

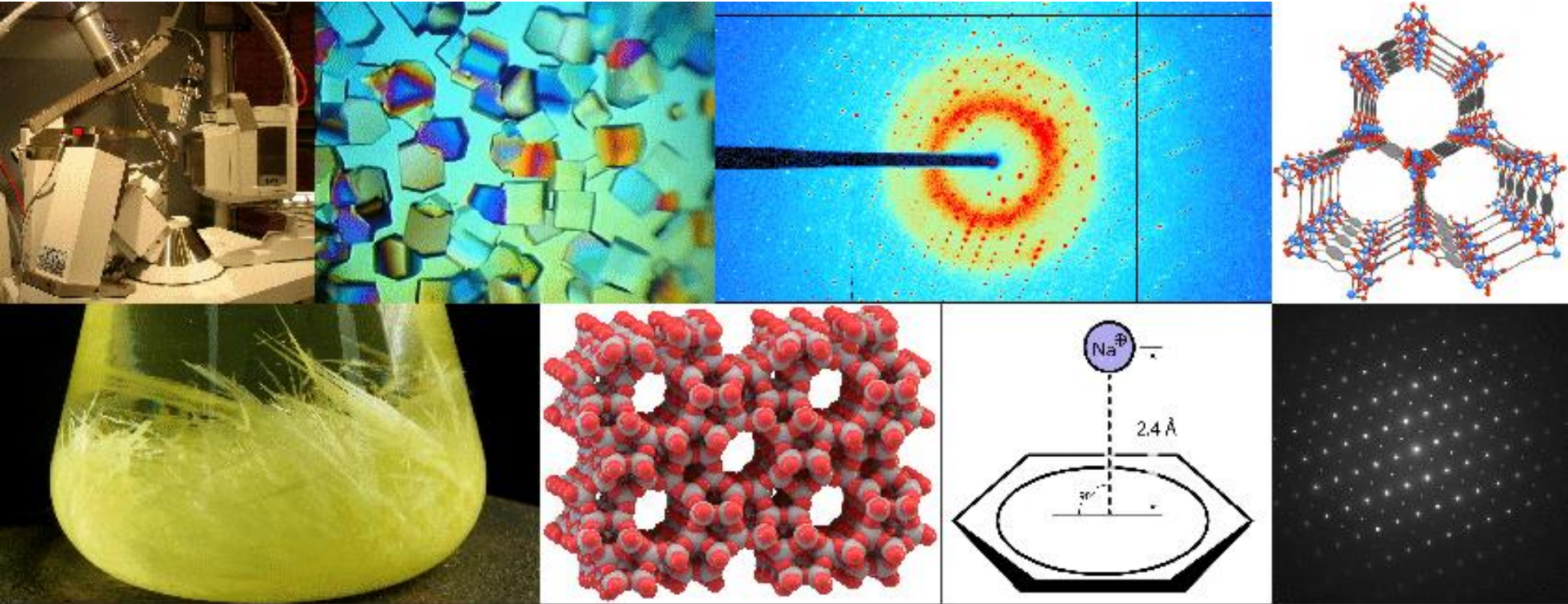
Materia Optativa de Grado y Postgrado | 2<sup>do</sup> CUATRIMESTRE 2023

# CRISTALOGRAFÍA

## Fundamentos y Aplicaciones

Florencia Di Salvo | Sebastián Suárez

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN, UBA



Materia Optativa de Grado y Postgrado | 2<sup>do</sup> CUATRIMESTRE 2023

# CELDA, DIRECCIONES Y PLANOS CRISTALOGRAFICOS

Florencia Di Salvo | Sebastián Suárez

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, FCEN, UBA

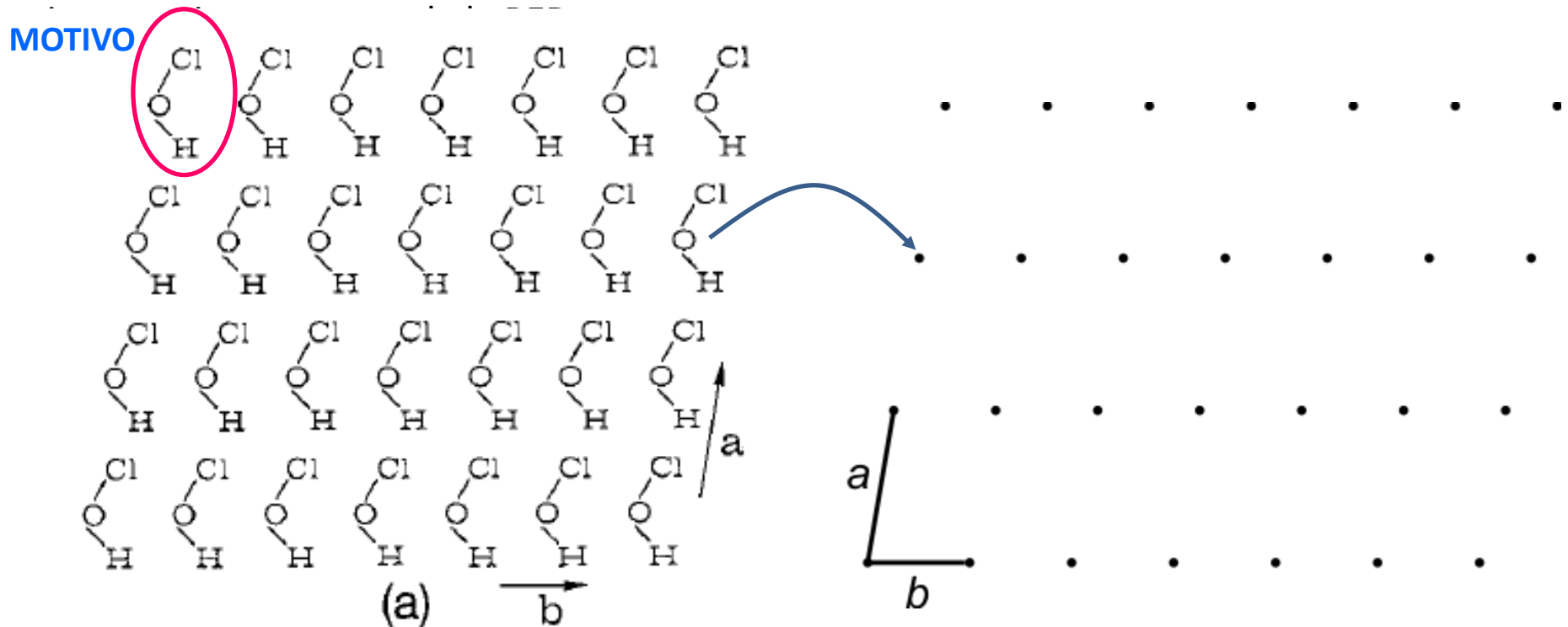
## ■ REDES

DEFINICIÓN de RED: corresponde a un arreglo infinito de puntos ubicados de forma tal que el ENTORNO DE CADA PUNTO es idéntico al ENTORNO DE CADA UNO DE LOS OTROS PUNTOS DE LA RED



## ■ REDES

Podemos llegar a la **DEFINICIÓN de RED** cpartiendo de un PATRÓN, dado por la repetición de un MOTIVO, el cual puede ser un átomo, ión, molécula. El MOTIVO corresponde a la “UNIDAD” del PATRÓN. Se puede situar a ese MOTIVO en los puntos de intersección de esta “GRILLA IMAGINARIA” que describe la RED la grilla la llamamos RED y a las



La repetición de ese MOTIVO da lugar a un PATRÓN

Ejemplo. Red 2D de HOCl (ácido hipocloroso): la red 2D se construye a partir de desplazar el motivo (HOCl) en intervalos  $a$  y  $b$

**RED:** es “la grilla” sobre la cual esta determinado el patrón dado por el MOTIVO. y es obtenida considerando el centro de gravedad de la molécula de HOCl

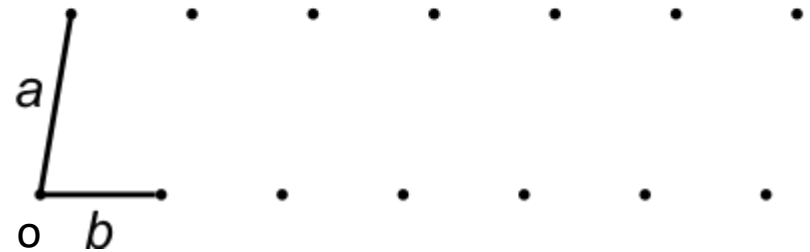
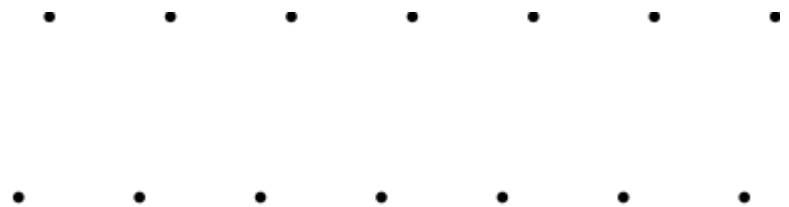
# ■ REDES

Se puede definir cualquier punto de la red mediante el vector:

$$\mathbf{Q}_{u,v} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b}$$

$\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  son vectores y  $u$  y  $v \in \mathbb{Z}^+ \cup \mathbb{Z}^-$

RED 2D



## ■ CELDAS

RED 2D



Elección arbitraria de la celda unidad

## ■ CELDAS

Se puede definir cualquier punto de la red mediante el vector:

$$\mathbf{Q}_{u,v} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b}$$

ECUACIÓN 1

$\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  son vectores y  $u$  y  $v \in \mathbf{Z}^+ \mathbf{Z}^-$

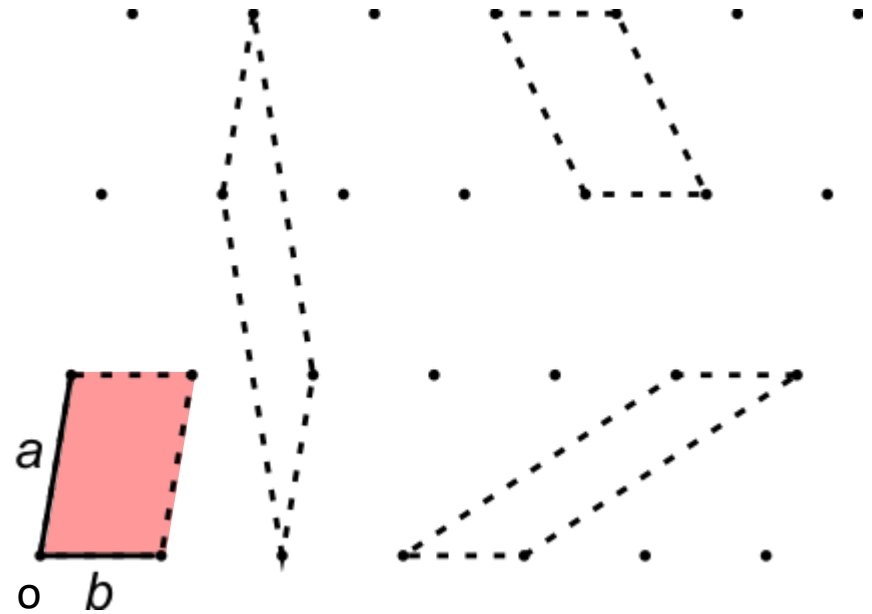
El paralelogramo que se define por  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  (vectores básicos de la red) = **celda unidad**

RED 2D



# ■ CELDAS

RED 2D



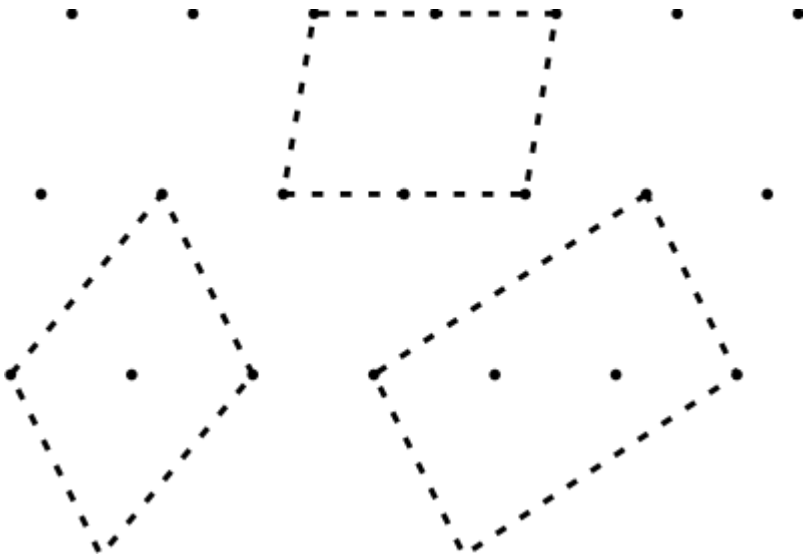
Elección arbitraria de la celda unidad

$$\mathbf{Q}_{u,v} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b}$$

(con diferentes  $u$  y  $v$ )

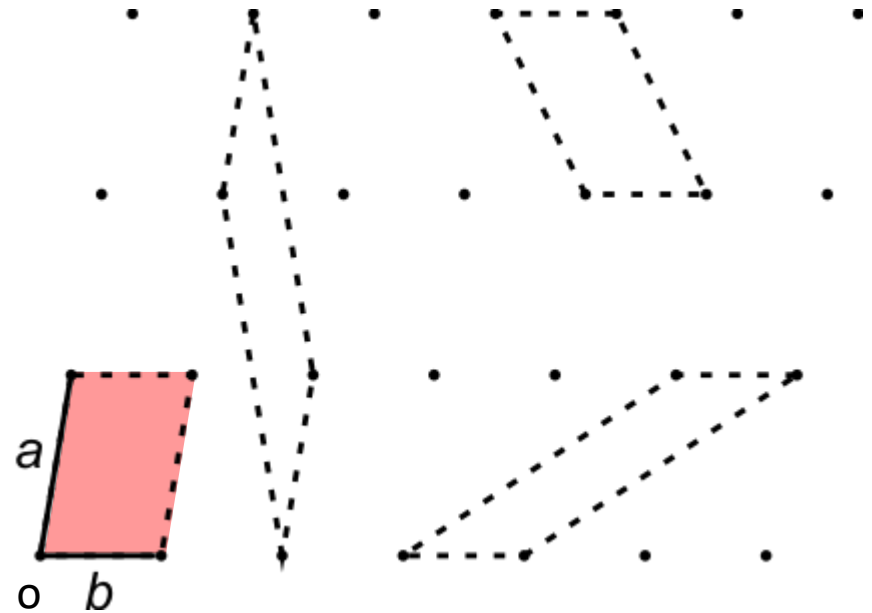


## ■ CELDAS



Para estas celdas sigue valiendo la ec. 1  
pero  $u$  y  $v$  ya no necesariamente son enteros

### RED 2D



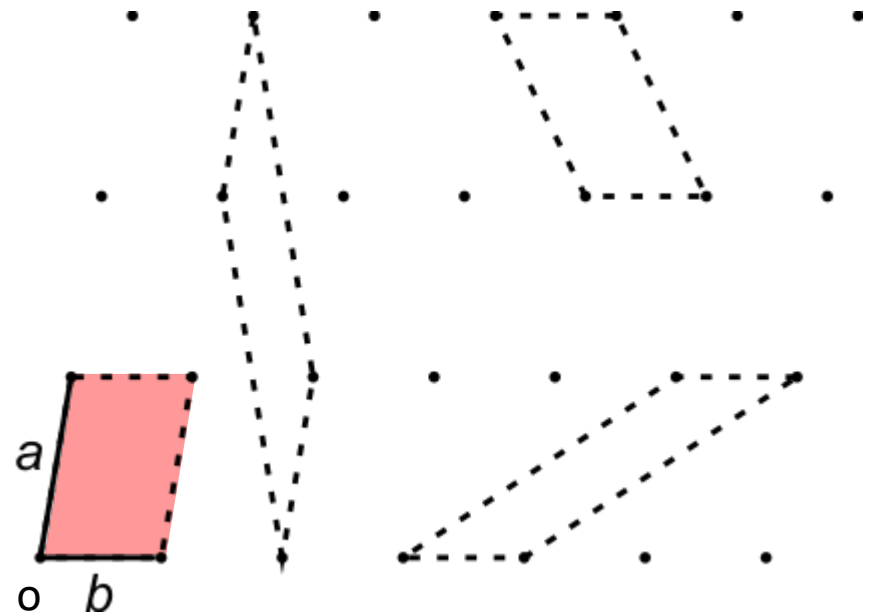
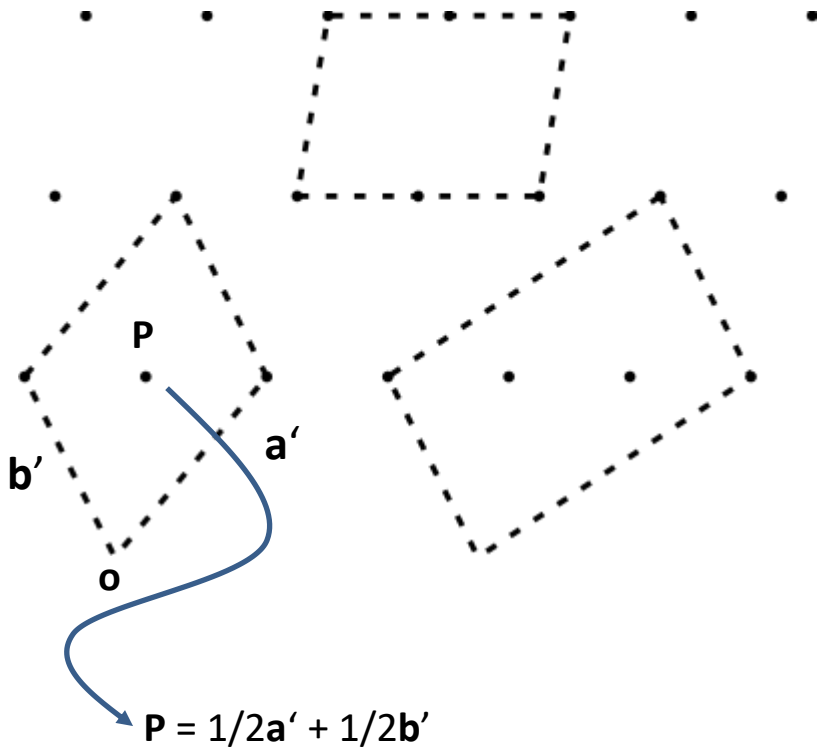
**Elección arbitraria de la celda unidad**

$$\mathbf{Q}_{u,v} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b}$$

(con diferentes  $u$  y  $v$ )

# ■ CELDAS

## RED 2D



Elección arbitraria de la celda unidad

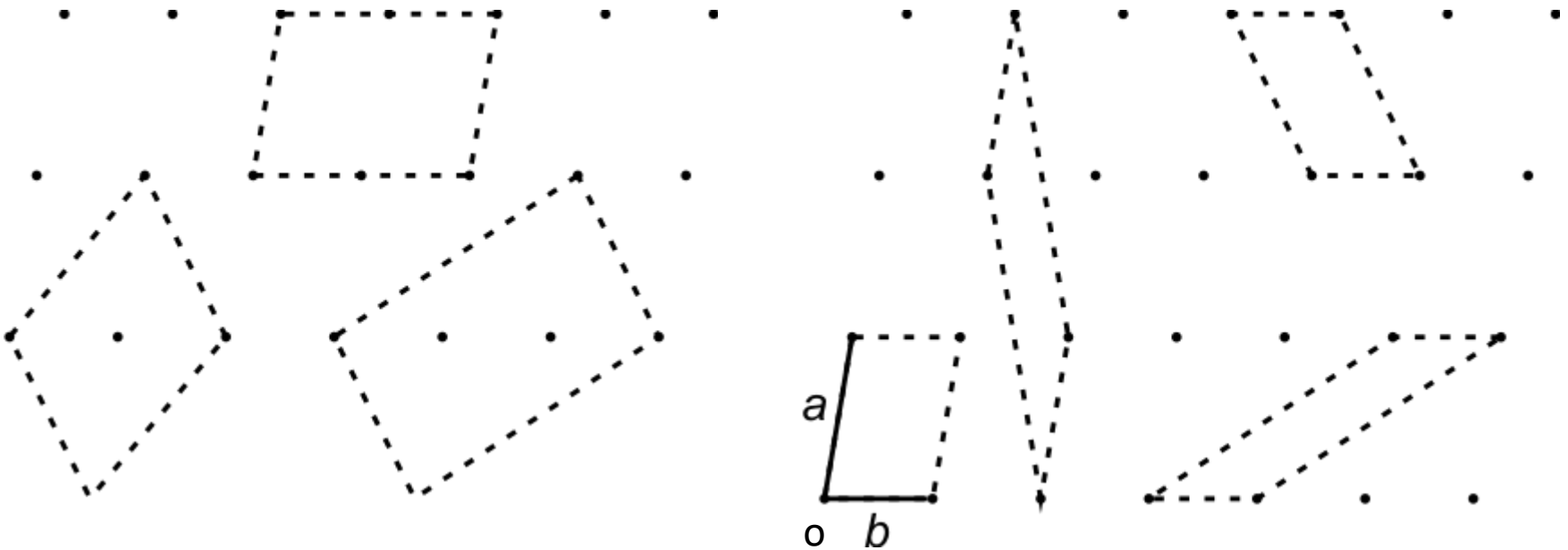
$$Q_{u,v} = ua + vb$$

(con diferentes  $u$  y  $v$ )

## ■ CELDAS

**Caracterización de las diferentes celda unidad posible:** por cantidad de puntos de la red que contienen (no olvidar de contar bien!)

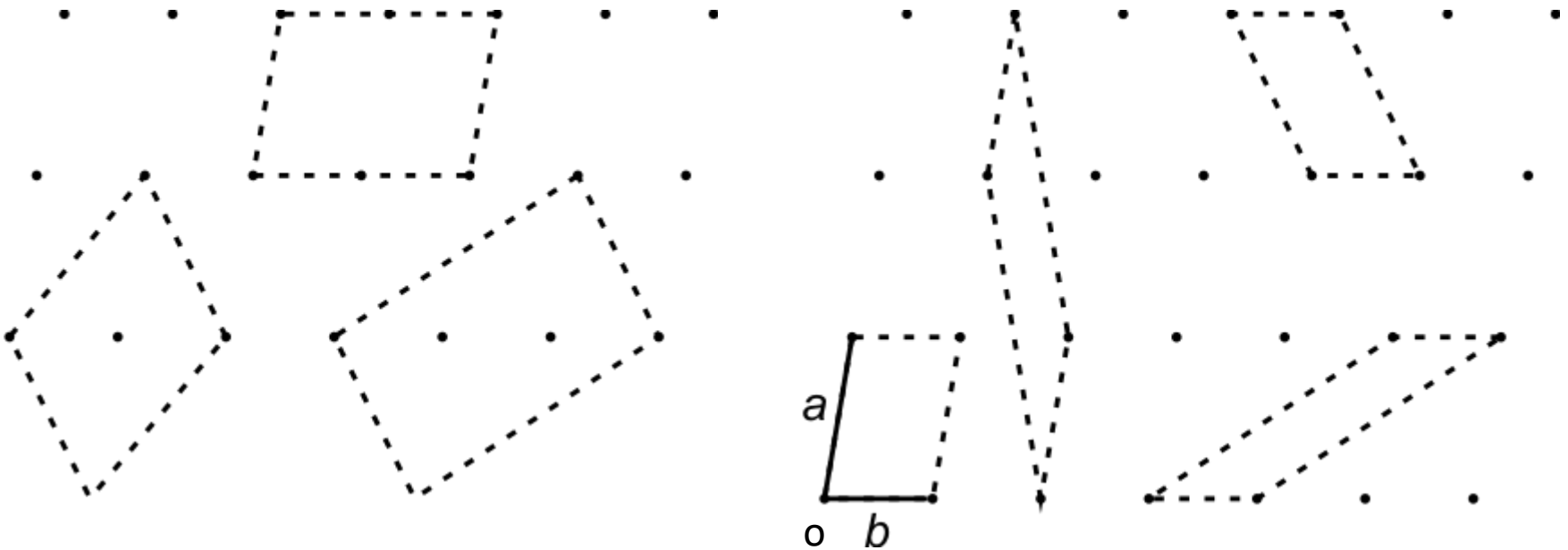
RED 2D



## ■ CELDAS

**Caracterización de las diferentes celda unidad posible:** por cantidad de puntos de la red que contienen (no olvidar de contar bien!)

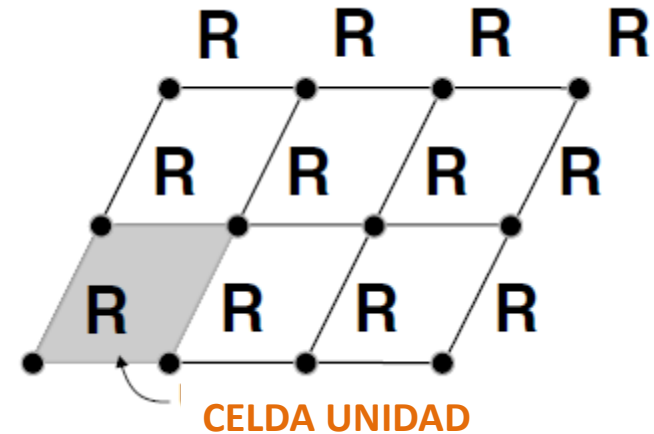
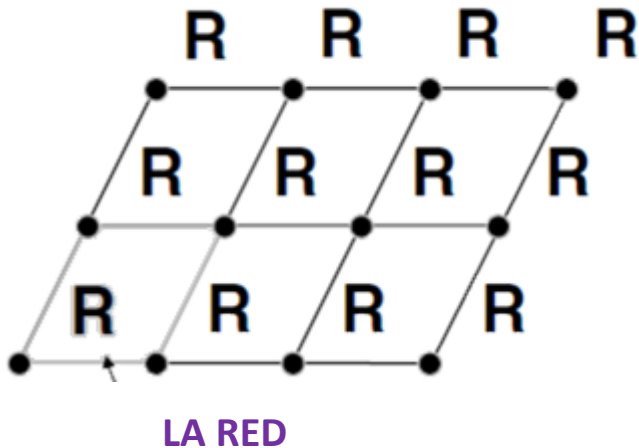
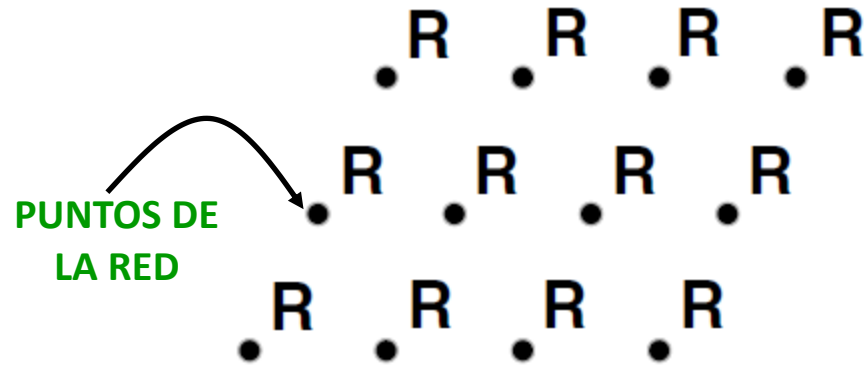
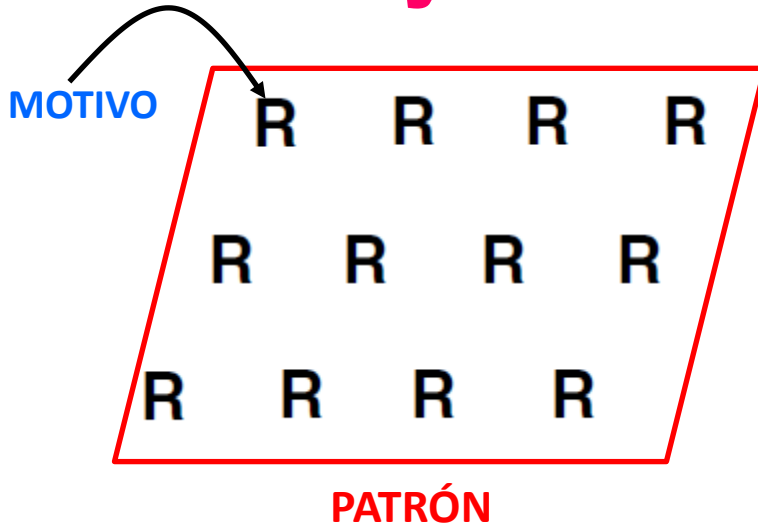
RED 2D



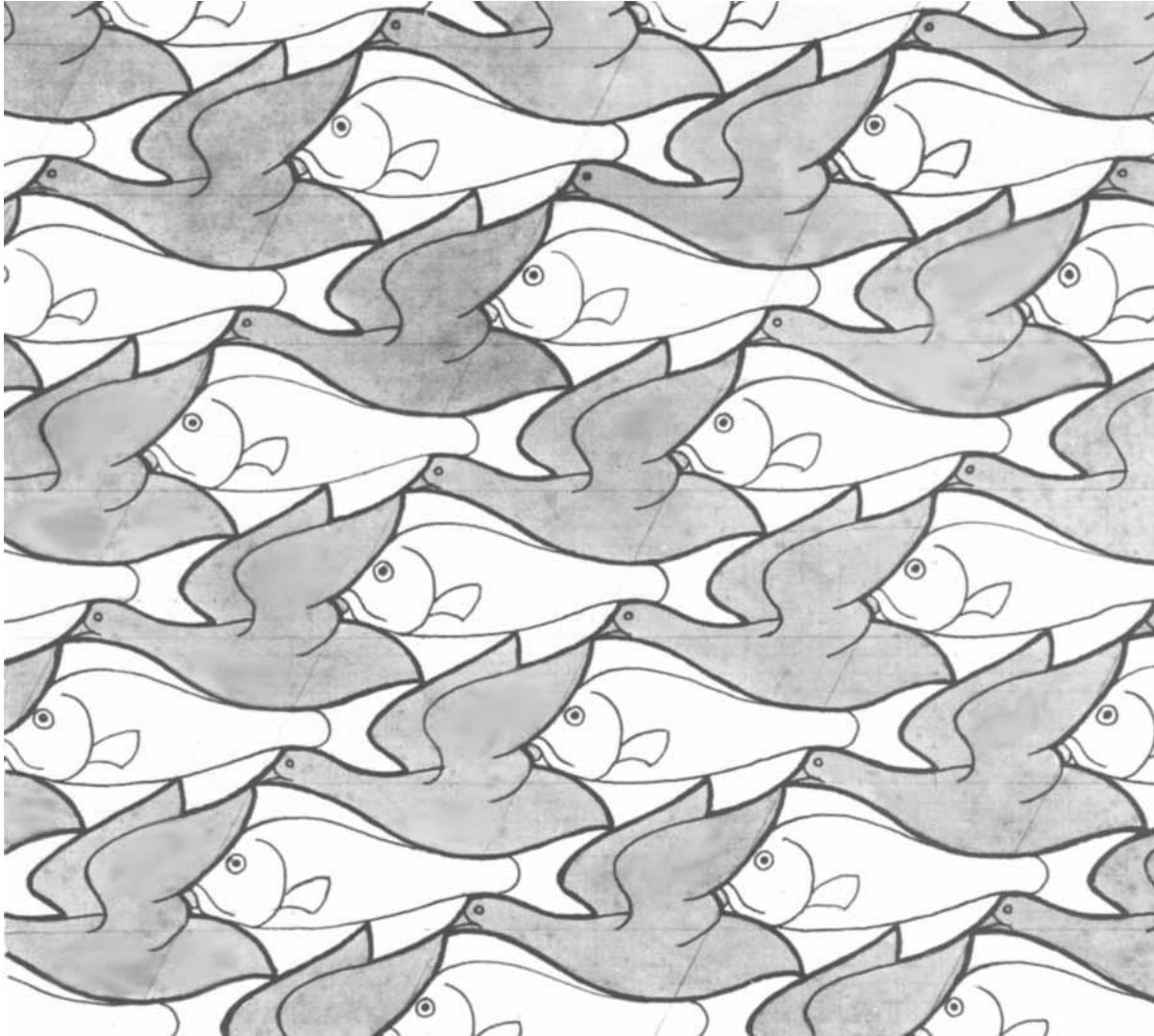
**DEFINICIÓN de CELDA PRIMITIVA:** corresponde a la celda unidad que contiene SOLO UN PUNTO de la red. Las que contienen más de un punto se denominan **múltiples** o **centradas**.

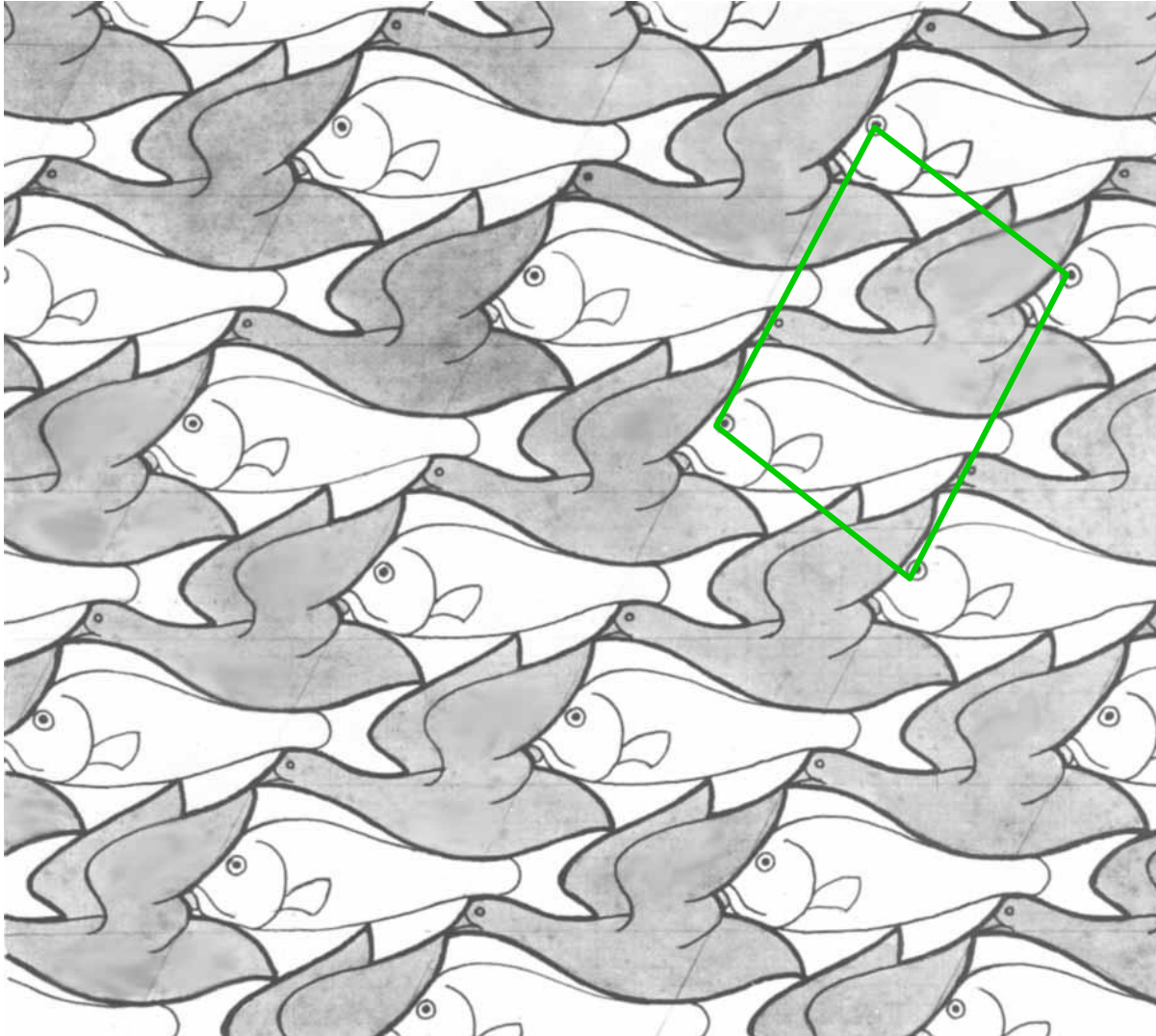
*¿Cuál/cuáles de estas serían celdas primitivas?*

## ■ REDES y CELDAS. Ejemplo

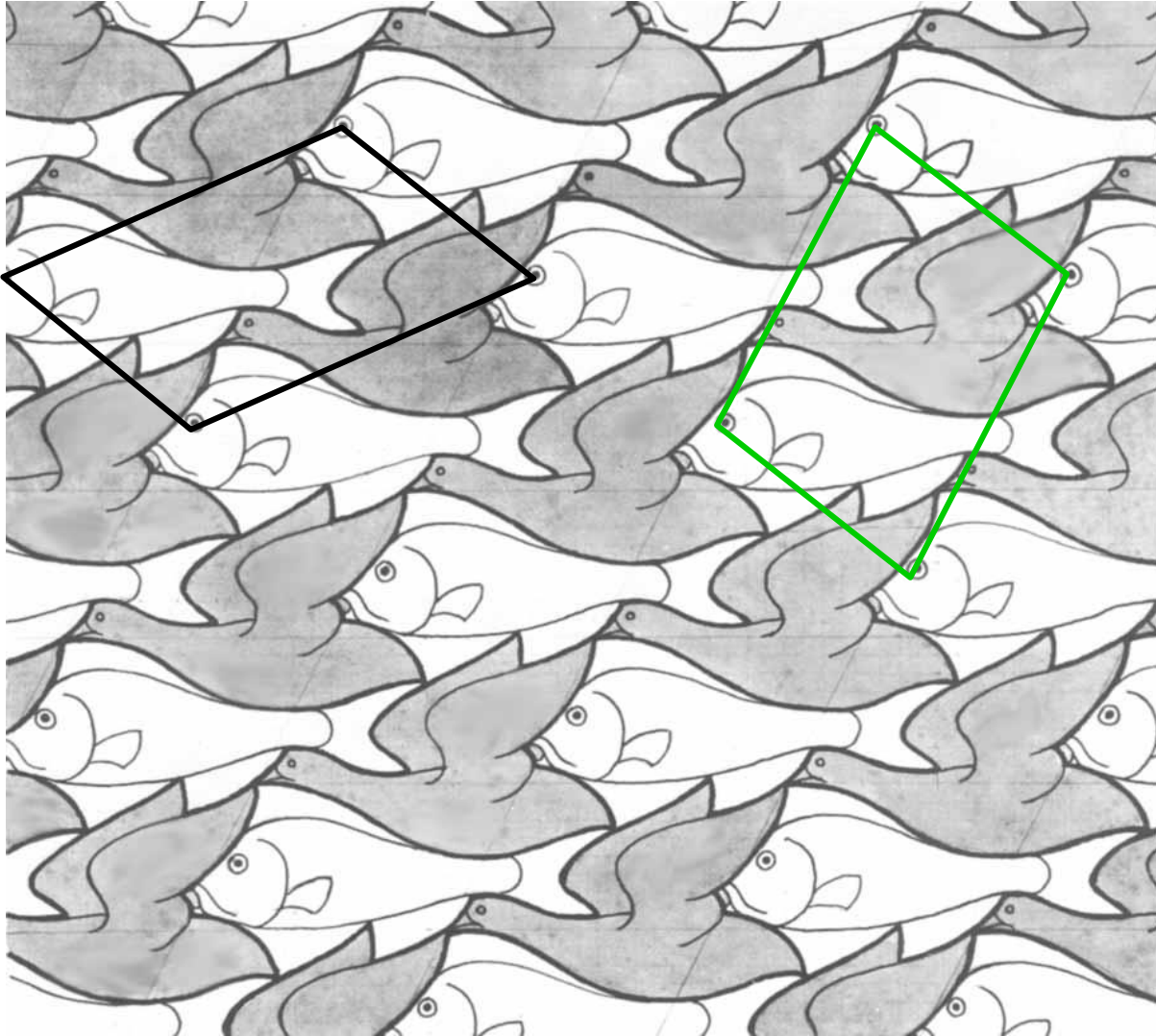


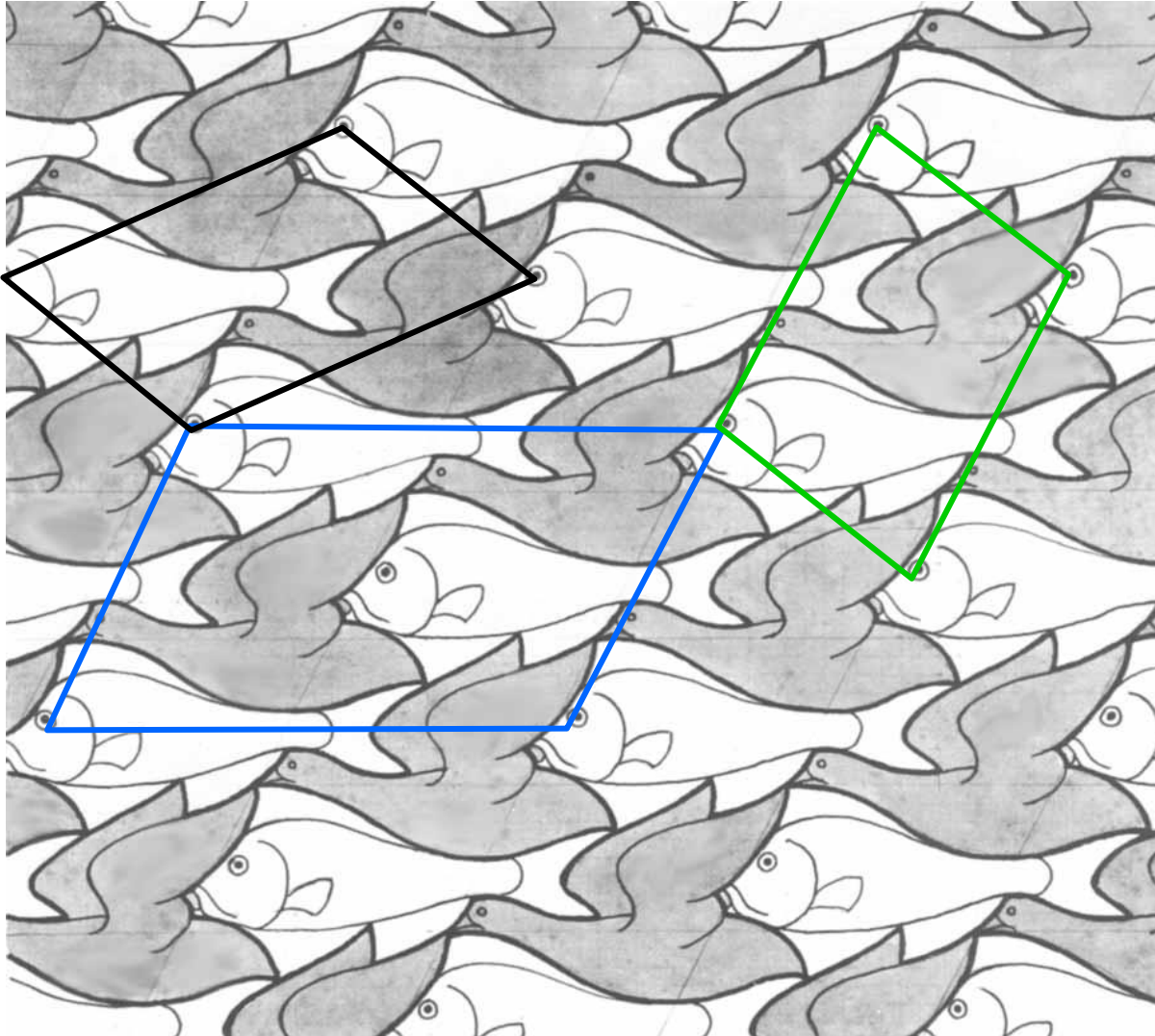
## ■ EJEMPLO DE CELDAS en 2D

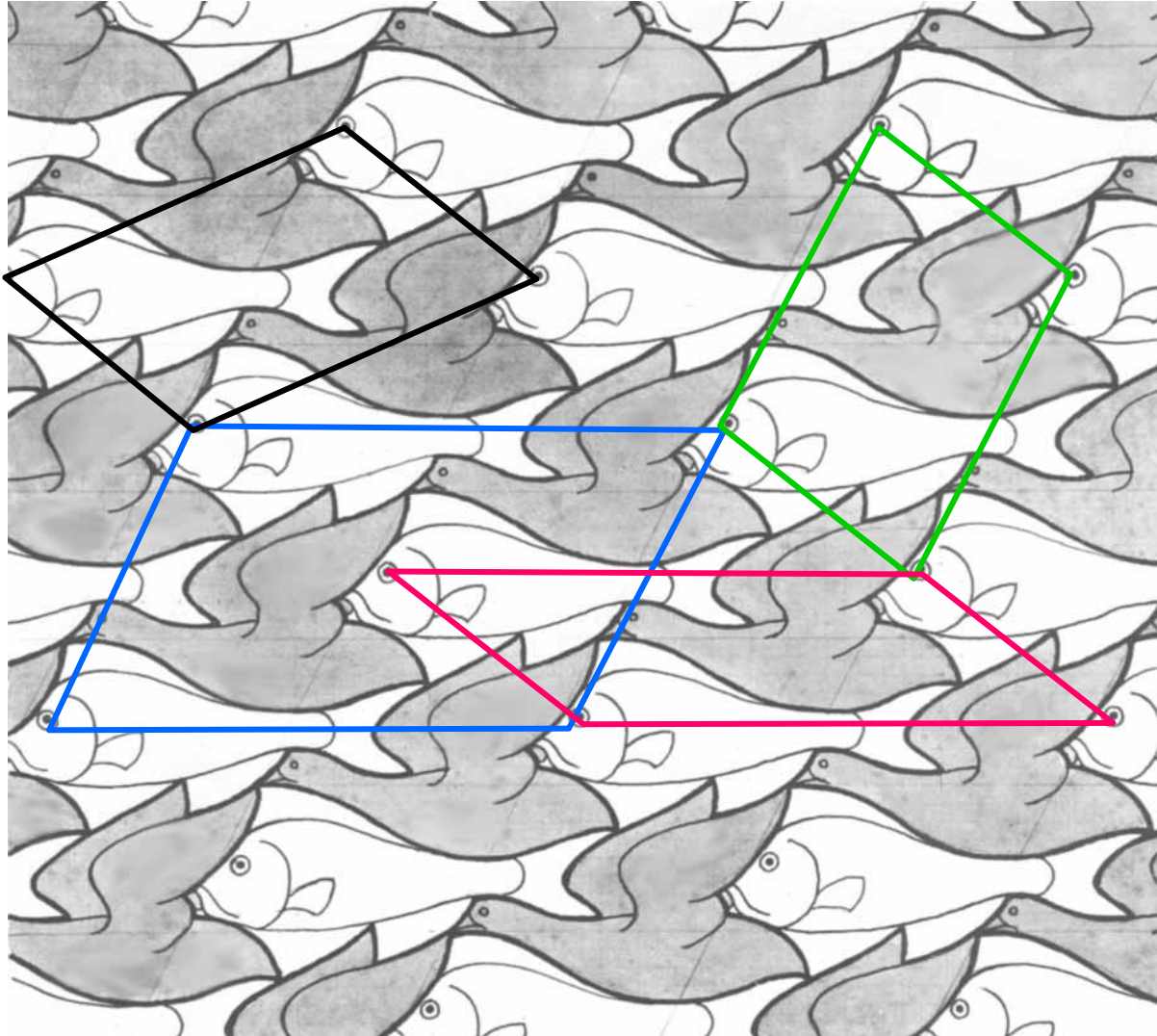






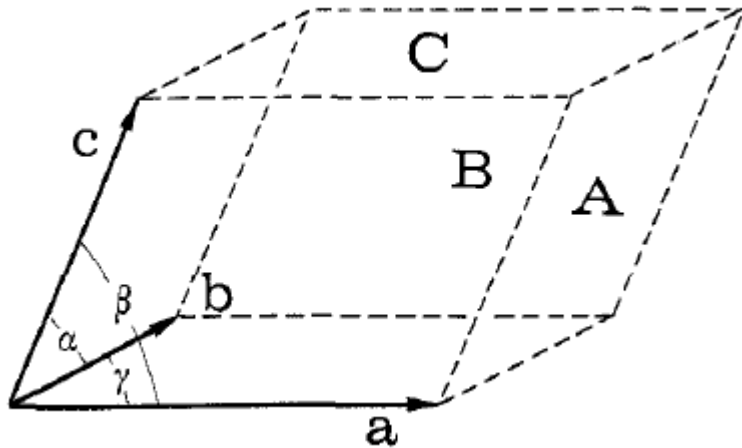






# ■ CELDAS (ahora en 3D)

## RED 3D



Se puede definir cualquier punto de la red mediante el vector:

$$\mathbf{Q}_{u,v,w} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}.$$

ECUACIÓN 2

El paralelepípedo que se define por  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$  (vectores básicos de la red) = **celda unidad**

$X Y Z$  = ejes cristalográficos

$\alpha \beta \gamma$  = ángulos

$A B C$  = caras

Si la celda es primitiva,  $u \ v \ w \in \mathbb{Z}^+ \ \mathbb{Z}^-$

Si la celda es múltiple,  $u \ v \ w \in \mathbb{Q}$

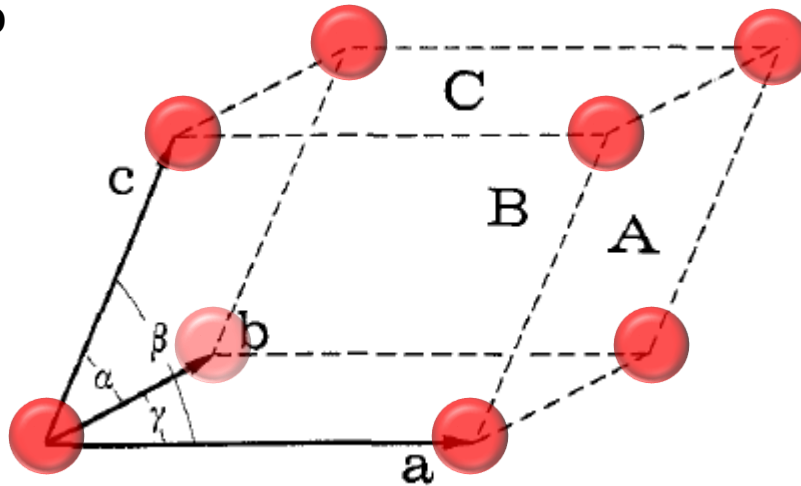
$$V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$$

$\swarrow$   $\searrow$   
 Producto escalar      Producto vectorial

*Orientación: "regla de la mano derecha"*

## ■ CELDAS (ahora en 3D)

RED 3D



Se puede definir cualquier punto de la red mediante el vector:

$$\mathbf{Q}_{u,v,w} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}.$$

ECUACIÓN 2

El paralelepípedo que se define por  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$  (vectores básicos de la red) = **celda unidad**

$X Y Z$  = ejes cristalográficos

$\alpha \beta \gamma$  = ángulos

$A B C$  = caras

Si la celda es primitiva,  $u \ v \ w \in \mathbf{Z}^+ \mathbf{Z}^-$

Si la celda es múltiple,  $u \ v \ w \in \mathbf{Q}$

$$V = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}$$

Producto escalar

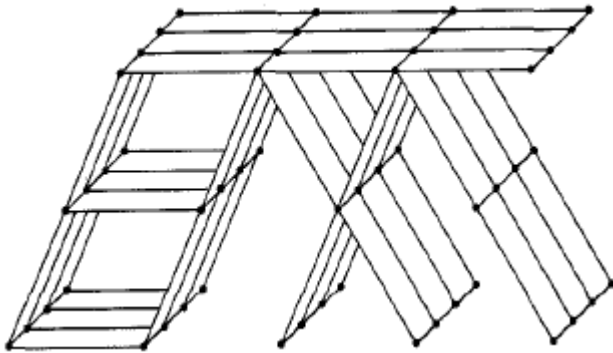
Producto vectorial

*Orientación: "regla de la mano derecha"*

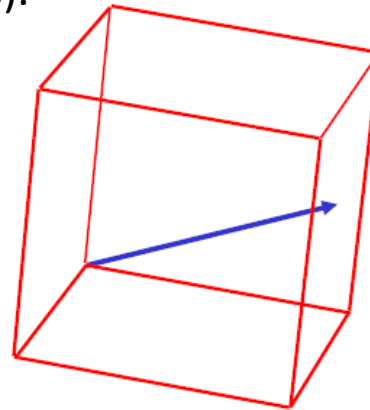


## ■ Propiedades RACIONALES de las CELDAS

Como los puntos de las celdas pueden representarse mediante NÚMEROS RACIONALES, sus propiedades se denominan también RACIONALES (planos/puntos racionales, también llamados planos/puntos cristalográficos).

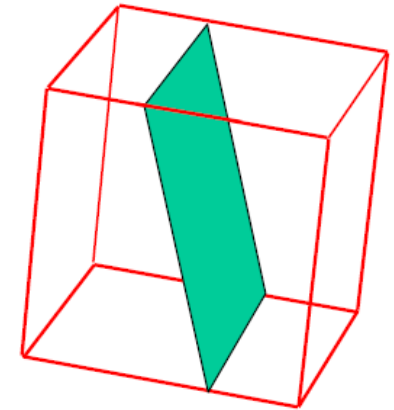


Planos y filas de la red



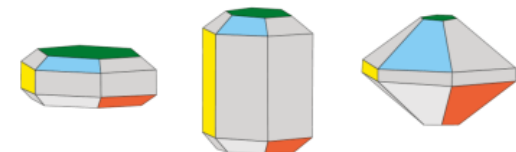
.. ..

direcciones



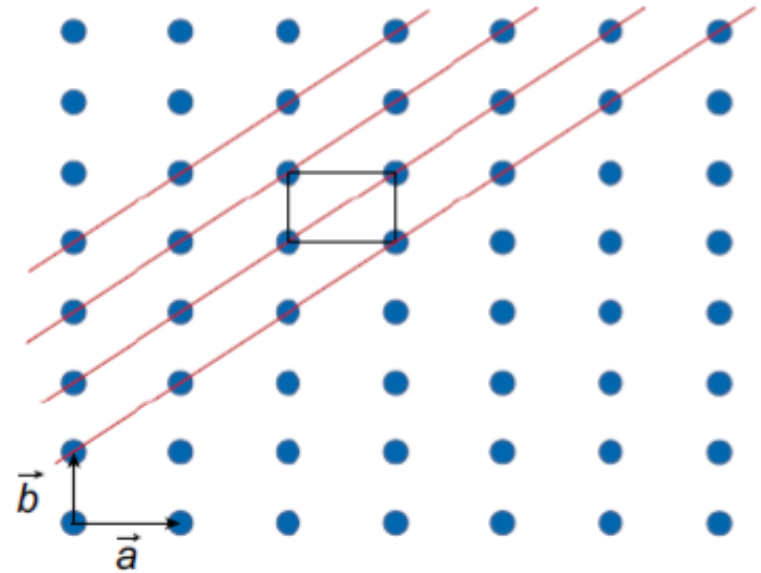
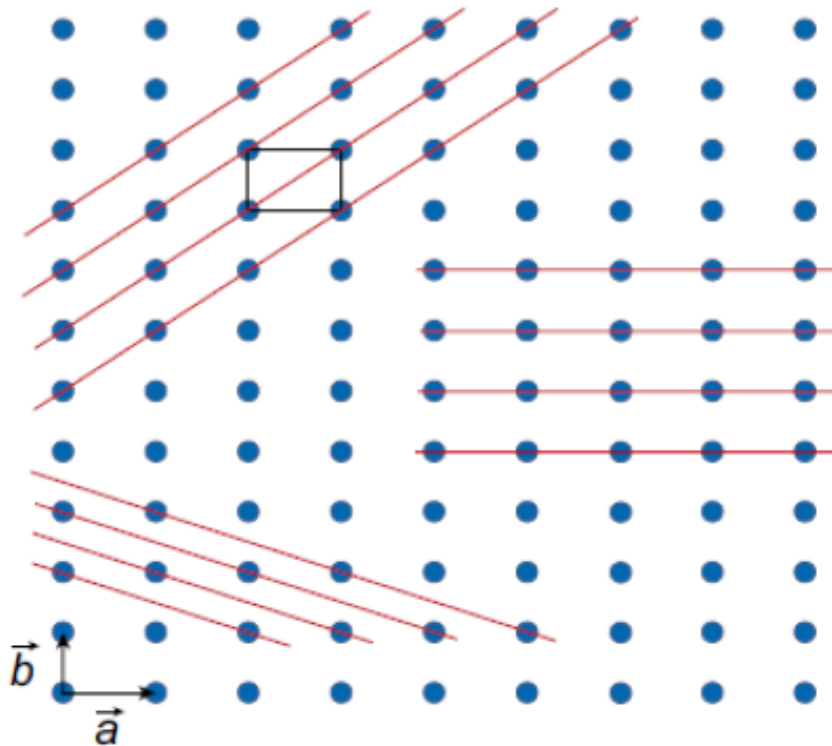
Planos

- Típicamente es necesario especificar ciertas direcciones y planos en los cristales
- Las propiedades de los materiales cristalinos y ciertos procesos fisicoquímicos asociados a los sólidos cristalinos suelen depender de las direcciones cristalográficas
- Las direcciones y los planos cristalográficos se describen mediante tres números enteros denominados **INDICES DE MILLER**
- Los **INDICES de MILLER** se utilizan también para describir las caras de los cristales (macroscópicamente hablando)



## ■ Planos de la red

Primero definamos los **planos de la red**: conjunto de planos paralelos en una red con igual espaciamiento, que la cortan de una manera específica



Los **INDICES de MILLER** son un sistema de notación para describir los planos de la red. Son 3 números enteros y coprimos  $h$   $k$   $l$ . También se llaman “valores  $hkl$ ”

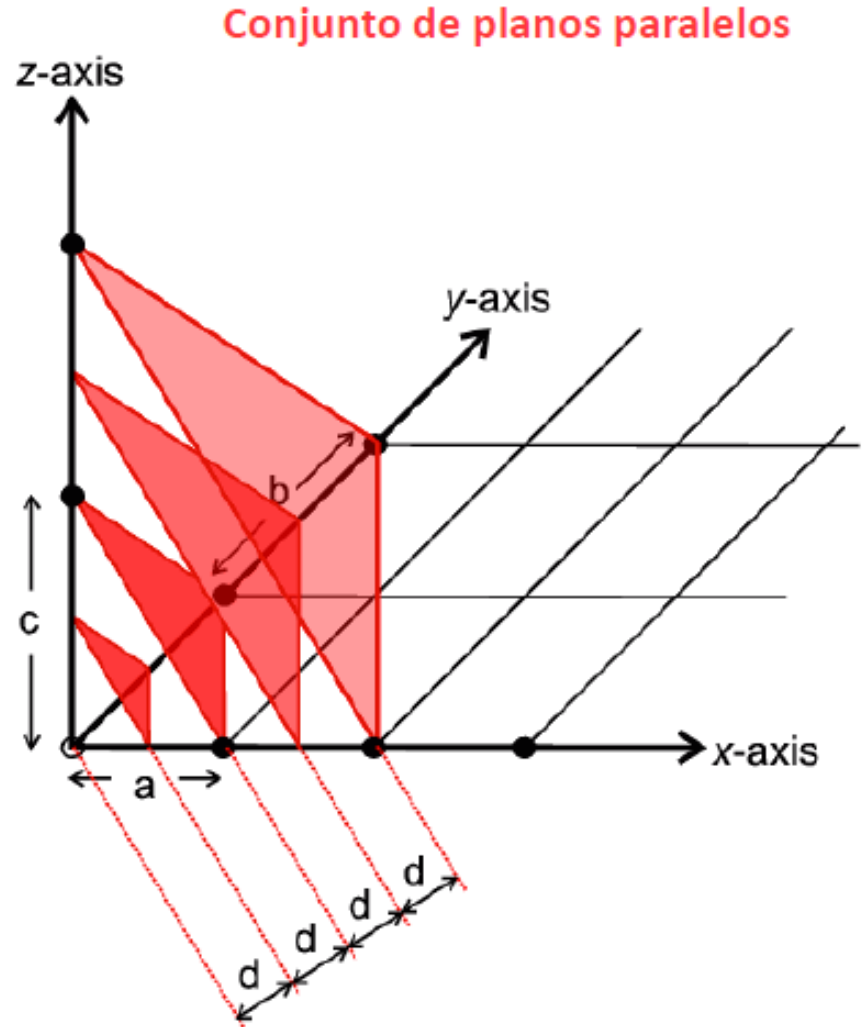
Se indican entre paréntesis ( $h$   $k$   $l$ )



## ■ Planos de la red

→ También definen planos en el cristal que interceptan los ejes  $x, y, z$  en  $a/h, b/k, c/l$ , respectivamente

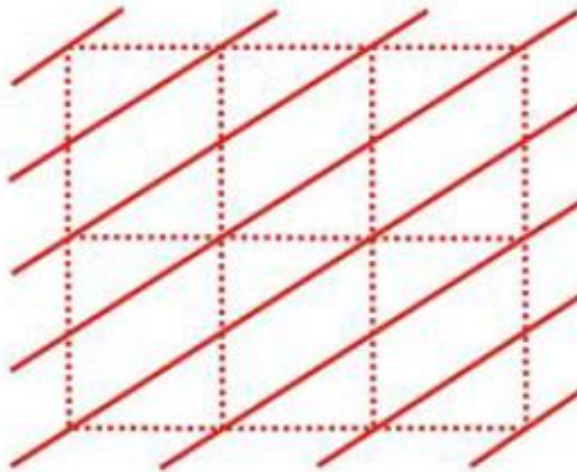
- Espaciamiento entre planos:  $d$
- Planos caracterizados por los **INDICES DE MILLER  $h, k, l$**   
 $\Rightarrow d_{hkl}$ : distancia entre planos definidos por  $h, k, l$
- También se los denomina “planos de Bragg”



## ■ Planos de la red

Desde un punto de vista geométrico, en una red podemos considerar unas líneas reticulares y planos reticulares

1)



*Familias de planos que se obtienen al cortar el eje vertical en 2 partes, y el horizontal en 1*

2)



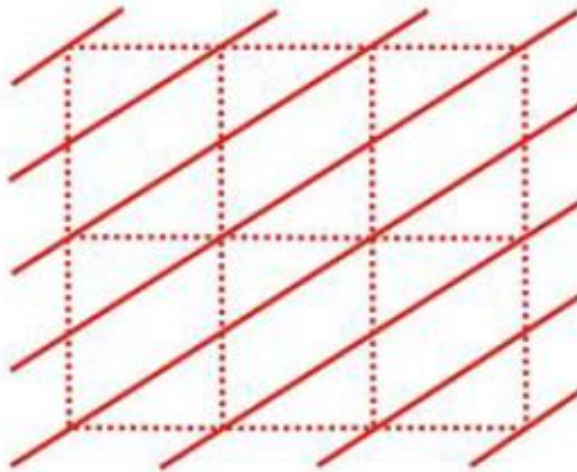
*Familias de planos que se obtienen al cortar el eje vertical en 3 partes, y el horizontal en 1*

“numero de partes” en la que los planos cortan los ejes de la celda, se los asocia con tres números que identifican la familia de planos --> conocidos como **INDICES DE MILLER** ( $h\ k\ l$ )

## ■ Planos de la red

Desde un punto de vista geométrico, en una red podemos considerar unas líneas reticulares y planos reticulares

1)



*Familias de planos que se obtienen al cortar el eje vertical en 2 partes, y el horizontal en 1*

2)

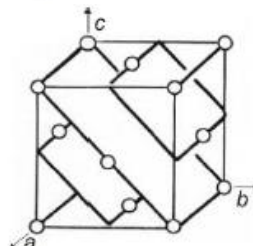


*Familias de planos que se obtienen al cortar el eje vertical en 3 partes, y el horizontal en 1*

“numero de partes” en la que los planos cortan los ejes de la celda, se los asocia con tres números que identifican la familia de planos --> conocidos como **INDICES DE MILLER** ( $h\ k\ l$ )

3)

??



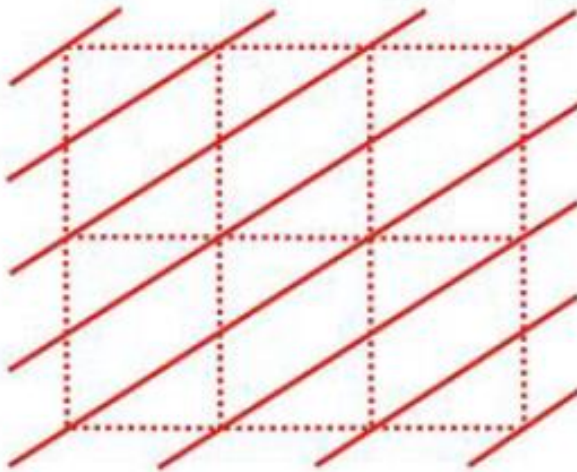
1)  $(2\ 1\ 0)$  2)  $(3\ 1\ 0)$



## ■ Planos de la red

Desde un punto de vista geométrico, en una red podemos considerar unas líneas reticulares y planos reticulares

1)



*Familias de planos que se obtienen al cortar el eje vertical en 2 partes, y el horizontal en 1*

2)

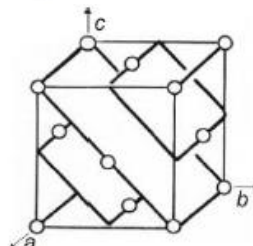


*Familias de planos que se obtienen al cortar el eje vertical en 3 partes, y el horizontal en 1*

“numero de partes” en la que los planos cortan los ejes de la celda, se los asocia con tres números que identifican la familia de planos --> conocidos como **INDICES DE MILLER** ( $h\ k\ l$ )

3)

??



1)  $(2\ 1\ 0)$  2)  $(3\ 1\ 0)$

3)  $(0\ 2\ 2)$

# ■ Planos cristalográficos

Tres puntos cristalográficos definen un PLANO CRISTALOGRAFICO

Tener en cuenta, Ecuación de cualquier plano:  

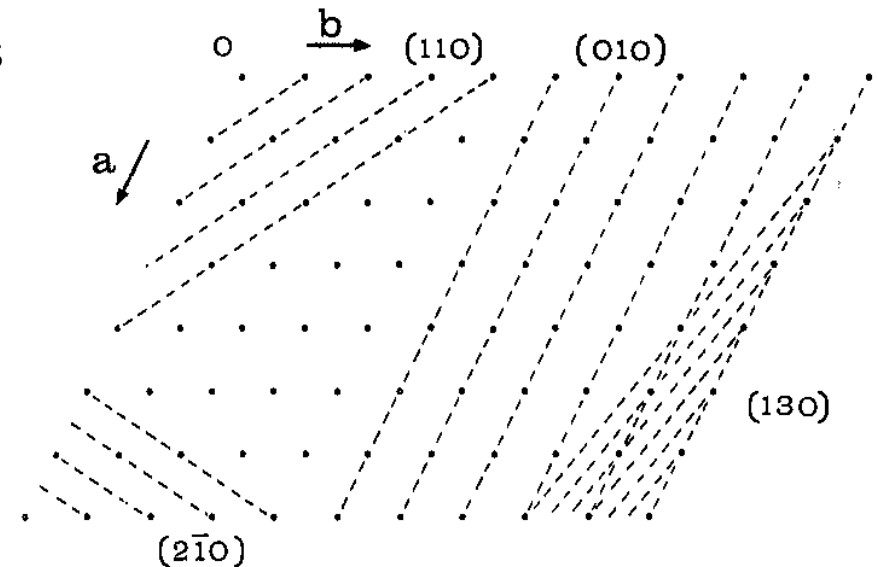
$$m_1 x + m_2 y + m_3 z = 1$$

Para describir a los planos cristalográficos en función de los índices de Miller se utiliza la nomenclatura: (h k l)

Los planos cristalográficos paralelos a cada uno de los ejes x y z se definen por los índices según: (0kl), (h0l) y (hk0) respectivamente

Los planos paralelos a cada una de las caras de la celda unidad A, B y C, se definen por los índices según: (h00), (0k0) y (00l) respectivamente

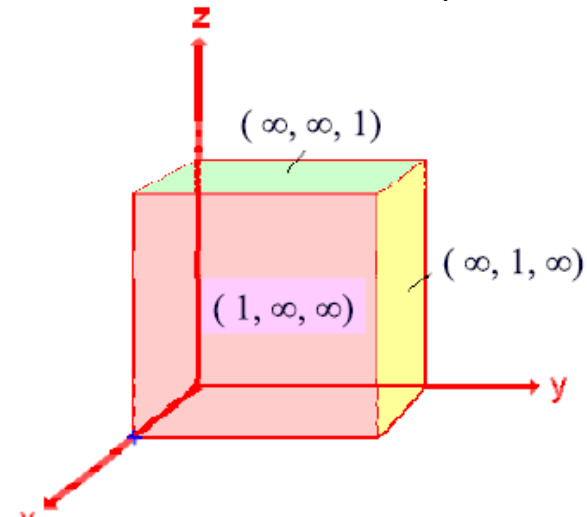
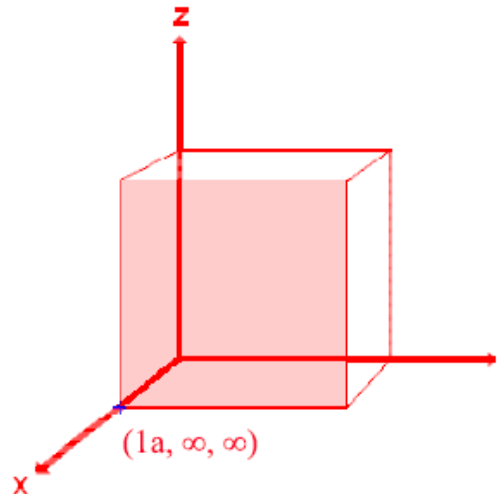
Planos paralelos = tienen los 'mismos índices de Miller



# ■ Planos cristalográficos

## REGLAS PARA DEFINIR UN PLANO CRISTALOGRAFICO

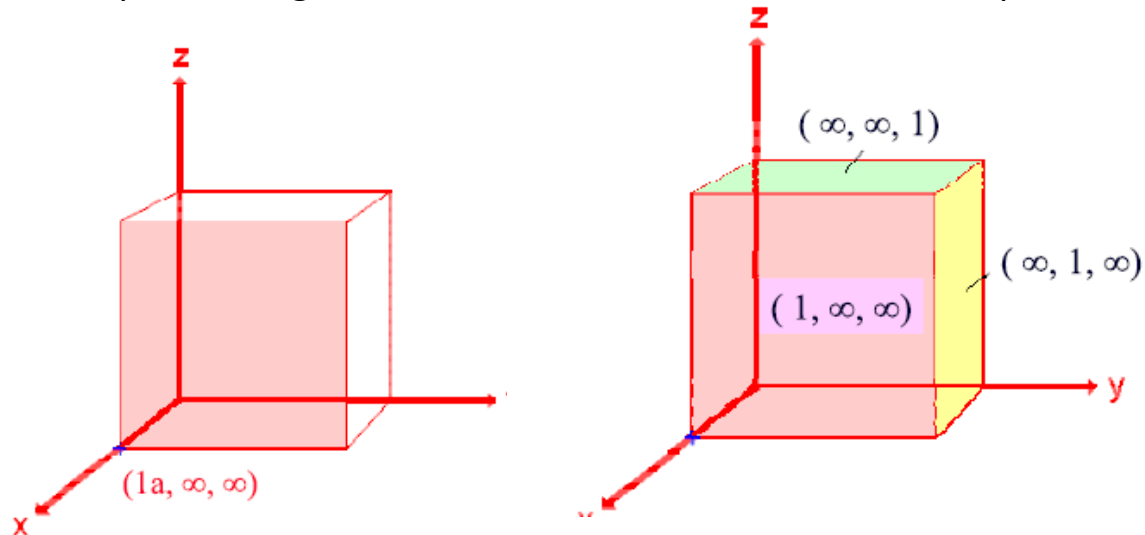
- El plano debe intersectar o ser paralelo a cualquier eje cristalográfico (x y z)
  - Si no se cumple lo anterior, el plano debe trasladarse o se necesita un origen
  - Determinar los puntos de intersección del plano con los ejes cristalográficos en función de a, b, c (dimensiones de la celda), o infinito si es paralelo a alguno de los ejes
  - Determinar el inverso/recíproco ( $1/a$   $1/b$   $1/c$   $1/\infty$ )
  - Reducir al menor número posible según factor común o mínimo común múltiplo
- > así se llega al h k l



# ■ Planos cristalográficos

## REGLAS PARA DEFINIR UN PLANO CRISTALOGRAFICO

- El plano debe intersectar o ser paralelo a cualquier eje cristalográfico (x y z)
- Si no se cumple lo anterior, el plano debe trasladarse o se necesita un origen
- Determinar los puntos de intersección del plano con los ejes cristalográficos en función de a, b, c (dimensiones de la celda), o infinito si es paralelo a alguno de los ejes
- Determinar el inverso/recíproco ( $1/a$   $1/b$   $1/c$   $1/\infty$ )
- Reducir al menor número posible según factor común o mínimo común múltiplo  
-> así se llega al h k l

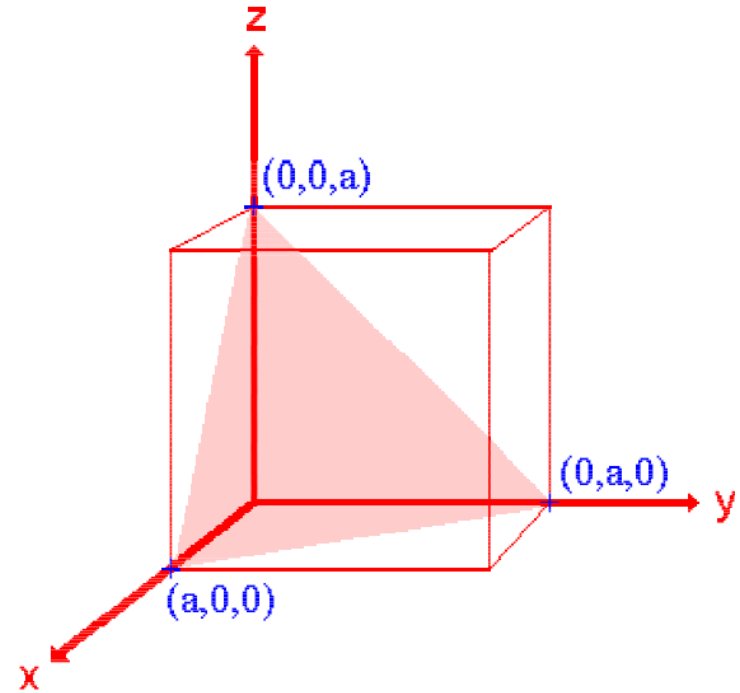
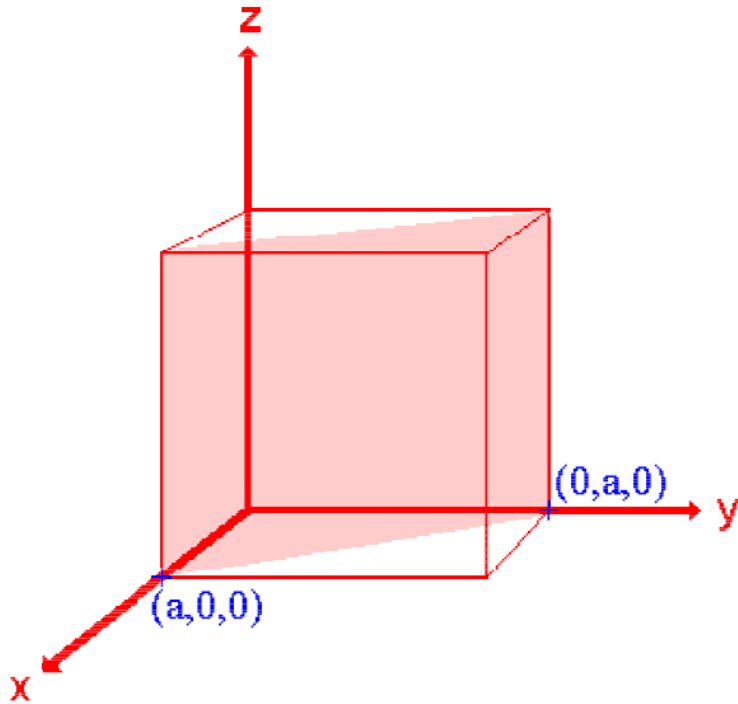


- Cara rosa:  $(1/1, 1/\infty, 1/\infty) = (100)$
- Cara verde:  $(1/\infty, 1/\infty, 1/1) = (001)$
- Cara amarilla:  $(1/\infty, 1/1, 1/\infty) = (010)$



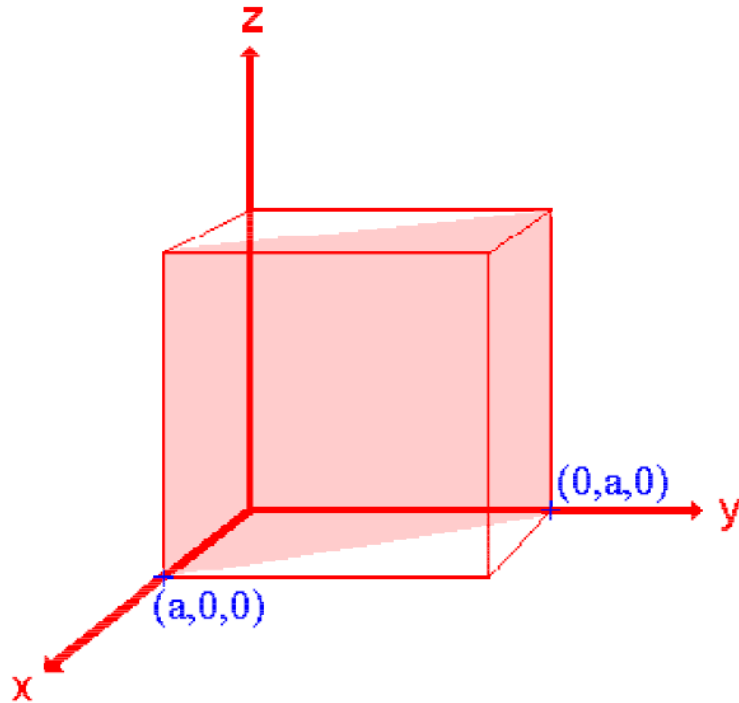
# ■ Planos cristalográficos

## Ejemplos



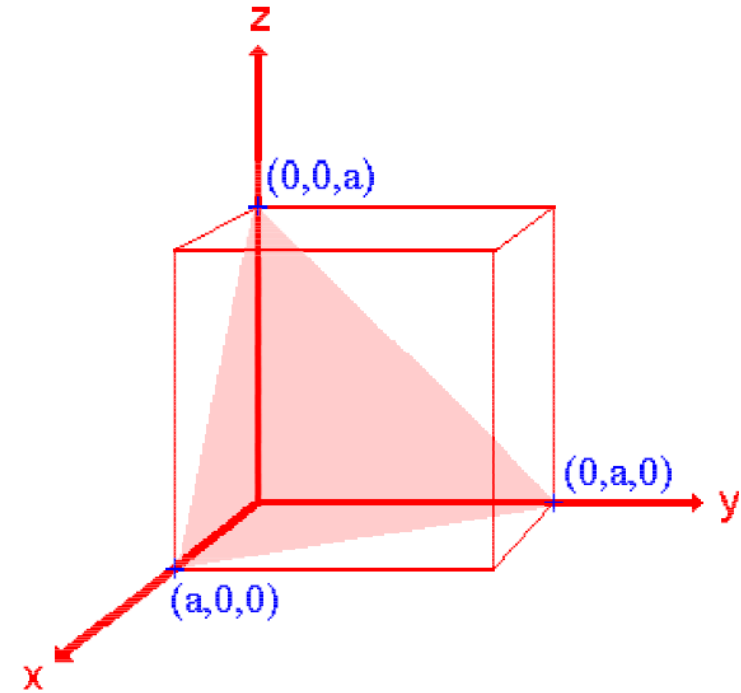
# ■ Planos cristalográficos

## Ejemplos



Intercepción:  $(1,1, \infty) \rightarrow (110)$

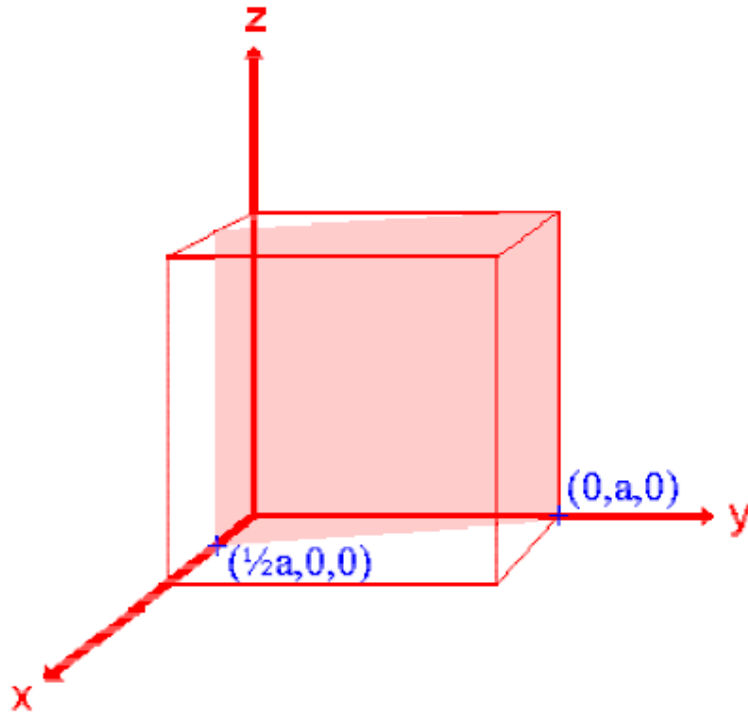
Suponiendo  $a = 1$



Intercepción =  $(1,1,1) \rightarrow (111)$

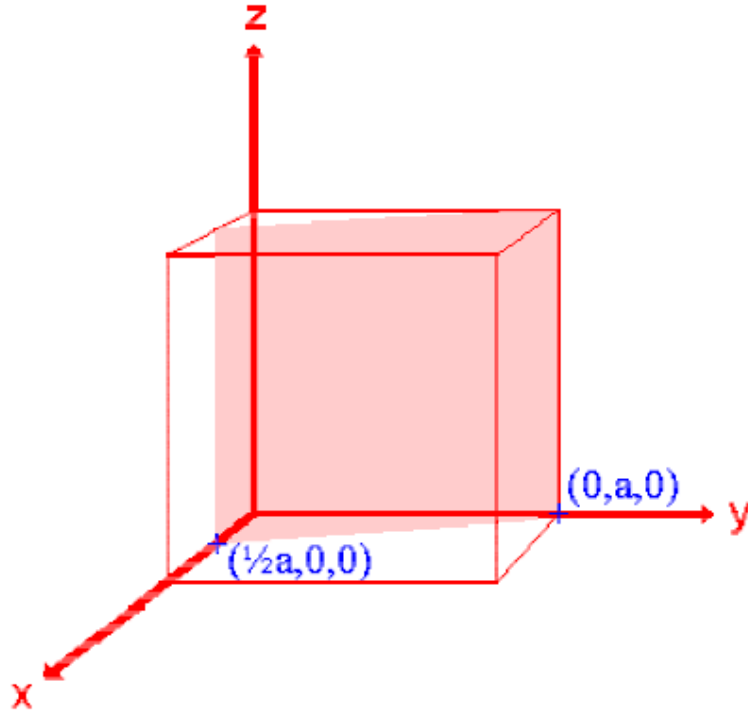
# ■ Planos cristalográficos

Ejemplos



# ■ Planos cristalográficos

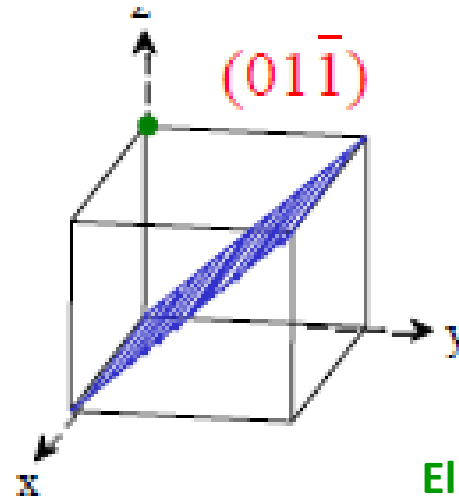
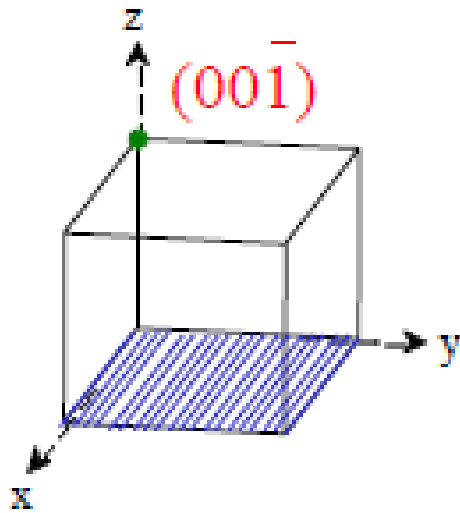
## Ejemplos



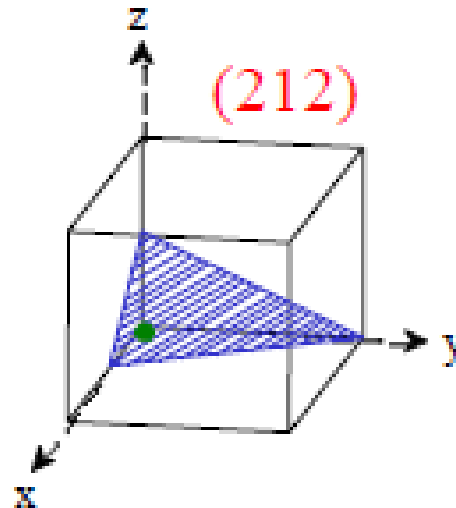
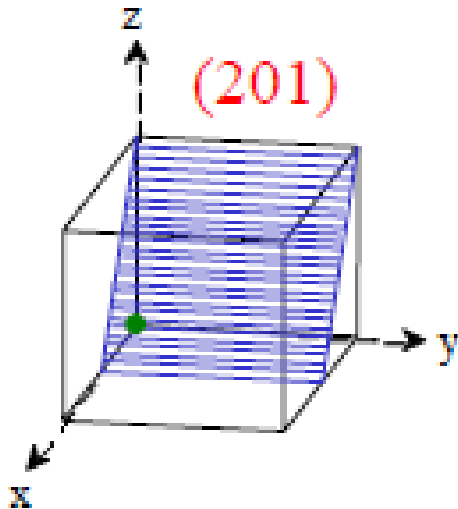
Intercepción:  $(\frac{1}{2}, 1, 0) \rightarrow (210)$

# ■ Planos cristalográficos

## Ejemplos

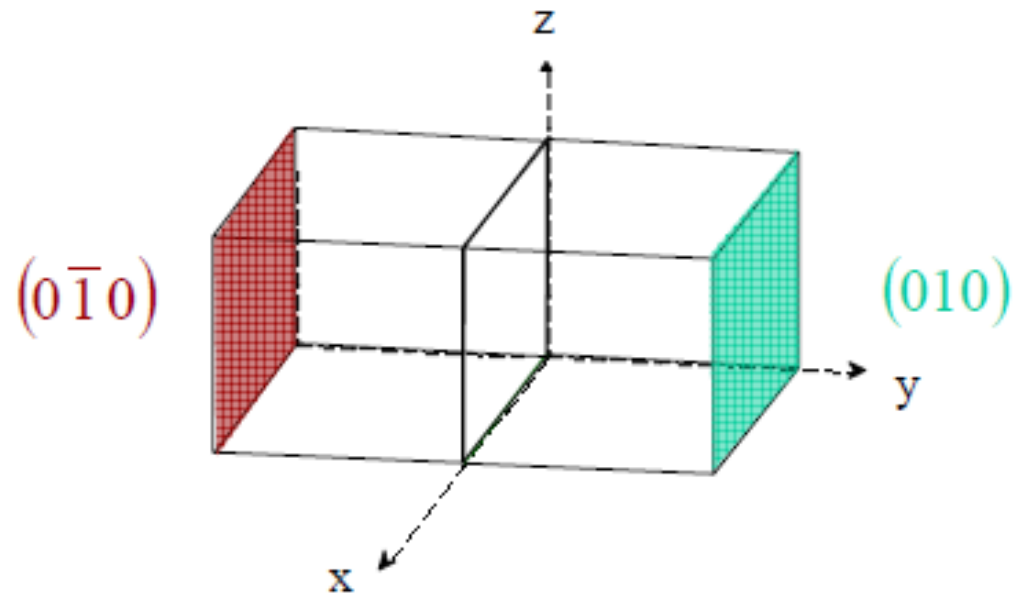


El punto verde indica  
dónde se ubicó el  
origen



# ■ Planos cristalográficos

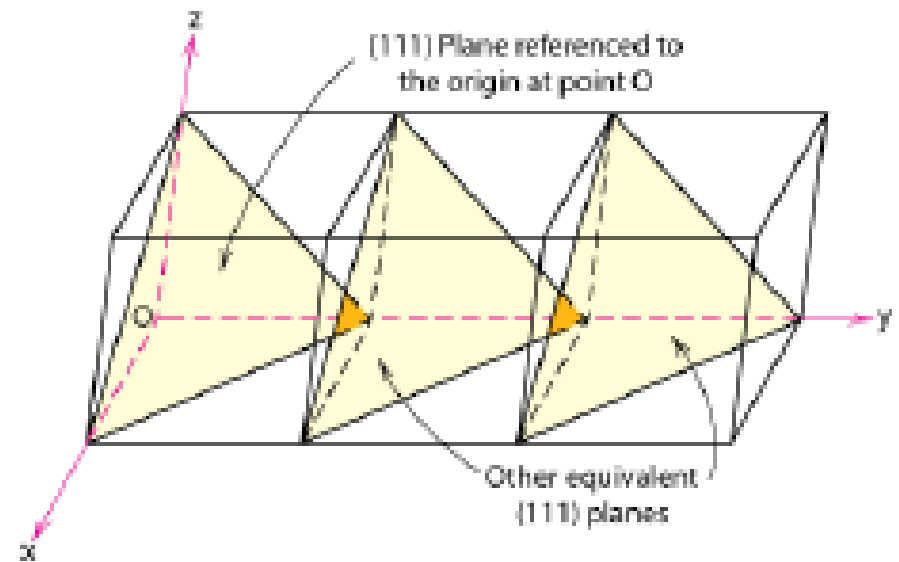
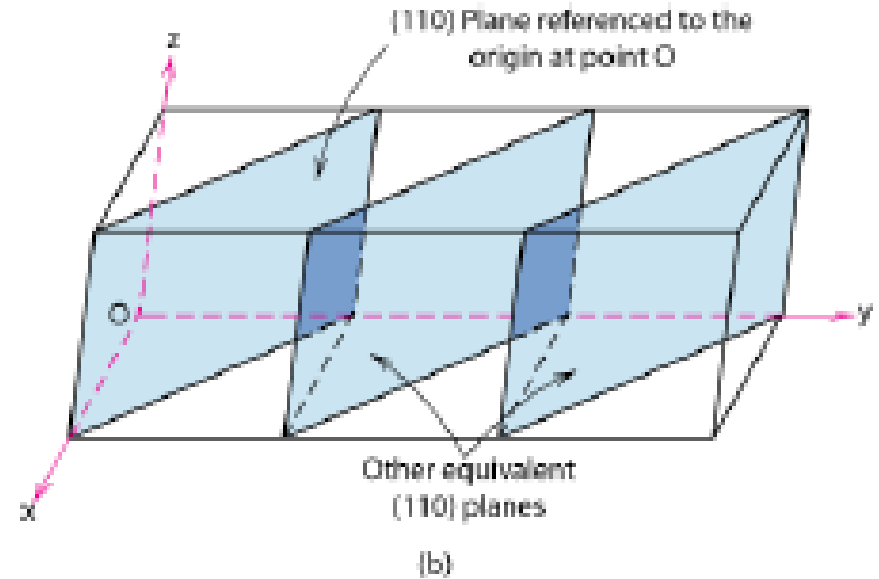
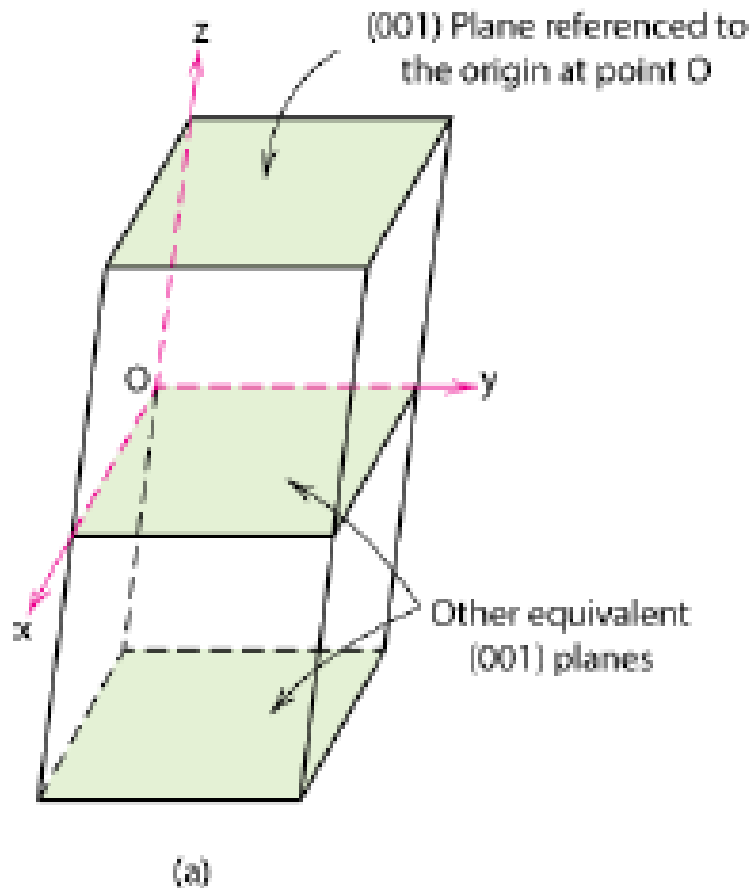
## Observación



Planos comprendiendo índices con signo opuesto son equivalentes

# ■ Planos cristalográficos

## Observación



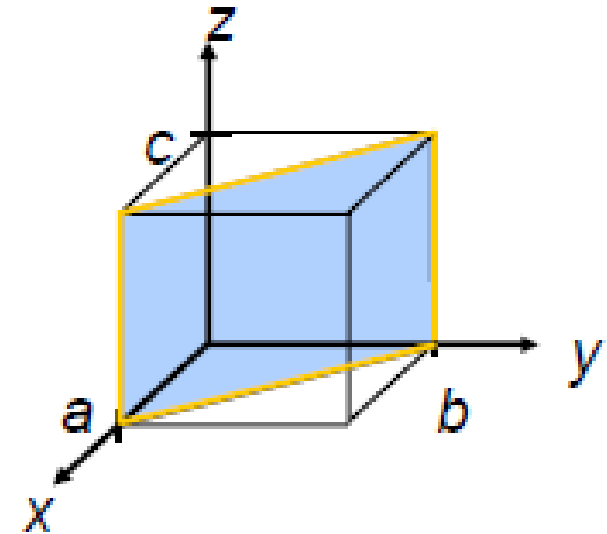


# ■ Planos cristalográficos

## Ejemplos

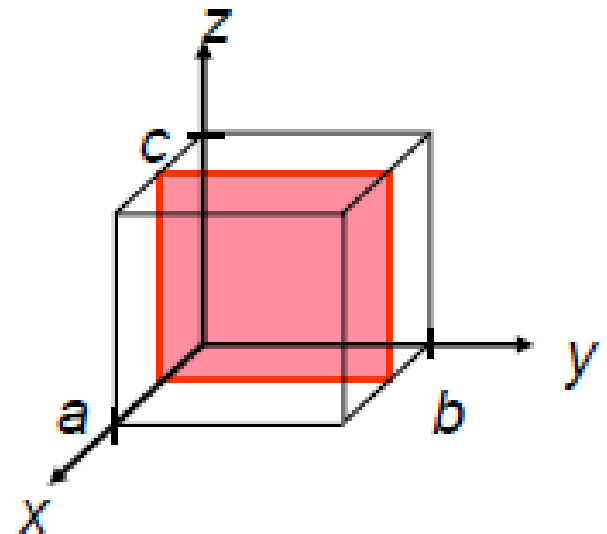
### Example

	$a$	$b$	$c$
1. Intercepts	1	1	$\infty$
2. Reciprocals	1/1	1/1	1/ $\infty$
	1	1	0
3. Reduction	1	1	0
4. Miller Indices	(110)		



### Example

	$a$	$b$	$c$
1. Intercepts	1/2	$\infty$	$\infty$
2. Reciprocals	1/(1/2)	1/ $\infty$	1/ $\infty$
	2	0	0
3. Reduction	2	0	0
4. Miller Indices	(100)		

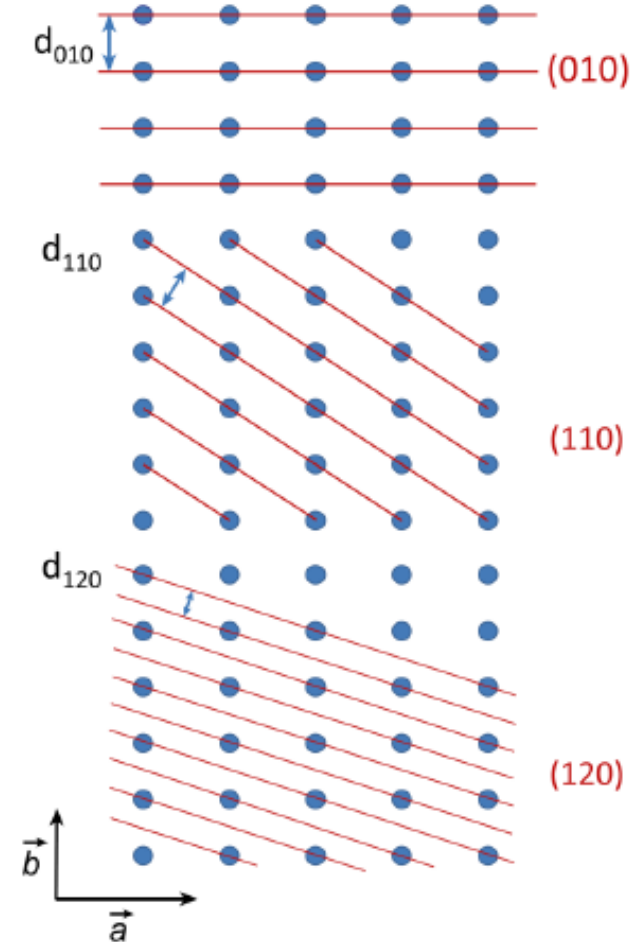


# ■ Planos cristalográficos

## Algunas Observaciones

Sobre la base de los ejemplos, se pueden derivar las siguientes relaciones con respecto a la Índices de Miller:

- Cuando mayores son los índices, menor es la distancia  $d$  entre dos planos directamente adyacentes de un conjunto de planos de la red
- Cuando mayores son los índices, menor es la densidad de puntos de la red (es decir, el número de puntos de la red por unidad de longitud) que se encuentran en los planos correspondientes. Dado que los puntos de la red representan motivos químicos (átomos, iones o moléculas), esto significa, para ejemplo, en las caras con índices de Miller mayores, la densidad de átomos será menor, y para aquellas con índices menores, la densidad será mayor, indicando también un empaquetamiento más compacto (más denso). Esto ejemplifica el vínculo entre reactividad y caras cristalográficas o bien planos cristalográficos.

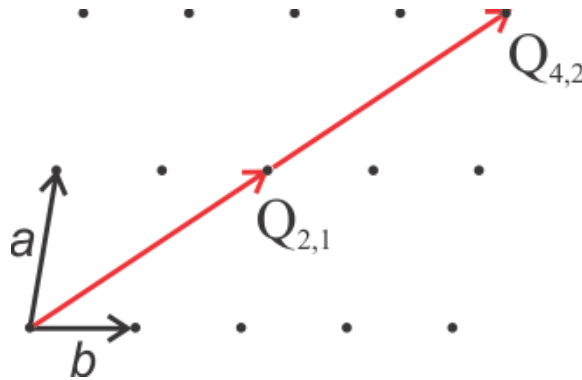


## ■ Direcciones cristalográficas

Dados un punto de la red representado por el vector  $\mathbf{Q}_1$  que cumplen con la ec. 2

$$\mathbf{Q}_{u,v,w} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c}.$$

Definimos la dirección de  $\mathbf{Q}_1$  mediante los enteros  $u, v, w$  (en el caso que  $\mathbf{Q}$  represente un punto de la red definido a partir de los vectores  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  y  $\mathbf{c}$  de una celda primitiva) o  $u, v, w$  racionales (en el caso que  $\mathbf{Q}$  esté definida a partir de vectores de una celda múltiple)



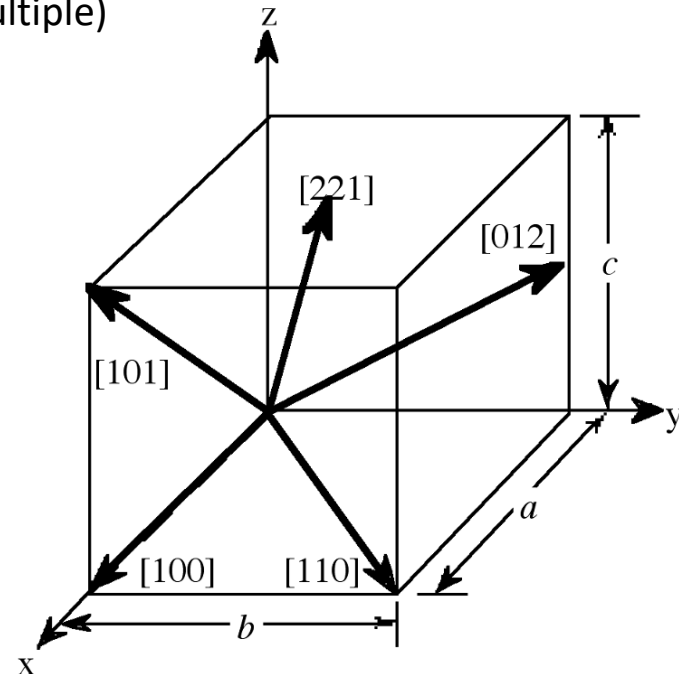
**Ejemplo en 2D**

### Recordar que:

$x, y, z$  son los ejes cristalográficos (colocados a partir de un origen arbitrario)

$a, b, c$  son los parámetros de la red (*dimensiones de cada uno de los lados de la celda*)

$h, k, l$  son los índices de Miller ( $u \ v \ w$ ); para expresar las direcciones se indican según: **[hkl]**

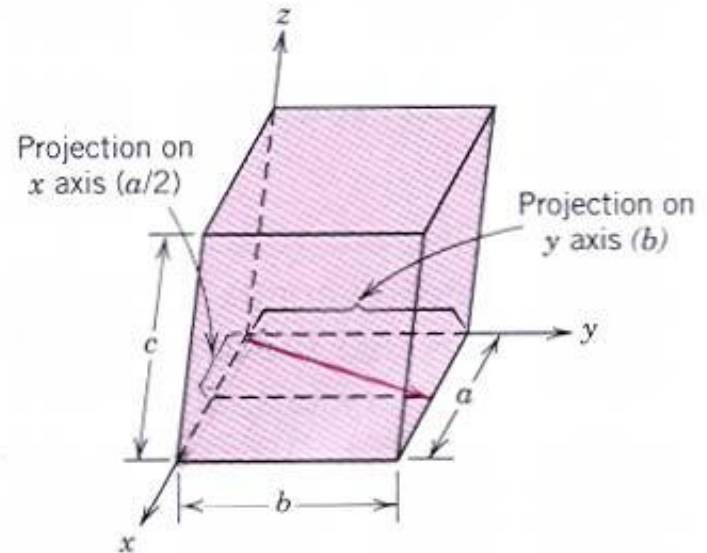


**Ejemplo en 3D**

# ■ Direcciones cristalográficas

## REGLAS PARA DEFINIR UNA DIRECCIÓN CRISTALOGRÁFICA

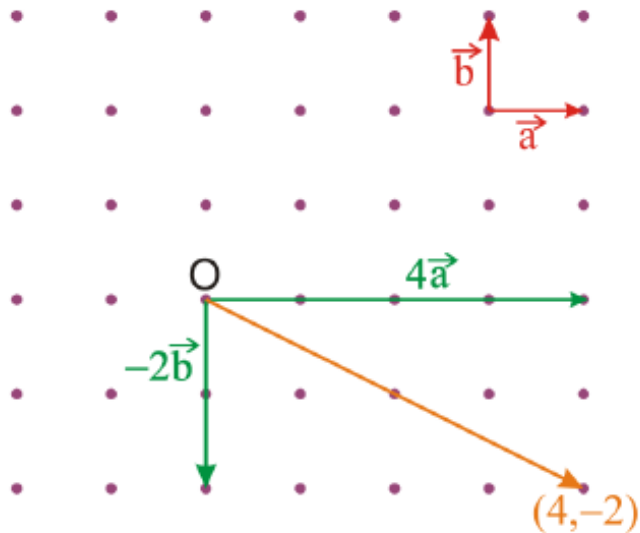
- Ir desde el punto hasta el origen del sistema de coordenadas
- Determinar la longitud de vector proyectado en las dimensiones de la celda unidad (**a, b, c**)
- Remover las unidades y así obtener los índices de Miller; ej.  $[u_a v_b w_c] \rightarrow [u v w]$
- $u v w$  son divididos y multiplicados por factores comunes para reducirse a los valores enteros menores posibles
- La dirección cristalográfica se denota entonces como  $[u v w]$
- Las propiedades de un material serán los mismos a lo largo de una familia de direcciones cristalográficas es la misma
- Para materiales cristalinos uniformes, todas las direcciones paralelas tendrán las mismas propiedades
- Para índices negativos: se usa barra sobre el número
- No usar comas para separar los índices
- $\langle hkl \rangle$  representa una familia de direcciones



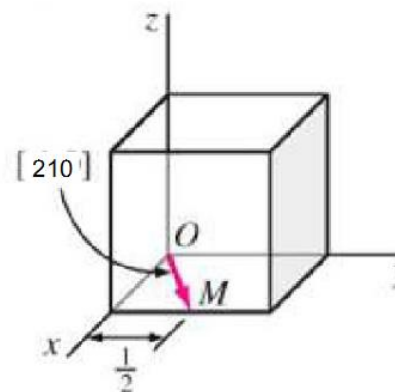
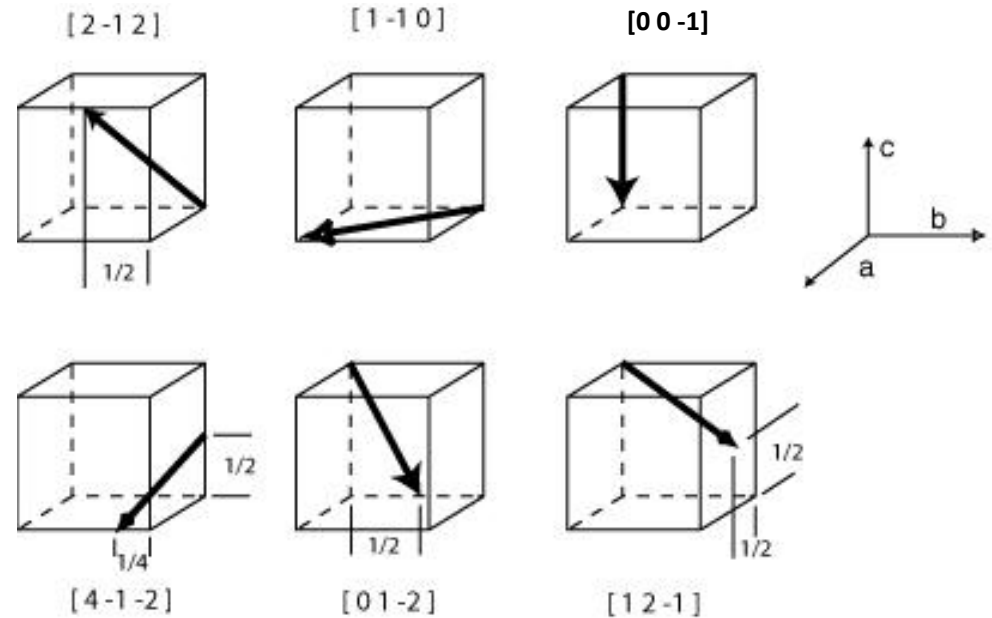
*¿Cuál sería esta dirección?*

# ■ Direcciones cristalográficas

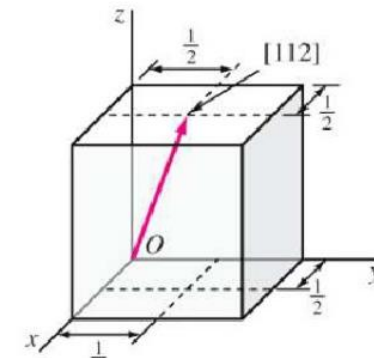
## Ejemplo



Dirección cristalográfica:  $[4 \bar{2}] \rightarrow [2 \bar{1}]$



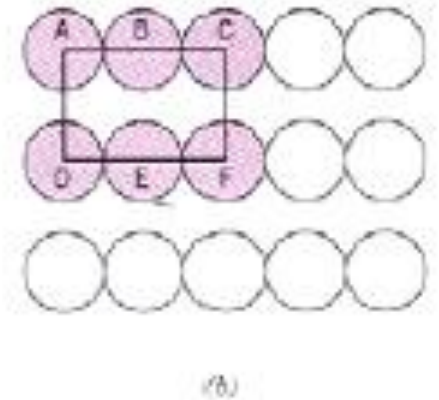
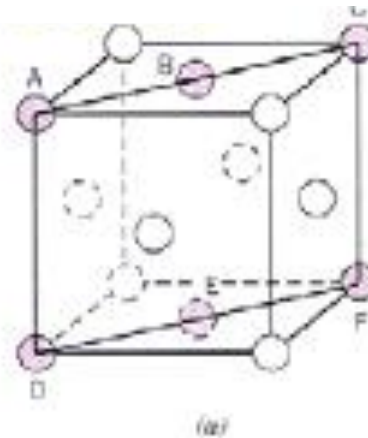
$X = 1, Y = \frac{1}{2}, Z = 0$   
 $[1 \frac{1}{2} 0] \rightarrow [2 1 0]$



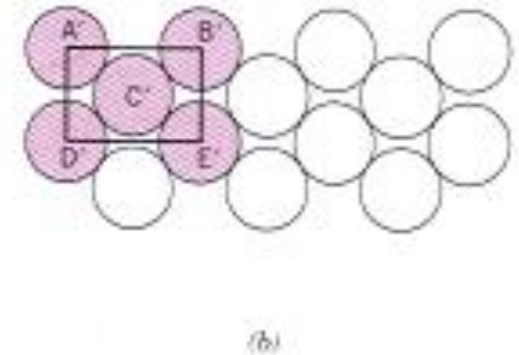
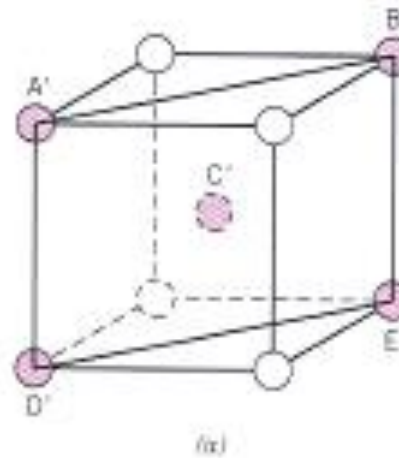
$X = \frac{1}{2}, Y = \frac{1}{2}, Z = 1$   
 $[\frac{1}{2} \frac{1}{2} 1] \rightarrow [1 1 2]$

# ■ Arreglos atómicos y Planos cristalográficos

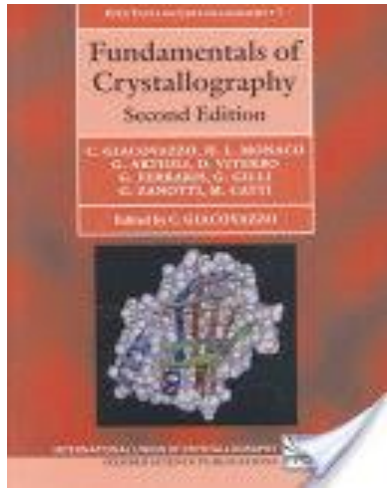
**FCC: (a) reduced sphere  
(b) atomic packing of  
an FCC (110) plane**



**BCC: (a) reduced sphere  
(b) atomic packing of  
an BCC (110) plane**

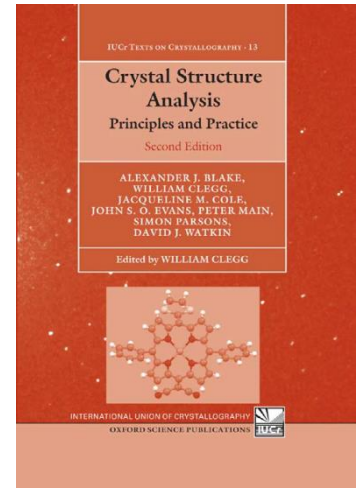


## ■ Referencias



**Fundamentals of Crystallography.**  
IUCr Book Series  
*Edited by Carmelo Giacovazzo*

**Crystal Structure Analysis**  
Principles and Practice  
IUCr Book Series  
*Edited by William Clegg*



### Visualizar planos

<http://calistry.org/calculate/latticePlanes>

[MillerIndices](#)

**Introduction to  
Crystallography**  
Frank Hoffmann  
Springer  
2020

