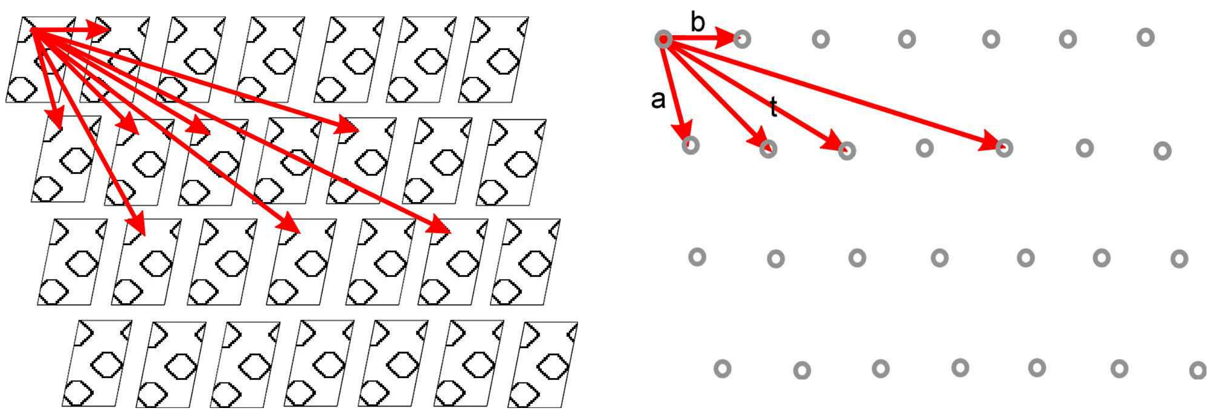
EL CRISTAL PERIODICIDAD

El cristal desde un punto de vista microscópico

Un medio cristalino está formado por un conjunto de átomos dispuestos en un orden bien definido generado por la repetición periódica tridimensional de un grupo de átomos, que constituyen el **motivo**.

En cada motivo se puede definir un punto cualquiera, que se relaciona con los puntos homólogos de los otros motivos con vectores translación, lo extremos de los cuales, que se denominan **nudos**, definen **la red cristalino**.

Esta asociación motivo-red es una característica fundamental del medio cristalino.



El cristal desde un punto de vista macroscópico

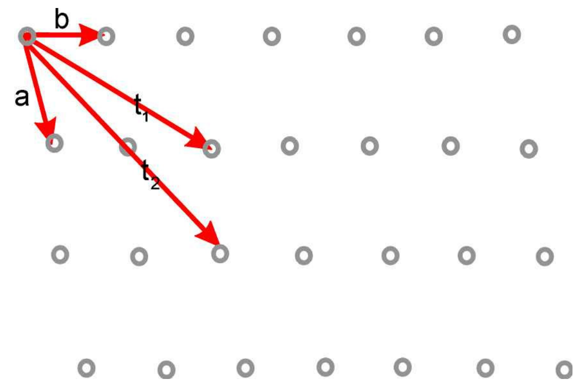
El modelo anterior implica "ver" los átomos que forman el cristal, no obstante, la interpretación del estudio del medio cristalino con técnicas que no permiten este nivel de definición (la luz visible, por ejemplo) se puede hacer en base a otro modelo que se podría llamar *macroscópic*o.

Desde este punto de vista, el cristal se puede considerar *una masa homogénea de propiedades vectoriales discontinuas*. Este aspecto lo diferencia de los vidrios, que no presentan propiedades vectoriales descontinuas.

PERIODICIDAD

La red, imaginada como una abstracción del medio cristalino, está formada por nudos, entre cada pareja de los cuales se puede dibujar un vector traslación.

En un red bidimensional es posible localizar dos vectores no colineales (tres no coplanarios si la red es tridimensional), de tal manera que todos los demás se pueden expresar como combinación lineal de estos, que se denominan **vectores fundamentales**.



En la figura se puede ver que

$$\vec{t}_1 = \vec{a} + 2\vec{b}\ ; \quad \vec{t}_2 = 3\vec{a} + 2\vec{b}$$

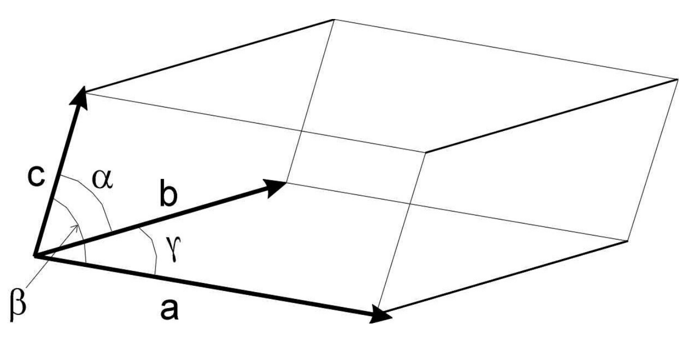
El postulado reticular establece que

"toda propiedad en un medio cristalino es invariante para una traslación definida por

$$\vec{t} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

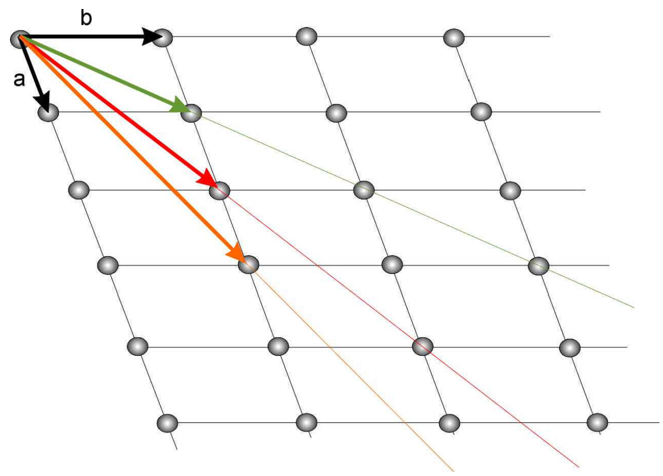
donde u, v y w son enteros, y a, b y c los vectores fundamentales de la red"

es decir, todos los nudos son idénticos y no hay ninguna diferencia entre ellos debida a su posición relativa en la red.



El tres vectores fundamentales definen un paralelepípedo que se conoce como **celda fundamental**, y su repetición en el espacio genera toda la red. Por tanto, el tamaño, forma y contenido de la celda fundamental permiten definir unívocamente el espacio cristalino.

Las características de la celda fundamental se expresan a partir de los vectores fundamentales que la definen y de los ángulos que forman entre ellos, con la convención que indica la figura (α es el ángulo entre *b* y *c* - el opuesto al vector *a*-; β es el ángulo entre *a* y *c* - opuesto a *b* -; y γ es el ángulo que forman *a* y *b* -opuesto a *c*).



También es posible definir **filas reticulares**, como sucesiones de nudos alineados, los cuales cumplen la condición

$$\vec{t} = n(u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c})$$

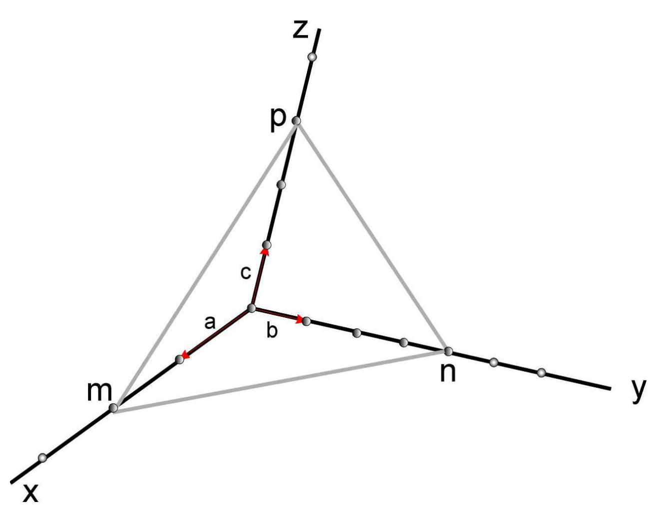
para *n*=1, T es el vector traslación que define la fila reticular, y sus coeficientes se utilizan como notación de la fila. Por convención se expresan entre corchetes y sin comas en medio:

$$[uvw]$$

Las filas definidas por los vectores fundamentales *a, b* y *c*, se llaman *filas fundamentales*, y constituyen el sistema de ejes de referencia que se emplea para describir y efectuar cálculos en la red cristalina. Hay que notar que se traca de un sistema de ejes no necesariamente ortogonal, en los que los vectores “unidad de medida” en cada dirección son *a*, *b* y *c* (que no tienen el valor 1).

Igualmente, se pueden definir **planos reticulares**, como aquellos formados por conjuntos de nudos coplanarios. Obviamente, tres nudos cualquiera no alineados definein un plano reticular. En aplicación del postulado reticular, una vez definido un plano, por cada nudo pasa otro plano paralelo al definido, de manera que se configuran *famílias de planos reticulares*. A la distancia que separa dos planos próximos de una misma família se la llama **espaciado reticular**, y se exprsesa como

$$d_{hkl}$$



La notación de los planos reticulares está formada (como en las filas) por una terna de números expressada entre paréntesis y sin comes en medio

$$(hkl)$$

Esta notación se puede deducir de la siguiente manera: supongamos un plano reticular como el de la figura, que corta a los ejes cristalinos a unas distancias m=2*a*, n=4*b*, y p=3*c*

(se utiliza la terna de números 2, 4 y 3 porque determinan el plano de la figura, pero no cualquier otro de la misma família de planos)

La equación canónica de un plano cualquiera, en función de los ejes cristalográficos definidos por *a, b* y *c* (x, y, z) es

$$\frac{x_0}{ma} + \frac{y_0}{nb} + \frac{z_0}{pc} = 1\ ,$$

la del plano de la figura es:

$$\frac{x_0}{2a} + \frac{y_0}{4b} + \frac{z_0}{3c} = 1$$

entre el plano dibujado y el origen habrá un número N de planos igual al mínimo múltiplo común de m, n y p, por tanto, la ecuación del plano de esta familia más cercana al origen será

$$\frac{Nx}{ma} + \frac{Ny}{nb} + \frac{Nz}{pc} = 1$$

haciendo

$$\frac{N}{m} = h\ ; \quad \frac{N}{n} = k\ ; \frac{N}{p} = l\ ,$$

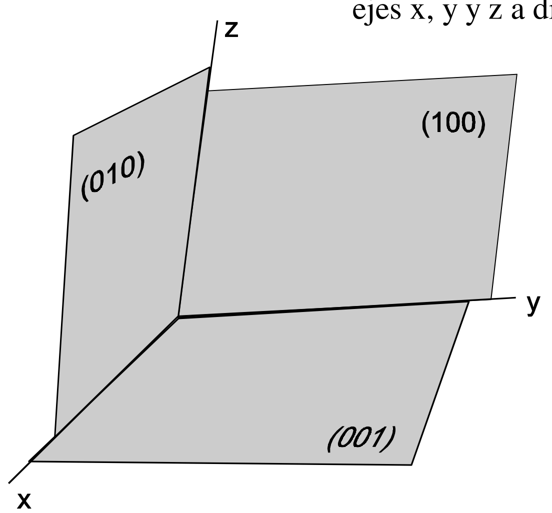
la ecuación del plano se puede reescribir de la siguiente manera

$$h \cdot \frac{x}{a} + k \cdot \frac{y}{b} + l \cdot \frac{z}{c} = 1$$

donde h, k y l son tres números enteros y primos entre si, e inversamente proporcionales a m, n y p (las distancias de intersección del plano con los ejes cristalográficos), respectivamente. Esta terna de números es la que se utiliza como notación de los planos reticulares, y se escribe

(hkl) **Sin comas en medio!**

Por tanto, el plano de la familia (hkl) más cercano al origen corta a los



ejes x, y y z a distancias a/h; b/k; c/l , respectivamente.

Consecuentemente, un índice cero significa que el plano es paralelo (no intersecta) al eje correspondiente.