

Estructura Cristalina de los Materiales

Luis Alberto Laguado Villamizar

Diseñador Industrial

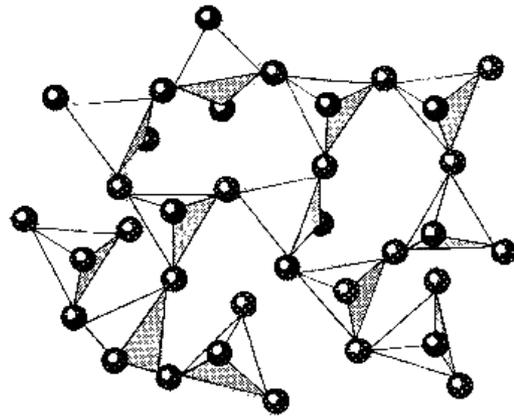
Mg Ingeniería de Materiales

CONTENIDO

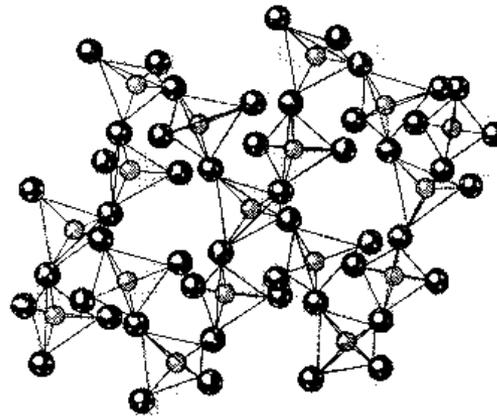
- Estructura amorfa y cristalina
- Celdas Unitarias
- Redes de Bravais
- Parámetros de Red
- Índices de Miller

Estructuras en estado sólido

- Amorfa



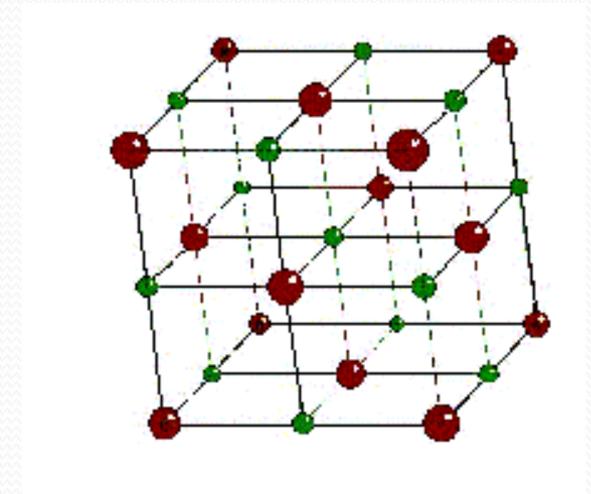
(c) silica glass



(d) quartz

Figure 3.29 Silica structures

- Cristalina



Estructura Amorfa

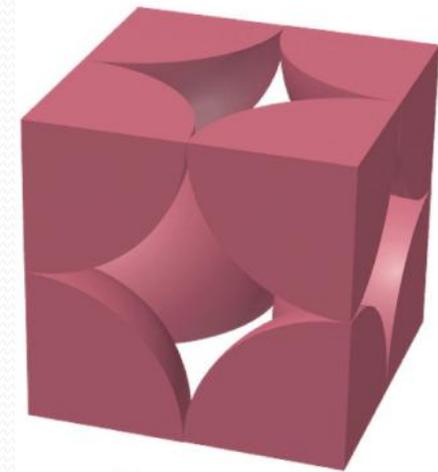
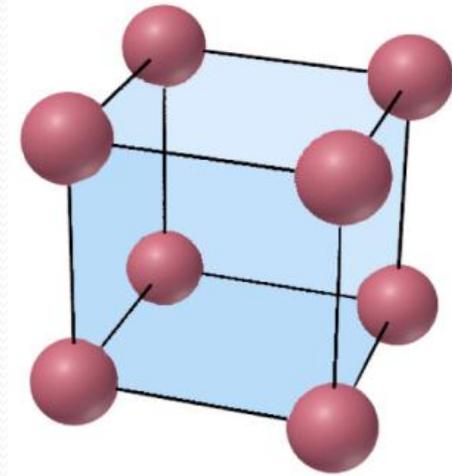
- Sus partículas presentan atracciones lo suficientemente fuertes para impedir que la sustancia fluya, obteniendo un sólido rígido y con cierta dureza.
- No presentan arreglo interno ordenado sino que sus partículas se agregan al azar.
- Al romperse se obtienen formas irregulares
- Se ablandan dentro de un amplio rango de temperatura y luego funden o se descomponen.
- Ejemplos: Asfalto, Parafina, Ceras, Vidrios, algunos polímeros, algunos cerámicos.

Estructura Cristalina

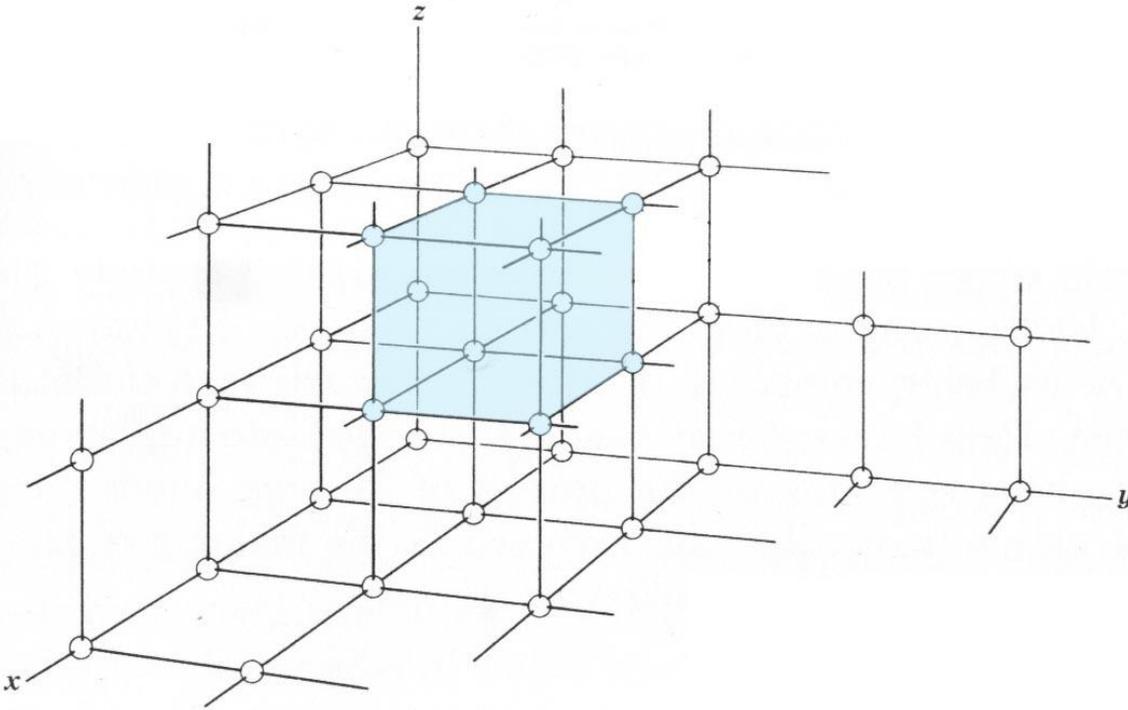
- Presentan un arreglo interno ordenado, basado en minúsculos cristales individuales cada uno con una forma geométrica determinada.
- Los cristales se obtienen como consecuencia de la repetición ordenada y constante de las unidades estructurales (átomos, moléculas, iones)
- Al romperse se obtienen caras y planos bien definidos.
- Presentan puntos de fusión definidos, al calentarlos suficientemente el cambio de fase ocurre de una manera abrupta.
- Ejemplos: NaCl, Sacarosa, Sales en general, Metales, Algunos polímeros, Algunos cerámicos.

Celda Unitaria

- El cristal individual es llamado celda unitaria, está formado por la repetición de ocho átomos.
- El cristal se puede representar mediante puntos en los centros de esos átomos.

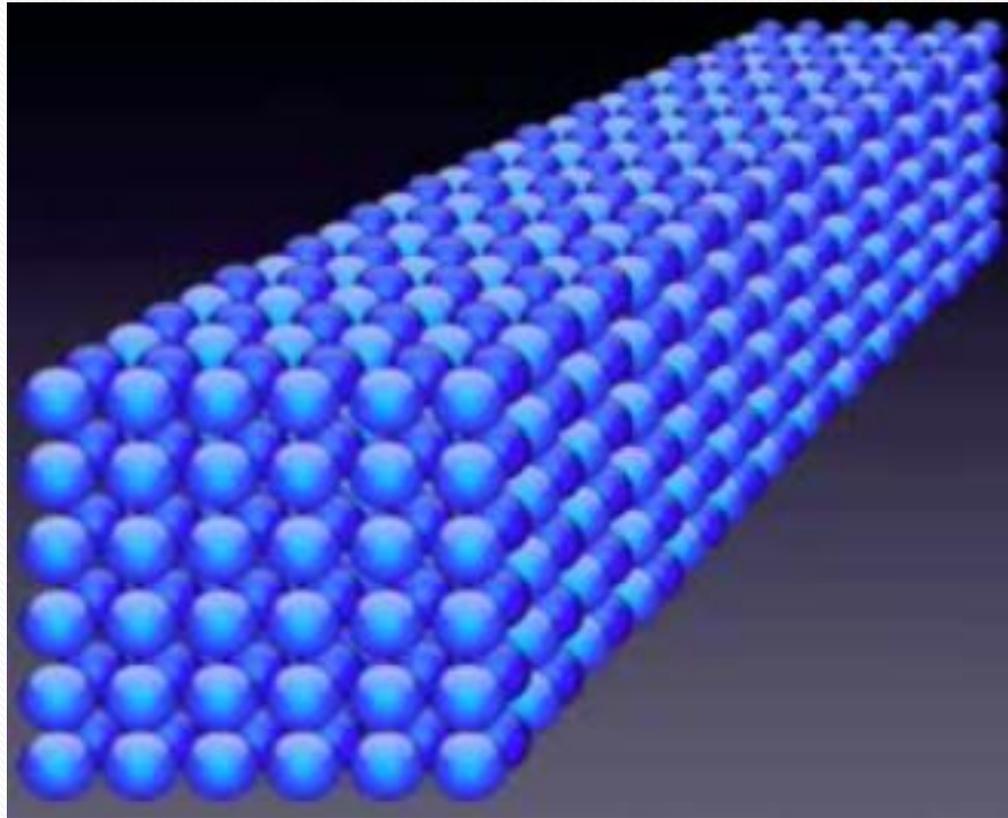


Red Cristalina

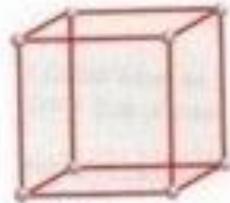


- Ordenamiento espacial de átomos y moléculas que se repite sistemáticamente hasta formar un Cristal

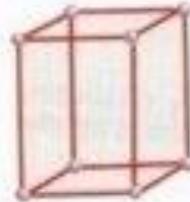
Estructura Cristalina



Sistemas Cristalinos



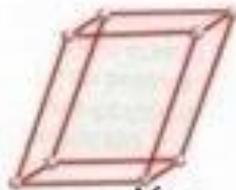
cúbica
sencilla



tetragonal
sencilla



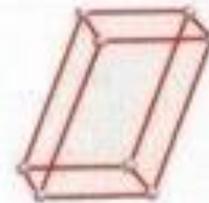
ortorómbica
sencilla



monoclínica
sencilla



hexagonal

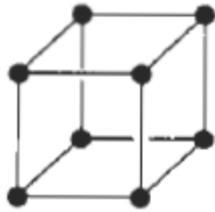


triclínica

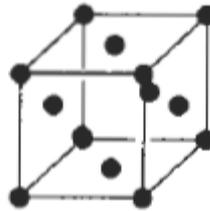


romboédrica

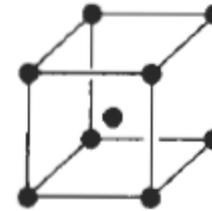
Redes de Bravais



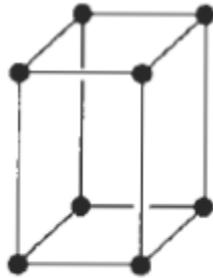
Cúbica simple



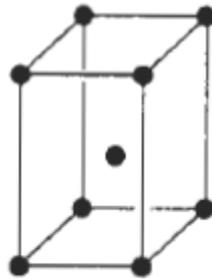
Cúbica centrada
en las caras



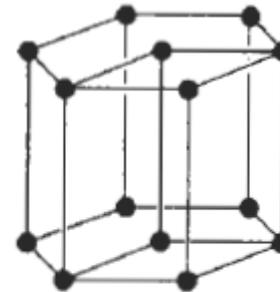
Cúbica centrada
en el cuerpo



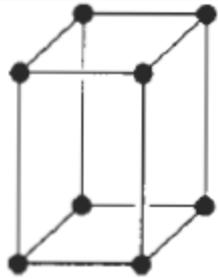
Tetragonal
simple



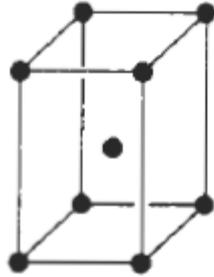
Tetragonal centrada
en el cuerpo



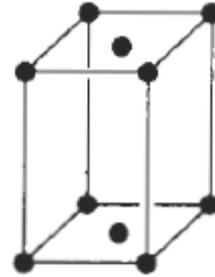
Hexagonal



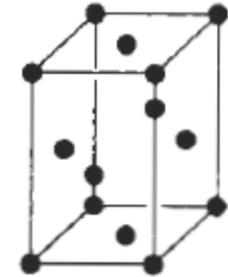
Ortorrónica simple



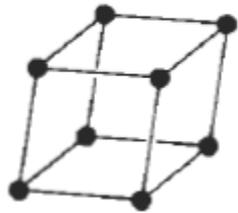
Ortorrónica centrada en el cuerpo



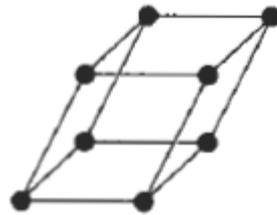
Ortorrónica centrada en las bases



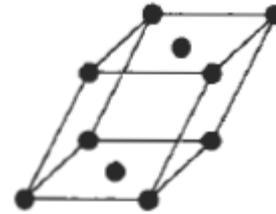
Ortorrónica centrada en las caras



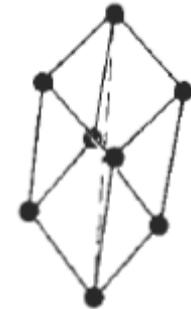
Romboédrica



Monoclínica simple



Monoclínica centrada en las bases



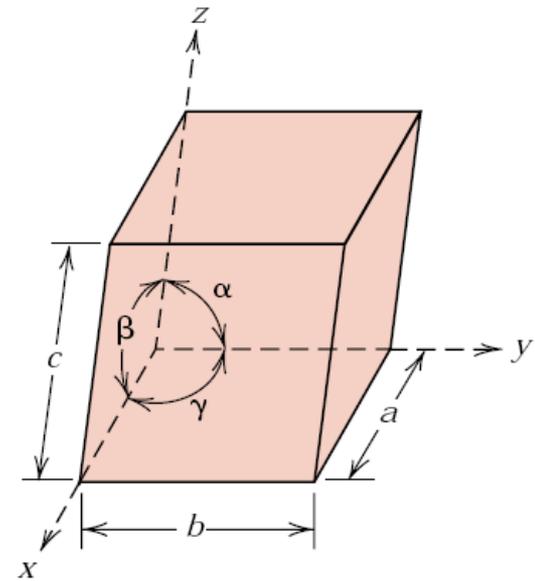
Triclínica

Redes de Bravais

Sistema Cristalino	Redes de Bravais	Nomenclatura
CÚBICO	Simple Centrado en el Cuerpo Centrado en las Caras	P o S (CS) I (CC) (BCC) F (CCC) (FCC)
TETRAGONAL	Simple Centrado en el Cuerpo	P o S (TS) I (TC)
ORTORRÓMBICO	Simple Centrado en el Cuerpo Centrado en las Caras Centrado en la Base	P o S (OS) I (OC) F (OCC) C (OB)
ROMBOÉDRICO	Simple	P o S (R)
HEXAGONAL	Simple	P o S (H)
MONOCLÍNICO	Simple Centrado en la Base	P o S (MS) C (MB)
TRICLÍNICO	Simple	P o S (TS)

Parámetros de Red

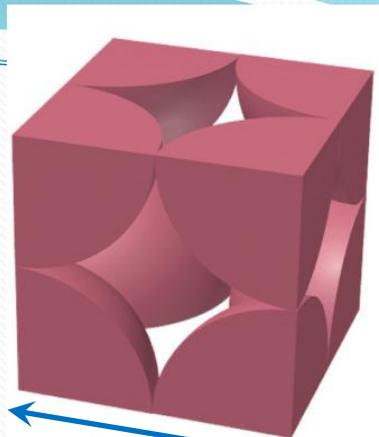
- El tamaño y la forma de la celda unitaria se especifica por la longitud de las aristas y los ángulos entre las caras.
- Cada celda unitaria se caracteriza por seis números llamados Parámetros de Red, Constantes de Red o Ejes Cristalográficos.
- La longitud de las aristas se expresa en nanómetros o Angstrom, esta longitud depende de los diámetros de los átomos que componen la red



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)	$abc\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma}$

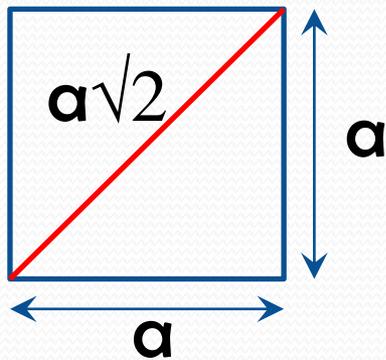
- Parámetro a_0



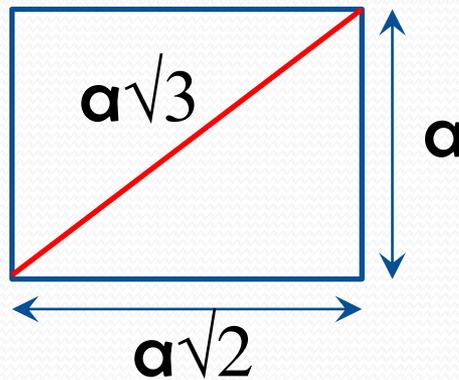
(CS)

$$a = 2r$$

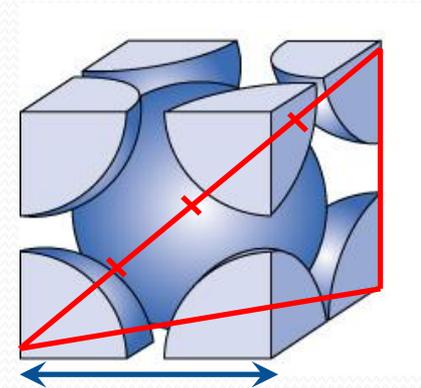
(Vista Superior)



(Alzado del Triángulo)



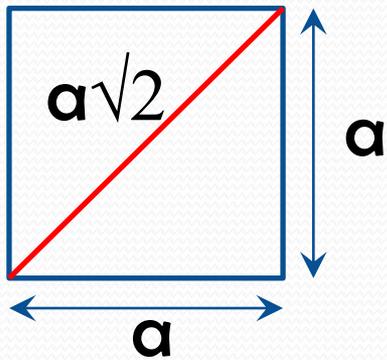
(BCC)



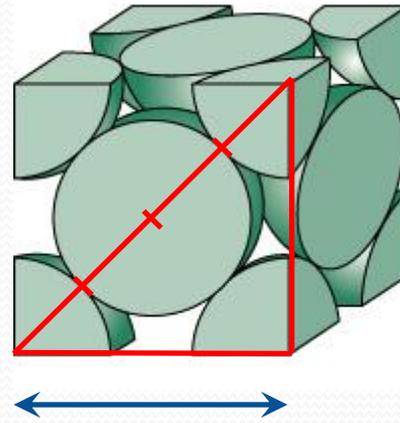
$$a\sqrt{3} = 4r$$

$$a = 4r/\sqrt{3}$$

(Vista Frontal)



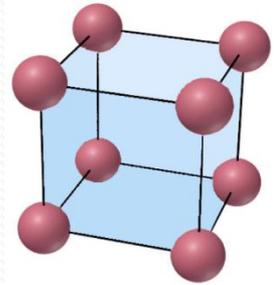
(FCC)



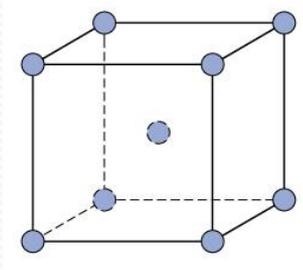
$$a\sqrt{2} = 4r$$

$$a = 4r/\sqrt{2}$$

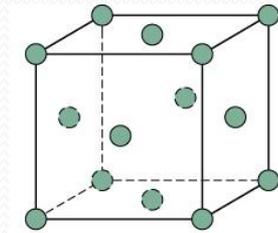
Posiciones atómicas



(CS)

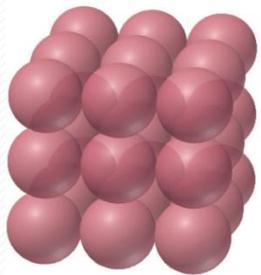


(BCC)

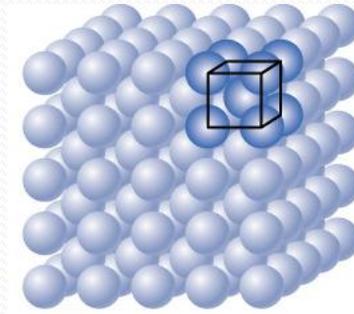


(FCC)

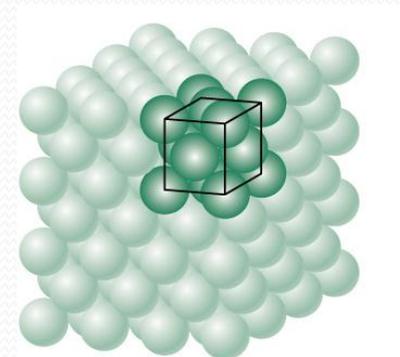
Esferas Rígidas



(CS)



(BCC)

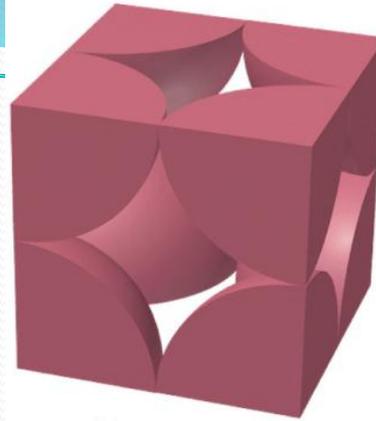


(FCC)

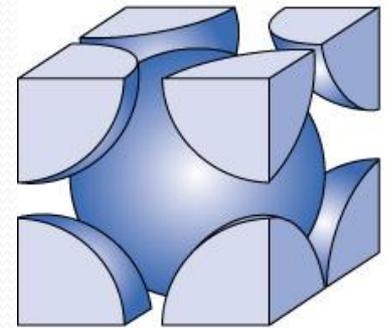
Átomos / Celda

- Cada una de las celdas unitarias tiene una cantidad específica de puntos de red: los vértices y los centros de las caras o el centro de la celda.
- Estos puntos de red están compartidos con las celdas vecinas:
 - un punto de red en un vértice pertenece simultáneamente a ocho celdas.
 - Un punto de red en una cara está compartido por dos celdas
 - Un punto de red centrado en el cuerpo solo pertenece a una celda.

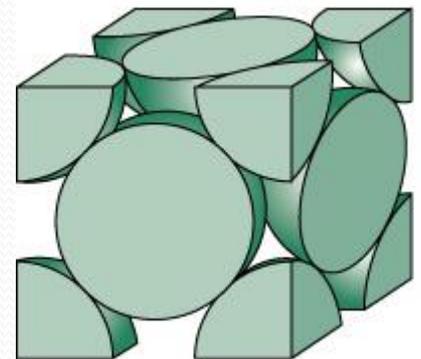
- Red Cúbica Simple (CS)
(8 vértices) x (1/8 átomos)
= 1 átomo/celda



- Red Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC)
(1 átomo/celda) + (1 átomo centro)
= 2 átomos/celda



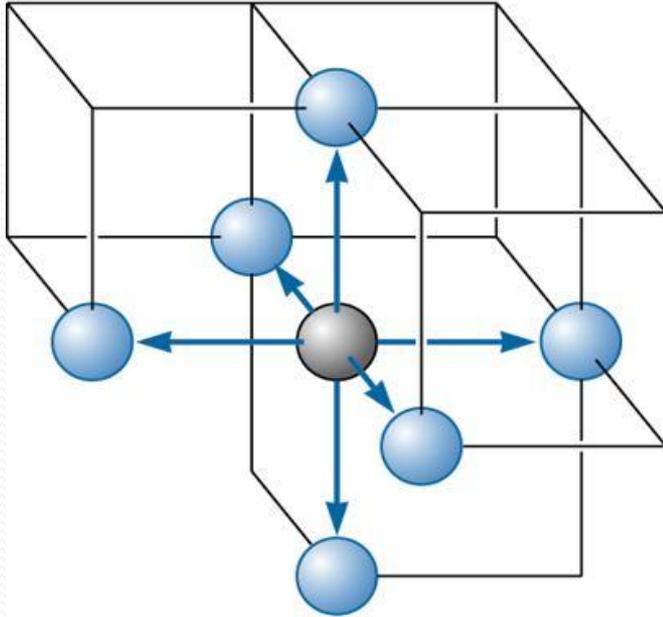
- Red Cúbica Centrada en las caras (FCC)
(1 átomo/celda) + (6 caras x 1/2 átomo)
= 4 átomos/celda



Número de coordinación

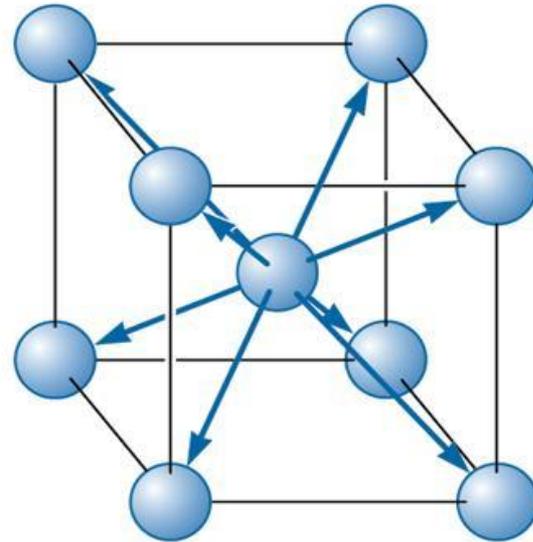
- Es la cantidad de átomos que se encuentran en contacto directo alrededor de un átomo, o la cantidad de vecinos más cercanos.
- Es una medida de qué tan compacto y eficiente es el empaquetamiento de los átomos.
- En la estructura cúbica simple, cada átomo tiene seis vecinos más cercanos en contacto.
- En la estructura cúbica centrada en el cuerpo, cada átomo tiene 8 vecinos más cercanos en contacto.

No. Coordinación = 6



(CS)

No. Coordinación = 8



(BCC)

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 ($a = 2r$)

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

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

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

Parámetros de red BCC

metal	Constante de red a (nm)	radio atómico r (nm)
Cromo	0,289	0,125
Hierro	0,287	0,124
Molibdeno	0,315	0,136
Potasio	0,533	0,231
Sodio	0,429	0,186
Tántalo	0,330	0,143
Volframio	0,316	0,137
Vanadio	0,304	0,132

Parámetros de red FCC

metal	Constante de red a (nm)	radio atómico r (nm)
Aluminio	0,405	0,143
Cobre	0,3615	0,128
Oro	0,408	0,144
Plomo	0,495	0,175
Níquel	0,352	0,125
Platino	0,393	0,139
Plata	0,409	0,144

Densidad teórica ρ

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

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

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

Cálculo de la densidad

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

$$\text{átomos/celda} = 2$$

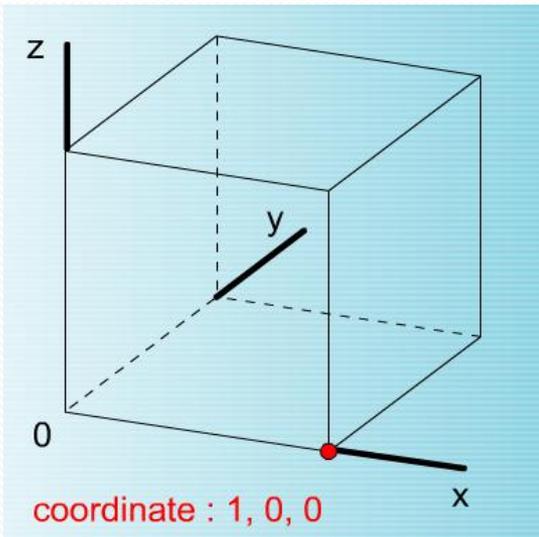
$$\text{masa atómica} = 55.847\text{gr/mol}$$

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

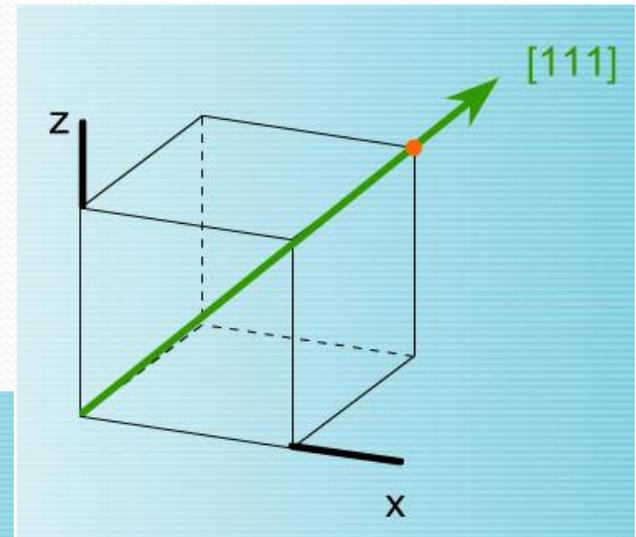
$$\rho = \frac{(2)(55.847)}{(23.54 \times 10^{-24})(6.02 \times 10^{23})} = 7.882\text{g/cm}^3$$

Índices de Miller

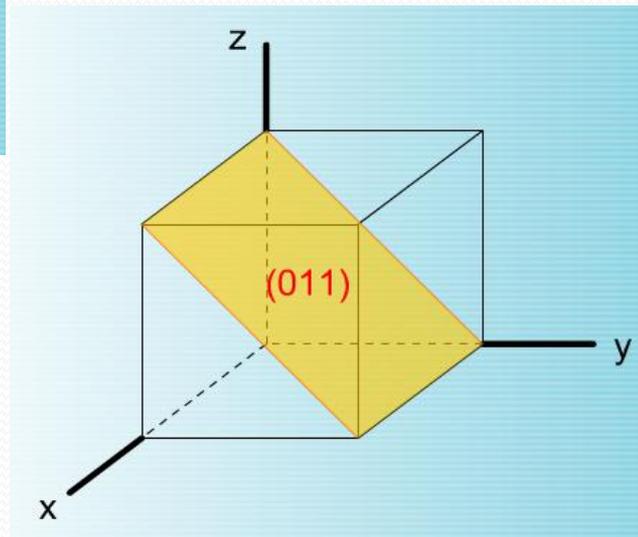
COORDENADAS



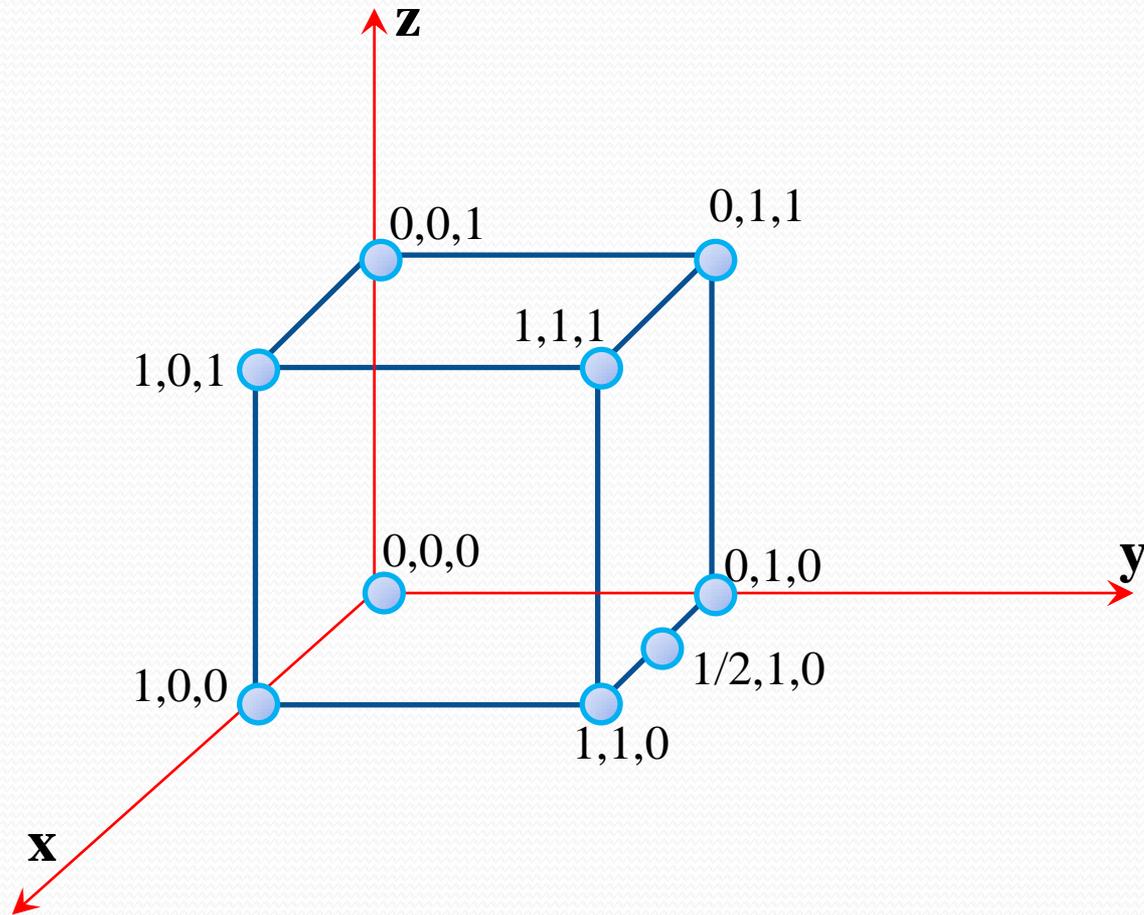
VECTORES



PLANOS



Puntos de Red

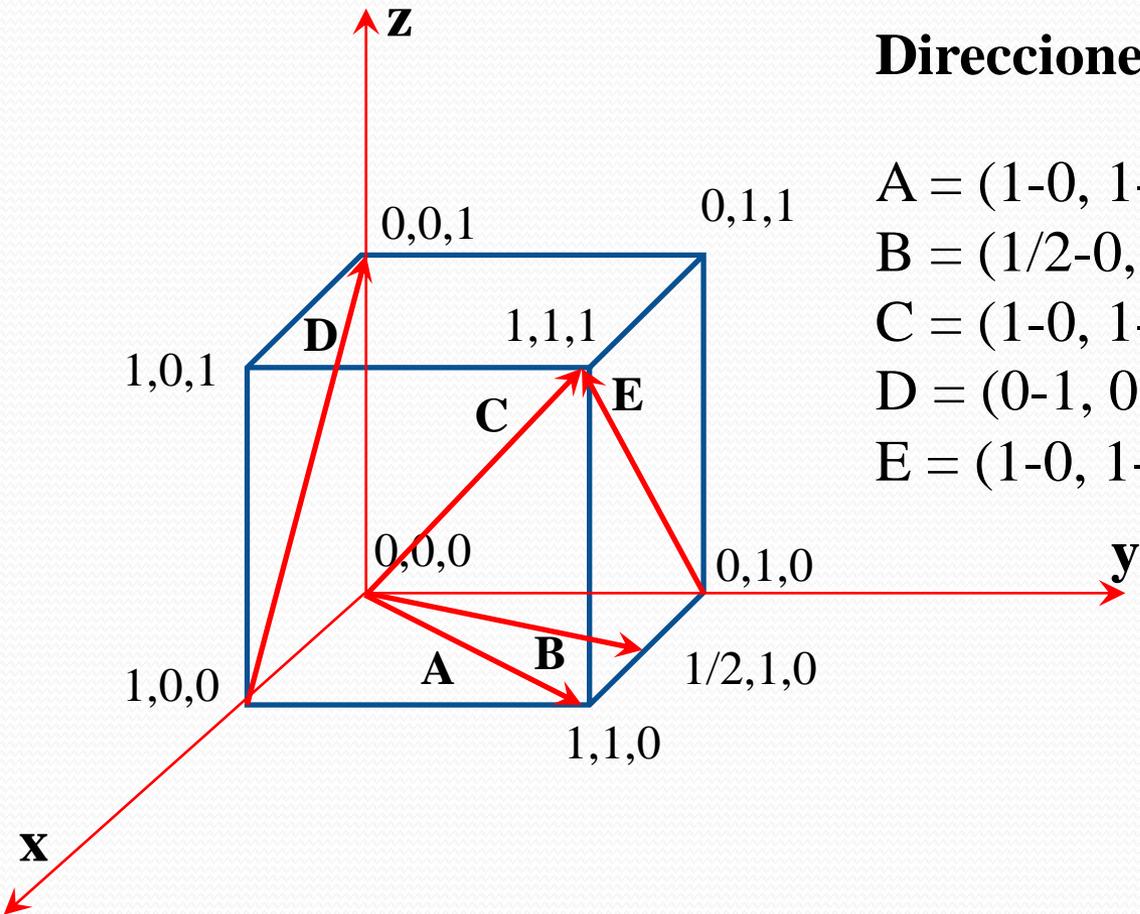


Direcciones cristalográficas

- Los índices de Miller de las direcciones cristalográficas se utilizan para describir direcciones específicas en la celda unitaria
- Las direcciones cristalográficas se usan para indicar determinada orientación de un cristal
- Como las direcciones son vectores, una dirección y su negativa representan la misma línea, pero en direcciones opuestas
- Una dirección y su múltiplo son iguales, es necesario reducir a enteros mínimos

Procedimiento para determinar las direcciones cristalográficas:

1. Determinar las coordenadas del punto inicial y final
2. Restar las coordenadas del final menos el inicial
3. Eliminar las fracciones o reducir los resultados obtenidos a los enteros mínimos
4. Encerrar los índices entre corchetes rectos [], los signos negativos se representan con una barra horizontal sobre el número



Direcciones:

$$A = (1-0, 1-0, 0-0) = [1 \ 1 \ 0]$$

$$B = (1/2-0, 1-0, 0-0) = [1/2, 1, 0] = [1 \ 2 \ 0]$$

$$C = (1-0, 1-0, 1-0) = [1 \ 1 \ 1]$$

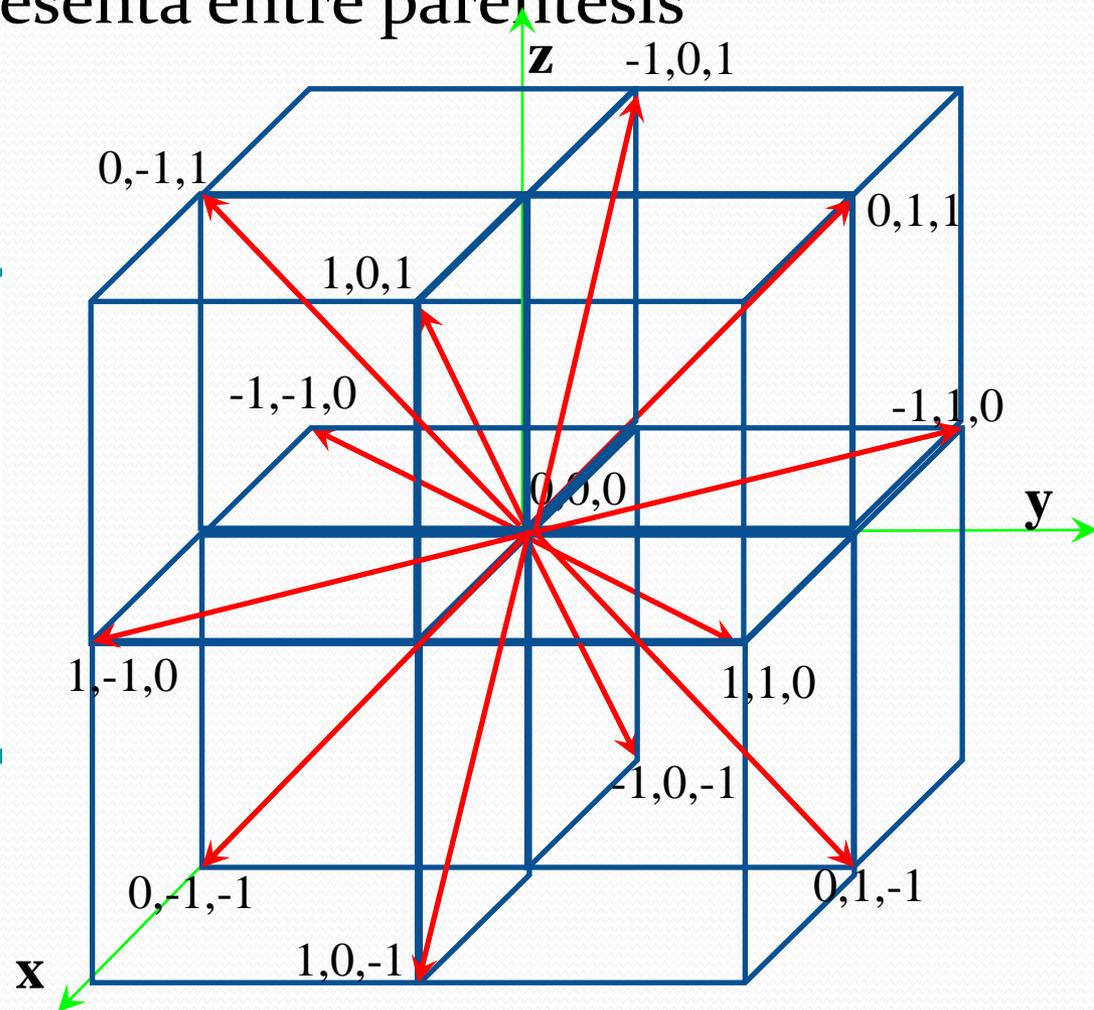
$$D = (0-1, 0-0, 1-0) = [-1, 0, 1] = [\bar{1} \ 0 \ 1]$$

$$E = (1-0, 1-1, 1-0) = [1, 0, 1] = [\ 0 \ 1]$$

Familias de direcciones

- Una Familia de direcciones es un grupo de direcciones equivalentes, y se representa entre paréntesis inclinados $\langle \ \rangle$

$$\langle 110 \rangle = \begin{cases} [110] & [\bar{1}\bar{1}0] \\ [101] & [\bar{1}0\bar{1}] \\ [011] & [0\bar{1}\bar{1}] \\ [1\bar{1}0] & [\bar{1}10] \\ [10\bar{1}] & [\bar{1}01] \\ [01\bar{1}] & [0\bar{1}1] \end{cases}$$



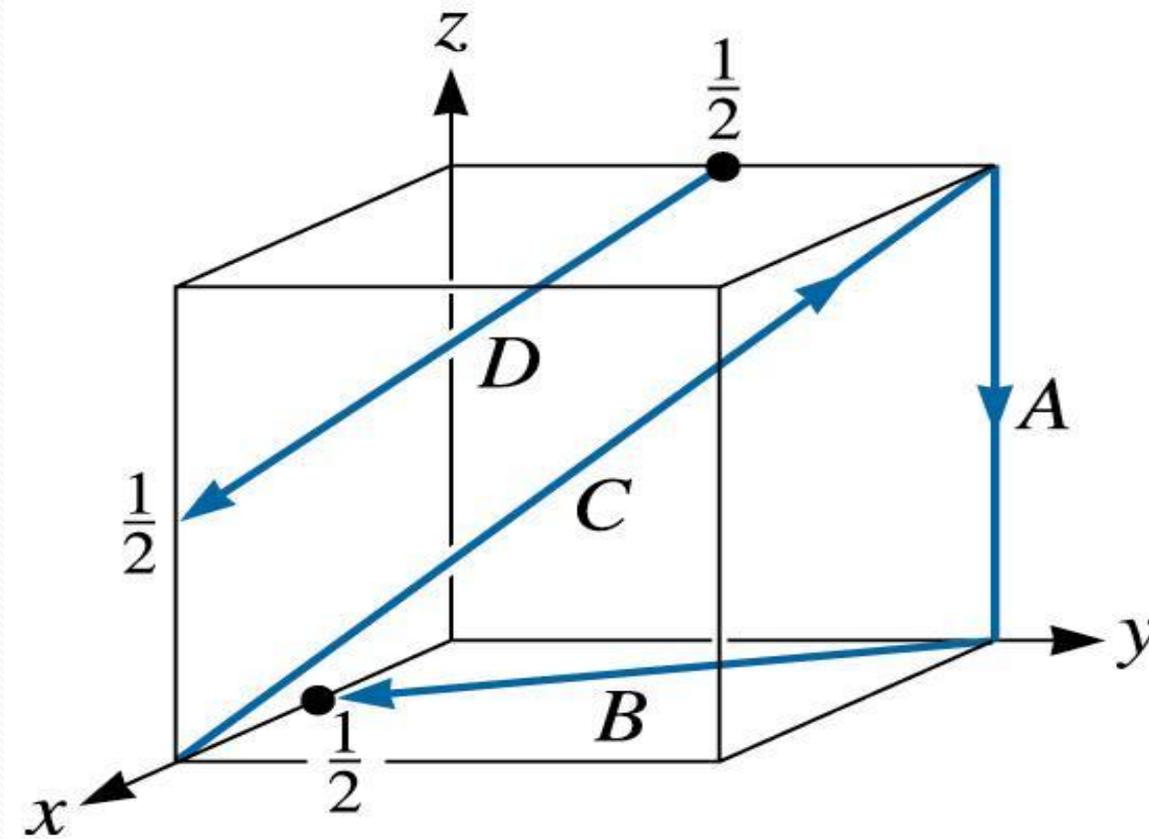
- Un material tiene las mismas propiedades en cada una de las direcciones de una familia.
- Los metales se deforman con facilidad en direcciones donde los átomos están en contacto más estrecho
- Las propiedades magnéticas del hierro y otros materiales dependen de las direcciones metalográficas
- Es más fácil magnetizar el hierro en las direcciones 100

Ejercicio:

- Para las siguientes familias de direcciones, definir todos los vectores posibles y dibujarlos en la celda unitaria Cúbica:
- $\langle 100 \rangle$
- $\langle 111 \rangle$

Ejercicio:

Por medio de los índices de Miller, identificar las siguientes direcciones cristalográficas:



Solución:

$$A: 0,1,0 - 0,1,1 = 0,0,-1 = [00\bar{1}]$$

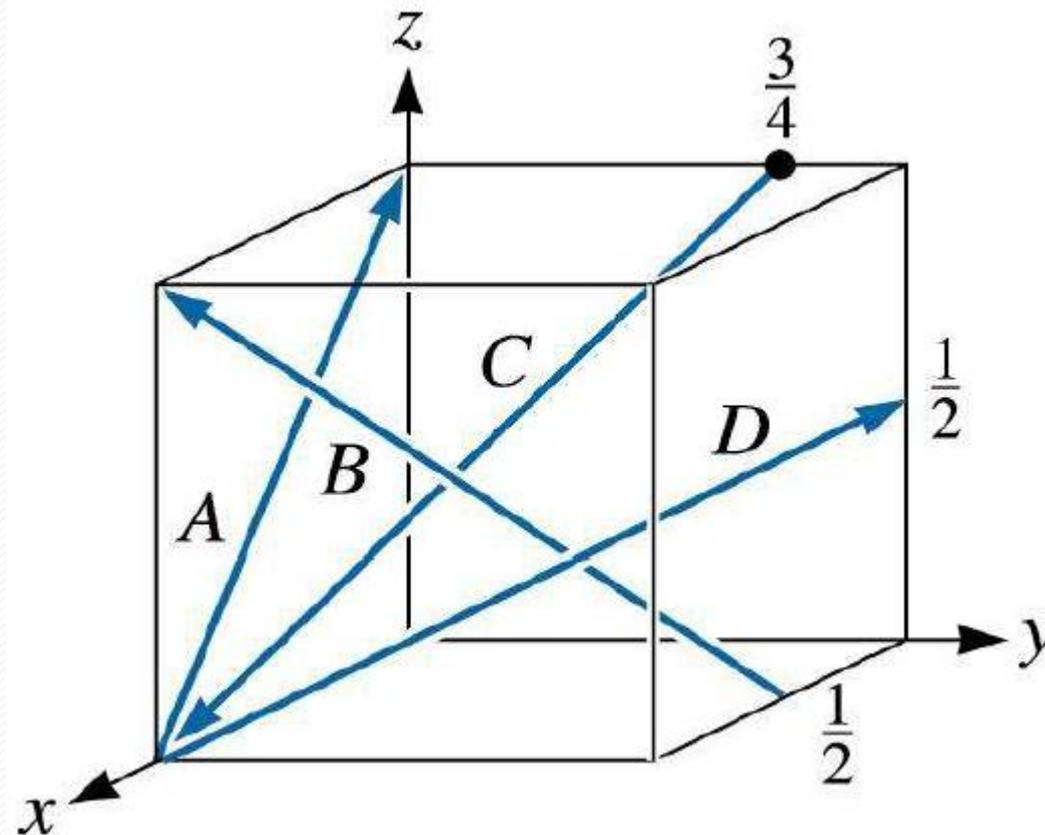
$$B: \frac{1}{2},0,0 - 0,1,0 = \frac{1}{2},-1,0 = [1\bar{2}0]$$

$$C: 0,1,1 - 1,0,0 = -1,1,1 = [\bar{1}11]$$

$$D: 1,0,\frac{1}{2} - 0,\frac{1}{2},1 = 1,-\frac{1}{2},-\frac{1}{2} = [2\bar{1}\bar{1}]$$

Ejercicio:

Por medio de los índices de Miller, identificar las siguientes direcciones cristalográficas:



Solución:

$$A: 0,0,1 - 1,0,0 = -1,0,1 = [\bar{1}01]$$

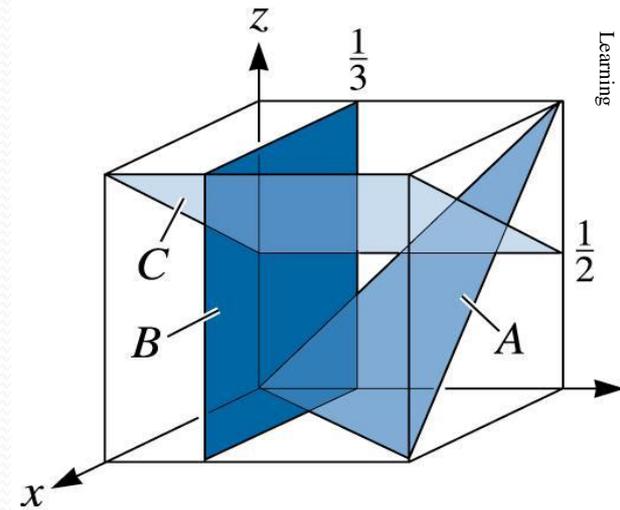
$$B: 1,0,1 - \frac{1}{2},1,0 = \frac{1}{2},-1,1 = [1\bar{2}2]$$

$$C: 1,0,0 - 0,\frac{3}{4},1 = 1,-\frac{3}{4},-1 = [4\bar{3}4]$$

$$D: 0,1,\frac{1}{2} - 0,0,0 = 0,1,\frac{1}{2} = [021]$$

Planos cristalográficos

- Un plano es un conjunto de átomos ubicados en un área determinada
- Los índices de Miller sirven para identificar planos específicos dentro de una estructura cristalina
- Este sistema sirve para identificar planos de deformación o de deslizamiento
- Se utiliza para determinar diferentes niveles de energía superficial
- Sirven para determinar el sentido de crecimiento de cristales en algunos materiales



Procedimiento para identificación de planos:

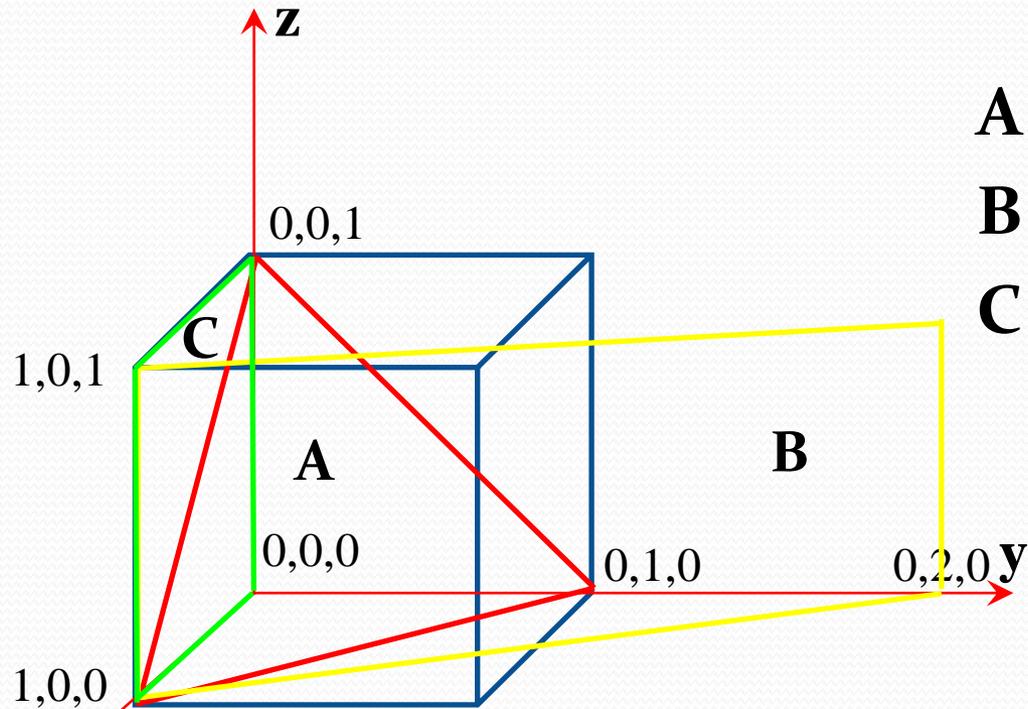
1. Identificar los puntos en donde el plano cruza los ejes x , y , z . Si el plano pasa por el origen de coordenadas, este se debe mover para poder ubicar una distancia.
2. Determinar los recíprocos de esas intersecciones.
3. Simplificar las fracciones, sin reducir a enteros mínimos.
4. Los tres números del plano se representan entre paréntesis, los negativos se identifican con una línea horizontal sobre el número

Determinar los índices de Miller de los siguientes planos:

A: $x=1, y=1, z=1$

B: $x=1, y=2, z=\infty$ (El plano no cruza el eje z)

C: $x=\infty, y=-1, z=\infty$ (El plano pasa por el origen, mover a $y=1$)



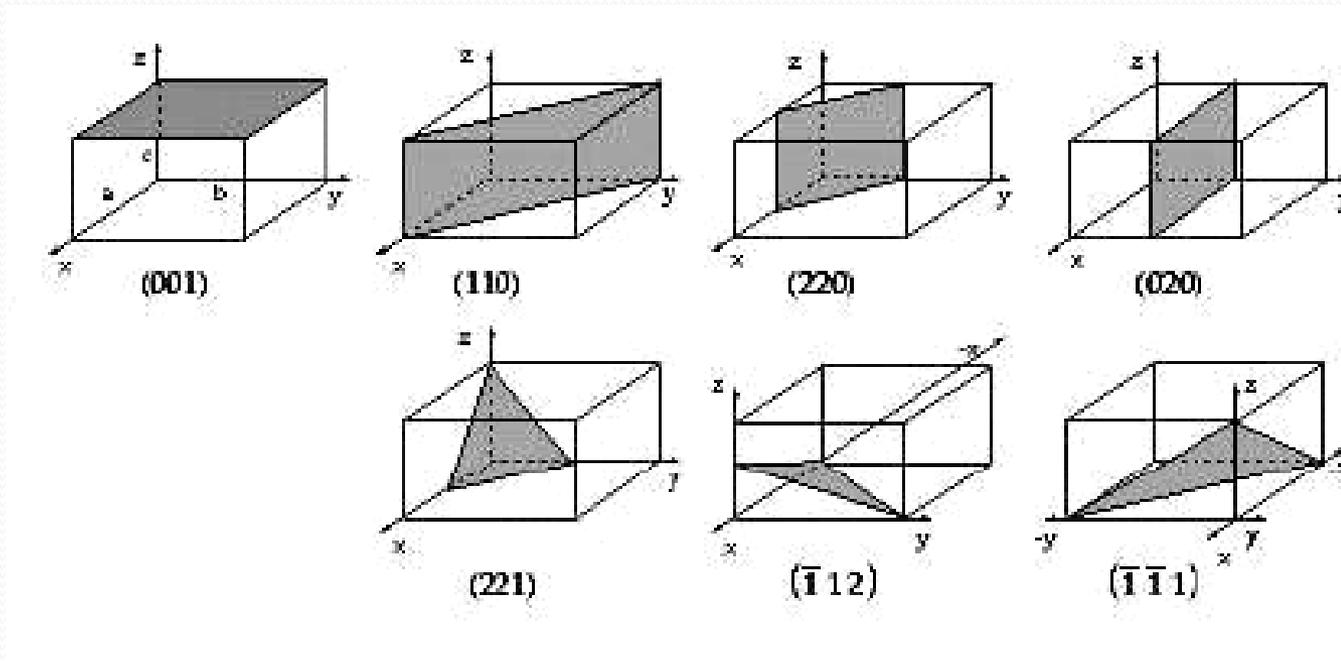
A: $1/1, 1/1, 1/1$ (1 1 1)

B: $1/1, 1/2, 1/\infty$ (2 1 0)

C: $1/\infty, 1/-1, 1/\infty$ (0 $\bar{1}$ 0)

Planos:

(001) , (110) , (220) , (020) , (221) , $(\bar{1}12)$, $(\bar{1}\bar{1}1)$

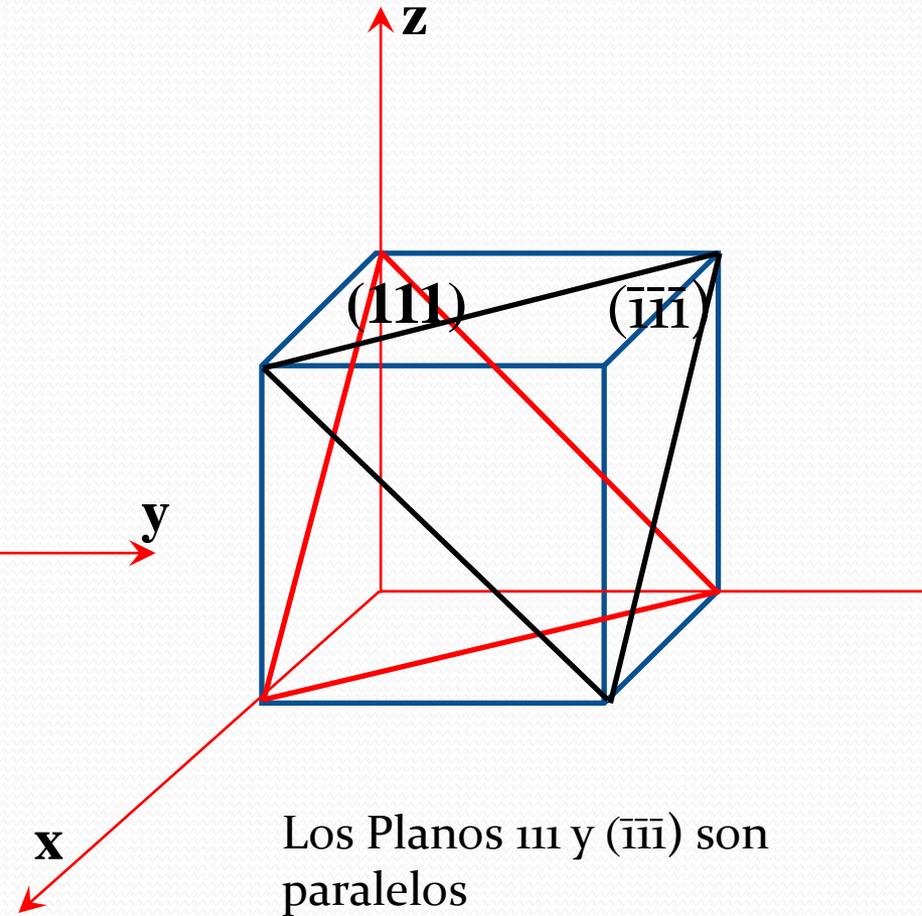
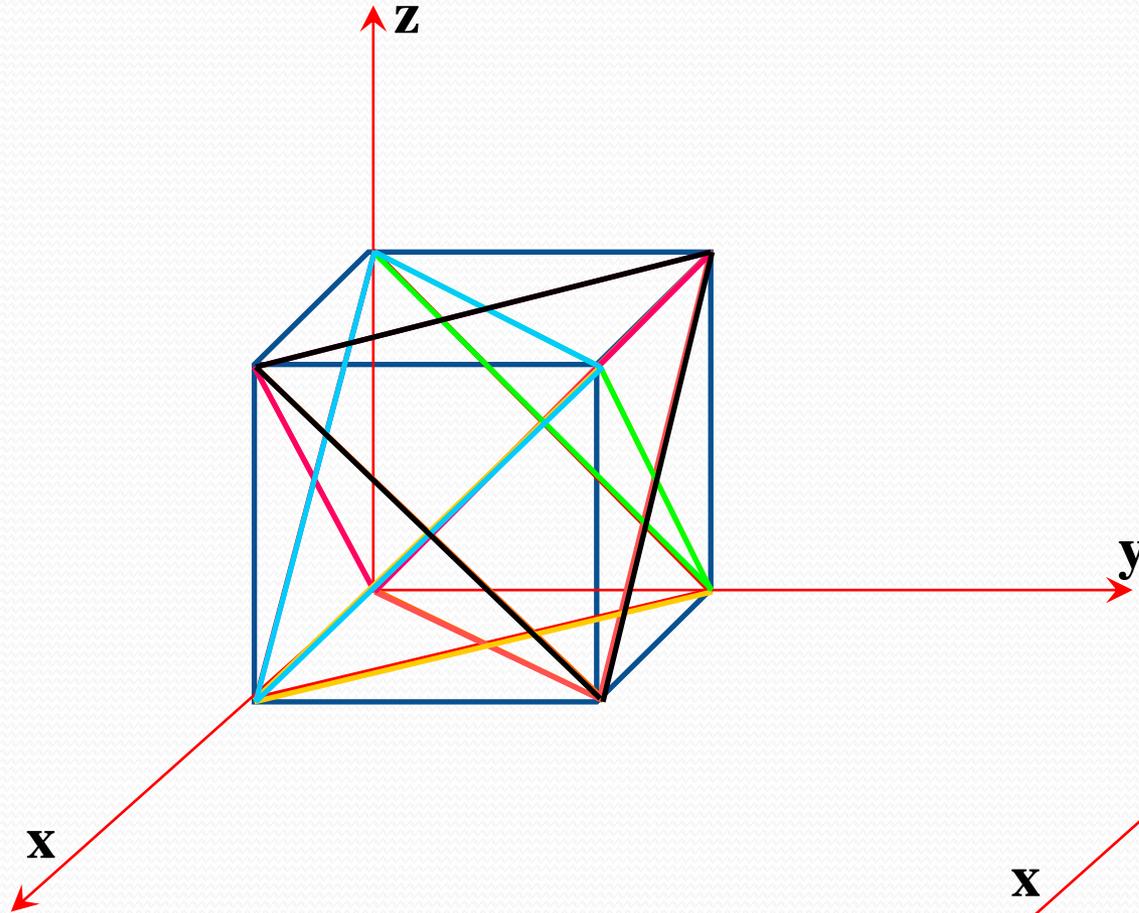


- Los planos y sus negativos son iguales $(0\ 2\ 0) = (0\ \bar{2}\ 0)$
- Los planos y sus múltiplos no son iguales,
- En cada celda unitaria, los planos de una familia representan grupos de planos equivalentes, se representan con corchetes $\{ \}$
- En los sistemas cúbicos, una dirección que tiene los mismos índices que un plano es perpendicular a ese plano
- Planos de la familia $\{110\}$

$$\{110\} \left\{ \begin{array}{l} (110) \\ (101) \\ (011) \\ (1\bar{1}0) \\ (10\bar{1}) \\ (01\bar{1}) \end{array} \right.$$

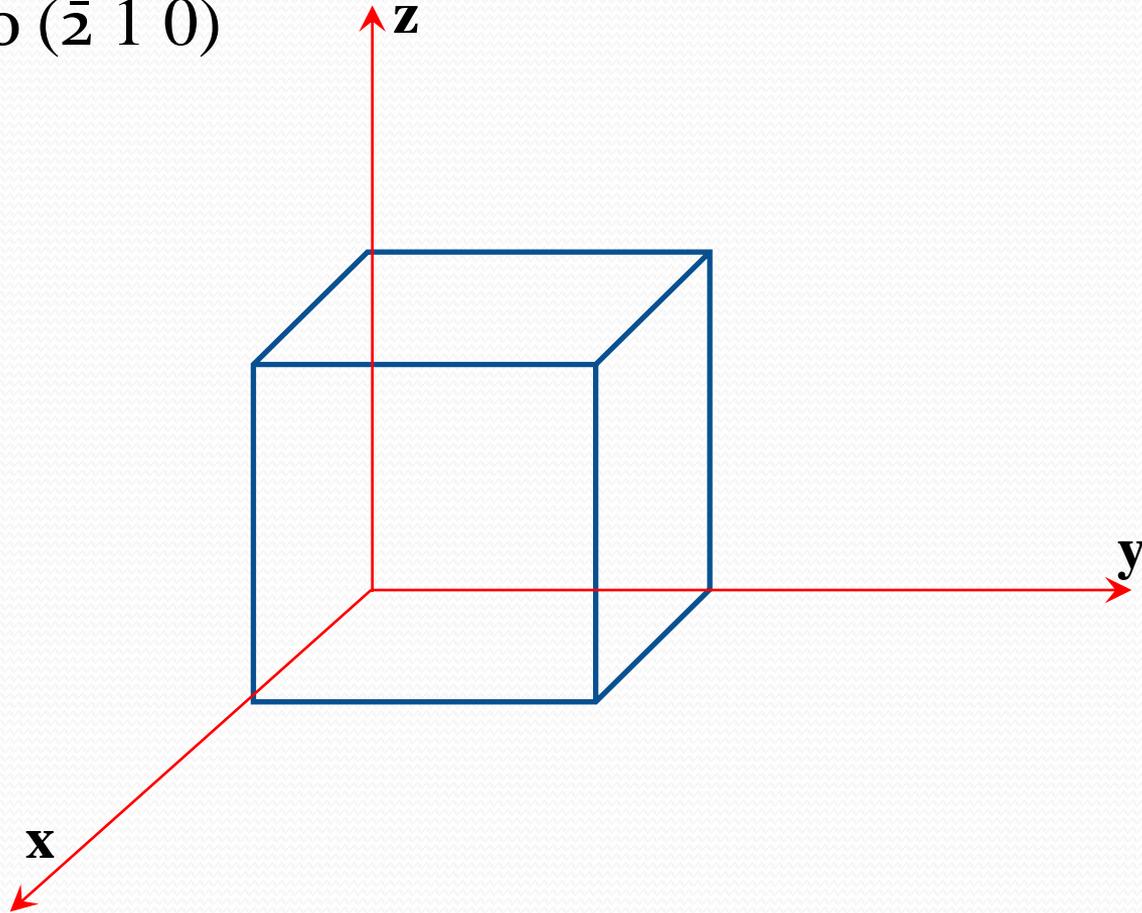
Planos de la familia $\{111\}$

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



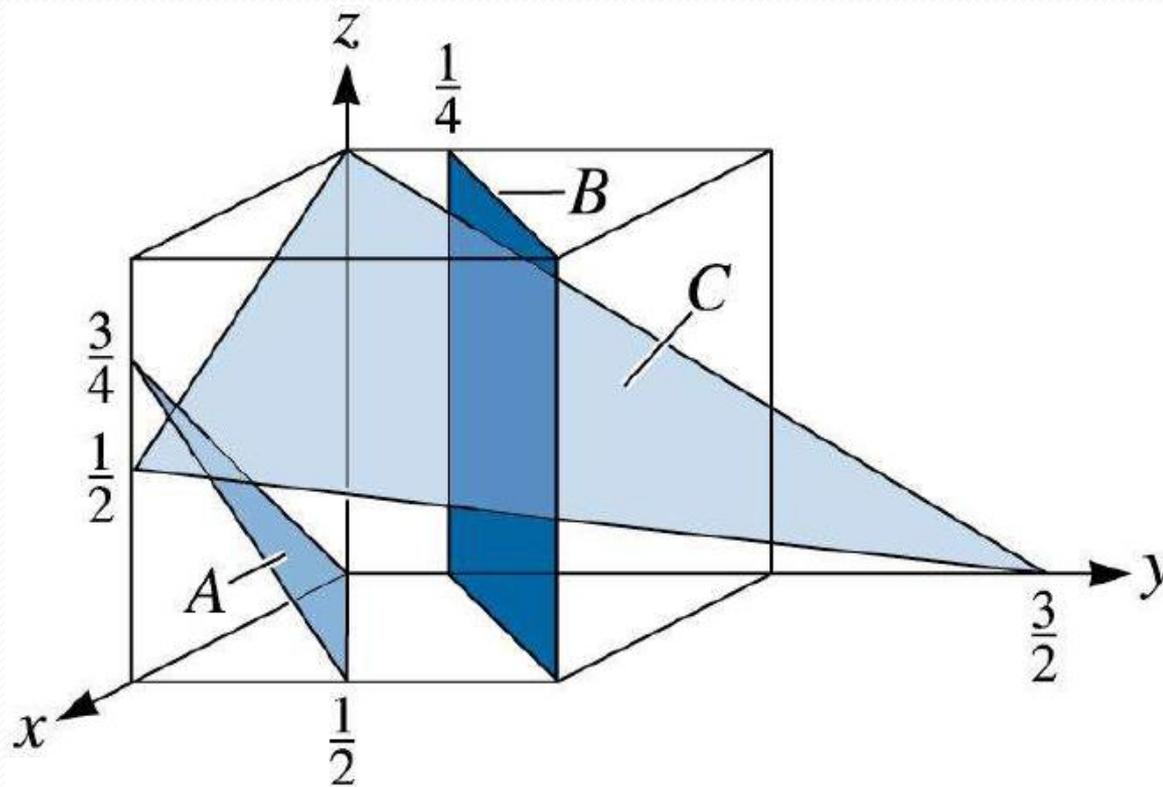
Ejercicio:

En una celda unitaria cúbica, trazar la dirección $[1 \bar{2} 1]$ y el plano $(\bar{2} 1 0)$



Ejercicio:

Identificar los siguientes planos cristalográficos por medio de los índices de Miller:



Solución:

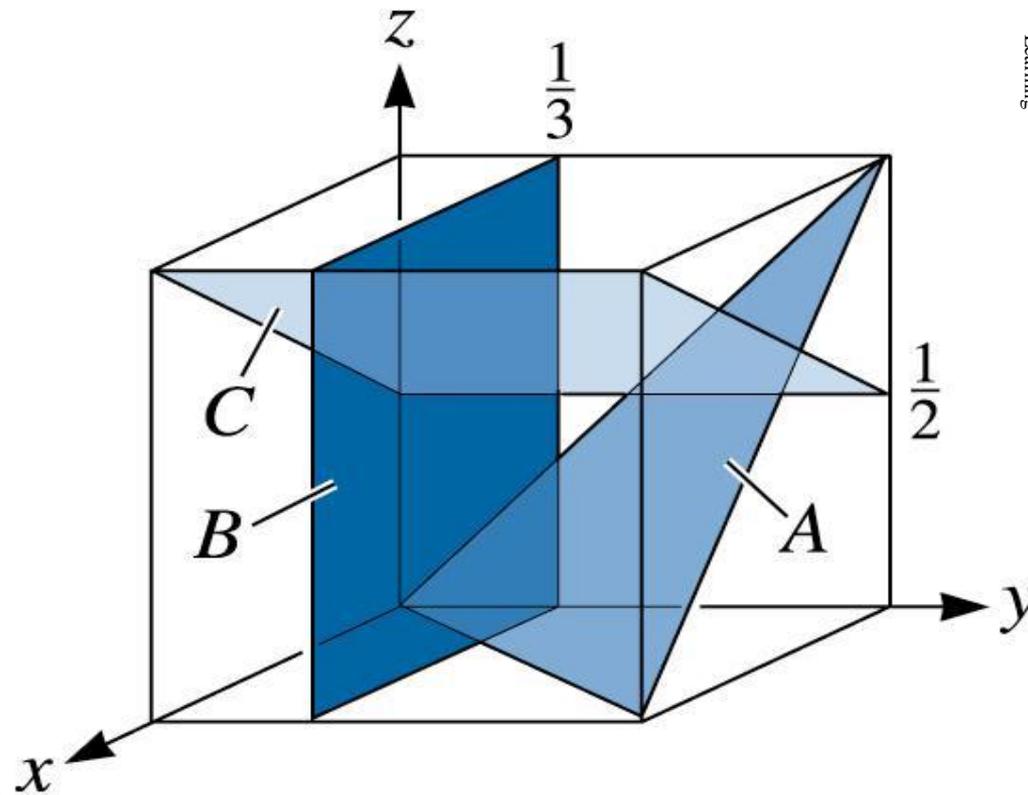
$$\begin{array}{llll} A: & x = -1 & 1/x = -1 \times 3 = -3 & \\ & y = \frac{1}{2} & 1/y = 2 \times 3 = 6 & (\bar{3}64) \quad (\text{origin at } 1,0,0) \\ & z = \frac{3}{4} & 1/z = \frac{4}{3} \times 3 = 4 & \end{array}$$

$$\begin{array}{llll} B: & x = 1 & 1/x = 1 \times 3 = 3 & \\ & y = -\frac{3}{4} & 1/y = -\frac{4}{3} \times 3 = -4 & (3\bar{4}0) \quad (\text{origin at } 0,1,0) \\ & z = \infty & 1/z = 0 \times 3 = 0 & \end{array}$$

$$\begin{array}{llll} C: & x = 2 & 1/x = \frac{1}{2} \times 6 = 3 & \\ & y = \frac{3}{2} & 1/y = \frac{2}{3} \times 6 = 4 & (346) \\ & z = 1 & 1/z = 1 \times 6 = 6 & \end{array}$$

Ejercicio:

Identificar los siguientes planos cristalográficos por medio de los índices de Miller:



Solución:

$$\begin{array}{l} A: \quad x = 1 \quad 1/x = 1 \\ \quad y = -1 \quad 1/y = -1 \\ \quad z = 1 \quad 1/z = 1 \end{array} \quad (1\bar{1}1)$$

$$\begin{array}{l} B: \quad x = \infty \quad 1/x = 0 \\ \quad y = 1/3 \quad 1/y = 3 \\ \quad z = \infty \quad 1/z = 0 \end{array} \quad (030)$$

$$\begin{array}{l} C: \quad x = 1 \quad 1/x = 1 \\ \quad y = \infty \quad 1/y = 0 \\ \quad z = -1/2 \quad 1/z = -2 \end{array} \quad (10\bar{2}) \quad (\text{origin at } 0,0,1)$$

Direcciones y Planos de Deslizamientos

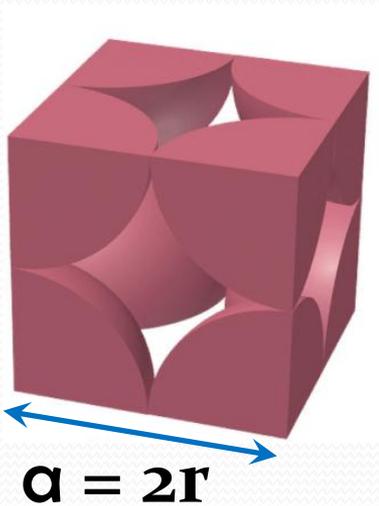
<i>Estructura</i>	<i>Dirección de Deslizamiento</i>	<i>Planos de Deslizamiento</i>	<i>Ejemplos</i>
FCC	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$	Cu, Al, Ni, Pb, Au, Ag, Fe
BCC	$\langle 111 \rangle$	$\{110\}$	Fe, W, Mo, Latón, Nb, Ta
BCC	$\langle 111 \rangle$	$\{210\}$	Fe, Mo, W, Na
BCC	$\langle 111 \rangle$	$\{321\}$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

Densidad Planar

- En los planos metalográficos se puede medir la cantidad de masa que ocupan los átomos con respecto al área del plano.
- Los procesos de deformación de los materiales se producen donde la densidad es alta, y se deforma por el deslizamiento de los átomos en ese plano.

$$\rho_p = \frac{\text{(número de átomos dentro del plano)}}{\text{area del plano}}$$

- Calcular la densidad planar de un plano 100 en una celda CS de Polonio, cuyo radio atómico es de 0.167nm



$$\rho_p = \frac{\left(\left(\frac{1}{4}\right) * 4\right)}{(2r)^2}$$

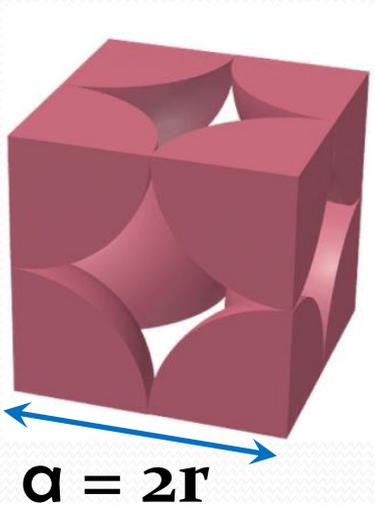
$$\rho_p = \frac{1}{(2r)^2} = 8.96 \text{ átomos/nm}^2$$

Fracción de empaquetamiento planar

- Es la fracción de área ocupada por átomos dentro de un plano específico.
- El resultado se multiplica por 100 y se obtiene el porcentaje de área de átomos que ocupan el plano.

$$FE_p = \frac{(\text{número de átomos dentro del plano})(\text{Área del círculo})}{\text{Área del plano}}$$

- Calcular la Fracción de empaquetamiento planar de un plano 100 en una celda CS



$$FE_p = \frac{\left(\left(\frac{1}{4}\right) * 4\right)(\pi r^2)}{(2r)^2}$$

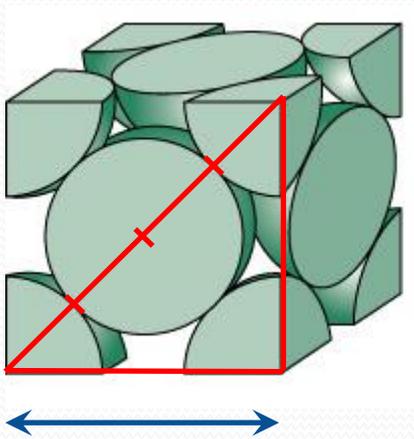
$$FE_p = \frac{1 (\pi r^2)}{(2r)^2} = \frac{\pi}{4} = 0.78 = 78\%$$

Densidad lineal

- Cantidad de puntos de red por unidad de longitud a lo largo de una dirección específica.
- Las direcciones con alta densidad lineal indican direcciones de deformación.

$$\rho_l = \frac{\text{(número de átomos sobre la línea)}}{\text{longitud de la línea}}$$

- Calcular la densidad lineal de la dirección [0 1 1] en una celda FCC de cobre, cuyo radio atómico es de 0.127nm



$$\rho_l = \frac{2}{4r}$$

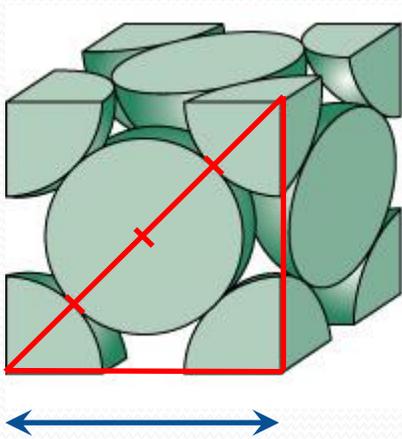
$$\rho_l = \frac{2}{4(0.127)} = 3.93 \text{ átomos/nm}$$

Fracción de empaquetamiento lineal

- Es la fracción de longitud ocupada por átomos dentro de una dirección específica.

$$FE_l = (\textit{Densidad lineal})(\textit{distancia de repetición})$$

- Calcular la Fracción de empaquetamiento lineal en la dirección $[0\ 1\ 1]$ en una celda FCC de cobre, cuyo radio atómico es de 0.127nm



$$FE_l = (\rho_l)(2r)$$

$$FE_l = (3.93)(2r) = 1$$

100%

Esta es una dirección compacta

Bibliografía

- ASKELAND Donald, PHULÉ Pradeep. Ciencia e Ingeniería de los Materiales. Cuarta edición, Thomson, México, 2004.
- ARENAS de Pulido Helena. El estado sólido y propiedades de los materiales. Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, 1994.