

# Actividad 05: Estructuras Cristalinas

Julian L. Avila-Martinez

jlavilam@udistrital.edu.co

Universidad Distrital Francisco José de Caldas

17 de noviembre de 2025

## 1. 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.

### 1.1. Densidad Teórica (Volumétrica)

La densidad teórica ( $\rho$ ) 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 [ $\text{g mol}^{-1}$ ];  $V_C$  es el volumen de la celda unitaria [ $\text{cm}^3$ ]; y  $N_A$  es el Número de Avogadro ( $\approx 6.022 \times 10^{23}$  átomos/mol).

#### 1.1.1. Ejemplo: Hierro $\alpha$ -Fe (Estructura BCC)

Para la estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC) del Hierro- $\alpha$ , 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  $\approx 55.845 \text{ g mol}^{-1}$ . 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  $(4R/\sqrt{3})^3 = 64R^3/(3\sqrt{3})$ . Sustituyendo  $n$  y  $V_C$  en la ecuación de densidad:

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

## 1.2. 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.

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

### 1.2.1. 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:

$$DL_{[110]} = \frac{2}{a\sqrt{2}}$$

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:

$$DL_{[110]} = \frac{2}{4R} = \frac{1}{2R}$$

## 1.3. 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.

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

### 1.3.1. 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  $L$ :

$$A_p = \frac{1}{2}L \left( L \sin \left( \frac{\pi}{6} \right) \right)$$
$$A_p = \frac{1}{2} (a\sqrt{2}) \left( a\sqrt{2} \frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \frac{a^2\sqrt{3}}{2}$$

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:

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

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

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

Esta configuración representa el empaquetamiento 2D más denso.

## 2. 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.

### 2.1. 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  $912^\circ\text{C}$ , el hierro es estable en la fase  $\alpha$ -Fe (ferrita), la cual posee la estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC) analizada en la sección anterior.

Al superar los  $912^\circ\text{C}$ , el hierro experimenta una transición de fase alotrópica a la fase  $\gamma$ -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 ( $\delta$ -Fe) a  $1394^\circ\text{C}$ , antes de alcanzar su punto de fusión a  $1538^\circ\text{C}$ . Las propiedades mecánicas y magnéticas de estas fases son drásticamente diferentes.

## 3. 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  $n = 1$ ),  $\lambda$  es la longitud de onda de los rayos X monocromáticos, y  $\theta$  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  $\theta$ , una cantidad macroscópica medible.

En la práctica, un difractómetro mide la intensidad de la radiación en función del ángulo de barrido  $2\theta$ . Los picos de alta intensidad corresponden a los ángulos  $\theta$  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.

## 4. 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.

### 4.1. 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 ( $0\bar{1}2$ ), donde la barra superior denota un valor negativo (e.g.,  $-1$ ). El plano (012) intercepta los ejes en  $(\infty, b, c/2)$ . El plano ( $0\bar{1}2$ ) 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  $\{012\}$ .

### 4.2. 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.

## 5. 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.

### 5.1. 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.

## 5.2. 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  $\theta$  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  $2\theta$  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.

## 5.3. 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=vTFBBAAQBAJ>.
- [4] Wikimedia Commons. *File:Periodic table large.svg* — *Wikimedia Commons, the free media repository*. 2025. URL: [https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Periodic\\_table\\_large.svg&oldid=1065922829%7D](https://commons.wikimedia.org/w/index.php?title=File:Periodic_table_large.svg&oldid=1065922829%7D).
- [5] Robert T. DeHoff. *Thermodynamics in materials science*. 2. ed. Boca Raton, Fla.: Taylor & Francis, 2006. 605 págs. ISBN: 978-0-8493-4065-9.
- [6] 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.
- [7] D.R. Gaskell. *Introduction to the Thermodynamics of Materials, Fifth Edition*. CRC Press, 2008. ISBN: 978-0-203-42849-8. URL: <https://books.google.com.co/books?id=3xfcBQAAQBAJ>.
- [8] Charles Kittel. *Introduction to solid state physics*. 8. ed., [repr.] Hoboken, NJ: Wiley. 680 págs. ISBN: 978-0-471-41526-8.
- [9] Michael P. Marder. *Condensed Matter Physics*. 1.<sup>a</sup> ed. Wiley, 25 de oct. de 2010. ISBN: 978-0-470-61798-4 978-0-470-94995-5. DOI: [10.1002/9780470949955](https://doi.org/10.1002/9780470949955). URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9780470949955>.

- [10] Ganpathy Murthy y R. Shankar. «Hamiltonian theories of the fractional quantum Hall effect». En: *Reviews of Modern Physics* 75.4 (3 de oct. de 2003), págs. 1101-1158. ISSN: 0034-6861, 1539-0756. DOI: [10.1103/RevModPhys.75.1101](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.75.1101). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.75.1101>.
- [11] W. Pauli. «On the Connection between Spin and Statistics». En: *Progress of Theoretical Physics* 5.4 (1 de jul. de 1950), págs. 526-543. ISSN: 0033-068X, 1347-4081. DOI: [10.1143/ptp/5.4.526](https://doi.org/10.1143/ptp/5.4.526). URL: <https://academic.oup.com/ptp/article-lookup/doi/10.1143/ptp/5.4.526>.
- [12] Wolfgang Pauli. *General Principles of Quantum Mechanics*. Col. de P. Achuthan y K. Venkatesan. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin / Heidelberg, 1980. ISBN: 978-3-540-09842-3.
- [13] F.N. Rhines. *Phase Diagrams in Metallurgy: Their Development and Application*. McGraw-Hill series in material science and engineering. McGraw-Hill, 1956. ISBN: 978-0-07-052070-7. URL: <https://books.google.com.co/books?id=IJNTAAAMAAJ>.
- [14] Julian Schwinger. «The Theory of Quantized Fields. I». En: *Physical Review* 82.6 (15 de jun. de 1951), págs. 914-927. ISSN: 0031-899X. DOI: [10.1103/PhysRev.82.914](https://doi.org/10.1103/PhysRev.82.914). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.82.914>.
- [15] James F. Shackelford. *Introduction to materials science for engineers*. Always learning. Boston Munich: Pearson, 2016. ISBN: 978-0-273-79340-3.
- [16] Saul Tapia y J. Antonio del Rio. *One temperature model for effective ovens*. Version Number: 1. 2011. DOI: [10.48550/ARXIV.1109.0664](https://doi.org/10.48550/ARXIV.1109.0664). URL: <https://arxiv.org/abs/1109.0664>.