

INTRODUCCIÓN

Consideremos la tabla periódica (ver apuntes en U-cursos) donde aparecen las estructuras cristalinas de los elementos puros. De la observación de ella se concluye que la mayoría de (pero no todos) los metales puros preferentemente forman:

- Cristales CCC (CFC)
- Cristales CC (BC)
- Cristales HC

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

EJERCICIO

Considere cristales C (cúbico simple), CC y CCC, formados por átomos esféricos de radio R , en contacto.

Se pide:

- a) Indique elementos puros que presentan cada tipo de cristal.
- b) Exprese el parámetro a de la respectiva celda cúbica en función de R . (R es un dato que constituye la unidad de medida de longitud a emplear).
- c) Calcule la densidad 3D de cada cristal expresada como ρ^{3D} [átoms./ R^3].
- d) Identifique los planos cristalinos más densos de cada cristal. Después calcule la densidad ρ^{2D} [átoms./ R^2] del plano más denso de cada cristal.
- e) Calcule la densidad lineal ρ^{1D} [átoms./ R] de una dirección cristalina correspondiente a la arista del respectivo cristal.
- e) Calcule la densidad lineal ρ^{1D} [átoms./ R] de la dirección cristalina más densa del respectivo cristal.

Los resultados de este ejercicio se presentan en la tabla siguiente. (La tabla similar de la clase tenía un error en los pasos del cálculo de la densidad 3D del cristal CCC).

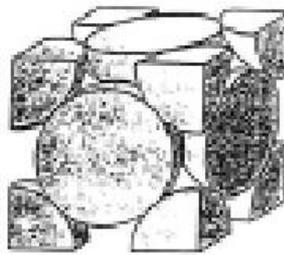
Importante: Para calcular densidades, normalmente es adecuado trabajar con una celda cristalina, ya sea en 1D, 2D o 3D. Para desarrollar ejercicios de este tipo hay que: visualizar bien la estructura cristalina que corresponda y los átomos que se tocan, y aplicar que el radio atómico vale R .

C	CC	CCC
No hay ejemplos de metales estructurales. Justifique por qué esta estructura no tiene sentido físico para los metales puros; vea las reglas físicas de las estructuras cristalinas)	Fe alfa, Cr, Na, etc.	Fe gamma, Cu, Ni, Pb Al,
$a = 2R$ (Una arista vale 2R)	$a = (4/\sqrt{3}) R$ (La diagonal del cubo vale 4R)	$a = (4/\sqrt{2}) R$ (La diagonal de una cara del cubo vale 4R)
$\rho^{3D} = (1 \text{ átomo})/(2R)^3$ $= 0,125 [\text{áts.}/R^3]$.	$\rho^{3D} = (2 \text{ átomos})/(4/\sqrt{3}R)^3$ $= 0,162[\text{áts.}/R^3]$.	$\rho^{3D} = (4 \text{ átomos})/(4/\sqrt{2}R)^3$ $= 0,176[\text{áts.}/R^3]$. Como era de esperar, este cristal es el de mayor densidad. ¿Por qué?
Los planos más densos son los de cara del cubo: planos {100}, de multiplicidad 3. $\rho^{2D} =$ $(1 \text{ átomo})/(2R)^2$ $= 0,25 [\text{áts.}/R^2]$	Los planos más densos son los perpendiculares a una diagonal de cara del cubo: planos {110}, de multiplicidad 6. $\rho^{2D} =$ $(2 \text{ átomos})/((4/\sqrt{3})^2(\sqrt{2})r^*R) =$ $0,265 [\text{áts.}/R^2]$	Los planos más densos son los perpendiculares a una diagonal del cubo: planos {111}, de multiplicidad 4. Conviene considerar una celda 2D que es un rombo con un ángulo de 60°. $\rho^{2D} =$ $(1 \text{ átomo})/((2R)(2R \cos 30)) =$ $0,289 [\text{áts.}/R^2]$ Estos son planos hexagonales compactos.
Arista del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/(2R)$ $= 0,5 [\text{áts.}/R]$	Arista del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/((4/\sqrt{3}) R)$ $= 0,433 [\text{áts.}/R]$	Arista del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/((4/\sqrt{2}) R)$ $= 0,355 [\text{áts.}/R]$
Dirección más densa del plano más denso: arista del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/(2R)$ $= 0,5[\text{áts.}/R]$, o sea, un átomo en un diámetro	Dirección más densa del plano más denso: diagonal del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/(2R)$ $= 0,5[\text{áts.}/R]$, o sea, un átomo en un diámetro	Dirección más densa del plano más denso: diagonal de una cara del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/(2R)$ $= 0,5[\text{áts.}/R]$, o sea, un átomo en un diámetro

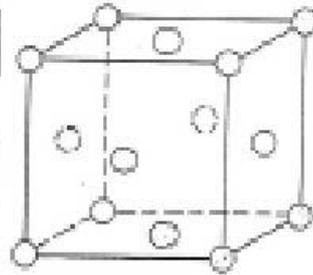
EJERCICIO PROPUESTO

Considere el centro de la arista de un cristal matriz CCC formado por átomos de radio R. En ese punto suponga que se ubica el centro de un pequeño átomo de impureza que es esférico con radio r. Calcule el radio de ese pequeño átomo que justo cabe en ese intersticio, sin deformar geoméricamente la red original CCC, $r = r_c$. (Se trata de una matriz donde hay una impureza disuelta intersticialmente).

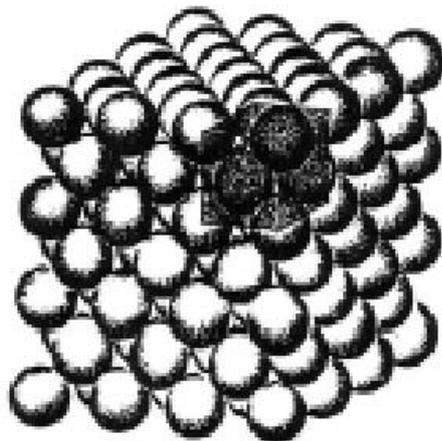
CRISTALES CCC Y CCC.



(a)



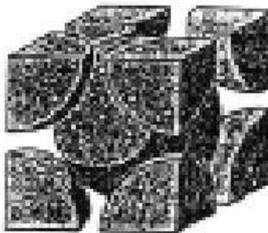
(b)



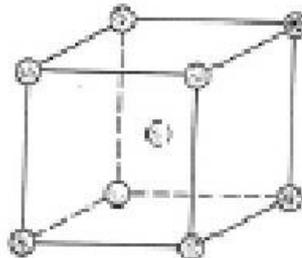
(c)

CRISTAL CÚBICO DE CARAS CENTRADAS.

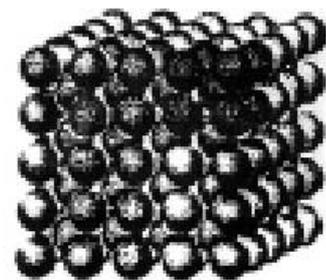
- A) UNA CELDA CRISTALINA, CON LOS ÁTOMOS REPRESENTADOS POR ESFERAS.
- B) UNA CELDA CRISTALINA, CON ESFERAS DE TAMAÑO REDUCIDO.
- C) UN AGRUPADO CRISTALINO DE MUCHOS ÁTOMOS (UN CRISTAL).



(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 AGRUPADO DE MUCHOS ÁTOMOS ORDENADOS (UN CRISTAL).