

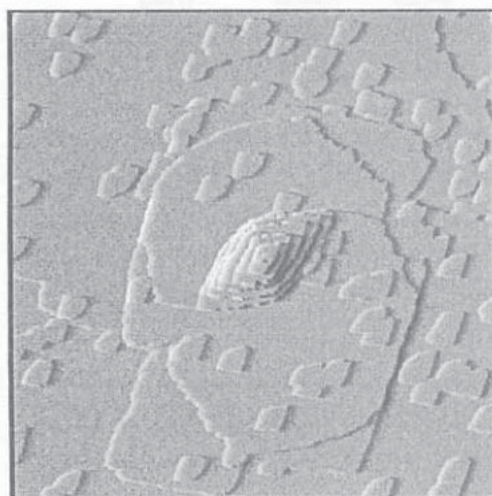
## MECANISMOS DE CRECIMIENTO CRISTALINO A ESCALA MOLECULAR EN BARITA

C.M. Pina, U. Becker, P. Risthaus, D. Bosbach y A. Putnis

Institut für Mineralogie, Universität Münster, Correnstraße 24, D-48149 Münster, Alemania

Mediante el empleo de microscopía de fuerza atómica (Atomic Force Microscopy, AFM) se ha obtenido información detallada acerca de los mecanismos de crecimiento que operan a escala molecular sobre las caras (001) y (210) de la barita. Las imágenes microtopográficas de estas caras, obtenidas in situ durante su crecimiento a partir de soluciones moderadamente sobresaturadas, muestran el desarrollo de núcleos bidimensionales con morfologías controladas estructuralmente [1,2], una fuerte anisotropía de las velocidades de crecimiento a lo largo de diferentes direcciones cristalográficas, así como la autoinhibición estructural del crecimiento en espiral (Ver figura 1a y 1b).

a)



b)

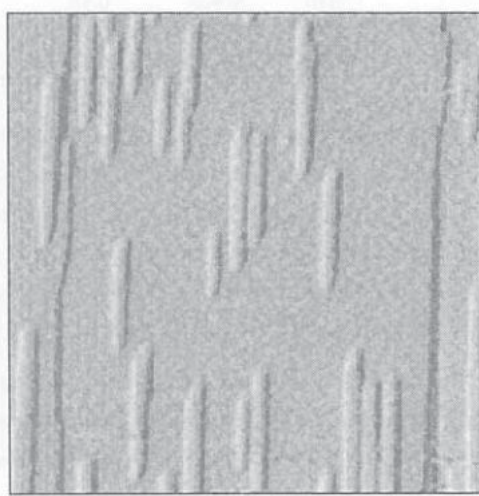


Fig.1. (a) Espiral de crecimiento y nucleación bidimensional sobre la cara (001) de la barita. Los núcleos bidimensionales con forma de sector circular tienen un altura de  $3.5 \text{ \AA}$  ( $1/2 d_{001}$ ) y alternan su orientación en capas sucesivas de crecimiento. (b) Núcleos bidimensionales sobre la cara (210) mostrando una gran anisotropía de crecimiento. La velocidad de avance en un sentido a lo largo de la dirección de máximo alargamiento de las islas es 10 veces mayor que en el sentido opuesto

La explicación de los fenómenos de crecimiento observados se ha basado, por un lado, en la información que la teoría de las PBCs (Periodic Bond Chains) proporciona sobre la estructura de las superficies de crecimiento [3,4] y, por otro, en la simulación por ordenador de la incorporación de unidades de crecimiento sobre dichas superficies. La geometría y orientación de las cadenas de enlaces fuertes dentro de las capas elementales de crecimiento, determinadas por la teoría de las PBCs para las caras (001) y (210), se pueden relacionar con algunos aspectos

morfológicos de las islas bidimensionales. Sin embargo, para entender la anisotropía de las velocidades de crecimiento observada es necesario el cálculo de las energías de fijación de los iones  $Ba^{2+}$  y  $SO_4^{2-}$  en lugares específicos de los escalones monomoleculares. Dicha anisotropía controla el desarrollo de los núcleos bidimensionales y conduce a que el crecimiento en espiral, considerado por la teoría clásica de Burton Cabrera y Frank [5] como el mecanismo predominante en condiciones próximas al equilibrio, no constituya un mecanismo cinéticamente efectivo en el caso de las caras morfológicamente más importantes de la barita.

Debido a que las características de simetría que condicionan la anisotropía de crecimiento en el caso de la barita se encuentran presentes en numerosas estructuras, es probable que la autoinhibición del crecimiento en espiral sea un fenómeno característico de un amplio número de compuestos.

#### Referencias

- [1] D.Bosbach, C. Hall, A. Putnis, Chem Geol., (en prensa)
- [2] C.M. Pina, D.Bosbach, M. Prieto, A.Putnis. J. Cryst Growth 187 (1998) 119
- [3] P.Hartman, in: I.Sunagawa (Ed). Morphology of Crystals, part A. cap.4. Terra Tokyo, 1987.
- [4] P. Hartman, C.S Strom, J. Cryst Growth 97 (1989) 502
- [5] W.K.Burton, N. Cabrera. y F.C. Frank. Phil Trans. R. Soc 243 (1951) 299