

La Cristalografía en el Bachillerato: Iniciación al estudio de esta Ciencia

M. D. RUIZ CRUZ*
y G. BARCELÓ SIERRA**

Resumen

En el programa de Ciencias Naturales de 1.º de BUP uno de los capítulos se titula «La materia mineral: Estructura y propiedades». Es evidente que en el título de este capítulo se incluyen dos de las líneas más interesantes de investigación en la Cristalografía reciente: La estructura de los minerales y el análisis de sus propiedades.

Aunque el estudio de las propiedades físicas de los minerales es fácilmente asimilable por los alumnos, dado que en este nivel carecen de los conocimientos necesarios de química, no puede llevarse a cabo el estudio de las estructuras cristalinas. La mayoría de los libros de texto, por ello, limitan el estudio de la Cristalografía al análisis de la simetría externa de los cristales (identificación de elementos de simetría, clases y sistemas cristalinos, etc.).

No obstante, y dado que la Cristalografía morfológica ha perdido gran parte del interés que tuvo al comienzo del desarrollo de esta Ciencia, pensamos que es mucho más interesante, siguiendo el enunciado del capítulo, *iniciar* en este curso el estudio de las estructuras cristalinas, dejando a un lado la simetría externa que, en niveles más avanzados puede deducirse como una consecuencia de la ordenación interna.

En este trabajo exponemos lo que, a nuestro juicio, podría constituir una iniciación a la Cristalografía en 1.º de BUP, que limitamos a la «Teoría reticular». El desarrollo de la lección constaría de los siguientes puntos:

- Concepto de red (parámetros, celda elemental, etc.).
- Deducción de las redes planas.
- Propiedades de las redes (estudio de la simetría de las redes planas).
- Deducción de redes espaciales.

* Catedrático de Ciencias Naturales I.N.B. «Emilio Prados». Málaga.

** Profesor adjunto. Facultad de Ciencias. Málaga.

En 3.º de BUP puede abordarse el estudio de la Cristalografía estructural (especialmente estructuras de coordinación y estructura de silicatos) y en Geología de COU podría pasarse, con la base suficiente, al estudio de las imperfecciones cristalinas y de los fenómenos con éstas relacionados: Isomorfismo y Polimorfismo.

Introducción

Hasta hace algunos años, la Cristalografía se definía como una rama de la Ciencia dedicada a estudiar los *crisales* (cuerpos sólidos limitados por superficies planas). Hoy día el concepto de «cristal» ha evolucionado y es conocido de todos que el hecho de que el cristal presente caras planas es puramente accidental, y que lo realmente importante es la ordenación interna de átomos, iones o moléculas que lo constituyen. La materia que presenta como característica fundamental esta ordenación interna se denomina «materia cristalina» y constituye el objeto de estudio de la Cristalografía.

Es evidente que el estudio de la morfología cristalina ha perdido gran parte de la importancia que tuvo al comienzo del desarrollo de la Cristalografía, por lo cual consideramos secundario el estudio de la simetría externa de los cristales y pensamos que el objetivo fundamental a alcanzar en 1.º de BUP es que el alumno aprenda a deducir los diferentes tipos de ordenaciones que puede presentar la materia cristalina. Es decir, en este primer curso, limitamos el estudio de la Cristalografía a la «teoría reticular».

En 3.º de BUP, como introducción al capítulo de «Génesis y evolución mineral», o si ello fuese posible, como lección independiente, teniendo en cuenta que el alumno cuenta con la base necesaria de química, puede abordarse con facilidad la «Cristalografía estructural». Considerando los tipos de enlace más importantes en el mundo mineral, pueden deducirse algunos de los tipos estructurales más frecuentes (por ejemplo, estructuras de coordinación) y analizar con cierto detalle la estructura de los silicatos, básica para poder comprender las transformaciones mineralógicas que tienen lugar durante el ciclo geológico (cristalización magmática, meteorización, metamorfismo, etc.).

Siguiendo este esquema, en Geología de COU el alumno contará con la base suficiente para iniciar el estudio de otro de los aspectos de la Cristalografía: «El cristal real», el análisis de algunas de las imperfecciones cristalinas y su influencia en una serie de fenómenos: La formación y crecimiento de los cristales (en este momento puede introducirse la morfología cristalina), el isomorfismo, polimorfismo, etc.

A continuación desarrollamos lo que, a nuestro juicio, podría constituir una iniciación a la Cristalografía en 1.º de BUP, que limitaremos a la «teoría reticular». La lección está basada en el trabajo individual del alumno, reduciéndose al máximo las explicaciones. Las láminas incluidas en el texto, por tanto, sólo constituyen una indicación de las que en el cuaderno de prácticas podrán ir realizando los alumnos.

Teoría reticular

La materia cristalina se extiende, evidentemente, en las tres direcciones del espacio, pero, para comenzar nuestro estudio, nos limitaremos a la ordenación que puede presentarse en un plano (lo que se conoce como redes planas), para pasar después a la ordenación tridimensional (o redes espaciales).

Puede parecer, en principio, que existen muchas posibilidades de ordenar los átomos, iones o moléculas¹, pero estas posibilidades son, en realidad, muy pocas. Veamos algunos ejemplos:

El oro nativo es un metal conocido de todos y que, químicamente está formado por la unión de una serie de átomos, todos iguales, que se representan por Au. Estos átomos, en primera aproximación, serían esferas muy pequeñas, en contacto entre sí, que podemos representar en un plano mediante circunferencias. El radio de un átomo de oro es de 1,37 Å. Tomemos como radio en nuestra representación una cantidad proporcional a ésta, por ejemplo, 1,37 cm. (o la mitad, si así resulta demasiado grande). Trazando una circunferencia con este radio habremos representado un átomo de Au, evidentemente muy aumentado (átomo 1). Dibujemos otra circunferencia del mismo radio, tangente con la anterior (átomo 2) y una tercera tangente a las dos anteriores (átomo 3). Si seguimos dibujando átomos alrededor del que hemos llamado 1, podremos llegar hasta seis. El átomo 1 está rodeado en un plano por otros seis idénticos. Si, siguiendo este camino continuamos dibujando átomos de Au, obtendremos un esquema como el de la figura 1.1.

La distribución de los átomos de oro es muy fácil de deducir en un plano, ya que todos los átomos son iguales. Tomemos ahora, por ejemplo, el centro de cada átomo y representémoslo por un punto. Obtendremos un esquema como el de la figura 1.2. Esto es una *red*. Para obtenerla, únicamente hemos eliminado los átomos y hemos representado su ordenación.

Cada punto de la red se denomina *nudo*.

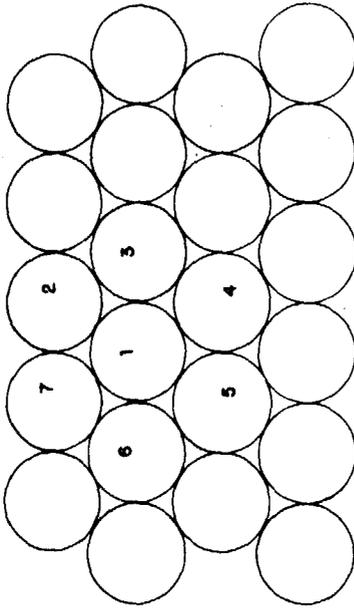
Una serie de nudos alineados constituyen una *fila reticular* o *red monodimensional*. Observemos que en cada fila reticular que consideremos, la distancia entre dos nudos se mantiene constante, e igualmente en filas reticulares paralelas. A esta distancia se le denomina *parámetro* o *traslación* de la fila y sirve para definirla.

Dos filas reticulares nos definen un plano, tal como el de la figura 1.2, que se denomina *plano reticular* o *red bidimensional* (o plana). En una red plana hay infinitas filas reticulares con traslaciones diferentes. De ellas consideraremos aquellas dos con traslaciones más pequeñas (a y b) para definirla. Estas dos traslaciones y el ángulo que forman entre sí estas filas reticulares nos definen un paralelogramo que se denomina *celda elemental* de la red plana. En el caso de la figura 1.2, el paralelogramo es un rombo.

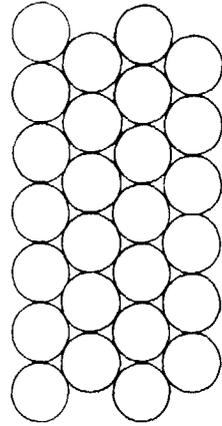
Consideremos ahora otro metal que llamaremos Me. Este metal está constituido al igual que el oro por átomos esféricos, iguales entre sí, pero en este caso, el radio atómico vale 0,8 Å. Si representamos, igual que en caso del oro, una serie de átomos de metal, tangentes entre sí, obtendremos el es-

¹ Una breve introducción sobre el concepto de átomo, ión y molécula resulta imprescindible.

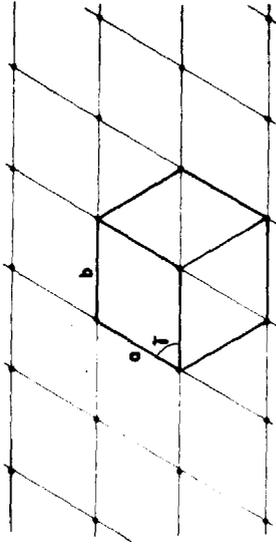
LÁMINA γ



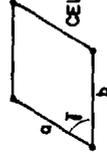
DISPOSICIÓN DE LOS ÁTOMOS DE ORO
 $r = 1,37 \text{ \AA}$



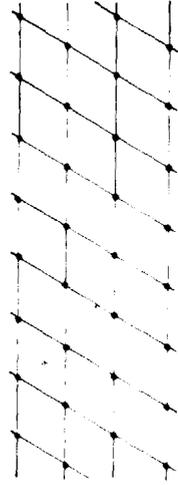
DISPOSICIÓN DE LOS ÁTOMOS DE UN METAL M_e
 $r = 0,8 \text{ \AA}$



RED DEL ORO



CELDA PLANA ELEMENTAL DEL ORO
 $a = b \quad \gamma = 60^\circ$



RED DEL METAL M_e



CELDA PLANA ELEMENTAL DEL METAL M_e
 $a = b \quad \gamma = 60^\circ$

Fig. 1.1

Fig. 1.3

quema de la figura 1.3. Dibujar la red que representa esta ordenación atómica es muy fácil, así como deducir la forma y dimensiones de la celda elemental. Se trata también (figura 1.4) de una celda rómbica con $\gamma = 60^\circ$, que únicamente se diferencia de la del oro por el valor de la traslación.

Una serie de elementos nativos (prácticamente todos los metales) muestran ordenaciones similares en un plano. La red plana que los representa es la misma para todos ellos.

Veamos ahora cómo se distribuyen los iones en el compuesto ClNa (cloruro sódico o sal común). En este caso existen dos elementos químicos diferentes, con diferentes radios, el del Cl^- vale $1,81 \text{ \AA}$ y el del Na^+ , $0,97 \text{ \AA}$. Dibujemos un ión Na^+ y, alrededor de él y, tangentes con el mismo, iones Cl^- . En este caso sólo caben cuatro iones Cl^- alrededor de un Na^+ (figura 2.1). La ordenación de los iones es, en este caso, diferente a las anteriores: el esquema de la figura 2.2 la representa. Para obtenerla tomamos, como antes, puntos equivalentes, el centro de los iones Cl^- o el de los iones Na^+ , por ejemplo. En ambos casos la red obtenida es idéntica, pero diferente a la de los metales. Ahora es una red cuadrada.

Tipos de redes planas

Hemos deducido dos tipos de redes planas, la *red cuadrada*, definida por $a = b$ y $\gamma = 90^\circ$ y la *red rómbica*, definida por $a = b$ y $\gamma \neq 90^\circ$. En el caso de los metales, además, por ser $\gamma = 60^\circ$ esta red forma hexágonos regulares y se denomina *red hexagonal*. Si comparamos la celda rómbica o cuadrada (lámina III) con la celda hexagonal, veremos que las primeras sólo tienen nudos en los vértices, en tanto que la celda hexagonal posee también un nudo en el interior. Las primeras se denominan «primitivas» y «múltiple» la segunda.

Si $a = b$ no existen más posibilidades: las redes planas serán cuadradas, rómbicas o hexagonales.

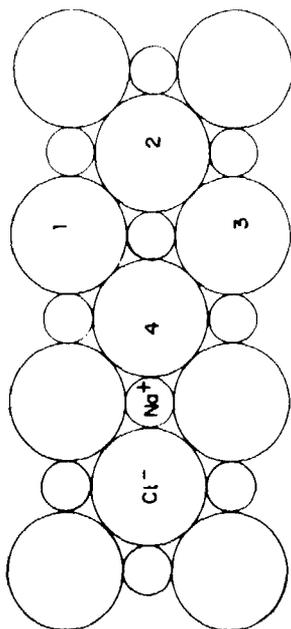
Si $a \neq b$ surgen dos nuevas redes: *Red rectangular*, definida por $a \neq b$ y $\gamma = 90^\circ$ (la celda elemental es un rectángulo) y *red romboidal*, definida por $a \neq b$ y $\gamma \neq 90^\circ$ (su celda elemental es un romboide).

Propiedades de las redes

Para deducirlas partiremos de la red plana más general, la red romboidal (lámina IV).

- Todos los nudos de una red son idénticos: Esta propiedad se denomina **homogeneidad** (figura 4.1).
- Si a partir de un nudo cualquiera consideramos las diversas filas reticulares que lo contienen (a, b, m, n, \dots , en figura 4.2), veremos que el valor de las traslaciones es diferente en cada caso, es decir, depende de la dirección. El hecho de que cualquier propiedad en una red dependa de la dirección se denomina **anisotropía**².

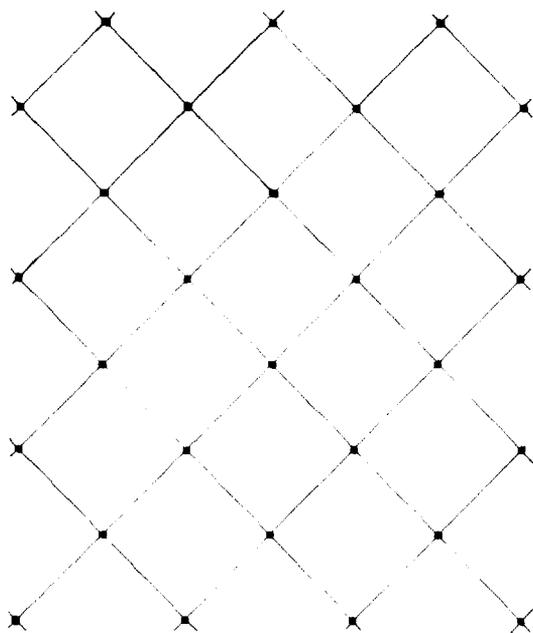
² Esta propiedad reticular se pone de manifiesto en las propiedades físicas de los minerales. Por ejemplo, los valores de la dureza dependen de la dirección.



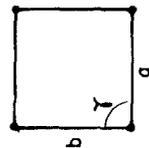
DISPOSICIÓN DE LOS IONES Cl^- Y Na^+ en el ClNa .

$r \text{Cl}^- = 1,81 \text{ \AA}$

$r \text{Na}^+ = 0,97 \text{ \AA}$



RED DEL ClNa



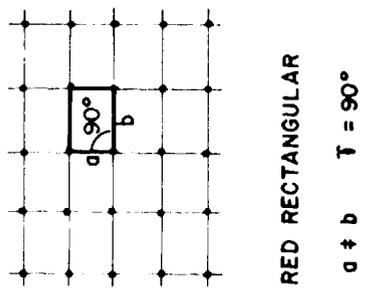
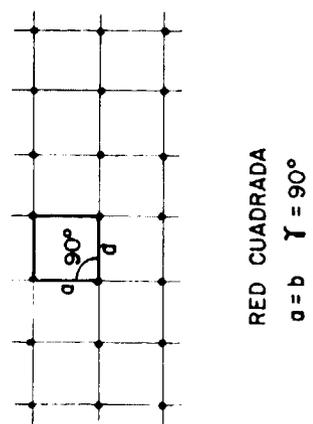
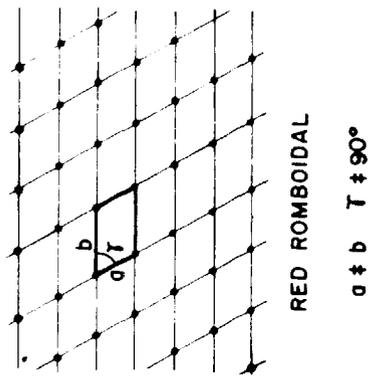
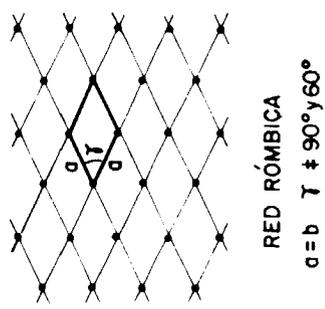
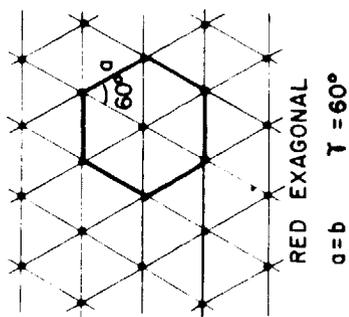
CELDA ELEMENTAL

$a = b$ $\gamma = 90^\circ$

Fig. 2.2

Fig. 2.1

LÁMINA III



- Mediante ciertas operaciones podemos hacer coincidir unos nudos con otros. Esta propiedad se denomina **simetría**. Veamos cuáles son estas operaciones:

Si en la figura 4.3 tomamos cualquier nudo como origen, 0, observaremos, siguiendo cualquier fila reticular que pase por él, que a un lado y a otro de 0 hay nudos a la misma distancia. Por ejemplo, los nudos 1 y 1' están a la misma distancia, c de 0, pero son diametralmente opuestos. Igual ocurre con 2 y 2', 3 y 3', etc. Este nudo, 0, es un **centro de simetría**. Por el principio de la homogeneidad, todos los nudos de la red serán centros de simetría.

En la figura 4.4 se representa una red cuadrada. Si tomamos cualquier nudo como origen, 0, de una circunferencia de radio = a (distancia de 0 a 1, o traslación de la red), veremos que el nudo 1, tras un giro de 90° alrededor del eje del compás, va a coincidir con el nudo 2. Tras otro giro de 90° el nudo 2 coincidirá con el 3 y éste con el 4. Es decir, tomando como eje de giro una línea perpendicular al papel en 0 y girando siempre en el mismo sentido, el nudo 1 origina otros tres equivalentes. Este elemento se llama **eje de giro** y en este caso, por hacer coincidir cuatro nudos de la red, se denomina eje cuaternario o 4. El principio de la homogeneidad hace que en cada nudo de la red cuadrada deban existir ejes 4 perpendiculares al papel.

Es fácil, de este modo, con la ayuda de un compás, deducir los ejes de simetría que presentan los diferentes tipos de redes planas. En la figura 5.1 hemos recogido su denominación, símbolo y ángulo de giro necesario para llevar a coincidencia dos nudos. En la figura 5.2 se han representado los ejes perpendiculares al papel en los diferentes tipos de redes planas³.

En los objetos naturales son raros los ejes de simetría, pero, pensemos, por ejemplo, en una estrella de mar. Tiene un eje de simetría, ¿de qué orden?

Observemos, por último, la figura 4.5. Representa una red rectangular. Perpendicularmente al papel, en cada nudo, existe un eje 2. Olvidemos que los ejes existen, por el momento, y supongamos que, perpendicularmente al papel y según la fila reticular a existiera un espejo. Sólo veríamos en realidad la parte del papel situada del espejo hacia la izquierda, pero cada nudo de esta zona lo veríamos reflejado, a la misma distancia, hacia el otro lado del espejo. Es decir, el nudo 2 aparecería reflejado hacia la derecha, a una distancia = b , exactamente sobre el nudo 2'. De igual forma, el nudo 1 lo veríamos reflejado a una distancia = $2b$, sobre el nudo real 1'.

Este nuevo elemento de simetría que actúa reflejando los nudos como un espejo se denomina **plano de reflexión** y se representa por m . Al ser la red homogénea, por cada fila reticular de traslación = a y perpendicularmente al papel, pasarán planos idénticos.

En la figura 5.2 se representan los planos que existen en los diferentes tipos de redes planas.

Entre los objetos naturales son muy frecuentes los planos de simetría. Pensemos en algunos ejemplos.

³ Existe otra serie de ejes contenidos en el plano del papel, que no han sido representados.

LÁMINA IV

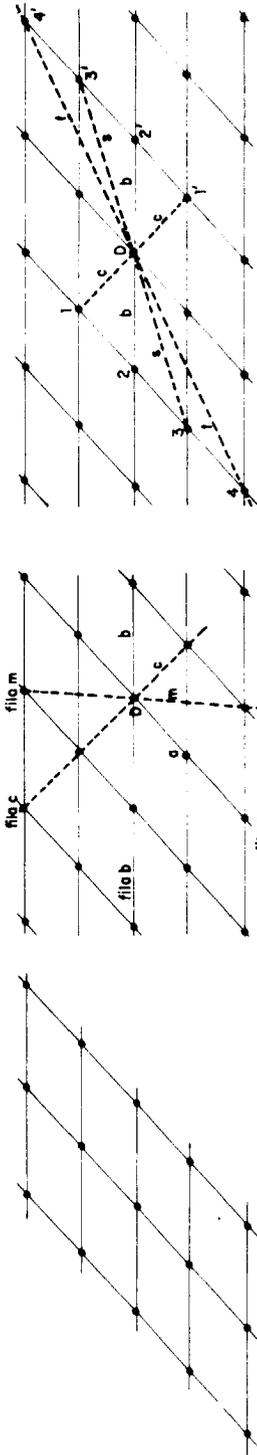


Fig. 4.1

Fig. 4.2

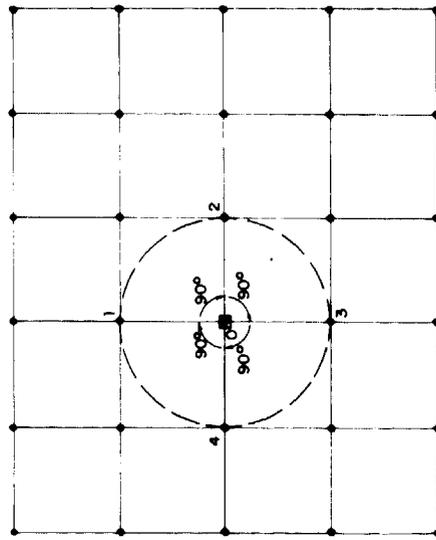


Fig. 4.4

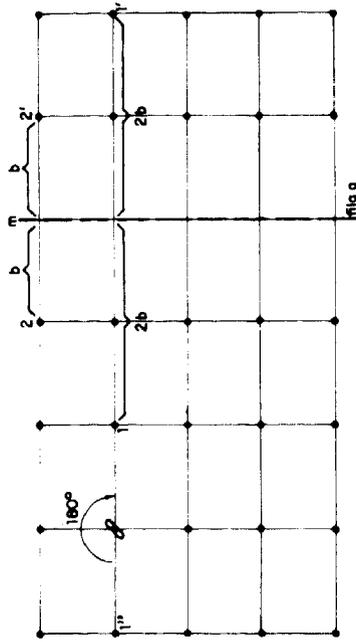


Fig. 4.3

LÁMINA V

- | | | | |
|-----------------|-----|-------------|------------------------|
| EJE BINARIO | ○-2 | GIRO - 180° | NUDOS EQUIVALENTES = 2 |
| EJE TERNARIO | △-3 | GIRO - 120° | NUDOS EQUIVALENTES = 3 |
| EJE CUATERNARIO | □-4 | GIRO - 90° | NUDOS EQUIVALENTES = 4 |
| EJE SENARIO | ○-6 | GIRO - 60° | NUDOS EQUIVALENTES = 6 |

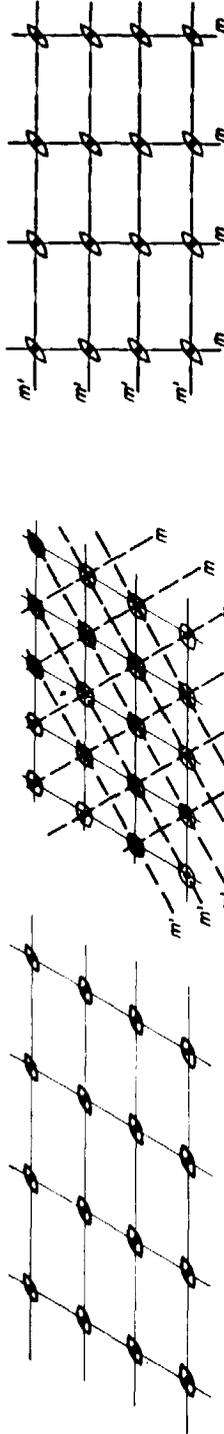


Fig. 5.1

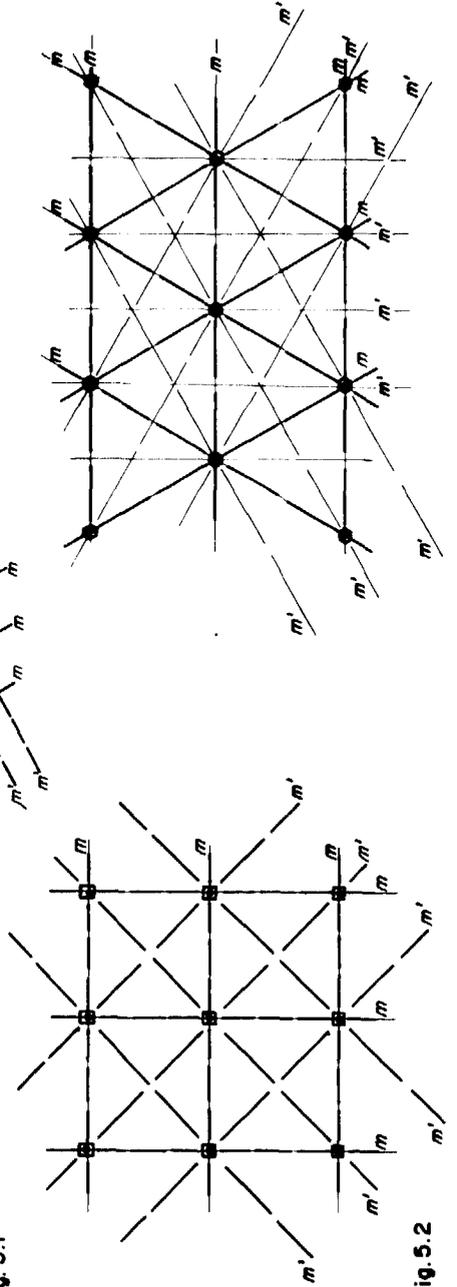


Fig. 5.2

Las redes espaciales

Una vez deducidos los diferentes tipos de redes planas hemos de pasar al espacio y tratar de deducir las redes tridimensionales.

Para definir una red espacial necesitamos seis parámetros: tres traslaciones y tres ángulos (figura 6.1). Éstos se denominan a , b , c , α , β , γ .

Una red espacial podemos definirla también mediante las tres redes planas que constituyen su celda elemental. Estas tres redes planas vendrían dadas por a , b y γ , a , c y β y b , c y α .

En el caso más general (figura 6.1), las tres redes planas son romboidales, pues $a \neq b \neq c$ y $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ y la red espacial, por tener los tres ángulos diferentes de 90° , se denomina red **triclínica**.

Si $a \neq b \neq c$ y $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$, es decir, sólo uno de los tres ángulos es diferente de 90° , la red se denomina **monoclínica** (figura 6.2) y viene definida por dos redes planas rectangulares y una romboidal.

Si la red plana rectangular a , b ó b , c tienen un nudo en el centro, la red se denomina **monoclínica** de bases centradas (C).

Si $a \neq b \neq c$ y $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, la red espacial se denomina red **rómbica** primitiva (P) y las redes planas que la constituyen son rectangulares (figura 7.1).

Si una de estas tres redes planas es centrada, la red espacial correspondiente se denomina **rómbica** de bases centradas (C).

Si se centran simultáneamente todas las redes planas, la red se denomina **rómbica** de caras centradas.

Si la red espacial tiene un nudo en el interior, la red se denomina **rómbica** centrada en el interior (I).

Si $a = b \neq c$ y $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, la red es muy parecida a la rómbica, pero con $a = b$; es decir, la red que constituye la base de la celda es cuadrada. La red espacial se denomina **tetragonal** primitiva (P) (figura 7.2).

Esta red, con un nudo adicional en el interior, se denomina **tetragonal** centrada en el interior (I).

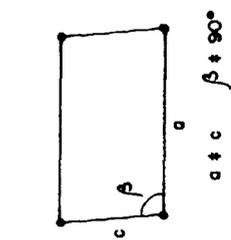
Si $a = b \neq c$ y $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$, las tres redes planas son rómbicas y la celda elemental que la define es un romboedro. La red se denomina **romboédrica** (figura 8.1).

Si $a = b \neq c$ y $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 60^\circ$, la red plana definida por a , b y γ es hexagonal. La red espacial también se denomina **hexagonal** y no es primitiva, ya que tiene nudos en el centro de las bases (figura 8.2).

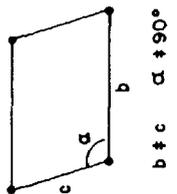
Por último, si $a = b = c$ y $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, la red espacial se denomina **cúbica** primitiva (P) y las tres redes planas que la definen son cuadradas (figura 8.3).

Dos nuevas posibilidades surgen con una celda cúbica: Si existen nudos en el centro de todas las caras, la red se denomina **cúbica** de caras centradas (F).

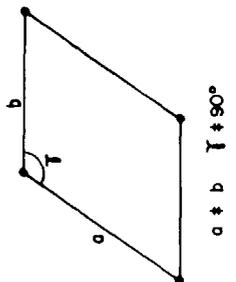
LÁMINA VI



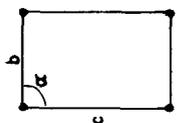
RED MONOCLÍNICA DE BASES CENTRADAS (C)



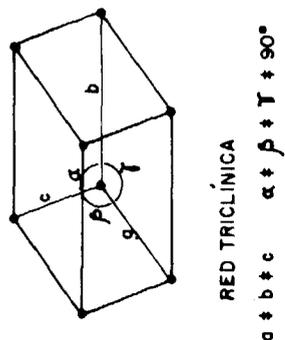
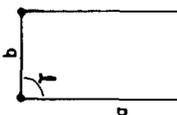
REDES PLANAS ROMBOIDALES



RED PLANA ROMBOIDAL



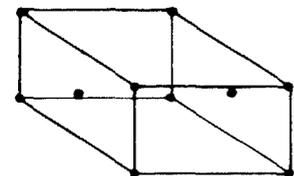
REDES PLANAS RECTANGULARES



RED TRICLÍNICA

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

Fig. 6.1



RED MONOCLÍNICA (P)

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

Fig. 6.2

LÁMINA VII

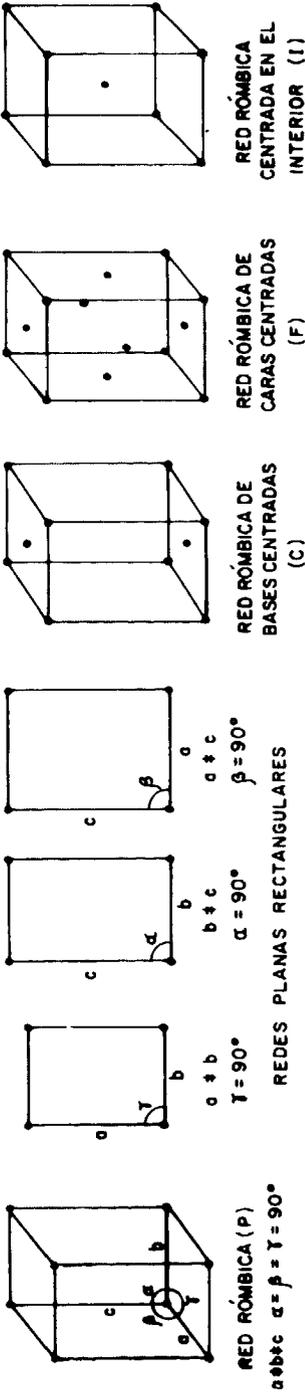


Fig. 7.1

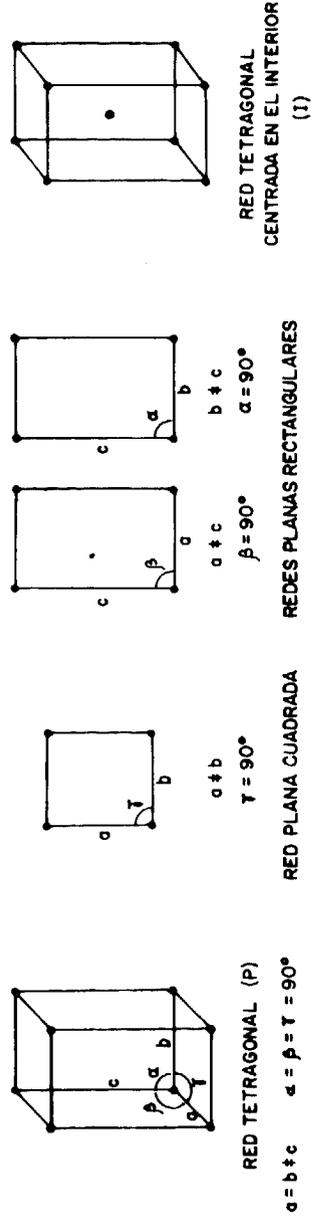


Fig. 7.2

LÁMINA VIII

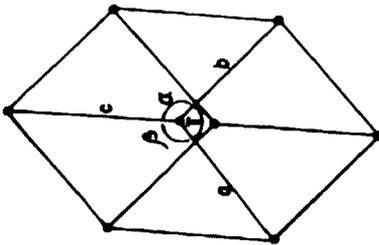
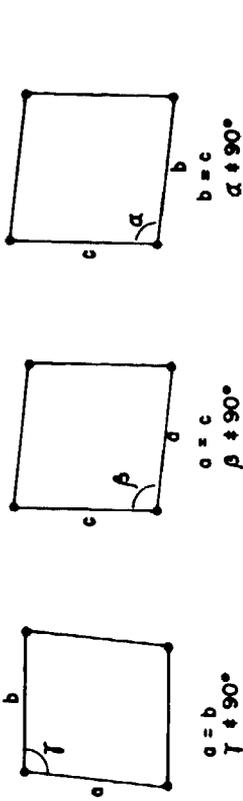


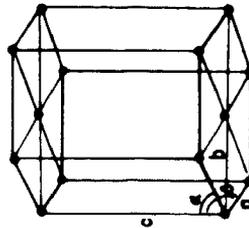
Fig. 8.1

RED ROMBOÉDRICA (R)

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

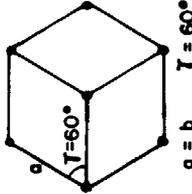


REDES PLANAS RÓMBICAS



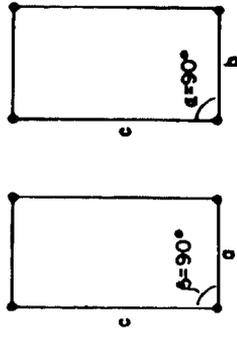
RED EXAGONAL

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



RED PLANA EXAGONAL

$a = b = c$ $\gamma = 120^\circ$



REDES PLANAS RECTANGULARES

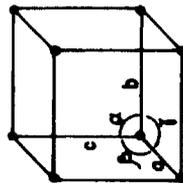
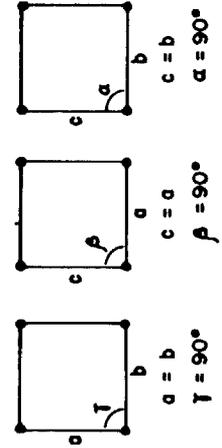


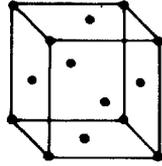
Fig. 8.3

RED CÚBICA (P)

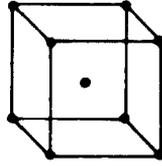
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



REDES PLANAS CUADRADAS



RED CÚBICA DE CARAS CENTRADAS (F)



RED CÚBICA CENTRADA EN EL INTERIOR (I)

Si sólo existe un nudo, en el interior, la red se denomina **cúbica** centrada en el interior (I).

Las redes espaciales poseen evidentemente las mismas propiedades que las redes planas. La deducción de los elementos de simetría existentes en las redes espaciales es más difícil que en el caso de las redes planas, pues hay que trabajar con modelos tridimensionales. Podemos, no obstante, enunciar una serie de principios generales:

- Cada nudo de la red es un centro de simetría.
- Los ejes de simetría coincidirán con filas reticulares.
- Los planos de simetría serán planos reticulares.

Bibliografía

AMORÓS, J. L.: *El Cristal*, Ed. Ucrania, Barcelona, 1975.

BLOSS, F. D.: *Crystallography and Crystalchemistry*, Ed. Holt Rinehart and Winston, Nueva York, 1974.

GAY, P.: *Introducción al estado cristalino*, Ed. Universitaria de Barcelona, Barcelona, 1977.



Química

