Descripción Geométrica de la Estructura Cristalina (EC) o Cristal.

EC = Red de Nodos (+) Motivo

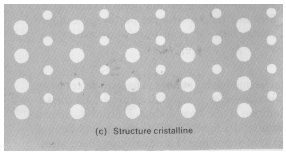
Los Nodos son Puntos Geométricos (no Átomos) cuyo entorno es equivalente en el Cristal.

El Motivo es un conjunto de Átomos que se asocia a cada Nodo.

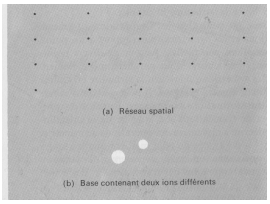
Al aplicar apropiadamente el Motivo a cada Nodo de la Red, se tiene el Cristal.

EC = Red de Nodos (+) Motivo

Con esta relación se puede trabajar hacia su derecha o hacia su izquierda.
A la derecha, en principio, no importa donde se ubica el primer Nodo.
A la izquierda, en principio, no importa cómo se ubica el Motivo respecto del primer nodo.
La Red y ewl Motivo se describen vectorialmente usando la misma base.
Los ejes de la base vectorial definen las aristas de la celda de la Red.
El Motivo debe aplicarse por Traslación Paralela.



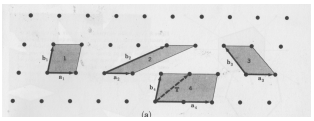
Red Nodal y Motivo Cristal



Red Nodal y Motivo

La Celda de la RED

- La elección de la celda de red no es única.



- En 3D hay 14 redes.
- Cada red se describe preferentemente por una (1) Celda Convencional o Unitaria.
- Entonces, en 3D hay 14 Celdas Convencionales.
- Las 14 Celdas Convencionales 3D se clasifican en 7 Sistemas: Cúbico, Hexagonal, Trigonal, etc.

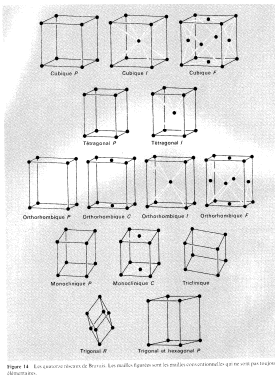
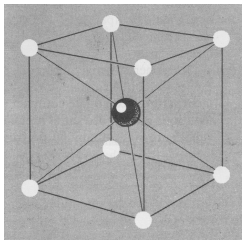


Fig. 10
Las 14 Redes 3D de Bravais representadas por sus Celdas Convencionales.
Los puntos representan nodos (y no átomos).

Celda del CsCl, descrita por su Celda Cristalina.

La Celda Cristalina es la Celda de Red con el Motivo aplicado en los Nodos.
Se entiende que trabajamos con la respectiva Celda Nodal Convencional.

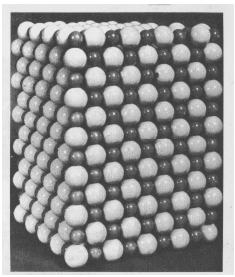


Esfera negra: Cl
Esferas blancas: Cs

Determine:
- la Red
- el Motivo

Modelo Atómico del NaCl.

La Celda Cristalina es la Celda de Red con el Motivo aplicado en los Nodos.
Se entiende que trabajamos con la respectiva Celda Nodal Convencional.

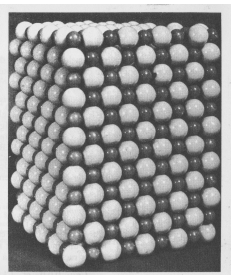


Esferas blancas: Cl
Esferas negras: Cl

Determine:
- la Red
- el Motivo

Modelo Atómico del NaCl.

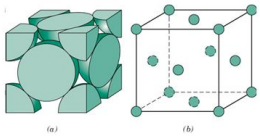
La Celda Cristalina es la Celda de Red con el Motivo aplicado en los Nodos.
Se entiende que trabajamos con la respectiva Celda Nodal Convencional.

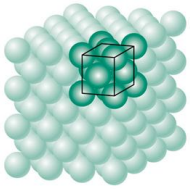


Esferas blancas: Cl
Esferas negras: Cl

Determine:
- la Red
- el Motivo

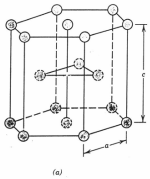
Cristal Cúbico Centrado en las Caras (CCC, FCC). Ejemplos: Cu, Ni, Al, etc.

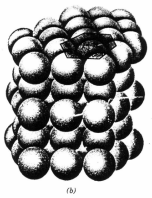




Determine:
- la Red
- el Motivo

Modelo Atómico de un Cristal Hexagonal Compacto (Zn, Cd, Ti, etc.)

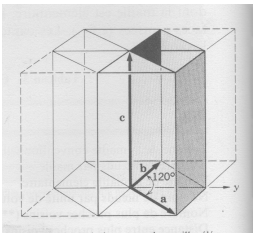




Determine:
- la Red
- el Motivo

Celda Unitaria Hexagonal P (de la Red Nodal)

P: celda primitiva= 1 nodo/celda

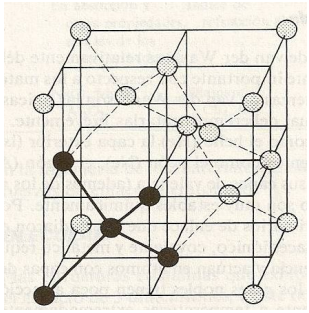


Definiciones:
- Factor de esbeltez de la celda = (c/a)

-Factor de esbeltez ideal. Es el valor que resulta de suponer que los átomos son perfectamente esféricos.
En este caso: a= 2R y c/2 es la altura de un tetraedro regular cuyas aristas valen 2R.
Entonces:
(c/a)ideal = 1,633

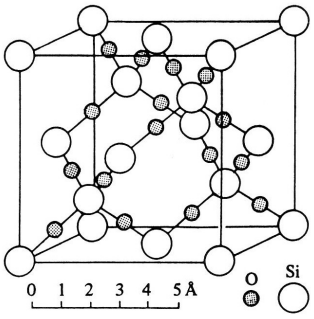
Factores de esbeltez reales

Cristal	c/a	Cristal	c/a	Cristal	c/a
He	1,633	Zn	1,861	Zr	1,594
Be	1,581	Cd	1,886	Gd	1,592
Mg	1,623	Co	1,622	Lu	1,586
Ti	1,586	Y	1,570		



De qué cristal se trata?

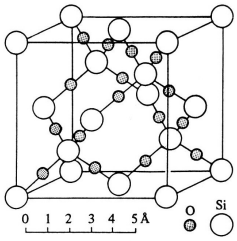
Determine:
- la Red
- el Motivo



¿De qué cristal se trata?

Determine (aprox.):
- la Red
- el Motivo

Celda cristalina del SiO_2 como cristobalita α.



- El Si tiene valencia 4 y puro forma diamante. El O tiene valencia 2.
- En la cristobalita α, cada Si está unidos a 4 átomos de O. Cada átomo de O está entre 2 áts. de Si.
- Así, a cada átomo de Si se asocian 4*(1/2) átomos de O, en conformidad con la fórmula estequeométrica SiO_2.
- Estas unidades SiO_2 se pueden ordenar formando distintas estructuras cristalinas, entre las que se cuenta la cristobalita.