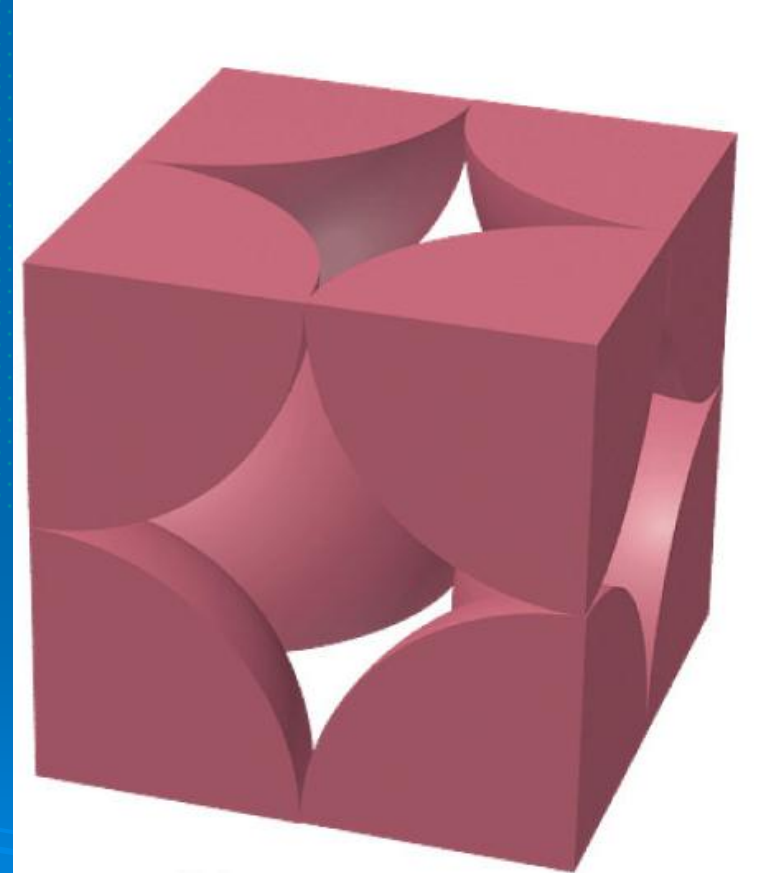
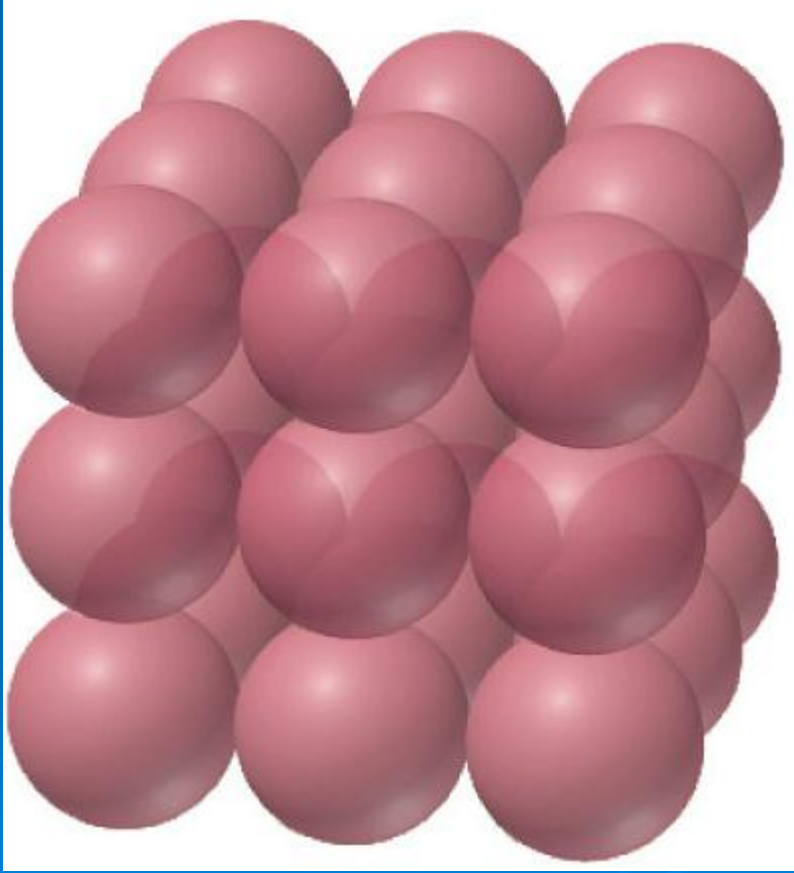


ESTRUCTURA DE LOS MATERIALES 2

FACTOR DE EMPAQUETAMIENTO

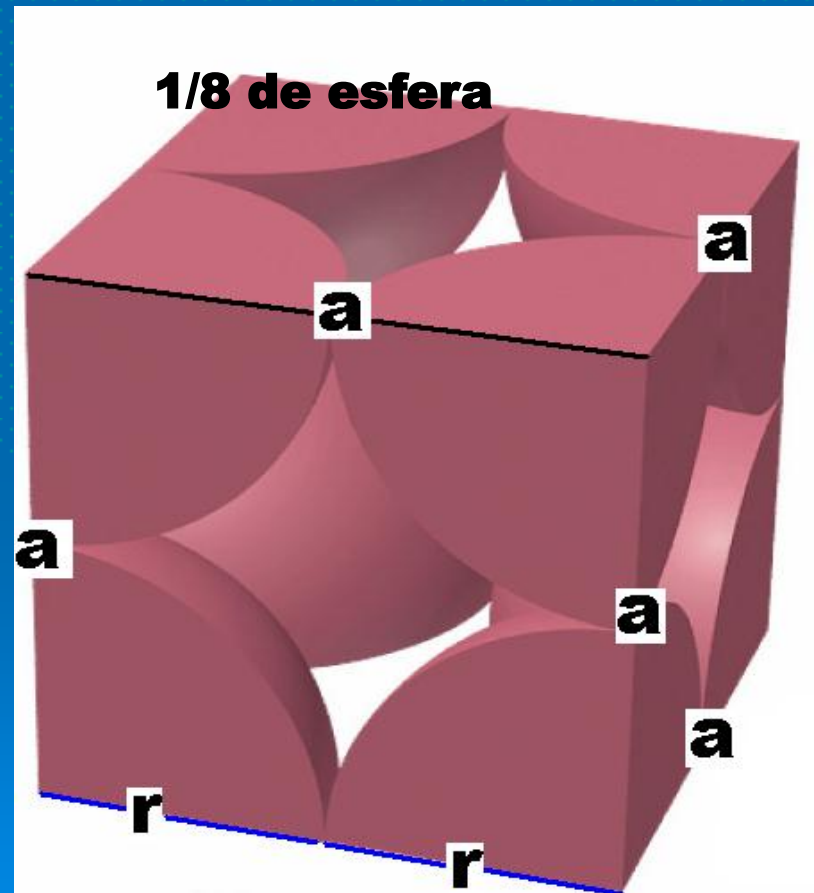
$FEA = (\text{No de átomos por celda} \cdot \text{Vol de un átomo}) / V (\text{celda})$

FORMA O ESTRUCTURA CÚBICA SIMPLE – CS –



RELACIÓN RADIO Y ARISTA. CS.

$$a = 2r. \text{FEA} = 0.52. \text{No Coord.} = 6$$



➤ FEA = (# átomo por celda)(volumen de 1 átomo) ÷ volumen celda

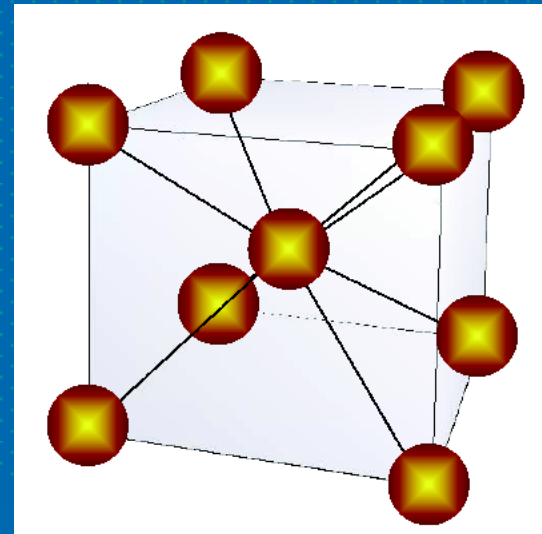
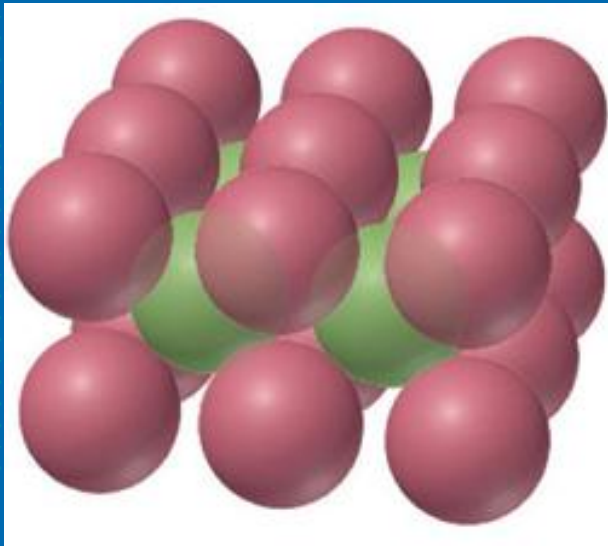
$$= (V_{\text{át}} \text{ por celda}) \cdot \text{Vol. 1 átomo} / a^3$$

$$= 1 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3 \div a^3$$

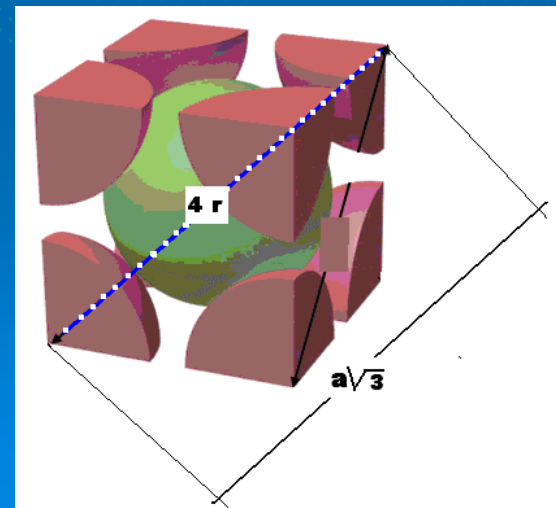
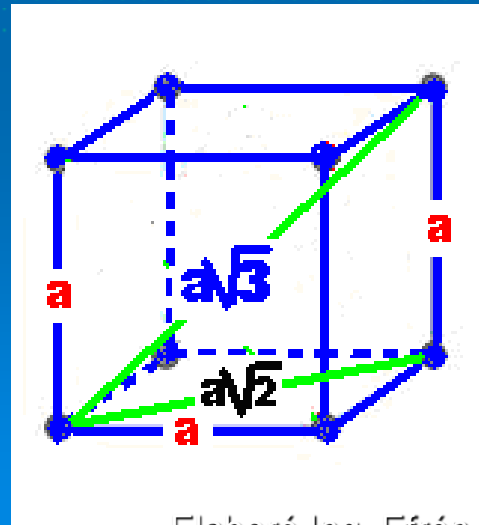
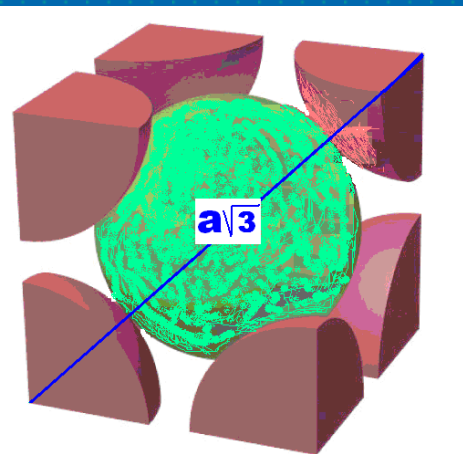
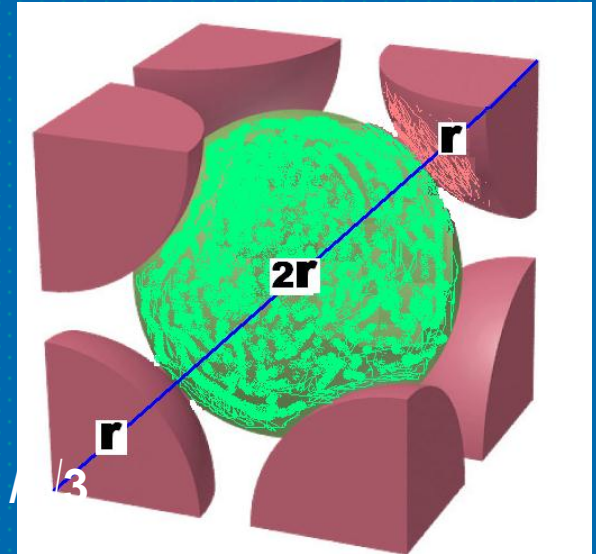
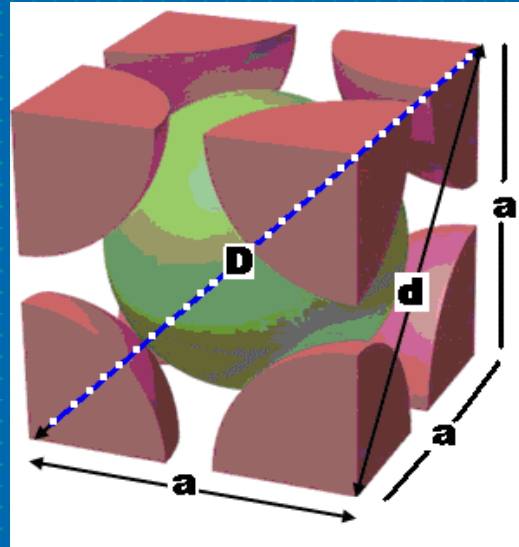
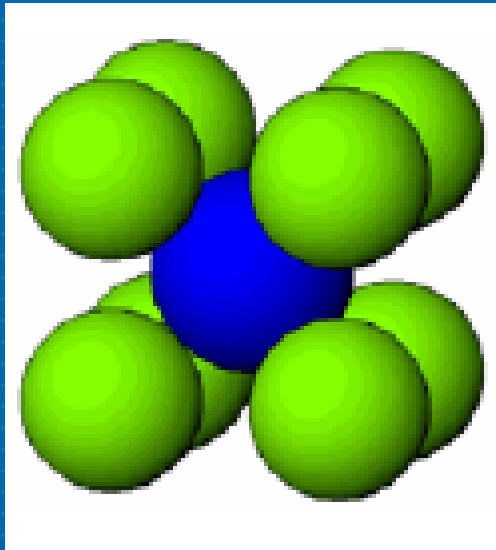
$$\text{pero } a = 2r$$

$$\text{➤ FEA} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3 / (2r)^3 = \pi / 6 = 0.52$$

FORMA CÚBICA DE CUERPO CENTRADO-BCC-



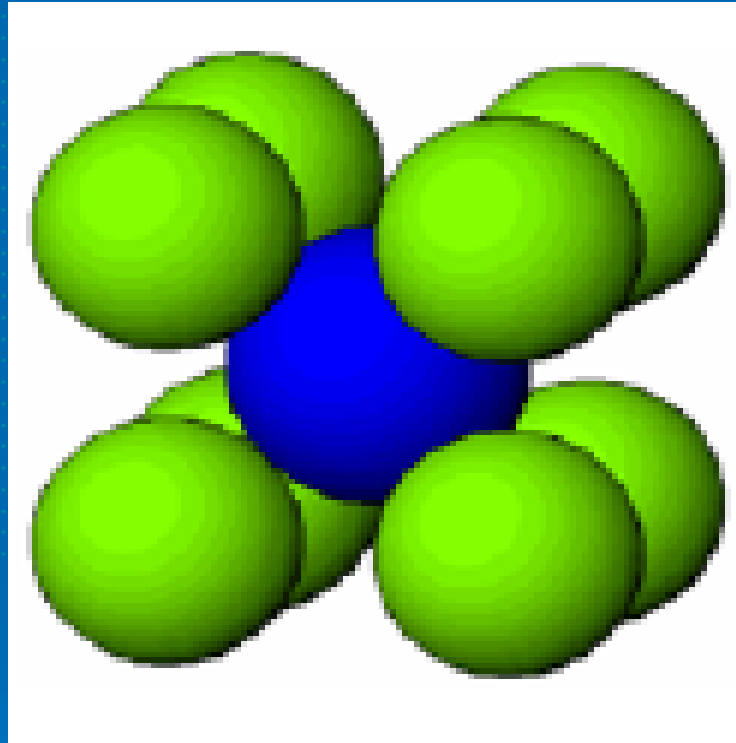
➤ bcc: metales de transición (vanadio, tungsteno, molibdeno, cromo)



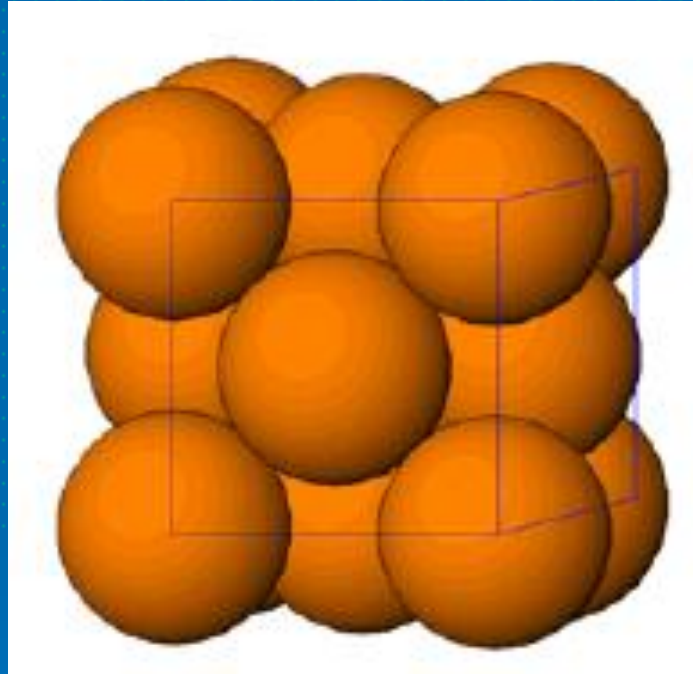
$$a\sqrt{3} = 4r \quad \dots\dots \quad a = 4r / \sqrt{3}$$

$$\mathbf{FEA} = \frac{2(4/3)\pi r^3}{a^3} = \frac{2(4/3)\pi r^3}{(4r/\sqrt{3})^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0.68$$

BCC: $a = 4r/\sqrt{3}$, FEA = 68% , No de Coord. = 8

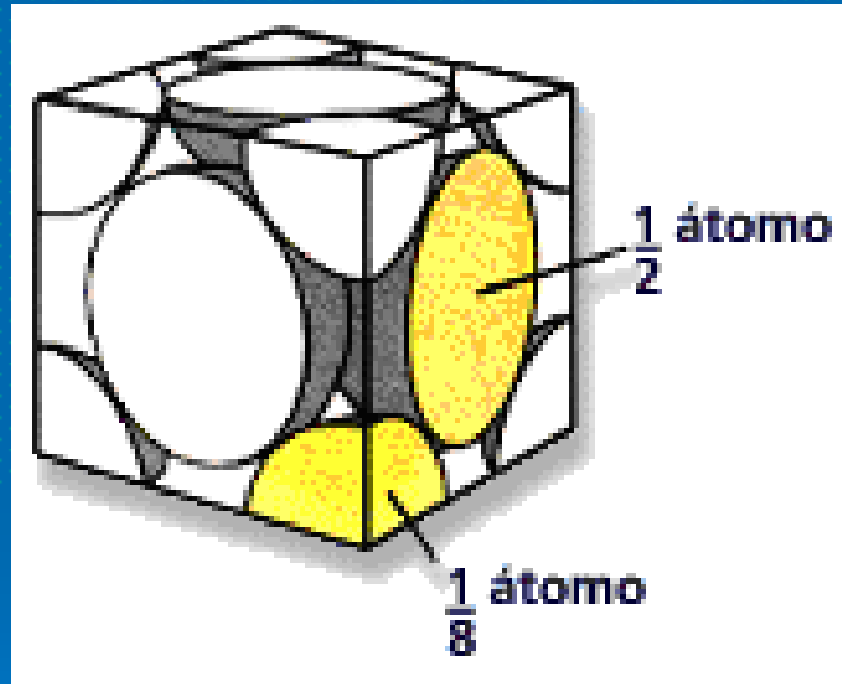


Forma Cúbica Centrada en las Caras ó FCC

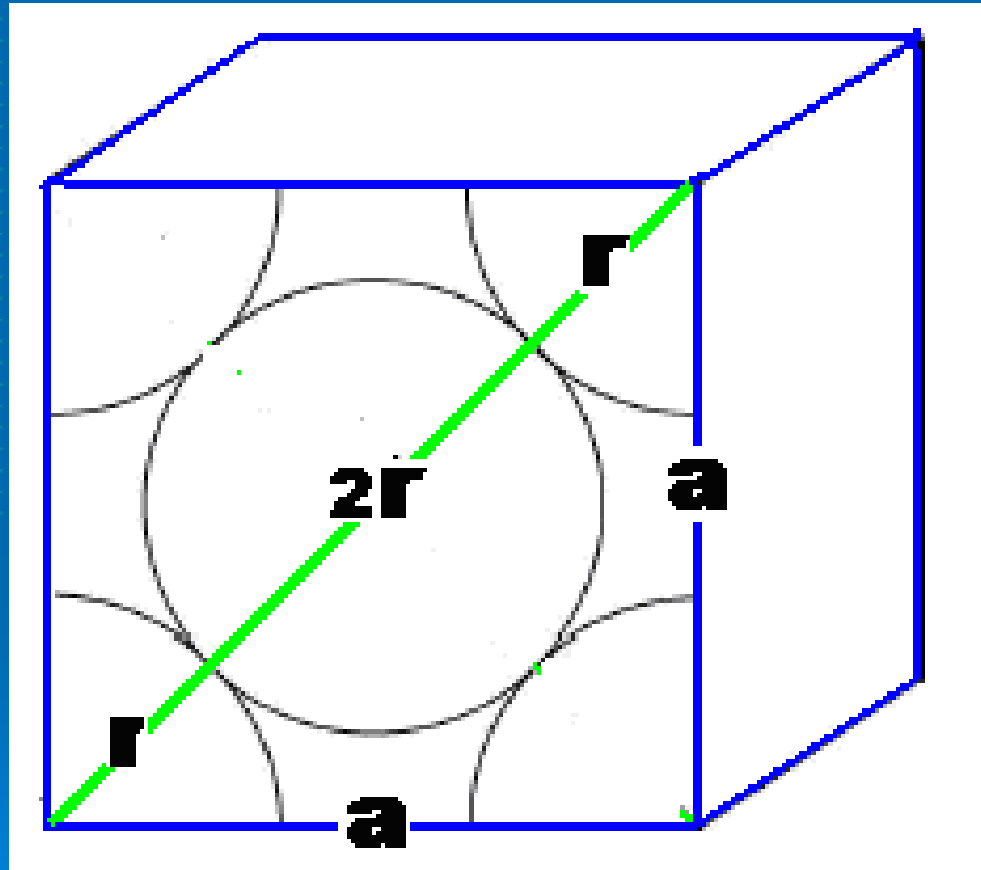


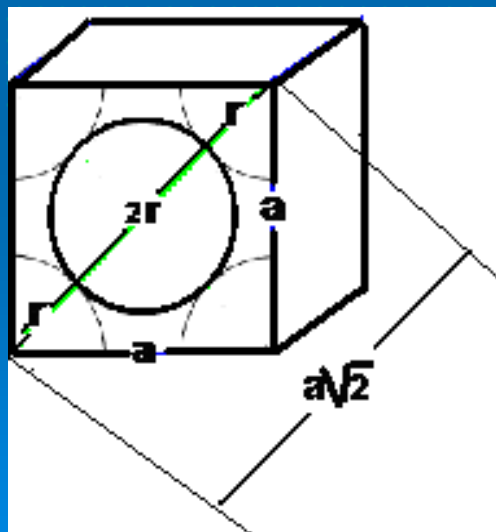
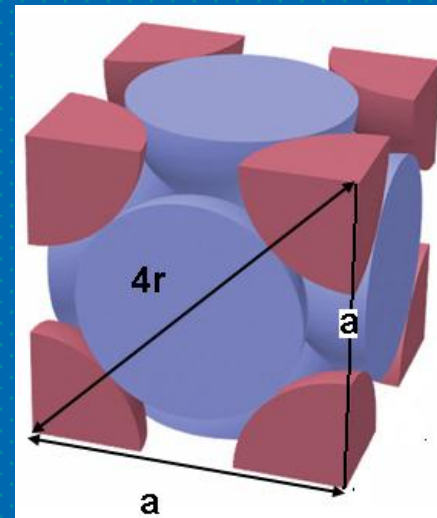
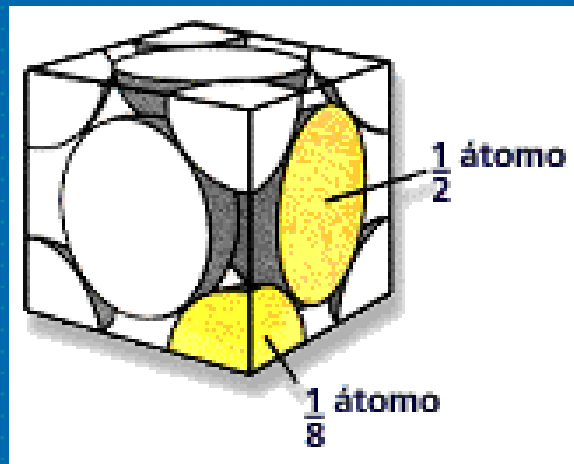
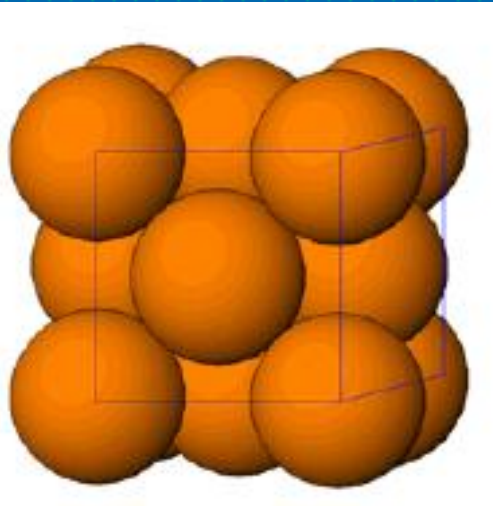
➤ fcc: cobre, plata, paladio, oro

CÚBICO DE CARAS CENTRADAS. -FCC-



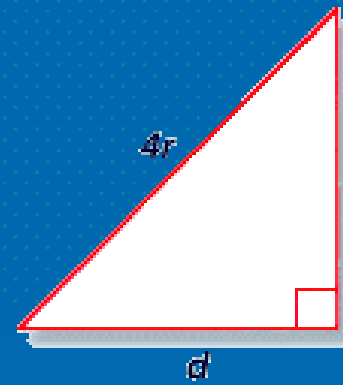
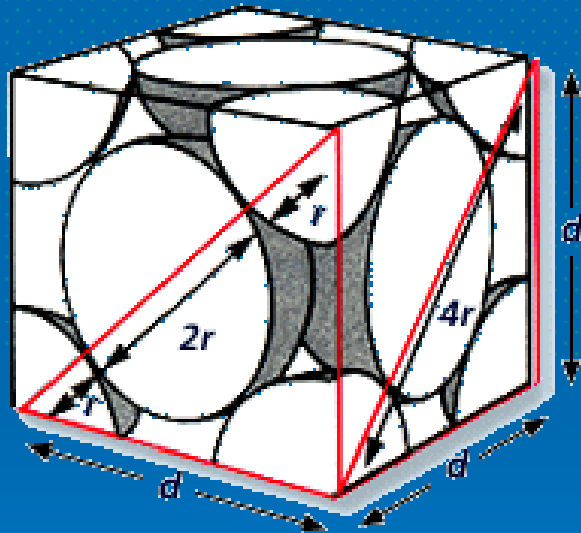
FCC: $a = 4r/\sqrt{2}$. FEA = 0.74 . No Coord.= 12



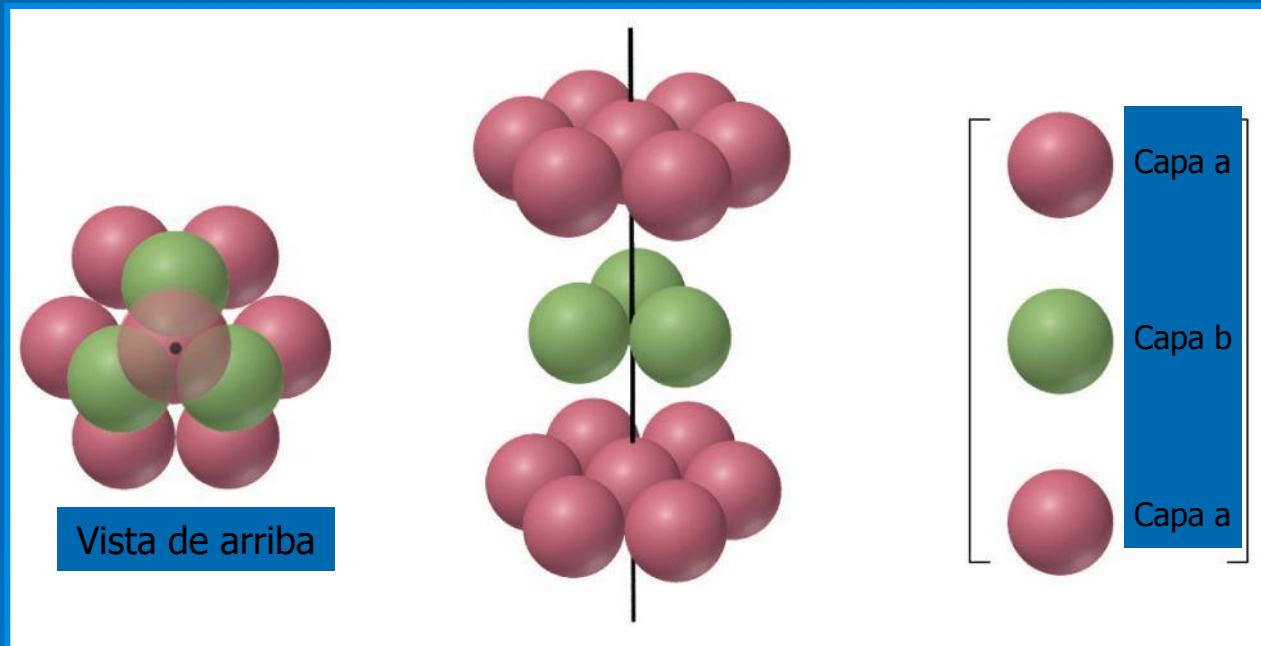


$$a\sqrt{2} = 4r \quad \dots\dots\dots a = 4r / \sqrt{2}$$

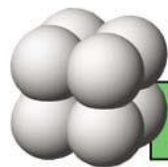
$$\mathbf{F E A} = \frac{4 \cdot (4/3)\pi r^3}{a^3} = \frac{(4/3)\pi r^3}{\left| \frac{4r}{2^{1/2}} \right|^3} = \mathbf{0.74}$$



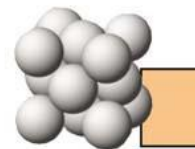
Hexagonal Compacta: $a = 2r$ $c/a = 1.63$, FEA = 0.74, No Coord. = 12



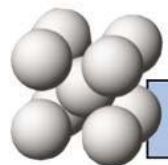
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															



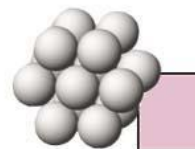
Cúbico simple



Empaquetamiento cúbico compacto (Cúbico centrado en las caras)



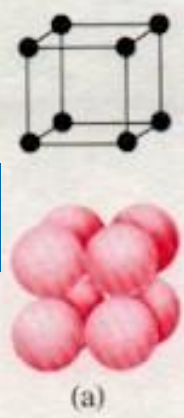
Cúbico centrado en el cuerpo



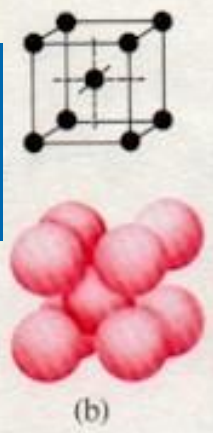
Empaquetamiento hexagonal compacto

© 2003 Thomson - Brooks/Cole

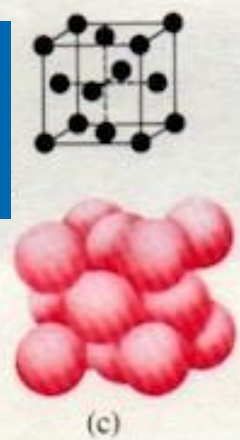
Cúbico Simple



Cúbico Centrado en el cuerpo

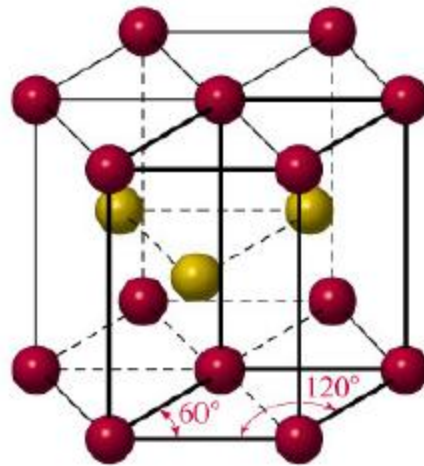


Cúbico centrado en las caras

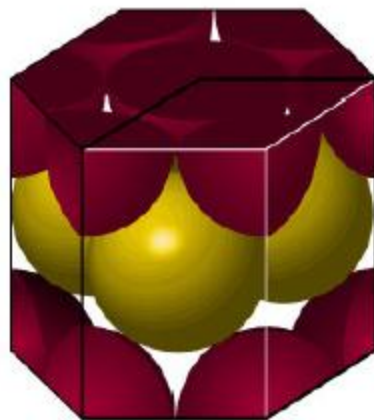


Celda unidad	Red	Ejemplo
(a) Cúbico simple		Polonio metálico
(b) Cúbico centrado en el cuerpo		Uranio metálico
(c) Cúbico centrado en las caras		Oro metálico

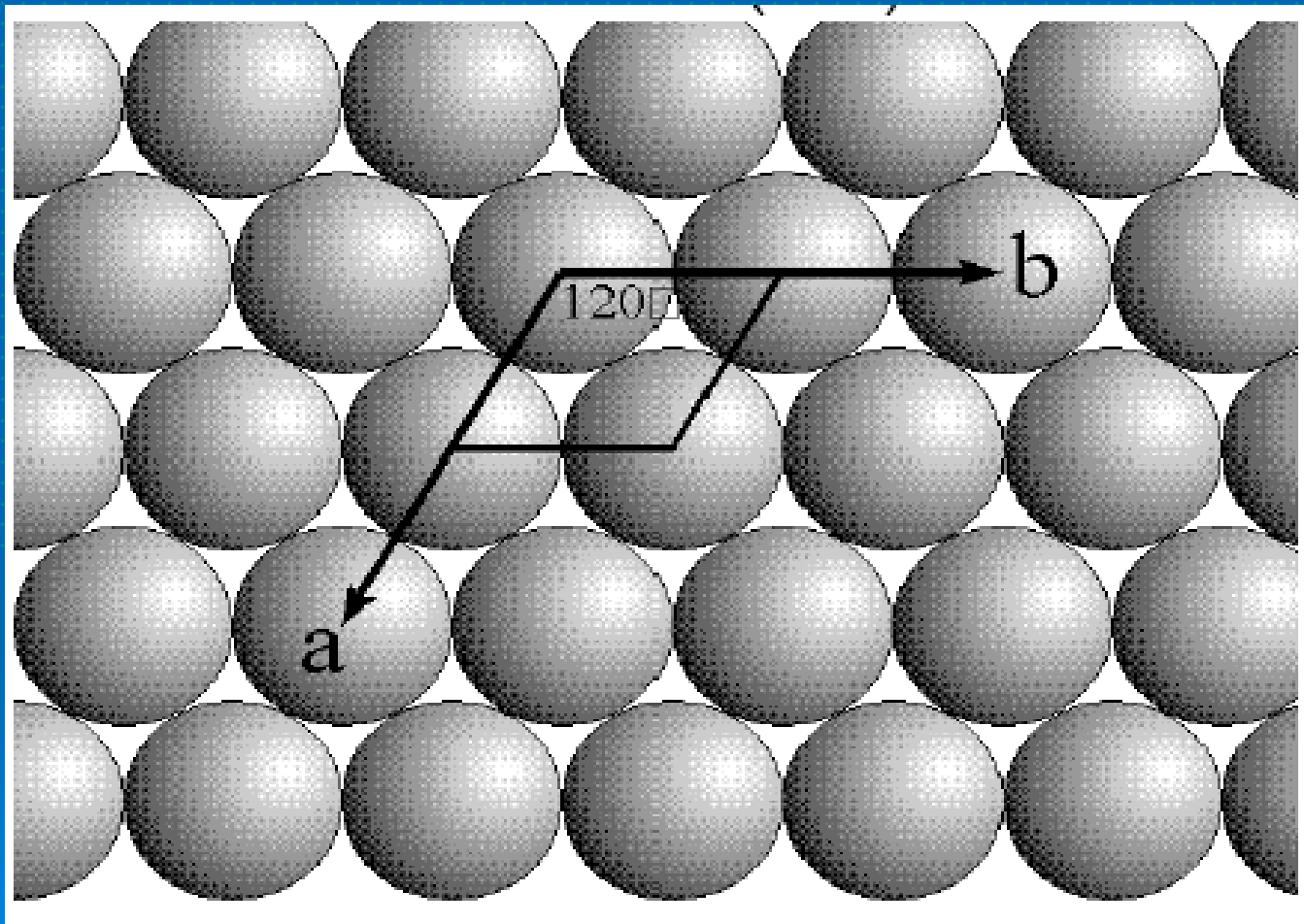
Estructura cristalina hexagonal compacta



(a)



(b)



Algunos parámetros de celdas.

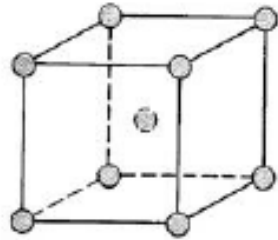
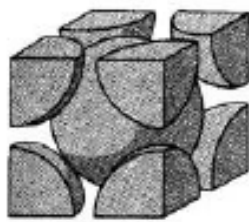
	# átomos/celda unitaria
CS	$8 \times 1/8 = 1$
CC (bcc)	$1 + 8 \times 1/8 = 2$
CCC (fcc)	$6 \times 1/2 + 8/1/8 = 4$

	# Coord	# ats/ celda	FE	Propiedades mecánicas
CS	6	1	0,52	No hay
CC (bcc)	8	2	0,68	Duro
CCC (fcc)	12	4	0,74	Dúctil
hcp	12	2	0,74	Frágil

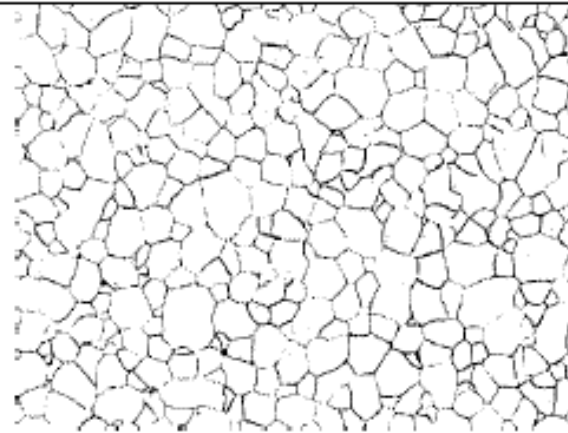
POLIMORFISMO Y ALOTROPÍA

- POLIMORFISMO: CUANDO EL MISMO MATERIAL EXISTE EN MÁS DE UNA FORMA CRISTALINA.
- ALOTROPÍA: POLIMORFISMO EN ELEMENTOS QUÍMICOS PUROS.

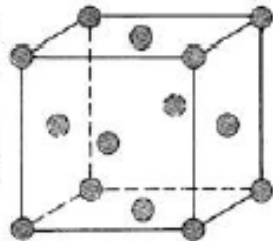
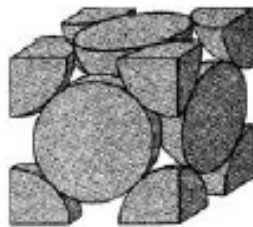
ALOTROPÍA DEL HIERRO



Hierro α : "ferrita"



Cristales de ferrita

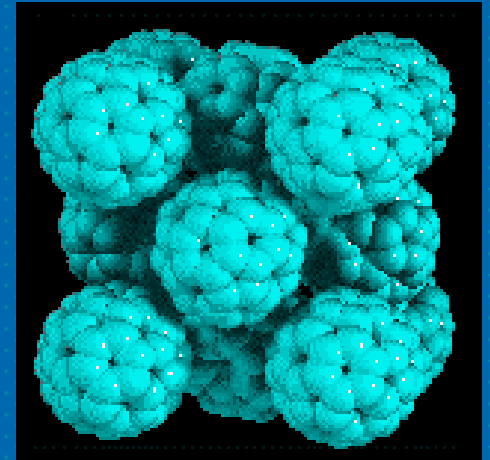


Hierro γ : "austenita"



Cristales de austenita

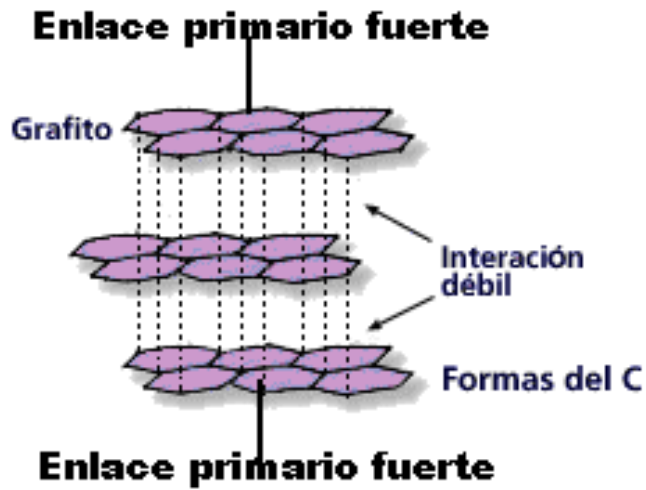
Carbón-Grafito-Diamante-Futboleno.



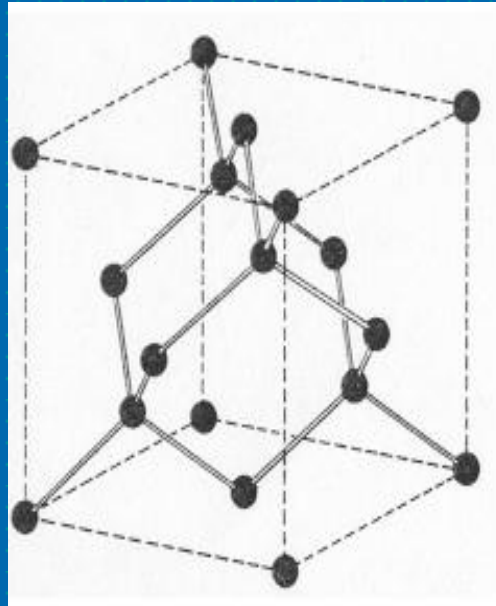
El carbono elemental existe:

- 1-Carbón común: → Amorfo
- 2-Grafito: → Cristalino
- 3-Diamante: → Cristalino
- 4.Fullereno o futboleno: → Cristalino

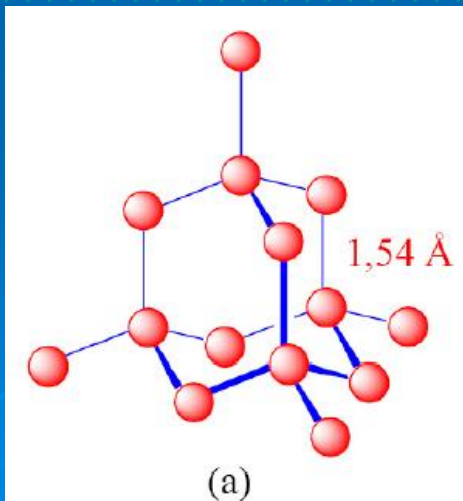
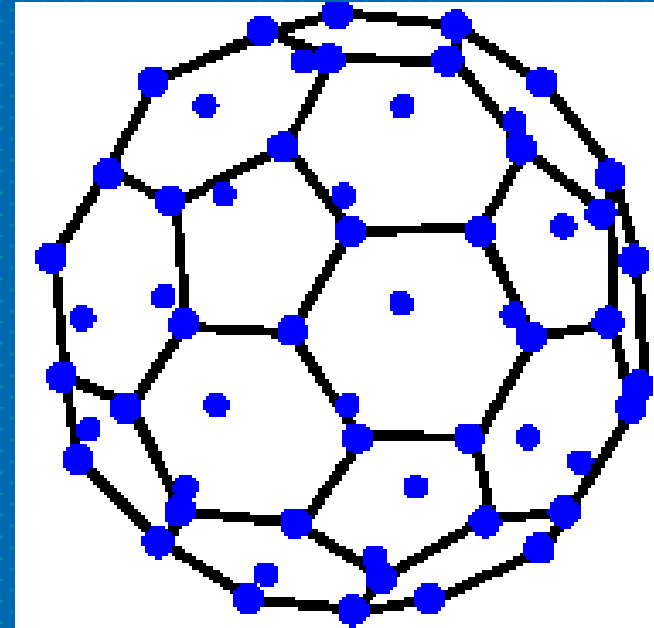
Grafito



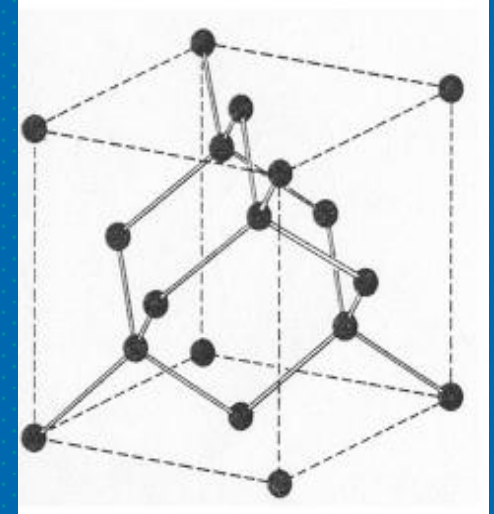
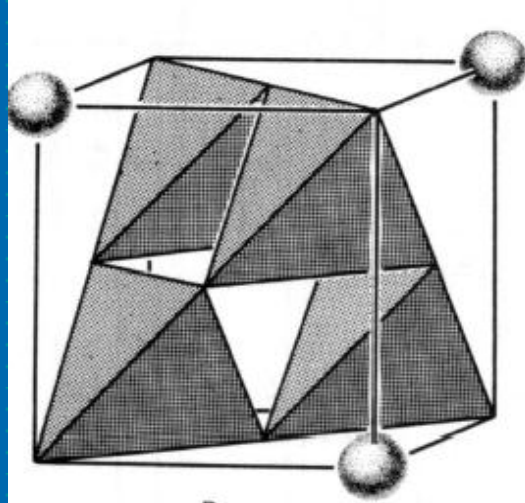
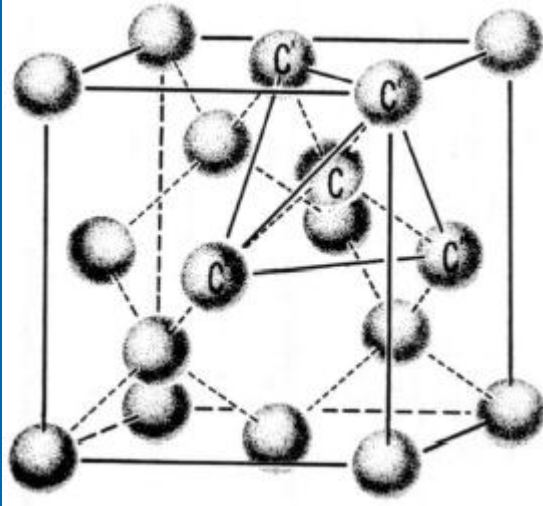
Diamante



Futboleno

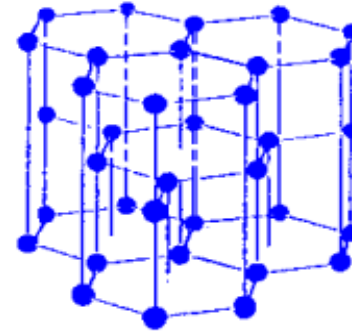


Estructura del Diamante



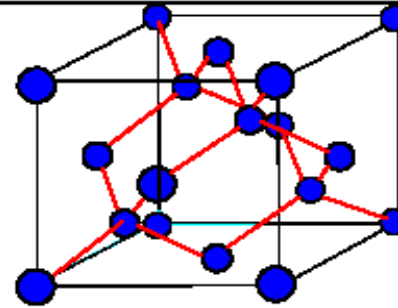
GRAFITO

- Negro
- Conductor eléctrico
- Blando, se exfolia en láminas
- Estructura: plano anillos hexagonales unidos débilmente entre si
- Barato



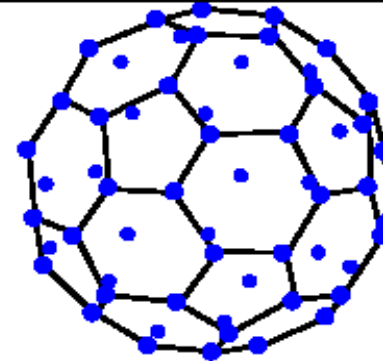
DIAMANTE

- Transparente
- Muy aislante (eléctrico)
- Muy duro
- Estructura: red tetragonal
- Caro

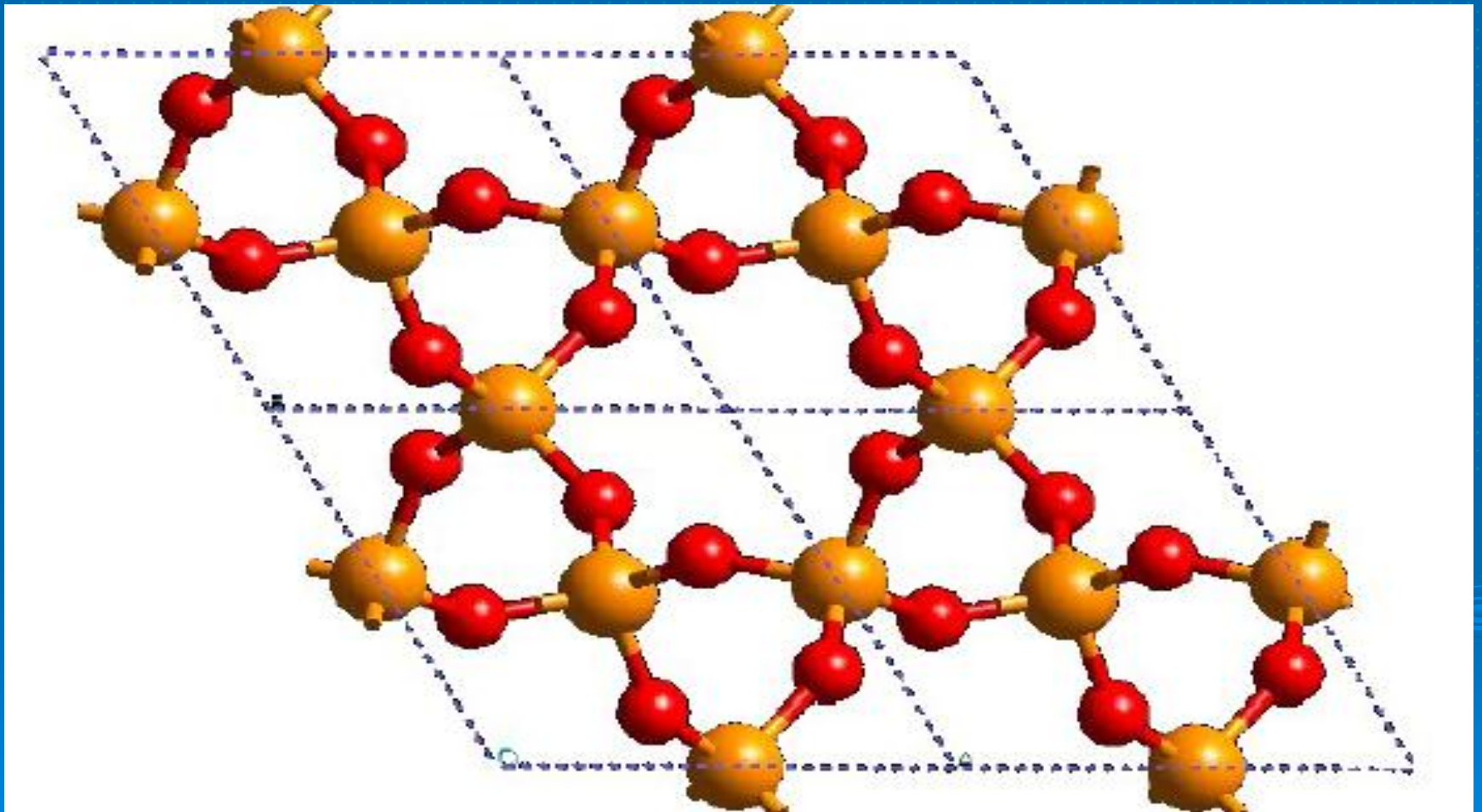


BUCKMINSTERFULLERENO, FULLERENO O FUTBOLENO

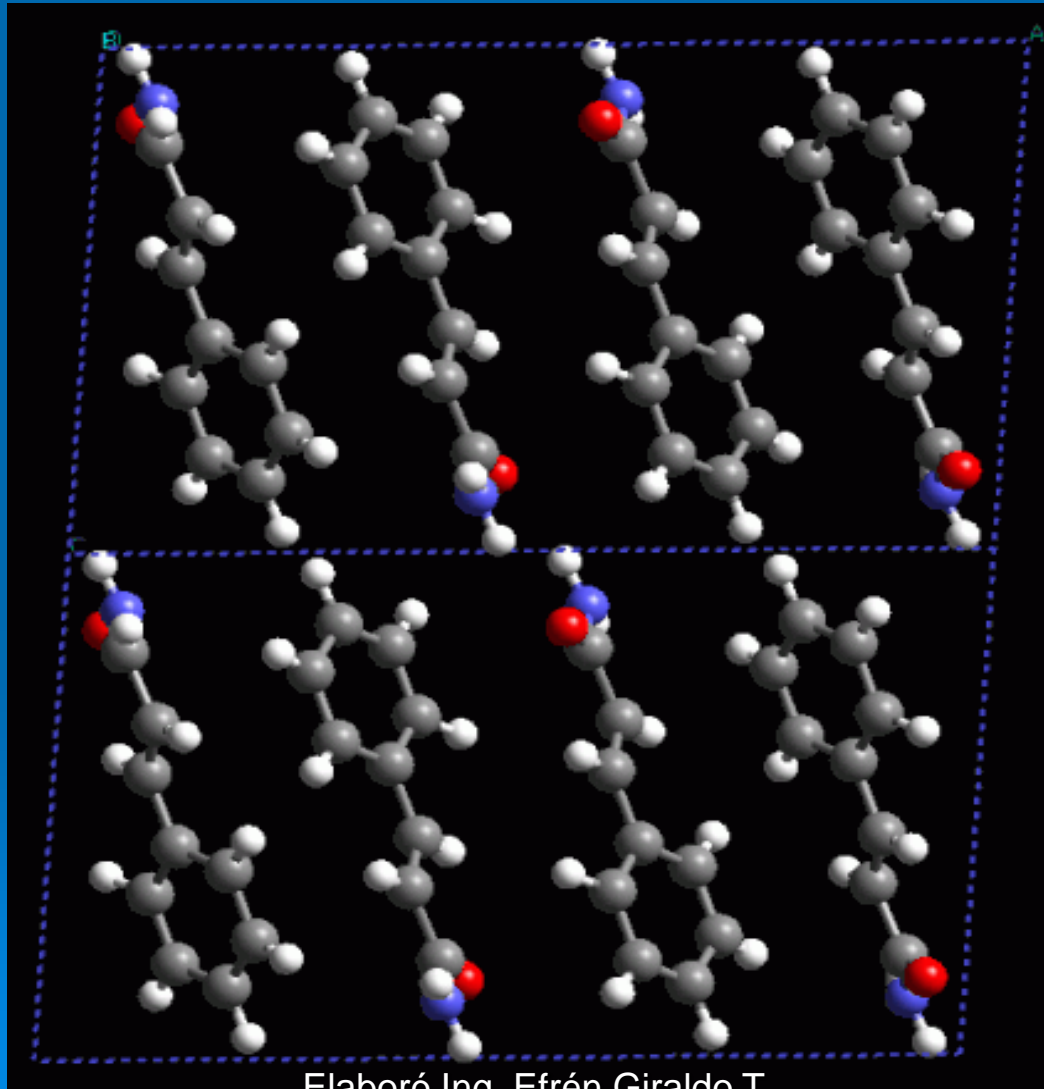
- Aislante; impurezas lo hacen superconductor
- Esferas duras independientes (rodamientos ideales)
- Estructura: C60: polihedro cuyas caras son hexágonos y pentágonos con átomos de C en los vértices
- Carísimo



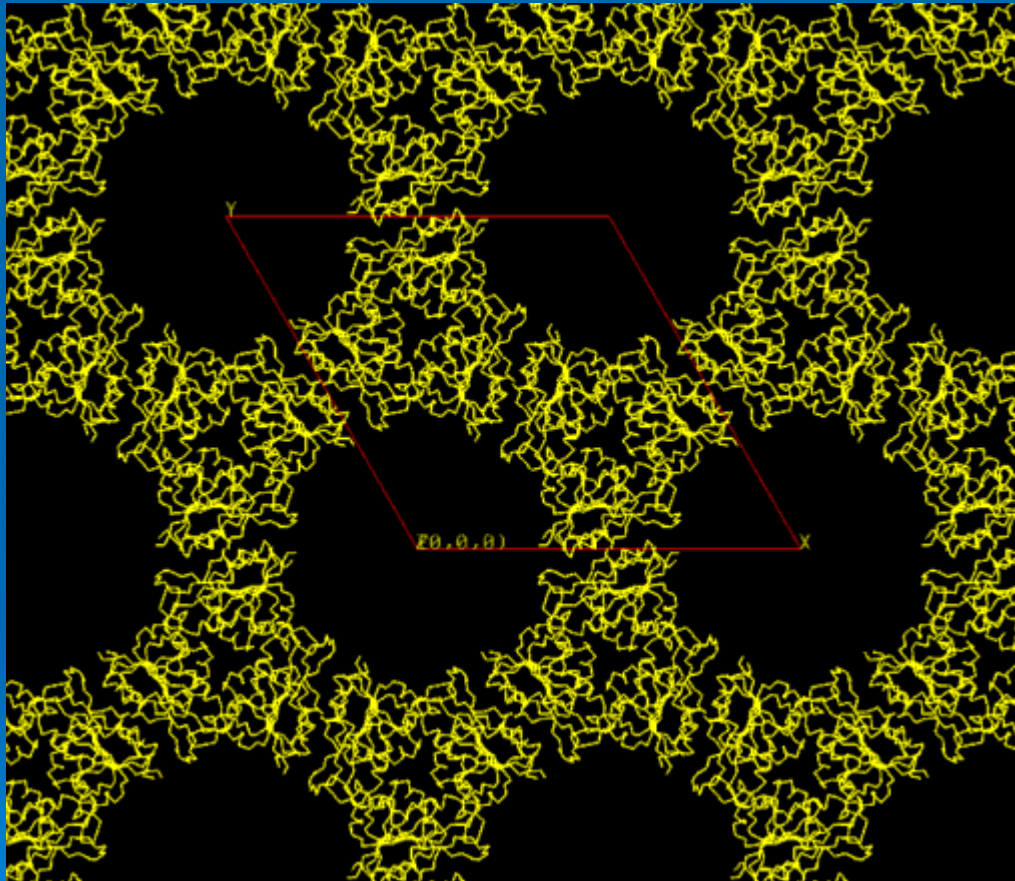
Estructura cristalina del Cuarzo alfa



Estructura cristalina de un material orgánico: cinnamida



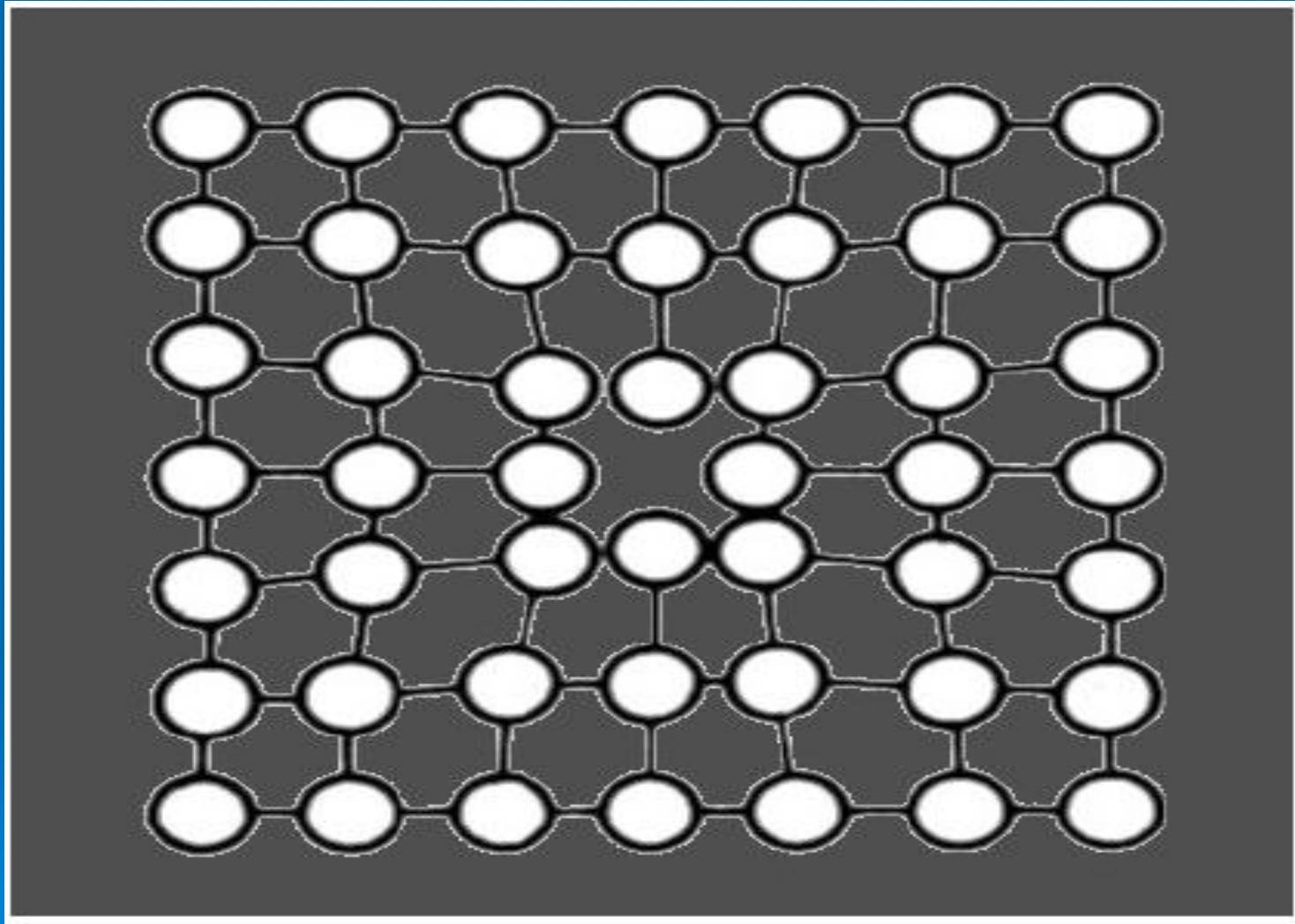
Estructura cristalina de una proteína: AtHal3



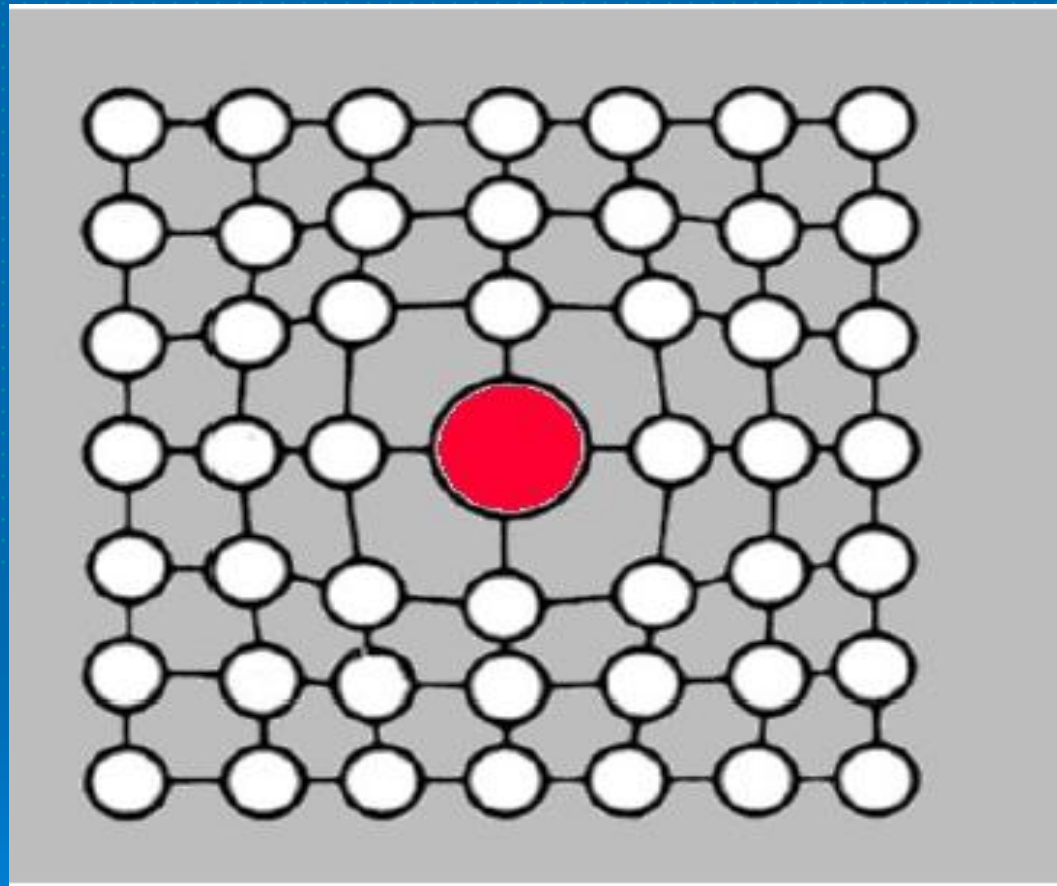
DEFECTOS RETICULARES

**Influyen en las
propiedades mecánicas,
físicas, eléctricas,
ópticas y magnéticas.**

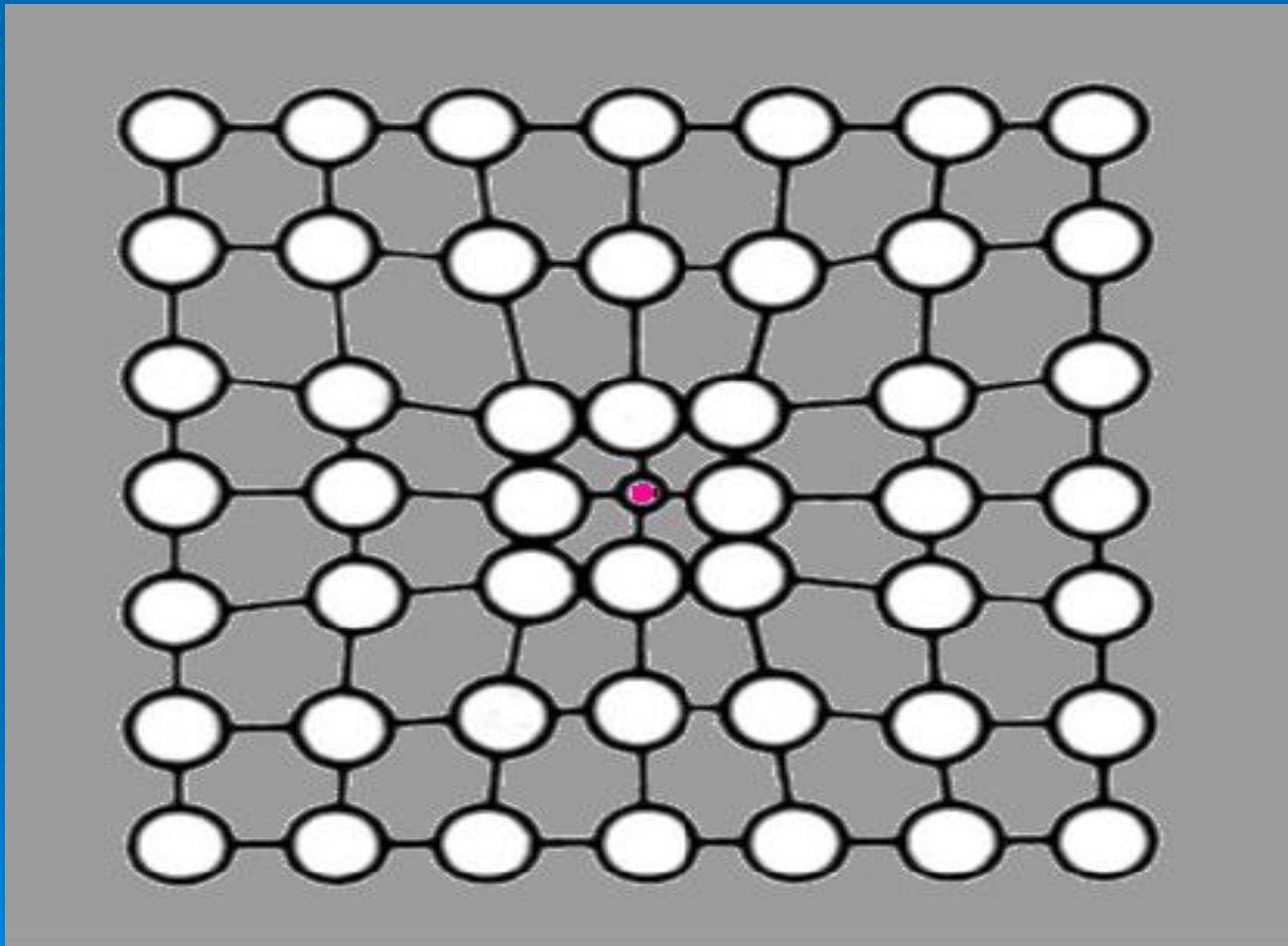
VACANCIAS: sitios vacíos.



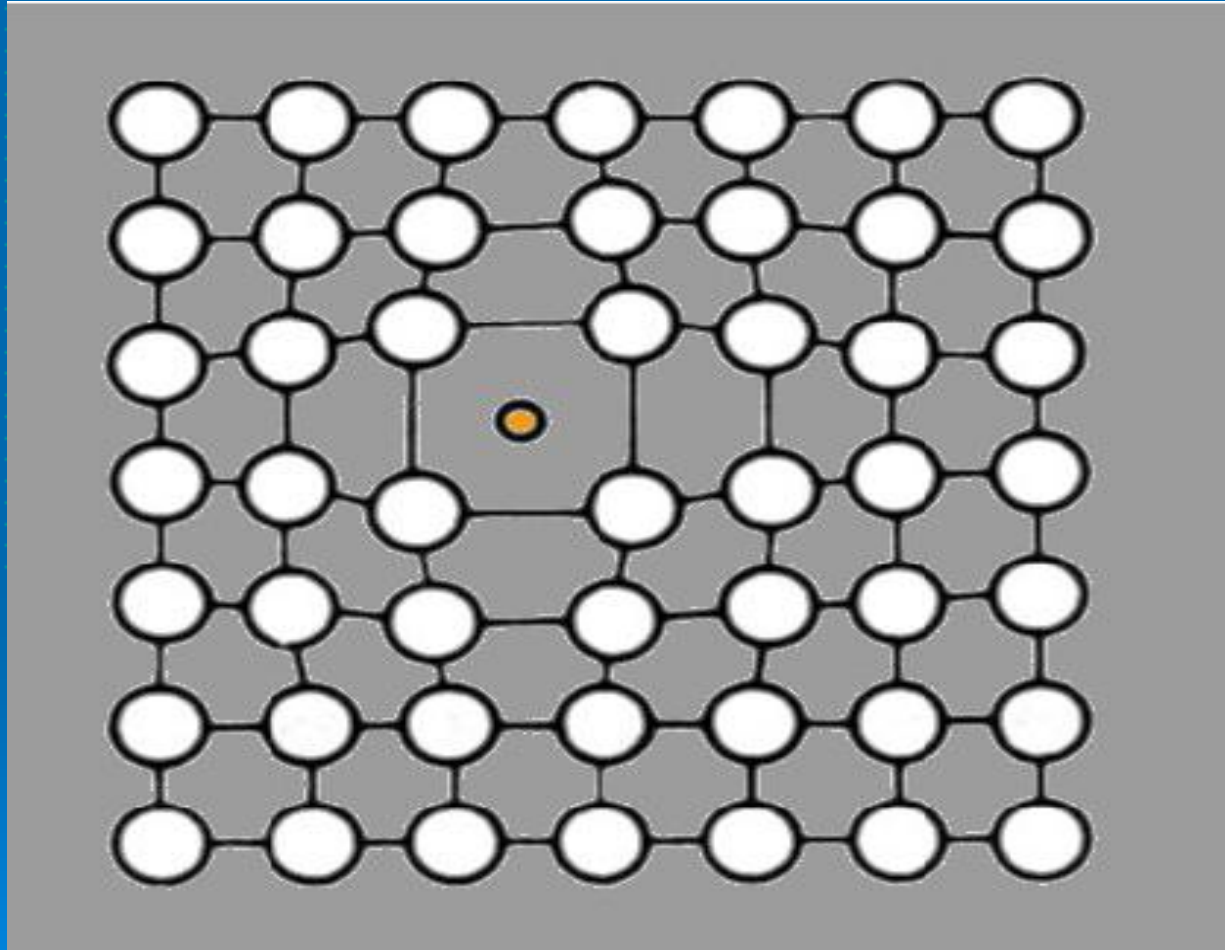
IMPUREZAS SUSTITUCIONALES

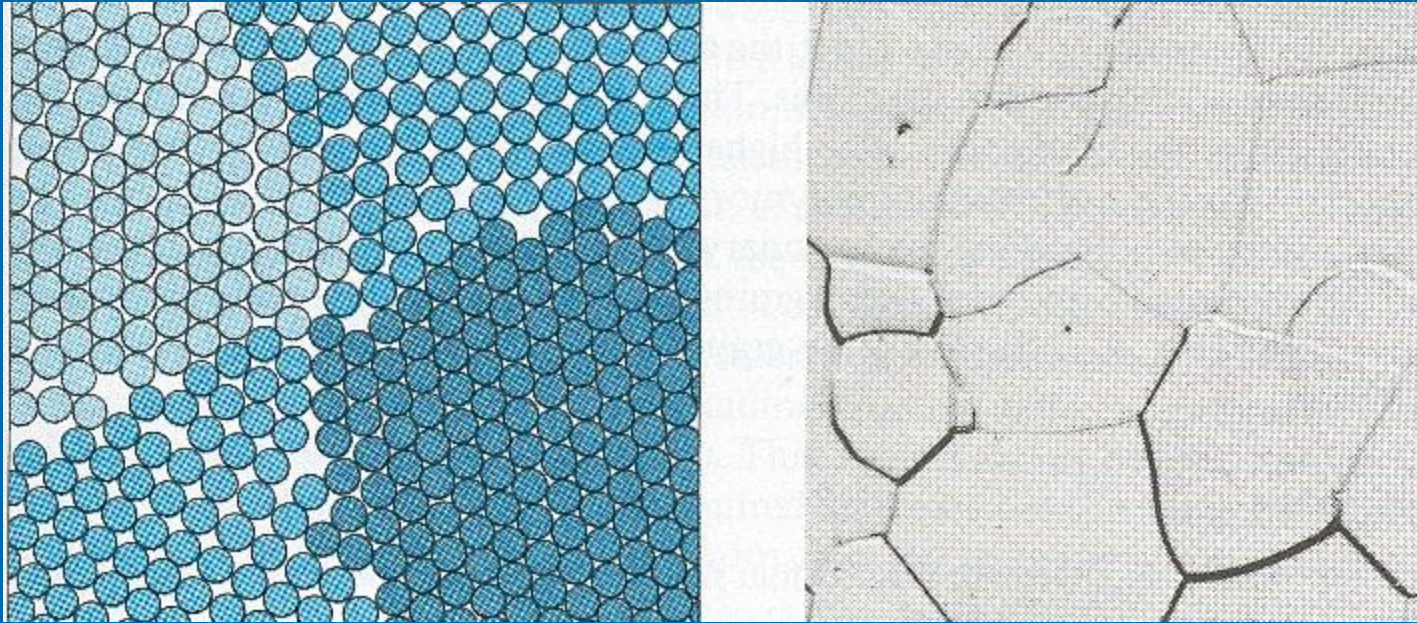


IMPUREZAS SUSTITUCIONALES



IMPUREZAS INTERSTICIALES





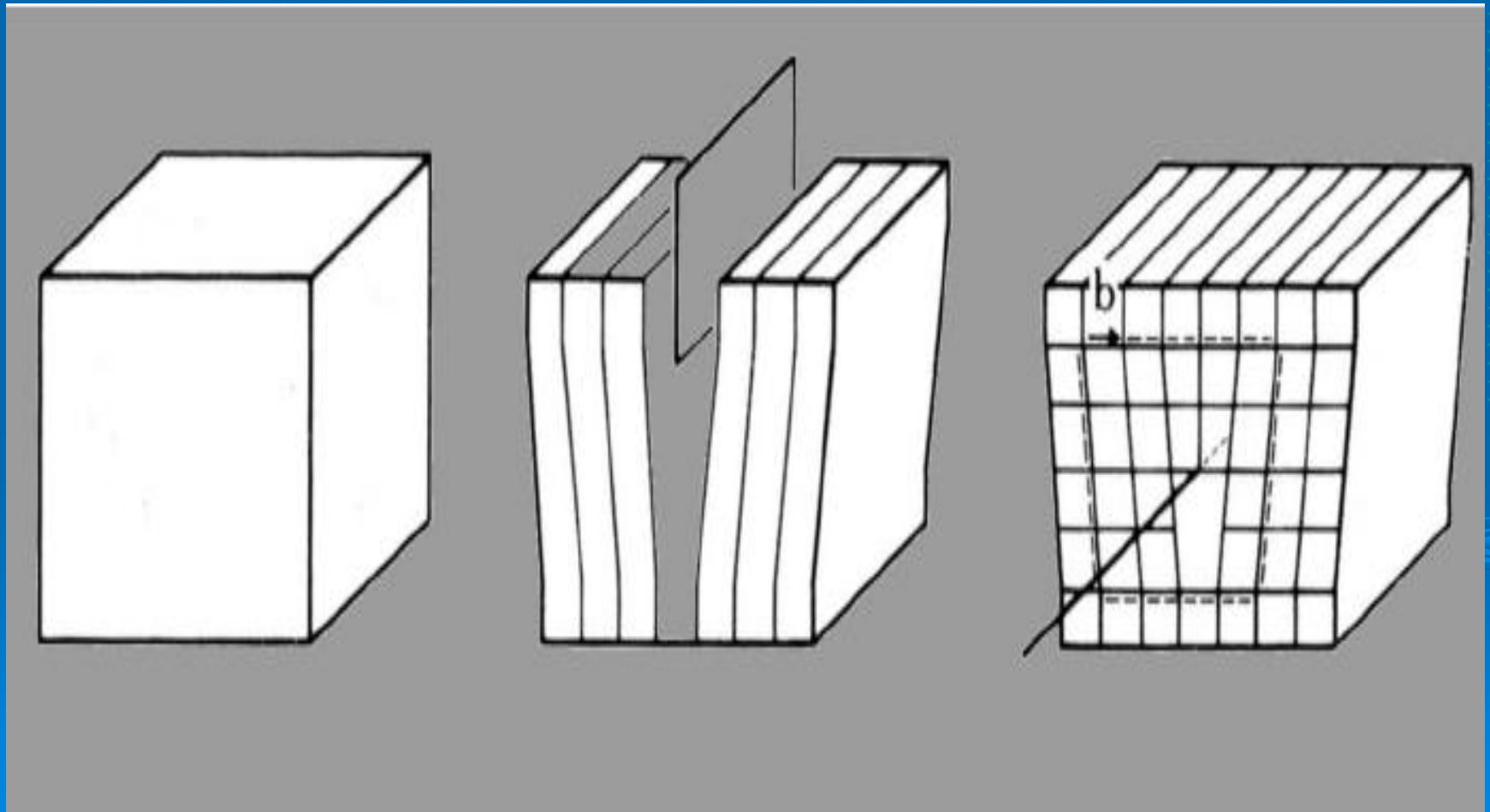
(a) Esquema que muestra el ordenamiento de los átomos en la formación del borde de grano. (b) Granos y límites de grano en una muestra de acero inoxidable.

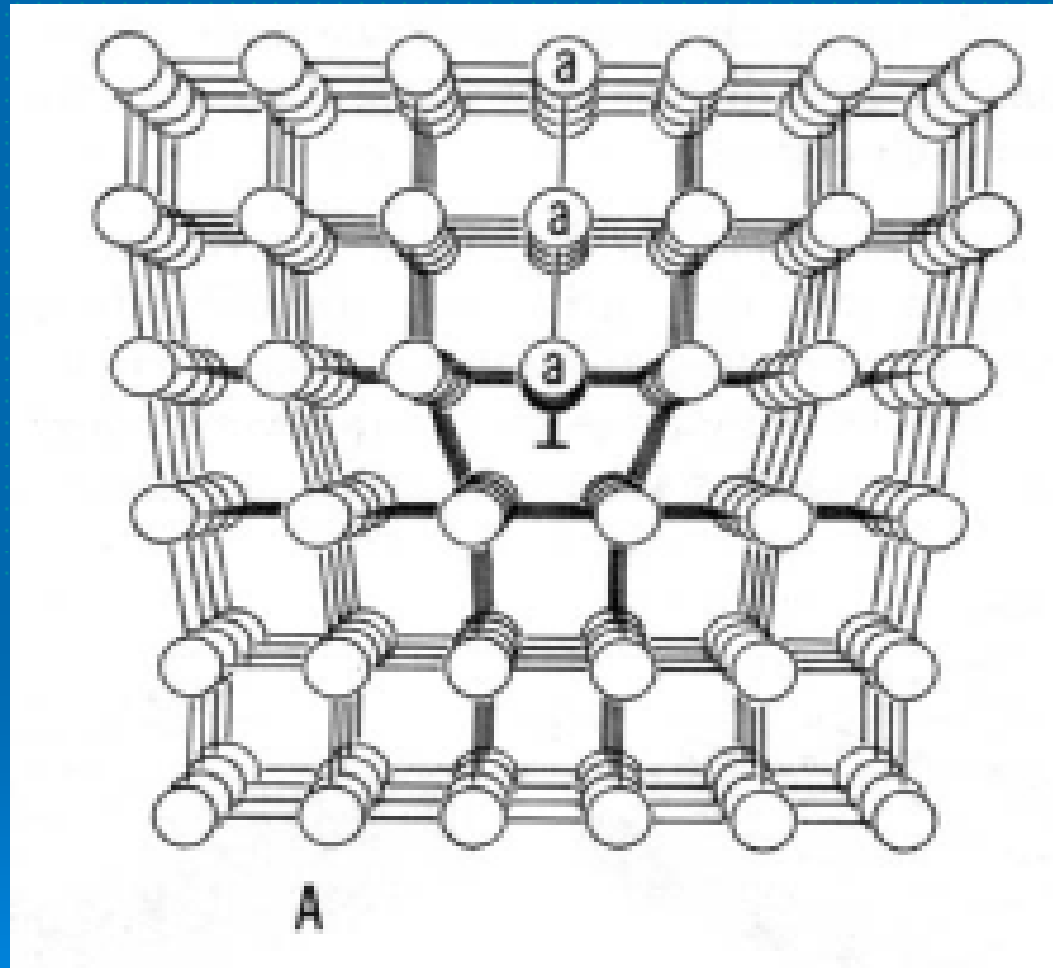
Dislocaciones:

- Región perturbada entre dos áreas básicamente **del cristal**
- **Desarreglo de planos en la red reticular**

DISLOCACIONES DE ARISTA O BORDE:

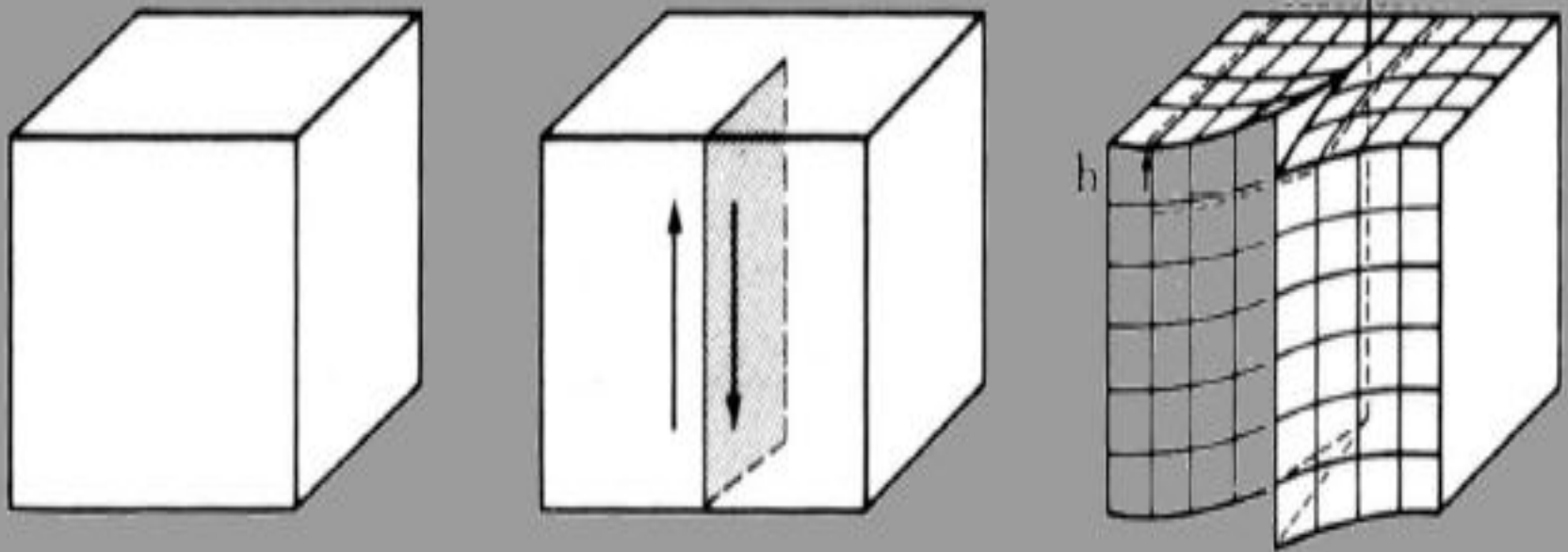
Falta parte de un plano de átomos o una parte de un plano se presenta en forma extra en la organización reticular.

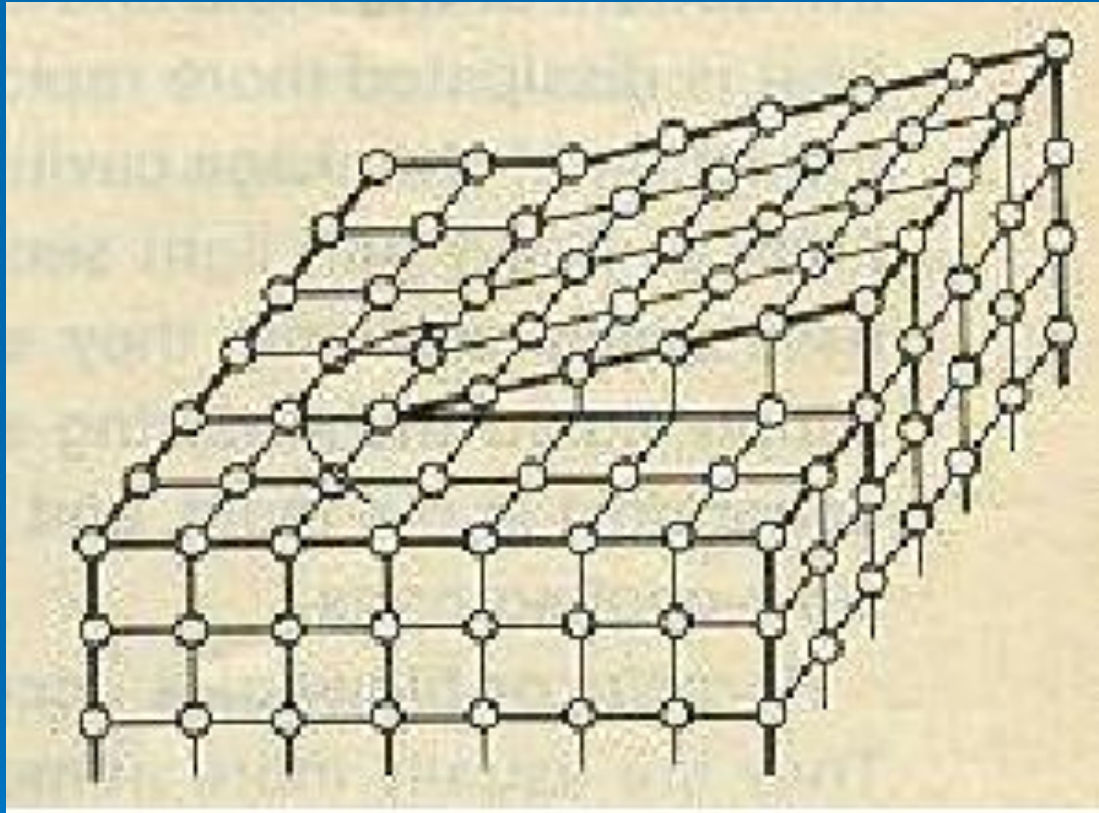




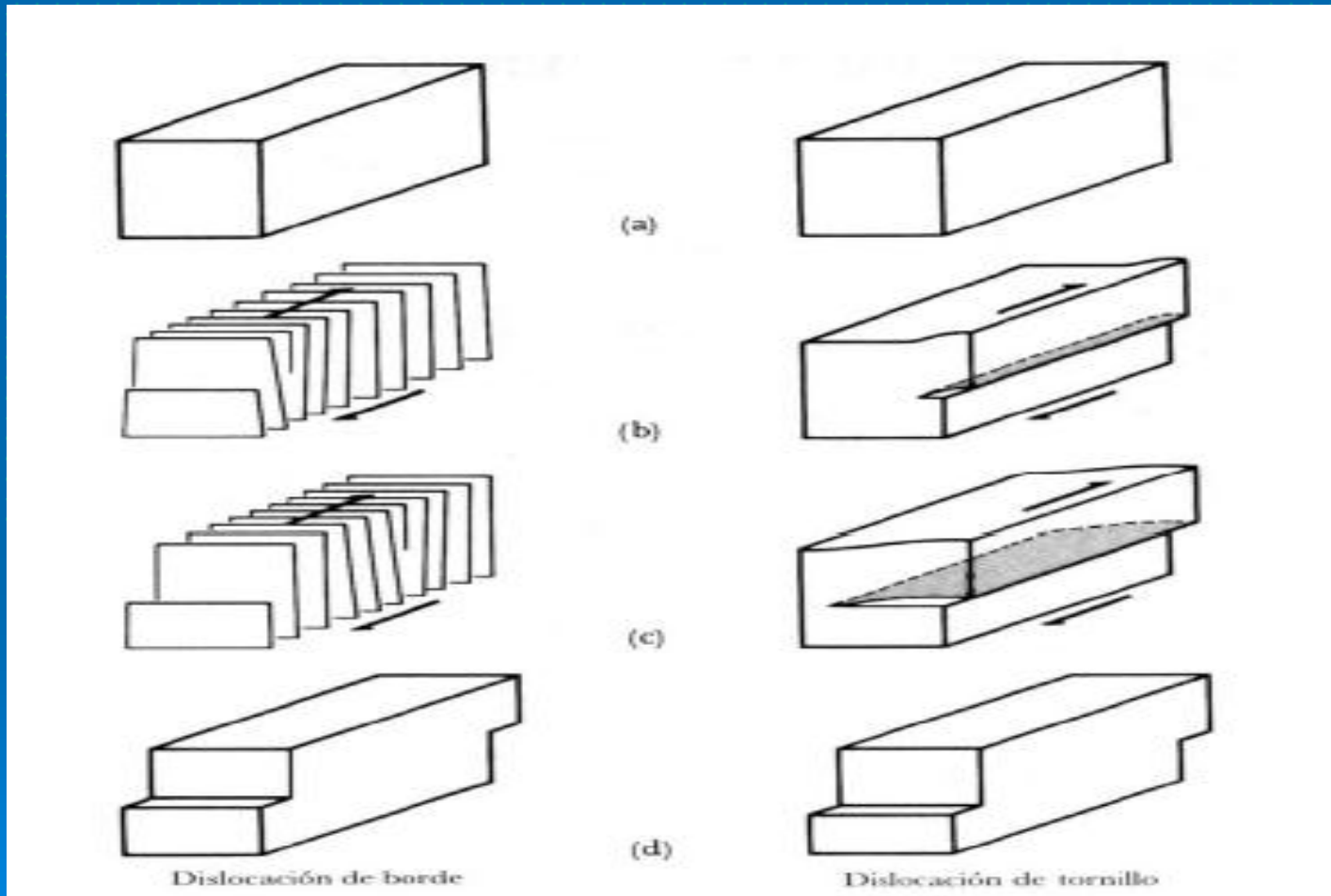
DISLOCACIONES DE ESPIRAL O TORNILLO:

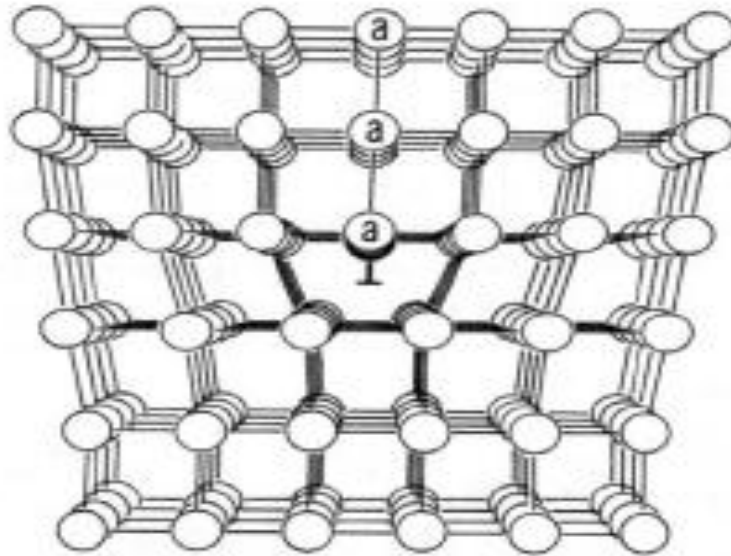
Una parte del cristal se desplaza en cierta dirección con respecto a otra.



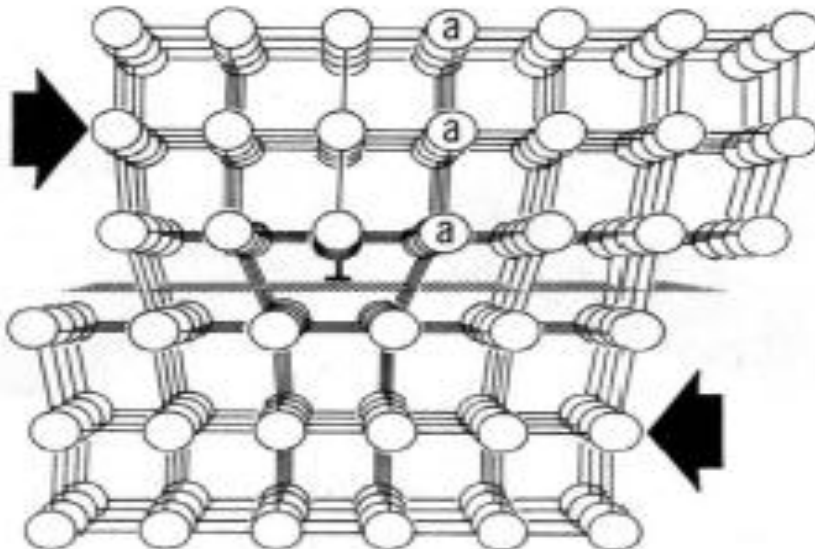


DESLIZAMIENTO O MOVIMIENTO DE DISLOCACIONES





A



Unidades y factores de conversión

- 1 libra : 4.448 Newtons (N).
- 1 psi : libras por pulgada cuadrada.
- 1 Mpa : Megapascal = meganewtons / m² = Newtons por mm² = 100.000 Pa
- 1GPa = 1 Gigapascal = 1000 MP
- kpsi = 1000 psi = 6.895 Mp
- 1psi = 0.006895 Mpa
- 1MPa =0.145 kpsi = 145 psi.
- 1A° = 1 Angtron = 10⁻¹⁰ m = 10⁻⁸ cm
- 1nm = 1 nanómetro = 10⁻⁹ m = 10⁻⁷cm =10A°

ISOTROPÍA Y ANISOTROPÍA

- i) **Materiales isótropos:** policristales orientados aleatoriamente \Rightarrow propiedades físicas similares en todas las direcciones.

- ii) **Materiales anisótropos:** orientación no aleatoria de los ejes cristalográficos \Rightarrow propiedades físicas pueden variar en función de la dirección en el material.

Relación entre:

Estructura-Propiedades-
Síntesis y Procesamiento-
Composición / Desempeño

COSTO / DESEMPEÑO

SÍNTESIS PROCESO

MATERIAL

MICROESTRUCTURA

COMPOSICIÓN

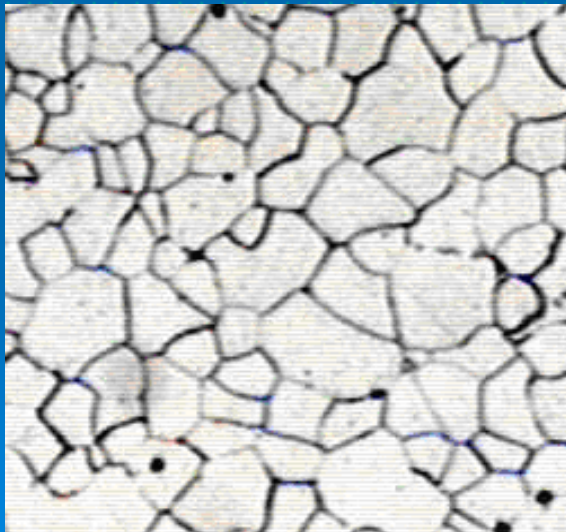
ESTRUCTURA ↔ PROPIEDADES

Cuál es la estructura que dará el mejor desempeño?

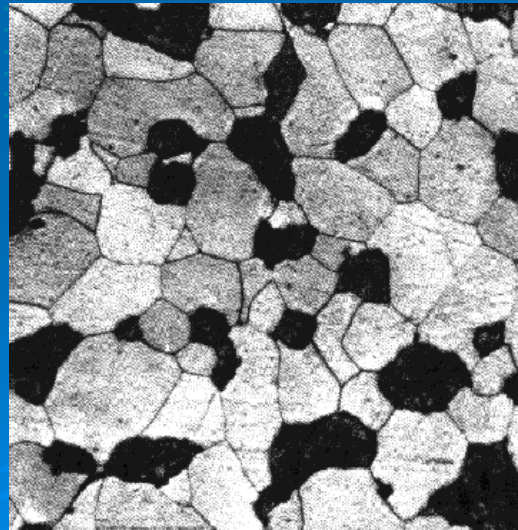
Diferentes materiales implica diferentes estructuras y diferentes propiedades

- Ferrita : blanda
- Perlita y ferrita: mayor dureza
- Sólo perlita : más dura

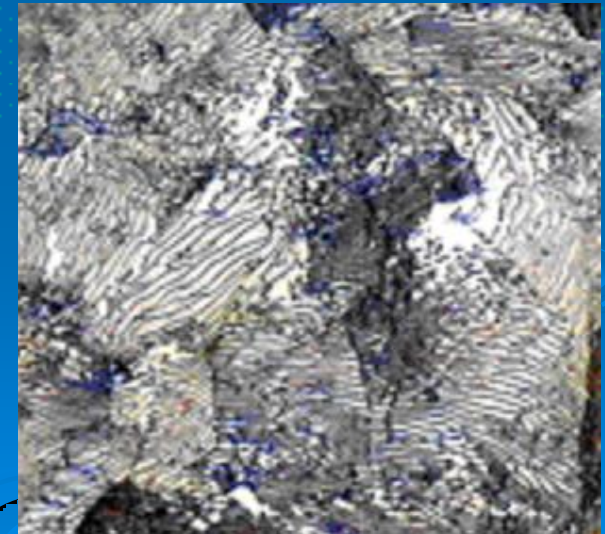
HIERRO

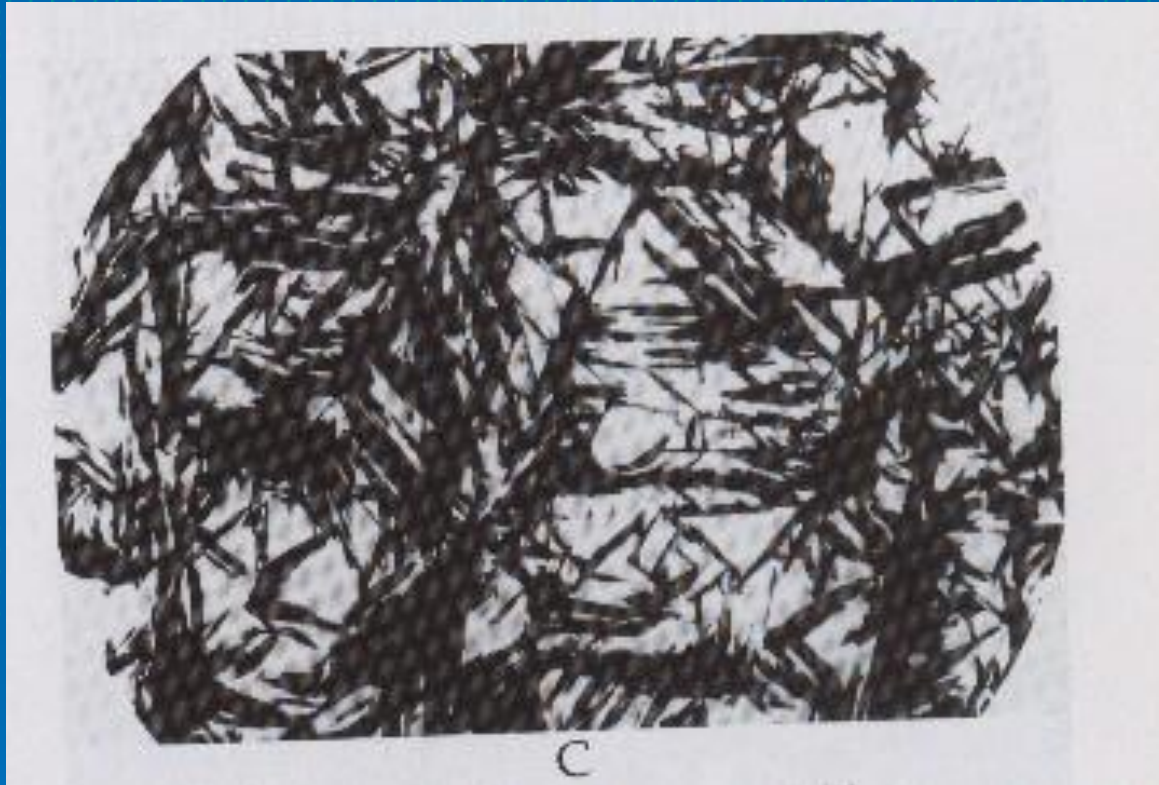


ACERO BAJO C



ACERO ALTO C

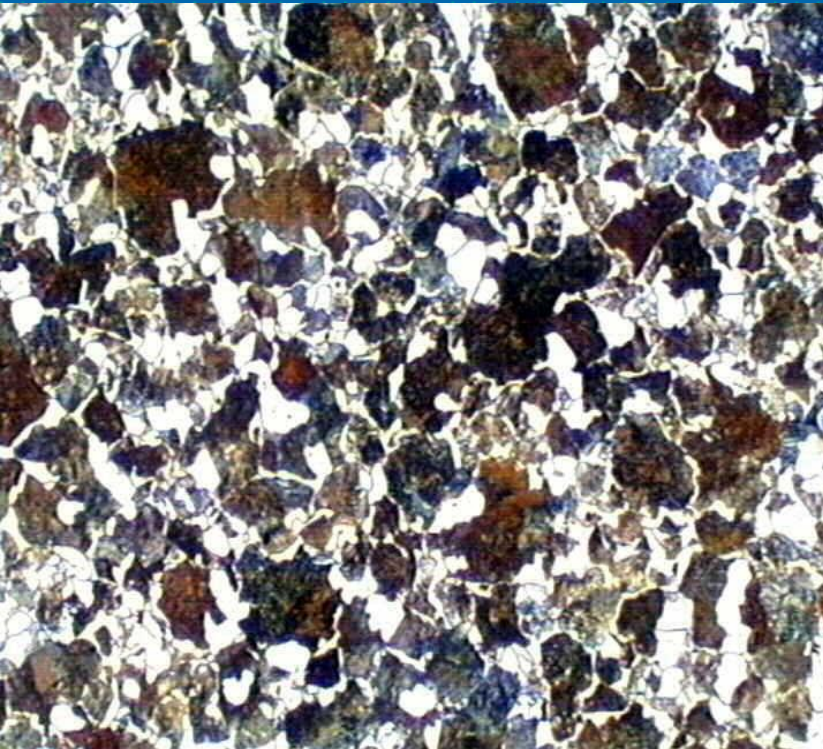




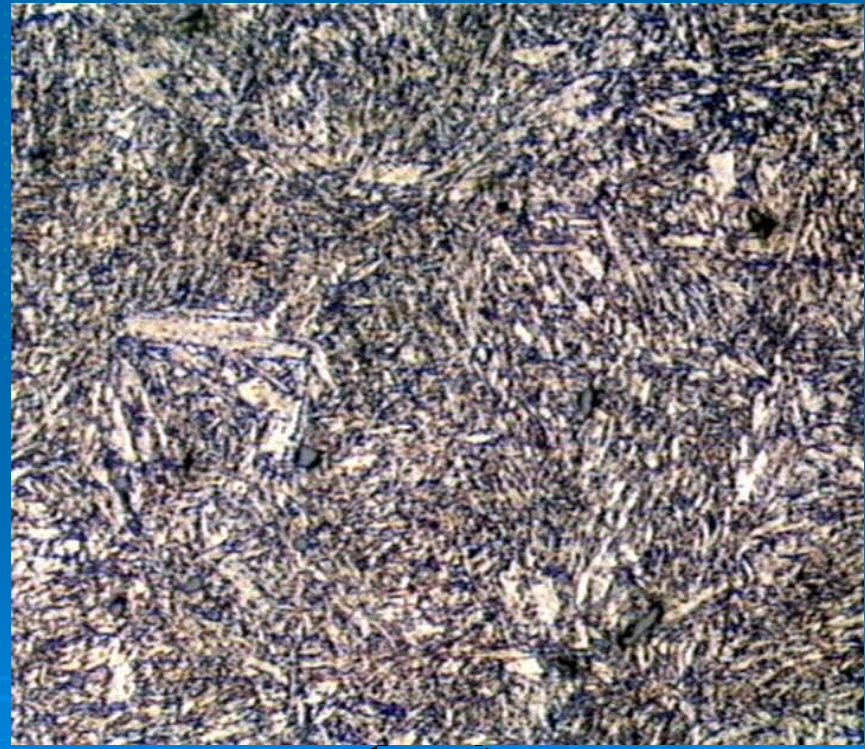
UN MISMO ACERO PUEDE TENER DIFERENTES ESTRUCTURAS

EJEMPLO: ACERO DE 0.35% C

➤ **PERLITA Y FERRITA**



FERRITA COMO FONDO Y CEMENTITA



Mismo acero 1035

➤ Cementita esferoidal



COMPOSICIÓN ↔ OTRAS

- ¿Cuál es la composición más adecuada para obtener ciertas propiedades específicas?
- ¿Cómo afecta cierta composición el costo?
- ¿De qué manera se afecta la estructura si varío la composición?
- ¿Qué cantidad de un material determinado y cuál de otro diferente y cómo se afecta el costo?

PROCESO VS. OTRAS

- Como afecta el tipo de proceso a las propiedades, a la estructura, al costo?
- Cuál es el mejor proceso con respecto a las demás?

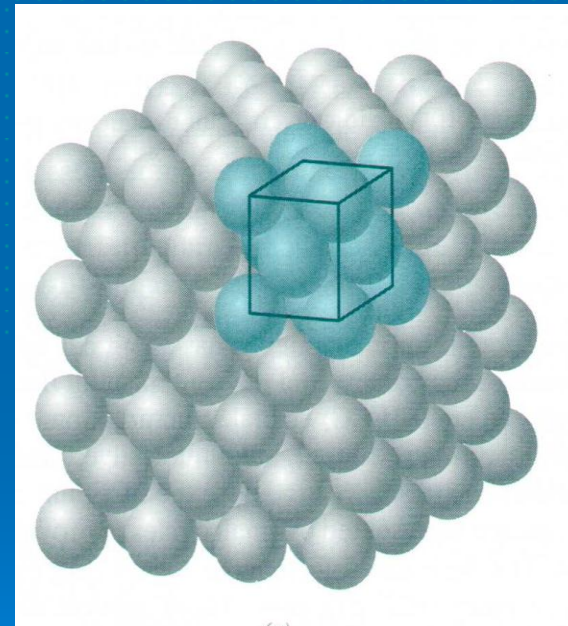
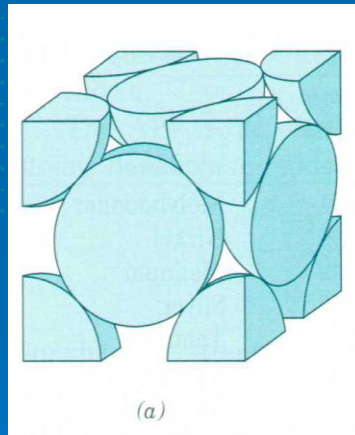
ACERO 0.35 %C

➤ MARTENSITA



Ejercicio:

Un metal cristaliza en la red cúbica centrada en las caras. Si su radio atómico es 1.38 \AA . ¿Cuántos átomos existirán en 1 cm^3 ?



Densidad

La densidad teórica de un material se puede calcular con las propiedades de su estructura cristalina

$$Densidad = \frac{(cantidad\ de\ átomos\ por\ celda)(masa\ atómica)}{(volumen\ de\ la\ celda\ unitaria)(N^{\circ}\ Avogadro)}$$

Ejercicio:

Determinar la densidad del aluminio, si este metal cristaliza en FCC, tiene un radio atómico de 0,143 nm y un peso atómico de 26,98 g/mol

Ejercicio

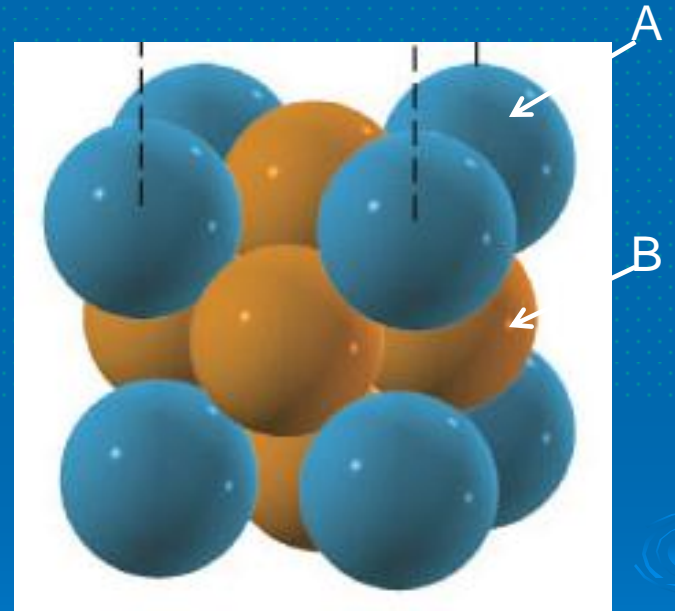
Una aleación cristaliza en cúbica centrada en las caras, como se muestra en figura, Calcule la densidad teórica

$$r_A = 4,83 \text{ \AA}$$

$$r_B = 5,21 \text{ \AA}$$

masa molecular átomo A: 56,78 g/mol

masa molecular átomo B: 65,98 g/mol



Ejercicio

Se tiene una aleación formada por átomos A y átomos B, que cristaliza FCC, los átomos A se ubican en los vértices de la celda y los átomos B en el centro de las caras.

- Calcule el radio de los átomos que pueden ingresar al centro de la celda, sin causar deformación
- Calcule la densidad de la aleación

Átomo	Radio (Å)	ρ (kg/m ³)	masa atómica (g/mol)
A	1,5	7.698	58,34
B	1,46	7.956	55,23
X		7.547	45,89

Ejercicio

Un clip pesa 0,59 g y es de hierro BCC. Calcule:

a) La cantidad de celdas unitarias en el clip

b) La cantidad de átomos de hierro en el clip

$$a_0 = 2,866 \text{ \AA}$$

$$\text{masa atómica} = 55,847 \text{ g/mol}$$

$$\text{densidad} = 7,87 \text{ g/cm}^3$$

Ejercicio:

La estructura del cloruro de sodio es una estructura cúbica, compuesta por 4 átomos de cloro y 4 átomos de sodio, tal como se muestra en figura. Determine

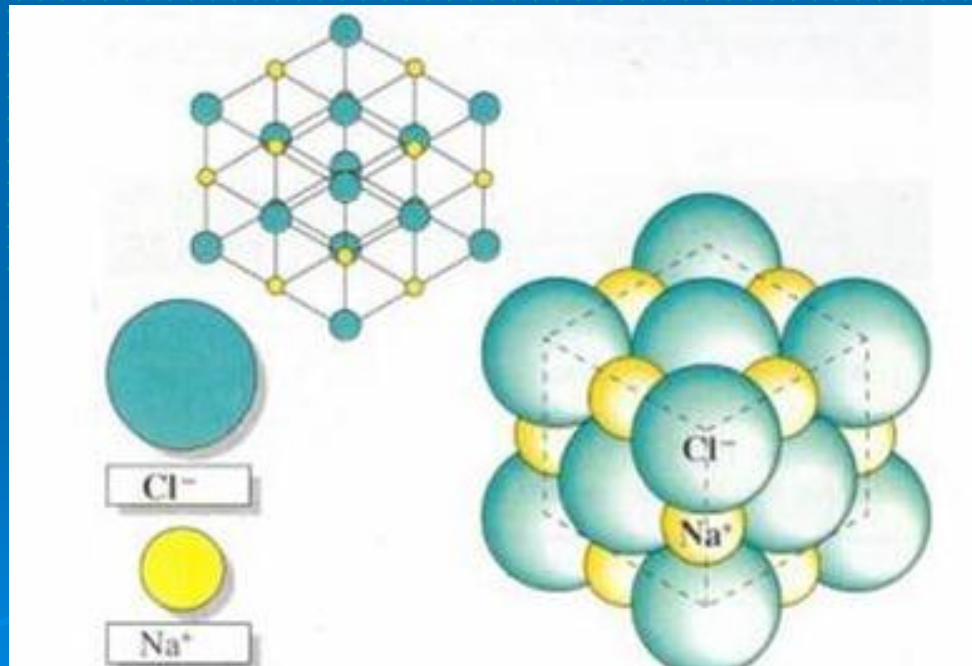
a) Densidad del cloruro de sodio

b) Factor de empaquetamiento de la celda

$$r_{\text{sodio}} = 0,098 \text{ nm}$$

$$r_{\text{cloro}} = 0,181 \text{ nm}$$

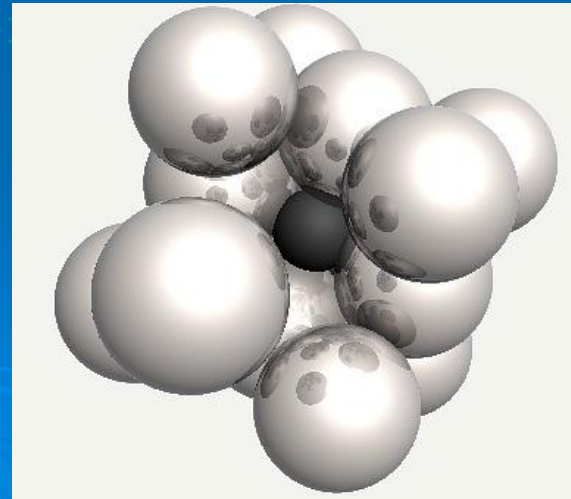
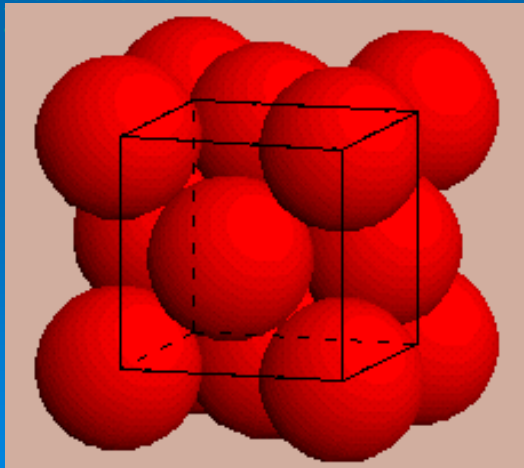
$$N^{\circ} \text{ avogadro} = 6,02 \times 10^{23}$$



Ejercicio

Se tiene un metal A que cristaliza cúbico de cara centrada, cuyo radio atómico es de $1,24 \text{ \AA}$.

- Calcule el radio de un átomo que podría ubicarse en el centro de la celda sin producir deformación.
- Cuál es la variación porcentual del factor de empaquetamiento de la celda al ingresar el nuevo átomo



Ejercicio

Calcular el cambio de volumen teórico que acompaña a la transformación alotrópica en un metal puro desde la estructura FCC a BCC. Considere que no existe cambio de volumen atómico antes y después de la transformación.

