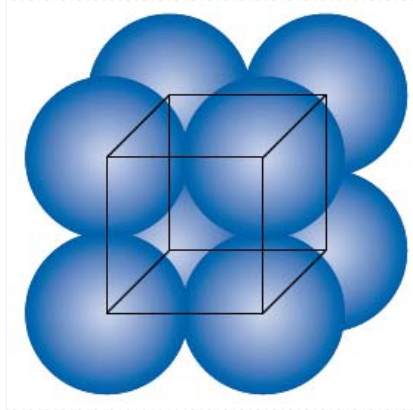


2. ESTRUCTURA DE LOS SÓLIDOS CRISTALINOS



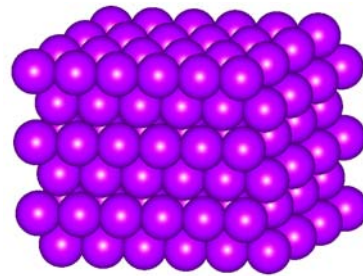
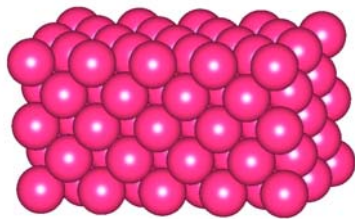
MATERIALES
13/14

ÍNDICE

1. CONCEPTOS GENERALES
2. CELDILLA CRISTALINA
3. SISTEMAS CRISTALINOS. REDES DE BRAVAIS
4. DENSIDAD Y FACTOR DE EMPAQUETAMIENTO
5. ESTRUCTURAS CRISTALINAS EN METALES , BCC, FCC, HCP
6. DIRECCIONES Y PLANOS CRISTALOGRAFICOS. ÍNDICES DE MILLER
7. POLIMORFISMO Y ALOTROPÍA
8. ANISOTROPÍA

1. Conceptos generales

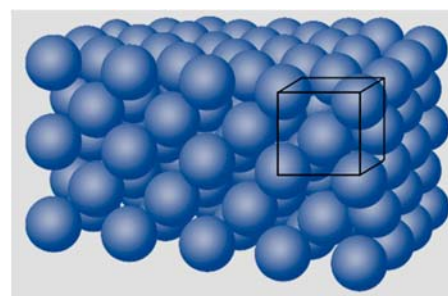
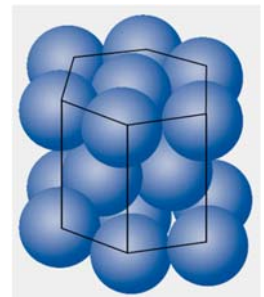
- Estructura de los materiales → **disposición adoptada por los átomos**
 - Cristalinidad (celdilla unidad)
 - tres estructuras cristalinas más frecuentes
 - planos y direcciones cristalográficas
 - No cristalinidad



3

1. Conceptos generales

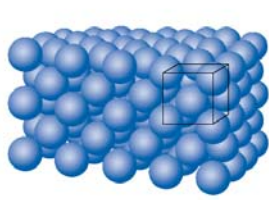
- **Material cristalino** = los átomos en disposición repetida o periódica
 - orden de largo alcance
 - cada átomo está enlazado con el más próximo
- **Propiedades** = f(estructura cristalina, ordenación espacial)
- **Complejidad**: metales < cerámicos, poliméricos
 - Metales (tres tipos de estructuras cristalinas)
 - Cerámicas (amplia variedad de estructuras)
 - Vidrio (amorfo)
 - Polímeros (cristalinos y amorfos)



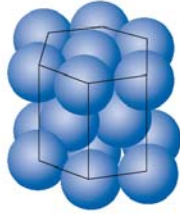
4

1. Conceptos generales

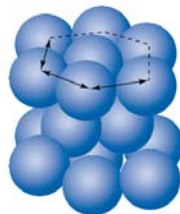
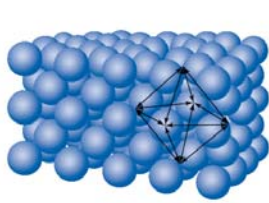
- Ductilidad → deformación mecánica → planos y direcciones de ↑ densidad atómica



Al (FCC)

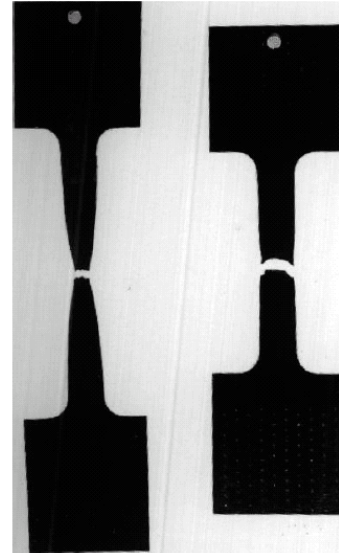


Mg (HCP)



5

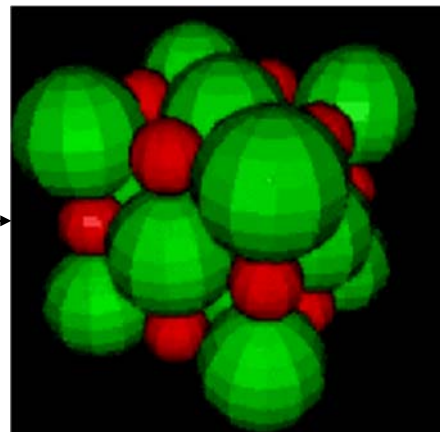
(12) direcciones ↑ densidad (3)



Ductilidad Fragilidad

1. Conceptos generales

En el modelo atómico se consideran los átomos como esferas rígidas



6

1. Conceptos generales

Número de coordinación:

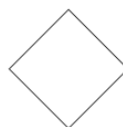
- Número de iones adyacentes que rodean a un determinado ión o átomo de referencia
- nº de coordinación más estable para una determinada configuración (dos, tres, cuatro, seis, ocho o doce) = f (r/R de los dos iones de carga opuesta)

Coordination number	Radius ratio, r/R	Coordination geometry
2	$0 < \frac{r}{R} < 0.155$	
3	$0.155 \leq \frac{r}{R} < 0.225$	
4	$0.225 \leq \frac{r}{R} < 0.414$	
6	$0.414 \leq \frac{r}{R} < 0.732$	
8	$0.732 \leq \frac{r}{R} < 1$	
12	1	
		HCP FCC

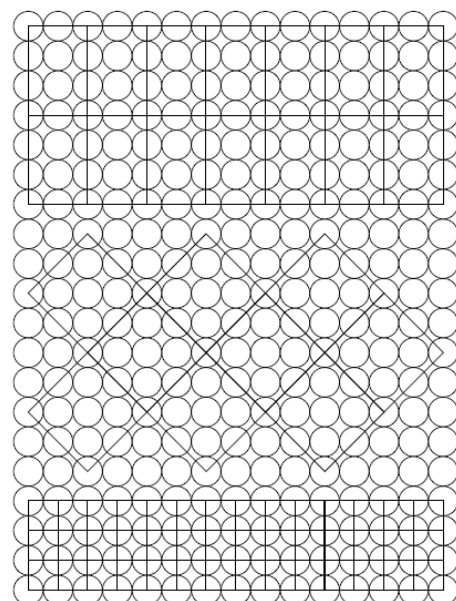
7

2. Celdilla unidad

- **Celdilla unidad:** la entidad más pequeña, sencilla de estructura cristalina. Describe la estructura.
 - paralelepípedos o prismas
 - representa la simetría de la estructura
 - Geometría
 - posición de los átomos

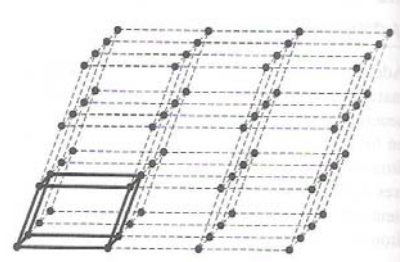
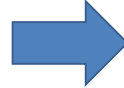
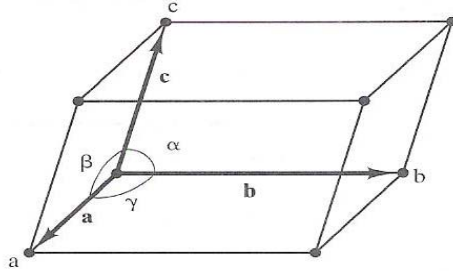


Unit cell



2. Celdilla unidad

- **Celdilla unidad:** la longitud de sus aristas, y los ángulos entre los ejes cristalográficos: **PARÁMETROS DE RED**
- **Parámetros de red:**
 - Longitud de las aristas: a, b, c
 - Ángulos entre ejes: α, β, γ



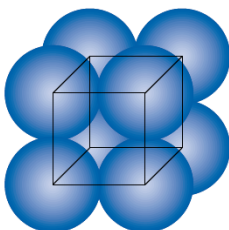
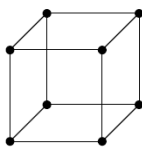
- Todas las estructuras se reducen a un número pequeño de geometrías:
 - 7 celdas unidad (**SISTEMAS CRISTALINOS**)
 - 14 agrupación de los átomos, puntos reticulares (**REDES DE BRAVAIS**)

9

3. Sistemas cristalinos. Redes de Bravais

• 7 SISTEMAS CRISTALINOS

Sitúo átomos en los puntos reticulares



Red cúbica simple

System	Axial lengths and angles ^a	Unit cell geometry
Cubic	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Orthorhombic	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Rhombohedral	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Hexagonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Monoclinic	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Triclinic	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

10

3. Sistemas cristalinos. Redes de Bravais

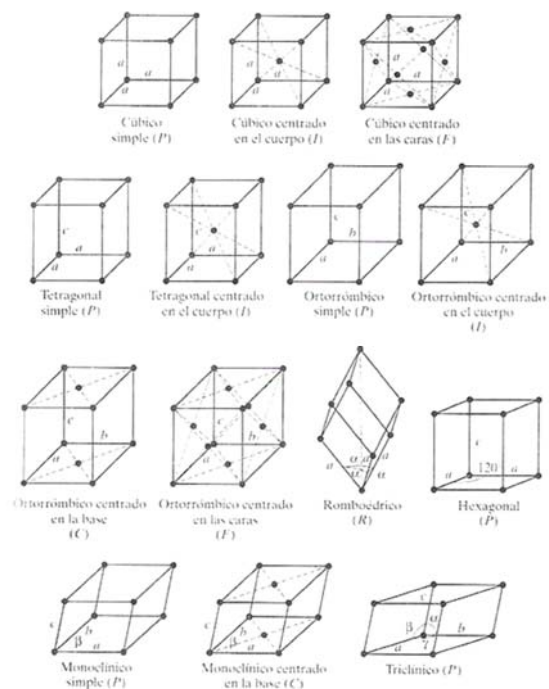
14 REDES CRISTALINAS (de Bravais)

- Debido a simetría y energía, solo unas configuraciones de puntos en una red reticular cristalina.

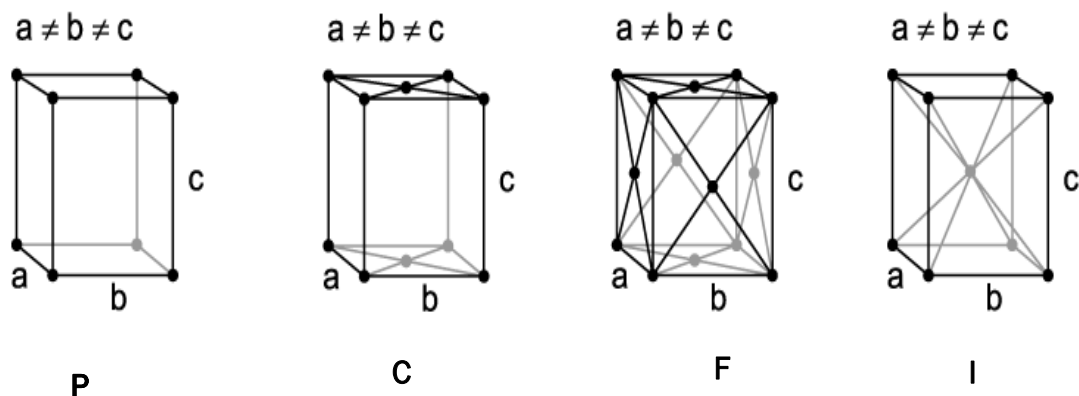
P: Celda primitiva → la configuración se dispone sólo en los vértices del paralelepípedo.

F: Celda centrada en las caras → la configuración se dispone en las caras y en los vértices. Si sólo tienen puntos reticulares en las bases se designa con C.

I: Celda centrada en el cuerpo → la configuración se dispone en el centro de la celda y en los vértices.



3. Sistemas cristalinos. Redes de Bravais



3. Sistemas cristalinos. Redes de Bravais

Sistema	Vectores sist Cristalino	Ángulos	Redes de Bravais
Cúbico	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	• Simple (P) • Centrada en el cuerpo (I) • Centrada en las caras (F)
Tetragonal	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	• Simple (P) • Centrado en el cuerpo
Ortorrómbico	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	• Simple (P) • Centrado en el cuerpo (I) • Centrado en la base (C) • Centrado en las caras (F)
Romboédrico	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	• Simple (P)
Hexagonal	$a=b \neq c$	$\alpha=\gamma=90^\circ$ $\beta=120^\circ$	• Simple (P)
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\gamma=90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$	• Simple (P) • Centrado en la base (C)
Triclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \gamma \neq \beta$	• Simple (P)

13

4. Densidad y factor de empaquetamiento

- **Factor de empaquetamiento (FEA)**

$$F.E.A = \frac{V_{\text{átomos}}}{V_{\text{celda unitaria}}} = \sum_{i=1}^n \frac{N_i \frac{4}{3} \pi r_i^3}{V_{cu}}$$

- N_i = Número total de átomos o iones en la celda unidad.
- r_i = radio atómico o iónico.

- **Densidad (ρ)**

$$\rho = \frac{\text{Masa átomos por celda}}{\text{Volumen celda unitaria}} = \sum_{i=1}^n \frac{N_i \frac{M_i}{N_A}}{V_{cu}}$$

- N_A = N° de Avogadro
- M_i = Peso atómico

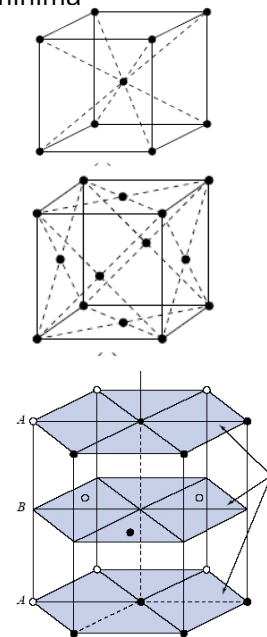
14

5. Estructuras cristalinas en metales, BCC, FCC, HCP.

- La mayoría de los metales (90 %) cristalizan en tres estructuras densamente empaquetadas (compactas). La disposición de los átomos corresponde a la $E_{\text{mínima}}$

- Cúbica centrada en el cuerpo BCC
- Cúbica centrada en las caras FCC
- Hexagonal compacta HCP

Metal	Estructura cristalina ^a	Radio atómico ^b (nm)	Metal	Estructura cristalina	Radio atómico (nm)
Aluminio	FCC	0,1431	Molibdeno	BCC	0,1363
Cadmio	HC	0,1490	Níquel	FCC	0,1246
Cromo	BCC	0,1249	Platino	FCC	0,1387
Cobalto	HC	0,1253	Plata	FCC	0,1445
Cobre	FCC	0,1278	Tántalo	BCC	0,1430
Oro	FCC	0,1442	Titanio (α)	HC	0,1445
Hierro (α)	BCC	0,1241	Tungsteno	BCC	0,1371
Plomo	FCC	0,1750	Zinc	HC	0,1332

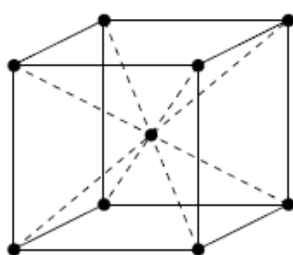


15

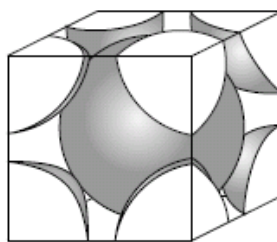
5. Estructuras cristalinas en metales, BCC, FCC, HCP.

ESTRUCTURA CÚBICA CENTRADA EN EL CUERPO, BCC

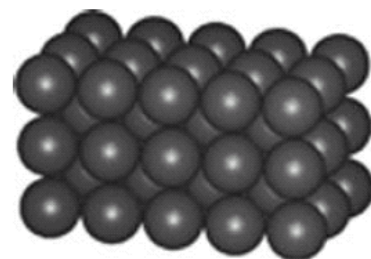
- Metales que cristalizan es este sistema α -Fe, V, Cr, Mo, and W
- modelo de esferas reducidas
 - modelo de esferas rígidas
 - agregado que representa la sección de un cristal



(a)



(b)



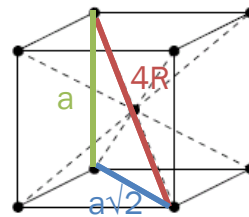
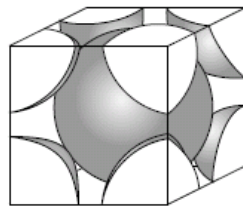
(c)

16

5. Estructuras cristalinas en metales, BCC, FCC, HCP.

ESTRUCTURA CÚBICA CENTRADA EN EL CUERPO, BCC

- Las esferas o cationes están en contacto entre si a lo largo de la diagonal del cubo.
- La longitud de la arista a y el radio atómico están relacionados $a = 4R/\sqrt{3}$
- Número de átomos equivalente en la celdilla $1 + 8 \cdot 1/8 = 2$ átomos
- Número de coordinación = 8 (cada átomo en el centro de la celdilla está rodeado por 8)
- Factor de empaquetamiento atómico FEA= 0.68

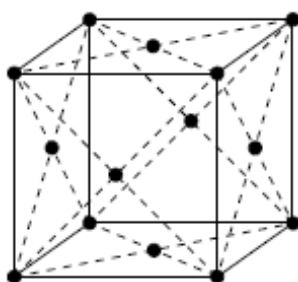


17

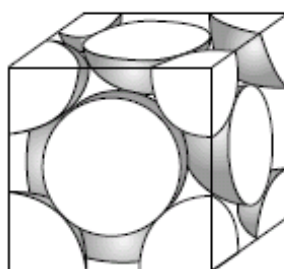
5. Estructuras cristalinas en metales, BCC, FCC, HCP.

ESTRUCTURA CÚBICA CENTRADA EN LAS CARAS, FCC

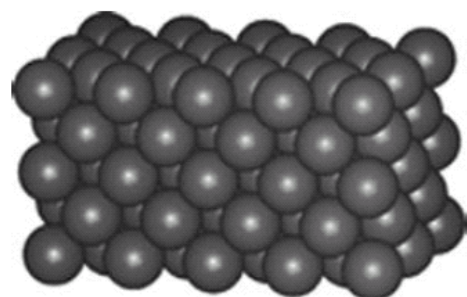
- Metales que cristalizan en este sistema γ -Fe, Al, Ni, Cu, Ag, Pt, and Au
- $a = 2R\sqrt{2}$
- N° átomos/ celda = $6 \cdot 1/2 + 8 \cdot 1/8 = 4$ átomos/celda
- N° coordinación = 12
- FEA = 0.74



(a)



(b)



(c)

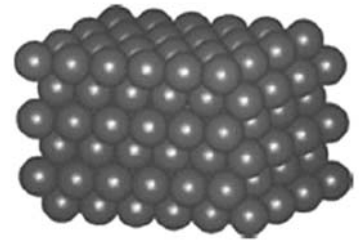
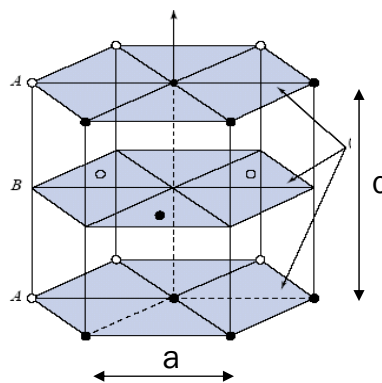
18

5. Estructuras cristalinas en metales, BCC, FCC, HCP.

ESTRUCTURA HEXAGONAL COMPACTA, HCP

- Metales que cristalizan en este sistema Be, Mg, α -Ti, Zn, and Zr

$$\frac{c^2}{4} = \frac{2}{3}a^2 \Rightarrow \frac{c}{a} = 1,633$$



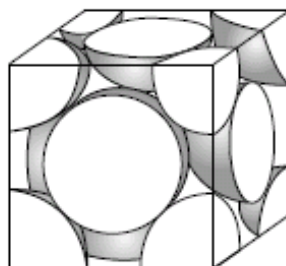
- $c/a = 1.633$
- N° átomos/ celda = $(6 \times 1/6) \times 2 + 2 \times 1/2 + 3 = 6$ átomos/celda
- N° coordinación = 12
- FEA = 0.74

19

Ejemplo: Cálculo de densidad del cobre

- El cobre tiene una estructura cristalina FCC y un radio atómico (r_a) de 0,1278 nm. Suponiendo el modelo de esferas rígidas (contacto a lo largo de la línea diagonal), calcular el valor teórico de la densidad del cobre en mg/m^3 .

(Datos: Masa atómica (M_A) del cobre = 63,54 g/mol)



20

- **Sol:** Del modelo de esferas rígidas , para una estructura FCC

$$\sqrt{2} \cdot a = 4R \quad a = \frac{4R}{\sqrt{2}} = \frac{4 \cdot (0,1278 \text{ nm})}{\sqrt{2}} = 0,361 \text{ nm}$$

- En 1 celdilla FCC → 4 átomos
- 1 átomo de Cu pesa

$$4 \text{ átomos Cu} \times \frac{1 \text{ mol átomos Cu}}{6,023 \cdot 10^{23} \text{ átomos Cu}} \times \frac{63,54 \text{ g}}{1 \text{ mol átomos Cu}}$$

- La masa en una celda unidad FCC es, entonces

$$m_{\text{celda unidad Cu}} = 4,22 \times 10^{-28} \text{ mg}$$

- Y el volumen

$$V_{\text{celda unidad Cu}} = a^3 = \left(0,361 \text{ nm} \times \frac{1 \text{ m}}{10^9 \text{ nm}} \right)^3 = 4,70 \times 10^{-29} \text{ m}^3$$

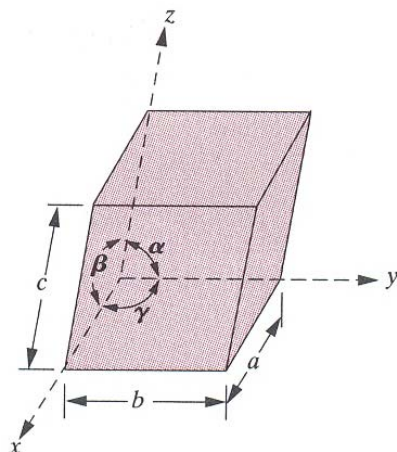
Finalmente, la densidad

$$\rho_{\text{V-Cu}} = \frac{m_{\text{celda unidad}}}{V_{\text{celda unidad}}} = \frac{4,22 \times 10^{-28} \text{ mg}}{4,70 \times 10^{-29} \text{ m}^3} = 8,98 \text{ mg / m}^3 \quad (8,98 \text{ mg / m}^3)$$

21

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

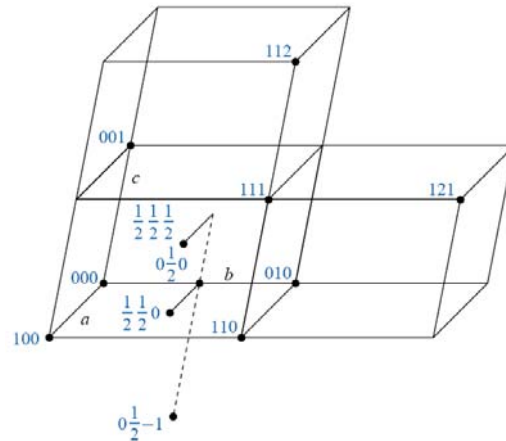
- Es necesario especificar algún plano cristalográfico o alguna dirección cristalográfica
- **Direcciones y planos**, con números enteros o índices. Los índices se determinan basándose en un sistema de coordenadas cuyo origen está en un vértice de la celdilla (x, y, z)



22

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

- **Posiciones de la red:** Expresadas como fracción o múltiplo de las dimensiones de la celdilla unidad.
- La posición centrada en el cuerpo tiene una posición $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$
- Determinación de la posición de un punto reticular de la red cristalina: vector de posición respecto de un origen de referencia 000



23

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

- **Direcciones cristalográficas:** línea entre dos puntos o un vector
- Etapas:
 1. En el origen de coordenadas se traza un vector. Toda vector se traslada a través de la red cristalina sin alterarse, si se mantiene el paralelismo ($\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 0$)
 2. Se determina la longitud del vector proyección en cada uno de los tres ejes ($\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, 0$)
 3. Estos nº se multiplican o dividen por un factor común para reducirlos al valor entero menor ($\frac{2}{6}, \frac{3}{6}, 0$)
 4. Se saca el denominador común del paréntesis y se dejan solo los numeradores (2, 3, 0)
 5. Los tres índices, sin separación se encierran entre corchetes [uvw] [2, 3, 0]
- De los tres ejes existen coordenadas positivas y negativas

$$[2, -3, 0] \Leftrightarrow [2, \bar{3}, 0]$$

24

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

- **Direcciones equivalentes:** el cristal tiene la misma simetría a lo largo de esas direcciones. Físicamente, son la misma dirección. Poseen diferentes índices.

$$[1,0,0][\bar{1},0,0][0,1,0][0,\bar{1},0][0,0,1][0,0,\bar{1}]$$

- Se representan por una terna entre corchetes angulares < >
- En el sistema cúbico, existen diferentes familias de direcciones.
 $\langle 1,0,0 \rangle$, $\langle 1,1,1 \rangle$ y $\langle 1,1,0 \rangle$
- Esta condición no se cumple en otros sistemas cristalinos, ej tetragonal

- equivalentes $[1,0,0][0,1,0]$

- no equivalente $[1,0,0][0,0,1]$

25

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

Planos cristalográficos

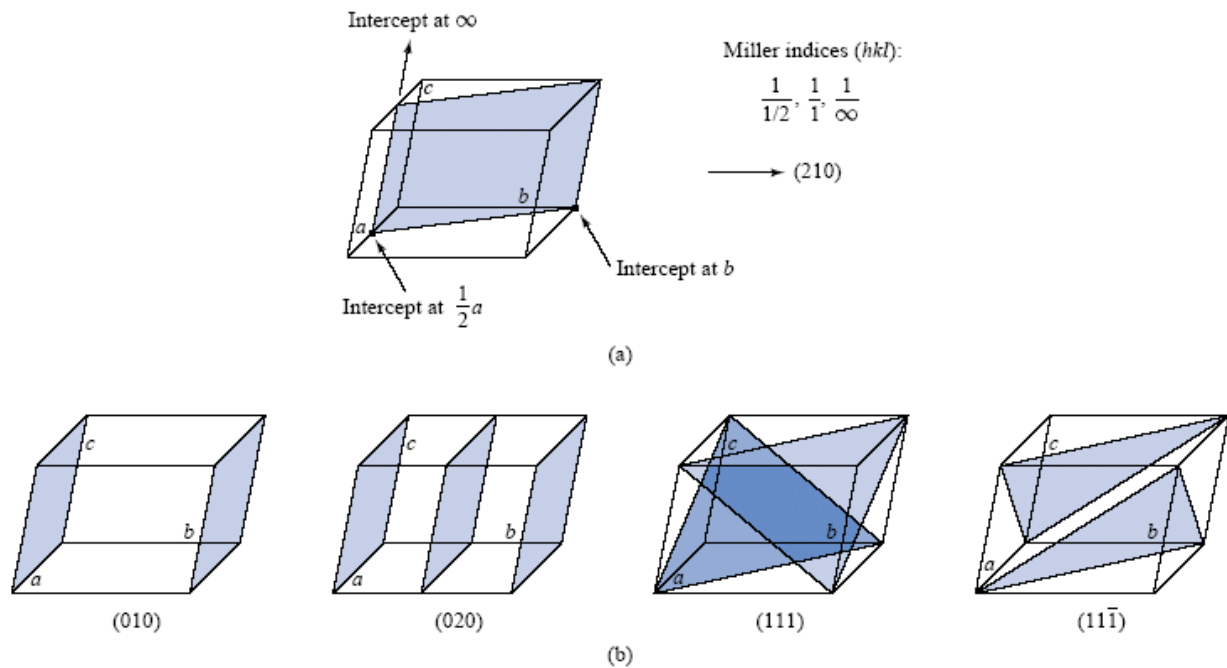
- Sistema de coordenadas de tres ejes
- Tres índices de Miller (hkl)

Determinación de los índices

- Si el plano pasa por el origen, se traza otro paralelo
- Identificar las intersecciones del plano en los ejes cristalográficos
- Calcular los recíprocos de dichas intersecciones
- Hallar el MCM de las fracciones y ponerlo de denominador común
- Se saca del paréntesis el denominador común
- Representar los índices de Miller como el conjunto más pequeño de hkl encerrado entre paréntesis, es decir, (hkl)

26

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

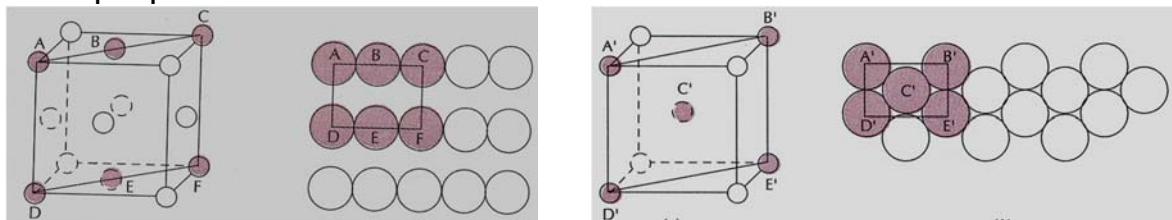


27

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

Familias de planos

- En los planos atómicos (110) de las estructuras FCC y BCC el empaquetamiento atómico es distinto



- Si el empaquetamiento atómico es idéntico = familia de planos

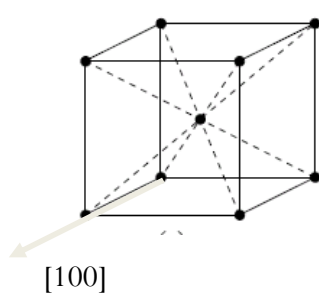
$$(111), (\bar{1}\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}11), (11\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), (\bar{1}1\bar{1}), (1\bar{1}1)$$

- Pertenecen a la familia $\{111\}$

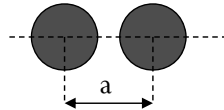
28

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

- **Densidad lineal:** fracción de longitud de línea de una dirección cristalográfica que pasa a través de los centros



Ej: densidad lineal en [100]

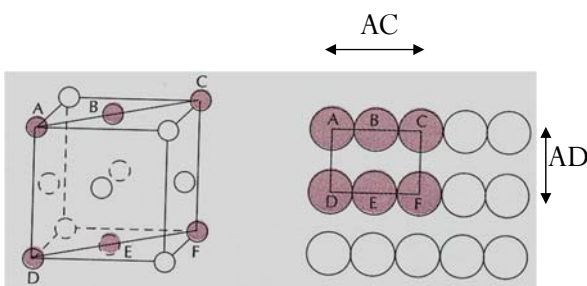


$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

$$DL = \frac{\text{átomos en la línea}}{\text{longitud de la línea}} = \frac{2}{4R}$$

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

- **Densidad planar:** fracción del área del plano ocupada por átomos
El plano debe pasar a través del centro del átomo



$$AC = 4R$$

$$AD = 2R\sqrt{2}$$

$$\text{Área} = AC \times AD = 8R^2\sqrt{2}$$

$$\text{Número total de átomos} = 2 \times \frac{1}{2} + 4 \times \frac{1}{4} = 2 \text{ átomos}$$

$$DP = \frac{2}{8R^2\sqrt{2}}$$

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

FRACCIÓN ATÓMICA LINEAL

- Fracción de longitud de línea de una dirección cristalográfica que pasa a través de los centros

$$FAL = \frac{N^{\circ} \text{ átomos} \cdot \text{longitud pasa centros}}{\text{longitud de la línea}}$$

FRACCIÓN ATÓMICA PLANAR

- Fracción de área atómica de un plano cristalográfico que pasa a través de los centros

$$FAP = \frac{N^{\circ} \text{ átomos} \cdot \text{Área átomo}}{\text{Área plano}}$$

31

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

- IMPORTANTE:

Densidad lineal }
Densidad planar } DESLIZAMIENTOS $\Rightarrow$ Mecanismo de plasticidad de metales

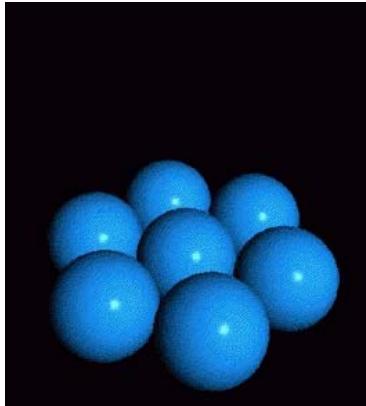
- Deslizamientos ocurren en los planos y direcciones de **máximo empaquetamiento**

32

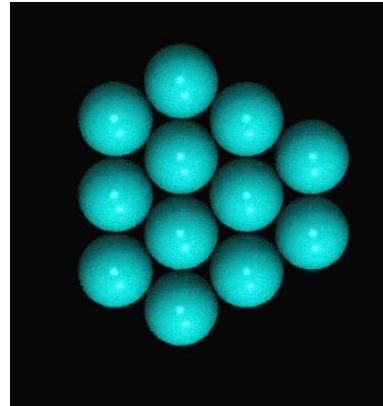
6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller

Estructuras compactas

- - FCC y HCP poseen un FEA = 0.74
- - poseen secuencia de apilamiento de planos diferente



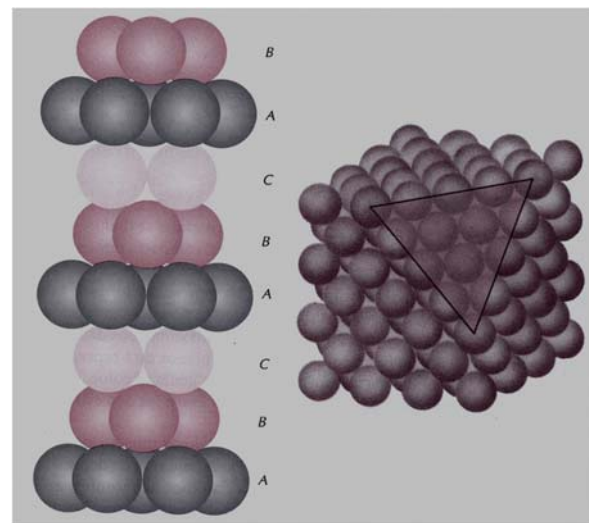
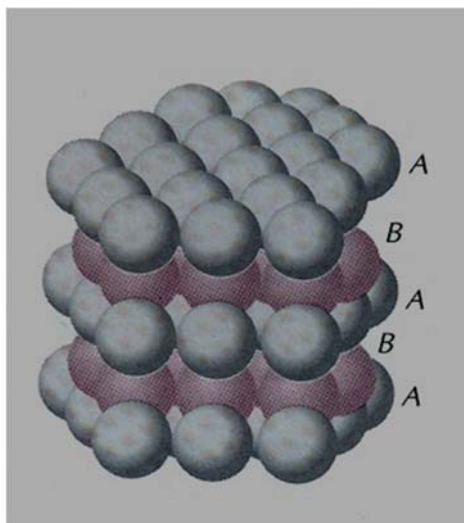
HCP
ABABAB



FCC
ABCABCABC

33

6. Direcciones y planos cristalográficos. Índices de Miller



Orden de agrupamiento

(0001)

(111)

34

7. Polimorfismo y alotropía

- **Polimorfismo:** + de una estructura cristalina (metales y no metales)
- **Alotropía:** + de una estructura cristalina en un sólido elemental

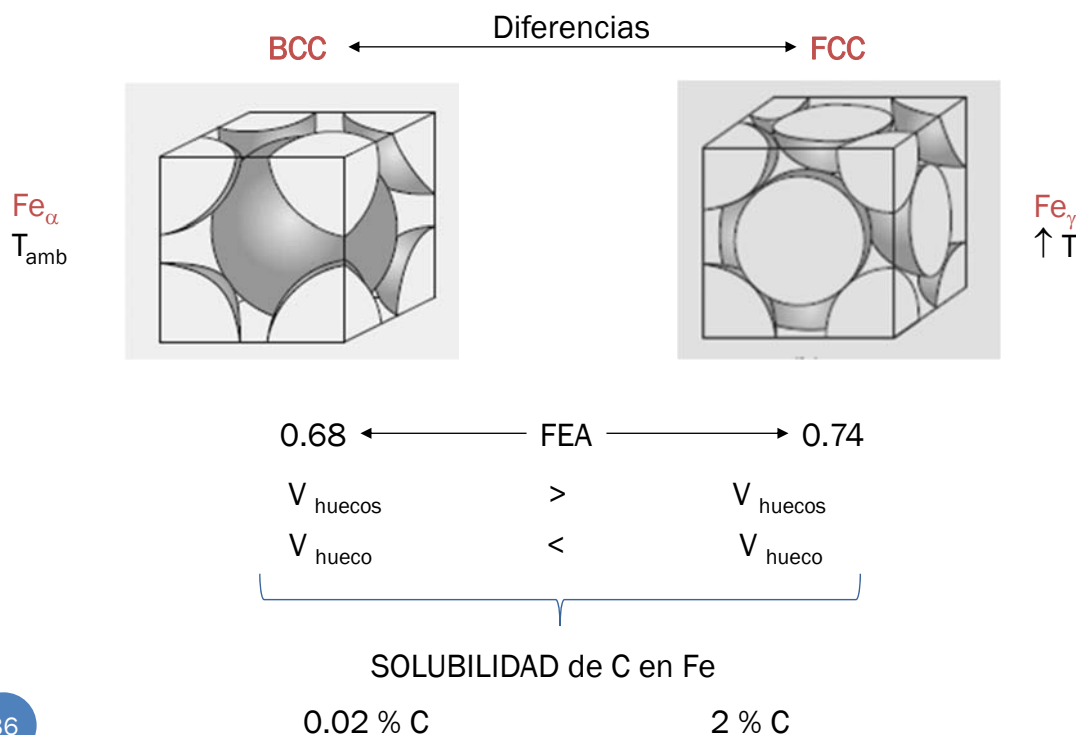
- Es función de la P y T
 - ej: hierro puro
 - BCC a T ambiente
 - FCC a T= 912 °C
- } ⇒ diferencias propiedades

Formas cristalinas alotrópicas de algunos metales

Metal	Estructura cristalina	
	a temperatura ambiente	A otras temperaturas
Ca	FCC	BCC(> 447 °C)
Co	HCP	FCC(> 427 °C)
Hf	HCP	BCC(> 1742 °C)
Fe	BCC	FCC(912-1394 °C)
Li	BCC	HCP(< -193 °C)
Na	BCC	HCP(< -233 °C)
Tl	HCP	BCC(> 234 °C)
Ti	HCP	BCC(> 883 °C)
Y	HCP	BCC(> 1481 °C)
Zr	HCP	BCC(> 872 °C)

35

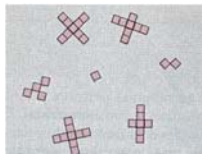
7. Polimorfismo y alotropía



36

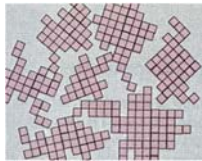
8. Anisotropía

Sólidos: conjunto de muchos cristales = granos. **Material poli cristalino**



= celdilla unidad

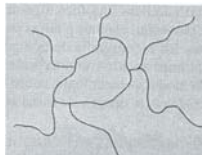
Núcleos de cristalización



Crecimiento de cristales pequeños. Obstaculización de crecimiento.



Al terminar la solidificación aparecen granos con formas irregulares. Orientación varía de grano en grano.



La estructura de granos aparece con líneas oscuras: límites de grano.

37

8. Anisotropía

- **Anisotropía**= direccionalidad de las propiedades= distancia atómica o iónica
- **Isotrópica**= propiedades son iguales en cualquier dirección.
- La anisotropía $\uparrow$ al $\downarrow$ simetría de la estructura

Metal	Modulos de elasticidad [psi $\times 10^6$ (Mpa $\times 10^3$)]		
	[100]	[110]	[111]
Aluminio	9,2 (63,7)	10,5 (72,6)	11,0 (76,1)
Cobre	9,7 (66,7)	18,9 (130,3)	27,7 (191,1)
Hierro	18,1 (125,0)	30,5 (210,5)	39,6 (272,7)
Tungsteno	55,8 (384,6)	55,8 (384,6)	55,8 (384,6)

38