

ESTADO SOLIDO. SOLIDOS CRISTALINOS Y AMORFOS. NOCIONES DE CRISTALES Y MINERALES.

I- INTRODUCCION.

La mayor parte de los minerales presentes en la corteza terrestre se encuentran en estado sólido cristalino, los cuales oscilan en torno a posiciones de equilibrio, caracterizados espacialmente por un ordenamiento atómico regular. Otros minerales llamados amorfos, son carentes de ordenamiento, los vidrios son ejemplos de estos materiales (también llamados líquidos súper enfriados), ya que fluyen muy lentamente. Los sólidos cristalinos se fragmentan a lo largo de planos de la red cristalina, caracterizándose por ángulos interfaciales. Los sólidos amorfos, carecen de estos ángulos regulares, dando bordes disparejos. Los cristales tienen puntos de fusión bien definidos, mientras que los amorfos pueden fundir a distintas temperaturas. En las sustancias en estado cristalino, la disposición atómica varía con la dirección; se dice por lo tanto que son anisótropos, es decir, que no presentan en sus diversas direcciones las mismas propiedades físicas (conductibilidad eléctrica, refracción, dureza, brillo, luminiscencia, exfoliación, etc.). Todos los cristales son cuerpos anisótropos, mientras que las sustancias amorfas (que no producen cristales), los gases y la casi totalidad de los líquidos son cuerpos isótropos (esto es, con características físicas constantes en todas las direcciones).

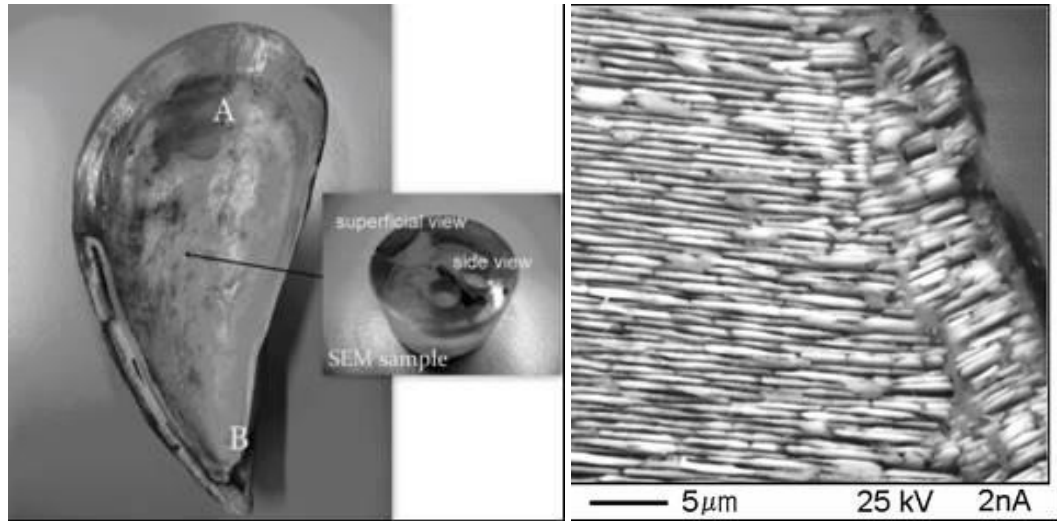
Una propiedad física relevante es la velocidad de crecimiento de cristales, la que varía con la dirección en forma discontinua. Por este motivo, las sustancias que se solidifican pueden adquirir, en condiciones favorables de formación, formas poliédricas más o menos regulares, constituyendo los cuerpos denominados cristales. Los cristales son poliedros naturales que poseen formas geométricas típicas construidas por superficies planas, denominadas caras. Hay diversos tipos de minerales, un subconjunto interesante hoy en día en ingeniería son los biominerales, como los huesos, uñas, cáscaras de huevo o incluso conchas marinas, dado que tienen aplicaciones en biomimética, es decir, se desea inspirarse en ellos para generar nuevos materiales y aplicaciones.

A continuación se presenta en la figura 1, una micrografía de SEM y un estudio DRX (microscopía electrónica de barrido) de una concha marina, de cholga (*Aulacomya Ater*). Se aprecian láminas cristalinas orientadas de Aragonita y Calcita (CaCO_3) unidas por materia orgánica de un 5% en peso, en una estructura de muro. Se sabe además que los grupos funcionales de la matriz orgánica favorecen ciertas direcciones de crecimiento de cristales y fases inorgánicas mientras que otros inhiben crecimiento. Por esta razón un diente crece en direcciones preferentes y tiene una morfología característica. Esto es aplicable al crecimiento de cualquier mineral o metal, la presencia de impurezas cambia localmente la termodinámica del sistema generando un nuevo entorno y con esto nuevas condiciones de nucleación y crecimiento de cristales.

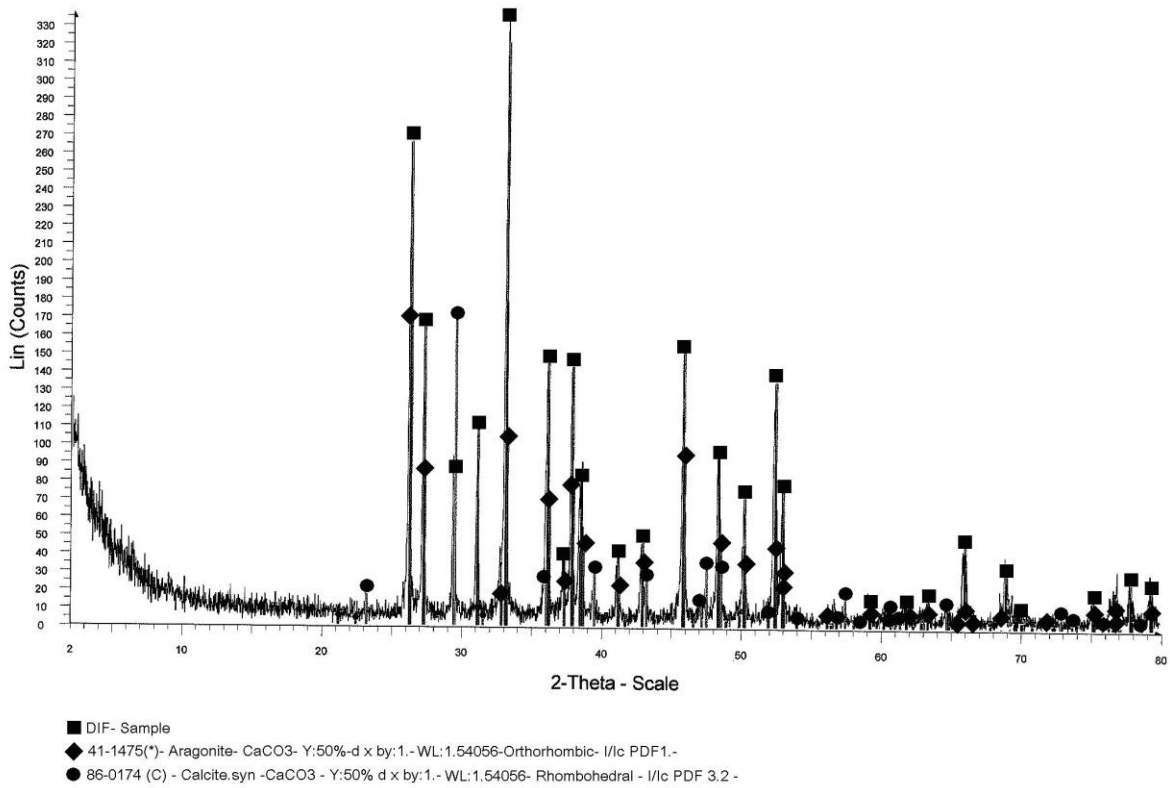
Los biocerámicos tienen grandes propiedades al impacto, la compresión y la flexión (propiedades mecánicas). Con SEM es posible ver su estructura microscópica a escala micrométrica y con DRX es posible identificar las diversas fases cristalinas presentes.

La cristalografía es la ciencia que estudia la morfología externa de los cristales y su estructura interna. El crecimiento regular de los cristales se logra si las condiciones ambientales son uniformes y constantes, supuestos que pocas veces cumplen. Es frecuente encontrar cristales con caras que crecen de formas distintas. Se habla de cristales con crecimientos presentes, orientados. Este inconveniente, desde el punto de vista cristalográfico, pueden entenderse gracias a cristales modelo, gracias a una traslación ideal de las caras. En general los cristales crecen a partir de sitios de nucleación, llamados gérmenes que al alcanzar un tamaño crítico se llaman núcleos. Si hay presentes muchos núcleos, en general se forman tamaños de cristal pequeños y al revés, pocos núcleos generan tamaños grandes. Los cristales que crecen al lado de otros a partir de núcleos distintos en general tienen orientaciones distintas y se conocen como granos, los cuales al crecer en algún instante adquieren condiciones de frontera. Esa frontera es conocida como borde de grano. Un grano en general es mono cristalino y un cristal constituido por muchos granos se entiende como una sustancia poli cristalina. Estas características son de gran importancia en metalurgia y en propiedades mecánicas de los minerales, del mismo modo que afecta otras propiedades físicas y químicas.

Figura 1: SEM y difractograma de DRX de Aulacomya Ater.



Aulacomya ater (A)



II- LA SIMETRÍA DE LOS CRISTALES

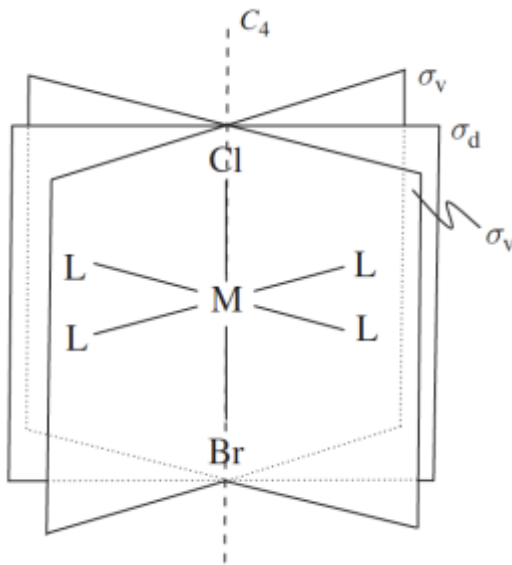
Los cristales definidos por formas geométricas regulares, poseen propiedades de simetría. En los cristales se puede reconocer tres elementos de simetría: centro, planos y ejes.

Centro de simetría. Punto que divide por la mitad todas las rectas que unen desde lados opuestos elementos equivalentes del cristal. Por tanto, un poliedro dotado de centro de simetría presenta pares de vértices caras y aristas opuestas y paralelas equivalentes.

Plano de simetría. Es aquel plano ideal que divide un cristal en dos partes iguales y especularmente simétricas. Un mismo poliedro puede tener un plano de simetría o varios. Hay Planos horizontal σ_h , vertical σ_v , y diedro σ_d .

La reflexión de cada punto en el plano resulta en una disposición indistinguible de la inicial. Decimos que es vertical si contiene al eje principal, y horizontal si es perpendicular al eje principal. El plano diedro también contiene al eje principal, pero bisecta el ángulo entre dos ejes C_2 perpendiculares al eje principal o entre dos planos σ_v . En la figura 2 podemos ver dos planos σ_v y un σ_d .

Figura 2: Molécula con cuatro ligando equivalentes "L".



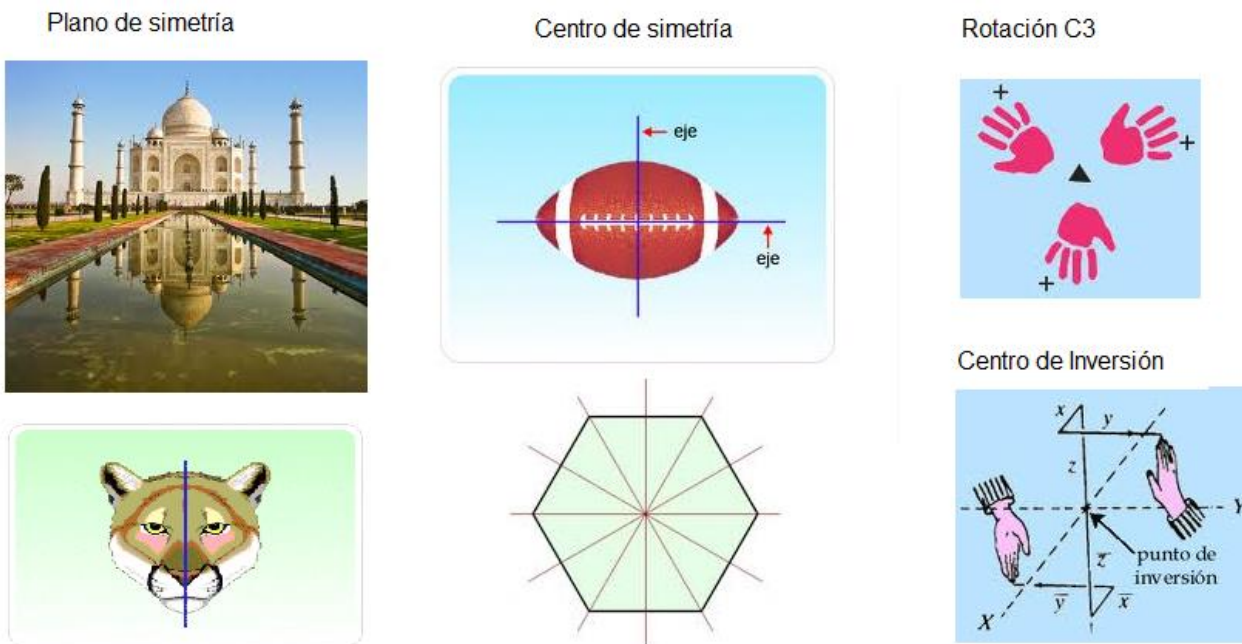
Eje de simetría. Si se hace rotar un eje 360° puede tener "n" posiciones equivalentes a la inicial y se habla de un eje de orden "n".

Los cristales pueden tener ejes de simetría de orden 2 (ejes binarios), orden 3 (ejes ternarios), orden 4 (ejes cuaternarios) u orden 6 (ejes senarios). En un eje C_3 tenemos las operaciones $C_3^1, C_3^2, C_3^3=E$ (obviamente $C_n^n=E$). Un exponente negativo indica un giro en sentido contrario, de manera que $C_3^{-1}=C_3^2$, donde E es la identidad.

Centro de inversión i: es un punto respecto al cual se invierten las coordenadas de cualquier punto del objeto en cuestión, de manera que $(x,y,z) \rightarrow (-x,-y,-z)$.

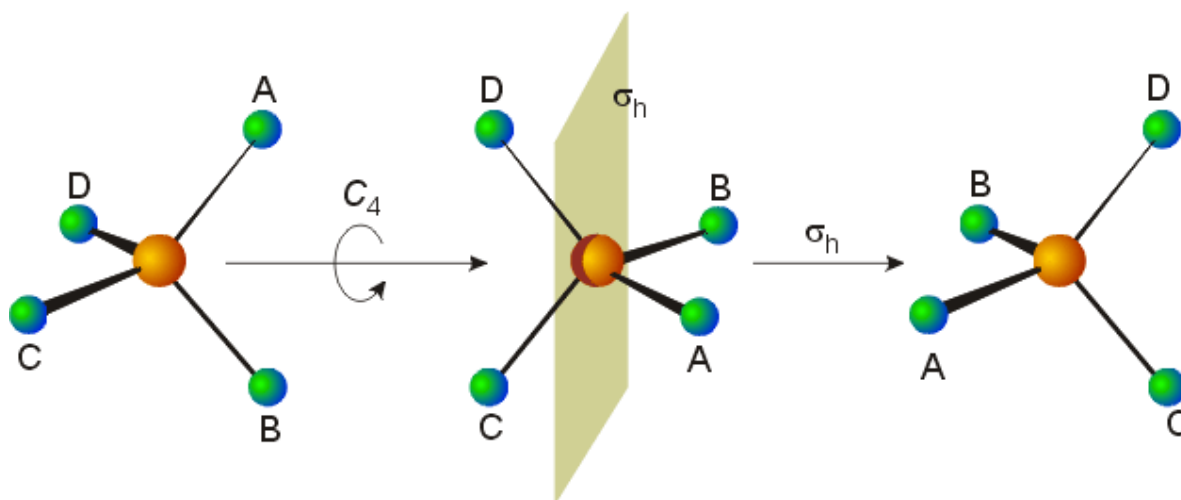
Otro concepto importante es el **grado de simetría**. Se entiende por grado de simetría al conjunto de elementos de simetría que coexisten en el interior de un cristal. En un cristal cúbico, por ejemplo, existen tres ejes cuaternarios, cuatro ejes ternarios, seis ejes binarios, nueve planos de simetría y el centro de simetría. En la figura 3 se ilustran algunos ejemplos de los distintos elementos de simetría.

Figura3: Ejemplos de Elementos de Simetría



Eje de rotación impropio S_n : es una combinación de dos operaciones de simetría: una reflexión alrededor de un eje C_n y una reflexión por un plano perpendicular al eje en cuestión. En la imagen de abajo podemos ver su aplicación en una molécula de metano, que consta de tres S_4 . Hay que observar además que los elementos de simetría que generan el eje impropio S_n (es decir, el eje de rotación y el plano horizontal) no tienen por qué existir de manera independiente, tal y como se puede comprobar en la molécula de metano, figura 4.

Figura 4: Molécula de Metano.



II.1 Coordenadas de simetría.

Modelo de 7 átomos. Introducción de un conjunto representativo de coordenadas internas

Se puede definir, por ejemplo, un conjunto de coordenadas internas que tiene relación con el “stretching” y “bending” de los enlaces presentes en el sistema de siete átomos descritos en la figura 5 y 6.

Se entiende por “stretching” (ver figura 5) a pequeñas oscilaciones que existen a lo largo de la longitud del enlace formado entre el átomo central (rojo) y alguno de los seis átomos que lo rodea. En total se definen seis coordenadas internas para stretching.

“Bending”, en cambio, es una vibración angular. Se puede definir como muestra la figura 6, doce coordenadas internas de “bending”. Para ello se requiere el átomo central (rojo) y dos átomos periféricos (verdes).

Figura 5: Coordenadas Δr (6)

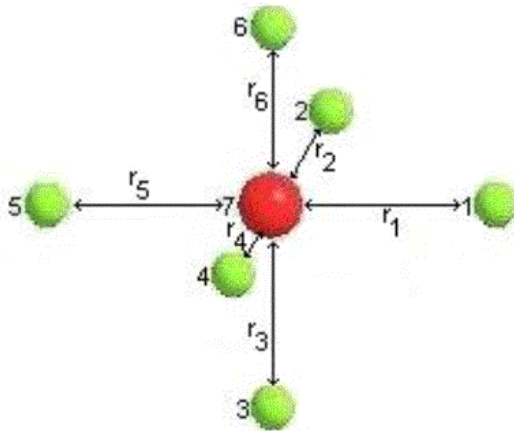
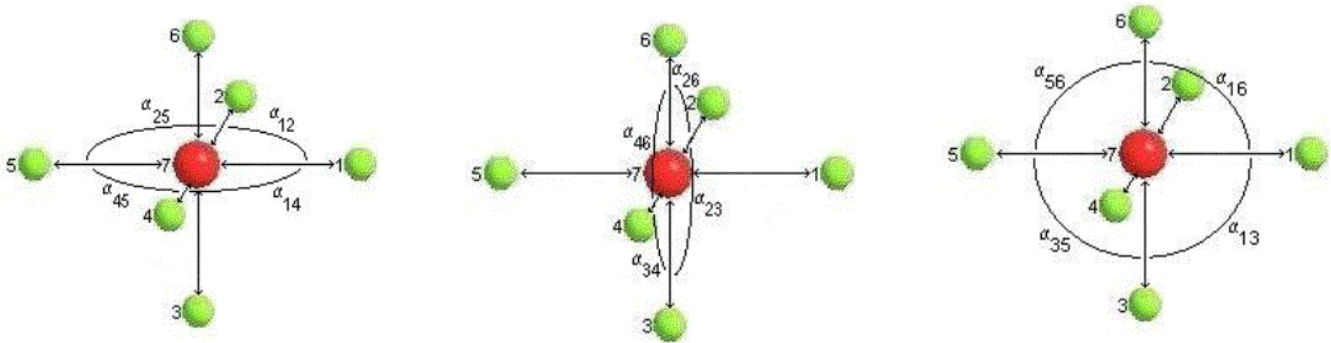


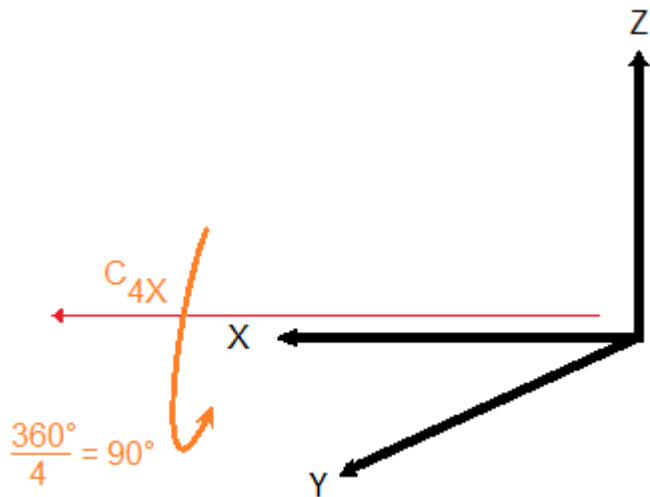
Figura 6: Coordenadas $\Delta\alpha$ (12)



Se genera para este conjunto ortogonal, operaciones de simetría, pensando que en el sistema de la figura 5 donde hay un átomo central rodeado por seis átomos equivalentes (de la misma naturaleza) situados sobre los tres ejes ortogonales. Las diferentes operaciones de simetría pueden representarse mediante matrices. Se definen, rotaciones propias (C) e impropias (S), planos de reflexión (σ) verticales, horizontales y diagonales, centros de inversión (Inv) y la identidad (E). En (B) se muestran todas las matrices que admite este sistema de átomos en configuración octaédrica.

Por ejemplo para C_{4X} se tiene un giro en 90° ($360^\circ/4$), a lo largo del eje "X", de modo que "Z" pasa a ser "Y" e "Y" pasa a ser "-Z", quedando "X" invariante. Notar que el giro es contra las manecillas del reloj, como muestra la figura 7.

Figura 7: Ilustración de un eje C_{4X}



Donde la matriz representante queda definida mediante:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ -z \\ y \end{pmatrix}$$

Las Matrices representativas del subgrupo de las rotaciones son las siguientes para el ejemplo en estudio:

$$C_{4x} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{4y} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{4z} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$C_{4x}^* = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{4y}^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{4z}^* = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$C_{2x} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad C_{2y} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad C_{2z} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$C_{111} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{111}^* = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{11\bar{1}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$C_{11\bar{1}}^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$C_{\bar{1}\bar{1}1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{\bar{1}\bar{1}1}^* = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{2xy} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$C_{2xy}^* = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad C_{2yz} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{2yz}^* = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$C_{2zx} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad C_{2zx}^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad Inv = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$S_{111} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{111}^* = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$S_{\bar{1}\bar{1}1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{\bar{1}\bar{1}1}^* = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{\bar{1}\bar{1}\bar{1}}^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$S_{1\bar{1}1} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{1\bar{1}1}^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{4xy} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$S_{4xy}^* = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad S_{4yz} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{4yz}^* = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$S_{4zx} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad S_{4zx}^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_{hx} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_{hy} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_{hz} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_{dx} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_{dx}' = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_{dy} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_{dy}' = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_{dz} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_{dz}' = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Todas las matrices descritas anteriormente pueden aplicarse sobre las coordenadas internas descritas en las figuras 5 y 6 y el resultado de cada operación se tabula a continuación.

Operaciones de Simetría sobre coordenadas internas

a) Operaciones de simetría sobre coordenadas internas "Δγ":

| E | C _{2x} | C _{2y} | C _{2z} | C _{4z} | C _{4x} | C _{4y} | C _{4z'} | C _{4x'} | C _{4y'} | C ₁₁₁ | C _{111*} | C ₁₁₁ | C _{111*} | C ₁₁₁ | C _{111*} |
|-------------------|------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|------------------|------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| x[1] | x[1] | x[5] | x[5] | x[2] | x[4] | x[3] | x[4] | x[1] | x[6] | x[3] | x[2] | x[6] | x[4] | x[2] | x[6] |
| x[2] | x[4] | x[2] | x[4] | x[5] | x[6] | x[2] | x[1] | x[3] | x[2] | x[1] | x[3] | x[5] | x[3] | x[6] | x[1] |
| x[3] | x[6] | x[6] | x[3] | x[3] | x[2] | x[5] | x[3] | x[4] | x[1] | x[2] | x[1] | x[2] | x[5] | x[5] | x[4] |
| x[4] | x[2] | x[4] | x[2] | x[1] | x[3] | x[4] | x[5] | x[6] | x[4] | x[5] | x[6] | x[1] | x[6] | x[3] | x[5] |
| x[5] | x[5] | x[1] | x[1] | x[4] | x[5] | x[6] | x[2] | x[5] | x[3] | x[6] | x[4] | x[3] | x[2] | x[4] | x[3] |
| x[6] | x[3] | x[3] | x[6] | x[6] | x[4] | x[1] | x[6] | x[2] | x[5] | x[4] | x[5] | x[4] | x[1] | x[1] | x[2] |
| C _{111*} | C ₁₁₁ | C _{2xy} | C _{2xy*} | C _{2yz} | C _{2yz*} | C _{2zx} | C _{2zx*} | Inv | S ₁₁₁ | S _{111*} | S ₁₁₁ | S _{111*} | S ₁₁₁ | S _{111*} | S ₁₁₁ |
| x[3] | x[4] | x[4] | x[2] | x[5] | x[5] | x[6] | x[3] | x[5] | x[4] | x[3] | x[6] | x[2] | x[6] | x[4] | x[3] |
| x[5] | x[6] | x[5] | x[1] | x[3] | x[6] | x[4] | x[4] | x[4] | x[3] | x[5] | x[1] | x[3] | x[5] | x[6] | x[1] |
| x[4] | x[1] | x[6] | x[6] | x[2] | x[4] | x[5] | x[1] | x[6] | x[1] | x[2] | x[2] | x[6] | x[4] | x[5] | x[4] |
| x[1] | x[3] | x[1] | x[5] | x[6] | x[3] | x[2] | x[2] | x[2] | x[6] | x[1] | x[5] | x[6] | x[1] | x[3] | x[5] |
| x[6] | x[2] | x[2] | x[4] | x[1] | x[1] | x[3] | x[6] | x[1] | x[2] | x[6] | x[3] | x[4] | x[3] | x[2] | x[6] |
| x[2] | x[5] | x[3] | x[3] | x[4] | x[2] | x[1] | x[5] | x[3] | x[5] | x[4] | x[4] | x[1] | x[2] | x[1] | x[2] |
| S _{111*} | S _{4xy} | S _{4xy*} | S _{4yz} | S _{4yz*} | S _{4zx} | S _{4zx*} | σ _{hx} | σ _{hy} | σ _{hz} | σ _{dx} | σ _{dx'} | σ _{dx} | σ _{dx'} | σ _{dy} | σ _{dy'} |
| x[2] | x[4] | x[2] | x[5] | x[5] | x[6] | x[3] | x[5] | x[1] | x[1] | x[2] | x[4] | x[1] | x[1] | x[6] | x[3] |
| x[6] | x[1] | x[5] | x[3] | x[6] | x[4] | x[4] | x[2] | x[4] | x[2] | x[1] | x[5] | x[6] | x[3] | x[2] | x[2] |
| x[1] | x[6] | x[6] | x[4] | x[2] | x[1] | x[5] | x[3] | x[3] | x[6] | x[3] | x[3] | x[4] | x[2] | x[5] | x[1] |
| x[3] | x[5] | x[1] | x[6] | x[3] | x[2] | x[2] | x[4] | x[2] | x[4] | x[5] | x[1] | x[3] | x[6] | x[4] | x[4] |
| x[4] | x[2] | x[4] | x[1] | x[1] | x[3] | x[6] | x[1] | x[5] | x[5] | x[4] | x[2] | x[5] | x[5] | x[3] | x[6] |
| x[5] | x[3] | x[3] | x[2] | x[4] | x[5] | x[1] | x[6] | x[6] | x[3] | x[6] | x[6] | x[2] | x[4] | x[1] | x[5] |

III. LA ESTRUCTURA DE LOS CRISTALES

La principal característica de los cristales es que la disposición espacial de los átomos que los constituyen es regular y periódica. En 1784 el abad francés René Just Haüy observando el fenómeno de la exfoliación (propiedad de un mineral de subdividirse fácilmente en partes más pequeñas similares), sostuvo la hipótesis de que cada cristal debía estar constituido por otros más pequeños: poliedros elementales indivisibles, denominadas moléculas integrantes (sólidos elementales), que conservan la composición química y el grado de simetría de cristal de partida. Los cristales de galena, por ejemplo, se rompen fácilmente en sólidos de exfoliación de forma cúbica. Si pudiésemos subdividir estos sólidos en partes, siempre más pequeñas, se obtendría una partícula microscópica que también tendría forma cúbica y composición igual al cuerpo de partida: es el llamado cubo elemental. Del mismo modo, con los cristales de calcita, que tienen exfoliación romboédrica, se puede llegar al romboedro elemental.

En 1848, August Bravais formuló su teoría sobre la estructura de los cristales, atribuyéndoles una estructura interna discontinua. De hecho, sustituyó la idea de moléculas integrantes por estructuras químicas dispuestas en las tres direcciones del espacio. Aparece el concepto de **celda unitaria**. Bravais consideró catorce tipos de retículos cristalinos determinados por átomos y moléculas en los cristales, llamados retículos elementales de Bravais o celda unitaria. De éstos, siete son simples y corresponden cada uno a uno de los siete sistemas de las redes de Bravais.

En 1879 el físico y cristalógrafo Leonhard Sohncke desarrolló la teoría de Bravais y estableció la existencia de 65 retículos diferentes (grupos de movimiento), con los cuales, de todos modos, quedan representadas solamente once de las treinta y dos clases de simetría.

Posteriormente, en 1891, combinando los elementos de simetría espacial independientes con los catorce retículos elementales, se obtienen 230 grupos espaciales, que representan todos los tipos de retículos posibles en los cristales, que son 230 modos de repetición de motivos en el espacio, compatibles con las redes de Bravais y la simetría de las estructuras.

III.1 Base y motivo de celdas cristalinas, definición formal de un cristal.

Un cristal es un objeto sólido constituido por átomos o moléculas con un patrón regular y ordenado que se repite en general en las tres dimensiones del espacio (salvo excepciones). Al definir un cristal simplemente se requiere definir una base, que puede producir nodos siguiendo un vector "r" de la forma $r = n_1a + n_2b + n_3c$ donde n_1 , n_2 y n_3 son cantidades enteras y a, b y c describen vectores que son base del espacio 3D, no necesariamente la base canónica. Esta red de nodos necesariamente requiere repetir en cada nodo un motivo, que no es otra cosa que un conjunto de átomos o moléculas que es invariante en el espacio e idéntico en cada nodo. La analogía industrial es el dibujo de un mantel o de un papel mural.

La estructura de menor volumen que puede definirse que guarda la información de todo el cristal es llamada celda unitaria. Esta celda queda definida por tres constantes del cristal a, b y c que definen las aristas de la celda y los ángulos α , β , γ entre aristas de manera que se define un paralelepípedo. A este conjunto de aristas y ángulos se les conoce como parámetros de red. Por convención α es formado por los vectores de las aristas b y c. Los otros ángulos son análogos. En general las aristas de las celdas tienen dimensiones de 3 a 40 Å.

Los átomos pueden nombrar sus posiciones usando la base a (1,0,0), b(0,1,0) y c(0,0,1), de manera que un átomo en el centro de la celda se denota por (0.5, 0.5, 0.5), entendiendo que la dimensión en Å se obtiene multiplicando posteriormente la coordenada por su arista.

Las celdas primitivas solo tienen un nodo en su interior. Cualquier celda con más de un nodo en su interior no es una celda primitiva. La figura 8 ilustra una red cuyas celdas tienen en su interior dos nodos por lo

que no son primitivas. Sobre esa red se dibuja el motivo que es una unidad asimétrica, constituida en este caso por dos átomos. Notar que este modelo de esferas rígidas es una idealización ya que los átomos en general no son esferas. A partir del radio de estas esferas y de la naturaleza del enlace presente en el cristal, se habla de radio iónico o radio covalente. La tabla periódica ofrece un valor de estos radios que debe entenderse como una aproximación de la realidad ya que es el cristal y su entorno quien define el radio de un átomo y no al revés como se podría pensar. Además el concepto de radio es discutible en física, ya que los orbitales de los átomos en general son infinitos, por lo que esto es un modelo que permite entender la estructura cristalina, aunque no interpreta completamente la física del problema.

Figura 8: Base y motivo de un cristal

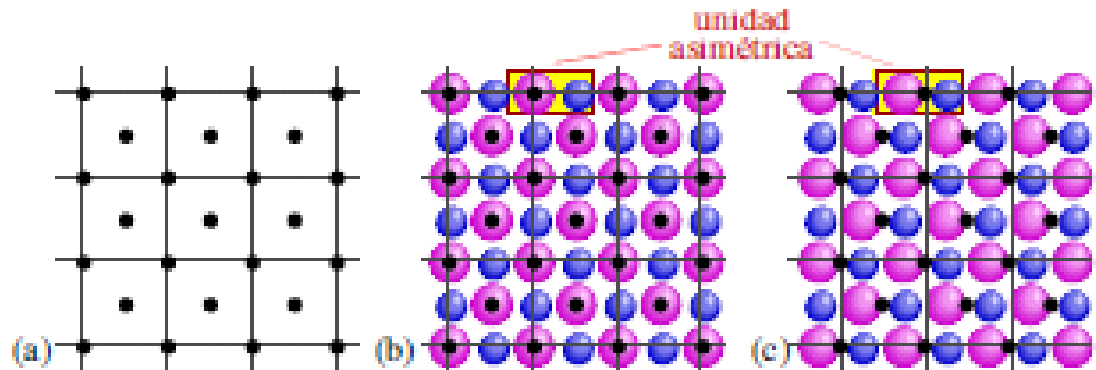
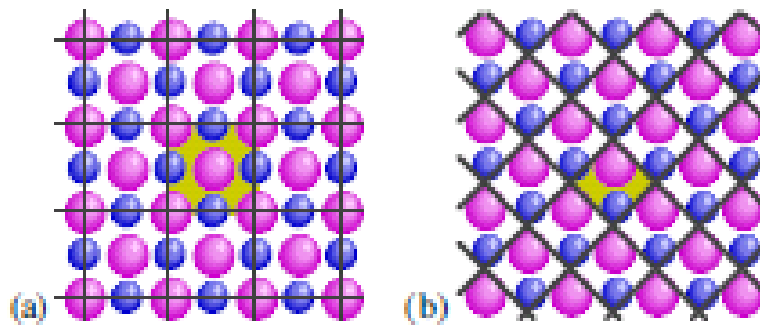


Figura 9: Posibles celdas unitarias



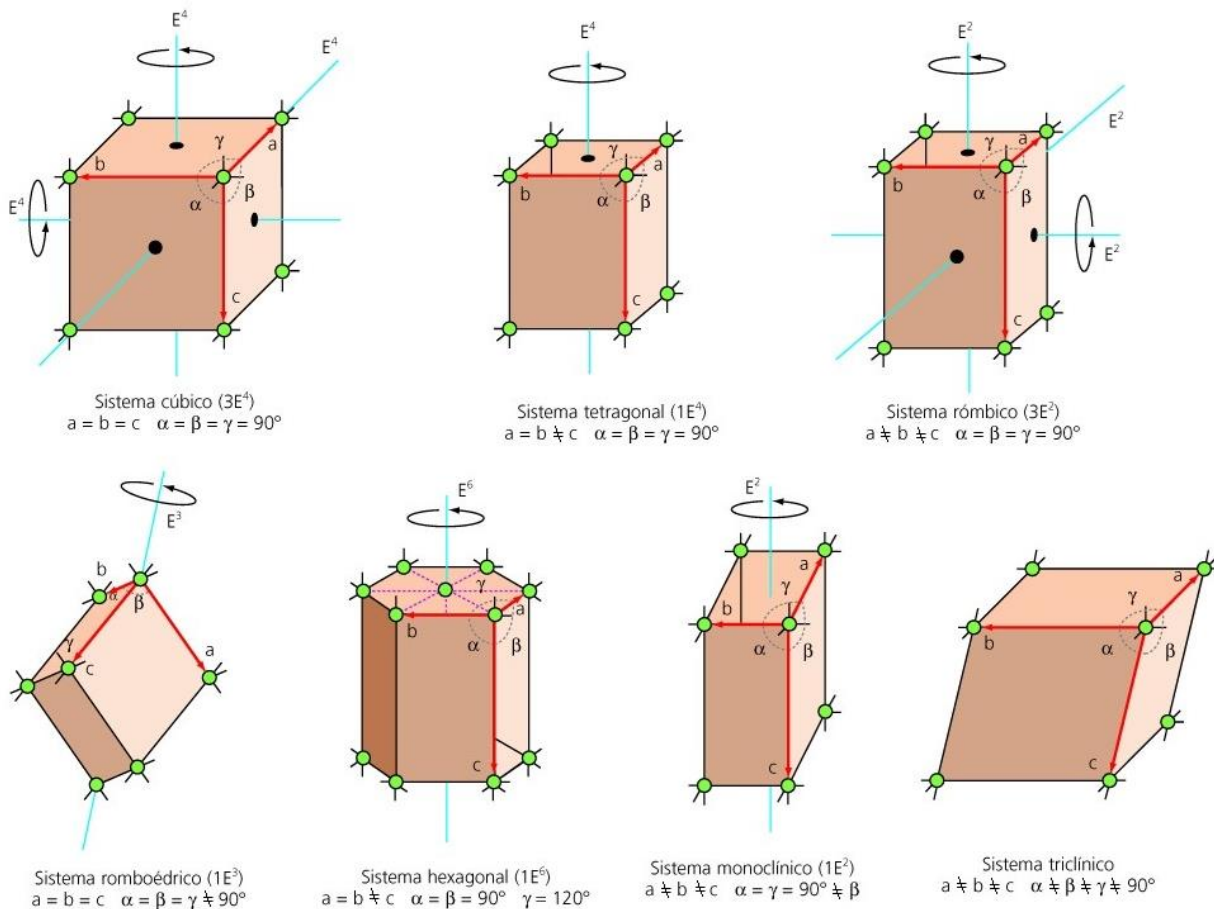
En la figura 9 se observan dos posibles retículos del mismo cristal. El caso (b) es una celda primitiva ya que solo hay un nodo presente en la celda que repite un motivo constituido por los dos átomos. El caso (a) presenta 1 átomo rosado en el interior de la celda y otros cuatro ocupando los vértices, lo que es $\frac{1}{4} * 4 = 1$. O sea posee dos átomos netos rosados en la celda. Adicionalmente los átomos en azul están en las aristas de la celda y ocupa cada uno $\frac{1}{2}$ del interior de la celda (ya que es compartido cada uno por dos celdas. El número total de átomos azules al interior de la celda es de dos átomos ($\frac{1}{2} * 4$). Luego en el caso (a) hay dos átomos azules y dos rosados. Se puede inferir que el área del retículo (a) es el doble del área del retículo (b), ya que tiene el doble de átomos (observar zona en amarillo). Ambas son celdas unitarias, pero sólo el segundo caso corresponde a una primitiva.

III.2 Clases de simetría y sistemas cristalinos.

Los cristales con el mismo grado de simetría constituyen una clase. Las clases son 32 (grupos puntuales), las cuales no presentan ningún elemento de simetría, se reúnen en siete sistemas. Al adicionar elementos de simetría, es posible definir 230 grupos espaciales que dan cuenta de cualquier cristal.

Los sistemas cristalinos se ordenan en tres grupos: monométrico, dimétrico y trimétrico, según las dimensiones de los parámetros de red que son los tres ángulos y las tres aristas. Ver figura 10.

Figura 10: Tipos de celdas primitivas que representan los siete sistemas cristalinos.



(a) GRUPO MONOMÉTRICO: El grupo mono métrico es único conocido como sistema cúbico. Los ángulos axiales son rectos y las aristas todas iguales.

(b) GRUPO DIMÉTRICO: El grupo dimétrico comprende tres sistemas: hexagonal, trigonal o romboédrico y tetragonal. La cara fundamental corta los ejes horizontales a la misma distancia y el eje vertical a una distancia distinta; así hay dos parámetros longitudes distintos.

(c) GRUPO TRIMÉTRICO: El grupo trimétrico comprende tres sistemas: rómbico, monoclinico y triclínico. En el grupo trimétrico la cara fundamental corta los ejes a tres distancias distintas, por lo que los parámetros longitudes son todos diferentes. Ver tabla I, donde se ilustran ejemplos notables.

Tabla I: Ejemplos de sistemas cristalinos para minerales

| Grupo | Celda | Ejemplos |
|-------|-------------|---|
| 1 | Cúbico | Diamante, alumbre, oro, hierro, plomo, cobre, plata |
| 2 | Tetragonal | Estaño, circonio, rutilo, scheelita |
| 3 | Rómbico | Topacio, azufre, yodo, nitrato de plata |
| 4 | Monoclinico | Bórax, azúcar de caña, yeso |
| 5 | Triclínico | Sulfato de cobre, ácido bórico |
| 6 | Trigonal | Arsénico, cuarzo, hielo, grafito |
| 7 | Hexagonal | Magnesio, cinc, berilio, cadmio, calcio |

La figura 12 ilustra las 14 redes de Bravais que es posible distinguir. Notar que no todas son celdas primitivas. La figura 11 destaca el sistema cúbico con sus tres redes cristalinas conocidas, la cúbica simple, (CS), la cúbica centrada en el cuerpo (CCB) y la cúbica centrada en las caras (CCF). La figura 13 ilustra una celda hexagonal, ella es la que tiene el mayor grado de compactación.

Figura 11: Sistema cúbico.

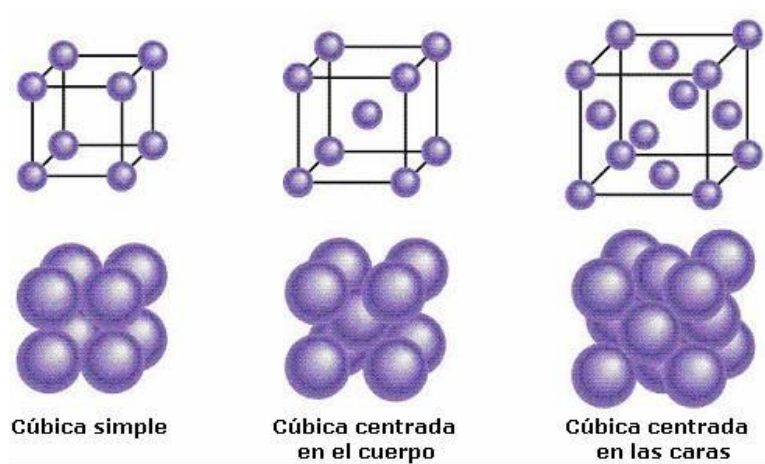


Figura 12: Las catorce redes de Bravais.

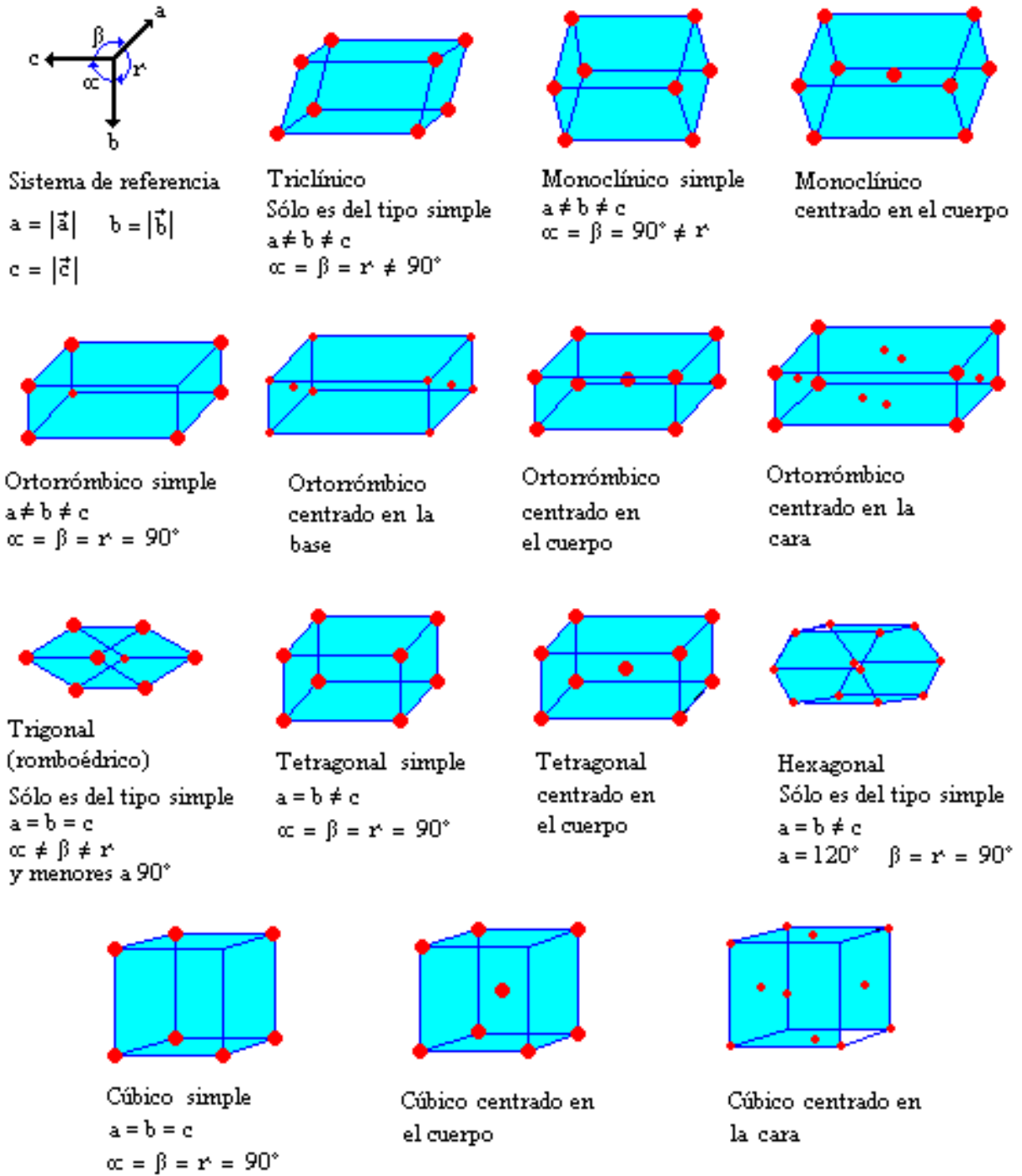
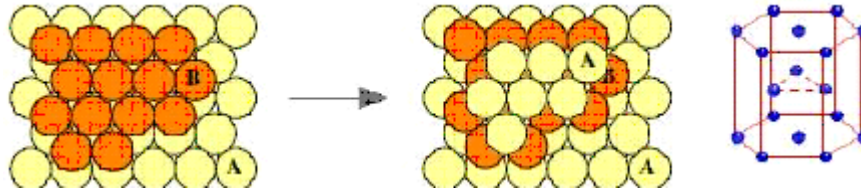


Figura 13: Celda Hexagonal compacta



III.3 Nano ingeniería - Nanotecnología

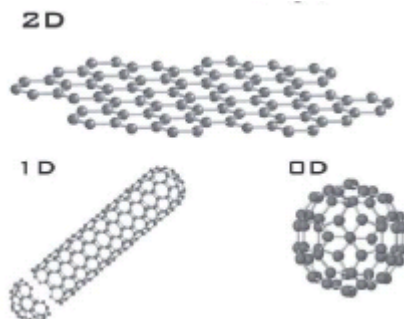
En los últimos años, la nanotecnología ha adquirido gran relevancia, primero a partir del descubrimiento de los “soccerones”, para luego lograr crear los nanotubos de carbono, que revolucionan el estudio del campo cuántico y recientemente con el descubrimiento del grafeno (película 2D, con distribución similar a la de un panal de abejas, ver figura 14), se promete una nueva era tecnológica, equivalente a la revolución de los plásticos.

El grafeno es un alótropo del carbono, una hojuela bidimensional cuasi plana formada por una red hexagonal de átomos de carbono. Sus propiedades destacan:

- Es el material con la mayor conductividad térmica y eléctrica.
- La mayor dureza siendo el más delgado y liviano.
- Reacciona químicamente con otras sustancias para producir compuestos de diferentes propiedades. Esto lo dota de gran potencial de desarrollo.
- Soporte de radiación ionizante.
- Gran ligereza, como la fibra de carbono, pero más flexible.
- Menor efecto Joule: se calienta menos al conducir los electrones.
- Para una misma tarea que el silicio, menor consumo de electricidad.
- Generación de electricidad al ser alcanzado por la luz. Estas propiedades prometen ya mucho en campos de telecomunicaciones, almacenamiento de energía, electrónica y deja abierta la posibilidad de nuevas aplicaciones en variados campos.

Aunque las aplicaciones más espectaculares y avanzadas del grafeno probablemente se producirán en el campo de la electrónica, por sus interesantes propiedades de conducción de calor y electricidad, sus primeros usos tendrán lugar en una de las facetas más cotidianas, accesibles y comunes de nuestra existencia: la indumentaria.

Figura 14: Grafeno, Nanotubo y Fullerenos (Socceron)



Se ha identificado propiedades antibacterianas de este material, comprobando que las bacterias no pueden crecer sobre fibras de grafeno, mientras que no se observa ningún efecto adverso sobre las células humanas. Dado que es un material que se produce en grandes volúmenes podría utilizarse para vendajes, envases para alimentos o para fabricar prendas de vestir y calzado inodoro, generado por la actividad bacteriana. Adicionalmente es un material que posee grandes propiedades mecánicas, poco peso, gran área superficial, impermeabilidad y flexibilidad.

El grafeno y sus derivados han abierto una nueva era en el campo de la Física Química y de las ciencias de los materiales.

El grafeno se produce en forma de láminas y en polvo, y cada tipo de material tiene aplicaciones distintas. En general, sus láminas se usan para la electrónica y el polvo para dopaje de materiales y así cambiar sus propiedades mecánicas térmicas y eléctricas. En electrónica se ha pensado usar para el desarrollo de pantallas flexibles, sensores y en polvo, para ser integrado en plásticos, resinas, pinturas y barnices. El material al cual se ha incorporado el grafeno, puede conducir la corriente eléctrica o puede transmitir calor.

En la industria del calzado se piensa aumentar la conductividad eléctrica del material que lo compone para fabricar zapatos de seguridad que puedan disipar la electricidad estática que se genera al caminar, eliminando las posibilidades de que se produzcan chispas.

Se piensan aplicaciones para dopar neumáticos que tengan mayor adherencia, aumente su duración y permitan ahorrar gasolina. Esto se lograría dopando grafeno en el caucho.

Otras aplicaciones dicen relación con aplicaciones en electrónica flexible, para baterías, pilas de combustible, sensores de nivel en los coches y en parachoques.

Dado que el grafeno es un material con alta conductividad térmica, se piensa utilizar en tuberías para geotermia, en disipadores de calor e incluso en tanques militares.

IV. Las Asociaciones de Cristales

Normalmente los cristales pueden recubrir la superficie de las rocas (drusas) o revestir el interior de cavidades (geodas). En la naturaleza son bastante raros los cristales aislados; en general, se encuentran reunidos en grupos más o menos numerosos (asociaciones cristalinas).

Cuando dos o más individuos de la misma especie mineralógica se unen y muestran un paralelismo de direcciones cristalográficas (aristas, planos o ejes de simetría), resulta una asociación paralela (típica de minerales como el cuarzo y la cerusita).

Las maclas son asociaciones cristalinas en las cuales dos o más individuos de la misma especie cristalina están dispuestos de forma que cada individuo es una imagen de otro respecto a un plano.

Un cristal cuyo entorno es una proyección de la celda unitaria en las tres direcciones del espacio físico, se conoce como monocristal. Cuando un sólido es nuevo (ya sea por síntesis en laboratorio o porque no sencillamente era desconocido hasta ahora), es necesario un monocristal de la especie para poder identificar su estructura (dimensiones organización atómica y celda unitaria) por técnicas como difracción de rayos X. –la mayoría de los cristales crecen a partir de gérmenes que son pequeñas agrupaciones de átomos que pasan de estado líquido a sólido que al alcanzar un tamaño crítico, se conocen como núcleos cristalinos. Estos núcleos no

necesariamente tienen las mismas direcciones de crecimiento. Dependiendo del número de estos núcleos, los cristales asociados a ellos crecen hasta toparse en sus fronteras definidas por los cristales generados por otros núcleos. Al cristal generado por un núcleo se le conoce como grano del cristal y a la frontera se le denomina borde de grano. Un monocristal en general se obtiene a partir de un solo núcleo presente en la solución, cuyo cristal en crecimiento no alcanza a toparse con otros cristales que estén en crecimiento. En general las propiedades físicas y químicas en monocristales varían según la dirección en que se miden (aniotrópicos), mientras que especies policristalinas, con muchos y pequeños granos tiende a ser isotrópico (por compensación, o sea por tener una distribución numerosa de granos orientados al azar) siempre y cuando no sean cristales con preferencia de crecimiento en alguna dirección u orientación de los cristales. El tamaño de estos granos define muchas propiedades de los materiales cristalinos. Un ejemplo típico es la recristalización de granos que se produce en hierros al carbono por técnicas como el templado, de manera de cambiar las propiedades mecánicas del material.

Las celdas unitarias describen la geometría a escala microscópica, sin embargo, otros factores como presencia de impurezas, la termodinámica de su formación, velocidades de crecimiento distintas o incluso caras con inhibición de crecimiento o en el caso de huesos, dientes o conchas marinas, matrices orgánicas, definen la macroestructura de los cristales. Esta estructura macroscópica se llama hábito cristalino. Minerales con la misma estructura cristalina no tienen por qué presentar el mismo hábito cristalino, e incluso un mismo mineral puede presentar variados hábitos, siendo algunos de ellos característicos de la zona geográfica. Dentro de los hábitos más comunes están:

- a) Acicular, que son cristales aislados en forma de agujas
- b) Prismático o columnar.
- c) Coraloide, o sea con forma de coral
- d) Filiforme, que tiene la forma de finas hebras
- e) Piramidal o bipiramidal, dado que termina en una pirámide en uno o en sus dos extremos.
- f) Según forma geométrica (cubo, octaedro)
- g) Arborescente (forma de árbol)
- h) Dendrítico, con forma de hoja de planta
- i) Reticulado, cuyos cristales son láminas alargadas finas formando una red
- j) Fibroso, mostrando pequeñas fibras paralelas que pueden separarse
- k) Foliado, de modo que sus pequeñas laminas pueden separarse
- l) Geoda, cuyos cristales recubren el interior de una roca
- m) Drusa, cristales que recubren la superficie de una roca
- n) Radial, cristales en círculo desde un punto central
- o) Masas o compacto, sin forma determinada
- p) Globular, en forma de esferas
- q) Botroidal, esferas que forman racimos
- r) Reniforme, con forma de riñón
- s) Mamilar, forma de mamas
- t) Bandeado, bandas de distintos colores como ágatas
- u) Pisolítico, cuyo aspecto es como los huevos de peces
- v) Granular, con pequeños granos de mineral
- w) Amigdaloides, con forma de almendras
- x) Nodular, con forma de esferas irregulares
- y) Estalactítico y estalagmítico, dependiendo si forma el techo o el piso del lugar donde se encuentre, tienen forma de chuzo, que forman un pilar cristalino si con el tiempo ambos cristales se unen (en general se forman por goteos de salmueras saturadas).

V. Dureza y Ductilidad. Dependencia de la Naturaleza del enlace.

La dureza es la propiedad que tienen los minerales de resistir el rayado y la abrasión. Se trata, por consiguiente, de una propiedad física que mide la resistencia que oponen cuando son sometidos a una presión, pero sin llegar a romperse. Un mineral puede ser muy duro, pero a la vez frágil, por el hecho de romperse con facilidad ante ciertos esfuerzos, como es el caso del diamante.

La estructura cristalina y el tipo de enlace que une los átomos, iones o moléculas del mineral son los dos factores que más influyen en su dureza. Por lo que respecta a la estructura cristalina, la dureza será más grande cuanto menor sea la distancia que separa las partículas, es decir, cuanto más cerrada sea su estructura. En cuanto a los enlaces, existen tres tipos fundamentales: covalente, iónico y metálico. Los minerales con enlaces covalentes destacan por su dureza. En estos enlaces, que se dan entre elementos no metálicos, los átomos se mantienen unidos al compartir electrones, por lo que la cohesión es muy fuerte. En los enlaces iónicos, en cambio, uno de los átomos capta electrones del otro; se da entre elementos metálicos y no metálicos. En ambos casos la dureza se manifiesta mediante una microfRACTURA, ya que las partículas no pueden fluir. Los minerales que presentan el tercer tipo de enlace, el metálico, suelen ser más blandos (dúctiles), y sus partículas pueden fluir plásticamente.

El enlace covalente es propio de los minerales duros, como el diamante o el cuarzo. La maleabilidad del oro, cobre o la plata se debe al enlace de sus átomos, de tipo metálico.

La Halita (NaCl) presenta enlace iónico. Tiene puntos reticulares ocupados por cationes y aniones, se mantienen unidos por atracción electrostática. Son duros, frágiles, punto de fusión alto y malos conductores de calor y electricidad. Son duros y quebradizos (frágiles), poseen altos puntos de fusión (sobre 300°C), son malos conductores del calor y de la electricidad como cristales; son solubles en agua (solventes polares) e insolubles en solventes apolares (benceno). Disueltos en solución son buenos conductores ya que producen iones (cationes positivos y aniones negativos). En general se forman este enlace entre elementos metálicos de los grupos I y II A con elementos electronegativos no metálicos tales como los de los grupos VI A y VII A. Esta estructura es adoptada por los haluros alcalinos como los de Li, Na, K, Rb y el CsF. También es adoptada por los óxidos de Ca, Mg, Sr, Ba y Cd.

La figura 15 (a) presenta la estructura del cristal iónico de cloruro de sodio (Halita), la cual presenta empaquetamiento cúbico. Cada ión presenta seis contraiones. En una celda unitaria se observan cuatro cationes de sodio y cuatro aniones de cloro preservando electroneutralidad del cristal. Debe tenerse presente que un vértice de celda se comparte entre 8 celdas, mientras que una cara comparte dos celdas.

La figura 15 (b) presenta una celda unitaria de un cristal iónico de cloruro de cesio. En ella cada ion está rodeado de 8 contraiones. La presentan también los compuestos como el CsCl, CsBr y CsI. La estructura del cloruro de cesio presenta una celda unidad cúbica simple en la que cada vértice está ocupado por el anión y el centro del cubo se ocupa por el catión, lo que conduce a una estequiometría uno es a uno, con coordinación 8.

El ejemplo 15 (c) ilustra una celda de blenda de zinc (ZnS). Cada ion está rodeado de cuatro contraiones. En un empaquetamiento de los aniones de tipo cúbico centrado en las caras en el que los cationes ocupan la mitad de los huecos tetraédricos.

La Wurtzita, un polimorfo de la blenda de zinc, también presenta fórmula química ZnS, pero su empaquetamiento es distinto como se observa en la figura 15(d). Los cationes ocupan la mitad de los huecos tetraédricos.

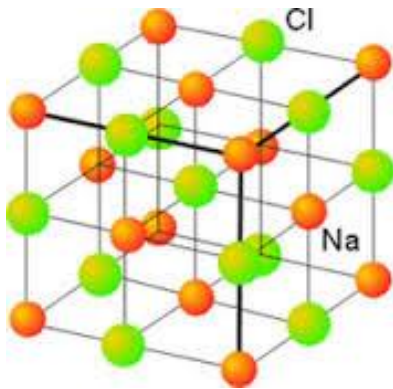
La Fluorita CaF₂ presenta un empaquetamiento cúbico. Su estructura cristalina iónica se ilustra en 15 (e). Esta estructura toma su nombre del mineral fluorita, CaF₂. Consiste en un empaquetamiento cúbico centrado en las caras de los cationes Ca²⁺ en el que los aniones F⁻ ocupan todos los huecos tetraédricos. En la

estructura de tipo fluorita, los aniones están rodeados de 4 cationes vecinos dispuestos en un entorno tetraédrico. Los cationes están rodeados de 8 aniones que se disponen en un entorno cúbico. Por lo tanto, los números de coordinación para el catión y el anión son de 8:4 respectivamente, lo que ofrece una estequiometría de 2:1.

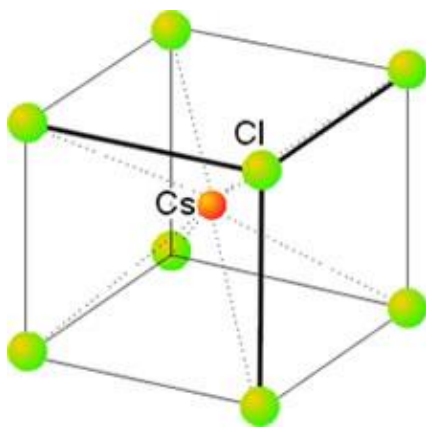
Finalmente la figura 15 (f) presenta la estructura de la celda unitaria de rutilo (TiO_2). Su empaquetamiento es hexagonal. Se basa en un empaquetamiento hexagonal compacto de los aniones en el que los cationes ocupan la mitad de los huecos octaédricos. Cada átomo de Ti está rodeado de seis átomos de oxígeno (disposición octaédrica) y cada átomo de oxígeno se rodea de tres átomos de titanio (disposición trigonal), de forma que la estructura de tipo rutilo presenta coordinación de 6:3.

Figura 15: Ejemplos de Celdas unitarias

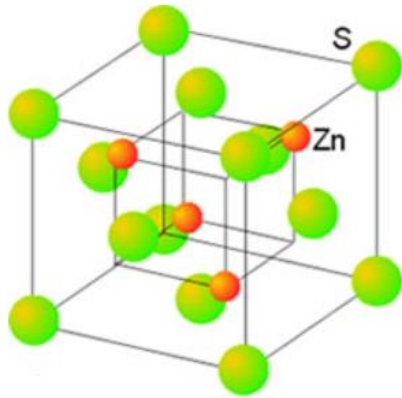
(a) Halita (NaCl , cúbica centrada en las caras)



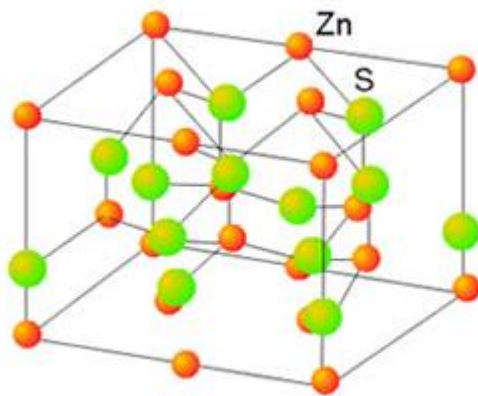
(b) Cloruro de Cesio (CsCl , cúbica simple)



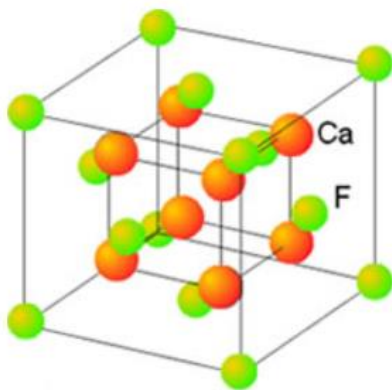
(c) Blenda de Zinc (ZnS , cúbica centrada en las caras)



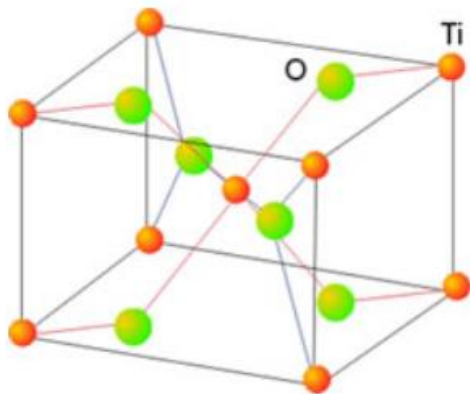
(d) Wurtzita, (ZnS , hexagonal)



(e) Fluorita (CaF_2 , cúbica centrada en las caras)



(f) Rutilo (TiO_2 , tetragonal)



V.1 Sitios tetraédricos y octaédricos.

En la estructura cristalina tiene relevancia los espacios (intersticios) que se generan al observar la estructura compactada en esferas rígidas, dado que son lugares que pueden en ocasiones ser ocupados por átomos de menor tamaño que pueden usar estos espacios sin distorsionar la red, ya sean impurezas, dopados o componentes deseados. Según el tamaño de esos átomos pueden ser de un radio crítico que si supera el radio del intersticio, distorsionan la red. Es común identificar dos de estos sitios: tetraédricos y octaédricos. Los sitios tetraédricos se ubican entre cuatro esferas en forma de tetraedro (de ahí su nombre), como se da por ejemplo en la configuración cúbica centrada en las caras. Los sitios octaédricos se ubican entre seis esferas. Pueden verse con facilidad en también en una estructura cubica centrada en las caras. Si hay N átomos en el cristal, habrá N sitios octaédricos, $2N$ sitios tetraédricos. Ver la figura 16 de manera de identificar ambos casos.

En general los compuestos intersticiales (o aleaciones intersticiales) son no estequiométricas, donde hay una matriz de átomos que aloja en su red cristalina metálica (metales de transición) a átomos pequeños como son el hidrógeno, boro, carbono, nitrógeno u oxígeno de manera que ellos pueden ocupar los intersticios sin deformar la red. Algunas redes típicas que también tienen esta cualidad son las de silicio o cuarzo. Un ejemplo de estas redes no estequiometrias son los hierros al carbono, formados por una red de hierro que puede alojar cantidades variables de carbono en sus intersticios. Obviamente la cantidad de carbono (composición de la aleación), la temperatura y velocidad de enfriamiento o tratamientos térmicos determina el tipo de cristales que se obtienen y por lo tanto, la naturaleza del hierro y su aplicación.

Figura 16: Sitios tetraédricos y octaédricos.

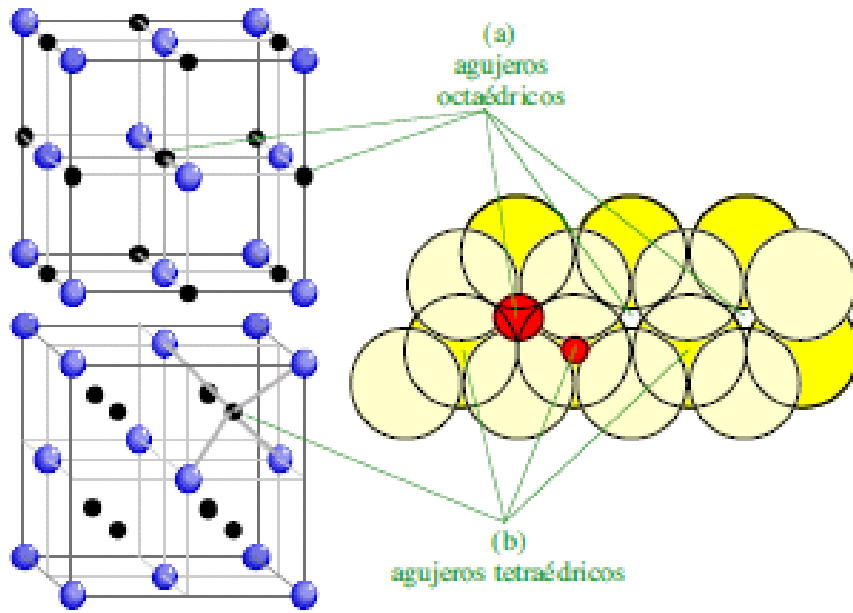


Figura 17: Celda unitaria carbono diamante.

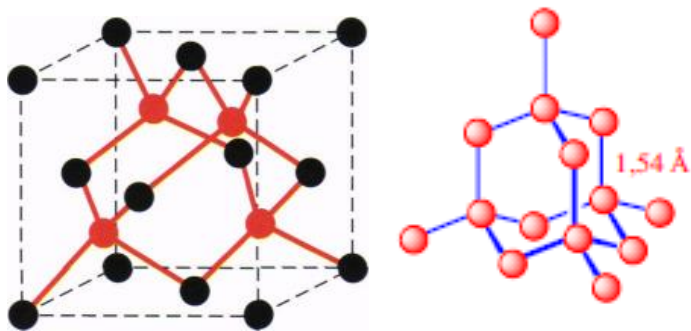
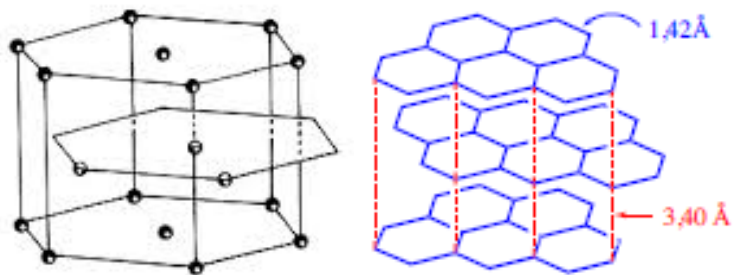


Figura 18: Carbono cristalino.



El grafito y el diamante tienen la misma composición química, átomos de carbono. Mientras que el grafito es un mineral extremadamente blando (1 en la escala de Mohs), el diamante es el mineral de mayor dureza (10). En el grafito, cada átomo de carbono está unido a otros tres mediante enlaces covalentes, en una estructura en capas, pero los enlaces entre las diferentes capas son muy débiles y le confieren una dureza muy baja. En cambio, en el diamante, cada átomo de carbono comparte electrones con otros cuatro átomos, enlaces covalentes, en una estructura tridimensional tetraédrica perfectamente empaquetada, que es la responsable de su gran dureza, lo que lo hace apto por sus propiedades ópticas para ser la gema por excelencia (Ver figura 17 y 18). Además el diamante posee alto punto de fusión. Su estructura covalente perfecta explica que sea un aislante eléctrico (con una separación entre la banda de valencia y la de conducción de 5,5 eV), excepcionalmente los diamantes azules, cuyo color se debe a la presencia de boro, son semiconductores de tipo "p". Es un excelente conductor térmico lo que no es esperable de un cristal covalente puro. En general buenos conductores eléctricos son buenos conductores térmicos como sucede en la mayoría de los metales. Las excepciones son el acero inoxidable, la mica el arseniuro de boro y el diamante.

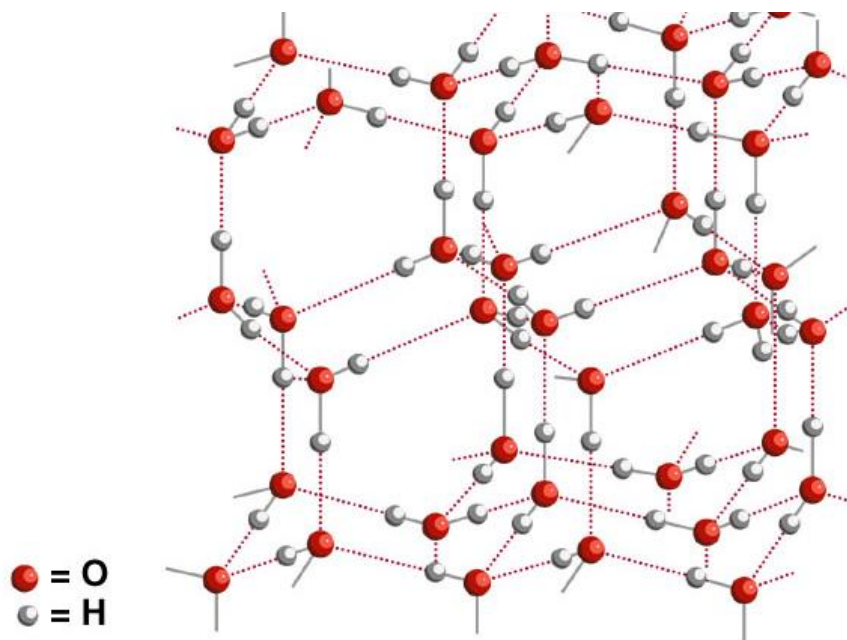
A diferencia de los metales donde los electrones transportan calor, en el diamante y en el arseniuro de boro (cinco veces mejores conductores térmicos que el cobre), el calor se traslada por ondas vibracionales de los átomos constituyentes (fonones) y las colisiones de estas ondas entre sí (interacción fonón - fonón), son responsables de la alta conducción térmica. Dado que es una red cristalina ordenada, prácticamente sin bordes de grano, esto favorece además la conducción por su gran orden. Estas propiedades convierten al diamante en un excelente material para realizar perforaciones (diamantina) de túneles, sondajes y exploración minera, además de su uso en disipación de calor en dispositivos eléctricos. El diamante está directamente enlazado con cuatro átomos vecinos (n° de coordinación 4), en una configuración tetraédrica. La longitud de enlace C-C es de 1,54 amstrong, como se observa en la figura 17.

En la figura 18 se observa la configuración tipo "panal de abejas" del carbono grafito. Los enlaces covalentes C-C en esta estructura son de 1,42 amstrong. Debe observarse que cada carbono está enlazado con tres carbonos vecinos siendo su cuarto electrón confinado al cristal en una estructura deslocalizada entre las placas de grafito, similar a lo que ocurre con los electrones en los metales (gas de electrones). Estas uniones entre placas son de naturaleza débil y sus distancias de equilibrio son notablemente superiores, del orden de 3,4 amstrong.

V.2 Cristales Moleculares.

En general son suaves y de bajos puntos de fusión (formados por fuerzas intermoleculares más que por enlaces), malos conductores del calor y de la electricidad. La figura 19, muestra un ejemplo de cristal de hielo de agua, generados por interacciones de puentes de hidrógeno. Hay otros ejemplos de estructuras moleculares formados por macromoléculas, entre ellas los polímeros destacan por su versatilidad de tamaños de cadena y funciones.

Figura 19: Cristal de Hielo



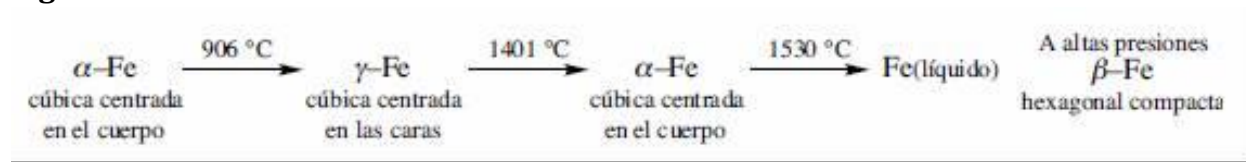
V.3 Cristales Metálicos.

En general los metales cristalinos están constituidos por átomos metálicos (grupos I, II y III de la tabla periódica) en cuyo interior están confinados los electrones de valencia, generando una especie de “nube” electrónica deslocalizada dada su baja electronegatividad, lo que permite la conducción eléctrica. Suelen agruparse en forma muy compacta ya sea hexagonal o cúbica. En general son dúctiles (maleables) y presentan brillo, poseen altos puntos de fusión, son buenos conductores del calor y de la electricidad, a temperatura ambiente son sólidos a excepción del mercurio. Los metales nobles son poco reactivos. Es el caso del oro y el platino lo que los hace deseables como joyas. En menor medida se usa bronce, cobre y plata, dado que presentan oxidación son menos valiosos que los anteriores. Obviamente la abundancia también es determinante en el precio.

Los hierros al carbono son aleaciones que se generan con una matriz de hierro en cuyos intersticios se alojan átomos de carbono de forma no estequiométrica.

Cuando el hierro es puro (en ausencia de carbono), el hierro puede presentar varias fases dependiendo de la temperatura. La fase alfa, (conocida como Ferrita es blanda y estable hasta los 906-910°C), con celda unitaria cúbica centrada en el cuerpo. Sobre 910° el metal se transforma a una nueva forma conocida como fase gama, cristal cúbico centrado en las caras, conocida como Austenita (duro). Sobre los 1400°C nuevamente el metal se trasforma a una fase llamada delta, la cual vuelve a fase cúbica centrada en el cuerpo. Ver figura 20.

Figura 20: Fases de Hierro dulce

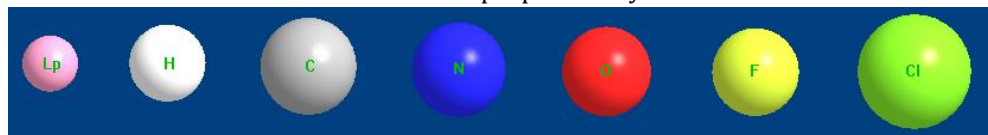


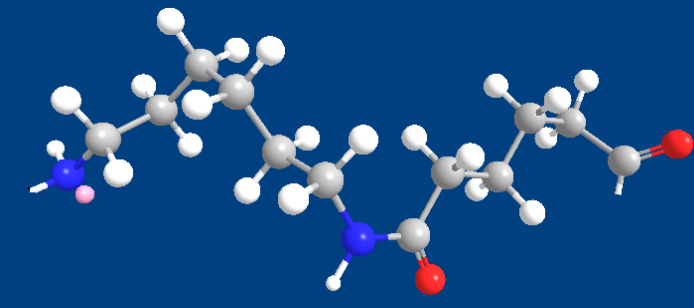
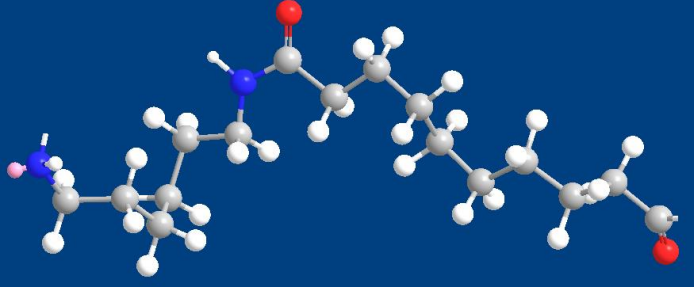
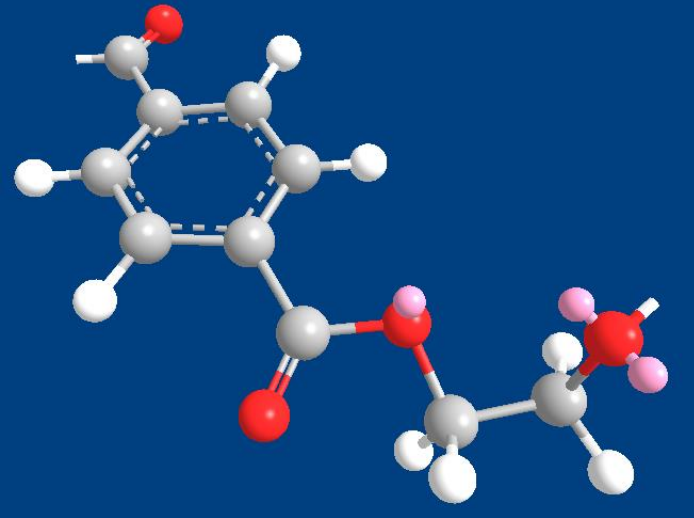
Más detalles de estos diagramas de fases se aprecian en un diagrama de hierro carbono, donde al considerarse el carbono como componente de la aleación, aparecen nuevas fases como la Cementita (Carburo de hierro), la Perlita (88% Ferrita, 12% Cementita) y otras fases como la Ledeburita, la Bainita y la Martensita. A aquellas aleaciones de esta naturaleza con contenidos de carbono entre un 0,03% y 1,07% se les conoce como aceros. El hierro dulce prácticamente no tiene carbón y aleaciones sobre 2,1%C se les conoce como hierros de fundición. Los aceros inoxidable presentan inclusiones de cromo cuya presencia lo hace responsable de esa propiedad. El estudio del hierro y el acero, sus técnicas y tecnologías de elaboración y propiedades se conoce como siderurgia.

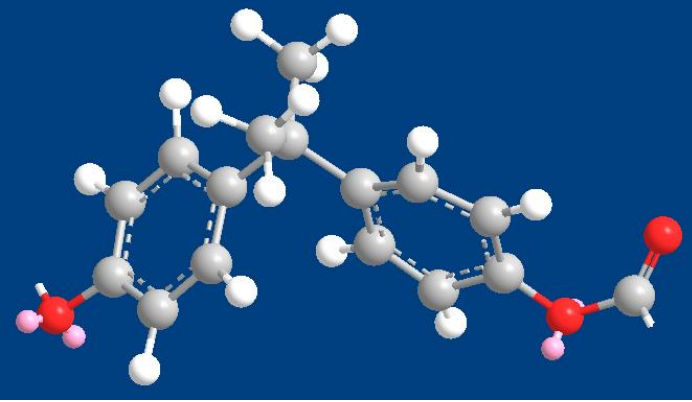
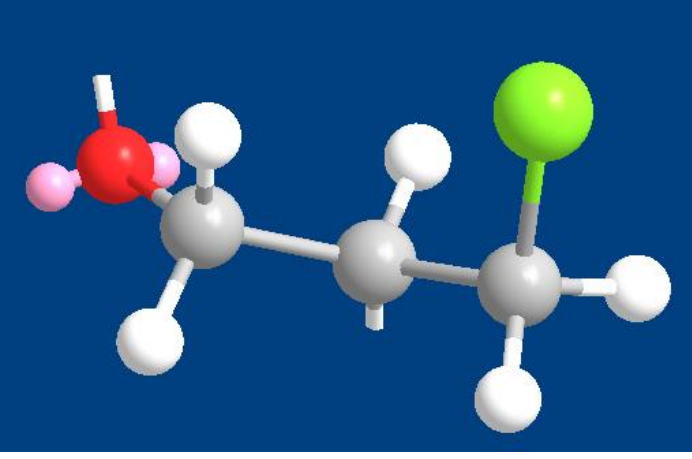
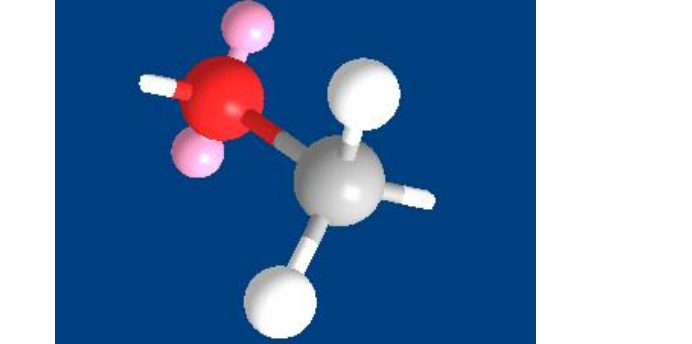
V.4. Polímeros.

Dentro de los polímeros existen aquellos de origen natural y los que son de origen sintético. Dentro de los polímeros naturales, el más común es la celulosa, formada por largas cadenas que se repiten llamadas glucosa. Los polímeros naturales también se conocen como biopolímeros. Otros ejemplos de ellos son el ámbar y el almidón. En el cuerpo humano es posible encontrar variados ejemplos de ellos como son el caso de las proteínas (formadas por péptidos que forman poli péptidos, que no son otra cosa que aminoácidos). Otros ejemplo de ellos son el caucho que adaptado por vulcanización se hace más resistente y elástico. Los polímeros sintéticos son macromoléculas, formadas por miles de estructuras menores que se repiten de manera idéntica, llamados monómeros, que en general son sintetizados mediante procesos de polimerización. Son de diversas características. Por ejemplo cuando son cadenas largas ordenadas una al lado de la otra suelen presentar transparencia, en cambio cuando su distribución es desordenada (equivalente a un ovillo de lana), suelen ser opacos. En general, la estructura química de los monómeros, determina sus propiedades, como se observa a continuación en la figura 21.

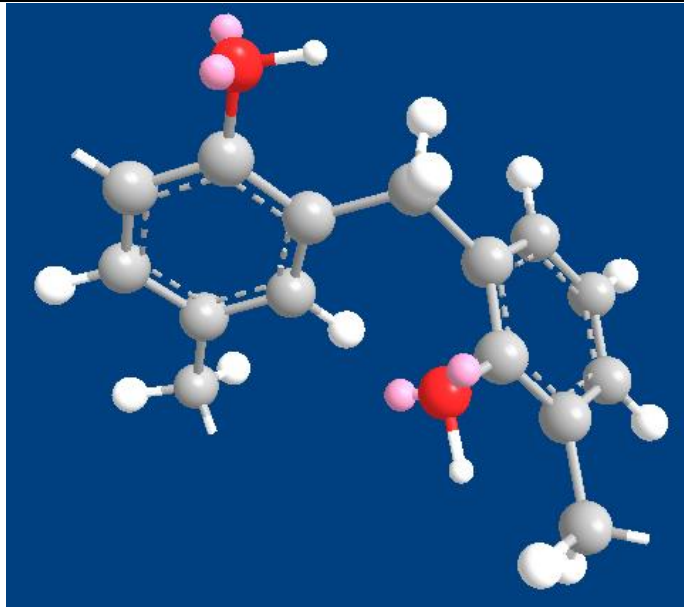
Figura 21. Monómeros de Polímeros sintéticos. Sus propiedades y usos.



| Polímero | Figura | Propiedades y usos |
|---|--|--|
| Poliámidas Nilón 6,6 |  | Textiles, hilos y cuerdas. Aislantes eléctricos y engranajes |
| Nilón 6,10 |  | Equipo deportivo |
| Poliésteres y Policarbonatos Terileno (PET) |  | Textiles, base de películas fotográficas y cintas magnéticas |

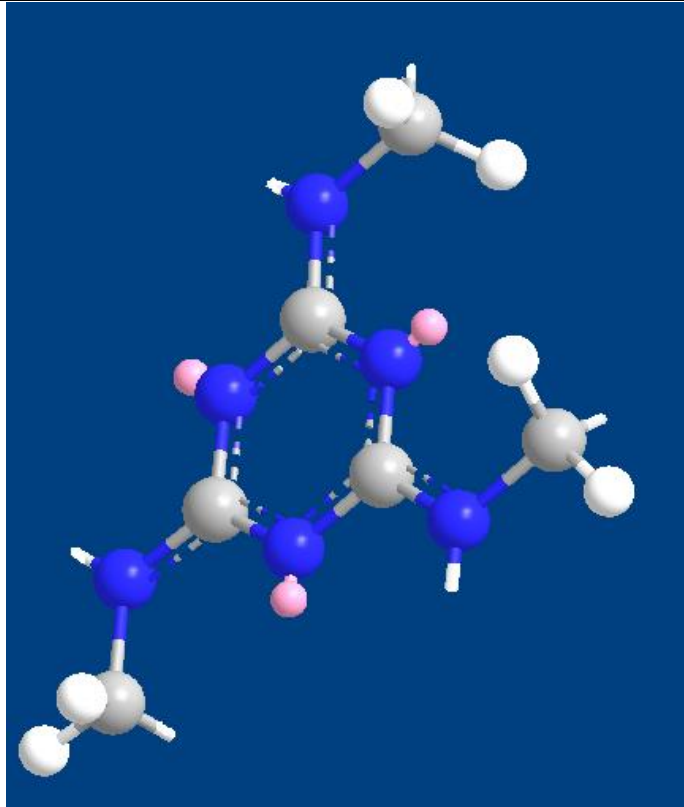
| | | |
|--|--|---|
| <p>Lexan</p> |  | <p>Cristales antibala, vidrios de seguridad, envases de alimentos</p> |
| <p>Poliésteres Poliglicol 166</p> |  | <p>Composición de uretanos y elastómeros de especialidad.</p> |
| <p>Celcon</p> |  | <p>Bolígrafos, tuberías y engranajes</p> |

bases fenólicas
Baquelita



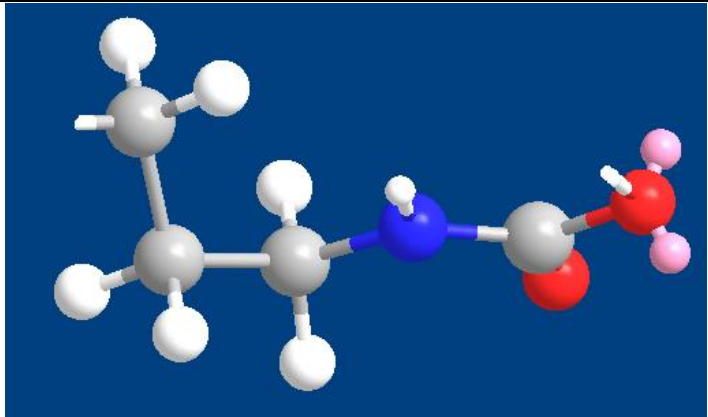
Duro termoestable,
usado en teléfonos
y aislantes
eléctricos

Formaldehído de
Melamina



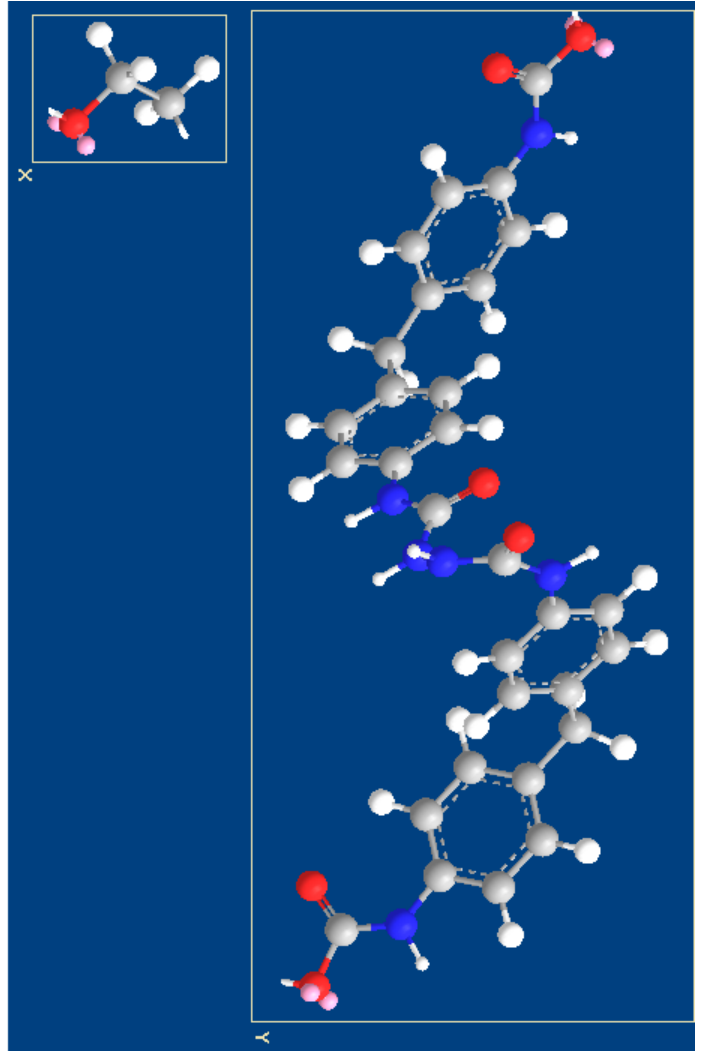
Superficies
laminadas como
mesas y muebles

Poliuretanos
Poliuretano

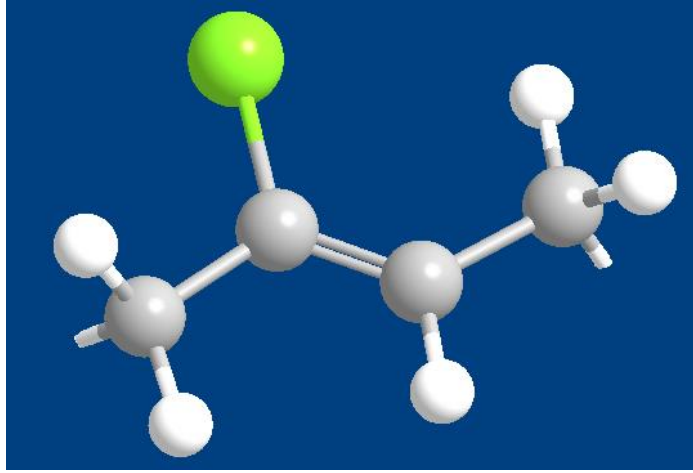
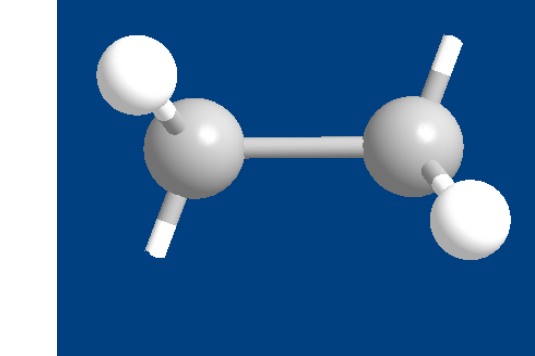
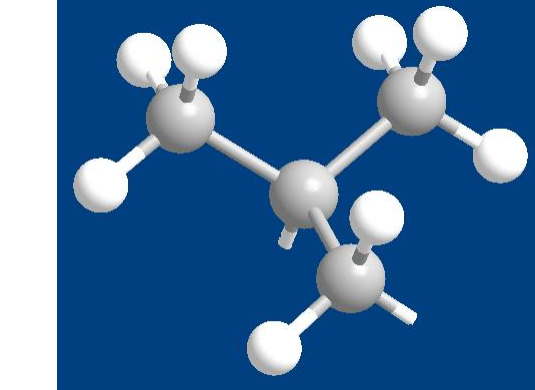
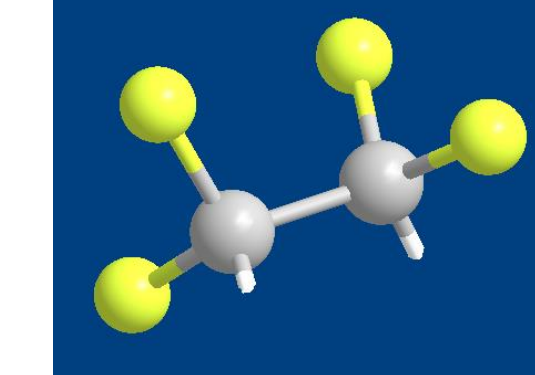


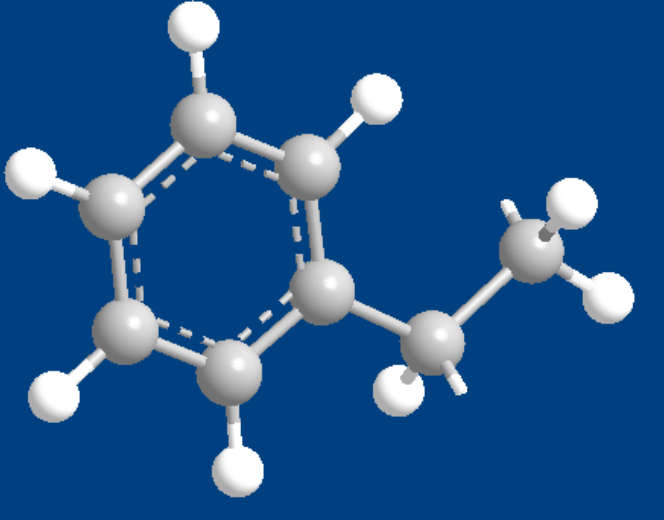
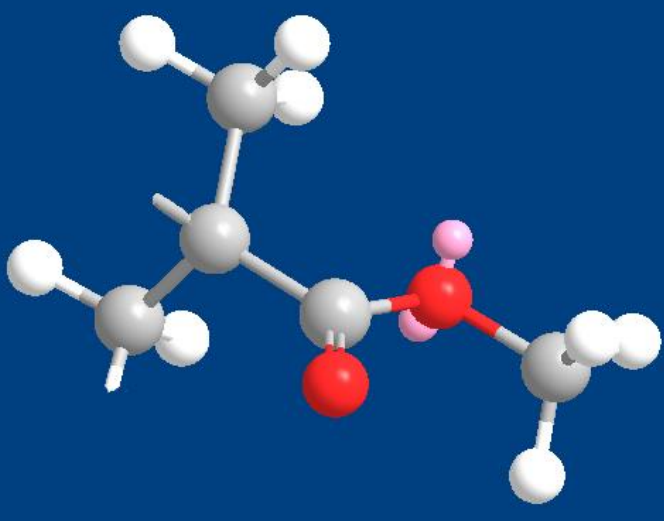
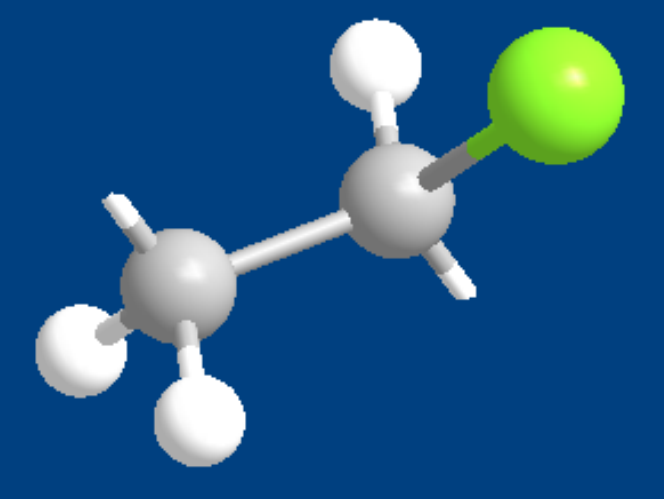
Espuma para colchón, almohadas, etc.

Elastano (lycra)



Aislante para ropa, alfombras

| | | |
|--|---|---|
| <p>Polialquenos Neopreno</p> |  | <p>Revestimiento, adhesivos, sellante liquido</p> |
| <p>Polietileno</p> |  | <p>Juguetes, botellas, fibras y películas</p> |
| <p>Caucho Butílico</p> |  | <p>Neumáticos, impermeables y sellos</p> |
| <p>Politetrafluor Etileno (PTFE) Teflón</p> |  | <p>Antiadherentes de cocina</p> |

| | | |
|--|--|--|
| <p>Poliestireno</p> |  | <p>Embalajes y aislamientos transparentes</p> |
| <p>Polimetil metacrilato (Plexigrás)</p> |  | <p>Transparente y cristalino, se usa en ventanas, señales luminosas y fibra de vidrio.</p> |
| <p>Cloruro de polivinilo (PVC)</p> |  | <p>Tuberías, plastificante en películas.</p> |

V.5 Vidrios Amorfos

No presentan una disposición interna ordenada por lo tanto no tienen ningún patrón determinado. También se les denomina vidrios o líquidos sobre enfriados.

A temperaturas altas los amorfos se transforman en líquidos y sus partículas constituyentes tienen libertad de movimiento, al disminuir lentamente la temperatura, la energía cinética de las partículas se va haciendo tan baja que se puede producir un acomodamiento entre ellas; pero si el enfriamiento se produce rápidamente y por debajo del punto de fusión (sobre enfriamiento), se origina, como resultado de las menores vibraciones, una contracción térmica que no permite el ordenamiento de las partículas aumentando la viscosidad que ya no es posible apreciar flujo y la sustancia adquiere las características de un sólido: rigidez, dureza, forma y volumen definidos. Dado su desorden estructural, son muy malos conductores térmicos. Como ejemplos cabe resaltar: el asfalto, ceras, la brea, vidrio y la mayoría de los polímeros.

Cuando un sólido amorfo se quiebra produce caras y bordes irregulares y al fundirse lo hace en un rango de temperaturas cambiando lentamente del estado sólido al estado líquido.

Hay tres tipos de vidrios como se presenta en la tabla II:

Tabla 2: Vidrios

| Nombre | Composición | Propiedades y usos |
|-----------------------|--|---|
| Vidrio de cuarzo puro | 100% SiO ₂ | Expansión térmica baja, transparente a una amplia gama de longitudes de onda. Utilizado en investigación óptica. |
| Vidrio Pyrex | SiO ₂ , 60-80% B ₂ O ₃ , 10-25% Al ₂ O ₃ , pequeña cantidad. | Expansión térmica baja; transparente a la radiación visible e infrarroja, pero no a la UV utilizado sobre todo en el laboratorio y en recipientes domésticos para cocinar. |
| Vidrio de sosa - cal | SiO ₂ , 75% , Na ₂ O, 15% CaO, 10 % | Fácilmente atacable por sustancias químicas y sensible a los choques térmicos. Trasmite la luz visible pero absorbe la radiación UV. Usado sobre todo en ventanas y botellas. |

Existen unos 800 tipos de vidrio comúnmente utilizados en la actualidad. El color del vidrio se debe en gran medida a la presencia de iones metálicos (como óxidos). El vidrio verde está formado de óxido de hierro Fe₂O₃ u óxido de cobre (II), CuO, el vidrio amarillo tiene óxido de uranio (IV), UO₂, el vidrio azul contiene óxidos de cobalto II y de cobre II, CoO y CuO⁺; y el vidrio rojo tiene pequeñas partículas de oro y cobre.

VI. MEDIDAS EN CRISTALES

VI.1 ÍNDICES DE MILLER

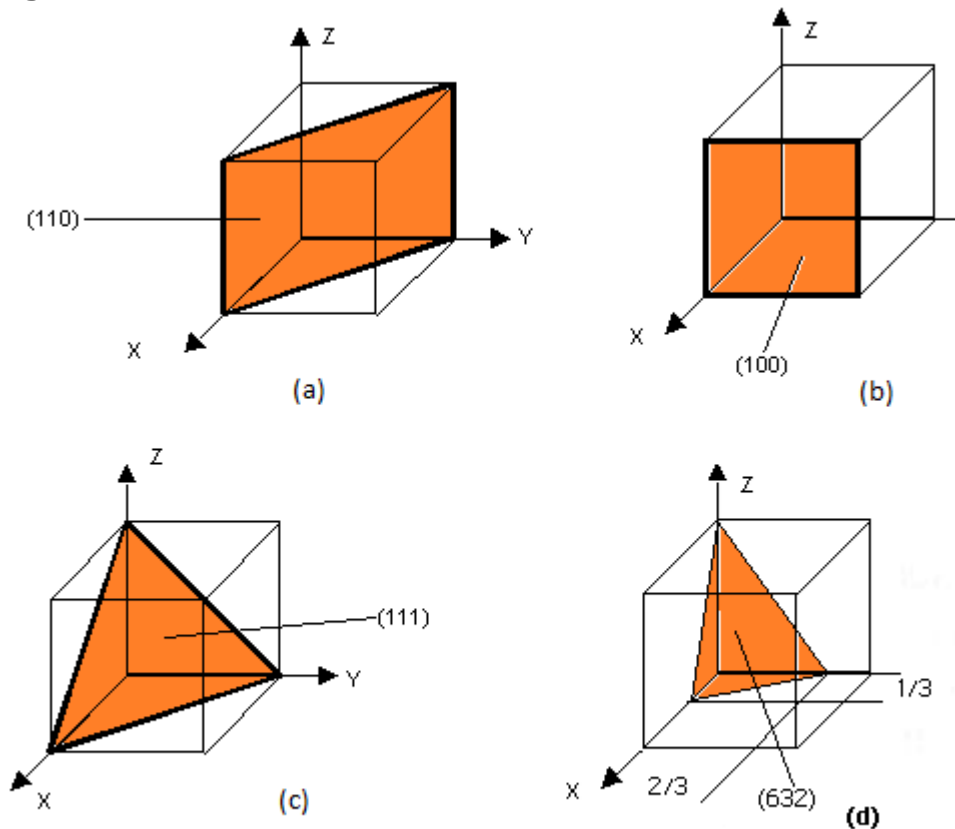
Retomando los sólidos cristalinos, podemos decir que existen planos y aristas que son deseables identificar en un cristal, ya sea porque son planos de clivaje o exfoliación o reacción. También pueden ser direcciones de crecimiento cristalino o de inhibición de éste. Para ellos se usa notación que permite identificar los planos, llamada índices de Miller.

Celdas Cúbicas. Los índices de Miller de un plano cristalino están definidos como los recíprocos (red recíproca) de las intersecciones que el plano determina con los ejes x , y , z de los tres lados no paralelos de la celda unitaria. Las aristas de una celda cúbica unitaria representan longitudes unitarias y las intersecciones de los planos de una red se miden en base a estas longitudes unitarias.

El procedimiento para determinar los índices de Miller para un plano de un cristal cúbico es el siguiente:

- Escoger un plano que no pase por el origen en $(0,0,0)$
- Determinar las intersecciones del plano en base a los ejes x , y , z cristalográficos para la celda unitaria. Estas intersecciones pueden ser fraccionarias.
- Construir los recíprocos de las intersecciones.
- Despejar fracciones y determinar el conjunto más pequeño de números enteros que estén en la misma razón de las intersecciones. Estos números enteros son los índices de Miller de un plano cristalográfico y se encierran entre paréntesis sin usar comas. La notación (hkl) se emplea para indicar los índices de Miller en sentido general, donde h , k , y l son los índices de Miller para un plano de un cristal cúbico de ejes x , y , y z respectivamente.

Figura 22: Índices de Miller en celdas cúbicas.



Las intersecciones del primer plano son 1, 1, ∞ y los recíprocos de estos números son 1, 1, 0 no involucran fracciones, siendo los índices de Miller (1 1 0).

Para la segunda figura, las intersecciones son: 1, ∞ , ∞ a los ejes x, y, z respectivamente, por lo tanto los recíprocos son: 1, 0, 0. Los índices de Miller para este plano son: (1 0 0).

Finalmente, el tercer plano, tiene las intersecciones 1, 1, 1 que nos dan un índice de Miller (1 1 1). Ver figura 22 (a), (b) y (c).

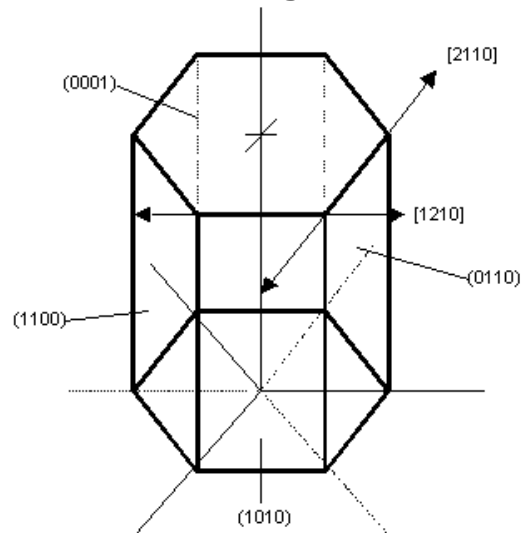
Si se considera que el plano cristalino pasa por el origen de manera que uno ó más cortes se hacen cero, el plano ha de ser desplazado a una posición equivalente en la misma celda unitaria de modo que el plano permanezca paralelo al original. Esto es posible porque todos los planos paralelos equidistantes son indicados con los mismos índices de Miller.

Si grupos de planos de redes equivalentes están relacionados por la simetría del sistema cristalino, se llaman familia de planos, y los índices de una familia de planos son encerrados entre llaves. Por ejemplo, los índices de Miller de los planos de la superficie del cubo (100) (010) y (001) se designan colectivamente como una familia con la notación {100}.

Una importante relación *sólo para el sistema cúbico* es que los índices de una dirección perpendicular a un plano de un cristal son los mismos que los índices de Miller para ese plano. Por ejemplo, la dirección [100] es perpendicular al plano cristalino (100). La figura 22 (d) ilustra el caso en que los planos cortan los ejes en fracciones. Se observa como recíprocos para la triada (x,y,z) las coordenadas (3, 3/2,1). En general los planos no se designan con fracciones. Amplificando por 2 la triada anterior se obtiene (6,3,2) que ilustra el plano representado.

Celda HCP. Se identifican empleando cuatro índices en vez de tres, se denominan índices Miller-Bravais, son representados por las letras h, k, i, l y encerrados entre paréntesis (h, k, i, l). Estos índices hexagonales están basados en un sistema coordenado de cuatro ejes, tres ejes básicos a_1, a_2, a_3 que forman 120° entre sí, el cuarto eje o eje c es el eje vertical y está localizado en el centro de la celda unidad (Ver figura 23). La unidad a de medida a lo largo de los ejes a_1, a_2, a_3 es la distancia entre los átomos. La unidad de medida a lo largo del eje c es la altura de la celda unidad. Los recíprocos de las intersecciones que un plano determina con los ejes a_1, a_2, a_3 proporcionan los índices h, k e i mientras que el recíproco de la intersección con el eje c da el índice l.

Figura 23: Índices de Miller en una red hexagonal.



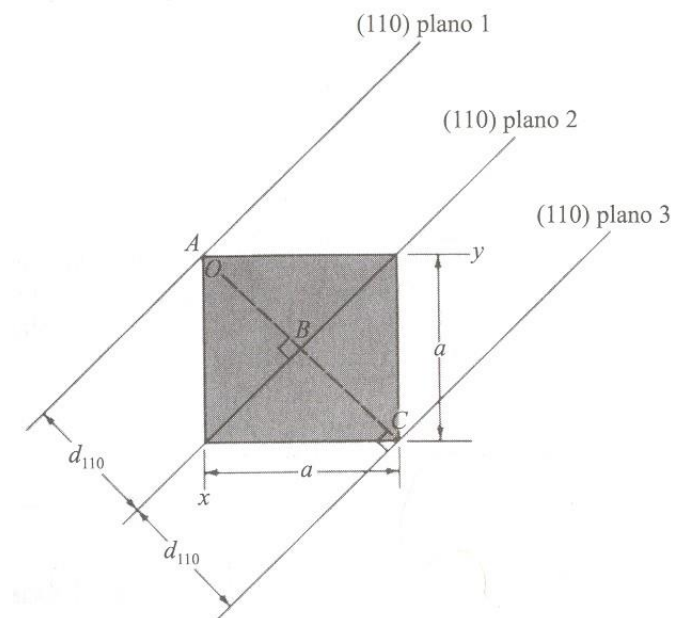
Los planos basales de la celda unidad HCP son muy importantes para esta celda, el plano basal de la parte superior es paralelo a los ejes a_1, a_2, a_3 , las intersecciones de este plano con estos ejes serán todas de valor infinito. Así, $a_1 = a_2 = a_3 = \infty$. El eje c, sin embargo, es único puesto que el plano basal superior intersecciona con el eje c a una distancia unidad. Tomando los recíprocos de estas intersecciones tenemos los índices de Miller-Bravais para el plano basal HCP. Así, $h=0, k=0, i=0, l=1$. El plano basal es, por lo tanto, un plano (0001).

Las direcciones en las celdas unitarias HCP se indican por cuatro índices [u,v,t,w]. Son vectores reticulares en las direcciones a_1, a_2, a_3 respectivamente y el índice w es un vector reticular en la dirección c. Una importante relación para el sistema cúbico y sólo para el sistema cúbico es que los índices de una dirección perpendicular a un plano del cristal son los mismos que los índices de Miller para ese plano. Por ejemplo, la dirección [100] es perpendicular al plano cristalino (100).

Para cristales cúbicos de arista "a", la distancia entre dos planos paralelos cercanos con los mismos índices de Miller se designa como d_{hkl} , donde h, k y l son los índices de Miller de los planos. Este espaciado representa la distancia desde un origen elegido contenido en un plano y otro plano paralelo con los mismos índices que sea cercano a él. Por ejemplo, la distancia entre los planos (110) 1 y 2, d_{110} , en la figura 24 es AB o BC. A partir de conocimientos geométricos sencillos puede ser mostrado para estructuras cristalinas que:

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

Figura 24: Vista superior de una celda unitaria que muestra la distancia entre planos cristalinos [110].



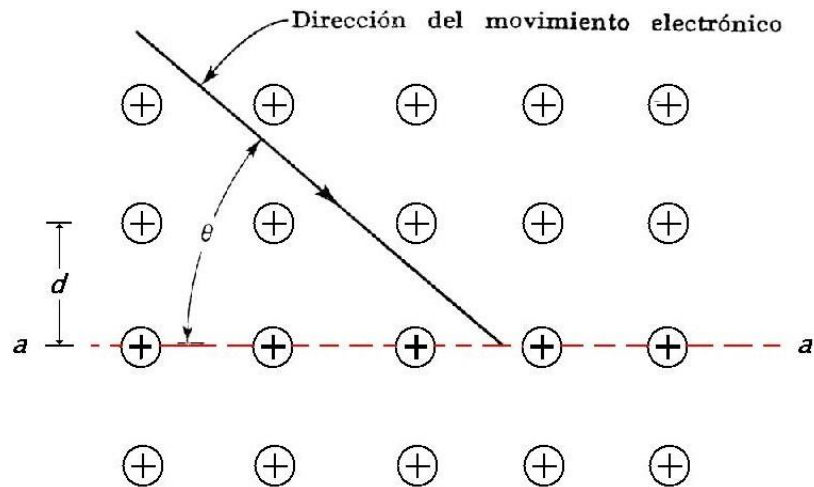
VI.2 Ley de Bragg.

En un cristal es posible identificar planos cristalinos separados por una distancia "d" interplanar. Esto se tiene solo en estructuras con ordenamiento interno periódico como los cristales. Si se incide sobre estos cristales radiación (por ejemplo rayos X) dicha radiación penetra el cristal y genera, entre otros fenómenos, difracción de rayos X. Algunos haces difractados se superponen en forma constructiva, o sea, son "coherentes", justo cuando se cumple la relación de Bragg:

$$n\lambda = 2d \sin\theta$$

donde n es un entero, λ es la longitud de la onda de la radiación incidente, d es el espaciado interplanar, y θ el ángulo de incidencia de la radiación y el plano reticular dado (ver figura 25).

Figura 25: ley de Bragg en un cristal metálico



Esta propiedad hace posible técnicas de caracterización como por ejemplo DRX (difracción de rayos X), mediante la cual se asocian picos de intensidad (radiación coherente) en un “difractograma” a medida que se barre el ángulo de incidencia sobre la muestra (que genera picos si están presentes los planos cristalinos). Estos difractogramas son únicos para cada mineral o especie sólida cristalina, lo que permite identificar la fase o fases cristalinas presentes en una muestra sólida, siempre y cuando tengan un contenido superior al 2%. Por desgracia sólidos amorfos no pueden verse usando este método (ver figura 1).

VII. Minerales.

Los minerales son los materiales básicos de la corteza terrestre. En general tienen una estructura interna cristalina compuesta por átomos organizados. Las rocas se agrupan según la manera en que se formaron. Hay tres grupos principales (ígneos, sedimentarios y metamórficos). Las rocas ígneas se forman a partir de magma fundido, las sedimentarias se acumulan a partir de capas de sedimento y las metamórficas se producen por efecto de la temperatura y presión las cuales transforman un mineral en otro.

VII.1 Composición química de la tierra.

Los principales componentes que conforman el planeta tierra (macizo sólido), aparecen en distintas cantidades en sus distintas capas. En general, cuando más profunda es la capa, mayor es la concentración de minerales más densos, como por ejemplo el hierro. En el núcleo de la tierra se encuentra una alta composición de óxidos de hierro, hierro y un porcentaje minoritario de óxido de níquel, el cual aumenta notablemente su presencia en la siguiente capa, el manto, lugar donde la presencia del hierro y sus óxidos decrece y aparecen los óxidos de magnesio y calcio, aparecen los silicatos. En la siguiente capa (corteza oceánica) disminuye la presencia de óxidos de magnesio aunque siguen apareciendo grandes cantidades de óxidos de níquel. Finalmente en la corteza continental los óxidos de níquel son reemplazados por dióxidos de silicio y sus derivados.

VII.2 Clasificación de los minerales.










Hay más de cuatro mil minerales naturales conocidos, aunque solo unos cien de ellos son abundantes. Según su composición química se clasifican en grupos. Cada grupo incluye numerosos minerales. Se listan a continuación los grupos y el número aproximado de minerales entre paréntesis. Sulfuros (600), Silicatos (500), óxidos e hidróxidos (400), Fosfatos y vanadatos (400), sulfatos (300), carbonatos (200), haluros (140), boratos y nitratos (125), molibdatos y tungstatos (42) y elementos nativos como oro, platino, cobre, azufre, carbono (20)

VII.3 Propiedades Físicas de los minerales.

VII.3.1 Dureza Mohs

El geólogo y físico alemán Friedrich Mohs (1773-1839) creó la «escala de Mohs», para medir los minerales en función de su dureza, desestimando la composición química. El método ideado por Mohs consiste en intentar rayar la superficie de un mineral con otro de dureza conocida. Así, si el mineral de dureza desconocida es rayado por el de dureza conocida, el primero tiene una dureza menor que el segundo. Por ejemplo, si el mineral a determinar no puede ser rayado por el cuarzo (dureza 7), pero sí por el topacio (dureza 8) o un corindón (dureza 9), se trata de un mineral de dureza entre 7 y 8. Ver la tabla III.

Tabla III: Escala de dureza y ejemplos.

| Escala de Mohs | Mineral | Material equivalente | Minerales de dureza similar |
|----------------|---|---|---|
| 10 | Diamante  | | |
| 9 | Corindón  | | Rubí y Zafiro |
| 8 | Topacio  | Papel abrasivo  | Granate  |
| 7 | Cuarzo  | Cuchillo de acero  | Esmeralda  |
| 6 | Ortoclasa  | Cortaplumas  | Pirita  |
| 5 | Apatito  | Vidrio  | Magnetita  |
| 4 | Fluorita  | Clavo de hierro  | Platino  |
| 3 | Calcita  | Moneda de bronce  | Aragonito  |
| 2 | Yeso  | Uña  | Oro, Cobre, Plata  |
| 1 | Talco  | | Yeso  |

Las gemas preciosas son minerales que tienen propiedades como la durabilidad, propiedad que depende de la dureza. El hecho que una gema no pierda valor con el paso del tiempo se debe a que son difíciles de rayar, por lo que mantienen intactas sus cualidades ópticas. No es de extrañar, por tanto, que las gemas más valiosas tengan durezas de 7 o más en la escala de Mohs. Obviamente hay otros factores como la talla o corte, pureza, brillo, color, composición y abundancia.

VII.3.2 Color.

Entre las propiedades físicas de los minerales está el color. Aquellos que no presentan esta propiedad se denominan incoloros. Se llaman idiocromáticos a aquellos que presentan un color propio. Ejemplo de ello es el amarillo en el azufre, el verde en la malaquita, el azul en la turquesa y el rojo de los rubíes. Se conoce como apocromáticos a aquellos que obtienen color por la presencia de inclusiones ajenas al cristal, o por defectos cristalinos o radiación.

VII.3.3 Brillo.

El brillo es la propiedad de un cristal de reflejar la luz y en general aumenta en forma proporcional con el índice de refracción. En general el ordenamiento cristalino, su composición y caras altamente pulidas afectan esta propiedad.

VII.3.4 Luminiscencia.

Algunos minerales pueden emitir luz si se someten con anterioridad a radiación o calor. Se llama fluorescencia cuando decae rápidamente la radiación (tiempo comparable con la radiación incidente) y Fosforescencia si el proceso es más lento.

VII.3.5 Exfoliación.

Es la propiedad de los minerales de romperse según sus planos de clivaje, de manera de respetar la geometría que propone su celda unidad. No todos los cristales presentan este tipo de ruptura, siendo característica en cada caso su posibilidad.

VII.3.6 Peso específico.

En general es el peso de un mineral comparado con agua de igual volumen a 4°C. La estructura cristalina y los átomos constituyentes son determinantes en esta propiedad y suele usarse para diferenciar cristales o descubrir falsificaciones, como es el caso de los brillantes y los zircones cúbicos usados en joyería.

VII.3.7 Magnetismo.

Los minerales paramagnéticos son atraídos por un campo magnético externo, mientras que los diamagnéticos son repelidos por los mismos. Existe un caso especial, el de los minerales ferromagnéticos que son capaces de generar ellos mismo un campo magnético.

VII.3.8 Conducción Eléctrica y Térmica, aislantes.

Los minerales en general son malos conductores térmicos y/o eléctricos. LA excepción en general la constituyen los metales debido a la nube de electrones presente en su estructura y una alta pureza y ordenamiento de la red cristalina. El grafito es un conductor unidireccional y en la otra dirección es aislante (planos covalentes). En general los cristales iónicos y covalentes son malos conductores térmicos y/o eléctricos. Algunos minerales frente a una acción mecánica externa sobre ellos se cargan de electricidad, se habla entonces de materiales piezoeléctricos. Otros por diferencias térmicas hacen lo propio, se conocen como materiales piroeléctricos.

VII.3.9 Ópticas

La luz al atravesar un cristal presenta fundamentalmente dos fenómenos ópticos, la reflexión y la refracción de la luz. La refracción se produce cuando la luz atraviesa un medio a otro cambiando la velocidad de la luz por este hecho. Se define el índice de refracción como el cociente entre la velocidad de la luz en el aire y el medio que atraviesa. Esta refracción puede ser simple o doble, se define así la mono refringencia (celdas cúbicas y sólidos amorfos) y la

birrefringencia (propia de grupos dimétrico y trimétrico). Una piedra que experimenta varios colores, por ejemplo las aguamarinas usadas en joyería con tono café y celestino es ejemplo de birrefringencia. La calcita es otro caso.

VII.3.10 Densidad

Los minerales que contienen elementos metálicos suelen ser más densos que los que no los poseen en su constitución. Es una función del empaquetamiento y volumen y peso de los átomos de su constitución. A modo de ejemplo se presenta la tabla IV.

Tabla IV: Densidad de algunos carbonatos.

| Mineral | Composición | Peso atómico del metal [g/mol] | Densidad [g/cc] |
|---------------|-------------------|--------------------------------|-----------------|
| Aragonita | CaCO ₃ | 40,1 | 2,94 |
| Estroncianita | SrCO ₃ | 87,6 | 3,87 |
| Witherita | CaCO ₃ | 137,3 | 4,31 |
| Cerusita | PbCO ₃ | 207,2 | 6,58 |

VIII. Referencias

- [1] "Conocer los minerales", Roberto Zorzin, Susaeta Ediciones, Madrid.
- [2] "Microstructure of calcite and aragonite in select Chilean gastropods and bivalves molluscs", R.Acevedo, A.Soto-Bubert, Marisol Jimenez-Guevara, Mauricio Belmar, Asian Journal of Spectroscopy, **14**, 63 (2010).
- [3] "Crystal Structure Determination", Werner Massa, Springer-Verlag, (2000).
- [4] "Minerales de gran tamaño", RBA Chile Ediciones limitada, páginas 57-59, (2013).
- [5] "Ciencia, la guía visual definitiva", Adam Hart Davis, Cosar Editores, Dorling Kindersley Ltd, (2009).
- [6] "Trasformatios in metals", Paul Shewmon, capítulo VI, Mc Graw Hill (1969).