



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE
PUEBLA

FACULTAD DE INGENIERÍA

GEOFÍSICA

DIFRACCIÓN DE RAYOS X, SIMETRÍA Y ESTRUCTURA
DE MATERIALES MAGNÉTICOS

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIATURA EN INGENIERÍA

GEOFÍSICA

PRESENTA

ANA BRENDA BARAJAS NAVA

DIRECTOR DE TESIS

M. en C. JOSÉ ONÉSIMO FILADELFO AGUILAR ANDRADE

ASESOR

DR. GABRIEL JUÁREZ DÍAZ



NOVIEMBRE 2015

Contenido

DIFRACCIÓN DE RAYOS X, SIMETRÍA Y ESTRUCTURA DE MATERIALES MAGNÉTICOS	3
OBJETIVOS.....	9
CAPITULO I	10
Introducción.....	10
1.1 Cristales Magnéticos	10
1.2 Grupos Magnéticos	11
1.3 Construcción de un Grupo Magnético.....	11
CAPITULO II	16
ANTECEDENTES.....	16
2.1 MAGNETISMO EN LAS ROCAS	16
2.2 INTERACCIONES ENTRE LOS ESPINES	18
2.3 Propiedades de los Materiales Magnéticos.....	19
2.3.1 Susceptibilidad Magnética k :.....	19
2.3.2 Tipo de materiales.....	20
2.3.3 Fenómenos magnéticos en la materia sometida a un campo exterior:.....	23
2.3.4 Permeabilidad magnética μ :.....	24
2.4 Ciclo de Histéresis y Remanencia Magnética:	24
Capitulo III	28
3. Cristalografía	28
3.1 Sistemas Cristalinos.....	28
3.2 Estructuras	29
3.2.1 Estructuras Amorfas	29
3.2.2 Estructuras Cristalinas	29
3.3 Celda Unitaria.....	30
3.4 Red Cristalina	30

3.5 Simetría de los Cristales	31
3.5.1 Elementos de Simetría	32
3.6 Grupos Puntuales Cristalográficos Convencionales.....	32
3.7 Clases y Sistemas Cristalinos.	36
3.8 Proyección Estereográfica	38
3.8 .1 Proyección Estereográfica Cubica.....	40
3.9 Difracción de Rayos X por Cristales.	44
3. 10 Teoría de Grupos	49
3.11 Cristalografía de Puntos Magnéticos	56
3.12 Limitaciones sobre la simetría en los cristales.....	61
CAPITULO IV	63
MATERIALES Y METODOS.....	63
4.1 Condiciones experimentales	63
4.2 Características Principales del Equipo.	64
4.3 Diseño experimental	65
CAPITULO V	66
5.1 Resultados.....	66
5.1.1 Características principales de las muestras	66
CUANTIFICACION	70
CONCLUSIONES	85
Bibliografía	86

Índice de Figuras

fig. 1 cuadros de Color	4
Fig. 2 Diferentes tipos de materiales magnéticos	2

Fig. 3 Comportamiento dia-para y ferromagneticos en un campo magnetico	16
Fig. 4 Orientación de los momentos magneticos	17
Fig. 5 Ciclo de Histeresis	18
Fig. 6 Curva de Adquisicion y Desimanación	19
Fig. 7 (a)(b) Medida de Temperaturas	20
Fig. 8 Representación de una celda unitaria de un cristal	23
Fig. 9 Red Cristalina	24
Fig. 10 Elementos de Simetria, triclinico, rombico, y sistema tetragonal.....	27
Fig. 11 Elementos de simetria, sistema trigonal y hexagonal	27
Fig. 12 Un cristal y su proyección estereografica	31
Fig. 13 Trazos posibles en la proyección estereografica	32
Fig. 14 Localización de los ejes de simetria en un cubo	33
Fig. 15 Proyeccion Estereografica de las familias de direcciones	35
Fig. 16 Proyección Estereografica completa del sistema cubico	36
Fig. 17 Ejes de simetra	46
Fig. 18 Tres ejes de simetria simples	47
Fig. 19 Triangulo Equilatero y sus rotaciones	50
Fig. 20 Triangulos negros y blancos que ilustran 3m	52
Fig. 21 Limitaciones sobre la simetria en los cristales	53
Fig. 22 Ejemplos de rotaciones permitidas	54
Fig. 23 Equipo y materiales empleados	56
Fig. 24 Ejemplo de Procesamiento de datos	57
Fig. 25 a)Muestra original de Ilmenita, b) muestra observada al microscopio optico 10 x, c) preparacion fija de polvo en tamiz de 200	58
Fig 26 Espectro de Difracción de la Ilmenita	60

Fig. 27 a) Muestra original de Manganeso, b) muestra observada al microscopio optico 10 x , c) preparación fija de polvo en tamiz 200	65
Fig. 28 Espectro de Difracción del Manganeso	67
Fig. 29 a)Muestra Original de Magnetita, b) muestra observada al microscopio optico 10 x, c) preparación fija de polvo en tamiz 200	72
Fig. 30 Espectro de Difracción de Magnetita	74

Índice de Tablas

Tabla 1 Elementos de Simetria	25
Tabla 2 Sistemas Cristalinos	30
Tabla 3 tabla de multiplicación para los grupos	43
Tabla 4 Conjuntos	45
Tabla 5 Grupos	48

Agradecimientos

Me siento orgullosa del gran paso tan importante en mi vida, el cual no hubiera sido capaz de dar sin la ayuda de mi familia.

A mi abuelito Feliciano (+) porque con fue un gran papá el mejor que pude tener, me apoyo en todo e hizo de mi lo que soy.

A mi mami Yola que aunque no soy su hija, me ha enseñado que con esfuerzo, trabajo y constancia todo se consigue, tengo tanto que agradecerte en especial por el amor incondicional que siempre me brindas, por la educación y por proporcionarme todo lo que he necesitado.

A mi mami Delfis por cada día hacerme ver la vida diferente y confiar en mis decisiones, tus esfuerzos son impresionantes y tu amor para mi es invaluable.

A mi abuelita que siempre me ha cuidado y apoyado, sé que siempre estoy en sus oraciones.

A mi hermana que siempre esta cuando la necesito, que me hace ser valiente y seguir adelante.

A mi novio Víctor que me ha motivado para terminar y apurarme en este trabajo.

En especial a mi director de tesis, M. en C. José Onésimo Filadelfo Aguilar Andrade por su esfuerzo y dedicación, quien con sus conocimientos, su experiencia, su paciencia y su motivación ha logrado en mí que pueda terminar mis estudios con éxito.

Al Dr. Gabriel Juárez Díaz por su apoyo en el aprendizaje y habilidades en la manipulación del equipo de difracción de Rayos X, por su asesoría y hospitalidad en el laboratorio.

A don Dani por dejarme preparar mis muestras en el laboratorio.

A mis Profesores por su guía y su enseñanza durante mi estancia en la institución, por su entrega en mis aprendizajes, por compartir su sabiduría y por impulsarme a ser cada día mejor, gracias por poner empeño en mi formación y ser de mí ahora una profesionista.

Y por supuesto a mi casa de estudios BENEMERITA UNIVERSIDAD AUTONOMA DE PUEBLA.

Con cariño para

Mis mamis Yolanda y Delfina

Mi hermana

Aideé

Mis abuelitos

Feliciano y Anita

Mi Novio

Víctor Alfonso

DIFRACCIÓN DE RAYOS X, SIMETRÍA Y ESTRUCTURA DE MATERIALES MAGNÉTICOS

RESUMEN

Este trabajo pretende que por medio de difracción de rayos x, se pueda calcular o estimar el contenido de materiales magnéticos de interés para la explotación y obtención de los minerales, de igual manera al conocer su estructura y simetría se podrán crear nuevos materiales con mayor resistencia y menor peso.

Como sabemos en los materiales magnéticos observamos que sus átomos o iones se comportan como si fuesen pequeños imanes que interactúan entre sí. En estos casos se dice que los átomos tienen un momento magnético diferente de cero, el cual se caracteriza por su magnitud y la dirección en la que está orientado. Estos pequeños imanes los denominaremos espines magnéticos o simplemente espines.

ABSTRACT

In this work aims that through x-ray diffraction, can calculate or estimate the content of magnetic materials of interest to the exploitation and production of minerals, similarly to know its structure and symmetry can create new materials with higher strength and lower weight.

As we know in magnetic materials observe its atoms or ions behave as if they were small magnets interacting. In these cases, it says that atoms have a magnetic moment different from zero, which is characterized by its magnitude and direction that is oriented. These small magnets will call magnetic spins or simply spins.

OBJETIVOS

OBJETIVOS GENERALES

- Estudio de materiales magnéticos usando el hecho de que algunos presentan una simetría muy marcada, como es el caso de la magnetita la cual tiene una estructura cubica y la hace altamente simétrica.
- Determinar la cantidad de mineral magnético y saber si es explotable o no un yacimiento

OBJETIVOS PARTICULARES

- Descripción de los materiales mediante sus simetrías.
- Estimación de los porcentajes en las muestras mediante el equipo de difracción de rayos X.
- Que otros minerales existen en las muestras de algún yacimiento.

CAPITULO I

Introducción

1.1 Cristales Magnéticos

Los cristales son un conjunto de objetos físicos que se encuentran en arreglos formados en una red. Estos objetos considerados como puntos se refieren a estos como átomos, iones y moléculas que mantienen una estructura. Estas estructuras cuando las queremos hacer lo más cercano a la realidad, se le debe considerar sus propiedades de simetría, además de incluir algunas cantidades físicas como su cantidad de movimiento angular, incluir un momento angular intrínseco del cristal, el cual se denota como el espín del cristal, y la teoría de grupos que describen a estos cristales se hace más complicada.

Los cristales considerados como una colección de puntos, realmente consisten de objetos, electrones, átomos, iones, moléculas que tienen una estructura. Esta estructura se va a ver afectada la simetría cuando se considera el espín de las partículas.

Una representación del cristal se hace por medio de diferentes regiones de color, se empieza por el color negro y color blanco, este se aplica a las simetrías en los cristales, pero se introduce una nueva operación, que consiste en el intercambio de colores.

Las operaciones que se pueden realizar debido a las simetrías del cristal, se asocian a un grupo o grupos los cuales escogen a cada punto un variable de dos valores, este es el espín con valor $\frac{1}{2}$ o color "Negro y Blanco".

1.2 Grupos Magnéticos

Hay cristales que cambian al efectuar una combinación de traslaciones con la orientación de los espines, este ocurre en un cristal antiferromagnético el cual al cambiar su espín a un sentido opuesto, se obtiene una simetría de un cristal ferromagnético.

Un ejemplo de un grupo magnético: el grupo C_{2h} tiene elementos E , C_2 , σ_h , e I (inversión), cada uno representado en un cuadro unitario. Este grupo tiene un subgrupo invariante con elementos (E, C_2) , (E, σ_h) , (E, I) .

1.3 Construcción de un Grupo Magnético

La construcción de un grupo magnético, se puede representar hablando del grupo de color del cuadrado. El cuadrado sin color tiene un grupo de simetría C_{4v} ($4mm$), con elementos E , C_{4z} , $C_{4z}^{-1} = C_{4z}^3$, $C_{2z} = C_{4z}^2$, σ_x , σ_y , σ_{da} , σ_{db} , donde z es el eje perpendicular al cuadrado. Así que el cuadrado es invariante bajo una rotación de $\frac{\pi}{2}$ y π alrededor de z , las líneas de reflexión bisectan los lados del cuadrado (los ejes x , y) y su línea a través de sus diagonales.

Desde el centro a cada esquina se dibuja una línea dividiendo el cuadrado en cuatro partes, y de color negro dos cuadros opuestos, dejando los otros dos blanco, esto disminuye la simetría. Entonces E , C_{2z} , σ_{da} , y σ_{db} intercambian el color negro y blanco.

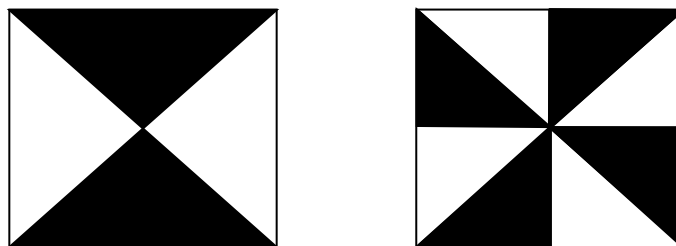


Fig 1. Cuadrados de Color

Este trabajo de tesis hace una descripción de materiales magnéticos, de estructuras cristalinas y sus características abarcando especialmente las que se encuentran en los minerales magnéticos, además se mencionan algunos conceptos físicos y matemáticos que serán útiles en la discusión y análisis de los resultados que se obtuvieron para algunos minerales.

Se encuentra dividido en cinco capítulos, en el capítulo I, trata de la introducción del trabajo, acerca de los cristales magnéticos, grupos magnéticos y la construcción de estos.

El capítulo II, trata de los antecedentes relacionados con la magnetización, las rocas y minerales magnéticos, la interacción de los espines, y sus propiedades.

El Capítulo III, trata de la cristalografía, sistemas cristalinos, sus estructuras, la simetría de los cristales, celdas unitarias y primitivas, proyección estereográfica, difracción de Rayos X y teoría de grupos.

En el capítulo IV, trata de la adquisición de los datos, los materiales y métodos, aplicados a algunas muestras de minerales magnéticos, a las cuales se les hizo la difracción de Rayos X, esta prueba nos da información sobre algunos aspectos en la composición y arreglos de los átomos del cristal como:

- ☒ Tipo de red.
- ☒ Sistema cristalino.
- ☒ Cuantificación

Se mencionan las características principales del equipo de difracción de Rayos X, el procesado de los datos obtenidos de algunas muestras como son: magnetita, óxido de manganeso, ilmenita, óxido de calcio y aluminio.

En el capítulo V, se presentan los resultados y conclusiones del análisis y la difracción de Rayos X de las muestras cristalinas.

Como sabemos en la naturaleza se tienen estructuras de cuerpos sólidos, estos se clasifican por sus propiedades eléctricas y se dividen en materiales que son

conductores y aislantes. Así que se tiene que los conductores son metales y los cristales iónicos son los aislantes.

Las estructuras de los minerales en su mayoría corresponden a la cubica centrada en la cara (FCC), la cubica centrada en el cuerpo (BCC) y la del empaquetamiento hexagonal (hep) y algunos de estos presentan una estructura cubica simple.

Este tipo de estructuras para cada tipo de red, usando el modelo de esferas duras del espacio en la cual se llenan estos en varios tipos de redes está dada por:

Cubica simple $\pi/6$

Cubica centrada en el cuerpo $\pi \sqrt{3}/8$

Cubica centrada en la cara $\pi \sqrt{2}/6$

Empaquetamiento hexagonal $\pi \sqrt{2}/6$

Estructura del diamante $\pi \sqrt{3}/16$

Cubica simple (CS)

CS esferas "r"

Cubo lado a

$$2r = a$$

$$r = \frac{a}{2}$$

$$V \text{ átomos} = \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$V \text{ celda} = a^3$$

$$\text{Ahora } V \text{ átomos} = \frac{4}{3} \pi \left(\frac{a}{2}\right)^3 = \frac{4}{3} \pi \frac{a^3}{8} = \frac{\pi}{6} a^3$$

Por lo tanto:

$$\frac{V \text{ átomos}}{V \text{ celda}} = \frac{\frac{\pi}{6} a^3}{a^3} = \frac{\pi}{6}$$

Empaquetamiento hexagonal (hep)

$$a = 2r$$

$$c = \frac{2\sqrt{6}}{3}$$

$$N^\circ \text{ átomos} = 2 \times [6 \times 1/6] + 2 \times 1/2 + 3 = 6$$

$$\frac{V \text{ átomos}}{V \text{ celda}} = \frac{6 \left(\frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sqrt{2}a}{4}\right)^3\right)}{a^3} = \pi \frac{\sqrt{2}}{6}$$

Como sabemos en los materiales magnéticos observamos que sus átomos o iones se comportan como si fuesen pequeños imanes que interactúan entre sí. En estos casos se dice que los átomos tienen un momento magnético diferente de cero, el cual se caracteriza por su magnitud y la dirección en la que está orientado. Es por ello que a estos pequeños imanes los denominaremos espines magnéticos o simplemente espines.

Pero no todos estos materiales se comportan de la misma manera, debido a que sus propiedades magnéticas dependen de dos factores. Éstos son: la magnitud de sus espines individuales, y la orientación relativa de éstos: Si los espines no tuviesen ninguna interacción, ya sea entre ellos o con sus alrededores, entonces

cada uno de ellos podría apuntar en cualquier dirección, puesto que no tendría preferencia alguna. Sin embargo, éste no es en general el caso: la orientación que tomará cada uno de ellos dependerá del balance de varios factores que pueden resumirse en factores internos y externos.

Como su nombre lo indica, los factores internos dependen de las características intrínsecas de cada material, esto es, del tipo de interacciones entre los espines. Por otro lado, los factores externos son los que están relacionados con el ambiente, es decir, que dependen de la interacción del sistema con sus alrededores. Como ejemplo de factores externos tenemos la posible existencia de un campo magnético producido por una fuente ajena al material, y por otro lado, de manera muy importante, la temperatura ambiental, ya que el medio ambiente funciona como una fuente de calor y agitación para el material.

Un ejemplo típico de un material magnético, es el de los imanes permanentes. En este caso, una gran parte de los espines está alineada permanentemente en la misma dirección. Y aunque el campo producido por cada uno de estos espines es muy pequeño, al sumarse sus contribuciones individuales se produce un campo magnético que puede observarse macroscópicamente.

En el otro extremo tenemos los materiales paramagnéticos. En estos materiales los espines apuntan en direcciones totalmente diferentes, por lo que las contribuciones de los espines individuales tienden a anularse. Como consecuencia, a nivel macroscópico no se observa un campo magnético resultante. Sin embargo, existen localmente pequeños campos magnéticos producidos por los espines, y un pequeño "imán de prueba" sentirá las variaciones de este campo a lo largo del material.

CAPITULO II

ANTECEDENTES

El magnetismo fenómeno mediante el cual los materiales ejercen fuerzas atractivas o repulsivas sobre otros materiales, es conocido desde hace miles de años. Sin embargo, los principios básicos y los mecanismos que explica el fenómeno magnético son complejos. Algunos ejemplos bien conocidos de materiales son el hierro, algunos aceros y la magnetita que se encuentran en la naturaleza y tienen propiedades magnéticas, todas las sustancias son influenciadas en mayor o menor grado por la presencia de un campo magnético.

2.1 MAGNETISMO EN LAS ROCAS

El magnetismo de rocas es el estudio del comportamiento y propiedades magnéticas de los distintos tipos de rocas y de los minerales que las constituyen, tal y como se encuentran en la naturaleza. Es un fenómeno físico por el cual, los materiales, en mayor o menor medida, ejercen fuerzas de atracción o repulsión sobre otros materiales. Algunos materiales conocidos presentan propiedades magnéticas detectables fácilmente como el níquel, hierro, cobalto y sus aleaciones que comúnmente se llaman imanes. Sin embargo, todos los materiales son influenciados, de mayor o menor forma, por la presencia de un campo magnético.

Así pues, un campo magnético no es más que la región del espacio donde se manifiestan los fenómenos magnéticos. Estos actúan según unas imaginarias líneas de fuerza, que son el camino que sigue la fuerza magnética y que son conocidas también como líneas de flujo magnético. La intensidad o dirección del campo en un determinado punto viene dado por H , que es una magnitud vectorial.

En ausencia de un campo magnético la mayor parte de la materia no manifiesta propiedades magnéticas; eso es debido a que internamente, los campos

magnéticos generados por el movimiento de los electrones están compensados unos con otros. Sin embargo al someter a un material, sea el que sea, a la acción de un campo magnético exterior, se produce una distorsión del movimiento electrónico lo que provoca la aparición de un momento magnético opuesto al campo exterior. Además, se da el caso de materiales que poseen un momento magnético y al ser sometidos a la acción del campo se produce una alineación de dichos momentos, lo que favorece la propagación del campo magnético.

La caracterización magnética de una muestra requiere la medición de diversos parámetros, siendo algunos de los más importantes:

- Susceptibilidad magnética.
- Ciclo de histéresis magnética.
- Curvas de adquisición y desimanación de IRM (Isothermal Remanent Magnetization, imanación remanente isoterma).
- Desimanación térmica de una IRM impartida en tres ejes ortogonales.
- Curvas de adquisición y desimanación de ARM (Anysteretic Remanent Magnetization, imanación remanente anisterética).
- Curvas termomagnéticas o de Curie.
- Medidas a bajas temperaturas.

Todos estos parámetros aportan información fundamental para identificar los diversos minerales ferromagnéticos presentes en una muestra y su estado magnético, que depende principalmente del tamaño y la forma de los granos o cristales.

Los estudios de magnetismo de rocas, ya sean completos o parciales, suelen llevarse a cabo complementariamente a cualquier estudio paleomagnético, con el objeto de averiguar cuáles son los minerales ferromagnéticos. Además, el magnetismo de rocas es un campo de investigación interesante, para conocer la

microfísica de los minerales. Es también una herramienta fundamental para los estudios de magnetismo ambiental o paleoambiental, que intentan caracterizar las fases magnéticas presentes en sedimentos recientes o antiguos y su variación, tanto espacial como temporal. Dada la conexión entre los parámetros ambientales o paleoambientales y la presencia y estado de unos u otros minerales ferromagnéticos, esto nos permite extraer información ambiental o paleoambiental importante.

2.2 INTERACCIONES ENTRE LOS ESPINES

Las interacciones entre los espines son originadas por mecanismos diversos, algunos de los cuales no son del todo conocidos. Sin embargo, para nuestra discusión, únicamente es pertinente conocer el efecto de dichas interacciones, sin importar las causas que las originan. Lo que sí es necesario señalar es que debido a un principio muy general de la naturaleza, la orientación final de los espines será aquella en donde la energía libre del sistema sea mínima. Para explicar a qué nos referimos, haremos una analogía entre un par de espines microscópicos y dos imanes permanentes. Esta analogía permitirá hacernos una idea acerca de lo que sucede a nivel molecular.

Si tomamos dos imanes permanentes, observaremos que los extremos de uno y otro se atraen o se repelen, debido a que cada uno de ellos tiene dos tipos de polos magnéticos. Como consecuencia, si los ponemos en contacto veremos que tienden a alinearse de una cierta manera que resulta "natural" para ellos. Decimos entonces que los imanes han tomado su posición de mínima energía, o de equilibrio. Si ahora tratamos de girar uno de ellos 180°, veremos que necesitamos hacer un trabajo; esto es, dado que esta nueva posición es de energía mayor que la anterior, necesitaremos suministrar energía para lograr y mantener esta nueva posición, ya que en el momento en que dejemos de administrar esta energía extra, o sea, en cuanto dejemos de hacer fuerza para detener a los imanes y les permitamos girar libremente, éstos cambiarán de dirección y se alinearán de

nueva cuenta en su antigua dirección, esto es, regresarán a su estado de mínima energía.

Algo similar sucede a nivel microscópico con los materiales a que nos hemos referido, únicamente que en vez de tener un par de imanes, tendremos un número del orden de 10 pequeños imanes interactuando entre sí. Entonces, cada par de los espines tratará localmente de orientarse de la forma más natural posible, es decir, de manera que la energía de ese par sea mínima. Como resultado de este proceso tenemos una gran diversidad de comportamientos en los diferentes materiales magnéticos.

2.3 Propiedades de los Materiales Magnéticos

Un mineral se imanta cuando se somete a un campo magnético

$$I = k H$$

Dónde:

I= inducción magnética

H=campo magnético

k= es la susceptibilidad magnética

I y H tienen la misma dirección.

2.3.1 Susceptibilidad Magnética k:

Al someter una sustancia a un campo magnético H, ésta se magnetiza. Adquiere intensidad de imantación M proporcional al campo exterior aplicado.

Se tiene por lo tanto:

$$M = k \cdot H$$

(Donde la constante de proporcionalidad k es la susceptibilidad magnética) y además: $M = m / volumen = p / \text{área}$ (donde m es el momento magnético = $p \cdot longitud$)

La medición de k se realiza en laboratorio mediante un puente de inductancia o una balanza magnética, o bien multiplicando el porcentaje de magnetita u otros minerales magnéticos presentes en la roca por la susceptibilidad de éstos, obtenida de tablas.

La utilidad práctica de su medición radica en la diferenciación entre rocas sedimentarias (k baja) e ígneas y metamórficas del basamento (k altas).

2.3.2 Tipo de materiales

1) *Diamagnéticos*. Son aquellos materiales en los que sus átomos no tienen momento magnético resultante; debido a esto no pueden interactuar magnéticamente con otros materiales, Consiste en la variación del momento magnético de los átomos, el cual se opone levemente a un campo magnético exterior, se produce debido a la simetría de los átomos causada por la alineación de momentos magnéticos asociados a electrones orbitales en presencia de un campo magnético externo, la cual hace que el momento magnético del átomo sea pequeño y negativo. Este fenómeno es independiente de la temperatura. El valor que adopta **k es negativo**.

Ejemplos son: grafito, calcita, albita, halita, anhidrita, cuarzo, feldespato, petróleos, agua, apatito, Ag, Au, Cu, Bi, Sb, etc.

2) *Paramagnéticos*. Son materiales en los cuales los átomos sí tienen momento magnético. Sin embargo, en ausencia de un campo magnético externo los espines individuales apuntan en direcciones diversas, de manera que sus contribuciones individuales se anulan; como consecuencia, no se observa un campo magnético resultante. Si se aplica un campo externo, entonces los espines se orientan ligeramente, dando como resultado una imantación en la dirección del campo aplicado. Todos los materiales magnéticos se comportan como paramagnetos cuando se encuentran a una temperatura alta; se dice entonces

que se encuentran en su fase paramagnética. Este comportamiento se debe a que a temperaturas altas los factores externos dominan sobre los internos, por lo cual el tipo de interacciones entre los espines pierde importancia. Debido a una simetría deficiente de los orbitales de los átomos se produce un momento magnético del átomo no nulo (en los elementos que tienen un número impar de electrones en las capas electrónicas externas) y en presencia de un campo exterior se ordenan de manera que refuerzan la acción de éste. Depende de la agitación térmica de las moléculas. El valor de ***k*** es **levemente positivo**.

Ejemplos son: augita, blenda, galena, pirita, limonita, olivino, granate, piroxenos, anfíboles, biotita, Pt, Al, Ti, Ir, etc.

3) *Ferromagnéticos* .En estos materiales las interacciones entre los espines son tales, que éstos tienden a alinearse paralelamente. Debido a esto, a temperaturas bajas, esto es, cuando los efectos internos son mucho más importantes que los externos, hay en estos materiales una orientación única con la cual se reduce a su valor mínimo la energía del material. Esta orientación corresponde a todos los espines que apuntan exactamente en la misma dirección. Se presenta sólo en el estado sólido, las fuerzas interatómicas producen un paralelismo de los momentos de los átomos próximos, en presencia de un campo exterior se ordenan de forma similar al paramagnetismo, pero con mayor intensidad.

El valor de ***k*** es **altamente positivo**. Caso de los metales nativos como el hierro, níquel y cobalto, presentes en meteoritos.

En estos también se producen dos series de momentos atómicos, paralelos y antiparalelos, pero dominan los primeros. Se da en la magnetita, pirrotina, ilmenita, titanomagnetita, cromita, etc. La respuesta magnética disminuye con el incremento de temperatura hasta casi cero, cuando se llega a la Temperatura de Curie, que es de 580° para la magnetita, desde donde sólo se comporta paramagnéticamente, fenómeno que también sucede en los minerales ferromagnéticos. El valor de ***k*** es **altamente positivo**

4) *Antiferromagnéticos*. En estos materiales, las interacciones entre los espines tienden a alinearlos antiparalelamente. Como resultado, a bajas temperaturas y en ausencia de un campo magnético externo, habrá una configuración única de mínima energía. En este estado del sistema, todos los espines apuntan alternadamente hacia arriba y hacia abajo, y el material no exhibe magnetismo a nivel macroscópico. Como en el caso anterior, pero las dos series de momentos son del mismo orden y se cancelan mutuamente, dando respuesta prácticamente nula. **El valor de k es cero**. Ejemplos son la hematita, óxidos de manganeso, de cobalto, de níquel, de hierro, etc.

5) *Vidrios de espín*. En este tipo de materiales encontramos que algunos pares de espines van a reducir su energía si se alinean paralelamente, mientras que otros lo van a hacer cuando sus posiciones sean antiparalelas. Dado que cada espín interactúa con muchos otros espines, algunos de "sus compañeros" le pueden "pedir" que se alinee en una dirección y otros en otra. Una consecuencia será que no todos los espines se puedan poner de acuerdo y que a temperaturas bajas no habrá una, sino muchas configuraciones diferentes que correspondan a estados de energía mínima. Para cada una de estas configuraciones tenemos que no todos los pares de espines contribuyen a reducir la energía libre; entonces se dice que los pares que no contribuyen se encuentran frustrados. Por consiguiente toda configuración de mínima energía contendrá muchos pares frustrados, diferentes en cada caso, ya que no será posible hacer que todos ellos contribuyan simultáneamente a reducir la energía del sistema.

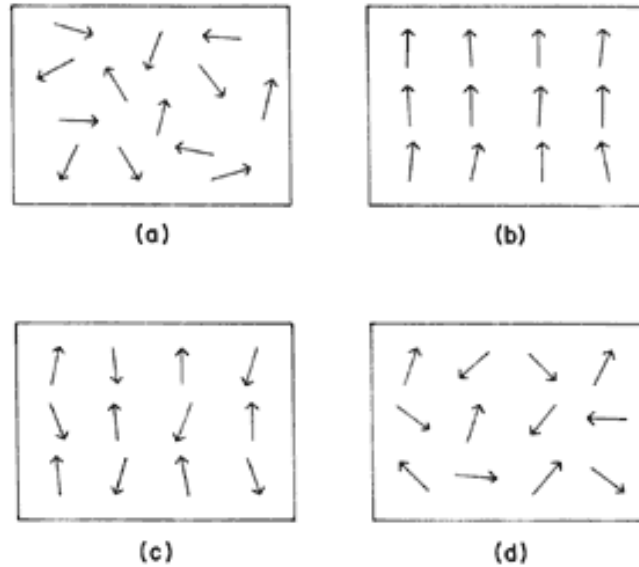
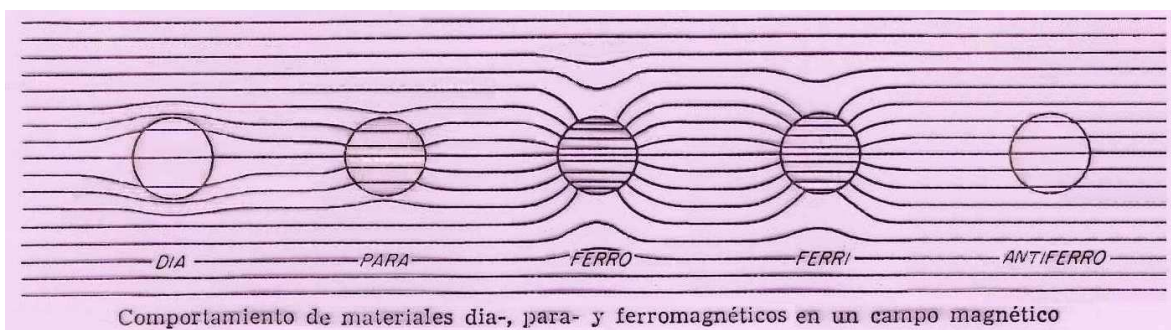


Fig. 2 Diferentes tipos de materiales magnéticos.

- a) Paramagneto. Los espines apuntan en direcciones al azar, las cuales varían al paso del tiempo.
- b) Ferromagnetos. Los espines tienen tendencia a alinearse en una misma dirección.
- c) Antiferromagnetos. Tendencia de los espines a alinearse antiparalelamente a sus vecinos.
- d) Vidrios de espín. Los espines apuntan en direcciones aparentemente al azar, pero fijas al paso del tiempo.

2.3.3 Fenómenos magnéticos en la materia sometida a un campo exterior:

Hay que considerar que la materia está formada por cargas eléctricas en movimiento



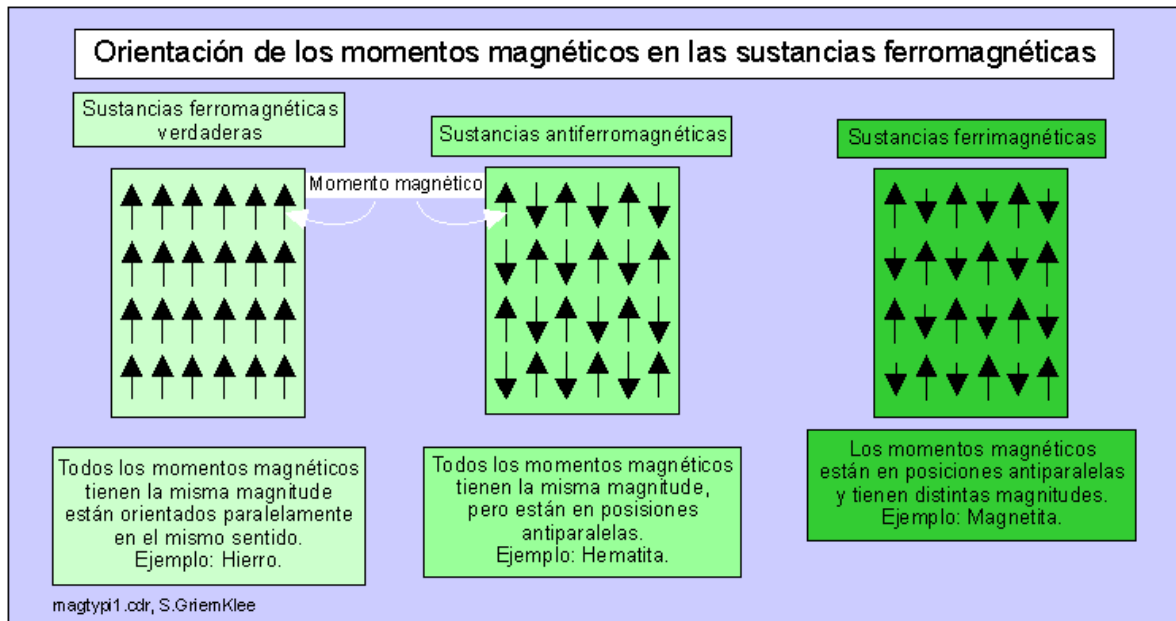


Fig.4 Orientación de los momentos Magnéticos.

2.3.4 Permeabilidad magnética μ : puede imaginarse como la facilidad que ofrece un cuerpo al paso del flujo magnético. Usualmente se toma a dimensionalmente, como la relación entre el flujo magnético inducido en un material respecto del que circula por el aire. Se relaciona con k de la siguiente manera:

$$\mu = \mu_0 (1 + k)$$

2.4 Ciclo de Histéresis y Remanencia Magnética:

A partir de ellos se pueden calcular distintos parámetros, como la imanación de saturación (M_s), la coercitividad (H_c), la imanación remanente de saturación (M_{rs}), etc. También, la propia forma de los ciclos proporciona información acerca de la naturaleza y posible coexistencia de varios minerales ferromagnéticos.

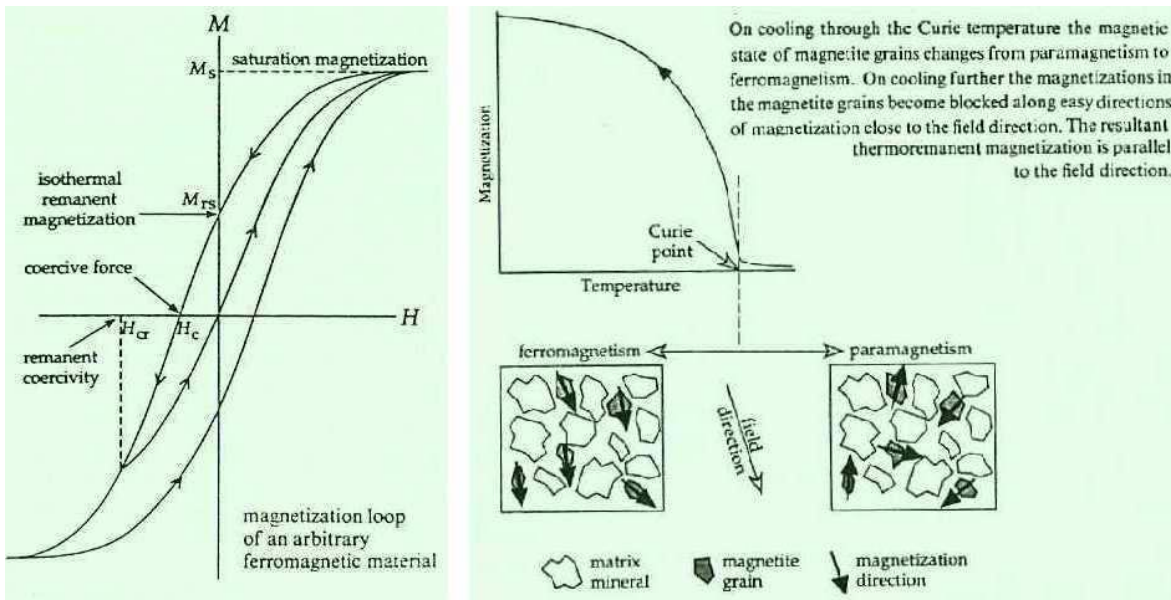
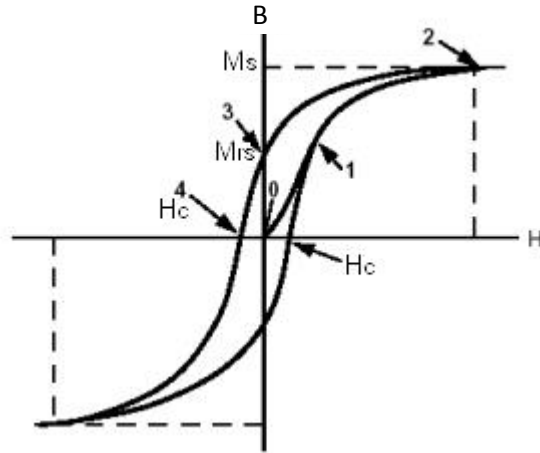


Fig. 5 Ciclo de Histéresis

El ciclo de histéresis muestra el comportamiento real de una sustancia magnética que experimenta magnetizaciones y desmagnetizaciones cíclicas.

Se produce sólo en los materiales ferro o ferrimagnéticos, cuyo comportamiento se aleja de la simple relación lineal $B = \mu_0 \cdot H$, llegándose a un máximo de respuesta B del material ferromagnético cuando se aplica un campo magnético creciente H, nivel de saturación, y desmagnetizándose, al ir reduciendo el campo aplicado, más gradualmente que cuando se magnetizó, para quedar al final un valor remanente de respuesta magnética del material. Es la base de los estudios

paleo y arqueomagnéticos o de Magnetismo Remanente, donde el campo inductor es el campo geomagnético de la Tierra y cuando éste cambia, una parte del campo inducido en la roca no cambia sino que permanece fijo en una dirección, documentando así la orientación del campo magnético terrestre en el momento en que se formó la roca.

- Curvas de adquisición y desimanación de IRM (Isothermal Remanent Magnetization, imanación remanente isoterma). A partir de ellas se calculan parámetros como la coercitividad de la remanencia (H_{cr}), la imanación remanente de saturación (M_{rs}), el S-ratio, etc, que dan información sobre la naturaleza de los minerales ferromagnéticos presentes en la roca.

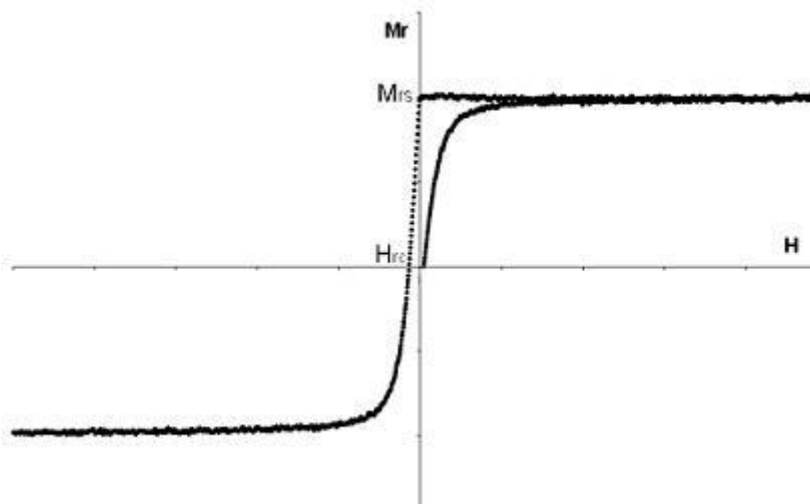


Fig 6. Curva de adquisición y desimanación

- Desimanación térmica de una IRM impartida en tres ejes ortogonales. Permite caracterizar simultáneamente las coercitividades y temperaturas de desbloqueo de las fases magnéticas presentes en la roca.

- Curvas de adquisición y desimanación de ARM (Anyisteretic Remanent Magnetization, imanación remanente anisterética).

- Curvas termomagnéticas o de Curie. Permiten caracterizar las temperaturas de Curie y/o de transformación química de los minerales ferromagnéticos de la roca.

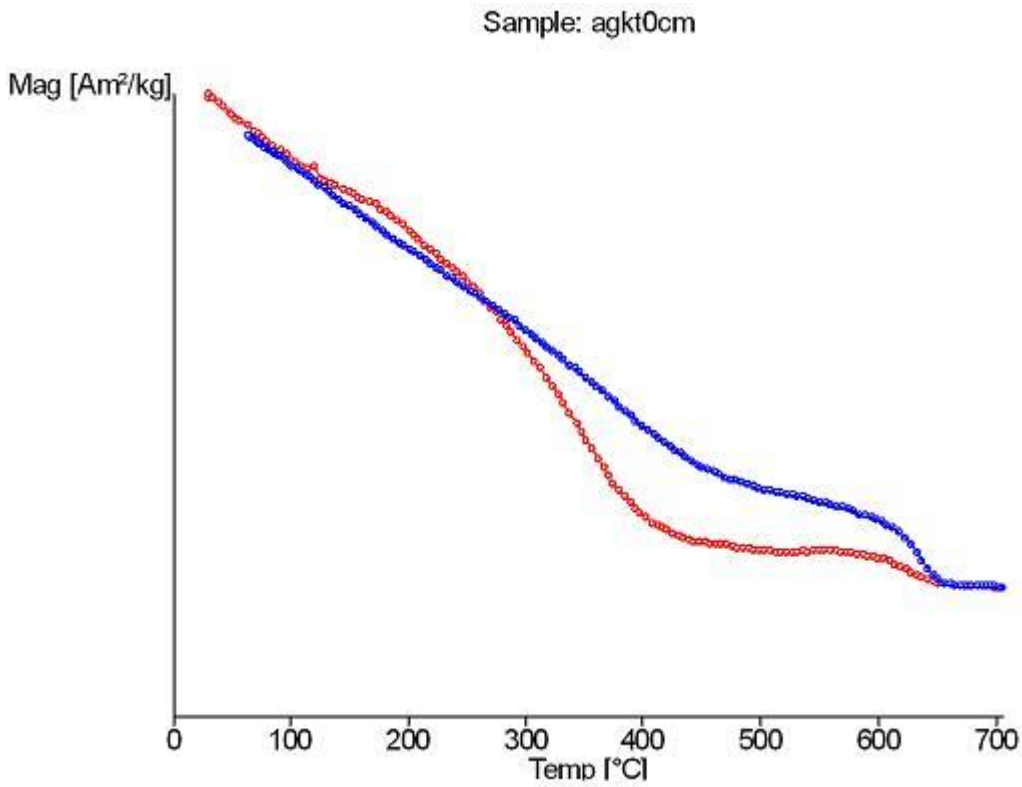
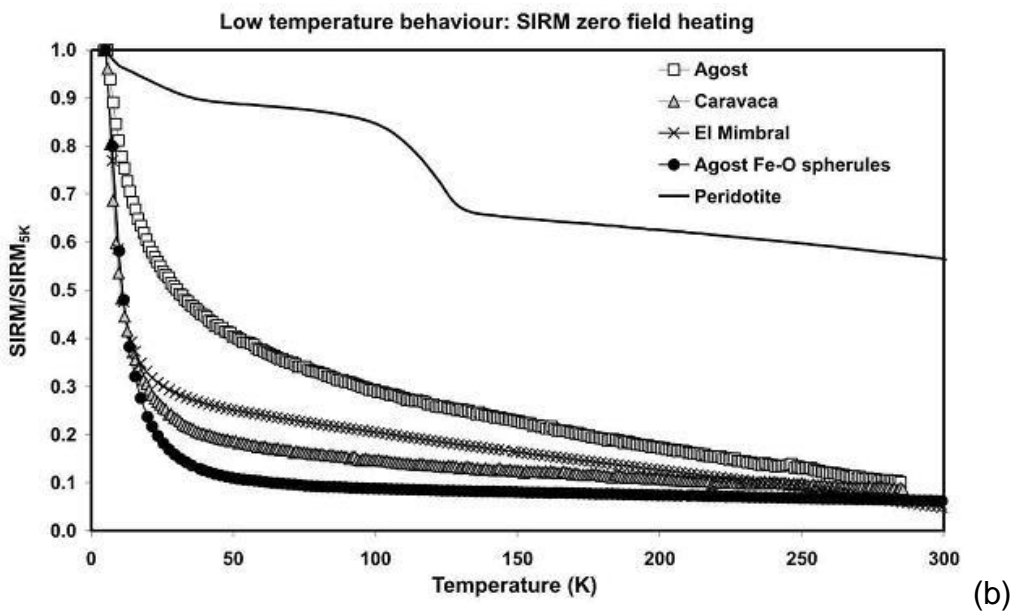


Fig7(a) y (b) . Medida de temperaturas

- Medidas a bajas temperaturas. Permiten caracterizar diversas transiciones de fase de baja temperatura (de Verwey, de Morin, etc), y también la importancia relativa de la fracción superparamagnética.



Capítulo III

3. Cristalografía

Trata de la estructura y propiedades del estado cristalino.

Definición de un cristal

Los cristales tienen frecuentemente formas poliédricas, limitadas por caras planas, y una gran parte de la belleza de los cristales se debe a este desarrollo de caras. Sin embargo, las caras pueden no ser lisas, o pueden destruirse, los cristales son a menudo demasiados pequeños para ser vistos sin la ayuda de un potente microscopio y muchas sustancias se componen de miles de diminutos cristales (policristalinas). Los metales son cristalinos, pero estos cristales individuales son a menudo muy pequeños y las caras no son aparentes.

Describiendo a los materiales cristalinos como elementos constitutivos (átomos, iones y moléculas) que se repiten periódicamente en las tres dimensiones, de manera ordenada y paralela, cuya distribución en el espacio muestra ciertas relaciones de simetría. Así la propiedad característica del medio cristalino es ser periódico es decir que a lo largo de cualquier dirección la materia que lo forma se halla a distancias específicas y paralelamente orientadas. Por tanto, el cristal está formado por la repetición monótona de agrupaciones atómicas paralelas entre si y a distancias repetitivas específicas formando una red cristalina, de manera que se denomina celda unitaria.

3.1 Sistemas Cristalinos

Existen muchas estructuras cristalinas diferentes y es conveniente clasificarlas en grupos de acuerdo con las configuraciones de la celda unitaria y/o la disposición atómica. Uno de estos esquemas se basa en la geometría de la celda unitaria, la forma del paralelepípedo sin tener en cuenta la posición de los átomos en la celda. Se establece un sistema x, y, z de coordenadas cuyo origen

coincide con un vértice de la celda; los ejes x , y , z coinciden con las aristas del paralelepípedo que salen de este vértice. La geometría de la celda unitaria se define en función de seis parámetros: la longitud de tres aristas a , b , c y los tres ángulos interaxiales α , β y γ . Estos ángulos, se denominan parámetros de red de una estructura cristalina. En este aspecto hay siete diferentes combinaciones de (a, b, c) y (α, β, γ) , que representan otros tantos sistemas cristalinos.

3.2 Estructuras

3.2.1 Estructuras Amorfas

Sus partículas presentan atracciones lo suficientemente fuertes para impedir que la sustancia fluya, obteniendo un sólido rígido y con cierta dureza, no presentan arreglo interno ordenado si no que sus partículas se arreglan al azar. Al romperse se obtienen formas irregulares, se ablandan dentro de un amplio rango de temperatura y luego se funden o se descomponen.

Ejemplos: asfalto, parafina, ceras, vidrios, algunos polímeros, algunos cerámicos.

3.2.2 Estructuras Cristalinas

Presentan un arreglo interno ordenado, basado en minusculos cristales, individuales cada uno con una forma geometrica determinada. Los cristales se obtienen como consecuencia de la repeticion ordenada y constante de las unidades estructurales(atomos, moleculas, iones).

Al romperse se obtienen caras y planos, bien definidos presentan puntos de fusion definidos al calentarlos suficientemente el cambio de fase ocurre una manera abrupta.

Ejemplos: NaCl, sacarosa, sales en generales, metales, algunos polimeros algunos ceramicos.

3.3 Celda Unitaria

En una red cristalina existen siempre tres traslaciones no coplanarias que tienen las dimensiones mínimas entre todas las traslaciones posibles de la red: son las traslaciones fundamentales o constantes reticulares cuyas dimensiones son submicroscópicas. La porción del espacio cristalino limitado por estas traslaciones constituye la celda fundamental del cristal.

El cristal individual es llamado celda unitaria, está formado por la repetición de 8 átomos. A su vez se puede representar mediante puntos en los centros de esos átomos.

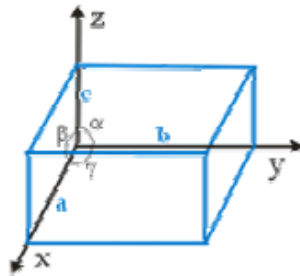


Fig 8. Representación de una celda unitaria de un cristal en la que se muestran las traslaciones (x, y, z) y ángulos.

A su vez definimos que la celda primitiva: es una celda con las dimensiones más pequeñas de tal forma que un cristal es una copia idéntica de celdas primitivas.

3.4 Red Cristalina

Las redes cristalinas se caracterizan fundamentalmente por un orden o periodicidad de átomos o moléculas que se repite sistemáticamente hasta formar un cristal. La estructura interna de los cristales viene representada por la llamada celda unitaria que se repite una y otra vez en las tres direcciones del espacio. El

tamaño de esta celda viene determinada por la longitud de sus tres aristas (a, b, c), y la forma por el valor de los ángulos entre dichas aristas (α, β, γ). El conjunto de elementos de simetría de un objeto que pasan por un punto, definen la simetría total del objeto (grupo puntual de simetría). Hay muchos grupos puntuales, pero en los cristales éstos han de ser compatibles con la periodicidad (repetitividad por traslación) por lo que hay sólo 32 posibles grupos puntuales que se denominan clases cristalinas.

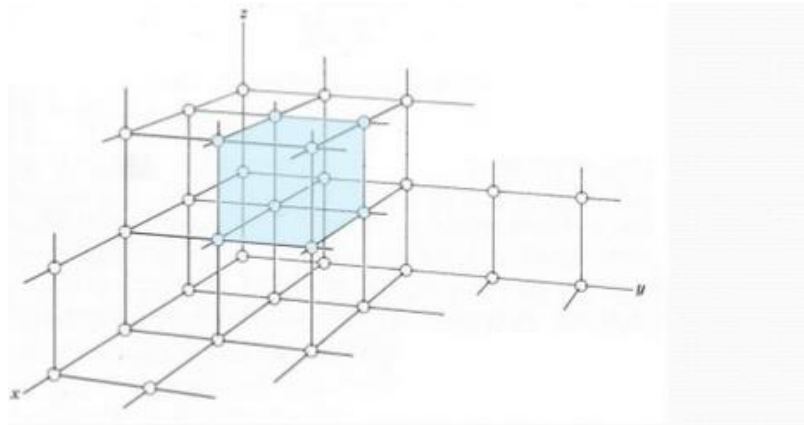


Fig9. Red cristalina

3.5 Simetría de los Cristales

Se define a la simetría como aquella transformación que al aplicarse a un objeto hace que este conserve todas sus dimensiones, y lo deje en una posición indistinguible de su posición original, la operación de simetría más sencilla que existe, por definición, en el medio cristalino, es la simple traslación entre un motivo y otro.

El lugar geométrico que ayuda a la visualización de la simetría de una distribución ordenada recibe el nombre de elemento de simetría. Por lo tanto las relaciones angulares entre las caras de un cristal no quedan afectadas por la simetría de traslación ya que originan desplazamientos tan pequeños que no pueden observarse morfológicamente.

La porción mínima del espacio cristalino que contiene en si misma toda la simetría de la red cristalina es la celda unitaria. El medio cristalino por ser periódico es un medio simétrico y todas sus propiedades derivan de este hecho.

3.5.1 Elementos de Simetría

Los elementos de simetría puntual, sin traslación, son el plano de simetría, el eje de rotación y el centro de simetría o centro de inversión.

El plano de simetría (m) o de reflexión, refleja partes, o todos, idénticos del objeto a través de un plano, ambos lados del plano aparecen idénticas caras cristalinas.

El eje de rotación origina una rotación al objeto de $360^\circ/n$ alrededor del eje (de derecha a izquierda), en el que la cara cristalina se repite un número determinado de veces según el orden del eje.

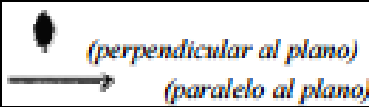



Eje de simetría	Símbolo	Giro al eje
eje monario		$n=1$ ($360^\circ/1=360^\circ$)
eje binario		$n=2$ ($360^\circ/2=180^\circ$)
eje ternario		$n=3$ ($360^\circ/3=120^\circ$)
eje cuaternario		$n=4$ ($360^\circ/4=90^\circ$)
eje senario		$n=6$ ($360^\circ/6=60^\circ$)

Tabla 1. Elementos de simetría

3.6 Grupos Puntuales Cristalográficos Convencionales.

Un grupo de puntos en tres dimensiones es un grupo del operador de simetría que actúa en un punto fijo 0, y deja invariante todas las distancias y ángulos en un espacio tridimensional Euclidiano. Los operadores de simetría tienen estas propiedades que son rotaciones alrededor de los ejes atravesando 0, o el

producto de tales rotaciones y las inversiones. Tales productos por supuesto incluyen reflexiones en planos que atraviesan 0.

Si el grupo contiene todas las posibles rotaciones y no otros elementos, es llamado el tridimensional grupo de rotación adecuada esto es isomorfo con el grupo $O^+(3)$ para todo 3×3 matrices ortogonales con determinante (+1)

Si un grupo contiene todas las posibles rotaciones y sus productos, con la inversión es llamado el tridimensional grupo de rotación. Esto es isomorfo con el grupo $O(3)$ para todo 3×3 matrices ortogonales. Operadores cuyas matrices tienen determinante (-1) son llamadas rotaciones impropias. Son los productos de las rotaciones y las inversiones.

Cada subgrupo del grupo de rotación en tres dimensiones es un grupo de puntos. Subgrupos de $O^+(3)$ son llamados grupos de puntos apropiados. Grupos de puntos adecuados de orden finito se clasifican como

Cíclico ($C_n=n$) Diedro ($D_n= n/2, n$ even, $D_n= n, n$ odd);
Tetraedro ($T= 23$), y Octaedro ($O= 432$)

Nos preocupamos por los grupos de puntos cristalográficos, tenemos un requerimiento extra que un operador sea compatible con la simetría traslacional de sólidos cristalinos. Por lo tanto las operaciones apropiadas de simetría son la identidad E, la inversión C, reflexiones en ciertos planos σ , y las rotaciones alrededor de ciertos ejes de orden $n=1, 2, 3, 4, \text{ o } 6$.

El último operador de simetría es denotado por C_n lo que significa una rotación en contra del reloj a través de 2π radianes alrededor del mismo eje.

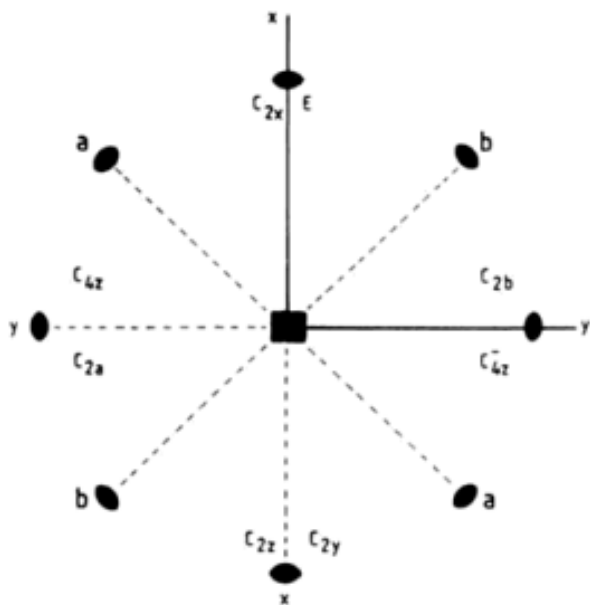


Fig 10. Elementos de simetría, triclinico, monoclinico, rómbico, y sistema tetragonal.

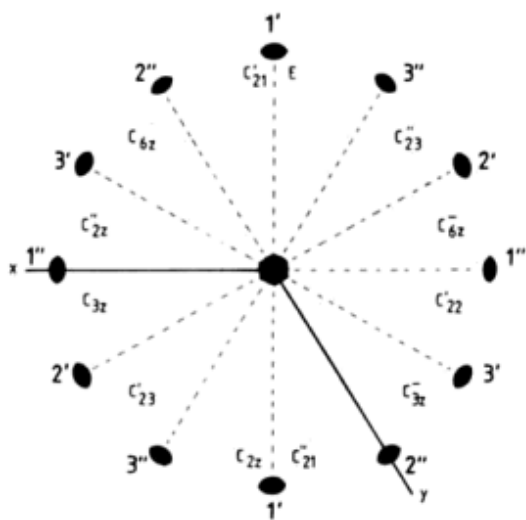


Fig 11. Elementos de simetría sistema trigonal y hexagonal.

Las combinaciones de ambos elementos de simetría originan los ejes de rotación impropios:

Eje de rotorreflexión, rotación de $360^\circ/n$ por reflexión en un plano perpendicular al eje.

Eje de rotoinversión, rotación de $360^\circ/n$ seguida por inversión a través de un punto en el eje.

Por su parte el centro de simetría (i) o centro de inversión, es un elemento de simetría puntual que invierte el objeto a través de una línea recta.

Matrices para las operaciones simétricas son:

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$R_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad R_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$D_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad D_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad D_3 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$M_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad M_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_1 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad S_2 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{-1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Donde I es la identidad y C es la inversión central. R_1, R_2, R_3 son reflexiones en el plano cuyas normales son a lo largo de las direcciones $x_1 = x^-, x_2 = y^-,$ y $x_3 = z^-$ respectivamente. $D_1, D_2, D_3,$ son rotaciones a través de π radianes alrededor de los ejes x_1^-, x_2^- y x_3^- respectivamente. T_1 es una reflexión a través del plano que divide en dos los ejes x_2^- y x_3^- y contiene el eje x_1^- . T_2 y T_3 son análogamente definidos. M_1 y M_2 son rotaciones a través $\frac{2\pi}{3}$ en dirección de la manecillas del reloj y en contra del reloj, alrededor de un eje haciendo ángulos agudos con los ejes $x_1, x_2,$ y

x_3 . S_1 y S_2 son rotaciones a través $\frac{2\pi}{3}$ en dirección de las manecillas del reloj y en contra de estas, respectivamente alrededor del eje $x_3 = z^-$.

3.7 Clases y Sistemas Cristalinos.

Las propiedades específicas de cristales están vinculadas a la simetría y a la anisotropía del medio cristalino, definiendo a la simetría del espacio cristalino como la propiedad de dicho espacio de coincidir consigo mismo mediante ciertas transformaciones llamadas operaciones de simetría en las cuales hay dos tipos: giros, y reflexiones.

En los giros el sistema de coordenadas derecho, enlazado con el cristal derecho, el izquierdo con el izquierdo; mientras que las reflexiones conducen a la sustitución del sistema de coordenadas derecho en el izquierdo y viceversa.

Las posibles combinaciones de las operaciones simétricas de poliedros cristalinos forman 32 grupos puntuales o 32 clases de simetría.

Estas 32 clases cristalinas se agrupan en siete sistemas cristalinos, las constantes reticulares y la mínima simetría que caracteriza a cada grupo de redes o sistema cristalino son las siguientes:

Sistema triclinico: es aquel que no posee ni una simetría

Sistema monoclinico: presenta como simetría un eje de rotación binario o un eje de inversión binario

Sistema ortorrómbico: posee tres ejes binarios perpendiculares entre si

Sistema tetragonal: posee como característica fundamental un eje de rotación cuaternario o un eje de inversión cuaternario

Sistema hexagonal: su característica fundamental es la presencia de un eje de rotación senario o un eje de inversión senario (eje ternario+ plano de simetría perpendicular)

Sistema romboédrico o trigonal: su característica común es la presencia de un eje de rotación ternario o un eje de inversión ternario

Sistema cúbico: posee como característica fundamental cuatro ejes de rotación ternarios, con $a = b = c$ y $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ tiene el mayor grado de simetría. La simetría desaparece en el sistema triclínico ya que $a \neq b \neq c$ y $\alpha \neq \beta \neq \gamma$. En las estructuras de los cristales metálicos se deduce que las estructuras FCC y BCC pertenecen al sistema cúbico, mientras que la HC cae dentro del hexagonal.


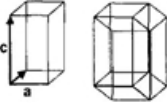
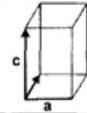
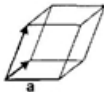
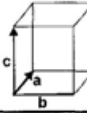
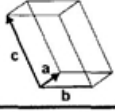
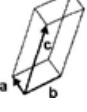
Sistema cristalino		Relación axial	Ángulos interaxiales
Cúbico		$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal		$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$
Tetragonal		$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Romboédrico		$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Ortorrómbico		$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Monoclínico		$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Triclínico		$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Tabla 2. Sistemas cristalinos

3.8 Proyección Estereográfica

La aplicación más común de la proyección estereográfica en cristalografía es que permite representar los ángulos entre las caras del cristal y las relaciones de simetría entre ellas. En esta, cada punto (polo) es el resultado de la proyección esférica de cada una de las caras cristalinas a través de los radios de la esfera, suponiendo el cristal incluido en el centro de una esfera, y la unión de estos puntos de proyección esférica con el polo N, si se encuentra en el hemisferio sur, y en el polo S si se encuentra en el hemisferio norte, obteniéndose de ello un punto de corte con el plano ecuatorial que es el polo proyección de la cara.

En la figura, observamos representadas las caras cristalinas a través de cada punto (polo) siendo el resultado de la proyección esférica a través de los radios de la esfera, suponiendo el cristal está incluido en el centro de una esfera

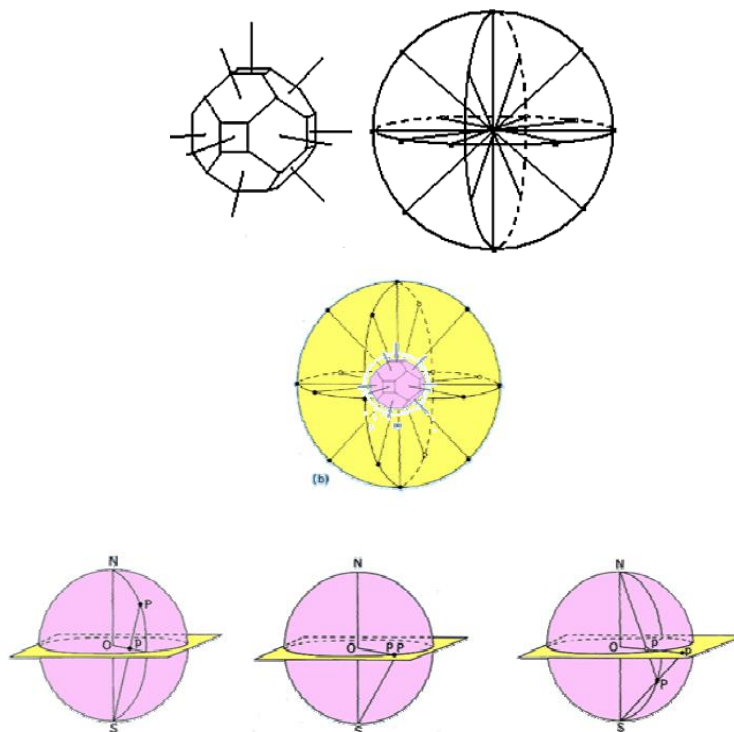
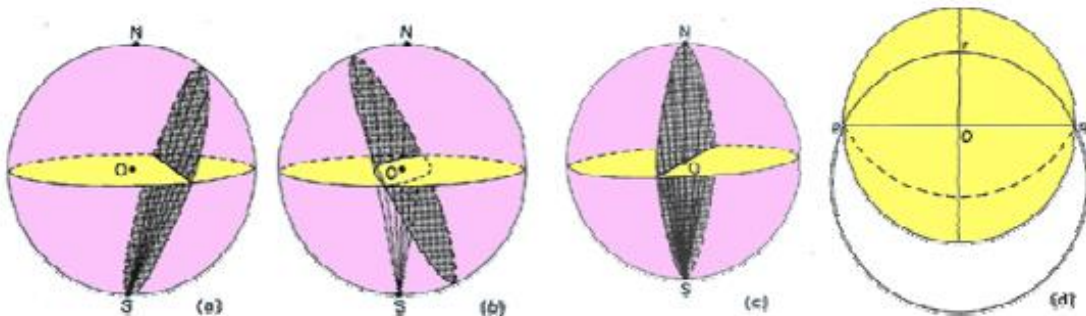


Fig. 12 Un cristal y su proyección estereográfica.

Si el cristal se imagina dentro de una esfera centrada sobre un punto arbitrario dentro del cristal, y cada cara se representa como un punto de acorte con el plano ecuatorial, originado por la proyección a un polo desde la normal a la cara que corta a la esfera, los puntos de intersección son enteramente independientes del tamaño relativo, y la simetría que relaciona dichos puntos revela la verdadera simetría del cristal. En una proyección se pueden hacer los siguientes trazos:

- (a) Cualquier círculo que pase a través del polo sur se proyecta como una línea recta ya que las líneas que unen cada punto del círculo con el polo de proyección son coplanares
- (b) Todos los círculos que son coplanares con el centro de la esfera de proyección se proyectan como círculos mayores e intersectan el círculo primitivo en los bordes finales del diámetro.
- (c) Si el círculo pasa a través del polo sur, se proyectara como un diámetro de la superficie ecuatorial ya que el círculo es coplanar con su proyección.
- (d) Se llama círculo menor a la proyección de todos los planos que no pasen por el centro de la esfera. Su proyección estereográfica produce un número de pequeños arcos circulares que gradúan los círculos mayores o máximo al cruzarlos.



3.8 .1 Proyección Estereográfica Cubica

Al igual que las longitudes y latitudes para marcar coordenadas en la Tierra, se emplean estas para la proyección de puntos en el plano de proyección. Las líneas de longitud son simplemente casos especiales de círculos máximos que pasan a través de los polos norte y sur, el ángulo entre polos es por supuesto 180° . Las líneas que representan la latitud son llamadas círculos mínimos y representan diferentes distancias angulares de los polos norte y sur. El círculo primitivo es el ecuador, el cual, es un círculo máximo a 90° de los polos. Estas líneas son las que nos conducen a definir las coordenadas de los puntos sobre la proyección en el plano ecuatorial, análogamente como se hace con la geografía terrestre.

Ahora consideraremos la proyección estereográfica del sistema cúbico, y como ya hemos visto, este sistema cuenta con todos los elementos de simetría, por esta razón se le considera el sistema de más alta simetría. En su proyección estereográfica se emplean los símbolos que representan las diferentes simetrías que presenta este sistema cristalino, con sus respectivos ángulos, así como sus Índices de Miller que representan las direcciones de sus planos.

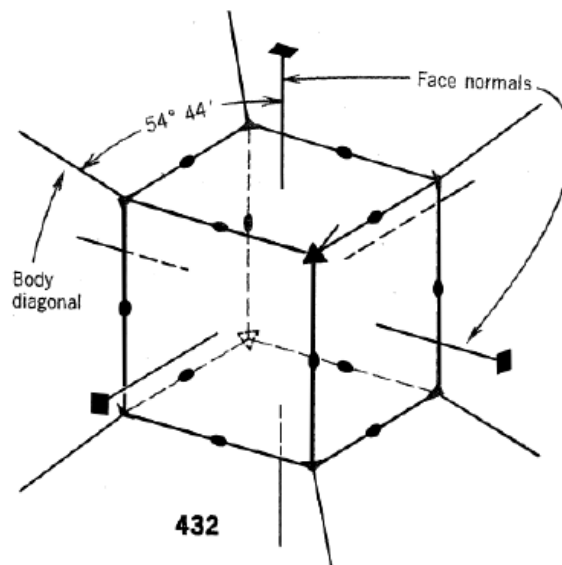


Fig. 13. La localización de los ejes de simetría en 432 respecto a un esquema similar a un cubo. (Fig. del Manual de Mineralogía, C. Klein. 2003).

El proceso que se sigue para dibujar la proyección estereográfica de las familias de direcciones $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ y $\langle 111 \rangle$. De estas familias de direcciones, la $\langle 100 \rangle$, consiste de las siguientes direcciones; [100], [100], [010], [010], [001] y [001]. Por lo tanto, son los pasos que se emplean para designar los puntos y círculos sobre el plano bi-dimensional.

El cristal es orientado de tal manera que la dirección de sus puntos [001] sean del polo sur al polo norte de la esfera de proyección. Se toma como eje vertical, al eje z y los ejes x y y descansen sobre el plano de proyección. Interpretando las direcciones de los planos mediante sus índices de Miller sabemos que el ángulo entre las direcciones [001] y [100] es de 90° , de modo que la proyección estereográfica de la dirección [100] yace en el plano ecuatorial.

En el inciso a) de la figura la proyección de la dirección [100] está a lo largo de la línea A - B. Haciendo esto, ahora las posiciones de todas las otras direcciones proyectadas estén fijas. El polo [010] está a 90° de [100] y [001]. Así, la dirección [010] está apuntando hacia M00, esto es en dirección positiva. Entonces la dirección negativa se encuentra en el lado opuesto de la proyección, lo que nos dice que [100] apunta hacia A, y [010] está apuntando hacia M0.

Para representar los polos que se encuentran en el polo sur, como la dirección [001], se emplea un círculo abierto en el centro de la proyección ecuatorial.

En el inciso (b) de la figura, se pueden observar las proyecciones de la familia de direcciones $\langle 100 \rangle$. Esta orientación que se le dio al cristal se mantiene para la proyección de las otras familias de direcciones. Ahora para la familia $\langle 110 \rangle$ que cuenta con doce miembros, se sabe que cuatro de estos doce, pertenecen a la zona [001]. Estas cuatro direcciones son las siguientes: [110], [110], [110], y [110]. El ángulo entre [110] y [100] es de 45° .

Esto lo podemos observar en la figura. En las otras tres direcciones que pertenecen a esta zona los polos se proyectan en los otros tres cuadrantes del círculo primitivo.

Por ultimo para en el inciso (e), la familia $\langle 111 \rangle$ tiene ocho miembros. Estas direcciones no pertenecen a la zona $\langle 001 \rangle$. Pero si se toma la dirección $[110]$, conoceremos todas las direcciones con $u + v = 0$ que pertenecen a esta zona.

Los cuatro miembros de esta familia para la zona $[110]$ son: $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$, $[11\bar{1}]$, y $[\bar{1}1\bar{1}]$. Observándolo en el inciso (f). Podemos notar en esta misma, que la dirección $[111]$ pertenece a un número de la zona tipo $\langle 110 \rangle$. De manera que podemos destacar que se encuentra en las zonas $[110]$, $[101]$, y $[011]$. Así se sabe que la proyección de la dirección $[111]$ se encuentra en la intersección de tres círculos máximos, que corresponden a cada una de estas zonas con las cuales se relaciona.

Así tenemos que la zona $[110]$ es una línea recta en la proyección porque también contiene las direcciones $[110]$, $[001]$ y $[\bar{1}\bar{1}0]$. La zona $[011]$ es normal a la dirección $[011]$, por lo tanto su proyección es un arco de círculo que va desde A a B a través de los puntos $[100]$, $[111]$, $[011]$, $[\bar{1}\bar{1}1]$ y $[100]$.

Esto se repite, como en los casos anteriores, para todos los miembros de la familia, ahora para la familia $[110]$. En (g), se muestran las zonas marcadas.

Las zonas que se generan en las intersecciones son, ejes de zona, las cuales son direcciones en la red cristalina. Se muestra en (h) la proyección estereográfica del cristal cubico, para estas familias.

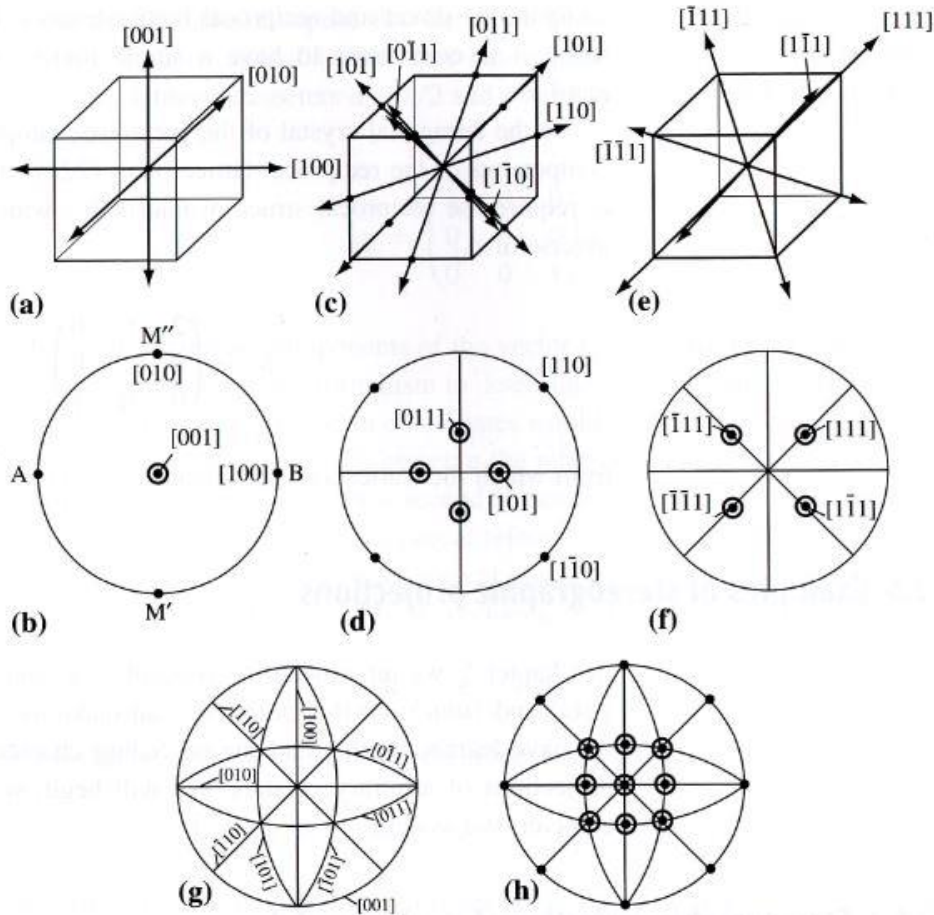


Fig. 14. Proyección estereográfica de las familias de direcciones $\langle 100 \rangle$ (a,b), $\langle 110 \rangle$, (c,d) y $\langle 111 \rangle$ (e,f). (g) muestra las zonas más importantes de la proyección [001]. En (h) las tres proyecciones están sobrepuestas en una sola. (Figura tomada de Structure of Materials: An Introduction to Crystallography, Diffraction, and Symmetry. M. De Graef, 2007, Cambridge Univeristy Press)

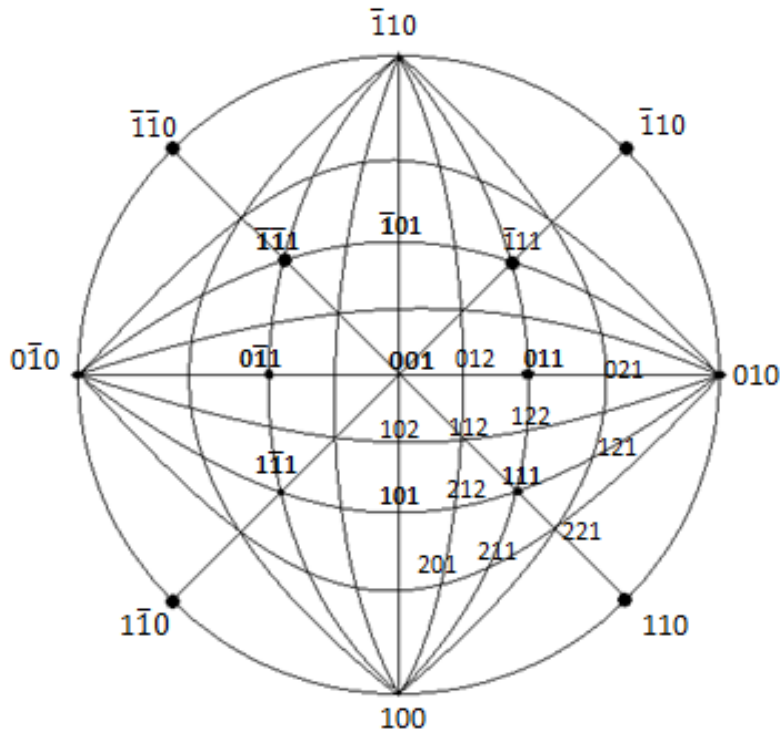


Fig. 15 Proyección estereográfica completa del sistema cúbico. En la cual también se muestran los símbolos utilizados para designar los elementos de simetría correspondientes, así como la tabla de los mismos.

3.9 Difracción de Rayos X por Cristales.

El conocimiento de las propiedades de una sustancia es clave para su identificación, caracterización y aplicabilidad en diversos campos científicos. Estas propiedades dependen de su composición química y de su estructura, pero realmente es la estructura la que, en última instancia, dicta las propiedades de las sustancias [1].

Las sustancias, comúnmente se clasifican en tres estados: gaseoso, líquido y sólido. Las únicas diferencias entre los tres estados de una misma sustancia son el movimiento térmico de sus partículas constituyentes y el grado de interacción entre estas.

En los sólidos, las partículas tienden a empaquetarse y formar lo que se conoce macroscópicamente como materia condensada. Estas pueden asumir una disposición al azar, dando lugar a los sólidos amorfos o líquidos sobrenfriados; sin embargo, una disposición ordenada es siempre más probable por corresponder al estado de menor energía. Esta disposición ordenada y periódica de átomos, iones o moléculas en el espacio se conoce como estado cristalino, y se denomina cristal a toda sustancia perteneciente a él [2].

Es por ello que las relaciones angulares entre las caras de un cristal no quedan afectadas por la simetría de traslación ya que originan desplazamientos tan pequeños que no pueden observarse morfológicamente. Solo las técnicas de rayos X y difracción electrónica permiten su detección.

La difracción de rayos X se produce al bombardear un metal con electrones de alta energía. Cuando los electrones penetran en el metal se desaceleran y emiten radiación continua *Bremsstrahlung* (*Bremsse* significa freno en alemán y *Strahlung* rayo). Sobre esta aparecen superpuestos picos agudos de alta intensidad. Estos picos tienen origen en la interacción de electrones incidentes con los electrones de las capas internas de los átomos, una colisión expulsa un electrón y un electrón de mayor energía desciende a la vacante, emitiendo el exceso de energía como un fotón de rayos X.

Esta técnica nos proporciona intensidades de las figuras de difracción siendo posible construir un esquema detallado de los entornos de los átomos. Los métodos de difracción de rayos X constituyen un instrumento muy útil del que se dispone para el estudio de la estructura interna de las moléculas cristalinas, otorgando resultados de compuestos estructurales a la mineralogía. Luego que se determina el orden interno del medio cristalino se establece la geometría de la celda, el tipo de red reticular, el sistema cristalino.

La mayor parte de la información que se posee de estructuras internas cristalinas es mediante la técnica de difracción de rayos X de *Broglie* y *Thompson*, ellos demostraron que era posible difractar la luz.

La luz se puede desdoblar en haces mediante una rejilla de difracción(serie de líneas muy cercanas y normalmente espaciadas en una superficie plana) , se produce si la longitud de onda es prácticamente la misma que la distancia que hay entre las líneas trazadas, como los espacios interatómicos en los cristales son del orden de 1 Å y la radiación electromagnética cuya longitud de onda es 1 Å corresponde a la región de los rayos X, los cristales actúan como una red de difracción para los rayos X

Los rayos X fueron descubiertos accidentalmente por Wilhelm Conrad *Röntgen* en 1885 cuando experimentaba con la producción de rayos catódicos en tubos de descarga cubiertos con papel negro. Descubrió que el haz de luz de electrones producido en el cátodo incidía en el vidrio del tubo y producía una radiación X de pequeña intensidad

Las aplicaciones de la difracción de rayos X fueron hasta 1912 cuando se aplicó a los cristales, pues había razones para creer que los cristales tenían arreglos periódicos de átomos con distancias interatómicos del orden de 1Å ($10^{-8}cm.$), para lo cual se propusieron tres hechos:

- 1.- Los cristales son periódicos.
- 2.- Los rayos X son ondas.
- 3.- La longitud de onda de los rayos X es del mismo orden de magnitud como las distancias repetidas en los cristales.

Los R-X son radiación electromagnética de la misma naturaleza que la luz pero de longitud de onda mucho más corta. La unidad de medida en la región de los r-x es el angstrom (Å), igual a $10^{-10}m$ y los rayos x usados en difracción tienen longitudes de onda en el rango 0.5-2.5 Å mientras que la longitud de onda de la luz visible está en el orden de 6000 Å.

Von Laue sugirió irradiar un cristal de $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ (Calcantita) con rayos X, de manera similar con el fenómeno de la dispersión producida por la rejilla de difracción, las distancias entre puntos idénticos en un cristal dan información solo

requerida para las correspondientes ecuaciones cristalográficas. Ya que el cristal es periódico en tres dimensiones, se tienen tres ecuaciones conocidas como las ecuaciones de Laue

$$a (\cos \alpha_0 - \cos \alpha) = h\lambda$$

$$b (\cos \beta_0 - \cos \beta) = k\lambda$$

$$c (\cos \gamma_0 - \cos \gamma) = l\lambda$$

Los ángulos entre el haz de rayos X incidente y los ejes de la celda unitaria a , b , c , son α_0 , β_0 , γ_0 y α , β , γ , son los ángulos correspondientes para el haz difractado. La interferencia constructiva ocurrirá para valores de los seis ángulos para los que h , k , l , son números enteros.

Los siete tipos de redes cristalinas tienen una generalización es como se pueden representar puntos de la red en un tipo de red llamada redes de Bravais.

Dentro de los cristales se tienen simetría, las cuales se pueden describir en términos de elementos puramente matemáticos, en el caso de cristales pueden ser descritos en términos de cantidades tensoriales.

Consideremos un material isotrópico en el cual la conductividad está dada por un número o valor. En un cristal esto es más complicado, en el caso de que la corriente será proporcional a un campo eléctrico, el cual va a depender de la dirección y orientación del cristal con respecto a las distancias de coordenadas. Entonces sea:

$$J_i = \sum_j \sigma_{ij} \epsilon_j$$

Aquí σ_{ij} por los elementos de matriz representado la conductividad del cristal, donde se le conoce como el tensor de conductividad.

Si por ejemplo es un cristal cubico, el cual tiene simetrías de rotación y reflexión entonces si se considera una operación de simetría como una rotación física del cristal en el que se rota el tensor de conductividad.

La rotación o reflexión estará representado por una matriz de tal forma que:

$$x' = Ux$$

Explícitamente

$$\begin{pmatrix} x1' \\ x2' \\ x3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u11 & u12 & u13 \\ u21 & u22 & u23 \\ u31 & u32 & u33 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x1 \\ x2 \\ x3 \end{pmatrix}$$

Considerando una rotación de $\pi/2$ alrededor del eje z, entonces

$$U_1 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

O bien una rotación de π alrededor del eje z

$$U_2 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Así se tiene que la correspondiente rotación de un tensor está dada por:

$$\sigma' = U \sigma U^{-1}$$

Donde U^{-1} es la matriz inversa de U

De este ejemplo U_1^{-1} es simplemente

$$U_1^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Así que la rotación de π es una operación de simetría del cubo, si se aplica el tensor de conductividad.

$$\sigma' = U_2 \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

$$U_2^{-1} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & -\sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & -\sigma_{23} \\ -\sigma_{31} & -\sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

Pero esta operación de simetría debe dejar al tensor de conductividad inalterado, lo que solo es válido si $\sigma_{13} \sigma_{23} \sigma_{31} \sigma_{32}$ son todos nulos.

Si se hace una rotación de $\pi/2$ alrededor del eje z, y si se prueba que $\sigma_{11}=\sigma_{22}$ y por una rotación alrededor del eje x donde $\sigma_{22}=\sigma_{33}$. Entonces el tensor de conductividad para un sistema cubico puede ser escrito como:

$$\sigma = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Donde σ es ahora un escalar, entonces se tiene que la conductividad para un cristal cubico es isotrópico.

3. 10 Teoría de Grupos

La teoría de grupos proporciona el lenguaje adecuado para formular y desarrollar los principios de simetría, gran parte de la estructura que aparece en la resolución de un sistema, es consecuencia de la simetría subyacente a dicho sistema. La teoría de grupos trata de desarrollar esos aspectos universales que presentan todos los sistemas que contienen simetrías de naturaleza análoga.

Un grupo es un conjunto de elementos $\{A, B, \dots\}$ dotados de una ley de composición (multiplicación), que a cada par ordenado $A, B \in \mathbb{R}$ le asigna otro elemento $A B C$ de forma tal que se satisfacen las siguientes propiedades:

- i. (cerradura) La ley de composición es interna, si $A, B \in \mathbb{R}$, entonces $AB \in \mathbb{R}$.
- ii. (asociatividad). Para todo $A, B, C \in \mathbb{R}$

$$A(BC) = (AB)C$$

- iii. (elemento unidad). Existe un único elemento, denotado usualmente E , con la propiedad de que $\forall A \in \mathbb{R}$

$$EA = AE = A$$

- iv. (elemento inverso). Para cada A existe un único elemento A^{-1} tal que

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E$$

La multiplicación en general no es conmutativa; es decir, en general $AB \neq BA$. Decimos que \mathbb{R} es abeliano cuando $AB = BA$ para todo par A, B .

El número de elementos de \mathbb{R} se denomina orden de \mathbb{R} , y se designa como $O(\mathbb{R})$. Si el orden es un número finito, decimos que \mathbb{R} es un grupo finito. La forma más inmediata de presentar a un grupo finito consiste en mostrar su tabla de multiplicación.

	A	B	\mathbb{R}
A	AA	AB	$A\mathbb{R}$
B	BA	BB	$B\mathbb{R}$
\mathbb{R}	$\mathbb{R}A$	$\mathbb{R}B$	$\mathbb{R}\mathbb{R}$

En la que no puede haber repetición de elementos en una misma fila, $\mathbb{R}A \neq \mathbb{R}B$, ni columna, $A\mathbb{R} \neq B\mathbb{R}$. La propiedad de asociatividad ha de verificarse separadamente. Si el grupo es abeliano, la tabla es simétrica respecto de la diagonal principal.

Ejemplo de grupo

Ejercicio 2.2. Si $a^3 = 1$ escribe la tabla multiplicadora de los grupos con elementos $a, a^2, 1$, donde la multiplicación ordinaria es la ley de combinación.

Solución

	1	A	a^2
1	1	A	a^2
a	a	a^2	1
a^2	a^2	1	a

Ejercicio 2.4 tabla de multiplicación para los grupos con elementos $1, a, a^2, b, ab, a^2b$, usando solo las propiedades generales de grupos y sus relaciones $ba = a^2b$, $bab = a^2$, $aba = b$, $ba^2b = a$

	1	a	a^2	b	ab	a^2b
1	1	a	a^2	b	ab	a^2b
a	a	a^2	1	ab	a^2b	b
a^2	a^2	1	a	a^2b	b	ab
b	b	a^2b	ab	1	a^2	a
ab	ab	b	a^2b	a	1	a^2
a^2b	a^2b	ab	b	a^2	a	1

Esta tabla es similar a la tabla de multiplicación del grupo C_{3v}

E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
\updownarrow	\updownarrow	\updownarrow	\updownarrow	\updownarrow	\updownarrow
1	a	a^2	b	ab	a^2b

Donde:

$$a * a = a^2$$

$$a * a^2 = a^3 = 1$$

$$a * b = ab$$

$$a * (ab) = a^2b$$

$$a * (a^2b) = a^3b = b$$

$$a^2 * a^2 = a^3 * a = a$$

$$a^2b$$

$$a^2ab = a^3b = b$$

$$a^2 * (a^2b) = a^3(ab) = ab$$

$$b * a = a^2b$$

$$b * a^2 = (ba)a = a^2ba = a^2a^2b = ab$$

$$b * b = b^2 = 1$$

$$b * (ab) = a^2$$

$$b * (a^2b) = b(ba) = b^2a = a$$

$$ab * (a) = aba = a \quad a^2b = b$$

$$ab * (a^2) = aba^2 = (aba)a = a(a^2b)a = ba = a^2b$$

$$ab * (b) = a$$

$$ab * (ab) = a(bab) = a^3 = 1$$

$$ab * (a^2b) = ab * ba = a^1a = a^2$$

$$a^2ba = a^4b = ab = a^2b * b = a^2b^2 = a^2$$

$$a^2b * a^2 = aaba = aba$$

$$a^2b = b$$

Ahora un conjunto $\{1, a, b, c\}$

	1	A	B	C
1	1	A	B	C
A	a	B	C	1
B	b	C	1	A
C	c	1	A	B

Con los elementos $1 \rightarrow 1, a \rightarrow i, b \rightarrow -1, c \rightarrow -i$

Es un grupo C_4 , llamado grupo conmutativo o Abelian. La representación, en el plano complejo, con rotaciones sucesivas de 90° la matriz de rotación.

$$R(\Theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

Para $\theta = 0, \pi/2$ y $3/2\pi$

Se tiene

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Ahora este grupo está representado por las matrices asociados como:

$1 \leftrightarrow 1, a \leftrightarrow i \leftrightarrow A, b \leftrightarrow -1 \leftrightarrow B, c \leftrightarrow -i \leftrightarrow C$.

Ejemplo: un grupo conocido como vierergrupe dado por las matrices.

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Asociada a la siguiente representación:

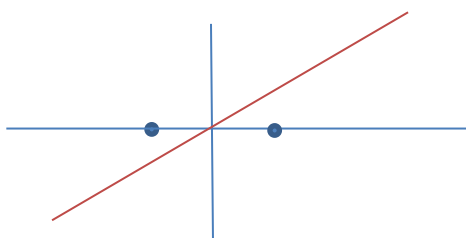
$$1 \leftrightarrow 1 \quad A \leftrightarrow V_1 \quad b = V_2 \quad c = V_3$$

Cumple la siguiente tabla de multiplicación

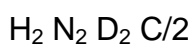
	1	V_1	V_2	V_3
1	1	V_1	V_2	V_3
V_1	V_1	1	V_3	V_2
V_2	V_2	V_3	1	V_1
V_3	V_3	V_2	V_1	1

Dos objetos: Eje de simetría

Sean dos átomos idénticos en el plano xy en las posiciones (1,0) y (-1,0)



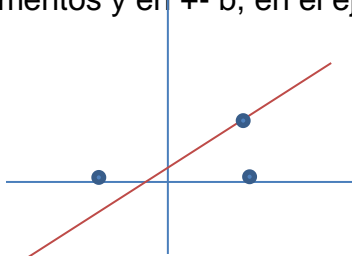
Moléculas Diatómicas



Las operaciones que dejan a las moléculas en el mismo arreglo son:

Identidad

Rotación π alrededor del eje Z o una rotación de 2π . Ahora el caso de una molécula o parte de un cristal con elementos x en +- a, del eje x, átomos de elementos y en +- b, en el eje y, y átomos de elementos z en +-c, en el eje Z.





Cada eje es un eje de simetría de rotación alrededor del eje x se demuestra por $R_x(\pi)$, de la misma manera para los otros ejes, así obtenemos las matrices de rotación.

$$R_x(\pi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad R_y(\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad R_z(\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

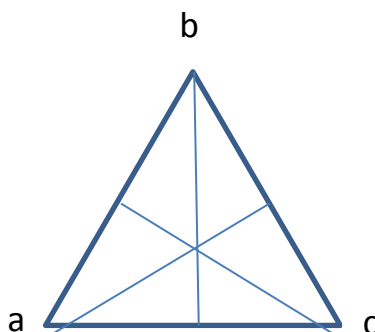
Entonces el conjunto de elementos $\{1, R_x(\pi), R_y(\pi), R_z(\pi)\}$ forman un grupo Abelian.

Tabla de multiplicación

	1	$R_x(\pi)$	$R_y(\pi),$	$R_z(\pi),$
1	1	R_x	R_y	R_z
$R_x(\pi)$	R_x	1	R_z	R_y
$R_y(\pi),$	R_y	R_z	1	R_x
$R_z(\pi),$	R_z	R_y	R_x	1

Este grupo etiquetado D_2 , la D significa un grupo y el subíndice 2 significa que tiene un eje de simetría doble.

Tres objetos ejes de simetría triple. En este caso se tiene tres átomos idénticos en los vértices de un triángulo equilátero.



Las rotaciones en el triángulo de; 2π , $\frac{2}{3}\pi$ y $\frac{4}{3}\pi$; las matrices correspondientes.

$$1 = R_z(2\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$A = R_z\left(\frac{2}{3}\pi\right) = \begin{pmatrix} \cos\frac{2}{3}\pi & -\operatorname{sen}\frac{2}{3}\pi \\ \operatorname{Sen}\frac{2}{3}\pi & \cos\frac{2}{3}\pi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$B = R_z\left(\frac{4}{3}\pi\right) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Dos o tres elementos del grupo se obtiene:

$$C = R_c(\pi) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \text{ es una reflexión}$$

$$D = R_D(\pi) = CB = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \text{ es una reflexión}$$

La tabla de multiplicación del grupo está dada como:

	1	A	B	C	D	E
1	1	A	B	C	D	E
A	A	B	1	D	E	C
B	B	1	A	E	C	D
C	C	E	D	1	B	A
D	D	C	E	A	1	B
E	E	D	C	B	A	1

3.11 Cristalografía de Puntos Magnéticos

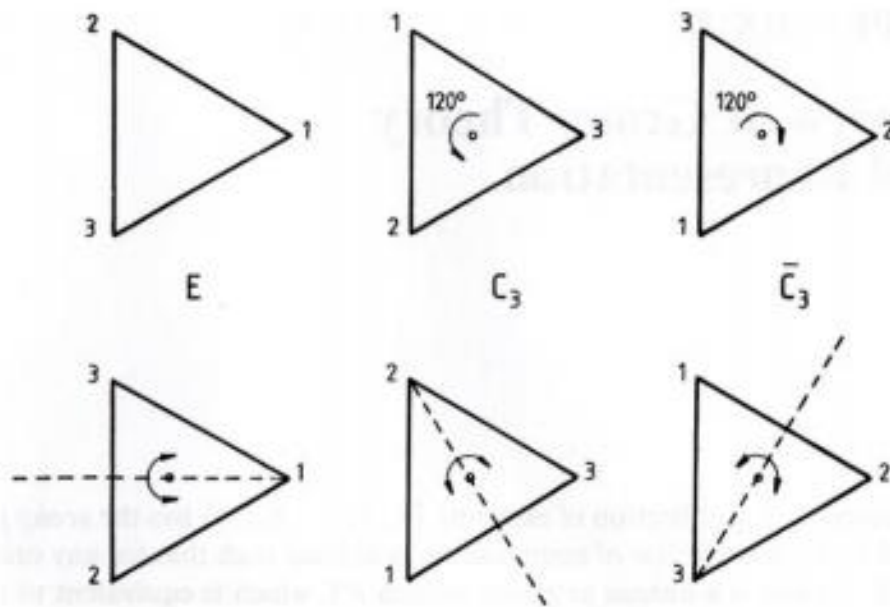
Además de las simetrías geométricas presentes en la estructura reticular de los cristales, los átomos de la red cristalina en materiales magnéticos están dotados de momentos magnéticos atómicos (espines). Las operaciones espaciales de

simetría, rotaciones y rotación - inversión, conservando las propiedades geométricas de la red, pueden invertir la orientación de los espines.

Para la simetría real de materiales magnéticos, el operador de anti simetría τ es el operador que reserva un momento magnético. Alternativamente nosotros podemos considerar τ como la reserva de la dirección de una corriente eléctrica desde un cambio en el momento magnético puede ser causada por un cambio de la dirección de la corriente eléctrica que produce el momento magnético. Entonces esto es equivalente a un cambio del sentido del tiempo, ya que $i = dq/dt$. Esto es posible para tener las comparaciones compuestas antisimétricas correspondientes que interpretan ambos elementos del grupo punto ordinario $\{G\}$ juntos con la operación del cambio de tiempo τ

Operaciones de estos tipos producen los grupos de puntos magnéticos (negro y blanco).

Se ilustra la derivación de un grupo de puntos magnéticos de grupos de puntos ordinarios $\{G\}$ considerando el ejemplo de grupos de puntos blancos y negros que se derivan de $C_{3v} = 3m$ que es el grupo de puntos de las operaciones de simetría de un triángulo equilátero. Un triángulo equilátero tiene las operaciones de simetría $E, C_{3z}, C_{3z}^-, \sigma_{d1}, \sigma_{d2}, \sigma_{d3}$,



Por interpretación de secuencia de la operación definida en la figura A₁ obtenemos la siguiente tabla de multiplicación de C_{3v}

		S					
		E	C ₃	C ₃ ⁻	σ ¹	σ ²	σ ³
R	E	E	C ₃	C ₃ ⁻	σ ¹	σ ²	σ ³
	C ₃	C ₃	C ₃ ⁻	E	σ ³	σ ¹	σ ²
	C ₃ ⁻	C ₃ ⁻	E	C ₃	σ ²	σ ³	σ ¹
	σ ¹	σ ¹	σ ²	σ ³	E	C ₃	C ₃ ⁻
	σ ²	σ ²	σ ³	σ ¹	C ₃ ⁻	E	C ₃
	σ ³	σ ³	σ ¹	σ ²	C ₃	C ₃ ⁻	E

Teorema 1: cada fila y columna de la tabla de multiplicación contiene cada elemento del grupo una vez y solo una vez. Escribiendo el resultado como $RG = G$ (para todo $R \in G$) RG es denotado como:

$$RG = \{RA, RB, RC, \dots\}.$$

Con ayuda de la tabla de multiplicación algún producto de elementos de grupo pueden reducirse a un solo elemento. Por ejemplo para la simetría de grupo C_{3v} se tiene.

$$C_3 \sigma^1 \sigma^3 = C_3 C_3^- = E$$

A la inversa, todos los elementos de grupo de orden g , pueden ser expresados como productos, cuyos factores son dibujados frente un número límite de elementos

En el grupo C_{3v} tenemos

$$C_3^2 = C_3^- \quad C_3^3 = E \quad C_3^2 \sigma^1 = \sigma^2 \quad C_3 \sigma^1 = \sigma^3$$

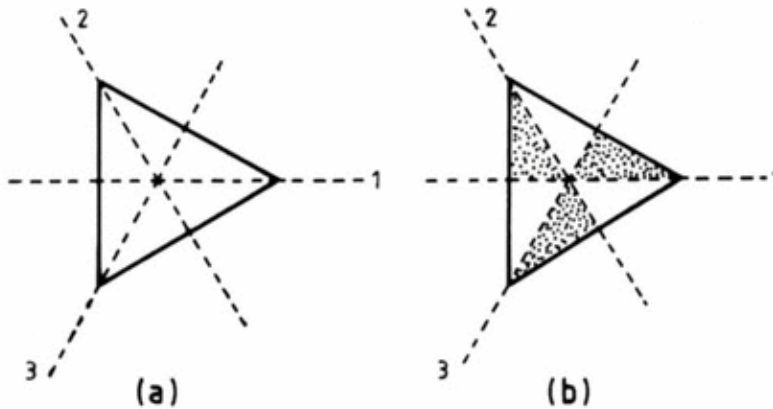
Así que todos los elementos de C_{3v} son expresados en términos de solo dos C_3 y σ^1

Si regularmente dibujamos los parches negros y blancos aleatoriamente en el triángulo, estas operaciones de simetría, aparte de E serán destruidas.

Sin embargo, si la mitad de los triángulos es coloreada negra y la otra mitad es coloreada blanca de alguna manera periódica, como en la figura 3.1, se muestran tres de estas operaciones de simetría E , C_3 , C_3^- que sobreviven y pueden ser operaciones de simetría del triángulo de color. Las operaciones restantes σ^1 , σ^2 y σ^3 ya no son operaciones de simetría desde el paso de la reflexión del plano vertical, es decir, atravesar el eje 1 llegar a un parche negro donde antes estaba

un parche blanco, y viceversa. Pero si cada una de esas operaciones es combinada con τ (el color cambia de operación), y produce $\tau\sigma_1$, $\tau\sigma_2$ y $\tau\sigma_3$, estas operaciones ahora se convierten en las operaciones de simetría del triángulo de color. La simetría de elementos de los sistemas triclinico, monoclinico, rómbico y tetragonal, son:

$E, C_3, C_3^-, \tau\sigma_1, \tau\sigma_2, \tau\sigma_3$



Triángulos negros y blancos que ilustran $3\bar{m}$

Que todavía forma un grupo y este grupo es denominado $3\bar{m}$. \bar{m} es subrayado desde que las imágenes especulares se combinan con el operador de cambio de color.

Ahora suponemos que G es un grupo puntual ordinario, se tiene que:

- El grupo puntual ordinario $\{M\} = \{G\}:32$

La operación de anisimetría τ no está presente en este grupo. Ya que son los grupos de puntos cristalográficos convencionales.

- Los grupos de puntos grises $\{M\} = \{G\} + \tau\{G\}:32$

La diferencia entre los grupos ordinarios y puntos grises es que en la última la anisimetría es un operador del grupo. Nota que $\{M\} = \{G\} \times \{E, \tau\}$ desde $\tau^2 = E$ y τ conmuta con todos los elementos de $\{G\}$.

- Los puntos de grupos magnéticos (negro y blanco)

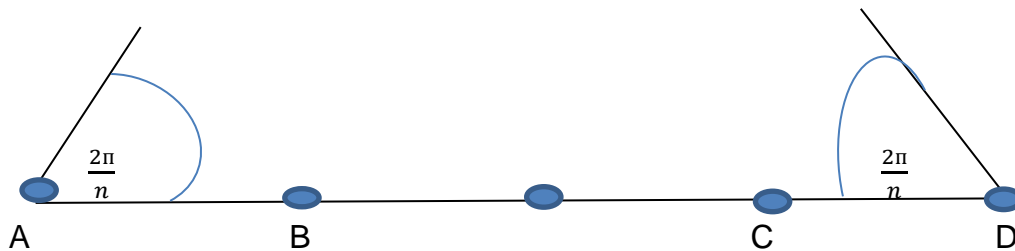
$$\{M\} = \{H\} + \tau\{G-H\}:58$$

Donde $\{H\}$ es un subgrupo de la caja 2 de los grupos de puntos convencionales $\{G\}$.

Aquí τ no es un elemento del grupo $\{M\}$, pero la mitad de elementos de $\{G\}$ son ahora combinados con τ .

3.12 Limitaciones sobre la simetría en los cristales

Justifica que $n=1,2,3,4,6$.



Una rotación de pliegue a través de D, a distancia ma de A, genera C' de C. $B'C' = \ell a$, donde ℓ es un entero, y $AD = ma$, donde m es un entero.

$$\ell a = ma - 2a \cos \frac{2\pi}{n}$$

$$\ell - m = -2 \cos \frac{2\pi}{n}$$

Por lo tanto tenemos que:

$$\cos \frac{2\pi}{n} = \frac{m-\ell}{2} \quad \text{con } +1 \text{ a } -1$$

$$\cos \frac{2\pi}{n} = -1, \quad n=2, \quad \frac{2\pi}{n} = 180^\circ$$

$$\cos \frac{2\pi}{n} = -\frac{1}{2}, \quad n=3, \quad \frac{2\pi}{n} = 120^\circ$$

$$\cos \frac{2\pi}{n} = 0, \quad n=4, \quad \frac{2\pi}{n} = 90^\circ$$

$$\cos \frac{2\pi}{n} = \frac{1}{2}, \quad n=6, \quad \frac{2\pi}{n} = 60^\circ$$

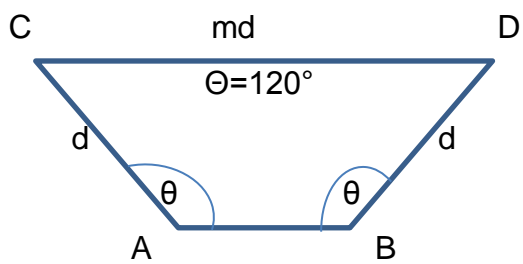
$$\cos \frac{2\pi}{n} = 1, \quad n=1, \quad \frac{2\pi}{n} = 0^\circ \text{ o } 360^\circ$$

La discreción es esencial.

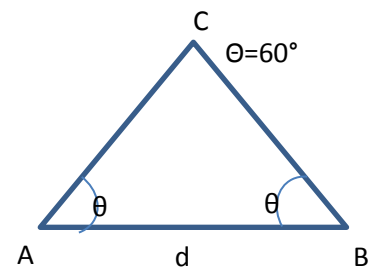
$$CD = d + 2d \cos(\pi - \theta) = md$$

$$\text{Así que: } \cos \theta = \frac{1-m}{2} \text{ y } |\cos \theta| \leq 1$$

Rotaciones de ambos 60° ($m=0$) y 120° sale del enrejado invariante, hay invariancia debajo de la traslación a lo largo de la línea AB.



Ejemplo de rotaciones permitidas



CAPITULO IV

MATERIALES Y METODOS

4.1 Condiciones experimentales

Para obtener de las muestras polvo, se realizaron las pulverizaciones en el laboratorio integral de la facultad de Ingeniería, así mismo para la difracción de rayos X se llevaron a cabo en el laboratorio de semiconductores del instituto de Física de la BUAP.

Para la pulverización se conto con una placa de acero, un martillo, dos mayas una de 80 (0.180 mm) y otra de 200 (0.075 mm). Mortero con pistilo, se trabajo con mucho cuidado para obtener el polvo y que este no se contaminara se utilizaron guantes, y entre cada muestra se desinfectaron los materiales. Así mismo se pego el polvo a una cinta adhesiva transparente y posteriormente se coloco en el portaobjetos.

Para la difracción de rayos X se trabajó con el Difractometro marca Bruker (axs) modelo D8 discover, el cual trabaja con una fuente o tubo de rayos X hecho de cobre.

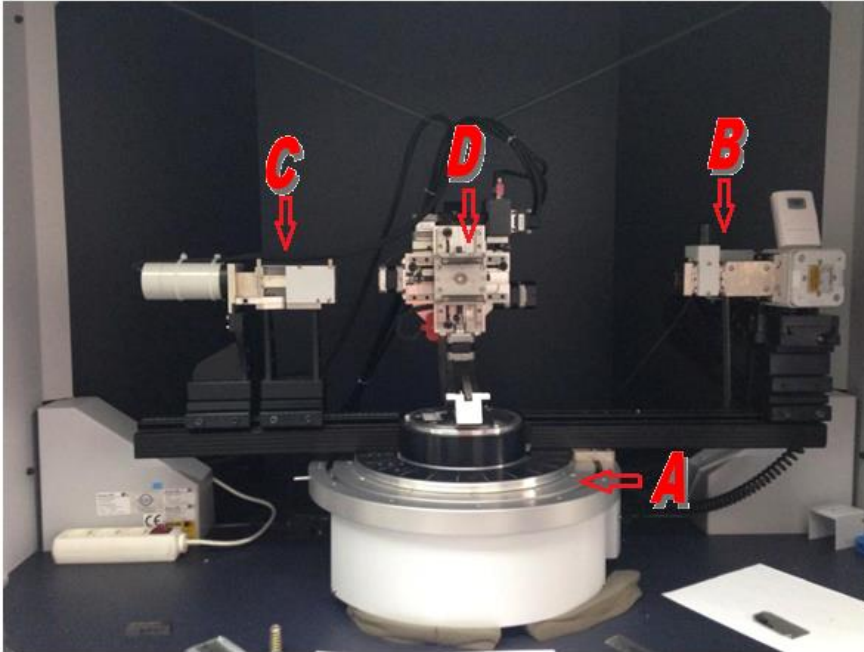
El ánodo es de cobre y por medio de los cátodos se emiten los electrones que se representan en rayos X.



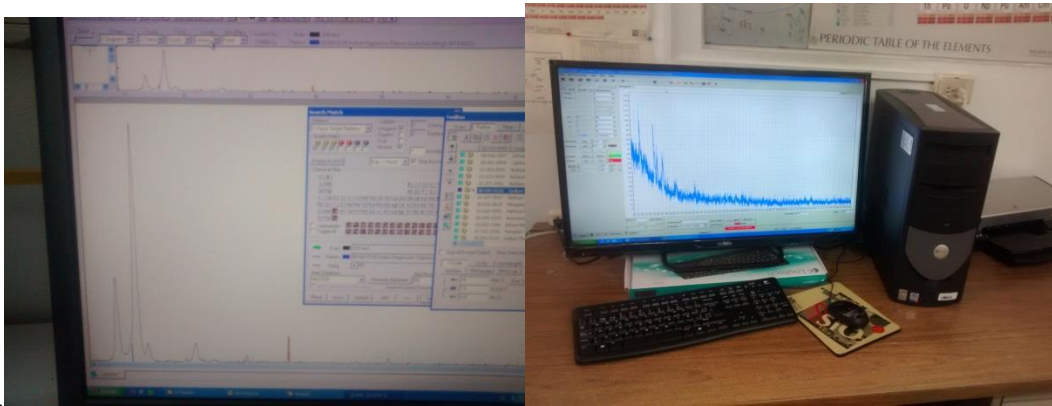
4.2 Características Principales del Equipo.

El equipo cuenta con las siguientes características:

- A) Base del Goniómetro
- B) Emisor de Rayos X
- C) Receptor de Rayos X
- D) Placa donde se coloca la muestra.



Para el procesamiento de los datos se trabajó con el software EVA plus el cual nos proporcionó la composición química que contenían las muestras y en porcentaje de cada elemento químico



4.3 Diseño experimental

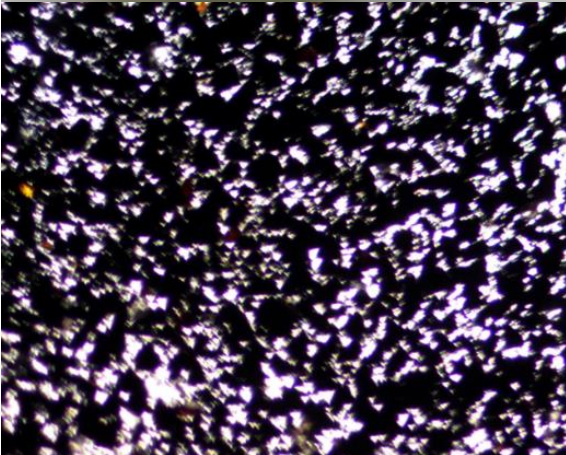
Se evaluaron muestras de oxido de manganeso y de manganeso (de una mina del estado de Chiapas), magnetita (de la sierra norte de puebla), cuarzo, oxido de aluminio, ilmenita, (de zacatecas), entre otras.


CAPITULO V

5.1 Resultados

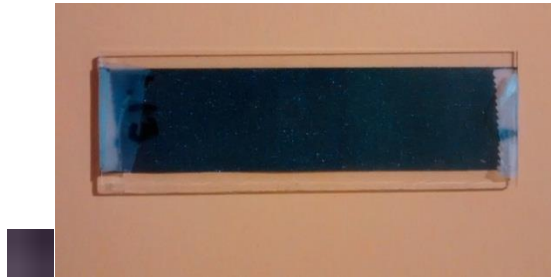
5.1.1 Características principales de las muestras

ILMENITA



 Muestra original de Ilmenita
al microscopio

muestra de ilmenita observada



Preparación fija de polvo de ilmenita

en tamiz de 200.

La ilmenita (FeTiO_3) es un mineral débilmente magnético, de color negro o gris, que se encuentra en las rocas metamórficas y en las rocas básicas ígneas (gabro, diabasa, piroxenita). El nombre deriva de las montañas "Ilme" en Rusia, uno de sus principales yacimientos. La mayoría de la ilmenita, sin embargo, está recubierta de sedimentos, como por ejemplo, de arena de playa. Contiene el 47,34% de FeO y el 52,66% de TiO_2 , aunque esta proporción es variable por la entrada del óxido férrico, reemplazable por magnesio y manganeso.

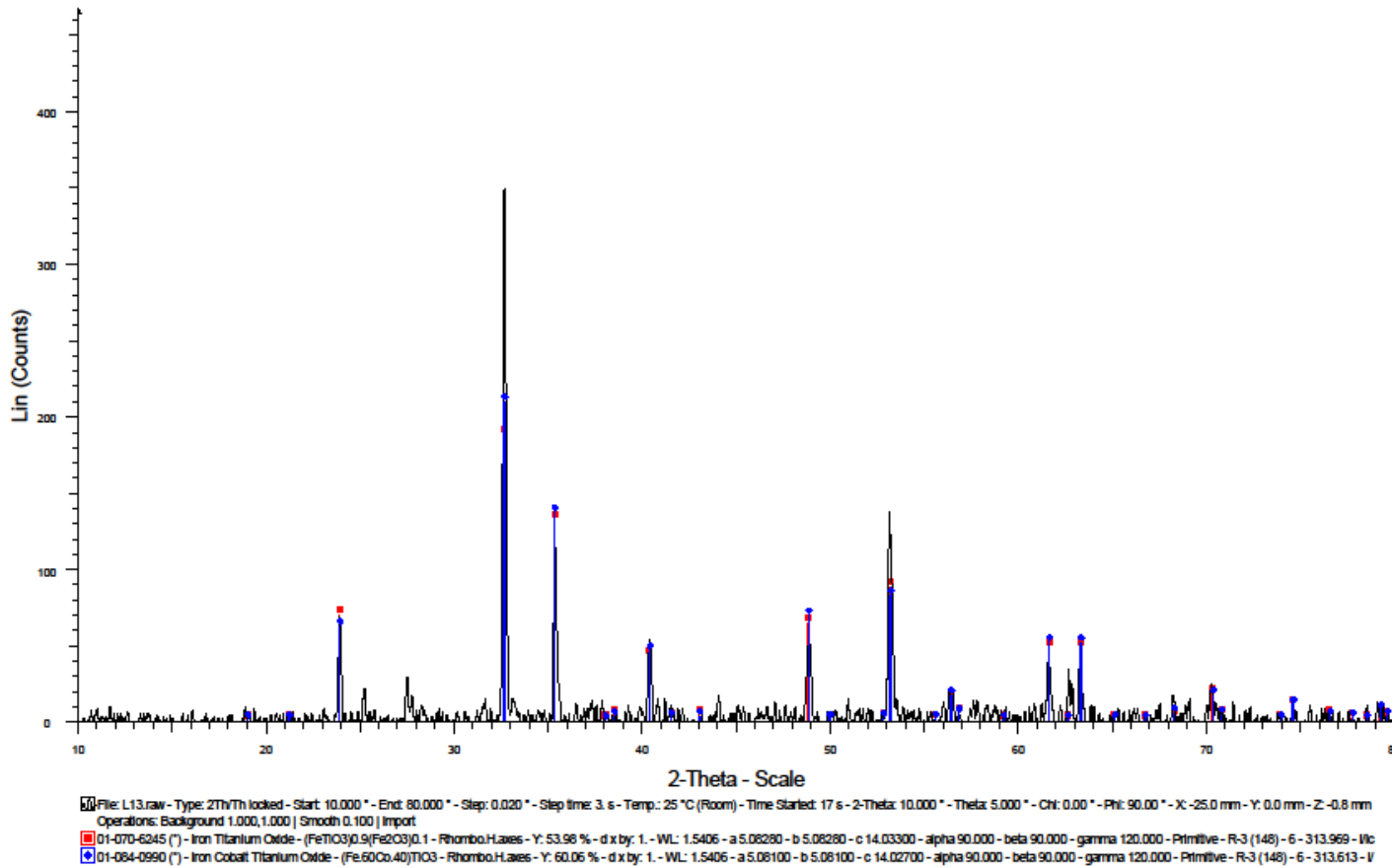
Se presenta en forma de cristales normalmente tabulares delgados y romboédricos.

Categoría	Minerales oxidos
Clase	4.CB.05 (Strunz)
Formula	$\text{Fe}^{2+}\text{Ti}^{4+}\text{O}_3$
Color	Negro
Raya	Negro rojiza
Lustre	Metalico
Transparencia	Opaco
Sistema cristalino	Hexagonal
Dureza	5,5 - 6 (Mohs)
Densidad	4,7 g/cm ³

Magnetismo

A veces magnético

Iron Titanium Oxide



Panem : 01-075-0519		Radiation = 1.540600		Quality : Indexed		
FeTiO ₃		d (Å)	l	h	k	i
Iron Titanium Oxide Also called: Iron titanate, Ilmenite		4.67520	11	0	0	3
		4.20013	12	1	0	1
		3.72844	250	0	1	2
		2.74269	999	1	0	4
		2.54159	628	1	1	0
		2.36566	1	0	1	5
		2.33760	6	0	0	6
		2.23296	217	1	1	-3
		2.17446	2	0	2	1
		2.10007	9	2	0	2
		1.86422	334	0	2	4
		1.82365	3	1	0	7
		1.72054	315	1	1	-6
		1.65227	7	1	2	-1
		1.62878	96	0	1	8
		1.61892	14	2	1	-2
		1.55840	1	0	0	9
		1.50321	242	1	2	-4
		1.48169	2	0	2	7
		1.46739	226	3	0	0
		1.43105	3	2	1	-5
		1.40004	1	3	0	3
		1.37135	30	2	0	8
		1.33637	66	1	0	10
		1.32854	17	1	1	-9
		1.28005	3	1	2	-7
		1.27079	42	2	2	0
		1.24281	8	0	3	6
		1.22630	9	2	2	-3
		1.21634	1	3	1	-1
		1.20687	38	2	1	-8
		1.20284	22	1	3	-2
		1.18283	29	0	2	10
		1.16880	1	0	0	12
		1.15304	53	3	1	-4
		1.11648	39	2	2	-6
		1.10330	1	2	0	11
		1.09717	1	4	0	1
		1.08723	4	0	4	2
		1.07238	40	1	2	-10
		1.06190	11	1	1	-12
		1.05003	14	4	0	4
		1.04788	7	1	0	13
		1.04262	1	3	1	-7
		1.02451	1	0	4	5
		1.01206	1	2	1	-11
		1.00732	1	2	3	-1
		1.00192	23	1	3	-8
		0.99961	12	3	2	-2
		0.98486	3	2	2	-9
		0.97685	18	0	1	14
		0.97047	39	2	3	-4
		0.96877	20	0	2	13
		0.96461	1	4	0	7
		0.96063	28	1	4	0
		0.95022	1	3	2	-5
		0.94097	4	4	1	-3
		0.93211	11	0	4	8
		0.92090	29	3	1	-10
		0.91423	1	3	0	12
		0.91182	18	2	0	14
		0.90524	1	1	2	-13
		0.90184	1	2	3	-7
		0.88853	31	1	4	-6
		0.88184	1	1	3	-11
		0.87754	3	1	1	1
		0.87511	10	3	2	-8
		0.86582	15	4	0	10
		0.86027	6	2	2	12
		*0.86027	6	1	0	
		0.85826	31	2	1	-14
		0.85392	14	0	5	4
		0.84720	21	3	3	0
		0.83362	1	3	3	-3
		*0.83362	1	0	4	11
		0.83047	1	2	4	1
		0.82614	1	2	4	-2
		0.81957	15	2	3	-10
		0.81775	10	1	4	-9
		0.81439	1	0	2	
		0.80946	21	4	2	-4
		0.79759	1	2	4	-5
Lattice : Rhombohedral		Mol. weight = 151.75				
S.G. : R-3 (148)		Volume [CD] = 313.85				
a = 5.08317	Z = 6	Dx = 4.817				
c = 14.02561		Mcor = 3.01				
Additional Patterns: See PDF 01-071-1140. ANX: ABX3. Analysis: Fe1 O3 Ti1. Formula from original source: Fe (Ti O3). ICSD Collection Code: 29209. Other Cell: 5.52 5.52 5.52 54.83 54.83 54.83. Sample Source or Locality: Specimen from Quincy, MA, USA. Minor Warning: No R value given in the paper. No e.s.d. reported/abstracted on the cell dimension. Wyckoff Sequence: f c2 (R3-R). Data collection flag: Ambient.						
Calculated from ICSD using POWD-12++ (2004) Barth, T.F.W., Posnjak, E., Z. Kristallogr., Kristalgeom., Kristalphys., Kristalchem., volume 88, page 265 (1934)						
Radiation : CuKα1		Filter :				
Lambda : 1.54060		d-sp : Calculated spacings				
SS/FOM : F30-1000(0.0005,32)						

CUANTIFICACION

Sample name:

File name: ilmenita.raw

Date of fitting: 06/10/2015 03:45:01 p.m.

Fitting limits: 10.000 59.980

Number of steps: 20

R/R0: 2.54

RWP: 65.8

Delta displacement: 0.134 mm

Concentrations:

01-084-0990 37.2% (Fe.60Co.40)TiO3

Iron Cobalt Titanium Oxide

01-070-6245 62.8% (FeTiO3)0.9(Fe2O3)0.1

Iron Titanium Oxide

O 31.4% Excess -4.1%

Ti 29.4% TiO2 49.0%

Fe 33.4% Fe2O3 47.8%

Co 5.7% CoO 7.3%

01-075-0519 Ilmenite

----- FeTiO3

FWHM(30): 0.427 °

Crystallite Size (Scherrer): 190.6 Å

I/Icor: 3.

System: Rhombo.H.axes

Space group: R-3 (148)

Cell param.: Initial Final

a: 5.08317 Fixed

c: 14.02561 Fixed

01-084-0990 Iron Cobalt Titanium Oxide

----- (Fe.60Co.40)TiO3

FWHM(30): 0.107 °

Crystallite Size (Scherrer): 759.7 A

I/Icor: 3.

System: Rhombo.H.axes

Space group: R-3 (148)

Cell param.: Initial Final

a: 5.08100 Fixed

c: 14.02700 Fixed

01-070-6245 Iron Titanium Oxide

----- (FeTiO3)0.9(Fe2O3)0.1

FWHM(30): 0.179 °

Crystallite Size (Scherrer): 453.1 A

I/Icor: 2.9

System: Rhombo.H.axes

Space group: R-3 (148)

Cell param.: Initial Final

a: 5.08280 Fixed

c: 14.03300 Fixed

01-070-6223 Iron Titanium Oxide

----- (FeTiO3)0.8(Fe2O3)0.2

FWHM(30): 0.442 °

Crystallite Size (Scherrer): 184.2 A

I/Icor: 2.6

System: Rhombo.H.axes

Space group: R-3 (148)

Cell param.: Initial Final

a: 5.07860 Fixed

c: 13.98500 Fixed

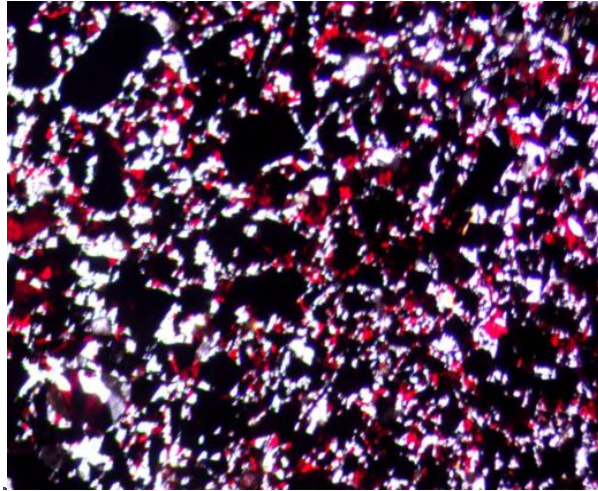
Model Parameters:

File Name: [Default]
Fitting limits: 3.000 60.000
Background degree: 3
Asymmetry [constant]: 1.15533
Asymmetry [$1/\tan(\theta)^2$]: 0.01656
Asymmetry [$1/\tan(\theta)^2$]: 0.00241625
Broadening [$\tan(\theta)$]: 0.41164
Broadening [$\tan(\theta)^2$]: 8.99686
Broadening [$\tan(\theta)^3$]: 0 Fixed
Lorentz width [Left const]: 1.1025
Lorentz width [Left/ $\tan(\theta)$]: -0.0218831
Lorentz width [Right const]: 0.971378
Lorentz width [Right/ $\tan(\theta)$]: -0.00971113

Manganese



Muestra de Manganeso



Muestra de manganeso vista al microscopio



Preparación de polvo de Manganeso en tamiz de 200.

El manganeso es un metal reactivo, de color gris plateado, con un tinte rosáceo, en su estado natural es un sólido generalmente no magnético. Su uso principal está en la fabricación de aleaciones de acero.

Es un metal de transición que tiene elevada dureza, el tener puntos de ebullición y fusión elevados y es un buen conductor de la electricidad y el calor.

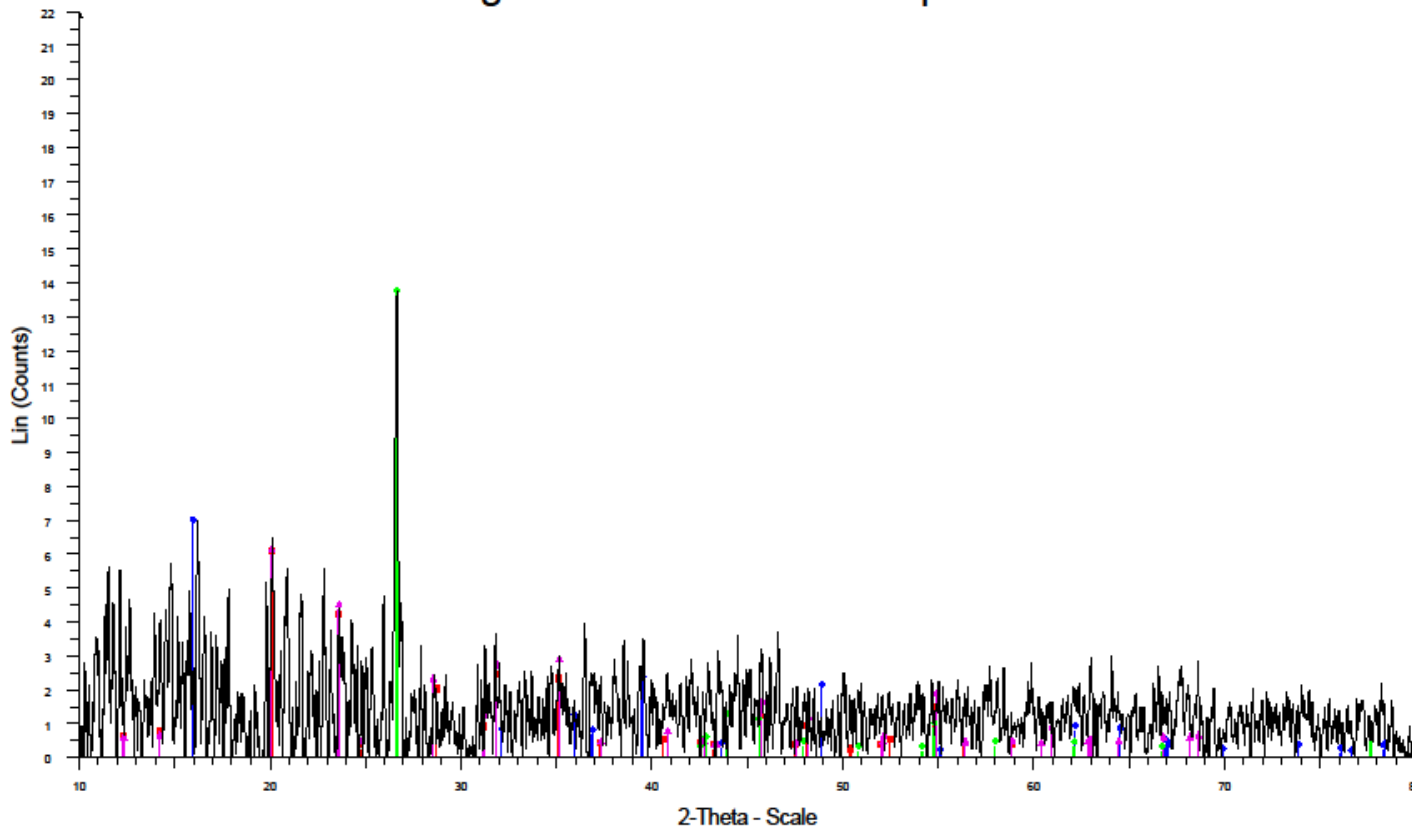
Propiedades

Manganeso

Símbolo químico	Mn
Número atómico	25
Grupo	7
Periodo	4
Aspecto	plateado metálico

Bloque	d
Densidad	7470 kg/m ³
Masa atómica	54.938049 u
Radio medio	140 pm
Radio atómico	161
Radio covalente	139 pm
Configuración electrónica	[Ar]3d ⁵ 4s ²
Electrones por capa	2, 8, 13, 2
Estados de oxidación	7, 6, 4, 2, 3
Óxido	ácido fuerte
Estructura cristalina	cúbica centrada en el cuerpo
Estado	sólido
Punto de fusión	(diamante) 1517 K
Punto de ebullición	2235 K
Calor de fusión	12.05 kJ/mol
Electronegatividad	1,55
Calor específico	480 J/(K·kg)
Conductividad eléctrica	0,695 × 10 ⁶ S/m
Conductividad térmica	7,82 W/(K·m)

Manganese Zirconium Phosphate



File: manganese.raw - Type: 2Th/Th locked - Start: 10.000 ° - End: 80.000 ° - Step: 0.020 ° - Step time: 0.1 s - Temp.: 25 °C (Room) - Time Started: 20 s - 2-Theta: 10.000 ° - Theta: 5.000 ° - Chi: 0.00 ° - Phi: 90.00 ° - X: -30.0 mm - Y: 0.0 mm - Z: 0.0 mm
 Operations: Enh. Background 1.000, 1.000 | Smooth 0.100 | Import

■ 00-053-1011 (I) - Manganese Zirconium Phosphate - $Mn_0.5Zr_2(PO_4)_3$ - Rhombo.H.Laues - Y; 43.23 % - d x by: 1. - WL: 1.5406 - a 8.85000 - b 8.85000 - c 21.80000 - alpha 90.000 - beta 90.000 - gamma 120.000 - Primitive - R-3 (148) - 6 - 1478.
■ 01-070-3726 (I) - Sodium Nickel Manganese Oxide - $Na_0.58(Ni_0.333Mn_0.667)O_{1.95}$ - Hexagonal - Y; 49.91 % - d x by: 1. - WL: 1.5406 - a 2.88500 - b 2.88500 - c 11.15500 - alpha 90.000 - beta 90.000 - gamma 120.000 - Primitive - P63/mmc (I) - 192 - 1477.97 - F
■ 00-045-0016 (I) - Manganese Zirconium Phosphate - $Mn_2Zr_4(PO_4)_6$ - Rhombo.H.Laues - Y; 43.36 % - d x by: 1. - WL: 1.5406 - a 8.84300 - b 8.84300 - c 21.82400 - alpha 90.000 - beta 90.000 - gamma 120.000 - Primitive - R $\bar{3}$ (I) - 3 - 1477.97 - F
■ 00-026-1077 (C) - Carbon - C - Hexagonal - Y; 99.16 % - d x by: 1. - WL: 1.5406 - a 2.45600 - b 2.45600 - c 16.74000 - alpha 90.000 - beta 90.000 - gamma 120.000 - Primitive - P3 (143) - 10 - 87.4466 - F30= 42(0.0090,73)

Pattern : 00-045-0016

Radiation = 1.540600

Quality : Indexed

MnZr₄(PO₄)₅

Manganese Zirconium Phosphate

Lattice : Rhombohedral

S.G. : R⁻³ (D)

a = 8.84300

c = 21.82400

Z = 3

Mol. weight = 989.65

Volume [CD] = 1477.96

Dx = 3.336

General Comments: NASICON-type structure. Pattern taken at room temperature. High temperature phase. Color: Light pink. Sample Preparation: Prepared by a sol-gel method from "Mn (N O3)2 · 6 H2 O", "Zr O Cl2 · 8 H2 O" and "N H4 H2 P O4" followed by heating at 1100 C for 24 hours. Structures: Heating below 900 C, crystallizes into β-"Fe2 (S O4)3". Data collection flag: Ambient.

Nomura, K., Osaka National Research Inst., AIST, Osaka, Japan., Private Communication (1993)

Radiation : CuKα

Lambda : 1.54180

SS/FOM : F30- 21(0.0180,82)

Filter : Beta

d-sp : Diffractometer

d (Å)	I	h	k	l
7.22600	7	1	0	1
6.26900	8	0	1	2
4.43200	100	1	1	0
*4.43200	100	1	0	4
3.77800	73	1	1	3
3.61300	5	2	0	2
3.13400	36	0	2	4
2.86900	18	2	1	1
2.80900	43	1	1	6
2.55500	46	2	1	4
*2.55500	46	3	0	0
2.40900	5	3	0	3
2.21100	10	2	2	0
2.12100	6	2	1	7
2.11500	5	2	2	3
2.09000	3	3	0	6
2.08500	3	3	1	2
1.98200	25	1	2	8
*1.98200	25	1	3	4
1.91000	4	3	1	5
1.88700	17	0	4	2
*1.88700	17	2	2	6
1.75500	5	1	3	7
1.75300	8	0	4	5
1.67100	29	3	2	4
*1.67100	29	4	1	0
1.63000	4	2	3	5
1.62900	5	4	1	3
1.56700	5	0	4	8
1.53100	4	3	2	7
1.51900	12	4	1	6
1.47700	5	2	3	8
1.47400	6	3	3	0
*1.47400	6	0	5	4
1.44400	5	2	4	1
1.39900	7	2	4	4
1.37400	7	4	2	5
1.36600	8	3	3	6

CUANTIFICACIÓN

Sample name:

File name: manganeso.raw

Date of fitting: 06/10/2015 03:11:37 p.m.

Fitting limits: 10.000 59.980

Number of steps: 16

R/R0: 1.01

RWP: 80.7

Delta displacement: 0.048 mm

Concentrations: WARNING missing I/Icor - inaccurate results

00-053-1011 6.8% Mn_{0.5}Zr₂(PO₄)₃

Manganese Zirconium Phosphate

01-070-3726 1.0% Na_{0.58}(Ni_{0.333}Mn_{0.667})O_{1.95}

Sodium Nickel Manganese Oxide

00-045-0016 18.4% MnZr₄(PO₄)₆

Manganese Zirconium Phosphate

00-026-1077 73.8% C

Carbon

C 73.8%

O 10.1%

Na 0.1%

P 4.7%

Mn 1.8%

Ni 0.2%

Zr 9.3%

00-053-1011 Manganese Zirconium Phosphate

----- Mn_{0.5}Zr₂(PO₄)₃

FWHM(30): 0.445 °

Crystallite Size (Scherrer): 182.7 Å

I/Icor (default): 1.

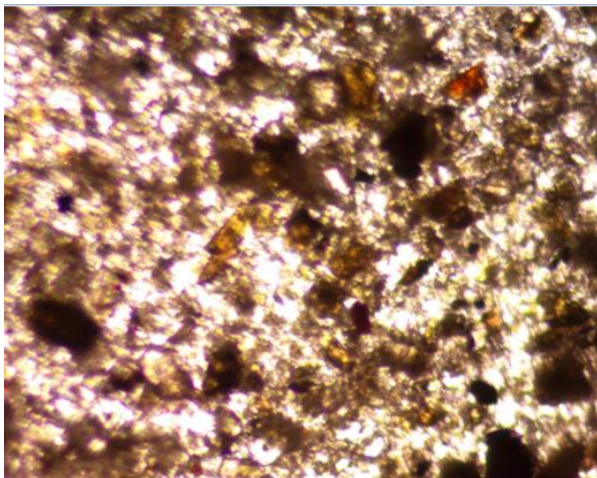
System: Rhombo.H.axes
Space group: R-3 (148)
Cell param.: Initial Final
a: 8.85000 Fixed
c: 21.80000 Fixed

01-070-3726 Sodium Nickel Manganese Oxide
----- Na_{0.58}(Ni_{0.333}Mn_{0.667})O_{1.95}

Magnetita



Muestra de Magnetita



Muestra de Magnetita vista al microscopio óptico (10X)



Preparación fija con magnetita

La magnetita es un material ferromagnético de valencia mixta de la familia de las espinelas cuya fórmula molecular es Fe_3O_4 . La magnetita cuenta con estructuras cristalina y magnética complejas que le dan propiedades muy interesantes. Por cristalizar en estructuras del mismo tipo, las espinelas deben su nombre al óxido MgAl_2O_4 (espinela), en ellas se presentan cationes divalentes (valencia química 2+) y trivalentes (valencia 3+) en diferente ambiente. Masas granudas, granos sueltos, arenas o agregados hojosos. Frecuentemente cristalizado en el sistema cubico, los cristales generalmente perfectos, fuertemente magnética propiedad que desaparece al ser calentada el rojo.

Propiedades

Brillo: Metálico.

Color: Negro.

Raya: Negra.

Dureza: 5,5-5,6.

Exfoliación: Irregular

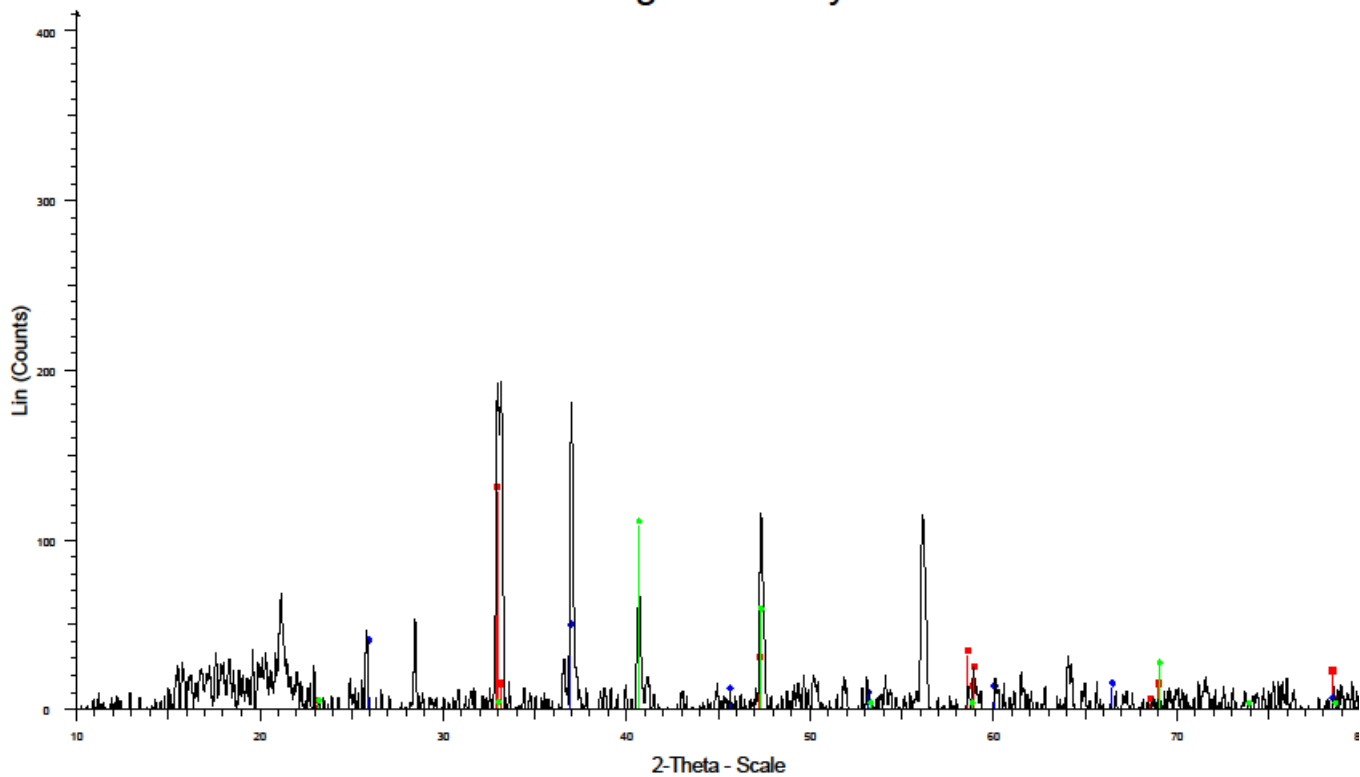
Fractura: Buena en algunas caras

Clase: óxidos e Hidróxidos

Peso específico: 5- 5,2

Transparencia: opaca

Sodium Magnesium Hydride



File: Mg-1.raw - Type: 2Th/Th locked - Start: 10.000 ° - End: 80.000 ° - Step: 0.020 ° - Step time: 3. s - Temp.: 25 °C (Room) - Time Started: 8 s - 2-Theta: 10.000 ° - Theta: 5.000 ° - Chi: 0.00 ° - Phi: 90.00 ° - X: 25.0 mm - Y: 0.0 mm - Z: -0.9 mm - Operations: Background 1.000,1.000 | Smooth 0.100 | Import

00-052-0873 (f) - Sodium Magnesium Hydride - NaMgH₃ - Orthorhombic - Y: 66.54 % - d x by: 1. - WL: 1.5406 - a 5.41200 - b 5.46500 - c 7.69400 - alpha 90.000 - beta 90.000 - gamma 90.000 - Primitive - Pnma (62) - 4 - 227.562 - F11= 4(0.03

03-065-9273 (f) - Mercury Magnesium - MgHg - Cubic - Y: 24.35 % - d x by: 1. - WL: 1.5406 - a 3.44200 - b 3.44200 - c 3.44200 - alpha 90.000 - beta 90.000 - gamma 90.000 - Primitive - Pm-3m (221) - 1 - 40.7786 - I/c PDF 20.4 - F16=1000(0.

01-089-3705 (f) - Manganese Chromium Nitride - Mn₃Cr_{0.6}ND_{0.8} - Cubic - Y: 55.98 % - d x by: 1. - WL: 1.5406 - a 3.84100 - b 3.84100 - c 3.84100 - alpha 90.000 - beta 90.000 - gamma 90.000 - Primitive - Pm-3m (221) - 1 - 56.6674 - I/c PDF

Pattern : 00-052-0873		Radiation = 1.540600		Quality : Indexed									
NaMgH₃ Sodium Magnesium Hydride		d (Å) 3.85069 2.72164 2.70654 1.02227 1.57437 1.56708 1.56578 1.36651 1.36036 1.21685 1.21378	i 1 100 9 24 24 17 2 2 15 2	h n 1 2 n 1 2 n 2 1 4	k n 1 n n n 1 1 1 2	l 2 2 n 4 2 n n 4 4 0							
Lattice : Orthorhombic S.G. : Pnma (62) a = 5.41200 b = 5.46500 c = 7.69400 a/b = 0.99030 c/b = 1.40787		Mol. weight = 50.32 Volume [CD] = 227.56 Dx = 1.469											
General Comments: Distorted perovskite related to "Gd Fe O ₃ ". Additional Patterns: See hydrogen-deficient form 00-042-1143. Color: Light gray. Sample Preparation: A 1:1 molar mixture of "Na H" and "Mg H ₂ " was heated for a few hours at 350 C under 70 bar "H ₂ "-pressure. Unit Cell Data Source: Powder Diffraction. Data collection tag: Ambient.													
Ronnebro, E., Noreus, D., Kadir, K., Reiser, A., Bogdanovic, B., J. Alloys Compds., volume 299, page 101 (2000)													
Radiation : CuKα1 Lambda : 1.54060 SS/FOM : F11= 4(0.0326,78)		Filter : Monochromator crystal d-sp : Guinier											

cuantificacion

Sample name:

File name: Mg-1.raw

Date of fitting: 06/10/2015 03:30:56 p.m.

Fitting limits: 10.000 59.980

Number of steps: 20

R/R0: 3.42

RWP: 86.3

Delta displacement: 0.076 mm

Concentrations: WARNING missing I/Icor - inaccurate results

00-052-0873 0.0% NaMgH3

Sodium Magnesium Hydride

03-065-9273 16.6% MgHg

Mercury Magnesium

01-089-3705 83.4% Mn3.2Cr0.8N0.8

Manganese Chromium Nitride

N 4.1%

Mg 1.8%

Cr 15.2%

Mn 64.2%

Hg 14.8%

00-052-0873 Sodium Magnesium Hydride

----- NaMgH3
FWHM(30): 0.81 °
Crystallite Size (Scherrer): 100.4 A
I/Icor (default): 1.
System: Orthorhombic
Space group: Pnma (62)
Cell param.: Initial Final
a: 5.41200 Fixed
b: 5.46500 Fixed
c: 7.69400 Fixed

03-065-9273 Mercury Magnesium
----- MgHg
FWHM(30): 0.124 °
Crystallite Size (Scherrer): 658.0 A
I/Icor: 20.4
System: Cubic
Space group: Pm-3m (221)
Cell param.: Initial Final
a: 3.44200 Fixed

01-089-3705 Manganese Chromium Nitride
----- Mn3.2Cr0.8N0.8
FWHM(30): 0.112 °
Crystallite Size (Scherrer): 725.6 A
I/Icor: 6.8
System: Cubic
Space group: Pm-3m (221)
Cell param.: Initial Final
a: 3.84100 Fixed

Model Parameters:

File Name: [Default]
Fitting limits: 3.000 60.000

Background degree: 3
Asymmetry [constant]: 1.15533
Asymmetry [$1/\tan(\theta)^2$]: 0.01656
Asymmetry [$1/\tan(\theta)^2$]: 0.00241625
Broadening [$\tan(\theta)$]: 0.41164
Broadening [$\tan(\theta)^2$]: 8.99686
Broadening [$\tan(\theta)^3$]: 0 Fixed
Lorentz width [Left const]: 1.1025
Lorentz width [Left/ $\tan(\theta)$]: -0.0218831
Lorentz width [Right const]: 0.971378
Lorentz width [Right/ $\tan(\theta)$]: -0.00971113

Resultados

En cada una de las muestras que se analizaron y de acuerdo al espectro de difracción que se obtuvo de estas, se cotejaron con una base de datos que se encontraba en el procesador EVA plus, algunos picos no coincidieron con la amplitud pero esto se debe a que la orientación de los granos pudo ser modificada o que la muestra no era pura, para considerar que se trataba de esa muestra u otra deben de coincidir en al menos 3 picos.

Para obtener el porcentaje de los elementos químicos se tuvieron que seleccionar los elementos de una tabla periódica, posteriormente en el procesador se eligió la opción cuantificar y este saca los datos de manera automática. Siempre y cuando tenga esos elementos el mineral.

CONCLUSIONES

Cada estructura cristalina corresponde a un tipo de mineral.

Los minerales magnéticos por lo general se encuentran con estructuras cúbicas, como se puede observar en la ilmenita, el manganeso y la magnetita.

De tal manera que al tener este tipo de estructura los hace altamente simétricos, es importante conocer la cantidad de mineral en las muestras, ya que si tenemos un yacimiento con exactitud se podrá saber si es explotable o no, de igual manera nos basamos en la geología.

El uso de la difracción de Rayos X, nos permitió corroborar nuestros resultados, en geofísica será de utilidad para tomar criterios y decisiones para aplicar técnicas de prospección geofísica, ya sea para yacimientos minerales metálicos o no metálicos.

Bibliografía

Telford, Geldart, Sheriff - Applied Geophysics

Introduction to crystallography Donald E. Sands

Constitutive Equations of Nonlinear Electromagnetic-Elastic Crystals E. Kiral, A. C. Eringen

Fundamentos de Cristalografía Hector Fabio Cortes H., Pedro Nel Martinez Reyes, Hoover Albeiro Valencia, Armendia Colombia 2006.

Problemas de cristalofísica N.perelomova, m taguieva editorial mir moscu 1975

Introducción a la ciencia e Ingeniería de los Materiales. William D.Callister Jr. Editorial reverte 2007 Cap 21 Propiedades Magneticas.

FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M., *The Feynman Lectures on Physics*, 2nd ed., Reading,Massachussetts, Addison-Wesley, 1963, 1, 3-9.

Bibliografía Electronica

Historia de la Cristalografía. Disponible en:

<[http://www4.uva.es/goya/Intranet/Pages/programas/sintesis/2012-2013/Historia de la Cristalografía.pdf](http://www4.uva.es/goya/Intranet/Pages/programas/sintesis/2012-2013/Historia%20de%20la%20Cristalografia.pdf)> .

<http://www.ibt.unam.mx/computo/pdfs/met/Cristalografia.pdf>

