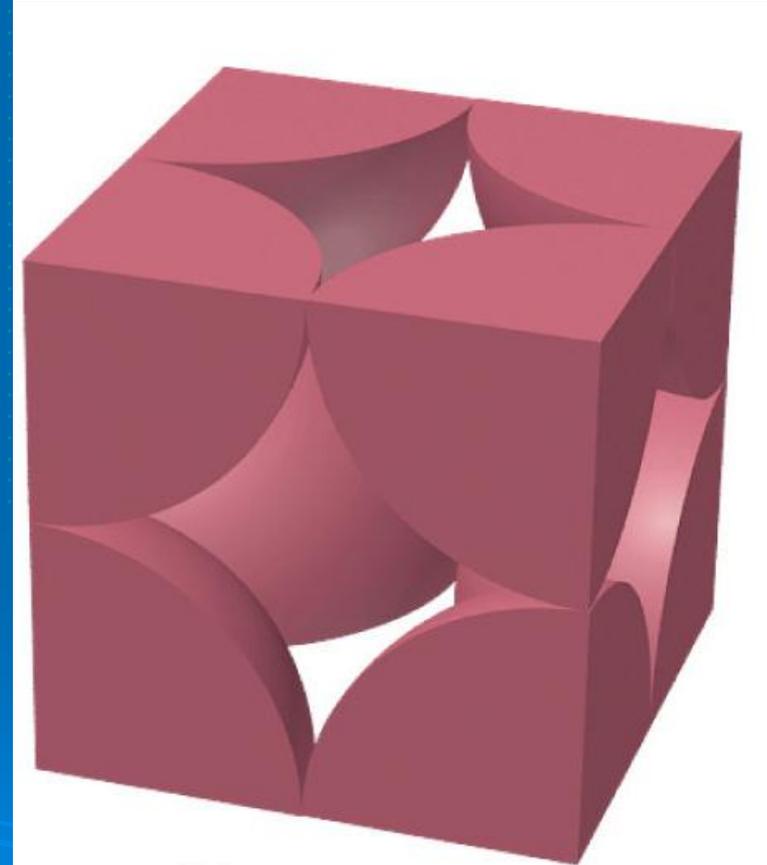
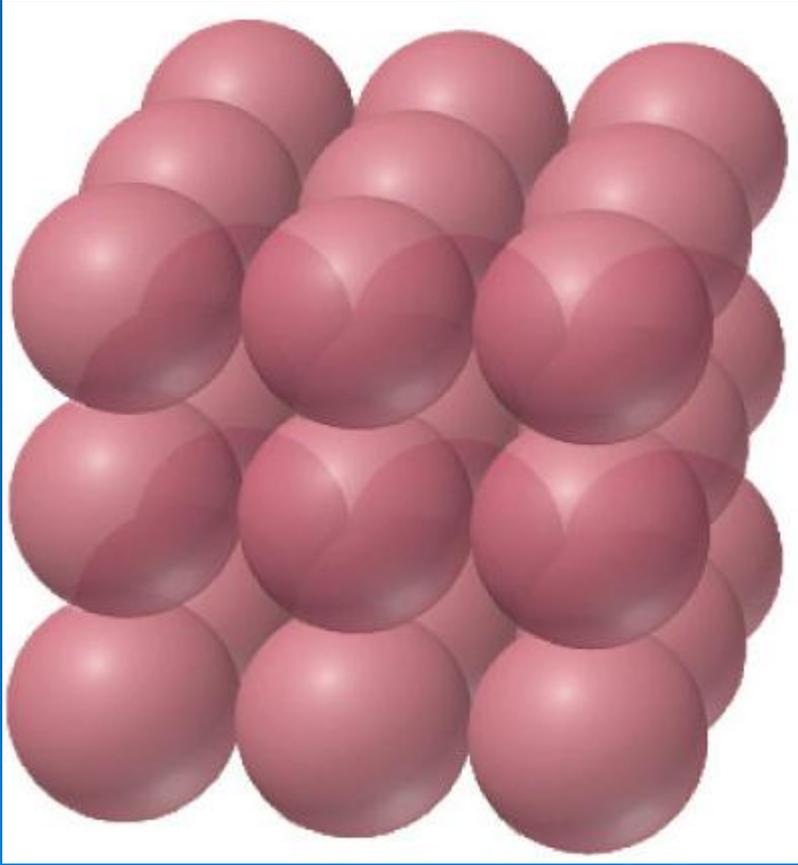


ESTRUCTURA DE LOS MATERIALES 2

FACTOR DE EMPAQUETAMIENTO

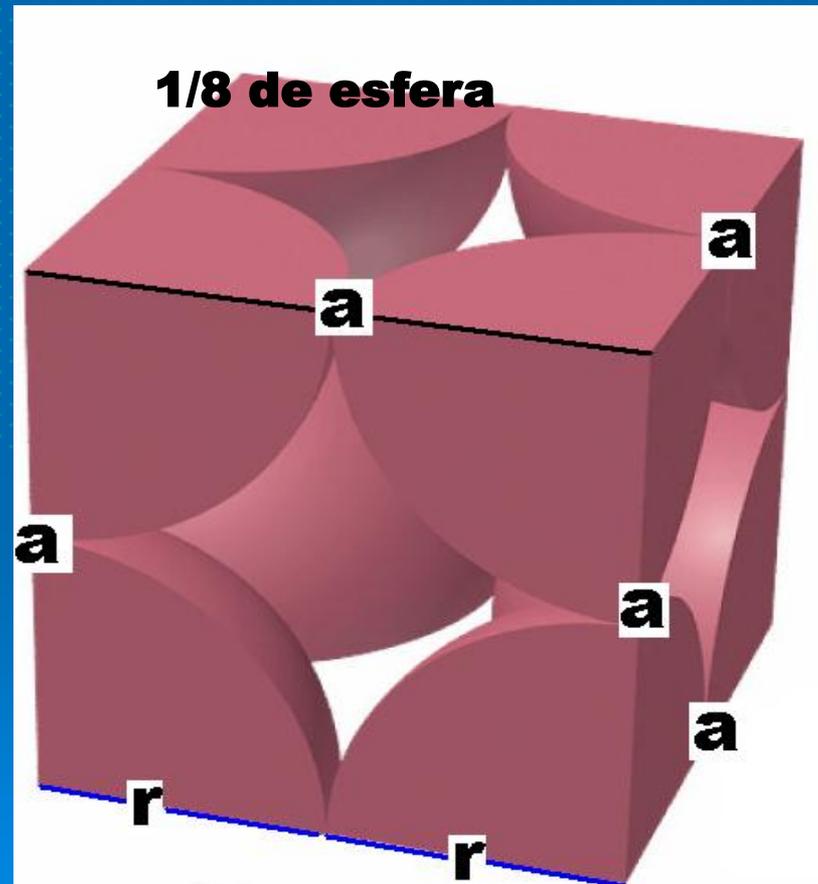
$FEA = (\text{No de átomos por celda} \cdot \text{Vol de un átomo}) / V (\text{celda})$

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

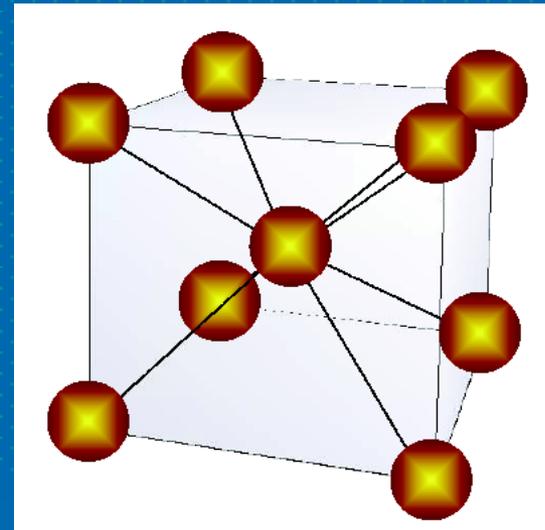
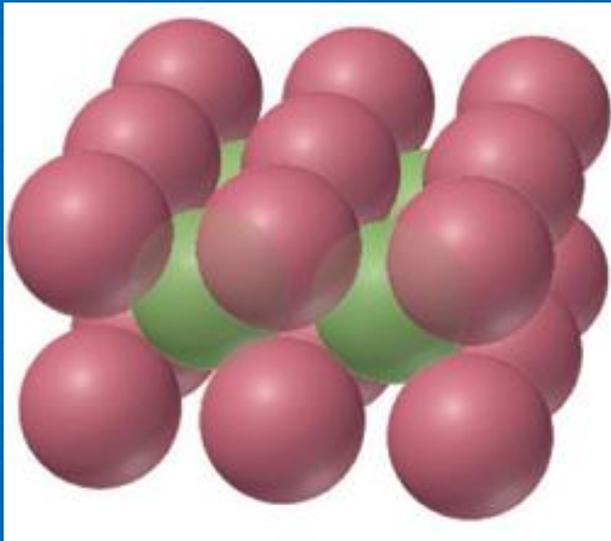
$$= (V_{\text{át}} \text{ por celda}) \cdot \text{Vol. 1 átomo} / a^3$$

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

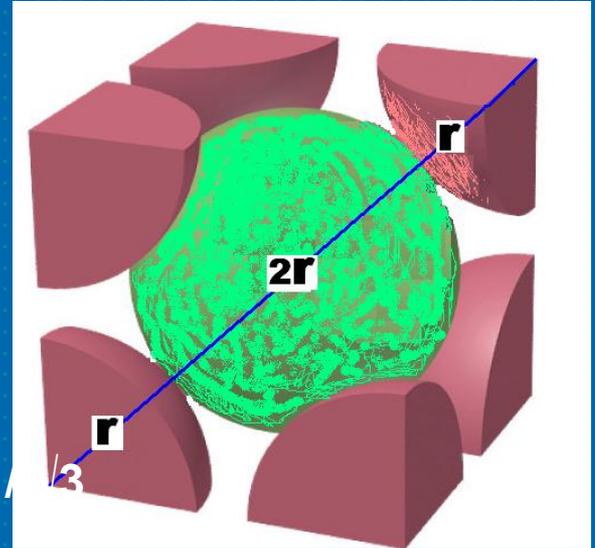
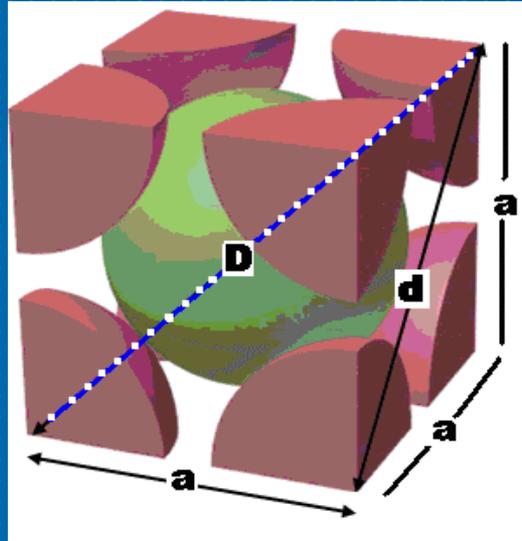
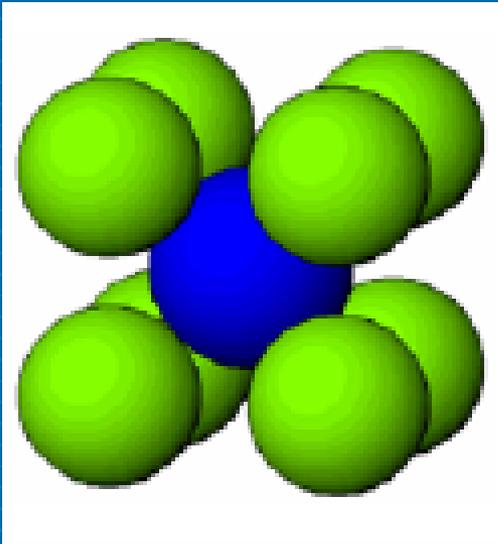
$$\text{pero } a = 2r$$

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

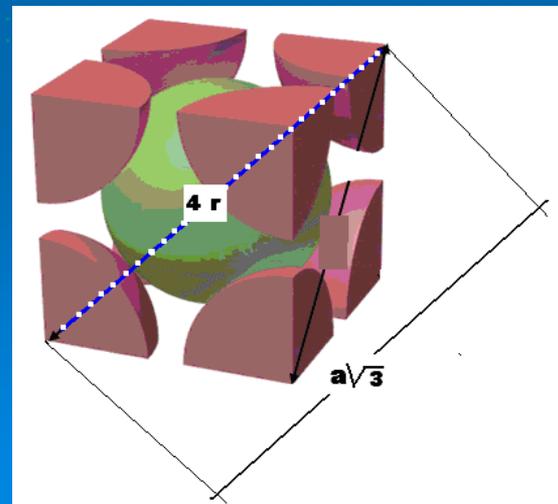
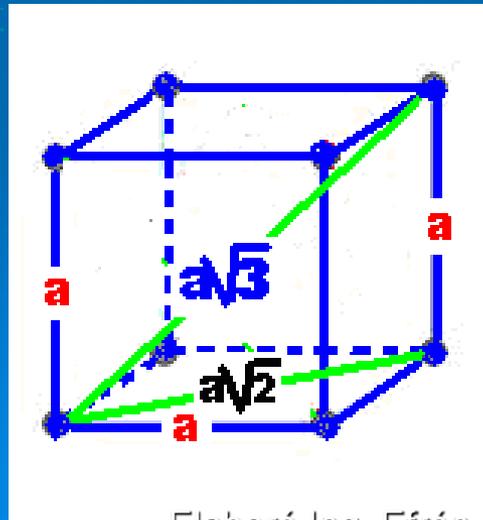
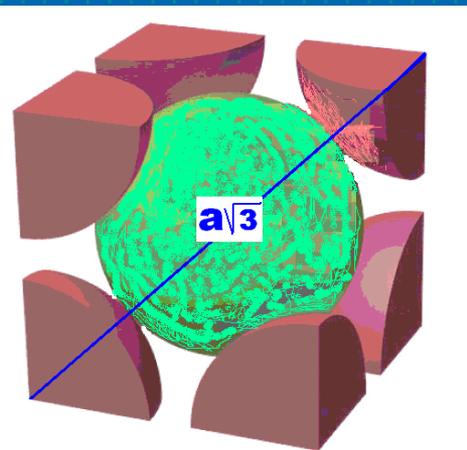
FORMA CÚBICA DE CUERPO CENTRADO-BCC-



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



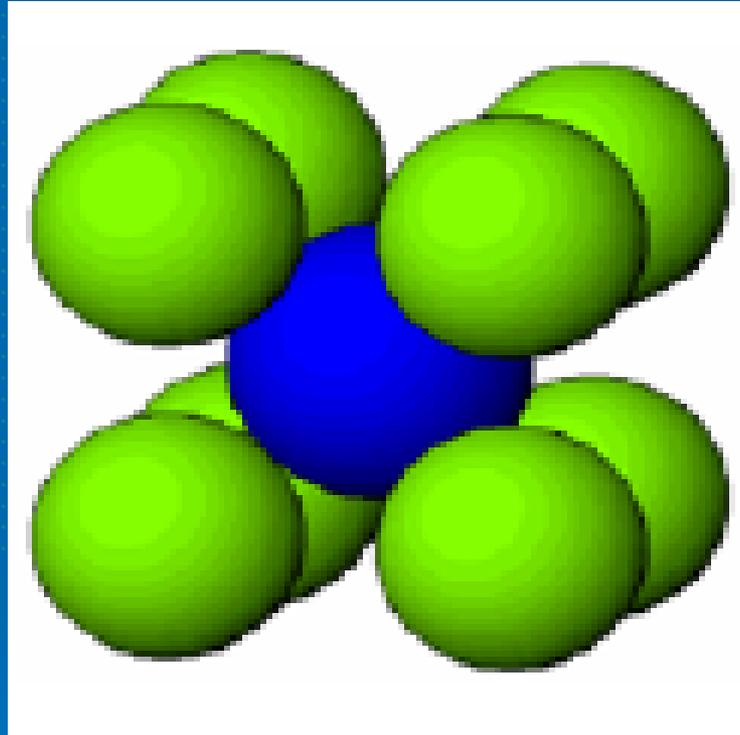
$$4r = \frac{a\sqrt{3}}{2}$$



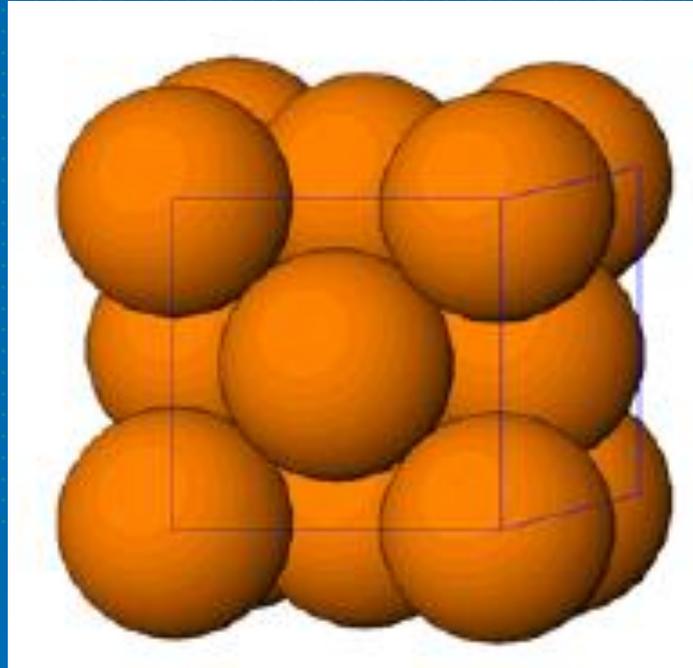
$$a\sqrt{3} = 4r \quad \dots\dots \quad a = 4r / \sqrt{3}$$

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

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

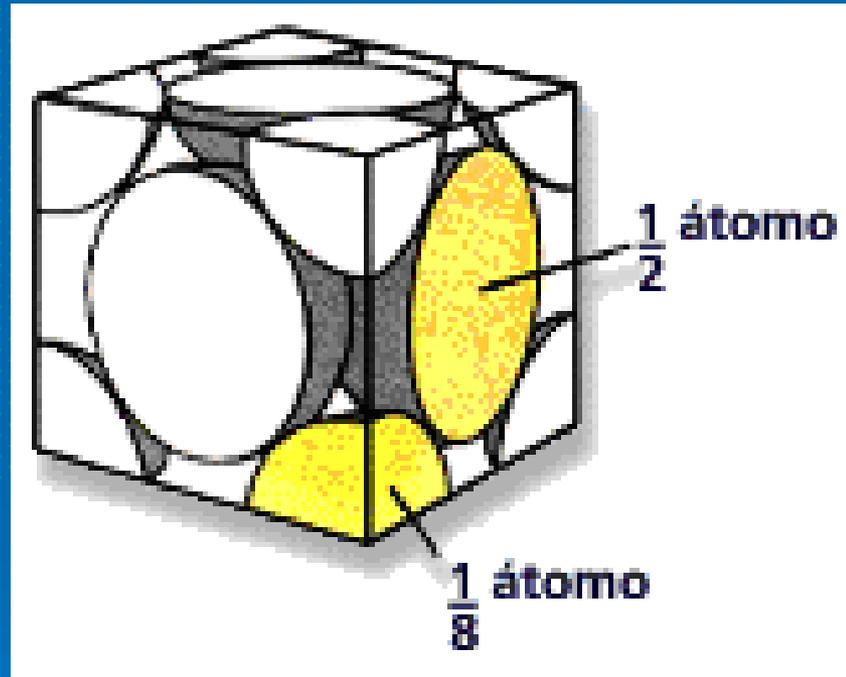


Forma Cúbica Centrada en las Caras ó FCC

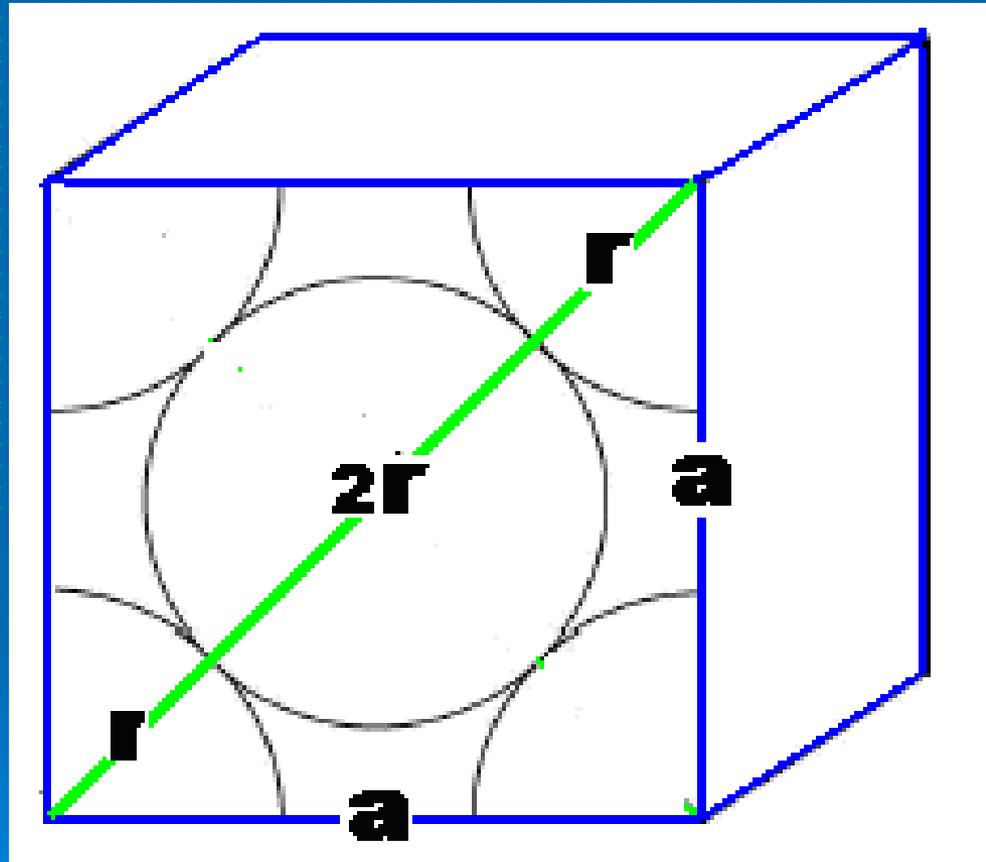


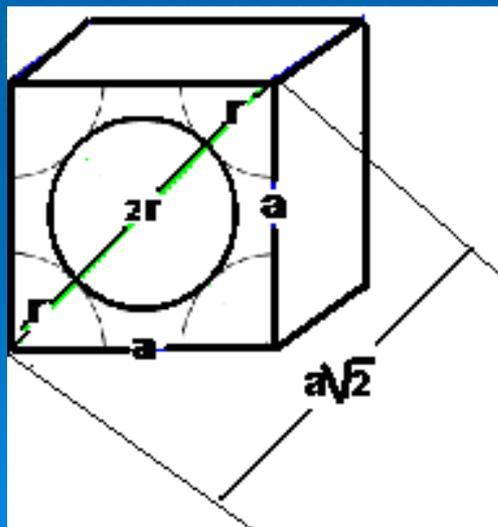
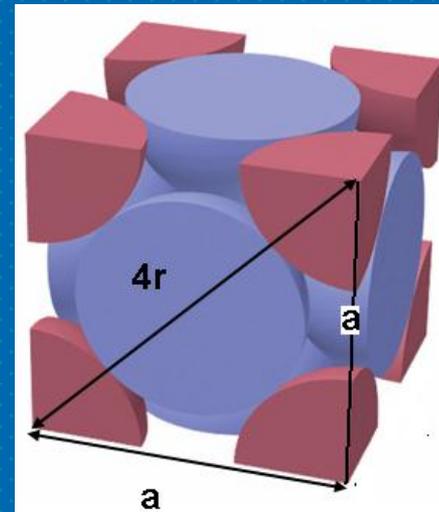
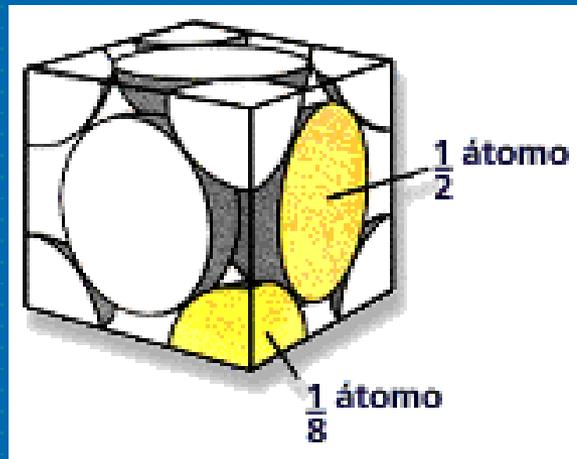
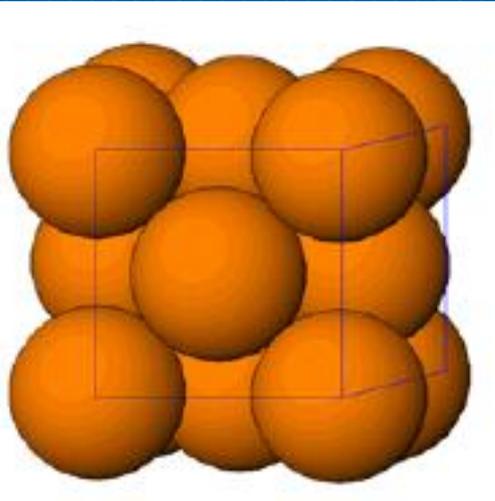
➤ fcc: cobre, plata, paladio, oro

CÚBICO DE CARAS CENTRADAS. -FCC-



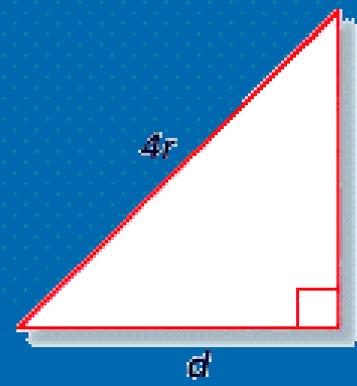
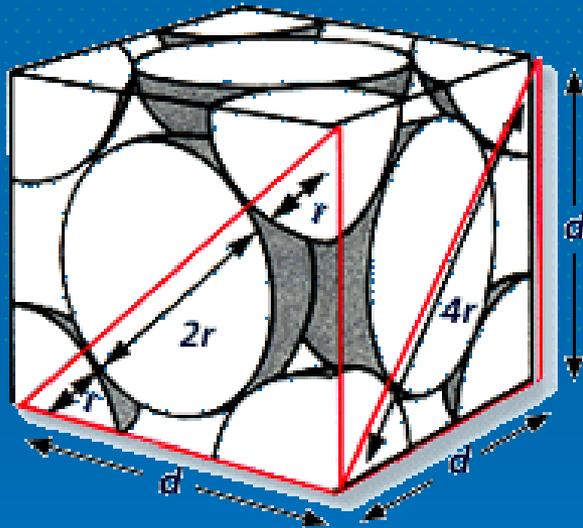
FCC: $a = 4r/\sqrt{2}$. FEA = 0.74 . No Coord.= 12



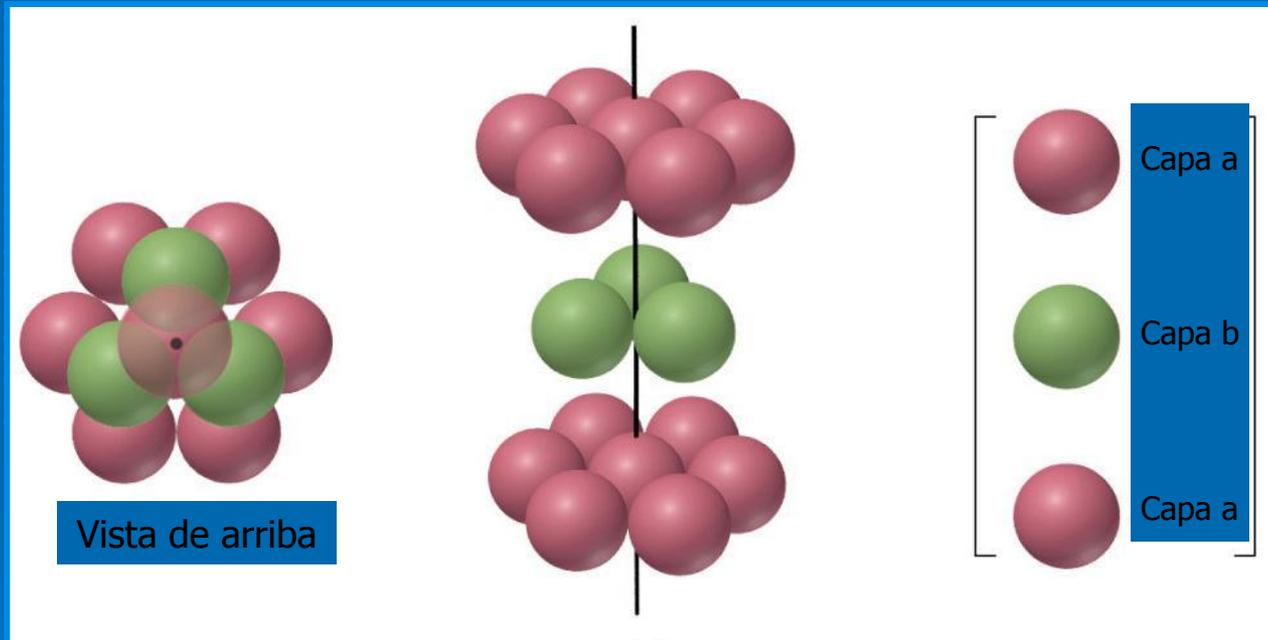


$$a\sqrt{2} = 4r \quad \dots\dots\dots a = 4r / \sqrt{2}$$

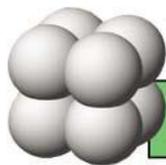
$$\mathbf{FEA} = \frac{4 \cdot (4/3)\pi r^3}{a^3} = \frac{(4/3)\pi r^3}{\left| \frac{4r}{2^{1/2}} \right|^3} = \mathbf{0.74}$$



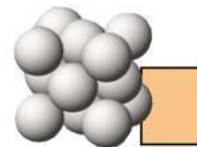
Hexagonal Compacta: $a = 2r$ $c/a = 1.63$, FEA = 0.74, No Coord. = 12



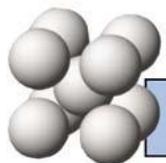
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															



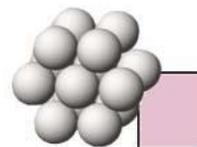
Cúbico simple



Empaquetamiento cúbico compacto (Cúbico centrado en las caras)

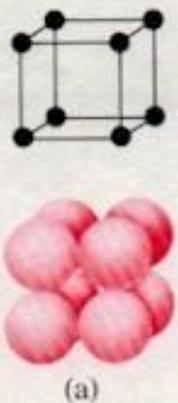
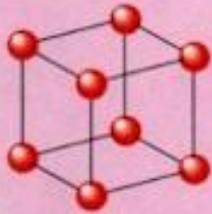
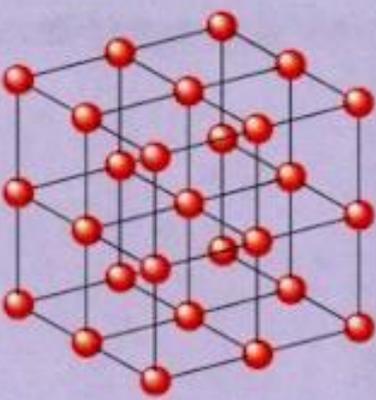
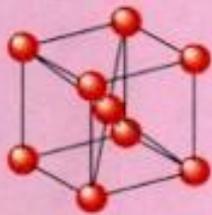
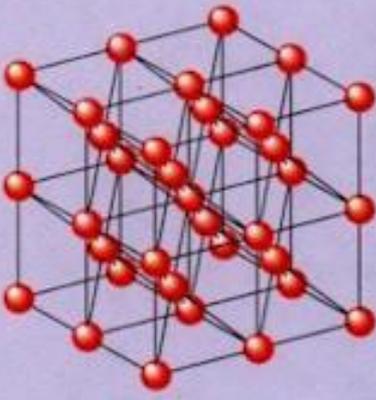
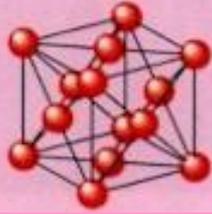
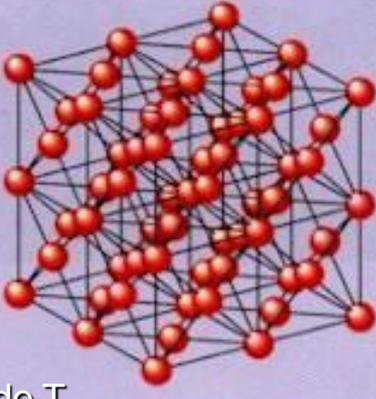


Cúbico centrado en el cuerpo

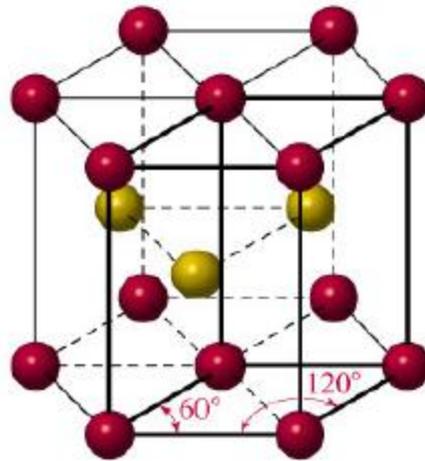


Empaquetamiento hexagonal compacto

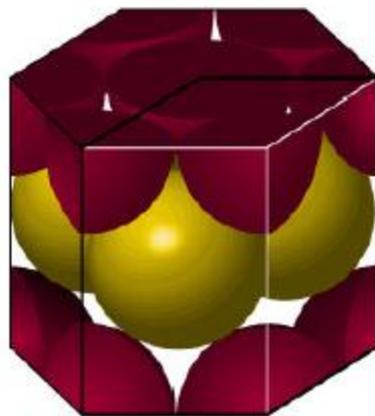
© 2003 Thomson - Brooks/Cole

		Celda unidad	Red	Ejemplo
Cúbico Simple	 <p>(a)</p>	 <p>Cúbico simple</p>		Polonio metálico
Cúbico Centrado en el cuerpo	 <p>(b)</p>	 <p>Cúbico centrado en el cuerpo</p>		Uranio metálico
Cúbico centrado en las caras	 <p>(c)</p>	 <p>Cúbico centrado en las</p>		Oro metálico

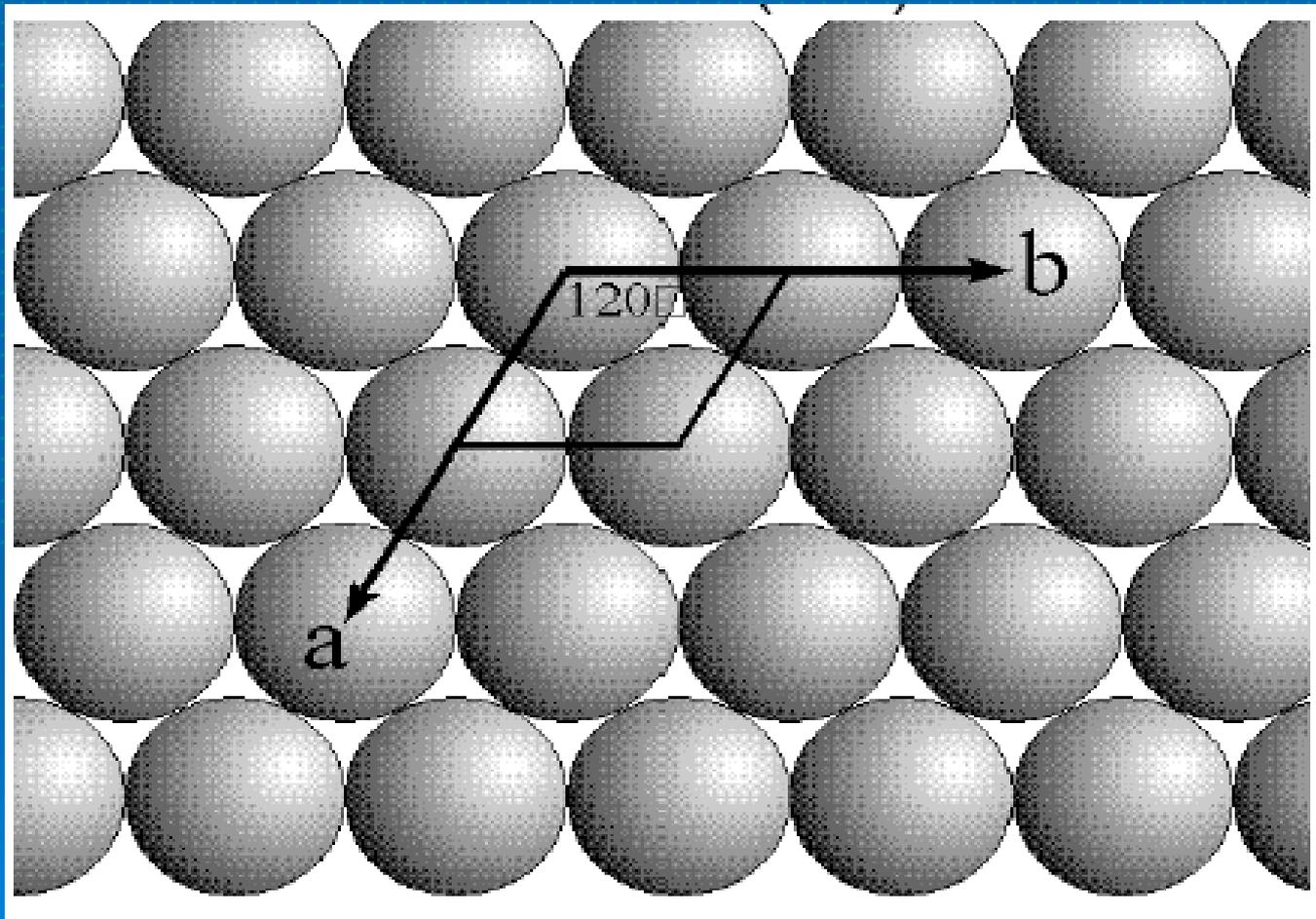
Estructura cristalina hexagonal compacta



(a)



(b)



Algunos parámetros de celdas.

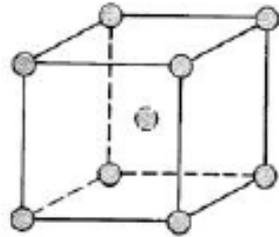
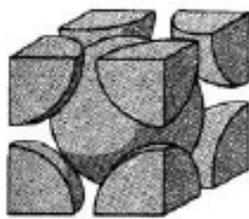
	# átomos/celda unitaria
CS	$8 \times 1/8 = 1$
CC (bcc)	$1 + 8 \times 1/8 = 2$
CCC (fcc)	$6 \times 1/2 + 8/1/8 = 4$

	# 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

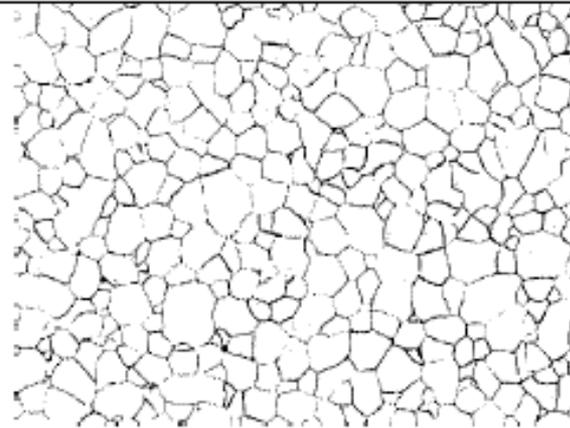
POLIMORFISMO Y ALOTROPÍA

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

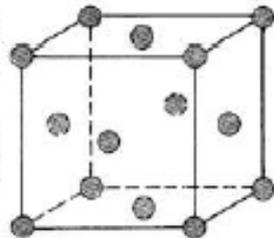
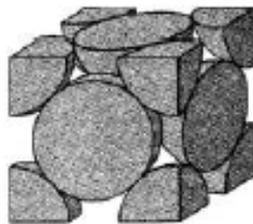
ALOTROPÍA DEL HIERRO



Hierro α : "ferrita"



Cristales de ferrita

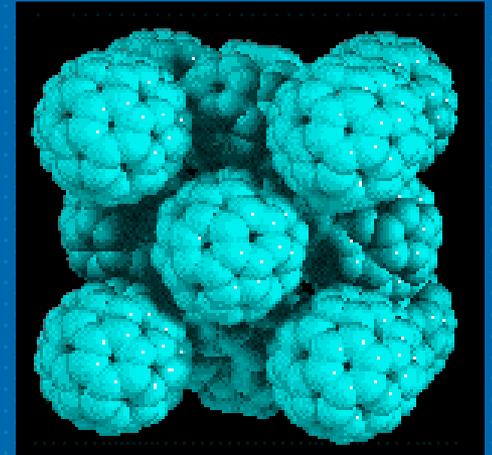


Hierro γ : "austenita"



Cristales de austenita

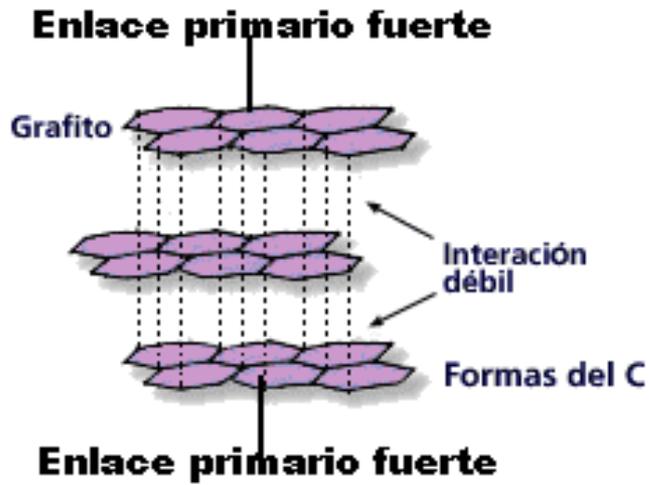
Carbón-Grafito-Diamante-Futboleno.



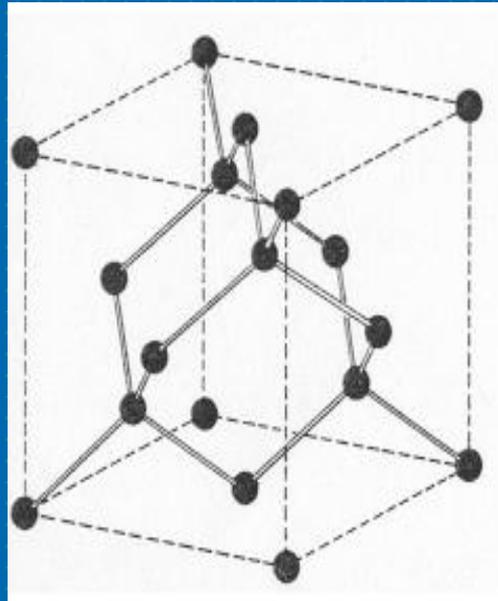
El carbono elemental existe:

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

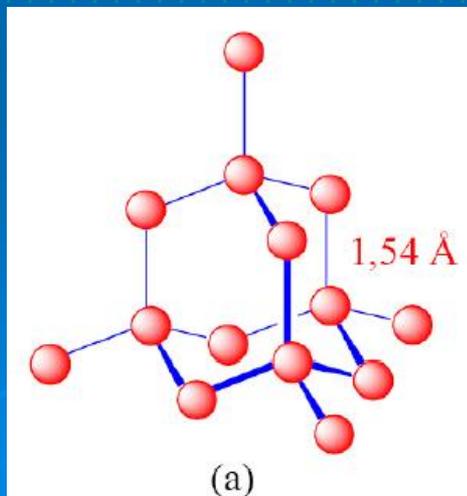
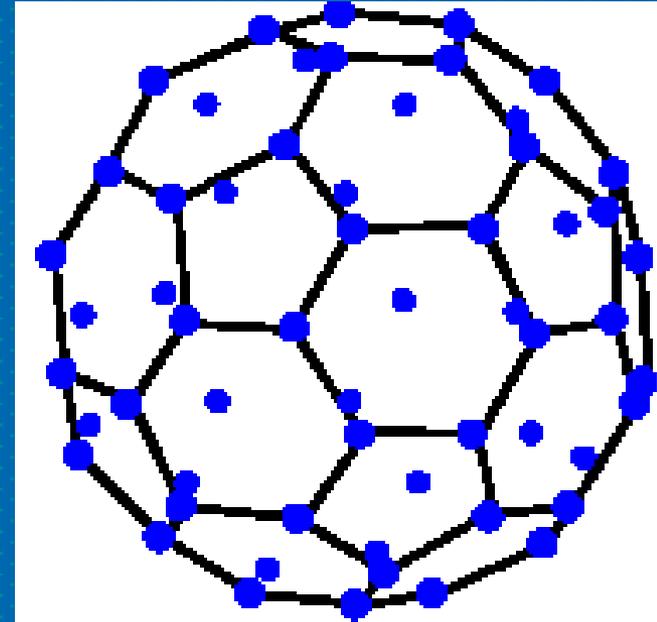
Grafito



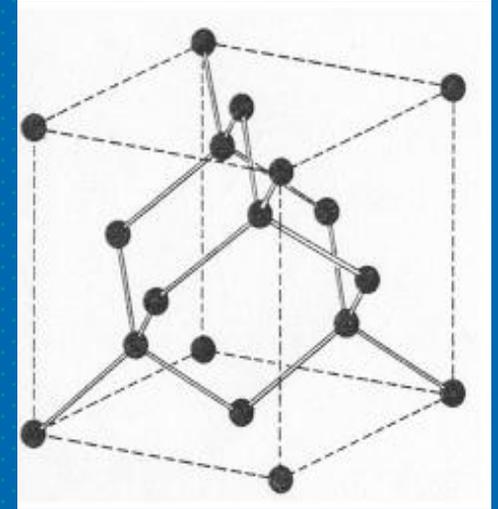
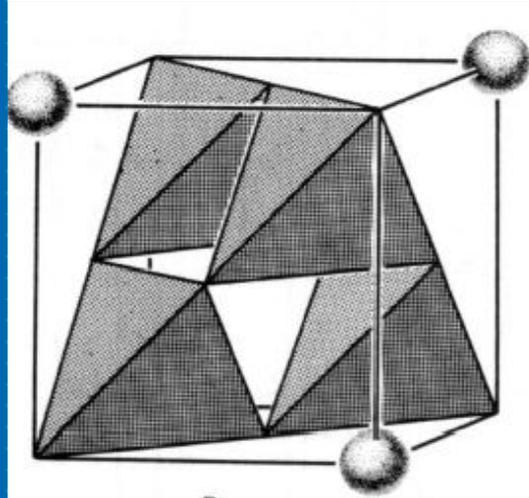
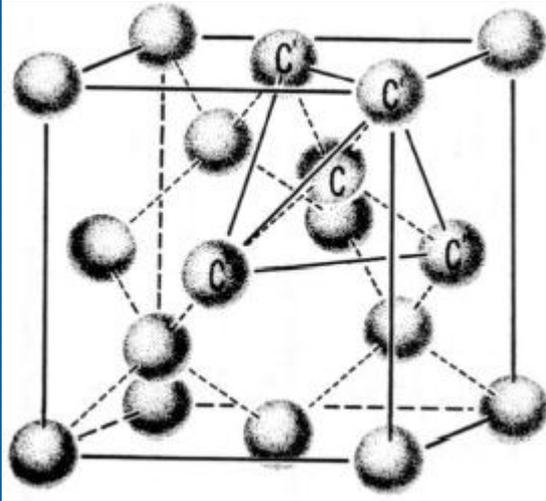
Diamante



Futboleno

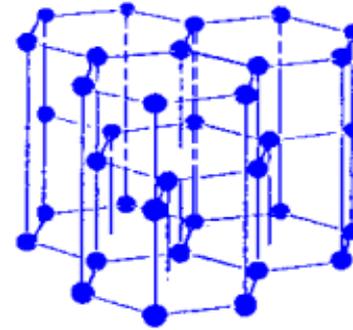


Estructura del Diamante



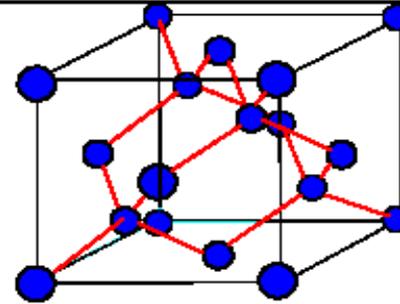
GRAFITO

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



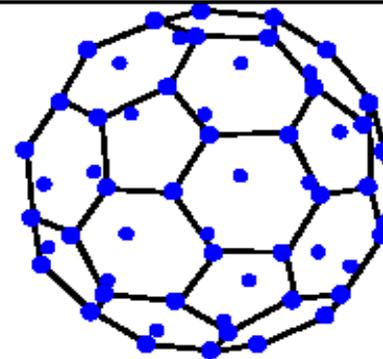
DIAMANTE

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

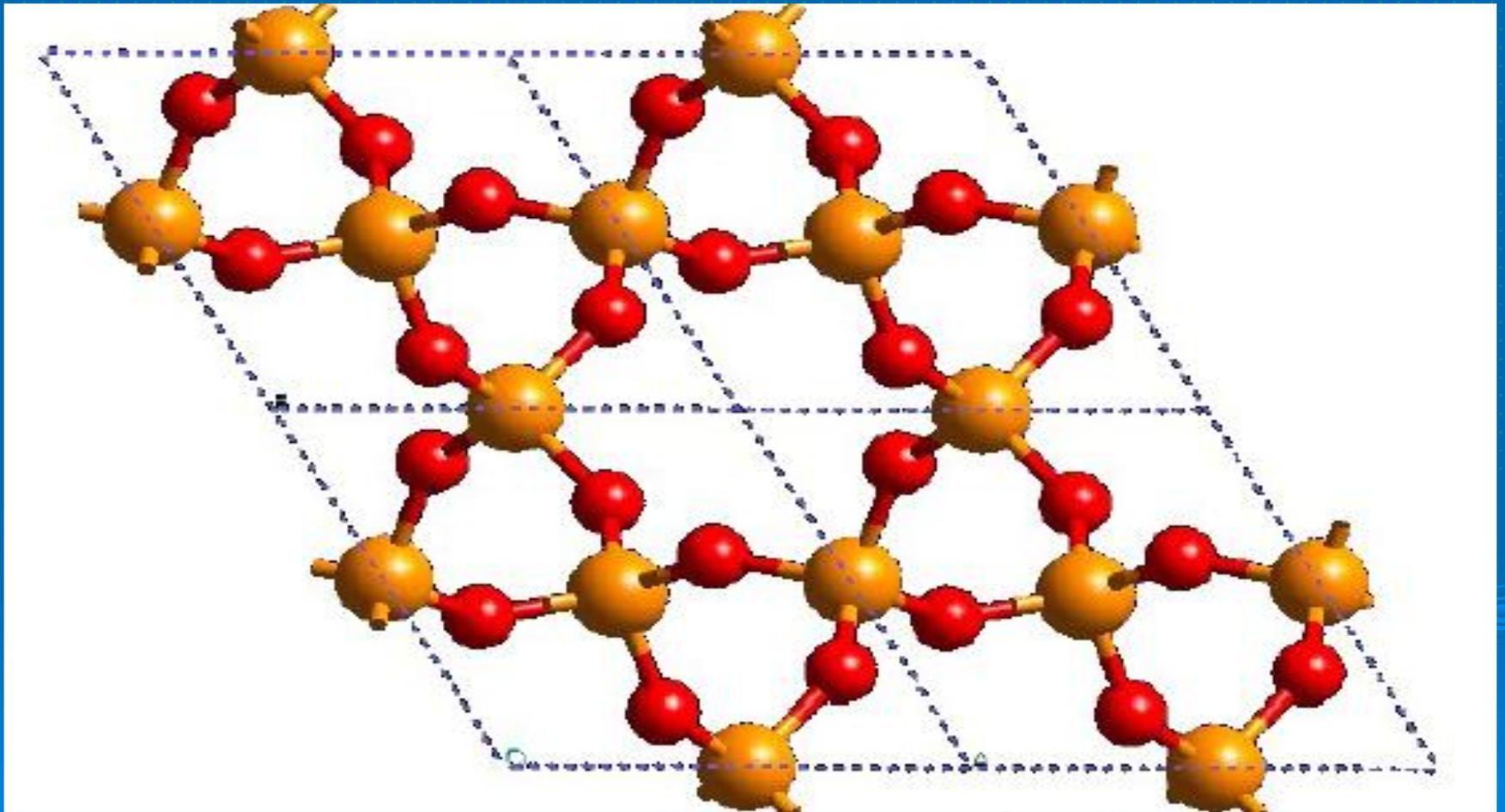


BUCKMINSTERFULLERENO, FULLERENO O FUTBOLENO

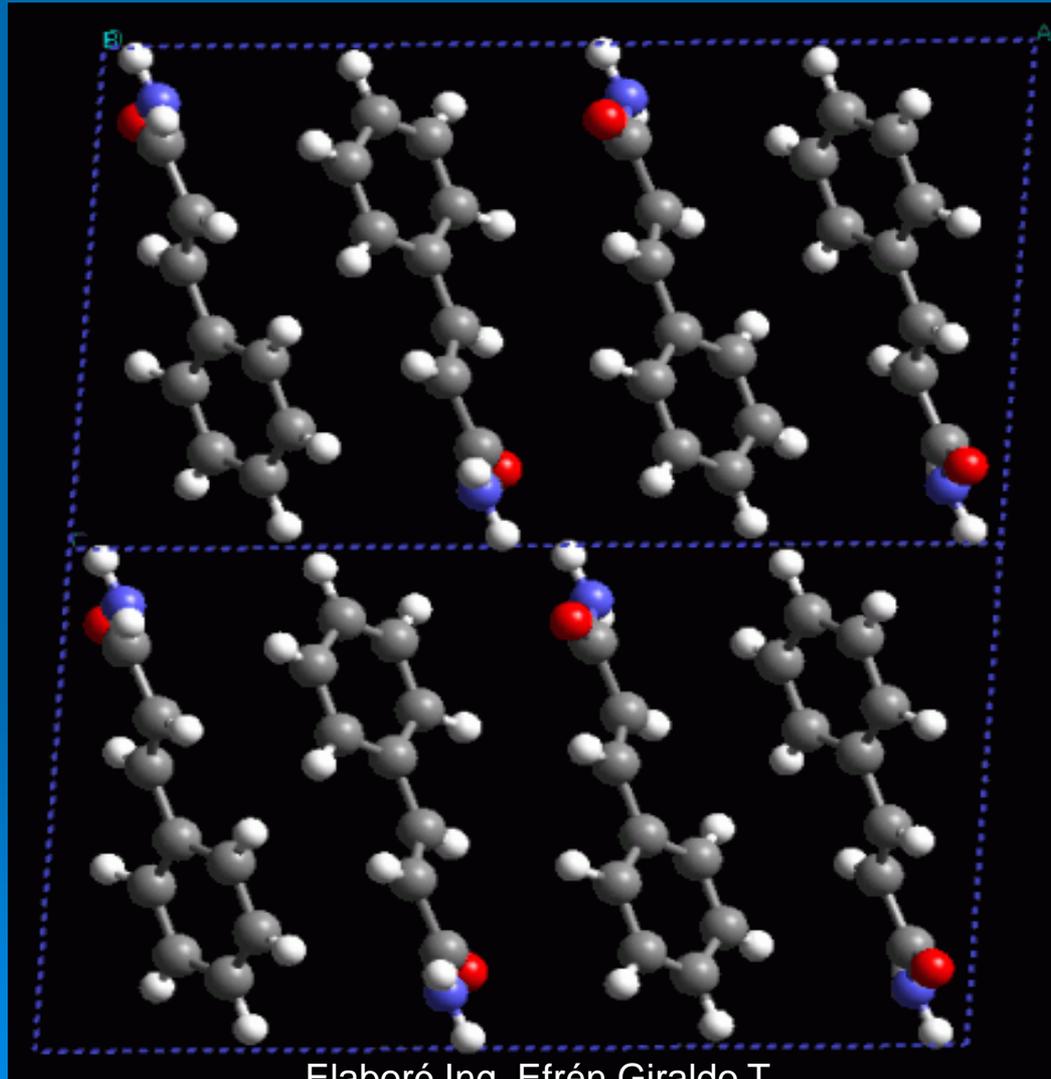
- Aislante; impurezas lo hacen superconductor
- Esferas duras independientes (rodamientos ideales)
- Estructura: C₆₀: polihedro cuyas caras son hexágonos y pentágonos con átomos de C en los vértices
- Carísimo



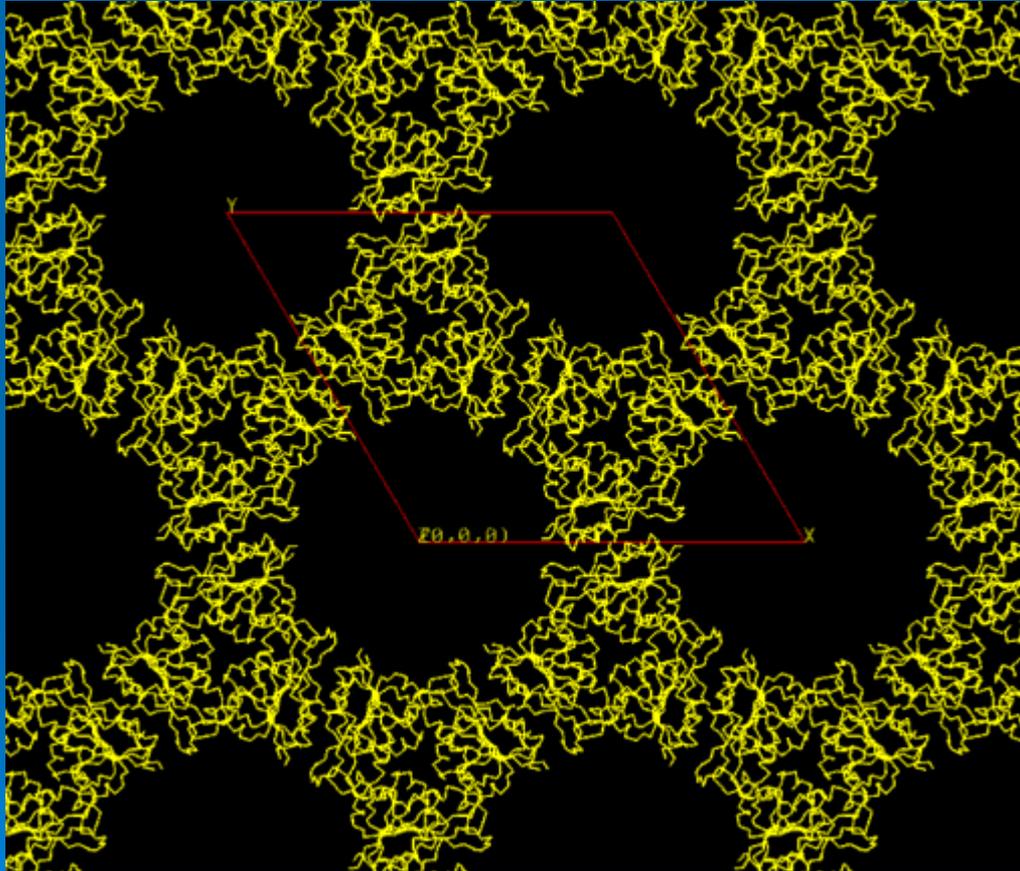
Estructura cristalina del Cuarzo alfa



Estructura cristalina de un material orgánico: cinnamida



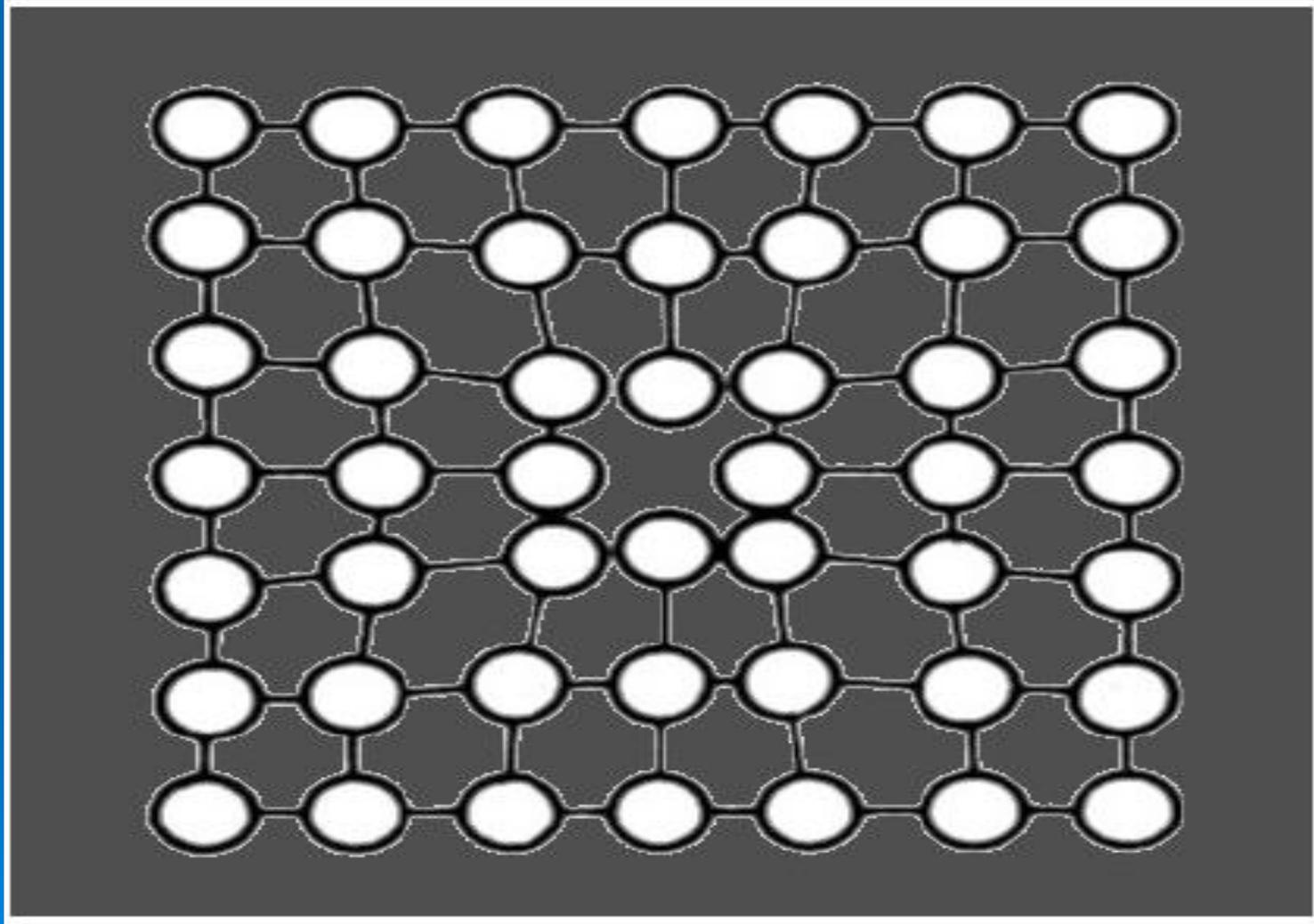
Estructura cristalina de una proteína: AtHal3



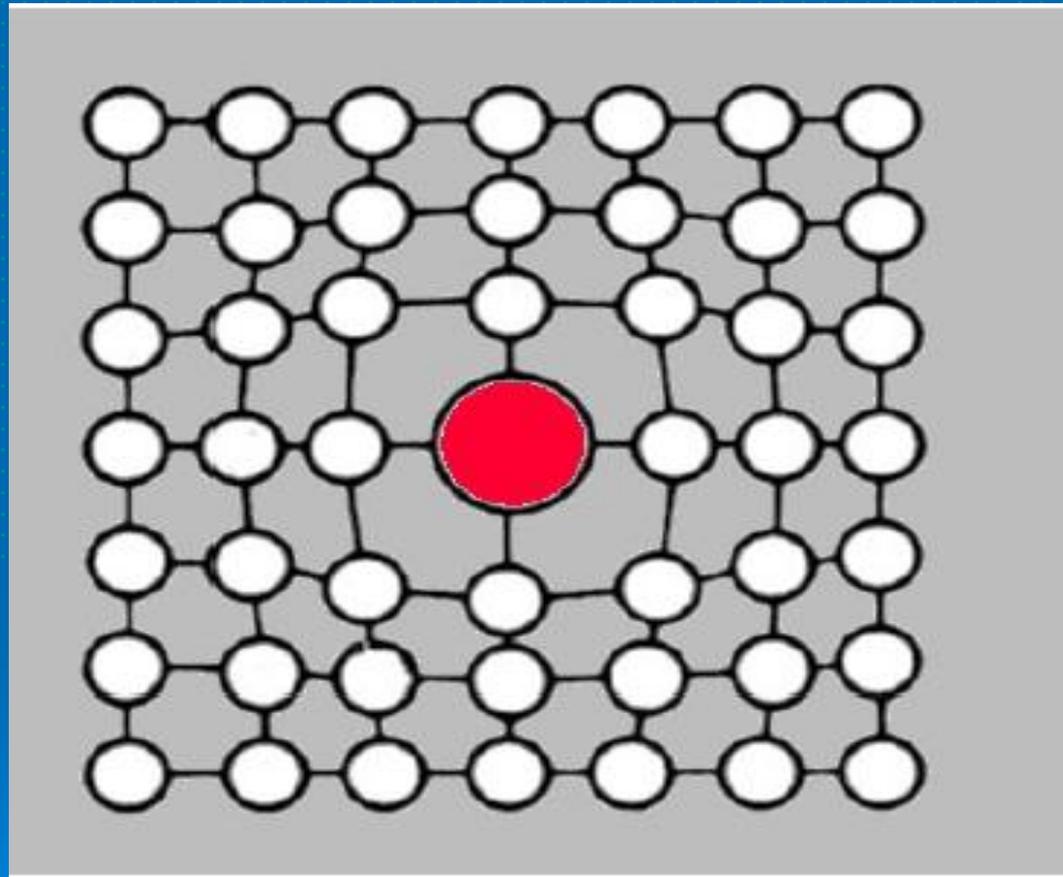
DEFECTOS RETICULARES

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

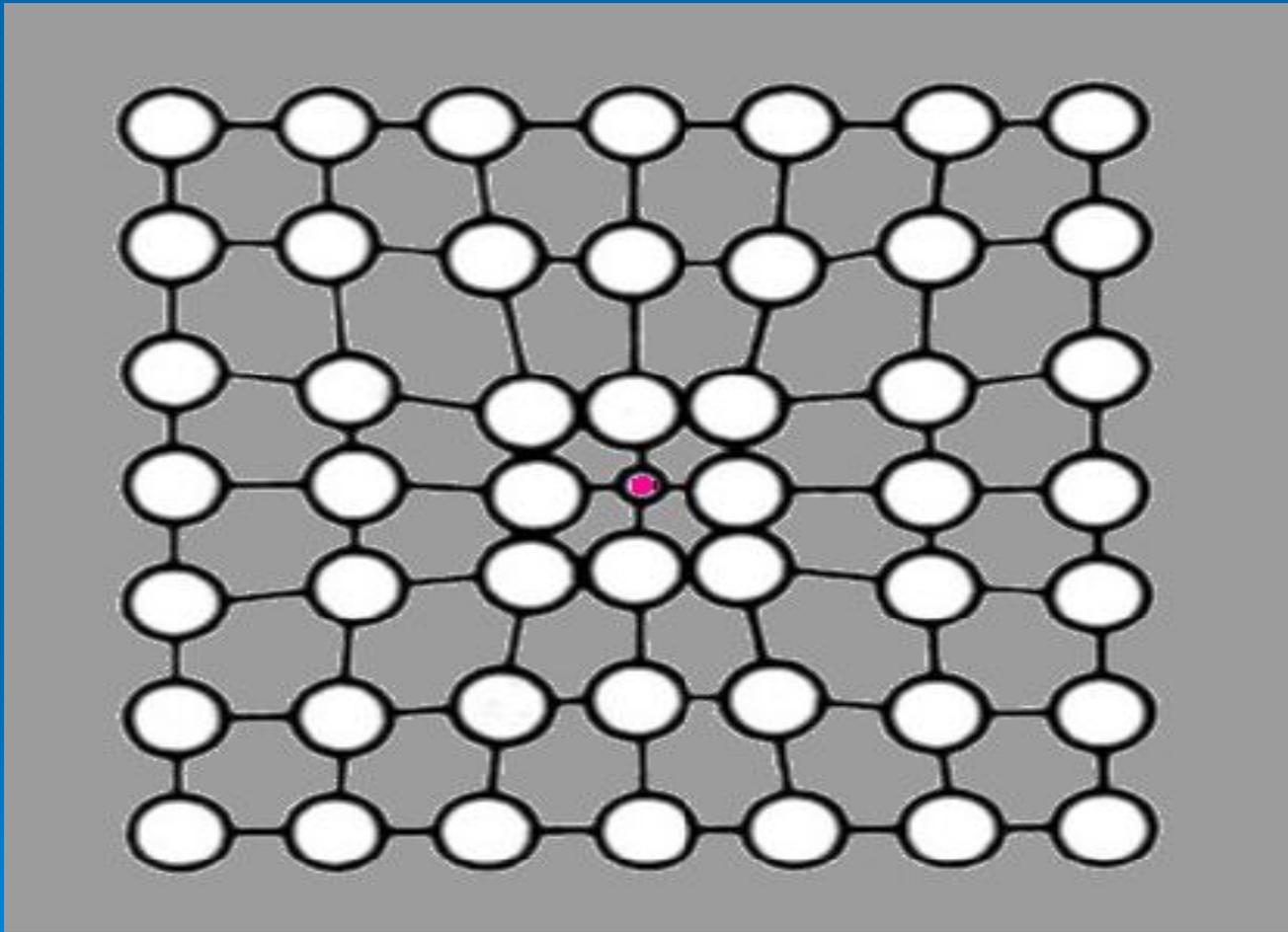
VACANCIAS: sitios vacíos.



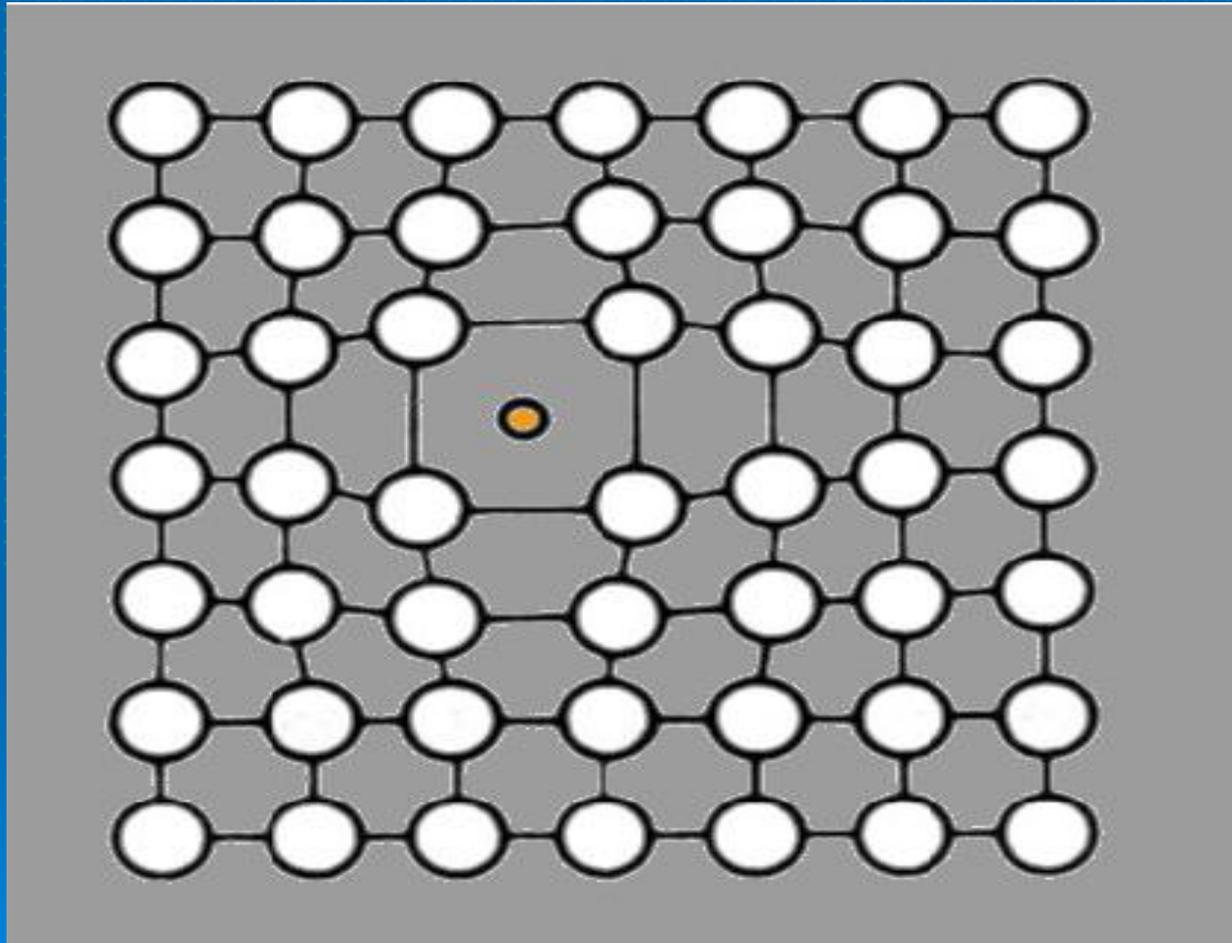
IMPUREZAS SUSTITUCIONALES

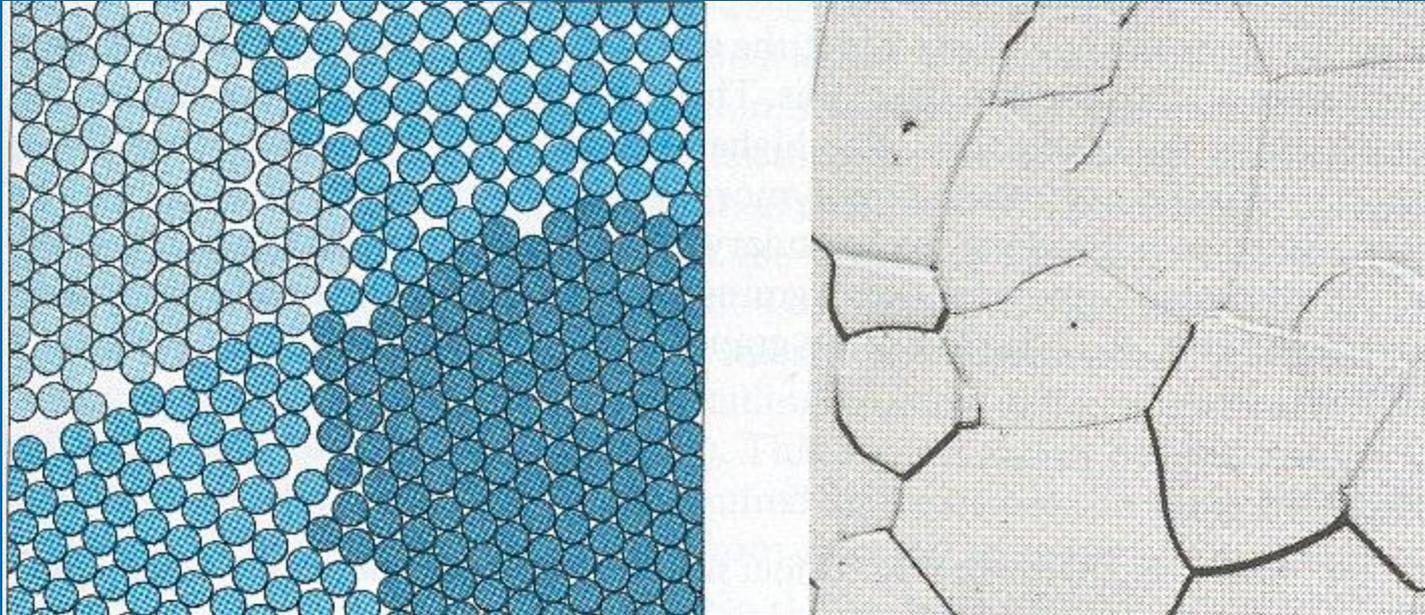


IMPUREZAS SUSTITUCIONALES



IMPUREZAS INTERSTICIALES





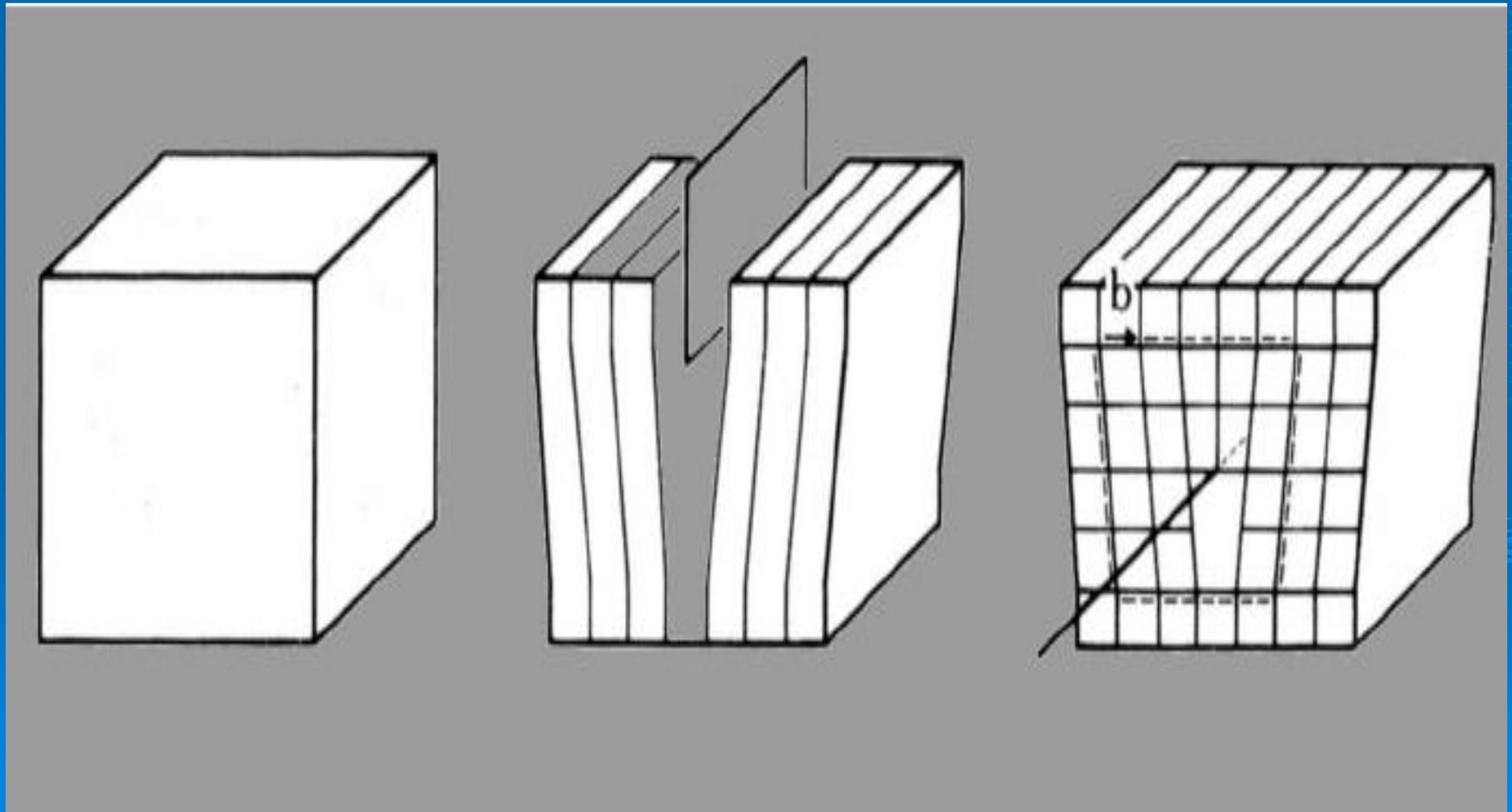
(a) Esquema que muestra el ordenamiento de los átomos en la formación del borde de grano. (b) Granos y límites de grano en una muestra de acero inoxidable.

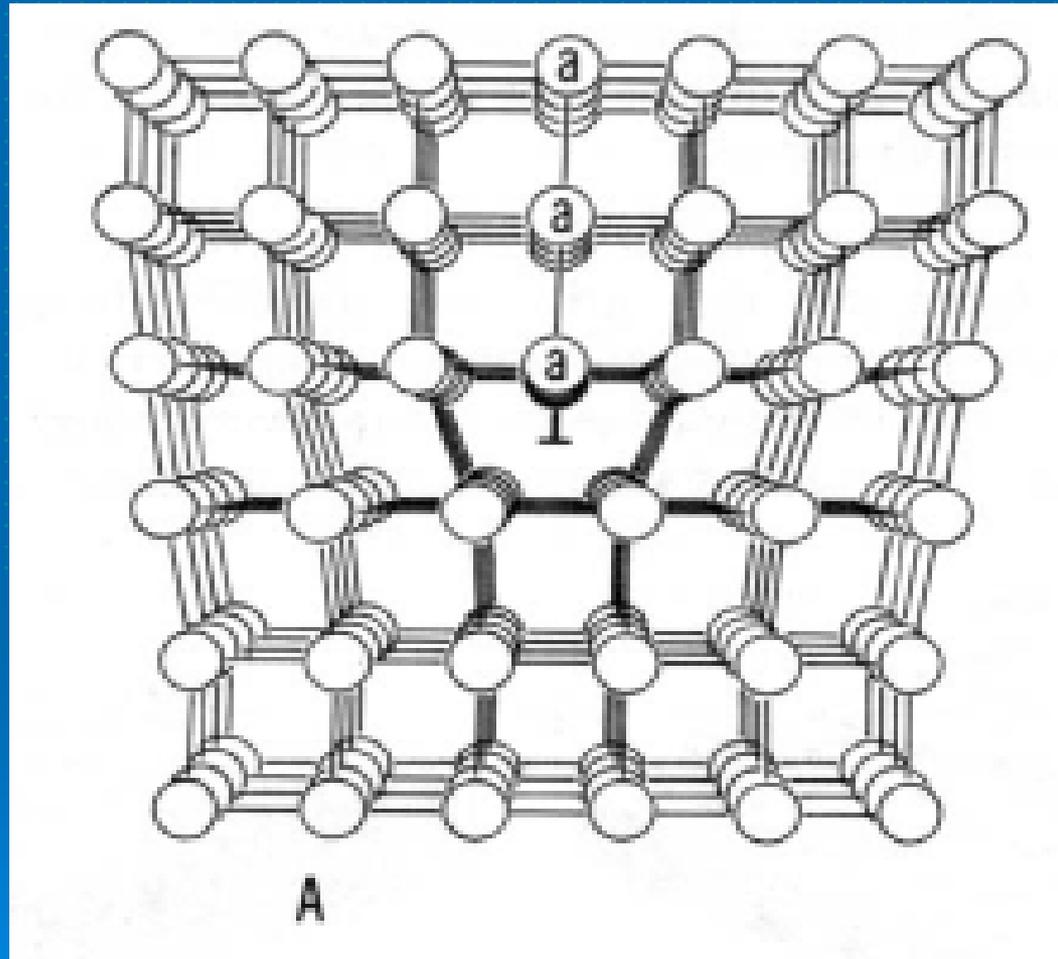
Dislocaciones:

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

DISLOCACIONES DE ARISTA O BORDE:

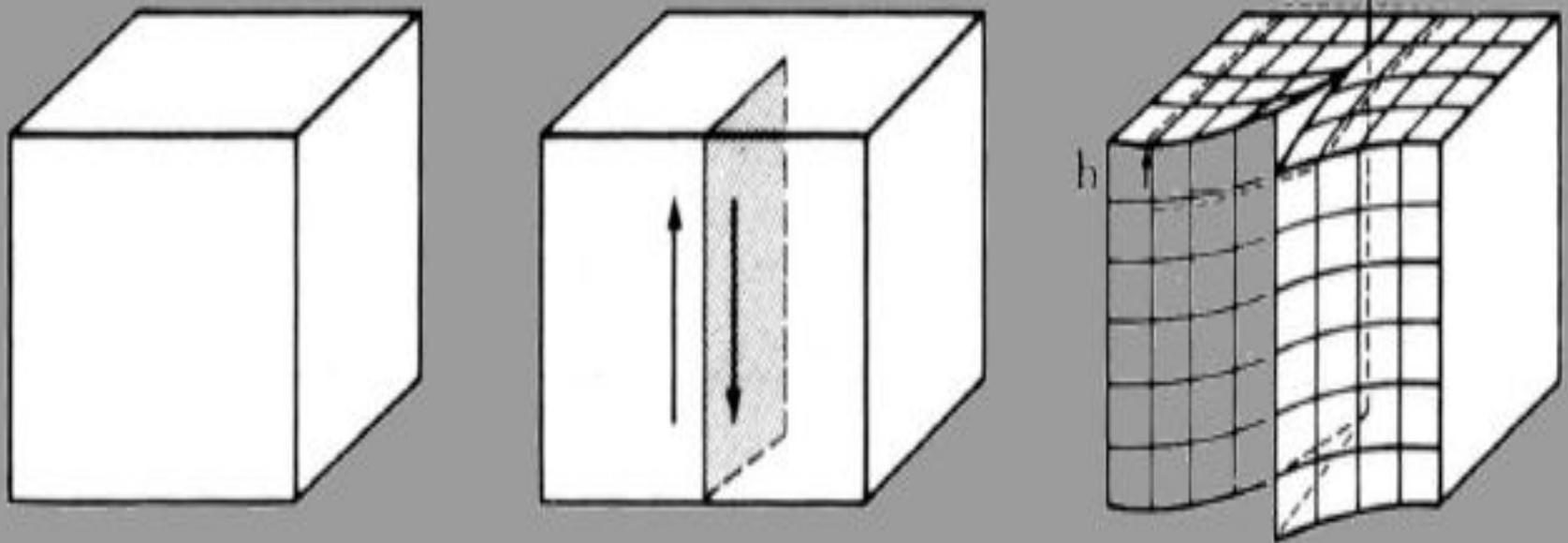
Falta parte de un plano de átomos o una parte de un plano se presenta en forma extra en la organización reticular.

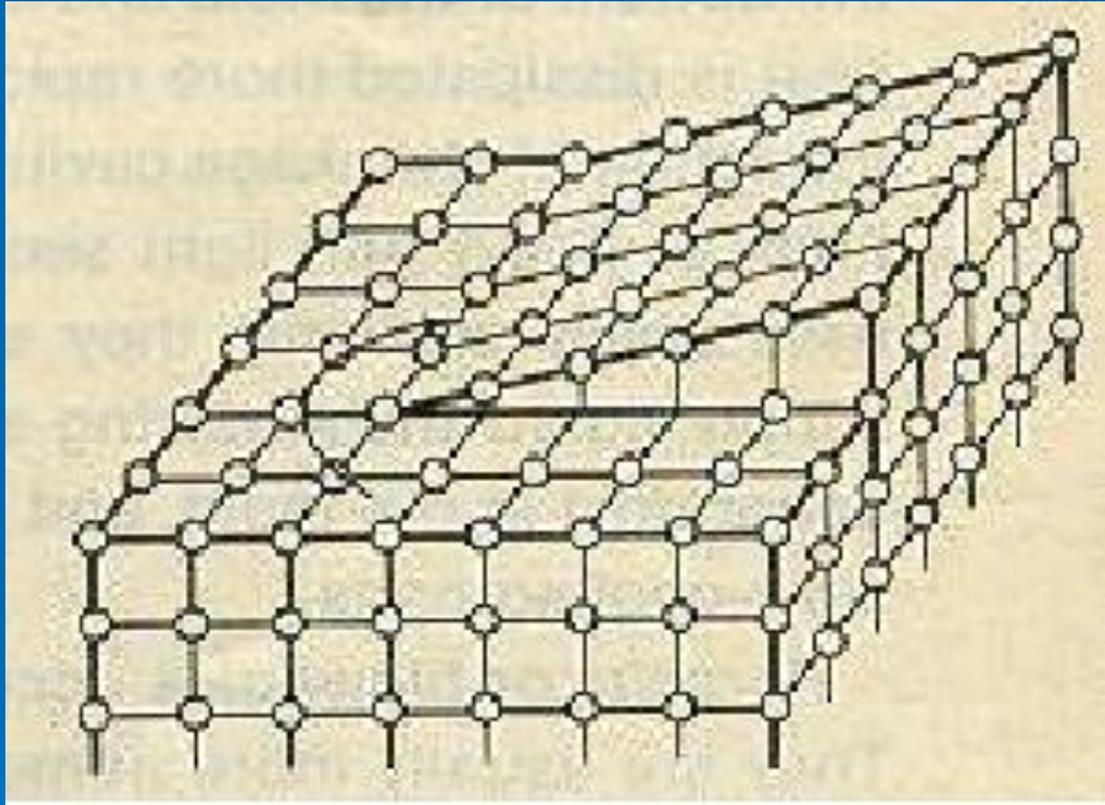




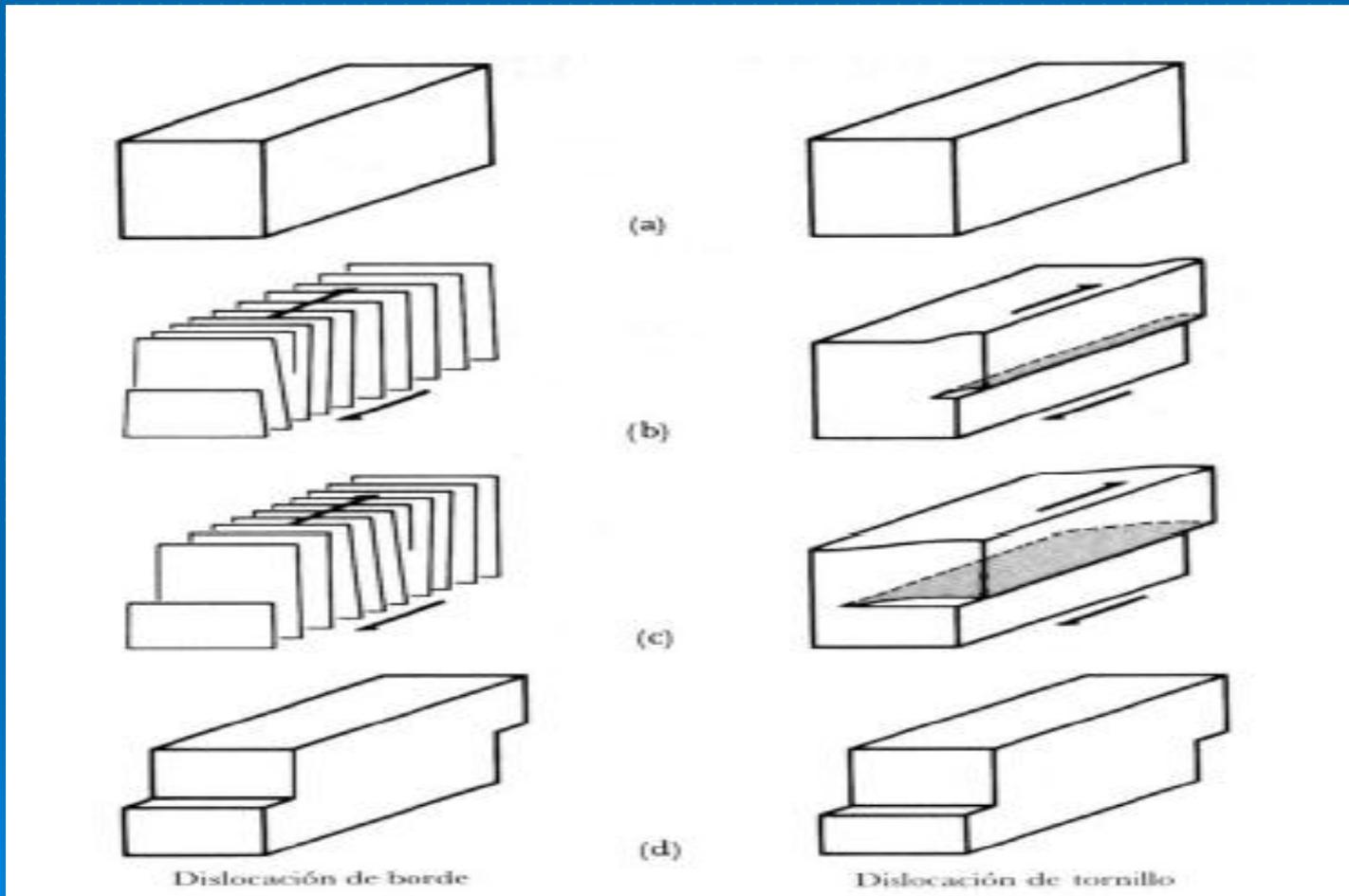
DISLOCACIONES DE ESPIRAL O TORNILLO:

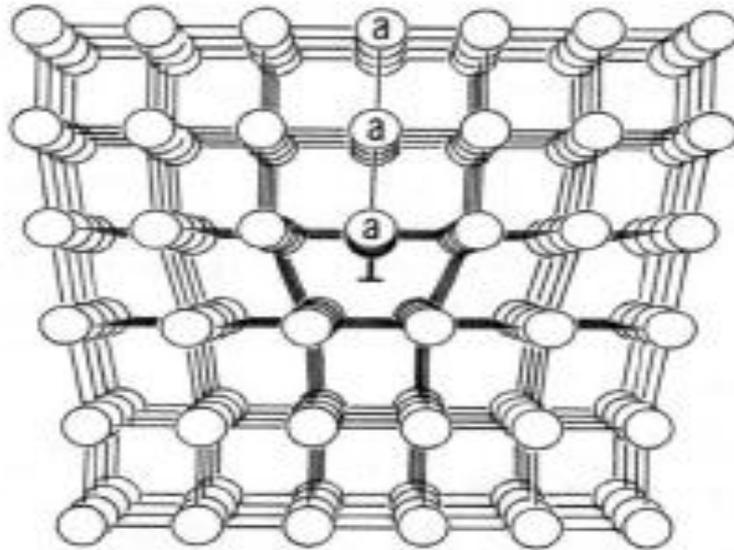
Una parte del cristal se desplaza en cierta dirección con respecto a otra.



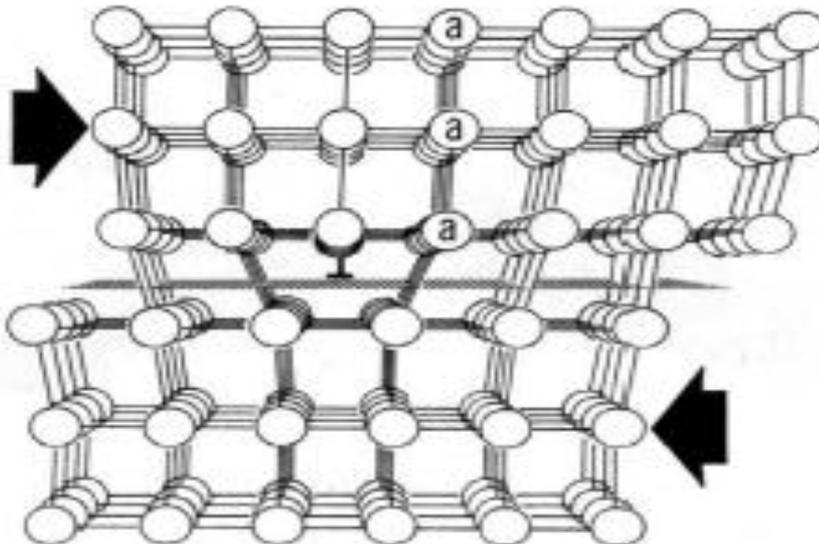


DESLIZAMIENTO O MOVIMIENTO DE DISLOCACIONES





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 = 10⁻⁷ cm = 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

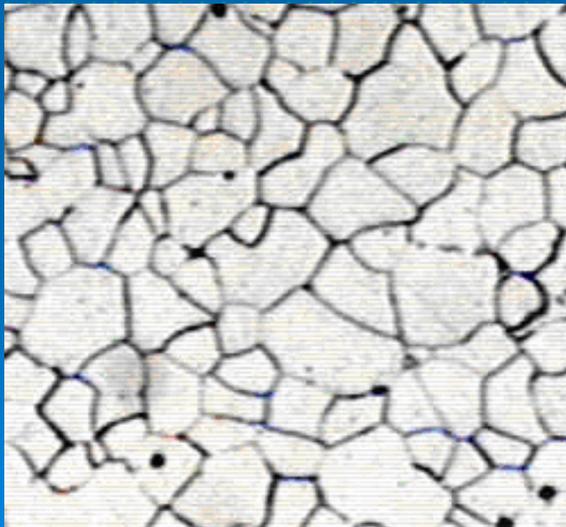
ESTRUCTURA ↔ PROPIEDADES

Cuál es la estructura que dará el mejor desempeño?

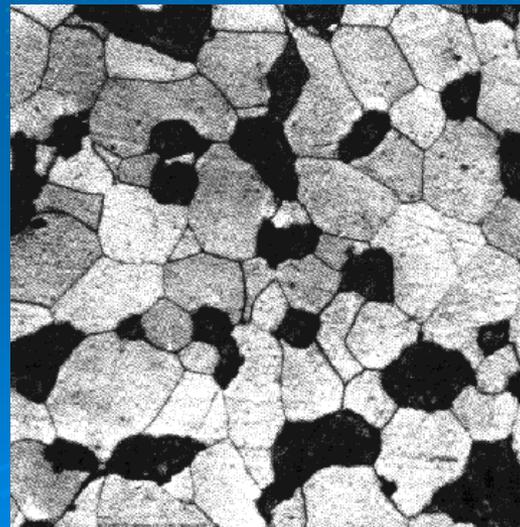
Diferentes materiales implica diferentes estructuras y diferentes propiedades

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

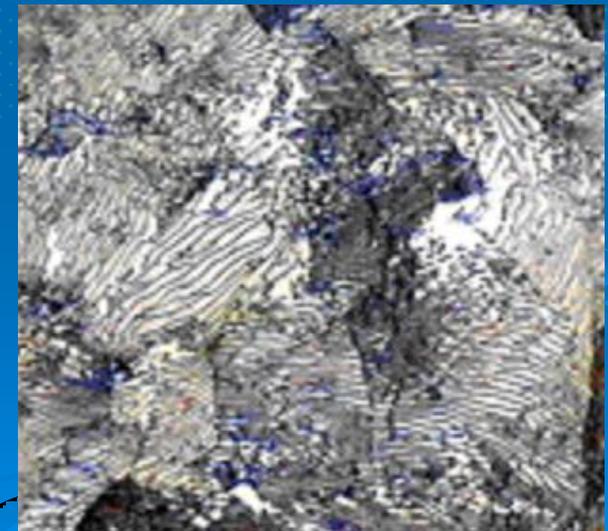
HIERRO

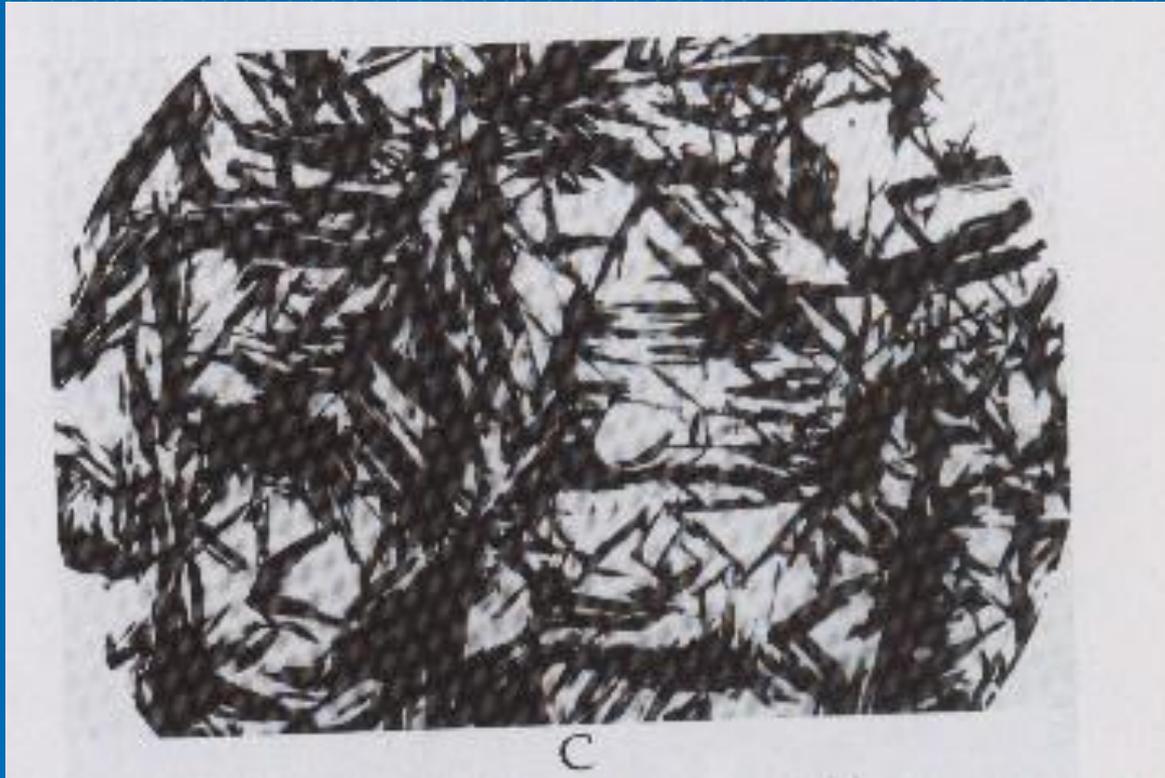


ACERO BAJO C



ACERO ALTO C

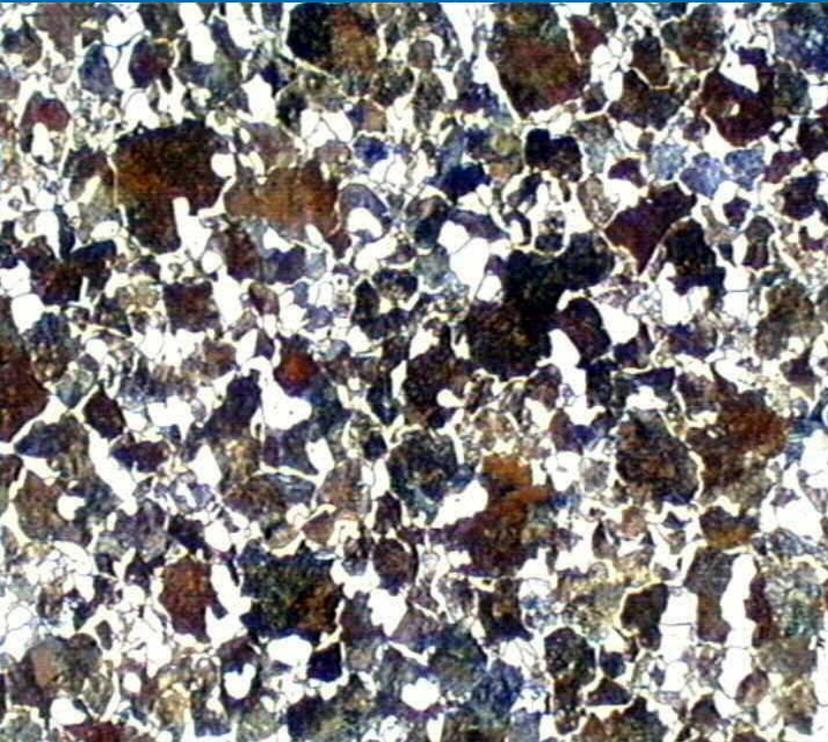




UN MISMO ACERO PUEDE TENER DIFERENTES ESTRUCTURAS

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?

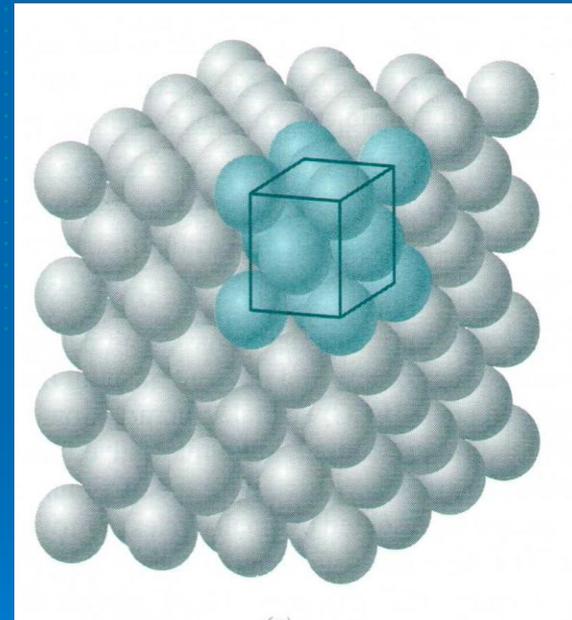
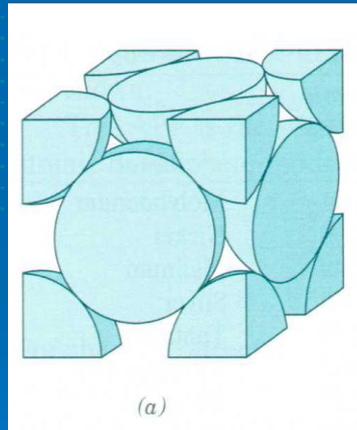
ACERO 0.35 %C

➤ 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

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

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

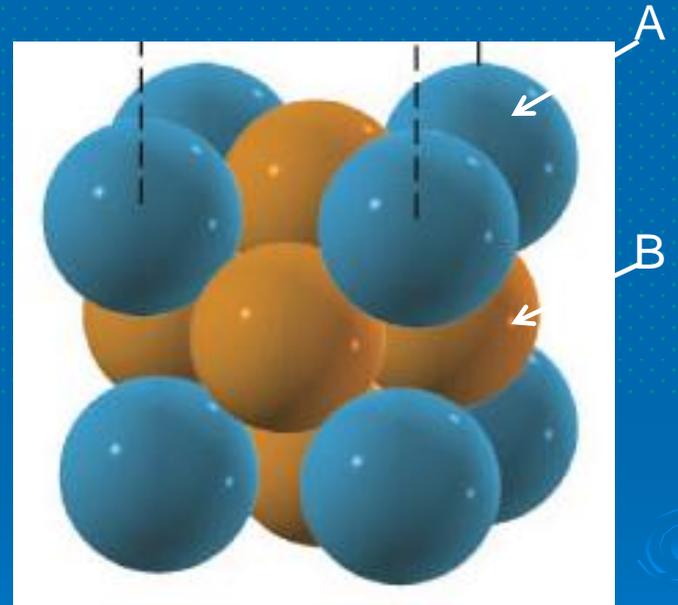
Una aleación cristaliza en cúbica centrada en las caras, como se muestra en figura, Calcule la densidad teórica

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

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

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

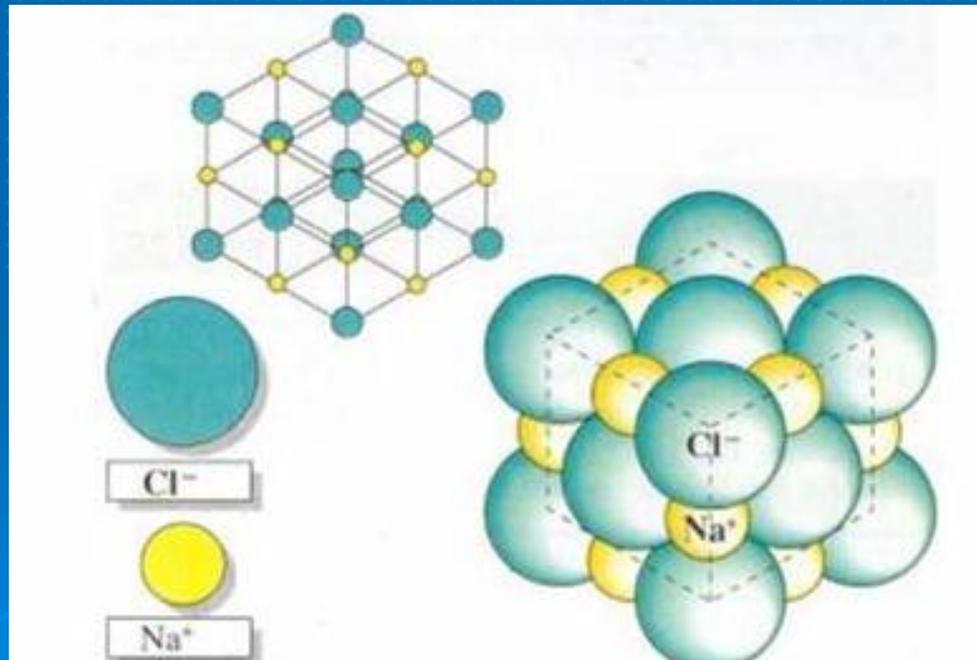
a) Densidad del cloruro de sodio

b) Factor de empaquetamiento de la celda

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

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

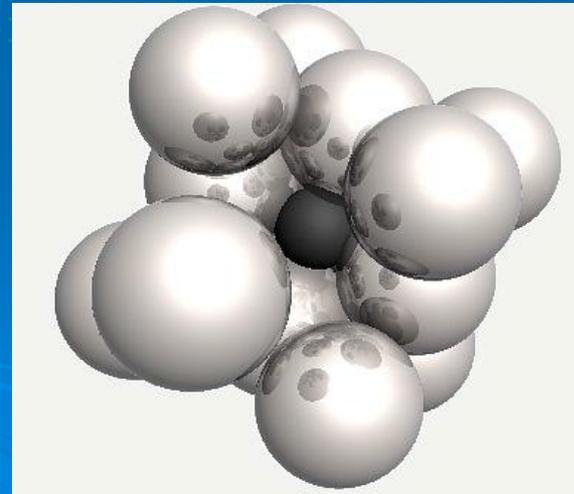
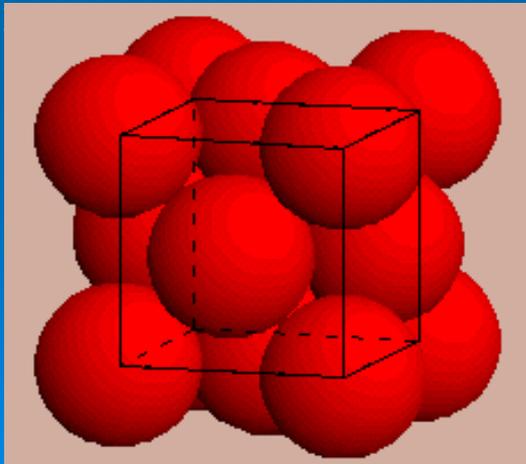
$$N^{\circ} \text{ avogadro} = 6,02 \times 10^{23}$$



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.

