

ME -32A

Conceptos que se vieron en la clase del jueves 04SEPT2008.

Planos, direcciones y sistemas de deslizamiento en cristales de Zn (HC) y de metales CCC (Cu, Al, Fe gamma, Ni, etc.). Planos densos y direcciones densas. En estos materiales el mecanismo de deformación plástica más importante es por deslizamiento de planos cristalinos densos, según direcciones cristalinas densas. En los cristales HC y CCC los planos más densos son planos hexagonales compactos. Un sistema de i está constituido por un plano de deslizamiento y una dirección de deslizamiento perteneciente a tal plano. Así, en el Zn hay 3 sistemas de deslizamiento en tanto que en los cristales CCC hay 12 sistemas; esto tiene un significativo efecto sobre la deformación plástica por deslizamiento de estos materiales.

Anisotropía e isotropía. Los monocristales son anisótropos; por ejemplo, en un material CCC, se obtienen distintos valores del módulo de Young (E) según si medimos a lo largo de una arista o bien de la diagonal del cubo de la celda. Por el contrario, los sólidos amorfos, (donde no hay direcciones preferentes, por el desorden de largo alcance), son materiales isótropos.

Problemas de ordenamiento atómico y de densidades 1D, 2D y 3D en cristales simples. Calcularemos densidades atómicas en elementos metálicos puros expresadas como número de átomos por unidad de volumen (3D, 2D o 1D), donde la unidad métrica de longitud será R, el radio iónico respectivo: ρ^{3D} [átoms./R³], ρ^{2D} [átoms./R²], ρ^{1D} [átoms./R], respectivamente.

Control de Lectura 3

La materia del Control de Lectura 3 corresponde principalmente a problemas geométricos de cristales simples, en el contexto de un curso de Ciencia de los Materiales. Ese contexto, implica saber de dónde vienen esas estructuras (¿por qué un material dado presenta una cierta estructura cristalina y no otra?, modelo de esferas duras en contacto, etc.). También estos problemas geométricos están orientados a la materia que vienen más adelante, donde se abordará cómo el ordenamiento atómico afecta el comportamiento de los materiales, aunque ya vimos el caso de los sistemas de deslizamiento en el marco de la deformación plástica.

A continuación se exponen algunos problemas geométricos tipo. Ver también lo que está ya en U-cursos del texto de Smith sobre geometría de cristales simples.

INTRODUCCIÓN

Consideremos la tabla periódica (ver apuntes en U-cursos) donde aparecen las estructuras cristalinas de los elementos puros. De la observación de ella se concluye que la mayoría de (pero no todos) los metales puros preferentemente forman:

- Cristales CCC (CFC)
- Cristales CC (BC)
- Cristales HC

A continuación se desarrollan ejercicios geométricos con los cristales CC y CCC, aplicando el modelo de esferas duras en contacto.

EJERCICIO

Considere cristales C (cúbico simple), CC y CCC, formados por átomos esféricos de radio R , en contacto.

Se pide:

- a) Indique elementos puros que presentan cada tipo de cristal.
- b) Expresé el parámetro a de la respectiva celda cúbica en función de R . (R es un dato que constituye la unidad de medida de longitud a emplear).
- c) Calcule la densidad 3D de cada cristal expresada como $\rho^{3D} [\text{áts./}R^3]$.
- d) Identifique los planos cristalinos más densos de cada cristal. Después calcule la densidad $\rho^{2D} [\text{áts./}R^2]$ del plano más denso de cada cristal.
- e) Calcule la densidad lineal $\rho^{1D} [\text{áts./}R]$ de una dirección cristalina correspondiente a la arista del respectivo cristal.
- e) Calcule la densidad lineal $\rho^{1D} [\text{áts./}R]$ de la dirección cristalina más densa del respectivo cristal.

Los resultados de este ejercicio se presentan en la tabla siguiente. (La tabla similar de la clase tenía un error en los pasos del cálculo de la densidad 3D del cristal CCC).

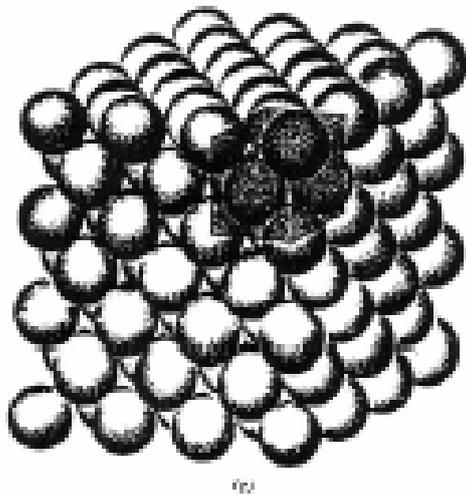
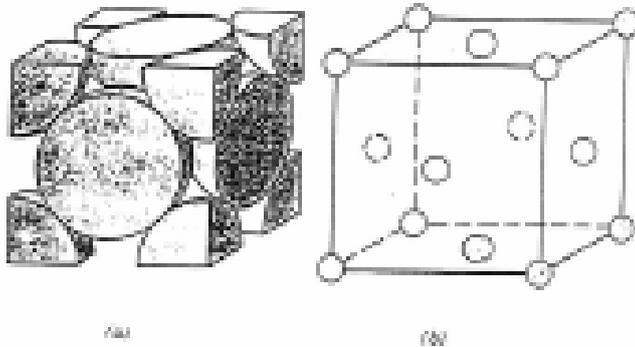
Importante: Para calcular densidades, normalmente es adecuado trabajar con una celda cristalina, ya sea en 1D, 2D o 3D. Para desarrollar ejercicios de este tipo hay que: visualizar bien la estructura cristalina que corresponda y los átomos que se tocan, y aplicar que el radio atómico vale R .

C	CC	CCC
No hay ejemplos de metales estructurales. Justifique por qué esta estructura no tiene sentido físico para los metales puros; vea las reglas físicas de las estructuras cristalinas)	Fe alfa, Cr, Na, etc.	Fe gamma, Cu, Ni, Pb Al,
$a = 2R$ (Una arista vale 2R)	$a = (4/\sqrt{3}) R$ (La diagonal del cubo vale 4R)	$a = (4/\sqrt{2}) R$ (La diagonal de una cara del cubo vale 4R)
$\rho^{3D} = (1 \text{ átomo})/(2R)^3$ $= 0,125 [\text{áts.}/R^3]$.	$\rho^{3D} = (2 \text{ átomos})/(4/\sqrt{3}R)^3$ $= 0,162[\text{áts.}/R^3]$.	$\rho^{3D} = (4 \text{ átomos})/(4/\sqrt{2}R)^3$ $= 0,176[\text{áts.}/R^3]$. Como era de esperar, este cristal es el de mayor densidad. ¿Por qué?
Los planos más densos son los de cara del cubo: planos {100}, de multiplicidad 3. $\rho^{2D} = (1 \text{ átomo})/(2R)^2$ $= 0,25 [\text{áts.}/R^2]$	Los planos más densos son los perpendiculares a una diagonal de cara del cubo: planos {110}, de multiplicidad 6. $\rho^{2D} = (2 \text{ átomos})/((4/\sqrt{3})^2(\sqrt{2})r \cdot R) = 0,265 [\text{áts.}/R^2]$	Los planos más densos son los perpendiculares a una diagonal del cubo: planos {111}, de multiplicidad 4. Conviene considerar una celda 2D que es un rombo con un ángulo de 60°. $\rho^{2D} = (1 \text{ átomo})/((2R)(2R \cos 30)) = 0,289 [\text{áts.}/R^2]$ Estos son planos hexagonales compactos.
Arista del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/(2R)$ $= 0,5 [\text{áts.}/R]$	Arista del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/((4/\sqrt{3}) R)$ $= 0,433 [\text{áts.}/R]$	Arista del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/((4/\sqrt{2}) R)$ $= 0,355 [\text{áts.}/R]$
Dirección más densa del plano más denso: arista del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/(2R)$ $= 0,5[\text{áts.}/R]$, o sea, un átomo en un diámetro	Dirección más densa del plano más denso: diagonal del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/(2R)$ $= 0,5[\text{áts.}/R]$, o sea, un átomo en un diámetro	Dirección más densa del plano más denso: diagonal de una cara del cubo $\rho^{1D} = (1 \text{ átomo})/(2R)$ $= 0,5[\text{áts.}/R]$, o sea, un átomo en un diámetro

EJERCICIO PROPUESTO

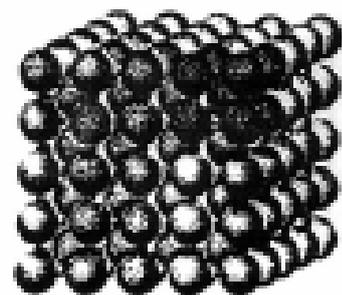
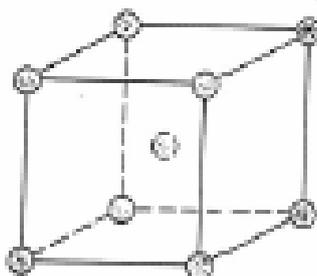
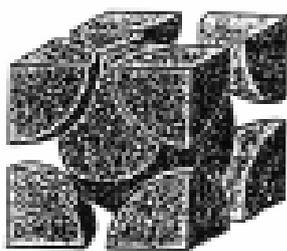
Considere el centro de la arista de un cristal matriz CCC formado por átomos de radio R. En ese punto suponga que se ubica el centro de un pequeño átomo de impureza que es esférico con radio r. Calcule el radio de ese pequeño átomo que justo cabe en ese intersticio, sin deformar geoméricamente la red original CCC, $r = r_C$. (Se trata de una matriz donde hay una impureza disuelta intersticialmente).

CRISTALES CCC Y FCC.



CRISTAL CÚBICO DE CARAS CENTRADAS.

- A) UNA CELDA CRISTALINA, CON LOS ÁTOMOS REPRESENTADOS POR ESFERAS.
- B) UNA CELDA CRISTALINA, CON ESFERAS DE TAMAÑO REDUCIDO.
- C) UN AGREGADO CRISTALINO DE MUCHOS ÁTOMOS (UN CRISTAL).



(a)

(b)

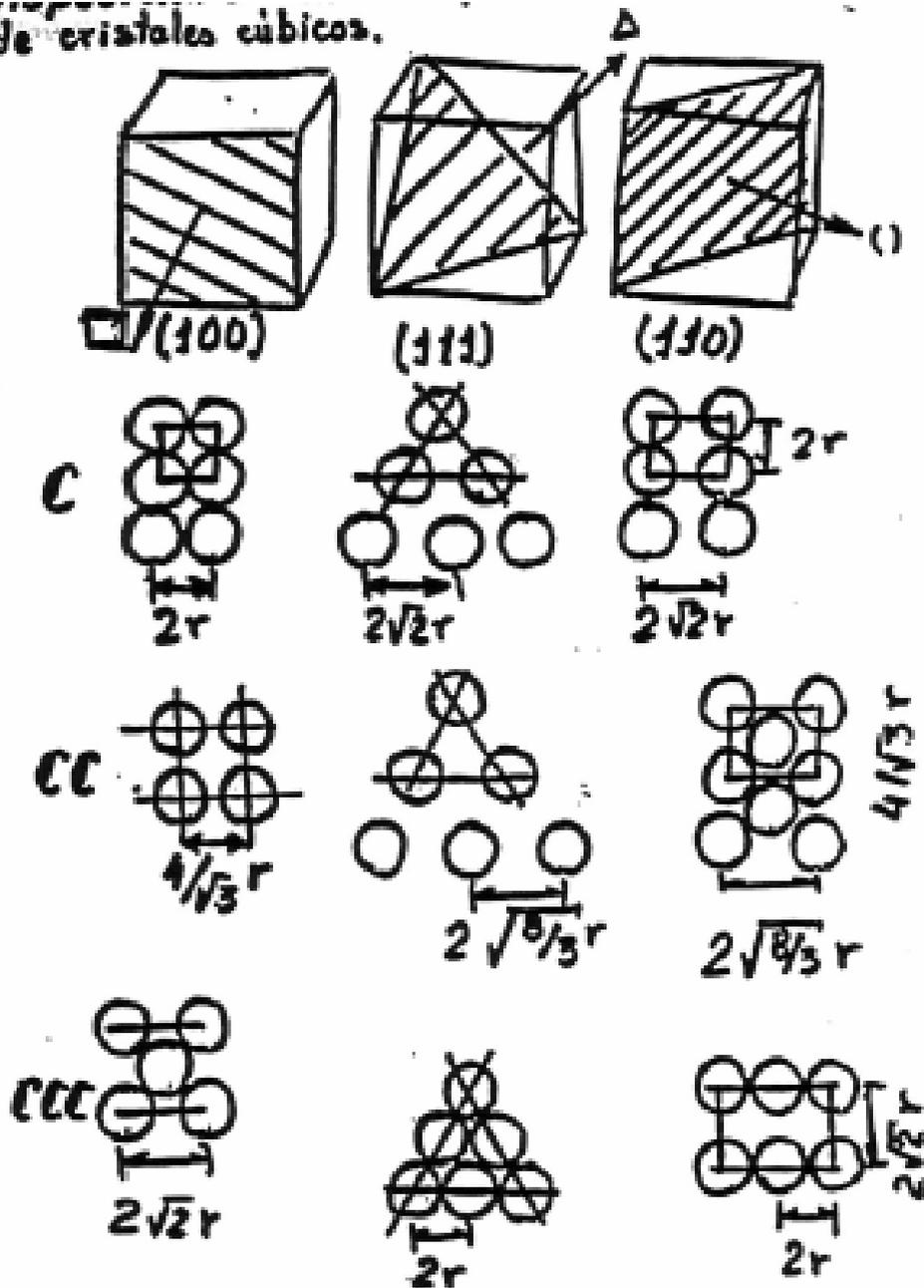
(c)

CRISTAL CÚBICO DE CUERPO CENTRADO

- A) UNA CELDA CRISTALINA, CON LOS ÁTOMOS REPRESENTADOS POR ESFERAS.
- B) UNA CELDA CRISTALINA, CON ESFERAS DE TAMAÑO REDUCIDO.
- C) UN AGREGADO DE MUCHOS ÁTOMOS ORDENADOS (UN CRISTAL).

**ARREGLOS ATÓMICOS Y DISTANCIAS INTERATÓMICAS
SOBRE ALGUNOS PLANOS DE CRISTALES CCC Y CC.**

de cristales cúbicos.



Los símbolos cuadrado, triángulo y paréntesis, se refieren a la simetría en rotación de los ejes indicados, atendiendo a las propiedades de un cubo. Así, el triángulo representa un eje de simetría de rotación de orden 3; esto es, una rotación en $1/3$ de vuelta (120°) en torno a este eje es una operación de invariancia, por la simetría del cubo.