Estructura Cristalina de los Metales

Sistema cúbico

1) Calcular la densidad del vanadio (V) si su estructura cristalina es cúbica centrada en el cuerpo (bcc), su radio atómico R=0.132 nm y su peso atómico 50.94 g/mol.

2) Calcular la densidad del platino (Pt) si su estructura cristalina es cúbica centrada en las caras (fcc), su radio atómico 0.139 nm y su peso atómico 195.1 g/mol.

3) Determinar qué tipo de estructura cúbica presenta un metal con:

a) a=3.6147 Å y R=1.28 Å
b) a=0.42906 nm y R=0.1858 nm

4) El hierro experimenta a 910ºC una transformación alotrópica, pasando de estructura bcc (denominada *ferrita* o Feα) a fcc (denominada *austenita* o Feγ). Suponiendo que el radio atómico se mantiene constante e igual a 1.24 Å, calcular:
a) La relación entre las densidades
b) El cambio relativo de volumen para una masa fija, al experimentar la transformación alotrópica mencionada, de bcc a fcc, indicando si corresponde a una expansión (aumento de vol.) o contracción (disminución)

5) Determinar qué estructura cúbica presenta el iridio (Ir) a partir de los siguientes datos: R=0.136 nm peso atómico=192.2 g/mol ρ=22.5 g/cm^3

6) Determinar qué estructura cúbica presenta el polonio (Po) a partir de los siguientes datos: a=0.3359 nm peso atómico=210 g/mol ρ=9.2 g/cm^3

7) Determinar si la plata (Ag) presenta estructura bcc o fcc partiendo de los siguientes datos de la Ag:
- radio atómico: 0.144 nm.
- peso atómico: 107.9 g/mol.
- densidad: 10.5 g/cm^3.

8) Calcular el radio atómico del plomo (Pb) sabiendo que su estructura es cúbica con un parámetro de red a= 4.9502 Å. Datos del Pb: peso atómico 207.2 g/mol, densidad 11.34 g/cm^3.

Sistema hexagonal

9) El circonio (Zr) tiene estructura hexagonal compacta (hcp) con relación c/a=1.593. Si su radio atómico es de 0.160 nm y el peso atómico 91.22 g/mol, calcular su densidad.

10) Determinar los parámetros de red (a y c) para la estructura hcp del cinc (Zn) si la relación c/a=1.856, ρ=7.13 g/cm^3 y peso atómico 65.39 g/mol.

11) Determinar la relación c/a para la estructura hcp del titanio, sabiendo que su radio atómico es 0.147 nm, su densidad (a 20ºC) es 4.51 g/cm3 y el peso atómico es 47.90 g/mol.

12) El titanio a 883ºC experimenta una transformación alotrópica, pasando a estructura bcc con parámetro de red a=3.32 Å.

a) Determinar la relación entre las densidades correspondientes a la estructura hcp y bcc.
b) Determinar la variación relativa de volumen cuando al enfriarse el titanio pasa de estructura bcc a hcp. ¿Se trata de una expansión o de una contracción?
c) ¿Qué relación entre densidades cabría esperar si el radio atómico permaneciera constante?

Nota: para resolver el probl. 12 hay que hacer uso de los resultados del Probl. 11

Planos cristalográficos

13) Como se mencionó en el problema 3, el Fe presenta estructura bcc o fcc, dependiendo de la temperatura. La técnica de Difracción de Rayos X (DRX) permite determinar los espaciados o distancias entre planos cristalinos, a partir de los cuales se deducen los parámetros de red. Si para la estructura bcc del Fe el parámetro de red es a=2.864 Å, para la fcc es a=3.5921 Å,

a) ¿Qué distancia cabe esperar entre los planos (020) para ambas estructuras?
b) Calcular la distancia entre los planos más compactos de una y otra estructura, que son los dan los picos de mayor intensidad por DRX.

SOLUCIONES

1) ρ (V) = 5.97 g/cm^3

2) ρ (Pt) = 21.32 g/cm^3

3) a) fcc 3b) bcc

4) a) $\rho\ (Fe_{bcc}) / \rho\ (Fe_{fcc}) = 0.92$ 4b) Contracción $\approx$ 8%

5) fcc

6) cúbica simple

7) fcc

8) R=1.75 Å

9) ρ (Zr) = 6.7 g/cm^{3}Feα

10) a = 2.666 Å; c= 4.9489 Å

11) c/a = 1.6

12) a) $\rho\ (Ti_{hcp}) / \rho\ (Ti_{bcc}) = 1.037$ b) Expansión $\approx$ 3.7 % c) $\rho\ (Ti_{hcp}) / \rho\ (Ti_{bcc}) = 1.11$

13) a) bcc d_{020}=1.432 Å; fcc d_{020}= 1.796 Å b) bcc d_{110}=2.025 Å; fcc d_{111}= 2.074 Å

Problemas ejemplo resueltos

2) *Calcular la densidad del platino (Pt) si su estructura cristalina es cúbica centrada en las caras (fcc), su radio atómico 0.139 nm y su peso atómico 195.1 g/mol.*

Este problema es un caso de aplicación directa de la expresión que nos da la densidad volumétrica de un material cristalino a partir de la masa y el volumen de la celda unidad:

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{\text{Masa Celda Unidad}}{\text{Volumen Celda Unidad}}$$

Para el caso concreto de una celda fcc, la masa será la correspondiente a los cuatro átomos que le corresponden. Para calcular la masa de cada átomo se divide el peso atómico en g/mol por el nº de átomos contenidos en un mol, es decir, el Nº de Avogadro $6.023x10^{23}$:

Masa Celda Unidad fcc = $4xP_{at}/N_{AV}$

Al tratarse de una celda cúbica, el volumen de la celda d parámetro de red a es el volumen de un cubo de lado a, es decir:

Vol. celda unidad = a^3

El enunciado no da directamente el parámetro de red del Pt, pero sí que es fcc y el radio atómico es 0.139 nm. Mediante la condición de compacidad de la red fcc se obtiene el parámetro de red correspondiente:

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = \frac{4 \times 0.139}{\sqrt{2}} = 0.39315nm$$

Dicho todo lo cual, ya estamos en condiciones de calcular la densidad, con la precaución de expresar a en cm para obtener la densidad en unidades de g/cm³, que son las habituales:

$$\rho = \frac{4 \times {}^{P_{at}}\!/_{N_{AV}}}{a^3} = \frac{4 \times {}^{195.1}\!/_{6.023x10^{23}}}{\left(3.9315x10^{-8}\right)^3} = 21.32g/cm^3$$

7) *Determinar si la plata (Ag) presenta estructura bcc o fcc partiendo de los siguientes datos de la Ag:*
- *radio atómico: 0.144 nm.*
- *peso atómico: 107.9 g/mol.*
- *densidad: 10.5 g/cm³.*

Como en el ejemplo anterior del P2, se trata de aplicar de nuevo la expresión de la densidad volumétrica, referida a la masa y volumen de la celda unidad. La diferencia en este caso es que conocemos la densidad y queremos deducir si se corresponde con una estructura bcc o fcc. La forma quizá más directa de resolverlo sería aplicar elplanteamiento del ejemplo anterior para calcular la densidad de la Ag suponiendo que sea bcc y fcc. La que más se ajuste cona densidad dada por el enunciado nos dará la clave para asignar la estructura de la plata.

Así pues:

$$\rho_{bcc} = \frac{2 \times {}^{P_{at}}\!/_{N_{AV}}}{\left(\frac{4R}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{2 \times {}^{107.9}\!/_{6.023x10^{23}}}{\left(\frac{4 \times 1.44x10^{-8}}{\sqrt{3}}\right)^3} = 9.74g/cm^3$$

$$\rho_{fcc} = \frac{4 \times P_{at}/N_{AV}}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}}\right)^3} = \frac{2 \times 107.9/6.023x10^{23}}{\left(\frac{4 \times 1.44x10^{-8}}{\sqrt{2}}\right)^3} = 10.6 g/cm^3$$

A la vista de ambos resultados, se concluye que la Ag presenta estructura fcc, pues la densidad calculada es casi idéntica a la aportada en el enunciado

10) *Determinar los parámetros de red (a y c) para la estructura hcp del cinc (Zn) si la relación c/a=1.856, ρ=7.13 g/cm^3 y peso atómico 65.39 g/mol (sol a=2.665, c=4.947)*

Al tratarse de sistema hexagonal, hay que tener en cuenta las características propias de este sistema. Así pues el número de átomos por celda es 6 y el volumen ahora es el de la celda hexagonal (NO el de la cúbica a^3) que vendrá dado por el área de la base (hexágono de lado a) por la altura (el parámetro c). Una vez calculado, el volumen queda:

$V_{hcp} = \frac{3}{2} a^2 c \sqrt{3}$ *La deducción se incluye al final.*

De forma que para la estructura hcp la expresión de la densidad toma la forma: $\rho = \frac{6 \times P_{at}/N_{AV}}{\frac{3}{2} a^2 c \sqrt{3}}$

Además hay que tener en cuenta que R y a están relacionados por a=2R, con lo cual para los datos del Zn aportados en el enunciado la densidad queda:

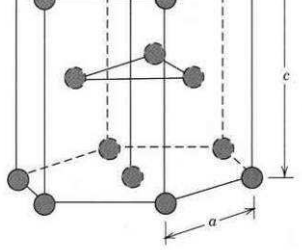
$$\rho = 7.13 g/cm^3 = \frac{6 \times \frac{65.39}{6.023x10^{23}}}{\frac{3\sqrt{3}}{2} \times 1.856 \times a^3}$$ donde se ha hecho uso de la relación c=1.856a

Sólo queda despejar a y el problema está resuelto:

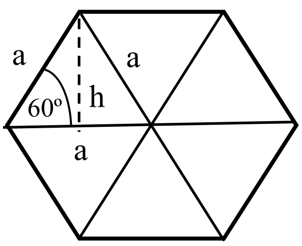
$$a = \sqrt[3]{\frac{6 \times \frac{65.39}{6.023x10^{23}}}{\frac{3\sqrt{3}}{2} \times 1.856 \times 7.13}} = 2.666x10^{-8} cm = 2.666 \text{A}$$

c=1.856a=4.9489 Å

Cálculo del volumen de la celda hcp



Vol=area base x altura
Altura = c
Area base = area hexágono lado a = 6 áreas triángulos equiláteros de lado a = 6 x ½ base Δ x altura Δ = 3 x a x a·sen60º $= \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2$



$$V_{hcp} = \frac{3\sqrt{3}}{2} a^2 c$$