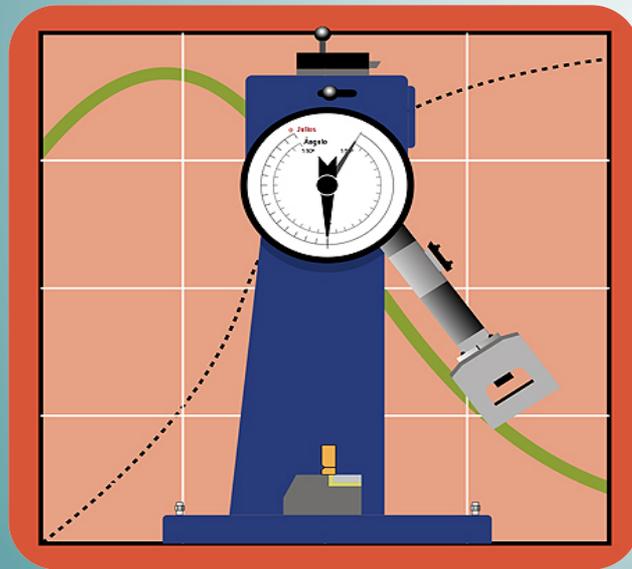


Materiales-G704/G742

Lección 3. Estructura cristalina y amorfa



Jesús Setién Marquínez
Jose Antonio Casado del Prado
Soraya Diego Cavia
Carlos Thomas García

Departamento de Ciencia e Ingeniería del
Terreno y de los Materiales

Este tema se publica bajo Licencia:

[Creative Commons BY-NC-SA 4.0](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

3.1 ESTADOS DE LA MATERIA

La materia puede presentarse en tres estados: gaseoso, líquido y sólido.

Estado gaseoso: según la teoría cinética los gases están formados por pequeñas esferas elásticas que se mueven desordenadamente de forma incesante, debido a que poseen una alta energía cinética cuyo valor depende exclusivamente de la temperatura:
 $E = K \cdot T \rightarrow$ (K cte. de Boltzmann).



Las partículas están muy alejadas entre sí, no existiendo interacciones entre ellas.

Estado líquido: las partículas poseen menor energía cinética que en los gases, por lo que existen fuerzas atractivas entre ellas, siendo la velocidad de difusión menor en los líquidos.

La interacción entre las moléculas y el hecho de que su compacidad sea máxima, ocasiona que, a diferencia de los gases, los líquidos sean **incompresibles**, pero conservando las características de **isotropía**.



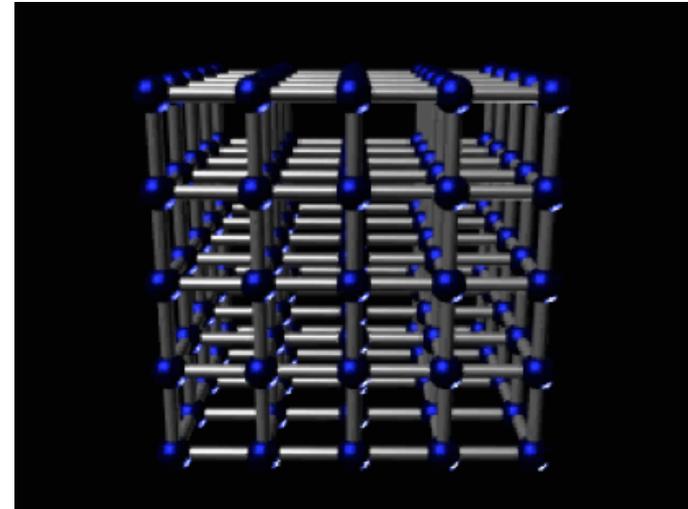
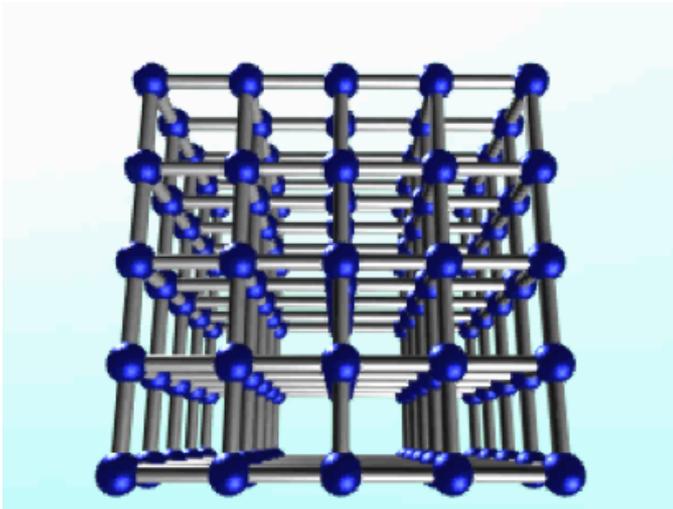
Estado sólido: sus partículas están en contacto entre sí, en posiciones fijas y con fuertes atracciones mutuas.



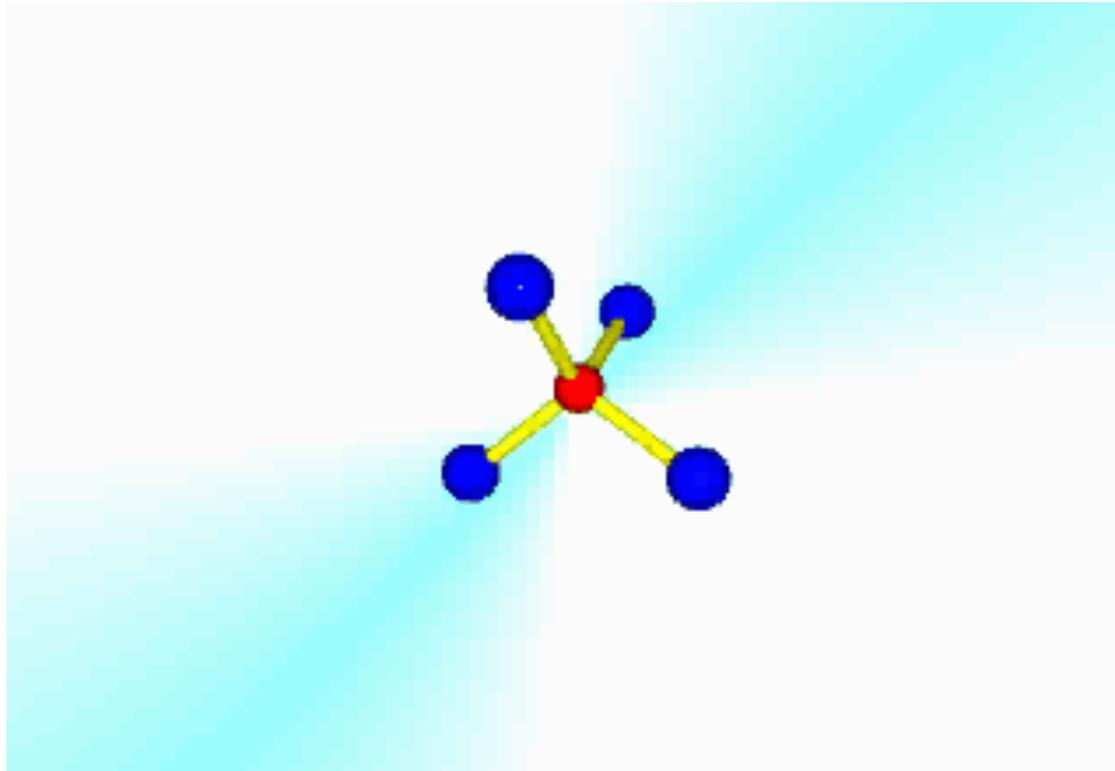
3.2 SÓLIDOS CRISTALINOS Y AMORFOS

Atendiendo a su ordenación estructural, los sólidos se clasifican en:

- **Cristalinos:** constituidos por pequeños cristales en los cuales los átomos están empaquetados según patrones tridimensionales regulares y repetitivos.



- **Amorfos (o vidrios):** cuando no existe regularidad en la disposición espacial de sus átomos.

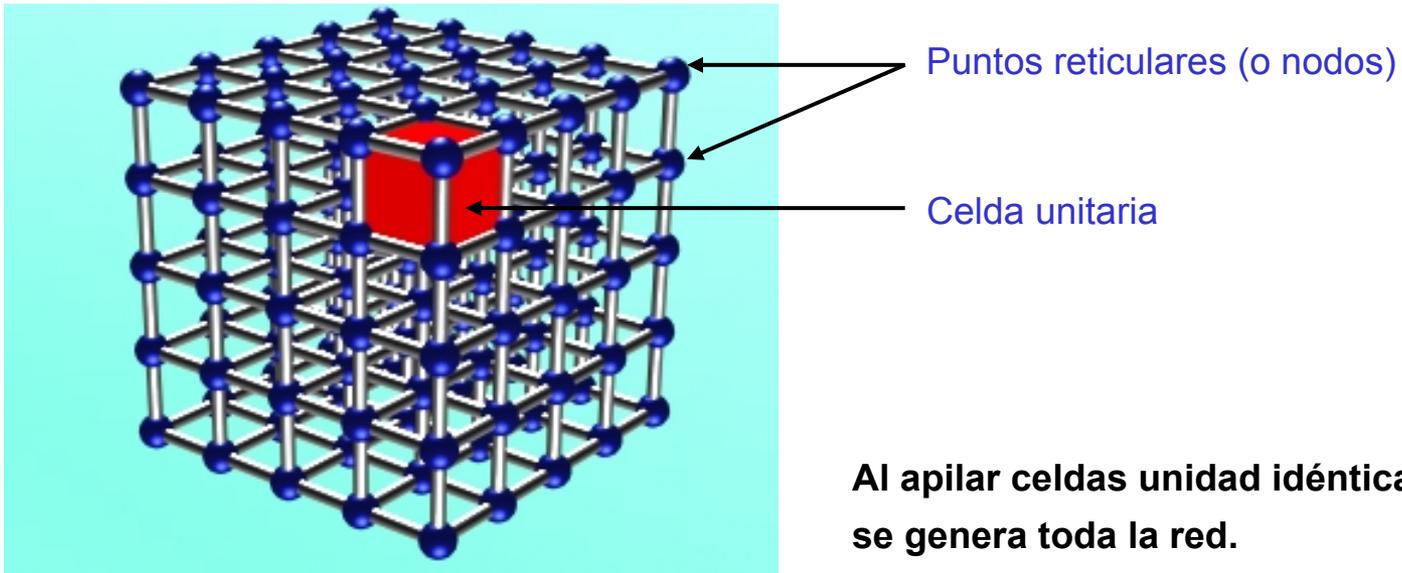


3.3 REDES CRISTALINAS

Cualquier red cristalina puede describirse como un modelo formado a base de repetir varias unidades estructurales.

Una red es un arreglo periódico de puntos que definen un espacio.

La **celda unidad** o **celda patrón** es una subdivisión de la red cristalina que conserva las características generales de toda la red.

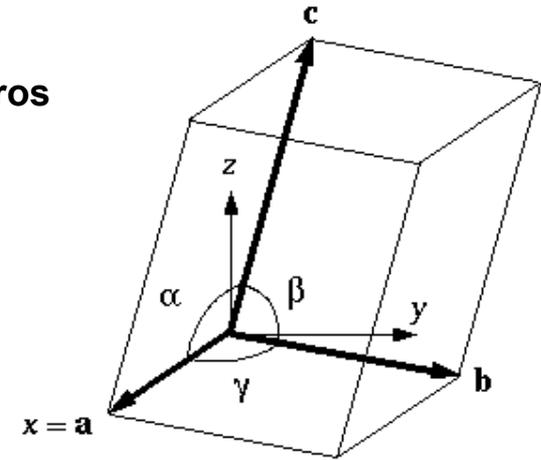


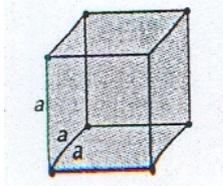
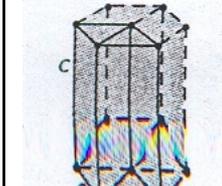
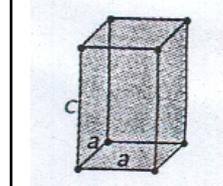
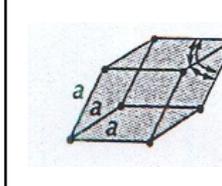
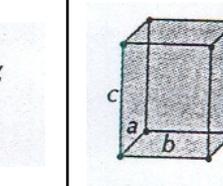
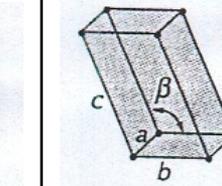
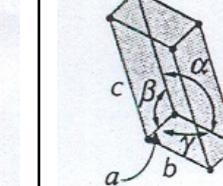
3.4 SISTEMAS CRISTALINOS Y REDES DE BRAVAIS

La celda unidad se define geoméricamente por 6 parámetros (**parámetros de red**):

- Tres ejes cristalográficos (a, b y c).
- Tres ángulos interaxiales (α , β y γ).

Variando los parámetros de red se obtienen los **7 sistemas cristalinos**.

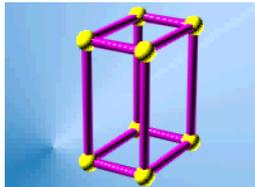


						
Cúbico	Hexagonal	Tetragonal	Romboédrico (Trigonal)	Ortorrómbico	Monoclinico	Triclinico
$a = b = c$	$a = b \neq c$	$a = b \neq c$	$a = b = c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$	$a \neq b \neq c$
$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

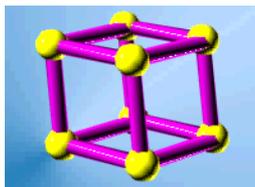
Existen 14 tipos de celdas unitarias o **Redes de Bravais**.

Según la ubicación de los nodos:

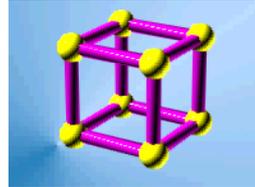
- Vértices (P).
- Centros de las caras (F).
- Centros de bases (C).
- Centro de la celda (I).



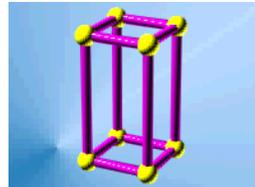
Ortorrónica simple



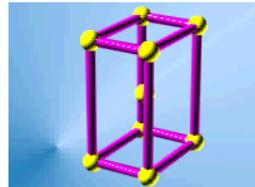
Romboédrica



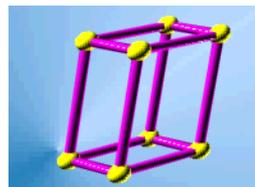
Cúbica simple



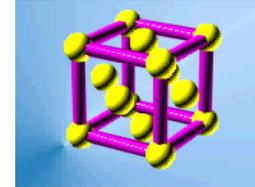
Tetragonal simple



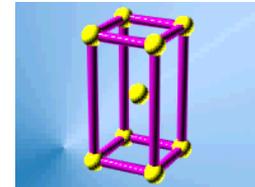
Ortorrónica centrada en el cuerpo



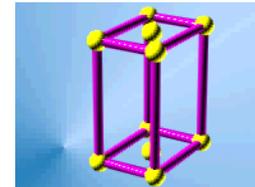
Monoclónica simple



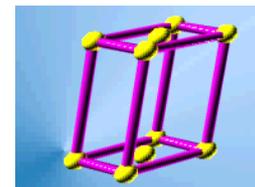
Cúbica centrada en las caras



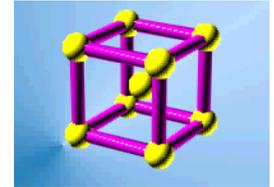
Tetragonal centrada en el cuerpo



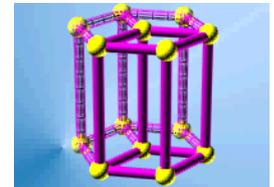
Ortorrónica centrada en las bases



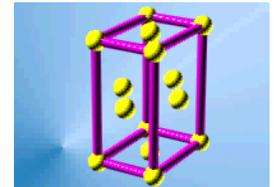
Monoclónica centrada en las bases



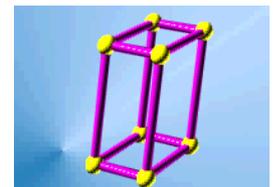
Cúbica centrada en el cuerpo



Hexagonal



Ortorrónica centrada en las caras



Triclónica

3.5 ESTRUCTURAS CRISTALINAS COMUNES



Po



Au, Ag, Pb, Pt, Fe (910 – 1.400°C)...



Fe, Li, K, Cr, V, W, Mo...

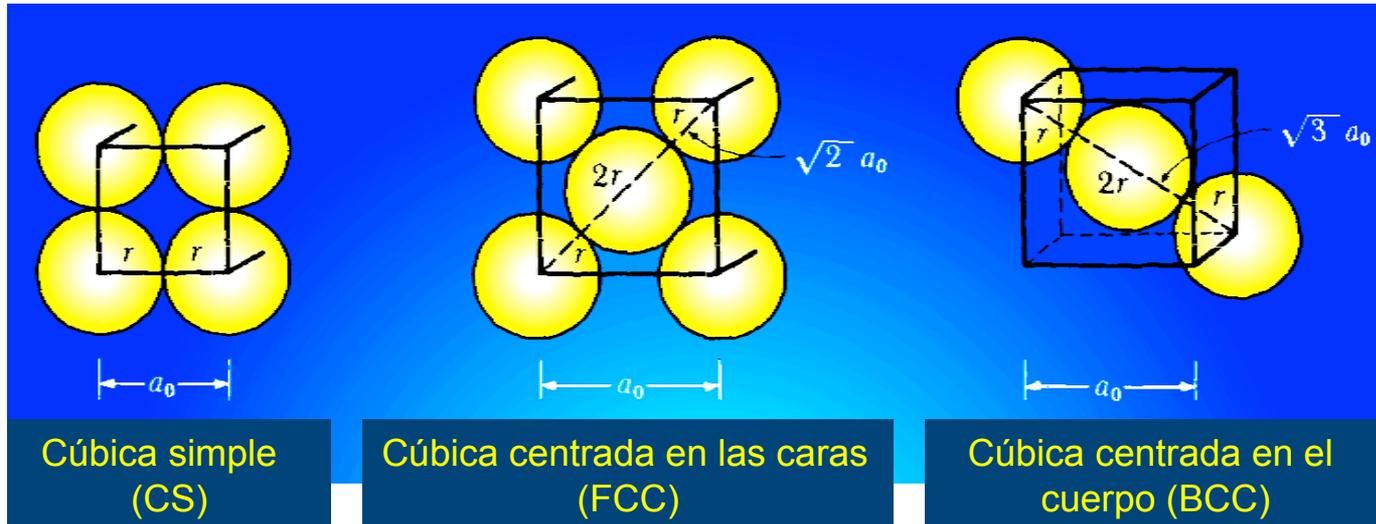
Número de ocupación o multiplicidad (n): nº átomos contenidos en la celda unidad:

- Los vértices contribuyen al recuento con $1/8$ de átomo.
- Las caras con $1/2$.
- Los nodos centrales con 1 .

$$CS: n = 8 \text{ vértices} \times \frac{1 \text{ átomo}}{8 \text{ vértice}} = 1 \text{ átomo}$$

$$FCC: n = 8 \text{ vértices} \times \frac{1 \text{ átomo}}{8 \text{ vértice}} + 6 \text{ caras} \times \frac{1 \text{ átomo}}{2 \text{ cara}} = 4 \text{ átomos}$$

$$BCC: n = 8 \text{ vértices} \times \frac{1 \text{ átomo}}{8 \text{ vértice}} + 1 \text{ átomo central} = 2 \text{ átomos}$$



Estructura CS: los átomos se tocan a lo largo de la arista del cubo:

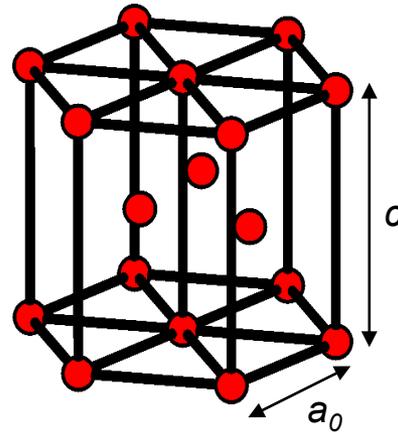
$$a_0 = 2r \quad r = \text{radio atómico}$$

Estructura FCC: los átomos se tocan a lo largo de la diagonal de la cara del cubo:

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

Estructura BCC: los átomos se tocan a lo largo de la diagonal del cubo:

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$



Hexagonal compacta
(HCP)

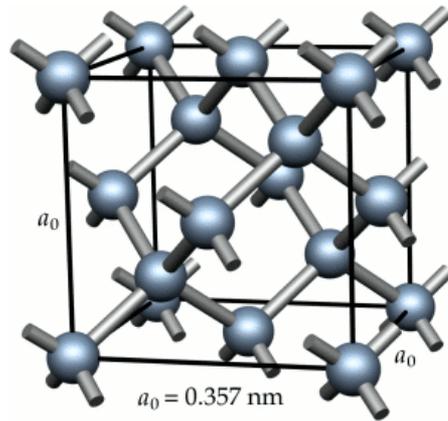
Mg, Zn, Ti, Cd, Be, Co, Zr...

$$HCP : n = 12 \text{ vértices} \times \frac{1 \text{ átomo}}{6 \text{ vértice}} + 3 \text{ átomos internos} + 2 \text{ bases} \times \frac{1}{2} \text{ átomos} = 6 \text{ átomos}$$

Estructura HCP: los átomos se tocan a lo largo de la arista del hexágono:

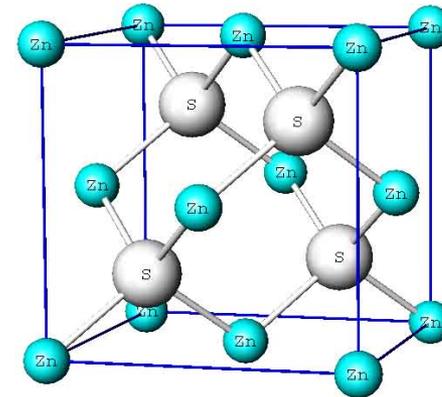
$$a_0 = 2r \quad r = \text{radio atómico}$$

$$c = 1.63 \cdot a_0$$



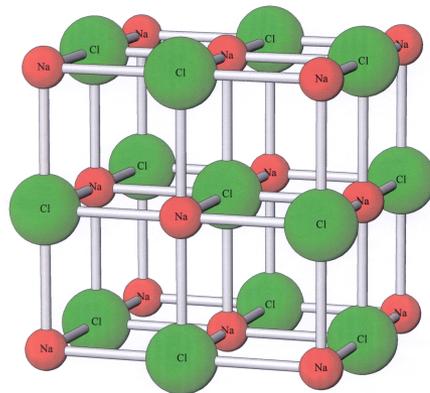
Cúbica del Diamante (DC)

Diamante, Si, Ge, Sn...



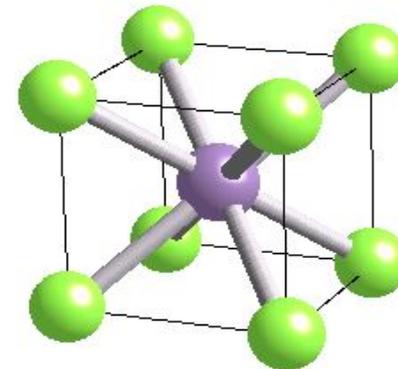
Tipo Blenda

GaAs, ZnS, TiC, ZrC, VN...



Tipo Cloruro de Sodio

NaCl, MgO, LiF, KCl, ...



Tipo Cloruro de Cesio

CsCl, RbCl, AlNi, CuZn, ...

3.6 ALOTROPÍA Y POLIMORFISMO

- Cada material escoge aquella estructura que proporciona la menor energía (suele ser pequeña la diferencia de energía entre estructuras alternativas).

Alotropía

Temperaturas	Formas alotrópicas	Sistema cristalino	Parámetros	Propiedades magnéticas
HASTA 788 °	α		2.86 Å	MUY MAGNÉTICA
a 910 °	β		2.90 Å	DÉBILMENTE MAGNÉTICA
a 1480 °	γ		3.60 Å	NO MAGNÉTICA
a 1539 °	δ		2.93 Å	DÉBILMENTE MAGNÉTICA

Metal	Estructura cristalina a temperatura ambiente	A otras temperaturas
Ca	FCC	BCC (> 447 °C)
Co	HCP	FCC (> 427 °C)
Hf	HCP	BCC (> 1742 °C)
Fe	BCC	FCC (912 - 1394 °C)
Li	BCC	BCC (> 1394 °C)
Na	BCC	HCP (< - 193 °C)
Tl	HCP	HCP (< - 233 °C)
Ti	HCP	BCC (> 234 °C)
Y	HCP	BCC (> 883 °C)
Zr	HCP	BCC (> 1481 °C)
		BCC (> 872 °C)

Peste del estaño

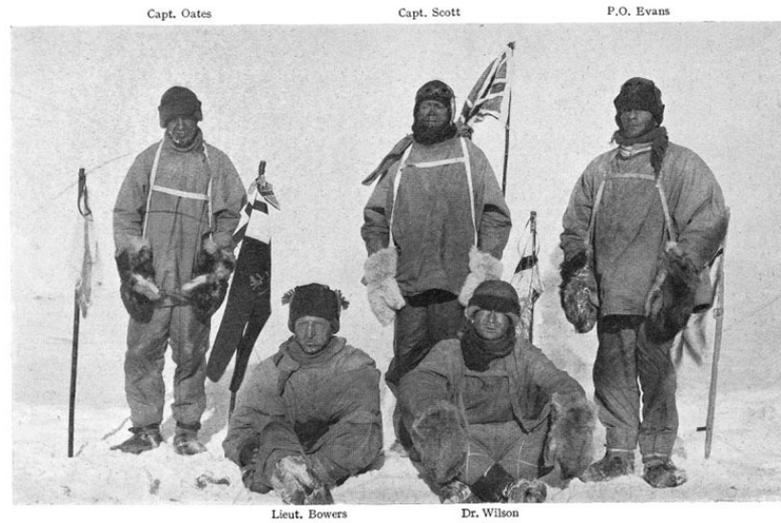
Cambio de Sn blanco (Sn- β , tetragonal), habitual a temperatura ambiente, a Sn gris frágil (Sn- α , cúbico), que aparece a temperaturas inferiores a 14,2°C con tiempos prolongados de exposición.



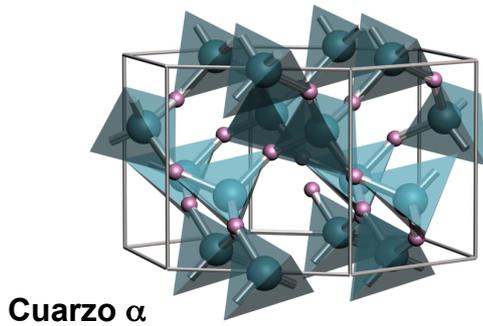
Caso 1: Campaña de Napoleón en Rusia, 1812.



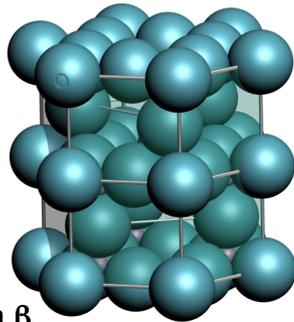
Caso 2: Expedición del capitán Scott al Polo Sur, 1912.



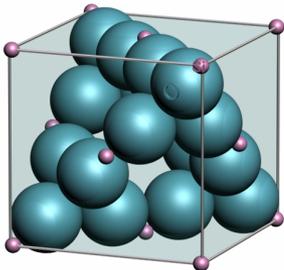
Polimorfismo



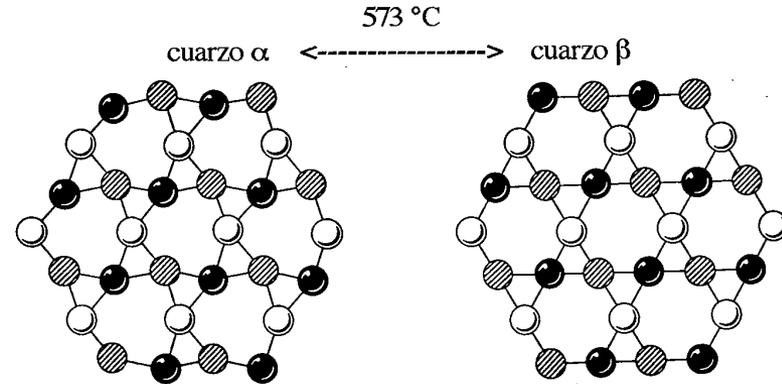
Cuarzo α



Tridimita β



Cristobalita β



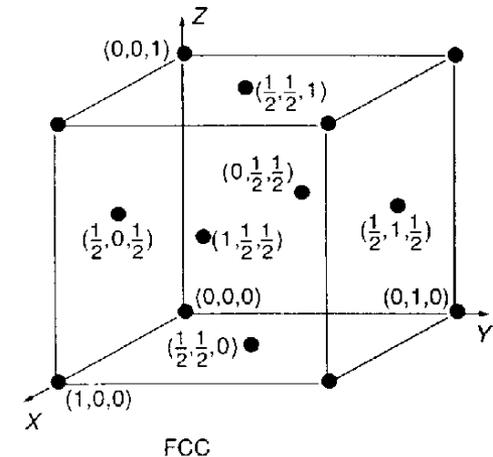
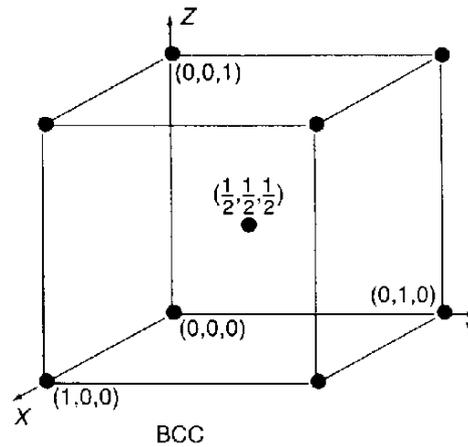
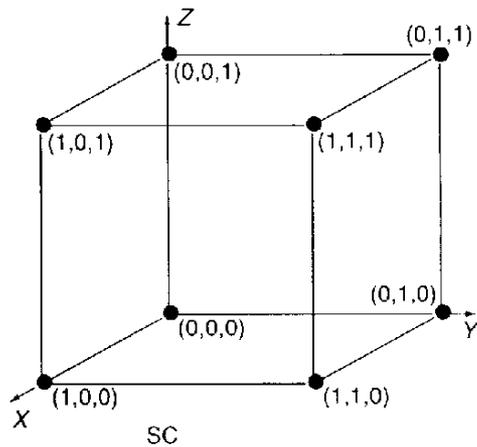
Sustancia química	Mineral		Peso específico	Condiciones de formación
CaCO ₃	Calcita	Romboédrico	2,71	
	Aragonito	Rómbico	2,93	
SiO ₂	α cuarzo	Trigonal	2,65	T < 573°C
	β cuarzo	Hexagonal	2,53	T > 573°C
	α tridimita	Monoclínico	2,27	--
	β tridimita	Hexagonal	2,26	T > 870°C
	α cristobalita	Tetragonal	2,32	--
β cristobalita	Cúbico	2,20	T > 1470°C	

3.6 ÍNDICES DE MILLER

Los Índices de Miller representan una notación cristalográfica que permite describir cualquier plano o dirección espacial por un conjunto de tres números.

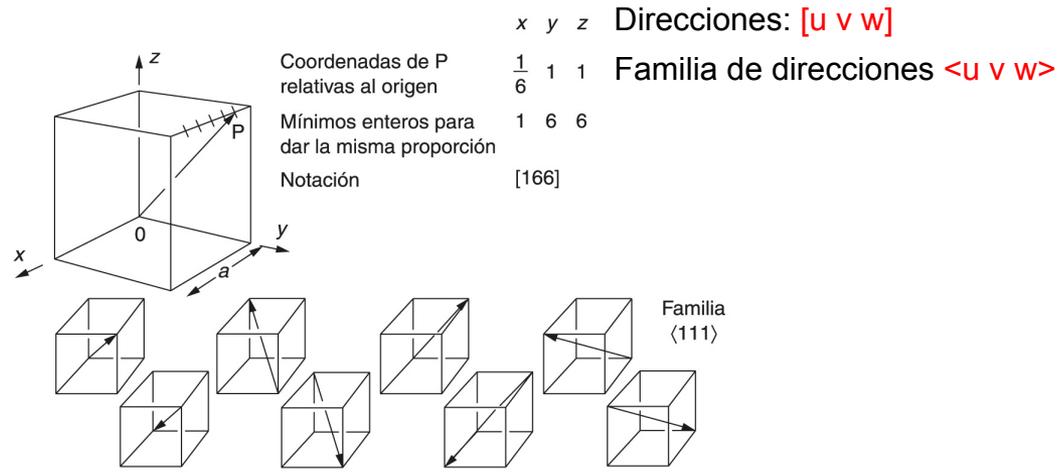
PUNTOS DE LA RED

Cada punto de la red se define mediante tres índices que denotan sus coordenadas cartesianas (x, y, z) en el espacio, con respecto de un origen arbitrario.

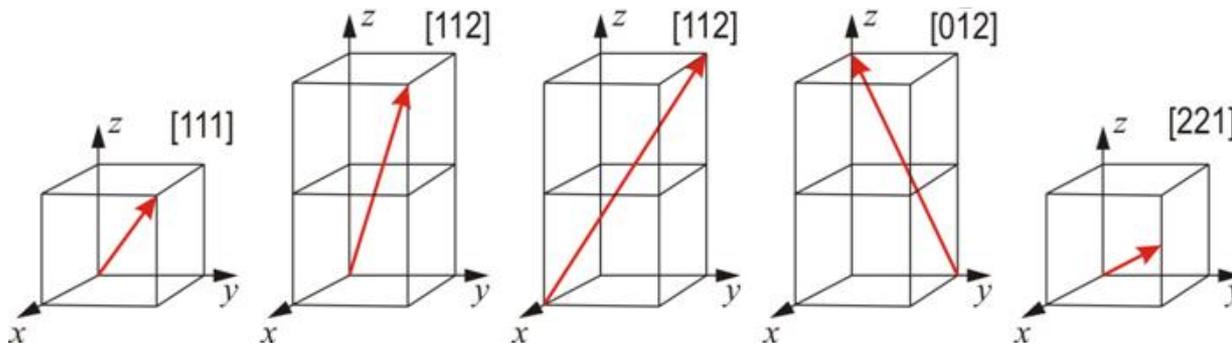


DIRECCIONES DE LA RED

Las **direcciones** son vectores que conectan dos puntos de red en un sentido preestablecido. Los índices de una dirección vienen dados por la diferencia de las coordenadas de los puntos, reducidas a los menores enteros en la misma proporción.



Nota: ¡sólo en sistemas cúbicos! $[111]$ es perpendicular a (111)
 $[100]$ es perpendicular a (100) , etc.



PLANOS DE LA RED

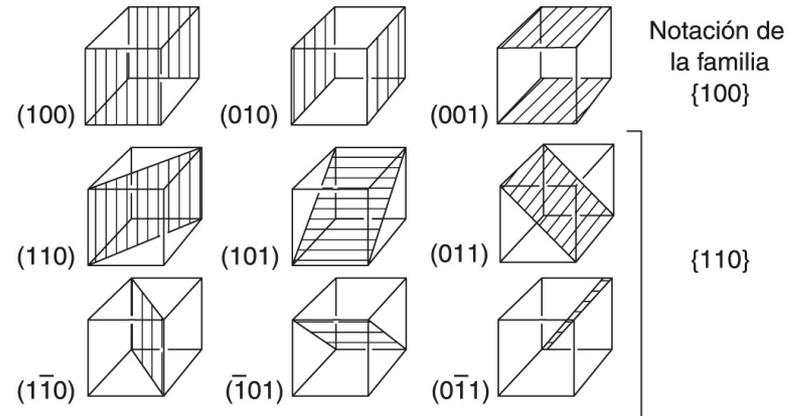
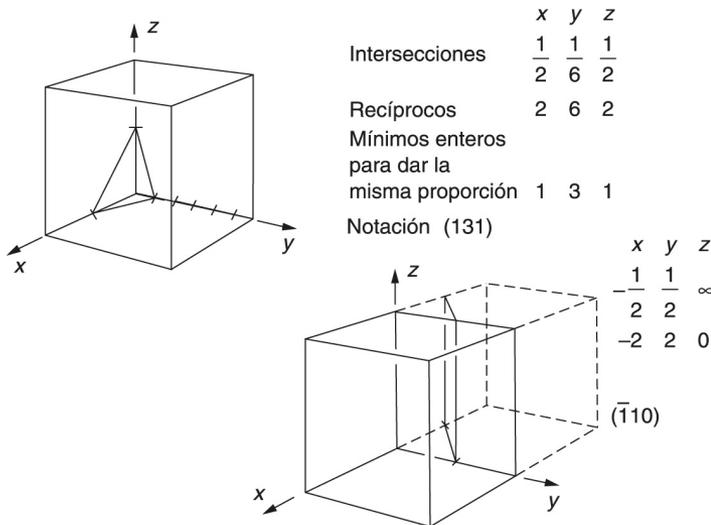
Los planos cristalográficos también se pueden identificar por tres índices de Miller.

Método:

1. Expresar los cortes del plano con los ejes en unidades de los parámetros de red de la celda unidad.
2. Calcular los inversos de estos valores.
3. Reducir los inversos a los menores enteros en la misma proporción.

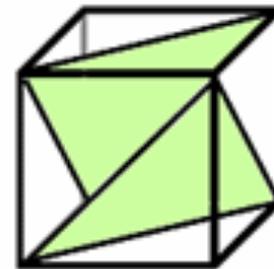
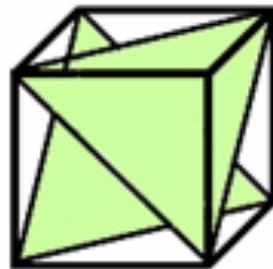
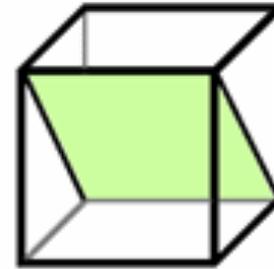
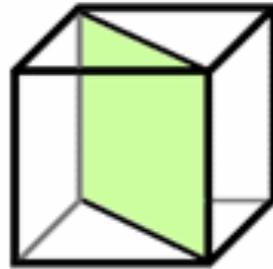
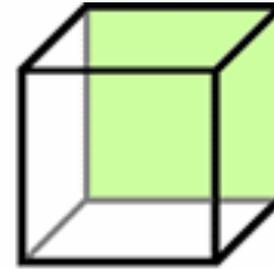
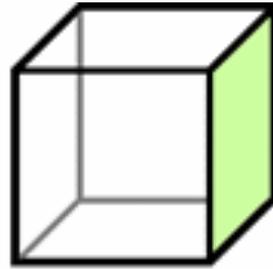
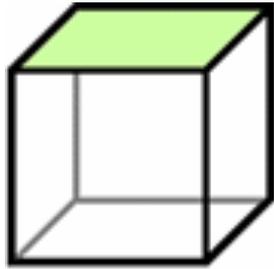
Planos: $(h\ k\ l)$

Familia de planos $\{h\ k\ l\}$



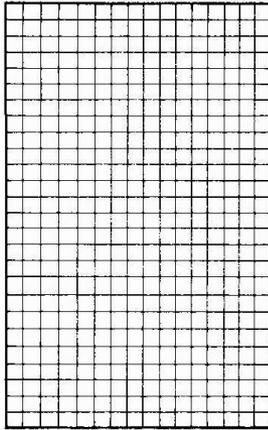
Estas reglas dejan de ser válidas para cualquier plano que pase por el origen de coordenadas.

Ejemplos:

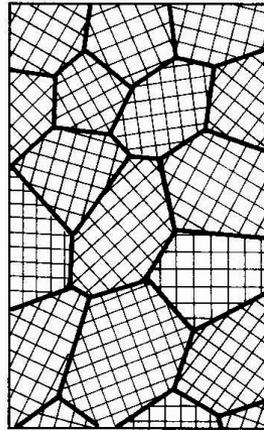


3.7 SÓLIDOS POLICRISTALINOS

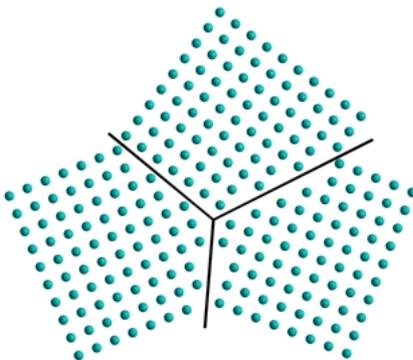
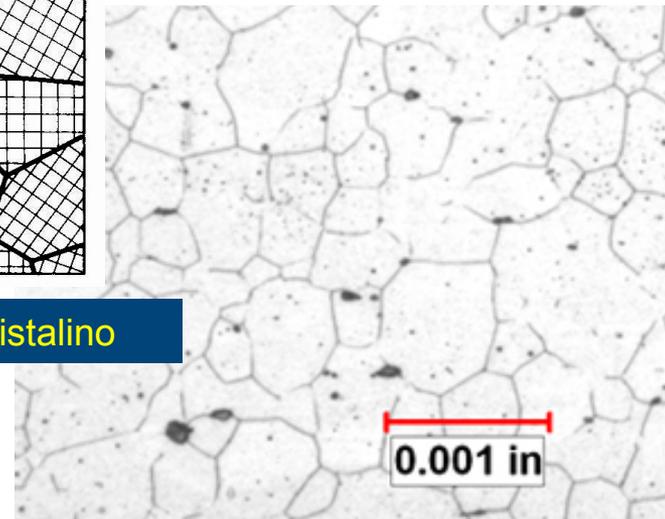
La mayoría de los sólidos cristalinos son el conjunto de muchos cristales pequeños o granos.



Sólido monocristalino



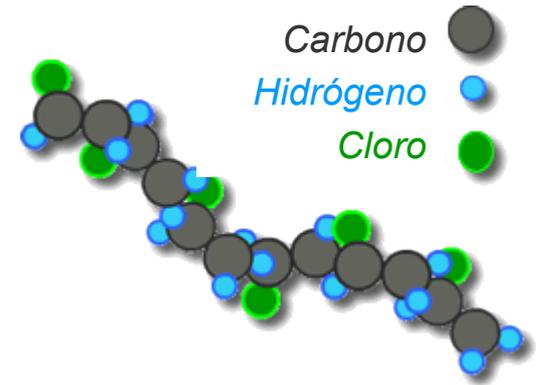
Sólido policristalino



El contacto entre granos supone un defecto en el ordenamiento espacial conocido como **límite** o **borde de grano**.

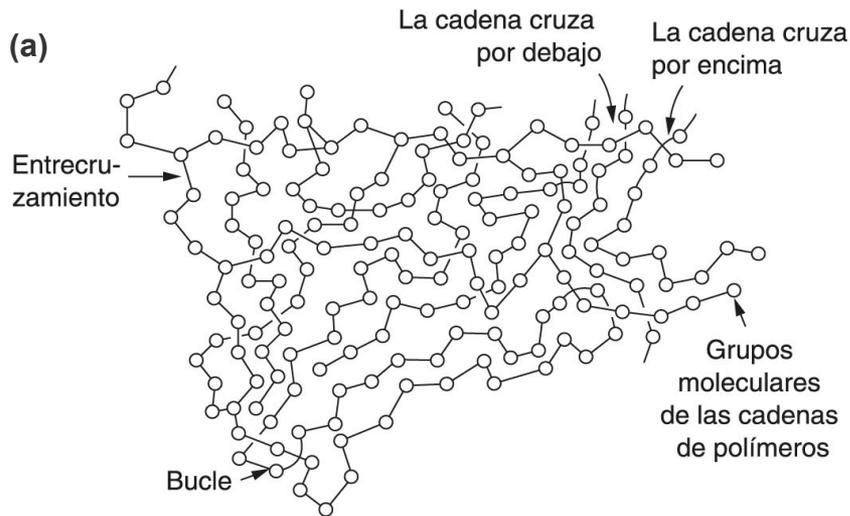
3.8 ESTRUCTURA DE POLÍMEROS

Polímeros: macromoléculas de cadena larga. Los átomos que forman el esqueleto están ligados por enlaces covalentes.

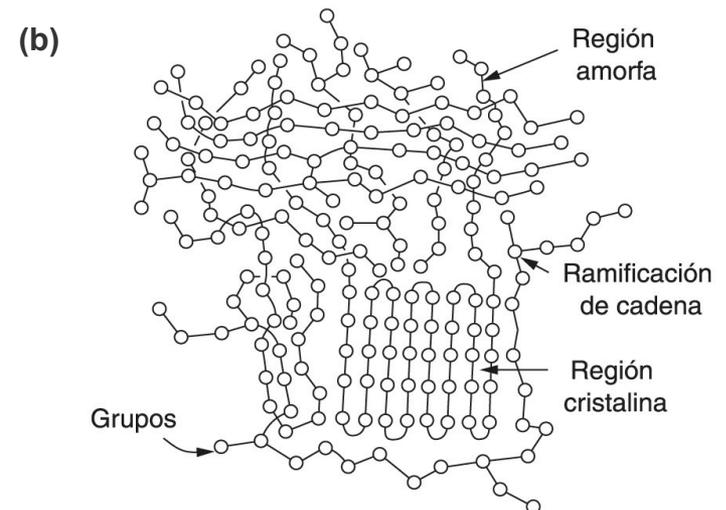


Disposición de cadenas:

Aleatoria (amorfa)



Estructura mixta (grado de cristalinidad)

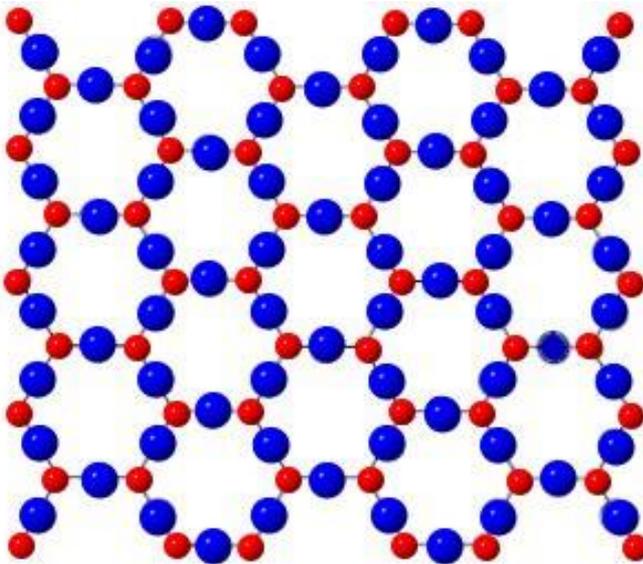


3.9 ESTRUCTURA DE VIDRIOS

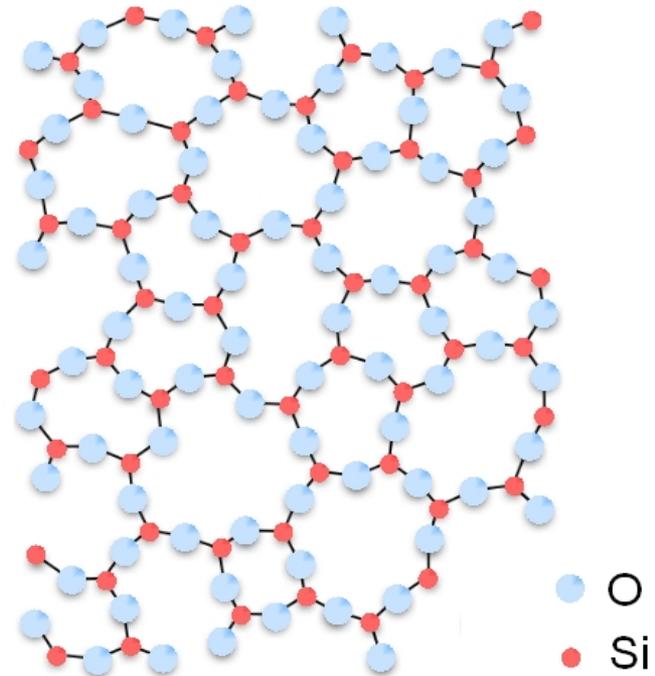
Los materiales con estructura atómica o molecular muy compleja, difícilmente se puede ordenar en cristales, dando origen a **estructuras amorfas**, sin ningún orden, que, normalmente, son isótropas.

Enfriamiento rápido → formación de sólido no cristalino (vidrio).

SiO₂ cristalina



SiO₂ amorfa



3.10 DENSIDAD DE LOS SÓLIDOS

Refleja la relación entre la masa y el tamaño de los átomos que integran el material, así como la eficiencia con la cual están empaquetados.

$$\rho = \frac{\textit{masa de la celda}}{\textit{volumen de la celda}} = \frac{n \cdot m}{V} = \frac{n \cdot M}{N_A \cdot V}$$

n: número de ocupación de la celda.

M: masa atómica del elemento correspondiente.

N_A : número de Avogadro ($6.023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$).

V: volumen de la celda ($V = a^3$ si la celda es cúbica, siendo a el parámetro de red).

Valores de Densidades

<i>Material</i>	ρ ($g\ cm^{-3}$)
Osmio	22,7
Platino	21,4
Wolframio y sus aleaciones	13,4-19,6
Oro	19,3
Uranio	18,9
Carburo de wolframio, WC	14,0-17,0
Tántalo y sus aleaciones	16,6-16,9
Molibdeno y sus aleaciones	10,0-13,7
Cobalto/carburo de wolframio, "cermets"	11,0-12,5
Plomo y sus aleaciones	10,7-11,3
Plata	10,5
Niobio y sus aleaciones	7,9-10,5
Níquel	8,9
Aleaciones de níquel	7,8-9,2
Cobalto y sus aleaciones	8,1-9,1
Cobre	8,9
Aleaciones de cobre	7,5-9,0
Latones y bronces	7,2-8,9
Hierro	7,9
Superaleaciones base hierro	7,9-8,3
Aceros inoxidable, austeníticos	7,5-8,1
Estaño y sus aleaciones	7,3-8,0
Aceros de baja aleación	7,8-7,85
Aceros dulces	7,8-7,85
Aceros inoxidable, ferríticos	7,5-7,7
Fundiciones	6,9-7,8
Carburo de titanio, TiC	7,2
Zinc y sus aleaciones	5,2-7,2
Cromo	7,2
Carburo de zirconio, ZrC	6,6

<i>Material</i>	ρ ($g\ cm^{-3}$)
Zirconio y sus aleaciones	6,6
Titanio	4,5
Aleaciones de titanio	4,3-5,1
Alúmina, Al ₂ O ₃	3,9
Haluros alcalinos	3,1-3,6
Magnesia, MgO	3,5
Carburo de silicio, SiC	2,5-3,2
Nitruro de silicio, Si ₃ N ₄	3,2
Mullita	3,2
Berilia, BeO	3,0
Rocas comunes	2,2-3,0
Calcita (mármol, caliza)	2,7
Aluminio	2,7
Aleaciones de aluminio	2,6-2,9
Vidrio de sílice, SiO ₂ (cuarzo)	2,6
Vidrios sódicos	2,5
Hormigón/cemento	2,4-2,5
GFRP	1,4-2,2
Fibras de carbono	2,2
PTFE	2,3
Fibras de boro/epoxi	2,0
Berilio y sus aleaciones	1,85-1,9
Magnesio y sus aleaciones	1,74-1,88
Fibras de vidrio (GFRP/poliéster)	1,55-1,95
Grafito, alta resistencia	1,8
PVC	1,3-1,6
CFRP	1,5-1,6
Poliésteres	1,1-1,5
Poliimidias	1,4
Epoxis	1,1-1,4
Poliuretano	1,1-1,3
Policarbonato	1,2-1,3
PMMA	1,2
Nailon	1,1-1,2
Poliestireno	1,0-1,1
Polietileno de alta densidad	0,94-0,97
Hielo, H ₂ O	0,92
Caucho natural	0,83-0,91
Polietileno de baja densidad	0,91
Polipropileno	0,88-0,91
Maderas	0,4-0,8
Corcho	0,1-0,2
Espumas poliméricas	0,01-0,6

Datos de Densidades en diagrama de barras

