

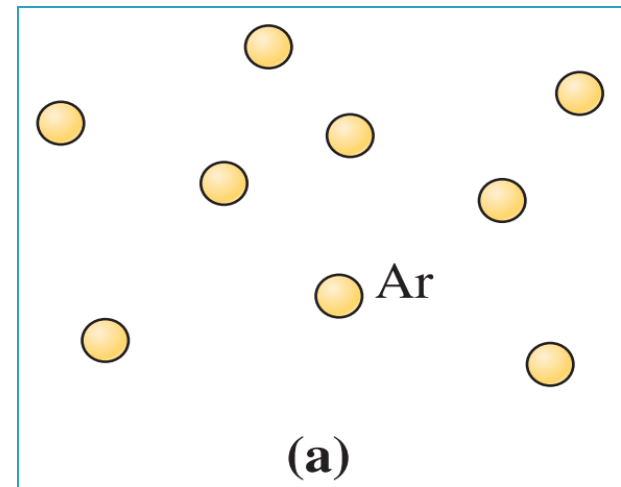
CIENCIA E INGENIERÍA DE LOS MATERIALES

ARREGLOS ATÓMICOS E IÓNICOS

En los distintos estados de la materia podemos encontrar 4 clases de arreglos atómicos o iónicos:

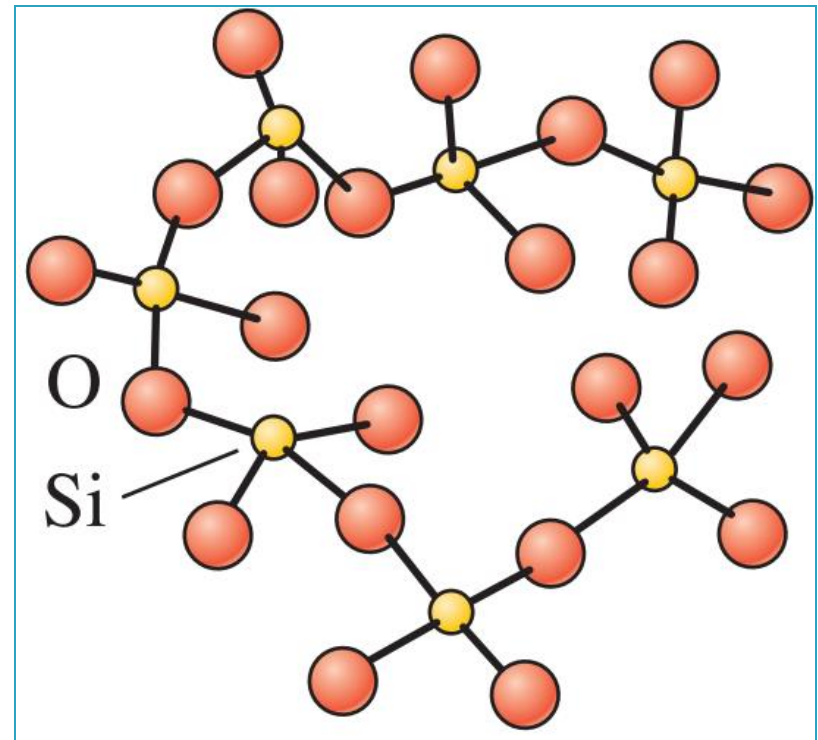
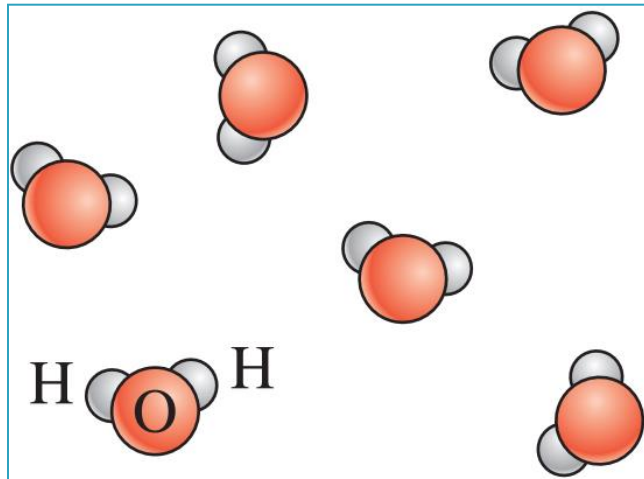
- Sin orden
- Orden de corto alcance
- Orden de largo alcance
- Cristales líquidos

Sin Orden: Los átomos o iones no tienen arreglo ordenado. Estos materiales llenan todo el espacio disponible que tienen. Ejemplo: Los gases monoatómicos como el Argón (Ar).



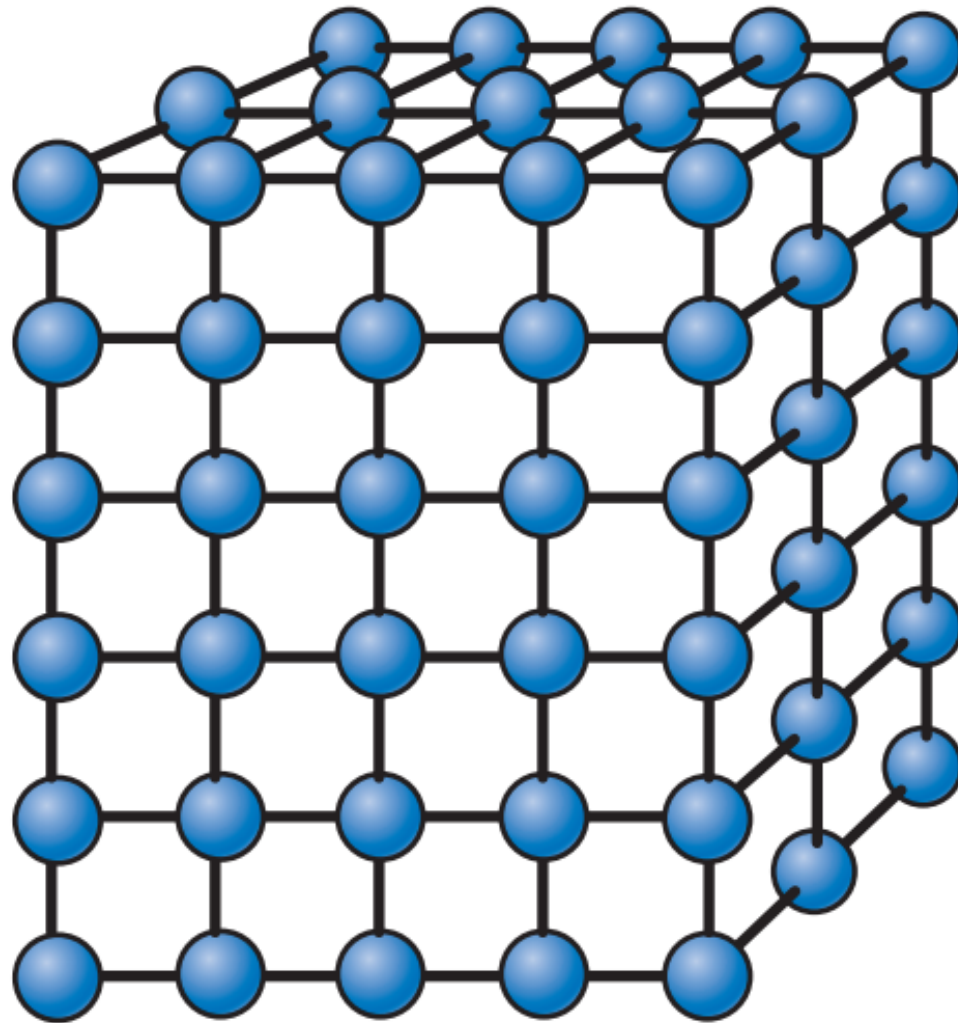
Orden de corto alcance: Esto ocurre si el arreglo espacial de los átomos solo se extiende a su vecindad inmediata.

- Vapor de H₂O
- Vidrios inorgánicos



Orden de largo alcance: En este ordenamiento encontramos metales, aleaciones, algunos cerámicos, semiconductores y algunos polímeros donde presentan estructura cristalina donde los átomos o iones muestran orden de largo alcance.

El arreglo atómico espacial abarca escalas de longitud mucho mayores de 100nm. Los átomos o iones en estos materiales forman un patrón regular y repetitivo, semejante a una red de tres dimensiones.



Cristales líquidos

Son materiales poliméricos que tienen un orden especial. En cierto estado los polímeros de cristal líquido se comporta como materiales amorfos (semejantes a líquidos). Sin embargo, cuando se les aplica un estímulo externo (campo eléctrico o un cambio de temperatura) algunas moléculas de polímero se alinean y forman pequeñas regiones que son cristalinas.

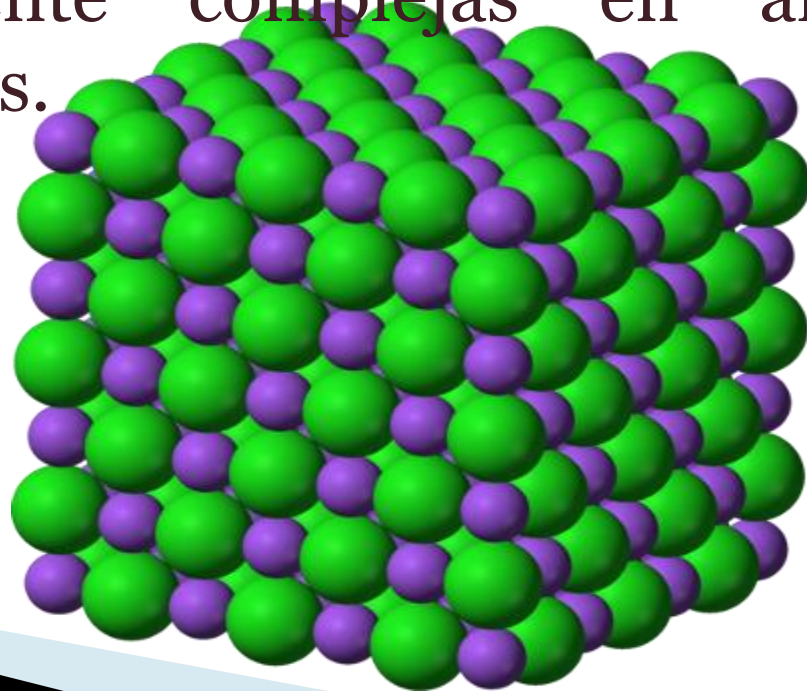
Aplicación: las pantallas de cristal líquido de los televisores LCD.

SoloStocks



ESTRUCTURA CRISTALINA

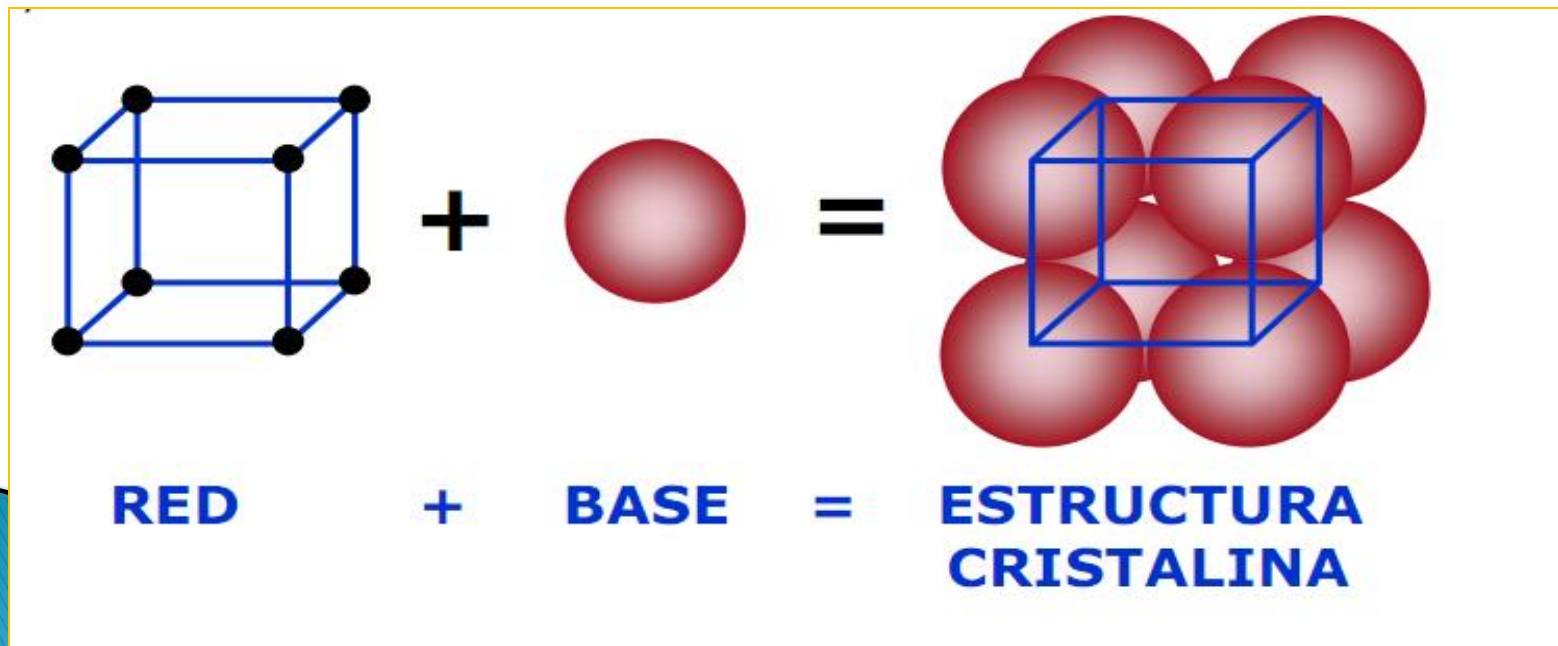
La forma en que están ordenados los átomos constituyen la estructura cristalina, cuya principal característica es ser periódica y repetitiva. La mayoría de los materiales son cristalinos, con estructuras que varían desde sencillas en metales hasta extremadamente complejas en algunos cerámicos y polímeros.



¿Como describir la estructura cristalina?

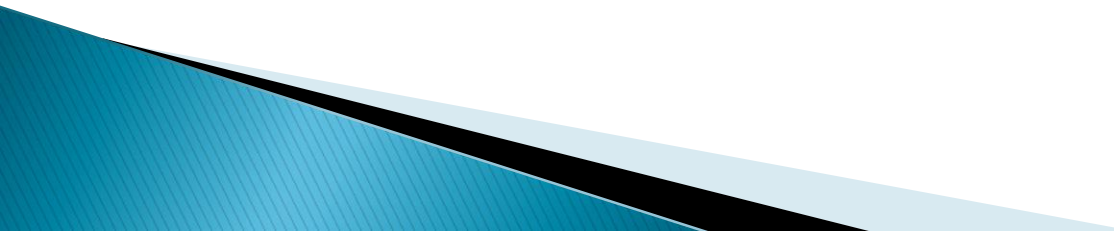
Consideramos los átomos (o iones) como esferas sólidas de diámetro definido: MODELO ATÓMICO DE ESFERAS RÍGIDAS.

Se toma un conjunto de puntos en el espacio tridimensional, denominado red cristalina, que define la disposición ordenada del sólido cristalino.

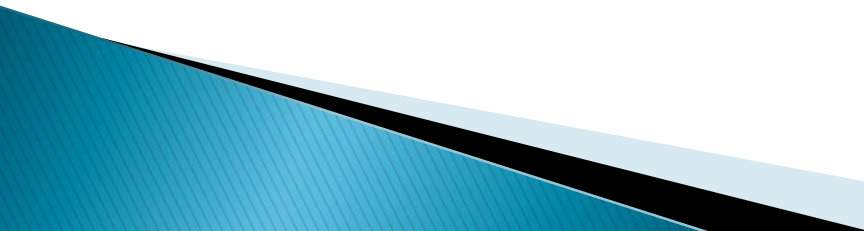


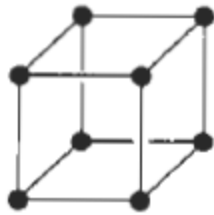
Red: Constituye el edificio o esqueleto sobre el que se construye la estructura cristalina, situando átomos o grupos de ellos en los puntos de red o cerca de ellos.

Celda Unitaria: Es la subdivisión de una red que sigue conservando las características generales de toda la red. Al apilar celdas unitarias idénticas se puede construir toda la red.

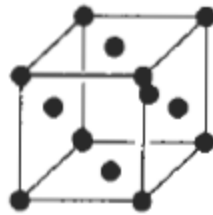


A. J. Bravais
demostró que con 14
celdas unitarias
estándar se
pueden describir
todas las redes
posibles.





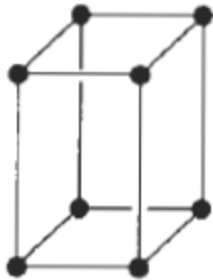
Cúbica simple



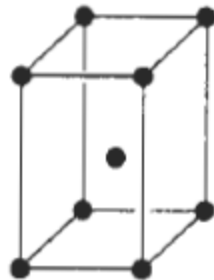
Cúbica centrada
en las caras



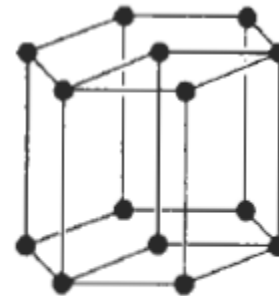
Cúbica centrada
en el cuerpo



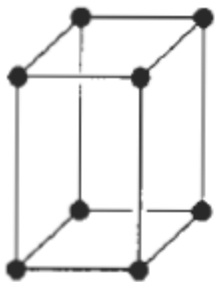
Tetragonal
simple



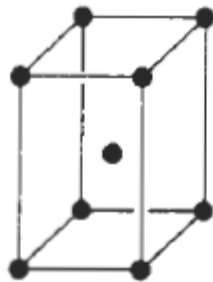
Tetragonal centrada
en el cuerpo



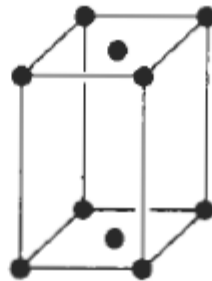
Hexagonal



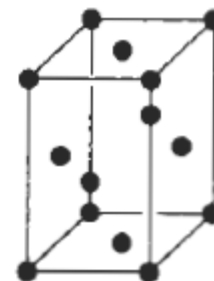
Ortorrónica simple



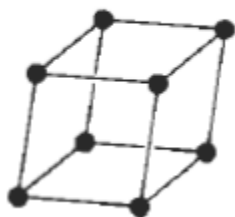
Ortorrónica centrada en el cuerpo



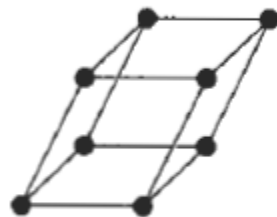
Ortorrónica centrada en las bases



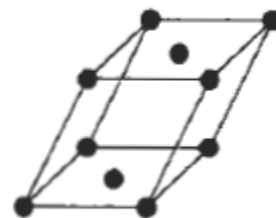
Ortorrónica centrada en las caras



Romboédrica



Monoclínica simple



Monoclínica centrada en las bases



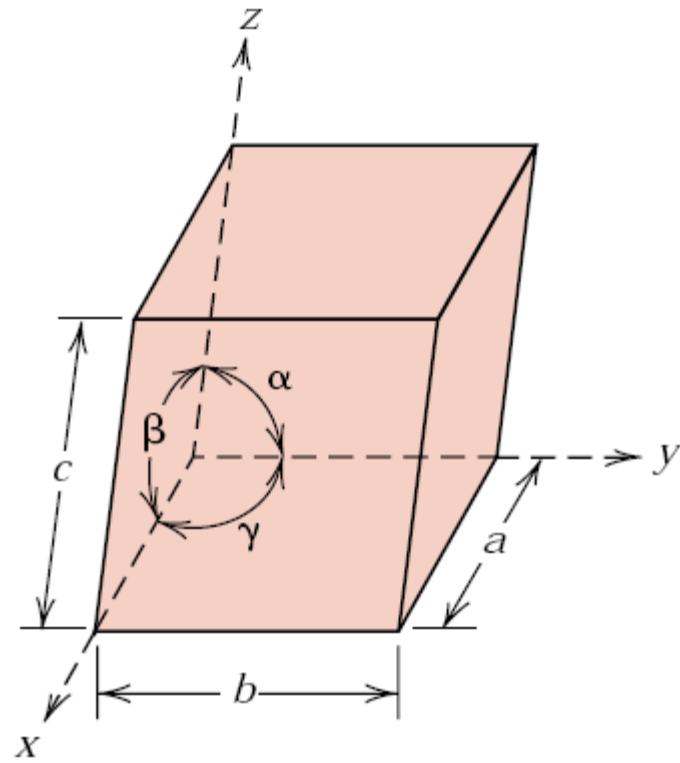
Triclínica

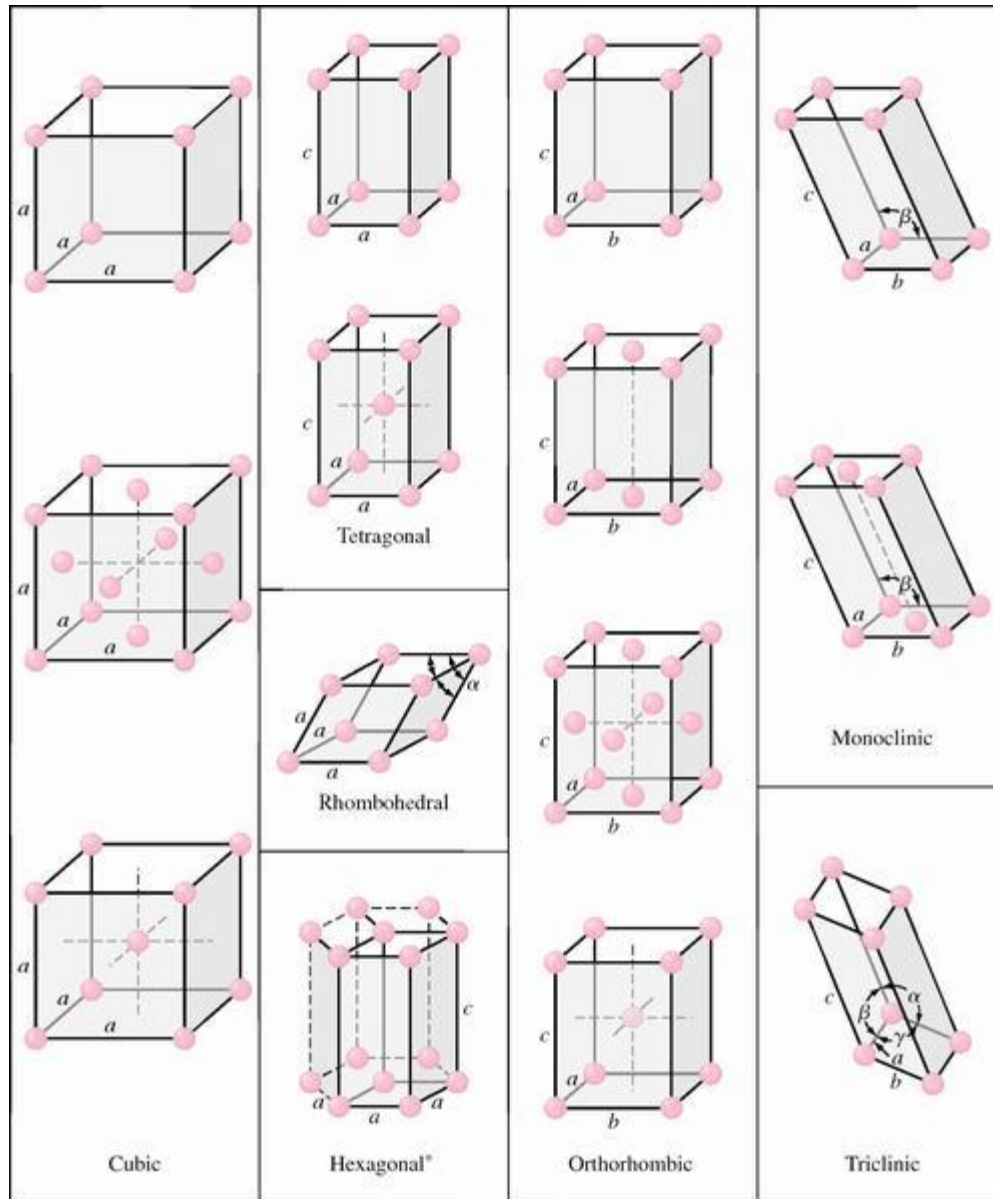
Parámetros de red: Describen el tamaño y la forma de la celda unitaria, incluye las dimensiones de las aristas de la celda unitaria y los ángulos entre estos.

En un sistema cristalino cúbico, sólo se necesita la longitud de uno de los lados del cubo es el parámetro de red (se suele llamar a_0). La longitud se expresa en nanómetros (nm) o en unidades de angstrom (\AA).

$$1 \text{ nanometer (nm)} = 10^{-9} \text{ m} = 10^{-7} \text{ cm} = 10 \text{ \AA}$$

$$1 \text{ angstrom (\AA)} = 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m} = 10^{-8} \text{ cm}$$

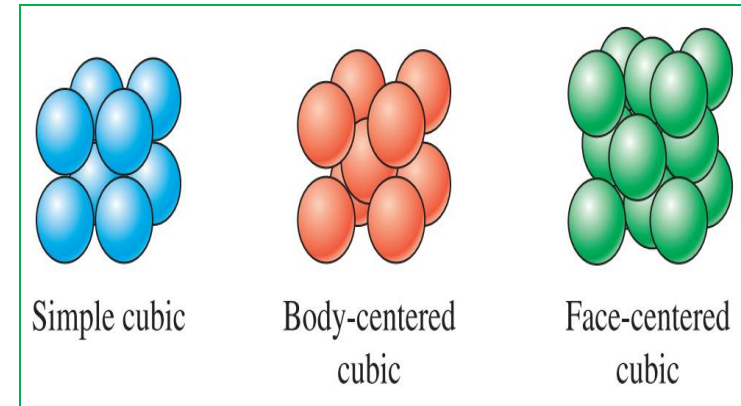
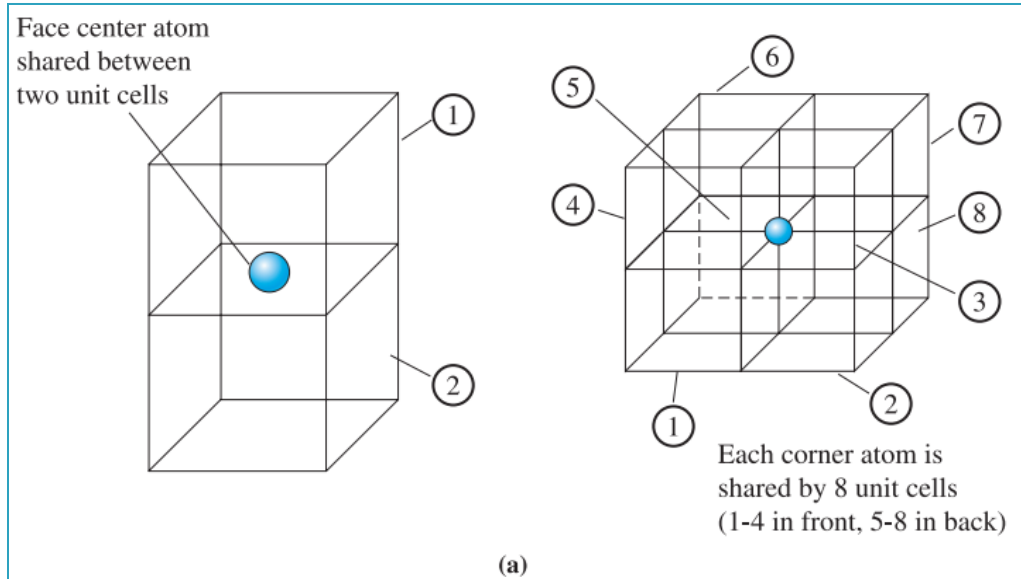




Parámetros de Red

Sistema Cristalino	Ejes	Ángulos entre ejes	Volumen
Cúbica	$a = b = c$	90° los tres	a^3
Tetragonal	$a = b \neq c$	90° los tres	a^2c
Ortorrómbica	$a \neq b \neq c$	90° los tres	abc
Hexagonal	$a = b \neq c$	Dos de 90° y uno de 120°	$0.866a^2c$
Romboédrica o Trigonal	$a = b = c$	Diferentes a 90° (todos iguales)	$a^3\sqrt{1-3\cos^2\alpha+2\cos^3\alpha}$
Monoclínica	$a \neq b \neq c$	Dos de 90° y uno diferente β	$abc \operatorname{sen}\beta$
Triclínica	$a \neq b \neq c$	Diferentes a 90° (todos diferentes)	$abc\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$

Cantidad de átomos por celda unitaria



El átomo que esta en un punto de red se puede considerar como compartido entre celdas unitarias:

Los vértices: $1/8$ de un punto

Las caras: $1/2$ de un punto

La centrada en el cuerpo: 1 punto completo

Example 3-1

Determining the Number of Lattice Points in Cubic Crystal Systems

Determine the number of lattice points per cell in the cubic crystal systems. If there is only one atom located at each lattice point, calculate the number of atoms per unit cell.

SOLUTION

In the SC unit cell, lattice points are located only at the corners of the cube:

$$\frac{\text{lattice points}}{\text{unit cell}} = (8 \text{ corners})\left(\frac{1}{8}\right) = 1$$

In BCC unit cells, lattice points are located at the corners and the center of the cube:

$$\frac{\text{lattice points}}{\text{unit cell}} = (8 \text{ corners})\left(\frac{1}{8}\right) + (1 \text{ body-center})(1) = 2$$

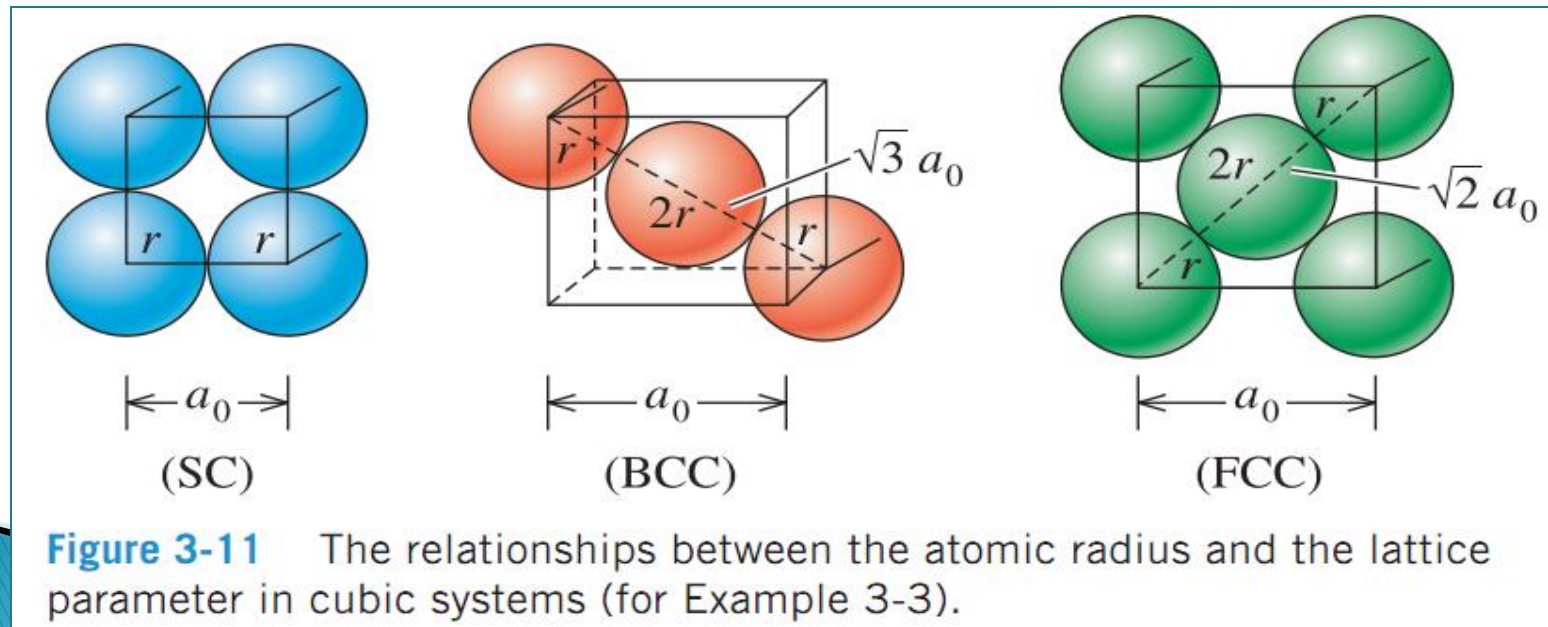
In FCC unit cells, lattice points are located at the corners and faces of the cube:

$$\frac{\text{lattice points}}{\text{unit cell}} = (8 \text{ corners})\left(\frac{1}{8}\right) + (6 \text{ faces})\left(\frac{1}{2}\right) = 4$$

Since we are assuming there is only one atom located at each lattice point, the number of atoms per unit cell would be 1, 2, and 4, for the simple cubic, body-centered cubic, and face-centered cubic unit cells, respectively.

Radio atómico Vs Parámetros de red:

En la celda unitaria, las direcciones a lo largo de las cuales los átomos están en contacto continuo son direcciones de empaquetamiento compacto o “direcciones compactas”.



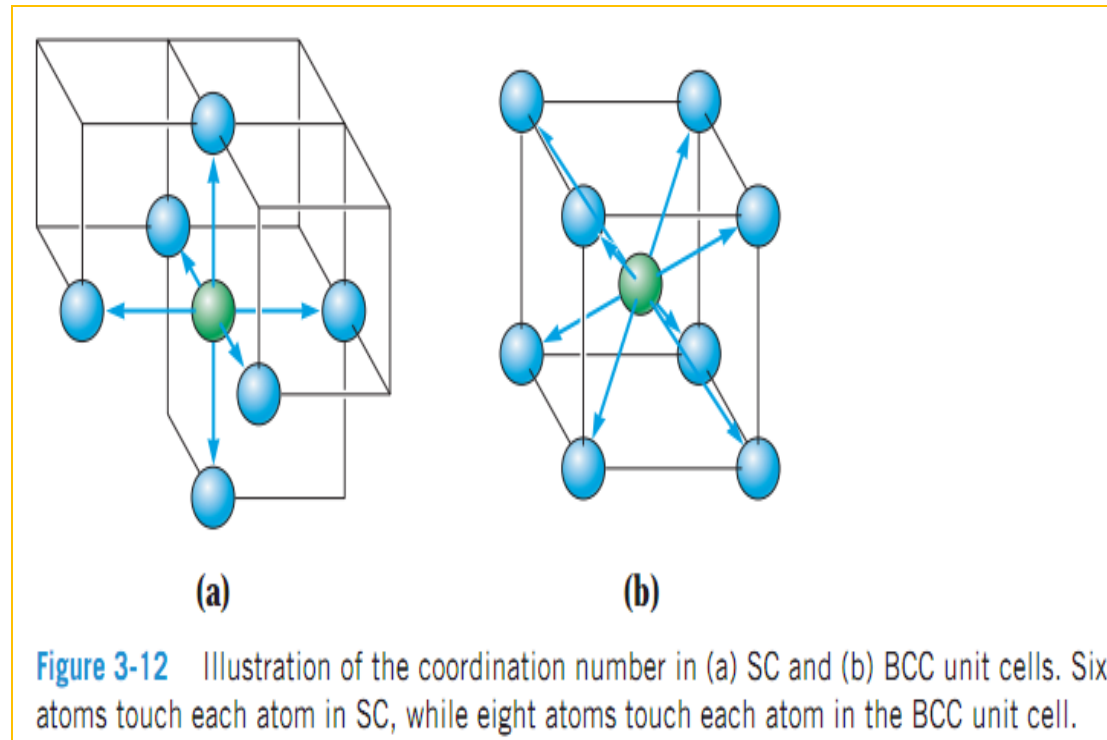
Número de coordinación: Es la cantidad de átomos que tocan a determinado átomo o sea la cantidad de vecinos más cercanos a este átomo en particular.
Es una medida de qué tan compacto y eficiente es el empaquetamiento de los átomos.

Estructura SC

coordinación 6

Estructura BCC

coordinación 8



Factor de empaquetamiento

- Es la fracción de espacio ocupada por los átomos, suponiendo que son esferas duras que se encuentran en contacto con su vecino más cercano
- Factor de empaquetamiento

$$FE = \frac{\text{volumen de átomos}}{\text{volumen de celda unitaria}}$$

$$FE = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{volumen de átomos})}{\text{volumen de celda unitaria}}$$

Cálculo del factor:

- Estructura Cúbica Simple ($a = 2r$)

$$FE = \frac{(1 \text{ átomo/celda}) (4\pi r^3/3)}{a^3} = \frac{(4\pi r^3/3)}{8r^3} = \frac{\pi}{6}$$

$$FE = 0.52 = 52\% \text{ empaquetamiento}$$

Porcentaje de la celda ocupada por los átomos

Estructuras principales

Estructura	a_0 en función de r	Átomos por celda	Número de coordinación	Factor de empaquetamiento	Ejemplos
Cúbica Simple (CS)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	Polonio, $Mn\alpha$
Cúbica centrada en el cuerpo (BCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, Ti, W, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Zr, Cr
Cúbica centrada en las caras (FCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Fe, Cu, Au, Pt, Ag, Pb, Ni, Al
Hexagonal compacta (HCP)	$a_0 = 2r$ $c_0 =$ $1.633a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr, Cd

Densidad teórica ρ

- La densidad teórica de un material se puede calcular con las propiedades de su estructura cristalina.

$$\text{Densidad} = \frac{\text{masa átomos}}{\text{volumen celda}}$$

$$\text{Densidad } \rho = \frac{(\# \text{ átomos / celda})(\text{masa atómica})}{(\text{vol celda unitaria})(\# \text{ avogadro})}$$

Cálculo de la densidad

- Determine la densidad del hierro (BCC),
parámetro de red: $a = 0.2866\text{nm}$

$$\text{átomos/celda} = 2$$

$$\text{masa atómica} = 55.847\text{gr/mol}$$

$$\text{volumen} = a^3 = (2.866 \times 10^{-8}\text{cm})^3 = 23.54 \times 10^{-24}\text{cm}^3/\text{celda}$$

$$\rho = \frac{(2)(55.847)}{(23.54 \times 10^{-24})(6.02 \times 10^{23})} = 7.882\text{g/cm}^3$$

Transformaciones alotrópicas o polimorfas

Los materiales que pueden tener más de una estructura cristalina se llaman alotrópicos, polimorfos o polimórficos.

Alotropía: suele reservarse para este comportamiento en los elementos puros.

Polimorfismo: se usa para compuestos.

A bajas temperaturas, el hierro tiene estructura BCC, pero a mayores temperaturas se transforma en un estructura FCC. Estas transformaciones dan como resultado cambios en las propiedades de los materiales y son la base del tratamiento térmico de los aceros y muchas otras aleaciones.

Example 3-6

Calculating Volume Changes in Polymorphs of Zirconia

Calculate the percent volume change as zirconia transforms from a tetragonal to monoclinic structure [9]. The lattice constants for the monoclinic unit cells are $a = 5.156$, $b = 5.191$, and $c = 5.304 \text{ \AA}$, respectively. The angle β for the monoclinic unit cell is 98.9° . The lattice constants for the tetragonal unit cell are $a = 5.094$ and $c = 5.304 \text{ \AA}$. [10] Does the zirconia expand or contract during this transformation? What is the implication of this transformation on the mechanical properties of zirconia ceramics?

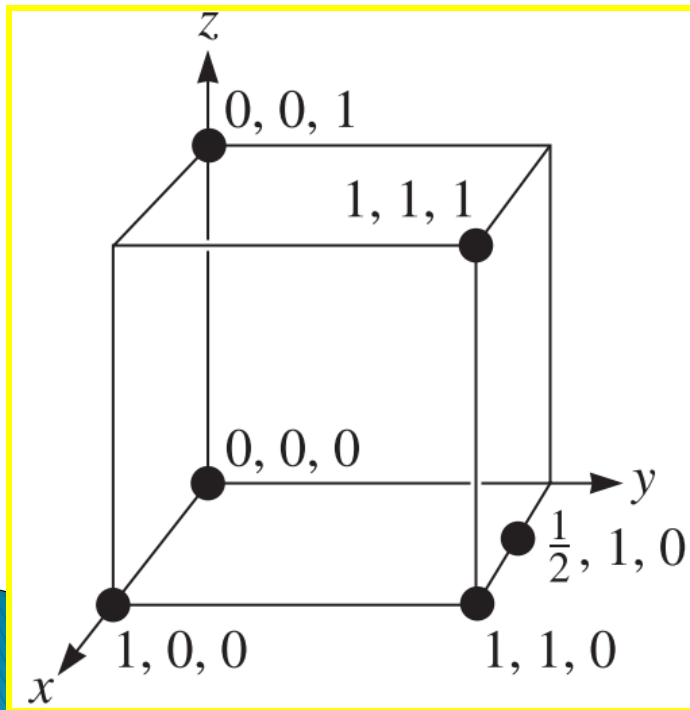
EJEMPLO 3-6

Diseño de un sensor para medir cambio de volumen

Para estudiar el comportamiento del hierro a temperaturas elevadas, nos gustaría diseñar un instrumento que pueda detectar (con exactitud de 1%) el cambio de volumen de un cubo de hierro de 1 cm^3 cuando se calienta pasando por su temperatura de transformación polimórfica. A 911°C , el hierro es BCC con un parámetro de red de 0.2863 nm . A 913°C , es FCC, con parámetro de red de 0.3591 nm . Determine la exactitud que se requiere en el instrumento medidor.

Puntos, direcciones y planos en la celda unitaria

Coordenadas de puntos. Se puede localizar ciertos puntos en la red o celda unitaria, como por ejemplo las posiciones de los átomos, definiendo el sistema de coordenadas de mano derecha de la figura.



La distancia se mide en términos de la cantidad de parámetros de red que hay que recorrer en cada una de las direcciones x, y, z para ir del origen al punto en cuestión.

Las coordenadas se escriben como las tres distancias, y los números se separan con comas.

Direcciones en la celda unitaria. Hay ciertas direcciones en la celda unitaria que tienen interés especial. Los índices de Miller de las direcciones son la notación abreviada para describir esas direcciones.

El procedimiento para determinar los índices de Miller de las direcciones es la siguiente:

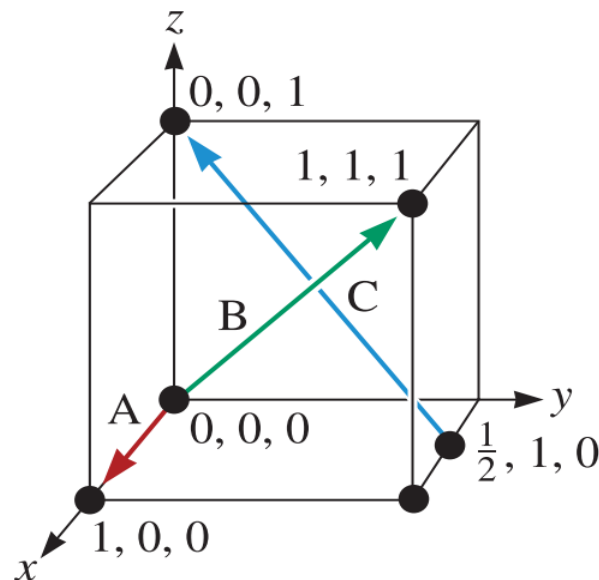
- 1) Usar un sistema coordinado de mano derecha y determinar las coordenadas de dos puntos que estén en la dirección.
- 2) Restar las coordenadas del punto “cola” de las coordenadas del punto “cabeza” para obtener la cantidad de parámetros de red recorridos en la dirección de cada eje del sistema de coordenadas.

- 3) Eliminar las fracciones y/o reducir los resultados obtenidos de la resta, hasta los enteros mínimos.
- 4) Encerrar los números entre corchetes []. Si se produce un signo negativo, representarlo con una barra o raya sobre el número.

Example 3-7

Determining Miller Indices of Directions

Determine the Miller indices of directions *A*, *B*, and *C* in Figure 3-15.



Importancia de las direcciones cristalográficas

Se usan para indicar determinada orientación de un solo cristal o de un material policristalino.

Por ejemplo: Los metales se deforman con más facilidad en direcciones a lo largo de las cuales los átomos están en contacto más estrecho.

Planos en la celda unitaria

Ciertos planos de átomos también tienen importancia especial .

Por ejemplo: Los metales se deforman a lo largo de los planos de átomos que estén empacados de manera más compacta.

Para identificar estos planos de importancia, se usan índices de Miller, como notación abreviada, como se observa en el siguiente procedimiento.

- 1) Identificar los puntos en donde el plano cruza los ejes x, y, z en función de los parámetros de red. Si el plano pasa por el origen, hay que mover el origen del sistema de coordenadas.
- 2) Sacar los recíprocos de esas intersecciones
- 3) Simplificar fracciones, pero no reducir a enteros mínimos
- 4) Encerrar entre paréntesis $()$ los números que resulten. De nuevo, los números negativos se deben escribir con una raya sobre ellos.

Example 3-8

Determining Miller Indices of Planes

Determine the Miller indices of planes *A*, *B*, and *C* in Figure 3-18.

