

Proyección de estructuras minerales mediante el programa Vesta

Carlos Pimentel. Carlos M. Pina

Instituto de Geociencias (CSIC, UCM). C/ José Antonio Nováis, 2. 28040 Madrid.
Departamento de Mineralogía y Petrología. Facultad de Ciencias Geológicas. Universidad Complutense de Madrid. C/ José Antonio Nováis, 2. 28040 Madrid.
cpimentelguerra@geo.ucm.es cmpina@geo.ucm.es

Resumen: en este trabajo se explica el funcionamiento básico del programa VESTA para que pueda ser utilizado por estudiantes de Geología para proyectar y visualizar estructuras cristalinas de minerales. Para ello se propone una serie de actividades que, en orden creciente de complejidad, permitirán comprender el funcionamiento del programa y los fundamentos de la proyección de estructuras cristalinas en tres dimensiones. Todo ello con el fin de que los estudiantes comprendan y sepan interpretar las estructuras minerales representadas en manuales universitarios de Mineralogía y artículos científicos.

Palabras clave: Cristalografía. Mineralogía. Estructuras cristalinas. Posición atómica. Proyección.

INTRODUCCIÓN

Los minerales se pueden definir como sólidos homogéneos de origen natural, generalmente abiogénico, con una composición química definida (pero no necesariamente fija) y con una disposición ordenada de sus átomos. Para un geólogo es importante conocer cómo son los minerales tanto química como estructuralmente, pues este conocimiento permite extraer conclusiones acerca de la formación, el origen y la evolución de las rocas. Por ello, durante los primeros cursos de los estudios de Geología se imparten asignaturas de Cristalografía y Mineralogía que abordan la identificación y el estudio de los minerales más comunes que forman las rocas (tanto en muestras de mano como empleando el microscopio petrográfico), así como la descripción y el análisis de sus estructuras cristalinas. El análisis detallado de estas estructuras cristalinas, es decir, de la organización tridimensional de los átomos de las fórmulas químicas de los minerales, permite explicar en buena medida sus propiedades fisicoquímicas y sus transformaciones cuando varían las condiciones de presión y temperatura.

En los libros y manuales universitarios de Mineralogía, las estructuras de los minerales aparecen representadas tanto en perspectiva como proyectadas sobre diferentes planos cristalinos. Además, se suelen mostrar los átomos con distintos colores y tamaños para diferenciar los distintos elementos químicos, así como los

enlaces entre átomos, poliedros de coordinación de aniones alrededor de cationes y los límites de las celdas unidad. Estas representaciones y proyecciones de las estructuras cristalinas se realizan a partir de la información obtenida mediante difracción de rayos X (y en menor medida de neutrones) por cristales y teniendo en cuenta las relaciones de simetría entre las posiciones atómicas de cada una de las posibles estructuras de los cristales, es decir, la simetría de los 230 grupos espaciales. Esta información sobre las coordenadas atómicas características de cada uno de los 230 grupos espaciales aparece recogida en las Tablas Internacionales de la Cristalografía (*International Tables for Crystallography*), publicadas por la Unión Internacional de Cristalografía (*International Union of Crystallography*, <https://www.iucr.org>)

En este artículo se explica cómo representar las estructuras cristalinas en tres dimensiones utilizando el programa informático gratuito VESTA. Además, se proponen actividades para representar las estructuras de minerales comunes en la naturaleza.

TABLAS INTERNACIONALES DE CRISTALOGRAFÍA

Las Tablas Internacionales de Cristalografía son una serie de manuales de referencia para los científicos que trabajan con cristales. En ellas se recogen los elementos de simetría y las posiciones atómicas de los 230 grupos espaciales, las condiciones de difracción, las propiedades físicas de los cristales y la cristalografía de macromoléculas biológicas.

En la figura 1 se muestra un ejemplo de una página del Volumen A de las Tablas Internacionales de la Cristalografía. En esta figura se puede observar toda la información relativa al grupo espacial $Pmc2_1$ (Aroyo, 2016). En la parte superior se indican el sistema cristalino, la clase cristalina y el grupo espacial cuya simetría se va a describir en la página. Debajo, aparecen representados los elementos de simetría de la celda unidad y las posiciones atómicas equivalentes en la estructura. Por último, se describen la simetría del origen de la celda unidad (*Origin*), la unidad asimétrica de la celda (*Asymmetric unit*), las operaciones de simetría y sus coordenadas (*Symmetry operations*), los generadores seleccionados para generar todas las posiciones equivalentes (*Generators selected*), las posiciones atómicas generales y especiales según la notación de Wyckoff (*Positions*) y las proyecciones especiales de simetría a lo largo de los tres ejes ortogonales (*Symmetry of special projection*).

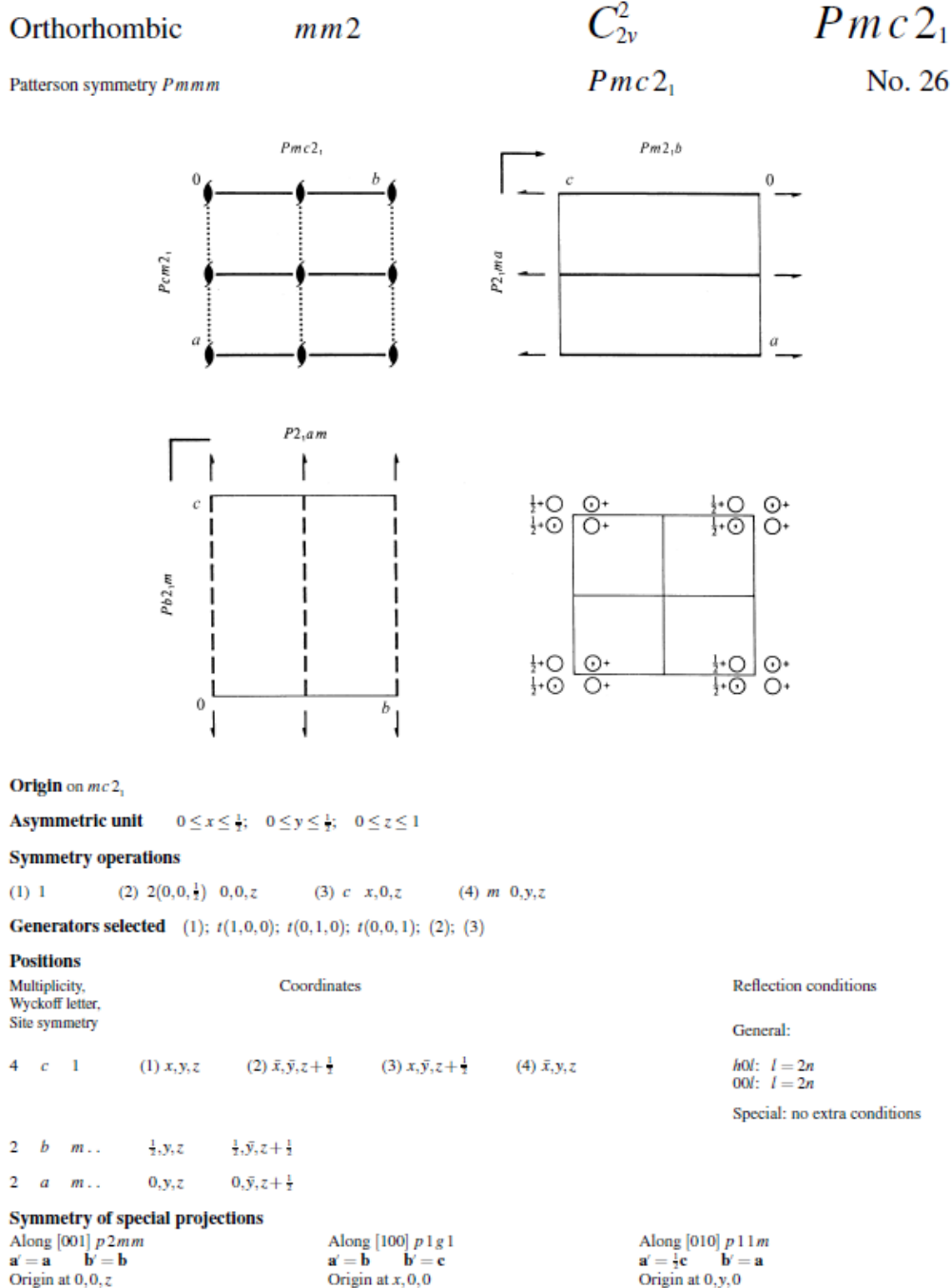


Figura 1. Reproducción de la página del volumen A de las Tablas Internacionales de la Cristalografía en la que se representan la simetría y coordenadas atómicas generales para un cristal genérico perteneciente al grupo espacial $Pmc2_1$ (Aroyo, 2016).

De toda la información recogida en las Tablas Internacionales de Cristalografía, únicamente los datos de sistema cristalino, grupo espacial y las posiciones de Wyckoff van a ser utilizados durante la realización de la práctica que se explica en este artículo. La representación de las estructuras cristalinas en tres dimensiones mediante el programa VESTA servirá para comprender la información contenida en dichas tablas.

OBJETIVO DE LA PRÁCTICA

El objetivo de esta práctica es representar estructuras cristalinas en tres dimensiones de minerales comunes en la naturaleza utilizando el programa VESTA. Dicho programa permite manipular las representaciones realizadas para poder observar, desde distintos ángulos, la disposición de los átomos dentro de la estructura.

METODOLOGÍA

Las proyecciones de estructuras de minerales se harán con el programa VESTA, *Visualization for Electronic and Structural Analysis* (Momma e Izumi, 2011), que se puede descargar gratuitamente desde el siguiente enlace: <http://jp-minerals.org/vesta/en/>. Para utilizarlo, únicamente es necesario descargar el archivo compatible con el sistema operativo del ordenador en el que se vaya a utilizar y descomprimirlo.

Para proyectar las estructuras se utilizará la información contenida en la base de datos gratuita *American Mineralogist Crystal Structure Database*, AMCSD (<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>; Downs y Hall-Wallace, 2003). Esta no es la única base de datos de libre acceso. Para realizar las actividades aquí propuestas también es posible la utilización de las bases de datos siguientes: *MinCyrst* (<http://database.iem.ac.ru/mincryst/search.php>) y *Crystallography Open Database* (<http://www.crystallography.net/cod/>). Esta última base de datos incluye, además de estructuras de minerales, estructuras de otros cristales inorgánicos sintéticos, cristales orgánicos y compuestos organometálicos. La utilización de la base de datos COD permite adaptar el contenido de esta práctica a estudiantes que tengan interés en este tipo de compuestos (p. ej., Ciencias Físicas, Ciencias Químicas, Ciencias Biológicas y Ciencia de Materiales).

En la base de datos AMCSD, la búsqueda de los minerales se puede realizar introduciendo el nombre (*Mineral*), la composición química (*Chemistry search*), los parámetros de red y la simetría (*Cell parameters and symmetry*) o los picos de difracción (*Diffraction search*). La forma más sencilla de utilizar esta base de datos es buscando el mineral por su nombre (en inglés). Sin embargo, seleccionando las diferentes opciones antes mencionadas se abrirán nuevas ventanas en las que se podrán realizar búsquedas más refinadas de los minerales. Al escribir el nombre del mineral e iniciar la búsqueda (*Search*) se abrirá una nueva ventana en la que aparecerá la lista de minerales que coinciden con el que se ha buscado (Fig. 2). Dentro de esta lista se buscará el que por sus características (habitualmente fases puras a presión y temperatura ambiente) sea más adecuado para la realización de la práctica. Una vez identificada la fase de interés, se pulsa *Download AMC Data* para descargar los datos de parámetros de red y posiciones atómicas, que se mostrarán en el resultado de la búsqueda o se descarga el

archivo .cif seleccionando *Download CIF Data* (Fig. 2). La opción dependerá de la actividad que se vaya a realizar.

The screenshot shows the American Mineralogist Crystal Structure Database search interface. At the top, there is a search form with fields for Mineral, Author, Chemistry Search, Cell Parameters and Symmetry, Diffraction Search, and General Search Search Tips. Below the form are 'Search' and 'Reset' buttons. On the left, there are navigation links for 'Logic interface', 'Viewing (About File)', and 'Download'. Below these are 'People' and a statistics box. The main content area shows search results for 'Halite', including the authors (Walker D, Verma P K, Cranswick L M D, Jones R L, Clark S M, Buhre S), the journal reference (American Mineralogist 89 (2004) 204-210), and the sample information (Sample: msl1416031, T = 25 C, P = 0.0 kbar, cell volume = 179.42 ang**3). The crystallographic data is listed as follows:

```

_database_code_amcsd 0003397
5.6401 5.6401 5.6401 90 90 90 Fm3m
atom x y z
Na 0 0 0
Cl .5 .5 .5
    
```

At the bottom of the results, there are four links in red: **1 Download AMC data (View Text File)**, **2 Download CIF data (View Text File)**, **Download diffraction data (View Text File)**, and **View JMOL 3-D Structure (permalink)**.

Figura 2. Captura de pantalla del formulario de búsqueda de la base de datos AMCS D y resultado de búsqueda del mineral halita (NaCl). Los números en rojo indican la opción para descargar los datos que se muestran en el resultado (1 – *Download AMC data*) y para descargar el archivo .cif (2 – *Download CIF data*).

Importar un archivo .cif es la forma más rápida y sencilla de trabajar con VESTA. Tras descargar el archivo .cif de la base de datos AMCS D se abre el programa VESTA, se pulsa en *File, Open*, se elige el archivo descargado, se abre y aparecerá dibujada en la ventana principal del programa una celda unidad de la estructura del mineral escogido.

El otro modo de dibujar las estructuras cristalinas de los minerales presenta un mayor interés para realizar la práctica, y es el que se desarrollará en las actividades propuestas, ya que requiere introducir manualmente los parámetros cristalográficos del mineral, es decir, el grupo espacial, los parámetros de red, los ángulos y las posiciones atómicas. Para poder proyectar las estructuras de este modo hay que abrir VESTA y seleccionar *File, New Structure...* Se abrirá entonces una nueva ventana con varias pestañas. En la primera de ellas (*Phase*, Fig. 3A), se escribirá el nombre del mineral o compuesto cuya estructura se desea visualizar. En la segunda pestaña (*Unit cell*, Fig. 3B), se seleccionará la simetría del cristal (sistema y grupo espacial) y se introducirán sus parámetros de red (dimensiones de la celda unidad y ángulos). En la tercera pestaña (*Structure parameters*, Fig. 3C), se escribirán los átomos que conforman el mineral y sus posiciones atómicas (parámetros x, y, z). Para cada posición atómica hay que incluir un nuevo elemento en la tabla (*New*). Para esta práctica, en la pestaña *Structure parameters* no se considerarán estructuras con desplazamiento anisotrópico de los

parámetros (*Anisotropic: None; Isotropic: B*), ni con diversos factores de ocupación, por lo que la opción *Occ.* será siempre igual a 1. En esta práctica tampoco se van a utilizar los parámetros volumétricos (*Volumetric data*), ni la forma de los cristales (*Crystal shape*). Una vez completados los datos de las primeras tres pestañas, se hace clic en el botón *OK* para que el programa genere la estructura introducida. Para no perder el trabajo realizado, éste se guarda en *File, Save As...* o *Export Data...*

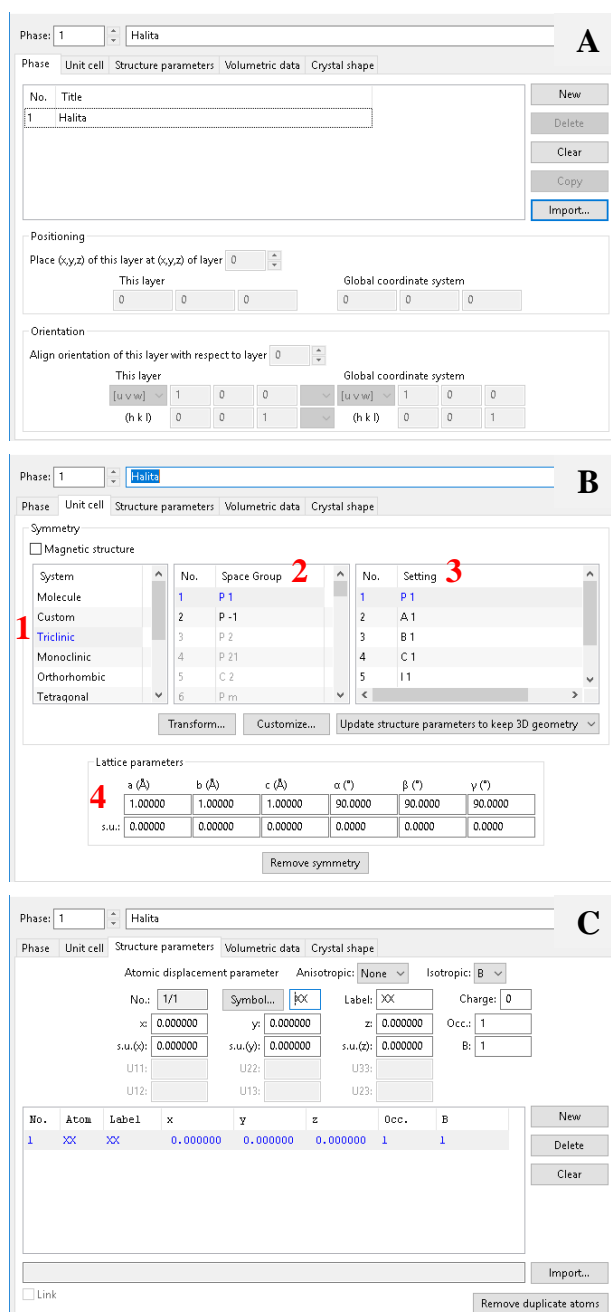


Figura 3. Imágenes de las distintas pestañas para dibujar una estructura en VESTA (*New structure...*). A) *Phase*, donde se escribe el nombre del mineral. B) *Unit cell*, donde se selecciona el sistema cristalino (1), el grupo espacial (2) y la configuración (3) de la estructura que se desea representar y sus parámetros de red (4). C) *Structure parameters*, donde se introducen los átomos y las posiciones atómicas que conforman la estructura del mineral.

Una vez proyectada la estructura del mineral, el programa VESTA permite: 1) proyectar la estructura a lo largo de uno de los ejes (a, b, c); 2) mover la estructura para verla desde distintas posiciones; 3) seleccionar átomos para conocer sus posiciones atómicas; 4) medir parámetros reticulares; 5) medir ángulos; 6) dibujar los poliedros de coordinación de los cationes; 7) añadir más celdas unidad; y 8) cambiar el color y el tamaño de los átomos representados (Fig. 4). En la parte inferior de la pantalla principal del programa (Fig. 4, nº 9) se muestran las posiciones atómicas de los átomos seleccionados y los resultados de las medidas de las distancias y los ángulos entre átomos. Hay otras opciones de utilidad dentro de VESTA que no son objeto de esta práctica, pero que pueden ser descubiertas y utilizadas fácilmente jugando con el programa.

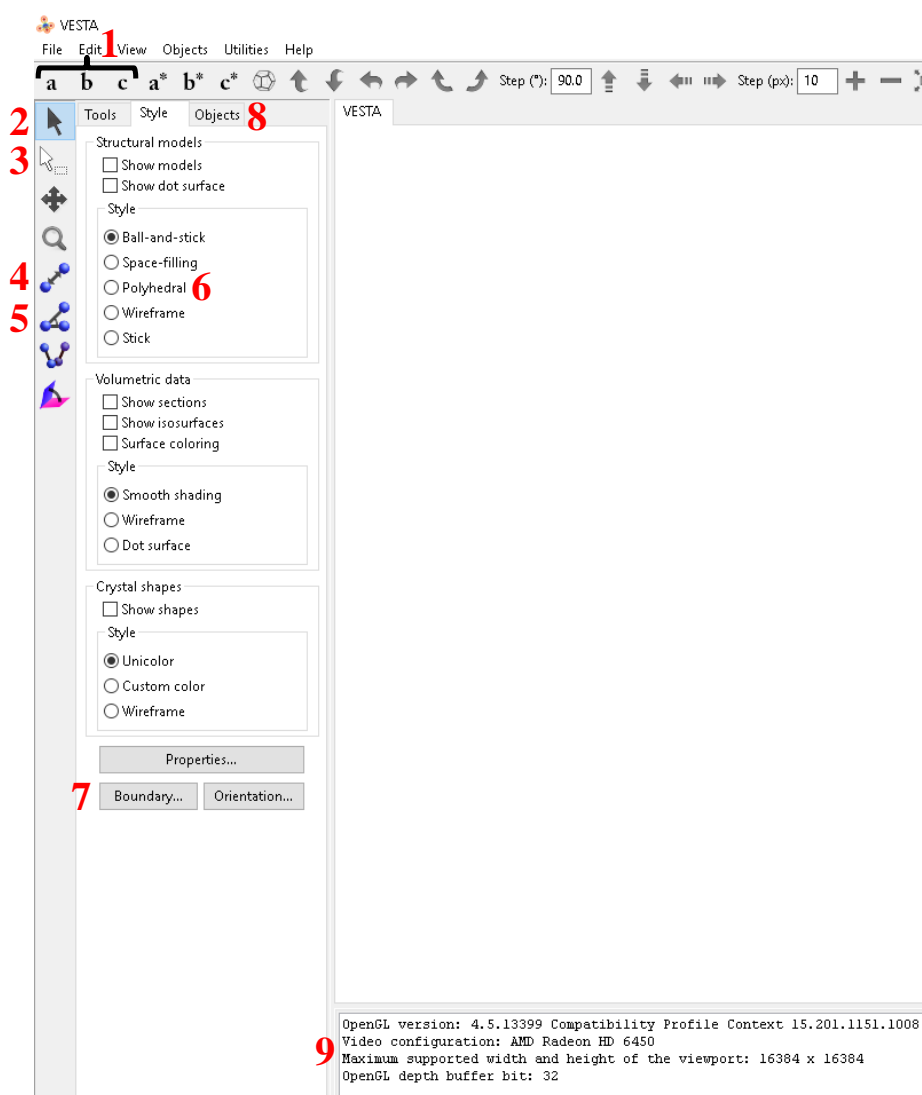


Figura 4. Pantalla principal del programa VESTA. Se han indicado algunas de las herramientas del programa que se utilizarán en esta práctica: 1) Proyectar las estructuras dibujadas a lo largo de los ejes a, b y c; 2) mover la estructura; 3) seleccionar átomos; 4) medir distancias entre átomos; 5) medir ángulos; 6) dibujar los poliedros de coordinación de los cationes (*Polyhedral*); 7) añadir celdas unidad (*Boundary*); y 8) cambiar tamaño y colores de átomos (*Objects*). En la ventana marcada como 9 se muestran los resultados de la selección de átomos, la medida de distancias y ángulos.

Para poder representar los poliedros de coordinación de los cationes (Fig. 4, nº 6) deben definirse primero todos los enlaces entre los átomos del mineral. Esto se hace desde la opción *Edit, Bonds...* Se abrirá una nueva ventana en la que se indican los átomos que se encuentran enlazados entre sí y las distancias mínimas y máximas de dichos enlaces. La representación de los enlaces puede activarse o desactivarse desde la pestaña *Objets* (Fig. 4, nº 8).

DESARROLLO DE LA PRÁCTICA

En esta práctica se propone representar la estructura de diferentes minerales en orden creciente de dificultad, desde un cristal cúbico, cuya proyección sobre las distintas caras de su celda unidad es sencilla, hasta estructuras de cristales descritas según la notación de Wyckoff para las que hay que calcular las posiciones equivalentes. Estas actividades se resolverán introduciendo en VESTA los datos proporcionados en los problemas. En dichas actividades se presentan los ejercicios resueltos paso a paso.

Actividad 1: Halita

La halita, NaCl, cristaliza en el grupo espacial cúbico $Fm\bar{3}m$. Los parámetros reticulares de este mineral son $a = 5,6401 \text{ \AA}$ y $\alpha = 90^\circ$. Construya la celda unidad de la halita sabiendo que en su estructura las posiciones de los átomos de Na y de Cl son:

Na: 0, 0, 0;

Cl: $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$.

Solución:

Para representar con VESTA la estructura de la halita se crea una nueva estructura en *File, New Structure...* En *Unit cell* se selecciona el sistema cúbico, el grupo espacial $Fm\bar{3}m$ (número 225) y se escriben los parámetros de red. En *Structure parameters* se introducen los datos de las posiciones atómicas para la celda elemental de la halita. Dado que el programa no admite la utilización de fracciones, las posiciones de los átomos de Cl tienen que indicarse como números decimales (0,5). Una vez representada, la estructura puede proyectarse a lo largo de los ejes a , b o c , es decir, sobre uno de los planos de la familia $\{100\}$ (Fig. 5). También puede representarse más de una celda unidad (Fig. 5), utilizando para ello la opción *Boundary...*, situada en el lado izquierdo de la ventana principal (Fig. 4, nº 7).

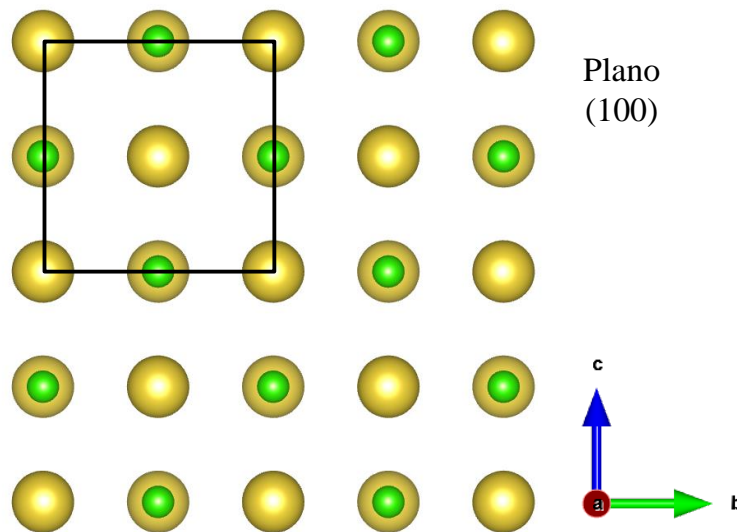


Figura 5. Estructura de la halita proyectada sobre su plano (100). Los átomos de Na se han representado en amarillo y los de Cl en verde. El cuadrado negro delimita una celda unidad de la halita sobre el plano (100).

Actividad 2: Cerusita

La cerusita, PbCO_3 , cristaliza en el grupo espacial ortorrómbico $Pm\bar{c}n$ y sus parámetros reticulares son $a = 5,166 \text{ \AA}$, $b = 8,468 \text{ \AA}$, $c = 6,146 \text{ \AA}$ y $\alpha = 90^\circ$. Los átomos de oxígeno en la cerusita ocupan dos posiciones cristalográficas diferentes. Las posiciones de los átomos en la celda elemental son:



A partir de los datos proporcionados, construya la estructura de la cerusita.

Solución:

En la pestaña de *Unit cell* se busca el grupo espacial $Pm\bar{c}n$, que corresponde al sistema ortorrómbico, grupo espacial $Pnma$ (número 62) y configuración (*Setting*) número 5, $Pm\bar{c}n$ (b, c, a). En esta pestaña también se escriben los parámetros reticulares. En *Structure parameters* se introducen las posiciones atómicas del Pb, el C y las dos posiciones cristalográficas que ocupa el oxígeno. Por último se visualiza la estructura (Fig. 6).

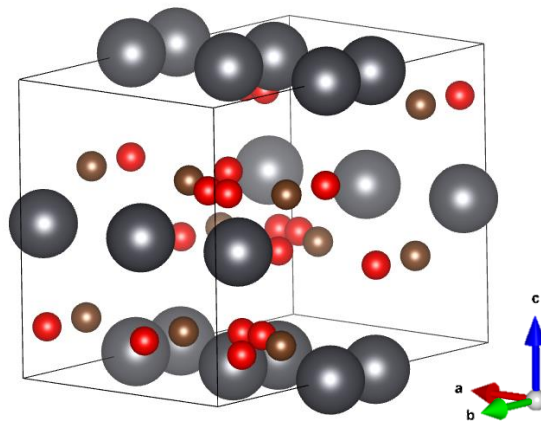


Figura 6. Estructura tridimensional de la cerusita, $PbCO_3$. Los átomos de plomo se han representado en gris, los de carbono en marrón y los de oxígeno en rojo. Las líneas negras delimitan la celda unidad de la cerusita.

Actividad 3: Dolomita

La dolomita, $CaMg(CO_3)_2$, cristaliza en el grupo espacial trigonal $R\bar{3}$. Los parámetros reticulares de la dolomita son $a = 4,808 \text{ \AA}$, $c = 16,01 \text{ \AA}$ y $\gamma = 120^\circ$.

- (a) Represente la estructura de la dolomita sabiendo que los átomos de la dolomita ocupan las siguientes posiciones:

Ca: 0; 0; 0;

C: 0; 0; 0,2435;

Mg: 0; 0; $\frac{1}{2}$;

O: 0,2374; 0,9653; 0.244;

- (b) ¿Sobre qué planos hay que proyectar la estructura de la dolomita para que se pueda observar la alternancia de capas de Ca y Mg?

Solución:

Para representar la estructura de la dolomita en VESTA se selecciona en la pestaña *Unit cell* el sistema trigonal, el grupo espacial $R\bar{3}$ (número 148), la configuración de ejes hexagonales (número 1) y se introducen los parámetros de red. Se introducen después las posiciones atómicas de los cuatro átomos en la pestaña de *Structure parameters* y se visualiza la estructura de la dolomita. Para observar claramente la alternancia de capas de calcio y magnesio, la estructura de la dolomita tiene que proyectarse a lo largo del eje a o b (Fig. 7), es decir, sobre los planos $(10\bar{1}0)$ y $(01\bar{1}0)$, ya que en la proyección sobre el plano (0001) no se observan dichas capas.

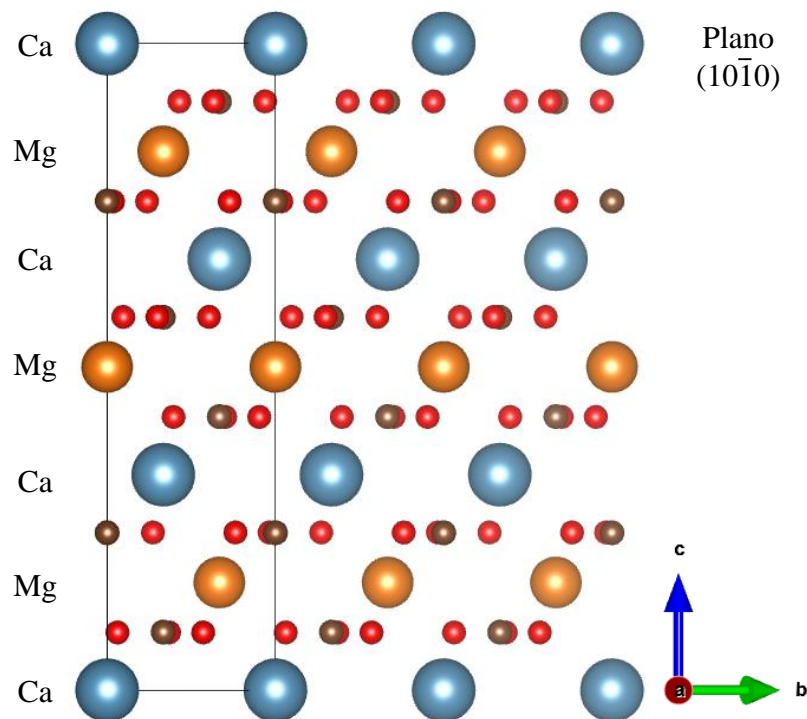


Figura 7. Estructura de la dolomita proyectada sobre la cara (1010) en la que se ha representado más de una celda unidad (delimitada por el rectángulo negro) para que se pueda observar claramente la alternancia de capas de átomos de calcio (azul) y de magnesio (naranja). Los átomos de carbono se han representado en marrón y los de oxígeno en rojo.

Actividad 4: Cuarzo

La sílice, SiO_2 , cristaliza con diferentes estructuras dependiendo de las condiciones de presión y temperatura a las que se ha formado (p. ej., cuarzo, cristobalita, tridimita...). El cuarzo de baja temperatura, cuarzo- α , cristaliza en el grupo espacial trigonal $P3_121$, con parámetros reticulares $a = 4,921 \text{ \AA}$; $c = 5,4163 \text{ \AA}$ y $\gamma = 120^\circ$. Una celda unidad de cuarzo- α contiene 3 átomos de Si que ocupan las posiciones de Wyckoff 3a con $x = 0,4698 \text{ \AA}$, y 6 átomos de O que ocupan las posiciones 6c con $x = 0,4141 \text{ \AA}$, $y = 0,2675 \text{ \AA}$ y $z = -0,1194 \text{ \AA}$. Para calcular las posiciones atómicas se utiliza la tabla 1 en la que se describen las posiciones equivalentes en el grupo espacial $P3_121$, según la notación de Wyckoff.

(a) Calcule las coordenadas fraccionarias de todas las posiciones atómicas en las que se encuentra el Si y el O dentro de la celda de cuarzo- α .

(b) Dibuje los poliedros de coordinación del SiO_4 .

Número de posiciones	Notación de Wyckoff	Simetría puntual	Posiciones
6	c	1	$x, y, z; y, x, 1/3 - z; \bar{y}, x - y, 1/3 + z;$ $\bar{x}, y - x, 2/3 - z; y - x, \bar{x}, 2/3 + z;$ $x - y, \bar{y}, \bar{z}$
3	b	2	$x, 0, 1/2; 0, x, 5/6; \bar{x}, \bar{x}, 1/6$
3	a	2	$x, 0, 0; 0, x, 1/3; \bar{x}, \bar{x}, 2/3$

Tabla 1: Posiciones equivalentes en el grupo espacial $P3_121$.

Solución:

Para representar la estructura del cuarzo- α hay que obtener las posiciones de los átomos de Si y O. Para ello, se obtienen primero las coordenadas fraccionarias de los átomos de Si introduciendo el valor de x en la posición 3a (Tabla 1):

0,47; 0; 0

0; 0,47; 0,33

-0,47; -0,47; 0,66

De modo análogo, se calculan las coordenadas fraccionarias de los átomos de O introduciendo los valores de x, y, z en la posición 6c (Tabla 1):

0,41; 0,27; -0,12

0,27; 0,41; 0,45

-0,27; 0,14; 0,21

-0,41; -0,14; 0,78

-0,14; -0,41; 0,54

0,14; -0,27; 0,12

Los valores negativos pueden transformándose en positivos. Para hacerlo basta con restar a 1 cada valor, así -0,41 se convierte en $1 - 0,41 = 0,59$. Esta transformación permite introducir los átomos que se van a representar en la celda unidad de referencia.

Una vez calculadas las coordenadas fraccionarias de los átomos de Si y O en la estructura del cuarzo- α , ésta puede ya representarse. Para introducir en VESTA todas las posiciones fraccionarias equivalentes calculadas anteriormente hay que asignar a la celda unidad una simetría provisional triclinica. Si se seleccionase la simetría correspondiente, $P3_121$, las posiciones fraccionarias equivalentes se generarían de forma automática por el programa. Por ello, en *Unit cell* se selecciona la simetría triclinica que carece de elementos de simetría, esto es, el grupo espacial $P1$ (número 1) y la configuración $P1$ (número 1). De este modo no se introducirá en la estructura ningún elemento de simetría. Se escriben también los parámetros reticulares. En *Structure parameters* se introducen todas las coordenadas fraccionarias calculadas para los átomos de Si y O y se representa la estructura (Fig. 8). Para dibujar los poliedros de coordinación del SiO_4 , primero hay que definir las distancias de los enlaces entre los átomos de oxígeno y silicio en la ventana *Edit, Bonds...* Para ello, se crea un nuevo enlace (*New*), se definen los átomos que están enlazados (*A1*: Si y *A2*: O) y las distancias mínimas y máximas (*Min. length*: 0 y *Max. length*: 3). Por último, se hace clic en *OK* y se dibujan los poliedros de coordinación del SiO_4 utilizando la opción *Polyhedral*, situada en el lado izquierdo de la ventana principal (Fig. 4, nº6).

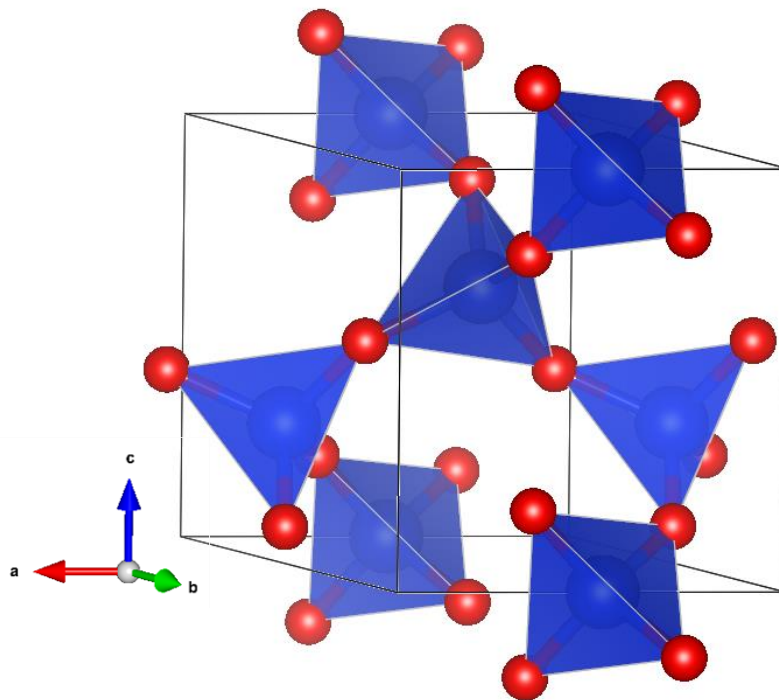


Figura 8. Estructura tridimensional del cuarzo- α en la que se han representado los poliedros de coordinación del SiO_4 (en azul oscuro). Los átomos de silicio se han representado de color azul oscuro y los de oxígeno en rojo. Las líneas negras delimitan la celda unidad del cuarzo- α .

Actividad 5: Caolinita

La caolinita, $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$, es un mineral del grupo de los filosilicatos que cristaliza en el grupo espacial triclínico $P1$ con los siguientes parámetros de red:

$$a = 5,1554 \text{ \AA}; b = 8,9448 \text{ \AA}; c = 7,4048 \text{ \AA}; \alpha = 91,7^\circ; \beta = 104,862^\circ; \gamma = 89,822^\circ$$

En la estructura de la caolinita, cada uno de los átomos de Al y Si ocupan dos posiciones cristalográficas diferentes, mientras que los átomos de oxígeno ocupan 5 posiciones cristalográficas diferentes. Para este ejercicio, los grupos OH se considerarán como un único átomo, ocupando 4 posiciones cristalográficas. Las coordenadas fraccionarias de cada una de estas posiciones son:

Al:	0,2971; 0,4957; 0,4721;	0,7926; 0,33; 0,4699;
Si:	0,9942; 0,3393; 0,0909;	0,5064; 0,1665; 0,0913;
OH:	0,051; 0,9698; 0,322;	0,9649; 0,1665; 0,6051;
	0,0348; 0,4769; 0,608;	0,0334; 0,857; 0,6094;
O:	0,0501; 0,3539; 0,317;	0,1214; 0,6604; 0,3175;
	0,0; 0,5; 0,0	0,2085; 0,2305; 0,0247; 0,2012; 0,7657;
	0,0032;	

(a) Represente la estructura de la caolinita.

(b) Represente los poliedros de coordinación del SiO_4 y del AlO_6 .

(c) ¿A lo largo de que ejes se puede observar la estructura en capas característica de este tipo de minerales?

Solución:

Para representar la estructura de la caolinita hay que seleccionar, en el apartado *Unit cell*, las opciones de simetría triclinica, grupo espacial *P1* (número 1) y configuración *C1* (número 4) e introducir los parámetros de red. En el apartado *Structure parameters* se escriben todas las coordenadas proporcionadas para cada uno de los átomos. Para representar los grupos OH se considerará que el átomo que los representa es el oxígeno y se etiqueta (*Label*) como OH. Una vez introducidas las posiciones de todos los átomos se visualiza la estructura. En este caso los átomos de O y los grupos OH se habrán representado de forma automática en color rojo. Para poder diferenciarlos, se cambiará el color de los grupos OH. El cambio de color de los átomos se hace en la pestaña *Objects* de la parte izquierda de la ventana (Fig. 4, nº8). En la lista de átomos se seleccionan los que representan los grupos OH y se les cambia el color. Por último, se representan los poliedros de coordinación. En la ventana *Bonds...* se crean dos enlaces nuevos. El primero de ellos entre el Si (*A1*) y el O (*A2*) y el segundo entre el Al (*A1*) y el O (*A2*). En ambos casos se establece una distancia máxima (*Max. length*) de 3 Å. Una vez determinados los enlaces se dibujan los poliedros de coordinación del SiO_4 y AlO_6 utilizando la opción *Polyhedral* (Fig. 9). La estructura en capas característica de este tipo de minerales puede observarse a lo largo de los ejes *a* y *b*.

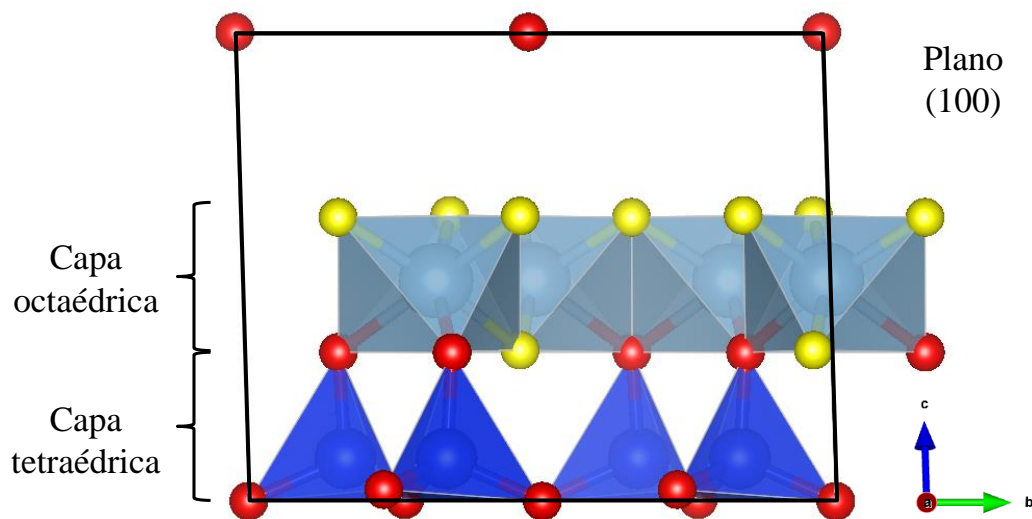


Figura 9. Estructura de la caolinita proyectada sobre el plano (100). En ella se observa la alternancia de capas características de este mineral: las capas tetraédricas (poliedros SiO_4 en color azul oscuro) y las capas octaédricas (poliedros AlO_6 en color azul claro). Los átomos de silicio se han representado en color azul oscuro, los de aluminio en gris azulado, los de oxígeno en rojo y los grupos OH en amarillo. Se ha delimitado en negro la celda unidad de la caolinita sobre el plano (100).

CONCLUSIONES

Mediante el desarrollo de esta práctica de representación de estructuras utilizando el programa VESTA, los estudiantes de cristalografía se habituarán a visualizar e interpretar estructuras cristalinas en tres dimensiones. Con ello se logrará, no sólo que aprendan a utilizar el programa, sino que también comprendan las representaciones de estructuras minerales incluidas en manuales universitarios y artículos científicos, así como la información contenida en las Tablas Internacionales de la Cristalografía.

Además de los cinco minerales que han sido presentados y resueltos en esta práctica, hay otros minerales comunes en la naturaleza que no han sido tratados para evitar caer en la repetición o debido a la complejidad que supone la proyección de su estructura (p. ej. yeso, barita, calcita, aragonito, forsterita – fayalita, hornblenda, ortosa, albita y moscovita). Sin embargo, la descarga de los archivos .cif de estos minerales puede ser interesante para que los estudiantes, tanto de asignaturas de Cristalografía como de Mineralogía, comprendan sus estructuras, observando, por ejemplo, cómo se disponen los poliedros SiO_4 en la estructura de los silicatos para determinar el grupo al que pertenecen (p. ej., nesosilicatos, sorosilicatos, ciclosilicatos, etc.). Por ello, el estudio de estos minerales se deja a modo de propuesta.

BIBLIOGRAFÍA

Aroyo, M. I. (2016) *International tables for crystallography. Volume A, Space-group symmetry*. Second Online Edition.

Downs, R.T., y Hall-Wallace, M. (2003) The American Mineralogist Crystal Structure Database. *American Mineralogist* 88, 247-250.

Momma, K., e Izumi, F. (2011) VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *J. Appl. Crystallogr.*, 44, 1272-1276.

Recibido: 3 diciembre 2018.

Aceptado: 6 febrero 2019.