

**CIENCIA DE LOS MATERIALES
MT – 1113**

**TEMA 2
ENLACES ATÓMICOS Y PROPIEDADES**

**Prof. Yliana Barón
ylianabaron@usb.ve
Departamento de Ciencia de los Materiales
MEM 2do piso**

ESTRUCTURA ATÓMICA

Enlace iónico
Enlace covalente
Enlace metálico

Enlaces atómicos

- ✓ **Enlaces primarios:** transferencia/compartición de electrones produce la unión entre átomos adyacentes (fuerte)
- ✓ **Enlaces secundarios:** atracción relativamente débil entre átomos

Enlaces de Van der Waals

Conceptos fundamentales

Núcleo { **Protones:** $+1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$, $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Neutrones: eléctricamente neutros, $1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$

Rodeando el núcleo { **Electrones:** $-1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$, $9.11 \times 10^{-31} \text{ kg}$

1. Cada elemento químico está caracterizado por el número de protones en el núcleo o el **número atómico (Z)**
2. La **masa atómica (peso atómico)** de un elemento químico es igual a la suma de las masas de los protones y neutrones contenidos en su núcleo.
3. El número de protones es fijo para cada elemento, pero en algunos casos el número de neutrones puede variar \Rightarrow **isótopos**
4. La **unidad de masa atómica (uma)** es igual a la masa del protón o neutrón ($1 \text{ uma} = 1.67 \times 10^{-27} \text{ kg}$; el C^{12} tiene $6\text{P} + 6\text{N} = 12 \text{ uma}$)
5. Existen 6.023×10^{23} uma en un gramo \Rightarrow Número de Avogadro
6. En 1 mol de sustancia hay 6.023×10^{23} átomos o moléculas

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
1	H Hidrógeno 1,00794	<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 15%;"> <p># Atómico</p> <p>Símbolo</p> <p>Nombre</p> <p>Peso Atómico</p> </div> <div style="width: 60%;"> <p>C Sólido</p> <p>Hg Líquido</p> <p>H Gaseoso</p> <p>Rf Desconocido</p> </div> <div style="width: 15%;"> <p>0</p> </div> </div>																2	He Helio 4,002602
2	3 Li Litio 6,941	4 Be Berilio 9,012182	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="width: 20%;">Metaloides</div> <div style="width: 20%;">Otros no metales</div> <div style="width: 20%;">Halógenos</div> <div style="width: 20%;">Gases nobles</div> </div>										5	B Boro 10,811	6 C Carbono 12,0107	7 N Nitrógeno 14,0067	8 O Oxígeno 15,9994	9 F Flúor 18,9984032	10 Ne Neón 20,1797
3	11 Na Sodio 22,98976...	12 Mg Magnesio 24,305	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="width: 20%;">Alcalinos</div> <div style="width: 20%;">Alcalinotérreos</div> <div style="width: 20%;">Lantánidos</div> <div style="width: 20%;">Actinidos</div> <div style="width: 20%;">Metales de transición</div> <div style="width: 20%;">Metales del bloque p</div> </div>										13	Al Aluminio 26,9815386	14 Si Silicio 28,0855	15 P Fósforo 30,973762	16 S Azufre 32,065	17 Cl Cloro 35,453	18 Ar Argón 39,948
4	19 K Potasio 39,0983	20 Ca Calcio 40,078	21 Sc Escandio 44,955912	22 Ti Titanio 47,887	23 V Vanadio 50,9415	24 Cr Cromo 51,9961	25 Mn Manganeso 54,938045	26 Fe Hierro 55,845	27 Co Cobalto 58,933195	28 Ni Níquel 58,6934	29 Cu Cobre 63,546	30 Zn Zinc 65,38	31 Ga Galio 69,723	32 Ge Germanio 72,63	33 As Arsénico 74,9216	34 Se Selenio 78,96	35 Br Bromo 79,904	36 Kr Kriptón 83,798	
5	37 Rb Rubidio 85,4678	38 Sr Estroncio 87,62	39 Y Itrio 88,90585	40 Zr Zirconio 91,224	41 Nb Niobio 92,90638	42 Mo Molibdeno 95,96	43 Tc Tecnecio (98)	44 Ru Rutenio 101,07	45 Rh Rodio 102,9055	46 Pd Paladio 106,42	47 Ag Plata 107,8682	48 Cd Cadmio 112,411	49 In Indio 114,818	50 Sn Estaño 118,71	51 Sb Antimonio 121,76	52 Te Telurio 127,6	53 I Yodo 126,90447	54 Xe Xenón 131,293	
6	55 Cs Cesio 132,9054...	56 Ba Bario 137,327	57-71	72 Hf Hafnio 178,49	73 Ta Tantalio 180,94788	74 W Wolframio 183,84	75 Re Renio 186,207	76 Os Osmio 190,23	77 Ir Iridio 192,217	78 Pt Platino 195,084	79 Au Oro 196,966569	80 Hg Mercurio 200,59	81 Tl Talio 204,3833	82 Pb Plomo 207,2	83 Bi Bismuto 208,9804	84 Po Polonio (209)	85 At Astatio (210)	86 Rn Radón (222)	
7	87 Fr Francio (223)	88 Ra Radio (226)	89-103	104 Rf Rutherfordio (267)	105 Db Dubnio (268)	106 Sg Seaborgio (271)	107 Bh Bohrio (272)	108 Hs Hassio (270)	109 Mt Meitnerio (276)	110 Ds Darmstadtio (281)	111 Rg Roentgenio (280)	112 Cn Copernicio (285)	113 Uut Ununtrio (284)	114 Fl Ununquadio (289)	115 Uup Ununpentio (288)	116 Lv Ununhexio (293)	117 Uus Ununseptio (294)	118 Uuo Ununoctio (294)	

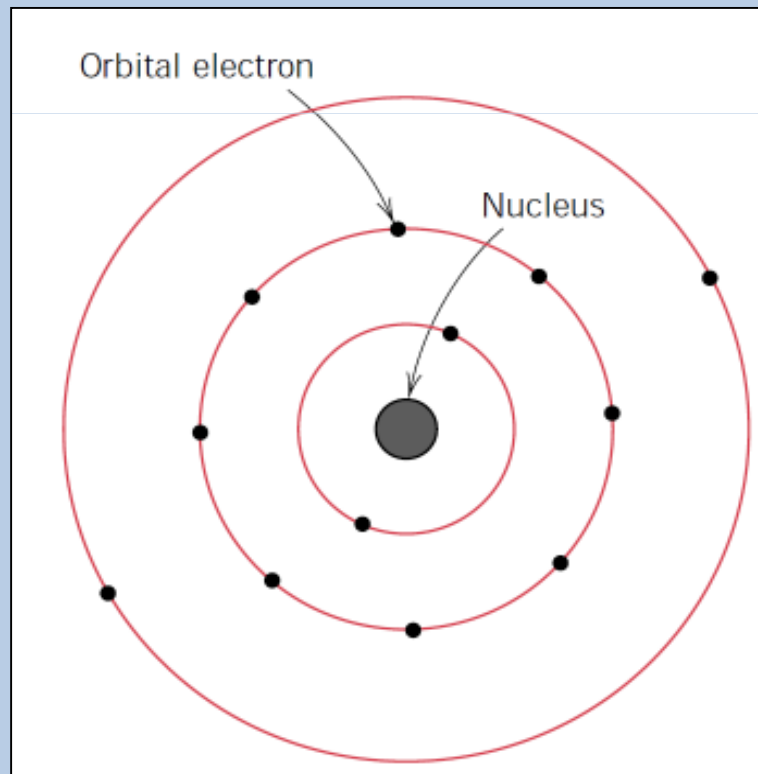
En el caso de los elementos con isotopos no estables, entre parentesis se encuentran las masas de aquellos isótopos que son más estables o más abundantes.

Tabla Periódica Diseño e Interface de Copyright © 1997 Michael Dayah Ptable.com Última actualización 30/04/2012

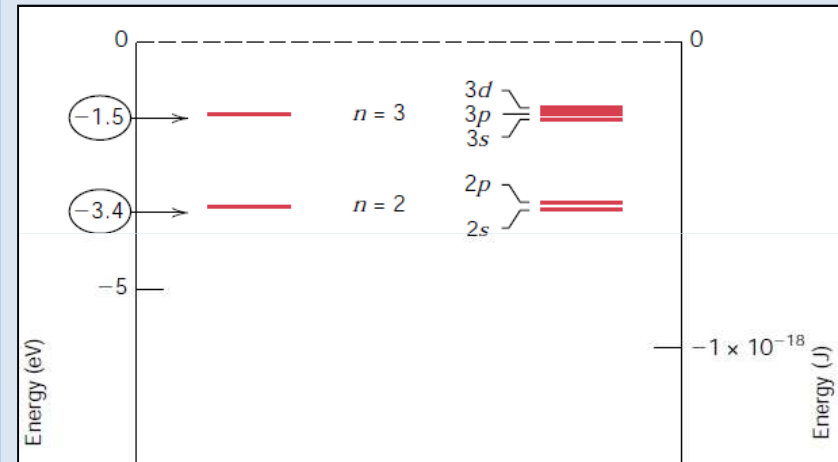
57 La Lantano 138,90547	58 Ce Cerio 140,116	59 Pr Praseodimio 140,90765	60 Nd Neodimio 144,242	61 Pm Prometio (145)	62 Sm Samario 150,36	63 Eu Europio 151,964	64 Gd Gadolinio 157,25	65 Tb Terbio 158,92535	66 Dy Disprosio 162,5	67 Ho Holmio 164,93032	68 Er Erbio 167,259	69 Tm Tulio 168,93421	70 Yb Iterbio 173,054	71 Lu Lutecio 174,9688
89 Ac Actinio (227)	90 Th Torio 232,03806	91 Pa Protactinio 231,03688	92 U Uranio 238,02891	93 Np Neptunio (237)	94 Pu Plutonio (244)	95 Am Americio (243)	96 Cm Curio (247)	97 Bk Berkelio (247)	98 Cf Californio (251)	99 Es Einstenio (252)	100 Fm Fermio (257)	101 Md Mendelevio (258)	102 No Nobelio (259)	103 Lr Laurencio (262)

Modelos atómicos

Asume que los electrones giran alrededor del núcleo del átomo en órbitas discretas, pudiendo ubicar la posición del electrón en dichas órbitas



Modelo de Bohr

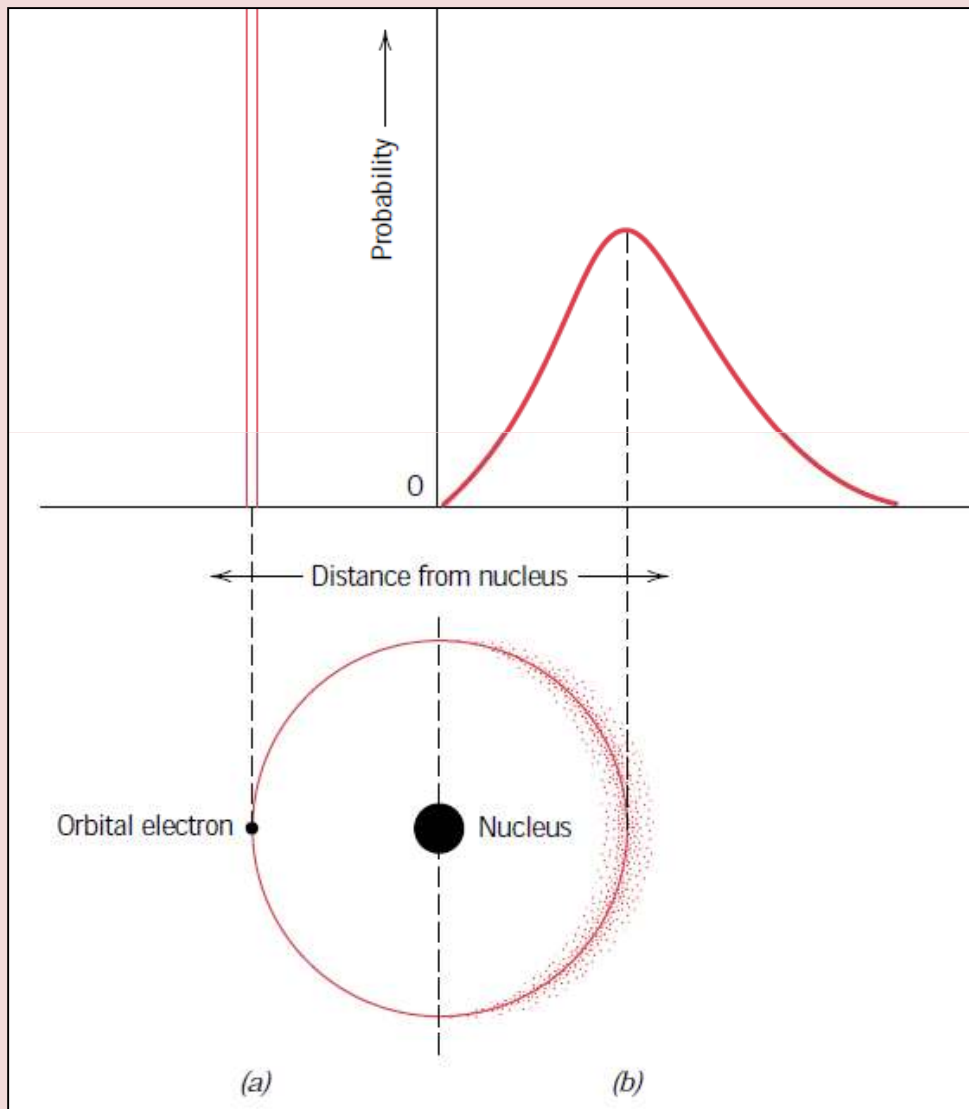


La energía del electrón está cuantizada o caracterizada por un nivel de energía; así, un electrón sólo pueden tener valores específicos de energía. Los electrones pueden pasar de un nivel de energía a otro mediante saltos cuánticos a un nivel mayor (con absorción de energía) o menor (emisión de energía)

Modelos atómicos

Modelo de onda-partícula

Considera que los electrones exhiben tanto **características de ondas como de partículas**. En este modelo, el electrón no es considerado una partícula que se encuentra en una órbita específica o discreta. La posición es considerada como la probabilidad de que el electrón esté en varios sitios alrededor del núcleo; es decir, que la posición del electrón está definida por la probabilidad de encontrar al electrón, por una densidad de probabilidades o por **una nube electrónica**



Modelo de onda-partícula

Cada electrón del átomo está caracterizado por cuatro parámetros \Rightarrow números cuánticos.

1. **Número cuántico principal** ($n \geq 1$) \rightarrow nivel de energía (distancia entre el núcleo y el electrón) \rightarrow K, L, M, N, O...
2. **Número cuántico azimutal** ($l = 0, 1 \dots n-1$) \rightarrow forma de los orbitales o subnivel de energía \rightarrow s, p, d o f
3. **Número cuántico magnético** ($m_l = -1 \dots 0 \dots +1$; $2l+1$ valores) \rightarrow orientación espacial del orbital
4. **Número cuántico de espín** ($m_s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$) \rightarrow sentido de giro del campo magnético que produce electrón al girar sobre su eje

n		l
1	K	s
2	L	s, p
4	M	s, p, d
3	N	s, p, d, f ₇

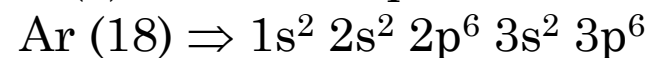
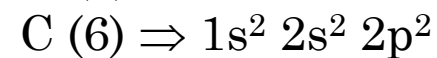
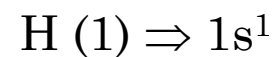
ESTRUCTURA ATÓMICA

Configuración electrónica

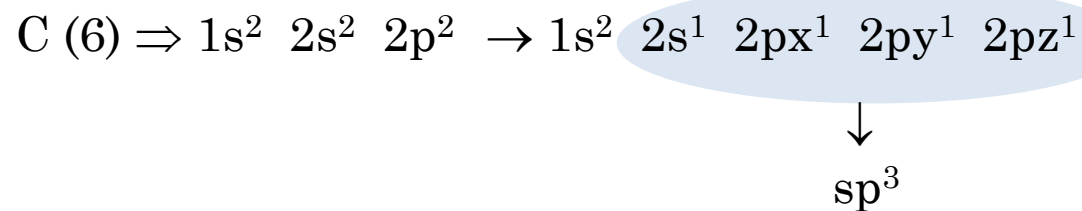
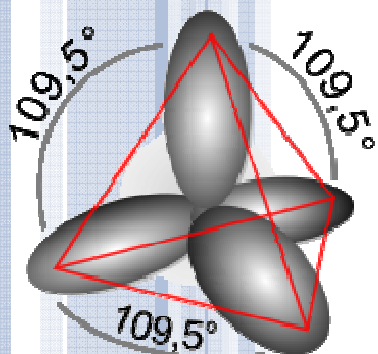
Distribución de electrones de acuerdo a números cuánticos

Principal Quantum Number n	Shell Designation	Subshells	Number of States	Number of Electrons	
				Per Subshell	Per Shell
1	<i>K</i>	<i>s</i>	1	2	2
2	<i>L</i>	<i>s</i>	1	2	8
		<i>p</i>	3	6	
3	<i>M</i>	<i>s</i>	1	2	18
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
4	<i>N</i>	<i>s</i>	1	2	32
		<i>p</i>	3	6	
		<i>d</i>	5	10	
		<i>f</i>	7	14	

1s			
2s	2p		
3s	3p	3d	
4s	4p	4d	4f



1. Cuando todos los electrones del átomo están ocupando los niveles mas bajos de energía disponibles, entonces se dice que el átomo está en su **estado basal**.
2. Los **electrones de valencia** son aquellos que ocupan el orbital de mayor energía (orbital externo). Éstos son los que participan en la formación de enlaces entre átomos y moléculas.
3. Bajo algunas circunstancias, los orbitales s y p se combinan para formar un **orbital sp^n** , donde n indica el número de orbitales p que se han combinado (1, 2 o 3). El orbital sp^3 del carbono es de gran importancia en la química de los polímeros!!!



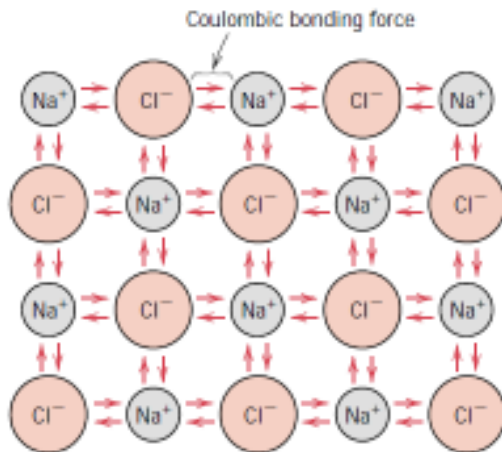
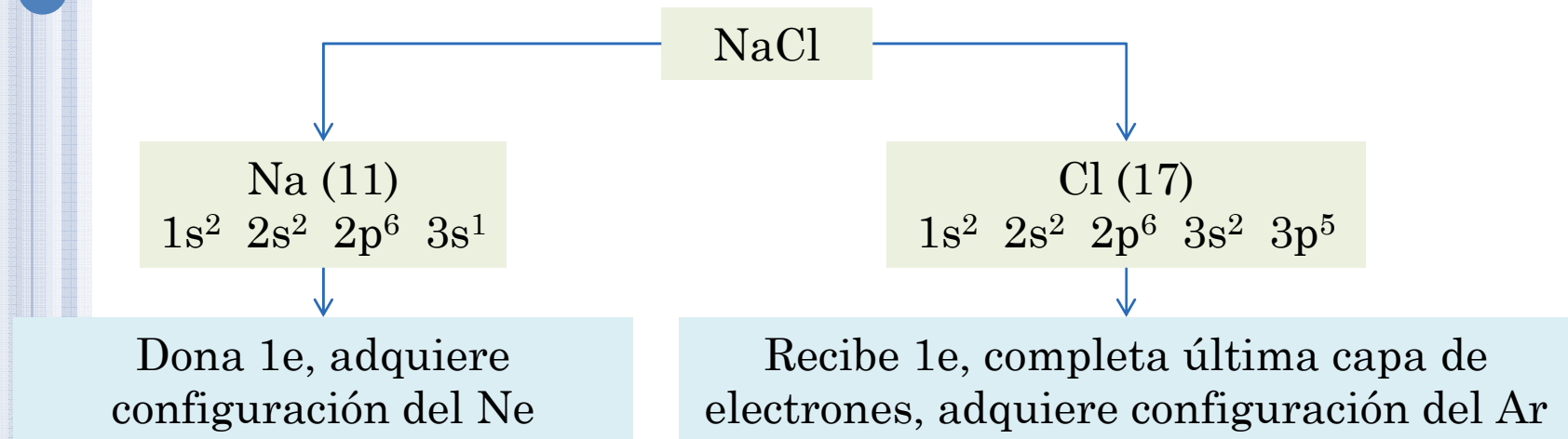
ENLACES PRIMARIOS

Enlace Iónico

- Es el resultado de una transferencia de electrones desde un átomo a otro. Es encontrado en compuestos formados por un elemento metálico y un no-metálico (extremos opuestos de la tabla periódica).
- El átomo metálico dona sus electrones de valencia al átomo no-metálico. En el proceso, todos los átomos adquieren una configuración estable o de gas inerte y carga eléctrica \Rightarrow los átomos se vuelven iones

ENLACES PRIMARIOS

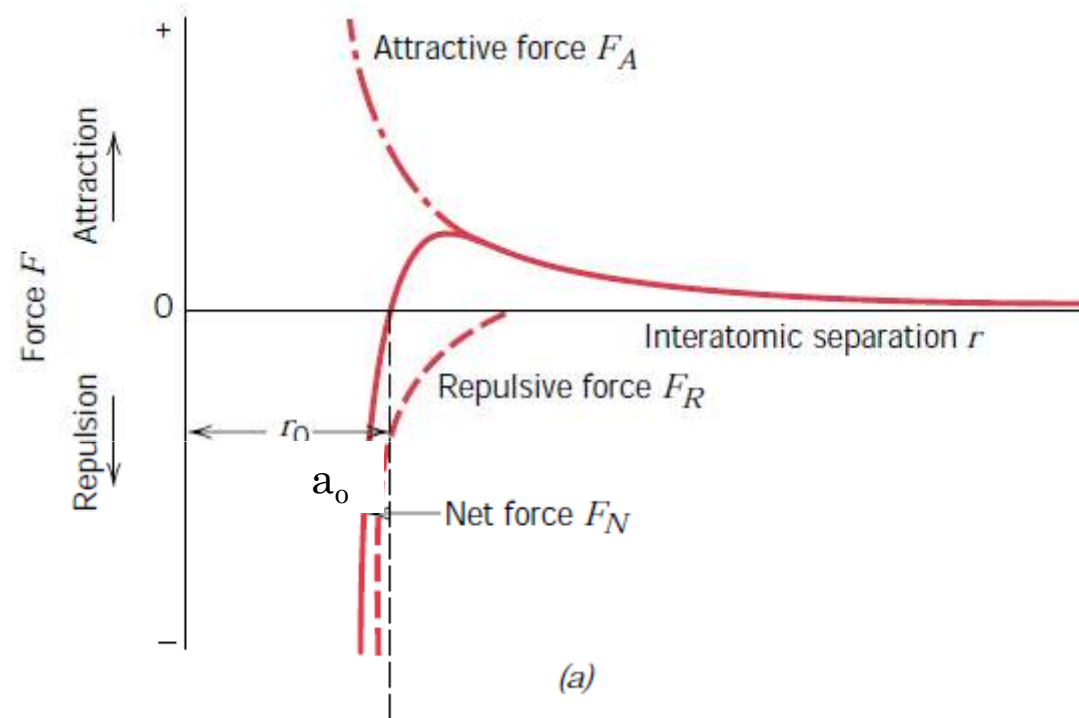
Enlace Iónico



- ✓ Los enlaces iónicos son no-direccionales: la magnitud del enlace es igual en todas las direcciones alrededor del ión.
- ✓ Para que los materiales iónicos sean estables, un ión positivo debe tener "vecinos" negativos en un esquema tridimensional.
- ✓ Los enlaces iónicos son los enlaces predominantes en los materiales cerámicos. Energía del enlace alta (600-1500kJ/mol), reflejado en alto punto de fusión

ENLACES PRIMARIOS

Enlace Iónico



- ✓ La fuerza del enlace es la fuerza neta de atracción (o repulsión) en función de la distancia de separación entre los dos átomos o iones.
- ✓ La fuerza neta es la suma de la fuerza de atracción y la de repulsión. Cuando se alcanza la distancia de equilibrio del enlace (a_0), las fuerzas de atracción y repulsión se igualan y se alcanza un estado de equilibrio

Enlace Iónico

Las fuerzas atractivas del enlace iónico son de tipo Coulombianas (los iones positivos y negativos se atraen debido a su carga eléctrica):

- Para dos iones aislados, la fuerza de atracción F_A es función de su distancia interatómica

$$F_A = -\frac{K}{a^2}$$

$$K = k_o(Z_1q)(Z_2q)$$

$$k_o = 9 \times 10^9 V.m/C$$

- Mientras que la fuerza de repulsión es

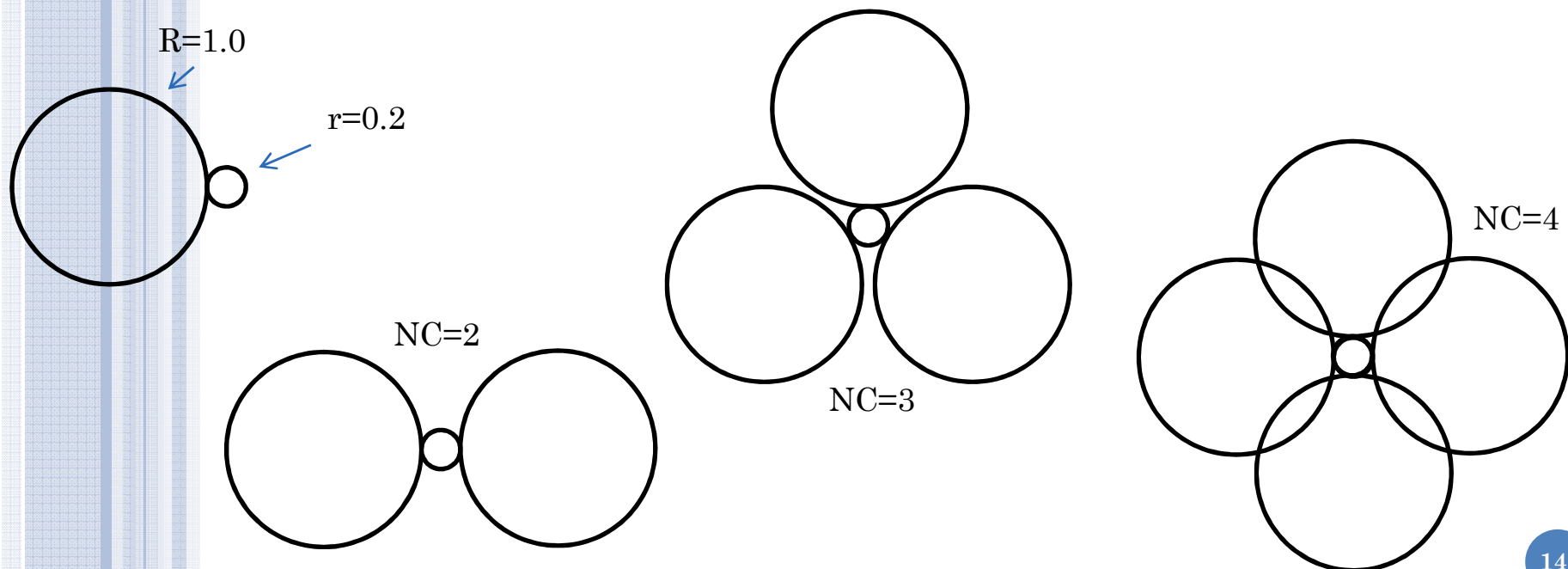
$$F_R = \lambda e^{-a/\rho}$$

λ y ρ son constantes determinadas experimentalmente para cada par de iones

ENLACES PRIMARIOS






Enlace Iónico

- ✓ El **número de coordinación** (NC) es el número de iones (o átomos) adyacentes que rodean a un determinado ión (o átomo) de referencia
- ✓ El número de coordinación depende de los tamaños relativos de los dos iones de carga opuesta. Este tamaño relativo se caracteriza a través de la **relación entre radios** (r/R), donde r es el radio del ión de menor tamaño y R el radio del ión de mayor tamaño



ENLACES PRIMARIOS

Enlace Iónico

Coordination Number	Cation-Anion Radius Ratio	Coordination Geometry
2	<0.155	
3	$0.155-0.225$	
4	$0.225-0.414$	
6	$0.414-0.732$	
8	$0.732-1.0$	

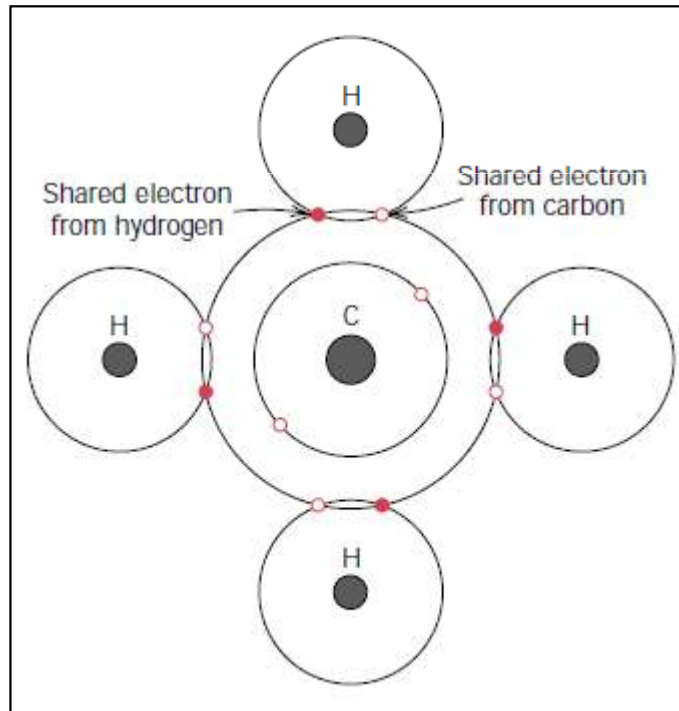
El número de coordinación es dependiente de la relación de radios (r/R):

- ✓ Si r es pequeño, entonces $NC=2$ es la configuración mas estable
- ✓ Si r es grande (comparable con R), entonces NC aumenta

ENLACES PRIMARIOS

Enlace Covalente

En los enlaces covalentes, la configuración estable (gas inerte) se alcanza cuando los átomos adyacentes comparten electrones



Enlace direccional. El enlace se establece entre átomos específicos y existe solo en la dirección entre los dos átomos que participan en él.

CH_4 , H_2O , HNO_3 , HF ,
diamante, GaAs, SiC

Hidrógeno (1) $1s^1 + 1e \Rightarrow$ Helio (2) $1s^2$

Carbono (6) $1s^2 2s^2 2p^2 + 4e \Rightarrow$ Neón (10) $1s^2 2s^2 2p^6$

ENLACES PRIMARIOS

Enlace Covalente

- ✓ El número de enlaces covalentes que puede tener un átomo está limitado por el número de electrones de valencia.
- ✓ Para N electrones de valencia, un átomo puede enlazarse con al menos $8-N$ átomos.
- ✓ Por ejemplo: $N=7$ para el átomo de Cl, así $8-N=1$. Entonces, un átomo de Cl sólo puede tener un enlace a otro átomo Cl_2 (Cl – Cl)

ENLACES PRIMARIOS

Enlace Covalente

- ✓ El enlace covalente puede ser muy fuerte (material duro y con alto punto de fusión), como en el diamante; o puede ser muy débil como en el bismuto ($T_f \approx 270^\circ\text{C}$).
- ✓ Los materiales poliméricos son un ejemplo de los enlaces covalentes. La estructura básica de los polímeros es una cadena larga de átomos de carbono unidos mediante enlaces covalentes, con electrones libres para enlazarse con otros átomos.

ENLACES PRIMARIOS

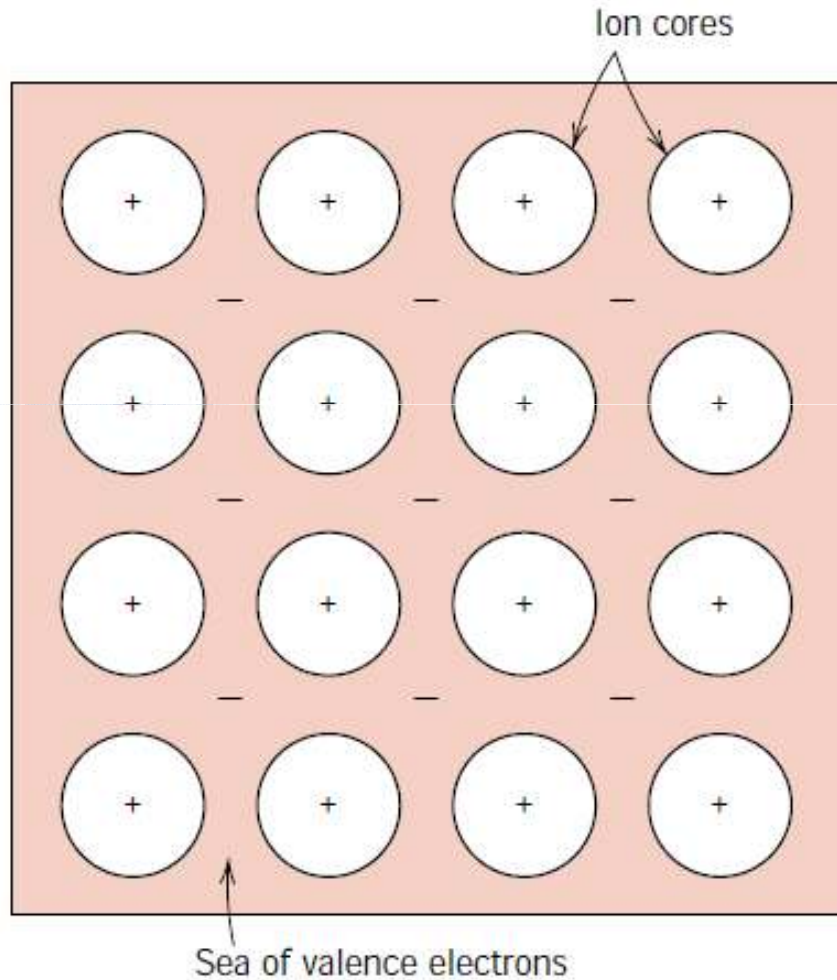
Enlace Covalente

- ✓ Es posible tener enlaces interatómicos que sean parcialmente iónicos y parcialmente covalentes.
- ✓ Mientras mayor sea la diferencia en electronegatividades de los átomos, mayor carácter iónico tiene el enlace

IA 1 H 2.1																	0 2 He -
	IIA 4 Be 1.5											IIIA 5 B 2.0	IVA 6 C 2.5	VA 7 N 3.0	VIA 8 O 3.5	VIIA 9 F 4.0	
11 Na 0.9	12 Mg 1.2						VIII					13 Al 1.5	14 Si 1.8	15 P 2.1	16 S 2.5	17 Cl 3.0	18 Ar -
19 K 0.8	20 Ca 1.0	21 Sc 1.3	22 Ti 1.5	23 V 1.6	24 Cr 1.6	25 Mn 1.5	26 Fe 1.8	27 Co 1.8	28 Ni 1.8	29 Cu 1.9	30 Zn 1.6	31 Ga 1.6	32 Ge 1.8	33 As 2.0	34 Se 2.4	35 Br 2.8	36 Kr -
37 Rb 0.8	38 Sr 1.0	39 Y 1.2	40 Zr 1.4	41 Nb 1.6	42 Mo 1.8	43 Tc 1.9	44 Ru 2.2	45 Rh 2.2	46 Pd 2.2	47 Ag 1.9	48 Cd 1.7	49 In 1.7	50 Sn 1.8	51 Sb 1.9	52 Te 2.1	53 I 2.5	54 Xe -
55 Cs 0.7	56 Ba 0.9	57-71 La-Lu 1.1-1.2	72 Hf 1.3	73 Ta 1.5	74 W 1.7	75 Re 1.9	76 Os 2.2	77 Ir 2.2	78 Pt 2.2	79 Au 2.4	80 Hg 1.9	81 Tl 1.8	82 Pb 1.8	83 Bi 1.9	84 Po 2.0	85 At 2.2	86 Rn -
87 Fr 0.7	88 Ra 0.9	89-102 Ac-No 1.1-1.7															

$$\% \text{ ionic character} = \{1 - \exp[-(0.25)(X_A - X_B)^2]\} \times 100$$

Enlaces Metálicos



- ✓ El enlace metálico es encontrado en los metales y aleaciones.
- ✓ Los materiales metálicos tienen uno, dos o tres electrones de valencia.
- ✓ Los electrones de valencia no están fijos a un solo átomo del sólido; están "libres" de moverse a través de todo el material.
- ✓ Modelo: "mar de electrones" o "nube de electrones" más núcleo metálico
- ✓ Los electrones libres actúan como un escudo que impide que los núcleos metálicos se repelan.
- ✓ No direccional

ENLACES PRIMARIOS

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature (°C)</i>
		<i>kJ/mol (kcal/mol)</i>	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550
Metallic	Hg	68 (16)	0.7	-39
	Al	324 (77)	3.4	660
	Fe	406 (97)	4.2	1538
	W	849 (203)	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7 (1.8)	0.08	-189
	Cl ₂	31 (7.4)	0.32	-101
Hydrogen	NH ₃	35 (8.4)	0.36	-78
	H ₂ O	51 (12.2)	0.52	0

Enlace iónico
Enlace covalente
Enlace metálico

Enlaces
atómicos

- ✓ **Enlaces primarios:** transferencia/compartición de electrones produce la unión entre átomos adyacentes (fuerte)
- ✓ **Enlaces secundarios:** atracción relativamente débil entre átomos

Enlaces de Van
der Waals

ENLACES SECUNDARIOS

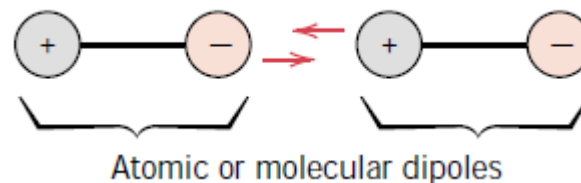
Enlaces de Van der Waals

Los enlaces secundarios o físicos son débiles (en comparación con los enlaces primarios o químicos).

Los enlaces secundarios están presentes en casi todos los átomos y moléculas; sin embargo, en muchos casos sus efectos son solapados por la presencia de los enlaces primarios.

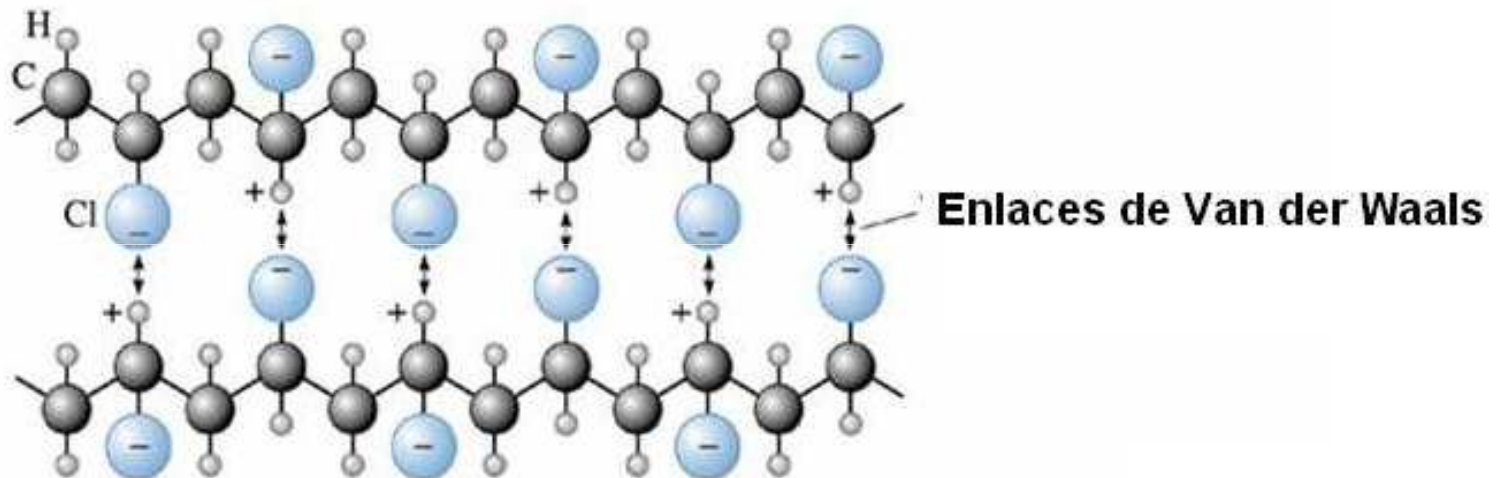
Los enlaces secundarios se forman a partir de los dipolos eléctricos presentes en átomos o moléculas: atracción Coulombiana entre extremo positivo y negativo del dipolo

Los enlaces de hidrógeno (puentes) ocurren en moléculas que tienen átomos de hidrógeno como parte de sus constituyentes

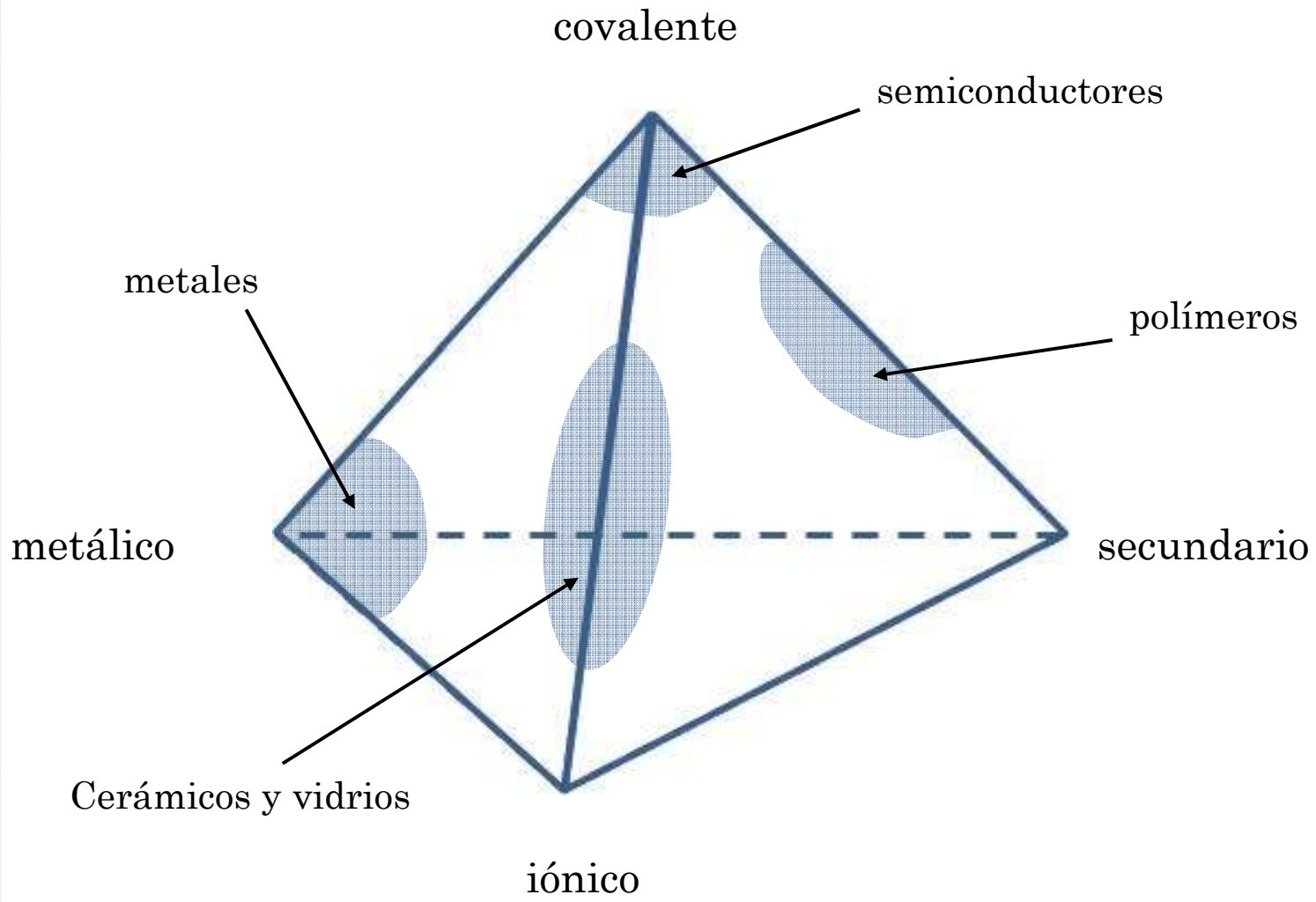


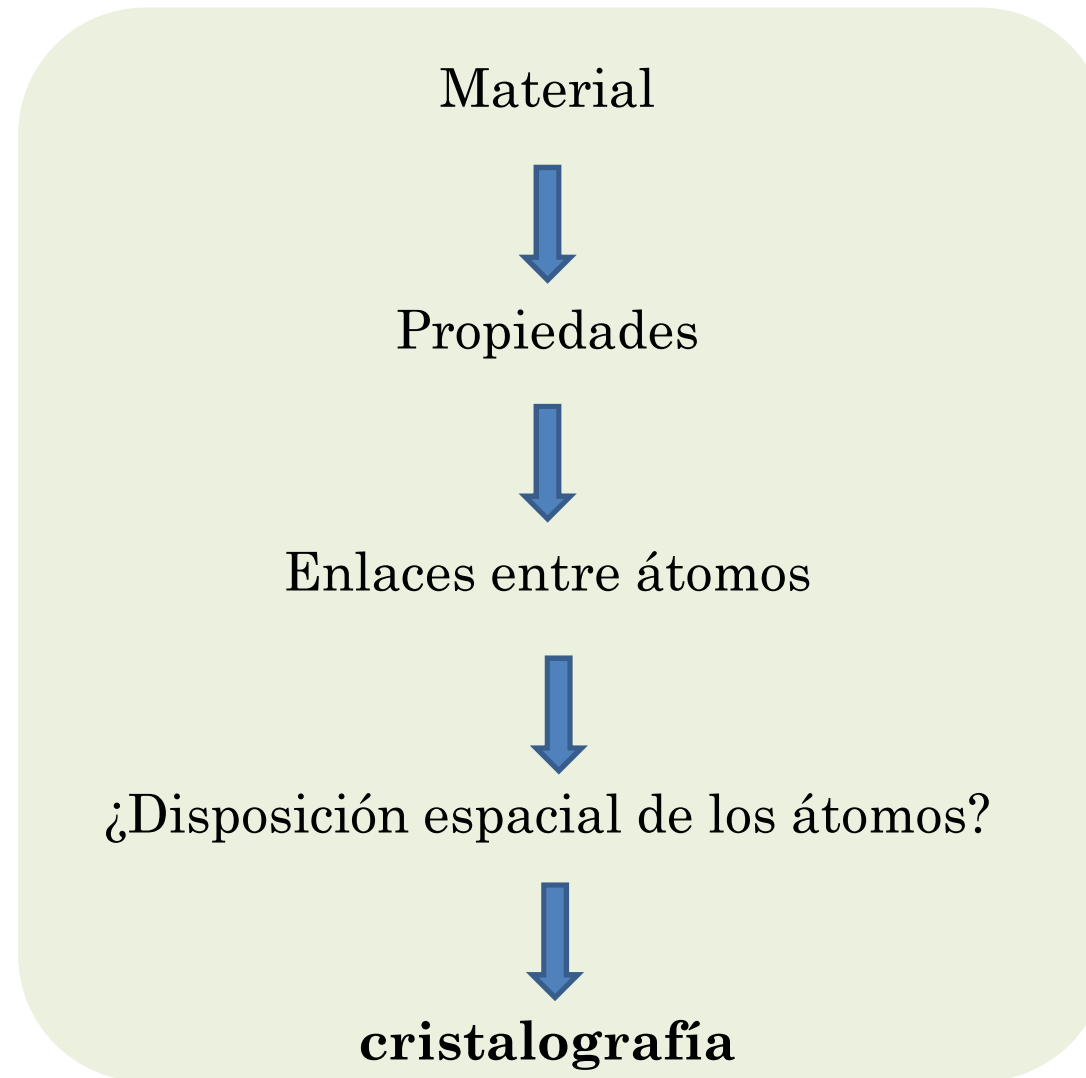
ENLACES SECUNDARIOS

Enlaces de Van der Waals



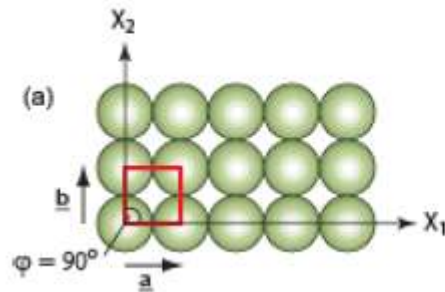
ENLACES



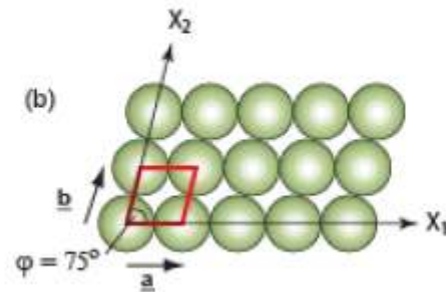


Empaquetamiento de esferas en 2D

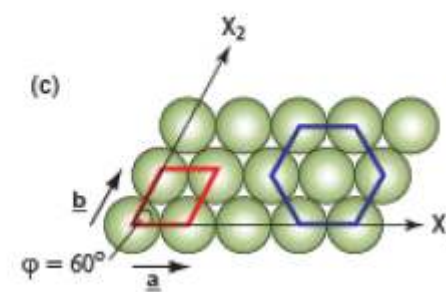
- ✓ Si tratan de empaquetar esferas en un plano, verán que hay tres arreglos típicos que pueden lograr; es decir, hay tres formas de empaquetar que difieren en su simetría.
- ✓ Cada una de estas formas de empaquetar puede ser extendida hasta el infinito agregando mas esferas a cada fila o columna. Cualquiera de estos tres empaquetamientos satisfacen la definición de cristal



Cúbica



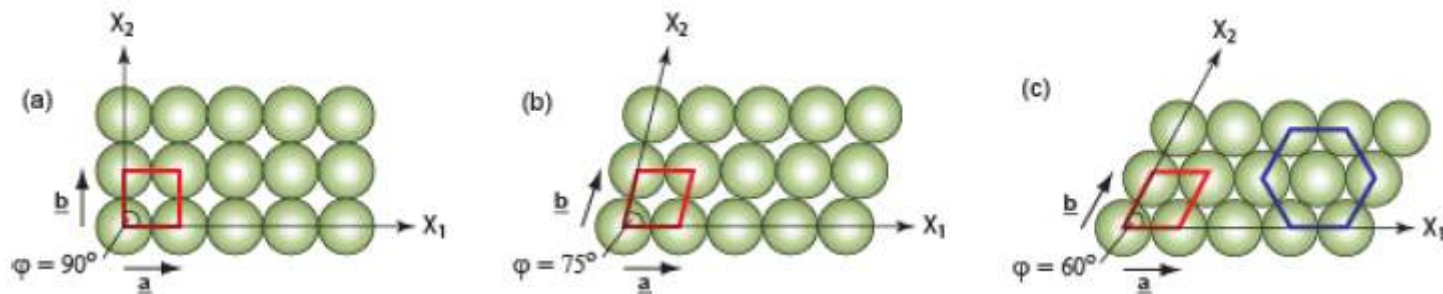
Oblicua



Hexagonal

Un **cristal** es un arreglo repetitivo de átomos, que se extiende en 2 o 3 dimensiones hasta el infinito, sin cambio en el patrón o regularidad

Empaquetamiento de esferas en 2D



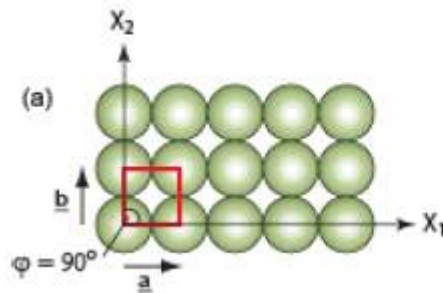
Cúbica

Oblicua

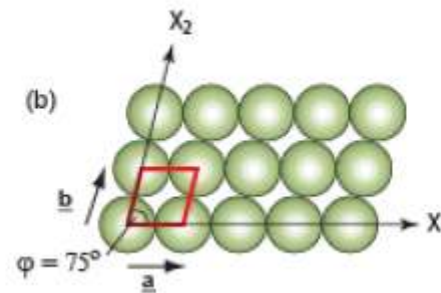
Hexagonal

- ✓ Cada una de estas estructuras está compuesta por esferas que se tocan en las direcciones X_1 y X_2 . Esto quiere decir que las direcciones X_1 y X_2 son compactas.
- ✓ De las tres estructuras, el arreglo hexagonal tiene la mayor densidad de empaquetamiento; de modo que el arreglo hexagonal forma un plano compacto. Es decir, es el arreglo que minimiza la cantidad de esferas por área.
- ✓ Las otras dos estructuras, aunque contienen direcciones compactas, no forman un plano compacto

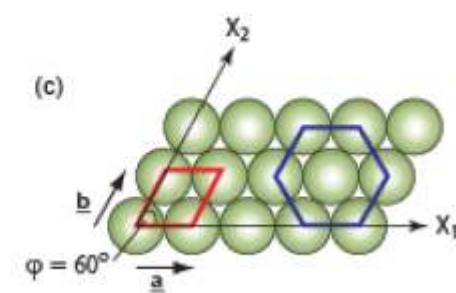
Empaquetamiento de esferas en 2D



Cúbica



Oblicua

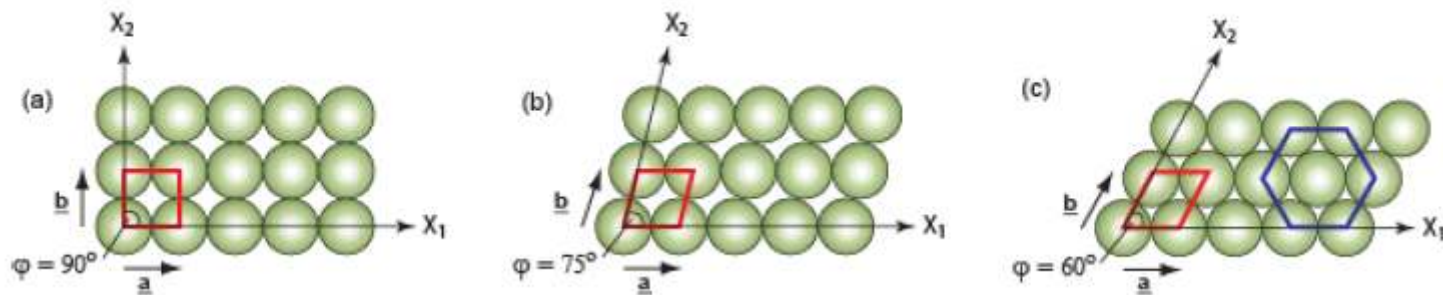


Hexagonal

Cada una de estas estructuras (cúbica, oblicua y hexagonal) está formada por una unidad que se repite (marcado en rojo sobre la figura). Esta unidad que se repite es la celda unitaria primitiva.

La **celda unitaria** de un cristal es la estructura básica del cristal. Si la celda unitaria se traslada regular y repetidamente en el espacio, es posible construir el cristal. La **celda unitaria primitiva** es la celda unitaria de menor tamaño

Empaquetamiento de esferas en 2D



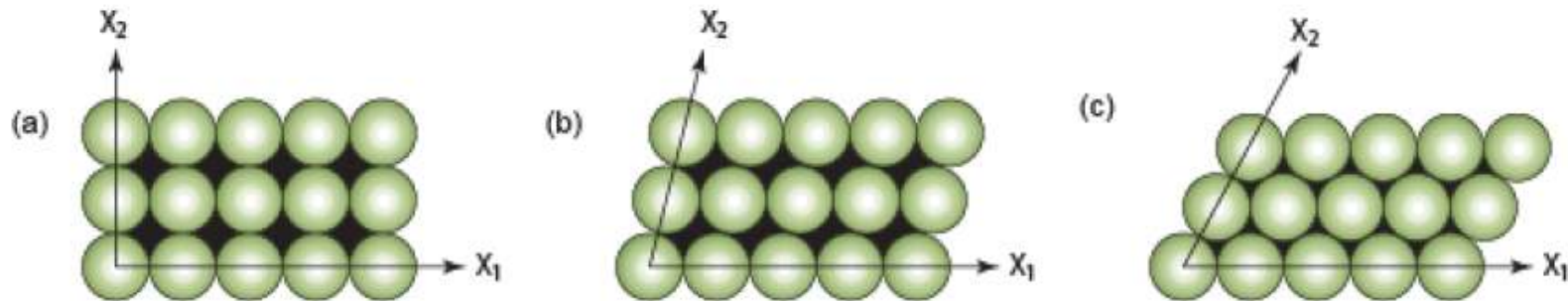
Cúbica

Oblicua

Hexagonal

- ✓ Las celdas primitivas están marcadas en rojo sobre cada una de las estructuras. En estas estructuras, la celda primitiva contiene un solo átomo.
- ✓ Aunque la celda primitiva es la unidad mas pequeña, en algunos casos es útil establecer una celda unitaria de mayor tamaño (en la estructura hexagonal, la celda unitaria en azul contiene 3 átomos) para satisfacer requerimientos de simetría.

Espacio Intersticial

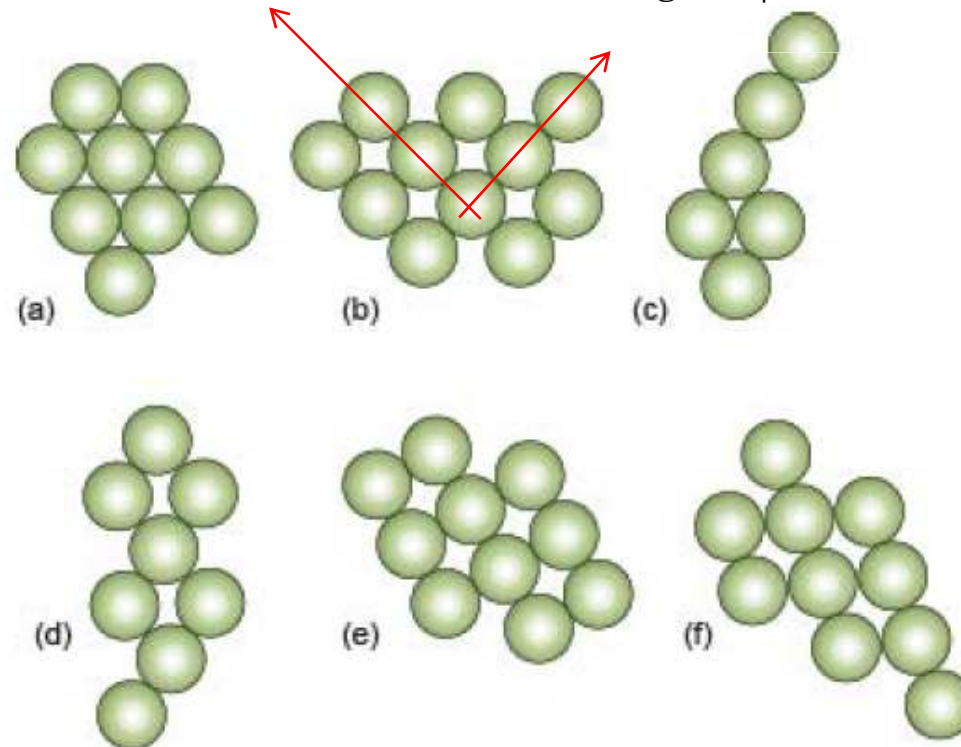


El **espacio intersticial** es la unidad de espacio entre los átomos o moléculas cuando están empaquetados en un cristal

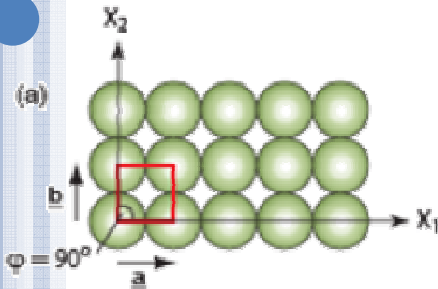
- ✓ Los espacios intersticiales tienen diferentes formas y diferentes tamaños en cada una de las tres estructuras presentadas.
- ✓ Este espacio es importante, ya que en las aleaciones y compuestos, donde hay mezcla de átomos de distinta naturaleza, los átomos pequeños se ubican en los intersticios dejados por los átomos grandes.
- ✓ De modo que la aleación sólo puede existir si el intersticio es lo suficientemente grande como para acomodar el átomo pequeño sin distorsión

Ejercicio

1. Identifique cada una de las 6 estructuras presentadas a continuación (cuales son oblicuas, cúbicas o hexagonales).
2. Dibuje la celda unitaria sobre cada una de las estructuras
3. Para cada estructura, identifique con cuantos átomos vecinos tiene una esfera (átomos que se toquen entre si)
4. Calcule el área por esferas para la celda unitaria de la estructura oblicua y hexagonal, asumiendo que el diámetro de las esferas es a . Expresé el área para la estructura oblicua en función del ángulo φ formado entre X_1 y X_2



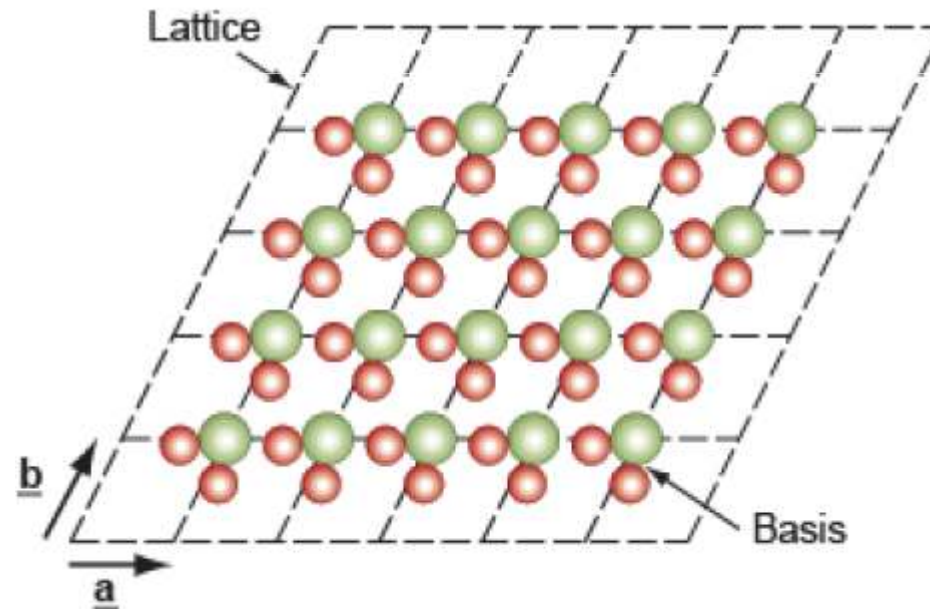
Empaquetamiento de unidades no-esféricas



- ✓ Hasta ahora, hemos considerado que los átomos son esferas. Esto es una buena aproximación de la realidad cuando se estudian cristales simples como el aluminio, cobre o níquel, formados por un solo elemento.
- ✓ Pero, la mayoría de los sólidos están formados por átomos de varios tipos, por ejemplo la alúmina (Al_2O_3) o el polietileno ($\text{CH}_3\text{-(CH}_2)_n\text{-CH}_3$).
- ✓ Para este tipo de materiales, la estructura resultante de agrupar los átomos tiene dimensiones a y b distintas.
 - a) Cuando a y b son distintas, es posible formar 5 estructuras
 - b) Cuando a y b son iguales, se forman 3 estructuras (cúbica, oblicua y hexagonal)

Red cristalina

Los sólidos pueden ser descritos en función de una red periódica, con un grupo idéntico de átomos unidos a cada punto de red, como se muestra en la figura. El grupo de átomos es la base. Si la base se repite varias veces en el espacio, entonces se forma el cristal

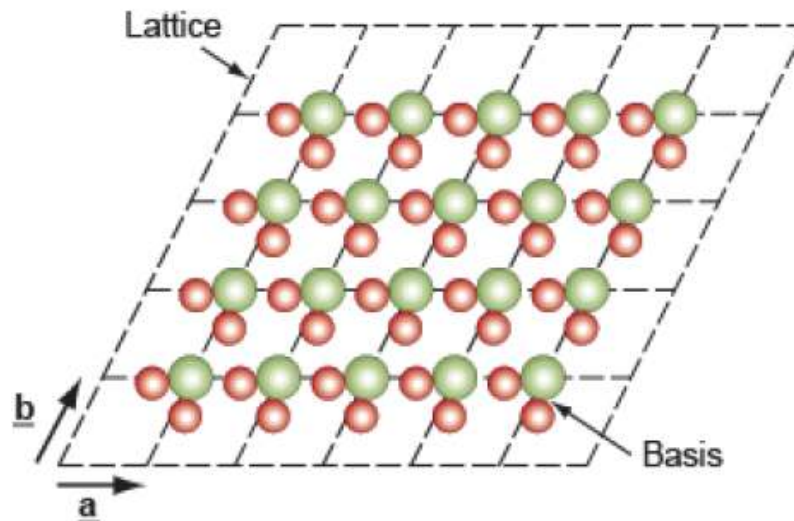


Red + Base = estructura del cristal

Red cristalina

La **red** (cristalina) está definida por la traslación de los vectores **a** y **b** (o en 3D **a**, **b** y **c**) de modo tal que el arreglo atómico luce idéntico cuando se observa desde cada punto de red. Un punto de red es llevado a otro punto de red, mediante la traslación

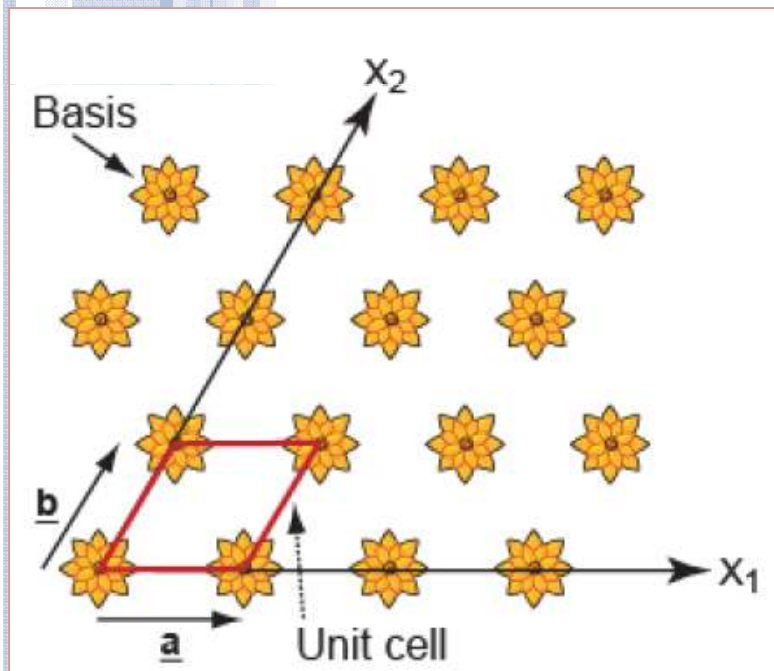
$$\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b} (+ n_3 \mathbf{c})$$



Si tomamos los vectores más cortos **a**, **b** y **c** que satisfacen el criterio de “lucir idénticos”, la celda unitaria contiene una sola unidad estructural; de modo que los vectores **a**, **b** y **c** son primitivos

Red cristalina

Todas las estructuras que tienen patrones que se repiten regularmente pueden ser descritos en función de una red y una base. Consideren la figura mostrada a continuación. Para identificar la red, la celda unitaria y la base se procede de la siguiente manera:



1. Identificar un punto en el patrón. Por ejemplo, el centro de una flor y marque todos los puntos que luzcan iguales (que tengan la misma posición y los mismos aspectos alrededor). Estos son los puntos de red
2. Unir los puntos de red para obtener la red: es hexagonal
3. Marcar la celda primitiva: la unidad mas pequeña que caracteriza completamente la estructura: el paralelogramo
4. Identificar la base: es el contenido de la celda primitiva: una flor completa (los segmentos de flor dentro de la celda al unirse dan una flor completa)

Simetría

Si a y b son distintas, entonces es posible encontrar 5 estructuras o redes distintas. Pero para entenderlo mejor, debemos ver lo que es la simetría.

Para describir un cristal, es necesario responder a 4 preguntas fundamentales:

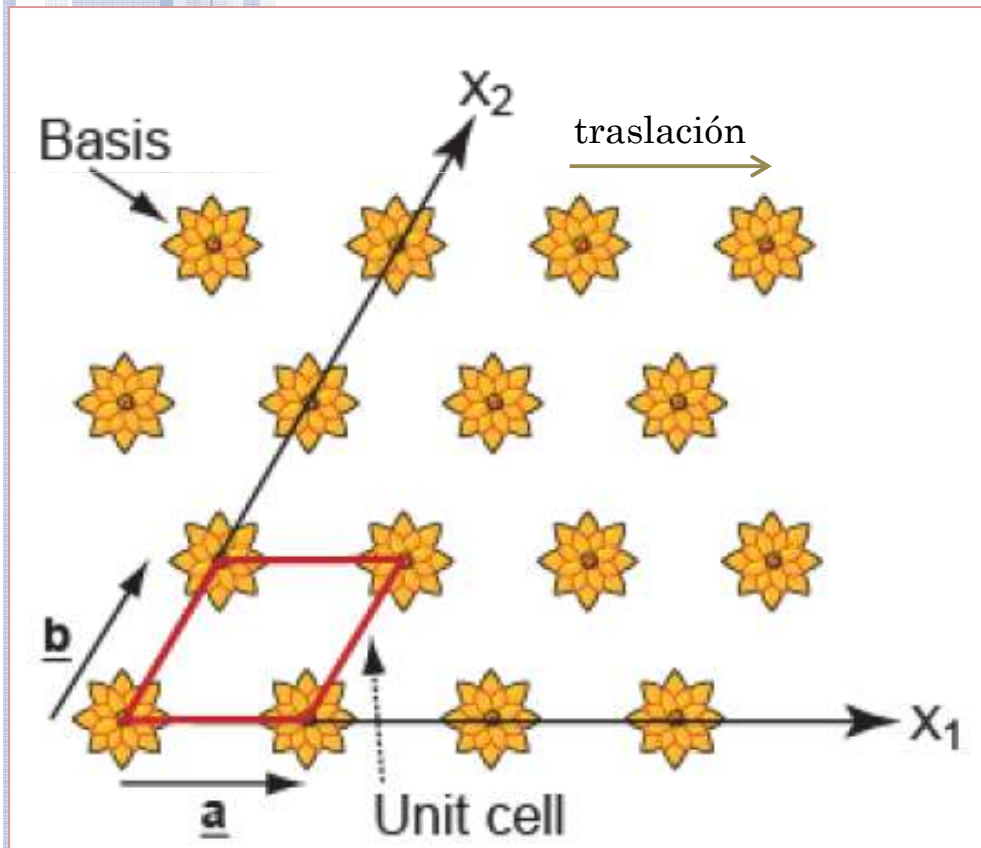
1. ¿Cuál es su red?
2. ¿Cuáles vectores a y b , al ser trasladados, describen mejor al cristal?
3. ¿Cuál es la base?
4. ¿Qué operaciones de simetría contiene la estructura?

Las operaciones de simetría que contiene un cristal son:

1. Traslación
2. Rotación
3. Reflexión

Simetría

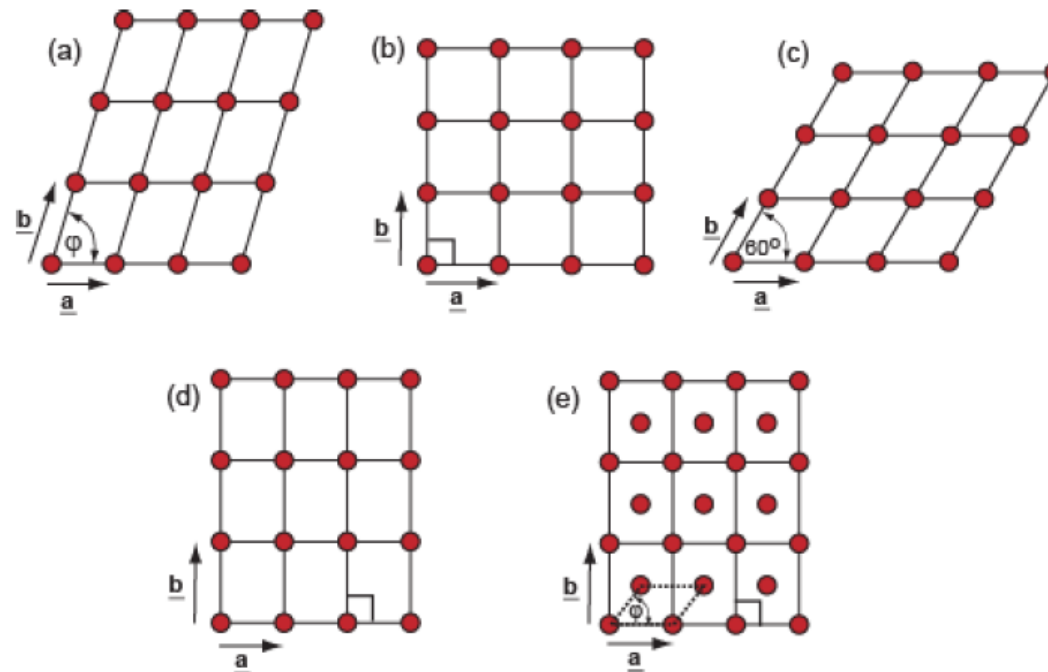
Todos los cristales tiene simetría de traslación, sino no serían cristales. En algunos casos, esta es la única simetría que tienen.



Veamos la figura completa. Si rotamos $\pi/3$ la imagen alrededor de un eje fijo, obtendremos la misma figura original. Si rotamos 360° (2π) pasaremos 6 veces por la posición original.

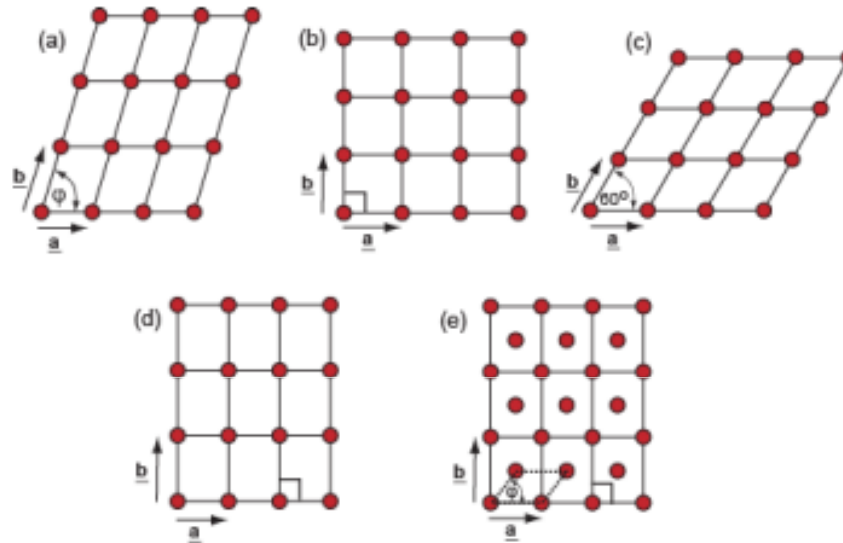
Las 5 estructuras en 2D

La red oblicua mas general, es aquella donde a y b son distintos y el ángulo formado entre ellos es distinto a 90° (figura a). Las estructuras cúbica y hexagonal se observan en las figuras b y c. Si los ejes a y b son distintos, pero forman 90° entre ellos, se forma la red rectangular; pero si además los ejes primitivos forman un ángulo distinto a 90° pero con simetría de reflexión, entonces se forma la red rectangular centrada.



CRISTALOGRAFÍA

Las 5 estructuras en 2D

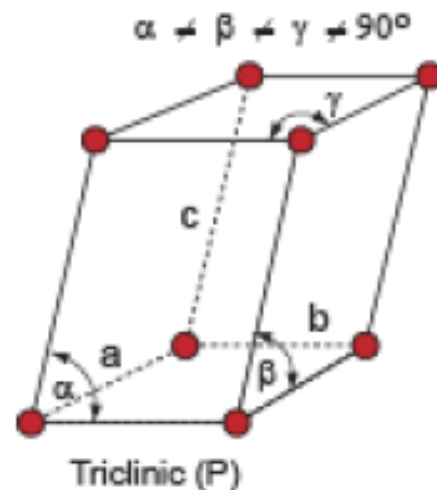


Red	Dimensiones de la celda	Ángulo
Oblicua	$a \neq b$	$\varphi \neq 90$
Cuadrada	$a = b$	$\varphi = 90$
Hexagonal	$a = b$	$\varphi = 120$
Rectangular primitiva	$a \neq b$	$\varphi = 90$
Rectangular centrada	$a \neq b$	$\varphi \neq 90$

Estructuras en 3D

Los cristales son más difíciles de dibujar en 3D que en 2D, pero las ideas y el lenguaje que se utiliza para describirlas es el mismo. Debido a la dimensión extra, se generan 14 redes, en vez de 5. Todas tienen simetría de traslación, algunas de rotación y otras de reflexión.

En 2D la red oblicua es la más general, las otras 4 son casos especiales que se derivan a partir de ella. En 3D, la red triclínica es la más general. La celda unitaria tiene dimensiones a , b y c distintas entre sí, y ninguno de sus ángulos forman 90° . Las otras 13 redes, son casos especiales de la triclínica.

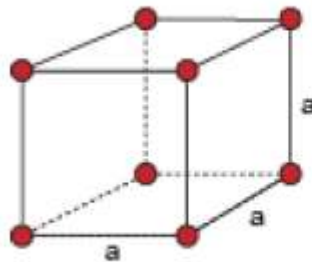


13 Redes de Bravais

Estructuras en 3D

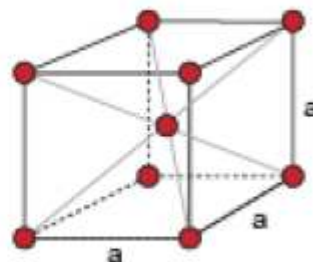
Redes que deben memorizar:

1. El cúbico simple o SC/CS ($a = b = c$, todos los ángulos son de 90°)
2. El cúbico centrado en el cuerpo o BCC
3. El cúbico centrado en las caras o FCC
4. El hexagonal compacto o HCP



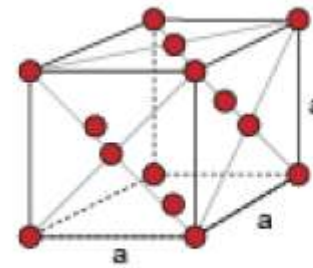
Simple cubic

SC o CS



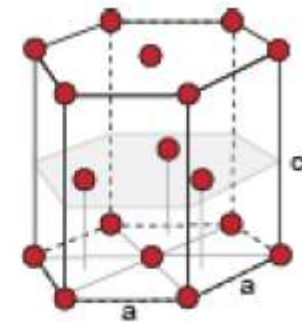
Body-centered cubic

BCC



Face-centered cubic

FCC



Hexagonal close packed

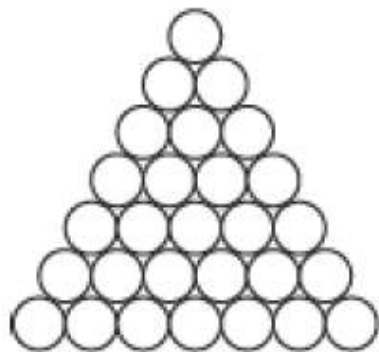
HCP

Empaquetado de estructuras en 3D

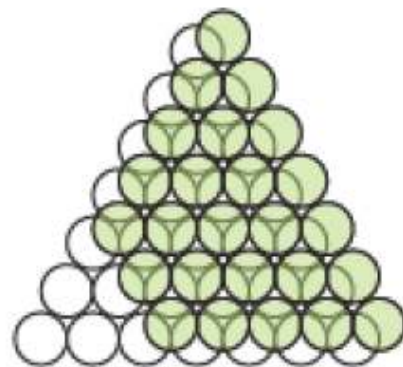
Si tratan de empaquetar esferas para formar una pirámide compacta (similar a organizar naranjas en el mercado) van a encontrar que hay dos formas de hacerlo.

Se comienza formando la base o primera capa que es un plano compacto, como el de la figura a. Para la segunda capa, se pueden colocar esferas sobre los espacios que quedan entre las esferas de la primera capa (figura b). Para la tercera capa hay 2 alternativas:

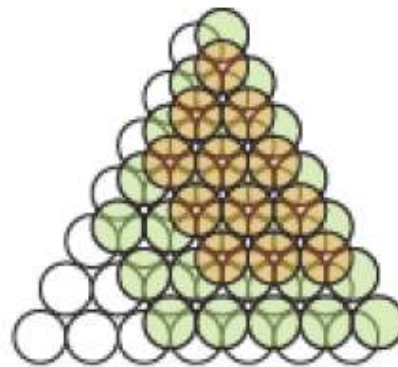
1. Las esferas de la tercera capa quedan sobre los espacios vacíos de la segunda capa (figura c)
2. Las esferas ocupan la misma posición que las esferas de la primera capa (figura d)



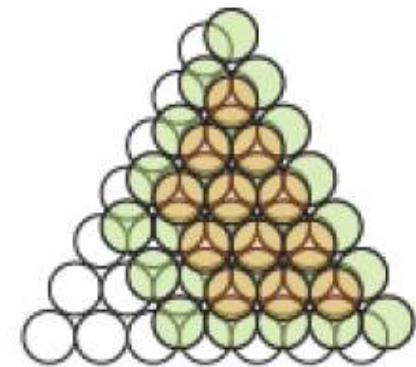
(a) Close-packed layer A



(b) Layer B on layer A to give AB close-packed double layer



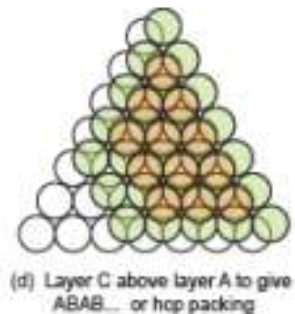
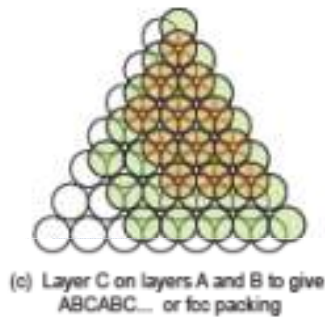
(c) Layer C on layers A and B to give ABCABC... or fcc packing



(d) Layer C above layer A to give ABAB... or hcp packing

Apilamiento

Ambos arreglos son igualmente densos; es decir, ambos forman estructuras compactas, pero difieren en simetría. De este modo, la forma de la celda primitiva va a ser distinta.



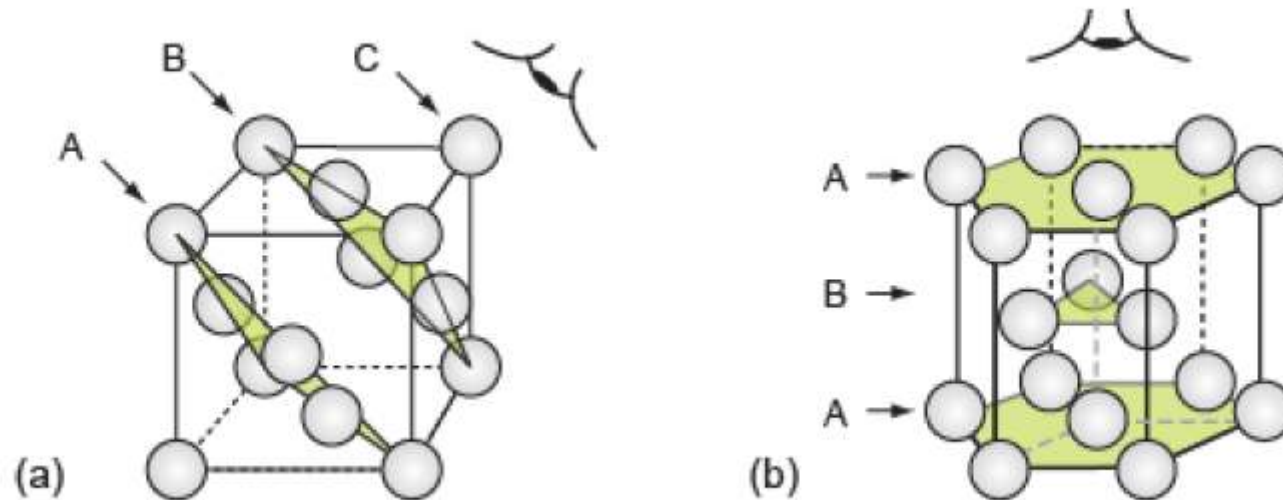
- ✓ Cuando se organizan las esferas de acuerdo a la configuración de la figura c; se forman 3 planos de esferas con posiciones distintas (A, B y C). De modo que la **secuencia de apilamiento** de estos planos es **ABCABCABC....** La estructura que describe esta secuencia de apilamiento es la **FCC**
- ✓ Cuando se organizan las esferas de acuerdo a la figura d; la primera y la tercera capa de esferas son iguales, las esferas están en la misma posición; de este modo, se forman 2 planos de esferas (A y B). Así que la **secuencia de apilamiento** es este caso sería **ABABAB...** esta es la secuencia de apilamiento de la estructura **HCP**

<i>Structure</i>	<i>Stacking sequence</i>	<i>Examples</i>
Face-centered cubic (FCC)	ABCABC...	Aluminum, Nickel, Copper
Close-packed hexagonal (HCP)	ABABAB...	Titanium, Magnesium, Zinc

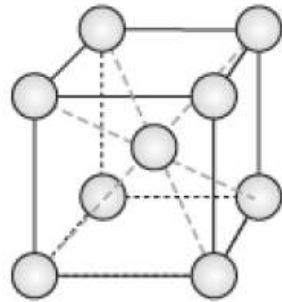
Empaquetamiento de estructuras compactas

En la figura pueden observar la celda unitaria y la secuencia de apilamiento de los planos compactos para cada estructura. Si se observa desde la posición correcta (donde está el ojo), se verá la misma secuencia de apilamiento de la lámina anterior.

De este modo, las estructuras FCC y HCP están formadas por planos compactos, y cada plano compacto contiene 3 direcciones compactas a lo largo de la cual las esferas se tocan entre sí.



CRISTALOGRAFÍA



Las estructuras cúbica simple y BCC, no son estructuras compactas. En estas estructuras, el espacio llenado por las esferas es menor.

La mayoría de los materiales metálicos con aplicación ingenieril contienen estructuras FCC, BCC o HCP; en la cual hay un átomo en cada punto de red (al igual que las esferas). La mayoría de los materiales cerámicos, contienen las mismas estructuras, pero con 2 átomos por punto de red. Por ejemplo, el NaCl, es FCC y tiene 1 átomo de Na^+ y 1 de Cl^- en cada punto de red.

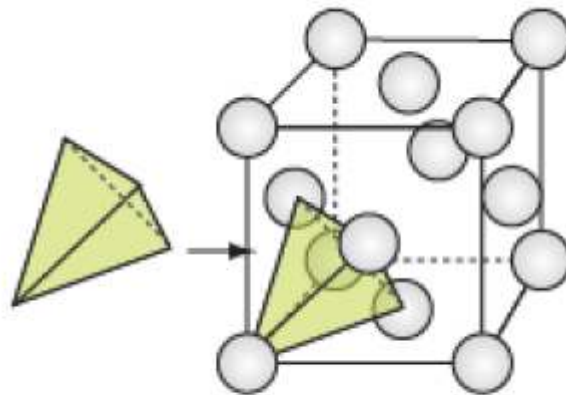
Red + Base = Estructura Cristalina

Espacio intersticial

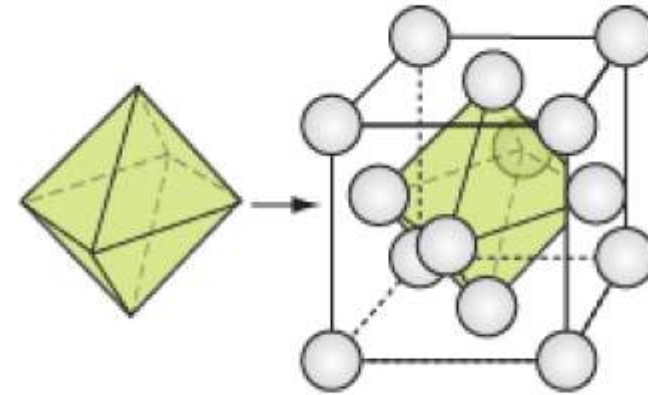
Al igual que en 2 dimensiones, el espacio intersticial es la unidad de espacio que se forma entre los átomos o moléculas.

Tanto las estructuras FCC como las HCP, contienen espacios intersticiales; los cuales pueden ser:

1. Tetraédricos
2. Octaédricos.



(a) FCC tetrahedral hole

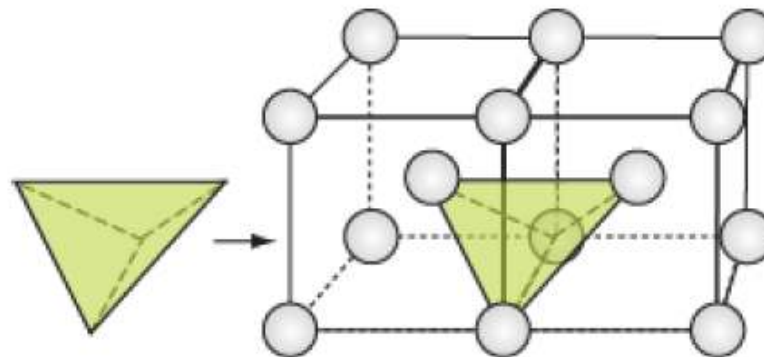


(b) FCC octahedral hole

Los intersticios octaédricos son mas grandes que los tetraédricos

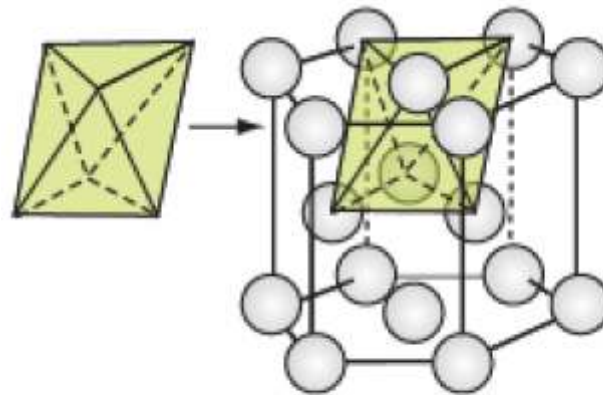
Los intersticios son importantes, ya que es allí donde se pueden alojar átomos extraños a la estructura (si son lo suficientemente pequeños para caber en esos espacios sin causar mucha distorsión).

El acero al carbono es una mezcla de hierro (Fe) con algo de carbono (C) en sitios intersticiales. El hierro es BCC y, al igual que la estructura FCC, contiene huecos o intersticios. Estos intersticios son tetraédricos. En ellos es posible hospedar átomos foráneos, con un radio 0,29 veces el del receptor, sin distorsión. El carbono, se acomoda en esos espacios; pero es un átomo grande, de modo que genera distorsión en la red. Esta distorsión es lo que le da al acero al carbono su resistencia



(c) BCC tetrahedral hole

Las estructuras HCP también tiene espacios intersticiales, tanto tetraédricos como octaédricos. Estos espacios tienen el mismo tamaño que los intersticios de la estructura FCC



(d) HCP octahedral hole

Ejercicios

- 1.- Calcule el diámetro de la esfera más grande que cabe en el intersticio octaédrico de la estructura FCC. Tomar el diámetro de la esfera de la estructura FCC como 1 (estructura receptora)
- 2.- Cuantos intersticios tetraédricos y octaédricos hay en la estructura FCC?
- 3.- Identifique los espacios tetraédricos en la estructura HCP, donde se ubican? Dibuje uno sobre la estructura de la figura

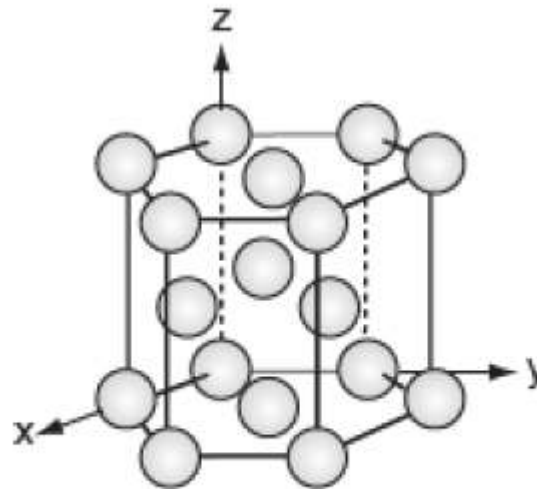


Figure C22. The HCP structure.

Describiendo planos

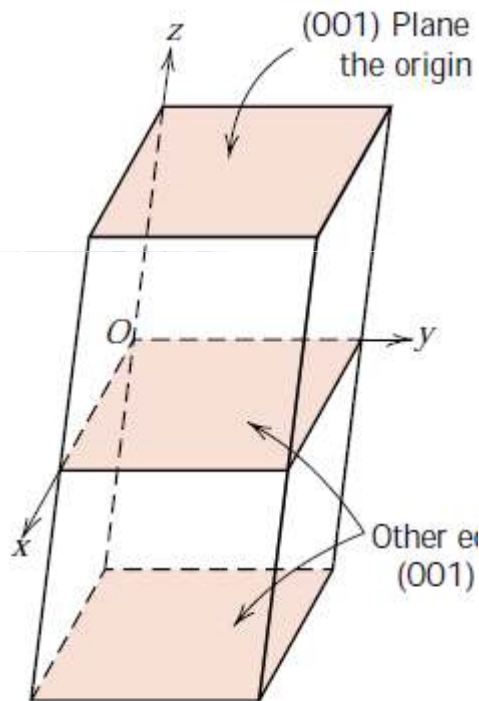
Las propiedades de un cristal depende de la dirección en que se evalúen. Por ejemplo, el módulo elástico del titanio hexagonal es mayor en el eje hexagonal que en uno normal a éste. Esta diferencia puede ser utilizada para diseñar materiales. En la fabricación de álabes de turbinas, es útil alinear el eje hexagonal del material con el eje de la turbina para obtener alta rigidez.

Por esto es necesario describir plano y direcciones que nos permitan ubicar al cristal en el espacio. Para ellos se utilizan los Índices de Miller.

Los **Índices de Miller** de un plano son el inverso de los interceptos entre el plano y los 3 ejes que definen la celda unitaria, reducidos al menor número entero posible.

Para determinar los índices (hkl) es necesario:

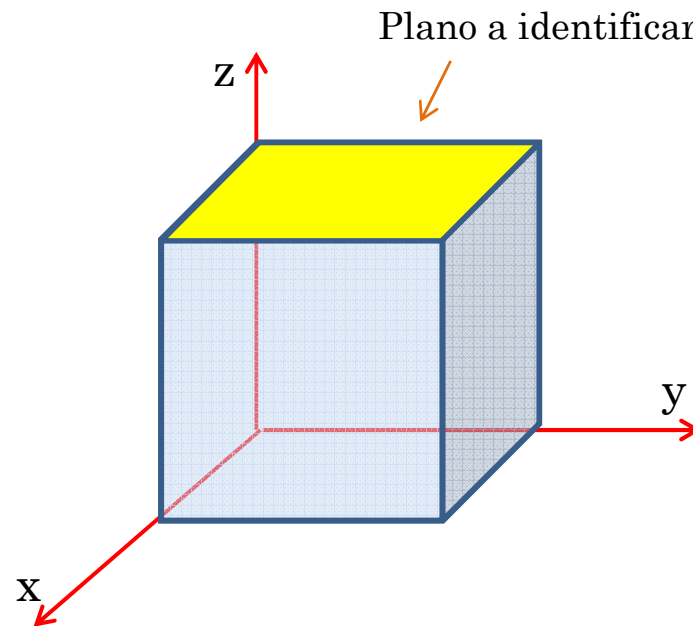
1. Si el plano pasa por el origen del sistema de coordenadas, se debe construir otro plano paralelo a éste mediante la traslación del plano original a través de la celda unitaria. También se puede establecer un nuevo origen del sistema de coordenadas en otro vértice de la celda unitaria.
2. En este punto, el plano cristalográfico intercepta o es paralelo a los ejes del sistema de coordenadas. Se determinan los puntos donde el eje corta los ejes x , y y z .
3. Se toman los inversos de estos números. Cuando un plano es paralelo a un eje, se considera que intercepta al eje en el infinito, así que su inverso es cero.
4. Si es necesario, los índices se reducen al número más pequeño mediante la multiplicación/división por un factor común.
5. Los índices enteros y reducidos, no separados por comas, se colocan entre paréntesis: (hkl). Los números negativos se denotan mediante la colocación de una barra sobre el índice.



(a)

Índices de Miller

Lo primero que se debe hacer es dibujar un sistema de coordenadas a lo largo de las aristas de la celda unitaria



Cortes con los ejes:

Eje x : ∞

Eje y : ∞

Eje z : 1

Inversos:

Eje x : 0

Eje y : 0

Eje z : 1

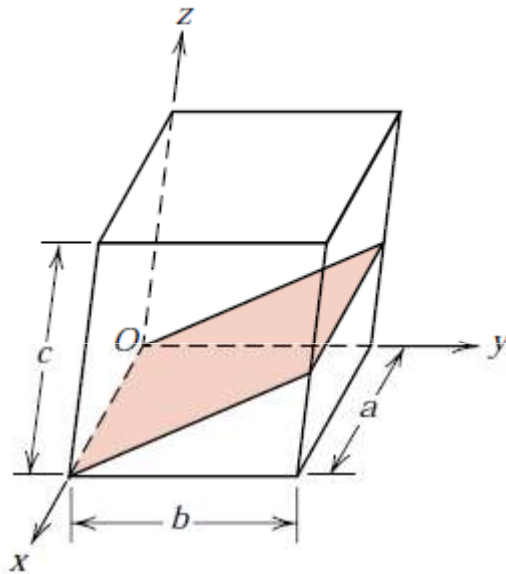
Índices del plano:

(001)

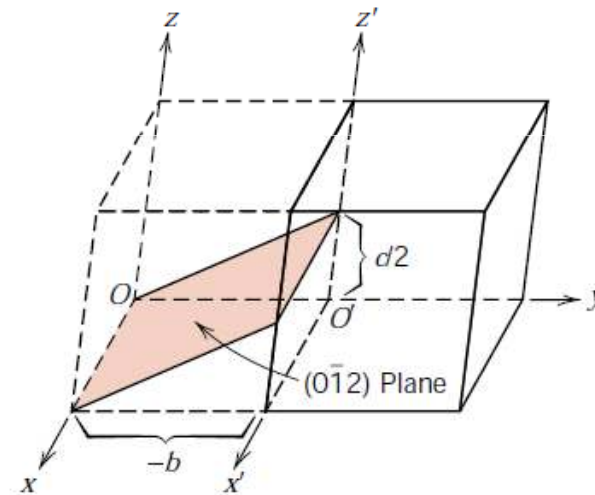
ESTRUCTURA CRISTALINA

Índices de Miller

Determinar los índices de Miller del plano de la siguiente figura:



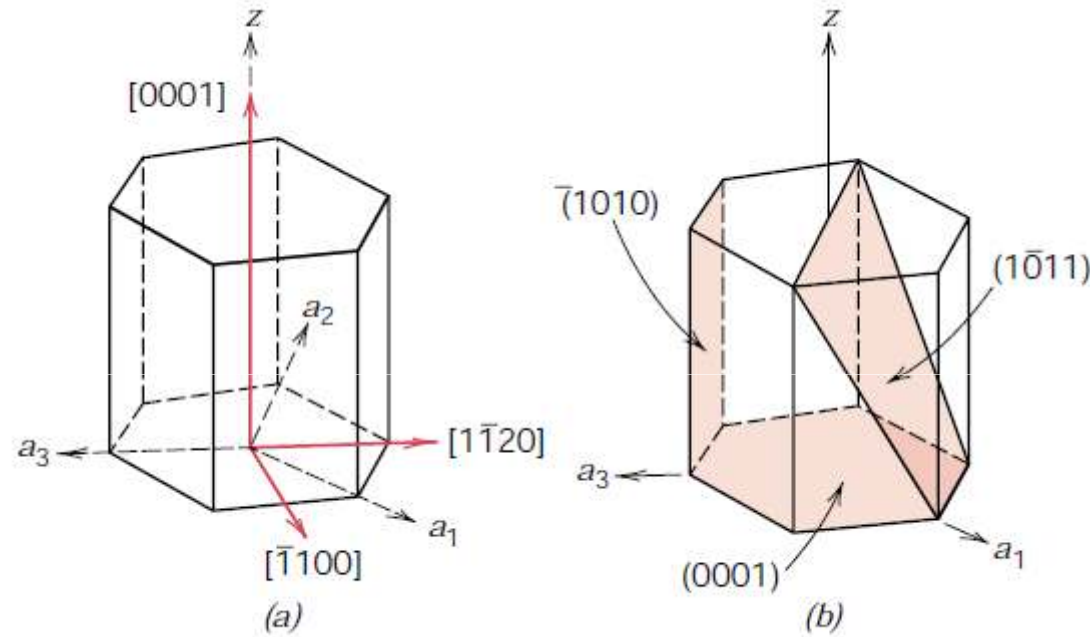
1. Pasa por el origen, hay que trasladarlo. Para ello se colocó el sistemas de coordenadas en otro vértice de la celda unitaria



	x	y	z
Intercepts	∞a	$-b$	$c/2$
Intercepts (in terms of lattice parameters)	∞	-1	$\frac{1}{2}$
Reciprocals	0	-1	2
Reductions (unnecessary)			
Enclosure		$(0\bar{1}2)$	

ESTRUCTURA CRISTALINA

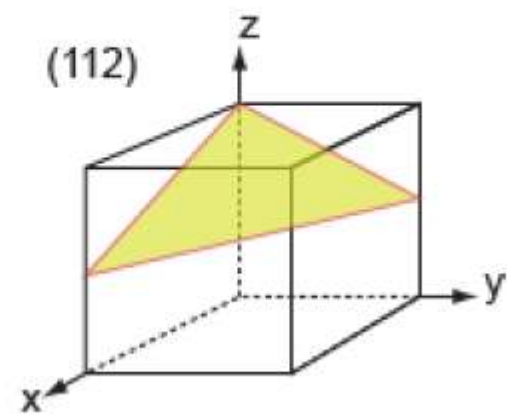
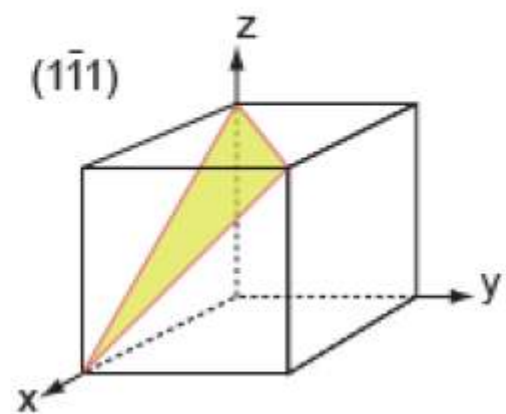
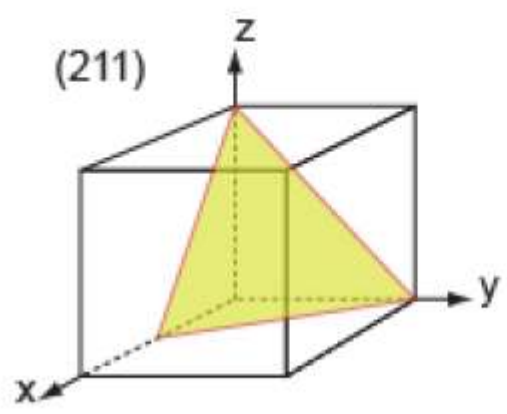
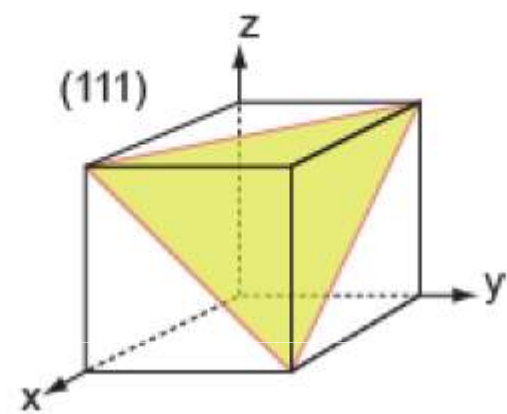
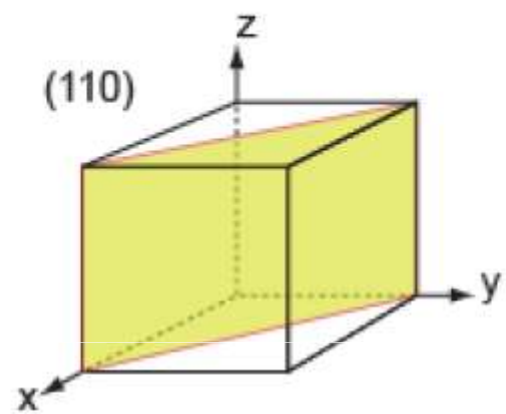
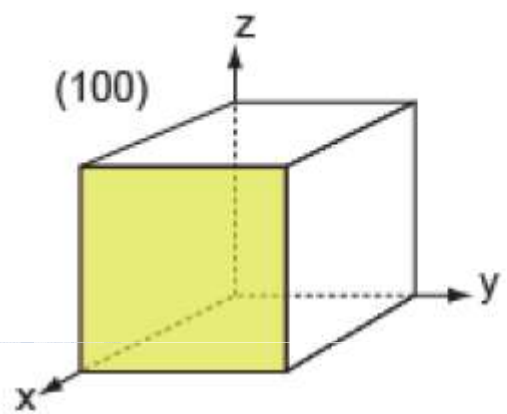
Índices de Miller



$(hkil)$



$$i = -(h + k)$$

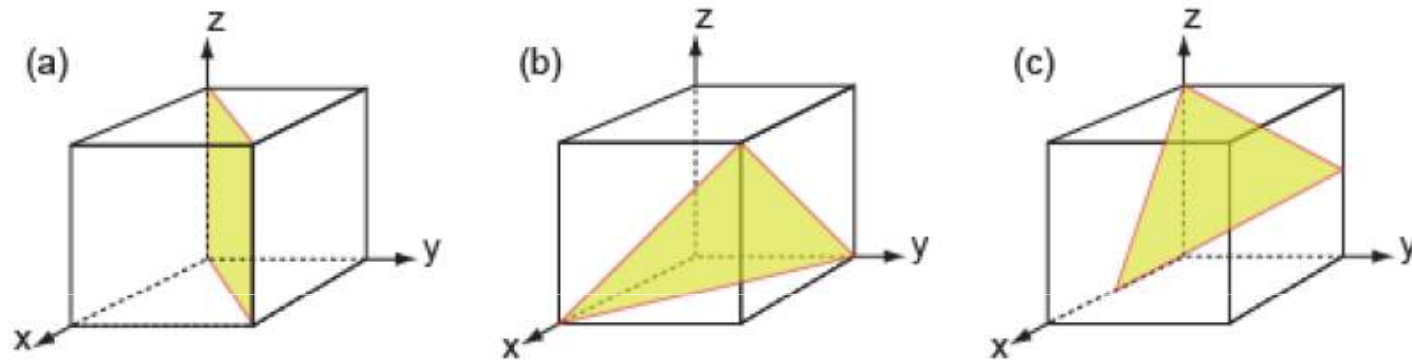


Los Índices de Miller se escriben entre paréntesis (111). Pero hay varios planos del tipo (111). Estos planos, que tienen índices distintos pero son de la misma forma (contienen la misma cantidad de átomos, por ejemplo) constituyen una familia de planos. La familia de planos se escribe entre llaves {111}

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

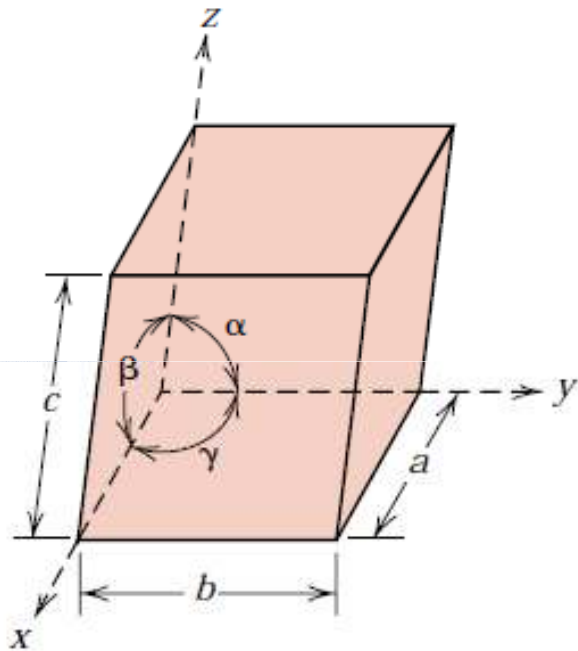
Ejercicios

1.- Cuales son los Índices de Miller de los planos de la siguiente figura?



2.- Por qué la lista de la familia de planos $\{111\}$ no contiene los planos $(\bar{1}\bar{1}1)$ o $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$?

3.- Dibuje los siguientes planos: $(\bar{1}11)$, (120) , $(\bar{1}\bar{1}2)$



✓ Basado en la geometría de la celda unitaria, se define un sistema de coordenadas x, y, z cuyo origen está en uno de los vértices de la celda

✓ La geometría de la celda unitaria está definida completamente por seis parámetros: $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma \Rightarrow$ **parámetros de red**

Los Índices de Miller de una dirección son las componentes del vector (NO el inverso) que comienza en el origen, a lo largo de una dirección, reducidos al menor número entero posible

Direcciones cristalográficas

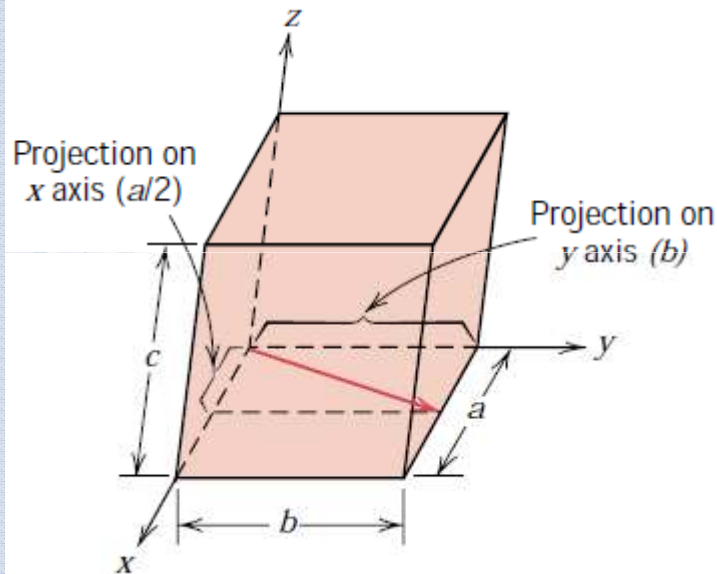
Una dirección cristalográfica es definida como una línea entre dos puntos (vector), obtenidos de la siguiente manera:

1. Un vector de longitud conveniente es posicionado de tal forma que pase por el origen del sistema de coordenadas. Cualquier vector puede ser trasladado a través del cristal, siempre que se mantenga su paralelismo
2. La longitud de la proyección del vector sobre cada uno de los ejes es determinado y medido en función de las dimensiones de la celda unitaria (a, b, c)
3. Estos números o índices son multiplicados/divididos por un factor común para obtener el menor entero posible
4. Los tres índices (reducidos) son colocados, sin comas, entre corchetes: [uvw]. Los índices u, v, w, corresponden a las proyecciones reducidas a lo largo de las direcciones x, y, z, respectivamente

Ejemplo

Determine los índices para el vector de la figura:

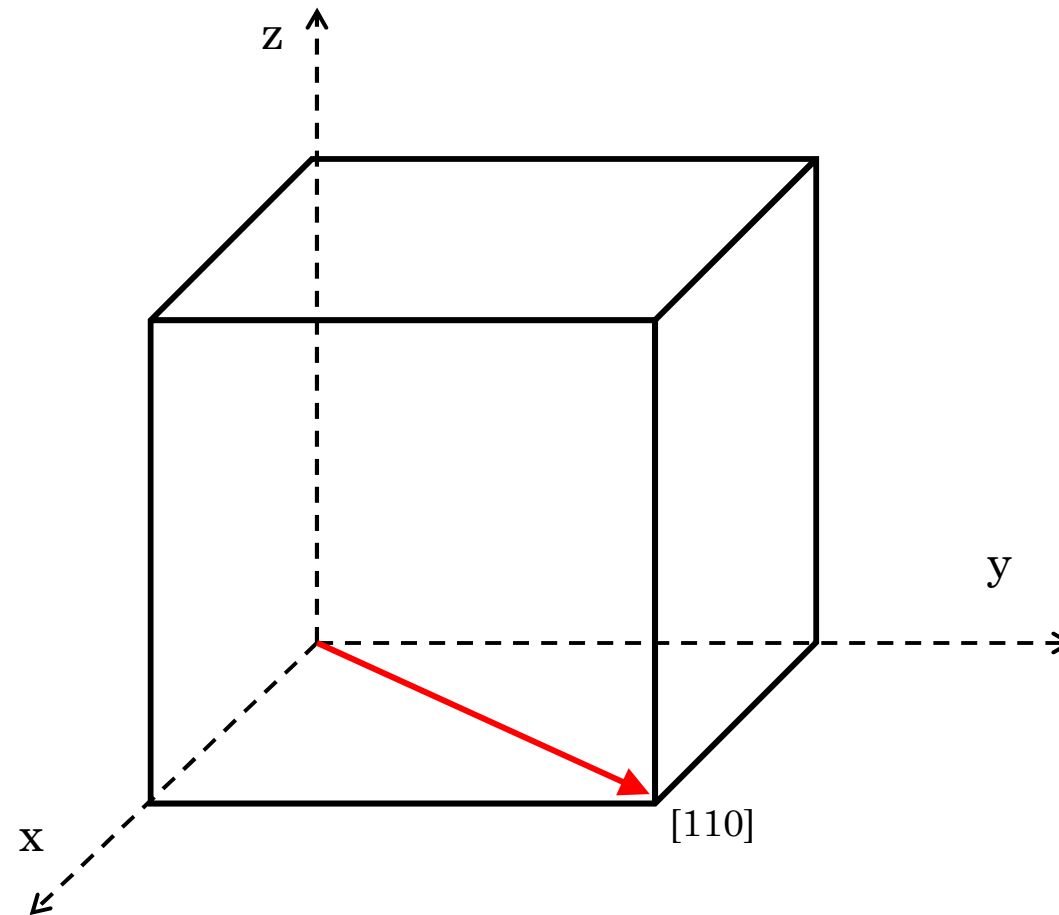
1. Debido a que el vector pasa por el origen, no es necesario trasladarlo
2. Las proyecciones del vector sobre los ejes x, y, z, son $a/2$, b y $0c$ respectivamente; lo que se convierte en $\frac{1}{2}$, 1 y 0 cuando eliminamos a, b, c
3. Hay que multiplicar todo por 2, para obtener un valor entero; entonces los valores reducidos son 1, 2 y 0



	x	y	z
Projections	$a/2$	b	$0c$
Projections (in terms of a, b, and c)	$\frac{1}{2}$	1	0
Reduction	1	2	0
Enclosure		[120]	

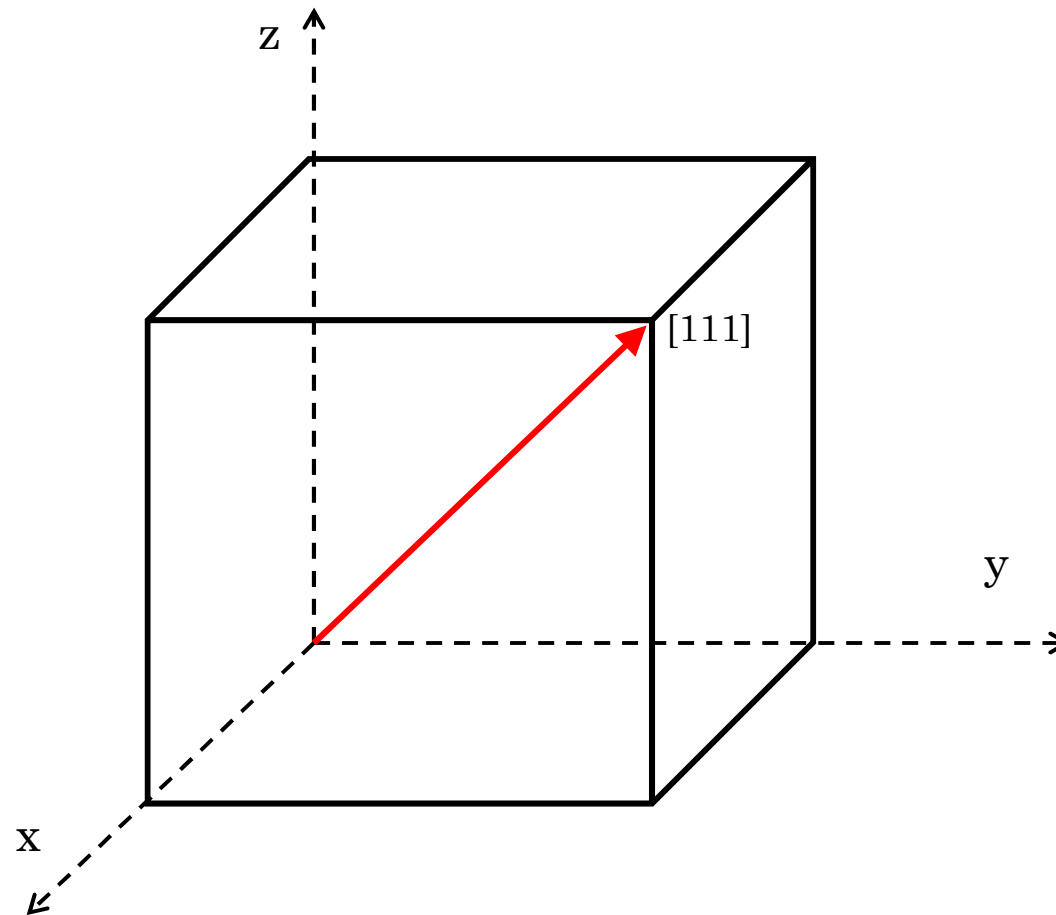
Ejemplo

Dibuje la dirección $[110]$ en una celda cúbica:

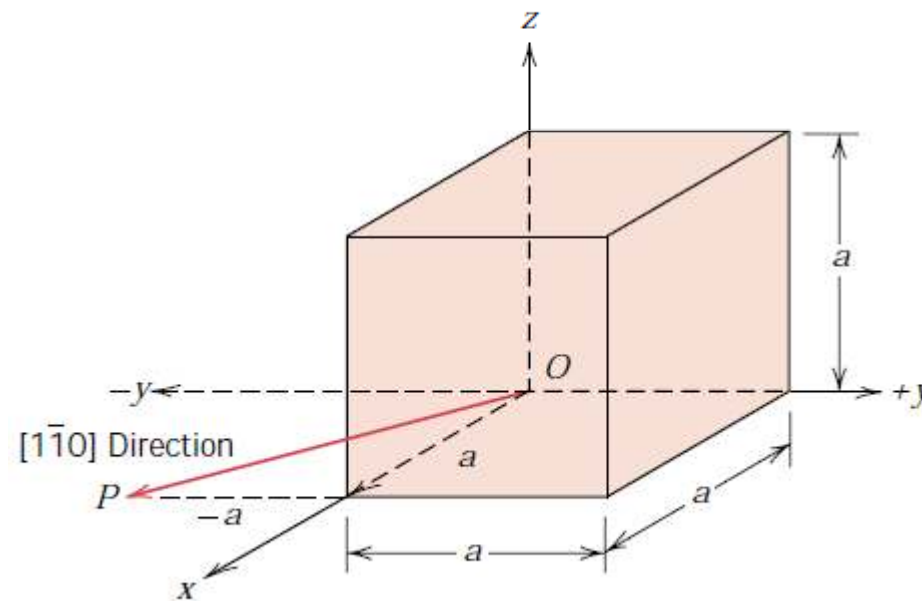


Ejemplo

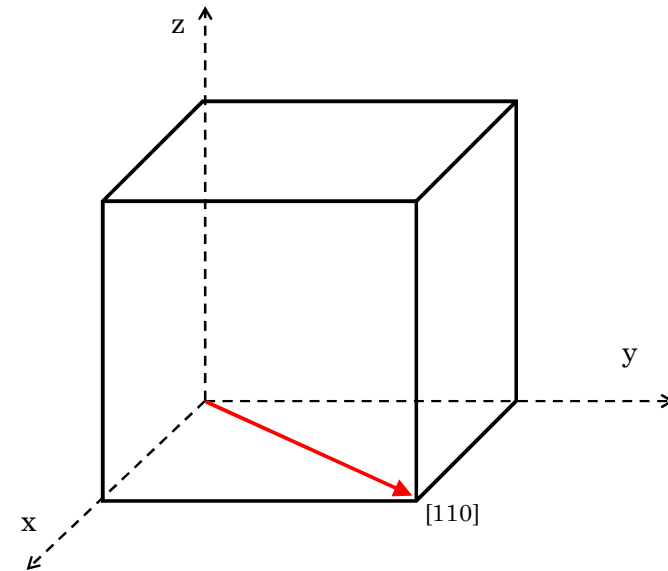
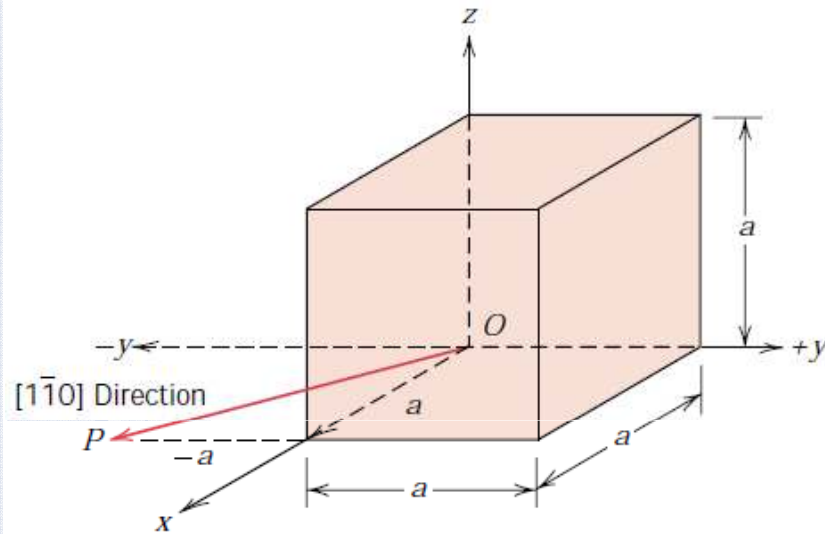
Dibuje la dirección [111] en una celda cúbica:



Dibuje la dirección $[1\bar{1}0]$ en una celda cúbica



Familia de direcciones



Estas dos direcciones son similares, ambas son diagonales de una cara de la celda unitaria. Varias direcciones no paralelas con índices distintos pueden ser equivalentes; ya que el espaciado entre átomos a lo largo de cada dirección es similar.

Por ejemplo, en los cristales cúbicos, las direcciones representadas con:

$[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$, $[00\bar{1}]$ son equivalentes.

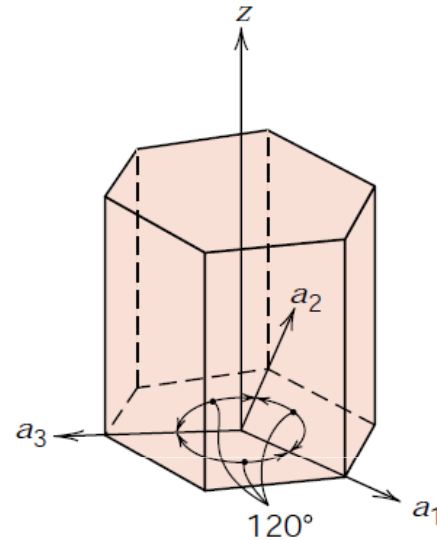
Las direcciones equivalentes se agrupan en **familias** de direcciones: $\langle 100 \rangle$

Direcciones cristalinas

Los ángulos entre dos direcciones pueden determinarse como se determinan para el caso de los vectores. Tomando las direcciones (uvw) y $(u'v'w')$, puede determinarse el ángulo δ entre estas dos direcciones mediante el producto escalar de dos vectores (sistema cúbico):

$$\cos \delta = \frac{D \cdot D'}{|D||D'|} = \frac{uu' + vv' + ww'}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2} \sqrt{(u')^2 + (v')^2 + (w')^2}}$$

Sistemas hexagonales



✓ En los sistemas con simetría hexagonal, dos direcciones con características similares no van a tener los mismos índices.

✓ Se define un sistema con 4 índices (esquema Miller-Bravais), donde los ejes a_1 , a_2 y a_3 están contenidos en el mismo plano, formando un ángulo de 120° entre ellos. El eje z es perpendicular a este plano (plano basal).

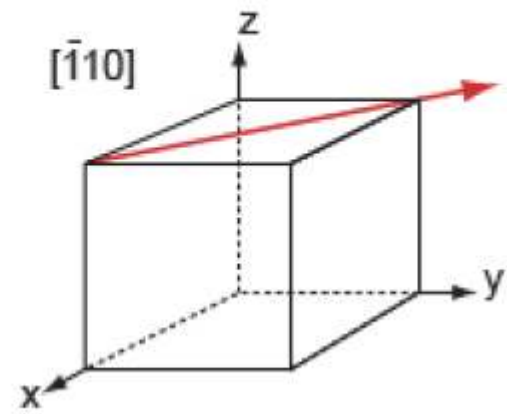
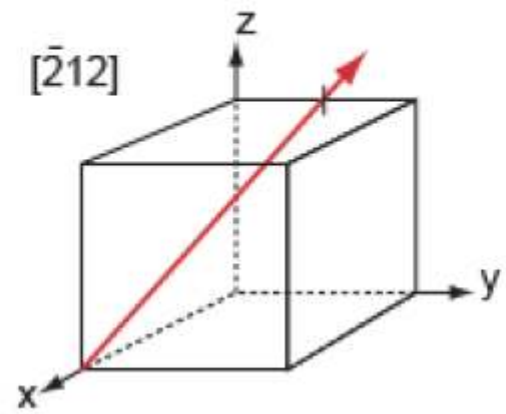
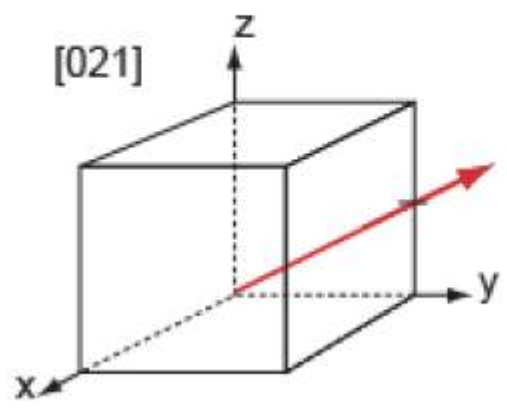
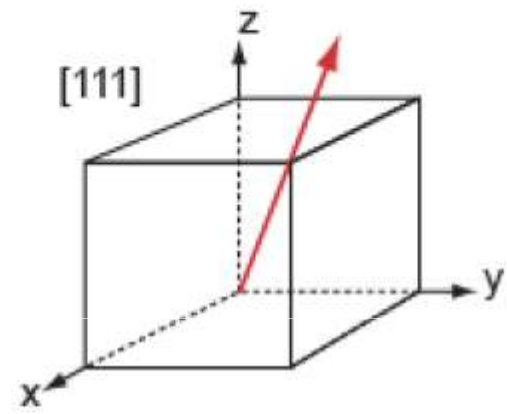
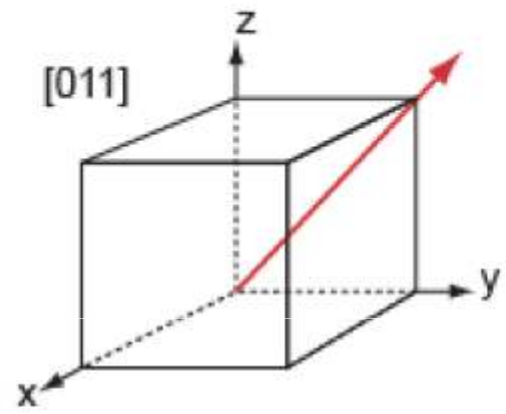
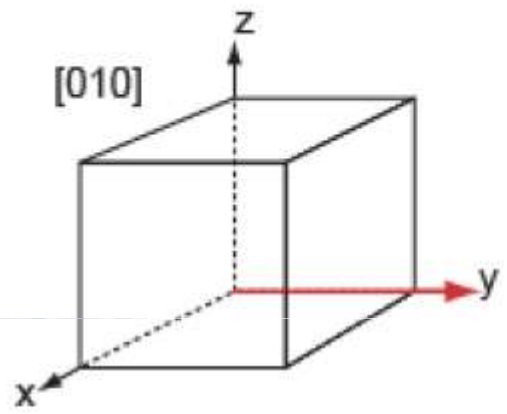
$$[u'v'w'] \longrightarrow [uvw]$$

$$u = \frac{n}{3}(2u' - v')$$

$$v = \frac{n}{3}(2v' - u')$$

$$t = -(u + v)$$

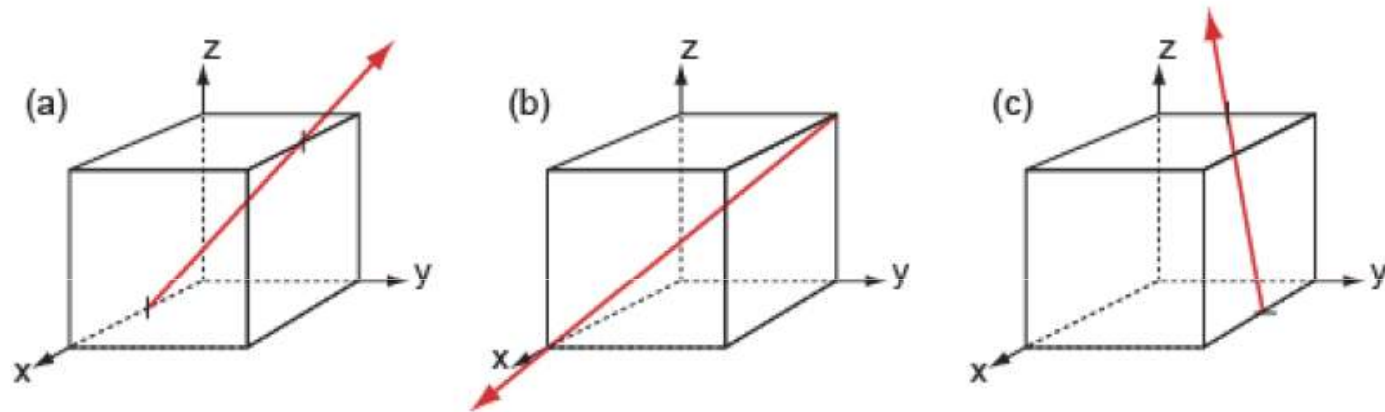
$$w = nw'$$



Direcciones	$[uvw]$ o $[uvtw]$
Familia de direcciones	$\langle uvw \rangle$ o $\langle uvtw \rangle$
Planos	(hkl) o $(hkil)$
Familia de planos	$\{hkl\}$ o $\{hkil\}$

Ejercicios

1.- Identifique los Índices de Miller para las siguientes 3 direcciones.



2.- Por qué la familia de direcciones $\langle 100 \rangle$ no contiene a la dirección $[\bar{1}00]$

3.- Demuestre que la dirección $[111]$ es normal al plano (111) en un cristal cúbico

4.- Dibuje las siguientes direcciones $[\bar{1}11]$, $[210]$, $[2\bar{2}1]$

Estructuras de los Materiales Ingenieriles

Ahora, veamos la importancia de las estructuras vistas hasta el momento:

- ✓ La mayoría de los 92 elementos estables son metálicos; de estos, la mayoría (68) están formados por estructuras FCC, BCC o HCP.
- ✓ Los materiales cerámicos, tienen estructuras mas complejas debido a que están formados por mas de un tipo de átomo (Al_2O_3 , TiN), pueden ser vistos como una estructura de un sólo tipo de átomos (FCC, BCC o HCP), con el otro átomo ocupando espacios intersticiales.

BCC (Body-centered cubic structure)

La estructura **BCC** se puede describir como una celda unitaria cúbica con un solo átomo en cada vértice y uno en el medio del cubo. La base es un átomo localizado en cada punto de red

Material	Typical uses
Iron, mild steel	The most important metal of engineering: construction, cars, cans
Alloy steels	Engine parts, tools, pipelines, power generation
Tungsten	Lamp filaments
Chromium	Electroplated coatings

Los metales BCC tienen las siguientes características:

1. Son dúctiles, particularmente cuando son calentados, lo que permite que sean deformados
2. Por lo general son tenaces, o resistentes a la propagación de grietas, a temperatura ambiente
3. Se vuelven frágiles a bajas temperaturas. Este cambio de comportamiento ocurre a la temperatura de transición dúctil-frágil; por lo que estos materiales no pueden ser utilizados por debajo de esta temperatura
4. Su resistencia depende de la temperatura
5. Por lo general pueden ser endurecidos al introducir átomos en los intersticios (átomos intersticiales)

ESTRUCTURA DE LOS METALES

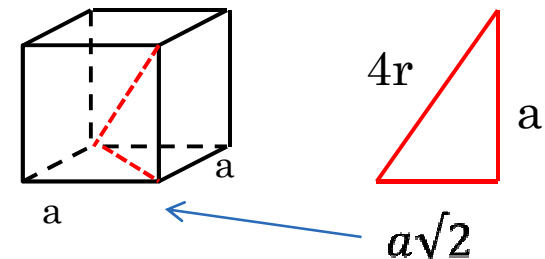
BCC

- ✓ Hay un átomo en el centro de la celda unitaria y 1/8 de átomo en cada uno de los vértices de a celda, por lo tanto existen 2 átomos en la celda unitaria.
- ✓ El factor de empaquetamiento (APF) para el bcc es 0.68 y representa la fracción de volumen de la celda unitaria ocupada por esos 2 átomos
- ✓ Metales bcc: Fe- α , V, Cr, Mo y W

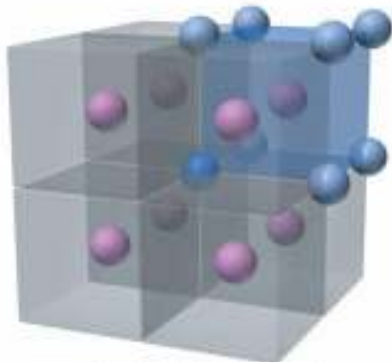
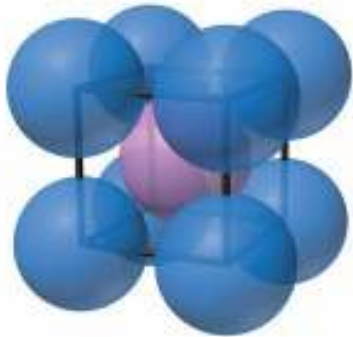
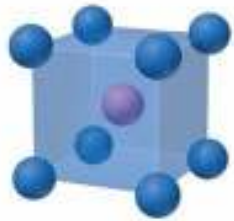
$$APF = \frac{N_{\text{átomos}} V_{\text{átomo}}}{V_{\text{celda unitaria}}}$$

$$4r = a^2 + (a\sqrt{2})^2 \Rightarrow a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

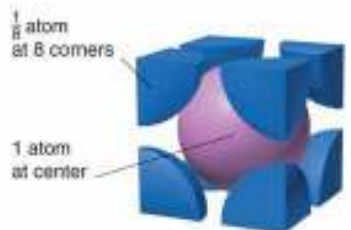
$$APF = \frac{2 \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}} \right)^3} \approx 0.68$$



Body-centered cubic



Coordination number = 8



$$\text{Atoms/unit cell} = \left(\frac{1}{8} \times 8 \right) + 1 = 2$$

Ejercicios

1. La estructura BCC es compacta? Compare la cantidad de átomos contenidos en la celda BCC, FCC y HCP, para justificar su respuesta.
2. Dibuje la dirección $[1\bar{1}\bar{1}]$ del BCC. Dibuje los planos (001) que contengan uno o mas átomos.
3. Dibuje la dirección compacta en el BCC
4. Los planos de deslizamiento del BCC para el hierro y el acero pertenecen a la familia $\{110\}$, las direcciones de deslizamiento son de la forma $\langle 111 \rangle$. Dibuje un plano de deslizamiento e identifique sus dimensiones
5. El diámetro atómico de un átomo de hierro 0,2482 nm. Calcule el parámetro de red del hierro BCC
6. El peso atómico del hierro es 55,85 kg/mol. Calcule su densidad

FCC (face-centered cubic structure)

La estructura **FCC** se puede describir como una celda unitaria cúbica con un punto de red en cada vértice y uno en el centro de cada cara. La base es un átomo en cada punto de red. Desde el punto de vista del empaquetamiento, consiste de una secuencia ABCABC... de plano compactos

Material	Typical uses
Aluminum and its alloys	Airframes, space frames and bodies of trains, trucks, cars, drink cans
Nickel and its alloys	Turbine blades and disks
Copper and α - brass	Conductors, bearings
Lead	Batteries, roofing, cladding of buildings
Austenitic stainless steels	Stainless cook-ware, chemical and nuclear engineering, cryogenic engineering
Silver, gold, platinum	Jewelry, coinage, electrical contacts

Los materiales FCC tienen las siguientes características:

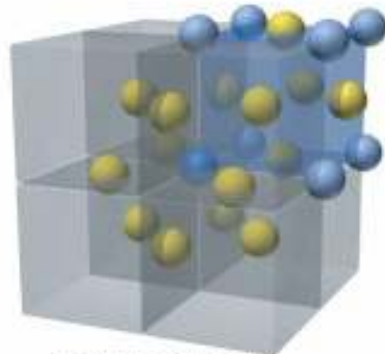
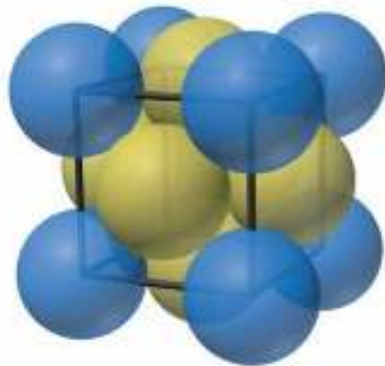
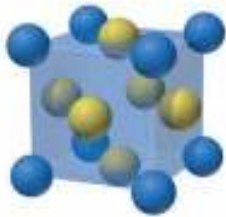
1. Son muy dúctiles en su estado puro. Se endurecen rápidamente cuando son deformados, pero se pueden reablandar o suavizar exponiéndolos a temperaturas moderadas (recocido). Esto permite que los metales FCC puedan ser laminados, forjados, trefilados o deformados.
2. Por lo general son tenaces, son resistentes a la propagación de grietas (alto K_{1c})
3. Retienen su ductilidad y tenacidad a temperaturas cercanas al cero absoluto

ESTRUCTURA DE LOS METALES

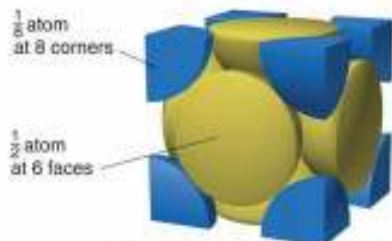
FCC

- ✓ Hay medio átomo en el centro de cada cara de la celda unitaria, y $\frac{1}{8}$ de átomo en cada vértice, lo que hace un total de 4 átomos en cada celda fcc.
- ✓ El factor de empaquetamiento del fcc es 0.74
- ✓ Metales fcc: Fe- γ , Al, Ni, Cu, Ag, Pt y Au

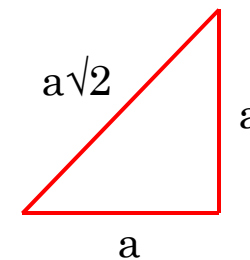
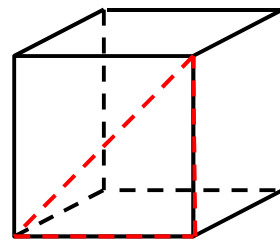
Face-centered cubic



Coordination number = 12



$$\text{Atoms/unit cell} = \left(\frac{1}{8} \times 8\right) + \left(\frac{1}{2} \times 6\right) = 4$$



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

Ejercicios

1. Es la dirección $[100]$ compacta en el FCC?
2. Es la dirección $[110]$ compacta en el FCC?
3. Los planos de deslizamiento de los metales FCC pertenecen a la familia $\{111\}$. Dibuje uno de estos planos.
4. Las direcciones de deslizamiento pertenecen a la familia $\langle 110 \rangle$. Dibuje uno de estas direcciones.
5. Determine el factor de empaquetamiento de la estructura FCC, asumiendo que los átomos son esferas rígidas
6. El diámetro atómico de un átomo de níquel es 0,2492 nm. Calcule el parámetro de red del níquel FCC.
7. El peso atómico del níquel es 58,71kg/mol, calcule su densidad

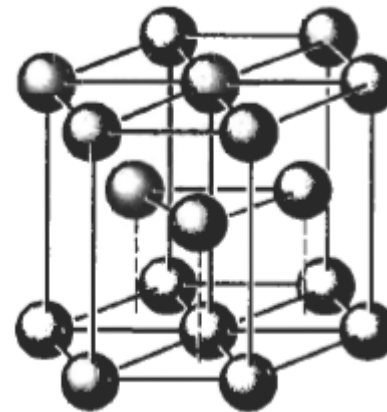
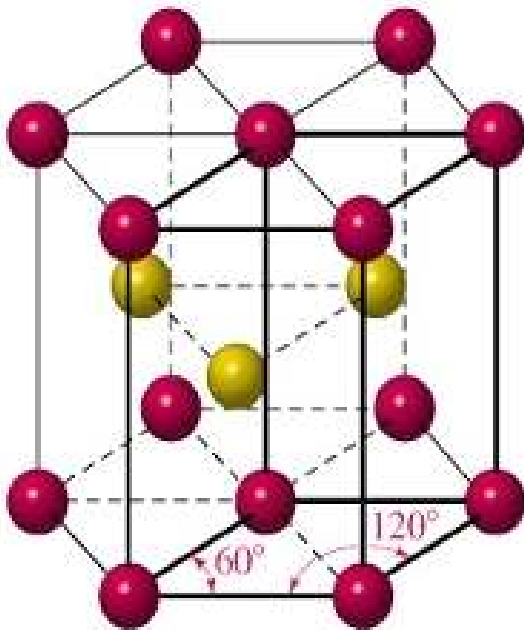
HCP (Close-packed hexagonal structure)

La estructura **HCP** se describe como una celda unitaria hexagonal con un átomo en cada punto de red y uno en el centro de cada cara hexagonal. La base consiste de 2 átomos (uno en 0,0,0 y otro en $2/3, 1/3, 1/2$). Desde el punto de vista del empaquetamiento, está formado por una secuencia de planos empaquetados ABABAB...

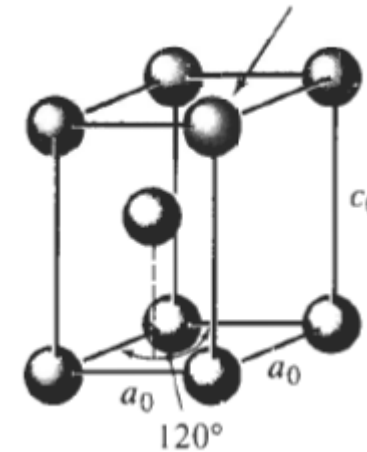
Material	Typical uses
Zinc	Die-castings, plating
Magnesium	Light-weight structures, an alloying element in aluminum
Titanium	Light, strong components for airframes and engines, biomedical and chemical engineering
Cobalt	High temperature superalloys, bone-replacement implants.
Beryllium	The lightest of the light metals. Its use is limited by expense and potential toxicity.

Son dúctiles lo que permite que sean conformados por distintos mecanismos de deformación, aunque es más limitado que para los FCC

- ✓ La estructura hcp es mas compleja que su red de Bravais.
- ✓ Hay 2 átomos asociados a cada punto de la red de Bravais: hay 1 átomo centrado dentro de la celda unitaria y varias fracciones de átomo en los vértices de la celda (cuatro $1/6$ átomos y cuatro $1/12$ átomos, lo que proporciona un total de 2 átomos por celda unitaria



Estructura hexagonal
compacta



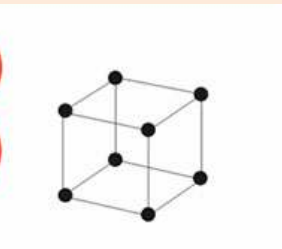
Celda unitaria

Ejercicios

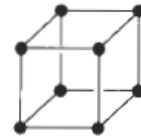
1. En las estructuras HCP, los planos de clivaje (planos de fractura) son de la forma (001). Dibuje este plano en la estructura HCP
2. El módulo de Young de un cristal de titanio es 16% mayor a lo largo de la dirección [001] que en la dirección [100] o [010]. Dibuje estas direcciones sobre la estructura HCP
3. El magnesio tiene estructura HCP, densidad de $1,74 \text{ Mg/m}^3$ y peso atómico de $24,312 \text{ kg/kmol}$. Asumiendo que los átomos se pueden representar como esferas rígidas, cual es el factor de empaquetamiento de esta estructura? Calcule las dimensiones de la celda unitaria.

ESTRUCTURA CRISTALINA

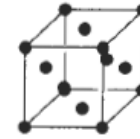
Redes de Bravais



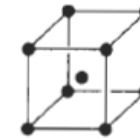
Puntos reticulares en lugar de átomos



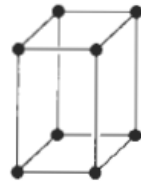
Cúbica simple



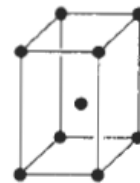
Cúbica centrada en las caras



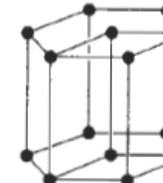
Cúbica centrada en el cuerpo



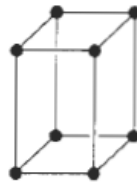
Tetragonal simple



Tetragonal centrada en el cuerpo



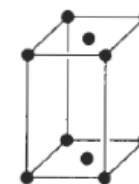
Hexagonal



Ortorrónica simple



Ortorrónica centrada en el cuerpo



Ortorrónica centrada en las bases



Ortorrónica centrada en las caras



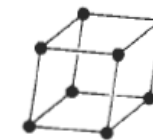
Romboédrica



Monoclínica simple



Monoclínica centrada en las bases



Triclínica

ESTRUCTURA DE LOS METALES

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

n = number of atoms associated with each unit cell

A = atomic weight

V_C = volume of the unit cell

N_A = Avogadro's number (6.023×10^{23} atoms/mol)

Conociendo la estructura del material, es posible
estimar su densidad teórica

ESTRUCTURA DE LOS METALES

bcc



fcc



hcp



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

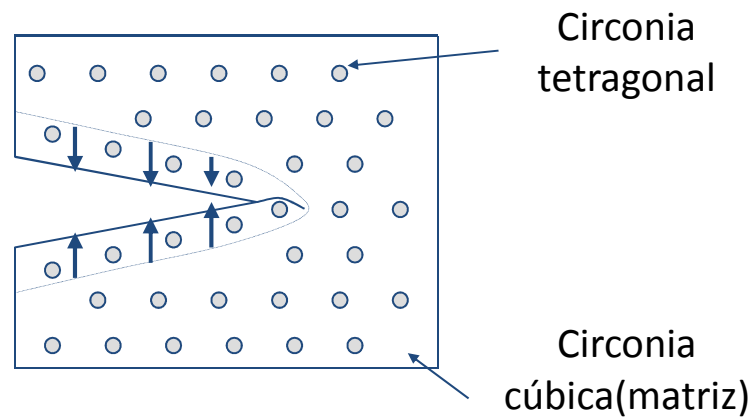
ESTRUCTURA CRISTALINA

Transformaciones alotrópicas

- ✓ Algunos materiales pueden presentar mas de una estructura cristalina, estos materiales son llamados alotrópicos o polimórficos.
- ✓ Por ejemplo, el hierro y el titanio tienen mas de una estructura cristalina. A bajas temperaturas el hierro tiene una estructura bcc, pero a temperaturas mas altas se convierte en una estructura fcc. Estas transformaciones son la base de los tratamientos térmicos del hierro y el titanio.
- ✓ Los materiales cerámicos también pueden presentar polimorfismo. El SiO_2 puede presentar diferentes estructuras cristalinas
- ✓ Las transformaciones polimórficas pueden venir acompañadas de un cambio de volumen durante el calentamiento o el enfriamiento. De no estar controlado este cambio de volumen, el material se puede agrietar y fallar

ESTRUCTURA CRISTALINA

Transformaciones alotrópicas

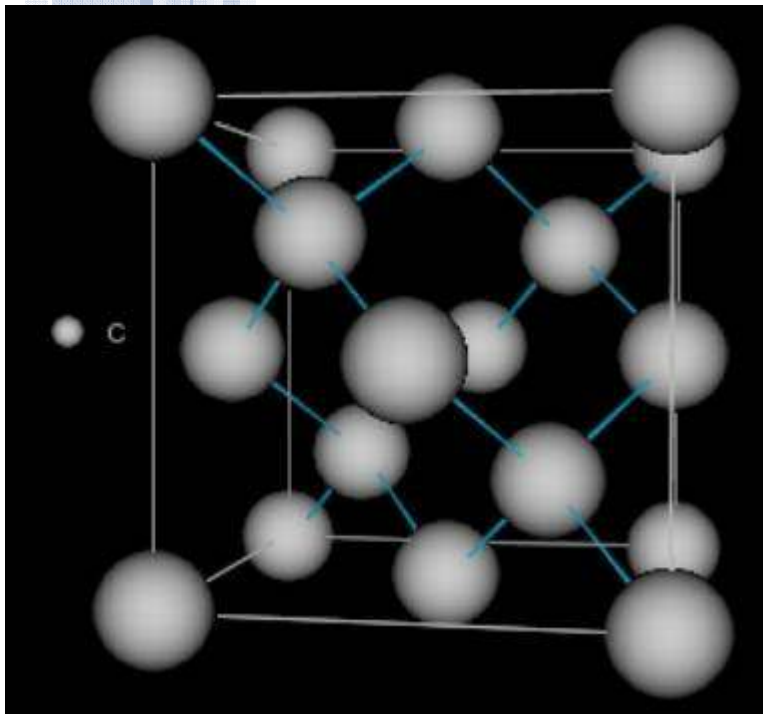


Recordar: Mecanismo de “arresto” de grietas en la circonia parcialmente estabilizada con Y_2O_3 , CeO_2 , MgO , CaO

ESTRUCTURA DE LAS CERÁMICAS

Diamante Cúbico DC (*Diamond Cubic Structure*)

El diamante es la cerámica con mayor dureza, que tiene uso en herramientas de corte, abrasivos, suspensiones para pulido, recubrimientos resistentes al rayado. El silicio y el germanio, la base de los semiconductores, tienen la misma estructura cristalina

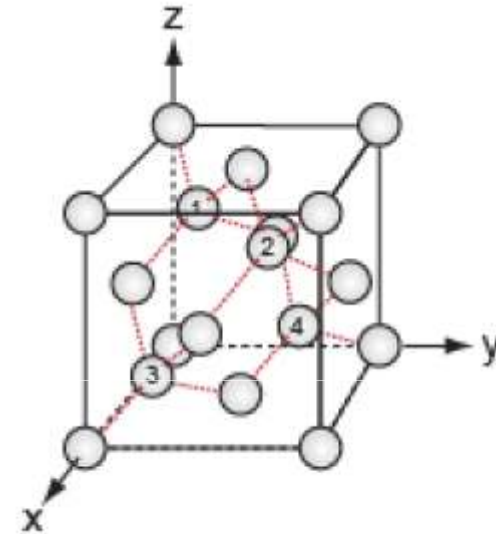


Es una forma de grafito estabilizada a alta presión. Tiene estructura cúbica: tiene ocho $\frac{1}{8}$ de átomos en los vértices de la celda unitaria, tiene $6 \frac{1}{2}$ átomos en las caras de la celda y 4 átomos dentro de la celdas (en posición tetraédrica)

La estructura de diamante cúbico es una red FCC con una base de 2 átomos (uno a $0,0,0$ y otro a $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$) asociados a cada punto de red

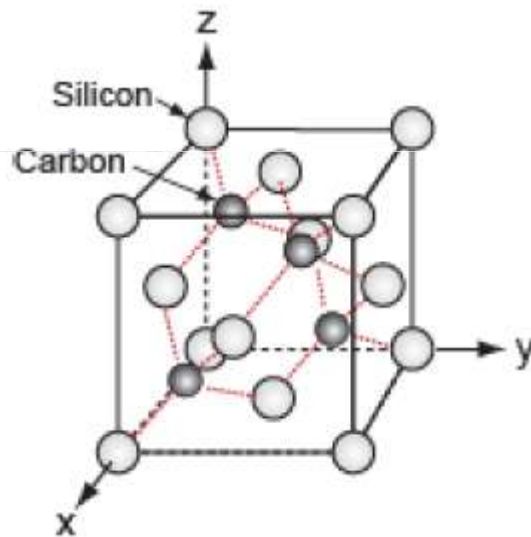
Diamante Cúbico DC (Diamond Cubic Structure)

La estructura de diamante cúbico puede ser analizada como una estructura FCC con átomos adicionales en el centro de sus intersticios tetraédricos, los cuales están marcados con los números 1, 2, 3 y 4 en la figura. Los espacios tetraédricos son muy pequeños para acomodar un átomo de completo, así que este átomo extra “empuja” a los otros átomos, disminuyendo la densidad de la celda



Material	Typical uses
Silicon	Semiconductors
Germanium	Semiconductors
Carbon as diamond	Cutting and grinding tools, jewelry
(Silicon carbide)	Abrasives, cutting tools

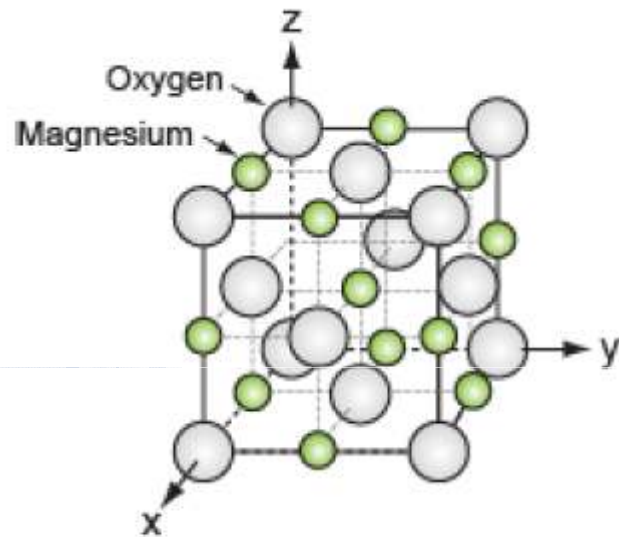
Ejercicios



Estructura del SiC

1. La estructura de diamante cúbico es compacta? Cuántos átomos hay en la celda unitaria DC?
2. Cuántos átomos de carbono hay en una celda unitaria de carburo de silicio? Cuántos de Silicio?
3. El parámetro de red del carburo de silicio es $a=0,436\text{nm}$. El peso atómico del Si es $28,09\text{kg/kmol}$ y del C es $12,01\text{kg/kmol}$. Cual es la densidad del carburo de silicio?

Óxidos con estructura de Sal de Roca

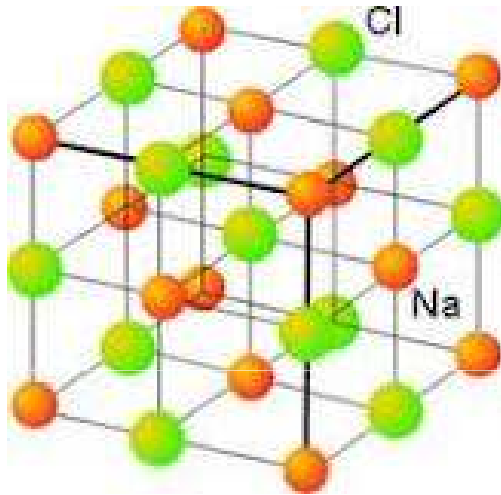


Estos óxidos tienen fórmula MO , donde M es un ion metálico. Los iones de oxígeno son grandes, usualmente de mayor tamaño que el metal. Cuando esto ocurre y los átomos de metal ocupan posiciones octaédricas en la red. La estructura resultante es conocida como Sal de Roca, porque es la estructura del cloruro de sodio.

Materials with the Rocksalt structure	Comment
Magnesia, MgO	A refractory, and ceramic with useful strength.
Ferrous oxide, FeO	One of several oxides of iron
Nickel oxide, NiO	Ceramic superconductors
All alkali halides, including salt $NaCl$	Feedstock for chemical industry, nuclear waste storage

ESTRUCTURA DE LAS CERÁMICAS

Óxidos con estructura de Sal de Roca



Iones de Cl:

$$\left(12 \times \frac{1}{4}\right) + 1 = 4$$

Iones de Na:

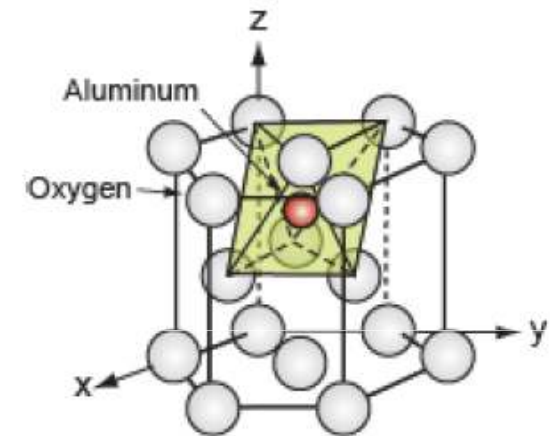
$$\left(6 \times \frac{1}{2}\right) + \left(8 \times \frac{1}{8}\right) = 4$$

- ✓ La estructura del NaCl puede considerarse como la interpenetración de dos estructuras fcc, una formada por iones de sodio y otra formada por iones de cloro.

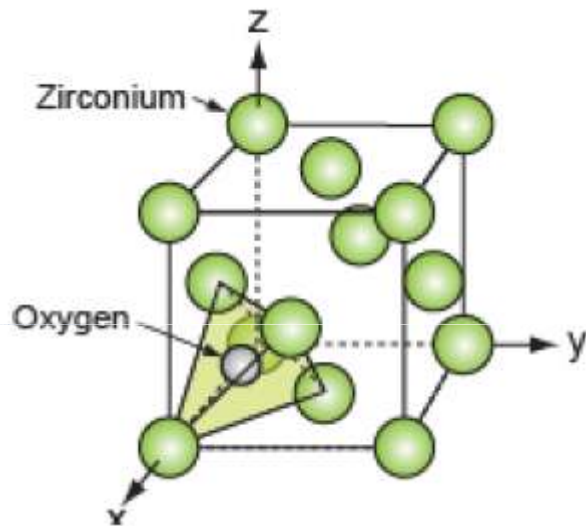
- ✓ En cada celda hay ocho iones: 4 de Na⁺ y 4 iones de Cl⁻.

Óxidos con estructura tipo Corundum

Muchos óxidos tienen fórmula M_2O_3 , entre ellos la alúmina. El oxígeno, por lo general el átomo más grande, está en un arreglo HCP. Los átomos metálicos (M) ocupan $2/3$ de los espacios octaédricos



Materials with the Corundum structure	Comment
Alumina, Al_2O_3	The most widely used technical ceramic
Iron oxide, Fe_2O_3	The oxide from which iron is extracted
Chromium oxide, Cr_2O_3	The oxide that gives chromium its protective coating.
Titanium oxide, Ti_2O_3	The oxide that gives titanium its protective coating.

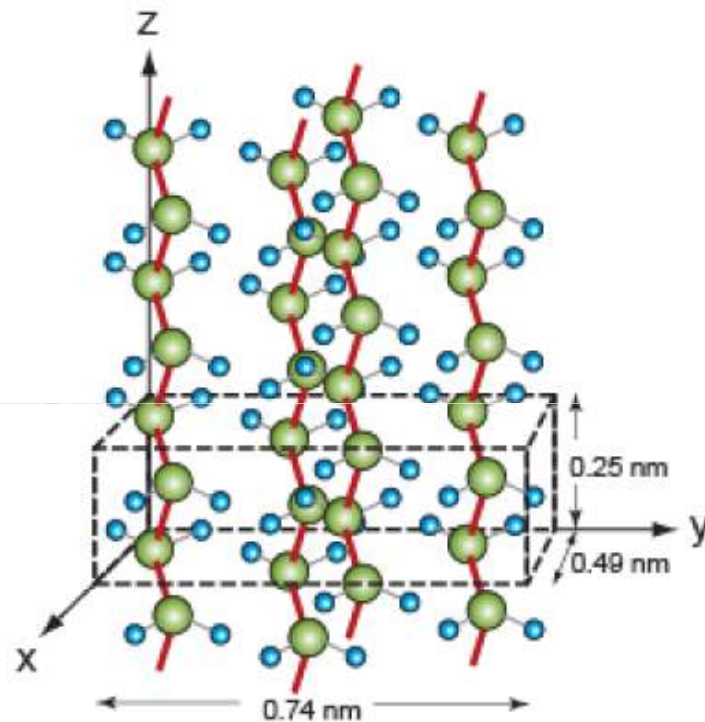


Las estructuras de fluorita tienen fórmula MO_2 . Están formados por átomos de gran tamaño (el Zr y el U están abajo en la tabla periódica). Estos átomos se agrupan en una estructura FCC y los átomos de oxígeno caben en los espacio tetraédricos

Materials with the Fluorite structure	Comment
Zirconia, ZrO_2 (slightly distorted fluorite)	The toughest high-temperature ceramic
Urania, UO_2	Nuclear fuel
Thoria, ThO_2	Nuclear fuel

1. Realice un dibujo representando la celdas unitaria del dióxido de uranio (UO_2).
 - a) Si los iones de uranio en esta estructura son compactos y se comportan como esferas rígidas de 0,276nm de diámetro, cual es el parámetro de red del UO_2 ?
 - b) Calcule el tamaño del intersticio tetraédrico y compárelo con el tamaño del átomo de oxígeno.

Estructura de los polímeros cristalinos



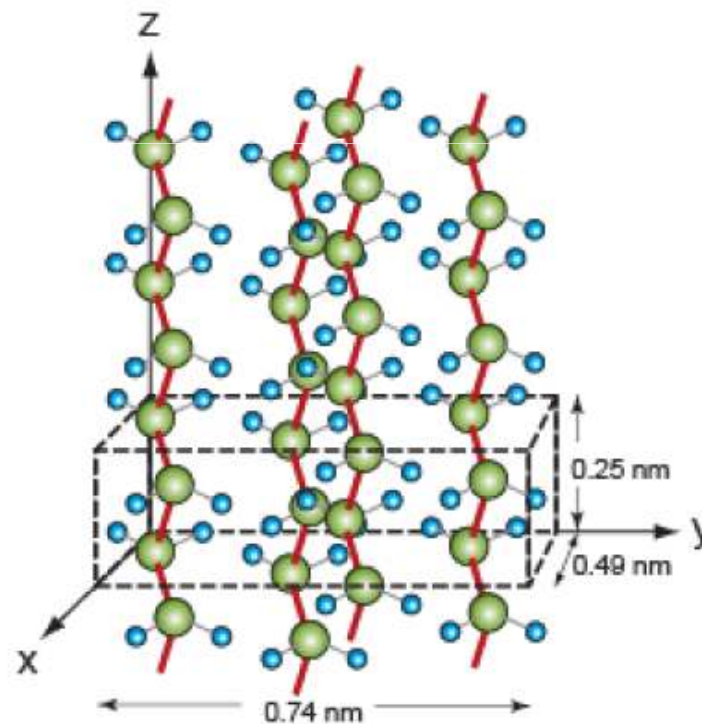
Muchos polímeros pueden cristalizar, aunque pocas veces forman estructuras 100% cristalinas. Las largas cadenas se alinean y empaquetan para dar orden (estructura repetitiva) al igual que lo hacen el resto de los cristales.

La baja simetría de las moléculas individuales hace que la red bajo la cual se ordenan las cadenas poliméricas sea la triclinica. En la figura se muestra la celda unitaria del polietileno

Material	Typical uses
Polyethylene, PE, 65-90%	Bags, tubes, bottles.
Nylon, PA, 65%	High quality parts, gears, catches.
Polypropylene, PP, 75%	Moldings, rope.

Ejercicios

1. Los cristales poliméricos son muy rígidos y resistentes en la dirección de alineamiento molecular. Cuales son los índices de esta dirección?



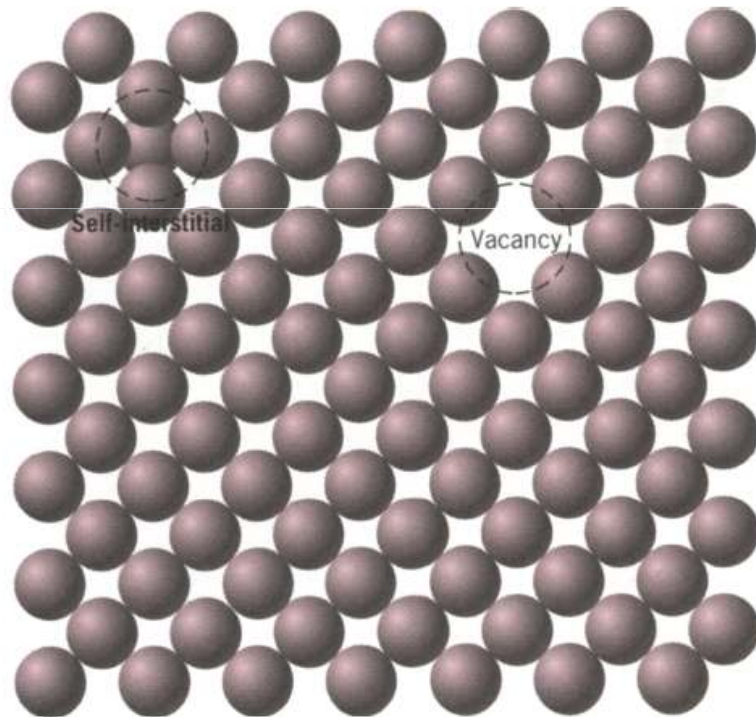
DEFECTOS CRISTALINOS

✓ Hasta ahora hemos estado hablando de estructuras cristalinas, considerando que éstas son perfectamente repetitivas. No existen materiales cristalinos en los que no haya al menos algunos defectos estructurales.

✓ Todos los materiales tienen cierto grado de **impurezas químicas**. Estas impurezas pueden mezclarse y producir una **solución sólida** que altera la regularidad estructural del material idealmente puro

✓ Además de las impurezas, existen diferentes tipos de defectos estructurales:

1. **Defectos puntuales:** ausencia de un átomo en una posición determinada \Rightarrow vacancia
2. **Defectos lineales:** presencia de planos extras \Rightarrow dislocaciones
3. **Defectos de superficie:** representan la frontera entre una región cristalina casi perfecta y sus alrededores



Los defectos puntuales pueden ser de dos tipos:

1. **Vacancia:** es un aposición atómica desocupada en la estructura cristalina. Es un sitio de la red cristalina que está vacío, pero que normalmente estaría ocupado por un átomo
2. **Átomo intersticial:** es un átomo situado en un hueco de la red cristalina, ocupando un aposición en la que normalmente no hay átomos. El átomo intersticial introduce distorsiones de la red circundante, debido a que el átomo intersticial por lo general es mas grande que el espacio que ocupa. Este defecto es poco probable, y existe en bajas concentraciones (mucho menor frecuencia de aparición que las vacancias)

Vacancias

Son los defectos puntuales mas simples. Todos los sólidos cristalinos contienen vacancias. La necesidad de la existencia de vacancias en los materiales es explicada en función de principios termodinámicos: la presencia de vacancias aumenta la entropía del cristal.

El número de vacancias en equilibrio en el material (N_v) es dependiente de la temperatura. A mayor temperatura, la relajación de la red permite la incorporación de mayor cantidad de vacancias

$$N_v = N \exp\left(-\frac{Q_v}{kT}\right)$$

N es el número total de sitios atómicos, Q_v la energía requerida para la formación de una vacancia, T la temperatura absoluta (K) y k la constante de Boltzmann (1.38×10^{-23} J/atomo-K // 8.62×10^{-5} eV/atomo-K // 1.987 cal/mol-K)

IMPUREZAS EN LOS METALES

- ✓ Los metales puros, que contienen un solo tipo de átomo son casi imposibles de obtener. Las impurezas siempre están presentes. Es difícil obtener metales con purezas superiores a 99.9999%
- ✓ Muchos materiales metálicos en vez de ser puros, son combinaciones de elementos, como las aleaciones; en los que las impurezas son agregadas con un propósito.
- ✓ La adición de átomos al metal puede producir la formación de una solución sólida o una segunda fase, dependiendo del tipo de impureza y su concentración. En las soluciones sólidas, el solvente está representado por el elemento o compuesto que está presente en mayor cantidad; el soluto denota el elemento en menor concentración.

IMPUREZAS EN LOS METALES

Solución Sólida

Las soluciones sólidas se forman cuando la estructura cristalina del solvente se mantiene, aún con la adición de los átomos del soluto. Los átomos de soluto se dispersan uniformemente en el solvente, de forma tal que una solución sólida tiene composición homogénea.

Los defectos puntuales también pueden ser encontrados en las soluciones sólidas:

1. Solución sólida sustitucional
2. Solución sólida intersticial

IMPUREZAS EN LOS METALES

Solución Sólida Substitucional

Reglas de Hume-Rothery:

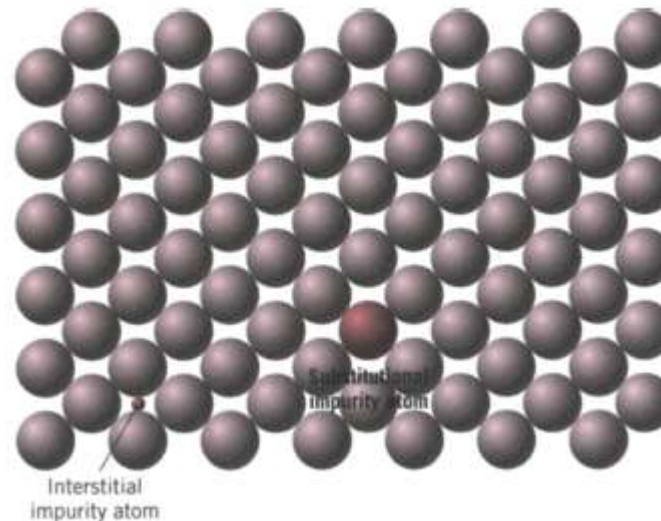
1. La diferencia entre los radios atómicos debe ser inferior al 15%
2. Los dos metales deben tener la misma estructura cristalina
3. La electronegatividad debe ser similar
4. La valencia debe ser la misma

Si no se cumplen una o más de las reglas de Hume-Rothery, entonces sólo se obtiene solubilidad parcial

IMPUREZAS EN LOS METALES

Solución Sólida Intersticial

- ✓ Cuando los radios atómicos del soluto y el solvente son muy diferentes, la sustitución del átomo de menor tamaño en una posición de la red cristalina (sustitución) puede ser energéticamente inestable.
- ✓ En este caso es más estable para el átomo pequeño introducirse en uno de los huecos (intersticios) que existen entre átomos cercanos en la red cristalina.

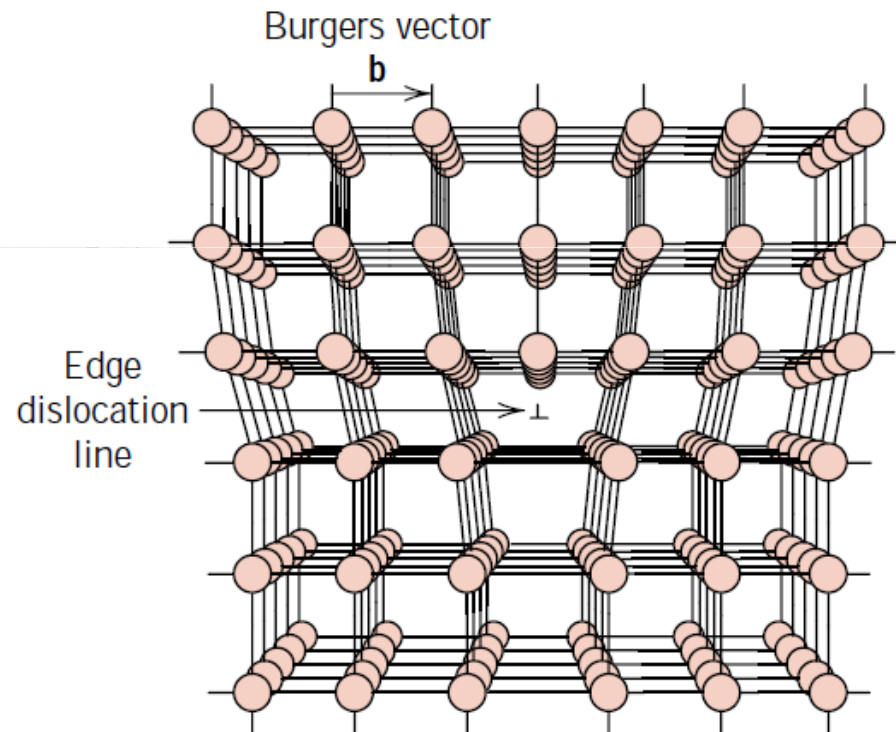


Dislocaciones

Una dislocación es un defecto lineal, alrededor del cual algunos átomos están “mal ordenados”:

1. Dislocaciones de borde
2. Dislocaciones de tornillo

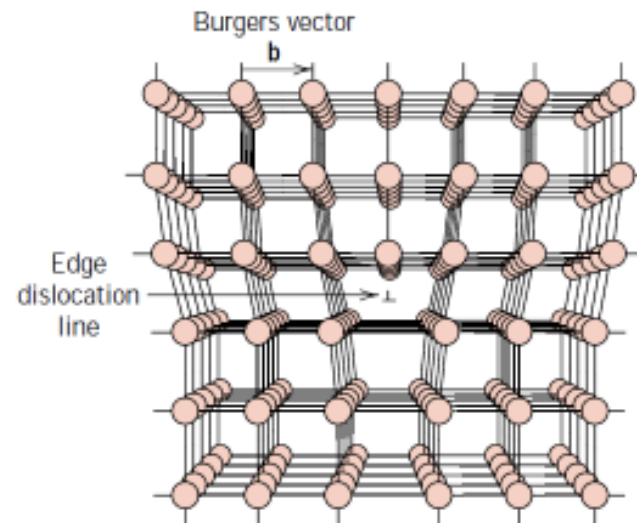
Las dislocaciones pueden formarse durante la solidificación de la aleación o por deformación plástica. forman durante la deformación.



DEFECTOS LINEALES

Dislocación de borde

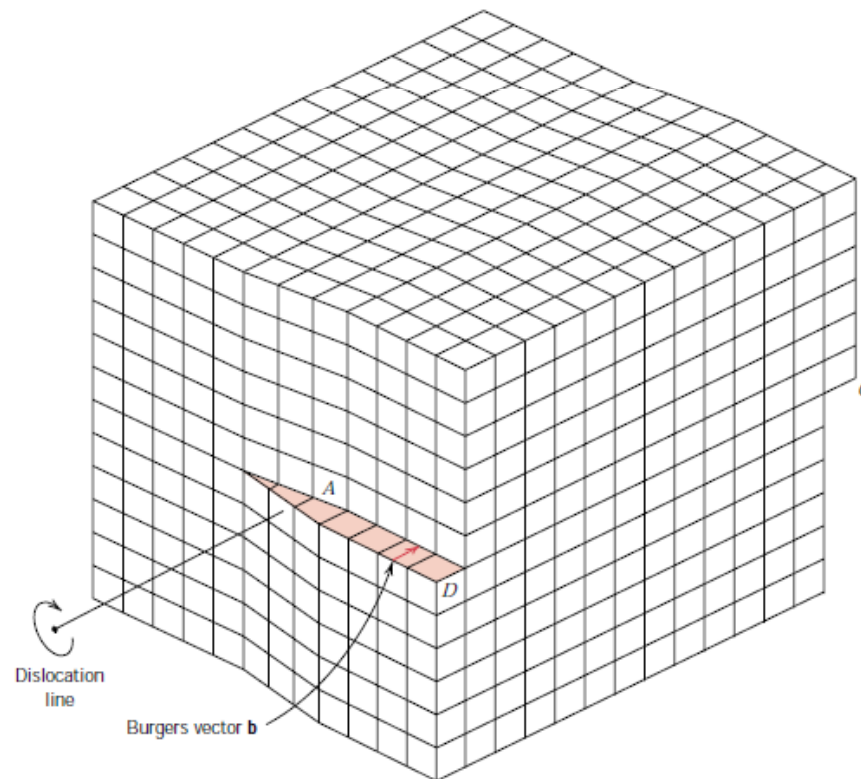
La dislocación de borde es una porción extra de átomos (un medio plano de átomos) que termina en el borde del cristal. Alrededor de la dislocación hay distorsión de la red. Los átomos encima de la línea de la dislocación están apretados, mientras que los que están por debajo están siendo “halados” para poder “acomodar” la dislocación. Esta distorsión disminuye a medida que nos alejamos de la dislocación. La dislocación de borde es representada como \perp , cuando el medio plano está en la parte superior del cristal; y como \top cuando está en la parte inferior



DEFECTOS LINEALES

Dislocación de tornillo

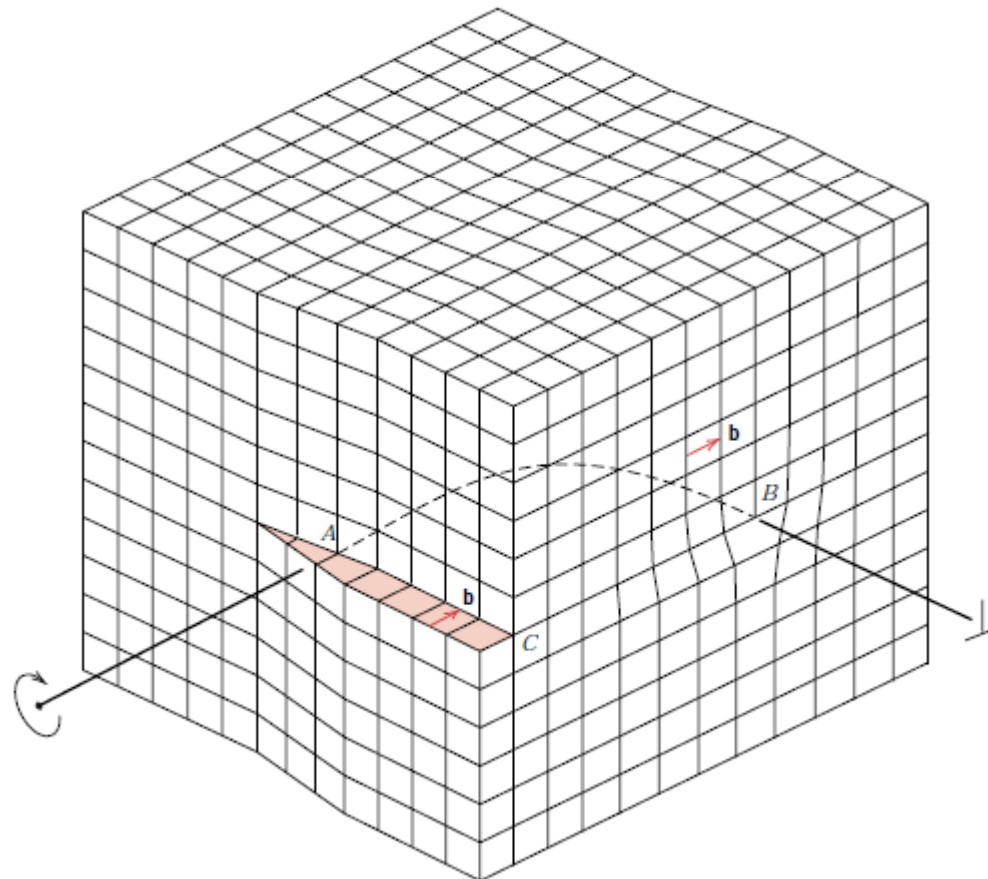
La dislocación de tornillo se forma bajo esfuerzos aplicados capaces de producir distorsión, de forma tal que la parte superior del cristal es desplazada una distancia atómica a la derecha de la porción inferior. La dislocación de tornillo o helicoidal debe su nombre al apilamiento en espiral de los planos cristalinos a lo largo de la línea de la dislocación



DEFECTOS LINEALES

Dislocaciones

La mayoría de las dislocaciones encontradas en los materiales cristalinos son mixtas

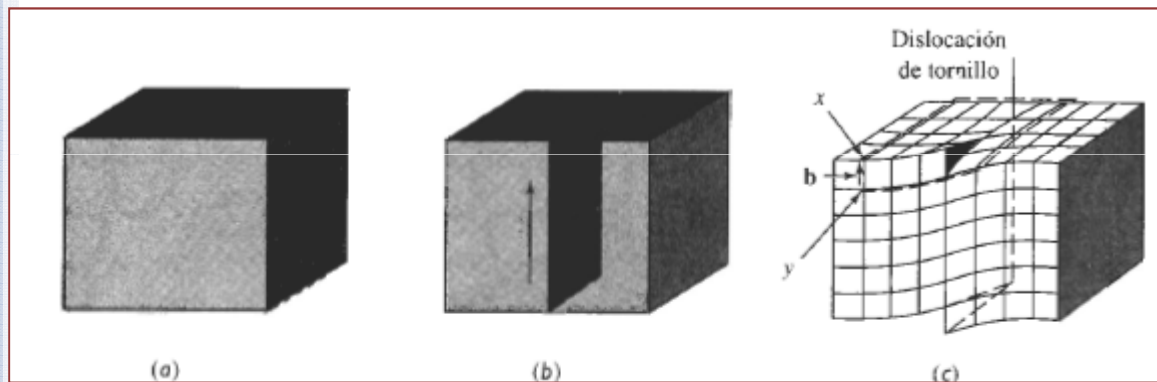


DEFECTOS LINEALES

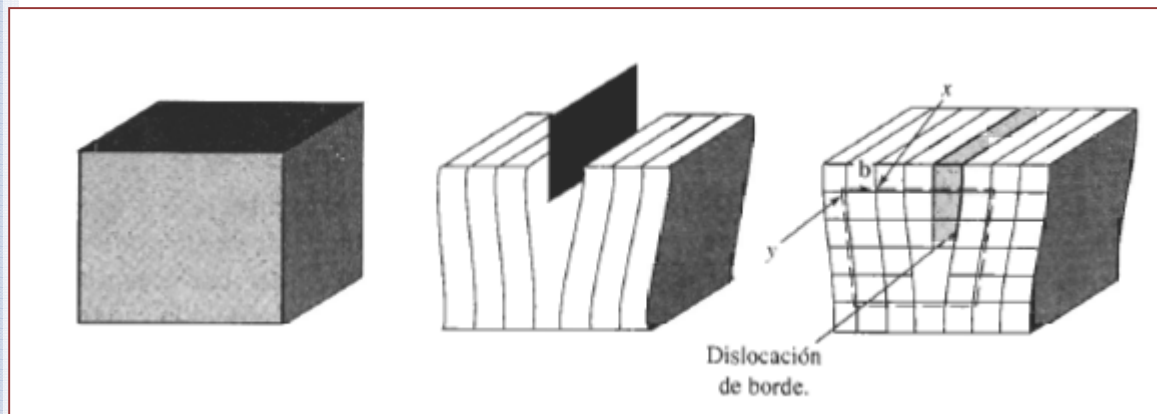
Dislocaciones

La magnitud y dirección de la distorsión asociada a la dislocación es expresada a través del **vector de Burgers (b)**.

El **vector de Burgers** es el vector desplazamiento necesario para cerrar un circuito realizado paso a paso alrededor del defecto.



b paralelo a la línea de la dislocación



b perpendicular a la línea de la dislocación

Dislocaciones

- ✓ Cuando se aplica un esfuerzo en la dirección del vector de Burgers a un cristal que contenga una dislocación, ésta se puede desplazar y moverse a través del cristal al romper los enlaces entre los átomos de un plano. El movimiento de dicha dislocación genera la deformación del cristal.
- ✓ Este proceso, mediante el cual se mueve una dislocación causando deformación del material se llama **deslizamiento**.
- ✓ La dirección en la cual se mueve la dislocación es la **dirección de deslizamiento** o la dirección del vector de Burgers. Durante el deslizamiento, la dislocación de borde genera distorsión en el plano formado por el vector de Burgers y la dislocación, este plano es llamado **plano de deslizamiento**.
- ✓ La combinación plano de deslizamiento / dirección de deslizamiento, conforma el **sistema de deslizamiento del cristal**.

DEFECTOS LINEALES

Dislocaciones

Durante el deslizamiento, una dislocación recorre 4 estados de equilibrio idénticos. El esfuerzo Peierls-Nabarro es el esfuerzo requerido para mover la dislocación de un estado a otro.

$$\tau = c \exp\left(-\frac{kd}{b}\right)$$

Donde τ es el esfuerzo cortante requerido para mover la dislocación, d es la distancia interplanar entre planos de deslizamiento adyacentes, b el vector de Burgers, c y k son constantes del material. La dislocación se moverá en aquel sistema de deslizamiento que requiera el menor consumo de energía

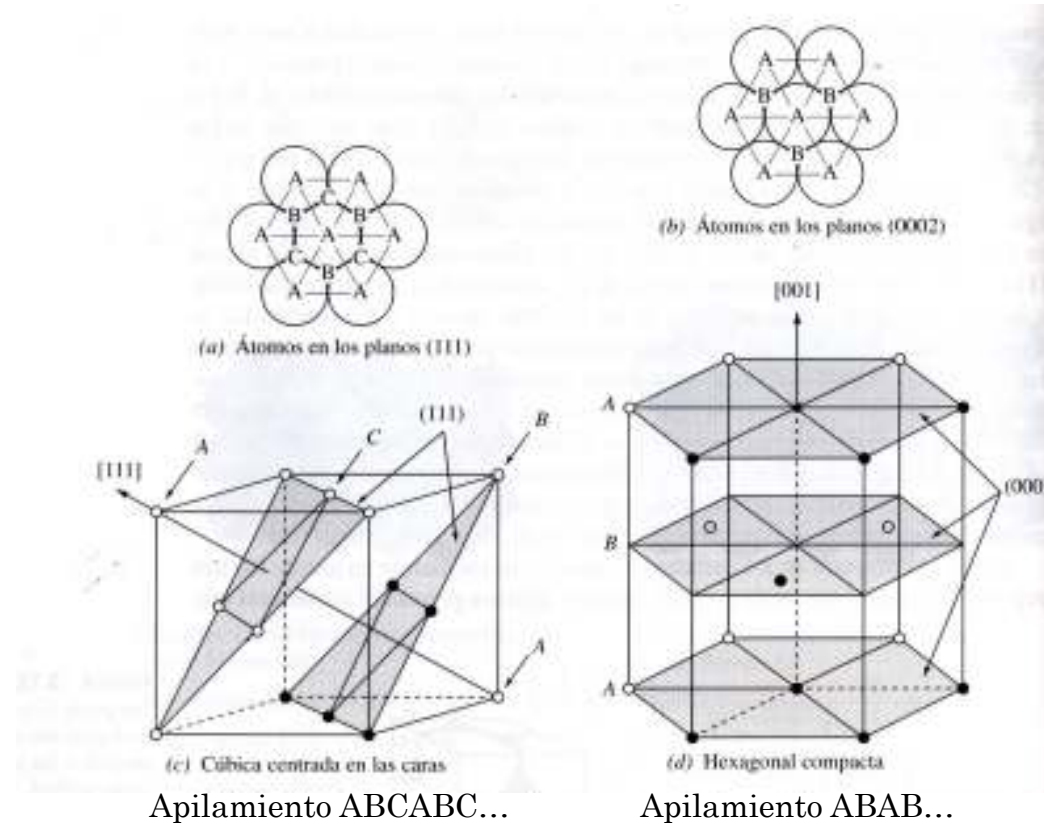
$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Dislocaciones

Varios factores determinan cuales son los sistemas de deslizamiento que se activan durante la deformación del material:

1. El esfuerzo requerido para hacer que la dislocación se mueva depende exponencialmente del vector de Burgers; de modo que la dirección de deslizamiento debe tener una densidad lineal alta
2. El esfuerzo requerido para hacer que la dislocación se mueva decrece de manera exponencial con la distancia interplanar de los planos de deslizamiento.
3. Las dislocaciones no se mueven fácilmente en materiales como el silicio o los polímeros (enlaces covalentes). Debido a la resistencia y direccionalidad del enlace, los materiales fallan frágilmente antes de que la fuerza se haga lo suficientemente alta para generar un deslizamiento apreciable
4. Los materiales con enlaces iónicos también ofrecen resistencia al deslizamiento. El movimiento de una dislocación rompe el equilibrio de cargas alrededor de aniones y cationes

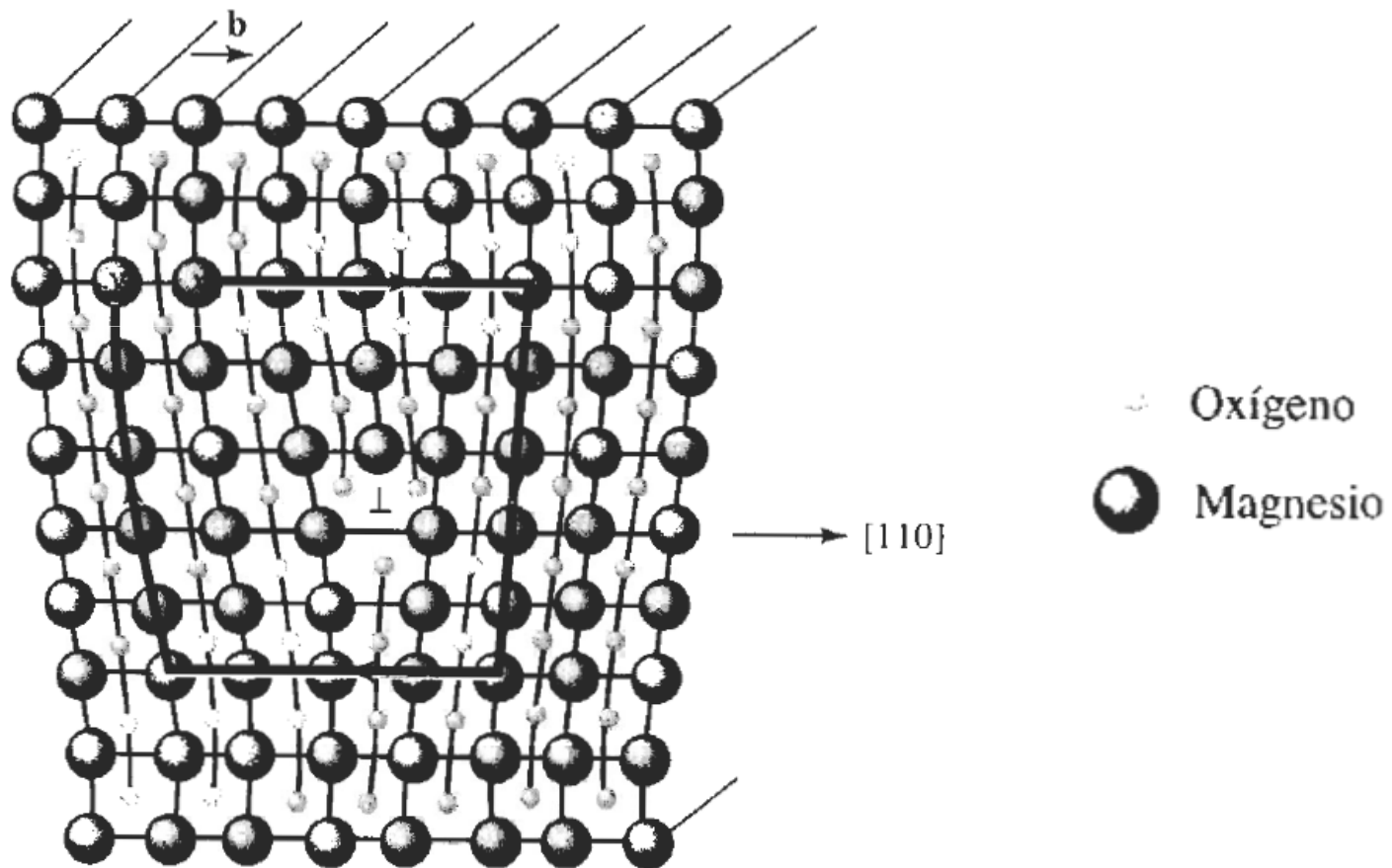
DEFECTOS LINEALES



Estructura cristalina	Plano de deslizamiento	Dirección de deslizamiento
BCC	{110}	<111>
FCC	{111}	<110>
HCP	{0001}	<110>

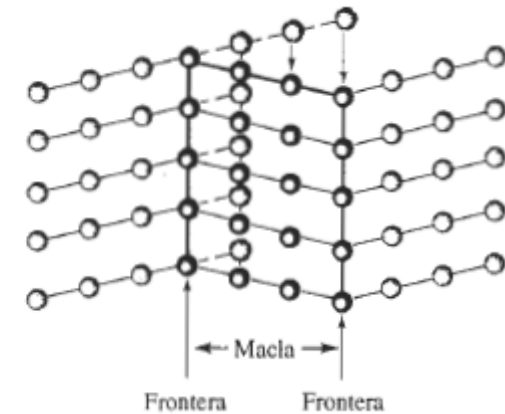
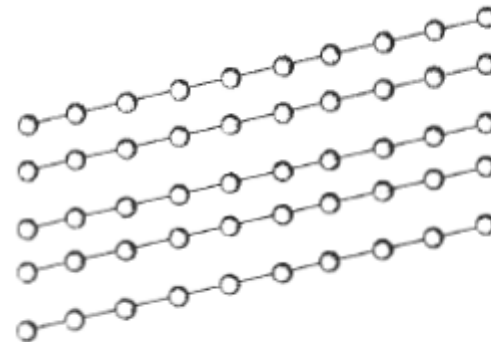
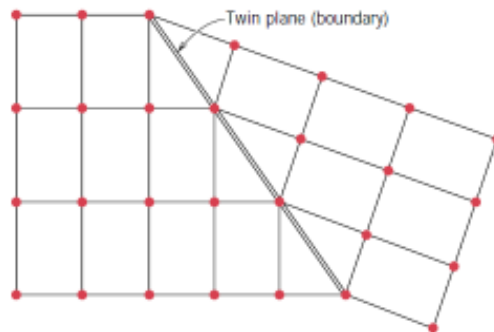
DEFECTOS LINEALES

Ejercicios



Maclas

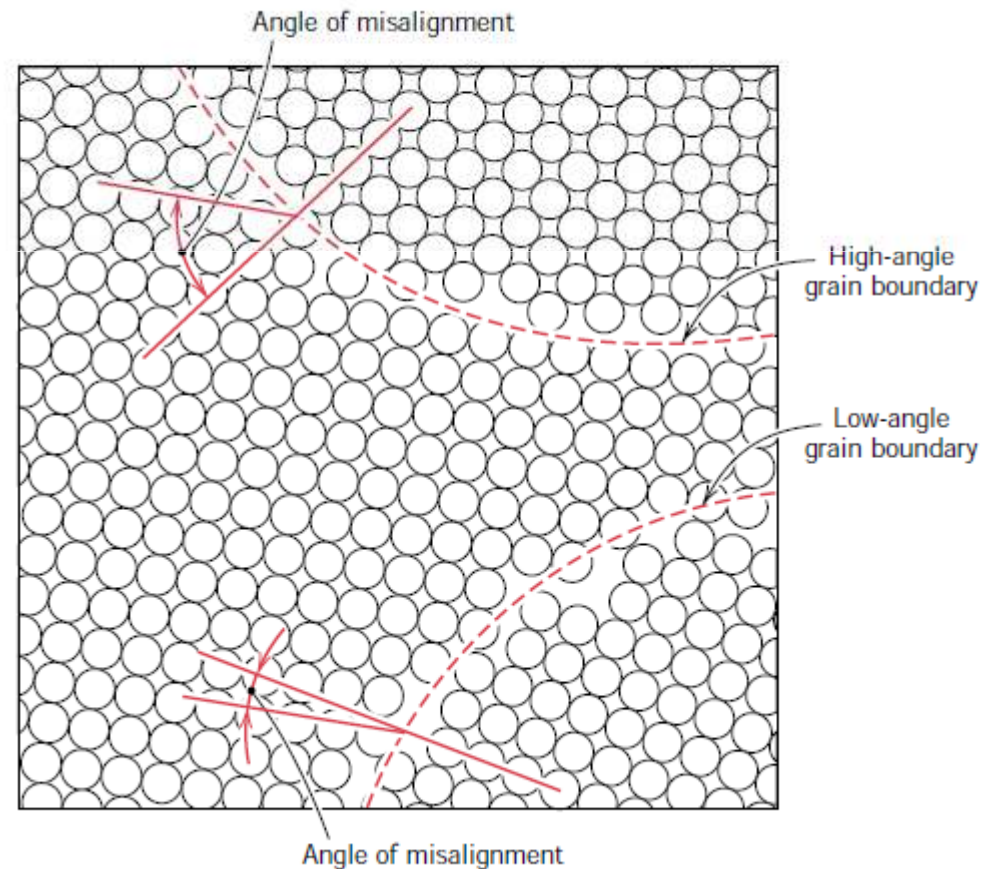
Las maclas son discontinuidades en la estructura que pueden producirse debido al desplazamiento atómico generado durante la deformación (bcc y hcp) o recocido (fcc). En las maclas los átomos de un lado de la frontera están situados en posiciones imágenes de los átomos situados en el otro lado. Un borde de macla es un plano que separa dos partes de un arreglo cristalino que tienen una pequeña diferencia en su orientación.



DEFECTOS DE SUPERFICIE

Bordes de Grano

Los bordes de grano son la frontera entre dos cristales o granos adyacentes con orientación cristalográfica distinta en materiales policristalinos

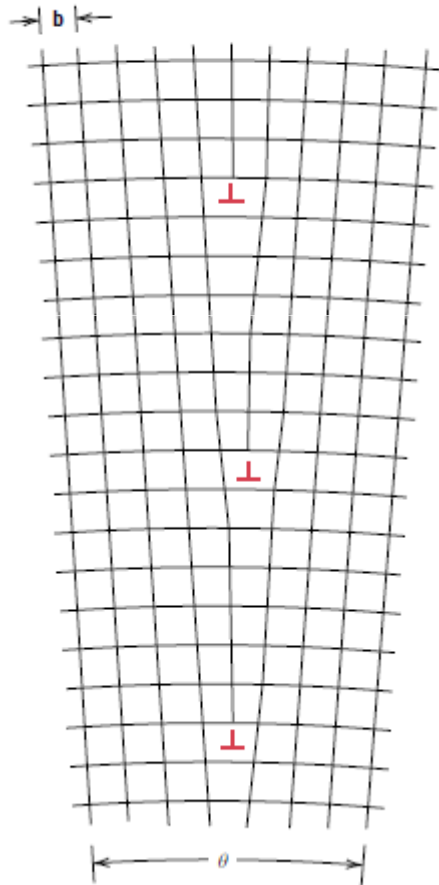


DEFECTOS DE SUPERFICIE

Bordes de grano de bajo ángulo

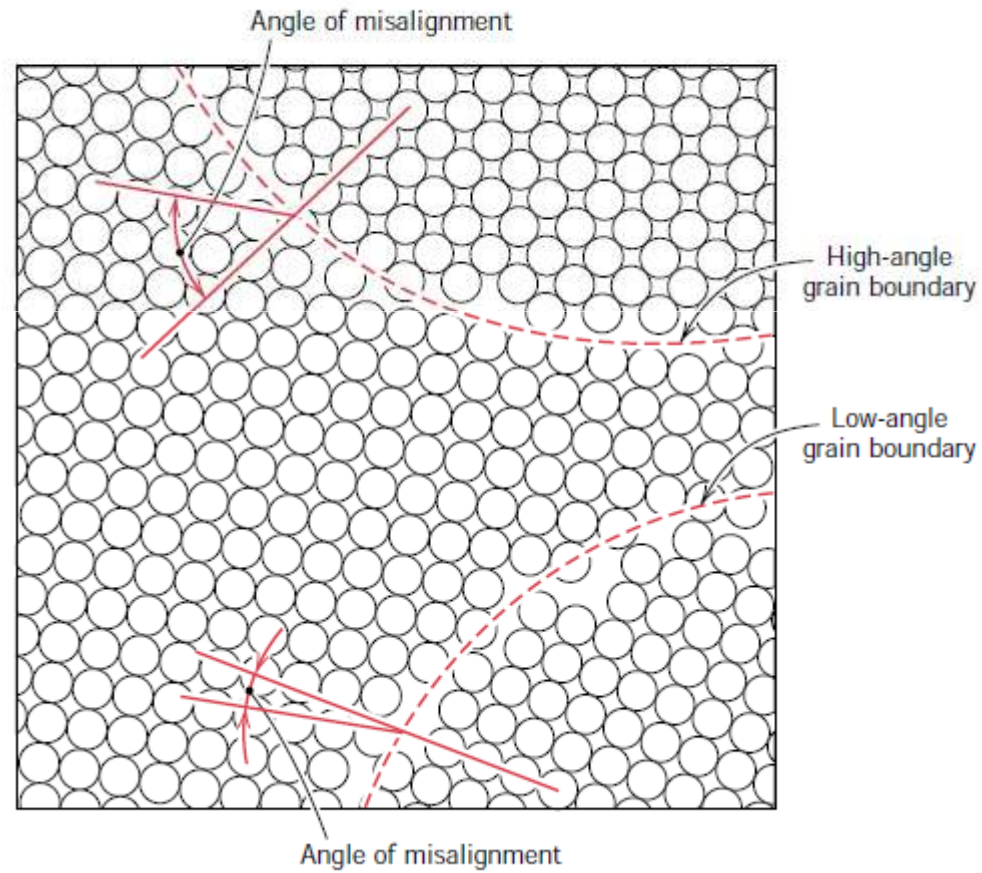
Varios grados de “errores” en el arreglo atómico entre átomos adyacentes son posibles. Cuando la orientación es pequeña, en el orden de pocos grados, se utiliza el término de borde de grano de bajo ángulo. Estos bordes de grano pueden ser descritos en función de las dislocaciones de borde. Cuando las dislocaciones están ordenadas como en la figura, se forma un borde de grano de bajo ángulo.

Los bordes de grano son mas reactivos que el interior del grano, debido a que la energía en esta zona es mayor; así que las impurezas tenderán a segregarse hacia estas zonas



DEFECTOS DE SUPERFICIE

Bordes de grano de alto ángulo



Bordes de grano

Un método para controlar las propiedades de un material es mediante el control del tamaño de los granos. Reduciendo el tamaño del grano se incrementa su número, y por lo tanto, la cantidad de bordes de grano. Cualquier dislocación se moverá solamente una distancia corta antes de encontrar un borde grano, incrementando la resistencia del material,. La ecuación de Hall-Petch relaciona el tamaño de grano con el esfuerzo de fluencia del material:

$$\sigma_y = \sigma_o + Kd^{-1/2}$$

σ_y es el esfuerzo de fluencia (esfuerzo bajo el cual el material se deforma de manera permanente), d es el diámetro promedio de los granos, σ_o y K son constantes del metal

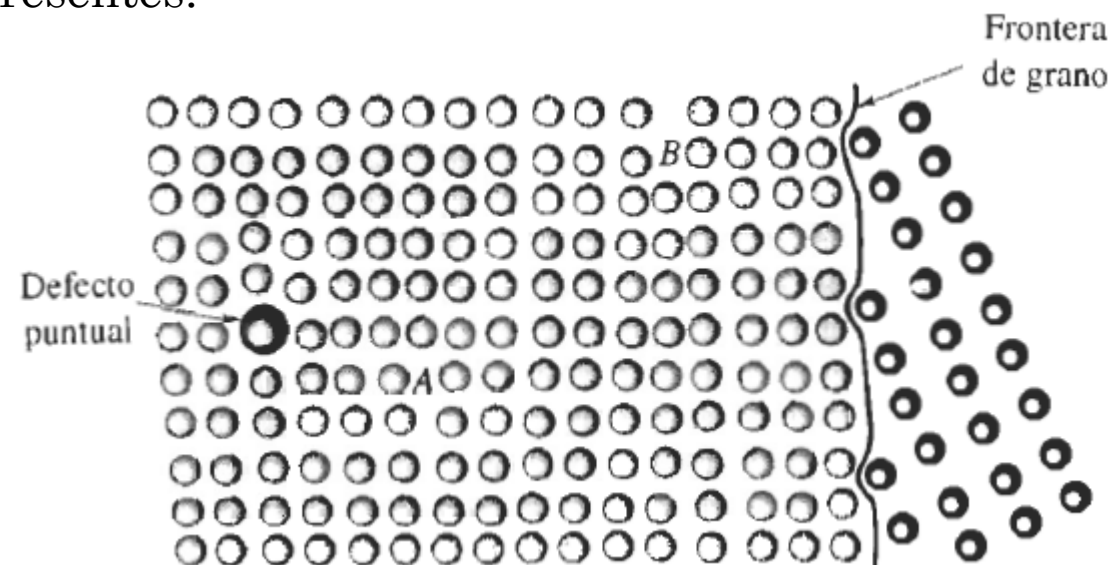
DEFECTOS DE SUPERFICIE

En un cristal perfecto, el arreglo fijo y repetido de los átomos tiene el nivel de energía mas bajo posible dentro del cristal. Cualquier imperfección en la red eleva la energía interna en el lugar donde se localiza el defecto. La energía local se incrementa alrededor del defecto porque los átomos están en compresión o en tensión

Imperfección de superficie (ergs/cm ²)	Al	Cu	Pt	Fe
Energía por falla de apilamiento	200	75	95	—
Energía por borde de macla	120	45	195	190
Energía por borde de grano	625	645	1000	780

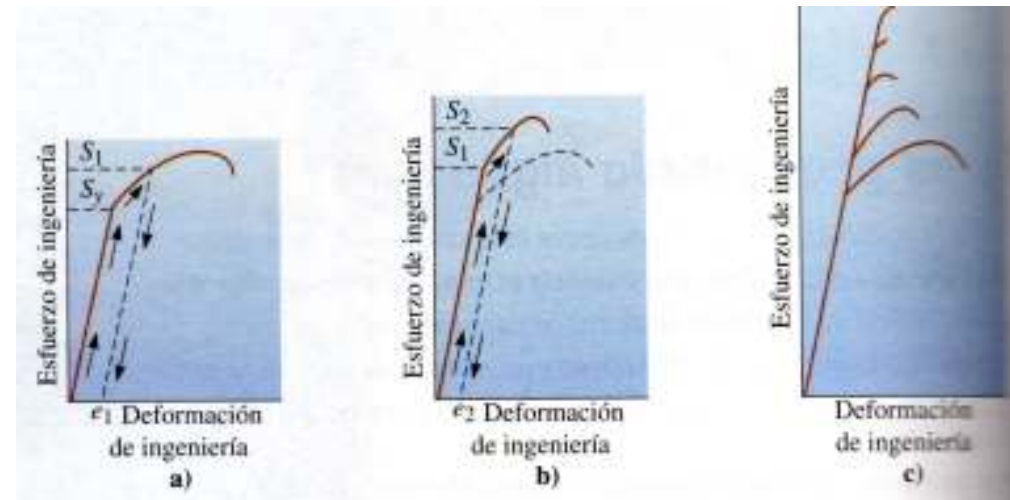
DEFECTOS DE SUPERFICIE

Si la dislocación en el punto A se mueve hacia la izquierda, será bloqueada por el defecto puntual. Si la dislocación se mueve hacia la derecha, entrará en interacción con la red desorganizada cerca de la segunda dislocación en el punto B. Si la dislocación se mueve aún mas hacia la derecha, quedará bloqueada por un borde grano haciendo al material mas resistente. Entonces es posible predecir la resistencia del material mediante el control del número y tipo de defectos presentes.



Si se toma un material dúctil y se le aplica un esfuerzo S_1 mayor que su esfuerzo de fluencia, el material se deformará plásticamente. Al retirar el esfuerzo, el material tendrá una deformación e_1 . Si con ese material deformado, se prepara una probeta de tracción, se obtendrá una curva distinta (figura b), con un esfuerzo S_1 mayor.

Se define el esfuerzo de flujo con el esfuerzo que se necesita para iniciar el flujo plástico de un material previamente deformado.



MT-1113

TRABAJO EN FRÍO

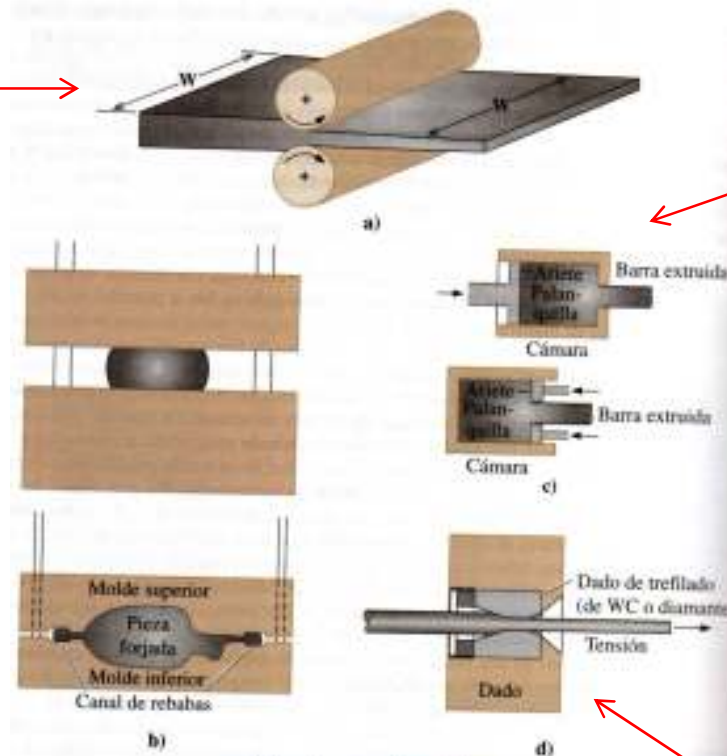


Cada vez que se aplica un esfuerzo mayor, el esfuerzo de flujo y la resistencia a la tracción aumentan, pero la ductilidad disminuye. Con el tiempo, se endurece el material metálico hasta que el esfuerzo de flujo y la resistencia a la tensión y a la ruptura se igualan. En este punto, el material no tiene ductilidad y no puede deformarse plásticamente.

TRABAJO EN FRÍO

Al aplicar un esfuerzo mayor a σ_y , el material se deforma y se endurece
 \Rightarrow el material se ha trabajado en frío

Laminado
 Placas, hojas, láminas



Extrusión
 Productos de secciones transversales uniformes (barras, tubos, molduras)

Forjado
 Deforma metal en una cavidad (cigüeñales, bielas)

Embutido profundo
 (Cuerpo de latas de bebida),
estiramiento y doblez
 (moldear hojas)

Trefilado
 Barra \rightarrow alambre o fibras

El trabajo en frío es una manera efectiva de moldear materiales metálicos mientras se aumenta su resistencia

TRABAJO EN FRÍO

Exponente de endurecimiento por deformación

La respuesta de un material metálico al trabajo en frío está dada por el exponente de endurecimiento por deformación (n), el cual es la pendiente de la región plástica de la curva esfuerzo-deformación real (no ingenieril).



$$\sigma = K\varepsilon^n$$

Donde K , el coeficiente de resistencia, es una constante. De este modo, el endurecimiento por deformación es mayor cuando n aumenta. Para los metales, el endurecimiento por deformación es el resultado de la interacción y multiplicación de las dislocaciones.

TRABAJO EN FRÍO

Exponente de endurecimiento por deformación

El exponente de endurecimiento por deformación (n) es relativamente bajo para los metales hcp, pero mayor para los bcc y fcc. Los metales con un coeficiente n alto responden mejor al trabajo en frío. Por ejemplo, un alambre de cobre que ha sido doblado es más resistente debido a que se ha endurecido por la deformación

Metal	Estructura cristalina	n	K
titanio	hcp	0.05	175000
Acero aleado recocido	bcc	0.15	93000
Acero al carbono templado y revenido	bcc	0.10	228000
molibdeno	bcc	0.14	105000
Cobre	fcc	0.54	46000
Cu-30%Zn	fcc	0.50	130000
Acero inoxidable austenítico	fcc	0.52	220000

Velocidad de deformación

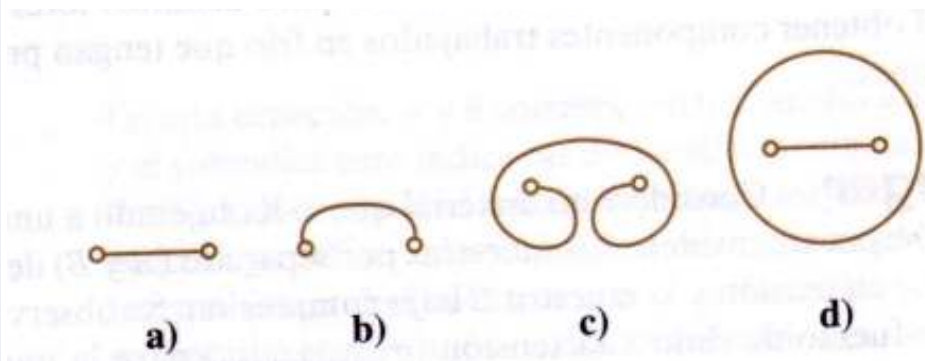
La sensibilidad del material a la velocidad con la que éste es deformado (m) es medido a través de la siguiente relación:

$$m = \left[\frac{\partial(\ln \sigma)}{\partial \left(\ln \dot{\varepsilon} \right)} \right]$$

Esta ecuación describe como varía el esfuerzo de flujo (σ) con la velocidad con la que se deforma el material ($\dot{\varepsilon}$). Para los materiales cristalinos por lo general m es menor a 0.1, pero aumenta con la temperatura.

Mecanismos

- ✓ Se obtiene un endurecimiento durante la deformación de un material metálico incrementando el número de dislocaciones. Antes de la deformación, la densidad de las dislocaciones es baja, alrededor de 10^6 por cm^3 .
- ✓ Cuando se aplica un esfuerzo mayor que la resistencia a la fluencia del material, las dislocaciones comienzan a desplazarse sobre su plano de deslizamiento hasta alcanzar un obstáculo (bordes de grano, inclusiones, vacancias, entre otros). Al aumentar el esfuerzo, las dislocaciones que están “ancladas” intentan moverse doblándose en el centro, hasta tal punto que se puede formar un “bucle”. Cuando el bucle se toca a si mismo (altos esfuerzos), se crea una nueva dislocación. A este mecanismo de formación de dislocaciones se le conoce como fuente de Frank-Read.



Mecanismos

- ✓ La densidad de dislocaciones puede aumentar hasta 10^{12} por cm^3 durante el endurecimiento por deformación. Y como se ha explicado hasta ahora, el movimiento de las dislocaciones es el mecanismo para la fluencia plástica en los materiales metálicos. Sin embargo, cuando se tienen demasiadas dislocaciones, éstas interfieren con sus propios movimientos. De modo, que un material que ha sido trabajo en frío se endurece pero pierde ductilidad.
- ✓ Las cerámicas también tienen dislocaciones y se pueden endurecer por deformación pero en un grado muy pequeño; ya que estas dislocaciones no son tan móviles. Los vidrios son amorfos, por lo tanto no contienen dislocaciones y no pueden ser endurecidos por deformación
- ✓ Los termoplásticos (PE, PS, nailon) se endurecen cuando se deforman, pero no debido a la multiplicación de las dislocaciones. Estos materiales se endurecen debido a la alineación y recristalización de las cadenas poliméricas

TRABAJO EN FRÍO

Porcentaje del trabajo en frío

Al controlar la cantidad de deformación plástica, se controla el endurecimiento por deformación. Por lo general, se mide la cantidad de deformación definiendo el porcentaje de trabajo en frío.

$$\% \text{ trabajo en frío} = \left[\frac{A_o - A_f}{A_o} \right] \times 100$$

Donde A_o es el área original de la sección transversal del metal y A_f el área final después de la deformación

Para el caso del laminado en frío se utiliza el porcentaje de la reducción del espesor de la lámina como la medida del trabajo en frío. Donde t_o es el espesor inicial y t_f el espesor final de la lámina

$$\% \text{ reducción espesor} = \left[\frac{t_o - t_f}{t_o} \right] \times 100$$

TRABAJO EN FRÍO

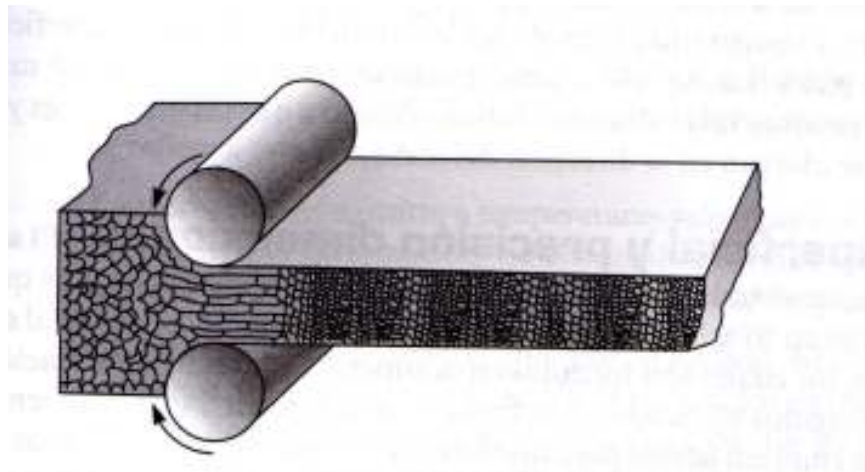
Ventajas y desventajas

- ✓ Se puede endurecer y dar forma final al metal simultáneamente
- ✓ Se pueden obtener excelentes tolerancias y acabados superficiales por medio del trabajo en frío
- ✓ El proceso de trabajo en frío puede ser un método económico para producir gran volumen de piezas pequeñas
- ✓ El trabajo en frío afecta la ductilidad, la conductividad eléctrica y la resistencia a la corrosión del material
- ✓ El endurecimiento logrado por la deformación en frío se pierde cuando el material es expuesto a altas temperaturas
- ✓ Los metales tienen un número limitado de sistemas de deslizamiento, por lo que la deformación en frío está limitada y sólo puede lograrse un grado pequeño de trabajo en frío.

TRABAJO EN CALIENTE

Los metales también pueden ser deformados en caliente, a temperaturas superiores a la de recristalización. De este modo, durante el trabajo en caliente, el material metálico se recristaliza de manera continua.

Durante el trabajo en caliente no ocurre endurecimiento, así que la deformación puede ser casi ilimitada. Una placa muy gruesa puede reducirse a una hoja delgada en una serie continua de operaciones a la temperatura adecuada.



- ✓ Hemos estado hablando de dislocaciones, las cuales se trancan o anclan debido a la presencia de obstáculos.
- ✓ Estos obstáculos pueden ser defectos puntuales o de superficie.
- ✓ Un obstáculo al movimiento de las dislocaciones son los bordes de grano. De modo que los materiales con tamaño de grano pequeño, al tener mayor densidad de obstáculos, aumentan la dureza del material.
- ✓ Estos bordes de grano son fronteras entre dos regiones o fases. Pero que son las fases? \Rightarrow tema 3