

# AAU

AMERICAN ANDRAGOGY  
UNIVERSITY



# INGENIERIA DE LOS MATERIALES

# Contenido

---

<b>PARTE I</b>	<b>Estructura, arreglo y movimiento de los átomos</b>	<b>3</b>
<b>I</b>	<b>Introducción a los materiales</b>	<b>5</b>
1-1	Introducción	5
1-2	Tipos de materiales	5
1-3	Relación entre estructura, propiedad y procesamiento	10
1-4	Efectos ecológicos sobre el comportamiento de los materiales	13
1-5	Diseño y selección de materiales	15
	Resumen	17
	Glosario	17
	Problemas	18
<b>2</b>	<b>Estructura atómica</b>	<b>19</b>
2-1	Introducción	19
2-2	Estructura del átomo	19
2-3	La estructura electrónica del átomo	20
2-4	Enlaces atómicos	24
2-5	Energía de enlace y espaciamiento interatómico	30
	Resumen	33
	Glosario	34
	Problemas	35
<b>3</b>	<b>Organización atómica</b>	<b>37</b>
3-1	Introducción	37
3-2	Orden de corto alcance comparado con orden de largo alcance	37
3-3	Celdas unitarias	39
3-4	Transformaciones alotrópicas y polimórficas	46
3-5	Puntos, direcciones y planos en la celda unitaria	47
3-6	Sitios intersticiales	57
3-7	Cristales iónicos	60

3-8	Estructuras covalentes	62
3-9	Difracción de los rayos-X	65
	Resumen	68
	Glosario	68
	Problemas	70

#### **4 Imperfecciones en arreglo atómico** **76**

4-1	Introducción	76
4-2	Dislocaciones	76
4-3	Significado de las dislocaciones	83
4-4	Ley de Schmid	84
4-5	Influencia de la estructura cristalina	86
4-6	Defectos puntuales	87
4-7	Defectos de superficie	92
4-8	Control del proceso de deslizamiento	97
	Resumen	99
	Glosario	100
	Problemas	101

#### **5 Movimiento de los átomos en los materiales** **105**

5-1	Introducción	105
5-2	Estabilidad de los átomos	105
5-3	Mecanismos de difusión	107
5-4	Energía de activación para la difusión	108
5-5	Velocidad de difusión (primera ley de Fick)	109
5-6	Perfil de composición (segunda ley de Fick)	119
5-7	Difusión y el procesamiento de los materiales	121
	Resumen	123
	Glosario	124
	Problemas	125

---

## **PARTE II Control de la microestructura y de las propiedades mecánicas de los materiales** **129**

### **6 Ensayos y propiedades mecánicas** **130**

6-1	Introducción	130
6-2	Ensayo a la tensión: uso del diagrama esfuerzo-deformación	131
6-3	Propiedades obtenidas del ensayo de tensión	133
6-4	El ensayo de flexión para materiales frágiles	138
6-5	Esfuerzo real-deformación real	141
6-6	El ensayo de dureza: su naturaleza y uso	142
6-7	Ensayo de impacto	143
6-8	Propiedades obtenidas a partir del ensayo de impacto	144
6-9	Tenacidad a la fractura	147

6-10	La importancia de la mecánica de la fractura	149
6-11	Ensayo de fatiga	150
6-12	Resultados del ensayo de fatiga	151
6-13	Aplicación de los ensayos de fatiga	153
6-14	Ensayo de termofluencia	156
6-15	Uso de los datos de termofluencia	158
	Resumen	160
	Glosario	161
	Problemas	162
<b>7</b>	<b>Endurecimiento por deformación y recocido</b>	<b>169</b>
7-1	Introducción	169
7-2	Relación del trabajo en frío con la curva esfuerzo-deformación	169
7-3	Mecanismos de endurecimiento por deformación	171
7-4	Propiedades en función del porcentaje del trabajo en frío	172
7-5	Microestructura y esfuerzos residuales	175
7-6	Características del trabajo en frío	179
7-7	Las tres etapas del recocido	182
7-8	Control del recocido	184
7-9	Recocido y procesamiento de materiales	185
7-10	Trabajo en caliente	187
7-11	Conformación superplástica	189
	Resumen	189
	Glosario	190
	Problemas	191
<b>8</b>	<b>Principios de endurecimiento por solidificación y procesamiento</b>	<b>195</b>
8-1	Introducción	195
8-2	Nucleación	195
8-3	Crecimiento	199
8-4	Tiempo de solidificación y tamaño de las dendritas	200
8-5	Curvas de enfriamiento	205
8-6	Fundición o estructura de lingote	205
8-7	Solidificación de los polímeros	207
8-8	Defectos de solidificación	208
8-9	Procesos de fundición	213
8-10	Solidificación y unión de los metales	217
	Resumen	218
	Glosario	219
	Problemas	220
<b>9</b>	<b>Equilibrio de fases y endurecimiento por solución sólida</b>	<b>225</b>
9-1	Introducción	225
9-2	Fases y diagrama de fases de sustancias puras	225
9-3	Soluciones y solubilidad	228
9-4	Condiciones para una solubilidad sólida ilimitada	230

9-5	Endurecimiento por solución sólida	231
9-6	Diagrama de fases isomorfo	234
9-7	Relaciones entre propiedades y el diagrama de fases	240
9-8	Solidificación de una aleación de solución sólida limitada	242
9-9	Solidificación fuera de equilibrio y segregación	244
	<i>Resumen</i>	247
	Glosario	247
	Problemas	249
<b>10</b>	<b>Endurecimiento por dispersión durante la solidificación</b>	<b>253</b>
10-1	Introducción	253
10-2	Principios de endurecimiento por dispersión	253
10-3	Compuestos intermetálicos	254
10-4	Diagramas de fases con reacciones de tres fases	258
10-5	El diagrama de fases eutéctico	260
10-6	<i>Resistencia de las aleaciones eutécticas</i>	267
10-7	Eutécticos y el procesamiento de los materiales	274
10-8	Solidificación fuera del equilibrio en el sistema eutéctico	275
10-9	Diagramas de fases ternarios	276
	<i>Resumen</i>	278
	Glosario	279
	Problemas	280
<b>11</b>	<b>Endurecimiento por dispersión mediante transformación de fase y tratamiento térmico</b>	<b>285</b>
11-1	Introducción	285
11-2	Nucleación y crecimiento en las reacciones en estado sólido	285
11-3	Aleaciones endurecidas al exceder el límite de solubilidad	289
11-4	Endurecimiento por envejecimiento o endurecimiento por precipitación	292
11-5	Efectos de temperatura y tiempo de envejecimiento	294
11-6	Requisitos para el endurecimiento por envejecimiento	295
11-7	Uso a altas temperaturas de las aleaciones endurecidas por envejecimiento	296
11-8	Reacción eutectoide	297
11-9	<i>Control de la reacción eutectoide</i>	301
11-10	La reacción martensítica y el revenido	306
	<i>Resumen</i>	312
	Glosario	313
	Problemas	314

---

**PARTE    Materiales de ingeniería**
**319****III****12    Aleaciones ferrosas****320**

## 12-1    Introducción

320

12-2	Clasificación de los aceros	320
12-3	Tratamientos térmicos simples	324
12-4	Tratamientos térmicos isotérmicos	326
12-5	Tratamientos térmicos de templado y revenido	329
12-6	Efecto de los elementos de aleación	335
12-7	Aplicación de la templabilidad	337
12-8	Aceros especiales	341
12-9	Tratamientos de superficies	342
12-10	Soldabilidad del acero	344
12-11	Aceros inoxidable	345
12-12	Transformaciones de fase en hierros fundidos	349
12-13	Características y producción de las fundiciones	352
	Resumen	358
	Glosario	359
	Problemas	361
<b>13</b>	<b>Aleaciones no ferrosas</b>	<b>366</b>
13-1	Introducción	366
13-2	Aleaciones de aluminio	366
13-3	<i>Aleaciones de magnesio</i>	376
13-4	Berilio	379
13-5	Aleaciones de cobre	380
13-6	Níquel y cobalto	384
13-7	Aleaciones de titanio	388
13-8	Metales refractarios	394
	Resumen	395
	Glosario	396
	Problemas	397
<b>14</b>	<b>Materiales cerámicos</b>	<b>400</b>
14-1	Introducción	400
14-2	La estructura de los cerámicos cristalinos	401
14-3	La estructura de los silicatos cristalinos	403
14-4	Imperfecciones en las estructuras cerámicas cristalinas	406
14-5	La estructura de los vidrios cerámicos	413
14-6	Fallas mecánicas de los materiales cerámicos	416
14-7	Deformación de los cerámicos a altas temperaturas	422
14-8	Procesamiento y aplicaciones de los vidrios cerámicos	428
14-9	Procesamiento y aplicaciones de los vidrio-cerámicos	432
14-10	Procesamiento y aplicaciones de productos de arcilla	433
14-11	Procesamiento y aplicaciones de cerámicos avanzados	436
14-12	Refractarios	440
14-13	Otros materiales cerámicos y sus aplicaciones	442
	Resumen	444
	Glosario	444
	Problemas	446

<b>15</b>	<b>Polímeros</b>	<b>449</b>
15-1	Introducción	449
15-2	Clasificación de los polímeros	450
15-3	Formación de cadenas por el mecanismo de adición	452
15-4	Formación de cadenas por el mecanismo de condensación	458
15-5	Grado de polimerización	460
15-6	Arreglo de las cadenas de poliméricas en los termoplásticos	462
15-7	Deformación y falla de los polímeros termoplásticos	468
15-8	Control de la estructura y de las propiedades de los termoplásticos	477
15-9	Elastómeros (hules)	487
15-10	Polímeros termoestables	493
15-11	Adhesivos	496
15-12	Aditivos de los polímeros	497
15-13	Conformado de los polímeros	498
	Resumen	501
	Glosario	502
	Problemas	504
<b>16</b>	<b>Materiales compuestos</b>	<b>508</b>
16-1	Introducción	508
16-2	Compuestos reforzados por dispersión	508
16-3	Compuestos particulados verdaderos	511
16-4	Compuestos reforzados con fibras	517
16-5	Características de los compuestos reforzados con fibras	521
16-6	Manufacturas de fibras y compuestos	529
16-7	Sistemas reforzados con fibras y sus aplicaciones	535
16-8	Materiales compuestos laminares	542
16-9	Ejemplos y aplicaciones de compuestos laminares	545
16-10	Estructuras tipo emparedado o sandwich	547
	Resumen	548
	Glosario	549
	Problemas	550
<b>17</b>	<b>Materiales para la construcción</b>	<b>553</b>
17-1	Introducción	553
17-2	Estructura de la madera	553
17-3	Contenido de humedad y densidad de la madera	555
17-4	Propiedades mecánicas de la madera	558
17-5	Expansión y contracción de la madera	560
17-6	Madera contrachapada o triplay	561
17-7	Concreto	561
17-8	Propiedades del concreto	564
17-9	Concreto reforzado y preesforzado	568
17-10	Asfalto	569
	Resumen	569

Glosario	570
Problemas	571

<b>PARTE IV</b>	<b>Propiedades físicas de los materiales para ingeniería</b>	<b>573</b>
<b>18</b>	<b>Comportamiento eléctrico de los materiales</b>	<b>574</b>
18-1	Introducción	574
18-2	Ley de Ohm y la conductividad eléctrica	574
18-3	Teoría de las bandas	579
18-4	Control de la conductividad de los metales	582
18-5	Superconductividad	586
18-6	Conductividad en otros materiales	589
18-7	Semiconductores intrínsecos	591
18-8	Semiconductores extrínsecos	595
18-9	Aplicación de los semiconductores en dispositivos eléctricos	600
18-10	Manufactura y fabricación de dispositivos semiconductores	604
18-11	Aislantes y propiedades dieléctricas	604
18-12	Dipolos y polarización	606
18-13	Propiedades dieléctricas y su control	609
18-14	Propiedades dieléctricas y capacitores	613
18-15	Propiedades dieléctricas y aislantes eléctricos	615
18-16	Piezoelectricidad y electrostricción	615
18-17	Ferroelectricidad	617
	Resumen	619
	Glosario	619
	Problemas	621
<b>19</b>	<b>Comportamiento magnético de los materiales</b>	<b>625</b>
19-1	Introducción	625
19-2	Dipolos magnéticos y momentos magnéticos	625
19-3	Magnetización, permeabilidad y el campo magnético	627
19-4	Interacción entre los dipolos magnéticos y el campo magnético	629
19-5	Estructura de dominios y el ciclo de histéresis	632
19-6	Aplicación de la curva magnetización-campo	634
19-7	La temperatura Curie	638
19-8	Materiales magnéticos	639
	Resumen	645
	Glosario	645
	Problemas	646
<b>20</b>	<b>Comportamiento óptico de los materiales</b>	<b>649</b>
20-1	Introducción	649
20-2	El espectro electromagnético	649
20-3	Ejemplos y usos de los fenómenos de emisión	650

20-4	Interacción de los fotones con un material	661
20-5	Sistemas y materiales fotónicos	672
	Resumen	674
	Glosario	675
	Problemas	676
<b>21</b>	<b>Propiedades térmicas de los materiales</b>	<b>679</b>
21-1	Introducción	679
21-2	Capacidad térmica y calor específico	679
21-3	Expansión térmica	682
21-4	Conductividad térmica	687
21-5	Choque térmico	691
	Resumen	692
	Glosario	693
	Problemas	693
<hr/>		
<b>PARTE</b>	<b>Protección contra el deterioro y la falla de los materiales</b>	<b>696</b>
<b>V</b>		
<b>22</b>	<b>Corrosión y desgaste</b>	<b>698</b>
22-1	Introducción	698
22-2	Corrosión química	698
22-3	Corrosión electroquímica	700
22-4	El potencial electroódico en las celdas electroquímicas	703
22-5	<i>Corriente de corrosión y polarización</i>	707
22-6	Tipos de corrosión electroquímica	707
22-7	Protección contra corrosión electroquímica	712
22-8	Degradación microbiana y polímeros biodegradables	719
22-9	Oxidación y otras reacciones gaseosas	720
22-10	Desgaste y erosión	723
	Resumen	725
	Glosario	726
	Problemas	728
<b>23</b>	<b>Fallas —origen, detección y prevención</b>	<b>731</b>
23-1	Introducción	731
23-2	Determinación del mecanismo de fractura en fallas de los metales	731
23-3	Fractura en materiales no metálicos	741
23-4	Origen y prevención de fallas en los metales	743
23-5	Métodos de prueba no destructivos	747
	Resumen	760
	Glosario	761
	Problemas	762

<b>Respuestas a problemas seleccionados</b>	<b>765</b>
<b>Apéndice A</b>	<b>772</b>
<b>Apéndice B</b>	<b>774</b>
<b>Apéndice C</b>	<b>776</b>
<b>Índice analítico</b>	<b>778</b>

## Prefacio

---

El libro *Ciencia e ingeniería de los materiales*, tercera edición, continúa con la idea general de las ediciones anteriores de dar a comprender la relación existente entre estructura, procesamiento y propiedades de los materiales. Este texto se supone para estudiantes de primero o segundo año, que ya tienen estudios previos de física, química y matemáticas. El autor presume que estos estudiantes no habrán tenido mucho contacto con ciencias de la ingeniería como la estática, la dinámica y la mecánica.

Es razonable admitir que el material presentado aquí no puede y no debe ser cubierto en un solo semestre. Sin embargo, seleccionando los temas apropiados, el instructor puede darle mayor énfasis a los metales, presentar un panorama general sobre los materiales, concentrarse en el comportamiento mecánico o enfocarse en las propiedades físicas. Además, el texto le sirve al estudiante como una referencia útil para cursos subsecuentes sobre procesos de manufactura, materiales, diseño o selección de materiales.

En un texto general e introductorio como éste, no se pueden presentar de manera realista problemas complejos y completos de diseño, porque el diseño y la selección de materiales dependen de muchos factores que se presentarán después en el plan de estudios del alumno. Sin embargo, a fin de poner al estudiante en contacto con elementos de diseño, en esta edición se han incluido más de 100 ejemplos que tratan sobre selección de materiales, consideraciones de diseño, e incluso diseño elemental. Estos ejemplos, que le dan al estudiante la oportunidad de aplicar las propiedades mecánicas y físicas de los materiales al proceso de selección, tienen tres formas:

- **Ejemplos de diseño**, que cubren específicamente consideraciones de diseño, como temperatura de operación, presencia de medios corrosivos, factores económicos, posibilidad de reciclaje y limitaciones ecológicas o ambientales, como en los ejemplos 13-2, 15-10 y 16-9.
- **Ejemplos de diseño y selección de materiales**, que definen un problema y los requisitos esenciales de diseño. La información necesaria para completar el diseño aparece en la solución, como en el ejemplo 13-10.
- **Ejemplos de diseño abiertos**, que sugieren la existencia de muchas soluciones posibles, dependiendo de consideraciones no descritas dentro del ejemplo, como en los ejemplos 8-8 y 23-5.

La parte I, que describe los enlaces atómicos, el arreglo atómico, las imperfecciones reticulares y la difusión, ha sido modificados o complementada con nuevos temas, en un esfuerzo para hacer que esta sección del texto resulte menos orientada a los metales. Por ejemplo, para explicar mejor el deslizamiento en materiales cristalinos, incluyendo los cerámicos, hemos

incluido nuevas ilustraciones de dislocaciones, junto con una versión abreviada del esfuerzo Peierls-Nabarro.

En la parte II se incluyen más ejemplos e ilustraciones de pruebas mecánicas de materiales *no metálicos, como las propiedades* contra impacto de los polímeros, resistencia y módulo elástico en los cerámicos y los compuestos frágiles. En adición, se ha ampliado de manera importante el tratamiento de la resistencia a la fractura y velocidad de crecimiento de grieta en el capítulo 6. El capítulo 8 describe la solidificación de los polímeros incluyendo una *microfotografía de dendritas en una cerámica solidificada*. En el capítulo 10 aparece una explicación ampliada de compuestos intermetálicos y, dentro del capítulo 11, se presenta la cinética de las transformaciones de fase, relacionándola tanto con los cerámicos como con los polímeros, así como con los metales.

En la parte III se reorganiza el análisis de las aleaciones ferrosas del capítulo 12 para una mejor comprensión. Además de la adición de material relativo a aleaciones no ferrosas; el capítulo 13 incluye ahora una descripción de la manera en que se producen los metales, una sección sobre aleaciones y técnicas modernas de procesamiento del aluminio; ejemplos de reciclaje, de problemas ecológicos y una diversidad de ejemplos de *diseño y de selección de materiales*.

El capítulo 14, dedicado a materiales cerámicos, incluye un análisis amplio de su deformación y fallas mecánicas, como la importancia de la presencia inevitable de defectos en estos materiales, y la necesidad de utilizar tratamientos estadísticos, como la estadística de Weibull, para caracterizar el comportamiento de los cerámicos. Este material ampliado también incluye un análisis del papel vital que juega el procesamiento en el comportamiento de un material cerámico, incluyendo mecanismos para mejorar su tenacidad. La sección 14-6 incluye un ejemplo de este material. Aunque todavía se encuentran en el capítulo 14 diagramas de fase, ahora se introducen a todo lo largo del capítulo para aclarar los conceptos que se están analizando. Por ejemplo, se utilizan diagramas de fase en la sección 14-4 para ilustrar la solubilidad sólida en sistemas cerámicos y en la sección 14-5 para explicar la producción de vidrio. A fin de ampliar la cobertura sobre las propiedades a altas temperaturas, como la termofluencia en cerámicos vítreos y cristalinos, se agregó la sección 14-7.

El capítulo 15 sobre polímeros ha sido reescrito y reorganizado para incluir una más amplia cobertura, en la sección 15-7, sobre deformación y falla. La sección 15-3 da una descripción *más completa de la polimerización por adición* y una nueva sección sobre adhesivos ilustra esta importante aplicación de los polímeros.

El capítulo 16 relativo a los compuestos, también ha sido reescrito para incluir tratamiento adicional, en las secciones 16-4 y 16-5, de las propiedades mecánicas de materiales compuestos *reforzados con fibras*. La sección 16-10 incluye ahora una descripción más detallada de las estructuras en panal. El análisis sobre madera y concreto aparece, por su parte, en un ampliado capítulo 17, el cual incluye un tratamiento más detallado del comportamiento de la madera y de la justificación de producir mezclas de concreto para aplicaciones específicas.

En la parte IV, el capítulo 18 cubre el tratamiento del comportamiento dieléctrico, permitiendo así al estudiante comprender los cambios en el comportamiento eléctrico de los materiales. También aparece en este capítulo información adicional sobre superconductividad y conductividad en polímeros y compuestos. El capítulo 20, relativo al comportamiento óptico, ha sido modificado y ahora las propiedades magnéticas y el comportamiento térmico se analizan en los capítulos 19 y 21 respectivamente.

En la parte V de esta edición se trata con mayor detalle la corrosión y degradación de los polímeros, incluyendo la utilización de polímeros biodegradables.

Gran cantidad de los ejemplos "de solución inmediata" de ediciones anteriores han sido reemplazados por nuevos ejemplos de selección y diseño, que le muestran al estudiante cómo

efectuar el cálculo y cómo dicho cálculo puede ayudar a resolver el problema de ingeniería aplicable.

Los resúmenes que se encuentran al final de cada capítulo se han ampliado y ahora son más completos que los correspondientes de ediciones anteriores. La mayor parte de los problemas, incluyendo sugerencias para proyectos de diseño y de selección, son nuevos en esta edición.

Además de las numerosas modificaciones anotadas al contenido, esta edición incluye un programa de ilustraciones completamente rediseñado. Estas figuras ya mejoradas deberán ayudar aún más a los estudiantes a visualizar los conceptos que se presentan. Los insertos muestran de manera fotográfica la relación entre la estructura de un material, su procesamiento y cómo sus propiedades pueden utilizarse en un producto final.

Los complementos para maestros son:

- **Manual de soluciones para instructores** que tiene soluciones completas de todos los problemas del texto y de otros elementos de examen adicionales; y
- **un juego de más de 100 microfotografías en formato de diapositiva, clasificadas por tipo de material para exhibición en clase.**
- Los complementos para los estudiantes son: **Theorist Notebooks for Science and Engineering of Materials** (del PWS Notebook Series™), un conjunto de problemas interactivos de apoyo a los capítulos 2-18 de Askeland, para uso con el programa de álgebra simbólica Student Edition of Theorist para Macintosh (también publicado por PWS Publishing Company);
- **Materials Science and Engineering Lab Manual**, por Sherif El Wakil (Universidad de Massachusetts en Dartmouth), que contiene una mezcla de ejercicios clásicos de laboratorio de la ciencia de los materiales para metales y materiales no metálicos, incluyendo cerámicos, compuestos y polímeros;
- **CD-ROM for Materials Science**, un conjunto de visualizaciones animadas QuickTime® desarrollado por John Russ (Universidad del Estado de North Carolina), que explica conceptos importantes de la ciencia de los materiales tales como deformación de cristales, diagramas de fase, corte y enlaces moleculares; todo distribuido en un disco CD-ROM para Macintosh y para Windows de IBM y
- **un software cristalográfico de calidad profesional para licencia**, el Software para Ciencia de Ingeniería de materiales desarrollado por James T. Staley, Scientific Software Services contiene cinco programas para computadoras IBM DOS y Macintosh, que le permiten a los estudiantes: visualizar planos y direcciones cristalográficas en cristales cúbicos y relacionarlos con sus índices Miller; apreciar el arreglo atómico en los planos cristalográficos de metales cúbicos y hexagonales y compuestos intermetálicos; estudiar cómo el tipo de radiación X incidente, la estructura cristalina, las especies atómicas y los parámetros de red afectan el espaciamiento y la intensidad de las líneas espectrales de un patrón de rayos X de partículas Debye-Scherrer; comprender la regla de la palanca al demostrar de manera gráfica su uso para varios diagramas de fase de dos componentes; y diseñar componentes estructurales utilizando gráficas interactivas de selección de materiales. Las licencias (otorgadas de acuerdo con el número de estudiantes inscritos) gozan de un descuento del 50% para aquellas escuelas que adopten el texto Askeland.

### Reconocimientos

Estoy en deuda con las numerosas personas que proporcionaron ayuda, apoyo y crítica constructiva, que llevó a la preparación de esta tercera edición del texto.

Mis colegas en UMR—Fred Kisslinger, Ron Kohser, Scott Miller, Chris Ramsay, Harry Weart y Robert Wolf—han tenido la paciencia de utilizar el texto en nuestros cursos de introducción y han aportado sugerencias invaluable.

Se extienden gracias especiales a todos nuestros estudiantes en Met 121 y AE 241; son ellos la razón por la que estoy aquí.

Quisiera reconocer a todos los instructores que han leído y utilizado el texto, y en particular reconocer las revisiones, enormemente útiles, del manuscrito ofrecidas por

C. M. Balik	David A. Thomas
<i>North Carolina State University</i>	<i>Lehigh University</i>
James H. Edgar	James G. Vaughan
<i>Kansas State University</i>	<i>The University of Mississippi</i>
Michael W. Glasgow	Krishna Vedula
<i>Broome Community College</i>	<i>Iowa State University</i>
Philip J. Guichelaar	Sherif D. El Wakil
<i>Western Michigan University</i>	<i>University of Massachusetts/Dartmouth</i>
<i>I. W. Hall</i>	Robert A. Wilke
<i>University of Delaware</i>	<i>The Ohio State University</i>
D. Bruce Masson	Alan Wolfenden
<i>Washington State University</i>	<i>Texas A &amp; M University</i>
Len Rabenberg	Ernest G. Wolff
<i>University of Texas at Austin</i>	<i>Oregon State University</i>

Las gracias más sinceras a todos en PWS Publishing Company, Thompson Steele Book Production y a Vantage Art por su aliento, sus consejos y, particularmente, por su paciencia. Gracias, Barbara, Sally y Elinor.

Finalmente, y de máxima importancia, estoy profundamente en deuda con mi esposa Mary y con mi hijo Per.

Donald R. Askeland  
*University of Missouri—Rolla*

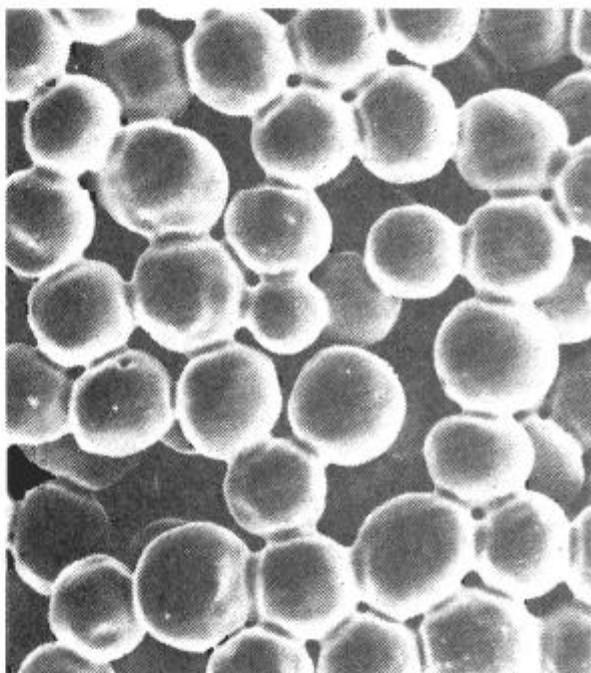
**C**lasificamos los materiales en varios grupos principales: metales, cerámicos, polímeros, semiconductores y compuestos. El comportamiento de los materiales en cada uno de estos grupos queda definido por su estructura. La estructura electrónica de un átomo determina la naturaleza de los enlaces atómicos, la cual ayuda a fijar las propiedades mecánicas y físicas de un material dado.

El arreglo de los átomos en una estructura cristalina o amorfa también influye en el comportamiento de un material. Las imperfecciones de la organización atómica juegan un papel vital en nuestra comprensión de la deformación, fallas y propiedades mecánicas.

Finalmente, el movimiento de los átomos, conocido como difusión, es importante para muchos tratamientos térmicos y procesos de manufactura, así como para las propiedades físicas y mecánicas de los materiales.

En los capítulos que siguen, introducimos el concepto de estructura-propiedad-procesamiento para controlar el comportamiento de los materiales y exami-

namos los papeles que juega la estructura atómica, la organización de los átomos, sus defectos y el movimiento de los mismos. Este análisis pone las bases necesarias para comprender la estructura y el comportamiento de los materiales que se verán posteriormente.



La consolidación de partículas de polvo es un método común para fabricar materiales metálicos, cerámicos y compuestos. La difusión de los átomos en los puntos de contacto entre partículas —en este caso, partículas de cobre esféricas— durante el sinterizado hace que las partículas queden unidas. Una sinterización y difusión prolongadas finalmente hacen que desaparezcan los poros entre las partículas. (*De Metals Handbook, Vol. 9, 9a edición, ASM International, 1985.*)

# PARTE I

## **Estructura, arreglo y movimiento de los átomos**

### CAPÍTULO 1

Introducción a los materiales

### CAPÍTULO 2

Estructura atómica

### CAPÍTULO 3

Organización atómico

### CAPÍTULO 4

Imperfecciones en el arreglo  
atómico

### CAPÍTULO 5

Movimiento de los átomos  
en los materiales

# CAPÍTULO 1

## Introducción a los materiales

### 1-1 Introducción

Todos los ingenieros tienen que ver con materiales, de manera cotidiana, en manufactura y procesamientos, y en el diseño y construcción de componentes o de estructuras. Deben seleccionar y utilizar materiales y analizar las fallas de los mismos.

Deben tomarse una diversidad de decisiones importantes al seleccionar los materiales a incorporar en un diseño, incluyendo si los materiales pueden ser transformados de manera consistente en un producto, con las tolerancias dimensionales correctas y si pueden mantener la forma correcta durante su uso. También, si las propiedades requeridas se pueden conseguir y mantener durante el uso; si el material es compatible con otras partes de un ensamble y puede fácilmente unirse a ellas; por otro lado, considerar que pueda reciclarse fácilmente y observar si el material o su fabricación puede causar problemas ecológicos. Finalmente, si puede convertirse de manera económica en un componente útil.

La intención de este texto es ayudar al lector a concientizarse sobre los tipos de materiales disponibles, a comprender su comportamiento general y sus capacidades, y a reconocer los efectos del entorno y las condiciones de servicio sobre su desempeño ingenieril. Esta comprensión es necesaria para ser capaz de participar en el diseño de componentes, sistemas y procesos confiables y económicos que utilicen el amplio espectro de los materiales.

### 1-2 Tipos de materiales

Los materiales se clasifican en cinco grupos: metales, cerámicos, polímeros, semiconductores y materiales compuestos (tabla 1-1). Los materiales de cada uno de estos grupos poseen estructuras y propiedades distintas. Las diferencias en resistencia, que se comparan en la figura 1-1 ilustran la amplia gama de propiedades disponibles.

**Metales** Los metales y sus aleaciones, incluyendo acero, aluminio, magnesio, zinc, hierro fundido, titanio, cobre y níquel, generalmente tienen como característica una buena conductividad eléctrica y térmica, una resistencia relativamente alta, una alta rigidez, ductilidad o conformabilidad y resistencia al impacto. Son particularmente útiles en aplicaciones estructurales o de carga. Aunque en ocasiones se utilizan **metales** puros, las combinaciones de metales conocidas como **aleaciones** proporcionan mejoría en alguna propiedad particularmente deseable o

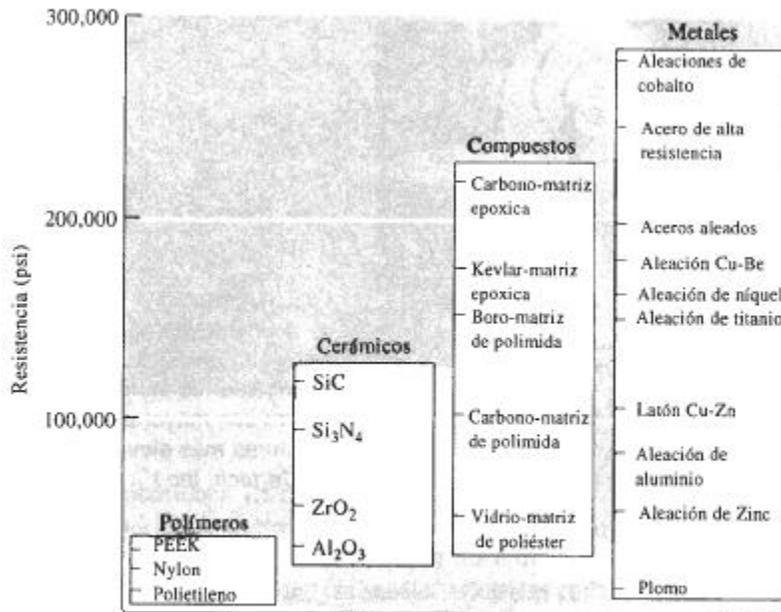
TABLA 1-1 Ejemplos, aplicaciones y propiedades representativas de cada familia de materiales

Aplicaciones		Propiedades
<b>Metales</b>		
Cobre	Alambre conductor eléctrico	Alta conductividad eléctrica, buena formabilidad
Hierro fundido gris	Bloques para motor de automóvil	Moldeable, maquinable, absorbe vibraciones
Aleación de aceros	Llaves	Endurecidas de manera significativa mediante tratamientos térmicos
<b>Cerámicos</b>		
SiO <sub>2</sub> -Na <sub>2</sub> O-CaO	Vidrio para ventana	Ópticamente útil, aislante térmico
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , MgO, SiO <sub>2</sub>	Refractarios para contener metal fundido	Aislantes térmicos, se funden a alta temperatura, relativamente inertes ante metal fundido
Titanato de bario	Transductores para equipo de audio	Convierten sonido en electricidad (comportamiento piezoeléctrico)
<b>Polímeros</b>		
Poliétileno	Empacado de alimentos	Fácilmente conformable en delgadas películas flexibles e impermeables
Epóxicos	Encapsulado de circuitos integrados	Eléctricamente aislante y resistente a la humedad
Fenólicos	Adhesivos para unir capas de madera laminada	Fuertes, resistentes a la humedad
<b>Semiconductores</b>		
Silicio	Transistores y circuitos integrados	Comportamiento eléctrico único
GaAs	Sistemas de fibras ópticas	Convierte señales eléctricas en luz
<b>Compuestos</b>		
Grafito en matriz epóxica	Componentes para aeronaves	Relación elevada resistencia-peso
Carburo de tungsteno-cobalto	Herramientas de corte de carburo para maquinado	Alta dureza, y de una buena resistencia al impacto
Acero recubierto de titanio	Recipientes para reactores	Tiene el bajo costo y la alta resistencia del acero, con la resistencia a la corrosión del titanio

permiten una mejor combinación de propiedades. La sección a través de un turborreactor que aparece en la figura 1-2 ilustra la utilización de varias aleaciones metálicas para una aplicación muy crítica.

**Cerámicos** El ladrillo, el vidrio, la porcelana, los refractarios y los abrasivos tienen baja conductividad eléctrica y térmica, y a menudo son utilizados como aislantes. Los cerámicos son fuertes y duros, aunque también muy frágiles o quebradizos. Las nuevas técnicas de procesamiento han conseguido que los cerámicos sean lo suficientemente resistentes a la fractura para que puedan ser utilizados en aplicaciones de carga, como los impulsores en motores de turbina (figura 1-3).

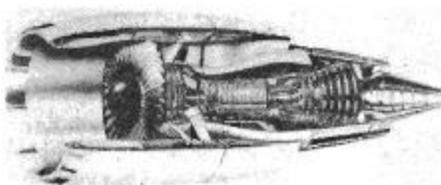
**Polímeros** Producidos mediante un proceso conocido como **polimerización**, es decir, creando grandes estructuras moleculares a partir de moléculas orgánicas, los polímeros incluyen el hule, los plásticos y muchos tipos de adhesivos. Los polímeros tienen baja conductividad



**FIGURA 1-1** Resistencias representativas de diversas categorías de materiales.

eléctrica y térmica, reducida resistencia y no son adecuados para utilizarse a temperaturas elevadas. Los polímeros **termoplásticos**, en los cuales las largas cadenas moleculares no están conectadas de manera rígida, tienen buena ductilidad y conformabilidad; los polímeros **termoestables** son más resistentes, aunque más frágiles porque las cadenas moleculares están fuertemente enlazadas (figura 1-4). Los polímeros se utilizan en muchas aplicaciones, incluyendo dispositivos electrónicos (figura 1-5).

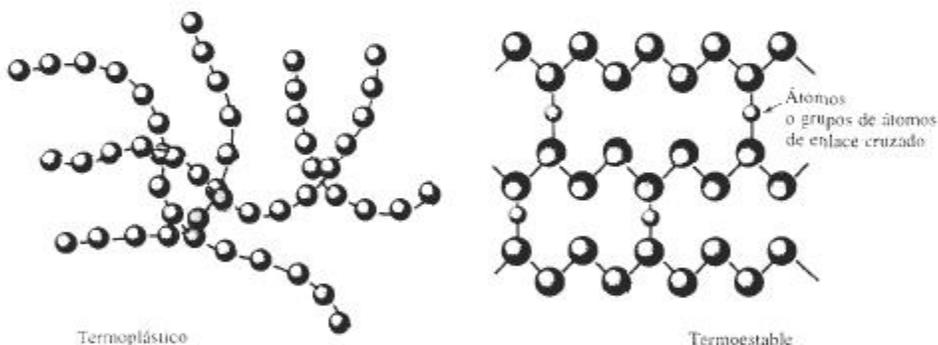
**Semiconductores** Aunque el silicio, el germanio y una variedad de compuestos como el GaAs son muy frágiles, resultan esenciales para aplicaciones electrónicas, de computadoras



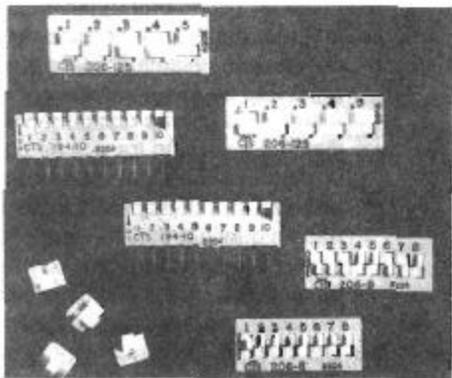
**FIGURA 1-2** Corte transversal de un turborreactor. La sección de compresión delantera opera a temperaturas bajas o medianas, y a menudo se utilizan componentes de titanio. La sección trasera de combustión opera a alta temperatura y se requieren de superaleaciones base níquel. La coraza exterior está sujeta a temperaturas bajas y resultan satisfactorios el aluminio y los materiales compuestos. (Cortesía de GE Aircraft Engines.)



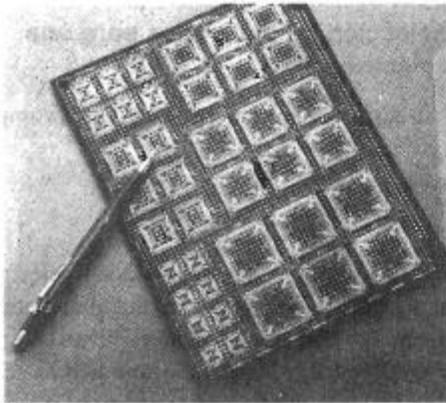
**FIGURA 1-3** Una diversidad de componentes cerámicos complejos, incluyendo impulsores y álabes, que permiten a los motores de turbina operar con mayor eficiencia a temperaturas más elevadas. (Cortesía de Certeck, Inc.)



**FIGURA 1-4** La polimerización ocurre cuando moléculas pequeñas, representadas por los círculos, se combinan para producir moléculas más grandes (es decir polímeros). Las moléculas de los polímeros pueden tener una estructura de tipo cadena (termoplásticos) o pueden formar redes tridimensionales (termoestables).



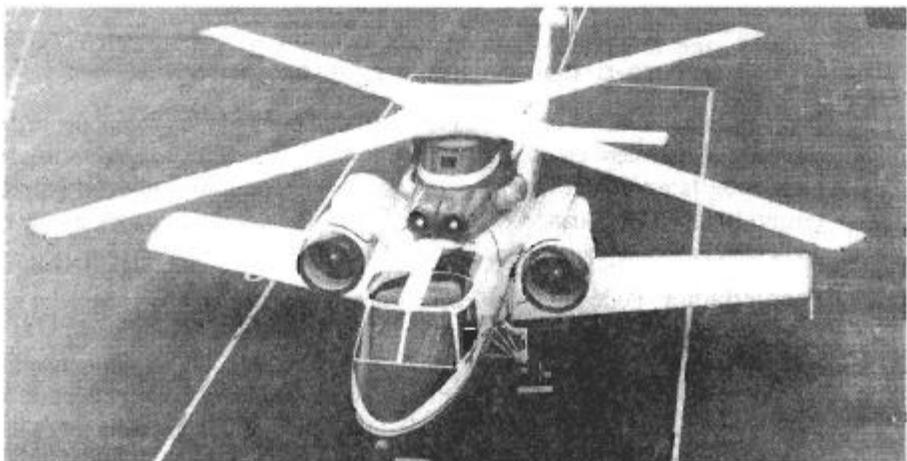
**FIGURA 1-5** Los polímeros se utilizan en una diversidad de dispositivos electrónicos, incluyendo estos interruptores de computadora, donde se requiere resistencia a la humedad y baja conductividad. (Cortesía de CTS Corporation).



**FIGURA 1-6** Los circuitos integrados para las computadoras y otros dispositivos electrónicos se basan en el comportamiento eléctrico, único de los materiales semiconductores. (Cortesía de Rogers Corporation.)

y de comunicaciones. La conductividad eléctrica de estos materiales puede controlarse para su uso en dispositivos electrónicos como transistores, diodos y circuitos integrados (figura 1-6). La información hoy día se transmite por luz a través de sistemas de fibras ópticas; los **semiconductores**, que convierten las señales eléctricas en luz y viceversa son componentes esenciales de estos sistemas.

**Materiales compuestos** Los **materiales compuestos** se forman a partir de dos o más materiales, produciendo propiedades que no se encuentran en ninguno de los materiales de manera individual. El concreto, la madera contrachapada y la fibra de vidrio son ejemplos típicos —aunque algo burdos— de materiales compuestos. Con materiales compuestos podemos producir materiales ligeros, fuertes, dúctiles, resistentes a altas temperaturas, o bien, podemos producir herramientas de corte duras y a la vez resistentes al impacto, que de otra manera se harían añicos. Los vehículos aéreos y aeroespaciales modernos dependen de manera importante de materiales compuestos como los polímeros reforzados de fibra de carbono (figura 1-7).



**FIGURA 1-7** El ala en X de los helicópteros modernos depende de un material compuesto de un polímero reforzado con fibra de carbono. (Cortesía de Sikorsky Aircraft Division —United Technologies Corporation.)

**EJEMPLO 1-1****Diseño y selección de materiales para una extensión eléctrica**

Diseñe los materiales necesarios para transportar una corriente entre dos componentes mediante una extensión eléctrica.

**SOLUCIÓN**

El material que transporte la corriente deberá tener una conductividad eléctrica alta. Un metal como el cobre, el aluminio o el oro será el seleccionado, pero el alambre metálico deberá quedar aislado a fin de evitar arcos o corto circuito. Aunque un recubrimiento cerámico representa un excelente aislamiento, los cerámicos son frágiles, y los alambres no podrán ser doblados sin que el recubrimiento cerámico se rompa. En vez de ello, seleccionaremos un recubrimiento de polímero termoplástico o de plástico con buenas características aislantes y buena ductilidad. ■

**EJEMPLO 1-2****Diseño y selección de materiales para una taza para café**

Diseñe un material a partir del cual se pueda producir una taza para café. ¿Qué propiedad en particular hará que ese material sea el adecuado?

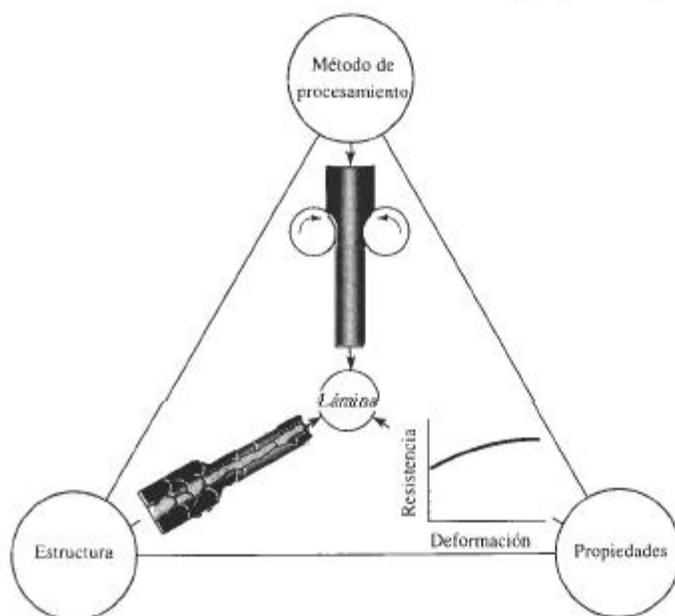
**SOLUCIÓN**

A fin de evitar que el usuario se queme las manos, las tazas para café deberán proporcionar un excelente aislamiento térmico. Debido a sus bajas conductividades térmicas, tanto los cerámicos como los polímeros son apropiados. Las tazas de poliestireno expandido desechables son particularmente eficaces porque contienen muchas burbujas de gas, que mejoran aún más el aislamiento. Esta deseable propiedad física deberá, sin embargo, sopesarse contra el daño potencial al medio ambiente causado al desechar el polímero. Las tazas de cerámica pueden ser reutilizadas y resultan menos peligrosas para el entorno. Las tazas de metal no se utilizarían, naturalmente, en razón de su alta conductividad térmica. ■

### 1-3 Relación estructura-propiedades-procesamiento

Para realizar su función durante su ciclo de vida esperado, un componente debe tener la forma correcta. El ingeniero en materiales debe cumplir este requisito aprovechando la relación compleja entre la estructura interna del material, su procesamiento y las propiedades finales del mismo (figura 1-8). Cuando el ingeniero de materiales modifica alguno de estos tres aspectos de la relación, cualquiera de los restantes, o ambos, también cambian.

**Propiedades** Podemos considerar las propiedades de un material en dos categorías: mecánicas y físicas. Las **propiedades mecánicas**, que describen la forma en que el material responde a una fuerza aplicada, incluyen resistencia, rigidez y ductilidad. Sin embargo, a menudo estamos interesados en la manera en que se comporta un material al ser expuesto a un golpe repentino e intenso (impacto), sometido a la aplicación de cargas cíclicas en el tiempo (fatiga), expuesto a altas temperaturas (termofluencia) o sujeto a condiciones abrasivas (desgaste). Las propiedades mecánicas también determinan la facilidad con la cual se puede deformar un material para llegar a una forma útil. Por ejemplo, una pieza de metal a forjar debe tener alta ductilidad para deformarse hasta la forma apropiada. A menudo cambios estructurales pequeños tienen un efecto profundo sobre las propiedades mecánicas.



**FIGURA 1-8** Relación tripartita entre estructura, propiedades y método de procesamiento. Cuando el aluminio es laminado en hojas, el proceso de laminado modifica la estructura del metal e incrementa su resistencia.

Las **propiedades físicas**, que incluyen el comportamiento eléctrico, magnético, óptico, térmico, elástico y químico dependen tanto de la estructura como del procesamiento de un material. Incluso minúsculas modificaciones de la estructura causan cambios profundos en la conductividad eléctrica de muchos materiales semiconductores; por ejemplo, temperaturas de fusión altas pueden reducir de manera importante las características de aislamiento térmico de los ladrillos cerámicos.

### EJEMPLO 1-3

#### Diseño y selección de materiales para el ala de un avión

Describe algunas de las propiedades mecánicas y físicas clave, a tomar en consideración al diseñar el material para el ala de un avión.

### SOLUCIÓN

Primero, consideraremos propiedades mecánicas. El material debe tener alta resistencia para soportar las fuerzas que actúan sobre el ala. El ala también está expuesta durante el aterrizaje y el despegue a una aplicación alternada o cíclica de fuerzas, así como a vibraciones durante el vuelo; por tanto, las propiedades de resistencia a la fatiga son de importancia. Durante el vuelo supersónico, el ala puede llegar a ponerse muy caliente, por lo que puede resultar crítica la resistencia a la termofluencia.

Las propiedades físicas también son de importancia. Dado que el ala debe ser todo lo ligera que sea posible, el material debe tener baja densidad. Si el ala está expuesta a atmósfera marina, se requiere resistencia a la corrosión. En caso de ser alcanzada por un rayo, la carga

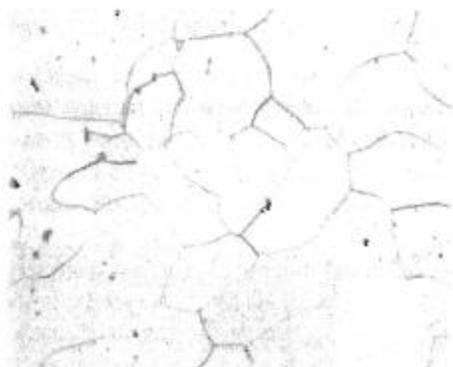
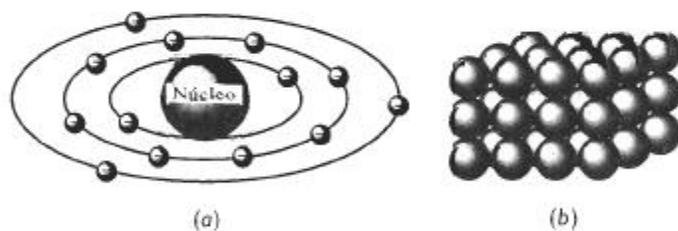
eléctrica deberá poder disiparse, a fin de evitar daños localizados; en consecuencia, el material deberá poseer buena conductividad.

Tradicionalmente, para cumplir con estos requisitos, se han utilizado aleaciones de aluminio. Hoy día, sin embargo, en muchas aeronaves modernas de alto rendimiento se utilizan compuestos de matrices poliméricas reforzadas por fibras. ■

**Estructura** La estructura de un material se puede considerar en diferentes niveles (figura 1-9). La disposición de los electrones que rodean al núcleo de los átomos individuales afecta el comportamiento eléctrico, magnético, térmico y óptico. Además, la configuración electrónica influye en la forma en que los átomos se unen entre sí.

En el siguiente nivel, se toma en consideración la disposición o arreglo de los átomos. Los metales, semiconductores, muchos cerámicos y algunos polímeros tienen una organización de átomos muy regular, es decir una **estructura cristalina**. Otros materiales cerámicos y muchos polímeros no tienen una organización atómica ordenada. Estos materiales amorfos o vítreos, se comportan de manera muy distinta a los materiales cristalinos. Por ejemplo, el polietileno vítreo es transparente, en tanto que el polietileno cristalino es traslúcido. Se pueden controlar las imperfecciones en la organización atómica a fin de producir cambios profundos en las propiedades.

En la mayor parte de los metales, de los semiconductores y de los cerámicos se encuentra una estructura granular. El tamaño y la forma de los granos influye en el comportamiento del material. En algunos casos, como en el de los chips de silicio para circuitos integrales o de los metales para componentes de los motores a chorro, deseamos producir un material que contenga un solo grano, es decir, un solo cristal.



**FIGURA 1-9** Cuatro niveles de estructura en un material: (a) estructura atómica, (b) estructura cristalina, (c) estructura granular en el hierro (x100), y (d) estructura multifásica en el hierro fundido blanco (x200).

Finalmente, en la mayor parte de los materiales se presenta más de una **fase**, teniendo cada una de ellas su arreglo atómico y propiedades únicas. El control del tipo, tamaño, distribución y cantidad de estas fases dentro del material es otra de las principales formas de controlar las propiedades.

**Procesamiento** El procesamiento de los materiales produce la forma deseada de un componente a partir de un material inicialmente sin forma. Los metales se pueden procesar vertiendo metal líquido en un molde (fundición), uniendo piezas individuales de metal (soldadura autógena, soldadura con aporte, unión adhesiva), conformando el metal sólido en formas útiles mediante alta presión (forja, trefilado, extrusión, laminado, doblado), compactando pequeñas partículas de polvo metálico en una masa sólida (metalurgia de polvos), o eliminando material excedente (maquinado). De manera similar, los materiales cerámicos pueden conformarse mediante procesos como colado, formado, extrusión o compactación, a menudo mientras están húmedos, seguido por un tratamiento térmico a altas temperaturas. Los polímeros se producen mediante inyección de plástico blando en moldes (similar a la fundición), extrusión y conformado. A menudo un material se trata térmicamente por debajo de su temperatura de fusión para lograr modificar su estructura. El tipo de procesamiento que utilizamos dependerá, por lo menos de manera parcial, de las propiedades —y por lo tanto de la estructura— del material.

#### EJEMPLO 1-4 Diseño de un proceso para producir filamentos de tungsteno

El tungsteno tiene una temperatura de fusión extraordinariamente alta de  $3410^{\circ}\text{C}$ , lo que dificulta su procesamiento en formas útiles. Diseñe un proceso mediante el cual a partir del tungsteno se puedan producir filamentos de diámetro pequeño.

#### SOLUCIÓN

Debido a la alta temperatura de fusión del tungsteno, no es posible utilizar la mayor parte de los procesos de fundición. Un método común para producir tungsteno es mediante metalurgia de polvos. Partículas de polvo de óxido de tungsteno ( $\text{WO}_3$ ), un cerámico, se calientan en una atmósfera de hidrógeno; la reacción subsecuente produce partículas metálicas de tungsteno y  $\text{H}_2\text{O}$ . Las partículas del polvo de tungsteno se consolidan mediante presión y alta temperatura formando varillas simples. Posteriormente estas varillas se trefilan (un proceso de conformado) progresivamente a diámetros más pequeños, hasta que se obtiene el tamaño correcto (figura 1-10).



**FIGURA 1-10** El óxido de tungsteno se puede reducir a partículas de polvo de metal de tungsteno, que se compactan en una forma simple y luego se estiran para obtener alambre.

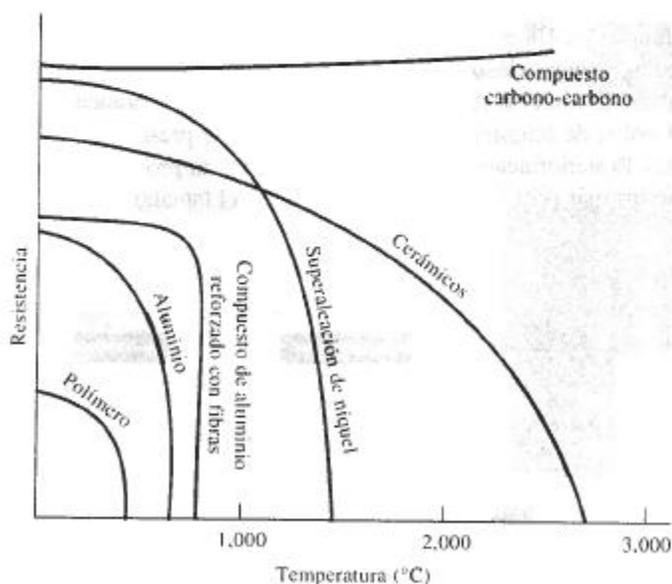
## 1-4 Efectos ambientales sobre el comportamiento de los materiales

La relación estructura-propiedades-procesamiento se modifica por el medio ambiente al cual está sujeto el material, incluyendo la alta temperatura y la corrosión.

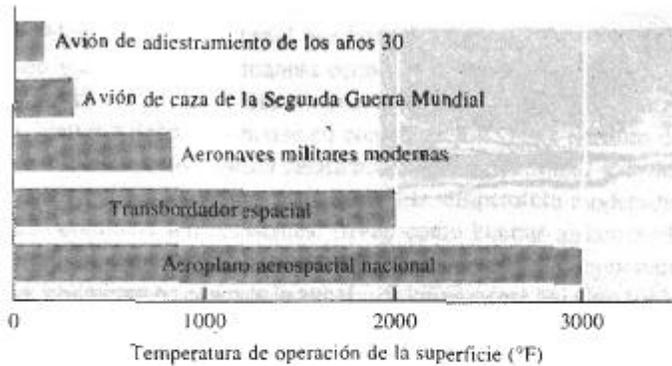
**Temperatura** Los cambios en temperatura alteran de manera notable las propiedades de los materiales (figura 1-11). Los materiales que han sido endurecidos por ciertos tratamientos térmicos o ciertas técnicas de conformado pueden perder súbitamente su resistencia al ser calentados. Las temperaturas elevadas modifican la estructura de la cerámica y hacen que los polímeros se derritan o se carbonicen, mientras que las bajas temperaturas pueden causar que un metal o polímero falle por fragilidad, aun cuando las cargas aplicadas sean bajas.

El diseño de materiales resistentes a temperaturas extremas resulta esencial para muchas tecnologías, como se ilustra en el incremento de las temperaturas de operación de los vehículos aéreos y aeroespaciales (figura 1-12). Conforme se alcanzan velocidades mayores, ocurre más calentamiento de la superficie externa del vehículo debido a la fricción con el aire. Al mismo tiempo, a temperaturas más altas los motores operan con mayor eficiencia. Por lo que, a fin de conseguir velocidades más altas y ahorro en el consumo de combustible, con los nuevos materiales se han ido incrementando gradualmente las temperaturas permisibles, tanto en la superficie externa como en los motores. Pero los ingenieros de materiales cotidianamente se enfrentan a nuevos retos. El "Aeroplano Aeroespacial Nacional", una aeronave moderna avanzada, que se pretende lleve pasajeros de un lado al otro del Océano Pacífico en menos de tres horas, requerirá desarrollar materiales y técnicas de procesamiento aún más exóticos, para tolerar las temperaturas más altas que se encontrarán.

**Corrosión** La mayor parte de los metales y los polímeros reacciona ante el oxígeno y otros gases, particularmente a temperaturas elevadas. Los metales y los cerámicos pueden desintegrarse (figura 1-13); los polímeros se pueden volver frágiles. Los líquidos corrosivos también atacan a los materiales y les provocan fallas prematuras (figura 1-14). El ingeniero se encuentra ante el reto de seleccionar materiales y recubrimientos que impidan estas reacciones y que permitan la operación en ambientes extremos.



**FIGURA 1-11** Al incrementarse la temperatura, normalmente se reduce la resistencia de un material. Los polímeros son adecuados sólo a bajas temperaturas. Algunos compuestos, como los de carbono-carbono, las aleaciones especiales y los cerámicos, tienen excelentes propiedades a altas temperaturas.



**FIGURA 1-12** Las temperaturas de operación para la superficie externa de aeronaves se han incrementado con el desarrollo de materiales. (Según M. Steinberg, *Scientific American*, Octubre de 1986.)

### EJEMPLO 1-5 Diseño de un proceso para soldar titanio

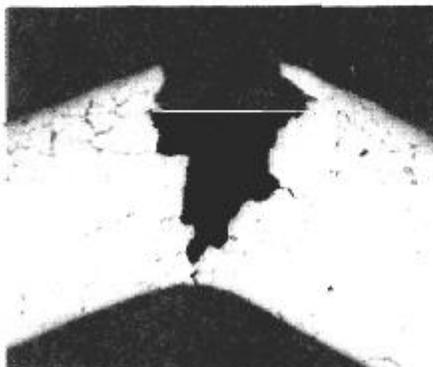
¿Qué precauciones deberán tomarse al soldar titanio?

#### SOLUCIÓN

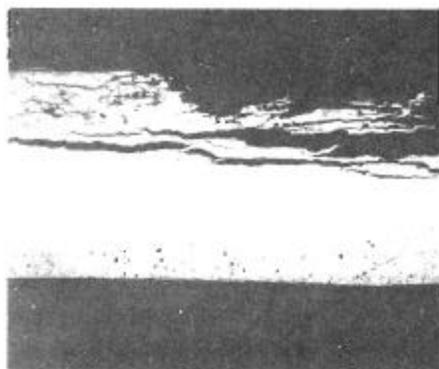
Durante la soldadura, el titanio es calentado a alta temperatura. Esto puede causar cambios perjudiciales en la estructura del titanio, eliminando algunos de los mecanismos de endurecimiento mediante los cuales se obtuvieron las propiedades del metal. Además, a altas temperaturas el titanio reacciona rápidamente ante el oxígeno, hidrógeno y otros gases. El proceso de soldadura debe aportar un mínimo de calor y al mismo tiempo proteger el metal de la atmósfera que lo rodea. Por tanto, pudieran necesitarse gases especiales, como el argón o incluso soldar al vacío.

## 1-5 Diseño y selección de materiales

Cuando se diseña un material para una aplicación dada, deberán tomarse en consideración varios factores. El material debe adquirir las propiedades físicas y mecánicas deseadas, debe ser procesado o manufacturado a la forma deseada, y debe ser una solución económica al problema de diseño. También es esencial la satisfacción de estos requisitos de forma que el entorno quede protegido, quizás fomentando el reciclaje de materiales. Al cumplir con estas necesidades



**FIGURA 1-13** Cuando el hidrógeno se disuelve en cobre duro (con oxígeno residual), se produce vapor en las fronteras de grano, creando pequeños huecos. El metal entonces se torna débil, y frágil, y falla con facilidad (x50).



**FIGURA 1-14** Ataque por bacterias al aluminio contaminado del tanque de combustible de un jet, causando una corrosión severa, picaduras y finalmente falla (x10).

de diseño, el ingeniero pudiera tener que llegar a algunos compromisos, a fin de obtener un producto de buen desempeño y que al mismo tiempo sea vendible.

Como ejemplo, normalmente se calcula el costo del material con base en el costo por libra de peso. En nuestro diseño y selección deberemos tomar en consideración la **densidad** del material, es decir su peso por unidad de volumen (tabla 1-2). Quizás el aluminio cueste más por libra que el acero, pero sólo tiene una tercera parte del peso del acero. Aunque los componentes que se fabriquen a partir de aluminio tendrían que ser más gruesos, el componente de aluminio pudiera resultar menos costoso que el que se fabrique a partir del acero, en razón a la diferencia en peso.

En algunos casos, particularmente en aplicaciones aeroespaciales, el peso resulta crítico, ya que cualquier peso adicional incrementa el consumo de combustible, reduciendo el alcance del vehículo. Al utilizar materiales ligeros pero muy resistentes, los vehículos aeroespaciales pueden diseñarse para mejorar el uso del combustible. Muchos vehículos aeroespaciales modernos utilizan materiales compuestos en vez de aluminio. Estos compuestos, como los epóxicos reforzados con carbono son más costosos que las aleaciones tradicionales de aluminio; sin embargo, el ahorro en combustible obtenido en función de una más alta **relación resistencia-peso** del compuesto (tabla 1-2) puede compensar el mayor costo inicial de la aeronave.

**TABLA 1-2** Relación resistencia-peso de diversos materiales

Material	Resistencia (lb/plg <sup>2</sup> )	Densidad (lb/plg <sup>3</sup> )	Relación resistencia-peso (plg)
Polietileno	1,000	0.03	$0.03 \times 10^6$
Aluminio puro	6,500	0.098	$0.07 \times 10^6$
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	30,000	0.114	$0.26 \times 10^6$
Epóxicos	15,000	0.05	$0.30 \times 10^6$
Aleación de acero con tratamiento térmico	240,000	0.28	$0.86 \times 10^6$
Aleación de aluminio con tratamiento térmico	86,000	0.098	$0.88 \times 10^6$
Compuesto carbono-carbono	60,000	0.065	$0.92 \times 10^6$
Aleación de titanio con tratamiento térmico	170,000	0.16	$1.06 \times 10^6$
Compuesto Kevlar-epóxico	65,000	0.05	$1.30 \times 10^6$
Compuesto carbono epóxico	80,000	0.05	$1.60 \times 10^6$

**RESUMEN**

La selección de un material que tenga las propiedades necesarias y el potencial para ser fabricado y convertido, de manera económica y con seguridad, en un producto útil es un proceso complicado, que involucra el conocimiento de la relación estructura-propiedades-procesamiento. Siempre deberán tomarse en consideración varias familias de materiales:

- Los metales tienen buena resistencia, buena ductilidad y formabilidad, buena conductividad eléctrica y térmica, y una resistencia a la temperatura moderada.
- Los cerámicos son resistentes, sirven como buenos aislantes eléctricos y térmicos; a menudo son resistentes al daño por ambientes corrosivos y de temperaturas altas, pero son frágiles.
- Los polímeros tienen una resistencia relativamente baja, no son adecuados para uso a altas temperaturas, tienen una buena resistencia contra la corrosión y, al igual que los cerámicos, proporcionan un buen aislamiento eléctrico y térmico. Los polímeros pueden ser dúctiles o frágiles, dependiendo si se ha seleccionado un polímero termoplástico o termoes estable.
- Los semiconductores poseen propiedades eléctricas y ópticas únicas que hacen de ellos componentes esenciales en dispositivos electrónicos y de comunicación.
- Los compuestos son mezclas de materiales que proporcionan combinaciones únicas de propiedades mecánicas y físicas que no pueden encontrarse en ningún material por sí solo.

Conforme estudiemos estos materiales, llegaremos a comprender los fundamentos de su estructura, su efecto en el comportamiento de dicho material, y el papel que juega el procesamiento y el ambiente en la relación entre estructura y propiedades. En particular, nuestro análisis proporcionará la base para el diseño de materiales, componentes y sistemas seguros y económicos.

**GLOSARIO**

**Aleaciones** Combinaciones de metales que mejoran las características generales de los mismos.

**Cerámicos** Grupo de materiales que se caracterizan por una buena resistencia y altas temperaturas de fusión, pero con ductilidad y conductividad eléctrica deficientes. Típicamente, las materias primas cerámicas son compuestos de elementos metálicos y no metálicos.

**Compuestos** Grupo de materiales formados a partir de mezclas de metales, cerámicos o polímeros, de manera que se obtengan combinaciones de propiedades poco comunes.

**Densidad** Masa por unidad de volumen de un material, por lo general expresado en unidades  $\text{g/cm}^3$ .

**Estructura cristalina** Arreglo de los átomos en un material con un patrón regular repetible.

**Fase** Un material que tiene en todas las partes la misma composición, estructura y propiedades en condiciones de equilibrio.

**Metales** Grupo de materiales que tienen características generales de buena ductilidad, resistencia y conductividad eléctrica.

**Polimerización** Proceso mediante el cual se unen moléculas orgánicas formando moléculas gigantes, es decir, polímeros.

**Polímeros** Grupo de materiales normalmente obtenidos al unir moléculas orgánicas en cadenas o redes moleculares gigantes. Los polímeros se caracterizan por baja resistencia, bajas temperaturas de fusión y pobre conductividad eléctrica.

**Propiedades físicas** Describen características como color, elasticidad, conductividad eléctrica o térmica, magnetismo y comportamiento óptico, que por lo general no se alteran por fuerzas que actúan sobre el material.

**Propiedades mecánicas** Propiedades de un material, como la resistencia, que describen la forma en que un material soporta fuerzas aplicadas, incluyendo fuerzas de tensión y de compresión, fuerzas de impacto, fuerzas cíclicas o de fatiga, o fuerzas a altas temperaturas.

**Relación resistencia-peso** La resistencia de un material dividida entre su densidad; los materiales con alta relación resistencia-peso son resistentes pero ligeros.

**Semiconductores** Grupo de materiales que tienen una conductividad eléctrica intermedia y otras propiedades físicas no usuales.

**Termoestables** Grupo especial de polímeros que normalmente son bastante frágiles. Estos polímeros típicamente tienen una estructura de red tridimensional.

**Termoplásticos** Grupo especial de polímeros que son fácilmente conformados, en formas útiles. Normalmente, estos polímeros tienen una estructura constituida por cadenas de átomos.

## PROBLEMAS

**1-1** A menudo el hierro se recubre con una delgada capa de zinc cuando se va a utilizar en el exterior. ¿Qué características le da el zinc a este metal recubierto, es decir galvanizado? ¿Qué precauciones deberán tomarse en consideración en la fabricación de este producto? ¿Cómo se afectará la capacidad de reciclaje del producto?

**1-2** Se desea producir una cabina transparente para una aeronave. Si se utilizara una cabina cerámica (vidrio de ventana tradicional), las piedras o los pájaros pudieran romperla. Diseñe un material que minimice daños o por lo menos impida que la cabina se rompa en pedazos.

**1-3** Los resortes en espiral deben ser muy resistentes y rígidos. El  $\text{Si}_3\text{N}_4$  es un material resistente y rígido. ¿Se podría seleccionar este material para un resorte? Explique.

**1-4** A veces se fabrican indicadores de temperatura a partir de una tira de metal en espiral, la cual se dilata una distancia específica cuando se incrementa la temperatura. ¿Cómo funciona el indicador? ¿de qué tipo de material se fabricaría el indicador? y ¿cuales son las propiedades importantes que debe poseer el material del indicador?

**1-5** Para el diseño de una aeronave que pueda volar sin detenerse una distancia de 30 kilómetros, mediante energía humana ¿qué tipo de propiedades de materiales son recomendables? ¿Qué materiales podrían ser apropiados?

**1-6** Se colocará en órbita un microsatélite de tres pies de diámetro. El satélite contendrá equipo electrónico delicado, que enviar y recibir señales de radio de la Tierra. Diseñe la carcasa exterior dentro de la cual quedará alojado el equipo electrónico. ¿Qué propiedades se requerirán y qué materiales pudieran ser considerados?

**1-7** ¿Qué propiedades debe tener la cabeza del martillo de carpintero? ¿Cómo se fabricaría la cabeza de la herramienta?

**1-8** El casco de un transbordador espacial está formado por tejas cerámicas adheridas a un recubrimiento de aluminio. Analice los requerimientos de diseño de dicho casco que llevaron a utilizar esta combinación de materiales. ¿Qué problemas para la producción del casco tuvieron que encarar diseñadores y fabricantes?

**1-9** Se debe seleccionar un material para los contactos eléctricos de un conmutador eléctrico que frecuentemente se abre y se cierra con fuerza. ¿Qué propiedades deberá poseer el material del contacto? ¿Qué tipo de material recomendaría? ¿Sería una buena selección la alúmina,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ? Explique.

**1-10** El aluminio tiene una densidad de  $2.7 \text{ g/cm}^3$ . Suponga que se desea producir un material compuesto basado en aluminio con una densidad de  $1.5 \text{ g/cm}^3$ . Diseñe un material que tenga esa densidad. ¿Podría ser una posibilidad introducir esferas de polietileno de una densidad de  $0.95 \text{ g/cm}^3$  dentro del aluminio? Explique.

**1-11** Se deberán identificar distintos materiales sin tener que recurrir al análisis químico o a largos procedimientos de prueba. Describa algunas técnicas posibles de prueba y de clasificación que se pudieran utilizar con base en las propiedades físicas de los materiales.

**1-12** Se necesitan separar físicamente distintos materiales en una planta de reciclaje de chatarra. Describa algunos métodos posibles que pudieran utilizarse para separar materiales como polímeros, aleaciones de aluminio y aceros.

**1-13** Algunos pistones para motor de automóvil pueden producirse a partir de un material compuesto que contiene pequeñas partículas duras de carburo de silicio en una matriz de aleación de aluminio. Explique el beneficio que aporta cada uno de los materiales del compuesto al pistón. ¿Qué problemas pudieran causar las distintas propiedades de ambos materiales en la producción de dicho componente?

Estructura  
atómica

## 2-1 Introducción

La estructura de un material puede ser examinada en cuatro niveles: estructura atómica, arreglo de los átomos, microestructura y macroestructura. Aunque la intención principal de este libro es que se comprenda y se pueda controlar la microestructura y la macroestructura de los diversos materiales, primero debemos entender las estructuras atómica y cristalina.

La estructura atómica influye en la forma en que los átomos se unen entre sí; esta comprensión a su vez nos ayuda a clasificar los materiales como metales, semiconductores, cerámicos y polímeros, y nos permite llegar a ciertas conclusiones generales en relación con las propiedades mecánicas y el comportamiento físico de estas cuatro clases de materiales.

## 2-2 Estructura del átomo

Un átomo está compuesto de un núcleo rodeado por electrones. El núcleo contiene neutrones y protones de carga positiva y tiene una carga positiva neta. Los electrones, de carga negativa, están sujetos al núcleo por atracción electrostática. La carga eléctrica  $q$  que llevan cada electrón y cada protón es de  $1.60 \times 10^{-19}$  coulomb (C). Dado que el número de electrones y protones en el átomo es el mismo, en su conjunto el átomo es eléctricamente neutro.

El **número atómico** de un elemento es igual al número de electrones o protones en cada átomo. Por tanto, un átomo de hierro, que contiene 26 electrones y 26 protones, tiene un número atómico de 26.

La mayor parte de la masa del átomo se encuentra en el núcleo. La masa de cada protón y cada neutrón es  $1.67 \times 10^{-24}$  g, pero la de cada electrón es de únicamente  $9.11 \times 10^{-28}$  g. La **masa atómica**  $M$ , que corresponde al número promedio de protones y neutrones en el átomo es la masa de una cantidad de átomos igual al **número de Avogadro**,  $N_A$ ,  $N_A = 6.02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  es el número de átomos o moléculas en un mol o molécula gramo. Por tanto, la masa atómica tiene unidades de g/mol. Una unidad alterna para la masa atómica es la **unidad de masa atómica**, es decir uma, que es 1/12 de la masa del carbono 12. Como un ejemplo, un mol de hierro contiene  $6.02 \times 10^{23}$  átomos y tiene una masa de 55.847 g, es decir 55.847 uma.

<sup>1</sup>A menudo la masa atómica se llama *peso atómico*.

**EJEMPLO 2-1**

Calcule el número de átomos en 100 g de plata.

**SOLUCIÓN**

El número de átomos se puede calcular a partir de la masa atómica y del número de Avogadro. Del Apéndice A, la masa atómica, es decir el peso, de la plata es 107.868 g/mol. El número de átomos es:

$$\begin{aligned}\text{Número de átomos de Ag} &= \frac{(100\text{g}) (6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}{107.868 \text{ g/mol}} \\ &= 5.58 \times 10^{23}\end{aligned}$$

**2-3 Estructura electrónica del átomo**

Los electrones ocupan niveles de energía discontinuos dentro del átomo. Cada electrón posee una energía en particular; no existen más de dos electrones en cada átomo con una misma energía. Esto también implica que existe una diferencia de energía discreta entre cualesquiera dos niveles diferentes de energía.

**Números cuánticos** El nivel de energía al cual corresponde cada electrón queda determinado por cuatro **números cuánticos**. El número de niveles de energía posibles es determinado por los tres primeros números cuánticos.

1. Al número cuántico principal  $n$  se le asignan valores enteros 1, 2, 3, 4, 5..... que se refieren a la **capa cuántica** a la cual pertenece el electrón (figura 2-1). A las **capas cuánticas** también se les asigna una letra; la capa correspondiente a  $n = 1$  se le llama K, para  $n = 2$  es L, para  $n = 3$  es M, y así sucesivamente.

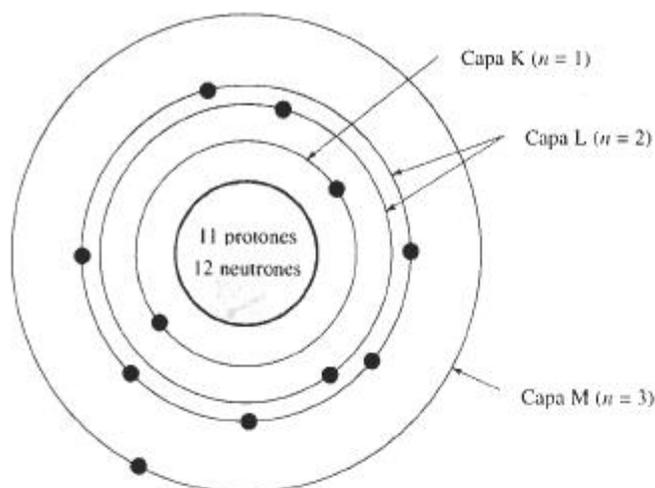
2. El número de niveles de energía en cada capa cuántica está determinado por el **número cuántico acimutal**  $l$  y por el **número cuántico magnético**  $m_l$ . Los números cuánticos acimutales también tienen asignados números:  $l = 0, 1, 2, 3, n - 1$ . Si  $n = 2$  entonces también existen dos números cuánticos acimutales,  $l = 0$  y  $l = 1$ . Los números acimutales cuánticos se simbolizan mediante minúsculas:

$$\begin{array}{ll} s \text{ para } l = 0 & d \text{ para } l = 2 \\ p \text{ para } l = 1 & f \text{ para } l = 3\end{array}$$

El número cuántico magnético  $m_l$  da el número de niveles de energía u orbitales, para cada número cuántico acimutal. El número total de números cuánticos magnéticos para cada  $l$  es  $2l + 1$ . Los valores para  $m_l$  se dan en números enteros entre  $-l$  y  $+l$ . Para  $l = 2$  existen  $2(2) + 1 = 5$  números cuánticos magnéticos, con valores  $-2, -1, 0, +1$  y  $+2$ .

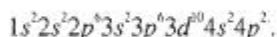
3. El **principio de exclusión de Pauli** establece que no puede haber más de dos electrones con giros propios opuestos en cada orbital. Al **número cuántico de espín**  $m_s$ , se le asignan los valores  $+1/2$  y  $-1/2$  para representar los distintos giros. La figura 2-2 muestra los números cuánticos y los niveles de energía para cada electrón de un átomo de sodio.

La notación abreviada que con frecuencia se utiliza para representar la estructura electrónica de un átomo combina el valor numérico del número cuántico principal, la notación en



**FIGURA 2-1** Estructura atómica del sodio, número atómico 11, mostrando los electrones de las capas cuánticas K, L y M.

minúsculas para el número cuántico acimutal y un superíndice que muestra el número de electrones en cada orbital. La notación abreviada para el germanio, que tiene un número atómico de 32 es:



Las configuraciones electrónicas para los elementos se resumen en el Apéndice C; los niveles energéticos se resumen en la tabla 2-1.

3s <sup>1</sup>	electrón 11	$n = 3, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2} \text{ o } -\frac{1}{2}$
2p <sup>6</sup>	electrón 10	$n = 2, l = 1, m_l = +1, m_s = -\frac{1}{2}$
	electrón 9	$n = 2, l = 1, m_l = +1, m_s = +\frac{1}{2}$
	electrón 8	$n = 2, l = 1, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$
	electrón 7	$n = 2, l = 1, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$
	electrón 6	$n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = -\frac{1}{2}$
2s <sup>2</sup>	electrón 5	$n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = +\frac{1}{2}$
	electrón 4	$n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$
1s <sup>2</sup>	electrón 3	$n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$
	electrón 2	$n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$
	electrón 1	$n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$

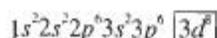
**FIGURA 2-2** Conjunto completo de números cuánticos para cada uno de los once electrones del sodio.

**TABLA 2-1** Patrón utilizado para la asignación de electrones a los niveles de energía.

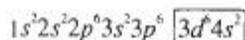
	$l = 0$ (s)	$l = 1$ (p)	$l = 2$ (d)	$l = 3$ (f)	$l = 4$ (g)	$l = 5$ (h)
$n = 1$ (K)	2					
$n = 2$ (L)	2	6				
$n = 3$ (M)	2	6	10			
$n = 4$ (N)	2	6	10	14		
$n = 5$ (O)	2	6	10	14	18	
$n = 6$ (P)	2	6	10	14	18	22

*Nota:* 2, 6, 10, 14,...., se refieren al número de electrones en cada nivel de energía.

**Desviaciones de las estructuras electrónicas esperadas** No siempre se sigue la construcción ordenada de la estructura electrónica, particularmente cuando el número atómico es grande y los niveles  $d$  y  $f$  se empiezan a llenar. Por ejemplo, esperaríamos que la estructura electrónica del hierro, número atómico 26 fuera:

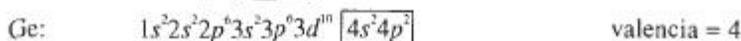
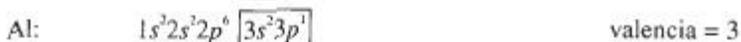


La estructura real, sin embargo, es:



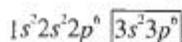
El nivel  $3d$  sin llenar causa el comportamiento magnético del hierro, según se ve en el capítulo 19.

**Valencia** La **valencia** de un átomo se relaciona con la capacidad del mismo para entrar en combinación química con otros elementos y a menudo queda determinado por el número de electrones en los niveles combinados  $sp$  más externos. Ejemplos de valencia son:

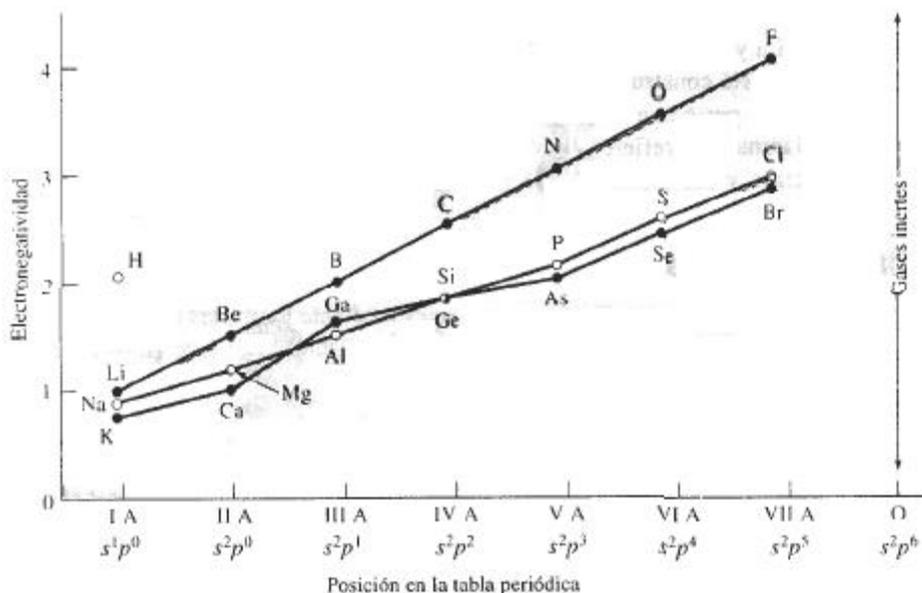


La valencia también depende de la naturaleza de la reacción química. El fósforo tiene una valencia de cinco al combinarse con el oxígeno, pero la valencia del fósforo es de sólo tres—los electrones del nivel  $3p$ —, al reaccionar con el hidrógeno. El manganeso puede tener una valencia de 2, 3, 4, 6 o 7.

**Estabilidad atómica y electronegatividad** Si un átomo tiene una valencia cero, el elemento es inerte. Un ejemplo es el argón que tiene una estructura electrónica:



Otros átomos se comportan como si sus niveles exteriores  $sp$  estuvieran totalmente llenos con ocho electrones o totalmente vacíos. El aluminio tiene tres electrones en su nivel externo  $sp$ . Un átomo de aluminio con facilidad cede sus tres electrones externos para vaciar el nivel



**FIGURA 2-3** Electronegatividades de elementos seleccionados, en relación con su posición en la tabla periódica.

**3sp.** Los enlaces atómicos y el comportamiento químico del aluminio quedan determinados con el mecanismo mediante el cual estos tres electrones interactúan con los átomos circundantes.

Por otra parte, el cloro contiene siete electrones en el nivel  $3sp$  externo. La reactividad del cloro se debe a su deseo de llenar su nivel de energía externo aceptando un electrón.

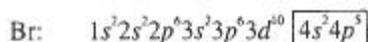
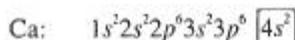
La **electronegatividad** es la tendencia de un átomo a ganar un electrón. Átomos con los niveles externos de energía casi llenos —como el cloro—son fuertemente electronegativos y aceptan electrones con facilidad; con los niveles de energía externos casi vacíos —como el sodio—, con facilidad ceden electrones y son fuertemente **electropositivos**. Elementos con número atómico alto también tienen baja electronegatividad; como sus electrones externos están alejados del núcleo positivo, éstos no permanecen tan fuertemente atraídos hacia el mismo. En la figura 2-3 se muestran las electronegatividades de algunos elementos.

### EJEMPLO 2-2

Utilizando sus estructuras electrónicas, compare las electronegatividades del calcio y del bromo.

### SOLUCIÓN

Las estructuras electrónicas, obtenidas del Apéndice C, son:



El calcio tiene dos electrones en su orbital  $4s$  externo y el bromo tiene siete electrones en su orbital externo  $4s4p$ . El calcio, con una electronegatividad de 1.0, tiene tendencia a ceder electrones y es fuertemente electropositivo, pero el bromo, con una electronegatividad de 2.8, tiende a aceptar electrones y es muy electronegativo.

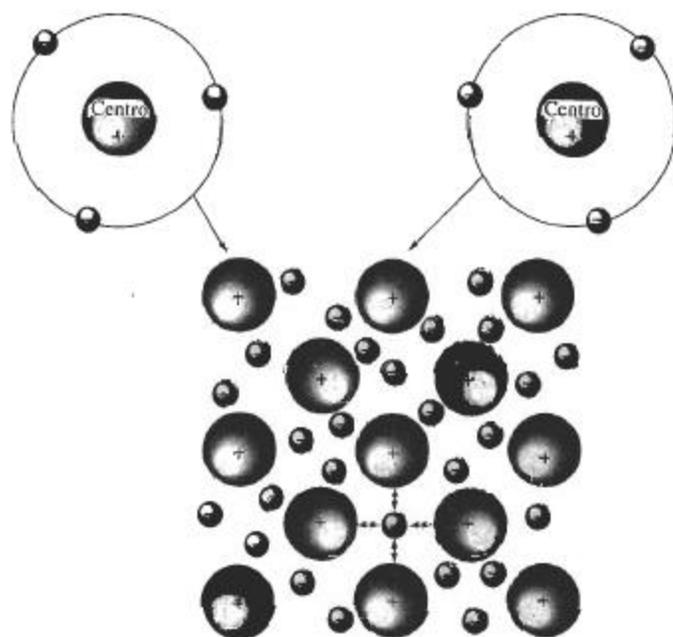
La ya familiar tabla periódica, que aparece en la parte interna de la contraportada de este libro, está construida de acuerdo con la estructura electrónica de los elementos. Las filas de la tabla periódica corresponden a las capas cuánticas, o números cuánticos principales. Las columnas, se refieren típicamente al número de electrones en el nivel de energía  $sp$  más externo y corresponden a la valencia más común.

## 2-4 Enlaces atómicos

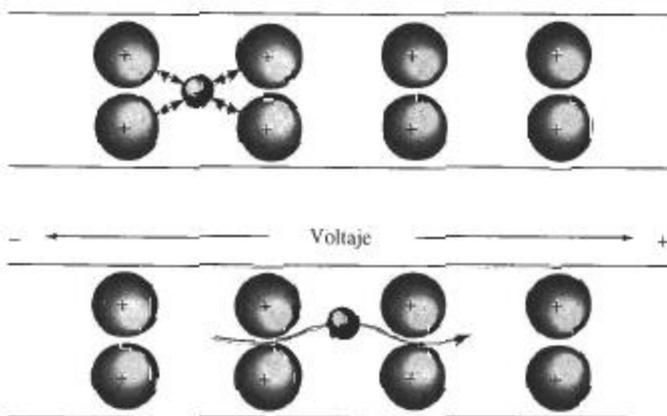
Existen cuatro mecanismos importantes mediante los cuales los átomos se enlazan o unen formando sólidos. En tres de los cuatro mecanismos, el enlace se consigue cuando los átomos llenan sus niveles externos  $s$  y  $p$ .

**El enlace metálico** Los elementos metálicos, que tienen una electronegatividad baja, ceden sus electrones de valencia para formar un "mar" de electrones que rodea a los átomos (figura 2-4). El aluminio, por ejemplo, cede sus tres electrones de valencia, dejando un cuerpo central formado por el núcleo y los electrones internos. En vista de que en este cuerpo central faltan tres electrones cargados negativamente, éste tiene una carga positiva igual a tres. Los electrones de valencia se mueven libremente dentro del mar de electrones y se asocian con varios centros atómicos. Los centros atómicos cargados positivamente se mantienen unidos mediante la atracción mutua con los electrones, produciendo así un fuerte **enlace metálico**.

Dado que sus electrones no están fijos a ninguna posición en particular, los metales son buenos conductores eléctricos. Bajo la influencia de un voltaje aplicado, los electrones de valencia se mueven haciendo que fluya una corriente si el circuito está completo (figura 2-5).



**FIGURA 2-4** El enlace metálico se forma cuando los átomos ceden sus electrones de valencia, creando un mar de electrones. Los cuerpos centrales atómicos positivamente cargados quedan enlazados mediante la atracción mutua con los electrones libres de carga negativa.



**FIGURA 2-5** Cuando se aplica voltaje a un metal, los electrones del mar de electrones se pueden mover fácilmente y conducir la corriente.

### EJEMPLO 2-3

Calcule el número de electrones capaces de conducir una carga eléctrica en diez centímetros cúbicos de plata.

### SOLUCIÓN

La valencia de la plata es uno, y sólo los electrones de valencia son los que conducen la carga eléctrica. Del Apéndice A, encontramos que la densidad de la plata es de  $10.49 \text{ g/cm}^3$ . La masa atómica de la plata es  $107.868 \text{ g/mol}$ .

$$\text{Masa por } 10 \text{ cm}^3 = (10 \text{ cm}^3)(10.49 \text{ g/cm}^3) = 104.9 \text{ g}$$

$$\text{Átomos} = \frac{(104.9 \text{ g})(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}{107.868 \text{ g/mol}} = 5.85 \times 10^{23}$$

$$\begin{aligned} \text{Electrones} &= (5.85 \times 10^{23} \text{ átomos})(\text{electrón de valencia/átomo}) \\ &= 5.85 \times 10^{23} \text{ electrón de valencia por } 10 \text{ cm}^3 \end{aligned}$$

**El enlace covalente** Los materiales con **enlace covalente** comparten electrones entre dos o más átomos. Por ejemplo, un átomo de silicio, que tiene una valencia de cuatro, obtiene ocho electrones en su capa externa de energía al compartir sus electrones con otros cuatro átomos de silicio que lo rodean (figura 2-6). Cada punto de contacto representa un enlace covalente; por lo que, cada átomo de silicio está enlazado a cuatro átomos vecinos mediante cuatro enlaces covalentes.

Para que se formen los enlaces covalentes, los átomos de silicio deben organizarse de manera que los enlaces tengan una **relación direccional** fija entre ellos. En el caso del silicio, esta organización produce un tetraedro, con ángulos de  $109.5^\circ$  entre los enlaces covalentes (figura 2-7).

Aunque los enlaces covalentes son muy fuertes, los materiales enlazados de esta manera por lo general tienen pobre ductilidad y mala conductividad eléctrica y térmica. Para que se mueva un electrón y pueda transportar corriente, debe romperse el enlace covalente, lo que requiere de altas temperaturas o voltajes. Muchos materiales cerámicos, semiconductores y



**EJEMPLO 2-4**

Describa cómo el enlace covalente une los átomos de oxígeno y de silicio en la sílice ( $\text{SiO}_2$ ).

**SOLUCIÓN**

El silicio tiene una valencia de cuatro y comparte electrones con cuatro átomos de oxígeno, dando así un total de ocho electrones para cada átomo de silicio. Sin embargo, el oxígeno tiene una valencia de seis y comparte electrones con dos átomos de silicio, dando al oxígeno un total de ocho electrones.

La figura 2-8 muestra una de las estructuras posibles. Como en la del silicio, el resultado es una estructura tetraédrica. ■

**EJEMPLO 2-5****Diseño de un termistor**

Un termistor es un dispositivo que se utiliza para indicar la temperatura, aprovechando el cambio en la conductividad eléctrica al modificarse la temperatura. Diseñe un material que pudiera servir como termistor en el rango de temperatura de  $500^\circ\text{C}$  a  $1000^\circ\text{C}$

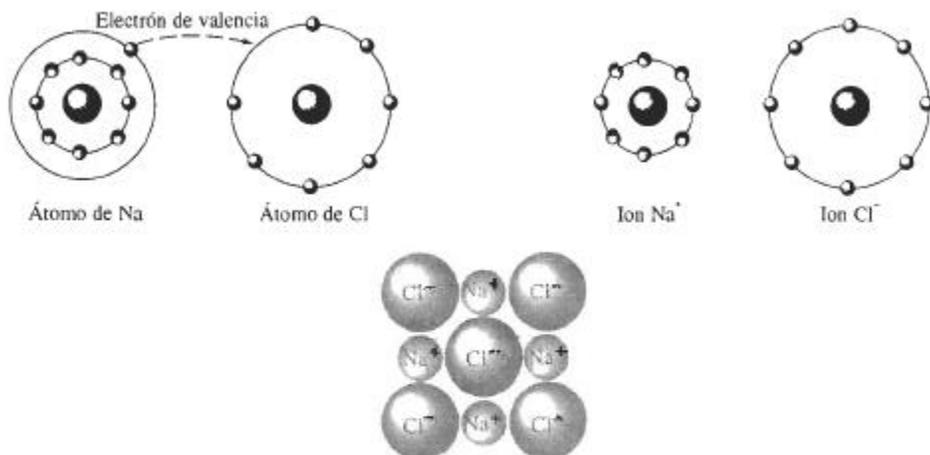
**SOLUCIÓN**

Deben satisfacerse dos requisitos de diseño: primero, deberá seleccionarse un material con alto punto de fusión; segundo, la conductividad eléctrica del material debe ser sensible a los cambios de temperatura. Pudieran resultar adecuados materiales con enlace covalente. A menudo tienen altas temperaturas de fusión y, conforme aumenta la temperatura se van rompiendo enlaces covalentes aumentando el número de electrones disponibles para transferir cargas eléctricas. El silicio semiconductor es una posibilidad: se funde a  $1410^\circ\text{C}$  y está enlazado de manera covalente. Una cierta cantidad de materiales cerámicos también tienen altos puntos de fusión y se comportan como los semiconductores. Los polímeros *no* serían adecuados, aun cuando el enlace principal sea covalente, debido a su relativamente baja temperatura de fusión o de descomposición. ■

**El enlace iónico** Cuando en un material se encuentran presentes más de un tipo de átomos, uno de ellos puede donar sus electrones de valencia a un átomo distinto, llenando la capa energética externa del segundo átomo. Ambos átomos ahora tendrán su nivel de energía externo lleno (o vacío), y a la vez han adquirido una carga eléctrica y se comportan como iones. El átomo que cede los electrones queda con carga neta positiva y es un **catión**; en tanto que el que acepta los electrones adquiere carga neta negativa y es un **anión**. Los iones de carga opuesta se atraen entonces el uno al otro y producen un **enlace iónico**. Por ejemplo, la atracción entre iones de sodio y cloro (figura 2-9) produce el cloruro de sodio ( $\text{NaCl}$ ) o sal de mesa. La conductividad eléctrica es mala; la carga eléctrica se transfiere mediante el movimiento de iones completos (figura 2-10), los que, por su tamaño, no se desplazan tan fácilmente como los electrones.

**EJEMPLO 2-6**

Describa el enlace iónico entre el magnesio y el cloro.



**FIGURA 2-9** Se crea un enlace iónico entre dos átomos distintos con electronegatividades diferentes. Cuando el sodio dona su electrón de valencia al cloro, cada uno se convierte en un ion; la atracción ocurre y se forma el enlace iónico.



**FIGURA 2-10** Cuando a un material iónico se le aplica voltaje, deben moverse iones completos para que fluya una corriente. El movimiento iónico es lento y la conductividad eléctrica es pobre.

## SOLUCIÓN

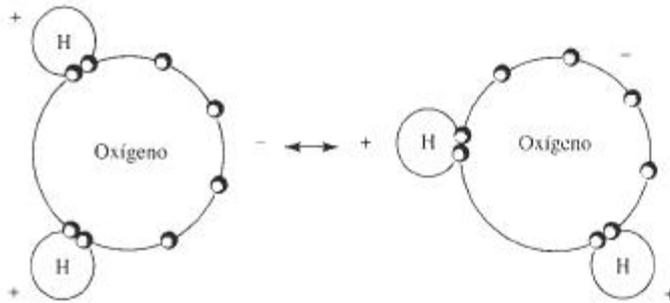
Las estructuras electrónicas y las valencias son:



Cada átomo de magnesio cede sus dos electrones de valencia, convirtiéndose en ion  $\text{Mg}^{2+}$ . Cada átomo de cloro acepta un electrón, convirtiéndose en ion  $\text{Cl}^-$ . A fin de llenar el enlace iónico, tendrá que haber dos veces más iones cloro que iones magnesio presentes y se forma un compuesto, el  $\text{MgCl}_2$ . ■

**Enlaces de Van der Waals** Los **enlaces de Van der Waals** unen moléculas o grupos de átomos mediante una atracción electrostática débil. Muchos plásticos, cerámicos, agua y otras moléculas están **polarizadas** de manera permanente; esto es, algunas porciones de la molécula están cargadas positivamente, en tanto que otras lo están negativamente. La atracción electrostática entre regiones de carga positiva de la molécula y regiones de carga negativa de una segunda molécula unen de manera débil ambas moléculas (figura 2-11). Esto, llamado *enlace de hidrógeno*, ocurre cuando una de las regiones polarizadas está formada de átomos de hidrógeno.

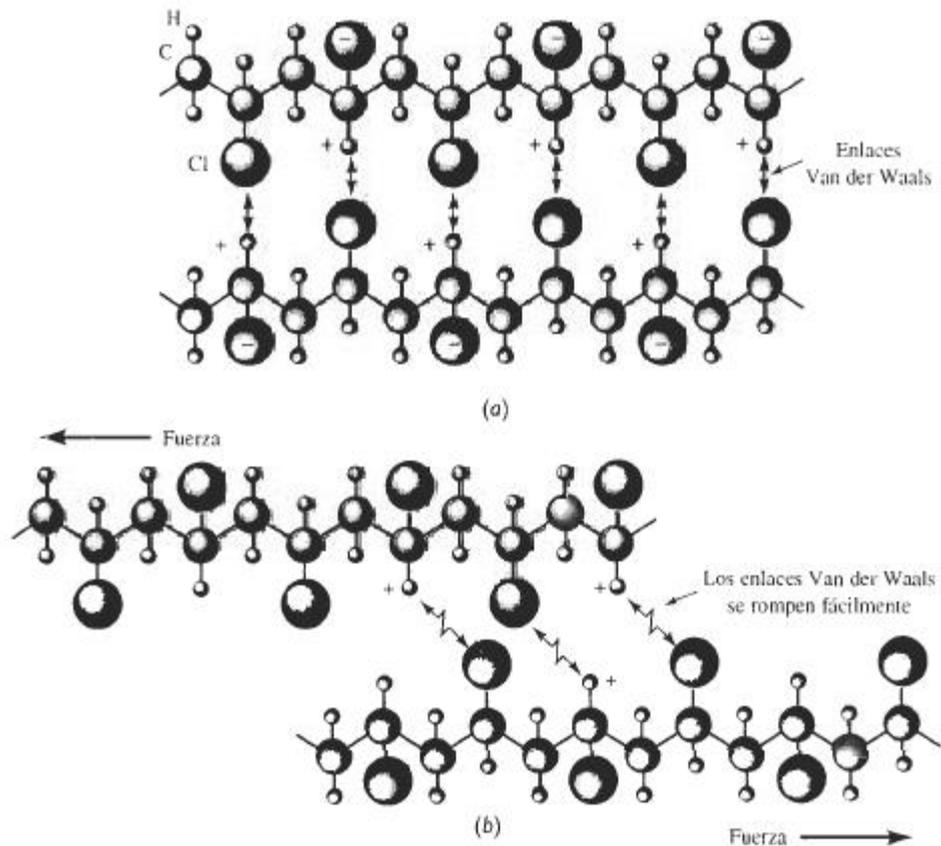
El enlace Van der Waals es un **enlace secundario**, aunque los átomos dentro de la molécula o grupo de átomos siguen unidos mediante fuertes enlaces covalentes o iónicos. Al calentar el agua hasta el punto de ebullición se rompen los enlaces de Van der Waals y el agua se con-



**FIGURA 2-11** El enlace de Van der Waals está formado como resultado de la polarización de moléculas o de grupos de átomos. En el agua, los electrones del el oxígeno tienen tendencia a concentrarse lejos del hidrógeno. La diferencia de carga resultante permite que la molécula se enlace débilmente con otras moléculas de agua.

vierte en vapor, pero son necesarias temperaturas mucho más altas para romper los enlaces covalentes que unen los átomos de oxígeno y de hidrógeno.

Los enlaces de Van der Waals pueden modificar de manera notable las propiedades de los materiales. Dado que los polímeros por lo general tienen enlaces covalentes, esperaríamos que



**FIGURA 2-12** (a) En el cloruro de polivinilo los átomos de cloro unidos a la cadena del polímero tienen carga negativa y los átomos de hidrógeno carga positiva. Las cadenas están enlazadas débilmente mediante enlaces Van der Waals. (b) Cuando se aplica una fuerza al polímero, los enlaces Van der Waals se rompen y las cadenas se deslizan una frente a la otra.

el cloruro de polivinilo (plástico PVC) fuera muy frágil, pero este material contiene moléculas muy largas en forma de cadena (figura 2-12). Dentro de cada una de éstas los enlaces son covalentes, pero las cadenas individuales se unen una con otra mediante enlaces Van der Waals. El cloruro de polivinilo puede ser deformado rompiendo los enlaces Van der Waals, permitiendo que las cadenas se deslicen una frente a la otra.

**Enlaces mixtos** En la mayor parte de los materiales, el enlace entre átomos es una mezcla de dos o más tipos. Por ejemplo, el hierro está enlazado mediante una combinación de enlaces metálicos y covalentes, lo que impide que los átomos se empaqueten tan eficientemente como pudiéramos esperar.

Los compuestos formados a partir de dos o más metales (**compuestos intermetálicos**) pueden estar enlazados mediante una mezcla de enlaces metálicos e iónicos, particularmente cuando existe una diferencia importante en electronegatividad entre elementos. Dado que el litio tiene una electronegatividad de 1.0 y el aluminio de 1.5, esperaríamos que el AlLi tuviera una combinación de enlaces metálicos e iónicos. Por otra parte, dado que tanto el aluminio como el vanadio tienen electronegatividades de 1.5, tendríamos tendencia a esperar que el AlV estuviera unido principalmente por enlaces metálicos.

Muchos compuestos cerámicos y semiconductores, que son combinaciones de elementos metálicos y no metálicos, tienen una mezcla de enlaces covalentes e iónicos. Conforme aumenta la diferencia de electronegatividad entre los átomos, los enlaces se hacen más iónicos. La fracción del enlace que es covalente puede ser estimada a partir de la ecuación:

$$\text{Fracción covalente} = \exp(-0.25\Delta E^2), \quad (2-1)$$

donde  $\Delta E$  es la diferencia de electronegatividades.

### EJEMPLO 2-7

Utilizamos a  $\text{SiO}_2$  como ejemplo de un material de enlaces covalentes. ¿Qué fracción del enlace es covalente?

### SOLUCIÓN

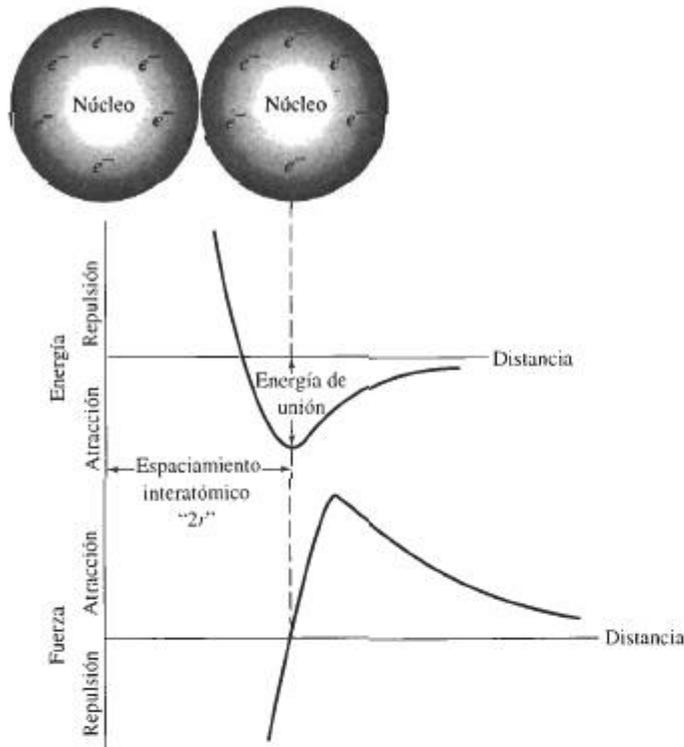
De la figura 2-3 estimamos la electronegatividad del silicio en 1.8 y la del oxígeno como 3.5. La fracción covalente del enlace es:

$$\text{Fracción covalente} = \exp[-0.25(3.5 - 1.8)^2] = \exp(-0.72) = 0.486$$

Aunque el enlace covalente representa aproximadamente la mitad del enlace, la naturaleza direccional de estos enlaces juega un papel de importancia en la estructura final del  $\text{SiO}_2$ .

## 2-5 Energía de enlace y espaciamiento interatómico

**Espaciamiento interatómico** La distancia de equilibrio entre átomos se debe a un equilibrio entre fuerzas de repulsión y de atracción. En el caso del enlace metálico, por ejemplo, la atracción entre electrones y cuerpos centrales atómicos es contrarrestada por la repulsión entre los núcleos de los átomos. El espaciamiento de equilibrio ocurre cuando la energía total del par de átomos llega a un mínimo o cuando ya ninguna fuerza neta actúa, sea para atraer o para repeler los átomos (figura 2-13).



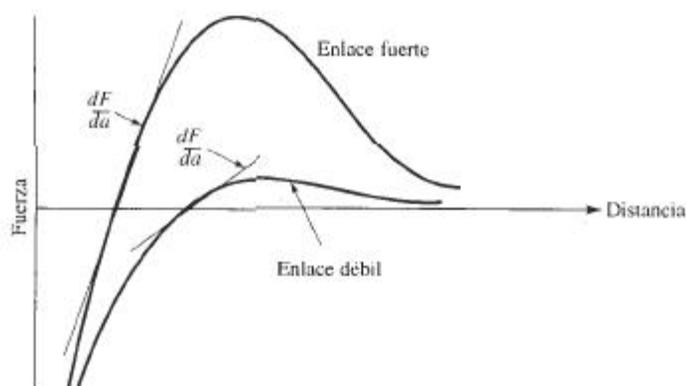
**FIGURA 2-13** Los átomos o iones están separados por un espaciamento de equilibrio, que corresponde al estado de mínima energía de los átomos o iones (o cuando la fuerza de atracción o repulsión entre los átomos o iones es igual a cero).

El espaciamento interatómico en un metal sólido es igual al diámetro atómico, es decir dos veces el radio atómico  $r$ . No podemos, sin embargo, utilizar este método tratándose de materiales con enlaces iónicos, dado que el espaciamento es la suma de dos radios iónicos distintos. Los radios atómicos e iónicos para los elementos aparecen listados en el Apéndice B y se utilizarán en el siguiente capítulo.

En la figura 2-13 el valor mínimo de la energía es la **energía de unión**, es decir, la energía requerida para crear o romper el enlace. En consecuencia, los materiales que tengan una

**TABLA 2-2** Energías de unión para los 4 mecanismos de enlace

Enlace	Energía de unión (kcal/mol)
Iónico	150-370
Covalente	125-300
Metálico	25-200
Van der Waals	< 10

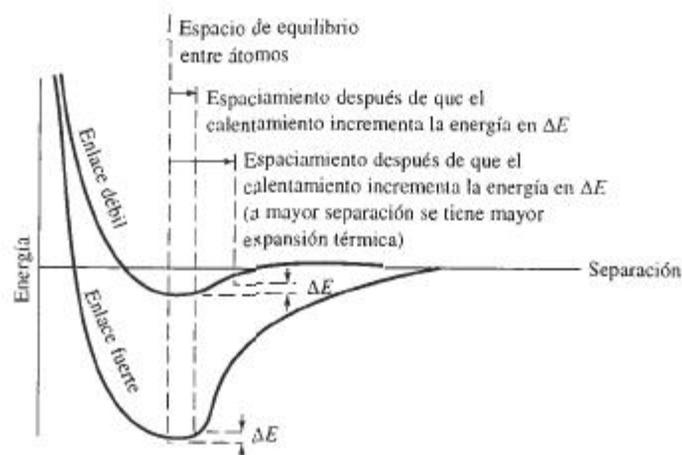


**FIGURA 2-14** Curva fuerza-distancia correspondiente a dos materiales, mostrando la relación entre el enlace atómico y el módulo de elasticidad. Una pendiente  $dF/da$  abrupta corresponde a un módulo alto.

energía de enlace elevada, también tendrán gran resistencia y una elevada temperatura de fusión. Los materiales con enlace iónico tienen una energía de unión particularmente grande, en razón de la gran diferencia en electronegatividad entre iones (tabla 2-2); los metales tienen energías de unión menores, dado que la electronegatividad de los átomos son similares.

Otras propiedades se pueden relacionar con las gráficas de fuerza-distancia y energía-distancia de la figura 2-13. Por ejemplo, el **módulo de elasticidad** de un material, que permite calcular la deformación de un material al aplicársele una fuerza, está relacionado con la pendiente de la curva fuerza-distancia (figura 2-14). Una pendiente abrupta, que se correlaciona con una energía de enlace más alta y un punto de fusión mayor, significa que se requiere de una fuerza mayor para separar los átomos; por lo que este material tendrá un módulo de elasticidad alto.

El **coeficiente de expansión térmica**, que determina cuánto se expandirá o se contraerá un material al modificar su temperatura, también está relacionado con la fuerza de los enlaces



**FIGURA 2-15** Curva de energía-espaciamento para dos átomos. Los materiales que tienen una curva con una depresión estrecha y profunda tienen coeficientes bajos de expansión térmica lineal.

atómicos. A fin de que se muevan los átomos desde su espaciamento de equilibrio, se deberá introducir energía al material. En un material cuya gráfica energía-separación atómica (figura 2-15) presenta una depresión estrecha y profunda debido a un fuerte enlace atómico, los átomos se separarán menos y tendrán un coeficiente de expansión térmica bajo. Los materiales con un coeficiente de expansión térmica bajo mantienen sus dimensiones con mayor precisión al cambiar la temperatura.

**EJEMPLO 2-8****Diseño de un brazo para transbordador espacial**

El transbordador espacial tiene un brazo manipulador largo que permite a los astronautas lanzar y recuperar satélites. Diseñe un material adecuado para este dispositivo.

**SOLUCIÓN**

Veamos dos de las muchas consideraciones de diseño. En primer término, el material debe ser rígido, de manera que ocurra poca deformación al aplicar una carga; esta característica ayuda a que el operador manibre el brazo manipulador con precisión. Generalmente, materiales con enlaces fuertes y punto de fusión altos tienen también un módulo de elasticidad, es decir de rigidez, elevado. En segundo término, el material debe ser ligero para permitir que en órbita se pueda llevar el máximo de carga; por lo que se desea una densidad baja.

Se obtiene una rigidez aceptable a partir de metales de punto de fusión alto (como el berilio y el tungsteno), de los cerámicos y de algunas fibras (como el carbono). El tungsteno, sin embargo, tiene una densidad muy alta, en tanto que los cerámicos son muy frágiles. El berilio, con módulo de elasticidad mayor que el del acero y densidad menor que la del aluminio, pudiera ser un excelente candidato. El material preferido es un compuesto formado de fibras de carbono incrustadas en matriz epóxica; la fibra de carbono tiene un módulo de elasticidad excepcionalmente alto, en tanto que la combinación carbono y epóxica da un material de densidad muy baja.

**RESUMEN**

La estructura electrónica del átomo, que queda descrita por un conjunto de cuatro números cuánticos, ayuda a determinar la naturaleza de los enlaces atómicos y, de ahí, las propiedades físicas y mecánicas de los materiales. Los enlaces atómicos están determinados en parte por la forma en que interactúan los electrones de valencia asociados con cada átomo.

- Para el enlace metálico encontrado en los metales, los electrones de valencia son capaces de moverse con facilidad. En consecuencia, los metales tienden a ser dúctiles y a tener una buena conductividad eléctrica y térmica.
- El enlace covalente que se encuentra en muchos materiales cerámicos, semiconductores y polímeros requiere que los átomos compartan electrones de valencia. Los enlaces son fuertes y altamente direccionales, haciendo que estos materiales sean frágiles y tengan mala conductividad eléctrica y térmica.
- El enlace iónico que se encuentra en muchos cerámicos se produce cuando un átomo dona un electrón a otro distinto, creando cationes de carga positiva y aniones de carga negativa. Igual que en los materiales enlazados de manera covalente, estos materiales tienen la tendencia a ser frágiles y malos conductores.
- Los enlaces Van der Waals se forman cuando átomos o grupos de átomos tienen una carga eléctrica no simétrica, permitiendo uniones por atracción electrostática. Los enlaces Van der Waals son de particular importancia para comprender el comportamiento de los polímeros termoplásticos.

- La energía de unión está relacionada con la fuerza de los enlaces y es particularmente alta en materiales unidos en forma iónica o covalente. Los materiales con una energía de unión alta, a menudo, tienen una temperatura de fusión elevada, un módulo de elasticidad alto y un coeficiente de expansión térmica bajo.

## GLOSARIO

**Anión** Ion cargado negativamente, producido cuando un átomo, usualmente de un no-metal, acepta uno o más electrones.

**Capa cuántica** Conjunto de niveles fijos de energía a los cuales corresponden los electrones. Cada electrón en esta capa tiene designados cuatro números cuánticos.

**Catión** Ion cargado positivamente, producido cuando un átomo, por lo general un metal, cede sus electrones de valencia.

**Coefficiente de expansión térmica** Grado del cambio de dimensiones de un material al modificarse su temperatura. Un material con un bajo coeficiente de expansión térmica tiende a conservar sus dimensiones cuando la temperatura cambia.

**Compuesto intermetálico** Compuesto como el Al<sub>3</sub>V formado por dos o más átomos metálicos; el enlace es típicamente una combinación de enlaces metálicos e iónicos.

**Electronegatividad** Tendencia relativa de un átomo a aceptar un electrón y convertirse en un anión. Los átomos fuertemente electronegativos aceptan electrones con facilidad.

**Electropositividad** Tendencia relativa de un átomo a ceder un electrón y convertirse en un catión. Los átomos fuertemente electropositivos ceden electrones con facilidad.

**Energía de unión** Energía requerida para separar dos átomos de su espaciamiento de equilibrio a una distancia alejada infinita. De manera alterna, la energía de unión es la fuerza del enlace entre dos átomos.

**Enlace covalente** Enlace formado entre dos átomos cuando dichos átomos comparten sus electrones de valencia.

**Enlace iónico** Enlace formado entre dos especies diferentes de átomos, cuando uno de ellos (el catión) dona sus electrones de valencia a otro (el anión). La atracción electrostática une a los iones.

**Enlace metálico** Atracción electrostática entre los electrones de valencia y los núcleos positivamente cargados de los átomos.

**Enlace secundario** Enlaces relativamente débiles, como los enlaces Van der Waals y los de hidrógeno, que típicamente unen moléculas entre sí.

**Enlace Van der Waals** Atracción electrostática débil entre moléculas polares. Las moléculas polares tienen concentraciones de carga positiva y negativa en diferentes lugares.

**Espacio interatómico** Espaciamiento de equilibrio entre los centros de dos átomos. En los elementos sólidos, el espaciamiento interatómico es igual al diámetro aparente del átomo.

**Masa atómica** Masa del número de Avogadro de átomos, g/mol. Normalmente, es el número promedio de neutrones y protones en el átomo. También se conoce como peso atómico.

**Módulo de elasticidad** Grado de deformación de un material cuando se le aplica una fuerza o un esfuerzo. Un material con un módulo de elasticidad alto experimenta muy poca deformación, incluso en el caso de fuerzas elevadas.

**Molécula polarizada** Molécula cuya estructura hace que algunas de sus partes tengan carga negativa, en tanto que otras tengan carga positiva; así, se logra la atracción electrostática entre moléculas.

**Número atómico** Número de protones o electrones en un átomo.

**Número de Avogadro** Número de átomos o moléculas en un mol. El número de Avogadro es  $6.02 \times 10^{23}$  por mol.

**Números cuánticos** Números que asignan electrones de un átomo a niveles discretos de energía. Los cuatro números cuánticos son el número cuántico principal  $n$ , número cuántico acimutal  $l$ , el número cuántico magnético  $m_l$  y el número cuántico de espín  $m_s$ .

**Principio de exclusión de Pauli** No más de dos electrones en un material pueden tener la misma energía. Los dos electrones tienen rotaciones magnéticas opuestas.

**Relación direccional** Uniones entre átomos en materiales enlazados de manera covalente, que forman ángulos específicos, dependiendo de cada material.

**Unidades de masa atómica** Masa de un átomo expresado como  $1/12$  de la masa de un átomo de carbono.

**Valencia** Número de electrones en un átomo que participan en los enlaces o en las reacciones químicas. Por lo general, la valencia es el número de electrones existentes en el nivel de energía externo  $sp$ .

## PROBLEMAS

**2-1** La hoja de aluminio utilizada para guardar alimentos pesa aproximadamente 0.3 g por pulgada cuadrada. ¿Cuántos átomos de aluminio están contenidos en esta muestra de hoja?

**2-2** Utilizando las densidades y pesos atómicos que se dan en el Apéndice A, calcule y compare el número de átomos por  $\text{cm}^3$  en

(a) plomo y

(b) litio

**2-3** Utilizando datos del Apéndice A, calcule el número de átomos de hierro en una tonelada (2000 libras).

**2-4** Utilizando los datos del Apéndice A, calcule el volumen en centímetros cúbicos que ocupa un mol de boro.

**2-5** A fin de recubrir una pieza de acero que tiene una superficie de  $200 \text{ plg}^2$  con una capa de níquel de 0.002 plg. de espesor:

(a) ¿Cuántos átomos de níquel se requieren?

(b) ¿Cuántos moles de níquel se requieren?

**2-6** Suponga que un elemento tiene una valencia de 2 y un número atómico de 27. Con base únicamente en los números cuánticos, ¿cuántos electrones deben estar presentes en el nivel de energía  $3d$ ?

**2-7** El indio, cuyo número atómico es 49, no contiene ningún electrón en sus niveles de energía  $4f$ . Con

base únicamente en esta información, ¿cuál debe ser la valencia del indio?

**2-8** Sin consultar el Apéndice C, describa los números cuánticos para cada uno de los 18 electrones de la capa  $m$  del cobre, utilizando un formato similar al de la figura 2-2.

**2-9** En los metales la carga eléctrica se transfiere mediante el movimiento de los electrones de valencia. ¿Cuántos portadores de carga potenciales existen en un alambre de aluminio de 1 mm de diámetro y 100 m de longitud?

**2-10** Al incrementar la temperatura de un semiconductor los enlaces covalentes se rompen. Por cada enlace roto dos electrones se liberan para moverse y transportar carga eléctrica. ¿Qué fracción de los electrones de valencia totales están libres para moverse y qué fracción de los enlaces covalentes deben romperse a fin de que  $5 \times 10^5$  electrones conduzcan carga eléctrica en 50 g de silicio?

**2-11** ¿Qué fracción del total de átomos de silicio debe remplazarse por átomos de arsénico para obtener un millón de electrones libres para moverse en una libra de silicio?

**2-12** El metano ( $\text{CH}_4$ ) tiene una estructura tetraédrica similar a la del  $\text{SiO}_2$  (figura 2-8), con un átomo de carbono cuyo radio mide  $0.77 \times 10^{-8} \text{ cm}$  en el centro y átomos de hidrógeno con radio de  $0.46 \times 10^{-8} \text{ cm}$  en

cuatro de sus ocho esquinas. Calcule el tamaño del cubo tetraédrico del metano.

**2-13** El compuesto AlP es un material semiconductor formado por enlaces mixtos, iónico y covalente. Calcule la fracción del enlace iónico.

**2-14** Calcule la fracción de enlace iónico en el MgO.

**2-15** El enlace en el compuesto intermetálico Ni<sub>3</sub>Al es predominantemente metálico. Explique por qué será muy pequeña la fracción de enlace iónico. La electronegatividad del níquel es de aproximadamente 1.8.

**2-16** Construya una gráfica con las temperaturas de fusión de los elementos de las columnas IVB a VIIIB de la tabla periódica en función del número atómico (esto es, trace las temperaturas de fusión del Ti hasta el Ni; del Zr al Pd; del Hf hasta el Pt). Analice estas relaciones, con base en los enlaces atómicos y la energía de unión,

(a) conforme el número atómico aumenta en cada fila de la tabla periódica y

(b) conforme el número atómico aumenta en cada columna de la tabla periódica.

**2-17** Construya una gráfica con la temperatura de fusión de los elementos de la columna IA de la tabla periódica en función del número atómico (esto es, trace las temperaturas de fusión del Li hasta el Cs). Analice esta relación, con base en los enlaces atómicos y la energía de unión.

**2-18** El berilio y el magnesio, ambos en la columna IIA de la tabla periódica, son metales ligeros. ¿Cuál de los dos tiene el módulo de elasticidad más alto? Explique, considerando la energía de unión, los radios atómicos, y utilizando los esquemas apropiados de la fuerza entre los átomos en función del espaciamiento interatómico.

**2-19** El boro tiene un coeficiente de expansión térmica mucho más bajo que el aluminio, aunque ambos están colocados en la columna IIIA de la tabla periódica. Explique, con base en la energía de unión, el tamaño del átomo, y la gráfica de energía contra espaciamiento interatómico, por qué esta diferencia es de esperarse.

**2-20** ¿Cuál de los siguientes materiales tiene el módulo de elasticidad más alto, el MgO o el magnesio? Explique.

**2-21** ¿Cuál de los siguientes materiales tiene el coeficiente de expansión térmica más alto, el Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> o el aluminio? Explique.

**2-22** El aluminio y el silicio están uno al lado del otro en la tabla periódica. ¿Cuál de los dos tiene el módulo de elasticidad más alto? Explique.

**2-23** Explique por qué el módulo de elasticidad de polímeros termoplásticos simples, como el polietileno y el poliestireno son muy bajos en comparación con los correspondientes de los metales y cerámicos.

**2-24** El acero se recubre con una delgada capa de cerámica para protegerlo contra la corrosión. ¿Qué le ocurriría al recubrimiento cuando se incrementa de manera significativa la temperatura del acero? Explique.

## Problemas de diseño

**2-25** Se desea introducir fibras cerámicas en una matriz metálica para producir un material compuesto, que estará sujeto a fuerzas y cambios de temperatura grandes. ¿Qué parámetros de diseño se tomarían en consideración para asegurarse de que las fibras se conservarán intactas, dándole resistencia a la matriz? ¿Qué problemas podrían presentarse?

**2-26** Un álabe de turbina fabricado de níquel se puede corroer en un turborreactor. ¿Qué parámetros de diseño se deben tomar en consideración al seleccionar un recubrimiento que no sólo deba proteger de las altas temperaturas de operación, sino que no deba romperse cuando el álabe se enfríe a temperatura ambiente? ¿Qué problemas podrían presentarse? ¿Qué tipos de materiales se deben seleccionar para dicho recubrimiento?

**2-27** Un semiconductor extrínseco puede ser producido introduciendo "impurezas" y en el silicio puro. Al hacerlo, los electrones adicionales a los necesarios para formar los enlaces se convierten en parte de la estructura y pueden moverse. Diseñe un sistema de aleaciones que genere esta semiconducción extrínseca en el silicio.

### 3-1 Introducción

El arreglo atómico juega un papel importante en la determinación de la microestructura y en el comportamiento de un material sólido. Por ejemplo, el arreglo atómico en el aluminio proporciona buena ductilidad, en tanto que en el hierro es la causa de una buena resistencia. Los transductores cerámicos capaces de detectar tumores en el cuerpo humano se basan en un arreglo atómico que produce un desplazamiento permanente de las cargas eléctricas dentro del material. Debido a distintos arreglos atómicos, se puede deformar fácilmente el polietileno, se puede estirar elásticamente el hule, y la epóxica resulta fuerte y quebradiza.

En este capítulo se describirán arreglos atómicos típicos en materiales sólidos perfectos y se desarrollará la nomenclatura utilizada para describirlos. El objetivo es estar preparados para comprender cómo las imperfecciones en el arreglo atómico permiten entender tanto la deformación como el endurecimiento de muchos materiales sólidos.

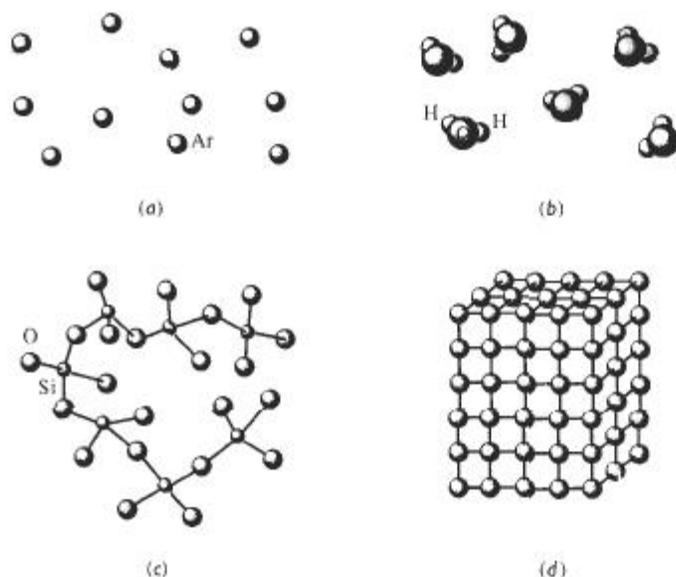
### 3-2 Orden de corto alcance comparado con orden de largo alcance

Si no se consideran las imperfecciones que aparecen en los materiales, entonces existen tres niveles de arreglo atómico (figura 3-1).

**Sin orden** En gases como el argón, los átomos no tienen orden y llenan de manera aleatoria el espacio en el cual está confinado el gas.

**Orden de corto alcance** Un material muestra **orden de corto alcance** si el arreglo especial de los átomos se extiende sólo a los vecinos más cercanos de dicho átomo. Cada molécula de agua en fase vapor tiene un orden de corto alcance debido a los enlaces covalentes entre los átomos de hidrógeno y oxígeno; esto es, cada átomo de oxígeno está unido a dos átomos de hidrógeno, formando un ángulo de  $104.5^\circ$  entre los enlaces. Sin embargo, las moléculas de agua no tienen una organización especial entre sí.

Una situación similar ocurre en los vidrios cerámicos. En el ejemplo 2-4, se describe la **estructura tetraédrica** en el sílice, que satisface el requisito de que cuatro átomos de oxígeno quedan enlazados de manera covalente a cada átomo de silicio. Dado que los átomos de oxígeno deben formar ángulos de  $109.5^\circ$  para satisfacer los requerimientos de direccionalidad de los



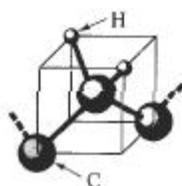
**FIGURA 3-1** Los niveles del arreglo atómico en los materiales: (a) los gases inertes no tienen un orden regular en sus átomos. (b, c) Algunos materiales, incluyendo el vapor de agua y el vidrio, tienen orden en una distancia muy corta. (d) Los metales y muchos otros sólidos tienen un orden regular de los átomos que se extiende por todo del material.

enlaces covalentes, se tiene como resultado un orden de corto alcance. Las unidades tetraédricas, sin embargo, pueden estar unidas entre sí de una manera aleatoria.

Los polímeros también despliegan arreglos atómicos de corto alcance que se parecen mucho a la estructura del vidrio de sílice. El polietileno está compuesto por cadenas de átomos de carbono, con dos átomos de hidrógeno unidos a cada carbono. Dado que éste tiene una valencia de cuatro y que los átomos de carbono e hidrógeno tienen enlaces covalentes, de nuevo se produce una estructura tetraédrica (figura 3-2). Las unidades tetraédricas pueden unirse de manera aleatoria para producir cadenas poliméricas.

Las cerámicas y los polímeros que tienen sólo este orden de corto alcance son materiales **amorfos**. Los **vidrios**, que se forman en sistemas tanto cerámicos como polímeros, son materiales amorfos y a menudo tienen propiedades físicas únicas. Unos cuantos materiales y semiconductores especialmente preparados también poseen sólo orden de corto alcance.

**Orden de largo alcance** Los metales, semiconductores, muchos materiales cerámicos e incluso algunos polímeros tienen una estructura cristalina en la cual los átomos muestran tanto un orden **de corto alcance** como un **orden de largo alcance**; el arreglo atómico especial se ex-



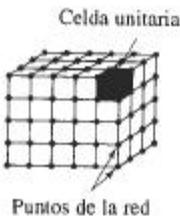
**FIGURA 3-2** Estructura tetraédrica en el polietileno.

tiende por todo el material. Los átomos forman un patrón repetitivo, regular, en forma de rejilla o de red. La **red** es un conjunto de puntos, conocidos como **puntos de red**, que están organizados siguiendo un patrón periódico de forma que el entorno de cada punto en la red es idéntico. Uno o más átomos quedan asociados a cada punto de la red.

La red difiere de un material a otro tanto en tamaño como en forma, dependiendo 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.

### 3-3 Celdas unitarias

La **celda unitaria** es la subdivisión de la red cristalina que sigue conservando las características generales de toda la red. En este texto, se verá la celda unitaria y la estructura cristalina de manera indistinta. En la figura 3-3 se muestra una celda unitaria en una red. Al apilar celdas unitarias idénticas, se puede construir toda la red.



**FIGURA 3-3** Una red es un arreglo periódico de puntos que definen un espacio. La celda unitaria (contorno grueso) es una subdivisión de la red que sigue conservando las características de la red.

Se identifican 14 tipos de celdas unitarias o **redes de Bravais** agrupadas en siete sistemas cristalinos (figura 3-4 y tabla 3-1). Los puntos de la red están localizados en las esquinas de las celdas unitarias y, en algunos casos, en cualquiera de las caras o en el centro de la celda unitaria. A continuación se verán algunas características de una red o de una celda unitaria.

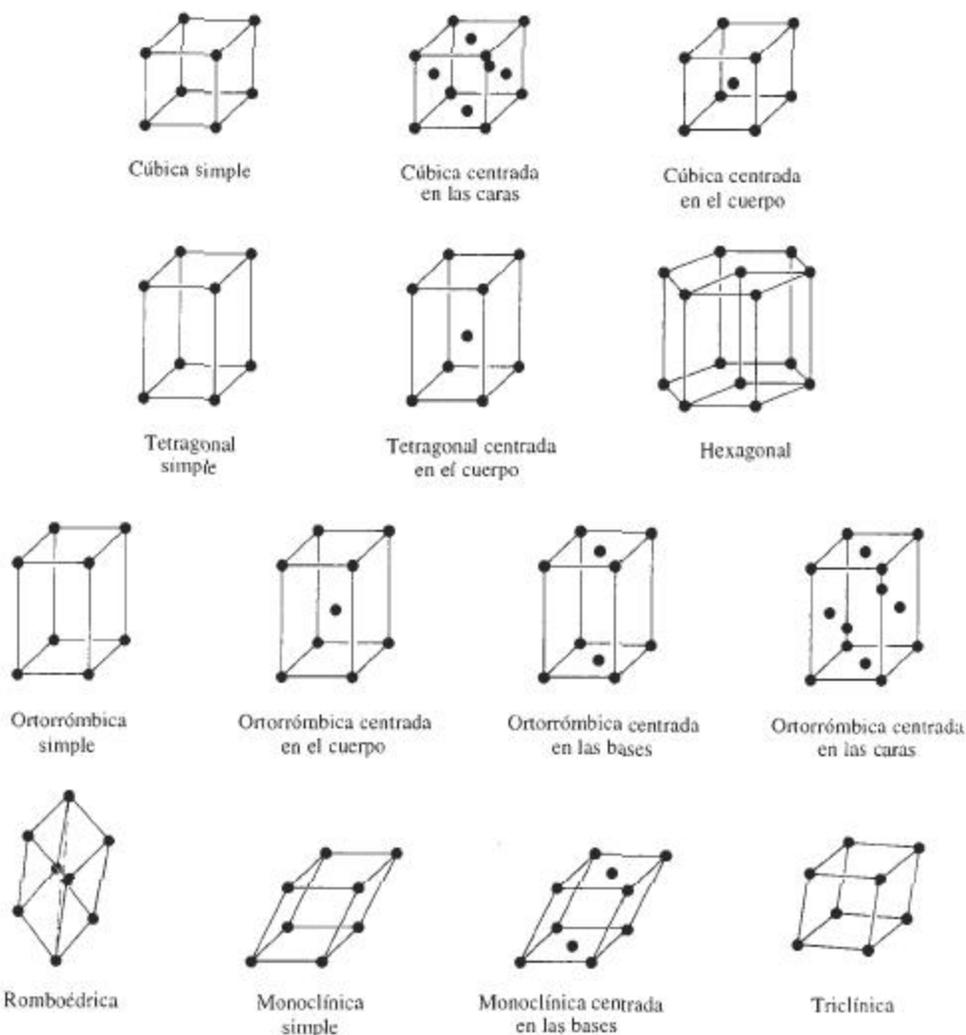
**Parámetro de red** Los **parámetros de la red**, que describen el tamaño y la forma de la celda unitaria, incluyen las dimensiones de los costados de la celda unitaria y los ángulos entre sus costados (figura 3-5). En un sistema cristalino cúbico, solamente es necesaria la longitud de uno de los costados del cubo para describir por completo la celda (se suponen ángulos de  $90^\circ$ , a menos que se especifique lo contrario). Esta longitud, medida a la temperatura ambiente, es el parámetro de red  $a_0$ . A menudo la longitud se da en nanómetros (nm), o en Angstroms ( $\text{\AA}$ ), donde:

$$1 \text{ nanómetro (nm)} = 10^{-9} \text{ m} = 10^{-7} \text{ cm} = 10 \text{ \AA}$$

$$1 \text{ angstrom (\AA)} = 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m} = 10^{-8} \text{ cm}$$

Se requieren varios parámetros de red para definir el tamaño y la forma de celdas unitarias complejas. Para una celda unitaria ortorrómbica, se deben especificar las dimensiones de los tres lados de la celda:  $a_0$ ,  $b_0$ , y  $c_0$ . Las celdas unitarias hexagonales requieren de dos dimensiones,  $a_0$  y  $c_0$ , y el ángulo de  $120^\circ$  entre los ejes  $a_0$ . La celda más complicada, la celda triclinica se describe mediante tres longitudes y tres ángulos.

**Número de átomos por celda unitaria** Cada una de las celdas unitarias está definida por un número específico de puntos de red. Por ejemplo, las esquinas de las celdas se identifican fácil-



**FIGURA 3-4** Los catorce tipos de celdas unitarias, o redes de Bravais, agrupados en siete sistemas cristalinos. Las características de los sistemas cristalinos se resumen en la tabla 3-1.

mente, igual que las posiciones de centrado en el cuerpo (centro de la celda) y centrado en las caras (*centrado en las seis caras de la celda, figura 3-4*). Al contar el número de puntos de red que corresponden a cada celda unitaria, se deben identificar los puntos de la red que van a ser compartidos por más de una celda unitaria. Un punto de red en la esquina de una celda unitaria estará compartido por siete celdas unitarias adyacentes; sólo una octava parte de cada esquina corresponde a una celda en particular. Por tanto, el número de puntos de red proveniente de todas las posiciones de esquina en una celda unitaria es:

$$\left( \frac{1 \text{ punto de red}}{8 \text{ esquina}} \right) \left( 8 \frac{\text{esquinas}}{\text{celda}} \right) = 1 \frac{\text{punto de red}}{\text{celda unitaria}}$$

TABLA 3-1 Características de los siete sistemas cristalinos

Estructura	Ejes	Ángulos entre ejes
Cúbica	$a = b = c$	Todos los ángulos de $90^\circ$
Tetragonal	$a = b \neq c$	Todos los ángulos de $90^\circ$
Ortorrómbica	$a \neq b \neq c$	Todos los ángulos de $90^\circ$
Hexagonal	$a = b \neq c$	Dos ángulos de $90^\circ$ Un ángulo de $120^\circ$
Romboédrica	$a = b = c$	Todos los ángulos son iguales y ninguno es de $90^\circ$
Monoclínica	$a \neq b \neq c$	Dos ángulos de $90^\circ$ Un ángulo ( $\beta$ ) distinto a $90^\circ$
Triclínica	$a \neq b \neq c$	Todos los ángulos son distintos y ninguno es de $90^\circ$

Las esquinas contribuyen con  $1/8$  de un punto, las caras con  $1/2$  y las posiciones en el centro del cuerpo contribuyen con todo un punto.

El número de átomos por celda unitaria es el producto del número de átomos por punto de red multiplicado por el número de puntos de red existentes por celda unitaria. En la mayor parte de los metales, se localiza un átomo en cada punto de red, por lo que el número de átomos es igual al número de puntos de red. En la figura 3-6 se muestran las estructuras de las celdas unitarias cúbica simple (CS), cúbica centrada en el cuerpo (CC) y cúbica centrada en las caras (CCC), con un átomo en cada punto de la red. En estructuras más complicadas, particularmente polímeros y cerámicos, pueden estar asociados varios, e incluso cientos, de átomos con cada punto de la red, formando celdas unitarias muy complejas.

### EJEMPLO 3-1

Determine el número de puntos de red por celda en los sistemas cristalinos cúbicos.

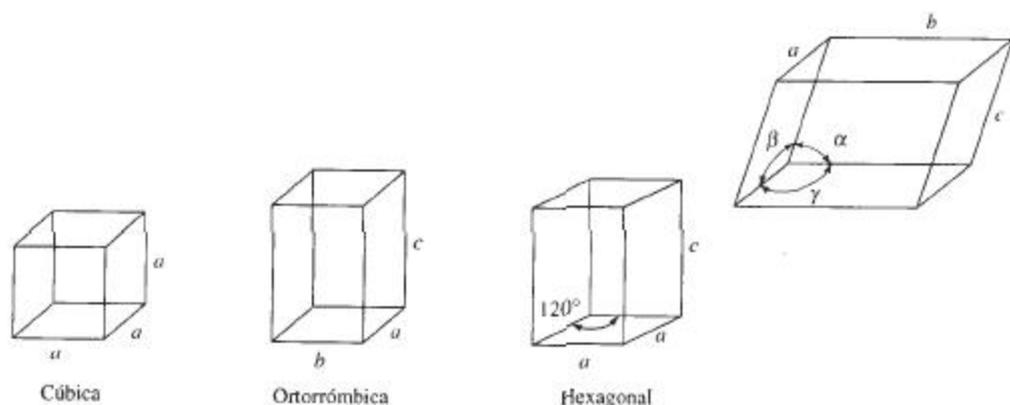


FIGURA 3-5 Definición de parámetros de red y de su uso en tres sistemas cristalinos.



**FIGURA 3-6** Los modelos de celdas unitarias cúbica simple (CS), cúbica centrada en el cuerpo (CC) y cúbica centrada en las caras (CCC), suponiendo un solo átomo por punto de red.

### SOLUCIÓN

En la celda unitaria CS, los puntos de la red están localizados sólo en las esquinas del cubo:

$$\frac{\text{puntos de la red}}{\text{celda unitaria}} = (8 \text{ esquinas}) \left( \frac{1}{8} \right) = 1$$

En las celdas unitarias CC, los puntos de red están localizados en las esquinas y en el centro del cubo:

$$\frac{\text{puntos de la red}}{\text{celda unitaria}} = (8 \text{ esquinas}) \left( \frac{1}{8} \right) + (1 \text{ centro}) (1) = 2$$

En las celdas unitarias CCC, los puntos de red están localizados en las esquinas y en las caras del cubo:

$$\frac{\text{puntos de la red}}{\text{celda unitaria}} = (8 \text{ esquinas}) \left( \frac{1}{8} \right) + (6 \text{ caras}) \left( \frac{1}{2} \right) = 4$$

**Radio atómico comparado con el parámetro de la red** Las direcciones en la celda unitaria a lo largo de las cuales los átomos están en contacto continuo **son las direcciones compactas**. En estructuras simples, particularmente en aquellas con sólo un átomo por punto de red, se utilizan esas direcciones para calcular la relación entre el tamaño aparente del átomo y el tamaño de la celda unitaria. Al determinar geoméricamente la longitud de la dirección, relativa a los parámetros de red y a continuación sumando los **radios atómicos** en esa dirección, es posible *determinar la dirección deseada*.

### EJEMPLO 3-2

Determine la relación entre el radio atómico y el parámetro de red en estructuras CS, CC y CCC cuando existe un átomo en cada punto de la red.

### SOLUCIÓN

Al hacer referencia a la figura 3-7, se verá que los átomos se tocan a lo largo de la arista del cubo en las estructuras CS. Los átomos de las esquinas están centrados en los vértices del cubo, por tanto:

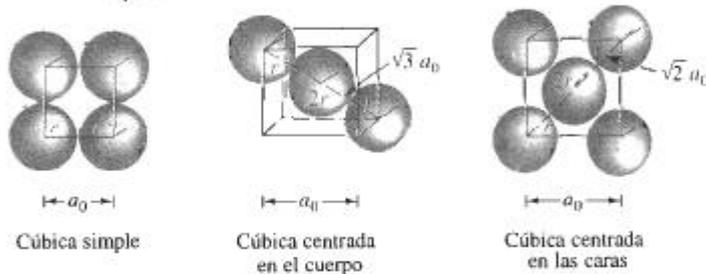
$$a_0 = 2r \quad (3-1)$$

En las estructuras CC, los átomos se tocan a lo largo de la diagonal del cuerpo, que tiene una longitud igual a  $\sqrt{3}a_0$ . Hay dos radios atómicos correspondientes al átomo central y un radio atómico proveniente de cada uno de los átomos en las esquinas de la diagonal del cuerpo, por lo que:

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad (3-2)$$

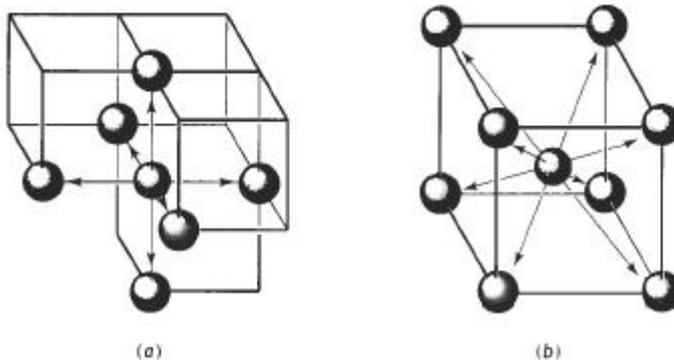
En las estructuras CCC, los átomos entran en contacto a lo largo de la diagonal de la cara del cubo, que tiene una longitud de  $\sqrt{2}a_0$ . Hay cuatro radios atómicos en esta longitud: dos radios provenientes del átomo centrado en la cara y un radio por cada esquina, por lo que:

$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{2}} \quad (3-3)$$



**FIGURA 3-7** Relación entre el radio atómico y el parámetro de red en sistemas cúbicos (vea el ejemplo 3-2).

**Número de coordinación** El número de átomos que tocan a otro en particular, es decir, el número de vecinos más cercanos, es el **número de coordinación** y es una indicación de qué tan estrecha y eficazmente están empaquetados los átomos. En estructuras cúbicas que contengan solamente un átomo por punto de la red, los átomos tienen un número de coordinación relacionado con la estructura de la red. Al revisar las celdas unitarias de la figura 3-8, se aprecia



**FIGURA 3-8** Ilustración de coordinación entre las celdas unitarias CS (a) y CC (b). En CS seis átomos tocan a cada átomo, en tanto que en CC los ocho átomos de esquina tocan al átomo centrado en el cuerpo.

que cada átomo de la estructura CS tiene un número de coordinación de 6, en tanto que cada átomo de la estructura CC tiene ocho vecinos cercanos. En la sección 3-5, se demostrará que cada átomo en la estructura CCC tiene un número de coordinación de 12, que es el máximo.

**Factor de empaquetamiento** El **factor de empaquetamiento** es la fracción de espacio ocupada por átomos, suponiendo que los átomos son esferas sólidas. La expresión general para el factor de empaquetamiento es:

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{(\text{número de átomos/celda})(\text{volumen de cada átomo})}{\text{volumen de la celda unitaria}} \quad (3-4)$$

### EJEMPLO 3-3

Calcule el factor de empaquetamiento para la celda CCC.

#### SOLUCIÓN

Existen cuatro puntos de red por celda; si hay un átomo por punto de red, también habrá cuatro átomos por celda. El volumen de un átomo es  $4\pi r^3/3$  y el volumen de la celda unitaria es  $a_0^3$ .

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{(4 \text{ átomos/celda})(\frac{4}{3}\pi r^3)}{a_0^3}$$

Dado que para las celdas unitarias CCC,  $a_0 = 4r/\sqrt{2}$ :

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{(4)(\frac{4}{3}\pi r^3)}{(4r/\sqrt{2})^3} = 0.74$$

En los metales, el factor de empaquetamiento de 0.74 de la celda unitaria CCC es el empaquetamiento más eficiente posible. Las celdas CC tienen un factor de 0.68 y las celdas CS un factor de 0.52. Los metales que sólo poseen un enlace de tipo metálico se empaquetan con la máxima eficiencia que les es posible. Los de enlaces mixtos, como el hierro, pueden tener celdas unitarias con un factor de empaquetamiento menor al máximo. Ningún metal ingenieril común tiene la estructura CS, aunque esta estructura se encuentra en materiales cerámicos.

**Densidad** La densidad teórica de un metal se puede calcular utilizando las propiedades de la estructura cristalina. La fórmula general es:

$$\text{Densidad } \rho = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica de cada átomo})}{(\text{volumen de la celda unitaria})(\text{número de Avogadro})} \quad (3-5)$$

### EJEMPLO 3-4

Determine la densidad del hierro CC, que tiene un parámetro de red de 0.2866 nm.

#### SOLUCIÓN

$$\text{átomos/celda} = 2$$

$$a_0 = 0.2866 \text{ nm} = 2.866 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\text{Masa atómica} = 55.847 \text{ g/mol}$$

Volumen de la celda unitaria =  $a_0^3 = (2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 = 23.54 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{celda}$   
 Número de Avogadro  $N_A = 6.02 \times 10^{23}$  átomos/mol

$$\rho = \frac{(2)(55.847)}{(23.54 \times 10^{-24})(6.02 \times 10^{23})} = 7.882 \text{ g/cm}^3$$

La densidad medida es  $7.870 \text{ g/cm}^3$ . La ligera discrepancia entre las densidades teórica y medida es una consecuencia de los defectos en la red.

**La estructura hexagonal compacta** Una forma especial de la red hexagonal, la estructura hexagonal compacta (HC), se muestra en la figura 3-9. La celda unitaria es el prisma sesgado, que se muestra por separado. La estructura HC tiene un punto de red por celda —uno proveniente de cada una de las ocho esquinas del prisma— pero con cada punto de la red están asociados dos átomos. Un átomo está ubicado en una esquina, en tanto que el otro está localizado dentro de la celda unitaria.

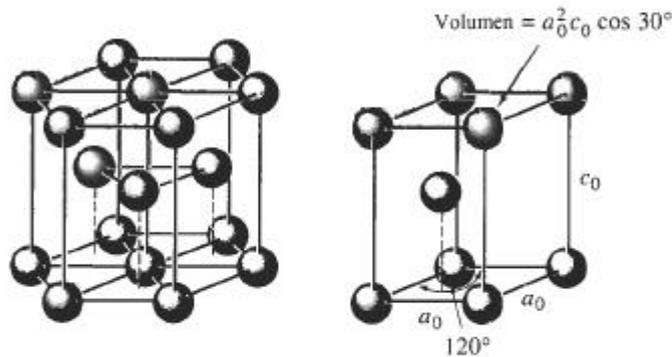


FIGURA 3-9 La red hexagonal compacta (HC) (izquierda) y su celda unitaria (derecha).

En metales HC ideales, los ejes  $a_0$  y  $c_0$  están relacionados entre sí mediante la relación  $c/a = 1.633$ . Sin embargo, la mayor parte de los metales HC tienen relaciones  $c/a$  que difieren ligeramente del valor ideal, en razón de los enlaces mixtos. Dado que la estructura HC, al igual

TABLA 3-2 Características de cristales metálicos comunes

Estructura	$a_0$ en función de $r$	Átomos por celda	Número de coordinación	Factor de empaquetamiento	Metales típicos
Cúbica simple (CS)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	Ninguno
Cúbica centrada en el cuerpo (CC)	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, Ti, W, Mo, Nb, Ta, K, Na, V, Cr, Zr
Cúbica centrada en las caras (CCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Fe, Cu, Al, Au, Ag, Pb, Ni, Pt
Hexagonal compacta (HC)	$a_0 = 2r$ $c_0 = 1.633 a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Cd

que la estructura CCC, tiene un factor de empaquetamiento muy eficiente de 0.74 y un número de coordinación de 12, una buena cantidad de metales poseen esta estructura. La tabla 3-2 resume las características de las estructuras cristalinas más importantes en los metales.

### 3-4 Transformaciones alotrópicas o polimórficas

Los materiales que pueden tener más de una estructura cristalina se llaman **alotrópicos** o **polimórficos**. El término **alotropía** por lo general se reserva para este comportamiento en elementos puros, en tanto que el polimorfismo es un término más general. Quizás haya notado en la tabla 3-2 cómo el hierro y el titanio tienen más de una estructura cristalina. A bajas temperaturas, el hierro tiene una estructura CC, pero a temperaturas más altas se convierte en una estructura CCC. Estas transformaciones dan los fundamentos para el tratamiento térmico del acero y del titanio.

Muchos materiales cerámicos, como el sílice ( $\text{SiO}_2$ ), también son polimórficos. La transformación puede venir acompañada de un cambio en volumen durante el calentamiento o el enfriamiento. De no estar controlado correctamente, este cambio en el volumen hará que el material se agriete y falle.

#### EJEMPLO 3-5 Diseño de un sensor para medir un cambio de volumen

Para estudiar la forma en que el hierro se comporta a temperaturas elevadas, se deberá diseñar un instrumento que pueda detectar —con una precisión del 1%— el cambio de volumen de un cubo de hierro de  $1 \text{ cm}^3$  cuando sea calentado a través de su temperatura de transformación polimórfica. A  $911^\circ\text{C}$  el hierro es CC, con un parámetro de red de  $0.2863 \text{ nm}$ . A  $913^\circ\text{C}$  es CCC, con un parámetro de red de  $0.3591 \text{ nm}$ . Determine la precisión requerida del instrumento de medición.

#### SOLUCIÓN

El cambio volumétrico durante la transformación se puede calcular a partir de datos cristalográficos. El volumen de la celda unitaria del hierro CC antes de transformarse es:

$$V_{\text{CC}} = a^3 = (0.2863 \text{ nm})^3 = 0.023467 \text{ nm}^3$$

este es el volumen ocupado por *dos* átomos de hierro, ya que existen dos átomos por celda unitaria en la estructura cristalina CC.

El volumen de la celda unitaria en el hierro CCC es:

$$V_{\text{CCC}} = a_0^3 = (0.3591 \text{ nm})^3 = 0.046307 \text{ nm}^3$$

Pero este es el volumen ocupado por *cuatro* átomos de hierro, ya que existen cuatro átomos por cada celda unitaria CCC. Por lo tanto se deben comparar dos celdas CC (con un volumen de

$2(0.023467) = 0.046934 \text{ nm}^3$ ) con cada celda CCC. El cambio porcentual en volumen durante la transformación es:

$$\text{Cambio de volumen} = \frac{(0.046307 - 0.046934)}{0.046934} \times 100 = -1.34\%$$

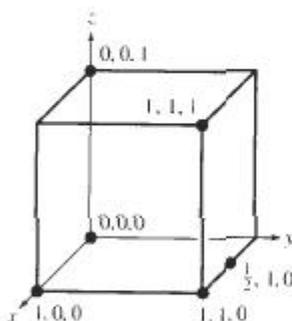
Esto indica que el hierro se contrae al calentarse.

El cubo de  $1 \text{ cm}^3$  de hierro se contrae a  $1 - 0.0134 = 0.9866 \text{ cm}^3$  después de transformarse; por tanto, para conseguir una precisión del 1%, el instrumento debe detectar un cambio de:

$$\Delta V = (0.01)(0.0134) = 0.000134 \text{ cm}^3$$

### 3-5 Puntos, direcciones y planos en la celda unitaria

**Coordenadas de los puntos** Es posible localizar ciertos puntos, como las posiciones de los átomos en la red o en la celda unitaria, construyendo el sistema de coordenadas dextrógiro de la figura 3-10. La distancia se mide en función del número de parámetros de red que habrá que moverse en cada una de las coordenadas  $x$ ,  $y$  y  $z$  para pasar desde el origen hasta el punto en cuestión. Las coordenadas se expresan como tres distancias, y separando cada número con comas.



**FIGURA 3-10** Coordenadas de puntos seleccionados en la celda unitaria. Los números se refieren a la distancia desde el origen en función de los números de parámetros de red.

**Direcciones en la celda unitaria** Ciertas direcciones en la celda unitaria son de particular importancia. Los metales se deforman, por ejemplo, en aquellas direcciones a lo largo de las cuales los átomos están en contacto más estrecho. **Los índices de Miller** para las direcciones son la notación abreviada de estas direcciones. El procedimiento que determina los índices de Miller para las direcciones es el siguiente:

1. Utilizando un sistema de coordenadas dextrógiro, determine las coordenadas de dos puntos que estén en esa dirección.
2. Reste las coordenadas del punto inicial de las coordenadas a las del punto final para obtener el número de parámetros de red recorridos en la dirección de cada eje del sistema de coordenadas.
3. Reduzca las fracciones y/o los resultados obtenidos de la resta a los mínimos enteros.
4. Encierre los números en corchetes [ ]. Si se obtiene un signo negativo, represéntelo con una barra sobre el número.

**EJEMPLO 3-6**

Determine los índices Miller de las direcciones *A*, *B* y *C* de la figura 3-11.

**SOLUCIÓN****Dirección A**

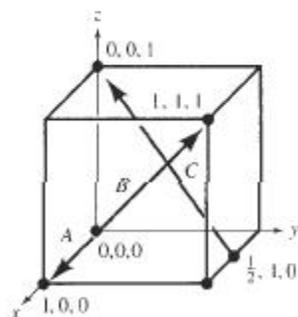
1. Los dos puntos son 1, 0, 0 y 0, 0, 0
2.  $1, 0, 0 - 0, 0, 0 = 1, 0, 0$
3. No hay fracciones ni enteros a reducir
4. [100]

**Dirección B**

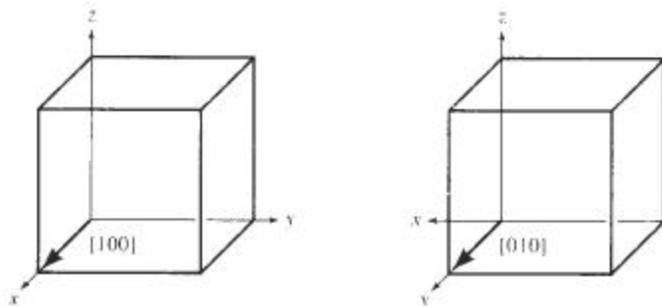
1. Los dos puntos son 1, 1, 1 y 0, 0, 0
2.  $1, 1, 1 - 0, 0, 0 = 1, 1, 1$
3. No hay ni fracciones por simplificar ni enteros por reducir
4. [111]

**Dirección C**

1. Los dos puntos son  $0, 0, 1$  y  $\frac{1}{2}, 1, 0$
2.  $0, 0, 1 - \frac{1}{2}, 1, 0 = -\frac{1}{2}, -1, 1$
3.  $2(-\frac{1}{2}, -1, 1) = -1, -2, 2$
4. [122]



**FIGURA 3-11** Direcciones y coordenadas cristalográficas requeridas para el ejemplo 3-6.



**FIGURA 3-12** Equivalencia de direcciones cristalográficas de una familia en sistemas cúbicos.

**TABLA 3-3** Direcciones de la forma  $\langle 110 \rangle$  en sistemas cúbicos

$$\langle 110 \rangle = \begin{cases} [110] & [\bar{1}\bar{1}0] \\ [101] & [\bar{1}0\bar{1}] \\ [011] & [0\bar{1}\bar{1}] \\ [1\bar{1}0] & [\bar{1}10] \\ [10\bar{1}] & [\bar{1}01] \\ [01\bar{1}] & [0\bar{1}1] \end{cases}$$

Deberán observarse varios puntos acerca del uso de los índices de Miller para las direcciones:

1. Dado que las direcciones son vectores, una dirección y su negativo no son idénticas;  $[100]$  no es igual a  $[\bar{1}00]$ . Representan la misma línea pero con direcciones opuestas.

2. Una dirección y su múltiplo son *idénticos*;  $[100]$  es la misma dirección que  $[200]$ . Simplemente se omitió hacer la reducción a mínimos enteros.

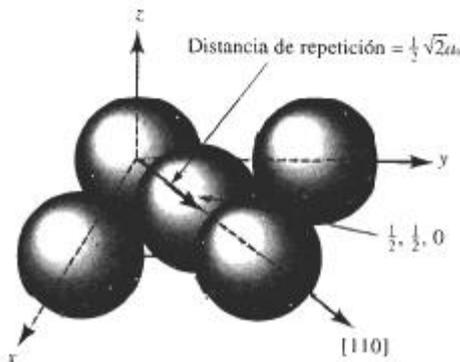
3. Ciertos grupos de direcciones son *equivalentes*; sus índices particulares dependen de cómo se construyen las coordenadas. Por ejemplo, en un sistema cúbico, una dirección  $[100]$  es equivalente a la dirección  $[010]$  si se redefine el sistema de coordenadas según se muestra en la figura 3-12. Es posible referirse a grupos de direcciones equivalentes como **familias de direcciones**. Se utilizan los paréntesis angulares  $\langle \rangle$  para indicar este conjunto, y todas las direcciones de la forma  $\langle 110 \rangle$  aparecen en la tabla 3-3. Es de esperarse que un material tenga las mismas propiedades en cada una de estas 12 familias de direcciones  $\langle 110 \rangle$ .

Otra manera de caracterizar direcciones equivalentes es mediante la **distancia de repetición**, es decir, la distancia entre puntos de la red a lo largo de la dirección. Por ejemplo, se podría examinar la dirección  $[110]$  en una celda unitaria CCC (figura 3-13); si se parte del punto  $0, 0, 0$ , el siguiente punto de la red estará en el centro de una cara, o en un sitio  $1/2, 1/2, 0$ . La distancia entre los puntos de red es, por tanto, la mitad de la diagonal de la cara, es decir  $\frac{1}{2}\sqrt{2}a_0$ . En el cobre, que tiene un parámetro de red de  $0.36151$  nm, la distancia de repetición es  $0.2556$  nm.

La **densidad lineal** es el número de puntos de red por unidad de longitud a lo largo de una dirección. En el cobre, existen dos distancias de repetición a lo largo de la dirección  $[110]$  en cada celda unitaria; dado que esta distancia es  $\sqrt{2}a_0 = 0.51125$  nm, entonces:

$$\text{Densidad lineal} = \frac{2 \text{ distancias de repetición}}{0.51125 \text{ nm}} = 3.91 \text{ puntos de red/nm}$$

Observe que la densidad lineal también es el recíproco de la distancia de repetición.



**FIGURA 3-13** Cómo determinar la distancia de repetición, la densidad lineal y la fracción de empaquetamiento para la dirección  $[110]$  en cobre CCC.

Finalmente, se podría calcular la **fracción de empaquetamiento** en una dirección en particular, es decir, la fracción verdaderamente cubierta por átomos. En el caso del cobre, en el cual un átomo está localizado en cada punto de la red, esta fracción es igual al producto de la densidad lineal por dos veces el radio atómico. En el caso de la dirección [110] en cobre CCC, el radio atómico  $r = \sqrt{2}a_0/4 = 0.12781$  nm. Por tanto, la fracción de empaquetamiento es:

$$\begin{aligned} \text{Fracción de empaquetamiento} &= (\text{densidad lineal})(2r) \\ &= (3.91)(2)(0.12781) \\ &= 1.0 \end{aligned}$$

Los átomos están en contacto en la dirección [110], ya que en los metales CCC la dirección [110] es compacta.

**Planos en la celda unitaria** Ciertos planos de átomos en un cristal también son significativos; por ejemplo, los metales se deforman a lo largo de aquellos planos de átomos que están empaquetados más estrechamente. Se utilizan los índices de Miller como una notación abreviada para identificar estos planos importantes, tal y como se describe en el procedimiento siguiente.

1. Identifique los puntos en los cuales el plano interseca los ejes de coordenadas  $x$ ,  $y$  y  $z$  en función del número de parámetros de red. Si el plano pasa a través del origen, el origen del sistema de coordenadas deberá moverse.
2. Tome los recíprocos de estas intersecciones.
3. Elimine las fracciones pero *no* reduzca a los mínimos enteros.
4. Encierre los números resultantes entre paréntesis ( ). De nuevo, los números negativos se escribirán con una barra sobre los mismos.

### EJEMPLO 3-7

Determine los índices de Miller de los planos A, B y C de la figura 3-14.

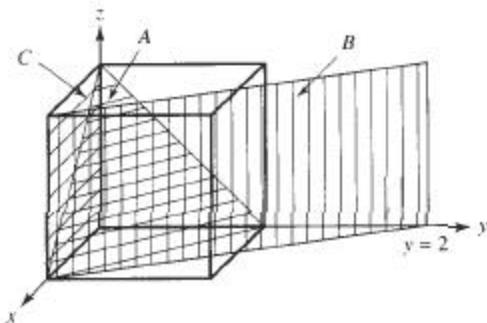
### SOLUCIÓN

#### Plano A

1.  $x = 1, y = 1, z = 1$
2.  $\frac{1}{x} = 1, \frac{1}{y} = 1, \frac{1}{z} = 1$
3. No hay fracciones a simplificar
4. (111)

#### Plano B

1. El plano nunca cruza el eje de las  $z$ , por lo que  $x = 1, y = 2, y z = \infty$ .



**FIGURA 3-14** Planos cristalográficos e intersecciones para el ejemplo 3-7.

$$2. \frac{1}{x} = 1, \frac{1}{y} = \frac{1}{2}, \frac{1}{z} = 0$$

$$3. \text{ Simplificar fracciones: } \frac{1}{x} = 2, \frac{1}{y} = 1, \frac{1}{z} = 0$$

4. (210)

### Plano C

1. Se debe mover el origen, ya que el plano pasa a través de 0, 0, 0. Se mueve también el origen un parámetro de red en la dirección  $y$ . Entonces,  $x \approx 0$ ,  $y = -1$ ,  $z = \infty$ .

$$2. \frac{1}{x} = 0, \frac{1}{y} = -1, \frac{1}{z} = 0$$

3. No hay fracciones que simplificar

4. (010)

Deberán anotarse varios aspectos de importancia en los índices de Miller para los planos:

1. Los planos  $y$  sus negativos son idénticos (que esto no era cierto en el caso de direcciones). Por tanto,  $(020) = (0\bar{2}0)$ .

2. Los planos  $y$  sus múltiplos no son idénticos (de nuevo, esto resulta ser lo opuesto a lo que se encontró en el caso de direcciones). Es posible demostrar esto definiendo densidades planares  $y$  fracciones de empaquetamiento planar. La **densidad planar** es el número de átomos por unidad de superficie cuyo centro está sobre el plano; la fracción de empaquetamiento es el área sobre dicho plano cubierta por dichos átomos. El ejemplo 3-8 muestra cómo se puede calcular esto.

### EJEMPLO 3-8

Calcule la densidad planar  $y$  la fracción de empaquetamiento planar para los planos (010)  $y$  (020) en el polonio cúbico simple, que tiene un parámetro de red de 0.334 nm.

### SOLUCIÓN

Los dos planos aparecen dibujados en la figura 3-15. En el plano (010), los átomos están centrados en cada una de las esquinas de la cara del cubo, estando solamente 1/4 de cada átomo en la cara de la celda unitaria. Por tanto, los átomos totales en cada cara es uno. La densidad planar es:

$$\begin{aligned} \text{Densidad planar (010)} &= \frac{\text{átomos por cara}}{\text{área de la cara}} = \frac{\text{un átomo por cara}}{(0.334)^2} \\ &= 8.96 \text{ átomos/nm}^2 = 8.96 \times 10^{14} \text{ átomos/cm}^2 \end{aligned}$$

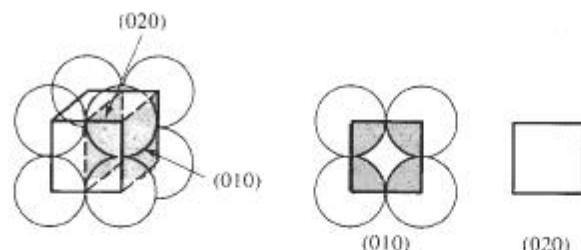
La fracción de empaquetamiento planar está dada por:

$$\begin{aligned} \text{Fracción de empaquetamiento (010)} &= \frac{\text{área de los átomos por cara}}{\text{área de la cara}} = \frac{(1 \text{ átomo})(\pi r^2)}{(a_0)^2} \\ &= \frac{\pi r^2}{(2r)^2} = 0.79 \end{aligned}$$

Sin embargo, no hay átomos centrados en los planos (020). En este caso, la densidad planar  $y$  la fracción de empaquetamiento planar son cero. Los planos (010)  $y$  (020) no son equivalentes.

3. En cada celda unitaria, los **planos de una familia** representan grupos de planos equivalentes que tienen sus índices particulares en función de la orientación del eje coordenado. Se representan estos grupos de planos similares utilizando la notación  $\{ \}$ . Los **planos de la familia**  $\{110\}$  en sistemas cúbicos aparecen en la tabla 3-4.

4. En los sistemas cúbicos, una dirección que tiene los mismos índices que un plano es perpendicular a dicho plano.



**FIGURA 3-15** Las densidades planares de los planos (010) y (020) en unidades de celda CS no son idénticas.

**Construcción de direcciones y de planos** Para construir una dirección o un plano en la celda unitaria, simplemente se trabaja en forma inversa. El ejemplo 3-9 muestra cómo es posible hacerlo.

**TABLA 3-4** Planos de la familia  $\{110\}$  en sistemas cúbicos

$\{110\}$	}	$(110)$ $(101)$ $(011)$ $(\bar{1}\bar{1}0)$ $(10\bar{1})$ $(0\bar{1}1)$
<p><i>Nota:</i> Los valores negativos de los planos no son planos únicos.</p>		

### EJEMPLO 3-9

Dibuje (a) la dirección  $[1\bar{2}1]$  y (b) el plano  $(\bar{2}10)$  en una celda unitaria cúbica.

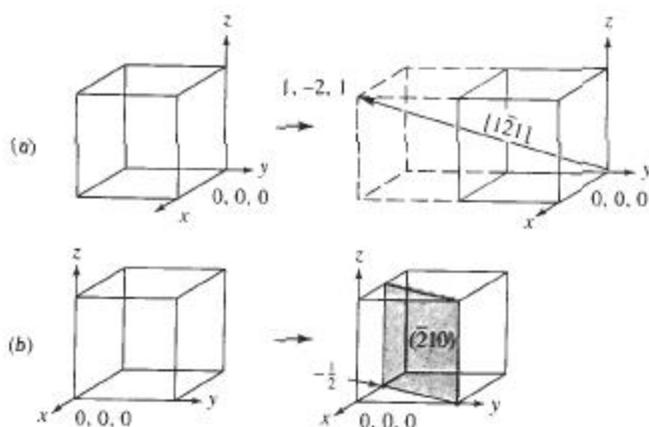
### SOLUCIÓN

- Dado que se sabe que será necesario desplazarse en la dirección  $y$  negativa, se localizará el origen en  $0, +1, 0$ . El punto inicial de la dirección quedará localizado en este nuevo origen. Un segundo punto de la dirección se puede determinar moviendo  $+1$  en la dirección de las  $x$ ,  $-2$  en la dirección de las  $y$  y  $+1$  en la dirección de las  $z$  [figura 3-16(a)].
- Para dibujar el plano  $(\bar{2}10)$ , primero habrá que calcular los recíprocos de los índices para obtener las intersecciones, esto es:

$$x = \frac{1}{-2} = -\frac{1}{2} \quad y = \frac{1}{1} = 1 \quad z = \frac{1}{0} = \infty$$

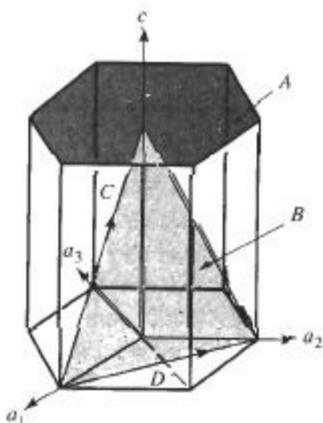
Dado que la intersección en  $x$  está en una dirección negativa, y se desea dibujar el plano dentro de la celda unitaria, se desplaza el origen  $+1$  en la dirección  $x$  hacia  $1, 0, 0$ . Entonces será posible localizar la intersección de  $x$  en  $-1/2$  y la de  $y$  en  $+1$ . El plano será paralelo al eje de las  $z$  [figura 3-16(b)].

**Índices de Miller para las celdas unitarias hexagonales** Un conjunto especial de **índices de Miller-Bravais** ha sido diseñado para las celdas unitarias hexagonales debido a la simetría singular del sistema (figura 3-17). El sistema de coordenadas utiliza cuatro ejes en vez de tres, con el eje  $a_3$  redundante. El procedimiento para localizar los índices de los planos es exactamente el mismo que antes, pero se requiere de cuatro intersecciones, dando índices de la forma  $(hki)$ . En función de la redundancia del eje  $a_3$  y de la geometría especial del sistema, los primeros tres enteros de la designación, que corresponden a las intersecciones de  $a_1$ ,  $a_2$  y  $a_3$ , están relacionados por la ecuación  $h + k = -i$ .



**FIGURA 3-16** Construcción de una dirección (a) y de un plano (b) dentro de la celda unitaria (vea el ejemplo 3-9).

Las direcciones en las celdas HC se denotan mediante el sistema de tres o de cuatro ejes. En el caso del sistema de tres ejes, el procedimiento es el mismo que el de los índices de Miller tradicionales; muestras de este procedimiento aparecen en el ejemplo 3-10. Un procedi-



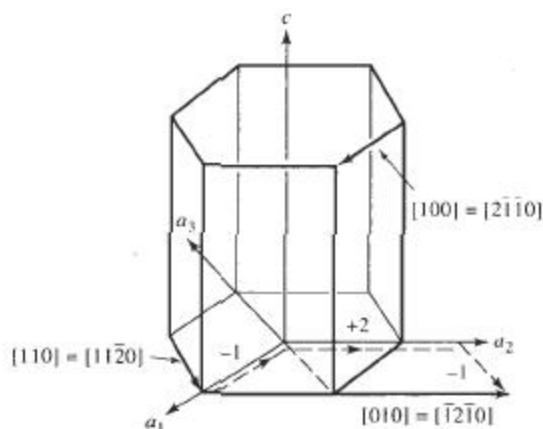
**FIGURA 3-17** Índices de Miller-Bravais obtenidos para planos cristalográficos en celdas unitarias HC utilizando un sistema de coordenadas de cuatro ejes.

miento más complicado, mediante el cual la dirección se divide en cuatro vectores, es el que se requiere para el sistema de cuatro ejes. Se determina el número de parámetros de red a mover en cada dirección, a fin de ir desde la "cola" a la "cabeza" de la dirección, en tanto que por razones de consistencia hay que asegurarse de que  $h + k = -i$ . Esto aparece ilustrado en la figura 3-18, mostrando que la dirección  $[010]$  es la misma que la dirección  $[\bar{1}2\bar{1}0]$ .

También es posible transformar la notación del sistema de tres ejes al de cuatro para el caso de direcciones utilizando las siguientes ecuaciones, donde  $h'$ ,  $k'$  y  $l'$  son los índices en el sistema de tres ejes.

$$\left. \begin{aligned} h &= \frac{1}{3}(2h' - k') \\ k &= \frac{1}{3}(2k' - h') \\ i &= -\frac{1}{3}(h' + k') \\ l &= l' \end{aligned} \right\} \quad (3-6)$$

Después de la transformación, los valores de  $h$ ,  $k$ ,  $i$  y  $l$  pueden requerir simplificación de fracciones o reducción a los mínimos enteros.



**FIGURA 3-18** Direcciones típicas en la celda unitaria HC, utilizando los sistemas tanto de tres como de cuatro ejes. Las líneas punteadas muestran que la dirección  $[1210]$  es equivalente a la dirección  $[010]$ .

### EJEMPLO 3-10

Determine los índices de Miller-Bravais para los planos  $A$  y  $B$  así como para las direcciones  $C$  y  $D$  de la figura 3-17.

### SOLUCIÓN

#### Plano A

- $a_1 = a_2 = a_3 = \infty$ ,  $c = 1$
- $\frac{1}{a_1} = \frac{1}{a_2} = \frac{1}{a_3} = 0$ ,  $\frac{1}{c} = 1$

3. No hay fracciones a simplificar.
4. (0001)

**Plano B**

1.  $a_1 = 1$ ,  $a_2 = 1$ ,  $a_3 = -\frac{1}{2}$ ,  $c = 1$
2.  $\frac{1}{a_1} = 1$ ,  $\frac{1}{a_2} = 1$ ,  $\frac{1}{a_3} = -2$ ,  $\frac{1}{c} = 1$
3. No hay fracciones a simplificar.
4. (1121)

**Dirección C**

1. Dos puntos son 0, 0, 1 y 1, 0, 0.
2. 0, 0, 1 -1, 0, 0 = -1, 0, 1
3. No hay fracciones que simplificar o enteros a reducir.
4.  $[\bar{1}01]$  o  $[\bar{2}113]$

**Dirección D**

1. Dos puntos son 0, 1, 0 y 1, 0, 0.
2. 0, 1, 0 -1, 0, 0 = -1, 1, 0
3. No hay fracciones que simplificar o enteros a reducir.
4.  $[\bar{1}10]$  o  $[\bar{1}100]$

**Planos y direcciones compactas** Al examinar la relación entre radio atómico y el parámetro de red, se buscan direcciones compactas, donde los átomos estén en contacto continuo. Ahora se pueden asignar índices de Miller a esas direcciones compactas, según se muestra en la tabla 3-5.

**TABLA 3-5** Planos y direcciones compactos

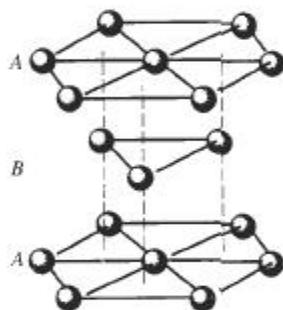
Estructura	Direcciones	Planos
CS	$\langle 100 \rangle$	Ninguna
CC	$\langle 111 \rangle$	Ninguna
CCC	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$
HC	$\langle 100 \rangle$ , $\langle 110 \rangle$ o $\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$(0001)$ , $(0002)$

También se pueden examinar celdas unitarias CCC y HC más de cerca y descubrir que por lo menos existe un conjunto de planos compactos en cada una de ellas. Los planos compactos aparecen en la figura 3-19. Note que se produce una disposición hexagonal de átomos en dos dimensiones. Los planos compactos son fáciles de encontrar en la celda unitaria HC: se trata de los planos (0001) y (0002) de la estructura HC a los que se les da el nombre especial de **planos basales**. De hecho, se puede construir una celda unitaria HC al apilar planos compactos con una **secuencia de apilamiento...ABABAB...** (figura 3-19). Los átomos del plano B, que es el plano (0002), se anidan en los valles entre átomos del plano A, que es el plano inferior (0001). Si se

coloca un plano de orientación idéntica al plano *A* en los valles del plano *B*, se crea la estructura *HC*. Observe que todos los planos compactos posibles son paralelos entre sí. Sólo los planos basales —(0001) y (0002)—, son compactos.

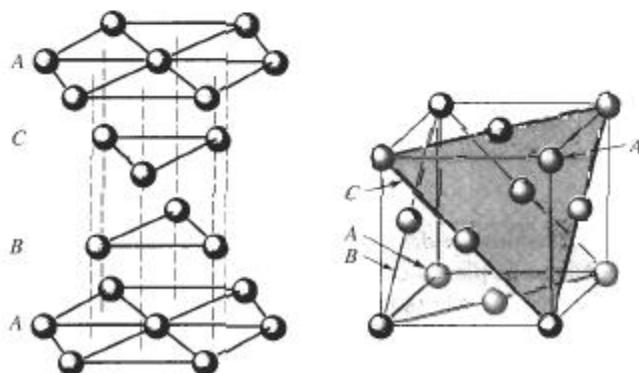
De la figura 3-19, se encuentra el número de coordinación de los átomos de la estructura *HC*. El átomo central en un plano basal está en contacto con otros átomos del mismo plano. Tres átomos en un plano inferior y tres átomos en un plano superior también tocan este mismo átomo. El número de coordinación es 12.

En la estructura *CCC*, planos compactos son de la forma {111} (figura 3-20). Cuando se apilan planos paralelos (111), los átomos del *B* se anidan en los valles del *A* y los átomos del plano *C* se acomodan sobre los valles tanto del *A* como del *B*. El cuarto plano encaja directamente sobre átomos del *A*. Por tanto, se produce una secuencia de apilamiento ...*ABCABCABC*... utilizando el plano (111). De nuevo, se encuentra que cada uno de los planos tiene un número de coordinación igual a 12.



**FIGURA 3-19** La secuencia de apilamiento *ABABAB* de planos compactos produce la estructura *HC*.

A diferencia de la celda unitaria *HC*, existen cuatro conjuntos de planos compactos no paralelos —(111), ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ ), (111) y ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )— dentro de una celda *CCC*. Esta diferencia entre las celdas unitarias *CCC* y *HC* —la presencia o ausencia de planos compactos que se intersecan— afectan el comportamiento de metales que tengan estas estructuras.



**FIGURA 3-20** La secuencia de apilamiento *ABCABCABC* de planos compactos produce la estructura *CCC*.

**Comportamiento isotrópico y anisotrópico** Debido a las diferencias del arreglo atómico en los planos y direcciones dentro de un cristal, también varían las propiedades según la dirección. Un material es **anisotrópico** si el valor de sus propiedades depende de la dirección cristalográfica a lo largo de la cual se mide la propiedad. Por ejemplo, el módulo de elasticidad del aluminio es 75.9 GPa ( $11 \times 10^6$  psi) en las direcciones  $\langle 111 \rangle$ , pero es de sólo 63.4 GPa ( $9.2 \times 10^6$  psi) en las direcciones  $\langle 100 \rangle$ . Si los valores de las propiedades son idénticos en todas las direcciones, entonces el cristal es **isotrópico**.

**Distancia interplanar** La distancia entre dos planos de átomos paralelos adyacentes con los mismos índices de Miller se conoce como **distancia interplanar**  $d_{hkl}$ . La distancia interplanar en materiales cúbicos está dada por la ecuación general,

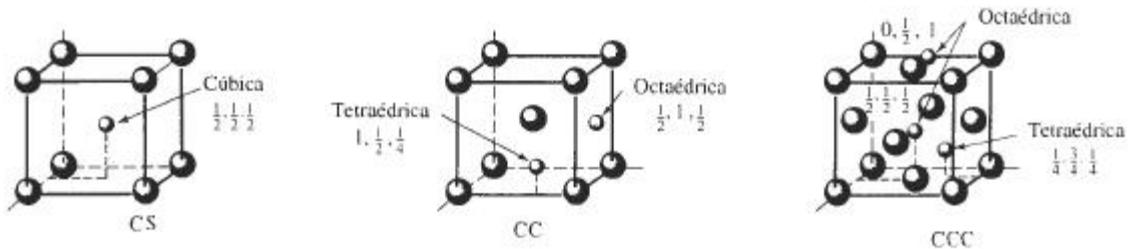
$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (3-7)$$

donde  $a_0$  es el parámetro de red y  $h$ ,  $k$  y  $l$  representan los índices de Miller de los planos adyacentes considerados.

### 3-6 Sitios intersticiales

En cualquiera de las estructuras cristalinas que han sido descritas, existen pequeños huecos entre los átomos de la red en los cuales se pueden colocar átomos más pequeños. Estos espacios se conocen como **sitios intersticiales**.

Un átomo, al ser colocado en un sitio intersticial toca dos o más átomos de la red. Este átomo intersticial tiene un número de coordinación igual al número de átomos que toca. La figura 3-21 muestra sitios intersticiales en las estructuras CS, CC, y CCC. El sitio **cúbico**, con un número de coordinación de ocho ocurre en la estructura CS. Los sitios **octaédricos** dan un número de coordinación de seis, en tanto que los **tetraédricos** dan un número de coordinación de cuatro. Como un ejemplo, los sitios octaédricos de las celdas unitarias CC quedan localizados en las caras del cubo; un pequeño átomo colocado en un sitio octaédrico toca los cuatro átomos de las esquinas de la cara, al que está al centro de la celda unitaria, además de otro en la parte central de la celda unitaria adyacente, y nos da un número de coordinación de seis. En las celdas unitarias CCC, existen los sitios octaédricos en los centros de cada orilla del cubo, así como en el centro de la celda unitaria.



**FIGURA 3-21** Localización de los sitios intersticiales en celdas unitarias cúbicas. Sólo se muestran sitios representativos.

**EJEMPLO 3-11**

Calcule el número de sitios octaédricos que corresponden de *manera única* a una celda unitaria CCC.

**SOLUCIÓN**

Los sitios octaédricos incluyen las doce orillas en la celda unitaria; sus coordenadas son

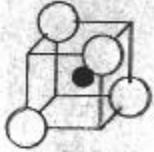
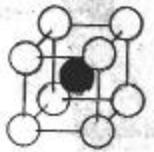
$$\begin{array}{l} \frac{1}{2}, 0, 0 \quad \frac{1}{2}, 1, 0 \quad \frac{1}{2}, 0, 1 \quad \frac{1}{2}, 1, 1 \\ 0, \frac{1}{2}, 0 \quad 1, \frac{1}{2}, 0 \quad 1, \frac{1}{2}, 1 \quad 0, \frac{1}{2}, 1 \\ 0, 0, \frac{1}{2} \quad 1, 0, \frac{1}{2} \quad 1, 1, \frac{1}{2} \quad 0, 1, \frac{1}{2} \end{array}$$

además de la posición central,  $1/2, 1/2, 1/2$ . Cada uno de los sitios en la orilla de la celda unitaria están compartidos entre cuatro celdas unitarias, por lo cual sólo una cuarta parte de cada sitio corresponde de manera única a cada celda unitaria. Por tanto, el número de sitios que corresponden de manera única a cada celda es

$$(12 \text{ orillas}) \left(\frac{1}{4} \text{ por celda}\right) + 1 \text{ localización central} = 4 \text{ sitios octaédricos}$$

Átomos intersticiales con radios ligeramente mayores al radio del sitio intersticial pueden introducirse en dicho sitio, empujando los átomos que lo rodean ligeramente hacia los lados. Sin embargo, los átomos cuyos radios son menores que el del hueco, no podrían acomodarse en el sitio intersticial, porque el ion entonces estaría "suelto" en dicho lugar. Si

**TABLA 3-6** Número de coordinación y relación del radio

Número de coordinación	Localización del sitio intersticial	Relación del radio	Representación
2	Lineal	0-0.155	
3	Centro del triángulo	0.155-0.225	
4	Centro del tetraedro	0.225-0.414	
6	Centro del octaedro	0.414-0.732	
8	Centro del cubo	0.732-1.000	

el átomo intersticial fuera demasiado grande, "preferirá" introducirse en un sitio con número de coordinación más grande (tabla 3-6). Por tanto, un átomo cuya relación de radio esté entre 0.225 y 0.414 entra en un sitio tetraédrico; si su radio es algo mayor que 0.414, se introducirá en un sitio octaédrico. Cuando los átomos son del mismo tamaño, como en los metales puros, la relación de radio es uno y el número de coordinación 12, como con los metales de estructuras CCC y HC.

### EJEMPLO 3-12 Diseño de un muro para absorción de radiaciones

Se desea producir un muro que absorba radiaciones, compuesto de 10,000 esferas de plomo, cada una de ellas de tres centímetros de diámetro, en un arreglo cúbico centrado en las caras. Se decidió que ocurrirá una mejor absorción al llenar los sitios intersticiales con esferas más pequeñas. Determine el tamaño de las esferas de plomo más pequeñas y determine cuántas serán necesarias.

### SOLUCIÓN

Es posible aplicar el conocimiento de las estructuras cristalinas para este diseño. Por ejemplo, introducir esferas de plomo pequeñas que simplemente quepan justo en todos los sitios octaédricos entre esferas de 3 cm. Primero, se determinará el diámetro de los sitios octaédricos localizados entre las esferas. La figura 3-22 muestra el arreglo de las esferas en un plano que contiene uno de estos sitios octaédricos.

$$\begin{aligned} 2R + 2r &= 2R\sqrt{2} \\ r &= \sqrt{2}R - R = (\sqrt{2} - 1)R \\ r/R &= 0.414 \end{aligned}$$

Esto es coherente con los datos de la tabla 3-6. En vista de que  $r/R = 0.414$ , el radio de las esferas de plomo pequeñas es

$$r = 0.414R = (0.414)(3 \text{ cm}/2) = 0.621 \text{ cm.}$$

Según el ejemplo 3-11 hay cuatro sitios octaédricos en el arreglo CCC, que también tiene cuatro puntos de red. Por tanto, se necesita la misma cantidad de esferas pequeñas que grandes, es decir, 10,000.

Como ejercicio, usted podría determinar el cambio en el factor de empaquetamiento debido a las esferas pequeñas; también se podrían comparar los sitios tetraédricos con los octaédricos.

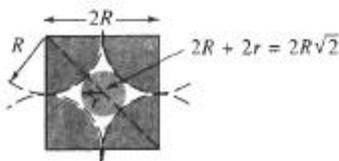


FIGURA 3-22 Cálculo del sitio intersticial octaédrico (para el ejemplo 312).

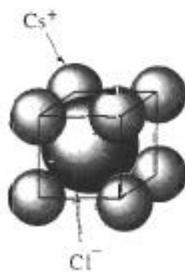
### 3-7 Cristales iónicos

Muchos materiales cerámicos contienen enlaces iónicos entre aniones y cationes. Estos materiales iónicos deben tener estructuras cristalinas que aseguren la neutralidad eléctrica, permitiendo, sin embargo, que iones de tamaño distinto se empaquen con eficiencia.

**Neutralidad eléctrica** Si las cargas en el anión y en el catión son idénticas, el compuesto cerámico tiene la fórmula  $AX$  y el número de coordinación para cada ion debe ser el mismo, si se desea asegurar el equilibrio correcto de la carga. Como un ejemplo, cada catión puede estar rodeado por seis aniones, en tanto que cada anión está a su vez, rodeado por seis cationes. Sin embargo, si la valencia del catión es  $+2$  y la del anión  $-1$ , entonces deberán estar dos veces más aniones, y la fórmula será de la forma  $AX_2$ . La estructura del compuesto  $AX_2$  debe asegurar que el número de coordinación del catión, sea el doble del número de coordinación del anión. Por ejemplo, cada catión puede tener ocho aniones como vecinos más cercanos, en tanto que únicamente cuatro cationes entran en contacto con cada anión.

**Radios iónicos** Las estructuras cristalinas de los compuestos iónicamente enlazados, a menudo pueden describirse colocando los cationes en los puntos normales de red de una celda unitaria, con los aniones colocados en uno o más de los sitios intersticiales descritos en la sección 3-6. La relación de tamaño de los radios iónicos de anión y catión influye la forma de empaquetamiento y el número de coordinación (tabla 3-6). A continuación se describen algunas estructuras comunes en compuestos cerámicos.

**Estructura del cloruro de cesio** El cloruro de cesio ( $\text{CsCl}$ ) es cúbico simple; el sitio intersticial "cúbico" lo ocupa el anión  $\text{Cl}^-$  (figura 3-23). La relación de radios,  $r_{\text{Cs}}/r_{\text{Cl}} = 0.167 \text{ nm}/0.181 \text{ nm} = 0.92$ , determina que el cloruro de cesio tiene un número de coordinación igual a ocho. Se puede representar la estructura como una estructura cúbica simple con dos iones, uno de  $\text{Cs}^+$  y uno de  $\text{Cl}^-$ , asociados con cada punto de red. Esta estructura es posible cuando el anión y el catión tienen la misma valencia.



**FIGURA 3-23** Estructura del cloruro de cesio, una celda unitaria CS con dos iones ( $\text{Cs}^+$  y  $\text{Cl}^-$ ) por punto de red.

#### EJEMPLO 3-13

Para el  $\text{KCl}$ , (a) verifique que el compuesto tiene la estructura del cloruro de cesio y (b) calcule el factor de empaquetamiento para el compuesto.

#### SOLUCIÓN

a. Del Apéndice B,  $r_{\text{K}} = 0.133 \text{ nm}$  y  $r_{\text{Cl}} = 0.181 \text{ nm}$ , por lo que:

$$\frac{r_{\text{K}}}{r_{\text{Cl}}} = \frac{0.133}{0.181} = 0.735$$

Dado que  $0.732 < 0.735 < 1.000$ , el número de coordinación para cada tipo de ion es ocho y una estructura CsCl es probable.

b. Los iones se tocan a lo largo de la diagonal del cuerpo de la celda unitaria, por lo que:

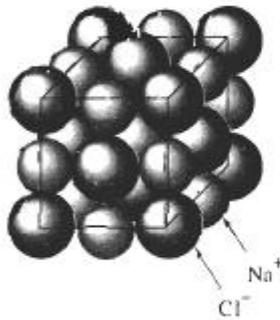
$$\sqrt{3}a_0 = 2r_K + 2r_{Cl} = 2(0.133) + 2(0.181) = 0.628 \text{ nm}$$

$$a_0 = 0.363 \text{ nm}$$

$$\text{Factor de empaquetamiento} = \frac{\frac{4}{3}\pi (0.133)^3 + \frac{4}{3}\pi (0.181)^3}{(0.363)^3} = 0.725$$

$$= \frac{\frac{4}{3}\pi r_K^3 (1 \text{ K ion}) + \frac{4}{3}\pi r_{Cl}^3 (1 \text{ Cl ion})}{a_0^3}$$

**Estructura del cloruro de sodio** La relación de radios para los iones de sodio y de cloro es  $r_{Na} / r_{Cl} = 0.097 \text{ nm} / 0.181 \text{ nm} = 0.536$ ; el ion de sodio tiene una carga de +1; el ion de cloro tiene una carga de -1. Por tanto, con base en el equilibrio de cargas y en la relación de radios, cada anión y catión debe tener un número de coordinación de seis. La estructura CCC, con los aniones de Cl en las posiciones CCC y los cationes de Na en los cuatro sitios octaédricos, satisface estos requisitos (figura 3-24). También se puede considerar esta estructura como CCC con dos iones, uno de Na y otro de Cl, asociados en cada punto de red. Muchos materiales cerámicos, incluyendo el MgO, CaO y FeO, tienen esta estructura.



**FIGURA 3-24** Estructura del cloruro de sodio, una celda unitaria CCC con dos iones ( $Na^+ + Cl^-$ ) por punto de red.

### EJEMPLO 3-14.

Demuestre que el MgO tiene la estructura cristalina del cloruro de sodio y calcule su densidad.

### SOLUCIÓN

Del Apéndice B,  $r_{Mg} = 0.066 \text{ nm}$  y  $r_O = 0.132 \text{ nm}$ , por lo que:

$$\frac{r_{Mg}}{r_O} = \frac{0.066}{0.132} = 0.50$$

Dado que  $0.414 < 0.50 < 0.732$ , el número de coordinación para cada ion es seis y la estructura del cloruro de sodio es posible.

Los pesos atómicos son 24.312 y 16 g/mol para el magnesio y el oxígeno respectivamente. Los iones se tocan a lo largo de las orillas del cubo, por lo que:

$$a_0 = 2r_{Mg} + 2r_O = 2(0.066) + 2(0.132) = 0.396 \text{ nm} = 3.96 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\rho = \frac{(4 \text{ iones de Mg})(24.312) + (4 \text{ iones de O})(16)}{(3.96 \times 10^{-8} \text{ cm})^3 (6.02 \times 10^{23})} = 4.31 \text{ g/cm}^3$$

**Estructura de la blenda de zinc** Aunque los iones Zn tienen una carga de +2 y el S tiene una carga de -2, la blenda de zinc ( $ZnS$ ) no puede tener la estructura del cloruro de sodio, ya que  $r_{Zn}/r_S = 0.074 \text{ nm}/0.184 \text{ nm} = 0.402$ . Esta relación de radios exige un número de coordinación igual a cuatro, lo que a su vez significa que los iones de azufre se introducen en sitios tetraédricos en una celda unitaria, como aparece indicado en la celda unitaria por el pequeño "cubículo" (figura 3-25). La estructura CCC, con cationes Zn en los puntos de red normales y aniones S en la mitad de los sitios tetraédricos pueden aceptar las restricciones tanto del equilibrio de cargas, como del número de coordinación. Una diversidad de materiales, incluyendo el semiconductor GaAs, tienen esta estructura.

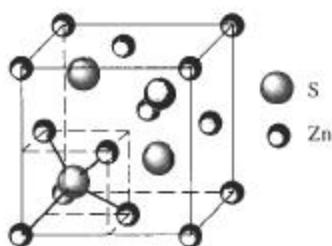


FIGURA 3-25 Celda unitaria de la blenda de zinc.

**Estructura de la fluorita** La estructura de la fluorita es CCC, con aniones localizados en las ocho posiciones tetraédricas (figura 3-26). Entonces, existen cuatro cationes y ocho aniones por celda y el compuesto cerámico debe tener la fórmula  $AX_2$ , como en el fluoruro de calcio o  $CaF_2$ . El número de coordinación de los iones de calcio es ocho, pero el correspondiente a los iones de fluoruro es cuatro, asegurando, por tanto, un equilibrio de las cargas.

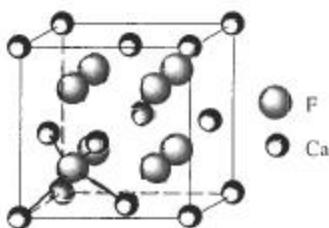


FIGURA 3-26 Celda unitaria de la fluorita.

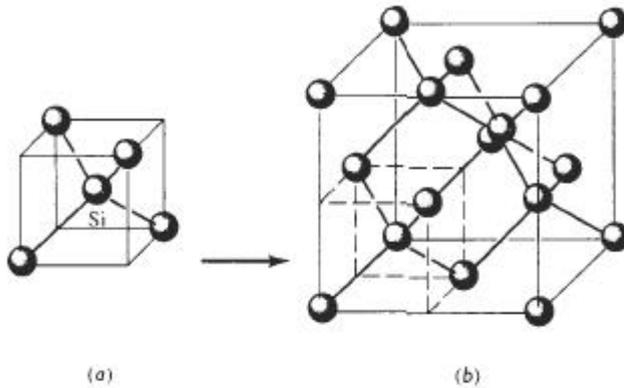
### 3-8 Estructuras covalentes

Los materiales con enlace covalente frecuentemente deben tener estructuras complejas, a fin de satisfacer las restricciones direccionales impuestas por el tipo de enlace.

**Estructura cúbica de diamante** Elementos como el silicio, el germanio y el carbono en su forma de diamante están unidos por cuatro enlaces covalentes y producen un tetraedro [figura 3-27 (a)]. El número de coordinación para cada átomo de silicio es solamente de cuatro, en razón a la naturaleza del enlace covalente.

Como estos grupos tetraédricos están combinados, se puede construir un cubo grande [figura 3-27 (b)]. Este cubo grande contiene ocho cubos más pequeños del tamaño del cubo tetraédrico; sin embargo, sólo cuatro de los cubos contienen tetraedros. El cubo grande es la celda unitaria **cúbica de diamante**, es decir la celda unitaria CD. Los átomos de las esquinas de los cubos tetraédricos proporcionan átomos en los puntos de red CCC normales. Sin embargo, están presentes

cuatro átomos adicionales dentro de la celda unitaria CD de los átomos en el centro de los cubos tetraédricos. Podemos describir la red CD como una red CCC con dos átomos asociados con cada punto de red. Por tanto, deberán existir ocho átomos por celda unitaria.



**FIGURA 3-27** (a) Celda unitaria tetraédrica y (b) cúbica de diamante (CD). Esta estructura abierta es producida en razón de los requisitos de los enlaces covalentes.

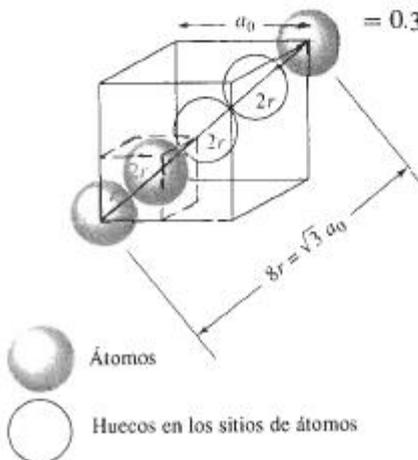
### EJEMPLO 3-15

Determine el factor de empaquetamiento del silicio cúbico de diamante.

### SOLUCIÓN

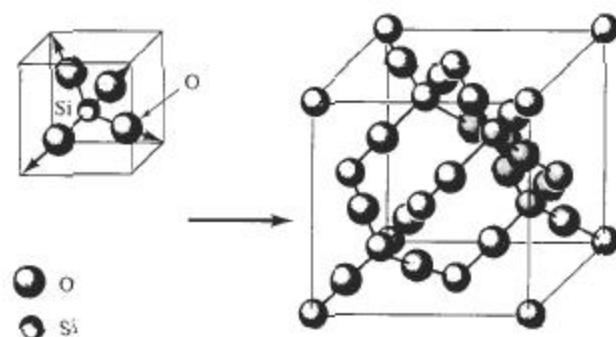
Se encontró que los átomos se tocan a lo largo de la diagonal del cuerpo en la celda (figura 3-28). Aunque no hay átomos presentes en todas las posiciones a lo largo de la diagonal del cuerpo, existen huecos que tienen el mismo diámetro que los átomos. En consecuencia:

$$\begin{aligned} \sqrt{3}a_0 &= 8r \\ \text{Factor de empaquetamiento} &= \frac{(8 \text{ átomos/celdas})\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{a_0^3} \\ &= \frac{(8)\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{(8r/\sqrt{3})^3} \\ &= 0.34 \end{aligned}$$



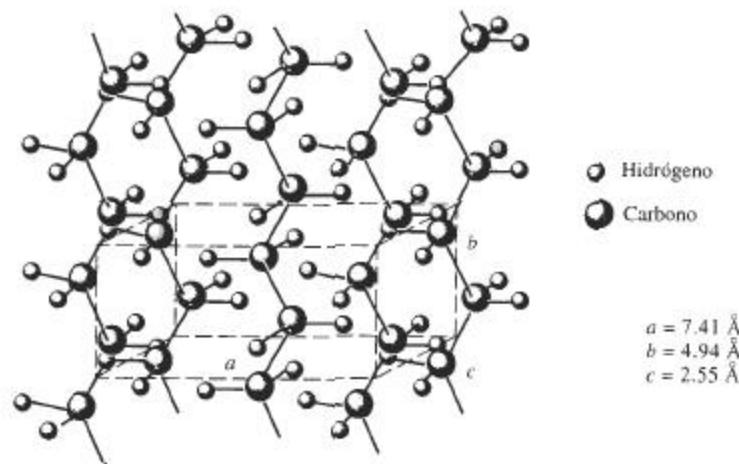
**FIGURA 3-28** Cómo determinar la relación entre el parámetro de red y el radio atómico en una celda unitaria cúbica de diamante (para el ejemplo 3-15).

**Silice cristalino** En algunas de sus formas, el sílice (es decir, el  $\text{SiO}_2$ ) tiene una estructura cerámica cristalina que es parte covalente y parte iónica. La figura 3-29 muestra la estructura cristalina de una forma del sílice, la cristobalita  $\beta$  que es una estructura CCC complicada. Los radios iónicos del silicio y del oxígeno son 0.042 nm y 0.132 nm respectivamente, por lo que la relación de radios es  $r_{\text{Si}}/r_{\text{O}} = 0.318$  y el número de coordinación es 4.



**FIGURA 3-29** Los tetraedros del silicio-oxígeno y su combinación para formar la cristobalita  $\beta$  del sílice.

**Polímeros cristalinos** Un cierto número de polímeros pueden formar una estructura cristalina. Las líneas punteadas en la figura 3-30 resaltan la celda unitaria para la red del polietileno. Éste se obtiene uniendo moléculas  $\text{C}_2\text{H}_4$  para producir largas cadenas de polímeros que forman una celda unitaria ortorrómbica. Algunos polímeros, incluyendo el nylon, pueden tener varias formas polimórficas.



**FIGURA 3-30** Celda unitaria del polietileno cristalino.

### EJEMPLO 3-16

¿Cuántos átomos de carbono y de hidrógeno existen en cada celda unitaria de polietileno cristalino? Existen el doble de átomos de hidrógeno que de átomos de carbono en la cadena. La densidad del polietileno es de aproximadamente  $0.9972 \text{ g/cm}^3$ .

## SOLUCIÓN

Si  $x$  es el número de átomos de carbono, entonces  $2x$  será el número de átomos de hidrógeno. De los parámetros de red que aparecen en la figura 3-30:

$$\rho = \frac{(x)(12 \text{ g/mol}) + (2x)(1 \text{ g/mol})}{(7.41 \times 10^{-8} \text{ cm})(4.94 \times 10^{-8} \text{ cm})(2.55 \times 10^{-8} \text{ cm})(6.02 \times 10^{23})}$$

$$0.9972 = \frac{14x}{56.2}$$

$$x = 4 \text{ átomos de carbono por celda}$$

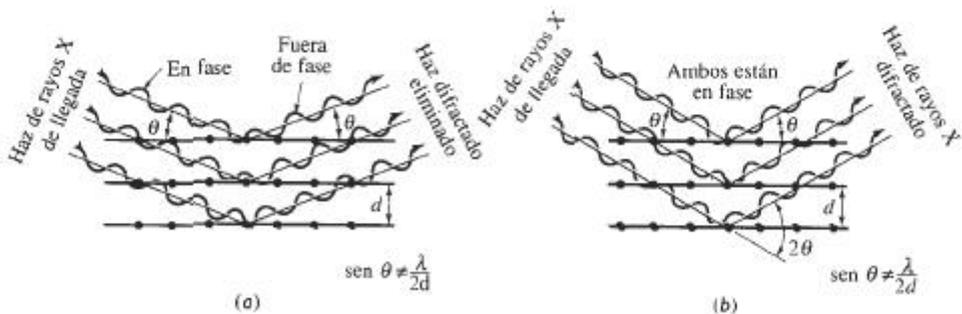
$$2x = 8 \text{ átomos de hidrógeno por celda}$$

## 3-9 Difracción de rayos X

Se puede obtener información sobre la estructura cristalina de un material utilizando difracción de rayos X. Cuando un haz monocromático (de una sola longitud de onda) del mismo orden de magnitud que el espaciamiento atómico del material lo golpea, los rayos X se dispersan en todas direcciones. La mayor parte de la radiación dispersa por un átomo anula la dispersada por otros átomos. Sin embargo, los rayos X que golpean ciertos planos cristalográficos en ángulos específicos se ven reforzados en vez de eliminados. Este fenómeno se conoce como **difracción**. Los rayos X han sido difractados o el haz ha sido reforzado, cuando las condiciones satisfacen la **ley de Bragg**,

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}}, \quad (3-8)$$

donde el ángulo  $\theta$  es la mitad del ángulo entre el haz difractado y la dirección original del haz,  $\lambda$  es la longitud de onda de los rayos X y  $d_{hkl}$  es la distancia interplanar entre los planos que causan el refuerzo constructivo del haz (figura 3-31).



**FIGURA 3-31** Interacciones destructivas (a) y de refuerzo (b) entre rayos X y la estructura cristalina de un material. El refuerzo ocurre en ángulos que satisfacen la ley de Bragg.

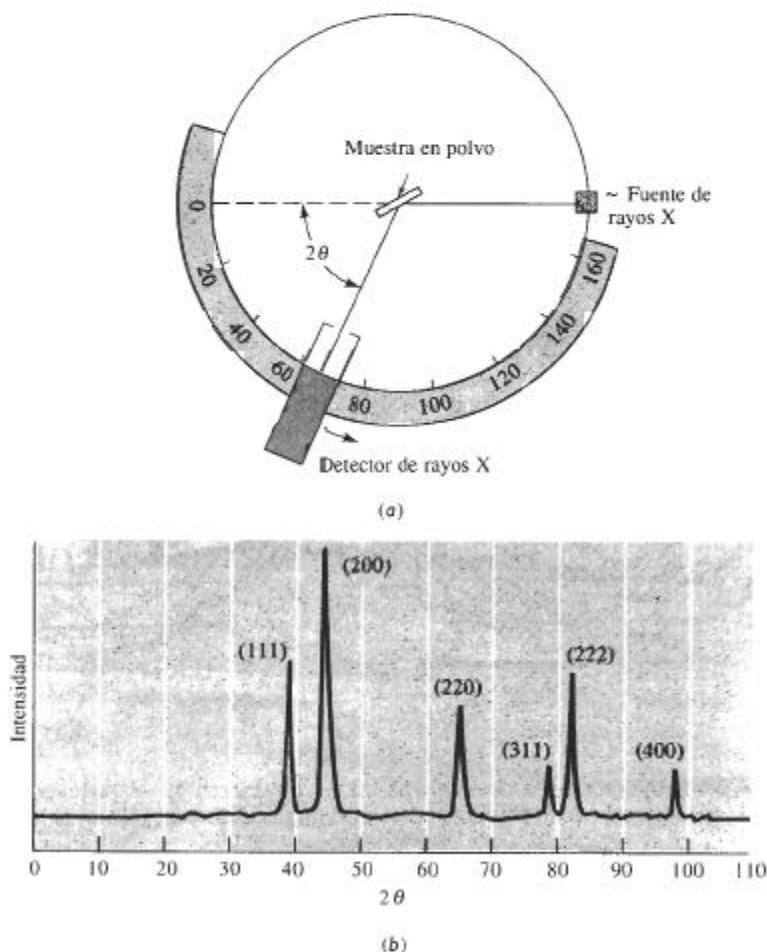
Cuando el material se prepara en forma de polvo fino, siempre habrá algunas partículas de polvo cuyos planos ( $hkl$ ) queden orientados en el ángulo  $\theta$  adecuado para satisfacer la ley de Bragg. Por tanto, se producirá un haz difractado, a un ángulo de  $2\theta$  en relación con el haz incidente. En un **difratómetro**, un detector móvil de rayos X registra los ángulos  $2\theta$  en los cuales se difracta el haz, dando un patrón característico de difracción (figura 3-32). Si se conoce la lon-

gitud de onda de los rayos X, se pueden determinar los espaciamentos interplanares y, finalmente, la identidad de los planos que causan dicha difracción.

Para identificar la estructura cristalina de un material cúbico, se anota el patrón de las líneas de difracción, típicamente, mediante la creación de una tabla de valores del  $\sin^2 \theta$ . Al combinar la ecuación 3-7 con la ecuación 3-8 para la distancia interplanar, se obtiene:

$$\sin^2 \theta = \frac{\lambda^2}{4a_0^2} (h^2 + k^2 + l^2) \quad (3-9)$$

En metales cúbicos simples, todos los planos posibles producirán difracciones, dando un patrón  $h^2 + k^2 + l^2$  de 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, ... En metales cúbicos centrados en el cuerpo, la difracción proviene únicamente de aquellos planos que tengan una suma entera par  $h^2 + k^2 + l^2$  de 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, ... Por lo que se refiere a los metales cúbicos centrados en las caras existe más interferencia destructiva y los planos que se difractarán son los que tengan una suma  $h^2 + k^2 + l^2$  de 3, 4, 8, 11, 12, 16, ... Calculando los valores de  $\sin^2 \theta$  y a continuación encontrando el patrón apropiado, se puede determinar la estructura cristalina de los metales que tengan una de estas estructuras simples, según se ilustra en el ejemplo 3-17.



**FIGURA 3-32** (a) Diagrama de un difractor, mostrando el haz incidente y el haz difractado, la muestra en forma de polvo y el detector de rayos X. (b) Patrón de difracción a partir de una muestra de polvo de oro.

**EJEMPLO 3-17**

Los resultados de un experimento de difracción de rayos X con  $\lambda = 0.7107 \text{ \AA}$  muestran que ocurren picos difractados en los siguientes ángulos  $2\theta$ :

Pico	$2\theta$	Pico	$2\theta$
1	20.20	5	46.19
2	28.72	6	50.90
3	35.36	7	55.28
4	41.07	8	59.42

Determine la estructura cristalina, los índices del plano que produce cada pico y el parámetro de red del material.

**SOLUCIÓN**

Se puede determinar primero el valor de  $\text{sen}^2 \theta$  para cada uno de los picos y a continuación dividirlo por el denominador menor, 0.0308.

Pico	$2\theta$	$\text{sen}^2 \theta$	$\text{sen}^2 \theta / 0.0308$	$h^2 + k^2 + l^2$	(hkl)
1	20.20	0.0308	1	2	(110)
2	28.72	0.0615	2	4	(200)
3	35.36	0.0922	3	6	(211)
4	41.07	0.1230	4	8	(220)
5	46.19	0.1539	5	10	(310)
6	50.90	0.1847	6	12	(222)
7	55.28	0.2152	7	14	(321)
8	59.42	0.2456	8	16	(400)

Al hacer lo anterior, se encuentra un patrón de valores de  $\text{sen}^2 \theta / 0.0308 = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$  y  $8$ . Si el material fuera cúbico simple, el 7 no estaría presente porque no existen planos  $h^2 + k^2 + l^2$  con un valor de 7. Por tanto, el patrón debe ser realmente 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16... y debe tratarse de un material cúbico centrado en el cuerpo. Los valores (hkl) listados dan estos valores  $h^2 + k^2 + l^2$  requeridos.

A continuación se utilizarán los valores  $2\theta$  para calcular el espaciamiento interplanar y de ahí el parámetro de red. Escogiendo el pico 8:

$$2\theta = 59.42 \text{ es decir } \theta = 29.71$$

$$d_{400} = \frac{\lambda}{2 \text{sen } \theta} = \frac{0.7107}{2 \text{sen}(29.71)} = 0.71699 \text{ \AA}$$

$$a_0 = d_{400} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = (0.71699)(4) = 2.868 \text{ \AA}$$

Éste es el parámetro de red correspondiente al hierro cúbico centrado en el cuerpo. ■

**RESUMEN**

Se pueden organizar los átomos en los materiales sólidos ya sea con un orden de corto alcance o con uno de largo alcance. Los materiales amorfos, como los vidrios y muchos polímeros, sólo tienen orden de corto alcance; los materiales cristalinos, incluyendo muchos materiales cerámicos, tienen tanto órdenes de largo alcance como de corto. La periodicidad a largo alcance en estos materiales se describe mediante la estructura cristalina.

- El arreglo atómico de los materiales cristalinos está representado por siete sistemas cristalinos generales, que incluyen catorce redes de Bravais específicas. Los ejemplos incluyen redes cúbicas simples, cúbicas centradas en el cuerpo, cúbicas centradas en las caras y hexagonales.
- Una estructura cristalina está caracterizada por los parámetros de red de la celda unitaria, que es la subdivisión más pequeña de la estructura cristalina que todavía describe la estructura general de la red. Otras características incluyen el número de puntos de red y de átomos por celda unitaria; el número de coordinación (es decir, el número de vecinos más cercanos) de los átomos en la celda unitaria y el factor de empaquetamiento de los átomos en la celda unitaria.
- Los materiales alotrópicos o polimórficos tienen más de una estructura cristalina posible. A menudo, la estructura y las propiedades de materiales con esta característica se pueden controlar mediante tratamientos térmicos especiales.
- Los átomos de metales que tengan estructuras cristalinas cúbicas centradas en la cara y hexagonales compactas poseen un empaquetamiento compacto. Los átomos están arreglados de tal forma que ocupan la fracción más grande del espacio. Las estructuras CCC y HC consiguen este arreglo mediante el apilamiento de distintas secuencias de planos atómicos compactos.
- Los puntos, las direcciones y los planos dentro de la estructura cristalina pueden ser identificados de manera formal mediante la asignación de coordenadas y de índices de Miller.
- Los valores de las propiedades mecánicas y físicas pueden ser diferentes si se miden a lo largo de distintas direcciones o planos dentro de un cristal; si ese es el caso, se dice que el cristal es anisotrópico. Si los valores de las propiedades son idénticos en todas direcciones, el cristal es isotrópico.
- Los sitios intersticiales o huecos entre los átomos normales de una red se pueden llenar utilizando otros átomos o iones. La estructura cristalina de muchos materiales cerámicos se puede comprender al considerar la forma en que se ocupan estos sitios. Los átomos o los iones que se localizan en los sitios intersticiales juegan un papel importante en el endurecimiento de los materiales, al influir las propiedades físicas de los mismos y en el control de su procesamiento.

**GLOSARIO**

**Alotropía** Característica de un material que es capaz de existir con más de una estructura cristalina, dependiendo de la temperatura y de la presión.

**Anisotropía** Característica de tener propiedades con valores distintos en direcciones diferentes.

**Celda unitaria** Subdivisión de la red que aún conserva las características generales de toda la red.

**Cúbico de diamante** Tipo especial de estructura cristalina cúbica centrada en las caras, que se observa en el carbono, en el silicio y en otros materiales de enlace covalente.

**Densidad** Masa por volumen unitario de un material, por lo general en unidades de  $g/cm^3$ .

**Densidad lineal** Número de puntos de red por unidad de longitud a lo largo de una dirección.

**Densidad planar** Número de átomos por unidad de área, cuyos centros están sobre dicho plano.

**Difracción** Interferencia constructiva, o refuerzo, de un haz de rayos X que interactúa con un material. El haz difractado proporciona una información útil en relación con la estructura cristalina del material.

**Direcciones compactas** Sentidos dentro de un cristal, a lo largo de las cuales los átomos están en contacto.

**Distancia de repetición** Distancia entre dos puntos adyacentes de la red, a lo largo de una dirección.

**Distancia interplanar** Separación entre dos planos paralelos adyacentes con los mismos índices de Miller.

**Estructura cristalina** Arreglo regular repetible de los átomos en un material.

**Factor de empaquetamiento** Fracción del espacio ocupado por los átomos.

**Familia de direcciones** Direcciones cristalográficas que tienen las mismas características, aunque su "sentido" sea distinto. Se indican dentro de paréntesis angulares  $\langle \rangle$ .

**Familia de planos** Planos cristalográficos que tienen las mismas características, aunque sus orientaciones sean distintas. Se expresan dentro de llaves  $\{ \}$ .

**Fracción de empaquetamiento** Fracción de una dirección (fracción de empaquetamiento lineal) o de un plano (factor de empaquetamiento planar) que realmente está ocupada por átomos o iones. Cuando hay un átomo localizado en cada punto de la red, la fracción de empaquetamiento lineal a lo largo de una dirección es el producto de la densidad lineal por dos veces el radio atómico.

**Índices de Miller-Bravais** Notación abreviada especial para describir los planos cristalográficos en las celdas unitarias hexagonales compactas.

**Índices de Miller** Expresión abreviada para describir ciertas direcciones y planos cristalográficos en un material.

**Isotropía** Característica de poseer los mismos valores de las propiedades en todas las direcciones.

**Ley de Bragg** Relación que describe el ángulo en que se difracta un haz de rayos X de una longitud de onda particular en planos cristalográficos con un espaciamiento interplanar dado.

**Materiales amorfos** Los que, incluyendo los vidrios, no tienen un orden de largo alcance o estructura cristalina de largo alcance.

**Número de coordinación** Cantidad de vecinos más cercanos a un átomo en su arreglo atómico.

**Orden de corto alcance** Arreglo regular y predecible de los átomos en una distancia corta por lo general una o dos distancias entre átomos.

**Orden de largo alcance** Arreglo regular repetitivo de los átomos en un sólido, que se extiende en una distancia muy grande.

**Parámetros de red** Longitudes de los lados de las celdas unitarias y los ángulos entre estos lados. Los parámetros de red describen el tamaño y forma de la celda unitaria.

**Plano basal** Nombre especial que se da al plano compacto en las celdas unitarias hexagonales compactas.

**Polimorfismo** Alotropía, es decir que tiene más de una estructura cristalina.

**Puntos de red** Puntos que conforman la red cristalina. Lo que rodea a cada punto de red es idéntico en cualquier parte del material.

**Radio atómico** El radio aparente de un átomo, que por lo general se calcula a partir de las dimensiones de la celda unitaria, utilizando direcciones compactas.

**Red** Conjunto de puntos que dividen el espacio en segmentos más pequeños de igual dimensión.

**Redes de Bravais** Las catorce posibles redes que se pueden crear utilizando puntos de red.

**Secuencia de apilamiento** Secuencia en la cual están apilados planos compactos. Si la secuencia es *ABABAB*, se produce una celda unitaria hexagonal compacta; si es *ABCABCABC*, se produce una estructura cúbica centrada en las caras.

**Sitio cúbico** Posición intersticial que tiene un número de coordinación igual a ocho. Un átomo o un ion en el sitio cúbico tocará otros ocho átomos o iones.

**Sitio intersticial** Hueco entre átomos o iones "normales" de un cristal, en el que se puede colocar otro átomo o ion normalmente distinto. Usualmente, el tamaño del sitio intersticial es más pequeño que el átomo o ion que se va a introducir.

**Sitio octaédrico** Posición intersticial que tiene un número de coordinación igual a seis. Un átomo o ion en un sitio octaédrico tocará otros seis átomos o iones.

**Sitio tetraédrico** Posición intersticial que tiene un número de coordinación igual a cuatro. Un átomo o ion en un sitio tetraédrico entra en contacto con otros cuatro átomos o iones.

**Tetraedro** Estructura producida cuando los átomos están unidos entre sí con una coordinación de cuatro.

**Vidrio** Material sólido no cristalino, que sólo tiene un orden de corto alcance entre sus átomos.

## PROBLEMAS

**3-1** Calcule el radio atómico en cm para lo siguiente:

(a) Metal CC con  $a_0 = 0.3294$  nm y con un átomo por punto de red.

(b) Metal CCC con  $a_0 = 4.0862$  Å y con un átomo por punto de red.

**3-2** Determine la estructura cristalina de lo siguiente:

(a) Un metal con  $a_0 = 4.9489$  Å,  $r = 1.75$  Å y un átomo por punto de red

(b) Un metal con  $a_0 = 0.42906$  nm,  $r = 0.1858$  nm y un átomo por punto de red.

**3-3** La densidad del potasio, que tiene una estructura CC y un átomo por punto de red es  $0.855$  g/cm<sup>3</sup>. El peso atómico del potasio es  $39.09$  g/mol. Calcule

(a) el parámetro de red y

(b) el radio atómico del potasio.

**3-4** La densidad del torio, que tiene una estructura CCC y un átomo por punto de red es de  $11.72$  g/cm<sup>3</sup>. El peso atómico del torio es de  $232$  g/mol. Calcule

(a) el parámetro de red y

(b) el radio atómico del torio.

**3-5** Un metal con una estructura cúbica tiene una densidad de  $2.6$  g/cm<sup>3</sup>, un peso atómico de  $87.62$  g/mol y un parámetro de red de  $6.0849$  Å. Un átomo está aso-

ciado con cada uno de los puntos de la red. Determine la estructura cristalina del metal.

**3-6** Un metal con una estructura cúbica tiene una densidad de  $1.892$  g/cm<sup>3</sup>, un peso atómico de  $132.91$  g/mol y un parámetro de red de  $6.13$  Å. Un átomo está asociado con cada punto de la red. Determine la estructura cristalina del metal.

**3-7** El indio tiene una estructura tetragonal, con  $a_0 = 0.32517$  nm y  $c_0 = 0.49459$  nm. La densidad es  $7.286$  g/cm<sup>3</sup> y el peso atómico es de  $114.82$  g/mol. ¿Tiene el indio una estructura tetragonal simple o una estructura tetragonal centrada en el cuerpo?

**3-8** El bismuto tiene una estructura hexagonal, con  $a_0 = 0.4546$  nm y  $c_0 = 1.186$  nm. La densidad es  $9.808$  g/cm<sup>3</sup> y el peso atómico es de  $208.98$  g/mol. Determine

(a) el volumen de la celda unitaria y

(b) cuántos átomos existen en cada celda unitaria.

**3-9** El galio tiene una estructura ortorrómbica, con  $a_0 = 0.45258$  nm,  $b_0 = 0.45186$  nm y  $c_0 = 0.76570$  nm. El radio atómico es  $0.1218$  nm. La densidad es de  $5.904$  g/cm<sup>3</sup> y el peso atómico es de  $69.72$  g/mol. Determine

(a) el número de átomos en cada celda unitaria y

(b) el factor de empaquetamiento de la celda unitaria.

**3-10** El berilio tiene una estructura cristalina hexagonal, con  $a_0 = 0.22858 \text{ nm}$  y  $c_0 = 0.35842 \text{ nm}$ . El radio atómico es de  $0.1143 \text{ nm}$ . La densidad es de  $1.848 \text{ g/cm}^3$  y el peso atómico es de  $9.01 \text{ g/mol}$ . Determine (a) el número de átomos en cada celda unitaria y (b) el factor de empaquetamiento de la celda unitaria.

**3-11** Por encima de  $882^\circ\text{C}$ , el titanio tiene una estructura cristalina CC con  $a = 0.332 \text{ nm}$ . Por debajo de esta temperatura tiene una estructura HC con  $a = 0.2978 \text{ nm}$  y  $c = 0.4735 \text{ nm}$ . Determine el porcentaje de cambio en volumen cuando el titanio CC se transforma en titanio HC. ¿Se trata de una contracción o de una expansión?

**3-12** El  $\text{Mn-}\alpha$  tiene una estructura cúbica con  $a_0 = 0.8931 \text{ nm}$  y una densidad de  $7.47 \text{ g/cm}^3$ . El  $\text{Mn-}\beta$  tiene una estructura cúbica distinta con  $a_0 = 0.6326 \text{ nm}$  y una densidad de  $7.26 \text{ g/cm}^3$ . El peso atómico del manganeso es de  $54.938 \text{ g/mol}$  y el radio atómico es de  $0.112 \text{ nm}$ . Determine el porcentaje de cambio en volumen que ocurriría si el  $\text{Mn-}\alpha$  se transforma en  $\text{Mn-}\beta$ .

**3-13** Un sujetapapeles típico pesa  $0.59 \text{ gramos}$  y está hecho de hierro CC. Calcule (a) el número de celdas unitarias y (b) el número de átomos de hierro del sujetapapeles (consulte el Apéndice A para los datos que necesite).

**3-14** El papel de aluminio que se utiliza para guardar alimentos tiene aproximadamente un espesor de  $0.001$  de pulgada. Suponga que todas las celdas unitarias del aluminio están organizadas de manera que  $a_0$  es perpendicular a la superficie del papel. En el caso de una hoja cuadrada de  $4 \text{ plg}$  de lado, determine (a) el número total de celdas unitarias en la hoja y (b) el espesor de la misma en función de celdas unitarias (vea el Apéndice A).

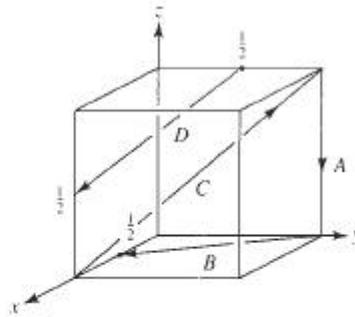
**3-15** Determine los índices de Miller correspondientes a las direcciones de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura 3-33.

**3-16** Determine los índices para las direcciones de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura 3-34.

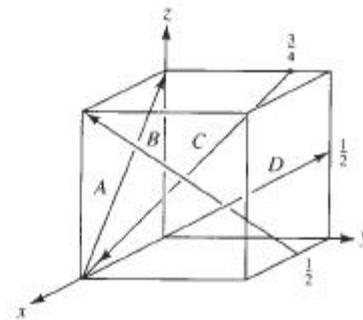
**3-17** Determine los índices para los planos de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura 3-35.

**3-18** Determine los índices para los planos de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura 3-36.

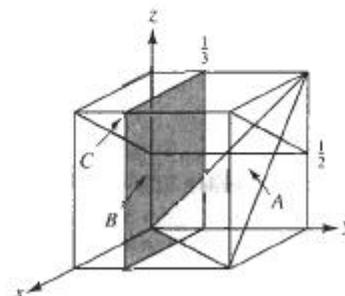
**3-19** Determine los índices de las direcciones en la red hexagonal que se muestra en la figura 3-37, utilizando sistemas tanto de tres dígitos como de cuatro.



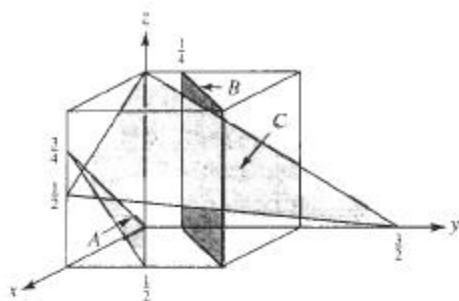
**FIGURA 3-33** Direcciones en una celda unitaria cúbica (para el problema 3-15).



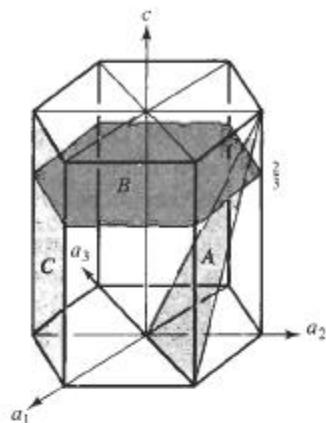
**FIGURA 3-34** Direcciones en una celda unitaria cúbica (para el problema 3-16).



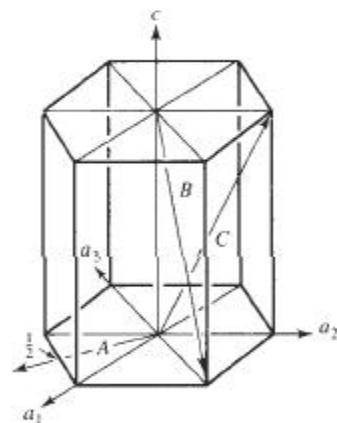
**FIGURA 3-35** Planos en una celda unitaria cúbica (para el problema 3-17).



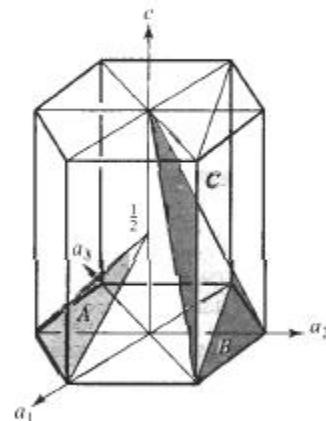
**FIGURA 3-36** Planos en una celda unitaria cúbica (para el problema 3-18).



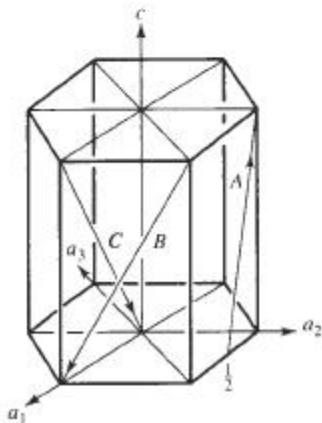
**FIGURA 3-39** Planos en una red hexagonal (para el problema 3-21).



**FIGURA 3-37** Direcciones en una red hexagonal (para el problema 3-19).



**FIGURA 3-40** Planos en una red hexagonal (para el problema 3-22).



**FIGURA 3-38** Direcciones en una red hexagonal (para el problema 3-20).

**3-20** Determine los índices de las direcciones en la red hexagonal que aparece en la figura 3-38 utilizando sistemas tanto de tres como de cuatro dígitos.

**3-21** Determine los índices de los planos en la red hexagonal que se muestran en la figura 3-39.

**3-22** Determine los índices de los planos de la red hexagonal mostrados en la figura 3-40.

**3-23** Esboce los siguientes planos y direcciones dentro de una celda unitaria cúbica:

- |           |           |           |
|-----------|-----------|-----------|
| (a) [101] | (b) [010] | (c) [122] |
| (d) [301] | (e) [201] | (f) [213] |
| (g) (011) | (h) (102) | (i) (002) |
| (j) (130) | (k) (212) | (l) (312) |

**3-24** Esboce los siguientes planos y direcciones dentro de una celda unitaria cúbica:

- (a) [110]      (b) {221}      (c) {410}  
 (d) [012]      (e) {321}      (f) [111]  
 (g) (111)      (h) (011)      (i) (030)  
 (j) (121)      (k) (113)      (l) (041)

**3-25** Esboce los siguientes planos y direcciones dentro de una celda unitaria hexagonal:

- (a) [0110]      (b) [1120]      (c) [1011]  
 (d) (0003)      (e) (1010)      (f) (0111)

**3-26** Esboce los planos y direcciones siguientes dentro de una celda unitaria hexagonal:

- (a) [2110]      (b) {1121}      (c) {1010}  
 (d) (1210)      (d) (1122)      (e) (1230)

**3-27** ¿Cuáles son los índices en las seis direcciones de la forma  $\langle 110 \rangle$  que están en el plano (111) de una celda cúbica?

**3-28** ¿Cuáles son los índices en las cuatro direcciones de la forma  $\langle 111 \rangle$  que están en el plano (101) de una celda cúbica?

**3-29** Determine el número de direcciones de la forma  $\langle 110 \rangle$  en una celda unitaria tetragonal y compárelos con el número de direcciones de la forma  $\langle 110 \rangle$  existentes en una celda unitaria ortorrómbica.

**3-30** Determine el ángulo entre la dirección [110] y el plano (110) en una celda unitaria tetragonal; a continuación determine el ángulo entre la dirección [011] y el plano (011) en una celda tetragonal. Los parámetros de red son  $a_0 = 4.0 \text{ \AA}$  y  $c_0 = 5.0 \text{ \AA}$ . ¿Qué es responsable de esta diferencia?

**3-31** Determine los índices de Miller del plano que pasa a través de los tres puntos con las coordenadas siguientes:

- (a) 0, 0, 1; 1, 0, 0; y 1/2, 1/2, 0  
 (b) 1/2, 0, 1; 1/2, 0, 0; y 0, 1, 0  
 (c) 1, 0, 0; 0, 1, 1/2; y 1, 1/2, 1/4  
 (d) 1, 0, 0; 0, 0, 1/4; y 1/2, 1, 0

**3-32** Determine la distancia de repetición, la densidad lineal y la fracción de empaquetamiento para el níquel CCC, que tiene un parámetro de red de 0.35167 nm, en las direcciones [100], [110], y [111]. ¿Cuál de estas direcciones es compacta?

**3-33** Determine la distancia de repetición, la densidad lineal, y la fracción de empaquetamiento del litio CC, que tiene un parámetro de red de 0.35089 nm, en las direcciones [100], [110], y [111]. ¿Cuál de estas direcciones es compacta?

**3-34** Determine la distancia de repetición, la densidad lineal y la fracción de empaquetamiento para el magnesio HC, en las direcciones [2110] y [1120]. Los pa-

rámetros de red para el magnesio HC aparecen en el Apéndice A.

**3-35** Determine la densidad planar y la fracción de empaquetamiento del níquel CCC en los planos (100), (110) y (111). ¿Cuál —si es que hay alguno— de estos planos es compacto?

**3-36** Determine la densidad planar y la fracción de empaquetamiento del litio CC en los planos (100), (110) y (111). ¿Cuál —si es que hay alguno— de estos planos es compacto?

**3-37** Suponga que se produce rodío CCC en una lámina de un milímetro de espesor, con el plano (111) paralelo a la superficie de la hoja. ¿Cuál es el grosor de la hoja expresado en distancias interplanares (111) del espesor  $d_{111}$ ? Vea el Apéndice A para los datos que requiera.

**3-38** En una celda unitaria CCC, ¿cuántos  $d_{111}$  están presentes entre el punto 0,0,0 y el punto 1,1,1?

**3-39** Determine el radio mínimo de un átomo que quepa justo en

- (a) el sitio intersticial tetraédrico en el níquel CCC  
 (b) el sitio intersticial octaédrico en el litio CC.

**3-40** ¿Cuál es el radio de un átomo que cabe exactamente en el sitio octaédrico del cobre CCC sin alterar la red?

**3-41** Utilizando los radios iónicos que se dan en el Apéndice B, determine el número de coordinación que se espera para los compuestos siguientes:

- (a)  $\text{Y}_2\text{O}_3$       (b)  $\text{UO}_2$       (c) BaO  
 (d)  $\text{Si}_3\text{N}_4$       (e)  $\text{GeO}_2$   
 (f) MnO      (g) MgS      (h) KBr

**3-42** ¿El NiO tiene la estructura del cloruro de cesio, del cloruro de sodio o de la blenda de zinc? Con base en la respuesta determine

- (a) el parámetro de red,  
 (b) la densidad y  
 (c) el factor de empaquetamiento.

**3-43** ¿El  $\text{UO}_2$  tiene la estructura del cloruro de sodio, de la blenda de zinc o de la fluorita? En función a la respuesta determine

- (a) el parámetro de red  
 (b) la densidad y  
 (c) el factor de empaquetamiento.

**3-44** ¿El BeO tiene la estructura del cloruro de sodio, de la blenda de zinc o de la fluorita? Con base en la respuesta determine

- (a) el parámetro de red  
 (b) la densidad y  
 (c) el factor de empaquetamiento.

**3-45** ¿El CsBr tiene la estructura del cloruro de sodio, de la blenda de zinc, de la fluorita o del cloruro de cesio? En función a la respuesta determine

- el parámetro de red
- la densidad y
- el factor de empaquetamiento.

**3-46** Esboce la organización iónica del plano (110) del ZnS (con la estructura de la blenda de zinc) y compárela con la del plano (110) del CaF<sub>2</sub> (con la estructura de la fluorita). Compare la fracción de empaquetamiento planar de los planos (110), correspondientes a estos dos materiales.

**3-47** El MgO, que tiene la estructura del cloruro de sodio también posee un parámetro de red de 0.396 nm. Determine la densidad y la fracción de empaquetamiento planar, de los planos (111) y (222) del MgO. ¿Qué iones estarán presentes en cada plano?

**3-48** El polipropileno forma una celda unitaria ortorrómbica con parámetros de red de  $a_0 = 1.450$  nm  $b_0 = 0.569$  nm y  $c_0 = 0.740$  nm. La fórmula química para la molécula del propileno, a partir de la cual se produce este polímero, es C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>. La densidad del polímero es de aproximadamente 0.90 g/cm<sup>3</sup>. Determine el número de moléculas de propileno, el número de átomos de carbono y el número de átomos de hidrógeno en cada celda unitaria.

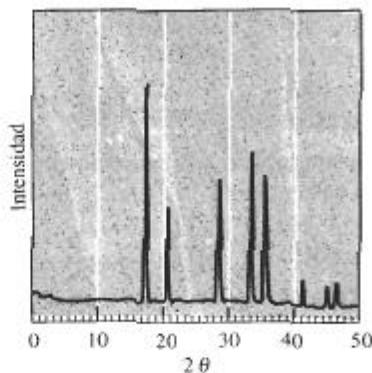
**3-49** La densidad de la cristobalita es aproximadamente de 1.538 g/cm<sup>3</sup> y tiene un parámetro de red de 0.8037 nm. Calcule el número de iones de SiO<sub>2</sub>, el número de iones de silicio y el número de iones de oxígeno en cada celda unitaria.

**3-50** Un haz difractado de rayos X es observado a partir de los planos (220) del hierro a un ángulo  $2\theta$  de 99.1°, cuando la longitud de onda de los rayos es 0.15418 nm. Calcule el parámetro de red del hierro.

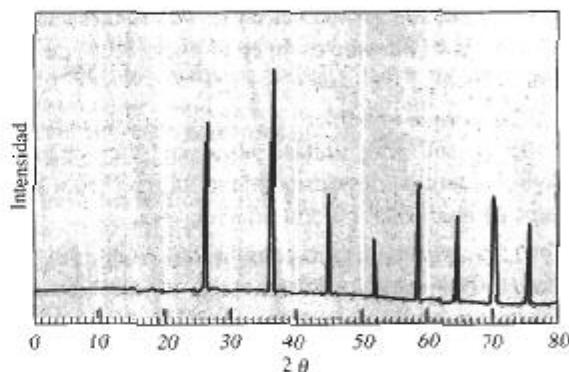
**3-51** Se observa un haz difractado de rayos X a partir de los planos (311) del aluminio con ángulo  $2\theta$  de 78.3°, cuando la longitud de onda de los rayos es 0.15418 nm. Calcule el parámetro de red del aluminio.

**3-52** La figura 3-41 muestra el resultado de un experimento de difracción de rayos X en la forma de la intensidad de picos difractados en función del ángulo de difracción  $2\theta$ . Si se utilizan rayos X con una longitud de onda de 0.15418 nm, determine

- la estructura cristalina del metal,
- los índices de los planos que producen cada uno de los picos y
- el parámetro de red del metal.



**FIGURA 3-41** Patrón de difracción de rayos X (para el problema 3-52).



**FIGURA 3-42** Patrón de difracción de rayos X (para el problema 3-53).

(c) el parámetro de red del metal.

**3-53** La figura 3-42 muestra los resultados de un experimento de difracción de rayos X en la forma de la intensidad del pico difractado en función del ángulo  $2\theta$  de difracción. Si se utilizan rayos X con una longitud de onda de 0.07107 nm, determine

- la estructura cristalina del metal y
- los índices de los planos que produce cada pico.



#### PROBLEMAS DE DISEÑO

**3-54** Se desea diseñar una celda de purificación. Ésta debe estar compuesta de dos tamaños de esferas; las más pequeñas deben caber dentro de los huecos existentes entre las mayores. Hay disponible una amplia variedad de tamaños, pero la más grande tiene un diámetro de un centímetro. A través de la celda fluirá un gas contamina-

do y los contaminantes serán absorbidos en la superficie de las esferas. Se encontró que para realizar esta purificación, es necesaria un área total de  $10,000 \text{ cm}^2$ . Diseñe la celda.

**3-55** Se desea clasificar u ordenar especímenes de hierro, algunos de los cuales son CCC y otros CC. Diseñe un método por difracción de rayos X mediante el cual se pueda efectuar lo anterior.

# CAPÍTULO 4

## Imperfecciones en el arreglo atómico

### 4-1 Introducción

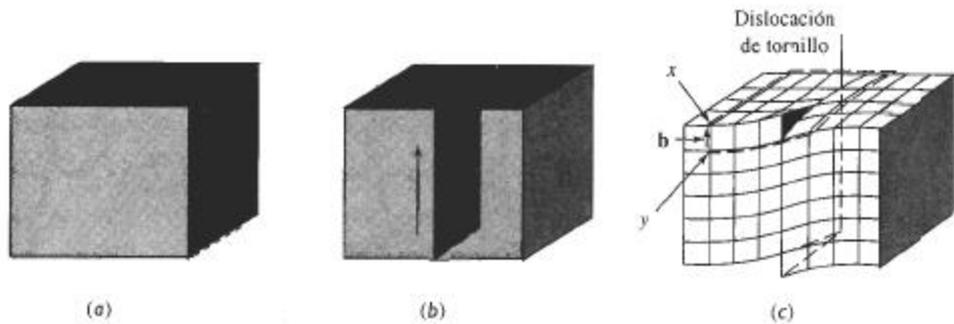
En todos los materiales el arreglo de los átomos contiene imperfecciones que tienen un efecto profundo sobre el comportamiento de los materiales. Mediante el control de las imperfecciones reticulares, creamos metales y aleaciones más resistentes, imanes más poderosos, transistores y celdas solares de mejor desempeño, vidrios y cristales de colores extraordinarios y muchos otros materiales de importancia práctica.

En este capítulo presentamos los tres tipos básicos de imperfecciones de red: defectos puntuales, defectos lineales (o dislocaciones) y defectos de superficie. Debemos recordar, sin embargo, que estas imperfecciones sólo representan defectos en relación con el arreglo atómico perfecto, y no con el material mismo. De hecho, estos "defectos" pudieran haber sido agregados de manera intencional, a fin de producir un conjunto deseado de propiedades mecánicas y físicas. En capítulos posteriores se verá cómo controlar estos defectos mediante la fabricación de aleaciones, tratamientos térmicos o técnicas de procesamiento para producir materiales de mejor desempeño ingenieril.

### 4-2 Dislocaciones

Las **dislocaciones** son imperfecciones lineales en una red que de otra forma sería perfecta. Generalmente se introducen en la red durante el proceso de solidificación del material o al deformarlo. Aunque en todos los materiales hay dislocaciones presentes, incluyendo los materiales cerámicos y los polímeros, son de particular utilidad para explicar la deformación y el endurecimiento de los metales. Podemos identificar dos tipos de dislocaciones: la dislocación de tornillo y la dislocación de borde.

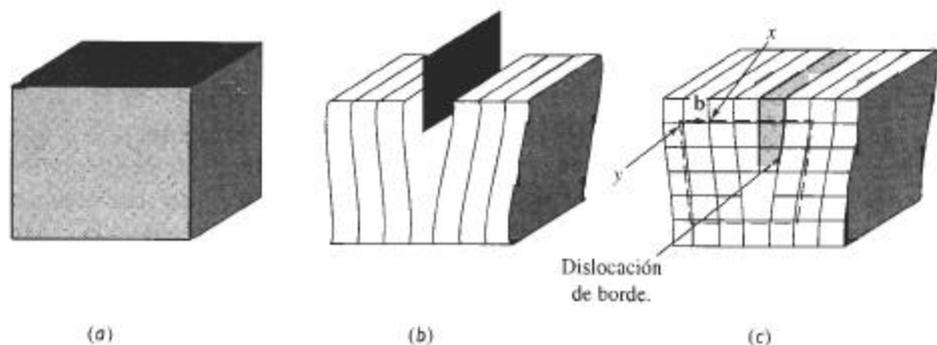
**Dislocación de tornillo** La **dislocación de tornillo** (figura 4-1) se puede ilustrar haciendo un corte parcial a través de un cristal perfecto, torciéndolo y desplazando un lado del corte sobre el otro la distancia de un átomo. Si en un plano cristalográfico describimos una revolución completa alrededor del eje sobre el cual el cristal fue torcido, partiendo del punto  $x$  y recorriendo espaciamentos atómicos iguales en cada dirección, terminaremos a un espacio atómico por debajo de nuestro punto de partida (punto  $y$ ). El vector que se requiere para cerrar la trayectoria y volver a nuestro punto inicial se conoce como el **vector de Burgers  $b$** . Si continuáramos



**FIGURA 4-1** El cristal perfecto (a) es cortado y deformado una distancia igual a un espaciamento atómico, (b) y (c). La línea a lo largo de la cual ocurre este corte es una dislocación de tornillo. Se requiere de un vector de Burgers  $\mathbf{b}$  para cerrar la trayectoria de espaciamentos atómicos alrededor de la dislocación de tornillo.

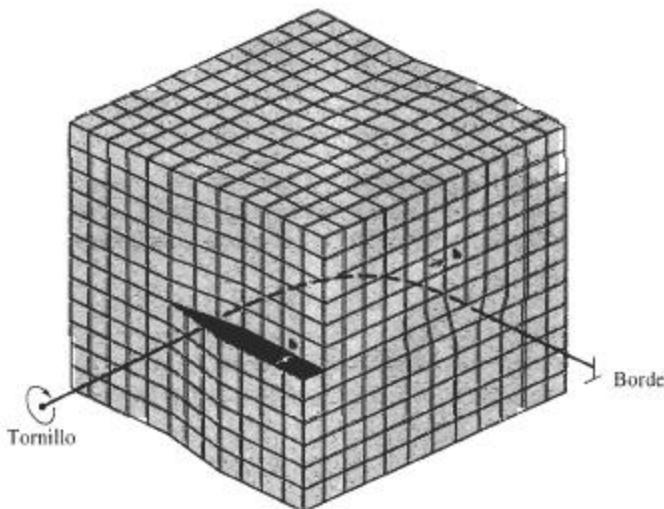
nuestra rotación, trazaríamos una trayectoria en espiral. El eje, es decir la línea alrededor de la cual trazamos esta trayectoria, es la dislocación de tornillo. El vector de Burgers es paralelo a la dislocación de tornillo.

**Dislocaciones de borde** Una **dislocación de borde** (figura 4-2) se puede ilustrar haciendo un corte parcial a través de un cristal perfecto, separándolo y rellenando parcialmente el corte con un plano de átomos adicional. El borde inferior de este plano adicional representa la dislocación de borde, la cual también se ilustra en la figura 4-5. Si seguimos una trayectoria en círculo a favor de las manecillas del reloj alrededor de la dislocación de borde, partiendo del punto  $x$  y recorriendo un número igual de espaciamentos atómicos en cada dirección, terminaríamos alejados un espaciamento atómico del punto de partida  $y$ . El vector que se requiere para completar el circuito es, de nuevo, el vector de Burgers. En este caso, el vector de Burgers es perpendicular a la dislocación. Al introducir la dislocación, los átomos por encima de la línea de dislocación se comprimen acercándose los unos a los otros, en tanto que los que quedan por debajo se estiran alejándose de sus posiciones de equilibrio. La red que los rodea ha sido distorsionada debido a la presencia de la dislocación.



**FIGURA 4-2** El cristal perfecto (a) es cortado y un plano adicional de átomos es insertado (b). El borde inferior del plano adicional es la dislocación de borde (c). Se requiere de un vector de Burgers  $\mathbf{b}$  para cerrar un círculo de igual cantidad de espaciamentos atómicos alrededor de la línea de dislocación.

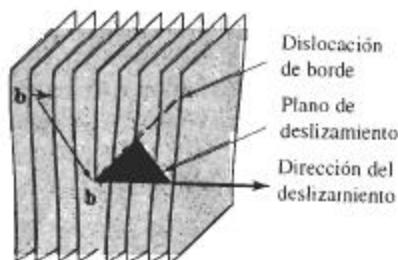
**Dislocaciones mixtas** Como se puede ver en la figura 4-3, las **dislocaciones mixtas** tienen componentes tanto de borde como de tornillo, con una región de transición entre ambas. El vector de Burgers, sin embargo, se conserva igual para todas las porciones de la dislocación mixta.



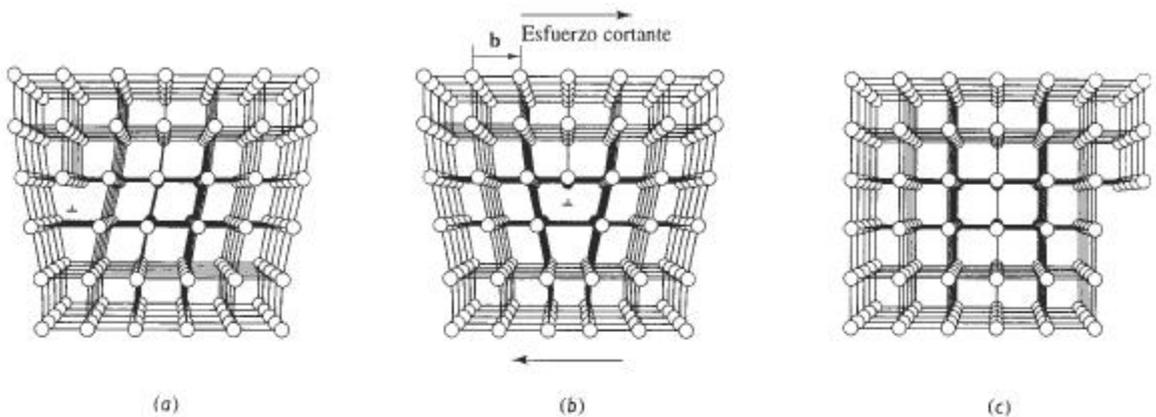
**FIGURA 4-3** Dislocación mixta. La dislocación de tornillo en la cara frontal del cristal gradualmente se convierte en dislocación de borde en el costado del cristal. (Adaptada de W. T. Read, *Dislocations in Crystals*. McGraw-Hill, 1953.)

**Deslizamiento** Podríamos trasladar el vector de Burgers del circuito a la dislocación de borde, según se muestra en la figura 4-4. Después de ese traslado, encontramos que el vector de Burgers y la dislocación de borde definen un plano en la red. El vector de Burgers y el plano resultan útiles para explicar cómo se deforman los materiales.

Cuando se aplica una fuerza cortante en la dirección del vector de Burgers a un cristal que contenga una dislocación, ésta se puede mover al romper los enlaces entre los átomos de un plano. El plano cortado se desplaza ligeramente para establecer enlaces con el plano parcial original de átomos. Este desplazamiento hace que la dislocación se mueva un espacio de un átomo hacia el lado, según se muestra en la figura 4-5. Si este proceso continúa, la dislocación



**FIGURA 4-4** Una vez trasladado el vector de Burgers del circuito cerrado a la línea de dislocación, se define un plano de deslizamiento.



**FIGURA 4-5** Cuando se aplica un esfuerzo cortante a la dislocación (a) los átomos se desplazan haciendo que la dislocación se mueva un vector de Burgers en la dirección de deslizamiento (b). Un movimiento continuo de la dislocación finalmente causará un escalón (c) y deformación permanente del cristal. (*Adaptado de A. G. Guy, Essentials of Material Science, McGraw-Hill, 1976.*)

se recorre a través del cristal hasta que se produce un escalón en el exterior del mismo; el cristal ha sido deformado. Si se pudieran introducir continuamente dislocaciones en el mismo plano del cristal y se movieran a lo largo de la misma trayectoria, el cristal quedaría cortado en dos.

El proceso mediante el cual se mueve una dislocación causando que se deforme un material se conoce como **deslizamiento**. La dirección en la cual se mueve la dislocación, la **dirección de deslizamiento**, es la dirección del vector de Burgers para las dislocaciones de borde. Durante el deslizamiento, la dislocación de borde barre el plano formado por el vector de Burgers y la dislocación; este plano se conoce como **plano de deslizamiento**. La combinación de dirección de deslizamiento y plano de deslizamiento se denomina **sistema de deslizamiento**. Una dislocación de tornillo produce el mismo resultado, la dislocación se mueve perpendicularmente al vector de Burgers, aunque el cristal se deforma en una dirección paralela a dicho vector.

Durante el deslizamiento, una dislocación recorre estados, o entornos, de equilibrio idénticos. El **esfuerzo Peierls-Nabarro** (ecuación 4-1) es el esfuerzo requerido para mover la dislocación de una localización de equilibrio a otra,

$$\tau = c \exp(-kd/b), \quad (4-1)$$

donde  $\tau$  es el esfuerzo cortante requerido para mover la dislocación;  $d$  es la distancia interplanar entre planos de deslizamiento adyacentes;  $b$  es el vector de Burgers y tanto  $c$  como  $k$  son constantes del material. La dislocación se mueve en aquel sistema de deslizamiento que requiera el mínimo consumo de energía. Varios factores importantes determinan qué sistemas de deslizamiento son los más probables de activarse durante la deformación del material.

1. El esfuerzo requerido para hacer que la dislocación se mueva aumenta de manera exponencial con la longitud del vector de Burgers. Por lo que la dirección de deslizamiento deberá tener una distancia de repetición de estados de equilibrio pequeña o una densidad lineal alta. Las direcciones compactas en los metales satisfacen este criterio y son las direcciones de deslizamiento usuales.

2. El esfuerzo requerido para hacer que la dislocación se mueva se reduce de manera exponencial con la distancia interplanar de los planos de deslizamiento. El deslizamiento ocurre con

mayor facilidad entre planos de átomos que sean suaves (de manera que tengan “colinas y valles” más pequeños en su superficie) y entre planos que estén alejados (o que tengan una distancia interplanar relativamente grande). Aquellos planos con una densidad planar alta llenan este requisito. Por lo que, usualmente, los planos de deslizamiento son los planos compactos o aquellos que tienen la mayor compactación posible. Los sistemas de deslizamiento más comunes en varios materiales se resumen en la tabla 4-1.

**TABLA 4-1** Planos y direcciones de deslizamiento en estructuras metálicas

Estructura cristalina	Plano de deslizamiento	Dirección de deslizamiento
Metales CC	{110} {112} {123}	$\langle 111 \rangle$
Metales CCC	{111}	$\langle 110 \rangle$
Metales HC	{0001} {1120} {1010} {1011}	$\langle 100 \rangle$ $\langle 110 \rangle$ o $\langle 1120 \rangle$
MgO, NaCl (iónicos)	{110}	$\langle 110 \rangle$
Silicio (covalente)	{111}	$\langle 110 \rangle$

*Nota: En algunos metales y aleaciones, o a temperaturas elevadas, estos planos están activos.*

3. Las dislocaciones no se mueven fácilmente en materiales como el silicio o los polímeros, los cuales tienen enlaces covalentes. Debido a la resistencia y direccionalidad de estos enlaces, los materiales típicamente fallan en forma frágil antes de que la fuerza se haga lo suficientemente alta para generar un deslizamiento apreciable.

4. Los materiales con enlace iónico, incluyendo muchos materiales cerámicos como el MgO, también ofrecen resistencia al deslizamiento. El movimiento de una dislocación rompe el equilibrio de cargas alrededor de aniones y cationes, requiriendo que los enlaces entre aniones y cationes se deshagan. Durante el deslizamiento, los iones con carga similar también deben pasar uno cerca del otro, lo que causa repulsión. Finalmente, la distancia de repetición a lo largo de la dirección de deslizamiento, o el vector de Burgers, es más grande que en los metales. De nuevo, el material falla frágilmente antes de que las dislocaciones se muevan.

#### EJEMPLO 4-1

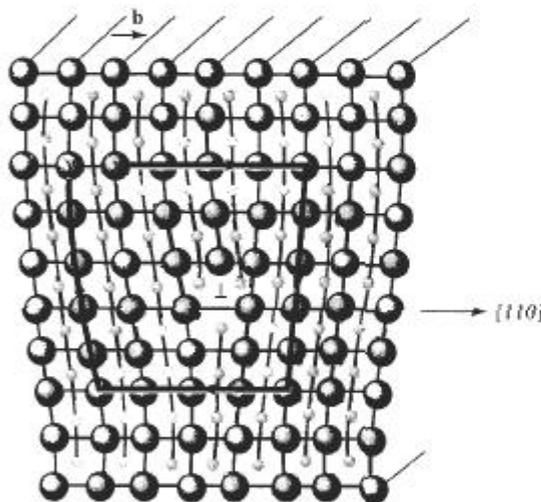
En la figura 4-6 se muestra esquemáticamente una dislocación en el MgO, el cual tiene la estructura cristalina del cloruro de sodio y un parámetro de red de 0.396 nm. Determine la longitud del vector de Burgers.

## SOLUCIÓN

En la figura 4-6 trazamos un circuito en la dirección de las manecillas del reloj alrededor de la dislocación, partiendo del punto  $x$ , y desplazándonos en igual cantidad de espaciamentos atómicos para terminar en el punto  $y$ . El vector  $\mathbf{b}$  es el vector de Burgers. Dado que  $\mathbf{b}$  tiene la dirección  $[110]$ , debe ser perpendicular a los planos  $\{110\}$ . La longitud de  $\mathbf{b}$  es la distancia entre dos planos  $(110)$  adyacentes. De la ecuación 3-6,

$$d_{110} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{0.396}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} = 0.280 \text{ nm}$$

El vector de Burgers tiene la dirección  $\langle 110 \rangle$  y una longitud de 0.280 nm. Observe, sin embargo, que dos medios planos adicionales de átomos forman la dislocación —uno compuesto de iones oxígeno y otro de iones magnesio. ■



- Oxígeno
- Magnesio

**FIGURA 4-6** Dislocación de borde en el MgO mostrando la dirección de deslizamiento y el vector de Burgers (para el ejemplo 4-1). (Adaptado de W. D. Kingery, H. K. Bowen y D. R. Uhlmann, *Introduction to Ceramics*, John Wiley, 1976.)

### EJEMPLO 4-2

Calcule la longitud del vector de Burgers en el cobre.

## SOLUCIÓN

El cobre es CCC con un parámetro de red de 0.36151 nm. Las direcciones compactas, o las direcciones del vector de Burgers, son de la forma  $\langle 110 \rangle$ . La distancia de repetición a lo largo

de las direcciones  $\langle 110 \rangle$  es la mitad de la diagonal de la cara, ya que los puntos de la red están localizados en las esquinas y en los centros de las caras de la celda unitaria.

$$\text{Diagonal de la cara} = \sqrt{2}a_0 = (\sqrt{2})(0.36151) = 0.51125 \text{ nm}$$

La longitud del vector de Burgers, es decir, la distancia de repetición es:

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2}(0.51125 \text{ nm}) = 0.25563 \text{ nm}$$

### EJEMPLO 4-3

La densidad planar del plano (112) en el hierro CC es  $9.94 \times 10^{14}$  átomos/cm<sup>2</sup>. Calcule (a) la densidad planar del plano (110) y (b) los espaciamientos interplanares tanto para los planos (112) como (110). ¿En cuál de los planos ocurriría normalmente el deslizamiento?

### SOLUCIÓN

El parámetro de red del hierro CC es 0.2866 nm, es decir  $2.866 \times 10^{-8}$  cm. El plano (110) se muestra en la figura 4-7, la porción sombreada corresponde a los átomos existentes dentro de la celda unitaria. Note que una cuarta parte de los cuatro átomos que se encuentran en las esquinas, más el átomo central, están dentro de un área de  $a_0$  veces  $\sqrt{2}a_0$ . La densidad planar es:

$$\begin{aligned} \text{Densidad planar (110)} &= \frac{\text{átomos}}{\text{área}} = \frac{2}{(\sqrt{2})(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^2} \\ &= 1.72 \times 10^{15} \text{ átomos/cm}^2 \end{aligned}$$

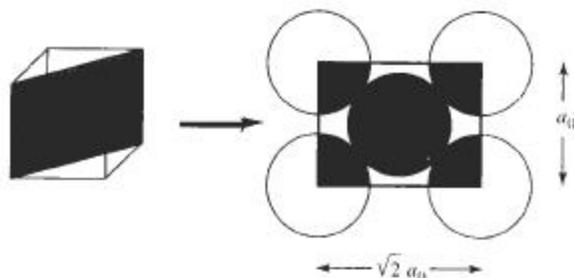
$$\text{Densidad planar (112)} = 9.94 \times 10^{14} \text{ átomos/cm}^2 \text{ (del enunciado del problema)}$$

Los espaciamientos interplanares son:

$$d_{110} = \frac{2.866 \times 10^{-8}}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0}} = 2.0266 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$d_{112} = \frac{2.866 \times 10^{-8}}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 2^2}} = 1.17 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

La densidad planar y el espaciamiento interplanar del plano (110) son más grandes que los correspondientes al plano (112); por tanto, el plano (110) será el de deslizamiento preferido. ■



**FIGURA 4-7** Posiciones de los átomos en el plano (110) en una celda unitaria CC (para el ejemplo 4-3).

### 4-3 Significado de las dislocaciones

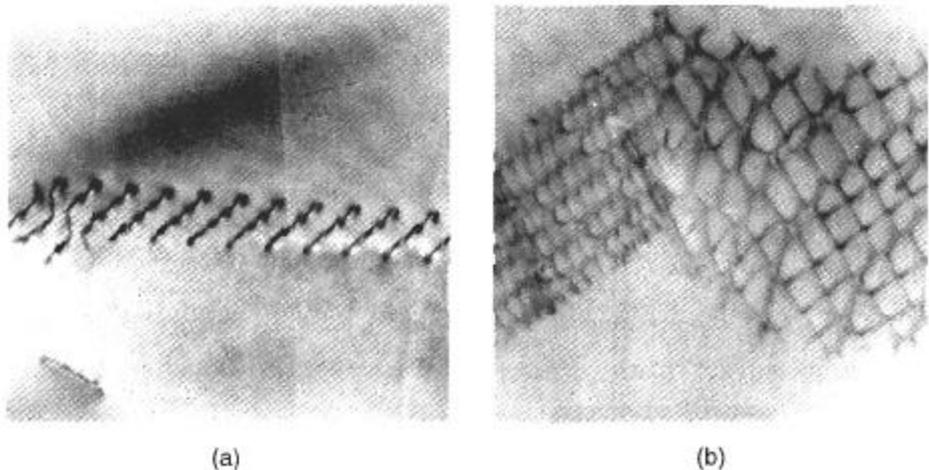
Aunque en algunos materiales cerámicos y polímeros puede ocurrir deslizamiento, el proceso de deslizamiento es de particular utilidad para entender el comportamiento mecánico de los metales. En primer término, el deslizamiento explica por qué la resistencia de los metales es mucho menor que el valor predecible a partir del enlace metálico. Si ocurre el deslizamiento, sólo es necesario que se rompa en algún momento una pequeña fracción de todas las uniones metálicas a través de la interfase, por lo que la fuerza requerida para deformar el metal resulta pequeña.

Segundo, el deslizamiento le da ductilidad a los metales. Si no hay dislocaciones presentes, una barra de hierro sería frágil; los metales no podrían ser conformados utilizando los diversos procesos, que involucran la deformación para obtener formas útiles, como la forja.

En tercer lugar, controlamos las propiedades mecánicas de un metal o aleación al interferir el movimiento de las dislocaciones. Un obstáculo introducido en el cristal impedirá que en una dislocación se deslice, a menos que apliquemos mayor fuerza. Si es necesario aplicar una fuerza superior, entonces el metal resulta ser más resistente.

En los materiales se encuentran enormes cantidades de dislocaciones. **La densidad de dislocaciones**, o la longitud total de dislocaciones por unidad de volumen, generalmente se utiliza para representar la cantidad de dislocaciones presentes. Densidades de dislocación de  $10^9$  cm/cm<sup>3</sup> son típicas en los metales más suaves, en tanto que se pueden conseguir densidades de hasta  $10^{12}$  cm/cm<sup>3</sup> deformando el material.

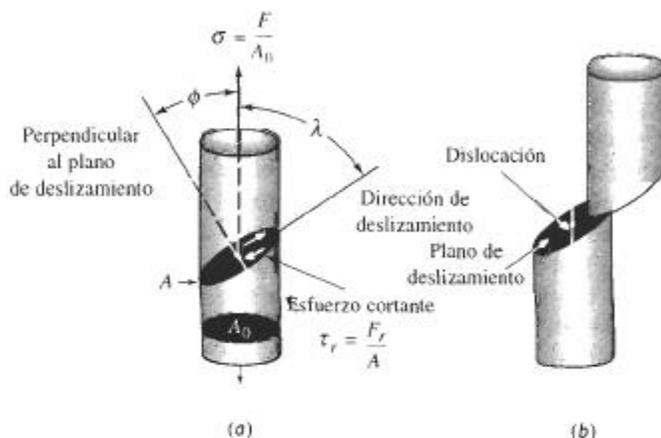
El **microscopio electrónico de transmisión** (MET) se utiliza para observar las dislocaciones. En el MET, se enfoca un rayo de electrones sobre una hoja extremadamente delgada del material; el haz de electrones interactúa con las imperfecciones en el material, causando diferencias en la fracción de electrones transmitidos. En consecuencia, se observan distintos contrastes al ver el haz transmitido sobre una pantalla fluorescente o sobre una placa fíca. La figura 4-8 muestra las dislocaciones, las cuales aparecen como líneas oscuras al observarse a muy altas ampliificaciones.



**FIGURA 4-8** Microfotografías electrónicas de dislocaciones en el Ti<sub>3</sub>Al: (a) apilamientos de dislocaciones (x 36,500) y (b) red de dislocaciones (x 15,750). (Cortesía de Gerald Feldewerth.)

## 4-4 Ley de Schmid

Podemos comprender las diferencias en el comportamiento de los metales que tienen estructuras cristalinas distintas examinando la fuerza que se requiere para iniciar el proceso de deslizamiento. Supóngase que aplicamos una fuerza unidireccional  $F$  a un cilindro de metal que está formado por un solo cristal (figura 4-9). Podemos orientar el plano de deslizamiento y la dirección de deslizamiento respecto a la fuerza aplicada definiendo los ángulos  $\lambda$  y  $\phi$   $\lambda$  es el ángulo entre la dirección de deslizamiento y la fuerza aplicada y  $\phi$  es el ángulo entre el perpendicular al plano de deslizamiento y la fuerza aplicada.



**FIGURA 4-9** (a) Se produce un esfuerzo cortante resultante  $\tau$  en un sistema de deslizamiento. (b) El movimiento de las dislocaciones en el sistema de deslizamiento deforma al material.

Para que la dislocación se mueva en este sistema de deslizamiento, la fuerza aplicada debe producir una fuerza cortante actuando en la dirección del deslizamiento. Esta fuerza cortante resultante  $F_r$  está dada por:

$$F_r = F \cos \lambda$$

Si dividimos la ecuación entre el área del plano de deslizamiento,  $A = A_0 / \cos \phi$ , obtendremos la **ley de Schmid**,

$$\tau_r = \sigma \cos \phi \cos \lambda,$$

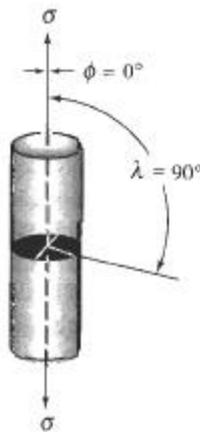
donde:

$$\tau_r = \frac{F_r}{A} = \text{esfuerzo cortante resultante en la dirección de deslizamiento}$$

$$\sigma = \frac{F}{A_0} = \text{esfuerzo unidireccional aplicado al cilindro}$$

### EJEMPLO 4-4

Suponga que el plano de deslizamiento es perpendicular al esfuerzo aplicado  $\sigma$ , como en la figura 4-10. Entonces,  $\phi = 0^\circ$ ,  $\lambda = 90^\circ$ ,  $\cos \lambda = 0$  y, por tanto,  $\tau_r = 0$ . Incluso si el esfuerzo aplicado  $\sigma$  fuera enorme, no se desarrollará ningún esfuerzo cortante a lo largo de la dirección de



**FIGURA 4-10** Cuando el plano de deslizamiento es perpendicular al esfuerzo aplicado  $\sigma$ , el ángulo  $\lambda$  es  $90^\circ$  y no hay esfuerzo cortante resultante.

deslizamiento y la dislocación no se moverá. (Usted podría llevar a cabo un sencillo experimento para demostrar lo anterior, utilizando una baraja. Si empuja sobre ella en ángulo, las cartas se deslizarán una sobre otra, como en el proceso de deslizamiento. Sin embargo, si empuja perpendicularmente sobre la baraja, las cartas no se deslizarán.) No puede ocurrir deslizamiento si el sistema de deslizamiento está orientado de forma tal que  $\lambda$  o  $\phi$  valen  $90^\circ$ . ■

El **esfuerzo cortante resultante crítico**  $\tau_{\text{crs}}$  es el esfuerzo cortante requerido para romper suficientes enlaces metálicos y que ocurra el deslizamiento. Cuando el esfuerzo *aplicado* produzca un esfuerzo cortante *resultante* que sea igual al esfuerzo cortante resultante *crítico* ocurrirá el deslizamiento y la deformación del metal.

$$\tau_r = \tau_{\text{crs}} \quad (4-3)$$

#### EJEMPLO 4-5

#### Diseño de un proceso de fundición de un monocristal-

Se desea producir una varilla hecha de un solo cristal de aluminio puro, que tenga un esfuerzo cortante resultante crítico de 148 psi. Se deberá orientar la varilla de forma que, cuando se le aplique un esfuerzo axial de 500 psi, la varilla se deforme por deslizamiento en una dirección de  $45^\circ$  en relación con su propio eje y mueva un sensor que detecte la sobrecarga. Diseñe la varilla y un método mediante el cual pudiera ser producida.

#### SOLUCIÓN

Las dislocaciones empiezan a moverse cuando el esfuerzo cortante resultante  $\tau$  es igual al esfuerzo cortante resultante crítico, 148 psi. De la ley de Schmid:

$$\begin{aligned} \tau &= \sigma \cos \lambda \cos \phi, \text{ o} \\ 148 \text{ psi} &= (500 \text{ psi}) \cos \lambda \cos \phi \end{aligned}$$

Dado que se desea que el deslizamiento ocurra en un ángulo de  $45^\circ$  con respecto al eje de la varilla,  $\lambda = 45^\circ$ , tenemos que:

$$\begin{aligned} \cos \phi &= \frac{148}{500 \cos 45^\circ} = \frac{148}{(500)(0.707)} = 0.419 \\ \phi &= 65.2^\circ \end{aligned}$$

Por tanto, debemos producir una varilla que esté orientada de forma que  $\lambda = 45^\circ$  y  $\phi = 65.2^\circ$ .

Esto se podría hacer mediante un proceso de solidificación. Se orientaría un cristal de aluminio sólido en la parte inferior de un molde. Se introduciría aluminio líquido en el molde. El líquido se empieza a solidificar partiendo del cristal inicial, obteniéndose una varilla de un solo cristal con la orientación adecuada.

## 4-5 Influencia de la estructura cristalina

Se puede utilizar la ley de Schmid para comparar las propiedades de los metales con estructuras cristalinas CC, CCC y HC. La tabla 4-2 lista tres factores de importancia que podemos examinar. Sin embargo, hay que tener cuidado en observar que este análisis describe el comportamiento de cristales individuales prácticamente perfectos. Los materiales de uso en ingeniería rara vez son un monocristal y siempre contienen grandes cantidades de defectos.

**TABLA 4-2** Resumen de factores que afectan el deslizamiento en estructuras metálicas

Factor	CCC	CC	HC ( $\frac{c}{a} > 1.633$ )
Esfuerzo cortante resultante crítico (psi)	50–100	5,000–10,000	50–100 <sup>a</sup>
Número de sistemas de deslizamiento	12	48	3 <sup>b</sup>
Deslizamiento cruzado	Puede ocurrir	Puede ocurrir	No puede ocurrir <sup>b</sup>
Resumen de propiedades	Dúctil	Resistente	Relativamente frágil

<sup>a</sup> Relativo a deslizamiento en planos basales.  
<sup>b</sup> Mediante aleación o calentamiento a temperaturas elevadas, en los metales HC se activan sistemas de deslizamiento adicionales, lo que permite el deslizamiento cruzado y, por tanto, mejora su ductilidad.

**Esfuerzo cortante resultante crítico** Si el esfuerzo cortante resultante crítico en un metal es muy alto, el esfuerzo aplicado  $\sigma$  debe ser también alto a fin de que  $\tau$  sea igual a  $\tau_{\text{crítico}}$ . Si  $\sigma$  es grande, el metal debe tener una alta resistencia. En los metales CCC, que tienen planos compactos {111} el esfuerzo cortante resultante crítico es bajo (aproximadamente de 50 a 100 psi en un cristal perfecto); los metales CCC tienden a tener resistencias bajas. Por otra parte, las estructuras cristalinas CC no contienen planos compactos y es necesario exceder un esfuerzo cortante resultante crítico superior (del orden de 10,000 psi en cristales perfectos) para que ocurra el deslizamiento; por tanto, los metales CC tienden a tener resistencias altas.

Es común esperar que los metales HC, debido a que contienen planos basales compactos, tengan bajos esfuerzos cortantes resultantes críticos. De hecho, en metales HC como el zinc, que tiene una relación  $c/a$  mayor o igual a la teórica de 1.633, el esfuerzo cortante resultante crítico es menor de 100 psi, justo igual que los metales CCC. En el titanio HC, sin embargo, la relación  $c/a$  es menor a 1.633; los planos compactos están demasiado cerca. El deslizamiento

ahora ocurre en planos como el (1010), el plano de las caras verticales del prisma hexagonal y el esfuerzo cortante resultante crítico es entonces tan grande o más que en los metales CC.

**Número de sistemas de deslizamiento** Si por lo menos un sistema de deslizamiento está orientado para dar los ángulos  $\lambda$  y  $\phi$  casi a  $45^\circ$ , entonces  $\tau$  llega a ser igual a  $\tau_{\text{máx}}$  para un esfuerzo bajo aplicado. Los metales HC ideales sólo tienen un conjunto de planos compactos paralelos, los planos (0001), y tres direcciones compactas, lo que nos da tres sistemas de deslizamiento. En consecuencia, la probabilidad de que estos planos y direcciones compactas estén orientados con  $\lambda$  y  $\phi$  cercanos a  $45^\circ$  es muy baja. El cristal HC puede fallar frágilmente sin presentar un deslizamiento significativo.

Sin embargo, en los metales HC con una relación  $c/a$  baja, o cuando están aleados correctamente, o cuando se incrementa la temperatura, entran en acción otros sistemas de deslizamiento, haciendo que estos metales sean menos quebradizos de lo esperado.

Por otra parte, los metales CCC contienen cuatro planos compactos no paralelos de la forma {111} y tres direcciones compactas de la forma  $\langle 110 \rangle$  dentro de cada plano, lo que nos da un total de 12 sistemas de deslizamiento. Por lo menos un sistema de deslizamiento estará favorablemente orientado para que ocurra un deslizamiento a bajos esfuerzos; esto permite que los metales CCC tengan ductilidades altas.

Finalmente, los metales CC tienen hasta 48 sistemas de deslizamiento que son casi compactos. Varios sistemas de deslizamiento están orientados adecuadamente para que ocurra el deslizamiento, permitiendo que los metales CC también tengan ductilidad.

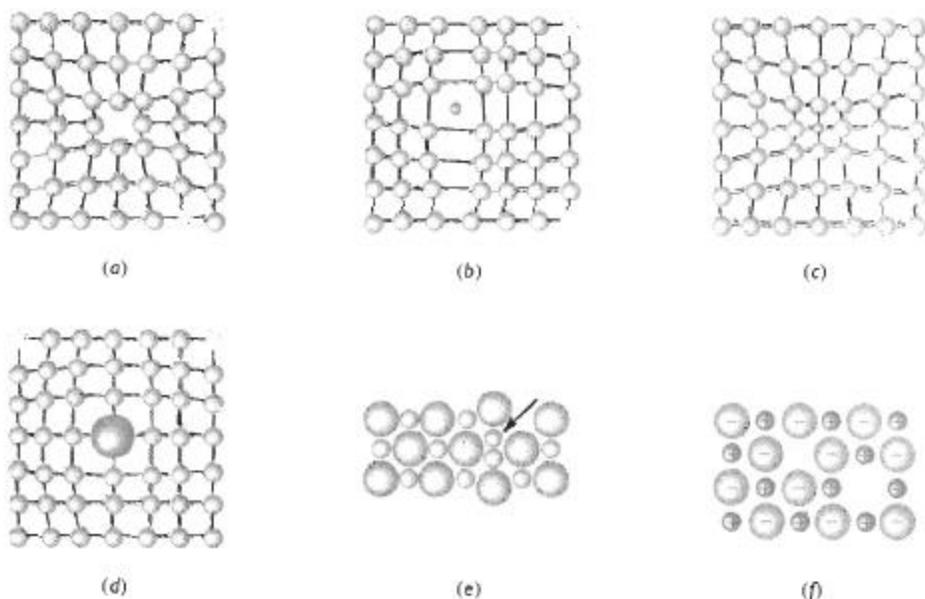
**Deslizamiento cruzado** Suponga que una dislocación de tornillo que se mueve en un plano de deslizamiento encuentra un obstáculo que le impide moverse más. La dislocación puede pasar a un segundo sistema de deslizamiento que interseca al anterior y que también está orientado correctamente para que la dislocación continúe su movimiento. Esto se conoce como deslizamiento cruzado. En muchos metales HC no puede ocurrir **deslizamiento cruzado** porque los planos de deslizamiento son paralelos y no se intersecan. Por tanto, los metales HC tienen tendencia a conservar su comportamiento frágil. Afortunadamente, se activan otros sistemas de deslizamiento al alea o calentar los metales HC, mejorando así la ductilidad. Es posible el deslizamiento cruzado tanto en los metales CCC como CC, ya que tienen una cierta cantidad de sistemas de deslizamiento que se intersecan. En consecuencia, el deslizamiento cruzado ayuda a mantener la ductilidad en estos metales.

## 4-6 Defectos puntuales

**Los defectos puntuales** son discontinuidades de la red que involucran uno o quizá varios átomos. Estos defectos o imperfecciones, que se muestran en la figura 4-11, pueden ser generados en el material mediante el movimiento de los átomos al ganar energía por calentamiento; durante el procesamiento del material; mediante la introducción de impurezas; o intencionalmente a través de las aleaciones.

**Vacancias** Una **vacancia** se produce cuando falta un átomo en un sitio normal. Las vacancias se crean en el cristal durante la solidificación a altas temperaturas o como consecuencia de daños por radiación. A temperatura ambiente aparecen muy pocas vacancias, pero éstas se incrementan de manera exponencial conforme se aumenta la temperatura; como se muestra en la siguiente ecuación de Arrhenius:

$$n_v = n \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right), \quad (4-4)$$



**FIGURA 4-11** Defectos puntuales: (a) vacancia; (b) pequeño átomo intersticial; (c) átomo sustitucional; (d) átomo sustitucional grande; (e) defecto Frenkel y (f) defecto Schottky. Todos estos defectos alteran el arreglo perfecto de los átomos circundantes.

donde  $n_v$  es el número de vacancias por  $\text{cm}^3$ ;  $n$  es el número de puntos de red por  $\text{cm}^3$ ;  $Q$  es la energía requerida para producir una vacancia, en  $\text{cal/mol}$ ;  $R$  es la constante de los gases,  $1.987 \text{ cal/mol} \cdot \text{K}$  y  $T$  es la temperatura en  $^\circ\text{K}$ . Debido a la gran energía térmica existente cerca del punto de fusión, pudiera existir vacancia por cada 1000 puntos de la red.

#### EJEMPLO 4-6 Diseño de un tratamiento térmico para producir vacancias

Diseñe un tratamiento térmico que proporcione 1000 veces más vacancias en el cobre de las que están normalmente presentes a temperatura ambiente. Se requieren aproximadamente 20,000  $\text{cal/mol}$  para producir una vacancia en el cobre.

#### SOLUCIÓN

El parámetro de red del cobre CCC es 0.36151 nm. El número de átomos de cobre, o puntos de red, por  $\text{cm}^3$  es:

$$n = \frac{4 \text{ átomos/celda}}{(3.6151 \times 10^{-8} \text{ cm})^3} = 8.47 \times 10^{22} \text{ átomos de cobre/cm}^3$$

A temperatura ambiente,  $T = 25 + 273 = 298 \text{ K}$ :

$$\begin{aligned} n_v &= (8.47 \times 10^{22}) \exp [(-20,000)/(1.987)(298)] \\ &= 1.815 \times 10^4 \text{ vacancias/cm}^3 \end{aligned}$$

Se desea producir 1000 veces esta cifra, es decir,  $n_v = 1.815 \times 10^{11}$  vacancias/cm<sup>3</sup>. Esto se puede lograr calentando el cobre a una temperatura a la cual se forme este número de vacancias:

$$n_v = 1.815 \times 10^{11} = (8.47 \times 10^{23}) \exp(-20,000/1.987T)$$

$$\exp(-20,000/1.987T) = \frac{1.815 \times 10^{11}}{8.47 \times 10^{23}} = 0.214 \times 10^{-11}$$

$$\frac{-20,000}{1.987T} = \ln(0.214 \times 10^{-11}) = -26.87$$

$$T = \frac{20,000}{(1.987)(26.87)} = 375 \text{ K} = 102^\circ\text{C}$$

Al calentar el cobre ligeramente por encima de 100°C (quizás incluso colocándolo en agua hirviendo), y a continuación enfriándolo rápidamente hasta la temperatura ambiente, la cantidad de vacancias atrapadas en la estructura podría ser 1000 veces mayor que la cantidad de vacancias al equilibrio a temperatura ambiente. ■

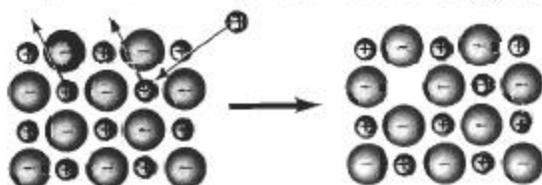
**Defectos intersticiales** Se forma un **defecto intersticial** cuando se inserta un átomo adicional en una posición normalmente desocupada dentro de la estructura cristalina. Los sitios intersticiales se ilustraron en la tabla 3-6. Los átomos intersticiales, aunque mucho más pequeños que los átomos localizados en los puntos de la red, aún así son mayores que los sitios intersticiales que ocupan; en consecuencia, la red circundante aparece comprimida y distorsionada. Los átomos intersticiales como el hidrógeno a menudo están presentes en forma de impurezas; los átomos de carbono se agregan al hierro para producir acero. Una vez dentro del material, el número de átomos intersticiales en la estructura se mantiene casi constante, incluso al cambiar la temperatura.

**Defectos sustitucionales** Se crea un **defecto sustitucional** cuando se reemplaza un átomo por otro de un tipo distinto. El átomo sustitucional permanece en la posición original. Cuando estos átomos son mayores que los normales de la red, los átomos circundantes se comprimen; si son más pequeños, los átomos circundantes quedan en tensión. En cualquier caso, el defecto sustitucional distorsiona la red circundante. Igualmente, se puede encontrar el defecto sustitucional como una impureza o como un elemento aleante agregado deliberadamente y, una vez introducido, el número de defectos es relativamente independiente de la temperatura.

**Otros defectos puntuales** Se crea un **intersticio** cuando un átomo idéntico a los de los puntos normales de la red se coloca en un lugar intersticial. Estos defectos aparecen con mayor frecuencia en redes con un factor de empaquetamiento bajo.

El **defecto Frenkel** es un par de defectos, intersticio-vacancia formado cuando un ion salta de un punto normal de la red a un sitio intersticial, dejando detrás una vacancia. Un **defecto Schottky** es un par de vacancias en un material de enlace iónico; deben faltar tanto un anión como un catión de la red si se ha de preservar la neutralidad eléctrica del cristal. Este defecto es común en materiales cerámicos de enlace iónico.

Un último defecto puntual importante ocurre cuando un ion reemplaza a otro con carga distinta. Este caso puede darse cuando un ion con valencia de +2 reemplaza a uno con valencia de +1 (figura 4-12). En este caso, se introduce un carga positiva adicional en la estructura. Para mantener el equilibrio de cargas, podría crearse una vacancia donde normalmente estaría localizado un catión de carga +1. Esta imperfección se observa en materiales que tienen un enlace iónico pronunciado.



**FIGURA 4-12** Cuando un catión bivalente reemplaza a un catión monovalente, deberá eliminarse también un catión monovalente adicional, creando así una vacancia.

**Importancia de los defectos puntuales** Los defectos puntuales alteran el arreglo perfecto de los átomos circundantes, distorsionando la red a lo largo de quizás cientos de espaciamentos atómicos, a partir del defecto. Una dislocación que se mueva a través de las cercanías generales de un defecto puntual encuentra una red en la cual los átomos no están en sus posiciones de equilibrio. Esta alteración requiere que se aplique un esfuerzo más alto para obligar a que la dislocación venza al defecto, incrementándose así la resistencia del material.

#### EJEMPLO 4-7

Determine el número de vacancias necesarias para que una red de hierro CC tenga una densidad de  $7.87 \text{ g/cm}^3$ . El parámetro de red del hierro es de  $2.866 \times 10^{-8} \text{ cm}$ .

#### SOLUCIÓN

La densidad teórica esperada del hierro se puede calcular a partir del parámetro de red y de su masa atómica. Dado que el hierro es CC, en cada celda unitaria están presentes dos átomos de hierro.

$$\rho = \frac{(2 \text{ átomos/celda})(55.847 \text{ g/mol})}{(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^3(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})} = 7.8814 \text{ g/cm}^3$$

Se desea producir un hierro de una densidad menor. Esto se puede hacer introduciendo de manera intencional vacancias en la red. Calculemos el número de átomos y vacancias que deben estar presentes en cada celda unitaria del hierro para obtener la densidad requerida de  $7.87 \text{ g/cm}^3$ :

$$\rho = \frac{(\text{átomos/celda})(55.847 \text{ g/mol})}{(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^3(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})} = 7.87 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Átomos/celda} = \frac{(7.87)(2.866 \times 10^{-8})^3(6.02 \times 10^{23})}{55.847} = 1.9971$$

Es decir, debe haber 0.0029 vacancias por celda unitaria. El número de vacancias por  $\text{cm}^3$  es:

$$\text{Vacancias/cm}^3 = \frac{0.0029 \text{ vacancias/celda}}{(2.866 \times 10^{-8} \text{ cm})^3} = 1.23 \times 10^{20}$$

Si se conociera más información, como la energía requerida para producir una vacancia en el hierro, se podría diseñar un tratamiento térmico (como en el ejemplo 4-6) para producir esta concentración de vacancias.

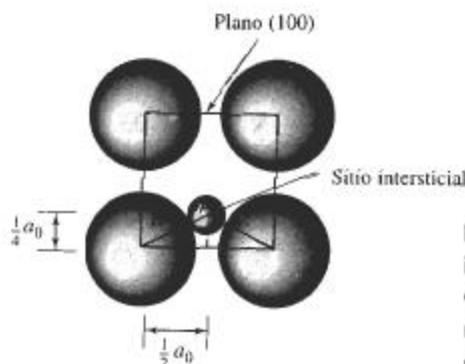
## EJEMPLO 4-8

En el hierro CCC, los átomos de carbono están localizados en los sitios octaédricos que se encuentran en el centro de cada borde de la celda unitaria  $(1/2, 0, 0)$  y en el centro de la celda unitaria  $(1/2, 1/2, 1/2)$ . En el hierro CC, los átomos de carbono entran en sitios tetraédricos, como  $1/4, 1/2, 0$ . El parámetro de red es  $0.3571 \text{ nm}$  en el caso del hierro CCC y de  $0.2866 \text{ nm}$  para el hierro CC. Los átomos de carbono tienen un radio  $0.071 \text{ nm}$ . (1) ¿Es de esperarse una distorsión más grande de la red cristalina debido a un átomo de carbono intersticial en el hierro CCC o en el hierro CC? (2) ¿Cuál sería el porcentaje de carbono atómico en cada tipo de hierro, si todos los sitios intersticiales fueran llenados?

## SOLUCIÓN

1. Se puede calcular el tamaño del sitio intersticial en la localización  $1/4, 1/2, 0$  con la ayuda de la figura 4-13. El radio  $R_{\text{CC}}$  del átomo de hierro es:

$$R_{\text{CC}} = \frac{\sqrt{3}a_0}{4} = \frac{(\sqrt{3})(0.2866)}{4} = 0.1241 \text{ nm}$$



**FIGURA 4-13** La posición del sitio intersticial  $1/4, 1/2, 0$  en los metales CC, mostrando el arreglo de los átomos normales y del átomo intersticial (para el ejemplo 4-8).

De la figura 4-13 tenemos que

$$\left(\frac{1}{2}a_0\right)^2 + \left(\frac{1}{4}a_0\right)^2 = (r_{\text{intersticial}} + R_{\text{CC}})^2$$

$$(r_{\text{intersticial}} + R_{\text{CC}})^2 = 0.3125a_0^2 = (0.3125)(0.2866 \text{ nm})^2 = 0.02567$$

$$r_{\text{intersticial}} = \sqrt{0.02567} - 0.1241 = 0.0361 \text{ nm}$$

En el caso del hierro CCC, el sitio intersticial como el  $1/2, 0, 0$  se encuentra a lo largo de las direcciones 100. Por lo que los radios del átomo de hierro del sitio intersticial son:

$$R_{\text{CCC}} = \frac{\sqrt{2}a_0}{4} = \frac{(\sqrt{2})(0.3571)}{4} = 0.1263 \text{ nm}$$

$$2r_{\text{intersticial}} + 2R_{\text{CCC}} = a_0$$

$$r_{\text{intersticial}} = \frac{0.3571 - (2)(0.1263)}{2} = 0.0522 \text{ nm}$$

El sitio intersticial en el hierro CC es menor que el correspondiente en el hierro CCC. Aunque ambos son menores que el átomo de carbono, éste distorsiona más la red CC que la

red CCC. Como resultado, se espera que entren menos átomos de carbono en las posiciones intersticiales del hierro CC que en las del CCC.

2. En el hierro CC, se espera encontrar dos átomos de hierro en cada celda unitaria. Hay un total de 24 sitios intersticiales del tipo  $1/4$ ,  $1/2$ , 0; sin embargo, en vista de que cada sitio está localizado en una cara de la celda unitaria, solamente la mitad de cada sitio corresponde de manera única a una sola celda. Por tanto:

$$(24 \text{ sitios}) \left( \frac{1}{2} \right) = 12 \text{ sitios intersticiales por celda unitaria}$$

Si se llenaran todos los sitios intersticiales, el porcentaje atómico de carbono contenido en el hierro sería:

$$\% \text{ de C} = \frac{12 \text{ átomos de C}}{12 \text{ átomos de C} + 2 \text{ átomos de Fe}} \times 100 = 86\%$$

En el hierro CCC se esperan cuatro átomos de hierro en cada celda unitaria y el número de sitios intersticiales es:

$$(12 \text{ en las aristas}) \left( \frac{1}{4} \right) + 1 \text{ en el centro} = 4 \text{ sitios intersticiales por celda unitaria}$$

De nuevo, si se llenaran todos los sitios intersticiales, el porcentaje atómico del carbono en el hierro CCC sería:

$$\% \text{at de C} = \frac{4 \text{ átomos de C}}{4 \text{ átomos de C} + 4 \text{ átomos de Fe}} \times 100 = 50\%$$

Como veremos en un capítulo posterior, el porcentaje atómico máximo de carbono presente en las dos formas de hierro bajo condiciones de equilibrio es:

CC: 1.0%

CCC: 8.9%

Debido a la deformación que se produce en la red del hierro por los átomos intersticiales de carbono, la fracción de sitios intersticiales que pueden ser ocupados es bastante pequeña en particular en el caso del hierro CC. ■

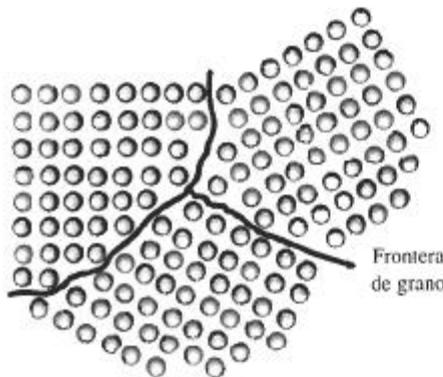
## 4-7 Defectos de superficie

**Los defectos de superficie** son las fronteras o planos que separan un material en regiones de la misma estructura cristalina pero con orientaciones cristalográficas distintas.

**Superficie del material** En las superficies externas del material la red termina de manera abrupta. Cada átomo de la superficie ya no tiene el mismo número de coordinación y se altera el enlace atómico. Asimismo, la superficie puede ser muy áspera, contener pequeñas muescas y quizá ser mucho más reactiva que el interior del material.

**Fronteras de grano** La microestructura de la mayor parte de los materiales está formada por muchos granos. Un **grano** es una porción del material dentro del cual el arreglo atómico es idéntico. Sin embargo, la orientación del arreglo atómico, o de la estructura cristalina, es distinta para cada grano. En la figura 4-14 se muestran de manera esquemática tres granos; la red de cada uno de ellos es idéntica pero están orientados de manera distinta. La **frontera de grano**, que es la superficie que separa los granos, es una zona estrecha en la cual los átomos no están correc-

tamente espaciados. Esto quiere decir que, en algunos sitios, los átomos están tan cerca unos de otros en la frontera de grano que crean una región de compresión y en otras áreas están tan alejados que crean una región de tensión.

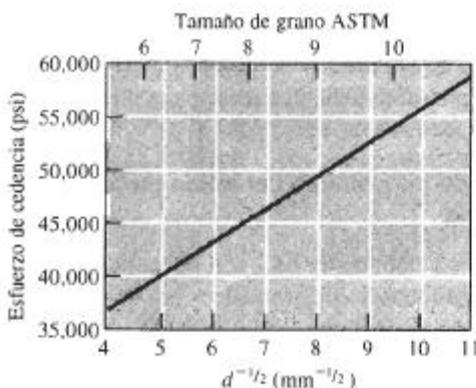


**FIGURA 4-14** Los átomos cerca de las fronteras de los tres granos no tienen un espaciamiento o arreglo de equilibrio.

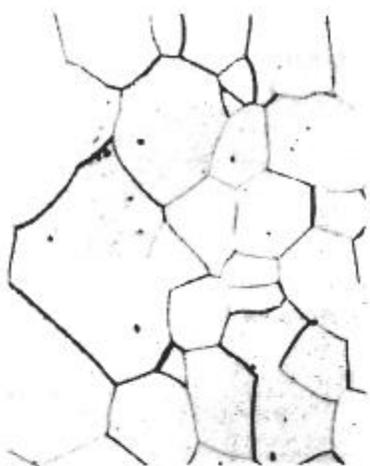
Un método para controlar las propiedades de un material es controlando el tamaño de los granos. Reduciendo el tamaño de éstos se incrementa su número y, por tanto, aumenta la cantidad de fronteras de grano. Cualquier dislocación se moverá solamente una distancia corta antes de encontrar una frontera de grano, incrementando así la resistencia del metal. La **ecuación de Hall-Petch** relaciona el tamaño de grano con el esfuerzo de cedencia del material.

$$\sigma_y = \sigma_0 + Kd^{-1/2} \quad (4-5)$$

donde  $\sigma_y$  es el esfuerzo de cedencia, es decir el esfuerzo bajo el cual el material se deforma de manera permanente;  $d$  es el diámetro promedio de los granos y  $\sigma_0$  y  $K$  son constantes del metal. La figura 4-15 muestra esta relación para el acero. En capítulos posteriores se describirá cómo



**FIGURA 4-15** Efecto del tamaño de grano en el esfuerzo de cedencia del acero a temperatura ambiente.



**FIGURA 4-16** Microestructura del paladio ( $\times 100$ ). (Del, Metals Handbook, Volumen 9, 9a. Ed., American Society for Metals, 1985.)

se puede controlar el tamaño del grano a través de la solidificación, la generación de aleaciones y el tratamiento térmico.

La *microscopía óptica* se utiliza para descubrir características microestructurales, como las fronteras de grano que requieran de una ampliación menor a los 2000 aumentos. El proceso para preparar una muestra y observar y registrar su microestructura se conoce como **metalografía**. Se lija y pule una muestra de material hasta obtener un acabado espejo. A continuación, la superficie se expone a un ataque químico, o *grabado*, donde las fronteras de grano se disuelven en mayor grado que el resto de cada grano. La luz proveniente del microscopio óptico se refleja o dispersa sobre la superficie de la muestra, dependiendo de la forma en que fueron debastadas químicamente las diferentes zonas de la superficie. Las características microestructurales que fueron más atacadas, como las fronteras de grano, provocan mayor dispersión de luz y aparecen como líneas oscuras (figura 4-16).

Una forma mediante la cual se especifica el tamaño de grano es el **número de tamaño de grano ASTM** (American Society for Testing & Materials). Se determina el número de granos por pulgada cuadrada a partir de una fotografía del metal tomada a una ampliación de  $\times 100$ . El número de granos por pulgada cuadrada  $N$  se introduce en la ecuación 4-6 y se calcula el número  $n$  de tamaño de grano ASTM:

$$N = 2^{n-1} \quad (4-6)$$

Un número ASTM grande indica que el material está constituido por muchos granos, es decir, los granos son muy pequeños y por tanto tiene una resistencia mecánica alta.

#### EJEMPLO 4-9

#### Diseño de un proceso cerámico para una resistencia requerida

Se desea producir un componente cerámico de KCl con un esfuerzo de cedencia de 3000 psi. Pruebas realizadas muestran que un tamaño de grano de  $5 \mu\text{m}$  da una resistencia de 4000 psi y que un tamaño de grano de  $100 \mu\text{m}$  da una resistencia de 1200 psi ( $1 \mu = 10^{-6} \text{ m}$ ).

#### SOLUCIÓN

Se puede utilizar la ecuación de Hall-Petch para determinar el tamaño de grano requerido en el cerámico. Para un tamaño de grano de  $5 \mu\text{m}$  se tiene:

$$\begin{aligned}
 s_v &= \sigma_0 + Kd^{-1/2} \\
 4000 &= \sigma_0 + K(5)^{-1/2} = \sigma_0 + 0.447 K \\
 \sigma_0 &= 4000 - 0.447 K
 \end{aligned}$$

Para un tamaño de grano de  $100 \mu\text{m}$

$$\begin{aligned}
 1200 &= \sigma_0 + K(100)^{-1/2} = 4000 - 0.447 K + 0.1 K \\
 (0.447 - 0.1)K &= 4000 - 1200 \\
 K &= \frac{2800}{0.347} = 8069
 \end{aligned}$$

y

$$\sigma_0 = 4000 - (0.447)(8069) = 393 \text{ psi}$$

Por tanto, el tamaño de grano requerido para una resistencia de 3000 psi es:

$$\begin{aligned}
 3000 &= 393 + 8069d^{-1/2} \\
 d^{-1/2} &= \frac{(3000 - 393)}{8069} = 0.323
 \end{aligned}$$

Así,  $d = 9.59 \mu\text{m}$ .

Un método para producir componentes cerámicos es primero triturar la materia prima (KCl en este caso), pasar el material triturado a través de una serie de mallas para eliminar las partículas demasiado grandes y demasiado finas y, a continuación, consolidar las partículas en un molde mediante presión y alta temperatura. En este caso, se desearía únicamente utilizar partículas que tuvieran aproximadamente  $9.59 \mu\text{m}$  de diámetro.

#### EJEMPLO 4-10

Supongamos que se cuentan 16 granos por pulgada cuadrada en una microfotografía tomada a una ampliación de  $\times 250$ . ¿Cuál es el número de tamaño de grano ASTM?

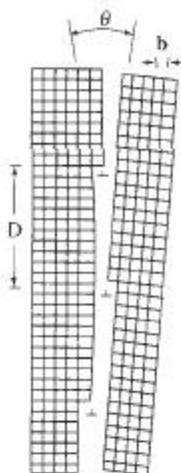
#### SOLUCIÓN

Si en la ampliación  $\times 250$  contamos 16 granos por pulgada cuadrada, entonces a una ampliación de  $\times 100$  debemos tener:

$$\mathcal{N} = \left(\frac{250}{100}\right)^2 (16) = 100 \text{ granos/plg}^2 \text{ a } 100 \times = 2^{n-1}$$

$$\begin{aligned}
 \log 100 &= (n - 1)\log 2 \\
 2 &= (n - 1)(0.301) \\
 n &= 7.64
 \end{aligned}$$

**Bordes de grano de ángulo pequeño** Un borde de grano de ángulo pequeño es un arreglo de dislocaciones que produce una pequeña desviación de la orientación cristalográfica entre redes adyacentes (figura 4-17). Dado que la energía de la superficie es menor que la de



**FIGURA 4-17** El borde de grano de ángulo pequeño es producido por un arreglo de dislocaciones, causando una falta de coincidencia angular  $\theta$  entre las redes en ambos lados del borde.

en un borde de grano normal, los bordes de grano de ángulo pequeño no son tan eficaces para bloquear el deslizamiento. Los bordes de ángulo pequeño formados por dislocaciones de borde se conocen como **bordes inclinados** y aquellos causados por dislocaciones de tornillo se conocen como **bordes torcidos**.

**Fallas de apilamiento** Las **fallas de apilamiento**, que ocurren en los metales CCC, representan un error de la secuencia de apilamiento de planos compactos. Normalmente, en una red CCC perfecta se produce una secuencia de apilamiento *ABCABCABC*. Pero, suponga que se produce la secuencia siguiente:

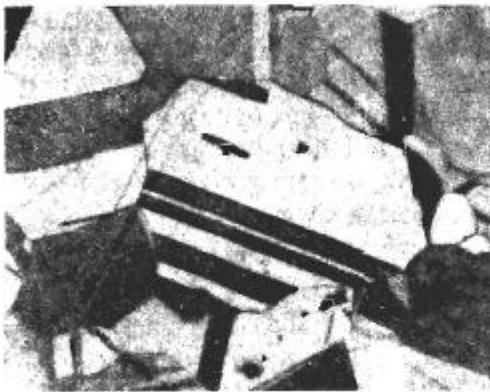
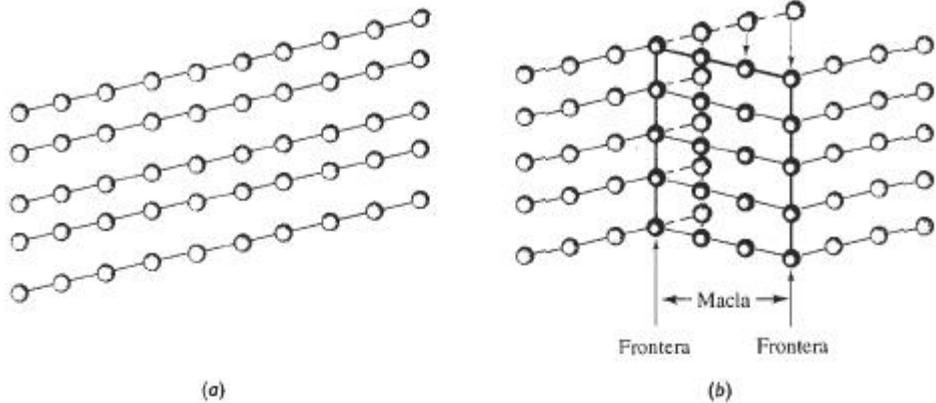
*ABCABABCABC*



En la porción de la secuencia indicada, el plano tipo *A* aparece donde debería estar localizado normalmente un plano tipo *C*. Esta pequeña región, que tiene una secuencia de apilamiento *HC* en vez de *CCC*, representa una falla de apilamiento. Estas fallas interfieren con el proceso de deslizamiento.

**Bordes de macla** Un **borde de macla** es un plano que separa dos partes de un grano que tienen una pequeña diferencia en la orientación cristalográfica. Estas partes de la red parecen formar una imagen especular en el plano del borde de macla (figura 4-18). Las maclas se producen cuando una fuerza de corte, que actúa a lo largo del borde de macla, hace que los átomos cambien de posición. Las maclas ocurren durante la deformación o el tratamiento térmico de ciertos metales. Los bordes de macla interfieren con el proceso de deslizamiento incrementando la resistencia del metal. El movimiento de los bordes de macla también puede hacer que un metal se deforme. La figura 4-18 muestra que la formación de una macla modificó la forma del metal.

La efectividad que tengan los defectos de superficie para interferir con el proceso de deslizamiento se puede juzgar a partir de las energías de superficie (tabla 4-3). Los bordes de grano de alta energía son más efectivos para bloquear dislocaciones que las fallas de apilamiento o los bordes de macla.



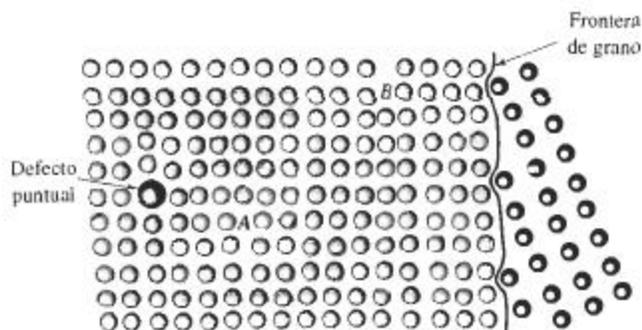
**FIGURA 4-18** Aplicación de un esfuerzo a un cristal perfecto (a) que puede causar un desplazamiento de los átomos (b) causando la formación de una macla. Note que el cristal se ha deformado debido a la macla. (c) Una microfotografía de maclas dentro de un grano de latón ( $\times 250$ ).

## 4-8 Control del proceso de deslizamiento

En un cristal perfecto, el arreglo fijo y repetido de los átomos tiene el nivel de energía más bajo posible dentro del cristal. Cualquier imperfección en la red eleva la energía interna en el lugar donde se localiza el defecto. La energía local se incrementa alrededor del defecto porque los átomos están en compresión o en tensión.

**TABLA 4-3** Energías de las imperfecciones de superficie en materiales seleccionados

Imperfección de superficie (ergs/cm <sup>2</sup> )	Al	Cu	Pt	Fe
Energía por falla de apilamiento	200	75	95	—
Energía por borde de macla	120	45	195	190
Energía por borde de grano	625	645	1000	780



**FIGURA 4-19** Si la dislocación en el punto *A* se mueve hacia la izquierda, será bloqueada por el defecto puntual. Si la dislocación se mueve hacia la derecha, entrará en interacción con la red desorganizada cerca de la segunda dislocación en el punto *B*. Si la dislocación se mueve aún más hacia la derecha, quedará bloqueada por un borde de grano.

Una dislocación en una red puede moverse fácilmente a través del cristal si el esfuerzo cortante en el sistema de deslizamiento es igual al esfuerzo cortante resultante crítico. Sin embargo, si la dislocación encuentra a su paso una región donde los átomos están desplazados de sus posiciones de equilibrio, se requerirá de un esfuerzo más alto para obligar a que la dislocación se traslade más allá de la región local de alta energía; por tanto, el material es más resistente. Podemos, entonces, controlar la resistencia de un material al controlar el número y tipo de imperfecciones presentes. Los tres mecanismos de endurecimiento más importantes se basan en las tres categorías de defectos de red que puede haber en los cristales.

**Endurecimiento por deformación** Las dislocaciones rompen la perfección de la red. En la figura 4-19, los átomos que están por debajo de la línea de dislocación en el punto *B* están en compresión, en tanto que los átomos por encima del mismo punto están sometidos a tensión. Si la dislocación *A* se mueve hacia la derecha y pasa cerca de la dislocación *B*, encontrará una región donde los átomos no están correctamente organizados. Se requerirán de esfuerzos más altos para mantener en movimiento a la dislocación *A*; en consecuencia, el metal es más resistente. Al incrementar el número de dislocaciones, se aumenta la resistencia del material. El *endurecimiento por deformación* se analizará formalmente en el capítulo 7.

**Endurecimiento por solución sólida** Cualquiera de los defectos puntuales también altera la perfección de la red. Si la dislocación *A* se mueve hacia la izquierda (figura 4-19) encontrará una red alterada debido al defecto puntual; se requiere un esfuerzo más alto para que el deslizamiento de la dislocación continúe. Al introducir intencionalmente átomos sustitucionales o intersticiales, generamos un *endurecimiento por solución sólida*, misma que se analizará en el capítulo 9.

**Endurecimiento por tamaño de grano** Finalmente, las imperfecciones de superficie como los bordes de grano también alteran la red. Si la dislocación *B* se mueve a la derecha (figura 4-19), encontrará un borde de grano y quedará bloqueada. Al incrementar el número de granos o al reducir el tamaño de los mismos, se consigue el *endurecimiento por tamaño de grano*. El control del tamaño del grano se analizará en varios capítulos posteriores.

#### EJEMPLO 4-11

#### Diseño y selección de materiales para una estructura estable

Se desea producir una ménsula para sostener ladrillos cerámicos en un horno de tratamientos térmicos. La ménsula deberá ser fuerte, poseer ductilidad para que en caso de sobrecarga se

deforme en vez de fracturarse, y deberá mantener la mayor parte de su resistencia hasta aproximadamente 600°C. Diseñe el material para esta ménsula, considerando las diversas imperfecciones de red como mecanismo de endurecimiento.

## SOLUCIÓN

Para dar servicio hasta 600°C, la ménsula no debe ser producida a partir de un material polimérico. En vez de ello, se considera un metal o un cerámico.

Para que tenga algo de ductilidad, las dislocaciones deben deslizarse. Ya que el deslizamiento en los cerámicos es difícil, la ménsula debe ser producida de algún material metálico. El metal debe tener un punto de fusión muy por encima de 600°C; el aluminio, con un punto de fusión de 660°C, no es adecuado. El hierro, sin embargo, sería una selección razonable.

Se pueden introducir defectos puntuales de línea y de superficie en el hierro para incrementar la resistencia, pero deseamos que las imperfecciones sean estables conforme se incrementa la temperatura de servicio. Como se verá en el capítulo 5, los granos pueden crecer a temperaturas elevadas, reduciendo el número de bordes de grano y causando una reducción en la resistencia. Como se indicará en el capítulo 7, las dislocaciones pueden ser aniquiladas a temperaturas elevadas, reduciendo también la resistencia. El número de vacancias depende de la temperatura, por lo que el control de estos defectos de red no produciría propiedades estables.

El número de átomos intersticiales o sustitucionales en la red, sin embargo, no cambia con la temperatura. Se puede agregar carbono al hierro como átomos intersticiales o remplazar átomos de hierro por átomos de vanadio en los puntos normales de la red. Estos defectos puntuales siguen interfiriendo con el movimiento de las dislocaciones y ayudan a conservar estable la resistencia.

Naturalmente, pueden ser de importancia otros requisitos de diseño. Por ejemplo, la ménsula de acero puede deteriorarse por oxidación o reaccionar químicamente con el ladrillo cerámico.

## RESUMEN

- Las imperfecciones, es decir, los defectos en la red de un material cristalino, son de tres tipos generales: defectos puntuales, defectos de línea o dislocaciones y defectos de superficie.
- Las dislocaciones son defectos de línea que se mueven al aplicar una fuerza al material haciendo que se deforme.
  - El esfuerzo cortante resultante crítico es el esfuerzo requerido para que se mueva la dislocación.
  - La dislocación se mueve en un sistema de deslizamiento, formado por un plano de deslizamiento y una dirección de deslizamiento. La dirección de deslizamiento, es decir, el vector de Burgers, típicamente es una dirección compacta. El plano de deslizamiento normalmente también es compacto o casi compacto.
  - En los cristales metálicos, el número y tipo de direcciones de deslizamiento y planos de deslizamiento influye en las propiedades del metal. En los metales CCC, el esfuerzo cortante resultante crítico es bajo y existe un número óptimo de planos de deslizamiento; en consecuencia, los metales CCC tienden a ser dúctiles. En el caso de los metales CC, no hay planos compactos disponibles y el esfuerzo cortante resultante crítico es alto; por lo que los metales CC tienden a ser resistentes. El número de sistemas de deslizamiento en los metales HC es limitado, haciendo que estos metales se comporten de manera frágil.
- Los defectos puntuales, que incluyen vacancias, átomos intersticiales y átomos sustitucionales, introducen campos de esfuerzos de compresión o de tensión que alteran la red adyacente. Como resultado, las dislocaciones no pueden deslizarse en las cercanías de defectos puntuales, incrementándose la resistencia del material. El número de vacancias, o de puntos de red vacíos, depende de

la temperatura del material; los átomos intersticiales (localizados en sitios intersticiales entre átomos normales) y los átomos sustitucionales (que remplazan al átomo normal en puntos de la red) a menudo se introducen de manera deliberada y generalmente su número no se altera por los cambios de temperatura.

- Los defectos de superficie incluyen los bordes de grano. Al producir un tamaño de grano muy pequeño se incrementa la cantidad de área de bordes de grano; dado que las dislocaciones no pueden pasar con facilidad a través de un borde de grano, el material se hace más resistente.
- El número y tipo de defectos de red controlan la facilidad del movimiento de las dislocaciones y, por tanto, influyen de manera directa sobre las propiedades mecánicas del material. Se obtiene el endurecimiento por deformación al incrementar el número de dislocaciones; el endurecimiento por solución sólida involucra incorporar defectos puntuales y el endurecimiento por tamaño de grano se obtiene al producir un material con granos más pequeños.

## Glosario

**Borde de grano de pequeño ángulo** Arreglo de dislocaciones que causan un pequeño error de orientación en la red a través de la superficie de la imperfección.

**Borde inclinado** Borde de grano de ángulo pequeño compuesto de un arreglo de dislocaciones de borde.

**Borde de macla** Defecto de superficie a través del cual hay una desorientación angular (o imagen de espejo) en la red. Los bordes de macla también pueden moverse y causar deformación del material.

**Borde torcido** Borde de grano de ángulo pequeño compuesto por un arreglo de dislocaciones de tornillo.

**Defecto Frenkel** Par de defectos puntuales que se producen cuando un ion se mueve para crear un sitio intersticial, dejando atrás una vacancia.

**Defecto intersticial** Defecto puntual que se produce cuando se coloca un átomo en la red en un sitio que normalmente no es un punto de red.

**Defecto Schottky** Par de defectos puntuales en materiales de enlace iónico. A fin de mantener una carga neutral se debe formar tanto una vacancia de catión como de anión.

**Defecto sustitucional** Defecto puntual que se produce cuando se elimina un átomo de un punto normal de una red y se remplaza con un átomo distinto, por lo general, de un tamaño diferente.

**Defectos puntuales** Imperfecciones, como vacancias, localizados en un solo punto en la red.

**Defectos de superficie** Imperfecciones, como bordes de grano que separan un material en regiones de distinta orientación cristalográfica.

**Densidad de dislocación** Longitud total de líneas de dislocación por centímetro cúbico dentro de un material.

**Deslizamiento** Deformación de un material mediante el movimiento de dislocaciones a través de la red.

**Deslizamiento cruzado** Cambio del sistema de deslizamiento de una dislocación.

**Dirección de deslizamiento** Dirección en la red a través de la cual se mueve la dislocación. La dirección de deslizamiento es la misma que la dirección del vector de Burgers.

**Dislocación** Imperfección lineal en la red de un material cristalino. El movimiento de las dislocaciones ayuda a explicar la manera en la que se deforman los materiales. La interferencia con el movimiento de las dislocaciones ayuda a explicar cómo se endurecen los materiales.

**Dislocación de borde** Dislocación introducida en la red al agregar un medio plano adicional de átomos.

**Dislocación de tornillo** Dislocación producida al torcer un cristal de forma que un plano atómico produce una rampa en espiral alrededor de la dislocación.

**Dislocación mixta** Una dislocación que contiene en parte componentes de borde y de tornillo.

**Ecuación Hall-Petch** Relación entre resistencia y tamaño de grano en un material; esto es,  $\sigma = \sigma_0 + Kd^{1/2}$ .

**Esfuerzo cortante resultante crítico** Esfuerzo cortante requerido para hacer que una dislocación se mueva y genere deslizamiento.

**Esfuerzo Peierls-Nabarro** El esfuerzo cortante, que depende del vector de Burgers y del espaciado interplanar, requerido para que se mueva una dislocación; esto es,  $\tau = c \exp(-kd/b)$ .

**Falla de apilamiento** Defecto de superficie en metales CCC causado por una secuencia incorrecta del apilamiento de planos compactos.

**Frontera de grano** Defecto de superficie que representa la frontera entre dos granos. La red tiene una orientación cristalográfica distinta a ambos lados de un borde de grano.

**Grano** Porción de un material sólido en el cual la red es idéntica y con una sola orientación cristalográfica.

**Intersticio** Defecto puntual causado cuando un átomo "normal" ocupa un sitio intersticial dentro de la red.

**Ley de Schmid** Relación entre el esfuerzo cortante, el esfuerzo aplicado y la orientación del sistema de deslizamiento; esto es,  $\tau = \sigma \cos \lambda \cos \phi$ .

**Metalografía** Preparación de la muestra de un material mediante pulido y ataque químico, de forma que su estructura pueda ser examinada utilizando un microscopio.

**Número de tamaño de grano ASTM** Medida del tamaño de los granos en un material cristalino que se obtiene al contar el número de granos por pulgada cuadrada en una ampliación de  $\times 100$ .

**Microscopio electrónico de transmisión (MET)** Instrumento que al pasar un haz de electrones a través de un material, puede detectar características estructurales microscópicas.

**Plano de deslizamiento** Plano que barre la línea de dislocación durante el deslizamiento. Normalmente, el plano de deslizamiento es un plano compacto, si es que existe alguno en la estructura cristalina.

**Sistema de deslizamiento** Combinación del plano de deslizamiento y de la dirección del deslizamiento.

**Vacancia** Átomo faltante en algún punto de la red.

**Vector de Burgers** Dirección y distancia en la que se mueve una dislocación en cada paso.

## PROBLEMAS

**4-1** ¿Cuáles son los índices Miller de las direcciones de deslizamiento

(a) en el plano (111) de una celda unitaria CCC?

(b) en el plano (011) de una celda unitaria CC?

**4-2** ¿Cuáles son los índices Miller de los planos de deslizamiento en celdas unitarias CCC que contienen la dirección de deslizamiento [101]?

**4-3** ¿Cuáles son los índices Miller de los planos de deslizamiento {110} en celdas unitarias CC que incluyen la dirección de deslizamiento [111]?

**4-4** Calcule la longitud del vector de Burgers de los materiales siguientes:

(a) Niobio CC

(b) Plata CCC

(c) Silicio cúbico de estructura tipo diamante

**4-5** Determine el espaciamento interplanar y la longitud del vector de Burgers para el deslizamiento en los sistemas de deslizamiento esperados en el aluminio CCC. Repita, suponiendo que el sistema de deslizamiento es un plano (110) y una dirección [111]. ¿Cuál es la razón entre los esfuerzos cortantes requeridos para el deslizamiento en estos dos sistemas? Suponga que  $k = 2$  en la ecuación 4-1.

**4-6** Determine el espaciamento interplanar y la longitud del vector de Burgers para el deslizamiento en el sistema de deslizamiento (110)/[111] en el tantalio CC. Repita, suponiendo que el sistema de deslizamiento es un sistema (111)/[110]. ¿Cuál es la razón entre los esfuerzos cortantes requeridos para el deslizamiento en ambos sistemas? Suponga que  $k = 2$  en la ecuación 4-1.

**4-7** ¿Cuántos gramos de aluminio, con una densidad de dislocaciones de  $10^{10}$  cm/cm<sup>3</sup>, se requieren para dar una longitud total de dislocaciones que llegue desde Nueva York hasta Los Ángeles (3000 millas)?

**4-8** La distancia de la Tierra a la Luna es de 240,000 millas. Si ésta fuera la longitud total de dislocaciones en un centímetro cúbico de material, ¿cuál sería su densidad de dislocaciones?

**4-9** Se desea introducir un átomo intersticial o un átomo sustitucional grande en la red cerca de una dislocación. ¿Entraría el átomo más fácilmente por encima o por debajo de la línea de dislocación que se muestra en la figura 4-5(b)? Explique.

**4-10** Compare las relaciones  $c/a$  para los metales HC siguientes; determine los procesos probables de deslizamientos en cada uno de ellos y estime el esfuerzo cortante resultante crítico aproximado. Explique. (Vea los datos del Apéndice A.)

- (a) zinc
- (b) magnesio
- (c) titanio
- (d) circonio
- (e) renio
- (f) berilio

**4-11** Un cristal único de un metal CCC está orientado de tal forma que la dirección [001] es paralela a un esfuerzo aplicado de 5000 psi. Calcule el esfuerzo cortante resultante que actúa sobre el plano de desliza-

miento (111) en las direcciones de deslizamiento [110], [011], y [101]. ¿Cuál de estos sistemas de deslizamiento se activará primero?

**4-12** Un monocristal de un metal CC está orientado de tal forma que la dirección [001] es paralela al esfuerzo aplicado. Si el esfuerzo cortante resultante crítico requerido para el deslizamiento es 12,000 psi, calcule la magnitud del esfuerzo aplicado requerido para que se inicie el deslizamiento en la dirección [111] y en los planos de deslizamiento (110), (011) y (101).

**4-13** Calcule el número de vacancias por centímetro cúbico que se esperan en el cobre a 1085°C (justo por debajo de la temperatura de fusión). La energía para la formación de vacancias es de 20,000 cal/mol.

**4-14** La fracción de puntos de red ocupada por vacancias en el aluminio sólido a 660°C es  $10^{-5}$ . ¿Cuál es la energía requerida para la creación de vacancias en el aluminio?

**4-15** La densidad de una muestra de paladio CCC es de 11.98 g/cm<sup>3</sup> y su parámetro de red es 3.8902 Å. Calcule

- (a) la fracción de los puntos de red que contengan vacancias y
- (b) el número total de vacancias en un centímetro cúbico de Pd.

**4-16** La densidad de una muestra de berilio HC es de 1.844 g/cm<sup>3</sup> y los parámetros de red son  $a_0 = 0.22858$  nm y  $c_0 = 0.35842$  nm. Calcule

- (a) la fracción de los puntos de red que contengan vacancias y
- (b) el número total de vacancias en un centímetro cúbico.

**4-17** El litio CC tiene un parámetro de red de  $3.5089 \times 10^{-8}$  cm y contiene una vacancia por cada 200 celdas unitarias. Calcule

- (a) el número de vacancias por centímetro cúbico y
- (b) la densidad del litio.

**4-18** El plomo CCC tiene un parámetro de red de 0.4949 nm y contiene una vacancia por cada 500 átomos. Calcule

- (a) la densidad y
- (b) el número de vacancias por gramo de Pb.

**4-19** Una aleación de niobio se produce al introducir átomos sustitucionales de tungsteno en la estructura CC; finalmente se produce una aleación con un parámetro de red de 0.32554 nm y una densidad de

11.95 g/cm<sup>3</sup>. Calcule la fracción de átomos de tungsteno dentro de la aleación.

**4-20** Se introducen átomos de estaño en la red de cobre CCC, produciendo una aleación con un parámetro de red de  $3.7589 \times 10^{-8}$  cm y una densidad de 8.772 g/cm<sup>3</sup>. Calcule el porcentaje atómico de estaño presente en la aleación.

**4-21** Remplazamos con tantalio el 7.5% atómico de los átomos de cromo en su red CC. La difracción de los rayos X muestra que el parámetro de red es 0.29158 nm. Calcule la densidad de la aleación.

**4-22** Suponga que introducimos un átomo de carbono por cada 100 átomos de hierro en una posición intersticial en el hierro CC, lo que nos da un parámetro de red de 0.2867 nm. Para la aleación Fe-C, encuentre

(a) la densidad y

(b) el factor de empaquetamiento.

**4-23** La densidad del hierro CC es 7.882 g/cm<sup>3</sup> y el parámetro de red 0.2866 nm cuando se introducen átomos de hidrógeno en posiciones intersticiales. Calcule

(a) la fracción atómica de los átomos de hidrógeno y

(b) el número de celdas unitarias en promedio que contienen átomos de hidrógeno.

**4-24** Suponga que está presente un defecto Schottky en cada diez celdas unitarias de MgO. El MgO tiene la estructura cristalina del cloruro de sodio y un parámetro de red de 0.396 nm. Calcule

(a) el número de vacancias de anión por cm<sup>3</sup> y

(b) la densidad del material cerámico.

**4-25** El ZnS tiene la estructura de la blenda de zinc. Si la densidad es 3.02 g/cm<sup>3</sup> y el parámetro de red es de 0.39583 nm, determine el número de defectos Schottky

(a) por cada celda unitaria y

(b) por centímetro cúbico.

**4-26** Suponga que introducimos los siguientes defectos puntuales. ¿Qué otros cambios en cada una de las estructuras pudieran resultar necesarios para mantener un equilibrio de carga? Explique.

(a) Reemplazo de iones Mg<sup>2+</sup> en lugar de átomos de itrio en Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

(b) Reemplazo de iones Fe<sup>3+</sup> en lugar de iones de magnesio en MgO.

(c) Reemplazo de iones Li<sup>+</sup> en lugar de iones de magnesio en el MgO.

(d) Reemplazo de iones Fe<sup>2+</sup> por los iones de sodio en el NaCl.

**4-27** La resistencia del titanio es 65,000 psi cuando el tamaño de grano es de  $17 \times 10^{-6}$  m y de 82,000 psi cuando el tamaño de grano es de  $0.8 \times 10^{-6}$  m. Determine

(a) las constantes de la ecuación de Hall-Petch y

(b) la resistencia del titanio cuando se reduce el tamaño de grano a  $0.2 \times 10^{-6}$  m.

**4-28** Una aleación de cobre y zinc tiene las propiedades siguientes:

Diámetros de grano (mm)	Resistencia (MPa)
0.015	170 MPa
0.025	158 MPa
0.035	151 MPa
0.050	145 MPa

Determine

(a) las constantes de la ecuación de Hall-Petch y

(b) el tamaño de grano requerido para obtener una resistencia de 200 MPa.

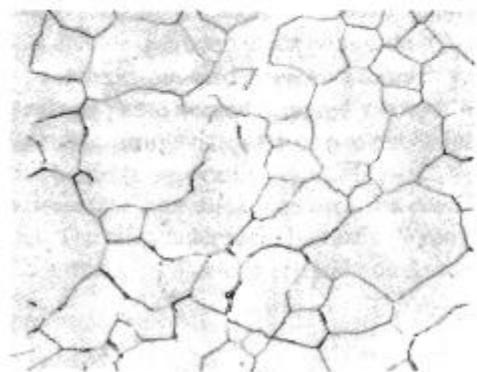
**4-29** Para un número de tamaño de grano ASTM de 8, calcule el número de granos por pulgada cuadrada

(a) a una amplificación de 100 ×

(b) sin amplificación.

**4-30** Determine el número de tamaño de grano ASTM si se observan 20 granos por pulgada cuadrada a una amplificación de 400.

**4-31** Determine el número de tamaño de grano ASTM si se observan 25 granos por pulgada cuadrada a una amplificación de 50.



**FIGURA 4-20** Microestructura del hierro, para el problema 4-32 ( $\times 500$ ). (De *Metals Handbook*, Vol. 9, Novena Ed., American Society for Metals, 1985.)

4-32 Determine el número de tamaño de grano ASTM para los materiales en

- (a) figura 4-16
- (b) figura 4-20
- (c) figura 1-9(c).

4-33 El ángulo  $\theta$  de un borde inclinado está dado por  $\sin(\theta/2) = b/2D$  (figura 4-17). Verifique lo correcto de esta ecuación.

4-34 Calcule el ángulo  $\theta$  de un borde granular de ángulo pequeño en el aluminio CCC cuando las dislocaciones están separadas 5000 Å. (Vea el problema 4-33.)

4-35 Para el hierro CC, calcule la distancia promedio entre dislocaciones en un borde de grano de ángulo pequeño inclinado  $0.50^\circ$ . (Vea el problema 4-33.)

4-36 Nuestro análisis de la ley de Schmid se ocupó de monocristales de un metal. Analice el deslizamiento y la ley de Schmid en un material policristalino. ¿Qué

podría ocurrir conforme el tamaño de grano se hace cada vez más pequeño?

### ⚙ Problemas de diseño

4-37 La densidad del aluminio puro, calculado a partir de datos cristalográficos se espera que sea de 2.69955 g/cm<sup>3</sup>.

(a) Diseñe una aleación de aluminio que tenga una densidad de 2.6450 g/cm<sup>3</sup>.

(b) Diseñe una aleación de aluminio que tenga una densidad de 2.7450 g/cm<sup>3</sup>.

4-38 Se desea obtener una placa de metal con buena soldabilidad. Durante el proceso de unión, el metal adyacente a la soldadura se calienta casi a la temperatura de fusión y, dependiendo de los parámetros de la soldadura, pudiera conservarse caliente durante algún tiempo. Diseñe una aleación que minimice la pérdida de resistencia en esta "área afectada por el calor" durante el proceso de soldadura.

## Movimiento de los átomos en los materiales

### 5-1 Introducción

La **difusión** es el movimiento de los átomos en un material. Los átomos se mueven de una manera predecible, tratando de eliminar diferencias de concentración y de producir una composición homogénea y uniforme. El movimiento de los átomos es necesario para muchos de los tratamientos que llevamos a cabo sobre los materiales. Es necesaria la difusión para el tratamiento térmico de los metales, la manufactura de los cerámicos, la solidificación de los materiales, la fabricación de transistores y celdas solares y la conductividad eléctrica de muchos cerámicos. Si comprendemos cómo se transfiere la masa mediante la difusión, podremos diseñar técnicas de procesamiento de materiales, dispositivos a prueba de fugas, e incluso equipo de purificación.

En este capítulo, nos concentraremos en comprender cómo ocurre la difusión en los materiales sólidos. Además, analizaremos varios ejemplos del uso de la difusión como ayuda en la selección de materiales y en el diseño de procesos de manufactura.

### 5-2 Estabilidad de los átomos

En el capítulo cuatro se mostró que se pueden introducir imperfecciones en la red de un cristal. Sin embargo, estas imperfecciones, e incluso los átomos que ocupan los puntos de red, no son estables ni están en reposo. En vez de ello, los átomos poseen algo de energía térmica y se moverán. Por ejemplo, un átomo puede trasladarse de un punto normal de la red y ocupar una vacancia cercana. Los átomos pueden moverse de un sitio intersticial a otro y pueden saltar a través de un borde de grano, haciendo que dicho borde se mueva.

La capacidad de los átomos y de las imperfecciones para difundirse aumenta conforme se aumenta la temperatura, o los átomos incrementan su energía térmica. La razón de movimiento está relacionada con la temperatura o energía térmica, mediante la ecuación de Arrhenius:

$$\text{Razón de movimiento} = c_0 \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right), \quad (5-1)$$

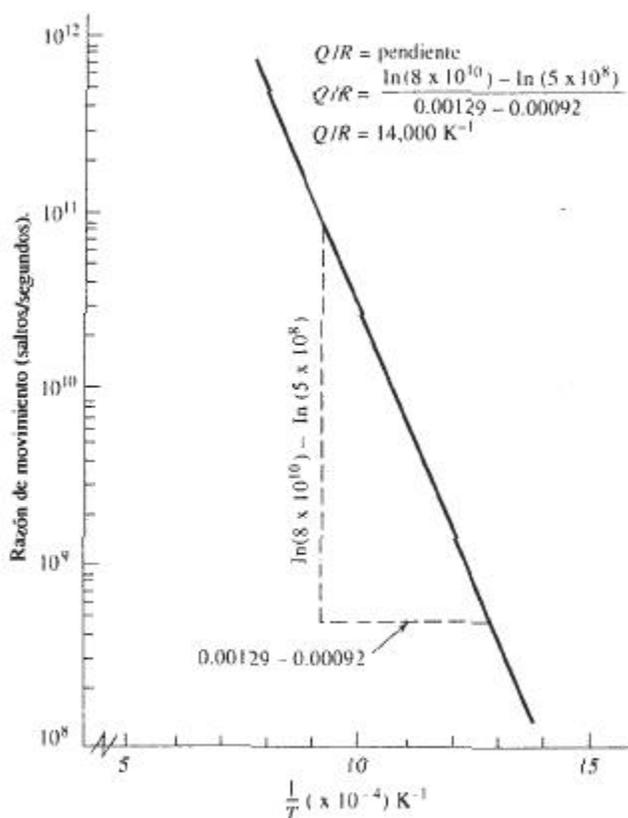
donde  $c_0$  es una constante,  $R$  es la constante de los gases (1.987 cal/mol · K),  $T$  es la temperatura absoluta (K) y  $Q$  la **energía de activación** (cal/mol) requerida para que una imperfección se mueva. Esta ecuación se deduce a partir de un análisis estadístico sobre la probabilidad de

que los átomos tengan la energía adicional  $Q$  necesaria para moverse. La razón de movimiento está relacionada con el número de átomos que se mueven.

Podemos volver a escribir la ecuación al aplicar el logaritmo natural en ambos términos:

$$\ln(\text{razón de movimiento}) = \ln(c_0) - \frac{Q}{RT} \quad (5-2)$$

Si trazamos el  $\ln(\text{razón de movimiento})$  correspondiente a alguna reacción, en función de  $1/T$  (figura 5-1), la pendiente de la curva será  $-Q/R$  y, en consecuencia, se podrá calcular  $Q$ . La constante  $c_0$  es el valor de la intersección de la curva donde  $1/T$  es igual a cero.



**FIGURA 5-1** Gráfica de la ecuación de Arrhenius considerando  $\ln(\text{razón de movimiento})$  en función de  $1/T$ , la cual puede ser utilizada para determinar la energía de activación requerida para una reacción.

### EJEMPLO 5-1

Suponga que se determina que los átomos intersticiales a  $500^\circ\text{C}$  se mueven de un sitio a otro a razón de  $5 \times 10^8$  saltos/s y a  $8 \times 10^{10}$  saltos/s a  $800^\circ\text{C}$ . Calcule la energía de activación  $Q$  del proceso.

### SOLUCIÓN

La figura 5-1 representa la gráfica de  $\ln$  (razón de movimiento) en función de  $1/T$ ; como se puede calcular en la figura, la pendiente de esta curva, como se puede calcular en la figura, da  $Q/R = 14,000 \text{ K}^{-1}$ , es decir  $Q = 27,880 \text{ cal/mol}$ . De manera alterna, se pueden resolver las dos ecuaciones simultáneas:

$$5 \times 10^8 = c_0 \exp \left[ \frac{-Q}{(1.987)(500 + 273)} \right] = c_0 \exp (-0.000651Q)$$

$$8 \times 10^{10} = c_0 \exp \left[ \frac{-Q}{(1.987)(800 + 273)} \right] = c_0 \exp (-0.000469Q)$$

En vista de que

$$c_0 = \frac{5 \times 10^8}{\exp (-0.000651Q)}$$

entonces

$$8 \times 10^{10} = \frac{(5 \times 10^8) \exp (-0.000469Q)}{\exp (-0.000651Q)}$$

$$160 = \exp [(0.000651 - 0.000469)Q] = \exp (0.000182Q)$$

$$\ln (160) = 5.075 = 0.000182Q$$

$$Q = \frac{5.075}{0.000182} = 27,880 \text{ cal/mol}$$

### 5-3 Mecanismos de difusión

Incluso en materiales sólidos absolutamente puros, los átomos se mueven de una posición en la red a otra. Este proceso, que se conoce como **autodifusión**, puede detectarse utilizando trazadores radioactivos. Suponga que se introduce un isótopo radioactivo del oro ( $\text{Au}^{198}$ ) en la superficie de oro normal ( $\text{Au}^{197}$ ). Después de un periodo, los átomos radioactivos se habrán movido hacia el interior del oro normal y, finalmente, los átomos radioactivos se habrán distribuido de manera uniforme en toda la muestra de oro. Aunque la autodifusión ocurre de manera continua en todos los materiales, su efecto en el comportamiento del material no es importante.

También ocurre la difusión de átomos distintos en los materiales (figura 5-2). Si se suelda una lámina de níquel a una lámina de cobre, los átomos de níquel gradualmente se difunden en el cobre y los de cobre emigran hacia el níquel. De nuevo, al transcurrir el tiempo los átomos de níquel y cobre quedarán uniformemente distribuidos.

Hay dos mecanismos importantes mediante los cuales se difunden los átomos (figura 5-3).

**Difusión por vacancia** En la autodifusión y en la difusión de átomos sustitucionales, un átomo abandona su sitio en la red para llenar una vacancia cercana (creando así una nueva vacancia en su lugar original en la red). Conforme continúa la difusión, se tiene un flujo de vacancias y átomos en sentidos opuestos conocido como **difusión por vacancia**. El número de vacancias, que se incrementa al aumentar la temperatura, ayuda a determinar la extensión tanto de la autodifusión como de la difusión de los átomos sustitucionales.