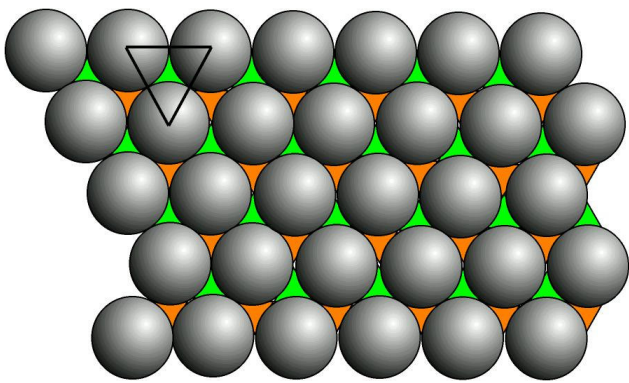
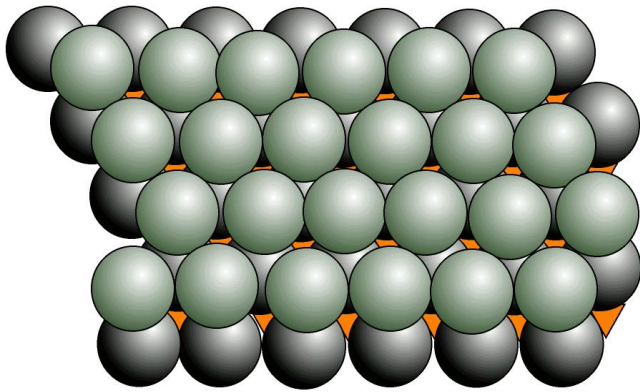


CRISTALES METÁLICOS

El enlace entre átomos de electronegatividad igual, o muy similar, es normalmente metálico. Se trata de un enlace no direccional, las estructuras a las que dará lugar se pueden imaginar como un empaquetado de esferas de manera que se minimice el espacio entre ellas (estructuras lo más compactas posibles). En estas condiciones, las coordinaciones más favorable son doce y, ocasionalmente, ocho.



Existen dos posibles estructuras con coordinación 12, que se pueden construir a partir del apilamiento de esferas de igual tamaño con el criterio de máxima compactad antes expresado. Si se coloca una primera capa de esferas, estas adoptan unas disposiciones de simetría hexagonal como la que se muestra en la figura, en la que cada tres bolas determinan un triángulo equilátero.



Sobre esta capa se puede colocar una segunda, las bolas de la cual se ubicarán entre cada tres de la primera, o sea en los espacios dibujados en verde o en calabaza. Así, la segunda capa quedará de la siguiente manera si se coloca sobre los espacios de color verde (para mejor lectura de la imagen se ha dibujado la segunda capa de color verde):

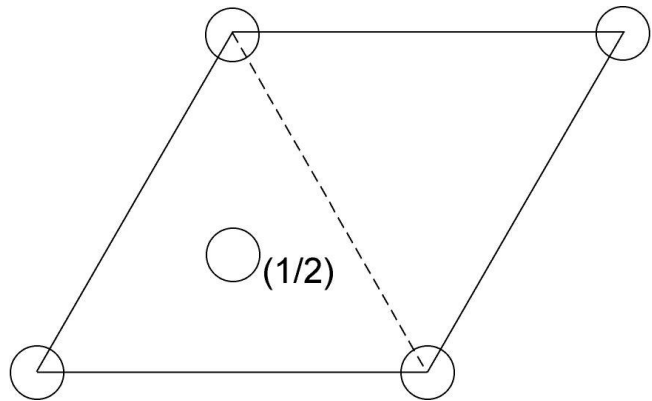
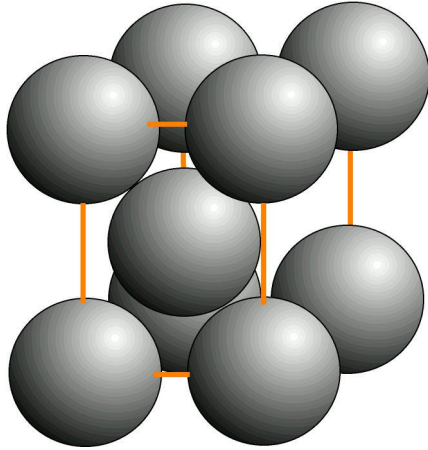
La tercera capa se puede colocar,

- a) sobre la vertical de los agujeros de color calabaza, o
- b) sobre la vertical de las bolas de la primera capa.

Según se elija una u otra opción, se obtendrán estructuras con simetrías diferentes.

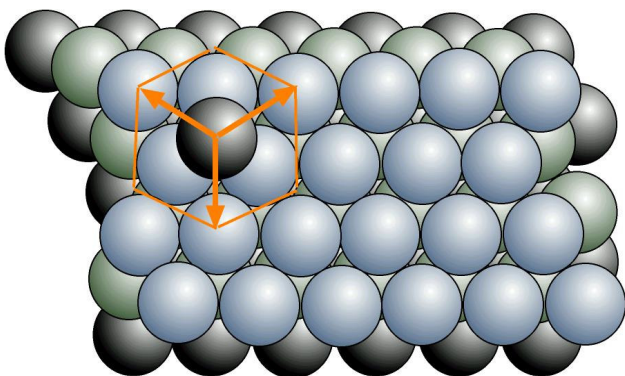
Si las bolas de la tercera capa se colocan sobre la vertical de las de la primera se obtiene una simetría hexagonal, la celda fundamental de la cual se muestra en la figura.

Y en proyección sobre (001)

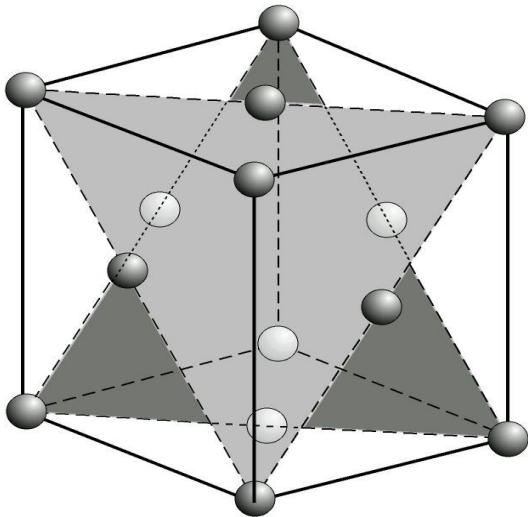


Esta disposición se conoce como “hexagonal compacta” y abreviadamente HCC (*hexagonal closest packing*).

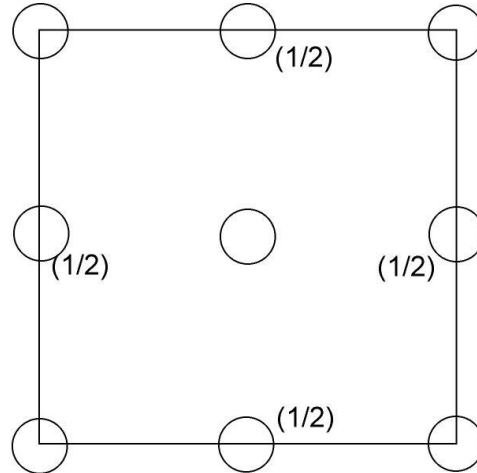
Si, en cambio las bolas de la tercera capa se colocan sobre la vertical de los agujeros de color calabaza, la estructura adopta una simetría cúbica, con los vértices de la celda fundamental en la capa 1 y 4 (señalados en calabaza en la figura).



La celda fundamental cúbica F, queda de la siguiente manera (se han dibujado las capas del apilamiento anterior).



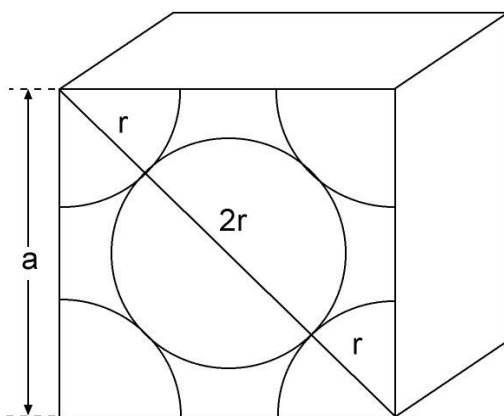
Y en proyección sobre (001),



Esta estructura se conoce como “cúbica compacta” y se abrevia con las iniciales FCC (*face centered cubic*).

En las dos estructuras la coordinación es 12: cada átomo está rodeado de seis átomos en su misma capa, tres de la de abajo y tres más de la superior.

Por otro lado, si se evalúa el índice de compacidad (relación de volumen de



la celda efectivamente ocupado por los átomos), se puede hacer considerando la sección en una de las caras de la celda fundamental cúbica.

Como se ve en la figura, la diagonal del cubo es cuatro veces el radio de los átomos, suponiendo que estos sean tangentes (modelo de empaquetado de esferas rígidas), por tanto se puede expresar el radio en función de la arista del cubo a partir de la expresión

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

como que hay cuatro átomos en la celda fundamental, la relación de los volúmenes ocupados respecto del de la celda es

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

es decir, que el volumen ocupado por los átomos es aproximadamente tres cuartas partes del volumen total. Considerando que este es el tipo de empaquetado más compacto posible, habrá que considerar que el volumen no ocupado en otras estructuras es importante, como se verá en otros casos concretos.

Este cálculo coincide con el que se puede hacer para el empaquetado de simetría hexagonal, el cual se sugiere al estudiante como ejercicio complementario.

Espacios de coordinación tetraédrica y octaédrica

Estos espacios intersticiales no ocupados por los átomos de la estructura, de hecho, se pueden describir en función de la coordinación que tendría un átomo que los ocupase, y de esta manera es posible citar *espacios de coordinación tetraédrica* o *espacios de coordinación octaédrica*, o abreviadamente, espacios tetraédricos o espacios octaédricos, respectivamente. Tanto en la estructura HCC como en la FCC es posible determinar las posiciones que ocupan estos “espacios”, como se verá a continuación.

Espacios de coordinación tetraédrica

En la estructura FCC estos son los de las posiciones (1/4,1/4,1/4) y similares, como se muestra en la siguiente figura:

ERROR: undefined
OFFENDING COMMAND: f

STACK:

-mark-
-savelevel-