



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tlanguistenco

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO

Unidad Académica Profesional Tlanguistenco

Programa educativo:
Ingeniería en Plásticos

Unidad de Aprendizaje: **Ciencia de Materiales**

Unidad 2. Estructura de los Materiales

Por:
M. en C. Isaias Alcalde Segundo

Septiembre de 2019



Justificación académica y guía del uso del material didáctico

La Ciencia de Materiales, es una disciplina muy importante en la formación de los futuros Ingenieros en Plásticos; ya que estarán trabajando directamente con los materiales poliméricos (plásticos), metales (moldes), así como con materiales compuestos (materiales plásticos reforzados con fibras), o de cualquier otro tipo.

Por lo que la comprensión y entendimiento de la estructura, propiedades y procesamiento de los diversos materiales les permitirá tomar la mejores decisiones en el momento de elegir los materiales a utilizar.

Para acceder esta presentación se requiere contar con un visualizador de archivos en PDF; se sugiere Adobe Acrobat Reader.



UNIDAD 2.- ESTRUCTURA DE LOS MATERIALES

2.1.- Estructura de los átomos

2.2.- Configuración electrónica de los átomos

2.3.- Enlaces atómicos y moleculares

2.4.- Estructuras metálicas

2.5.- Estructuras cerámicas

2.6.- Estructuras de los polímeros

2.7.- Diagramas de fases

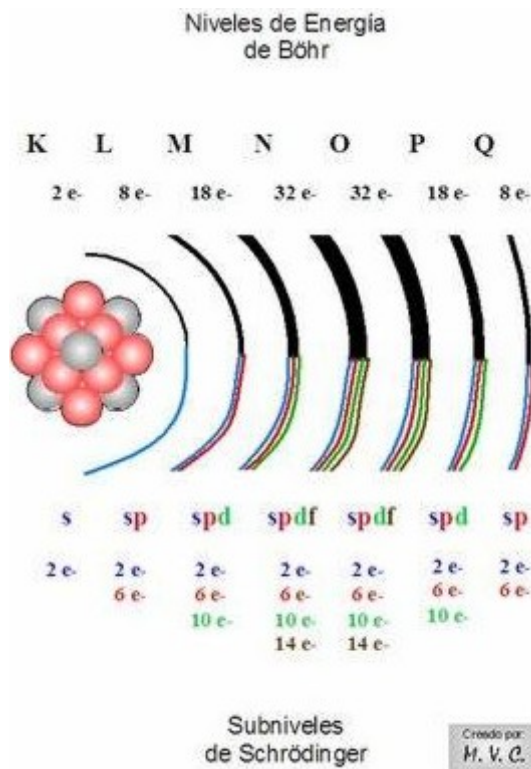
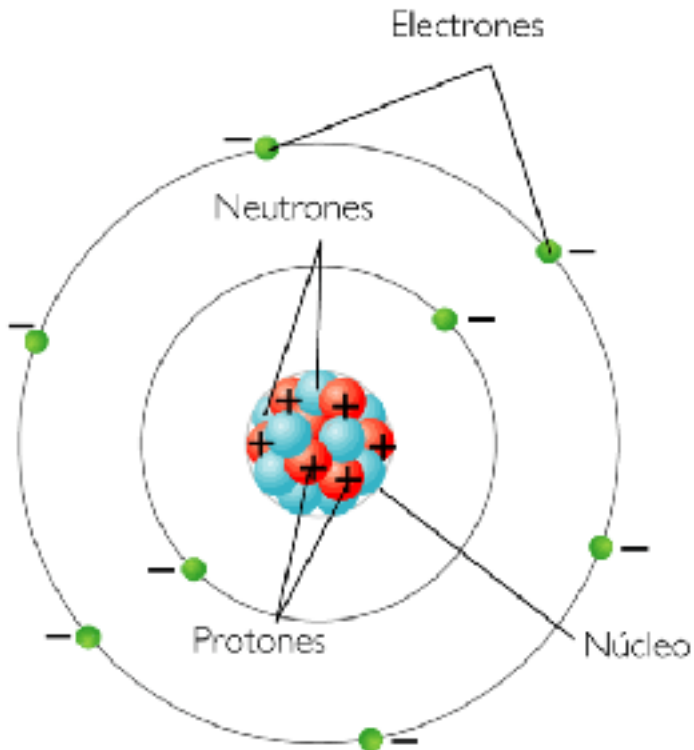


2.1.- Estructura de los átomos

Las propiedades y el comportamiento de los materiales dependen de su estructura interna



Descripción de las partículas subatómicas. Estructura del átomo



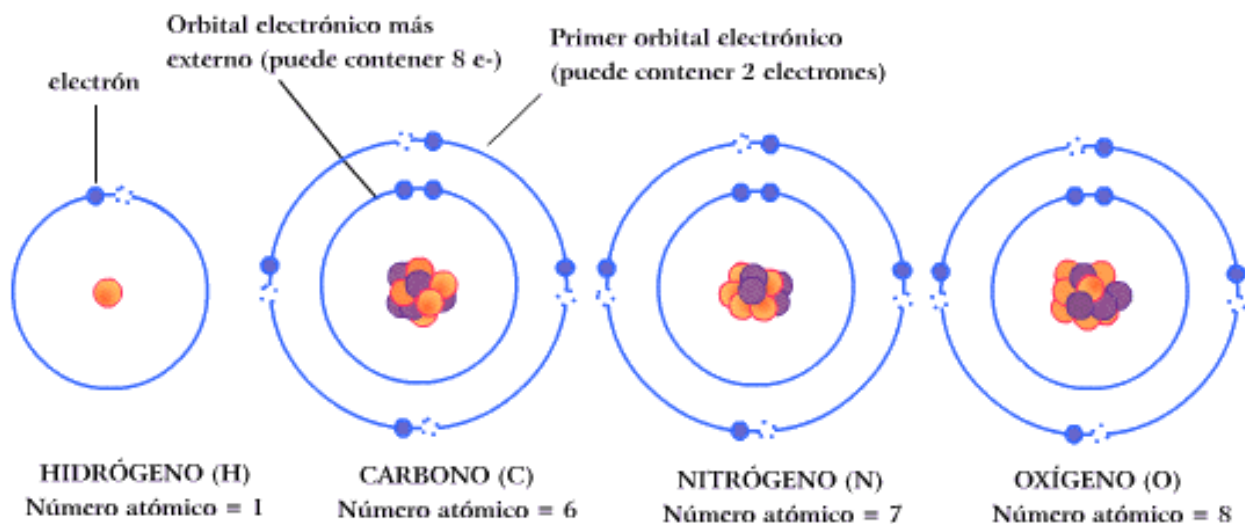


Partículas elementales

Partícula	Masa (kg)	Carga (C)
Protón	1.674×10^{-27}	$+ 1.602 \times 10^{-19}$
Neutrón	1.672×10^{-27}	0
Electrón	9.11×10^{-31}	$- 1.602 \times 10^{-19}$



Estructura atómica





Estructura atómica de los sólidos.

Organización atómica

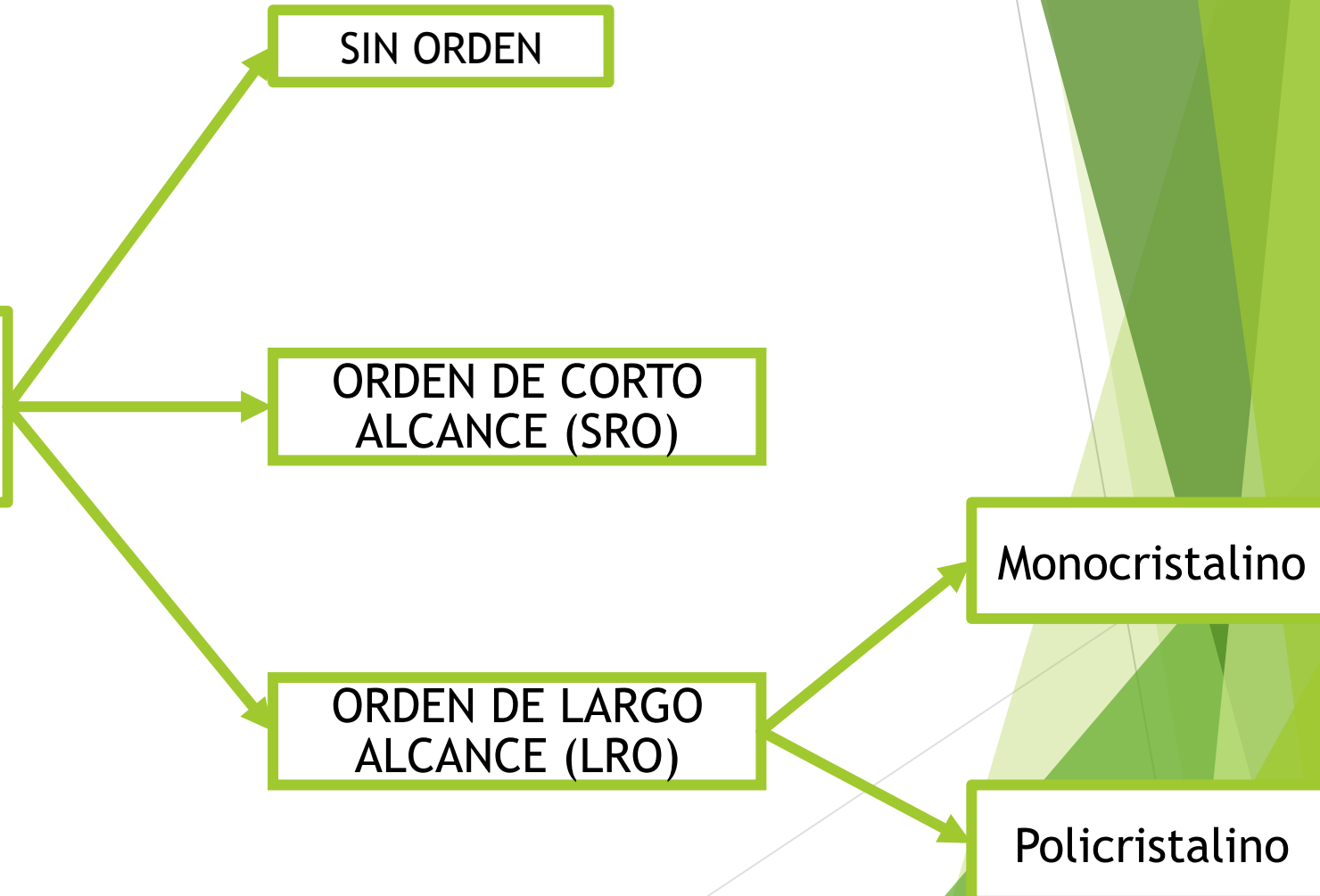
SIN ORDEN

ORDEN DE CORTO ALCANCE (SRO)

ORDEN DE LARGO ALCANCE (LRO)

Monocristalino

Policristalino





Organización
atómica

SIN ORDEN

ORDEN DE CORTO
ALCANCE (SRO)

ORDEN DE LARGO
ALCANCE (LRO)

Los gases monoatómicos, tal como el Argón (Ar) o plasma creado tubos de luz fluorescente, átomos o iones no tienen orden y llenan de manera aleatoria el espacio en el cual está confinado el gas.

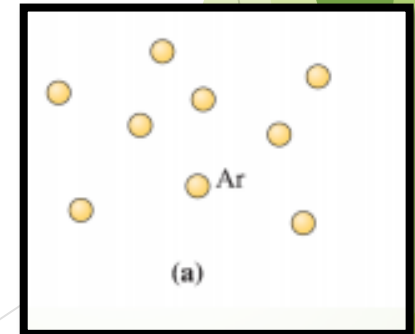


Figura 11: Arreglo atómico:
a) gases inertes monoatómicos que no tienen un ordenamiento atómico regular.



Organización atómica

SIN ORDEN

ORDEN DE CORTO ALCANCE (SRO)

ORDEN DE LARGO ALCANCE (LRO)

Un material presenta un orden de corto alcance si el arreglo especial de los átomos se extiende sólo a los vecinos más cercanos de dicho átomo.

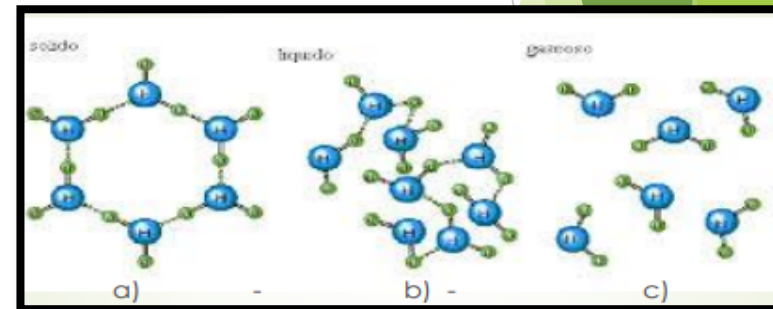


Figura 12: a) Estructura cristalina el hielo consiste en una red tetraédrica, b) Estructura de la molécula en estado líquida, c) Estructura del agua gaseosa, las moléculas se encuentran libres.



Organización atómica

SIN ORDEN

Una situación similar ocurre en **vidrios y cerámicos**, como la sílica: estructura tetraédrica donde los 4 átomos de oxígeno están unidos a cada átomo de silicio.

ORDEN DE CORTO ALCANCE (SRO)

Estos tetraedros pueden compartir **aristas o caras**.

ORDEN DE LARGO ALCANCE (LRO)

Muchos **polímeros** también muestran arreglos atómicos de corto alcance. El polietileno se compone de cadenas de átomos de carbono, con dos átomos de hidrógeno.



Organización atómica

SIN ORDEN

Muchos metales y aleaciones, semiconductores, cerámicas y algunos polímeros tienen a estructura cristalina.

ORDEN DE CORTO ALCANCE (SRO)

El especial arreglo atómico se extiende mucho más largo de escalas de longitud $> 100\text{nm}$.

ORDEN DE LARGO ALCANCE (LRO)

Los átomos forman un patrón repetitivo regular en forma de rejilla o de red. A estos materiales les llamamos **MATERIALES CRISTALINOS**.



**ORDEN DE
LARGO
ALCANCE
(LRO)**

Monocristalino

Consiste de un solo cristal largo.

Son utilizados en aplicaciones electrónicas y ópticas.

Policristalino

Consiste de muchos cristales pequeños con orientación variada en el espacio.

GRAIN (granos).

Los límites entre los cristales, donde los cristales están desalineados se llaman **LÍMITES DE GRANO.**



ORDEN DE LARGO ALCANCE (LRO)

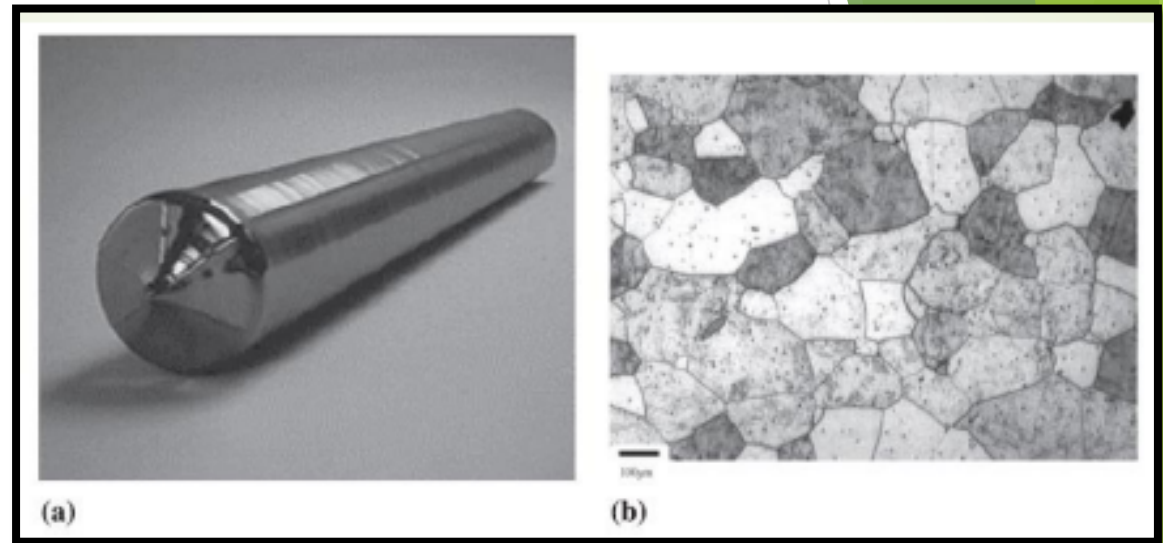


Figura 13: a) Fotografía de un solo cristal de silicio, b) Micrografía de un acero inoxidable policristalino que muestra los granos y los límites de grano.

El orden de largo alcance en los materiales cristalinos pueden ser detectados y medidos usando técnicas tales como DIFRACCIÓN DE RAYOS X O DIFRACCIÓN DE ELECTRÓN.



Estructura cristalina.

- ▶ La estructura cristalina es la forma sólidos de cómo se ordenan y empaquetan los átomos, moléculas, o iones.
- ▶ Estos son empaquetados de manera ordenada y con patrones de repetición que se extienden en las tres dimensiones del espacio.
- ▶ La **crystalografía** es el estudio científico de los cristales y su formación.
- ▶ Son granos pequeños y no son observables claramente. En minerales traslucidos se pueden apreciar mejor.

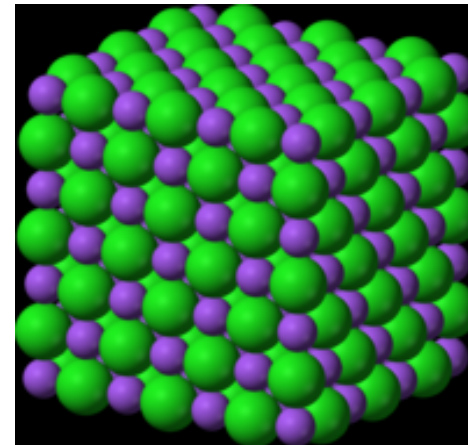
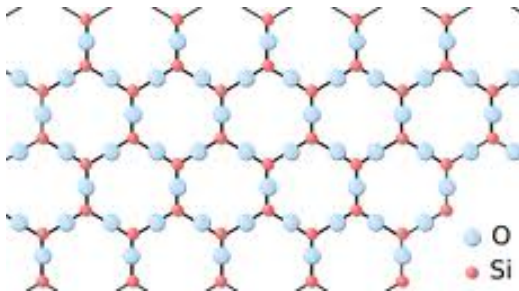


Figura 14: Ejemplo de una estructura cristalina.



Sólido cristalino.

- Presentan en: **metales, cerámicas y ciertos polímeros.**
- Los átomos se encuentran ordenados según leyes geométricas.
- Las posiciones de los átomos guardan cierta simetría.
- Presenta una temperatura de fusión constante.



Sólido desordenado (amorfo).

- Presentan en: **vidrios, plásticos.**
- Los átomos se disponen al azar.
- No existe simetría en las posiciones de los átomos.
- No poseen una temperatura de fusión fija.

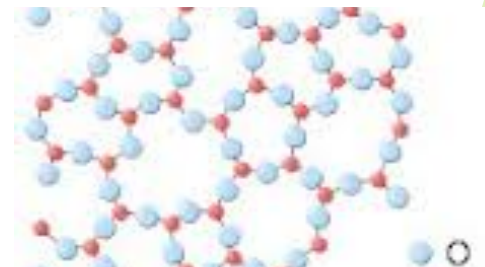


Figura 15: Diferentes tipos de estructuras..



Los átomos, iones o moléculas se repiten periódicamente en las tres direcciones del espacio ocupando posiciones definidas.

Como consecuencia de la distribución interior, poseen forma geométrica exterior definida.

Un cristal está considerado como un grupo de átomos que se repiten de forma regular por todo el cuerpo. En cualquier caso se conservan distancias y ángulos.

S
I
S
T
E
M
A
S

C
R
I
S
T
A
L
I
N
O
S



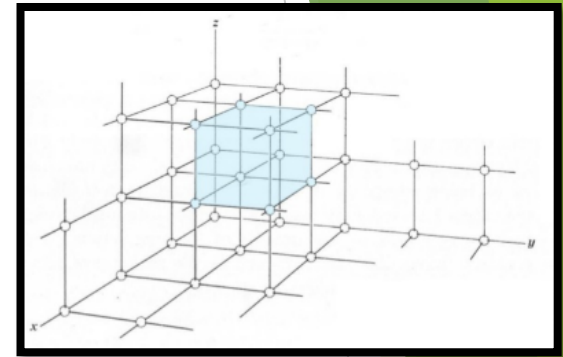
Conjunto de puntos, que están organizados siguiendo un patrón periódico.

Uno o más átomos quedan asociados a cada punto de la red.

Red cristalina

La red difiere de un material a otro tanto en tamaño como en forma, depende del tamaño de los átomos y del tipo de enlace entre ellos.

La **estructura cristalina** de un material se refiere: al tamaño, la forma y la organización atómica dentro de la red.



Ejemplo de una red cristalina.



Celda unidad

Es la subdivisión de la red cristalina que sigue conservando las características generales de toda la red.

Las estructuras cristalinas son paralelepípedos o prismas con 3 conjuntos de caras paralelas.

Es la unidad es la unidad estructural fundamental y define la estructura cristalina mediante su geometría y por la disposición de los átomos dentro de ella.



- ▶ Un **crystal** es un cuerpo sólido macroscópico formado de materia químicamente homogénea; está delimitado por caras y posee ángulos constantes (**estructura ordenada**).
- ▶ La construcción de un cristal se basa en una red cristalográfica formada por elementos estructurales homogéneos (la celda unitaria).
- ▶ Los cristales representan un estado energético mínimo de ordenación por la unión eléctrica de iones átomos o moléculas.

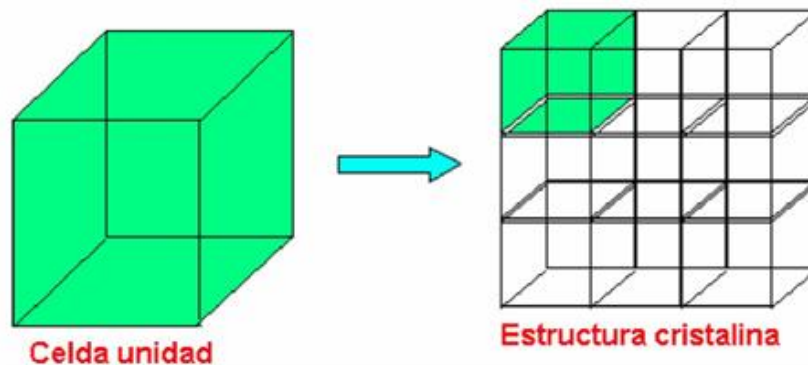
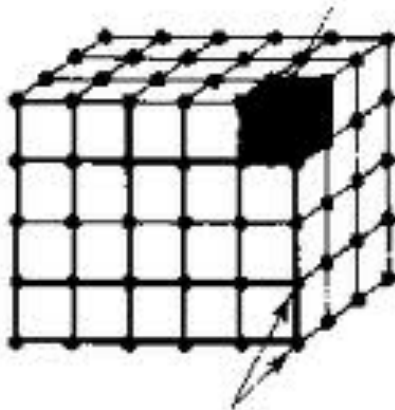


Figura 16: Representación de una celda unidad a transformar a una estructura cristalina.



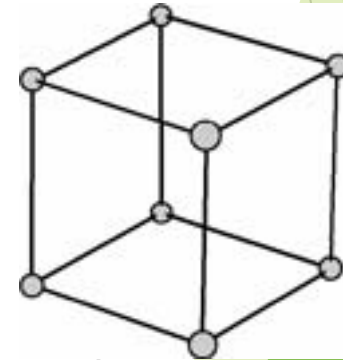
- Para una estructura cristalina fija es posible escoger distintas celdas primitivas, pero todas ellas contendrán el mismo número de átomos
- La celda unidad convencional se elige de forma que refleje la simetría del cristal
- Como ejemplo; una celda que posea un átomo en cada vértice (cada uno compartido con 8 vecinos) tendrá:

Celda Unitaria



Puntos de la Red

$$8 \times \frac{1}{8} = 1$$





Sistemas cristalinos

Redes tridimensionales: En este caso la celda unidad queda definida por tres traslaciones fundamentales (a , b y c) los ángulos que forman: α (entre b y c), β (entre a y c), y γ (entre a y b)

Del apilamiento de estas redes se obtienen las **redes tridimensionales**. Existen 14 tipos diferentes de redes tridimensionales (**redes de Bravais**) que se agrupan en 7 sistemas cristalinos diferentes.

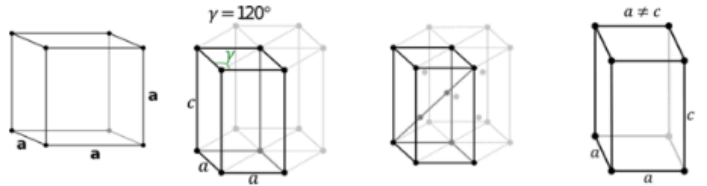


Sistemas cristalinos

Sistema cristalinos	Ejes	Ángulos entre ejes
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ortorrombico	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$
Trigonal (o romboédrico)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Monoclinico	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$
Triclínico	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$ $\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$



Los 7 sistemas cristalinos



Cúbico



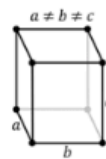
Hexagonal



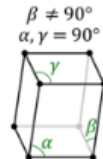
Trigonal



Tetragonal



Ortorómbico



Monoclínico



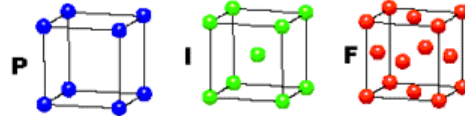
Triclínico



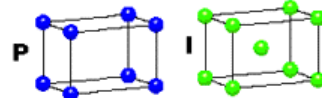


Redes de Bravais (7 Sistemas cristalinos)

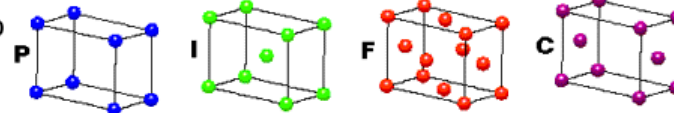
CÚBICO
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



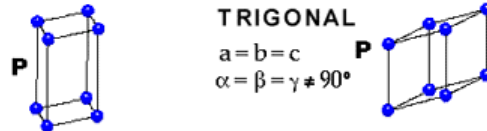
TETRAGONAL
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



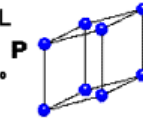
ORTORÓMBICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



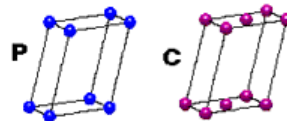
HEXAGONAL
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma = 120^\circ$



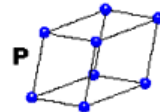
TRIGONAL
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



MONOCLÍNICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ$
 $\beta \neq 90^\circ$



TRICLÍNICO
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



Tipos de celdas:

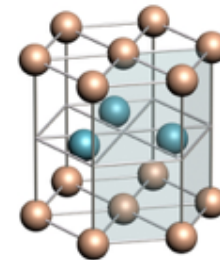
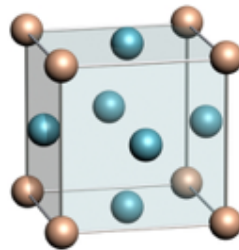
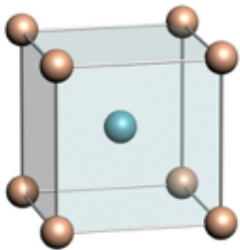
P = Primitiva
I = Centrada en interior
F = Centrada en todas las caras
C = Centrada en dos caras

14 redes de Bravais



Estructuras cristalinas de los metales

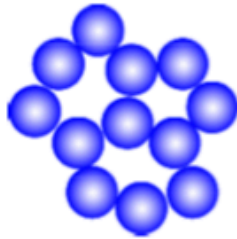
No hay restricciones en cuanto al número y posición de átomos vecinos más próximos, lo cual conduce, para la mayoría de los metales, a estructuras cristalinas con gran número de vecinos próximos y **densamente empaquetados**.





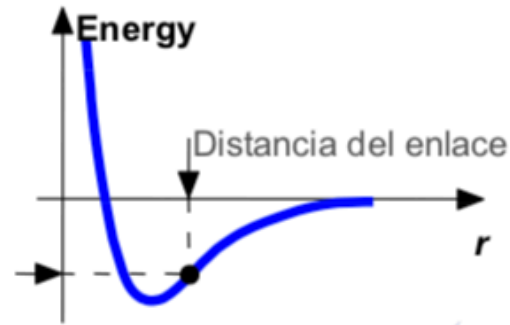
Energía y empaquetamiento

- No denso, empaquetamiento

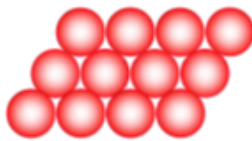


aleatorio

energía de
enlace

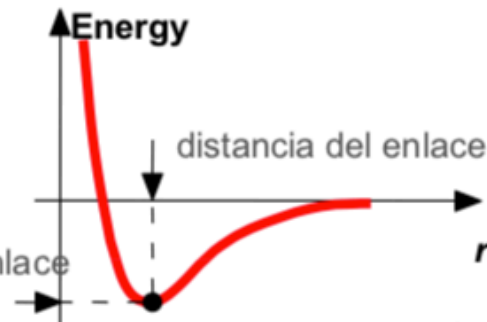


- Denso, empaquetamiento



ordenado

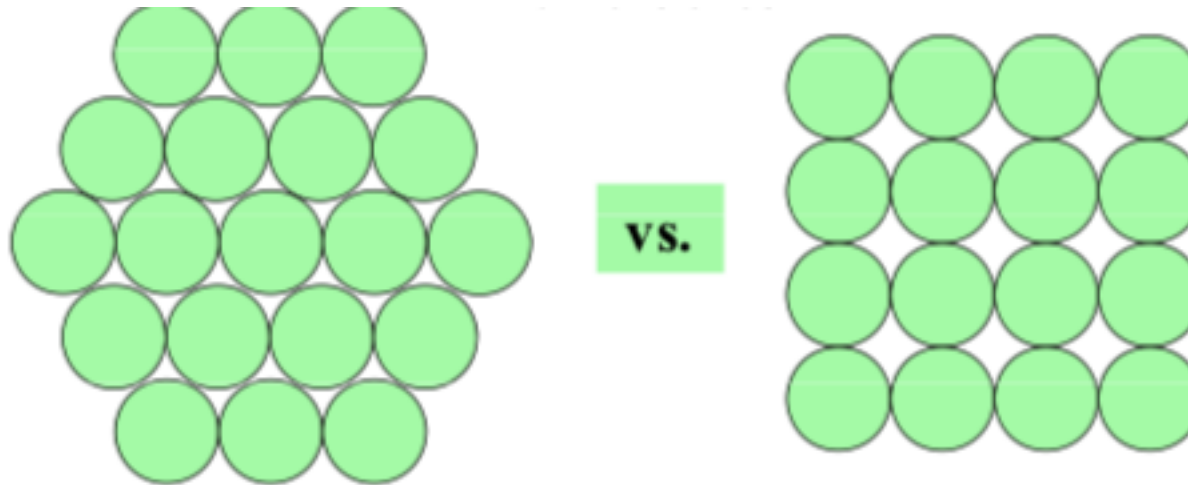
Energía de enlace



Estructuras densas y con empaquetamiento ordenado
tienden a tener menores energía



Esquema de empaquetamiento



Representación bidimensional de un sólido. Su apilamiento representa un esquema en 3D.



Modelo de esfera dura

- Los átomos (o iones) se consideran como esferas sólidas con diámetros bien definidos
- Las esferas más cercanas se tocan entre sí.
- En los metales cada esfera representa el núcleo atómico.
- Las esferas se empacan de forma distinta.
- Empaquetamiento no compacto (CS, BCC).
- Empaquetamiento compacto (FCC-ABC, HC- ABA)
- Cada arreglo distinto presenta un número de coordinación.



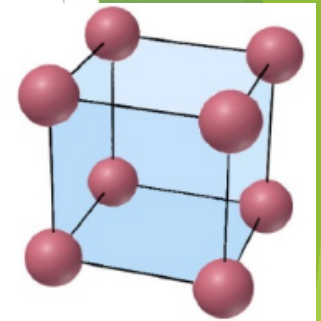
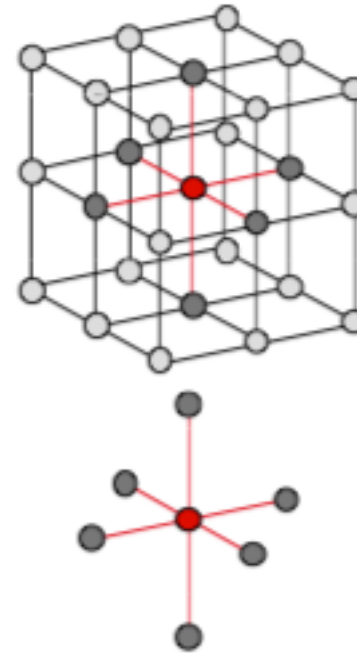
Propiedades de las celdas unitarias

- Número de átomos por celda unitaria
- Relación entre radio atómico y longitud de los lados de la celda unitaria
- Número de coordinación
- Factor de empaquetamiento.



Estructura Cristalina: Cúbica Simple (CS)

- Es rara debido a su baja densidad de empaquetamiento
- Las direcciones de empaquetamiento compacto son los bordes del cubo
- Número de coordinación = 6
- Átomos por celda: $8 \text{ vértices} \cdot \frac{1}{8} = 1$
- Relación entre la longitud de arista y el radio del átomo: $2r = a$
- Eficacia del empaquetamiento = 52%
- Ejemplos: α -Po, Hg





Numero de
coordinación

- ▶ Numero de átomos que se encuentran en contacto con un átomo en particular, o el número de átomos mas cercano (máximo 12).

Factor de
empaquetamiento
(FEA)

- ▶ Fracción del espacio de la celda unitaria ocupada por los átomos (suponiendo que son esferas perfectas y solidas).

FEA= Volumen de los átomos en una celda unidad/
Volumen total de la celda unidad

Numero de coordinación (FCC)	12
Factor de empaquetamiento (FCC)	0.74



Fracción o Factor de empaquetamiento atómico

Factor de empaquetamiento (FEA)

- Fracción del espacio de la celda unitaria ocupada por los átomos (suponiendo que son esferas perfectas y solidas).

FEA= Volumen de los átomos en una celda unidad/
Volumen total de la celda unidad

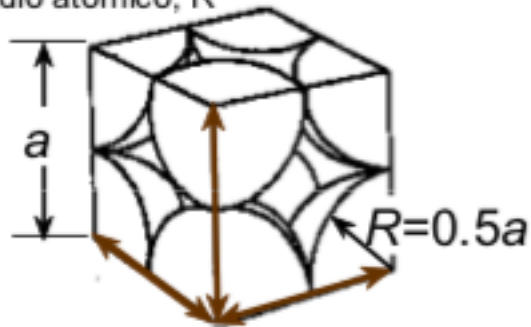
Volumen de átomos
en una celda unidad = $(4/3\pi r^3)(\text{no. átomos de la celda unidad})$



Factor de empaquetamiento atómico (CS)

Cubo de lado 'a'

Radio atómico, R



contiene $8 \times 1/8 =$
1 átomo/celda unitaria

$$\text{APF} = \frac{\text{átomos Celda u.} \cdot \frac{\text{volumen átomo}}{\text{átomo}}}{\text{volumen Celda u.}}$$
$$\text{APF} = \frac{1 \cdot \frac{4}{3} \pi (0.5a)^3}{a^3}$$

- APF de una cúbica simple = 0.52



Estructura Cristalina: Cúbica Centrada en las Caras (FCC)

- ▶ Los átomos se tocan entre si a lo largo de las diagonales de las caras.
- ▶ Todos los átomos son iguales.
- ▶ Cristalizan en esta estructura: **Al, Cu, Au, Pb, Ni, Pt, Ag.**
- ▶ Cada átomo del vértice es compartido con **8** celdas unidad.
- ▶ Los átomos centrados en las caras solo son compartidos con **2** celdillas unidad.

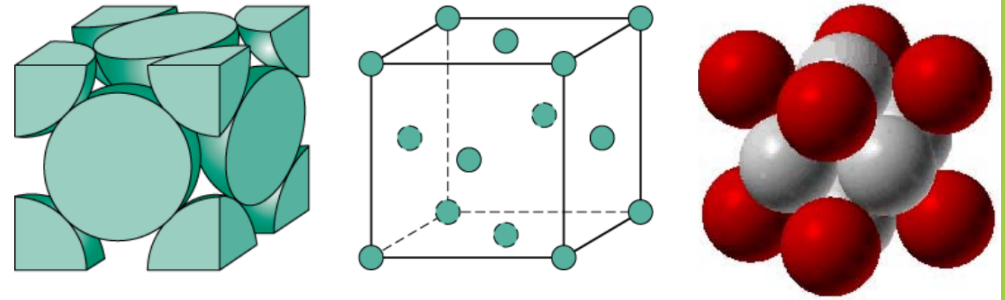


Figura 17:

- El modelo de esferas rígidas de la celdilla unidad FCC
- Representa los centros de los átomos mediante círculos pequeños, lo que origina una mejor perspectiva de las posiciones de los átomos.
- Representa una sección del cristal formada por muchas celdillas unidad FCC.

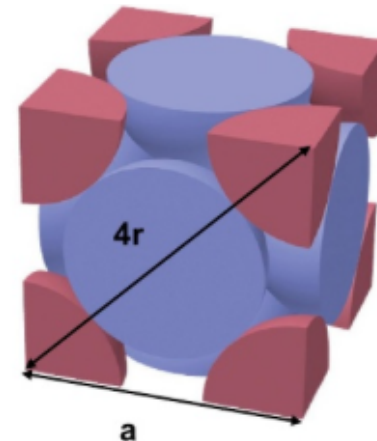
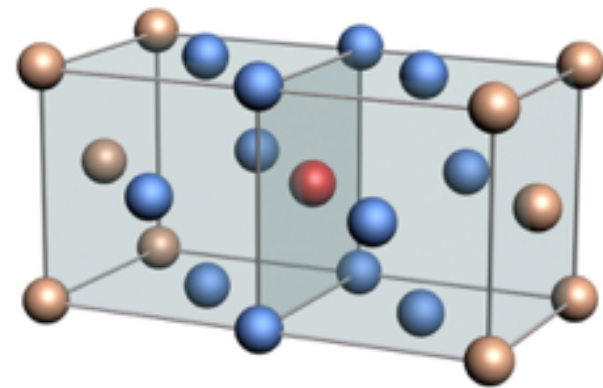
La longitud de la arista del cubo a y el radio atómico R se relacionan mediante la siguiente fórmula:

$$a = 2r\sqrt{2}$$



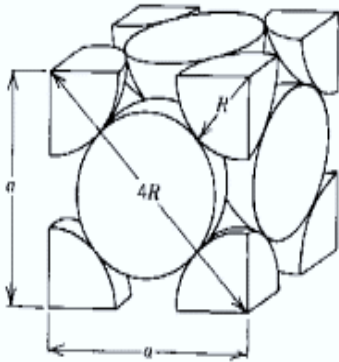
Estructura Cristalina: Cúbica Centrada en las Caras (FCC)

- Átomos por celda: $8 \text{ aristas} \cdot \frac{1}{8} + 6 \text{ caras} \cdot \frac{1}{2} = 4$.
- Relación entre la longitud de arista y el radio del átomo:
 $(4r)^2 = a^2 + a^2$.
- El valor de longitud de la arista del cubo es: $a = 2r\sqrt{2}$
- No. de coordinación: 12.
- Eficacia del empaquetamiento: 74.0%.





Factor de empaquetamiento atómico (FCC)



De acuerdo al teorema de Pitágoras

$$a^2 + b^2 = c^2 \Rightarrow a^2 + a^2 = (4r)^2$$

$$2a^2 = 16r^2 \Rightarrow a^2 = \frac{16r^2}{2} = 8r^2$$

$$a = \sqrt{8r^2} = \sqrt{8} \sqrt{r^2} = \sqrt{8} \cdot r$$

$$a = (\sqrt{2 \cdot 2 \cdot 2})r \Rightarrow a = (\sqrt{2^2 \cdot 2})r$$

$$a = 2\sqrt{2}r$$

$$FEA = \frac{(\text{átomo / celda})(\text{volumen de la esfera})}{\text{volumen total de la celda unidad}}$$

$$FEA = \frac{(4 \text{átomo / celda}) \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{a^3}$$

$$FEA = \frac{(4 \text{átomo / celda}) \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{(2r\sqrt{2})^3} = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{2^3 r^3 (\sqrt{2})^3} =$$

$$FEA = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{8r^3 (\sqrt{2} \sqrt{2} \sqrt{2})} = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{8r^3 \left((\sqrt{2})^2 \sqrt{2} \right)} = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{8r^3 2\sqrt{2}}$$

$$FEA = \frac{\frac{16}{3} \pi r^3}{16r^3 \sqrt{2}} = 0.74$$

$$\boxed{FEA = 74.0\%}$$



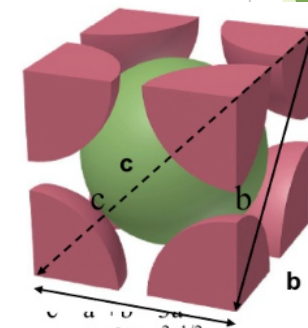
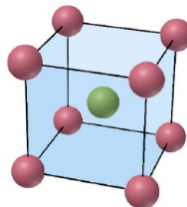
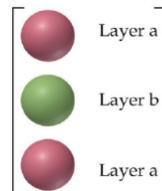
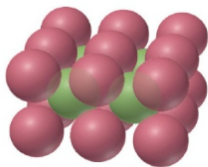
Estructura Cristalina: Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC)

- ▶ Es una estructura común en los metales donde la celdilla unidad cúbica que tiene átomos localizados en los 8 vértices y un átomo en el centro.
- ▶ No. de coordinación: 8
- ▶ Átomos por celda: $8 \text{ aristas} \cdot \frac{1}{8} + 1 \text{ centro} = 2$ (2 átomos por celda unitaria)
- ▶ Relación entre la longitud de arista y el radio atómico: $4r$ ó

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

- ▶ Eficacia del empaquetamiento = 68%

- ▶ Ejem

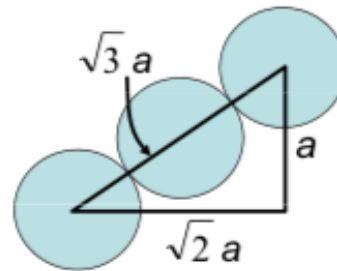
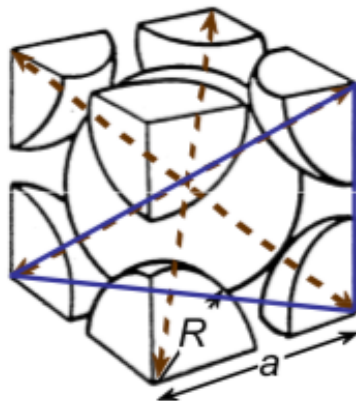


Los átomos del centro y de los vértices se tocan mutuamente a lo largo de las diagonales del cubo y la longitud a de la arista de la celdilla y el radio atómico R se relacionan mediante la siguiente fórmula:

$$a = 4R / \sqrt{3}$$



Factor de empaquetamiento atómico (BCC)



Direcciones de empaquetamiento:
longitud = $4R = \sqrt{3} a$

$$\text{APF} = \frac{\text{átomos Celda u} \times \text{volumen átomo}}{\text{volumen Celda unitaria}}$$

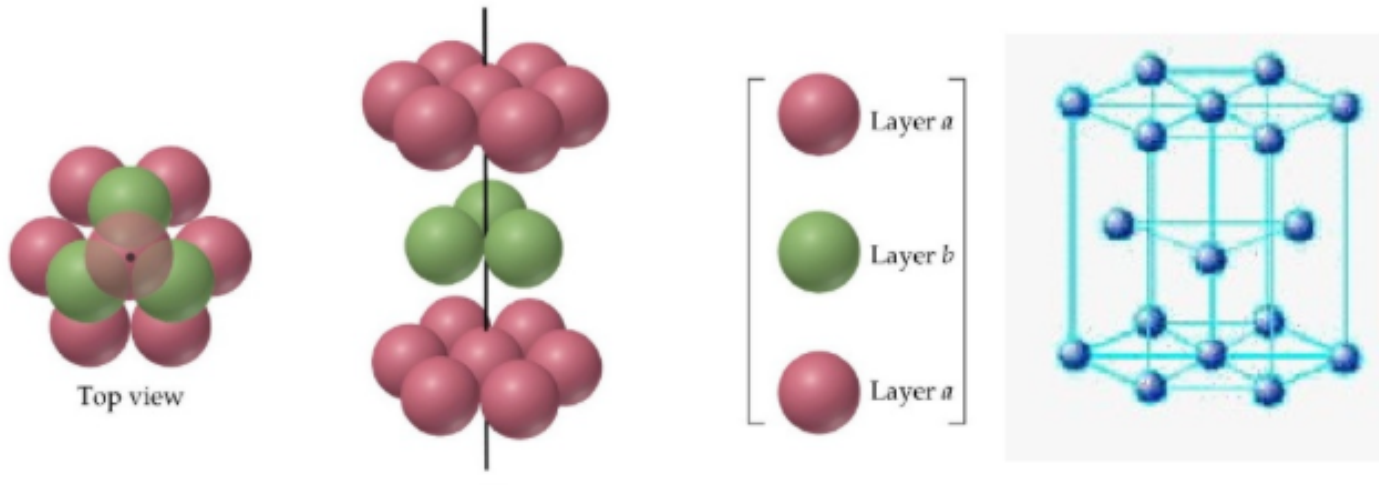
APF = $\frac{2 \times \frac{4}{3} \pi (\frac{\sqrt{3}a}{4})^3}{a^3}$

APF para una estructura BCC = 0.68



SOLIDOS CRISTALINOS

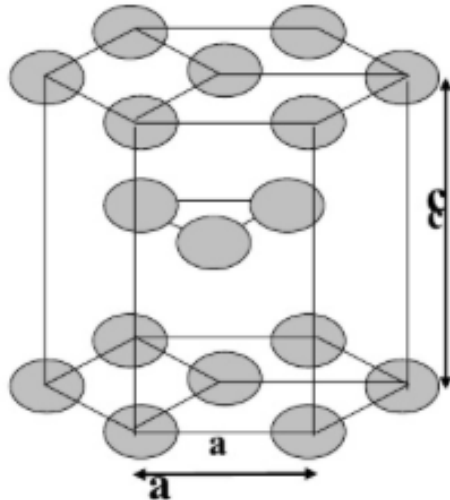
Celda hexagonal compacta HC (empaquetamiento compacto ABA)





SOLIDOS CRISTALINOS

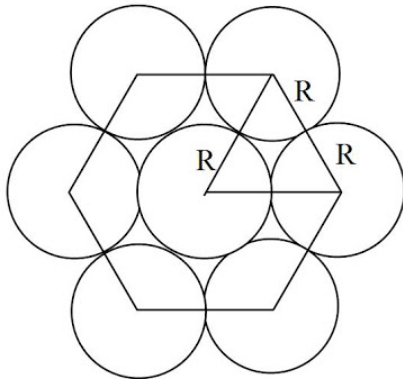
Celda hexagonal compacta HC (empaquetamiento compacto ABA)



- No. de coordinación: 12
- Átomos por celda: 2
- Para el hexágono (3 celdas): $12 \text{ vértices} \cdot \frac{1}{6} + 2 \text{ caras} \cdot \frac{1}{2} + 3 \text{ centros} = 6 \text{ átomos}$.
- Eficacia del empaquetamiento = 74%
- Parámetros: a = ancho del hexágono y c = altura; distancia entre dos planos.
- Ejemplos: Be, Mg, Zn, Cd, Ti



El máximo empaquetamiento se encuentra en las aristas de la base del hexágono, donde se encuentran en contacto los átomos, donde $a = 2R$ y $b = 2R$.



Factor de empaquetamiento (FEA):

$$V_{\text{at celda}} = 6 \text{ átomos/celda} \cdot V_{\text{volumen átomo}} = 6 \cdot \frac{4}{3} \pi R^3$$

Volumen de la celda:

$$V_{\text{celda}} = \text{Área base} \cdot \text{Altura}$$

Cálculo del área de la base:

Donde: la base es un hexágono, luego:

$$\text{Área base} = \frac{\text{Perímetro} \cdot \text{Apotema}}{2} = \frac{2R \cdot 6R \cdot \sqrt{3}}{2} = 6R^2 \sqrt{3}$$

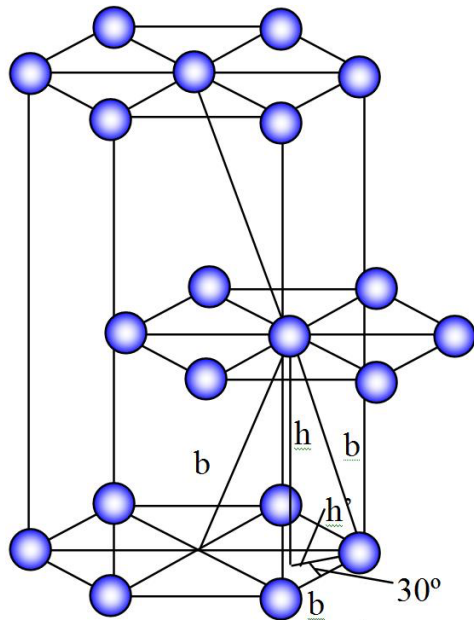
$$\text{Perímetro} = 2R \cdot 6$$

$$\text{Apotema} = \sqrt{4R^2 - R^2} = R\sqrt{3}$$



Cálculo de la altura:

La altura es el doble de altura de un tetraedro regular formado por cuatro esferas de radio R.



$$H = 2h$$

$$2h' \cos 30^\circ = b$$

$$h' = \frac{b}{\sqrt{3}}$$

$$h^2 = b^2 - h'^2$$

$$h^2 = b^2 - \left(\frac{b}{\sqrt{3}}\right)^2 = b^2 - b^2/3 = 2b^2/3$$

$$h = \frac{b\sqrt{2}}{\sqrt{3}} = \frac{b\sqrt{6}}{3}$$



Como $b = 2R$:

$$h = \frac{2R\sqrt{6}}{3}$$

Luego, la altura, H :

$$H = 2h = \frac{4R\sqrt{6}}{3}$$

$$V_{\text{celda}} = \text{Área base} \cdot \text{Altura} = 6R^2\sqrt{3} \frac{4R\sqrt{6}}{3} = 8R^3\sqrt{18} = 24R^3\sqrt{2}$$

$$FEA = \frac{8\pi R^3}{24R^3\sqrt{2}} = \frac{\pi}{3\sqrt{2}} = 0,74$$

lo que significa que el 74% de la celda lo ocupan los átomos, y el resto son huecos, el 26%



Posiciones intersticiales: huecos

Hay diferentes tipos de huecos:

Octaédricos:

- No. de coordinación: 6
- Huevo situado en el centro de un octaedro regular

Tetraédricos

- No. de coordinación: 4
- Huevo situado en el centro de un tetraedro regular

Estructuras COMPACTAS:

- No. de huecos tetraédricos: $2n$
- No. de huecos octaédricos: n ,
Siendo n : No. de átomos/celdilla



Notaciones cristalográficas

a) Posiciones atómicas

- Cualquier punto P de la red espacial puede expresarse por el vector de posición que une el origen de la celdilla con el propio punto.

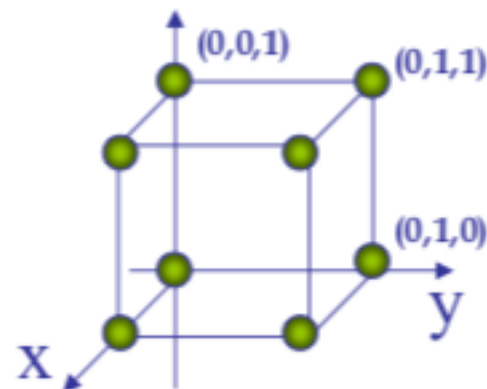
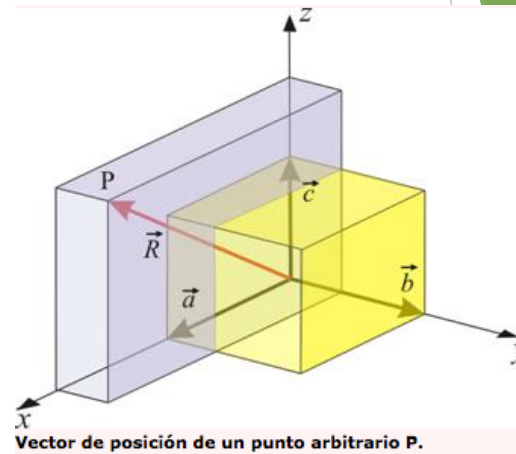
- Los vectores \vec{a} , \vec{b} y \vec{c} se conocen vectores reticulares o axiales.

- Si \vec{R} el vector de posición, entonces:

$$\vec{R} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

- Las coordenadas de punto P se expresa como:

$$P = u + v + w$$





b) Direcciones

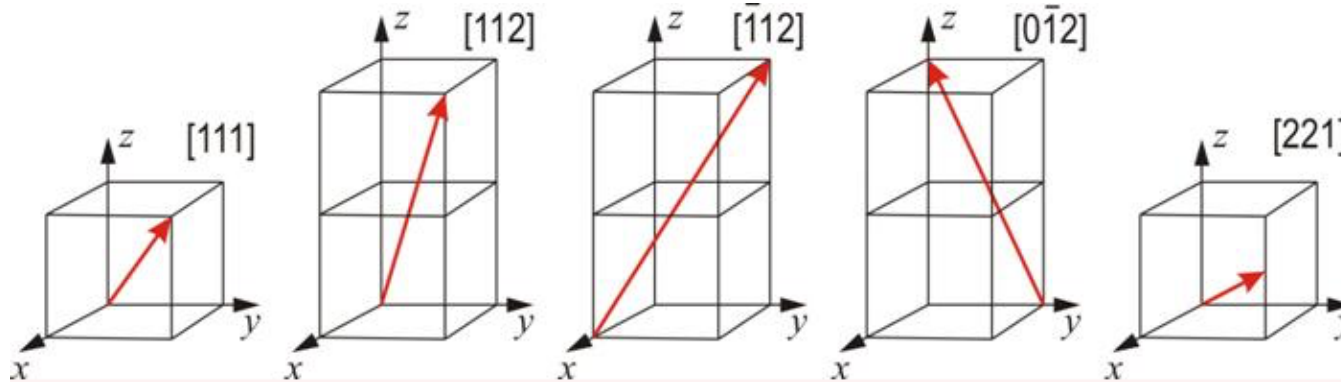
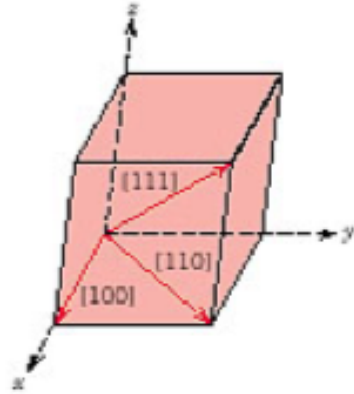
- Las propiedades de los materiales depende del plano o dirección en la que se miden.
- La notación empleada se conoce como **notación de índices de Miller**.
- Las componentes de cualquier vector puede conectarse restando las coordenadas de los puntos final e inicial.

$$\overrightarrow{P_1P_2} = P_2 - P_1 = (u_2 - u_1, v_2 - v_1, w_2 - w_1)$$

- Los índices de Miller corresponden a los componentes del vector, pero reducidos a los enteros mas pequeños posibles: h , k y l .
- La dirección se representa como $[h \ k \ l]$.
- Si una dirección es negativa, se indica señalando con un guion encima del número.
- Una familia de direcciones equivalentes se asigna entre corchete con ángulo $\langle hkl \rangle$

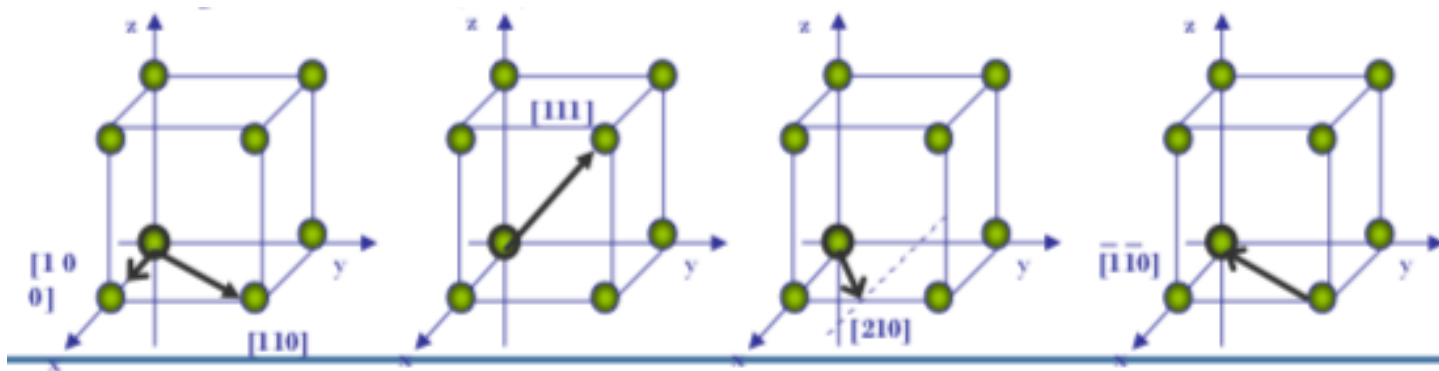


Ejemplos de direcciones





Ejemplos de direcciones



- Arista del cubo: $[100]$, $[010]$, $[001]$, $[0\bar{1}0]$, $[00\bar{1}]$, $[\bar{1}00]$ = $\langle 100 \rangle$
- Diagonales del cubo: $\langle 111 \rangle$
- Diagonales caras: $\langle 110 \rangle$

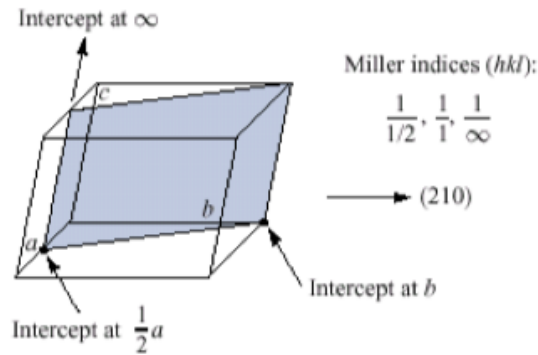


Planos cristalinos

- Un plano queda perfectamente determinado con tres puntos que no sean colineales.
- Si cada punto está sobre un eje cristalino diferente, el plano puede especificarse dando las coordenadas de los puntos en función de las longitudes reticulares a , b y c .
- Para especificar la orientación de un plano, se siguen las siguientes reglas.
 - Se encuentran las intersecciones con los ejes en función de las constantes de la red. Si el plano no corta a un eje, porque es paralelo a él, la intersección se toma como ∞ .
 - Se toman los inversos de estos números, y luego se reducen a tres números enteros que tengan la misma relación.
- Los tres números resultantes, se encierran entre paréntesis (índices de Miller), representan al plano.
- Los planos equivalentes pueden entre llaves los índices de uno cualquiera de sus miembros $\{hkl\}$.



Ejemplos de planos cristalinos



$$\left. \begin{array}{l} x=1/2 \\ y=1 \\ z=\infty \end{array} \right\}$$

(210)

$$\left. \begin{array}{l} x=1 \\ y=1 \\ z=\infty \end{array} \right\}$$

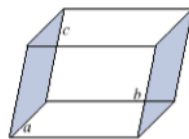
(110)

$$\left. \begin{array}{l} x=1 \\ y=1 \\ z=1 \end{array} \right\}$$

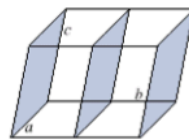
(111)

$$\left. \begin{array}{l} x=1 \\ y=\infty \\ z=\infty \end{array} \right\}$$

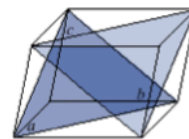
(100)



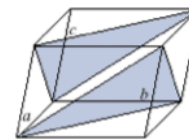
(010)



(020)



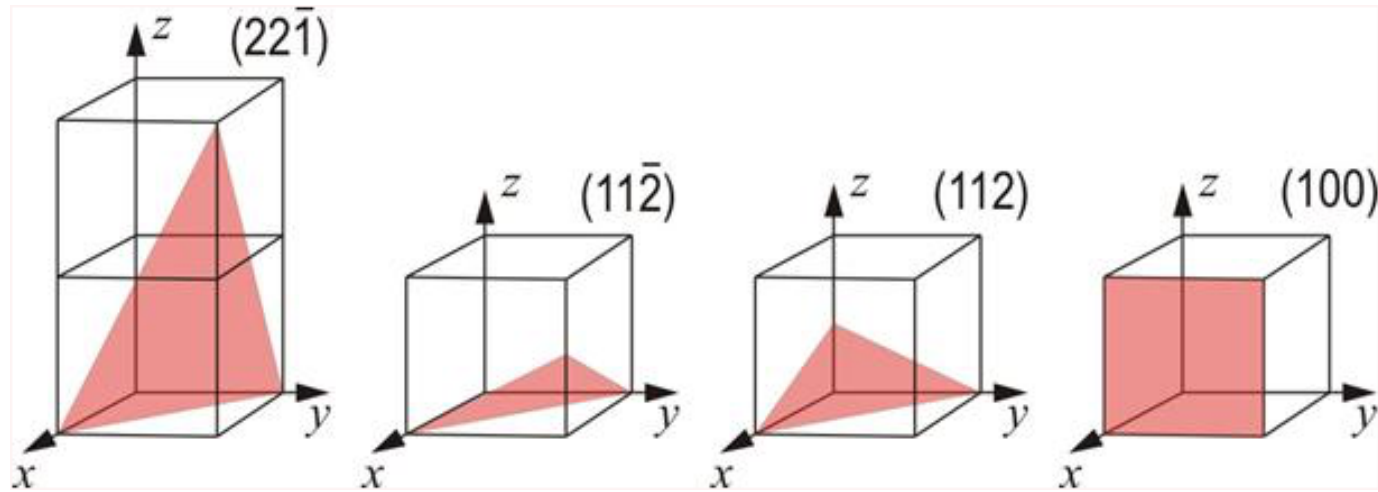
(111)



(11 $\bar{1}$)



Ejemplos de planos cristalinos





Distancia de los planos

Sistema cúbico

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

Donde:

d_{hkl} = espaciado interplanar entre planos paralelos contiguos con índices de Miller h, k, l .

a = constante de red (arista del cubo unidad).

h, k, l = índices de Miller de los planos cúbicos considerados.



Cálculos de la densidad atómica volumétrica, planar y lineal de las celdas unitarias

a) Densidad atómica volumétrica:

$$\text{Densidad} = \rho = \frac{\text{Masa de átomos en la celda unitaria}}{\text{Volumen total de la celda unitaria}}$$

$$\rho = \frac{n \cdot A}{V_C \cdot N_A}$$

Donde:

n : número de átomos/celda unidad

A: Peso atómico

V_C : Volumen de celda unidad

N_A : Número de Avogadro (6.023×10^{23} átomos/mol)



b) Densidad atómica lineal ρ_l :

Es la relación entre el número de diámetros atómicos cortados por la longitud seleccionada de la línea en dirección de interés con respecto a la longitud seleccionada de la línea.

$$\rho_l = \frac{\text{no.} \cdot \text{equivalente} \cdot \text{de} \cdot \text{átomos}}{\text{longitud} \cdot \text{lineal}}$$

El factor de empaquetamiento lineal: es la fracción realmente ocupada por átomos en la longitud seleccionada.

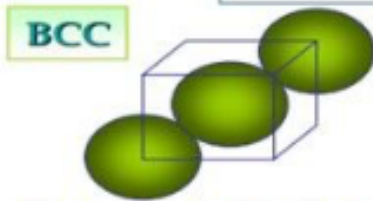
$$FE_l = \frac{\text{no.} \cdot \text{radios} \cdot \text{atómicos}}{\text{longitud} \cdot \text{lineal}}$$

Tan solo se consideraran aquellos átomos donde la dirección de interés pase por su centro.

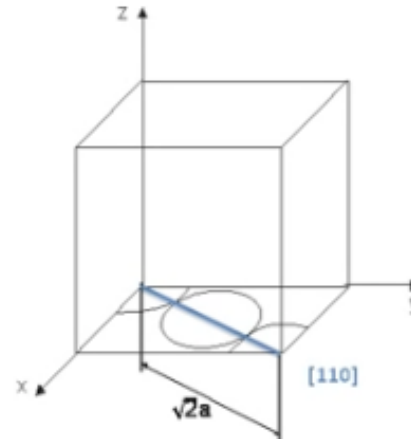
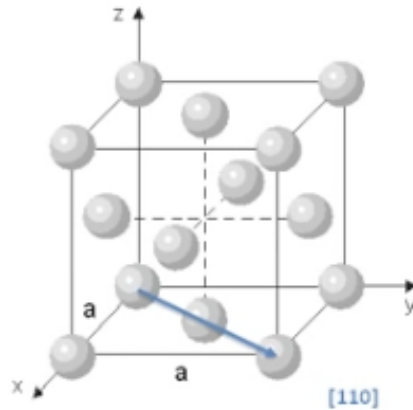


Ejemplo de densidad atómica lineal

$$\rho_l = \frac{\text{N}^\circ \text{ átomos diametral. interseca dos por la línea}}{\text{long. línea}} = \frac{\text{átomos}}{m}$$



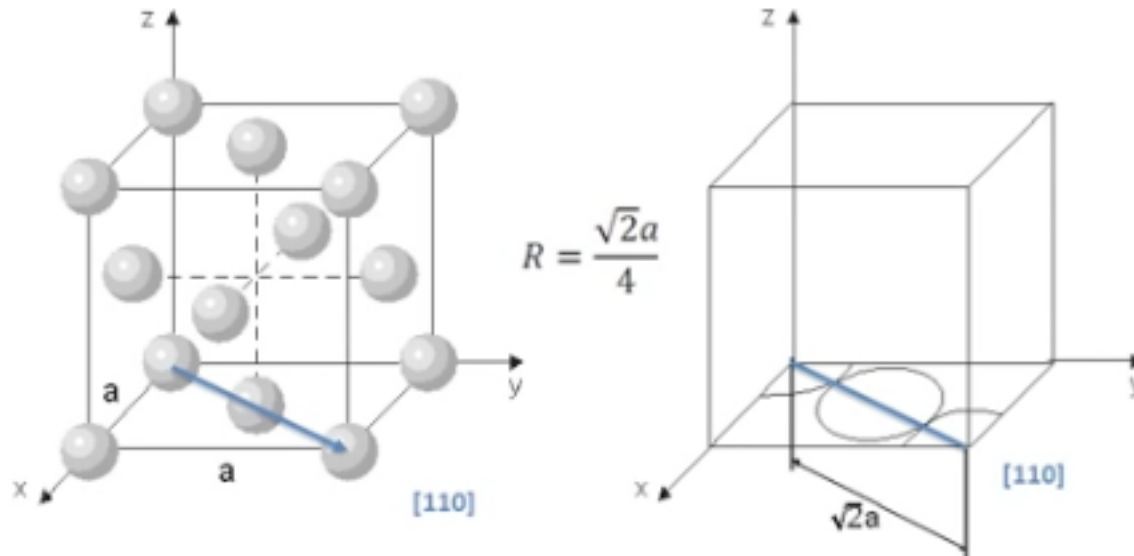
$$\text{Ejemplo : } \rho_{[111]} = \frac{1 \text{ átomo centro} + 2 \cdot \frac{1}{2}}{\sqrt{3} \cdot a} = \frac{2\sqrt{3} \text{ átomos}}{3a m}$$



$$\rho_l = \frac{n^\circ \text{ equivalente de átomos}}{\text{longitud línea}} \rightarrow \rho_l = \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}a}$$



Ejemplo de densidad atómica lineal



$$FE_L = \frac{n^{\circ} \text{ radios atómicos}}{\text{longitud línea}} \rightarrow FE_L = \frac{4 \times R}{\sqrt{2}a} \rightarrow FE_L = \frac{4 \frac{\sqrt{2}a}{4}}{\sqrt{2}a} \rightarrow FE_L = 1$$



c) Densidad atómica planar ρ_p :

Es la relación entre el número equivalente de átomos cortados por el área seleccionada, con respecto al área seleccionada.

$$\rho_p = \frac{\text{no. equivalentes de átomos}}{\text{área seleccionada}}$$

El factor de empaquetamiento planar: es la fracción realmente ocupada por átomos en el seleccionada.

$$FE_p = \frac{\text{superficie de átomos}}{\text{área seleccionada}}$$

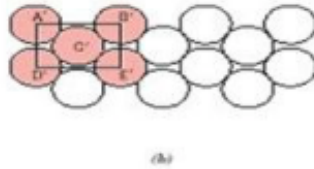
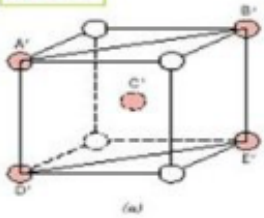
Tan solo se consideraran aquellos átomos donde la línea pase por su centro.



Ejemplo de densidad atómica planar

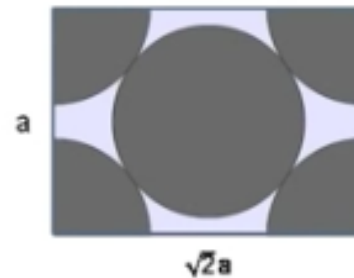
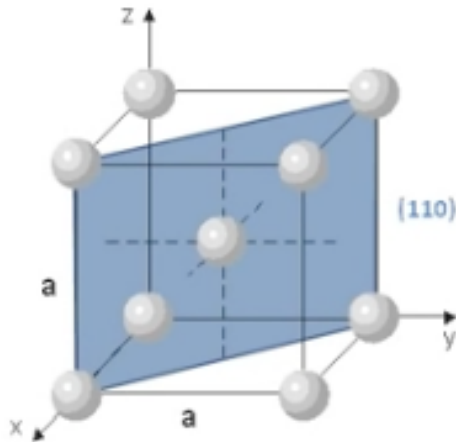
$$\rho_p = \frac{\text{N}^\circ \text{ átomos intersección por el área}}{\text{área seleccionada}} = \frac{\text{átomos}}{m^2}$$

BCC



Ejemplo :

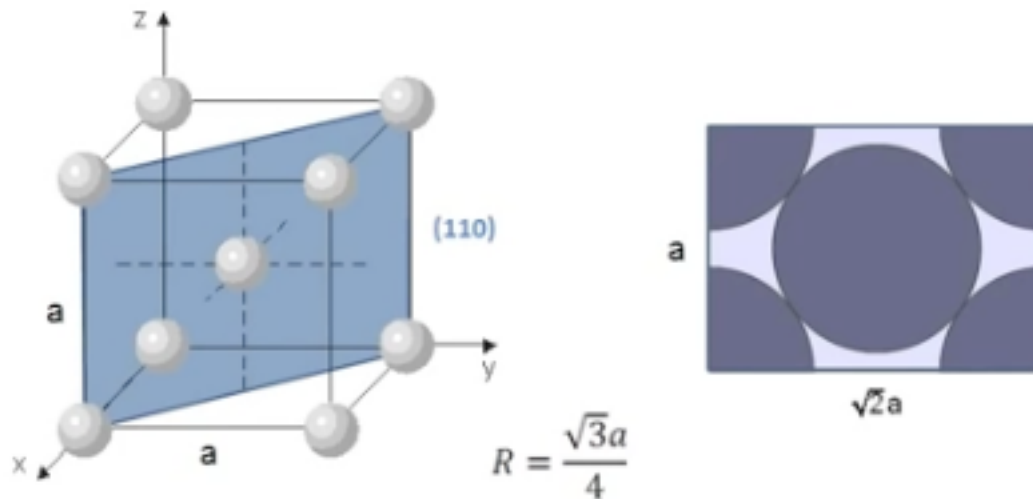
$$\rho_p = \frac{1 \text{ átomo centro} + 4 \cdot \frac{1}{4} \text{ vértices}}{a \cdot \sqrt{2} \cdot a} = \frac{\sqrt{2} \text{ átomos}}{a^2 m^2}$$



$$\rho_p = \frac{n^\circ \text{ equivalente de átomos}}{\text{área seleccionada}} \rightarrow \rho_p = \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}a \times a} \rightarrow \rho_p = \frac{2 \text{ átomos}}{\sqrt{2}a^2}$$



Ejemplo de densidad atómica planar



$$FE_p = \frac{\text{superficie átomos}}{\text{área seleccionada}} \Rightarrow FE_p = \frac{2 \times \pi R^2}{\sqrt{2}a \times a} \Rightarrow FE_p = \frac{2 \times \pi \frac{3a^2}{16}}{\sqrt{2}a^2} \Rightarrow FE_p = 0,835$$



Por qué son importantes los planos cristalográficos

Deformación plástica

- La deformación plástica tiene lugar cuando los átomos deslizan entre ellos.
- El deslizamiento ocurre a lo largo de planos cristalográficos específicos (fracción atómica planar mas elevada) y a lo largo de direcciones preferentes (fracción atómica lineal mas elevada).

Sistemas de Deslizamiento			
Estructura cristalina	Planos compactos	Direcciones compactas	Número
BCC (Fe- α , Mo, W)	{110}	$\langle 111 \rangle$	$6 \times 2 = 12$
FCC (Fe- γ , Cu, Ni, Al)	{111}	$\langle 110 \rangle$ -	$4 \times 3 = 12$
HCP (Cd, Mg, Zn, Ti- α)	{0001}	$\langle 1120 \rangle$	$1 \times 3 = 3$



Por qué son importantes los planos cristalográficos

Propiedades de transporte

- En algunos materiales, la estructura atómica produce un transporte rápido de e^- y/o calor en un plano y relativamente fuera de él. Ejemplo grafito.
- La conductividad térmica es más rápida en los planos con enlace covalente sp^2 que en la dirección perpendicular a ellos. $YBa_2Cu_3O_7$.
- Algunas redes contienen planos cristalográficos de Cu y O. Estos planos conducen pares de e^- (pares de Cooper) que son los responsables de la superconductividad. Estos materiales son aislantes eléctricos en la dirección perpendicular a los planos Cu-O.



Características de una estructura cristalina

- ▶ Volumen de la celdilla unidad
- ▶ Número de átomos por celdilla unidad.
- ▶ Concentración atómica.
- ▶ Fracción de empaquetamiento atómico.
- ▶ Densidad teórica.
- ▶ Forma y número de los intersticios
- ▶ Numero de coordinación (Z).



Estructuras cristalinas de algunos metales alotrópicos

Metal	Estructura cristalina	Rango de temperatura, °C
<i>Cobalto</i>	HC	< 477
	CCC	477 - 1490
<i>Estaño</i>	Tipo diamante	< 13
	TCI	13 - 232
<i>Hierro</i>	CCI	< 911
	CCC	911 - 1392
	CCI	1392 - 1539
<i>Titanio</i>	HC	< 882
	CCI	882 - 1668
<i>Zirconio</i>	HC	< 862
	CCI	862 - 1852
<i>Uranio</i>	Romboédrica	< 663
	TCI	663 - 764
	CCI	764 - 1130



Estructuras cristalinas de algunos metales alotrópicos

- La razón por la que cierto metal sigue un determinado patrón de cristalización y no otro, obedece, en última instancia, a consideraciones energéticas.
- La estabilidad de una estructura cristalina se mide a través de su *energía libre* ($G=H-TS$), de modo que la forma alotrópica más estable, para una temperatura y presión determinadas, es aquella que tiene menor energía libre.
- Las estructuras HC y CCC, debido a su mejor aprovechamiento del espacio, poseen *entalpía* y *entropía* más bajas que las correspondientes de la estructura CCI.



Anisotropía-Isotropía

Módulo elástico

Material	Dirección cristalográfica [100]	Dirección cristalográfica [100]	Dirección cristalográfica [100]
Al (FCC)	9.2	11.0	10.0
Cu (FCC)	9.7	27.8	18.1
Fe-a (BCC)	19.1	40.4	30.0
W (BCC)	59.2	59.2	59.2
MgO	35.5	48.7	45.0
NaCl (FCC)	6.3	4.7	5.3

Material anisótropo: Propiedades dependen de la dirección cristalográfica en la que se miden.

Material isotrópico: propiedades idénticas en todas direcciones.



Principales características de la mayoría de los metales

Estructura	f_e	Z	a/r	Átomos/ celda	I. O./ celda	i. T./ celda
BCC	0.68	8	$\frac{4}{\sqrt{3}}$	2	6<	12
FCC	0.74	12	$2\sqrt{2}$	4	4	8
HC	0.74	12	2	6	6	12



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

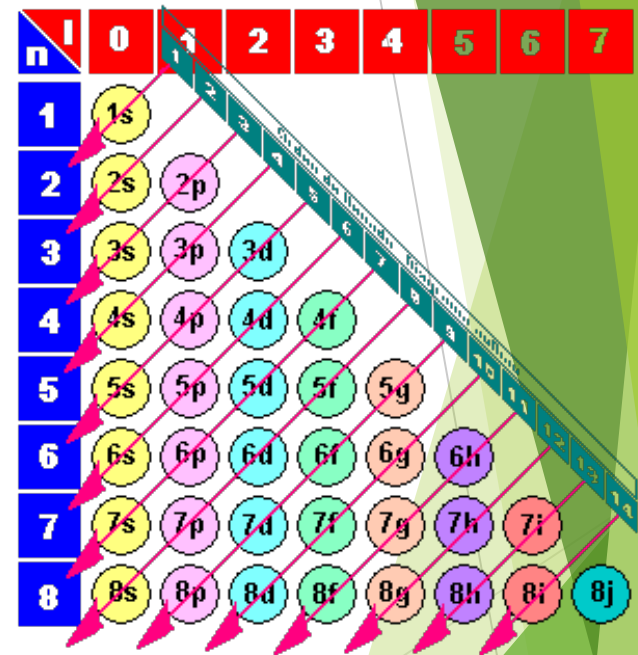
2.1.- Configuración electrónica de los los átomos



Configuraciones electrónicas

Es la forma de saber cómo son ocupados los electrones en estado fundamental o de mínima energía. Tomando en cuenta lo siguiente:

- Cada orbital puede tener, como máximo, dos electrones con spines antiparalelos (principio de exclusión de Pauli).
- Los orbitales se llenan empezando por el de menor energía y siguiendo por los demás en orden creciente (principio de aufbau).
- Al ocupar los orbitales degenerados, cada uno de ellos ha de estar ocupado por un electrón antes de asignar un segundo electrón a cualquiera de ellos (regla de la máxima multiplicidad de Hund).





Principio de Exclusión de Pauli

- *Dos electrones en un átomo no pueden tener los cuatro números cuánticos iguales*
- Si dos electrones tienen iguales n , l y m_l por tanto se encuentran en el mismo orbital
- Es necesario que un electrón tenga un $m_s = 1/2$ y el otro un $m_s = -1/2$



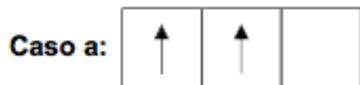


Orden de llenado de los orbitales. Regla de Hund

- La configuración más estable en los subniveles es aquella que tenga mayor multiplicidad.
- La multiplicidad se define como: $P = 2S+1$
Donde:

$$S = \sum m_z$$

Supongamos 2 electrones en los orbitales p, existen dos posibilidades



$$S = +\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \quad P = 2 * 1 + 1 = 3$$



$$S = +\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \quad P = 2 * 0 + 1 = 1$$

a es más estable que b



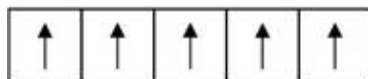
Excepciones a la regla de llenado

Excepciones a la regla de llenado.

Los orbitales semilleros presentan una estabilidad extra.

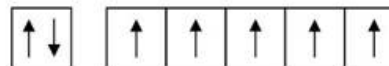
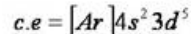
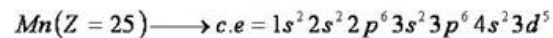
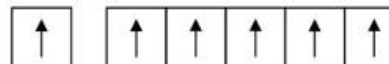
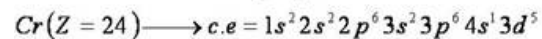
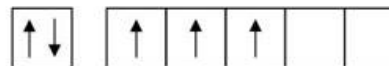
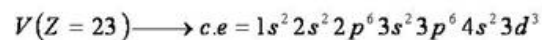


np^3 es muy estable



nd^5 es muy estable

Esto hace que en metales de transición, elementos como el Cromo llenen antes los orbitales 3d que se llene completamente el orbital 4s





Configuraciones electrónicas

Átomo	Z	Configuración electrónica			
Li	3	$1s^2 2s^1$	↑↓	↑	
Be	4	$1s^2 2s^2$	↑↓	↑↓	
B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$	↑↓	↑↓	↑
C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$	↑↓	↑↓	↑ ↑
N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$	↑↓	↑↓	↑ ↑ ↑
O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$	↑↓	↑↓	↑↓ ↑ ↑
F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑
Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$	↑↓	↑↓	↑↓ ↑↓ ↑↓

Configuración electrónica de Metales de Transición.

Sc:	[Ar]	↑					↑↓	[Ar] $3d^1 4s^2$
Ti:	[Ar]	↑	↑				↑↓	[Ar] $3d^2 4s^2$
V:	[Ar]	↑	↑	↑			↑↓	[Ar] $3d^3 4s^2$
Cr:	[Ar]	↑	↑	↑	↑	↑	↑	[Ar] $3d^5 4s^1$
Mn:	[Ar]	↑	↑	↑	↑	↑	↑↓	[Ar] $3d^5 4s^2$
Fe:	[Ar]	↑↓	↑	↑	↑	↑	↑↓	[Ar] $3d^6 4s^2$
Co:	[Ar]	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	↑↓	[Ar] $3d^7 4s^2$
Ni:	[Ar]	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	↑↓	[Ar] $3d^8 4s^2$
Cu:	[Ar]	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	[Ar] $3d^{10} 4s^1$
Zn:	[Ar]	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	[Ar] $3d^{10} 4s^2$



La tabla periódica y configuraciones electrónicas

Bloque s

1s 1 H																	Bloque p						1s ² 2 He
3 Li	2s 4 Be																	5 B	6 C	7 N	2p 8 O	9 F	10 Ne
11 Na	3s 12 Mg	Bloque d																13 Al	14 Si	15 P	3p 16 S	17 Cl	18 Ar
19 K	4s 20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	3d 26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	4p 34 Se	35 Br	36 Kr						
37 Rb	5s 38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	4d 44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	5p 52 Te	53 I	54 Xe						
55 Cs	6s 56 Ba	57 La	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	5d 76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	6p 84 Po	85 At	86 Rn						
87 Fr	7s 88 Ra	89 Ac	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	6d 108 Hs	109 Mt															

Bloque f

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	4f 65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	5f 97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr



Universidad Autónoma del Estado de México

Unidad Académica Profesional Tianguistenco

Capacidad	Configuración electrónica	Orbitales																	
		s ¹	s ²	d ¹	d ²	d ³	d ⁴	d ⁵	d ⁶	d ⁷	d ⁸	d ⁹	d ¹⁰	p ¹	p ²	p ³	p ⁴	p ⁵	p ⁶
2	1s	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1	11	12	13	14	15	16	17	18
8	2s2p	3 Li 6,94 Litio	4 Be 9,01 Berilio											5 B 10,81 Boro	6 C 12,01 Carbono	7 N 14,01 Nitrógeno	8 O 16,00 Oxígeno	9 F 18,99 Flúor	10 Ne 20,18 Neón
8	3s3p	11 Na 22,99 Sodio	12 Mg 24,31 Magnesio											13 Al 26,98 Aluminio	14 Si 28,09 Silicio	15 P 30,97 Fósforo	16 S 32,07 Azufre	17 Cl 34,45 Cloro	18 Ar 39,95 Argón
18	4s3d4p	19 K 39,10 Potasio	20 Ca 40,08 Calcio	21 Sc 44,96 Escandio	22 Ti 47,90 Titanio	23 V 50,94 Vanadio	24 Cr 52,00 Cromo	25 Mn 54,94 Manganeso	26 Fe 55,85 Hierro	27 Co 58,93 Cobalto	28 Ni 58,70 Níquel	29 Cu 63,55 Cobre	30 Zn 65,38 Zinc	31 Ga 69,72 Galio	32 Ge 72,59 Germanio	33 As 74,92 Arsénico	34 Se 78,96 Selenio	35 Br 79,90 Bromo	36 Kr 83,80 Criptón
18	5s4d5p	37 Rb 85,47 Rubidio	38 Sr 87,62 Estroncio	39 Y 88,91 Itrio	40 Zr 91,22 Zirconio	41 Nb 92,91 Niobio	42 Mo 95,94 Molibdeno	43 Tc [97] Tecnecio	44 Ru 101,07 Rutenio	45 Rh 102,91 Rodio	46 Pd 106,4 Paladio	47 Ag 107,87 Plata	48 Cd 112,40 Cadmio	49 In 114,82 Indio	50 Sn 118,69 Estaño	51 Sb 121,75 Antimonio	52 Te 127,60 Teluro	53 I 126,90 Yodo	54 Xe 131,30 Xenón
32	6s4f5d6p	55 Cs 132,91 Cesio	56 Ba 137,33 Bario	57 La 138,91 Lantano	72 Hf 178,49 Hafnio	73 Ta 180,95 Tántalo	74 W 183,85 Volframo	75 Re 186,21 Renio	76 Os 190,2 Osmio	77 Ir 192,22 Iridio	78 Pt 195,09 Platino	79 Au 196,97 Oro	80 Hg 200,59 Mercurio	81 Tl 204,37 Talio	82 Pb 207,19 Plomo	83 Bi 208,98 Bismuto	84 Po [209] Polonio	85 At [210] Astatio	86 Rn [222] Radón
32	7s5f6d7p	87 Fr [223] Francio	88 Ra [226] Rádico	89 Ac [227] Actinio	104 Rf [261] Rutherfordio	105 Db [262] Dubnio	106 Sg [263] Seaborgio	107 Bh [264] Hidrógeno	108 Hs [265] Hassio	109 Mt [268] Meitnerio	110 Uun [269] Ununnilio	111 Uuu [272] Unununio	112 Uub [277] Ununbium						

Número atómico → 1
 Masa atómica* → 1,008
 Nombre → Hidrógeno

Simbolo Negro - sólido
 Azul - líquido
 Rojo - gas
 Violeta - artificial

* Un número entre paréntesis indica el número de masa atómica del isótopo conocido de vida media más larga.

Metales
 Semimetales
 No metales
 Gases nobles

Metales ↔ No metales

Configuración electrónica	f ¹	f ²	f ³	f ⁴	f ⁵	f ⁶	f ⁷	f ⁸	f ⁹	f ¹⁰	f ¹¹	f ¹²	f ¹³	f ¹⁴
Lantni dos	58 Ce 140,12 Cerio	59 Pr 140,91 Praseodimio	60 Nd 144,24 Neodimio	61 Pm [145] Promecio	62 Sm 150,35 Samario	63 Eu 151,96 Europio	64 Gd 157,25 Gadolinio	65 Tb 158,93 Terbio	66 Dy 162,50 Disprobio	67 Ho 164,93 Holmio	68 Er 167,26 Erbio	69 Tm 168,93 Tulio	70 Yb 173,04 Iterbio	71 Lu 174,97 Lutecio
Actnidos 7	90 Th 232,04 Torio	91 Pa [231] Protactinio	92 U 238,03 Uranio	93 Np [237] Neptunio	94 Pu [244] Plutonio	95 Am [243] Americio	96 Cm [247] Curio	97 Bk [247] Berquellio	98 Cf [251] Californio	99 Es [254] Einstenio	100 Fm [257] Fermio	101 Md [258] Mendelevio	102 No [259] Nobelio	103 Lr [260] Laurencio



Tabla de Elementos Químicos

#	sim.	nombre	periodo, bloque	grupo	estado a 20°C 1atm	peso atómico	estados de oxidación	conf. electrónica
1	H	Hidrógeno	1, s	1	gas	1.00794	1	1s1
2	He	Helio	1, s	18	gas	4.002602		1s2
3	Li	Litio	2, s	1	solido	6.941	1	1s2 2s1
4	Be	Berilio	2, s	18	solido	9.012182	2	1s2 2s2
5	B	Boro	2, p	13	solido	10.811	3	1s2 2s2 p1
6	C	Carbono	2, p	14	solido	12.0107	± 4,2	1s2 2s2 p2
7	N	Nitrógeno	2, p	15	gas	14.0067	± 3,5,4,2	1s2 2s2 p3
8	O	Oxígeno	2, p	16	gas	15.9994	-2	1s2 2s2 p4
9	F	Fluor	2, p	17	gas	18.9984032	-1	1s2 2s2 p5
10	Ne	Neon	2, p	18	gas	20.1797		1s2 2s2 p6
11	Na	Sodio	3, s	1	solido	22.98977	1	[Ne] 3s1
12	Mg	Magnesio	3, s	2	solido	24.305	2	[Ne] 3s2
13	Al	Aluminio	3, p	13	solido	26.981538	3	[Ne] 3s2 p1
14	Si	Silicio	3, p	14	solido	28.0855	4	[Ne] 3s2 p2
15	P	Fósforo	3, p	15	solido	30.973761	± 3,5,4	[Ne] 3s2 p3
16	S	Azufre	3, p	16	solido	32.065	± 2,4,6	[Ne] 3s2 p4
17	Cl	Cloro	3, p	17	gas	35.453	± 1,3,5,7	[Ne] 3s2 p5
18	Ar	Argón	3, p	18	gas	39.948		[Ne] 3s2 p6
19	K	Potasio	4, s	1	solido	39.0983	1	[Ar] 4s1
20	Ca	Calcio	4, s	2	solido	40.078	2	[Ar] 4s2

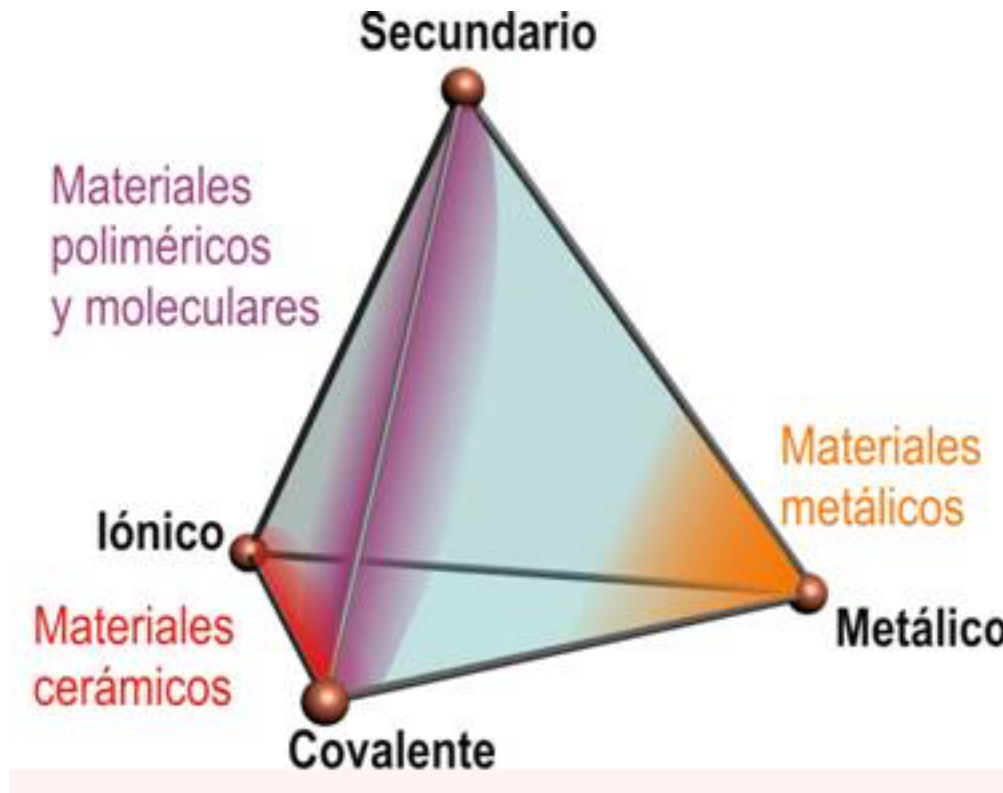


Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

2.3.- Enlaces atómicos y moleculares



Enlaces y tipos de materiales





Enlace químico

Es la fuerza que mantiene unidos a los átomos (enlace interatómico) para formar moléculas o formar sistemas cristalinos (iónicos, metálicos o covalentes) y moléculas (enlace intermolecular) para formar los estados condensados de la materia (sólido y líquido); dicha fuerza es de naturaleza electromagnética (eléctrica y magnética), predominante fuerza eléctrica.



TIPOS DE ENLACE

- a) Enlaces primarios (materiales cerámicos y metálicos)
 - Enlace covalente
 - Enlace metálico
 - Enlace iónico

- b) Enlaces secundarios (polímeros)
 - Enlaces de Van der Waals
 - Enlaces de hidrogeno
 - Dipolo-dipolo



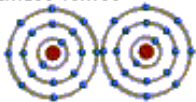
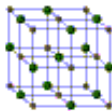

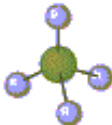

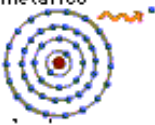
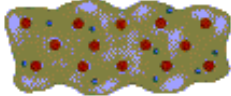
CLASIFICACIÓN DE LOS ENLACES QUÍMICOS

- a) Enlaces interatómicos
 - Enlace covalente
 - Enlace metálico
 - Enlace iónico

- b) Enlaces intermoleculares o fuerzas de Van der Waals
 - Enlace dipolo-dipolo
 - Enlaces puente de hidrogeno
 - Enlace por fuerzas de London

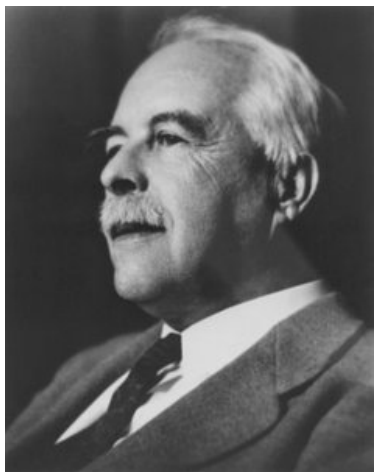


Enlaces químicos primarios: iónico, covalente y metálico

TIPO DE ENLACE	TIPO DE ESTRUCTURA	EJEMPLO DE ESTRUCTURA	PROPIEDADES CARACTERÍSTICAS
Enlace iónico  ▲ ejemplo: KCl	Red iónica	 ▲ Cloruro de potasio, KCl	Sólidos cristalinos Puntos de fusión elevados Puntos de ebullición elevados Solubles en agua Conducen la electricidad fundidos o en disolución No conducen la electricidad en estado sólido
Enlace covalente  ▲ ejemplo: CH ₄	Moléculas simples	 ▲ Metano, CH ₄	Fundamentalmente líquidos y gases Puntos de fusión bajos Puntos de ebullición bajos Insolubles en agua No conducen la electricidad
	Moléculas gigantes	 ▲ Diamante, C	Sólidos Puntos de fusión elevados Puntos de ebullición elevados La solubilidad y conductividad varían de una sustancia a otra
Enlace metálico  Tabla de Microsoft	Red metálica	 ▲ Plata, Ag	Sólidos cristalinos Dúctiles y maleables Puntos de fusión elevados Puntos de ebullición elevados Insolubles en agua



Las bases para explicar la formación de los enlaces iónico y covalente fueron expuestas en 1916 por Walter Kossel y en 1923 por Gilbert Lewis, respectivamente.



Gilbert N. Lewis
(1875-1946)



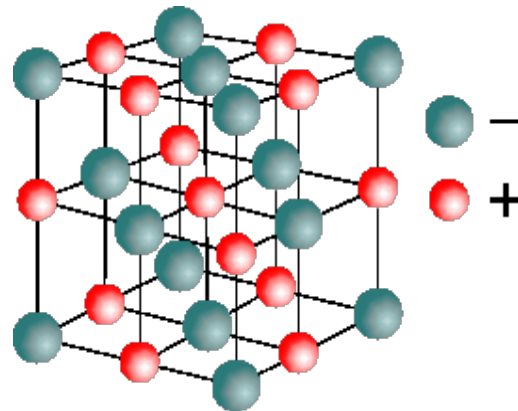
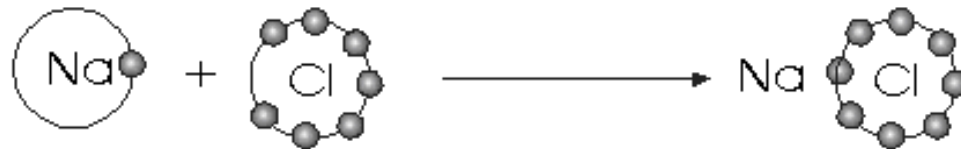
Walter Kossel
(1888-1956)

Ambos autores atribuían la falta de reactividad mostrada por los átomos de los gases nobles a la estructura electrónica de la última capa llena que presentaban, lo que les confería gran estabilidad



Enlace iónico o electrovalente

El enlace iónico es la fuerza de atracción eléctrica que existe entre los iones de cargas opuestas que los mantienen juntos en una estructura cristalina.





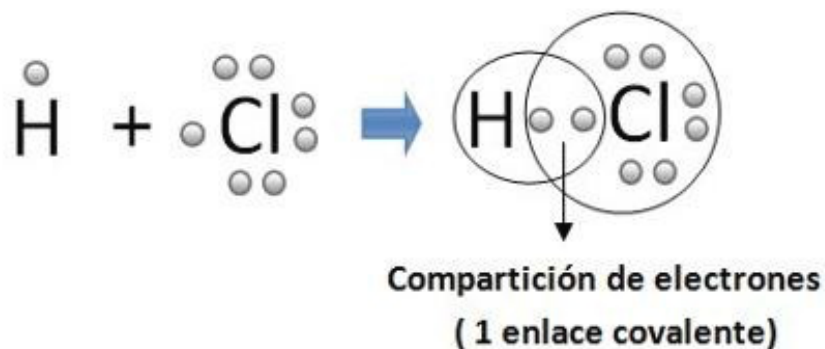
Propiedades de los compuestos iónicos

- a) A temperatura ambiental son sólidos, cuya estructura está definida por lo que son cristalinos (la atracción de los iones es polidireccional)
- b) Generalmente son solubles en agua y otros solventes polares como etanol, acetona, etc.
- c) Tienen alta temperatura de fusión y ebullición.
- d) En solución acuosa o fundidos conducen la corriente eléctrica, pero en el estado sólido no la conducen.



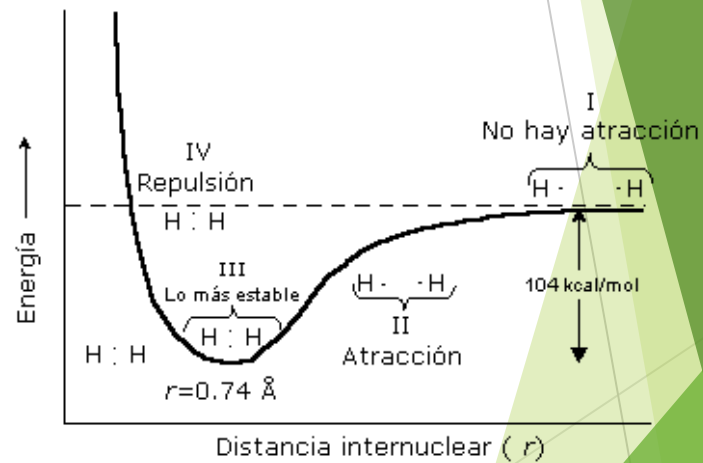
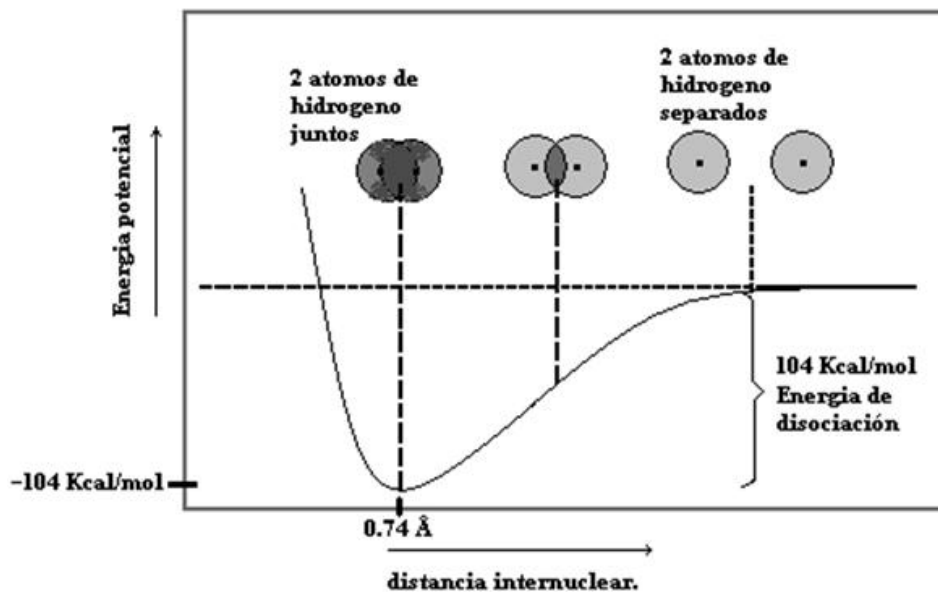
Enlace covalente

Es la fuerza electromagnética que mantiene unidos a átomos que comparten electrones, los cuales tienen espines o giros opuestos. Los átomos enlazados se encuentran neutros y generalmente son no metálicos.





Energía de enlace. Formación de la molécula de hidrógeno





Propiedades de los compuestos covalentes

- a) A temperatura ambiental pueden ser sólidos, líquidos o gaseosos.
- b) Algunos pueden ser sólidos cristalinos
- c) Generalmente tienen baja temperatura de fusión y ebullición.
- d) Generalmente son insolubles en agua, pero si son solubles en solventes apolares
- e) Son aislantes, es decir, son malos conductores eléctricos.



Enlace covalente: según el par de electrones enlazantes

1. **Enlace Simple:** Cuando entre los átomos enlazados comparten un par de electrones
2. **Enlace Múltiple:** Cuando los átomos enlazados comparten mas de un par de electrones, estos pueden ser:
 - a) **Enlace doble:** Compartición de dos pares de electrones.
 - b) **Enlace triple:** Compartición de tres pares de electrones.

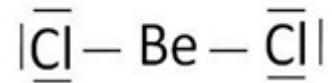
Según la estabilidad química los enlaces pueden ser **sigma (σ)** o **pi(π)**



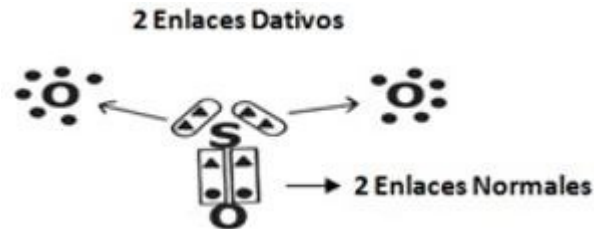
Enlace covalente: según número de electrones aportados para formar el par de electrones enlazantes

- a) **Enlace covalente normal:** Cada átomo aporta un electron a la formación del enlace

Hay dos enlaces normales



- b) **Enlace covalente coordinado o dativo:** Sólo uno de los átomos aporta el par electrónico enlazante





Enlace covalente: según su polaridad

- 1. Enlace Covalente Apolar o Puro:** Es cuando los átomos comparten equitativamente a los electrones. Generalmente participan átomo del mismo elemento no metálico.
Se cumple que la diferencia de electronegatividades es cero: $\Delta EN = 0$
ejemplo: Hidrogeno (H_2)
- 2. Enlace Covalente Polar:** Es cuando los electrones enlazantes no son compartidos en forma equitativa por los átomos, esto debido a que uno de los átomos es mas negativo que otro.
Se cumple que la diferencia de electronegatividades es diferente de cero: $\Delta EN \neq 0$
ejemplo: Yoduro de Hidrógeno

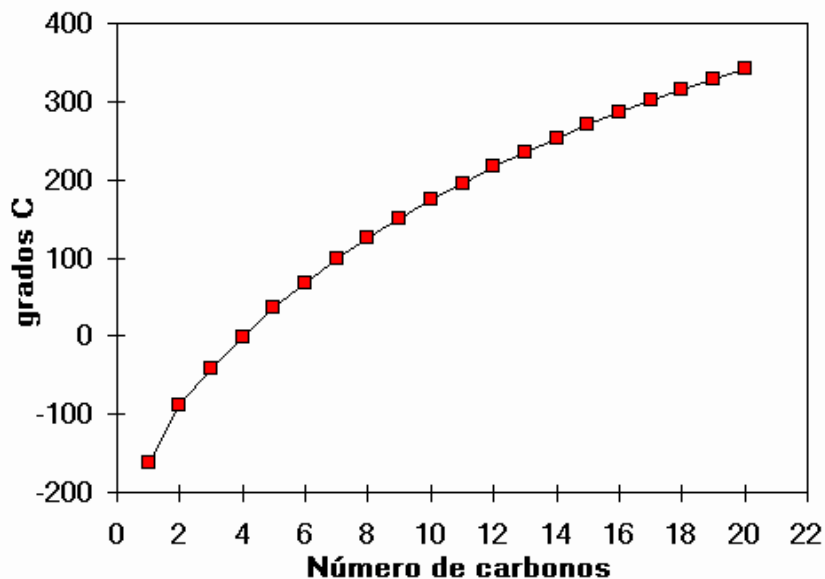


Enlaces de Van der Waals

Alcano	Punto de ebullición (°C)
Metano	-161.5
Etano	-88.6
Propano	-42.1
Butano	-0.5
Pentano	36.1
Hexano	68.7
Heptano	98.4
Octano	125.7
Nonano	158.8
Decano	174.1
Heptadecano	303
Eicosano	343



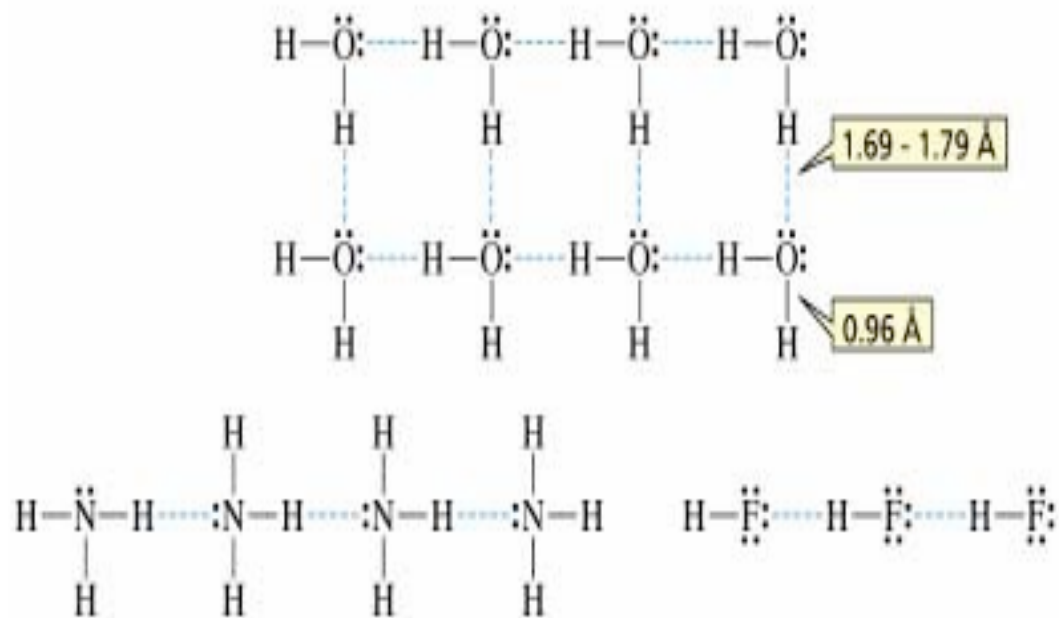
PUNTO DE EBULLICIÓN DE ALCANOS NO RAMIFICADOS



El punto de ebullición aumenta con el tamaño del alcano porque las fuerzas intramoleculares atractivas (**fuerzas de van der Waals y de London**) son más efectivas cuanto mayor es la superficie de la molécula.



Enlaces por puentes de hidrogeno

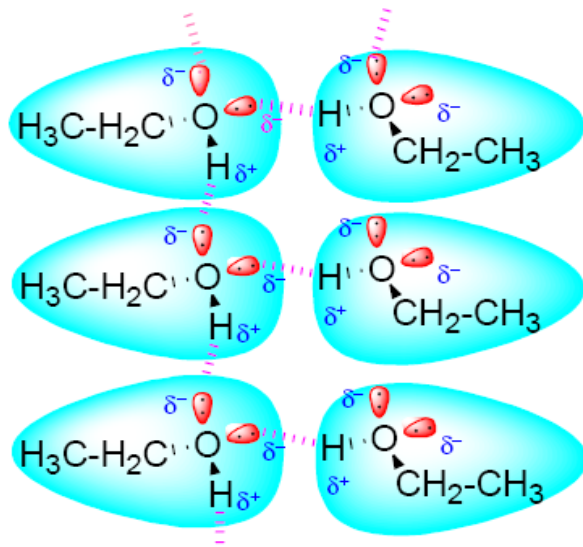


Interacciones por puente de hidrógeno en la molécula de H_2O , NH_3 y HF

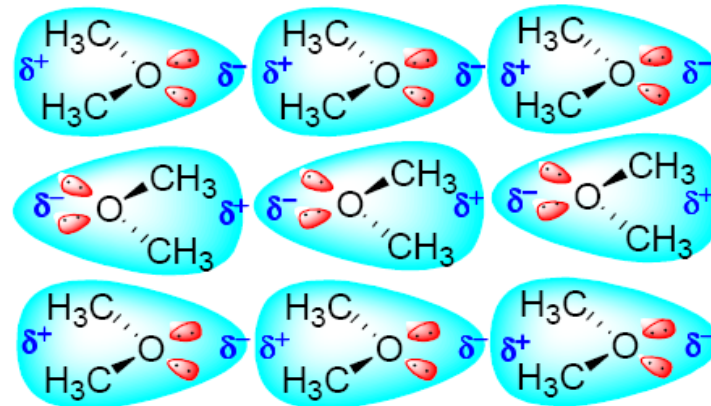


Enlaces por dipolo-dipolo.- Interacciones de moléculas

Interacciones por puente de hidrógeno en el etanol



Interacciones dipolo-dipolo en el dimetil éter





Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

2.4.- Estructura de los metales



Estructuras cristalinas metálicas

- Tienen empaquetamiento denso
- Razones para el empaquetamiento denso:
 - Generalmente solo está presente un elemento, por lo que todos los radios atómicos son iguales.
 - El enlace metálico no es direccional.
 - Las distancias a los primeros vecinos tienden a ser cortas para reducir la energía del enlace.
 - La nube electrónica cubre a los núcleos
- Tienen las estructuras cristalinas más simples.



Estructuras cristalinas de los metales

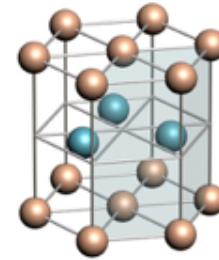
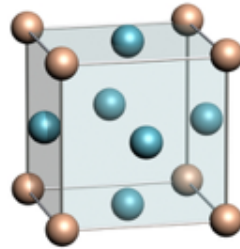
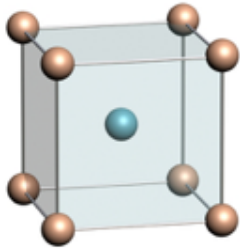
Metal	Estructura cristalina ^a	Radio atómico ^b (nm)	Metal	Estructura cristalina	Radio atómico (nm)
Aluminio	FCC	0,1431	Molibdeno	BCC	0,1363
Cadmio	HC	0,1490	Níquel	FCC	0,1246
Cromo	BCC	0,1249	Platino	FCC	0,1387
Cobalto	HC	0,1253	Plata	FCC	0,1445
Cobre	FCC	0,1278	Tántalo	BCC	0,1430
Oro	FCC	0,1442	Titanio (α)	HC	0,1445
Hierro (α)	BCC	0,1241	Tungsteno	BCC	0,1371
Plomo	FCC	0,1750	Zinc	HC	0,1332

^a FCC = cúbica centrada en las caras; HC = hexagonal compacta; BCC = cúbica centrada en el cuerpo.

^b Un nanómetro (nm) equivale a 10^{-9} m. Para convertir los nanómetros a unidades angstrom (Å) es necesario multiplicar por 10 el valor de los nanómetros.



Estructura cristalina de los metales



BCC	FCC	HC
Cromo Molibdeno Wolframio Vanadio Tántalo	Níquel Plata Cobre Platino Aluminio Plomo	Magnesio Cobalto Zinc



Estructuras cristalinas de algunos metales alotrópicos

Metal	Estructura cristalina	Rango de temperatura, °C
<i>Cobalto</i>	HC	< 477
	CCC	477 - 1490
<i>Estaño</i>	Tipo diamante	< 13
	TCI	13 - 232
<i>Hierro</i>	CCI	< 911
	CCC	911 - 1392
	CCI	1392 - 1539
<i>Titanio</i>	HC	< 882
	CCI	882 - 1668
<i>Zirconio</i>	HC	< 862
	CCI	862 - 1852
<i>Uranio</i>	Romboédrica	< 663
	TCI	663 - 764
	CCI	764 - 1130



Estructuras cristalinas de algunos metales alotrópicos

- La razón por la que cierto metal sigue un determinado patrón de cristalización y no otro, obedece, en última instancia, a consideraciones energéticas.
- La estabilidad de una estructura cristalina se mide a través de su *energía libre* ($G=H-TS$), de modo que la forma alotrópica más estable, para una temperatura y presión determinadas, es aquella que tiene menor energía libre.
- Las estructuras HC y CCC, debido a su mejor aprovechamiento del espacio, poseen *entalpía* y *entropía* más bajas que las correspondientes de la estructura CCI.



Anisotropía-Isotropía

Módulo elástico

Material	Dirección cristalográfica [100]	Dirección cristalográfica [100]	Dirección cristalográfica [100]
Al (FCC)	9.2	11.0	10.0
Cu (FCC)	9.7	27.8	18.1
Fe-a (BCC)	19.1	40.4	30.0
W (BCC)	59.2	59.2	59.2
MgO	35.5	48.7	45.0
NaCl (FCC)	6.3	4.7	5.3

Material anisótropo: Propiedades dependen de la dirección cristalográfica en la que se miden.

Material isótropo: propiedades idénticas en todas direcciones.



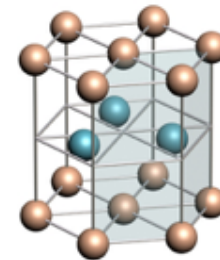
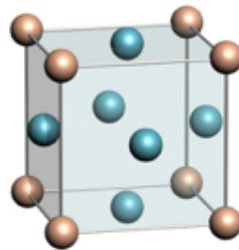
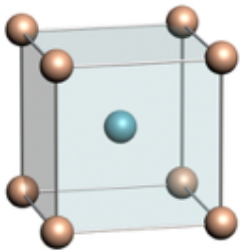
Principales características de la mayoría de los metales

Estructura	f_e	Z	a/r	Átomos/ celda	I. O./ celda	i. T./ celda
BCC	0.68	8	$\frac{4}{\sqrt{3}}$	2	6<	12
FCC	0.74	12	$2\sqrt{2}$	4	4	8
HC	0.74	12	2	6	6	12



Estructuras cristalinas de los metales

No hay restricciones en cuanto al número y posición de átomos vecinos más próximos, lo cual conduce, para la mayoría de los metales, a estructuras cristalinas con gran número de vecinos próximos y **densamente empaquetados**.





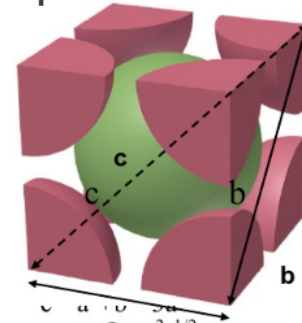
Estructura Cristalina: Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC)

Características mas importantes:

- ▶ Átomos por celda: $8 \text{ aristas} \cdot \frac{1}{8} + 1 \text{ centro} = 2$ (2 átomos por celda unitaria)
- ▶ No. de coordinación: 8
- ▶ Direcciones de mayor concentración atómica $\langle 111 \rangle$.
- ▶ Los átomos se tocan a lo largo de cualquiera de las diagonales principales del cubo $\{111\}$.

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

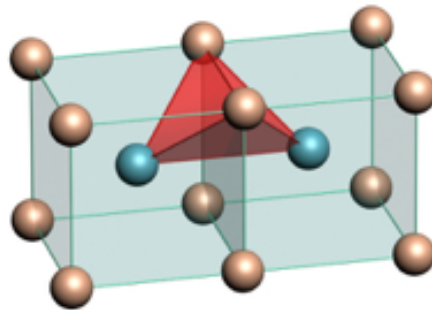
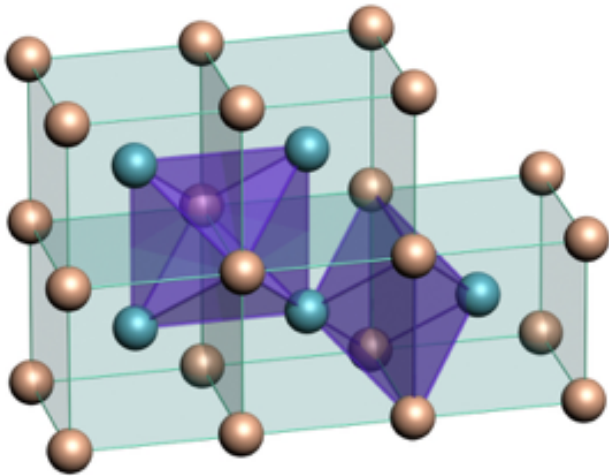
- ▶ Eficacia del empaquetamiento = 68%
- ▶ Los planos más compactos de la estructura BCC son los $\{110\}$.





Características mas importantes:

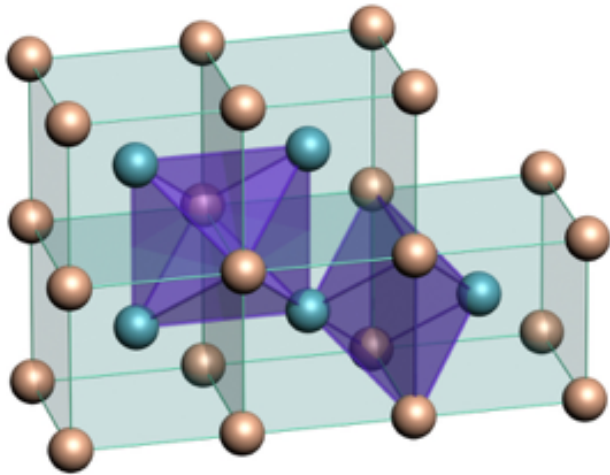
Intersticios (octaédricos y tetraédricos)





Características mas importantes:

Intersticios octaédricos

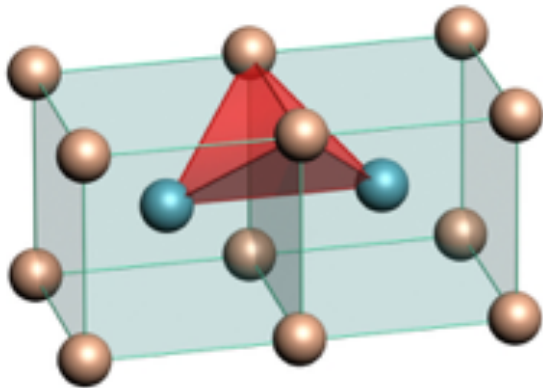


- Se sitúan en los centros de las caras y de las aristas de la celdilla.
- Sus posiciones son $(\frac{1}{2}, 1, 0)$, $(\frac{1}{2}, 1, \frac{1}{2})$ y equivalentes.
- Hay un total de 6 intersticios octaédricos por celdilla.
- Los octaedros que describen a cada intersticio son irregulares.
- Un intersticio octaédrico puede alojarse un átomo con un radio máximo igual a $0.155 r$.



Características mas importantes:

Intersticios tetraédricos



- Los intersticio teteraedricos, tambien , son **irregulares**.
- Se sitúan en las caras del cubo, en las posiciones $(1/2, 1, 3/4)$ y equivalentes.
- Hay un total de 12 intersticios tetraédricos por celdilla
- Pueden alojar, sin distorsión de la red, un átomo extraño con un radio máximo igual a $0.291 r$.
- En esta estructura, los intersticios tetraédricos son mayores que los octaédricos.



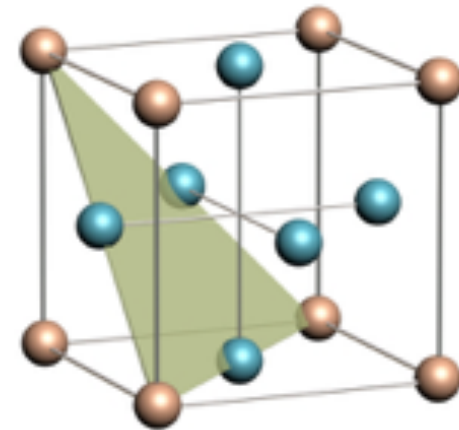
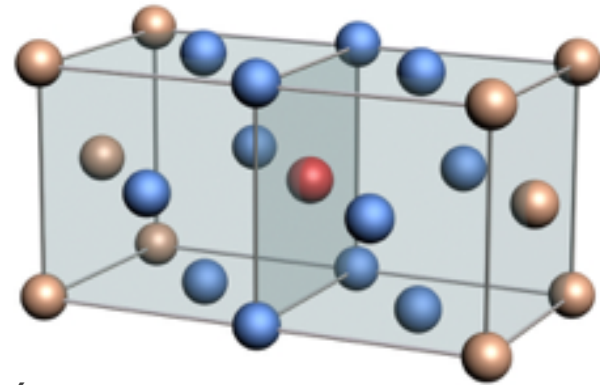
Estructura Cristalina: Cúbica Centrada en las Caras (FCC)

Características mas importantes

- ▶ Átomos por celda: 4.
- ▶ No. de coordinación: 12.
- ▶ Eficacia del empaquetamiento: 74%.
- ▶ Direcciones de mayor concentración atómica $\langle 110 \rangle$.
- ▶ Los átomos se tocan a lo largo de las diagonales de la cara.

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

- ▶ Los planos más compactos de la estructura BCC son los $\{111\}$.



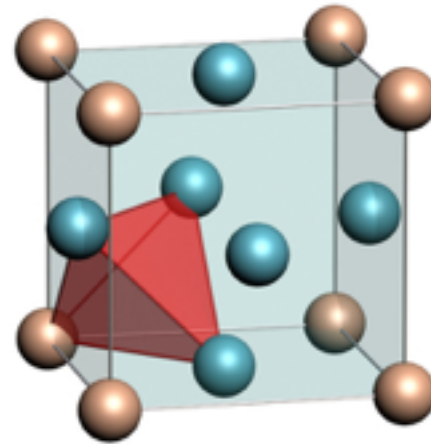
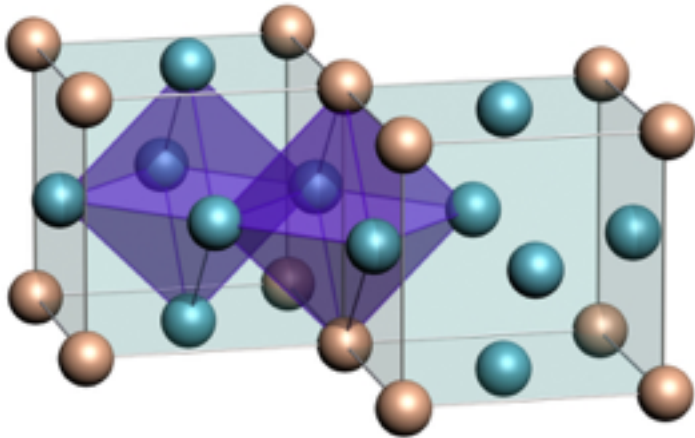


Concentración atómica superficial de los planos {100}, {110} y {111}, en la estructura CCC.

Planos	Sección planar considerada	Número de átomos contenidos en la sección considerada	Área de la sección planar considerada	Concentración atómica superficial
{100}		$1 + 4 \times \frac{1}{4} = 2$	a^2	$\frac{2}{a^2}$
{110}		$4 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{2} = 2$	$\sqrt{2}a^2$	$\frac{2}{\sqrt{2}a^2} \approx \frac{1.41}{a^2}$
{111}		$3 \times \frac{1}{6} + 3 \times \frac{1}{2} = 2$	$\frac{\sqrt{3}}{2}a^2$	$\frac{4}{\sqrt{3}a^2} \approx \frac{2.30}{a^2}$



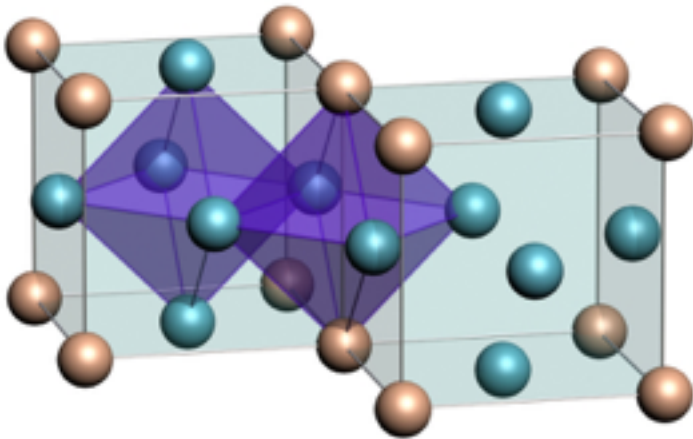
Intersticios (octaédricos y tetraédricos)



Los intersticio octaédricos y tetraedricos en un FCC son regulares.



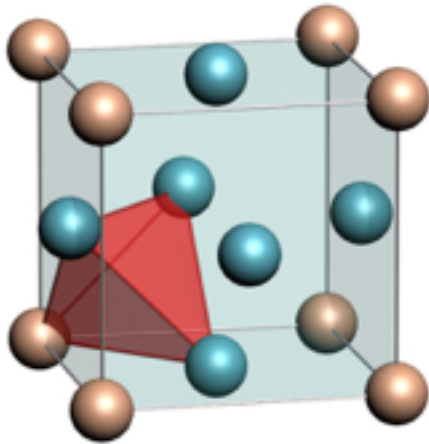
Intersticios (octaédricos y tetraédricos)



- Los *intersticios octaédricos* se encuentran en el *centro del cubo* y en el *punto medio de cada una de las aristas* de la celdilla.
- Hay un total de 4 intersticios octaédricos por celdilla: 1x1 (en el centro del cubo) + $1/4 \times 12$ (en mitad de las aristas).
- El radio máximo de un átomo que pudiera alojarse en el interior de estos intersticios vale $0.414 r$.



Intersticios (octaédricos y tetraédricos)



- Los intersticios tetraédricos se sitúan en los centros de los ocho cubitos en que se puede dividir el cubo elemental, o sea, en la posición $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$, y equivalentes.
- Hay un total de 8 intersticios tetraédricos por celdilla.
- Pueden albergar un átomo extraño de radio máximo igual a $0.225 r$.
- Los intersticios mayores son los octaédricos y no los tetraédricos.

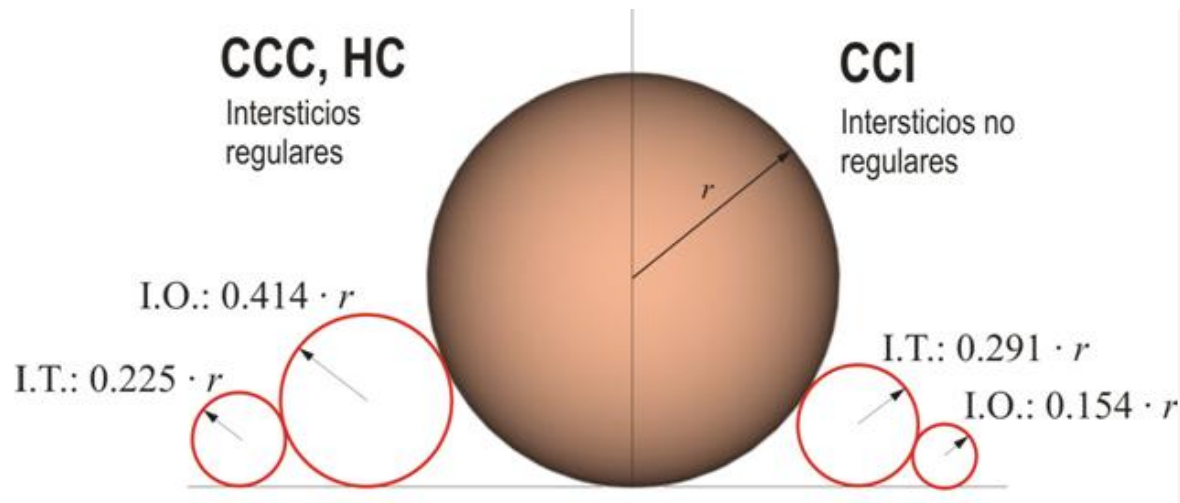


Principales características de las celdillas de la mayoría de los metales

ESTRUCTURA	f_c	Z	a/r	Átomos / celdilla	I.O. / celdilla	I.T. / celdilla
<u>CCI</u>	0.68	8	$4/\sqrt{3}$	2	6<	12
<u>CCC</u>	0.74	12	$2\sqrt{2}$	4	4	8
<u>HC</u>	0.74	12	2	6	6	12



Principales características de la mayoría de los metales



- Para un determinado radio del átomo anfitrión, las estructuras que podrían albergar los átomos mayores serían las estructuras compactas (CCC y HC), aunque esto pueda parecer insólito.
- En las estructuras CCC y HC los intersticios mayores son los octaédricos, en tanto que para la CCI, los mayores son los tetraédricos



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

2.5.- Estructura de los cerámicas



La escala atómica de los materiales cerámicos

- Introducción
 - Estructuras cristalinas sencillas
 - Estructuras cristalinas algo más complejas
- Estructura cristalinas muy complejas: silicatos
 - Vidrios cerámicos



Introducción: Cristales cerámicos

- Los materiales cerámicos resultan de la combinación de elementos metálicos y no metálicos, o bien, exclusivamente de no metálicos.
- Entre los cerámicos pueden existir materiales con enlace:
 - Puramente covalente, como el diamante.
 - Marcadamente iónico, como la sal común (67% de ionicidad).
 - Con una gradación entre iónico y covalente, como es el caso del arseniuro de galio.
 - Con ambos a la vez (enlace mixto), como es el caso de muchos silicatos.
- Al igual que los metales, las cerámicas pueden ser cristalinas o amorfas, aunque la tendencia hacia la vitrificación es mucho mayor que en los metales.



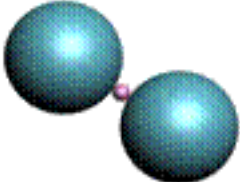
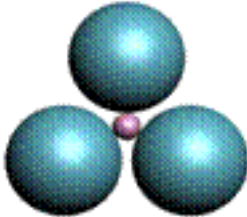
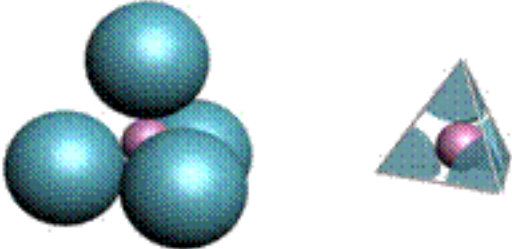
Enlace iónico

- La **valencia** determina la proporción de los distintos iones intervinientes, para asegurar la **electroneutralidad**.
- Los iones eligen la **configuración más estable** (disposición de aniones y cationes que maximiza la atracción y minimiza la repulsión electrostática).
- Mayor **estabilidad** mientras mayor sea el número de coordinación.



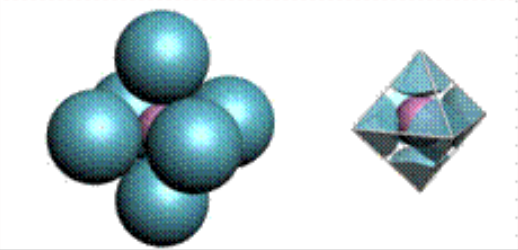
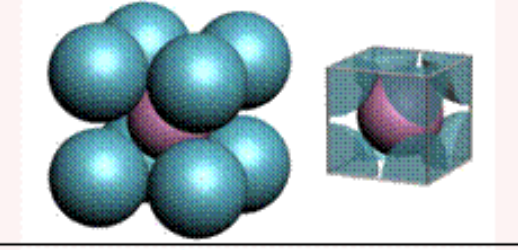
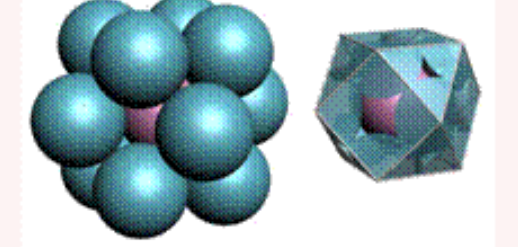


Número, tipo y poliedro de coordinación en función de la relación de radios

Relación de radios $x = r_A / r_B$	Nº de coordinación (Z)	Poliedro de coordinación
$0 < x < 0.155$	2	
$0.155 \leq x < 0.225$	3	
$0.225 \leq x < 0.414$	4	



Número, tipo y poliedro de coordinación en función de la relación de radios

Relación de radios $x = r_A / r_B$	Nº de coordinación (Z)	Poliedro de coordinación
$0.414 \leq x < 0.732$	6	
$0.732 \leq x < 1$	8	
$x = 1$	12	



Estructuras cristalinas sencillas

- a) Estructura del cloruro de sodio
- b) Estructura del cloruro de cesio
- c) Estructura del sulfuro de zinc
- d) Estructura del diamante



a) Estructura Cloruro de sodio

- **Carácter iónico:** $\frac{r_{Na^+}}{r_{Cl^-}} = \frac{0.095}{0.181} = 0.52 \Rightarrow \text{Coor. octaédrica}$

- **Estructura cristalina:**

Red: CCC

Base: Aniones en posiciones N

Cationes en N+(0,0,1/2)

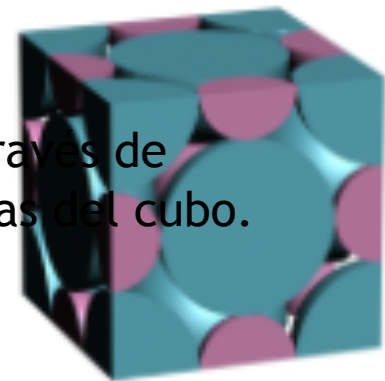
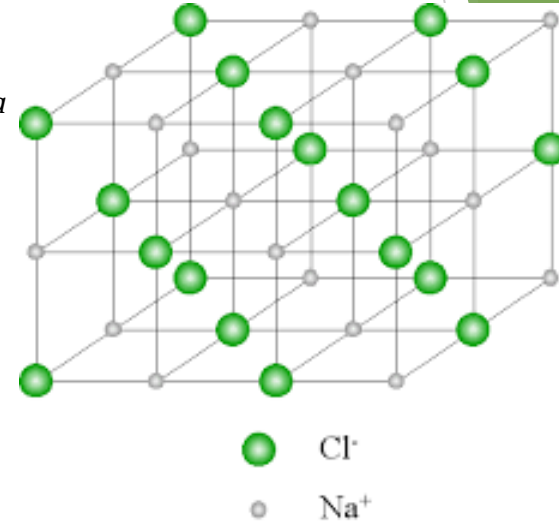
No es una estructura CCC

Para la estructura CCC el I.O.=0.414 r

I.O. (Cl⁻)=0.414x0.181=0.075<0.102

La estructura se deforma y no hay contacto a través de la diagonal de la cara, sino a través de las aristas del cubo.

$$a = 2(r_+ + r_-)$$

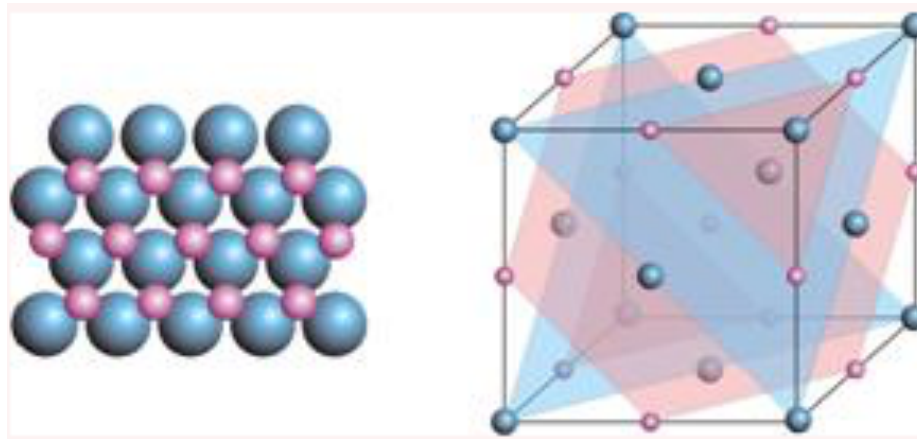




b) Estructura Cloruro de sodio

Numero de iones/celdilla

4 Cl⁻ y 4 Na⁺



Sistemas que cristalizan en el mismo patrón:

MgO, CaO, SrO, FeO y MnO



Estructura Cloruro de Cesio

- Carácter iónico: $\frac{r_{Cs^+}}{r_{Cl^-}} = \frac{0.165}{0.181} = 0.92 \Rightarrow \text{Coord. cúb}$

- Estructura cristalina:

Red: CS

Base: Aniones en posiciones N

Cationes en $N+(1/2, 1/2, 1/2)$

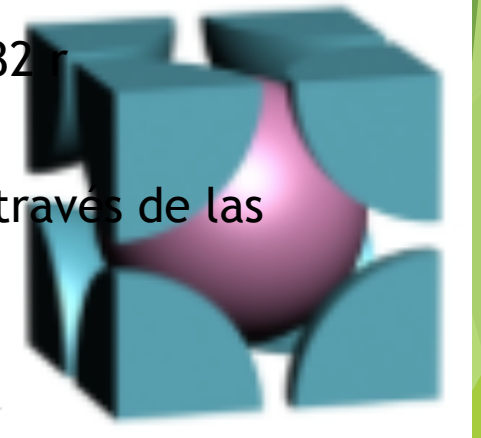
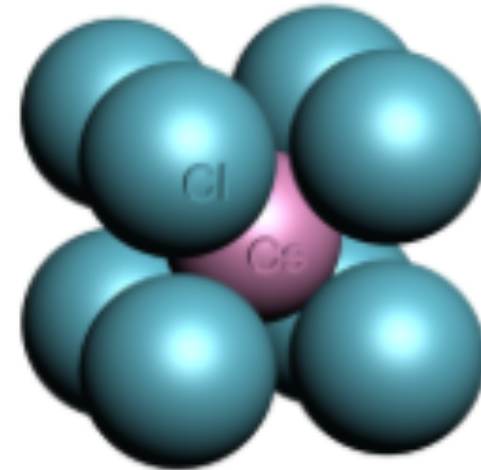
No es una estructura CCC

Para la estructura CS el I. Cúbico = $0.732 \frac{r_+}{r_-}$

I.C. (Cl^-) = $732 \times 0.181 = 0.132 < 0.165$

No hay contacto a través de las aristas, sino a través de las diagonales del cubo.

$$a\sqrt{3} = 2(r_+ + r_-) \Rightarrow a = \frac{2}{\sqrt{3}}(r_+ + r_-)$$

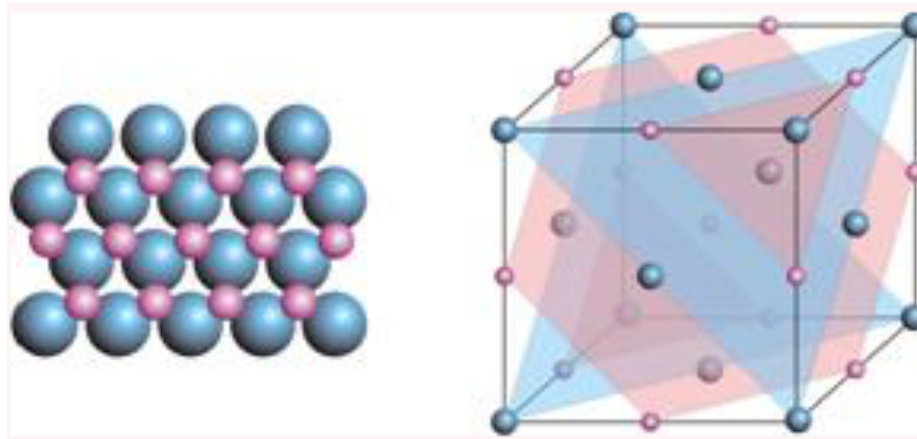




Estructura Cloruro de Cesio

Numero de iones/celdilla

1 Cl^- y 4 Cs^+



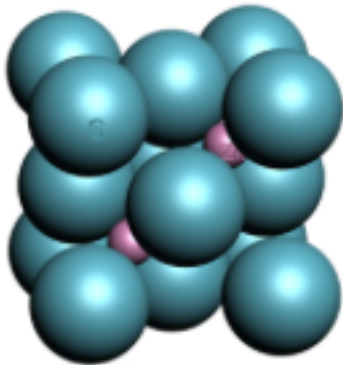
Sistemas que cristalizan en esta mismo estructura:

CsBr , TiCl , TlBr , ...

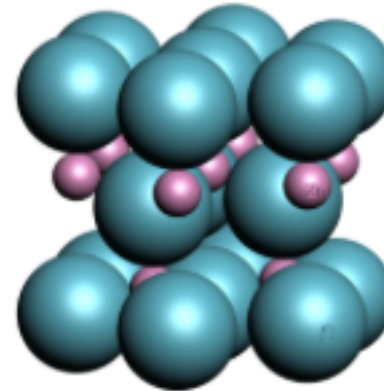


c) Estructura Sulfuro de Zinc

- Carácter iónico: $\frac{r_{Zn^{2+}}}{r_{S^{-}}} = \frac{0.067}{0.168} = 0.4 \Rightarrow \text{Coor. tetraédrica}$
- Variedades:



Esfalerita



Wurzita

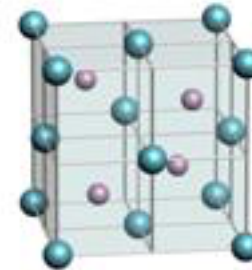
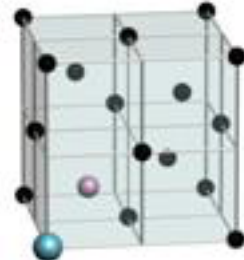


Estructura Sulfuro de Zinc

- Variedad Esfalerita:

Red: CCC

Base:



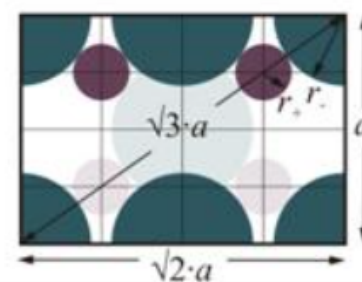
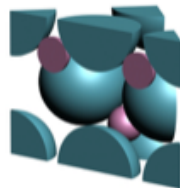
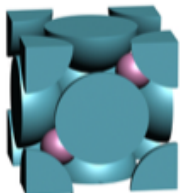
Aniones en posiciones N

Cationes en posiciones en N + (1/4, 1/4, 1/4)

Número de iones/celdilla: 4 S²⁻ y 4 Zn²⁺

Contacto entre cada Zn²⁺ y los S²⁻ que lo rodean:

$$\frac{\sqrt{3}}{4}a = (r_+ + r_-) \Rightarrow a = \frac{4}{\sqrt{3}}(r_+ + r_-)$$





Estructura Sulfuro de Zinc

- Variedad Esfalerita:
- Otros compuestos cristalizan en esta estructura
 - Semiconductores como GaAs, InP, CdTe...
 - Carburos, como el TiC o el TaC
 - Nitruros, como el TiN y el ZrN
- La componente covalente en algunos de ellos es bastante importante.
- La estructura formada tiene una hibridación sp^3 .



Estructura Sulfuro de Zinc

- Variedad Wurzita:

Red: HC

Base (4 iones):

2 Aniones S^{2-} en posiciones N y $N + (2/3, 1/3, 1/2)$

2 Cationes Zn^{2+} en posiciones en $N + (2/3, 1/3, 1/6)$ y
 $N + (0, 0, 2/3)$

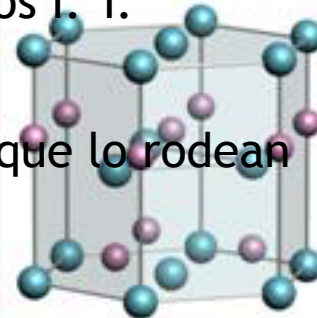
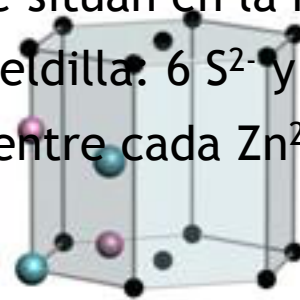
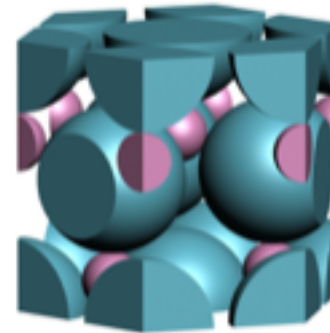
Puede escribirse como:

Los S^{2-} ocupan las posiciones de la HC

Los Zn^{2+} se sitúan en la mitad de los I. T.

Numero de iones/celdilla. 6 S^{2-} y 6 Zn^{2+}

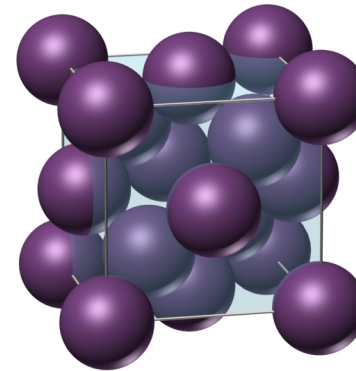
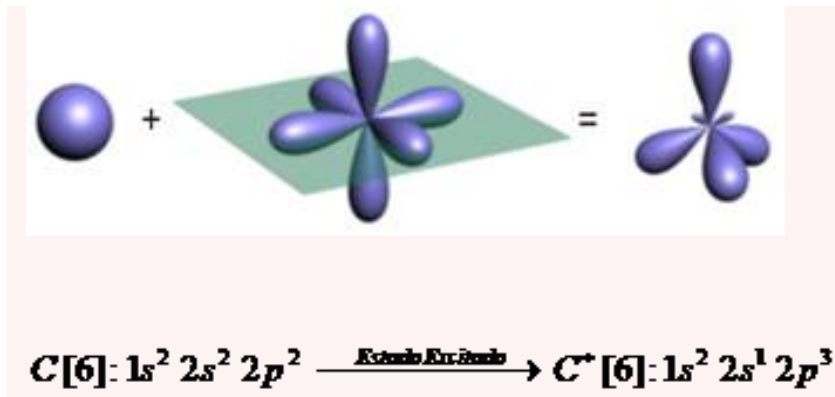
Contacto entre cada Zn^{2+} y los S^{2-} que lo rodean





d) Estructura del diamante

Carácter covalente puro y átomos de un sólo elemento





Estructura del diamante

- Estructura cristalina

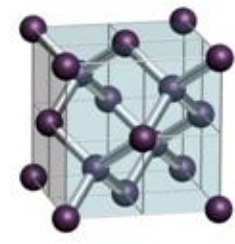
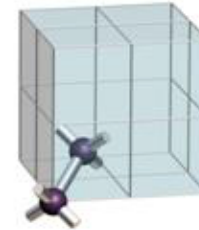
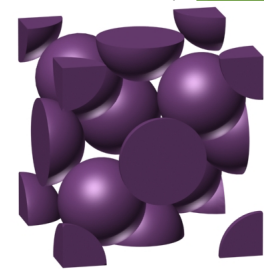
Red: CCC.

No es una estr. CCC, F.E. es de sólo el 34%

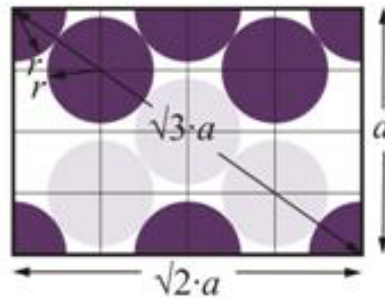
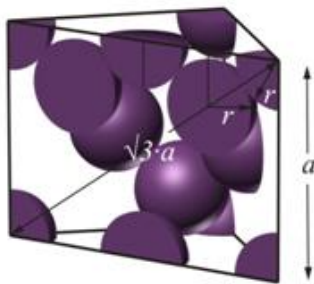
Base:

aniones en posición N.

cationes en $N + (\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$



- Contacto entre átomos en centro de cubitos que lo rodean



$$\frac{\sqrt{3}}{4}a = 2r \Rightarrow a = \frac{8r}{\sqrt{3}}$$

- El Si y el Ge también cristalizan según esta estructura.



Estructuras cristalinas complejas

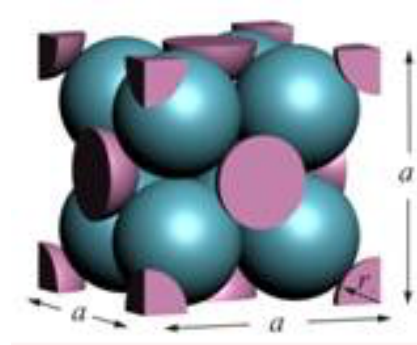
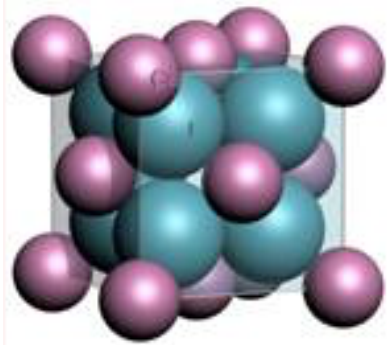
- a) La estructura de la fluorita
- b) La estructura de la perovskita
- c) La estructura de la espinela



Estructuras cristalinas iónicas complejas

a) Fluorita

- Carácter iónico: $\frac{r_{Ca^{2+}}}{r_{F^-}} = \frac{0.099}{0.136} = 0.728 \Rightarrow \text{Coor. cúbica}$



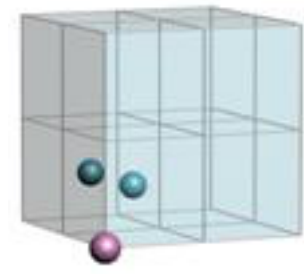
- Estructura cristalina:

Red: CCC

Base (3 iones):

1 de Ca^{2+} en posiciones N

2 de F^- en $N + (1/4, 1/4, 1/4)$ y $N + (1/4, 3/4, 1/4)$





Estructuras cristalinas iónicas complejas

a) Fluorita

- Estructura cristalina:

Una descripción alternativa sería:

Los Ca^{2+} ocupan las posiciones de la CCC

Los F^- se sitúan en todos los I. T.

- Número de iones/celdilla

4 Ca^{2+} y 8 F^-

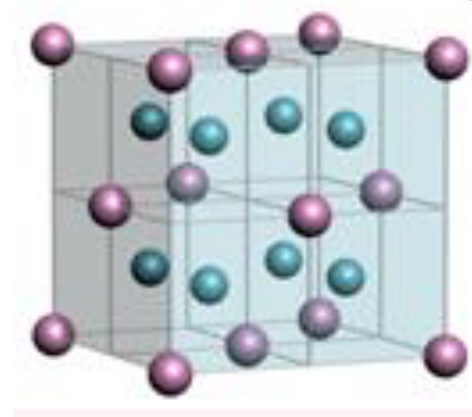
- Número de coordinación

Coor. Aniónica es 8 (cúbica)

Coor. Catiónica es 4 (tetraédrica)

- Ejemplos de compuestos que cristalizan en esta estructura

UO_2 , ThO_2 y TeO_2

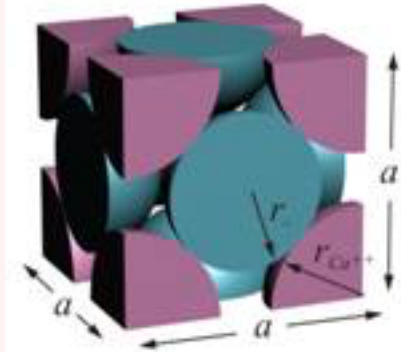
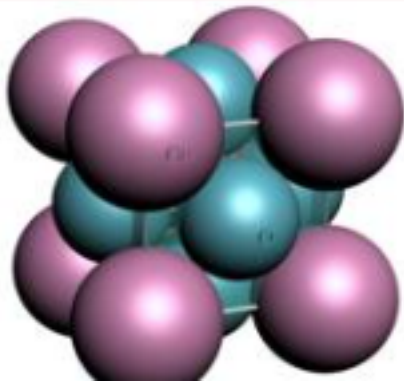
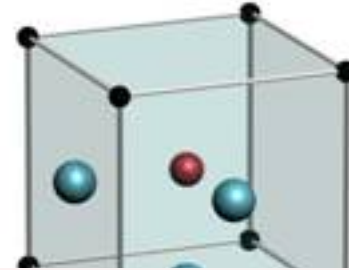




b) Perovskita (CaTiO_3)

- Estructura cristalina:

Red: CS



1 de Ca^{2+} en posiciones N

2 de F^- en $\text{N} + (1/4, 1/4, 1/4)$ y $\text{N} + (1/4, 3/4, 1/4)$

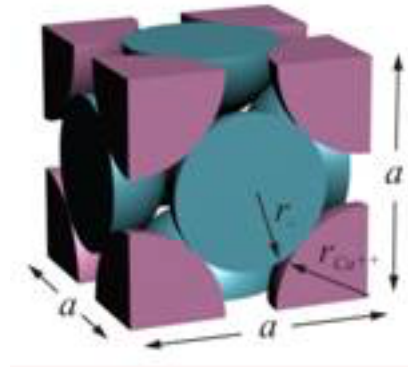
- Número de iones/celdilla

1 Ca^{2+} , 3 O^{2-} y 1 Ti^{4+}



b) Perovskita (CaTiO_3)

- Número de iones/celdilla
1 Ca^{2+} , 3 O^{2-} y 1 Ti^{4+}



- Los materiales con este tipo de estructuras poseen interesantes propiedades eléctricas.
- Algunas son ya explotadas comercialmente (como la piezoelectricidad del BaTiO_3)
- Otras son objeto de intensísima investigación (como las propiedades superconductoras de alta temperatura).



c) Espinela (MgAl_2O_4)

- Estructura cristalina:

Red: CCC

Base (14 iones):

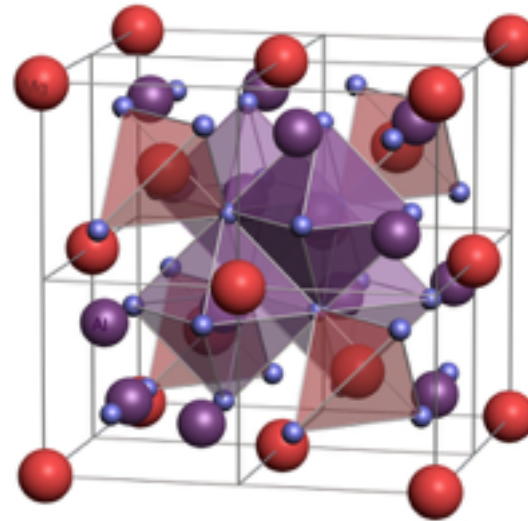
2 Mg^{2+}

4 Al^{3+}

8 O^{2-}

- Número de iones/celdilla
56 iones por celdilla

- Otras espinelas son el NiAl_2O_4 , ZnAl_2O_4 y ZnFe_2O_4





Estructuras cristalinas de compuestos iónicos

Tipo de estructura	Fórmula tipo	Relación $r+/r-$	Índice de coordinación
Cloruro de cesio	MX	>0.732	8:8
Cloruro de sodio	MX	$0.014-0.732$	6:6
Blenda	MX	<0.414	4:4
Fluorita	MX_2	>0.732	8:4
Rutilo	MX_2	$0.414-0.732$	6:3
Cuarzo	MX_2	<0.414	4:2



Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

Estructura cristalinas muy complejas

a) Los silicatos



Estructuras muy complejas

La corteza terrestre constituida por arcillas, feldespatos y micas.

Como el C, el Si también puede formar una amplísima variedad de compuestos, y también puede adoptar la estructura cristalina del diamante.

Sin embargo, un átomo de Si es más estable cuando está rodeado por átomos de O que cuando se halla unido a otros cuatro átomos de Si.

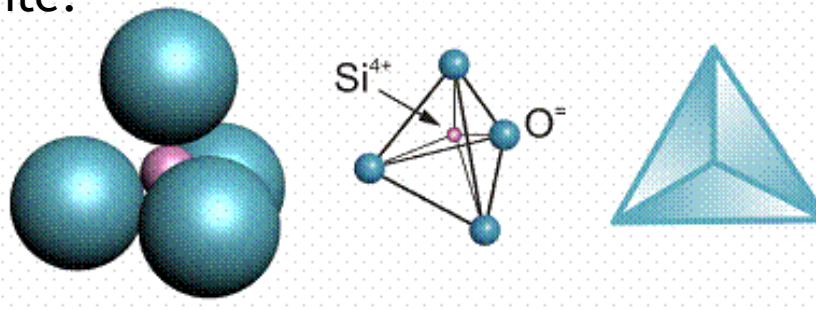
Este grupo Este grupo $(\text{SiO}_4)^{4-}$, denominado **grupo silicato**, se halla presente en gran número de minerales.



El grupo silicato

Enlace mitad iónico mitad covalente.

$$\frac{r_{Si^{4+}}}{r_{O^{2-}}} = 0.29 \Rightarrow \text{Coor.: tetraédrica}$$



El Si original alcanza la configuración de gas noble desprendiéndose de los 4 e- que le sobran, que serán adquiridos por los 4 átomos de O que lo rodean.

Cada uno de esos átomos de O necesitan, para completar su octeto, adquirir otro e- adicional entablan enlaces con otros átomos (covalentes cuando es con silicios de otros tetraedros, o iónicos si es con cationes metálicos).

Por ello, el grupo silicato, no tiene existencia aislada.



Estructuras de silicatos

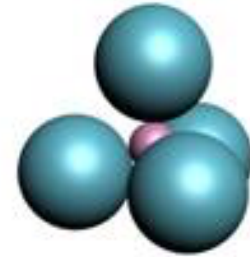
- a) Isla
- b) Doble isla
- c) Anillo
- d) Laminares
- e) Reticulares



Estructuras de silicatos

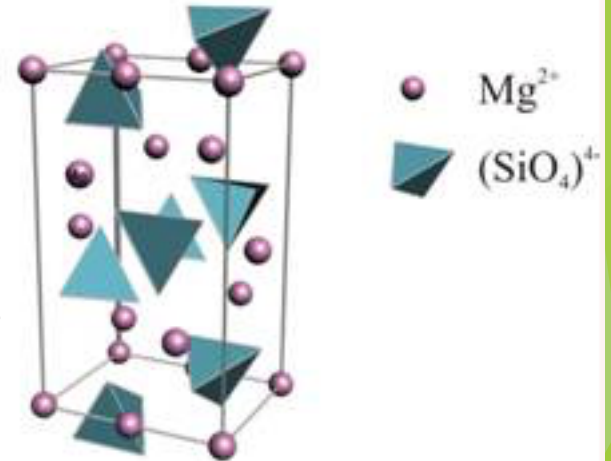
a) Isla (neosilicatos)

- Enlaces entre islas
- Iónico, con cationes metálicos.
- Vértices compartidos en cada isla igual a 0
- Unidad estructural: $(\text{SiO}_4)^{4-}$



Ejemplos

- Forsterita (Mg_2SiO_4), arena refractaria
- Olivina (MgFeSiO_4)





Estructuras de silicatos

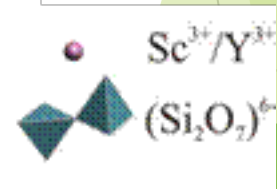
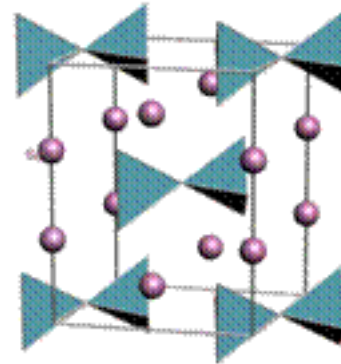
b) Doble isla (sorosilicatos)

- Enlaces entre unidades
- Iónico, con cationes metálicos.
- Vértices compartidos en cada unidad igual a 1
- Unidad estructural: $(\text{Si}_2\text{O}_7)^{6-}$



Ejemplos

- Thortveitita $(\text{Sc}_2\text{Y})_2\text{Si}_2\text{O}_7$
- Akermanita $(\text{Ca}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7)$

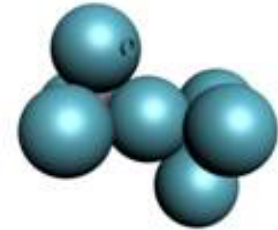




Estructuras de silicatos

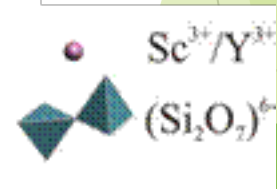
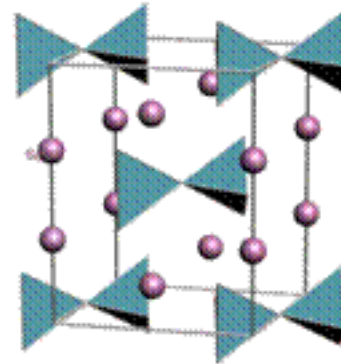
b) Doble isla (sorosilicatos)

- Enlaces entre unidades
- Iónico, con cationes metálicos.
- Vértices compartidos en cada unidad igual a 1
- Unidad estructural: $(\text{Si}_2\text{O}_7)^{6-}$



Ejemplos

- Thortveitita $(\text{Sc}_2\text{Y})_2\text{Si}_2\text{O}_7$
- Akermanita $(\text{Ca}_2\text{MgSi}_2\text{O}_7)$

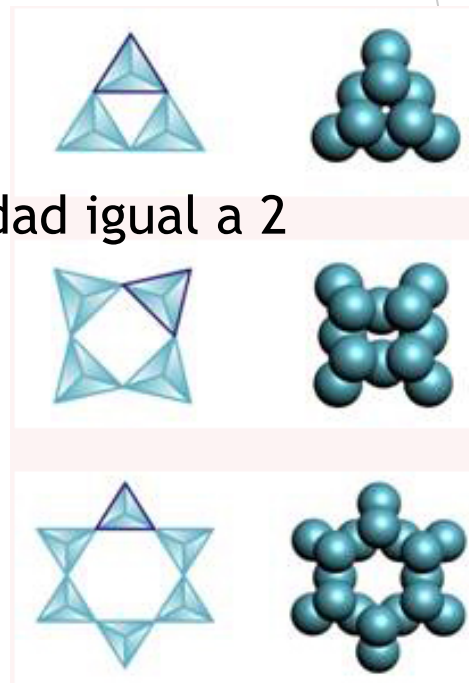
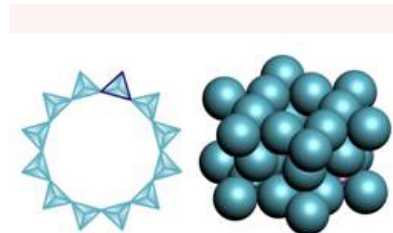
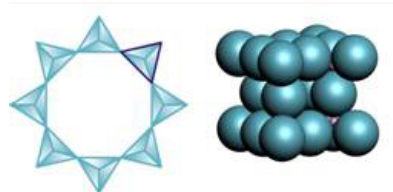




Estructuras de silicatos

c) Anillo (ciclosilicatos)

- Enlaces entre unidades
- Iónico, con cationes metálicos.
- Vértices compartidos en cada unidad igual a 2
- Unidad estructural: $(\text{Si}_n\text{O}_{3n})^{2n-}$

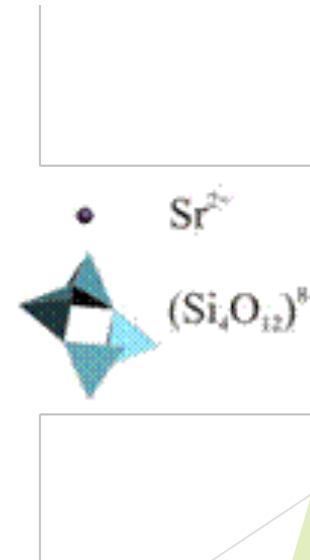
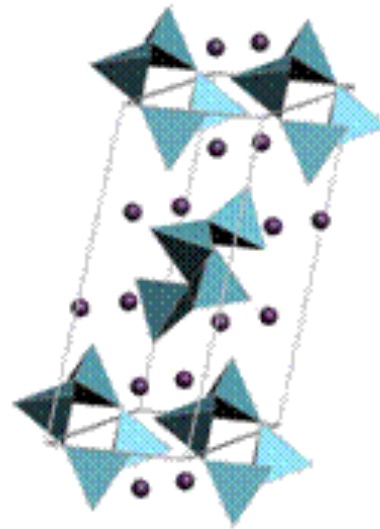




Estructuras de silicatos

Ejemplos de anillo

- Tetrasilicato de estroncio ($\text{Sr}_4(\text{Si}_4\text{O}_{12})$)





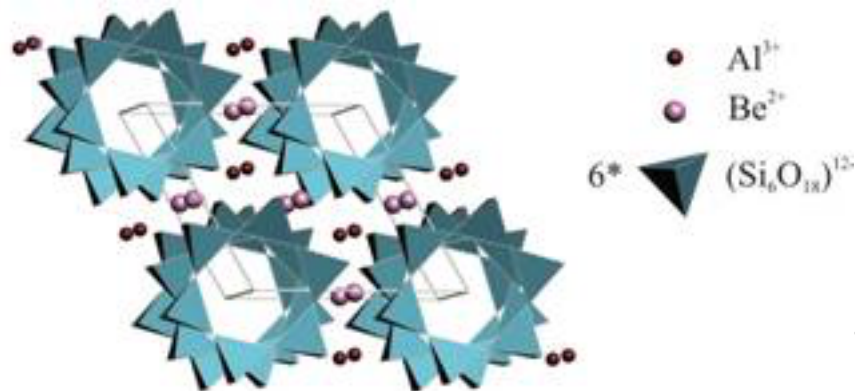
Estructuras de silicatos

Ejemplos de anillo

- Berilo ($\text{Al}_2\text{Be}_3(\text{SiO}_3)_6$)



Berilo (variedad esmeralda)

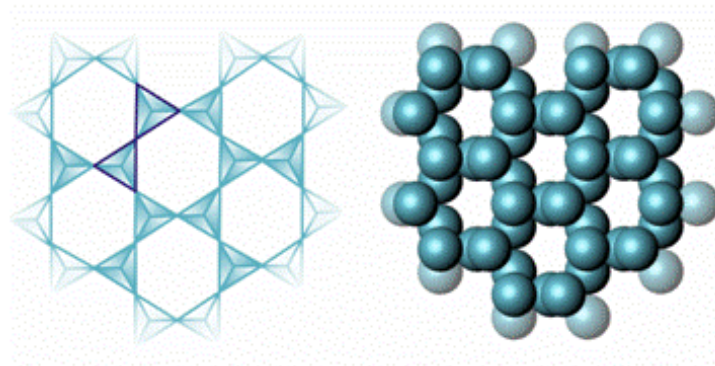




Estructuras de silicatos

d) Laminares (filosilicatos)

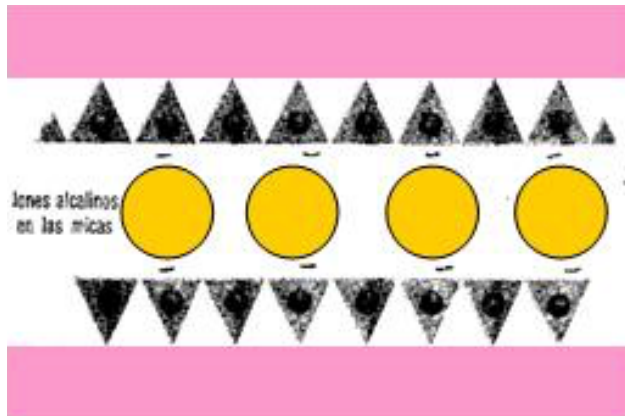
- Unión con otras láminas.
- Iónico, con cationes metálicos y grupos hidróxidos.
- Láminas eléctricamente neutras.
- Vértices compartidos en cada lámina unidad igual a 3.
- Material maleable, deformable, lubricantes, exfoliables.
- Unidad estructural: $(\text{Si}_2\text{O}_5)^{2-} \rightarrow (\text{Si}_{2n}\text{O}_{5n})^{2n-}$





Ejemplos de laminas

Micas $((\text{AlSi}_3\text{O}_{10})(\text{OH})_2\text{KAl}_2)$





Estructuras de silicatos

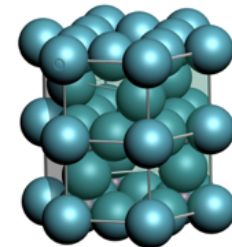
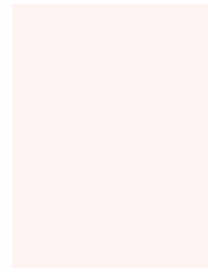
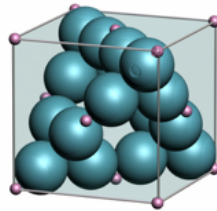
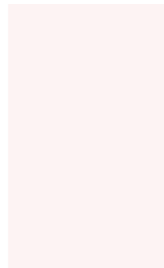
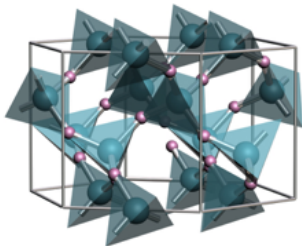
e) Reticulares (tectosilicatos)

- Vértices compartidos igual 4.
- Unidad estructural: (SiO_2) → Estructura eléctricamente neutra

Ejemplos:

Silice, con diversas formas polimórficas:

- Cuarzo: 2 cadenas en espiral envolviendo un prisma hexagonal.
- Cristobalita, Si en nudos de CCC + $\frac{1}{2}$ I. T., O entre cada dos Si.
- Tridimita, Si en nudos de HC + $\frac{1}{2}$ I. T., O entre cada dos Si.





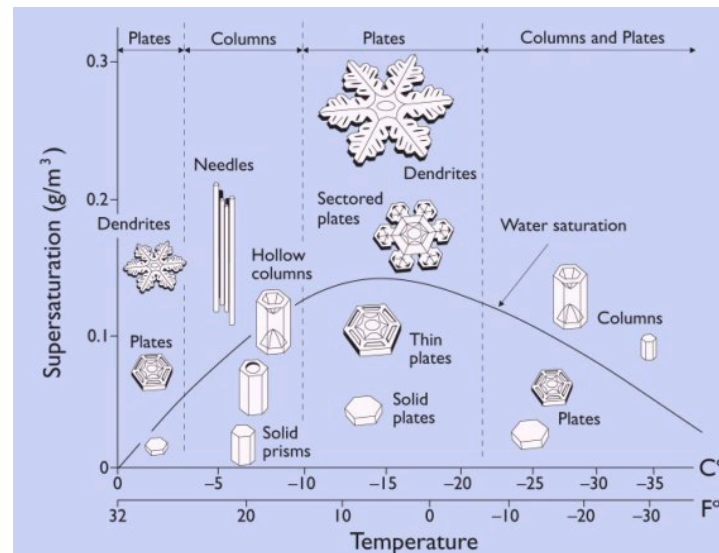
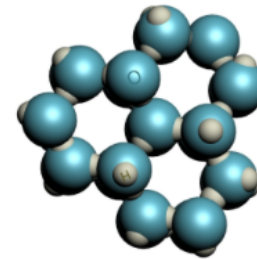
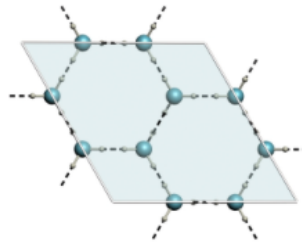
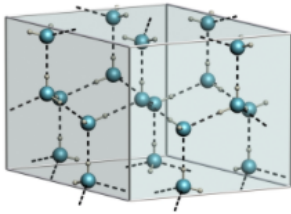
La escala atómica de los materiales moleculares

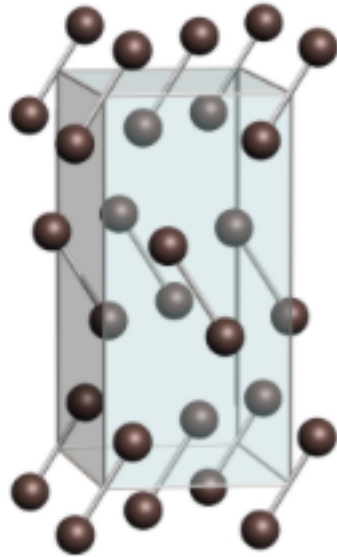
- a) Introducción
- b) Soluciones líquidas moleculares
 - c) Cristales líquidos
 - d) Geles moleculares
- e) Las formas moleculares del carbono



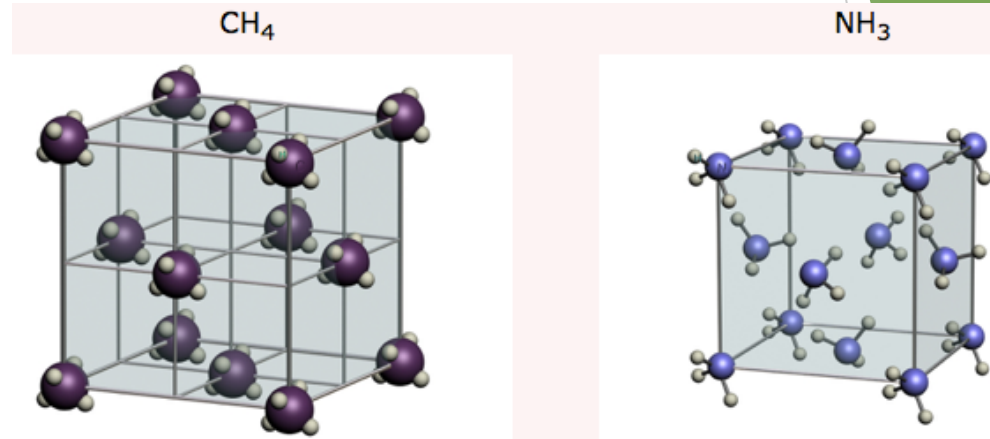
Moléculas simples

Agua





El yodo (I_2) cristaliza en una celdilla ortorrómbica

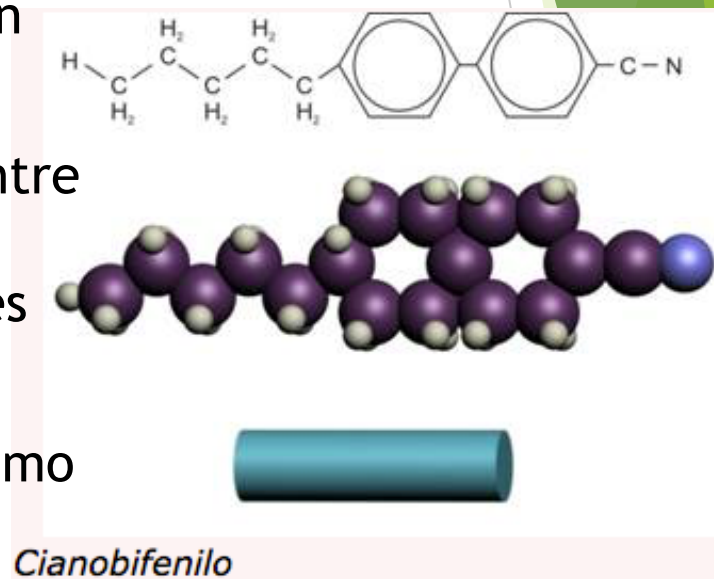


El metano cristaliza siguiendo un patrón CCC por debajo de $-182.5\text{ }^\circ\text{C}$. El amoniacico cristaliza, también siguiendo este patrón, cuando su temperatura desciende por debajo de $-77.7\text{ }^\circ\text{C}$.



Cristales líquidos

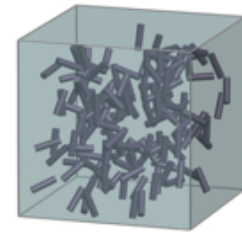
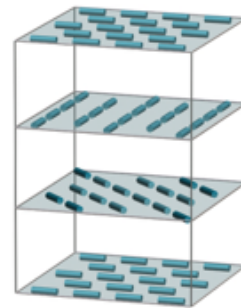
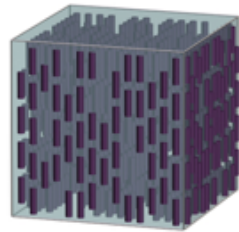
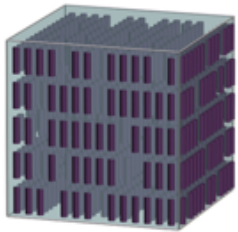
- Son materiales moleculares en los que incluso en estado líquido, sus moléculas constituyentes presentan cierto grado de ordenamiento
- Ocupan una posición intermedia entre los sólidos monocristalinos (anisótropos) y los líquidos comunes (isótropos).
- Los cristales líquidos son fluidos como los líquidos, pero, por otro lado, exhiben propiedades anisótropas como los cristales.





Clasificación de los cristales líquidos

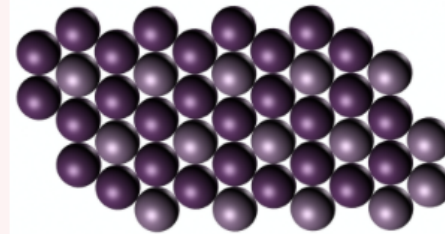
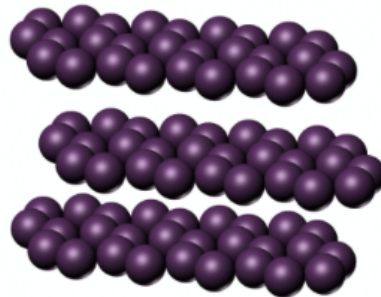
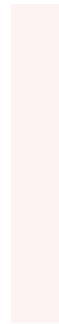
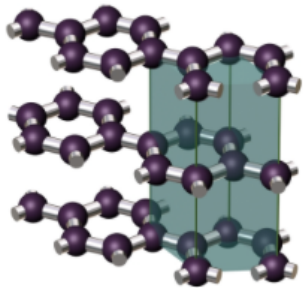
- a) Nemáticos
- b) Esmécticos
- c) Colestéricos





Formas moleculares del carbono

a) Grafeno y grafito

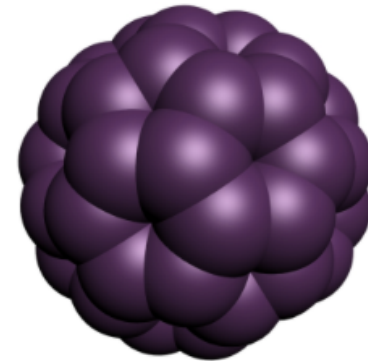
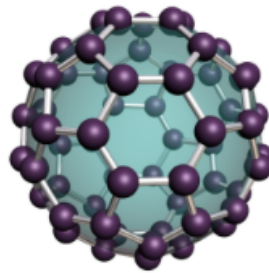
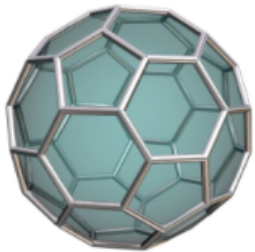




Formas moleculares del carbono

b) Fullerenos

Los **fullerenos** son un conjunto de formas alotrópicas del carbono, con formas esferoidales que contienen desde 32 hasta 960 átomos de carbono sólidos moleculares, muy estables ya que no poseen electrones libres, y que dan lugar a sólidos moleculares blandos



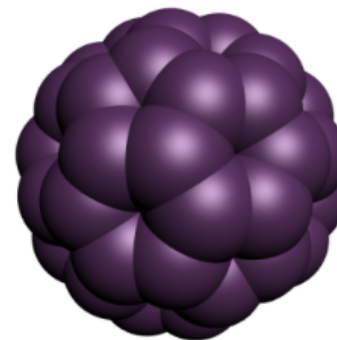
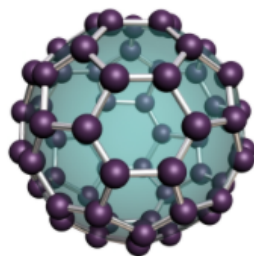
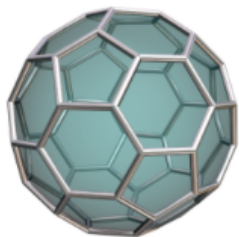


Formas moleculares del carbono

b) Fullerenos

Los **fullerenos** son un conjunto de formas alotrópicas del carbono, con formas esferoidales que contienen desde 32 hasta 960 átomos de carbono sólidos moleculares, muy estables ya que no poseen electrones libres, y que dan lugar a sólidos moleculares blandos.

El arquetipo de estas moléculas es la denominada **buckminsterfullereno**, **buckybola** o **futboleno**, de fórmula C_{60} .

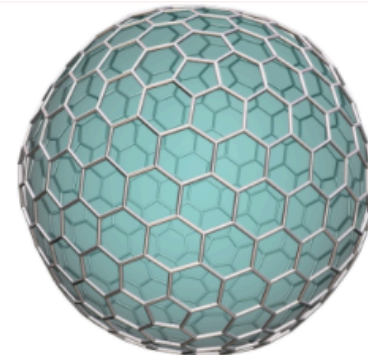
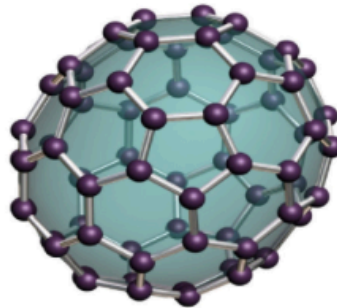
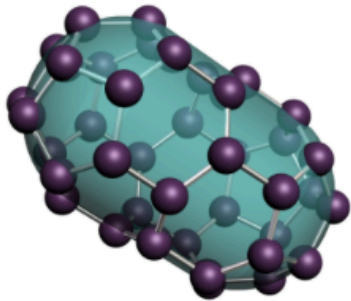




Formas moleculares del carbono

b) Fullerenos

Otras moléculas esferoidales (pero no esferas perfectas) son la C_{32} , la C_{40} , C_{50} , C_{58} y C_{70} y los fullerenos gigantes, C_{240} , C_{540} y C_{960} . El futboleno tiene 20 hexágonos y el C_{70} tiene 25, pero ambos tienen 12 pentágonos.



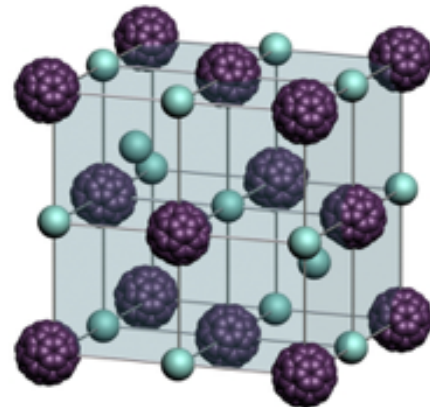
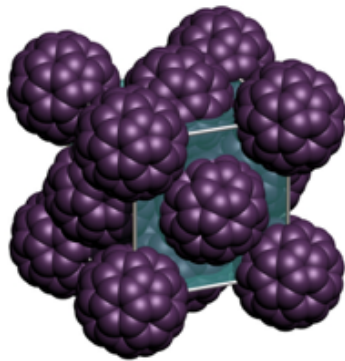


Formas moleculares del carbono

b) Fullerenos

El futboleno cristaliza según una red de Bravais CCC denominada *fullerita*.

Las fulleritas puras son aislantes; ahora bien, impurificadas con átomos de metales alcalinos se comportan como semiconductores y hasta como superconductores.

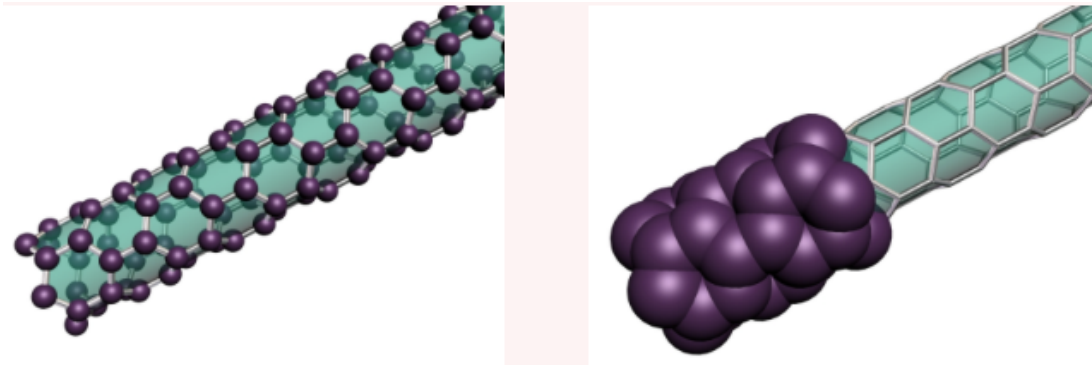




Formas moleculares del carbono

c) Nanotubos

Para construir fullerenos esféricos son necesarias combinaciones de pentágonos y hexágonos. Si se prescindie de los pentágonos, se obtienen también moléculas estables en forma de cilindros huecos que se denominan *nanotubos de carbono*





Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

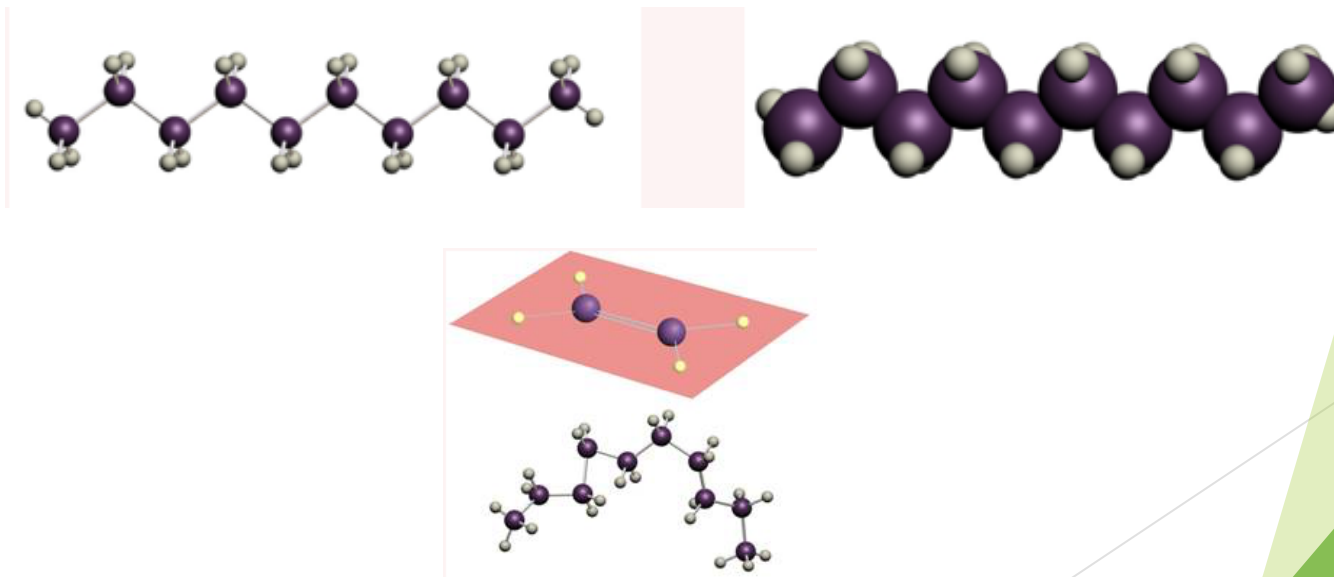
2.6.- Estructura de los polímeros



CRISTALES POLIMÉRICOS

Polietileno

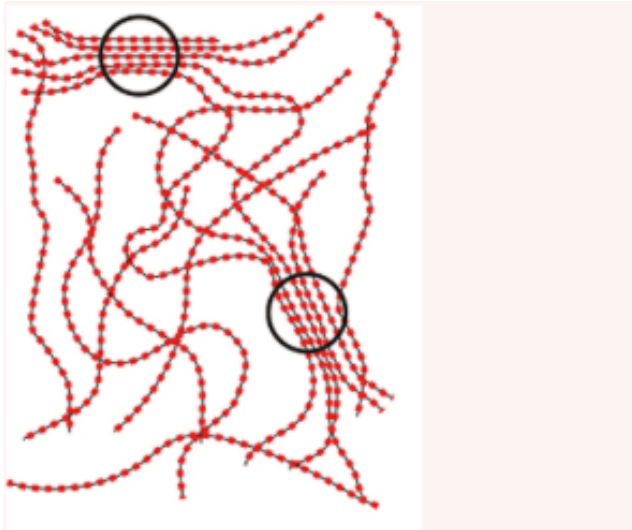
En el polietileno, los átomos de carbono encadenados se hallan dispuestos en zigzag, formando ángulos de 109.5° .



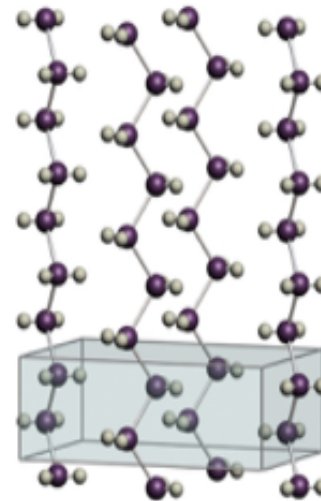


CRISTALES POLIMÉRICOS

Semicristalinidad.



La cristalinidad parcial de un material polimérico se caracteriza por un ordenamiento de las cadenas como consecuencia de las interacciones intermoleculares

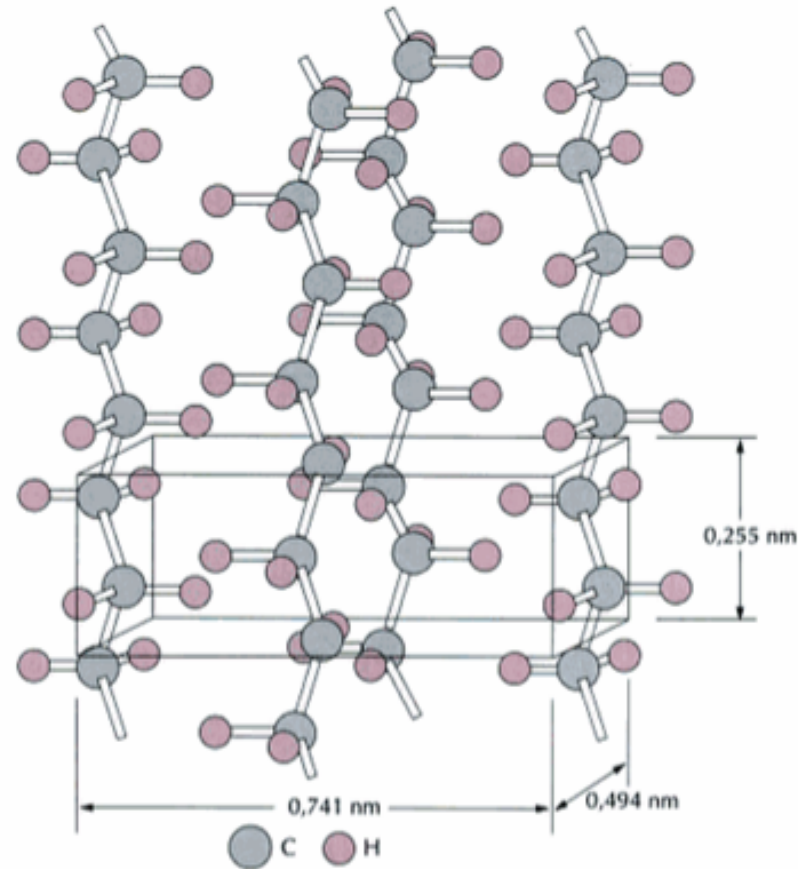


Disposición de las cadenas moleculares en una celdilla unidad del polietileno



CRISTALES POLIMÉRICOS

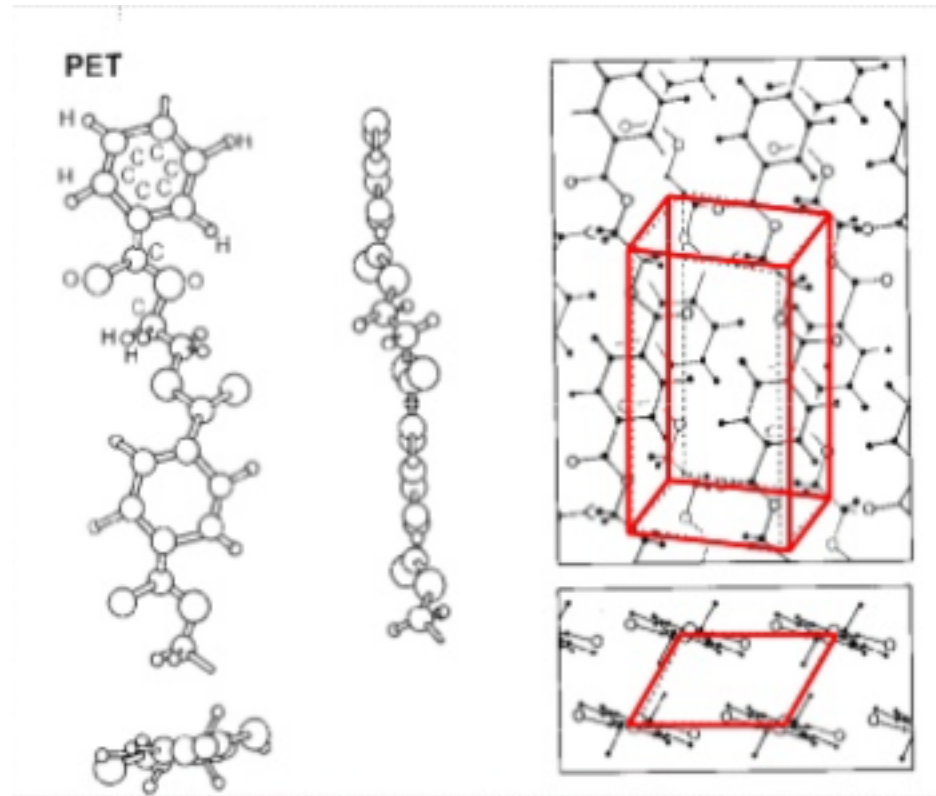
Polietileno.





CRISTALES POLIMÉRICOS

PET.





Universidad Autónoma del Estado de México
Unidad Académica Profesional Tianguistenco

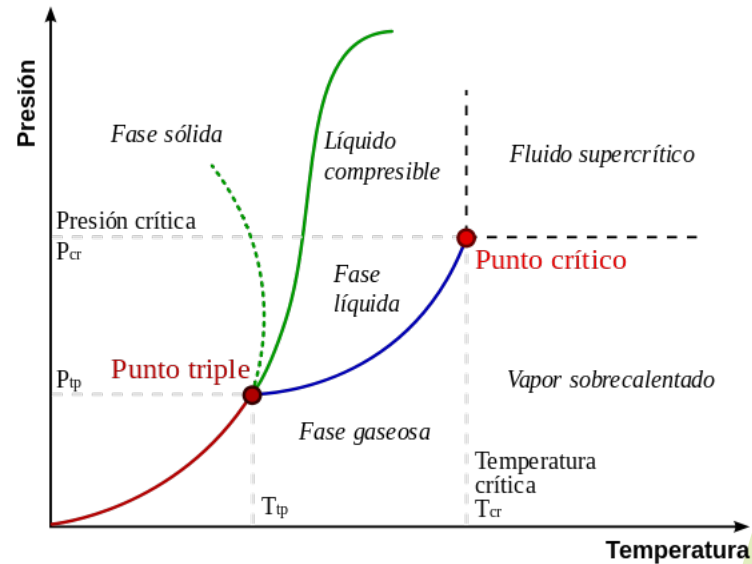
2.7.- Diagramas de fases



¿Qué es un diagrama de fase?

En un material, una **fase** es una región que difiere en su microestructura y/o composición, de otra región.

En termodinámica y ciencia de materiales se denomina **diagrama de fase** o **diagrama de estados de la materia**, a la representación gráfica entre los diferentes estados de la materia, en función de variables elegidas para su estudio.





¿Para qué se utiliza un diagrama de fase?

- Número de fases microscópicas asociadas a una condición de estado dada, que comprende un conjunto de valores de temperatura, presión y otras variables que describen la naturaleza del material. (Regla de las fases)
- La composición química de las fases presentes.
- Identificar la composición y cantidad de cada una de las fases presentes. (Regla de la palanca)



Regla de las fases de Gibbs

$$P + F = C + 2$$

Donde:

P = número de fases que pueden coexistir en el sistema

C = número de componentes en el sistema

F = grados de libertad

2= es el número de variables de estado del sistema del sistema (P , T)

Los diagramas de fases binarios utilizados en la ciencia de materiales son, en su mayoría, diagramas temperatura-composición, en los que la presión se mantiene constante, por lo general a 1atm.

En consecuencia, la regla de las fases condensada es:

$$P + F = C + 1$$



Regla de las fases de Gibbs

Una **fase** es una porción de microestructura homogénea desde el punto de vista químico y estructural.

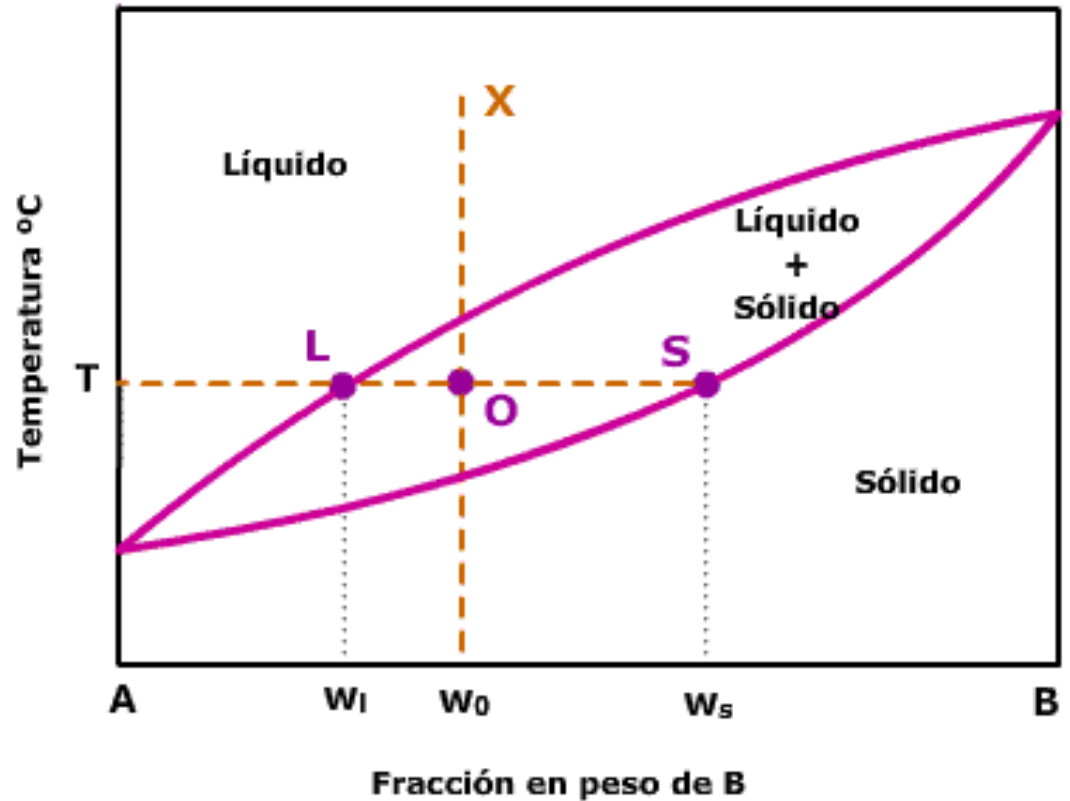
Componentes: las distintas sustancias químicas de las cuales esta formada la fase.

Grados de libertad: son los números de variables (presión, temperatura, composición) que se pueden cambiar independientes del sistema.



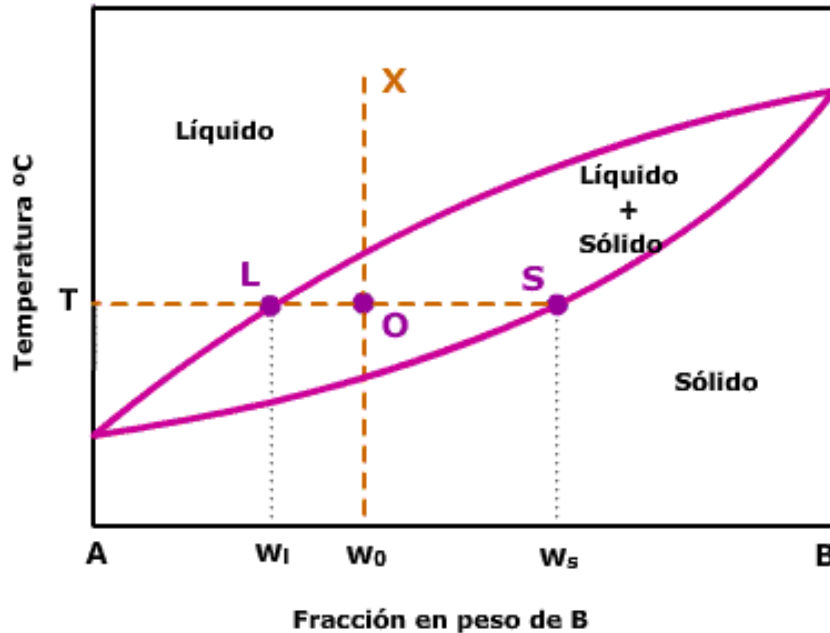
Regla de la palanca

Es el método empleado para conocer el porcentaje de fase sólida y líquida presentes en una aleación de cierta concentración cuando se encuentra a una determinada temperatura.





Regla de la palanca



$$\% \cdot de \cdot fase \cdot sólida = \frac{W_0 - W_l}{W_s - W_l}$$

$$\% \cdot de \cdot fase \cdot líquida = \frac{W_s - W_0}{W_s - W_l}$$

Se puede calcular el porcentaje de una fase como la diferencia entre el 100% y el porcentaje de la otra fase.



Tipos de diagramas de fases

- a) Sistemas de un componente:
 - Sustancias puras
- b) Sistemas de 2 o mas componentes:
 - Diagramas de fases binarios
 - Diagramas de fases ternarios



Diagrama de fase de una sustancia pura

Los pares (presión, temperatura) que corresponden a una transición de fase entre:

Dos fases sólidas: Cambio alotrópico;

Entre una fase sólida y una fase líquida: fusión - solidificación;

Entre una fase sólida y una fase vapor (gas): sublimación - deposición (o sublimación inversa);

Entre una fase líquida y una fase vapor: **vaporización** - condensación (o licuefacción).

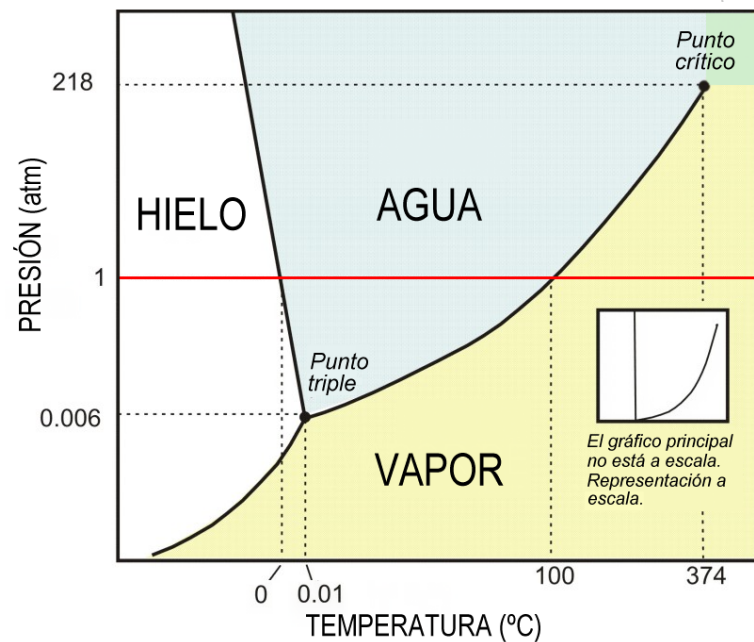
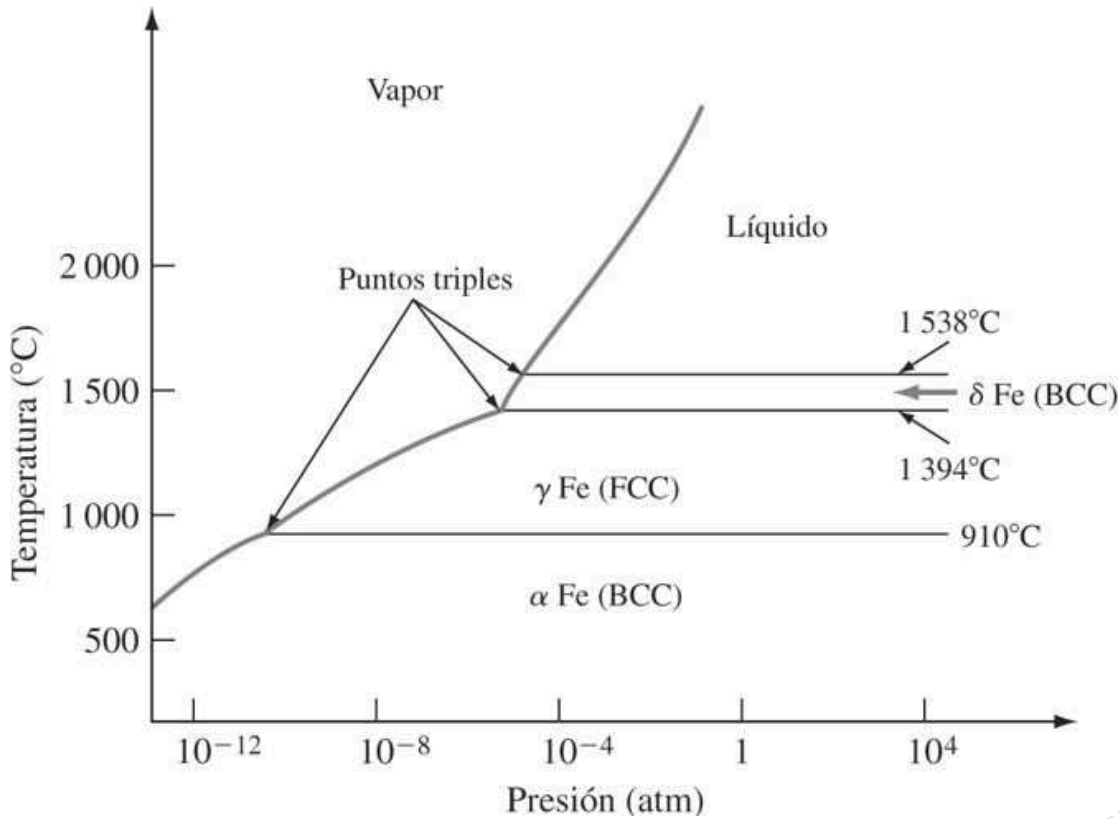


Diagrama de fases en equilibrio para el agua pura



Diagrama de fase del hierro puro



$\gamma Fe \rightarrow$ Austenita

$\alpha Fe \rightarrow$ Ferrita



Diagrama de fase binario

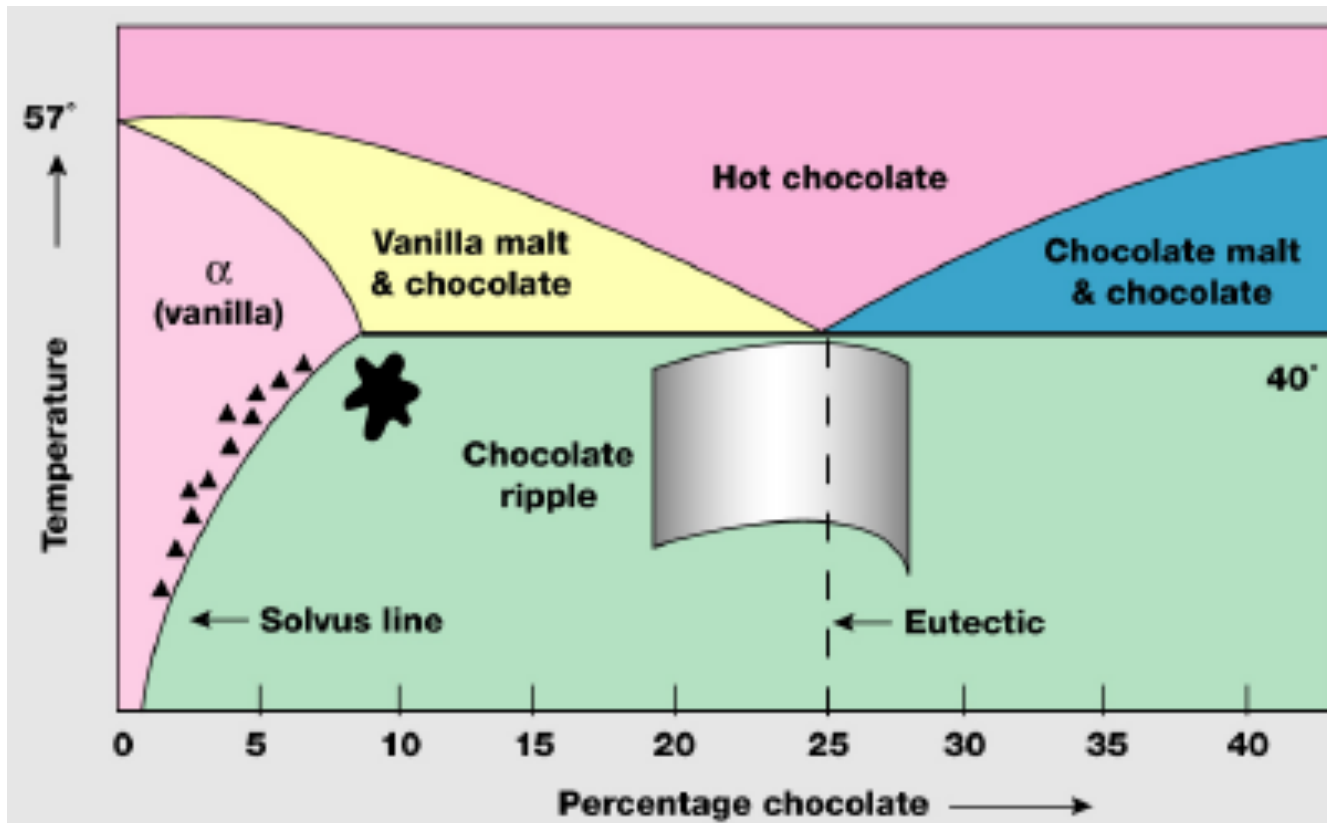




Diagrama de fase ternario

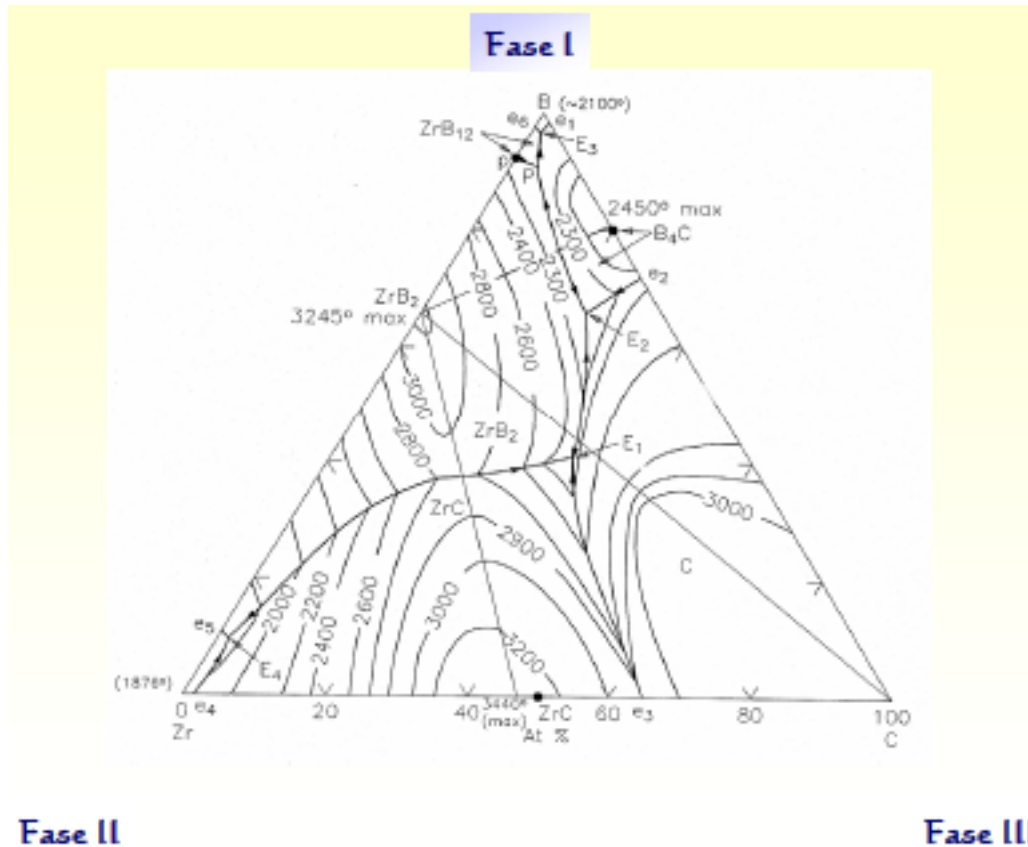




Diagrama de fase binario

Hay punto y líneas en estos diagramas importantes para su caracterización:

- Sólido puro o solución sólida, SS
- Mezcla de disoluciones sólidas (eutéctica, eutectoide, peritética, peritectoide)
- Mezcla sólido - líquido
- Únicamente líquido, ya sea mezcla de líquidos inmiscibles (emulsión) o un líquido completamente homogéneo
- Mezcla líquido - gas
- Gas



Diagrama de fase binario

En un diagrama binario pueden aparecer las siguientes regiones:

- Línea de *liquidus*, por encima de la cual solo existen fases líquidas.
- Línea de *solidus*, por debajo de la cual sólo existen fases sólidas.
- Línea eutectica y eutectoide. Son líneas horizontales (isotermas) en las que tienen lugar transformaciones eutecticas y eutectoides, respectivamente.
- Línea de *solvus*, que indica las temperaturas para las cuales una disolución sólida (α) de A y B deja de ser soluble para transformarse en dos disoluciones sólidas (α) + (β) de distinta composición en A y B.
- Concentraciones definidas, en las que tienen lugar transformaciones a temperatura constante: Eutéctica, Eutectoide, Peritéctica, Peritectoide, Monotéctica, Monotectoide, Sintéctica, Catatéctica



Representación esquemática de las principales transformaciones en los diagramas binarios

REACCIÓN	ECUACIÓN	ESQUEMA
Eutética (E):	$L \rightleftharpoons \alpha + \beta$	
Eutectoide (E'):	$\alpha \rightleftharpoons \beta + \gamma$	
Peritética (P):	$\alpha + L \rightleftharpoons \beta$	
Peritectoide (P'):	$\alpha + \beta \rightleftharpoons \gamma$	
Monotética (M):	$L_1 \rightleftharpoons \alpha + L_2$	
Monotectoide (M'):	$\alpha \rightleftharpoons \beta + \gamma$	



Diagrama de fase binario

- Mezcla de 2 componentes (A y B)
- Dependiendo de la solubilidad en estado sólido:
 - Sistema binario con **solubilidad TOTAL**: Sistema Isomorfo (Regla de Hume-Rothery)

DIAGRAMAS EUTÉCTICOS

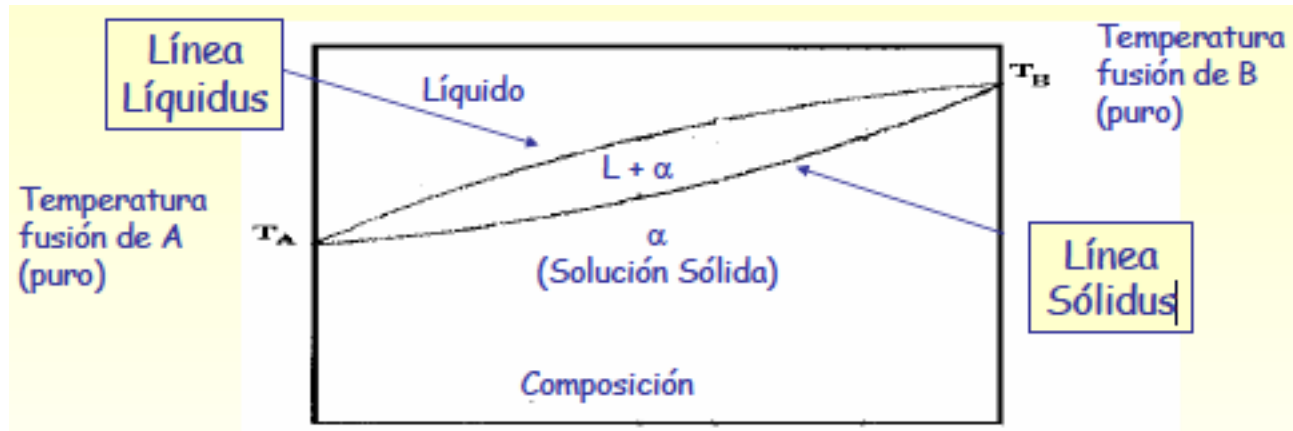
- Sistema binario con **solubilidad PARCIAL**
- Sistema binario con **insolubilidad TOTAL**
- Se representa P o T frente a composición
 - Fracción molar: (0-1)
 - Porcentaje en peso: (0-100)

$$x_A = \frac{\text{moles}_A}{\text{moles}_A + \text{moles}_B}$$

$$\%Wt_A = \frac{W_A}{W_A + W_B} \times 100$$



Solubilidad total en estado sólido



Hay tres zonas diferentes:

a) 2 regiones monofásicas

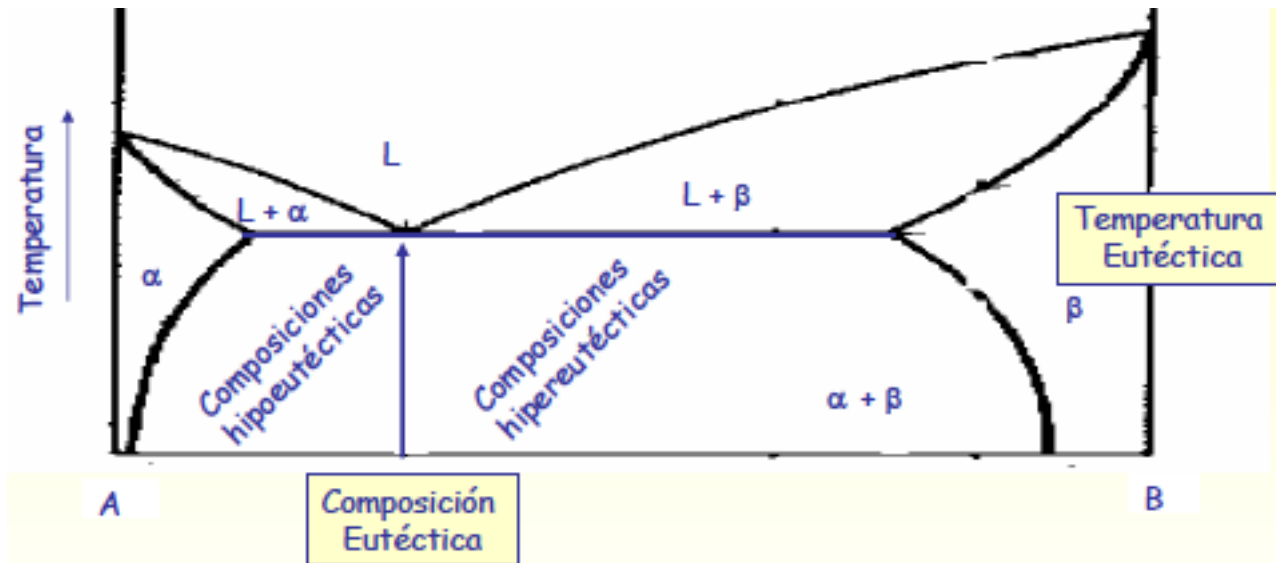
- L (líquido): única fase líquida (A y B son completamente solubles)
- α : única fase sólida: solución sólida con una estructura cristalina definida (A y B son completamente solubles)

b) 1 región bifásica (coexistencia de dos fases: sólida + líquida)

- $L + \alpha$



Diagrama eutéctico con Solubilidad Parcial



En zonas de Solución Sólida (SS) próxima a los extremos:

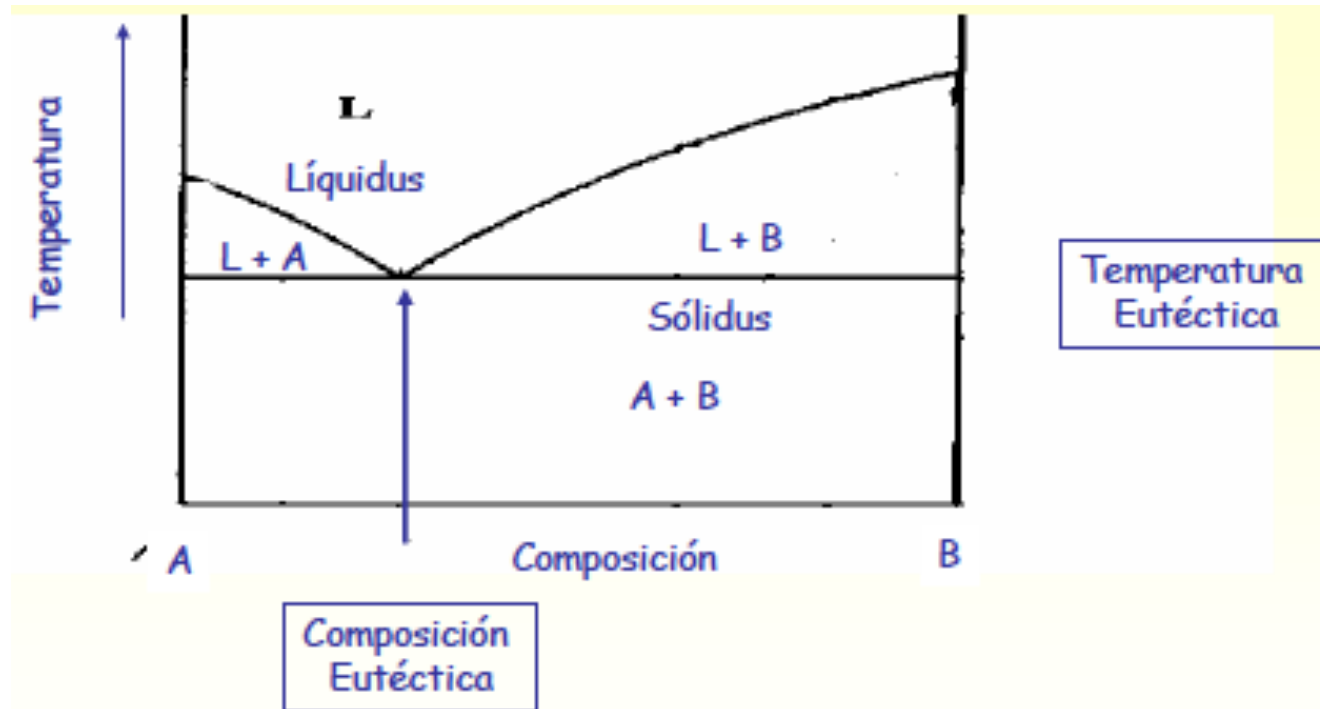
- α : SS con igual estructura cristalina que A
- β : SS con igual estructura cristalina que B.

En la zona central, dos fases sólidas presentes:

α y β



Diagrama eutéctico con Insolubilidad Total





BIBLIOGRAFIA

- Askeland, D. R., Wright, W. J. (2017). *Ciencia e ingeniería de los materiales*. México: Cengage Learning.
- Callister, W. D., Rethwish, W. D. (2015). *Ciencia e ingeniería de materiales*. España: Reverte
- Montes, J. M., Cuevas, F. G. y Cintas, J. (2014). *Ciencia e ingeniería de los materiales*. España: Paraninfo.
- Smith, W. (2014). *Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales*. México: McGraw-Hill Interamericana
- Shackelford, J. F. (2010). *Introducción a la ciencia de materiales para ingenieros*. Madrid, España: Pearson-Prentice Hall.
- Newell, J. (2011). *Ciencia de materiales, aplicaciones en ingeniería*. México: Alfaomega grupo editor, S. A. de C. V.