

# Celdas unitarias y estructuras de cristal



Center for Nanotechnology Education



Este material está basado en trabajo apoyado por la Fundación Nacional de Ciencia bajo la Concesión Número 0802323 y 1204918. **Cualquier opinión, hallazgos, conclusiones o recomendaciones expresadas en este material son las del autor(es) y no necesariamente representan las opiniones de la Fundación Nacional de Ciencias.**



Este trabajo está licenciado por [“Creative Commons Attribution-NonCommercial-ShareAlike 3.0 Unported License”](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/).

Basado en un trabajo en [www.nano-link.org](http://www.nano-link.org).

## Celdas unitarias y estructuras de cristal

### Abstracto

En este módulo, los estudiantes preparan una solución saturada con bórax, acetato de sodio y sulfato de cobre. Al secarse, cada cristal tendrá una forma diferente. La forma que observamos en un cristal (a escala macro) depende de cómo están arreglados sus átomos. Una de las propiedades que define la estructura cristalina es el arreglo repetitivo de los átomos y se basa en la geometría de la celda unitaria fundamental. Los estudiantes pueden introducir otros productos químicos para cambiar la estructura cristalina resultante. Este módulo es una buena introducción a la estructura cristalina la cual se complementa muy bien con el modelo de palo y esfera (“ball and stick model”).

### Resultados

Los estudiantes tendrán una comprensión básica de las estructuras cristalinas y sus propiedades, y cómo se forman los cristales.

### Prerrequisitos

Los estudiantes deben tener cierta exposición a los siguientes conceptos de ciencias físicas que suelen encontrarse en las ciencias de octavo grado:

- La comprensión básica de los átomos.
- Los conceptos básicos de los enlaces químicos.

### Correlación

#### *Conceptos Científicos*

- Naturaleza atómica de materiales sólidos.
- Estructura de materiales cristalinos.
- Celdas unitarias cristalinas.

#### *Conceptos de Nanociencia*

- Fuerzas e interacciones en la nanoescala: enlaces iónicos y covalentes.
- Propiedades de los materiales.

## Información de trasfondo

Un cristal (o sólido cristalino) es un material con átomos, moléculas o iones arreglados u organizados en un patrón repetitivo ordenado, que se extiende en sus tres dimensiones espaciales. El estudio científico de los cristales y su formación se conoce como cristalografía. El proceso de formación de cristales se denomina cristalización o solidificación. La palabra cristal se deriva de la antigua palabra griega κρύσταλλος "kristallos", que significa "hielo" y "cristal de roca" y su prefijo κρύος "krios" significa "helado o helada". Algunos ejemplos de sólidos cristalinos son: el hielo (agua solidificada), minerales como el cuarzo y la halita (sal de roca) y muchas piedras preciosas, como rubíes y diamantes. La mayoría de los metales comunes, como el oro, la plata, el hierro y el cobre, tienen una microestructura cristalina que consta de muchas regiones cristalinas diminutas. A este tipo de sólido se le llama policristalino.

### *Estructura cristalina*

La cristalización es el proceso de formación de un cristal a partir de un líquido (sólido derretido o fundido) o de materiales disueltos en un líquido. Por ejemplo, el agua cuando se enfría sufre un cambio de estado (fase) del líquido a su forma sólida (hielo). Durante el cambio de fase, las moléculas de agua están inicialmente en un estado menos ordenado (líquido). A medida que se enfrían y pierden energía térmica, las moléculas comienzan a alinearse en un arreglo cristalino ordenado, el cual caracteriza al hielo. El cristal ordenado representa un estado de energía más bajo que el del líquido menos ordenado, por lo que este cambio de fase libera una cantidad de energía al ambiente. Esa energía se conoce como el calor de fusión.

En la mayoría de los casos, durante la solidificación ("congelación"), se forman muchos cristales pequeños simultáneamente y crecen hasta fusionarse, formando una estructura policristalina. Bajo las circunstancias adecuadas, se puede hacer que un gran cristal crezca lo suficiente hasta convertirse en una muestra macroscópica. Estos materiales cristalinos ("single crystals") son importantes en muchos campos de la tecnología.

Las propiedades físicas de un sólido cristalino dependen del tamaño y el arreglo de los cristales individuales o granos. La estructura cristalina que forma un líquido depende de sus propiedades químicas, las condiciones bajo las cuales se está solidificando y la presión del ambiente. Generalmente, el proceso de enfriamiento de un líquido resulta en la formación de un material cristalino.

Sin embargo, bajo otras condiciones, el líquido puede solidificarse y formar un material no cristalino. En la mayoría de los casos en los que esto ocurre, el líquido se enfría tan rápido que los átomos no pueden moverse a su lugar correspondiente en el enrejado ("lattice") antes de perder por completo su movimiento. Un material no cristalino, que no tiene un orden de largo alcance, se llama un material amorfo, vítreo o vidrio. A menudo se le conoce también como sólido amorfo. Existen diferencias particulares entre los sólidos cristalinos y los sólidos amorfos: el proceso de formación de un vidrio no libera el calor de fusión.

Las estructuras cristalinas se producen en todas las clases de materiales, con todo tipo de enlaces químicos. Casi todos los metales existen en estado policristalino. Los metales amorfos o monocristalinos deben producirse sintéticamente, a menudo con gran dificultad. Los cristales unidos por enlaces iónicos, como las sales de cloruro de sodio y cloruro de potasio, pueden formarse al solidificarlas, ya sea de un líquido fundido o por cristalización de una solución. Los cristales unidos por enlaces covalentes también son comunes, entre ellos se destacan el diamante, la sílice y el grafito.

El polimorfismo es la capacidad de un sólido para existir en más de una forma cristalina. Por ejemplo, el hielo de agua generalmente se encuentra en la forma hexagonal conocida como **hielo Ih**, puede existir con cristales cúbicos conocido como **hielo Ic**, el hielo romboédrico conocido como **hielo II** y muchas otras formas. La misma molécula también puede tener fases amorfas, como el hielo amorfo. Este fenómeno también se conoce como polimorfismo. Pero para los elementos químicos, el polimorfismo se conoce como alotropía. El diamante, el grafito y los fullerenos son ejemplos de diferentes alótropos del carbono.

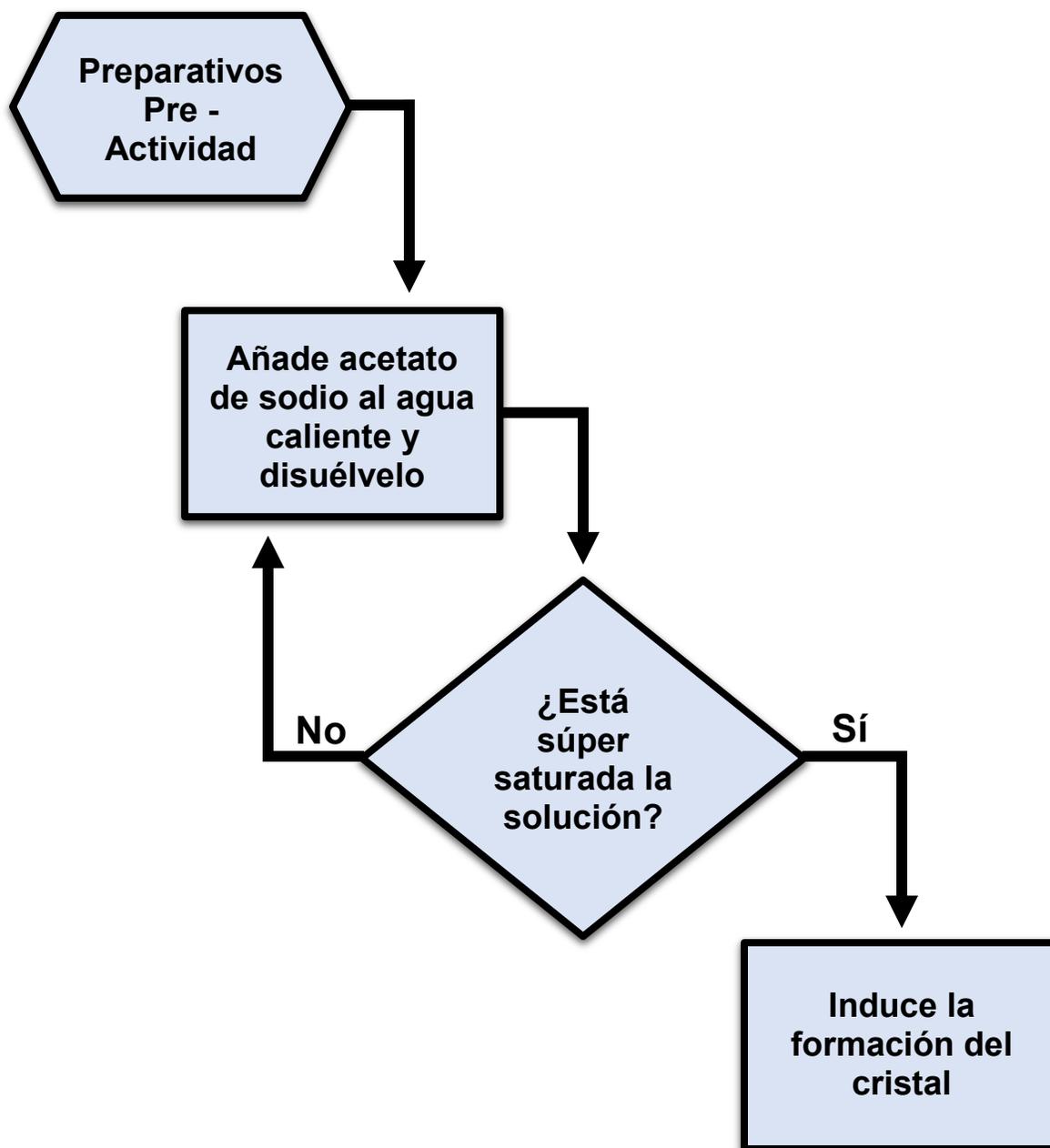
Mientras que el término "cristal" tiene un significado específico en el campo de la ciencia de materiales y la física del estado sólido, coloquialmente "cristal" se refiere a objetos sólidos que exhiben formas geométricas bien definidas y, a menudo, agradables. En este sentido de la palabra, muchos tipos de cristales se encuentran en la naturaleza. La forma de estos cristales depende de los tipos de enlaces moleculares entre los átomos para determinar su estructura, así como de las condiciones bajo las cuales se formaron.

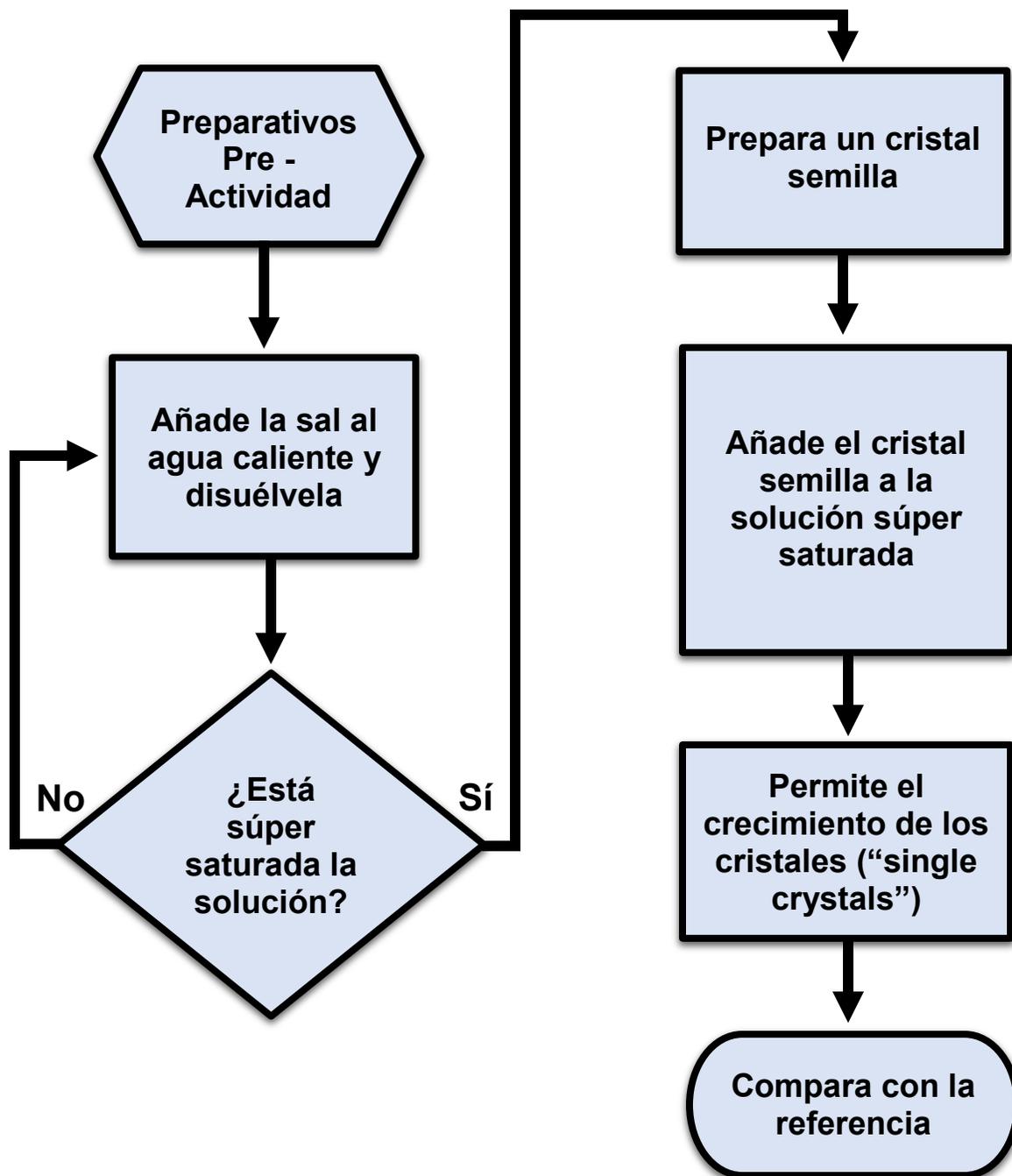
Los copos de nieve, los diamantes y la sal de mesa son ejemplos comunes de cristales. Algunos materiales cristalinos pueden exhibir propiedades eléctricas especiales como el efecto ferroeléctrico o el efecto piezoeléctrico. Además, la luz que pasa a través de un cristal a menudo se refracta o se dobla en diferentes direcciones, produciendo una variedad de colores. La óptica de cristal es el estudio de estos efectos. En estructuras dieléctricas periódicas se puede esperar un rango de propiedades ópticas únicas como se ve en los cristales fotónicos.

## Actividad de aprendizaje: Celdas unitarias y estructuras de cristal

### Flujograma de la actividad

#### Parte I. Preparación de una solución súper saturada



*Parte II. Crecimiento de cristales*

## Actividad de aprendizaje: Celdas unitarias y estructuras de cristal

### I. Preparación de la solución súper saturada

Una solución súper saturada es una solución que tiene mayor cantidad de sustancia disuelta de lo que normalmente podría contener a temperatura ambiente. En esta actividad prepararás una solución súper saturada y crecerás cristales a partir de esta solución.

#### Materiales

- Agua destilada o desionizada
- Acetato de sodio, anhidro
- Tubo de ensayo
- Gradilla para tubos de ensayo
- Plancha de calor o baño de agua
- Vaso de laboratorio
- Placas Petri de plástico o vidrio (opcional)
- Agitadores
- Agarraderas



## Procedimiento

1. Llena un tubo de ensayo con agua a una altura de 2 cm desde la parte inferior del tubo.
2. Agrega suficiente polvo de acetato de sodio para que la altura total del agua más el polvo esté a 3 cm del fondo del tubo.
3. Agrega el acetato de sodio hasta que esté completamente disuelto asegurándote de raspar la parte inferior.
4. Agrega más acetato de sodio hasta que no pueda volver a disolver más la solución, asegurándote de raspar la parte inferior.
5. Coloca el tubo de ensayo en un baño de agua y calienta la solución hasta que todo el polvo se haya disuelto y la solución sea transparente. Asegúrate que no hierva.
6. Una vez que el acetato de sodio se haya disuelto completamente, retira el tubo de ensayo del baño de agua y colócalo SUAVEMENTE en una gradilla para que se enfríe lentamente (5-10 minutos). **Opcional:** puedes verter una pequeña cantidad de la solución en una placa Petri para observar mejor la formación de los cristales.
7. Una vez que la solución se haya enfriado, agita la solución con moviendo o golpeando el tubo de ensayo y observa cómo crecen los cristales. Si el movimiento o el golpe no funcionan, entonces puedes colocar 1 cristal de acetato de sodio (cristal semilla) en la solución. Pueden pasar varios minutos antes de que se observe la formación de cristales.

**Nota:** Durante los primeros 2 pasos, es muy importante que continúes agregando acetato de sodio hasta que ya no pueda disolverse. El proceso de disolución toma tiempo. Si dejas de agitar demasiado pronto, es posible que la solución no esté sobresaturada y el experimento no funcione.

## II. Crecimiento de cristales

### Materiales

- Vasos de plástico o vidrio
- Agua destilada o desionizada
- Material para la cristalización, el cual puede ser
  - bórax (borato de sodio)
  - acetato de sodio
  - sulfato de cobre
- Lápiz e hilo

### Procedimiento

1. Etiquetar vasos de precipitados. NOTA: Los volúmenes más grandes de agua requerirán más material para alcanzar la saturación. Los volúmenes finales (paso 4 a continuación) solo requieren una profundidad de dos centímetros.
2. Saturar soluciones a. Prepare las soluciones de las sales que está utilizando disolviendo primero los materiales en agua tibia, revolviendo con frecuencia. segundo. Continúe agregando material hasta que observe que el sólido no disuelto se acumula en la parte inferior del vaso de precipitados. do. Una vez que la solución esté súper saturada, deje que se enfríe.
3. Recoja un cristal semilla para hacer crecer una muestra de cristal único más grande
  - a. Sumerja una longitud de hilo en la solución saturada
  - b. Deje secar el hilo
  - c. Retire cualquier exceso de cristales
4. Vierta la solución saturada en dos vasos separados a una profundidad de al menos dos centímetros.
5. Configurar la cámara de crecimiento de cristal a. Suspenda el hilo hecho en el Paso 3 de un lápiz colocado en la parte superior de la jarra. segundo. Coloque el vaso en las condiciones deseadas (es decir, baño de hielo, nevera, encimera) sin tocar.
6. Monitoree el crecimiento de los cristales, lo que puede demorar de unas pocas horas a unos pocos días.
7. Investigue el tipo de material utilizado en el experimento, determine la estructura cristalina esperada y encuentre algunas imágenes de estos cristales.
8. Examine los cristales que creció, usando una lupa de lente de mano y / o un microscopio óptico. Haz un bosquejo de las formas de cristal a continuación. Compara tus cristales con los resultados encontrados en el Paso 7.

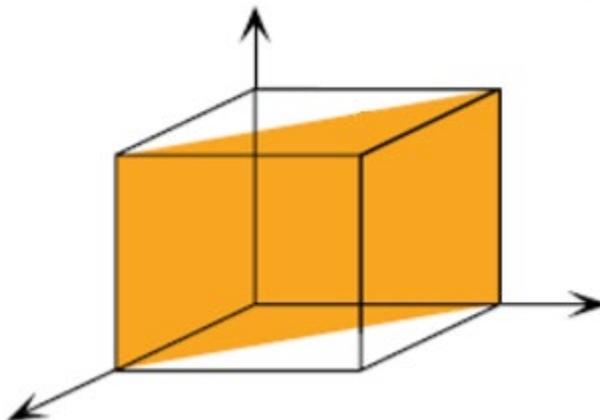
## Preguntas de discusión

- ¿Qué significan los siguientes términos?
  - a. súper saturado
  - b. material amorfo
  - c. policristalino
  - d. exotérmica / endotérmica
  - e. defectos de cristal
  - f. límite de grano
- Comenta brevemente tu experiencia con el crecimiento de cristales en esta actividad.
- ¿Dónde más observas cristales?
- ¿Por qué necesitamos conocer la estructura cristalina de un material? Explica, de forma general, cómo diferentes estructuras pueden resultar en diferentes propiedades.
- ¿Qué tipos de defectos pueden haberse introducido en los cristales que creciste?
- ¿Qué aspectos ambientales del experimento pueden haber contribuido a lo que observaste?
- ¿Fue el crecimiento cristalino endotérmico o exotérmico? ¿Por qué?
- ¿Cuáles son algunos usos prácticos para una solución súper saturada de acetato de sodio? (*Piensa en los calentadores de manos químicos que se usan para las actividades al aire libre en climas fríos.*)
- ¿Cómo es este experimento un ejemplo de autoensamblaje?

Para las siguientes preguntas el instructor debe haber repasado la presentación de PowerPoint con la clase, sobre la estructura del cristal y la terminología de la celda ("célula") unitaria.

- ¿Qué es una celda unitaria?
- ¿En qué unidades se miden frecuentemente las longitudes de los lados de las celdas unitarias, usualmente designadas como "a", "b" y "c"?
- ¿Cuántos átomos por celda unitaria hay en una estructura cristalina cúbica de cuerpo centrado (BCC)?
- Para una celda unitaria BCC, ¿qué representan (1,0,0), (1,1,0), (1,1,1) y (0,0,1)?
- Dibuja una representación de la celda unitaria BCC utilizando el "ball and stick model".
- Para la celda unitaria que se muestra en la Figura 1,

**Figura 1.** Celda unitaria



- a. Identifica los ejes x, y, z.
- b. Ya que esta es una estructura cúbica y la longitud de cada lado es la misma, identifica ese valor como "a".
- c. Muestra las dimensiones "a" en el dibujo de la celda unitaria.
- d. Dibuja el vector direccional (índice) correspondiente a [110].

## Usos presentes y aplicaciones futuras

Los cristales y el crecimiento de cristales son muy importantes en muchas áreas de la ciencia y la ingeniería. Prácticamente todos los circuitos integrados se realizan utilizando un sustrato de silicio monocristalino y utilizan capas de materiales policristalinos. El manejo del crecimiento del cristal es esencial en la producción de acero y otros metales, donde la estructura del cristal determina la resistencia del metal, la ductilidad y otras propiedades. Los materiales cristalinos también se utilizan en dispositivos ópticos y optoelectrónicos.

Comprender el crecimiento de los cristales también es importante para las ciencias terrestres. En geofísica, los minerales en la corteza terrestre crecen desde la masa fundida para formar varios tipos de rocas ígneas. En meteorología, el crecimiento de los cristales de hielo desempeña un papel central en la comprensión de la dinámica de las nubes, los rayos y la formación de lluvia y granizo.

## Recursos multimedia

### Videos

- Soluciones súper saturadas  
[http://www.youtube.com/watch?V=1y3bKIOkcmk&feature=player\\_embedded](http://www.youtube.com/watch?V=1y3bKIOkcmk&feature=player_embedded)

### Simulaciones

- [www.nanohub.org](http://www.nanohub.org)
- [www.concord.org](http://www.concord.org)

### Artículos

- Higgins, Nichols (2007). "Catalysts under the microscope". "Nature Nanotechnology. Vol. 2".
- Howard, J. Michael; Darcy Howard (Ilustrador) (1998). "Introduction to Crystallography and Mineral Crystal Systems".  
Sitio web: <http://www.Rockhounds.com/rockshop/xtal/index.html>. Bob's Rock Shop (recuperado el 2008/4/20).
- Krassmann, Thomas (2005–2008). "The Giant Crystal Project".  
Sitio web: <http://giantcrystals.Strahlen.org>. Krassmann (recuperado el 2008/4/20).
- Varios autores (2007). "Teaching Pamphlets".  
Sitio web: <http://www.Iucr.Ac.UK/iucr-top/comm/cteach/pamphlets.html>  
"Commission on Crystallographic Teaching" (recuperado el 2008/4/20).
- Varios autores (2004). "Crystal Lattice Structure: Index by Space Group".  
Sitio web: <http://cstwww.nrl.navy.Mil/lattice/spcgrp/>. "U.S. Naval Research Laboratory, Center for Computational Material Science" (recuperado el 2008/4/20).
- Varios autores (2010). "Crystallography".  
Sitio web: [www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/indexen.html](http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/indexen.html). "Spanish National Research Council, Department of Crystallography" (recuperado el 2010/1/08).
- Ward (2005). "Snapshots of Crystal Growth". "Science". 10 de junio de 2005.

### *Referencias adicionales*

- Henry George Liddell, Robert Scott, “A Greek-English Lexicon” en “Perseus Digital”.
- “Library”  
[www.perseus.tufts.edu/hopper/text?doc=Perseus:text:1999.04.0057:entry=kru/stallos](http://www.perseus.tufts.edu/hopper/text?doc=Perseus:text:1999.04.0057:entry=kru/stallos)
- “The American Heritage Dictionary of English Language, Fourth Edition: Appendix I: Indo-European Roots”. 2000.
- “National Geographic”, 2008. “Cavern of Crystal Giants”.  
<http://ngm.nationalgeographic.com/2008/11/crystal-giants/shear-text>

### **Reconocimientos**

- Contribuciones - Desarrollado por Kristie Jean de “North Dakota State College of Science”. Editado y modificado por Deb Newberry de “Dakota County Technical College” y James Marti de “University of Minnesota”. Traducido al español por Rodfal A. Rodríguez y María T. Rivera de Cupey María Montessori School.