

En el sistema cúbico hay tres tipos de celdas unidad: cúbica sencilla, cúbica centrada en el cuerpo y cúbica centrada en las caras. En el sistema ortorrómbico se encuentran los cuatro tipos. En el sistema tetragonal existen sólo dos: simple y centrado en el cuerpo. La celda unidad tetragonal centrada en las caras no existe pero se puede construir con cuatro celdas unidad tetragonales centradas en el cuerpo. El sistema monoclinico tiene celdas unidad simples y centradas en la base y en el sistema romboédrico, hexagonal y triclínico solamente existen celdas unidad simples.

### 3.3. Principales estructuras cristalinas metálicas

En este capítulo se discutirán en detalle las principales estructuras cristalinas de metales puros. En el Capítulo 10 se tratarán las principales estructuras cristalinas iónicas y covalentes que se presentan en los materiales cerámicos.

La mayoría de metales puros (aproximadamente un 90 por 100) cristalizan por solidificación en tres estructuras cristalinas compactas: *cúbica centrada en el cuerpo (BCC)* (Fig. 3.3a), *cúbica centrada en las caras (FCC)* (Fig. 3.3b) y *hexagonal compacta (HCP)* (Fig. 3.3c). La estructura HCP\* es una modificación densa de la estructura cristalina hexagonal simple mostrada en la Figura 3.2. La mayoría de los metales cristalizan en estas estructuras empaquetadas porque la energía disminuye a medida que los átomos se acercan y se enlazan entre sí. De este modo las estructuras más compactas corresponden a ordenamientos de niveles energéticos menores y más estables.

Debería recalcar el tamaño extremadamente pequeño de las celdas unidad de las estructuras cristalinas metálicas que se muestran en la Figura 3.3. La arista del cubo de la celda unidad del hierro cúbico centrado en el

cuerpo, por ejemplo, a temperatura ambiente es igual a  $0,287 \times 10^{-9}$  m, o 0,287 nanómetros (nm)<sup>3</sup>. Por tanto, si se alinearan celdas unidad de hierro puro, arista con arista, en 1 mm habría:

$$1 \text{ mm} \times \frac{1 \text{ celda unidad}}{0,287 \text{ nm} \times 10^{-6} \text{ mm/nm}} = 3,48 \times 10^6 \text{ celdas unidad!!}$$

Vamos a examinar con detalle la disposición de los átomos en las celdas unidad de las tres principales estructuras cristalinas metálicas. Como aproximación consideraremos a los átomos en estas estructuras como esferas rígidas. La distancia entre los átomos (distancia interatómica) en las estructuras cristalinas puede ser determinada experimentalmente por análisis de difracción de rayos X<sup>4</sup>. Por ejemplo, la distancia interatómica entre dos átomos de aluminio en un trozo de aluminio puro a 20 °C es de 0,2862 nm. El radio del átomo de aluminio en el aluminio metal se toma como la mitad de esta distancia interatómica, es decir, 0,143 nm. En las Tablas 3.2 a 3.4 se dan los valores de radios atómicos para algunos metales.

TABLA 3.2. Metales seleccionados que tienen estructura cristalina BCC a temperatura ambiente (20 °C) y su constante de red y radio atómico

Metal	Constante de red a (nm)	Radio atómico R* (nm)
Cromo	0,289	0,125
Hierro	0,287	0,124
Molibdeno	0,315	0,136
Potasio	0,533	0,231
Sodio	0,429	0,186
Tántalo	0,330	0,143
Volframio	0,316	0,137
Vanadio	0,304	0,132

\*Calculado a partir de la constante de red utilizando la Ec. (3.1)  $R = \sqrt{3}a/4$ .

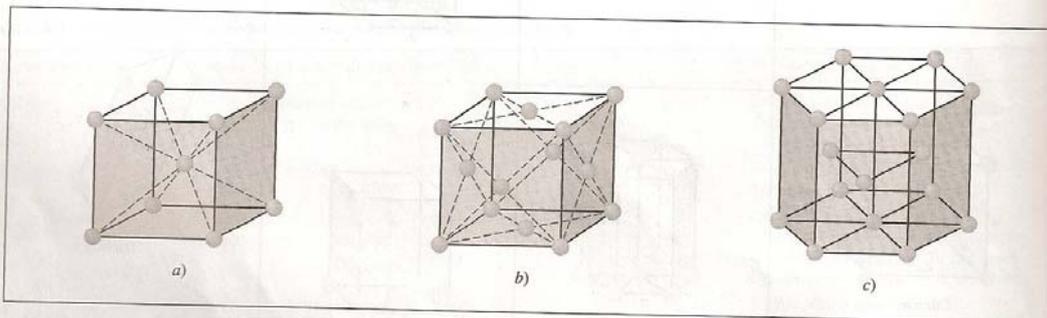


FIGURA 3.3. Principales celdas unidad en las estructuras cristalinas de metales: a) Cúbica centrada en el cuerpo; b) cúbica centrada en las caras, y c) hexagonal compacta.

\* N. del T. La estructura denominada HCP no corresponde al sistema hexagonal, puesto que éste sólo admite celda simple. En realidad equivale a una celda romboédrica simple de más difícil representación.

<sup>3</sup> 1 nanómetro =  $10^{-9}$  metros.

<sup>4</sup> Algunos de los principios del análisis de difracción de rayos X se estudiarán en la Sec. 3.11.

**TABLA 3.3.** Metales seleccionados que tienen estructura cristalina FCC a temperatura ambiente (20 °C) y su constante de red y radio atómico

Metal	Constante de red $a$ (nm)	Radio atómico $R^*$ (nm)
Aluminio	0,405	0,143
Cobre	0,3615	0,128
Oro	0,408	0,144
Plomo	0,495	0,175
Níquel	0,352	0,125
Platino	0,393	0,139
Plata	0,409	0,144

\* Calculado a partir de la constante de red utilizando la Ec. (3.3),  $R = \sqrt{2} a/4$ .

**3.3.1. Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (BCC)**

Consideremos en primer lugar la situación de los átomos en la celda unidad para la estructura cristalina BCC mostrada en la Figura 3.4a. En esta celda unidad las esferas representan los puntos donde están colocados los átomos e indican claramente sus posiciones relativas. Si representamos los átomos en esta celda como esferas rígidas, la representación de la celda unidad corresponde a la mostrada en la Figura 3.4b. En esta celda unidad vemos que el átomo central está rodeado por ocho veci-

nos más próximos y se dice que presentan un número de coordinación de 8.

Si aislamos una esfera rígida única de la celda unidad, obtenemos el modelo mostrado en la Figura 3.4c. Cada una de estas celdas tiene el equivalente a dos átomos por celda unidad. Un átomo entero se encuentra en el centro de la celda unidad y un octavo de esfera se encuentra en cada vértice de la celda, lo que equivale a otro átomo. Así, hay un total de  $1$  (en el centro) +  $8 \times 1/8$  (en los vértices) =  $2$  átomos por celda unidad. En la celda unidad BCC los átomos de cada vértice contactan entre sí a través de la diagonal del cubo, como se muestra en la Figura 3.5, por lo que la relación entre la arista del cubo  $a$  y el radio atómico  $R$  es

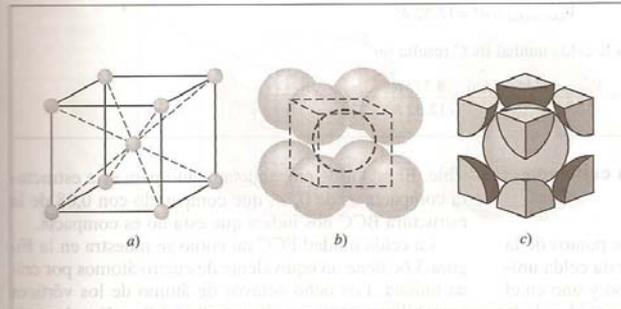
$$\sqrt{3}a = 4R \quad \text{o} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (3.1)$$

Si consideramos esféricos los átomos en la celda unidad BCC, se puede calcular el factor de empaquetamiento atómico (APF) utilizando la ecuación

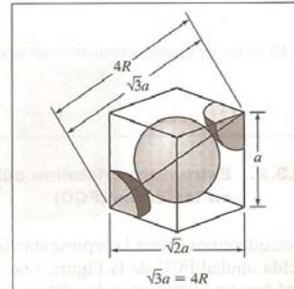
$$\text{Factor de empaquetamiento atómico (APF)} = \frac{\text{Volumen de átomos en la celda unidad}}{\text{Volumen de la celda unidad}} \quad (3.2)$$

**TABLA 3.4.** Metales seleccionados que tienen estructura cristalina HCP a temperatura ambiente (20 °C) y su constante de red, radio atómico y relación  $c/a$

Metal	Constante de red (nm)		Radio atómico $R$ (nm)	Relación $(c/a)$	% de desviación de la relación ideal
	$a$	$c$			
Cadmio	0,2973	0,5618	0,149	1,890	+15,7
Cinc	0,2665	0,4947	0,133	1,856	+13,6
HCP ideal				1,633	0
Magnesio	0,3209	0,5209	0,160	1,623	-0,66
Cobalto	0,2507	0,4069	0,125	1,623	-0,66
Circonio	0,3231	0,5148	0,160	1,593	-2,45
Titanio	0,2950	0,4683	0,147	1,587	-2,81
Berilio	0,2286	0,3584	0,113	1,568	-3,98



**FIGURA 3.4.** Celdas unidad BCC: a) De posiciones atómicas; b) de esferas rígidas, y c) aislada.



**FIGURA 3.5.** Celda unidad BCC mostrando la relación entre la constante de red  $a$  y el radio atómico  $R$ .

**Problema ejemplo 3.1**

El hierro a 20 °C es BCC con átomos de radio atómico de 0,124 nm. Calcule la constante de celda  $a$  para la arista del cubo de la celda unidad del hierro.

**Solución:** En la Figura 3.5 se ve que los átomos de hierro en la celda unidad BCC se tocan a través de la diagonal del cubo. Así, si  $a$  es la arista del cubo, tenemos

$$\sqrt{3}a = 4R \quad (3.1)$$

donde  $R$  es el radio del átomo de hierro. Entonces

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} = \frac{4(0,124 \text{ nm})}{\sqrt{3}} = 0,2864 \text{ nm} \blacktriangleleft$$

Utilizando esta ecuación, el APF para la celda unidad BCC (Fig. 3.3a) resulta ser del 68 por 100 (véase Problema ejemplo 3.2). Esto es, el 68 por 100 del volumen de la celda unidad BCC está ocupado por átomos, quedando un 32 por 100 de espacio vacío. La estructura cristalina BCC *no* es una estructura com-

pacta, puesto que los átomos podrían situarse aún más juntos. Muchos metales como hierro, cromo, volfranio, molibdeno y vanadio tienen la estructura BCC a temperatura ambiente. La Tabla 3.2 muestra las constantes de red y el radio atómico para varios metales BCC.

**Problema ejemplo 3.2**

Calcule el factor de empaquetamiento atómico para la celda unidad BCC, considerando los átomos como esferas rígidas.

**Solución:**

$$\text{APF} = \frac{\text{Volumen de los átomos en la celda unidad BCC}}{\text{Volumen de la celda unidad BCC}} \quad (3.2)$$

Puesto que tenemos dos átomos por celda unidad BCC, el volumen de los átomos de radio  $R$  en una celda unidad es

$$V_{\text{átomos}} = (2) \left( \frac{4}{3} \pi R^3 \right) = 8,373 R^3$$

El volumen de la celda unidad es:

$$V_{\text{celda unidad}} = a^3$$

Donde  $a$  es la constante de red. La relación entre  $a$  y  $R$  se obtiene a partir de la Figura 3.5, que muestra cómo los átomos de la celda unidad contactan a través de la diagonal del cubo. Así,

$$\sqrt{3}a = 4R \quad \text{o} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (3.1)$$

Así,

$$V_{\text{celda unidad}} = a^3 = 12,32 R^3$$

El factor de empaquetamiento atómico para la celda unidad BCC resulta ser

$$\text{APF} = \frac{V_{\text{átomos/celda unidad}}}{V_{\text{celda unidad}}} = \frac{8,373 R^3}{12,32 R^3} = 0,68 \blacktriangleleft$$

**3.3.2. Estructura cristalina cúbica centrada en las caras (FCC)**

Consideremos ahora la representación por puntos de la celda unidad FCC de la Figura 3.6a. En esta celda unidad hay un átomo en cada vértice del cubo y uno en el centro de cada cara. El modelo de esferas rígidas de la Figura 3.6b indica que los átomos en la estructura cristalina FCC están empaquetados tan juntos como es po-

sible. El factor de empaquetamiento para esta estructura compacta es de 0,74, que comparado con 0,68 de la estructura BCC nos indica que ésta no es compacta.

La celda unidad FCC tal como se muestra en la Figura 3.6c tiene un equivalente de cuatro átomos por celda unidad. Los ocho octavos de átomo de los vértices contabilizan como un átomo ( $8 \times 1/8 = 1$ ) y las seis mitades de las caras del cubo contribuyen con otros tres átomos, dando un total de cuatro átomos por celda uni-

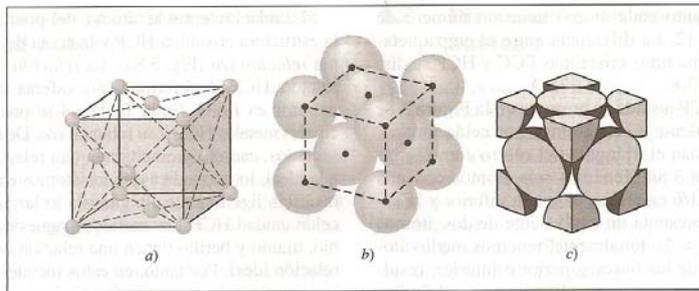


FIGURA 3.6. Celda unidad FCC: a) De posiciones atómicas; b) de esferas rígidas, y c) aislada.

dad. En la celda FCC los átomos contactan en la diagonal de la cara del cubo como se indica en la Figura 3.7, por lo que la relación entre la arista del cubo  $a$  y el radio atómico  $R$  es:

$$\sqrt{2}a = 4R \quad \text{o} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{2}} \quad (3.3)$$

El APF para la estructura cristalina FCC es de 0,74, que es mayor que el factor 0,68 de la estructura BCC. Un APF de 0,74 es el máximo de compacto posible para átomos esféricos. Muchos metales como el aluminio, cobre, plomo, níquel y hierro a temperatura elevada (de 912 a 1.394 °C) cristalizan en la estructura FCC. La Tabla 3.3 presenta las constantes de red y los radios atómicos para metales FCC seleccionados.

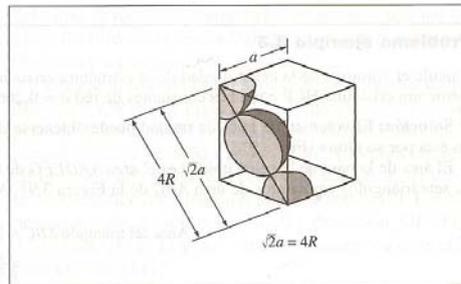


FIGURA 3.7. Celda unidad FCC mostrando la relación entre la constante de red  $a$  y el radio atómico  $R$ . Como los átomos se tocan a lo largo de la diagonal de la cara,  $\sqrt{2}a = 4R$ .

### 3.3.3. Estructura cristalina hexagonal compacta (HCP)

La tercera estructura cristalina más común en metales es la estructura HCP presentada en la Figura 3.8. Los metales no cristalizan en la estructura cristalina hexagonal sencilla mostrada en la Figura 3.2 porque el APF es demasiado bajo. Los átomos pueden alcanzar una menor

energía y una condición más estable formando la estructura HCP de la Figura 3.8. El APF de la estructura cristalina HCP es de 0,74, el mismo que el de la estructura FCC, ya que en ambas estructuras los átomos están empaquetados lo más juntos posible. En ambas estructuras HCP y FCC cada átomo está rodeado de 12

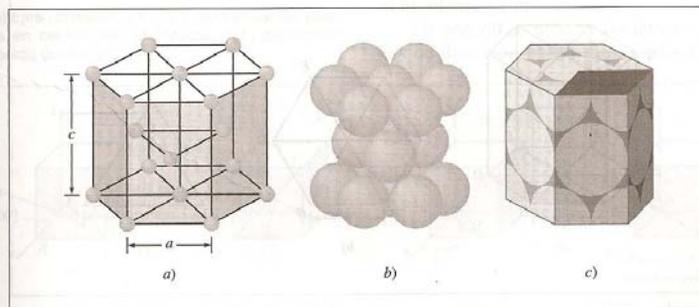


FIGURA 3.8. Celda unidad HCP: a) De posiciones atómicas; b) de esferas rígidas, y c) celda unidad aislada.

átomos, y por tanto cada átomo tiene un número de coordinación de 12. La diferencia entre el empaquetamiento en las estructuras cristalinas FCC y HCP se discutirá en la Sec. 3.8.

Una celda HCP aislada se presenta en la Figura 3.8c y tiene el equivalente a seis átomos por celda unidad. Tres átomos forman el triángulo del centro como se indica en la Figura 3.8a. Tenemos seis átomos con una participación de 1/6 en ambas bases, la inferior y la superior, lo que representa un equivalente de dos átomos más ( $2 \times 6 \times 1/6 = 2$ ). Finalmente, tenemos medio átomo en el centro de las bases superior e inferior, resultando el equivalente a un átomo. El número total de átomos en la estructura cristalina de la celda unidad HCP es de  $3 + 2 + 1 = 6$ .

La relación entre la altura  $c$  del prisma hexagonal de la estructura cristalina HCP y la arista de la base  $a$  se llama *relación  $c/a$*  (Fig. 3.8a). La *relación  $c/a$*  para una estructura HCP ideal formada por esferas empaquetadas al máximo es 1,633. En la Tabla 3.4 se presentan los principales metales HCP y su relación  $c/a$ . De los metales presentados, cadmio y cinc tienen una relación  $c/a$  superior a la ideal, lo que indica que los átomos en estas estructuras están ligeramente alargados a lo largo del eje  $c$  de la celda unidad HCP. Los metales magnesio, cobalto, circonio, titanio y berilio tienen una relación  $c/a$  menor que la relación ideal. Por tanto, en estos metales los átomos están ligeramente comprimidos en la dirección del eje  $c$ . Así, los metales recogidos en la Tabla 3.4 presentan una cierta desviación del modelo ideal de esferas rígidas.

**Problema ejemplo 3.3**

Calcule el volumen de la celda unidad de la estructura cristalina del cinc utilizando los datos siguientes: el cinc puro tiene una estructura cristalina HCP con unas constantes de red  $a = 0,2665 \text{ nm}$  y  $c = 0,4947 \text{ nm}$ .

**Solución:** El volumen de la celda unidad puede obtenerse determinando el área de la base de la celda unidad y multiplicando ésta por su altura (Fig. 3.9).

El área de la base de la celda unidad es el área  $ABDEFG$  de la Figura 3.9a y b. Esta área total consiste en la suma de las áreas de seis triángulos equiláteros de área  $ABC$  de la Figura 3.9c.

$$\begin{aligned} \text{Área del triángulo } ABC &= \frac{1}{2}(\text{base})(\text{altura}) \\ &= \frac{1}{2}(a)(a \text{ sen } 60^\circ) = \frac{1}{2}a^2 \text{ sen } 60^\circ \end{aligned}$$

A partir de la Fig.3.9b

$$\begin{aligned} \text{El área total de la base} &= (6) \left( \frac{1}{2} a^2 \text{ sen } 60^\circ \right) \\ &= 3a^2 \text{ sen } 60^\circ \end{aligned}$$

A partir de la Fig. 3.9a

$$\begin{aligned} \text{Volumen de la celda unidad HCP del cinc} &= (3 a^2 \text{ sen } 60^\circ)(c) \\ &= (3)(0,2665 \text{ nm})^2(0,8660)(0,4947 \text{ nm}) \\ &= 0,0913 \text{ nm}^3 \quad \blacktriangleleft \end{aligned}$$

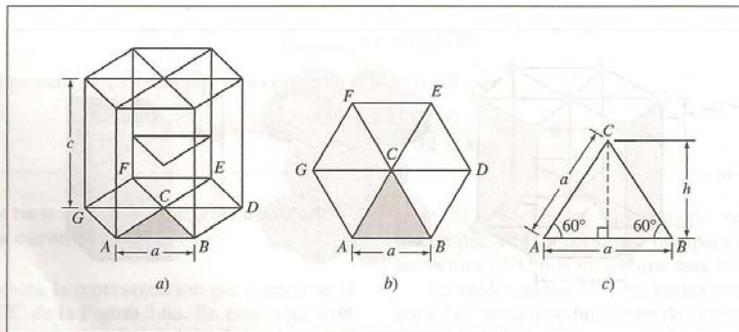


FIGURA 3.9. Diagramas para calcular el volumen de la celda unidad HCP. a) Celda unidad HCP; b) base de la celda unidad HCP, y c) triángulo ABC separado de la base de la celda unidad.

el infinito. Así,  $a_1 = \infty$ ,  $a_2 = \infty$  y  $a_3 = \infty$ . El eje  $c$ , sin embargo, es unitario, ya que el plano basal superior intersecciona al eje  $c$  a una distancia unidad. Tomando los recíprocos de estas intersecciones tenemos los índices de Miller-Bravais para el plano basal HCP. Así,  $h = 0$ ,  $k = 0$ ,  $i = 0$  y  $l = 1$ . El plano basal HCP es, por tanto, cero-cero-cero-uno o el plano (0001).

**Planos del prisma.** Utilizando el mismo método, las intersecciones del plano frontal del prisma (ABCD) de la Figura 3.17b son  $a_1 = +1$ ,  $a_2 = \infty$ ,  $a_3 = -1$  y  $c = \infty$ . Tomando los recíprocos de estas intersecciones tenemos  $h = 1$ ,  $k = 0$ ,  $i = -1$  y  $l = 0$ , o el plano (10 $\bar{1}$ 0). Análogamente, el plano del prisma ABEF de la Figura 3.17b tiene los índices (1 $\bar{1}$ 00) y el plano DCGH los índices (01 $\bar{1}$ 0). Todos los planos del prisma HCP pueden ser identificados colectivamente como la familia de planos {10 $\bar{1}$ 0}.

A veces, los planos HCP son identificados solamente por tres índices (hkl)\*, puesto que  $h + k = -i$ . Sin embargo, los índices (hkil) se utilizan habitualmente, puesto que ponen de manifiesto el carácter hexagonal de la celda unidad HCP.

**3.7.2. Índices de dirección en las celdas unidades HCP<sup>6</sup>**

En las celdas unidad HCP las direcciones se indican habitualmente por cuatro índices  $u, v, t$  y  $w$  encerrados entre corchetes como [uv $\bar{t}w$ ]. Los índices  $u, v$  y  $t$  son los vectores de la red en las direcciones  $a_1, a_2$  y  $a_3$ , respec-

\* N. del T. Dado que la parte anterior de  $a_3$  se considera negativa para mantener la alternancia de signos y que el eje  $a_3$  es la bisectriz de  $a_1$  y  $a_2$ , siempre se cumplirá que  $-i = h + k$ .

<sup>6</sup> El tema de los índices de dirección para las celdas unidad hexagonales no se presenta normalmente en un curso de introducción a los materiales, pero se incluye aquí para estudiantes avanzados.

tivamente (Fig. 3.16) y el índice  $w$  es un vector reticular en la dirección  $c$ . Para mantener la uniformidad entre las direcciones y los planos HCP se ha acordado que para las direcciones  $u + v = -t$ .

Ahora se pueden determinar los índices hexagonales de Miller-Bravais para las direcciones  $a_1, a_2$  y  $a_3$  que son los ejes basales positivos de la celda unidad hexagonal. Los índices de la dirección  $a_1$  se dan en la Figura 3.18a, los índices de la dirección  $a_2$  en la Figura 3.18b y los índices de la dirección  $a_3$  en la Figura 3.18c. En la Figura 3.18d se indican los índices para la dirección  $c$  y también para la dirección  $a_3$ . La Figura 3.18e resume las direcciones positivas y negativas en el plano basal superior de la estructura cristalina hexagonal sencilla.

**3.8. Comparación de estructuras cristalinas FCC, HCP y BCC**

**3.8.1. Estructuras cristalinas cúbica centrada en las caras y hexagonal compacta**

Como se ha indicado anteriormente, las estructuras cristalinas HCP y FCC son estructuras compactas. Esto es, sus átomos, que se consideran aproximadamente como «esferas», están empaquetados lo más juntos posible de forma que se alcanza un factor de empaquetamiento de 0,74<sup>7</sup>. El plano (111) en la estructura cristalina FCC presentado en la Figura 3.19a tiene un orden de empaquetamiento idéntico al de los planos (0001) de la estructura cristalina HCP presentado en la Figura 3.19b. Sin

<sup>7</sup> Como se indicó en la Sec. 3.3, los átomos en la estructura HCP se desvían varios grados de la situación ideal. En algunos metales HCP los átomos están alargados a lo largo del eje  $c$  y en otros casos están comprimidos a lo largo del eje  $c$  (véase Tabla 3.4).

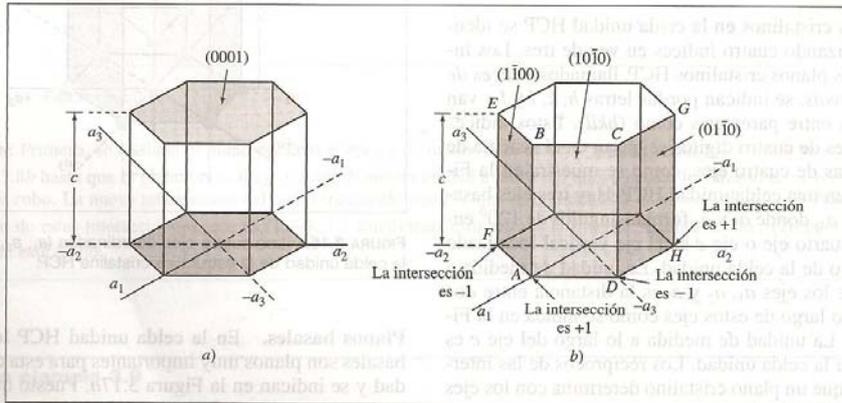


FIGURA 3.17. Índices de Miller-Bravais de los planos cristalinos hexagonales: a) planos basales, y b) planos del prisma.

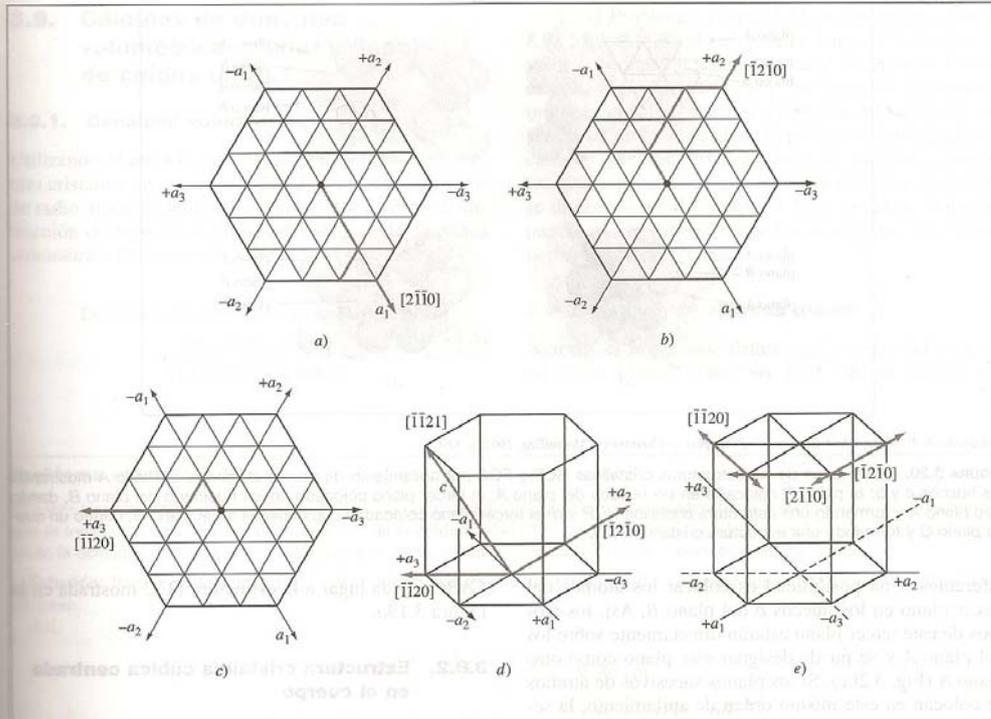
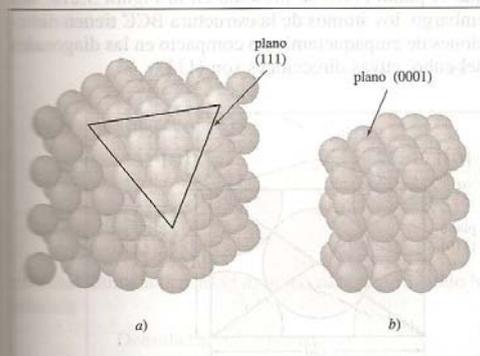


FIGURA 3.18. Índices de Miller-Bravais de dirección en la estructura cristalina hexagonal para las direcciones principales: a) dirección del eje  $+a_1$  en el plano basal; b) dirección del eje  $+a_2$  en el plano basal; c) dirección del eje  $+a_3$  en el plano basal; d) dirección del eje  $+a_3$  incorporando el eje  $c$ , y e) las direcciones de Miller-Bravais positivas y negativas están indicadas en la estructura cristalina hexagonal sencilla en el plano basal superior.

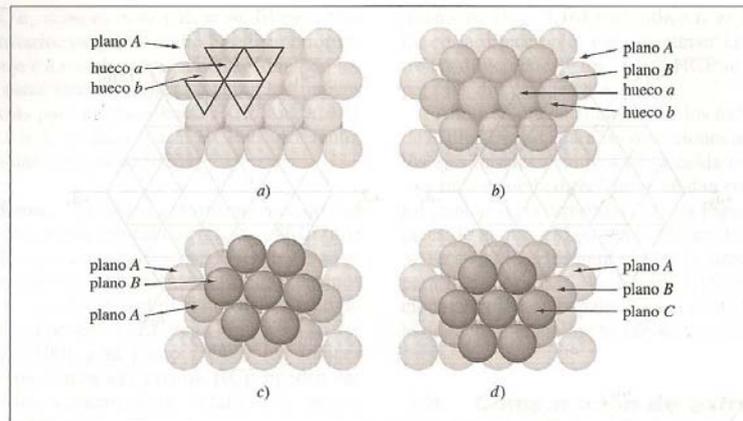


Según W. G. Moffatt, G. W. Pearsall y J. Wulff, «The Structure and Properties of Materials», vol. I, «Structure», Wiley, 1964, p. 51.)

FIGURA 3.19. Comparación de la: a) estructura cristalina FCC mostrando los planos de empaquetamiento compacto (111), b) estructura cristalina HCP mostrando los planos de empaquetamiento compacto (0001).

embargo, las estructuras cristalinas tridimensionales FCC y HCP no son idénticas, puesto que hay una diferencia en el orden de apilamiento de los planos atómicos, que puede describirse mejor considerando el apilamiento de esferas rígidas representando átomos. Como analogía podemos imaginar el apilamiento de planos de canicas de igual tamaño, unos sobre otros, minimizando el espacio entre canicas.

Consideremos primero un plano de empaquetamiento compacto de átomos designado por plano A, como se muestra en la Figura 3.20a. Obsérvese que hay dos tipos diferentes de espacios vacíos o huecos entre los átomos. Los huecos señalados en la parte superior de la página se designan por huecos *a* y los que están en la parte inferior de la página, huecos *b*. Un segundo plano de átomos puede situarse sobre los huecos *a* o *b* y se consigue la misma estructura tridimensional. Situemos el plano B sobre los huecos *a*, como se muestra en la Figura 3.20b. Ahora, si un tercer plano de átomos se coloca sobre el plano B para formar una estructura compacta, es posible formar dos estructuras compactas



(Adaptado de P. Ander y A. J. Sonnessa, «Principles of Chemistry», Macmillan, 1965, p. 661.)

**FIGURA 3.20.** Formación de las estructuras cristalinas HCP y FCC por apilamiento de planos atómicos. a) Plano A mostrando los huecos a y b; b) plano B colocado en los huecos del plano A; c) tercer plano colocado en los huecos b del plano B, dando otro plano A y formando una estructura cristalina HCP, y d) el tercer plano colocado en los huecos a del plano B, dando un nuevo plano C y formando una estructura cristalina FCC.

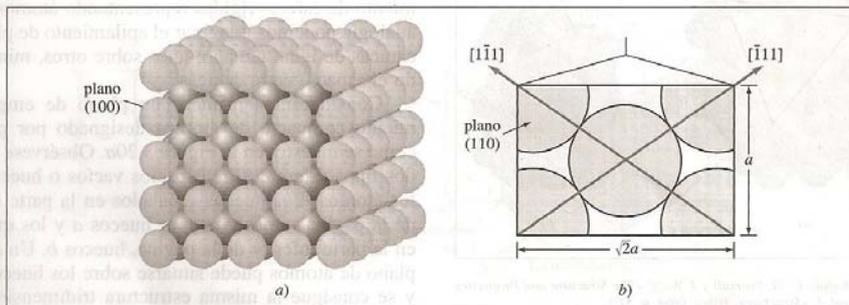
diferentes. Una posibilidad es colocar los átomos del tercer plano en los huecos *b* del plano B. Así, los átomos de este tercer plano estarán directamente sobre los del plano A y se puede designar este plano como otro plano A (Fig. 3.20c). Si los planos sucesivos de átomos se colocan en este mismo orden de apilamiento, la secuencia de apilamiento de la estructura tridimensional obtenida puede ser designada por *ABABAB...* Así, una secuencia como esta conduce a una estructura cristalina HCP (Fig. 3.19b).

La segunda posibilidad de formar una estructura compacta es colocar el tercer plano en los huecos *a* del plano B (Fig. 3.20d). Este tercer plano se designa por *C*, ya que los átomos no están directamente sobre los del plano B o los del plano A. La secuencia de apilamiento en esta estructura compacta se designa por *ABCAB-*

*ABC...* y da lugar a la estructura FCC mostrada en la Figura 3.19a.

**3.8.2. Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo**

La estructura BCC no es una estructura de empaquetamiento compacto y por tanto no presenta planos de empaquetamiento compacto como los planos {111} en la estructura FCC y los planos {0001} en la estructura HCP. Los planos más densamente empaquetados en la estructura BCC son la familia de planos {110}, de los que el plano (110) se presenta en la Figura 3.21b. Sin embargo, los átomos de la estructura BCC tienen direcciones de empaquetamiento compacto en las diagonales del cubo, cuyas direcciones son {111}.



[a] Según W. G. Moffatt, G. W. Pearsall y J. Wulff, «The Structure and Properties of Materials», vol. I: «Structure», Wiley, 1964, p. 51.]

**FIGURA 3.21.** Estructura cristalina BCC mostrando: a) el plano (100), y b) una sección del plano (110). Obsérvese que no se trata de una estructura compacta pero que las diagonales son direcciones compactas.

### 3.9. Cálculos de densidad volumétrica, planar y lineal de celdas unidad

#### 3.9.1. Densidad volumétrica

Utilizando el modelo de esferas rígidas para la estructura cristalina de la celda unidad de un metal y un valor de radio atómico del metal obtenido por análisis de difracción de rayos X se obtiene un valor de la densidad volumétrica de un metal, utilizando la ecuación

$$\text{Densidad volumétrica de un metal} = \rho_v = \frac{\text{Masa/celda unidad}}{\text{Volumen/celda unidad}} \quad (3.5)$$

En el Problema ejemplo 3.11 se obtiene un valor de  $8,98 \text{ Mg/m}^3$  ( $8,98 \text{ g/cm}^3$ ) para la densidad del cobre. El valor experimental tabulado para la densidad del cobre es  $8,96 \text{ Mg/m}^3$  ( $8,96 \text{ g/cm}^3$ ). La densidad ligeramente inferior del valor experimental puede atribuirse a la ausencia de átomos en algunas posiciones atómicas (vacantes), defectos de línea y uniones defectuosas entre los granos (límites de grano). Estos defectos cristalinos se discutirán en el Capítulo 4. Otra causa de la discrepancia puede deberse a que los átomos no son esferas perfectas.

#### 3.9.2. Densidad atómica planar

A veces es importante determinar la densidad atómica en varios planos cristalinos. Para ello se calcula una

#### Problema ejemplo 3.11

El cobre tiene una estructura cristalina FCC y un radio atómico de  $0,1278 \text{ nm}$ . Considerando los átomos como esferas rígidas que se tocan entre sí a lo largo de la diagonal de la celda unidad FCC como se muestra en la Figura 3.7, calcule el valor teórico de la densidad del cobre en megagramos por metro cúbico. La masa atómica del cobre es de  $63,54 \text{ g/mol}$ .

**Solución:** Para la celda unidad FCC,  $\sqrt{2}a = 4R$ , donde  $a$  es la constante de red en la celda unidad y  $R$  es el radio del átomo de cobre.

Así,

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = \frac{(4)(0,1278 \text{ nm})}{\sqrt{2}} = 0,361 \text{ nm} \quad (3.5)$$

$$\text{La densidad volumétrica del cobre} = \rho_v = \frac{\text{Masa/celda unidad}}{\text{Volumen/celda unidad}}$$

En la celda unidad FCC hay cuatro átomos/celda unidad. Cada átomo de cobre tiene una masa de  $(63,54 \text{ g/mol}) / (6,02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})$ . Así, la masa  $m$  de los átomos de cobre en la celda unidad es

$$m = \frac{(4 \text{ átomos})(63,54 \text{ g/mol})}{6,02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol}} \left( \frac{10^{-6} \text{ Mg}}{\text{g}} \right) = 4,22 \times 10^{-28} \text{ Mg}$$

El volumen  $V$  de la celda unidad del Cu es

$$V = a^3 = \left( 0,361 \text{ nm} \times \frac{10^{-9} \text{ m}}{\text{nm}} \right)^3 = 4,70 \times 10^{-29} \text{ m}^3$$

Así la densidad del cobre es

$$\rho_v = \frac{m}{V} = \frac{4,22 \times 10^{-28} \text{ Mg}}{4,70 \times 10^{-29} \text{ m}^3} = 8,98 \text{ Mg/m}^3 \quad (8,98 \text{ g/cm}^3) \blacktriangleleft$$

llamada *densidad atómica planar* utilizando la relación

$$\text{Densidad atómica planar} = \rho_p = \frac{\text{N.º equivalente de átomos cortados por el área seleccionada}}{\text{Área seleccionada}} \quad (3.6)$$

Por convenio se utiliza en estos cálculos el área de un plano que corta a una celda unidad, como muestra

por ejemplo la Figura 3.22 para el plano (110) en una celda unidad BCC. Para que el área de un átomo se contabilice en este cálculo el plano de interés debe cortar el centro del átomo. En el Problema ejemplo 3.12 el plano (110) corta el centro de cinco átomos, pero sólo se contabiliza el equivalente a dos átomos, puesto que sólo una cuarta parte de cada uno de los átomos de los cuatro vértices está incluida en el área de la celda unidad.

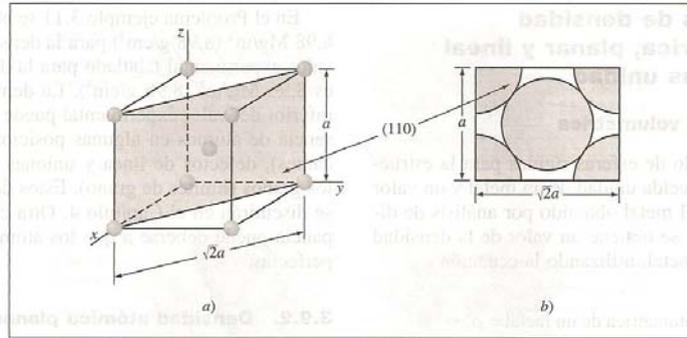


Figura 3.22. a) Celda unidad de posiciones atómicas BCC mostrando un plano (110) sombreado, y b) área de los átomos en la celda unidad BCC cortada por el plano (110).

**Problema ejemplo 3.12**

Calcule la densidad atómica planar  $\rho_p$  en el plano (110) de la red BCC del hierro  $\alpha$  en átomos por milímetro cuadrado. La constante de red del hierro  $\alpha$  es 0,287 nm.

**Solución:**

$$\rho_p = \frac{\text{N.º equivalente de átomos cuyos centros están cortados por el área seleccionada}}{\text{Área seleccionada}} \quad (3.6)$$

El número equivalente de átomos cortado por el plano (110) en términos de área dentro de la celda unidad BCC se muestra en la Figura 3.22 y es:

$$1 \text{ átomo en el centro} + 4 \times \frac{1}{4} \text{ de átomo en los cuatro vértices del plano} = 2 \text{ átomos}$$

El área interceptada por el plano (110) dentro de la celda unidad (área seleccionada) es

$$(\sqrt{2}a)(a) = \sqrt{2}a^2$$

Así la densidad atómica planar es

$$\begin{aligned} \rho_p &= \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}(0,287 \text{ nm})^2} = \frac{17,2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} \\ &= \frac{17,2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} \times \frac{10^{12} \text{ nm}^2}{\text{mm}^2} \\ &= 1,72 \times 10^{13} \text{ átomos/mm}^2 \quad \blacktriangleleft \end{aligned}$$

**3.9.3. Densidad atómica lineal**

Algunas veces es importante determinar la densidad atómica de varias direcciones en las estructuras cristalinas. Para ello se calcula una magnitud llamada *densidad atómica lineal* a partir de la relación:

$$\text{Densidad atómica lineal} = \rho_l = \frac{\text{N.º de diámetros atómicos cortados por la longitud seleccionada de la línea en la dirección de interés}}{\text{Longitud seleccionada de la línea}} \quad (3.7)$$

El Problema ejemplo 3.13 muestra cómo puede calcularse la densidad atómica lineal en la dirección [110] de la red cristalina del cobre puro.

**3.10. Polimorfismo o alotropía**

Muchos elementos y compuestos existen en más de una forma cristalina en diferentes condiciones de temperatura y presión. Este fenómeno se llama *polimorfismo* o *alotropía*. Muchos metales de importancia industrial como el hierro, titanio y cobalto sufren transformaciones alotrópicas a temperaturas elevadas a presión atmosférica. La Tabla 3.5 recoge algunos metales seleccionados que presentan transformaciones alotrópicas y los cambios de estructura que tienen lugar.

**Problema ejemplo 3.13**

Calcule la densidad atómica lineal  $\rho_l$  en la dirección [110] de la red cristalina de cobre en átomos por milímetro. El cobre es FCC y tiene una constante de red de 0,361 nm.

**Solución:** Los átomos cuyos centros corta la dirección [110] se muestran en la Figura 3.23. Se escoge como longitud de la línea la diagonal de la cara de la celda FCC, que es  $a\sqrt{2}$ . El número de diámetros atómicos cortados por esta línea es  $\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} = 2$  átomos. Utilizando la Ec. 3.7 la densidad atómica lineal es

$$\begin{aligned} \rho_l &= \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}a} = \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}(0,361 \text{ nm})} = \frac{3,92 \text{ átomos}}{\text{nm}} \\ &= \frac{3,92 \text{ átomos}}{\text{nm}} \times \frac{10^6 \text{ nm}}{\text{mm}} \\ &= 3,92 \times 10^6 \text{ átomos/mm} \blacktriangleleft \end{aligned}$$

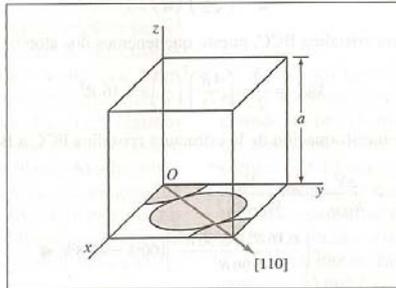


FIGURA 3.23. Diagrama para calcular la densidad atómica lineal en la dirección [110] en una celda unidad FCC.

TABLA 3.5. Formas cristalinas alotrópicas de algunos metales

Metal	Estructura cristalina a temperatura ambiente	A otras temperaturas
Ca	FCC	BCC (> 447 °C)
Co	HCP	FCC (> 427 °C)
Hf	HCP	BCC (> 1.742 °C)
Fe	BCC	FCC (912-1.394 °C) BCC (> 1.394 °C)
Li	BCC	HCP (< -193 °C)
Na	BCC	HCP (< -233 °C)
Tl	HCP	BCC (> 234 °C)
Ti	HCP	BCC (> 883 °C)
Y	HCP	BCC (> 1.481 °C)
Zr	HCP	BCC (> 872 °C)

El hierro se presenta en estructura cristalina BCC y FCC en el rango de temperaturas que va desde temperatura ambiente hasta la temperatura de fusión a 1.539 °C como se muestra en la Figura 3.24. El hierro alfa ( $\alpha$ ) existe desde -273 hasta 912 °C y tiene una estructura cristalina BCC. El hierro gamma ( $\gamma$ ) existe desde 912 hasta 1.394 °C y tiene una estructura cristalina FCC. El hierro delta ( $\delta$ ) existe desde 1.394 °C hasta 1.539 °C,

que es la temperatura de fusión del hierro. La estructura cristalina del hierro  $\delta$  es también BCC pero con una constante de red mayor que la del hierro  $\alpha$ .

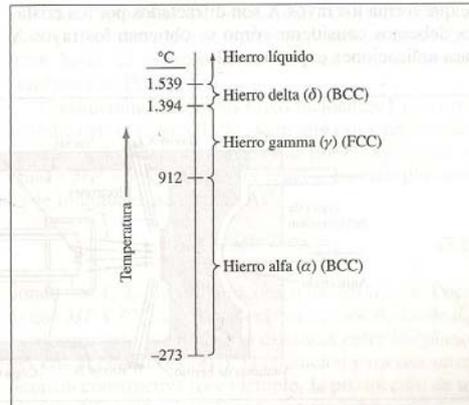


FIGURA 3.24. Formas cristalinas alotrópicas del hierro entre distintos rangos de temperatura a presión atmosférica.

**Problema ejemplo 3.14**

Calcule el cambio de volumen teórico que acompaña a la transformación alotrópica en un metal puro desde la estructura FCC a BCC. Considere el modelo de esferas rígidas y que no existe cambio de volumen atómico antes y después de la transformación.

**Solución:** En la celda unidad de la estructura cristalina FCC los átomos están en contacto entre sí en la diagonal de las caras, como se muestra en la Figura 3.7. De este modo

$$\sqrt{2}a = 4R \quad \text{o} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{2}} \quad (3.3)$$

En la celda unidad de la estructura cristalina BCC, los átomos están en contacto a lo largo de la diagonal del cubo, como se muestra en la Figura 3.5. De este modo

$$\sqrt{3}a = 4R \quad \text{o} \quad a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (3.1)$$

El volumen por átomo de la estructura cristalina FCC, puesto que tenemos cuatro átomos en la celda unidad, es

$$V_{\text{FCC}} = \frac{a^3}{4} = \left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3 \left(\frac{1}{4}\right) = 5,66 R^3$$

El volumen por átomo de la estructura cristalina BCC, puesto que tenemos dos átomos en la celda unidad, es

$$V_{\text{BCC}} = \frac{a^3}{2} = \left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3 \left(\frac{1}{2}\right) = 6,16 R^3$$

El cambio de volumen asociado a la transformación de la estructura cristalina FCC a BCC, asumiendo que no existe cambio en el radio atómico, es

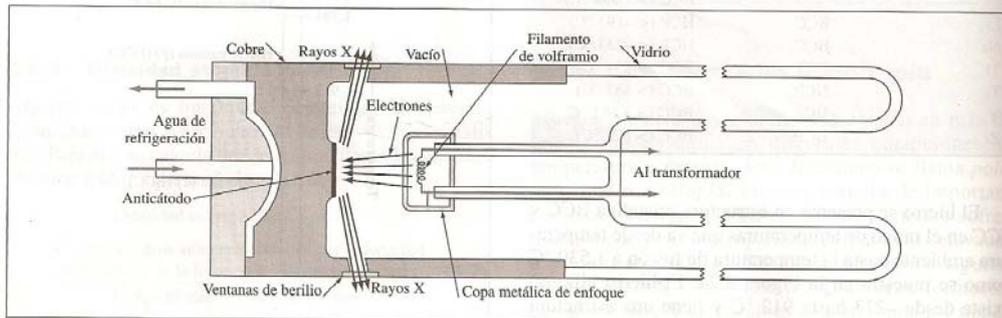
$$\begin{aligned} \frac{\Delta V}{V_{\text{FCC}}} &= \frac{V_{\text{BCC}} - V_{\text{FCC}}}{V_{\text{FCC}}} \\ &= \left(\frac{6,16 R^3 - 5,66 R^3}{5,66 R^3}\right) 100\% = +8,8\% \quad \blacktriangleleft \end{aligned}$$

**3.11. Análisis de estructuras cristalinas**

El conocimiento actual de las estructuras cristalinas se ha obtenido principalmente por la técnica de difracción de rayos X que utiliza radiación de aproximadamente la misma longitud de onda que la distancia entre los planos de la red cristalina. Sin embargo, antes de discutir de qué forma los rayos X son difractados por los cristales debemos considerar cómo se obtienen los rayos X para aplicaciones experimentales.

**3.11.1. Fuentes de rayos X**

Los rayos X utilizados en la difracción son radiaciones electromagnéticas con longitudes de onda entre 0,05 y 0,25 nm (0,5 y 2,5 Å). Para poder comparar, la longitud de onda de la luz visible es del orden de 600 nm (6.000 Å). Para producir rayos X para aplicaciones en difracción se necesita aplicar un voltaje de unos 35 kV entre un cátodo y un ánodo metálicos, ambos en el vacío, como se presenta en la Figura 3.25. Cuando el filamento de wolframio del cátodo se calienta, se liberan electrones por emisión termoiónica y se aceleran a través del vacío de-



(Según B. D. Cullity, «Elements of X-Ray Diffraction», 2.ª ed., Addison-Wesley, 1978, p. 23.)

**FIGURA 3.25.** Diagrama esquemático de la sección transversal de un tubo de rayos X de filamento sellado.