

ANEXOS

ANEXO No.1



ANEXO No. 2

- Entregar un esquema de la estructura cúbica centrada en las caras, en donde se indique el número de átomos que se encuentran dentro de la celda.
- Entregar por escrito una tabla con los 7 sistemas cristalinos y las 14 redes de Bravais.
- Entregar por escrito una lista de 15 metales en donde se especifique en cada uno el tipo ó tipos de estructuras cristalinas que presentan.

ANEXO No. 3

- Entregue por escrito cuales son las estructuras cristalinas más importantes en metales y esquematícelas.
- Elaborar un cubo en hielo seco en donde se especifiquen los valores estándares de sus lados y entregarlo.
- Dibuje en un papel cuadriculado la estructura cúbica centrada en el cuerpo, en donde se represente el número de átomos que hay dentro de la celda.
- Entregar por escrito y resueltos los siguientes problemas:
 - El potasio a 20°C es BCC y tiene un radio atómico de 0.238nm. calcule el valor de la constante de red en mm.
 - El tungsteno a 20°C es BCC y tiene un radio atómico de 0.141nm, calcular la constante de red en cm.
 - El sodio a 20°C es BCC y tiene una constante de red de 0.429nm, calcule su radio atómico en mm.

ANEXO No. 4

- Entregar por escrito una investigación sobre un metal que tenga estructura cúbica centrada en las caras, en donde indique propiedades físicas, químicas y que usos y aplicaciones tiene.
- Resolver los siguientes problemas y entregarlos por escrito:
 - El hierro tiene una estructura cristalina FCC a una temperatura mayor de 912°C y tiene una constante de red de 0.408nm ; calcule el valor del radio atómico de un átomo de hierro en nm.

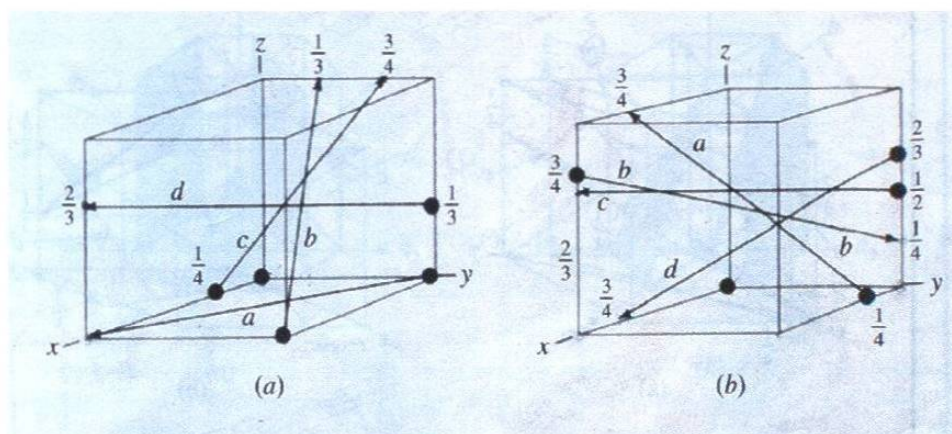
 - La plata tiene una estructura cristalina FCC a una temperatura de 20°C y tiene una constante de red de 0.409nm ; calcule el valor del radio atómico de un átomo de hierro en mm.
 - El plomo a 20°C es FCC y tiene un radio atómico de 0.175nm , calcular la constante de red en cm.

 - El platino a 20°C es FCC y tiene un radio atómico de 0.139nm , calcular la constante de red en mm.

 - El aluminio tiene una estructura cristalina FCC a una temperatura de 20°C y tiene una constante de red de 0.405nm ; calcule el valor del radio atómico de un átomo de aluminio en mm.

ANEXO No. 5

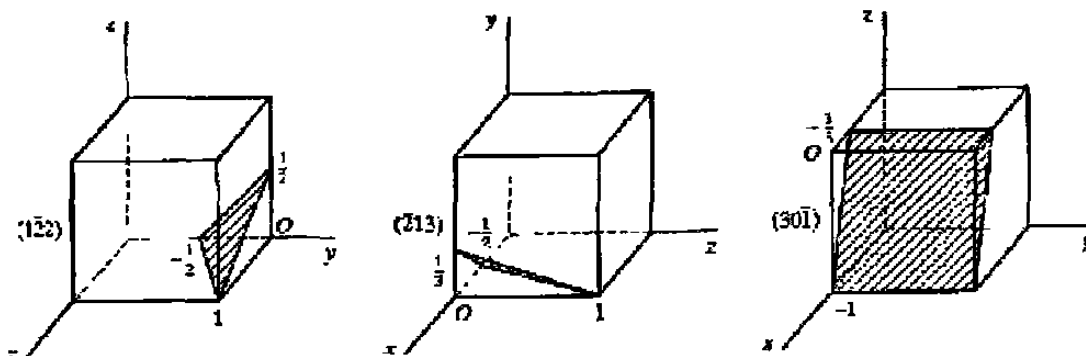
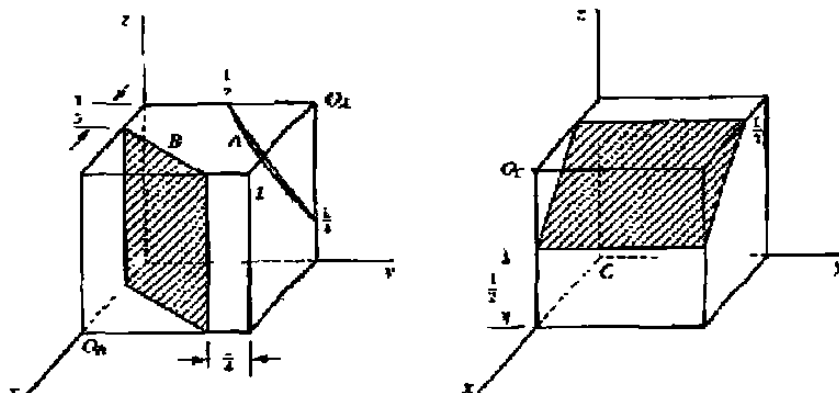
- Entregar por escrito y resueltos los siguientes problemas:
 - El cadmio a 20°C es HCP; utilizando como valor de su radio atómico 0.148nm. Calcule el volumen de su celdilla unidad. Considere un factor de empaquetamiento de 0.74.
 - Esquematice en un papel milimétrico la estructura FCC en donde se representen sus átomos, coloque en cada átomo el valor de su posición.
 - Calcule los índices de dirección de los vectores que se encuentran en las siguientes figuras.



- Dibuje los vectores en celdas cúbicas a partir de los siguientes índices de Dirección.
 - [212̄]
 - [323̄]
 - [203̄]
 - [100]
 - [102̄]

ANEXO No.6

- De la celda mostrada a continuación calcule los índices de Miller para los planos ahí mostrados.



- De los siguientes índices de Miller dibuje los planos en celdas unidad cúbicas.

$(\bar{2}\bar{1}\bar{3})$	$(\bar{2}32)$
(321)	(122)
(312)	(223)
$(20\bar{3})$	

- A partir de los siguientes índices de Miller – Bravais, dibuje los planos cristalinos en celdas HCP.

$$(10\bar{1}\bar{1}) \quad (12\bar{1}\bar{2}) \quad (1\bar{2}1\bar{2})$$

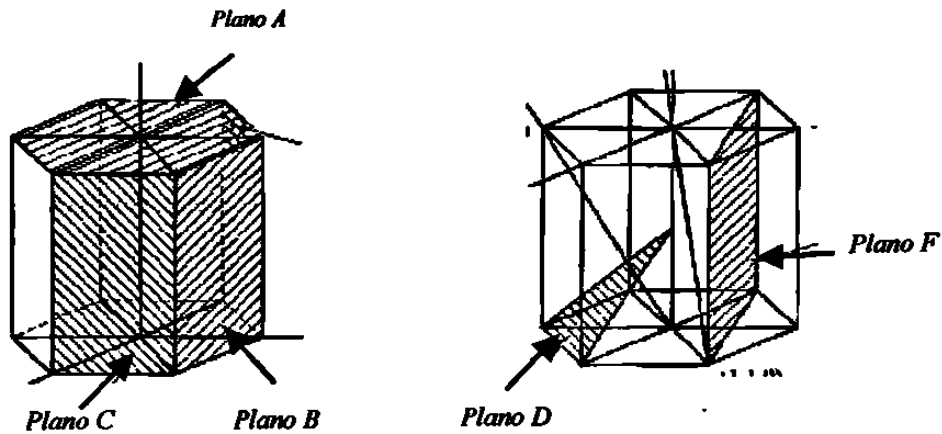
$$(\bar{1}2\bar{1}\bar{0}) \quad (\bar{1}\bar{1}01) \quad (2\bar{2}00)$$

- El calcio es FCC y tiene una constante de red igual a 0.5582nm. calcule los siguientes espaciamentos interplanares:

$$(\bar{2}10) \quad (\bar{3}12)$$

$$(211)$$

- En la siguiente figura se muestran los planos de la celda HCP, determine sus Índices de Miller – Bravais.



ANEXO No.7

- Investigue similitudes y diferencias entre las celdas FCC y HCP, en fuentes bibliográficas diferentes al libro de texto. Realícelo en forma de tabla.

ANEXO No.8

- La constante de red del carbono es $a= 0.24612\text{nm}$ y $c=0.67078\text{nm}$, cuya estructura cristalina es HCP, así como su peso atómico es 12.01115 g/mol . Calcule su densidad en g/cm^3 .
- Calcule la densidad del paladio en g/cm^3 ; si su constante de red $a= 0.38907\text{nm}$ y su peso atómico es 106.4 g/mol .
- Calcule la densidad atómica planar en átomos/nm^2 para los planos cristalinos (111), (001) y (110) en el platino, que tiene una constante de red de 0.39239nm y una estructura FCC.
- Calcule la densidad atómica planar en átomos/mm^2 para los planos cristalinos (111), (001) y (110) en el bario, que tiene una constante de red de 0.5019nm y una estructura BCC.

ANEXO No.9

- Calcule la densidad atómica lineal en átomos/mm, para las siguientes direcciones en el tantalio con estructura cristalina BCC, que tienen una constante de red a de 0.33.026nm.
a) [100] b) [110] c) [111]

- Calcule la densidad atómica lineal en átomos/nm para las siguientes direcciones en el cobre con estructura cristalina FCC, que tienen una constante de red a de 0.36147nm.
a) [100] b) [110] c) [111]

- Calcule la densidad atómica lineal en átomos/nm para las siguientes direcciones en el tungsteno con estructura cristalina BCC, que tienen una constante de red a de 0.31648nm.
a) [010] b) [011] c) [101]

- El hierro es un metal alotrópico, haga un esquema en donde indique las temperaturas a las cuales sufre cambio y que estructura se presenta en dichos cambios; así como las fases que presenta.

ANEXO No.10

- Dibuje un diagrama esquematizado de un tubo de rayos X de uso en difracción e indique el camino de los electrones y de los rayos X.
- ¿Cuál es la característica de la radiación de los rayos X y cuál es su origen?
- Una muestra de metal BCC, fue colocada en un difractómetro de rayos X utilizando radiación X de longitud de onda igual a 0.1541nm a $2\theta = 101.502^\circ$; se obtiene difracción a partir de los planos (310). Calcule el valor de la constante de red a para éste metal elemental BCC. Considere primer orden de difracción $n=1$.
- Rayos X de longitud de onda desconocida son difractados por una muestra de níquel. El ángulo 2θ era 102.072° ; para los planos (220). ¿Cuál es la longitud de onda de los rayos X utilizados? la constante de red del níquel es de 0.352236nm ; considérese primer orden de difracción $n=1$.

ANEXO No.11

ESTRUCTURAS Y GEOMETRIA CRISTALINAS

Tema II

- **REDES ESPACIALES Y CELDAS UNIDAD**

La importancia en la Ingeniería, de la estructura física de los materiales sólidos depende:

- * De la disposición de los átomos, iones ó moléculas que constituyen el sólido
- * De las fuerzas de enlace entre ellos

Cristaloquímica: ciencia que estudia las estructuras de materiales cristalinos

Cristal o sólido cristalino: es un sólido compuesto de átomos, iones o moléculas ordenados de una cierta forma y que se repite en 3 dimensiones.

Estructura cristalina: modelo regular de 3 dimensiones de átomos o iones en el espacio.

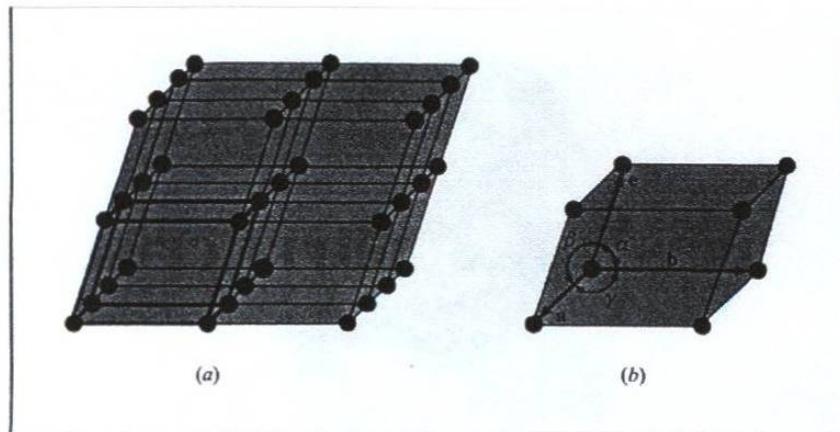
Ejemplos: metales, aleaciones y cerámicos.

Retículo ó red Espacial: es una disposición de puntos tridimensional infinita. (fig.3.1 a)

Celda Unidad: es la unidad mas pequeña de una estructura cristalina en 3 dimensiones, la cual muestra la simetría completa de la estructura.

El tamaño y la forma de la celda unidad puede describirse por 3 vectores reticulares a,b y c (se originan a partir de un vértice).

Las longitudes axiales a,b y c, y los ángulos interaxiales α , β y γ son las constantes reticulares de la celda unidad. (fig.3.1b)

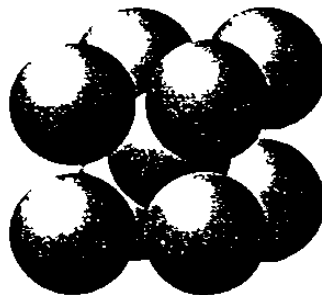


Numero de átomos por celda unidad: es el producto del numero de átomos por punto reticular multiplicado por el numero de puntos de red por celda unidad

$1/8$ punto de red- esq. X 8 esq. Celda = 1 punto de red de celda

Numero de coordinación: es el numero de átomos que se encuentran en contacto con un átomo en particular, o el numero de átomos vecinos mas cercanos.

	No. Coord
Cúbica simple	6
Cúbica centrada en el cuerpo	8
Cúbica centrada en las caras	12
Hexagonal compacta	12



- SISTEMAS CRISTALINOS Y REDES DE BRAVAIS

Hay 7 formas fundamentales de celdas unidad, llamadas también sistemas cristalinos (tabla 3.1)

TABLA 3.1. Clasificación de retículos espaciales en sistemas cristalinos

Sistema cristalino	Longitudes axiales y ángulos interaxiales	Retículos espaciales
Cúbico	3 ejes iguales en ángulos rectos $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Cúbico sencillo Cúbico centrado en el cuerpo Cúbico centrado en las caras
Tetragonal	3 ejes en ángulos rectos, dos de ellos iguales $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Tetragonal sencillo Tetragonal centrado en el cuerpo
Ortorrómico	3 ejes distintos en ángulos rectos $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Ortorrómico sencillo Ortorrómico centrado en el cuerpo Ortorrómico centrado en las bases Ortorrómico centrado en las caras
Romboédrico	3 ejes iguales, inclinados por igual $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Romboédrico sencillo
Hexagonal	2 ejes iguales a 120° y a 90° con el tercero $a = b \neq c$, $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$	Hexagonal sencillo
Monoclínico	3 ejes distintos, dos de ellos no forman 90° $a \neq b \neq c$, $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Monoclínico sencillo Monoclínico centrado en la base
Triclínico	3 ejes distintos con distinta inclinación, y sin formar ningún ángulo recto $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Triclínico sencillo

Los 7 sistemas cristalinos presentan variaciones de la celda unidad básica, estas se llaman las 14 Redes de Bravais (fig.3.2)

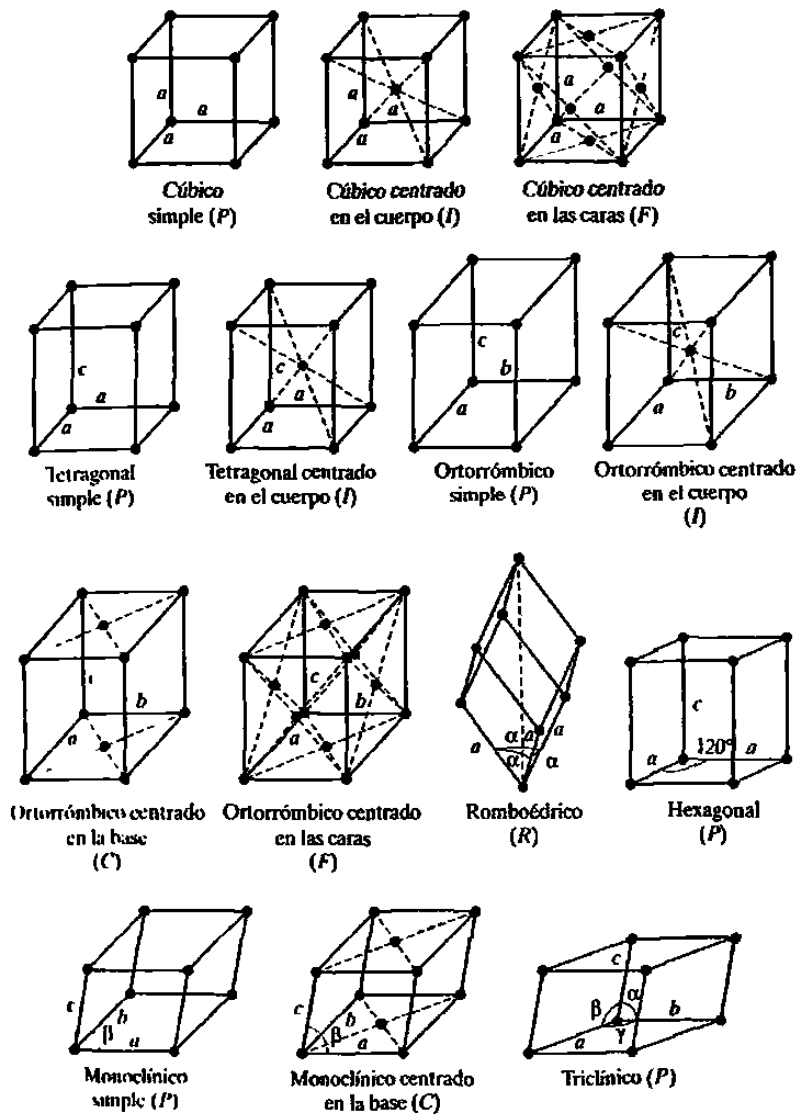


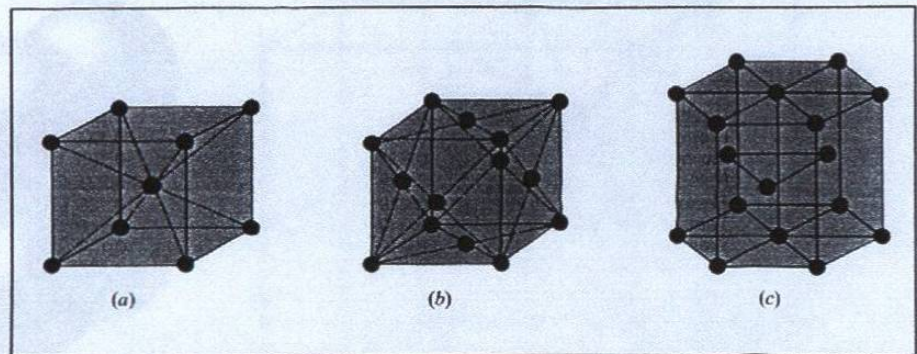
Fig. 2-4 Las 14 redes de Bravais.

ANEXO No.12

• PRINCIPALES ESTRUCTURAS CRISTALINAS METALICAS

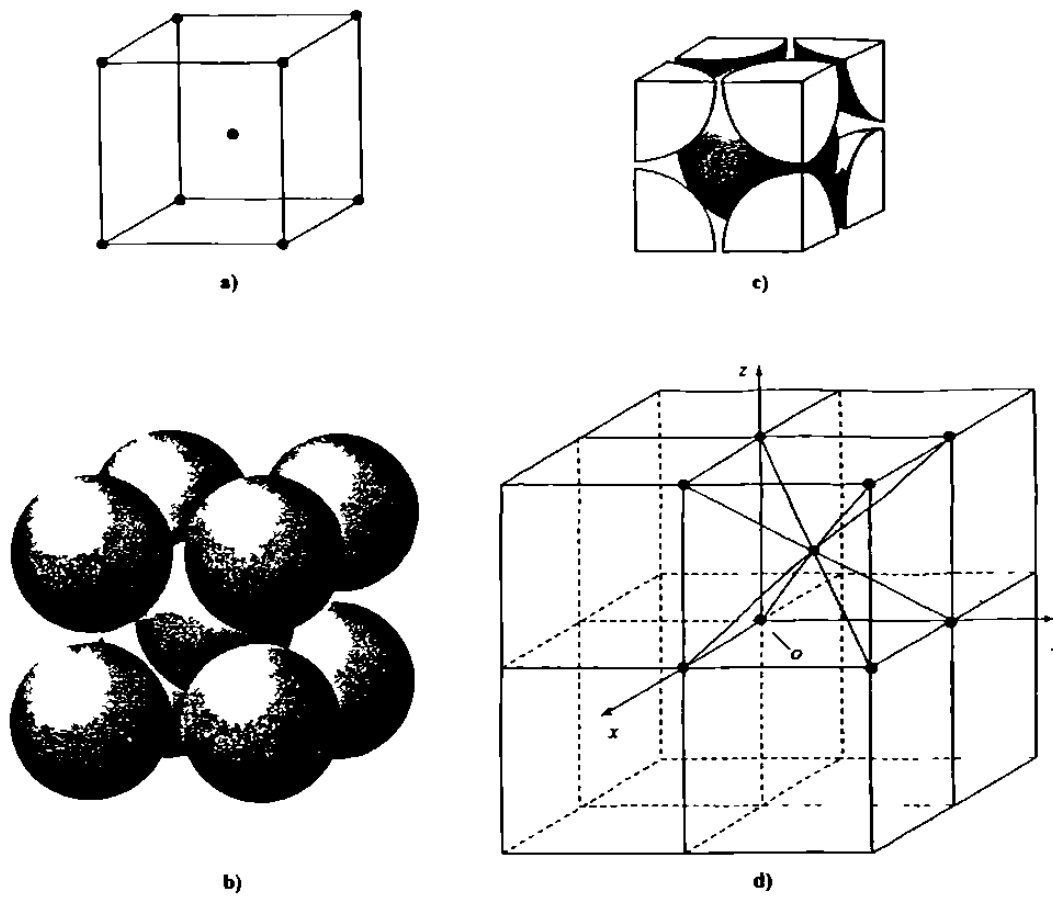
- Cúbica centrada en el cuerpo (BCC) fig. 3.3. a
- Cúbica centrada en las caras (FCC) fig. 3.3. b
- Hexagonal compacta (HCP) fig. 3.3.c

Figura 3.3. Celdillas unidad de las principales estructuras cristalinas metálicas— (a) cúbica centrada en el cuerpo; (b) cúbica centrada en las caras; (c) hexagonal compacta.



• ESTRUCTURA CRISTALINA CUBICA CENTRADA EN EL CUERPO (BCC)

- En esta celda unidad las esferas sólidas representan los centros donde los átomos están localizados
- Si representamos los átomos como esferas rígidas. El átomo central se encuentra rodeado por los otros 8 vecinos por lo tanto su número de coordinación = 8
- Si aislamos una celda unidad sencilla de esferas rígidas un átomo completo está localizado en el centro y 1/8 de esfera está localizado en cada vértice de la celda unidad, haciendo el equivalente de otro átomo.
- Por lo tanto $1 (\text{centro}) + 8 \times 1/8 (\text{vértices}) = 2 \text{ átomos. (fig.3.3.1)}$



a) longitud de la Cara del cubo. (Fig.3.5)

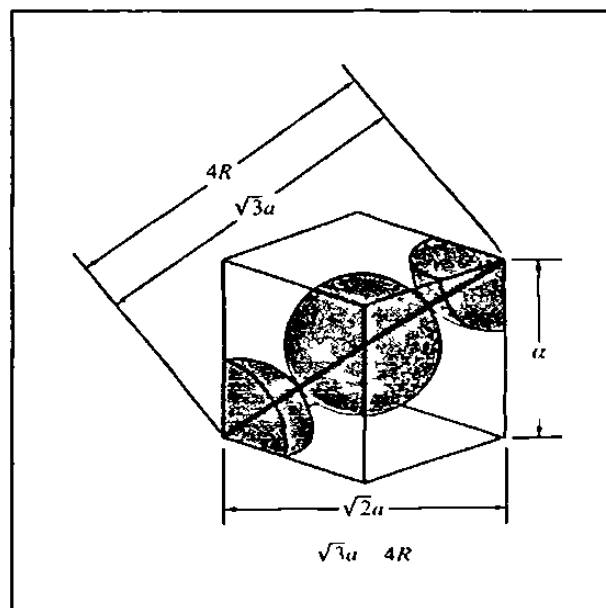


Figura 3.5.
 Celdilla unidad BCC
 que muestra la relacion
 entre la constante
 de red a y el radio
 atomico R .

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

Donde:

a.-long. Cara del cubo

R.- radio atómico (tabla 3.2)

TABLA 3.2. Metales seleccionados que tienen la estructura cristalina BCC a temperatura ambiente (20 °C) y sus constantes reticulares (arista del cubo, a) y radios atómicos (R)

Metal	Constante reticular (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	0,185
Tántalo	0,330	0,143
Wolframio	0,316	0,137
Vanadio	0,304	0,132

Ej. El hierro a 20°C presenta una estructura BCC con átomos de radio atómico 0.124nm. Calcular la constante de red a para el lado del cubo de la celda unidad del Fe.

$$a = \frac{4R}{3} = \frac{4(0.124nm)}{3} = 0.2864nm$$

ANEXO No.13

b)Factor de empaquetamiento: si los átomos en la celda BCC se consideran esféricos, el factor de empaquetamiento atómico (APF) es igual a 0.68 ó 68%, es decir, que éste % esta ocupado por átomos y el 32% esta vacío, y puede calcularse de la siguiente manera:

$$\text{APF} = \frac{\text{volumen de átomos en la celda}}{\text{volumen de la celda unidad}}$$

Ej. Calcúlese el APF para la celda unidad BCC, suponiendo que los átomos son esferas macizas.

Hay 2 átomos por celda unidad BCC, el volumen de dichos átomos de radio R es:

$$V_{\text{átomos}} = 2\left(\frac{4}{3}\pi R^3\right) = 8.373R^3$$

El volumen de la celda BCC es:

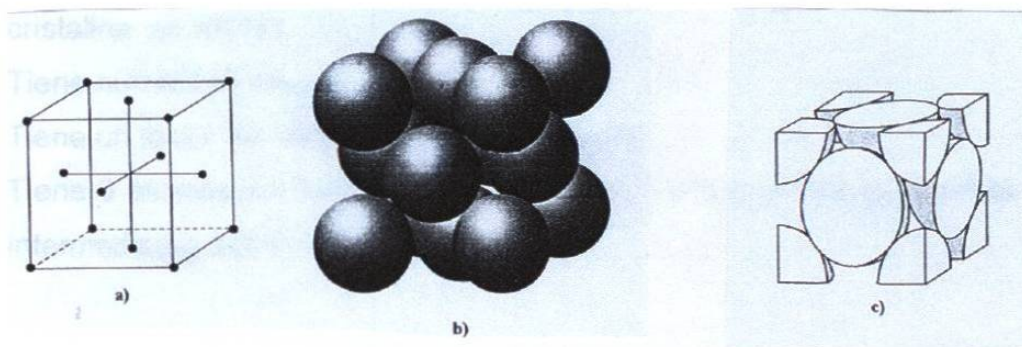
$$V_{\text{celda unidad}} = a^3 = \frac{4R}{3} = 12.32R^3$$

Por lo tanto:

$$\text{APF} = \frac{V_{\text{átomos/celda unidad}}}{V_{\text{celda unidad}}} = \frac{8.373R^3}{12.32R^3} = 0.68$$

- ESTRUCTURA CRISTALINA CUBICA CENTRADA EN LAS CARAS (FCC)
- * En esta celda unidad hay un punto reticular en cada vértice del Cubo y otro en el centro de cada cara del cubo.
- * El modelo de esferas sólidas indica que los átomos están unidos lo mas compacto posible

- * La celda FCC tiene 4 átomos por celda unidad
- * Los 8/8 de átomo de los vértices cuentan por 1 ($8 \times 1/8 = 1$) y los 6/2 átomos en las caras del cubo contribuyen con 3 átomos mas, dado un total de 4 átomos por celda unidad.



El APF para la estructura FCC es 0.74 y es el máximo posible para empaquetamiento de átomos esféricos. Y para esta estructura la longitud de la cara del cubo a (fig.3.7) es:

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$

Nota: muchos metales como Al, Cu, Pb, Ni y Fe a elevadas temperaturas (912 a 1394°C) cristalizan según la estructura FCC. (fig.3.7)

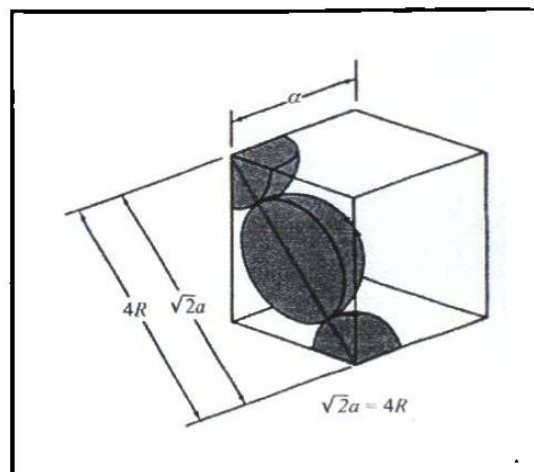
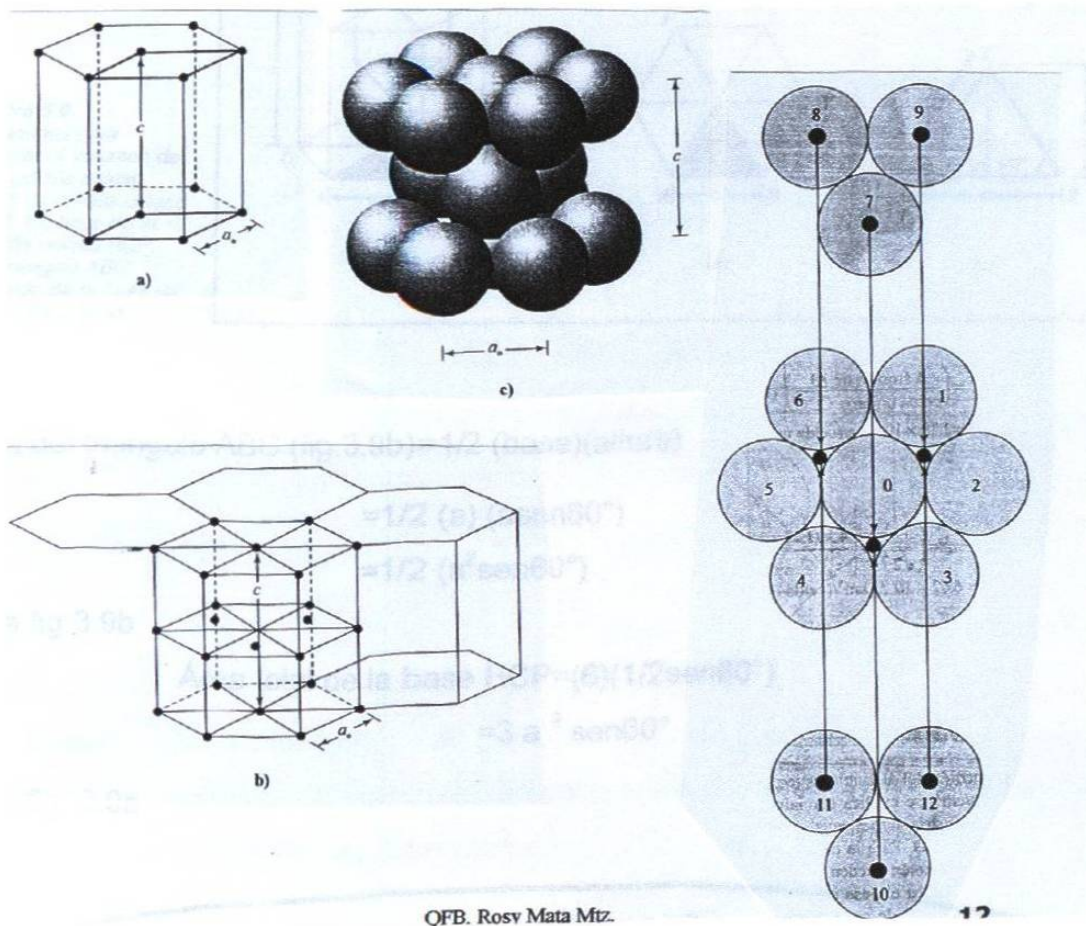


Figura 3.7. Celdilla unidad FCC que muestra la relación entre la constante de red a y el radio atómico R . Los átomos contactan a lo largo de las diagonales de las caras $\sqrt{2}a = 4R$.

ANEXO No.14

- ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL COMPACTA (HCP)
- * Es una celda unidad con una disposición de empaquetamiento atómico en el cual 12 átomos rodea a un átomo idéntico central.
- * La secuencia de apilamiento de planos compactos en una estructura cristalina es ABAB.....
- * Tiene numero de coordinación 12
- * Tiene un factor de empaquetamiento de 0.74
- * Tiene 6 átomos por celda unidad, 3 átomos forman un triángulo en la capa intermedia(fig.3.3.4)

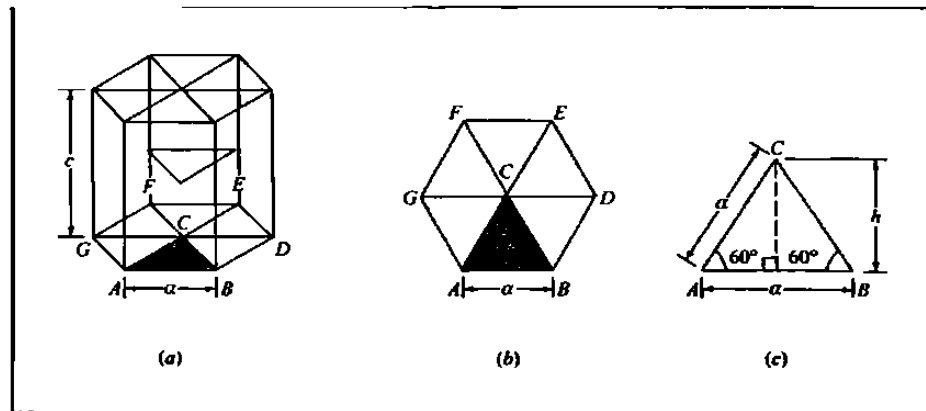


La relación de la altura del prisma hexagonal de la estructura cristalina HCP al lado de la base a , se llama relación c/a

Ej. Calcular el volumen de la celda unidad de la estructura cristalina del zinc usando los siguientes datos: el zinc puro tiene estructura HCP con constantes de red $a=0.2667\text{nm}$ y $c=0.4947\text{ nm}$.

Solución: El volumen de la celda unidad HCP del zinc puede ser obtenida determinando el arrea de la base de la celda unidad y multiplicando ésta por su altura (fig.3.9)

Figura 3.9.
Diagramas para
calcular el volumen de
una celdilla unidad
HCP, (a) celdilla unidad
HCP, (b) base de la
celdilla unidad HCP,
(c) triángulo ABC
extraído de la base de
la celdilla unidad.



Área del triángulo ABC (fig.3.9b)= $1/2$ (base)(altura)

$$=1/2 (a) (a\text{sen}60^\circ)$$

$$=1/2 (a^2\text{sen}60^\circ)$$

de la fig.3.9b

$$\text{Área total de la base HCP}=(6)(1/2\text{sen}60^\circ)$$

$$=3 a^2 \text{sen}60^\circ$$

de la fig. 3.9a

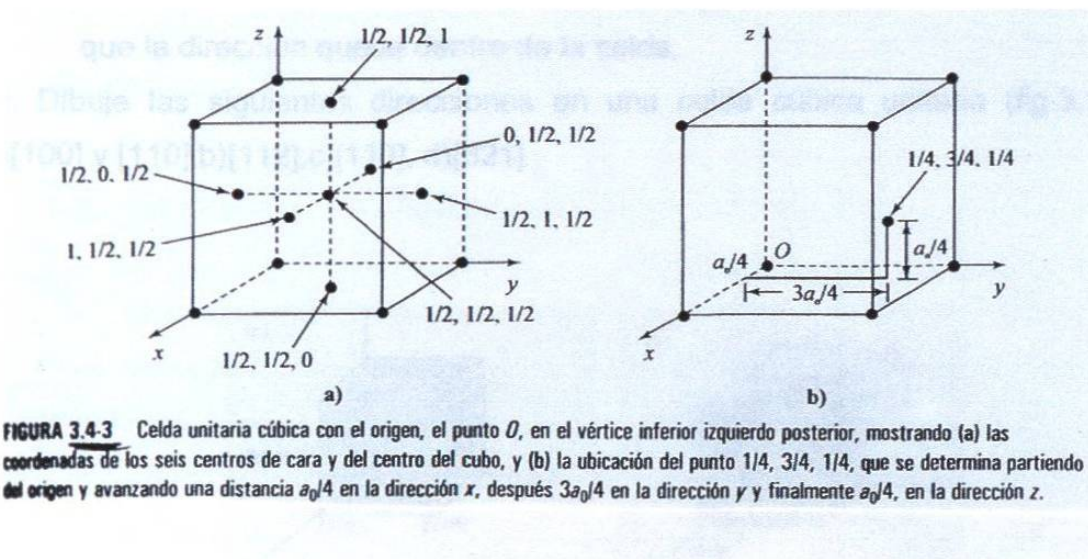
$$\text{Volumen de la celda HCP}=(3 a^2\text{sen}60^\circ)(c)$$

$$V=(3)(0.2665\text{nm})^2(0.866)(0.4947\text{nm})$$

$$\underline{V=0.0913\text{nm}^3}$$

- POSICIONES ATOMICA EN CELDAS UNIDAD BASICA

Coordenadas de los puntos: las posiciones atómicas unitarias se localizan usando distancias a lo largo de los ejes x , y , y z como se indica en la fig. 3.4.3. a las coordenadas de posición para los átomos en la celda unitaria FCC. El átomo central de la unidad celular BCC tiene coordenadas $(1/2, 1/2, 1/2)$.



- DIRECCIONES EN CELDILLAS UNIDAD CUBICAS

Para cristales cúbicos los índices de Dirección Cristalográficas son los componentes vectoriales de las direcciones resueltas a lo largo de cada eje de coordenadas a los enteros mas pequeños

Cálculos para obtener los índices de dirección

- ✓ se determinan las coordenadas de 2 puntos que estén en esa dirección.
- ✓ se restan las coordenadas (adelante menos la de atrás)
- ✓ se eliminan fracciones reduciéndose la resta a números enteros
- ✓ se representan los números enteros entre corchetes y los valores negativos se representan con una barra sobre el numero.

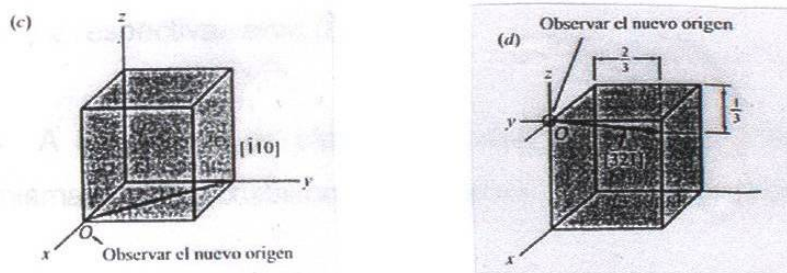
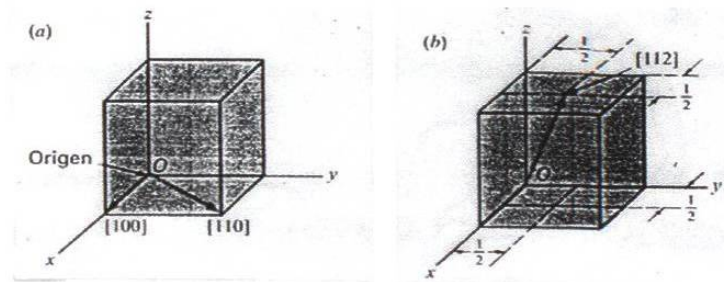
Cálculos para graficar las direcciones

- ✓ El índice de dirección se divide entre el numero mayor
- ✓ de la división anterior se obtienen los valores de x, y, y z.
- ✓ posteriormente se grafica en la celda cúbica.

Nota: para valores negativos hay que mover el origen, de tal manera que la dirección quede dentro de la celda.

Ej. Dibuje las siguientes direcciones en una celda cúbica unitaria (fig.3.12)

a)[100] y [110], b)[112], c)[110], d)[321]



ANEXO No.15

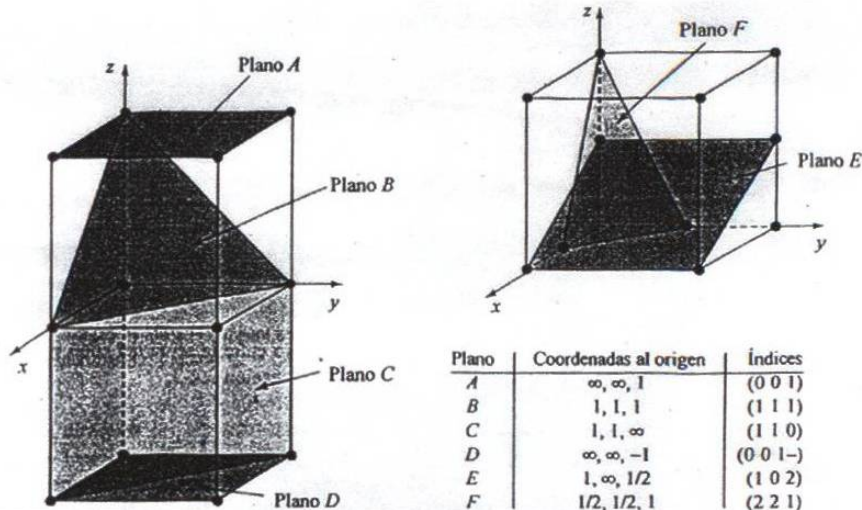
• INDICES DE MILLER PARA PLANOS CRISTALOGRAFICOS EN CELDAS UNIDAD CUBICAS

Los índices de Miller de un plano cristalino están definidos como los recíprocos de las intersecciones que el plano determina con los ejes x,y, y z de los 3 lados no paralelos del cubo unitario.

El procedimiento de DETERMINACIÓN DE LOS INDICES DE MILLER para un plano de un cristal cúbico es el sig:

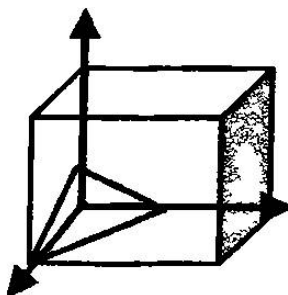
- escoger un plano que no pase por el origen en (0,0,0)
- determinar las intersecciones del plano en base a loa ejes x, y, y z cristalográficos para un cubo unitario. Estas intersecciones pueden ser fraccionarias.
- Construir los recíprocos de estas intersecciones
- Despejar fracciones y determinar el conjunto mas pequeño de números enteros que estén en la misma razón que las intersecciones.
- Estos números enteros son los índices de Miller de un plano cristalográfico y se encierra entre paréntesis () sin usar comas.
- La notación (h k l) se usa para indicarlos en sentido general, donde h, k y l son los índices de Miller para un plano de un cristal cúbico de ejes x, y, y z respectivamente.(fig.3.4.6)
- A los grupos de planos de redes equivalentes relacionados por la misma simetría cristalino se les llamas Familia de Planos.

FIGURA 3.4.6.
Índices de Miller, $(h\ k\ l)$, para especificar planos en una red cristalina. Se ha colocado arbitrariamente el origen en el vértice inferior izquierdo trasero en la celda unitaria superior del inciso a), y en el vértice inferior izquierdo trasero de la celda unitaria del inciso b).



El procedimiento para DIBUJAR UN PLANO A PARTIR DE LOS INDICES DE MILLER es el sig:

- ✓ Los valores del Índice de Miller ej. (123)
- ✓ Se dividen entre el menor numero, sin tomar en cuenta el cero 1/1, 2/1 y 3/1
- ✓ Después se invierten y se obtienen los cortes en los ejes , y y z $x=1$, $y=1/2$ y $z=1/3$



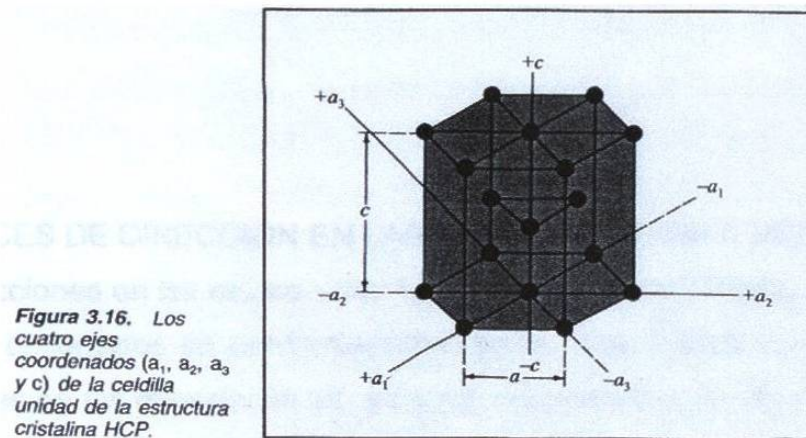
Distancia Interplanar

La distancia interplanar entre 2 planos paralelos muy cercanos con los mismos Índices de Miller se designa por d_{hkl} , donde h , k y l son los Índices de Miller de los planos.

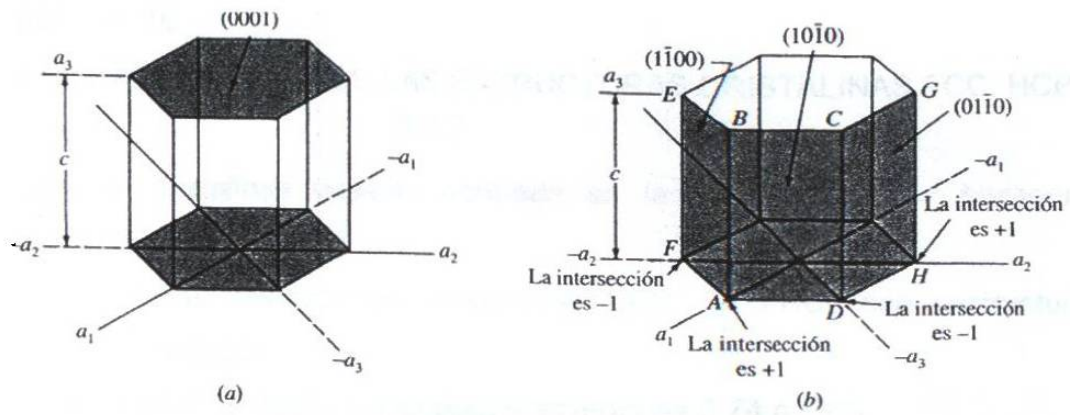
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

- PLANOS Y DIRECCIONES CRISTALOGRAFICAS EN CELDAS UNIDAD HEXAGONALES

Índices para los planos cristalinos HCP, llamados Índices de Miller Bravais, son designados por las letras h, k, i, l y encerrados entre paréntesis como (h k i l), están basados en un sistema coordenado de 4 ejes (fig. 3.16).



- Planos Básales: los planos básales de la celda unidad HCP son muy importantes (fig.3.17), el plano basal de la parte superior es paralelo a los ejes a_1 , a_2 , y a_3 , y las intersecciones de este plano con estos ejes serán todas el valor ∞ . Así, $a_1=\infty$, $a_2=\infty$, $a_3=\infty$.
- Planos del prisma: las intersecciones del plano del prisma frontal (ABCD) de la fig.3.17b son $a_1=+1$, $a_2=\infty$, $a_3=-1$ y $c=\infty$. Tomando los recíprocos de estas intersecciones tenemos $h=1$, $k=0$, $i=-1$ y $l=0$, ó el plano (1000).



* INDICES DE DIRECCIÓN EN LAS CELDAS UNITARIAS HCP

Las direcciones en las celdas unitarias HCP se indican también por 4 índices u , v , t y w encerrados en corchetes como $[uv\bar{t}w]$. Los índices u, v, t son vectores reticulares en las direcciones a_1 , a_2 y a_3 , respectivamente (fig.3.18) y el índice w es un vector reticular en la dirección c .

Algunas de las direcciones mas importantes de las celdas unitarias HCP están indicadas en la fig.3.18.

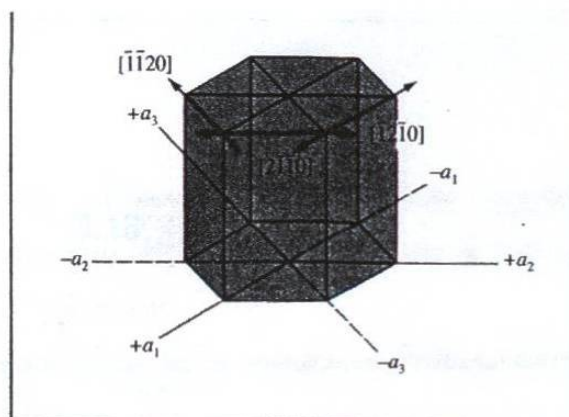


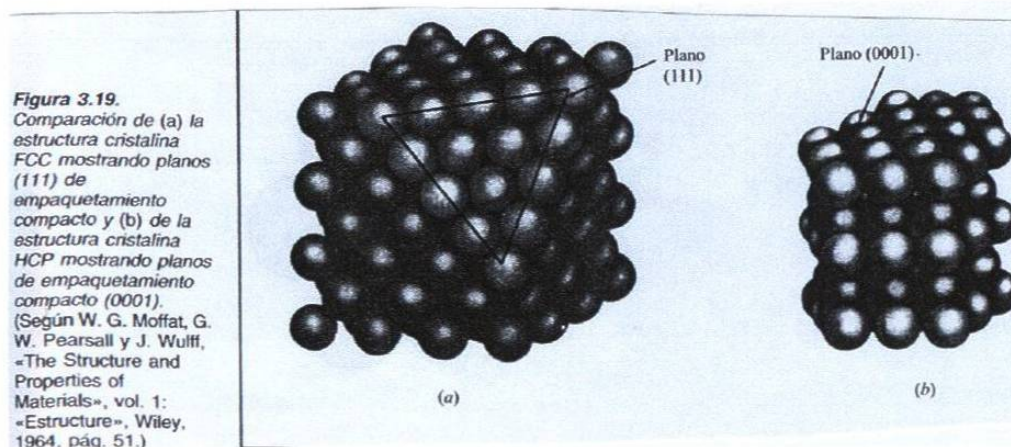
Figura 3.18. Algunas direcciones importantes en celdillas unidad HCP.

ANEXO No.16

* COMPARACION ENTRE LAS ESTRUCTURAS CRISTALINAS FCC, HCP Y BCC

Estructuras cristalinas cúbicas centrada en las caras (FCC) y hexagonal compacta (HCP).

- * Ambas estructuras cristalinas HCP y FCC son estructuras compactas.
- * Tienen un factor de empaquetamiento de 0.74 ó 74%
- * Las 2 estructuras tiene numero de coordinación de 12
- * Los planos (111) de la estructura cristalina FCC mostrados en la fig.3.19 a tienen un orden de agrupamiento idéntico al de los planos (0001) de la estructura cristalina HCP mostrados en la fig. 3.19b.



- * Una diferencia es la secuencia de apilamiento viendo hacia la dirección c en la estructura HCP y hacia $[111]$ en la estructura FCC, como muestra la fig. 3.53 a y b.
- * La secuencia de apilamiento de la estructura tridimensional HCP es ABABABA...(fig.3.5.4b).
- * La secuencia de apilamiento de la estructura compacta FCC es ABCABC...(fig.3.5.4)

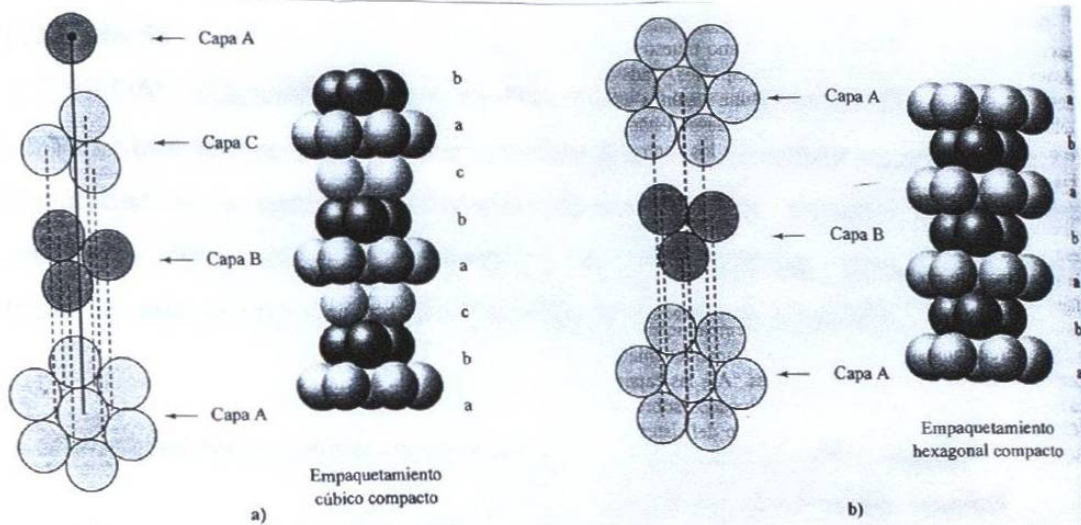
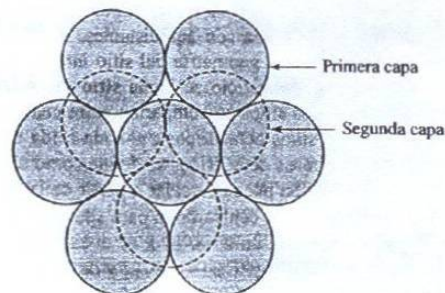
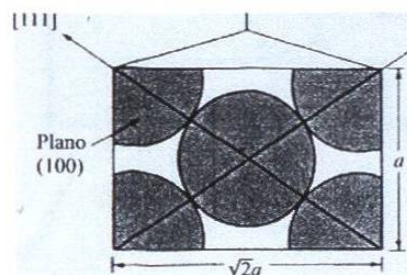


FIGURA 3.5-4 Ilustraciones de la secuencia de apilamiento de planos compactos en a) la estructura CCC y b) en la estructura HC. Observe que la secuencia de apilamiento es ABCABC... en las celdas CCC, y ABABAB... en las celdas HC.



- **ESTRUCTURA CRISTALINA CUBICA CENTRADA EN EL CUERPO (BCC)**
 - * La estructura BCC no es una estructura compacta
 - * Los planos mas densos en la estructura BCC son los planos de la familia $[110]$ de los cuales el plano (110) se muestra en la fig.3.21 b.



ANEXO No.17

• DENSIDAD VOLUMÉTRICA Y PLANAR EN CELDAS UNIDAD

Densidad Volumétrica. Utilizando el modelo atómico de esfera compacta para la celda unidad de la estructura cristalina de un metal y un valor para el radio atómico del metal obtenido del análisis de difracción de rayos x, se puede obtener un valor para la densidad volumétrica usando la ecuación:

$$\text{Densidad Volumétrica del metal } \rho_v = \frac{\text{masa de la celda unidad}}{\text{Volumen de la celda unidad}}$$

Ej. El cobre tiene una estructura cristalina FCC y un radio atómico de 0.1278nm. Considerando que los átomos son esferas compactas que contactan a lo largo de las diagonales de la celda unidad FCC, como muestra la fig.3.7, calcúlese el valor teórico de la densidad del cobre en megagramos por metro cúbico. La masa atómica del cobre es 63.54g/mol.

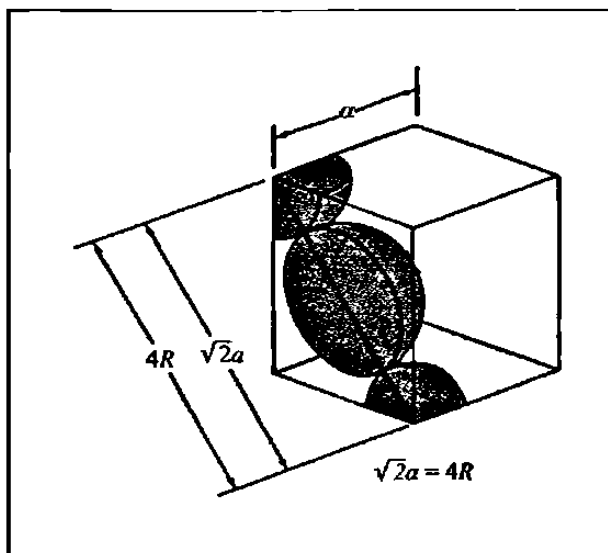


Figura 3.7. Celdilla unidad FCC que muestra la relación entre la constante de red a y el radio atómico R . Los átomos contactan a lo largo de las diagonales de las caras $\sqrt{2}a = 4R$.

Solución:

Para la celdilla unidad FCC, $2a = (4R)^2$, donde a es la constante de red de la celdilla unidad y R es el radio atómico del cobre. Así,

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

$$\text{Densidad volumétrica del cobre} = \rho_v = \frac{\text{masa de la celdilla unidad}}{\text{volumen de la celdilla unidad}} \quad (3.5)$$

En la celdilla unidad FCC hay cuatro átomos. Cada átomo de cobre tiene una masa de $(63,54 \text{ g/mol}) / (6,02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})$. Así que la masa m de cobre en la celdilla unidad es

$$m = \frac{(4 \text{ átomos})(63,54 \text{ g/mol})}{6,02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol}} \left(\frac{10^{-6} \text{ Mg}}{\text{g}} \right) = 4,22 \times 10^{-28} \text{ Mg}$$

El volumen V de la celdilla unidad de cobre es

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

Por tanto, la densidad del cobre es:

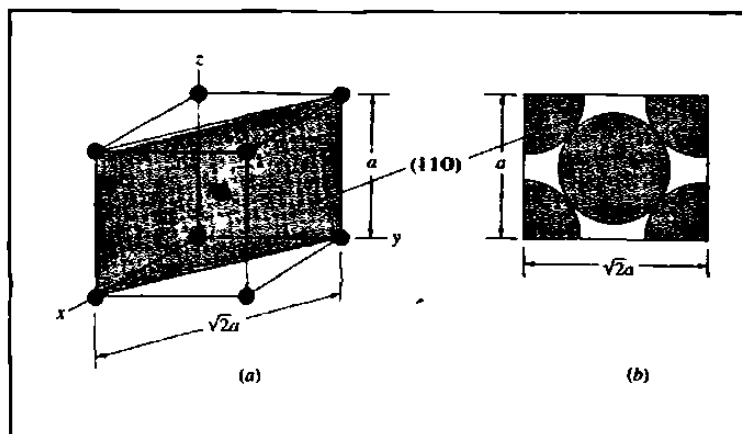
$$\rho_r = \frac{m}{V} = \frac{4,22 \times 10^{-28} \text{ Mg}}{4,70 \times 10^{-29} \text{ m}^3} = 8,98 \text{ Mg/m}^3 \text{ (8,98 g cm}^3\text{)} \quad \blacktriangleleft$$

* **DENSIDAD ATÓMICA PLANAR (ρ_p)**

$$\rho_p = \frac{\text{No. Equiv. de átomos cuyos centros están intersectados por el}}{\text{área seleccionada (plano)}} \quad \underline{\underline{\text{área seleccionada (plano)}}}$$

En estos cálculos se utilizan el área de un plano que intersecta a la celda unidad (fig.3.22 y ej. 3.12)

Figura 3.22.
(a) Celdilla unidad BCC de posiciones atómicas mostrando un plano (110) sombreado;
(b) secciones de los átomos de la celdilla unidad BCC cortadas por el plano (110)



Ej.: calcule la densidad atómica planar sobre el plano (110) de la red BCC del hierro alfa en átomos por mm^2 .

Solución:

$$\rho_p = \frac{\text{num. equiv. de átomos cuyos centros están intersectados por el área seleccionada}}{\text{área seleccionada}} \quad (3.6)$$

El número equivalente de átomos intersectados por el plano (110) en términos del área superficial dentro de la celdilla unidad BCC se muestra en la Figura 3.22 y es

$$1 \text{ átomo en el centro} + 4 \times \frac{1}{4} \text{ átomos en los vértices del plano} = 2 \text{ átomos}$$

El área intersectada por el plano (110) dentro de la celdilla unidad (área seleccionada) es

$$(\sqrt{2}a)(a) = \sqrt{2}a^2$$

Así, la densidad atómica planar es

$$\begin{aligned} \rho_p &= \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}(0,287 \text{ nm})^2} = \frac{17,2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} \\ &= \frac{17,2 \text{ átomos}}{\text{nm}^2} \times \frac{10^{12} \text{ nm}^2}{\text{mm}^2} \\ &= 1,72 \times 10^{13} \text{ átomos mm}^{-2} \quad \blacktriangleleft \end{aligned}$$

Plano (111) en celdas cúbicas

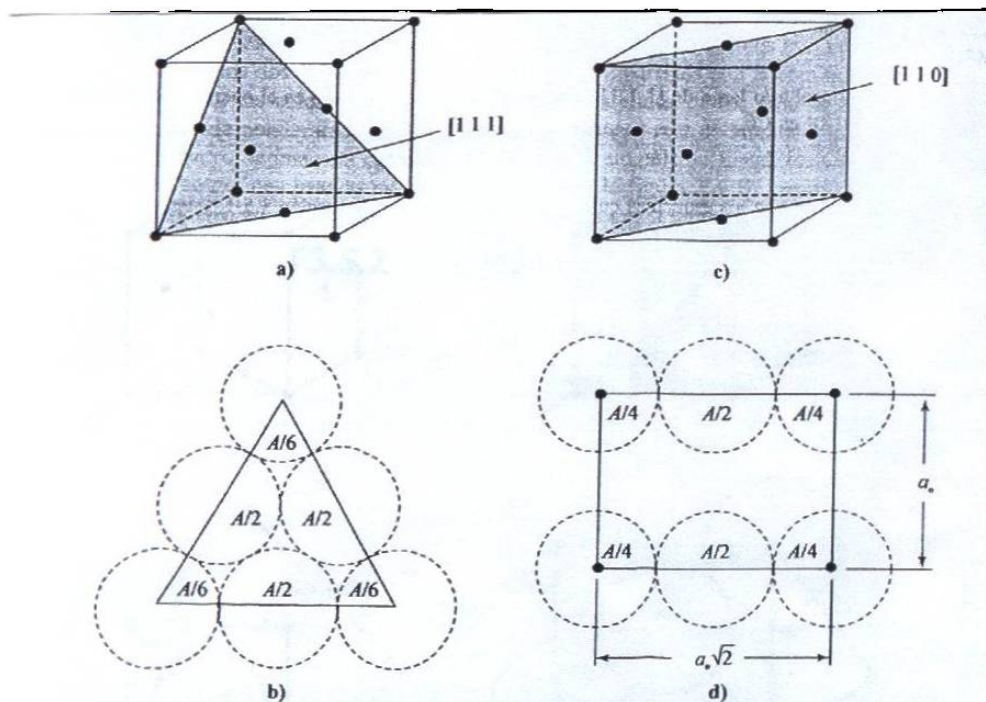


FIGURA 3.5-2 a) La parte del plano (1 1 1) contenida en una sola celda unitaria CCC, representada en tres dimensiones; b) el mismo plano trazado en dos dimensiones; c) la parte del plano (1 1 0) contenida en una sola celda unitaria CCC, trazada en tres dimensiones; d) el mismo plano trazado en dos dimensiones.

ANEXO No.18

* DENSIDAD ATÓMICA LINEAL (ρ_l)

$$\rho_l = \frac{\text{No. de átomos que tienen sus centros localizados en una línea de dirección dada dentro de una longitud seleccionada}}{\text{longitud de la línea seleccionada}}$$

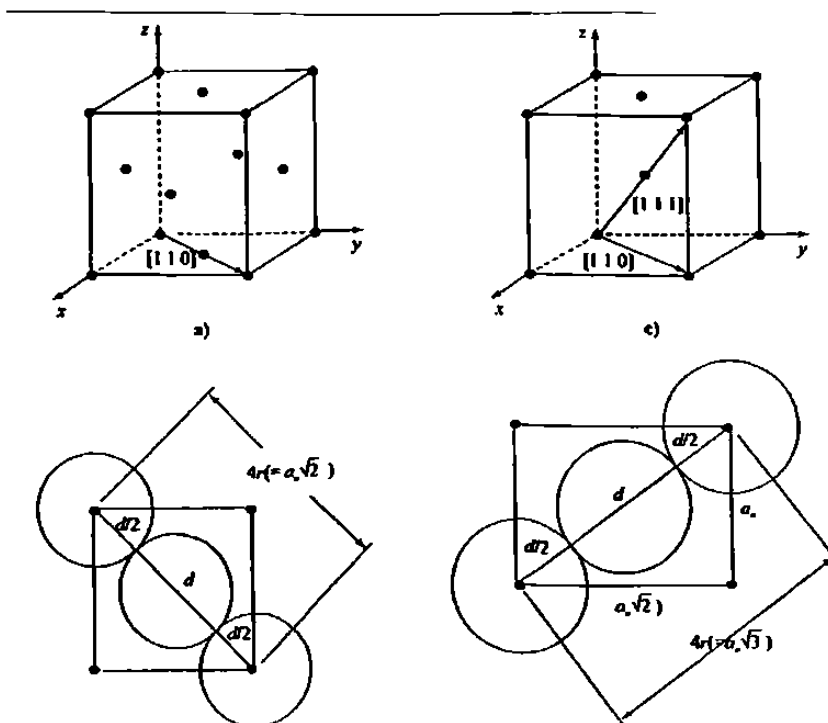
Problema Ejemplo 3.13

Calcule la densidad atómica lineal ρ_l en la dirección [110] en la red cristalina de cobre en átomos por milímetro.

Solución:

Los átomos cuyos centros están intersectados por la dirección [110] se muestran en la Figura 3.23. Debemos seleccionar la longitud de la diagonal de la cara de la celdilla unidad FCC: longitud de la línea seleccionada (Fig. 3.7). El número de diámetros atómicos intersectados por esta longitud de línea es $\frac{1}{2} + 1 + \frac{1}{2} = 2$ átomos. Así que, utilizando la Ecuación 3.7, la densidad atómica lineal es

$$\begin{aligned} \rho_l &= \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}a} = \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}(0,361 \text{ nm})} = \frac{3,92 \text{ átomos}}{\text{nm}} \\ &= \frac{3,92 \text{ átomos}}{\text{nm}} \times \frac{10^6 \text{ nm}}{\text{mm}} \\ &= 3,92 \times 10^6 \text{ átomos/mm} \leftarrow \end{aligned}$$



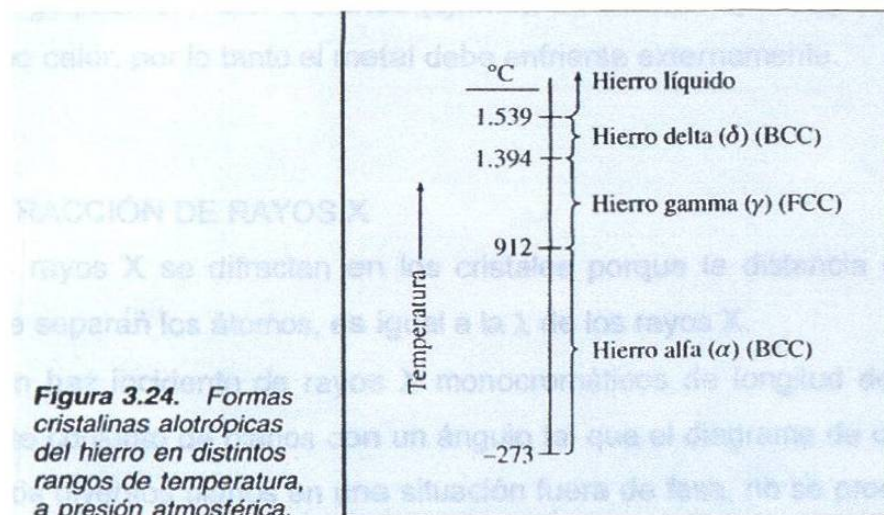
* POLIMORFISMO O ALOTROPIA

Muchos elementos y compuestos existen en más de una forma cristalina bajo diferentes condiciones de temperatura y presión. Este fenómeno es determinado como polimorfismo o alotropía. Ej. Hierro, titanio y cobalto, a elevadas temperaturas (tabla 3.5).

Tabla 3.5. 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 (> 1.742 °C)
Fe	BCC	FCC (912 – 1.394 °C) BCC (> 1.394 °C)
Li	BCC	HCP (< -193 °C)
Na	BCC	HCP (< -233 °C)
Tl	HCP	BCC (> 234 °C)
Ti	HCP	BCC (> 883 °C)
Y	HCP	BCC (> 1.481 °C)
Zr	HCP	BCC (> 872 °C)

El hierro existe en ambas estructuras cristalinas BCC y FCC, sobre un rango de temperatura que va desde la temperatura ambiente hasta su punto de fusión a 1539°C, (fig.3.24).

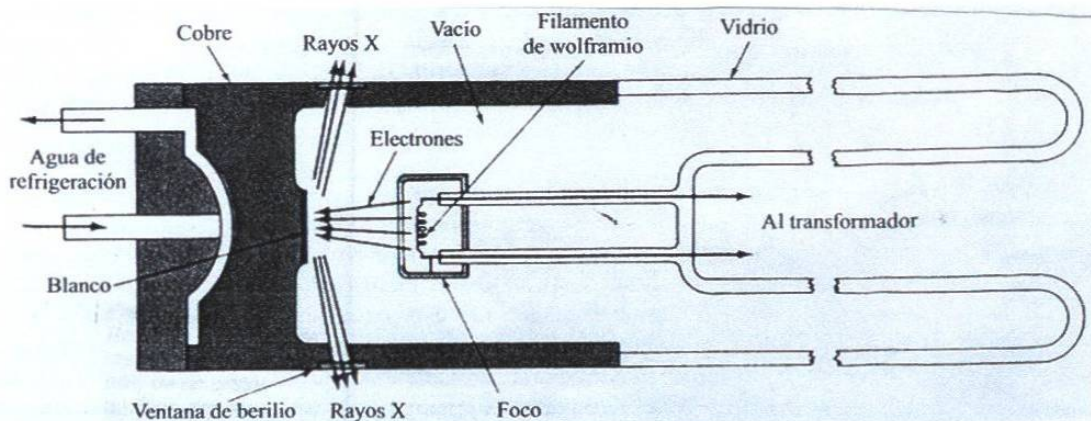


ANEXO No.19

* ANÁLISIS DE LA ESTRUCTURA DE UN CRISTAL

El conocimiento actual de las estructuras cristalinas ha sido obtenido por medio de técnicas de difracción de Rayos X.

- Fuentes de rayos X: los rayos X utilizados para la difracción, son ondas electromagnéticas con longitudes de onda que oscilan entre 0.05 y 0.25nm (0.5 y 2.5°A), (fig.3.25).



- Producción de rayos X: los rayos X que se utilizan en la difracción se obtienen suministrando un voltaje de 35Kv. Cuando se calienta el filamento de tungsteno del cátodo se liberan electrones por emisión termoiónica. Cuando los electrones golpean el metal o blanco (ej. Mo), se emiten rayos X y un 98% se libera como calor, por lo tanto el metal debe enfriarse externamente.

* DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Los rayos X se difractan en los cristales porque la distancia entre los planos que separan los átomos, es igual a la λ de los rayos X.

Cuando un haz incidente de rayos X monocromáticos de longitud de onda λ golpea este conjunto de planos con un ángulo tal que el diagrama de ondas del haz deja los diversos planos en una situación fuera de fase, no se producir haz reforzando alguno (fig.3.28.a)

De este modo tiene lugar interferencias destructivas. Si los diagramas de ondas reflejados del haz dejan a los diversos planos en fase, entonces se producir un reforzamiento del haz o interferencia constructiva (fig.3.28.b).

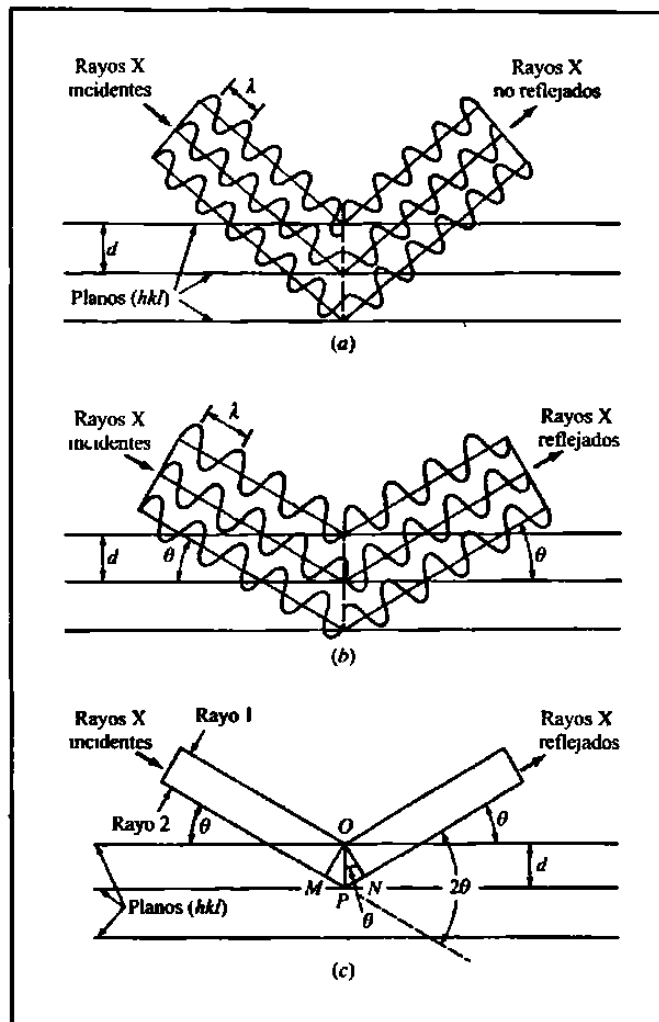
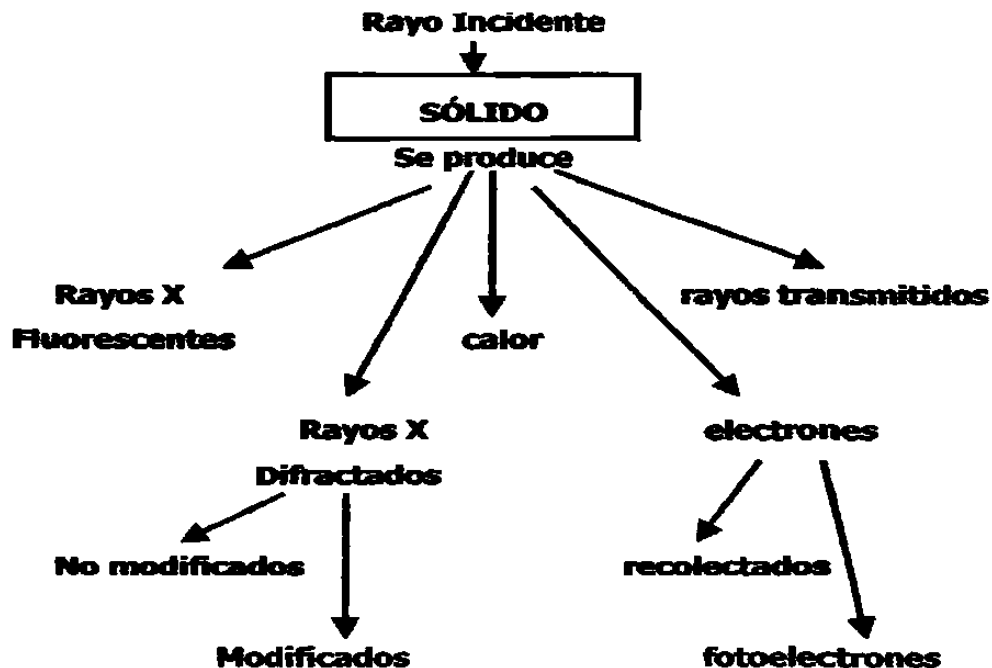


Figura 3.28.
Reflexión de un haz de rayos X por los planos (hkl) de un cristal. (a) Para ángulos arbitrarios de incidencia no se produce reflexión alguna (b) Para el ángulo de Bragg los rayos reflejados están en fase y se refuerzan mutuamente. (c) Similar a (b) con la excepción de que se ha omitido la representación de la onda (Segun A. G. Guy y J. J Hren, «Elements of Physical Metallurgy», 3ª ed., Addison-Wesley, 1974, pág 201)

* EFECTOS PRODUCIDOS POR EL PASO DE RAYOS X ATRAVES DE LA MATERIA



La difracción de rayos X se produce, solamente para aquellos rayos cuyos ángulos de incidencia satisfagan la Ley de Bragg.

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin\theta$$

$n = 1$ (orden de difracción)

λ = longitud de onda de los rayos X

θ = ángulo

d = distancia interplanar

Ej. Una muestra de hierro BCC colocada en un difractómetro es sometida a rayos X incidentes con una $\lambda = 0.1541 \text{ nm}$. Se obtiene difracción de los planos

[110] a $2\theta=44.704^\circ$. Calcular un valor para la constante de red a del hierro BCC. (considérese $n = 1$).

$$2\theta = 44.704^\circ \qquad \theta = 22.35^\circ$$

$$n\lambda = 2d_{hkl} \text{ sen } \theta \qquad \text{despejando } d_{hkl}$$

$$d_{[110]} = \frac{\lambda}{2 \text{ sen } \theta} = \frac{0.1541 \text{ nm.}}{2(\text{sen } 22.35^\circ)}$$

$$d_{[110]} = \frac{0.1541 \text{ nm.}}{2(0.3803)} = 0.2036 \text{ nm}$$

Tomado en cuenta (*) y despejamos a tenemos:

$$* d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \qquad a = d_{hkl} \sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

$$a_{(\text{Fe})} = d_{[110]} \sqrt{1^2+1^2+0^2} = (0.2026 \text{ nm})(1.414) = \underline{0.287\text{nm}}$$

El análisis de estructuras cristalinas se puede hacer por 3 métodos de difracción de Rayos X:

- ✓ Método de Polvos
- ✓ Método de Laue
- ✓ Método de Cristal Rotatorio

Método de Polvos: es la técnica mas usada, se utiliza una muestra pulverizada a fin de que se produzca una orientación al azar de muchos cristales que asegure que algunas de las partículas estén orientadas en el haz de rayos X para satisfacer las condiciones de difracción de la Ley de Bragg.

Los análisis modernos de cristales utilizan un difractómetro de rayos X que tiene un contador de radiación para detectar el ángulo y la intensidad del haz difractado.

Cada sustancia cristalina tiene un difractograma y se usa para saber si la reacción fue completa. (fig.3.12.3).

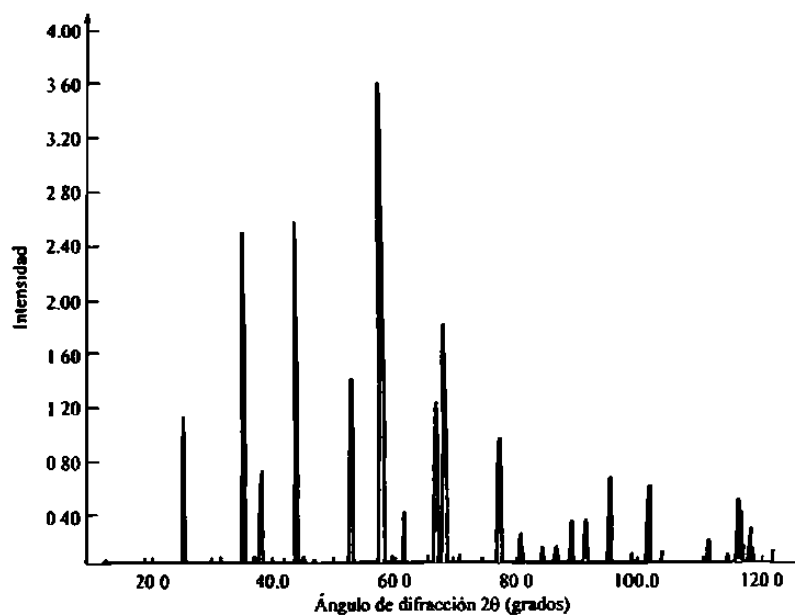


FIGURA 3.12-3 Una gráfica de datos de difracción de rayos X, en forma de intensidad del haz en función del ángulo de incidencia θ , para el NaCl policristalino. (Fuente: Cortesía de P. Desai.)

ANEXO No.20

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
Ingeniero Industrial Administrador

A quien corresponda:

En referencia al trabajo presentado por la QFB. Rosa Elena Mata Mzt., encuentro que el tema de Estructura y Geometría Cristalina perteneciente a la asignatura de Ciencia de los Materiales cursada en el cuarto semestre de la carrera de Ingeniero Industrial Administrador, se ha desarrollado de forma muy completa, llevando un orden lógico y sencillo, así como su forma de estructurarlo; por otro lado se ha desglosado cada punto del tema de manera accesible y entendible para el alumno, buscando además con las actividades de aprendizaje propuestas y con los ejercicios de los anexos, que el alumno construya de manera gradual y concisa su conocimiento.

educación
PARA LA VIDA

El tema de Estructura y Geometría Cristalina es de gran importancia, ya que en él se asientan las bases para la comprensión de las propiedades físicas y químicas de los materiales de acuerdo a su estructura cristalina; lo cual nos permite determinar la utilidad que los materiales tendrán en los distintos procesos de manufactura, materia que se cursa en el quinto semestre de dicha carrera.

Atentamente
"Alere Flamman Venetatis"
Enero 10 de 2003
QFB. Gloria Pedraza Cantú

Catedrático de la Facultad de Ciencias Químicas

JEFATURA



INGENIERO INDUSTRIAL
ADMINISTRADOR

Av. Pedro de Alba s/n
Cd. Universitaria C.P. 66400
San Nicolás de los Garza, N.L.
Tel.: 8329 4010 ext. 6260 y 6262
Fax: 83 32 11 40
e-mail: amartine@ccr.dsi.uanl.mx

ANEXO No.21



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

Ingeniero Industrial Administrador

A quien corresponda:

Respecto a la propuesta de trabajo que la QFB. Rosa Elena Mata Martínez hace para el 2° capítulo de la materia ciencias de materiales; apreciamos que cubre los requerimientos que en ese capítulo deben desarrollarse en los estudiantes, como son los conocimientos básicos de la estructura y propiedades de los materiales para apoyar al siguiente curso del cual es requisito y que en Procesos de Manufactura, este trata dentro de su contenido: los materiales, procesos y sistemas de producción.

Así mismo, el uso de este material didáctico para profesores y alumnos es nuevo en esta materia, creo que se deberán obtener buenos resultados al utilizarlo, sin embargo sería conveniente darle seguimiento para constatarlo con los maestros que imparten esta materia.

Por lo anterior estoy convencida que la propuesta es pertinente, novedosa y necesaria.

FECHA

Atentamente,
"Alere Flammam Veritate"
Diciembre 18, 2002



QI. Ma. Magdalena de la Rosa Resendiz
Coordinadora del Área Básica de Ingeniería Industrial



Av. Pedro de Alba s/n
Cd. Universitaria C.P. 66400
San Nicolás de los Garza, N.L.
Tel.: 8329 4010 ext. 6260 y 6262
Fax: 83 32 11 40
e-mail: amartine@ccr.dsi.uanl.mx

educación
POR LA VIDA

ANEXO No.22

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
Ingeniero Industrial Administrador

A quien corresponda:

El contenido de éste tema cuenta con el orden lógico que se requiere para la asignatura de Ciencia de los Materiales, y lo novedoso de su estructuración le permite al alumno su fácil comprensión, así como la forma tan detallada en que se presenta.

Dicho curso pertenece al cuarto semestre del programa de formación de la carrera de Ingeniero Industrial Administrador, el tema en cuestión contiene los conocimientos básicos de la estructura y propiedades de los materiales; los cuales son requeridos en el curso de Procesos de Manufactura en donde se tienen tres aspectos fundamentales: los materiales, los procesos y los sistemas de producción; ésta materia pertenece al quinto semestre de la mencionada carrera.

De lo antes mencionado puedo decir que la manera de presentar dicho tema es pertinente y novedosa.

Atentamente

"Alere Flamma Veritatis"
Diciembre 20 de 2002

Ing. Antonio Cantú

Catedrático de la Facultad de Ciencias Químicas

JEFATURA



INGENIERO INDUSTRIAL
ADMINISTRADOR

