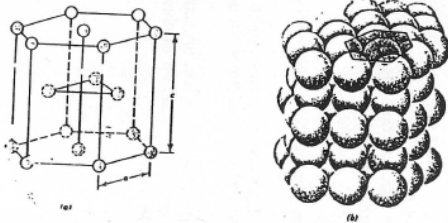


Crystal Hexagonal Compacto



For the hexagonal close-packed crystal structure, (a) a reduced-sphere unit cell (a and c represent the short and long edge lengths, respectively), and (b) an aggregate of many atoms.

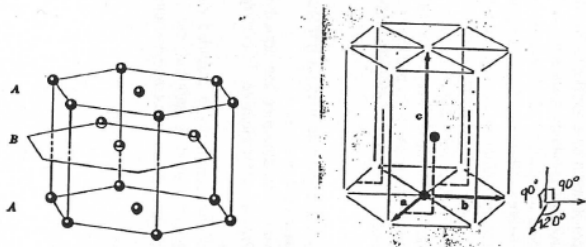


Figure 276 Structure hexagonale compacte. Les positions des atomes dans cette structure ne constituent pas un réseau. Le réseau est hexagonal simple avec une base formée de deux atomes identiques associés à chaque nœud.

Figure 277 La maille élémentaire comprend deux côtés a = b séparés par un angle de 120°. L'axe c est perpendiculaire au plan de a et b. Pour une structure idéale, c = 1,633 a. Les deux atomes de la base sont en noir sur la figure. L'un a pour coordonnées, 000; l'autre 1/3, 1/3, c'est-à-dire à l'extrémité du vecteur r = 1/3 a + 1/3 b + 1/3 c.

Crystal	c/a	Crystal	c/a	Crystal	c/a
He	1,633	Zn	1,861	Zr	1,594
Be	1,581	Cd	1,886	Gd	1,592
Mg	1,623	Co	1,622	Lu	1,586
Tl	1,586	Y	1,570		

FACTOR DE ESBELTEZ DE UNA CELDA HC

Considere un cristal Hexagonal Compacto.

La red pertinente está representada por una celda Trigonal P. Esta celda sólo tienen nodos en los vértices. Los parámetros de la celda son a, a y c. Los ángulos entre los ejes valen 90, 90 y 60°. El motivo está formado por dos átomos, cuyas coordenadas son: (0 0 0) y (2/3, 1/3 1/2).

Se pide calcular el cociente c/a asociado a esta celda, considerando un modelo de esferas duras en contacto. Suponga que la simetría de los átomos es perfectamente esférica (una aproximación).

Definición de factor de esbeltez c/a

El factor de esbeltez relacionado con la hipótesis de perfecta simetría esférica, que es el que vamos a calcular aquí, se llama factor de esbeltez ideal.

CÁLCULO

Llamemos r al radio atómico y expresemos las magnitudes geométricas necesarias para el cálculo en función de r. (En todo caso, el resultado es independiente del tamaño de las esferas).

Nótese que en la figura adjunta, la pirámide xyzw es un tetraedro regular. En los puntos x, y, z y w, hay centros atómicos; son cuatro átomos en contacto. Las caras de la pirámide son triángulos equiláteros de arista 2r.

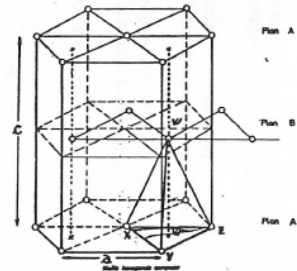
El parámetro a de la celda vale 2r, en tanto que el parámetro c de la celda es igual al doble de la altura de la referida pirámide. Calculemos primero esa altura y después el cociente c/a ideal.

Para empezar $a = 2r$. Además: $XY = YZ = ZW = XW = YW = XZ = 2r$.

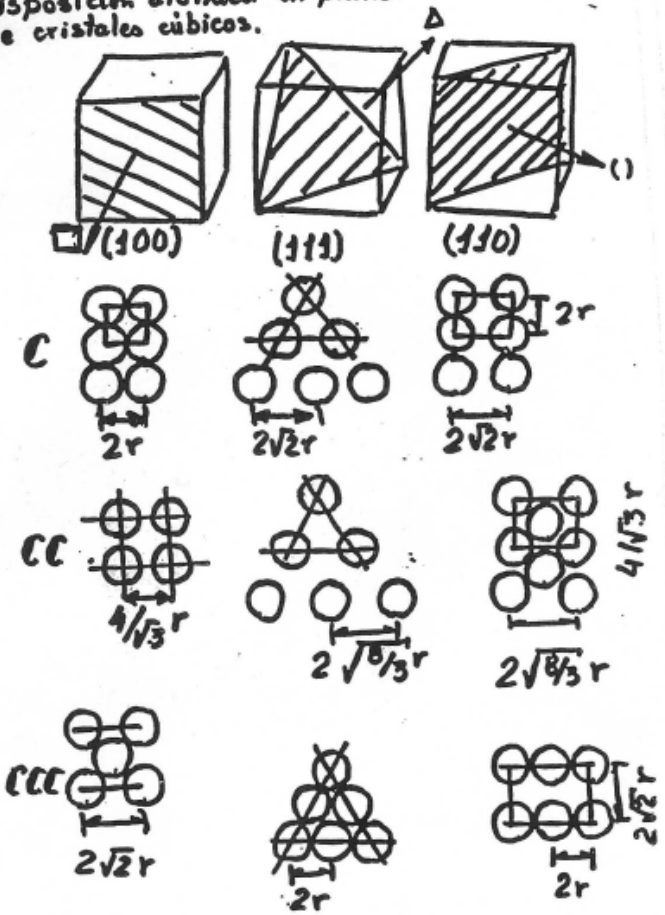
ΔUYZ : $YZ = 2r, UY = r$
 $r^2 + (UZ)^2 = (2r)^2 \Rightarrow UZ = \sqrt{3}r$
 $W'Z = 2/3 UZ \Rightarrow W'Z = 2/\sqrt{3}r$

$\Delta W'ZW$: $WZ = 2r, W'W = c/2$
 $(W'W)^2 + (W'Z)^2 = (WZ)^2$
 $(c/2)^2 + (2/\sqrt{3}r)^2 = (2r)^2$

$\frac{c}{2r} = \frac{c}{a} \Rightarrow \frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633$



Disposición atómica en planos de cristales cúbicos.



EJERCICIO

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

Se pide:

- Indique cristales de elementos puros importantes de cada tipo.
- Expresé el parámetro a de la respectiva celda cúbica en función de R.
- Calcule la densidad 3D de cada cristal expresada como ρ^{3D} [átoms./R³].
- 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 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 ³] = 0,125 [átoms./R ³]	$\rho^{3D} = 2/(4/\sqrt{3})^3$ [átoms./R ³] = 0,162 [átoms./R ³]	$\rho^{3D} = (2\sqrt{2})^3$ [átoms./R ³] = 0,176 [átoms./R ³] No existe ningún cristal más denso que éste. Sólo el cristal HC es igualmente denso.
{100}	{110}	{111}
$d_{100} = 2/\sqrt{1} R$ = 2 R	$d_{110} = (4/\sqrt{3})/\sqrt{2} R$ = 1,633 R	$d_{111} = (2\sqrt{2})/\sqrt{3} R$ = R No existe ningún plano con distancias interplanares mayores que ésta, la que es igual a la de los planos hexagonales compactos del cristal HC
$\rho_{100}^{2D} = 1/[(2)*(2)]$ [átoms./R ²]	$\rho_{110}^{2D} = 2/[(4/\sqrt{3}) * ((4/\sqrt{3})\sqrt{2})]$ [átoms./R ²]	$\rho_{111}^{2D} = 4/[(2)*(2 \cos 30)]$ [átoms./R ²] Estos son planos hexagonales compactos, de máxima densidad. También se encuentran en los cristales HC.