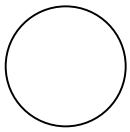
Estructuras cristalinas

La comprensión de los materiales se logra por medio de modelos.

El modelo aceptado en la actualidad es el siguiente:

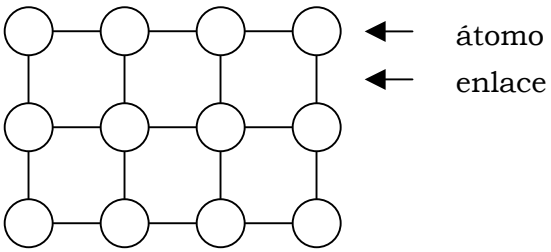
- Los materiales están formados por
- Los átomos se comportan como si fueran esferas sólidas.
- Átomos de diferente naturaleza química se representan por esferas de tamaño diferente.



Átomo de hierro
Radio atómico = 0.124 nm
Número atómico = 2.6

Átomo de carbono
Radio atómico = 0.071 nm
Número atómico = 6

- Los átomos se unen entre sí para formar el material



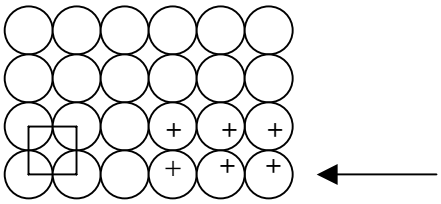
- Dependiendo del material, los átomos tienen dos posibilidades para enlazarse.

  1. Los átomos no siguen ningún orden o siguen un orden de corto alcance ⟶ materiales amorfos

  2. Los átomos siguen un ordenamiento de largo alcance ⟶ materiales alcalinos.

La estructura cristalina es el concepto que describe la forma como se organizan los átomos en el material.

La estructura cristalina se determina por difracción de rayos X.



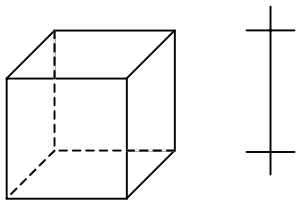
Al lugar geométrico donde se ubica el átomo se le mana punto de red

Toda la estructura cristalina puede estudiarse a partir de una pequeña porción que contenga el patrón de ordenamiento. A esa pequeña porción se le llama celda unitaria.

Los materiales son tridimensionales, por tanto las celdas unitarias son tridimensionales.

Existen 14 tipos diferentes de celdas unitarias agrupadas en 7 sistemas cristalinos.

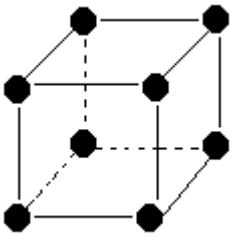
Estudiaremos únicamente el sistema cúbico. En este sistema la celda unitaria es un cubo de arista a_0.



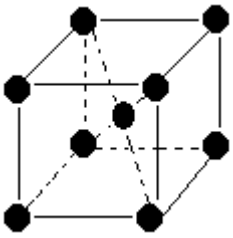
a_0 = parámetro de red. Se mide a temperatura ambiente.

El sistema cúbico posee tres estructuras cristalinas:

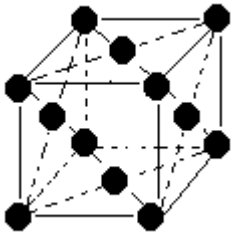
1. Estructura cúbica simple (CS)



2. Estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC)



3. Estructura cúbica centrada en la cara (FCC)

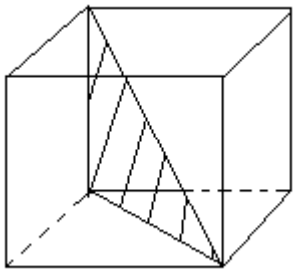


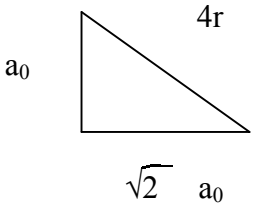
Algunas propiedades de las celdas unitarias son:

1. **Número de átomos por celda**
   Es el número "promedio" de puntos de red asociados a una celda unitaria.
   - La estructura CS tiene 1 átomo por celda unitaria
   - La estructura BCC tiene 2 átomos por celda unitaria
   - La estructura FCC tiene 4 átomos por celda unitaria

2. Relación entre el radio atómico y el parámetro de red

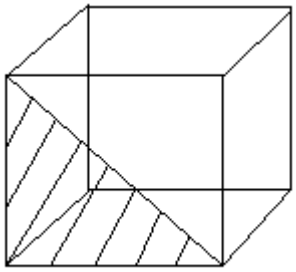
Estructura BCC

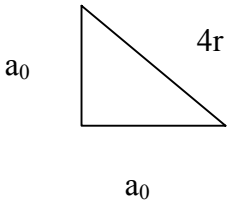




$a_0 = 4r/\sqrt{3}$

Estructura FCC

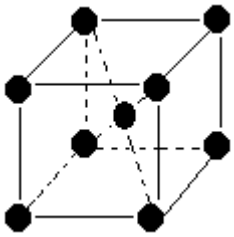




$a_0 = 4r/\sqrt{2}$

3. Número de coordinación.

Es el número de átomos que tocan a un átomo en particular.



BCC

El átomo en el centro está en contacto con 8 átomos → número de coordinación = 8

4. Factor de empaquetamiento

Es la fracción de espacio de la celda unitaria que es ocupada por átomos.

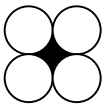
$$FE = \frac{(\text{Número de átomos por celda})\ (\text{volumen del átomo})}{\text{volumen de la celda unitaria}}$$

5. Densidad teórica

$$\rho = \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} = \frac{\left(\text{Número de átomos por celda}\right)\left(\text{Peso molecular de los átomos}\right)}{\left(\text{Volumen de la celda unitaria}\right)\left(\text{Número de avogadro}\right)}$$

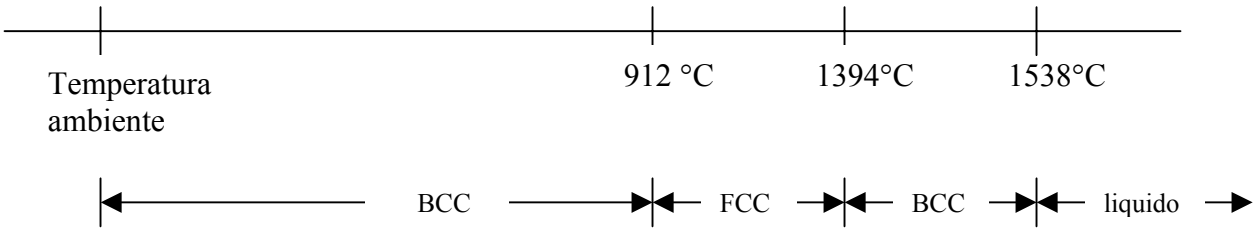
6. Sitios intersticiales

Son los huecos que existen entre los átomos que forman la estructura cristalina.



Ejemplo:
Existen materiales que pueden tener más de una estructura cristalina.

- Si son elementos puros se les llama alotrópicos
- En general se llaman polimórficos.



Cuando un pedazo de hierro se calienta, su volumen aumenta debido a la expansión térmica del metal.

Cuando alcanza los 912^{0}C el hierro se contrae porque cambia su estructura cristalina.