

Actividad 05: Estructuras Cristalinas

Julian Avila

jlavilam@udistrital.edu.co

Universidad Distrital Francisco José de Caldas

5 de noviembre de 2025

1. Cálculo de Densidades Cristalográficas

En cristalografía, cuantificamos la eficiencia del empaquetamiento atómico mediante tres tipos de densidades.

1.1. Densidad Teórica (Volumétrica)

La densidad teórica (ρ) es la masa por unidad de volumen de la celda unitaria. Es una propiedad macroscópica fundamental derivada de la microestructura.

La fórmula general es:

$$\rho = \frac{n \cdot A}{V_C \cdot N_A}$$

Donde:

- n : Número de átomos (o unidades fórmula) por celda unitaria.
- A : Masa atómica (o peso fórmula) [g mol^{-1}].
- V_C : Volumen de la celda unitaria [cm^3].
- N_A : Número de Avogadro ($6,022 \times 10^{23}$ átomos/mol).

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

- n : 2 átomos/celda (1 en el centro + 8 vértices \times 1/8).
- A : $\approx 55,845$ g/mol.
- V_C : a^3 . En la estructura BCC, la diagonal del cubo es $4R = \sqrt{3}a$, donde R es el radio atómico. Por lo tanto, $a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$.
- El volumen es $V_C = \left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3 = \frac{64R^3}{3\sqrt{3}}$.

Sustituyendo, la densidad depende fundamentalmente del radio atómico y la masa:

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

1.2. Densidad Lineal (DL)

La densidad lineal (DL) mide la fracción de la longitud de una dirección cristalográfica específica que está ocupada por átomos. Es crucial para entender la deformación plástica (dislocaciones) y las propiedades de transporte.

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

1.2.1. Ejemplo: Estructura FCC - Dirección [110]

- El vector [110] va de (0, 0, 0) a (a, a, 0).
- Atraviesa: 1/2 átomo en (0, 0, 0), 1 átomo completo en (a/2, a/2, 0) (centro de la cara), y 1/2 átomo en (a, a, 0).
- Total de átomos en el vector: $1/2 + 1 + 1/2 = 2$ átomos.
- Longitud del vector: $L = \sqrt{a^2 + a^2 + 0^2} = a\sqrt{2}$.

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

En FCC, la diagonal de la cara es $4R = a\sqrt{2}$. Sustituyendo:

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

1.3. Densidad Planar (DP)

La densidad planar (DP) mide la fracción del área de un plano cristalográfico que está ocupada por átomos. Los planos con mayor DP son los planos de deslizamiento preferenciales.

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

1.3.1. Ejemplo: Estructura FCC - Plano (111)

Este es el plano de empaquetamiento compacto en FCC.

- El plano corta los ejes en (a, 0, 0), (0, a, 0) y (0, 0, a). Forma un triángulo equilátero.
- Área del plano (A_p): Es un triángulo de lado $L = a\sqrt{2}$ (la diagonal de una cara). $A_p = \frac{1}{2} \cdot \text{base} \cdot \text{altura} = \frac{1}{2}(a\sqrt{2})(a\sqrt{2} \sin(60^\circ)) = \frac{a^2\sqrt{3}}{2}$.
- Átomos en el plano: 3 átomos en los vértices (cada uno compartido por 2D, contribuye 1/2? No, miremos el área 2D).
- Es más simple: 3 vértices (cada uno contribuye 1/6 del área del hexágono 2D) y 3 centros de cara (cada uno contribuye 1/2).
- Alternativa más robusta: 3 átomos en los vértices (e.g., (a,0,0), (0,a,0), (0,0,a)) y 3 átomos en centros de cara (e.g., (a/2, a/2, 0), (a/2, 0, a/2), (0, a/2, a/2)).
- Dentro del triángulo A_p : Hay $3 \times (1/2 \text{ átomo en las caras}) + 3 \times (1/6 \text{ átomo en los vértices})$. (Considerando el área de un átomo como πR^2).

- Método estándar: Contar átomos centrados en el plano. Vértices: $3 \times 1/6$ (contribución al triángulo) + Centros de cara: $3 \times 1/2$. Total $1/2 + 3/2 = 2$ átomos.

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

Sustituyendo $a = 2\sqrt{2}R$ (de $a\sqrt{2} = 4R$):

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

Este es el máximo empaquetamiento 2D posible (aprox. 0.907).

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.
- [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.^a 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=IJNTAAAAMAAJ>.
- [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>.