

**MARCELO**

Hola a todos. Este es mi video sobre estructuras cristalinas. Yo soy Marcelo Alejandro

**GONZÁLEZ:**

González Alanís. Y bueno, todo este documento hecho en matemática está escrito en inglés, pero no se preocupen, se los voy a explicar muy bien en español. Primero que nada, no quiero que se concentren en el código. Y por favor, solo concéntrense en las estructuras. Primero que nada, aquí podemos ver lo que es una estructura cristalina. Pero antes de enseñárselas, les quiero explicar dos cosas muy importantes que tienen que saber para las estructuras cristalinas.

Es, una, ¿qué es una estructura cristalina? Una estructura cristalina es una manera en la que los átomos, iones o moléculas se acomodan en 3 dimensiones. Y otro término muy importante es lo que es una celda unitaria. Una celda unitaria es el volumen más pequeño que hay en un cristal que tiene que seguir el patrón. Mínimo tienen que seguir el patrón de toda la red cristalina. ¿Ustedes cuál creen que ser la celda unitaria en esta red cristalina? Pues bueno, claro, la celda unitaria es la que teníamos al principio.

Esta es la celda unitaria. Es la celda unitaria de una estructura cristalina simple cúbica. Es la más simple de todas. Además de esta, hay otras 6 diferentes que dependen de las longitudes y los ángulos que hay entre ellas. En este caso, los ángulos y las longitudes son todas iguales. Ahora que estuvimos hablando de la celda simple cúbica cristalina, pues bueno, vamos a adentrarnos un poco más en ella. Como ya han visto, esta es la celda estructura cristalina, pero si nos enfocamos en la celda unitaria, ¿cuántos átomos tiene esta celda unitaria? En sí, esta celda unitaria tiene un átomo en total. ¿Por qué?

Porque tiene 8 átomos en todas las esquinas del cubo y esos 8 átomos tienen un octavo de su volumen dentro de la celda unitaria. Entonces un octavo por 8 esquinas, hay un átomo en total. Además del número de átomos, otro de los términos importantes para las estructuras cristalinas es el número de coordinación. ¿Qué es el número de coordinación? Este es solo el número de vecinos más cercanos que tiene cada átomo.

En este caso, en la celda simple cúbica, el número de coordinación es 6. En una simple celda unitaria no es posible ver el número de coordinación, entonces lo que vamos a hacer es vamos a juntar 8 celdas unitarias, ponerlas todas juntas, cambiarle los colores para que sea más fácil para ustedes ver cuáles son los átomos vecinos más cercanos a cada uno de los átomos. Aquí tenemos el átomo en rojo que es el que estamos analizando y sus vecinos más

cercanos son los átomos amarillos.

Si pueden contar aquí, son 6. 1, 2, 3, 4, 5, 6. Esos son los átomos más cercanos que tiene cualquier átomo en una red cristalina simple cúbica. Aún siendo una red cristalina muy, muy simple, no hay muchos elementos que se quieran cristalizar en este tipo de estructura. Sólo el elemento alfa polonio es el único que se cristaliza en una estructura simple cúbica. Pero bueno, estoy seguro que ustedes nunca han utilizado polonio porque el polonio es radiactivo.

Y además, el hecho de que sea la única es porque esta estructura tiene un factor de empaquetamiento muy pequeño. Lo que no favorece que los elementos se cristalicen en ella porque los elementos, por lo general los metálicos, quieren estar mucho más juntos. Pero ahora lo que te estarás preguntando es, ¿qué es ese factor de empaquetamiento? Pues el factor de empaquetamiento es simplemente un valor que nos dice qué tan juntos, qué tan cercanos están los átomos en una celda unitaria. El factor de empaquetamiento se puede calcular con una fórmula.

Esa fórmula se la voy a enseñar ahora. Que es el volumen que tienen los átomos en la celda unitaria, sobre el volumen total de la celda unitaria. En este caso lo que yo hice fue crear una función para obtener ese factor de empaquetamiento, utilizando el número de átomos en la celda unitaria, su volumen y el volumen de la celda unitaria. El volumen de la celda unitaria en sí, como es un cubo, es solo su longitud al cubo. Como lo ven aquí. Y para calcular el volumen de los átomos. Bueno, primero tenemos que considerar que son esferas.

Considerando que son esferas es muy fácil saber su volumen, porque el volumen es  $\frac{4}{3}$  por  $\pi$  por el radio al cubo. En este caso, en la celda simple cúbica, es muy fácil obtener el radio porque en una longitud de la celda unitaria hay 2 átomos. Entonces si la longitud es aquí y tenemos 2 átomos, el radio será la mitad de la longitud. Entonces ven cómo usando la función, sabiendo que el número de átomos es 1, el radio es la mitad de la longitud, tenemos un factor de empaquetamiento de 0.52. Que es relativamente bajo.

Y bueno, después de hablar de la estructura cristalina más simple, vamos a irnos a algo un poquito más complicado. Ahora vamos a irnos a una estructura cristalina que es llamada la celda centrada en el cuerpo. ¿Por qué se llama célula asentada en el cuerpo? Bueno, como verán aquí en esta visualización, es celda centrada en el cuerpo porque tiene un átomo completo en medio de toda la celda. En comparación con el otro, sigue teniendo los 8 átomos en todas las esquinas, pero ahora tenemos un átomo en medio.

Lo que significa que el número de átomos en la celda es ahora 2. Tenemos el que está en medio que está completo. Tenemos el un octavo de las 8 esquinas. Entonces ahora el número de átomos en la celda unitaria es 2. Como verán ahora, si hacemos un poco más pequeña la separación, ven que está muchísimo más densa. Entonces vamos a ver que el factor de empaquetamiento es mayor, pero eso lo vamos a ver después.

El número de coordinación en la estructura es simple cúbica era 6, ahora es 8. Vamos a enseñarles eso para que puedan verlo. Hicimos lo mismo. Se hizo lo mismo. Se pusieron 8 celdas unitarias en conjunto. Estamos analizando lo que es el átomo rojo y vemos cómo los átomos amarillos son sus átomos o sus vecinos más cercanos y son 8. Entonces ahora que sabemos que el número de coordinación es 8, ¿cómo creen que va a ser su factor de empaquetamiento? Claro que el factor de empaquetamiento va a ser mayor, pero bueno.

Para el factor de empaquetamiento, ya conocemos la fórmula, es la fórmula anterior. Es el volumen de los átomos entre el volumen de la célula unitaria. Ahora, como tenemos un átomo en medio, los átomos en las esquinas en realidad no se tocan. Entonces no es tan fácil calcularlo con solo la longitud. En este caso tenemos que usar 3 diferentes átomos, como ven aquí, el del medio y 2 de las esquinas. Si recuerdan anteriormente, ¿cuál es o cómo se calcula la diagonal interna de un cubo?

La diagonal interna de un cubo es raíz de 3 veces más larga que cualquier longitud de ese cubo. Entonces como vemos aquí, tenemos 4 radios de esferas en esa diagonal interna. Entonces si tenemos 4 y sabemos que la diagonal interna es raíz de 3 veces cualquier lado del cubo, pues claro que el radio sería raíz de 3 veces por esa longitud del cubo entre 4. Tenemos 4 radios. Usamos la misma función para el factor de empaquetamiento, sabiendo que ahora tenemos 2 átomos, ya conocemos cuál es el radio y vemos que el factor de empaquetamiento es 0.68.

Un poco más grande que el de la celda anterior. Algunos de los ejemplos de los elementos que se cristalizan en una celda central en el cuerpo son cromo, wolframio, hierro, tantalio, además de molibdeno. Ahora que terminamos con la celda central en el cuerpo, vamos a irnos todavía un poquito más complicado, a la celda central en las caras. La celda central en las caras en sí es una de las más comunes en los metales. Lo van a poder ver por los ejemplos.

Como podrán ver en la estructura, es una estructura muchísimo más empaquetada. Se ve

muchísimo más densa que las otras. Lo que van a poder ver con su factor de empaquetamiento después. Lo que podemos ver aquí es que ahora los átomos no están centrados en el centro, en el cuerpo de la celda unitaria sino en las caras. Como un cubo tiene 6 caras, los átomos están en la cara, a la mitad de la cara. Entonces, ¿cuál es la cantidad de átomos que hay en esta celda unitaria? Son 4. ¿Por qué? Uno, es los 8 que están en las esquinas que ya hemos contado en todas las celdas anteriores.

En este caso, como tenemos 6 caras, los átomos están en medio de la cara, entonces tenemos 6 mitades de átomos dentro de la celda unitaria. 6 mitades nos dan 3, 3 más 1, 4. 4 es el número de átomos que hay en esta celda unitaria. ¿Y cuál es tu número de coordinación? Claro que como podrán ver, como está muchísimo más empaquetada, su número de coordinación es mucho más grande que antes. Su número de coordinación es 2. Y de hecho, si quisiéramos ver el número de coordinación como lo habíamos estado viendo, con 8 celdas unitarias juntas es imposible verlo.

Ni siquiera se puede ver dónde está la celda o el átomo rojo que habíamos estado analizando. Entonces sobre lo que voy a hacer para que lo puedan ver ustedes es poner solo 2 celdas unitarias juntas, una arriba de la otra y van a poder ver los vecinos más cercanos de los átomos. En este caso, decidí cambiar los colores. Como pueden ver, el átomo analizado es el amarillo y los vecinos más cercanos son los rojos. Si los cuentan, son 12. Finalmente, su factor de empaquetamiento tampoco es tan directo como el de la celda cúbica simple. En este caso tenemos que utilizar una cara del cubo.

En esta cara estamos haciendo el mismo análisis. Tenemos 2 átomos en las esquinas, 1 átomo en medio de la cara. Y como recuerdan, ¿cuál es la diagonal de un cuadro? Bueno, la diagonal de un cuadro es raíz de 2 veces más grande que cualquier longitud de ese cuadro. Entonces utilizando el mismo concepto anteriormente, tenemos 3 átomos. En estos 3 átomos hay 4 radios. Entonces para calcular el factor de empaquetamiento, tenemos 4 átomos, el radio es raíz de 2 veces la longitud entre 4. Son 4 radios.

Eso nos da un factor de empaquetamiento de 0.74. 0.74 es el factor de empaquetamiento más grande que se puede obtener para átomos en una celda unitaria del mismo radio. En este caso, los ejemplos son muchísimo más comunes, como aluminio, cobre, níquel, plata u oro.

Pues bueno, muchísimas gracias por todo. Nada más le quería agradecer a Bianca Eifert y

Christian Heilinguer que fueron los autores del Paquete Cristálica. Que sin ese paquete este documento de matemáticas no se hubiera podido haber hecho. Si quieren jugar con las estructuras y visualizaciones que hice, por favor, mándenme un correo y con gusto les comparto el documento. Muchísimas gracias.