

## INTRODUCCIÓN

Los metales puros preferentemente forman:

Cristales CCC. Red CCC, con un átomo por nodo

Cristales CC: Red CC, con un átomo por nodo

Cristales HC, hexagonales compactos: Red Hexagonal P (o simple), con dos átomos por nodo

A continuación haremos ejercicios geométricos con los cristales CC y CCC, aplicando el modelo de esferas duras en contacto.

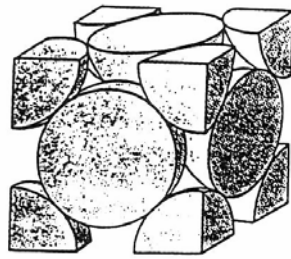
## EJERCICIO

Considere cristales del sistema cúbico, esto es, cristales C, CC y CCC, formados por átomos esféricos de radio R, en contacto.

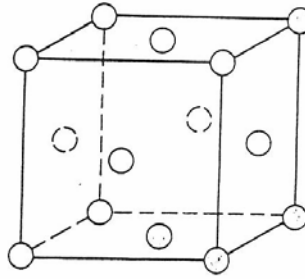
Se pide:

- Indique cristales de elementos puros importantes de cada tipo.
- Expresa el parámetro a de la respectiva celda cúbica en función de R.
- Calcule la densidad 3D de cada cristal expresada como  $\rho^{3D}$  [átoms./R<sup>3</sup>].
- Identifique los planos cristalinos más densos de cada cristal. Después calcule la densidad 2D del plano más denso de cada cristal.

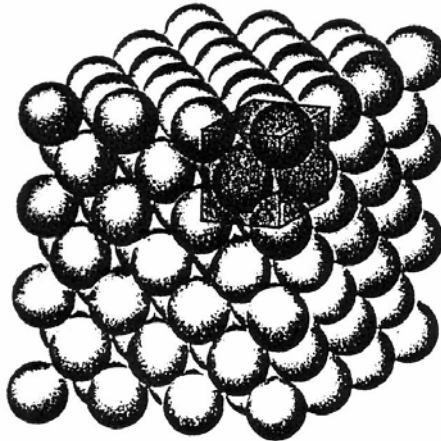
C	CC	CCC
No hay ejemplos de metales estructurales. (Po)	Fe alfa, Cr, Na, etc.	Fe gamma, Cu, Ni, Pb Al, etc. Este cristal es predicho por el modelo de esferas duras en contacto, al igual que el HC.
$a = 2R$	$a = (4/\sqrt{3}) R$	$a = (2/\sqrt{2}) R$
$\rho^{3D} = 1/2^3$ [átoms./R <sup>3</sup> ] = 0,125 [átoms./R <sup>3</sup> ]	$\rho^{3D} = 2/(4/\sqrt{3})^3$ [átoms./R <sup>3</sup> ] = 0,162 [átoms./R <sup>3</sup> ]	$\rho^{3D} = (2/\sqrt{2})^3$ [átoms./R <sup>3</sup> ] = 0,176 [átoms./R <sup>3</sup> ] No existe ningún cristal más denso que éste. Sólo el cristal HC es igualmente denso.
{100}	{110}	{111}
$\rho_{100}^{2D} = 1 / [(2)*(2)]$ [átoms./R <sup>2</sup> ]	$\rho_{110}^{2D} = 2/ [(4/\sqrt{3}) * ((4/\sqrt{3})\sqrt{2})]$ [átoms./R <sup>2</sup> ]	$\rho_{111}^{2D} = 4/[(2)*(2 \cos 30)]$ [átoms./R <sup>2</sup> ] Estos son planos hexagonales compactos, de máxima densidad. También se encuentran en los cristales HC.



(a)



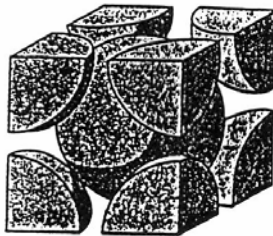
(b)



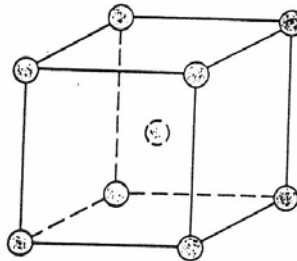
(c)

CRISTAL CÚBICO DE CARAS CENTRADAS.

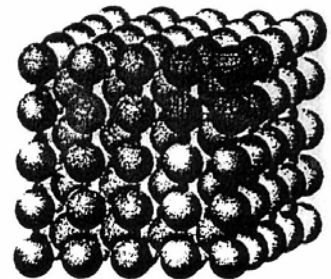
- A) UNA CELDA CRISTALINA, CON LOS ÁTOMOS REPRESENTADOS POR ESFERAS.
- B) UNA CELDA CRISTALINA, CON ESFERAS DE TAMAÑO REDUCIDO.
- C) UN AGREGADO CRISTALINO DE MUCHOS ÁTOMOS (UN CRISTAL).



(a)



(b)



(c)

CRISTAL CÚBICO DE CUERPO CENTRADO

- A) UNA CELDA CRISTALINA, CON LOS ÁTOMOS REPRESENTADOS POR ESFERAS.
- B) UNA CELDA CRISTALINA, CON ESFERAS DE TAMAÑO REDUCIDO.
- C) UN AGREGADO DE MUCHOS ÁTOMOS ORDENADOS (UN CRISTAL).

# Densidades Cristalográficas

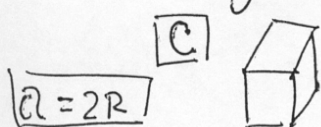
Considere cristales de metales puros, para los cuales es aplicable el modelo de esferas duras en contacto.

Suponga que el radio atómico,  $R$ , es un dato.

Se pide calcular densidades en las unidades que se indican:

$$\rho^{3D} [\text{átoms}/R^3], \rho^{2D} [\text{átoms}/R^2] \text{ y } \rho^{1D} [\text{átoms}/R]$$

Ejemplo. Considere esferas de radio  $R$  que forman cristales  $C$ ,  $CC$ , y  $CCC$ . En cada caso, calcule la  $\rho^{3D}$  correspondiente.

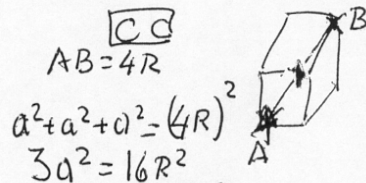


$$\# \text{ átomos/celda} = 1$$

$$\rho_c^{3D} = \frac{1}{a^3} \text{ áts}$$

$$= \frac{1}{8} \frac{\text{átoms}}{R^3}$$

$$\rho_c^{3D} = 0,125 \text{ áts}/R^3$$

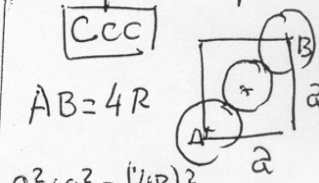


$$\# \text{ átomos/celda} = 2$$

$$\rho_{CC}^{3D} = \frac{2}{a^3} \text{ áts}$$

$$= \frac{2}{(4/\sqrt{3})^3} \frac{\text{átoms}}{R^3}$$

$$\rho_{CC}^{3D} = 0,162 \text{ áts}/R^3$$



$$\# \text{ átomos/celda} = 4$$

$$\rho_{CCC}^{3D} = \frac{4}{a^3} \text{ áts}$$

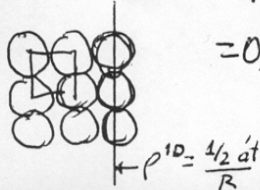
$$= \frac{4}{(2\sqrt{2})^3} \frac{\text{átoms}}{R^3}$$

$$\rho_{CCC}^{3D} = 0,176 \text{ áts}/R^3$$

Para esos mismos cristales calcule la densidad 2D de una cara de la celda.

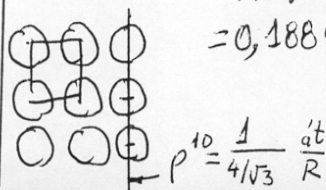
$$\rho_c^{2D} = \frac{1 \text{ átom}}{a^2} = \frac{1}{4} \frac{\text{átoms}}{R^2}$$

$$= 0,250 \frac{\text{átoms}}{R^2}$$



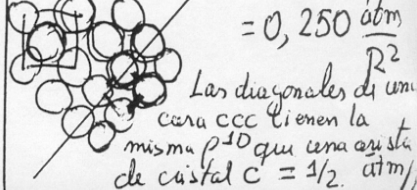
$$\rho_{CC}^{2D} = \frac{2 \text{ átom}}{a^2} = \frac{2}{(4/\sqrt{3})^2} \frac{\text{átoms}}{R^2}$$

$$= 0,188 \frac{\text{átoms}}{R^2}$$

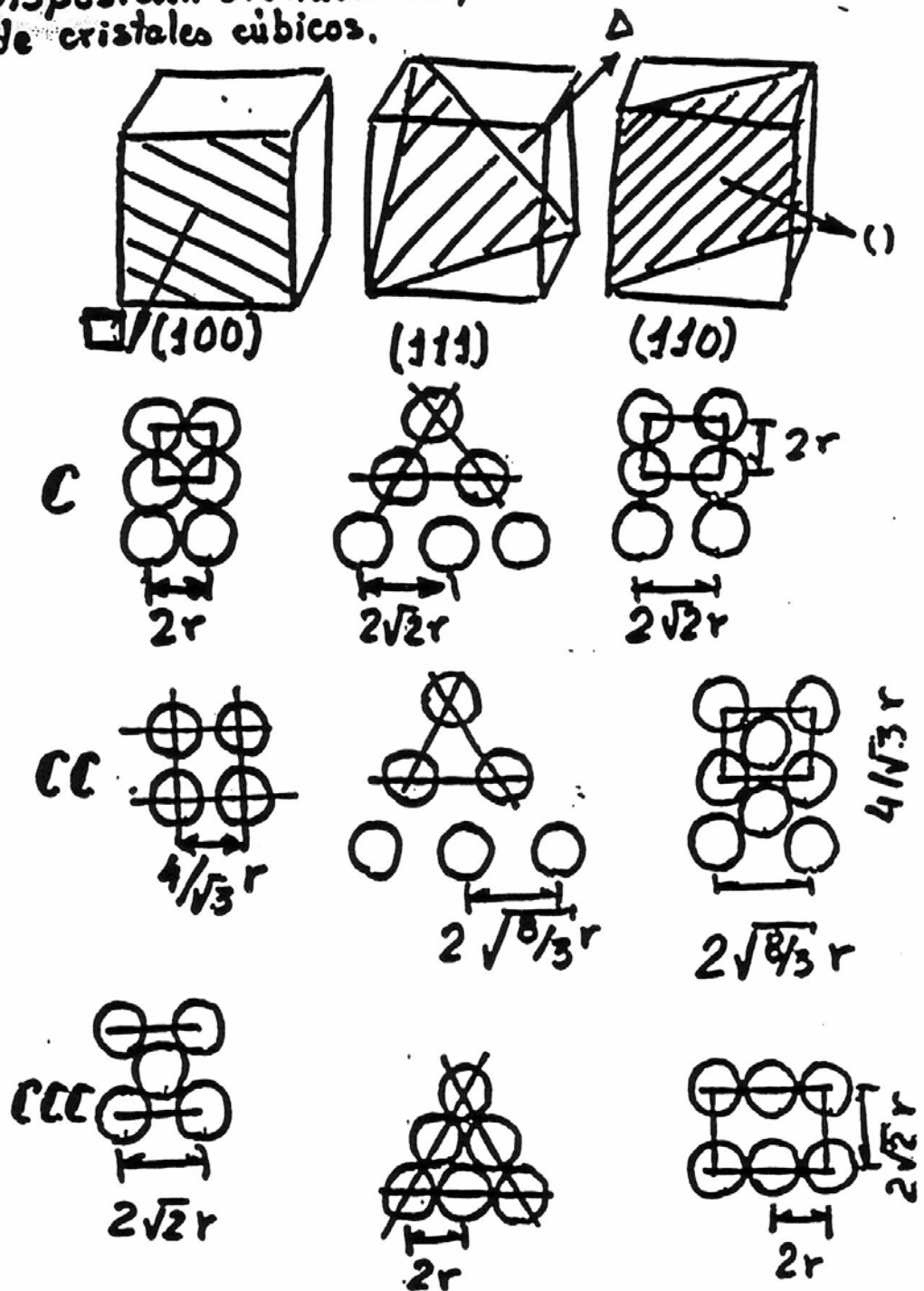


$$\rho_{CCC}^{2D} = \frac{4 \text{ átom}}{a^2} = \frac{4}{(2\sqrt{2})^2} \frac{\text{átoms}}{R^2}$$

$$= 0,250 \frac{\text{átoms}}{R^2}$$



Disposición atómica en planos de cristales cúbicos.



Los símbolos cuadrado, triángulo y paréntesis, se refieren a la simetría en rotación de los ejes indicados, atendiendo a las propiedades de un cubo. Así, el triángulo representa un eje de simetría de rotación de orden 3; esto es, una rotación en  $1/3$  de vuelta ( $120^\circ$ ) en torno a este eje es una operación de invariancia, por la simetría del cubo.