Actividad 05: Estructuras Cristalinas

Julian L. Avila-Martinez

jlavilam@udistrital.edu.co

Universidad Distrital Francisco José de Caldas

1 de diciembre de 2025

1. Análisis de la Estructura Cúbica Simple (SC)

La topología de la estructura cúbica simple (SC) se define por la ubicación de puntos de red exclusivamente en los vértices del cubo unitario.

1.1. Ocupación de la Celda Unitaria

La periodicidad traslacional de la red implica que cada punto nodal en un vértice es compartido simultáneamente por ocho celdas unitarias contiguas. En consecuencia, la multiplicidad efectiva de átomos, n, contenida en el volumen fundamental se reduce a la unidad:

$$n = (8)\frac{1}{8} = 1 \quad \text{átomo por celda.} \tag{1}$$

Esta singularidad define a la celda SC como una celda primitiva propiamente dicha.

1.2. Geometría de Contacto y Parámetro de Red

Asumiendo el modelo de esferas duras, la restricción geométrica de máxima proximidad dicta que el contacto atómico ocurre a lo largo de las aristas del cubo. Dado un radio atómico R, la relación con el parámetro de red a es inmediata y lineal:

$$a = 2R. \tag{2}$$

Esta relación establece que el espacio intersticial es máximo en el centro de la celda cúbica.

1.3. Número de Coordinación: Argumento de Simetría

El número de coordinación (Z) se define como el número de vecinos más cercanos equidistantes a un átomo de referencia. En lugar de una enumeración espacial trivial, consideramos la simetría del grupo puntual cúbico.

Si situamos un átomo en el origen $(0, 0, 0)$, los vecinos más próximos se encuentran a una distancia $d = a$. Debido a la ortogonalidad de la base, estos vecinos corresponden a las traslaciones elementales a lo largo de los ejes cartesianos principales positivo y negativo. El conjunto de vectores de posición para los vecinos es:

$$\vec{r}_{nn} = \{\pm ae_1, \pm ae_2, \pm ae_3\}. \tag{3}$$

La cardinalidad de este conjunto determina unívocamente el número de coordinación:

$$Z = 6. \tag{4}$$

1.4. Factor de Empaquetamiento Atómico (APF)

La eficiencia del llenado espacial se cuantifica mediante el Factor de Empaquetamiento Atómico (APF). Sustituyendo la relación geométrica $a(R)$ y la ocupación n en la definición de densidad volumétrica adimensional, se obtiene una constante trascendente independiente del radio atómico:

$$\text{APF} = \frac{nV_{\text{átomo}}}{V_{\text{celda}}} = \frac{\frac{4}{3}\pi R^3}{(2R)^3} = \frac{\pi}{6} \approx 0.5236. \tag{5}$$

Este valor, sustancialmente bajo, indica que el 47.64 % del volumen de la estructura es espacio vacío, lo cual explica la inestabilidad termodinámica intrínseca de esta configuración frente a empaquetamientos más densos (BCC o FCC) en enlaces metálicos no direccionales.

2. Análisis de la Estructura Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC)

La topología de la estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC) se caracteriza por la inserción de un punto de red adicional en el baricentro de la celda cúbica.

2.1. Ocupación de la Celda Unitaria

La base asociada a esta red de Bravais contiene un motivo de dos átomos. La celda convencional encierra el átomo central en su totalidad (contribución unitaria) y comparte los ocho átomos de los vértices con las celdas adyacentes (contribución de 1/8 cada uno). El número de átomos por celda, n, es invariante:

$$n = 1 + 8\left(\frac{1}{8}\right) = 2 \quad \text{átomos}. \tag{6}$$

Este resultado duplica la densidad másica efectiva respecto a la estructura SC para un mismo volumen y especie atómica.

2.2. Geometría de Contacto y Parámetro de Red

A diferencia de la estructura simple, los átomos en los vértices no se tocan entre sí a lo largo de la arista e_i. La restricción geométrica de esferas duras impone que la tangencia ocurra a lo largo de la diagonal espacial del cubo (dirección $\langle 111 \rangle$).

La longitud de esta diagonal es la norma del vector $d = ae_1 + ae_2 + ae_3$, es decir, $\|d\| = a\sqrt{3}$. Esta distancia debe acomodar dos radios atómicos completos (del átomo central) y dos radios parciales (de los vértices), totalizando $4R$. La relación fundamental es:

$$a\sqrt{3} = 4R \implies a = \frac{4R}{\sqrt{3}}. \tag{7}$$

2.3. Número de Coordinación: Argumento de Simetría

Para determinar el número de coordinación Z, situamos el origen en el átomo central de la celda, cuya posición relativa es $\frac{1}{2}(e_1 + e_2 + e_3)$. Los vecinos más próximos son los átomos ubicados en los vértices del cubo.

El conjunto de vectores de desplazamiento δ desde el centro hacia los vecinos más cercanos se construye mediante las permutaciones de signo de las componentes semidiagonales:

$$\delta_{nn} = \left\{ \frac{a}{2}(\sigma_1 e_1 + \sigma_2 e_2 + \sigma_3 e_3) \mid \sigma_i \in \{1, -1\} \right\}. \tag{8}$$

Dado que existen 3 grados de libertad binarios $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$, la cardinalidad del conjunto de vecinos equidistantes es 2^3. Por lo tanto:

$$Z = 8. \tag{9}$$

2.4. Factor de Empaquetamiento Atómico (APF)

Evaluando la eficiencia volumétrica mediante la sustitución de $n = 2$ y la relación $R(a)$, obtenemos una expresión compacta para el APF:

$$\text{APF} = \frac{(2)\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = \frac{8\pi R^3}{3\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{8\pi R^3}{3}\frac{3\sqrt{3}}{64R^3}. \tag{10}$$

Simplificando los términos algebraicos:

$$\text{APF} = \frac{\pi\sqrt{3}}{8} \approx 0.6802. \tag{11}$$

Este incremento en la densidad de empaquetamiento (del 52 % al 68 %) justifica parcialmente la predominancia de fases BCC sobre SC en la naturaleza, aunque aún no alcanza el límite geométrico de máximo empaquetamiento (0.74).

3. Análisis de la Estructura Cúbica Centrada en las Caras (FCC)

La estructura cúbica centrada en las caras (FCC) representa el límite geométrico superior de densidad para el empaquetamiento de esferas idénticas (junto con la estructura hexagonal compacta). La red se define mediante la colocación de nodos en los vértices y en el centro geométrico de cada una de las seis caras del cubo.

3.1. Ocupación de la Celda Unitaria

La evaluación del número de átomos n requiere sumar las contribuciones de dos conjuntos de sitios cristalográficos distintos. Los 8 átomos de vértice contribuyen 1/8 cada uno, mientras que los 6 átomos centrados en las caras, compartidos únicamente por dos celdas adyacentes, contribuyen 1/2 cada uno. La suma resultante es:

$$n = 8\left(\frac{1}{8}\right) + 6\left(\frac{1}{2}\right) = 4 \quad \text{átomos}. \tag{12}$$

Esta ocupación de 4 átomos por celda es el doble de la estructura BCC, lo que sugiere una alta eficiencia en la ocupación del espacio.

3.2. Geometría de Contacto y Parámetro de Red

El contacto entre esferas rígidas en la red FCC no ocurre a lo largo de la arista del cubo (a), sino a lo largo de la diagonal de las caras. Esta dirección corresponde a la familia de vectores $\langle 110 \rangle$. Considerando una cara en el plano e_{12}, el vector diagonal es $d = ae_1 + ae_2$.

La norma de este vector es $\|d\| = a\sqrt{2}$. Sobre esta longitud se distribuyen: un radio del átomo en el origen, el diámetro completo del átomo central de la cara, y un radio del átomo en el vértice opuesto. La condición de tangencia establece:

$$a\sqrt{2} = 4R \implies a = 2\sqrt{2}R. \tag{13}$$

Esta relación confirma que los átomos están más densamente agrupados que en las estructuras SC y BCC.

3.3. Número de Coordinación: Argumento de Simetría

El número de coordinación Z se determina identificando el conjunto de vecinos más cercanos al átomo situado en el origen. Debido a la simetría cúbica, estos vecinos son los átomos centrados en las caras adyacentes al origen.

Las posiciones de estos átomos se generan mediante las permutaciones de los vectores base tomados de a dos. El conjunto de desplazamientos δ hacia los vecinos más cercanos es:

$$\delta_{nn} = \left\{ \frac{a}{2}(\sigma_i e_i + \sigma_j e_j) \mid i \neq j,\, \sigma \in \{1, -1\} \right\}. \tag{14}$$

Aquí, los índices i, j se eligen del conjunto $\{1, 2, 3\}$. Existen $\binom{3}{2} = 3$ pares de planos coordenados posibles. En cada plano, existen $2^2 = 4$ combinaciones de signos para los cuadrantes. El número total de elementos es, por tanto:

$$Z = 3 \times 4 = 12. \tag{15}$$

Este es el máximo número de coordinación posible para esferas de igual tamaño.

3.4. Factor de Empaquetamiento Atómico (APF)

La eficiencia máxima del empaquetamiento se calcula sustituyendo la ocupación $n = 4$ y la restricción geométrica $a(R)$ en la definición de densidad volumétrica.

$$\text{APF} = \frac{(4)\frac{4}{3}\pi R^3}{a^3} = \frac{16\pi R^3}{3(2\sqrt{2}R)^3}. \tag{16}$$

Desarrollando el denominador, $(2\sqrt{2})^3 = 16\sqrt{2}$. La expresión se reduce a:

$$\text{APF} = \frac{16\pi R^3}{(3)16\sqrt{2}R^3} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.7405. \tag{17}$$

Este valor de ≈ 0.74 representa la densidad máxima teórica para un empaquetamiento periódico de esferas, significativamente superior a la estructura BCC (0.68).

4. Análisis de la Estructura Hexagonal Compacta (HCP)

La estructura Hexagonal Compacta (HCP) representa, junto con la FCC, la solución al problema de empaquetamiento óptimo de esferas. Formalmente, no constituye una red de Bravais por sí misma, sino una red hexagonal simple asociada a una base de dos átomos.

4.1. Métrica del Espacio y Ocupación

La celda unitaria convencional es un prisma hexagonal definido por los vectores base $\{e_1, e_2, e_3\}$. La métrica del espacio no es euclidiana estándar; los vectores basales del plano e_{12} forman un ángulo de 120°, mientras que e_3 es ortogonal al plano. El tensor métrico $g_{ij} = e_i \cdot e_j$ presenta componentes no diagonales:

$$g_{ij} = \begin{pmatrix} a^2 & -a^2/2 & 0 \\ -a^2/2 & a^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{pmatrix}. \tag{18}$$

La ocupación n se deriva de la topología del prisma: 12 átomos en los vértices (contribución de 1/6 cada uno), 2 átomos en los centros de las caras basales (contribución de 1/2), y 3 átomos interiores completamente contenidos en la celda.

$$n = 12\left(\frac{1}{6}\right) + 2\left(\frac{1}{2}\right) + 3 = 6 \quad \text{átomos.} \tag{19}$$

4.2. Geometría de Contacto y Relación Axial

La condición de esferas duras impone restricciones tanto en el plano basal como en la dirección de apilamiento. En el plano definido por e_{12}, los átomos son tangentes a lo largo de la arista, implicando $a = 2R$.

La restricción crítica ocurre entre capas alternas (secuencia ABAB). Tres átomos del plano basal forman un triángulo equilátero de lado a. El átomo de la capa siguiente descansa en el hueco formado por estos tres, creando un tetraedro regular de lado a. La altura de este tetraedro corresponde a $c/2$. Por argumentos trigonométricos sobre el tetraedro regular, la relación ideal entre la altura y la base es:

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx 1.633. \tag{20}$$

Desviaciones de este valor ideal indican una distorsión de la esfericidad del potencial interatómico (anisotropía de enlace).

4.3. Número de Coordinación: Topología de Apilamiento

El análisis de coordinación aprovecha la simetría de traslación entre capas. Consideremos un átomo en el plano B (capa intermedia).

1. Intra-capa: Dentro de su propio plano hexagonal, el átomo está rodeado por 6 vecinos tangentes a distancia a.
2. Inter-capa (Sup/Inf): Debido a la simetría de apilamiento, el átomo descansa sobre un "nido" de 3 átomos de la capa A inferior y soporta a 3 átomos de la capa A superior.

La geometría del tetraedro regular garantiza que la distancia a los vecinos de las capas adyacentes es idéntica a la distancia intra-capa (a), siempre que $c/a = \sqrt{8/3}$. Por consiguiente, la suma directa es:

$$Z = 6_{\text{plano}} + 3_{\text{sup}} + 3_{\text{inf}} = 12. \tag{21}$$

Esto confirma que la densidad local es idéntica a la estructura FCC.

4.4. Factor de Empaquetamiento Atómico (APF)

El volumen de la celda hexagonal V_c se calcula mediante el producto triple de los vectores base: $V_c = |e_1 \wedge e_2 \wedge e_3|$. Dado el ángulo de 120° (o $\pi/3$ en radianes para el área del rombo base, multiplicado por 3 para el hexágono):

$$V_c = \text{ÁreaBase} \cdot c = \left(6\frac{\sqrt{3}}{4}a^2\right)c = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2 c. \tag{22}$$

Sustituyendo la relación ideal $c = a\sqrt{8/3}$ y la ocupación $n = 6$:

$$\text{APF} = \frac{(6)\frac{4}{3}\pi R^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2\left(a\sqrt{\frac{8}{3}}\right)} = \frac{8\pi R^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2}(2R)^3\sqrt{\frac{8}{3}}}. \tag{23}$$

Tras la simplificación algebraica, el factor converge al mismo límite irracional que la estructura FCC:

$$\text{APF} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} \approx 0.7405. \tag{24}$$

Esto demuestra que la eficiencia de empaquetamiento es invariante ante la secuencia de apilamiento (ABC vs AB), dependiendo únicamente de la compacidad de las capas individuales.

5. Determinación de Índices Cristalográficos Direccionales

La definición formal de una dirección cristalográfica $[uvw]$ se construye a partir del vector de desplazamiento relativo Δr entre dos puntos nodales de la red, P_{inicial} y P_{final}. El procedimiento algorítmico requiere la reducción de las componentes de este vector a su conjunto de enteros coprimos más pequeño, preservando la colinealidad.

Sean las coordenadas generalizadas en la base de la red $\{e_i\}$. El vector se define como:

$$r = (x_f - x_i)e_1 + (y_f - y_i)e_2 + (z_f - z_i)e_3. \tag{25}$$

Procedemos al análisis de los tres casos propuestos:

5.1. Caso A: Eje Principal

Datos: $P_i = (0,0,0)$, $P_f = (1,0,0)$.

El vector de desplazamiento es inmediato:

$$r_A = (1-0)e_1 + (0-0)e_2 + (0-0)e_3 = e_1. \tag{26}$$

Las componentes ya son enteras y mínimas. La dirección coincide con el eje fundamental de la celda.

$$\text{Índices:} \quad [100] \tag{27}$$

5.2. Caso B: Diagonal Principal (Cúbica)

Datos: $P_i = (0,0,0)$, $P_f = (1,1,1)$.

El vector resultante atraviesa el cuerpo de la celda desde el origen:

$$r_B = (1-0)e_1 + (1-0)e_2 + (1-0)e_3 = e_1 + e_2 + e_3. \tag{28}$$

Al ser las tres componentes la unidad, no requieren normalización.

$$\text{Índices:} \quad [111] \tag{29}$$

5.3. Caso C: Vector Generalizado

Datos: $P_i = (1/2, 1, 0)$, $P_f = (0, 0, 1)$.
Calculamos las componentes fraccionarias del desplazamiento:

$$r_C = (0 - 1/2)e_1 + (0 - 1)e_2 + (1 - 0)e_3 = -\frac{1}{2}e_1 - e_2 + e_3. \tag{30}$$

Para satisfacer la definición de índices de Miller (números enteros), aplicamos un factor de escala escalar $\lambda = 2$ para eliminar el denominador, una operación que es invariante respecto a la dirección del vector:

$$2 \cdot r_C = -e_1 - 2e_2 + 2e_3. \tag{31}$$

Adoptando la convención cristalográfica donde los componentes negativos se denotan con una barra superior ($\bar{u}$):

$$\text{Índices:} \quad [\bar{1}\bar{2}2] \tag{32}$$

6. Determinación de Índices de Miller para Planos Cristalográficos

La notación de Miller (hkl) especifica una familia de planos mediante un vector normal en el espacio recíproco. El procedimiento estándar invierte los interceptos axiales y normaliza a enteros coprimos. Formalmente, si los interceptos son x_1e_1, x_2e_2, x_3e_3, los índices se derivan de la relación de proporcionalidad $h : k : l = x_1^{-1} : x_2^{-1} : x_3^{-1}$.

6.1. Plano A: El Plano Octaédrico

Interceptos: $(1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1)$.
Los interceptos normalizados respecto a los parámetros de red son $\mathbf{x} = (1, 1, 1)$. Calculamos los recíprocos:

$$\left(1^{-1}, 1^{-1}, 1^{-1}\right) = (1, 1, 1). \tag{33}$$

Al ser enteros unitarios, no requieren reducción.

$$(hkl) = (111). \tag{34}$$

Este plano representa la máxima densidad planar en sistemas FCC.

6.2. Plano B: Plano Prismático General

Interceptos: $(1, 0, 0), (0, 2, 0)$.
La ausencia de un tercer intercepto explícito implica paralelismo con el eje e_3. Matemáticamente, el intercepto tiende al infinito asintótico: $\mathbf{x} = (1, 2, \infty)$. Tomando los inversos:

$$\left(\frac{1}{1}, \frac{1}{2}, \lim_{\xi \to \infty} \frac{1}{\xi}\right) = (1, 0.5, 0)\,. \tag{35}$$

Para recuperar la naturaleza diofántica de los índices, aplicamos el factor de escala mínimo $\lambda = 2$:

$$(hkl) = 2(1, 0.5, 0) = (210). \tag{36}$$

6.3. Plano C: Formulación Algebraica (Bivector)

Definición: El plano subyacente al bivector $B = e_3 \wedge e_1$.

En lugar de buscar interceptos geométricos, utilizamos el álgebra de Clifford $\mathcal{C}\ell_3$. El bivector B codifica intrínsecamente la orientación del subespacio plano. El vector normal $\mathbf{n}$ (asociado a los índices de Miller) es el dual de Hodge (o complemento ortogonal) del bivector en el espacio tridimensional euclidiano.

Utilizando el pseudoescalar $I = e_1 \wedge e_2 \wedge e_3$, la relación de dualidad establece:

$$\mathbf{n} \propto -IB = -(e_1 \wedge e_2 \wedge e_3)(e_3 \wedge e_1). \tag{37}$$

Dada la anticonmutatividad del producto exterior y la normalización $e_i^2 = 1$:

$$\mathbf{n} \propto e_2. \tag{38}$$

El vector normal e_2 corresponde a los índices direccionales [010]. Por consiguiente, la familia de planos ortogonales a este vector se denota:

$$(hkl) = (010). \tag{39}$$

7. Densidades Cristalográficas y Empaquetamiento

En el análisis de estructuras cristalinas, la eficiencia del empaquetamiento atómico y las propiedades direccionales se cuantifican mediante tres métricas fundamentales de densidad, derivadas directamente de la geometría de la celda unitaria.

7.1. Densidad Teórica (Volumétrica)

La densidad teórica (ρ) se define como la masa total de los átomos contenidos en una celda unitaria, dividida por el volumen de dicha celda (V_C). Representa la densidad ideal del material en un estado cristalino perfecto, conectando la microestructura atómica con la densidad macroscópica observable.

La fórmula general para la densidad teórica es:

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

Donde n es el número de átomos (o unidades fórmula) por celda unitaria; A es la masa atómica $[\mathrm{g\,mol^{-1}}]$; V_C es el volumen de la celda unitaria $[\mathrm{cm^3}]$; y N_A es el Número de Avogadro ($\approx 6.022 \times 10^{23}$ átomos/mol).

7.1.1. Ejemplo: Hierro α-Fe (Estructura BCC)

Para la estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC) del Hierro-α, el número de átomos por celda n es 2 (un átomo central más la contribución de 1/8 por cada uno de los 8 vértices). La masa atómica A es $\approx 55.845\ \mathrm{g\,mol^{-1}}$. En la estructura BCC, el contacto atómico ocurre a lo largo de la diagonal del cubo, $a\sqrt{3}$, la cual equivale a $4R$, donde R es el radio atómico. De esta relación, se despeja el parámetro de red $a = 4R/\sqrt{3}$. El volumen $V_C = a^3$ resulta entonces en $\left(4R/\sqrt{3}\right)^3 = 64R^3/(3\sqrt{3})$. Sustituyendo n y V_C en la ecuación de densidad:

$$\rho_{\mathrm{BCC}} = \frac{2A}{\left(\frac{64R^3}{3\sqrt{3}}\right) N_A} = \frac{6\sqrt{3}A}{64R^3 N_A} = \frac{3\sqrt{3}A}{32R^3 N_A}$$

7.2. Densidad Lineal (DL)

La densidad lineal (DL) se define como el número de átomos cuyos centros son interceptados por un vector de dirección cristalográfica, dividido por la longitud de dicho vector. Esta métrica es fundamental para el análisis de la deformación plástica, ya que las dislocaciones tienden a moverse preferencialmente a lo largo de direcciones de alto empaquetamiento.

$$\mathrm{DL} = \frac{\text{Número de átomos centrados en el vector}}{\text{Longitud del vector de dirección}}$$

7.2.1. Ejemplo: Estructura FCC - Dirección [110]

Consideremos la dirección [110] en una estructura FCC. Este vector conecta el origen $(0,0,0)$ con el vértice $(a,a,0)$, y su longitud es $L = \sqrt{a^2 + a^2 + 0^2} = a\sqrt{2}$. El número de átomos centrados en este vector es 2. Este conteo proviene de la suma de contribuciones: $1/2$ átomo en el origen $(0,0,0)$, un átomo completo en el centro de la cara $(a/2, a/2, 0)$, y $1/2$ átomo en el vértice $(a,a,0)$. La densidad lineal para la dirección [110] es, por tanto:

$$\mathrm{DL}_{[110]} = \frac{2}{a\sqrt{2}}$$

En la estructura FCC, el contacto atómico se da en la diagonal de la cara, $a\sqrt{2} = 4R$. Al sustituir esta relación, la densidad lineal se simplifica notablemente a:

$$\mathrm{DL}_{[110]} = \frac{2}{4R} = \frac{1}{2R}$$

7.3. Densidad Planar (DP)

La densidad planar (DP) se define como el número de átomos centrados en un plano cristalográfico, por unidad de área de dicho plano, restringido a los límites de la celda unitaria. Los planos de alta densidad planar (planos compactos) constituyen los sistemas de deslizamiento preferenciales para la deformación.

$$\mathrm{DP} = \frac{\text{Número de átomos centrados en el área planar}}{\text{Área del plano dentro de la celda}}$$

7.3.1. Ejemplo: Estructura FCC - Plano (111)

Este es el plano de empaquetamiento compacto en la estructura FCC. Intercepta los ejes en $(a,0,0)$, $(0,a,0)$ y $(0,0,a)$, formando un triángulo equilátero dentro de la celda unitaria. La longitud de cada lado del triángulo, L, corresponde a la diagonal de una cara: $L = a\sqrt{2}$. El área de esta sección planar (A_p) es la de un triángulo equilátero de lado L:

$$A_p = \frac{1}{2} L \left(L \sin\left(\frac{\tau}{6}\right)\right)$$

$$A_p = \frac{1}{2}\left(a\sqrt{2}\right)\left(a\sqrt{2}\frac{\sqrt{3}}{2}\right) = \frac{a^2\sqrt{3}}{2}$$

El número de átomos N_p centrados en esta área se determina sumando las contribuciones de los átomos que intercepta. El plano pasa por 3 átomos en los vértices del triángulo (cada uno contribuyendo $1/6$ al área interna) y 3 átomos en los centros de las caras adyacentes (cada uno contribuyendo 1/2). El número total de átomos es, por tanto: $N_p = 3(1/6) + 3(1/2) = 2$ átomos. La densidad planar para el plano (111) resulta ser:

$$\mathrm{DP}_{(111)} = \frac{N_p}{A_p} = \frac{2}{a^2\sqrt{3}/2} = \frac{4}{a^2\sqrt{3}}$$

Usando la relación de FCC, $a\sqrt{2} = 4R \implies a = 2\sqrt{2}R$:

$$\mathrm{DP}_{(111)} = \frac{4}{(2\sqrt{2}R)^2\sqrt{3}} = \frac{4}{8R^2\sqrt{3}} = \frac{1}{2\sqrt{3}R^2}$$

Esta configuración representa el empaquetamiento 2D más denso.

8. Polimorfismo y Alotropía

El polimorfismo es la capacidad de un material sólido de existir en más de una estructura cristalina, o red de Bravais, manteniendo una composición química idéntica. Cada una de estas estructuras, conocidas como polimorfos, corresponde a un mínimo de energía libre de Gibbs diferente y es, por lo tanto, termodinámicamente estable bajo un conjunto específico de condiciones de presión (P) y temperatura (T).

La transición entre fases polimórficas es una transición de fase de primer orden, generalmente implicando un cambio discontinuo en el volumen, la simetría y la entalpía.

Cuando este fenómeno se observa en un elemento puro, como el carbono o el hierro, se utiliza el término más específico de alotropía. Las diferentes formas se denominan alótropos. La alotropía es, por tanto, un subconjunto del polimorfismo.

8.1. Ejemplo: Alotropía del Hierro (Fe)

Un ejemplo de importancia fundamental en la ciencia de materiales es la alotropía del hierro puro. A presión atmosférica y por debajo de 912 °C, el hierro es estable en la fase α-Fe (ferrita), la cual posee la estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC) analizada en la sección anterior.

Al superar los 912 °C, el hierro experimenta una transición de fase alotrópica a la fase γ-Fe, conocida como austenita. La austenita posee una estructura cúbica centrada en las caras (FCC). Esta transformación (BCC $\rightarrow$ FCC) es esencial, ya que la estructura FCC, con un factor de empaquetamiento atómico superior, permite una solubilidad de carbono significativamente mayor. Este hecho es el principio fundamental para la formación y el tratamiento térmico de los aceros.

Si se continúa calentando, el hierro vuelve a una fase BCC (δ-Fe) a 1394 °C, antes de alcanzar su punto de fusión a 1538 °C. Las propiedades mecánicas y magnéticas de estas fases son drásticamente diferentes.

9. Espaciado Interplanar y la Ley de Bragg

El espaciado interplanar, denotado d_{hkl}, es un parámetro geométrico fundamental de la red cristalina. Se define como la distancia perpendicular que separa dos planos paralelos adyacentes en una familia de planos, identificados por los índices de Miller (hkl).

El cálculo de este espaciado depende intrínsecamente de la simetría del sistema cristalino y de sus parámetros de red. Para los sistemas ortogonales (cúbico, tetragonal y ortorrómbico), la relación general se expresa de forma más elegante en términos de su inverso al cuadrado:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

De esta ecuación se derivan los casos de mayor simetría. Para un sistema tetragonal ($a = b \neq c$), la fórmula se simplifica; para un sistema cúbico ($a = b = c$), la relación colapsa a:

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

La importancia física primordial del espaciado d_{hkl} radica en su rol central en la difracción, particularmente en la difracción de rayos X (XRD). El cristal en su totalidad actúa como una red de difracción tridimensional para la radiación incidente.

La interferencia constructiva de la radiación, dispersada por los planos (hkl), solo ocurre cuando se satisface una condición geométrica estricta. Esta condición es la *Ley de Bragg*:

$$n\lambda = 2d_{hkl}\sin(\theta)$$

Donde n es un entero que representa el orden de la difracción (a menudo se considera $n = 1$), λ es la longitud de onda de los rayos X monocromáticos, y θ es el ángulo de Bragg, el ángulo de incidencia entre el haz y el plano cristalino.

Esta ecuación es la piedra angular de la cristalografía experimental. Establece una relación unívoca entre el espaciado microscópico d_{hkl}, una propiedad interna del material, y el ángulo θ, una cantidad macroscópica medible.

En la práctica, un difractómetro mide la intensidad de la radiación en función del ángulo de barrido 2θ. Los picos de alta intensidad corresponden a los ángulos θ que satisfacen la Ley de Bragg. Al medir las posiciones de estos picos, se determina el conjunto de espaciados $\{d_{hkl}\}$ presentes en la muestra, lo cual permite la identificación inequívoca de la estructura de la red de Bravais y el cálculo preciso de sus parámetros de red.

10. Convenciones de Notación en Índices de Miller

La notación de los índices de Miller, (hkl), está sujeta a convenciones estrictas que son cruciales para su correcta interpretación.

10.1. Planos Equivalentes por Inversión

Un plano cristalográfico se define por sus interceptos; los índices (hkl) representan una familia de planos paralelos infinitos. Por convención, un conjunto de índices y su negativo directo, $(-h, -k, -l)$, se consideran físicamente equivalentes.

Consideremos los índices (012) y $(0\bar{1}\bar{2})$, donde la barra superior denota un valor negativo (e.g., -1). El plano (012) intercepta los ejes en $(\infty, b, c/2)$. El plano $(0\bar{1}\bar{2})$ intercepta los ejes en $(\infty, -b, -c/2)$.

Estos dos planos son paralelos y están separados por la misma distancia d_{hkl}. Geométricamente, describen el mismo conjunto de planos en el cristal, aunque sus vectores normales apunten en direcciones opuestas. En el contexto de la difracción, dado que la Ley de Bragg depende de d_{hkl}, ambos planos son indistinguibles y se consideran idénticos. Pertenecen a la misma familia de planos $\{012\}$.

10.2. Múltiplos de Índices y Órdenes de Difracción

Una situación conceptualmente diferente surge con los índices que son múltiplos enteros, como (123) y (246).

Por definición geométrica, los índices de Miller (hkl) deben ser el conjunto de enteros más pequeños que mantienen la misma proporción (es decir, deben ser coprimos). El plano (123)

intercepta los ejes en $(a, b/2, c/3)$. La notación (246) es, por esta definición, inválida, ya que puede reducirse a (123) al dividir por un factor común de 2. Representaría un plano con interceptos $(a/2, b/4, c/6)$, que es un plano paralelo a (123) pero con un espaciado diferente.

Sin embargo, la notación (nh, nk, nl), como (246), adquiere un significado físico fundamental en el contexto de la difracción de rayos X. Se utiliza universalmente como una taquigrafía para referirse a los órdenes de difracción superiores ($n > 1$) de la Ley de Bragg ($n\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta$).

El pico (123) corresponde al primer orden ($n = 1$) de difracción de los planos (123). El pico (246) se refiere específicamente al segundo orden ($n = 2$) de difracción de esos mismos planos (123).

Esta notación es matemáticamente consistente. El espaciado para un plano ficticio (246) sería $d_{246} = d_{123}/2$. Al sustituir esto en la Ley de Bragg para $n = 1$, se obtiene:

$$1\lambda = 2d_{246} \sin(\theta_{(246)}) = 2\left(\frac{d_{123}}{2}\right) \sin(\theta_{(246)})$$

$$\lambda = d_{123} \sin(\theta_{(246)})$$

Si comparamos esto con la condición de Bragg para el segundo orden de (123):

$$2\lambda = 2d_{123} \sin(\theta_{(123),n=2})$$

$$\lambda = d_{123} \sin(\theta_{(123),n=2})$$

Vemos que $\theta_{(246)} = \theta_{(123),n=2}$. Por lo tanto, (123) y (246) no son iguales: representan el primer y segundo orden de difracción de la misma familia de planos, y aparecen como picos distintos en un difractograma.

11. Relevancia de la Anisotropía Cristalográfica

El formalismo de las direcciones y planos cristalográficos es esencial, ya que la estructura periódica de un cristal implica que sus propiedades, en general, no son isotrópicas. Los índices de Miller y las direcciones proveen el lenguaje matemático preciso para cuantificar y predecir esta anisotropía.

11.1. Influencia en las Propiedades del Material

La mayoría de los monocristales exhiben una marcada anisotropía, donde la magnitud de una propiedad física depende de la dirección $[uvw]$ en la que se mide. Los planos (hkl) y las direcciones $[uvw]$ son el lenguaje para describir este fenómeno.

Un ejemplo canónico es la deformación plástica en metales. El deslizamiento (slip) no ocurre en planos arbitrarios, sino que se activa preferencialmente en los planos de mayor densidad planar (DP) y en las direcciones de mayor densidad lineal (DL), ya que esto requiere la menor energía (menor esfuerzo de cizalla). Este conjunto, un plano y una dirección específicos, se denomina *sistema de deslizamiento*. Por ejemplo, en la estructura FCC, el deslizamiento ocurre en los planos $\{111\}$ y en las direcciones $\langle 1\bar{1}0 \rangle$.

Similarmente, propiedades como la conductividad eléctrica, el módulo de Young, y la susceptibilidad magnética (eje de fácil magnetización) están intrínsecamente ligadas a la orientación cristalográfica.

11.2. Rol en la Difracción de Rayos X

Como se estableció en la sección anterior, los índices de Miller son el pilar de la interpretación de la difracción. La Ley de Bragg ($n\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta$) relaciona el ángulo de difracción θ con el espaciado d_{hkl}. Los índices (hkl) son, precisamente, la etiqueta que identifica de forma unívoca cada espaciado d.

Este formalismo permite "indexar" el difractograma: cada pico de intensidad medido en un ángulo 2θ experimental se asigna a un plano (hkl) específico. Sin los índices de Miller, un patrón de difracción sería solo una serie de picos anónimos; con ellos, se convierte en un mapa directo que revela la red de Bravais y los parámetros de red del material.

11.3. Determinación del Crecimiento del Cristal

La morfología externa de un cristal cultivado (sus facetas) no es aleatoria, sino que está dictada por la cristalografía. Las caras externas de un cristal ideal tienden a ser los planos (hkl) que poseen la energía superficial más baja.

Esto se debe a que los planos de baja energía, que usualmente corresponden a planos de alto empaquetamiento (alta DP), son termodinámicamente más estables. Durante el proceso de cristalización (desde un fundido, vapor o solución), los planos de alta energía crecen rápidamente y "desaparecen", mientras que los planos estables de bajo índice (como $\{100\}$, $\{110\}$ o $\{111\}$) crecen más lentamente y definen la forma facetada final del material.

Referencias

[1] Michael F. Ashby. *Materials selection in mechanical design*. 4th ed. Burlington, MA: Butterworth-Heinemann, 2011. ISBN: 978-1-85617-663-7.

[2] Neil W. Ashcroft y N. David Mermin. *Solid state physics*. Fort Worth Philadelphia San Diego [etc.]: Saunders college publ, 1976. ISBN: 978-0-03-083993-1.

[3] D.R. Askeland y W.J. Wright. *The Science and Engineering of Materials, Enhanced, SI Edition*. Cengage Learning, 2015. ISBN: 978-1-305-44633-5. URL: https://books.google.com.co/books?id=vTFBBAAAQBAJ.

[4] Robert T. DeHoff. *Thermodynamics in materials science*. 2. ed. Boca Raton, Fla.: Taylor & Francis, 2006. 605 págs. ISBN: 978-0-8493-4065-9.

[5] P. A. M. Dirac. *The principles of quantum mechanics*. 4. ed. (rev.), repr. International series of monographs on physics 27. Oxford: Clarendon Press, Oxford University Press, 2010. 314 págs. ISBN: 978-0-19-852011-5.

[6] Charles Kittel. *Introduction to solid state physics*. 8. ed., [repr.] Hoboken, NJ: Wiley. 680 págs. ISBN: 978-0-471-41526-8.

[7] Michael P. Marder. *Condensed Matter Physics*. 1.ª ed. Wiley, 25 de oct. de 2010. ISBN: 978-0-470-61798-4 978-0-470-94995-5. DOI: 10.1002/9780470949955. URL: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9780470949955.

[8] James F. Shackelford. *Introduction to materials science for engineers*. Always learning. Boston Munich: Pearson, 2016. ISBN: 978-0-273-79340-3.