Estructura de los Sólidos

Estructura Cristalina

OBJETIVOS

a) Definir sólidos cristalinos y amorfos

b) Definir estructura cristalina

c) Describir las diferentes estructuras cristalinas

d) Utilizar índices de Miller para describir direcciones y planos cristalográficos

e) Definir alotropía y polimorfismo

Contenido de la clase

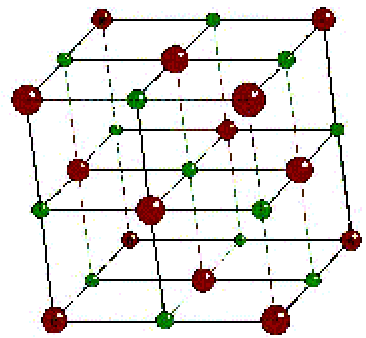
- Sólidos cristalinos y amorfos
- Reticulado cristalino
- Sistemas cristalinos
- Índices de Miller: direcciones y planos cristalográficos
- Estructuras cristalinas de materiales metálicos (CFC, CCC y HC)
- Alotropia y polimorfismo
- Materiales monocristalinos y policristalinos

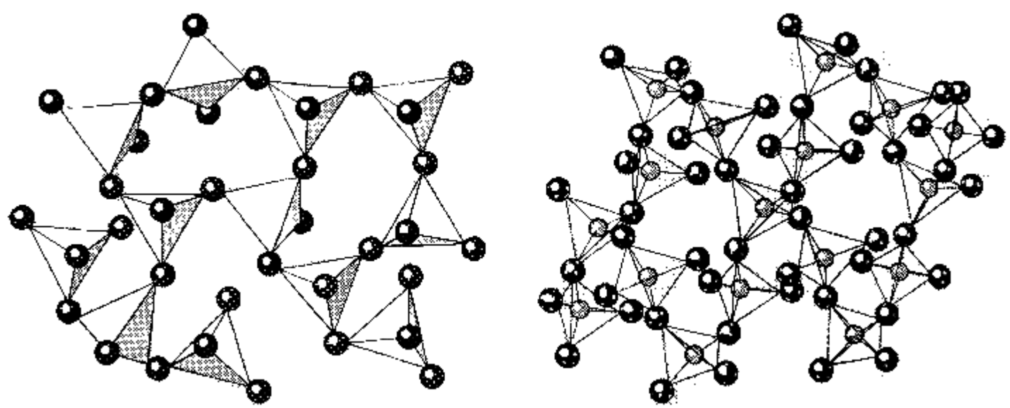
Sólidos cristalinos y amorfos

- Según la distribuición espacial de los átomos, moléculas o iones, los materiales sólidos pueden ser clasificados en:
  - **Cristalinos**: compuestos por átomos, moléculas o iones organizados de una forma periódica en tres dimensiones. Las posiciones ocupadas siguen una ordenación que se repite para grandes distancias atómicas (de largo alcance).
  - **Amorfos**: compuestos por átomos, moléculas o iones que no presentan una ordenación de largo alcance. Pueden presentar ordenación de corto alcance.

Sólidos cristalinos y amorfos

Cristalino





(c) silica glass

(d) quartz

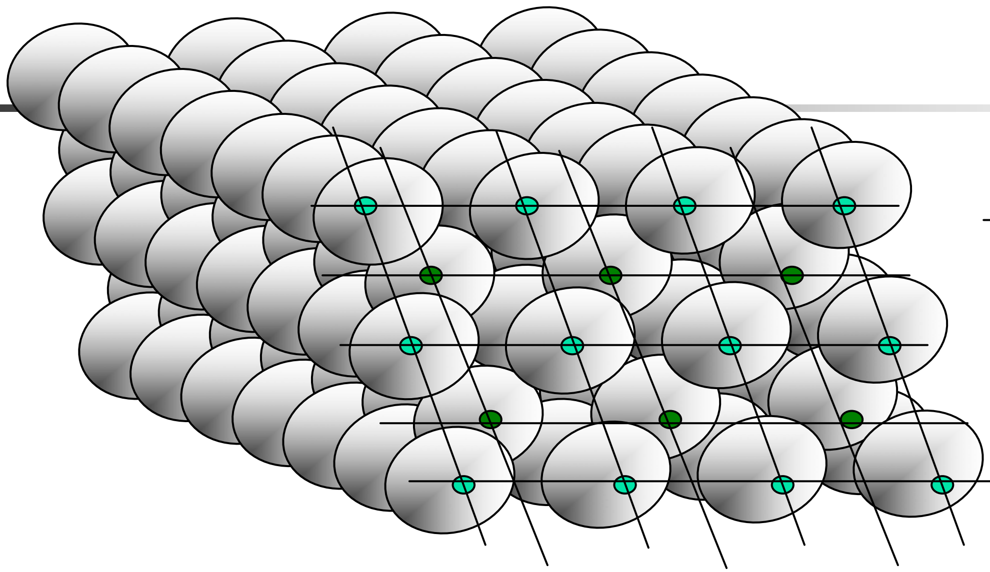
Amorfo

Figure 3.29 Silica structures

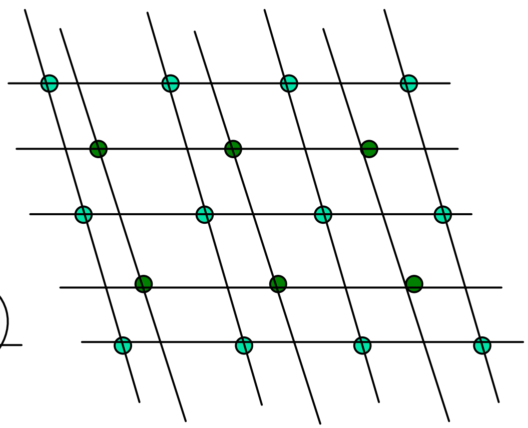
Reticulado cristalino

- Conceptos sobre materiales cristalinos:
- E**structura cristalina**. Es la forma geométrica como átomos, moléculas o iones se encuentran espacialmente ordenados.
- **Á**tomos o iones son representados como esferas de diametro fijo.
- **Reticulado**: Arreglo tridimensional de puntos en el que cada punto tiene los mismos vecinos.
- **Celda unitaria**: Es el menor grupo de átomos representativo de una determinada estructura cristalina.
- **Número de Coordinación :** el numero de átomos que tocan a otro en particular, es decir el numero de vecinos mas cercanos, indica que tan estrechamente están empaquetados los átomos.
- **Parámetro de Red :** Longitudes de los lados de las celdas unitarias y los ángulos entre estos lados.

Reticulado cristalino



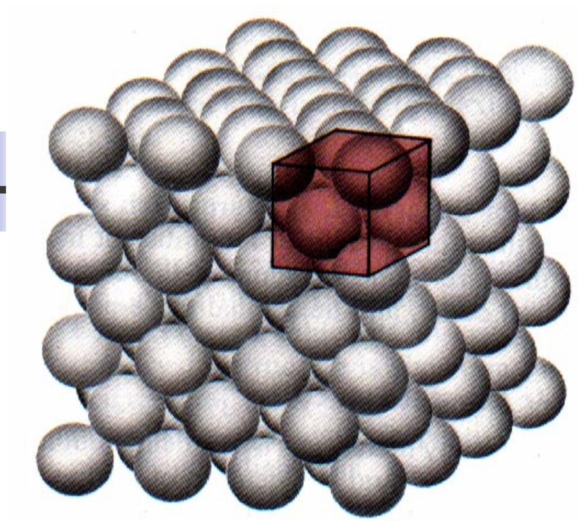
Sólido cristalino en el cual los átomos son representados por esferas rígidas



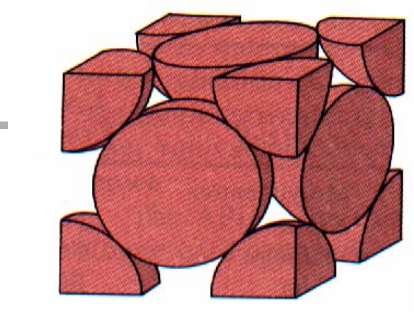
Reticulado cristalino

En el reticulado cristalino dos puntos cualquiera tienen los mismos vecinos.

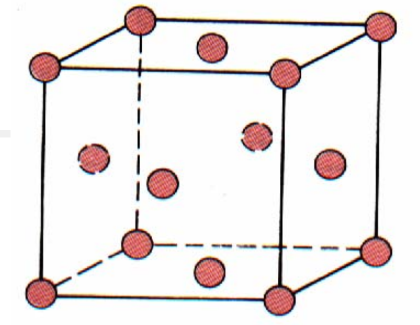
Celda Unitaria



Sólido cristalino CFC



Celda unitária representada por esferas rígidas



Celda unitária de un reticulado cristalino.

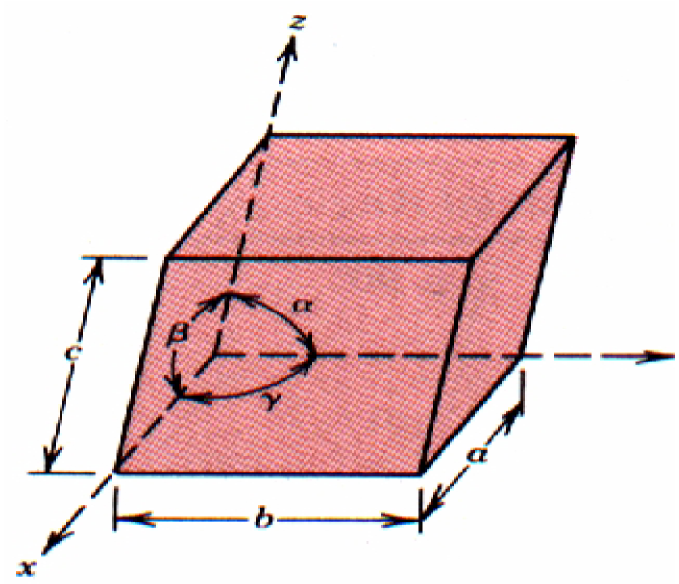
El concepto de celda unitaria es usado para representar la simetría de una determinada estructura cristalina.

Cualquier punto de la celda unitária que sea transladado de un múltiplo entero de parámetros de red ocupará una posición equivalente en otra celda unitária.

Parámetros de red

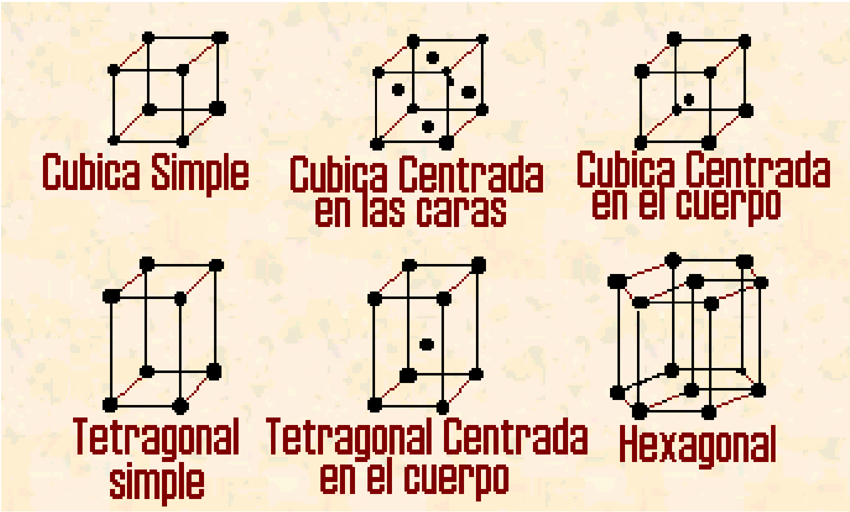
- Geométricamente una celda unitária puede ser representada por un paralelepípedo.

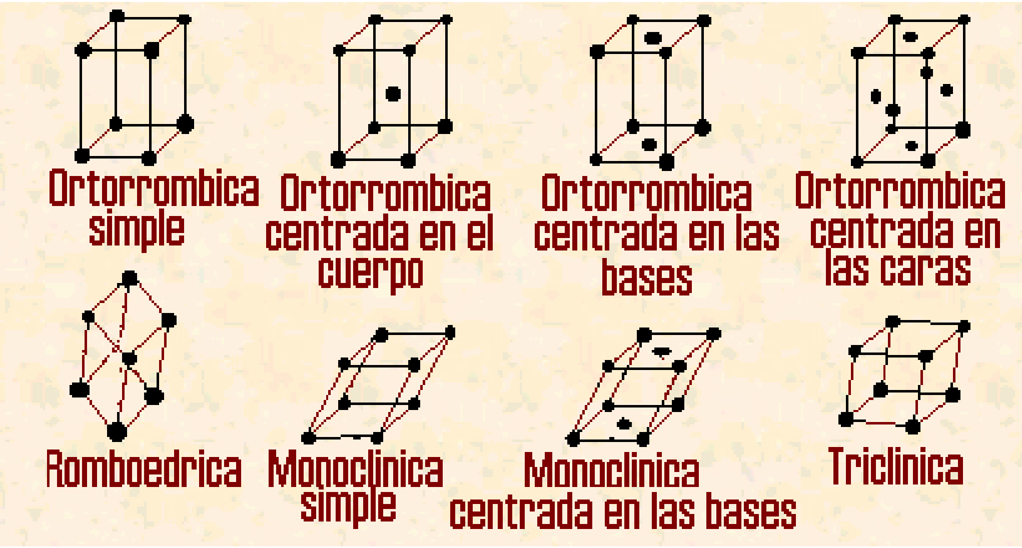
- La geometría de la celda unitária es descrita en términos de seis parámetros: La longitud de las tres aristas del paralelepípedo (a, b y c) y los tres ángulos entre las aristas (α, β y γ). Esos parámetros son llamados ***parámetros de red.***



Sistemas cristalinos (Redes de Bravais)

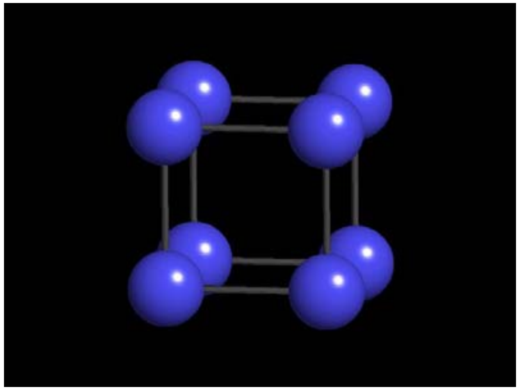
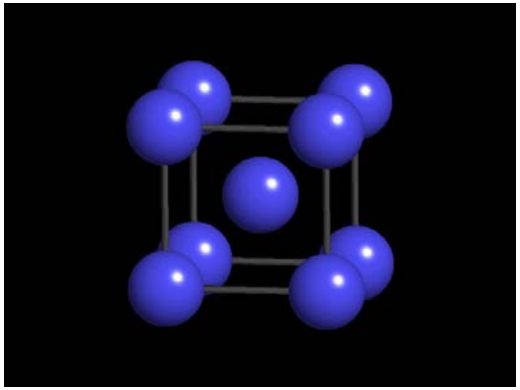
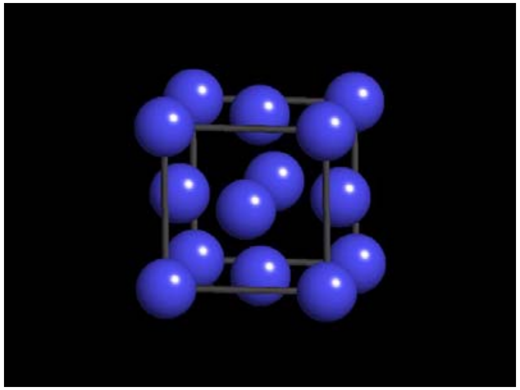
•Aunque existen 14 posibles celdas cristalinas, Existen siete combinaciones diferentes en las cuales están agrupadas en dependencia de los parámetros de red. Cada una de esas combinaciones constituye un sistema cristalino.





Sistema Cúbico

- a = b = c
- $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$

Cúbico simple

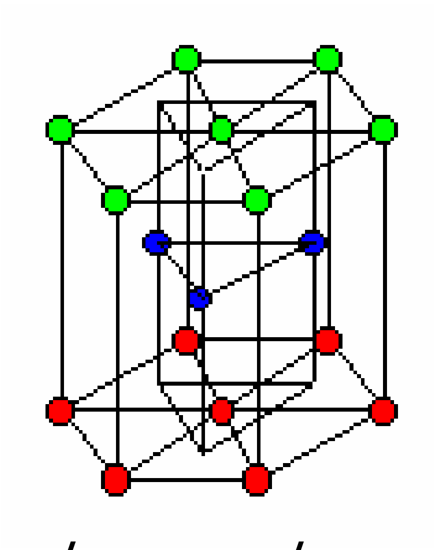
Cúbico de cuerpo centrado (CCC)

Cúbico de cara centradas (CFC)

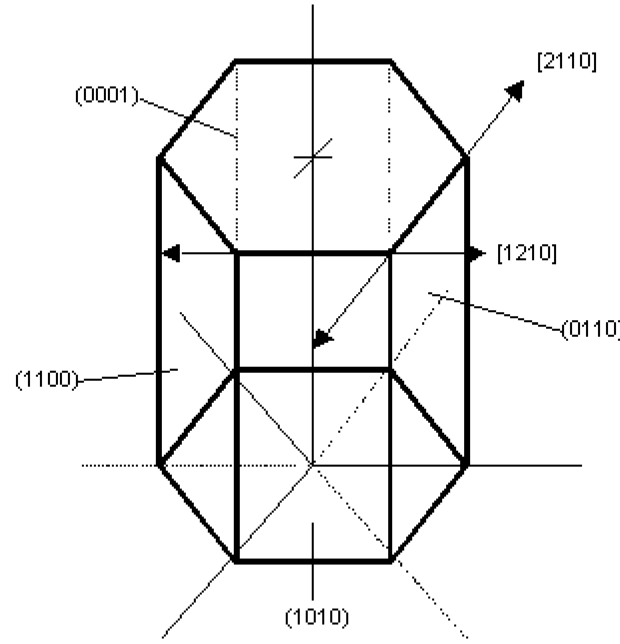
Sistema Hexagonal

$a = b \neq c$

$\alpha = \beta = 90^0 \;\; y \; \gamma = 120^0$



hexagonal

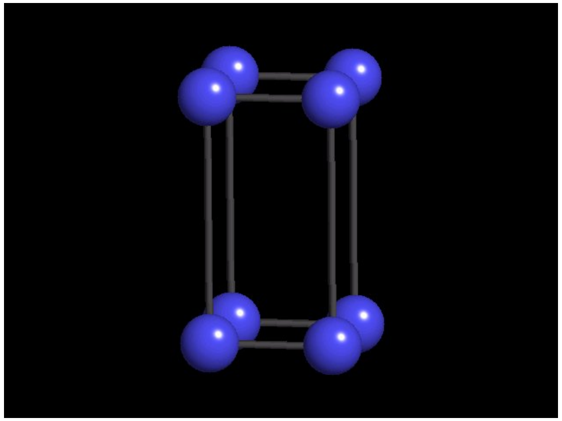


hexagonal

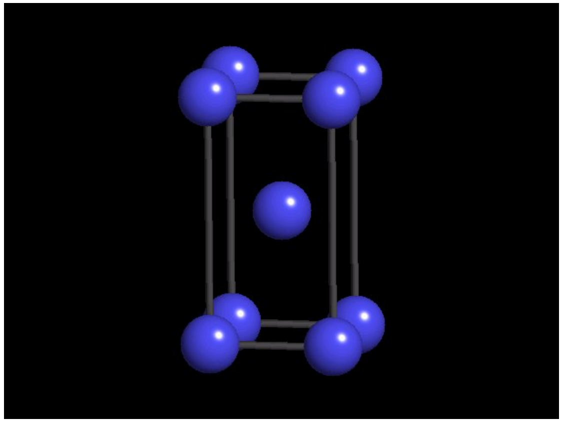
Sistema Tetragonal

$a = b \neq c$

$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$



Tetragonal simple

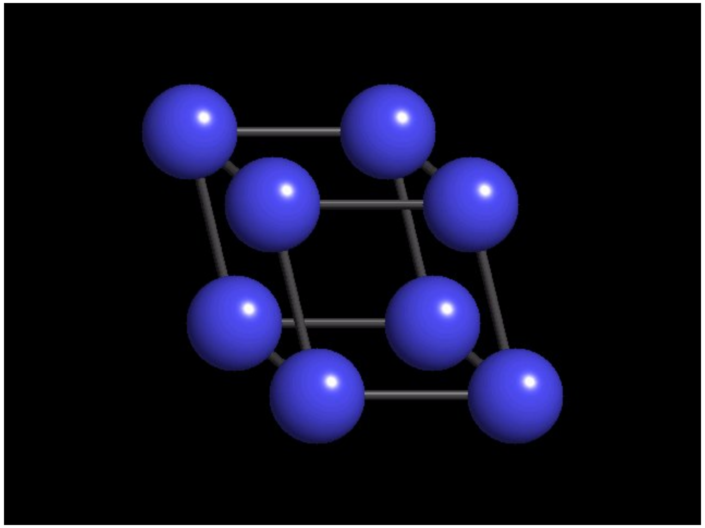


Tetragonal de cuerpo centrado

Sistema Rombohédrico

$a = b = c$

$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$

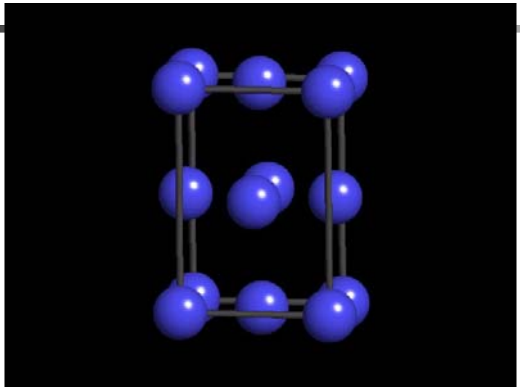


Rombohédrico (R)

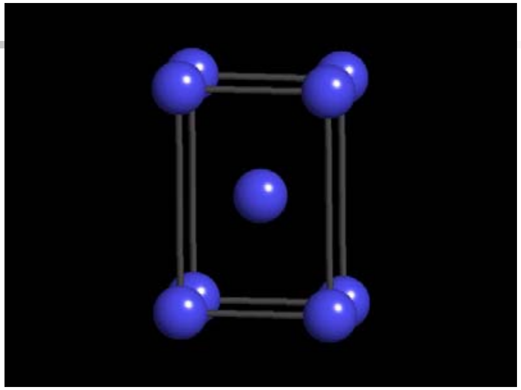
Sistema Ortorrómbico

$a \neq b \neq c$

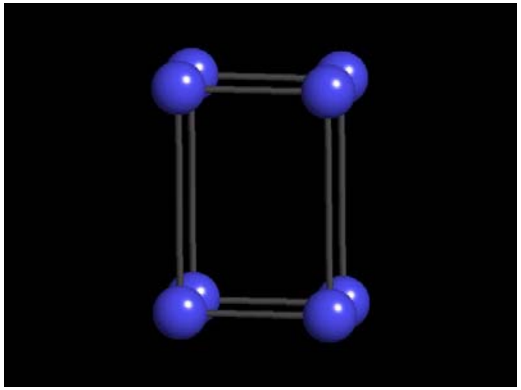
$\alpha = \beta = \gamma = 90^0$



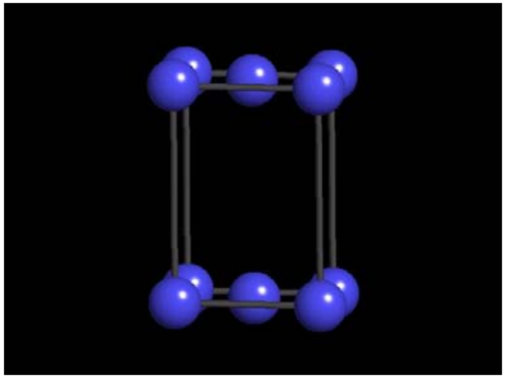
Ortorrómbico de cara centradas



Ortorrómbico de cuerpo centrado



Ortorrómbico simple

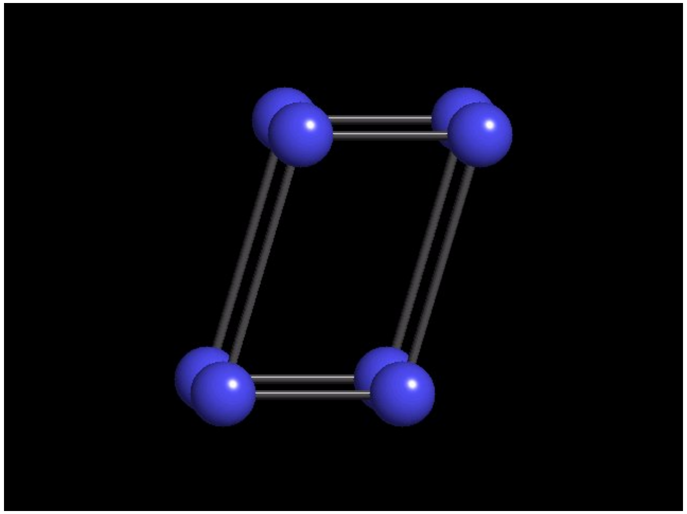


Ortorrómbico de bases centradas

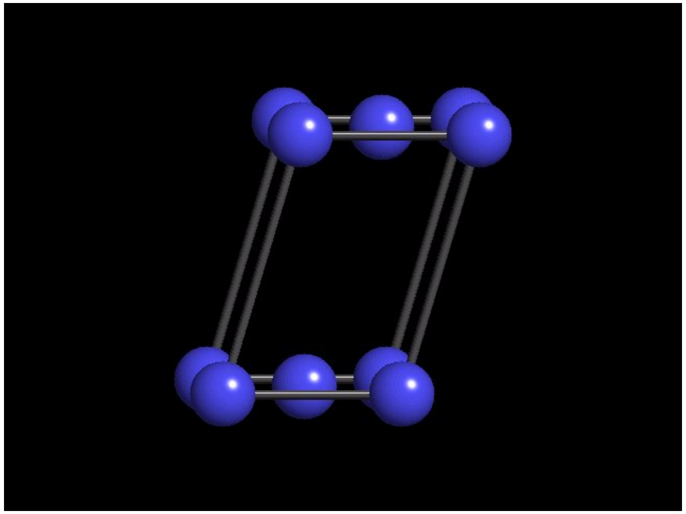
Sistema Monoclínico

$a \neq b \neq c$

$\alpha = \gamma = 90^0 \neq \beta$



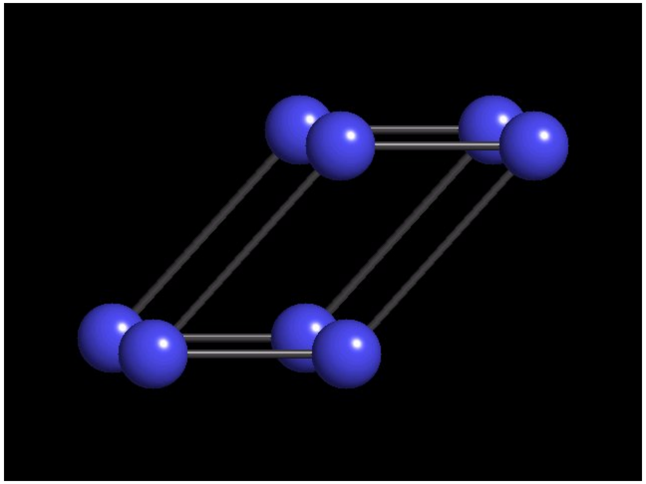
Monoclínico simple



Monoclínico de bases centradas

Sistema Triclínico

$a \neq b \neq c$
$\alpha \neq \gamma \neq \beta$

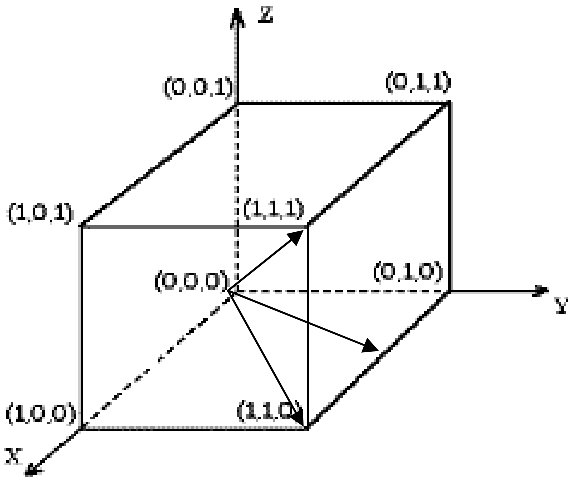


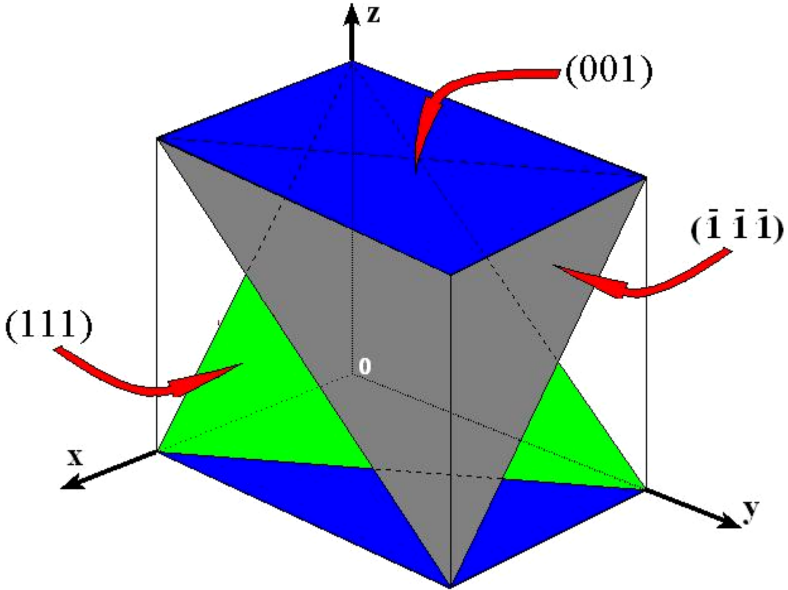
Triclínico

Índices de Miller

Notación empleada para localizar direcciones y planos en una celda unitaria

Coordenadas Celda Unitaria : se pueden localizar puntos en una celda estableciendo un sistema de coordenadas, con un eje 0,0,0 que sirva de referencia. Un punto cualquiera se designa (x,y,z).

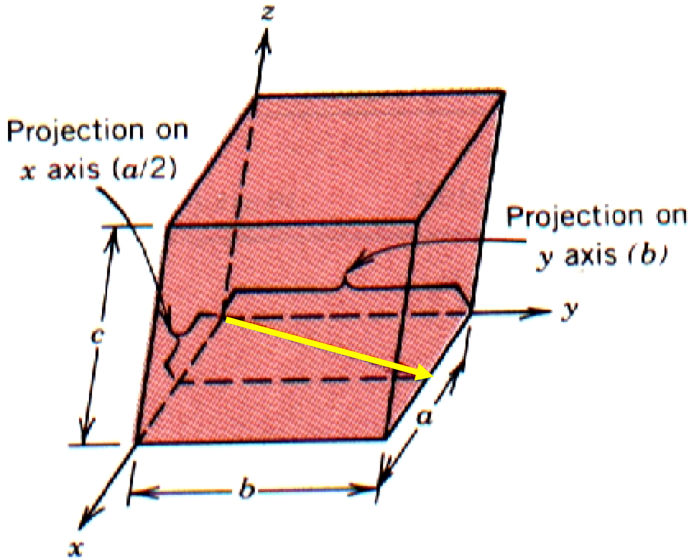




Índices de Miller: direcciones cristalográficas

- **Direción cristalográfica**: vector que une dos puntos de la red cristalina.
- Procedimento para determinación de los índices de Miller de una direción cristalográfica:
  - Transladar el “vector dirección” de manera que pase por el origen del sistema de coordenadas.
  - Determinar la proyección del vetor en cada uno de los tres ejes coordenados. Esas proyecciones deben ser medidas en terminos de los parámetros de red (a,b,c)
  - Multiplicar o dividir esos tres números por un fator comun, de tal forma tal que los tres números resultantes sean los menores enteros posibles.
  - Representar la direción escriviendo los tres números entre corchetes: [u v w].

Direcciones cristalográficas : ejemplo



	x	y	z
proyecciones en términos de a,b y c	½ x a	1 x b	0 x c
proyecciones	½	1	0
redución a mínimos interos	1	2	0
notación	[120]		

Nota: una família de direcciones, por ejemplo [100], $[\bar{1}00]$, [010], $[0\bar{1}0]$, [001] y $[00\bar{1}]$ es representada por <100>

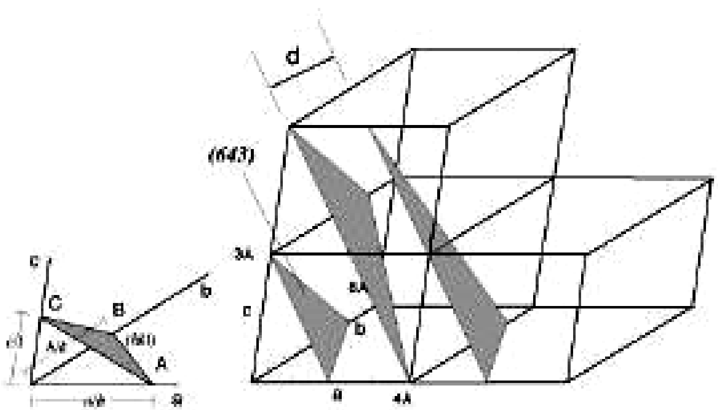
Índices de Miller: Planos Cristalográficos

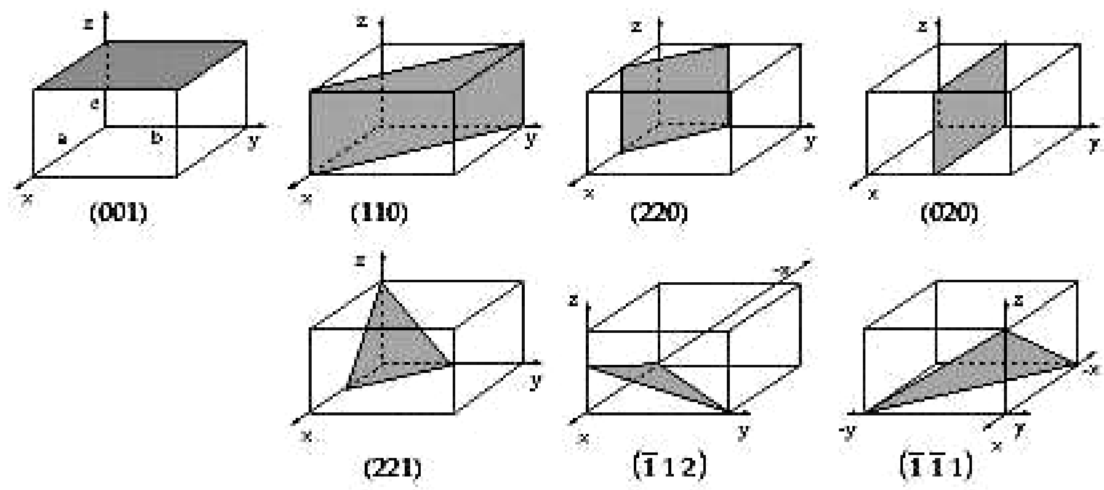
Determinación de los índices de Miller de un plano cristalográfico:

- Determinar los interceptos del plano con los ejes del sistema de coordenadas en términos de los parámetros de red a,b y c. Si el plano pasa por el origen, se debe transladar el plano a una nueva posición en el sistema de coordenadas.
- Obtener los recíprocos de esos tres interceptos. Si el plano es paralelo a uno de los ejes, el intercepto se considera en el infinito y el su recíproco será cero.
- Representar los índices de Miller en la forma (*h k l*)

Nota: A veces es necesário multiplicar o dividir esos tres recíprocos por un factor común, tal que los tres números resultantes sean los menores enteros posibles.

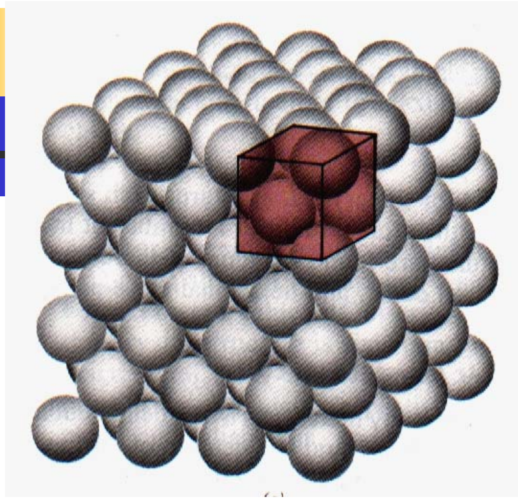
Planos cristalográficos

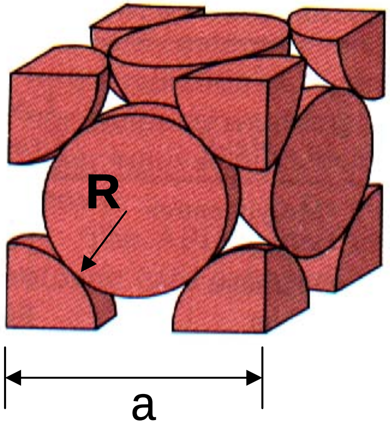


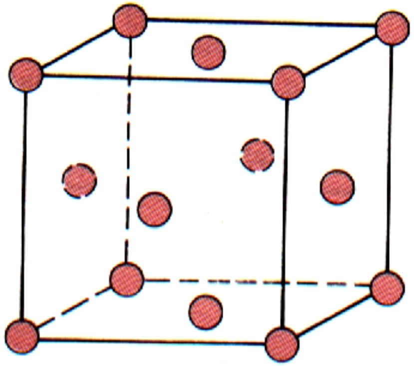


Nota: una família de planos, como por ejemplo ($\bar{1}11$), ($1\bar{1}1$), ($11\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}1$), ($1\bar{1}\bar{1}$), ($\bar{1}1\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) y (111) es representada por {111}

Cúbica de cara centrada (CFC)

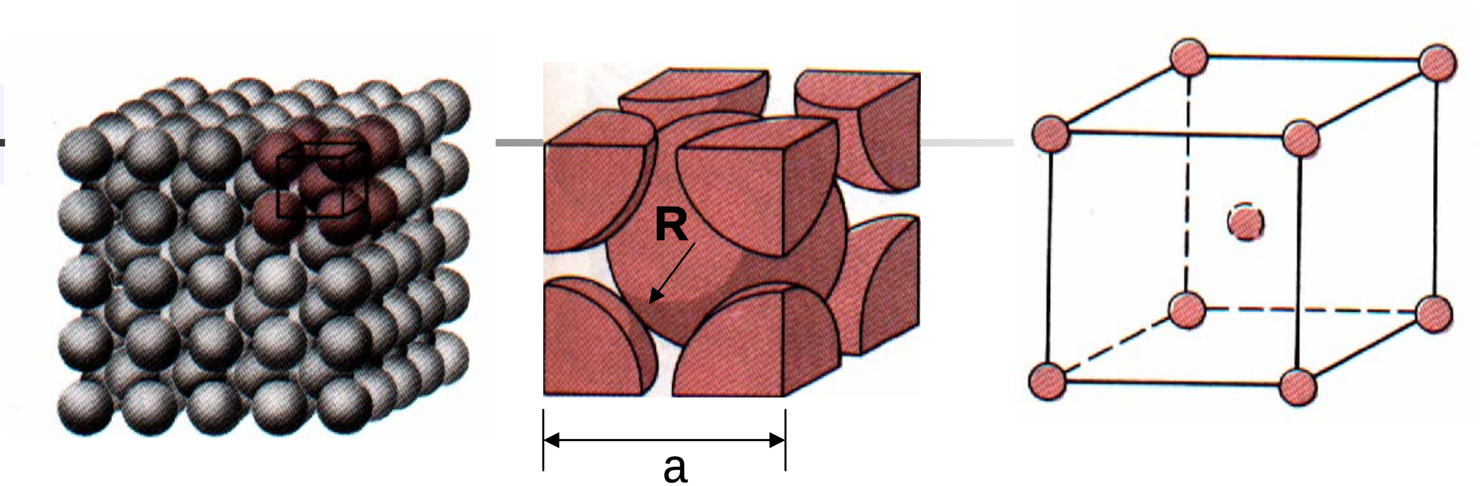






- La relación entre el radio atómico, R, y la arista del cubo, a, es dada por: $a = 2R\sqrt{2}$
- El número de átomos por celda unitária es igual a 4.
- El número de coordinación es igual a 12.
- ejemplo de metales CFC: cobre, alumínio, oro, plomo.

Cúbica de cuerpo centrado (CCC)



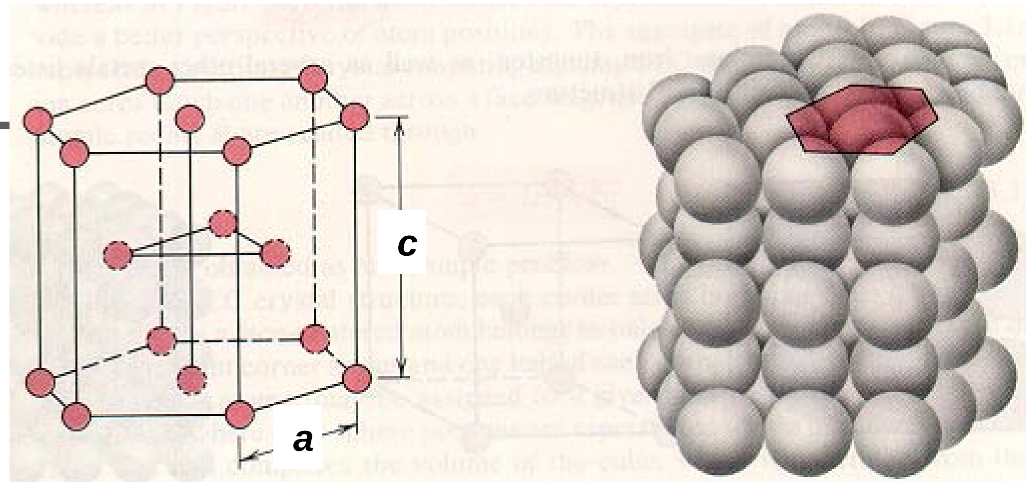
- La relación entre el radio atómico, R, y la arista del cubo, a, es dada por: $a = \dfrac{4R}{\sqrt{3}}$
- El número de átomos por celda unitária es igual a 2
- El número de coordenación es igual a 8
- Ejemplo de metales CCC: Fe-α, cromo, tungsteno, molibdeno

Factor de empaquetamiento atómico (FEA)

$$\mathrm{FEA} = \frac{\mathrm{V}_{\text{átomos}}}{\mathrm{V}_{\text{célula}}}$$

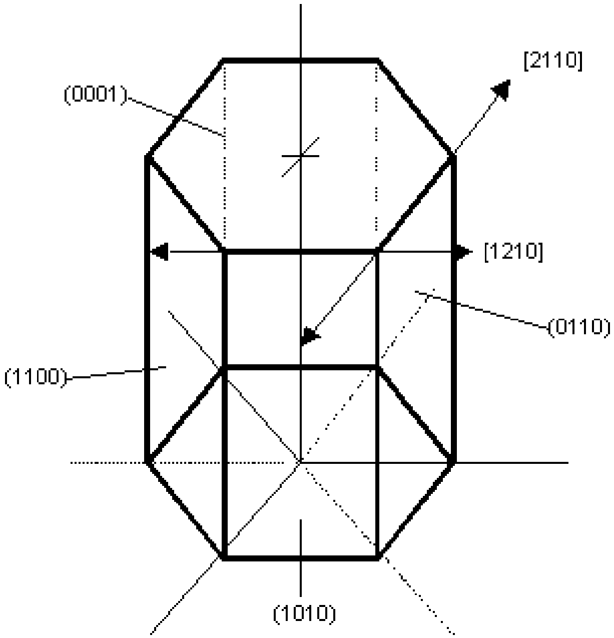
$$FEA_{CFC} = \frac{4\left(\dfrac{4\pi R^3}{3}\right)}{a^3} = \frac{4\left(\dfrac{4\pi R^3}{3}\right)}{(2R\sqrt{2})^3} = 0{,}74$$

Hexagonal Compacta (HC)



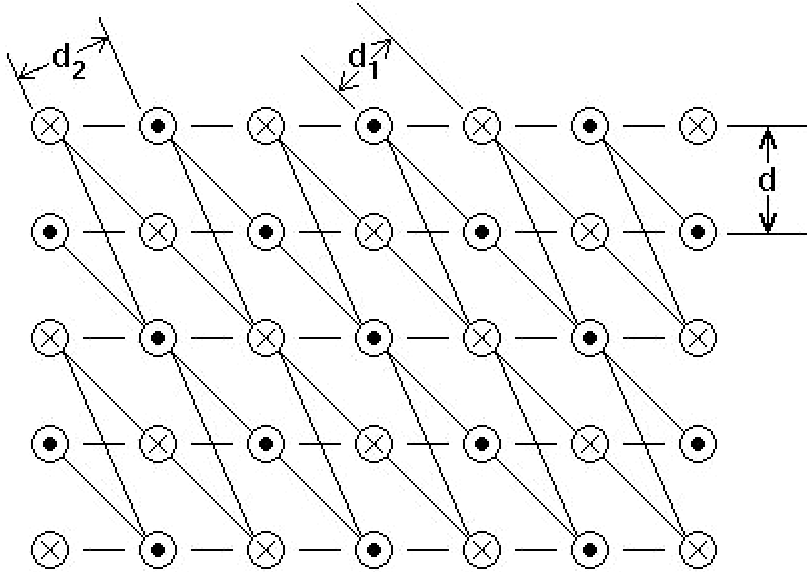
- c/a = 1,633 (ideal)
- El número de átomos por celda unitária es igual a 6
- El número de coordinación es igual a 12
- El FEA es igual a 0,74
- ejemplo de metais HC: cádmio, cobalto, zinco

Índices de Miller para una celda HCP.



Los planos en esta celda se identifican con cuatro índices en vez de tres, llamados índices Miller-Bravais, y representados por las letras h, k, i, l encerrados entre paréntesis (h, k, i, l). Estos índices hexagonales están basados en un sistema coordenado de cuatro ejes, tres ejes básicos a_1,a_2,a_3 que forman 120° entre sí, el cuarto eje o eje c es el eje vertical y está localizado en el centro de la celdilla unidad. Los índices de esta celda se obtienen igual de forma que para las celdas cúbicas, donde los recíprocos de las intersecciones que un plano determina con los ejes a_1,a_2,a_3 proporcionan los índices h, k e i mientras que el reciproco de la intersección con el eje c da el índice l.

Espaciado interplanar



En ocasiones es útil conocer la distancia interplanar de una misma familia de planos, esta distancia se halla así:

Estructuras cúbicas. $$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Estructura hexagonal. $$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2}$$

SISTEMAS DE DESLIZAMIENTO

Un sistema de deslizamiento es la combinación de un plano y una dirección que se halla sobre el plano a lo largo del cual se produce el deslizamiento.

El Mecanismo de deslizamiento puede definirse como el movimiento paralelo de dos regiones cristalinas adyacentes, una respecto a la otra, a través de algún plano (o planos).

Los cristales FCC poseen 12 sistemas de deslizamiento debido a que tienen cuatro grupos {**111**} y con tres direcciones <110> en cada una.

Estructura	*Dirección de Deslizamiento*	*Planos de Deslizamiento*	*Ejemplos*
FCC	<110>	{111}	Cu, Al, Ni, Pb, Au, Ag, Fe
BCC	<111>	{110}	Fe, W, Mo, Latón, Nb, Ta
BCC	<111>	{210}	Fe, Mo, W, Na
BCC	<111>	{321}	Fe, K
HCP	<1120>	(0001)	Cd, Zn, Mg, Ti, Be, Co
HCP	<1120>	{1010}	Ti, Mg, Zr, Be
HCP	<1120>	{1011}	Ti, Mg

Observaciones generales de gran importancia en sistemas de deslizamiento:

1. Las direcciones de deslizamiento se presentan siempre en la dirección de empaquetamiento compacto. Existen excepciones, por ejemplo, mercurio sólido.
2. El deslizamiento ocurre usualmente sobre la mayoría de los planos compactos. Esta observación esta relacionada con el hecho de que los planos empaquetados más densamente también son el grupo de planos (hkl) ocupados, que tienen el espaciamiento más amplio.
3. El deslizamiento se produce primero sobre el sistema de deslizamiento que tiene el mayor esfuerzo de corte a lo largo de su dirección de deslizamiento.

Definiciones

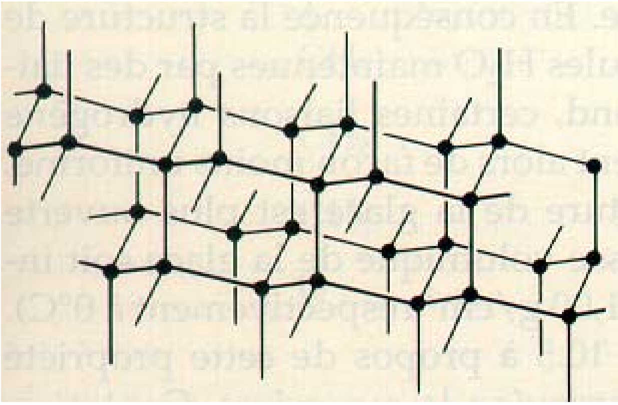
- **Polimorfismo**: fenómeno en el cual un sólido (metálico o no metálico) puede presentar más de una estructura cristalina, dependiendo de la temperatura y de la presión (por ejemplo, Al_2O_3 como alumina-α y alumina-γ).

- **Alotropía**: polimorfismo en elementos puros.

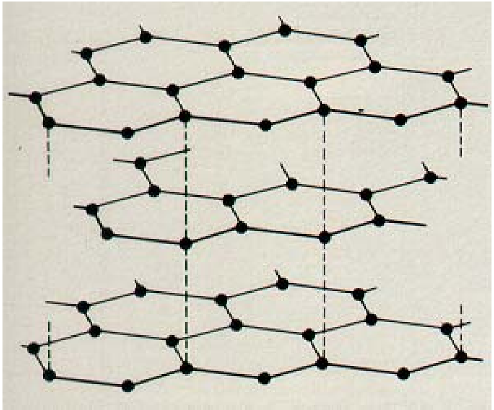
  ejemplo: el diamante y el grafito son constituídos por atómos de carbono organizados en diferentes estructuras cristalinas.

- **Anisotropía:** Cuando las propiedades de un material dependen de la direción en que son medidas.

- **Isotropía:** Cuando las propiedades de un material NO dependen de la direción en que son medidas.



Diamante



Grafito

Definiciones de densidad

1. Densidad volumétrica. Relación entre la masa de un cuerpo con respecto a su volumen. Basados en una celda unitaria, la densidad de un material puede ser hallada como:

$$\rho = \frac{\text{No átomos por celda x peso molecular}}{\text{volumen de la celda x No Avogradro}}$$

2. Densidad Planar. Relación entre el numero de átomos completos contenidos en un plano y el área del plano

$$\rho_p = \frac{\text{No átomos por plano cristalino}}{\text{área del plano}}$$

3. Densidad Lineal. Relación entre el numero de átomos completos contenidos en una cierta dirección y la longitud de la dirección

$$\rho_p = \frac{\text{No átomos contenidos en una dirección cristalina}}{\text{Longitud de la dirección}}$$

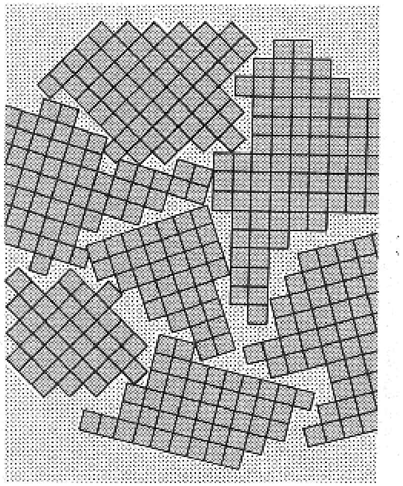
Materiales monocristalinos y policristalinos

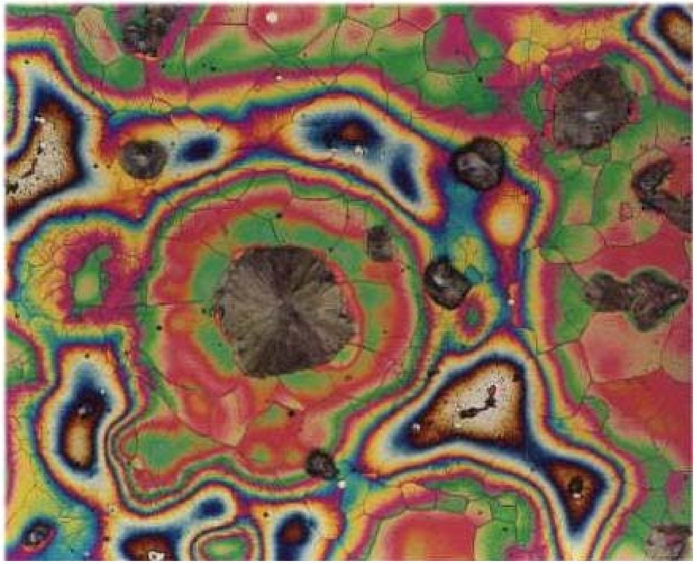
Materiales monocristalinos

- **Monocristalinos**: presentam la misma estructura cristalina en toda la extensión del material sin interrupciones.

Materiales policristalinos

- ***Policristalinos***: constituídos de varios cristales o granos.





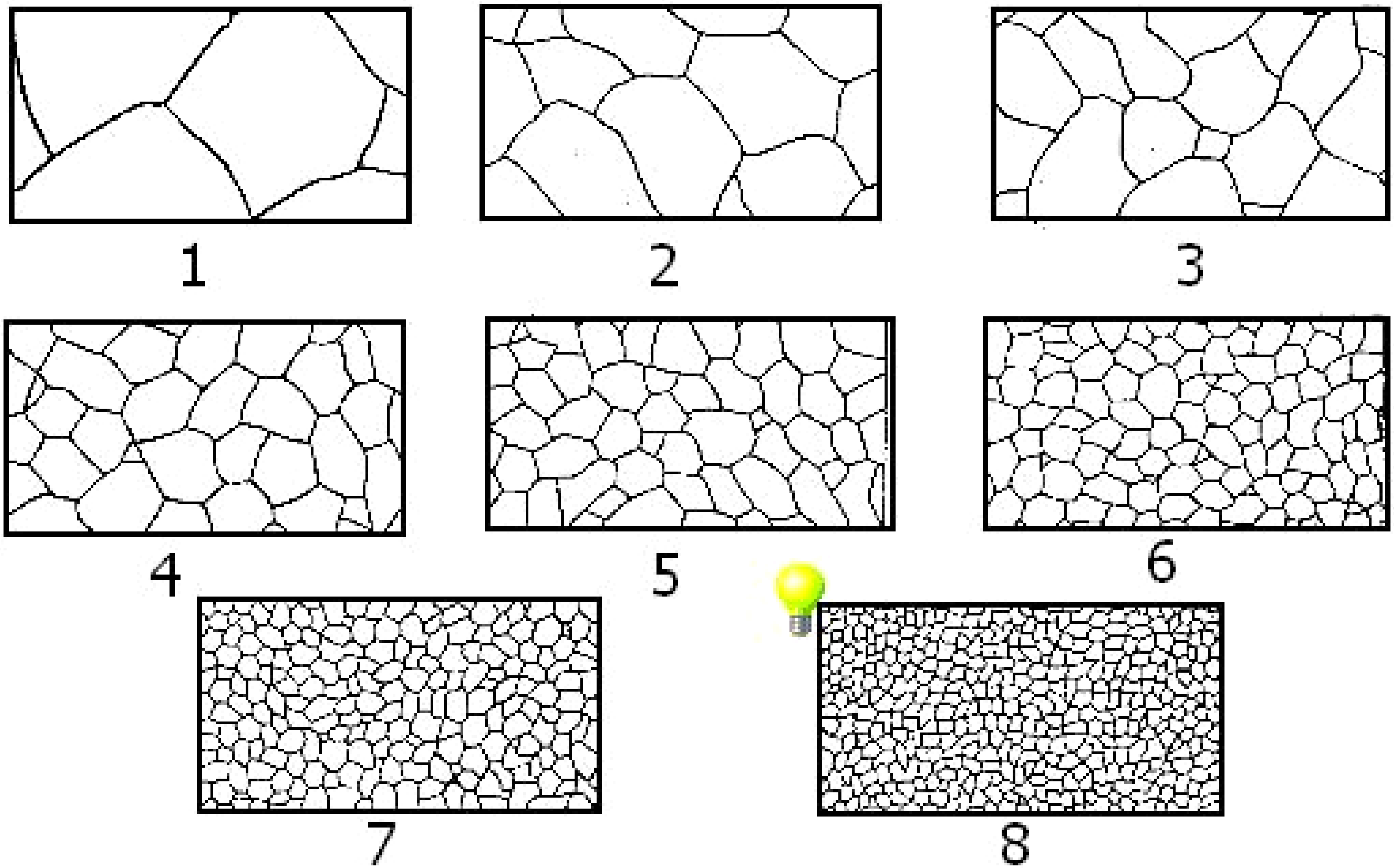
Material policristalino

Los ***límites de grano*** son regiones que separan cristales de diferentes orientaciones en un material policristalino.

Tamanho de Grão Austenítico

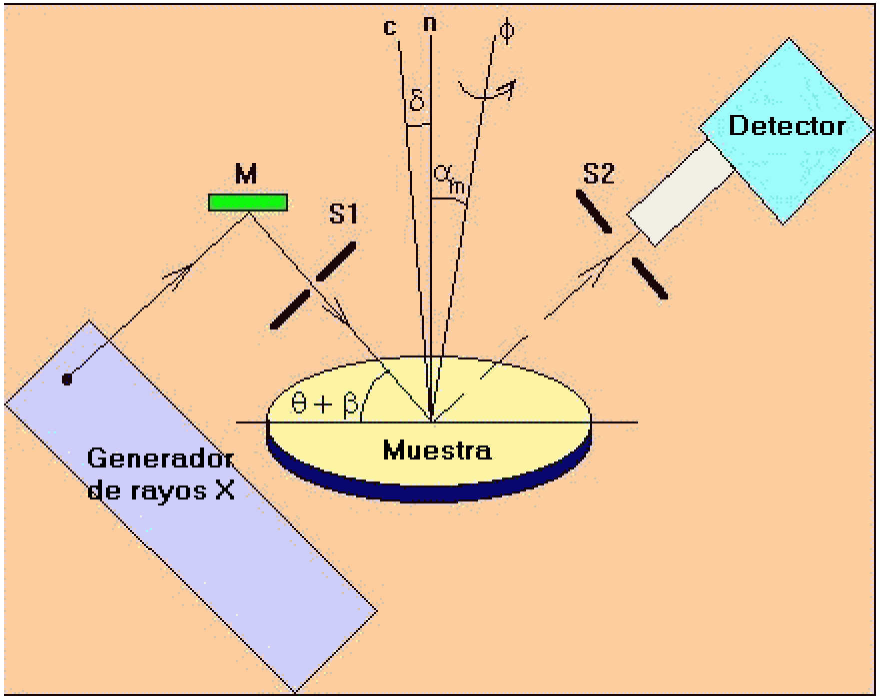
$$\sigma = \sigma_0 + \frac{k}{\sqrt{d}}$$

ASTM E-112

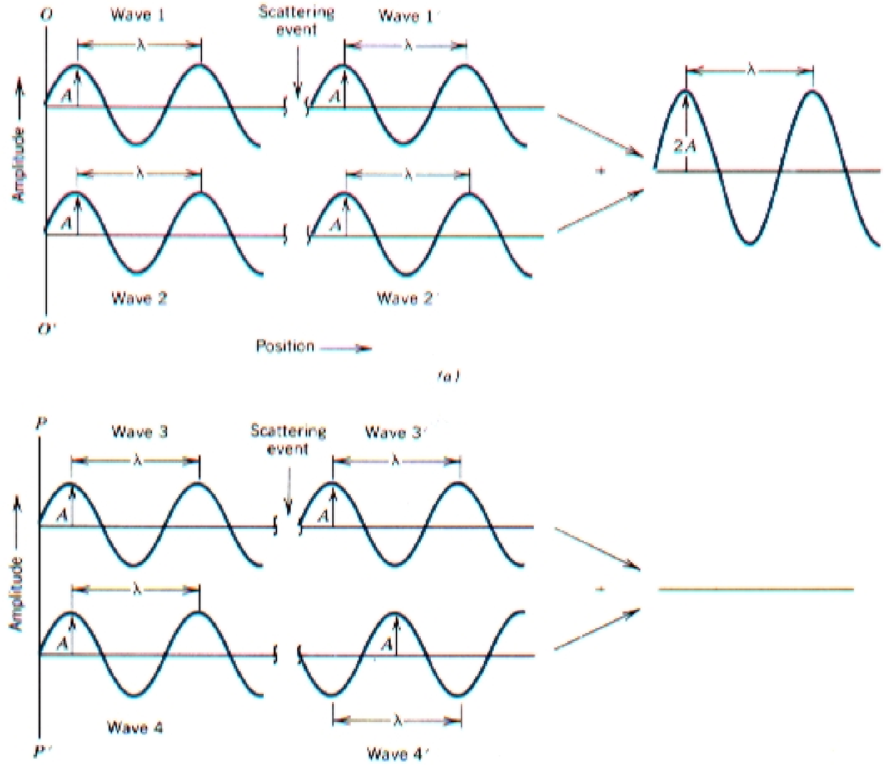


Difracción de rayos X

- El fenómeno de difración ocurre cuando una onda encuentra una serie de obstáculos espaciados regularmente, que: (1) son capaces de dispersar la onda y (2) el espaciado entre ellos es comparable en magnitud a la longitud de onda.



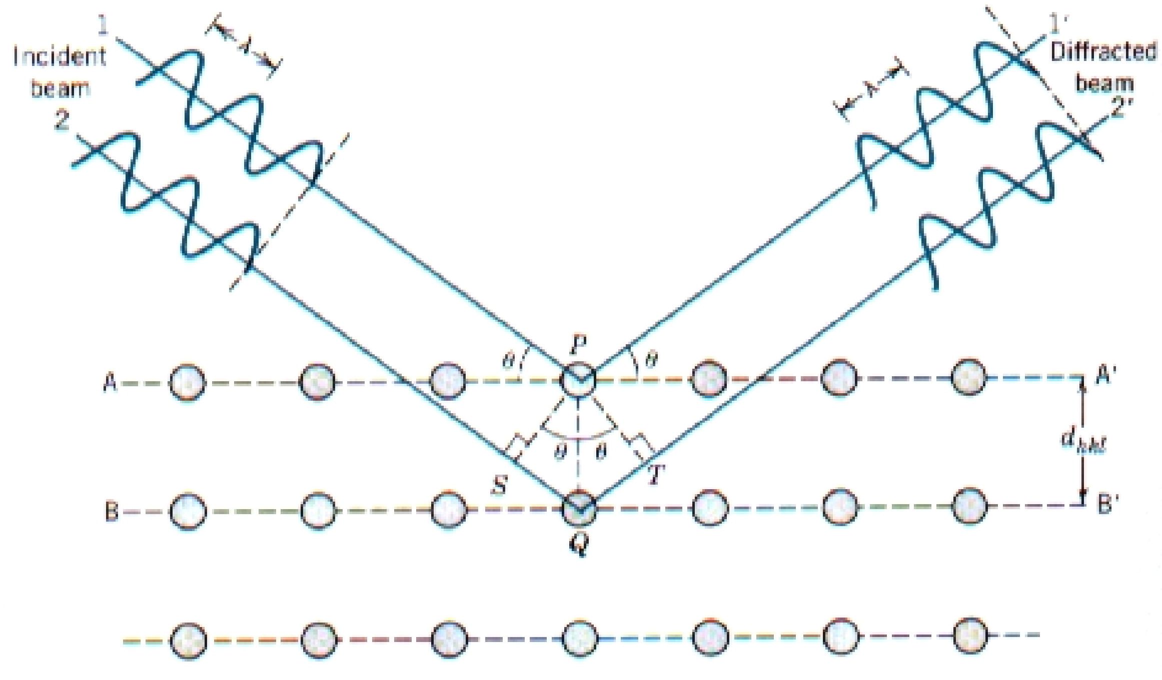
Difracción de rayos X



Interferencia construtiva

Interferencia destrutiva

Difracción de rayos X

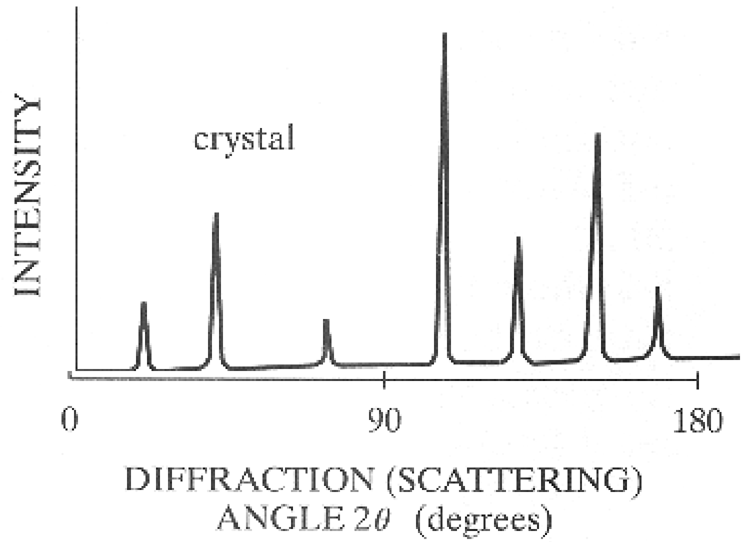


$$n\lambda = \overline{SQ} + \overline{QT}$$

$$n\lambda = d_{hkl}\,\mathrm{sen}\,\theta + d_{hkl}\,\mathrm{sen}\,\theta = 2d_{hkl}\,\mathrm{sen}\,\theta$$

$$n\lambda = 2d_{hkl}\,\mathrm{sen}\,\theta$$

(Ley de Bragg)



Difratograma esquemático de un sólido cristalino.

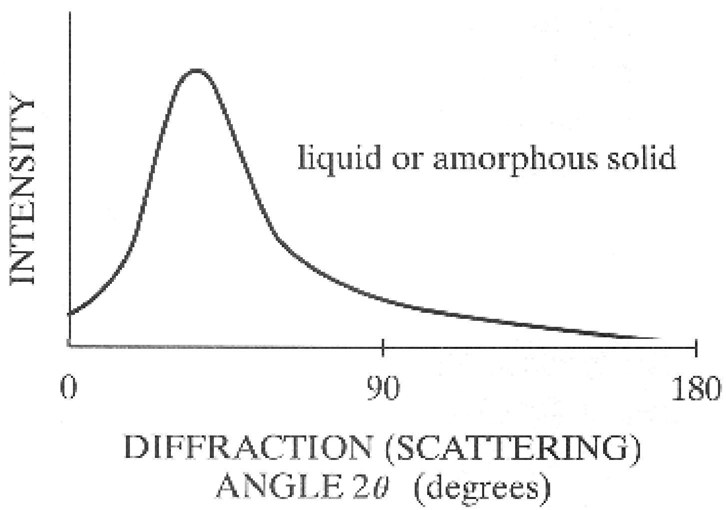


Gráfico de intensidad de rayos X en función de la variación de 2θ para un sólido amorfo o para un líquido.

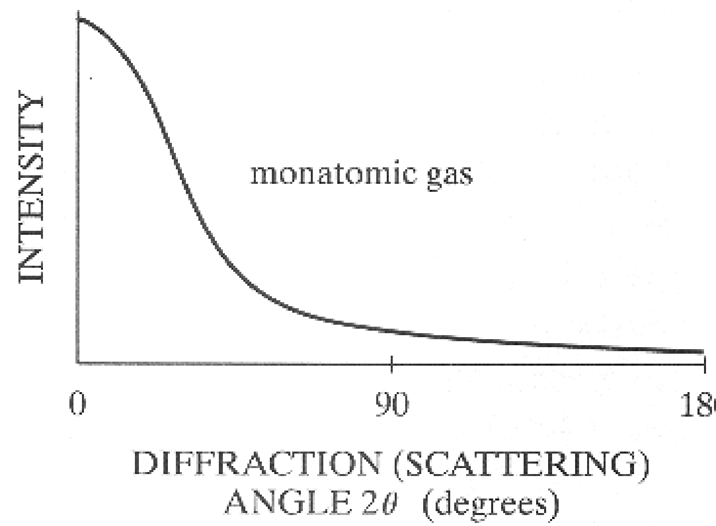


Gráfico de intensidade de rayos X en función de la variación de 2θ para un gas monoatómico.

Reglas para la determinación de los planos de difracción hkl en cristales cúbicos

Redes de Bravais	Reflexiones presentes	Reflexiones ausentes
BCC	(h+k+l)= pares	(h+k+l)= impares
CFC	(h+k+l) todas pares o todas impares	(h+k+l) no todas pares ni todas impares

$$\frac{\boldsymbol{sen}^2\theta_A}{\boldsymbol{sen}^2\theta_B} = \frac{\boldsymbol{h}_A^2 + \boldsymbol{k}_A^2 + \boldsymbol{k}_A^2}{\boldsymbol{h}_B^2 + \boldsymbol{k}_B^2 + \boldsymbol{k}_B^2}$$

Donde θ_A y θ_B son dos ángulos de difracción asociados con los planos principales de difracción $\{h_A k_A l_A\}$ y $\{h_B k_B l_B\}$ respectivamente

$$\frac{\boldsymbol{sen}^2\theta_A}{\boldsymbol{sen}^2\theta_B} = 0.5$$ BCC

$$\frac{\boldsymbol{sen}^2\theta_A}{\boldsymbol{sen}^2\theta_B} = 0.75$$ CFC