

C.N.E.A. Biblioteca	
ARCHIVO PUBLICACIONES	
Nº 1	AÑO 1977

01.77.01

PMM/A-221

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

PROGRAMA MULTINACIONAL DE METALURGIA
(Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico-OEA)

ELEMENTOS DE CRISTALOGRAFIA

- Aplicaciones a la Metalurgia Física -

Alberto F. Bonfiglioli*

Miguel Ipohorski**

Rodolfo J. Acuña**

* ALUAR, Gerencia de Desarrollo

** Comisión Nacional de Energía Atómica, Dpto. de Materiales

Buenos Aires - Argentina
1977

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

PROGRAMA MULTINACIONAL DE METALURGIA
(Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico-OEA)

ELEMENTOS DE CRISTALOGRAFIA

- Aplicaciones a la Metalurgia Física -

Alberto F. Bonfiglioli*

Miguel Ipohorski**

Rodolfo J. Acuña**

* ALUAR, Gerencia de Desarrollo

** Comisión Nacional de Energía Atómica, Dpto. de Materiales

INDICE

CAPITULO I

LA RED GEOMETRICA

- I.1 LA NOCION DE ORDEN EN LA MATERIA: EL GAS IDEAL Y LOS SOLIDOS CRISTALINOS
 - I.2 RED GEOMETRICA DE PUNTOS
 - I.2.1 Redes Planas. Filas Reticulares. Celdas
 - I.2.2 Redes de Bravais en el Plano
 - I.2.3 Redes Tridimensionales. Filas Reticulares. Celdas
 - I.2.4 Redes de Bravais en el Espacio
 - I.2.5 Planos Reticulares. Indices de Weiss y Miller
 - I.3 LA RED RECIPROCA
 - I.3.1 Propiedades de la Red Recíproca
 - I.3.2 Utilidad del Formulismo de la Red Recíproca
- EJERCICIOS DE APLICACION

CAPITULO II

ESTRUCTURAS CRISTALINAS

- II.1 ESTRUCTURAS PERIODICAS PLANAS
 - II.2 ESTRUCTURAS CRISTALINAS TRIDIMENSIONALES
 - II.3 SIMETRIA DE LOS CRISTALES
 - II.3.1 Anisotropía Cristalina
 - II.3.2 Formas Exteriores de un Cristal
 - II.4 OPERACIONES Y ELEMENTOS DE SIMETRIA. GRUPOS PUNTUALES
 - II.4.1 Grupos Puntuales Bidimensionales. Nomenclatura de Herman-Mauguin
 - II.4.2 Grupos Puntuales Tridimensionales. Sistemas Cristalinos
 - II.5 LAS FORMAS EXTERIORES Y LA ESTRUCTURA ATOMICA DE LOS CRISTALES
 - II.5.1 Cristales Constituidos por Atomos Situados en los Nodos de la Red
 - II.5.2 Cristal Constituido por un Motivo Atómico Distribuido Alrededor de los Nodos de la Red
 - II.5.3 Los Grupos Espaciales
 - II.5.4 Posiciones Equivalentes
 - II.5.5 Nomenclatura Strukturbericht
- EJERCICIOS DE APLICACION

CAPITULO III

LA PROYECCION ESTEREOGRAFICA

- III.1 PROPIEDADES GENERALES
- III.2 LA RED DE WULFF
- III.3 LA PROYECCION TIPO
- III.4 EL TRIANGULO FUNDAMENTAL
- III.5 UTILIZACION DE LA PROYECCION ESTEREOGRAFICA
 - III.5.1 Medición del Angulo entre Dos Planos
 - III.5.2 Rotación de Polos
 - III.5.3 Determinación de los Indices de Miller de un Polo Dado
- EJERCICIOS DE APLICACION

CAPITULO IV

ESTRUCTURA ATOMICA DE LOS METALES

- IV.1 ESTRUCTURA CRISTALINA DE LOS ELEMENTOS Y SU CLASIFICACION EN LA TABLA PERIODICA
- IV.2 DISTINTOS TIPOS DE UNIONES INTERATOMICAS
- IV.3 REPRESENTACION DE LA ESTRUCTURA ATOMICA DE LOS METALES MEDIANTE EL MODELO DE LAS ESFERAS RIGIDAS
- IV.4 LAS ESTRUCTURAS METALICAS MAS COMUNES
 - IV.4.1 Estructura Tipo A_1 (Cúbica de Caras Centradas)
 - IV.4.1.1 Intersticios en la Estructura A_1
 - IV.4.2 Estructura Tipo A_3 (Hexagonal Compacta)
 - IV.4.2.1 Intersticios en la Estructura A_3
- IV.5 FALLAS DE APILAMIENTO EN ESTRUCTURAS COMPACTAS
 - IV.5.1 Formación de Fallas por Deformación Plástica
- IV.6 MACLAS
 - IV.6.1 Maclas en la Estructura A_1
 - IV.6.2 Maclas en las Estructuras A_2 y A_3
- IV.7 ESTRUCTURA ATOMICA DE ALEACIONES
 - IV.7.1 Soluciones Sólidas Intersticiales
 - IV.7.1.1 La Transformación Martensítica
 - IV.7.2 Soluciones Sólidas Sustitucionales
 - IV.7.2.1 Orden de Corto Alcance
 - IV.7.2.2 Orden de Largo Alcance. Superestructuras
 - IV.7.2.3 Parámetro de Orden de Largo Alcance
 - IV.7.2.4 Dominios de Antifase
 - IV.7.3 Relaciones de Orientación entre Precipitados y Matriz
- EJERCICIOS DE APLICACION

AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer a las siguientes personas e Instituciones:

- Al Programa Multinacional de Metalurgia (Programa Regional de Desarrollo Científico y Tecnológico, OEA), por la financiación del presente trabajo.
- Al Departamento de Materiales, Gerencia de Desarrollo, CNEA, donde se ha efectuado el presente trabajo.
- Al Sr. Oscar Curotto por su apoyo y colaboración durante la impresión del mismo.
- A la Sra. Alicia P. de Semino por todo el trabajo de tipografía.

El presente trabajo se ha basado fundamentalmente en las siguientes publicaciones:

- "Difracción de Rayos X", A.F. Bonfiglioli, CNEA, Buenos Aires, 1967 .
- "Cristalografía", A.F. Bonfiglioli, CNEA, Buenos Aires, 1968 .
- "Cristalografía y Rayos X", PMM/A-21, II Edición Revisada y Corregida, A.F. Bonfiglioli, CNEA, 1970 .

Estas fueron editadas a partir de 1967 para el curso de Cristalografía y Difracción de Rayos X de los Cursos Panamericanos de Metalurgia que se dictaron en la Gerencia de Desarrollo de esta Comisión Nacional de Energía Atómica.

I.1 LA NOCION DE ORDEN EN LA MATERIA: EL GAS IDEAL Y LOS SOLIDOS CRISTALINOS

Cada estado de la materia está caracterizado por la manera en la que se distribuyen los átomos que la componen. Las propiedades de un cuerpo ya sea gaseoso, líquido o sólido, dependen de la configuración de los átomos en su interior. La distribución atómica más desordenada corresponde al estado gaseoso y la teoría cinética de los gases se apoya precisamente en ese caos para explicar las propiedades de un gas ideal. Los líquidos constituyen un estado de la materia en el cual existe un orden parcial entre sus constituyentes elementales (átomos o moléculas). Estos se nuclean formando pequeñas agrupaciones en las cuales la distribución atómica (o molecular) está bien diferenciada de una distribución al azar. Sin embargo, no existe mayor relación entre una agrupación dada y sus vecinos. Suele decirse que en los líquidos existe un orden de corto alcance entre sus átomos. Desde este punto de vista los sólidos amorfos se clasifican junto con los líquidos en un mismo estado de la materia. Un sólido amorfo como el vidrio, por ejemplo, no es sino un líquido de muy alta viscosidad.

Finalmente, el estado cristalino está caracterizado por el ordenamiento riguroso de sus átomos en toda su extensión. Se dice entonces que existe un orden atómico de largo alcance. De la misma manera que las propiedades de los gases ideales se explican en base al caos existente entre sus átomos, todas las propiedades de la materia cristalizada depende directa o indirectamente de esa distribución ordenada. El objeto fundamental de la cristalografía es precisamente el estudio sistemático de ese ordenamiento desde un punto de vista geométrico.

La distribución atómica en los cristales es periódica en las tres direcciones del espacio. Conviene por lo tanto comenzar su estudio en base a una abstracción: la red geométrica de puntos. Como lo veremos más adelante (Sección II.2) una red constituye el esqueleto sobre el cual se construyen las estructuras cristalinas reales.

I.2 RED GEOMETRICA DE PUNTOS

Una red geométrica es un conjunto de puntos regularmente distribuidos en el espacio de tal manera que uno cualquiera de ellos tiene a su alrededor una distribución idéntica de puntos vecinos. A cada uno de los puntos de una red se lo denomina nodo.

El concepto de red así definido, aunque puede resultar difícil de visualizar, se intuye fácilmente en la práctica. A los efectos de facilitar esta visualización, comenzaremos por estudiar primero el caso de las redes planas para pasar luego al caso tridimensional.

I.2.1 Redes Planas - Filas Reticulares - Celdas

Consideremos dos conjuntos de rectas paralelas y equidistantes entre sí, que se cortan según ángulo cualquiera, Fig. I.1. Las intersecciones de estas dos familias de rectas determinan un conjunto de puntos que constituyen los nodos de una red plana. Se puede ver en la Fig. I.1. que un nodo cualquiera tiene a su alrededor una distribución de nodos vecinos idéntica a la de cualquiera de los demás. Uno de ellos puede elegirse arbitrariamente como origen O. A partir del origen pueden trazarse dos vectores $\vec{a}$ y $\vec{b}$, a los que llamaremos vectores base de la red, cuyas direcciones sean las correspondientes a las dos familias de rectas originales y cuyos módulos a y b, respectivamente, sean iguales a la distancia entre dos nodos vecinos según esas mismas direcciones. Los sentidos positivos de los vectores base se pueden elegir arbitrariamente. Cualquier nodo de la red queda entonces definido por el extremo de un vector que es combinación lineal de los vectores base.

$$\vec{r}_{uv} = u\vec{a} + v\vec{b} \quad (\text{I.1})$$

donde u y v son enteros cualesquiera, positivos, negativos o nulos. El nodo correspondiente se denomina simplemente (u,v).

Según las direcciones de $\vec{a}$ y $\vec{b}$ los nodos de la red se distribuyen en intervalos regulares de longitudes a y b, respectivamente. Una disposición periódica similar, aunque con distintos espaciados, se observa también según cualquier otra dirección definida por dos nodos cualesquiera. Esta sucesión de puntos alineados se denomina fila reticular; cada dirección o fila reticular en la red queda definida entonces por un vector $\vec{r}_{uv}$, ec. I.1, donde u y v son enteros cualesquiera primos entre sí, ver ejercicio E.I.6. Una dirección se denomina en forma abreviada $\{u,v\}$. Por ejemplo, en la red plana de la Fig. I.1 la dirección $\{1,1\}$ está definida por el vector $\vec{OP}$ y contiene a los nodos O, P, P', P'', etc. Cualquier fila reticular paralela a una dada de índices $\{u,v\}$ tiene sus mismas características geométricas. A todo este conjunto o familia de filas reticulares se lo designa con los mismos índices. Es importante notar también que en toda familia de filas reticulares $\{u,v\}$ están contenidos todos los nodos de la red, incluido por supuesto el nodo origen.

Siempre con referencia a la Fig. I.1 se puede ver que las dos familias de rectas originales dividen el espacio en compartimentos a los que llamaremos celdas. Toda la red puede considerarse como la simple repetición de una celda convenientemente elegida. En la figura mencionada, la celda que más intuitivamente describe la red es la determinada por el paralelogramo que tiene por lados a los vectores base $\vec{a}$ y $\vec{b}$ definidos anteriormente. Su área es numéricamente igual al producto vectorial (Ver Apéndice).

$$A = \left| \vec{a} \times \vec{b} \right| \quad (\text{I.2})$$

Cada una de estas celdas contiene 4 nodos. Estos a su vez son comunes

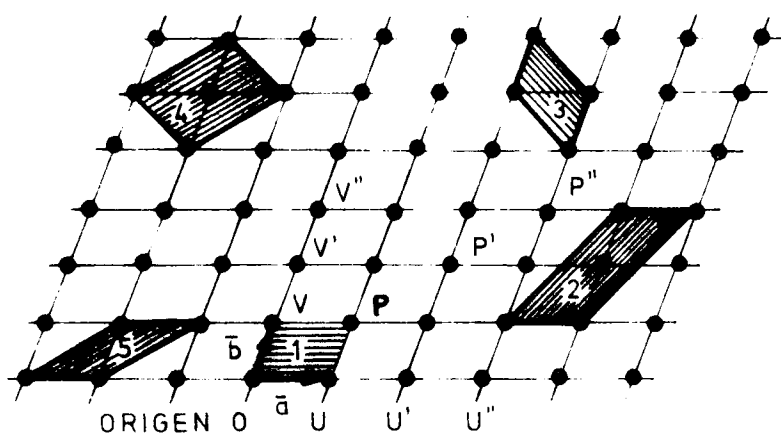


Fig.I.1. Esquema de una red plana de puntos. Un nodo cualquiera de la red tiene a su alrededor una distribución de nodos idéntica a la de los demás. A partir de un origen arbitrario O se trazan los vectores bases $\vec{a}$ y $\vec{b}$. La dirección o fila reticular $(1,1)$ está definida por el vector OP y contiene a los nodos $O, P, P', P'', \dots$. Se muestran también cinco tipos posibles de celdas que por sucesivas traslaciones definen la red considerada.

a 4 celdas y por lo tanto, cada celda contiene en total un solo nodo. Celdas de este tipo que contienen solamente nodos en sus vértices, se denominan primitivas. Pero la elección de la celda primitiva de una red no es única, como se puede ver en la Fig. I.1. Más adelante, en la sección (I.2.4), al tratar el caso general de redes tridimensionales, se discutirán los criterios de elección de una celda en una red dada. Por el momento es importante destacar que siempre existe una relación entre el área de una celda y el número de nodos que ésta contiene. En efecto, si a cada celda corresponde un nodo, el número de celdas primitivas debe ser igual al número de nodos que contiene la red. Como este número es independiente de la celda elegida, podemos concluir que una red dada contiene un número constante de celdas primitivas independientemente de la forma que éstas tengan. Si además se tiene en cuenta que el área total de una red plana es independiente de la elección de la celda, se deduce inmediatamente que en una red todas las celdas primitivas tienen igual área. Si una celda contiene dos nodos (un nodo compartido en cada vértice y un nodo propio p.ej. en el centro) el número de estas celdas deberá ser igual a la mitad del número total de nodos. Por lo tanto una celda con dos nodos tiene un área igual al doble de la correspondiente a una celda primitiva. Tal es el caso de la celda "2" de la Fig. I.1. En general, una celda conteniendo n nodos tiene un área n veces mayor que la de una celda primitiva.

Entonces, si una celda está definida por dos vectores cualesquiera de la red

$$\begin{aligned}\vec{r}_{u,v} &= u\vec{a} + v\vec{b} \\ \vec{r}_{u',v'} &= u'\vec{a} + v'\vec{b}\end{aligned}\tag{I.3}$$

su superficie estará dada por (ver Apéndice).

$$S = (\vec{a} \times \vec{b}) \begin{vmatrix} u & v \\ u' & v' \end{vmatrix}$$

y la celda contendrá n nodos si

$$\begin{vmatrix} u & v \\ u' & v' \end{vmatrix} = \pm n\tag{I.4}$$

En cambio, la celda será primitiva si el valor del determinante (I.4) es igual a ± 1 .

I.2.2 Redes de Bravais en el Plano

Hemos visto que, dada una red, existen varias posibilidades para la elección de la celda primitiva que la describe. Si por alguna razón (ver sección I.2.4) se

prefiere describir la misma red por medio de una celda más compleja, las posibilidades de elección aumentan enormemente, llegando a ser infinitas en el caso de una red plana infinita. Sin embargo, la geometría de las celdas que pueden llegar a describir una red bidimensional tiene que ajustarse necesariamente a alguno de los cinco tipos que se detallan en la Tabla I.1.

TABLA I.1

	Forma de la celda	Ejes de la celda	Angulo entre ejes	Nombre de la red
1	Paralelogramo General	$a \neq b$	$\neq 90^\circ$	Oblícuo
2	Rectangular Con un nodo en cada vértice Con un nodo suplementario en el centro	$a \neq b$	$= 90^\circ$	Rectangular centrado
3				
4	Cuadrada	$a = b$	$= 90^\circ$	Cuadrático
5	Romboidal con lados a 60°	$a = b$	$= 120^\circ$	Hexagonal

En otras palabras, un conjunto plano de puntos dispuestos de tal manera que cada uno de ellos es equivalente a los demás, se puede describir solamente por medio de uno de los cinco tipos de celdas mencionados, que se denominan Celdas de Bravais planas.

Esta limitación respecto de las formas posibles de una celda plana se irá viendo más claramente en los ejercicios de aplicación. A título de ejemplo diremos solamente que todas las celdas primitivas que pueden describir la red de la Fig. I.1 tienen una característica común: todas pertenecen al sistema oblicuo.

I.2.3 Redes Tridimensionales. Filas Reticulares. Celdas

Una red tridimensional es un conjunto de puntos en el espacio distribuidos de tal manera que cada uno de ellos es equivalente a los demás, es decir que tiene una disposición idéntica de puntos a su alrededor. Se puede generar a partir de una red plana construida sobre los vectores base $\vec{a}$ y $\vec{b}$, desplazando todos los nodos de la misma según un tercer vector $\vec{c}$ que no pertenezca al plano determinado por $\vec{a}$ y $\vec{b}$. De esta manera, un nodo cualquiera (u,v,w) de la red tridimensional

queda identificado por el extremo de un vector.

$$\vec{r}_{uvw} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad (I.5)$$

donde u, v y w son enteros cualesquiera, positivos, negativos o nulos. De la misma manera que en una red plana, un vector como el dado por (I.5) con u, v y w primos entre sí, define una fila reticular o dirección $\{u, v, w\}$ y todas las filas paralelas a la misma. Cualesquiera sean u, v y w , una familia de filas reticulares $\{uvw\}$ contiene a todos los nodos de la red, incluido el origen.

Tres familias de filas reticulares, no coplanares entre sí, dividen al espacio en celdas tridimensionales y de manera análoga al caso de las redes planas, puede considerarse a la red generada por sucesivas traslaciones de estas celdas. En la Fig. I.2 se muestra en forma esquemática una red tridimensional de puntos y tres tipos posibles de celdas primitivas.

I.2.4 Redes de Bravais en el Espacio

De forma análoga al caso de las redes planas, la geometría de las celdas que pueden describir una red tridimensional es muy limitada. En efecto, sólo existen 14 formas posibles de celdas que por sucesivas traslaciones pueden generar una red. Estas celdas reciben el nombre de celdas de Bravais y se esquematizan en la Fig. I.3.

Cualquier otra disposición tridimensional de puntos que cumpla con la definición de red, necesariamente tiene que estar comprendida dentro de alguna de estas 14 redes. Como veremos en el Capítulo II, por propiedades comunes de simetría, estas 14 redes se agrupan en 7 sistemas reticulares. Las celdas respectivas se caracterizan, además de su forma geométrica específica, por la disposición de los nodos en las mismas. En efecto, existen celdas con nodos en los vértices, en los centros de las caras, o en los centros de los respectivos volúmenes. Siguiendo las reglas establecidas por la Unión Internacional de Cristalografía, las celdas se denominan de la siguiente manera de acuerdo a la disposición de sus nodos:

P	:	Primitiva. Nodos en los Vértices solamente.
I	:	Intracentrada. Nodos en los vértices, más un nodo adicional en el centro de la celda.
F	:	Centrada en las caras. Nodos en los vértices, más nodos adicionales en los centros de cada una de las caras.
A, B o C	:	Centrada solamente en dos caras opuestas, perpendiculares al eje $\vec{a}$, al eje $\vec{b}$, o al eje $\vec{c}$, respectivamente.

Las características geométricas de las 14 redes de Bravais de la Fig. I.3 se resumen en la Tabla I.2. Cualquier otra celda no incluida entre las 14 de Bravais, o bien no describe una red, o puede reducirse a una celda de las ya enumeradas. En los ejercicios de aplicación se verán algunos ejemplos de trans-

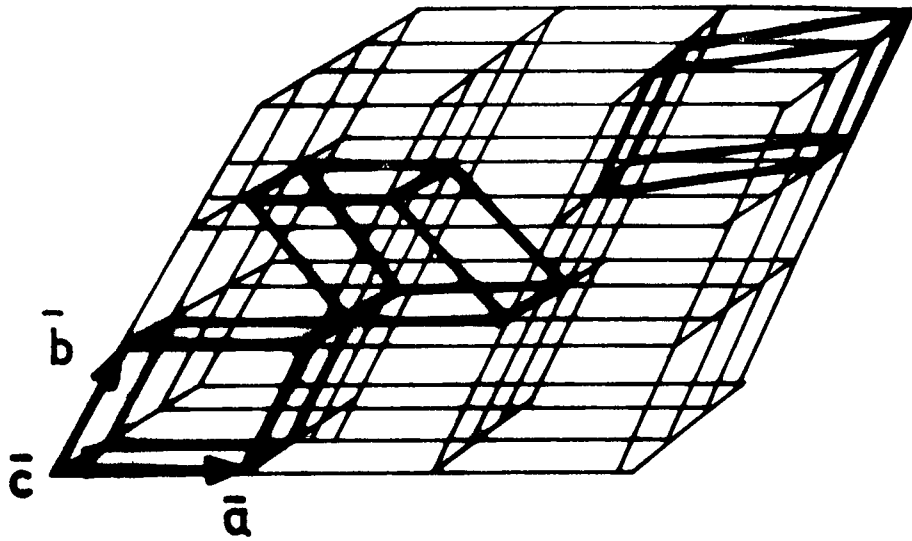


Fig.I.2. Esquema de una red tridimensional de puntos. Los vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ constituyen una de las ternas posibles de vectores base. Se muestran también tres tipos posibles de celdas.

formaciones de celdas en una red.

TABLA I.2

Sistema Reticular	Nº de redes posibles	Tipos de Celdas	Relación entre los lados a, b y c y sus ángulos respectivos	
Triclínico	1	P	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoclínico	2	P y B o P y C	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
Ortorrómico	4	P, C, I, F	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	P, I	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	1	P	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$
Hexagonal	1	P	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$
Cúbico	3	P, I, F	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Un razonamiento análogo al que se hizo con las redes planas muestra que existe una relación directa entre el volumen de una celda y el número de nodos que ésta contiene. En efecto, los 8 vértices de una celda primitiva son compartidos con 8 celdas vecinas. El número de nodos de una red tridimensional es por lo tanto igual al número de celdas primitivas. Si una celda no primitiva contiene n nodos, su volumen es n veces mayor que el de la celda primitiva. El volumen de una celda cualquiera que tiene por aristas a los vectores.

$$\begin{aligned}\vec{r}_{u,v,w} &= u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \\ \vec{r}_{u'v'w'} &= u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c} \\ \vec{r}_{u''v''w''} &= u''\vec{a} + v''\vec{b} + w''\vec{c}\end{aligned}\tag{I.6}$$

se calcula mediante el producto doble mixto (ver Apéndice A)

$$\begin{aligned}V_c &= (\vec{r}_{uvw} \times \vec{r}_{u'v'w'}) \cdot \vec{r}_{u''v''w''} \\ &= \begin{vmatrix} u & v & w \\ u' & v' & w' \\ u'' & v'' & w'' \end{vmatrix} \quad (abc)\end{aligned}\tag{I.7}$$

donde (abc) representa el producto doble mixto de los vectores elementales $\vec{a}, \vec{b}$ y $\vec{c}$. La celda será primitiva si

$$\begin{vmatrix} u & v & w \\ u' & v' & w' \\ u'' & v'' & w'' \end{vmatrix} = \pm 1\tag{I.8}$$

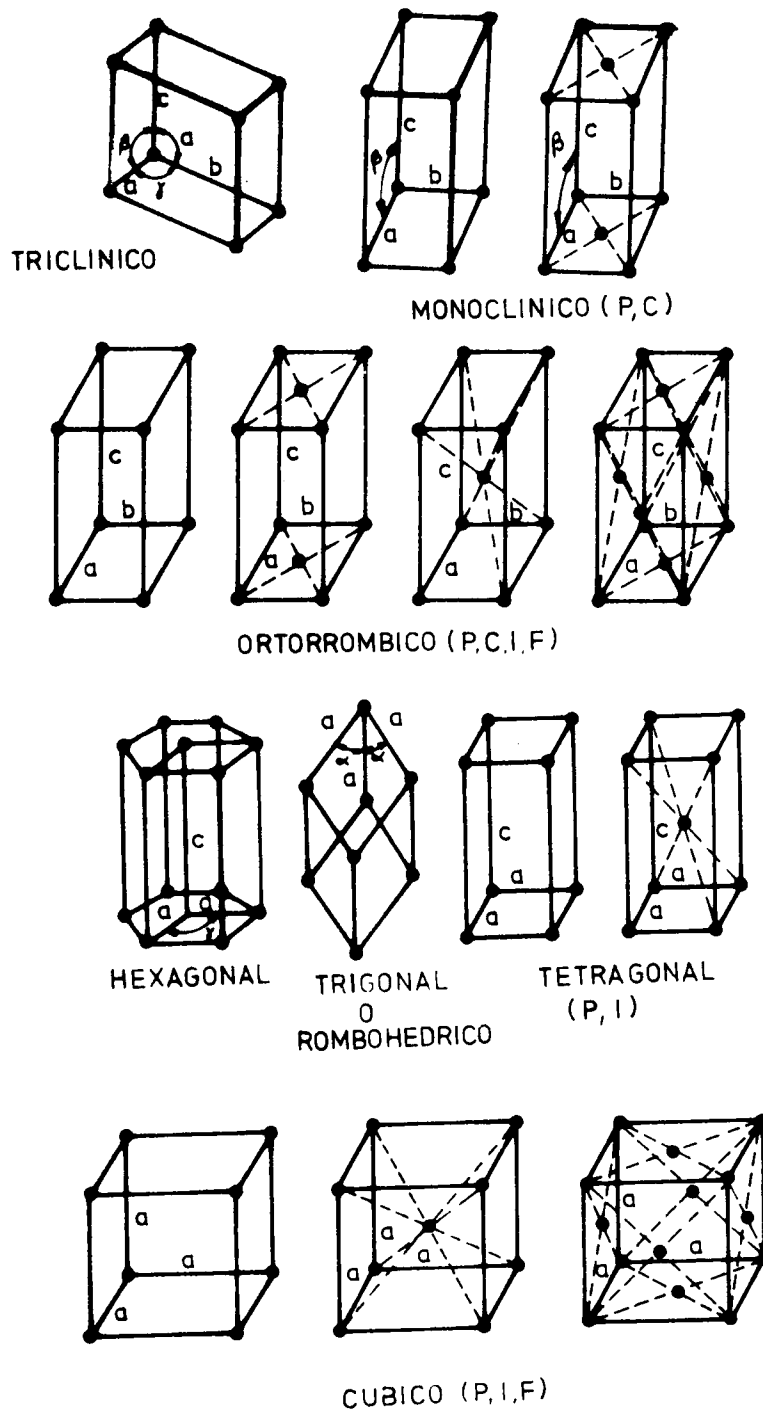


Fig.I.3. Las 14 redes de Bravais. Existen solamente 14 formas posibles de celdas que por sucesivas traslaciones pueden generar una red.

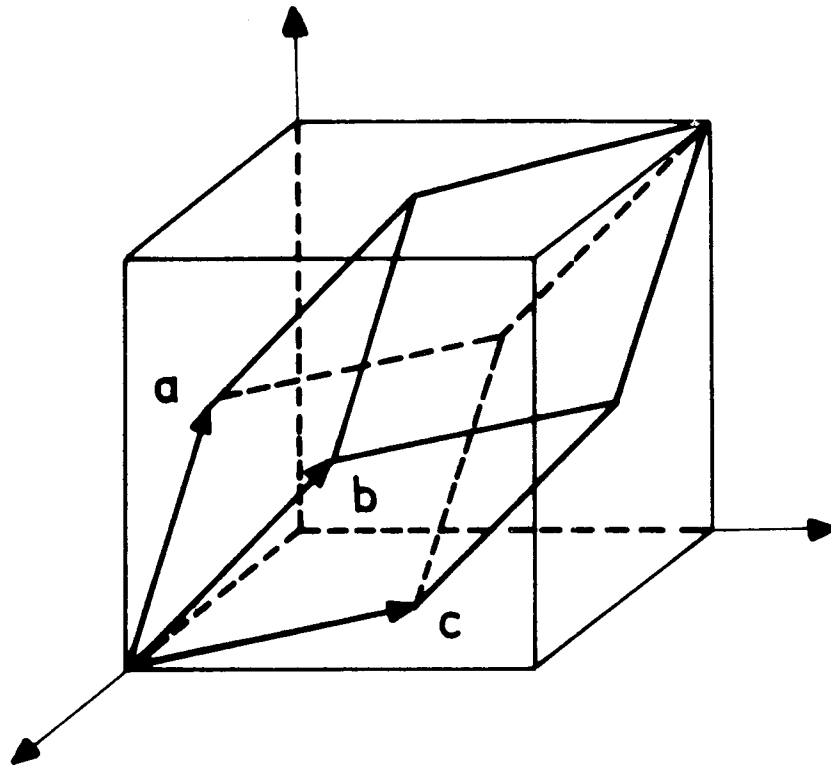


Fig.I.4. Ejemplo de celda primitiva y celda múltiple. La red cúbica de caras centradas se describe por una celda primitiva trigonal constituida por tres vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ de igual longitud, formando 60° entre sí. Pero las simetrías de la red se ven más claramente representadas si se utiliza una celda cúbica múltiple de orden 4.

y en cambio contendrá n nodos si el determinante (I.8) es igual a $\pm n$.

Dada una red y elegida una celda para describirla, ésta siempre podrá ser transformada en otra, que deberá ser un caso particular de las 14 redes de Bravais. Los criterios para describir una estructura reticular en base a uno u otro tipo de celda responden fundamentalmente a razones de orden práctico. En ciertos casos puede resultar cómodo utilizar una celda primitiva, dada la simplicidad de las mismas pero también es común el empleo de celdas múltiples que por alguna razón, ya sea por tener lados iguales entre sí o ángulos rectos entre sus ejes, resaltan más claramente alguna de las simetrías de la red que se quiere describir.

El ejemplo más ilustrativo de elección de celdas múltiples para describir una red es sin duda el de un caso particular del sistema trigonal. La celda primitiva de este sistema está constituida por tres vectores de igual longitud

$$a = b = c$$

que, para el caso particular de

$$\alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$$

se puede transformar en una celda conteniendo 4 nodos, correspondiente a la red cúbica F, Fig. I.4.

En efecto, en base a los vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ se puede construir una celda cúbica F definida por los tres vectores

$$\begin{aligned}\vec{r}_{\bar{1}11} &= -\vec{a} + \vec{b} + \vec{c} \\ \vec{r}_{1\bar{1}1} &= \vec{a} - \vec{b} + \vec{c} \\ \vec{r}_{11\bar{1}} &= \vec{a} + \vec{b} - \vec{c}\end{aligned}\tag{I.9}$$

De acuerdo a (I.7) el volumen de la nueva celda será

$$V_c (\text{celda cúbica F}) = V_c (\text{celda trigonal}) \begin{vmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix}$$

o sea

$$V_c (\text{celda cúbica F}) = 4 V_c (\text{celda trigonal})$$

Es decir que el sistema trigonal con $\alpha = \beta = \gamma = 60^\circ$ se puede describir tanto por una celda primitiva trigonal de tipo P como por una celda cúbica F conteniendo 4 nodos. En general se prefiere esta última representación, puesto que es mucho más fácil visualizar un cubo en el espacio que un rombohedro y además, quedan puestas en evidencia mucho más claramente las simetrías del sistema.

I.2.5 Planos Reticulares - Índices de Weiss y de Miller

La red tridimensional presenta un elemento nuevo respecto de las redes planas: el plano reticular. Todo plano determinado por tres nodos no alineados, por dos filas reticulares paralelas o por dos filas reticulares que se cortan en un punto, es un plano reticular. Es fácil ver que los nodos pertenecientes a los planos reticulares de una red tridimensional, constituyen una red plana.

En una red tridimensional infinita, existen infinitos planos reticulares. Dado un plano reticular cualquiera, existe una familia de infinitos planos, regularmente espaciados, que son paralelos al mismo. La distancia entre dos planos vecinos se denomina espaciado. Igual que en el caso de las filas reticulares, una familia dada de planos contiene todos los nodos de la red y en particular, el nodo origen. Por lo tanto, el espaciado entre planos reticulares puede considerarse también como la distancia desde el origen al plano de la familia que se encuentra más próximo al mismo.

Un conjunto de planos de distintas familias que se cortan según una misma fila reticular, define una zona. Si la fila reticular tiene índices $\{u, v, w\}$ ésta constituye el eje de zona $\{u, v, w\}$ o más brevemente, la zona $\{u, v, w\}$.

En cuanto a la forma de notación para los planos reticulares, existen varias posibilidades. La orientación de una familia de planos queda perfectamente determinada si se especifican los ángulos α, β y γ que forman la normal a los mismos con los tres vectores base $\vec{a}$, $\vec{b}$, y $\vec{c}$. Pero esta notación hace muy difícil la identificación de la familia de planos correspondiente y su uso no resulta práctico. Es más fácil visualizar en cambio la orientación de un plano dado si se conocen las intersecciones del mismo con los tres ejes de referencia, medidas en fracciones o múltiplos de las longitudes a , b y c . Así por ejemplo, en la Fig. I.5 a) el plano ABC puede designarse por el conjunto de números 121 y el plano DEF por 243.

Este conjunto de tres números, que se conocen como índices de Weiss, podrían utilizarse para caracterizar los distintos planos reticulares. Sin embargo, su uso resulta incómodo cuando es necesario referirse a planos paralelos a los ejes. Mucho más prácticos resultan entonces los llamados índices de Miller. En general, si un plano cualquiera de una familia (conjunto de planos paralelos entre sí) corta a los ejes de referencia en los puntos u , v , w , todo el conjunto de planos queda identificado por tres números enteros definidos por

$$h = \frac{M}{u} \quad k = \frac{M}{v} \quad l = \frac{M}{w} \quad (\text{I.10})$$

donde M es el mínimo común múltiplo de los índices de Weiss u , v , w . Los índices (h, k, l) representan pues, un plano que corta a los ejes de referencia en los puntos

$$\frac{a}{h}, \quad \frac{b}{k}, \quad \frac{c}{l}$$

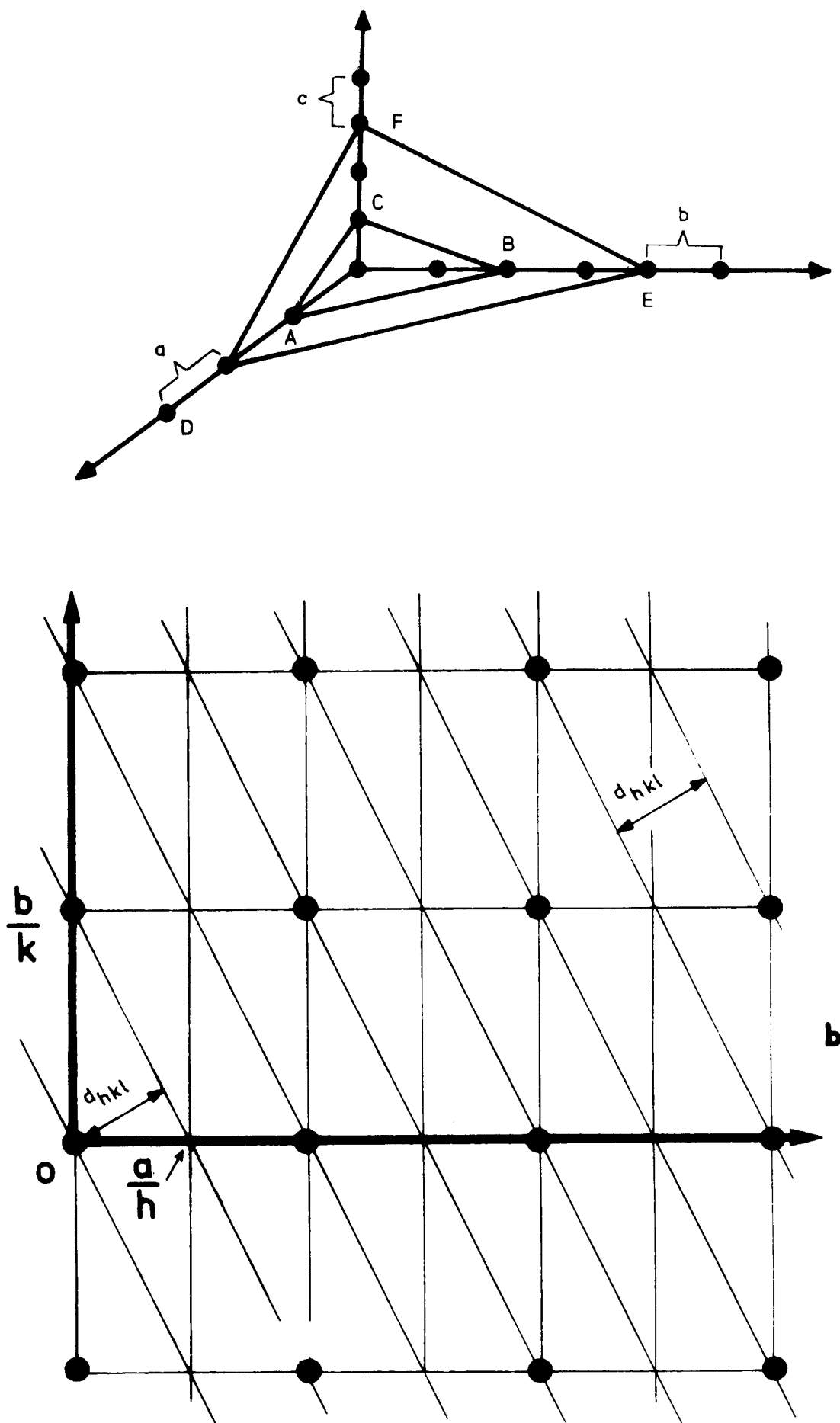


Fig. I.5. a) Planos reticulares en una red tridimensional de puntos ABC; plano de índices de Weiss (121), o índices de Miller (212). DEF; índices de Weiss (243) o índices de Miller (643). b) Familia de planos de índices de Miller (210), de espaciado reticular d_{hkl} . Esta es también la distancia del origen al plano más cercano. Se indican también los planos de índices de Miller (200) y (010).

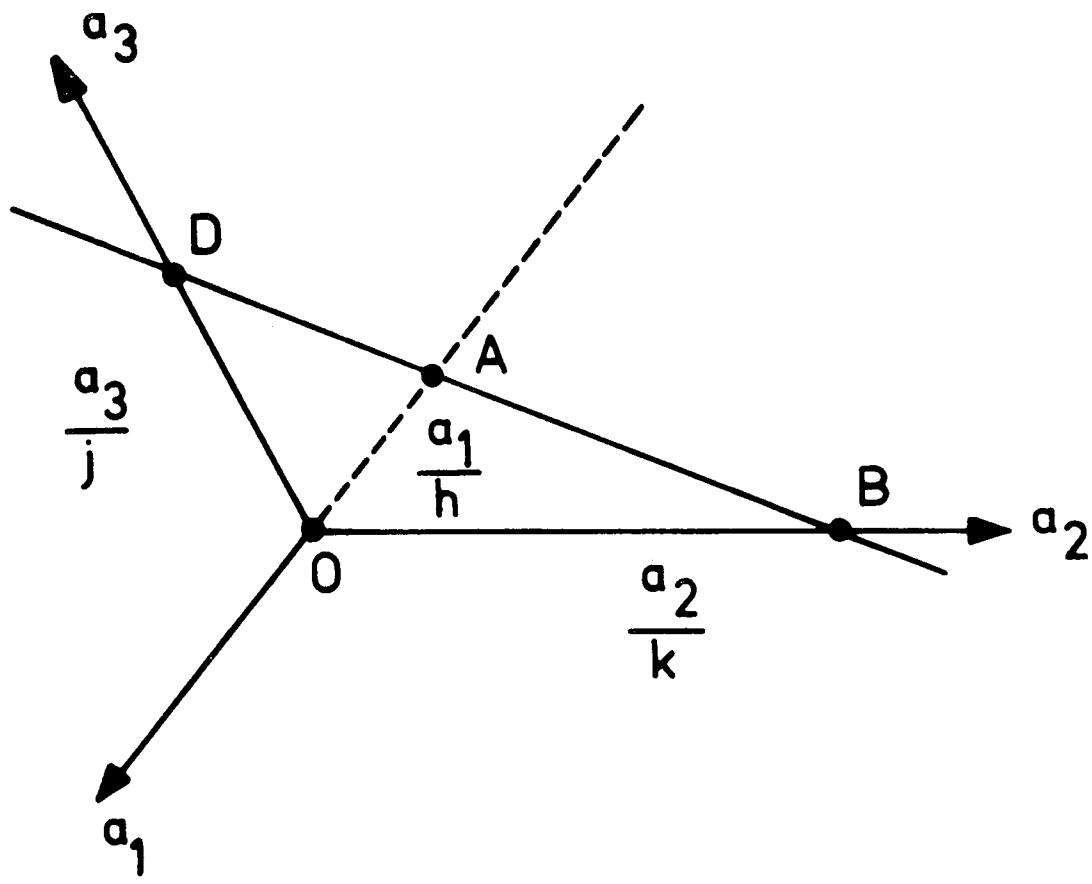


Fig.I.6. Relación entre los índices de Miller-Bravais (hkjl) en la red hexagonal descrita por cuatro vectores base $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ y $\vec{c}$. Se puede demostrar que $h + k = -j$.

y todos aquellos paralelos a éste, separados entre sí por una longitud d_{hkl} igual a la distancia entre el plano (hkl) y el origen. Por ejemplo, los índices de Miller del plano ABC de la Fig. I.5 (a) son

$$h = 2 \quad k = 1 \quad l = 2$$

y toda la familia se designa con (212). En la Fig. I.5 (b) se ha representado la familia de planos (210). Si un plano reticular corta a algún eje de referencia en la dirección negativa, el signo (-) se indica con una barra arriba del índice correspondiente, p.ej. ($1\bar{1}0$).

Un caso particular en la notación de Miller lo constituye el sistema hexagonal, Fig. I.3, en el cual los planos reticulares se suelen designar entre otras posibilidades (ejercicio E.I.12) por cuatro índices (h k j l), llamados índices de Miller-Bravais. Estos corresponden a las inversas de las intersecciones del plano considerado con los tres ejes $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ y $\vec{a}_3$ que forman ángulos de 120° entre sí en el plano basal de la celda y con el eje $\vec{c}$ normal a dicho plano, Fig. I.6.

Los tres primeros índices h, k, j están ligados por una relación que se puede deducir fácilmente a partir de la Fig. I.6. Es evidente la relación

$$\text{area } \triangle OBD = \text{área } \triangle OAD + \text{área } \triangle OAB$$

Estas áreas pueden expresarse en función de los productos vectoriales (ver Apéndice A).

$$\frac{\vec{OB} \times \vec{OD}}{2} = \frac{\vec{OA} \times \vec{OD}}{2} + \frac{\vec{OA} \times \vec{OB}}{2}$$

es decir

$$\frac{a_2}{k} \cdot \frac{a_3}{j} \sin 120^\circ = \frac{a_1}{(-h)} \cdot \frac{a_3}{j} \sin 60^\circ + \frac{a_1}{(-h)} \cdot \frac{a_2}{k} \sin 60^\circ$$

Como

$$a_1 = a_2 = a_3$$

resulta finalmente

$$h + k + j = 0 \quad (I.11)$$

Dada esta relación se suele utilizar una notación de Miller reducida para designar planos en el sistema hexagonal, obviando el tercer índice

$$(hk \cdot l)$$

sobreentendiéndose que

$$j = -h - k$$

Pero la notación completa de Miller Bravais con los cuatro índices es más clara, puesto que pone de manifiesto las simetrías propias del sistema hexagonal. Así, por ejemplo, los planos $(1\bar{1}00)$ y $(10\bar{1}0)$ tienen la misma geometría y se dice que son cristalográficamente equivalentes (ver Capítulo II). En la notación reducida los mismos planos se designarían como $(1\bar{1}0)$ y (100) respectivamente, y no es inmediato que estos índices correspondan al mismo tipo de planos reticulares. Otros ejemplos serán analizados en los ejercicios de aplicación (E.I.11 y E.I.12) así como las notaciones para determinar direcciones en el sistema hexagonal.

I.3 LA RED RECÍPROCA

La representación de planos reticulares en una red tridimensional suele ser engorrosa. Bravais sugirió la idea de representar familias de planos reticulares por medio de otra red obtenida de la original mediante una transformación adecuada. En esta nueva red, llamada recíproca, cada nodo corresponde a una familia de planos (hkl) de la red original o directa. La red recíproca, introducida inicialmente como un simple artificio geométrico, tiene una enorme importancia en el estudio de los sólidos y en particular, será utilizada continuamente al considerarse la difracción de rayos X.

Supongamos una red tridimensional construida en base a la terna de vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ que definen una celda de volumen $V_c = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}$ (Apéndice A). La red recíproca se construye en base a una nueva terna $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$ y $\vec{c}^*$ definida por

$$\vec{a}^* = \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{V_c} \quad \vec{b}^* = \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{V_c} \quad \vec{c}^* = \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{V_c} \quad (\text{I.12})$$

Los módulos de estos nuevos vectores están dados en unidades de longitud recíproca. Por ejemplo, si $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ están medidos en Å, los vectores base de la red recíproca resultan medidos en Å⁻¹. A partir de la definición de $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$ y $\vec{c}^*$ y teniendo en cuenta las propiedades del producto entre vectores, se obtienen las siguientes relaciones

$$\begin{aligned} \vec{a}^* \cdot \vec{a} &= \vec{b}^* \cdot \vec{b} = \vec{c}^* \cdot \vec{c} = 1 \\ \vec{a}^* \cdot \vec{b} &= \vec{a}^* \cdot \vec{c} = \vec{b}^* \cdot \vec{a} = \vec{b}^* \cdot \vec{c} = \vec{c}^* \cdot \vec{a} = \vec{c}^* \cdot \vec{b} = 0 \end{aligned} \quad (\text{I.13})$$

que suelen tomarse también como definición de los vectores base de la red recíproca. A partir de ellas pueden deducirse fácilmente las expresiones dadas por (I.12).

Si la red directa es tal que los vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ son ortogonales entre sí, caso de la red cúbica p.ej., se tiene que

$$\begin{aligned} |\vec{b} \times \vec{c}| &= bc & |\vec{a} \times \vec{c}| &= ac & |\vec{a} \times \vec{b}| &= ab \\ V_c &= (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = abc \end{aligned}$$

y por lo tanto

$$|\vec{a}^*| = \frac{1}{a}, |\vec{b}^*| = \frac{1}{b}, |\vec{c}^*| = \frac{1}{c}, V_c^* = a^* b^* c^* = \frac{1}{V_c} \quad (\text{I.14})$$

Estas relaciones, que son inmediatas cuando los vectores base de la red directa son ortogonales entre sí, tienen sin embargo validez general y son consecuencia directa de las propiedades del producto vectorial y escalar de vectores (Apéndice A). De la misma manera pueden obtenerse los ángulos α^* , β^* y γ^* entre los vectores $\vec{a}^*$ y $\vec{b}^*$, $\vec{b}^*$ y $\vec{c}^*$, $\vec{c}^*$ y $\vec{a}^*$, respectivamente, en función de los ángulos correspondientes α , β y γ , entre los vectores base de la red directa.

I.3.1 Propiedades de la Red Recíproca

Comenzaremos por demostrar la propiedad fundamental de la red recíproca.

A toda familia de planos (hkl) de la red directa, le corresponde un nodo en la red recíproca definido por el extremo del vector

$$\vec{r}_{hkl}^* = h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*$$

cuya dirección es normal a los planos (hkl) y su módulo igual a la recíproca del espaciado d_{hkl} entre dichos planos.

Consideremos el plano de la familia (hkl) que pasa más próximo al origen O. Por definición de índices de Miller, este plano corta a los tres ejes de referencia en los puntos

$$\frac{a}{h}, \quad \frac{b}{k}, \quad \frac{c}{l}$$

respectivamente. Para demostrar que el vector $\vec{r}_{hkl}^*$ es normal al plano (hkl) basta con demostrar que es normal a dos vectores no paralelos de dicho plano. En la Fig. I.7 se puede ver que dos vectores contenidos en el plano (hkl) son

$$\vec{\frac{b}{k}} - \vec{\frac{a}{h}} \quad \text{y} \quad \vec{\frac{c}{l}} - \vec{\frac{b}{k}}$$

Calculando el producto escalar de $\vec{r}_{hkl}^*$ con el primero de ellos

$$\vec{r}_{hkl}^* \cdot \left(\vec{\frac{b}{k}} - \vec{\frac{a}{h}} \right) = (h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*) \cdot \left(\vec{\frac{b}{k}} - \vec{\frac{a}{h}} \right)$$

según las expresiones (I.13) resulta

$$\vec{r}_{hkl}^* \cdot \left(\vec{\frac{b}{k}} - \vec{\frac{a}{h}} \right) = 1 - 1 = 0$$

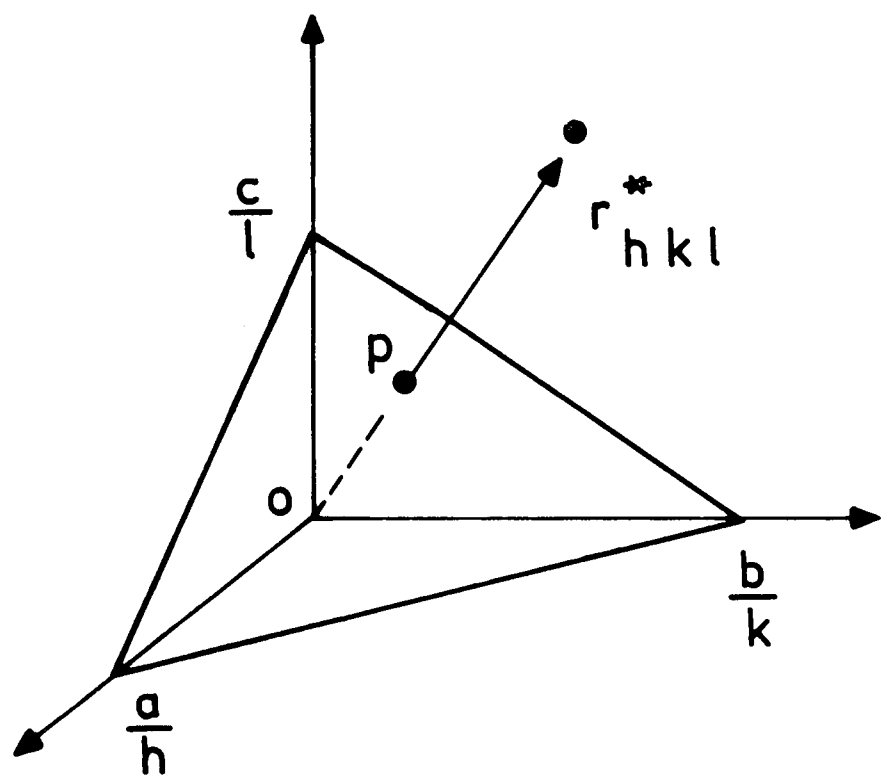


Fig. I.7. Todo vector $\vec{r}_{hkl}^*$ en la red recíproca es perpendicular a los planos de índices de Miller (hkl) y su módulo vale $|\vec{r}_{hkl}^*| = \frac{1}{d_{hkl}}$

Análogamente se demuestra que también es nulo el producto

$$\vec{r}_{hkl}^* \cdot \left(\frac{\vec{c}}{1} - \frac{\vec{b}}{k} \right)$$

y por lo tanto el vector recíproco $\vec{r}_{hkl}^*$ es normal al plano (hkl).

Por otro lado, notemos que el punto P, Fig. I.7 es la proyección del origen O sobre el plano (hkl). Luego, el vector OP tiene la misma dirección de $\vec{r}_{hkl}^*$ y su módulo es el espaciado d_{hkl} . Calculando el producto escalar

$$\vec{r}_{hkl}^* \cdot \frac{\vec{a}}{h}$$

y teniendo en cuenta que OP es la proyección de $\frac{\vec{a}}{h}$ sobre $\vec{r}_{hkl}^*$

$$\vec{r}_{hkl}^* \cdot \frac{\vec{a}}{h} = \left| \vec{r}_{hkl}^* \right| \cdot \left| \overrightarrow{OP} \right| = \left| \vec{r}_{hkl}^* \right| d_{hkl}$$

Pero por otro lado

$$\vec{r}_{hkl}^* \cdot \frac{\vec{a}}{h} = (h \vec{a}^* + k \vec{b} + l \vec{c}^*) \cdot \frac{\vec{a}}{h} = 1$$

con lo que resulta finalmente

$$\left| \vec{r}_{hkl}^* \right| = \frac{1}{d_{hkl}} \quad (\text{I.15})$$

De la propiedad fundamental reexpresada por (I.15) se deduce también que si el nodo (hkl) de la red recíproca, perteneciente a la fila reticular definida por el vector $\vec{r}_{hkl}^*$, con h, k, l primos entre sí, representa una familia de planos reticulares de espaciado d_{hkl} , el nodo siguiente (2h, 2k, 2l) representa una familia de planos de espaciado mitad. Fig. I.8.

En efecto, el nodo 2h, 2k, 2l está definido por el extremo del vector

$$\vec{r}_{2h, 2k, 2l}^* = 2 \vec{r}_{hkl}^*$$

De acuerdo a (I.15) su módulo es

$$\left| \vec{r}_{2h, 2k, 2l}^* \right| = 2 \left| \vec{r}_{hkl}^* \right| = \frac{2}{d_{hkl}} = \frac{1}{\frac{d_{hkl}}{2}} \quad (\text{I.16})$$

y puede considerarse por lo tanto como un vector que representa en el espacio recíproco a una familia de planos de espaciado $d_{hkl}/2$. Esta nueva familia de planos reticulares tiene características singulares, puesto que solamente uno de cada dos planos

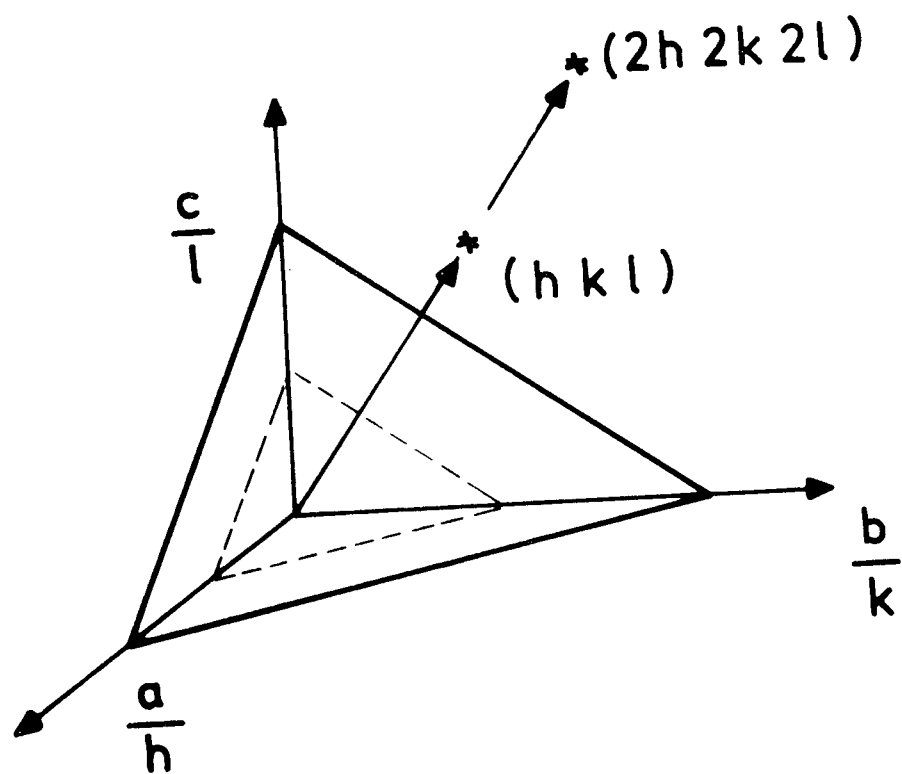


Fig.I. 8. Un vector $\vec{r}^*_{2h2k2l} = 2\vec{r}^*_{hkl}$ de la red recíproca corresponde a una familia de planos de la red directa de espaciado $(d_{hkl}/2)$.

de la misma tiene existencia real, tal como puede verse en la Fig. I.8. De la misma manera, un nodo de la red recíproca (nh , nk , nl) representa una familia de planos de índices (hkl) pero cuyo espaciado es d_{hkl}/n . Por el momento consideraremos esta propiedad como una simple consecuencia de la definición de red recíproca, pero más adelante, al tratar la teoría de la difracción de rayos X por una sustancia cristalina, veremos la utilidad de esta formulación.

Otra propiedad de la red recíproca es la siguiente:

La red recíproca de la red recíproca
es la red original o directa.

En efecto, las relaciones (I.12) o (I.13) que se pueden usar indistintamente para definir la red recíproca de una red dada, son simétricas. La propiedad fundamental expresada por (I.15) se puede aplicar entonces a la red recíproca y por lo tanto a cada familia (uvw) de planos reticulares de la misma le corresponde un nodo en la red directa, ver ejercicios E.I. 24 y E.I. 25.

Otra consecuencia de la propiedad fundamental I.15 es que cuanto mayores son los índices (hkl) de una familia de planos, tanto mayor es $\vec{r}_{hkl}^*$ y por lo tanto menor el espaciado d_{hkl} . Inversamente, cuanto menores son los índices, mayor es el espaciado entre los planos correspondientes. Dado que el número de nodos es constante, cuanto menores son los índices, mayor es el número de nodos que contiene cada uno de los planos de la familia. Si suponemos por un momento que cada nodo contiene un átomo, formando de esta manera un cristal (ver capítulo II) los planos de pequeños índices son los que están más espaciados entre sí. Las fuerzas atómicas de cohesión son por lo tanto menores entre estos planos y es lógico pensar que el cristal se pueda "romper" más fácilmente según dichos planos. Este fenómeno, conocido desde hace mucho tiempo en una gran variedad de cristales naturales, se conoce con el nombre de "clivaje". Estos cristales suelen quedar limitados entonces por caras que corresponden a planos atómicos de pequeños índices, que son los que definen la forma macroscópica del cuerpo. Por esta razón se suele denominar a los planos de pequeños índices (hkl) como los más "importantes". En los metales, en cambio, este fenómeno se hace sentir en el curso de la deformación plástica: el deslizamiento durante la deformación se produce sobre los planos más espaciados entre sí y por lo tanto de mayor densidad atómica. Por ejemplo, en el aluminio los planos que deslizan preferencialmente son los índices de Miller (111).

I.3.2 Utilidad del Formalismo de la Red Recíproca

La red recíproca definida por los vectores $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$, $\vec{c}^*$, fue obtenida a partir de una celda construida en base a una terna $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ de la red directa. Si elegimos otra celda para describir la red directa, correspondientemente cambia la celda y los vectores de referencia que definen la red recíproca según (I.12). Pero la red descrita es la misma dada la correspondencia entre planos de una red y nodos de la otra. Es evidente que esta correspondencia debe ser independiente de la celda elegida para describir la red directa.

Al efectuar un cambio de celda, solamente cambian los índices de los nodos y las filas reticulares y los índices de Miller de las distintas familias de planos. El formalismo de la red recíproca nos permite hallar rápidamente los índices referidos a la nueva celda. A título de ejemplo, veremos como se transforman los índices de Miller de una familia de planos. En efecto, sean $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ los vectores sobre los cuales está construída la celda original y sean

$$\begin{aligned}\vec{A} &= u \vec{a} + v \vec{b} + w \vec{c} \\ \vec{B} &= u' \vec{a} + v' \vec{b} + w' \vec{c} \\ \vec{C} &= u'' \vec{a} + v'' \vec{b} + w'' \vec{c}\end{aligned}\tag{I.17}$$

los vectores que definen la nueva celda. Queremos hallar ahora los nuevos índices de Miller (HKL) de una familia de planos reticulares referidos a los vectores $\vec{A}$, $\vec{B}$ y $\vec{C}$, en función de los índices (hkl) de la misma familia referidos a la terna primitiva $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$. Como la distancia entre planos reticulares es siempre la misma, independiente del sistema de referencia elegido, se verifica que

$$H \vec{A}^* + K \vec{B}^* + L \vec{C}^* = h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*$$

Multiplicando escalarmente miembro a miembro por $\vec{A}^*$, $\vec{B}^*$ y $\vec{C}^*$ sucesivamente y teniendo en cuenta las relaciones (I.13) se obtiene finalmente

$$\begin{aligned}H &= h u + k v + l w \\ K &= h u' + k v' + l w' \\ L &= h u'' + k v'' + l w''\end{aligned}\tag{I.18}$$

que son las expresiones buscadas. En los ejercicios se verán otros ejemplos de aplicación del formalismo de la red recíproca.

EJERCICIOS DE APLICACION

- E.I.1 Cuáles de las cinco celdas dibujadas en la Fig. I.1 son primitivas. Cuántos nodos contienen las que no son primitivas. En cada caso, cuál es la relación entre el número de nodos y el valor del determinante dado por la ec. I.4.
- E.I.2 Elegir tres celdas primitivas en la red plana de la Fig. I.1 y demostrar que tienen igual área. En la misma red, elegir dos celdas no primitivas y determinar sus áreas. Cuál es la relación entre el área de cada una de esas dos celdas y el número de nodos que contienen.
- E.I.3 Demostrar que el sistema reticular oblicuo centrado, que no está incluido en los cinco tipos de redes planas de la Tabla I, se puede en realidad reducir a un sistema oblicuo simple.
- E.I.4 Por qué el conjunto de puntos de la Fig. I.9, supuesto infinito, no satisface a la definición de red geométrica dada en I.2. Es posible describir este conjunto mediante la repetición sistemática de alguna celda? En caso afirmativo, cuál podría ser ésta?
- E.I.5 Demostrar por qué no aparece la celda tetragonal de caras centradas en las 14 redes de Bravais. Por qué la estructura hexagonal compacta no es una red de Bravais.
- E.I.6 Demostrar que si u y v son enteros no primos entre sí, la dirección definida por

$$\vec{r}_{u,v} = u \vec{a} + v \vec{b}$$

es la misma que la definida por

$$\vec{r}_{u',v'} = \frac{u}{n} \vec{a} + \frac{v}{n} \vec{b}$$

donde n es el máximo común divisor de u y v .

Basta demostrar que los dos vectores son paralelos. En efecto resulta que

$$n \vec{r}_{u',v'} = \vec{r}_{u,v}$$

Por lo tanto, una dirección se define por vectores del tipo $\vec{r}_{u,v}$, con u y v primos entre sí.

- E.I.7 La celda elemental en una red tridimensional está dada por una terna de vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$, que forman entre sí ángulos α , β y γ .

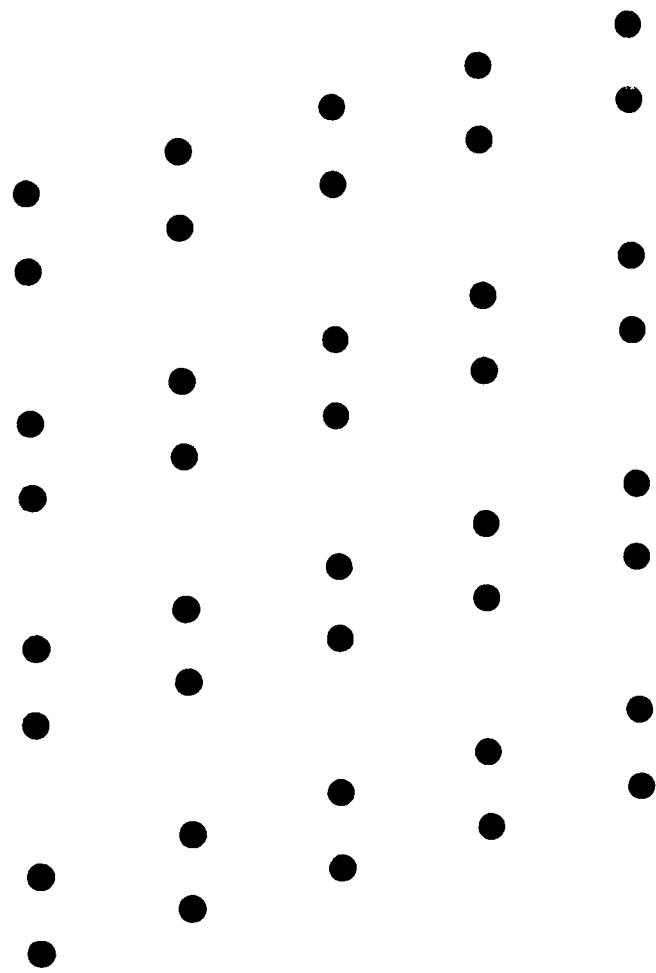


Fig.I.9. Conjunto de puntos distribuidos periódicamente pero que no constituye una red puntual, de acuerdo a la definición.

Dibujar en figuras separadas

las direcciones $\{001\} \{111\} \{012\} \{110\} \{101\} \{122\}$
 los planos $(001) (111) (012) (110) (101) (122)$

para cada uno de los casos siguientes

$$\begin{array}{ll} a = b = c & \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \\ a = b \neq c & \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ \\ a = b = c & \alpha \neq \beta \neq \gamma \end{array}$$

E.I.8 Dibujar en una red cúbica los planos caracterizados por los siguientes índices de Miller

$$(100)(001) \quad (110)(101) \quad (111)(1\bar{1}\bar{1})$$

E.I.9 En una celda cúbica indicar gráficamente las direcciones $[01\bar{2}]$ y $[\bar{1}\bar{1}2]$ que pasan por el punto $(0, \frac{1}{2}, 0)$.

E.I.10 Demostrar que si un plano reticular está dado por los índices de Miller (hkl) , a todo plano paralelo al mismo le corresponden los mismos índices. Por definición de índices de Miller, el plano de la familia (hkl) que pasa más cerca del origen O corta a los tres ejes de referencia en los puntos a/h , b/k y c/l (ejercicio anterior). Todo plano paralelo al mismo, Fig. I.10, cortará a los tres ejes en segmentos que son múltiplos de los segmentos anteriores, es decir

$$m \frac{a}{h}, \quad m \frac{b}{k}, \quad m \frac{c}{l}$$

Los índices de Miller de este plano son, por definición, las inversas de estos segmentos

$$\frac{h}{m} \quad \frac{k}{m} \quad \frac{l}{m}$$

multiplicadas por el mínimo común múltiplo de los mismos, que en este caso es m . Luego, los índices de Miller de todo plano paralelo al designado por (hkl) son también (hkl) .

E.I.11 Direcciones en la Red Hexagonal.

Notación de tres ejes. Tomando como referencia los ejes $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ y $\vec{c}$ que definen la celda monoclinica de la Fig. II.3, una dirección cualquiera de la red hexagonal se expresa como

$$\vec{r} = U \vec{a}_1 + V \vec{a}_2 + W \vec{c} \equiv \{U, V, W\}$$

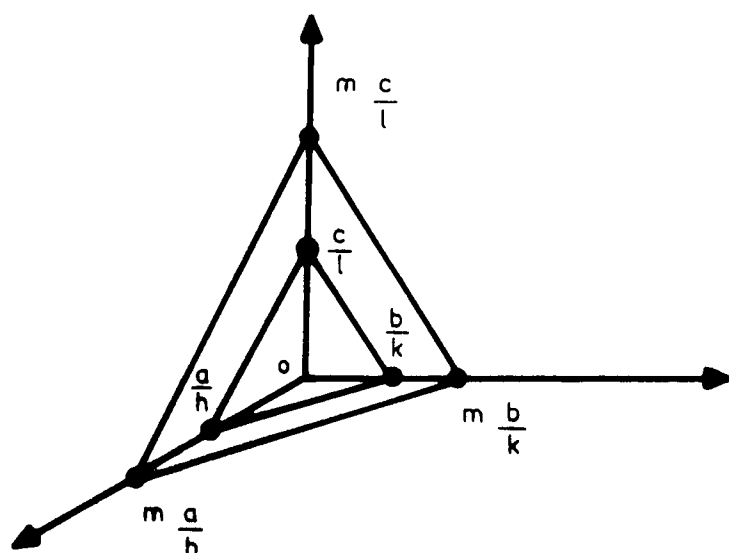


Fig.I.10. Esquema para demostrar que si un plano reticular está dado por los índices de Miller (hkl) a todo plano paralelo al mismo le corresponden los mismos índices.

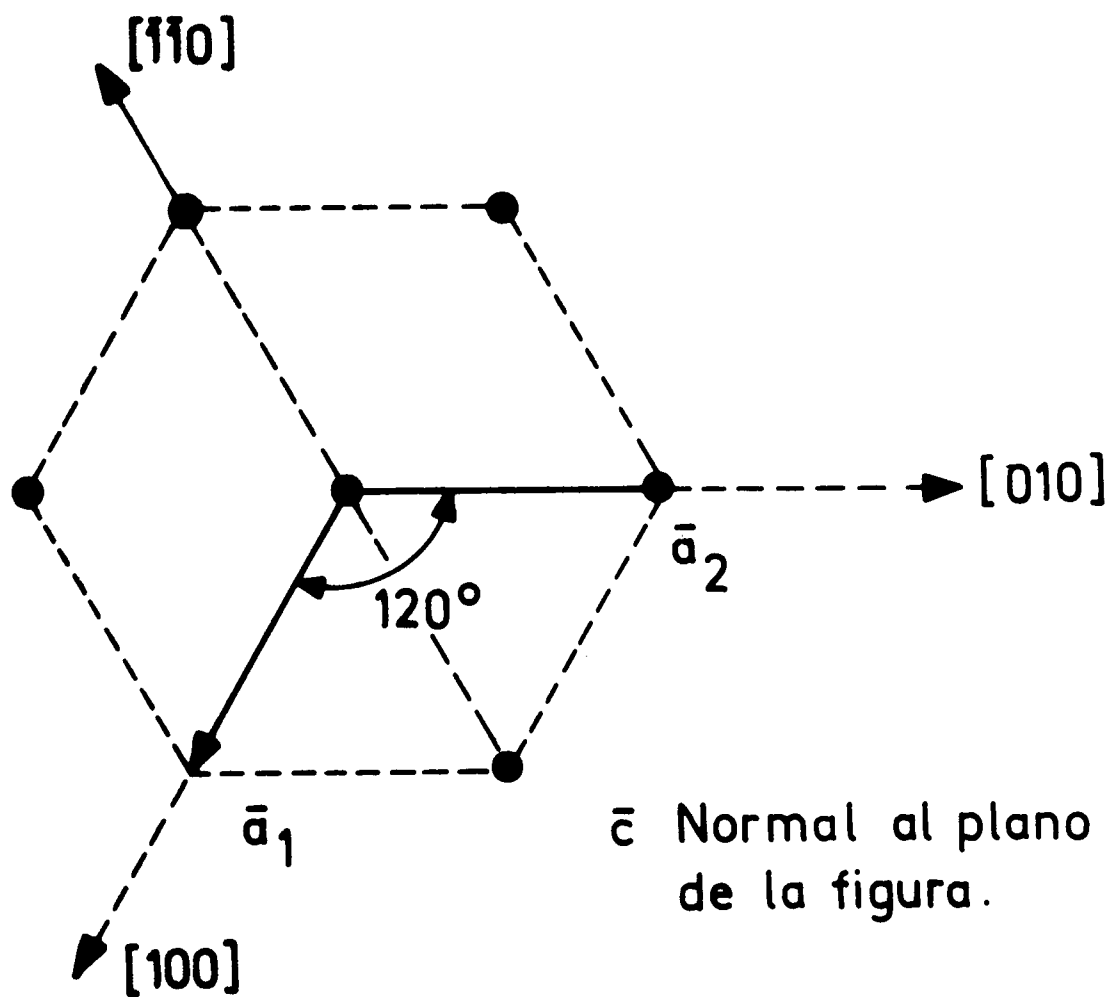


Fig.I.11. Direcciones en la red hexagonal descrita por tres ejes $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ y $\vec{c}$. Este último es normal al plano de la figura.

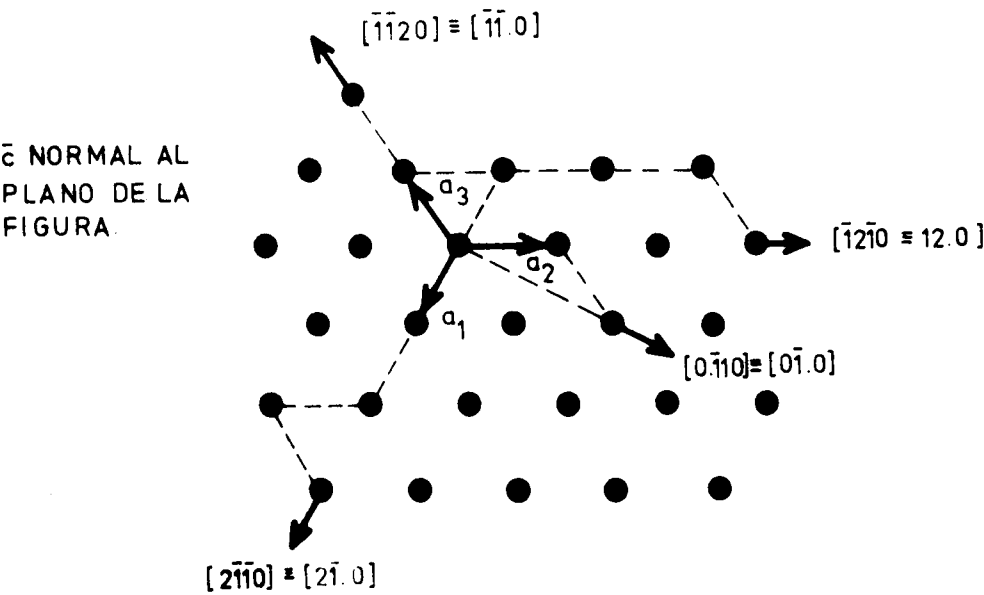


Fig.I.12. Direcciones en la red hexagonal descripta por cuatro ejes $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ y $\vec{c}$.

Pero esta notación presenta el inconveniente de que direcciones cristalográficamente equivalentes pueden no tener la misma forma algebraica. Por ejemplo, las tres direcciones compactas en el plano basal se designan, respectivamente $\{100\}$, $\{010\}$ y $\{\bar{1}\bar{1}0\}$, Fig. I.11. Este inconveniente se puede obviar si se introduce un cuarto eje de referencia $\vec{a}_3$ sobre el plano basal, tal que $\vec{a}_3 = -(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$, como ya se ha hecho en la sección I.2.4, Fig. I.6 al definir los índices de Miller-Bravais para una familia de planos. Toda dirección se representa entonces por un vector

$$\vec{r} = u \vec{a}_1 + v \vec{a}_2 + t \vec{a}_3 + w \vec{c} \equiv [u, v, t, w]$$

con

$$t = -(u + v)$$

Los índices u, v, t, w de una dirección son entonces iguales al número de veces que se ha tenido que trasladar cada uno de los vectores $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ y $\vec{c}$, respectivamente, para formar un vector coincidente con la dirección dada, tomando siempre la precaución de que el número de traslaciones del vector $\vec{a}_3$ sea igual y de signo contrario, al número de veces que se han trasladado $\vec{a}_1$ y $\vec{a}_2$. En la Fig. I.12 se muestran algunos ejemplos de direcciones sobre el plano basal. De esta manera, a direcciones cristalográficamente equivalentes le corresponden índices que son permutaciones algebraicas de un mismo conjunto. Por ejemplo, las tres direcciones compactas en el plano basal en esta notación, pertenecen a la misma forma de índices $\langle 11\bar{2}0 \rangle$, Fig. I.12. En la misma figura se indican también las notaciones abreviadas en las cuales se ha eliminado explícitamente el índice superfluo t . Pero esta notación de tres índices $[u, v, w]$ siempre está referida a un sistema de cuatro ejes y no debe confundirse con la notación $[U, V, W]$ correspondiente al sistema de tres ejes definidos al comienzo. Los dos sistemas de índices por supuesto guardan una relación entre sí que se obtiene reemplazando t y $\vec{a}_3$ por sus expresiones respectivas $[-(u + v)]$ y $[-(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)]$ con lo cual resulta

$$U = 2u + v \quad V = u + 2v \quad W = w$$

También se suele utilizar una variante de la celda ortorrómbica, llamada celda orto hexagonal, centrada en las bases, para describir la red hexagonal. Los vectores $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ que definen esta celda son

$$\vec{a} = \vec{a}_1, \vec{b} = \vec{a}_1 + 2\vec{a}_2, \vec{c}$$

y una dirección cualquiera en el espacio se describe por un vector

$$\vec{r} = p \vec{a} + q \vec{b} + r \vec{c} \equiv [p, q, r]$$

Esta notación presenta la misma desventaja de la correspondiente a la celda monoclinica definida por los vectores $\vec{a}_1, \vec{a}_2$ y $\vec{c}$. Pero dado que los

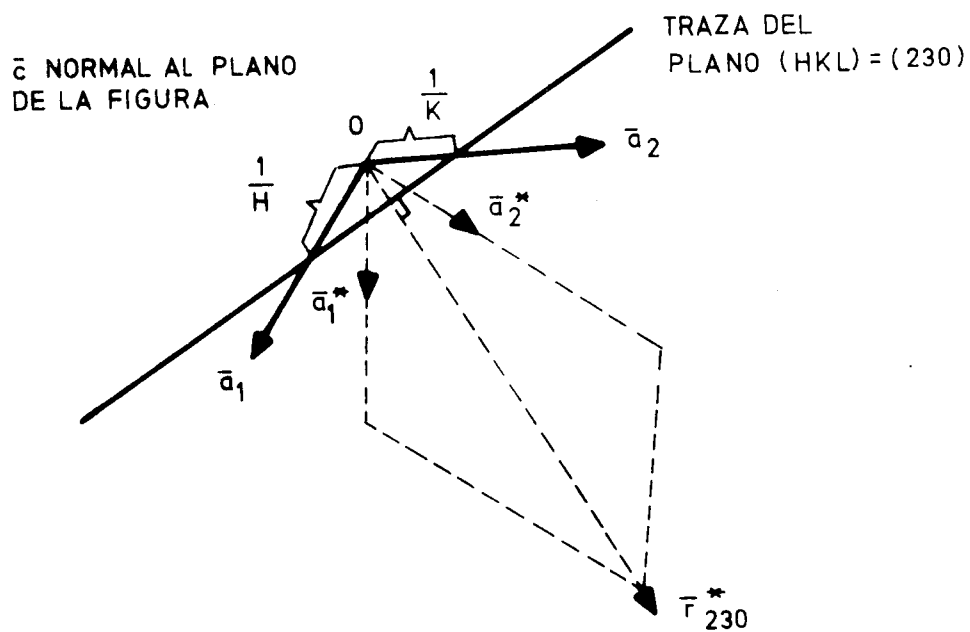


Fig.I.13. Orientación de los vectores en la red recíproca respecto de los vectores de la red directa para el caso hexagonal. En la notación en tres ejes todo vector $\bar{r}_{HKL}^*$ es perpendicular a la familia de planos de índices de Miller (H.K.L).

nuevos vectores base $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ son ortogonales entre sí, las expresiones cristalográficas deducidas en base a esta celda toman una forma muy simple (ver tabla del artículo de Otte y Crocker). La relación entre los índices $\{p, q, r\}$ y $\{U, V, W\}$ está dada por

$$\{U, V, W\} = \{p + q, 2q, r\}$$

E.I.12

Planos en la Red Hexagonal

Se ha visto en la sección I.2.4 la notación de cuatro índices (hkil) llamados de Miller y Bravais, para designar las distintas familias de planos reticulares de la red hexagonal, tomando como referencia cuatro vectores $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ y $\vec{c}$. Fig. I.6. También se dedujo la relación existente entre los índices h, k, i que daba origen a la notación reducida (hk. l). Si se utiliza la celda monoclinica definida por los vectores $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ y $\vec{c}$, Fig. II.3 (b), sección II.2, se puede ver fácilmente que los índices de Miller (HKL) de una familia de planos son idénticos a los índices correspondientes en el sistema de cuatro ejes pero en su notación reducida, es decir

$$(H, K, L) = (h, k, . l)$$

Al igual que en otras redes cristalinas, la normal $\vec{r}_{\text{HKL}}^*$ a una familia de planos (H,K,L) se expresa en términos de los vectores de la red recíproca $\vec{a}_1^*$, $\vec{a}_2^*$ y $\vec{c}^*$ obtenidos en el ejercicio E.I. 27, Fig. I.13

$$\vec{r}_{\text{HKL}}^* = H\vec{a}_1^* + K\vec{a}_2^* + L\vec{c}^*$$

En cambio en el sistema de cuatro ejes $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$, $\vec{c}$ no es posible encontrar un sistema de vectores base que definan su red recíproca satisfaciendo la definición dada en la sección I.3. Pero se puede definir un sistema de cuatro vectores

$$\vec{A}_1^* = \frac{2}{3a^2} \vec{a}_1, \vec{A}_2^* = \frac{2}{3a^2} \vec{a}_2, \vec{A}_3^* = \frac{2}{3a^2} \vec{a}_3, \vec{C}^* = \frac{1}{c} \vec{c}$$

que no son los recíprocos de $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3, \vec{c})$ pero que permite describir una familia de planos de índices de Miller-Bravais (hkil) por medio de un vector perpendicular a la misma, del tipo

$$\vec{r}_{\text{hkil}}^* = h\vec{A}_1^* + k\vec{A}_2^* + i\vec{A}_3^* + l\vec{C}^*$$

Finalmente en el sistema ortohexagonal a toda familia de planos le corresponde un conjunto de índices (e,f,g) que se relacionan con (H, K,L) mediante

$$(H, K, L) = (e, \frac{f-e}{2}, g)$$

Las expresiones para los espaciados cristalinos, ángulos entre dos

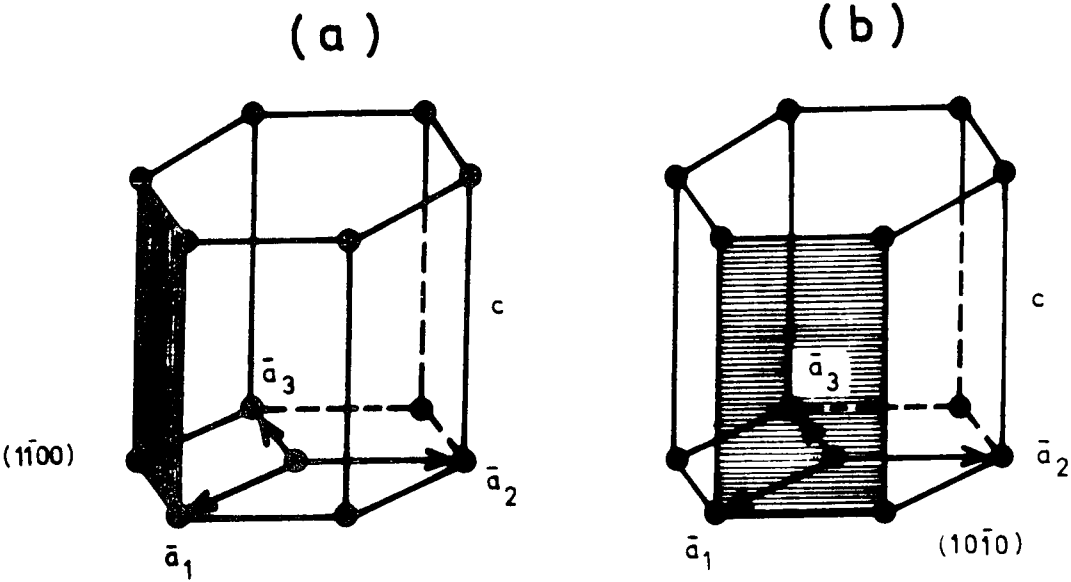
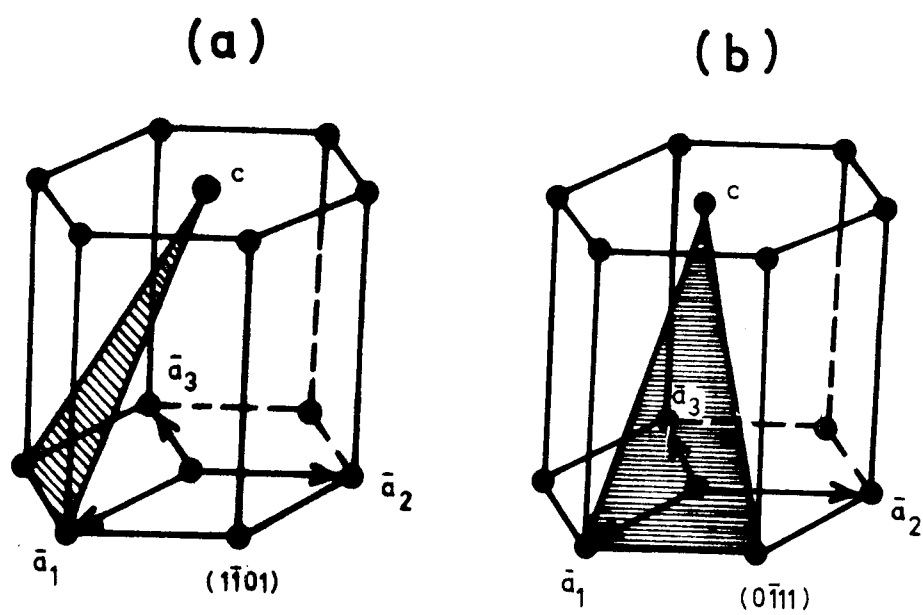


Fig.I.14. Planos prismáticos en la red hexagonal.



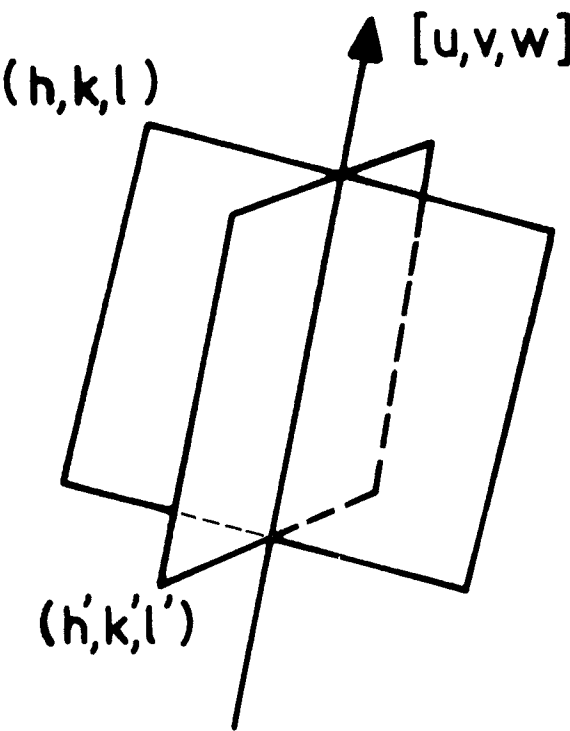


Fig.I.16. Zona $[u,v,w]$ definida por los planos (hkl) y $(h'k'l')$.

planos, ángulos entre dos direcciones, etc., en los distintos sistemas de referencia se resumen en el trabajo de Otte y Crocker así como en las Tablas Internacionales de Cristalografía.

- E.I.13 En la red hexagonal definida por los cuatro vectores base $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ y $\vec{c}$
- Dibujar sobre el plano basal
 - a) las direcciones $[10\bar{1}0]$, $[01\bar{1}0]$ y $[\bar{1}100]$
 - b) las intersecciones de los planos $(10\bar{1}0)$, $(01\bar{1}0)$ y $(\bar{1}100)$ con el plano del dibujo.
 - Cuál es la relación entre los planos y direcciones anteriores
 - Dibujar los planos $(10\bar{1}3)$, $(11\bar{2}0)$ y $(11\bar{2}1)$
- E.I.14 En la red hexagonal descrita por la celda monoclinica de la Fig. II.3 (b)
- Dibujar sobre el plano basal
 - a) las direcciones $[110]$, $[1\bar{1}0]$ y $[\bar{1}10]$
 - b) las intersecciones de los planos (110) , $(1\bar{1}0)$ y $(\bar{1}10)$ con el plano del dibujo
 - Cuál es ahora la relación entre planos y direcciones descritos con los mismos índices.
 - En la red recíproca definida por los vectores $\vec{a}_1^*$, $\vec{a}_2^*$ y $\vec{c}^*$ (ejercicio E.I. 27) dibujar en el plano basal los vectores recíprocos $[110]$, $[1\bar{1}0]$ y $[\bar{1}10]$. Cuál es la relación entre estos vectores y los planos (110) , $(1\bar{1}0)$ y $(\bar{1}10)$ de la red directa.
- E.I.15 Verificar que en el sistema hexagonal, los planos definidos por los índices de Miller-Bravais $(1\bar{1}00)$ $(10\bar{1}0)$ son equivalentes, es decir, contienen la misma disposición de nodos. Recordando que un índice de Miller 0 significa que el plano es paralelo al eje de referencia correspondiente, los planos $(1\bar{1}00)$ y $(10\bar{1}0)$ son los indicados en la figura. Es inmediato que ambos planos son equivalentes puesto que constituyen los lados del mismo prisma hexagonal. Por esta misma razón los planos reticulares de este tipo se suelen denominar prismáticos.
- E.I.16 Verificar que los planos $(1\bar{1}01)$ y $(0\bar{1}11)$ son también equivalentes. En efecto, éstas constituyen las caras de una pirámide hexagonal formada por el extremo del vector de referencia $\vec{c}$ y la base hexagonal de la celda. La disposición de nodos es la misma en ambos planos, que se suelen denominar piramidales.
- E.I.17 Cuál es la condición para que un plano de índices de Miller (hkl) pertenezca a una zona $\{u\ v\ w\}$?

Si el eje de la zona está definido por un **vector**

$$\vec{r}_{uvw} = u \vec{a} + v \vec{b} + w \vec{c}$$

y la normal al plano (hkl) es, en el espacio recíproco

$$\vec{r}_{hkl}^* = h \vec{a}^* + k \vec{b}^* + l \vec{c}^*$$

el plano estará contenido en la zona si se verifica que

$$\vec{r}_{hkl}^* \cdot \vec{r}_{uvw} = 0$$

o sea

$$h u + k v + l w = 0$$

que es la expresión buscada.

E.I.18

Cuál es la condición para que dos planos (hkl) y (h'k'l) pertenezcan a la misma zona {u v w}

De acuerdo a la expresión obtenida anteriormente deben verificarse simultáneamente

$$\begin{aligned} h u + k v + l w &= 0 \\ h' u + k' v + l' w &= 0 \end{aligned}$$

E.I.19

Cuáles son los índices {u v w} de la zona a la cual pertenecen dos planos no paralelos de índices (hkl) y (h'k'l). Si la dirección {u, v, w} está contenida en ambos planos, deben verificarse simultáneamente las dos ecuaciones del ejercicio anterior. Dividiendo ambas ecuaciones por w, éstas constituyen un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas. A partir de ellas se pueden obtener las relaciones

$$\frac{u}{w}, \frac{v}{w}$$

que son suficientes para identificar la dirección buscada $\left\{ \frac{u}{w}, \frac{v}{w}, 1 \right\}$

Multiplicando la primera ecuación por h'/l'w y la segunda por h/l'w se obtiene

$$\frac{h h' u}{l l' w} + \frac{k h' v}{l l' w} + \frac{h'}{l'} = 0$$

$$\frac{h h' u}{l l' w} + \frac{h k' v}{l l' w} + \frac{h}{l} = 0$$

Restando miembro a miembro y reordenando resulta

$$\frac{v}{w} = \frac{hl' - h'l}{kh' - k'h}$$

Análogamente se obtiene la expresión para u/w . Ambas se pueden expresar además como un cociente de determinantes

$$\frac{v}{w} = \frac{\begin{vmatrix} hh' \\ 11' \\ kk' \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} kk' \\ hh' \end{vmatrix}} \quad \frac{u}{w} = \frac{\begin{vmatrix} kk' \\ 11' \\ hh' \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} hh' \end{vmatrix}}$$

E.I.20 En una red cristalina los planos $(1\bar{1}1)$ y $(2\bar{2}1)$ definen una fila reticular. Otra fila está definida por los planos (121) y (101) . Determinar los índices del plano (hkl) que contiene ambas filas reticulares. En otras palabras se pide determinar el plano (hkl) que pertenece a las zonas determinadas por los dos pares de planos reticulares mencionados.

E.I.21 Demostrar que si $\{u, v, w\}$ es un eje de la red cristalina y (hkl) es un nodo de la red recíproca correspondiente, se tiene

$$hu + kv + lw = n$$

si el nodo (hkl) se halla sobre el n -ésimo plano (uvw) de la red recíproca contando a partir del origen.

E.I.22 Utilizando el formalismo de la red recíproca encontrar la expresión general del espaciado reticular d_{hkl} entre planos reticulares de una familia caracterizada por índices de Miller (hkl) en el sistema cúbico. Por definición de vector de la red recíproca

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{r}_{hkl}^*|}$$

siendo

$$\vec{r}_{hkl}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

y como $\vec{a}^*$, $\vec{b}^*$ y $\vec{c}^*$ son ortogonales entre sí, aplicando el teorema de Pitágoras en el espacio es

$$|\vec{r}_{hkl}^*|^2 = h^2 |\vec{a}^*|^2 + k^2 |\vec{b}^*|^2 + l^2 |\vec{c}^*|^2$$

como

$$|\vec{a}^*|^2 = |\vec{b}^*|^2 = |\vec{c}^*|^2 = \frac{1}{a^2}$$

resulta finalmente

$$d_{hkl} = \frac{1}{|\vec{r}_{hkl}^*|} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

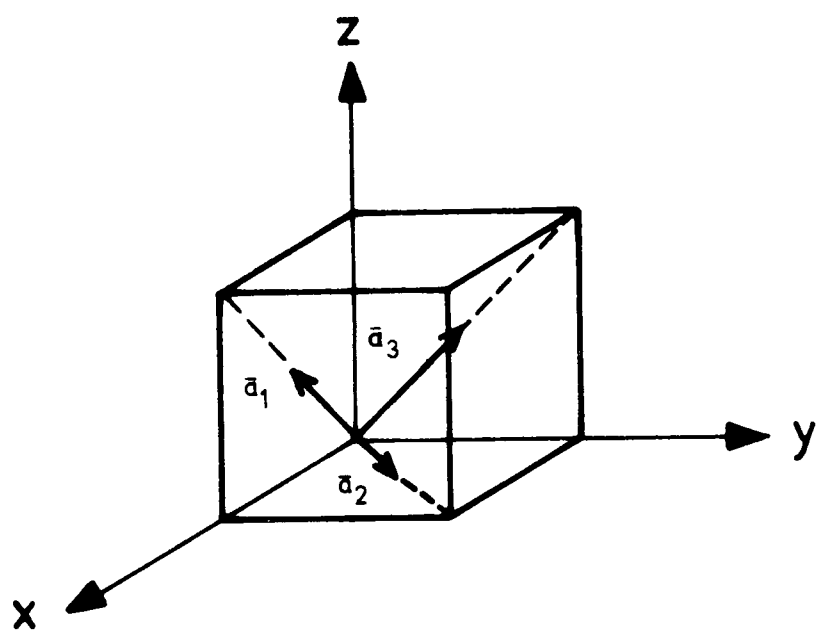


Fig.I.17. Esquema para determinar la red recíproca de una red cúbica de caras centradas .

E.I. 23

Utilizando el formalismo de la red recíproca demostrar que el espaciado interplanar correspondiente a la familia de planos de índices de Miller (hkl) está dado, para la red hexagonal, por

$$d_{hkl} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

E.I. 24

Demostrar que la red recíproca de una red cúbica de caras centradas, es una cúbica de cuerpo centrado.

Los tres vectores que definen la celda primitiva romboédrica de la red cúbica F son

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} \vec{i} + \frac{a}{2} \vec{k}, \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} \vec{i} + \frac{a}{2} \vec{j}, \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2} \vec{j} + \frac{a}{2} \vec{k}$$

donde $\vec{i}$, $\vec{j}$, $\vec{k}$ son tres vectores unitarios según las direcciones de los tres ejes ortogonales x, y, z respectivamente (Apéndice A).

El volumen de la celda romboédrica es $(a^3/4)$, Fig. I.17. Aplicando la definición de red recíproca, sección I.3, y la definición de producto vectorial (Apéndice A).

$$\vec{a}_1^* = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{a^3/4} = \frac{4}{a^3} \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{vmatrix} = \frac{1}{a} (\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$

Análogamente se obtienen

$$\begin{aligned} \vec{a}_2^* &= \frac{1}{a} (\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \\ \vec{a}_3^* &= \frac{1}{a} (-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \end{aligned}$$

Estos tres vectores se representan gráficamente en la Fig. I.18.

Puede verse fácilmente que $\vec{a}_1^*$, $\vec{a}_2^*$ y $\vec{a}_3^*$ describen una red cúbica I. Cada uno de ellos une el origen con el nodo situado en el centro de un cubo de lado $2 \times 1/a$. Por lo tanto la red recíproca de una red cúbica F de parámetro a, es una red cúbica I cuyo parámetro es igual a $2/a$. Este resultado se puede obtener también a partir de la teoría cinemática de la difracción.

E.I. 25

Encontrar ahora la red recíproca de la red cúbica I definida por los tres vectores $\vec{a}_1^*$, $\vec{a}_2^*$ y $\vec{a}_3^*$ calculados en el ejercicio anterior, y demostrar que vuelve a ser la red cúbica F definida por los vectores $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ y $\vec{a}_3$. El volumen de la celda recíproca determinada por

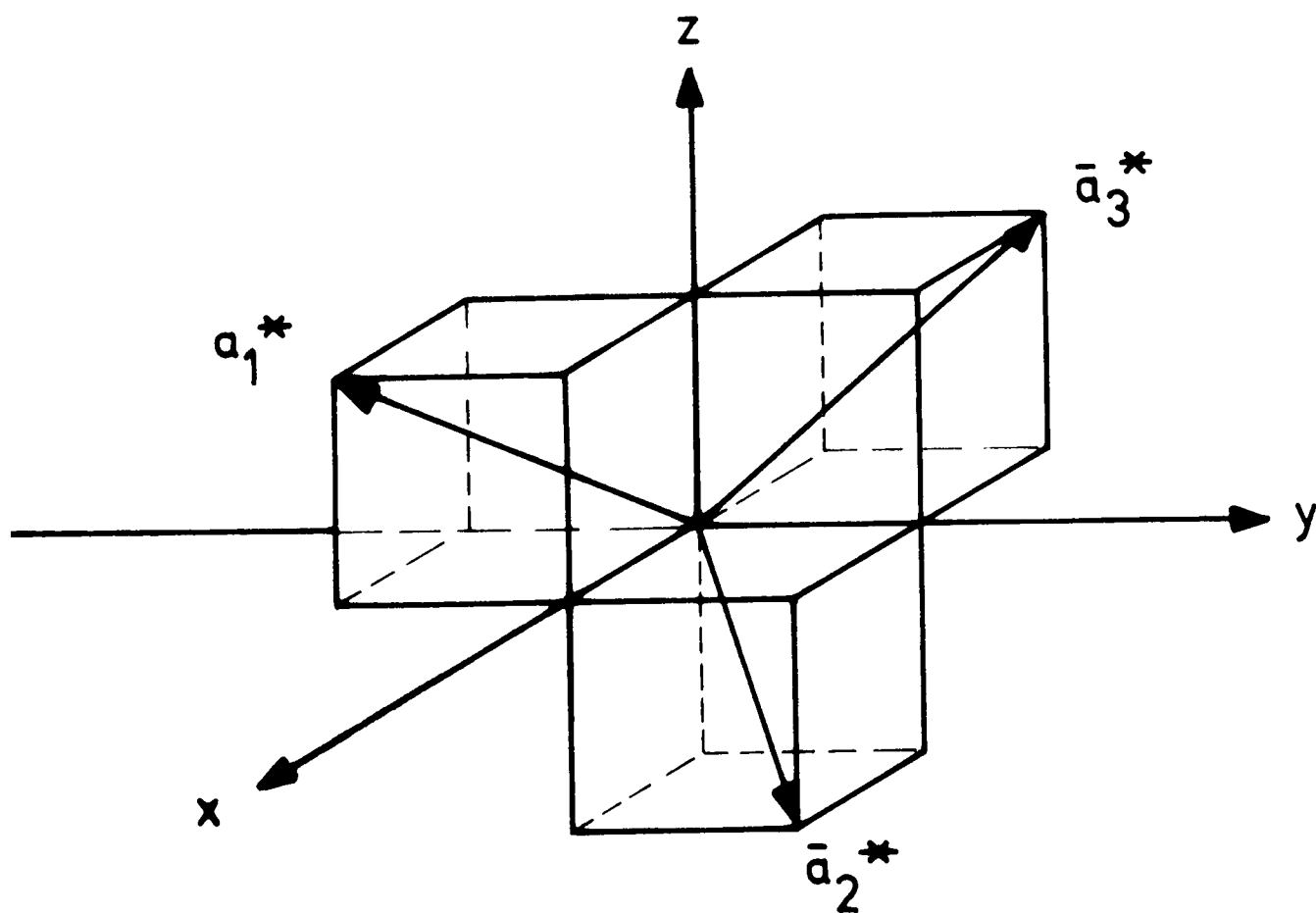


Fig.I.18. Vectores base de la red recíproca de una red cúbica de caras centradas de parámetro "a". Se puede ver que éstos describen una red cúbica de cuerpo centrado de parámetro $\frac{1}{a}$.

$\vec{a}_1^*$, $\vec{a}_2^*$ y $\vec{a}_3^*$ es

$$V^* = \frac{1}{2} \left(\frac{2}{a} \right)^3 = \frac{4}{a^3}$$

Por lo tanto

$$\vec{a}_1^* = \frac{\vec{a}_2^* \times \vec{a}_3^*}{V^*} = \frac{a^3}{4} \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{a^2}$$

Análogamente se obtienen $\vec{a}_2^*$ y $\vec{a}_3^*$. Este resultado, obtenido para el caso particular de las redes cúbicas I y F, es completamente general: la red recíproca de la red recíproca, vuelve a ser la red original.

E.I.26

Demostrar utilizando la propiedad fundamental de la red recíproca, sección I.3.1, que el ángulo ϕ entre los planos pertenecientes a las familias $(h_1 k_1 l_1)$ y $(h_2 k_2 l_2)$ de una red cúbica, está dado por la expresión

$$\cos \phi = \frac{h_1 h_2 + k_1 k_2 + l_1 l_2}{\left[(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2) \right]^{1/2}}$$

Comparar con los datos numéricos del Apéndice B.

E.I.27

Determinar la red recíproca de una red hexagonal.

Consideremos la celda primitiva de la Fig. II.3 (b), caso particular del sistema monoclínico, definida por los vectores $\vec{a}_1$ y $\vec{a}_2$, a 120° entre sí, y el vector $\vec{c}$ perpendicular a los dos anteriores. Fig. I.19. El volumen de esta celda es

$$V_c = a_1 a_2 \sin 60^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

$$\text{pues } |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a$$

Los vectores que definen la red recíproca se calculan a partir de las expresiones obtenidas en la sección I.3, ec. I.12. Expresando $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ y $\vec{a}_3$ en una terna de ejes ortogonales $\vec{i}$, $\vec{j}$, $\vec{k}$, Fig. I.19.

$$\vec{a}_1 = \frac{a\sqrt{3}}{2} \vec{i} - \frac{a}{2} \vec{j}$$

$$\vec{a}_2 = a \vec{j}$$

$$\vec{c} = c \vec{k}$$

y según la expresión del producto vectorial deducida en el apéndice A.3.

$$\vec{a}_1^* = \frac{\vec{a}_2 \times \vec{c}}{V_c} = \frac{1}{V_c} \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & c \end{vmatrix} = \frac{2}{\sqrt{3}a} \vec{i}$$

Análogamente se obtienen las expresiones

$$\vec{a}_2^* = \frac{1}{a\sqrt{3}} (\vec{i} + \sqrt{3} \vec{j}) \quad \vec{c}^* = \frac{1}{c} \vec{k}$$

Se puede comprobar fácilmente que $|\vec{a}_1^*| = |\vec{a}_2^*|$. El ángulo α que forma $\vec{a}_2^*$ con $\vec{a}_2$ (eje $\vec{j}$) se calcula mediante

$$\cos \alpha = \frac{\text{componente según } \vec{j} \text{ de } \vec{a}_2^*}{\text{módulo de } \vec{a}_2^*} = \frac{1/a}{2/a\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

De donde $\alpha = 30^\circ$. Igualmente, el ángulo entre $\vec{a}_1^*$ y $\vec{a}_1$ es de 30° . Entonces $\vec{a}_1^*$ y $\vec{a}_2^*$ forman 60° entre sí y la red recíproca de una red hexagonal, es otra red hexagonal, pero rotada 30° respecto de la red directa. La relación entre las longitudes de los vectores $\vec{c}^*$ y $\vec{a}_1^*$ es

$$\frac{|\vec{c}^*|}{|\vec{a}_1^*|} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{a}{c}$$

En la estructura hexagonal compacta es $c/a = \sqrt{8/3}$ (Sección IV.5.2), y para este caso

$$\frac{|\vec{c}^*|}{|\vec{a}_1^*|} = 0.53$$

El eje recíproco $\vec{c}^*$ tiene por lo tanto módulo aproximadamente igual a la mitad de las longitudes de $\vec{a}_1^*$ o $\vec{a}_2^*$.

II.1 ESTRUCTURAS PERIODICAS PLANAS

En el capítulo anterior se ha definido el concepto de red de puntos y se han analizado sus propiedades generales. Veremos ahora cómo a partir de esa abstracción geométrica puede generarse una estructura periódica.

Siguiendo un orden similar al del capítulo anterior, comenzaremos por estudiar primero las estructuras periódicas planas. Consideremos entonces el dibujo de la Fig. II.1, supuesto infinito, construido mediante la repetición sistemática de un motivo geométrico dado. A lo largo de la dirección horizontal x los puntos homólogos $P_1, P_2, P_3, \dots$ se deducen unos de otros mediante una traslación del tipo

$$\vec{r} = u \vec{a}$$

donde $\vec{a}$ es el vector que indica el período de traslación según el eje x , y u es un entero cualquiera, positivo, negativo o nulo. Se puede ver en la misma figura que estos puntos homólogos son equivalentes puesto que el entorno de cada uno de ellos es exactamente el mismo. Otro tanto puede decirse del conjunto de puntos homólogos $P_1, P_2, P_3, \dots$ o del conjunto $P_1'', P_2'', P_3'' \dots$. Análogamente a lo largo de la dirección vertical y los puntos homólogos se deducen unos de otros mediante una traslación del tipo

$$\vec{r} = v \vec{b}$$

donde $\vec{b}$ es el período de repetición según el eje y , y v es un entero cualquiera. En general, un conjunto de puntos homólogos están relacionados unos con otros por un vector traslación del tipo

$$\vec{r}_{u,v} = u \vec{a} + v \vec{b} \quad \text{positivos, negativos o nulos.} \quad (\text{II.1})$$

donde u y v son enteros cualesquiera. Por lo tanto, y de acuerdo a lo expuesto en I.2.1., los puntos homólogos de un dibujo periódico como el de la Fig. II.1 constituyen los nodos de una red plana, siendo $\vec{a}$ y $\vec{b}$ los vectores que definen la celda elemental. Efectivamente se puede ver en la misma figura que cualquiera de los conjuntos de puntos homólogos considerados definen los nodos de una red plana rectangular, que difieren entre sí solamente en la elección del origen. La porción del dibujo asociada a cada nodo recibe el nombre de motivo. Este depende de la celda y del origen elegidos, pero en todos los casos el dibujo periódico descrito por sucesivas traslaciones de la celda es el mismo. Es decir, que al efectuar un cambio de celda en una red determinada por un conjunto de puntos homólogos, el motivo contenido dentro de la nueva celda será distinto al de la celda original, pero dará origen al mismo dibujo bidimensional.

Es muy importante por lo tanto diferenciar los conceptos de red y dibujo o estructura periódica. Dado un dibujo periódico plano, el tipo de red correspondiente (que tendrá que ser una de las cinco redes planas de Bravais, Tabla I) queda unívocamente determinado. Pero el motivo de repetición depende del conjunto de puntos homólogos que se consideren para definir dicha red. Aunque no existe regla fija para la elección del origen de una red dada, se trata en general de elegir puntos

tales que el motivo correspondiente sea el más representativo del conjunto total, o el que refleje más claramente las simetrías del mismo. Entonces, y tal como fue adelantado en I.1, la red constituye el esquema o esqueleto de toda estructura periódica. Una vez definida la red y elegido un origen adecuado, el motivo de repetición queda unívocamente determinado alrededor de los nodos de la misma.

II.2 ESTRUCTURAS CRISTALINAS TRIDIMENSIONALES

Las consideraciones válidas para las estructuras periódicas bidimensionales se pueden generalizar rápidamente al caso espacial. En efecto, dada una estructura periódica tridimensional construida por las sucesivas repeticiones de un motivo, los puntos homólogos del mismo definen los nodos de una red, relacionados unos con otros mediante traslaciones del tipo

$$\vec{r}_{uvw} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \quad (\text{II.2})$$

donde $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ son los vectores que indican los períodos de traslación según tres direcciones en el espacio no paralelas entre sí que definen una celda elemental, y u , v y w son enteros cualesquiera, positivos, negativos o nulos. El tipo de red tiene que ser necesariamente una de las 14 redes de Bravais (Fig. I.3) pero el motivo de repetición dependerá de la elección del origen. Si el motivo espacial está constituido por alguna configuración de átomos o moléculas, sus sucesivas traslaciones darán lugar a una estructura cristalina.

En consecuencia, una estructura cristalina está definida por dos elementos conceptuales diferentes: la red, definida por traslaciones del tipo $\vec{r}_{u,v,w}$ a partir de un cierto origen, y el motivo propiamente dicho distribuido alrededor de cada uno de los nodos de esa red. El motivo de repetición depende del punto elegido como origen de las traslaciones, pero la estructura final obtenida es la misma en todos los casos. El concepto de red es entonces fundamental para describir las características periódicas de los sólidos cristalinos.

Una vez encontrada la red que describe la estructura de un cristal dado y elegida una celda elemental (primitiva o no), cada uno de sus nodos queda identificado por sus coordenadas (u, v, w) . Para determinar completamente la posición de todos los átomos del cristal, solamente falta especificar la posición de los átomos que componen el motivo de repetición. Dada la periodicidad de la estructura, es suficiente conocer las coordenadas dentro de una celda. Estas se suelen expresar en fracciones x , y , z de las longitudes de las aristas a , b , c de la celda. En los ejercicios de aplicación se verán algunos ejemplos.

II.3 SIMETRÍA DE LOS CRISTALES

II.3.1. Anisotropía cristalina

La estructura triplemente periódica de los sólidos cristalinos, analizada

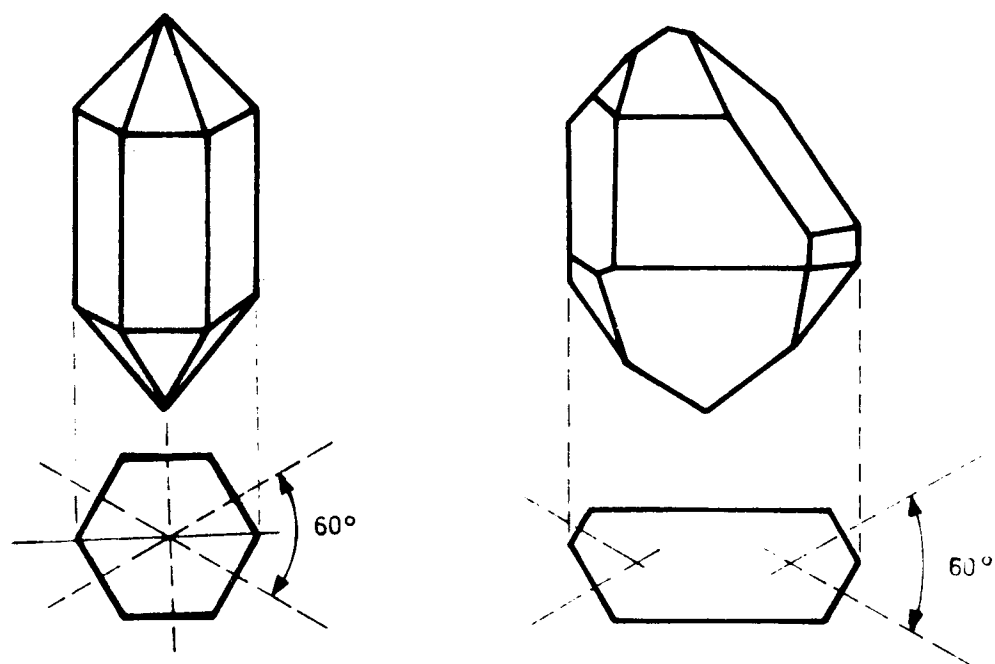


Fig.II.2. Dos posibles formas de un cristal de cuarzo. En ambos casos la orientación relativa de las caras es la misma y sus respectivas normales forman un ángulo de 60° .

en la sección anterior, se caracteriza por una propiedad de particular importancia: la densidad de átomos, o motivos atómicos, no es la misma a lo largo de todas las filas reticulares. Por lo tanto la magnitud de las fuerzas que los átomos ejercen entre sí es también distinta según la dirección particular considerada. Es inmediato entonces que las propiedades de los cristales no pueden ser las mismas en todas las direcciones. La resistencia a la tracción de un metal, por ejemplo, dependerá de la dirección en la cual se lo deforma. Lo mismo puede decirse de todas las otras propiedades elásticas o mecánicas en general. El hecho de que las propiedades de un cristal sean diferentes según las distintas direcciones del mismo es entonces una consecuencia directa de la triple periodicidad de la estructura, y se denomina anisotropía.

Un aspecto particular de la anisotropía se manifiesta a través de las formas exteriores de los cristales naturales. Hemos visto en efecto en la sección I.3.1 que las caras que presentan los cristales naturales son paralelas a los planos según los cuales el cristal puede romperse fácilmente. De la misma manera, durante el crecimiento de un cristal, sea en la naturaleza o en el laboratorio, ciertas caras se desarrollan más que otras como consecuencia de la anisotropía cristalina. El objeto de esta sección es analizar las particularidades de las formas macroscópicas de los cristales y establecer la relación entre éstas y la estructura triplemente periódica estudiada en el capítulo anterior.

II.3.2 Formas Exteriores de un Cristal

En numerosos tratados de cristalografía o mineralogía, al definir un cristal se suele hacer referencia a las caras planas y a las aristas agudas que presentan algunos cuerpos cristalinos. Actualmente una definición de cristal basada en estas características sería impropia, pues un vidrio de forma particular podría considerarse como cristal (y sabemos que es un líquido) mientras que un cristal metálico crecido en un molde cilíndrico no lo sería. Sin embargo, esas definiciones se apoyan en un hecho que durante siglos fue la principal fuente de conocimiento de la materia cristalizada: las formas exteriores. Aun en el presente, cuando es posible conocer las coordenadas de un átomo dentro de un cristal con una precisión del 1%, las formas exteriores constituyen el punto de partida para el estudio de una de las características más importantes de todos los cuerpos cristalinos: la simetría. Todas las propiedades de los sólidos cristalinos son afectadas directamente por la simetría de los mismos. Si las formas de un cristal son tales que una cierta dirección se deduce a partir de otra mediante una cierta operación de simetría, ambas direcciones serán cristalográficamente equivalentes. Las constantes elásticas, la resistencia a la tracción, la conductividad térmica, etc. serán las mismas según esas direcciones.

A título de ejemplo, consideremos el cuarzo, que ha sido estudiado desde tiempos inmemoriales. En la naturaleza se encuentra constituyendo cristales cuya forma puede ser la esquematizada en la Fig. II.2 (a), o también la de la Fig. II.2 (b). A primera vista se trata de dos cuerpos distintos, pero en realidad existen elementos comunes a ambos que permiten afirmar que se trata de dos aspectos distintos de la misma forma. En efecto, si trazamos las normales a las caras

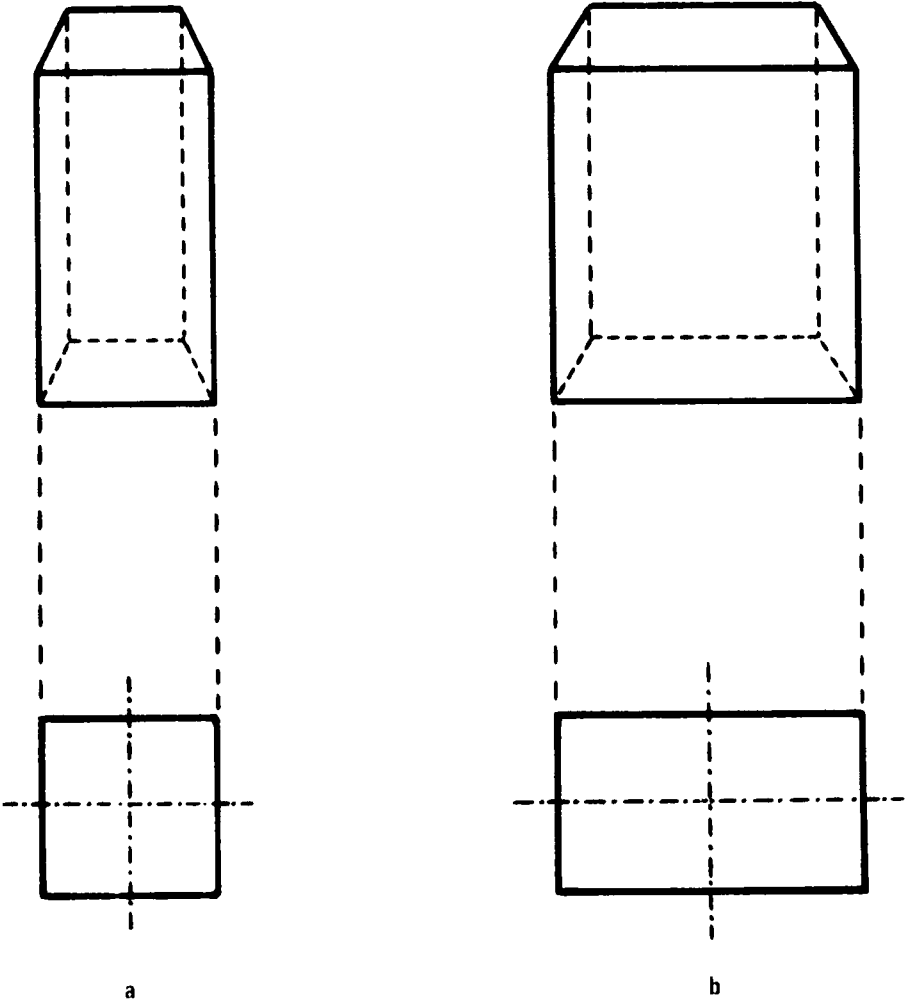


Fig.II.3. Dos posibles formas de un cristal de ClNa . Se puede observar que las normales de las caras forman 90° entre sí.

verticales de los dos cuerpos, todas ellas guardan entre sí la misma relación que las diagonales de un hexágono. En los dos casos la orientación relativa de las caras es la misma, y sus respectivas normales se distribuyen con simetría hexagonal. Cada una de ellas se deduce de la anterior mediante un giro de $1/6$ de vuelta completa (60°) y es equivalente a cualquiera de las otras. Esta es una característica común a todos los cristales de cuarzo, independiente del origen de los mismos. Es evidente que existen factores que hacen que el cuerpo presente formas irregulares, pero la orientación relativa de sus caras es siempre la misma, y no depende de las muestras ni de su origen. Innumerables ejemplos podrían citarse en base a otros cristales

II.4 OPERACIONES Y ELEMENTOS DE SIMETRÍA. GRUPOS PUNTUALES

Así como un cristal de cuarzo presenta simetría hexagonal, podríamos analizar el caso de cristales cuyas formas permitan descubrir otros tipos de simetría. Consideremos en efecto un segundo ejemplo: el cloruro de sodio. Esta sustancia cristaliza según una red cúbica F, y los planos de clivaje son normales a los tres ejes de referencia. Se encuentra en la naturaleza en las formas esquematizadas en las Figs. II.3 (a) y (b). Las dos formas son equivalentes, y la única diferencia reside en el hecho de que un tipo de caras se ha desarrollado más que otras. Las normales a las caras forman 90° entre sí, y por lo tanto se deducen unas de otras mediante giros de $1/4$ de vuelta completa.

Análogamente se puede demostrar que ciertos tipos particulares de simetría no pueden existir en los cristales. En efecto, al descomponer un cristal grande en cristales más pequeños, se encuentra siempre que las formas de estos últimos son equivalentes, y que las posibles formas cristalinas son tales que ensambladas una con otra para constituir un cuerpo de mayores dimensiones llenan completamente el espacio. De esta manera quedan excluidas las formas geométricas con simetría pentagonal o heptagonal*. Puede verse esquemáticamente en la Fig. II.4 que si se tuvieran prismas de base pentagonal o heptagonal, éstos dejarían espacios vacíos entre sí al ensamblarse. En cambio, es perfectamente posible llenar el espacio con prismas de base cuadrada o hexagonal, Fig. II.4 (a) y (b).

La clasificación de las simetrías en los cristales se hace en base a las llamadas operaciones de simetría y la existencia de estas operaciones está limitada por las formas posibles de llenar el espacio. Cada operación se designa por un símbolo, y las combinaciones entre ellas se simbolizan por una agrupación adecuada de estos últimos, que responde a una convención internacional conocida como nomenclatura de Herman-Mauguin. Para estudiar las distintas operaciones de simetría empezaremos

- - - - -

* Esta restricción puede desaparecer en el estado gaseoso, y en efecto, existen moléculas con ejes de rotación de orden 5.

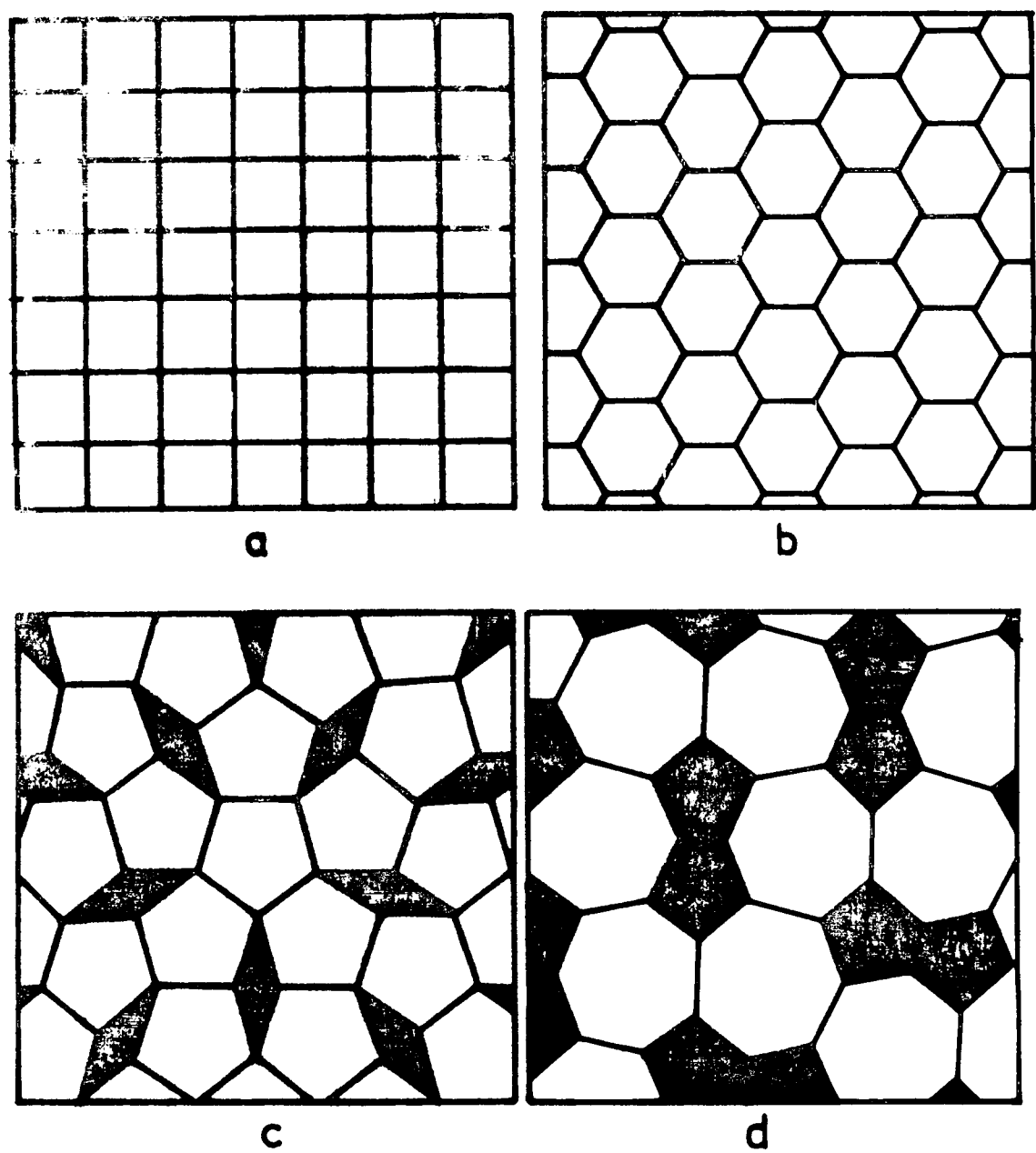


Fig.II.4. Esquema bidimensional para demostrar que la repetición periódica de figuras con simetría pentagonal o heptagonal deja espacios sin llenar. En la naturaleza no se observan formas cristalinas con simetrías de rotación de orden 5 o 7.

por considerar el esquema monodimensional de la Fig. II.5. La figura es simétrica respecto del punto 0, y la operación mediante la cual la parte derecha se obtiene a partir de la parte izquierda se denomina reflexión respecto del punto 0, el cual permanece invariado por esta operación. La reflexión respecto de un punto es la única operación de simetría posible en una dimensión.

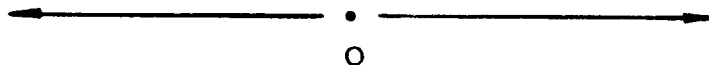


Fig. II.5

A continuación estudiaremos las operaciones de simetría en dos dimensiones, para pasar luego al caso de las simetrías de un cristal tridimensional.

II.4.1 Grupos Puntuales Bidimensionales. Nomenclatura de Herman-Mauguin

En el plano existen dos operaciones de simetría posibles:

- rotación alrededor de un punto
- reflexión respecto de una línea

Veamos como ejemplo de la primera operación, el caso de la letra S. Al rotarla alrededor de su centro, se obtiene una figura superpuesta a la letra original que coincide con ella misma. La letra S es por lo tanto simétrica respecto de rotaciones de $2\pi/2$ alrededor de su centro, el cual permanece invariado en el curso de la rotación.

Las rotaciones alrededor de un punto se designan por su número de orden n , donde n es el número de veces en que una dada figura coincide con ella misma después de efectuar un giro completo de 2π . De esta manera, cualquier hexágono de la Fig. II.4 (b) coincide consigo mismo después de una rotación de $2\pi/6$, es decir coincide 6 veces consecutivas en una rotación completa de 2π . Se dice entonces que un hexágono es una figura geométrica que tiene un eje de simetría de orden 6. Análogamente, los cuadrados de la Fig. II.4 (a) poseen un eje de orden 4. Los pentágonos y heptágonos de las Fig. II.4 (c) y (d) tienen eje de orden 5 y 7 respectivamente. Pero si consideramos las rotaciones que dan lugar a figuras que puedan llenar el plano, de acuerdo a lo mencionado en la sección II.4, en dos dimensiones sólo pueden existir las rotaciones de orden

n =	2,	3,	4,	6
símbolo				

y ninguna otra rotación es factible por lo tanto fuera de las mencionadas.

En cuanto a la operación de reflexión respecto de una línea, un ejemplo típico es la letra H. Una reflexión se indica con la letra *m* (de *mirror*, *miroir*) y es una operación tal que divide a la figura considerada en dos partes, siendo cada una de ellas la imagen especular de la otra.

El conjunto de operaciones de simetría que dejan invariado un punto se denomina grupo puntual (queda excluida de los grupos puntuales toda operación que involucre traslaciones). Ya se ha visto que en una dimensión sólo existe una única operación de simetría, y por lo tanto sólo hay un grupo puntual. En el caso bidimensional las posibilidades se multiplican pero sin embargo el número de grupos puntuales que pueden conducir a operaciones distintas es limitado, puesto que la combinación de ciertas operaciones de simetría implica la existencia simultánea de otras. Se puede demostrar que en dos dimensiones sólo existen 10 grupos puntuales resultantes de la combinación de líneas m y rotaciones de orden 2, 3, 4 y 6.

Cada grupo puntual define una clase de simetría o clase cristalina caracterizada por el conjunto de elementos de simetría que define al grupo, Tabla II.1. Se puede ver en la misma, que existen elementos de simetría comunes a distintos grupos. De esta manera los 10 grupos puntuales se clasifican en 4 sistemas, cada uno de los cuales está definido por una operación de simetría común a los grupos que pertenecen al sistema. Por convención, el grupo puntual 1 (ninguna simetría) se une al grupo 2 para formar el sistema oblicuo. Asimismo, los grupos *m* y *mm* se agrupan en el sistema llamado rectangular, Tabla II.1.

Veremos a continuación el orden de escritura de las distintas operaciones de simetría en la nomenclatura de Herman-Mauguin. Para ello en la figura plana cuya simetría se va a describir, se traza un eje de referencia *x* en la dirección horizontal. Las operaciones de simetría que caracterizan la figura se escriben entonces en el siguiente orden,

- orden *n* del eje de rotación respecto de un punto: 2, 3, 4 o 6.
- reflexión *m* respecto de una línea normal al eje *x*, y de todas las deducibles de la primera por efecto de la rotación anterior.
- toda otra reflexión *m* no deducible de la anterior por la rotación.

En otras palabras, un símbolo *m* ubicado en segundo y tercer lugar en la notación de Herman-Mauguin, indica la existencia de dos familias de líneas *m*. Las líneas de cada familia están relacionadas entre sí mediante la operación de rotación indicada en primer lugar, pero no existe la misma relación entre líneas pertenecientes a familias distintas.

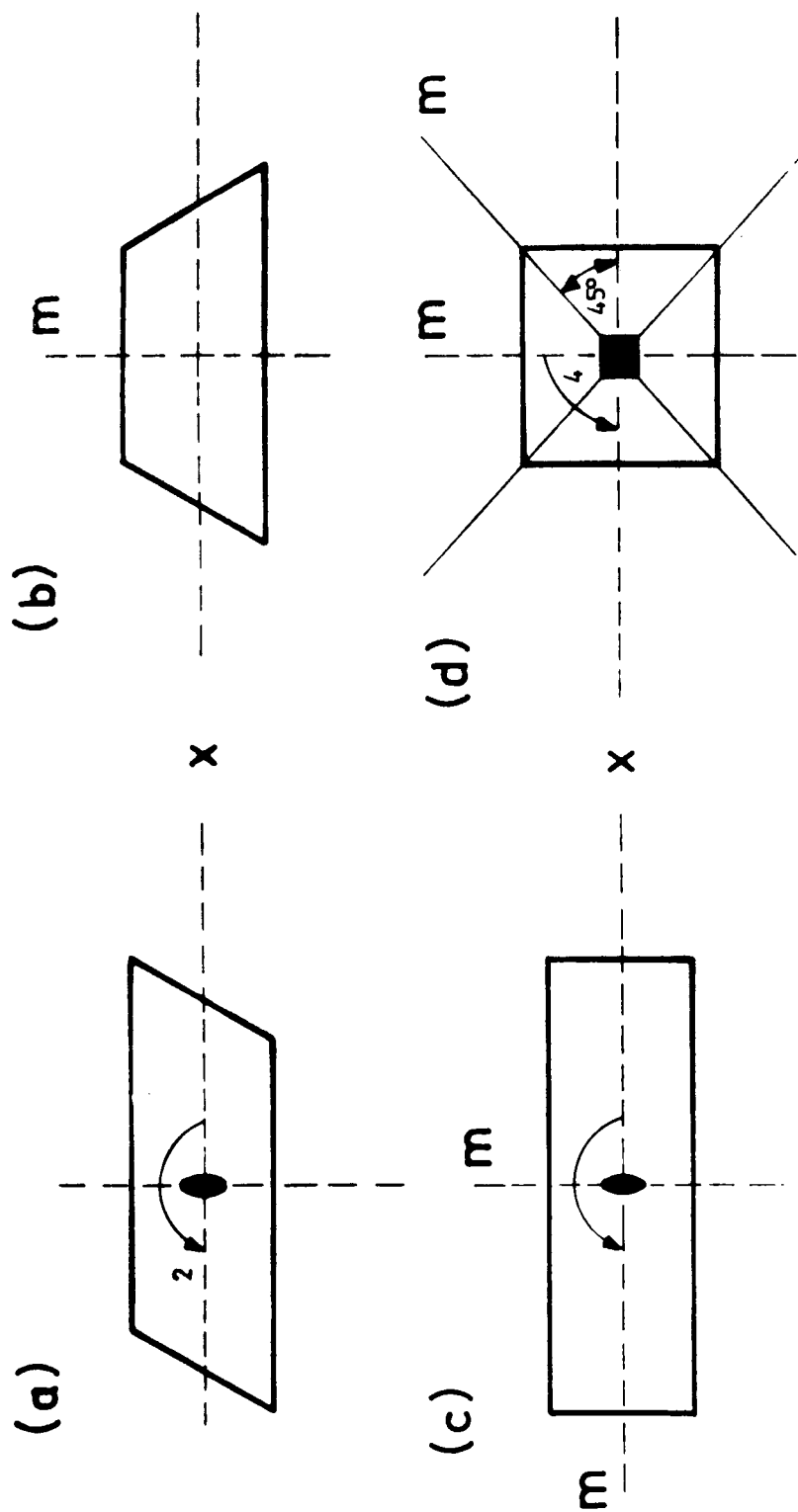
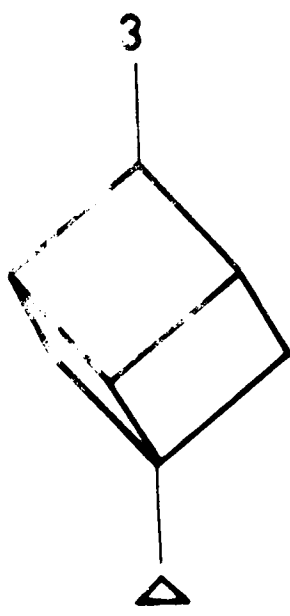
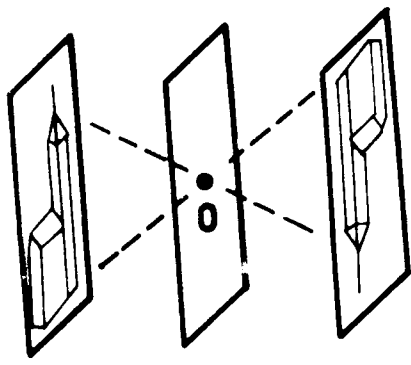


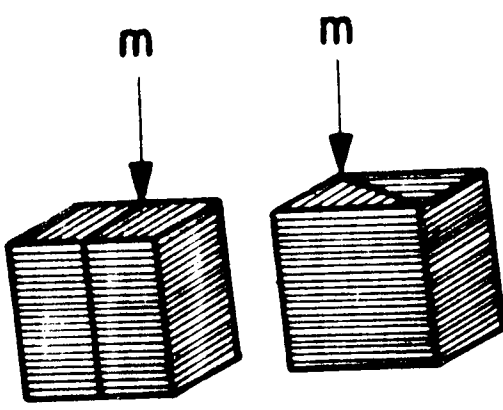
Fig. II. 6. a) Simetría de rotación de orden 2.
b) Simetría de reflexión (línea m).
c) Eje de rotación de orden 2 combinado con una segunda línea m no deducible de la anterior por la operación de rotación.
d) Un eje de rotación de orden 4 combinado con una línea m . En este caso aparece una segunda línea de reflexión formando 45° con la anterior.



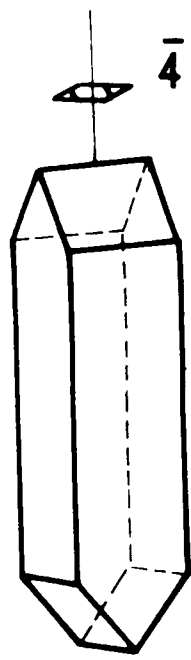
ROTACION
(ejemplo de un eje 3)



INVERSION
(o es el centro de simetría)



REFLEXION



ROTOINVERSION
(ejemplo de un eje $\bar{4}$)

Fig. II.7. Las cuatro operaciones de simetría que dejan invariante un punto en el espacio.

Para ir fijando ideas consideraremos a continuación los ejemplos más sencillos de simetrías en el plano. En el caso simple de una rotación de orden 2, Fig. II.6 (a), o de una reflexión respecto de una línea m , Fig. II.6 (b), los símbolos de Herman-Mauguin son 2, y m , respectivamente. Una figura caracterizada por un eje de orden 2 y una línea m , Fig. II.6 (c), necesariamente posee una segunda línea m , no deducible de la anterior por la operación de rotación indicada. En efecto, al actuar la rotación sobre la primera línea m , no produce ninguna línea m nueva, sino que relaciona solamente las partes positivas y negativas de la misma. Por lo tanto la rotación completa de las simetrías de la Fig. II.6 (c) es

$$2 \ m \ m$$

De la misma manera se pueden analizar las simetrías de la Fig. II.6 (d). Cada rotación de $2\pi/4$ alrededor del punto central vuelve a poner la figura en coincidencia consigo misma. Existe una línea m paralela al eje de referencia x , y la rotación genera una nueva línea m a 90° respecto de la primera. Pero también existe otra línea de reflexión m formando 45° con el eje x , y una línea m formando -45° con el mismo eje, obtenida a partir de la anterior mediante la misma rotación. La notación de Herman-Mauguin de las simetrías del dibujo de la Fig. II.6 (d) es por lo tanto

$$4 \ m \ m$$

En el ejercicio de aplicación E.II.1 se verán ejemplos de figuras planas con simetrías de rotación de orden 3 y 6, y la deducción de los símbolos de Herman-Mauguin correspondientes.

Notemos que en la notación de Herman-Mauguin no es necesario escribir todos los símbolos. Tal como es el caso del rectángulo de la Fig. II.6 (c), la existencia de una operación dada de simetría suele implicar necesariamente la presencia de otra. Por lo tanto se utiliza normalmente una notación abreviada, en la cual se escriben solamente los símbolos estrictamente necesarios para caracterizar la simetría, quedando implícitos los demás. De esta manera

2 m m se escribe solamente	2 m
o también se suele utilizar	
la forma totalmente equivalente	mm
4 m m se escribe	4 m

TABLA II.1
GRUPOS PUNTUALES BIDIMENSIONALES

Nº de Orden del Grupo	Operaciones de simetría	Símbolo completo	Símbolo abreviado	Sistema	Simetría mínima
1	Ninguna	1	1	oblicuo	ninguna
2	Eje de orden 2	2	2		
3	Línea m	m	m	rectangu- lar	m
4	Eje de orden 2 Dos líneas m perpendicu- lares entre sí	2m	2m		
5	Eje de orden 4	4	4	cuadrático	4
6	Eje de orden 4 Dos líneas m formando 45° entre sí	4mm	4m		
7	Eje de orden 3	3	3	hexagonal	3
8	Eje de orden 3, línea m	3m	3m		
9	Eje de orden 6	6	6		
10	Eje de orden 6 Dos líneas m formando 30° entre sí	6mm	6m		

II.4.2 Grupos Puntuales Tridimensionales. Sistemas Cristalinos

El análisis que se ha hecho de las simetrías de figuras bidimensionales facilita el estudio de las simetrías en el caso tridimensional. Estas son las que finalmente permiten describir las formas de los cristales reales. Es obvio que en tres dimensiones el número de operaciones de simetría posibles que dejan invariante un punto, es mayor que en el caso anterior. Son cuatro en total, y se esquematizan gráficamente en la Fig. II.7. En la Tabla II.2 se indican además los símbolos de Herman-Mauguin correspondientes.

TABLA II.2

OPERACIONES DE SIMETRÍA TRIDIMENSIONALES

Operación	Símbolo de Herman-Mauguin
Inversión respecto de un punto	1
Rotación respecto de una línea (eje) de orden: 2,3,4,6	2,3,4,6
Reflexión respecto de un plano	m
Rotoinversión de orden: 2,3,4,6	$\bar{2}, \bar{3}, \bar{4}, \bar{6}$

Así como en el caso bidimensional la combinación de las operaciones de simetría daba lugar a 10 posibilidades diferentes que constituyen los 10 grupos puntuales planos, en el caso tridimensional las operaciones de simetría definidas en la Tabla II.2 dan lugar a 32 combinaciones diferentes que constituyen los 32 grupos puntuales cristalinos. Cada uno de ellos define una clase cristalina y todo cristal debe pertenecer necesariamente a uno de esos grupos.

Las convenciones de la nomenclatura de Herman-Mauguin son semejantes a las utilizadas en los grupos bidimensionales:

	rotación	rotoinversión
Rotación (o rotoinversión) de orden n cuyo eje es normal a un plano m	n/m	$\bar{n}/m$
Rotación (o rotoinversión) de orden n cuyo eje es paralelo a un plano m	n m	$\bar{n} m$
Rotación de orden n con un plano m normal y otro plano n paralelo al eje de rotación	n/mn	

Análogamente a lo que sucede en el caso plano, la presencia de ciertos elementos de simetría tridimensionales implica necesariamente la existencia de otros, y por lo tanto no es necesario escribir la secuencia de símbolos

completa. En las dos primeras columnas de la Tabla II.3 se da la lista de los 32 grupos puntuales, y las nomenclaturas de Herman-Mauguin respectivas, en su forma completa y en la notación reducida.

TABLA II.3
GRUPOS PUNTUALES Y SISTEMAS CRISTALINOS

Nº de orden del grupo	Símbolos de Herman-Mauguin (entre paréntesis se indica la nota- ción abreviada)	Simetría mínima para pertenecer a un sistema	Relaciones entre los ejes y sus ángulos respecti- vos, que implica la simetría mínima	Nombre del sistema cristalino
1 2	1 1	ninguna	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	triclínico
3 4 5	2 m ($\bar{2}$) 2/m	2 o m	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	monoclínico
6 7 8	2 mm 222 2 m 2 m 2 m (m m m)	222 o m	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	ortorrómico
9 10 11 12 13 14 15	4 $\bar{4}$ 4/m $\bar{4}$ 2m 4 mm 422 (42) 4/m 2/m 2/m (4/m m m)	4 σ $\bar{4}$	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	tetragonal
16 17 18 19 20	3 $\bar{3}$ 3m 32 $\bar{3}$ 2/m ($\bar{3}$ m)	3 o $\bar{3}$	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	trigonal (o rombo- hédrico)
21 22 23 24 25 26 27	6 6 6/m 6 2 m 6 m m 6 22 (62) 6/m 2/m 2/m (6/m m m)	6 o 6	$a = b \neq c$ $\gamma = 120^\circ$ $\alpha = \beta = 90^\circ$	hexagonal

Nº de orden del grupo	Símbolos de Herman-Mauguin (entre paréntesis se indica la notación abreviada)	Simetría mínima para pertenecer a un sistema	Relaciones entre los ejes y sus ángulos respectivos, que implica la simetría mínima	Nombre del sistema cristalino
28	23	4 ejes de orden 3 (diagonales de un cubo)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	cúbico
29	2/m 3 (m3)			
30	$\bar{4}$ 3m			
31	4, 3, 2, (43)			
32	4/m, 3, 2/m (m3m)			

Se puede ver en la Tabla II.3 que existen grupos caracterizados por operaciones de simetría comunes, y así los 32 grupos se unen para definir siete sistemas cristalinos. Los grupos pertenecientes a un mismo sistema contienen una o dos operaciones de simetría, que son las que definen al sistema. Un grupo perteneciente a un sistema puede contener más elementos de simetría que el mínimo necesario para pertenecer al mismo.

Las características de cada sistema (número mínimo de simetrías) se pueden resumir en siete "sólidos tipo". Estos son paralelepípedos en los cuales están contenidas las simetrías del sistema, que se traducen a su vez en relaciones bien definidas entre las longitudes de sus aristas a, b, c , y los ángulos entre éstas

$\alpha = \hat{bc}$

$\beta = \hat{ca}$

$\gamma = \hat{ab}$

En la tabla II.3 se puede ver cómo se agrupan los 32 grupos puntuales en los 7 sistemas cristalinos, y los "sólidos tipo" correspondientes se muestran en la Fig. II.8.

Es conveniente recordar que si un cristal pertenece a un cierto sistema, no necesariamente su forma macroscópica es la del sólido tipo correspondiente a ese sistema. Ya se ha visto en la sección II.3.2 que las caras exteriores de un cristal pueden desarrollarse en forma muy variada y el sólido tipo debe por lo tanto considerarse solamente como una visualización geométrica de las simetrías del sistema que representa.

En la Fig. II.9 se dan dos ejemplos de formas cristalinas simples indicándose el sistema al cual pertenecen y el grupo puntual correspondiente.

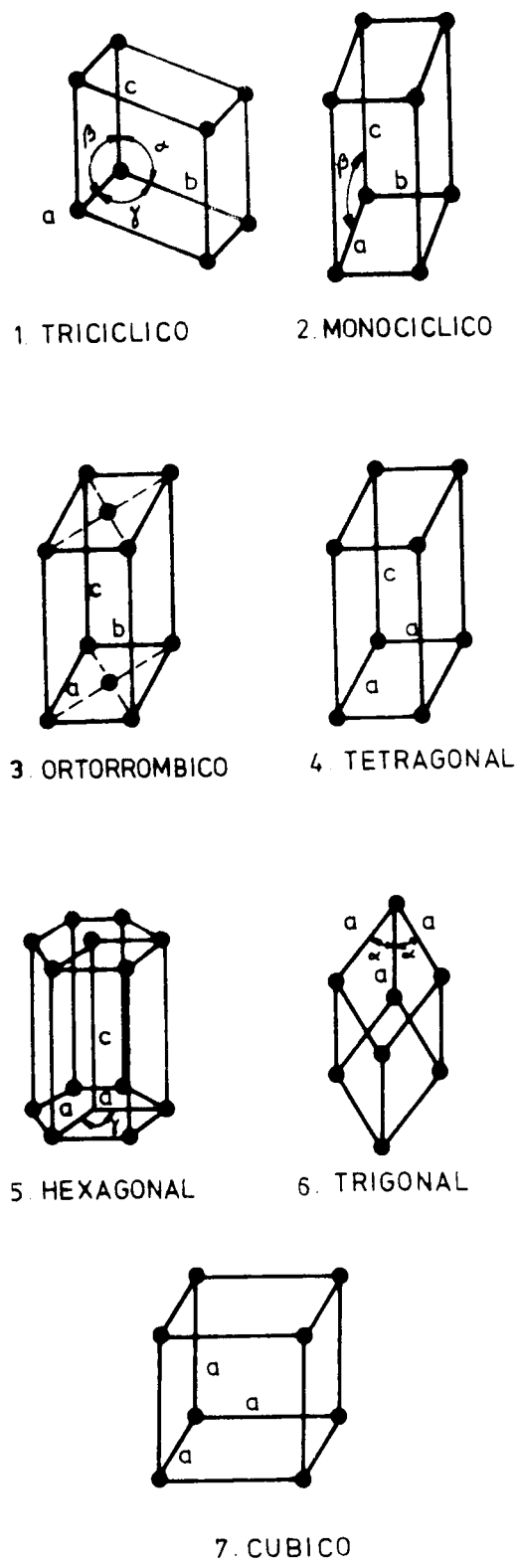


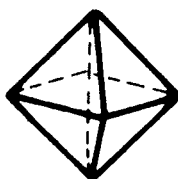
Fig.II.8. Los siete sistemas cristalinos y forma de los sólidos que los representan.

(a)



UREA (TETRAGONAL)
GRUPO $\bar{4}2m$

(b)



ESPINELA (CUBICO)
 Al_2O_4Mg
GRUPO $m\bar{3}m$

Fig. II.9. Dos ejemplos de formas cristalinas simples indicándose el sistema y el grupo puntual al cual pertenecen.

II.5 LAS FORMAS EXTERIORES Y LA ESTRUCTURA ATOMICA DE LOS CRISTALES

A través de todo lo expuesto hasta el presente se ha visto, aunque en forma más bien intuitiva, que existe una estrecha relación entre la estructura atómica de un cristal y las formas macroscópicas que éste puede adoptar. También es un hecho muy significativo, aunque no se haya dicho explícitamente, que la forma de los sólidos tipo que definen los sistemas cristalinos coincide con la forma geométrica de las celdas de Bravais, Fig. I.3.

Hasta ahora se ha tratado a los cristales desde dos puntos de vista diferentes. En el primer capítulo se estudiaron las propiedades de las redes tridimensionales, mientras que en las secciones del presente capítulo se han tratado las propiedades de simetría de las formas exteriores de un cristal. El objeto de esta sección es unir los dos puntos de vista estudiando cómo se puede formar un cristal construido sobre una de las 14 redes de Bravais a partir de la repetición de motivos atómicos elementales, para constituir un cuerpo macroscópico cuyas formas exteriores permanezcan a una de las 32 clases de simetría.

Trataremos primero el caso simple de un cristal constituido por un único tipo de átomos en los nodos de la red, para pasar luego al caso general de un motivo de repetición más complejo.

II.5.1 Cristal constituido por átomos situados en los nodos de la red

Supongamos que se quiera construir un cristal cuya forma macroscópica sea una de las correspondientes a los sólidos tipo representativos de las simetrías macroscópicas del cristal. Para ello es necesario elegir una celda tal que por sucesivas traslaciones, tantas como sean necesarias para alcanzar el tamaño del cristal macroscópico, pueda finalmente formar un cuerpo con las simetrías exigidas. Dado que se ha supuesto un solo átomo por cada nodo de la red, es suficiente partir de una celda cuya forma geométrica sea la misma que la del sólido tipo. Así, para formar un sólido tetragonal, es suficiente elegir una celda tetragonal. Existen a su vez dos posibilidades, puesto que son dos los tipos de celdas de Bravais tetragonales: P o I. Como ambas tienen la misma forma geométrica con las simetrías que le son características, la repetición de cualquiera de las dos conduce a un sólido macroscópico tetragonal. De la misma manera, el sólido tipo monoclinico puede alcanzarse trasladando las celdas monoclinicas P o C, y el sólido tipo cúbico mediante las traslaciones sucesivas de las celdas cúbicas P, I o F. Pero las configuraciones atómicas de una celda P, I o F son distintas, según se ve en la Fig. I.3. Por lo tanto, aun en el caso simple que estamos tratando (un solo átomo por cada nodo de la red), vemos que una misma forma cristalina macroscópica puede alcanzarse mediante la repetición de distintas configuraciones atómicas.

Inversamente, la repetición de una celda dada puede conducir a un sólido

macroscópico de simetría menor. Tal es el caso, p.ej., de las traslaciones de una celda cúbica, Fig. II.10. En un caso el sólido macroscópico puede alcanzar una forma octaedral, cuyos elementos de simetría son los mismos que los de la celda cúbica (9 planos m , 6 ejes de orden 2, 4 ejes de orden 3, 3 ejes de orden 4) pero también puede constituir un tetraedro, caracterizado solamente por 6 planos m , 3 ejes de orden 4 y 4 ejes de orden 3. La característica común de todas las posibles formas cristalinas alcanzadas mediante las traslaciones de una celda cúbica es que todas poseen 4 ejes de orden 3, que es la simetría mínima para pertenecer al sistema cúbico.

II.5.2 Cristal constituido por un motivo atómico distribuido alrededor de los nodos de la red.

El problema de construir un cristal macroscópico de simetría dada a partir de la repetición de una celda con un motivo atómico en sus nodos, se plantea de manera análoga al caso anterior: la celda debe pertenecer al mismo sistema que el cristal macroscópico. Pero como alrededor de cada nodo de la red se distribuye ahora un motivo atómico, éste no debe destruir la simetría del grupo puntual que define la forma macroscópica. La agrupación debe entonces necesariamente poseer las simetrías del cristal. Con la restricción adicional de que en el motivo sólo existan ejes de orden 2, 3, 4 o 6, el número de combinaciones posibles de operaciones de simetría se reduce también a 32. La distribución de caras cristalinas o motivos atómicos en base a operaciones de simetría que dejen invariable un punto, es formalmente el mismo problema.

Entonces para construir un cristal macroscópico perteneciente a una clase de simetría C del sistema cristalino S

- se elige un motivo tal que contenga las simetrías correspondientes a la clase C
- se elige la red cristalina en base a la celda de Bravais que corresponde al sistema S
- se distribuye el motivo alrededor de cada nodo de la red construida en base a esa celda.

Como la celda elemental elegida contiene todos los elementos de simetría del motivo entonces el conjunto tendrá la simetría requerida.

Pero, como se verá en la sección siguiente, existen aún otras posibilidades que no se han tenido en cuenta hasta el presente. De la misma manera que es posible alcanzar una forma de simetría macroscópica mediante la repetición de distintas celdas de Bravais (P, I, F) en realidad pueden existir más de 32 formas de combinar geoméricamente los átomos alrededor de los nodos de una red para constituir un cristal macroscópico de simetría dada.

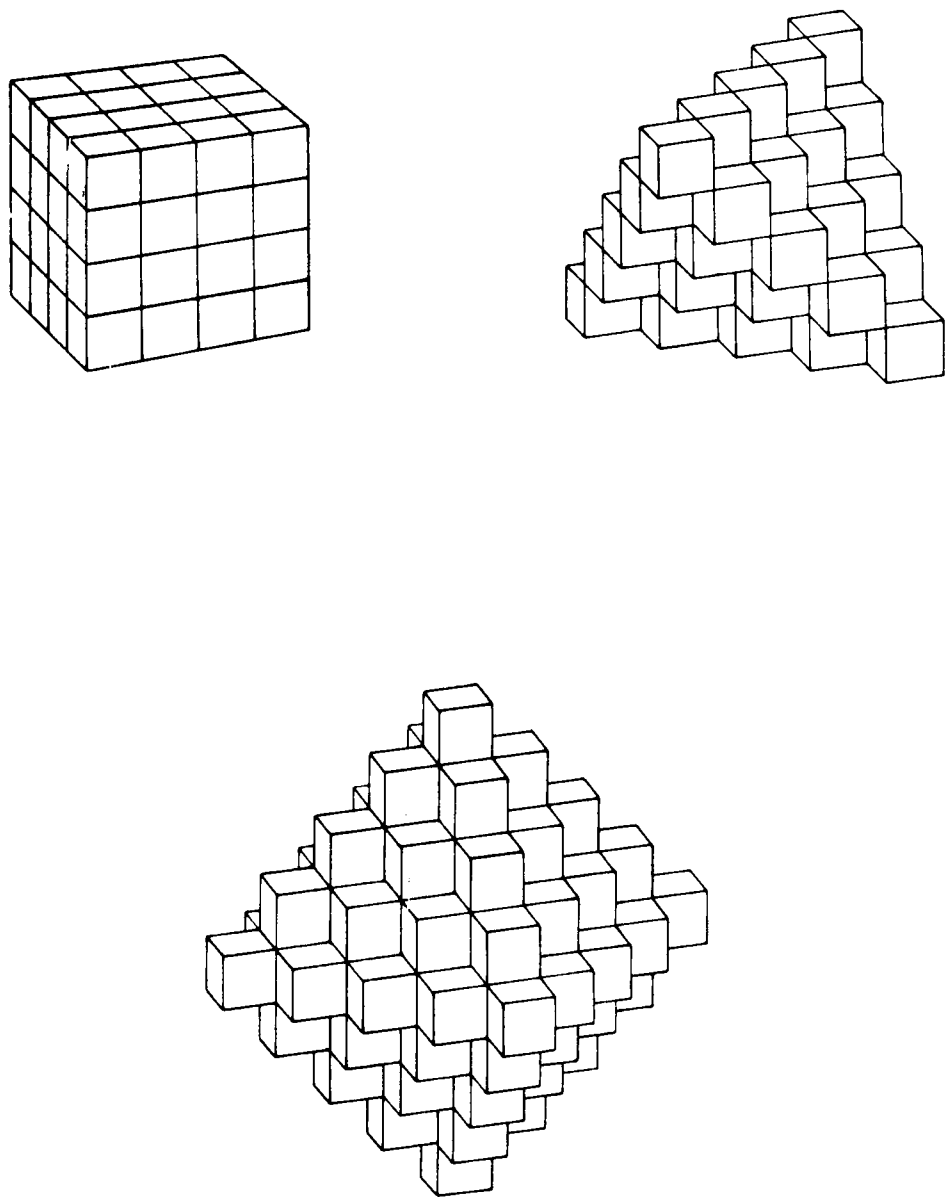


Fig. II.10. La repetición de una celda de una simetría dada puede dar origen a distintas formas macroscópicas de igual o menor simetría. Las tres formas de la figura poseen 4 ejes de rotación de orden 3 que es la simetría mínima para pertenecer al sistema cúbico.

II.5.3 Los Grupos Espaciales

Consideremos el motivo de la Fig. II.11 (a). Las simetrías del mismo se describen mediante el grupo m. De acuerdo a lo mencionado en la sección anterior podríamos distribuir ese motivo, por ejemplo, alrededor de los nodos de una de las dos celdas de Bravais del sistema monoclinico (P o C) y por sucesivas traslaciones tendríamos un cristal perteneciente a la clase m del sistema monoclinico, grupo 4 de la Tabla II.3.

Consideremos ahora la celda de tipo P. En este caso la Fig. II.11 (b) representa un plano (001) de la red, y el plano (010) es el que actúa como plano m. Pero podemos considerar también la distribución de la Fig. II.11 (c). El semimotivo M₂ se deduce de M₁ mediante una reflexión seguida de una traslación igual a a/2. Considerado en la escala atómica el plano (010) ha dejado de ser un plano m en la forma en que se ha entendido este tipo de simetría hasta el presente. Al observar la distribución de motivos a lo largo de toda la extensión del cristal, se puede ver que el plano m actúa como un plano m particular, que en lugar de reproducir la imagen especular de M₁ produce una imagen desplazada en una longitud igual a la mitad de la arista a de la celda. Como este desplazamiento es inapreciable desde el punto de vista macroscópico, la repetición de un motivo cuyos componentes están relacionados por una reflexión con deslizamiento también conduce a un cristal que posee la simetría macroscópica pedida. Se ha introducido así un nuevo elemento de simetría: el plano con deslizamiento. De la misma manera puede efectuarse un deslizamiento igual a c/2 puesto que la dirección c está también contenida en el plano de reflexión (010). Análogamente puede existir un deslizamiento según una diagonal contenida en dicho plano en cuyo caso la traslación sería igual a (a + c)/2. Si el plano fuera el correspondiente a una cara centrada de la celda, también sería factible la traslación (a + c)/4.

Para indicar una reflexión con deslizamiento en la notación de Herman-Mauguin, se reemplaza la m de la reflexión simple por los siguientes símbolos según cual sea la traslación correspondiente

Símbolo de Herman-Mauguin	Traslación
a	$\frac{a}{2}$
b	$\frac{b}{2}$
c	$\frac{c}{2}$
n	$\frac{a + b}{2}$
d	$\frac{a + b}{4}$

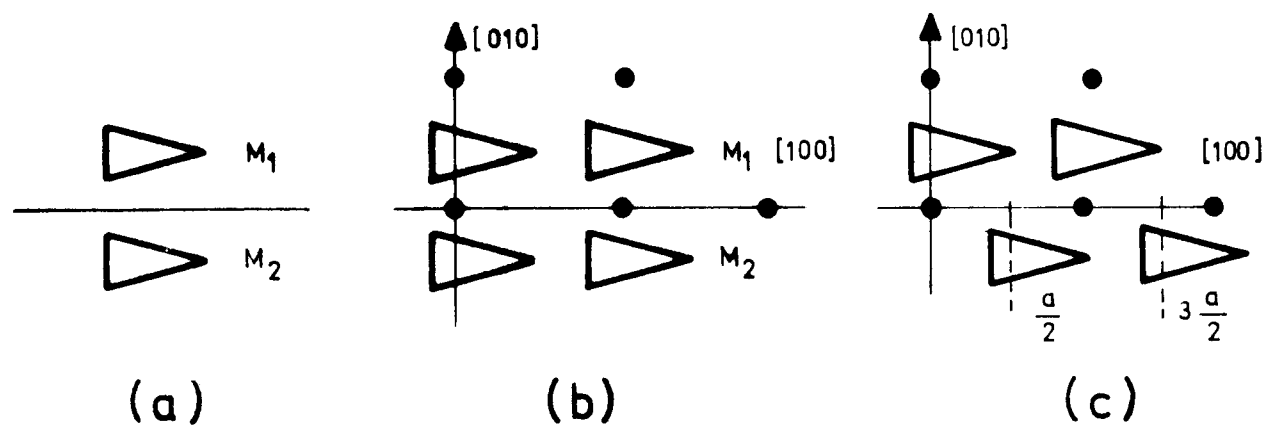


Fig. II.11. El reemplazo de una línea de simetría m por una línea con deslizamiento no altera la simetría macroscópica de un cristal.

En forma análoga a la reflexión con deslizamiento se puede introducir otra operación que, alterando la distribución atómica local, no afecta la simetría exterior de un cristal: la rotación con deslizamiento, cuyo elemento operante es el eje helicoidal. Un eje helicoidal de orden 2 es un eje tal que a la rotación respectiva asocia además una traslación igual a $a/2$ en una dirección paralela al eje a , Fig. II.12 (a). Análogamente, un eje helicoidal de orden 3 alrededor del eje a asocia a la rotación de orden 3 un desplazamiento igual a $a/3$, Fig. II.12 (b).

En cada uno de los casos la hélice descrita por la rotación y el deslizamiento puede ser a su vez levógira o dextrógira. En la Tabla II.4 se detallan las características de los ejes helicoidales posibles con su respectiva notación de Herman-Mauguin.

TABLA II.4
EJES HELICOIDALES

Símbolo	Orden del Eje	Traslación	Tipo
2_1	2	$1/2$	
3_1	3	$1/3$	Dextrógiro
3_2	3	$1/3$	Levógiro
4_1	4	$1/4$	Dextrógiro
4_2	4	$1/2$	Incluye un eje de orden 2
4_3	4	$1/4$	Levógiro
6_1	6	$1/6$	Dextrógiro
6_2	6	$1/3$	Dextrógiro
6_3	6	$1/2$	Incluye un eje de orden 3
6_4	6	$1/3$	Levógiro
6_5	6	$1/6$	Levógiro

Con las dos nuevas operaciones de simetría introducidas aumenta entonces el número de posibilidades de construir un cristal macroscópico de simetría dada. Con las operaciones de inversión, rotación, reflexión y rotoinversión existían 32 combinaciones que correspondían a las 32 formas exteriores posibles. Si se agrega la reflexión con deslizamiento y los ejes helicoidales, el número total de

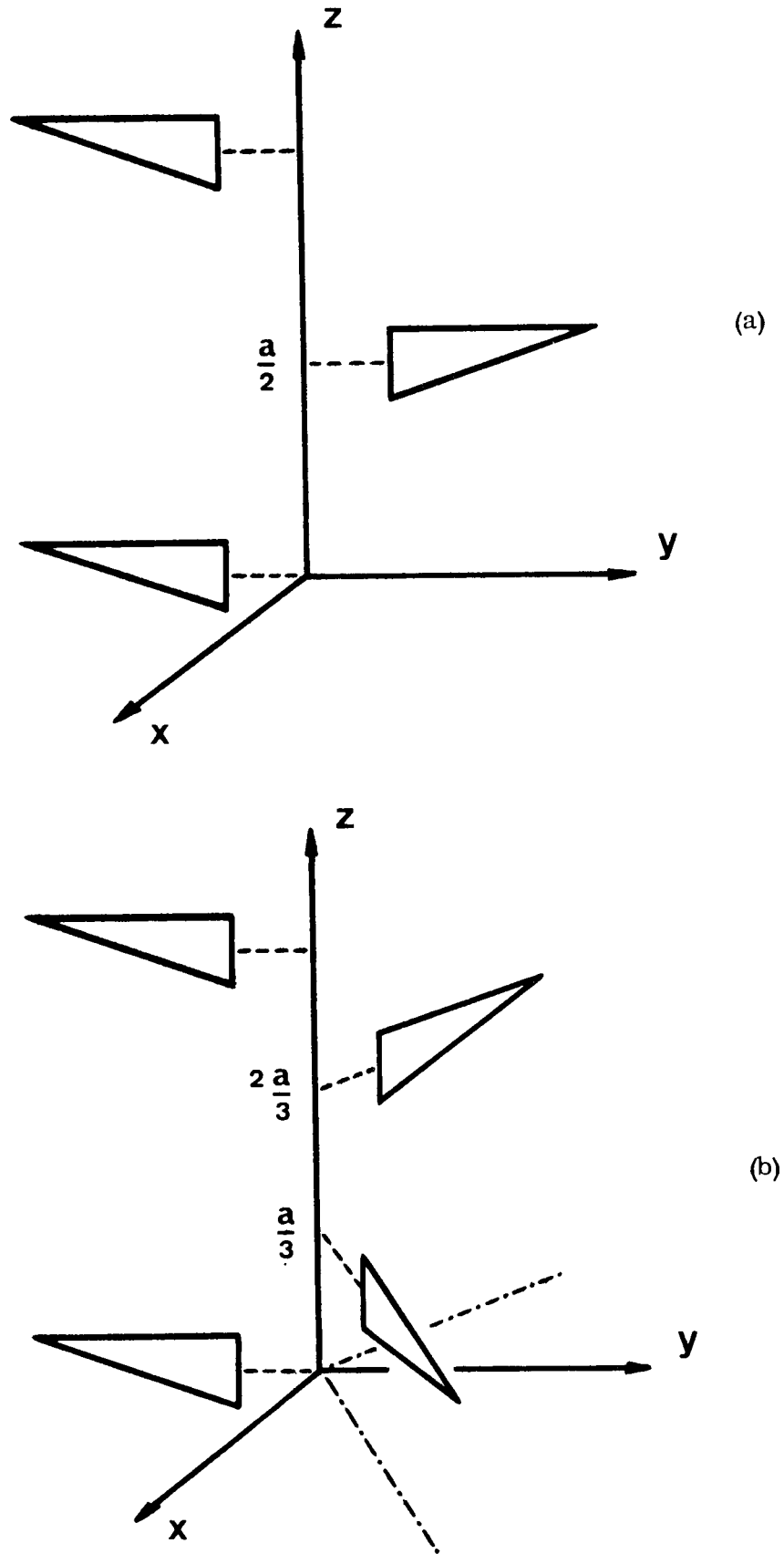


Fig. II.12. Ejemplo de eje helicoidal de orden 2 (a) y de orden (3), b. La presencia de un eje helicoidal aunque altera la distribución atómica local no afecta la simetría exterior de un cristal.

combinaciones que puede dar lugar a las mismas formas es ahora igual a 230. Estas 230 combinaciones de operaciones de simetría se denominan grupos espaciales. Cada uno de ellos representa una distribución de elementos de simetría dentro de una celda dada.

Resumiendo:

- los átomos pueden ordenarse periódicamente en el espacio de 230 maneras diferentes.
- estas 230 formas de distribuciones atómicas generan 32 formas macroscópicas de cristales, Tabla II.3.
- estas 32 formas se clasifican en 7 sistemas cristalinos.

Por lo tanto varias distribuciones atómicas pueden generar formas macroscópicas caracterizadas por el mismo grupo puntual de simetría. Por ejemplo el grupo puntual 2 del sistema monoclinico, Tabla II.3, puede alcanzarse con dos grupos espaciales, mientras que el grupo $2/m$ del mismo sistema se llega mediante cinco grupos espaciales distintos.

El primer símbolo en la nomenclatura de Herman-Mauguin de los grupos espaciales, una letra mayúscula, indica el tipo de red de Bravais

P, I, F

La descripción de los demás elementos de simetría es similar a la de los 32 grupos puntuales con la salvedad de que el orden corresponde a la orientación espacial del elemento respecto de los tres ejes cristalográficos. Así por ejemplo en el sistema tetragonal la secuencia de los elementos de simetría corresponde a

eje c, eje a, eje $[110]$

De esta manera $P \bar{4} m2$ indica que el eje c de la celda tetragonal primitiva tiene la simetría 4, los dos ejes a son paralelos a un plano m, y la dirección $[110]$ es un eje de orden 2. En el sistema cúbico el ordenamiento de los elementos de simetría es: a, $[111]$, $[110]$. Puesto que la dirección $[111]$ tiene la simetría 3 o $\bar{3}$, la aparición de un 3 en segundo lugar caracteriza sin lugar a dudas al sistema cúbico.

II.5.4 Posiciones Equivalentes

En un cristal caracterizado por un grupo espacial dado, existen átomos iguales relacionados unos con otros mediante las operaciones de simetría correspondientes al grupo. Si un átomo está situado en un punto genérico de coordenadas fraccionarias x, y, z , dentro de la celda elemental, el conjunto de elementos de simetría le hace corresponder un cierto número de átomos equivalentes. Las coordenadas de las po-

siciones generadas por el grupo se denominan posiciones equivalentes, y la cantidad de estas posiciones se denomina rango. Puede ocurrir también que el punto genérico se encuentre sobre un plano o un eje de simetría. En este caso el número de puntos equivalentes es siempre menor que si el punto inicial se encuentra en una posición general. El caso extremo correspondería al punto inicial situado sobre el centro de simetría, con lo cual todos los puntos equivalentes se confundirían con ese centro.

Por ejemplo, en la Tabla II.5 se muestra la lista de posiciones equivalentes para el grupo $P \bar{4} 2_1 c$ correspondiente al sistema tetragonal derivado del grupo puntual $\bar{4} 2 m$ (Tablas Internacionales de Cristalografía, Vol.I). La primera columna indica el rango del conjunto de puntos equivalentes. Este es igual a 8 para una posición general. Cada conjunto está caracterizado además por letras minúsculas consecutivas, llamadas símbolos de Wyckoff, de tal manera que la última corresponde a la posición general.

TABLA II.5
POSICIONES EQUIVALENTES
DEL GRUPO ESPACIAL $P \bar{4} 2_1 c$

Rango	Símbolo de Wyckoff	Coordenadas de las posiciones equivalentes
8	e	$x, y, z; \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} - z$ $\bar{x}, \bar{y}, z; \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z$ $\bar{y}, x, z; \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + z$ $y, \bar{x}, \bar{z}; \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + z$
4	d	$0, \frac{1}{2}, z; \frac{1}{2}, 0, \bar{z}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} - z$
4	c	$0, 0, z; 0, 0, \bar{z}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z$
2	b	$0, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$
2	a	$0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

II.5.5 Nomenclatura Strukturbericht

En forma independiente de las designaciones en base a la nomenclatura de Herman-Mauguin los editores del "Strukturbericht" (Zeitschrift für Metallographie), en la actualidad "Structure Reports", han adoptado una nomenclatura simplificada para designar los tipos de estructura que se encuentran más frecuentemente. Así, las estructuras fcc se designan por A_1 , las bcc por A_2 , las hcp por A_3 . La estructura cúbica del diamante es A_4 en esta notación, y las aleaciones se denominan con la letra L.

Finalmente, es interesante destacar que ninguna información concerniente a los grupos espaciales puede obtenerse a partir de observaciones o experiencias macroscópicas. Los métodos de difracción, siendo el más generalizado de ellos el de rayos X, son los únicos que permiten decidir acerca del grupo espacial al cual pertenece un cristal. La teoría de grupos espaciales introducida originalmente como una abstracción matemática por Schoenflies y Fedorov, se convirtió en una herramienta imprescindible para todo cristalógrafo después del descubrimiento de la difracción de los rayos X por un cristal.

EJERCICIOS

- E.II.1 El cloruro de cesio es un ejemplo típico de cristal iónico, en el cual los átomos están ionizados y se mantienen unidos mediante fuerzas electrostáticas. La red que describe esta estructura es la cúbica simple, y el motivo está compuesto por un ión Cl^- y un ión Cs^+ . Tal como puede verse en la Fig. II.13 el motivo de repetición toma distintas formas según donde se elija el origen de la red.
- E.II.2 La llamada estructura hexagonal compacta, que designaremos por las iniciales hcp de "hexagonal close packed" se encuentra en algunos sólidos metálicos, como el berilio, magnesio, cobalto, zinc. El apilamiento compacto de átomos (que pueden considerarse como esferas rígidas, ver IV.3) puede originar una estructura tal como la esquematizada en la Fig. II.14 (a) en la cual se alternan sucesivamente dos capas de átomos dispuestos según una red hexagonal plana. La red de Bravais que describe esta estructura es la hexagonal (Fig. I.3).
En la celda de la Fig. II.14 (a) se puede ver que los vértices están ocupados por átomos de una de las dos capas, que llamaremos de tipo A, mientras que los átomos de la segunda, que llamaremos de tipo B, ocupan posiciones intermedias entre las dos anteriores (ver Sección IV.5.2). De esta manera la celda hexagonal contiene en su interior tres átomos de la capa B, que sumados a los 12 de los vértices, compartidos entre seis celdas, y los dos átomos en los centros de las bases, compartidos a su vez con dos celdas, constituyen un motivo compuesto en total por 6 átomos. La misma estructura puede

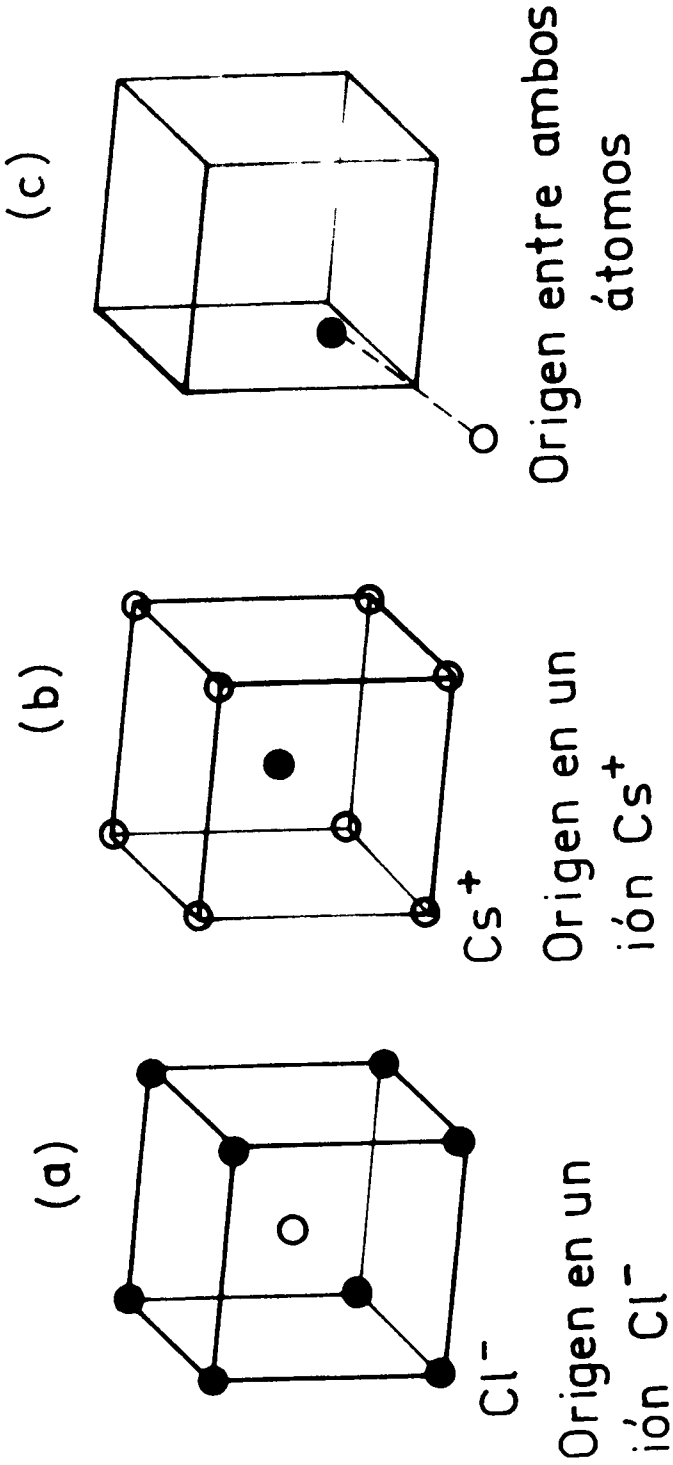


Fig.II.13. La red que describe la estructura del ClCs es la cúbica simple y el motivo está compuesto por un ión Cl^- y un ión Cs^+ . El motivo de repetición puede ser distinto según donde se tome el origen de la red.

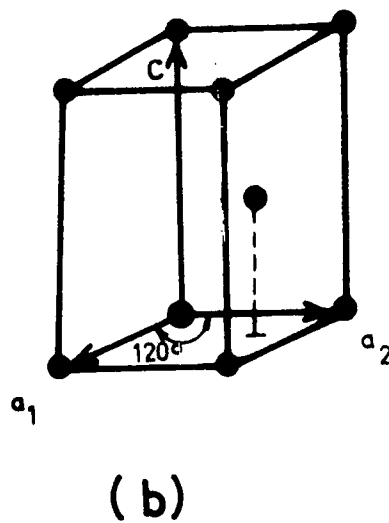
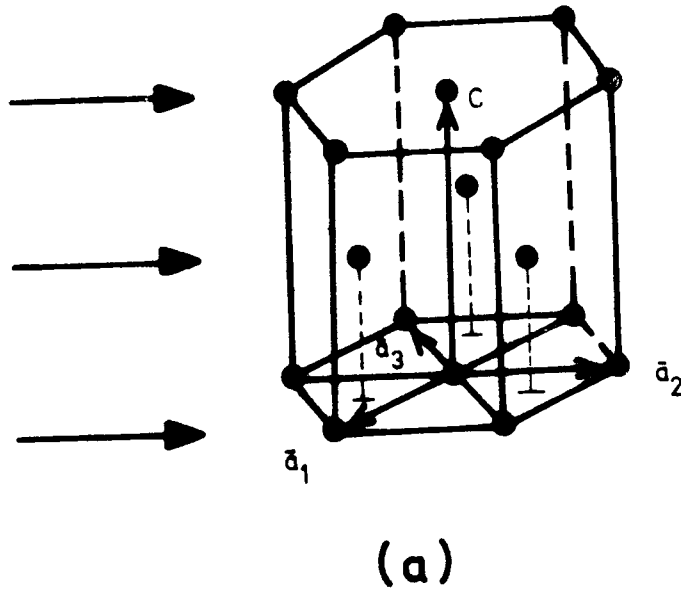


Fig.II.14. Dos celdas posibles para describir la estructura hexagonal compacta.
 a) Celda de base hexagonal que contiene un motivo compuesto por 6 átomos.
 b) Celda monoclnica, con $a_1=a_2$ y $\gamma=120^\circ$ que contiene un motivo de dos átomos.

Fig.II.15. Dibujo periódico bidimensional generado por la repetición de un motivo o configuración básica sobre los nodos de una red plana.

describirse por medio de una celda más sencilla, que es un caso particular del sistema monoclinico, con $a = b$ y $\gamma = 120^\circ$, ver Tabla I.2 y Fig. II.14 (b). Esta celda contiene 8 átomos de la capa A, compartidos con 8 celdas vecinas, y un átomo de la capa B en su interior. Por lo tanto el motivo que describe el sistema hexagonal compacto, referido a esta nueva celda, consiste en dos átomos. Estos están situados en las posiciones

$$(000) \quad \left(\frac{1}{3} \quad \frac{2}{3} \quad \frac{1}{2} \right)$$

referidas a los ejes $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$ y $\vec{c}$ de la Fig. II.14 (b). Es interesante notar que los puntos definidos por estas coordenadas no tienen la misma configuración de vecinos, y por lo tanto, no constituyen una red por sí mismos, de acuerdo con la definición.

E.II.3

En el dibujo periódico de la Fig. II.15 determinar:

- La celda de máxima simetría
- El motivo o configuración básica
- Los elementos de simetría
- El grupo espacial bidimensional
- Las coordenadas de las partes equivalentes a uno dado, en posición general
- Idem, para posiciones especiales

E.II.4

Cuáles son las operaciones de simetría que caracterizan las figuras planas dadas por la Fig. II.16 (a)(b)(c)(d). Escribir los respectivos símbolos de Herman-Mauguin.

Se ve inmediatamente que la Fig. II.16 (a) posee solamente un eje de orden 3, cuya notación de Herman-Mauguin es 3, y pertenece al grupo puntual 7 de la Tabla II.1. La Fig. II.16 (b) además del eje de orden 3, posee una línea m (normal al eje de referencia x), que por sucesivas rotaciones de $2\pi/3$ origina dos nuevas líneas m, formando 120° entre sí. La notación completa es 3 m, al igual que la reducida, y el grupo puntual respectivo es el N° 8 de la Tabla II.1.

La Fig. III.16 (c) posee solamente un eje de rotación de orden 6, grupo 9 de la Tabla II.1. Pero la Fig. III.16 (d) posee además una línea m normal al eje x, que por sucesivas rotaciones de $2\pi/6$ da origen a dos nuevas líneas m. La existencia de estos dos elementos de simetría implica necesariamente una segunda familia de líneas m, originadas por sucesivas rotaciones de $2\pi/6$ a partir de una línea que forma 30° respecto de la línea m normal al eje x. La notación completa de Herman-Mauguin es por lo tanto 6 mm, que se puede reducir a 3 m, grupo 10 de la Tabla II.1.

E.II.5

Demostrar mediante un dibujo adecuado en el plano, que una rotación de orden 4 y una línea m, producen otras dos líneas a 45° respecto de la primera.

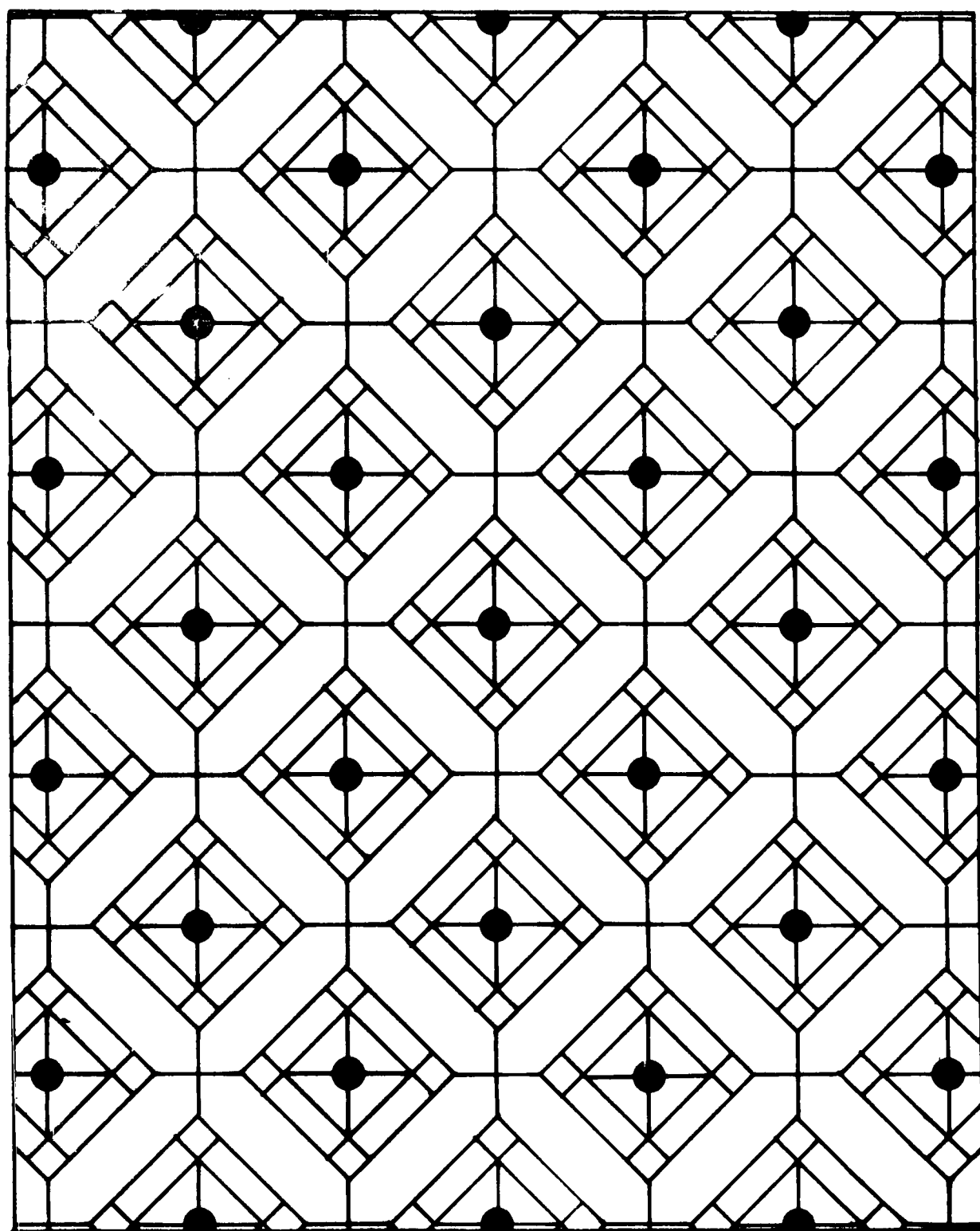


Fig. II.15. Dibujo bidimensional period co.

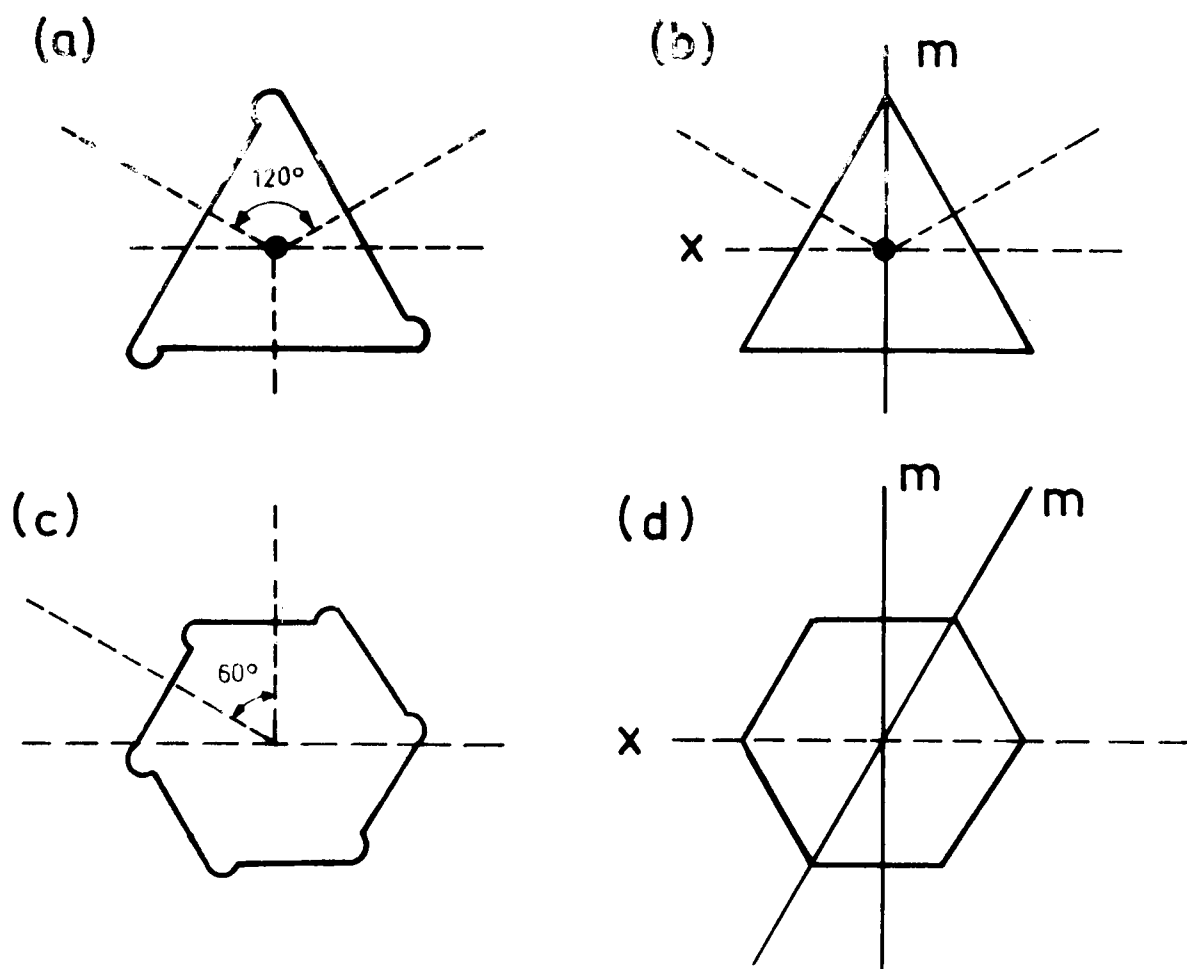


Fig.II.16. Figuras planas con distintas simetrías.

- E.II.6 Demostrar que la simetría $\bar{2}$ es equivalente a m , y que $3/m$ es equivalente a $\bar{6}$.
- E.II.7 El cobre cristaliza en una estructura cúbica de caras centradas, con un átomo en cada nodo de la red. Indicar los elementos de simetría de esa estructura.
- E.II.8 Verificar gráficamente las simetrías de la estructura descrita por el grupo espacial

$$I 4/m \bar{3} 2/m$$

que corresponde a la estructura A_2 en la nomenclatura "Strukturbericht". La celda de Bravais es cúbica de cuerpo centrado, El símbolo $4/m$ indica que existe un eje de rotación de orden 4, en las direcciones de la forma $\langle 001 \rangle$, Fig. II.17 y que es perpendicular a un plano de reflexión m de la forma $\{001\}$. El símbolo $\bar{3}$ indica la existencia de un eje de orden 3 de rotoinversión. Este eje es evidentemente uno de la forma $\langle 111 \rangle$. Finalmente, existe un eje de orden 2, de la forma $\langle 110 \rangle$ perpendicular a un plano m de la forma $\{110\}$ ver Fig. II.17. La rotación reducida $I m 3 m$ indica la existencia de un plano de reflexión del tipo $\{001\}$, de un eje de orden 3 de tipo $\langle 111 \rangle$ y de un plano de reflexión de tipo $\{110\}$. La sola presencia de estas tres operaciones incluye necesariamente todos los elementos de simetría descritos por la rotación completa.

- E.II.9 Qué elementos de simetría se encuentran en la estructura hexagonal compacta.
- E.II.10 Utilizando las tablas internacionales de la cristalografía, Vol.I, analizar los símbolos de los siguientes grupos espaciales; indicando en cada caso los elementos de simetría que intervienen, cuál es el grupo puntual del cual deriva cada uno de los grupos dados y cuál es el sistema al que pertenece cada uno de ellos

$$P 4_3 2,2 \quad P 4_2/nm \quad P 6_3/m mc$$

Comparar la rotación completa con la abreviada.

- E.II.11 a) Una de las formas cristalinas del elemento C es el diamante cuya estructura es cúbica, de parámetro de red $a = 7.91 \text{ \AA}$. Si su densidad es 3.51 gr/cm^3 , cuántos átomos de C contiene cada celda. Peso atómico del C: 12.01. Número de Avogadro $N = 6.06 \times 10^{23}$ - Respuesta: 8.
- b) Sabiendo que el grupo espacial de la estructura diamante es $F 4_1/\bar{3} 2/m$, determinar las posiciones de los átomos en la celda elemental -

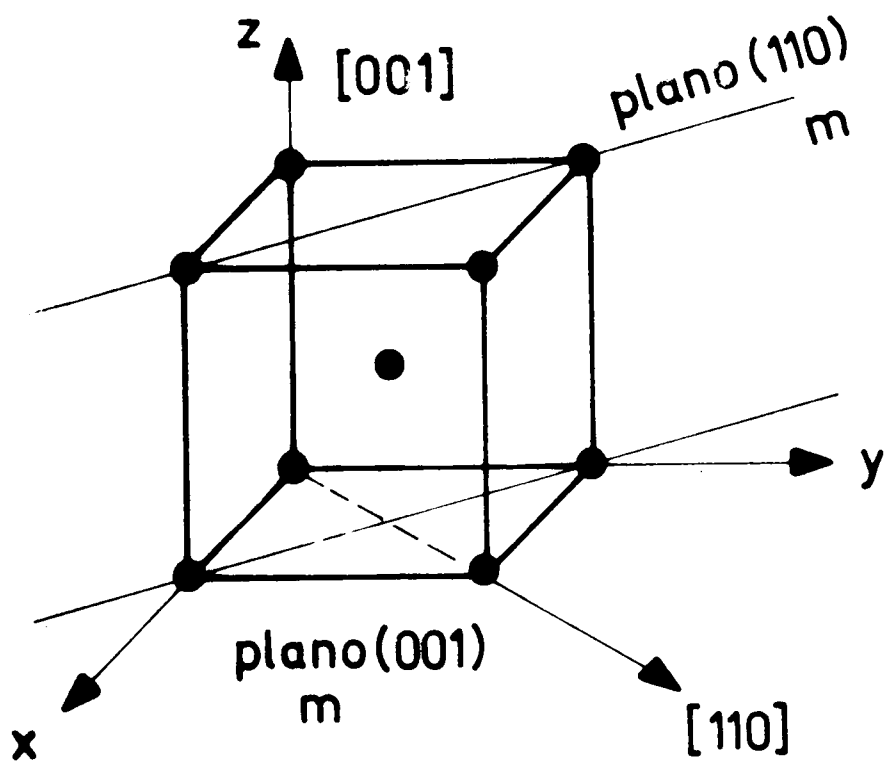


Fig. II.17. Elementos de simetría de la estructura cúbica de cuerpo centrado.

Sugerencia: consultar Tablas Internacionales de Cristalografía y en base al resultado del ejercicio anterior, analizar las posibles posiciones especiales. Respuesta: $0,0,0$; $0,\frac{11}{22},\frac{1}{2}$; $\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$; $\frac{1}{2},\frac{1}{2},0$;

$$\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4} ; \frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4} ; \frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4} ; \frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}$$

III LA PROYECCION ESTEREOGRAFICA

III.1 PROPIEDADES GENERALES

Hasta el presente se ha recurrido al uso de dibujos en perspectiva siempre que se ha necesitado representar en el plano del papel las distintas características tridimensionales de redes y cristales. Esto puede hacerse en forma relativamente fácil para estructuras cúbicas o hexagonales, pero resulta sumamente engorroso al tratar estructuras más complejas. Surge entonces la necesidad de representar de alguna otra manera figuras espaciales sobre un plano, conservando en lo posible el mayor número de características geométricas de las mismas.

Estas representaciones planas de figuras tridimensionales se denominan en general proyecciones.

El pasaje de la figura espacial al dibujo plano correspondiente puede hacerse de varias maneras. Cada tipo de proyección conserva en el plano un conjunto de propiedades de la figura original, y por lo tanto la manera de proyectar dependerá del problema particular considerado. Como en cristalografía interesan fundamentalmente las relaciones angulares entre familias de planos y ejes, se busca una proyección que conserve esas relaciones del cristal tridimensional. La llamada proyección estereográfica cumple precisamente con esta condición y es la de uso más frecuente en metalurgia física. La proyección estereográfica da una imagen simple y precisa de las relaciones angulares y elementos de simetría, y elimina detalles, en general sin importancia, concernientes al tamaño del cristal o formas exteriores. Dadas las innumerables aplicaciones de esta proyección, se hará a continuación un estudio más detallado de sus propiedades.

La orientación de un plano cristalográfico queda determinada mediante el ángulo que forma con un plano tomado como referencia. Este ángulo es igual al que forman sus respectivas normales. Por lo tanto la orientación de los planos de una forma $\{hkl\}$, queda definida por el conjunto de sus normales que se trazan a partir de un origen común.

Consideremos ahora el cristal situado en el centro de una esfera, llamada esfera de referencia, cuyo diámetro sea grande respecto de las dimensiones del cristal. El haz de segmentos constituido por las normales a la forma de planos considerada, corta a la superficie de la esfera de referencia en puntos a los que se denomina polos. Por ejemplo, en la Fig. III.1 (a) se han dibujado los polos de la forma $\{100\}$. Cada polo representa, a través de su posición sobre la esfera de referencia, la orientación de una familia de planos en el espacio. La distancia angular θ entre dos polos, medida sobre la esfera a lo largo de un círculo máximo, es igual al ángulo θ que forman los planos correspondientes, Fig. III.1 (b).

También es posible representar cada plano por su intersección con la esfera de referencia. Si el plano pasa por el centro de ésta, la intersección será un círculo máximo, en caso contrario será un círculo menor. Dos planos que pasan por el centro de la esfera, cortan a la misma según dos círculos máximos. La distancia angular entre

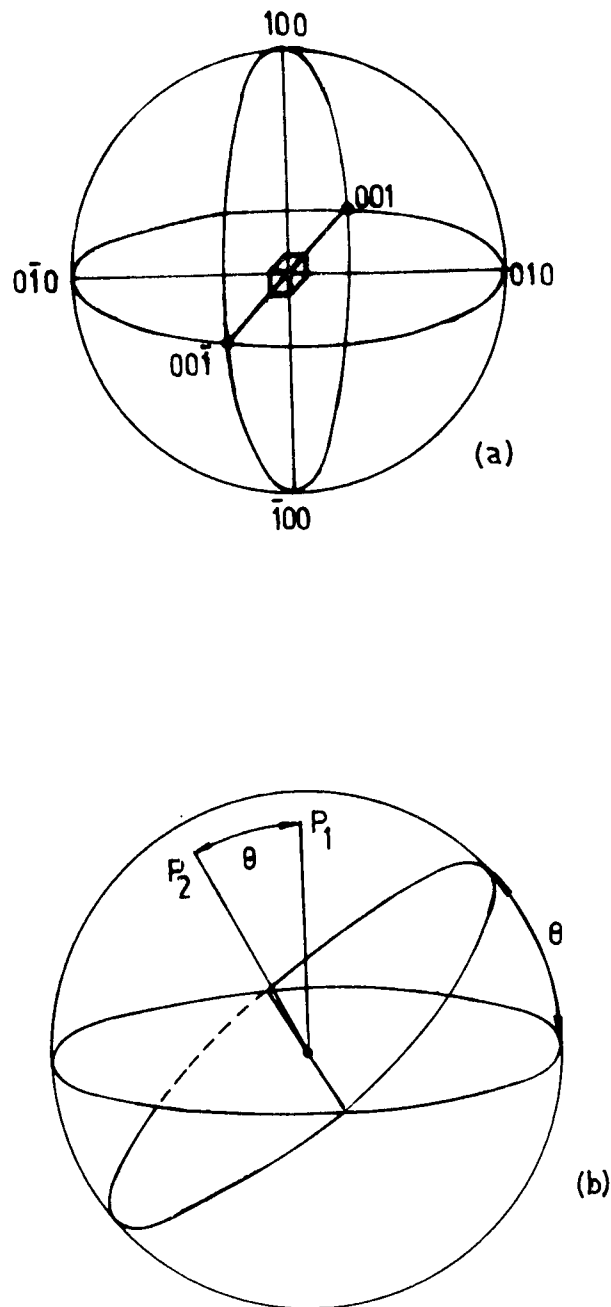


Fig.III.1. a) Polos de la forma $\{100\}$ del sistema cúbico. Cada polo corresponde a la intersección de la normal a una familia de planos con la esfera de referencia.
b) El ángulo θ formado por dos planos es igual a la distancia angular entre los polos correspondientes sobre la esfera de referencia.

estos dos círculos, medida sobre la esfera, es igual al ángulo θ que forman los dos planos entre sí, Fig. III. 1 (b). En cualquiera de los dos casos, la medición de ángulos entre planos en el espacio se ha reducido a la medición de distancias angulares sobre la esfera de referencia. Pero para resolver el problema planteado inicialmente es necesario llevar esta representación a un plano.

En la proyección estereográfica cada dirección, o normal a un plano cristalino, se representa primero en la esfera de referencia, tal como se ha mencionado, por su polo P, y éste se proyecta luego sobre un plano tangente a la esfera, Fig. III. 2. La proyección se realiza uniendo el polo P con el extremo B del diámetro de la esfera que pasa por A y C. De esta manera, a una dirección, o a un plano que tiene su polo respectivo en P, le corresponde una "imagen" P' en el plano de proyección, que es la intersección de la recta BP con ese plano. En otras palabras, el punto P' es la "sombra" del punto P sobre el plano tangente a la esfera en A, si se considera que existe una fuente luminosa en el punto B.

El círculo máximo NESO que pasa por el centro de la esfera, se proyecta como el círculo N'E'S'O', y este último se denomina círculo de referencia. Todo polo perteneciente al hemisferio situado a la derecha del plano NESO se proyecta dentro de este círculo, Fig. III.2, mientras que aquellos del hemisferio izquierdo se proyectarían fuera de él. Pero la distorsión de esta proyección sería demasiado pronunciada y se prefiere en cambio proyectar este último hemisferio sobre un plano tangente a la esfera en B, siendo ahora A el punto de proyección. Las proyecciones de los dos hemisferios se pueden dibujar en realidad superpuestas dentro de un mismo círculo de referencia, diferenciándose los puntos correspondientes a uno u otro hemisferio con los signos (+) y (-) o también con dos colores distintos. Si el plano de proyección no es tangente a la esfera en A o B, sino que se sitúa en cualquier otra posición normal al eje AB, solamente cambia la escala de la proyección, pero no la distribución de los puntos. Por lo tanto puede tomarse también el plano ecuatorial NESO como plano de proyección. Girando el círculo NESO alrededor del eje NS, se puede ver que todo círculo máximo que pasa por los puntos N y S se proyecta como un arco dentro del círculo de referencia. En cambio el círculo horizontal ABEO se proyecta como el diámetro O'E' del mismo círculo. Resumiendo, las propiedades más importantes en la proyección estereográfica son las siguientes:

- 1) A un arco de circunferencia situado sobre la esfera de referencia le corresponde también un arco de circunferencia sobre el plano de proyección.
- 2) Todo círculo sobre la esfera de referencia se proyecta también como un círculo en el plano de proyección, aunque el centro del círculo proyectado no coincide con la proyección del centro del círculo original.
- 3) Las relaciones angulares entre arcos de circunferencia situados sobre la esfera de referencia se conservan invariantes en el plano de proyección.

III.2 LA RED DE WULFF

Consideremos ahora a la esfera de referencia dividida por círculos máximos que pasan por los puntos N y S formando p.ej. 10° entre sí (meridianos) y círculos

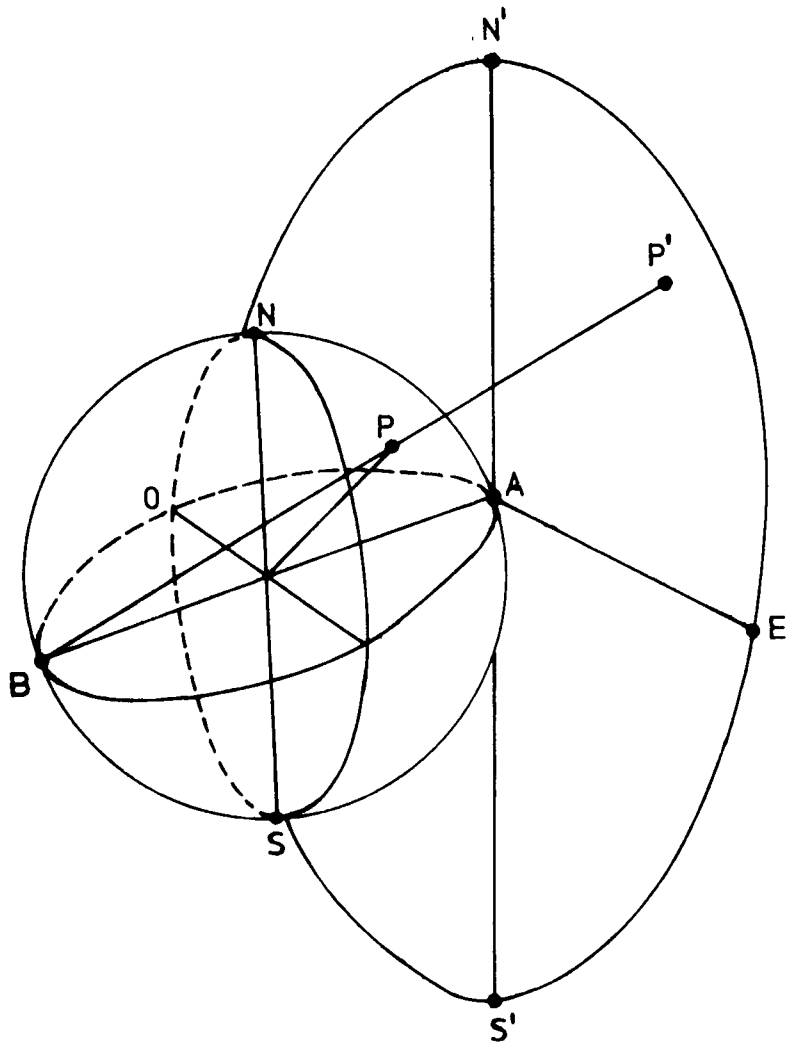


Fig.III.2. Proyección estereográfica. Una dirección o una normal a una familia de planos cristalinos se representa primero en la esfera de referencia por un polo P y éste se proyecta luego sobre un plano tangente a la esfera, punto P'. El círculo N'E'S'O', proyección del círculo máximo NESO, se denomina círculo de referencia.

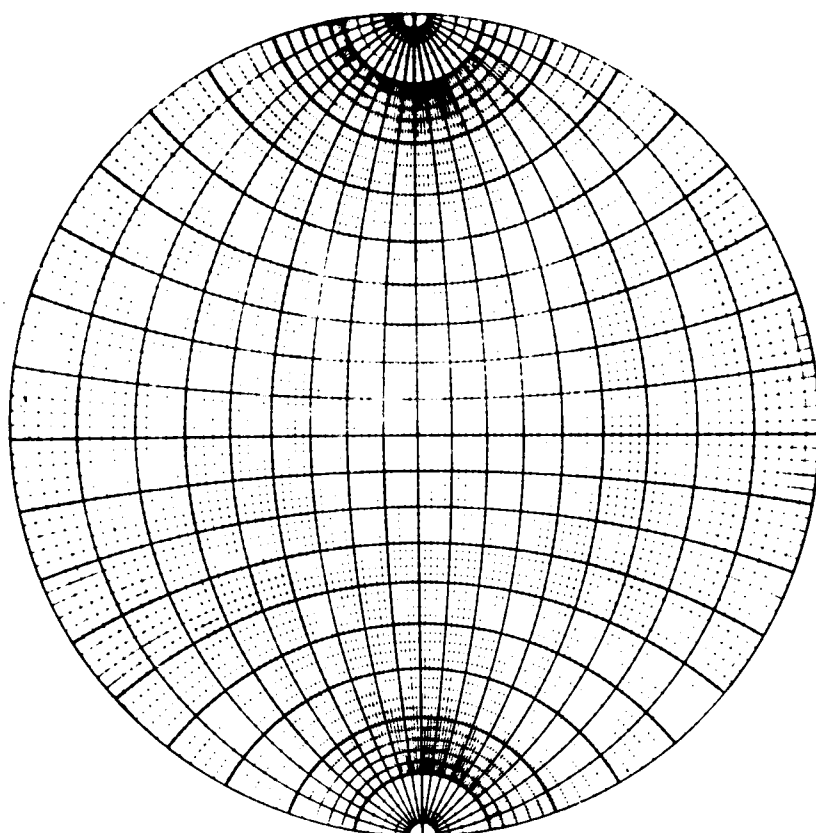
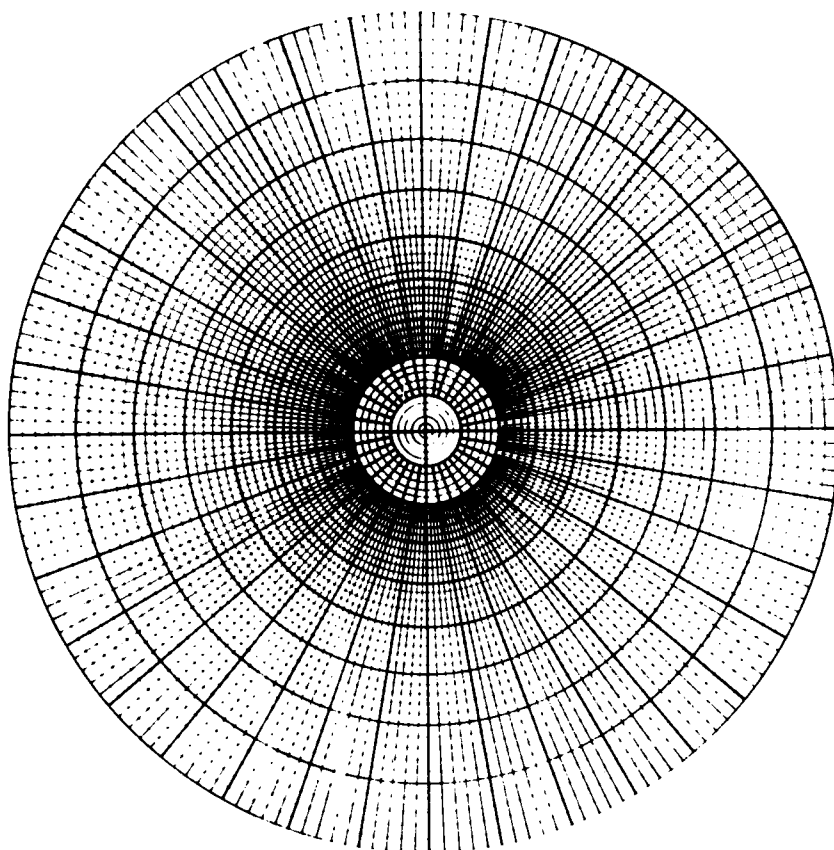
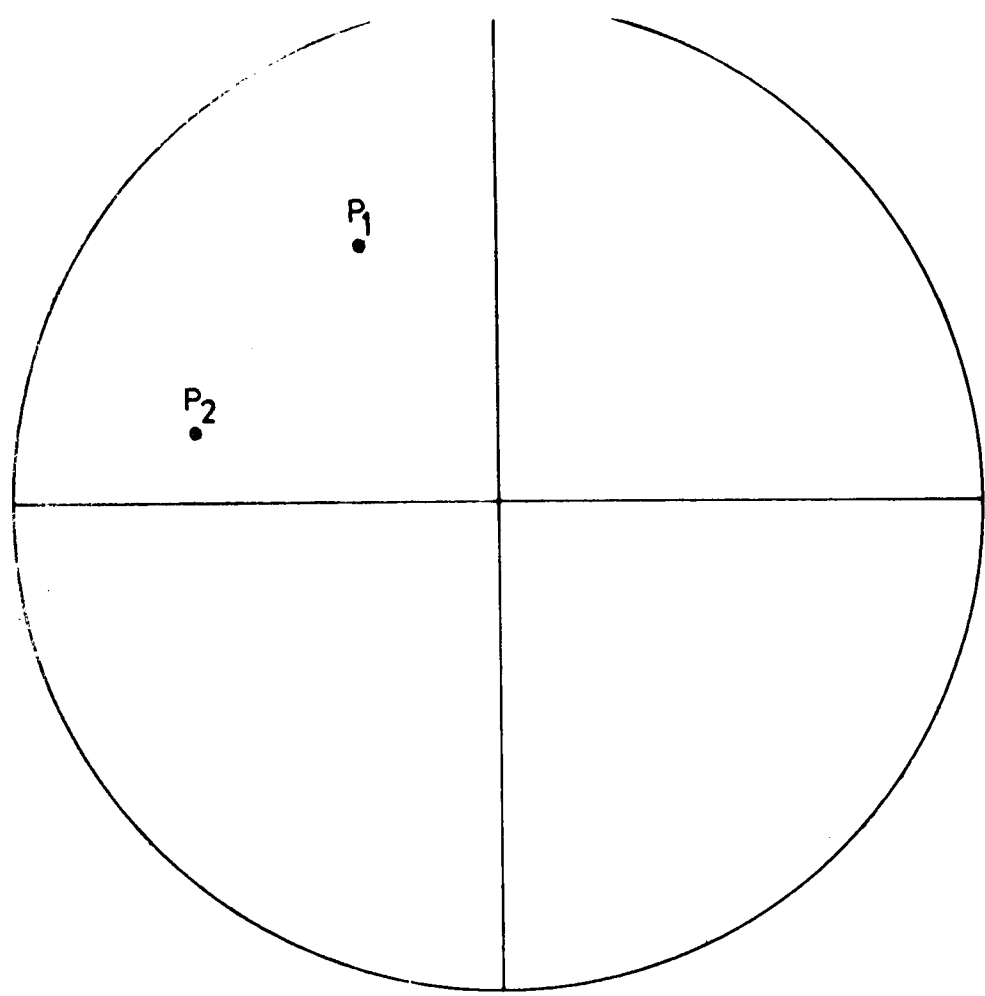
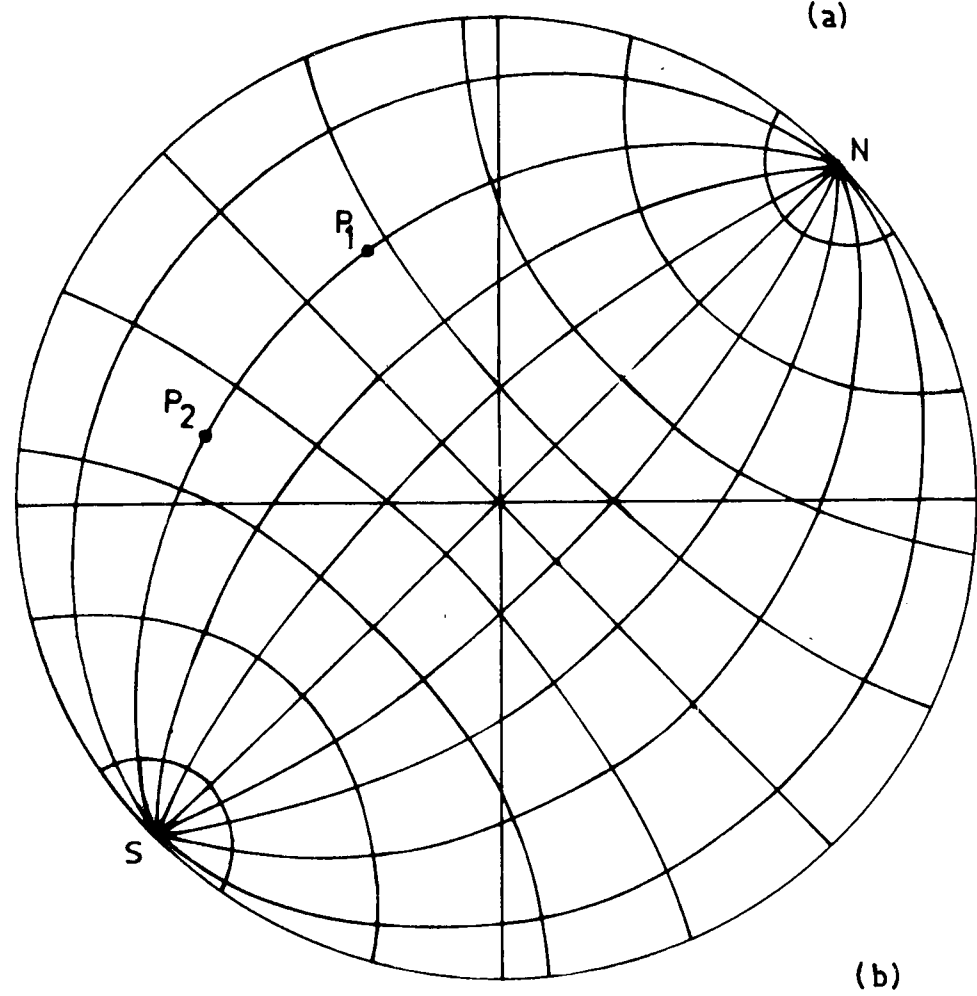
**a****b**

Fig.III.3. Dos proyecciones distintas de los meridianos y paralelos de la esfera de referencia: a) Red de Wulff; b) Proyección polar.



(a)



(b)

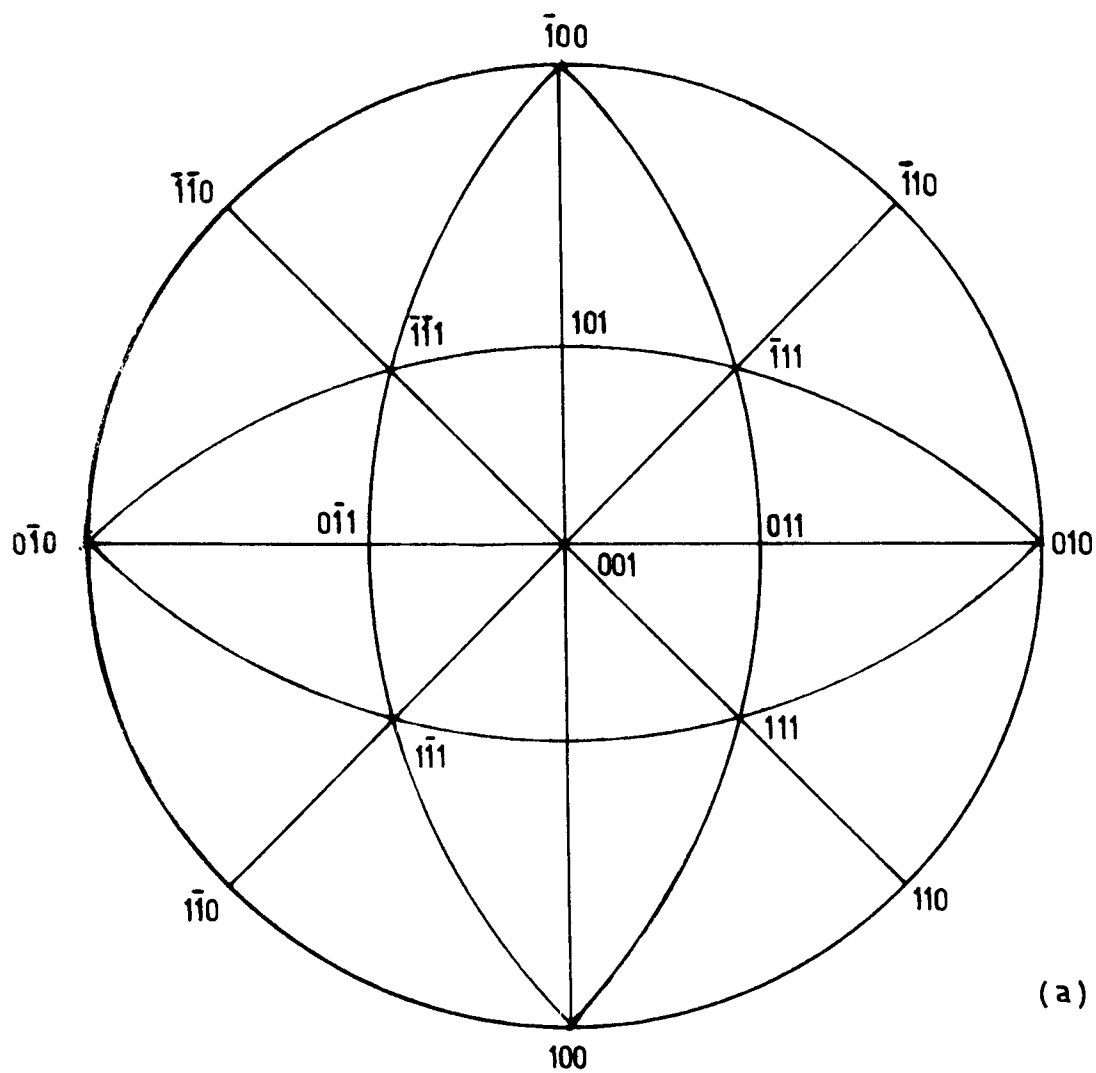
Fig.III.4. Medición de ángulos en la proyección estereográfica. Se gira la red de Wulff hasta que los dos puntos se sitúen sobre el mismo círculo máximo y sobre ésta se mide directamente el ángulo.

menores concéntricos con el eje NS (paralelos) también separados entre sí por la misma distancia angular de 10° . La proyección de esta distribución sobre un plano tangente a la esfera de origen a la llamada red de Wulff, que resulta de suma utilidad para el empleo práctico de la proyección estereográfica, Fig. III.3 (a). Si la proyección se efectúa sobre un plano paralelo al plano ecuatorial ABEO, normal al eje NS, se obtiene en cambio, la llamada red polar, Fig. III.3 (b).

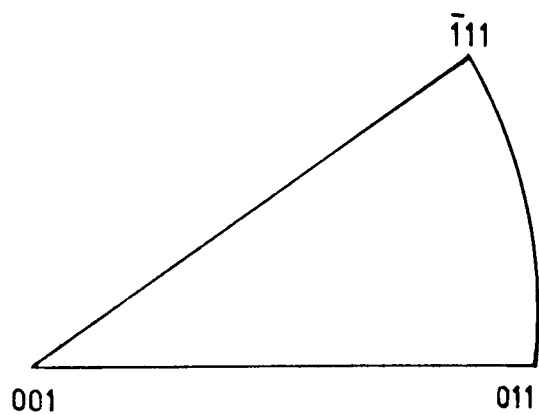
Es interesante notar, tanto en la proyección polar como en la red de Wulff, que la proyección estereográfica conserva los ángulos tal como se mencionó en la sección III.1. Se puede observar en la Fig. III.3 que en efecto, la proyección de cualquier meridiano corta a la proyección de cualquier paralelo bajo un ángulo de 90° conservándose de esta manera las relaciones existentes entre los mismos sobre la esfera de referencia. Una aplicación inmediata de la red de Wulff es la determinación de ángulos en la proyección estereográfica. Por ejemplo, para medir el ángulo que forma dos direcciones dadas en el espacio, cuyos polos respectivos son P_1 y P_2 , Fig. III.4 (a) sencillamente se superpone la red y se gira la proyección (o la red) hasta que los dos puntos se sitúen sobre la proyección de un mismo círculo máximo. El ángulo entre los dos polos se mide directamente sobre dicho círculo máximo, Fig. III.4 (b). En general, en un laboratorio se suele disponer de redes de Wulff impresas sobre papel transparente. Se puede utilizar entonces un papel cualquiera para marcar los trazos o los polos y superponer al mismo la red transparente para realizar las mediciones.

III.3 LA PROYECCION TIPO

La proyección estereográfica de planos cristalinos en la cual uno de ellos es paralelo al plano de proyección, se denomina proyección tipo. En el sistema cúbico se suelen elegir para ello los planos de las formas $\{100\}$, $\{110\}$ o $\{111\}$. Estas proyecciones son sumamente útiles para visualizar las orientaciones relativas a las distintas familias de planos o direcciones de un cristal. Para construir una proyección tipo basta con conocer los ángulos que forman entre sí los planos cristalinos (o sus respectivas normales). Estos ángulos dependen de los planos (hkl) considerados, las longitudes a , b , c de las aristas de la celda primitiva y los ángulos que forman entre sí. Es decir que en general, una proyección tipo vale para un cristal dado. Sin embargo, en muchos casos una misma proyección sirve para todos los cristales de un sistema dado. Tal es el caso del sistema cúbico, de sumo interés en metalurgia física, en el cual los ángulos que forman entre sí dos planos cualesquiera sólo dependen de sus índices de Miller. Por lo tanto es posible construir una tabla de ángulos interplanares para todos los cristales de dicho sistema y a partir de ella obtener las proyecciones tipo que se necesiten (ver ejercicio E.III.4). En la Fig. III.5 se muestra en forma esquemática, los principales polos de una proyección tipo (001). En el Apéndice se muestran en forma mucho más completa las proyecciones tipo más utilizadas en los sistemas cúbico y hexagonal.



(a)



(b)

Fig.III.5. Proyección tipo (001) del sistema cúbico. Los polos de las formas $\{100\}$, $\{110\}$ y $\{111\}$ dividen la proyección en 24 triángulos que son cristalográficamente equivalentes, dadas las simetrías del sistema cúbico.

III.4 EL TRIANGULO FUNDAMENTAL

Consideremos la proyección tipo de la Fig. III.5 (a). Los polos correspondientes a los planos de las formas $\{100\}$, $\{110\}$ y $\{111\}$ determinan 24 figuras de tipo triangular que son cristalográficamente equivalentes dadas las simetrías del sistema cúbico. Cada una de las figuras se denomina triángulo fundamental, dado que constituyen el elemento básico para representar la orientación de un plano o una dirección en un cristal. En efecto, para determinar el eje de un monocristal, o la normal a un grano cristalino dado, no es necesario ubicar el polo respectivo en toda la proyección tipo, puesto que por las simetrías del sistema cúbico, toda dirección P siempre estará situada dentro de uno de los triángulos mencionados, Fig. III.5 (b). Mediante esta representación, solamente queda una indeterminación respecto de posibles rotaciones del cristal alrededor de la dirección P, pero éstas no tienen mayor importancia en la mayoría de los problemas que se presentan en metalurgia.

III.5 UTILIZACION DE LA PROYECCION ESTEREOGRAFICA

Veremos a continuación algunas de las aplicaciones más comunes de la proyección estereográfica. Como ya se ha dicho en la sección III.1, los problemas más frecuentes de metalurgia física están relacionados con la determinación de ángulos entre dos planos cristalinos, entre dos direcciones dadas o entre una dirección y un plano.

III.5.1 Medición del Angulo entre dos Planos

La medición del ángulo entre dos planos puede realizarse de dos maneras. Un plano puede representarse por su traza sobre la esfera de referencia. Esta traza es un círculo máximo P_1 que se proyecta de la manera indicada en la Fig. III.6 (a). Otro plano P_2 tendrá una proyección que será también un círculo máximo. El ángulo α entre los dos planos se determina entonces midiendo el ángulo entre los círculos máximos correspondientes. Para ello se trazan las tangentes a ambos en el punto de intersección, puesto que, como ya se ha mencionado, las relaciones angulares son conservadas en la proyección estereográfica.

Si se conocen los polos correspondientes a los dos planos, el ángulo entre los mismos se mide directamente haciendo coincidir un círculo máximo de la red de Wulff con los dos polos, tal como se indicó en la sección III.2, Fig. III.4. Este método es más preciso que el anterior y es el que se utiliza normalmente. El primer caso siempre se puede reducir a este último puesto que si se conoce la traza de un plano, el polo correspondiente se determina muy fácilmente. En efecto, como la normal a un plano forma 90° con el mismo, se hace coincidir un círculo máximo de la red de Wulff con la traza del plano y se miden 90° a lo largo del diámetro $O'E'$ de la misma red, Fig. III.6 (b). El punto P'_1 así obtenido es el polo correspondiente al plano P_1 . De la misma manera se obtiene el punto P'_2 correspondiente al plano P_2 . El ángulo α entre los dos planos es el indicado en la Fig. III.6 (c).

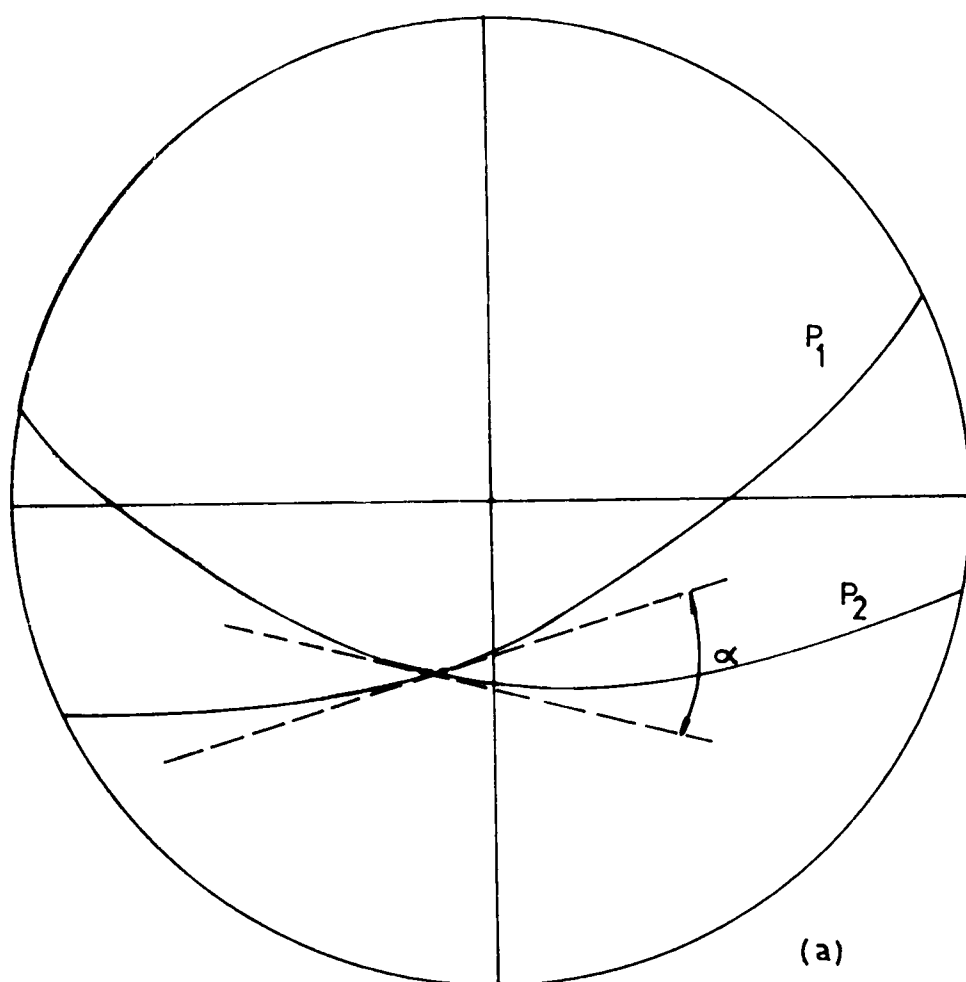
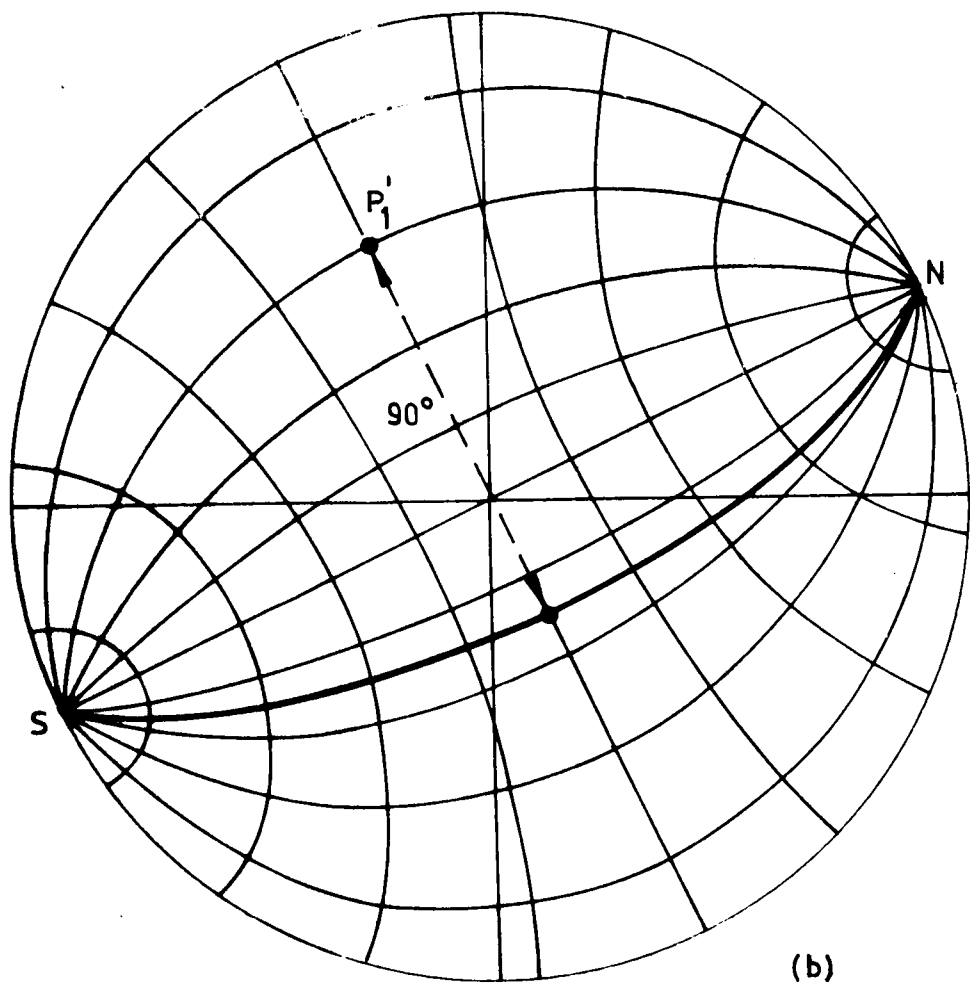


Fig.III.6. a) Medición del ángulo entre dos planos.

Si los dos planos se representan en la proyección mediante sus trazas correspondientes, el ángulo que forman entre ellos es igual al que forman las tangentes en el punto de intersección.

b) Determinación del polo de un plano a partir de su traza.

c) Medición del ángulo entre dos polos P'_1 y P'_2 .



III.5.2 Rotación de Polos

Un problema que se presenta frecuentemente es el de la rotación de los polos de una proyección estereográfica, cuando el cristal gira alrededor de un eje dado. Analizaremos a continuación tres posibilidades.

- a) Rotación alrededor de un eje normal al plano de proyección. Es la rotación, ya descrita, que se realiza alrededor del centro de la red de Wulff para situar dos polos sobre un mismo círculo máximo. Fig. III.4.
- b) Rotación alrededor de un eje paralelo al plano de proyección. Siempre se puede reducir este caso al de una rotación alrededor del eje NS. Si el eje de rotación no es paralelo a NS basta rotar la red de Wulff alrededor de su centro hasta que ambos sean coincidentes y luego se desplazan los polos sobre sus respectivos paralelos (líneas de latitud) el número de grados requeridos en la rotación.

Consideremos entonces el caso de la Fig. III.7. Al rotar el cristal alrededor del eje NS, cada polo se desplaza a lo largo de su respectivo paralelo (línea de latitud) y por lo tanto es suficiente con que este desplazamiento, medido en grados, sea igual al ángulo de rotación del cristal. Tal es el caso de los polos A_1 y B_1 que luego de una rotación de 60° pasan a las posiciones A_2 y B_2 respectivamente. En cuanto al punto C_1 de la misma Fig. III.7 es necesario tener en cuenta que luego de desplazarse 40° en el sentido OE, alcanza el borde de la proyección. Los 20° restantes son recorridos sobre el otro hemisferio de la proyección. El punto final C_2 debe por lo tanto marcarse con un signo (-). Por el contrario un punto como el D_1 situado inicialmente sobre el hemisferio negativo, durante la misma rotación se desplaza primero un ángulo igual a 40° en el sentido EO hasta alcanzar el borde de la proyección y luego, ya sobre el hemisferio positivo, recorre los 20° restantes en el sentido OE hasta la posición final D_2 . Todas estas operaciones pueden visualizarse fácilmente dibujando meridianos y paralelos sobre la esfera de referencia de la Fig. III.3 y estudiando los desplazamientos de los polos mencionados tanto sobre la esfera como en la proyección estereográfica.

- c) Rotación alrededor de un eje inclinado respecto del Plano de Proyección. En este caso es necesario descomponer la rotación en dos operaciones sucesivas: primero una rotación alrededor de un eje perpendicular al plano de proyección y luego otra rotación alrededor de un eje contenido en dicho plano. Para ilustrar el procedimiento a seguir consideremos el caso de la Fig. III.8 (a) en la cual se desea rotar el polo A_1 alrededor de un eje cuyo polo es B_1 , en un cierto ángulo, p.ej. de 40° en el sentido de las agujas del reloj.

Primero se efectúa una rotación alrededor de un eje normal a la proyección de manera de llevar B_1 al ecuador OE de la misma, Fig. III.8 (b). Luego se rota el ángulo necesario para que B_1 sea coincidente con el centro de la proyección, Fig. III.8 (c). Este ángulo resulta ser igual a 48° . Esta última operación afecta también al punto A_1 el cual después de rotar los mismos 48°

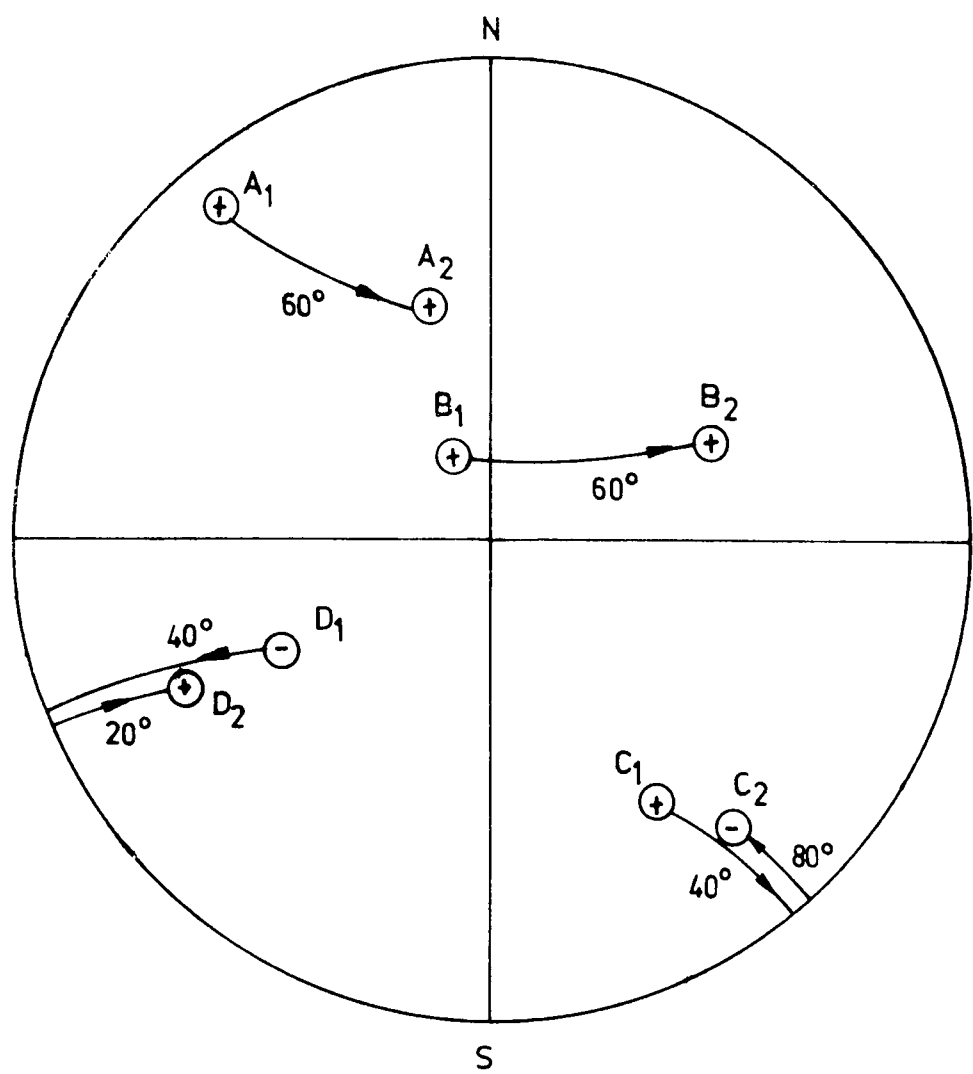


Fig.III.7. Rotación alrededor del eje NS. Cada polo se desplaza por su respectivo paralelo un ángulo igual al requerido en la rotación.

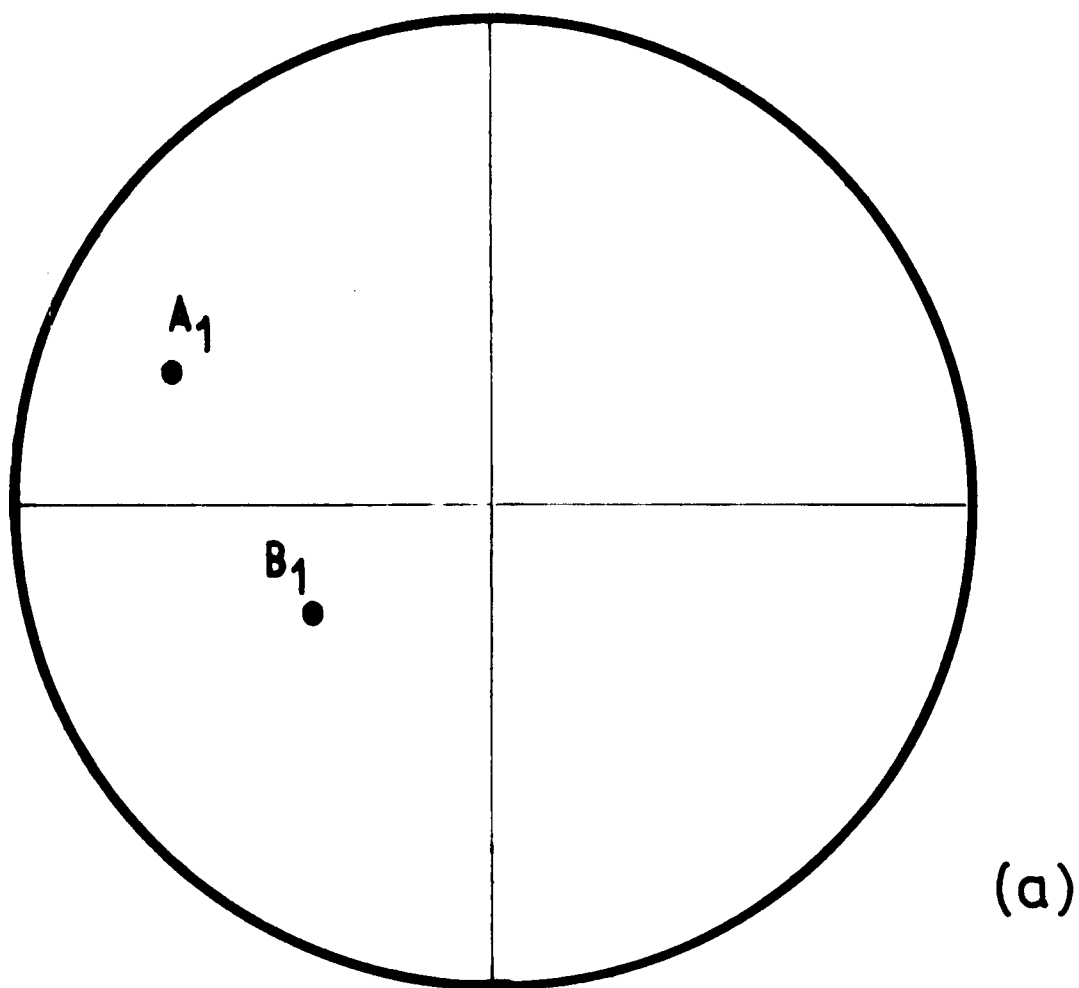
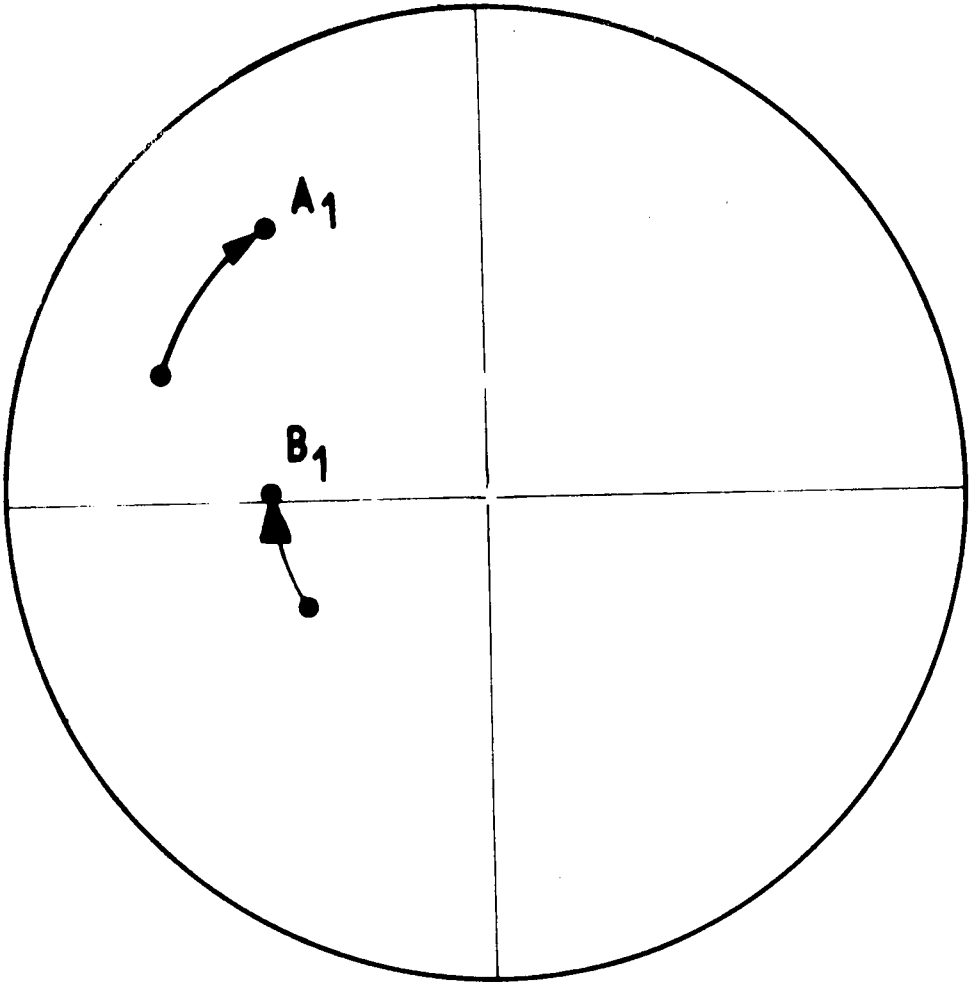
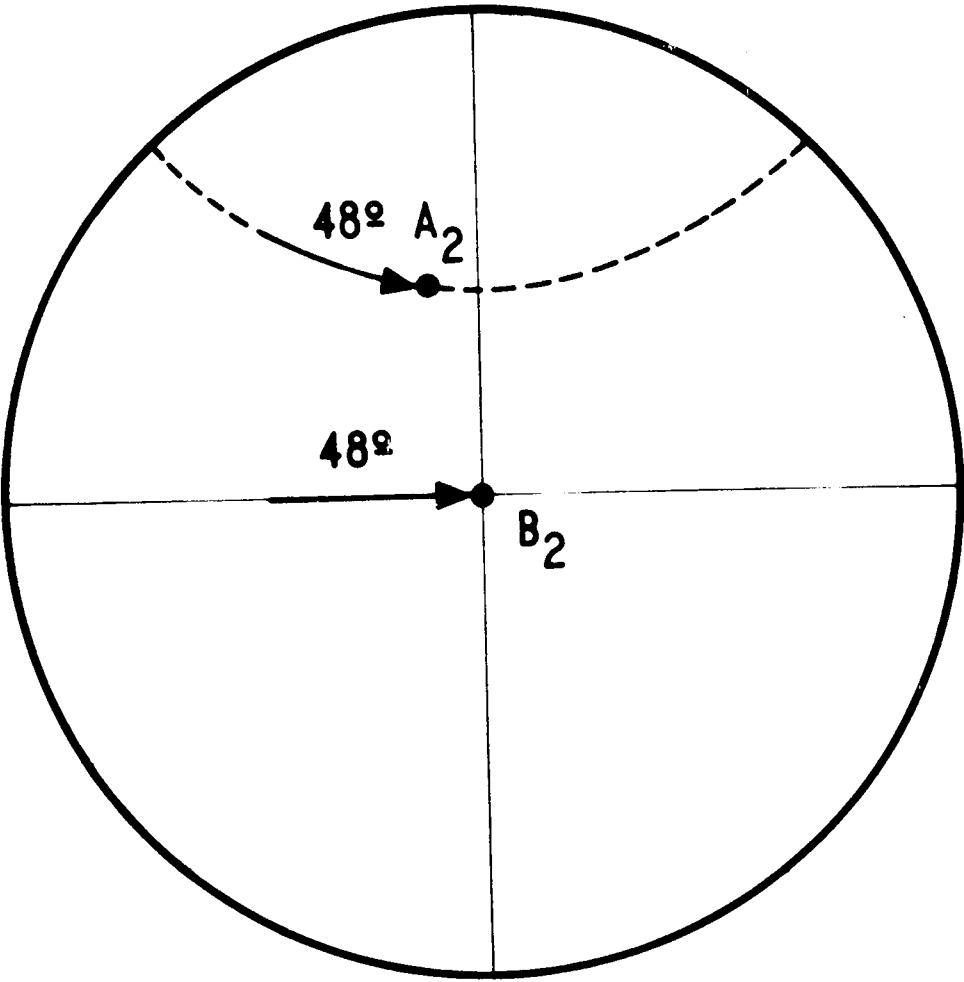


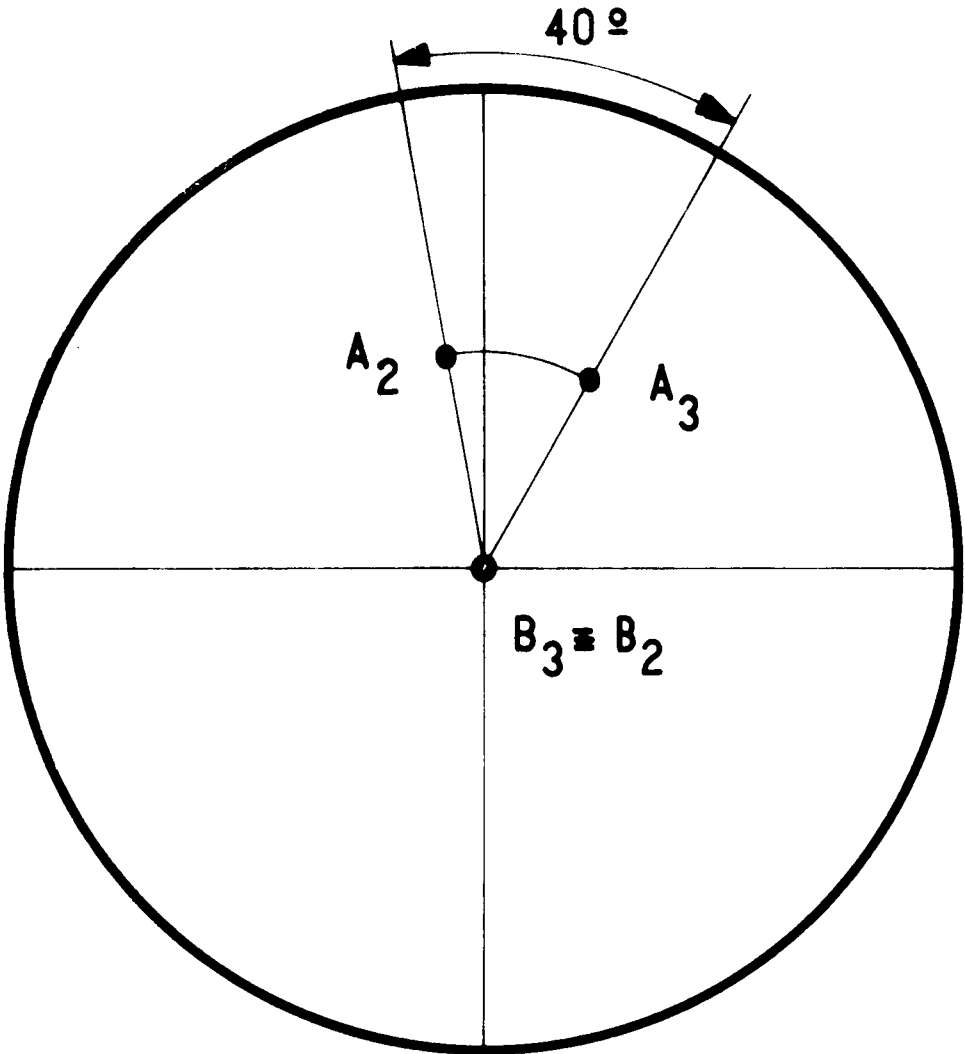
Fig.III.8. Rotación alrededor de un eje inclinado respecto al plano de proyección.



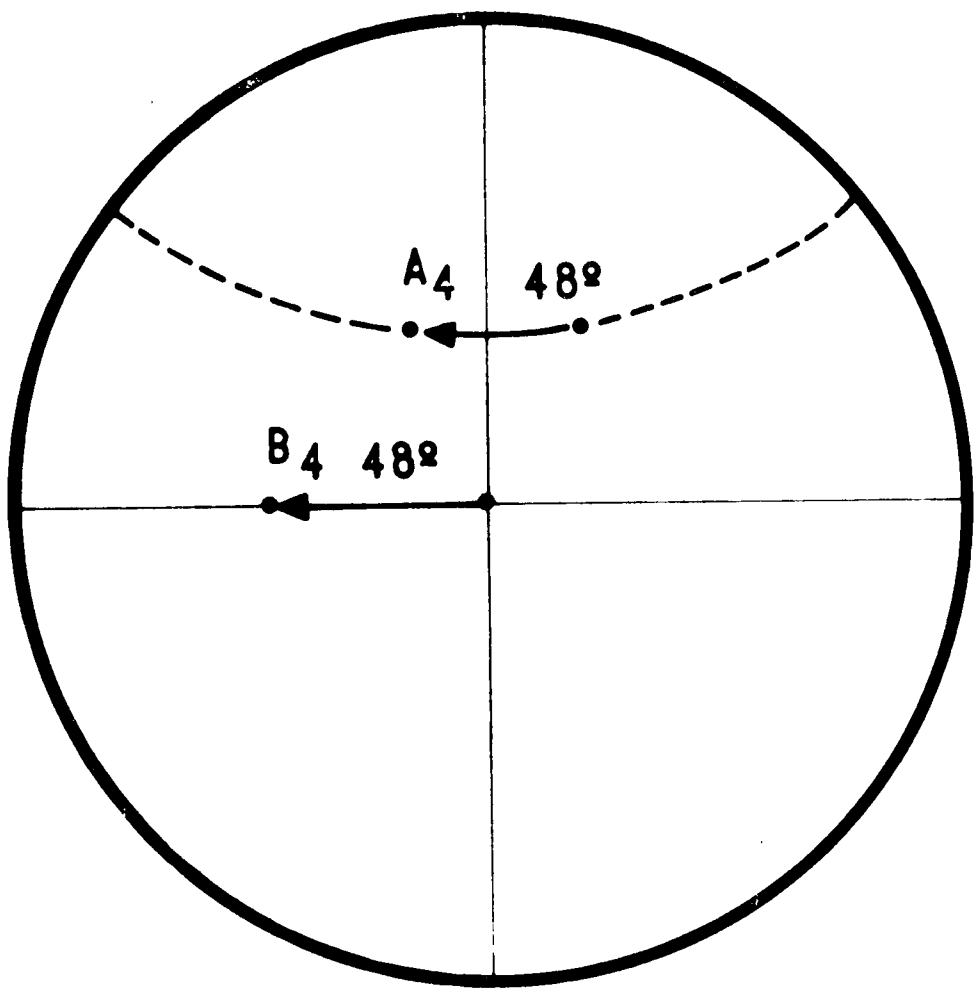
(b)



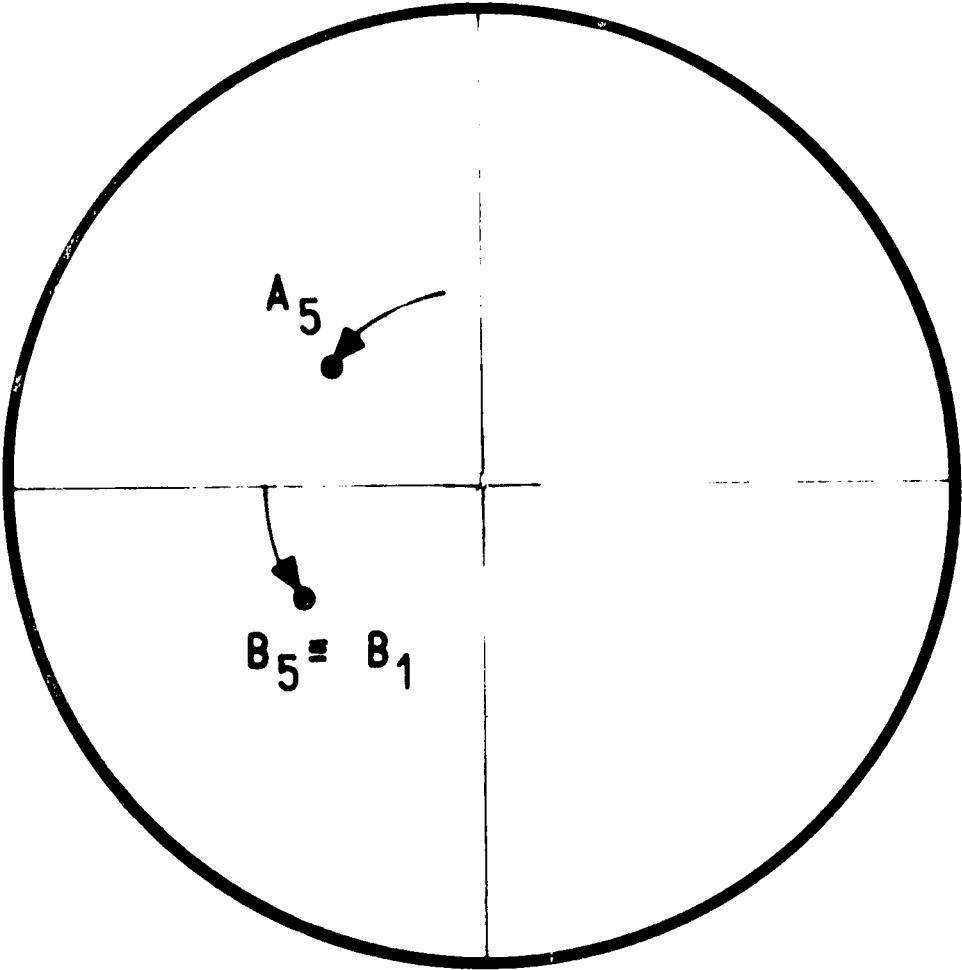
(c)



(d)



(e)



(f)

desplazándose sobre su paralelo correspondiente se sitúa en la posición A_2 , Fig. III.8 (c). Ahora se puede efectuar fácilmente la rotación de 40° alrededor del eje B_2 puesto que éste se encuentra en el centro de la proyección. El punto A_2 pasa entonces a la posición A_3 de la Fig. III.8 (d). Finalmente es necesario volver al eje de rotación B_3 a su posición original mediante un giro de 48° alrededor del eje NS en sentido contrario al efectuado anteriormente. El polo A_3 pasa entonces a la posición A_4 Fig. III.8 (e). Una rotación alrededor de un eje normal a la proyección, Fig. III.8 (f) coloca al polo B_4 en la posición B_5 coincidente con la posición inicial B_1 y el polo A_4 pasa a la posición final A_5 que es la resultante de la rotación pedida de 40° alrededor del eje cuyo polo es B_1 .

III.5.3 Determinación de los índices de Miller de un polo dado

El problema de determinar los índices de Miller de un plano cuyo polo está ubicado en una cierta posición A de la proyección estereográfica, Fig. III.9 (a), se puede resolver fácilmente si se dispone de una buena proyección tipo, con un número suficientemente grande de polos. Si la proyección en la que está situado el polo A tiene la misma escala que la proyección tipo, por simple superposición de ambas pueden identificarse los índices de dicho polo.

Si por alguna razón ésto no es posible, será necesario seguir entonces el método esquematizado en la Fig. III.9 (a) y (b) válido para el sistema cúbico. Sea en efecto, un plano (hkl) cuya normal está definida por el polo A en la proyección estereográfica. Si p, q, r, son los directores de esa normal, y d es el espaciado entre los planos (hkl), entonces

$$p = \cos \varphi = \frac{d}{a/h}, \quad q = \cos \sigma = \frac{d}{b/k}, \quad r = \cos \tau = \frac{d}{c/l}$$

de donde

$$\frac{pa}{qb} = \frac{h}{k}, \quad \frac{pa}{rc} = \frac{h}{l}, \quad \frac{qb}{rc} = \frac{k}{l}$$

como $a = b = c$

$$\text{resulta} \quad \frac{p}{q} = \frac{h}{k}, \quad \frac{p}{r} = \frac{h}{l}, \quad \frac{q}{r} = \frac{k}{l}$$

Entonces midiendo los ángulos φ , σ y τ con la red de Wulff, tal como se indica en la Fig. III.9 (a) y calculando luego los cosenos respectivos, se obtienen las relaciones entre los índices de Miller del plano representado por el polo A.

Otras aplicaciones de interés en metalurgia física pueden encontrarse detalladas en el libro de Barret-Massalski, *The Structure of Metals*, McGraw Hill, New York 1966, 3a. edición.

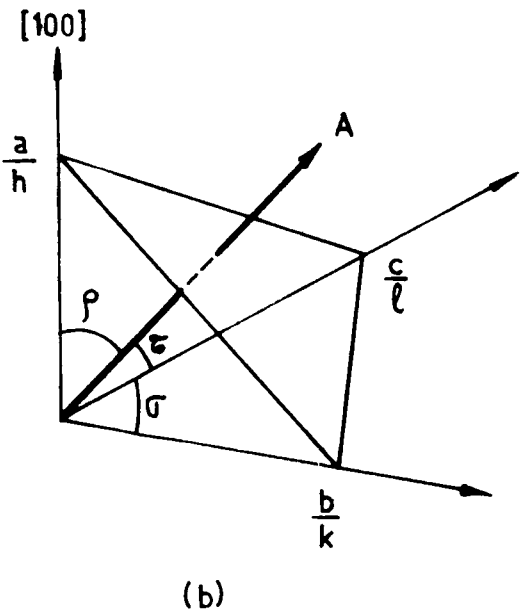
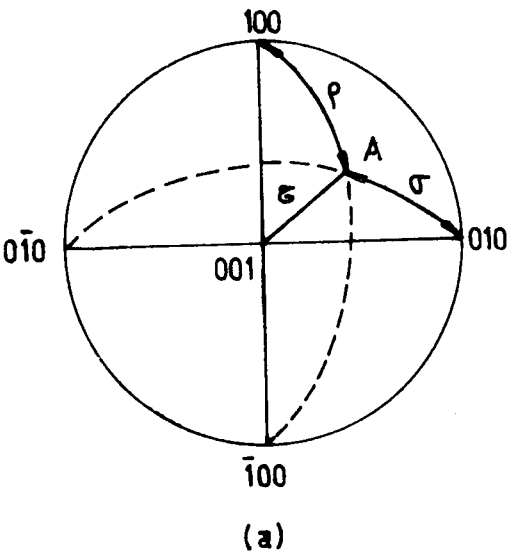


Fig.III.9. Los índices de Miller de un polo dado A se pueden obtener midiendo los ángulos ρ , ζ y σ respecto de los polos de tres direcciones conocidas .

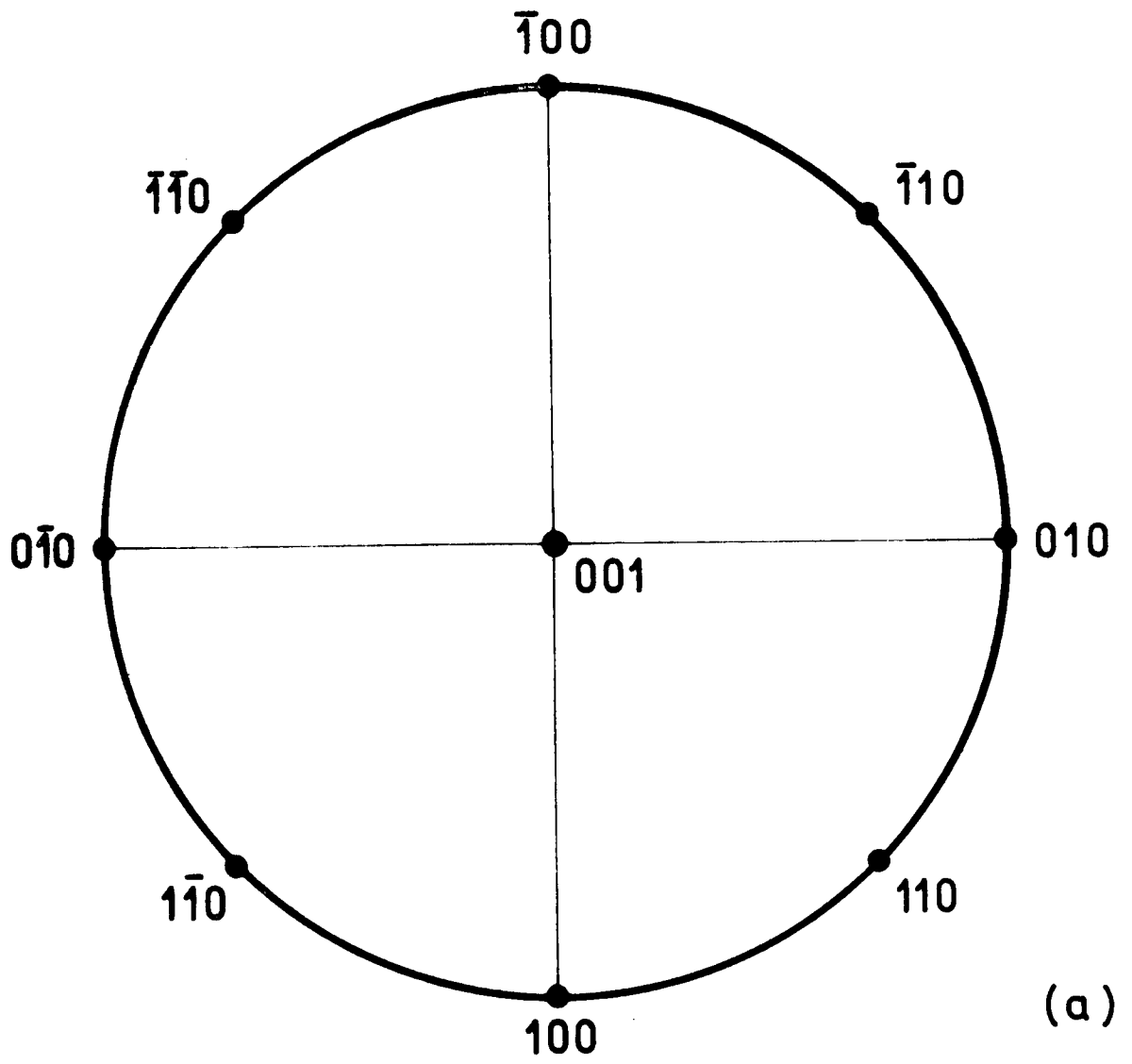
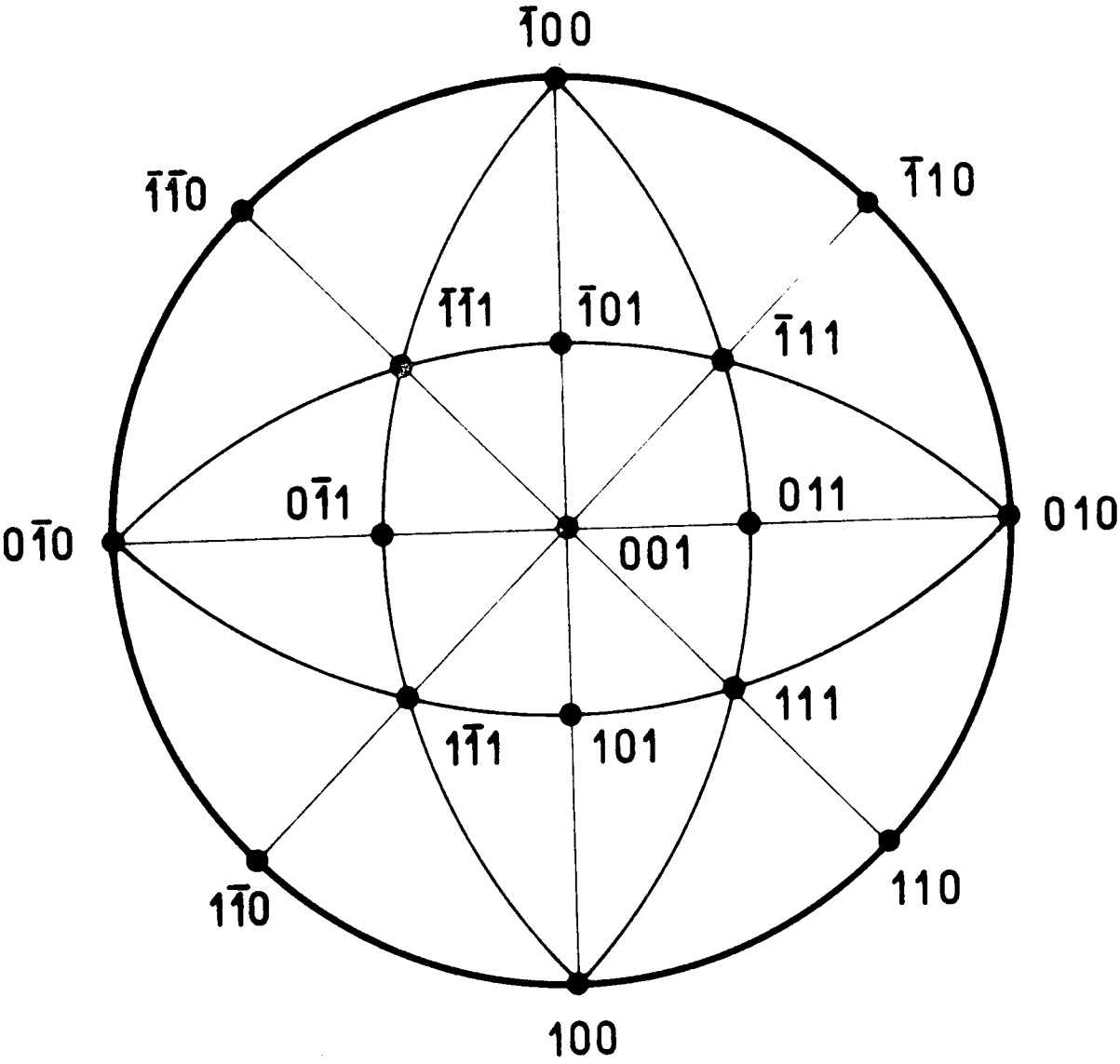


Fig.III.10. Construcción de la proyección (001) del sistema cúbico.



(b)

- E.III.1 Dados dos puntos A y B arbitrarios en una proyección estereográfica, medir el ángulo comprendido entre ellos utilizando la red de Wulff.
- E.III.2 Determinar el polo P correspondiente al círculo máximo que pasa por los puntos A y B. Dibujar también el punto P' diametralmente opuesto a P.
- E.III.3 Utilizando la red de Wulff, dibujar el lugar geométrico de los puntos que distan 20° de uno cualquiera dado.
- E.III.4 Construcción de la Proyección Tipo (001) del Sistema Cúbico.
El polo (001) se sitúa en el centro de la proyección. Se puede ver fácilmente, comparando con el esquema de la Fig. III.1 (a) que los demás polos de la forma $\{100\}$ se sitúan sobre los puntos N, S, O y E del círculo de referencia, Fig. III.10 (a) a 90° del primero.

Los polos correspondientes a los planos de la forma $\{110\}$ se ubican inmediatamente con la red de Wulff, puesto que éstos forman 45° o 90° con los polos de la forma $\{100\}$ Fig. III.10 (b). Todos los demás polos se pueden situar sobre la proyección de la misma manera, con el auxilio de la tabla de ángulos interplanares y la red de Wulff. El problema puede simplificarse sin embargo, teniendo en cuenta las simetrías del sistema cúbico. En efecto, sabemos que debe existir una simetría de rotación de orden 4 alrededor del centro de la proyección, puesto que el eje $\{001\}$ es un eje de orden 4.

Además, se puede recurrir a otras relaciones cristalográficas, como por ejemplo, la orientación relativa entre planos pertenecientes a una misma zona y el eje correspondiente. Como las normales a los planos de una zona son coplanares y además forman un ángulo de 90° con el eje de zona, los polos correspondientes a los planos de esa zona se sitúan sobre el mismo círculo máximo de la proyección, y el eje de zona a 90° del mismo, recordar Fig. III.6 (b). Teniendo en cuenta las relaciones que existen entre los índices de planos y ejes de zona, (ejercicio E.I.17), se puede ver, p.ej. que el plano (111) pertenece a la zona cuyo eje es $\{101\}$ y también a la zona de eje $\{0\bar{1}1\}$. El polo (111) debe encontrarse entonces en la intersección de los círculos máximos correspondientes a esas dos zonas. Estos dos círculos y su intersección, se muestran en la Fig. 1 (b). Por simetría se obtienen inmediatamente los polos $(\bar{1}11)$, $(1\bar{1}1)$ y $(11\bar{1})$. La tabla de ángulos interplanares da un valor de 54.7° para el ángulo comprendido entre los polos (111) y (001) que se puede verificar superponiendo la red de Wulff sobre la proyección.

Análogamente se pueden ir obteniendo los demás polos.

- E.III.5 Construir la proyección tipo (011)
La proyección tipo (011) puede construirse de la misma manera que

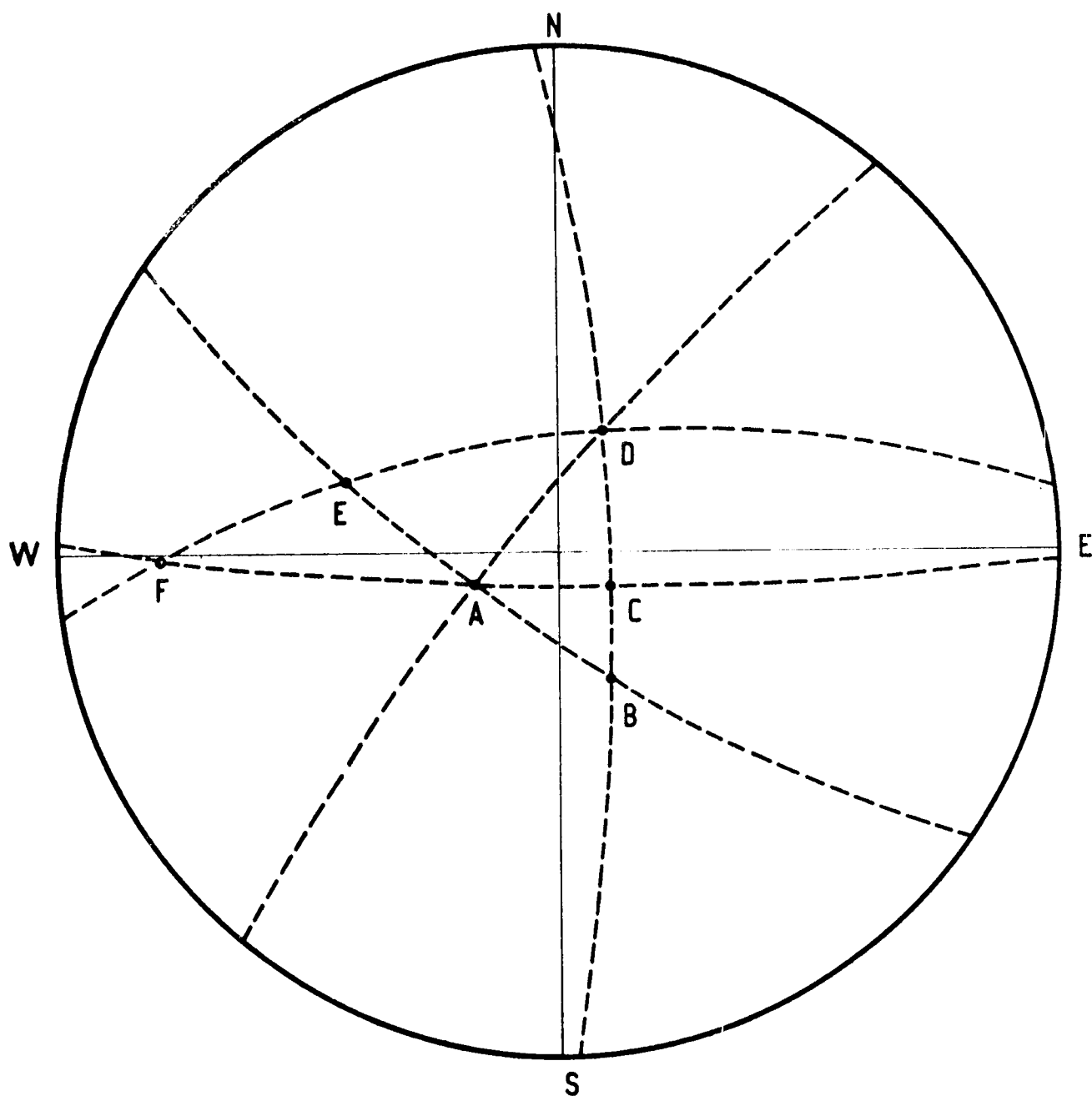


Fig.III.11. Los índices de Miller de los polos A, B, C, D se pueden determinar midiendo sus distancias angulares con la red de Wulff y comparando estos valores con las tablas de ángulos interplanares.

la anterior o bien simplemente rotando todos los polos de la proyección (001) en un ángulo de 45° alrededor del eje NS (ver sección III.5.2). El polo (011) pasa entonces a ocupar el centro de la proyección.

E.III.6 A, partir de la proyección tipo (001) efectuar el giro necesario para llevar el polo (112) al centro de la proyección. Indicar en esta nueva proyección los polos de las formas {100} , {110} y {111}.

E.III.7 Los círculos máximos , 1, 2, 3 y 4 en la Fig. III.11 corresponden a cuatro familias de planos de un cristal de aluminio. Los polos respectivos son A, B, C y D. Utilizando la red de Wulff se encuentran las siguientes relaciones angulares

AB: 35°; BC: 20° , CD: 34° , DA: 44° AC: 30°

Con estos datos y con la ayuda de la tabla de ángulos interplanares determinar los índices de Miller (hkl) de los polos A, B, C y D:

En la Tabla (Apéndice) se encuentran los siguientes valores:

$h_1k_1l_1$	$h_2k_2l_2$	ángulo			
100	100	0	90		
	110	45	90		
	111	54.7			
	211	35.2	65.9		
110	110	0	60	90	
	111	35.2	90		
	211	30	54.7	73.2	90
111	111	0	70.53		
	211	19.5	61.9	90	

Del análisis de las distintas posibilidades se comprueba fácilmente

A: (110) C: (211)
B: (111) D: (100)

E.III.8 Construir la proyección estereográfica correspondiente a las direcciones de los vectores que unen un átomo con todos sus primeros vecinos , para los siguientes casos:

- a) un metal cúbico de cuerpo centrado (I). Elegir (001) en el centro de la proyección.
- b) un metal cúbico de caras centradas (F). Elegir (001) en el centro de la proyección.
- c) un metal hexagonal compacto. Elegir (0001) en el centro de la proyección.

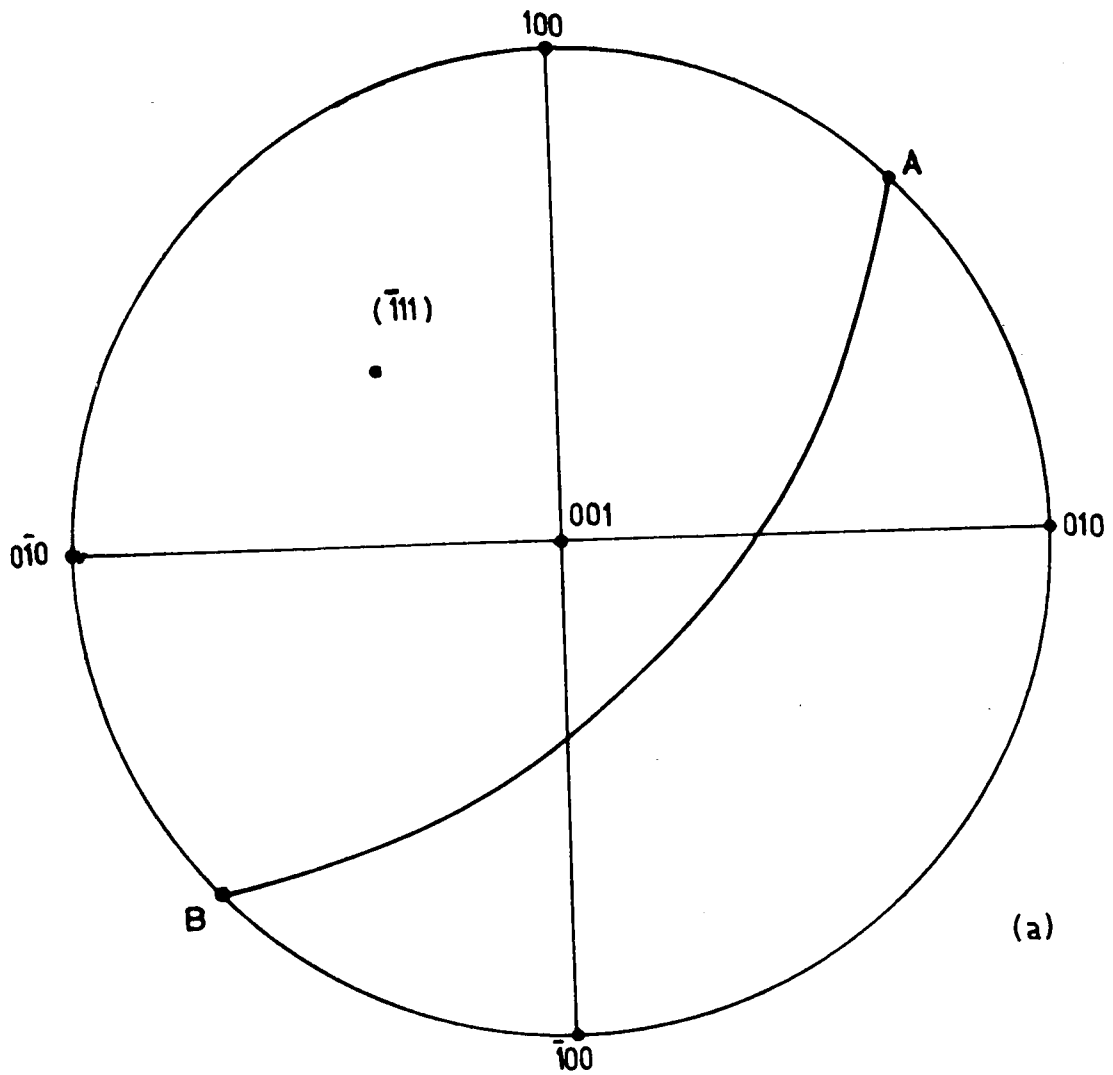
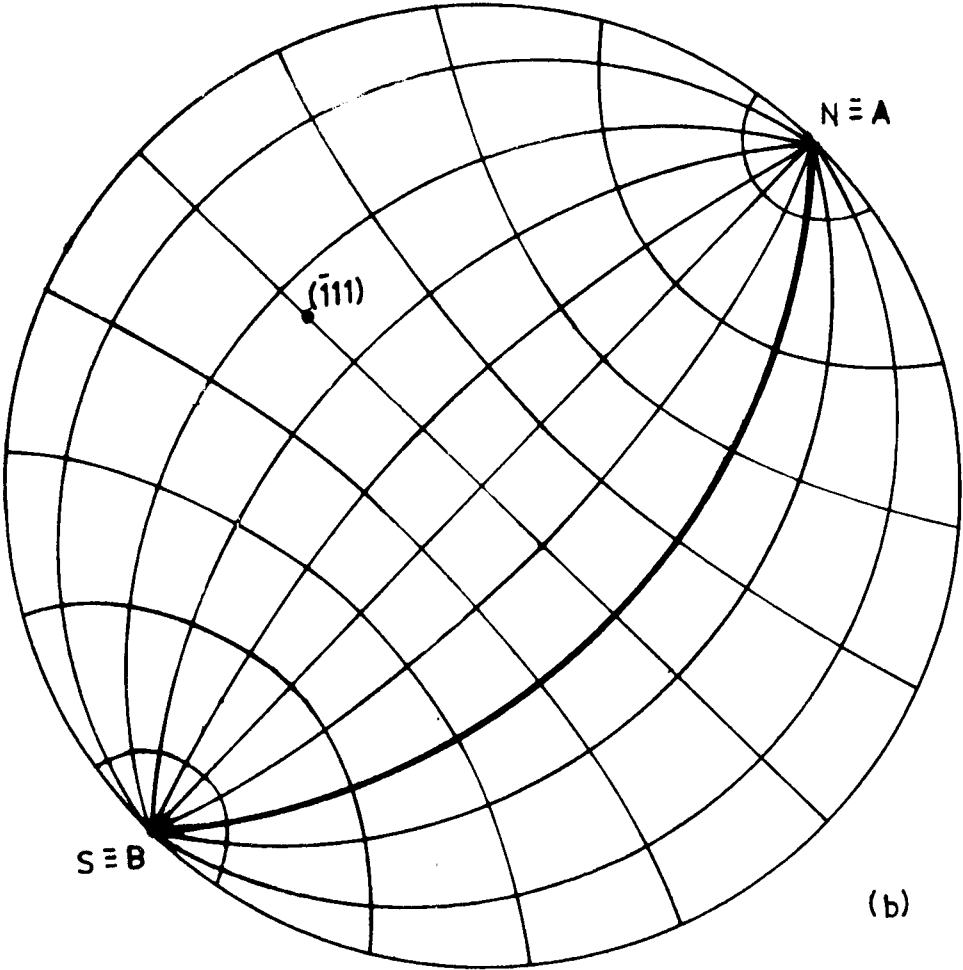
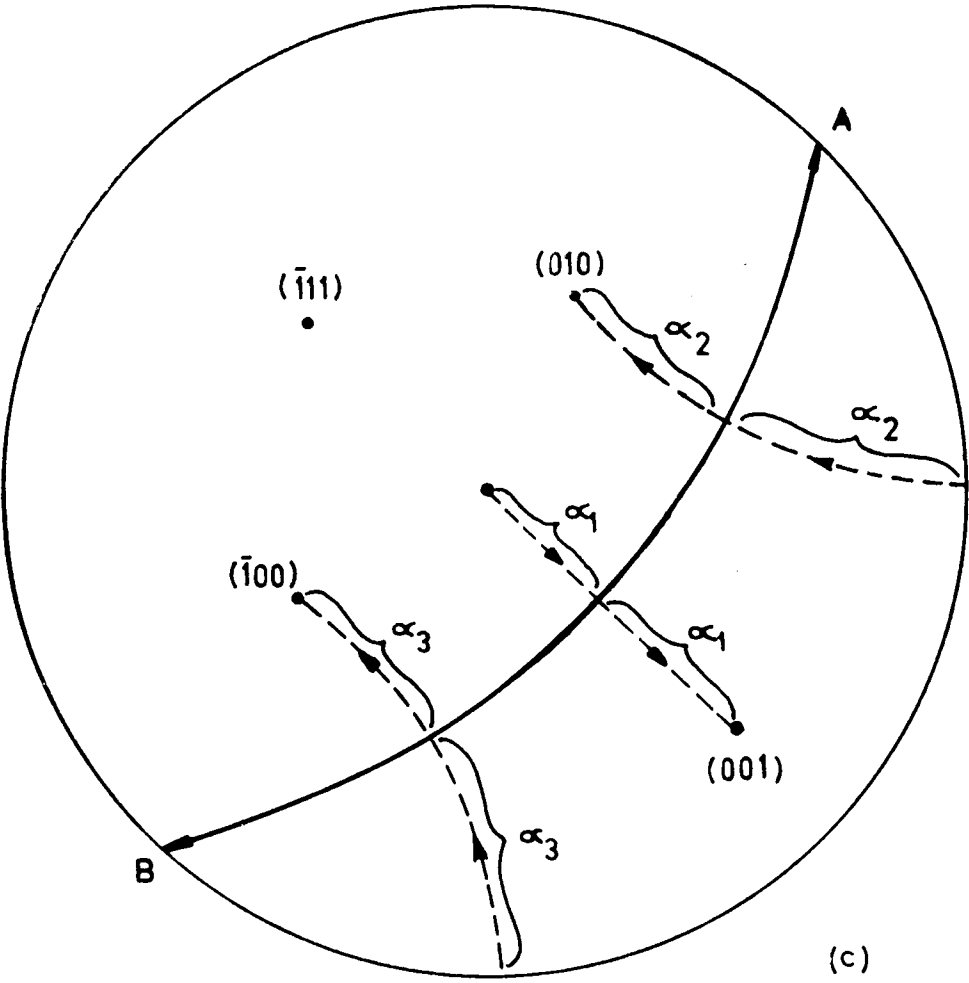


Fig.III.12. Representación de los polos de un cristal cúbico de caras centradas, y de una macla obtenida por reflexión en un plano $(\bar{1}11)$.
 a) AB: traza del plano $(\bar{1}11)$ y su polo P correspondiente. b) Giro de la red de Wulff hasta ubicar el polo P sobre el ecuador OE. c) La reflexión de los distintos polos se realiza a lo largo de los paralelos correspondientes.



(b)



- E.III.9 Representar a una proyección estereográfica, los polos de un cristal cúbico A_1 y una macla obtenida por reflexión según un plano $(\bar{1}11)$.

Dos cristales forman una macla cuando existe una relación de orientación bien definida a través de algunos elementos de simetría. En el caso particular de la estructura A_1 , uno de los cristales que compone la macla se deduce del otro mediante una reflexión en un plano de tipo $\{111\}$ ver más adelante, Fig. IV.15. Esta relación de orientación es fácilmente visualizable en una proyección estereográfica. Consideremos por ejemplo un cristal cúbico y su proyección tipo (001), ejercicio E. III.4. Uno de los planos de macla (también llamado plano de composición) puede ser p.ej. el plano $(\bar{1}11)$. En la Fig. III.12 (a) se indica el polo y la traza AB correspondiente, recordar Fig. III.6 (b). La posición de los polos del cristal maclado se obtiene reflejando los polos de la proyección tipo respecto de la traza del plano $(\bar{1}11)$. Para ello se superpone una red de Wulff rotada de tal manera que el polo $(\bar{1}11)$ esté contenido en el ecuador OE de la misma. Las reflexiones de los distintos polos se realizan luego a lo largo de los paralelos correspondientes, como se indica en la Fig. III.12 (c). Nótese que los polos (010) y $(\bar{1}00)$ pasan al hemisferio posterior de la proyección, recordar Fig. III.7.

- E.III.10 En una proyección tipo (001) del sistema cúbico, representar los planos y las direcciones más densos, tanto para la red I como la red F.
- E.III.11 En una proyección tipo (0001) de la estructura hexagonal compacta, representar los planos más densos, dibujando los círculos máximos correspondientes. En la misma proyección indicar las direcciones de las filas reticulares más densas.

- E.III.12 Determinación de los Índices de Miller de un Plano a partir de sus trazas sobre dos superficies dadas.
- Este es un problema típico que se presenta en metalurgia. Es el caso de la determinación del plano de deslizamiento en la deformación plástica de monocristales o del plano de hábito de martensita inducida por tensión. Consideremos, a título de ejemplo, un monocristal de forma cilíndrica, sometido a tracción según una dirección paralela al eje del mismo, NS en la fig. III.13. La deformación se realiza por medio del deslizamiento en una familia de planos cristalográficos bien determinada. Las intersecciones de estos planos con la superficie exterior de la muestra son elipses. Si se pulen sobre la muestra dos planos P_1 y P_2 cualesquiera formando un cierto ángulo ϕ entre sí, generalmente $\approx 90^\circ$, las intersecciones de los planos de deslizamiento con estas dos superficies son dos familias de rectas que forman ángulos iguales a α_1 y α_2 con el eje NS, Fig. III.13.

Consideremos ahora una proyección estereográfica paralela al plano P_1 de tal manera que sus polos N y S sean coincidentes con la proyección de la dirección de tracción, Fig. III.14. La traza del plano P_2 es un

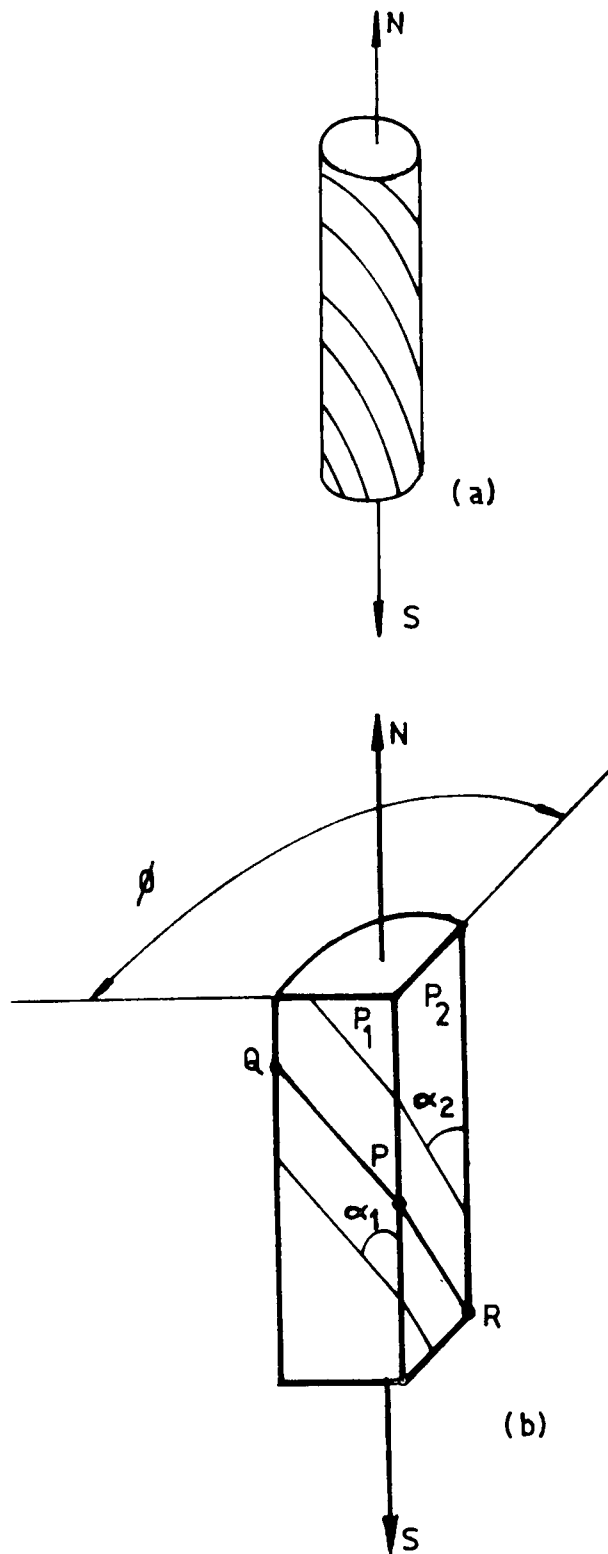


Fig.III.13. Determinación de los índices de Miller de un plano a partir de sus trazas sobre dos superficies dadas.

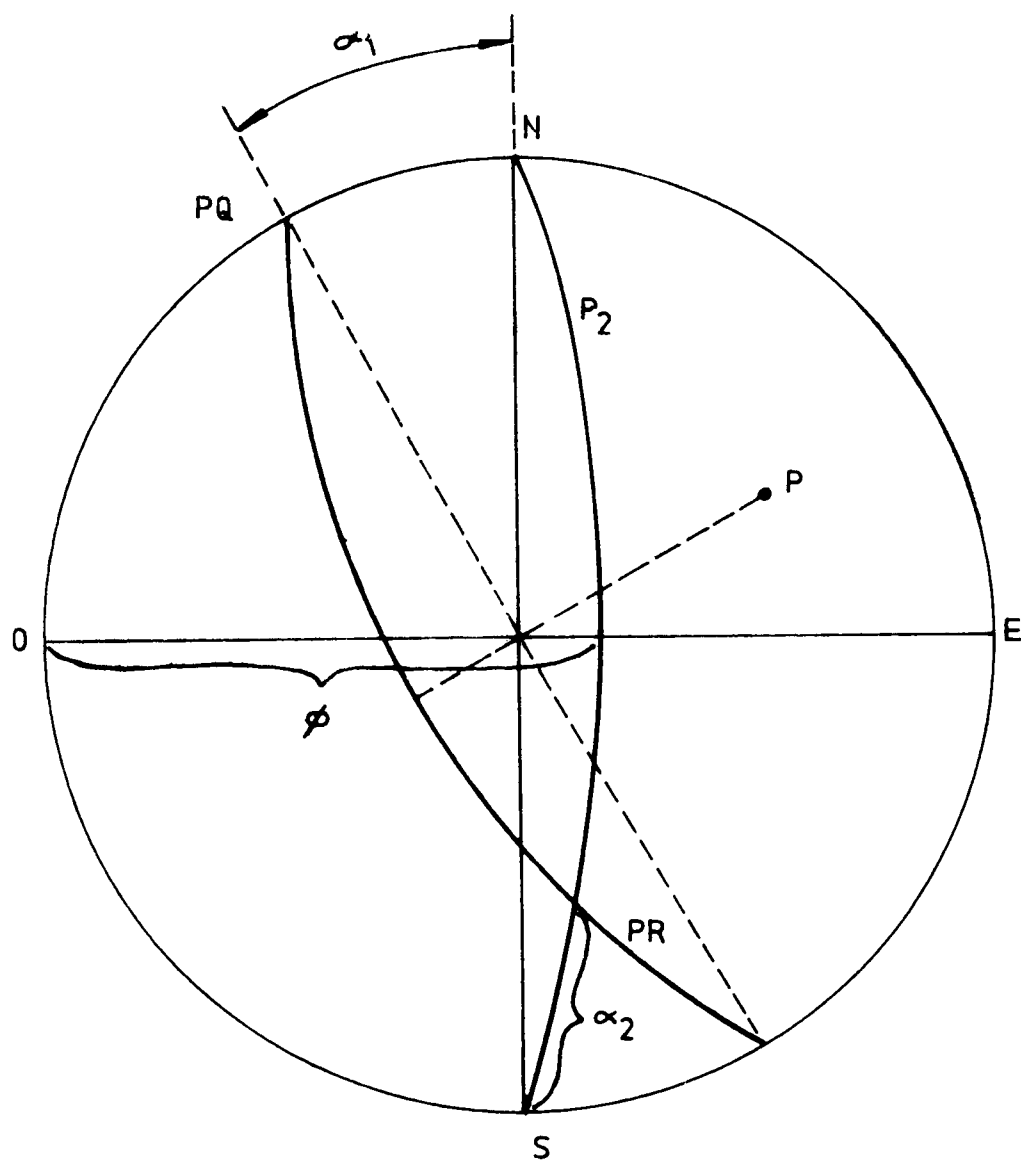


Fig.III.14. Proyección estereográfica correspondiente a la Fig.III.13.

círculo máximo situado a una distancia angular igual a ϕ respecto de la traza de P_1 (círculo de proyección NOSE). En la Fig. III.14 se ha representado el caso particular de $\phi > 90^\circ$. La proyección de la dirección PR será un punto situado sobre el círculo de proyección a una distancia angular α_1 respecto del punto N. La dirección PR en cambio, se proyecta como un punto sobre la traza del plano P_2 situado a una distancia angular α_2 del punto S. Como el plano de deslizamiento P contiene las direcciones PQ y PR, su traza en la proyección estereográfica será el círculo máximo que contiene a los puntos PQ y PR. El polo correspondiente se determina inmediatamente de acuerdo a lo visto en la sección III.5.1. Fig. III.6 (b).

La orientación de los planos de deslizamiento queda entonces determinada por el polo P obtenido de la manera indicada quedando también determinados los ángulos que forma con cualquier otra dirección de la muestra. Para determinar además sus índices de Miller es necesario conocer la orientación del cristal, por ejemplo mediante un diagrama de Laue obtenido con el haz de rayos X normal al plano P_1 . De esta manera se puede conocer la ubicación de los polos de los distintos planos cristalográficos de la muestra en una proyección estereográfica orientada respecto del cristal de la misma manera que la de la Fig. III.14. Por comparación directa de las dos proyecciones se pueden conocer entonces los índices de Miller del plano P.

E.III.12

Nociones Elementales de Figura de Polo.

Una proyección tipo, p.ej. la (110), representa la orientación en el espacio de los distintos planos de un monocristal cúbico orientado de tal manera que el plano (110) es paralelo al plano de la proyección. Pero en general, para definir la orientación de un monocristal es suficiente representar la orientación de una sola familia de planos cristalinicos, por ejemplo los de la forma $\{110\}$. Fig. III.15 (a) en una proyección estereográfica.

Consideremos ahora una muestra, p.ej. en forma de lámina, compuesta por un cierto número de granos cristalinicos ligeramente desorientados entre sí alrededor de una orientación promedio como la del monocristal anterior. La orientación de los granos de esta muestra queda especificada por una proyección estereográfica en la cual se indica la posición de los polos de tipo $\{110\}$ de cada uno de los cristales individuales. La "textura" o distribución de orientaciones preferenciales de la muestra se describe entonces mediante una proyección como la indicada en la Fig. III.15 (b). Si la lámina contiene un número cada vez mayor de granos, la distribución de polos de la Fig. III.15 (b) pasará gradualmente de una distribución de puntos a un ennegrecimiento continuo que será más o menos uniforme según cual sea el grado de desorientación entre los cristales. Esta es la llamada Figura de Polo $\{110\}$ de la muestra. Si el número de cristales de la muestra es muy grande, se suelen trazar curvas de nivel, tales como la de la Fig. II.15 (c) que unen

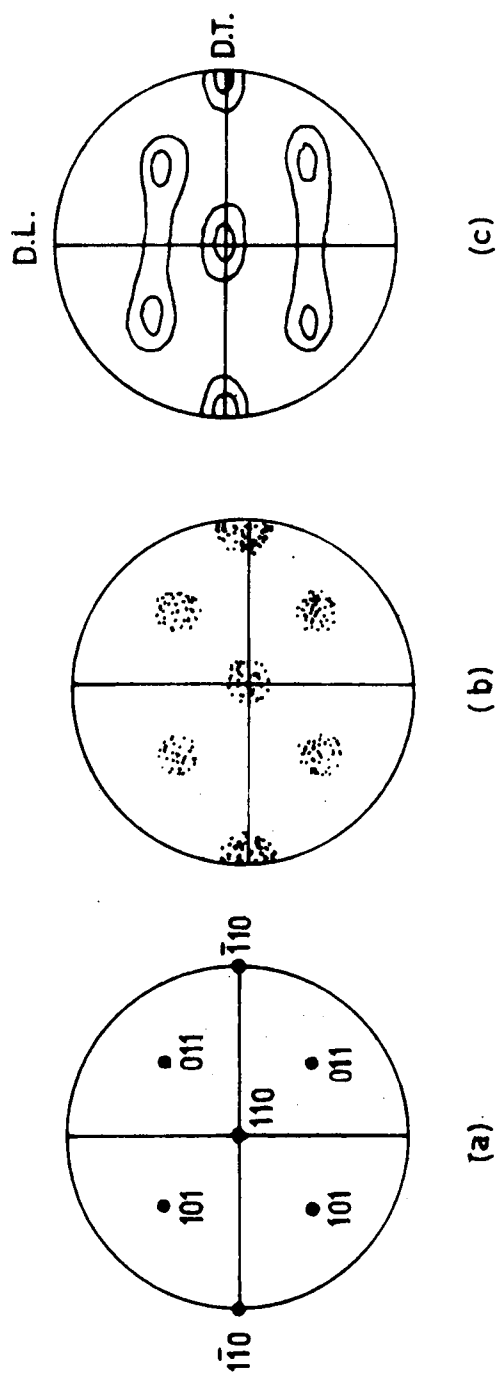


Fig. III.15. Figuras de Polo.

- a) Proyección (110) de un monocristal cúbico.
- b) Proyección estereográfica de un conjunto de granos cristalinos, ligeramente desorientados entre sí.
- c) Figura de polo correspondiente a una muestra policristalina con textura cúbica dominante.

los puntos de igual densidad de polos (ennegrecimiento) en la proyección estereográfica.

En estos casos se especifica además la orientación de la figura de polos respecto de alguna dirección preferencial en la muestra. En chapas laminadas, la proyección estereográfica se realiza en un plano paralelo al de la chapa y la dirección de laminación (D.L.) se hace coincidir con la dirección Sur-Norte de la proyección, Fig. III.15 (c).

Una misma textura se puede representar también mediante diferentes figuras según sean los planos $\{hkl\}$ que se consideren en la proyección estereográfica. En general se representa la distribución correspondiente a planos cristalinos de bajos índices de Miller, que puedan ser fácilmente visualizables. Por ejemplo, la textura dominante de laminación en frío del aluminio y en general, de metales cúbicos de caras centradas, se escribe en forma abreviada como

$$(110) \{112\}$$

indicando que la mayoría de los granos cristalinos de la muestra están orientados de tal manera que sus planos $\{110\}$ son paralelos a la superficie de la chapa y las direcciones del tipo $\langle 112 \rangle$ son paralelas a la dirección de laminación. La Fig. III.15 (c) representa otra de las orientaciones preferenciales presentes en una chapa laminada de aluminio, que se indica como $(110) \{001\}$. La obtención de figuras de polo a partir de experiencias de difracción de Rayos X será descrita en el apunte de difracción de rayos X.

IV ESTRUCTURA ATOMICA DE LOS METALES

IV.1 LA ESTRUCTURA CRISTALINA DE LOS ELEMENTOS Y SU CLASIFICACION EN LA TABLA PERIODICA

La estructura cristalina de un elemento está relacionada con la configuración electrónica de sus átomos y ésta a su vez determina la ubicación del elemento en la tabla periódica. Según sea la configuración electrónica, las uniones atómicas de los elementos pueden ser de distinta naturaleza y éstas determinan las principales características estructurales de los sólidos que se originan. La Tabla IV.1 muestra en efecto, que los elementos se ordenan en la tabla periódica formando grupos verticales y períodos horizontales. Elementos pertenecientes al mismo grupo tienden a formar estructuras semejantes a temperatura ambiente. Por ejemplo, los elementos alcalinos (grupo IA) cristalizan todos según una red cúbica I, los elementos de los grupos IIA y IIB son en su mayoría hexagonales y los del grupo IB son cúbicos F. Los elementos del lado izquierdo de la tabla periódica son los que presentan características típicamente metálicas (llamamos metal en el sentido clásico, aunque ésta no sea una definición rigurosa, a todo elemento dúctil, opaco, y que conduce muy bien el calor y la electricidad). Los elementos del lado derecho son los llamados no metales o metaloides, de estructura cristalina más bien compleja, aunque algunos son gases o líquidos aún a temperatura ambiente. Los elementos intermedios son los llamados de "transición" y las "tierras raras" y poseen características esencialmente metálicas. En la literatura existen descripciones mucho más completas de la distribución de los elementos en la tabla periódica y no nos detendremos aquí en su análisis puesto que escaparía a los propósitos del texto.

IV.2 DISTINTOS TIPOS DE UNIONES INTERATOMICAS

Los átomos de los elementos o compuestos sólidos se mantienen unidos entre sí mediante distintos tipos de fuerzas atractivas, que se denominan en general enlaces atómicos. La configuración electrónica de los átomos es la que determina el tipo de enlace y este último es el factor que determina la estructura cristalina. De esta manera los distintos sólidos se pueden clasificar en base al tipo de unión atómica aunque debe tenerse en cuenta que esta clasificación es más bien empírica y no la resultante de un entendimiento completo de las relaciones entre la estructura cristalina de un sólido y las características electrónicas de los átomos que lo componen. Aunque en general en los sólidos existen simultáneamente varios tipos de enlaces, en ciertos cuerpos sólidos típicos las uniones interatómicas tienen características bien definidas y es en base a éstos que se hace una clasificación según el tipo de enlace predominante. Se pueden considerar desde este punto de vista cuatro grandes grupos:

- a) **Cristales Iónicos:** Los átomos alcalinos pueden perder fácilmente su único electrón de valencia y de la misma manera los átomos de halógenos pueden ganar un electrón. Los primeros dan origen a iones positivos y los segundos a iones negativos. Cuando ambos se unen para constituir un cristal, se ejercen fuerzas electrostáticas entre ellos, originándose una distribución tal que

Periods	Metals										Metalloids						Inert Gases & Electron Shells					
	Groups		Metals		Metalloids		Inert Gases & Electron Shells															
1 Short	IA	IIA	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	VIII	IB	IIB	IIIB	IVB	VB	VIB	VII	0						
2 Short	Li	Be													H	2						
3 Short	Na	Mg													F	10						
4 Long	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	36						
5 Long	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	54						
6 Long	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	86						
7 Long	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Mn	118						
	Strongly Basic										Transition Elements						Class III					
	Class I										Class II						Class III					

■ Face-centered Cubic

◆ Body-centered Cubic

△ Trigonal

⬢ Hex Close packed

⬢ Cubic, a-Mn

◇ Orthorhombic

⬢ Cubic, diamond structure

⬢ Body-centered Tetragonal

● Liquid

⬢ Monoclinic

⬢ Rhombohedral

TABLA IV.1

minimiza la energía del sistema. Esta condición se logra cuando cada ión negativo se rodea de 6 iones positivos (y viceversa) dando origen a una estructura eléctricamente neutra con igual cantidad de iones de ambos signos. Estructuras iónicas típicas son las correspondientes al NaCl, KCl, LiF, etc.

- b) **Cristales Covalentes:** El elemento de unión que caracteriza a este grupo es un electrón compartido entre átomos vecinos. Se puede considerar a este electrón como perteneciente simultáneamente a la capa exterior de dos átomos adyacentes, completando en conjunto una capa electrónica semejante a la del gas inerte más próximo en la tabla periódica. Todo el cristal se comporta entonces como una gran molécula, obteniéndose sólidos estables muy duros y de alto punto de fusión. Un ejemplo típico es el diamante ($Z=6$). Se comparten 4 electrones de valencia entre 4 átomos vecinos, completando éstos en conjunto una capa exterior de 8 electrones similar a la del neón ($Z=10$).
- c) **Cristales Moleculares:** Los cristales orgánicos son los más representativos de este tipo. Las moléculas de estos cristales están formadas por átomos unidos entre sí por enlaces covalentes aunque las configuraciones electrónicas de las moléculas resultantes están levemente distorsionadas y los centros de gravedad de las cargas positivas no coinciden con los correspondientes a las cargas negativas. Las moléculas se comportan así como dipolos eléctricos que ejercen entre sí fuerzas denominadas de Van der Waals. Estas fuerzas son débiles y dan origen a estructuras más bien desordenadas como las de los polímeros. Por la misma razón los cristales moleculares se caracterizan por un bajo punto de fusión.
- d) **Cristales Metálicos:** En un metal, el conjunto de todos los iones positivos se mantiene unido por el conjunto de todos los electrones de valencia. Estos últimos se comportan como un fluido cargado negativamente, susceptible de moverse a lo largo de todo el cristal, denominado gas de electrones o gas de Fermi. Este es responsable de la alta conductividad de los metales. Como el número de electrones de valencia de un átomo metálico es muy bajo, no existe posibilidad de enlace covalente o de formación de iones positivos o negativos por parte de dos átomos vecinos. El gas de electrones de valencia debe considerarse entonces como perteneciente a toda la red cristalina y no a un átomo o conjunto de átomos en particular. Esta característica explica la ductilidad de los metales puesto que si se deforma una distribución atómica de tipo metálico, cada átomo forma inmediatamente nuevos enlaces que son tan fuertes como los anteriores y puede soportar así deformaciones considerables sin fracturarse.

Aunque de todos los tipos de estructura nos interesa particularmente el caso de los metales, no nos detendremos más en el análisis de este tipo de enlace que puede consultarse en distintos textos (Kittel). Pasaremos por lo tanto directamente al estudio de las características geométricas más importantes de las principales estructuras metálicas.

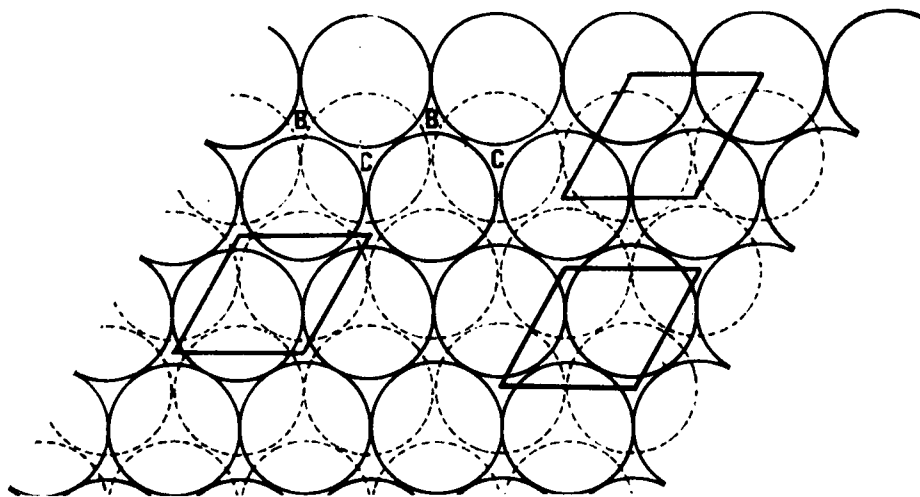


Fig.IV.1. Capa de esferas rígidas en contacto sobre un plano. Se observan dos tipos de intersticios indicados con las letras B y C.

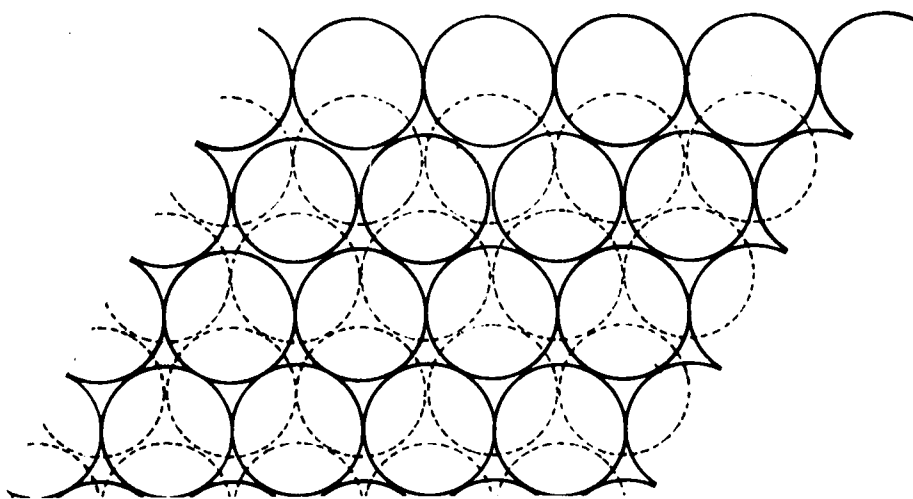


Fig.IV.2. Apilamiento compacto de esferas rígidas. Una estructura compacta en tres dimensiones puede formarse apilando sucesivas capas compactas sobre los intersticios de la anterior.

IV.3 REPRESENTACION DE LA ESTRUCTURA ATOMICA DE LOS METALES MEDIANTE EL MODELO DE ESFERAS RIGIDAS

Dado que la unión entre los átomos de un metal no es direccional, cada átomo tiende a enlazarse con sus vecinos tratando de alcanzar las distribuciones más compactas y rodearse por el máximo número posible (número de coordinación) de vecinos inmediatos. Es por esta razón que se pueden representar las estructuras metálicas por un empaquetamiento compacto de esferas rígidas e impenetrables entre sí.

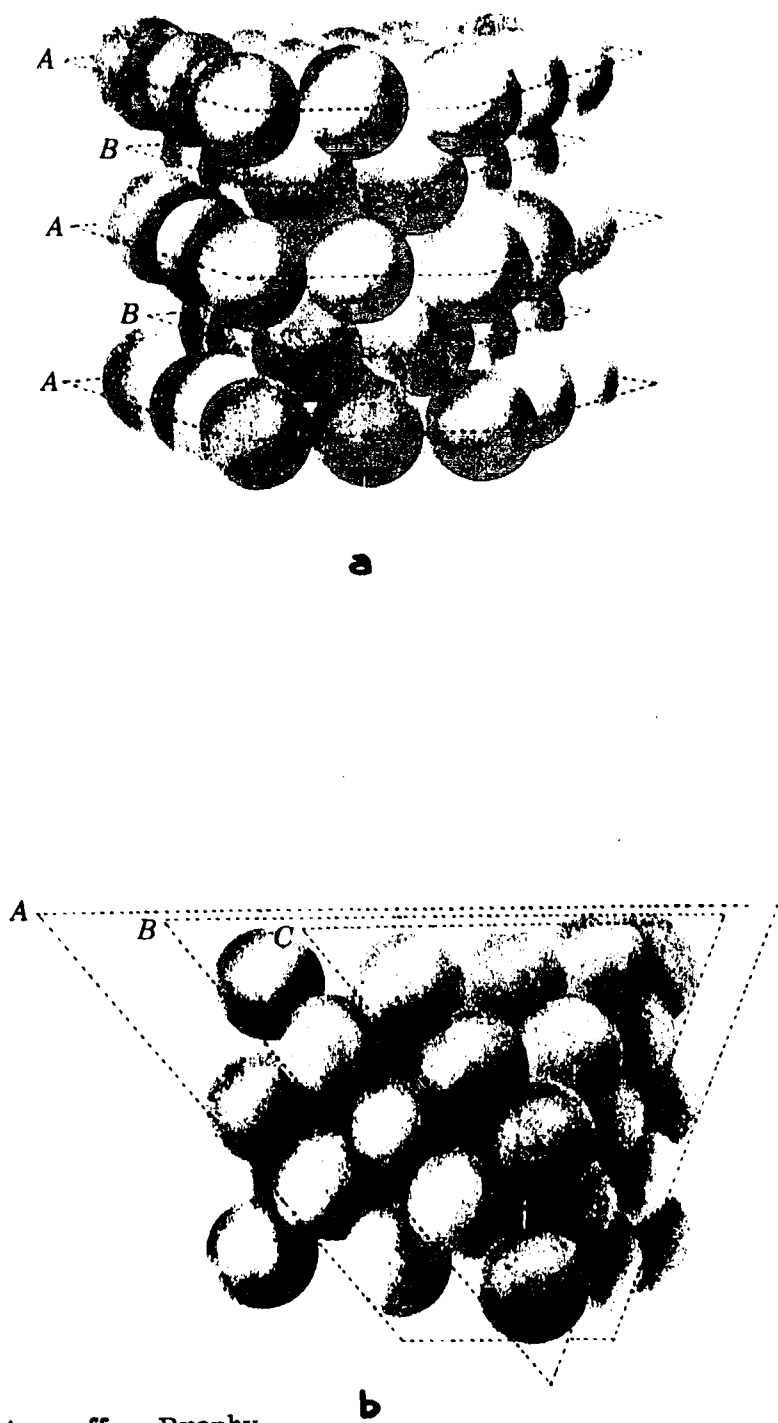
Consideremos en efecto una capa de esferas rígidas en contacto sobre un plano, tal como se ilustra en la Fig. IV.1. La estructura periódica resultante, en la cual cada esfera está rodeada por 6 esferas vecinas puede describirse por una red de Bravais plana hexagonal (Tabla I.1, capítulo I), cuya celda se esquematiza en la misma figura. Cada celda contiene dos tipos de espacios, vacíos o intersticios, que se indican con las letras B y C. Ambos intersticios son de tipo triangular, pero difieren en su orientación: los de tipo B tienen su "base" abajo y el vértice hacia arriba, mientras que los de tipo C tienen la orientación opuesta. De acuerdo a lo tratado en la sección II.1. la misma estructura se puede describir por una red cuyo origen se sitúe sobre el centro de los intersticios, Fig. IV.1. Resulta así que todos los intersticios del mismo tipo están relacionados entre sí por traslaciones enteras idénticas a las que relacionan entre sí los centros de las esferas.

Una estructura compacta en tres dimensiones puede entonces construirse apilando capas de esferas como las que hemos considerado, cada una de las cuales es compacta y se describe por el mismo sistema reticular. Las maneras en las cuales pueden apilarse las distintas capas de esferas para dar lugar a una estructura compacta son infinitas. Consideremos en efecto una capa de esferas centradas en las posiciones A, como la indicada en la Fig. IV.2. Sobre ésta es posible apilar otra capa compacta ubicando las esferas sobre las "depresiones" de los intersticios B o C.

Supongamos que esta segunda capa esté ubicada sobre las posiciones B, como se indica en la misma figura. Una tercer capa puede entonces apilarse sobre las depresiones situadas en las posiciones C o A y así sucesivamente. Eligiendo al azar la ubicación de los sucesivos apilamientos se podrían construir infinitas estructuras compactas. Pero son solamente dos las formas de apilamiento que se encuentran realmente en los metales. Una de ellas sigue la secuencia ABABAB ... y conduce a una estructura de tipo hexagonal compacta A_3 mientras que la otra secuencia posible ABCABCABC ... da origen a una estructura cúbica de caras centradas A_1 . En ambos apilamientos cada esfera (átomo) está rodeada por el número máximo posible de esferas vecinas que es igual a 12. En la Fig. IV.3 (a) y (b) se ilustran los dos tipos de estructuras resultantes.

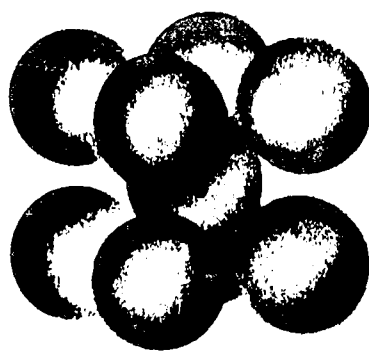
En cambio, si se forma una capa constituida por esferas de radio r , distribuidas sobre los nodos de una red plana cuadrada de tal manera que la distancia a entre esferas vecinas sea

$$a = \frac{4}{3} r$$



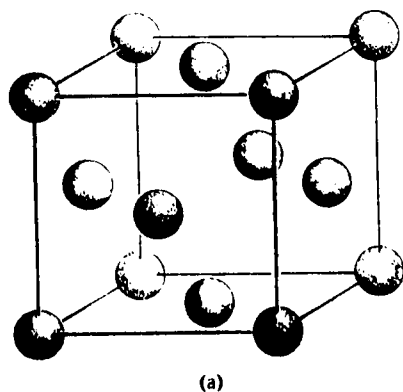
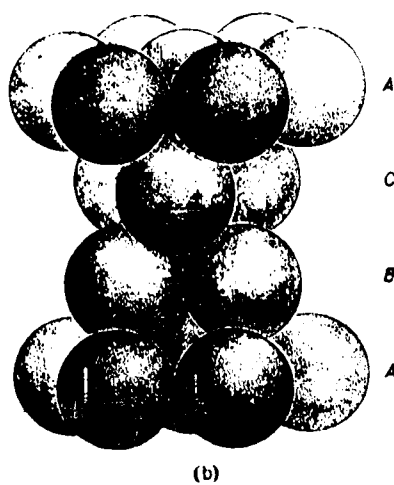
Extraído de Azaroff y Brophy

Fig.IV.3. Secuencias posibles de apilamiento compacto. a) Secuencia ABABAB...: estructura hexagonal compacta. b) Secuencia ABCABCABC...: estructura cúbica de caras centradas.



Extraído de Azaroff y Brophy

Fig.IV.4. Modelo de esferas rígidas de la estructura cúbica de cuerpo centrado.



Extraído de Azaroff y Brophy

Fig.IV.5. a) Apilamiento compacto de esferas rígidas en la estructura cúbica de caras centradas.
b) Disposición de las esferas en la celda cúbica de caras centradas. El tamaño de las esferas ha sido reducido para poner más claramente de manifiesto la simetría cúbica.

y sobre esta capa se apilan luego capas idénticas ubicando siempre las esferas de la capa superior sobre las depresiones de la capa inferior, Fig. IV.4, se obtiene una estructura cúbica de cuerpo centrado. Esta estructura, denominada A_2 en la rotación Strukturbericht no es compacta como las anteriores. Metales como el Fe, W, Mo, Cr, cristalizan según esta estructura.

Las principales características geométricas de las estructuras mencionadas serán detalladas a continuación.

IV.4 LAS ESTRUCTURAS METÁLICAS MÁS COMUNES

IV.4.1 Estructuras Tipo A_1 (Cúbica de Caras Centradas)

En la Fig. IV.5 (a) se ha representado nuevamente la estructura compacta obtenida mediante el apilamiento ABCABC de esferas rígidas. En la Fig. IV.5 (b) se esquematiza la celda de Bravais que describe la estructura mencionada, en la cual se ha reducido el tamaño de las esferas para poner de manifiesto más claramente la simetría cúbica. Esta estructura se describe por el grupo espacial $Fm\bar{3}m$ (grupo N° 225).

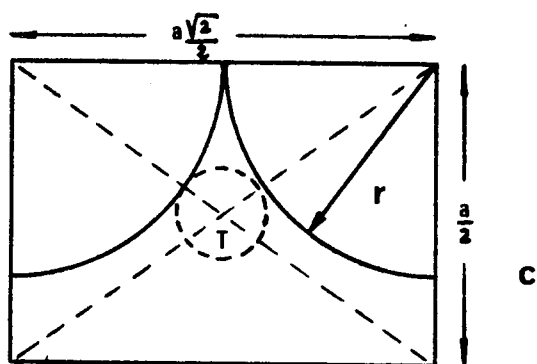
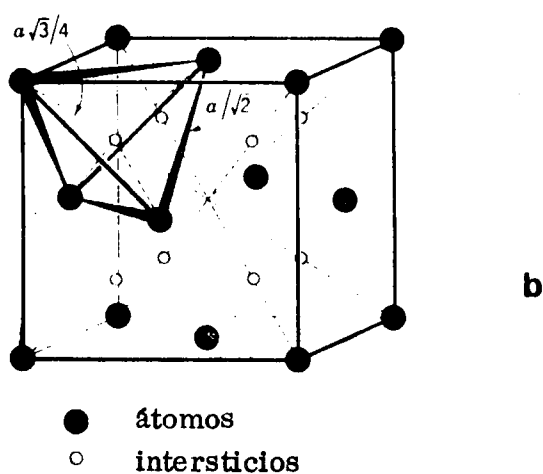
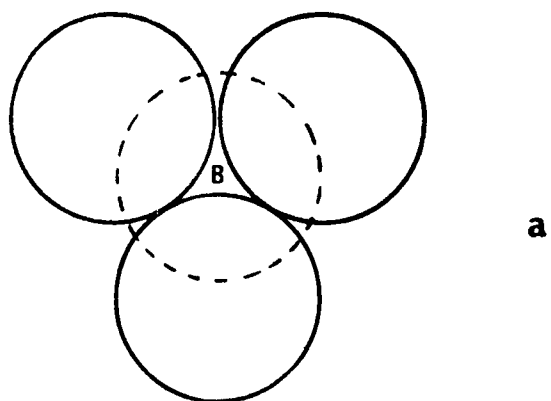
Se puede demostrar fácilmente (ejercicio E.IV.9) que la distancia entre primeros vecinos es

$$a \frac{\sqrt{2}}{2}$$

siendo a la arista de la celda, y que los átomos, supuestos esféricos, ocupan el 74% del volumen de la misma (ejercicio E.IV.9). También se puede ver que los planos más compactos, que son los correspondientes a los planos de apilamiento de las esferas rígidas son de la forma $\{111\}$ y que las direcciones más compactas son de la forma $\langle 110 \rangle$, ejercicio E.IV.9. Los 4 planos $\{111\}$ y las 12 direcciones $\langle 110 \rangle$ según las diagonales de las caras del cubo, caracterizan así la distribución de mayor compactitud y mayor simetría de todas las estructuras cristalinas.

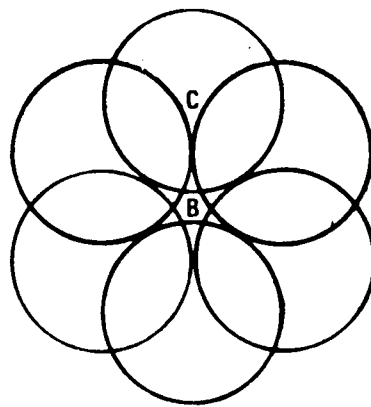
IV.4.1.1 Intersticios en la Estructura A_1

Los intersticios que deja esta estructura son sumamente pequeños y pueden ser de dos tipos. Si sobre la depresión situada entre tres esferas vecinas (intersticio de tipo B, Fig. IV.2) se coloca otra esfera, Fig. IV.6 (a), queda un espacio vacío limitado por las 4 esferas. Como éstas se distribuyen según los vértices de un tetraedro, el intersticio delimitado se denomina tetraedral. En la Fig. IV.6 (b) se muestran las posiciones que ocupan los intersticios tetraedrales dentro de la celda cúbica. Se puede ver que éstos están situados sobre las diagonales de la celda, a distancias iguales a $1/4 \cdot \sqrt{3}a$ de los vértices de la misma. En la Fig. IV.6 (c) se muestra un esquema auxiliar que permite calcular el radio máximo de la esfera rígida que puede ocupar una posición intersticial tetraedral. En efecto, se puede ver que el

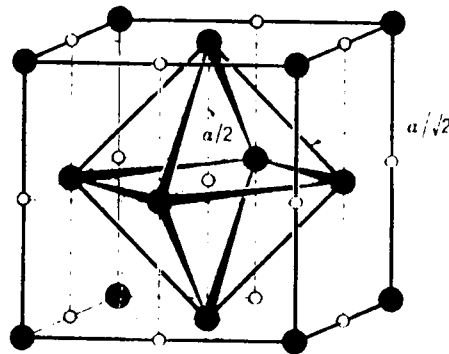


Extraído de Barret y Massalski

Fig.IV.6. Intersticios tetraedrales en la estructura cúbica de caras centradas. a) Formación de un intersticio tetraedral. b) Ubicación de un intersticio tetraedral en la celda de Bravais. c) Esquema para calcular el radio máximo de una esfera rígida que puede ocupar un intersticio tetraedral.

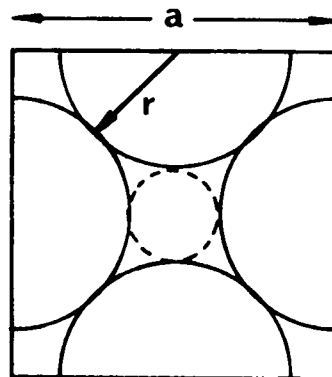


a



b

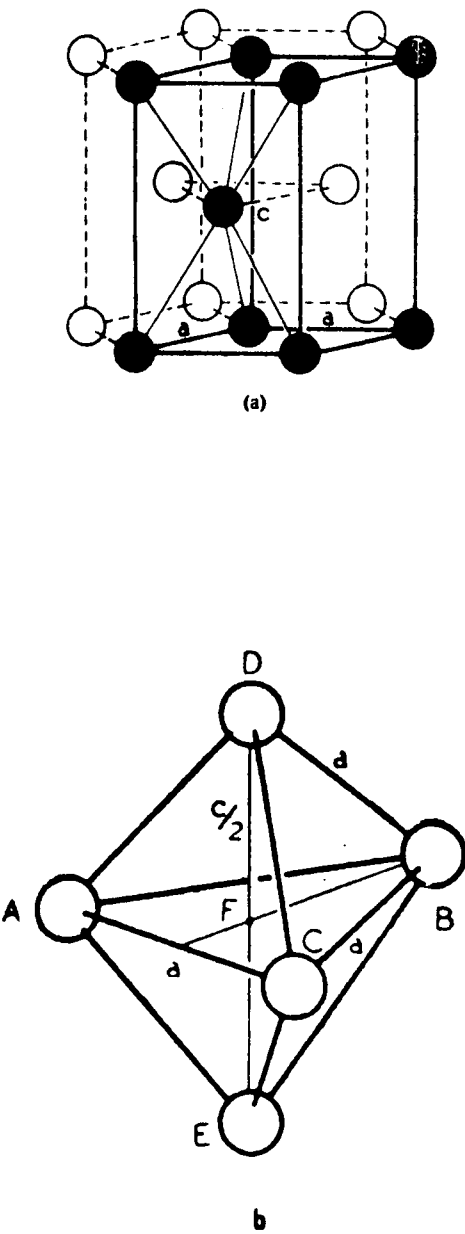
● átomos
○ intersticios



c

Extraído de Barret y Massalski

Fig.IV.7. Intersticios octaedrales en la estructura cúbica de caras centradas .
a) Formación de un intersticio octaedral. b) Ubicación de los intersticios octa-
edrales en la celda de Bravais . c) Esquema auxiliar para calcular el radio má-
ximo de una esfera rígida que puede ocupar un intersticio octaedral.



Extraído de Barret y Massalski

Fig.IV.8. a) Celda de base hexagonal de la estructura hexagonal compacta.
b) Esquema auxiliar para calcular el valor de la relación c/a .

tetraedro marcado en la Fig. IV.6 (b) se puede inscribir dentro de un cubo de arista $a/2$ y que su centro T coincide con el centro de la esfera intersticial. Se puede demostrar entonces que en el intersticio tetraedral de un apilamiento compacto de esferas de radio $r = a \sqrt{2}/4$ puede acomodarse una esfera de radio máximo igual a $0.225 r$ (ejercicio E.IV.1).

Consideremos ahora un intersticio plano de tipo B, como el del caso anterior, formado por tres esferas rígidas vecinas. Si se apila otra capa compacta de esferas de radio r , centradas en las posiciones C (Fig. IV.2) se obtiene ahora sobre el intersticio original B, un intersticio plano orientado en sentido contrario, vértice hacia abajo, Fig. IV.7 (a). Las dos capas delimitan entonces un espacio vacío denominado intersticio octaedral. En efecto, este intersticio está rodeado por 6 esferas dispuestas según los vértices de un octaedro. En la Fig. IV.7 (b) se muestra la posición de los posibles intersticios octaedrales dentro de la celda cúbica F, en la cual por razones de claridad, se ha reducido el tamaño de las esferas que representan a los átomos. El corte de la celda según un plano de tipo (100), Fig. IV.7 (c) facilita el cálculo del radio máximo de la esfera rígida que puede ocupar un intersticio octaedral en la estructura cúbica de caras centradas. Se puede demostrar (ejercicio E.IV.2) que este radio es igual a $0.414 r$. Es importante notar finalmente que en las estructuras compactas, solamente pueden existir estos dos tipos de intersticios, independientemente de la secuencia del apilamiento, ver sección siguiente.

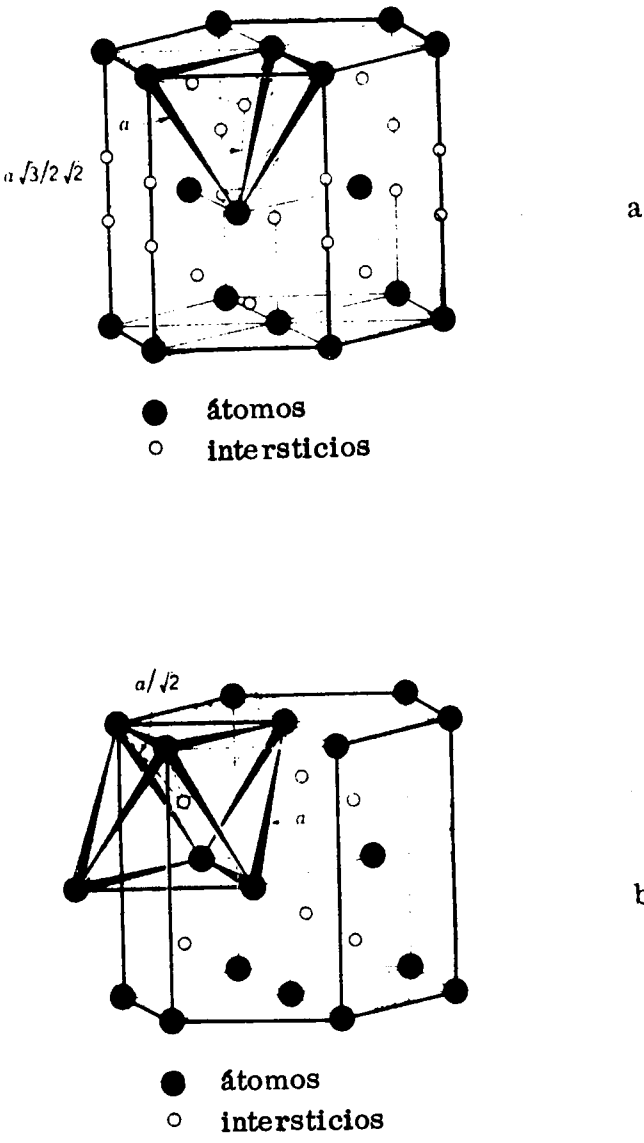
IV.4.2 Estructura Tipo A_3 (Hexagonal Compacta)

Esta estructura difiere de la anterior en la manera de apilar las sucesivas capas compactas. Como ya se ha demostrado en la Fig. IV.3 (a) el apilamiento de las dos primeras capas sigue la secuencia AB, análogamente a la estructura A_1 . La tercer capa se apila, en cambio, de tal manera que las esferas vuelven a ocupar la posición A correspondiente a la primer capa. La estructura que así se obtiene se describe por una red de Bravais hexagonal y un motivo compuesto por 6 átomos por celda o también por una red monocflica con $a=b$ y $\gamma=120^\circ$ y un motivo compuesto por dos átomos por celda situados en las posiciones (000) y $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$ sección II.2., Fig. II.3.

En las Tablas Internacionales de Cristalografía esta estructura se halla clasificada según esta última celda, tomando el origen de la red en el centro de la línea que une los dos átomos que componen el motivo.

El número de coordinación (primeros vecinos) es 12, igual que en la estructura A_1 y los planos más compactos son los (0001) llamados basales, cuya configuración es igual a la de los planos compactos {111} de la estructura fcc. Sin embargo en la estructura A_3 sólo existe ese conjunto de planos compactos. Las direcciones más compactas son las del tipo $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ paralelas a los planos $\{10\bar{1}0\}$ que constituyen las caras del prisma hexagonal, Fig. IV.8 (a) recordar ejercicio E.I.15. El grupo espacial correspondiente a esta estructura es el $P6_3/mmc$ (grupo N° 194).

En un apilamiento compacto de esferas rígidas tipo A_3 , la relación entre el eje $\bar{c}$ y el eje $\bar{a}$ es



Extraído de Barret y Massalski

Fig.IV.9. Intersticios en la estructura hexagonal compacta. a) Intersticios tetraedrales. b) Intersticios octaedrales.

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$$

El dibujo auxiliar de la Fig. IV.8 (b) permite calcular fácilmente este valor, ejercicio E.IV.3. Sin embargo, en las estructuras hexagonales reales existen apartamientos más o menos pronunciados de esta situación ideal, tal como se puede ver en la Tabla IV.2.

TABLA IV.2

Elemento	c/a
Be	1.5847
Ti	1.5873
Zr	1.5893
Mg	1.6235
Zn	1.8556
Cd	1.8859

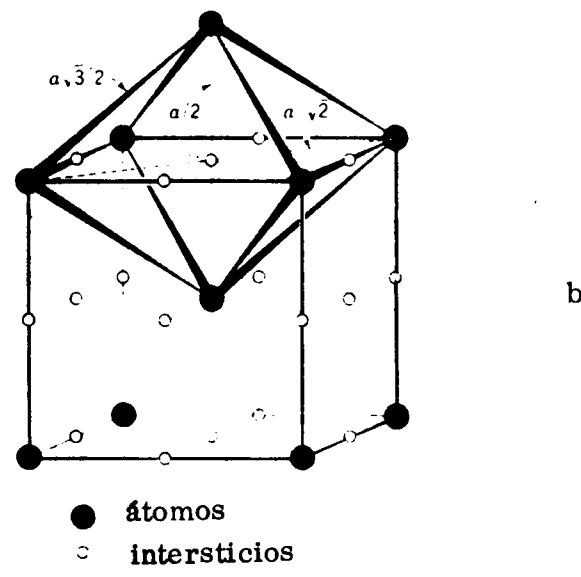
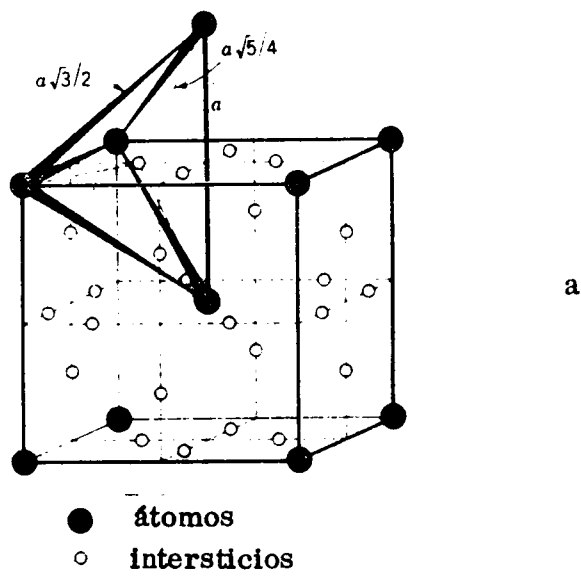
IV.4.2.1 Intersticios en la Estructura A₃

También se puede calcular fácilmente que en el apilamiento ideal ($c/a = 1.633$) las esferas ocupan el 74% del total del espacio, como en la estructura fcc. De la misma manera los intersticios, como no dependen de la forma del apilamiento, son similares a los de la estructura fcc. En la Fig. IV.9 (a) y (b) se muestra la ubicación de los intersticios tetraedrales y octaedrales, respectivamente, en la celda hexagonal.

IV.4.3 Estructuras Tipo A₂ (cúbica de cuerpo centrado)

Esta estructura ya ha sido ilustrada en la Fig. IV.4 y se describe mediante la red de Bravais cúbica I. La celda correspondiente contiene 2 átomos, situados en las posiciones (000) y $\left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}\right)$ ver sección II.2. Fig. II.2 (a) y el grupo espacial que describe las simetrías de esta estructura es Im3m (grupo N° 229).

La estructura A₂ no resulta del apilamiento sucesivo de capas compactas de esferas rígidas y en este sentido difiere de las estructuras A₁ y A₃. Solamente el 68% del espacio está ocupado por átomos, supuestos esféricos, frente al 74% de las estructuras anteriores. Los planos más compactos son los de la forma {110} cuya multiplicidad es 6. Además los planos de las familias {112} y {123} también contienen una alta densidad de átomos y por esta razón, existe en esta estructura una tendencia al deslizamiento que se manifiesta indistintamente en las tres formas de planos. El deslizamiento en la estructura A₂ se produce en las direcciones compactas $\langle 111 \rangle$. A pesar que las estructuras cúbicas de caras centradas fcc o hcp



Extraído de Barret y Massalski

Fig.IV.10. Intersticios en la estructura cúbica de cuerpo centrado.
a) Intersticios tetraedrales. b) Intersticios octaedrales.

hexagonal compacta son más compactas que la bcc cúbica de cuerpo centrado, los intersticios de esta última son más pequeños. Los intersticios tetraedrales se encuentran en el centro de un tetraedro distorsionado definido por dos átomos de los vértices y dos átomos correspondientes a los centros de dos celdas adyacentes, Fig. IV.10 (a). Pueden alojarse en ellos esferas de radio máximo igual a $0.219 r$. En cambio los intersticios octaedrales son más pequeños que los anteriores puesto que el radio de la mayor esfera que puede situarse en los mismos es $0.154 r$ contrariamente a lo que ocurre en los apilamientos compactos. La ubicación de los sitios intersticiales octaédricos en la celda cúbica se muestra en la Fig. IV.10 (b).

IV.5 FALLAS DE APILAMIENTO EN ESTRUCTURAS COMPACTAS

Se ha visto anteriormente que las estructuras compactas pueden considerarse originadas por el apilamiento de capas atómicas según distintas secuencias. La única condición para que el apilamiento resulte compacto es que dos capas contiguas no ocupen posiciones iguales. La secuencia ABCABC ... origina la estructura A_1 y un apilamiento ABAB ... origina en cambio la estructura A_3 . Sin embargo, dada una estructura, es muy frecuente encontrar alteraciones en la secuencia de capas, las cuales dan origen a defectos extendidos sobre los planos compactos del cristal, denominados fallas de apilamiento.

En la estructura A_1 puede ocurrir que una capa entera quede removida en la secuencia de apilamiento, como por ejemplo

$$\dots ABC / BCABC \dots$$

donde en el lugar de la barra falta una capa de tipo A. Esta falla se denomina intrínseca. De la misma manera puede introducirse una capa extra entre dos capas vecinas

$$\dots ABC \underline{B} ABC \dots$$

que dan origen a una falla de apilamiento extrínseca. Cuando una falla de apilamiento divide al cristal en dos porciones de orientación diferente tales que una de ellas es la imagen especular de la otra, se dice que se tiene una macula (ver más adelante IV.6).

Teniendo en cuenta solamente las interacciones entre los átomos de dos capas vecinas, no existiría diferencia entre las estructuras A_1 y A_3 puesto que éstas se inician con la misma secuencia AB. Energéticamente, ambas estructuras serían equivalentes. Pero el apilamiento de la tercer capa es diferente y la interacción entre segundos vecinos no es la misma. Por lo tanto existe una pequeña diferencia de energía entre ambos apilamientos. El hecho de que esta diferencia sea muy pequeña es la razón por la cual las fallas de apilamiento constituyen un defecto muy común en estructuras compactas.

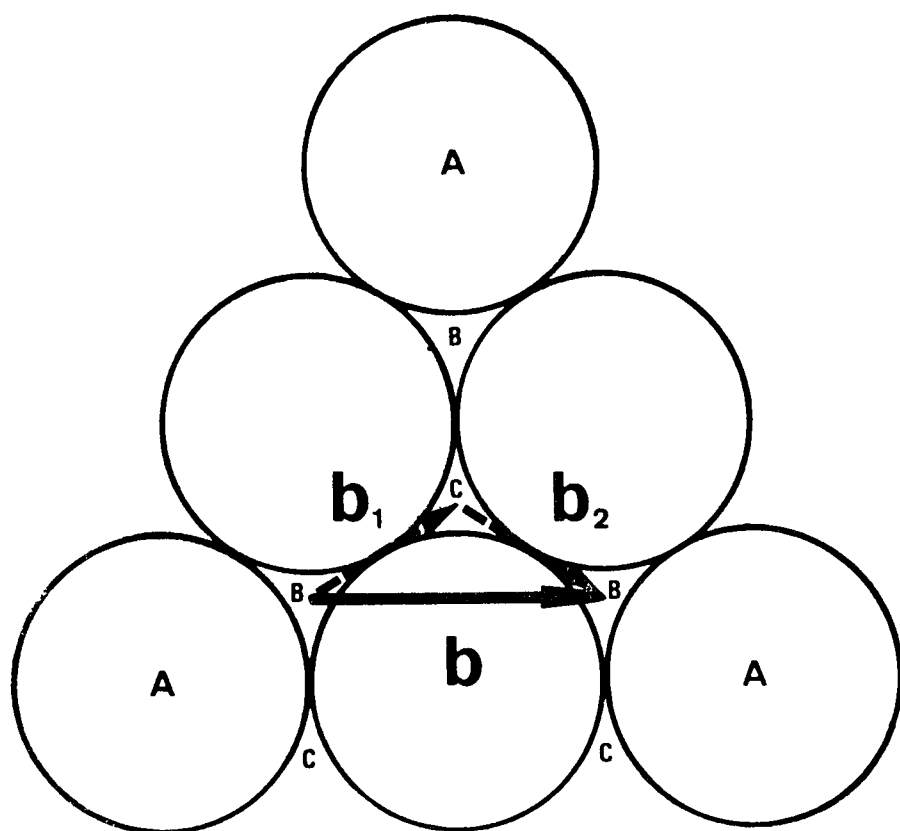


Fig.IV.11. Esquema de la disposición de átomos en un plano (111) en la estructura cúbica de caras centradas. En la deformación plástica, el deslizamiento de la capa inmediata superior no se realiza directamente entre dos sitios 'B' (vector $\vec{b}$) sino que resulta energéticamente más favorable el camino definido por los vectores $\vec{b}_1$ y $\vec{b}_2$ tales que $\vec{b} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$.

IV.5.1 Formación de Fallas por Deformación Plástica

Las fallas de apilamiento desempeñan un papel muy importante en las deformaciones plásticas de los metales. Supongamos por ejemplo un cristal fcc sometido a una tensión tal que favorezca un deslizamiento. Este se producirá preferencialmente sobre los planos $\{111\}$ según las direcciones $\langle 110 \rangle$. En la Fig. IV.11 se muestra esquemáticamente la disposición de átomos sobre un plano compacto (111) de un cristal cúbico de caras centradas. Un deslizamiento sobre dicho plano en la dirección compacta $[\bar{1}10]$, diagonal de la cara inferior del cubo, debería llevar a los átomos de la capa superior de un sitio B a otro sitio B mediante el desplazamiento.

$$\vec{b} = \frac{1}{2} \vec{a} [\bar{1}10]$$

igual a la mitad de la longitud de la diagonal de la celda cúbica. Así, una capa B después de un desplazamiento igual a $\vec{b}$ volvería a ocupar las posiciones B. Sin embargo, este desplazamiento no es el que se produce en una deformación plástica, sino que energéticamente resulta más favorable un deslizamiento en "zig-zag" definido por los vectores

$$\vec{b}_1 = \frac{\vec{a}}{6} [\bar{2}11] \quad \vec{b}_2 = \frac{\vec{a}}{6} [\bar{1}2\bar{1}]$$

tales que

$$\vec{b} = \vec{b}_1 + \vec{b}_2$$

Entonces, durante el deslizamiento un átomo situado en una posición B pasa primero a la posición C mediante el desplazamiento $\vec{b}_1$. La capa B ha pasado a ser una capa C y la capa inmediata superior, que era C, debido al mismo desplazamiento $\vec{b}_1$ ha pasado a ser una capa A, Fig. IV.11. Del apilamiento original ABC ABC se tiene ahora la secuencia

$$\begin{array}{ccccccc} A & B & C & A & \vdots & C & A & B & C \end{array}$$

El desplazamiento $\vec{b}_1$ ha removido una capa B y se ha introducido de esta manera una falla de apilamiento intrínseca. Si se produce además un desplazamiento según $\vec{b}_2$ la capa C pasa a ser nuevamente una capa B y la capa siguiente A pasa a ser C. La falla de apilamiento desaparece y la secuencia vuelve a ser nuevamente el ABC ABC. En la Fig. IV.12 se ha representado nuevamente el plano (111) en la celda cúbica de caras centradas, reduciéndose el tamaño de los átomos por razones de claridad. En esta construcción pueden visualizarse rápidamente los vectores $\vec{b}$, $\vec{b}_1$ y $\vec{b}_2$ (ejercicio E.IV.5).

IV.6 MACLAS

Dos cristales constituyen una nacla cuando formando parte del mismo cuerpo, están ligados por relaciones de orientación bien definidas a través de ciertas operaciones de simetría.

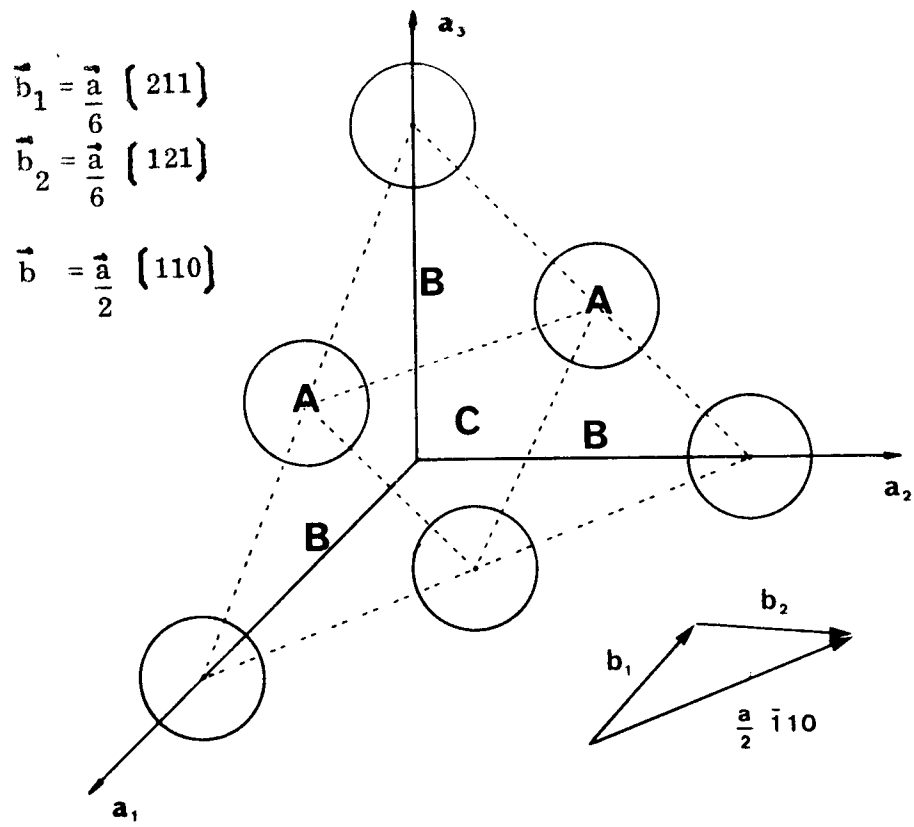


Fig.IV.12. Esquema del plano compacto (111) en el cual se indica la posición de los vectores $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ y $\vec{b}$.

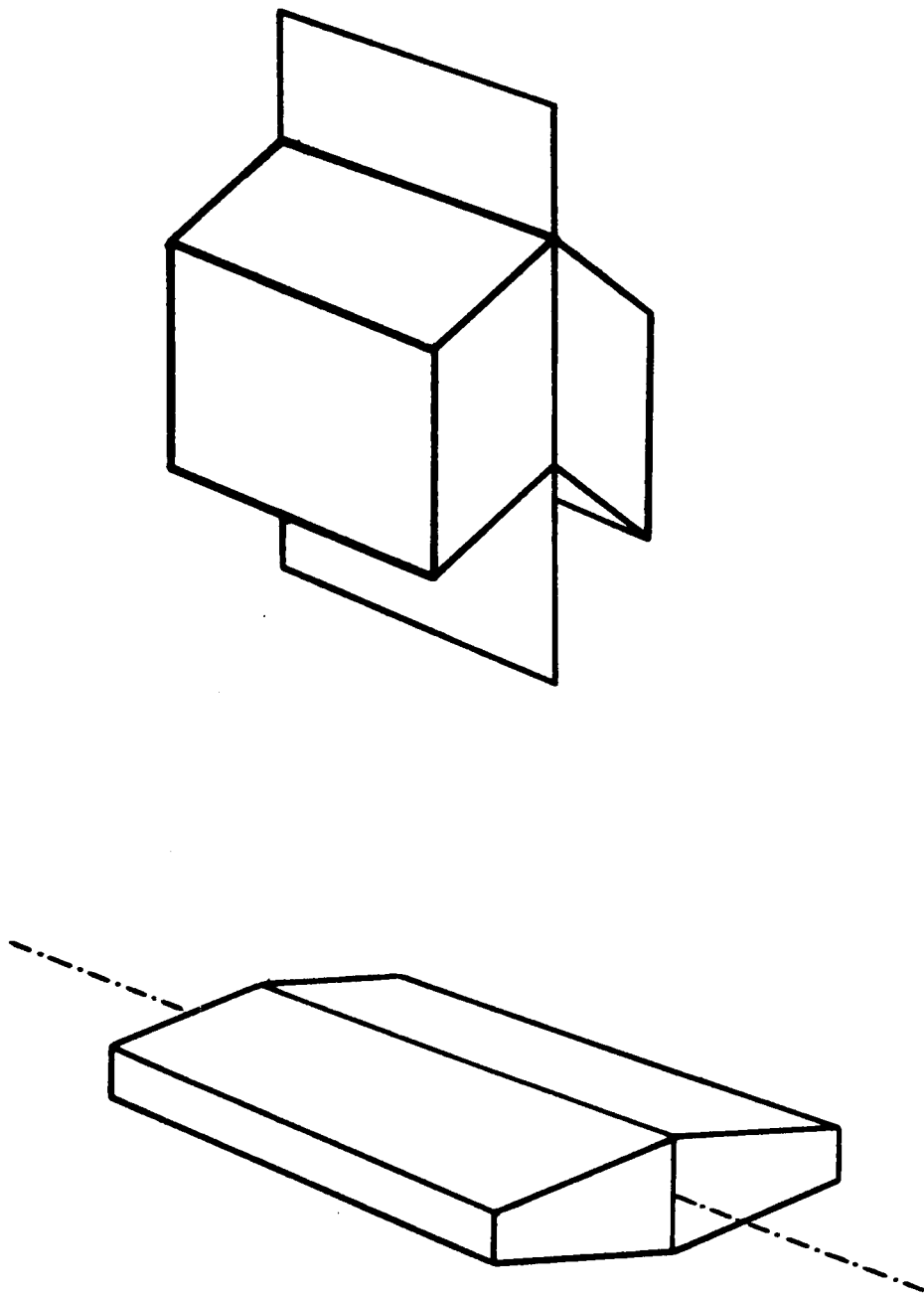


Fig.IV.13. a) Macla de reflexión. b) Macla de rotación de orden 2.

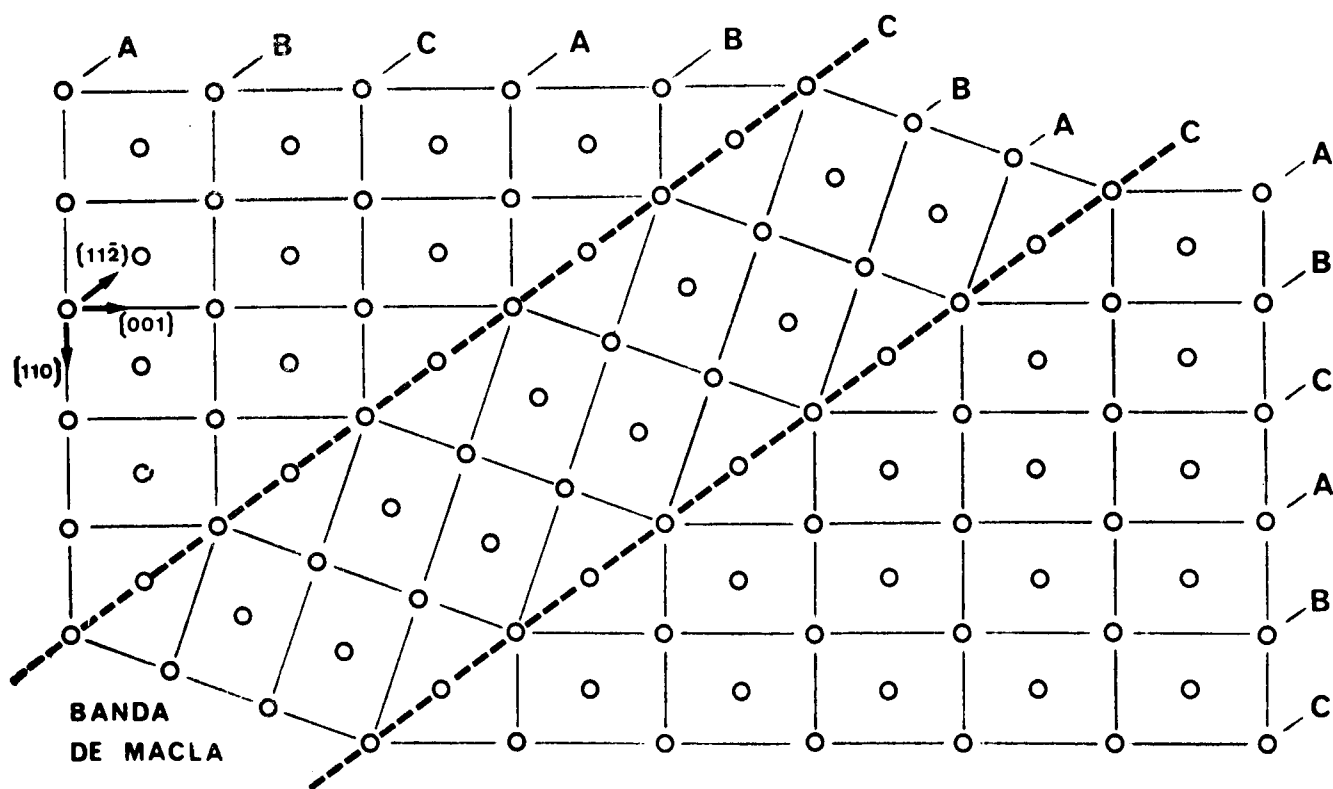


Fig.IV.14. Esquema de formación de una macla en un cristal cúbico de caras centradas (fcc). El dibujo corresponde a la proyección del cristal tal como se vería según la dirección $(\bar{1}10)$. Con A, B y C se indican las sucesivas capas compactas.

Si la orientación de un cristal se deduce de la orientación del otro mediante la reflexión en un plano, se tiene una macla de reflexión. Fig. IV.13 (a). Es obvio que el plano de reflexión, denominado generalmente plano de composición, corresponde al mismo tipo de plano reticular de los dos cristales. Sin embargo este plano no debe confundirse con los elementos de simetría del grupo puntual del cristal (capítulo II). Es también interesante notar que en las zonas adyacentes al plano de composición pueden alterarse las distancias interatómicas y por lo tanto siempre se necesita una cierta energía para producir una macla.

Si las orientaciones de los dos cristales están relacionadas por rotaciones de orden 2, 3, 4 o 6, se tiene una macla de rotación. Fig. IV.13 (b). El eje de rotación puede encontrarse en el plano común a ambos cristales o puede ser normal al mismo.

En metalurgia física, las maclas de mayor interés son las que se presentan en las estructuras A_1 , A_2 y A_3 . Estas pueden clasificarse a su vez en dos grandes grupos según la causa que las origina.

- Maclas de recristalización. Se presentan en metales y aleaciones fcc después de una deformación y un tratamiento de recristalización a altas temperaturas.
- Maclas de deformación. En la deformación plástica de metales bcc y hcp se puede producir una forma particular de deslizamiento en el cual cada capa atómica desliza una cierta distancia respecto de la capa adyacente. La orientación de la parte del cristal que ha deslizado cambia respecto del cristal no deformado, originando finalmente una macla.

IV.6.1 Maclas en Estructuras A_1

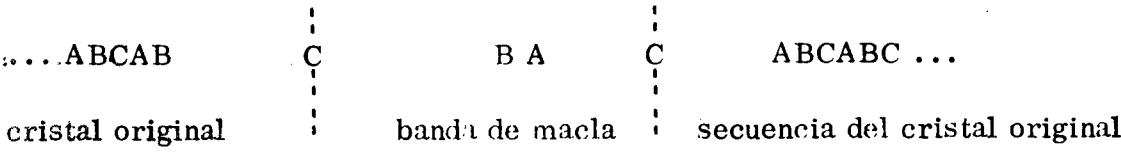
En la Fig. IV. 14 se esquematiza la proyección de átomos de un cristal fcc, tal como se verían según una dirección $[110]$ del mismo. En la misma figura se han marcado con las letras A, B, C a las capas atómicas compactas (ver Fig. IV.1).

Supongamos que el cristal crece, p.ej. por solidificación, a partir de la fase líquida, en la dirección $[001]$ (izquierda a derecha, Fig. IV. 14). Las sucesivas capas compactas se van apilando de acuerdo a la secuencia ABC ABC ... correspondiente a la estructura fcc. En un momento dado, es altamente probable que después de una capa C se apile una capa de tipo B, produciéndose una falla de apilamiento. Si el cristal sigue creciendo según la secuencia propia del fcc, la falla será el único defecto presente en el cristal. En cambio, puede ocurrir que después de una capa B se apile una capa A, luego una capa C de acuerdo a la secuencia BAC... Este apilamiento también da origen a una estructura fcc pero su orientación es diferente de la anterior puesto que es distinto el orden de ocupación de los sitios atómicos.

Se puede ver que el plano PP', Fig. IV.14 correspondiente a la última capa C de la parte izquierda del cristal, actúa como plano de reflexión. En efecto, todo átomo de la capa B siguiente tiene un equivalente en la capa B anterior al plano PP'. Otro tanto puede decirse de la capa siguiente A. En la Fig. IV.14 se han marcado con

líneas de puntos algunas de estas correspondencias .

Si luego, durante el crecimiento subsiguiente del cristal, se produce una nueva falla en la secuencia se vuelve al apilamiento original tal como se puede ver en la parte derecha de la Fig. IV.14 Se ha nucleado así una banda de macla entre dos partes del cristal que han seguido la secuencia del apilamiento original, de acuerdo al esquema



Las superficies que limitan la macla definen dos fallas de apilamiento en las cuales la secuencia de capas compactas corresponde a la estructura hexagonal A_3 .

IV.6.2 Maclas en Estructuras A_2 y A_3

La formación de maclas constituye uno de los mecanismos importantes dentro de los procesos de deformación plástica de metales cúbicos de cuerpo centrado. El plano de composición en estas estructuras es de la forma $\{112\}$. En el caso del Fe α estas maclas se producen por deformación de nuestras monocristalinas a bajas temperaturas . También son característica de la deformación del hierro por impacto, dando origen a bandas muy estrechas denominadas bandas de Neumann.

Los desplazamientos atómicos que intervienen en la formación de maclas en estructuras tipo A_2 son un poco más complejos que en el caso de estructuras compactas, ver Hume Rothery, capítulo 3, y por ejemplo las distancias interatómicas en las vecindades del plano de composición son un 9.2% menores que las normales en la estructura del Fe α .

En metales hexagonales se producen maclas de deformación cuando la orientación del cristal no favorece el deslizamiento de planos atómicos. El plano de composición es generalmente uno de la forma $\{10\bar{1}2\}$. Se puede ver además que dadas las simetrías propias de la estructura hexagonal, los pequeños desplazamientos atómicos necesarios para producir una macla pueden cambiar apreciablemente la orientación relativa entre la macla y el cristal original. P.ej. en el caso de Cd el eje $\vec{c}$ de la macla es aproximadamente perpendicular al eje $\vec{c}$ del cristal no deformado.

IV.7 ESTRUCTURA ATOMICA DE ALEACIONES

A título de aplicación de los conocimientos anteriores, haremos a continuación un breve análisis cristalográfico de algunas aleaciones y de las transformaciones que en ellas pueden llevarse a cabo. Desde el punto de vista estructural las aleaciones binarias pueden pertenecer a dos grandes grupos , según cual sea la ubicación de los átomos del metal soluto B en la estructura del metal solvente a: intersticiales y sustitucionales .

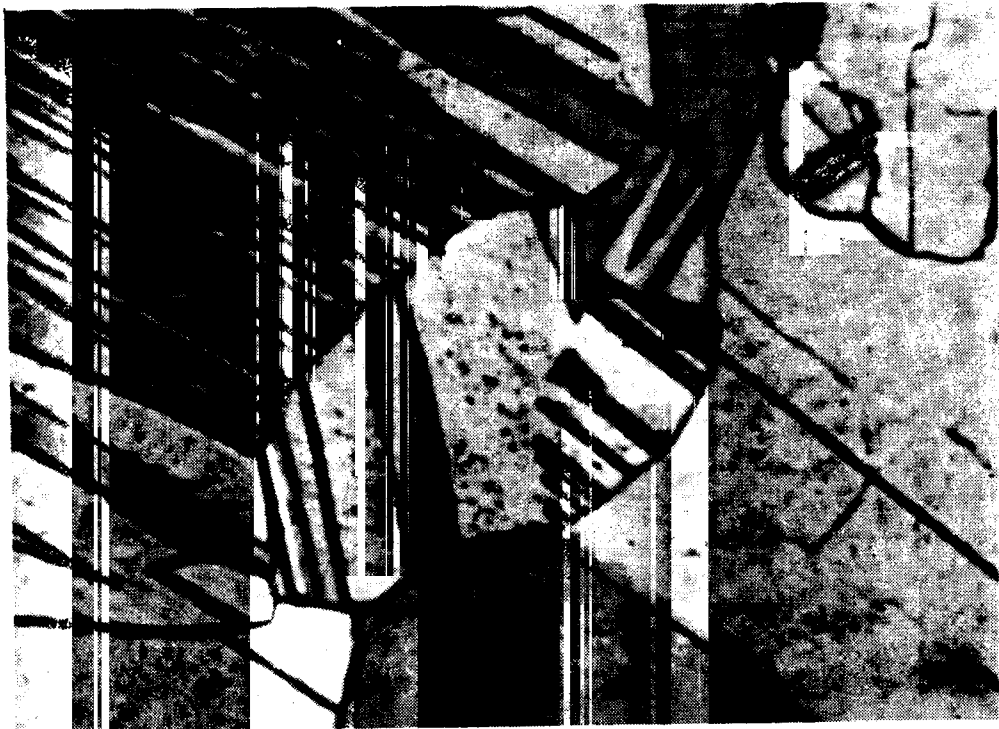


Fig.IV.15. Maclas en una muestra de óxido de Vanadio. Micrografía óptica obtenida con un aumento total de 400 x. Atención: Ing. D.I. Vassallo.

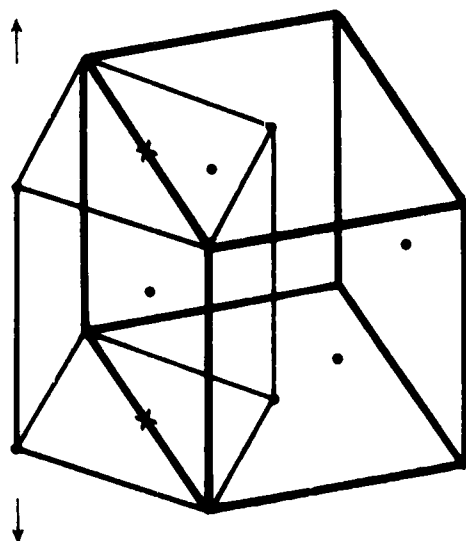


Fig. IV.16. Relación entre la celda cúbica fcc de la austenita (fase γ) y la celda tetragonal de la martensita.

IV.7.1 Soluciones Sólidas Intersticiales

Cuando los átomos del metal soluto B ocupan los intersticios de la estructura del metal base A, se tiene una solución sólida intersticial. Un ejemplo típico es la austenita: los átomos de carbono se ubican en los intersticios de la estructura A_1 del Fe γ . Ya se ha visto en la sección IV.5.1 que los intersticios tetraedrales y octaedrales de la estructura A_1 , construída mediante el apilamiento de átomos esféricos de radio r , puede alojar átomos cuyos radios máximos son $0.225 r$ y $0.44 r$ respectivamente. Suponiendo que el Fe γ pueda describirse por el modelo de esferas rígidas y siendo su parámetro de red $a=3.65 \text{ \AA}$ se halla fácilmente que los sitios tetraedrales pueden dar cabida a átomos de radio $0.28 \text{ \AA}$ y los octaedrales a átomos de radio igual a $0.52 \text{ \AA}$, ejercicio E.IV.6. En la Tabla IV.3 se da la lista de los radios atómicos de elementos solubles en el hierro.

TABLA IV.3

ELEMENTO	H	B	C	N	O
Radio Atómico ($\text{\AA}$)	0.46	0.97	0.77	0.71	0.60

En cambio en la estructura A_2 del Fe α cuyo parámetro de red es $2.87 \text{ \AA}$ podrían caber átomos de $0.36 \text{ \AA}$ de radio en los intersticios tetraedrales y de $0.19 \text{ \AA}$ en los octaedrales. Es evidente entonces que es más favorable la constitución de una solución sólida intersticial en la estructura A_1 que en la A_2 .

Pero es posible también obtener soluciones intersticiales de carbono en la estructura cúbica de cuerpo centrado del Fe α . Los átomos de C se ubican en los sitios octaedrales contrariamente a lo que podría esperarse provocando el desplazamiento de los dos átomos vecinos inmediatos. La relajación posterior hace que la red cúbica pase a ser tetragonal. Esta es la llamada transformación martensítica.

IV.7.1.1 La transformación martensítica

La transformación martensítica es un fenómeno conocido desde hace mucho tiempo y es el responsable del endurecimiento de aceros templados rápidamente desde altas temperaturas. Una característica particular de esta transformación de fase es que no interviene ningún proceso de difusión en ella y solamente es el resultado de una variación local de las posiciones atómicas de la estructura original.

Consideremos la celda tipo A_1 de la Fig. IV.16 que corresponde a un acero austenítico cúbico de caras centradas. La misma estructura puede describirse mediante una celda tetragonal I en la cual los planos de la forma $\{110\}$ y las direcciones del tipo $\langle 111 \rangle$ son paralelas a los planos $\{100\}$ y a las direcciones $\langle 110 \rangle$ respectivamente, de la estructura A_1 .

En la misma figura se han marcado además los intersticios octaedrales comunes a ambas estructuras. En la transformación martensítica, inducida p.ej. por una tensión en la dirección vertical, los átomos de carbono no alcanzan a difundir como para formar algún carburo y sólo pueden reordenarse localmente y ocupar preferentemente dichas posiciones intersticiales. El hecho de que se ocupe un solo tipo de sitios intersticiales trae como resultado una distorsión tetragonal de la red cúbica original que es proporcional a la concentración de carbono así como la presencia de fuertes tensiones locales en la estructura resultante. La transformación martensítica puede tener lugar también en aleaciones no ferrosas como el latón con 37.5% de Zinc.

IV.7.2 Soluciones Sólidas Sustitucionales

IV.7.2.1 . Orden de Corto Alcance

En una solución sólida sustitucional un cierto número de átomos del metal soluto B reemplaza a los átomos del solvente A en la estructura cristalina de este último. Las diferencias de tamaño de los átomos que componen la solución sólida provocan en general una variación de las dimensiones de la celda del solvente. La ley de Vegard establece que las dimensiones de la celda varían linealmente con la concentración de soluto, aunque en realidad la validez de esta ley es sólo aproximada.

A su vez, en una solución sólida sustitucional los átomos de los metales A y B pueden distribuirse en tres formas distintas:

- 1) Al azar - Los átomos de A y B se distribuyen indistintamente en los sitios atómicos correspondientes a la estructura del metal solvente A o de la estructura particular que pueda adoptar la aleación. Se dice que la aleación constituye una solución sólida homogénea o que está completamente desordenada. Prácticamente este caso no se presenta en los sistemas binarios conocidos.
- 2) Los átomos de A y B se distribuyen de tal manera que cada átomo de A tiende a rodearse por átomos de B como vecinos inmediatos y existe por lo tanto una tendencia al ordenamiento. Esta situación suele presentarse tanto en las soluciones sólidas sustitucionales como intersticiales.
- 3) Los átomos de la misma naturaleza tienden a agruparse entre sí. Se dice que en la aleación existe una tendencia a la segregación. Este caso es frecuente en soluciones sólidas sustitucionales.

En cualquiera de los tres casos, los conceptos de triple periodicidad y simetría, dejan de tener la validez establecida hasta el presente, puesto que puntos equivalentes de la red pueden estar ocupados por átomos diferentes. En el caso de un metal puro, la triple periodicidad permitía describir una estructura en base a la celda que con su repetición constituía todo el cristal. Las características de la celda quedaban especificadas por unos pocos parámetros geométricos. Pero para describir la estructura de una solución sólida sería necesario especificar la posición individual de cada uno de los átomos de la aleación. Es evidente que esta

descripción no puede hacerse y es necesario por lo tanto limitarse a un estudio estadístico. De esta manera en una solución sólida completamente desordenada sólo es posible decir que en posiciones equivalentes de la red existe un "átomo promedio". Este es un átomo ficticio cuyas características son una combinación de las características de los átomos que componen la solución sólida, promediadas con un factor de peso que depende directamente de la composición atómica.

Si la distribución atómica en una solución sólida se aparta de la correspondiente al azar, la descripción de la estructura se hace entonces en términos de los llamados parámetros de orden de corto alcance. La definición de estos parámetros no es única y adoptaremos aquí una de las más utilizadas en la literatura.

Sea $\vec{r}_m$ un vector de la red cristalina, donde m simboliza ahora los tres enteros u, v, w (sección I.2.3). Consideremos todos los pares de átomos separados por el vector $\vec{r}_m$ suponiendo que el origen de dicho vector se toma sobre un átomo B. Los parámetros de orden de corto alcance de Warren-Cowley se definen entonces por la relación

$$\alpha_m = 1 - \frac{P_m^{BA}}{C_A}$$

donde P_m^{BA} es la probabilidad de hallar un átomo A en el extremo del vector $\vec{r}_m$ cuando existe un átomo B en su origen y C_A es la concentración atómica del metal A. Si la solución sólida está completamente desordenada, la probabilidad de encontrar un átomo A en cualquier punto de la red cristalina es C_A ; luego $\alpha_m = 0$ para todo m, salvo el caso trivial $\alpha_0 = 1$, pues por hipótesis existe un átomo B en el origen.

Si la solución evoluciona hacia el ordenamiento, existirán dominios en los cuales cada átomo tiende a rodearse por átomos de naturaleza diferente, separados entre sí por dominios de solución totalmente desordenada. En este caso la probabilidad de encontrar un átomo A vecino al átomo B situado en el origen será tal que

$$P_m^{BA} > C_A$$

y α_m será negativo para todos los vectores $\vec{r}_m$ correspondientes a la primer capa de vecinos de B. Si el extremo del vector $\vec{r}_m$ cae en la segunda capa, la probabilidad de encontrar allí un átomo A será

$$P_m^{BA} < C_A$$

y α_m será positivo. Puesto que los dominios ordenados son pequeños y están separados por dominios de solución sólida desordenada, al aumentar $\vec{r}_m$, entonces P_m^{BA} tiende a C_A y α_m tiende por lo tanto a cero. Si la solución sólida evoluciona en cambio

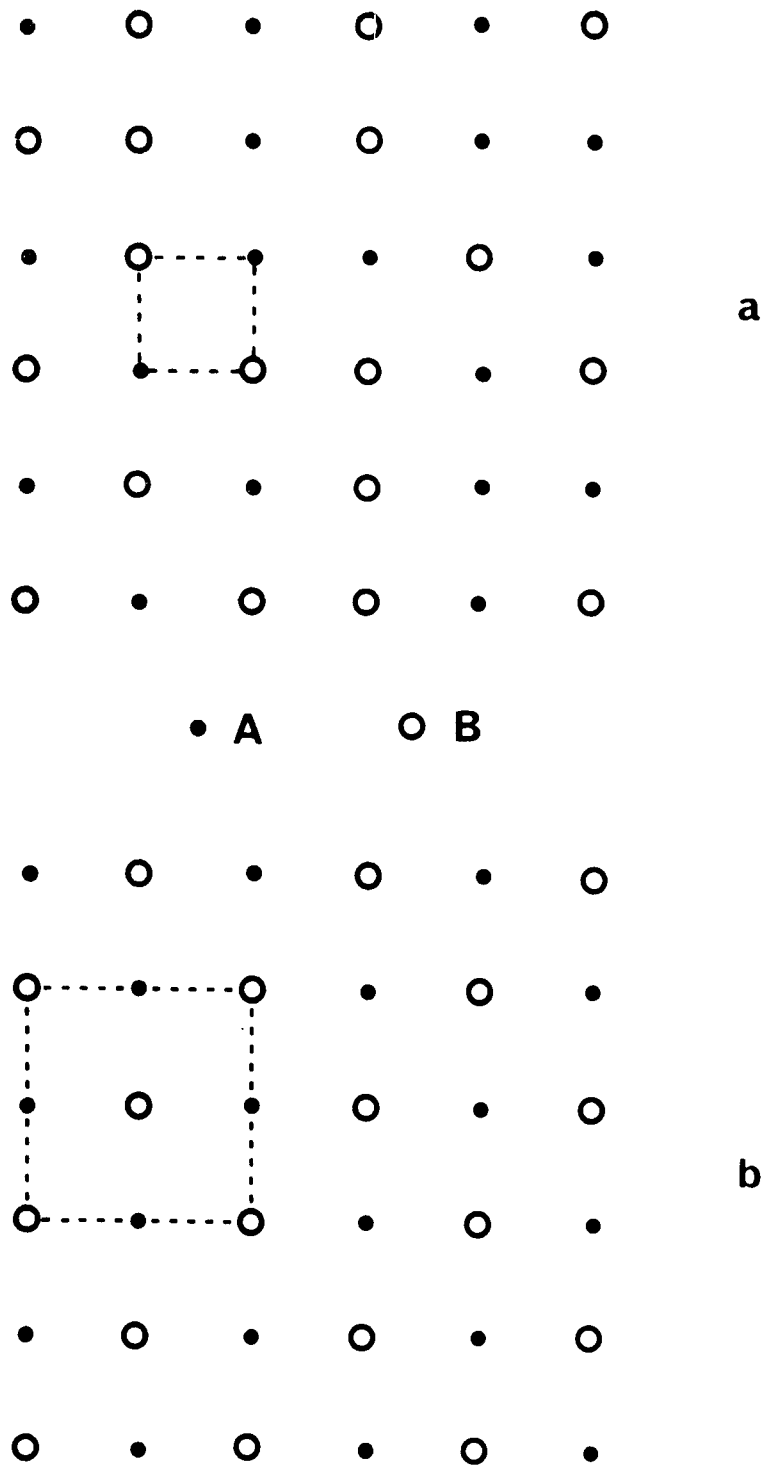


Fig.IV.17. a) Esquema de una solución sólida binaria completamente desordenada.
b) Esquema de la misma solución sólida completamente ordenada. En este caso es posible definir una nueva celda de mayor tamaño para describir la estructura del cristal. Esta disposición ordenada se denomina superestructura.

hacia la segregación, se constituyen dominios en los cuales los átomos de B (o los del metal A) tienden a agruparse. En este caso $P_m^{BA} < C_A$ y los parámetros α_m son todos positivos.

IV.7.2.2 Orden de Largo Alcance. Superestructuras

Un caso particular de ordenamiento se presenta en una solución sólida en la cual los átomos se suceden en una secuencia ordenada tipo ABA B ... en todo el volumen de la aleación. En este caso, para la primera capa de vecinos

$$P_1^{BA} = 1 \quad \therefore \quad \alpha_1 = \frac{1}{C_A}$$

Para la segunda capa en cambio

$$P_2^{BA} = 0 \quad \therefore \quad \alpha_2 = 1$$

De esta manera el parámetro α oscila entre los valores 1 y $1-1/C_A$ en todo el volumen del cristal. Se dice entonces que existe orden de largo alcance.

Habíamos visto que en una solución sólida completamente desordenada, la celda unitaria se podía definir solamente en base a un átomo promedio situado sobre sus nodos, tal como se muestra esquemáticamente en la Fig. IV.17 (a). Pero en una solución sólida completamente ordenada es posible definir una celda de tal manera que su repetición sucesiva describa todo el cristal, Fig. IV.17 (b). Esta celda contiene átomos idénticos en puntos equivalentes, pero su tamaño es mayor que el de la celda de la solución desordenada. Este hecho ha conducido al nombre de superestructura para designar una solución sólida caracterizada por un orden de largo alcance. Los sistemas de aleaciones que pueden dar lugar a superestructuras son numerosas, aunque sin embargo la mayoría de ellos puede clasificarse según unas pocas estructuras tipo, basadas en las redes A_1 , A_2 y A_3 . Nos limitaremos a mencionar los ejemplos más representativos.

1) Cu_3Au - Nomenclatura Strukturbericht $L1_2$

En el estado desordenado la estructura es de tipo A_1 , con un átomo promedio (75% Cu + 25% Au) en cada nodo de la red, describiéndose por el grupo espacial $Fm\bar{3}m$, Fig. IV.18 (a). Pero en el estado de orden total la celda que describe la aleación es cúbica simple, alrededor de cuyos nodos se distribuye un motivo compuesto por un átomo de Au en el origen (000) y tres átomos de Cu en las posiciones $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$, $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$, Fig. IV.18 (b). El grupo espacial correspondiente es

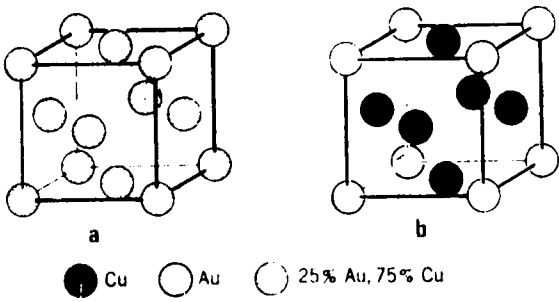


Fig.IV.18. Celda unitaria de la aleación Cu_3Au . a) Estructura desordenada. b) Estructura ordenada.

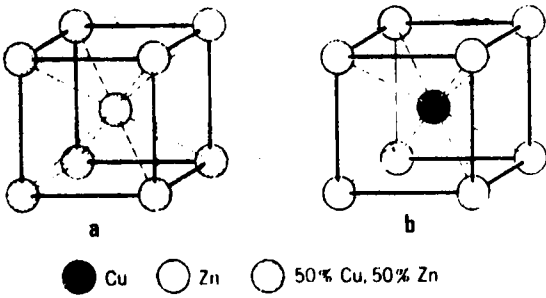


Fig.IV.19. Aleación CuZn o latón β . a) Estructura desordenada. b) Estructura ordenada.

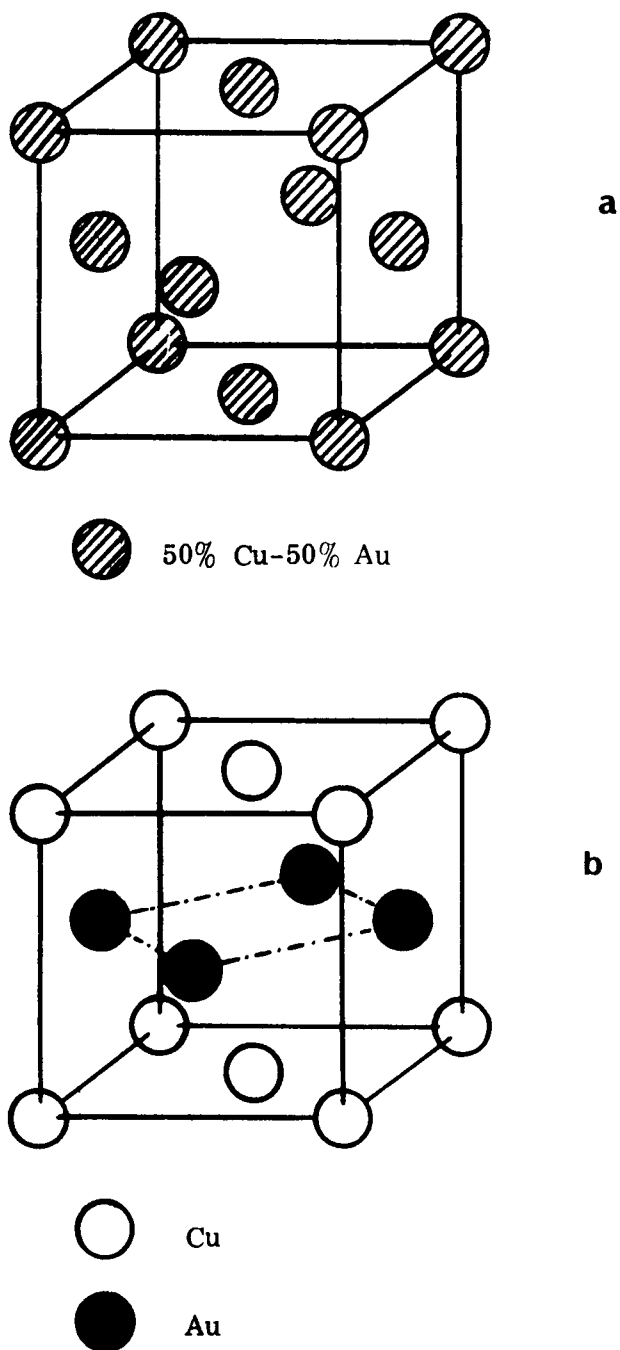


Fig.IV.20. Celda unitaria de la aleación CuAu. a) Estructura ordenada, b) Estructura desordenada.

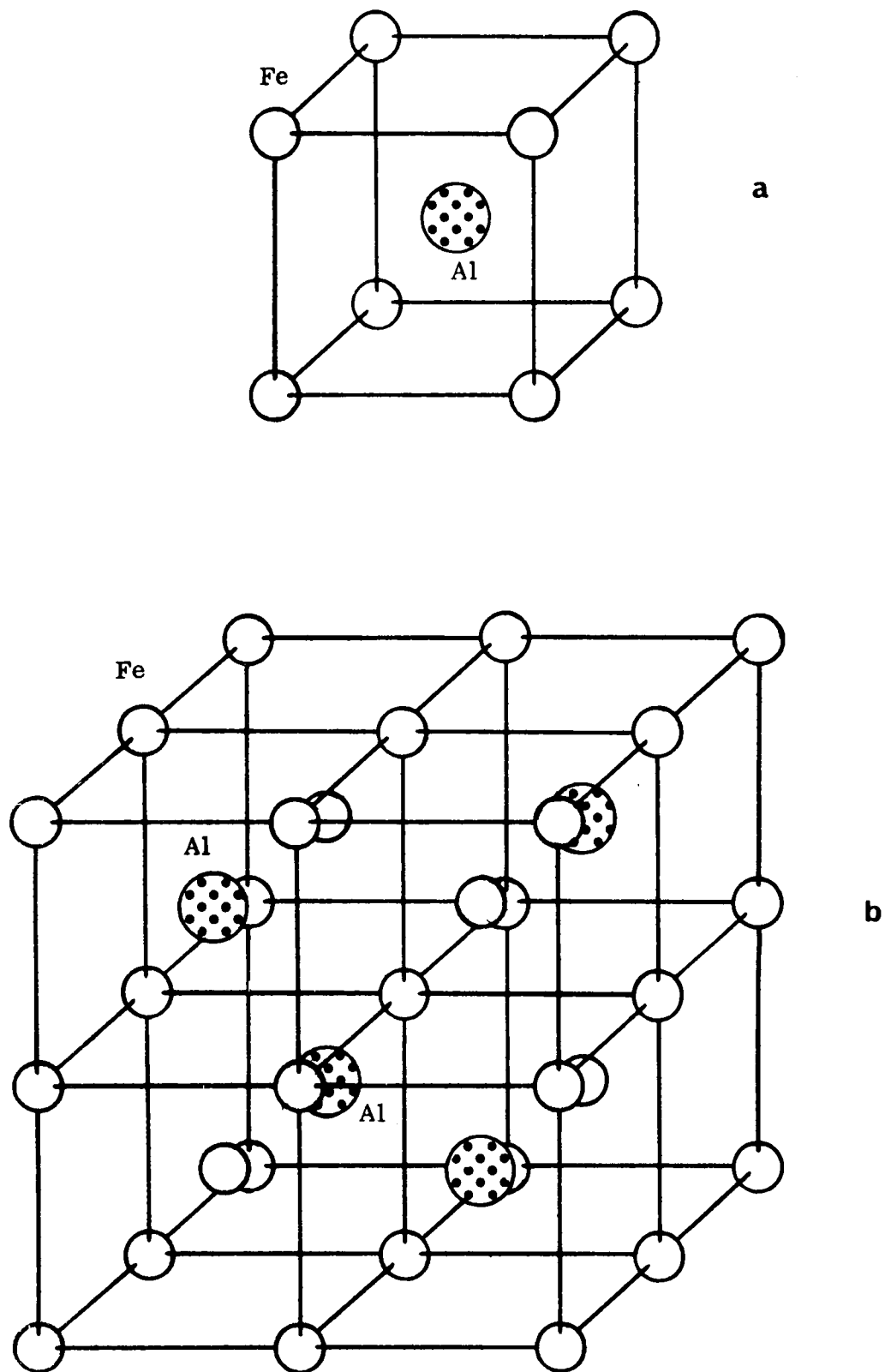


Fig.IV.21. a) Superestructura del FeAl. b) Superestructura del Fe₃Al .

ahora $Pm3m'$.

La celda es cúbica en ambos casos pero en la solución ordenada un cierto motivo de repetición se asocia a la celda primitiva P, mientras que en el caso desordenado es cúbica F con un "átomo promedio" en cada nodo de esta última red. El tipo de superestructura $L1_2$ ha sido observado en casi un centenar de sistemas. Además del Cu_3Au , podemos citar el Pt_3Sn , Al_3U , $AlZr_3$, Fe_3Ni .

2) CuZn o latón

En el estado desordenado la estructura es de tipo A_2 , Fig. IV.19 (a), con un átomo promedio 50% Cu - 50% Zn en cada nodo de esta red. Al ordenarse la estructura se describe por una celda cúbica simple en la cual cada nodo tiene asociado un motivo compuesto por dos átomos, uno de Cu y otro de Zn, Fig. IV.19 (b). Este tipo de superestructura se encuentra también en otros sistemas como el AuCd, β AlNi, β NiZn, etc.

3) CuAu - Nomenclatura Strukturbericht $L1_0$

En el estado ~~desordenado~~ la estructura de esta aleación es fcc, Fig. IV.20 (a). Al ordenarse la superestructura resultante es tal que los planos (001) contienen alternadamente átomos de Cu y átomos de Au solamente. La celda resultante queda ligeramente distorsionada en la dirección $[001]$ pasando de esta manera a ser tetragonal con una relación $c/a = 0.93$. El grupo espacial es $P4/mmm$ y dentro de la celda tetragonal los átomos de Cu ocupan las posiciones (000) $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0)$ y los de Au $(0 \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ y $(\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$. Fig. IV.20 (b)

Otros ejemplos de superestructuras $L1_0$ pueden encontrarse en los sistemas siguientes, indicándose en cada caso la relación c/a

AgTi	(0.993)	AlTi	(1.020)
CdPt	(0.914)	FePt	(0.968)

4) Sistema Fe-Al

Las aleaciones Fe-Al pueden dar lugar a dos tipos de superestructuras

Fe-Al (Strukturbericht $L2_1$), Fe_3Al (Strukturbericht DO_3)

En el estado desordenado ambas se describen por la estructura A_2 del Fe. Al ordenarse la aleación Fe-Al toma una estructura basada en la celda cúbica simple, alrededor de cuyos nodos se distribuye un motivo compuesto por dos átomos, uno de Fe en la posición (000) y otro de Al en la posición $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$. Fig. IV.21 (a).

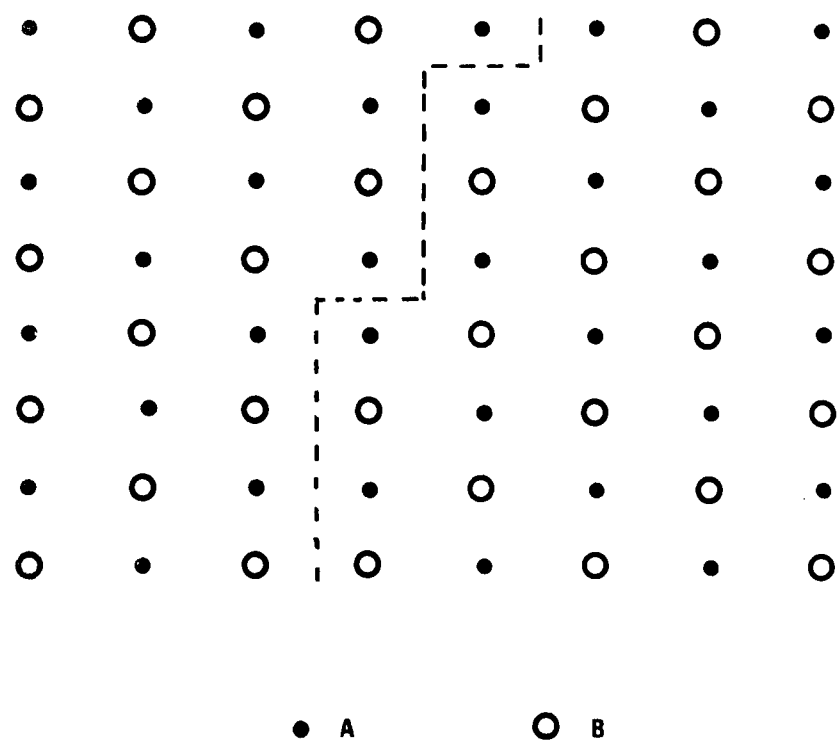


Fig.IV.22. Esquema de un dominio de antifase de una aleación ordenada.

La solución sólida Fe_3Al se ordena en base a una red cúbica F. En cada nodo de la misma se sitúa un motivo compuesto por 1 átomo de Al y 3 átomos de Fe como se indica en la Fig. IV.21 (b).

IV.7.2.3 Parámetro de Orden de Largo Alcance

En general una solución sólida que tiende a formar una superestructura nunca se ordena completamente, sino que presenta apartamientos más o menos pronunciados de esa situación extrema. Es posible especificar cuantitativamente el estado de ordenamiento de este tipo de aleaciones mediante el llamado parámetro de orden de largo alcance de Bragg & Williams.

En una solución sólida de átomos de un metal A y otro B, cuyas proporciones relativas son C_A y C_B se distinguen dos tipos de sitios. Si la aleación está completamente ordenada, todos los sitios denominados α están ocupados por átomos A y los sitios llamados β por átomos B. Pero si el ordenamiento no es completo, solo una fracción r_α del número total de sitios α estará ocupada por átomos A. Correspondientemente sólo una fracción r_β del número total de sitios β estará ocupada por átomos B. Entonces, para una aleación parcialmente ordenada se define el parámetro de orden de Bragg & Williams por la relación

$$S = \frac{r_\alpha - C_A}{1 - C_A} = \frac{r_\beta - C_B}{1 - C_B}$$

Si el orden es perfecto $r_\alpha = r_\beta = 1$ $S = 1$

Si el desorden es total $r_\alpha = C_A$ $r_\beta = C_B$ $S = 0$

El parámetro S define así estadísticamente el estado de orden de una aleación en todo su volumen. La descripción que resulta de dicho parámetro es menos detallada que con los parámetros de corto alcance, puesto que para un estado caracterizado por $S = 0$ pueden existir numerosas configuraciones atómicas con parámetros $\alpha_m \neq 0$.

IV.7.2.4 Dominios de Antifase

Cuando una solución sólida está parcialmente ordenada pueden distinguirse en ella dominios dentro de los cuales existe orden de largo alcance, separados por límites en los cuales el ordenamiento se destruye localmente. Por ejemplo, si en una cierta dirección la secuencia de átomos es

... ABABAB/BABABA ...

el lugar marcado con la barra representa un borde entre dominios. Si se considera a la secuencia ABAB ... como una onda de concentración en la cual A y B representan

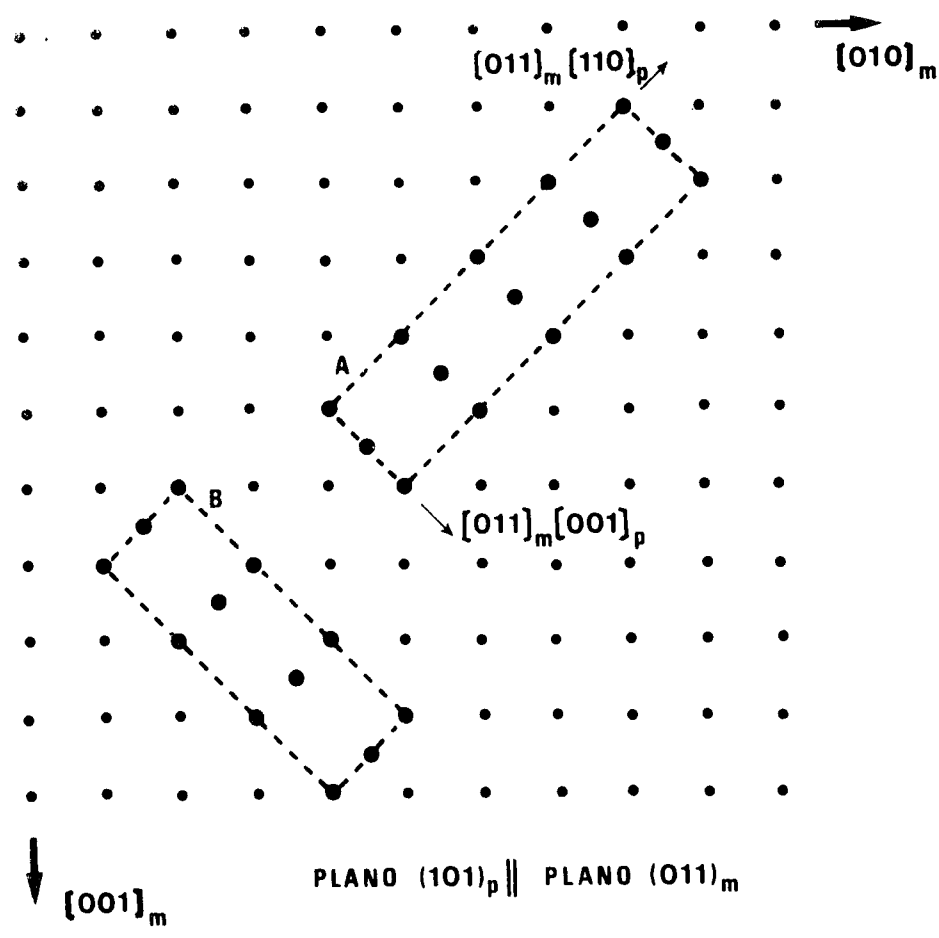


Fig.IV.23. Esquema de precipitación de una segunda fase con relación de orientación entre planos y direcciones de la matriz y la fase precipitada.

sus máximos y mínimos respectivamente, el borde de un dominio correspondería a un cambio de fase igual a π en esa onda. Los dominios estarían pues en oposición de fase y este hecho ha originado el nombre de "dominios de antifase". En la Fig. IV.22 se ilustra un caso esquemático de dominios de antifase en dos dimensiones.

Tanto los parámetros de orden de largo y corto alcance, como la presencia de dominios de antifase, pueden detectarse a partir de experiencias de rayos X y es de donde proviene la mayor parte de la información acerca de las transformaciones orden-desorden.

IV.7.3 Relaciones de Orientación entre Precipitados y Matriz

Si a una cierta temperatura T_0 la concentración del metal B es una aleación binaria supera un valor límite C_B^0 la configuración de equilibrio no será ya una solución sólida homogénea (fase α) sino una mezcla de fases $\alpha + \beta$. Si la precipitación de la nueva fase se lleva a cabo en condiciones de temperatura tales que se alcanzan en todo momento los correspondientes estados de equilibrio, el precipitado en general no guarda relaciones de orientación definidas respecto de la matriz en la cual se forma. Sin embargo, en numerosos casos la precipitación se produce en soluciones sólidas sobresaturadas retenidas a temperaturas más bajas que la correspondiente a la aparición de la segunda fase. Tal sería el caso de aleaciones templadas bruscamente. En estos casos es altamente probable que el sistema no alcance la configuración de equilibrio estable y se produzca en cambio un conjunto de transformaciones que pueden ir desde la segregación de átomos de soluto B en zonas que guardan la misma estructura cristalina de la matriz A (zonas de Guinier-Preston) hasta la precipitación de fases de transición con estructuras diferentes de la correspondiente a la solución sólida original. En este último caso, también es muy probable que la fase precipitada crezca en general con uno de sus planos cristalinos paralelo a una cierta familia de planos de la matriz. Se dice entonces que entre la matriz y el precipitado existe un plano de hábito.

En la Fig. IV.23 se ilustra esquemáticamente el plano (100) de una solución sólida de estructura cúbica en la cual crece una fase tetragonal con su plano (110) paralelo al plano (100) de la matriz. En el precipitado marcado con A la dirección $[1\bar{1}0]$ del precipitado es paralela a la dirección $[01\bar{1}]$ de la matriz mientras que en el precipitado B la misma dirección del precipitado es paralela a la dirección $[0\bar{1}\bar{1}]$ de la matriz.

Debe tenerse también en cuenta que si un precipitado crece sobre un plano de hábito (hkl) crecerá con igual probabilidad sobre cada uno de los planos de la forma $\{hkl\}$. En una observación al microscopio óptico o electrónico aparecerán por lo tanto precipitados con distintas orientaciones, correspondientes a todos los planos de hábito cristalográficamente equivalentes. Las bien conocidas estructuras de Widmanstätten son un ejemplo típico de precipitación con plano de hábito.

- E.IV.1 Calcular el radio máximo de la esfera que puede situarse en una posición intersticial tetraedral en una estructura formada por el apilamiento compacto fcc de esferas rígidas de radio r .

Como se ha visto en IV.5.1 los intersticios tetraedrales se sitúan sobre las diagonales de la celda cúbica, a distancias iguales a

$\frac{\sqrt{3}}{4}a$ de los vértices de la misma. Siendo el radio r de las esferas igual a $\frac{\sqrt{2}}{4}a$, se puede ver inmediatamente en el esquema auxiliar de la Fig. IV.6 (c) que el radio de la mayor esfera que puede acomodarse en este tipo de intersticio es

$$\frac{\sqrt{3}}{4}a - \frac{\sqrt{2}}{4}a = \frac{1}{4}(\sqrt{3} - \sqrt{2})a = \frac{1}{4}(\sqrt{3} - \sqrt{2})\frac{4r}{\sqrt{2}} = 0.225r$$

- E.IV.2 Calcular el radio máximo de la esfera que puede ubicarse en un intersticio octaedral de una estructura compacta.
- E.IV.3 Calcular la relación c/a para un apilamiento compacto de esferas rígidas tipo A_3 (hexagonal compacto) (Fig. IV.8 (b)).
- E.IV.4 Calcular el radio máximo de las esferas que pueden acomodarse en los intersticios tetraedrales y octaedrales en una estructura A_2 (Fig. IV.10).
- E.IV.5 Se ha visto en la sección IV.6 que la deformación plástica en un cristal A_1 produce un deslizamiento en zig-zag sobre los planos $\{111\}$ creando y aniquilando sucesivamente fallas de apilamiento. Calcular los vectores $\vec{b}_1$ y $\vec{b}_2$ que definen el deslizamiento que tiene lugar sobre la familia de planos (111) de una estructura cúbica de caras centradas, Fig. IV.12.
- E.IV.6 Calcular los radios máximos de los átomos que pueden acomodarse en la estructura A_1 del Fe γ en los intersticios tetraedrales y octaedrales, suponiendo un apilamiento de esferas rígidas. El parámetro de la red, arista de la celda cúbica, es $a=3.65 \text{ \AA}$.
- E.IV.7 Idem para la estructura A_2 del Fe- α . Parámetro de red $a=2.87 \text{ \AA}$.
- E.IV.8 Sea un acero austenítico de composición: 86.56% Fe, 12.1% Mn, 1.34% C cuya estructura A_1 tiene un parámetro de red $a=3.631 \text{ \AA}$. La densidad macroscópica de esta aleación es 7.839 gr/cm^3 . Demostrar que los átomos de carbono no están ocupando los nodos de la red fcc.
- E.IV.9 Calcular la distancia entre primeros vecinos y la fracción del volumen total ocupado por los átomos que constituyen una estructura fcc de acuerdo al modelo de esferas rígidas. Expresar estas cantidades en función de la longitud a de la arista de la celda cúbica.

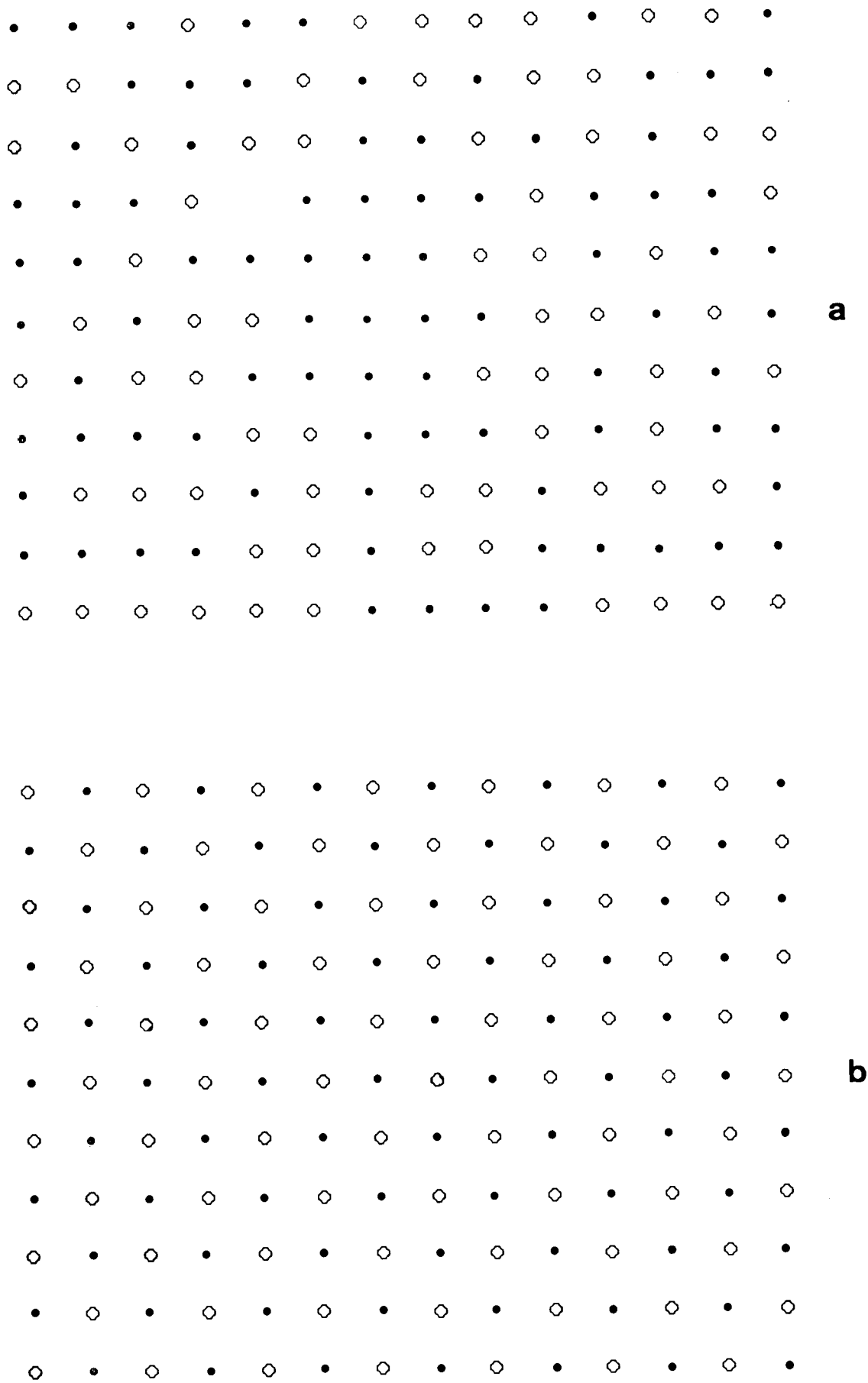


Fig.IV.24. Solución sólida sustitucional AB en la cual existe tendencia a la segregación (a) y al ordenamiento (b).

- E.IV.10** Se tiene un conjunto de esferas rígidas de radio r tangentes entre sí, formando estructuras cúbicas P,I,F, respectivamente y tales que a cada nodo de la red corresponde una esfera. Llenar entonces el siguiente cuadro en base a los datos de los problemas anteriores y cálculos complementarios en los casos necesarios:

TABLA IV.4

Estructura	P	I	F
Radio de las esferas (átomos)			
Primeros - número Vecinos - distancia entre centros			
Segundos - número Vecinos - distancia entre centros			
Fracción del volumen ocupado por las esferas (%)			
Fracción del área ocupada (100) por las esferas en los planos (110) (111)			
Cuales son los planos reticulares más densos y cuál es su multiplicidad			
Cuales son las filas reticulares más densas y cuál es su multiplicidad			

- E.IV.11** En la estructura A_1 del Cu ($a=3.61 \text{ \AA}$) calcular los espaciados interplanares d_{100} , d_{110} y d_{111} . Explicar porqué la deformación plástica en este metal se produce preferencialmente por deslizamiento sobre los planos $\{111\}$ -
- E.IV.12** Los esquemas bidimensionales de la Fig. IV.24 (a) y (b) representan una solución sólida sustitucional AB, en la cual los átomos A se representan por círculos (o) y los átomos B por cruces (x). Calcular los parámetros de orden de corto alcance α_i hasta los quintos vecinos ($i=5$) y analizar su variación en función de la distancia al origen señalado en las figuras (se supone en este ejercicio que el cálculo realizado para el origen indicado es representativo del estado de toda la aleación).

BIBLIOGRAFIA

- TAYLOR A., "X-Ray Metallography", John Wiley & Sons, N.Y. 1961.
- AZAROFF L., BROPHY J.J., "Electronic Processes in Materials" McGraw Hill, N.Y., 1963.
- BARRET C.S , MASSALKSI T.B , "Structure of Metals", 3a.edición, McGraw Hill, N.Y., 1966.
- CULLITY B.D., Elements of X-Ray Diffraction, Addison Wesley, Reading (Mass.), 1959.
- N.F.M. Henry y K. Lonsdale (editores), International Tables for X-Ray Crystallography, Kynoch Press, Birmingham (Gr.Br.) 1952.
- PHILLIPS F.C., An Introduction to Crystallography, Longmans, Green & Co., London, 1946; John Wiley & Sons, N.Y. 1963 (3a.ed.).
- REED-HILL R.E., Physical Metallurgy Principles, Van Nostrand, N.Y., 1964.
- BUERGER M.J., X-Ray Cristallography, John Wiley & Sons, 1952.
- HENRY N.F.M., LIPSON H. y WOOSTER W.A., The Interpretation of X-Ray Diffraction Photographs, MacMillan, London, 1960.
- OTTE H.M. y CROCKER A.G., Crystallographic Formulae for Hexagonal Lattices, Phys.Stat.Sol. 9, 441 (1965).
- HUME ROTHERY W., "The Structures of Alloys of Iron, Pergamon Press, 1966, Capítulo 9.
- BRICK R.M., GORDON R.B., PHILLIPS A., "Structure and Properties of Alloys", McGraw Hill, N.Y., 1965.
- WOOLFSON M.M., "An Introduction to X-Ray Crystallography", Cambridge University Press, 1970.
- AZAROFF L.V., BROPHY J.J., "Electronic Processes in Materials", McGraw Hill, N.Y., 1963.

APENDICE A

NOCIONES ELEMENTALES DE ALGEBRA VECTORIAL

A.1 DEFINICION DE UN VECTOR

Un segmento orientado, como el MN de la Fig.A.1, constituye un vector, si para él mismo se especifican los siguientes parámetros:

- Módulo o magnitud. Es la cantidad aritmética que mide la longitud del segmento MN.
- Dirección. Queda definida en el espacio por la recta portadora del segmento, también llamada recta de acción.
- Sentido. Es el que tendría un móvil, dirigiéndose desde M hasta N, Fig. A.1.
- Origen o Punto de Aplicación. Es el punto a partir del cual se mide el segmento que representa al vector.

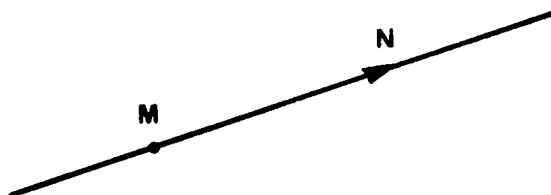


Fig.A.1

Un vector entonces es una magnitud por una cantidad aritmética, una dirección y un sentido en el espacio. Los vectores son imprescindibles para representar magnitudes físicas que necesitan para su especificación completa, además de un número que mide la intensidad de la magnitud considerada, una dirección y un sentido en los cuales ellas actúan. Tal es el caso de los desplazamientos, las velocidades o las fuerzas, que se denominan por lo tanto magnitudes vectoriales. Las magnitudes escalares en cambio quedan especificadas por un único número y la unidad respectiva (masa, densidad, cantidad de calor).

Dos vectores son iguales cuando tienen igual módulo, igual dirección e igual sentido. Vectores opuestos son los que difieren solamente en su sentido.

Si al definir un vector no se especifica su origen, el vector se denomina libre, pues puede deslizarse a lo largo de su recta de acción, y ésta a su vez puede desplazarse paralela a sí misma. En caso contrario el vector se llama ligado. La mayoría de los problemas cristalográficos se resuelven utilizando solamente vectores libres pudiéndose desplazar por lo tanto su recta de acción siempre que sea conveniente.

A.2 OPERACIONES CON VECTORES

A.2.1 Suma de Vectores

Consideremos un punto que recorre la distancia OP en la dirección Oy, Fig. A.2 y que a continuación se desplaza una distancia PQ en la dirección perpendicular Ox. Resulta inmediato que los desplazamientos sucesivos OP y PQ tienen el mismo efecto que el desplazamiento único OQ. Se puede decir entonces que el vector $\vec{A}$ representativo del desplazamiento OQ es la suma de los vectores $\vec{A}_1$ y $\vec{A}_2$ correspondientes a los desplazamientos sucesivos OP y PQ.

$$\vec{A} = \vec{A}_1 + \vec{A}_2$$

Este resultado es el que se obtiene aplicando la llamada regla del paralelogramo. Puede verse en efecto en la Fig.A.2 (a) que trasladando el vector $\vec{A}_1$ de manera de llevar el punto O al punto P, y construyendo el paralelogramo PP'Q'Q la diagonal PQ' es un vector de igual dirección, sentido y módulo que $\vec{A}$.

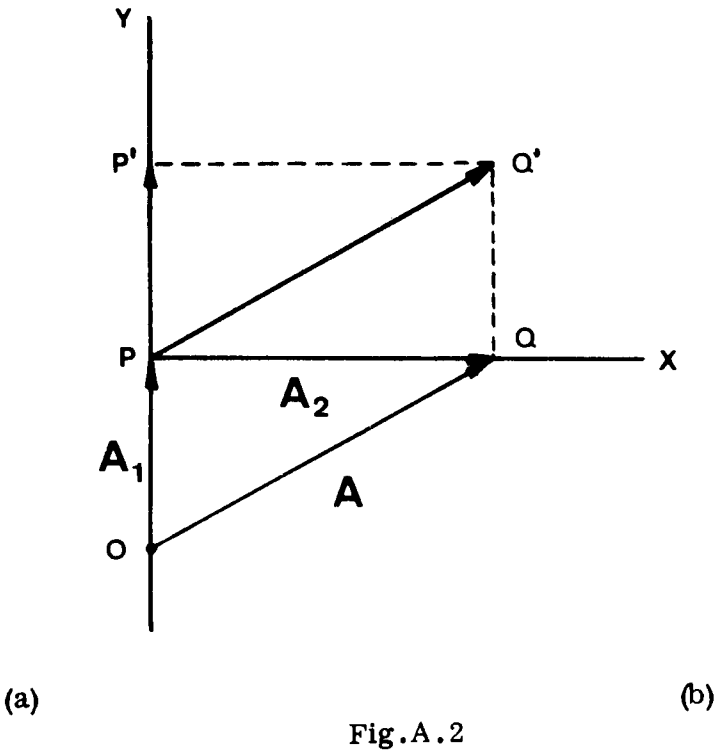


Fig.A.2

La suma de vectores se define entonces de la manera siguiente. Dados dos vectores $\vec{A}_1$ y $\vec{A}_2$, el vector suma $\vec{A}$ de los mismos es el que une el origen de $\vec{A}_1$ con el extremo de $\vec{A}_2$, cuando el extremo de $\vec{A}_1$ es coincidente con el origen de $\vec{A}_2$. La generalización para la suma de más de dos vectores es inmediata. El vector

$$\vec{A} = \vec{A}_1 + \vec{A}_2 + \vec{A}_3 + \dots + \vec{A}_n$$

se halla haciendo coincidir el extremo de $\vec{A}_1$ con el origen de $\vec{A}_2$, el extremo de $\vec{A}_2$ con el origen de $\vec{A}_3$, y así sucesivamente. El vector suma $\vec{A}$ es el que une el origen de $\vec{A}_1$ con el extremo de $\vec{A}_n$ (regla del polígono), Fig. A.2 (b).

De la definición dada surgen inmediatamente las propiedades conmutativa y asociativa para la suma de vectores

$$\vec{A}_1 + \vec{A}_2 = \vec{A}_2 + \vec{A}_1 \quad \vec{A}_1 + \vec{A}_2 + \vec{A}_3 = (\vec{A}_1 + \vec{A}_2) + \vec{A}_3$$

El vector diferencia entre dos vectores dados $\vec{A}$ y $\vec{A}_1$ se obtiene teniendo en cuenta que

$$\vec{A} - \vec{A}_1 = \vec{A} + (-\vec{A}_1)$$

En la Fig. A.2 se puede ver fácilmente que

$$\vec{A} - \vec{A}_1 = \vec{A}_2$$

y que el vector diferencia entre dos vectores es el vector que une los extremos de los mismos.

Consideremos ahora la suma de n vectores iguales. Puesto que todos tienen igual módulo, dirección y sentido, se suman simplemente una a continuación del otro sobre la misma recta de acción. La longitud del vector suma será igual a n veces la longitud de los vectores componentes. Entonces, el vector suma de n vectores iguales es otro vector de igual dirección y sentido que los vectores dados y cuyo módulo es n veces mayor. El producto de un vector $\vec{A}$ por un escalar entero positivo n es en consecuencia un vector de igual dirección y sentido que el vector dado y cuyo módulo es el producto del entero n por el módulo de $\vec{A}$. Esta definición se generaliza inmediatamente para un número x cualquiera, entero o fraccionario, positivo o negativo: el producto de un vector $\vec{A}$ por un escalar cualquiera es otro vector de igual dirección, cuyo módulo es $x\vec{A}$, y cuyo sentido depende del signo de x . Por ejemplo, el vector opuesto a un vector $\vec{A}$ dado se obtiene multiplicando a éste por (-1) .

$$-\vec{A} = (-1) \vec{A}$$

La división de un vector por un escalar x se define simplemente como la multiplicación del vector por el escalar $1/x$. En particular si $x=A$ (módulo de A) convendremos en llamar vector unitario en la dirección A , o versor, al vector

$$\vec{a} = \left(\frac{1}{A} \right) \vec{A}$$

Entonces todo vector $\vec{A}$ puede expresarse como el producto de su módulo A por el vector unitario de la dirección correspondiente

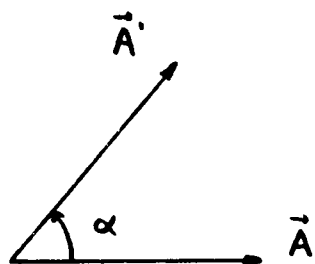
$$\vec{A} = A \vec{a}$$

A.2.2 Multiplicación de Vectores. Producto Escalar y Producto Vectorial

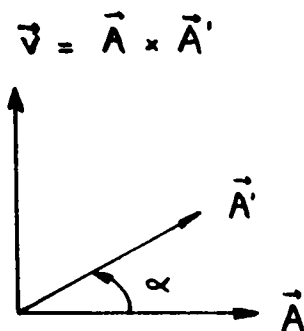
Se definen dos operaciones de multiplicación entre vectores. El producto escalar da como resultado una cantidad escalar, y el producto vectorial da otro vector.

Se define como producto escalar $\vec{A} \cdot \vec{A}'$ de dos vectores $\vec{A}$ y $\vec{A}'$ a la cantidad $AA' \cos \alpha$, donde A y A' son los módulos de $\vec{A}$ y $\vec{A}'$ respectivamente, y α el ángulo que forman entre sí, Fig. A.3 (a).

$$\vec{A} \cdot \vec{A}' = AA' \cos \alpha$$



(a)
Producto escalar



(b)
Producto vectorial

Fig. A.3

El producto escalar de dos vectores es también, en otras palabras, igual al producto del módulo de uno de los vectores por la proyección del otro sobre el primero. Puesto que $\cos \alpha = \cos (-\alpha)$ no interesa el sentido en el que se mide el ángulo entre los dos vectores, y por lo tanto el producto escalar es conmutativo

$$\vec{A} \cdot \vec{A}' = \vec{A}' \cdot \vec{A}$$

El producto escalar será positivo si el ángulo que forman los vectores es agudo, y negativo si ese ángulo es obtuso. El producto escalar de dos vectores perpendiculares entre sí es nulo puesto que $\cos \pi/2 = 0$.

Si los dos vectores tienen la misma dirección y sentido, $\cos \alpha = 1$, y se tiene simplemente

$$\vec{A} \cdot \vec{A}' = AA'$$

En particular el producto escalar de un vector por sí mismo es igual al cuadrado de su módulo

$$\vec{A} \cdot \vec{A} = A^2$$

Las reglas del cálculo algebraico permanecen válidas en el caso del producto escalar, como por ejemplo

$$(\vec{A}_1 + \vec{A}_2) \cdot (\vec{B}_1 + \vec{B}_2) = \vec{A}_1 \cdot \vec{B}_1 + \vec{A}_1 \cdot \vec{B}_2 + \vec{A}_2 \cdot \vec{B}_1 + \vec{A}_2 \cdot \vec{B}_2$$

El producto vectorial $\vec{A} \times \vec{A}'$ de dos vectores $\vec{A}$ y $\vec{A}'$ es por definición otro vector V perpendicular al plano determinado por $\vec{A}$ y $\vec{A}'$, y cuyo módulo es $AA' \sin \alpha$, Fig. A.3 (b). Es importante notar que el ángulo α puede medirse desde $\vec{A}$ hacia $\vec{A}'$ (sentido positivo de rotación, ver más adelante sección A.3) o en sentido inverso. Aunque el valor absoluto del ángulo α es igual en ambos casos, como la función $\sin \alpha$ es impar ($\sin(-\alpha) = -\sin \alpha$) el producto vectorial depende del orden de los factores

$$\vec{A} \times \vec{A}' = -\vec{A}' \times \vec{A}$$

El producto vectorial no es por lo tanto conmutativo y la inversión del orden de los factores da como resultado vectores de sentido opuesto. Las reglas del cálculo algebraico siguen siendo válidas, siempre que no se invierta el orden de multiplicación vectorial.

Finalmente, se pueden combinar las dos operaciones anteriores, y definir así el llamado producto mixto. Sean los tres vectores $\vec{A}_1$, $\vec{A}_2$ y $\vec{A}_3$, no coplanares entre sí. Se denominan producto mixto a la cantidad escalar

$$(\vec{A}_1 \vec{A}_2 \vec{A}_3) = (\vec{A}_1 \times \vec{A}_2) \cdot \vec{A}_3$$

El producto mixto así definido tiene un significado geométrico bien preciso.

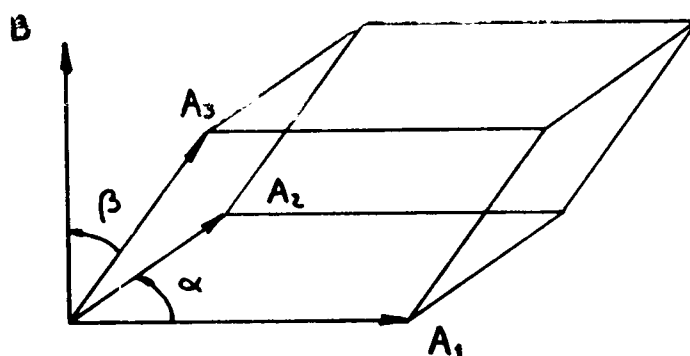


Fig.A.4

En efecto, el vector $\vec{A}_1 \times \vec{A}_2 = \vec{B}$ es normal al plano definido por $\vec{A}_1$ y $\vec{A}_2$ y su módulo $A_1 A_2 \sin \alpha$ es numéricamente igual al área del paralelogramo que determinan. Consideremos ahora el paralelepípedo limitado por $\vec{A}_1$, $\vec{A}_2$ y $\vec{A}_3$. El módulo del vector $\vec{B}$ es igual al área de la base, y el producto escalar $\vec{B} \cdot \vec{A}_3$ es entonces numéricamente igual al producto de la base por la altura del paralelepípedo, es decir, su volumen.

Puede además demostrarse que

$$(\vec{A}_1 \vec{A}_2 \vec{A}_3) = (\vec{A}_1 \times \vec{A}_2) \cdot \vec{A}_3 = (\vec{A}_2 \times \vec{A}_3) \cdot \vec{A}_1 = \vec{A}_3 \times \vec{A}_1 \cdot \vec{A}_2$$

En cualquiera de estas expresiones puede invertirse el orden de los factores que se multiplican escalarmente, pero una inversión en el orden de un producto vectorial dará en cambio una inversión en el signo del resultado.

Otra propiedad del producto mixto, que surge de su definición, es que si de los tres vectores, dos cualesquiera de ellos son paralelos, el resultado es nulo.

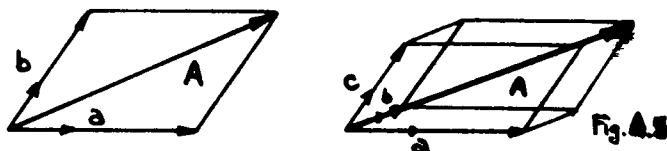
A.3 COMPONENTES DE UN VECTOR

Todo vector $\vec{A}$ en el plano, se puede descomponer en dos vectores a los que denominaremos ua y vb tales que

$$\vec{A} = u\vec{a} + v\vec{b}$$

donde u y v son escalares, y $(\vec{a}, \vec{b})$ un par de vectores unitarios. De manera más general todo vector $\vec{A}$ en el espacio puede considerarse como la suma de tres vectores no coplanares

$$\vec{A} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$



Las tres cantidades (uvw) determinan completamente el vector $\vec{A}$ respecto de la terna de referencia dada por $\vec{a}, \vec{b}$ y $\vec{c}$. Estos vectores se llaman fundamentales o vectores base, o vectores unitarios, y los números (u, v, w) son las componentes del vector $\vec{A}$. En el plano el vector $\vec{A}$ es la diagonal del paralelogramo determinado por $u\vec{a}$ y $v\vec{b}$, Fig. A.5(a), y en el espacio $\vec{A}$ es la diagonal del paralelepipedo construido sobre los vectores $u\vec{a}$, $v\vec{b}$ y $w\vec{c}$, Fig. A.5 (b). El mismo vector $\vec{A}$ podría definirse respecto de cualquier otro conjunto de vectores fundamentales pero sus componentes $(u'v'w')$ serían diferentes a las componentes originales (u, v, w) .

Veremos a continuación algunas de las ventajas de utilizar una terna de referencia para describir vectores en el espacio. Sean, en efecto, dos vectores $\vec{A}$ y $\vec{A}''$ definidos por sus componentes $(u'v'w')$ y $(u''v''w'')$, respectivamente, en la terna fundamental, $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$. El vector suma $\vec{A}_1$ será

$$\begin{aligned}\vec{A}_1 = \vec{A}' + \vec{A}'' &= (u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c}) + (u''\vec{a} + v''\vec{b} + w''\vec{c}) \\ &= (u' + u'')\vec{a} + (v' + v'')\vec{b} + (w' + w'')\vec{c}\end{aligned}$$

Análogamente el vector diferencia

$$\vec{A}_2 = \vec{A}' - \vec{A}'' = (u - u'')\vec{a} + (v' - v'')\vec{b} + (w' - w'')\vec{c}$$

Entonces, si dos vectores están definidos por sus componentes respecto de una terna de referencia, las componentes del vector suma (o diferencia) se obtienen sumando (o restando) las componentes de los dos vectores originales según cada una de las direcciones de la terna. Esta propiedad se puede generalizar fácilmente al caso de n vectores. Resulta también inmediato que las componentes del producto de un vector por un escalar, son iguales a las componentes del vector original multiplicadas por el mismo escalar.

Si la terna $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ es ortogonal (se suele utilizar en este caso la notación $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$) se pueden encontrar expresiones particularmente simples para los productos escalar, vectorial y mixto. Sean en efecto los vectores expresados según dicha terna

$$\vec{A} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

$$\vec{A}' = u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c}$$

El producto escalar de ambos será

$$\vec{A} \cdot \vec{A}' = (u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}) \cdot (u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c})$$

Multiplicando escalarmente cada uno de los sumandos de $\vec{A}$ por los sumandos de $\vec{A}'$, y teniendo en cuenta que

$$\vec{a} \cdot \vec{a} = a^2 = 1 \quad \vec{a} \cdot \vec{b} = 0$$

$$\vec{b} \cdot \vec{b} = b^2 = 1 \quad \vec{b} \cdot \vec{c} = 0$$

$$\vec{c} \cdot \vec{c} = c^2 = 1 \quad \vec{c} \cdot \vec{a} = 0$$

dado que la terna es ortogonal, y los vectores que la componen tienen módulo igual a 1, se obtiene finalmente

$$\vec{A} \cdot \vec{A}' = uu' + vv' + ww'$$

El caso particular del producto escalar de un vector por sí mismo, se expresa

$$\vec{A} \cdot \vec{A} = A^2 = u^2 + v^2 + w^2$$

que es sencillamente el resultado del teorema de Pitágoras en el espacio. En base a las propiedades del producto escalar se pueden obtener otras relaciones de suma utilidad en el cálculo vectorial. Por ejemplo multiplicando escalarmente el vector $\vec{A}$ por cada uno de los vectores base $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$

$$\vec{A} \cdot \vec{a} = (u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}) \cdot \vec{a} = ua^2 = u$$

y análogamente

$$\vec{A} \cdot \vec{b} = v \quad \vec{A} \cdot \vec{c} = w$$

se puede ver que las componentes u, v, w del vector $\vec{A}$ son iguales al módulo de la proyección de dicho vector sobre las direcciones dadas por $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ respectivamente. Además si llamamos α, β, γ a los ángulos que forma $\vec{A}$ con $\vec{a}, \vec{b}$ y $\vec{c}$, respectivamente, tendremos

$$u = A \cos \alpha \quad v = A \cos \beta \quad w = A \cos \gamma$$

y entonces

$$A^2 = u^2 + v^2 + w^2 = A^2 \cos^2 \alpha + A^2 \cos^2 \beta + A^2 \cos^2 \gamma$$

de donde resulta

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1$$

Los ángulos que forma un vector $\vec{A}$ con las direcciones de referencia no son pues independientes. Si se dan dos de ellos el tercero queda determinado por la relación última. Los cosenos de dichos ángulos se denominan cosenos directores del vector $\vec{A}$.

Para calcular el producto vectorial de dos vectores $\vec{A}$ y $\vec{A}'$ es necesario definir primero el sentido positivo de giro, tal como se ha mencionado en A.2.2.

La convención que se utiliza generalmente es la llamada regla del tirabuzón, o de la terna derecha. Dados dos vectores $\vec{a}$ y $\vec{b}$, Fig. A.6, el sentido positivo se define como el sentido en el cual un observador parado sobre el eje $\vec{c}$ vería rotar el vector $\vec{a}$

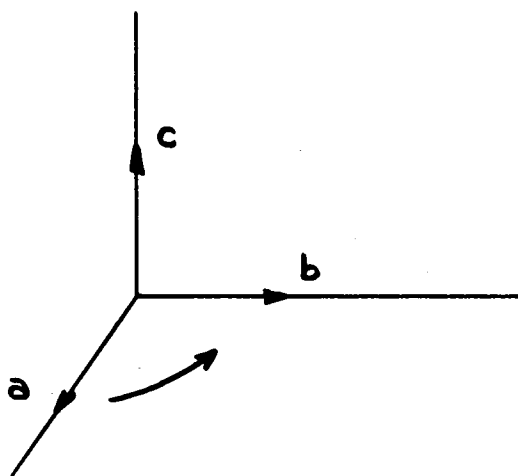


Fig. A.6

hacia el vector $\vec{b}$. Se tiene entonces, que el producto vectorial de dos vectores $\vec{A}$ y $\vec{A}'$ se expresa

$$\begin{aligned}\vec{A} \times \vec{A}' &= (u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}) \times (u'\vec{a} + v'\vec{b} + w'\vec{c}) \\ &= uu' \vec{a} \times \vec{a} + vv' \vec{b} \times \vec{b} + ww' \vec{c} \times \vec{c} \\ &= uv' \vec{a} \times \vec{b} + uw' \vec{a} \times \vec{c} + vu' \vec{b} \times \vec{a} \\ &= vw' \vec{b} \times \vec{c} + wv' \vec{c} \times \vec{a} + wv' \vec{c} \times \vec{b}\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que de la definición de producto vectorial

$$\vec{a} \times \vec{a} = \vec{b} \times \vec{b} = \vec{c} \times \vec{c} = 0$$

$$\begin{array}{lll}\vec{a} \times \vec{b} = \vec{c} & \vec{a} \times \vec{c} = -\vec{b} & \vec{b} \times \vec{c} = \vec{a} \\ \vec{b} \times \vec{a} = -\vec{c} & \vec{c} \times \vec{a} = \vec{b} & \vec{c} \times \vec{b} = -\vec{a}\end{array}$$

resulta finalmente

$$\vec{A} \times \vec{A}' = (vw' - v'w)\vec{a} + (wu' - w'u)\vec{b} + (uv' - u'v)\vec{c}$$

que se puede expresar como suma de determinantes

$$\vec{A} \times \vec{A}' = \begin{vmatrix} v & v' \\ w & w' \end{vmatrix} \vec{a} + \begin{vmatrix} w & w' \\ u & u' \end{vmatrix} \vec{b} + \begin{vmatrix} u & u' \\ v & v' \end{vmatrix} \vec{c}$$

o, en forma más reducida como

$$\vec{A} \times \vec{A}' = \begin{vmatrix} \vec{a} & \vec{b} & \vec{c} \\ u & v & w \\ u' & v' & w' \end{vmatrix}$$

En forma análoga, y teniendo en cuenta siempre las propiedades del producto escalar y vectorial, aplicadas a los vectores ortogonales unitarios $\vec{a}, \vec{b}$ y $\vec{c}$, se puede deducir la siguiente expresión para el producto mixto de tres vectores $\vec{A}_1, \vec{A}_2$ y $\vec{A}_3$ en función de sus componentes (uvw) , $(u'v'w')$ y $(u''v''w'')$ respectivamente

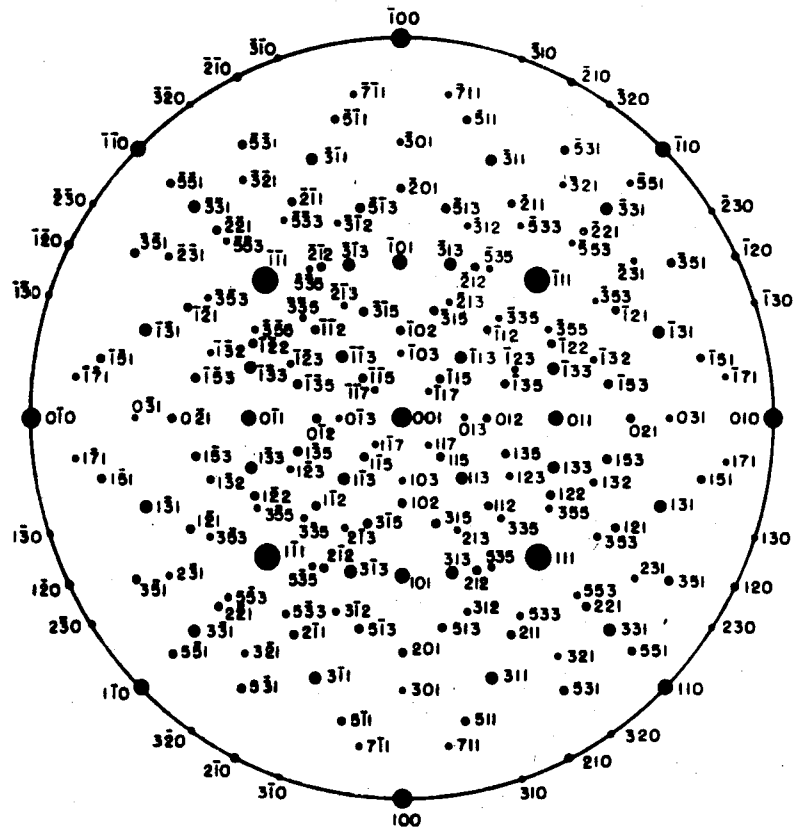
$$(\vec{A}_1 \vec{A}_2 \vec{A}_3) = \begin{vmatrix} u & v & w \\ u' & v' & w' \\ u'' & v'' & w'' \end{vmatrix}$$

Si la terna no fuera ortogonal, el producto mixto $(\vec{A}_1 \vec{A}_2 \vec{A}_3)$ se expresaría también como el determinante formado por sus componentes, pero en este caso multiplicado por el producto mixto $(\vec{a} \vec{b} \vec{c})$ de los vectores base.

APENDICE B

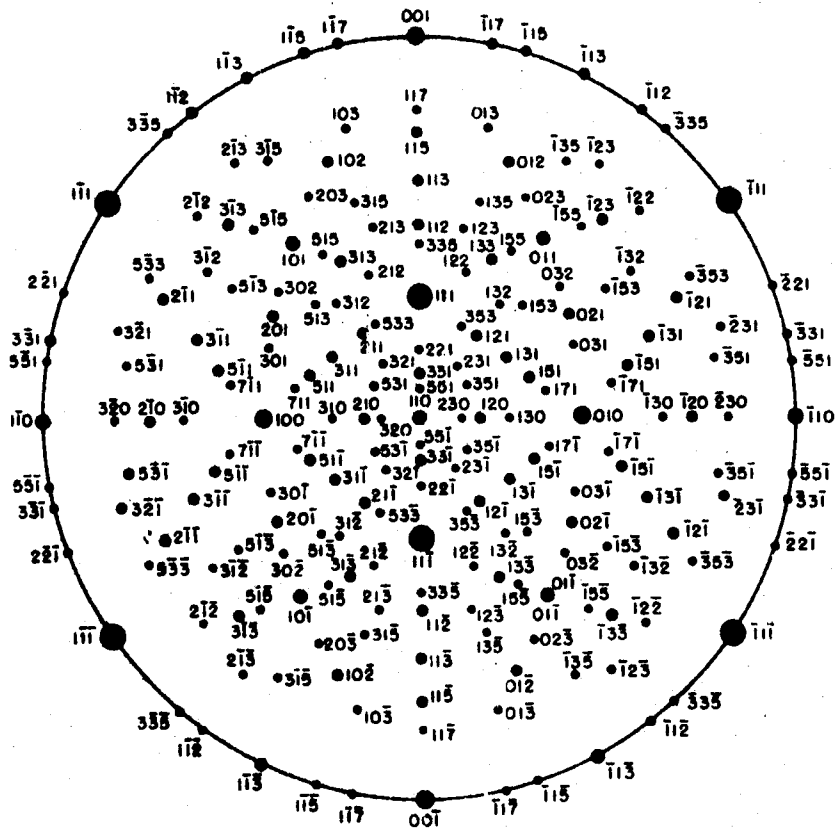
ANGULOS INTERPLANARES EN EL SISTEMA CUBICO

$(h_1k_1l_1)$	$(h_2k_2l_2)$	Angulos entre $(h_1k_1l_1)$ y $(h_2k_2l_2)$				
100	100	0°	90°			
	110	45°	90°			
	111	54°44'				
	210	26°34'	63°26'	90°		
	211	35°16'	65°54'			
	221	48°11'	70°32'			
	311	25°14'	72°27'			
110	110	0°	60°	90°		
	111	35°16'	90°			
	210	18°26'	50°46'	71°34'		
	211	30°1'	54°44'	73°13'	90°	
	221	19°28'	45°	76°22'	90°	
	311	31°29'	64°	47°	90°	
111	111	0°	70°32'			
	210	39°14'	75°2'			
	211	19°28'	61°52'	90°		
	221	15°48'	54°44'	78°54'		
	311	29°30'	58°30'	79°58'		
210	210	0°	36°52'	53°8'	66°25'	78°28' 90°
	211	24°6'	43°5'	56°47'	79°29'	90°
	221	26°34'	41°49'	53°24'	63°26'	72°39' 90°
	311	19°17'	47°36'	66°8'	82°15'	
211	211	0°	33°33'	48°11'	60°	70°32' 80°24'
	221	17°43'	35°16'	47°7'	65°54'	74°12' 82°12'
	311	10°0'	42°24'	60°30'	75°45'	90°
221	221	0°	27°16'	38°57'	63°37'	83°37' 90°
311	311	0°	35°6'	50°29'	65°58'	84°47'



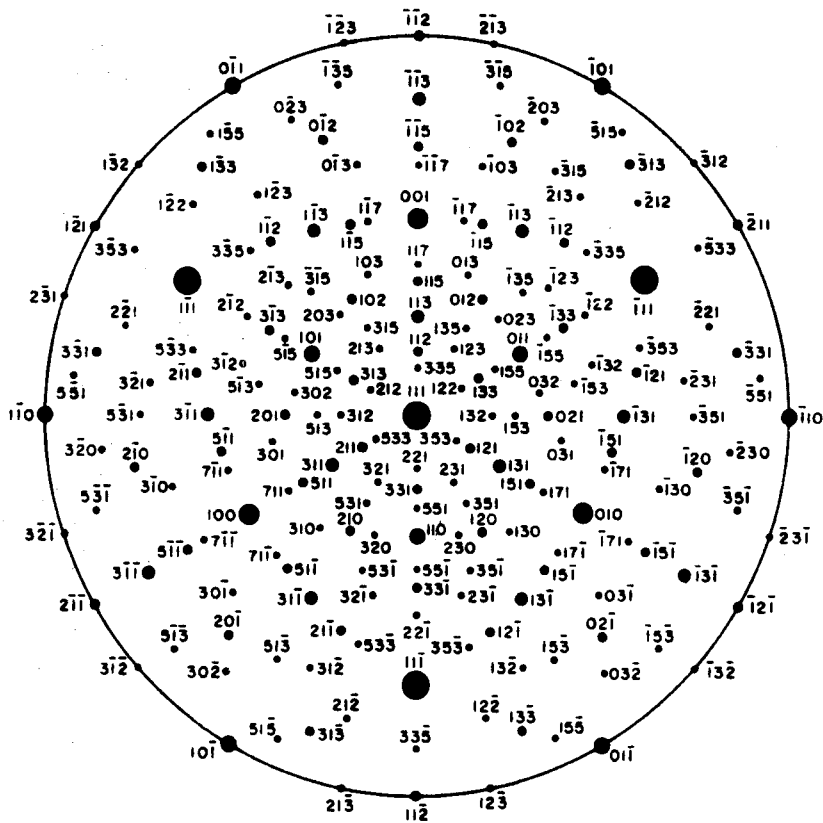
Proyección tipo (001) de un cristal cúbico

Extraído del libro de A. Taylor



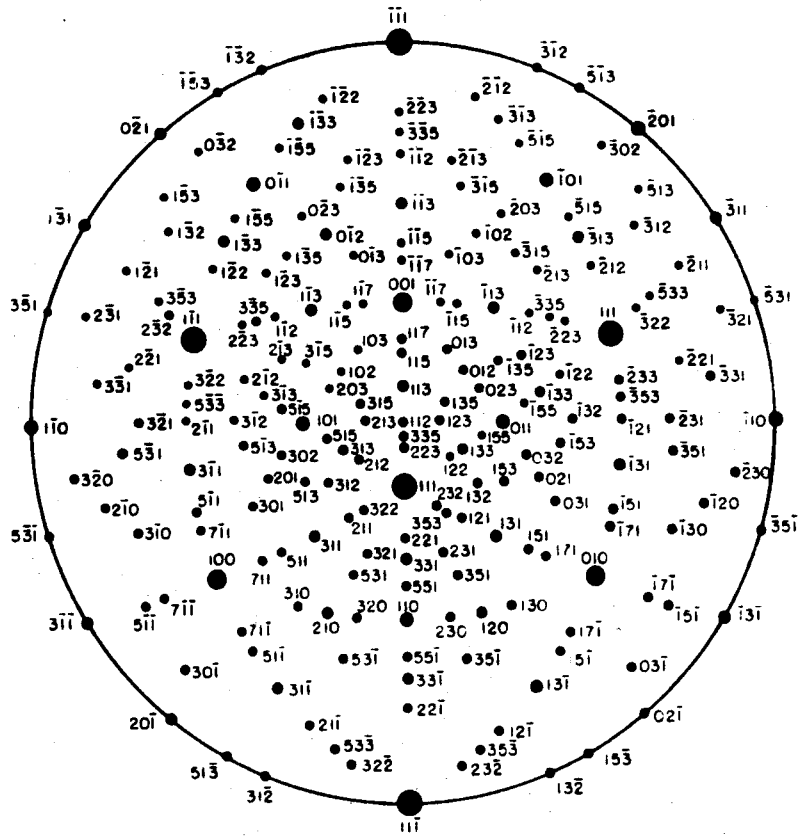
Proyección tipo (110) de un cristal cúbico

Extraído del libro de A. Taylor



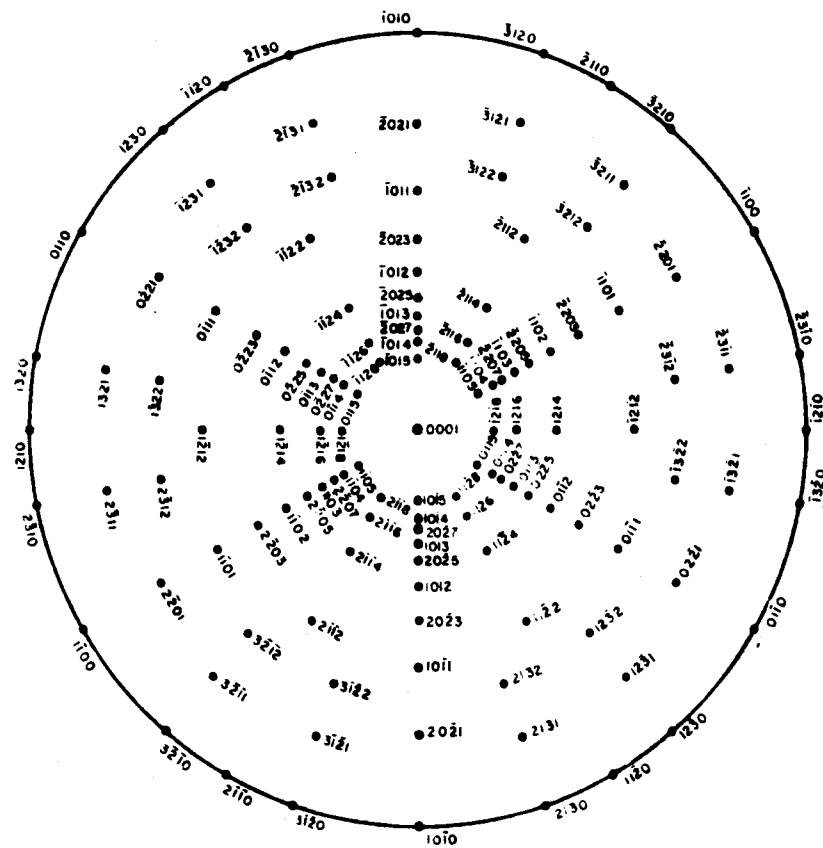
Proyección tipo (111) de un cristal cúbico

Extraído del libro de A. Taylor



Proyección tipo (112) de un cristal cúbico

Extraído del libro de A. Taylor



Proyección tipo (0001) para un cristal hexagonal de Mg
con $c/a = 1.6235$

Extraído del libro de A. Taylor

