

3

LA ESTRUCTURA DE LOS SÓLIDOS CRISTALINOS



Fotografía obtenida mediante difracción de rayos X (Laue) de un monocristal de magnesio. La gran mancha blanca del centro corresponde al impacto del rayo incidente paralelo a la dirección cristalográfica [0001]. Los puntos luminosos de la periferia corresponden a los rayos X difractados por planos cristalográficos específicos. El espectro generado por estos puntos indica simetría hexagonal para la estructura cristalina compacta del magnesio. (Fotografía cedida por J. G. Byrne, Universidad de Utah.)

3.1 INTRODUCCIÓN

En el Capítulo 2 se han descrito los enlaces atómicos determinados por la configuración electrónica de los átomos individuales. Ahora se discute el nivel siguiente de la estructura de los materiales: la disposición adoptada por los átomos en el estado sólido. En este contexto se introducen los conceptos de cristalinidad y no cristalinidad. En los sólidos cristalinos se presenta la noción de estructura cristalina en términos de la celdilla unidad. Se detallan las tres estructuras cristalinas más frecuentes en los metales en función de planos y direcciones cristalográficas. Se consideran los materiales como monocristalinos, policristalinos y no cristalinos.

ESTRUCTURA CRISTALINA

3.2 CONCEPTOS FUNDAMENTALES

Los materiales sólidos se pueden clasificar según la regularidad con que se sitúan, unos respecto de otros, los átomos o iones. En un material **cristalino**, los átomos se sitúan en una disposición repetitiva o periódica a lo largo de muchas distancias atómicas; es decir, existe un orden de largo alcance tal que, al solidificar el material, los átomos se sitúan según un patrón tridimensional repetitivo, en el cual cada átomo está enlazado con su vecino más próximo. Los metales, muchas cerámicas y ciertos polímeros adquieren estructuras cristalinas en condiciones normales de solidificación. El orden de largo alcance no existe en los materiales que no cristalizan. Estos materiales denominados *no cristalinos* o *amorfos*, se discuten brevemente al final de este capítulo.

Algunas propiedades de los sólidos cristalinos dependen de la **estructura cristalina** del material; es decir, de la ordenación espacial de átomos, iones y moléculas. Hay un número muy grande de estructuras cristalinas diferentes que tienen, todas ellas, orden atómico de largo alcance. Estas estructuras varían desde las relativamente simples de los metales a las excesivamente complejas de los materiales cerámicos y poliméricos. La presente discusión abarca varias de las estructuras cristalinas de los metales más corrientes. Los Capítulos 13 y 15 se dedican a la estructura cristalina de las cerámicas y los polímeros.

Al describir la estructura cristalina se consideran los átomos (o iones) como esferas sólidas con diámetros muy bien definidos. Es el denominado *modelo atómico de esferas rígidas*, en el cual las esferas representan átomos macizos en contacto. La Figura 3.1c muestra un ejemplo de la disposición atómica de alguno de los metales elementales más corrientes mediante el modelo de las esferas rígidas. En este caso, todos los átomos son idénticos. En el contexto de las estructuras cristalinas a menudo se utiliza la palabra **red**; en este sentido red significa disposición tridimensional de puntos coincidentes con las posiciones de los átomos (o centros de las esferas).

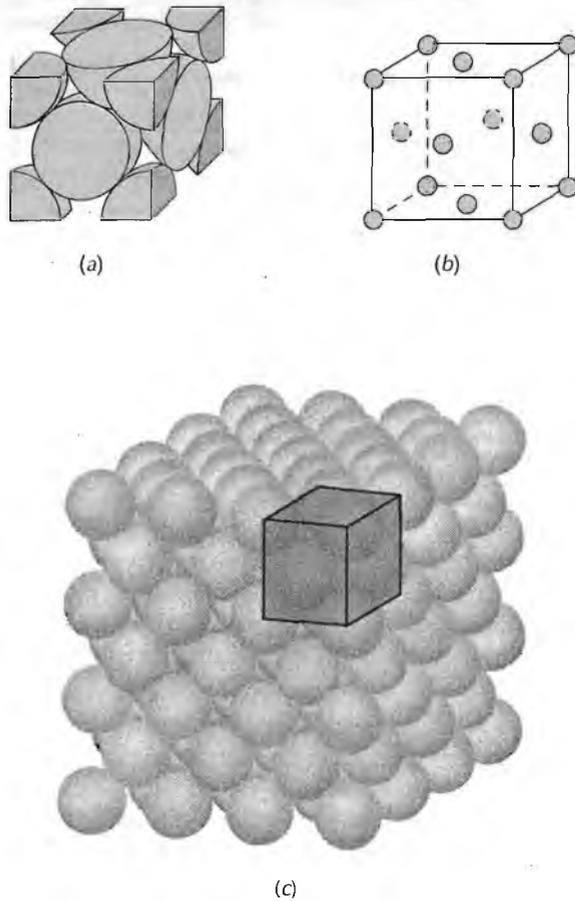


Figura 3.1 Estructura cristalina cúbica centrada en las caras: (a) representación de la celdilla unidad mediante esferas rígidas, (b) celdilla unidad representada mediante esferas reducidas y (c) agregado de muchos átomos. (Figura c adaptada de W. G. Moffatt, G. W. Pearsall y J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, Structure, p. 51. Copyright 1964 John Wiley & Sons, Nueva York. Reproducida con permiso de John Wiley & Sons, Inc.)

3.3 CELDILLA UNIDAD

El orden atómico de los sólidos cristalinos indica que grupos de pocos átomos forman un patrón que se repite en el espacio. Al describir la estructura cristalina conviene dividirla en las pequeñas entidades, que se repiten, llamadas **celdillas unidad**. La celdilla unidad de la mayoría de las estructuras cristalinas son paralelepípedos o prismas con tres conjuntos de caras paralelas. En la Figura 3.1, y dentro del agregado de esferas, se ha dibujado una celdilla, que en este caso es un cubo. La celdilla unidad se elige para representar la simetría de la estructura cristalina, de modo que las posiciones de los átomos en el cristal se puedan representar desplazando a distancias discretas la celdilla unidad a lo largo de los ejes. De este modo, la celdilla unidad es la unidad estructural fundamental y define la estructura cristalina mediante su geometría y por la posición de los átomos dentro de ella. Ordinariamente, la claridad aconseja que los vértices del paralelepípedo coincidan con los centros de las esferas rígidas que representan los átomos. Para definir algunas estructuras cristalinas es necesario establecer más de una celdilla unidad; sin

<i>Metal</i>	<i>Estructura cristalina^a</i>	<i>Radio atómico^b (nm)</i>	<i>Metal</i>	<i>Estructura cristalina</i>	<i>Radio atómico (nm)</i>
Aluminio	FCC	0,1431	Molibdeno	BCC	0,1363
Cadmio	HC	0,1490	Níquel	FCC	0,1246
Cromo	BCC	0,1249	Platino	FCC	0,1387
Cobalto	HC	0,1253	Plata	FCC	0,1445
Cobre	FCC	0,1278	Tántalo	BCC	0,1430
Oro	FCC	0,1442	Titanio (α)	HC	0,1445
Hierro (α)	BCC	0,1241	Tungsteno	BCC	0,1371
Plomo	FCC	0,1750	Zinc	HC	0,1332

^a FCC = cúbica centrada en las caras; HC = hexagonal compacta; BCC = cúbica centrada en el cuerpo.
^b Un nanómetro (nm) equivale a 10^{-9} m. Para convertir los nanómetros a unidades angstrom (Å) es necesario multiplicar por 10 el valor de los nanómetros.

embargo, generalmente se usa la celdilla unidad que tiene el mayor nivel de simetría geométrica.

3.4 ESTRUCTURAS CRISTALINAS DE LOS METALES

El enlace atómico de este grupo de materiales es metálico y de naturaleza no direccional. Por consiguiente, no hay restricciones en cuanto al número y posición de átomos vecinos más próximos; lo cual conduce, para la mayoría de los metales, a estructuras cristalinas con gran número de vecinos muy próximos y densamente empaquetados. Utilizando el modelo de esferas rígidas en la descripción de los metales, cada esfera representa un catión en la estructura cristalina. La Tabla 3.1 indica el radio atómico para algunos metales. La mayoría de los metales más corrientes cristaliza en una de las tres estructuras cristalinas siguientes: cúbica centrada en las caras, cúbica centrada en el cuerpo y hexagonal compacta.

3.4.1 Estructura cristalina cúbica centrada en las caras

La estructura cristalina exige que muchos metales tengan una celdilla unidad de geometría cúbica, con los átomos localizados en los vértices del cubo y en los centros de todas las caras del cubo. Es la denominada estructura cristalina **cúbica centrada en las caras (FCC)**. Cristalizan en esta estructura el cobre, aluminio, plata y oro (ver Tabla 3.1). La Figura 3.1a muestra el modelo de esferas rígidas de la celdilla unidad FCC, mientras que la Figura 3.1b representa los centros de los átomos mediante pequeños círculos, lo que origina una mejor perspectiva de las posiciones de los átomos. El agregado de átomos de la Figura 3.1c representa una sección del cristal formada por muchas celdillas unidad FCC. Estas esferas o cationes están en contacto entre sí a lo largo de la diagonal. La longitud de la arista del cubo a y el radio atómico R se relacionan mediante la siguiente fórmula:

$$a = 2R\sqrt{2} \quad (3.1)$$

Este resultado se deduce en el problema resuelto 3.1.

En los cristales de estructura FCC, cada átomo del vértice es compartido con ocho celdillas unidad, mientras que los átomos centrados en las caras sólo son compartidos con dos celdillas. Esto está representado en la Figura 3.1a, donde sólo se han dibujado las partes de las esferas integradas dentro del cubo. La celdilla comprende el volumen del cubo generado desde los centros de los átomos de los vértices, como indica la citada figura.

Las posiciones de los vértices y de los centros de las caras son equivalentes, puesto que el desplazamiento de la celdilla unidad desde el átomo del vértice original al átomo del centro de una cara no altera la estructura de la celdilla.

Dos características importantes de la estructura cristalina son el **número de coordinación** y el **factor de empaquetamiento atómico (FEA)**. En los metales, cada átomo siempre está en contacto con el mismo número de átomos vecinos, que es el número de coordinación. En la estructura cúbica centrada en las caras, el número de coordinación es 12. Esto se confirma examinando la Figura 3.1a: el átomo centrado en la cara frontal tiene cuatro átomos vecinos correspondientes a los vértices, cuatro átomos vecinos correspondientes a los átomos centrados en las caras y que están en contacto con él por detrás, y cuatro átomos vecinos equivalentes a estos últimos pero que pertenecen a la siguiente celdilla unidad (no representada en la figura).

El FEA es la fracción de volumen de las esferas rígidas en una celdilla unidad en el modelo atómico de las esferas rígidas:

$$\text{FEA} = \frac{\text{volumen de átomos en una celdilla unidad}}{\text{volumen total de la celdilla unidad}} \quad (3.2)$$

En la estructura FCC el factor de empaquetamiento atómico es 0,74, que es el máximo empaquetamiento posible para esferas rígidas del mismo tamaño. El cálculo de este FEA se incluye en un problema resuelto. Los metales más característicos tienen factores de empaquetamiento atómico relativamente grandes, para maximizar el efecto pantalla de la nube de electrones libres.

3.4.2 Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo

Otra estructura cristalina común en los metales también es una celdilla unidad cúbica que tiene átomos localizados en los ocho vértices y un átomo en el centro. Esta estructura cristalina se denomina **cúbica centrada en el cuerpo (BCC)**. La Figura 3.2c muestra un conjunto de esferas que representan esta estructura cristalina, mientras que las Figuras 3.2a y 3.2b son representaciones de celdillas unidad mediante los modelos de esfera rígida y de esfera reducida, respectivamente. Los átomos del centro y de los vértices se tocan mutuamente a lo largo de las diagonales del cubo y la longitud a de la arista de la celdilla y el radio atómico R se relacionan mediante la siguiente fórmula:

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (3.3)$$

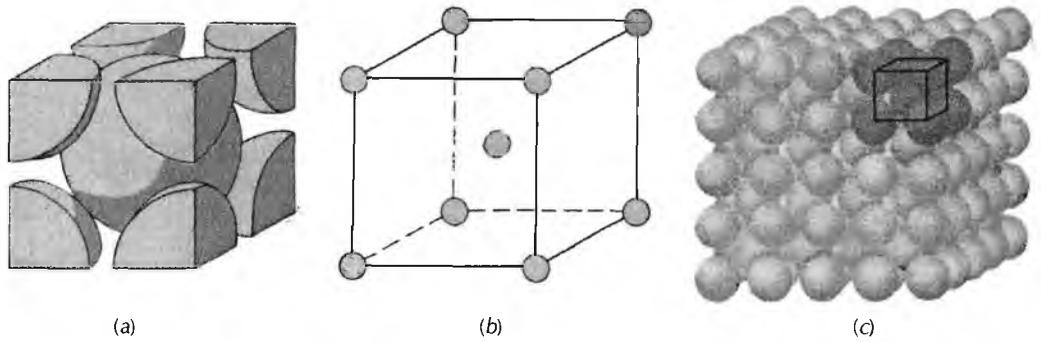


Figura 3.2 Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo: (a) representación de la celdilla unidad mediante esferas rígidas, (b) celdilla unidad representada mediante esferas reducidas y (c) agregado de muchos átomos. (Figura c de W. G. Moffatt, G. W. Pearsall y J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright 1964 John Wiley & Sons, Nueva York. Reproducida con permiso de John Wiley & Sons, Inc.)

El cromo, el hierro y el tungsteno, así como varios de los otros metales listados en la Tabla 3.1 presentan estructura BCC.

Cada celdilla unidad BCC tiene asociados dos átomos: un átomo equivalente a un octavo de cada uno de los ocho átomos de los vértices, que son compartidos con otras ocho celdillas unidad, y el átomo del centro de la celdilla, que no es compartido. Además, las posiciones de los átomos del centro y del vértice son equivalentes. El número de coordinación de la estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo es 8: cada átomo situado en el centro de la celdilla está rodeada por ocho átomos situados en los vértices. Debido

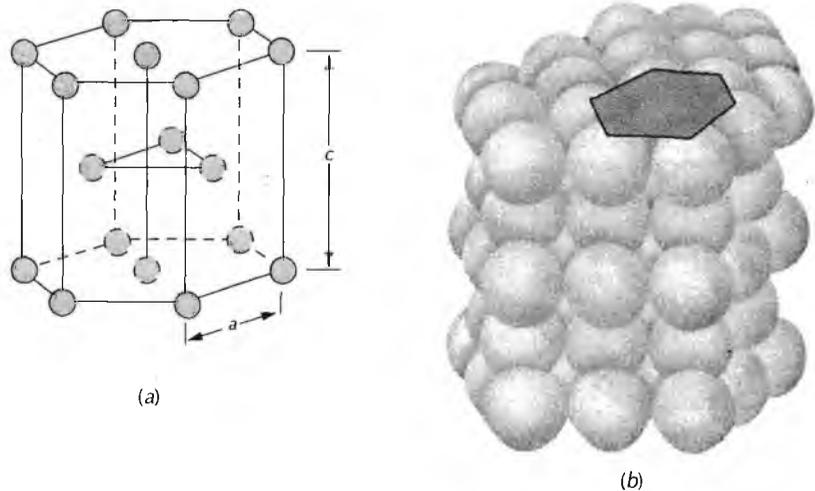


Figura 3.3 Estructura cristalina hexagonal compacta: (a) representación de la celdilla unidad mediante esferas reducidas (a y c representan las aristas corta y larga, respectivamente) y (b) un agregado de muchos átomos. (Figura b de W. G. Moffatt, G. W. Pearsall y J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright 1964 John Wiley & Sons, Nueva York. Reproducida con permiso de John Wiley & Sons, Inc.)

a que el número de coordinación es menor en la estructura BCC que en la FCC, también el factor de empaquetamiento atómico es menor para BCC: 0,68 frente a 0,74.

3.4.3 Estructura cristalina hexagonal compacta

No todos los metales tienen celdilla unidad con simetría cúbica; la última estructura cristalina que se discute es la que tiene celdilla unidad hexagonal. La Figura 3.3a muestra la celdilla unidad, en el modelo de esferas reducidas, de esta estructura denominada **hexagonal compacta (HC)**. En la Figura 3.3b se aprecia un conjunto de varias celdillas unidad HC. Las bases superior e inferior consisten en hexágonos regulares con sus átomos en los vértices y uno en el centro. Otro plano que provee de tres átomos adicionales a la celdilla unidad está situado entre ambos planos. Cada celdilla unidad equivale a seis átomos: cada átomo situado en los 12 vértices superiores e inferiores contribuye con la sexta parte, los 2 átomos del centro de los hexágonos contribuyen con la mitad y los 3 átomos del plano central contribuyen enteramente. En la Figura 3.3a se aprecia que a y c representan las dimensiones corta y larga de la celdilla unidad, respectivamente. La relación c/a debe ser 1,633; sin embargo, para algunos metales HC esta relación se desvía del valor ideal.

El número de coordinación y el factor de empaquetamiento atómico para los cristales de estructuras HC son idénticos que para los FCC: 12 y 0,74, respectivamente. Son metales HC el cadmio, magnesio, titanio y zinc; algunos de éstos figuran en la Tabla 3.1.

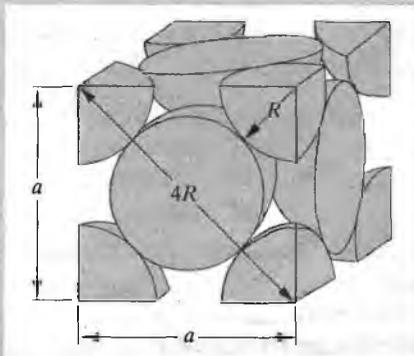
PROBLEMA RESUELTO 3.1

Calcular el volumen de la celdilla unidad FCC en función del radio atómico R .

SOLUCIÓN

En la celdilla unidad esquematizada, cada átomo contacta con el vecino a lo largo de la diagonal, cuya longitud es $4R$. Ya que la celdilla unidad es un cubo, su volumen es a^3 , donde a es la longitud de la arista. Del triángulo rectángulo de la cara

$$a^2 + a^2 = (4R)^2$$



de donde se deduce el valor de a ,

$$a = 2R \sqrt{2} \quad (3.1)$$

El volumen V_c de la celdilla unidad vale:

$$V_c = a^3 = (2R \sqrt{2})^3 = 16 R^3 \sqrt{2} \quad (3.1)$$

PROBLEMA RESUELTO 3.2

Demostrar que el factor de empaquetamiento atómico para la estructura cristalina FCC es 0,74.

SOLUCIÓN

El FEA se define como la fracción de volumen de esferas rígidas en una celdilla unidad:

$$\text{FEA} = \frac{\text{volumen total esferas}}{\text{volumen total celdilla unidad}} = \frac{V_S}{V_C}$$

Los volúmenes de las esferas y de la celdilla unidad se pueden calcular en función del radio atómico R . El volumen de cada esfera es $\frac{4}{3} \pi R^3$, y ya que hay cuatro átomos en cada celdilla unidad FCC, el volumen total de las esferas es:

$$V_S = (4) \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{16}{3} \pi R^3$$

Del problema resuelto 3.1, se deduce que el volumen total de la celdilla unidad vale:

$$V_C = 16 R^3 \sqrt{2}$$

Por lo tanto, el factor de empaquetamiento atómico es

$$\text{FEA} = \frac{V_S}{V_C} = \frac{\left(\frac{16}{3}\right) \pi R^3}{16 R^3 \sqrt{2}} = 0,74$$

3.5 CÁLCULO DE LA DENSIDAD

El conocimiento de la estructura cristalina de un sólido metálico permite el cálculo de su densidad ρ mediante la siguiente relación:

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A} \quad (3.2)$$

donde

n = número de átomos asociados a cada celdilla unidad

A = peso atómico

V_C = volumen de la celdilla unidad

N_A = número de Avogadro ($6,023 \times 10^{23}$ átomos/mol)

PROBLEMA RESUELTO 3.3

Calcular la densidad del cobre y compararla con la densidad experimental, sabiendo que tiene un radio atómico de 0,128 nm (1,28 Å), estructura cristalina FCC y un peso atómico de 63,5 g/mol.

SOLUCIÓN

Para solucionar este problema se utiliza la Ecuación 3.5. Puesto que la estructura cristalina es FCC, el número de átomos por celdilla unidad, n , es 4. El peso atómico A_{Cu} es 63,5 g/mol. El volumen de la celdilla unidad V_C para FCC se determinó en el problema resuelto 3.1 como $16R^3\sqrt{2}$, donde R , el radio atómico, mide 0,128 nm.

Sustituyendo los varios parámetros en la ecuación 3.5,

$$\begin{aligned}\rho &= \frac{nA_{\text{Cu}}}{V_C N_A} = \frac{nA_{\text{Cu}}}{(16R^3\sqrt{2}) N_A} \\ &= \frac{(4 \text{ átomos/celdilla unidad}) (63,5 \text{ g/mol})}{[16\sqrt{2} (1,28 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 / \text{celdilla unidad}] (6,023 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})} \\ &= 8,89 \text{ g/cm}^3\end{aligned}$$

El valor de la densidad experimental del cobre es 8,94 g/cm³, valor muy próximo al resultado.

3.6 POLIMORFISMO Y ALOTROPÍA

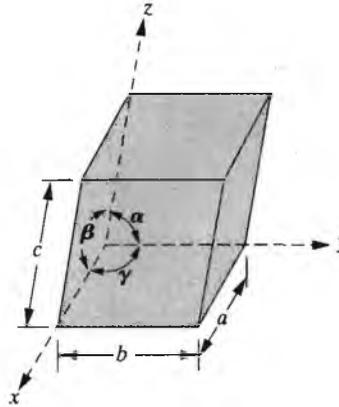
Algunos metales y no metales pueden tener más de una estructura cristalina: un fenómeno conocido como **polimorfismo**. Si este fenómeno ocurre en un sólido elemental se denomina **alotropía**. La existencia de una estructura cristalina depende de la presión y de la temperatura exteriores. Un ejemplo familiar es el carbono: el grafito es estable en condiciones ambientales, mientras que el diamante se forma a presiones extremadamente elevadas. El hierro puro tiene estructura cristalina BCC a temperatura ambiental y cambia a FCC a 912°C (1674°F). La transformación polimórfica a menudo va acompañada de modificaciones de la densidad y de otras propiedades físicas.

3.7 SISTEMAS CRISTALINOS

Existen muchas estructuras cristalinas diferentes y es conveniente clasificarlas en grupos de acuerdo con las configuraciones de la celdilla unidad y/o la disposición atómica. Uno de estos esquemas se basa en la geometría de la celdilla unidad, la forma del paralelepípedo sin tener en cuenta la posición de los átomos en la celdilla. Se establece un sistema x , y y z de coordenadas cuyo origen coincide con un vértice de la celdilla; los ejes x , y y z coinciden con las aristas del paralelepípedo que salen de este vértice, como ilustra la Figura 3.4. La geometría de la celdilla unidad se define en función de seis parámetros: la longitud de tres aristas a , b y c y los tres ángulos interaxiales α , β y γ . Estos ángulos se denominan **parámetros de red** de una estructura cristalina y están representados en la Figura 3.4.

En este aspecto hay siete diferentes combinaciones de a , b y c y α , β , y γ , que representan otros tantos sistemas cristalinos. Estos siete sistemas crista-

Figura 3.4 Celdilla unidad con los ejes de coordenadas x , y y z mostrando las longitudes de las aristas (a , b y c) y los ángulos interaxiales (α , β y γ).



linos son el cúbico, tetragonal, hexagonal, ortorrómbico, romboédrico, monoclinico y triclínico. En la Tabla 3.2 se dan las relaciones entre parámetros de red y se esquematizan las celdillas unidad. El sistema cúbico con $a = b = c$ y $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ tiene el mayor grado de simetría. La simetría desaparece en el sistema triclínico ya que $a \neq b \neq c$ y $\alpha \neq \beta \neq \gamma$.

De la discusión de las estructuras de los cristales metálicos se deduce que las estructuras FCC y BCC pertenecen al sistema cúbico, mientras que la HC cae dentro del hexagonal. La celdilla unidad hexagonal convencional realmente consiste en tres paralelepípedos situados como muestra la Tabla 3.2.

DIRECCIONES Y PLANOS CRISTALOGRAFICOS

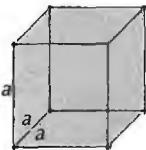
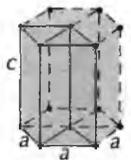
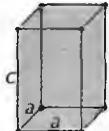
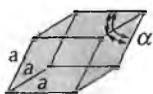
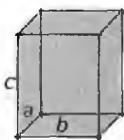
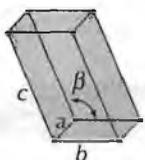
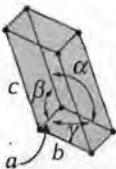
Al hablar de materiales cristalinos, a menudo es conveniente especificar algún plano cristalográfico de átomos particular o alguna dirección cristalográfica. Convencionalmente se ha establecido que para designar las direcciones y planos se utilicen tres enteros o índices. Los valores de los índices se determinan basándose en un sistema de coordenadas cuyo origen está situado en un vértice de la celdilla unidad y cuyos ejes (x , y y z) coinciden con las aristas de la celdilla unidad, como indica la Figura 3.4. En los sistemas cristalinos hexagonal, romboédrico, monoclinico y triclínico, los tres ejes *no* son perpendiculares entre sí, como ocurre en el familiar sistema de coordenadas cartesianas.

3.8 DIRECCIONES CRISTALOGRAFICAS

Una dirección cristalográfica se define por una línea entre dos puntos o por un vector. Se utilizan las siguientes etapas para determinar los índices de las tres direcciones.

1. En el origen de coordenadas del sistema se traza un vector de longitud conveniente. Todo vector se puede trasladar a través de la red cristalina sin alterarse, si se mantiene el paralelismo.

Tabla 3.2 Relaciones entre parámetros de red y las geometrías de las celdillas unidad de los siete sistemas cristalinos

Sistema cristalino	Relación axial	Ángulos interaxiales	Geometría de la celdilla unidad
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Romboédrico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Ortorrómbico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Triclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

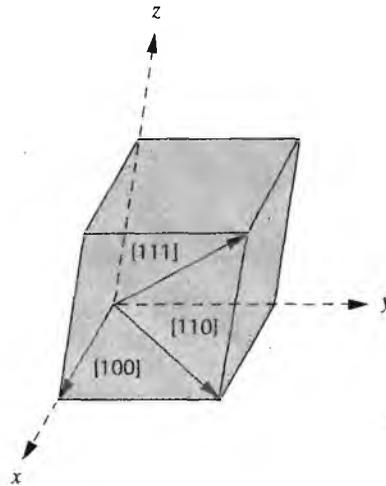


Figura 3.5 Las direcciones $[100]$, $[110]$ y $[111]$ en una celdilla unidad.

2. Se determina la longitud del vector proyección en cada uno de los tres ejes; *en función de las dimensiones a , b y c de la celdilla unidad*.
3. Estos tres números se multiplican o se dividen por un factor común para reducirlos al valor entero menor.
4. Los tres índices, sin separación, se encierran en un corchete, así: $[uvw]$. Los números enteros u , v y w corresponden a las proyecciones reducidas a lo largo de los ejes x , y y z , respectivamente.

Para cada uno de los tres ejes existen coordenadas positivas y negativas. Los índices negativos también son posibles y se representan mediante una línea sobre el índice. Por ejemplo, la dirección $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ tiene un componente en la dirección $-y$. Cambiando los signos de todos los índices se obtiene una dirección antiparalela; por ejemplo, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ significa la dirección directamente opuesta a $[111]$. Si en una estructura cristalina particular se deben especificar una dirección o un plano, conviene, para mantener la coherencia, que la conversión positiva-negativa no se cambie una vez establecida.

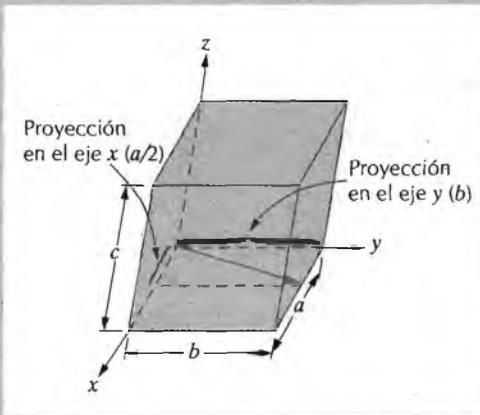
Las direcciones $[100]$, $[110]$ y $[111]$ son únicas y están dibujadas en la celdilla unidad mostrada en la Figura 3.5.

PROBLEMA RESUELTO 3.4

Determinar los índices de la dirección mostrada en la figura adjunta.

SOLUCIÓN

El vector dibujado pasa por el origen del sistema de coordenadas y, por lo tanto, no necesita traslación. Las proyecciones de este vector en los ejes x , y y z son, respectivamente, $a/2$, b y $0c$, que se convierten en $1/2$, 1 y 0 en términos de los parámetros de la celdilla unidad (por ejemplo, cuando a , b y c desaparecen). La reducción de estos números al menor de los enteros se



consigue multiplicando cada uno de ellos por el factor 2. El conjunto de estos enteros 1, 2 y 0 se encierra dentro de un paréntesis como $[120]$.

Este procedimiento se puede resumir así:

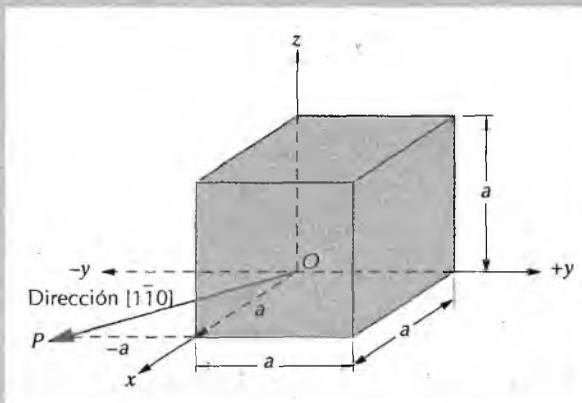
	x	y	z
Proyecciones	$a/2$	b	$0c$
Proyecciones (en función de a, b y c)	$1/2$	1	0
Reducción	1	2	0
Encerrar entre paréntesis		$[120]$	

PROBLEMA RESUELTO 3.5

Dibujar una dirección $[\bar{1}\bar{1}0]$ dentro de una celdilla unidad cúbica.

SOLUCIÓN

En primer lugar se dibuja una celdilla unidad adecuada y el sistema de ejes coordenados. En la figura adjunta la celdilla unidad es cúbica y el punto O , origen del sistema de coordenadas, está localizado en un vértice del cubo.



Este problema se soluciona siguiendo el procedimiento inverso del ejemplo anterior. Las proyecciones de la dirección $[\bar{1}\bar{1}0]$ a lo largo de los ejes x, y y z son $a, -a$ y $0a$, respectivamente. Esta dirección viene definida por un vector

que va desde el origen de coordenadas al punto P , que se localiza desplazándose a unidades a lo largo del eje x y, desde esta posición, desplazándose $-a$ unidades en una dirección paralela al eje $-y$, como indica la figura. Este vector no tiene componente z ya que la proyección sobre el eje z es cero.

En algunas estructuras cristalinas, varias direcciones no paralelas con diferentes índices son equivalentes; esto significa que el espaciado atómico a lo largo de cada dirección es el mismo. Por ejemplo, en cristales cúbicos, todas las direcciones representadas por los siguientes índices son equivalentes: $[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$ y $[00\bar{1}]$. En los cristales cúbicos todas las direcciones que tienen los mismos índices, sin tener en cuenta orden o signo, son equivalentes; por ejemplo, $[123]$ y $[\bar{2}1\bar{3}]$. Generalmente esta condición no se cumple en otros sistemas cristalinos. Por ejemplo, para cristales con simetría tetragonal, las direcciones $[100]$ y $[010]$ son equivalentes, mientras que no lo son las $[100]$ y $[001]$. Por conveniencia, las direcciones equivalentes se agrupan en *familias* que se anotan encerradas en un paréntesis angular: $\langle 100 \rangle$.

3.8.1 Cristales hexagonales

Algunas direcciones cristalográficas equivalentes de los cristales de simetría hexagonal no tienen el mismo conjunto de índices. Este problema se resuelve de forma más complicada utilizando el sistema de coordenadas de cuatro ejes, o de *Miller-Bravais*, mostrado en la Figura 3.6. Los tres ejes a_1 , a_2 y a_3 están situados en un plano, llamado plano basal, y forman ángulos de 120° entre sí. El otro eje, z , es perpendicular al plano basal. Los índices de una dirección, obtenidos de este modo, se anotan mediante cuatro dígitos: $[uvw]$. Por convención, los tres primeros índices corresponden a las proyecciones a lo largo de los ejes del plano basal a_1 , a_2 y a_3 .

La conversión del sistema de tres índices al sistema de cuatro índices.

$$[u'v'w'] \rightarrow [uvw]$$

se consigue aplicando las siguientes fórmulas:

$$u = \frac{n}{3}(2u' - v') \quad (3.3a)$$

$$v = \frac{n}{3}(2v' - u') \quad (3.6b)$$

$$t = -(u + v) \quad (3.6c)$$

$$w = nw' \quad (3.6d)$$

donde los índices señalados con apóstrofo están asociados con el sistema de tres índices y los que no con el nuevo sistema de Miller-Bravais de cuatro índices; n es el factor requerido para reducir u , v , t y w a los enteros más pequeños. Utilizando esta conversión la dirección $[010]$ se convierte en la $[12\bar{1}0]$. En la celdilla unidad hexagonal (Figura 3.7a) están indicadas varias direcciones diferentes.

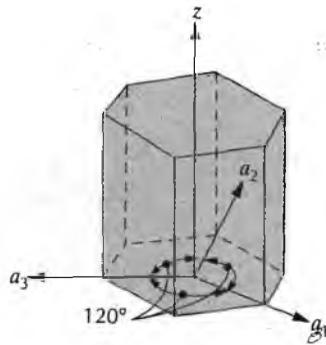


Figura 3.6 Sistema de ejes de coordenadas para una celda unidad hexagonal (esquema Miller-Bravais).

3.9 PLANOS CRISTALOGRAFICOS

La orientación de los planos cristalográficos de la estructura cristalina se representa de modo similar. También se utiliza un sistema de coordenadas de tres ejes y la celda unidad es fundamental, como se representa en la Figura 3.4. Los planos cristalográficos del sistema hexagonal se especifican mediante tres **índices de Miller** (hkl). Dos planos paralelos son equivalentes y tienen índices idénticos. El procedimiento utilizado para la determinación de los valores de los índices es el siguiente.

1. Si el plano pasa por el origen, se traza otro plano paralelo con una adecuada traslación dentro de la celda unidad o se escoge un nuevo origen en el vértice de otra celda unidad.
2. El plano cristalográfico o bien corta, o bien es paralelo a cada uno de los tres ejes. La longitud de los segmentos de los ejes se determina en función de los parámetros de red h , k y l .
3. Se escriben los números recíprocos de estos valores. Un plano paralelo a un eje se considera que lo corta en el infinito y, por lo tanto, el índice es cero.
4. Estos tres números se multiplican o dividen por un factor común.
5. Finalmente, se escriben juntos los índices enteros dentro de un paréntesis: (hkl)

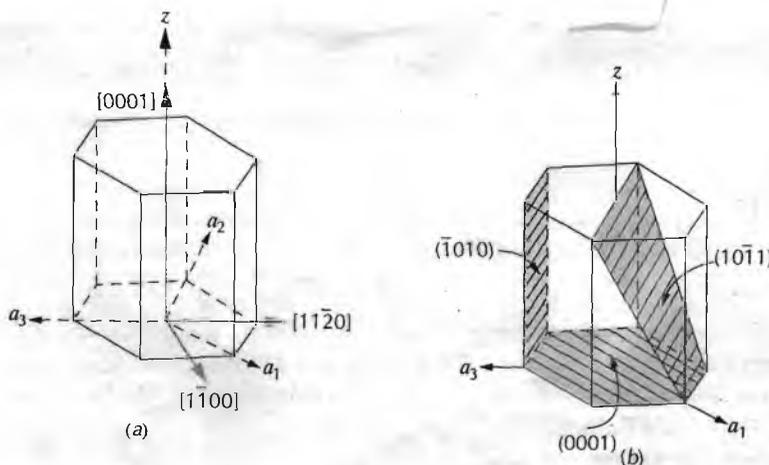


Figura 3.7 En el sistema cristalino hexagonal, (a) las direcciones $[0001]$, $[1\bar{1}00]$ y $[11\bar{2}0]$ y (b) los planos (0001) , $(10\bar{1}1)$ y $(\bar{1}010)$.

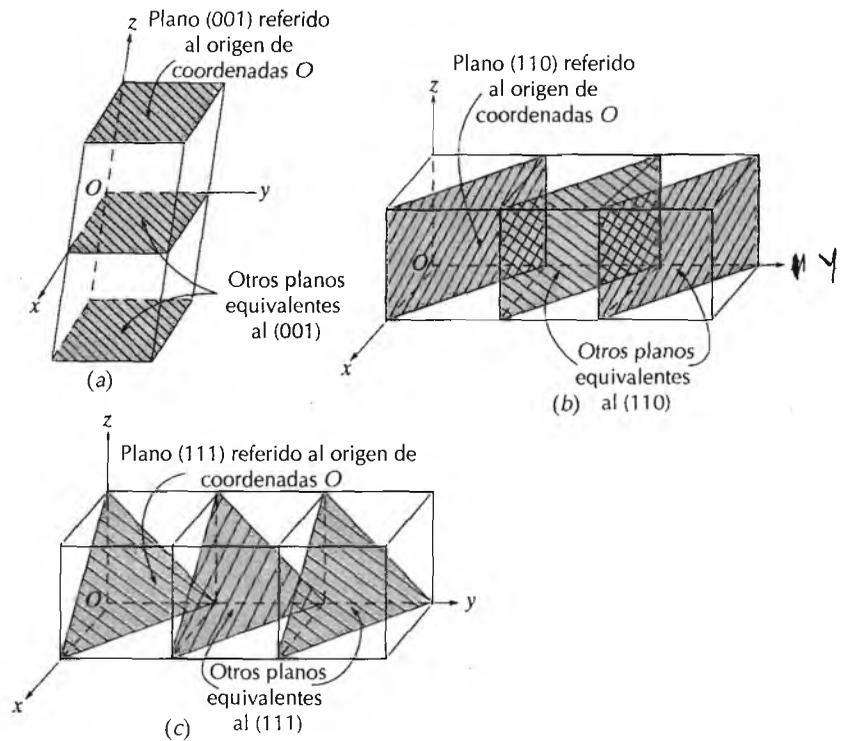


Figura 3.8 Representaciones de planos cristalográficos correspondientes a las series (a) (001), (b) (110) y (c) (111).

Una intersección en el sentido negativo del origen se indica mediante una barra o un signo menos sobre el índice. Además, cambiando el signo de todos los índices se obtiene un plano paralelo opuesto a una distancia equivalente del origen. En la Figura 3.8 se han representado varios planos con índice bajo.

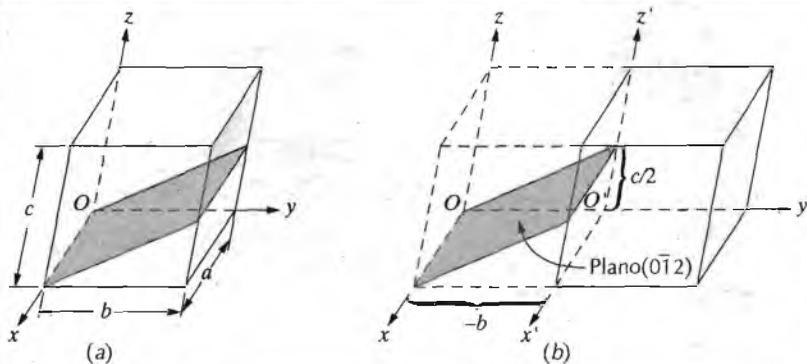
Una característica única e interesante de los cristales cúbicos es que los planos y las direcciones que tienen los mismos índices son perpendiculares entre sí. Sin embargo, esta relación geométrica entre planos y direcciones que tienen los mismos índices no existe en otros sistemas cristalinos.

PROBLEMA RESUELTO 3.6

Determinar los índices de Miller del plano mostrado en la figura adjunta (a).

SOLUCIÓN

Ya que el plano pasa por el origen O , se debe escoger un nuevo origen en el vértice de la celdilla unidad adyacente, llamado O' y mostrado en la figura (b). Este plano es paralelo al eje x y su intersección tiene lugar en ∞a . Las intersecciones de los ejes y y z , referidos al nuevo origen O' , son $-b$ y $c/2$, respectivamente. En términos de los parámetros de la red a , b y c , estas intersecciones valen ∞ , -1 y $1/2$. Los recíprocos de estos números son 0 , -1 y 2 . Ya que todos son enteros no es necesaria ninguna reducción. Finalmente se escriben entre paréntesis $(0\bar{1}2)$.



Esquemáticamente estas etapas son:

	x	y	z
Intersecciones	∞a	$-b$	$c/2$
Intersecciones (en función del parámetro de red)	∞	-1	$1/2$
Recíprocos	0	-1	2
Reducción (innecesaria)			
Encerrar entre parentesis		$(0\bar{1}2)$	

PROBLEMA RESUELTO 3.7

Dibujar un plano $(0\bar{1}1)$ dentro de una celdilla unidad cúbica.

SOLUCIÓN

El procedimiento para solucionar este problema puede ser el inverso del problema anterior. En primer lugar se elimina el paréntesis de los números y se escriben los recíprocos: ∞ , -1 y 1 . Esto significa que el plano es paralelo al eje x , mientras que corta a los ejes y y z en $-b$ y c , respectivamente, como indica la figura (a). Este plano se ha dibujado en la figura (b). El plano se indica mediante segmentos que representan sus intersecciones con las caras de la celdilla unidad o sus prolongaciones. Por ejemplo, en la figura, el segmento ef es la intersección entre el plano $(0\bar{1}1)$ y la base superior de la celdilla unidad; el segmento gh representa la intersección entre este mismo plano $(0\bar{1}1)$ y la prolongación de la base inferior. Los segmentos fh y eg son las intersecciones entre $(0\bar{1}1)$ y las prolongaciones de las caras laterales frontal y opuesta, respectivamente.

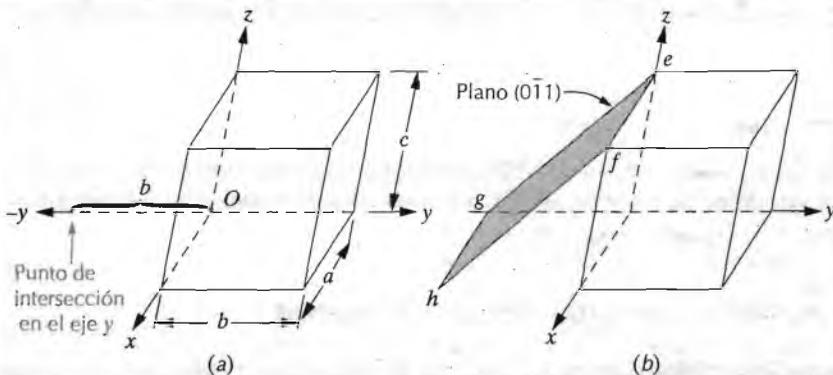
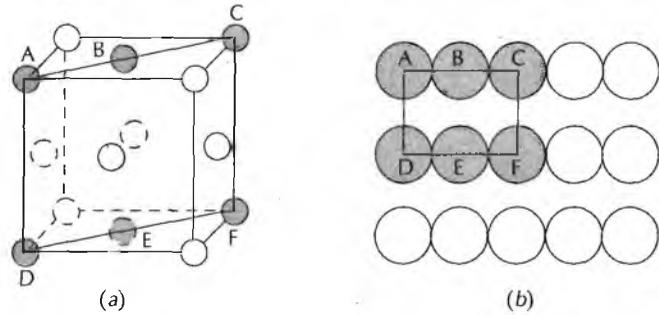


Figura 3.9 (a) Celdilla unidad FCC con esferas reducidas y con el plano (110). (b) Empaquetamiento atómico de un plano (110) FCC, cuyas posiciones atómicas se indican en (a).



3.9.1 Disposición atómica

La disposición atómica de los planos cristalográficos depende de la estructura cristalina. Los planos atómicos (110) para las estructuras FCC y BCC están representados en las Figuras 3.9 y 3.10, donde también se incluyen las celdillas unidad con esferas reducidas. Obsérvese que el empaquetamiento atómico es distinto en cada caso. Los círculos representan átomos en los planos cristalográficos obtenidos cortando por el centro las esferas rígidas.

El empaquetamiento atómico puede ser idéntico para varios planos cristalográficos que tienen diferentes índices, los cuales dependen de la simetría de la estructura cristalina; tales planos constituyen una familia de planos equivalentes. Una familia de planos se designa encerrando los números con unas llaves. Por ejemplo, los planos (111), ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$), ($\bar{1}11$), ($1\bar{1}\bar{1}$), ($11\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}1$), ($\bar{1}1\bar{1}$) y ($1\bar{1}1$) de los cristales cúbicos pertenecen a la familia {111}. Sólo en el sistema cúbico, los planos que tienen los mismos índices, independientemente del orden y del signo, son equivalentes. Por ejemplo, ($1\bar{2}3$) y ($3\bar{1}2$) pertenecen a la familia {123}.

3.9.2 Cristales hexagonales

En los cristales con simetría hexagonal es deseable que los planos y las direcciones equivalentes tengan los mismos índices, lo cual se consigue mediante el sistema de Miller-Bravais mostrado en la Figura 3.6. Esta conversión conduce al esquema de cuatro índices ($hkil$) que clasifica la orientación de los planos en el sistema cristalino hexagonal. Hay alguna redundancia, pues i equivale a la suma de h y k :

$$i = -(h + k)$$

Los tres índices h , k y l son idénticos para ambos sistemas. La Figura 3.7b recoge varios de los planos más comunes de los cristales con simetría hexagonal.

3.10 DENSIDADES ATÓMICAS LINEAL Y PLANAR

En las dos secciones precedentes se ha discutido la equivalencia entre planos y direcciones no paralelas, y se ha relacionado la equivalencia con el empa-

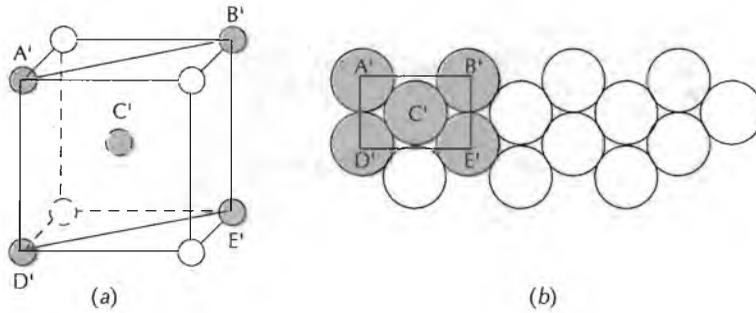


Figura 3.10 (a) Celdilla unidad BCC con esferas reducidas y con el plano (110). (b) Empaquetamiento atómico de un plano (110) BCC, cuyas posiciones atómicas se indican en (a).

quetamiento atómico. Ahora es el momento de introducir los conceptos de densidades lineal y planar. La *densidad lineal* corresponde a la fracción de longitud de línea, de una dirección cristalográfica particular, que pasa a través de los centros de los átomos. Similarmente, la *densidad planar* es simplemente la fracción del área del plano cristalográfico ocupada por átomos (representados como círculos); el plano debe pasar a través del centro del átomo para que éste se pueda incluir. Estos conceptos, uni y bidimensional, al igual que el efecto de empaquetamiento atómico se tratan en los problemas resueltos siguientes.

PROBLEMA RESUELTO 3.8

Calcular la densidad lineal de la dirección [100] en BCC.

SOLUCIÓN

En la Figura 3.11a están representadas la celdilla unidad BCC (esferas reducidas) y en su interior la dirección [100]. En la Figura 3.11b está representado el empaquetamiento lineal en esta dirección. La base para el cálculo es la longitud de la línea dentro de la celdilla unidad, L_p , que en este

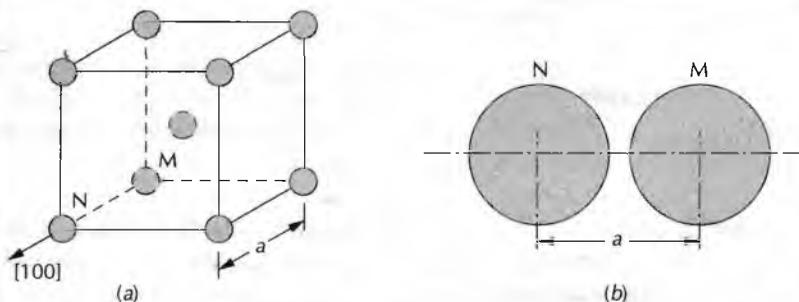


Figura 3.11 (a) Celdilla unidad BCC con esferas reducidas y con la dirección [100] indicada. (b) Distancia interatómica en la dirección [100] de una estructura cristalina BCC: entre los átomos M y N de (a).

caso es el parámetro de red a : la distancia entre los centros de los átomos M y N. En función del radio atómico R ,

$$L_1 = a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (\text{ver ecuación 3.3})$$

La longitud de la línea intersectada por los círculos (átomos M y N), L_c , es igual a $2R$. La densidad lineal DL es la siguiente relación

$$DL = \frac{L_c}{L_1} = \frac{2R}{4R\sqrt{3}} = 0,866$$

PROBLEMA RESUELTO 3.9

Calcular la densidad del plano (110) del FCC.

SOLUCIÓN

El empaquetamiento atómico de este plano se representa en la Figura 3.9b. Considérese que la posición del plano que interseca la celdilla unidad (Figura 3.9b) y luego calcúlese el área de este plano y el área total de los círculos en función del radio atómico R . La densidad del plano es la relación de estas dos áreas.

El área del plano de la celdilla unidad, A_p , es la del rectángulo definido por los centros de los átomos A, C, D y F (Figura 3.9b). La longitud del rectángulo (\overline{AC}) y la anchura (\overline{AD}) son, respectivamente

$$\begin{aligned} \overline{AC} &= 4R \\ \overline{AD} &= 2R\sqrt{2} \end{aligned} \quad (\text{ver ecuación 3.1})$$

De donde se deduce:

$$A_p = (\overline{AC})(\overline{AD}) = (4R)(2R\sqrt{2}) = 8R^2\sqrt{2}$$

El área total de los círculos es la suma de un cuarto correspondiente a los átomos A, C, D y F y la mitad de los átomos B y E, lo que da un total de 2 círculos equivalentes. El área total encerrada en los círculos de los átomos es:

$$A_c = (2)\pi R^2$$

La densidad del plano es:

$$DP = \frac{A_c}{A_p} = \frac{2\pi R^2}{8R^2\sqrt{2}} = 0,555$$

Las densidades lineales y planares tienen gran importancia para explicar los deslizamientos, que son el fundamento del mecanismo de la plasticidad de los metales. Los deslizamientos ocurren en la mayoría de los planos cristalográficos de máximo empaquetamiento a lo largo de las direcciones que tienen el mayor empaquetamiento atómico.

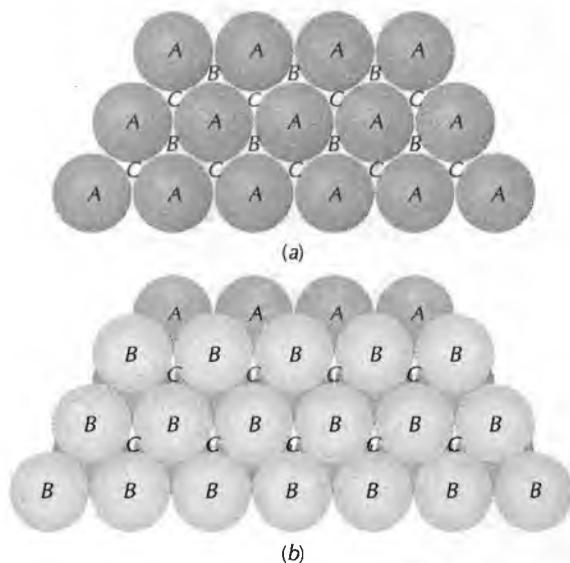


Figura 3.12 (a) Un conjunto de planos atómicos empaquetados. Se indican las posiciones A, B y C. (b) Secuencia de apilamiento AB de planos atómicos empaquetados. (Adaptado de W. G. Moffatt, G. W. Pearsall y J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 50. Copyright 1964 John Wiley & Sons, Nueva York. Reproducida con permiso de John Wiley & Sons, Inc.)

3.11 ESTRUCTURAS CRISTALINAS COMPACTAS

De la discusión de las estructuras cristalinas de los metales se deduce que las estructuras cúbica centrada en las caras y hexagonal compacta tienen un factor de empaquetamiento de 0,74, que es el más eficiente empaquetamiento de átomos o esferas de igual tamaño. Además, las representaciones de la celdilla unidad de estas estructuras cristalinas se pueden describir en función de planos compactos de átomos (p. ej., planos con la máxima densidad de átomos o esferas rígidas); una parte de uno de estos planos está representada en la Figura 3.12 *a*. Ambas estructuras cristalinas se generan colocando planos compactos uno encima del otro; la diferencia entre las dos estructuras radica en la secuencia de apilamiento.

Si a los centros de los átomos que forman un plano compacto los marcamos con A, al representar ese plano aparecen dos conjuntos de depresiones triangulares equivalentes, constituidas por tres átomos adyacentes, en los que se sitúan los átomos del siguiente plano compacto de átomos. Los triángulos que tienen el vértice situado hacia arriba se designan arbitrariamente como B, mientras que los que lo tienen dirigido hacia abajo se denominan C, tal como se indica en la Figura 3.12 *a*.

El segundo plano compacto puede hacer coincidir los centros de los átomos con las posiciones B o C; ambas son equivalentes. Supongamos que las posiciones escogidas arbitrariamente son las B; la secuencia de apilamiento se denomina AB y está ilustrada en la Figura 3.12 *b*. La diferencia entre FCC y HC radica en la colocación del tercer plano compacto. Para HC los centros atómicos del tercer plano coinciden con las posiciones A. La secuencia de apilamiento, ABABAB..., se repite. Desde luego la secuencia ACACAC... es equivalente. Los planos compactos del HC son del tipo (0001) y su relación con la celdilla unidad se muestra en la Figura 3.13.

Figura 3.13 Secuencia de apilamiento de planos atómicos empaquetados de la estructura hexagonal compacta. (Adaptado de W.G. Moffat, G. W. Pearsall y J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. Copyright 1964 John Wiley & Sons, Nueva York. Reproducida con permiso de John Wiley & Sons, Inc.)

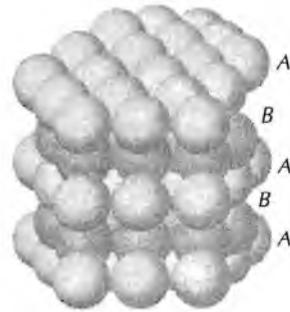
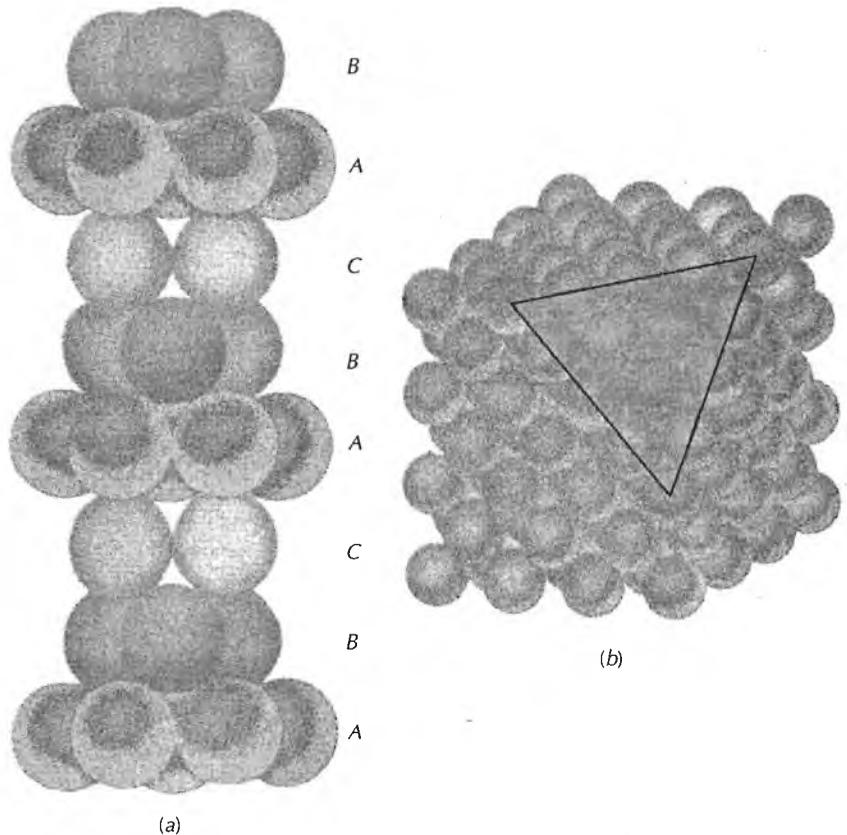


Figura 3.14 (a) Secuencia de apilamiento de planos empaquetados de la estructura cúbica centrada en las caras. (b) Se ha eliminado un vértice para mostrar la relación entre el apilamiento de planos atómicos empaquetados y la estructura cristalina FCC. El triángulo trazado corresponde a un plano (111). (Figura (b) de W. G. Moffat, G. W. Pearsall y J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. I, *Structure*, p. 51. © 1964 John Wiley and Sons, Nueva York. Reproducida con permiso de John Wiley & Sons, Inc.)



En los cristales de estructura cúbica centrada en las caras, los centros de los átomos del tercer plano se alinean con las posiciones C del primer plano (Figura 3.14a). La secuencia de apilamiento es $ABCABCABC$; es decir, se repite el alineamiento atómico después del tercer plano compacto. Es menos evidente relacionar el apilamiento de estos planos compactos con la celdilla unidad FCC. Sin embargo, esta relación se indica en la Figura 3.14b; estos planos son del tipo (111). El significado de estos planos compactos FCC y HC se discute en el Capítulo 7.

3.12 MONOCRISTALES

Cuando la disposición atómica de un sólido cristalino es perfecta, sin interrupciones, a lo largo de toda la muestra, el resultado es un **monocristal**. Todas las celdillas unidad están entrelazadas o unidas del mismo modo y tienen la misma dirección. Los monocristales existen en la naturaleza, pero también se pueden generar artificialmente. El crecimiento de estos últimos es, por lo general, difícil, ya que el medio se debe controlar cuidadosamente.

Si los extremos de un monocristal crecen sin impedimentos externos, el cristal adquiere una forma geométrica regular con caras planas, como las que presentan algunas piedras preciosas. La forma refleja la estructura cristalina. En la fotografía de la Figura 3.15 aparecen varios monocristales. En los últimos años los monocristales han adquirido extraordinaria importancia en la moderna tecnología, sobre todo en microelectrónica, que emplea monocristales de silicio y de otros semiconductores.

3.13 MATERIALES POLICRISTALINOS

La mayoría de los sólidos cristalinos son un conjunto de muchos cristales pequeños o **granos**. Este tipo de material se denomina **policristalino**. En la Figura 3.16 se han esquematizado varias etapas de la solidificación de una muestra policristalina. Al principio, aparecen pequeños cristales o núcleos en distintas posiciones. Estas orientaciones cristalográficas son completamente al azar y están indicadas por cuadrados. Los granos pequeños cre-

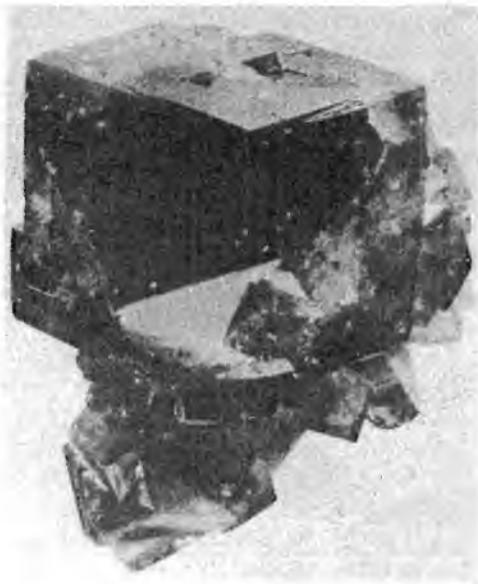


Figura 3.15 Aspecto de varios monocristales de fluorita, CaF_2 . (Fotografía nº38181P Smithsonian Institution.)

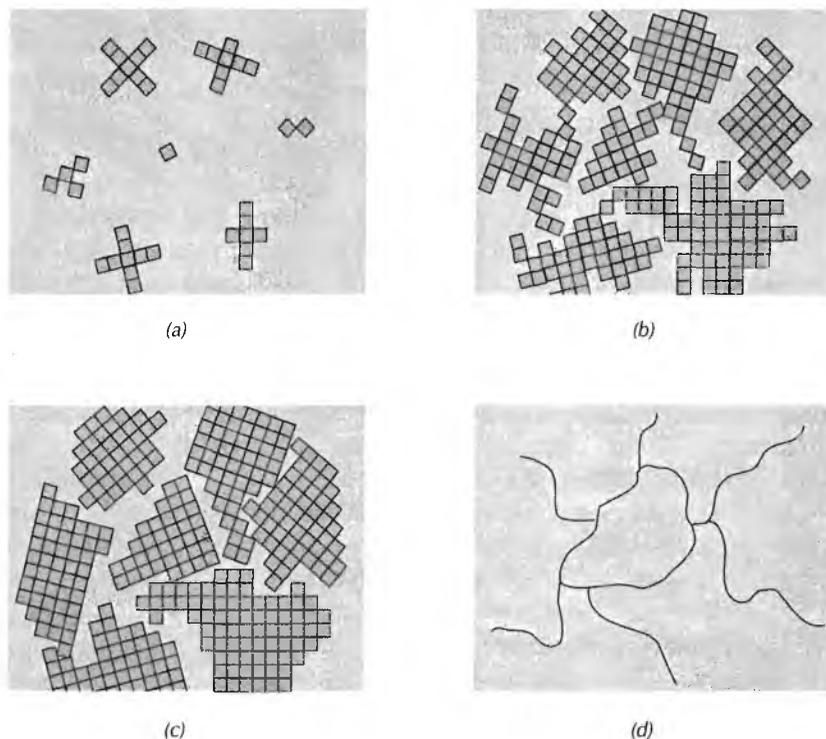


Figura 3.16 Esquemas de varias etapas de la solidificación de un material policristalino; las cuadrículas representan celdillas unidad. (a) Núcleos de cristalización. (b) Crecimiento de los cristales pequeños. También se observa que algún cristal obstruye el crecimiento de su vecino. (c) Al terminar la solidificación aparecen granos de formas irregulares. (d) Bajo el microscopio, la estructura de los granos aparece con líneas oscuras en los límites de grano. (Adaptado de W. Rosenhain, *An Introduction to the Study of Physical Metallurgy*, 2ª edición. Constable & Company Ltd., Londres, 1915.)

cen por la sucesiva adición a la estructura de átomos del líquido subenfriado. Los extremos de granos adyacentes interaccionan entre sí al finalizar el proceso de solidificación. La Figura 3.16 indica que la orientación cristalográfica varía de un grano a otro. También existe alguna irregularidad en la disposición atómica en la región donde se unen dos granos: esta área, denominada **límite de grano**, se discute con más detalle en la Sección 4.5.

3.14 ANISOTROPÍA

Las propiedades físicas de algunos monocristales dependen de la dirección cristalográfica tomada para su medida. Por ejemplo, el módulo elástico, la conductividad eléctrica y el índice de refracción pueden tener diferentes valores en la dirección [100] y en la [111]. La direccionalidad de las propiedades se denomina **anisotropía** y está relacionada con la variación de la distancia atómica o iónica según la dirección cristalográfica. Las sustancias cuyas propiedades son independientes de la dirección de la medida se denominan **isotrópicas**. La extensión y la magnitud de los efectos anisotrópicos en materiales cristalinos son función de la simetría de la estructura cristalina. El grado de anisotropía se incrementa al disminuir la simetría estructural: normalmente las estructuras triclinicas tienen la mayor anisotropía. En la Tabla 3.3 se dan valores del módulo elástico en las orientaciones [100], [110] y [111] de varios materiales.

En la mayoría de los materiales policristalinos, las orientaciones cristalográficas de los granos individuales son completamente al azar. En estas cir-

Tabla 3.3 Valores del módulo de elasticidad de varios metales y en distintas orientaciones cristalográficas

Metal	Módulos de elasticidad [psi × 10 ⁶ (Mpa × 10 ³)]		
	[100]	[110]	[111]
Aluminio	9,2 (63,7)	10,5 (72,6)	11,0 (76,1)
Cobre	9,7 (66,7)	18,9 (130,3)	27,7 (191,1)
Hierro	18,1 (125,0)	30,5 (210,5)	39,6 (272,7)
Tungsteno	55,8 (384,6)	55,8 (384,6)	55,8 (384,6)

Fuente: R.W. Hertzberg. *Deformation and Fracture Mechanics of Engineering Materials*, 3ª edición. Copyright 1989 John Wiley & Sons, Nueva York. Reproducido con autorización de John Wiley & Sons, Inc.

cunstances, aunque cada grano sea anisotrópico, la probeta compuesta de un conjunto de granos, se comporta isotrópicamente. También la magnitud de la propiedad medida significa el promedio del valor direccional. Existen técnicas destinadas a producir materiales policristalinos cuyos granos tienen una orientación cristalográfica preferente. Estas técnicas se utilizan cuando interesa obtener características anisotrópicas.

3.15 DIFRACCIÓN DE RAYOS X: DETERMINACIÓN DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS

Muchos de los conocimientos actuales de la disposición atómica y molecular de los sólidos resultan de las investigaciones mediante difracción de rayos X; además, los rayos X tienen gran importancia en el desarrollo de nuevos materiales. A continuación se describe brevemente el fenómeno de la difracción de rayos X y se deducen las estructuras cristalinas y las distancias interplanares utilizando rayos X.

3.15.1 El fenómeno de difracción

Ocurre difracción cuando una onda encuentra una serie de obstáculos separados regularmente, que (1) son capaces de dispersar la onda y (2) están separados por distancias comparables en magnitud a la longitud de onda. Además, la difracción es la consecuencia de relaciones entre fases específicas, establecidas entre dos o más ondas dispersadas por los obstáculos.

En la Figura 3.17a se consideran las ondas 1 y 2, que tienen la misma longitud de onda (λ) y están en fase en $O-O'$. Se supone que experimentan dispersión al recorrer diferentes caminos. Es importante la relación entre las fases de ondas dispersadas, que depende de la longitud del camino. En la Figura 3.17a se aprecia que estas ondas dispersadas (denominadas 1' y 2') con-

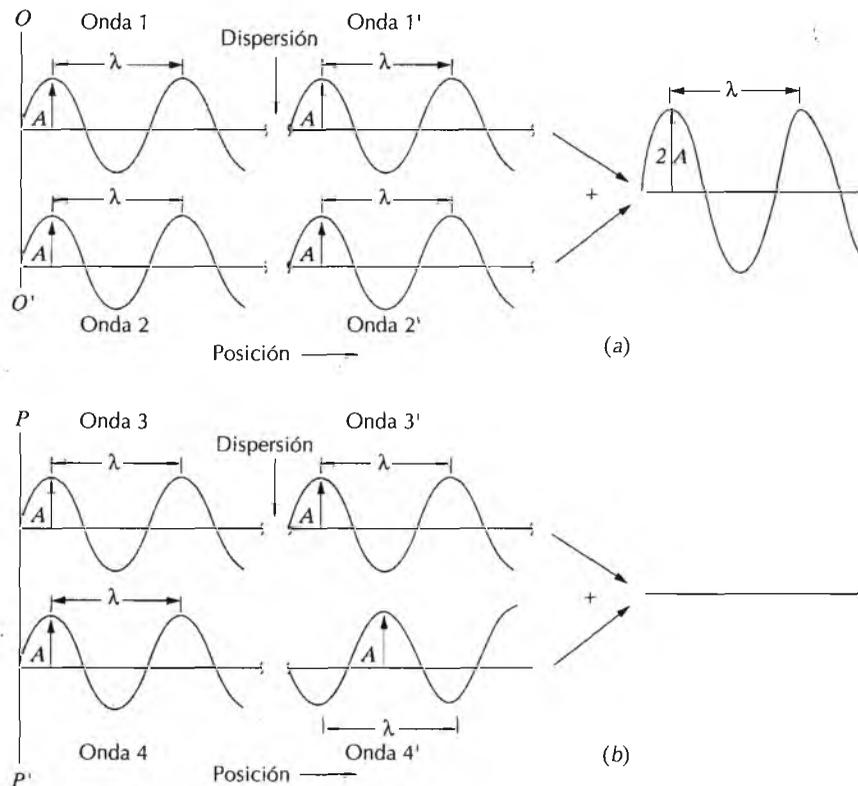


Figura 3.17 (a) Dos ondas (la 1 y la 2) con la misma longitud de onda y que permanecen en fase después de un fenómeno de dispersión (ondas 1' y 2') se interfieren positivamente. La amplitud de la onda resultante es la suma de las ondas dispersadas. (b) Dos ondas (la 3 y la 4) con la misma longitud de onda y que resultan desfasadas después de un fenómeno de dispersión (ondas 3' y 4') se interfieren destructivamente. Las amplitudes de las dos ondas dispersadas se cancelan mutuamente.

tinúan en fase. Se dice que se refuerzan mutuamente (con interferencia constructiva) y se suman sus amplitudes, como indica el resultado de la derecha de la figura. Esta es una manifestación de la **difracción** y los rayos difractados están compuestos de gran número de ondas dispersas que se refuerzan mutuamente.

Entre ondas dispersadas existen otras relaciones de fases que no conducen al reforzamiento mutuo. Esta condición está registrada en la Figura 3.17b, donde la diferencia entre las longitudes de los caminos después de la dispersión es un número impar de semilongitudes de onda. Las ondas dispersadas no están en fase. Las amplitudes se anulan entre sí o interfieren destructivamente (p.ej., la onda resultante tiene amplitud cero), como indica el extremo derecho de la figura. Existen relaciones de fase intermedias entre estos dos extremos, resultando sólo un reforzamiento parcial.

3.15.2 Difracción de rayos X y ley de Bragg

Los rayos X son una forma de radiación electromagnética que tiene elevada energía y corta longitud de onda: del orden de los espacios interatómicos de los sólidos. Cuando un haz de rayos X incide en un material sólido, parte de este haz se dispersa en todas direcciones a causa de los electrones asociados a los átomos o iones que encuentra en el trayecto. A continuación se examinan las condiciones necesarias para la difracción de rayos X por una disposición ordenada de átomos.

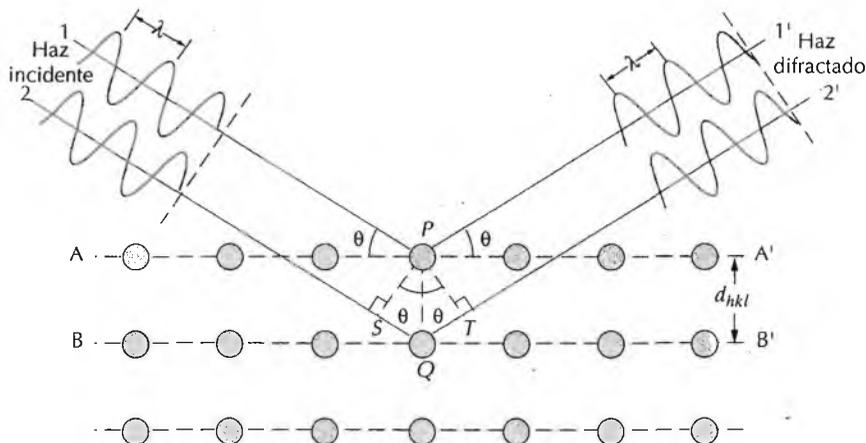


Figura 3.18 Difracción de rayos X por los planos atómicos (A-A' y B-B').

En la Figura 3.18 se consideran dos planos paralelos de átomos A-A' y B-B' que tienen los mismos índices de Miller h , k y l y están separados por una distancia interplanar d_{hkl} . Se supone que un haz paralelo, monocromático y coherente (en fase) de rayos X de longitud de onda λ incide en estos dos planos según un ángulo θ . Dos rayos de este haz, señalados como 1 y 2, son dispersados por los átomos P y Q. Según un ángulo θ con los planos, ocurre una interferencia constructiva de los rayos dispersados 1' y 2', siempre que las diferencias de recorrido entre 1-P-1' y 2-Q-2' (p.ej. $\overline{SQ} + \overline{QT}$) equivalgan a un número entero, n , de longitud de onda. Es decir, la condición para la difracción es:

$$n\lambda = \overline{SQ} + \overline{QT} \quad (3.8)$$

o

$$n\lambda = d_{hkl}\text{sen}\theta + d_{hkl}\text{sen}\theta = 2d_{hkl}\text{sen}\theta \quad (3.9)$$

La Ecuación 3.9 es conocida como **ley de Bragg**; donde n es el orden de difracción, que puede ser cualquier número entero (1, 2, 3...) siempre que $\text{sen } \theta$ no exceda la unidad. Así, se obtiene una simple expresión que relaciona la longitud de onda de los rayos X y la distancia interatómica con el ángulo de incidencia del haz difractado. Si no se cumple la ley de Bragg, la interferencia es de naturaleza no constructiva y el campo del haz difractado es de muy baja intensidad.

La magnitud de la distancia entre dos planos de átomos contiguos y paralelos (p.ej., la distancia interplanar d_{hkl}) es función de los índices de Miller (h , k y l) así como de los parámetros de red. Por ejemplo, para estructuras cristalinas de simetría cúbica,

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (3.10)$$

donde a es el parámetro de red (longitud de la arista de la celdilla unidad). Los otros seis sistemas cristalinos, anotados en la Tabla 3.2, cumplen relaciones similares pero más complejas que las de la Ecuación 3.10.

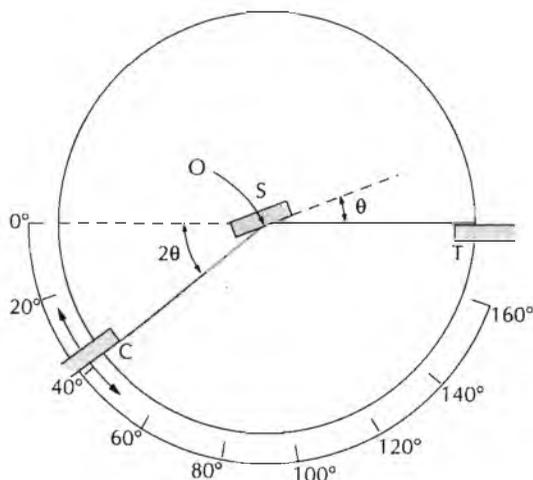


Figura 3.19 Esquema de un difractor de rayos X: T = fuente de rayos X, S = muestra, C = detector, O = eje de giro de la muestra y del detector.

La ley de Bragg, Ecuación 3.9, es una condición necesaria pero no suficiente para la difracción en cristales reales. Esta ley especifica condiciones para que ocurra la difracción en celdillas unidad con átomos sólo en los vértices. Los átomos situados en otras posiciones (p.ej., en las caras y en el interior de la celdilla como en FCC y BCC) los centros actúan como centros extras de dispersión que, a ciertos ángulos de Bragg, pueden producir dispersiones desfasadas. El resultado es la ausencia de algunos haces difractados que deberían estar presentes según la Ecuación 3.9. Por ejemplo, para la estructura cristalina BCC, $h + k + l$ debe ser un número par para que tenga lugar la difracción, mientras que para FCC, h , k y l deben ser todos impares o pares.

3.15.3 Técnicas de difracción

La técnica de difracción más común utiliza una muestra pulverizada o policristalina consistente en muchas partículas diminutas y orientadas al azar, que se exponen a una radiación de rayos X monocromática. Como cada partícula de polvo es un cristal, teniendo gran cantidad de ellos libremente orientados se asegura que algunas partículas estén orientadas adecuadamente para que sus planos cristalográficos cumplan las condiciones para la difracción.

El *difractómetro* es un aparato utilizado para determinar los ángulos en que ocurre difracción en las muestras pulverizadas. En la Figura 3.19 se ha esquematizado el difractor. Una muestra S, en forma de lámina plana, se coloca de modo que gire alrededor de un eje O, perpendicular al plano del papel. En el punto T se genera un haz monocromático de rayos X y las intensidades de los haces difractados se detectan con el contador C. La muestra, la fuente de rayos X y el contador están en un mismo plano.

El contador se instala en un lugar que pueda girar en torno al eje O y la posición angular, en función de 2θ , se determina mediante una escala gra-

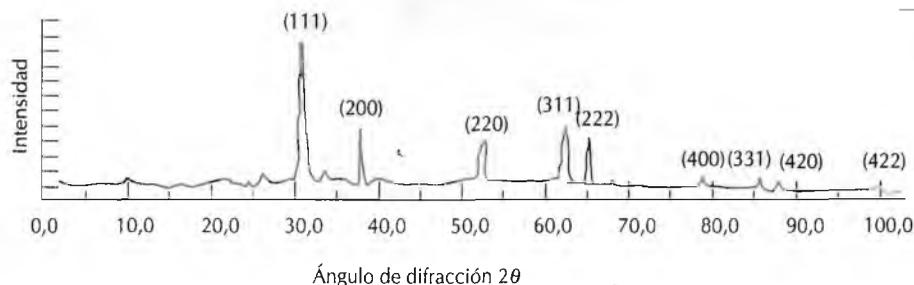


Figura 3.20 Espectro de difracción del plomo pulverizado. (Cortesía de Wesley L. Holman.)

duada.¹ La muestra y el contador se acoplan mecánicamente de modo que una rotación θ de la muestra represente un giro 2θ del contador, lo cual asegura el mantenimiento de los ángulos incidente y difractado (Figura 3.19). En el trayecto del haz se incorporan calibradores para delimitarlo y focalizarlo. La utilización de un filtro asegura un haz casi monocromático.

El contador se mueve a una velocidad angular constante y la intensidad del haz difractado (monitorizada por el contador) se registra en función de 2θ . El ángulo 2θ es el denominado *ángulo de difracción* y se determina experimentalmente. La Figura 3.20 es un espectro de difracción de una muestra de plomo pulverizada. Los picos de alta intensidad aparecen cuando algún conjunto de planos cristalográficos cumple la condición de difracción de Bragg. Estos picos de la figura corresponden a índices de planos.

Se han diseñado otras técnicas de polvos en las cuales, en lugar de utilizar el contador, la intensidad y la posición del haz difractado se registran en una película fotográfica.

Una de las principales aplicaciones de la difracción de rayos X es la determinación de estructuras cristalinas. El tamaño y la geometría de la celdilla unidad se deducen de las posiciones angulares de los picos de difracción, y la disposición de los átomos en la celdilla se deduce de la intensidad relativa de estos picos.

Los haces de rayos X, de electrones y de neutrones también se utilizan para la investigación de otro tipo de materiales. Por ejemplo, para conocer las orientaciones cristalográficas de monocristales se observan los espectros de difracción (lauegramas) de rayos X. La fotografía de la página 31 corresponde a un cristal de magnesio; los puntos claros (con la excepción del centro) son haces de rayos X difractados por un conjunto específico de planos cristalográficos. Otras aplicaciones de rayos X incluyen el análisis químico cualitativo y cuantitativo, la determinación del tamaño de grano y las tensiones residuales.

¹Conviene puntualizar que el símbolo θ ha sido utilizado en dos diferentes contextos en esta discusión. Aquí θ representa el ángulo para localizar las posiciones de la fuente y del contador de rayos X. Anteriormente (Ecuación 3.9) se utilizó para establecer el criterio de Bragg para que tuviera lugar la difracción.

Para el hierro BCC, calcular (a) la distancia interplanar y (b) el ángulo de difracción para el conjunto de planos (211). El parámetro de red, para el Fe, es 0,2866 nm (2,866 Å). Se utiliza una radiación monocromática de una longitud de onda de 0,1542 nm (1,542 Å) y el orden de difracción es 1.

SOLUCIÓN

(a) La distancia interplanar d_{hkl} se calcula utilizando la Ecuación 3.10 con $a = 0,2866$ nm, $h = 2$, $k = 1$, y $l = 1$, ya que se consideran los planos (211). Por tanto,

$$\begin{aligned} d_{hkl} &= \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \\ &= \frac{0,2866 \text{ nm}}{\sqrt{(2)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = 0,1170 \text{ nm} (1,170 \text{ Å}) \end{aligned}$$

(b) El valor de θ se puede calcular mediante la Ecuación 3.9, con $n = 1$, ya que se trata de una difracción de primer orden.

$$\begin{aligned} \text{sen } \theta &= \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{(1)(0,1542 \text{ nm})}{(2)(0,1170 \text{ nm})} = 0,659 \\ \theta &= \text{sen}^{-1}(0,659) = 41,22^\circ \end{aligned}$$

El ángulo de difracción, 2θ , vale:

$$2\theta = (2)(41,22^\circ) = 82,44^\circ$$

3.16 SÓLIDOS NO CRISTALINOS

Los sólidos **no cristalinos** carecen de un ordenamiento atómico sistemático y regular a distancias atómicas relativamente grandes. Estos materiales también se denominan **amorfos** (literalmente significa sin forma) o líquidos subenfriados, puesto que la estructura atómica recuerda la de un líquido.

La condición amorfa se visualiza comparando las estructuras cristalina y no cristalina del material cerámico dióxido de silicio (SiO_2), que puede existir en ambos estados. Las Figuras 3.21a y 3.21b presentan esquemas bidimensionales de ambas estructuras del SiO_2 . Invariablemente, cada ion silicio se une a tres iones oxígeno en ambos estados, pero la estructura es mucho más desordenada e irregular para la condición no cristalina.

El que un sólido adquiera la forma cristalina o amorfa depende de la facilidad con que la estructura atómica al azar del líquido se pueda transformar en un estado ordenado durante la solidificación. El material amorfo se caracteriza por la relativamente compleja estructura atómica y molecular, que se puede ordenar con relativa dificultad. El enfriamiento rápido favorece la formación de sólidos no cristalinos, ya que el proceso de ordenación necesita algún tiempo.

Normalmente los metales forman sólidos cristalinos. Algunos materiales cerámicos son cristalinos, mientras que otros, como los vidrios inorgánicos, son amorfos. Los polímeros pueden ser completamente cristalinos, entera-

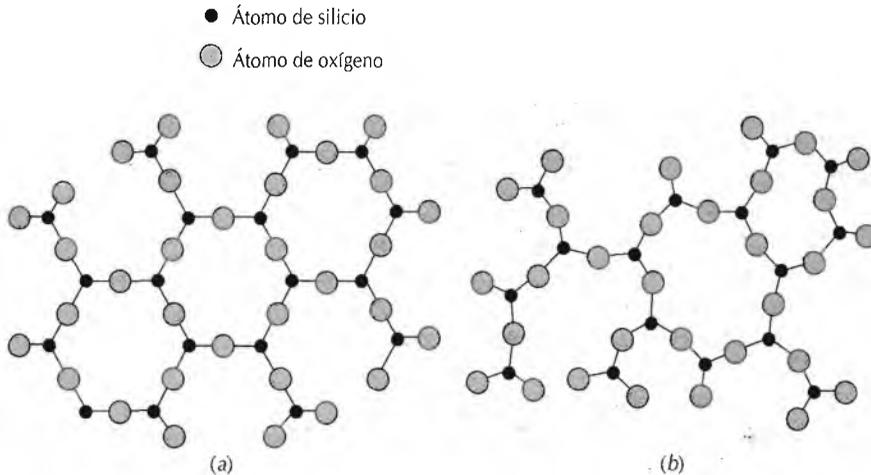


Figura 3.21 Esquemas bidimensionales de las estructuras de: (a) dióxido de silicio cristalino y (b) dióxido de silicio no cristalino

mente no cristalinos o una mezcla de ambos. En los Capítulos 13 y 15 se consideran la estructura y las propiedades de cerámicas y polímeros amorfos.

RESUMEN

En los sólidos cristalinos los átomos se colocan según un modelo ordenado y reiterativo, que contrasta con la distribución al azar y desordenada de los materiales no cristalinos o amorfos. Los átomos se representan como esferas rígidas y la estructura cristalina del sólido es la disposición espacial de estas esferas. Las diferentes estructuras cristalinas se definen en función de celdillas unidad paralelepípedas, caracterizadas por la geometría y disposición de los átomos.

La mayoría de los metales cristalizan en una de las tres estructuras simples: cúbica centrada en la cara (FCC), cúbica centrada en el cuerpo (BCC) y hexagonal compacta (HC). Dos características de la estructura cristalina son el número de coordinación (número de átomos vecinos más próximos) y el factor de empaquetamiento atómico (la fracción de volumen de esfera rígida en la celdilla unidad). Las estructuras cristalinas FCC y HC tienen los mismos números de coordinación y el factor de empaquetamiento atómico, ya que ambas estructuras se generan por apilamiento de planos compactos de átomos.

Los planos y las direcciones cristalográficas se especifican mediante índices. La determinación de los índices se fundamenta en un sistema de ejes coordenados definidos por la celdilla unidad para la estructura cristalina particular. Los índices de la dirección se calculan en función de las proyecciones del vector en cada uno de los ejes de coordenadas, mientras que los índices del plano se determinan a partir de los recíprocos de las intersecciones axiales. Para las celdillas unidad hexagonales, es más conveniente un esquema de cuatro índices para direcciones y planos.

Las equivalencias cristalográficas direccional y planar están relacionadas con las densidades lineal y planar, respectivamente. El empaquetamiento atómico (p.ej. densidad planar) de esferas en un plano cristalográfico depende de los índices del plano y de la estructura cristalina. Para una estructura cristalina determinada, los planos que tienen idéntico empaquetamiento aunque tengan índices de Miller diferentes, pertenecen a la misma familia.

Los monocristales son materiales en que la ordenación atómica se extiende ininterrumpidamente por toda la probeta. En algunas circunstancias, pueden tener caras planas y formas geométricas regulares. La mayoría de los sólidos cristalinos, sin embargo, son policristalinos, compuestos de muchos diminutos cristales provistos de diferentes orientaciones cristalográficas.

La difracción de rayos X se utiliza para determinar la estructura cristalina y la distancia interplanar. Un haz de rayos X dirigido a un material cristalino puede experimentar difracción (interferencia constructiva) como resultado de la interacción con una serie de planos atómicos paralelos según la ley de Bragg. La distancia interplanar es función de los índices de Miller y del parámetro o de los parámetros de red, así como de la estructura cristalina.

TÉRMINOS Y CONCEPTOS IMPORTANTES

Alotropía	Estructura cristalina	Límite de grano
Amorfo	Factor de empaquetamiento atómico (FEA)	Monocristal
Anisotropía	Grano	No cristalino
Celdilla unidad	Hexagonal compacta (HC)	Número de coordinación
Cristalina	Índices de Miller	Parámetro de red
Cúbica centrada caras (FCC)	Isotrópico	Policristalino
Cúbica centrada cuerpo (BCC)	Ley de Bragg	Polimorfismo
	Difracción	Red
		Sistema cristalino

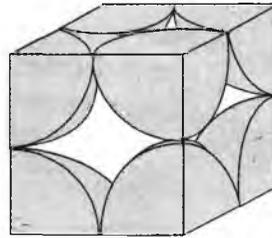
BIBLIOGRAFÍA

- AZAROFF, L. H., *Elements of X-Ray Crystallography*, McGraw-Hill Book Company, New York, 1968. Reprinted by TechBooks, Fairfax, VA.
- BARRET, C. S. and T. B. MASSALSKI, *Structure of Metals*, 3rd edition, Pergamon Press, Oxford, 1980.
- BRAGG, W. L., *The Crystalline State, Vol. I: A General Survey*, The McMillan Co., New York, 1934.
- BUERGUER, M. J., *Elementary Crystallography*, John Wiley & Sons, New York, 1956.
- COHEN, J. B., *Diffractions Methods in Material Science*, The McMillan and Co., New York, 1966.
- CULLITY, B. D., *Elements of X-Ray Diffraction*, 2nd edition, Addison-Wesley Publishing Co., Reading, MA, 1978.
- WYCKOFF, R. W. G., *Cristal Structures*, 2nd edition, Interscience Publishers, 1963.

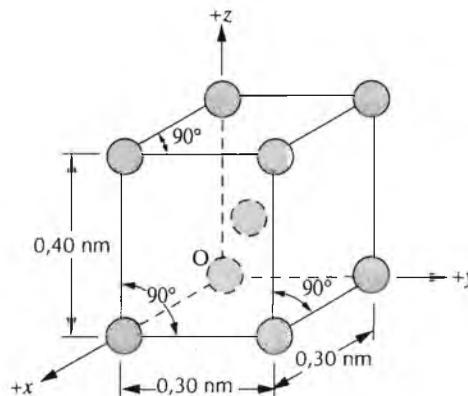
- 3.1 ¿Cuál es la diferencia entre estructura atómica y estructura cristalina?
- 3.2 ¿Cuál es la diferencia entre una estructura cristalina y un sistema cristalino?
- 3.3 Si el radio atómico del plomo vale 0,175 nm, calcular el volumen atómico de la celdilla unidad en metros cúbicos.
- 3.4 Demostrar para la estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo que la longitud de la arista a de la celdilla unidad y el radio atómico R están relacionados según $a = 4R/\sqrt{3}$.
- 3.5 Demostrar que, para la estructura cristalina HC, la relación ideal c/a vale 1,633.
- 3.6 Demostrar que el factor de empaquetamiento atómico para BCC es 0,68.
- 3.7 Demostrar que el factor de empaquetamiento atómico para HC es 0,74.
- 3.8 Suponiendo un metal de estructura cristalina cúbica simple con los átomos localizados en los vértices del cubo y tocándose entre sí a lo largo de las aristas del cubo (Figura 3.22). (a) ¿Cuál es el número de coordinación para esta estructura cristalina? (b) Calcular el factor de empaquetamiento atómico.
- 3.9 El molibdeno tiene una estructura cristalina BCC, un radio atómico de 0,1363 nm y un peso atómico de 95,94 g/mol. Calcular y comparar su densidad con el valor experimental anotado en la Tabla C.2 del Apéndice C.
- 3.10 Calcular el radio de un átomo de paladio sabiendo que el Pd tiene una estructura cristalina FCC, una densidad de 12,0 g/cm³ y un peso atómico de 106,4 g/mol.
- 3.11 Calcular el radio de un átomo de tántalo sabiendo que el Ta tiene una estructura cristalina BCC, una densidad de 16,6 g/cm³ y un peso atómico de 180,9 g/mol.
- 3.12 La Figura 3.22 muestra la estructura cúbica simple de un hipotético metal. Si su peso atómico es 70,4 g/mol y el radio atómico es 0,126 nm, calcular su densidad.
- 3.13 El circonio tiene una estructura cristalina HC y una densidad de 6,51 g/cm³. (a) ¿Cuál es el volumen de la celdilla unidad en metros cúbicos? (b) Si la relación c/a es 1,593, calcular los valores de c y de a .
- 3.14 Utilizando los datos de peso atómico, estructura cristalina y radio atómico tabulados en la parte interior de la portada, calcular las densidades teóricas del aluminio, níquel, titanio y tungsteno y comparar estos valores con las densidades experimentales anotadas en la misma tabla. La relación c/a para el titanio es 1,58.
- 3.15 El niobio tiene un radio atómico de 0,1430 nm (1,430 Å) y una densidad de 8,57 g/cm³. Determinar si tiene estructura cristalina FCC o BCC.
- 3.16 Se adjuntan el peso atómico, la densidad y el radio atómico de tres hipotéticas aleaciones. Determinar para cada una si su estructura cristalina es FCC, BCC o cúbica simple y justificarlo. Una celdilla unidad cúbica simple se muestra en la Figura 3.22.

Aleación	Peso atómico (g/mol)	Densidad (g/cm ³)	Radio atómico (nm)
A	43,1	6,4	0,122
B	184,4	12,3	0,146
C	91,6	9,6	0,137

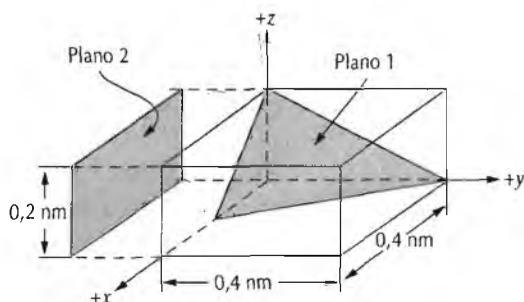
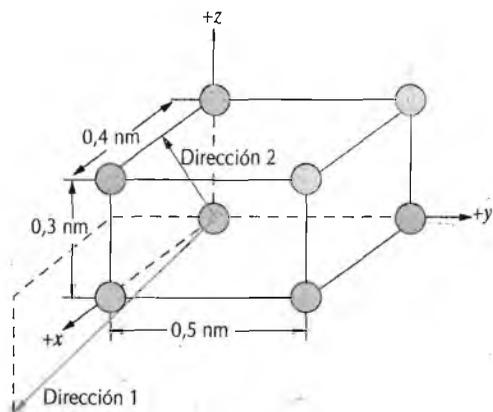
Figura 3.22 Representación de la celdilla unidad de la estructura cristalina cúbica mediante esferas rígidas.



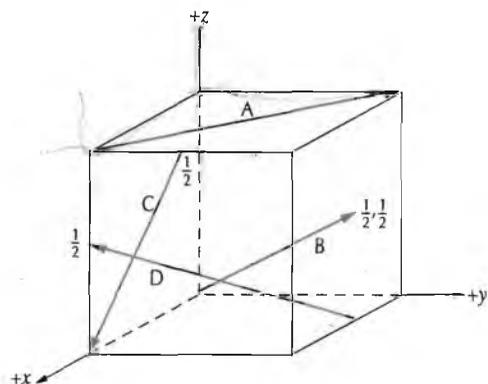
- 3.17 Calcular el factor de empaquetamiento atómico del uranio. Los parámetros de red a , b y c de la celdilla unidad, de simetría ortorrómbica, valen 0,286, 0,587 y 0,495, respectivamente; la densidad $19,05 \text{ g/cm}^3$, el peso atómico $238,03 \text{ g/mol}$ y el radio atómico $0,1385 \text{ nm}$.
- 3.18 Demostrar que la relación ideal c/a para la estructura cristalina HC es 1,633.
- 3.19 El indio tiene una celdilla unidad tetragonal cuyos parámetros de red a y c valen $0,459$ y $0,495 \text{ nm}$, respectivamente.
- (a) Determinar el número de átomos en la celdilla unidad, si el factor de empaquetamiento atómico y el radio atómico son $0,69$ y $0,1625 \text{ nm}$, respectivamente.
- (b) Calcular la densidad. El peso atómico del indio es $114,82 \text{ g/mol}$.
- 3.20 El titanio tiene una celdilla unidad HC y la relación de parámetros de red c/a es $1,58$. Si el radio del átomo de Ti es $0,1445 \text{ nm}$, (a) determinar el volumen de la celdilla unidad y (b) calcular la densidad del Ti y compararla con el valor de la literatura.
- 3.21 El magnesio tiene una estructura cristalina HC, una relación c/a de $1,624$ y una densidad de $1,74 \text{ g/cm}^3$. Calcular el radio atómico del Mg.
- 3.22 El cobalto tiene una estructura cristalina HC, un radio atómico de $0,1253 \text{ nm}$ y una relación c/a de $1,623$. Calcular el volumen de la celdilla unidad del Co.
- 3.23 Esta es la celdilla unidad de un hipotético metal:
- (a) ¿A qué sistema cristalino pertenece esta celdilla unidad?
- (b) ¿Cómo se llama esta estructura cristalina?
- (c) Calcular la densidad del material sabiendo que su peso atómico es 114 g/mol .



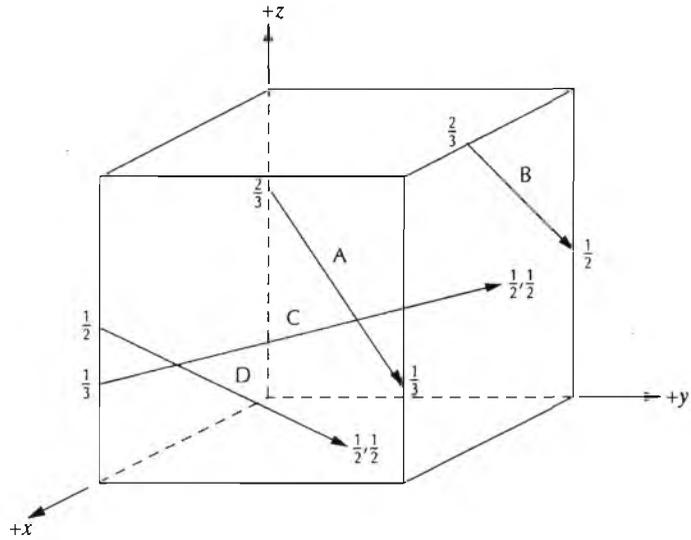
- 3.24 Esquematizar la celdilla unidad de la estructura cristalina ortorrómbica centrada en las caras.
- 3.25 Dibujar una celdilla unidad ortorrómbica y trazar en ella una dirección $[2\bar{1}1]$ y un plano $(02\bar{1})$.
- 3.26 Dibujar una celdilla unidad monoclinica y trazar en ella una dirección $[\bar{1}01]$ y un plano (200) .
- 3.27 Aquí se muestran las celdillas unidad de dos hipotéticos metales:
- (a) ¿Cuáles son los índices de las direcciones indicadas por los dos vectores de (a)?
- (b) ¿Cuáles son los índices de los planos indicados en (b)?



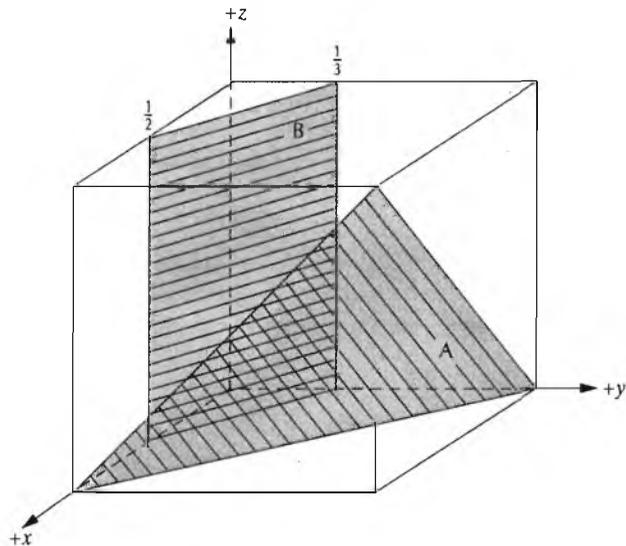
- 3.28 Dentro de una celdilla unidad cúbica trazar las siguientes direcciones: (a) $[101]$; (b) $[211]$; (c) $[10\bar{2}]$; (d) $[3\bar{1}3]$; (e) $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$; (f) $[\bar{2}12]$; (g) $[3\bar{1}2]$; (h) $[301]$.
- 3.29 Determinar los índices de las direcciones mostradas en la siguiente celdilla unidad cúbica:



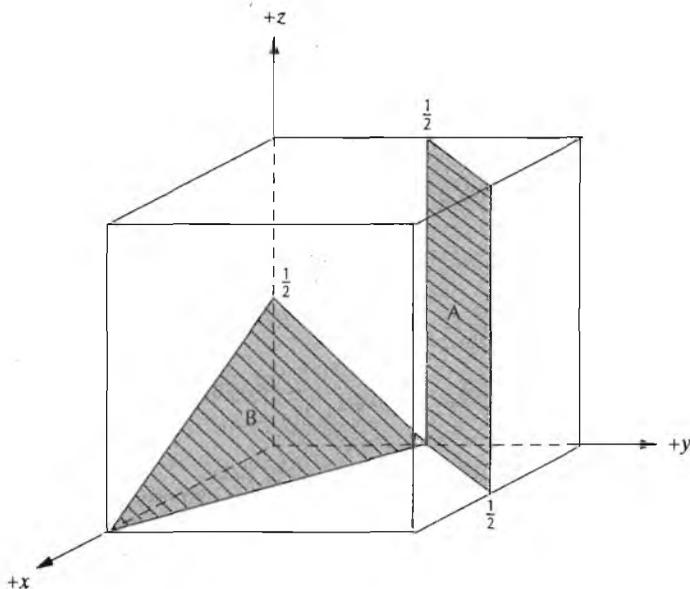
- 3.30 Determinar los índices de las direcciones mostradas en la siguiente celdilla unidad cúbica:



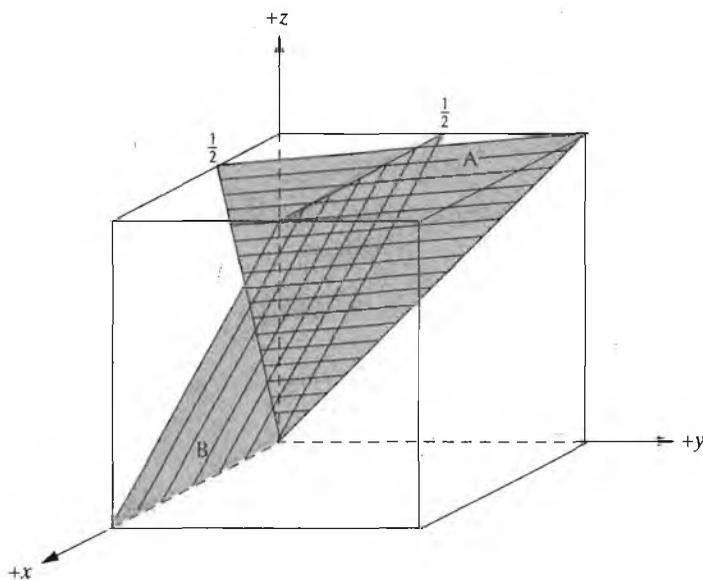
- 3.31 En los cristales tetragonales, citar los índices de las direcciones equivalentes a cada una de las siguientes: (a) $[011]$; (b) $[100]$.
- 3.32 (a) En la celdilla unidad hexagonal, convertir las direcciones $[110]$ y $[00\bar{1}]$ en el sistema de cuatro dígitos Miller-Bravais. (b) Hacer la misma conversión de los planos (111) y $(0\bar{1}2)$.
- 3.33 Determinar los índices de Miller de los planos mostrados en la siguiente celdilla unidad:



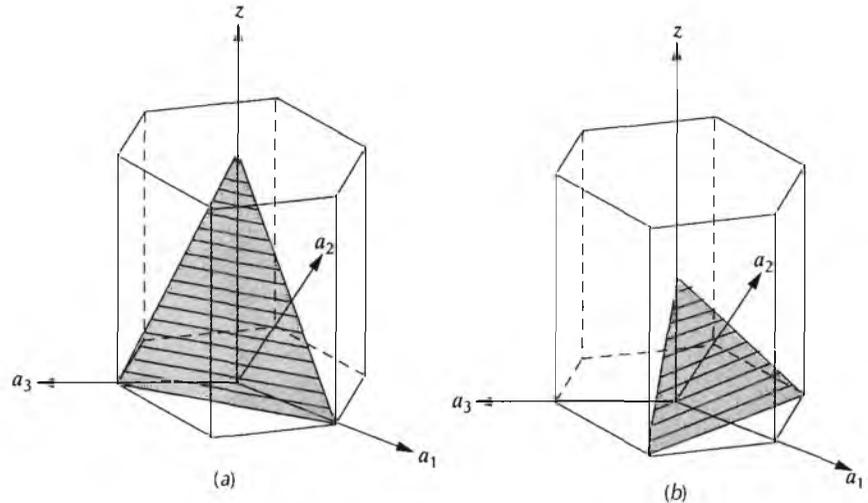
- 3.34 Determinar los índices de Miller de los planos mostrados en la siguiente celdilla unidad:



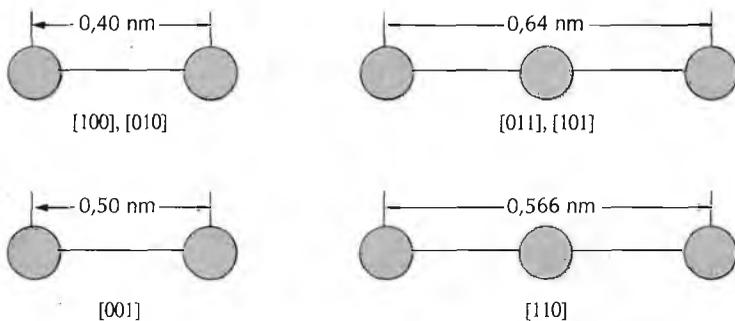
- 3.35 Determinar los índices de Miller de los planos mostrados en la siguiente celdilla unidad:



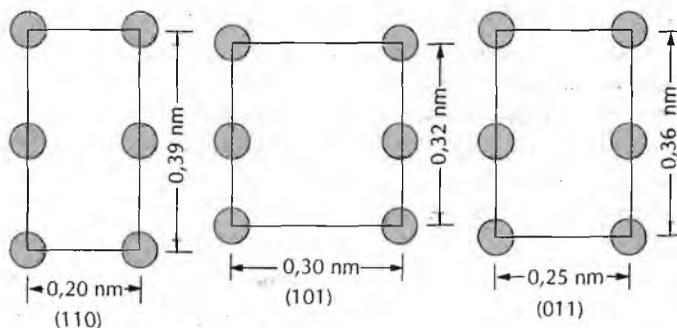
- 3.36 Esquematizar los planos $(0\bar{1}\bar{1}1)$ y $(2\bar{1}\bar{1}0)$ en una celdilla unidad hexagonal.
 3.37 Determinar los índices de los planos mostrados en las celdillas unidad hexagonales siguientes:



- 3.38 Dentro de la celdilla unidad cúbica esquematizar los siguientes planos: (a) $(10\bar{1})$; (b) $(2\bar{1}1)$; (c) (012) ; (d) $(3\bar{1}3)$; (e) $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$; (f) $(\bar{2}12)$; (g) $(3\bar{1}2)$; (h) (301) .
- 3.39 En la estructura cristalina cúbica simple de la Figura 3.22, esquematizar (representar los átomos con círculos llenos) el empaquetamiento atómico de los siguientes planos: (a) (100) ; (b) (110) ; (c) (111) .
- 3.40 Esquematizar el empaquetamiento atómico de los planos (a) (100) de la estructura cristalina FCC y (b) (111) de la estructura cristalina BCC (similares a los de las Figuras 3.9b y 3.10b).
- 3.41 Considerar la celdilla unitaria de esferas reducidas mostrada en el Problema 3.24, cuyo origen de coordenadas coincide con el átomo denominado O. Determinar qué planos son equivalentes en los siguientes conjuntos:
- (a) (100) , $(0\bar{1}0)$ y (001) .
 (b) (110) , (101) , (011) y $(\bar{1}01)$.
 (c) (111) , $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(11\bar{1})$ y $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$.
- 3.42 Anotar los índices de las direcciones formadas por la intersección, dentro de un cristal cúbico, de los siguientes pares de planos: (a) (110) y (111) ; (b) (110) y $(1\bar{1}0)$; y (c) $(11\bar{1})$ y (001) .
- 3.43 Calcular y comparar las densidades lineales de las direcciones $[100]$, $[110]$ y $[111]$ en la FCC.
- 3.44 Calcular y comparar las densidades lineales de las direcciones $[110]$ y $[111]$ en la BCC.
- 3.45 Calcular y comparar las densidades planares de los planos (100) y (111) en la FCC.
- 3.46 Calcular y comparar las densidades planares de los planos (100) y (110) en la BCC.
- 3.47 Calcular la densidad planare del plano (0001) en la HC.
- 3.48 Aquí se muestran esquemas de empaquetamiento atómico de distintas direcciones cristalográficas de algunos metales hipotéticos. Los círculos representan sólo los átomos reducidos de estas direcciones incluidos dentro de la celdilla unidad.
- (a) ¿A qué sistema cristalino pertenece la celdilla unidad?
 (b) ¿Cómo se denomina esta estructura cristalina?



- 3.49 A continuación se muestran tres planos cristalográficos distintos de una celdilla unidad de un hipotético metal. Los círculos representan átomos.
- ¿A qué sistema cristalino pertenece la celdilla unidad?
 - ¿Cómo se denomina esta estructura cristalina?
 - Si la densidad de esta metal es $18,91 \text{ g/cm}^3$, determinar el peso atómico.



- 3.50 Explicar por qué las propiedades de los materiales policristalinos casi siempre son isotrópicas.
- 3.51 Utilizando los datos de la Tabla 3.1 correspondientes al aluminio, calcular la distancia interplanar del conjunto de planos (110).
- 3.52 Utilizando una radiación monocromática de longitud de onda $0,0711 \text{ nm}$, determinar el ángulo de difracción esperado para la difracción de primer orden del conjunto de planos (310) para el cromo BCC.
- 3.53 Utilizando los datos de la Tabla 3.1 correspondientes al hierro α , calcular las distancias interplanares de los conjuntos de planos (111) y (211).
- 3.54 El metal rodio tiene estructura cristalina FCC. Si el ángulo de difracción es de $36,12^\circ$ (difracción de primer orden) para el conjunto de planos (311) cuando se emplea una radiación X monocromática de una longitud de onda de $0,071 \text{ nm}$, calcular (a) la distancia interplanar de este conjunto de planos y (b) el radio atómico del átomo de rodio.
- 3.55 El metal niobio tiene una estructura cristalina BCC. Si el ángulo de difracción es de $75,99^\circ$ (difracción de primer orden) para el conjunto de planos (211) cuando se emplea una radiación X monocromática de una longitud de onda de $0,1659 \text{ nm}$, calcular (a) la distancia interplanar de este conjunto de planos y (b) el radio atómico del átomo de niobio.

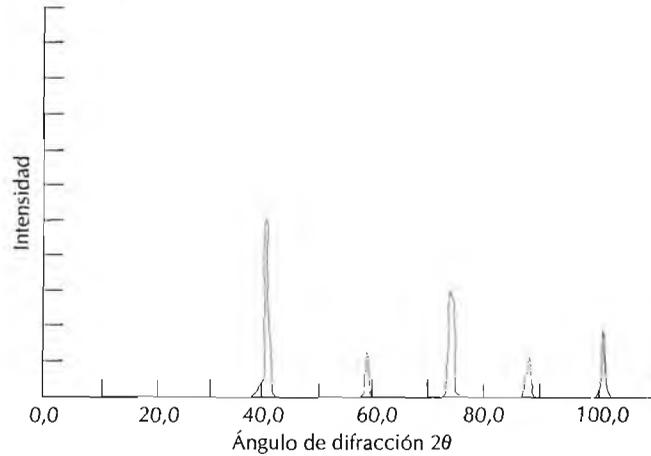


Figura 3.23 Espectro de difracción del tungsteno pulverizado. (Cortesía de Wesley L. Holman.)

- 3.56 Cuando una radiación monocromática de una longitud de onda de 0,1542 nm incide en el níquel FCC, ¿qué conjunto de planos cristalográficos hace aparecer los picos de primer orden con un ángulo de difracción de 44,53°?
- 3.57 La Figura 3.20 muestra un espectro de difracción de rayos x del plomo, utilizando radiación monocromática de longitud de onda de 0,1542 nm. Se han anotado los índices de cada pico. Calcular la distancia interplanar de cada conjunto de planos indexados. Determinar también el parámetro de red del Pb para cada pico.
- 3.58 Los índices de los picos del espectro de difracción de la Figura 3.20 cumplen las reglas de la difracción para FCC (p.ej. h , k y l deben ser todos pares o impares). Enumerar los índices h , k y l de los cuatro primeros picos de difracción para cristales BCC con $h + k + l$ par.
- 3.59 La Figura 3.23 muestra los cinco primeros picos del espectro de difracción de rayos X del tungsteno, que tiene estructura cristalina BCC. Se ha utilizado radiación monocromática con una longitud de onda de 0,1542 nm.
- Determinar los índices h , k y l de los picos.
 - Determinar la distancia interplanar para cada uno de los picos.
 - Determinar el radio atómico del W para cada uno de los picos y comparar estos resultados con el valor de la Tabla 3.1.
- 3.60 Un material con enlace atómico predominantemente de naturaleza iónica, ¿es más o menos propicio que un material covalente a formar un sólido no cristalino después de la solidificación? ¿Por qué? (Ver Sección 2.6.)