

CRISTALOGRAFÍA

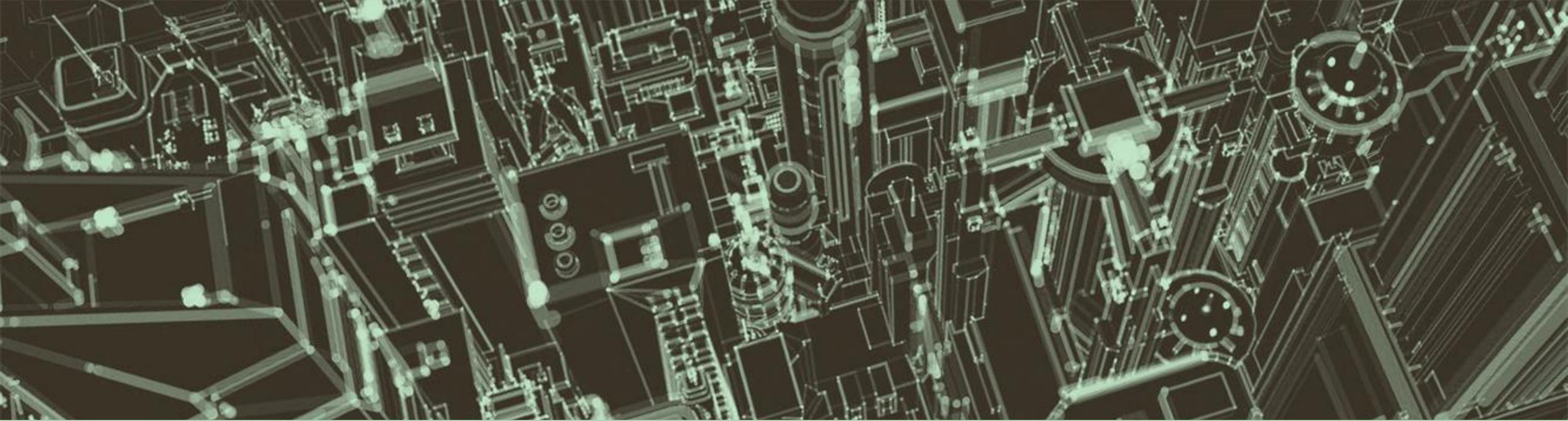
INTRODUCCIÓN A LA CIENCIA DE MATERIALES

2023



Docente y bibliografía

- Docente: Mariana Silva
- Mail: msilva@fing.edu.uy
- BIBLIOGRAFÍA BÁSICA: “Introducción a la ciencia e ingeniería de los materiales”.
W. Callister. Capítulos 3



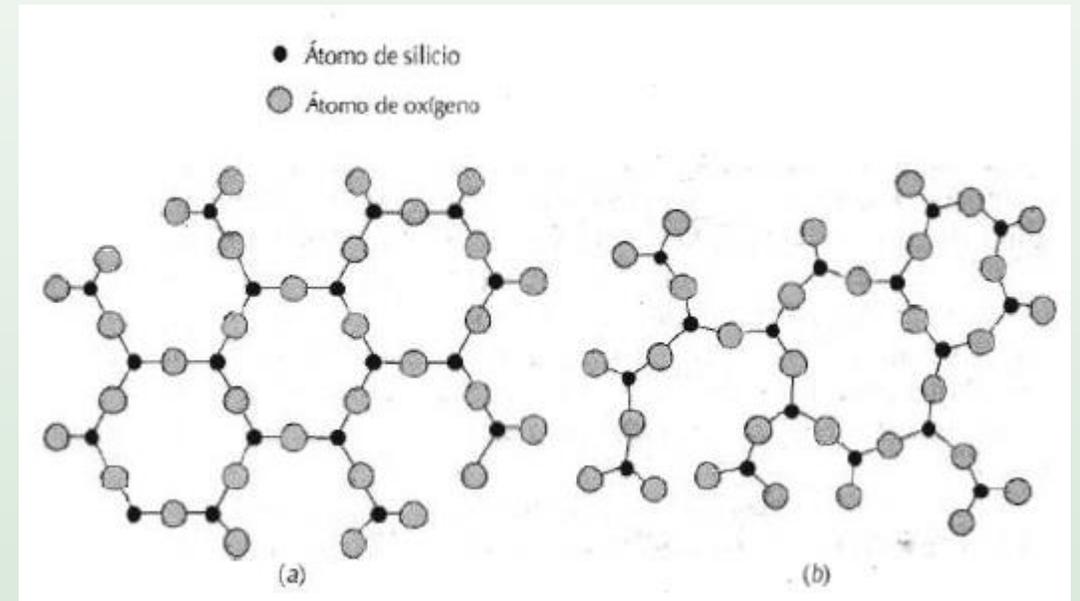
Estructura cristalina



Estructura cristalina

Los sólidos se clasifican según la regularidad con la que los átomos o iones se ubican unos respecto a otros:

- Materiales cristalinos
- Materiales no cristalinos o amorfos



Estructura cristalina

Materiales cristalinos: sus átomos o iones se encuentran agrupados en forma ordenada formando redes cristalinas. Existe un orden de largo alcance. Los átomos o iones se sitúan según un patrón tridimensional repetitivo.

Ejemplo: metales, muchos cerámicos y algunos polímeros.

Materiales amorfos: sus átomos se encuentran en forma dispersa y su distribución corresponde a las leyes del azar

Sólidos cristalinos

Algunas propiedades de este tipo de sólidos depende de la estructura cristalina, de como se ordenan los átomos o iones que lo componen.

Modelo atómico de las esferas rígidas: para realizar el estudio de las estructuras cristalinas, se toma este modelo en el cual los átomos o iones son considerados como esferas rígidas de diámetros definidos

Sólidos cristalinos _ conceptos previos

- Red cristalina: es la posición tridimensional de puntos coincidentes con las posiciones de los átomos.
- Celda unitaria: es la unidad mas pequeña de átomos que forman el patrón que se repite en el espacio. La celda unitaria define la estructura cristalina mediante su geometría y por la posición de los átomos dentro de ella.



Sistemas cristalinos

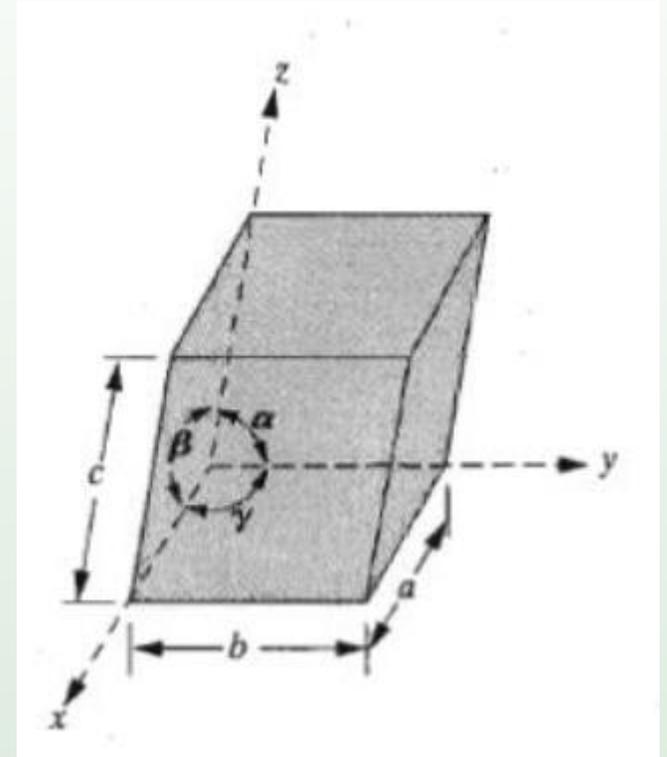
Existen distintas estructuras cristalinas y para su estudio conviene clasificarlas según la configuración atómica de la celda unitaria.

Si para su clasificación nos basamos en la geometría de la celda unitaria, primero debemos establecer un sistema coordenado cuyo origen coincide con un vértice de la celda unitaria

La geometría de la celda unidad queda definida por 6 parámetros:

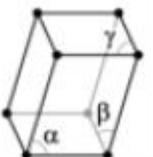
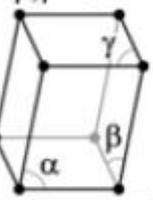
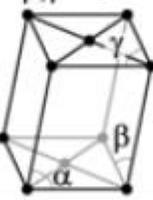
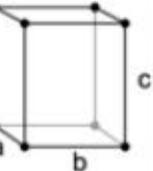
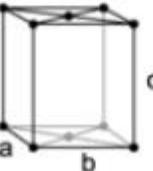
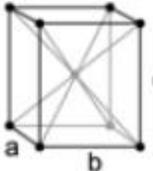
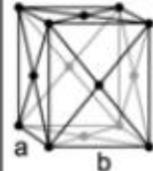
- la longitud de las 3 aristas a , b y c
- los 3 ángulos interaxiales α , β y γ

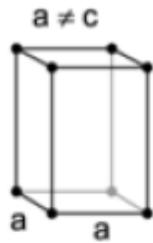
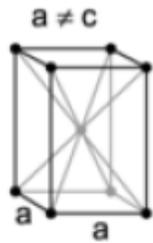
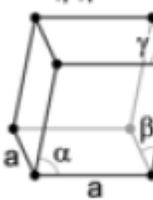
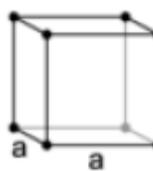
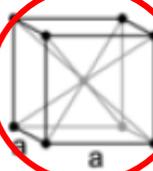
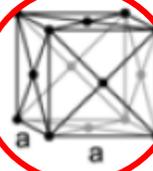
6 PARÁMETROS DE RED



Sistemas cristalinos

Existen 14 tipos posibles de redes espaciales y pueden clasificarse en 7 sistemas cristalinos.

Sistema cristalino	Redes de Bravais			
triclínico	P			
	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 			
monoclínico	P	C		
	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 		
ortorrómbico	P	C	I	F
	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 	$a \neq b \neq c$ 

tetragonal	P	I		
	$a \neq c$ 	$a \neq c$ 		
romboédrico (trigonal)	P			
	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 			
hexagonal	P			
	$a \neq c$ 			
cúbico	P	I	F	
				

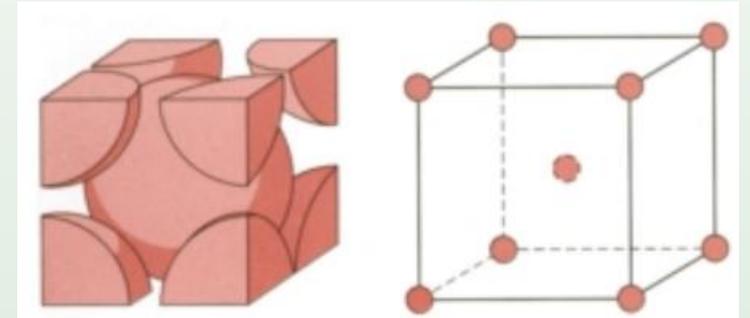
Sistemas cristalinos

La mayoría de los metales importantes se cristalizan en los sistemas cúbicos o en los hexagonales y solo tres tipos de redes espaciales se encuentran comúnmente:

- Cúbica centrada en el cuerpo (BCC)
- Cúbica centrada en las caras (FCC)
- Hexagonal compacta (CPH)

Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (BCC)

- Presenta un átomo en cada esquina del cubo y uno en el centro del cubo.
- El átomo del centro toca a cada átomo de los vértices pero estos no se tocan entre si.
- Los átomos de los vértices son compartidos por ocho cubos adyacentes y el átomo del centro no lo comparte ningún otro cubo.



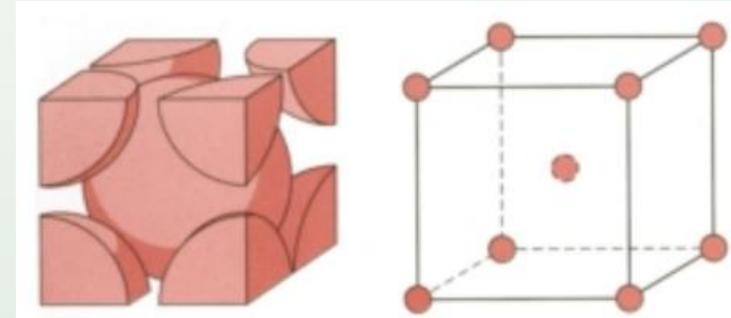
Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (BCC)

La celda unitaria de la estructura BCC contiene:

- 8 átomos en las esquinas $\times 1/8 = 1$ átomo
- 1 átomo central = 1 átomo

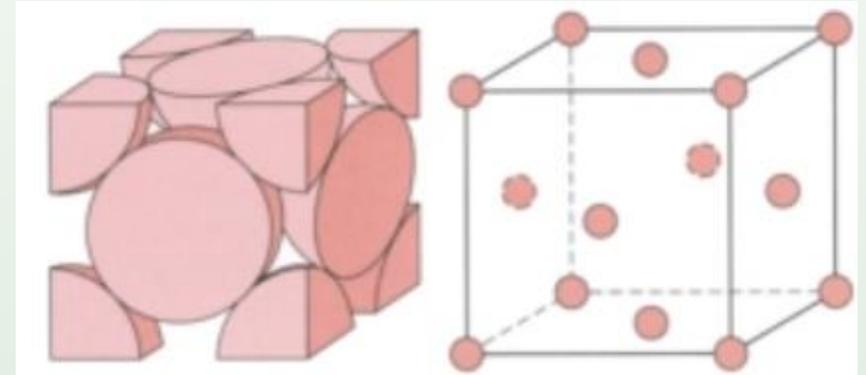
Total = 2 átomos por celda

El Cr, W, Mo, V y Hierro α son ejemplos de metales que cristalizan con una estructura BCC



Estructura cristalina cúbica centrada en las caras (FCC)

- Presenta un átomo en cada esquina del cubo y uno en el centro de cada cara, pero ninguno en el centro el cubo.
- Cada átomo de las caras toca los átomos de las esquinas más próximas.
- Cada átomo de las esquinas lo comparten ocho cubos adyacentes y cada átomo de las caras solo dos cubos adyacentes



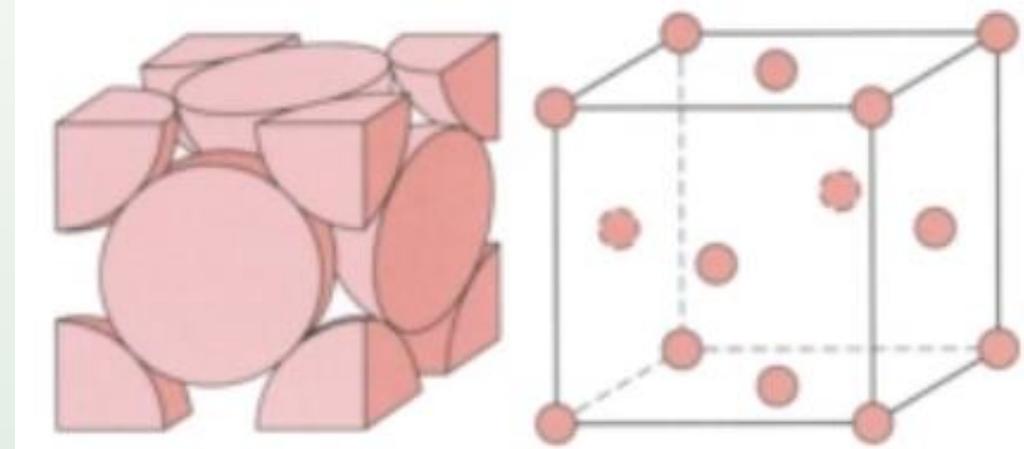
Estructura cristalina cúbica centrada en las caras (FCC)

La celda unitaria de la estructura FCC contiene:

- 8 átomos en las esquinas $\times 1/8 = 1$ átomo
- 6 átomos centrados en la caras $\times 1/2 = 3$ átomos

Total = 4 átomos por celda unitaria

Al, Ni, Cu, Au, Ag, Pb y Pt son ejemplos de metales que cristalizan en la red FCC.

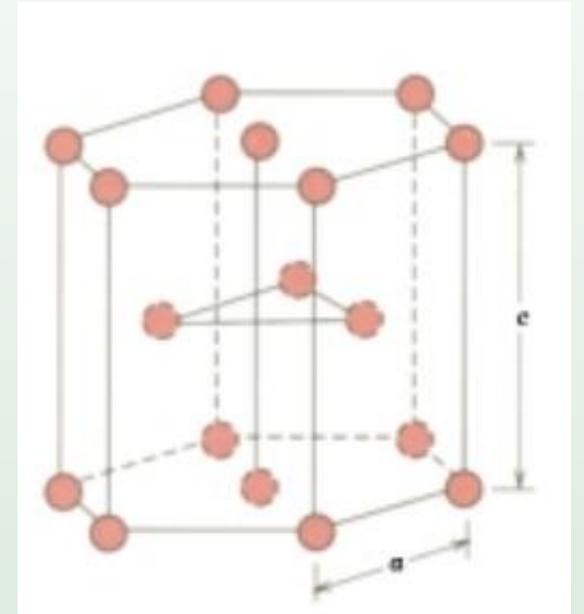


Estructura cristalina hexagonal compacta (CPH)

La red hexagonal compacta presenta dos planos basales en forma de hexágonos regulares, con un átomo en cada vértice del hexágono y uno en el centro.

Además hay tres átomos en forma de triángulo a la mitad de distancia de los planos basales.

Co, Cd y Ti son ejemplos de metales que cristalizan con este tipo de estructura.



Factor de empaquetamiento atómico (FEA)

Definición: Es la fracción del volumen de la celda unitaria que es ocupada por átomos, basándonos en el modelo de esferas rígidas.

Da una idea de que también compactados están los átomos de un material.

Se calcula de la siguiente manera:

$$\text{FEA} = \frac{\text{número de átomos por celda} \times \text{volumen de un átomo}}{\text{volumen de la celda unitaria}}$$

La estructura FCC y CPH están más densamente empaquetadas (FEA = 0.74) que la BCC (FEA = 0.68).

Factor de empaquetamiento atómico (FEA)

$$FEA_{\text{BCC}} = 0.68$$

Volumen del átomo: $\frac{4}{3}\pi r^3$

Largo 'a' en función del radio del átomo: $4r = a\sqrt{3}$

$$FEA_{\text{FCC}} = 0.74$$

Volumen del átomo: $\frac{4}{3}\pi r^3$

Largo 'a' en función del radio del átomo: $4r = a\sqrt{2}$

$$FEA_{\text{CPH}} = 0.74$$

Cálculo teórico de la densidad

$$\rho = \frac{m}{V}$$

$$\rho = \frac{nA}{V_C N_A}$$

Donde: n es el número de átomos por celda

A peso atómico

V_C volumen de la celda unitaria

N_A número de Avogadro (6.023×10^{23} átomos/mol)

Cálculo teórico de la densidad

Calcular la densidad teórica del Cu sabiendo su radio atómico es de 0,128 nm, solidifica en FCC y el peso atómico es 63,5 g/mol

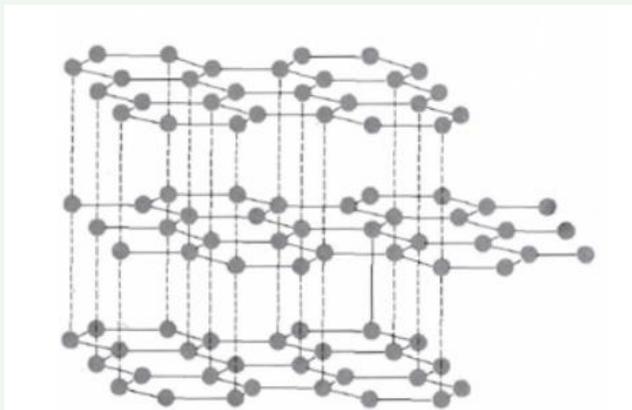
Polimorfismo y alotropía

- Es la propiedad que presentan algunos metales y no metales de **poseer varias estructuras cristalinas** en el estado sólido.
- Como regla general: las fases quedan definidas por la P y T externas (ejemplo: agua)
- Si se refiere a un elemento químico, se llama alotropía. Si se refiere a una aleación, se llama polimorfismo.

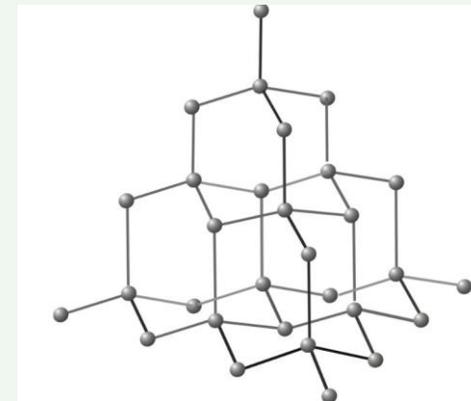
Polimorfismo y alotropía

Ejemplo: El carbono presenta 2 estructuras: grafito y diamante

El grafito es estable en condiciones ambiente, mientras que el diamante se forma a presiones elevadas.



Grafito



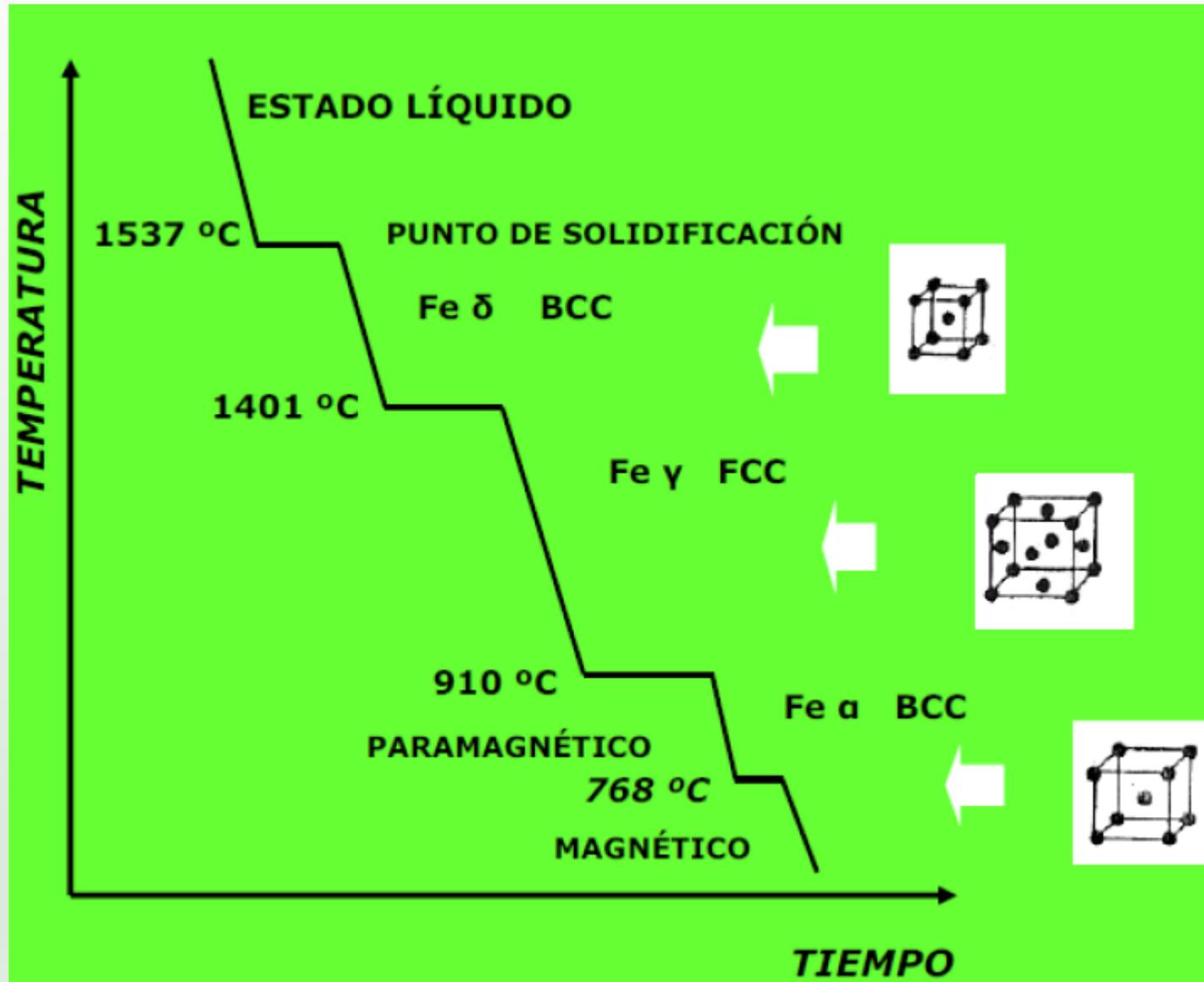
Diamante

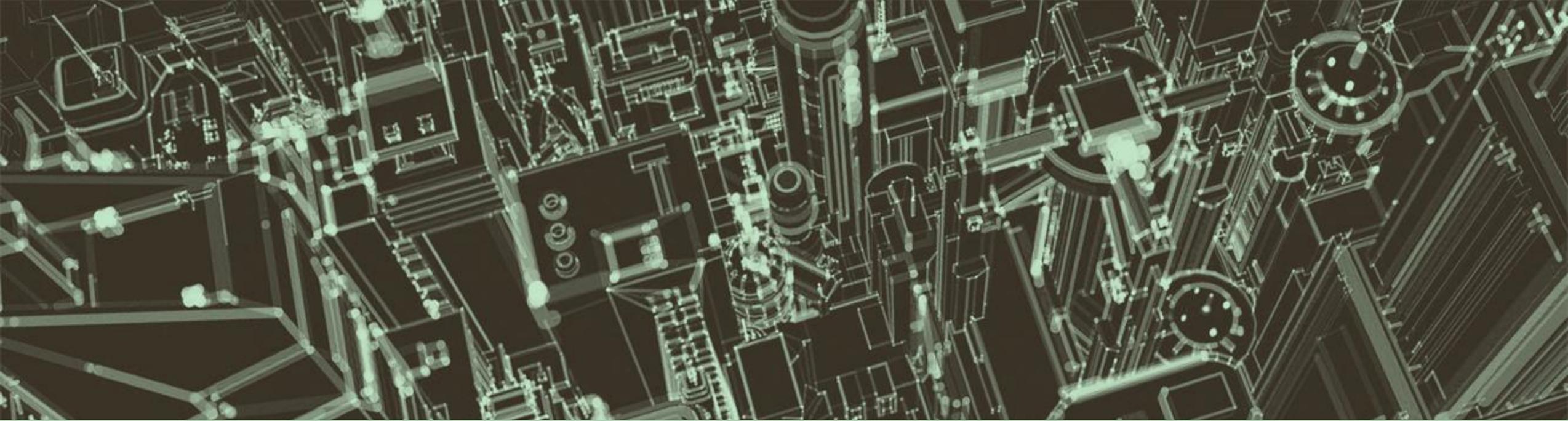
Polimorfismo y alotropía

Varios metales presentan esta propiedad, dentro de ellos el hierro (Fe).

- El hierro puro tiene estructura BCC a temperatura ambiente y cambia a FCC a 912°C.
- Las transformaciones polimórficas en general van acompañadas de cambios en la densidad y de otras propiedades físicas.

Diagrama de enfriamiento del Fe desde el estado líquido





Índices de Miller



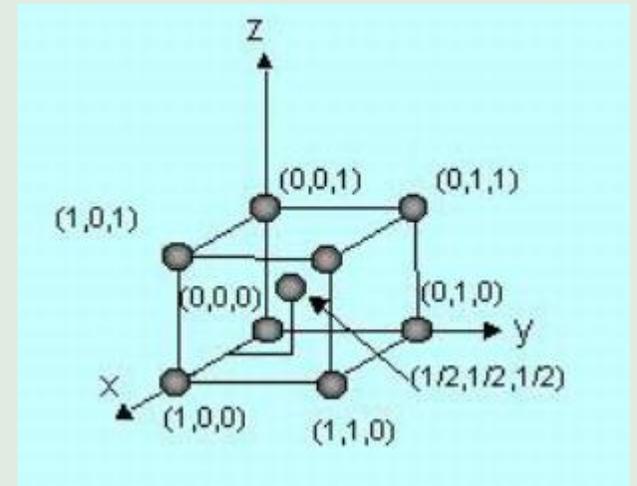
Planos y direcciones cristalográficas

Las capas de átomos o los planos en donde están ordenados los átomos se llaman planos atómicos o cristalográficos.

Existe una convención para designar las direcciones y planos:

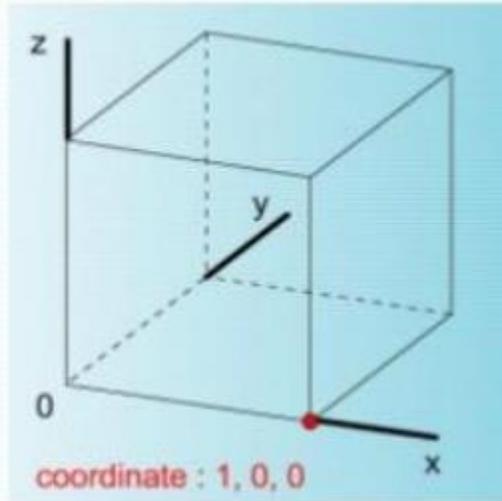
ÍNDICES DE MILLER

La relación que guarda un conjunto de planos con los ejes de la celda unitaria se designa por los índices de Miller (3 números enteros)

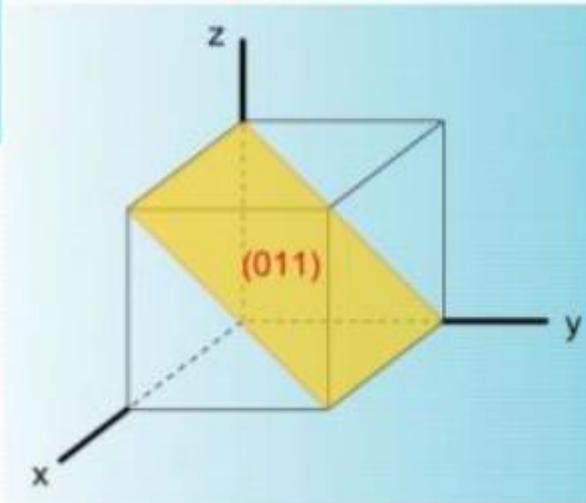


Índices de Miller

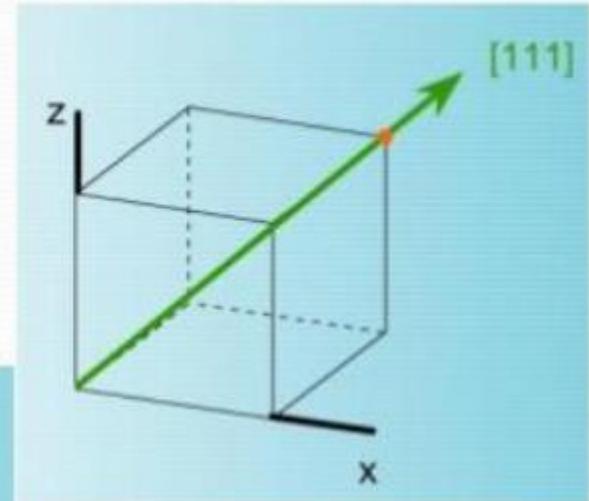
COORDENADAS



PLANOS



VECTORES

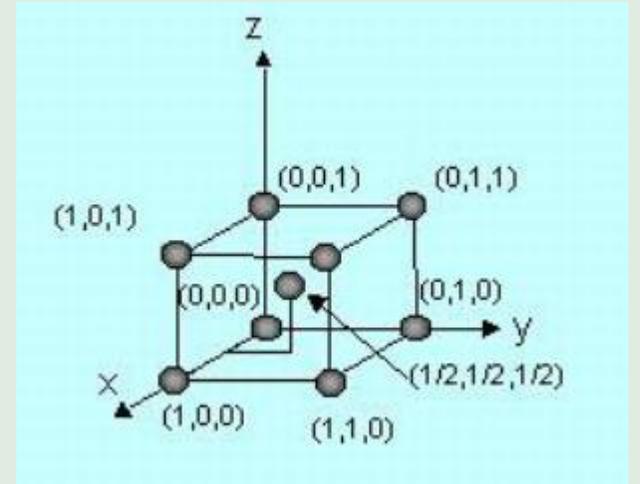


Índices
de Miller

Índice de Miller

A tener en cuenta:

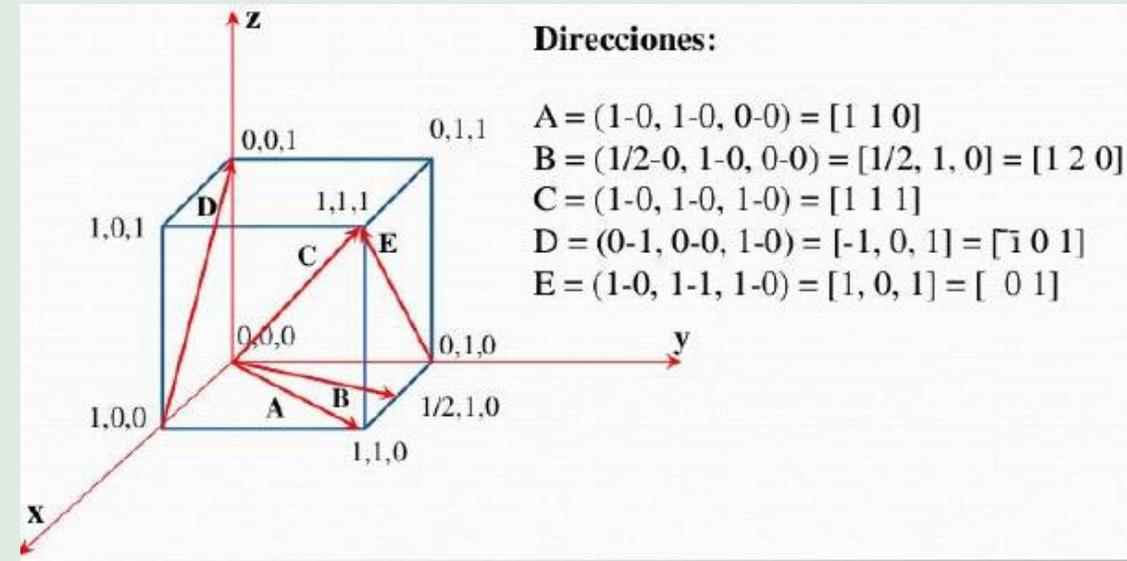
- Se establece que una esquina de la celda unitaria sea le origen de las coordenadas espaciales.
- La unidad de la coordenadas es el parámetro de la red del cristal (1) y si un plano es paralelo a un eje, lo intercepta en el infinito (0).



Índices de Miller de direcciones cristalográficas

Procedimiento para determinar las direcciones cristalográficas:

1. Determinar las coordenadas del punto inicial y final.
2. Restar las coordenadas del punto final menos el inicial.
3. Eliminar las fracciones.
4. Encerrar los índices entre [].
5. Los números negativos se interpretan con una barra horizontal sobre el número.



Índices de Miller de direcciones cristalográficas

Ejercicio: Indicar la dirección $[0\ 3\ \bar{1}]$

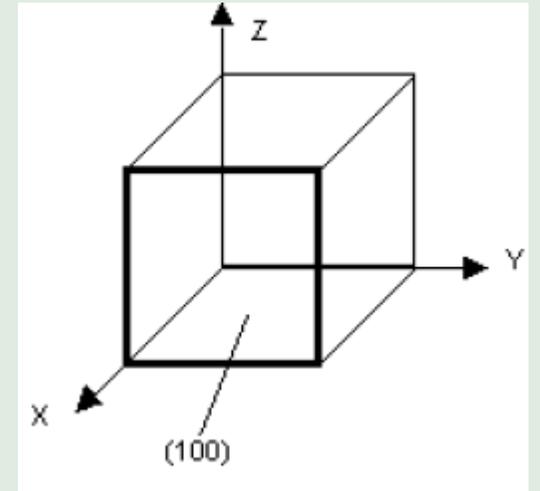
-

Ejercicio: Indicar la dirección $[0\ 3\ \bar{1}]$

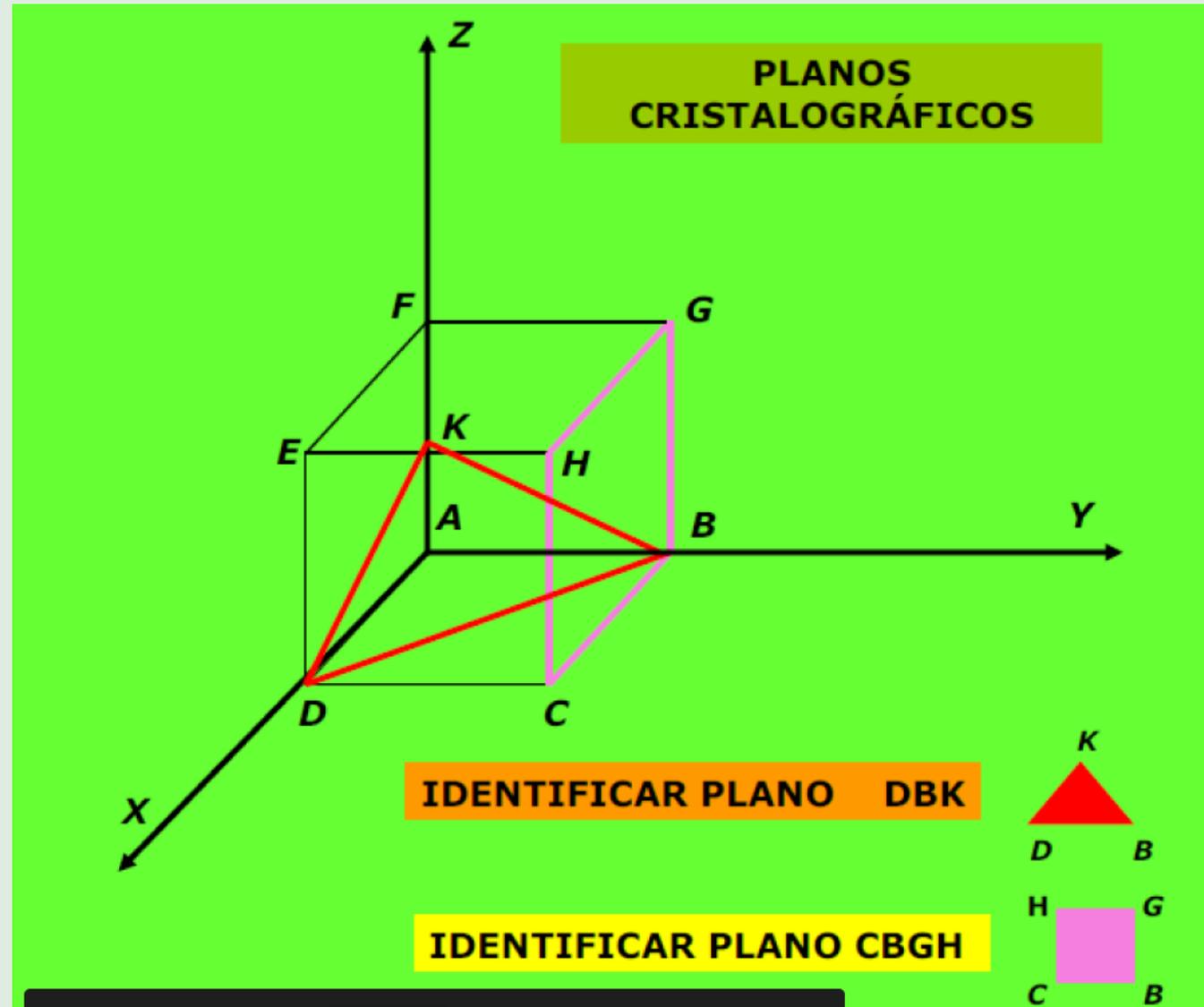
Índice de Miller de planos cristalográficos en celdas cúbicas

Para obtener los índices de Miller de un plano cristalográfico:

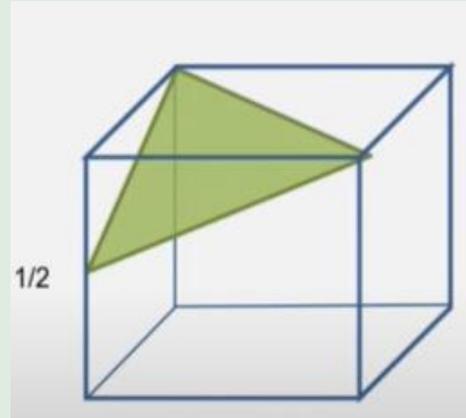
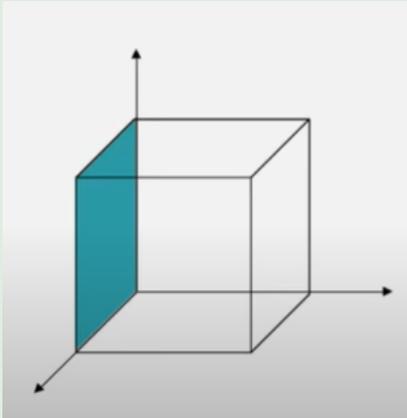
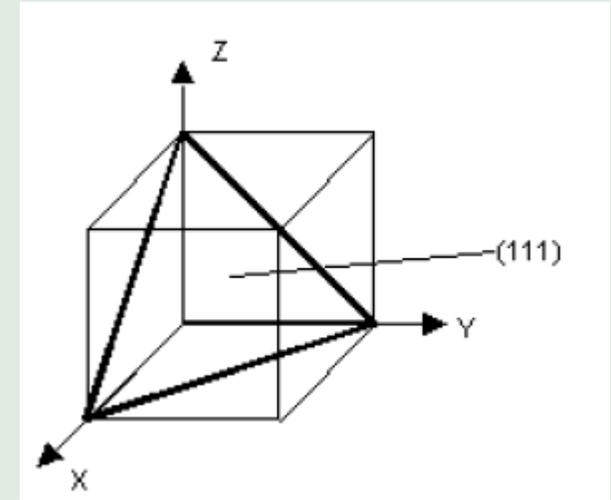
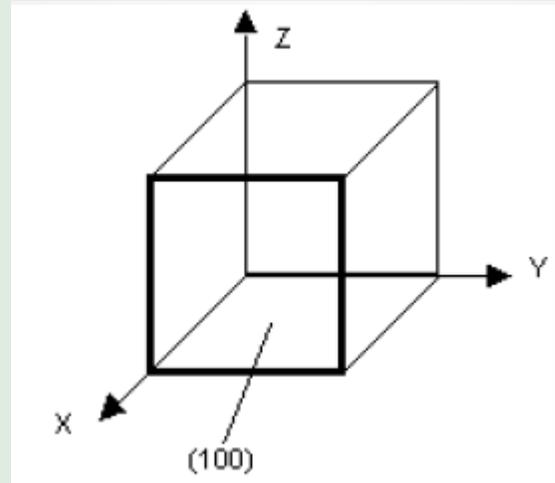
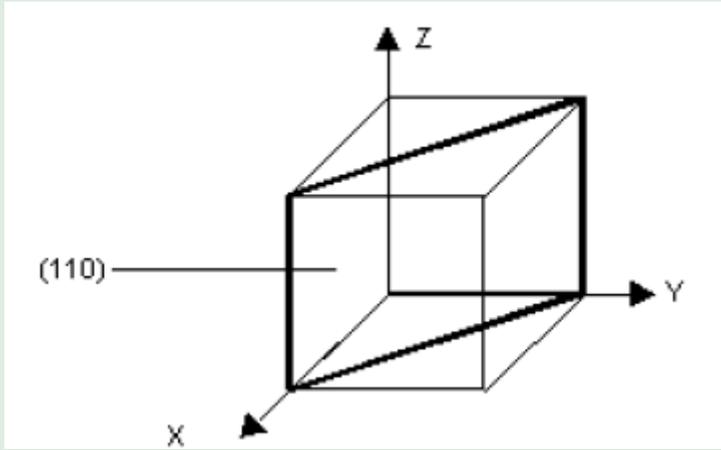
1. Primero determinamos la intersección de este con los ejes
2. Una vez obtenidos los números, se hallan sus inversos y los multiplicamos por el mínimo común múltiplo
3. Los números negativos se interpretan con una barra horizontal sobre el número.
4. Utilizar paréntesis curvos ().



Índice de Miller – Ejemplos de planos



Índice de Miller – Ejemplos de planos

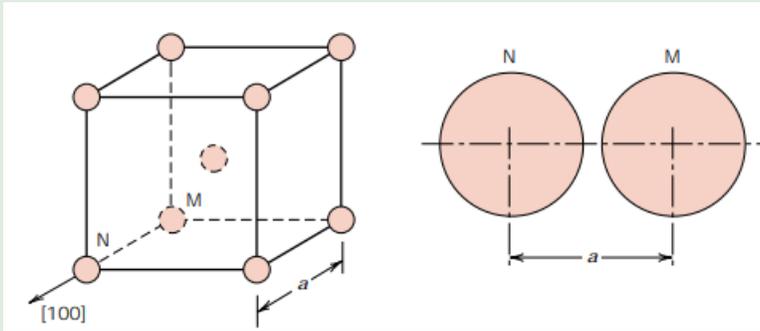


Dibujar el plano $(0\ 3\ \bar{1})$

Densidad atómica lineal

Densidad lineal (D_L): es la fracción de longitud de línea que pasa a través de los centros de dos átomos.

$$D_L = \frac{\text{número de átomos en el vector}}{\text{longitud del vector}} \quad (\text{átomos/cm})$$



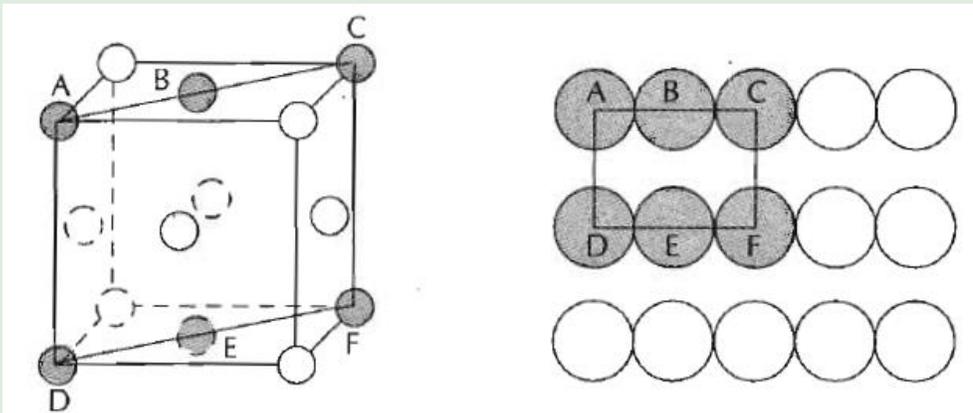
Calcular la D_L de la dirección [1 0 0] de la estructura BCC

Densidad atómica planar

Densidad planar (D_P): es la fracción del área del plano cristalográfico ocupada por átomos.

El plano debe pasar por el centro del átomo para que este se pueda incluir.

$$D_P = \frac{\text{número de átomos en el plano}}{\text{área del plano}} \quad (\text{átomos/cm}^2)$$



Calcular la D_P del plano (1 1 0) de la estructura FCC

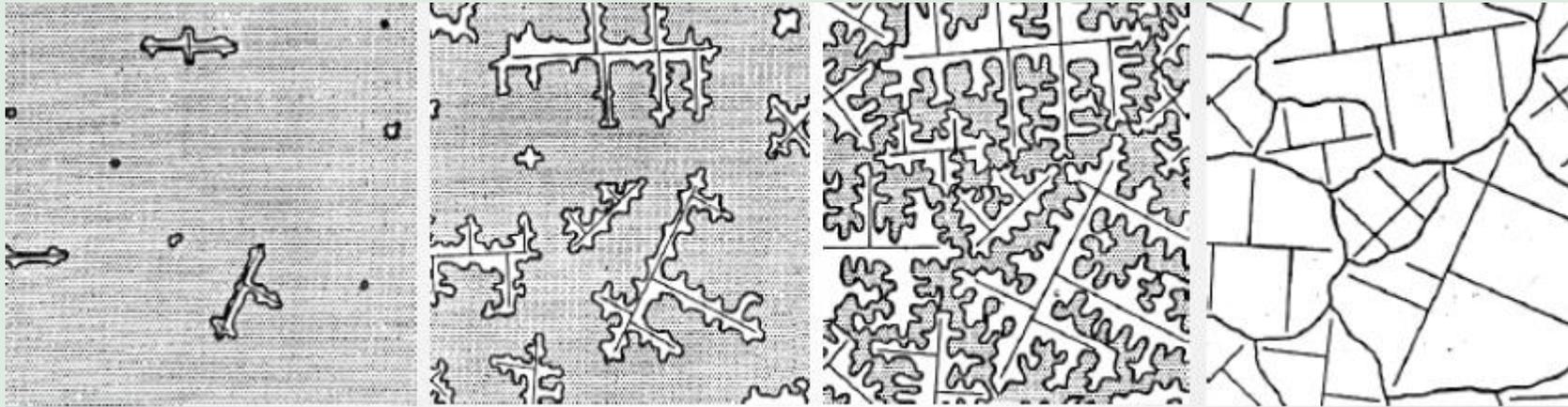
Materiales mono y policristalinos

La mayoría de los sólidos cristalinos están formados por muchos cristales pequeños, también llamados granos. También es posible obtener materiales formados por un solo cristal, llamados monocristal.

Al comienzo de la solidificación de estos materiales, aparecen pequeños núcleos o cristales en distintas posiciones, cuya orientación cristalográfica es al azar. Los granos pequeños crecen adicionando átomos y los extremos de los granos adyacentes interaccionan entre sí al finalizar la solidificación.

La orientación cristalográfica varía de un grano a otro y en la zona del límite de grano existen irregularidades en la disposición atómica.

Avance de la solidificación en materiales policristalinos



Monocristales

La disposición atómica en los monocristales es la de una red perfecta.

Cuando el monocristal crece sin impedimentos externos, el cristal crece adquiriendo una forma geométrica regular con caras planas.



Anisotropía

La anisotropía es la propiedad de determinados monocristales en los que la magnitud de determinadas propiedades físicas depende de la dirección cristalográfica en que se mida.

Si las propiedades físicas son independientes de la dirección en que se mida, entonces el material es isotrópico

En los materiales policristalinos, la orientación cristalográfica en cada grano es al azar. Si bien cada grano puede ser anisotrópico, el material compuesto por un conjunto de granos se comporta de manera isotrópica.

La magnitud de la propiedad medida, será el promedio de los valores en las distintas direcciones.