

Unidad 2:

ESTRUCTURAS CRISTALINAS

ESTRUCTURAS CRISTALINAS



GRAFITO



DIAMANTE

PROPIEDADES

Blando, opaco,
oscuro, lubricante,
buen conductor

Muy duro,
transparente,
abrasivo, aislante

COMPOSICIÓN

Carbono

Carbono

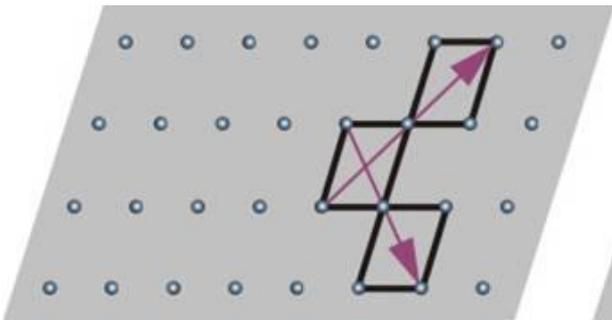
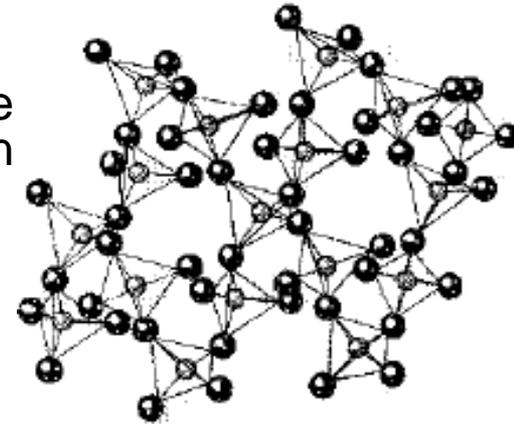
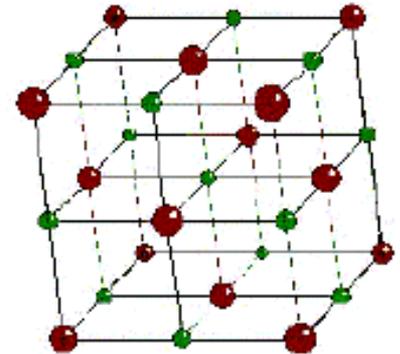
Igual composición y propiedades antagónicas ¿Por qué?

Distinta ESTRUCTURA CRISTALINA

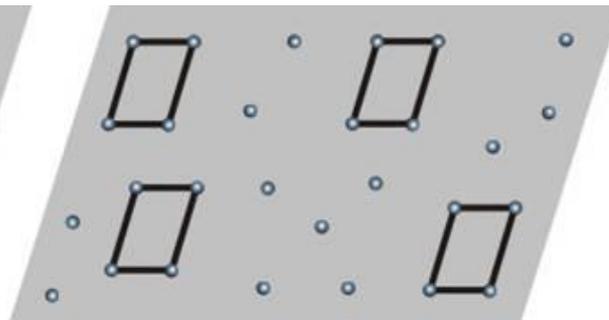
Sólidos cristalinos y amorfos

Según la distribución espacial de los átomos, moléculas o iones, los materiales sólidos pueden ser clasificados en:

- ✓ **Cristalinos:** compuestos por átomos, moléculas o iones organizados de una forma periódica en tres dimensiones. Las posiciones ocupadas siguen una ordenación que se repite para grandes distancias atómicas (de largo alcance).
- ✓ **Amorfos:** compuestos por átomos, moléculas o iones que no presentan una ordenación de largo alcance. Pueden presentar ordenación de corto alcance.



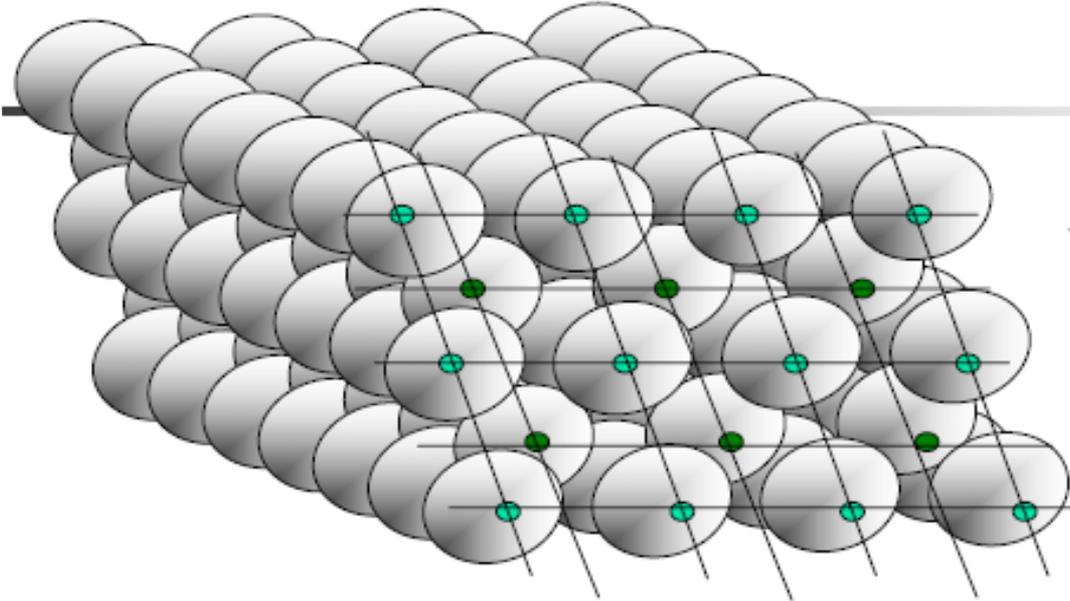
Orden de largo alcance



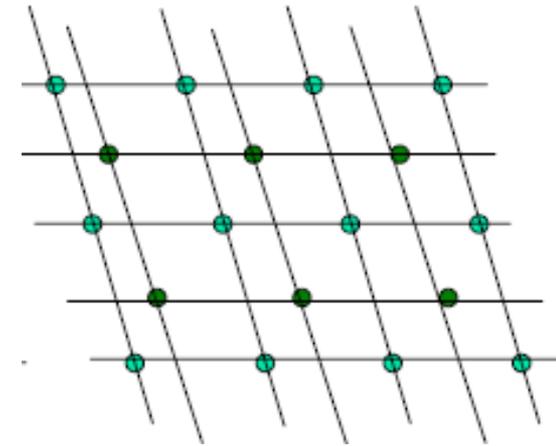
Orden de corto alcance: el orden sólo se restringe a ciertas zonas.

Los puntos pueden representar un átomo, una molécula o un grupo de átomos o moléculas.

Reticulado cristalino



Sólido cristalino en el cual los átomos son representados por esferas rígidas

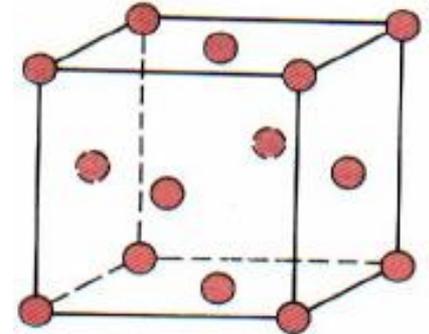
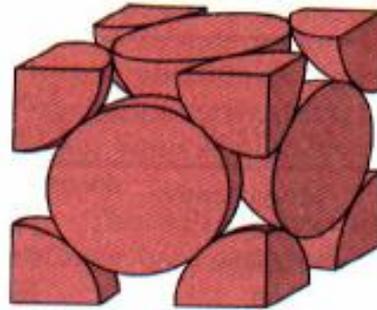
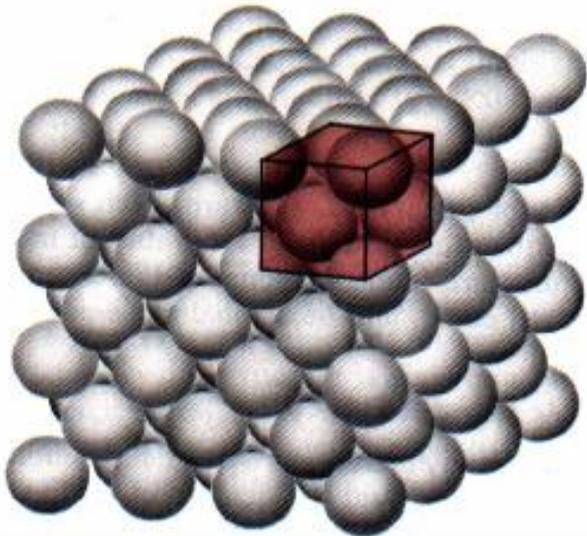


Reticulado cristalino

Reticulado Cristalino: El ordenamiento atómico en sólidos cristalinos puede representarse asimilando los átomos a los puntos de intersección de una red de líneas en tres dimensiones. Cada punto tiene los mismos vecinos.

Celda unitaria

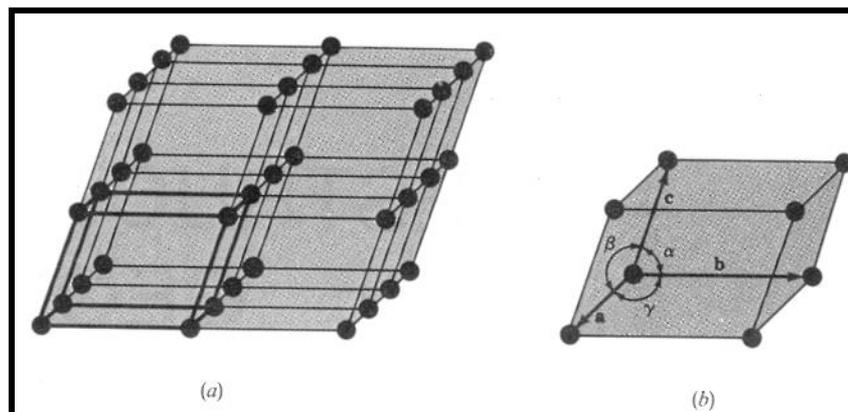
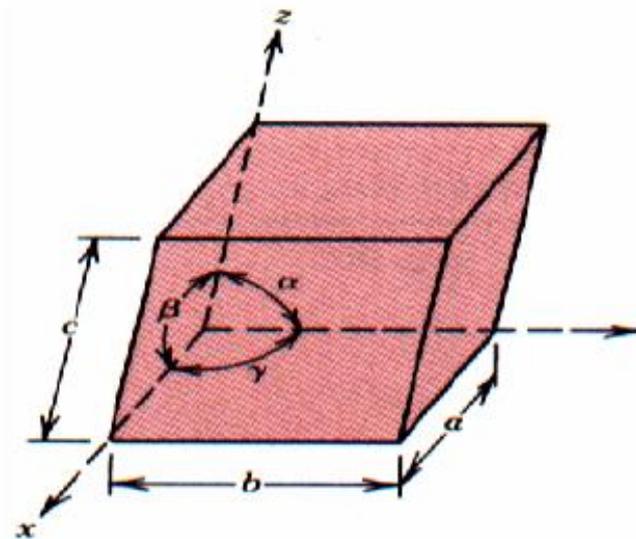
Celda unitaria: Es el menor grupo de átomos representativo de una determinada estructura cristalina.



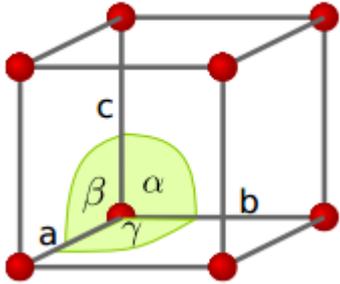
El concepto de celda unitaria es usado para representar la simetría de una determinada estructura cristalina.

Parámetros de red

- Geométricamente una celda unitaria puede ser representada por un **paralelepípedo**.
- La geometría de la celda unitaria es descrita en términos de seis parámetros: La **longitud de las tres aristas** del paralelepípedo (a , b y c) y **los tres ángulos entre las aristas** (α , β y γ). Esos parámetros son llamados **parámetros de red** o **constantes reticulares**.



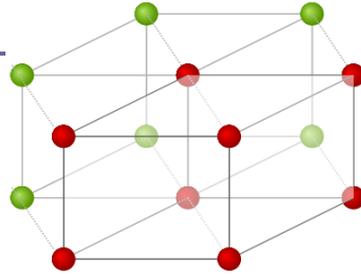
SISTEMAS CRISTALINOS



CÚBICO

$$a=b=c$$

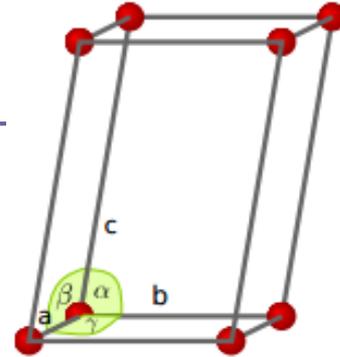
$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$



HEXAGONAL

$$a=b\neq c$$

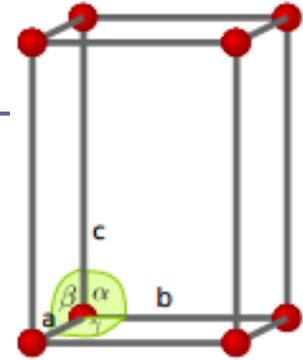
$$\alpha=\beta=90^\circ \quad \gamma=120^\circ$$



MONOCLÍNICO

$$a\neq b\neq c$$

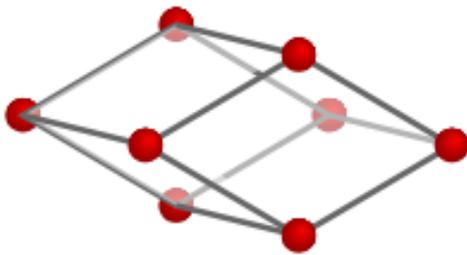
$$\alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$$



ORTORROMBICO

$$a\neq b\neq c$$

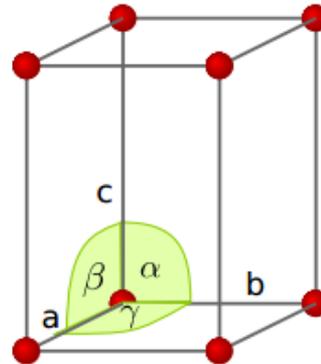
$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$



ROMBOÈDRICO

$$a=b=c$$

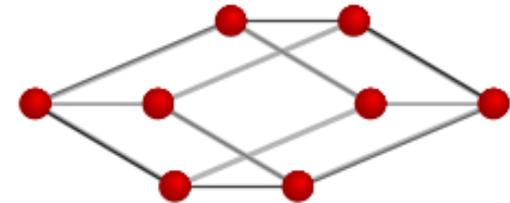
$$\alpha=\beta=\gamma\neq 90^\circ$$



TETRAGONAL

$$a=b\neq c$$

$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

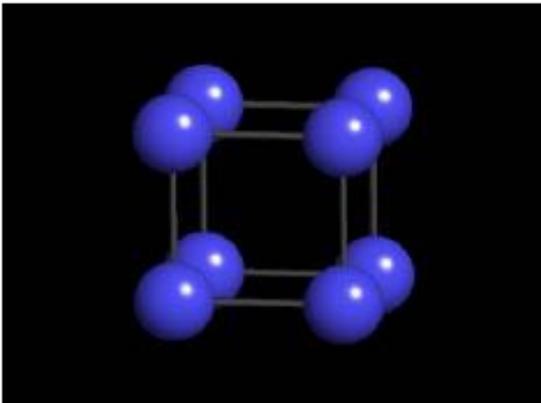


TRICLÍNICO

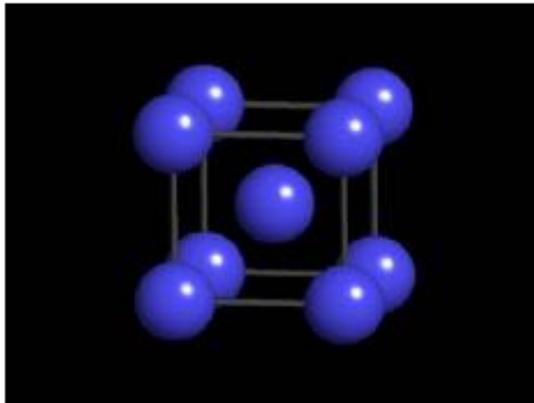
$$a\neq b\neq c$$

$$\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq 90^\circ$$

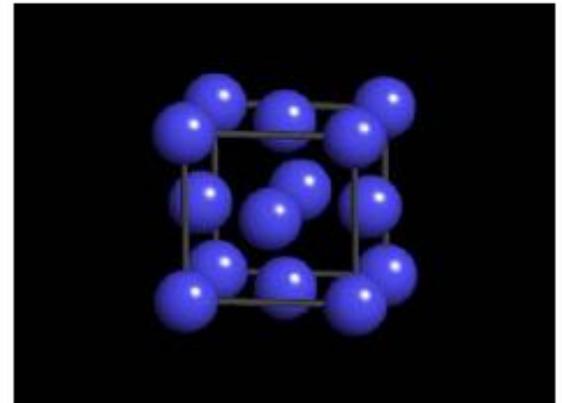
Sistema Cúbico



Cúbico simple



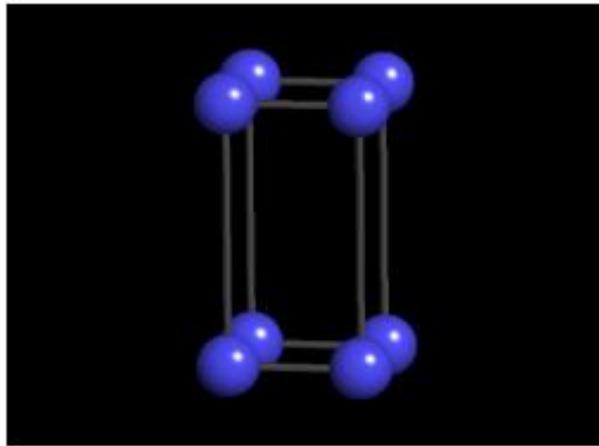
*Cúbico de cuerpo
centrado (CCC)*
(BCC)



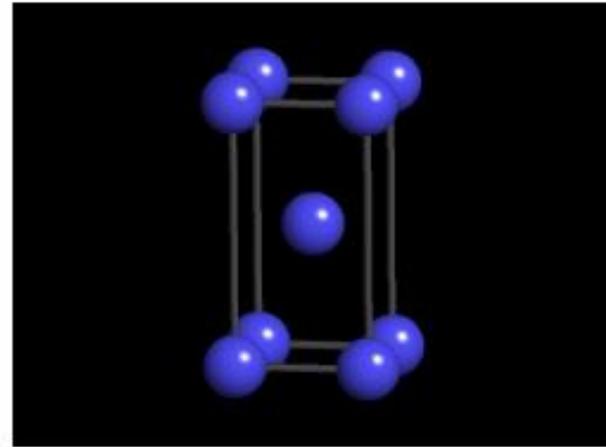
*Cúbico de cara
centradas (CFC)*
(FCC)

$$a = b = c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90$$

Sistema Tetragonal



Tetragonal simple



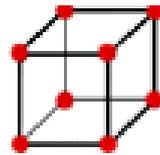
*Tetragonal de
cuerpo centrado*

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = \gamma = 90$$

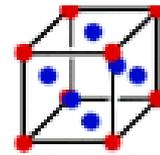
Sistemas Cristalinos – Redes de Bravais

Celdas unitarias de Bravais

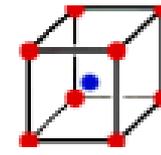
- Todos los sólidos cristalinos presentan estructuras que pueden identificarse con alguna de las **14 celdas** básicas de Bravais



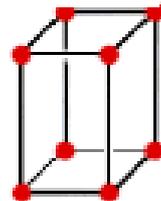
Cúbica Simple



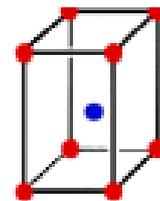
Cúbica de Caras Centradas



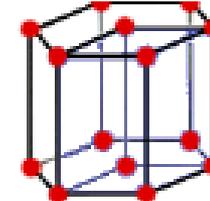
Cúbica Centrada en el Cuerpo



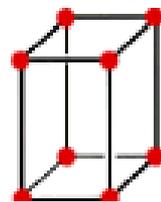
Tetragonal Simple



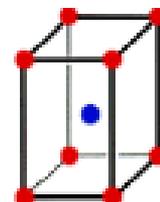
Tetragonal Centrada en el Cuerpo



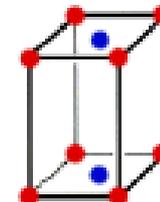
Hexagonal



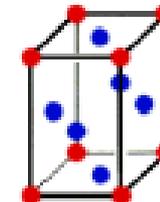
Ortorrómbica Simple



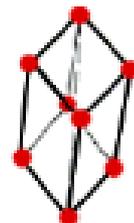
Ortorrómbica Centrada en el Cuerpo



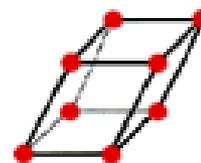
Ortorrómbica Centrada en las Bases



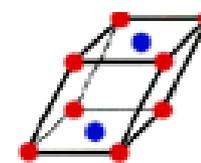
Ortorrómbica Centrada en las Caras



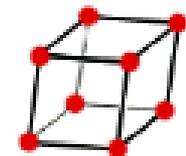
Romboédrica



Monoclínica Simple



Monoclínica Centrada en las Bases



Triclínica

Sistemas Cristalinos – Redes de Bravais

Sistema cristalino	Longitudes axiales y ángulos interaxiales	Redes espaciales
Cúbico	Tres ejes iguales en ángulos rectos $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Cúbico sencillo Cúbico centrado en el cuerpo Cúbico centrado en las caras
Tetragonal	Tres ejes en ángulos rectos, dos iguales $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Tetragonal sencillo Tetragonal centrado en el cuerpo
Ortorrómbico	Tres ejes distintos en ángulos rectos $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Ortorrómbico sencillo Ortorrómbico centrado en el cuerpo Ortorrómbico centrado en las bases Ortorrómbico centrado en las caras
Romboédrico	Tres ejes iguales, inclinados por igual $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Romboédrico sencillo
Hexagonal	Dos ejes iguales a 120° y un tercero en ángulo recto $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Hexagonal sencillo
Monoclínico	Tres ejes distintos, dos de ellos no forman ángulo recto $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	Monoclínico sencillo Monoclínico centrado en las bases
Triclínico	Tres ejes desiguales con distinta inclinación y ninguno en ángulo recto $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Triclínico sencillo

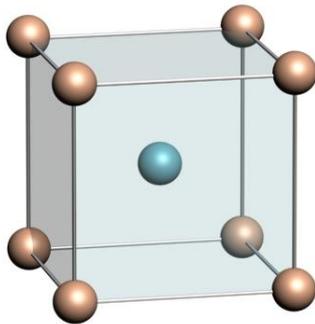
Principales Estructuras Cristalinas Metálicas

La mayoría de los elementos metálicos cristaliza siguiendo tres tipos de estructuras:

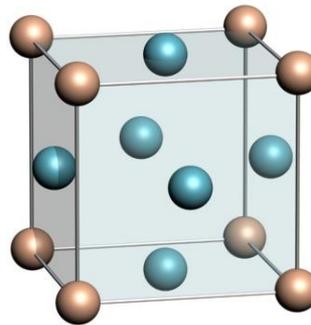
Cubica Centrada en el Cuerpo – BCC (Body-Centered Cubic)

Cubica Centrada en las Caras – FCC (Face-Centered Cubic)

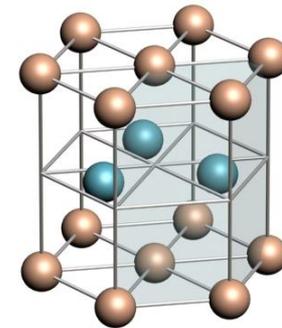
Hexagonal Compacta – HCP (Hexagonal Close-Packed)



BCC

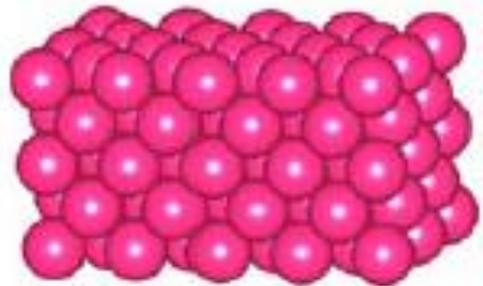
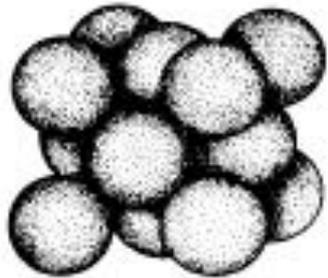
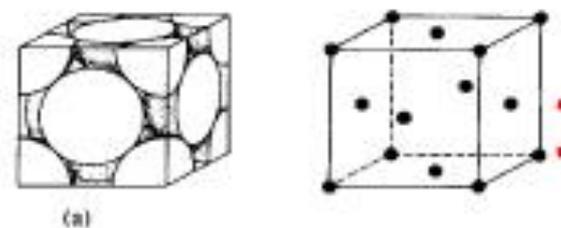
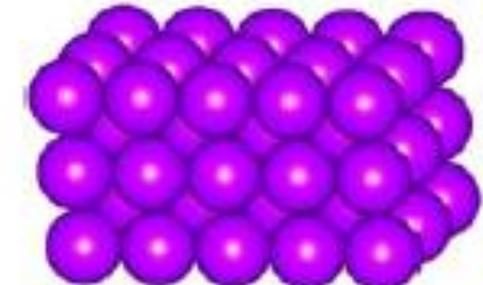
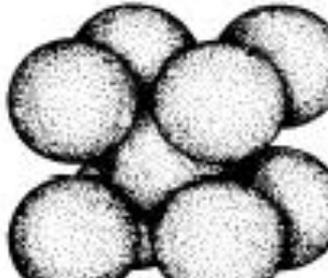
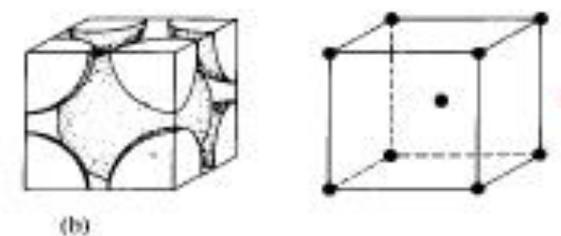
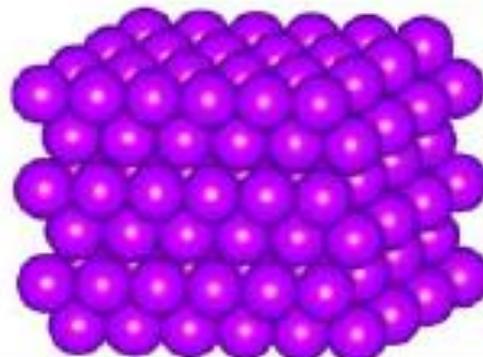
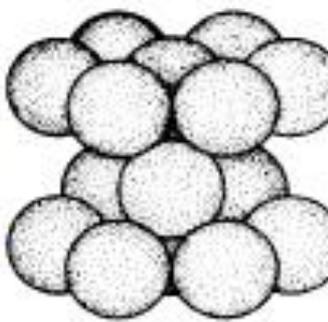
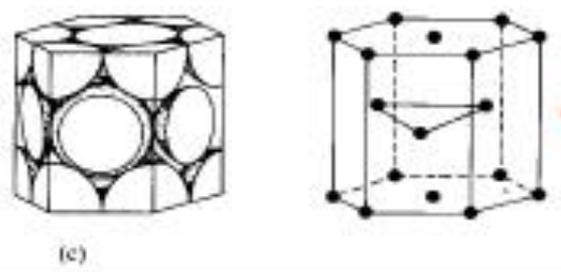


FCC

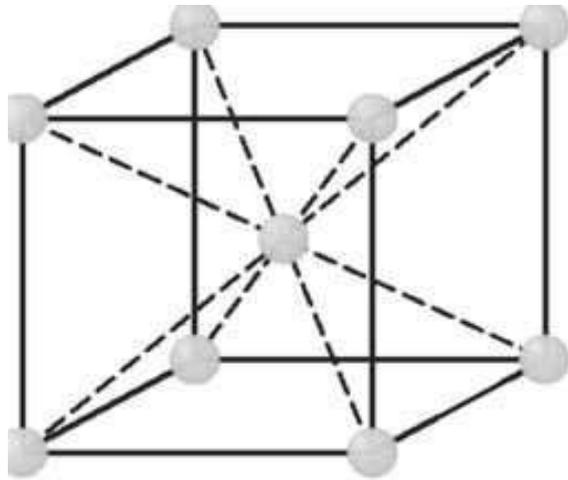


HCP

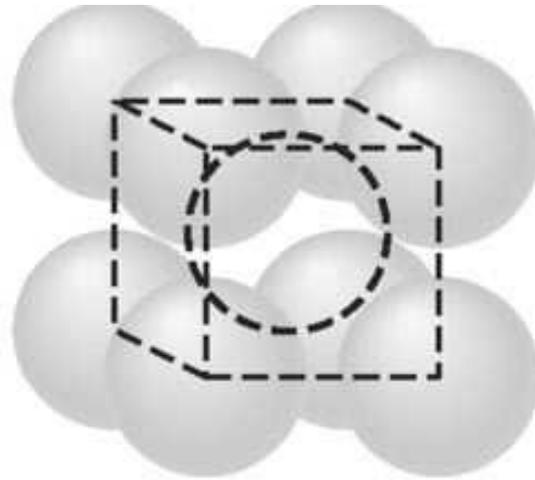
Principales Estructuras Cristalinas Metálicas

<i>Tipo de estructura</i>	<i>Red Cristalina</i>	<i>Celda Unitaria</i>	
Cúbica Centrada en las Caras (FCC)			 (a) (b)
Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC)			 (a) (b)
Hexagonal Compacta (HCP)			 (a) (b)

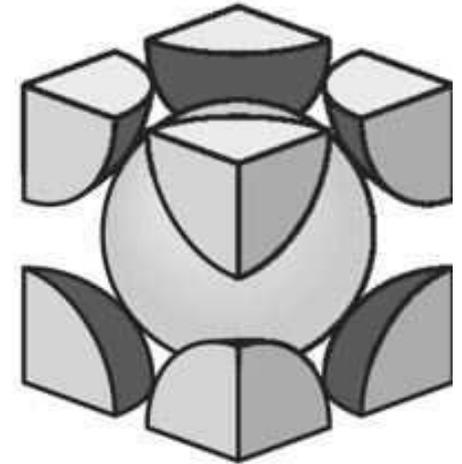
Estructura Cristalina Cúbica de Cuerpo Centrado - BCC



a)



b)



c)

Celdas unitarias BCC: a) de posiciones atómicas, b) de esferas rígidas y c) aislada.

Estructura Cristalina Cúbica de Cuerpo Centrado - BCC

Metales que presentan estructura BCC

Metal	Constante de red a (nm)	Radio atómico R^* (nm)
Cromo	0.289	0.125
Hierro	0.287	0.124
Molibdeno	0.315	0.136
Potasio	0.533	0.231
Sodio	0.429	0.186
Tántalo	0.330	0.143
Volframio	0.316	0.137
Vanadio	0.304	0.132

*Calculado a partir de la constante de red utilizando la ecuación (3.1), $R = \sqrt{3}a/4$.

3,48 millones de celdas unidad en un mm !!!!

Características de la Estructura BCC

Número de átomos por celda

Para una celda cúbica, este número puede calcularse mediante la expresión siguiente:

$$n = 1/8 n_v + 1/2 n_c + n_i$$

Siendo:

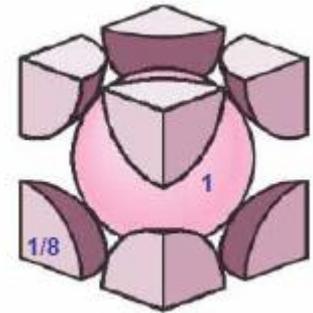
n_v : número de átomos en los vértices

n_c : número de átomos en las caras

n_i : número de átomos internos

$$n = 1/8 * 8 + 0 + 1$$

$$n=2$$



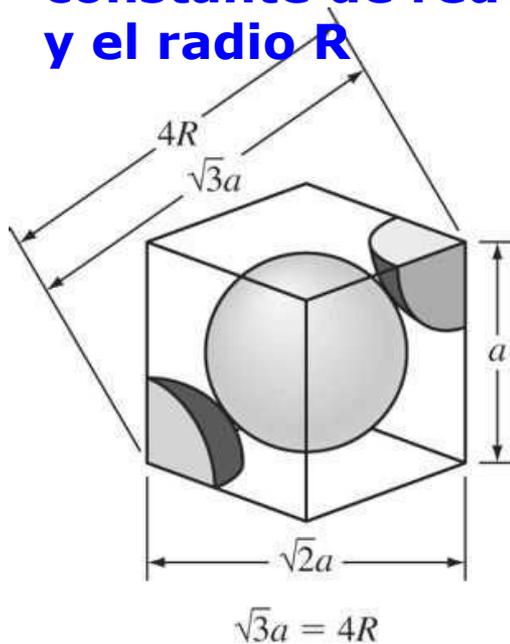
Número de coordinación

El número de coordinación es el **número de vecinos más próximos que rodean a un átomo dado**

$$N=8$$

Características de la Estructura BCC

Relación entre la constante de red a y el radio R



Compacidad o factor de empaquetamiento atómico

El Factor de empaquetamiento atómico (FEA) es la **fracción de espacio ocupado en la celdilla**. Matemáticamente:

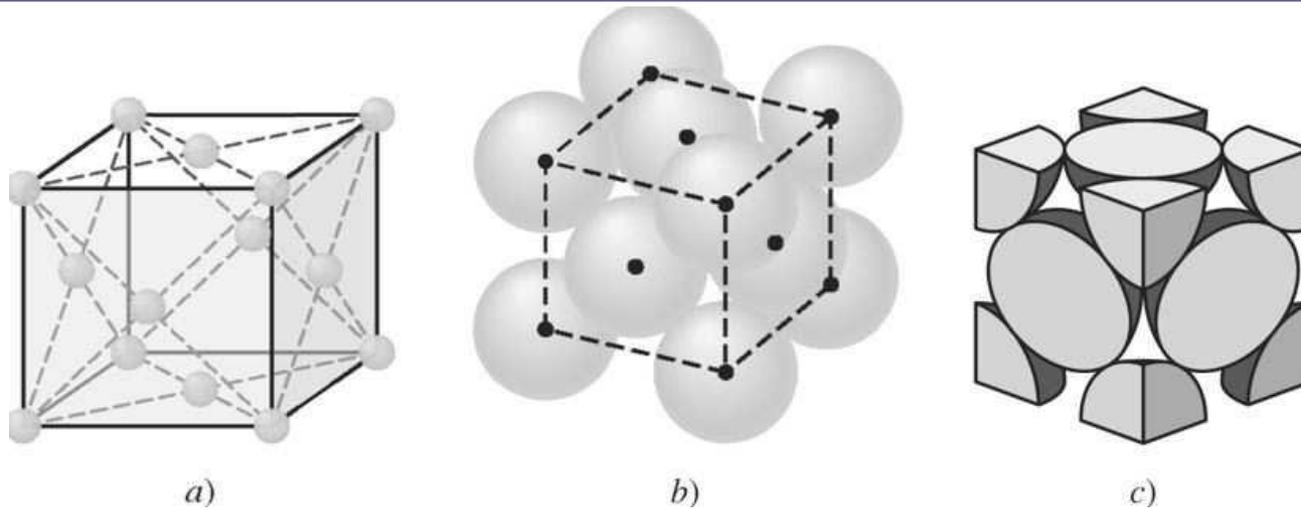
$$\text{FEA} = \frac{\text{Volumen ocupados por los átomos}}{\text{Volumen de la celdilla}}$$

$$\text{FEA} = \frac{2 \times \frac{4}{3} \pi R^3}{a^3}$$

$$\text{FEA} = 0,68$$

Video [BBC](#)

Estructura cristalina cúbica centrada en las caras - FCC



Celdas unitarias FCC: a) de posiciones atómicas, b) de esferas rígidas y c) aislada.

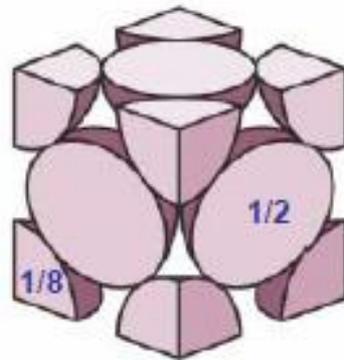
Metales que presentan estructura FCC

Metal	Constante de red a (nm)	Radio atómico R^* (nm)
Aluminio	0.405	0.143
Cobre	0.3615	0.128
Oro	0.408	0.144
Plomo	0.495	0.175
Níquel	0.352	0.125
Platino	0.393	0.139
Plata	0.409	0.144

*Calculado a partir de la constante de red utilizando la ecuación (3.3), $R = \sqrt{2}a/4$.

Características de la Estructura FCC

Número de átomos por celda



$$n = 1/8 * 8 + 1/2 * 6$$

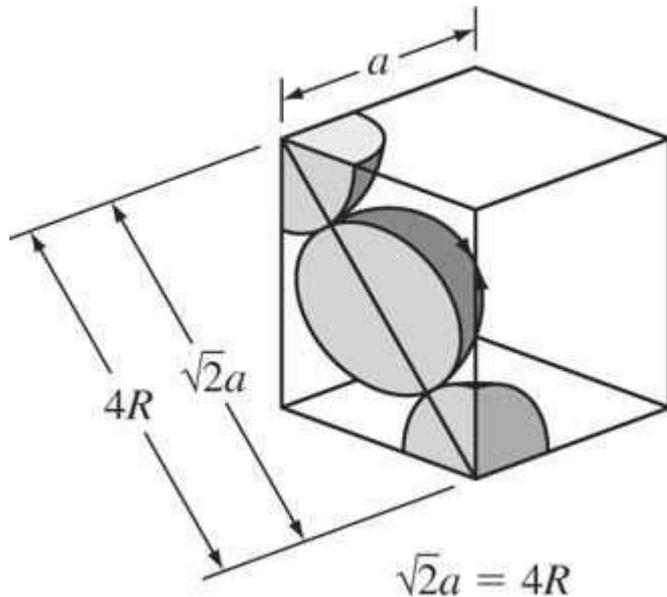
$$n=4$$

Número de coordinación

$$N=12$$

Características de la Estructura FCC

Relación entre la constante de red a y el radio R



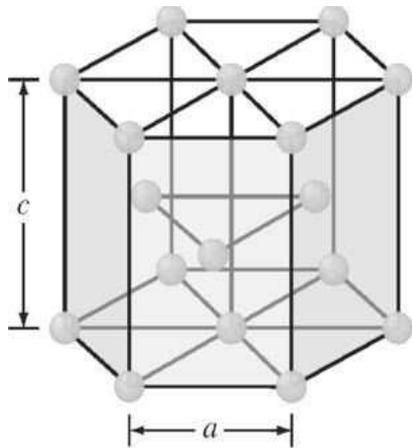
Compacidad o factor de empaquetamiento atómico

$$\text{FEA} = 0,74$$

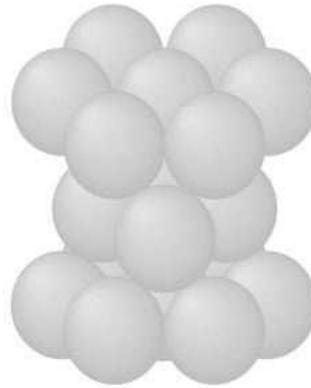
Es el máximo posible con átomos esféricos!

[Video FCC](#)

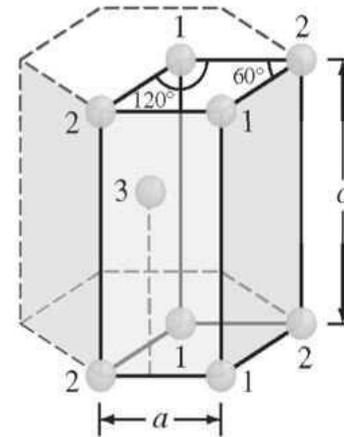
Estructura cristalina hexagonal compacta - HCP



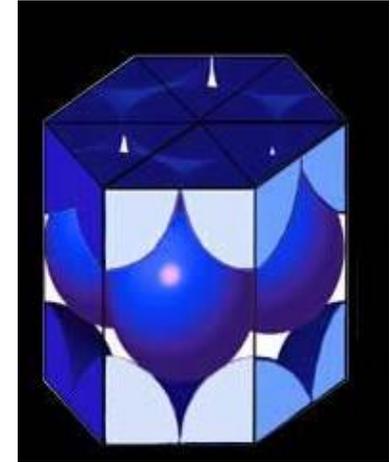
a)



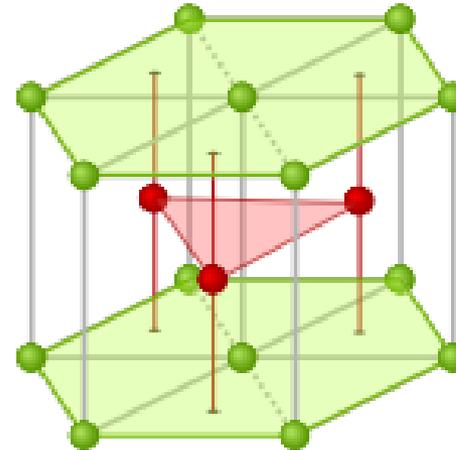
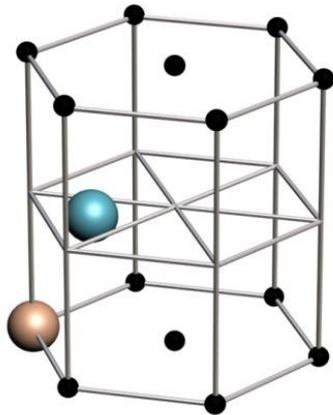
b)



c)



Celdas unitarias HCP: a) de posiciones atómicas b) de esferas rígidas y c) aislada.



Estructura cristalina hexagonal compacta - HCP

Metales que presentan estructura HCP

Metal	Constante de red (nm)		Radio atómico R (nm)	Relación c/a	% de desviación de la relación ideal
	a	c			
Cadmio	0.2973	0.5618	0.149	1.890	+15.7
Zinc	0.2665	0.4947	0.133	1.856	+13.6
HCP ideal				1.633	0
Magnesio	0.3209	0.5209	0.160	1.623	-0.66
Cobalto	0.2507	0.4069	0.125	1.623	-0.66
Circonio	0.3231	0.5148	0.160	1.593	-2.45
Titanio	0.2950	0.4683	0.147	1.587	-2.81
Berilio	0.2286	0.3584	0.113	1.568	-3.98

La relación c/a para una estructura cristalina HCP ideal consistente en esferas uniformes tan próximas como sea posible es $1,633 = 2 \sqrt{2} / \sqrt{3}$

Características de la Estructura HCP

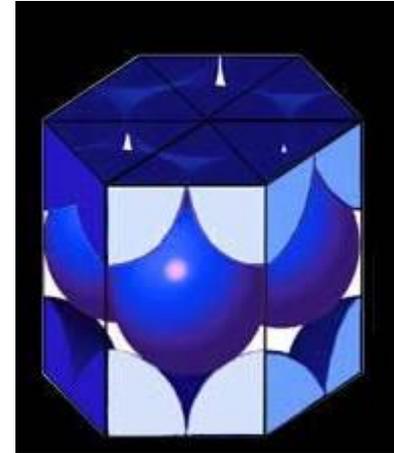
Número de átomos por celdilla

$$n = 1/6 * 6*2 + 1/2 * 2 + 3$$

$$N=6$$

Número de coordinación

$$N=12$$



Estructura cristalina hexagonal compacta - HCP

El volumen de la celda unitaria HCP = área de la base x altura

El área de la base de la celda unitaria es el área $ABDEFG$. Esta área total consiste en la suma de las áreas de seis triángulos equiláteros de área ABC

Área del triángulo $ABC = \frac{1}{2}$ base x altura

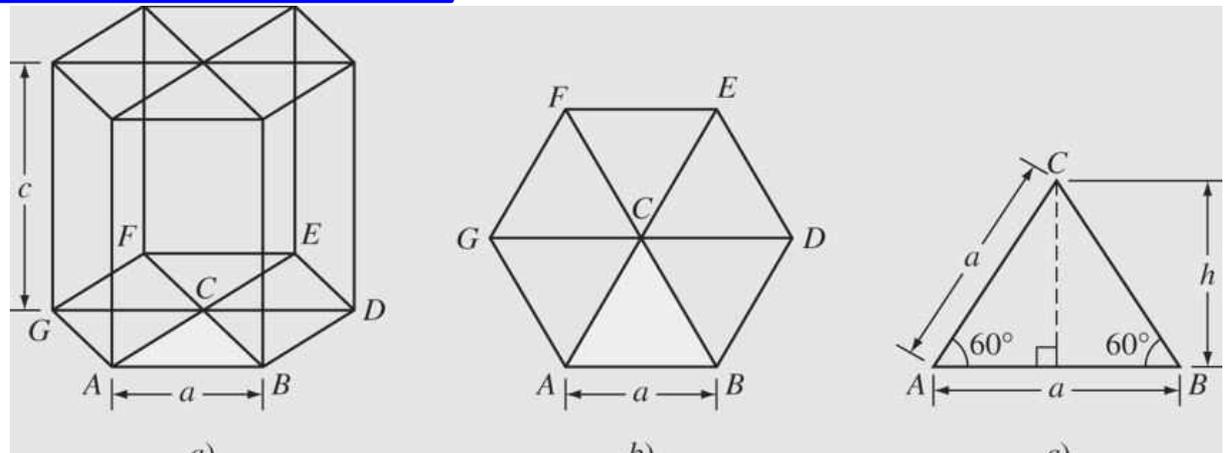
$$= \frac{1}{2} (a)(a \text{ sen } 60^\circ) = \frac{1}{2} a^2 \text{ sen } 60^\circ$$

Area de la base = $(6)(\frac{1}{2} a^2 \text{ sen } 60^\circ) = 3 a^2 \text{ sen } 60^\circ$

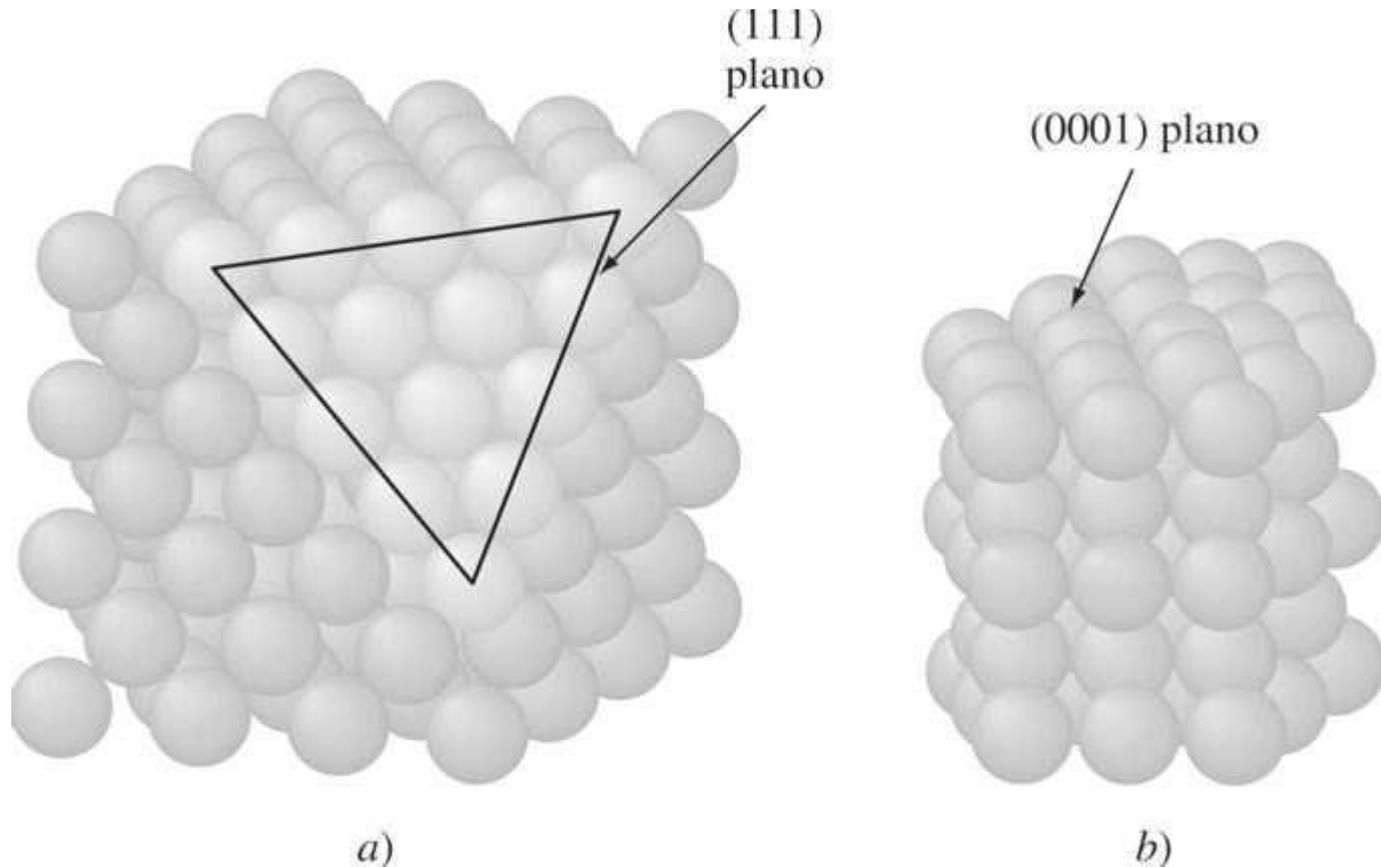
$$\text{Volumen de celda HCP} = (3 a^2 \text{ sen } 60^\circ)(c)$$

$$\text{FEA} = 0,74$$

[Video HCP](#)

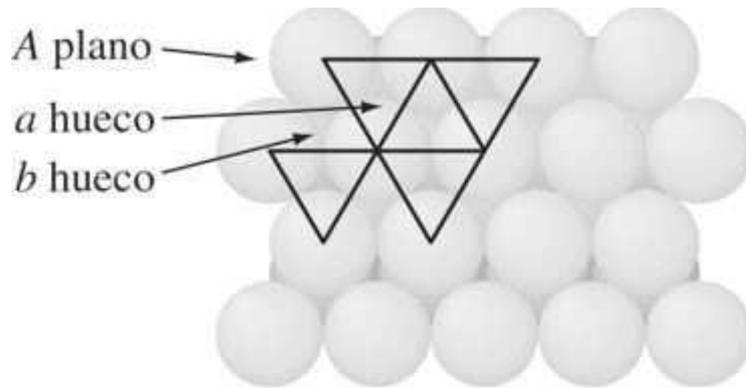


COMPARACIÓN ENTRE LAS ESTRUCTURAS CRISTALINAS FCC, HCP Y BCC

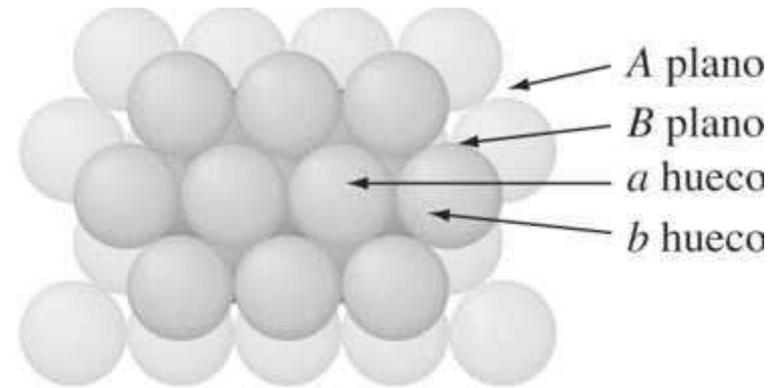


COMPARACIÓN ENTRE LAS ESTRUCTURAS CRISTALINAS FCC y HCP

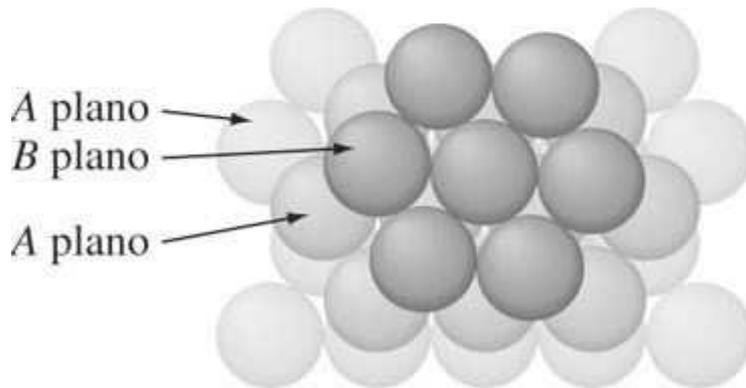
VIDEO



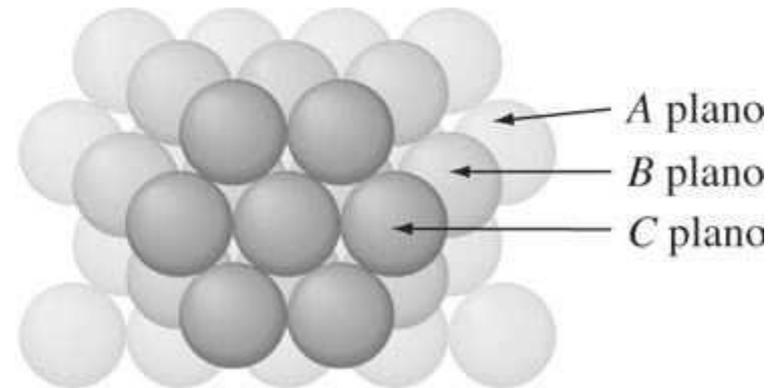
a)



b)

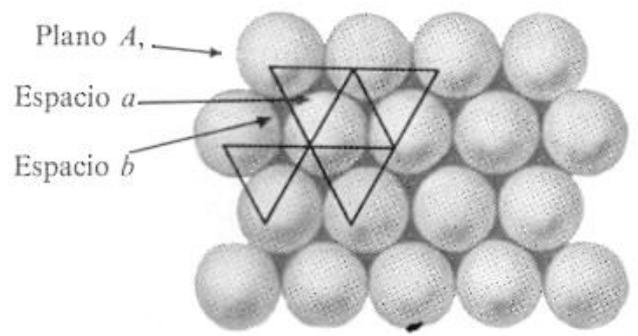


c)

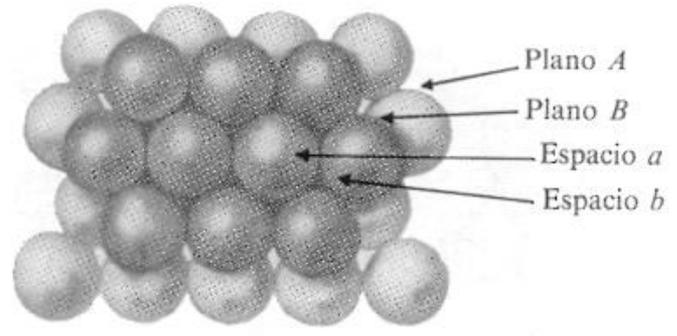


d)

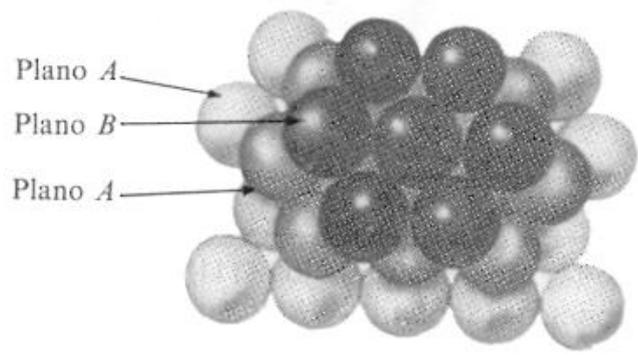
COMPARACIÓN ENTRE LAS ESTRUCTURAS CRISTALINAS FCC y HCP



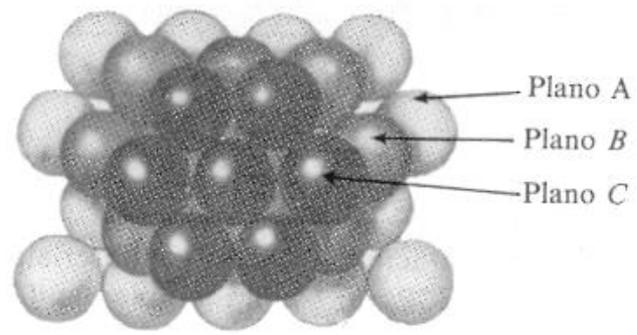
(a)



(b)



(c)



(d)

Posiciones Atómicas en Celdas Unidad

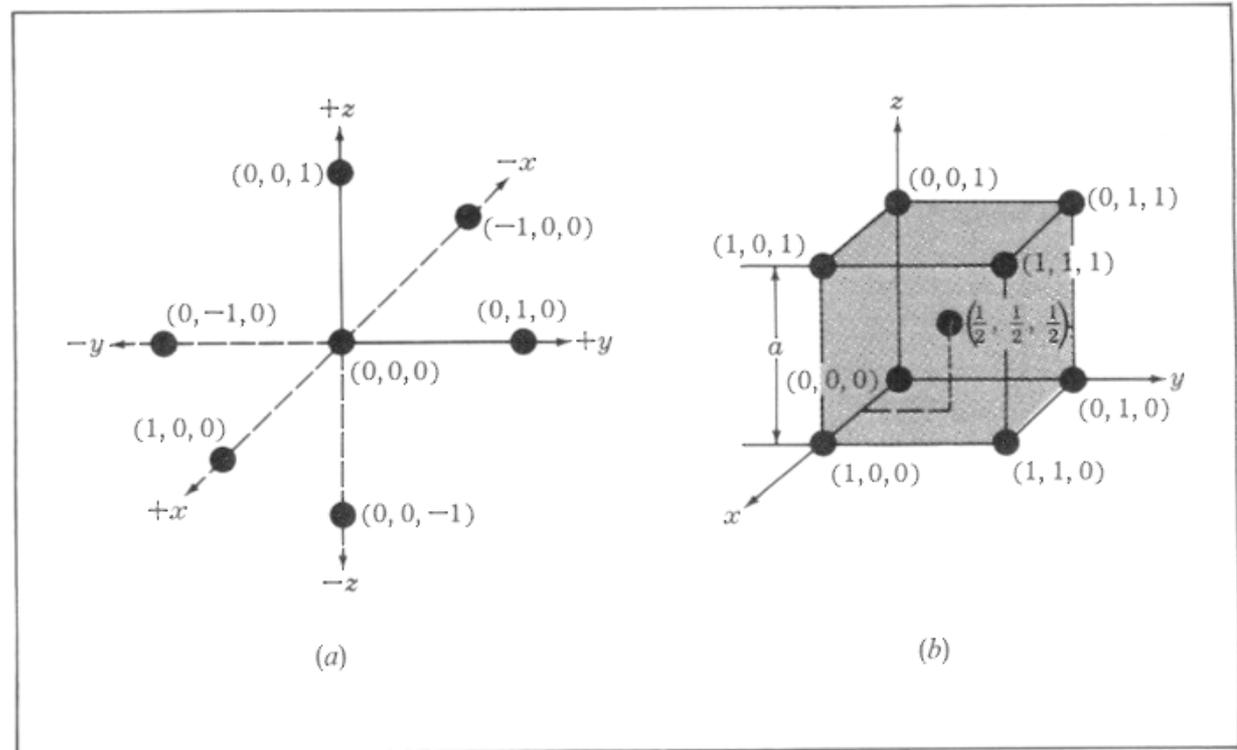


FIGURA 3.10. (a) Ejes rectangulares x, y, z , para localizar las posiciones atómicas en las celdas unidad cúbicas. (b) Posiciones atómicas en una celda unidad BCC.

Direcciones Cristalográficas

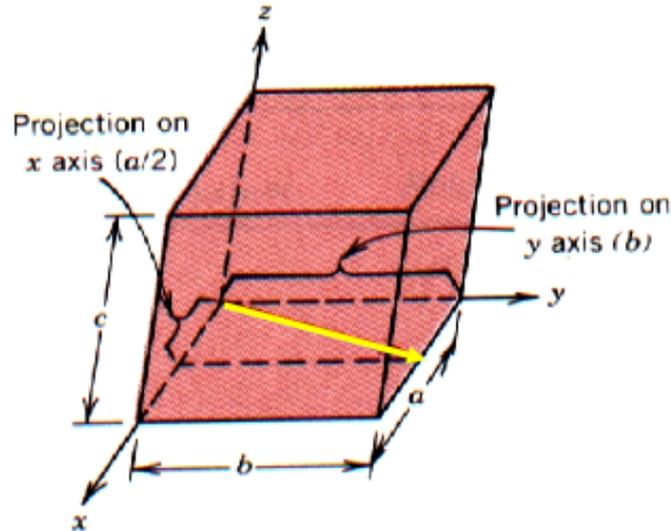
Dirección cristalográfica: vector que une dos puntos de la red cristalina.

Procedimiento para determinar los índices de una dirección cristalográfica:

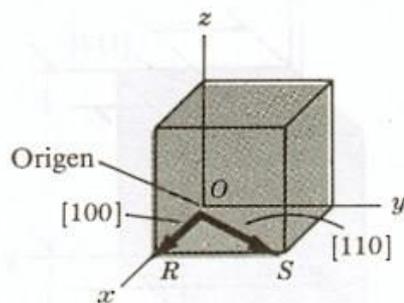
- ❑ Trasladar el “vector dirección” de manera que pase por el origen del sistema de coordenadas.
- ❑ Determinar la proyección del vector en cada uno de los tres ejes coordenados. Esas proyecciones deben ser medidas en términos de los parámetros de red (a,b,c)
- ❑ Multiplicar o dividir esos tres números por un factor común, de tal forma que los tres números resultantes sean los menores enteros posibles.
- ❑ Representar la dirección escribiendo los tres números entre corchetes: [u v w].

Todos los vectores de dirección paralelos tienen los mismos índices de dirección.

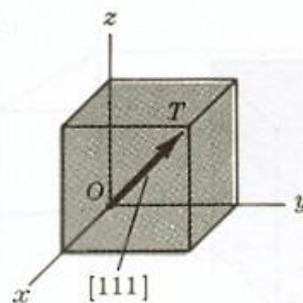
Direcciones Cristalográficas



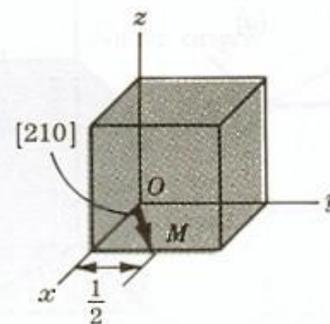
	X	Y	Z
proyecciones en términos de a,b y c	$\frac{1}{2} \times a$	$1 \times b$	$0 \times c$
proyecciones	$\frac{1}{2}$	1	0
reducción a mínimos interos	1	2	0
notación	[120]		



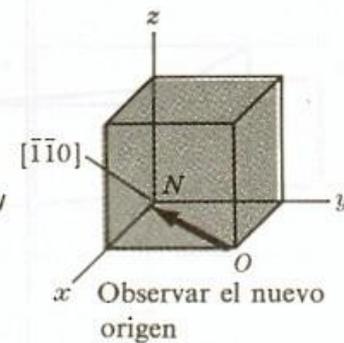
(a)



(b)



(c)

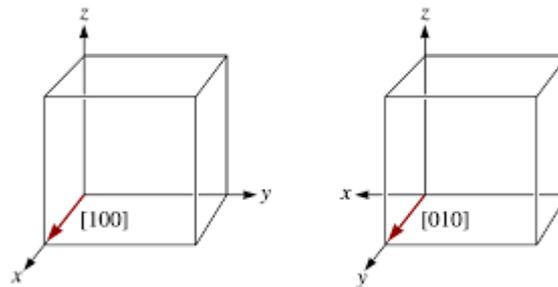


(d)

Direcciones Cristalográficas

Observar:

- Debido a que las direcciones son vectores, una dirección y su negativo no son idénticos. $[100]$ no es igual a $[\bar{1}00]$. Representan la misma línea pero direcciones opuestas.
- Una dirección y su múltiplo son idénticas; $[100]$ es la misma dirección que $[200]$.
- Las direcciones se dice que son ***crystalográficamente equivalentes*** si los espacios atómicos a lo largo de cada dirección son los mismos. Tienen sus índices particulares debido a la forma en que se construyen sus coordenadas.



Las siguientes direcciones de una arista del cubo son crystalográficamente equivalentes:

$$[100], [010], [001], [0\bar{1}0], [00\bar{1}], [\bar{1}00] \quad \langle 100 \rangle$$

Las direcciones equivalentes se llaman ***familia de índices***

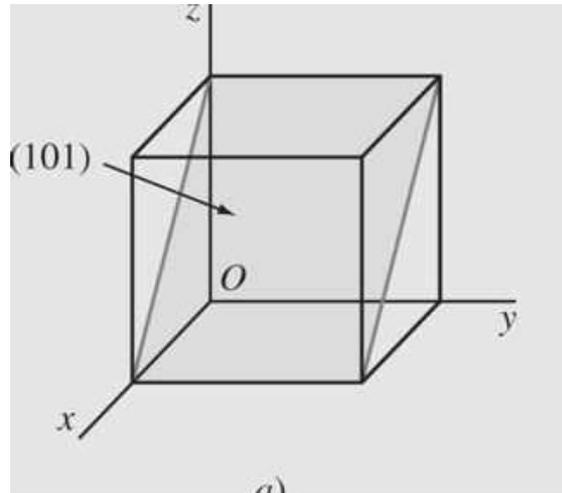
Índices de Miller: Planos Cristalográficos

Determinación de los índices de Miller de un plano cristalográfico:

- ❑ Determinar las intersecciones del plano con los ejes del sistema de coordenadas en términos de los parámetros de red a , b y c . Si el plano pasa por el origen se debe trasladar el plano a una nueva posición en el sistema de coordenadas.
- ❑ Obtener los recíprocos de esas tres intersecciones. Si el plano es paralelo a uno de los ejes, la intersección se considera en el infinito y su recíproco será cero.
- ❑ Representar los índices de Miller en la forma $(h\ k\ l)$

Nota: A veces es necesario multiplicar o dividir esos tres recíprocos por un factor común, tal que los tres números resultantes sean los menores enteros posibles.

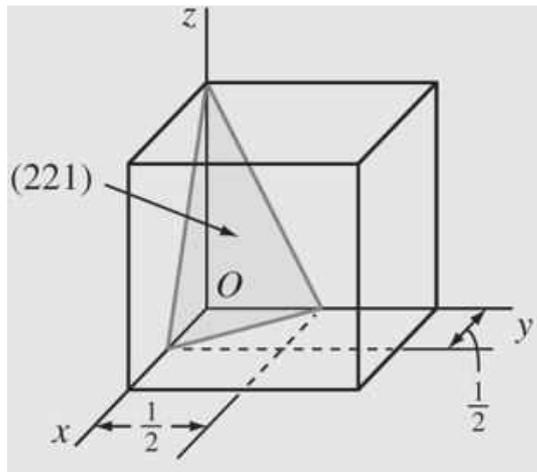
INDICES DE MILLER PARA PLANOS CRISTALOGRAFICOS EN CELDAS UNIDAD CUBICAS



Ejes	x	y	z
Intercepción	1	∞	1
Reciproco	1/1	1/ ∞	1/1
	1	0	1

Indice: (101)

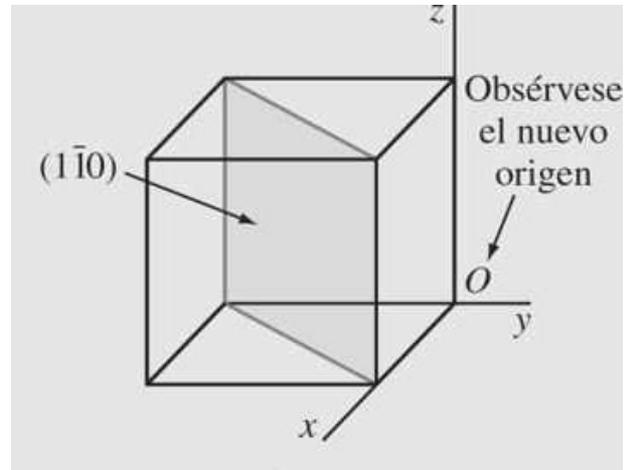
INDICES DE MILLER PARA PLANOS CRISTALOGRAFICOS EN CELDAS UNIDAD CUBICAS



Ejes	x	y	z
Intercepción	1/2	1/2	1
Reciproco	2/1	2/1	1/1
	2	2	1

Indice: (221)

INDICES DE MILLER PARA PLANOS CRISTALOGRAFICOS EN CELDAS UNIDAD CUBICAS



Ejes	x	y	z
Intercepción	1	-1	∞
Reciproco	1/1	-1/1	1/ ∞
	1	-1	0

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

Densidad

□ Densidad volumétrica:

□

□ Densidad volumétrica del metal = $\rho_v = \frac{\text{Masa de la celdilla unidad}}{\text{Volumen de la celdilla unidad}}$

□

□

□

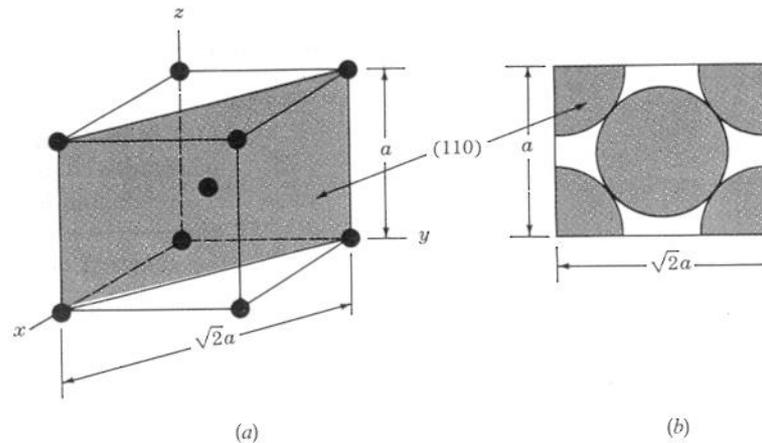
□ $\rho_v = \frac{\text{Nro at. por celdilla} \times \text{peso molecular}}{\text{Volumen de la celdilla} \times N^\circ \text{ Av.}}$

□

Densidad

□ Densidad atómica planar:

$$\rho_p = \frac{\text{núm. equiv. de átomos cortados por el área seleccionada}}{\text{área seleccionada}}$$



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

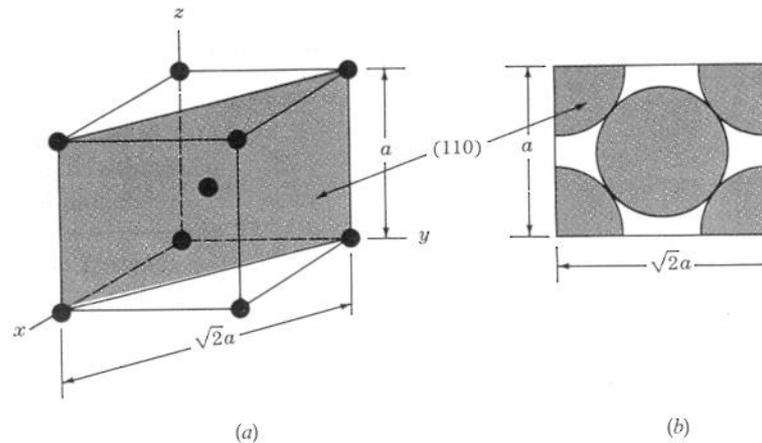
$$\text{Área del plano} = (\sqrt{2} a)(a) = \sqrt{2} a^2$$

$$\rho_p = 2 / \sqrt{2} a^2$$

Densidad

- Densidad atómica planar o fracción de empaquetamiento planar:

$$\rho_p = \frac{\text{área de los átomos cortados por el área seleccionada}}{\text{área seleccionada}}$$



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

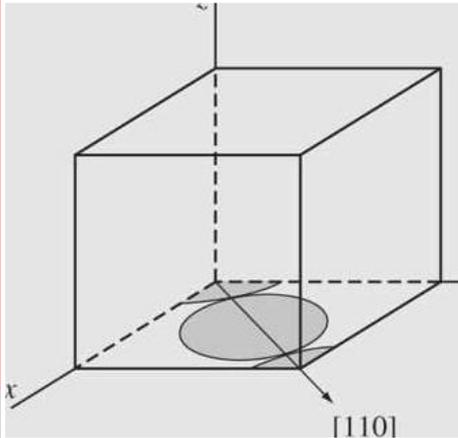
$$\text{Área del plano} = (\sqrt{2} a)(a) = \sqrt{2} a^2$$

$$\rho_p = \frac{2 \pi R^2}{\sqrt{2} a^2}$$

Densidad

Densidad atómica lineal:

$\rho_l = \frac{\text{n}^\circ \text{ de diámetros atómicos equiv. dentro de una longitud seleccionada}}{\text{longitud de la línea seleccionada}}$

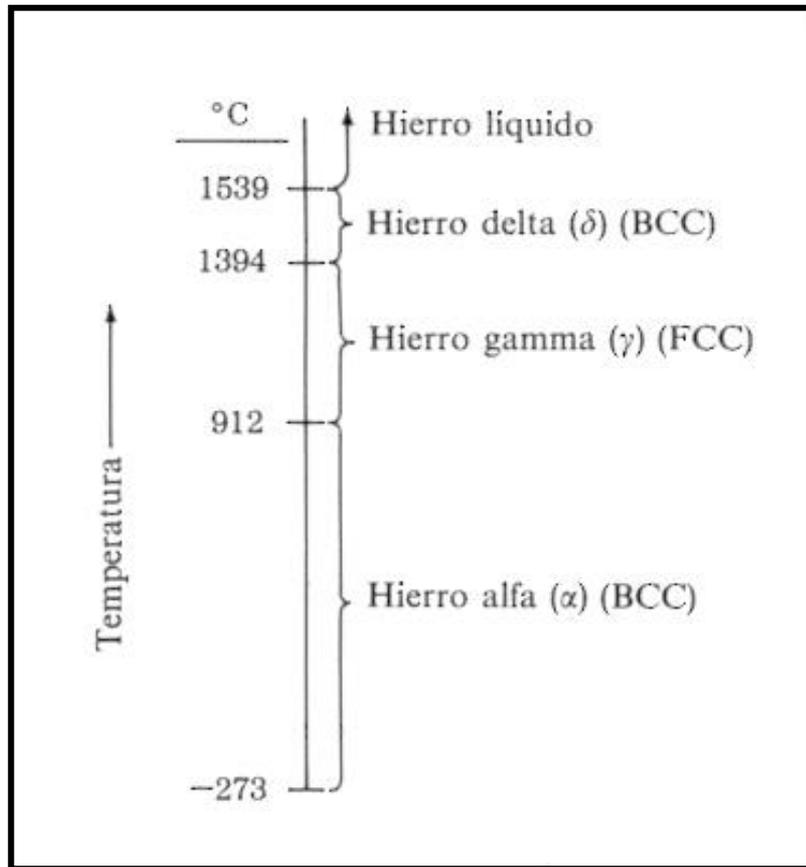


$$\rho_l = 2 / \sqrt{2}a$$

$\rho_l = \frac{\text{longitud de los diámetros cortados por la longitud seleccionada}}{\text{longitud de la línea seleccionada}}$

$$\rho_l = 2 * 2 R / \sqrt{2} a = 1$$

POLIMORFISMO Y ALOTROPIA



Muchos elementos y compuestos existen en más de una forma cristalina bajo diferentes condiciones de temperatura y presión.

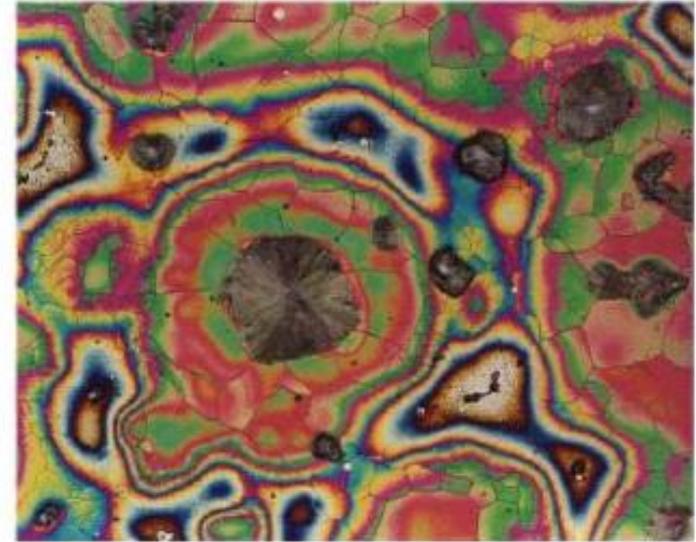
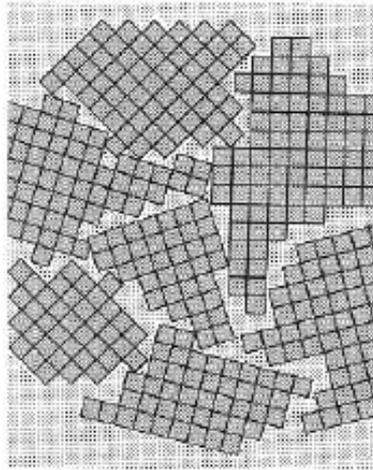
Materiales monocristalinos

Monocristalinos: presentan la misma estructura cristalina en toda la extensión del material sin interrupciones.



Materiales Policristalinos

Policristalinos:
constituidos de
varios cristales
o granos.



Material policristalino

Los **límites de grano** son regiones que separan cristales de diferentes orientaciones en un material policristalino.

Bibliografía

- ✓ William F. Smith, Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales, segunda edición , ed Mc Graw Hill
- ✓ CALLISTER, W.D., Introducción a la Ciencia e Ingeniería de los Materiales, Reverté S. A.