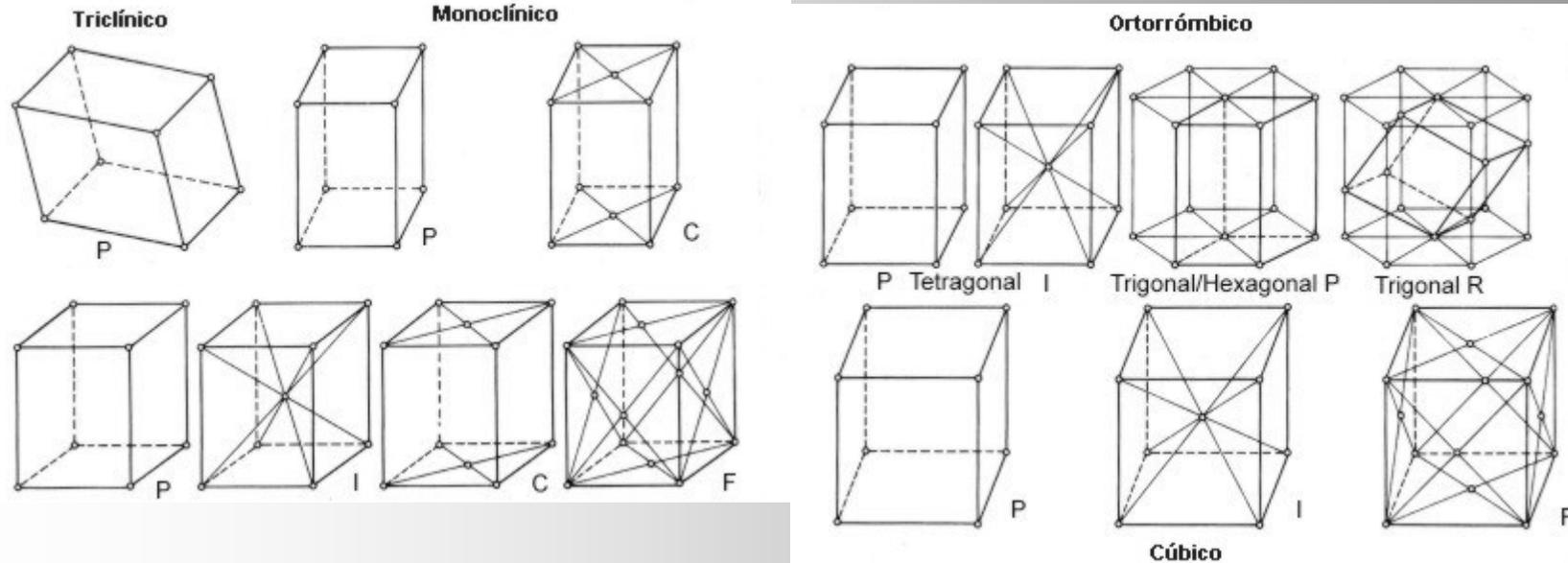


# Unidad 2: Estado Sólido

# Redes de Bravais



**P** = primitiva (sólo hay un punto de red dentro la celdilla, uno por vértice repartido en ocho vértices,  $8/8=1$ )

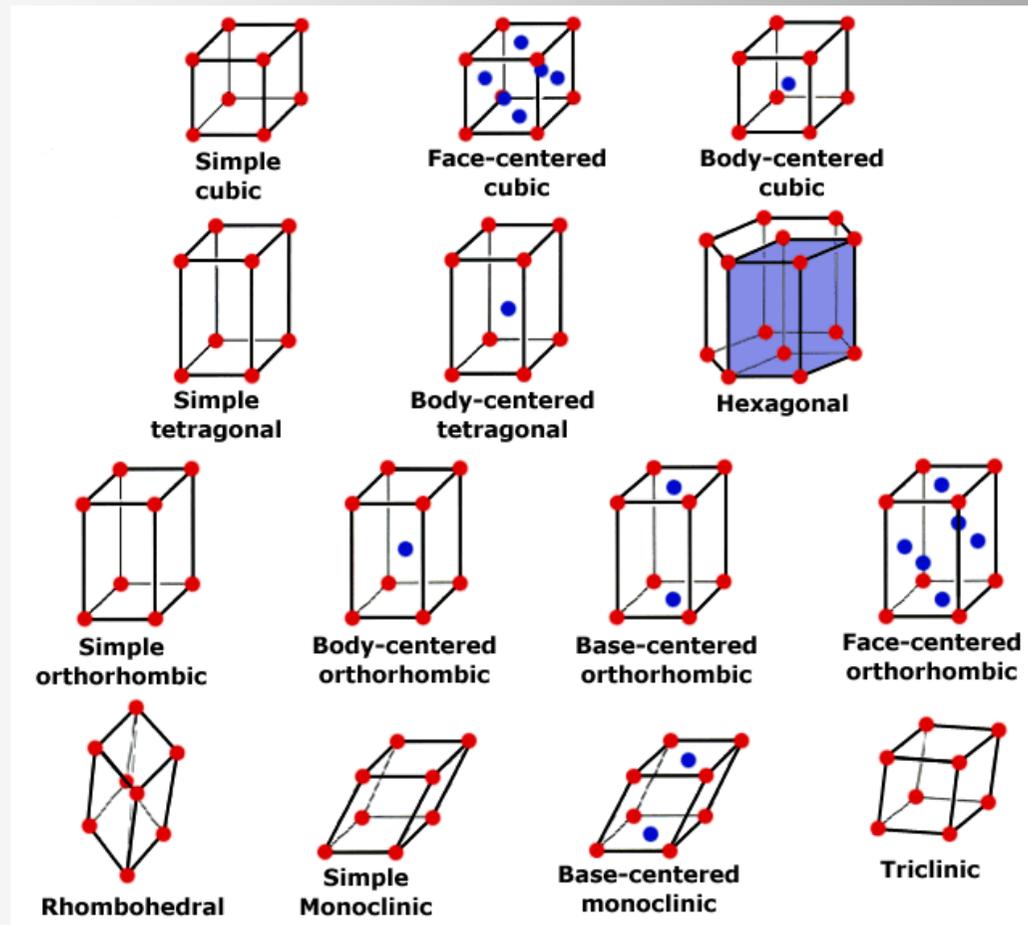
**C** = centrada en las caras perpendiculares al eje c de la celdilla (además de un  $8/8$  de punto por vértice)

**I** = centrada en el cuerpo de la celdilla (además de los  $8/8$  habituales)

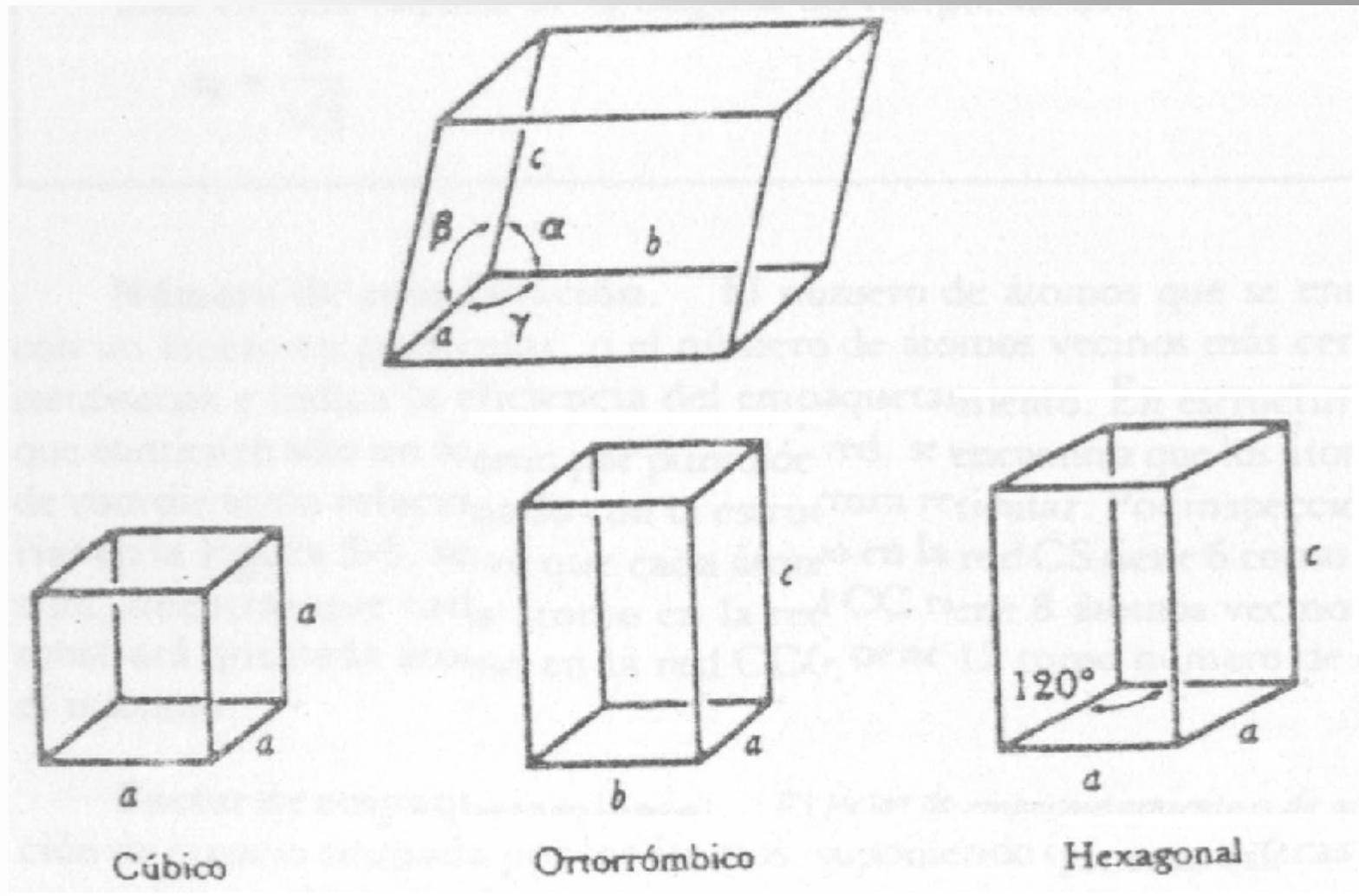
**F** = centrada en todas las caras de la celdilla (además de los  $8/8$  habituales)

**R** = primitiva, con ejes iguales y ángulos iguales, ó hexagonal doblemente centrada en el cuerpo (además de los habituales)

# Los siete sistemas de estructura cristalina y las 14 redes de Bravais

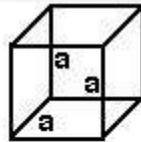


# Parámetros de red



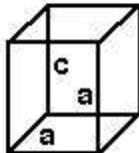
Cubic

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



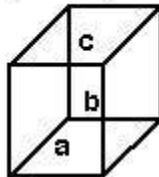
Tetragonal

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



Orthorhombic

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



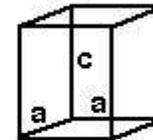
Rhombohedral

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



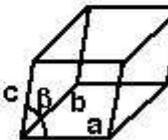
Hexagonal

$$a = b \neq c$$
$$\alpha = \beta = 90^\circ$$
$$\gamma = 120^\circ$$



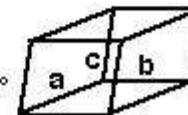
Monoclinic

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

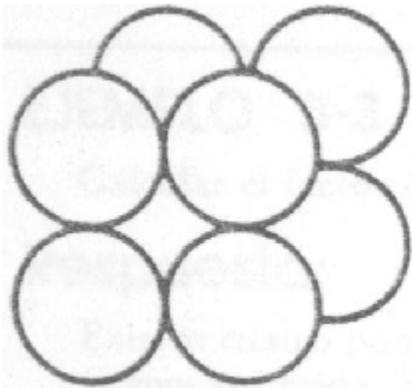


Triclinic

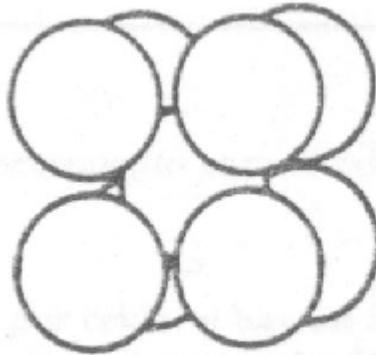
$$a \neq b \neq c$$
$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



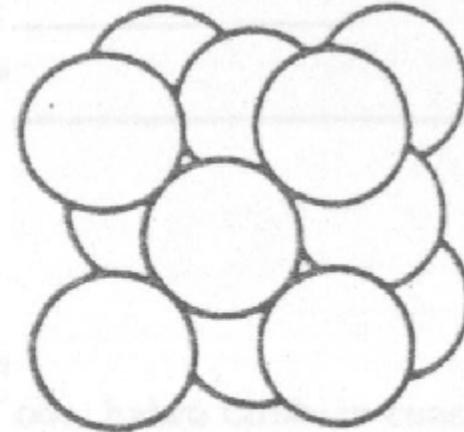
# Celdas unitarias cúbicas



Cúbica simple



Cúbica centrada  
en el cuerpo



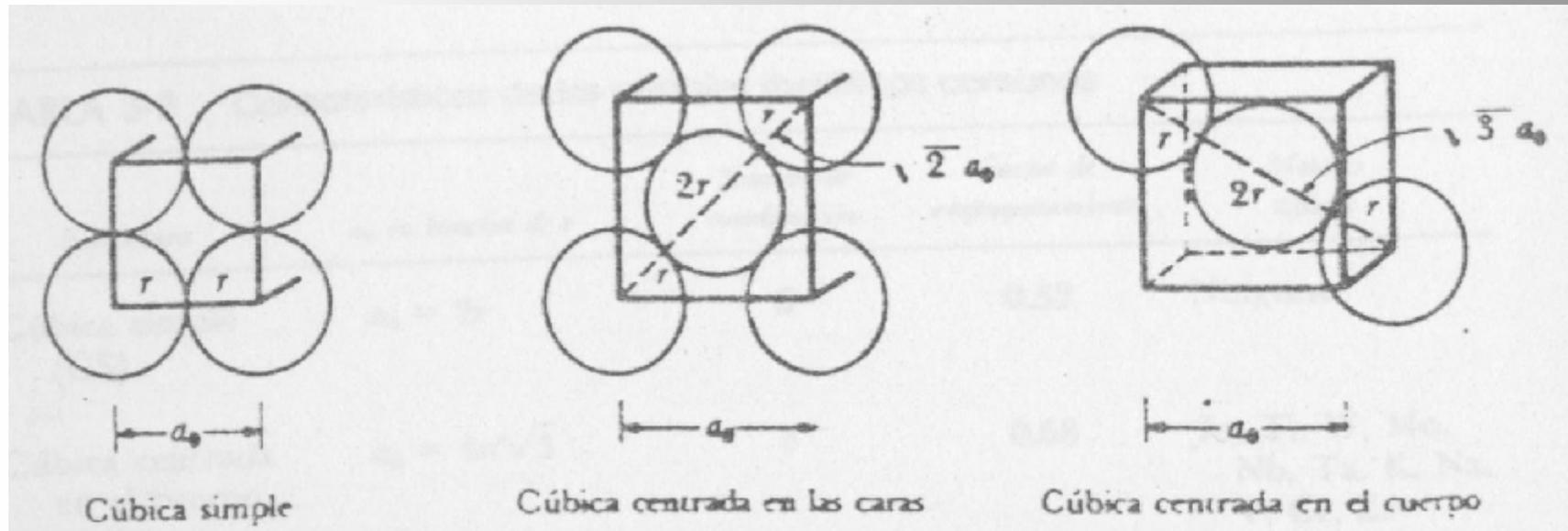
Cúbica centrada  
en las caras

$$\frac{\text{nodos}}{\text{celda}} = (8 \text{ esquinas}) \left( \frac{1}{8} \right) = 1$$

$$\frac{\text{nodos}}{\text{celda}} = (8 \text{ esquinas}) \left( \frac{1}{8} \right) + (1 \text{ centro}) (1) = 2$$

$$\frac{\text{nodos}}{\text{celda}} = (8 \text{ esquinas}) \left( \frac{1}{8} \right) + (6 \text{ caras}) \left( \frac{1}{2} \right) = 4$$

Determinar la relación entre el radio atómico y el parámetro de red en las estructuras cúbica simple, cúbica centrada en las caras y cúbica centrada en el cuerpo

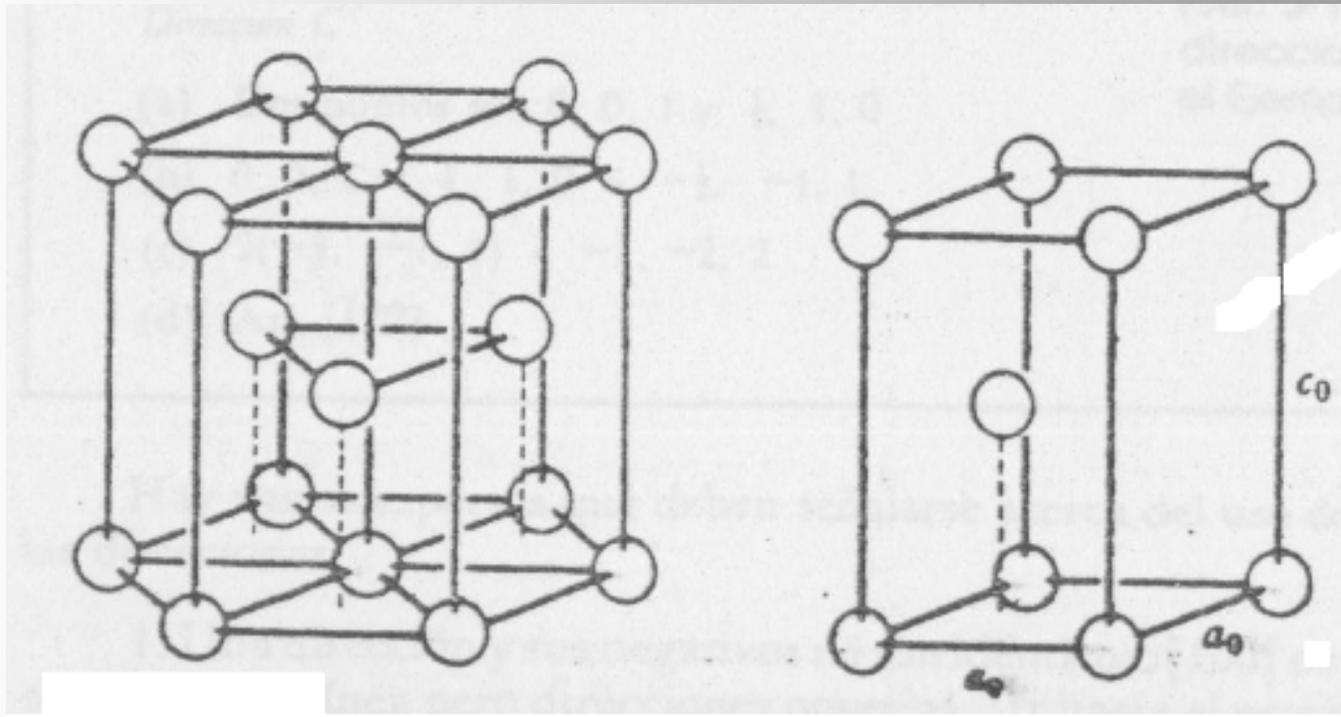


$$a_0 = 2r$$

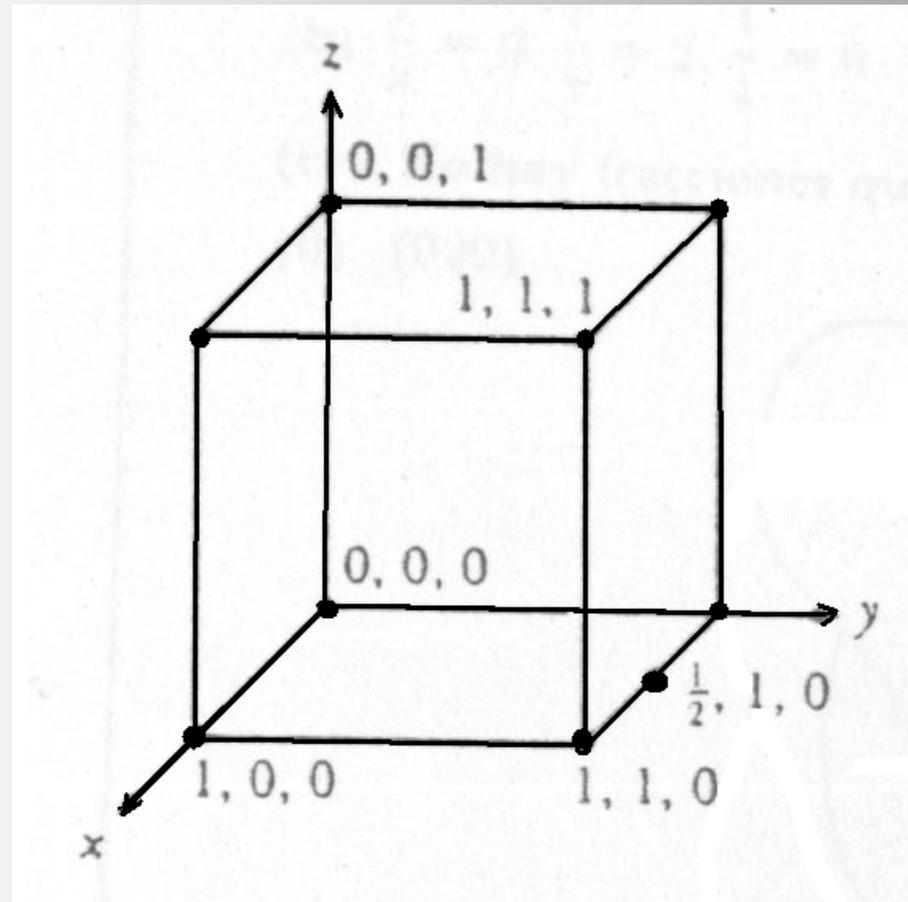
$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

# Estructura hexagonal compacta



# Puntos, direcciones y planos en la celda unitaria



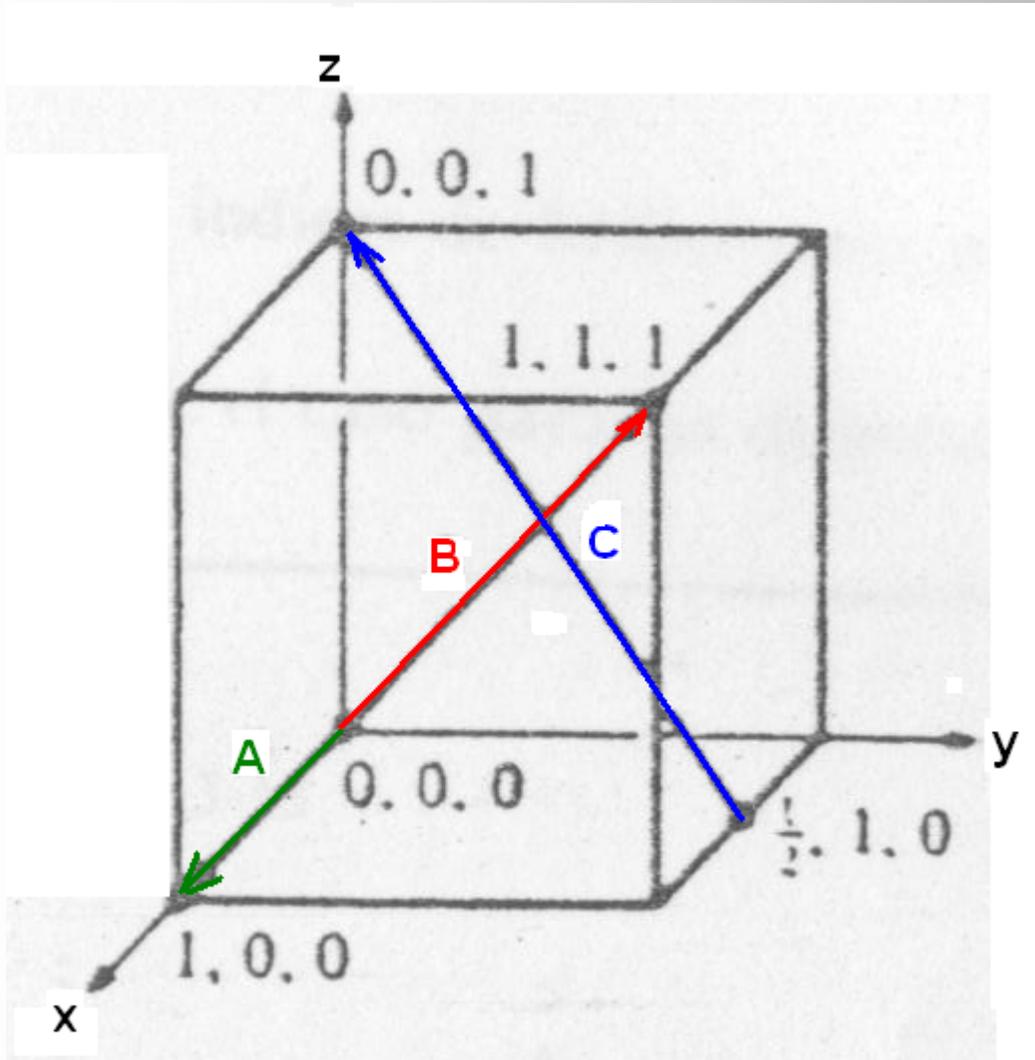
# Indices de Miller

## Direcciones en la celda unitaria

Procedimiento:

- Utilizando un sistema coordenado “derecho” se determinan las coordenadas de dos puntos que están en esa dirección
- Se restan las coordenadas del punto “posterior” de las del punto “anterior” → parámetros de red medidos en la dirección de cada eje del sistema coordenado
- Se eliminan las fracciones y/o se reducen los resultados obtenidos de las restas , a los enteros mínimos
- Se enuncia los números entre corchetes [ ]. Si se obtiene un signo negativo, se representa con una barra sobre el número.

# Ejemplo 1



Indices de Miller  
de las direcciones:

$$A: [1\ 0\ 0]$$

$$B: [1\ 1\ 1]$$

$$C: [\bar{1}\ \bar{2}\ 2]$$

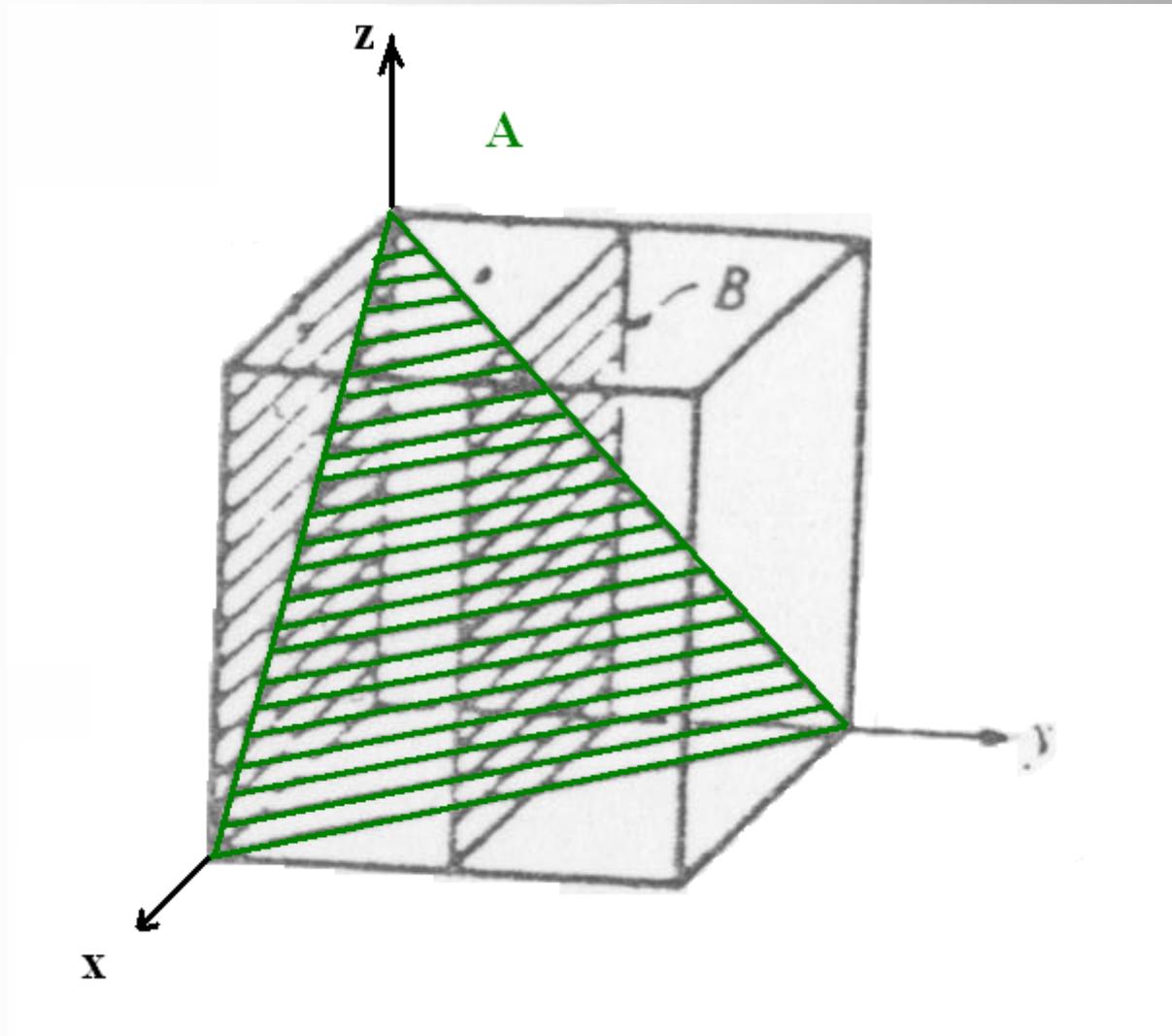
# Planos en la celda unitaria

## Procedimiento:

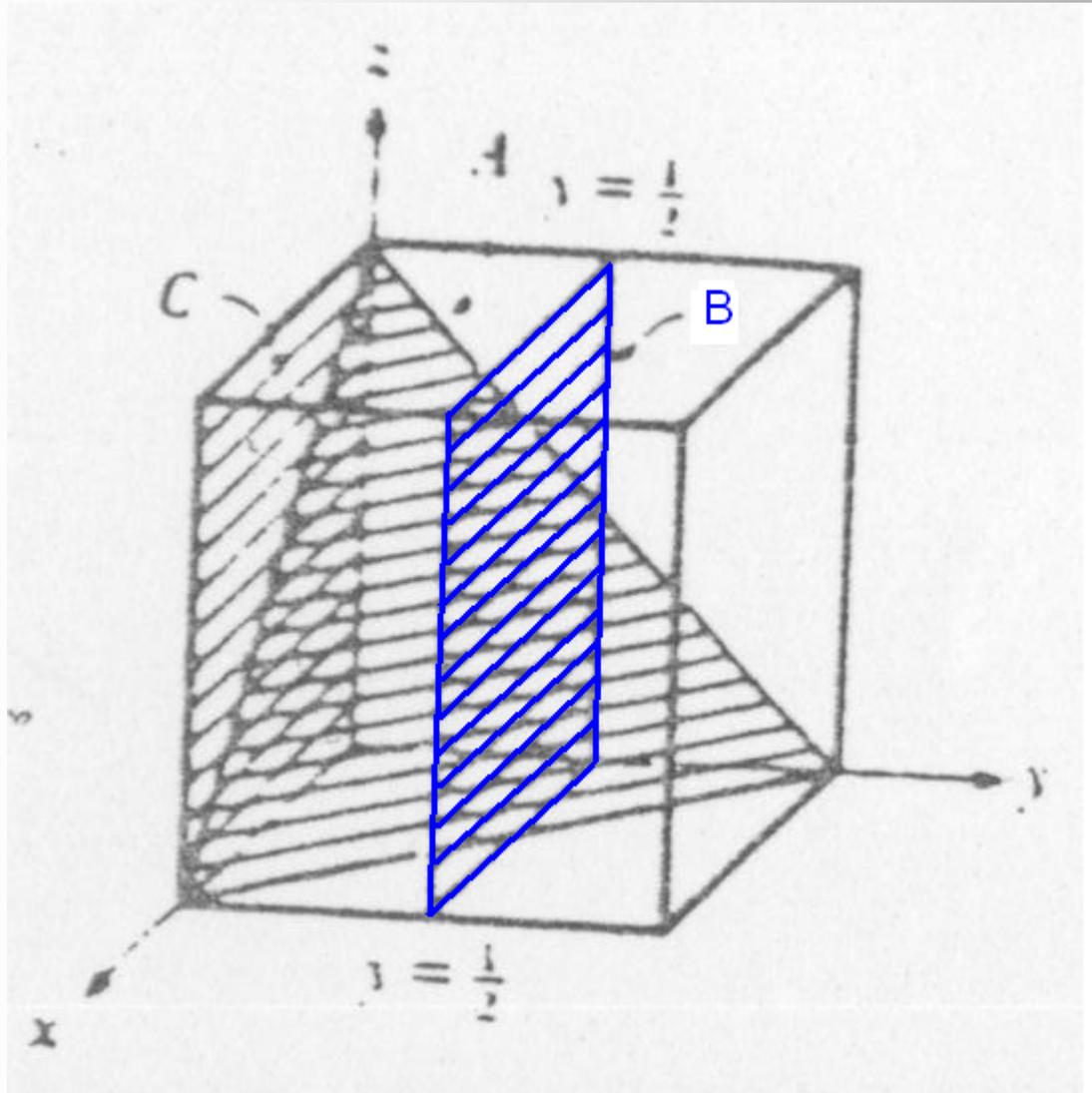
- Se identifica los puntos en los cuales el plano intersecta a los ejes coordenados  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Si el plano pasa por el origen, se debe desplazar el origen del sistema de coordenadas.
- Se obtienen los recíprocos de estas intercepciones.
- Se elimina las fracciones, pero no se reducen a mínimos enteros.
- Se encierra las cifras resultantes entre paréntesis ( ). Los números negativos se representan con una raya sobre la cifra.

## Ejemplo 2

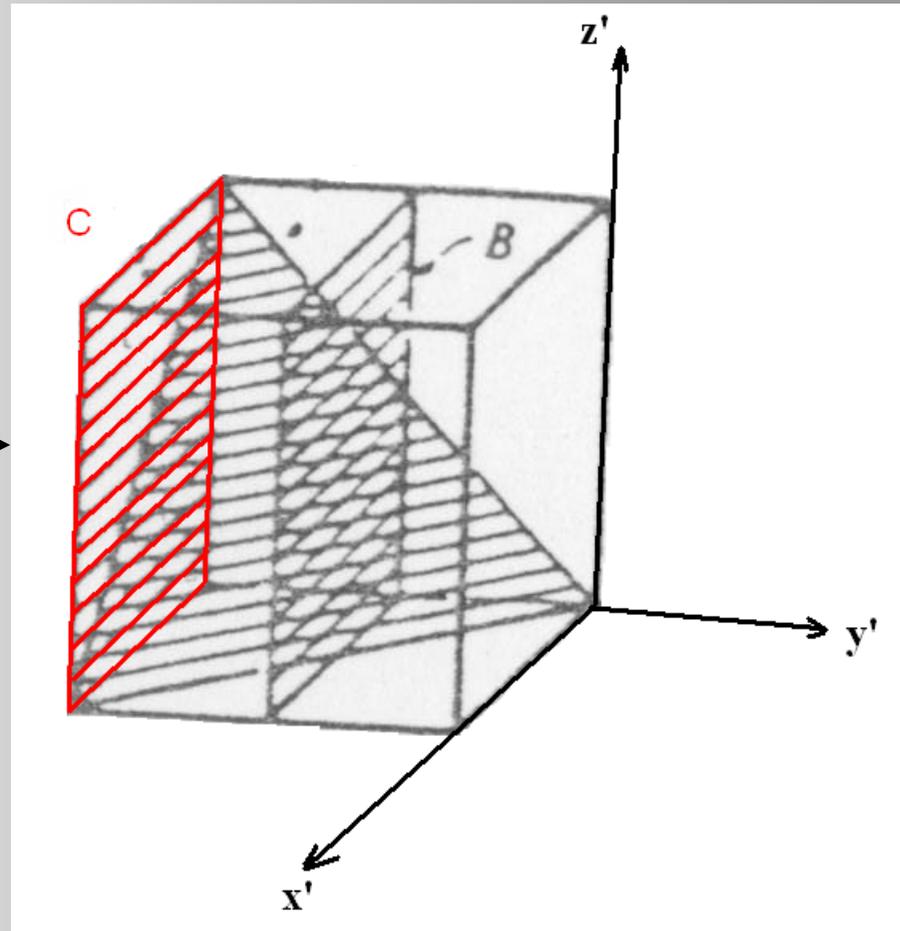
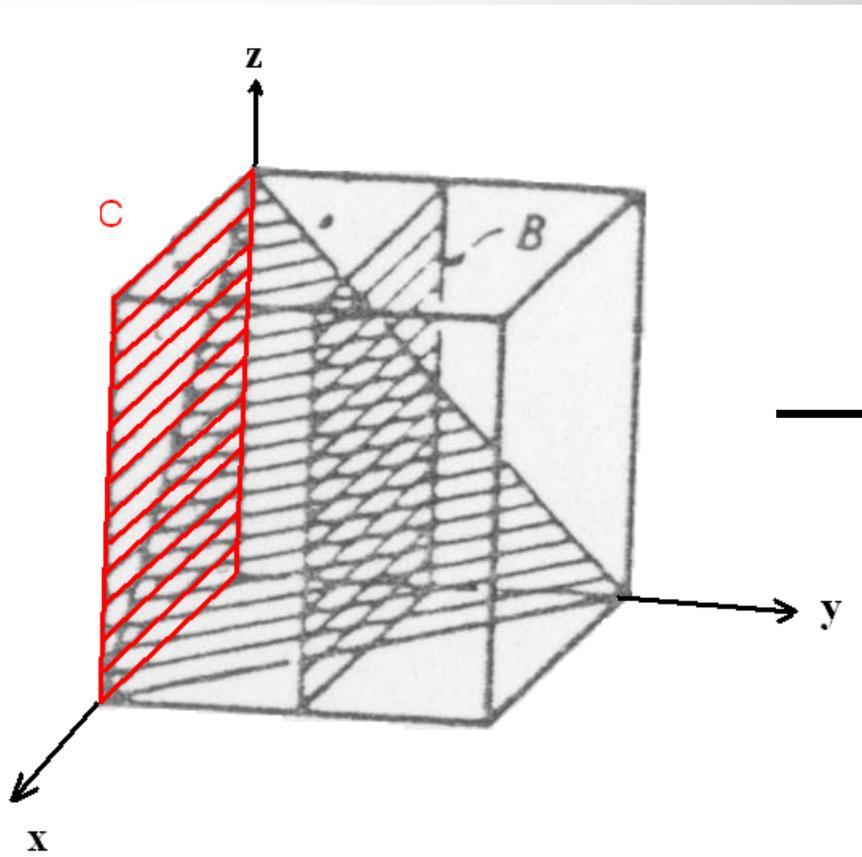
Determinar los índices de Miller de los planos A, B y C



Plano A: (1 1 1)

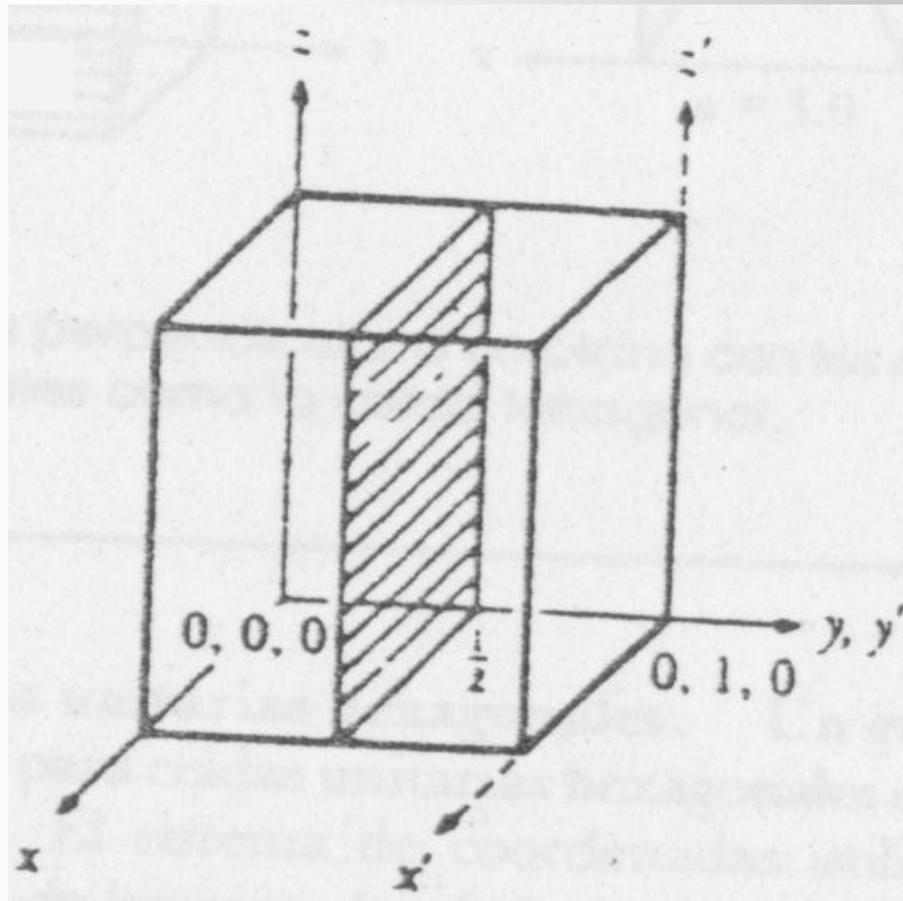


Plano B: (0 2 0)



*Plano C :  $(0\bar{1}0)$*

## Ejemplo 3



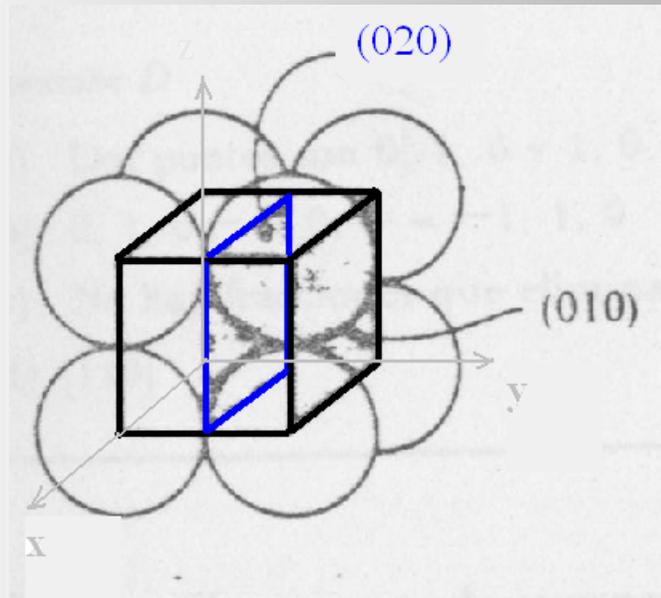
$$(0\ 2\ 0)$$

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

Indices de Miller que sólo difieren en el signo, identifican al mismo plano

## Ejemplo 4

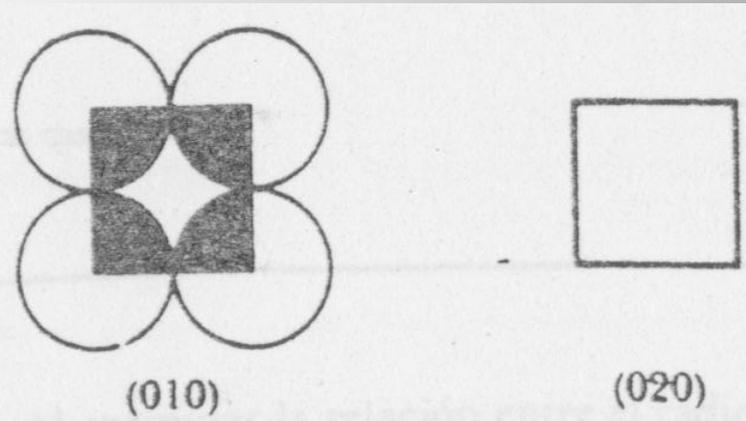
En una celda unitaria cúbica simple, los planos (010) y (020), son idénticos?



- Plano (010) intercepta ejes en  $(\infty, 1, \infty)$
- Plano (020) intercepta ejes en  $(\infty, 1/2, \infty)$

Los planos son paralelos pero diferentes

Comparación de la *densidad planar* (fracción del plano ocupada por átomos)



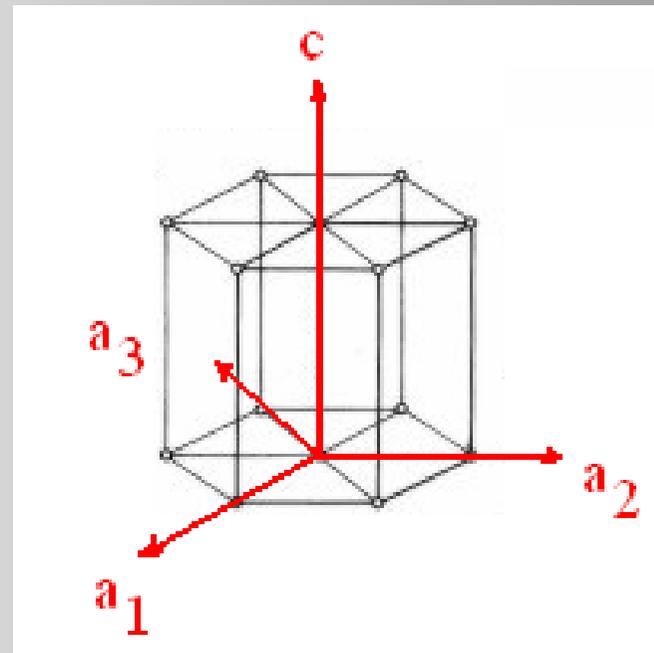
$$Densidad\ planar\ (010) = \frac{\left(\frac{1}{4}\text{ atomo / esquina}\right)(4\text{ esquinas})(\pi r^2)}{a_0^2} = \frac{\frac{1}{4} * 4 * \pi r^2}{(2r)^2} = 0,79$$

$$Densidad\ planar\ (020) = 0$$

Los índices de Miller de un plano y sus múltiplos NO representan planos idénticos.

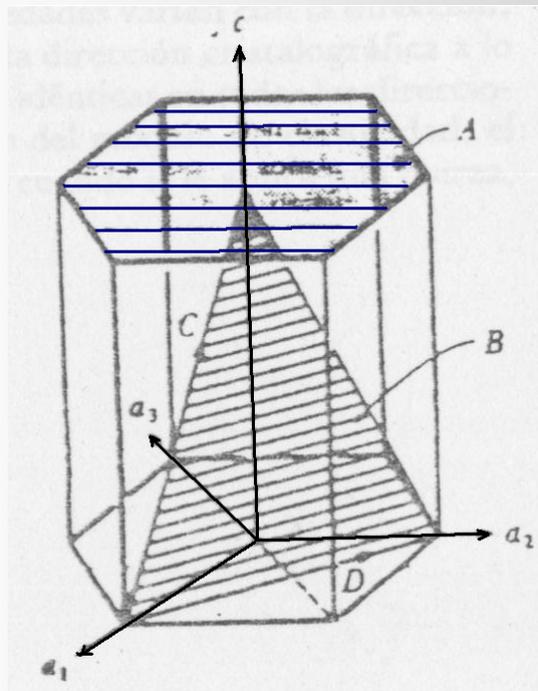
# Indices de Miller para planos en celdas unitarias hexagonales

- Sistema de coordenadas con 4 ejes (Indices de Miller-Bravais)
- La tercera coordenada es la suma de las dos primeras, con signo negativo
- Planos:  $(a_1, a_2, a_3, c)$
- Direcciones:  $(a_1, a_2, c)$



## Ejemplo 5

Determinar los índices de Miller-Bravais para los planos A y B, y las direcciones C y D



*Plano A:*  $(0001)$

*Plano B:*  $(11\bar{2}1)$

*Dirección C:*  $[\bar{1}01]$

*Dirección C:*  $[\bar{1}10]$

# Planos y Direcciones de Compacidad

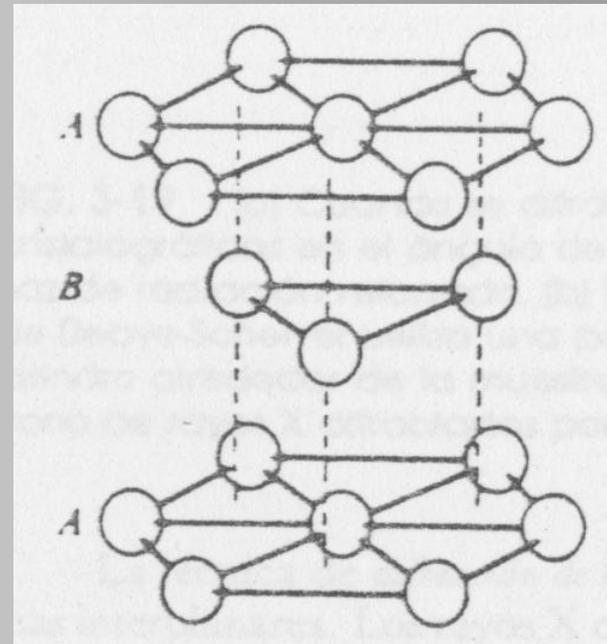
Aquellos en que los átomos están en contacto continuo

Estructura Hexagonal compacta

Planos de compacidad:

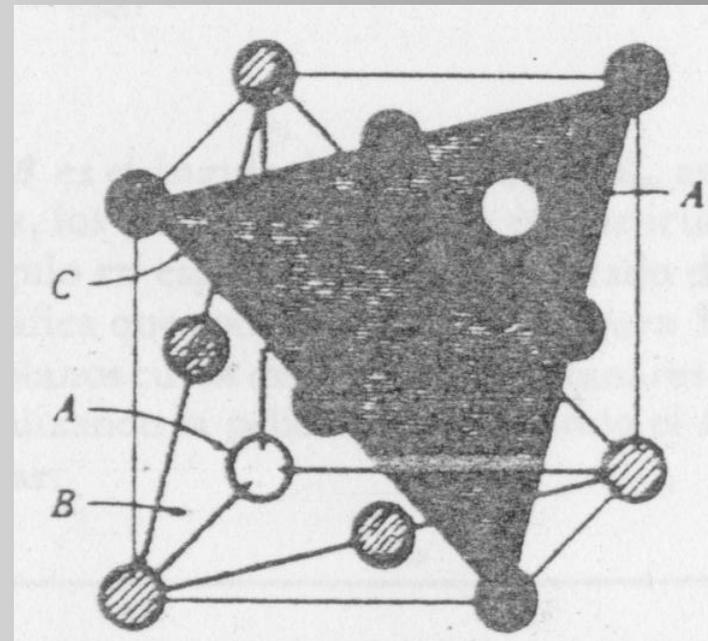
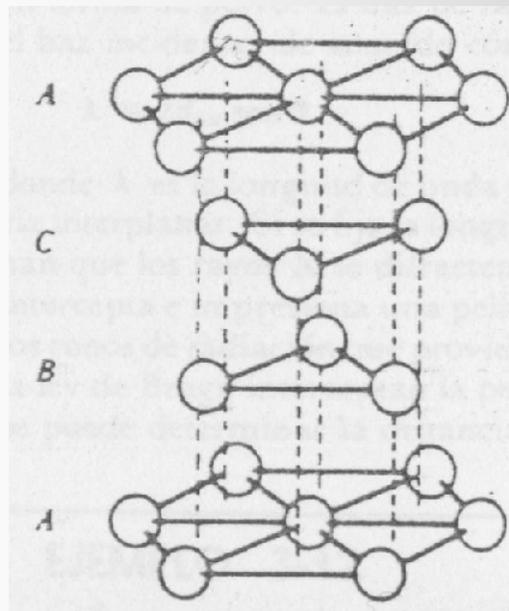
(0001) A y

(0002) B → planos basales

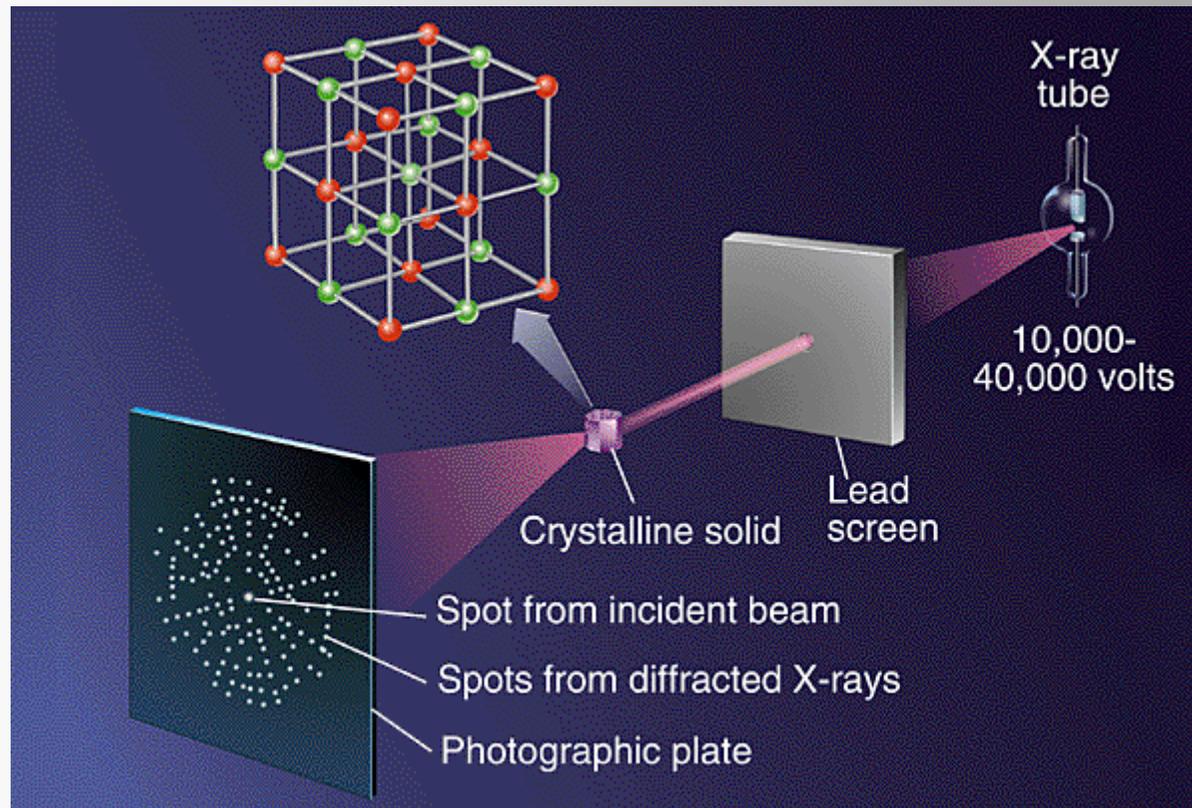


# Estructura Cúbica Centrada en las Caras

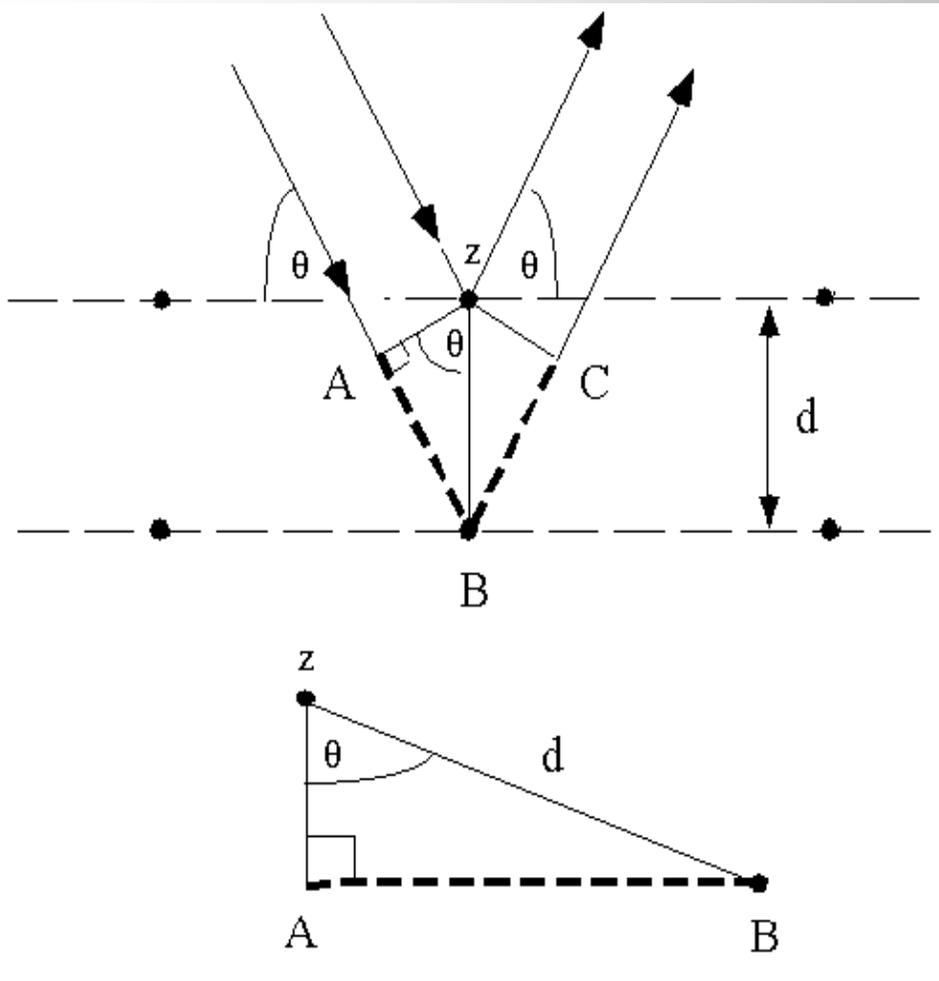
Planos de compacidad:  $\{1\ 1\ 1\}$



# Difracción de rayos X



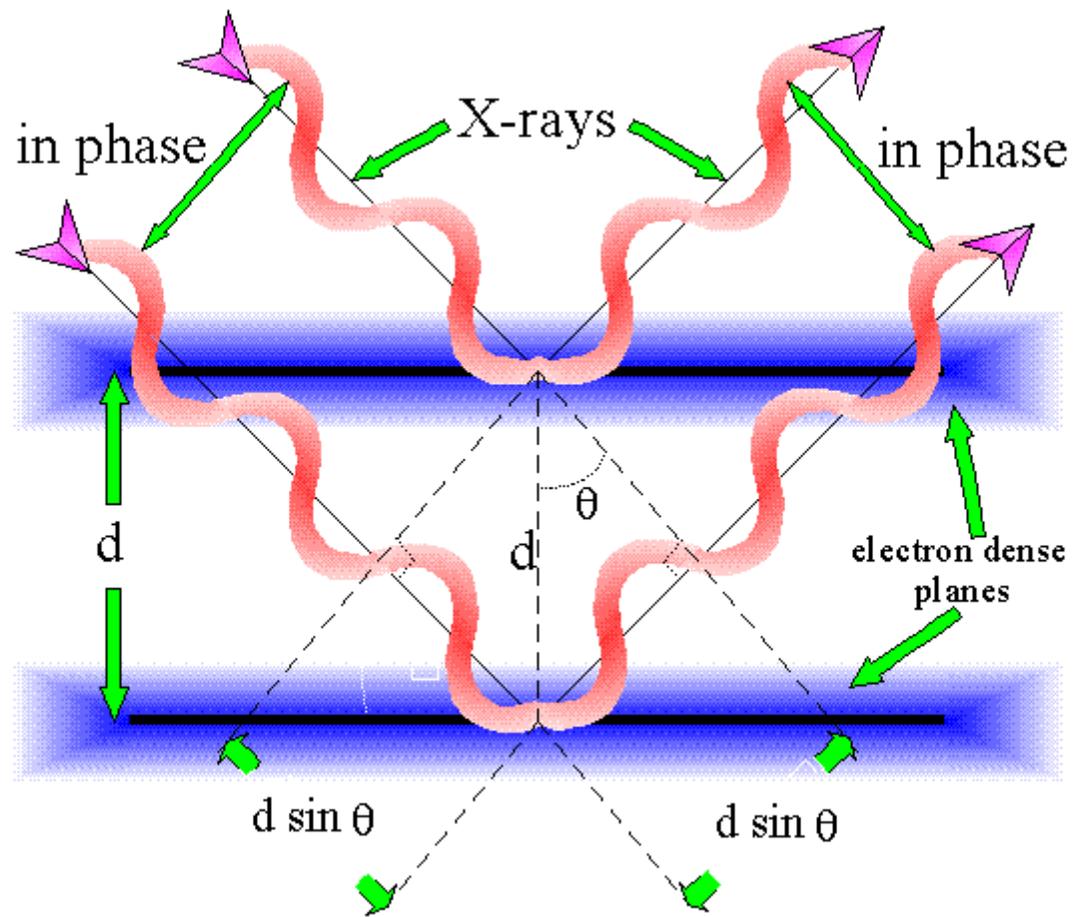
# Difracción de Rayos X



Ley de Bragg

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

- $d$ : distancia entre las capas atómicas en un cristal
- $\lambda$  : longitud de onda de los rayos X incidentes
- $n$ : un número entero



# Irregularidades en el arreglo atómico cristalino

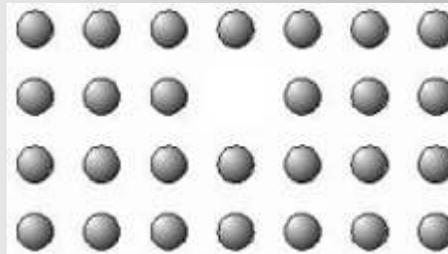
## Defectos

- puntuales
- de línea (dislocaciones)
  - dislocación de alabeo o de tornillo
  - dislocación de borde o de arista
- de superficie

# Defectos puntuales

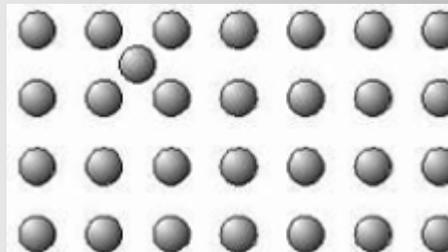
- VACANCIAS

Se producen por ausencia en la red de un átomo o ión



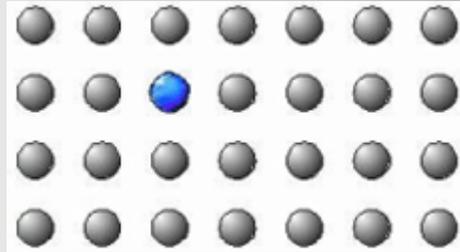
- ATOMO INTERSTICIAL

Inclusión en la red de un átomo fuera de las posiciones reticulares. Generalmente aparece unido a una vacancia



- ATOMO SUSTITUCIONAL

Entrada de un átomo (o ión) diferente en la red. Su efecto depende de su tamaño relativo a los átomos (o iones) originales.

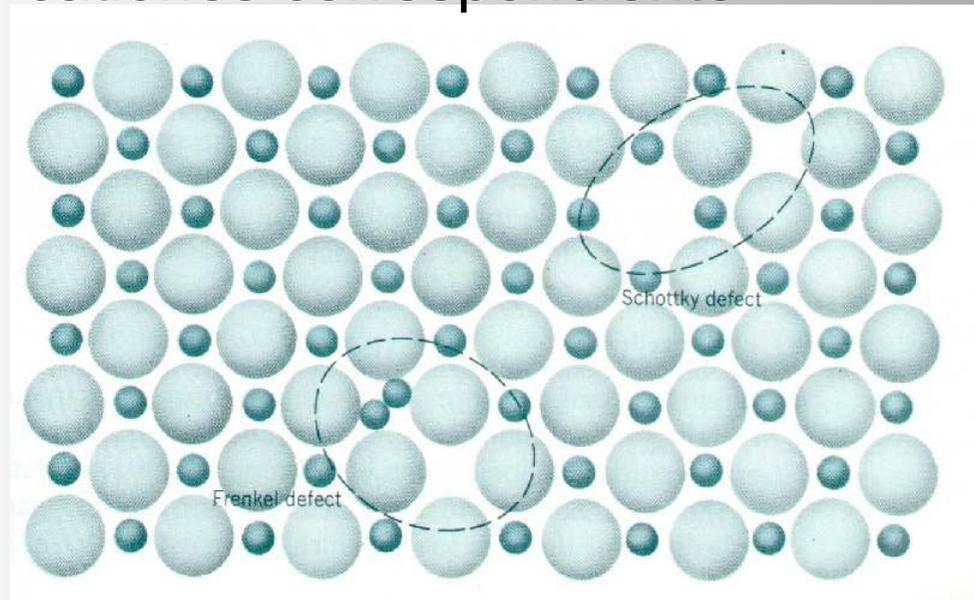


- DEFECTO DE FRENKEL

un átomo o ión ocupa una posición normalmente vacante, dejando a su vez vacante su propia posición.

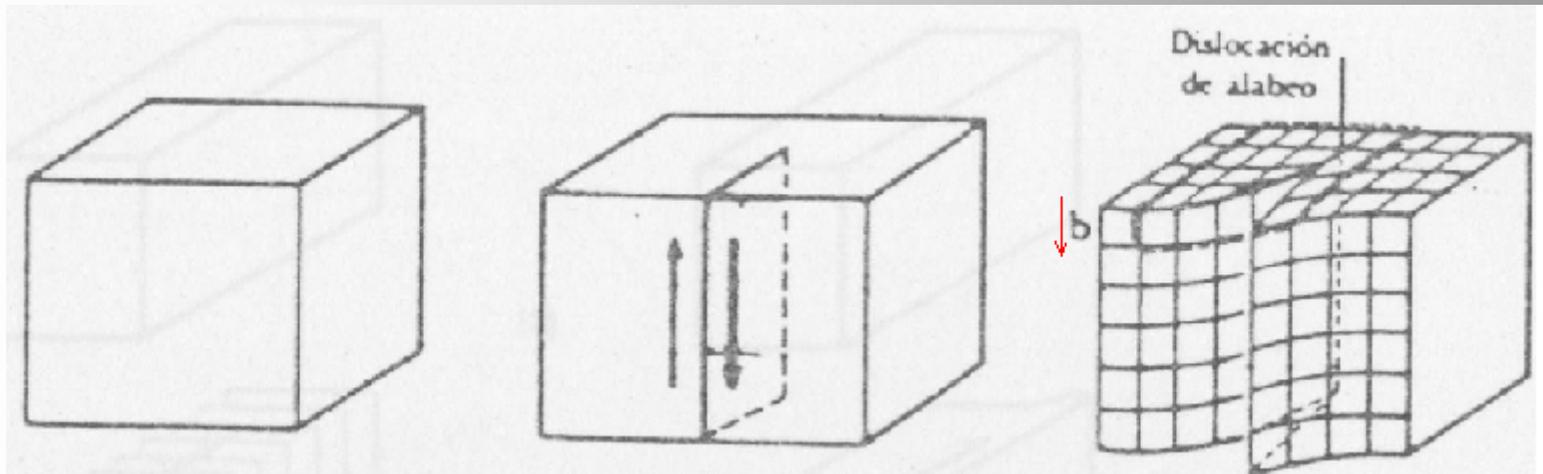
- DEFECTO DE SCHOTTKY

falta de un átomo (o ión) en una red cristalina, pero para mantener la neutralidad eléctrica, también faltan los aniones o cationes correspondiente



# Dislocación de alabeo o de tornillo

- Corte parcial a través de un cristal perfecto, volviendo a unir el cristal, desviándolo un espaciamiento atómico

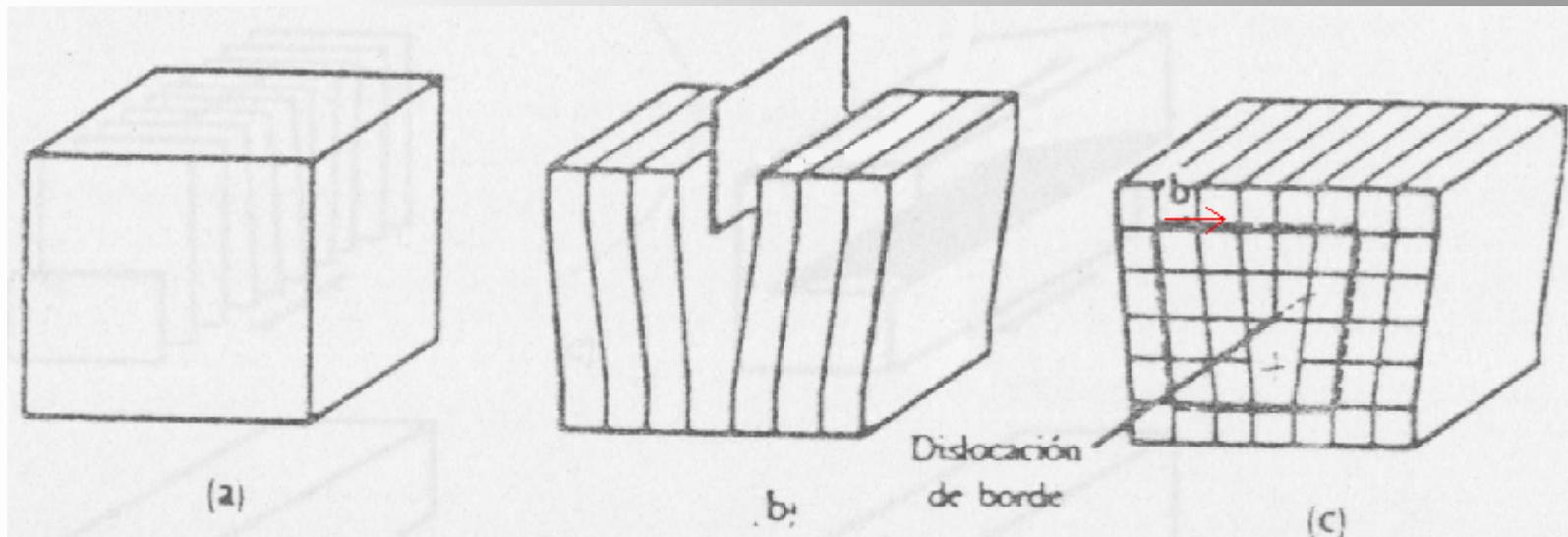


b: vector de Burguers: vector que se requiere para completar el giro y volver al punto de partida

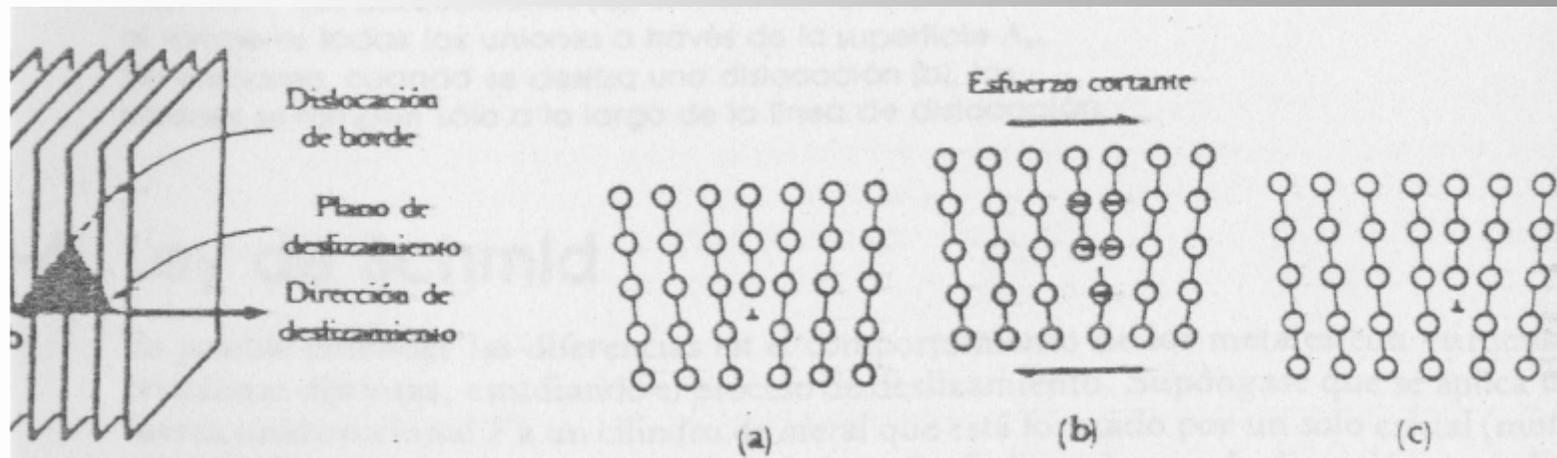
b es paralelo a la dislocación de tornillo

## Dislocación de borde o de arista

- Dividir parcialmente un cristal perfecto, separando el cristal y llenando el corte con un plano adicional de átomos



$b$  es perpendicular a la dirección de borde



Quando se aplica una fuerza cortante a la dislocación en (a), los átomos se desplazan (b), hasta que la dislocación se mueve un vector de Burgers en la dirección de deslizamiento

# Deformación de cristales

- Fuerza cortante en la dirección de  $b$ , sobre un cristal que contiene una dislocación  $\Rightarrow$  la dislocación se mueve
- Efecto: deformación visible en el cristal

Deslizamiento: proceso por el cual se mueve una dislocación y causa deformación

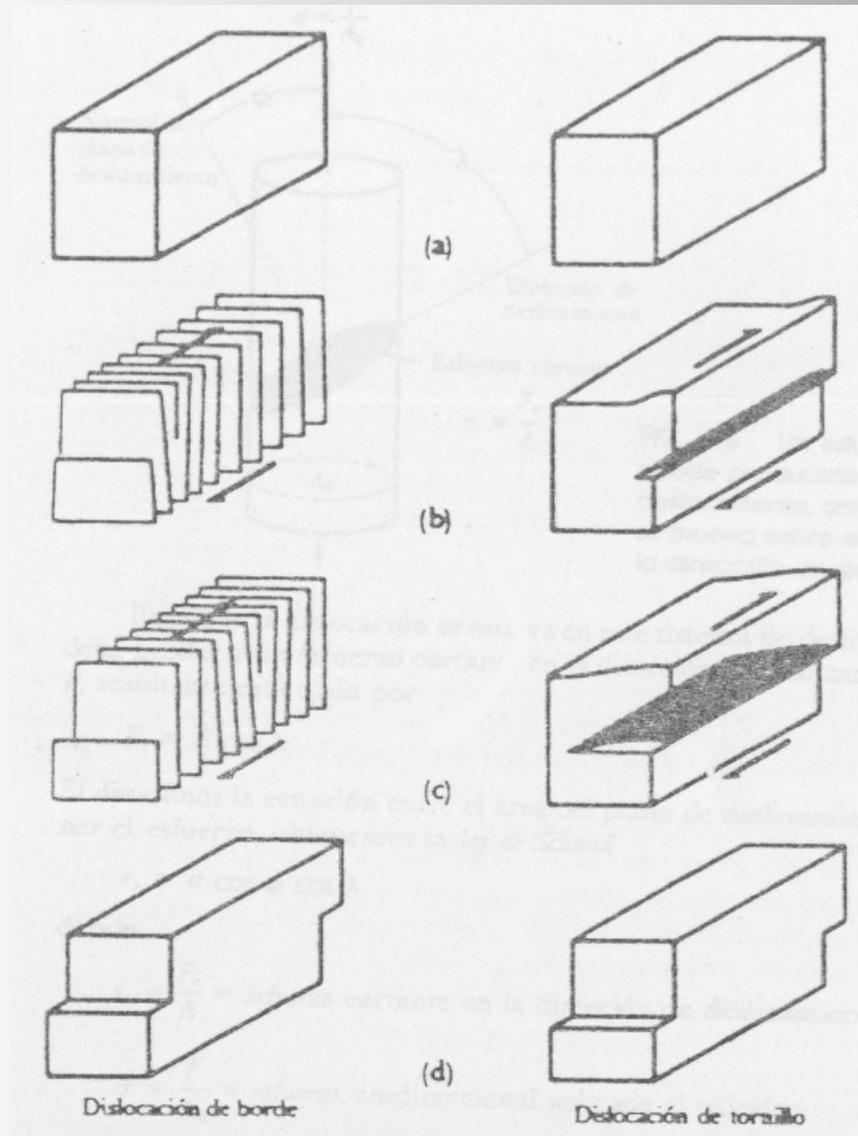
Dirección de deslizamiento: dirección en la cual se mueve la línea de dislocación. Suele ser una dirección compacta.

Plano de deslizamiento: aquel formado por el vector de Burguers y la dislocación. Suele ser un plano compacto.

# Deformación de cristales

Dislocación de borde:

Dirección de deslizamiento: la de b



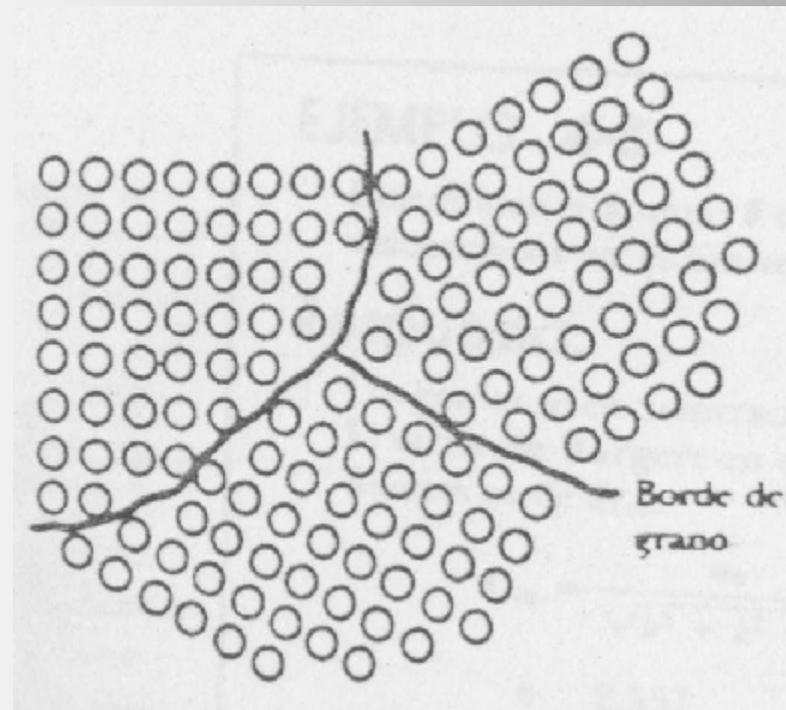
Dislocación de tornillo:

Dirección de deslizamiento: perpendicular a b

# Defectos de superficie

- Borde de grano

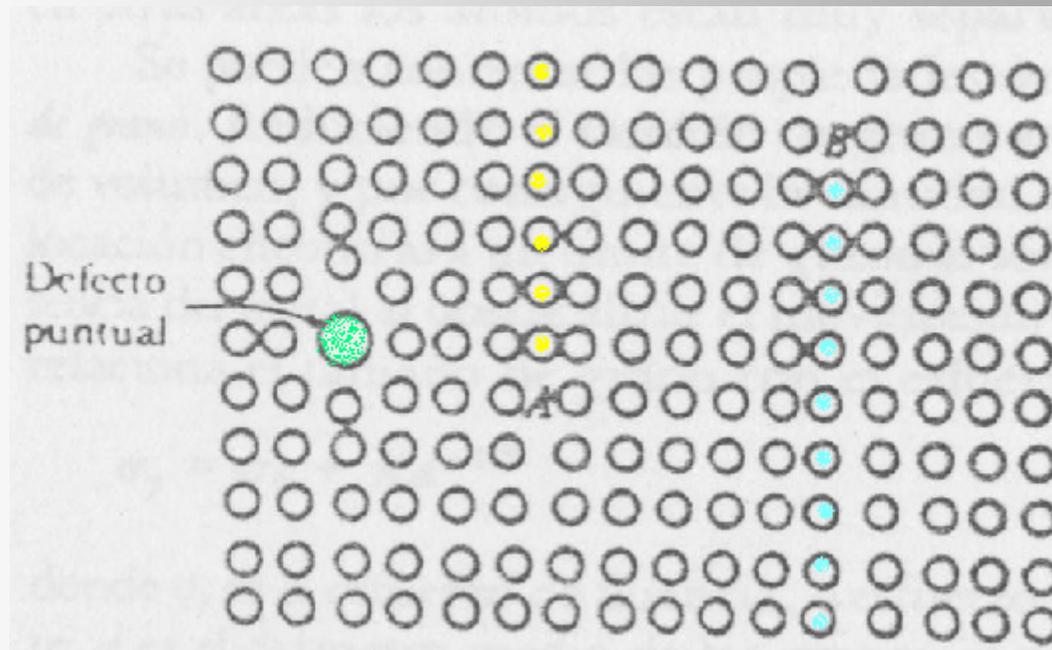
La mayoría de los materiales son policristalinos



## Interacción entre dislocaciones

Al incrementar el número de dislocaciones se incrementa la resistencia mecánica del metal

- Si la dislocación en A se mueve a la izquierda, es obstruida por el defecto puntual.
- Si la dislocación se mueve a la derecha, interactúa con el desorden de red cerca de la segunda dislocación en el punto B.



- Metales son blandos y deformables a causa del movimiento de las dislocaciones en la estructura cristalina
- El endurecimiento se produce cuando se dificulta este movimiento
- Mecanismos:
  - deformación en frío
  - endurecimiento por aleación