

# CELDA UNITARIA

Al describir la estructura cristalina conviene dividirla en pequeñas entidades, que se repiten, llamadas celdas unitarias. La celda unitaria de la mayoría de las estructuras cristalinas son paralelepípedos o prismas con tres pares de caras paralelas. La celda unitaria se elige para representar la simetría de la estructura cristalina, de modo que las posiciones de los átomos en el cristal se puedan representar desplazando a distancias discretas la celda unitaria a lo largo de los ejes. De este modo, la celda unitaria es la unidad estructural fundamental y define la estructura cristalina mediante su geometría y por la posición de los átomos dentro de ella. Ordinariamente, la claridad aconseja que los vértices del paralelepípedo coincidan con los centros de las esferas rígidas que representan los átomos. Se identifican 14 tipos de celdas unitarias o redes de Bravais agrupadas en siete sistemas cristalinos. Los puntos de la red están localizados en las esquinas de las celdas unitarias y, en algunos casos, en cualquiera de las caras o en el centro de la celda unitaria.

## Características de la celda unitaria

**Parámetros de red.** Describen el tamaño y la forma de la celda unitaria, incluyen las dimensiones de los costados del cubo para describir por completo la celda (se suponen ángulos de  $90^\circ$ , a menos que se especifique lo contrario). Esta longitud medida en la temperatura ambiente es el parámetro de red  $a_0$ . A menudo la longitud se da en nanómetros (nm) o en Angstroms  $A$ .

**Número de átomos por celda.** Cada una de las celdas unitarias está definida por un número específico de puntos de red. Al contar el número de puntos de red que corresponden a cada celda unitaria, se deben identificar los puntos de la red que van a ser compartidos por más de una celda unitaria. Los vértices contribuyen con  $1/8$  de un punto, las caras con  $1/2$  y las posiciones en el centro del cuerpo contribuyen con todo un punto. El número de átomos por celda unitaria es el producto del número de átomos por punto de red multiplicado por el número de puntos de red existentes en la celda unitaria.

**Radio atómico comparado con el parámetro de red.** Las direcciones en la celda unitaria a lo largo de las cuales los átomos están en contacto continuo son las direcciones compactas. Al determinar geométricamente la longitud de la dirección, relativa a los parámetros de red y a continuación sumando los radios atómicos en esa dirección, es posible determinar la dirección deseada.

**Número de coordinación.** El número de átomos que tocan a otro en particular, es decir, el número de vecinos más cercanos, es una indicación de que tan estrecha y eficazmente están empaquetados los átomos.

**Factor de empaquetamiento FEA.** Es la fracción de espacio ocupada por átomos, suponiendo que los átomos son esferas sólidas. Su expresión general es:

$$FEA = \frac{\text{Volumen de átomos de una celda unitaria}}{\text{Volumen total de la celda unitaria}}$$

**Referencia:**

Universidad Nacional Autónoma de México. (2021). Estructura cristalina. [PDF].  
[https://unita.unam.mx/fi\\_papime\\_pe1000720/pdfs/estructura.pdf](https://unita.unam.mx/fi_papime_pe1000720/pdfs/estructura.pdf)