

Estructura cristalina diamante

Una de las formas alotrópicas del C es la del Diamante, cuya celda cristalina se muestra en la Fig. 1. Es esta celda la que, por traslación paralela, permite generar (idealmente) el cristal.

El C diamante es un material covalente. Además del Carbono, otros tres elementos puros (Si, Ge y Sn), también pueden presentar esta misma estructura. Más allá de los elementos puros, hay varios compuestos binarios que son variaciones de la estructura cristalina diamante. Entre ellos cabe mencionar la cristobalita alfa (covalente) y el ZnS (blenda, un cristal iónico).

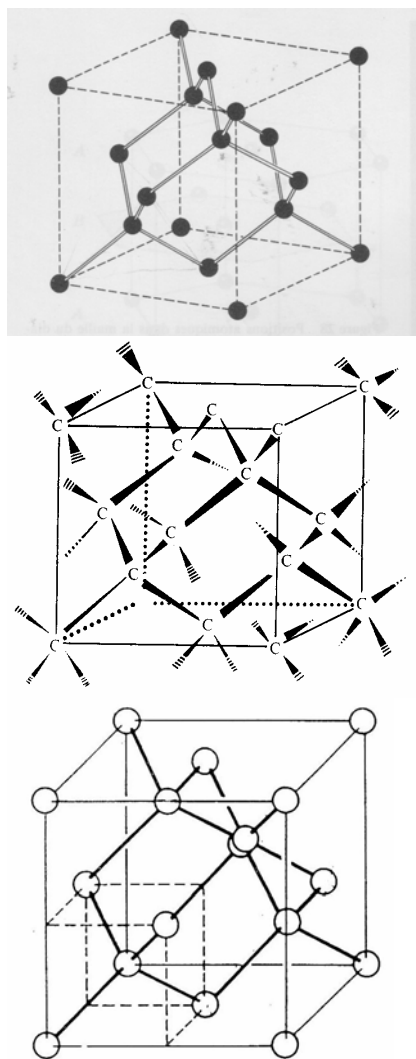


Fig. 1 Celda del Carbono Diamante, en distintas representaciones

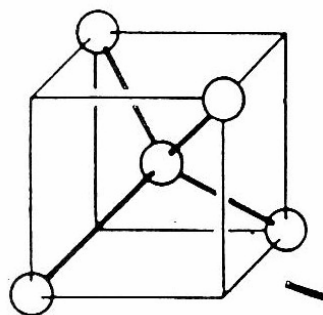


Fig. 2 Figura de un “cubo auxiliar” de los enlaces covalentes del C en el diamante. (Esto NO es una celda)

Para el caso del C diamante, establezcamos la relación entre enlace y estructura cristalina. La Fig. 2 muestra un “cubo auxiliar” ilustrando los 4 enlaces de un átomo cualquiera de C en el Diamante, debidos a la hibridización sp^3 . Nótese que en ese cubo auxiliar hay un átomo de C al centro, y también hay átomos de C en 4 vértices no contiguos (o alternados). El átomo central está en la mitad de las diagonales de este cubo auxiliar.

Para comprender el orden atómico en la celda cristalina del Diamante, considerémosla dividida en 8 cubos menores, ver Fig. 3. Nótese que de esos 8 cubos menores, 4 corresponden a los cubos auxiliares de la Fig. 2, en tanto que los otros 4 no tienen átomos en su centro, aunque sí en 4 esquinas no contiguas. Nótese que esta estructura es mucho menos densa que la de los cristales predichos por el modelo de esferas duras, para iones con simetría esférica. Aquí los cuatro enlaces dirigidos de cada carbono limitan la densidad.

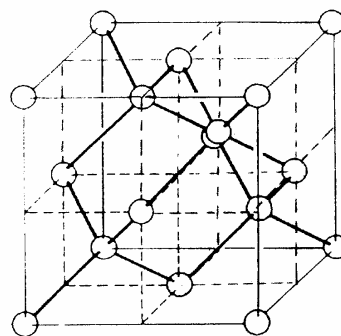


Fig. 3 Celda del C Diamante dividida en 8 cubos menores.

La Fig. 4 muestra los dos cubos menores de la parte baja de la Fig. 3, que corresponden a cubos auxiliares.

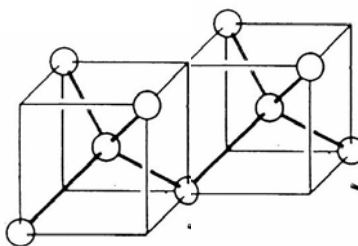


Fig. 4 Dos cubos auxiliares como los que van en la parte baja de la celda de la Fig. 3.

Al analizar la celda del Diamante, ver Figs. 1 y 3, se deduce que:

- la celda de red es CCC
- el motivo tiene dos átomos por nodo. Un nodo se ubica en el origen y el otro en un cuarto de la diagonal de la celda: $C(000)$ y $C(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$.

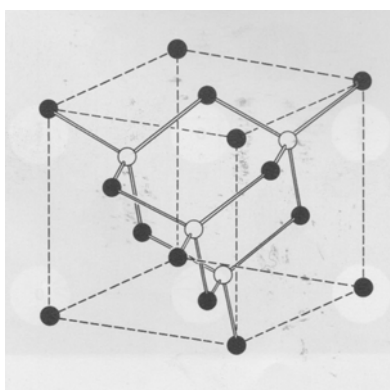


Fig. 5 Celda cristalina del ZnS.

La Fig. 5 ilustra la celda cristalina del ZnS (blenda), un cristal iónico. En este caso, se deduce que la red nodal es CCC, y el motivo $Zn(000)$ y $S(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$. (Por supuesto que el Zn se puede cambiar por el S, y viceversa).

Finalmente, la Fig. 6 muestra un cristal de cristobalita alfa, otro cristal covalente de fórmula estequiométrica SiO_2 . Nótese que esta estructura es similar a la del C Diamante, sólo que hay que reemplazar los átomos de C por átomos de Si y, entre dos átomos de Si (de valencia 4), siempre hay que poner un átomo de O (de valencia 2).

(Es como tomar cada C y reemplazarlo por un Si rodeado por 4 mitades de O; ello da SiO_2).

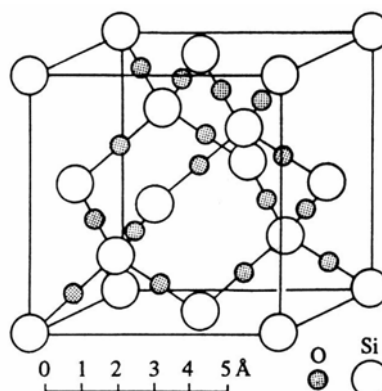


Fig. 6 Cristobalita alfa, una de las formas alotrópicas del SiO_2 .