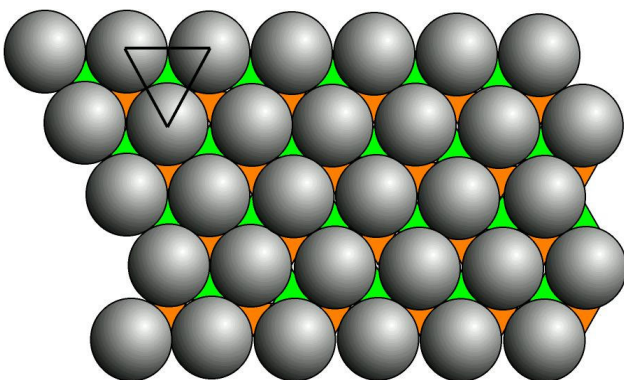


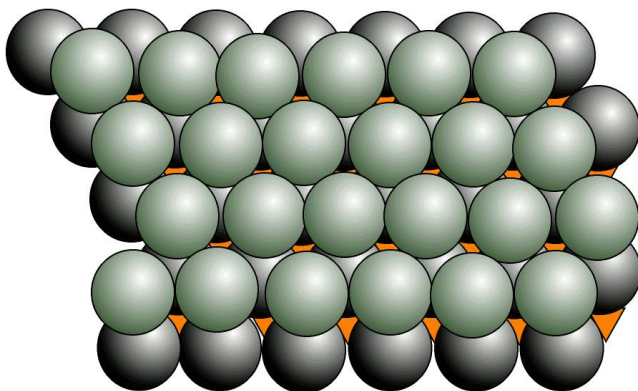
CRISTALLS METÀL·LICS

L'enllaç entre àtoms d'electronegativitat igual, o molt semblant, és normalment metàl·lic. Es tracta d'un enllaç no direccional, les estructures a les quals donarà lloc es poden imaginar com un empaquetat d'esferes de manera que es minimitzi l'espai entre elles (estructures el més compactes possible). En aquestes condicions, les coordinacions afavorides són dotze i, ocasionalment, vuit.

Existeixen dues possibles estructures amb coordinació 12, que es poden construir a partir de l'apilament d'esferes d'igual mida amb el criteri de màxima compacitat abans expressat. Si es col·loca una primera capa d'esferes, aquestes adopten una disposició de simetria hexagonal com la que es mostra a la figura, en la que cada tres boles determinen un triangle equilàter.



Sobre aquesta capa es pot col·locar una segona, les boles de la qual s'ubicaran entre cada tres de la primera, sigui en els espais dibuixats en verd o en carabassa. Així, la segona capa quedarà de la següent manera si es col·loca sobre els espais de color verd (per millor lectura de la imatge s'ha dibuixat la segona capa de color verd):

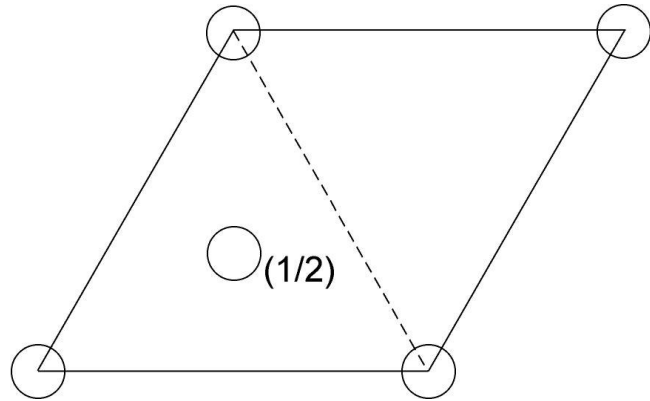
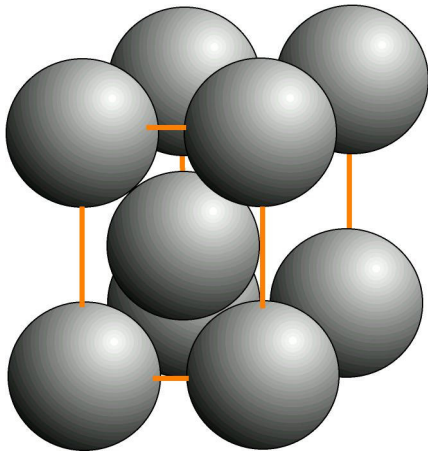


La tercera capa es pot col·locar,
a) sobre la vertical dels forats de color carabassa, o
b) sobre la vertical de les boles de la primera capa.

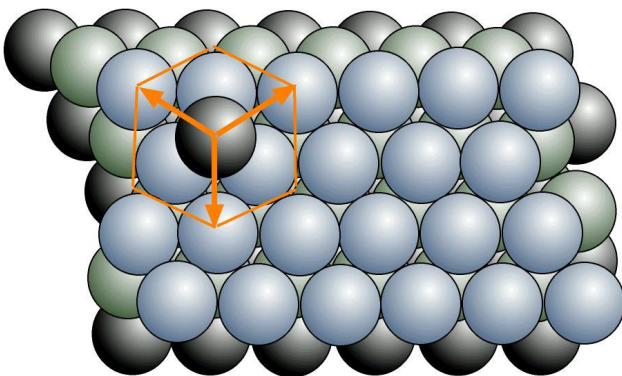
Segons es triï una o altra opció, s'obtingran estructures amb simetries diferents.

Si les boles de la tercera capa es coloquen sobre la vertical de les de la primera s'obté una simetria hexagonal, la cel·la fonamental de la qual es mostra a la figura.

I en projecció sobre (001)

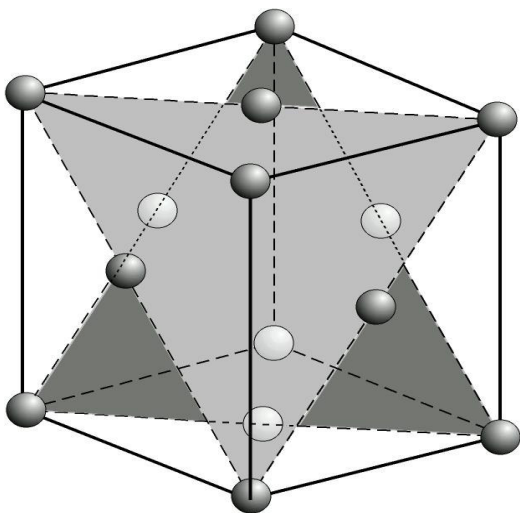


Aquesta disposició es coneix com “hexagonal compacte” i abreviadament HCC (*hexagonal closest packing*).

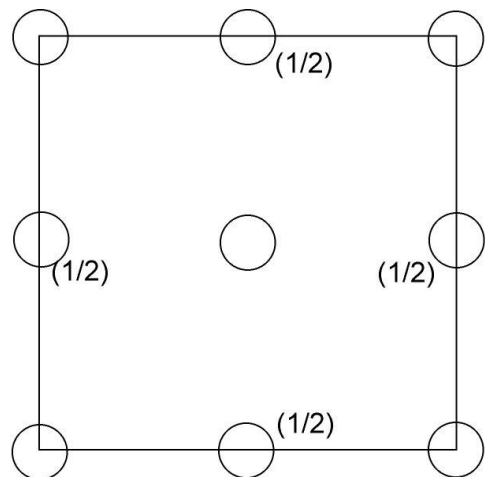


Si, en canvi les boles de la tercera capa es coloquen sobre la vertical dels forats de color carabassa, l'estructura adopta una simetria cúbica, amb els vèrtex de la cel·la fonamental a la capa 1 i 4 (assenyalats en carabessa a la figura).

La cel·la fonamental cúbica F, queda de la següent manera (s'han dibuixat les capes de l'apilament anterior).

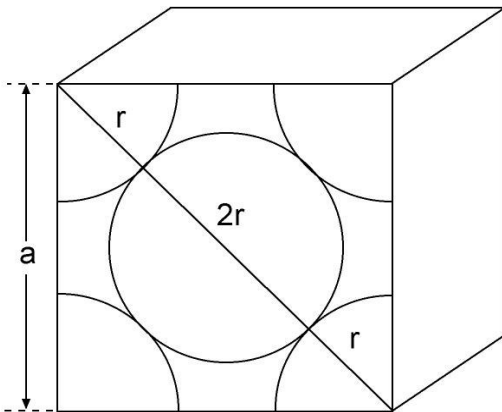


I en projecció sobre (001),



Aquesta estructura es coneix com “cúbica compacte” i s’abreuja amb les inicials FCC (*face centered cubic*).

En les dues estructures la coordinació és 12: cada àtom està voltat de sis àtoms en la seva mateixa capa, tres de la de sota i tres més de la superior.



D'altra banda, si s'avalua l'índex de compacitat (relació de volum de la cel·la efectivament ocupat pel àtoms), es pot fer considerant la secció en una de les cares de la cel·la fonamental cúbica.

Com es veu a la figura, la diagonal del cub és quatre vegades el radi dels àtoms, suposant que aquests siguin tangents (model d'empaquetament d'esferes rígides), per tant es pot expressar el radi en funció de l'aresta del cub a partir de l'expressió

$$a\sqrt{2} = 4r$$

com que hi ha quatre àtoms a la cel·la fonamental, la relació dels volum ocupat respecte del de la cel·la és

$$\frac{V_{at}}{V_c} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi \left(\frac{a\sqrt{2}}{4}\right)^3}{a^3} = 0.741$$

és a dir, que el volum ocupat pel àtoms és aproximadament tres quartes parts del volum total. Considerant que aquest és el tipus d'empaquetament més compacte possible, caldrà considerar que el volum no ocupat en altres estructures és important, com es veurà en altres casos concrets.

Aquest càlcul concideix amb el que es pot fer per l'empaquetament de simetria hexagonal, el qual es suggereix a l'estudiant com exercici complementari.

ERROR: undefined
OFFENDING COMMAND: f

STACK:

-mark-
-savelevel-