
CAPITULO II

CRISTALOQUIMICA

La cristalografía trata de las relaciones entre la composición química de un mineral, el arreglo geométrico de sus átomos (estructura) y las fuerzas de enlace que mantienen a los átomos unidos. Estas relaciones determinan las propiedades físicas de los minerales como el peso específico (densidad), dureza, clivaje, magnetismo. Es de interés entender como los tipos de enlaces atómicos pueden afectar dichas propiedades.

Un átomo es la partícula más pequeña que puede tomar parte en las reacciones químicas. Antiguamente se le creía indivisible, de ahí su nombre que significa sin división. Puede representarse como un núcleo positivo formado por protones y neutrones, rodeado por electrones de carga negativa en rápido movimiento orbital. El número de protones es igual al número de electrones y varía con cada elemento. El número de protones (o electrones) es llamado número atómico. La suma de protones y neutrones es igual a la masa atómica o peso atómico. Ejemplo: el sodio (Na) tiene un número atómico de 11: significa que hay 11 protones (y 11 neutrones) en el núcleo y 11 electrones rodeándolo. La masa del átomo se asocia principalmente al peso de los protones y neutrones que posee, a cada protón se le atribuye una masa de 1.

Los neutrones no siempre se encuentran en la misma cantidad que los protones, por lo que un elemento puede tener diferentes masas atómicas. Por ejemplo: el carbono (C) tiene un número atómico de 6 y una masa atómica de 12, 13 y 14, lo cual significa que existen 6, 7 y 8 neutrones que acompañan a 6 protones en núcleos de diferentes átomos de carbono, los cuales se denominan C^{12} , C^{13} y C^{14} respectivamente. A estas variedades diferenciadas, donde el número de neutrones es distinto al de protones, se les llaman isótopos. Los isótopos generalmente son inestables y tienden a equilibrarse produciendo el fenómeno llamado radioactividad.

Los electrones no se distribuyen al azar sino en niveles de energía llamados orbitales. El número máximo de electrones en cada orbital es de 2 en la primera (He), 8 en la segunda = 10 (Ne), 8 en la tercera = 18 (Ar), 8 en la cuarta = 36 (Kr), etc. Cuando un elemento tiene el número máximo de electrones en la órbita exterior, comúnmente resulta una sustancia inerte, como son los gases nobles.

Fórmulas químicas

La mayoría de los minerales tienen composiciones que corresponden a compuestos químicos. Algunos de ellos están formados por un solo elemento y se les llama nativos, como el oro, el cobre, la plata y el azufre.

Algunas veces es difícil preparar sustancias químicas puras en el laboratorio. En la naturaleza los minerales se forman normalmente en un medio ambiente complejo, esta es la razón por la que las composiciones nunca corresponden a una fórmula química ideal.

Las fórmulas que representan la composición química de los minerales se calculan del mismo modo que las de cualquier otra sustancia química. Ejemplo, se obtuvieron los siguientes resultados analizando una calcopirita:

Elementos	I Análisis %	II Pesos atómicos	III Relaciones de combinación	IV Total	V Números enteros
Cu	34.89	63.54	0.5491	1.021	1
Fe	30.04	55.85	0.5378	1.000	1
S	34.51	32.07	1.0768	2.002	2
	----- 99.44				

Dividiendo los porcentajes (I) de los diversos componentes por sus pesos atómicos (II), se obtienen sus relaciones de combinación (III) que se pueden expresar en números enteros aproximados (IV) de los que resulta la siguiente relación: Cu : Fe : S = 1 : 1 : 2 (V). La fórmula resultante es CuFeS_2 .

Se notará que la suma de la columna (I) no da un total del 100 %. Un análisis completo delataría huellas o trazas de otros elementos, pero éstos no tienen relación con la identificación del mineral como calcopirita. En el caso de minerales más complejos, donde se indica la composición dando los porcentajes de los diversos óxidos que tiene, el procedimiento es el mismo, con la excepción de que en este caso se emplean los pesos moleculares de los óxidos, es decir, la suma de los pesos atómicos de sus elementos.

Al analizar un berilo se obtuvo el siguiente resultado:

Compuestos	I Análisis %	II Pesos moleculares	III Relaciones de combinación	IV Total	V Números enteros
SiO_2	66.37	60.1	1.1043	5.846	6
Al_2O_3	19.26	101.9	0.1889	1.000	1
BeO	14.02	25.0	0.5604	2.967	3
	----- 99.64				

Estos óxidos se combinan de la siguiente manera: $\text{BeO} : \text{Al}_2\text{O}_3 : \text{SiO}_2 = 3 : 1 : 6$ del cual se obtienen para el berilo la fórmula $3\text{BeO} \text{ Al}_2\text{O}_3 \text{ 6SiO}_2$ o $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$

Composición porcentual

Una vez establecida la fórmula de un mineral, es posible calcular el porcentaje de cada uno de sus componentes. El grado de su pureza se aprecia fácilmente comparando el análisis con la composición porcentual teórica, estimada a partir de la fórmula generalmente aceptada.

Volviendo al ejemplo de la calcopirita, cuya fórmula se ha calculado como CuFeS_2 , se puede determinar su composición porcentual teórica averiguando que porcentaje del peso molecular total del mineral corresponde al peso de combinación de un componente dado.

Ejemplo :

Componentes	Pesos atómicos	Relación de combinación	Pesos de combinación	Proporción del peso molecular	Composición porcentual
Cu	63.54	1	63.54	63.54/183.53	34.62
Fe	55.85	1	55.85	55.85/183.53	30.43
S	32.07	2	64.14	64.14/183.53	34.95
			183.53		100.00

Siendo la fórmula del berilo $\text{Be}_3\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{18}$ el porcentaje sería :

Componente	Pesos moleculares	Relación de combinación	Pesos de combinación	Proporción del peso molecular	Composición porcentual
SiO_2	60.1	6	360.6	360.6/537.5	67.09
Al_2O_3	101.9	1	101.9	101.9/537.5	18.96
BeO	25.0	3	75.0	75.0/537.5	13.95
			537.5		100.00

Denominación

Han sido descritas aproximadamente 3,600 especies de minerales. Los nombres asignados a los minerales tienen orígenes diversos, algunos pueden provenir del elemento único que constituye el mineral. Ejemplo: oro, plata, cobre o bien de la composición del mineral como cuprita, zincita, argentita, magnesita, etc.

En ocasiones el nombre se ha utilizado para honrar a algún científico o mineralogista, por ejemplo, la scheelita (Scheele, científico químico suizo), la wollastonita (W.H. Wollaston científico inglés), etc.

Algunos minerales fueron denominados por sus características físicas como la pectolita (gr. pectos - compacto); por el color, como la celestina (azul celeste), azurita (azul profundo), tetraedrita (cristaliza en tetraedros).

Otros han sido nombrados a partir del lugar donde se descubrieron, por ejemplo, la vesuvianita (Monte Vesubio), la danburita (Danbury, E.U.A.).

Enlaces atómicos

Muchos factores tienen influencia sobre la manera en la cual los átomos se unen y el tipo de enlace que forman. Algunos de ellos son: el número atómico, la distribución de los electrones en las órbitas, el tamaño de los átomos, número de coordinación y las condiciones de presión y temperatura. La habilidad de enlace de los átomos depende principalmente de su órbita externa. Un átomo con su órbita externa casi completa tiende a aceptar electrones, mientras que un átomo con uno o 2 electrones en su capa externa tiende a cederlos. Existen tres tipos principales de enlaces los cuales se describen a continuación.

Enlace Iónico

Se forma por la transferencia de uno o más electrones de un átomo a otro. Al pasar o adquirir electrones los elementos son llamados iones porque adquieren una carga eléctrica. Las fuerzas de atracción entre dichas cargas mantienen juntos a los iones.

Ejemplo:

Un átomo de Sodio Na $2\ 8\ 1$ al ceder su electrón M, obtiene una configuración vecina a la del Neón Ne $2\ 8$, pero la suma de sus electrones y protones queda desequilibrada, resultando una carga positiva (+), llamándose entonces catión.

Del mismo modo, un átomo de Cloro de estructura electrónica Cl $2\ 8\ 7$, acepta fácilmente un electrón para completar su capa M, entonces la suma de sus electrones y protones queda desequilibrada, teniendo una carga negativa (-) resultando un anión, su capa externa se parece a la del Argón Ar $2\ 8\ 8$.

La configuración con 18 electrones tiene también un alto grado de estabilidad. Ejemplos:

	K	L	M	N	O	P		K	L	M	N	O
Zn ₃₀	2	8	18	2			evoluciona a Zn ⁺²	2	8	18		
Cd ₄₈	2	8	18	18	2		evoluciona a Cd ⁺²	2	8	18	18	
Hg ₈₀	2	8	18	32	18	2	evoluciona a Hg ⁺²	2	8	18	32	18

La posibilidad que tienen los elementos de desarrollar enlaces iónicos puede ser expresado por diferentes valores. Generalmente son elementos que tienen entre uno y tres electrones en su última órbita, o bien que les falta dicho número de electrones, los que se unen en este enlace.

De forma general los átomos cargados positivamente son cationes monovalentes (Na^+ , K^+ , etc.), divalentes (Fe^{+2} , Ca^{+2} , ...), trivalentes (Fe^{+3} , ...), tetravalentes (Ti^{+4} , ..), pentavalentes (P^{+5} ,...); mientras que los átomos cargados negativamente son aniones monovalentes (Cl^- , Br^- , F^- , etc.) o divalentes (O^{-2} , S^{-2} , etc.).

Los cristales que tienen enlaces iónicos, entre los cuales están la mayor parte de los silicatos, tienen generalmente una dureza y una densidad moderada, puntos de fusión y de ebullición relativamente altos y son muy malos conductores del calor y la electricidad.

Se llama potencial de ionización al trabajo (expresado en electrón-voltios) necesario para extraer un electrón dado de su órbita y llevarlo a una distancia infinita. Si el potencial de ionización es poco elevado, el átomo sólo necesita energías débiles para perder los electrones y, por consiguiente, formará más fácilmente enlaces iónicos. El inverso da la formación de enlaces covalentes.

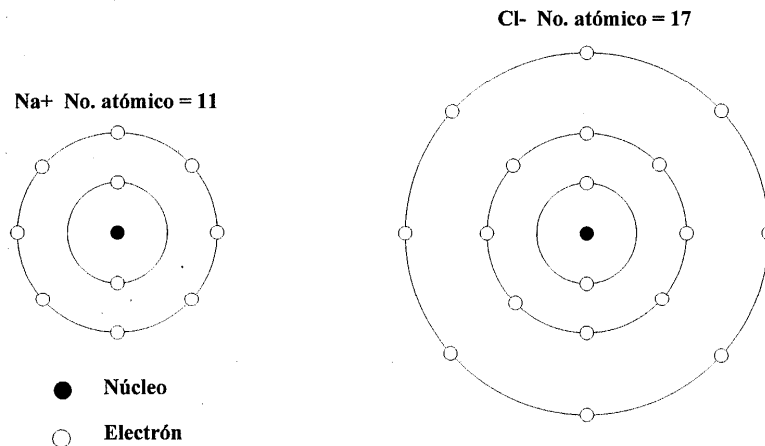


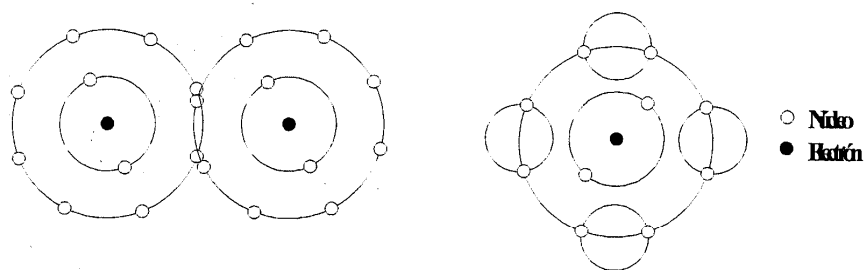
Fig. 7. Distribución esquemática de las capas electrónicas para especies ionizadas.

Enlace covalente

En este enlace, dos átomos comparten sus electrones periféricos completando así sus orbitales exteriores, de manera que cada uno de ellos adquiere la estructura de un gas noble.

La energía del enlace covalente es del mismo orden, o incluso ligeramente más fuerte, que la energía del enlace iónico, por consiguiente, las propiedades mecánicas y los puntos de fusión y de ebullición de los cristales covalentes casi no se distinguen de los iónicos. De igual manera son malos conductores del calor y electricidad y siguen siendo aislantes en el estado líquido, contrariamente a los que poseen enlaces iónicos que liberan iones en el baño de fusión.

Numerosos enlaces tienen un carácter intermedio de covalente a iónico. Lo que se puede establecer es que cuanto mayor es la diferencia de la electronegatividad entre dos átomos, más marcado es el carácter iónico. Dos átomos de la misma electronegatividad tendrán un enlace totalmente covalente.



Oxígeno O_2 No. atómico = 8

CH_4 Número atómico del carbono = 6
Número atómico del hidrógeno = 1

Fig. 8. Distribución esquemática de las capas electrónicas para especies covalentes.

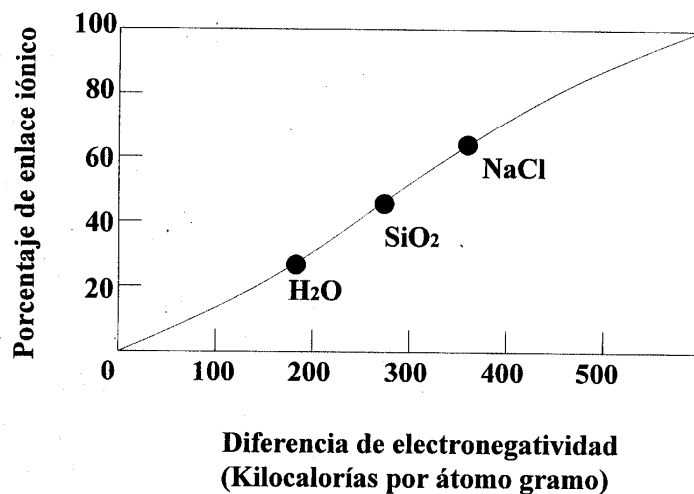
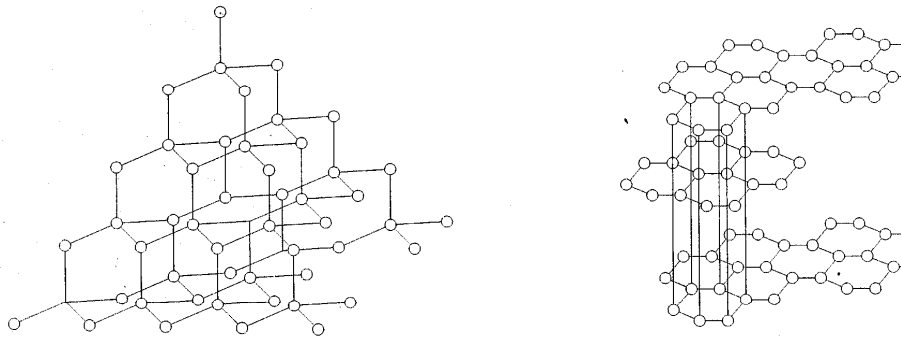


Fig. 9. El tipo de enlace como función de la diferencia de electronegatividad.



Diamante. Cada átomo de carbono se une a otros cuatro en enlace covalente.

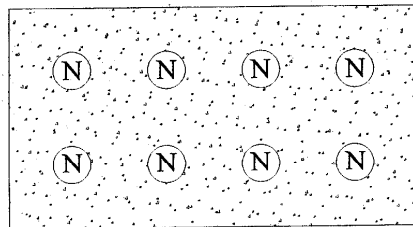
Grafito. Cada átomo de carbono se une con otros tres mediante enlace covalente, formando láminas. El enlace entre ellas es mediante fuerzas de Van der Waals (líneas verticales).

Fig. 10. Coordinación esquemática del diamante y del grafito (según Laurence Bragg. G. F. Claringbull y W. H. Taylor, 1965).

Enlace Metálico

Se puede suponer que los átomos del metal se encuentran en el cristal bajo formas de iones positivos y que entre ellos existe una nube de electrones en la cual cada electrón no tiene preferencia por un núcleo y tiene la facilidad de movilizarse.

Este tipo de enlace produce ciertas propiedades que caracterizan a los minerales metálicos, por ejemplo, son maleables (se deforman plásticamente), dúctiles (pueden convertirse en alambres), buenos conductores de la electricidad y del calor y tienen brillo metálico.



Los electrones que forman el gas electrónico entre los núcleos N, pueden agitarse sin perturbar la estructura.

Fig. 11. Representación esquemática del enlace metálico.

Enlaces o Fuerzas de Van der Waals

Los enlaces de Van der Waals o residuales, son fuerzas atractivas muy débiles que nacen de una distribución no uniforme de las cargas (asimetría electrónica), o de la polarización de átomos, moléculas o complejos iónicos, de otro modo neutrales.

Tales enlaces residuales, dan al argón, líquido o sólido, su débil cohesión a temperaturas extremadamente bajas, en ausencia de electrones libres, compartidos o donados. Este tipo de enlace es el principal de los gases.

Enlaces Efectivos

La presencia de un solo tipo de enlace en los minerales es rara, a menudo coexisten dos o más tipos. Cuando un cristal tiene un solo tipo de enlace se llama homodésmico, como lo son la halita - NaCl (iónico), el diamante - C (covalente), el cobre - Cu (metálico), Helio - He (Van der Waals); y heterodésmico cuando se encuentran varios tipos de enlace en la estructura cristalina. Un ejemplo de este último caso es el grafito en el que existen dos capas con fuerte enlace covalente que están ligadas entre sí por los débiles enlaces de Van der Waals. Por esta razón, las capas son fácilmente separables unas de otras, lo que explica la excelente exfoliación y la baja dureza que presenta el grafito.