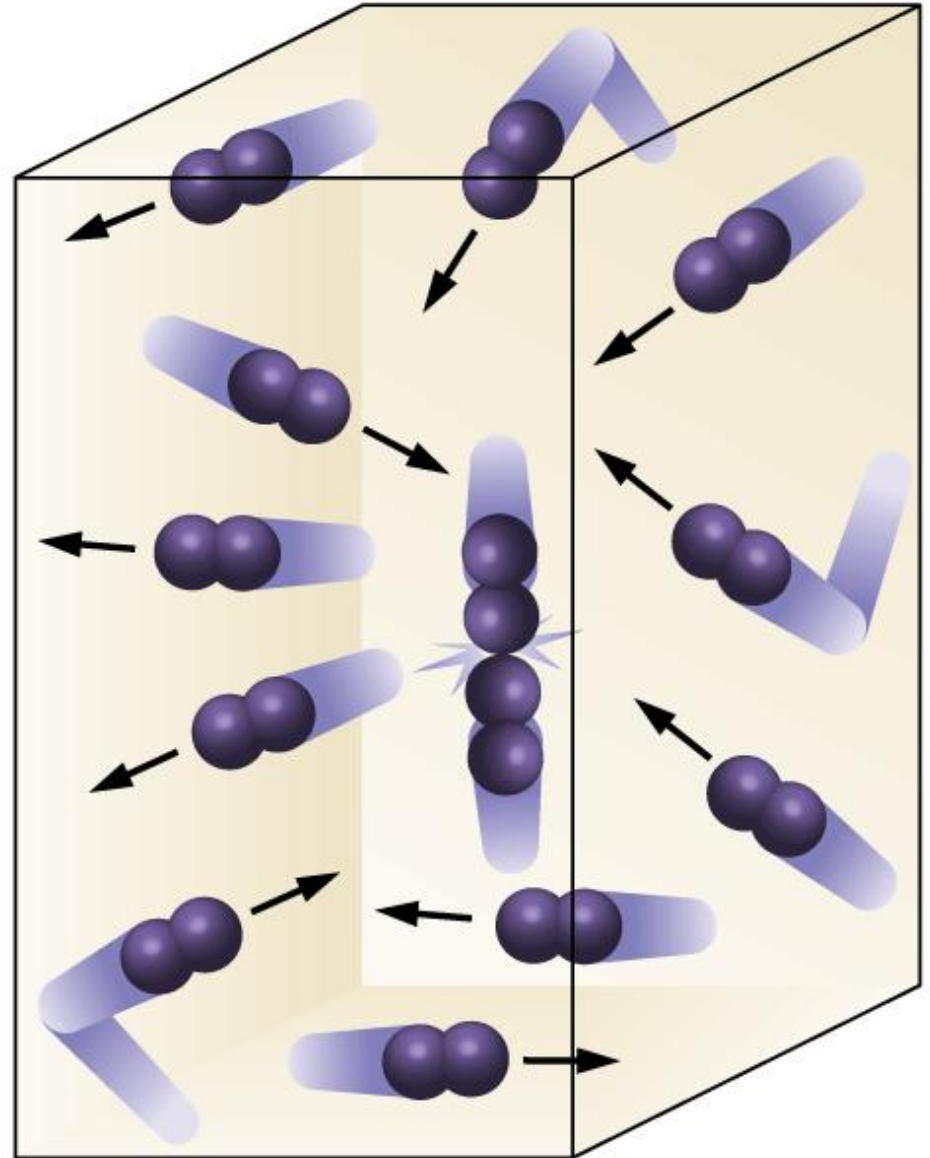


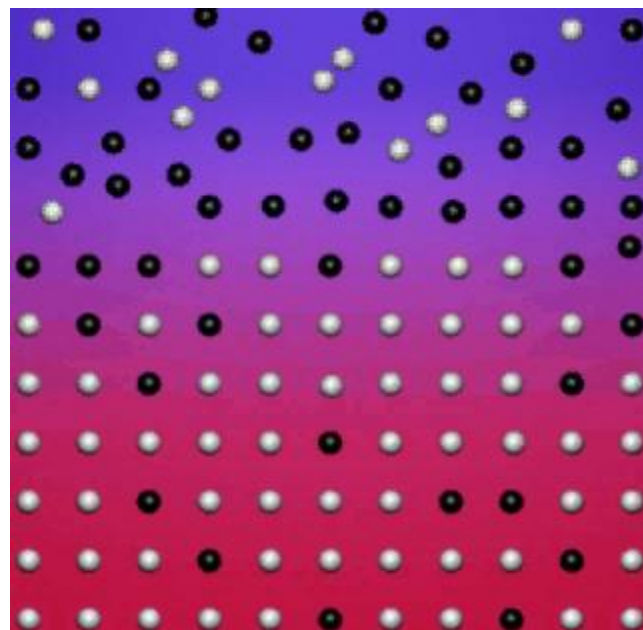
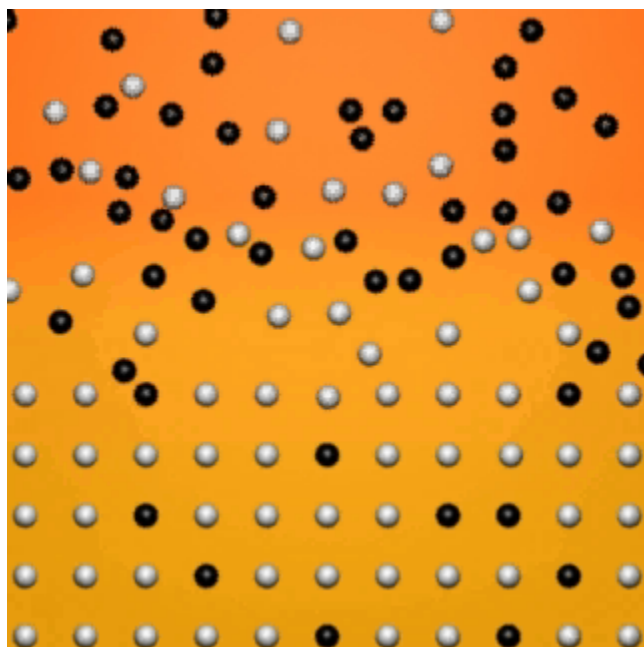
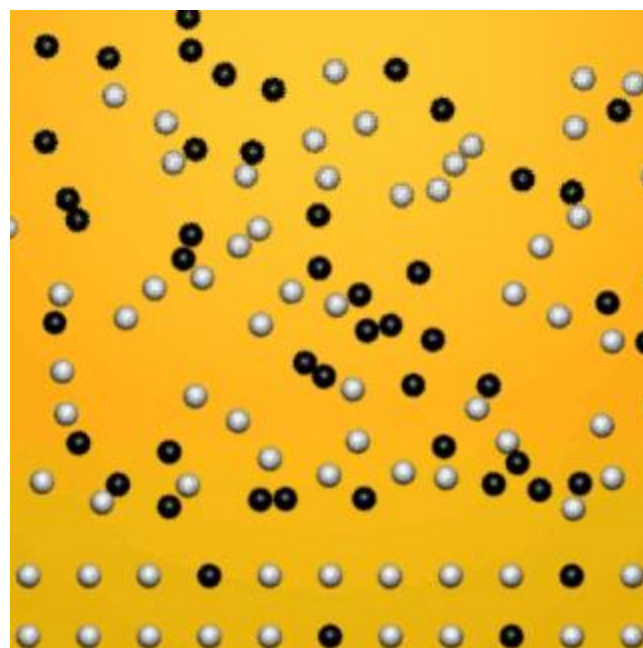
Estructuras Cristalinas

Julio Alberto Aguilar Schafer

**Modelo del estado
líquido
los metales**



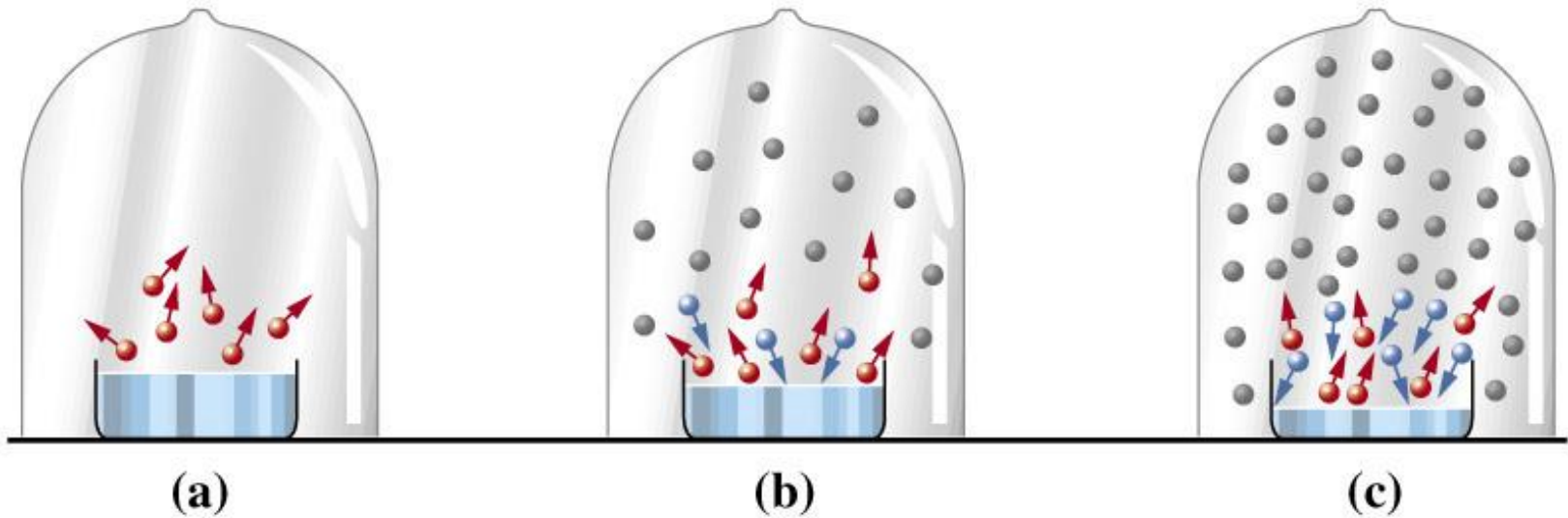
Modelo del paso del estado líquido al estado sólido de los metales



Equilibrio líquido-vapor

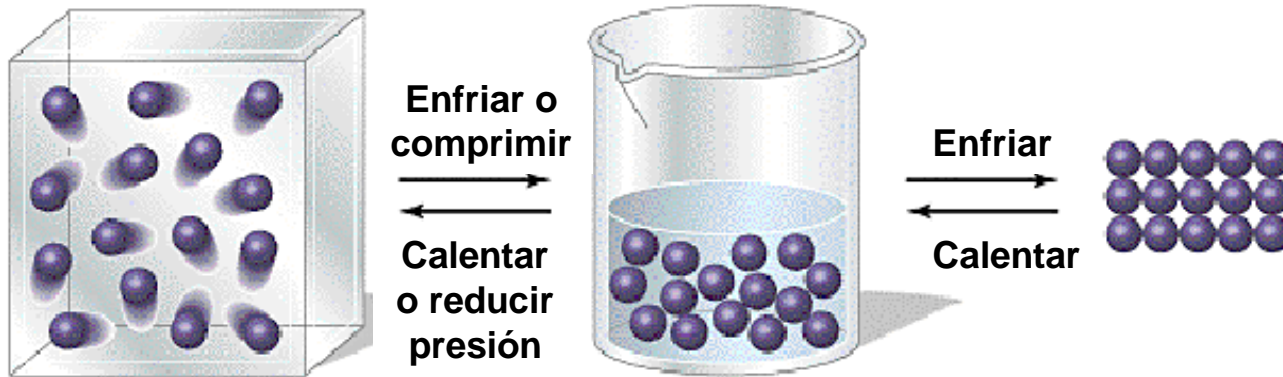
Presión de vapor

- Moléculas en estado vapor
- Moléculas que pasan a vapor (se vaporizan)
- ← Moléculas que pasan al líquido (se condensan)



Propiedades de los líquidos

Comparación molecular entre sólidos y líquidos



GASES

- Desorden total
- Partículas tienen completa libertad de movimiento.
- Partículas tienden a estar alejadas entre sí
- Forma y volumen indeterminado.

LÍQUIDOS

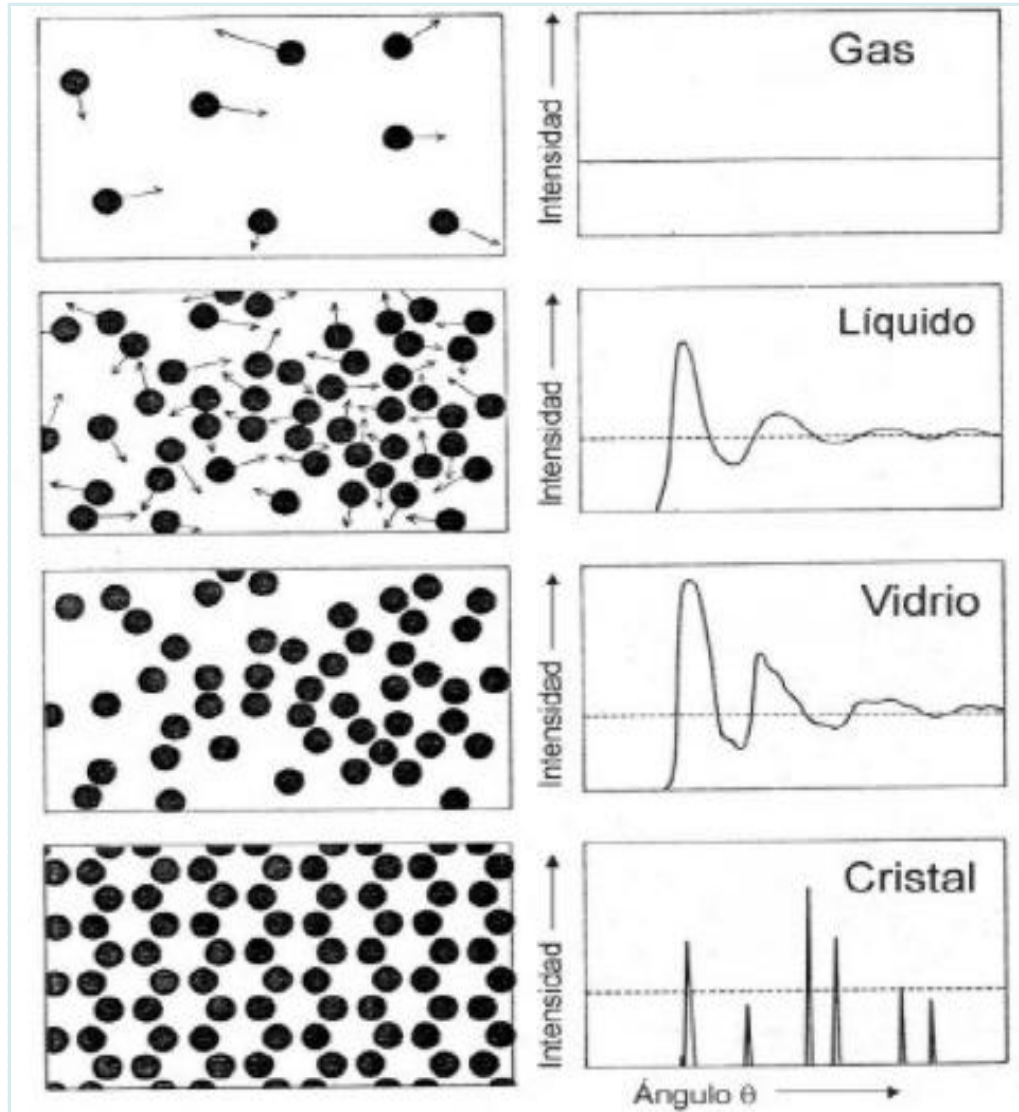
- Menor desorden
- Partículas tienen movimiento relativo entre sí
- Partículas tienen mayor cohesión (juntas)
- Forma determinada al recipiente que los contiene

SÓLIDOS

- Orden
- Partículas fijas en una posición determinada.
- Partículas unidas entre sí
- Forma y volumen determinado

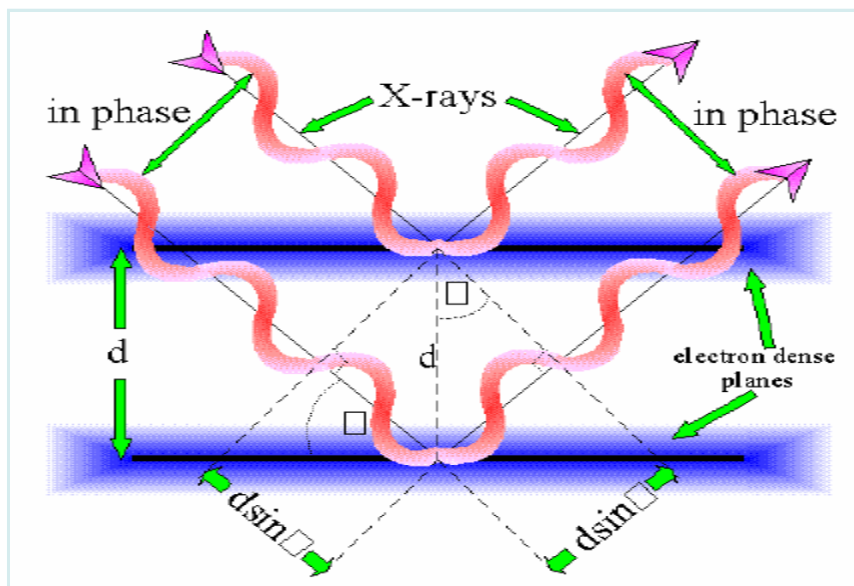
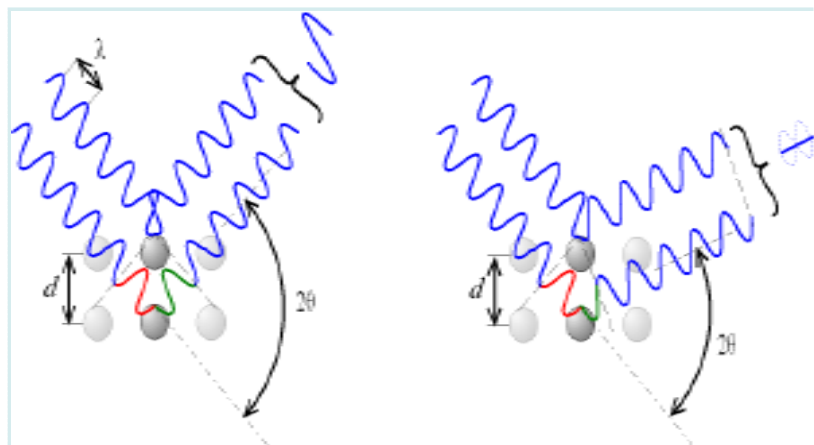
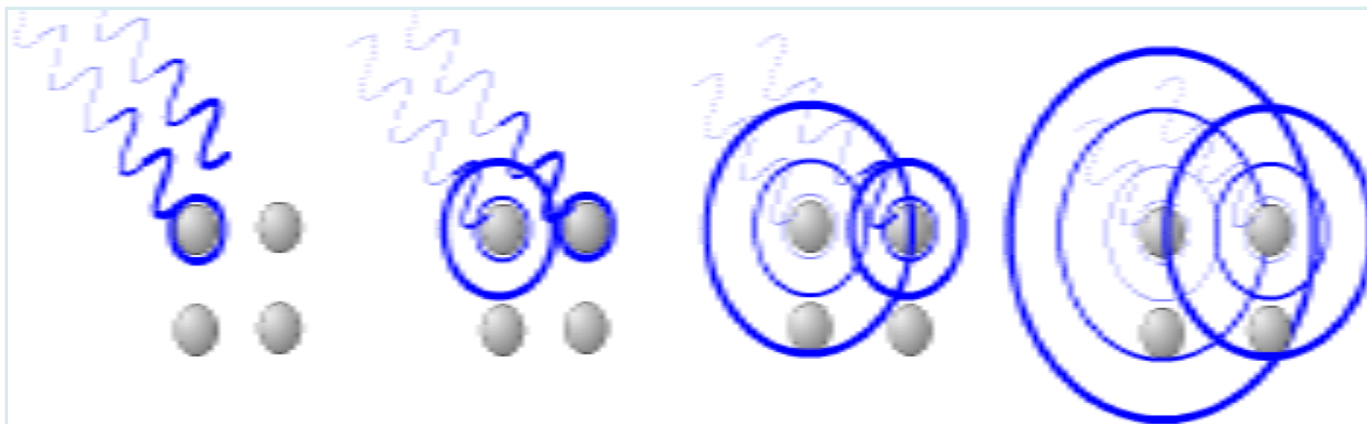
Difracción de rayos X

Patrón de difracción según orden de la materia



Difracción de rayos X

Interacción de rayos X con un grupo de átomos ordenado



CARACTERÍSTICAS METALES

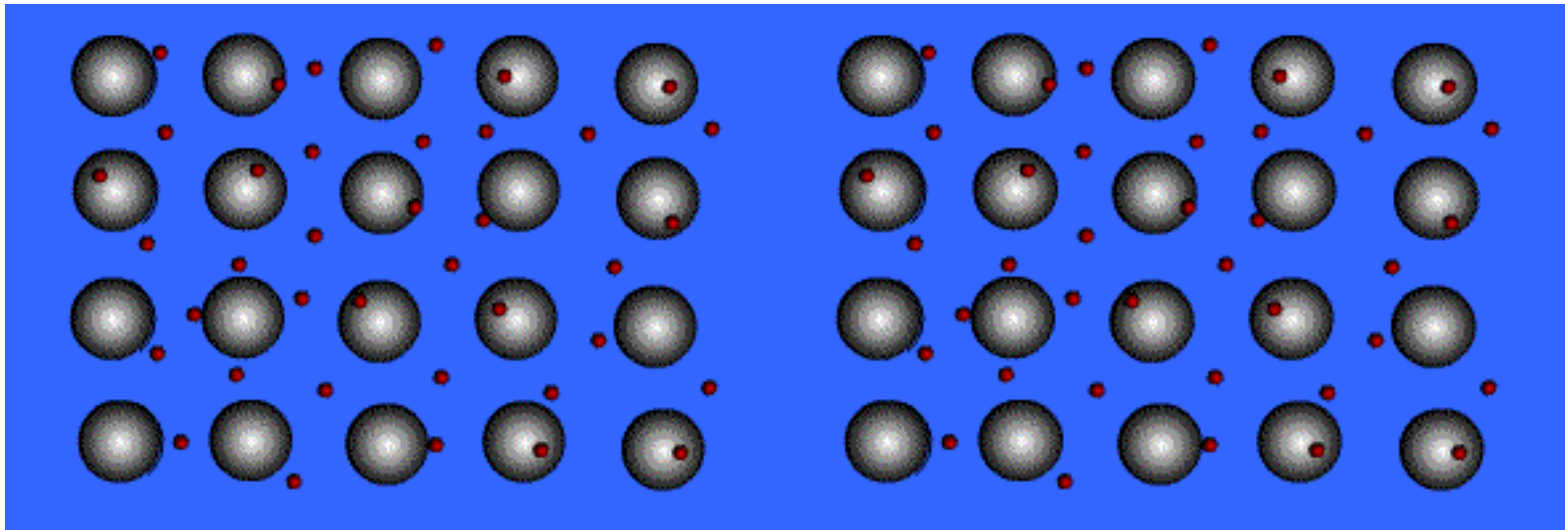
DERIVADAS DEL ENLACE METÁLICO

- 1. CONDUCCIÓN TÉRMICA Y ELÉCTRICA ELEVADA**
- 2. RESISTENCIA MECÁNICA ALTA**
- 3. GRAN PLASTICIDAD, DUCTILIDAD Y TENACIDAD**
- 4. MALEABILIDAD ELEVADA**
- 5. CARÁCTER RECICLABLE**

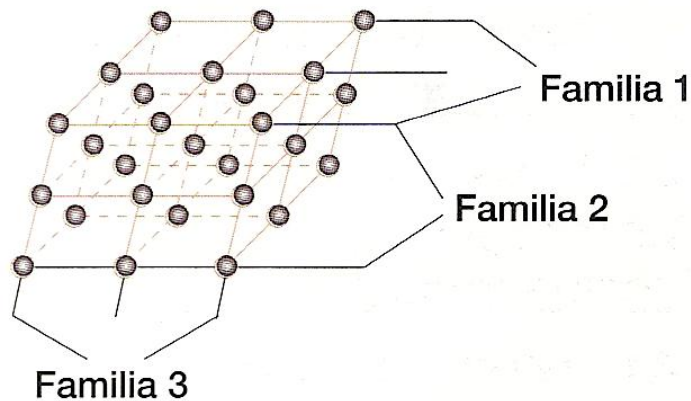
ESTRUCTURA INTERNA DE LOS METALES

- REDES TRIDIMENSIONALES: ESTADO CRISTALINO
- ENLACE METÁLICO:
 1. FORMACIÓN DE UNA NUBE ELECTRÓNICA
 2. PERTENENCIA INCONCRETA DE LOS e^- A LOS ÁTOMOS
 3. GRAN MOVILIDAD ELECTRÓNICA
 4. ESTO JUSTIFICA LA ELEVADA CONDUCTIVIDAD METÁLICA.

ENLACE METÁLICO

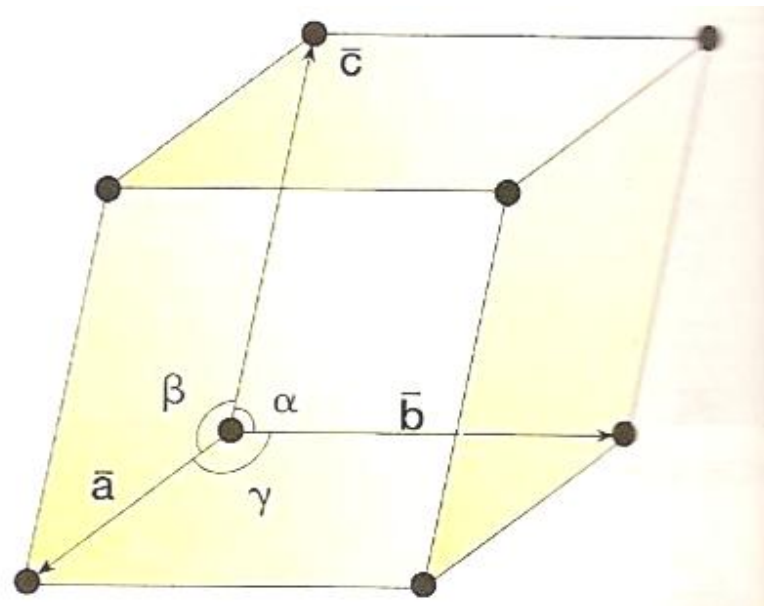


ESTADO CRISTALINO: redes tridimensionales compactas con máximo aprovechamiento espacial.



Red puntual formada por la intersección de tres familias de planos.

MISMA VECINDAD:
distancia permanente entre puntos



CELDA UNIDAD: ejes y ángulos cristalográfico

ESTRUCTURA CRISTALINA

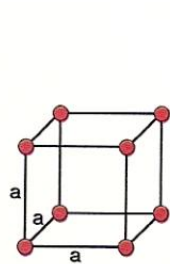
- REDES CRISTALINAS SIMPLES:
 - Representan todas las posibles redes puntuales de átomos situados en vértices.
 - Sus celdas unidad son ‘CELIDAS PRIMITIVAS’

REDES CRISTALINAS DE BRAVAIS: 14 celdas unidad

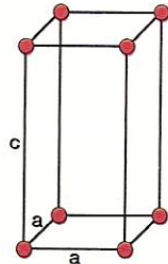
CARACTERÍSTICAS:

- Redes puntuales más complejas
- Cumplen la propiedad de misma vecindad.
- Sus celdas unidad: 'CELIDAS NO PRIMITIVAS'
- La posición atómica en 'no vértice' da lugar:
 - Redes SENCILLAS
 - Redes CENTRADAS EN EL CUERPO
 - Redes CENTRADAS EN LAS CARAS.
 - Redes CENTRADAS EN LA BASE.

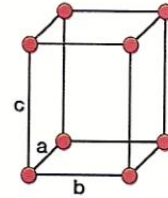
REDES DE BRAVAIS



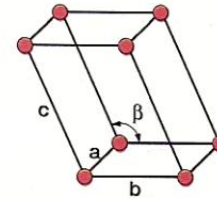
Cúbico sencillo



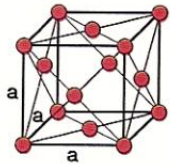
Tetragonal sencillo



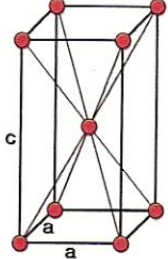
Ortorrómbico sencillo



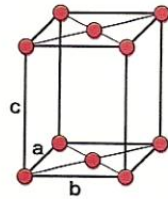
Monoclínico sencillo



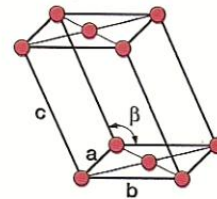
Cúbico centrado en las caras



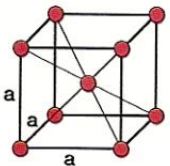
Tetragonal centrado en el cuerpo



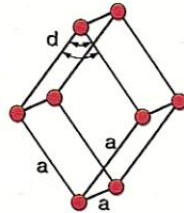
Ortorrómbico centrado en las bases



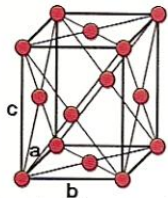
Monoclínico centrado en las bases



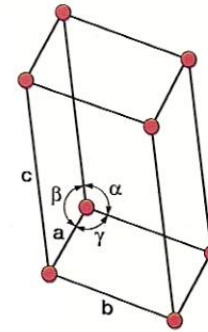
Cúbico centrado en el cuerpo



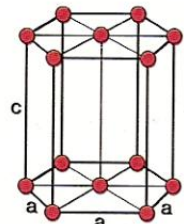
Romboédrica



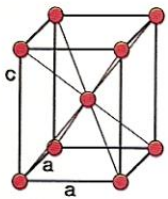
Ortorrómbico centrado en las caras



Triclínica



Hexagonal



Ortorrómbico centrado en el cuerpo

Sistemas cristalinos y redes de Bravais

Ejes y ángulos	Sistema cristalino	Red espacial	Ejemplo
$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Triclínico	Simple	Ácido bórico Dicromato de potasio
$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Monoclínico	Simple De base centrada	Azufre β Sacarosa
$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Ortorrómico	Simple De base centrada De caras centradas Centrada	Azufre α Galio
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Tetragonal	Simple Centrada	Estaño (blanco) Indio, martensita
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Cúbico	Simple De caras centradas Centrada	Carbono (diamante) Oro, aluminio, plomo, plata Hierro α
$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	Hexagonal	Simple	Magnesio, berilio, cinc, Cadmio, grafito
$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Romboédrico	Simple	Antimonio, mercurio, Arsénico, bismuto

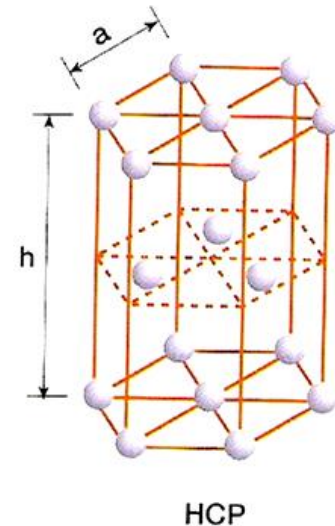
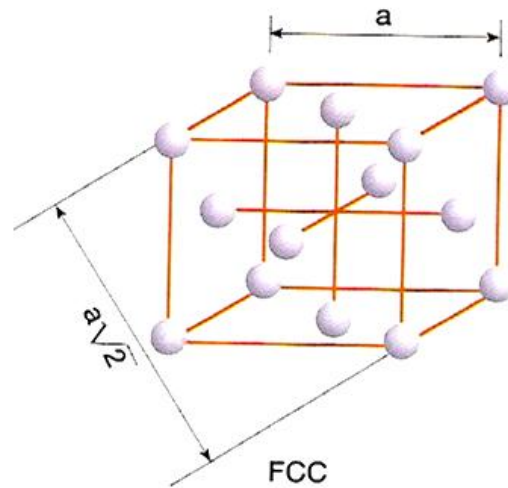
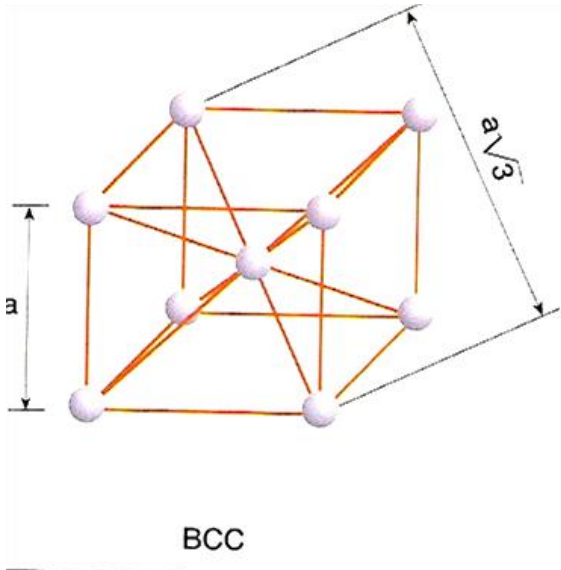
Elemento	Red cristalina	Radio atómico (Å)	Dimensión de la red, a (Å)
Aluminio	FCC	1,431	4,049
Berilio	HCP	1,142	2,286
Cromo	BCC	1,249	2,884
Cobalto	HCP	1,254	2,507
Cobre	FCC	1,278	3,615
Oro	FCC	1,441	4,079
Hierro	BCC	1,241	2,866
Plomo	FCC	1,750	4,951
Magnesio	HCP	1,604	3,209
Níquel	FCC	1,246	3,524
Paladio	FCC	1,375	3,890
Platino	FCC	1,388	3,923
Potasio	BCC	2,312	5,334
Plata	FCC	1,444	4,086
Titanio	HCP	1,475	2,950
Vanadio	BCC	1,316	3,039
Cinc	HCP	1,332	2,665

SISTEMAS DE CRISTALIZACIÓN DE LOS METALES

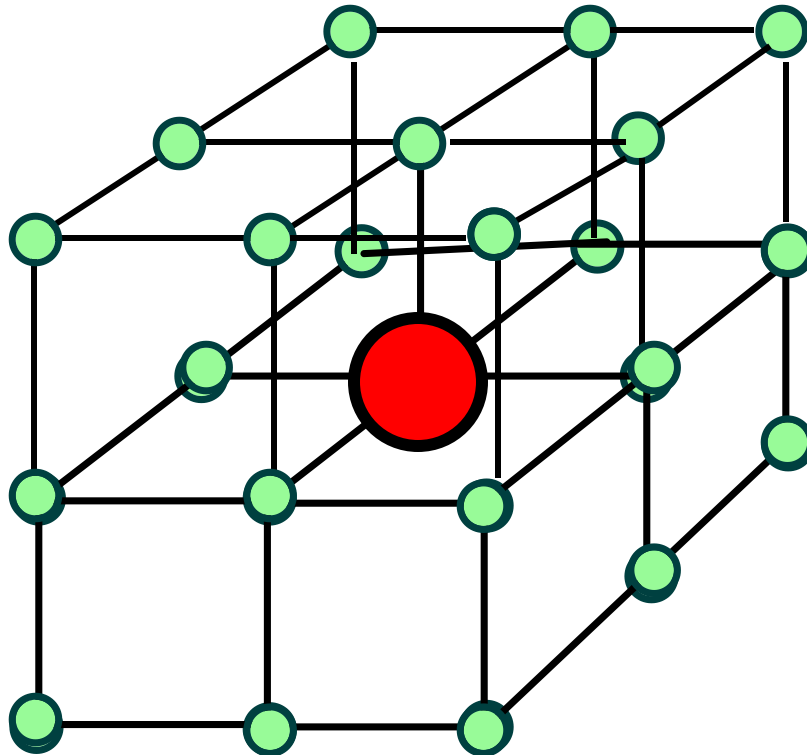
REDES CRISTALINAS METÁLICAS

LOS METALES CRISTALIZAN EN LAS SIGUIENTES ESTRUCTURAS:

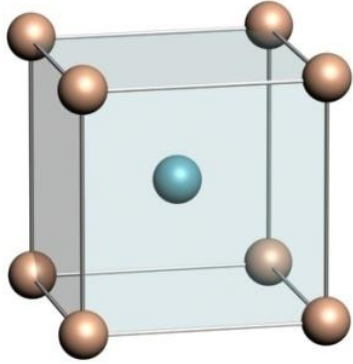
- RELACIONADO CON EL ESTADO DE MÍNIMA ENERGÍA
- HIPÓTESIS DE LAS ESFERAS RÍGIDAS



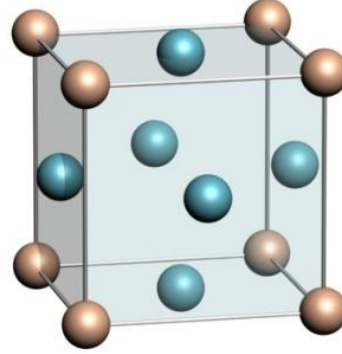
Las celdas unitarias no actúan de forma independiente, cada átomo en cada arista es compartido por el átomo de las aristas de cada celdas unitarias adyacente.



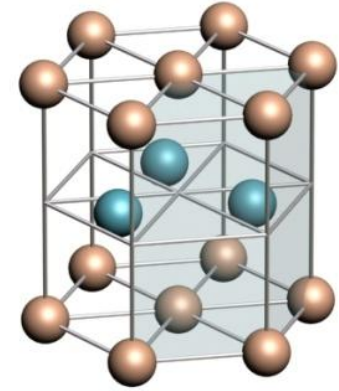
$$1/8 \times 8 = 1$$



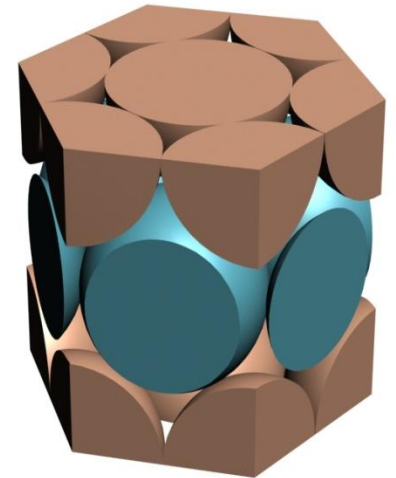
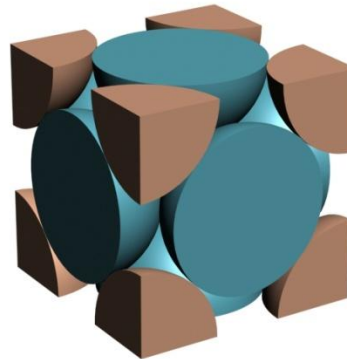
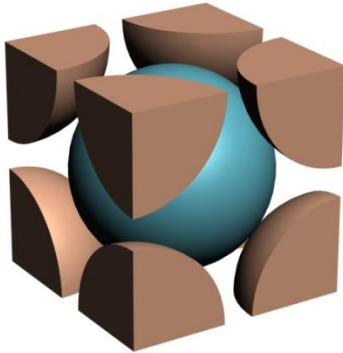
**Cubico centrado
en el cuerpo**

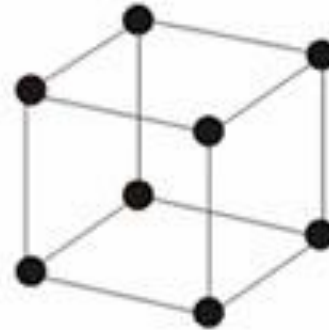


**Cubico centrado
en las caras**



**Exagonal
compacto**





**Arriba, estructura cúbica centrada en el cuerpo.
Abajo, estructura cúbica-primitiva.**

Red cúbica centrada (BCC)

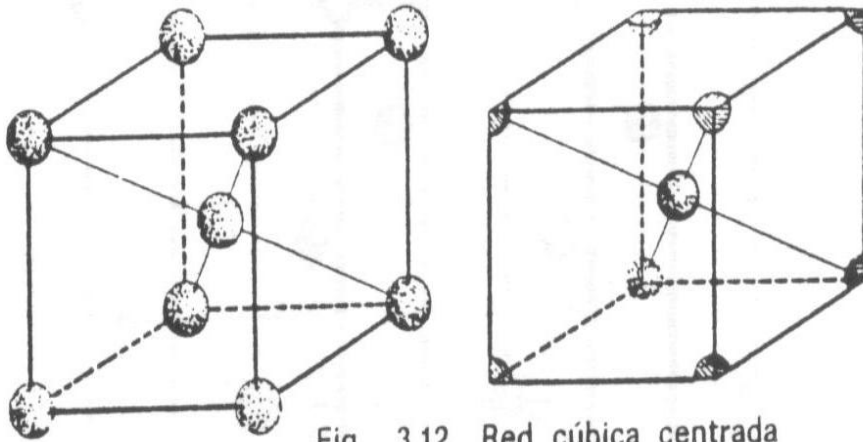
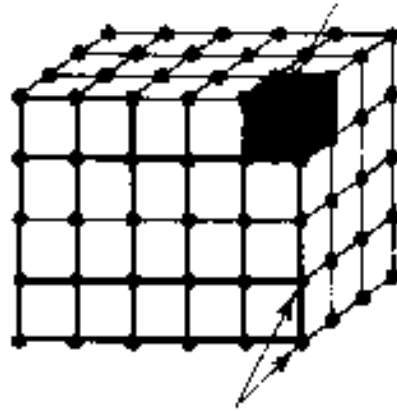


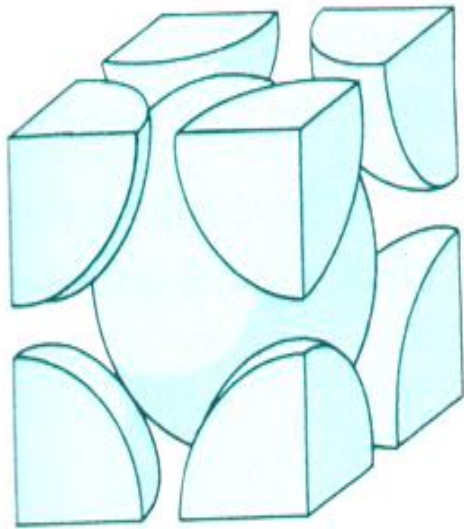
Fig. 3.12 Red cúbica centrada

- **Nº de átomos: 2**
- **Propiedades:
materiales
resistentes a
la deformación**
- **Fe α , Ti, W, Mo, Nb,
Ta, K, Na, V, Cr, Zr**
- **F. empaq: 0,68**

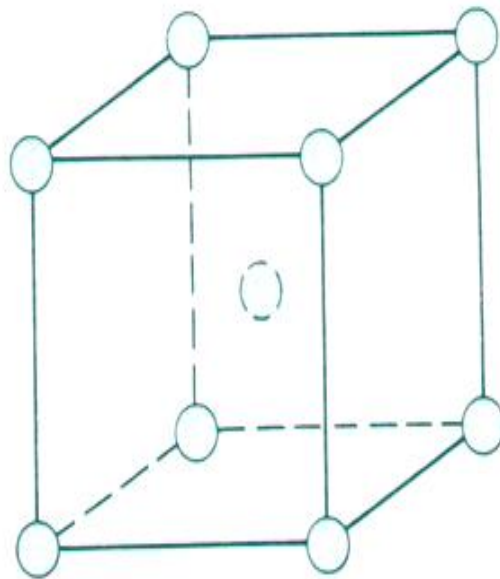
Celda Unitaria



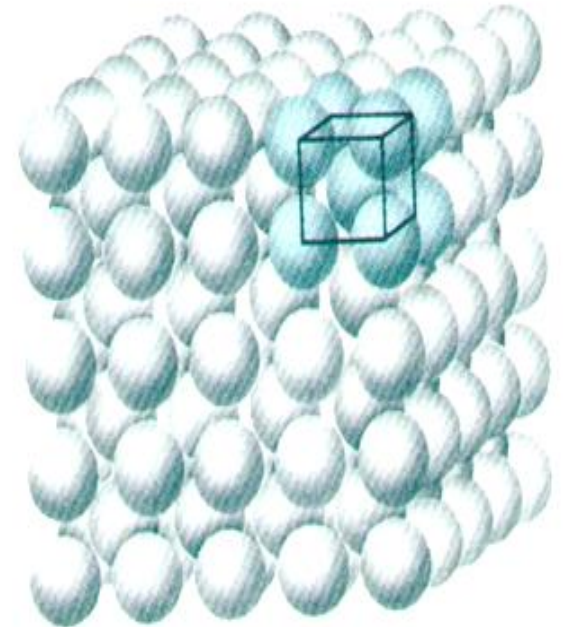
Puntos de la Red



(a)

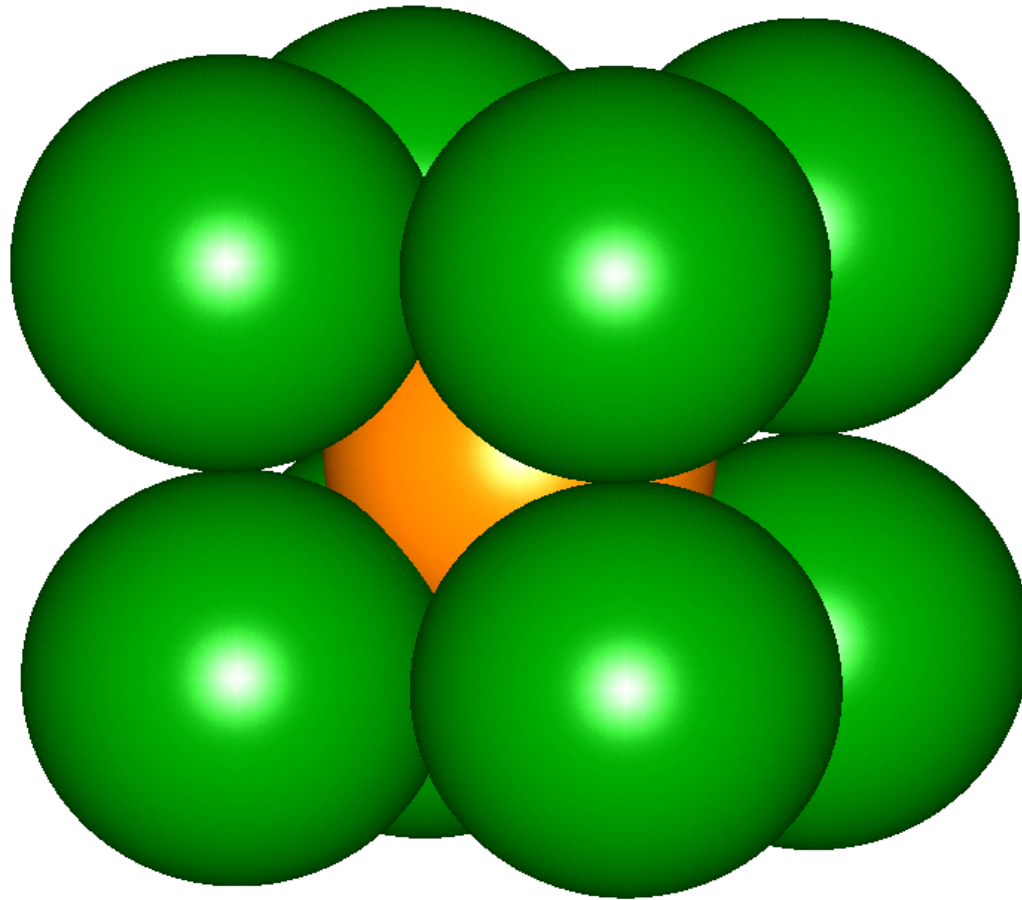


(b)



(c)

Cúbico centrado en el cuerpo



Red cúbica centrada en caras *(FCC)*

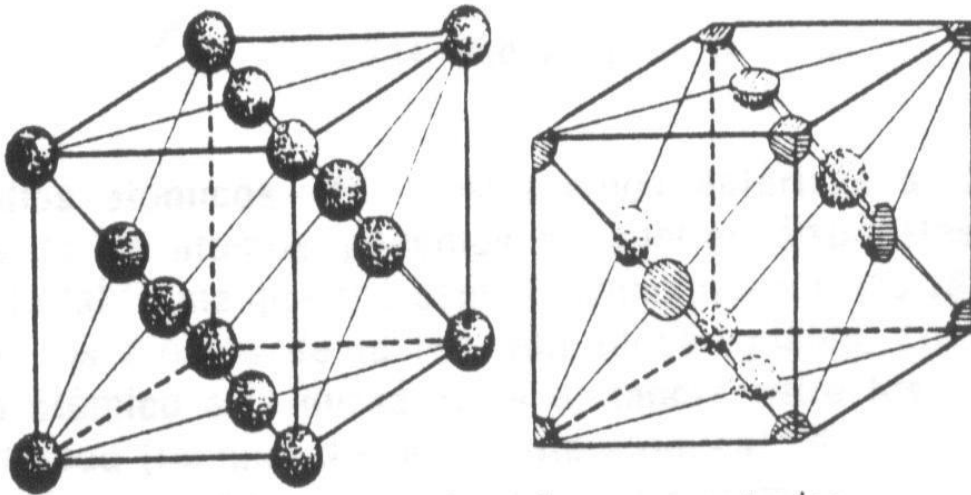
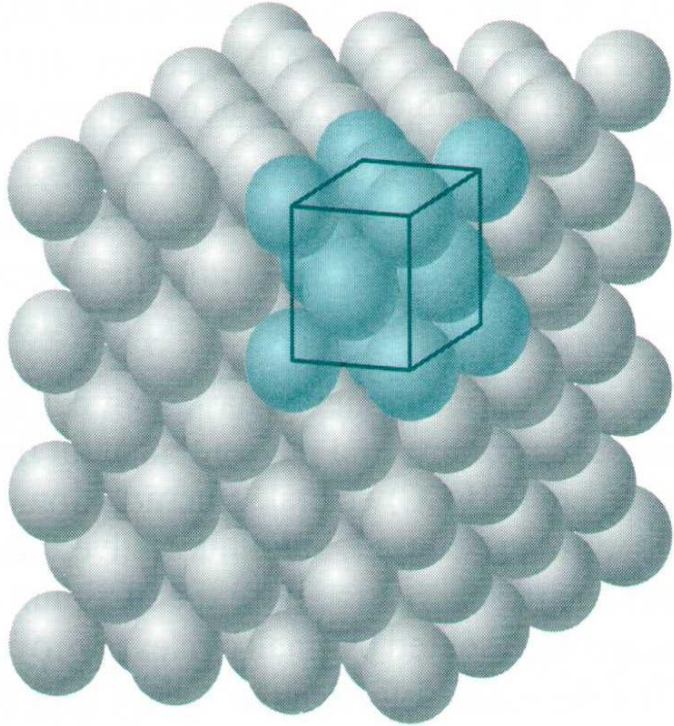
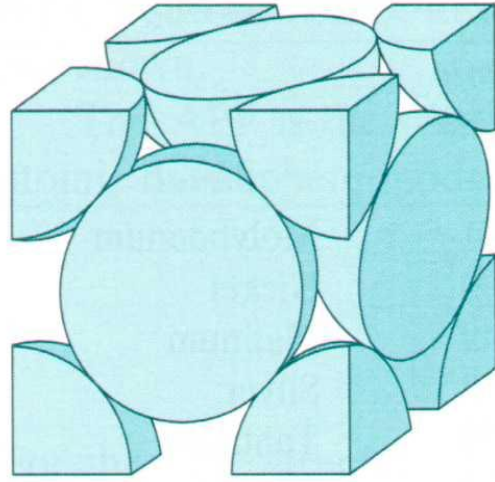


Fig. 3.13 Red cúbica de caras centradas

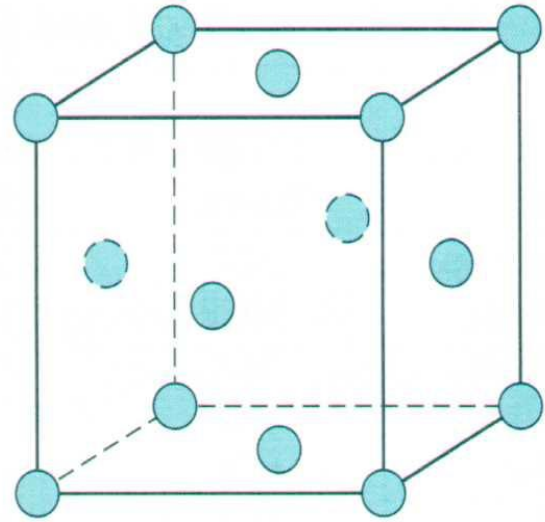
- N° de átomos: 4
- Propiedades: se deforman mejor que BCC
- Fe, Cu, Al, Au, Ag, Pb, Ni, Pt
- F. empaq: 0,74



(c)



(a)



(b)

Red hexagonal compacta (HC)

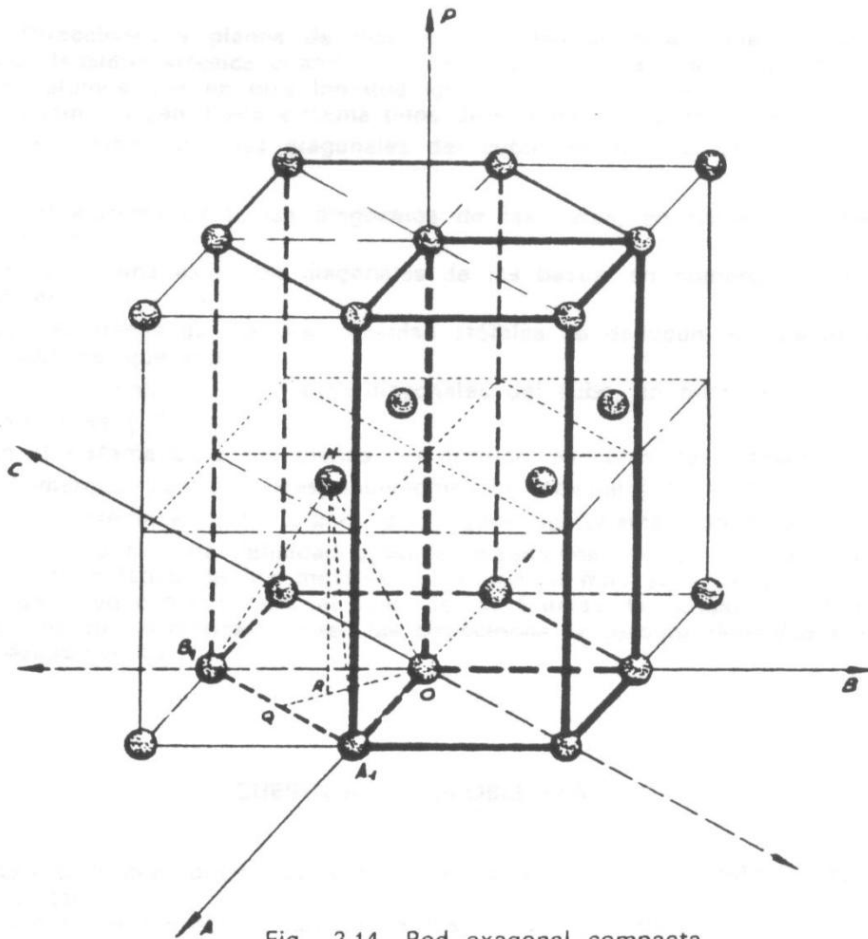
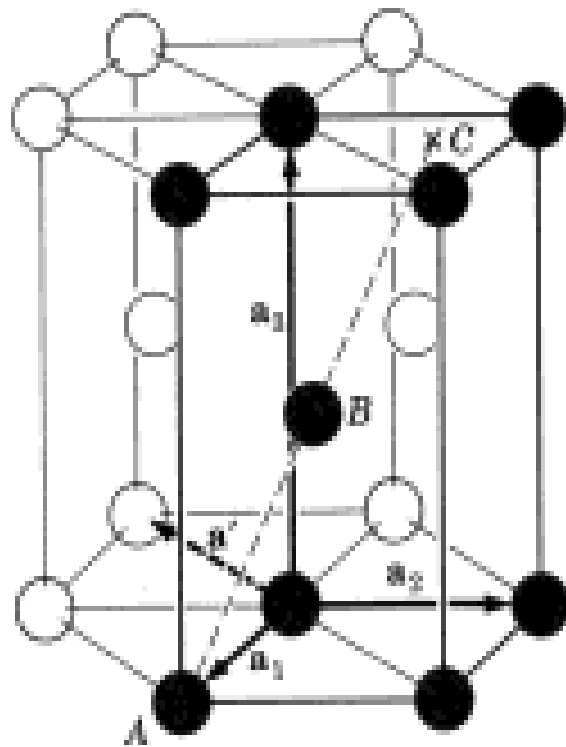
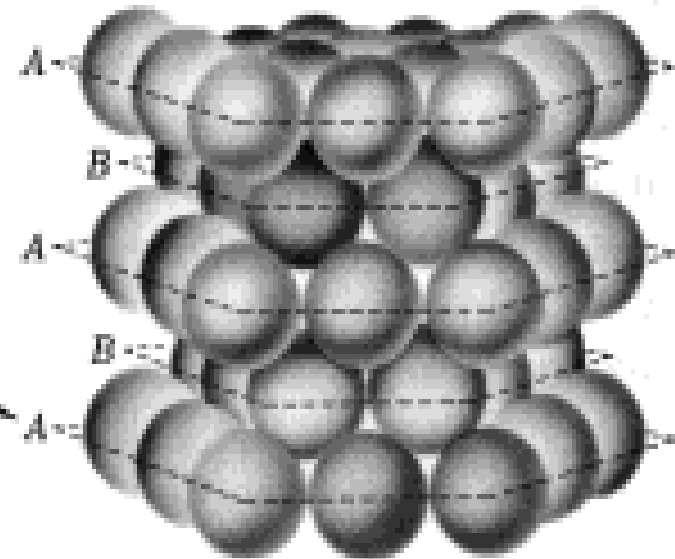


Fig. 3.14 Red exagonal compacta

- N° de átomos: 6
- Propiedades: poco deformables
- Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr, Cd
- F. empaq: 0,74



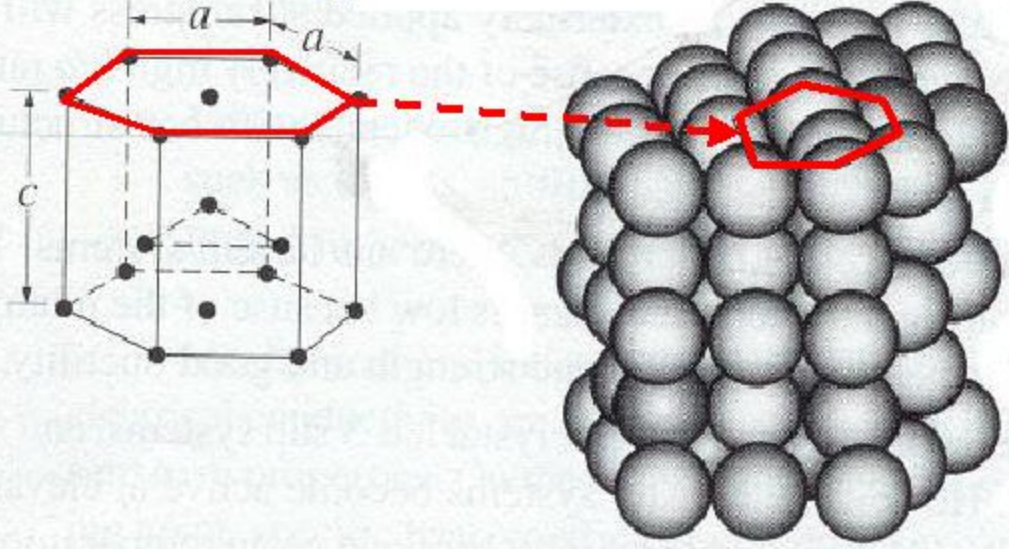
(a) The crystal structure consists of AB atom pairs on the points of the hexagonal space lattice.



(b) Successive basal planes are stacked in $ABABAB$ arrangement.

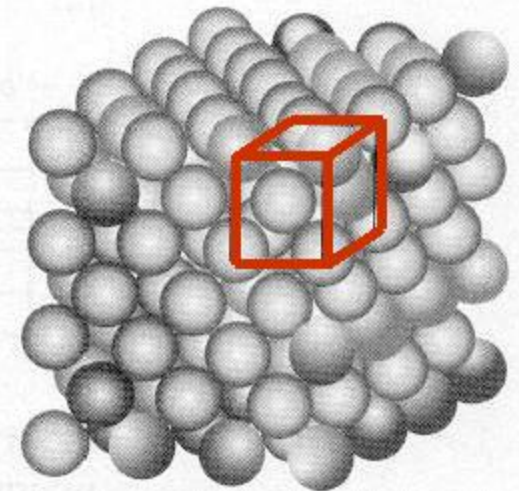
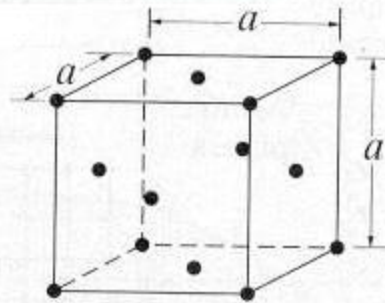
Important features of the hexagonal close-packed crystal structure.

HCP lattice



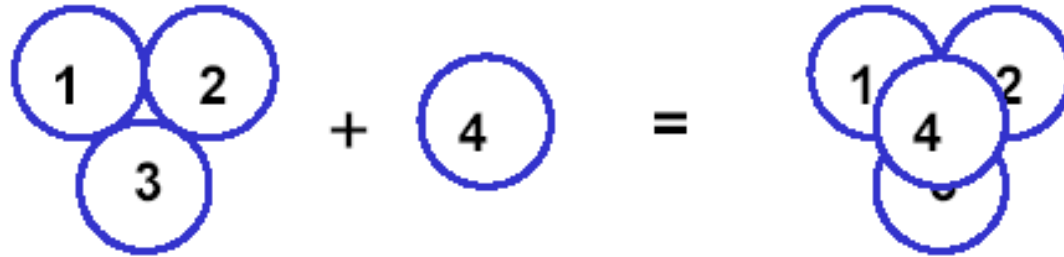
see pp 40 - 41

FCC lattice

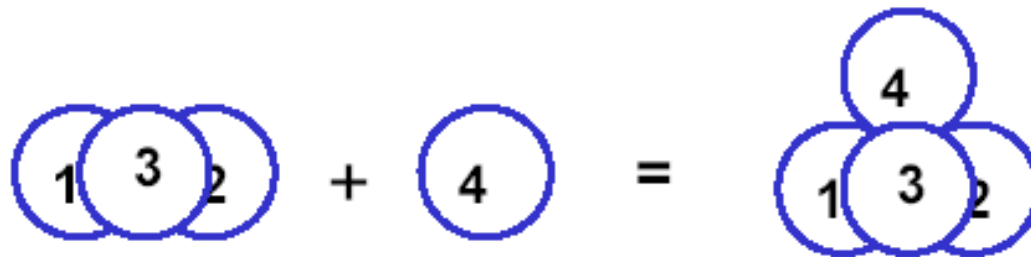


Ordenamiento de planos de átomos iguales durante la solidificación de metales puros

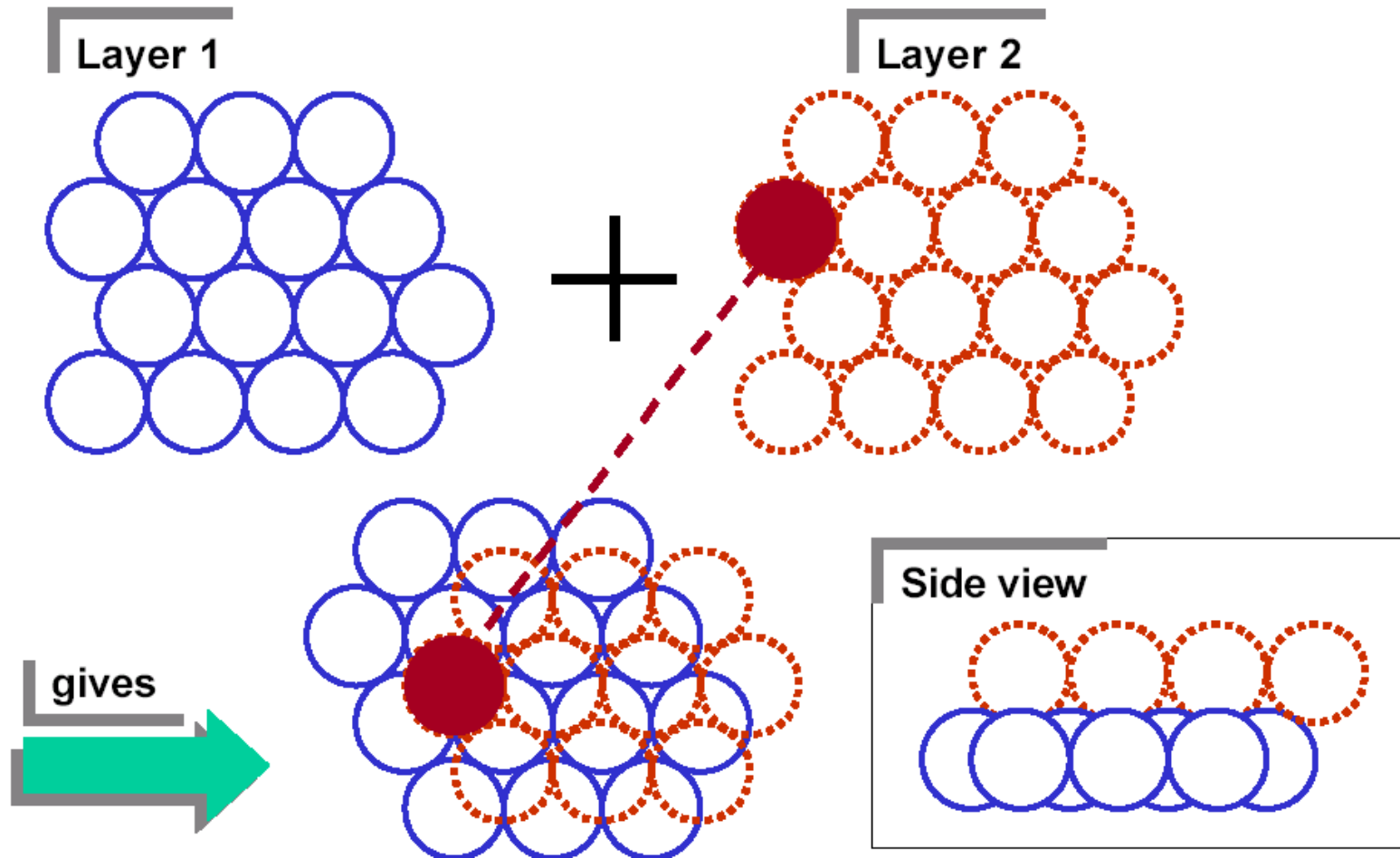
Vista superior

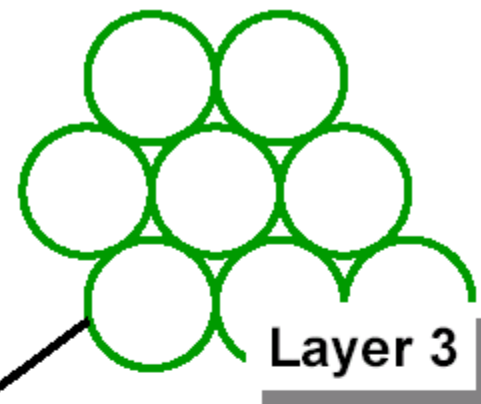
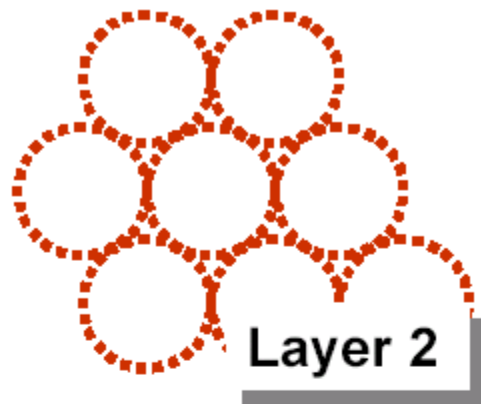
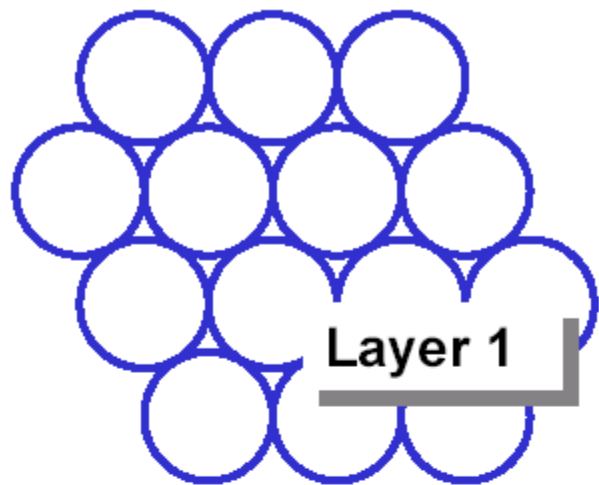


Vista lateral

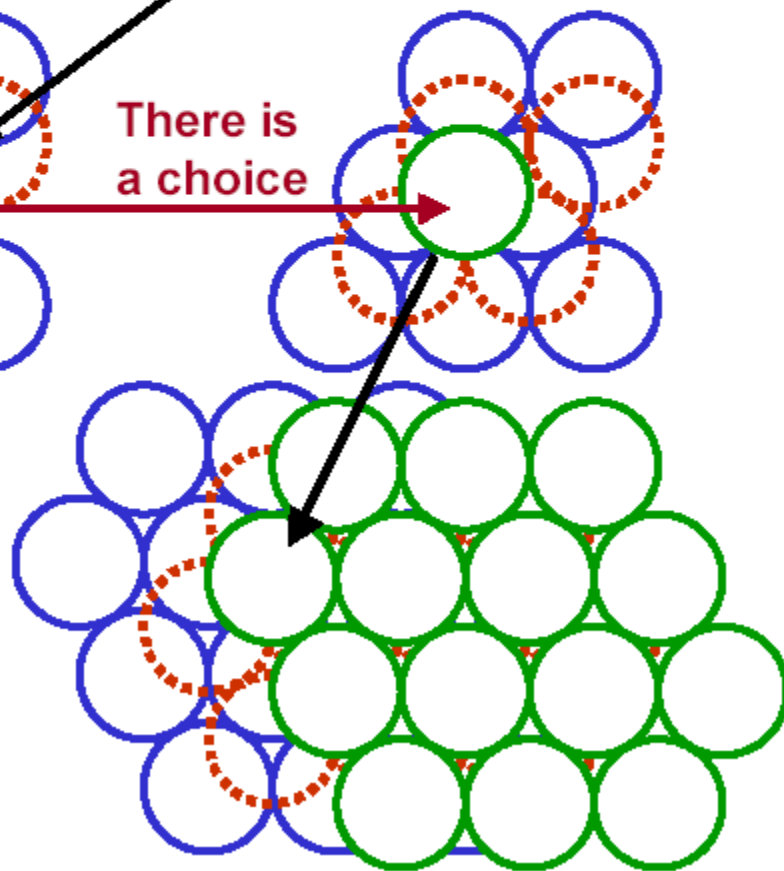
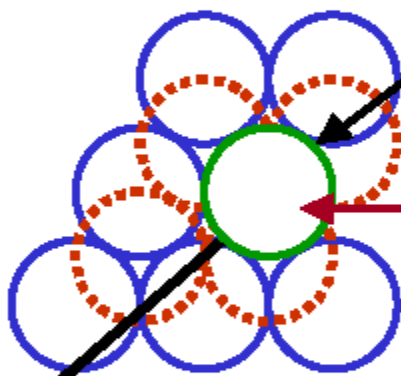


Vista superior de átomos en metales puros

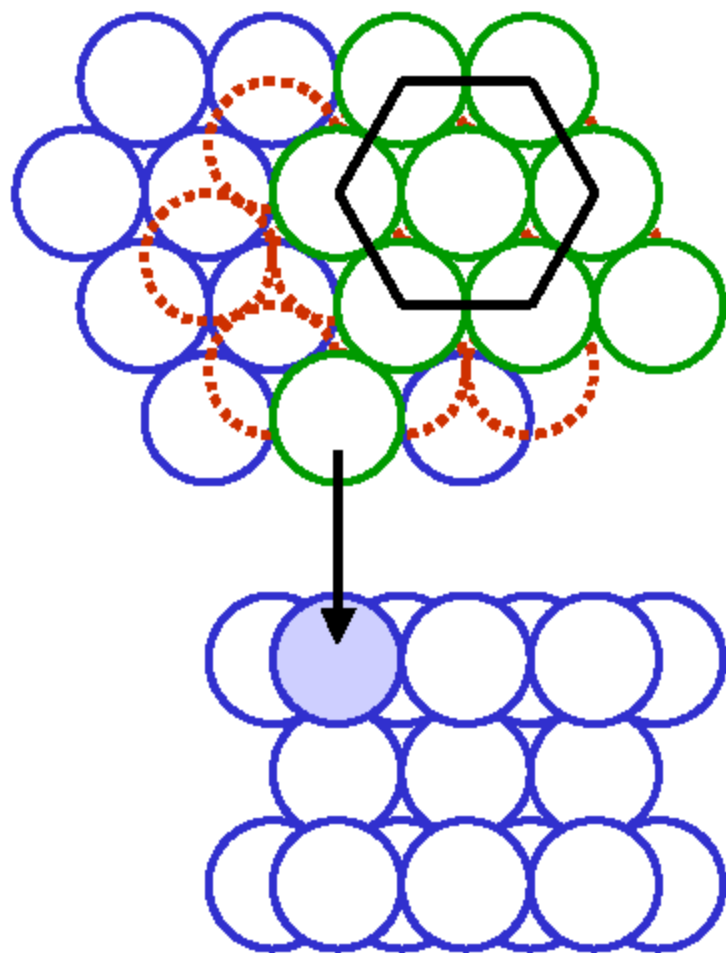




Now add a third layer



Hexagonal close packed,
HCP, lattice



Face centred cubic,
FCC, lattice

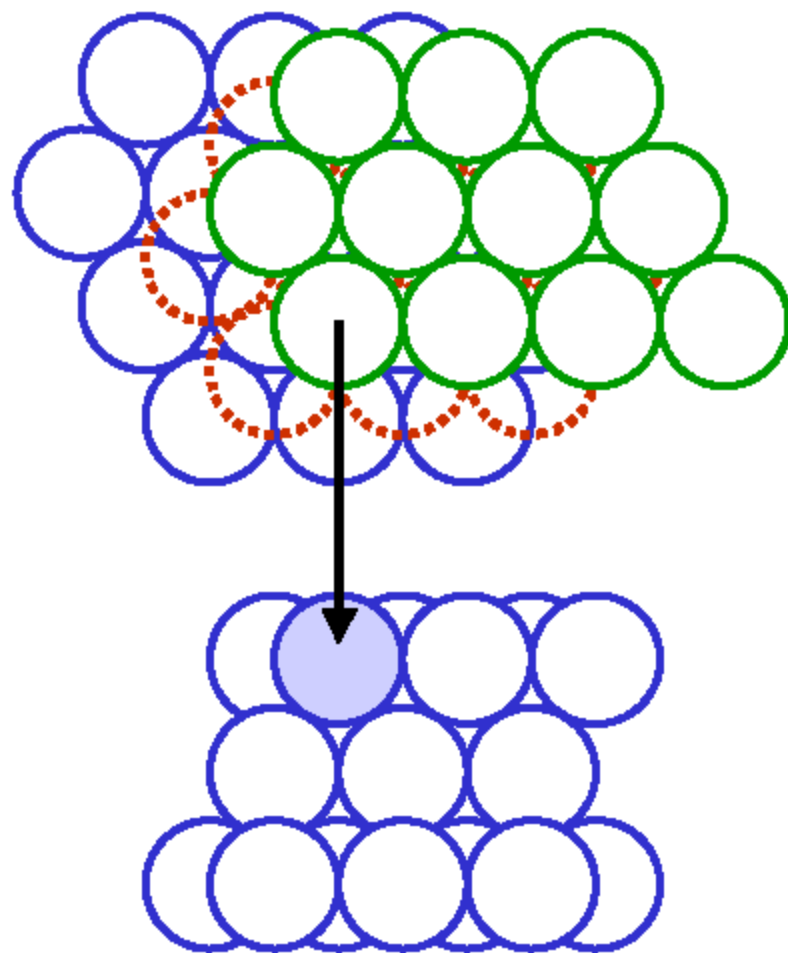


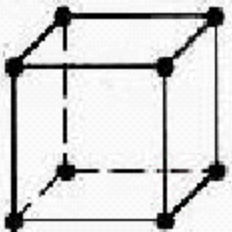

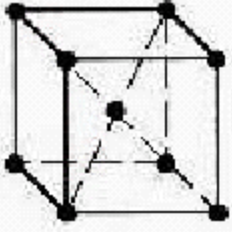

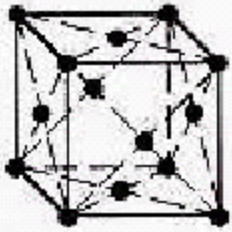

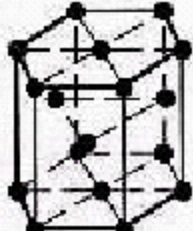

Tabla periódica de los elementos químicos

Group	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
Period																			
1	1 H																		2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
6	55 Cs	56 Ba	* 71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
7	87 Fr	88 Ra	** 103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Uuu	112 Uub	113 Uut	114 Uuq	115 Uup	116 Uuh	117 Uus	118 Uuo	
*Lanthanoids			* 57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb			
**Actinoids			** 89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No			

Table 4. PERIODIC TABLE OF ELEMENTS IN METALLIC MATERIALS

1 IA	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18 VIIA
	IIA											IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA	
3 Li	4 Be											5 B					
11 Na	12 Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIIB	-----	VIII	-----	IB	IIB	13 Al					
19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga					
37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb			
55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi			
87 Fr	88 Ra																

57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lw

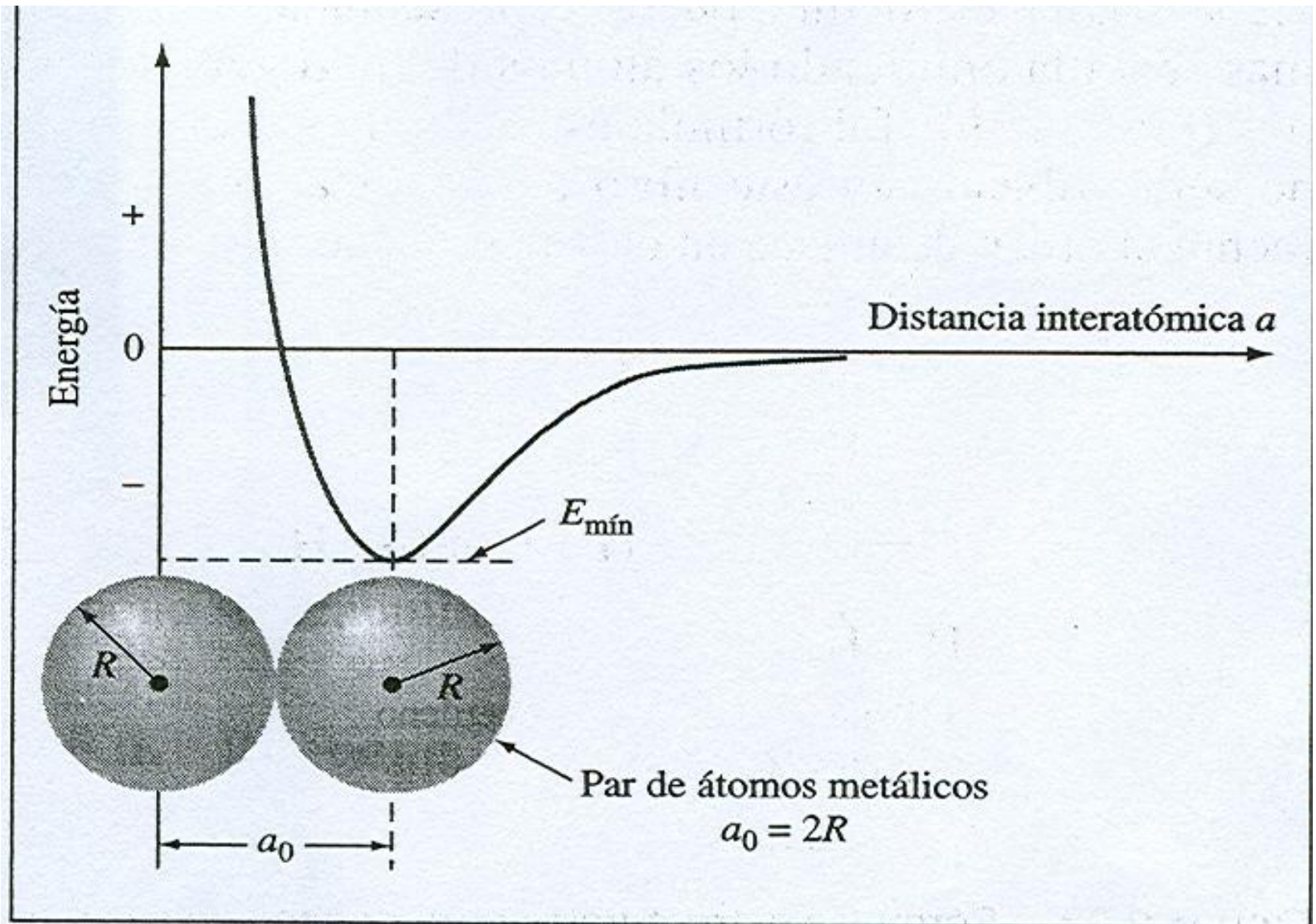
	Lattice structure	Unit cell schematic	Ping-pong ball model
iron	Simple cubic		
	Body-centered cubic		
copper, iron	Face-centered cubic		
zinc	Hexagonal close-packed		

Some comments about lattices:

Space lattices are extremely small:



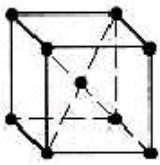



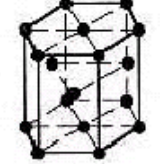

- on the order of 4\AA on an edge
- or approximately 10^{-7} mm (1/500,000 sheet of paper)
- the dimensions of a space lattice are characteristic of individual elements

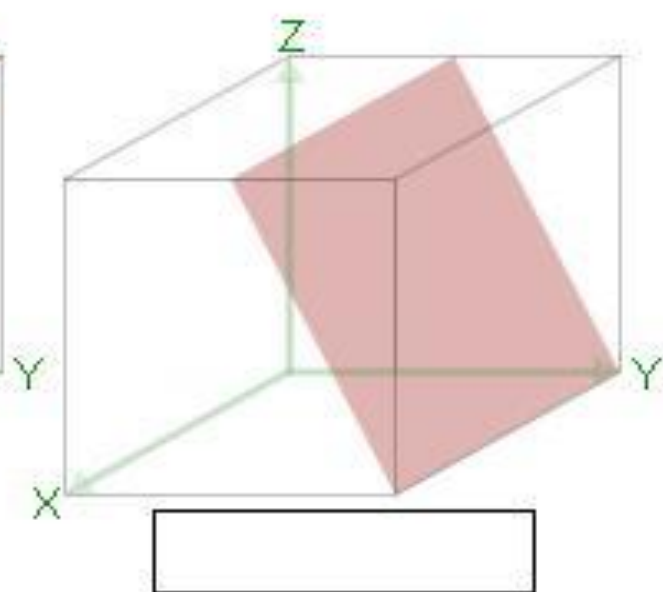
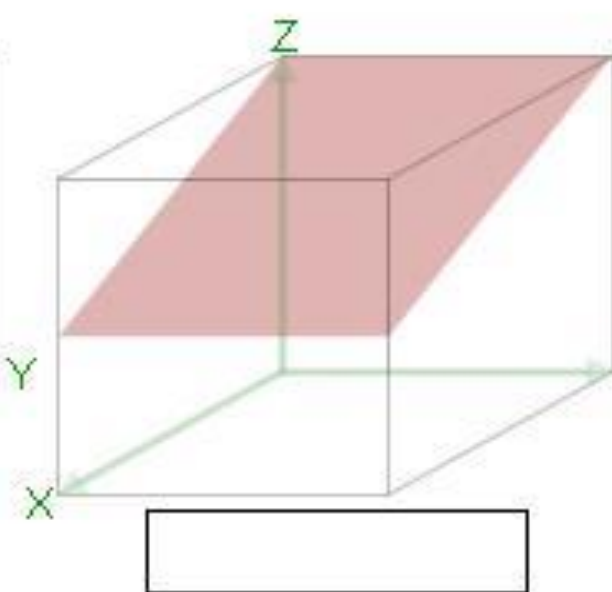
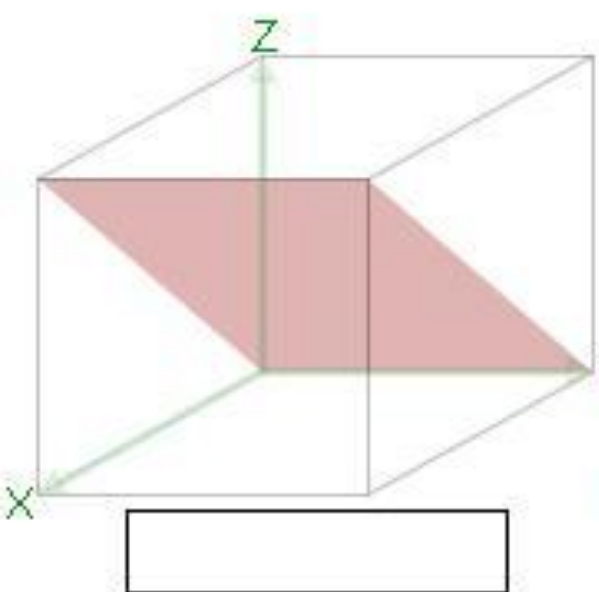
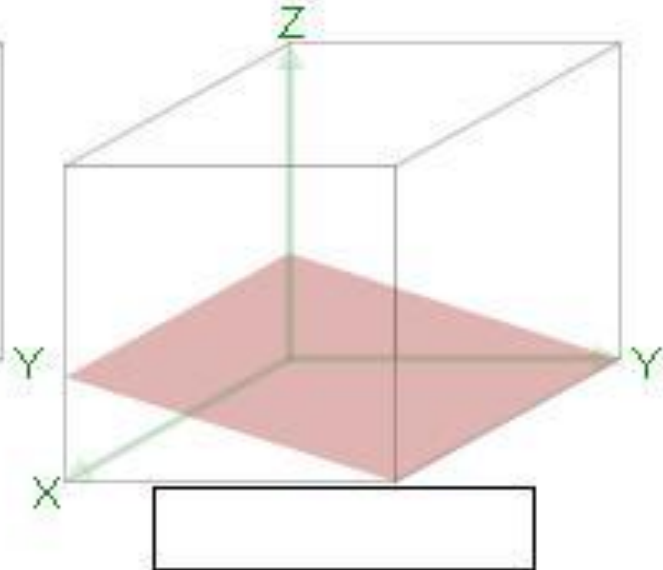
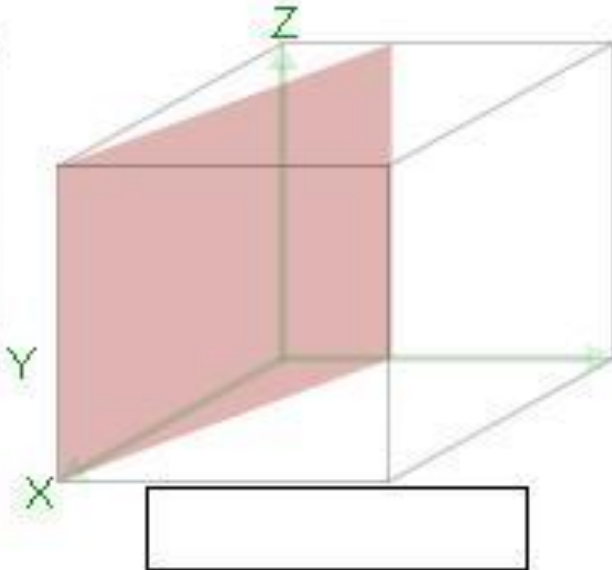
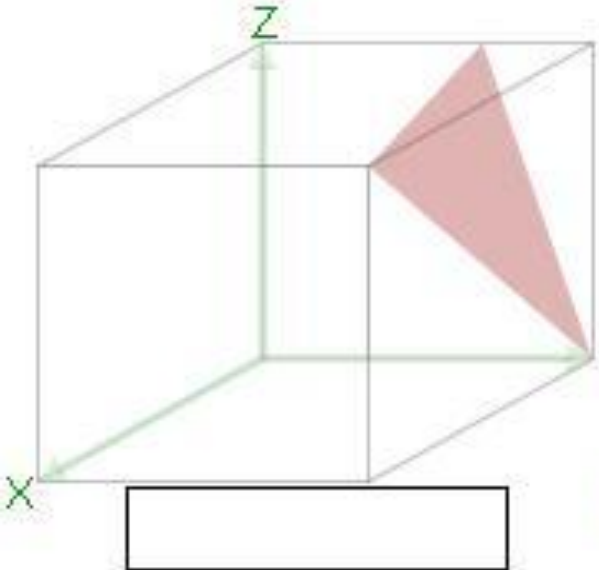
Curva de distancia entre átomos en estructuras cristalinas



Structure	Number of slip planes	Probability of slip
BCC	48	high
FCC	12	moderate
HCP	3	low

Planos de deslizamiento

	Lattice structure	Unit cell schematic	Ping-pong ball model	Number of nearest neighbors	Packing efficiency	Typical metals
(a)	Simple cubic			6	52%	None
(b)	Body-centered cubic			8 12	68%	Fe, Cr, Mn, Cb, W, Ta, Ti, V, Na, K
(c)	Face-centered cubic			12 48	74%	Fe, Al, Cu, Ni, Ca, Au, Ag, Pb, Pt
(d)	Hexagonal close-packed			12 3	74%	Be, Cd, Mg, Zn, Zr



$$(\bar{1} 0 \bar{2})$$

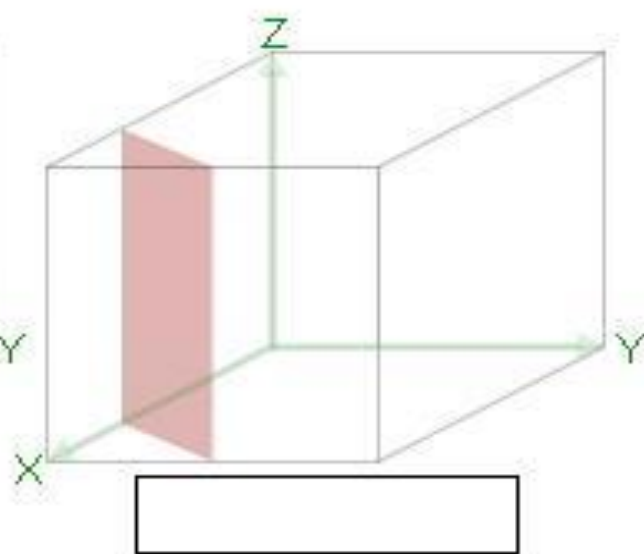
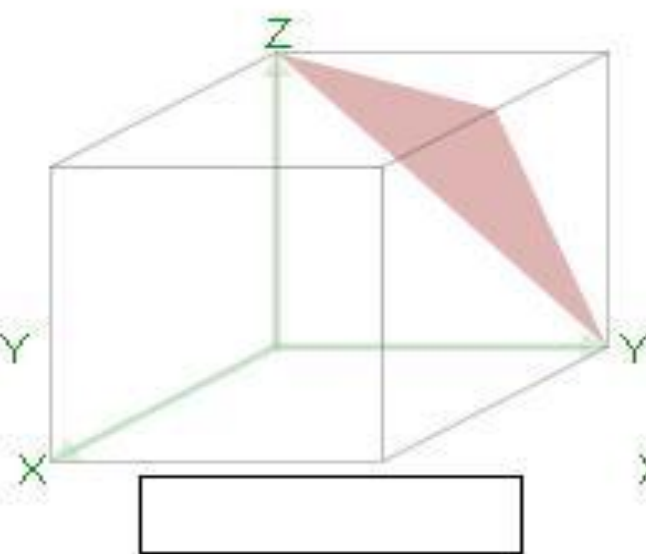
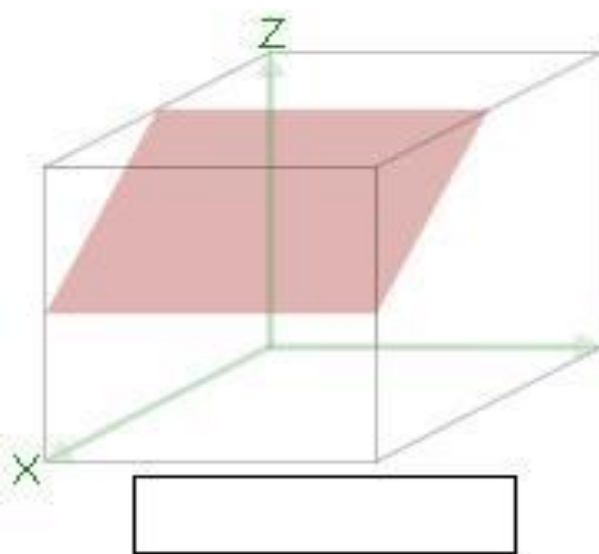
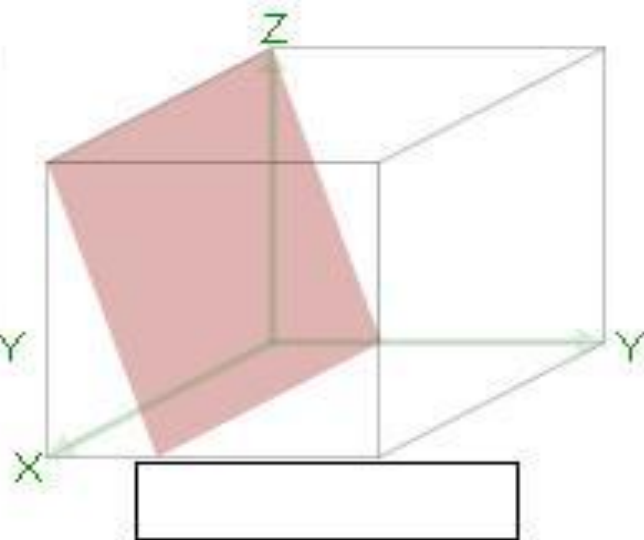
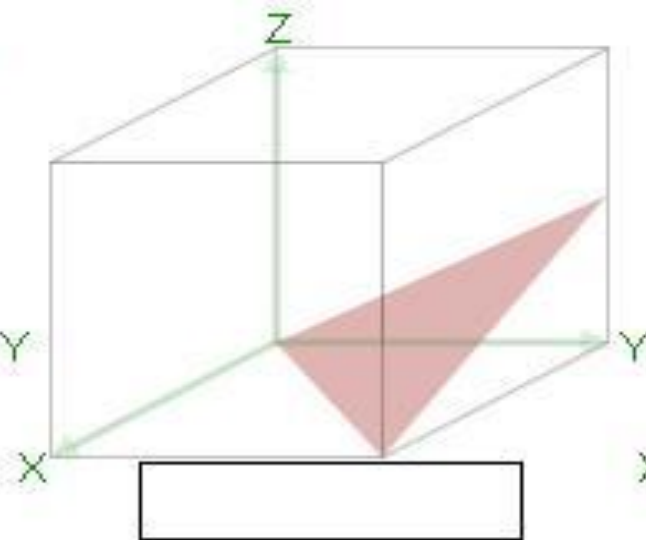
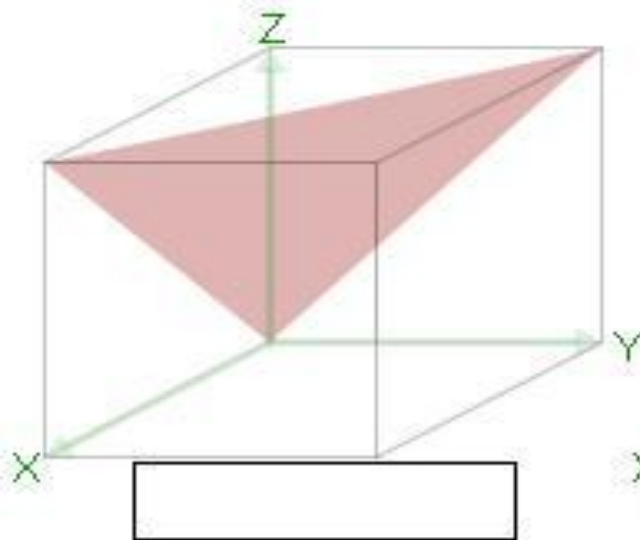
$$(0 1 3)$$

$$(1 \bar{3} \bar{1})$$

$$(1 0 \bar{1})$$

$$(1 3 0)$$

$$(0 \bar{2} \bar{1})$$



$$(1 \bar{1} 2)$$

$$(\bar{3} 2 0)$$

$$(1 1 \bar{1})$$

$$(0 3 1)$$

$$(\bar{2} 0 \bar{2})$$

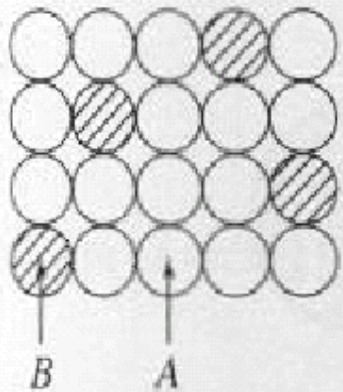
$$(2 \bar{1} \bar{1})$$

Ejemplo de una estructura cristalina

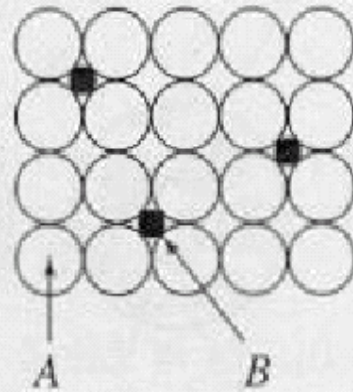
- Ordenamiento regular de átomos
- Distancia atómica 2×10^{-10}
- Significa 20,000,000 de átomos en un milimetro

Defectos puntuales

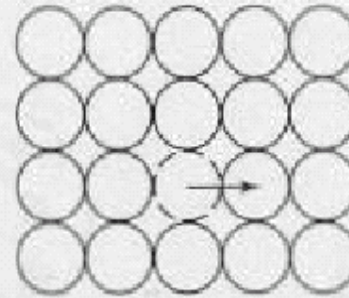
- a) Substitución
- b) Solución sólida intersticial
- c) Vacancia
- d) Difusión intersticial



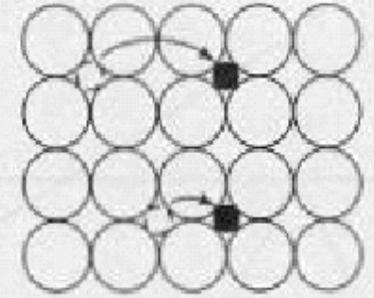
(a)



(b)

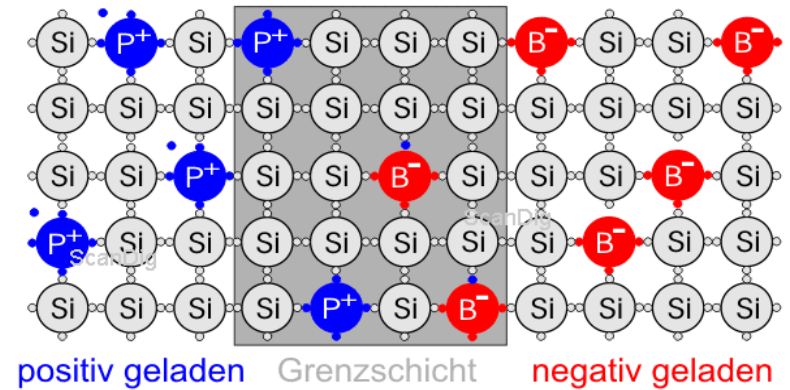


(c)



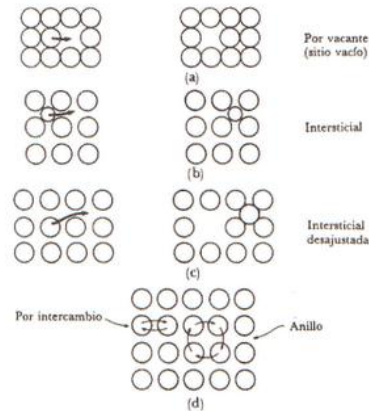
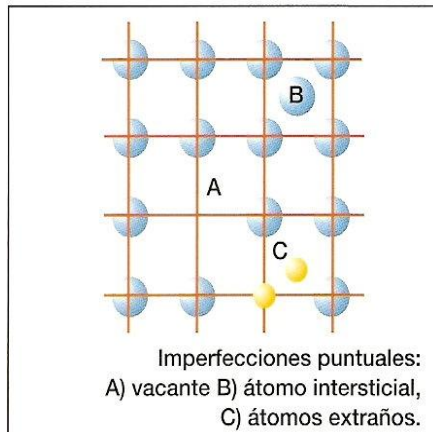
(d)

DEFECTOS DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA



- **DEFECTOS TÉRMICOS:** Dilatación térmica por vibración.
- **DEFECTOS ELECTRÓNICOS:** Impurezas atómicas.
 - **MATERIALES SEMICONDUCTORES**
- **DEFECTOS ATÓMICOS:** Fallos en la estructura cristalina
 - **PUNTUALES, LINEALES O SUPERFICIALES**

DEFECTOS ATÓMICOS PUNTUALES



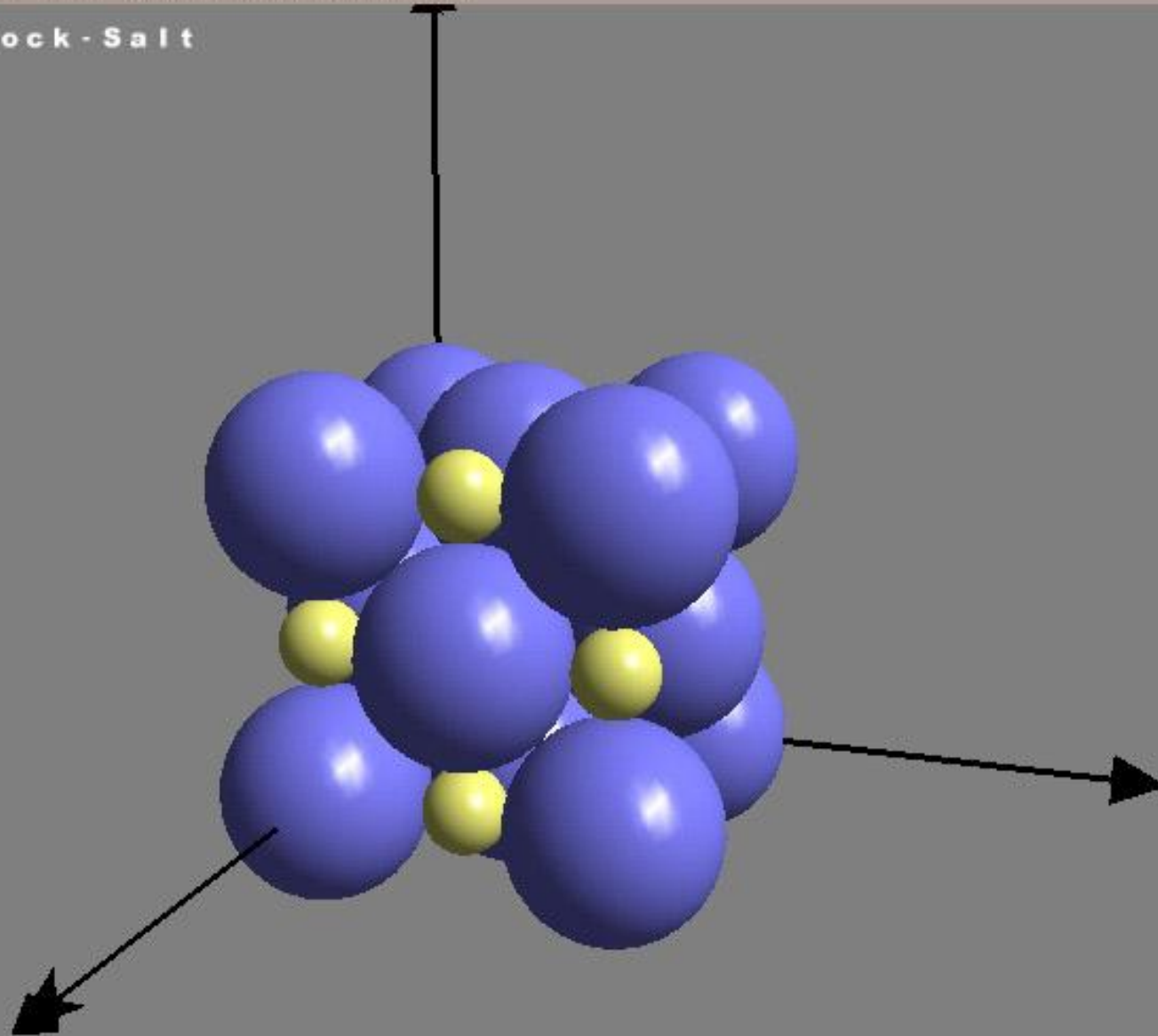
**CAUSAN LOS EFECTOS DE
DIFUSIÓN.**

- **ATÓMOS INTERSTICIALES:** Átomo en un intersticio. Espontáneo. La concentración sube con T.
- **LUGARES VACANTES:** En los que no hay átomos
- **ÁTOMO EXTRAÑOS:** Átomos diferentes que se sitúan en los puntos reticulares o en los huecos. Espontáneo. La concentración sube con T.

Structure: Rock-Salt

DEMO

x=15.0
y=-20.0
z=0.0

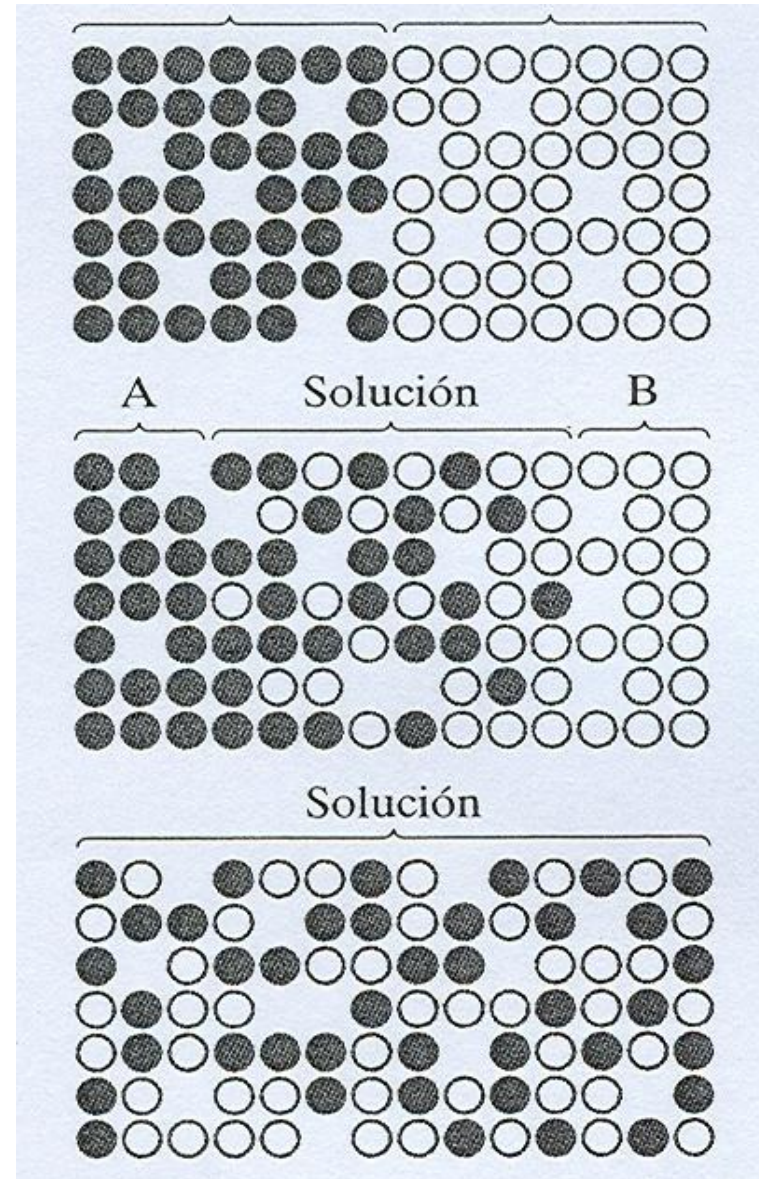


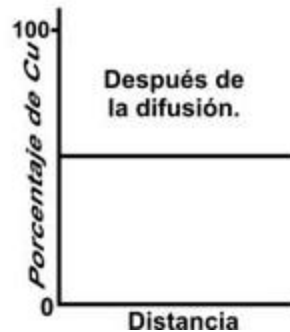
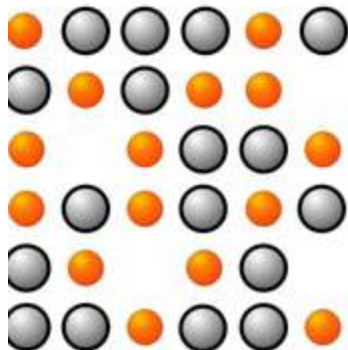
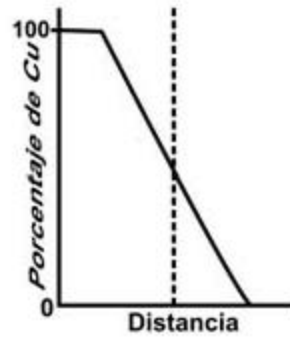
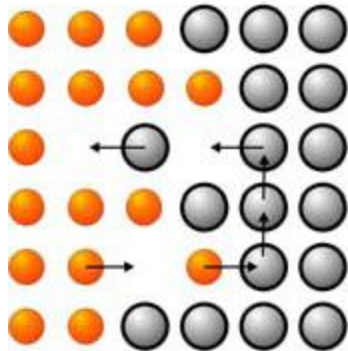
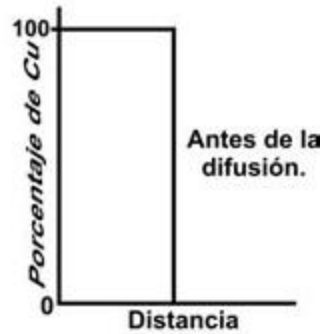
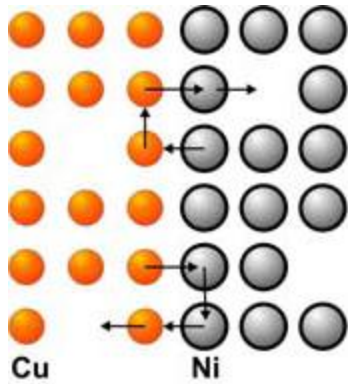
Radius 1 = 1.000 A
Radius 2 = 0.400 A

DEMO

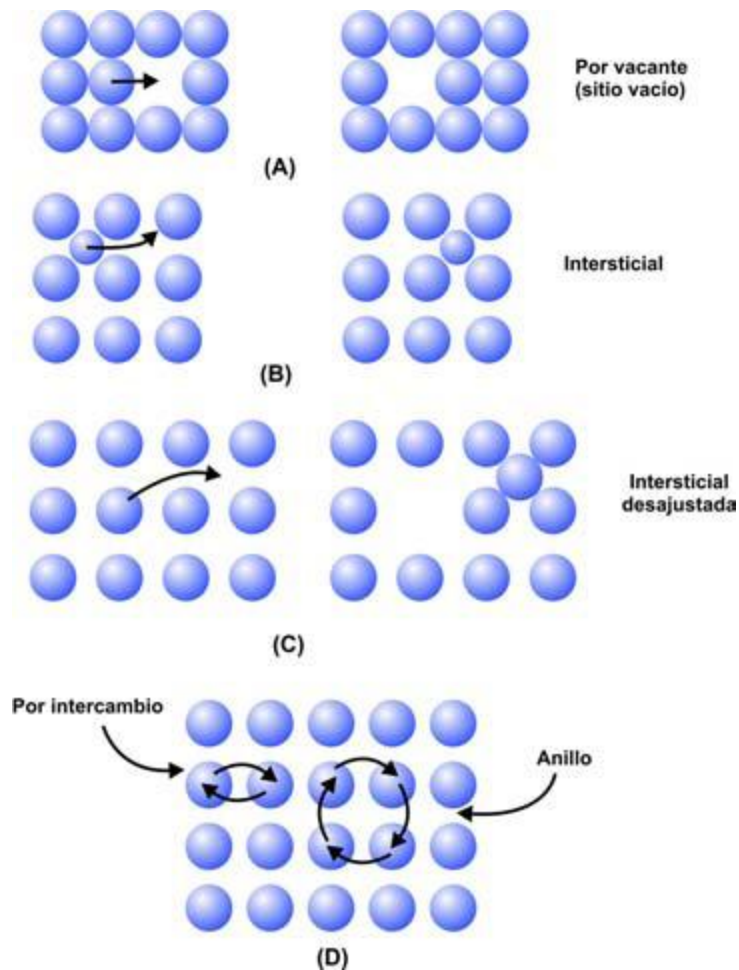
Difusión de átomos en estructuras cristalinas

Figura 5.7. Interdifusión de los materiales A y B. Aunque cualquier átomo de A o B tiene la misma probabilidad de moverse en cualquier dirección aleatoria (véase la Figura 5.6), los gradientes de concentración de los dos materiales pueden producir un flujo neto de átomos de A hacia el interior de B, y viceversa. (De W. D. Kingery, H. K. Bowen y D. R. Uhlmann, *Introduction to Ceramics*, 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc., NY, 1976.)



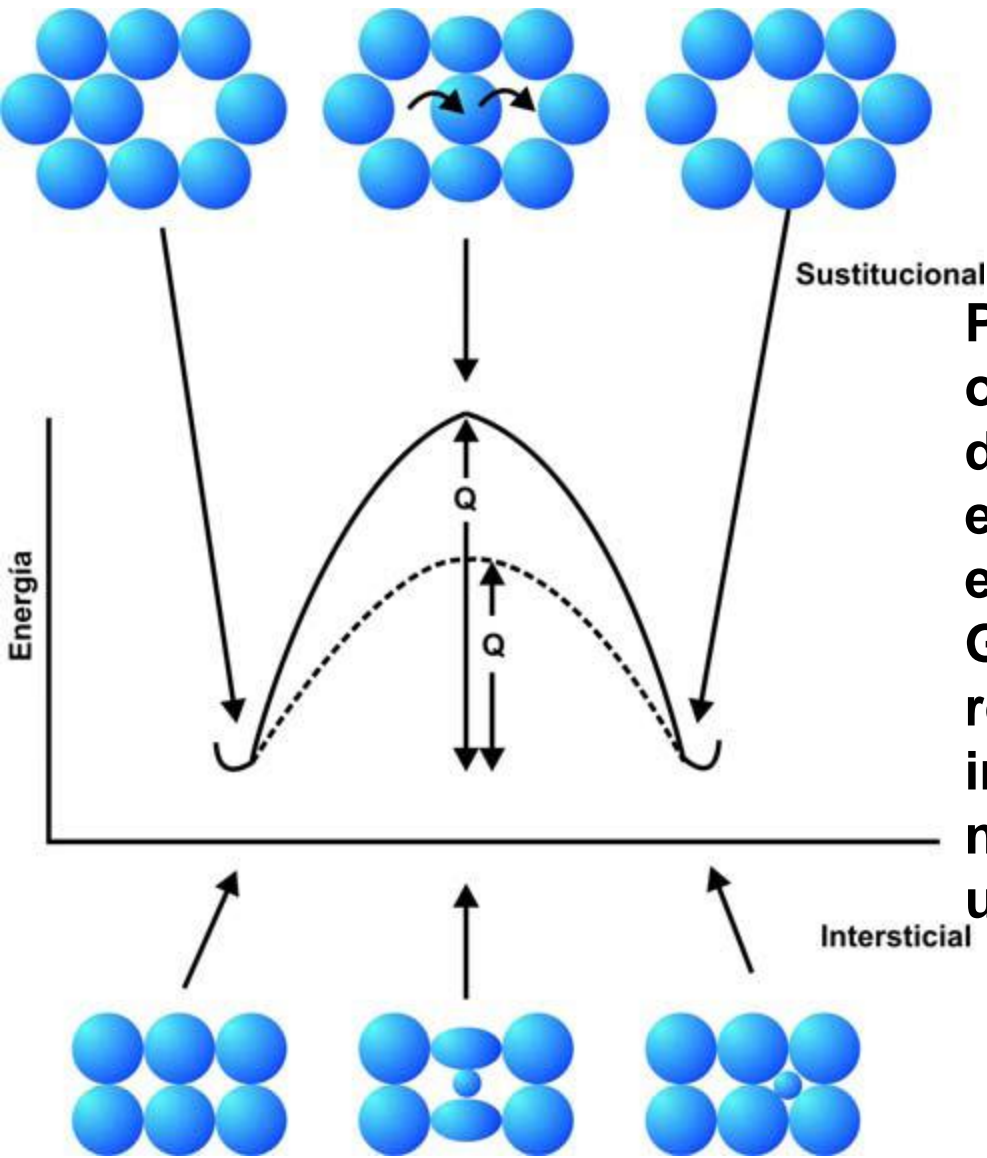


Difusión de los átomos de cobre en el níquel. Al final, los átomos de cobre están uniformemente distribuidos en todo el níquel.

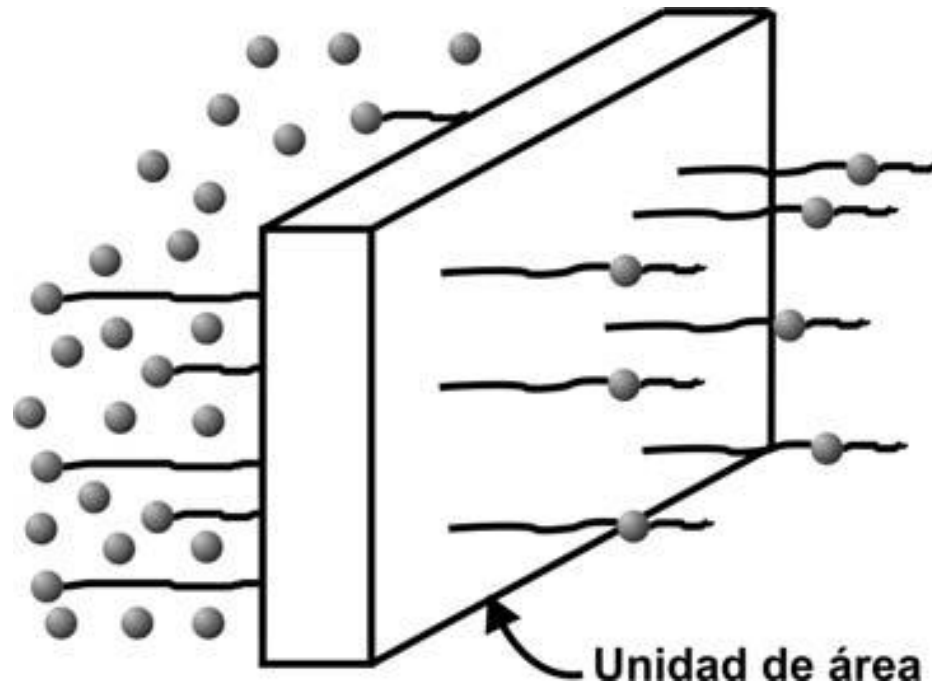


Mecanismos de difusión en los materiales.

- (A) Difusión por vacantes o por sustitución de átomos,**
- (B) difusión intersticial,**
- (C) difusión intersticial desajustada,**
- (D) difusión por intercambio y en círculo.**



**Puesto que los átomos son forzados o deformados al pasar entre otros durante la difusión, se requiere una energía alta. Esta cantidad es la energía de activación Q .
Generalmente el átomo sustitucional requiere mayor energía que el intersticial. Normalmente se necesita menos energía para forzar un átomo intersticial**



La densidad de flujo durante la difusión se define como el número de átomos que pasan a través de un plano de área unitaria por unidad de tiempo.

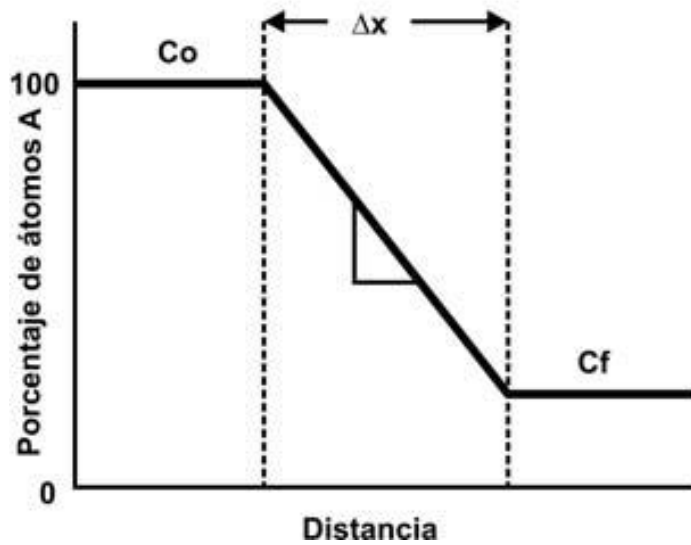
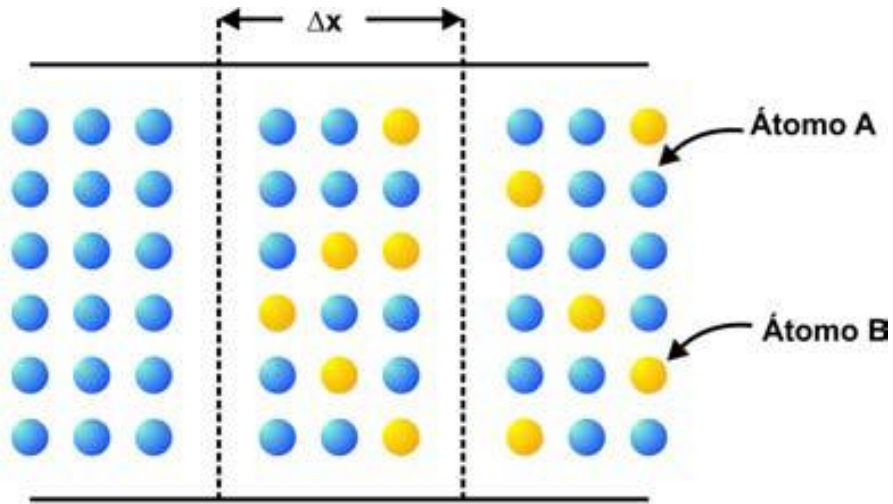
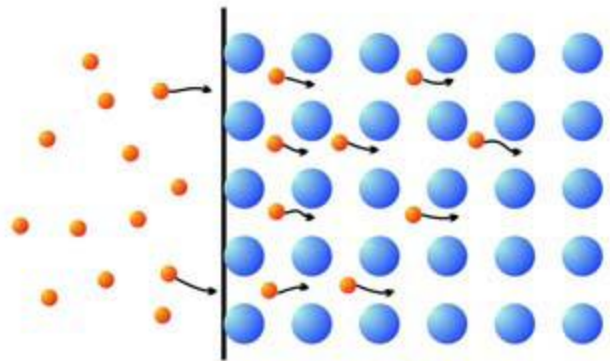
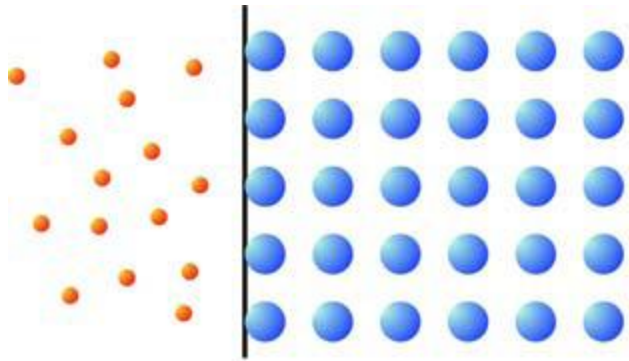
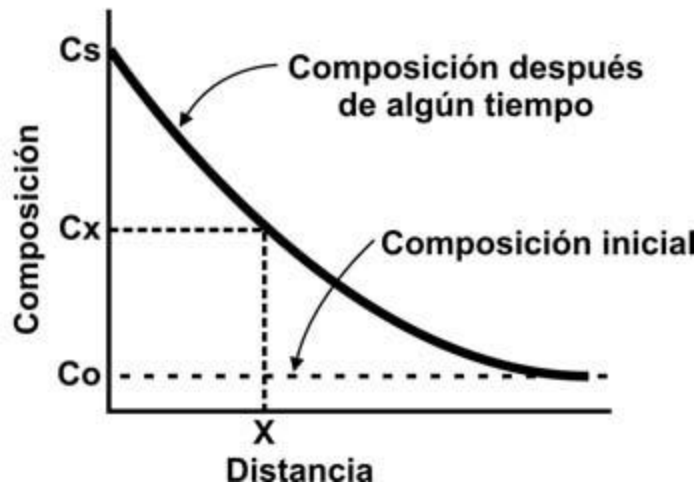
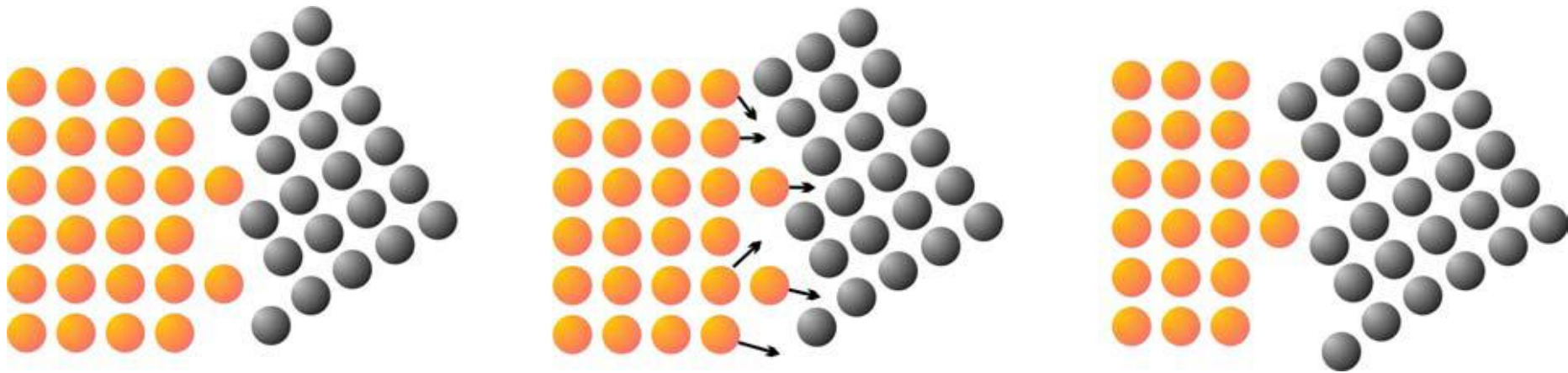
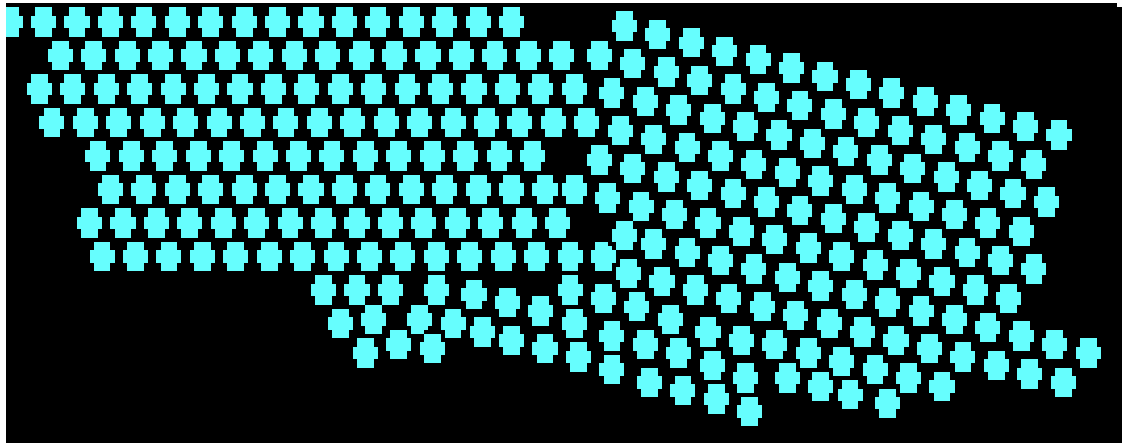


Ilustración del gradiente de concentración.

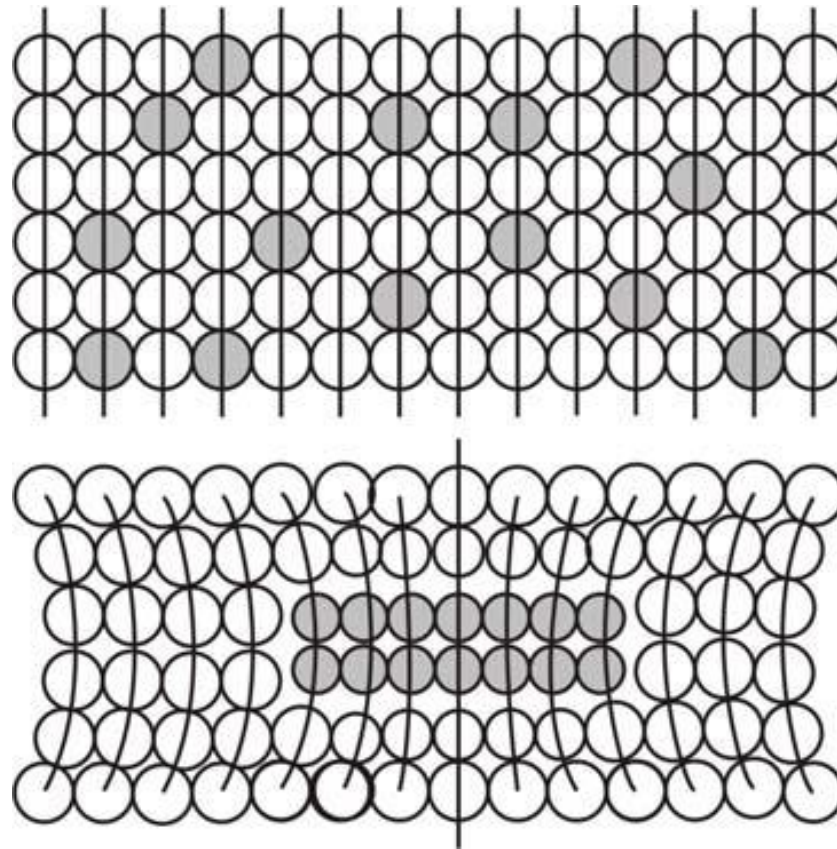


Difusión de los átomos en la superficie de un material, lo que representa la aplicación de la segunda ley de Fick.





El crecimiento de grano ocurre cuando los átomos se difunden a través del límite granular de un grano a otro.



Coherencia. La figura superior representa una solución sólida sobresaturada de átomos B (círculos oscuros) en una matriz de átomos A (círculos claros). La figura inferior muestra una partícula de precipitado coherente formada por la agrupación de átomos B.

Difusión de átomos

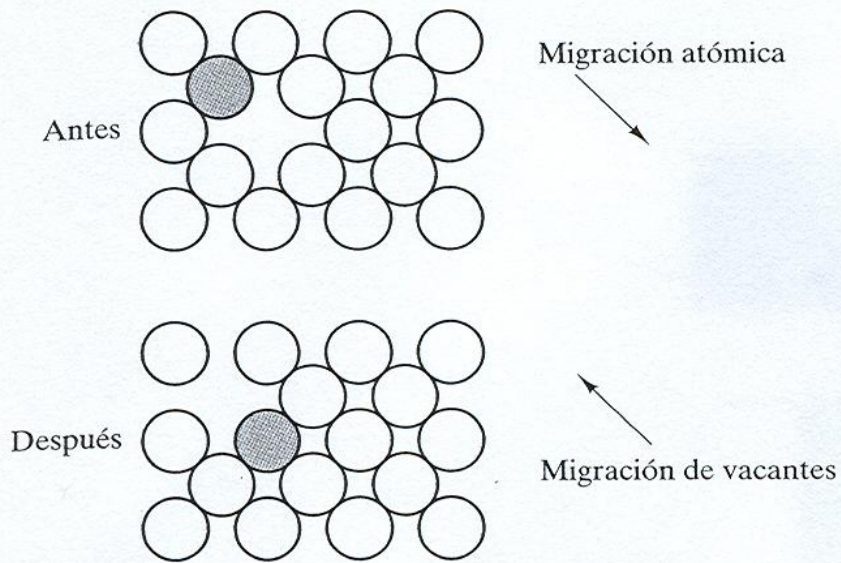


Figura 5.5. La migración atómica se produce por un mecanismo de migración de vacantes. Obsérvese que la dirección del flujo global del material (el átomo) es opuesta a la dirección del flujo de vacantes.

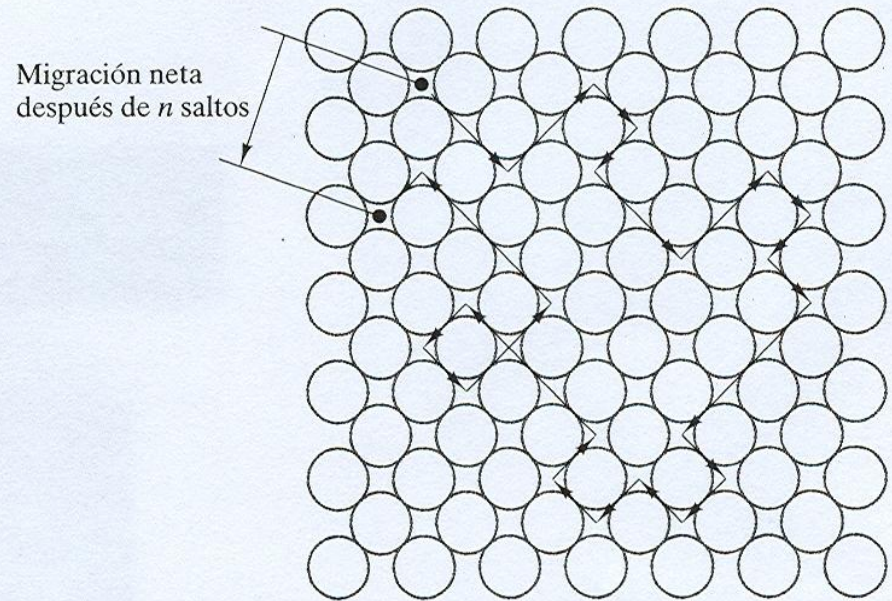
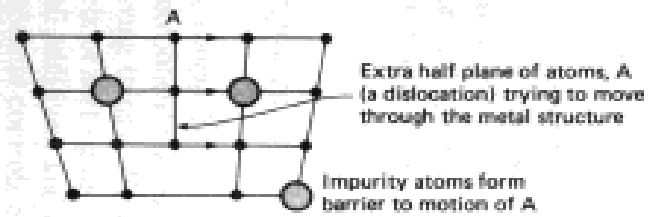
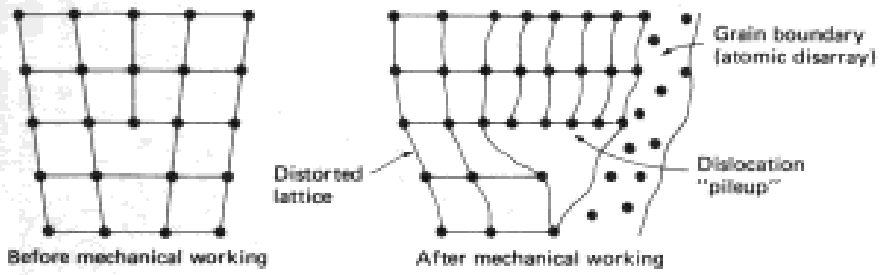


Figura 5.6. Difusión por un mecanismo intersticial, donde se ve la naturaleza aleatoria del movimiento de migración atómico.

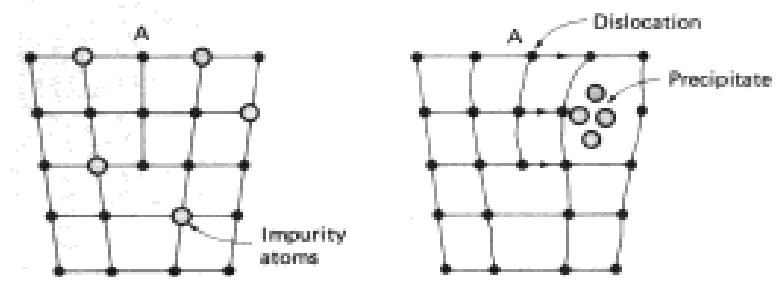
Defectos puntuales en la estructura cristalina de un metal



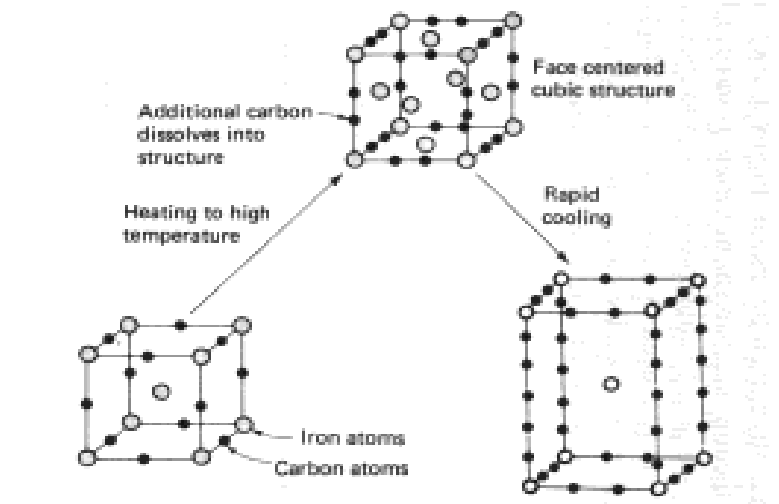
(a) Solid solution strengthening



(b) Mechanical working

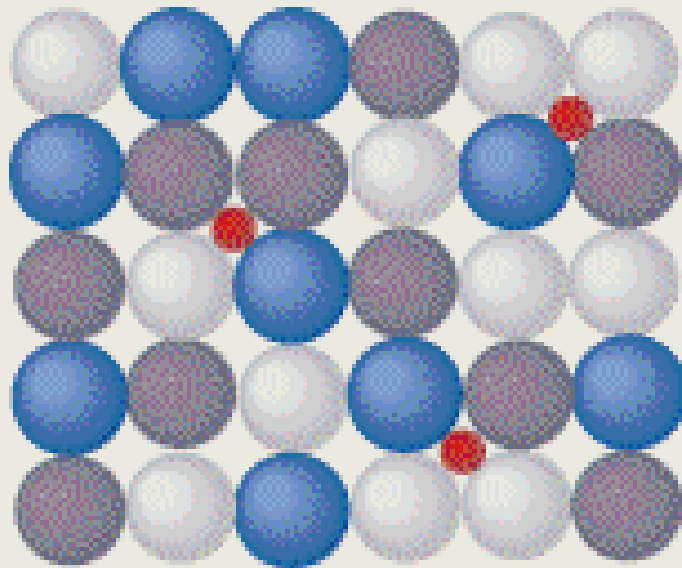


(c) Precipitation hardening

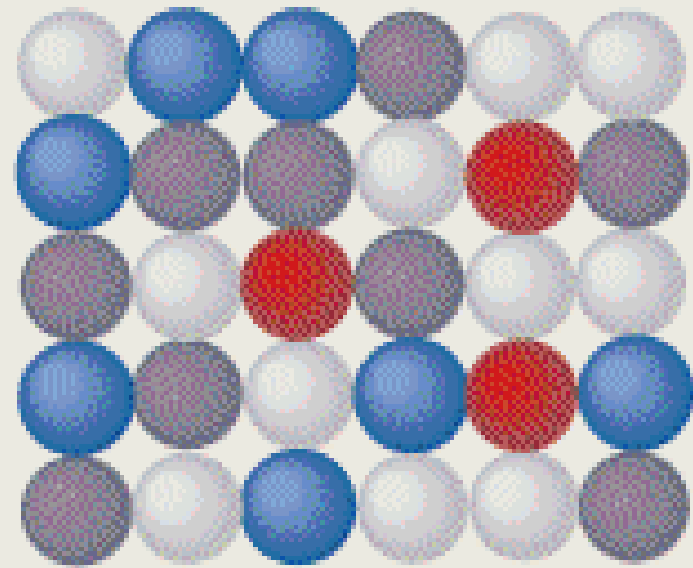


(d) Quench hardening

SOLUCIONES SÓLIDAS



Intersticial



De sustitución

Defectos de planos

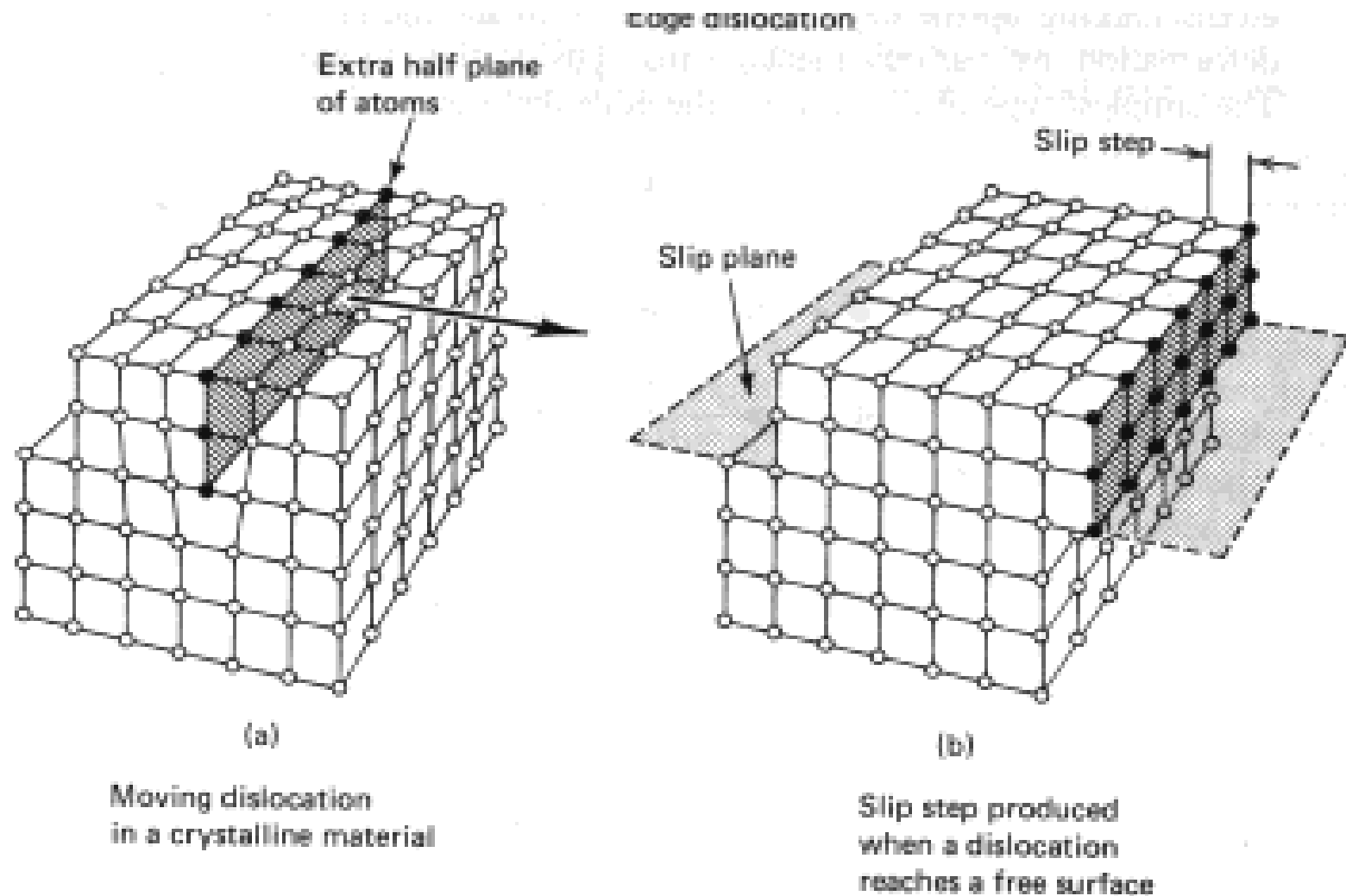


Figure 1-9 Slip produced by movement of an edge dislocation.

IMPERFECCIONES LINEALES: DISLOCACIONES

DISLOCACIÓN.- Imperfección lineal alrededor de la cual los átomos del cristal están desalineados

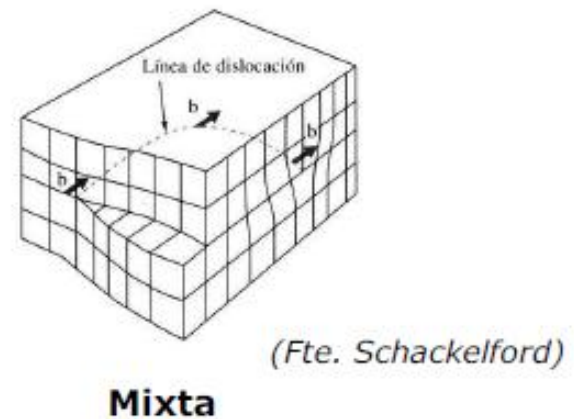
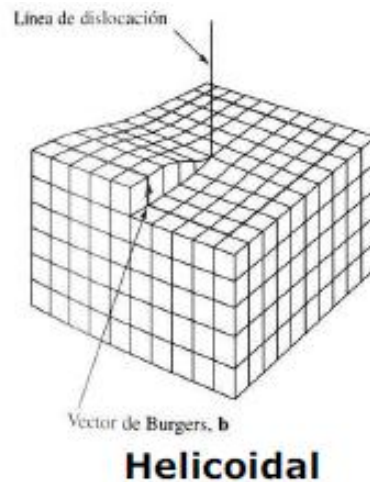
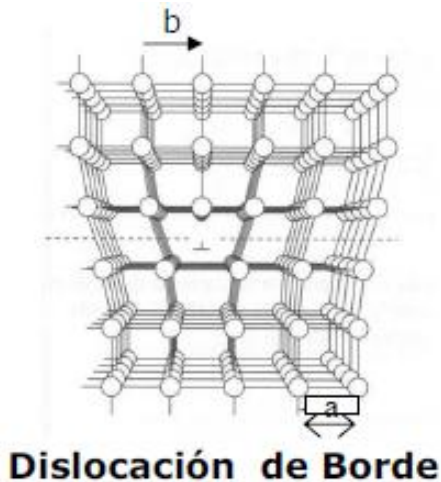
DE ARISTA (borde, cuña, línea)

Semiplano de átomos cuya arista (borde) termina dentro del cristal.

HELICOIDAL

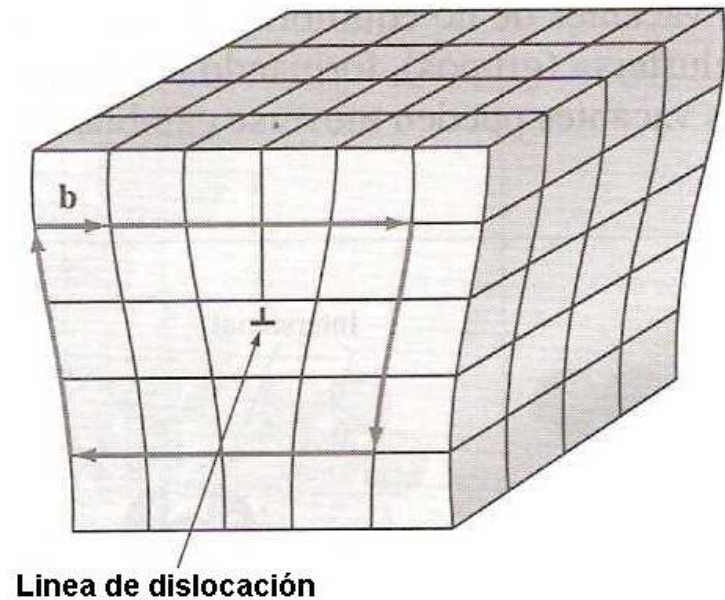
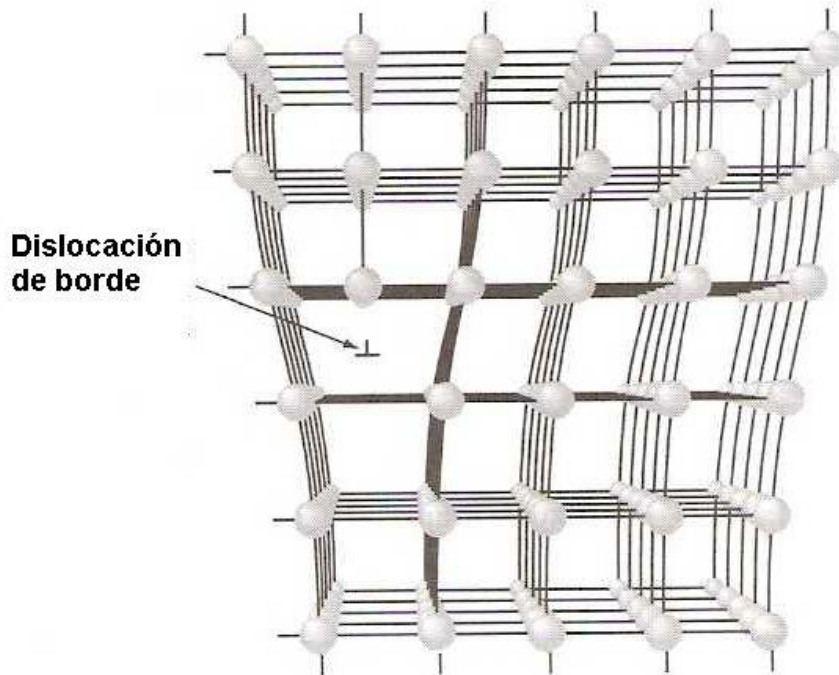
Apilación de planos en espiral a lo largo de la línea de dislocación.

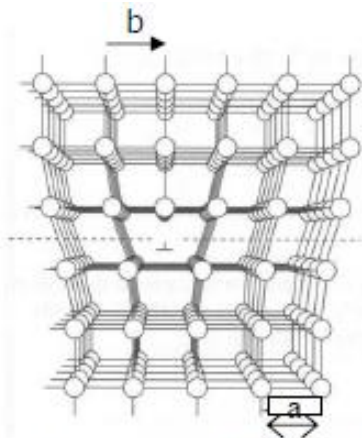
MIXTAS De carácter doble: arista y helicoidal



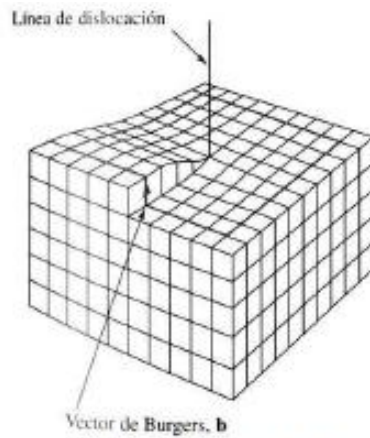
Dislocación de borde

Una dislocación de borde se crea en un cristal por la intersección de un semiplano extra de átomos





Dislocación de Borde

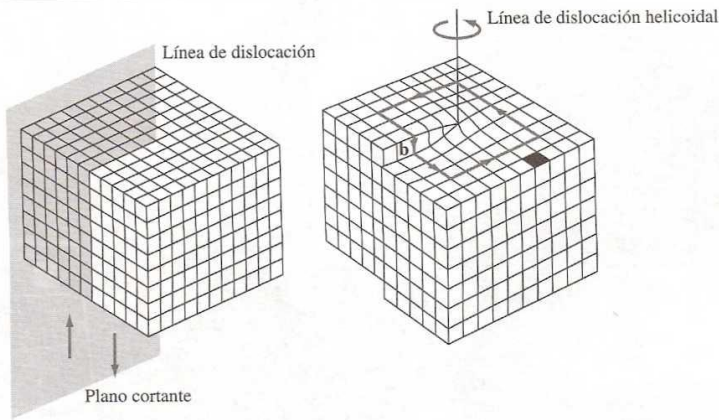


Helicoidal

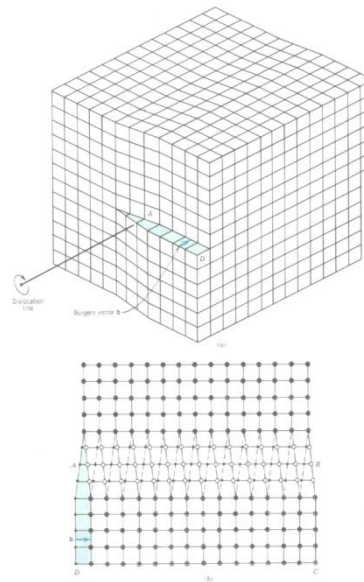


Mixta

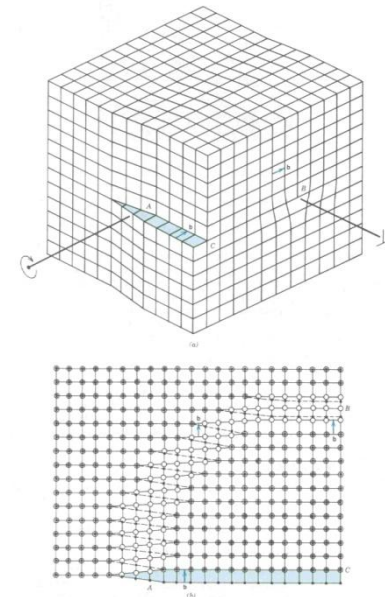
(Fte. Schackelford)



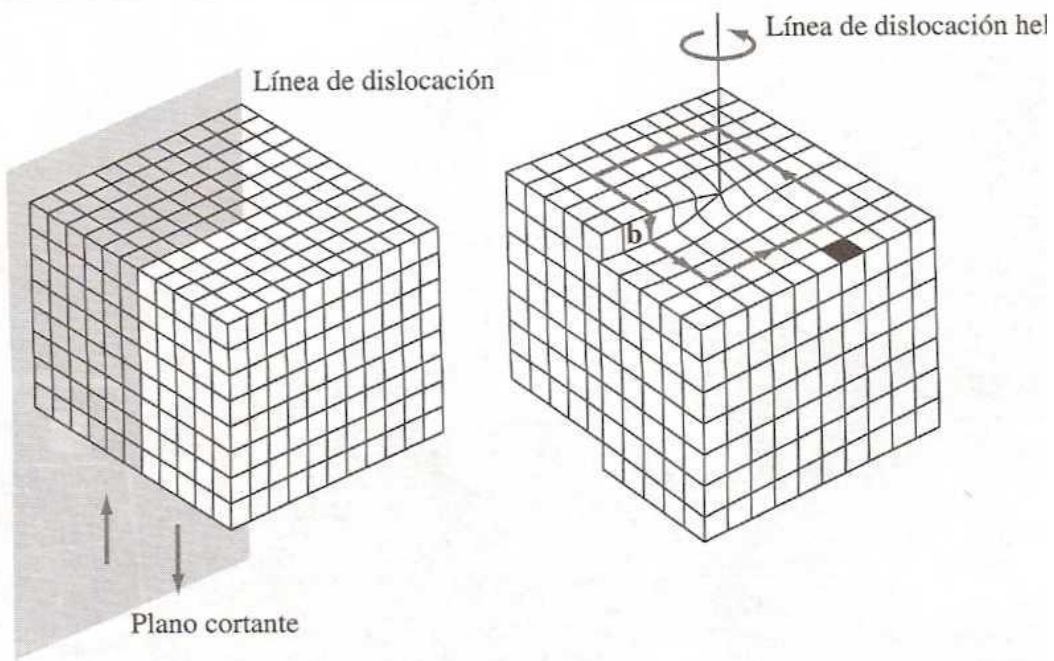
Formación de una dislocación helicoidal



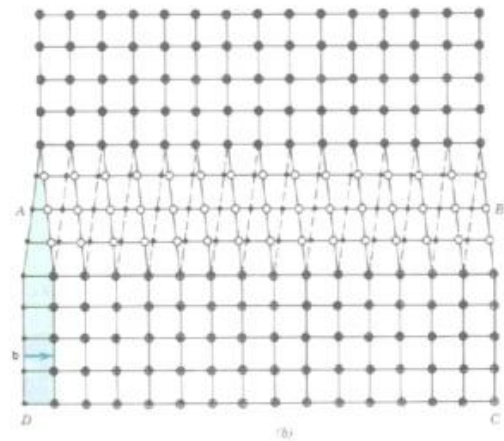
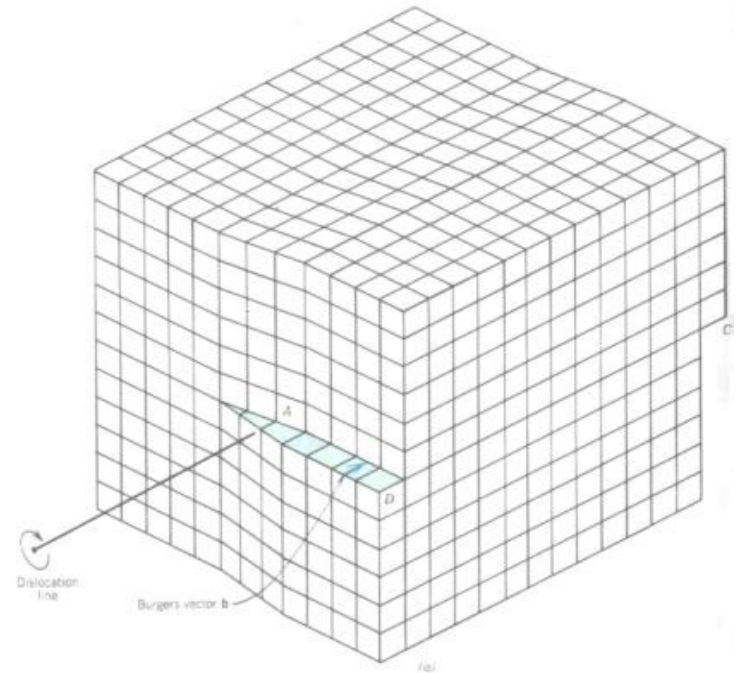
Dislocación de tornillo



Dislocación mixta

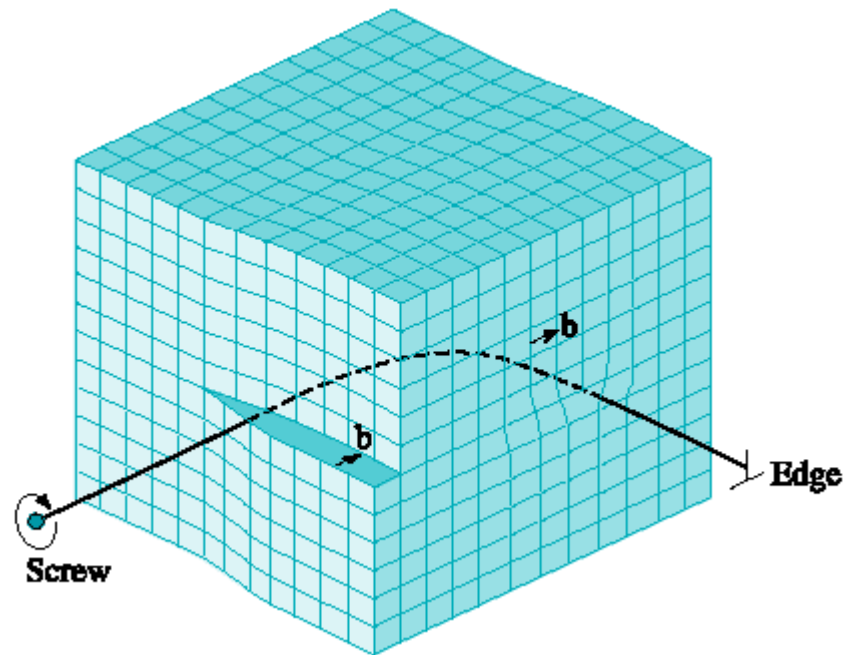


**deformación de una
dislocación**



**deformación de
una dislocación**

Dislocación mixta
Tiene componentes de borde y de tornillo.
La línea de dislocación es una curva plana



*Dislocación mixta: La dislocación de tornillo en la cara frontal del cristal
Cambia en forma gradual a dislocación de borde al lado del cristal*