Sólidos

Clase III

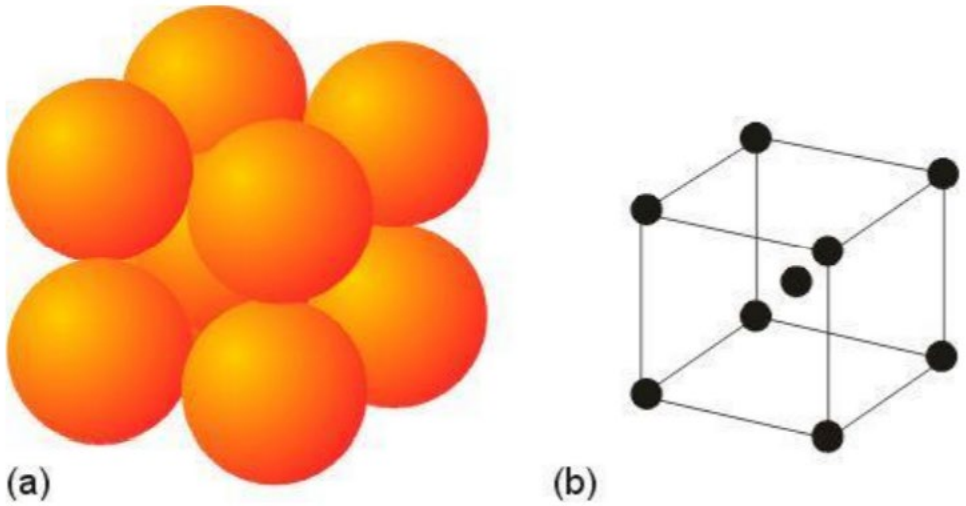
Temas

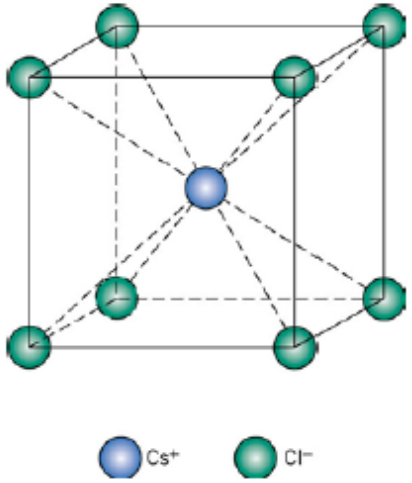
- Cristales Iónicos
- Cristalografía de rayos X
- Materiales

Cristales iónicos

- La mayor parte de las estructuras cristalinas iónicas consisten en un apilamiento tridimensional de aniones o cationes más pequeños situándose en las posiciones intersticiales.

- El tamaño de la posición intersticial varía según el modo de apilamiento. Por ejemplo, una celda cúbica simple tiene una posición intersticial relativamente grande en el centro

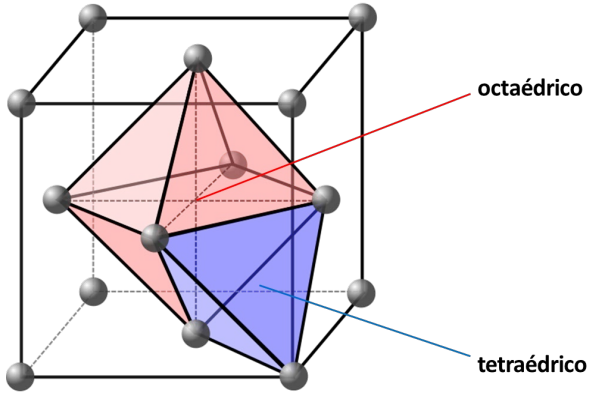


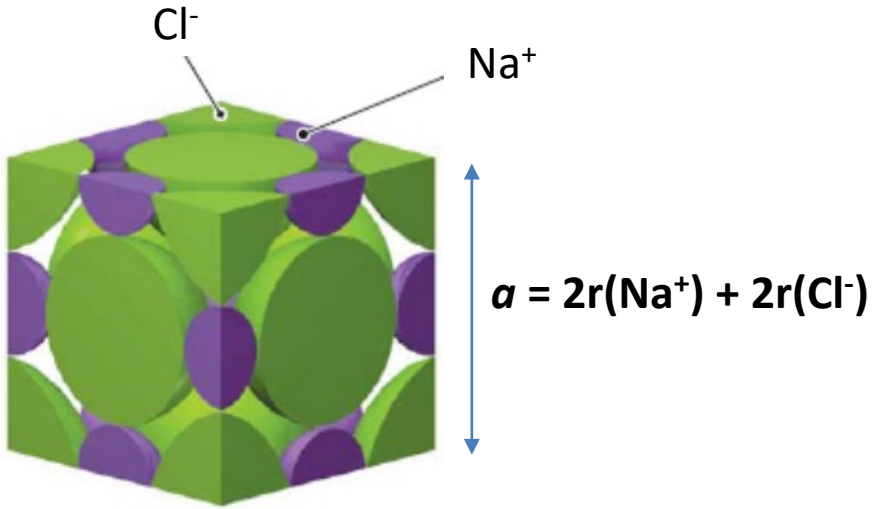


El Cs^+ esta en el centro del cubo, con Cl^- en las esquinas.

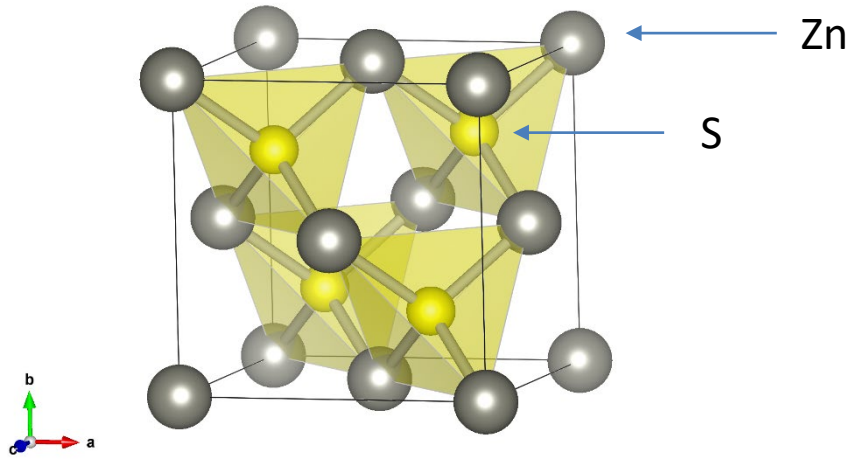
Cristales iónicos

- En la estructura de NaCl los aniones de mayores dimensiones (Cl-) forman un empaquetamiento FCC, en el cual todos los huecos octaédricos están ocupados por Na^+, en tanto que los huecos tetraédricos están totalmente desocupados

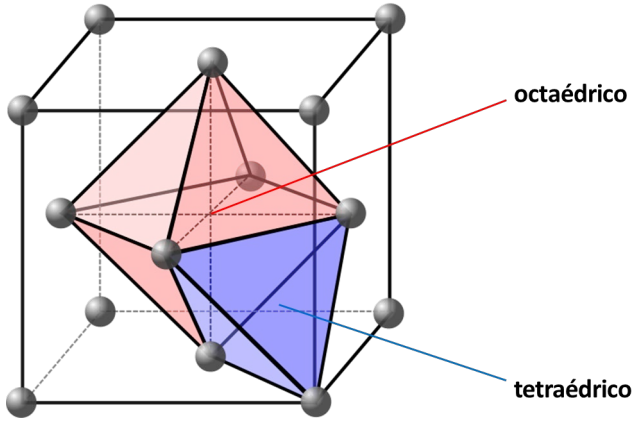




ZnS (Zinc Blenda)

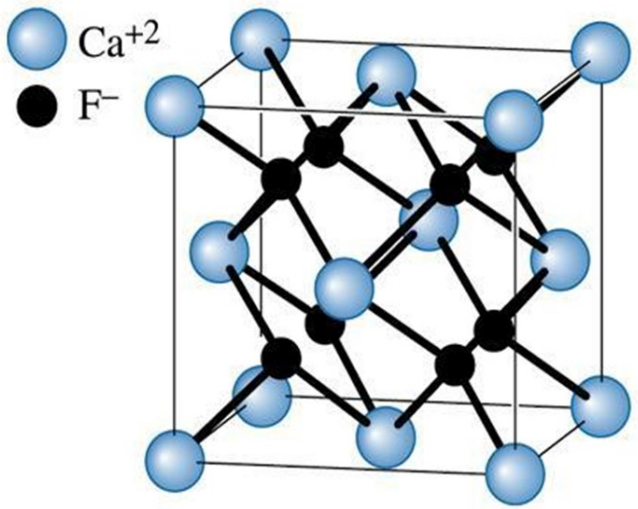


Estructura FCC de iones Zn^{2+}, con S^{2-} en los huecos tetraédricos

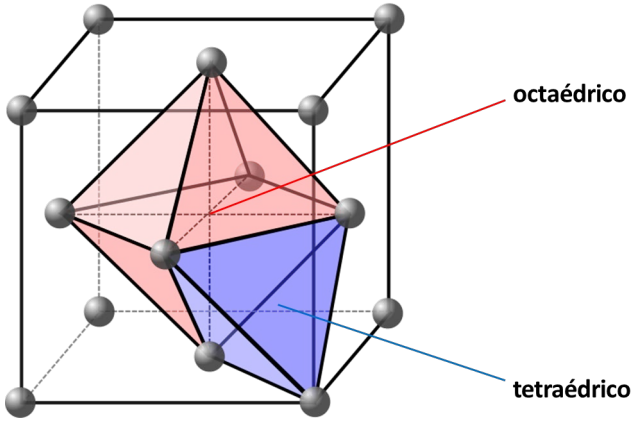




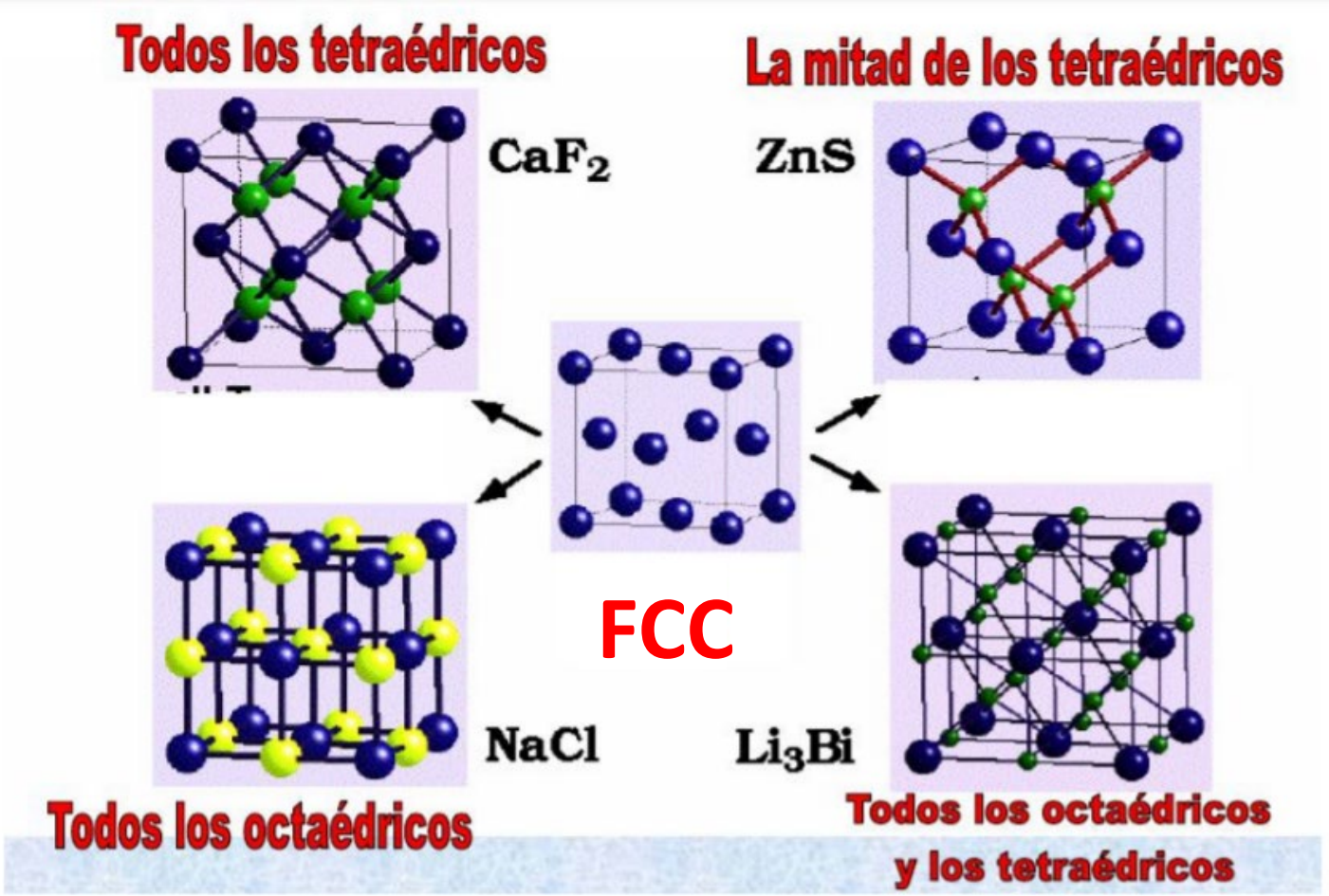
Cristales iónicos: CaF2 (Fluorita)



Estructura FCC de iones Ca^{2+}, con F^- en los huecos octaédricos

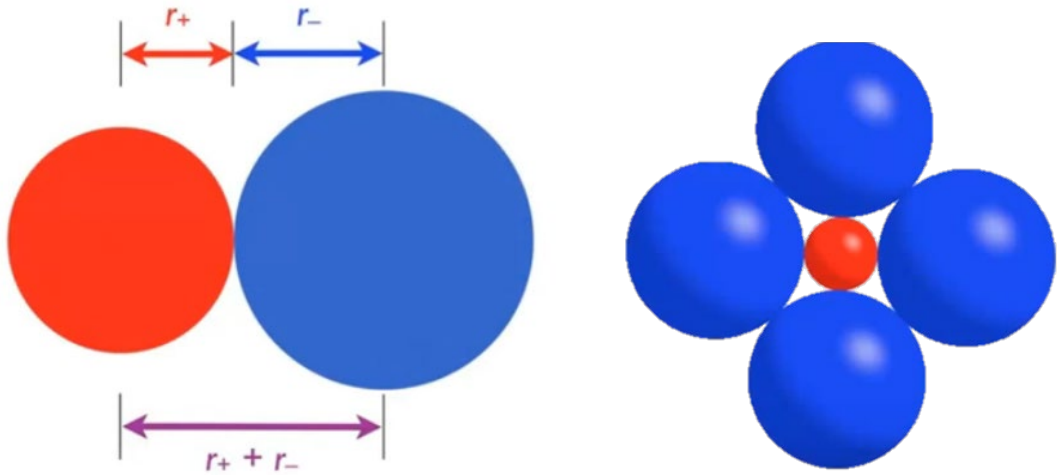





Todos los tetraédricos
CaF_2
La mitad de los tetraédricos
ZnS
FCC
NaCl
Todos los octaédricos
Li_3Bi
Todos los octaédricos
y los tetraédricos

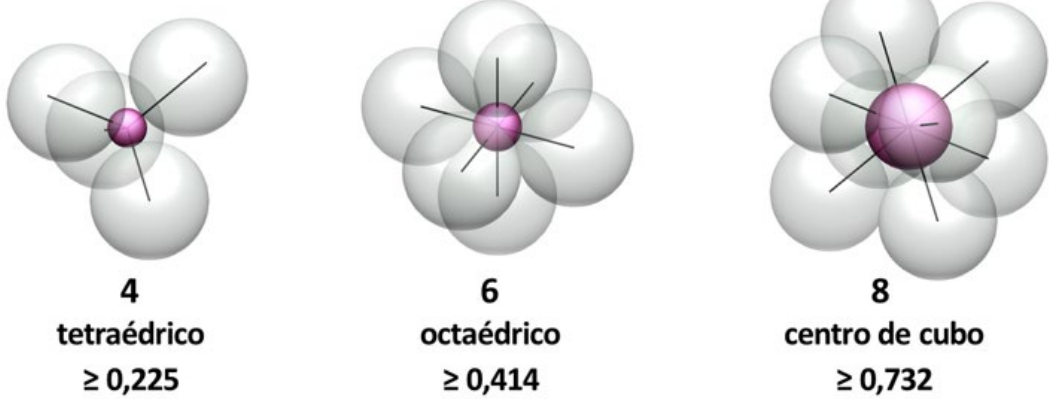
Relación de Radios y Predicción de Estructura

- Para empaquetamientos en compuestos puramente iónicos, una relación simple entre los radios iónicos de cationes y aniones, r_+/r_- permite predecir la geometría o número de coordinación en los intersticios.



Número de Coordinación del catión	Geometría	r_+/r_-
4	Tetraédrica	0,225-0,414
6	Octaédrica	0,414-0,732
8	Cúbica	0,732-1,0

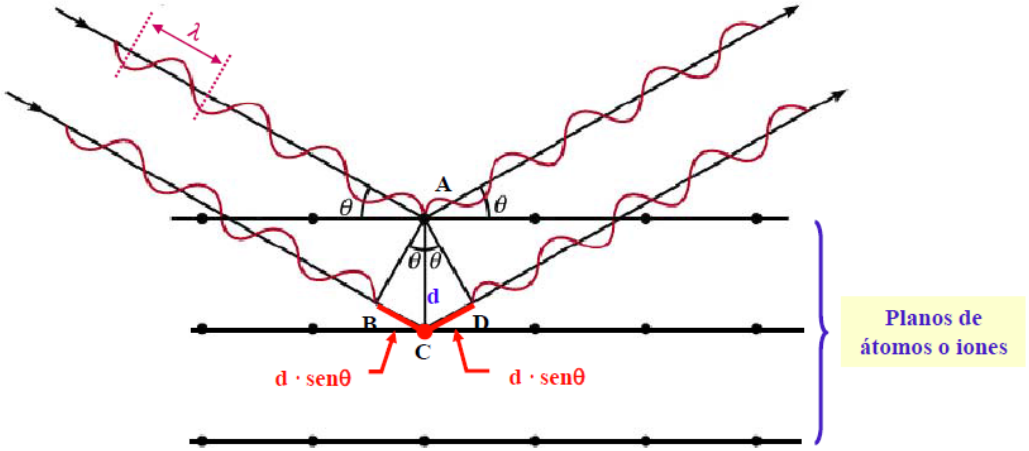
Relación de Radios

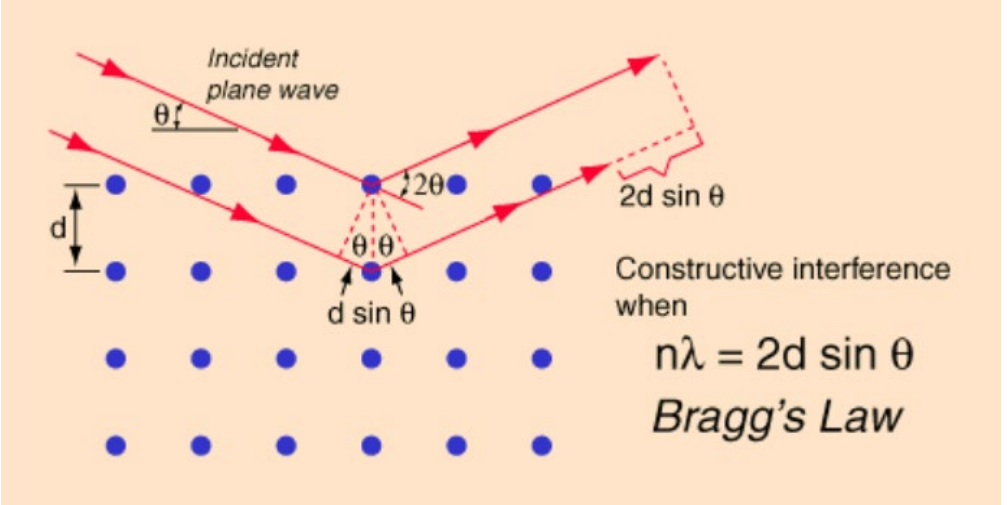


Número de Coordinación	Geometría	r+/r-
4	Tetraédrica	0,225-0,414
6	Octaédrica	0,414-0,732
8	Cúbica	0,732-1,0

Difracción de rayos X

Determinación de la estructura de un material cristalino





- Los triángulos ABC y ACD son idénticos
- La hipotenusa de ambos es igual a la distancia entre los átomos (d)
- Las distancias BC y CD tiene valores de "*dsen θ*"

$$n\lambda = 2\ d\ \text{sen}\ \theta$$ Ley de Bragg

Difracción de rayos X

La magnitud de la distancia entre planos de átomos contiguos y paralelos (o distancia interplanar d_{hkl}) es una función de los índice de Miller (*h,k,l*) así como de los parámetros de red. Por ejemplo, para estructuras cristalinas de simetría cubica se cumple que:

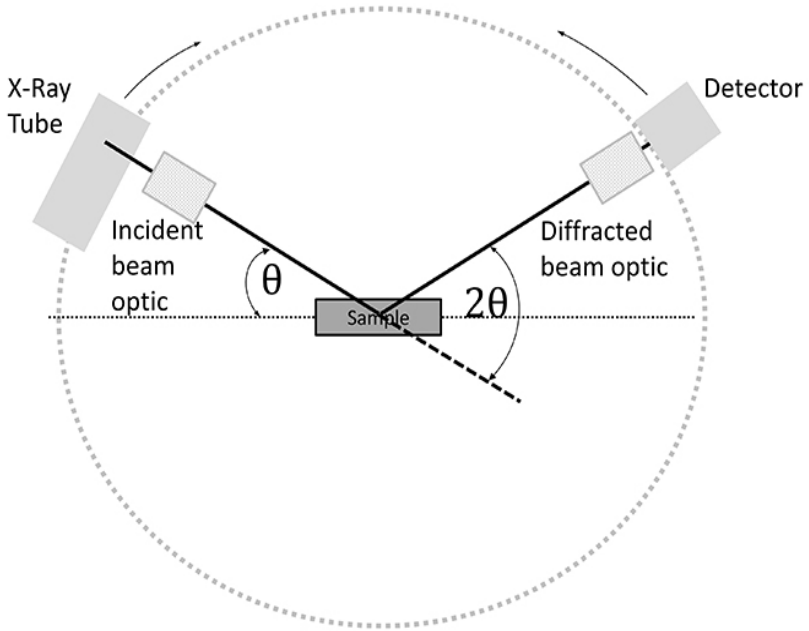
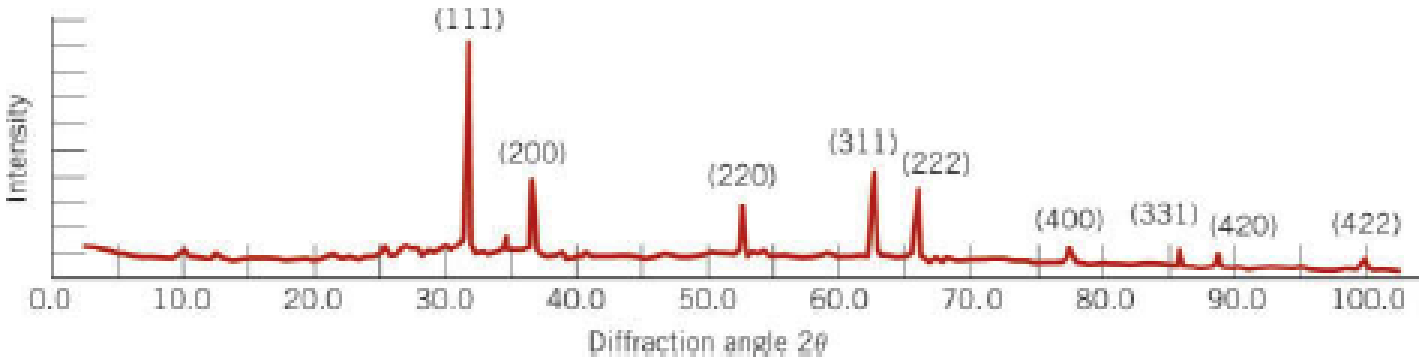


Figure 4 Basic set up for a Brag-Brentano diffractometer

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$



Patrón de difracción de plomo pulverizado

quimica.uc.cl

Ejercicio

Para el hierro (arreglo BCC), calcular (a) la distancia interplanar y (b) el ángulo de difracción para el conjunto de planos (211). El parámetro de red, para el Fe es 0,2866 nm. Se utiliza una radiación monocromática de una longitud de onda de 0,1542 nm y el orden de difracción es 1.

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

a) $$d_{hkl} = \frac{0{,}2866\ nm}{\sqrt{2^2 + 1^2 + 1^2}} = 0{,}1170\ nm$$

$n\lambda = 2\ d\ \text{sen}\ \theta$

b) $$sen\theta = \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{(1)(0{,}1542\ nm)}{(2)(0{,}1170\ nm)}$$

$$\theta = sen^{-1}(0{,}659) = 41{,}22°$$

$$2\theta = 82{,}44°$$

Bibliografía

- Askeland, Donald R. (2004) La ciencias e ingeniería de los materiales, 3er edición. Capitulo 2.

- Callister, W. Ciencia e ingeniería de los materiales, tomo 1 (1996). Reverte. Capitulo 2.