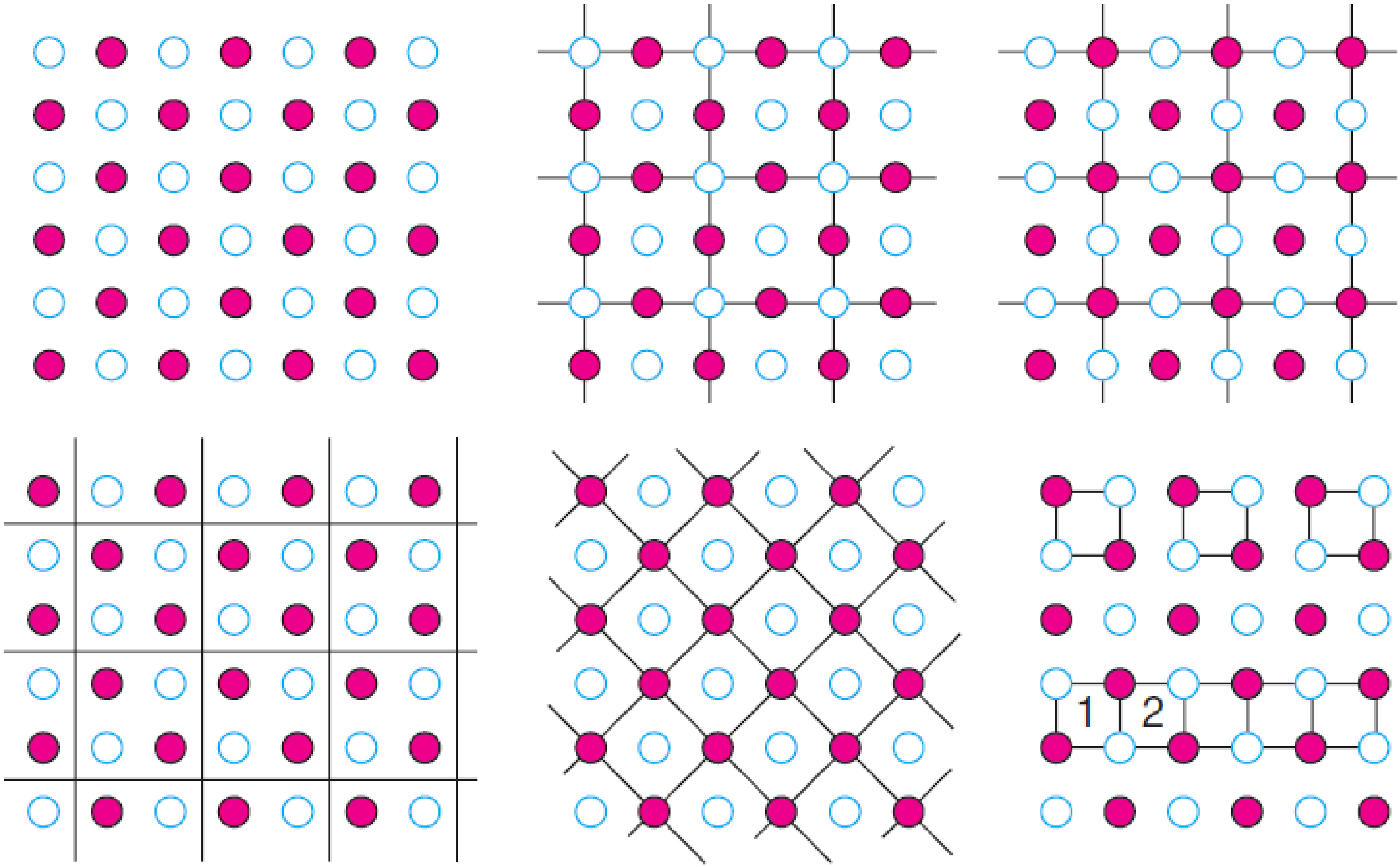
En el espacio de la red, los vectores **a**, **b** y **c** a lo largo de las tres **direcciones cristalográficas** definen un **paralelepípedo** llamado **celda primitiva**.

CELDA UNITARIA

Una celda primitiva o una combinación adecuada de varias de éstas, escogida como unidad repetitiva de la red es llamada **celda unitaria** (*unit cell*).

Por lo tanto, la celda unitaria es la unidad más pequeña que contiene **toda** la información (simetría) necesaria para construir, sin ambigüedad, la red infinita del cristal.

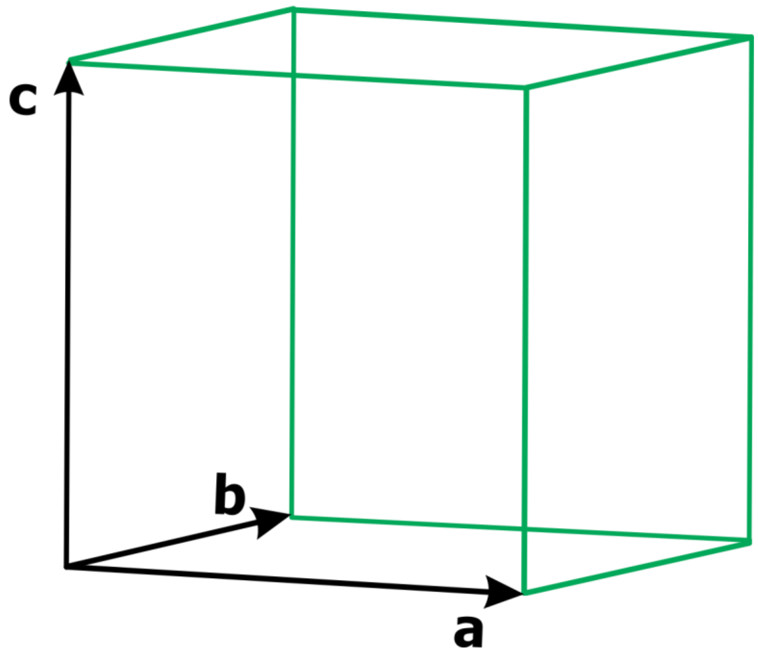



1
2

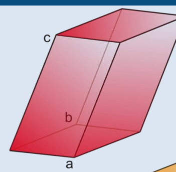
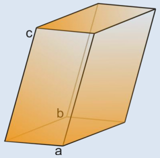
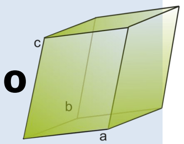
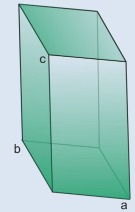
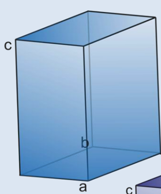
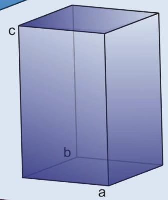
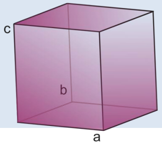
Parámetros de Red

Para definir una celda unitaria en tres dimensiones se requiere precisar los vectores **a**, **b** y **c**, así como los ángulos interaxiales **α**, **β** y **γ**.

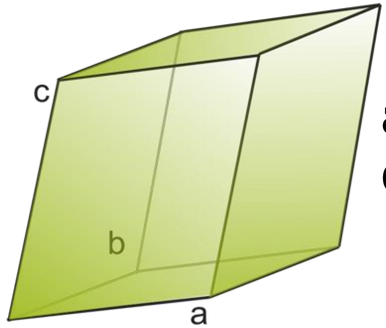
De esta forma, basándose en estos seis elementos llamados **parámetros de red** pueden definirse **siete sistemas cristalinos**.



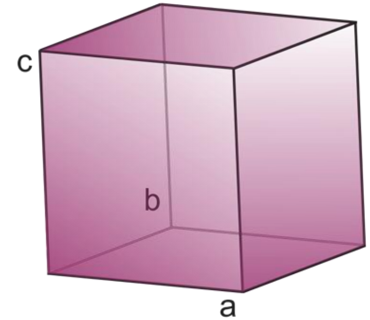
Los 7 Sistemas Cristalinos

Sistema	Número de redes	Simetría característica	Restricciones sobre los ejes y ángulos
Triclínico	**1**	**1** ó **-1**	**a ≠ b ≠ c** **α ≠ β ≠ γ** 
Monoclínico	**2**	Un **2** ó **-2**	**a ≠ b ≠ c** **α = γ = 90º ≠ β** 
Trigonal	**1**	Un **3**	**a = b = c** **α = β = γ < 120º, ≠ 90º** 
Hexagonal	**1**	Un **6**	**a = b ≠ c** **α = β = 90º, γ = 120º** 
Ortorrómbico	**4**	Tres **2** mutuamente perpendiculares	**a ≠ b ≠ c** **α = β = γ = 90º** 
Tetragonal	**2**	Un **4** ó **-4**	**a = b ≠ c** **α = β = γ = 90º** 
Cúbico	**3**	Cuatro **3**	**a = b = c** **α = β = γ =90º** 

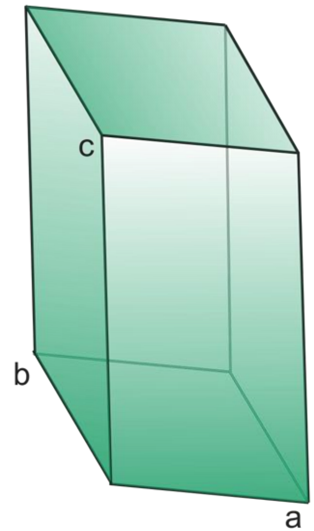
Los 7 Sistemas Cristalinos



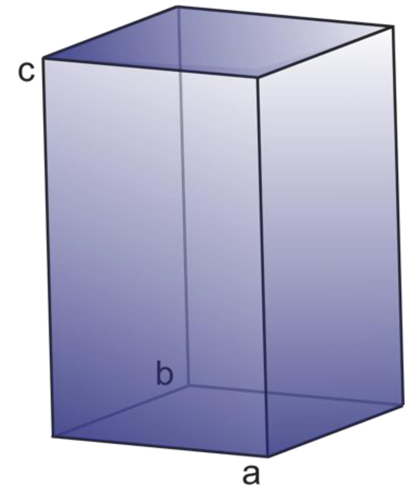
a = b = c
α=β=γ <120°
≠ 90°



a = b = c
α=β=γ=90°

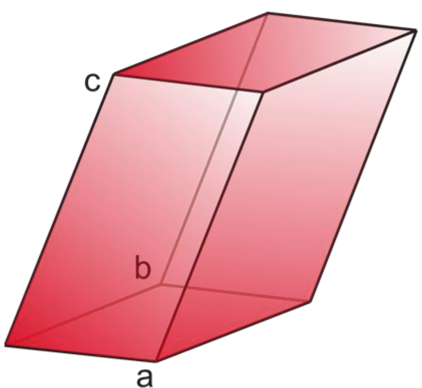


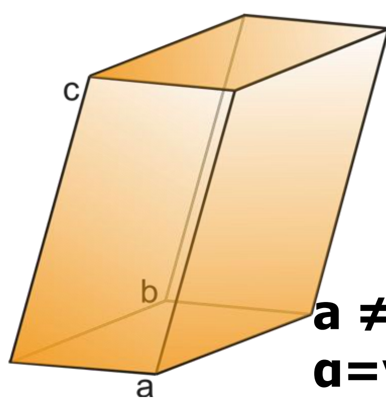
a = b ≠ c
α =β=90°
γ = 120°



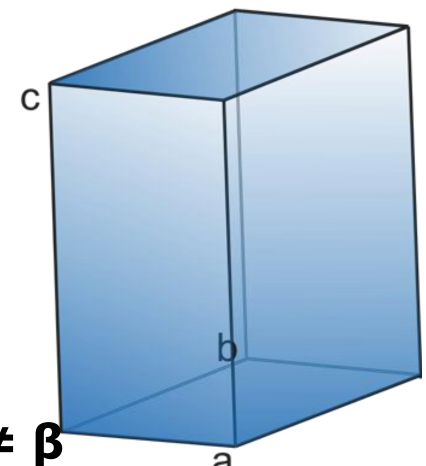
a = b ≠ c
α=β=γ=90°

a ≠ b ≠ c
α ≠ β ≠ γ



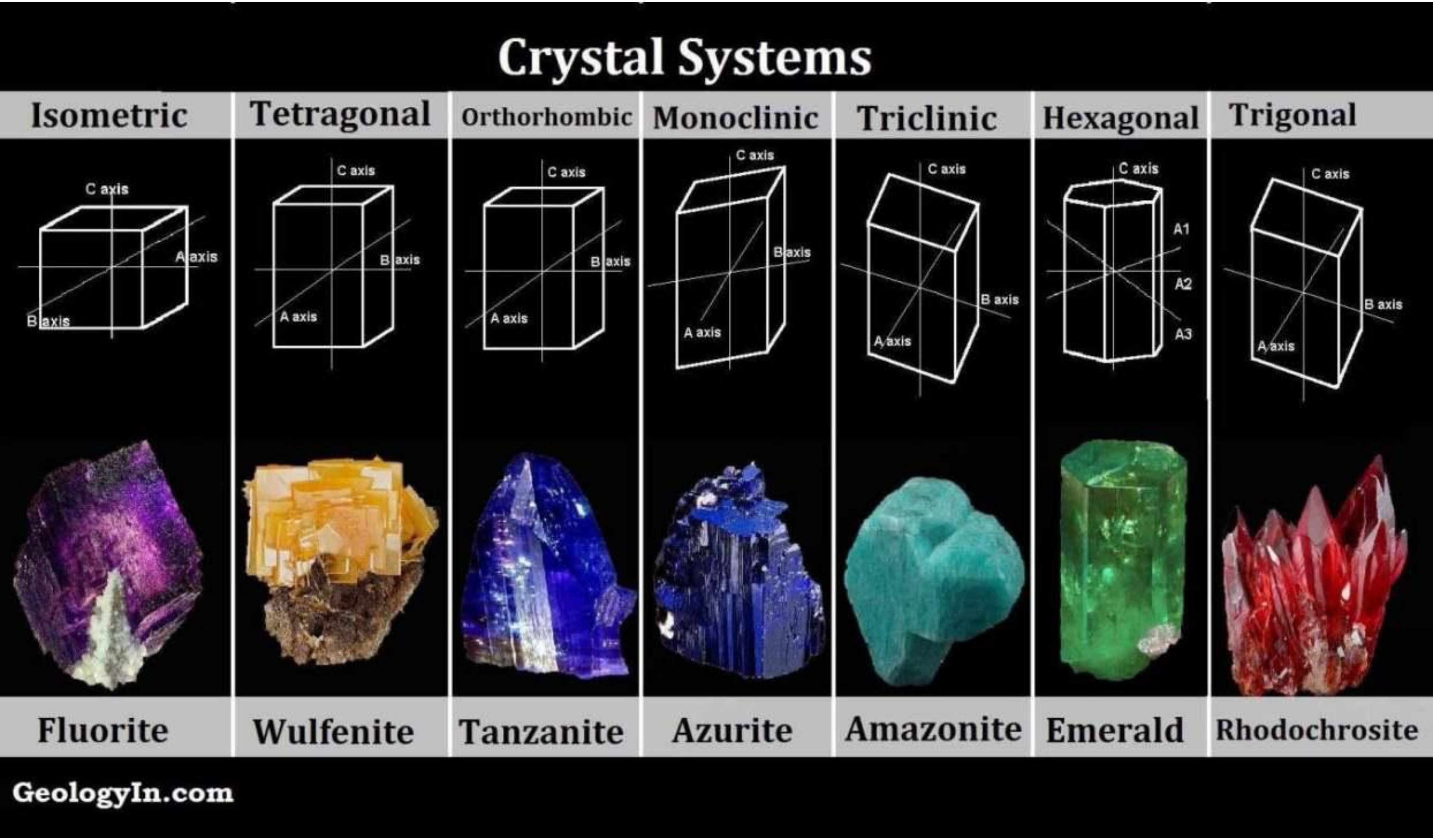


a ≠ b ≠ c
α=γ=90° ≠ β



a ≠ b ≠ c
α=β=γ=90°

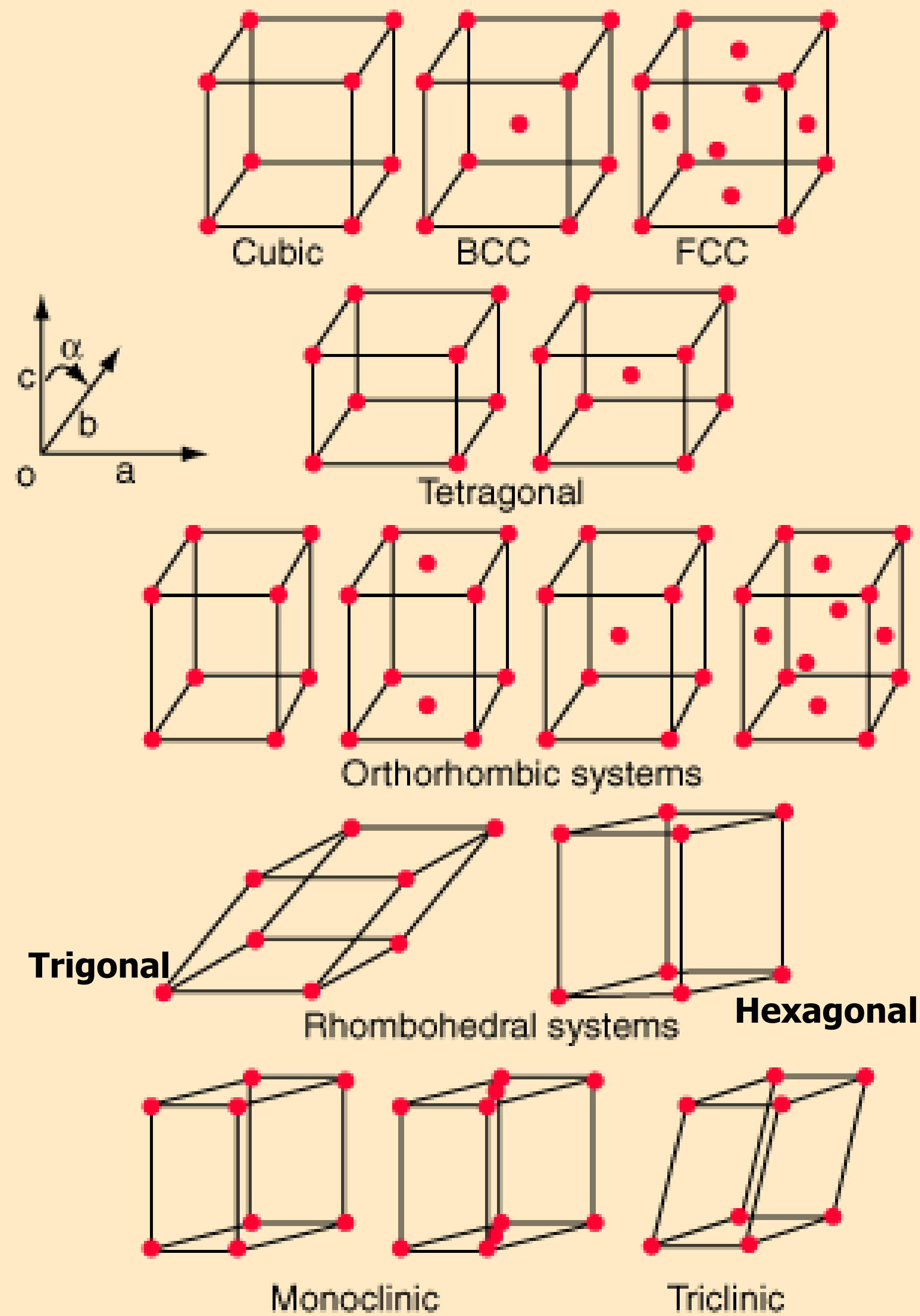
Los 7 Sistemas Cristalinos

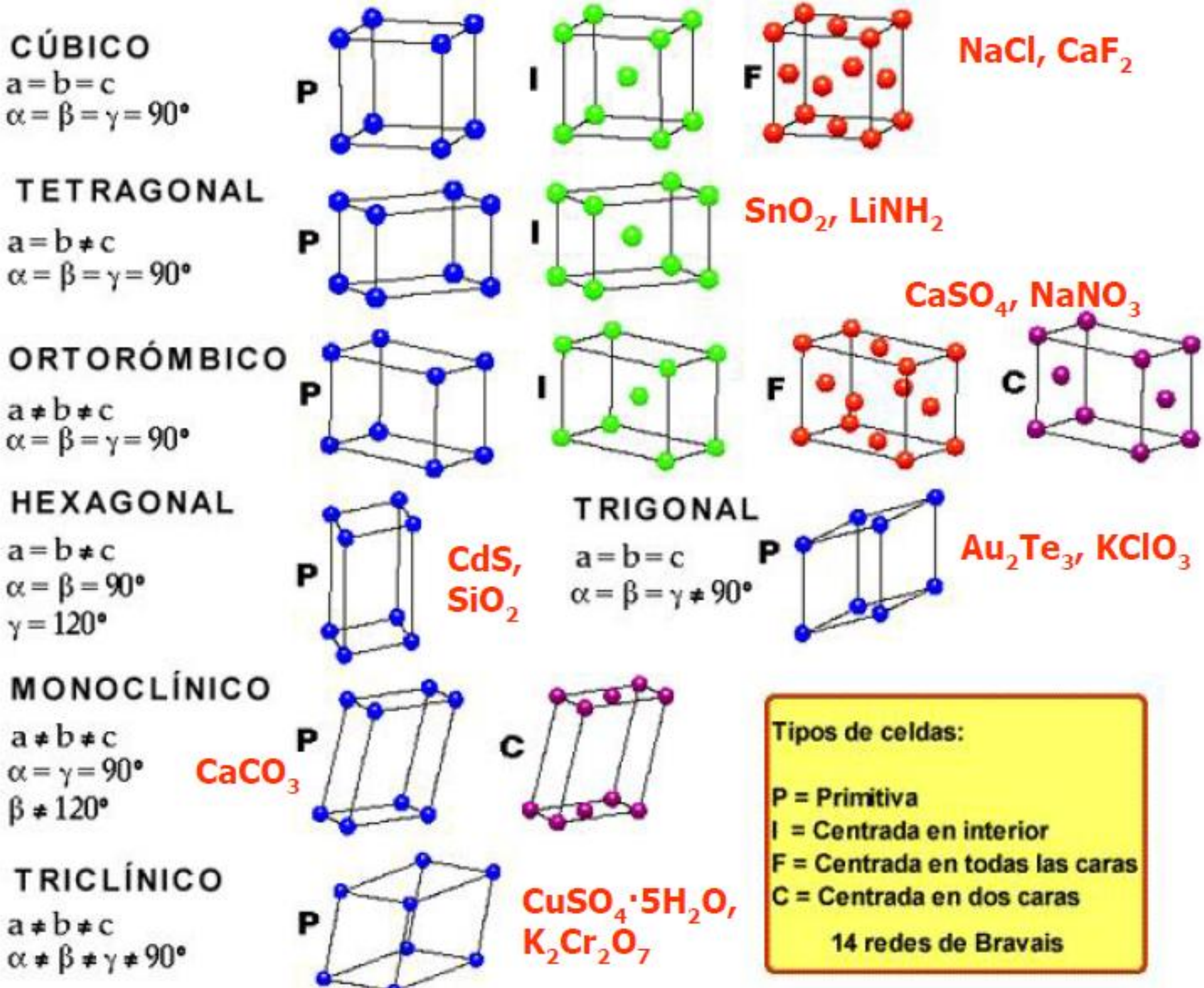


LAS 14 REDES DE BRAVAIS

Existen **14 formas independientes** de arreglar los puntos en una red tridimensional

Auguste Bravais




CÚBICO
a = b = c
α = β = γ = 90°
P
I
F
NaCl, CaF2
TETRAGONAL
a = b ≠ c
α = β = γ = 90°
P
I
SnO2, LiNH2
ORTORÓMBICO
a ≠ b ≠ c
α = β = γ = 90°
P
I
F
C
CaSO4, NaNO3
HEXAGONAL
a = b ≠ c
α = β = 90°
γ = 120°
P
CdS,
SiO2
TRIGONAL
a = b = c
α = β = γ ≠ 90°
P
Au2Te3, KClO3
MONOCLÍNICO
a ≠ b ≠ c
α = γ = 90°
β ≠ 120°
CaCO3
P
C
TRICLÍNICO
a ≠ b ≠ c
α ≠ β ≠ γ ≠ 90°
P
CuSO4·5H2O,
K2Cr2O7
Tipos de celdas:
P = Primitiva
I = Centrada en interior
F = Centrada en todas las caras
C = Centrada en dos caras
14 redes de Bravais

Calculando d_{hkl} en los otros sistemas

Cúbico

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

(hkl)	d_{hkl}
(100)	
(010)	
(001)	
{100}	

(hkl)	d_{hkl}	
(100)		{100}
(010)		
(001)		{001}

Tetragonal

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Ortorrómbico

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Hexagonal

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3}\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Trigonal (R)

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2)\sin\alpha^2 + 2(hk + kl + hl)(\cos\alpha^2 - \cos\alpha)}{a^2(1 - 3\cos\alpha^2 + 2\cos\alpha^2)}$$

Monoclínico

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2\sin\beta^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2\sin\beta^2} - \frac{2hl\cos\beta}{ac\ \sin\beta^2}$$