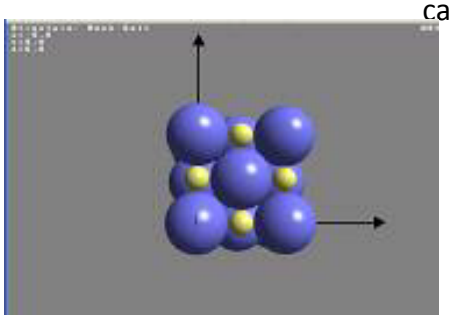
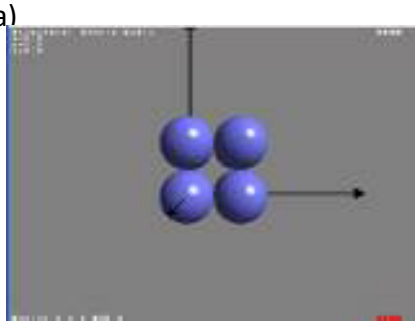
Ejes de simetría en cristales cúbicos
y
Problemas de cristales sencillos

En cristales cúbicos, una arista de la celda es un eje de rotación de orden 4; símbolo: □.

. (También lo es una paralela a una arista que pase por el centro de una cara)



Cristal tipo NaCl



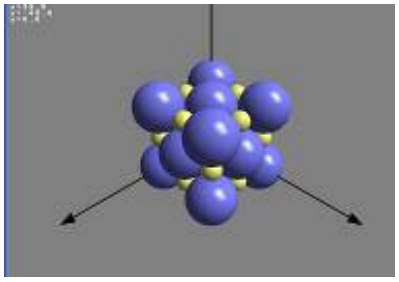
Cristal cúbico simple, C

Se ha representado el orden atómico 2D sobre un plano de cara, plano de la familia {100}.

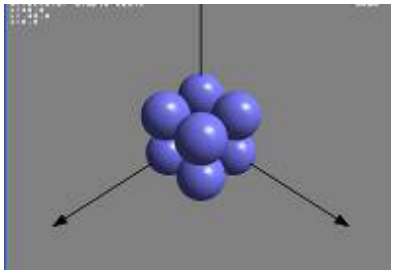
Dada una celda convencional, los ejes de referencia son las aristas de la celda. En este caso, la norma de los vectores de la base es 1.

En cristales cúbicos, una diagonal de la celda es un eje de rotación de orden 3; símbolo: ⧋.

.



Cristal tipo NaCl

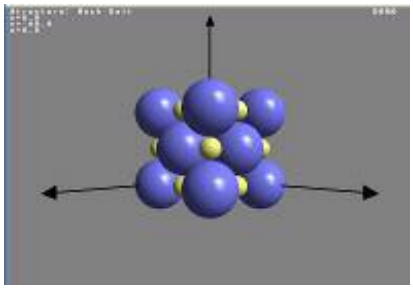


Cristal cúbico simple, C

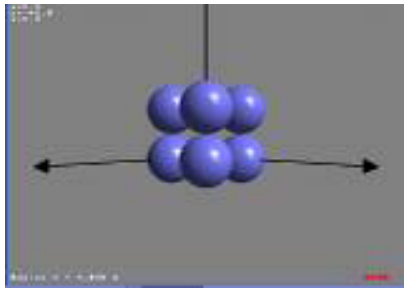
Las direcciones diagonales de cubo corresponden a la familia de direcciones ⟨111⟩.

En cristales de cúbicos, una dirección perpendicular a un plano de la familia {110}* es un eje de rotación de orden 2; símbolo: ().

.



Cristal tipo NaCl



Cristal cúbico simple, C

*: y que, adicionalmente, corresponda a una diagonal de cara o bien que pase por la mitad de una arista.

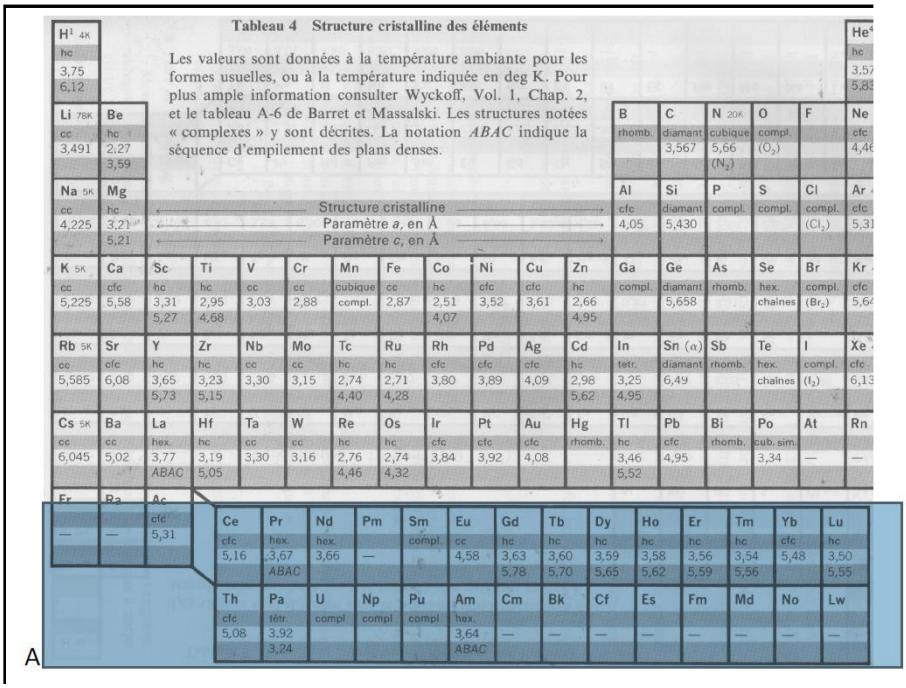


Tableau 4 Structure cristalline des éléments

Les valeurs sont données à la température ambiante pour les formes usuelles, ou à la température indiquée en deg K. Pour plus ample information consulter Wyckoff, Vol. 1, Chap. 2, et le tableau A-6 de Barret et Massalski. Les structures notées « complexes » y sont décrites. La notation *ABAC* indique la séquence d'empilement des plans denses.

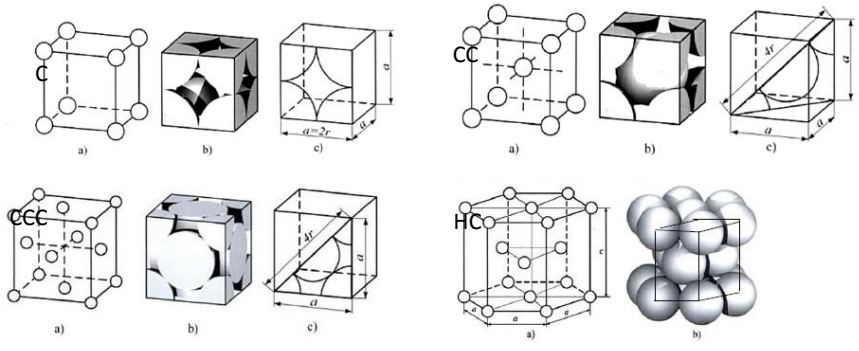
Structure cristalline
Paramètre *a*, en Å
Paramètre *c*, en Å

H[1] 4K hc 3,75 6,12												B rhomb.	C diamant 3,567	N 20K cubique 5,66 (N_2)	O compl. (O_2)	F	He[4] hc 3,57 5,83
Li 78K cc 3,491	Be hc 2,27 3,59											Al cfc 4,05	Si diamant 5,430	P compl.	S compl.	Cl compl. (Cl_2)	Ne cfc 4,46 Ar cfc 5,31
Na 5K cc 4,225	Mg hc 3,21 5,21																
K 5K cc 5,225	Ca cfc 5,58	Sc hc 3,31 5,27	Ti hc 2,95 4,68	V cc 3,03	Cr cc 2,88	Mn cubique compl.	Fe cc 2,87	Co hc 2,51 4,07	Ni cfc 3,52	Cu cfc 3,61	Zn hc 2,66 4,95	Ga compl.	Ge diamant 5,658	As rhomb.	Se hex. chaines	Br compl. (Br_2)	Kr cfc 5,64
Rb 5K cc 5,585	Sr cfc 6,08	Y hc 3,65 5,73	Zr hc 3,23 5,15	Nb cc 3,30	Mo cc 3,15	Tc hc 2,74 4,40	Ru hc 2,71 4,28	Rh cfc 3,80	Pd cfc 3,89	Ag cfc 4,09	Cd hc 2,98 5,62	In tetr. 3,25 4,95	Sn (α) diamant 6,49	Sb rhomb.	Te hex. chaines	I compl. (I_2)	Xe cfc 6,13
Cs 5K cc 6,045	Ba cc 5,02	La hex. 3,77 *ABAC*	Hf hc 3,19 5,05	Ta cc 3,30	W cc 3,16	Re hc 2,76 4,46	Os hc 2,74 4,32	Ir cfc 3,84	Pt cfc 3,92	Au cfc 4,08	Hg rhomb.	Tl hc 3,46 5,52	Pb cfc 4,95	Bi rhomb.	Po cub. sim. 3,34	At —	Rn —
Fr — —	Ra — —	Ac cfc 5,31															

Ce cfc 5,16	Pr hex. 3,67 *ABAC*	Nd hex. 3,66	Pm —	Sm compl.	Eu cc 4,58	Gd hc 3,63 5,78	Tb hc 3,60 5,70	Dy hc 3,59 5,65	Ho hc 3,58 5,62	Er hc 3,56 5,59	Tm hc 3,54 5,56	Yb cfc 5,48	Lu hc 3,50 5,55
Th cfc 5,08	Pa tétr. 3,92 3,24	U compl.	Np compl.	Pu compl.	Am hex. 3,64 *ABAC*	Cm —	Bk —	Cf —	Es —	Fm —	Md —	No —	Lw —

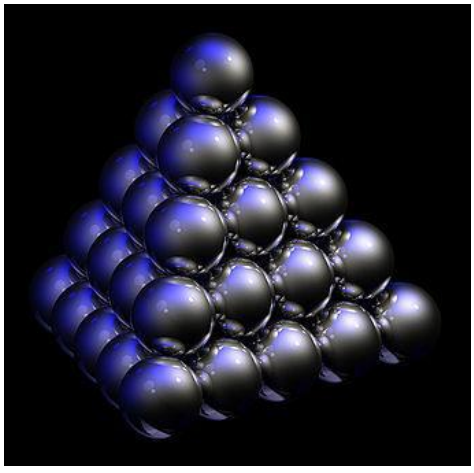
A

Algunas Estructuras Cristalinas. (Aquí las esferas representan átomos).



- ¿Cuáles son las estructuras cristalinas más frecuentes de los metales puros? Justifique. Dato: tabla periódica.
- Para cada cristal, determine la celda nodal y el motivo. Caso más complicado , el cristal HC. Dato: la tabla de celdas de Bravais.
- ¿Por qué la estructura C es demasiado inestable para un metal puro?
- Para el cristal HC: ¿cuántos nodos tiene su celda de red?, ¿cuántos átomos tiene su celda cristalina?, ¿existe la red hexagonal compacta?

Aplicación: 4 planos hexagonales compactos en cristales CCC (CFC)

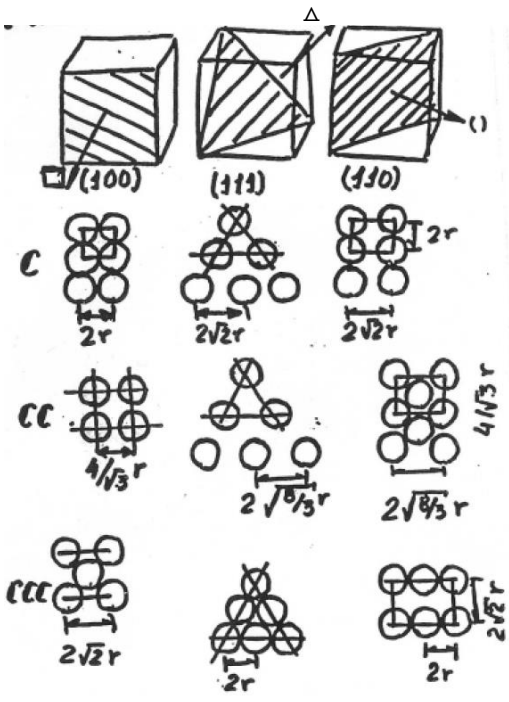


En un cristal CCC, los planos {111} son hexagonales compactos. Si el eje Z es vertical, entonces, por rotaciones de 90° en torno a ese eje, se identifican 4 conjuntos de planos hexagonales compactos.

La familia de planos {111} presenta multiplicidad 4.

Disposición atómica sobre tres planos cristalinos de cristales del sistema cúbico (C, CC y CCC).

Átomos esféricos de radio r.
Para cada cristal, uno de los planos representados es el de mayor densidad, identifíquelo.
Observe la simetría en rotación de las direcciones representadas con flechas:□,△ y ().
Calcule la multiplicidad de cada uno de estos tres planos en un cristal cúbico cualquiera.



Problema
Considere un cristal CCC.
Para planos de las familias {100}, {110} y {111}, determine justificadamente:
- el orden de apilamiento de esos planos.
- la multiplicidad de esos planos.
La determinación justificada y la respuesta final deben ser apoyadas por argumentos y figura.

Respuestas finales, falta justificación y dibujos.
Los planos {111}, (que son planos hexagonales compactos), tienen multiplicidad 4 y su orden de apilamiento es ABC periódico.
Los planos {100}, planos paralelos a las caras, tienen multiplicidad 3 y su orden de apilamiento es AB periódico.
Los planos {110} tiene multiplicidad 6 y su orden de apilamiento es AB periódico.

Problema

1. Considere un cristal HC formado por átomos esféricos de radio *R*.

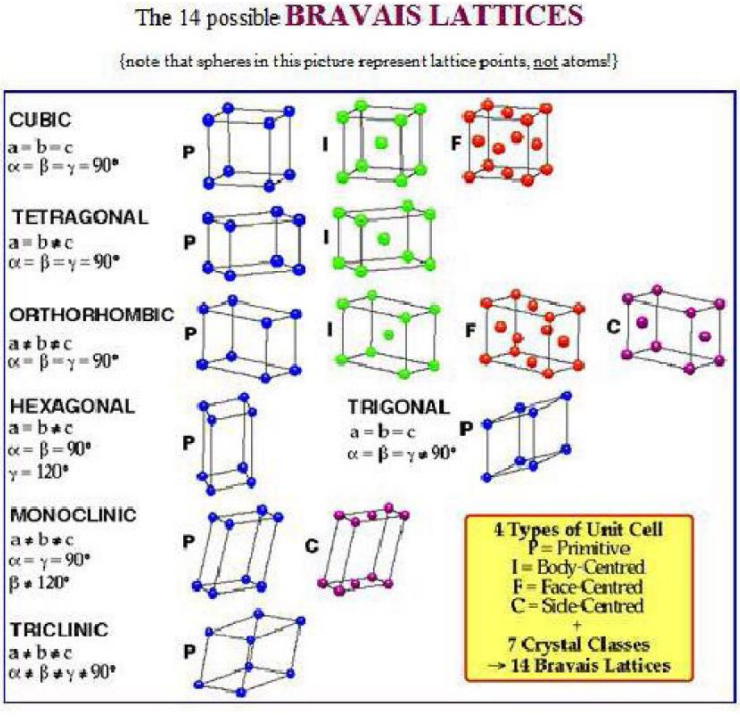
- Calcule la densidad $\rho^{3D}[átomos/R^3]$ del cristal. Note que la distancia entre dos átomos vecinos es 2R. Por ahí habrá que calcular la altura de una pirámide que es un tetraedro regular, de lados 2R.
- ¿Cuál es la multiplicidad y el orden de apilamiento de los planos hexagonales compactos de este cristal?.
- Sobre un plano hexagonal, ¿cuántas son las direcciones cristalinas de máxima densidad $\rho^{1D}[átomos/R]$? Calcule el valor de dicha densidad.

Problema

Considere un cristal CCC formado por átomos de radio *R* y un plano que corta al eje OX en 1 arista, al eje OY en 1 arista y al eje OZ en 3 aristas.

Calcule la densidad $\rho^{3D}[átomos/R^3]$ de dichos planos, haciendo explícito su procedimiento geométrico (dibujos).

Recomendaciones. Para partir tendrá que dibujar varias celdas, siendo conveniente que considere el eje OZ perpendicular al plano del papel. Después dibuje el arreglo atómico correspondiente a dicho plano sobre el papel y seleccione una celda 2D. También convendrá iniciar su cálculo estableciendo la relación entre la arista *a* de la celda CCC y el dato R, función *a(R)*.



CRISTAL Denominación del tipo (geometría)	**EJEMPLOS**	**BASE O MOTIVO**	**RED de Bravais,** según denominación de su celda convencional
Tipo Diamante (NO es un cristal CCC)	C, Si y Ge diamante.	2 átomos por nodo Posiciones: (0 0 0) y (1/4 1/4 1/4)	CCC, cúbica centrada en las caras
CCC	Cu, Feγ, Al, Ni, etc.	1 átomo por nodo Posición: (0 0 0)	CCC, cúbica centrada en las caras
CC	Feα, Cr, etc.	1 átomo por nodo Posición: (0 0 0)	CC, cúbica centrada en el cuerpo
HC, hexagonal compacto (NO es un cristal hexagonal)	Zn, Cd, Ti, etc,	2 átomos por nodo Posiciones: (0 0 0) y (1/3 1/3 1/2)	Hexagonal P (primitiva o simple)
Tipo NaCl	NaCl	2 átomos por nodo Posiciones: Na (000) y Cl (1/2 0 0)	CCC, cúbica centrada en las caras
Tipo CsCl	CsCl	2 átomos por nodo Posiciones: Cs (000) y Cl (1/2 1/2 1/2)	C, cúbica primitiva o simple

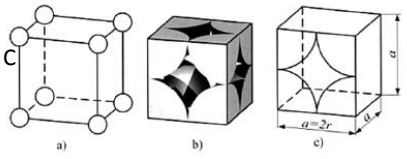
Tabla de la Red y Motivo de algunas Estructuras Cristalinas vistas en el curso.

En términos lógicos, considere que la definición de red es primero y después la de cristal. (Aunque no fue así históricamente).

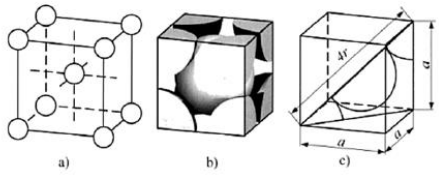
En este marco, el cristal recibe el mismo nombre de la red, solo si el motivo consiste en 1 átomo por celda.

Algunas Estructuras Cristalinas. (Aquí las esferas representan átomos).

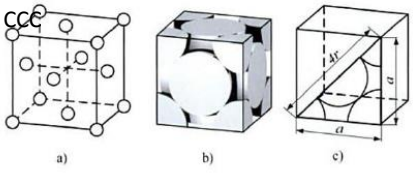
C



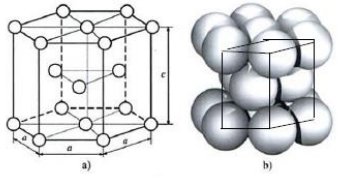
CC



CCC



HC



Sea R el radio iónico. Para cada cristal, calcule la densidad ρ^{1D}*[áts./R]*, de una dirección cristalina perpendicular a uno cualquiera de los planos más densos del cristal. Demuestre cualitativamente (esto es, sin calcular) que la densidad ρ^{3D}*[átomos/R³]* de un cristal CCC debe ser idéntica a la de un cristal HC.

Problemas Planteados y Resueltos

A. Considere un cristal CC formado por átomos de radio R. Se pide:

i) Determine la dirección más densa del cristal.

ii) Calcule la relación a(R).

iii) Calcule la densidad ρ^{3D}*[átomos/R^3] del cristal*.

iv) Calcule la densidad de los planos más densos del cristal, ρ^{2D}*[átomos/R^2]*.

B. Ídem para un cristal CCC.

……

SOLUCIONES

A.

i) Para un cristal CC la dirección más densa es una diagonal de la celda. Esa diagonal vale *4R*.

ii) La relación geométrica entre la arista *a* y la longitud de esa diagonal es $3a^2 = (4R)^2$, de donde $a= 4R/3^{1/2}$.

iii) Para calcular la densidad del cristal se puede recurrir a considerar la celda: $\rho^{3D} = (\#\ áts.\ en\ la\ celda)/(Vol.\ de\ celda)= (2\ áts.)/a^3 =((8*1/8)+1*1)\ áts.)/\ (4R/\sqrt{3})^3= 0,162[áts./R^3].$

Iv) Los planos más densos son los *{110}.* Consideremos una celda 2D rectangular. $\rho^{2D}= (\#\ átomos\ en\ la\ celda)/(Área\ de\ la\ celda)= ((4*1/4)+1)áts.)/(a*(a*\sqrt{2}))=(2\ áts.)/((4R/3^{1/2})^2*\sqrt{2})= 0,265[áts./R^3].$

B.

i) Para un CCC la dirección más densa es una diagonal de cara, *4R*. ii) $a= 2\sqrt{2}\ R$. iii) $\rho^{3D} = ((6*1/2)+1*1)/a^3= 0,176\ [átomos/R^3].$ iv) Planos hexag. compactos {111}, $\rho^{2D}= (1\ át.)/(a*(a*cos30°)= 0,177\ [áts./R^3].$

Los valores de densidad de iii) y iv) son los máximos posibles.