



04.73.05

PMM/A-119

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

NOVENO CURSO PANAMERICANO DE METALURGIA

Dentro del Programa Multinacional de Metalurgia
(Programa Regional en Ciencia y Tecnología - OEA)

INTRODUCCION A LA METALURGIA

ENLACES ATOMICOS Y CRISTALOGRAFIA

Lic. José V. Ovejero García

Departamento de Metalurgia
- Buenos Aires - Argentina
- 1973 -

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

NOVENO CURSO PANAMERICANO DE METALURGIA

Dentro del Programa Multinacional de Metalurgia
(Programa Regional en Ciencia y Tecnología - OEA)

INTRODUCCION A LA METALURGIA

ENLACES ATOMICOS Y CRISTALOGRAFIA

Lic. José V. Ovejero García

Departamento de Metalurgia
- Buenos Aires - Argentina
- 1973 -

ENLACES CRISTALINO

1.1. Introducción

El primer paso para entrar en la ciencia de los metales ha de consistir en decir qué es un metal.

Los metales poseen ciertas propiedades especiales y fácilmente observables, particularmente conductibilidad eléctrica y térmica elevadas, opacidad, brillo, resistencia mecánica y ductilidad. En la definición de metal podrían intervenir todas estas propiedades y otras, pero la definición no resultaría satisfactoria por dos razones. En primer lugar no sería completamente discriminativa, pues no existe propiedad evidente alguna común a los metales que no sea compartida por otra sustancia no metálica y que no falte en alguna sustancia metálica. Si queremos definir un metal en función de alguna propiedad especial podemos tomar como más apropiada, la resistividad eléctrica, que crece al aumentar la temperatura. Sin embargo, esta propiedad dista mucho de ser accesible al sentido común del hombre corriente.

Si hemos de explicar es estado metálico tenemos que buscar no las propiedades organolepticas, sino las causas que las determinan, las cuales están íntimamente ligadas con los modos de formarse las masas metálicas a partir de los átomos y, en último término, con la estructura de los átomos mismos.

En química se agrupan como metales aquellos elementos que se comportan de un cierto modo en las reacciones químicas, que forman óxidos e hidróxidos fuertemente básicos y que al combinarse con los ácidos forman sales. Resulta evidente que las propiedades descritas son característica de los átomos individuales, pues las reacciones químicas tendrán lugar por combinaciones y disociaciones entre átomos y moléculas aisladas.

Cuando empleamos el criterio metalúrgico, el término metálico se aplica a ciertos objetos macroscópicos, como un alambre de cobre o un lingote de acero. La idea totalmente distinta que ahora tenemos presente es que ciertos agregados atómicos muy grandes pueden existir en un estado especial, el estado metálico de la materia, en el cual poseen las propiedades físicas y mecánicas mencionadas en el primer párrafo. Estas propiedades son propiedades de grupo determinadas por el tipo de unión existente entre los átomos y no por átomos aislados. Analizaremos esta unión y otro tipo de uniones posibles.

1.2. Atomo

Antes de entrar a analizar los distintos tipos de uniones veremos el elemento básico de la misma, el átomo (Fig.1,1).

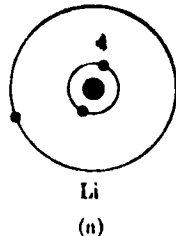


Fig. 1.1

Está formado por un núcleo, de carga eléctrica positiva y electrones, de carga eléctrica negativa, que se desplazan a su alrededor. Estos últimos se encuentran distribuidos siguiendo ciertas reglas en diferentes niveles de energía. Los electrones de la capa exterior, llamados de valencia, son los responsables del comportamiento químico del elemento. En gases nobles, de gran estabilidad química, poseen ocho electrones en su capa externa (excepto el Helio que tiene dos). Los átomos que no tienen ocho electrones en su capa externa tienden a adquirir esta configuración mediante distintos tipos de uniones para adoptar esta configuración de menor energía.

1.3. Tipo de enlaces

Los átomos se reúnen dando lugar a tres estados de agregación: gas, líquido y sólido.

La interpretación física de la afinidad entre los átomos debe buscarse en la existencia de fuerzas atractivas. Pero el hecho que sea difícil apretar los átomos demasiado íntimamente, a pesar de una fuerte afinidad indica que existen fuerzas repulsivas cuando las distancias interatómicas son cortas. Esta repulsión, base de la impenetrabilidad de la materia, es una fuerza de carácter local, o sea que a distancias grandes es más débil que la fuerza atractiva, pero a distancia corta es más intensa que ésta.

La posición de equilibrio de un par de átomos corresponde a la igualdad de dichas fuerzas. Teniendo en cuenta que la fuerza total sobre una partícula se puede definir como la derivada de la energía potencial con respecto a la posición ($F = -\partial u / \partial r$) se deduce que la energía es mínima en la posición de equilibrio (Fig.1.2).

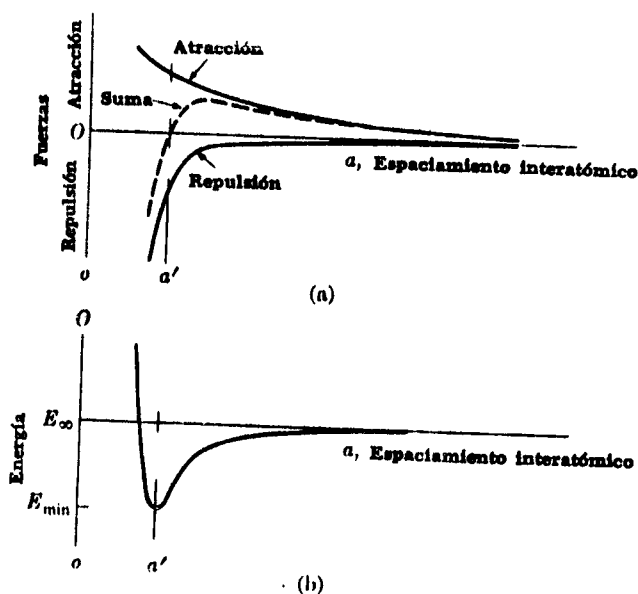


Fig.1.2

La naturaleza de la fuerza de unión estática que dan lugar al enlace de átomos o moléculas son casi en su totalidad electrostáticas con pequeñas contribuciones magnéticas; la otra contribución, importante en la energía de enlace la constituyen los efectos cinéticos procedentes del movimiento de los electrones.

En algunos casos, no es posible clasificar ciertos sólidos, en otros se puede hacer una distribución cuantitativa, aproximada, de la contribución de los distintos tipos de enlace a la energía de enlace total.

Los principales tipos de enlace, y sus características, son mostradas en la tabla 1.

Tipo de enlace	Ejemplos	Energía enlace Kcal/mol	Características
Iónico	Na Cl	180	Fuerte absorción en el infrarrojo; débil conductividad eléctrica a baja temperatura, buena conduc. elec. a altas temperaturas.
	Li F	240	
Covalente	Si C	170	Gran dureza, débil conductividad a baja temp. en especies puras.
		283	
Metálico	Na	26	Elevada cond. eléctrica.
	F	94	
Molecular	A	1.8	Puntos de fusión y ebullición bajos.
	CH ₄	2.4	

1.4. Enlace iónico

El enlace iónico, llamado también heteropolar, es aquel en el que un electrón de un átomo de un elemento A pasa a otro átomo de un elemento B debido a que encuentra un nivel más bajo de energía. El resultado de esto es un agregado compuesto de iones positivos y negativos en lugar de átomos aislados.

Analizaremos como enlace iónico típico, el cloruro de sodio (Na Cl), (Fig. 1.3).

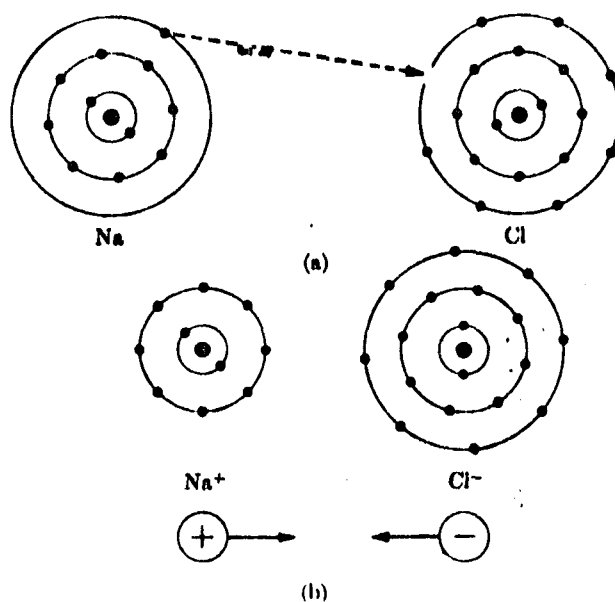


Fig 1.3

El electrón de la capa externa del sodio posee una energía relativamente alta o sea con poco consumo de energía se le puede expulsar del átomo para originar así un ión positivo (elemento electropositivo).

El cloro, cuya capa externa está casi completa puede aceptar un electrón con mucha facilidad (elemento electro negativo) .

Debido a esto hay una transferencia de electrones de los átomos de Sodio a los de Cloro, es decir de los elementos electropositivos o electronegativos. Por esta razón, un compuesto de átomos de Cloro y Sodio se convierte en un compuesto de iones positivos de sodio y negativos de cloro. La energía de tal agregado disminuye aún más, si los vecinos más próximos de cada ión son iones de signos contrarios. Debido a esto se produce una atracción electrostática entre la carga de signos opuestos.

En la Fig.1.4 se ilustra, en dos dimensiones esta ordenación.

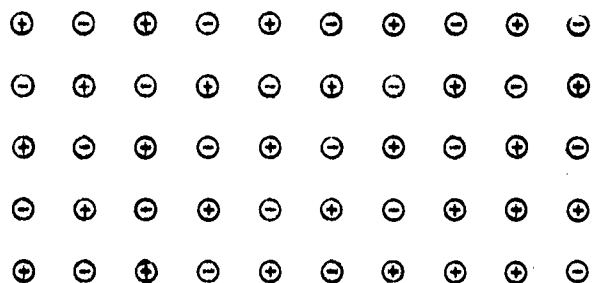


Fig.1.4

La fuerza de atracción electrostática o coulombiana es de la forma conocida.

$$\vec{f} = \frac{e_1 e_2}{r_{1,2}^2}$$

donde : e_1 y e_2 son las cargas de los iones 1 y 2

$r_{1,2}$ distancia entre iones

La energía potencial coulombiana correspondiente para un par de iones es :

$$\phi = \frac{e_1 e_2}{r_{1,2}}$$

(Recordemos que la fuerza es la derivada de la energía)

Cada ión tiene en el espacio 6 vecinos inmediatos de signo contrario y 12 siguientes del mismo signo. Como la distancia entre los iones de signo contrario son menores que entre los del mismo signo, predominan las fuerzas de atracción electrostática sobre las de repulsión entre iones del mismo signo. El conjunto podría contraerse indefinidamente si cada ión pudiera considerarse constituido por una carga puntiforme, como hemos supuesto implícitamente hasta ahora. Pero esto no ocurre y a las fuerzas ya citadas se agrega una tercera que aparece cuando las cargas electrónicas de los iones se superponen. Cuando esto sucede, se producen fuerzas de repulsión que separa unos de otros.

Esto se debe a que tanto el ión sodio como el ión cloro poseen su capa exterior completa, característica de los gases nobles. El sodio, al perder un electrón, se vuelve ión positivo con

la configuración electrónica del neón, mientras que el cloro al ganar un electrón, asume la del argón.

La energía repulsiva es de la forma

$$\phi_r = \frac{B e^2}{r^n}$$

donde : B, es una constante

n, exponente cuyo valor es del orden de 9

De acuerdo a la teoría de Born, la energía potencial total en un cristal del tipo NaCl es :

$$\phi = \phi_M + \phi_r$$

donde : ϕ_M , es la energía debida a interacciones coulombianas

ϕ_r , es la energía repulsiva

la energía potencial total de un cristal conteniendo un mol de NaCl será : (Fig.1.5)

$$U = - \frac{N z^2 e^2 A}{r} + \frac{N B e^2}{r^n}$$

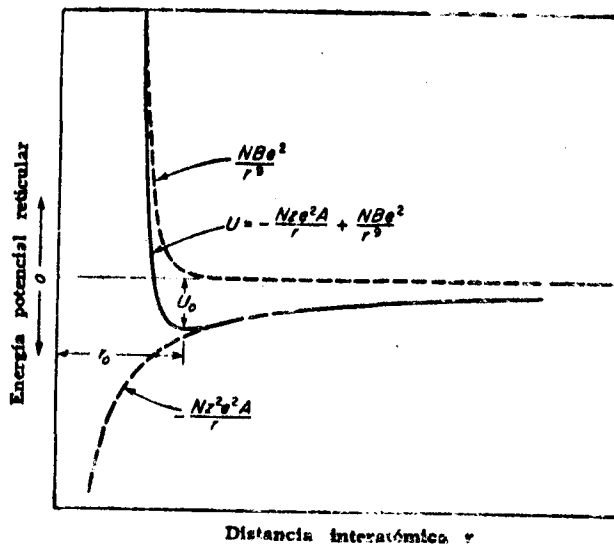


Fig.1.5

donde : N, es el número de Avogrado

A y B, constantes

1.5. Enlace covalente u Homopolar

Una segunda manera de disminuir la energía de los átomos, cuando se forma un agregado, se presenta cuando los electrones pueden compartirse entre átomos con capa externa parcialmente llena. Este tipo de enlace se denomina covalente u homopolar. Dos átomos de hidrógeno, por ejemplo, comparten su electrón y su configuración electrónica se asemeja a la del helio (Fig.1.6).

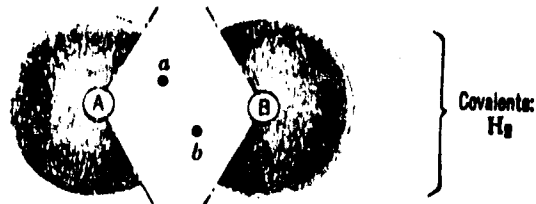


Fig.1.6

Otros ejemplos son el O_2 , N_2 , F_2 , FH que aparecen también en la Fig.1.7 .

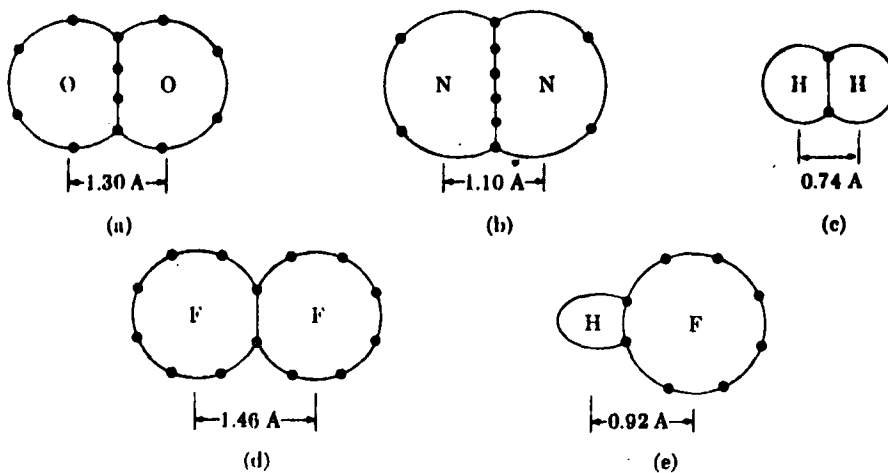


Fig.1.7

En el caso del enlace covalente se pueden formar moléculas o cristales. Dos átomos de cloro comparten dos electrones para formar una molécula de cloro. En el silicio cada átomo se rodea de cuatro vecinos inmediatos con cada uno de los cuales comparte dos electrones, resultando cada átomo de silicio en el centro de un tetraedro formado por átomos de silicio.

Este esquema se puede repetir indefinidamente en forma tridimensional originándose un cristal con estructura cúbica del diamante. (Fig. 1.8).

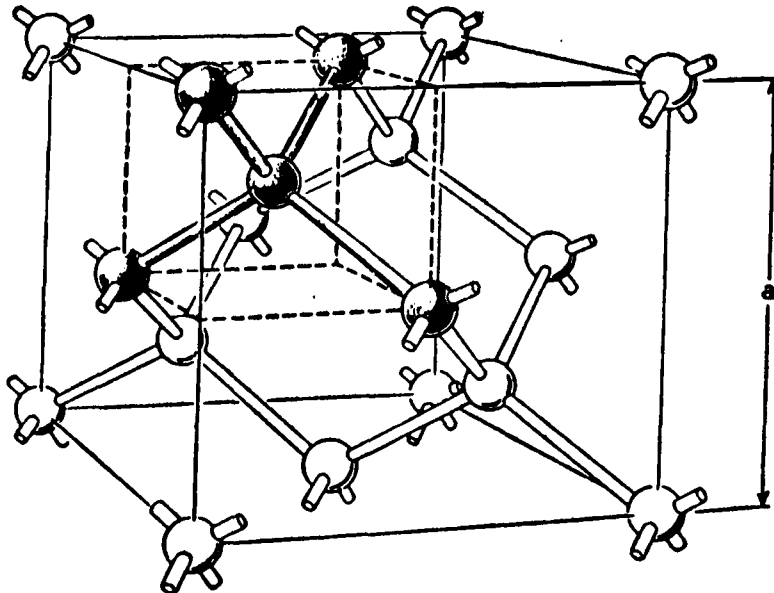


Fig. 1.8

En otros casos, el oxígeno por ejemplo, se produce una saturación que impide la unión de más de dos átomos para formar un cristal.

El enlace covalente se produce también entre átomos no idénticos como, por ejemplo el FH, aunque en muchos compuestos el enlace es del tipo intermedio entre el iónico y el covalente.

No existe una explicación satisfactoria, en términos de la física clásica, para esta unión. La energía de unión se pone de manifiesto cuando se realiza el tratamiento mecánico cuántico del problema. Esta energía recibe el nombre de energía de "intercambio" y no tiene análogo en la física clásica. Por este motivo sólo daremos aquí las características principales de este enlace que son :

- a) Densidad elevada de electrones entre los iones.
- b) Propiedades direccionales marcadas.
- c) Saturación.

Aparentemente existe una continuidad entre los cristales iónicos y los covalente. Con frecuencia es importante estimar hasta qué límite un enlace determinado es iónico o covalente, pero esto puede resultar difícil de precisar.

1.6. Enlace metálico

Los metales se caracterizan por una elevada conductividad eléctrica y, por consiguiente, una porción de sus electrones deben poseer libertad de movimiento. Estos electrones responsables de la conductividad eléctrica se denominan electrones de conducción.

En algunos metales como los alcalinos, la interacción de los núcleos iónicos con los electrones es ampliamente responsable de la energía de enlace.

El cristal de un metal alcalino puede considerarse como un compuesto de iones positivos situados en un campo, más o menos uniforme, de cargas negativas.

La naturaleza difusa de la unión metálica es responsable de la fácil deformabilidad de los metales.

A medida que aumenta el número de electrones de valencia y la rigidez en que están ligados, se hace más localizada en el espacio, va aumentando la naturaleza covalente de la unión. Los metales de transición (átomos metálicos con capa d incompleta), tales como el hierro, níquel, tungsteno y titanio, presentan una fracción signi-

ficativa de ligadura covalente, esto explica, en parte, sus altos puntos de fusión.

1.7. Cristales moleculares

Los átomos de los gases inertes y las moléculas saturadas están ligadas en la fase sólida por débiles fuerzas electrostáticas denominadas fuerzas de Van der Waals.

El origen de esta fuerza es el siguiente : en un átomo o molécula de momento dipolar nulo, en valor medio, existe un momento dipolar fluctuante asociado con la posición instantánea de los electrones en el átomo. (Fig. 1.9).

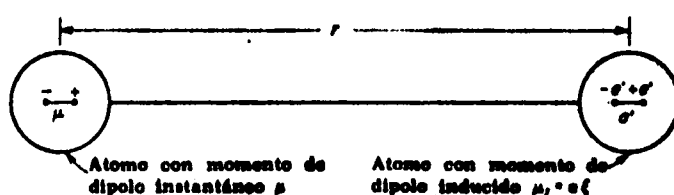


Fig. 1.9

El campo eléctrico instantáneo asociado al momento inducirá un momento dipolar en los átomos próximos. (Fig. 1.10).

La interacción media del momento original y el momento inducido da lugar a una fuerza atractiva entre los átomos. Muchos sólidos orgánicos son estables gracias a las fuerzas de Van der Waals.

Estos cristales se caracterizan por tener enlaces débiles con bajos puntos de fusión y ebullición.

La energía de enlace total se puede expresar mediante la fórmula :

$$U = - \frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^n}$$

Se demostró que si n es igual a 12 se correlacionan bien las propiedades observadas en los gases nobles.

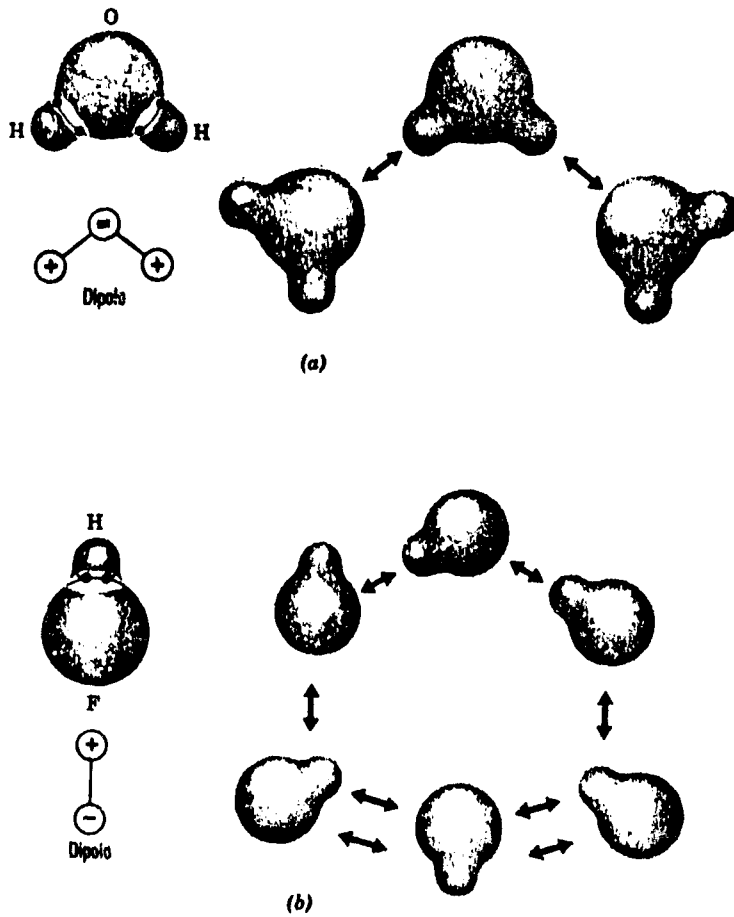


Fig. 1.10

1.8. Conclusiones

Los cuatro tipos de enlace se han descrito en términos de - electrones y órbitas. También pueden describirse en términos de funciones de onda de la Mecánica Cuántica que nos proporciona una justificación más rigurosa y cuantitativa de la disminución de energía que resulta del agregado de los átomos. Pudimos ver, en el análisis realizado de los diferentes tipos de enlace, que estos no son muy diferentes ni mutuamente exclusivos. Sería probablemente más real

considerar en la mayoría de los casos, como una mezcla de diversos tipos. Un ejemplo de enlace mixto podría ser el del CaSO_4 donde el azufre con el oxígeno se unen covalentemente y el SO_4^{2-} se une iónicamente con el Ca^{++} . Como se muestra en la Fig. 1.11.

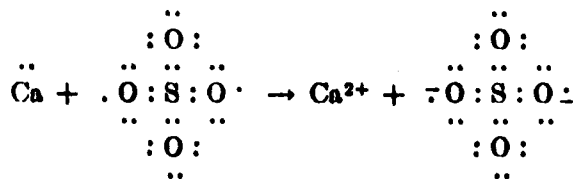


Fig. 1.11

1.9. Resumen

Energía de enlace : energía necesaria para disociar el sólido en átomos, moléculas o iones separados. Se establece a temperatura ambiente excepto para los cristales moleculares en que se toma a la temperatura de fusión.

Enlace iónico : es, esencialmente, el enlace resultante de la interacción electrostática de iones con cargas opuestas.

Enlace covalente : es el enlace formado por coparticipación de un par de electrones.

Enlace molecular : se produce por la acción de débiles fuerzas electrostáticas denominadas fuerzas de Van der Waals surgidas como consecuencia de la polaridad de las moléculas.

Enlace metálico : se puede suponer que las fuerzas que mantienen unido a un cristal metálico proceden de la atracción de los iones con carga positiva por la "nube" de carga negativa que queda entre ellos.

ESTRUCTURA DE LOS METALES

2.1. Introducción

Las propiedades de los cuerpos dependen directa o indirectamente de la distribución de los átomos que la componen. La materia se presenta, como sabemos, en tres estados :

gas : con una distribución, de las moléculas que lo componen, al azar (este caos imperante es la base de la teoría cinética de los gases).

líquidos y sólidos amorfos : presentan un ordenamiento parcial o de corto alcance.

sólidos cristalinos : ordenamiento de los átomos en toda su extensión es decir de largo alcance.

2.2. Cristal

Como estudiaremos los sólidos veremos que se entiende por cristal. Definiremos como cristal a la formación ordenada de átomos en el espacio. Existen numerosos tipos de estructuras cristalinas. Por fortuna, los metales cristalizan, en su gran mayoría, en estructuras relativamente sencillas.

2.3. Modelo de esfera rígida

Al formarse un cristal, con un ordenamiento tan compacto como sea posible, la energía de este ordenamiento es mínima (los átomos ocupan posiciones de mínimo de energía) siendo máximo el número de ligaduras. En primera aproximación, estos átomos pueden ser tratados como esferas rígidas. El número de las que pueden apilarse en torno de una central, de manera que todas se toquen, es doce.

De las estructuras que aparecen en los metales, dos observan ordenamientos de este tipo. La estructura cúbica de caras centradas (f.c.c.) y la estructura hexagonal compacta (h.c.p.).

2.4. Diferencias de apilamiento entre la estructura f.c.c. y h.c.p.

Vimos que las estructuras f.c.c. y h.c.p. tienen el apilamiento más compacto posible. La diferencia que existe entre ellas es la forma en la cual se produce el apilamiento. Fig. 1.12 .

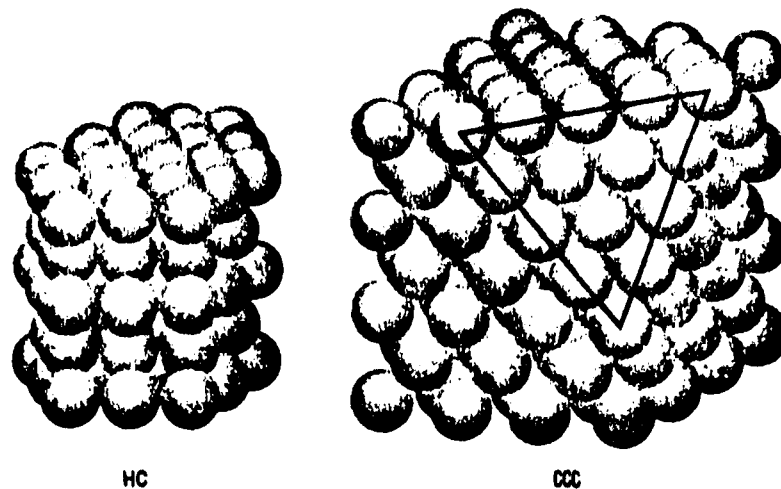


Fig. 1.12

La sucesión de apilamiento más compacta posible se produce de la siguiente manera : (Fig. 1.13) .

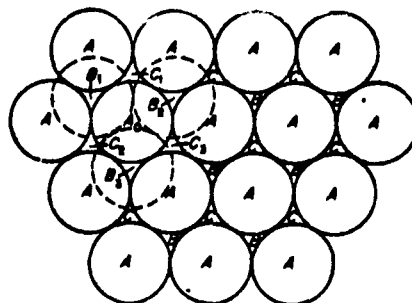


Fig. 1.13

Designaremos a los átomos del plano base por A y a los de la segunda capa por B. La mayor densidad se obtendrá cuando los átomos B se alojen en el hueco que dejan tres átomos de la capa A y se apoyen en ellos. La tercera capa, que llamaremos C, tiene dos alternativas, puede caer sobre los átomos A, o estar desplazada. En otras palabras

se obtendrá dos tipos de sucesiones regulares de máxima densidad AB AB AB AB (la capa C está en la misma posición, sobre la capa B, que la inferior A, por eso la llamamos a esta capa C con A) y ABC ABC ABC (el átomo C está desplazado de la capa A inferior). El apilamiento AB AB AB corresponde a la estructura hexagonal compacta y el apilamiento ABC ABC ABC a la cúbica de caras centradas (Fig.1.14).

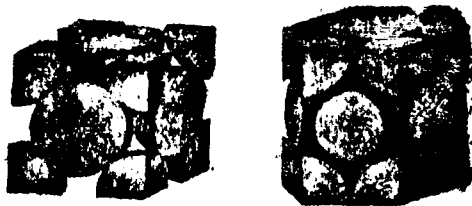


Fig. 1.14

Esta diferencia de apilamiento, a pesar de ser las dos igualmente compactas, se refleja en las propiedades físicas de ambas estructuras. Al continuar cada apilamiento en el espacio resulta una forma geométrica que dá lugar a estas dos designaciones. Por este motivo existen un número de planos distintos en ambas estructuras. En la estructura cúbica centrada en las caras existen cuatro planos compactos, mientras que en la estructura hexagonal existe sólo uno. Los planos compactos de la estructura f.c.c. se los denomina octaédricos y los de la estructura hexagonal basal (ambos de igual compactidad). Como veremos más adelante ésto da origen a marcadas diferencias de propiedades mecánicas de ambas estructuras.

2.5. Estructura cúbica de cuerpo centrado (b.c.c.)

Dos tercios, aproximadamente, de los metales, exhiben las estructuras descritas anteriormente (f.c.c. y h.c.p.), a temperatura ambiente, la mayoría del tercio restante, que no solidifica con estructura compacta, son los metales alcalinos (Na,K,etc.) y los de transición (Fe,Cr,W,etc.) que presentan la estructura cúbica de cuerpo centrado (b.c.c.) (Fig.1.15) que no es tan compacta como las otras pero aún

así es un ordenamiento atómico de energía relativamente baja.

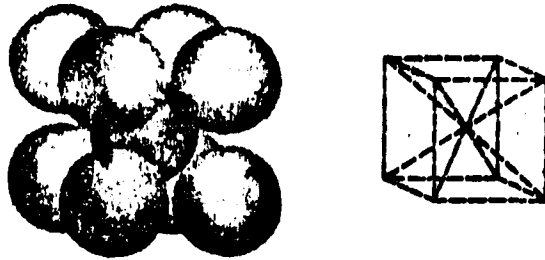


Fig. 1.15

La mayoría de los metales alcalinos se transforman a muy bajas temperaturas de b.c.c. a f.c.c. ó h.c.p. Una posible razón de esto es que su ordenamiento menos compacto a temperatura ambiente es el efecto de la energía térmica. Se cree que la razón por la cual la mayoría de los metales de transición solidifican en una estructura b.c.c. es la naturaleza parcialmente covalente y, por lo tanto direccional de sus uniones. Fig. 1.16 .

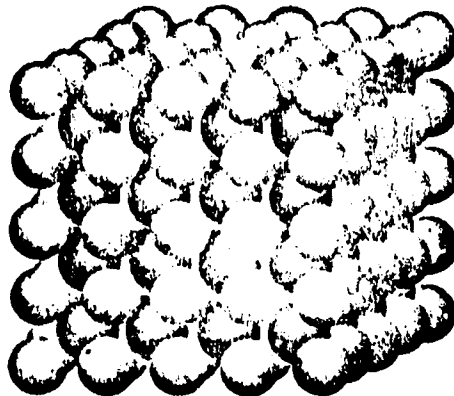


Fig. 1.16

2.6. Número de coordinación

El número de coordinación de un átomo en un cristal se define como el número de vecinos más cercanos que posee, o sea nos dá la idea de la compacidad del sistema. Para las estructuras f.c.c. y h.c.p. (igualmente compactas) este número es doce. Para la estructura b.c.c.

el número de coordinación es ocho .

ESTRUCTURA CRISTALINA

2.7. Introducción

Al introducirnos más en el estudio de los cristales se hace evidente la necesidad de un esquema racional para estudiarlos. El esquema tomado se apoya en el ordenamiento regular que posee el cristal en el espacio. Las estructuras cristalinas se describirán en términos de un concepto geométrico idealizado llamado red espacial.

2.8. Redes de Bravais

Definiremos como red espacial a la ordenación tridimensional de puntos en que cada uno de ellos tiene alrededores idénticos. La ordenación de los puntos de la red con relación a uno dado es idéntica con la que ocurre alrededor de otro cualquiera. Estos puntos se denominan nodos de la red. Existen catorce redes espaciales. Es decir no existen más que catorce formas posibles de ordenar puntos en el espacio con la condición de que tengan alrededores idénticos. Estas catorce formas posibles de ordenamiento recibe el nombre de redes de Bravais, (Fig. 1.17) . Por supuesto existen muchos mas modos de construir un cristal real por apilamiento de átomos, es decir existen muchas más estructuras cristalinas que catorce.

Sin embargo, cualquier estructura cristalina consiste en algún motivo fundamental repetido en cada punto (nodo) de la red espacial, de la cual, como dijimos ya anteriormente, existen catorce.

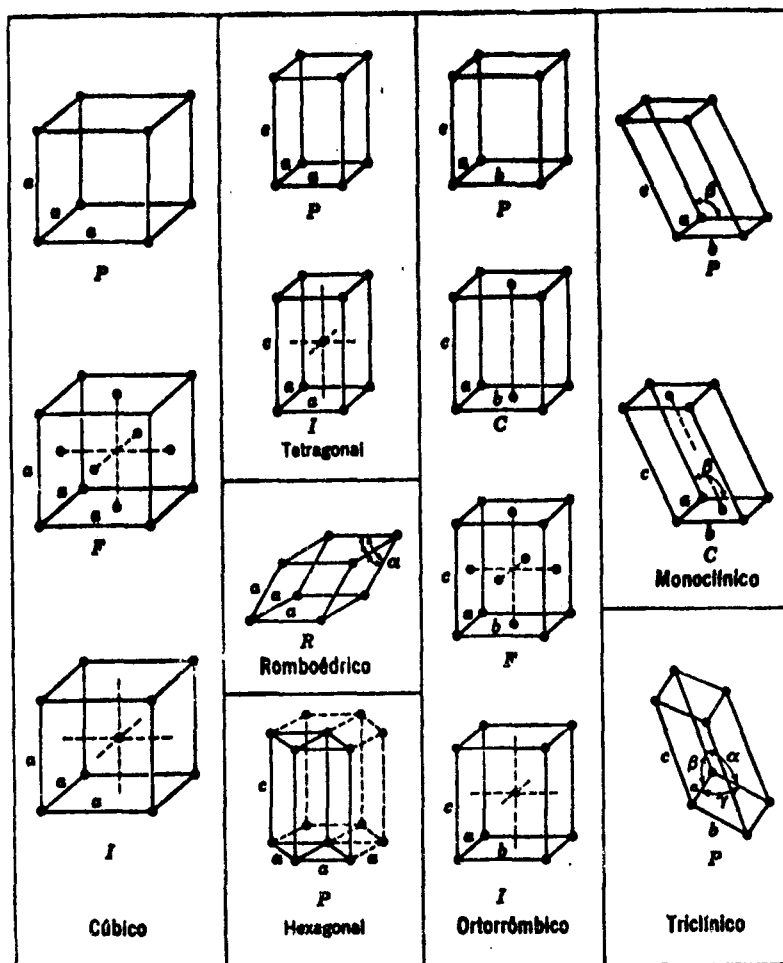


Fig. 1.17

Con cada punto de la red (nodo) pueden estar asociados uno o más átomos, pero por cada átomo o grupo de átomos idénticos con la misma orientación, en todo otro nodo de la red para satisfacer la definición de red espacial. El átomo o grupo de átomos asociados a cada nodo de la red constituye un motivo. De esta se deduce que deben existir mucho modos de construir un cristal real por apilamiento de átomos, es decir muchas más estructuras cristalinas que catorce. En otras

palabras no es lo mismo red cristalina que estructura cristalina.

2.9. Celda unitaria

Debido a que la estructura de un cristal perfecto es un diagrama regular de átomos, los ordenamientos atómicos pueden totalmente especificando las posiciones atómicas de alguna unidad repetitiva de la red espacial. Dicha unidad se denomina celda unitaria de la red espacial. Cada celda unitaria de una red espacial es idéntica en forma y tamaño y orientación a cualquier otra. Es el bloque constructivo fundamental de la estructura. Las celdas unitarias idénticas de una red espacial particular llenarán el espacio y generarán la red espacial particular cuando se las apile cara a cara.

Una red espacial puede tener varias celdas unitarias diferentes que satisfagan los criterios indicados más arriba, pero, por conveniencia, se eligen las celdas unitarias que presentan una geometría simple y contengan solamente unos pocos puntos de la red. Son ejemplos de celdas unitarias las 14 redes de Bravais, (Fig.1.17).

2.10. Celda primitiva

Si elegimos los vectores de la celda unitaria de tal manera que los únicos puntos recticulares en la celda ocupen sus vértices, o de otra manera que haya un solo punto recticular por celda, la celda resultante se denomina primitiva (Fig.1.18).

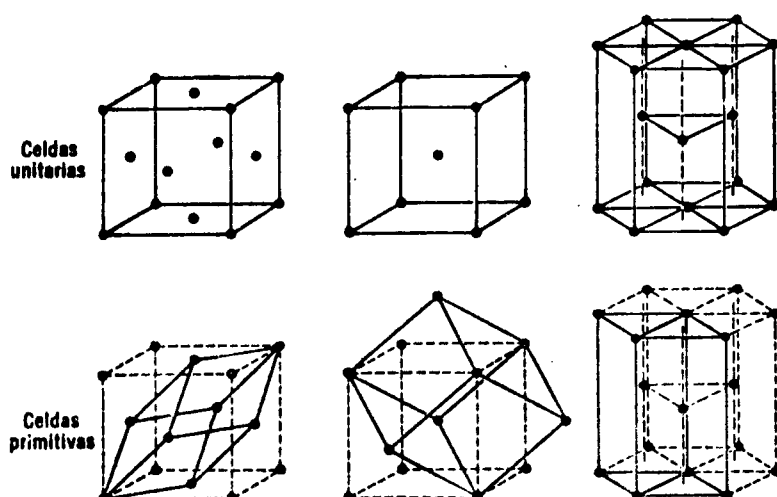


Fig.1.18

O sea que apilando estas celdas primitivas obtendríamos la misma red que apilando sus correspondientes celdas unitarias. Como dijimos anteriormente se toman las celdas unitarias nombradas por presentar una geometría simple lo cual facilita el manejo de las mismas.

2.11. Planos y direcciones cristalinas - Indices de Miller

Por los nodos de la red cristalina podemos hacer pasar planos. El concepto de plano cristalinoses muy útil. Una serie de fenómenos pueden ser descritos en base a este concepto. La difracción de rayos X puede considerarse como una reflexión de ciertos planos (ley de Bragg), el clivaje se produce según ciertos planos cristalográficos, lo mismo que el deslizamiento (slip), en los procesos de deformación.

Es necesario poder identificar los diferentes planos de un sistema cristalino. Para este fin se utilizan universalmente los índices de Miller.

2.12. Indices de Miller de planos cristalinos

Un plano en el espacio satisface la ecuación :

$$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1$$

donde a, b y c son las intersecciones del plano con los ejes x, y, z, respectivamente. Cada eje se gradúa tomando como unidad la longitud correspondiente a la arista de la celda. Para describir los planos cristalográficos se toman los ejes a lo largo de tres aristas no paralelas de la celda unitaria y se miden las intersecciones en función de la longitud unitaria. Estos números (a, b y c) se conocen como índices de Weis. El empleo de estos índices, o sea tomar las intersecciones a, b y c para representar un plano cristalino tiene la desventaja de que las intersecciones son, a menudo fracciones menores que la unidad y su valor puede ser infinito (en el caso de un plano paralelo a un eje). Por esta razón se toman los universalmente conocidos índices de Miller que se obtienen de la siguiente forma : se toman las intersecciones a cada eje, se calculan sus recíprocos y se multiplica por el mínimo común múltiplo.

Estos números que se denominan con h, k, l, son los índices de Miller, se los encierra entre paréntesis. Si alguna intersección es con una dirección negativa se coloca sobre el índice correspondiente el signo negativo. Esto es posible que quede más claro con el siguiente ejemplo :

Supongamos que a, b y c son las intersecciones con los ejes x, y z respectivamente. Entonces los índices de Miller serían

$$h = \frac{M}{a} ; k = \frac{M}{b} \text{ y } l = \frac{M}{c}$$

siendo M el mínimo común múltiplo de los índices de Weis (a, b y c)

Supongamos

$$\begin{aligned} a &= 1 \\ b &= 2 \\ c &= -3 \end{aligned}$$

los recíprocos serán

$$\frac{1}{a} ; \frac{1}{b} ; \frac{1}{c} \text{ o sea } \frac{1}{1} ; \frac{1}{2} ; -\frac{1}{3}$$

el mínimo común múltiplo será

$$M = a.b.c = 1.2.3 = 6$$

o sea que

$$h = \frac{M}{a} = \frac{6}{1} = 6$$

$$K = \frac{M}{b} = \frac{6}{2} = 3$$

$$l = \frac{M}{c} = \frac{6}{-3} = -2$$

por lo tanto

$$(h \ k \ l) = (6 \ 3 \ \bar{2})$$

Los índices de Miller encerrados entre paréntesis designan solamente a un plano o a una serie de planos paralelos (familia de planos). Para designar todos aquellos planos que son equivalentes en un cristal (que tengan la misma densidad atómica) llamados planos de la misma forma, se encierran los índices de Miller entre llaves (Fig.1.19).

Ejemplo : los planos de la cara de un cubo son de la forma

$$\langle 100 \rangle = (100) ; (010) ; (001) ; (\bar{1}00) ; (0\bar{1}0) ; (00\bar{1}) .$$

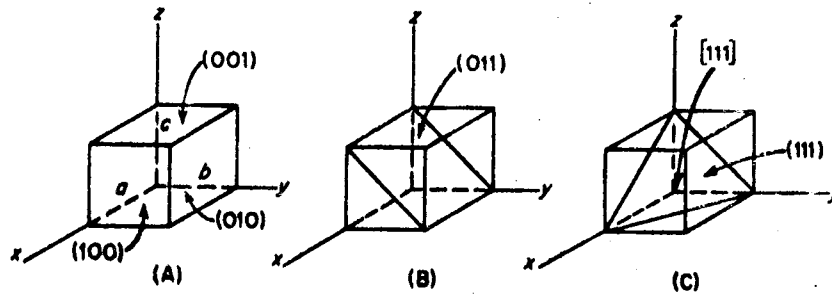


Fig. 1.19

2.13. Distancia entre planos

Una cosa importante de hacer resaltar es el hecho de que cuando mayor densidad de átomos tengan un plano mayor será la distancia existente entre ellos.

Para el caso del sistema cúbico (su deducción se verá en el curso de Cristalografía y Rayos X) esta distancia está dada por :

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

siendo a el parámetro de la red.

2.14. Direcciones cristalográficas

Los índices de una dirección son simplemente las componentes vectoriales de la dirección a lo largo de cada uno de los ejes coordenados, reducidos a los enteros más pequeños. Estos números se los encierra entre corchete [uvw] (Fig.).

Ejemplo : el eje x tiene los índices [100] el eje y [010] y el z [001] .

Cuando la dirección tiene una o varias componentes negativas se coloca sobre las mismas el signo menos.

Ejemplo : el eje -x será [100] .

Un juego completo de direcciones equivalentes (direcciones de una forma) se indican así $\langle uvw \rangle$.

Una cosa importante de hacer resaltar es que no siempre una dirección es perpendicular a un plano que tiene los mismos índices. Esto sólo ocurre para el caso de cristales cúbicos y en algunos casos para los hexagonales.

2.15. Planos y direcciones en cristales hexagonales Índices de Miller - Bravais

a) Planos cristalográficos

Con el objeto de destacar la simetría de la red hexagonal se utilizan los índices de Miller-Bravais en lugar de los índices de Miller. Esto se debe a que los índices de Miller no dan una idea de esta simetría y es así que planos de la misma forma (equivalentes en el cristal) resultan con índices distintos.

Se ilustrará esto con un ejemplo.

Ejemplo : las caras del hexágono (Planos prismáticos). El plano (100) y (1 $\bar{1}$ 0) son planos de la misma forma (prismáticos) y tienen índices distintos.

La notación de Miller-Bravais subsana este problema. Esta notación se representa con cuatro números, los índices de un plano, h k i l encerrados entre paréntesis (h k i l). Estos índices se determinan de la misma forma que los de Miller y los ejes son (Fig.1.20) a_1 a_2 a_3 y C.

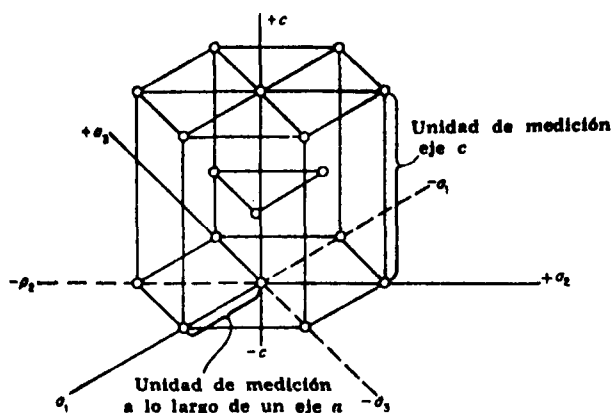


Fig. 1.20

Debido a que sólo tres ejes no coplanares son necesarios para determinar un plano en el espacio, los cuatro índices no pueden ser independientes entre sí. Sus valores guardan la relación

$$l = (h+k)$$

Ejemplo : en la Figura 1.21 se representa el plano basal (0001) y uno de los prismáticos (1010). El plano prismático pertenece a la forma $\langle 10\bar{1}0 \rangle$.

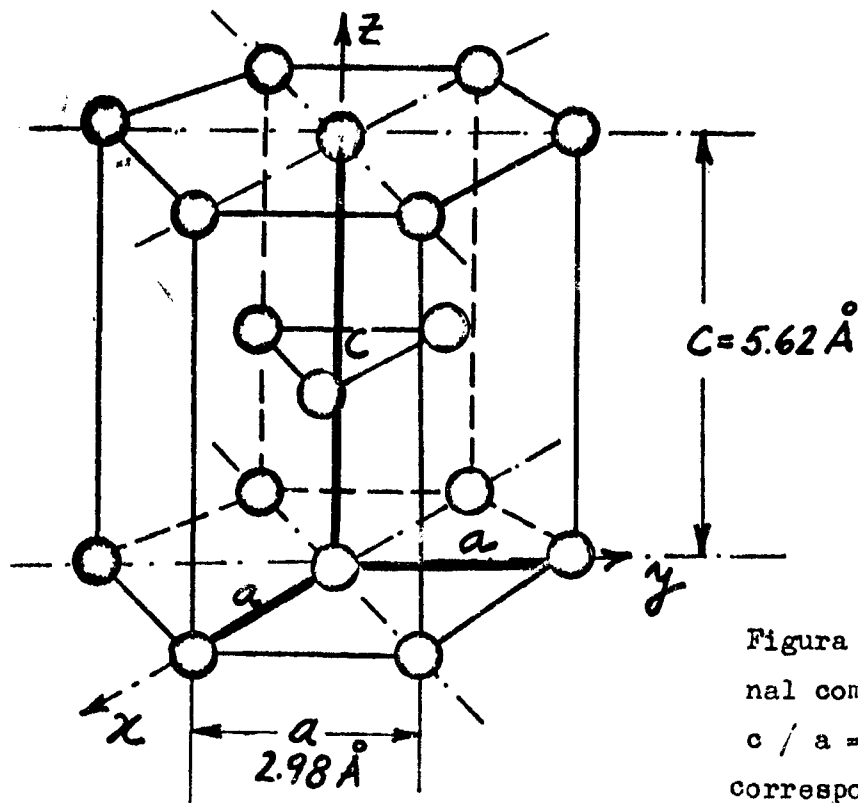


Figura 6. Estructura hexagonal compacta. Relación ideal $c/a = 1.633$. La figura corresponde al cadmio.-

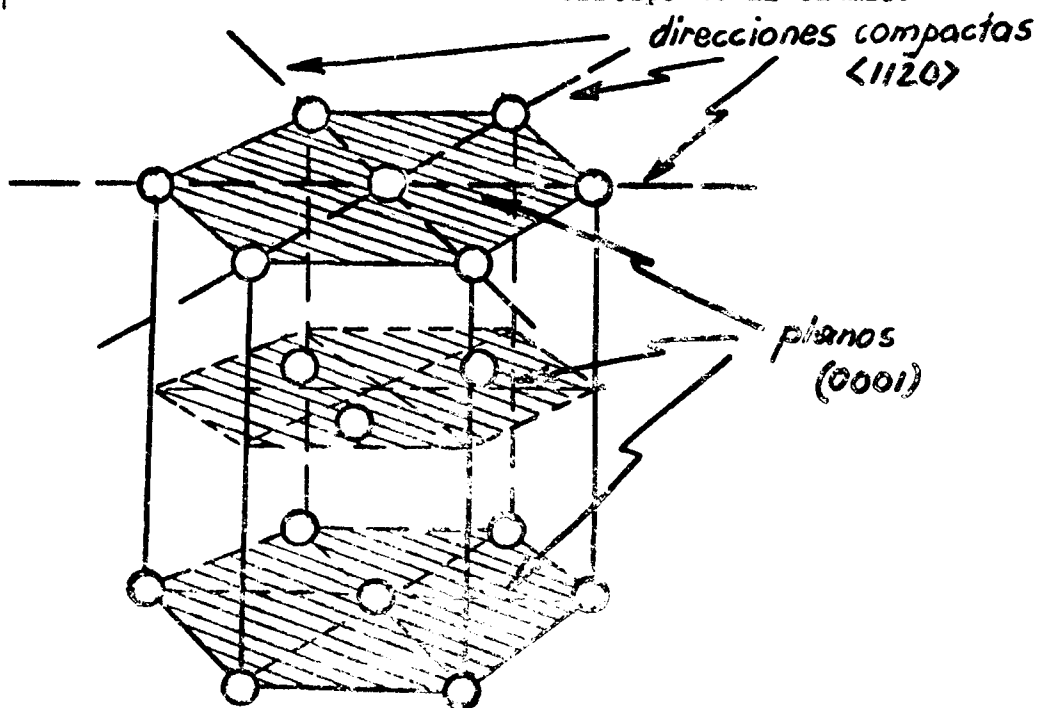


Fig. 1.21

b) Direcciones cristalográficas

La notación de cuatro índices se emplea también para el hexagonal, en el caso de direcciones. De los índices de Miller $[u\ v\ w]$ se pasa a los de Miller-Bravais $[u\ v\ t\ w]$. Al escribir los índices de direcciones, el tercer dígito debe ser siempre igual a la suma negativa de los dos primeros dígitos. Esto es si los dos primeros dígitos son 2 y 1 el tercero debe ser -3 de otra manera $[2\ 1\bar{3}0]$.

2.16. Relaciones entre los índices de Miller y Miller-Bravais

Es a veces conveniente pasar de una notación a otra.

En el caso de planos no es problema debido a que para pasar de la notación de tres a la de cuatro empleamos la relación $i = (h + k)$. Para pasar de la notación de cuatro a la de tres hasta despreciar el tercer índice i .

En el caso de direcciones esta relación es más complicada. Daremos las relaciones existentes entre ellas y su deducción se verá en el Curso de Cristalografía y Rayos X.

Si $[U\ V\ W]$ es la notación de tres y $u\ v\ t\ w$ la de cuatro se tienen las relaciones : (Fig. 1.22)

$$U = u - t \quad ; \quad V = v - t \quad ; \quad W = w$$
$$u = \frac{1}{3}(2U - V) \quad ; \quad v = \frac{1}{3}(2V - U) \quad ; \quad t = -(u + v)$$

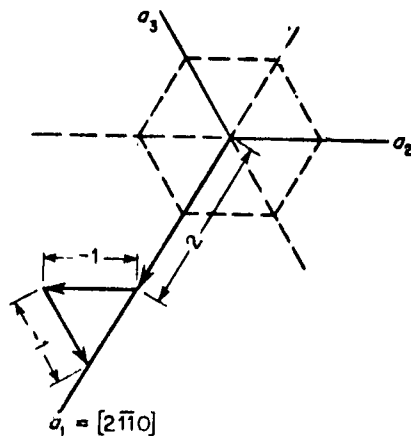


Fig. 1.22

El ejemplo de la Fig.1.22 aclara de donde provienen estas relaciones.

Resumen

Sitio atómico : porción normal ocupada por un átomo en un cristal.

Dirección compacta : línea a lo largo de la cual los átomos están en contacto.

Estructura cristalina : arreglo tridimensional, repetitivo, de átomos o iones en un sólido.

Red cristalina : representación geométrica de las posiciones relativas de los átomos o iones en un cristal ideal.

Nodo de la red : punto de la red cristalina que tiene alrededores idénticos en el espacio.

Motivo : el átomo (ión) o grupo de átomos (iones) asociados a cada nodo de la red con la misma orientación en todos los nodos.

Celda unitaria : es una unidad repetitiva conveniente que indica posiciones atómicas a la vez que nodos de la red.

Estructura b.c.c. : arreglo atómico en el cual un átomo está en contacto con ocho átomos idénticos situados en las esquinas de un cubo imaginario.

Estructura f.c.c. : arreglo compacto de átomos en el cual doce átomos idénticos (en contacto entre sí) tocan a uno central de la misma especie. El resultado es un poliedro que posee simetría cúbica.

Estructura h.c.p. : arreglo compacto de átomos en el cual doce átomos en contacto entre sí tocan a uno central de la misma especie. El resultado es un prisma de simetría hexagonal.

Celda primitiva : es la celda unitaria que sólo posee puntos de la red en sus vértices. O sea un nodo por celda.

CRISTALES REALES

2.17. Estructura de cristales reales

Las redes descritas en la teoría reticular pertenecen a cristales ideales por lo tanto idealizaciones de las estructuras reales mucho más complicadas. La primera complicación consiste en que los átomos no están quietos sino que vibran continuamente alrededor de una posición media. La frecuencia de vibración depende de las fuerzas interatómicas y su amplitud de la temperatura. Por otro lado existen numerosas causas de irregularidades en la estructura cristalina que persisten si se adopta un promedio temporal de las posiciones atómicas, las más frecuentes de aquellas son los átomos de sustancia extrañas que existen en el cristal añadidos intencionalmente como elementos de aleación y en caso contrario como impurezas.

Numerosas observaciones ponen en evidencia que, aparte de las vibraciones reticulares y los átomos extraños, existen, en los cristales numerosas irregularidades. A estas irregularidades las llamaremos imperfecciones o defectos. Estos defectos se clasifican en :

- puntuales
- lineales
- bidimensionales
- de volúmen

Analizaremos aquí sólo los dos primeros.

2.18. Defectos puntuales

El estudio de fenómenos como la deformación en que intervienen movimientos de los átomos a través del cristal, ha demostrado que deben existir en el cristal imperfecciones de un tamaño del orden atómico. Pueden considerarse dos tipos :

- a) las vacancias, es decir, la ausencia de un átomo en un punto donde debería encontrarse.

- b) Los átomos intersticiales, es decir, átomos del mismo tipo que los de los nodos que en vez de ocupar los nodos normales se han desplazado a intersticios de la red (Fig. 1.23).

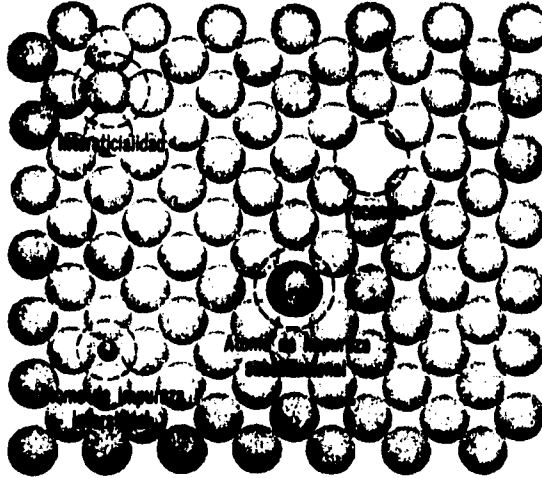


Fig. 1.23

2.19. Borde de grano

Los metales son normalmente policristalinos, es decir, constituidos por cristales pequeños, o granos, que se interpenetran.

Cada grano está unido a sus adyacentes en todos los puntos de su superficie, por un borde de grano, cuya forma no guarda relación alguna con la simetría interna del cristal. Al no encontrarse en los bordes de grano los átomos en sus posiciones habituales es esto, también, una imperfección cristalina y es un defecto de dos dimensiones (Fig.1.24 - Fig. 1.25).

Existen otros tipos de defectos, lineales, que son las dislocaciones que no analizaremos y otros de volúmen.

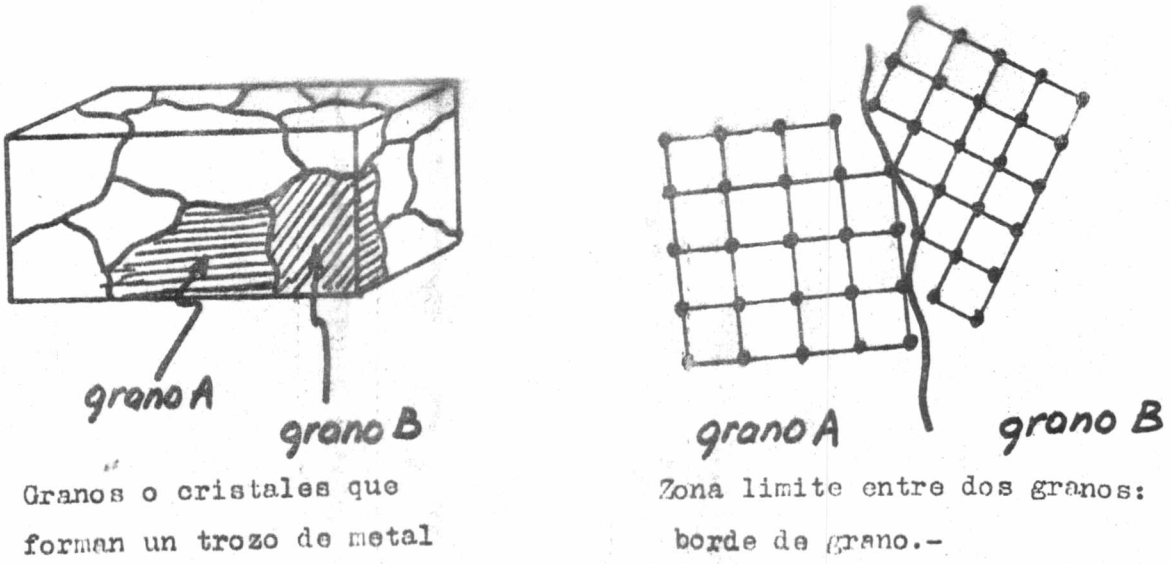
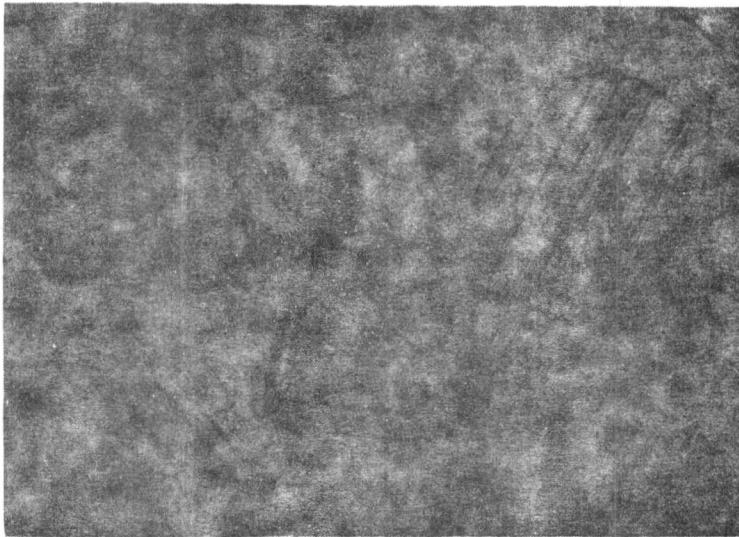


Fig. 1.24



Micrografia 4
Cu + 20% Zn

Fig. 1.25

-PROBLEMAS-

1. Dibujar los siguientes planos y direcciones en una celda unitaria cúbica:
 (100) ; (110) ; (111) ; (120) ; (101) ; $(\bar{1}\bar{1}0)$; $(11\bar{2})$; $(1\bar{2}1)$; $(\bar{2}11)$; $(12\bar{3})$; $[110]$;
 $[100]$; $[111]$; $[120]$; $[\bar{1}\bar{1}1]$; $[101]$; $[11\bar{2}]$; $[1\bar{2}1]$; $[\bar{2}11]$; $[12\bar{3}]$
2. En una celda hexagonal dibujar los planos y direcciones: $(1\bar{2}10)$; $(10\bar{1}2)$;
 $(\bar{1}011)$; (1120) ; (1210) ; $(10\bar{1}0)$; (0001) ; $[110]$; $[\bar{1}\bar{1}1]$; $[021]$
3. Mostrar que en una red cúbica el plano (111) es perpendicular a la dirección $[111]$.
4. Tomando solo tres ejes para el sistema hexagonal, cómo se designarían en índices de Miller, los planos $(10\bar{1}0)$, $(\bar{1}100)$?
5. Mostrar que hcp y fcc son igualmente compactos y que son más compactos que bcc.
6. Dibuje, en el sistema cúbico, la familia de planos:

$\{111\}$	cuántos son
$\{100\}$	"
$\{110\}$	"
$\{112\}$	"
$\{120\}$	"
7. A qué sistema cristalino pertenece el Na Cl y Cs Cl ?
8. Calcule las distancias interplanares para los siguientes planos del sistema cúbico:
 (100) ; (110) y (111)
- 9.Cuál es el valor de c/a para hcp?
10. Determinar los índices de las 6 caras verticales de la celda unitaria hexagonal compacta.

- I.1.-El Zn es h.c.p..La altura de la celda unitaria es $h = 4,94 \text{ \AA}$ y los centros de los átomos de la celda unitaria estan separados,unos de otros, $2,65 \text{ \AA}$.
- a)¿cuántos átomos hay en la celda?
- b)¿cuál es el volumen de la celda?
- c)Si la densidad verdadera es $7,135 \text{ g/cm}^3$ ¿cómo es comparada con la densidad calculada? Explicar su diferencia
- I.2.-
¿Cuál es la densidad lineal de los átomos en la dirección $[112]$ a)del Fe b)del Ni ?
- I.3.-
El titanio tiene una estructura h.c.p.($a = 2,95 \text{ \AA}$ y $h = 4,683 \text{ \AA}$)por debajo de 880°C y estructura b.c.c. ($a = 3,32 \text{ \AA}$)por arriba de 880°C .Al pasar por arriba de 880°C se expande o se contrae?
- I.4.-
¿ Al solidificar un gas noble pasa a ser conductor o aislador?
- I.5.-
Escribir la expresión correspondiente a los ejes a_1, a_2, a_3 y c de la celda hexagonal utilizando los índices de Miller-Bravais.
- I.6.-
Explique por que los átomos de C en el diamante se unen covalentemente,mientras que los átomos de Pb se unen metálicamente,aún cuando el C y el Pb tienen C/U 4 electrones de valencia.¿Que efectos esperaria encontrar debido a la diferencia de unión sobre la la resistencia ductilidad y conductividad?

B I B L I O G R A F I A

- 1 - BARRET, Charles - Estructura de los Metales.
- 2 - VAN VLACK, Lawrence - Elements of Materials Science.
- 3 - CHALMERS, Bruce - Metalurgia Física
- 4 - KITTEL, Charles - Introducción a la Física del Estado Sólido.
- 5 - COTTRELL, A.H. - Metalurgia Física - Introducción a las Teorías de la Estructura de los Metales y aleaciones.
- 6 - WULFF y otros - Introducción a la Ciencia de Materiales. Vol. I .
- 7 - REED-HILL - Principios de Metalurgia Física.