

PRÁCTICA Nº 1 REDES DE BRAVAIS Y ESTRUCTURAS CRISTALINAS

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Red de Bravais y celda primitiva unidad

Uno de los conceptos fundamentales en la descripción de un sólido cristalino es el de **red de Bravais**, que especifica cómo las unidades básicas que lo componen (átomos, grupos de átomos o moléculas) se repiten periódicamente a lo largo del cristal.

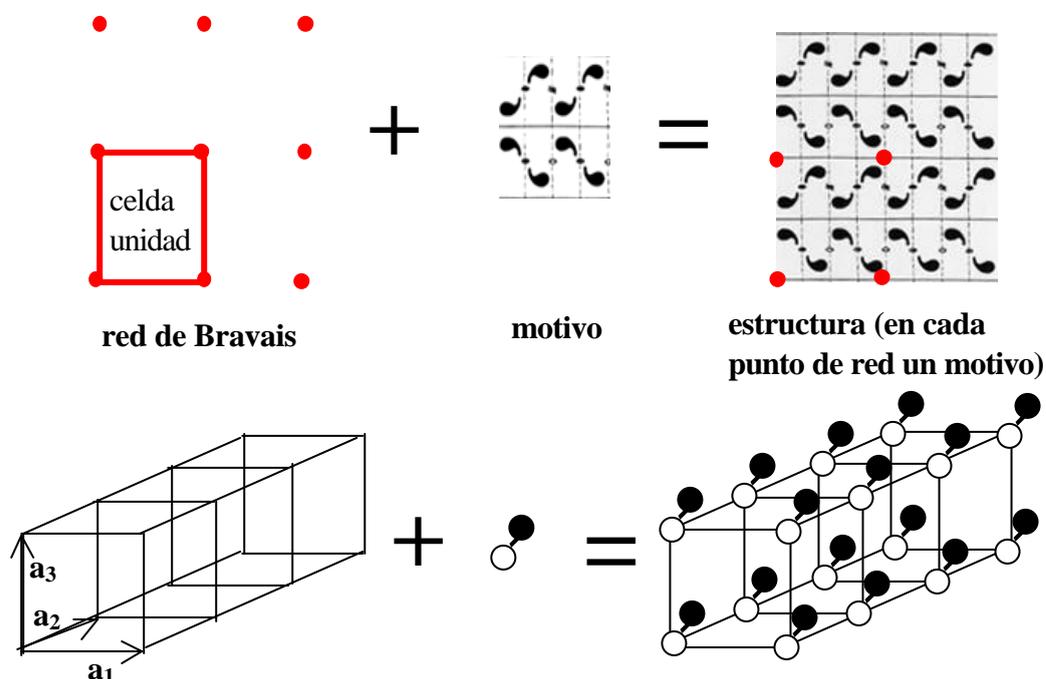
Una red de Bravais es un conjunto formado por todos los puntos cuyo vector de posición es de la forma $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ donde \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 son tres vectores linealmente independientes y n_1 , n_2 y n_3 son números enteros.

A los vectores \mathbf{a}_i se les llama vectores primitivos o traslaciones fundamentales de la red de Bravais. Resulta evidente que al trasladar una red de Bravais según un vector de la forma $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$, coincide consigo misma. La invariancia traslacional de la red de Bravais constituye su característica más importante.

Se llama **celda primitiva unidad** de una red de Bravais a un volumen del espacio tal que trasladado mediante todos los vectores de dicha red llena todo el espacio sin dejar vacíos ni superponerse. Esta condición implica que una celda unidad contiene únicamente un punto de la red. Sin embargo existe un número infinito de celdas primitivas, todas ellas con el mismo volumen.

Siempre es posible elegir una región (que pueda contener más de un punto de la red) que, trasladada mediante un subconjunto de vectores de la red, llena el espacio sin dejar vacíos ni superponerse. Dichas celdas unidades (no primitivas) pueden elegirse de modo que reflejen mejor la simetría de la red.

La estructura de un cristal real queda descrita cuando se da la **red de Bravais** subyacente y la distribución de los átomos dentro de la celda primitiva (**motivo**). La red cristalina está pues formada por copias de la misma unidad fundamental o motivo localizadas en todos los puntos de la red de Bravais.



1.2 Operaciones de simetría

Además de la simetría de traslación, que es común a todas las redes de Bravais, una red puede resultar invariante frente a otros tipos de transformaciones. Recordemos las más importantes:

- **Rotación en torno a un eje:** una red tiene un eje de simetría de orden n cuando coincide consigo misma al girarla un ángulo $2\pi/n$ en torno a dicho eje. Debido a las exigencias que impone la simetría de traslación en una red de Bravais solo son posibles ejes de orden 2, 3, 4 y 6.
- **Reflexión respecto a un plano:** una red tiene un plano de simetría cuando coincide con su imagen especular respecto a dicho plano.
- **Inversión respecto a un punto:** una red tiene un centro de inversión cuando coincide con su imagen invertida respecto a un punto.

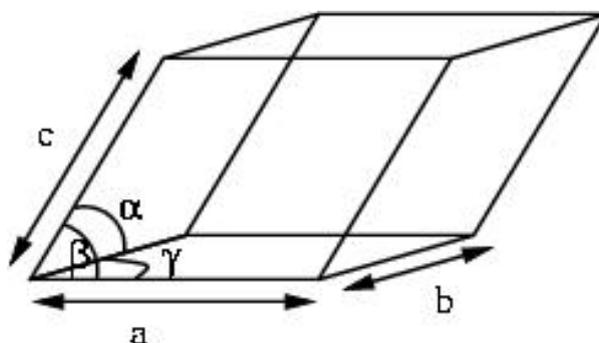
Algunas redes pueden ser invariantes frente a productos de dos elementos sin serlo frente a cada uno de ellos.

Existen otras transformaciones resultantes del producto de dos de las anteriores o de una de las anteriores con una traslación que no pertenece a la red de Bravais:

- **Eje helicoidal:** la red es invariante frente a una rotación de orden n seguida de una traslación no perteneciente a la red de Bravais.
- **Plano de deslizamiento reflejado:** la red es invariante frente a una reflexión respecto a un plano seguida de una traslación no perteneciente a la red de Bravais.

Al conjunto de transformaciones de simetría que dejan invariante una red de Bravais se llama **grupo espacial de dicha red**. Al conjunto de transformaciones de simetría que dejan invariante la red (permaneciendo fijo un punto de dicha red) se llama **grupo puntual de la red**.

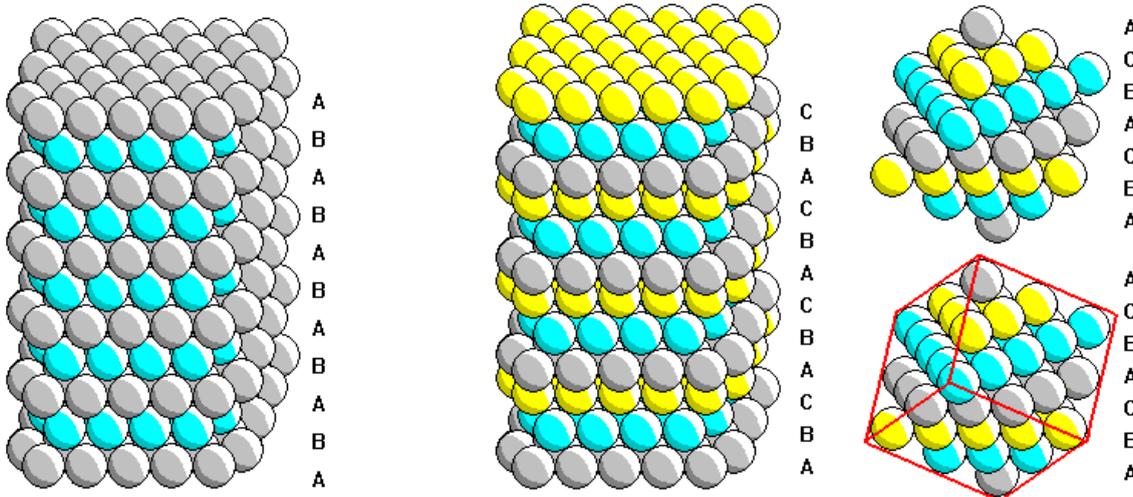
Según la simetría de la celda unidad las redes de Bravais poseen más o menos elementos de simetría adicionales. Existen 7 sistemas cristalinos, a cada uno de los cuales corresponde un grupo puntual determinado. Pueden existir redes de Bravais diferentes con el mismo grupo puntual, existiendo en total 14 redes de Bravais cristalinas. Si caracterizamos cada red por su celda unidad, siendo ésta un paralelepípedo de lados a , b , c y de ángulos entre aristas α , β , γ se obtienen los distintos sistemas pasando del cubo (celda con máxima simetría) al paralelepípedo irregular:



SISTEMA CRISTALINO	DIMENSIONES	REDES DE BRAVAIS
Cúbico	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Primitiva (P) o simple (S) Centrada en el cuerpo (I) Centrada en las caras (F)
Tetragonal	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Primitiva (P) o simple (S) Centrada en el cuerpo (I)
Ortorrómico	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Primitiva (P) o simple (S) Centrada en el cuerpo (I) Centrada en las caras (F) Centrada en las bases (C)
Romboédrico o trigonal	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	Primitiva (P) o simple (S)
Hexagonal	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$	Primitiva (P) o simple (S)
Monoclínico	$a \neq b \neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma \neq 90^\circ$	Primitiva (P) o simple (S) centrada en las bases (C)
Triclínico	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Primitiva (P) o simple (S)

Si se introduce la simetría de la propia base de la estructura cristalina (hasta ahora solo nos hemos referido a la red de Bravais) se llegan a contabilizar hasta 32 grupos puntuales y 230 grupos espaciales.

Si se conciben los átomos como esferas no deformables, la forma mas compacta de apilar es aquella en se apilan, de manera compacta, planos hexagonales compactos. En ese caso, cada átomo está rodeado de 12 primeros vecinos. Es el número de coordinación máximo que puede darse en una estructura cristalina. Según la secuencia de apilamiento de los planos, se dan dos tipos de estructura: cúbica centrada en caras y hexagonal compacta.

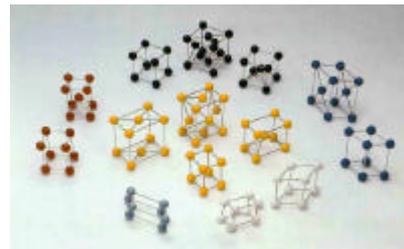


Empaquetamiento hexagonal compacto

Empaquetamiento cúbico compacto

2. MATERIAL DISPONIBLE

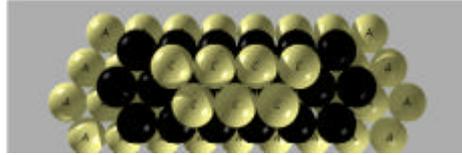
2.1 Una colección de celdas unidad de las 14 redes de Bravais



2.2 Una colección de estructuras cristalinas:

<p>Estructura NaCl Característica de sales (KCl, AgBr, KBr, PbS) y óxidos (MgO, FeO)</p>	<p>Estructura CsCl Compuestos intermetálicos y sales CsCl, o AlNi, CuZn</p>	<p>Estructura zincblenda semiconductores III-V (GaAs, GaP, InSb, InP). Diamante, si hay un solo elemento: C, Si Ge</p>
<p>vista de planta</p>		
<p>Estructura BN (Nitruro de Boro) o grafito (solo un elemento): C</p>		<p>Estructura Wurtzita (CdS, ZnS)</p>
<p>vista de planta</p>		
<p>Estructura Calcita (CO₃Ca)</p>		

2.3 Un sistema para realizar estructuras por apilamiento de planos



2.4 Esquemas de los objetos correspondientes a los grupos puntuales de simetría

3. TRABAJO A REALIZAR

- 3.1 - Identifica las 14 redes de Bravais y clasifícalas por sistemas cristalinos.
 - Determina los vectores de base de la celda primitiva unidad.
 - Determina las posiciones de los puntos en la celda unidad no primitiva
 - Identifica los elementos de simetría propios de cada sistema
 - Analiza las redes correspondientes a cada sistema y busca si podrían existir más.

- 3.2 Identifica las diferentes estructuras cristalinas
 - Sistema cristalográfico
 - Celda unidad
 - Motivo (coordenadas de los átomos de la base)
 - Grupo puntual

- 3.3 Realiza estructuras mediante el sistema de apilamiento.
 - Analiza las diferencias entre estructuras compactas y no compactas.

ANEXO GRUPOS PUNTALES

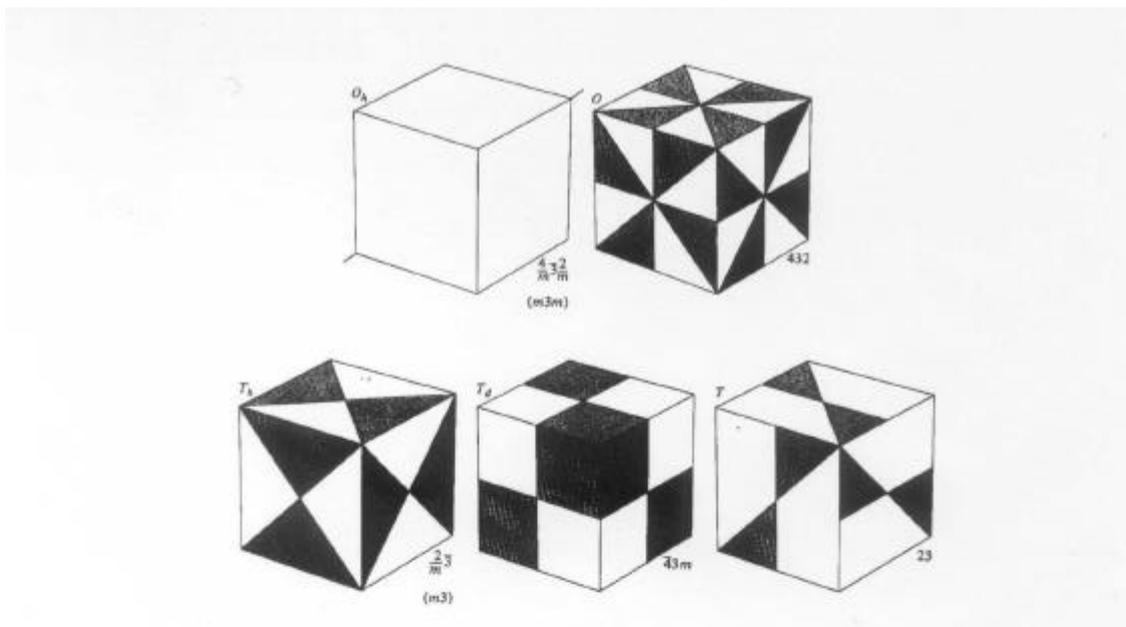


Figure 7: The cubic group. This diagram is from Ashcroft and Mermin.

SCHOENFLIES	HEXAGONAL	TETRAGONAL	TRIGONAL	ORTHO-RHOMBIC	MONOCLINIC	TRICLINIC	INTERNATIONAL
C_n	C_6 6	C_4 4	C_3 3		C_2 2	C_1 1	n
C_{nv}	C_{6v} 6mm	C_{4v} 4mm	C_{3v} 3m	C_{2v} 2mm			n/m (n even) nm (n odd)
C_{nh}	C_{6h} 6/m	C_{4h} 4/m			C_{2h} 2/m		n/m
	C_{3h} $\bar{6}$				C_{1h} $\bar{2}$		
S_n		S_4 $\bar{4}$	S_6 (C_{3h}) $\bar{3}$		S_2 (C_i) $\bar{1}$		\bar{n}
D_n	D_{6h} 622	D_{4h} 422	D_3 32	D_2 (V) 222			$n2'$ (n even) $n2$ (n odd)
D_{nh}	D_{6h} 6/mmm	D_{4h} 4/mmm		D_{2h} (V_h) 2/mmm			$\frac{n}{2} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ (n/mmm)
	D_{3h} $\bar{6}2m$						$\bar{n}2m$ (n even)
D_{nd}		D_{2d} (V_d) 42m	D_{3d} $\bar{3} \frac{2}{m}$				$\bar{n} \frac{2}{m}$ (n odd)

Figure 8: The noncubic groups. This diagram is from Ashcroft and Mermin.