

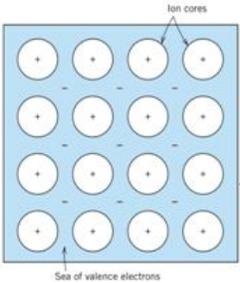
## Estructuras Cristalinas más usuales de Metales Puros (y de sus soluciones sólidas)

### Cristales metálicos

Reglas generales  
 Para un cristal al equilibrio químico, los átomos se ordenarán en forma regular y compacta, de manera compatible con:

- neutralidad eléctrica
- relación entre radios iónicos
- direccionalidad y número de enlaces

Para metales puros: Modelo de esferas duras en contacto.  
Hipótesis: iones con simetría esférica



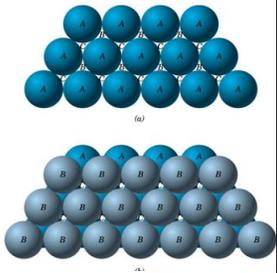
### Modelo de Esferas Duras en Contacto (MEDC)

Esferas: simetría iónica\*  
 Duras: iones impenetrables por otros iones. Fuerzas de repulsión y radio iónico.  
 Contacto: por las fuerzas de enlace  
 \*: hipótesis básica

Primer resultado

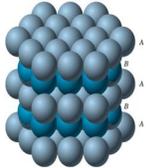
- Planos hexagonales compacto

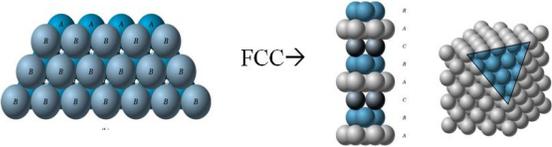
El apilamiento es encajado



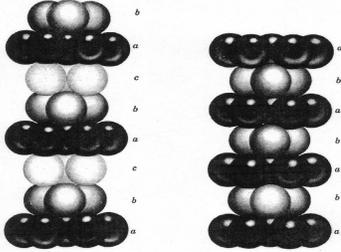
### Segundo Resultado del MEDC

Dos formas de apilamiento regular encajado de planos compactos:  
 ABABAB... (HCP)  
 y  
 ABCABC... (FCC)

HCP → 

FCC → 

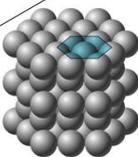
### Dos arreglos netamente distinguibles de planos hexagonales compactos

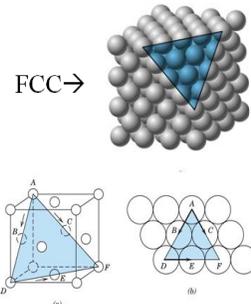


Cubic close packing      Hexagonal close packing

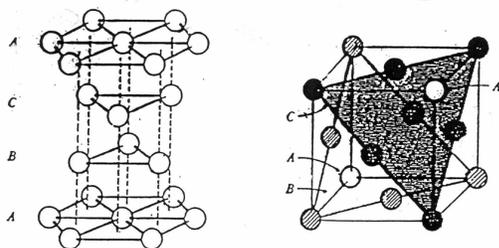
Fig. 1.6 Perspective of FCC and HCP structures viewed parallel to close-packed layers.

### Planos Hexagonales Compactos en Cristales HCP (1 conjunto) y FCC (4 conjuntos)

HCP → 

FCC → 

### Cristal Cúbico Centrado en las Caras. ¿Red y Motivo?



### Estructuras cristalinas más frecuentes de Metales Puros (Experimental)

- Revisando una Tabla Periódica adecuada se observa:
  - HCP y CFC, previsto por el MEDC. (Estas son las únicas estructuras que contienen planos hexagonales compactos).
  - CBC, NO previsto por el MEDC. Incluye al Fe alfa.
  - Hay algunos metales no estructurales que presentan otras estructuras cristalinas.

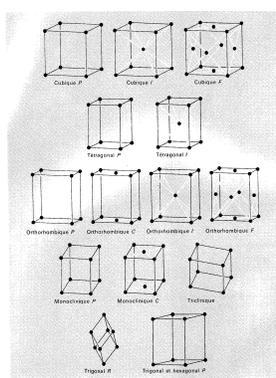
(Es muy importante si la hipótesis de esfericidad se cumple o no).

Tableau 4 Structure cristalline des éléments

Les valeurs sont données à la température ambiante pour les formes usuelles, ou à la température indiquée en deg K. Pour plus ample information consulter Wyckoff, Vol. 1, Chap. 2, et le tableau A-6 de Barrett et Massalski. Les structures notées « complexes » y sont décrites. La notation *ABAC* indique la séquence d'empilement des plans denses.

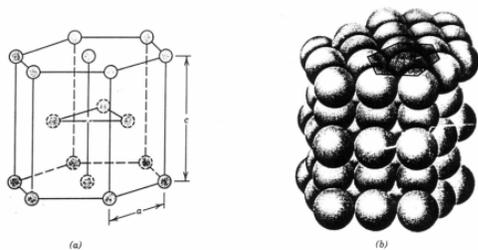
El.	Structure cristalline	Paramètre <i>a</i> , en Å	El.	Structure cristalline	Paramètre <i>a</i> , en Å
Li	cc	3,57	Al	cc	3,57
Be	cc	3,59	Si	cc	3,57
B	cc	3,57	P	cc	3,57
C	cc	3,57	S	cc	3,57
N	cc	3,57	Cl	cc	3,57
O	cc	3,57	Ar	cc	3,57
F	cc	3,57	Kr	cc	3,57
Ne	cc	3,57	Xe	cc	3,57
Na	cc	3,57	Rn	cc	3,57
Mg	cc	3,57			
Al	cc	3,57			
Si	cc	3,57			
P	cc	3,57			
S	cc	3,57			
Cl	cc	3,57			
Ar	cc	3,57			
Kr	cc	3,57			
Xe	cc	3,57			
Rn	cc	3,57			

### Estructura Cristalina= Motivo Atómico (\*) Red Nodal



- Cada una de las 14 redes nodales 3D se describe por un celda convencional, ver figura adjunta.
- Recuerde que los nodos son puntos geométricos, no átomos

### Cristal Hexagonal Compacto ¿Red y Motivo?



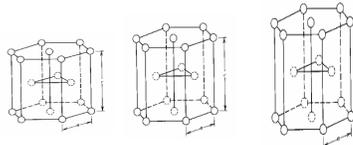
### Factores de esbeltez reales

Cristal	<i>c/a</i>	Cristal	<i>c/a</i>	Cristal	<i>c/a</i>
He	1,633	Zn	1,861	Zr	1,594
Be	1,581	Cd	1,886	Gd	1,592
Mg	1,623	Co	1,622	Lu	1,586
Ti	1,586	Y	1,570		

La estructura cristalina y el valor del factor se determinan por difracción de R-X.

Interpretación de estos resultados experimentales de la tabla:

Solo para el He los átomos se comportan como esféricos. En el Ti, los iones son más achatados y en el Zn, más alargados.



### CRISTAL CCC (CFC)

Nótese el apilamiento ABCABC... en la celda cúbica.

### El mecanismo más importante de: Deformación plástica en metales.

- Tracción.
- Deformación plástica (irreversible) de un monocristal de Zinc, apropiadamente orientado.
- El mecanismo de deformación es por deslizamiento de los planos más densos del cristal.
- Bandas de deslizamiento.

### Sistemas de deslizamiento

Un sistema de deslizamiento incluye:

- una dirección cristalina densa. Se ha observado que ésta es siempre sólo la 1º más densa
- y un plano cristallino denso. Se ha observado que el plano 1º más denso siempre participa; en algunos casos también participan otros algo menos densos (casos del Ti y del Fe alfa). Ver tabla siguiente.

A un plano hexagonal compacto se asocian tres direcciones densas. Eso da lugar a tres sistemas de deslizamiento con ese plano.

### Sistemas de deslizamiento observados en metales

ESTRUC-TURA	PLANO DE DESLIZAM-ENTO	DIRECCION DE DESLIZAM-IENTO	NUMERO DE SISTEMAS DE DESLIZAM-IENTO
CCC Cu, Al, Ni, Pb, Au, Ag, $\gamma$ Fe,...	{111}	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	$4 \times 3 = 12$
HC Cd, Zn, Mg, Ti, Be,...	{0001}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$1 \times 3 = 3$
Ti	{10\bar{1}0}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$3 \times 1 = 3$
Ti, Mg	{10\bar{1}1}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$6 \times 1 = 6$

- Compare los casos del Cu (CC), Zn(HC) y Ti(HC).
- ¿Por qué la diferencia entre el Zn y el Ti? Por el factor de esbeltez.

### Las 3 estructuras metálicas más frecuentes

### Preguntas

•En el contexto del MEDC, suponga átomos esféricos de radio R. R es un dato, que debe usar como unidad de medida.

- Compare las densidades del cristales HCP y CFC. Unidades: # átomos/volumen.
- Físicamente, ¿por qué un arreglo atómico cúbico simple no es posible?

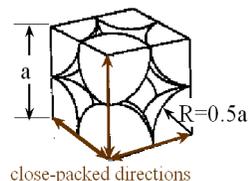
## Problemas

- Calcule el Número de Coordinación, o Número de Primeros Vecinos en los siguientes cristales.
  - Cúbico simple (C)
  - Cúbico de cuerpos centrados (CCC, FCC)
  - Cúbico de caras centradas (CC, BCC)
  - Hexagonal compacto (HC, HCP)

(Mientras mayor es el NC de una estructura de átomos de radio R, más densa es esa estructura).

## Factor de Empaque Atómico (FEA o APF)

- Definición  
APF= Vol. de átomos en la celda/Vol. celda



Problema. Calcule el APF de una celda cúbica simple (C), aplicando MEDC.

Respuesta.  
APF= 0,52

## Cálculo de la Densidad (geométrica) de un Cristal

Para un cristal dado, se calculará:  
 $\rho^{3D} = \# \text{ átomos} / \text{Vol}$

Emplearemos como unidades, salvo que se indique lo contrario, para independizarnos del valor métrico del radio atómico, R:

$\rho^{3D} [\# \text{ átomos} / R^3]$

Problema  
Considere el MEDC y átomos de radio R.

a) Calcule  $a(R)$  y  $\rho^{3D} [\# \text{ átomos} / R^3]$  para cristales:

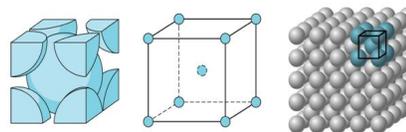
- 1.C
- 2.CC
- 3.CCC
- 4.HC

b) Calcule  $\rho^{2D} [\# \text{ átomos} / R^2]$  para una dirección tipo arista y para la dirección más densa de un cristal CCC.

## Problema planteado para un cristal CC (CBC)

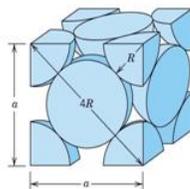
Considere el MEDC y átomos de radio R.

- Calcule  $a(R)$  y  $\rho^{3D} [\# \text{ átomos} / R^3]$ .
- Calcule  $\rho^{1D} [\# \text{ átomos} / R^2]$  para una dirección tipo arista y para la dirección más densa del cristal.



## Problema propuesto

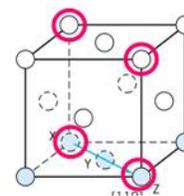
- El Al es un cristal CCC (CFC) de radio atómico  $R = 0,1431$  nm. Calcule la densidad de un cristal de Al en  $[g / cm^3]$ . Para trabajar, busque en una tabla los valores del número de Avogadro y del peso molar del Al. Compare su resultado con valores de tabla de la densidad  $[g / cm^3]$  del Al.



## Densidad planar, $\rho^{2D} [\# \text{ átomos} / R^2]$

- Considere un cristal CC (BC) y el plano al cual pertenecen los átomos en rojo, ver figura adjunta.

Calcule la densidad  $\rho^{2D} [\# \text{ átomos} / R^2]$  de tal plano.

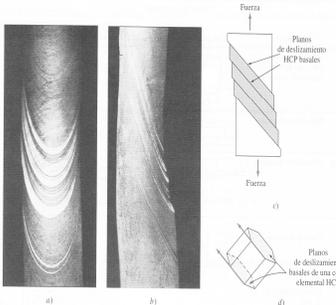


### Comportamiento mecánico y cristales

- La figura adjunta corresponde a un experimento de comportamiento mecánico ya tratado en clase.
- ¿Qué muestra el experimento?
- ¿Cómo se relaciona éste con la materia de cristales?



### El mecanismo más importante de: Deformación plástica en metales.



- Tracción.
- Deformación plástica (irreversible) de un monocristal de Zinc, apropiadamente orientado.
- El mecanismo de deformación es por deslizamiento de los planos más densos del cristal.
- Bandas de deslizamiento.

### Cambios alotrópicos del Fe puro

- Bajo condiciones de equilibrio, el Fe puro experimenta, al ser calentado, los siguientes cambios de estructura (Smith):  $Fe\alpha$  (CBC)  $\rightarrow$   $Fe\delta$  (CFC)  $\rightarrow$   $Fe\gamma$  (CBC)  $\rightarrow$  L

Calcule el cambio porcentual de volumen al pasar de  $Fe\alpha$  (CBC)  $\rightarrow$   $Fe\delta$  (CFC).

Aplique el MEDC y suponga átomos de radio R, una constante. (Precise el signo del cambio de volumen).

### Polimorfismo o Alotropía del Fe puro (Figura del texto de Smith)

Bajo condiciones de equilibrio, el Fe puro presenta cambios de estructura cristalina. Esos cambios son transformaciones de fase, al estado sólido.

Fase: región de materia homogénea. Su composición, orden atómico y propiedades son característicos.

$Fe\alpha$  (CBC) y  $Fe\delta$  (CBC) corresponden a la misma estructura.

La fase  $Fe\alpha$  se llama Ferrita.

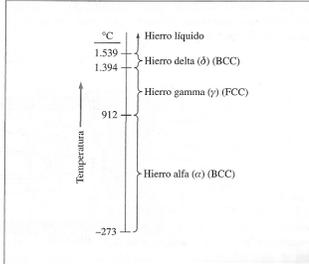


FIGURA 3.24. Formas cristalinas alotrópicas del hierro entre distintos rangos de temperatura a presión atmosférica.

### Problema

Calcule el cambio porcentual de volumen al pasar de  $Fe\alpha$  (CBC)  $\rightarrow$   $Fe\delta$  (CFC).

Aplique el MEDC y suponga átomos de radio R, una constante. (Precise el signo del cambio de volumen).

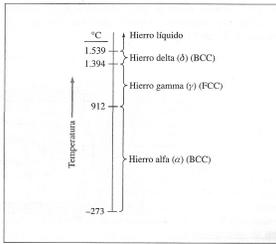


FIGURA 3.24. Formas cristalinas alotrópicas del hierro entre distintos rangos de temperatura a presión atmosférica.

### Bibliografía principal

- William Callister, *Materials Science and Engineering, an Introduction*, Seventh Edition, John Wiley and Sons, 2007.

Cristal de ADN

