Química del estado sólido

Clase 4

Temas

- Empaquetamiento compacto de Esferas
- Sitios intersticiales
- Planos cristalográficos
- Densidad Planar
- Cristalografía de rayos X
- Materiales

Densidad Teórica (ρ)

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

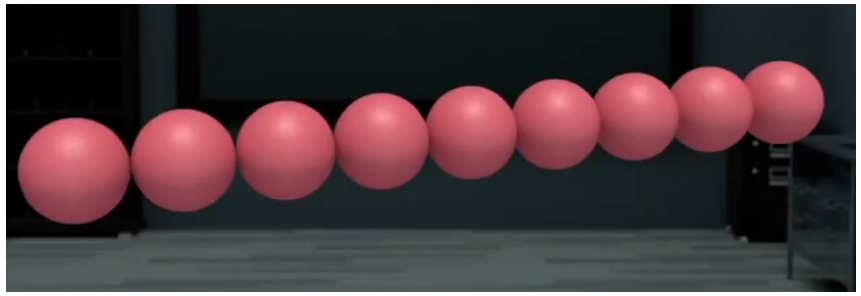
Ejemplo:
Determine la densidad del hierro (estructura BCC) en g/cm^3, si su constante de red (a) es 0,2866 nm y su masa atómica es 55,847 g/mol.

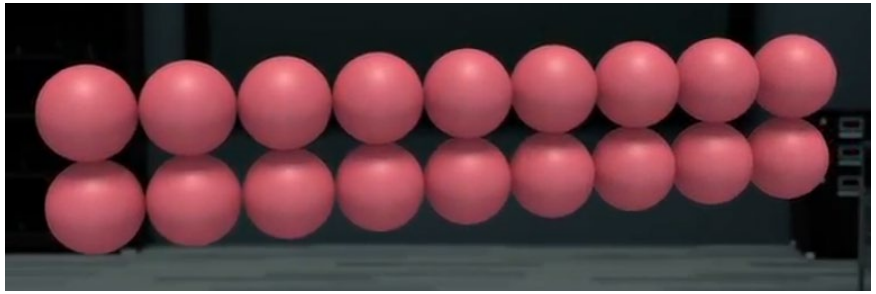
$$\textbf{Densidad} = \frac{\text{masa de átomos}}{\text{volumen de celda}}$$

$$\rho = \frac{\frac{\text{átomos}}{\text{celda}} \times \text{masa atómica}}{(\text{volumen de celda unitaria})(\text{N}_{\text{avogadro}})}$$

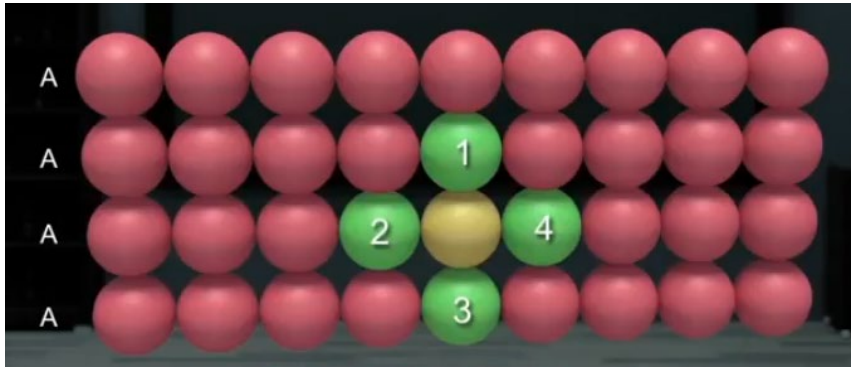
R: 7,882 g/cm^3

Empaquetamiento Compacto y Celdas Unitarias: 2-D

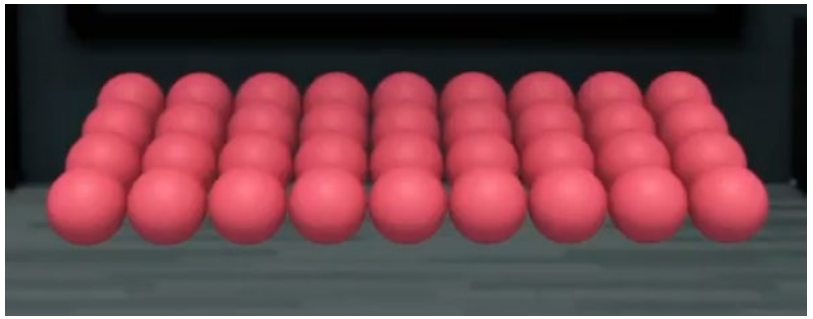


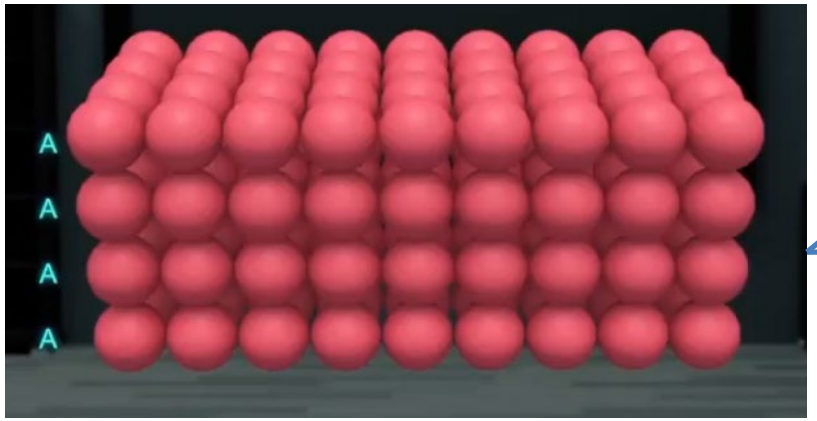


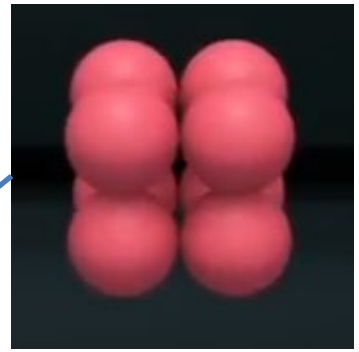
Cada fila de átomos está posicionada directamente sobre la fila anterior en una distribución regular. Cada átomo está en contacto con 4 átomos vecinos (# de coordinación igual a 4 para un arreglo en 2-D)



Empaquetamiento Compacto y Celdas Unitarias: 3-D







Celda unitaria cúbica simple

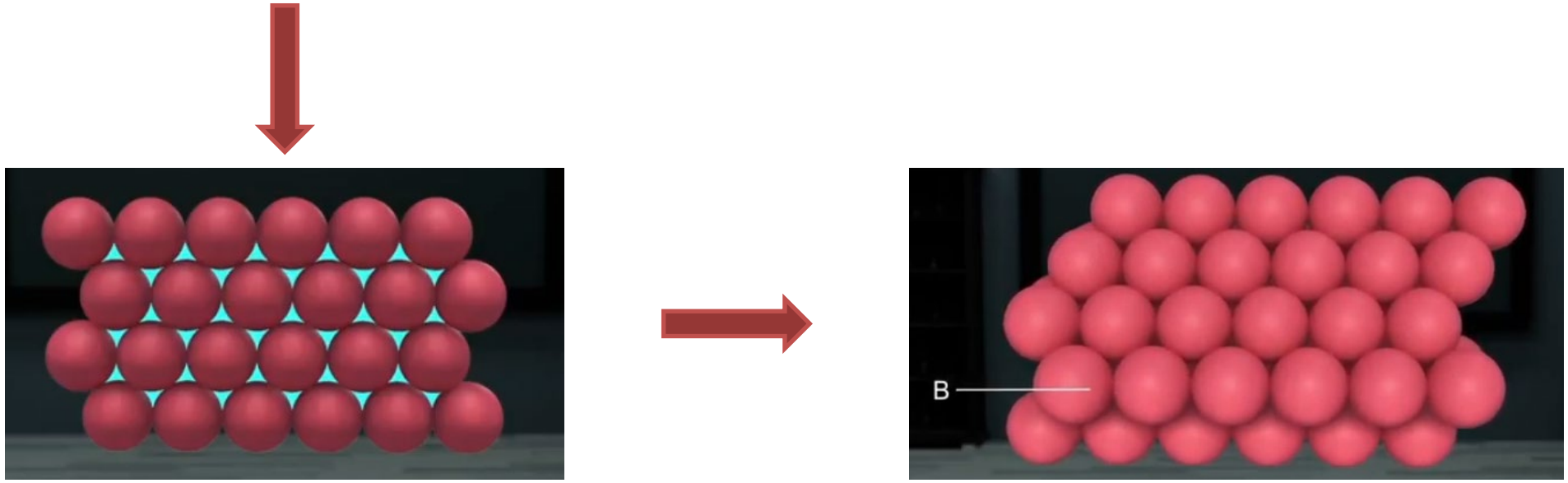


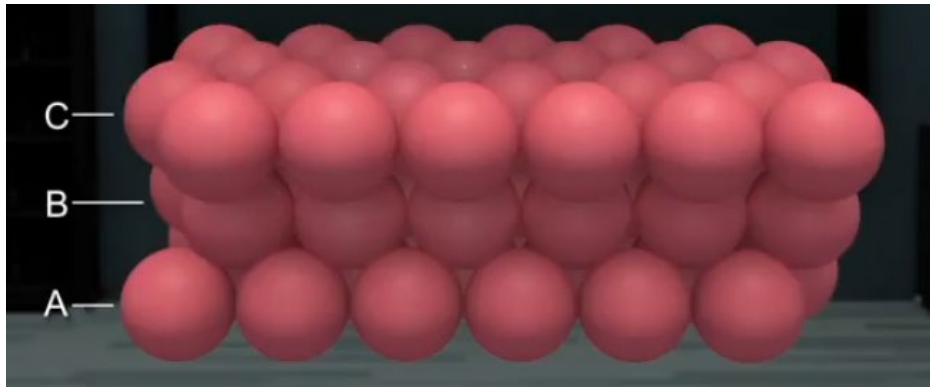
Cada átomo en la red está en contacto con 6 átomos

Empaquetamiento Compacto:

Celda Cúbica Centrada en Las Caras (FCC)

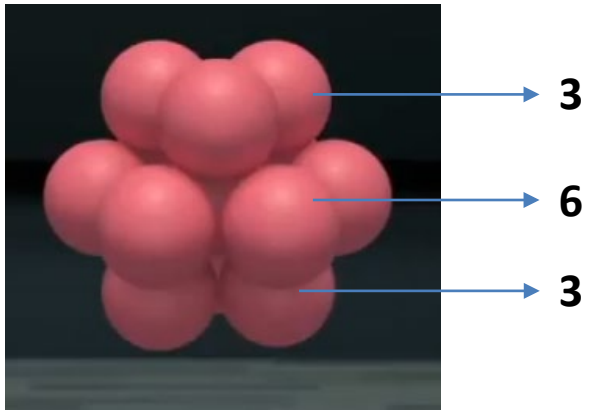
Segunda opción: Esferas se posicionan no directamente una sobre otras, sino que desplazadas





empaquetamiento
ABC-ABC-ABC
“cúbico compacto”

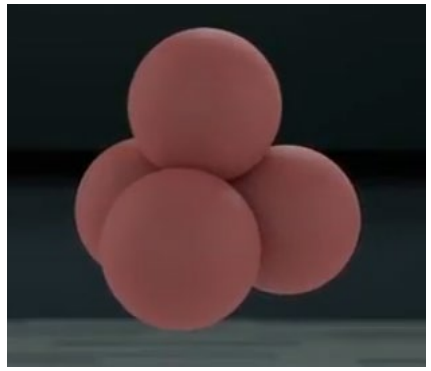
Cúbico Centrado en las Caras (FCC)

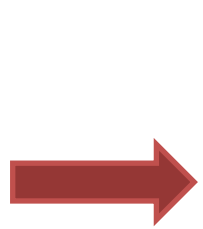


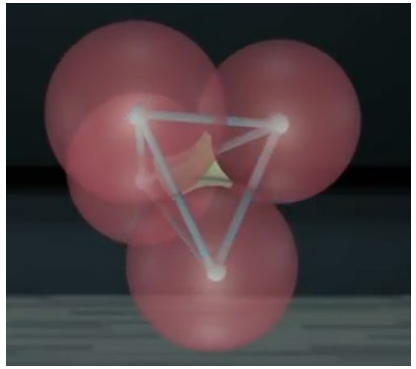
N° de coordinación = 12

Sitios intersticiales

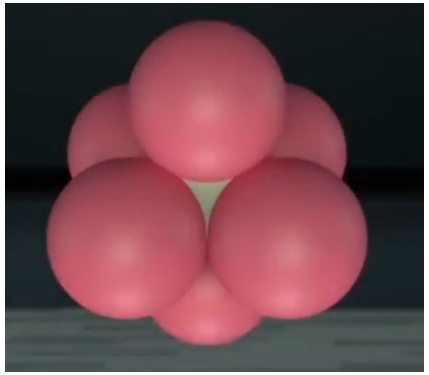
- En el ordenamiento de empaquetamiento compacto se producen 2 tipos de huecos denominados sitios intersticiales



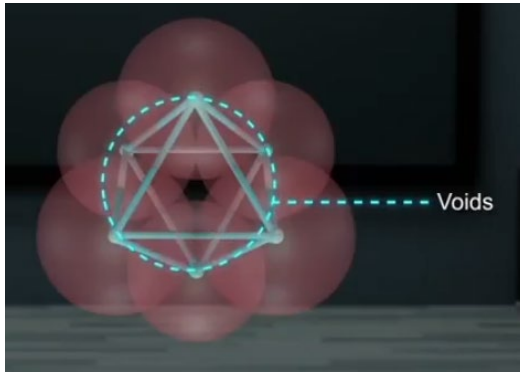




Hueco está posicionado en el centro de 4 átomos que forman un tetraedro



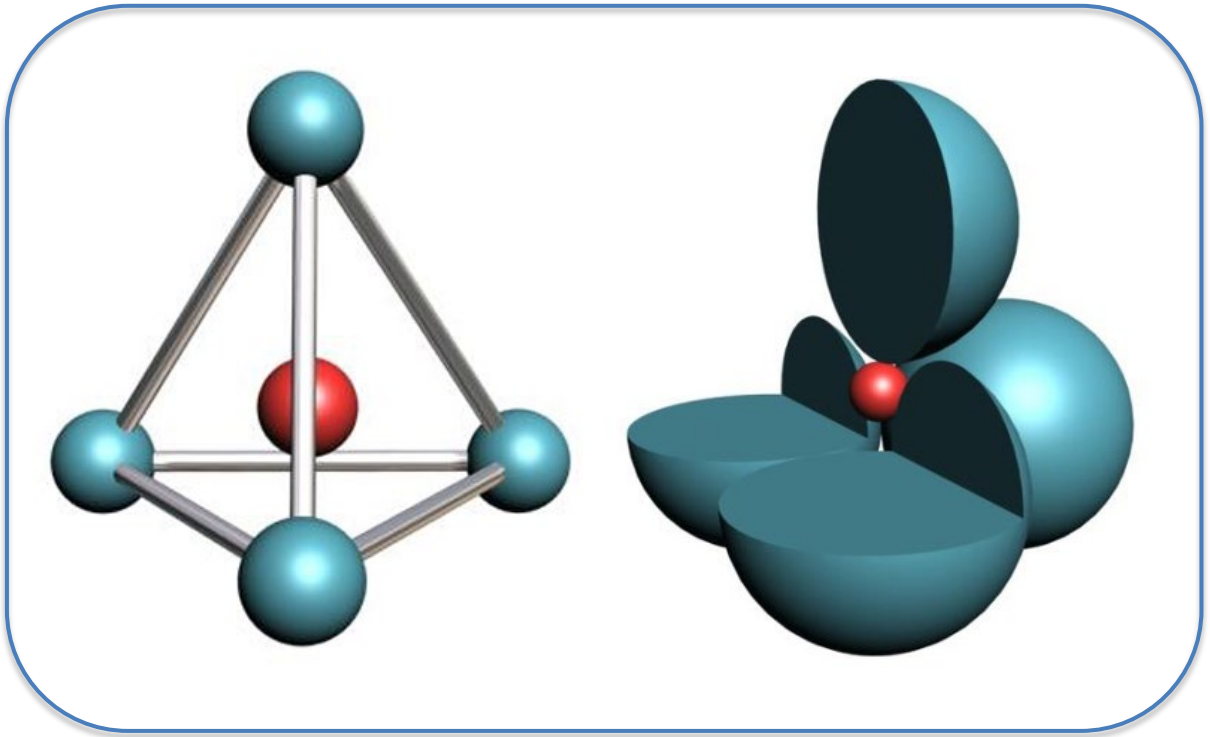




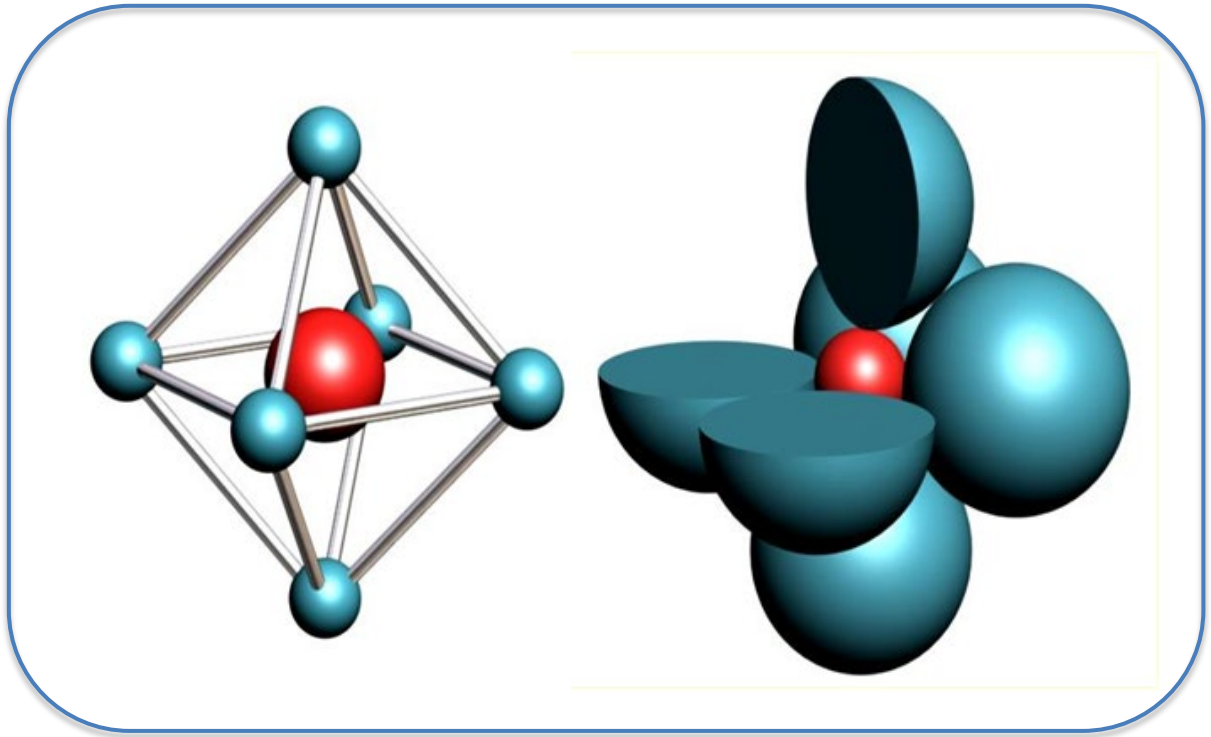
Hueco está posicionado en el centro de 6 átomos que forman un octaedro

Vista Aérea de Sitios (o Huecos) Intersticiales

Sitios Tetraédricos



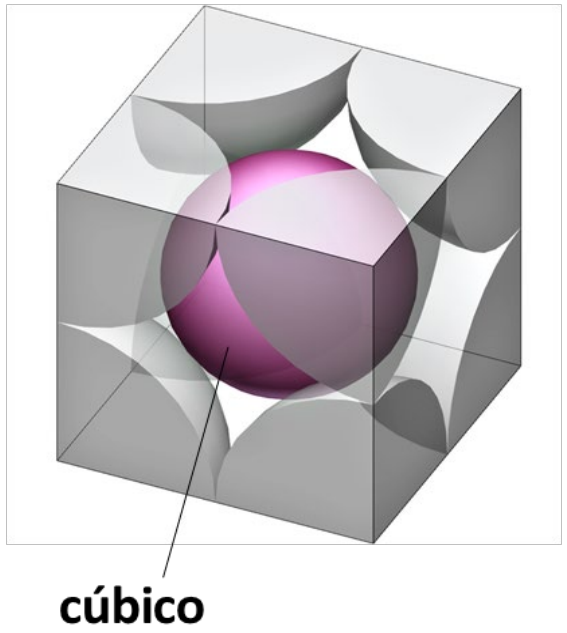
Sitios Octaédricos



Representación de un hueco

Sitios intersticiales y Celdas Cúbicas

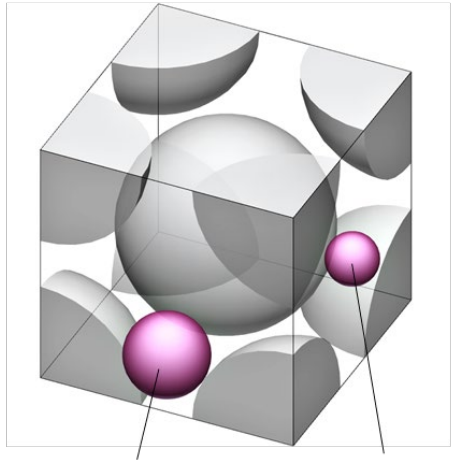
SC



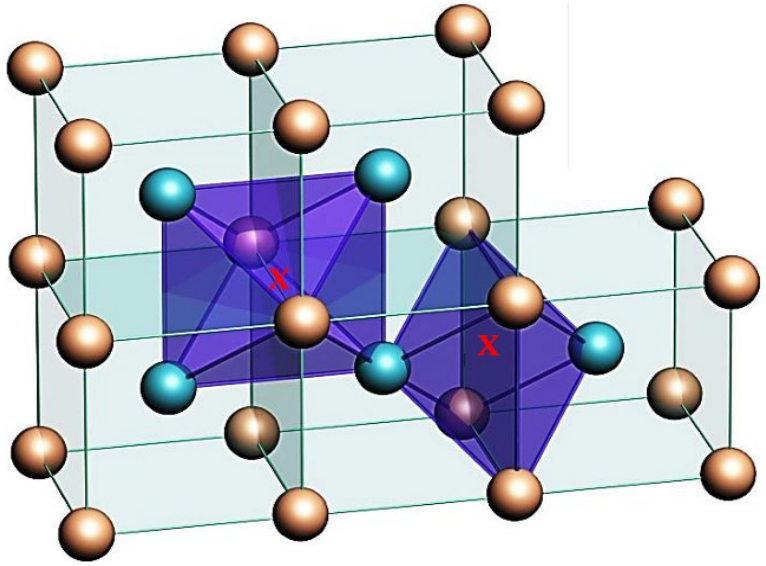
6 huecos octaédricos

Sitios intersticiales y Celdas Cúbicas

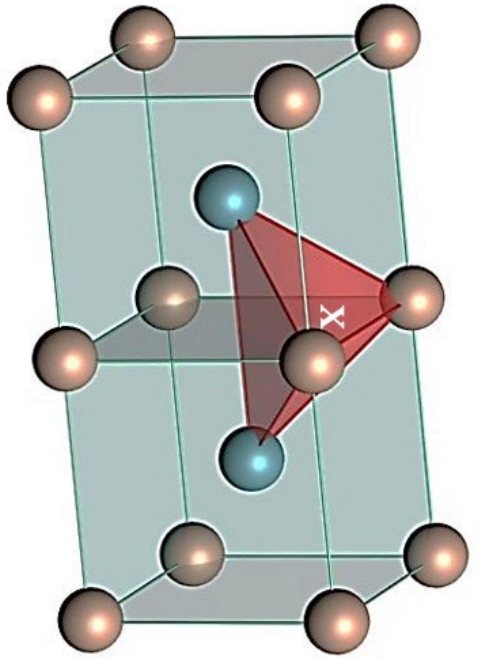
BCC



tetraédrico octaédrico



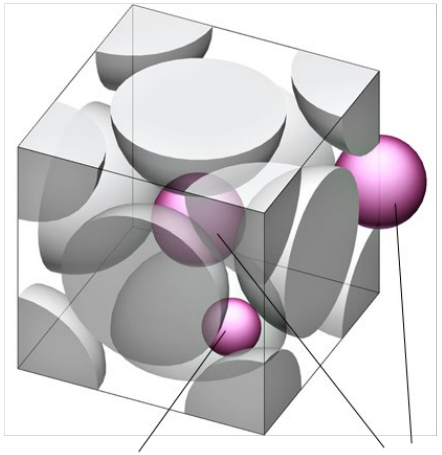
6 huecos octaédricos

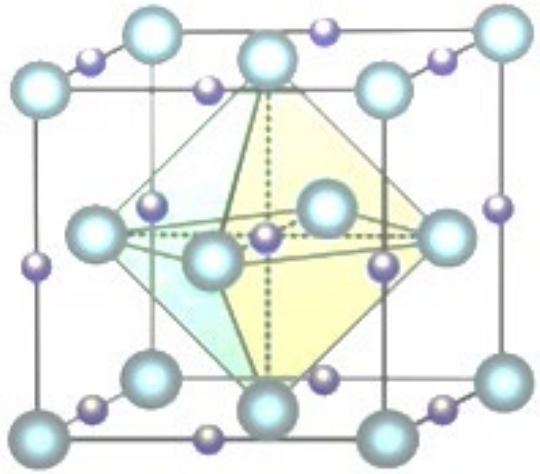


12 huecos tetraédricos

Sitios intersticiales y Celdas Cúbicas

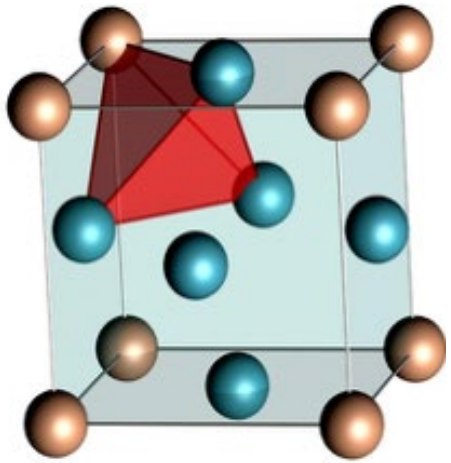
FCC





4 huecos octaédricos

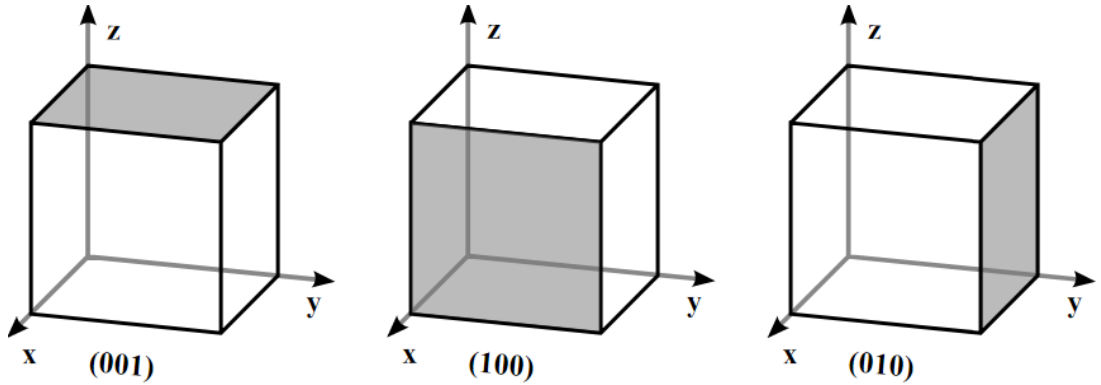
1 hueco en el centro
12 huecos en cada línea del cubo, los cuales se comparten con 4 celdas unitarias



8 huecos tetraédricos

Planos cristalográficos

- Un plano es un conjunto de átomos unidos en un área determinada

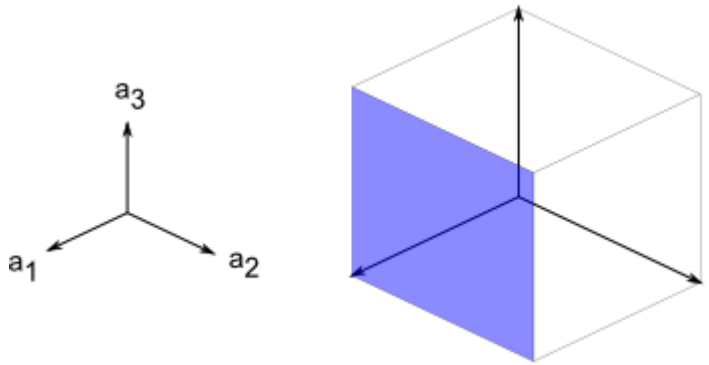


- Los índices de **Miller**, denotados por las letras (*hkl*), sirven para identificar planos específicos de una estructura cristalina.
- Este sistema sirve para identificar planos de deformación o de deslizamiento y para determinar el sentido de crecimiento de cristales en algunos materiales.

Procedimiento para Determinar Planos cristalinos

1. Los planos cristalográficos se expresan como un conjunto de números enteros, conocidos como índices de Miller (*hkl*). Dos planos paralelos son equivalentes y tienen índices idénticos.
2. Si el plano pasa por el origen, se traza otro plano paralelo con una adecuada traslación dentro de la celda unitaria o se escoge un nuevo origen en el vértice de otra celda unitaria.
3. El plano cristalográfico o bien corta, o bien es paralelo a cada uno de los tres ejes. La longitud de los segmentos de los ejes se determina en función de los parámetros de red a, b y c.
4. Se escriben los números recíprocos de estos valores. Un plano paralelo a un eje se considera que lo corta en el infinito y, por lo tanto, el índice es cero.
5. Estos tres números se multiplican o dividen por un factor común.
6. Finalmente, se escriben juntos los índices enteros dentro de un paréntesis: (*hkl*)

Ejemplo

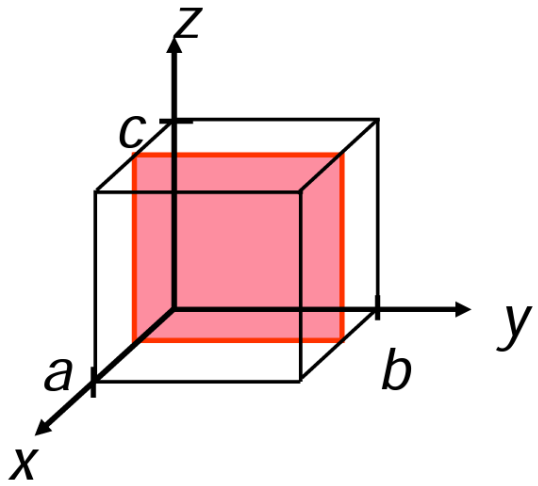


	X (a)	Y (b)	Z (c)
Intercepto	1	∞	∞
Reciprocos	1/1	1/ ∞	1/ ∞
Miller	1	0	0

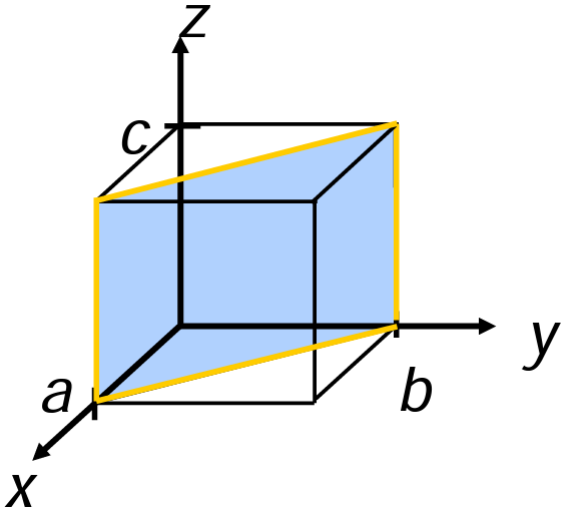
1. Escoger el origen
2. Encontrar la intersección entre el origen y las dimensiones de la celda unitaria.
3. Calcular los recíprocos.
4. Reducir múltiplos (eliminar fracciones).

Ejercitar: https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller_indices/lattice_draw.php

Ejemplo

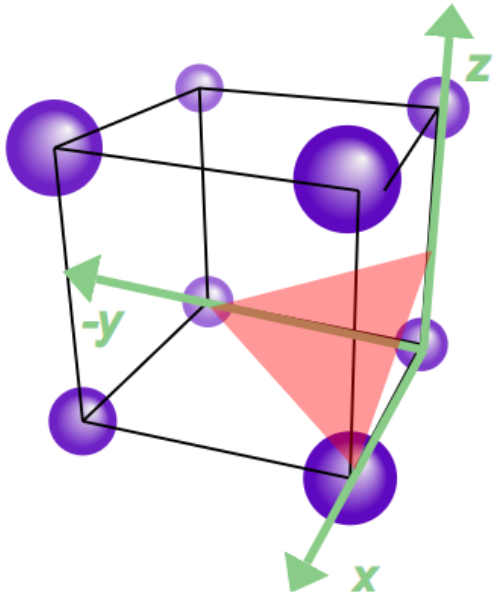


	X (a)	Y (b)	Z (c)
Intercepto	1/2	∞	∞
Recíprocos	2/1	1/ ∞	1/ ∞
Miller	2	0	0



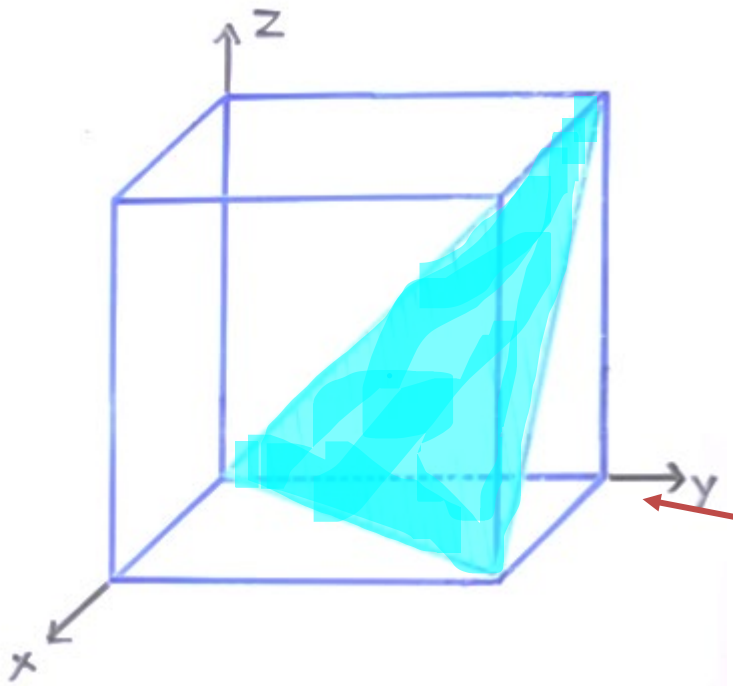
	X (a)	Y (b)	Z (c)
Intercepto	1/1	1/1	∞
Recíprocos	1/1	1/1	1/ ∞
Miller	1	1	0

Ejemplo



	X (a)	Y (b)	Z (c)
Intercepto	1/1	-1/1	1/2
Recíprocos	1/1	1/-1	2/1
Miller	1	-1	2

Ejemplo

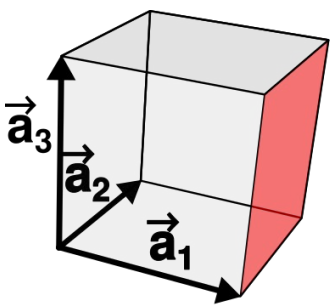


	X (a)	Y (b)	Z (c)
Intercepto	1/1	-1/1	1/1
Recíprocos	1/1	1/-1	1/1
Miller	1	-1	1

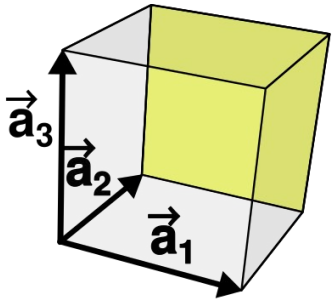
Cambiar coordenadas para que el plano cristalográfico no pase por el origen.

Ejercicios

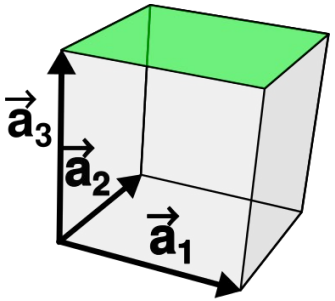
1. Determine los índices de Miller de las siguientes celdas.



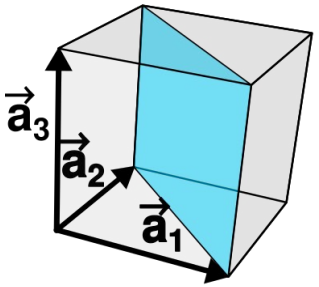
(100)



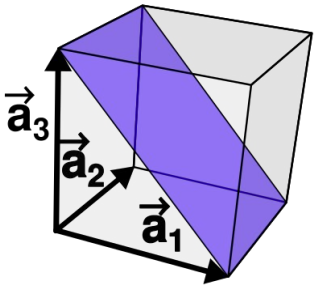
(010)



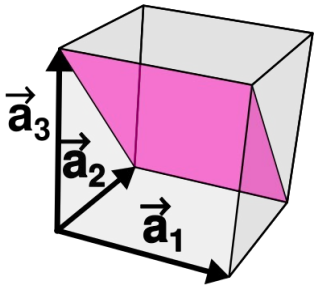
(001)



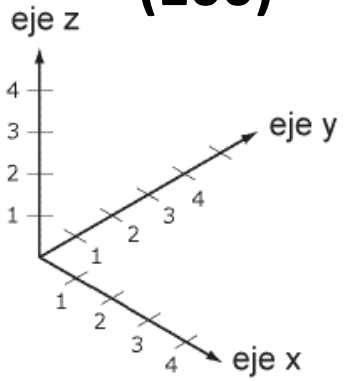
(110)



(101)



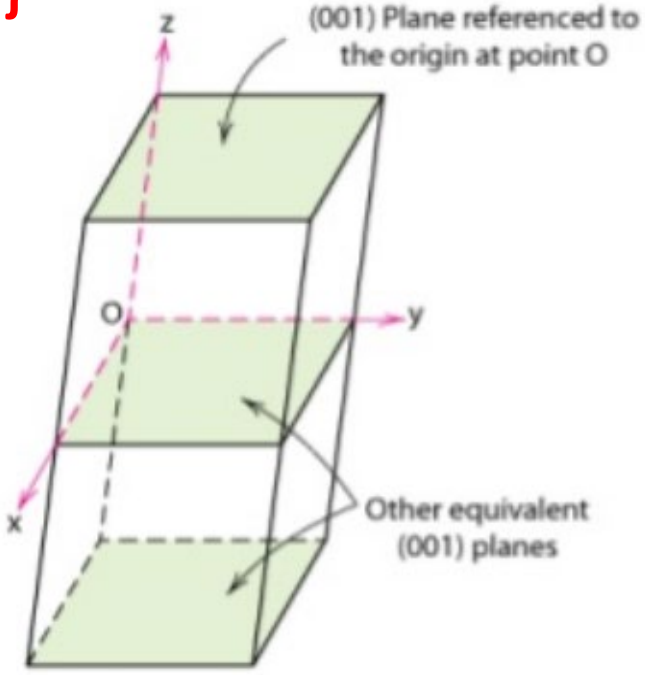
(011)



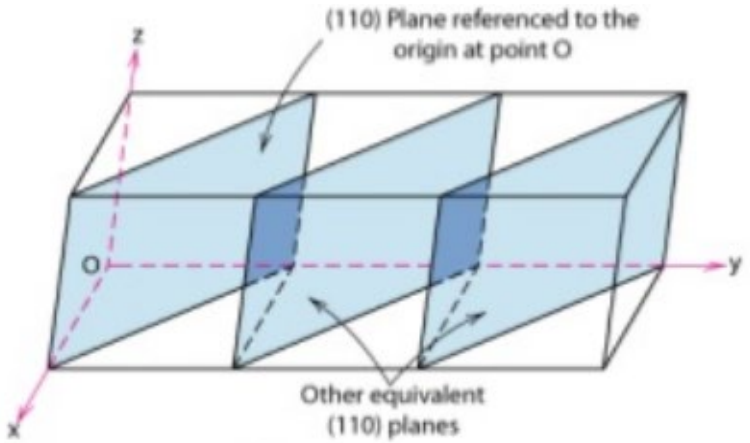
http://calistry.org/calculate/latticePlanesMillerIndices

Planos Equivalentes

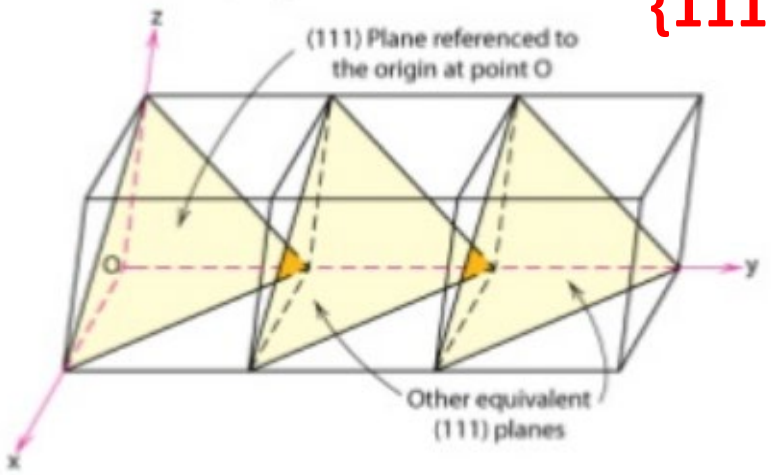
{001}



{110}



{111}



Familia de Planos cristalográficas

En los sistemas cúbicos se da una situación particular: Planos que tienen los mismos índices, no importa en que orden o con qué signo, son equivalentes. A eso le llamamos una familia de planos y se denotan con corchetes de las forma { }.

Planos de la familia { 1 1 0 } en sistemas cúbicos

$$\{110\} = \begin{cases} (110) \\ (101) \\ (011) \\ (1\bar{1}0) \\ (10\bar{1}) \\ (01\bar{1}) \end{cases}$$

Tarea: Dibuje todos lo planos cristalográficos de la familia {110}.

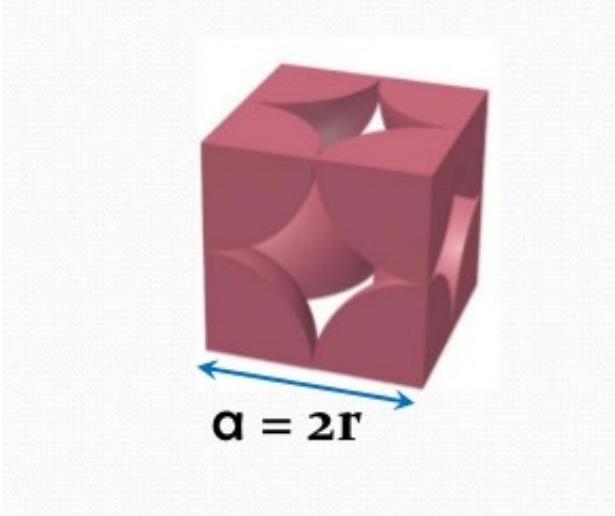
Densidad Planar

- La densidad planar es simplemente la fracción del área del plano cristalográfico ocupada por átomos.

$$\rho_p = \frac{número\ de\ átomos\ dentro\ del\ plano\ cristalográfico}{área\ del\ plano\ cristalográfico}$$

Ejemplo:

Calcular la densidad planar del plano (100) en una celda CS de Polonio, cuyo radio es de 0,167 nm



$$\rho_p = \frac{\left(\left(\frac{1}{4}\right) * 4\right)}{(2r)^2}$$

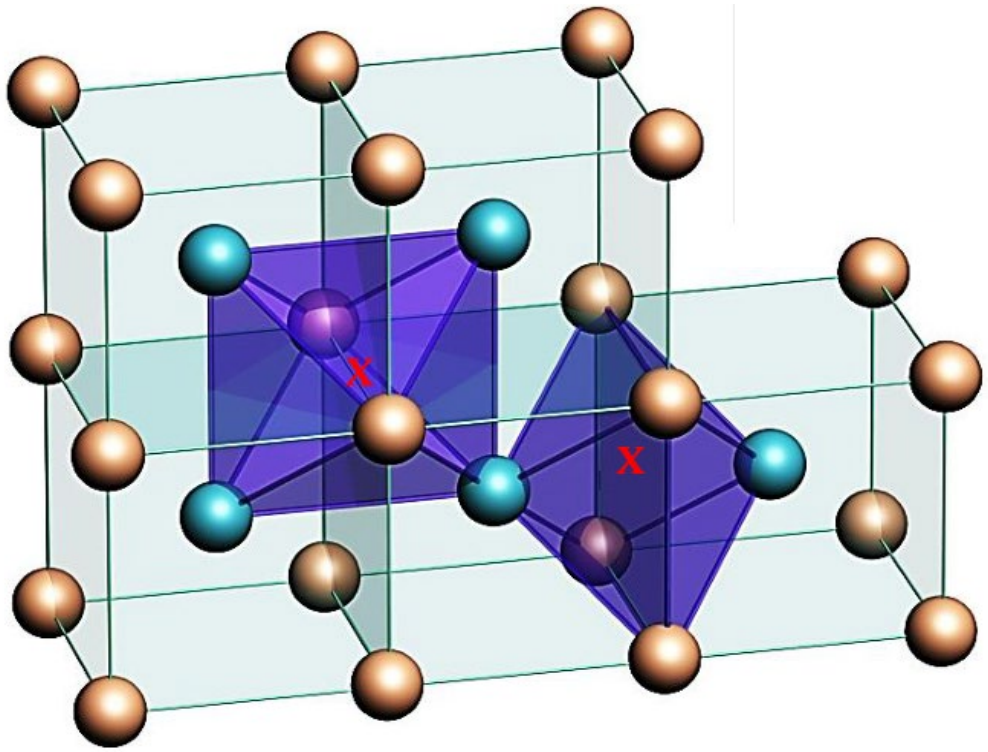
$$\rho_p = \frac{1}{(2r)^2} = 8.96\ \text{átomos/nm}^2$$

Bibliografía

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

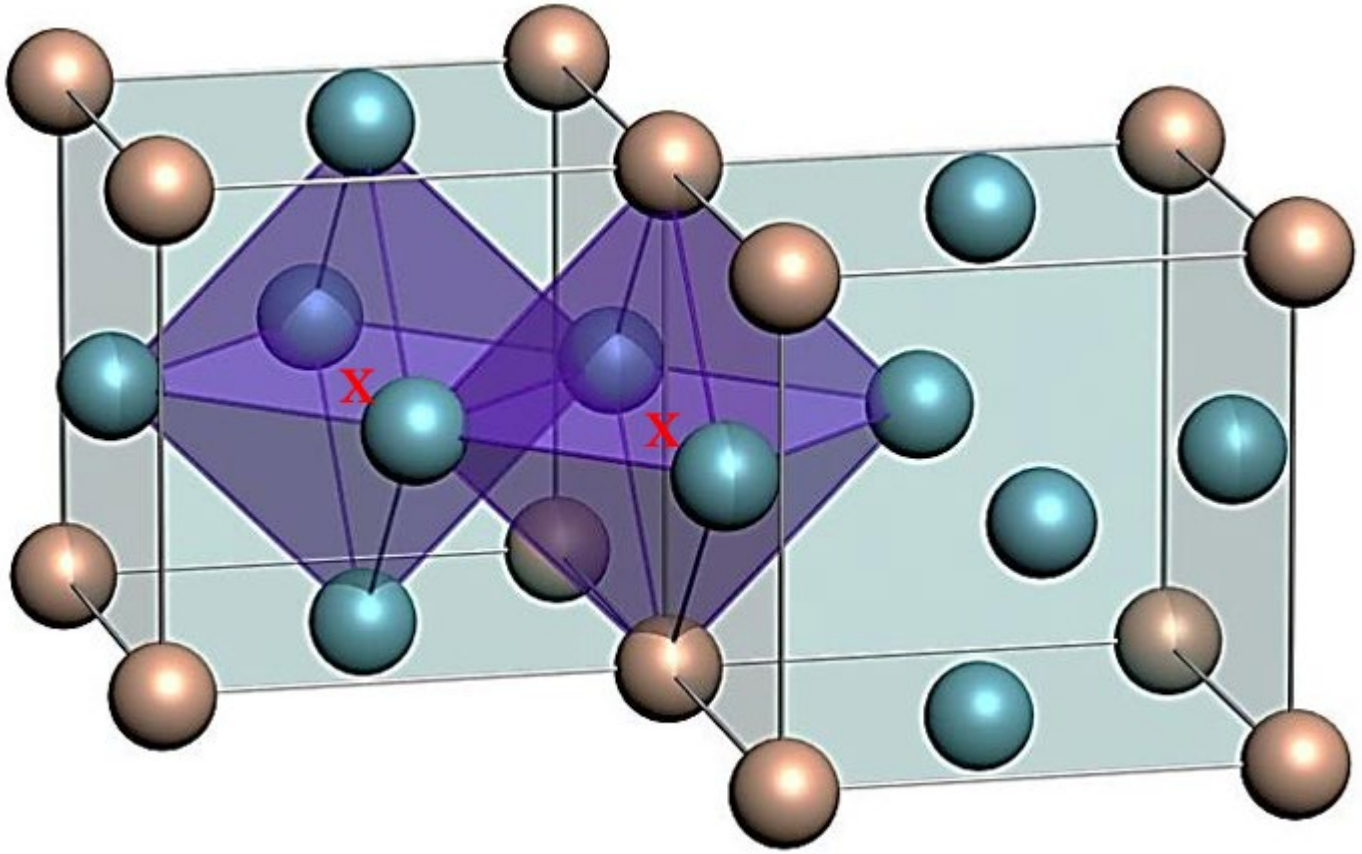
- Callister, W. Ciencia e ingeniería de los materiales, tomo 1 (1996). Reverte. Capitulo 2.

BCC, sitios interticiales



6 huecos octaédricos por celda

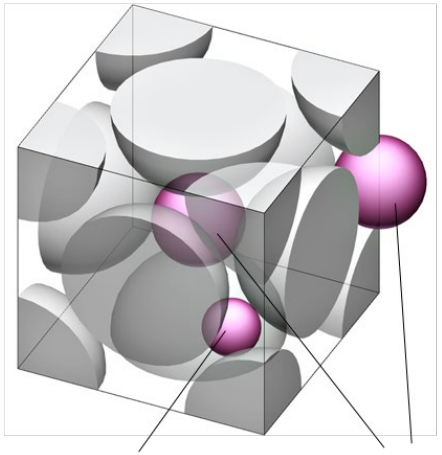
FCC, sitios interticiales

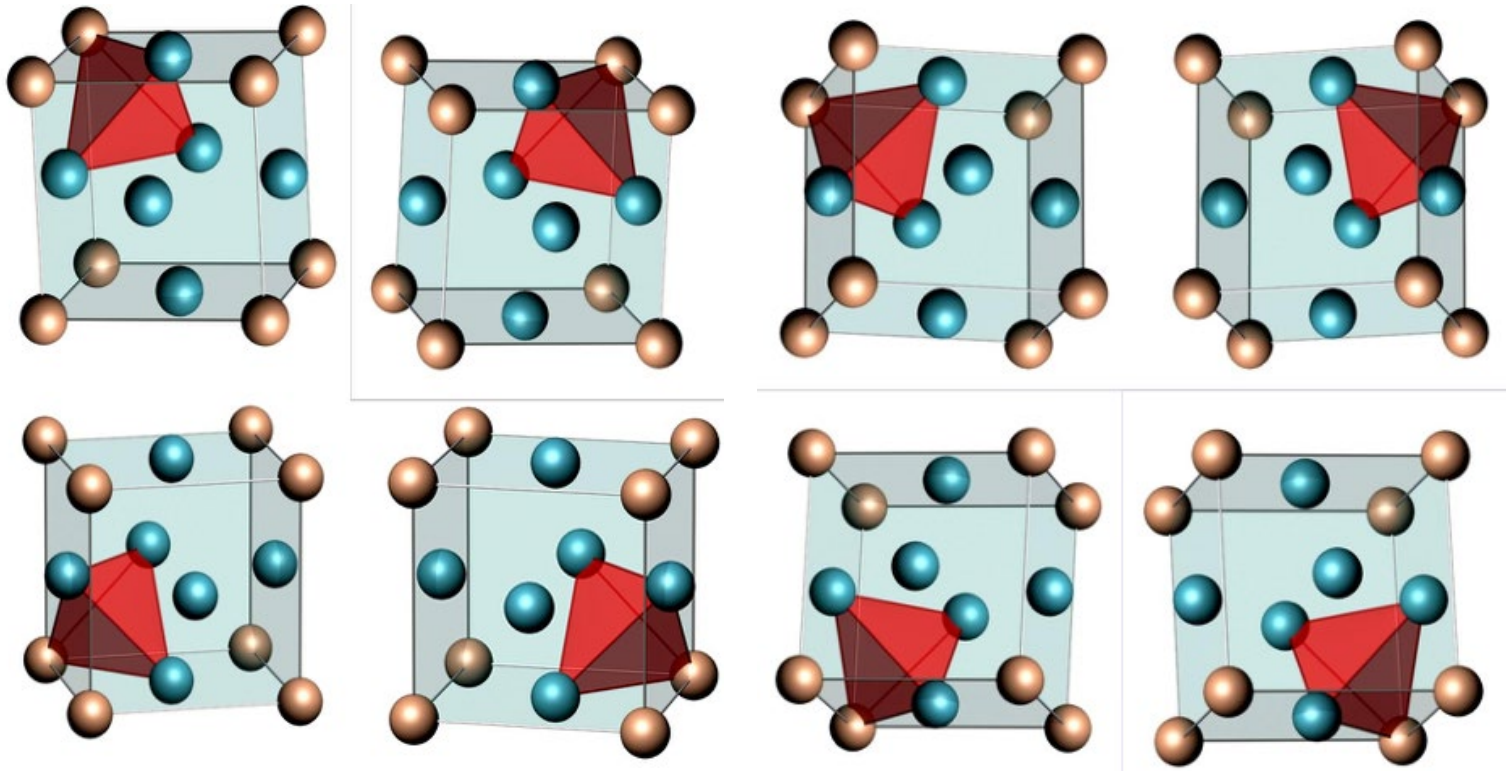


8 huecos octaédricos

Sitios intersticiales y Celdas Cúbicas

FCC





8 huecos tetraédricos