

CAPÍTULO 3

Organización atómica

3-1 Introducción

El arreglo atómico juega un papel importante en la determinación de la microestructura y en el comportamiento de un material sólido. Por ejemplo, el arreglo atómico en el aluminio proporciona buena ductilidad, en tanto que en el hierro es la causa de una buena resistencia. Los transductores cerámicos capaces de detectar tumores en el cuerpo humano se basan en un arreglo atómico que produce un desplazamiento permanente de las cargas eléctricas dentro del material. Debido a distintos arreglos atómicos, se puede deformar fácilmente el polietileno, se puede estirar elásticamente el hule, y la epóxica resulta fuerte y quebradiza.

En este capítulo se describirán arreglos atómicos típicos en materiales sólidos perfectos y se desarrollará la nomenclatura utilizada para describirlos. El objetivo es estar preparados para comprender cómo las imperfecciones en el arreglo atómico permiten entender tanto la deformación como el endurecimiento de muchos materiales sólidos.

3-2 Orden de corto alcance comparado con orden de largo alcance

Si no se consideran las imperfecciones que aparecen en los materiales, entonces existen tres niveles de arreglo atómico (figura 3-1).

Sin orden En gases como el argón, los átomos no tienen orden y llenan de manera aleatoria el espacio en el cual está confinado el gas.

Orden de corto alcance Un material muestra **orden de corto alcance** si el arreglo especial de los átomos se extiende sólo a los vecinos más cercanos de dicho átomo. Cada molécula de agua en fase vapor tiene un orden de corto alcance debido a los enlaces covalentes entre los átomos de hidrógeno y oxígeno; esto es, cada átomo de oxígeno está unido a dos átomos de hidrógeno, formando un ángulo de 104.5° entre los enlaces. Sin embargo, las moléculas de agua no tienen una organización especial entre sí.

Una situación similar ocurre en los vidrios cerámicos. En el ejemplo 2-4, se describe la **estructura tetraédrica** en el sílice, que satisface el requisito de que cuatro átomos de oxígeno quedan enlazados de manera covalente a cada átomo de silicio. Dado que los átomos de oxígeno deben formar ángulos de 109.5° para satisfacer los requerimientos de direccionalidad de los

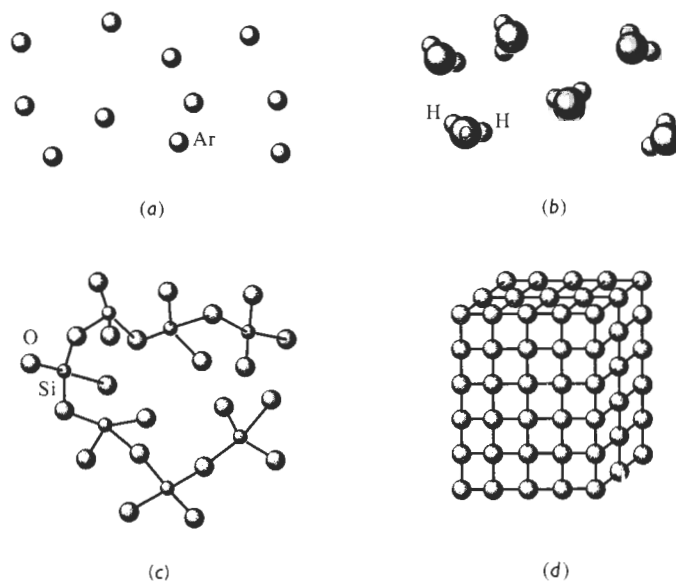


FIGURA 3-1 Los niveles del arreglo atómico en los materiales: (a) los gases inertes no tienen un orden regular en sus átomos. (b, c) Algunos materiales, incluyendo el vapor de agua y el vidrio, tienen orden en una distancia muy corta. (d) Los metales y muchos otros sólidos tienen un orden regular de los átomos que se extiende por todo del material.

enlaces covalentes, se tiene como resultado un orden de corto alcance. Las unidades tetraédricas, sin embargo, pueden estar unidas entre sí de una manera aleatoria.

Los polímeros también despliegan arreglos atómicos de corto alcance que se parecen mucho a la estructura del vidrio de sílice. El polietileno está compuesto por cadenas de átomos de carbono, con dos átomos de hidrógeno unidos a cada carbono. Dado que éste tiene una valencia de cuatro y que los átomos de carbono e hidrógeno tienen enlaces covalentes, de nuevo se produce una estructura tetraédrica (figura 3-2). Las unidades tetraédricas pueden unirse de manera aleatoria para producir cadenas poliméricas.

Las cerámicas y los polímeros que tienen sólo este orden de corto alcance son materiales **amorfos**. Los **vidrios**, que se forman en sistemas tanto cerámicos como polímeros, son materiales amorfos y a menudo tienen propiedades físicas únicas. Unos cuantos materiales y semiconductores especialmente preparados también poseen sólo orden de corto alcance.

Orden de largo alcance Los metales, semiconductores, muchos materiales cerámicos e incluso algunos polímeros tienen una estructura cristalina en la cual los átomos muestran tanto un orden **de corto alcance** como un **orden de largo alcance**; el arreglo atómico especial se ex-

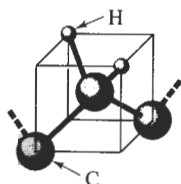


FIGURA 3-2 Estructura tetraédrica en el polietileno.

tiende por todo el material. Los átomos forman un patrón repetitivo, regular, en forma de rejilla o de red. La **red** es un conjunto de puntos, conocidos como **puntos de red**, que están organizados siguiendo un patrón periódico de forma que el entorno de cada punto en la red es idéntico. Uno o más átomos quedan asociados a cada punto de la red.

La red difiere de un material a otro tanto en tamaño como en forma, dependiendo del tamaño de los átomos y del tipo de enlace entre ellos. La **estructura cristalina** de un material se refiere al tamaño, la forma y la organización atómica dentro de la red.

3-3 Celdas unitarias

La **celda unitaria** es la subdivisión de la red cristalina que sigue conservando las características generales de toda la red. En este texto, se verá la celda unitaria y la estructura cristalina de manera indistinta. En la figura 3-3 se muestra una celda unitaria en una red. Al apilar celdas unitarias idénticas, se puede construir toda la red.

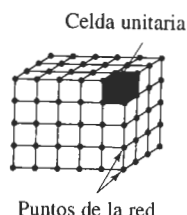


FIGURA 3-3 Una red es un arreglo periódico de puntos que definen un espacio. La celda unitaria (contorno grueso) es una subdivisión de la red que sigue conservando las características de la red.

Se identifican 14 tipos de celdas unitarias o **redes de Bravais** agrupadas en siete sistemas cristalinos (figura 3-4 y tabla 3-1). Los puntos de la red están localizados en las esquinas de las celdas unitarias y, en algunos casos, en cualquiera de las caras o en el centro de la celda unitaria. A continuación se verán algunas características de una red o de una celda unitaria.

Parámetro de red Los **parámetros de la red**, que describen el tamaño y la forma de la celda unitaria, incluyen las dimensiones de los costados de la celda unitaria y los ángulos entre sus costados (figura 3-5). En un sistema cristalino cúbico, solamente es necesaria la longitud de uno de los costados del cubo para describir por completo la celda (se suponen ángulos de 90° , a menos que se especifique lo contrario). Esta longitud, medida a la temperatura ambiente, es el parámetro de red a_0 . A menudo la longitud se da en nanómetros (nm), o en Angstroms ($\text{\AA}$), donde:

$$\begin{aligned} 1 \text{ nanómetro (nm)} &= 10^{-9} \text{ m} = 10^{-7} \text{ cm} = 10 \text{ \AA} \\ 1 \text{ angstrom (\AA)} &= 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m} = 10^{-8} \text{ cm} \end{aligned}$$

Se requieren varios parámetros de red para definir el tamaño y la forma de celdas unitarias complejas. Para una celda unitaria ortorrómbica, se deben especificar las dimensiones de los tres lados de la celda: a_0 , b_0 , y c_0 . Las celdas unitarias hexagonales requieren de dos dimensiones, a_0 y c_0 , y el ángulo de 120° entre los ejes a_0 . La celda más complicada, la celda triclinica se describe mediante tres longitudes y tres ángulos.

Número de átomos por celda unitaria Cada una de las celdas unitarias está definida por un número específico de puntos de red. Por ejemplo, las esquinas de las celdas se identifican fácil-

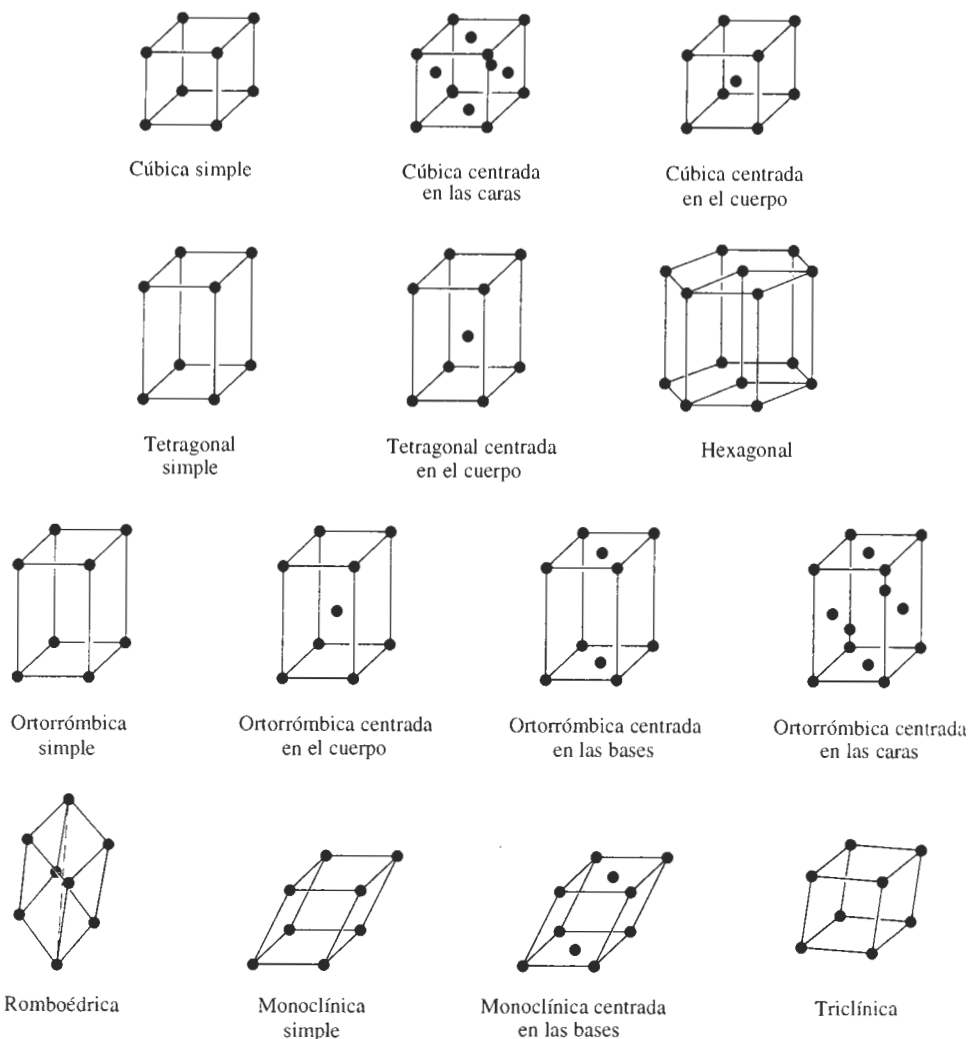


FIGURA 3-4 Los catorce tipos de celdas unitarias, o redes de Bravais, agrupados en siete sistemas cristalinos. Las características de los sistemas cristalinos se resumen en la tabla 3-1.

mente, igual que las posiciones de centrado en el cuerpo (centro de la celda) y centrado en las caras (centrado en las seis caras de la celda, figura 3-4). Al contar el número de puntos de red que corresponden a cada celda unitaria, se deben identificar los puntos de la red que van a ser compartidos por más de una celda unitaria. Un punto de red en la esquina de una celda unitaria estará compartido por siete celdas unitarias adyacentes; sólo una octava parte de cada esquina corresponde a una celda en particular. Por tanto, el número de puntos de red proveniente de todas las posiciones de esquina en una celda unitaria es:

$$\left(\frac{1 \text{ punto de red}}{8 \text{ esquina}} \right) \left(8 \frac{\text{esquinas}}{\text{celda}} \right) = 1 \frac{\text{punto de red}}{\text{celda unitaria}}$$

TABLA 3-1 Características de los siete sistemas cristalinos

Estructura	Ejes	Ángulos entre ejes
Cúbica	$a = b = c$	Todos los ángulos de 90°
Tetragonal	$a = b \neq c$	Todos los ángulos de 90°
Ortorrómbica	$a \neq b \neq c$	Todos los ángulos de 90°
Hexagonal	$a = b \neq c$	Dos ángulos de 90° Un ángulo de 120°
Romboédrica	$a = b = c$	Todos los ángulos son iguales y ninguno es de 90°
Monoclínica	$a \neq b \neq c$	Dos ángulos de 90° Un ángulo (β) distinto a 90°
Triclínica	$a \neq b \neq c$	Todos los ángulos son distintos y ninguno es de 90°

Las esquinas contribuyen con $1/8$ de un punto, las caras con $1/2$ y las posiciones en el centro del cuerpo contribuyen con todo un punto.

El número de átomos por celda unitaria es el producto del número de átomos por punto de red multiplicado por el número de puntos de red existentes por celda unitaria. En la mayor parte de los metales, se localiza un átomo en cada punto de red, por lo que el número de átomos es igual al número de puntos de red. En la figura 3-6 se muestran las estructuras de las celdas unitarias cúbica simple (CS), cúbica centrada en el cuerpo (CC) y cúbica centrada en las caras (CCC), con un átomo en cada punto de la red. En estructuras más complicadas, particularmente polímeros y cerámicos, pueden estar asociados varios, e incluso cientos, de átomos con cada punto de la red, formando celdas unitarias muy complejas.

EJEMPLO 3-1

Determine el número de puntos de red por celda en los sistemas cristalinos cúbicos.

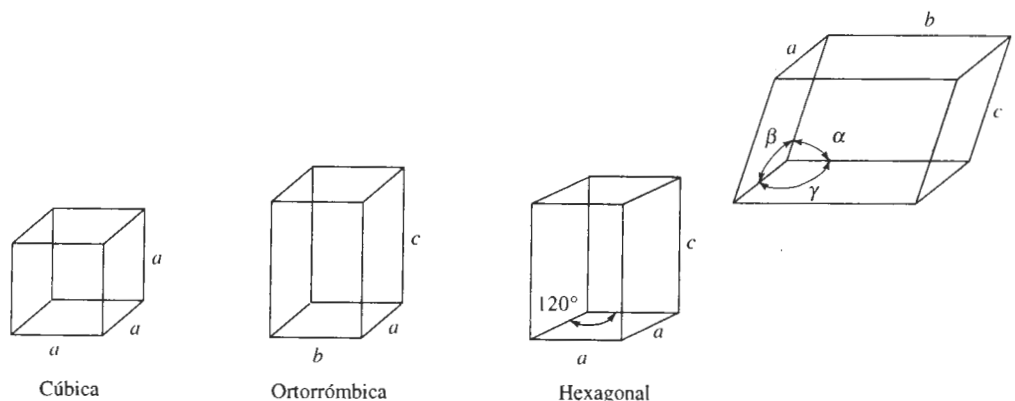


FIGURA 3-5 Definición de parámetros de red y de su uso en tres sistemas cristalinos.



FIGURA 3-6 Los modelos de celdas unitarias cúbica simple (CS), cúbica centrada en el cuerpo (CC) y cúbica centrada en las caras (CCC), suponiendo un solo átomo por punto de red.

SOLUCIÓN

En la celda unitaria CS, los puntos de la red están localizados sólo en las esquinas del cubo:

$$\frac{\text{puntos de la red}}{\text{celda unitaria}} = (8 \text{ esquinas}) \left(\frac{1}{8} \right) = 1$$

En las celdas unitarias CC, los puntos de red están localizados en las esquinas y en el centro del cubo:

$$\frac{\text{puntos de la red}}{\text{celda unitaria}} = (8 \text{ esquinas}) \left(\frac{1}{8} \right) + (1 \text{ centro}) (1) = 2$$

En las celdas unitarias CCC, los puntos de red están localizados en las esquinas y en las caras del cubo:

$$\frac{\text{puntos de la red}}{\text{celda unitaria}} = (8 \text{ esquinas}) \left(\frac{1}{8} \right) + (6 \text{ caras}) \left(\frac{1}{2} \right) = 4$$

Radio atómico comparado con el parámetro de la red Las direcciones en la celda unitaria a lo largo de las cuales los átomos están en contacto continuo **son las direcciones compactas**. En estructuras simples, particularmente en aquellas con sólo un átomo por punto de red, se utilizan esas direcciones para calcular la relación entre el tamaño aparente del átomo y el tamaño de la celda unitaria. Al determinar geoméricamente la longitud de la dirección, relativa a los parámetros de red y a continuación sumando los **radios atómicos** en esa dirección, es posible determinar la dirección deseada.

EJEMPLO 3-2

Determine la relación entre el radio atómico y el parámetro de red en estructuras CS, CC y CCC cuando existe un átomo en cada punto de la red.

SOLUCIÓN

Al hacer referencia a la figura 3-7, se verá que los átomos se tocan a lo largo de la arista del cubo en las estructuras CS. Los átomos de las esquinas están centrados en los vértices del cubo, por tanto:

$$a_0 = 2r \quad (3-1)$$

En las estructuras CC, los átomos se tocan a lo largo de la diagonal del cuerpo, que tiene una longitud igual a $\sqrt{3}a_0$. Hay dos radios atómicos correspondientes al átomo central y un radio atómico proveniente de cada uno de los átomos en las esquinas de la diagonal del cuerpo, por lo que:

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad (3-2)$$

En las estructuras CCC, los átomos entran en contacto a lo largo de la diagonal de la cara del cubo, que tiene una longitud de $\sqrt{2}a_0$. Hay cuatro radios atómicos en esta longitud: dos radios provenientes del átomo centrado en la cara y un radio por cada esquina, por lo que:

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{2}} \quad (3-3)$$

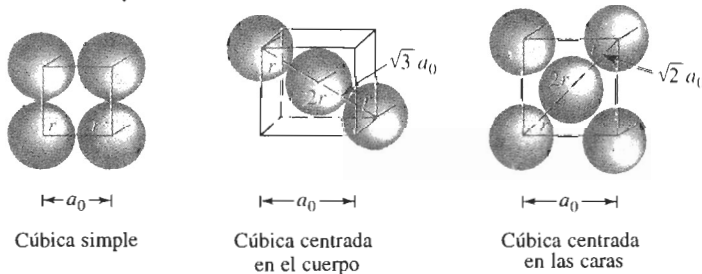


FIGURA 3-7 Relación entre el radio atómico y el parámetro de red en sistemas cúbicos (vea el ejemplo 3-2).

Número de coordinación El número de átomos que tocan a otro en particular, es decir, el número de vecinos más cercanos, es el **número de coordinación** y es una indicación de qué tan estrecha y eficazmente están empaquetados los átomos. En estructuras cúbicas que contengan solamente un átomo por punto de la red, los átomos tienen un número de coordinación relacionado con la estructura de la red. Al revisar las celdas unitarias de la figura 3-8, se aprecia

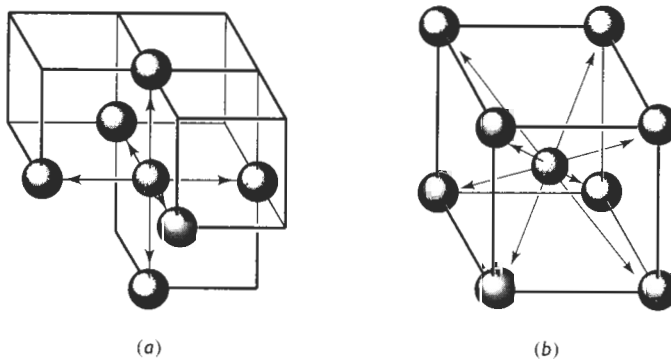


FIGURA 3-8 Ilustración de coordinación entre las celdas unitarias CS (a) y CC (b). En CS seis átomos tocan a cada átomo, en tanto que en CC los ocho átomos de esquina tocan al átomo centrado en el cuerpo.

que cada átomo de la estructura CS tiene un número de coordinación de 6, en tanto que cada átomo de la estructura CC tiene ocho vecinos cercanos. En la sección 3-5, se demostrará que cada átomo en la estructura CCC tiene un número de coordinación de 12, que es el máximo.

Factor de empaquetamiento El **factor de empaquetamiento** es la fracción de espacio ocupada por átomos, suponiendo que los átomos son esferas sólidas. La expresión general para el factor de empaquetamiento es:

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{(\text{número de átomos/celda})(\text{volumen de cada átomo})}{\text{volumen de la celda unitaria}} \quad (3-4)$$

EJEMPLO 3-3

Calcule el factor de empaquetamiento para la celda CCC.

SOLUCIÓN

Existen cuatro puntos de red por celda; si hay un átomo por punto de red, también habrá cuatro átomos por celda. El volumen de un átomo es $4\pi r^3/3$ y el volumen de la celda unitaria es a_0^3 .

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{(4 \text{ átomos/celda})(\frac{4}{3}\pi r^3)}{a_0^3}$$

Dado que para las celdas unitarias CCC, $a_0 = 4r/\sqrt{2}$:

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{(4)(\frac{4}{3}\pi r^3)}{(4r/\sqrt{2})^3} = 0.74$$

En los metales, el factor de empaquetamiento de 0.74 de la celda unitaria CCC es el empaquetamiento más eficiente posible. Las celdas CC tienen un factor de 0.68 y las celdas CS un factor de 0.52. Los metales que sólo poseen un enlace de tipo metálico se empaquetan con la máxima eficiencia que les es posible. Los de enlaces mixtos, como el hierro, pueden tener celdas unitarias con un factor de empaquetamiento menor al máximo. Ningún metal ingenieril común tiene la estructura CS, aunque esta estructura se encuentra en materiales cerámicos.

Densidad La densidad teórica de un metal se puede calcular utilizando las propiedades de la estructura cristalina. La fórmula general es:

$$\text{Densidad } \rho = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica de cada átomo})}{(\text{volumen de la celda unitaria})(\text{número de Avogadro})} \quad (3-5)$$

EJEMPLO 3-4

Determine la densidad del hierro CC, que tiene un parámetro de red de 0.2866 nm.

SOLUCIÓN

$$\text{átomos/celda} = 2$$

$$a_0 = 0.2866 \text{ nm} = 2.866 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\text{Masa atómica} = 55.847 \text{ g/mol}$$

Volumen de la celda unitaria = $a_0^3 = (2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 = 23.54 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{celda}$
 Número de Avogadro $N_A = 6.02 \times 10^{23}$ átomos/mol

$$\rho = \frac{(2)(55.847)}{(23.54 \times 10^{-24})(6.02 \times 10^{23})} = 7.882 \text{ g/cm}^3$$

La densidad medida es 7.870 g/cm^3 . La ligera discrepancia entre las densidades teórica y medida es una consecuencia de los defectos en la red.

La estructura hexagonal compacta Una forma especial de la red hexagonal, la estructura hexagonal compacta (HC), se muestra en la figura 3-9. La celda unitaria es el prisma sesgado, que se muestra por separado. La estructura HC tiene un punto de red por celda —uno proveniente de cada una de las ocho esquinas del prisma— pero con cada punto de la red están asociados dos átomos. Un átomo está ubicado en una esquina, en tanto que el otro está localizado dentro de la celda unitaria.

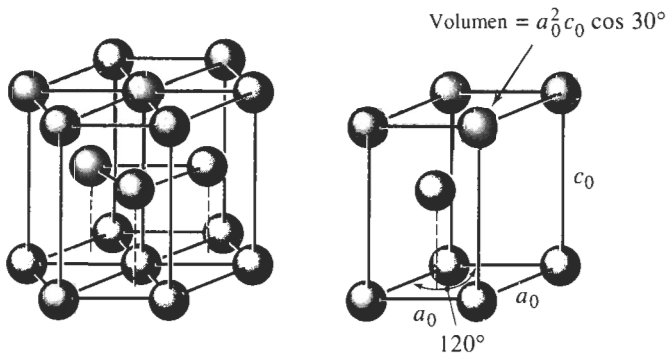


FIGURA 3-9 La red hexagonal compacta (HC) (izquierda) y su celda unitaria (derecha).

En metales HC ideales, los ejes a_0 y c_0 están relacionados entre sí mediante la relación $c/a = 1.633$. Sin embargo, la mayor parte de los metales HC tienen relaciones c/a que difieren ligeramente del valor ideal, en razón de los enlaces mixtos. Dado que la estructura HC, al igual

TABLA 3-2 Características de cristales metálicos comunes

Estructura	a_0 en función de r	Átomos por celda	Número de coordinación	Factor de empaquetamiento	Metales típicos
Cúbica simple (CS)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	Ninguno
Cúbica centrada en el cuerpo (CC)	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, Ti, W, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Cr, Zr
Cúbica centrada en las caras (CCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Fe, Cu, Al, Au, Ag, Pb, Ni, Pt
Hexagonal compacta (HC)	$a_0 = 2r$ $c_0 = 1.633 a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Cd

que la estructura CCC, tiene un factor de empaquetamiento muy eficiente de 0.74 y un número de coordinación de 12, una buena cantidad de metales poseen esta estructura. La tabla 3-2 resume las características de las estructuras cristalinas más importantes en los metales.

3-4 Transformaciones alotrópicas o polimórficas

Los materiales que pueden tener más de una estructura cristalina se llaman **alotrópicos** o **polimórficos**. El término **alotropía** por lo general se reserva para este comportamiento en elementos puros, en tanto que el polimorfismo es un término más general. Quizás haya notado en la tabla 3-2 cómo el hierro y el titanio tienen más de una estructura cristalina. A bajas temperaturas, el hierro tiene una estructura CC, pero a temperaturas más altas se convierte en una estructura CCC. Estas transformaciones dan los fundamentos para el tratamiento térmico del acero y del titanio.

Muchos materiales cerámicos, como el sílice (SiO_2), también son polimórficos. La transformación puede venir acompañada de un cambio en volumen durante el calentamiento o el enfriamiento. De no estar controlado correctamente, este cambio en el volumen hará que el material se agriete y falle.

EJEMPLO 3-5 Diseño de un sensor para medir un cambio de volumen

Para estudiar la forma en que el hierro se comporta a temperaturas elevadas, se deberá diseñar un instrumento que pueda detectar —con una precisión del 1%— el cambio de volumen de un cubo de hierro de 1 cm^3 cuando sea calentado a través de su temperatura de transformación polimórfica. A 911°C el hierro es CC, con un parámetro de red de 0.2863 nm . A 913°C es CCC, con un parámetro de red de 0.3591 nm . Determine la precisión requerida del instrumento de medición.

SOLUCIÓN

El cambio volumétrico durante la transformación se puede calcular a partir de datos cristalográficos. El volumen de la celda unitaria del hierro CC antes de transformarse es:

$$V_{\text{BCC}} = a^3 = (0.2863 \text{ nm})^3 = 0.023467 \text{ nm}^3$$

este es el volumen ocupado por *dos* átomos de hierro, ya que existen dos átomos por celda unitaria en la estructura cristalina CC.

El volumen de la celda unitaria en el hierro CCC es:

$$V_{\text{CCC}} = a_0^3 = (0.3591 \text{ nm})^3 = 0.046307 \text{ nm}^3$$

Pero este es el volumen ocupado por *cuatro* átomos de hierro, ya que existen cuatro átomos por cada celda unitaria CCC. Por lo tanto se deben comparar dos celdas CC (con un volumen de

$2(0.023467) = 0.046934 \text{ nm}^3$) con cada celda CCC. El cambio porcentual en volumen durante la transformación es:

$$\text{Cambio de volumen} = \frac{(0.046307 - 0.046934)}{0.046934} \times 100 = -1.34\%$$

Esto indica que el hierro se contrae al calentarse.

El cubo de 1 cm^3 de hierro se contrae a $1 - 0.0134 = 0.9866 \text{ cm}^3$ después de transformarse; por tanto, para conseguir una precisión del 1%, el instrumento debe detectar un cambio de:

$$\Delta V = (0.01)(0.0134) = 0.000134 \text{ cm}^3$$

3-5 Puntos, direcciones y planos en la celda unitaria

Coordenadas de los puntos Es posible localizar ciertos puntos, como las posiciones de los átomos en la red o en la celda unitaria, construyendo el sistema de coordenadas dextrógiro de la figura 3-10. La distancia se mide en función del número de parámetros de red que habrá que moverse en cada una de las coordenadas x , y y z para pasar desde el origen hasta el punto en cuestión. Las coordenadas se expresan como tres distancias, y separando cada número con comas.

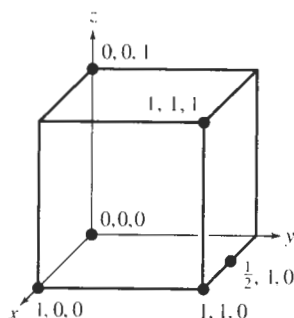


FIGURA 3-10 Coordenadas de puntos seleccionados en la celda unitaria. Los números se refieren a la distancia desde el origen en función de los números de parámetros de red.

Direcciones en la celda unitaria Ciertas direcciones en la celda unitaria son de particular importancia. Los metales se deforman, por ejemplo, en aquellas direcciones a lo largo de las cuales los átomos están en contacto más estrecho. **Los índices de Miller** para las direcciones son la notación abreviada de estas direcciones. El procedimiento que determina los índices de Miller para las direcciones es el siguiente:

1. Utilizando un sistema de coordenadas dextrógiro, determine las coordenadas de dos puntos que estén en esa dirección.
2. Reste las coordenadas del punto inicial de las coordenadas a las del punto final para obtener el número de parámetros de red recorridos en la dirección de cada eje del sistema de coordenadas.
3. Reduzca las fracciones y/o los resultados obtenidos de la resta a los mínimos enteros.
4. Encierre los números en corchetes []. Si se obtiene un signo negativo, represéntelo con una barra sobre el número.

EJEMPLO 3-6

Determine los índices Miller de las direcciones *A*, *B* y *C* de la figura 3-11.

SOLUCIÓN**Dirección A**

1. Los dos puntos son 1, 0, 0 y 0, 0, 0
2. $1, 0, 0 - 0, 0, 0 = 1, 0, 0$
3. No hay fracciones ni enteros a reducir
4. [100]

Dirección B

1. Los dos puntos son 1, 1, 1 y 0, 0, 0
2. $1, 1, 1 - 0, 0, 0 = 1, 1, 1$
3. No hay ni fracciones por simplificar ni enteros por reducir
4. [111]

Dirección C

1. Los dos puntos son $0, 0, 1$ y $\frac{1}{2}, 1, 0$
2. $0, 0, 1 - \frac{1}{2}, 1, 0 = -\frac{1}{2}, -1, 1$
3. $2(-\frac{1}{2}, -1, 1) = -1, -2, 2$
4. [122]

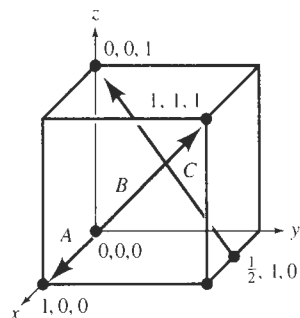


FIGURA 3-11 Direcciones y coordenadas cristalográficas requeridas para el ejemplo 3-6.

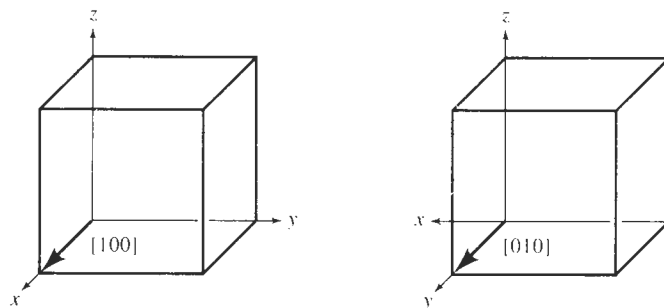


FIGURA 3-12 Equivalencia de direcciones cristalográficas de una familia en sistemas cúbicos.

TABLA 3-3 Direcciones de la forma $\langle 110 \rangle$ en sistemas cúbicos

$$\langle 110 \rangle = \begin{cases} [110] & [\bar{1}\bar{1}0] \\ [101] & [\bar{1}0\bar{1}] \\ [011] & [0\bar{1}\bar{1}] \\ [1\bar{1}0] & [\bar{1}10] \\ [10\bar{1}] & [\bar{1}01] \\ [01\bar{1}] & [0\bar{1}1] \end{cases}$$

Deberán observarse varios puntos acerca del uso de los índices de Miller para las direcciones:

1. Dado que las direcciones son vectores, una dirección y su negativo no son idénticas; $[100]$ no es igual a $[\bar{1}00]$. Representan la misma línea pero con direcciones opuestas.

2. Una dirección y su múltiplo son *idénticos*; $[100]$ es la misma dirección que $[200]$. Simplemente se omitió hacer la reducción a mínimos enteros.

3. Ciertos grupos de direcciones son *equivalentes*; sus índices particulares dependen de cómo se construyen las coordenadas. Por ejemplo, en un sistema cúbico, una dirección $[100]$ es equivalente a la dirección $[010]$ si se redefine el sistema de coordenadas según se muestra en la figura 3-12. Es posible referirse a grupos de direcciones equivalentes como **familias de direcciones**. Se utilizan los paréntesis angulares $\langle \rangle$ para indicar este conjunto, y todas las direcciones de la forma $\langle 110 \rangle$ aparecen en la tabla 3-3. Es de esperarse que un material tenga las mismas propiedades en cada una de estas 12 familias de direcciones $\langle 110 \rangle$.

Otra manera de caracterizar direcciones equivalentes es mediante la **distancia de repetición**, es decir, la distancia entre puntos de la red a lo largo de la dirección. Por ejemplo, se podría examinar la dirección $[110]$ en una celda unitaria CCC (figura 3-13); si se parte del punto 0, 0, 0, el siguiente punto de la red estará en el centro de una cara, o en un sitio $1/2, 1/2, 0$. La distancia entre los puntos de red es, por tanto, la mitad de la diagonal de la cara, es decir $\frac{1}{2}\sqrt{2}a_0$. En el cobre, que tiene un parámetro de red de 0.36151 nm, la distancia de repetición es 0.2556 nm.

La **densidad lineal** es el número de puntos de red por unidad de longitud a lo largo de una dirección. En el cobre, existen dos distancias de repetición a lo largo de la dirección $[110]$ en cada celda unitaria; dado que esta distancia es $\sqrt{2}a_0 = 0.51125$ nm, entonces:

$$\text{Densidad lineal} = \frac{2 \text{ distancias de repetición}}{0.51125 \text{ nm}} = 3.91 \text{ puntos de red/nm}$$

Observe que la densidad lineal también es el recíproco de la distancia de repetición.

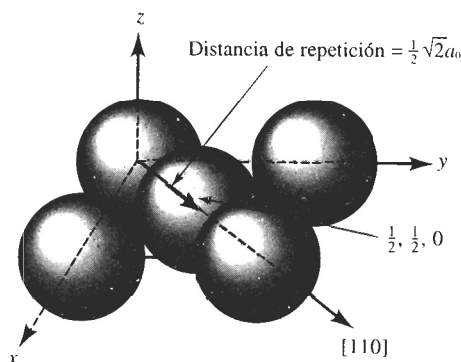


FIGURA 3-13 Cómo determinar la distancia de repetición, la densidad lineal y la fracción de empaquetamiento para la dirección $[110]$ en cobre CCC.

Finalmente, se podría calcular la **fracción de empaquetamiento** en una dirección en particular, es decir, la fracción verdaderamente cubierta por átomos. En el caso del cobre, en el cual un átomo está localizado en cada punto de la red, esta fracción es igual al producto de la densidad lineal por dos veces el radio atómico. En el caso de la dirección [110] en cobre CCC, el radio atómico $r = \sqrt{2}a_0/4 = 0.12781$ nm. Por tanto, la fracción de empaquetamiento es:

$$\begin{aligned}\text{Fracción de empaquetamiento} &= (\text{densidad lineal})(2r) \\ &= (3.91)(2)(0.12781) \\ &= 1.0\end{aligned}$$

Los átomos están en contacto en la dirección [110], ya que en los metales CCC la dirección [110] es compacta.

Planos en la celda unitaria Ciertos planos de átomos en un cristal también son significativos; por ejemplo, los metales se deforman a lo largo de aquellos planos de átomos que están empaquetados más estrechamente. Se utilizan los índices de Miller como una notación abreviada para identificar estos planos importantes, tal y como se describe en el procedimiento siguiente.

1. Identifique los puntos en los cuales el plano interseca los ejes de coordenadas x , y y z en función del número de parámetros de red. Si el plano pasa a través del origen, el origen del sistema de coordenadas deberá moverse.
2. Tome los recíprocos de estas intersecciones.
3. Elimine las fracciones pero *no* reduzca a los mínimos enteros.
4. Encierre los números resultantes entre paréntesis (). De nuevo, los números negativos se escribirán con una barra sobre los mismos.

EJEMPLO 3-7

Determine los índices de Miller de los planos A, B y C de la figura 3-14.

SOLUCIÓN

Plano A

1. $x = 1, y = 1, z = 1$
2. $\frac{1}{x} = 1, \frac{1}{y} = 1, \frac{1}{z} = 1$
3. No hay fracciones a simplificar
4. (111)

Plano B

1. El plano nunca cruza el eje de las z , por lo que $x = 1, y = 2, y z = \infty$.

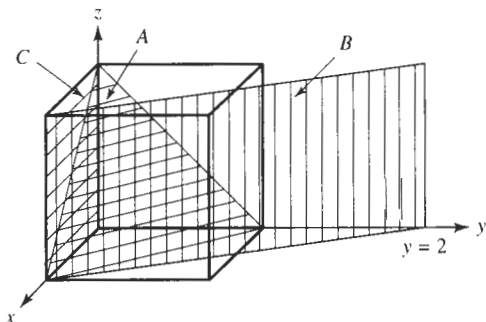


FIGURA 3-14 Planos cristalográficos e intersecciones para el ejemplo 3-7.

$$2. \frac{1}{x} = 1, \frac{1}{y} = \frac{1}{2}, \frac{1}{z} = 0$$

$$3. \text{ Simplificar fracciones: } \frac{1}{x} = 2, \frac{1}{y} = 1, \frac{1}{z} = 0$$

$$4. (210)$$

Plano C

1. Se debe mover el origen, ya que el plano pasa a través de 0, 0, 0. Se mueve también el origen un parámetro de red en la dirección y. Entonces, $x = , y = -1, y z = \infty$.

$$2. \frac{1}{x} = 0, \frac{1}{y} = -1, \frac{1}{z} = 0$$

3. No hay fracciones que simplificar

$$4. (010)$$

Deberán anotarse varios aspectos de importancia en los índices de Miller para los planos:

1. Los planos y sus negativos son idénticos (que esto no era cierto en el caso de direcciones). Por tanto, $(020) = (0\bar{2}0)$.

2. Los planos y sus múltiplos no son idénticos (de nuevo, esto resulta ser lo opuesto a lo que se encontró en el caso de direcciones). Es posible demostrar esto definiendo densidades planares y fracciones de empaquetamiento planar. La **densidad planar** es el número de átomos por unidad de superficie cuyo centro está sobre el plano; la fracción de empaquetamiento es el área sobre dicho plano cubierta por dichos átomos. El ejemplo 3-8 muestra cómo se puede calcular esto.

EJEMPLO 3-8

Calcule la densidad planar y la fracción de empaquetamiento planar para los planos (010) y (020) en el polonio cúbico simple, que tiene un parámetro de red de 0.334 nm.

SOLUCIÓN

Los dos planos aparecen dibujados en la figura 3-15. En el plano (010), los átomos están centrados en cada una de las esquinas de la cara del cubo, estando solamente 1/4 de cada átomo en la cara de la celda unitaria. Por tanto, los átomos totales en cada cara es uno. La densidad planar es:

$$\begin{aligned} \text{Densidad planar (010)} &= \frac{\text{átomos por cara}}{\text{área de la cara}} = \frac{\text{un átomo por cara}}{(0.334)^2} \\ &= 8.96 \text{ átomos/nm}^2 = 8.96 \times 10^{14} \text{ átomos/cm}^2 \end{aligned}$$

La fracción de empaquetamiento planar está dada por:

$$\begin{aligned} \text{Fracción de empaquetamiento (010)} &= \frac{\text{área de los átomos por cara}}{\text{área de la cara}} = \frac{(1 \text{ átomo})(\pi r^2)}{(a_0)^2} \\ &= \frac{\pi r^2}{(2r)^2} = 0.79 \end{aligned}$$

Sin embargo, no hay átomos centrados en los planos (020). En este caso, la densidad planar y la fracción de empaquetamiento planar son cero. Los planos (010) y (020) no son equivalentes.

3. En cada celda unitaria, los **planos de una familia** representan grupos de planos equivalentes que tienen sus índices particulares en función de la orientación del eje coordenado. Se representan estos grupos de planos similares utilizando la notación $\{ \}$. Los **planos de la familia** $\{110\}$ en sistemas cúbicos aparecen en la tabla 3-4.

4. En los sistemas cúbicos, una dirección que tiene los mismos índices que un plano es perpendicular a dicho plano.

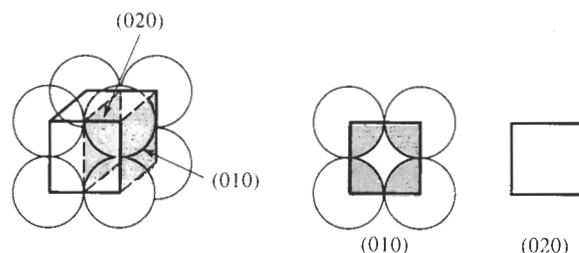


FIGURA 3-15 Las densidades planares de los planos (010) y (020) en unidades de celda CS no son idénticas.

Construcción de direcciones y de planos Para construir una dirección o un plano en la celda unitaria, simplemente se trabaja en forma inversa. El ejemplo 3-9 muestra cómo es posible hacerlo.

TABLA 3-4 Planos de la familia $\{110\}$ en sistemas cúbicos

$\{110\}$	$\left\{ \begin{array}{l} (110) \\ (101) \\ (011) \\ (1\bar{1}0) \\ (10\bar{1}) \\ (01\bar{1}) \end{array} \right.$
-----------	---

Nota: Los valores negativos de los planos no son planos únicos.

EJEMPLO 3-9

Dibuje (a) la dirección $[1\bar{2}1]$ y (b) el plano $(\bar{2}10)$ en una celda unitaria cúbica.

SOLUCIÓN

- Dado que se sabe que será necesario desplazarse en la dirección y negativa, se localizará el origen en 0, +1, 0. El punto inicial de la dirección quedará localizado en este nuevo origen. Un segundo punto de la dirección se puede determinar moviendo +1 en la dirección de las x, -2 en la dirección de las y y +1 en la dirección de las z [figura 3-16(a)].
- Para dibujar el plano $(\bar{2}10)$, primero habrá que calcular los recíprocos de los índices para obtener las intersecciones, esto es:

$$x = \frac{1}{-2} = -\frac{1}{2} \quad y = \frac{1}{1} = 1 \quad z = \frac{1}{0} = \infty$$

Dado que la intersección en x está en una dirección negativa, y se desea dibujar el plano dentro de la celda unitaria, se desplaza el origen $+1$ en la dirección x hacia $1, 0, 0$. Entonces será posible localizar la intersección de x en $-1/2$ y la de y en $+1$. El plano será paralelo al eje de las z [figura 3-16(b)].

Índices de Miller para las celdas unitarias hexagonales Un conjunto especial de **índices de Miller-Bravais** ha sido diseñado para las celdas unitarias hexagonales debido a la simetría singular del sistema (figura 3-17). El sistema de coordenadas utiliza cuatro ejes en vez de tres, con el eje a_3 redundante. El procedimiento para localizar los índices de los planos es exactamente el mismo que antes, pero se requiere de cuatro intersecciones, dando índices de la forma $(hkil)$. En función de la redundancia del eje a_3 y de la geometría especial del sistema, los primeros tres enteros de la designación, que corresponden a las intersecciones de a_1 , a_2 y a_3 , están relacionados por la ecuación $h + k = -i$.

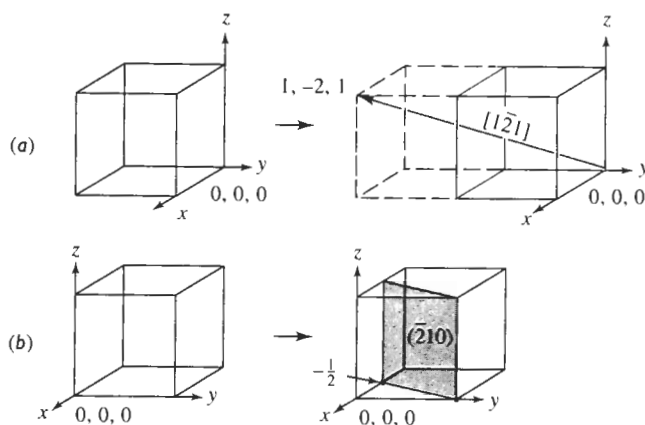


FIGURA 3-16 Construcción de una dirección (a) y de un plano (b) dentro de la celda unitaria (vea el ejemplo 3-9).

Las direcciones en las celdas HC se denotan mediante el sistema de tres o de cuatro ejes. En el caso del sistema de tres ejes, el procedimiento es el mismo que el de los índices de Miller tradicionales; muestras de este procedimiento aparecen en el ejemplo 3-10. Un procedi-

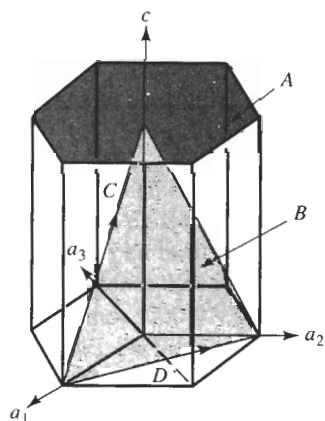


FIGURA 3-17 Índices de Miller-Bravais obtenidos para planos cristalográficos en celdas unitarias HC utilizando un sistema de coordenadas de cuatro ejes.

miento más complicado, mediante el cual la dirección se divide en cuatro vectores, es el que se requiere para el sistema de cuatro ejes. Se determina el número de parámetros de red a mover en cada dirección, a fin de ir desde la “cola” a la “cabeza” de la dirección, en tanto que por razones de consistencia hay que asegurarse de que $h + k = -i$. Esto aparece ilustrado en la figura 3-18, mostrando que la dirección $[010]$ es la misma que la dirección $[\bar{1}2\bar{1}0]$.

También es posible transformar la notación del sistema de tres ejes al de cuatro para el caso de direcciones utilizando las siguientes ecuaciones, donde h' , k' y l' son los índices en el sistema de tres ejes.

$$\left. \begin{aligned} h &= \frac{1}{3}(2h' - k') \\ k &= \frac{1}{3}(2k' - h') \\ i &= -\frac{1}{3}(h' + k') \\ l &= l' \end{aligned} \right\} \quad (3-6)$$

Después de la transformación, los valores de h , k , i y l pueden requerir simplificación de fracciones o reducción a los mínimos enteros.

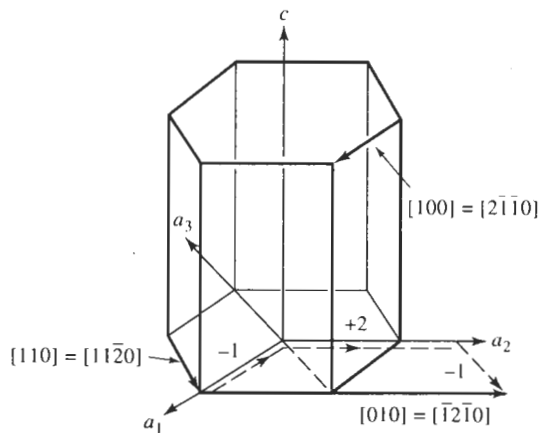


FIGURA 3-18 Direcciones típicas en la celda unitaria HC, utilizando los sistemas tanto de tres como de cuatro ejes. Las líneas punteadas muestran que la dirección $[1210]$ es equivalente a la dirección $[010]$.

EJEMPLO 3-10

Determine los índices de Miller-Bravais para los planos *A* y *B* así como para las direcciones *C* y *D* de la figura 3-17.

SOLUCIÓN

Plano A

1. $a_1 = a_2 = a_3 = \infty$, $c = 1$
2. $\frac{1}{a_1} = \frac{1}{a_2} = \frac{1}{a_3} = 0$, $\frac{1}{c} = 1$

3. No hay fracciones a simplificar.

4. (0001)

Plano B

1. $a_1 = 1$, $a_2 = 1$, $a_3 = -\frac{1}{2}$, $c = 1$

2. $\frac{1}{a_1} = 1$, $\frac{1}{a_2} = 1$, $\frac{1}{a_3} = -2$, $\frac{1}{c} = 1$

3. No hay fracciones a simplificar.

4. (1121)

Dirección C

1. Dos puntos son 0, 0, 1 y 1, 0, 0.

2. 0, 0, 1 -1, 0, 0 = -1, 0, 1

3. No hay fracciones que simplificar o enteros a reducir.

4. $[\bar{1}01]$ o $[\bar{2}113]$

Dirección D

1. Dos puntos son 0, 1, 0 y 1, 0, 0.

2. 0, 1, 0 -1, 0, 0 = -1, 1, 0

3. No hay fracciones que simplificar o enteros a reducir.

4. $[\bar{1}10]$ o $[\bar{1}100]$

Planos y direcciones compactas Al examinar la relación entre radio atómico y el parámetro de red, se buscan direcciones compactas, donde los átomos estén en contacto continuo. Ahora se pueden asignar índices de Miller a esas direcciones compactas, según se muestra en la tabla 3-5.

TABLA 3-5 Planos y direcciones compactos

Estructura	Direcciones	Planos
CS	$\langle 100 \rangle$	Ninguna
CC	$\langle 111 \rangle$	Ninguna
CCC	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$
HC	$\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ o $\langle 11\bar{2}0 \rangle$	(0001), (0002)

También se pueden examinar celdas unitarias CCC y HC más de cerca y descubrir que por lo menos existe un conjunto de planos compactos en cada una de ellas. Los planos compactos aparecen en la figura 3-19. Note que se produce una disposición hexagonal de átomos en dos dimensiones. Los planos compactos son fáciles de encontrar en la celda unitaria HC; se trata de los planos (0001) y (0002) de la estructura HC a los que se les da el nombre especial de **planos basales**. De hecho, se puede construir una celda unitaria HC al apilar planos compactos con una **secuencia de apilamiento**...ABABAB... (figura 3-19). Los átomos del plano B, que es el plano (0002), se anidan en los valles entre átomos del plano A, que es el plano inferior (0001). Si se

coloca un plano de orientación idéntica al plano *A* en los valles del plano *B*, se crea la estructura HC. Observe que todos los planos compactos posibles son paralelos entre sí. Sólo los planos basales —(0001) y (0002)—, son compactos.

De la figura 3-19, se encuentra el número de coordinación de los átomos de la estructura HC. El átomo central en un plano basal está en contacto con otros átomos del mismo plano. Tres átomos en un plano inferior y tres átomos en un plano superior también tocan este mismo átomo. El número de coordinación es 12.

En la estructura CCC, planos compactos son de la forma {111} (figura 3-20). Cuando se apilan planos paralelos (111), los átomos del *B* se anidan en los valles del *A* y los átomos del plano *C* se acomodan sobre los valles tanto del *A* como del *B*. El cuarto plano encaja directamente sobre átomos del *A*. Por tanto, se produce una secuencia de apilamiento ...*ABCABCABC*... utilizando el plano (111). De nuevo, se encuentra que cada uno de los planos tiene un número de coordinación igual a 12.

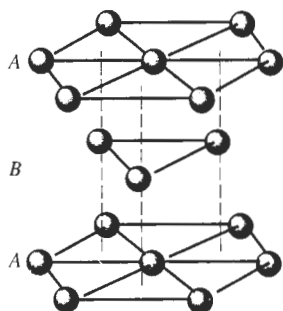


FIGURA 3-19 La secuencia de apilamiento *ABABAB* de planos compactos produce la estructura HC.

A diferencia de la celda unitaria HC, existen cuatro conjuntos de planos compactos no paralelos —(111), ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$), (111) y ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)— dentro de una celda CCC. Esta diferencia entre las celdas unitarias CCC y HC —la presencia o ausencia de planos compactos que se intersecan— afectan el comportamiento de metales que tengan estas estructuras.

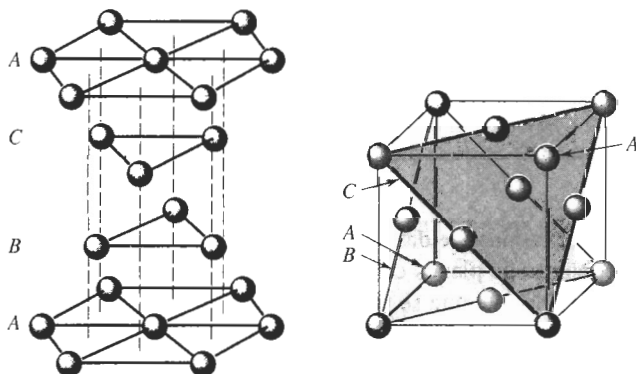


FIGURA 3-20 La secuencia de apilamiento *ABCABCABC* de planos compactos produce la estructura CCC.

Comportamiento isotrópico y anisotrópico Debido a las diferencias del arreglo atómico en los planos y direcciones dentro de un cristal, también varían las propiedades según la dirección. Un material es **anisotrópico** si el valor de sus propiedades depende de la dirección cristalográfica a lo largo de la cual se mide la propiedad. Por ejemplo, el módulo de elasticidad del aluminio es 75.9 GPa (11×10^6 psi) en las direcciones $\langle 111 \rangle$, pero es de sólo 63.4 GPa (9.2×10^6 psi) en las direcciones $\langle 100 \rangle$. Si los valores de las propiedades son idénticos en todas las direcciones, entonces el cristal es **isotrópico**.

Distancia interplanar La distancia entre dos planos de átomos paralelos adyacentes con los mismos índices de Miller se conoce como **distancia interplanar** d_{hkl} . La distancia interplanar en materiales cúbicos está dada por la ecuación general,

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (3-7)$$

donde a_0 es el parámetro de red y h, k y l representan los índices de Miller de los planos adyacentes considerados.

3-6 Sitios intersticiales

En cualquiera de las estructuras cristalinas que han sido descritas, existen pequeños huecos entre los átomos de la red en los cuales se pueden colocar átomos más pequeños. Estos espacios se conocen como **sitios intersticiales**.

Un átomo, al ser colocado en un sitio intersticial toca dos o más átomos de la red. Este átomo intersticial tiene un número de coordinación igual al número de átomos que toca. La figura 3-21 muestra sitios intersticiales en las estructuras CS, CC, y CCC. El sitio **cúbico**, con un número de coordinación de ocho ocurre en la estructura CS. Los sitios **octaédricos** dan un número de coordinación de seis, en tanto que los **tetraédricos** dan un número de coordinación de cuatro. Como un ejemplo, los sitios octaédricos de las celdas unitarias CC quedan localizados en las caras del cubo; un pequeño átomo colocado en un sitio octaédrico toca los cuatro átomos de las esquinas de la cara, al que está al centro de la celda unitaria, además de otro en la parte central de la celda unitaria adyacente, y nos da un número de coordinación de seis. En las celdas unitarias CCC, existen los sitios octaédricos en los centros de cada orilla del cubo, así como en el centro de la celda unitaria.

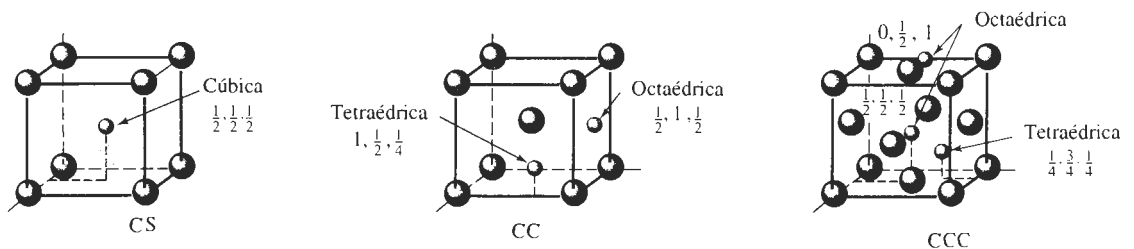


FIGURA 3-21 Localización de los sitios intersticiales en celdas unitarias cúbicas. Sólo se muestran sitios representativos.

EJEMPLO 3-11

Calcule el número de sitios octaédricos que corresponden de *manera única* a una celda unitaria CCC.

SOLUCIÓN

Los sitios octaédricos incluyen las doce orillas en la celda unitaria; sus coordenadas son

$$\frac{1}{2}, 0, 0 \quad \frac{1}{2}, 1, 0 \quad \frac{1}{2}, 0, 1 \quad \frac{1}{2}, 1, 1$$

$$0, \frac{1}{2}, 0 \quad 1, \frac{1}{2}, 0 \quad 1, \frac{1}{2}, 1 \quad 0, \frac{1}{2}, 1$$

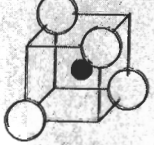
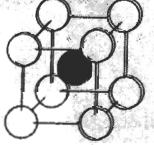
$$0, 0, \frac{1}{2} \quad 1, 0, \frac{1}{2} \quad 1, 1, \frac{1}{2} \quad 0, 1, \frac{1}{2}$$

además de la posición central, $1/2, 1/2, 1/2$. Cada uno de los sitios en la orilla de la celda unitaria están compartidos entre cuatro celdas unitarias, por lo cual sólo una cuarta parte de cada sitio corresponde de manera única a cada celda unitaria. Por tanto, el número de sitios que corresponden de manera única a cada celda es

$$(12 \text{ orillas}) \left(\frac{1}{4} \text{ por celda}\right) + 1 \text{ localización central} = 4 \text{ sitios octaédricos}$$

Átomos intersticiales con radios ligeramente mayores al radio del sitio intersticial pueden introducirse en dicho sitio, empujando los átomos que lo rodean ligeramente hacia los lados. Sin embargo, los átomos cuyos radios son menores que el del hueco, no podrían acomodarse en el sitio intersticial, porque el ion entonces estaría “suelto” en dicho lugar. Si

TABLA 3-6 Número de coordinación y relación del radio

Número de coordinación	Localización del sitio intersticial	Relación del radio	Representación
2	Lineal	0-0.155	
3	Centro del triángulo	0.155-0.225	
4	Centro del tetraedro	0.225-0.414	
6	Centro del octaedro	0.414-0.732	
8	Centro del cubo	0.732-1.000	

el átomo intersticial fuera demasiado grande, “preferirá” introducirse en un sitio con número de coordinación más grande (tabla 3-6). Por tanto, un átomo cuya relación de radio esté entre 0.225 y 0.414 entra en un sitio tetraédrico; si su radio es algo mayor que 0.414, se introducirá en un sitio octaédrico. Cuando los átomos son del mismo tamaño, como en los metales puros, la relación de radio es uno y el número de coordinación 12, como con los metales de estructuras CCC y HC.

EJEMPLO 3-12

Diseño de un muro para absorción de radiaciones

Se desea producir un muro que absorba radiaciones, compuesto de 10,000 esferas de plomo, cada una de ellas de tres centímetros de diámetro, en una arreglo cúbico centrado en las caras. Se decidió que ocurrirá una mejor absorción al llenar los sitios intersticiales con esferas más pequeñas. Determine el tamaño de las esferas de plomo más pequeñas y determine cuántas serán necesarias.

SOLUCIÓN

Es posible aplicar el conocimiento de las estructuras cristalinas para este diseño. Por ejemplo, introducir esferas de plomo pequeñas que simplemente quepan justo en todos los sitios octaédricos entre esferas de 3 cm. Primero, se determinará el diámetro de los sitios octaédricos localizados entre las esferas. La figura 3-22 muestra el arreglo de las esferas en un plano que contiene uno de estos sitios octaédricos.

$$\begin{aligned} 2R + 2r &= 2R\sqrt{2} \\ r &= \sqrt{2}R - R = (\sqrt{2} - 1)R \\ r/R &= 0.414 \end{aligned}$$

Esto es coherente con los datos de la tabla 3-6. En vista de que $r/R = 0.414$, el radio de las esferas de plomo pequeñas es

$$r = 0.414R = (0.414)(3 \text{ cm}/2) = 0.621 \text{ cm}.$$

Según el ejemplo 3-11 hay cuatro sitios octaédricos en el arreglo CCC, que también tiene cuatro puntos de red. Por tanto, se necesita la misma cantidad de esferas pequeñas que grandes, es decir, 10,000.

Como ejercicio, usted podría determinar el cambio en el factor de empaquetamiento debido a las esferas pequeñas; también se podrían comparar los sitios tetraédricos con los octaédricos.

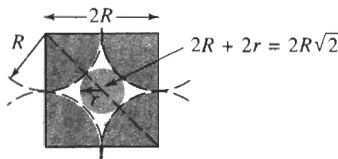


FIGURA 3-22 Cálculo del sitio intersticial octaédrico (para el ejemplo 312).

3-7 Cristales iónicos

Muchos materiales cerámicos contienen enlaces iónicos entre aniones y cationes. Estos materiales iónicos deben tener estructuras cristalinas que aseguren la neutralidad eléctrica, permitiendo, sin embargo, que iones de tamaño distinto se empaquen con eficiencia.

Neutralidad eléctrica Si las cargas en el anión y en el catión son idénticas, el compuesto cerámico tiene la fórmula AX y el número de coordinación para cada ion debe ser el mismo, si se desea asegurar el equilibrio correcto de la carga. Como un ejemplo, cada catión puede estar rodeado por seis aniones, en tanto que cada anión está a su vez, rodeado por seis cationes. Sin embargo, si la valencia del catión es $+2$ y la del anión -1 , entonces deberán estar dos veces más aniones, y la fórmula será de la forma AX_2 . La estructura del compuesto AX_2 debe asegurar que el número de coordinación del catión, sea el doble del número de coordinación del anión. Por ejemplo, cada catión puede tener ocho aniones como vecinos más cercanos, en tanto que únicamente cuatro cationes entran en contacto con cada anión.

Radios iónicos Las estructuras cristalinas de los compuestos iónicamente enlazados, a menudo pueden describirse colocando los cationes en los puntos normales de red de una celda unitaria, con los aniones colocados en uno o más de los sitios intersticiales descritos en la sección 3-6. La relación de tamaño de los radios iónicos de anión y catión influye la forma de empaquetamiento y el número de coordinación (tabla 3-6). A continuación se describen algunas estructuras comunes en compuestos cerámicos.

Estructura del cloruro de cesio El cloruro de cesio (CsCl) es cúbico simple; el sitio intersticial “cúbico” lo ocupa el anión Cl (figura 3-23). La relación de radios, $r_{\text{Cs}}/r_{\text{Cl}} = 0.167 \text{ nm}/0.181 \text{ nm} = 0.92$, determina que el cloruro de cesio tiene un número de coordinación igual a ocho. Se puede representar la estructura como una estructura cúbica simple con dos iones, uno de Cs y uno de Cl , asociados con cada punto de red. Esta estructura es posible cuando el anión y el catión tienen la misma valencia.

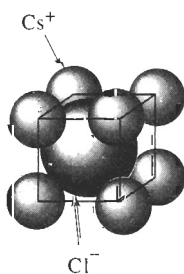


FIGURA 3-23 Estructura del cloruro de cesio, una celda unitaria CS con dos iones (Cs^+ y Cl^-) por punto de red.

EJEMPLO 3-13

Para el KCl , (a) verifique que el compuesto tiene la estructura del cloruro de cesio y (b) calcule el factor de empaquetamiento para el compuesto.

SOLUCIÓN

a. Del Apéndice B, $r_{\text{K}} = 0.133 \text{ nm}$ y $r_{\text{Cl}} = 0.181 \text{ nm}$, por lo que:

$$\frac{r_{\text{K}}}{r_{\text{Cl}}} = \frac{0.133}{0.181} = 0.735$$

Dado que $0.732 < 0.735 < 1.000$, el número de coordinación para cada tipo de ion es ocho y una estructura CsCl es probable.

b. Los iones se tocan a lo largo de la diagonal del cuerpo de la celda unitaria, por lo que:

$$\sqrt{3}a_0 = 2r_K + 2r_{Cl} = 2(0.133) + 2(0.181) = 0.628 \text{ nm}$$

$$a_0 = 0.363 \text{ nm}$$

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{\frac{4}{3}\pi (0.133)^3 + \frac{4}{3}\pi (0.181)^3}{(0.363)^3} = 0.725$$

$$= \frac{\frac{4}{3}\pi r_K^3 (1 \text{ K ion}) + \frac{4}{3}\pi r_{Cl}^3 (1 \text{ Cl ion})}{a_0^3}$$

Estructura del cloruro de sodio La relación de radios para los iones de sodio y de cloro es $r_{Na} / r_{Cl} = 0.097 \text{ nm} / 0.181 \text{ nm} = 0.536$; el ion de sodio tiene una carga de +1; el ion de cloro tiene una carga de -1. Por tanto, con base en el equilibrio de cargas y en la relación de radios, cada anión y catión debe tener un número de coordinación de seis. La estructura CCC, con los aniones de Cl en las posiciones CCC y los cationes de Na en los cuatro sitios octaédricos, satisface estos requisitos (figura 3-24). También se puede considerar esta estructura como CCC con dos iones, uno de Na y otro de Cl, asociados en cada punto de red. Muchos materiales cerámicos, incluyendo el MgO, CaO y FeO, tienen esta estructura.

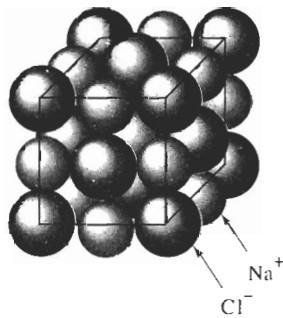


FIGURA 3-24 Estructura del cloruro de sodio, una celda unitaria CCC con dos iones ($Na^+ + Cl^-$) por punto de red.

EJEMPLO 3-14.

Demuestre que el MgO tiene la estructura cristalina del cloruro de sodio y calcule su densidad.

SOLUCIÓN

Del Apéndice B, $r_{Mg} = 0.066 \text{ nm}$ y $r_O = 0.132 \text{ nm}$, por lo que:

$$\frac{r_{Mg}}{r_O} = \frac{0.066}{0.132} = 0.50$$

Dado que $0.414 < 0.50 < 0.732$, el número de coordinación para cada ion es seis y la estructura del cloruro de sodio es posible.

Los pesos atómicos son 24.312 y 16 g/mol para el magnesio y el oxígeno respectivamente. Los iones se tocan a lo largo de las orillas del cubo, por lo que:

$$a_0 = 2r_{Mg} + 2r_O = 2(0.066) + 2(0.132) = 0.396 \text{ nm} = 3.96 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\rho = \frac{(4 \text{ iones de Mg})(24.312) + (4 \text{ iones de O})(16)}{(3.96 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 (6.02 \times 10^{23})} = 4.31 \text{ g/cm}^3$$

Estructura de la blenda de zinc Aunque los iones Zn tienen una carga de +2 y el S tiene una carga de -2, la blenda de zinc (ZnS) no puede tener la estructura del cloruro de sodio, ya que $r_{\text{Zn}}/r_{\text{S}} = 0.074 \text{ nm}/0.184 \text{ nm} = 0.402$. Esta relación de radios exige un número de coordinación igual a cuatro, lo que a su vez significa que los iones de azufre se introducen en sitios tetraédricos en una celda unitaria, como aparece indicado en la celda unitaria por el pequeño “cubículo” (figura 3-25). La estructura CCC, con cationes Zn en los puntos de red normales y aniones S en la mitad de los sitios tetraédricos pueden aceptar las restricciones tanto del equilibrio de cargas, como del número de coordinación. Una diversidad de materiales, incluyendo el semiconductor GaAs, tienen esta estructura.

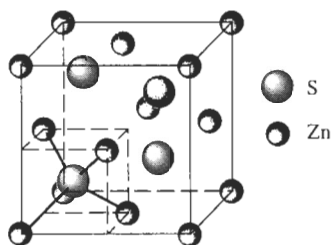


FIGURA 3-25 Celda unitaria de la blenda de zinc.

Estructura de la fluorita La estructura de la fluorita es CCC, con aniones localizados en las ocho posiciones tetraédricas (figura 3-26). Entonces, existen cuatro cationes y ocho aniones por celda y el compuesto cerámico debe tener la fórmula AX_2 , como en el fluoruro de calcio o CaF_2 . El número de coordinación de los iones de calcio es ocho, pero el correspondiente a los iones de fluoruro es cuatro, asegurando, por tanto, un equilibrio de las cargas.

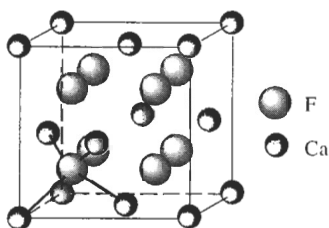


FIGURA 3-26 Celda unitaria de la fluorita.

3-8 Estructuras covalentes

Los materiales con enlace covalente frecuentemente deben tener estructuras complejas, a fin de satisfacer las restricciones direccionales impuestas por el tipo de enlace.

Estructura cúbica de diamante Elementos como el silicio, el germanio y el carbono en su forma de diamante están unidos por cuatro enlaces covalentes y producen un tetraedro [figura 3-27 (a)]. El número de coordinación para cada átomo de silicio es solamente de cuatro, en razón a la naturaleza del enlace covalente.

Como estos grupos tetraédricos están combinados, se puede construir un cubo grande [figura 3-27 (b)]. Este cubo grande contiene ocho cubos más pequeños del tamaño del cubo tetraédrico; sin embargo, sólo cuatro de los cubos contienen tetraedros. El cubo grande es la celda unitaria **cúbica de diamante**, es decir la celda unitaria CD. Los átomos de las esquinas de los cubos tetraédricos proporcionan átomos en los puntos de red CCC normales. Sin embargo, están presentes

cuatro átomos adicionales dentro de la celda unitaria CD de los átomos en el centro de los cubos tetraédricos. Podemos describir la red CD como una red CCC con dos átomos asociados con cada punto de red. Por tanto, deberán existir ocho átomos por celda unitaria.

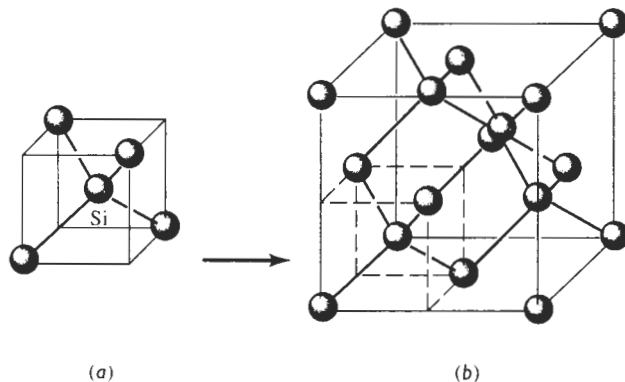


FIGURA 3-27 (a) Celda unitaria tetraédrica y (b) cúbica de diamante (CD). Esta estructura abierta es producida en razón de los requisitos de los enlaces covalentes.

EJEMPLO 3-15

Determine el factor de empaquetamiento del silicio cúbico de diamante.

SOLUCIÓN

Se encontró que los átomos se tocan a lo largo de la diagonal del cuerpo en la celda (figura 3-28). Aunque no hay átomos presentes en todas las posiciones a lo largo de la diagonal del cuerpo, existen huecos que tienen el mismo diámetro que los átomos. En consecuencia:

$$\begin{aligned} \sqrt{3}a_0 &= 8r \\ \text{Factor de empaquetamiento} &= \frac{(8 \text{ átomos/celdas})\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{a_0^3} \\ &= \frac{(8)\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{(8r/\sqrt{3})^3} \\ &= 0.34 \end{aligned}$$

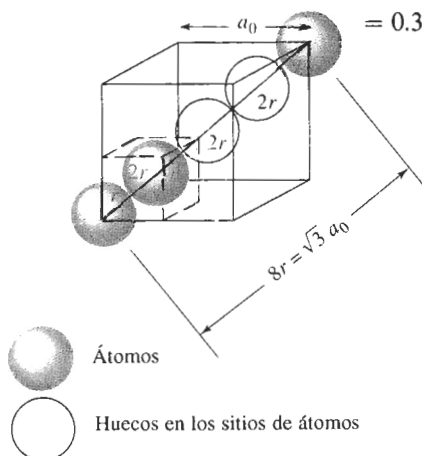


FIGURA 3-28 Cómo determinar la relación entre el parámetro de red y el radio atómico en una celda unitaria cúbica de diamante (para el ejemplo 3-15).

Sílice cristalino En algunas de sus formas, el sílice (es decir, el SiO_2) tiene una estructura cerámica cristalina que es parte covalente y parte iónica. La figura 3-29 muestra la estructura cristalina de una forma del sílice, la cristobalita β que es una estructura CCC complicada. Los radios iónicos del silicio y del oxígeno son 0.042 nm y 0.132 nm respectivamente, por lo que la relación de radios es $r_{\text{Si}}/r_{\text{O}} = 0.318$ y el número de coordinación es 4.

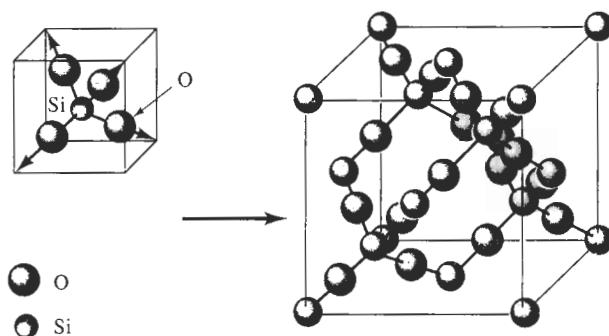


FIGURA 3-29 Los tetraedros del silicio-oxígeno y su combinación para formar la cristobalita β del sílice.

Polímeros cristalinos Un cierto número de polímeros pueden formar una estructura cristalina. Las líneas punteadas en la figura 3-30 resaltan la celda unitaria para la red del polietileno. Éste se obtiene uniendo moléculas C_2H_4 para producir largas cadenas de polímeros que forman una celda unitaria ortorrómbica. Algunos polímeros, incluyendo el nylon, pueden tener varias formas polimórficas.

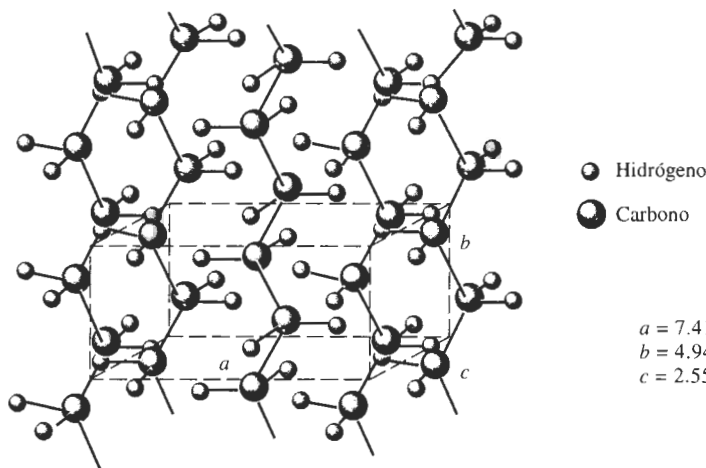


FIGURA 3-30 Celda unitaria del polietileno cristalino.

EJEMPLO 3-16

¿Cuántos átomos de carbono y de hidrógeno existen en cada celda unitaria de polietileno cristalino? Existen el doble de átomos de hidrógeno que de átomos de carbono en la cadena. La densidad del polietileno es de aproximadamente 0.9972 g/cm^3 .

SOLUCIÓN

Si x es el número de átomos de carbono, entonces $2x$ será el número de átomos de hidrógeno. De los parámetros de red que aparecen en la figura 3-30:

$$\rho = \frac{(x)(12 \text{ g/mol}) + (2x)(1 \text{ g/mol})}{(7.41 \times 10^{-8} \text{ cm})(4.94 \times 10^{-8} \text{ cm})(2.55 \times 10^{-8} \text{ cm})(6.02 \times 10^{23})}$$

$$0.9972 = \frac{14x}{56.2}$$

$x = 4$ átomos de carbono por celda

$2x = 8$ átomos de hidrógeno por celda

3-9 Difracción de rayos X

Se puede obtener información sobre la estructura cristalina de un material utilizando difracción de rayos X. Cuando un haz monocromático (de una sola longitud de onda) del mismo orden de magnitud que el espaciamento atómico del material lo golpea, los rayos X se dispersan en todas direcciones. La mayor parte de la radiación dispersa por un átomo anula la dispersada por otros átomos. Sin embargo, los rayos X que golpean ciertos planos cristalográficos en ángulos específicos se ven reforzados en vez de eliminados. Este fenómeno se conoce como **difracción**. Los rayos X han sido difractados o el haz ha sido reforzado, cuando las condiciones satisfacen la **ley de Bragg**,

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}}, \quad (3-8)$$

donde el ángulo θ es la mitad del ángulo entre el haz difractado y la dirección original del haz, λ es la longitud de onda de los rayos X y d_{hkl} es la distancia interplanar entre los planos que causan el refuerzo constructivo del haz (figura 3-31).

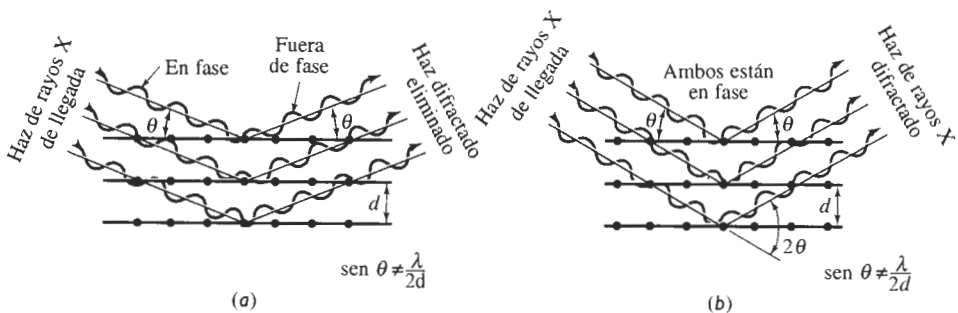


FIGURA 3-31 Interacciones destructivas (a) y de refuerzo (b) entre rayos X y la estructura cristalina de un material. El refuerzo ocurre en ángulos que satisfacen la ley de Bragg.

Cuando el material se prepara en forma de polvo fino, siempre habrá algunas partículas de polvo cuyos planos (hkl) queden orientados en el ángulo θ adecuado para satisfacer la ley de Bragg. Por tanto, se producirá un haz difractado, a un ángulo de 2θ en relación con el haz incidente. En un **difractómetro**, un detector móvil de rayos X registra los ángulos 2θ en los cuales se difracta el haz, dando un patrón característico de difracción (figura 3-32). Si se conoce la lon-

gitud de onda de los rayos X, se pueden determinar los espaciamentos interplanares y, finalmente, la identidad de los planos que causan dicha difracción.

Para identificar la estructura cristalina de un material cúbico, se anota el patrón de las líneas de difracción, típicamente, mediante la creación de una tabla de valores del $\sin^2 \theta$. Al combinar la ecuación 3-7 con la ecuación 3-8 para la distancia interplanar, se obtiene:

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a_0^2} (h^2 + k^2 + l^2) \quad (3-9)$$

En metales cúbicos simples, todos los planos posibles producirán difracciones, dando un patrón $h^2 + k^2 + l^2$ de 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8.... En metales cúbicos centrados en el cuerpo, la difracción proviene únicamente de aquellos planos que tengan una suma entera par $h^2 + k^2 + l^2$ de 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16,... Por lo que se refiere a los metales cúbicos centrados en las caras existe más interferencia destructora y los planos que se difractarán son los que tengan una suma $h^2 + k^2 + l^2$ de 3, 4, 8, 11, 12, 16,... Calculando los valores de $\sin^2 \theta$ y a continuación encontrando el patrón apropiado, se puede determinar la estructura cristalina de los metales que tengan una de estas estructuras simples, según se ilustra en el ejemplo 3-17.

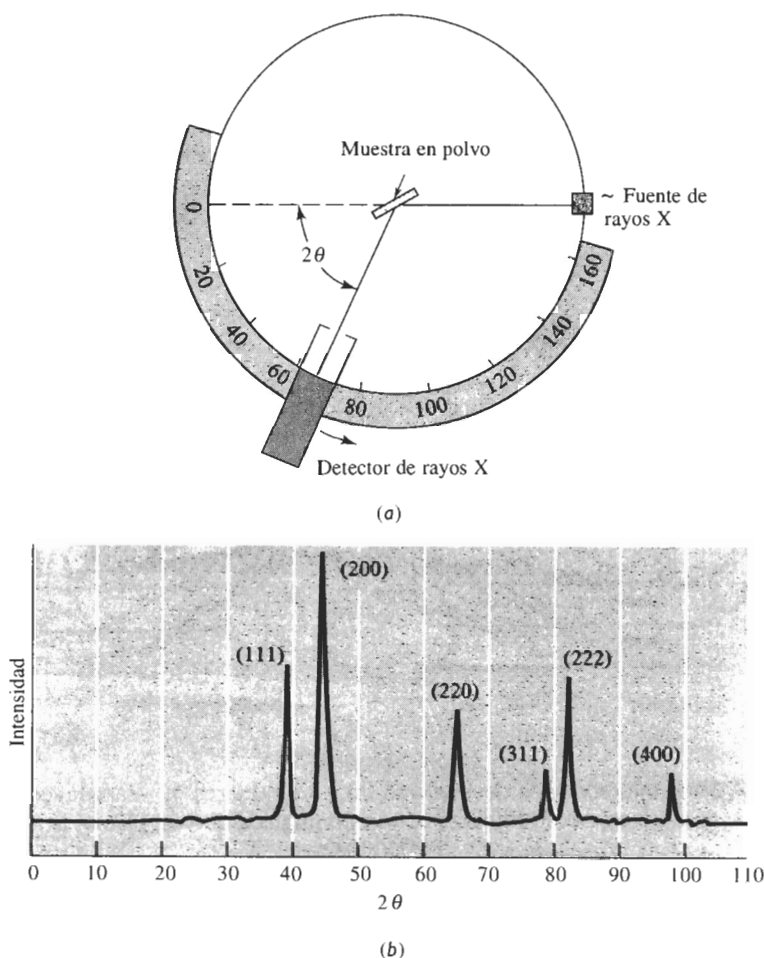


FIGURA 3-32 (a) Diagrama de un difractómetro, mostrando el haz incidente y el haz difractado, la muestra en forma de polvo y el detector de rayos X. (b) Patrón de difracción a partir de una muestra de polvo de oro.

EJEMPLO 3-17

Los resultados de un experimento de difracción de rayos X con $\lambda = 0.7107 \text{ \AA}$ muestran que ocurren picos difractados en los siguientes ángulos 2θ :

Pico	2θ	Pico	2θ
1	20.20	5	46.19
2	28.72	6	50.90
3	35.36	7	55.28
4	41.07	8	59.42

Determine la estructura cristalina, los índices del plano que produce cada pico y el parámetro de red del material.

SOLUCIÓN

Se puede determinar primero el valor de $\sin^2 \theta$ para cada uno de los picos y a continuación dividirlo por el denominador menor, 0.0308.

Pico	2θ	$\sin^2 \theta$	$\sin^2 \theta / 0.0308$	$h^2 + k^2 + l^2$	(hkl)
1	20.20	0.0308	1	2	(110)
2	28.72	0.0615	2	4	(200)
3	35.36	0.0922	3	6	(211)
4	41.07	0.1230	4	8	(220)
5	46.19	0.1539	5	10	(310)
6	50.90	0.1847	6	12	(222)
7	55.28	0.2152	7	14	(321)
8	59.42	0.2456	8	16	(400)

Al hacer lo anterior, se encuentra un patrón de valores de $\sin^2 \theta / 0.0308 = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$ y 8 . Si el material fuera cúbico simple, el 7 no estaría presente porque no existen planos $h^2 + k^2 + l^2$ con un valor de 7. Por tanto, el patrón debe ser realmente 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16... y debe tratarse de un material cúbico centrado en el cuerpo. Los valores (hkl) listados dan estos valores $h^2 + k^2 + l^2$ requeridos.

A continuación se utilizarán los valores 2θ para calcular el espaciamiento interplanar y de ahí el parámetro de red. Escogiendo el pico 8:

$$2\theta = 59.42 \quad \text{es decir} \quad \theta = 29.71$$

$$d_{400} = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{0.7107}{2 \sin(29.71)} = 0.71699 \text{ \AA}$$

$$a_0 = d_{400} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = (0.71699)(4) = 2.868 \text{ \AA}$$

Éste es el parámetro de red correspondiente al hierro cúbico centrado en el cuerpo.

RESUMEN

Se pueden organizar los átomos en los materiales sólidos ya sea con un orden de corto alcance o con uno de largo alcance. Los materiales amorfos, como los vidrios y muchos polímeros, sólo tienen orden de corto alcance; los materiales cristalinos, incluyendo muchos materiales cerámicos, tienen tanto órdenes de largo alcance como de corto. La periodicidad a largo alcance en estos materiales se describe mediante la estructura cristalina.

- El arreglo atómico de los materiales cristalinos está representado por siete sistemas cristalinos generales, que incluyen catorce redes de Bravais específicas. Los ejemplos incluyen redes cúbicas simples, cúbicas centradas en el cuerpo, cúbicas centradas en las caras y hexagonales.
- Una estructura cristalina está caracterizada por los parámetros de red de la celda unitaria, que es la subdivisión más pequeña de la estructura cristalina que todavía describe la estructura general de la red. Otras características incluyen el número de puntos de red y de átomos por celda unitaria; el número de coordinación (es decir, el número de vecinos más cercanos) de los átomos en la celda unitaria y el factor de empaquetamiento de los átomos en la celda unitaria.
- Los materiales alotrópicos o polimórficos tienen más de una estructura cristalina posible. A menudo, la estructura y las propiedades de materiales con esta característica se pueden controlar mediante tratamientos térmicos especiales.
- Los átomos de metales que tengan estructuras cristalinas cúbicas centradas en la cara y hexagonales compactas poseen un empaquetado compacto. Los átomos están arreglados de tal forma que ocupan la fracción más grande del espacio. Las estructuras CCC y HC consiguen este arreglo mediante el apilamiento de distintas secuencias de planos atómicos compactos.
- Los puntos, las direcciones y los planos dentro de la estructura cristalina pueden ser identificados de manera formal mediante la asignación de coordenadas y de índices de Miller.
- Los valores de las propiedades mecánicas y físicas pueden ser diferentes si se miden a lo largo de distintas direcciones o planos dentro de un cristal; si ese es el caso, se dice que el cristal es anisotrópico. Si los valores de las propiedades son idénticos en todas direcciones, el cristal es isotrópico.
- Los sitios intersticiales o huecos entre los átomos normales de una red se pueden llenar utilizando otros átomos o iones. La estructura cristalina de muchos materiales cerámicos se puede comprender al considerar la forma en que se ocupan estos sitios. Los átomos o los iones que se localizan en los sitios intersticiales juegan un papel importante en el endurecimiento de los materiales, al influir las propiedades físicas de los mismos y en el control de su procesamiento.

GLOSARIO

Alotropía Característica de un material que es capaz de existir con más de una estructura cristalina, dependiendo de la temperatura y de la presión.

Anisotropía Característica de tener propiedades con valores distintos en direcciones diferentes.

Celda unitaria Subdivisión de la red que aún conserva las características generales de toda la red.

Cúbico de diamante Tipo especial de estructura cristalina cúbica centrada en las caras, que se observa en el carbono, en el silicio y en otros materiales de enlace covalente.

Densidad Masa por volumen unitario de un material, por lo general en unidades de g/cm^3 .

Densidad lineal Número de puntos de red por unidad de longitud a lo largo de una dirección.

Densidad planar Número de átomos por unidad de área, cuyos centros están sobre dicho plano.

Difracción Interferencia constructiva, o refuerzo, de un haz de rayos X que interactúa con un material. El haz difractado proporciona una información útil en relación con la estructura cristalina del material.

Direcciones compactas Sentidos dentro de un cristal, a lo largo de las cuales los átomos están en contacto.

Distancia de repetición Distancia entre dos puntos adyacentes de la red, a lo largo de una dirección.

Distancia interplanar Separación entre dos planos paralelos adyacentes con los mismos índices de Miller.

Estructura cristalina Arreglo regular repetible de los átomos en un material.

Factor de empaquetamiento Fracción del espacio ocupado por los átomos.

Familia de direcciones Direcciones cristalográficas que tienen las mismas características, aunque su “sentido” sea distinto. Se indican dentro de paréntesis angulares $\langle \rangle$.

Familia de planos Planos cristalográficos que tienen las mismas características, aunque sus orientaciones sean distintas. Se expresan dentro de llaves $\{ \}$.

Fracción de empaquetamiento Fracción de una dirección (fracción de empaquetamiento lineal) o de un plano (factor de empaquetamiento planar) que realmente está ocupada por átomos o iones. Cuando hay un átomo localizado en cada punto de la red, la fracción de empaquetamiento lineal a lo largo de una dirección es el producto de la densidad linear por dos veces el radio atómico.

Índices de Miller-Bravais Notación abreviada especial para describir los planos cristalográficos en las celdas unitarias hexagonales compactas.

Índices de Miller Expresión abreviada para describir ciertas direcciones y planos cristalográficos en un material.

Isotropía Característica de poseer los mismos valores de las propiedades en todas las direcciones.

Ley de Bragg Relación que describe el ángulo en que se difracta un haz de rayos X de una longitud de onda particular en planos cristalográficos con un espaciamiento interplanar dado.

Materiales amorfos Los que, incluyendo los vidrios, no tienen un orden de largo alcance o estructura cristalina de largo alcance.

Número de coordinación Cantidad de vecinos más cercanos a un átomo en su arreglo atómico.

Orden de corto alcance Arreglo regular y predecible de los átomos en una distancia corta por lo general una o dos distancias entre átomos.

Orden de largo alcance Arreglo regular repetitivo de los átomos en un sólido, que se extiende en una distancia muy grande.

Parámetros de red Longitudes de los lados de las celdas unitarias y los ángulos entre estos lados. Los parámetros de red describen el tamaño y forma de la celda unitaria.

Plano basal Nombre especial que se da al plano compacto en las celdas unitarias hexagonales compactas.

Polimorfismo Alotropía, es decir que tiene más de una estructura cristalina.

Puntos de red Puntos que conforman la red cristalina. Lo que rodea a cada punto de red es idéntico en cualquier parte del material.

Radio atómico El radio aparente de un átomo, que por lo general se calcula a partir de las dimensiones de la celda unitaria, utilizando direcciones compactas.

Red Conjunto de puntos que dividen el espacio en segmentos más pequeños de igual dimensión.

Redes de Bravais Las catorce posibles redes que se pueden crear utilizando puntos de red.

Secuencia de apilamiento Secuencia en la cual están apilados planos compactos. Si la secuencia es *ABABAB*, se produce una celda unitaria hexagonal compacta; si es *ABCABCABC*, se produce una estructura cúbica centrada en las caras.

Sitio cúbico Posición intersticial que tiene un número de coordinación igual a ocho. Un átomo o un ion en el sitio cúbico tocará otros ocho átomos o iones.

Sitio intersticial Hueco entre átomos o iones “normales” de un cristal, en el que se puede colocar otro átomo o ion normalmente distinto. Usualmente, el tamaño del sitio intersticial es más pequeño que el átomo o ion que se va a introducir.

Sitio octaédrico Posición intersticial que tiene un número de coordinación igual a seis. Un átomo o ion en un sitio octaédrico tocará otros seis átomos o iones.

Sitio tetraédrico Posición intersticial que tiene un número de coordinación igual a cuatro. Un átomo o ion en un sitio tetraédrico entra en contacto con otros cuatro átomos o iones.

Tetraedro Estructura producida cuando los átomos están unidos entre sí con una coordinación de cuatro.

Vidrio Material sólido no cristalino, que sólo tiene un orden de corto alcance entre sus átomos.

PROBLEMAS

3-1 Calcule el radio atómico en cm para lo siguiente:

(a) Metal CC con $a_0 = 0.3294$ nm y con un átomo por punto de red.

(b) Metal CCC con $a_0 = 4.0862$ Å y con un átomo por punto de red.

3-2 Determine la estructura cristalina de lo siguiente:

(a) Un metal con $a_0 = 4.9489$ Å, $r = 1.75$ Å y un átomo por punto de red

(b) Un metal con $a_0 = 0.42906$ nm, $r = 0.1858$ nm y un átomo por punto de red.

3-3 La densidad del potasio, que tiene una estructura CC y un átomo por punto de red es 0.855 g/cm³. El peso atómico del potasio es 39.09 g/mol. Calcule

(a) el parámetro de red y

(b) el radio atómico del potasio.

3-4 La densidad del torio, que tiene una estructura CCC y un átomo por punto de red es de 11.72 g/cm³. El peso atómico del torio es de 232 g/mol. Calcule

(a) el parámetro de red y

(b) el radio atómico del torio.

3-5 Un metal con una estructura cúbica tiene una densidad de 2.6 g/cm³, un peso atómico de 87.62 g/mol y un parámetro de red de 6.0849 Å. Un átomo está aso-

ciado con cada uno de los puntos de la red. Determine la estructura cristalina del metal.

3-6 Un metal con una estructura cúbica tiene una densidad de 1.892 g/cm³, un peso atómico de 132.91 g/mol y un parámetro de red de 6.13 Å. Un átomo está asociado con cada punto de la red. Determine la estructura cristalina del metal.

3-7 El indio tiene una estructura tetragonal, con $a_0 = 0.32517$ nm y $c_0 = 0.49459$ nm. La densidad es 7.286 g/cm³ y el peso atómico es de 114.82 g/mol. ¿Tiene el indio una estructura tetragonal simple o una estructura tetragonal centrada en el cuerpo?

3-8 El bismuto tiene una estructura hexagonal, con $a_0 = 0.4546$ nm y $c_0 = 1.186$ nm. La densidad es 9.808 g/cm³ y el peso atómico es de 208.98 g/mol. Determine

(a) el volumen de la celda unitaria y

(b) cuántos átomos existen en cada celda unitaria.

3-9 El galio tiene una estructura ortorrómbica, con $a_0 = 0.45258$ nm, $b_0 = 0.45186$ nm y $c_0 = 0.76570$ nm. El radio atómico es 0.1218 nm. La densidad es de 5.904 g/cm³ y el peso atómico es de 69.72 g/mol. Determine

(a) el número de átomos en cada celda unitaria y

(b) el factor de empaquetamiento de la celda unitaria.

3-10 El berilio tiene una estructura cristalina hexagonal, con $a_0 = 0.22858 \text{ nm}$ y $c_0 = 0.35842 \text{ nm}$. El radio atómico es de 0.1143 nm . La densidad es de 1.848 g/cm^3 y el peso atómico es de 9.01 g/mol . Determine (a) el número de átomos en cada celda unitaria y (b) el factor de empaquetamiento de la celda unitaria.

3-11 Por encima de 882°C , el titanio tiene una estructura cristalina CC con $a = 0.332 \text{ nm}$. Por debajo de esta temperatura tiene una estructura HC con $a = 0.2978 \text{ nm}$ y $c = 0.4735 \text{ nm}$. Determine el porcentaje de cambio en volumen cuando el titanio CC se transforma en titanio HC. ¿Se trata de una contracción o de una expansión?

3-12 El $\text{Mn-}\alpha$ tiene una estructura cúbica con $a_0 = 0.8931 \text{ nm}$ y una densidad de 7.47 g/cm^3 . El $\text{Mn-}\beta$ tiene una estructura cúbica distinta con $a_0 = 0.6326 \text{ nm}$ y una densidad de 7.26 g/cm^3 . El peso atómico del manganeso es de 54.938 g/mol y el radio atómico es de 0.112 nm . Determine el porcentaje de cambio en volumen que ocurriría si el $\text{Mn-}\alpha$ se transforma en $\text{Mn-}\beta$.

3-13 Un sujetapapeles típico pesa 0.59 gramos y está hecho de hierro CC. Calcule

- (a) el número de celdas unitarias y
- (b) el número de átomos de hierro del sujetapapeles (consulte el Apéndice A para los datos que necesite).

3-14 El papel de aluminio que se utiliza para guardar alimentos tiene aproximadamente un espesor de 0.001 de pulgada. Suponga que todas las celdas unitarias del aluminio están organizadas de manera que a_0 es perpendicular a la superficie del papel. En el caso de una hoja cuadrada de 4 plg de lado, determine

- (a) el número total de celdas unitarias en la hoja y
- (b) el espesor de la misma en función de celdas unitarias (vea el Apéndice A).

3-15 Determine los índices de Miller correspondientes a las direcciones de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura 3-33.

3-16 Determine los índices para las direcciones de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura 3-34.

3-17 Determine los índices para los planos de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura 3-35.

3-18 Determine los índices para los planos de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura 3-36.

3-19 Determine los índices de las direcciones en la red hexagonal que se muestra en la figura 3-37, utilizando sistemas tanto de tres dígitos como de cuatro.

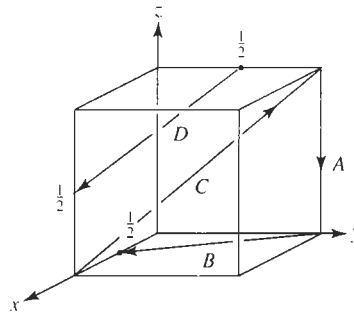


FIGURA 3-33 Direcciones en una celda unitaria cúbica (para el problema 3-15).

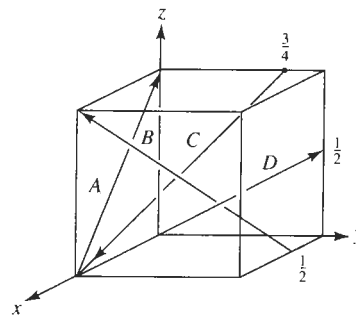


FIGURA 3-34 Direcciones en una celda unitaria cúbica (para el problema 3-16).

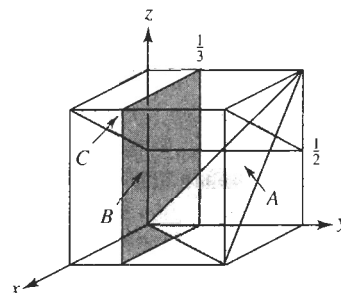


FIGURA 3-35 Planos en una celda unitaria cúbica (para el problema 3-17).

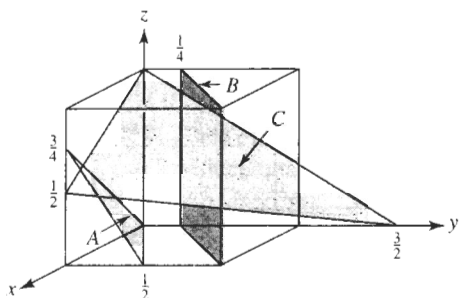


FIGURA 3-36 Planos en una celda unitaria cúbica (para el problema 3-18).

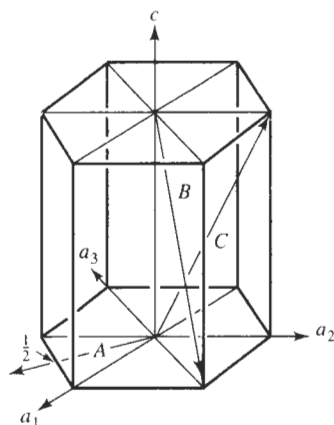


FIGURA 3-37 Direcciones en una red hexagonal (para el problema 3-19).

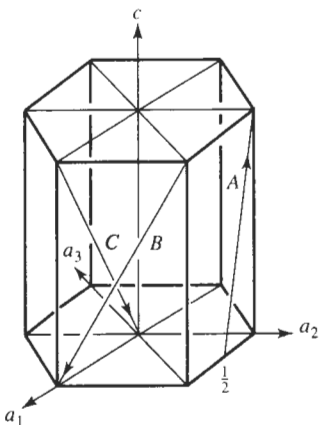


FIGURA 3-38 Direcciones en una red hexagonal (para el problema 3-20).

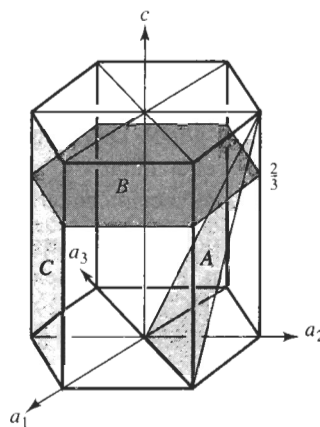


FIGURA 3-39 Planos en una red hexagonal (para el problema 3-21).

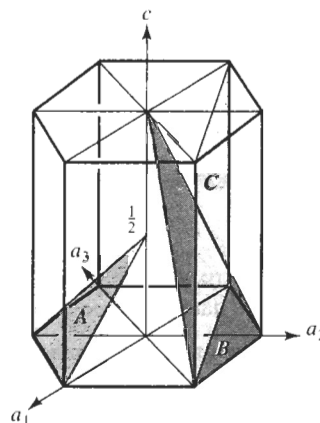


FIGURA 3-40 Planos en una red hexagonal (para el problema 3-22).

3-20 Determine los índices de las direcciones en la red hexagonal que aparece en la figura 3-38 utilizando sistemas tanto de tres como de cuatro dígitos.

3-21 Determine los índices de los planos en la red hexagonal que se muestran en la figura 3-39.

3-22 Determine los índices de los planos de la red hexagonal mostrados en la figura 3-40.

3-23 Esboce los siguientes planos y direcciones dentro de una celda unitaria cúbica:

- | | | |
|-------------|-------------|-------------|
| (a) $[101]$ | (b) $[010]$ | (c) $[122]$ |
| (d) $[301]$ | (e) $[201]$ | (f) $[213]$ |
| (g) (011) | (h) (102) | (i) (002) |
| (j) (130) | (k) (212) | (l) (312) |

3-24 Esboce los siguientes planos y direcciones dentro de una celda unitaria cúbica:

- | | | |
|-----------|-----------|-----------|
| (a) [110] | (b) [221] | (c) [410] |
| (d) [012] | (e) [321] | (f) [111] |
| (g) (111) | (h) (011) | (i) (030) |
| (j) (121) | (k) (113) | (l) (041) |

3-25 Esboce los siguientes planos y direcciones dentro de una celda unitaria hexagonal:

- | | | |
|------------|------------|------------|
| (a) [0110] | (b) [1120] | (c) [1011] |
| (d) (0003) | (e) (1010) | (f) (0111) |

3-26 Esboce los planos y direcciones siguientes dentro de una celda unitaria hexagonal:

- | | | |
|------------|------------|------------|
| (a) [2110] | (b) [1121] | (c) [1010] |
| (d) (1210) | (e) (1122) | (f) (1230) |

3-27 ¿Cuáles son los índices en las seis direcciones de la forma $\langle 110 \rangle$ que están en el plano (111) de una celda cúbica?

3-28 ¿Cuáles son los índices en las cuatro direcciones de la forma $\langle 111 \rangle$ que están en el plano (101) de una celda cúbica?

3-29 Determine el número de direcciones de la forma $\langle 110 \rangle$ en una celda unitaria tetragonal y compárelos con el número de direcciones de la forma $\langle 110 \rangle$ existentes en una celda unitaria ortorrómbica.

3-30 Determine el ángulo entre la dirección [110] y el plano (110) en una celda unitaria tetragonal; a continuación determine el ángulo entre la dirección [011] y el plano (011) en una celda tetragonal. Los parámetros de red son $a_0 = 4.0 \text{ \AA}$ y $c_0 = 5.0 \text{ \AA}$. ¿Qué es responsable de esta diferencia?

3-31 Determine los índices de Miller del plano que pasa a través de los tres puntos con las coordenadas siguientes:

- | |
|---------------------------------------|
| (a) 0, 0, 1; 1, 0, 0; y 1/2, 1/2, 0 |
| (b) 1/2, 0, 1; 1/2, 0, 0; y 0, 1, 0 |
| (c) 1, 0, 0; 0, 1, 1/2; y 1, 1/2, 1/4 |
| (d) 1, 0, 0; 0, 0, 1/4; y 1/2, 1, 0 |

3-32 Determine la distancia de repetición, la densidad lineal y la fracción de empaquetamiento para el níquel CCC, que tiene un parámetro de red de 0.35167 nm , en las direcciones [100], [110], y [111]. ¿Cuál de estas direcciones es compacta?

3-33 Determine la distancia de repetición, la densidad lineal, y la fracción de empaquetamiento del litio CC, que tiene un parámetro de red de 0.35089 nm , en las direcciones [100], [110], y [111]. ¿Cuál de estas direcciones es compacta?

3-34 Determine la distancia de repetición, la densidad lineal y la fracción de empaquetamiento para el magnesio HC, en las direcciones [2110] y [1120]. Los pa-

rámetros de red para el magnesio HC aparecen en el Apéndice A.

3-35 Determine la densidad planar y la fracción de empaquetamiento del níquel CCC en los planos (100), (110) y (111). ¿Cuál —si es que hay alguno— de estos planos es compacto?

3-36 Determine la densidad planar y la fracción de empaquetamiento del litio CC en los planos (100), (110) y (111). ¿Cuál —si es que hay alguno— de estos planos es compacto?

3-37 Suponga que se produce rodio CCC en una lámina de un milímetro de espesor, con el plano (111) paralelo a la superficie de la hoja. ¿Cuál es el grosor de la hoja expresado en distancias interplanares (111) del espesor d_{111} ? Vea el Apéndice A para los datos que requiera.

3-38 En una celda unitaria CCC, ¿cuántos d_{111} están presentes entre el punto 0,0,0 y el punto 1,1,1?

3-39 Determine el radio mínimo de un átomo que quepa justo en

- | |
|--|
| (a) el sitio intersticial tetraédrico en el níquel CCC |
| (b) el sitio intersticial octaédrico en el litio CC. |

3-40 ¿Cuál es el radio de un átomo que cabe exactamente en el sitio octaédrico del cobre CCC sin alterar la red?

3-41 Utilizando los radios iónicos que se dan en el Apéndice B, determine el número de coordinación que se espera para los compuestos siguientes:

- | | | |
|-----------------------------|--------------------|------------------|
| (a) Y_2O_3 | (b) UO_2 | (c) BaO |
| (d) Si_3N_4 | (e) GeO_2 | |
| (f) MnO | (g) MgS | (h) KBr |

3-42 ¿El NiO tiene la estructura del cloruro de cesio, del cloruro de sodio o de la blenda de zinc? Con base en la respuesta determine

- | |
|-----------------------------------|
| (a) el parámetro de red, |
| (b) la densidad y |
| (c) el factor de empaquetamiento. |

3-43 ¿El UO_2 tiene la estructura del cloruro de sodio, de la blenda de zinc o de la fluorita? En función a la respuesta determine

- | |
|-----------------------------------|
| (a) el parámetro de red |
| (b) la densidad y |
| (c) el factor de empaquetamiento. |

3-44 ¿El BeO tiene la estructura del cloruro de sodio, de la blenda de zinc o de la fluorita? Con base en la respuesta determine

- | |
|-----------------------------------|
| (a) el parámetro de red |
| (b) la densidad y |
| (c) el factor de empaquetamiento. |

3-45 ¿El CsBr tiene la estructura del cloruro de sodio, de la blenda de zinc, de la fluorita o del cloruro de cesio? En función a la respuesta determine

- (a) el parámetro de red
- (b) la densidad y
- (c) el factor de empaquetamiento.

3-46 Esboce la organización iónica del plano (110) del ZnS (con la estructura de la blenda de zinc) y compárela con la del plano (110) del CaF_2 (con la estructura de la fluorita). Compare la fracción de empaquetamiento planar de los planos (110), correspondientes a estos dos materiales.

3-47 El MgO, que tiene la estructura del cloruro de sodio también posee un parámetro de red de 0.396 nm. Determine la densidad y la fracción de empaquetamiento planar, de los planos (111) y (222) del MgO. ¿Qué iones estarán presentes en cada plano?

3-48 El polipropileno forma una celda unitaria ortorrómbica con parámetros de red de $a_0 = 1.450$ nm $b_0 = 0.569$ nm y $c_0 = 0.740$ nm. La fórmula química para la molécula del propileno, a partir de la cual se produce este polímero, es C_3H_6 . La densidad del polímero es de aproximadamente 0.90 g/cm^3 . Determine el número de moléculas de propileno, el número de átomos de carbono y el número de átomos de hidrógeno en cada celda unitaria.

3-49 La densidad de la cristobalita es aproximadamente de 1.538 g/cm^3 y tiene un parámetro de red de 0.8037 nm. Calcule el número de iones de SiO_2 , el número de iones de silicio y el número de iones de oxígeno en cada celda unitaria.

3-50 Un haz difractado de rayos X es observado a partir de los planos (220) del hierro a un ángulo 2θ de 99.1° , cuando la longitud de onda de los rayos es 0.15418 nm. Calcule el parámetro de red del hierro.

3-51 Se observa un haz difractado de rayos X a partir de los planos (311) del aluminio con ángulo 2θ de 78.3° , cuando la longitud de onda de los rayos es 0.15418 nm. Calcule el parámetro de red del aluminio.

3-52 La figura 3-41 muestra el resultado de un experimento de difracción de rayos X en la forma de la intensidad de picos difractados en función del ángulo de difracción 2θ . Si se utilizan rayos X con una longitud de onda de 0.15418 nm, determine

- (a) la estructura cristalina del metal,
- (b) los índices de los planos que producen cada uno de los picos y

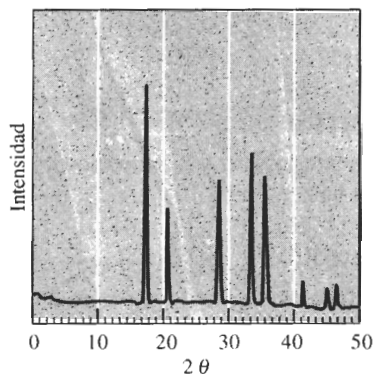


FIGURA 3-41 Patrón de difracción de rayos X (para el problema 3-52).

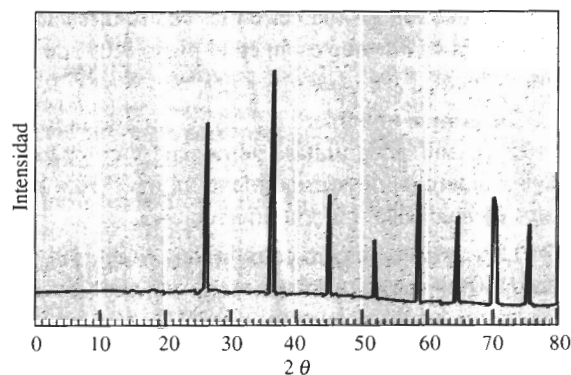


FIGURA 3-42 Patrón de difracción de rayos X (para el problema 3-53).

(c) el parámetro de red del metal.

3-53 La figura 3-42 muestra los resultados de un experimento de difracción de rayos X en la forma de la intensidad del pico difractado en función del ángulo 2θ de difracción. Si se utilizan rayos X con una longitud de onda de 0.07107 nm, determine

- (a) la estructura cristalina del metal y
- (b) los índices de los planos que produce cada pico.



PROBLEMAS DE DISEÑO

3-54 Se desea diseñar una celda de purificación. Ésta debe estar compuesta de dos tamaños de esferas; las más pequeñas deben caber dentro de los huecos existentes entre las mayores. Hay disponible una amplia variedad de tamaños, pero la más grande tiene un diámetro de un centímetro. A través de la celda fluirá un gas contamina-

do y los contaminantes serán absorbidos en la superficie de las esferas. Se encontró que para realizar esta purificación, es necesaria un área total de $10,000 \text{ cm}^2$. Diseñe la celda.

3-55 Se desea clasificar u ordenar especímenes de hierro, algunos de los cuales son CCC y otros CC. Diseñe un método por difracción de rayos X mediante el cual se pueda efectuar lo anterior.