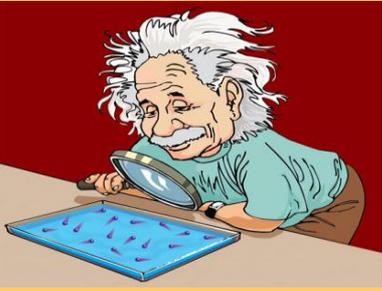


UNIVERSIDAD NACIONAL DE TRUJILLO

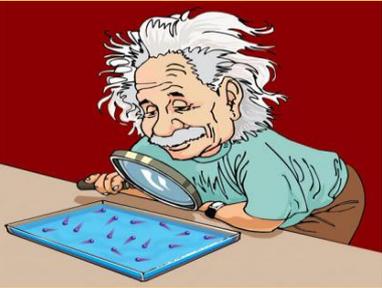
CURSO MATERIALES DE INGENIERIA

Prof. Dr. W. Loyola
www.fclasses.wix.com/capacita

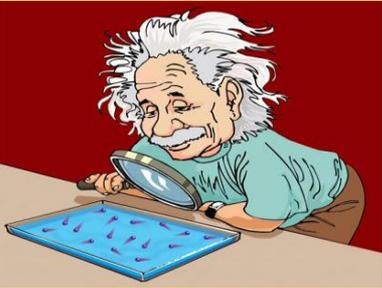


CONTENIDO

- Introducción
- Organización atómica
- Estructura de los sólidos cristalinos
 - Celda unitaria.
 - Estructura cristalina cúbica centrada en las caras.



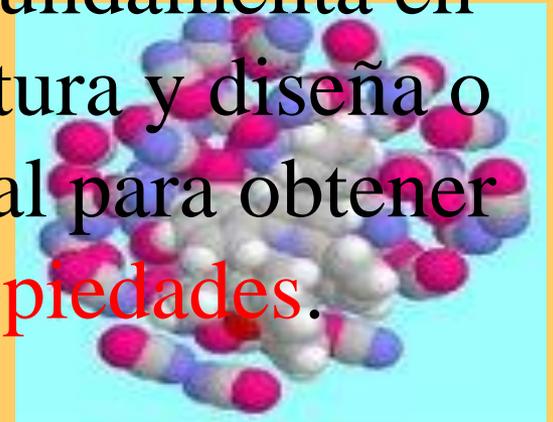
- Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo.
- Estructura cristalina hexagonal compacta.

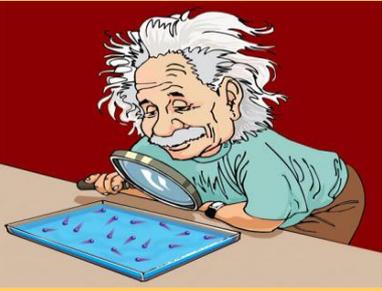


INTRODUCCION

A. CIENCIA E INGENIERIA DE MATERIALES: implica investigar la relación entre estructura y las propiedades de los materiales.

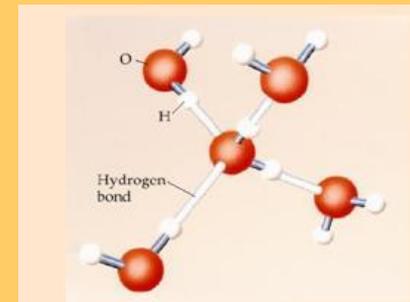
B. Ingeniería de los materiales: se fundamenta en las relaciones propiedades – estructura y diseña o proyecta la **estructura** de un material para obtener un conjunto predeterminado de **propiedades**.

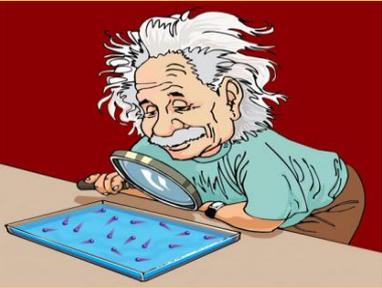




Estructura subatómica: implica a los electrones dentro de los átomos individuales y a las interacciones en su núcleo.

A nivel atómico, la estructura se refiere a la organización de los átomos o moléculas entre sí.



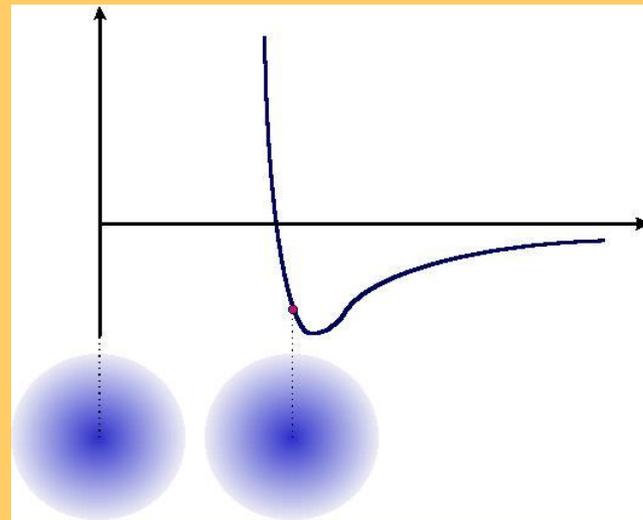
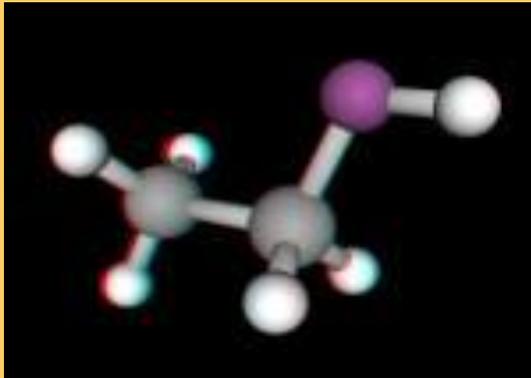


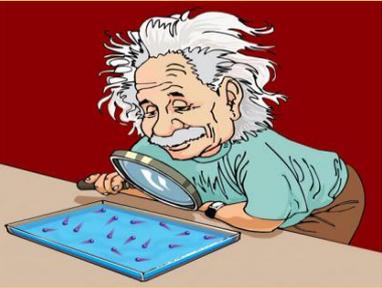
PROPIEDADES IMPORTANTES DE LOS MATERIALES SOLIDOS

1. **Propiedades mecánicas** ($F \rightarrow \varepsilon$)
2. **Propiedades eléctricas** (Conduct., cte eléctrica).
3. **Propiedades magnéticas** (respuesta frente a un campo magnético).
4. **Propiedades térmicas** (capacidad calorífica y conductividad)
5. **Propiedades ópticas** (el estímulo de la radiación electromagnética)



6. **Propiedades químicas** (reactividad química de un material).





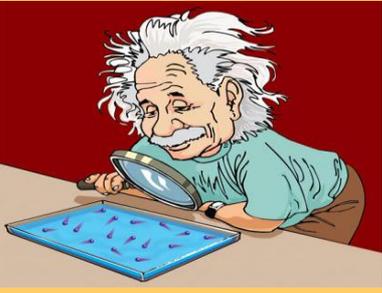
CLASIFICACION DE LOS MATERIALES

METALES:

- Tienen un gran número de electrones deslocalizados que no pertenecen a ningún átomo.
- Conducen el calor y la electricidad y son opacos a la luz visible.

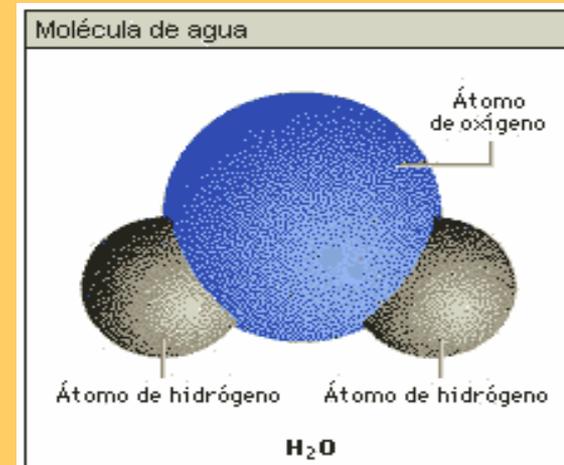
POLIMEROS:

- Van desde los plásticos al caucho
- Se trata de compuestos orgánicos basados en el C, H y otros elementos no metálicos, gran longitud de EM.

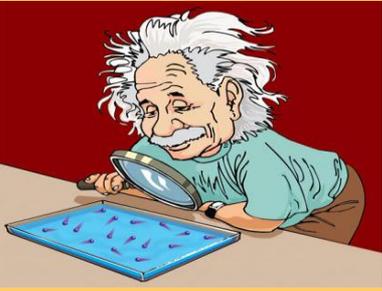


CERAMICOS: constituidos por metales y no metales (óxidos nitruros y carburos), incluyen minerales de arcilla, cemento y vidrio.

- Son aislantes eléctricos y térmicos, a elevada T y en ambientes agresivos son más resistentes que los metales y los polímeros.
- Son duros y más frágiles.



SEMICONDUCTORES



- Tienen propiedades eléctricas intermedias entre los conductores y los aislantes eléctricos.
- Los semiconductores **posibilitan la fabricación de los circuitos integrados que han revolucionado las industrias eléctricas y de los ordenadores.**

ORGANIZACIÓN ATÓMICA



El **arreglo atómico** juega un papel importante en la determinación de la microestructura y en el comportamiento de un material sólido. En el **Al** el **arreglo atómico** proporciona **buena ductilidad**, en el **Fe** 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 de cargas eléctricas permanente dentro del material.



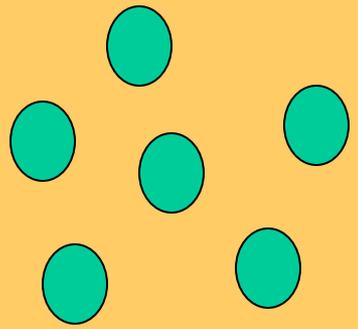
OBJETIVO

•Comprender como las imperfecciones en el arreglo atómico permiten entender tanto la **DEFORMACION** como el **ENDURECIMIENTO** de muchos materiales sólidos.



ORDEN DE CORTO ALCANCE COMPARADO CON EL DE LARGO ALCANCE

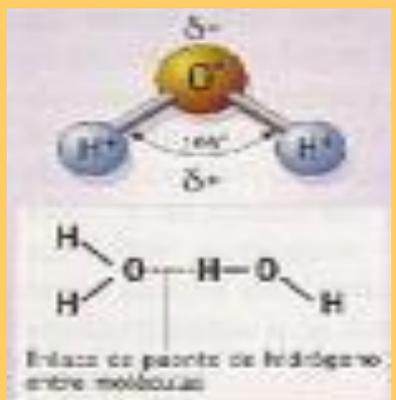
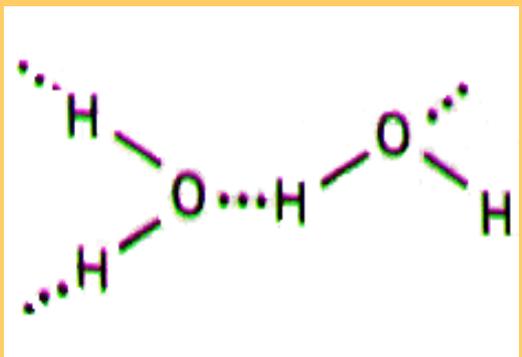
A) SIN ORDEN



Ejm. Ar

B) ORDEN DE CORTO ALCANCE

SI EL ARREGLO ESPECIAL DE LOS ATOMOS SE EXTIENDE SOLO A LOS VECINOS MAS CERCANOS DE DICHO ATOMO.

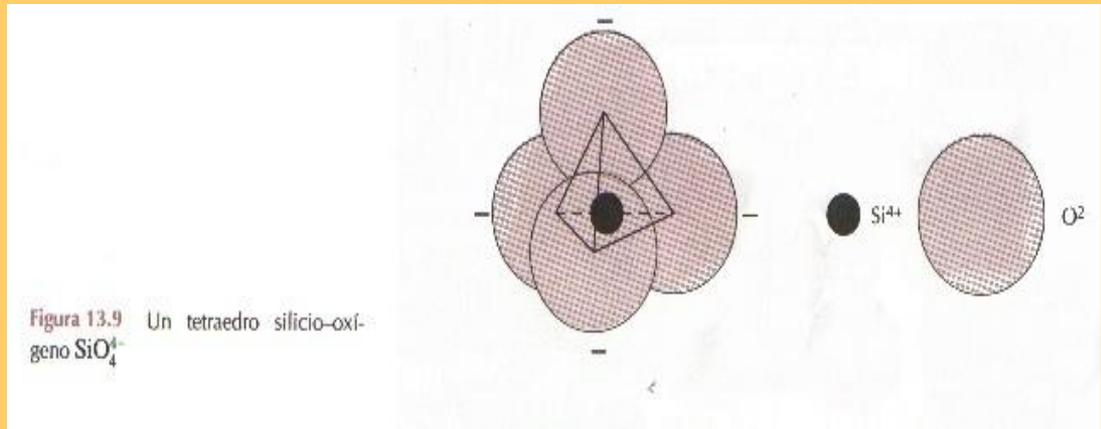


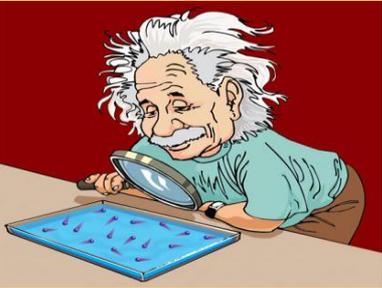


Cada molécula de agua en fase vapor tiene un orden de corto alcance debido a los enlaces covalentes entre los átomos de hidrógeno y oxígeno (forman ángulo de $104,5^\circ$ entre los enlaces). Sin embargo, las moléculas de agua no tienen una organización especial entre si.

EL SILICIO FORMA 4 ENLACES COVALENTES.

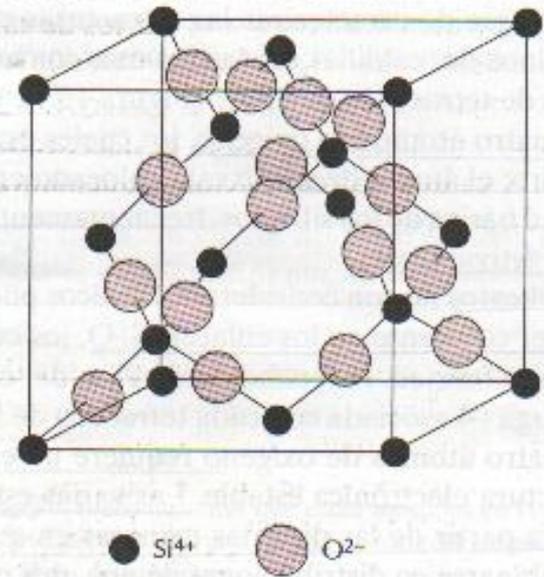
COMO RESULTADO SE TIENE UN ORDEN DE CORTO ALCANCE. LAS UNIDADES TETRAEDRICAS SIN EMBARGO, PUEDEN ESTAR UNIDAS ENTRE SI DE UNA MANERA ALEATORIA.

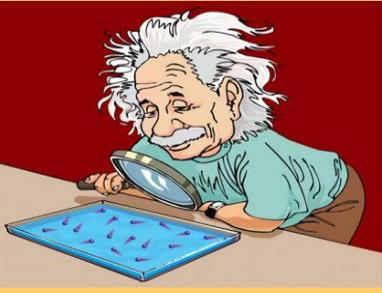




QUIMICAMENTE EL SILICATO MAS SENCILLO ES EL SiO_2 . Estructuralmente es una red tridimensional que se genera cuando todos los átomos de oxígeno del tetraedro son compartidos con tetraedros adyacentes. Por tanto el material es electricamente neutro.

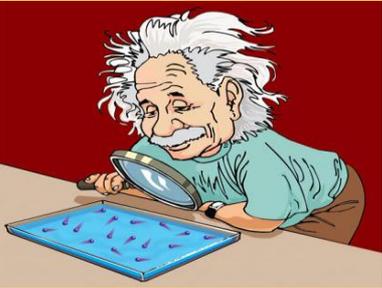
Figura 13.10 Distribución de los átomos de silicio y oxígeno en una celdilla unidad de cristobalita, un polimorfo del SiO_2 .





Los **polimeros** también despliegan arreglos atómicos de corto alcance que se parecen mucho a la estructura del vidrio de sílice.

El **polietileno** está compuesto por **cadena de átomos de carbono**, con **2 átomos de H** unidos a cada carbono dado que el **carbono tiene una valencia de 4** y que los **átomos de C e H** tienen **enlaces covalentes**, de nuevo se produce una **estructura tetraédrica**. Las **estructuras tetraédricas** pueden unirse de manera aleatoria para producir **cadenas poliméricas**.



CERAMICOS Y POLIMEROS



ORDEN DE CORTO ALCANCE



MATERIALES AMORFOS



ORDEN DE LARGO ALCANCE

METALES, SEMICONDUCTORES MUCHOS MATERIALES CERAMICOS Y ALGUNOS POLIMEROS

TIENEN

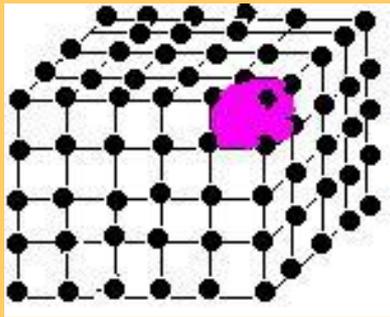
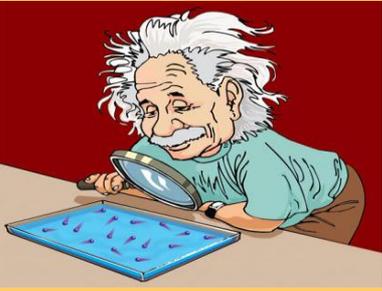
ESTRUCTURA CRISTALINA

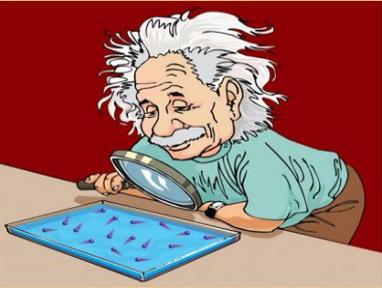
(**átomos** muestran orden de corto y largo alcance)

Forman un patron en forma de **rejilla o red cristalina** (conjunto de puntos, localizados en las esquinas, centro, o caras de la celda unitaria)

Conocido como

PUNTOS DE RED (difiere de un material a otro, depende del tamaño de los átomos y del tipo de enlace entre ellos.)





SUB DIVISION DE LA RED



CELDA UNITARIA

(Al apilar celdas unitarias identicas se puede construir la red)



SE IDENTIFICAN **14** TIPOS DE CELDAS UNITARIAS O REDES DE BRAVAIS, AGRUPADAS EN **7** SISTEMAS CRISTALINOS

ESTRUCTURAS CRISTALINAS DE LOS METALES

a) ESTRUCTURA CRISTALINA CUBICA CENTRADA EN LAS CARAS

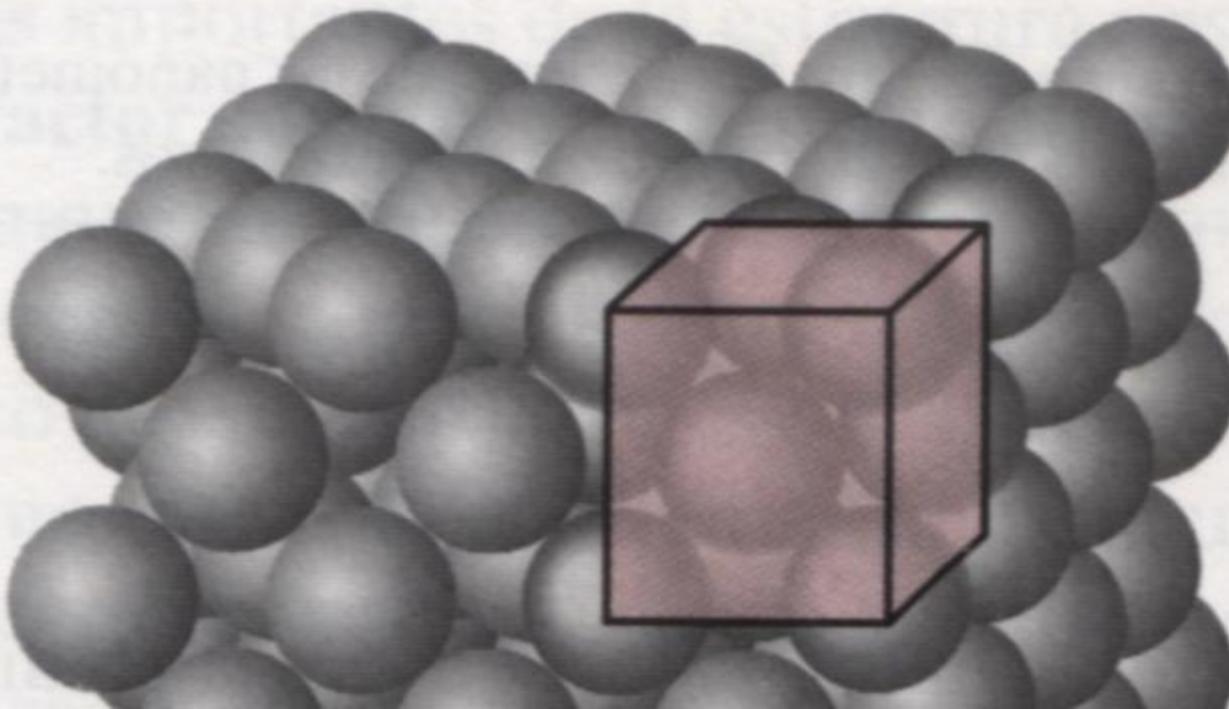
(a)

REJICULO DE ESFERAS RIGIDAS

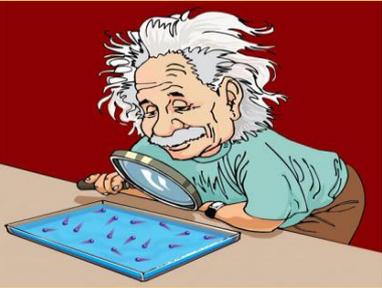
UN ATOMO DEL VERTICE ES
COMPARTIDO CON 8 CELDAS
CUBICAS, MIENTRAS QUE LOS
ATOMOS CENTRADOS EN LAS CARAS
SON COMOPARTIDOS CON DOS
CELAS.

(b)

**CENTROS DE LOS ATOMOS MEDIANTE
PEQUEÑOS CIRCULOS**



SECCION
CRISTAL
FORMADA
MUCHAS CELAS
UNITARIAS CUBICAS



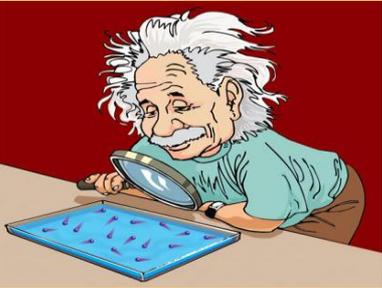
La **estructura cúbica centrada en las caras (FCC)**: cristalizan en esta estructura el Cobre, aluminio, plata y oro.

Las esferas o cationes están en contacto entre sí a lo largo de la diagonal. La longitud de la arista del cubo a y el radio atómico R se relacionan mediante :

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

CARACTERÍSTICAS DE LA ESTRUCTURA CRISTALINA:

1. NÚMERO DE COORDINACIÓN (**NC**)
2. FACTOR DE EMPAQUETAMIENTO ATÓMICO (**FEA**)

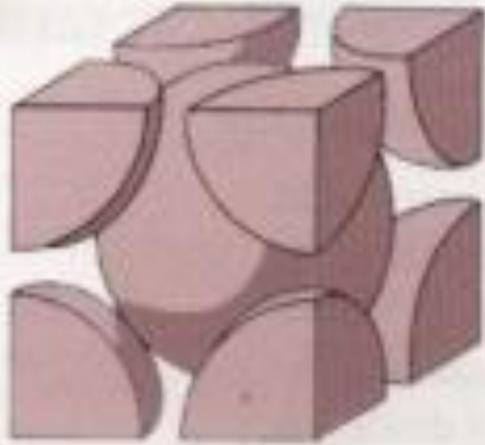


EN LA ESTRUCTURA (FCC) EL NUMERO DE COORDINACION ES 12, EL ATOMO CENTRADO EN LA CARA FRONTAL TIENE 4 ATOMOS VECINOS CORRESPONDIENTES A LOS VÉRTICES, 4 ATOMOS VECINOS CORRESPONDIENTES A LOS ATOMOS CENTRADOS EN LAS CARAS Y QUE ESTAN EN CONTACTO CON EL POR DETRÁS, Y 4 ÁTOMOS VECINOS EQUIVALENTES A ESTOS ÚLTIMOS PERO QUE PERTENECEN A LA SIGUIENTE CELDA UNITARIA.

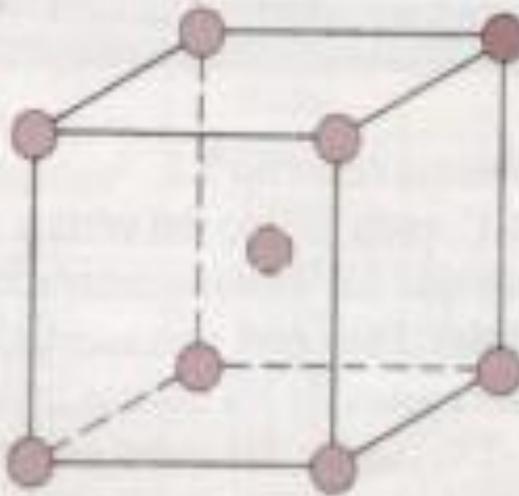
El factor de empaquetamiento atómico (FEA), para la estructura FCC es 0,74, máximo empaq. Posible para esferas rígidas del mismo tamaño.

$$FEA = \frac{\text{Volumen de átomos en una celda unitaria}}{\text{Volumen total de la celda unitaria}}$$

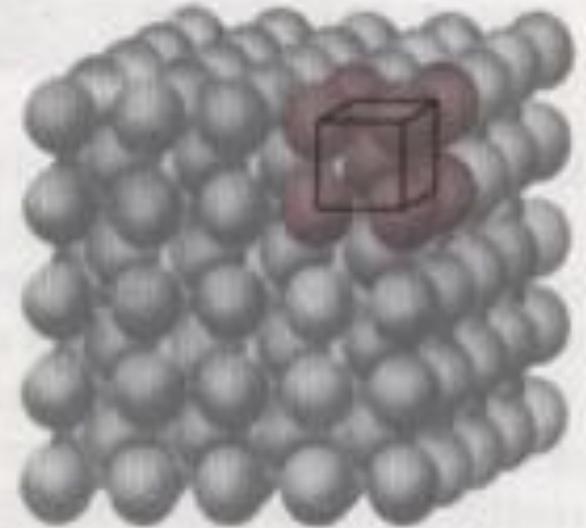
b) ESTRUCTURA CRISTALINA CUBICA CENTRADA EN EL CUERPO (BCC)



(a)

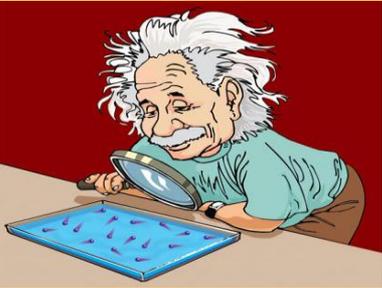


(b)



(c)

Figura 3.2 Estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo: (a) representación de la celdilla unidad mediante esferas rígidas, (b) celdilla unidad representada mediante esferas reducidas y (c) agregado de muchos átomos. (Figura c de W. G. Moffatt, G. W. Pearsall y J. Wulfi, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. 1, Structure, p. 51, Copyright 1964 John Wiley & Sons, Nueva York. Reproducida con permiso de John Wiley & Sons, Inc.)

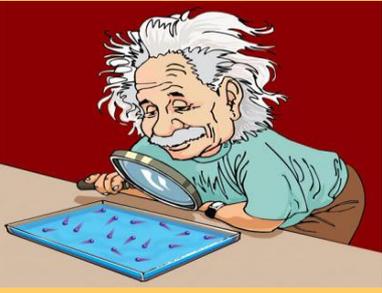


Los **átomos del centro y de los vértices** se tocan mutuamente **a lo largo de las diagonales del cubo** y la **longitud a de la arista de la celda y el radio atómico R** se relacionan mediante:

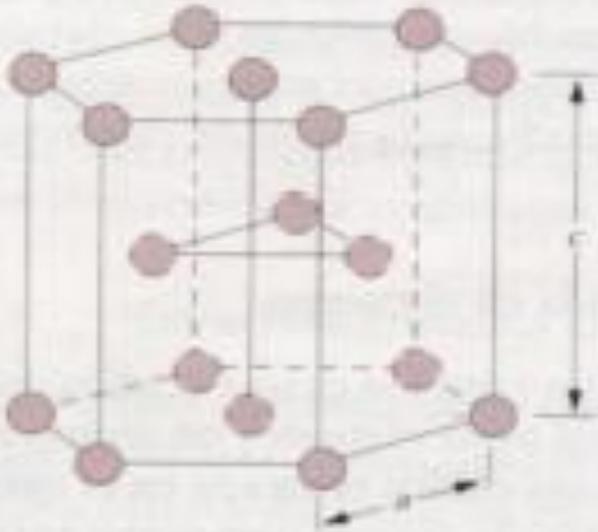
$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}}$$

El **número de coordinación (NC)** de la estructura **BCC** es **8**, cada átomo **situado en el centro de la celda está rodeado por 8 átomos situados en los vértices.**

El **FEA** es 0,68.



c) ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL COMPACTA (HC)



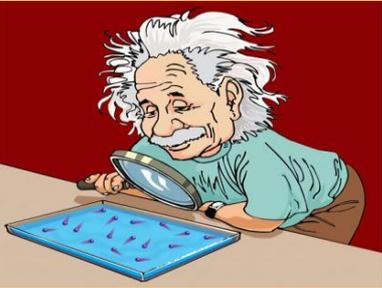
(a)



(b)

LAS BASES SON HEXAGONOS REGULARES

Figura 3.3 Estructura cristalina hexagonal compacta: (a) representación de la celdilla unidad mediante esferas reducidas (a y c representan las aristas corta y larga, respectivamente) y (b) un agregado de muchos átomos. (Figura b de W. G. Moffatt, G. W. Pearsall y J. Wulff, *The Structure and Properties of Materials*, Vol. 1, Structure, p. 51, Copyright 1964 John Wiley & Sons, Nueva York. Reproducida con permiso de John Wiley & Sons, Inc.)



CADA CELDA UNIATARIA EQUIVALE A 6 ÁTOMOS, CADA ATOMO SITUADO EN LOS 12 VERTICES SUPERIORES E INFERIORES CONTRIBUYE CON $1/6$ PARTE, LOS 2 ATOMOS DEL CENTRO DE LOS HEXÁGONOS CONTRIBUYEN CON $1/2$ Y LOS 3 ATOMOS DEL PLANO CENTRAL CONTRIBUYEN TOTALMENTE.

El **NC** y el **FEA** son los mismos que la para la estructura FCC, es decir **12** y **0,74**, respectivamente.

SISTEMAS CRISTALINOS

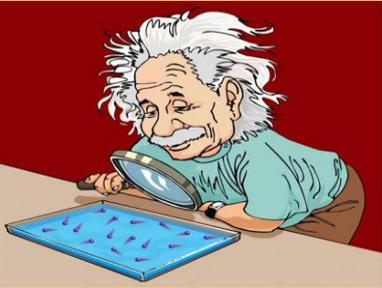
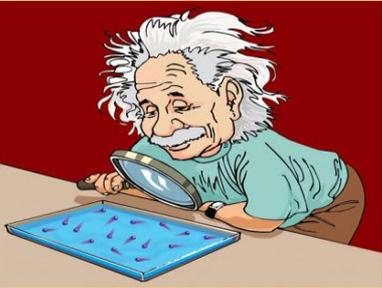


Tabla 3.2 Relaciones entre parámetros de red y las geometrías de las celdillas unidad de los siete sistemas cristalinos

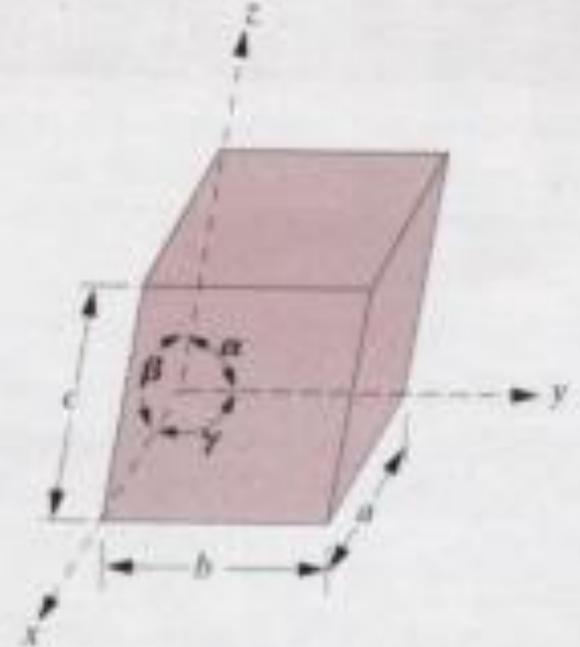
Sistema cristalino	Relación axial	Ángulos interaxiales	Geometría de la celdilla unidad
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Romboédrico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Ortorrómbico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Triclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

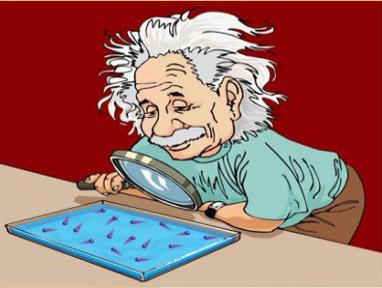


La geometría de la celda unitaria se define en función de 6 parámetros: la longitud de 3 aristas **a, b y c** y los tres ángulos interaxiales **α , β , γ** . Estos ángulos se denominan **PARAMETROS DE RED** de una estructura cristalina.

LA ESTRUCTURA DE LOS SÓLIDOS CRISTALINOS

Figura 3.4 Celdilla unidad con los ejes de coordenadas x , y y z mostrando las longitudes de las aristas (a , b y c) y los ángulos interaxiales (α , β y γ).





Una dirección cristalográfica se define por una línea entre dos puntos o por un vector.

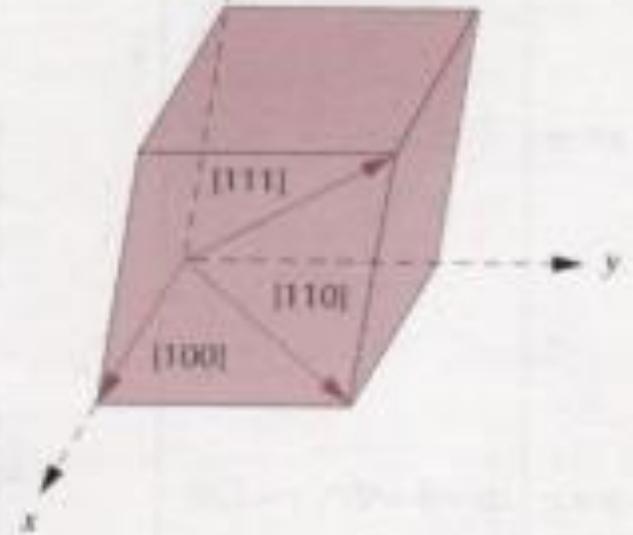
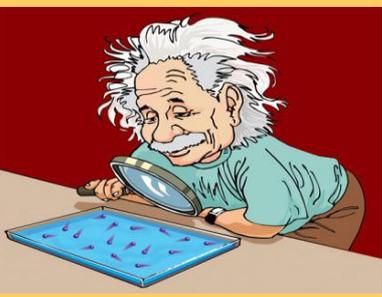
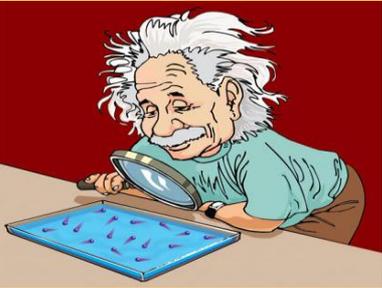


Figura 3.5 Las direcciones [100], [110] y [111] en una celdilla unidad.

ETAPAS PARA DETERMINAR LOS INDICES DE LAS TRES DIRECCIONES



1. En el origen de coordenadas del sistema se traza un vector de longitud conveniente. Todo vector se puede trasladar a través de la red cristalina sin alterarse, si se mantiene el paralelismo.
2. Se determina la longitud del vector proyección en cada uno de los tres ejes, en función de las dimensiones a, b y c de la celda unitaria.
3. Estos 3 números se multiplican o se dividen por un factor común para reducirlos al vector entero menor.

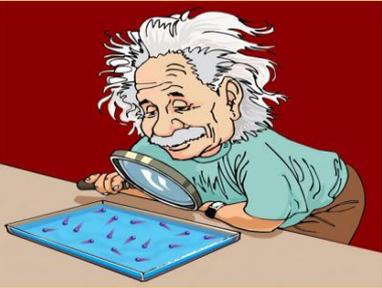


4. Los 3 índices, sin separación, se encierran en corchetes **[u v w]**.

* Los números enteros u , v y w corresponden a las proyecciones reducidas a lo largo de los ejes x , y y z , respectivamente.

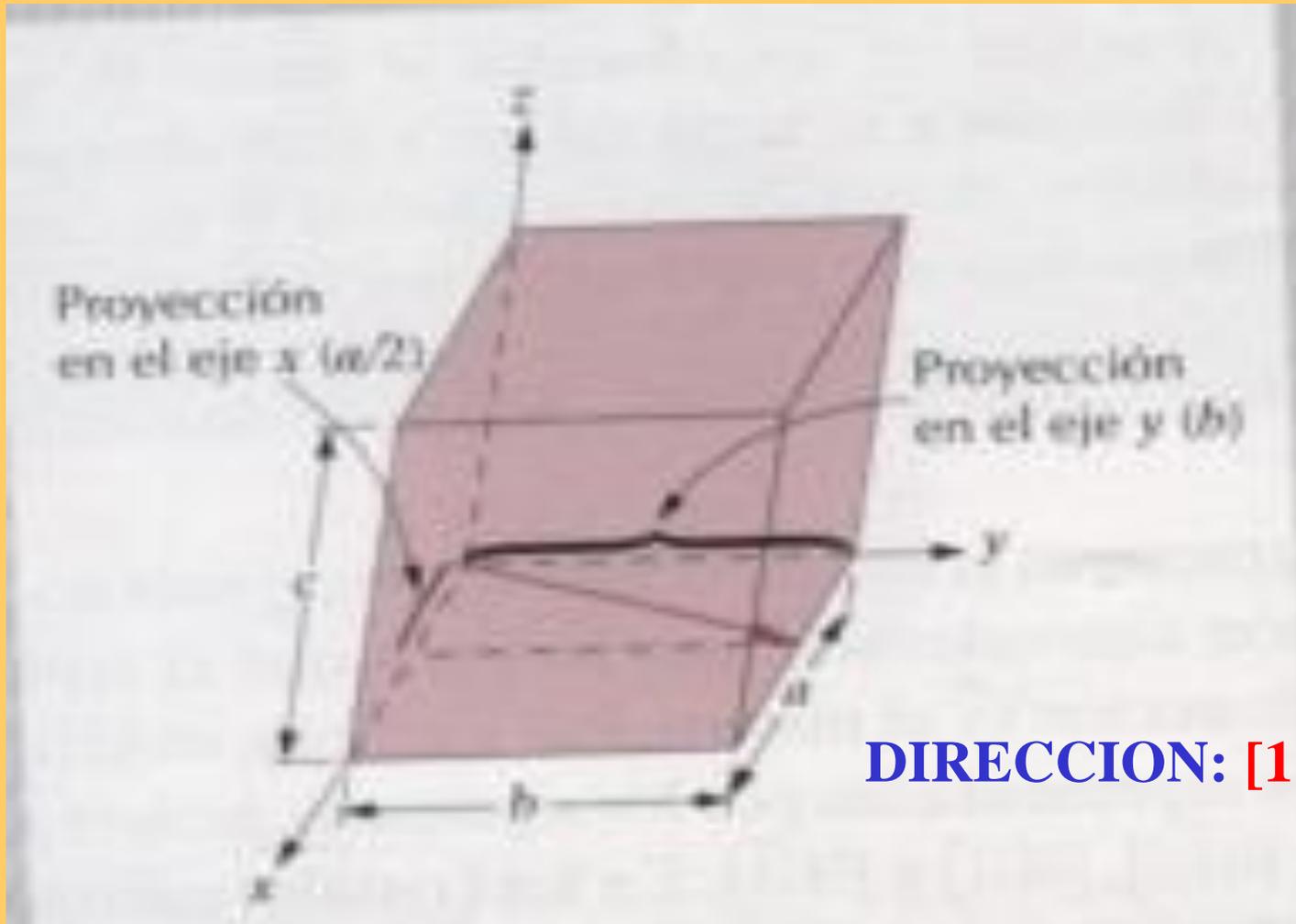
* Para $c \neq u$ de los 3 ejes existen coordenadas positivas y negativas.

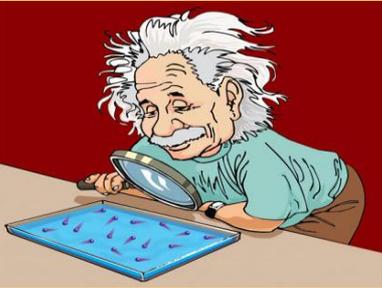
* Los índices negativos también son posibles y se representan mediante una línea sobre el índice.



Ejemplo:

1. Determinar los índices de la dirección mostrada en la Fig. adjunta.

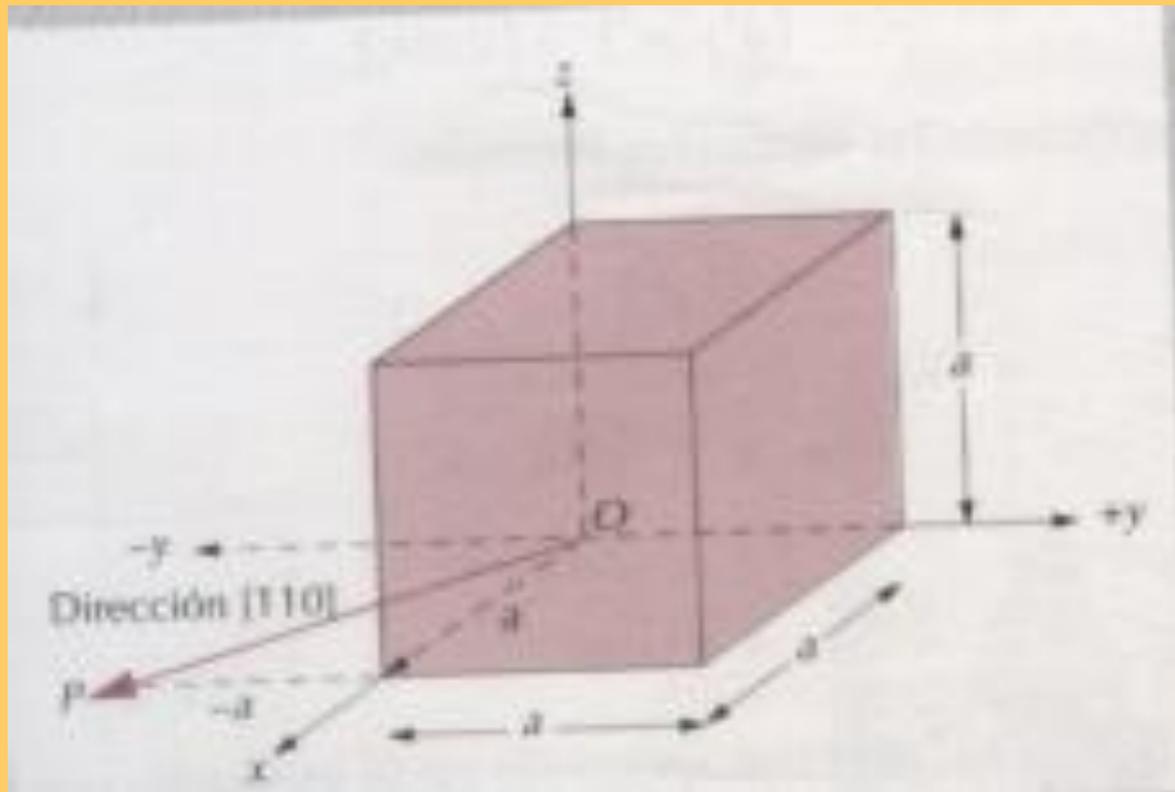




2. Dibujar una dirección $[1 \bar{1} 0]$ dentro de una celda unitaria cúbica.

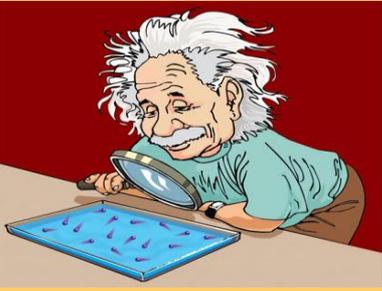
Solucion:

1. SE DIBUJA UNA CELDA UNITARIA ADECUADA. EL PUNTO O ESTA LOCALIZADO EN UN VERTICE DEL CUBO.



2. LAS PROYECCIONES DE LA DIRECCIÓN $[1 \bar{1} 0]$ A LO LARGO DE LOS EJES x, y, z SON a, -a y 0(a), RESPECTIVAMENTE.

EQUIVALENCIA

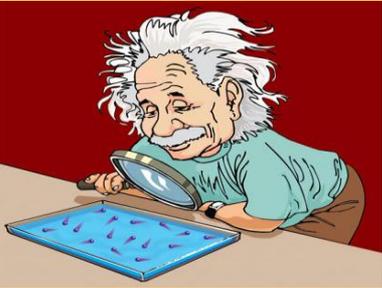


En algunas estructuras cristalinas, varias direcciones no paralelas con diferentes índices son equivalentes; esto significa que el espaciado atómico a lo largo de cada dirección es el mismo.

Por ejemplo, en cristales cúbicos todas las direcciones representadas por los siguientes índices son equivalentes.

$[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$, $[001]$ y $[00\bar{1}]$

En los cristales cúbicos todas las direcciones que tienen los mismos índices, sin tener en cuenta orden o signo, son equivalentes; por ejem.



$$[123] \text{ y } [\bar{2}\bar{1}\bar{3}]$$

Generalmente esta condición no se cumple en otros sistemas cristalinos.

Por ejm., para cristales con simetría tetragonal las direcciones $[100]$ y $[001]$ son equivalentes; mientras que no lo son las $[100]$ y $[001]$.

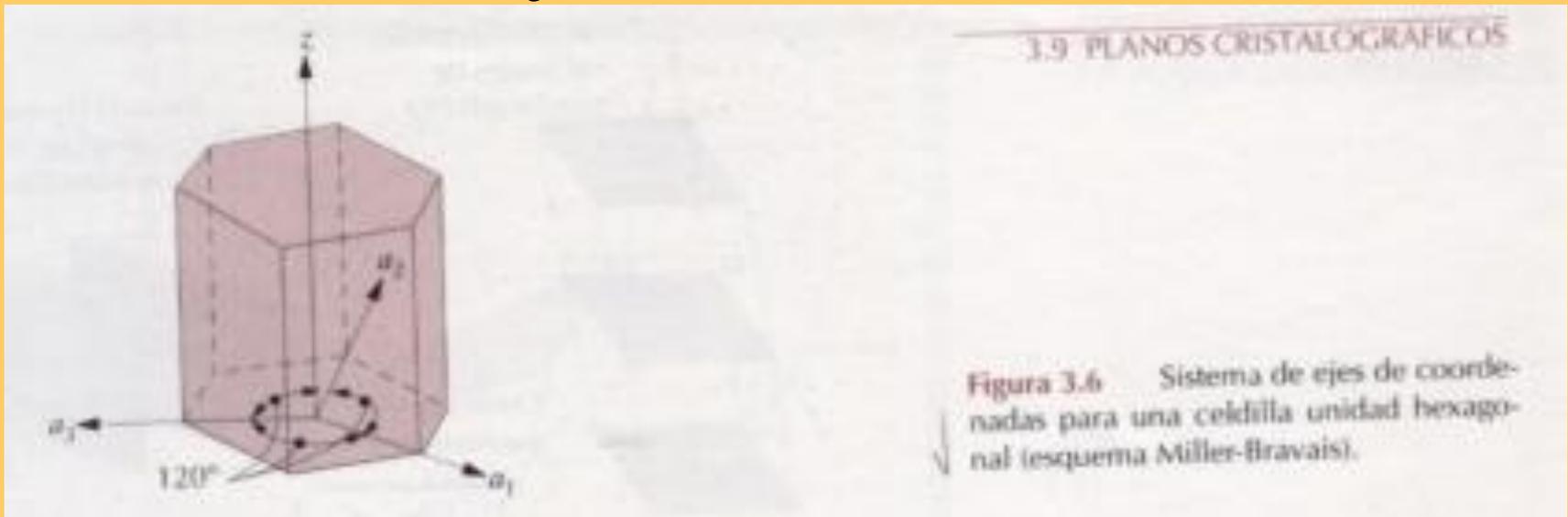
Por conveniencia, las direcciones equivalentes se agrupan en **FAMILIAS** que se denotan.

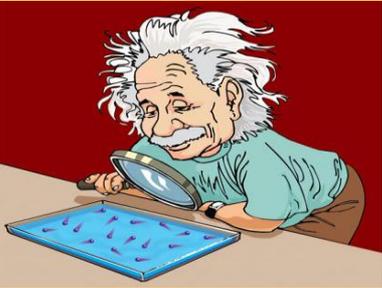
$$\langle 100 \rangle$$

CRISTALES HEXAGONALES

* Algunas direcciones cristalográficas equivalentes de los cristales de simetría hexagonal no tienen el mismo conjunto de índices.

* Este problema se resuelve usando el sistema de coordenadas de 4 ejes o de **MILLER – BRAVAIS**.





* Los 3 ejes a_1 , a_2 y a_3 están situados en un plano, llamado plano basal, y forman ángulos de 120° entre si. El otro eje z , es perpendicular al plano basal.

* Los índices de una dirección, obtenidos de este modo, se anotan mediante cuatro dígitos:

$[u \ v \ t \ w]$



* Corresponden a las proyecciones a lo largo de los ejes del plano basal a_1 , a_2 y a_3 .



La conversión del **sistema de 3 índices** al **sistema de 4 índices**.

$$[u'v'w'] \longrightarrow [uvw]$$

Se consigue aplicando las siguientes fórmulas.

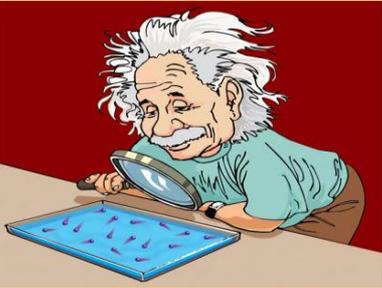
$$u = \frac{n}{3} [2u' - v']$$

$$v = \frac{n}{3} [2v' - u']$$

$$t = -(u + v)$$

$$w = nw'$$

* Donde los índices señalados con apòstrofos están asociados con el sistema de 3 índices y los que no con el nuevo sistema de **MILLER-BRAVAIS** de 4 índices, n es el factor requerido para resucir **u**, **v**, **t** y **w** a los enteros más pequeños.



* Utilizando esta conversión la dirección $[010]$ se convierte en la $[\bar{1}2\bar{1}0]$

* En la sgte figura están indicadas varias direcciones para una celda unitaria hexagonal.

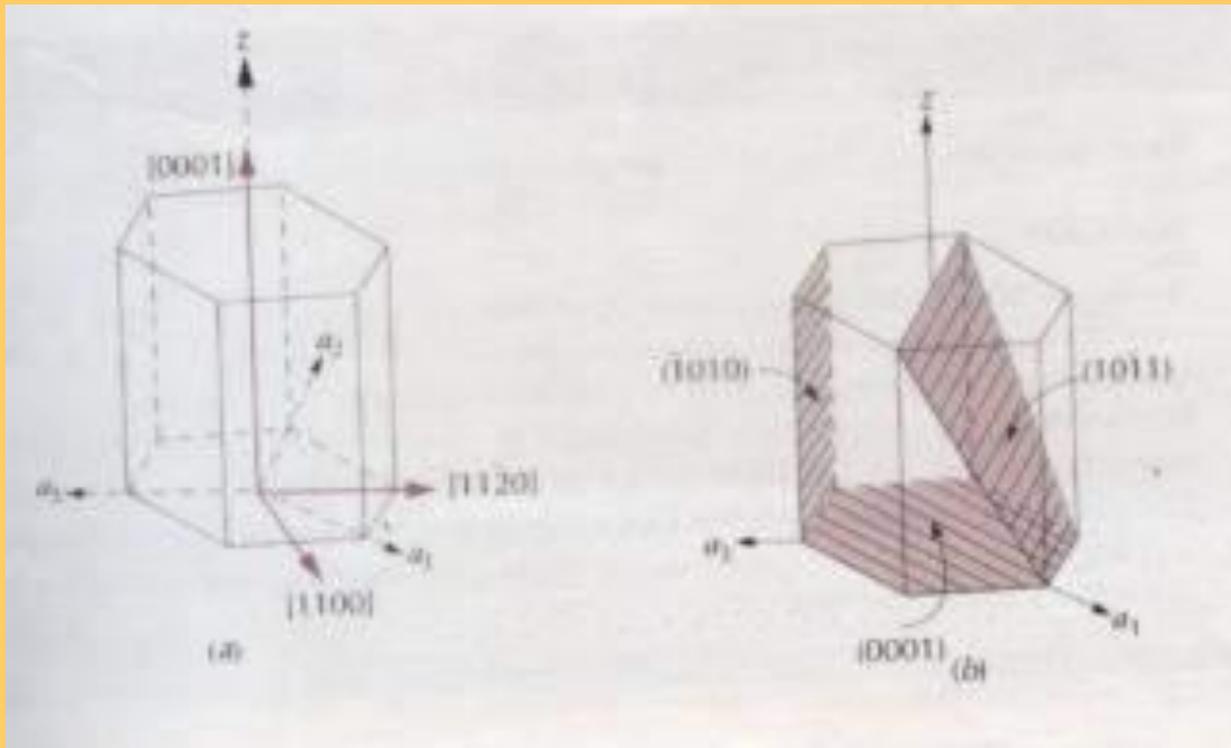
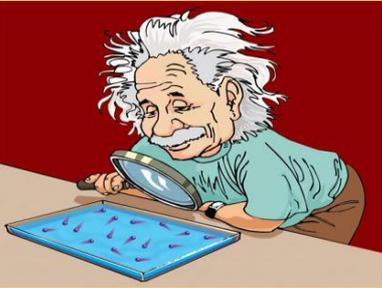


Figura 3.7 • En el sistema cristalino hexagonal, (a) las direcciones $[0001]$, $[1100]$ y $[\bar{1}120]$ y (b) los planos (0001) , $(10\bar{1}1)$ y (1010) .

PLANOS CRISTALOGRAFICOS



LA ESTRUCTURA DE LOS SOLIDOS CRISTALINOS

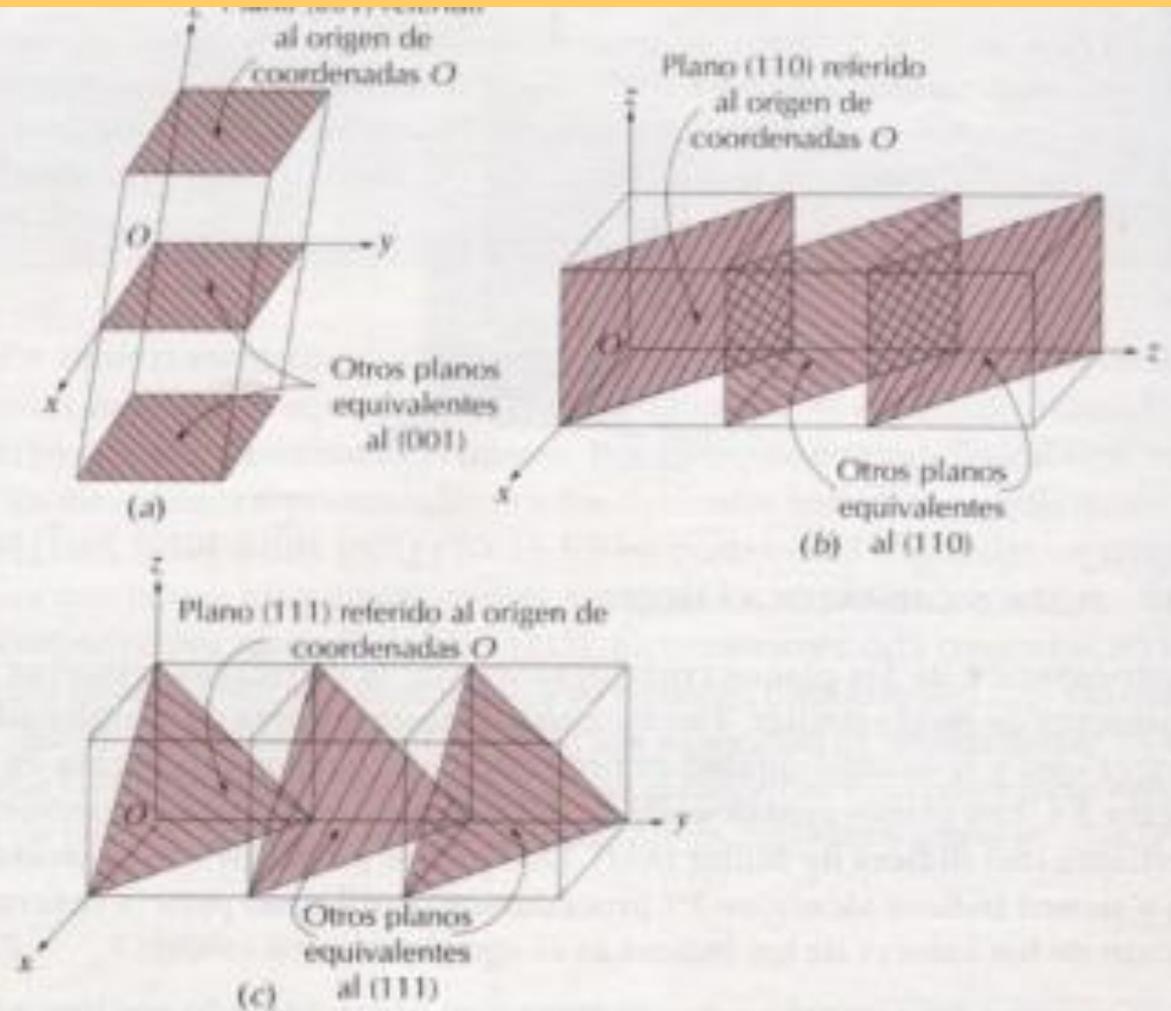
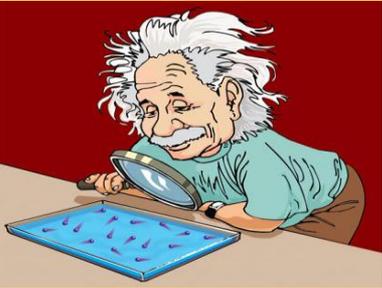


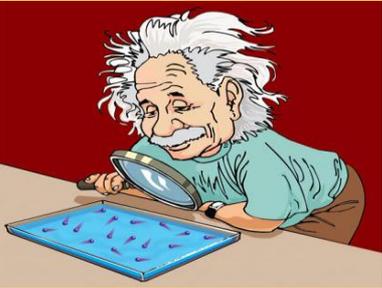
Figura 3.8 Representaciones de planos cristalográficos correspondientes a las series (a) (001), (b) (110) y (c) (111).



* Los planos cristalográficos del sistema **HEXAGONAL** se especifican mediante los **3 índices de MILLER (h k l)**. Dos planos paralelos son equivalentes y tienen índices idénticos.

Procedimiento para determinar valores de los índices.

1. Si el plano pasa por el origen, se traza otro plano paralelo con una adecuada traslación dentro de la celda unitaria o se escoge un nuevo origen en el vértice de otra celda unitaria.
2. El plano cristalográfico o bien corta, o bien es paralelo a cada uno de los **3 ejes**: la longitud de los segmentos de los ejes se determina en función de los parámetros de red **h, k y l**.

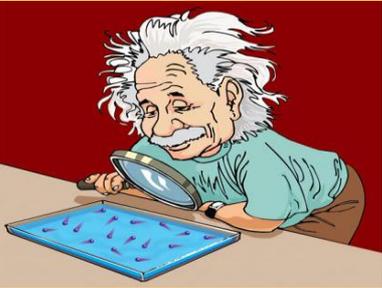


3. Se escriben los números recíprocos de estos valores. Un plano paralelo a un eje se considera que lo corta en el infinito y, por lo tanto, el índice es cero.

4. Estos 3 números se multiplican o dividen por un factor común.

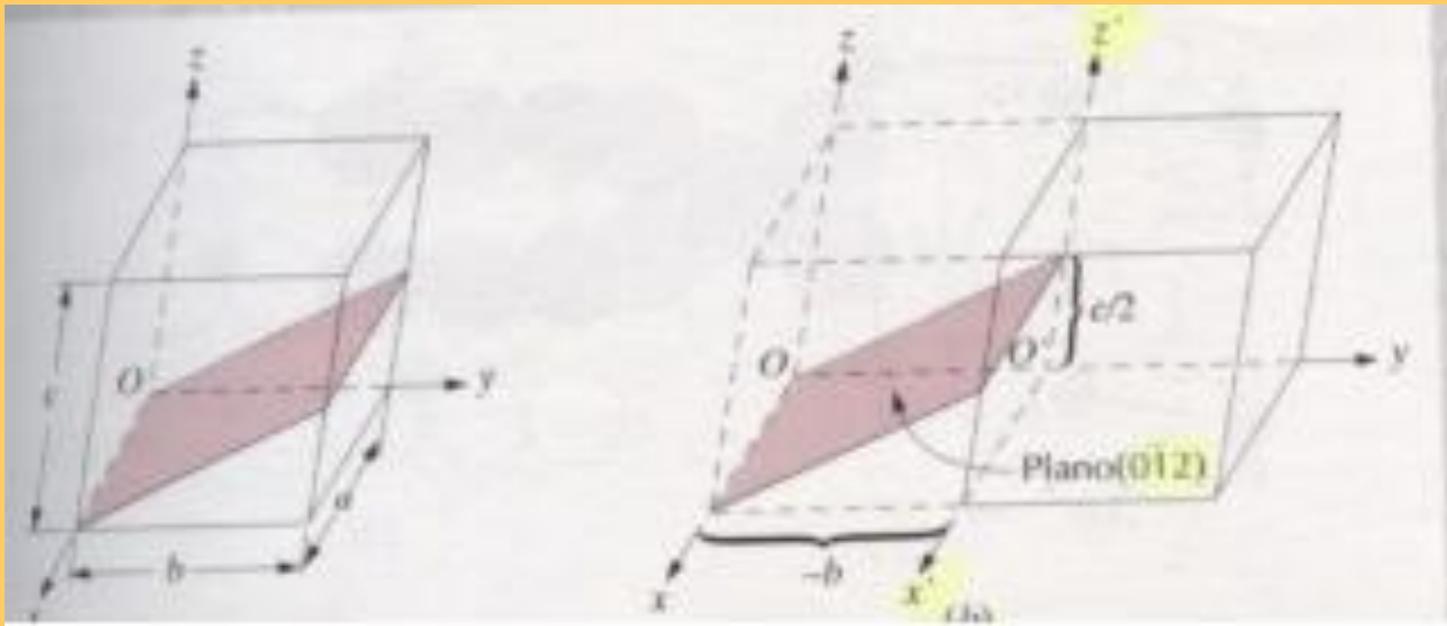
5. Finalmente, se escriben juntos los índices enteros dentro de un paréntesis (hkl).

6. Una intersección en el sentido negativo del origen se indica mediante una barra o un signo menos sobre el índice. Cambiando el signo de todos los índices se obtienen un plano paralelo opuesto a una distancia equivalente del origen.



* Una característica de los **cristales cúbicos** es que los planos y las direcciones que tienen los mismos índices son **perpendiculares entre sí**. Sin embargo, esta relación geométrica entre planos y direcciones que tienen los mismos índices no existe en otros sistemas cristalinos.

Ejemplo: Determinar los índices de Miller del plano de la Fig (a):





SOLUCION:

* Ya que el plano pasa por el origen O , se debe escoger un nuevo origen en el vértice de la celda unitaria adjunta, llamado O' y mostrado en la Fig. b.

* Este plano es paralelo al eje x' y su intersección tiene lugar en ∞
a. Las intersecciones de los ejes y y z respecto al nuevo origen O' son $-b$ y $c/2$, respectivamente. En términos de los parámetros de red a, b y c , estas intersecciones valen $\infty, -1$ y $1/2$.

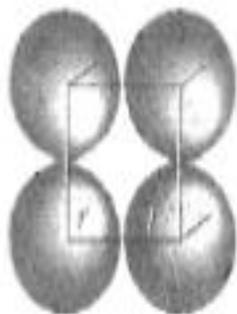
* Los recíprocos de estos números son $0, -1$ y 2 . Ya que todos son enteros no requieren ninguna reducción finalmente se escriben entre paréntesis

$$(0 \bar{1} 2)$$



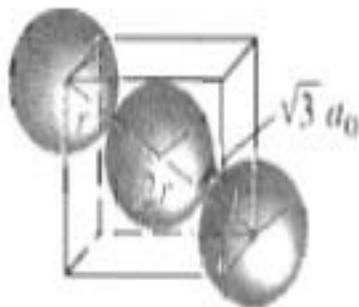
$$a_0 = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

(3-3)



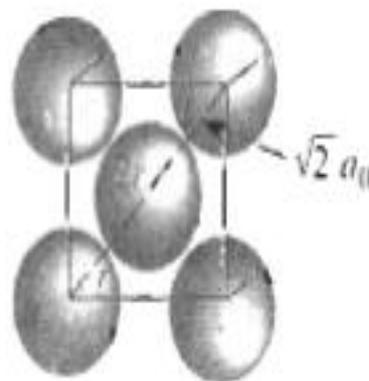
$\leftarrow a_0 \rightarrow$

Cúbica simple



$\leftarrow a_0 \rightarrow$

Cúbica centrada
en el cuerpo



$\leftarrow a_0 \rightarrow$

Cúbica centrada
en las caras

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

EJEMPLO 3-1

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

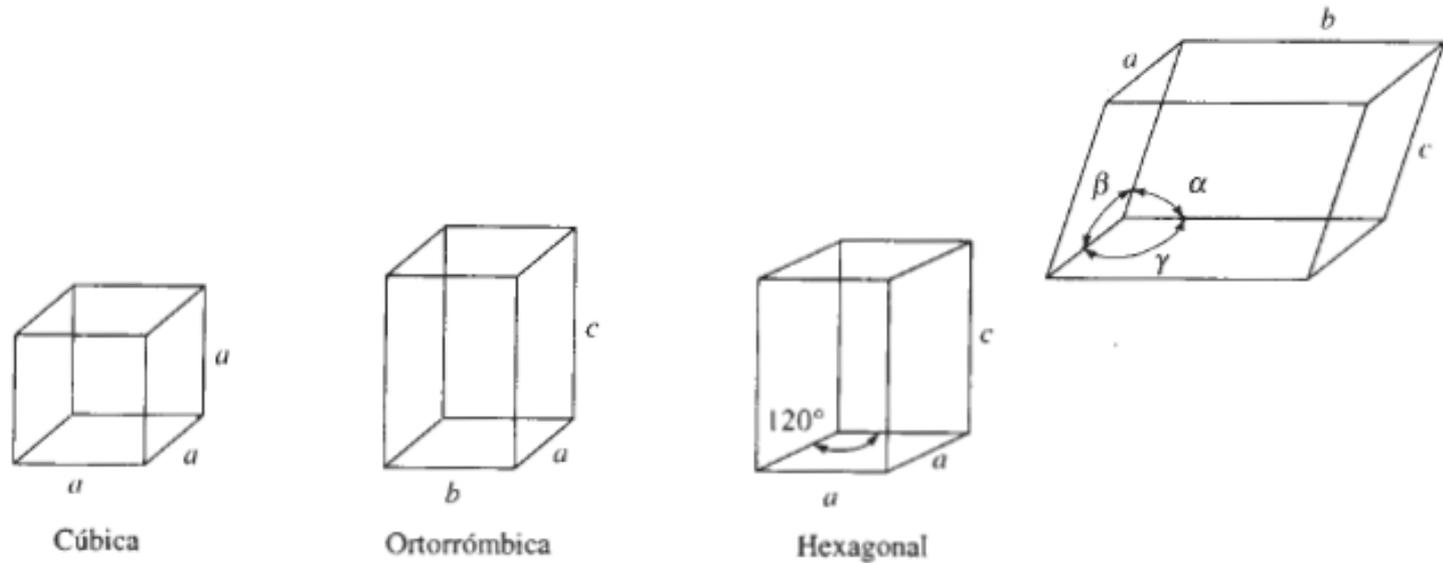


FIGURA 3-5 Definición de parámetros de red y de su uso en tres sistemas cristalinos.



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:

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

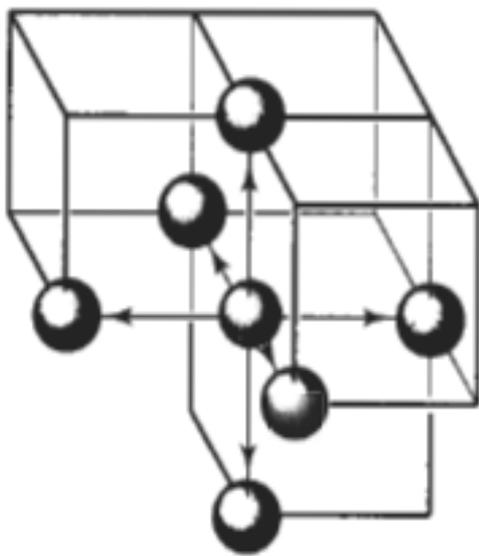
En las celdas unitarias CC, los puntos de red están localizados en las esquinas y en el centro del cubo:

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

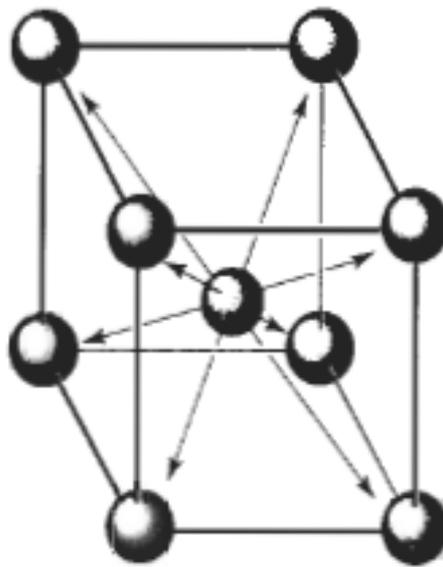
En las celdas unitarias CCC, los puntos de red están localizados en las esquinas y en las caras del cubo:

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





(a)



(b)

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.



* Se elimina el paréntesis de los números y se escriben los recíprocos: ∞ , -1 y 1. Esto significa que el plano es paralelo al eje x, mientras que corta a los ejes y y z en $-b$ y c , respectivamente, como se indica en la Fig.(b)

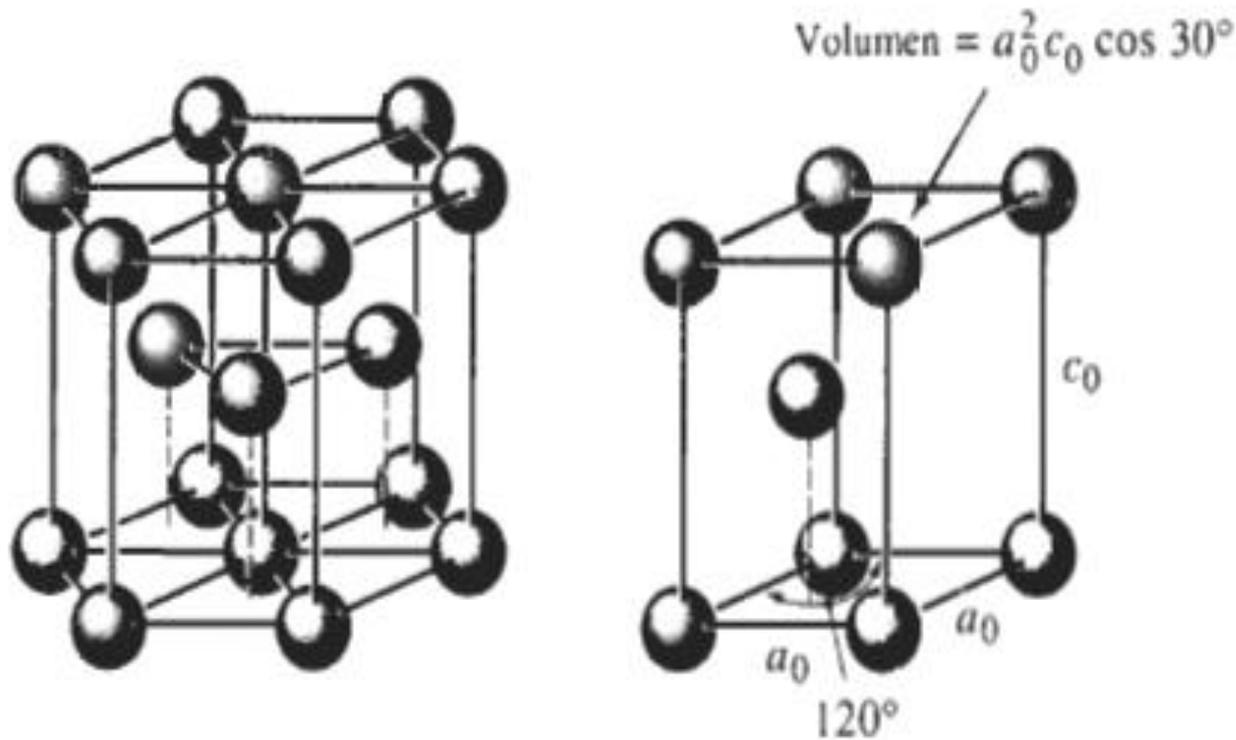


FIGURA 3-9 La red hexagonal compacta (HC) (izquierda) y su celda unitaria (derecha).



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



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.

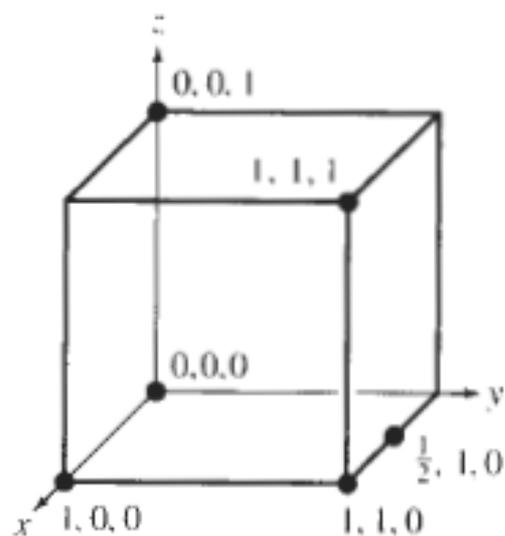


FIGURA 3-10 Coordenadas de puntos seleccionados en la celda unitaria. Los números se refieren a la distancia desde el origen en función de los números de parámetros de red.



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. $[122]$

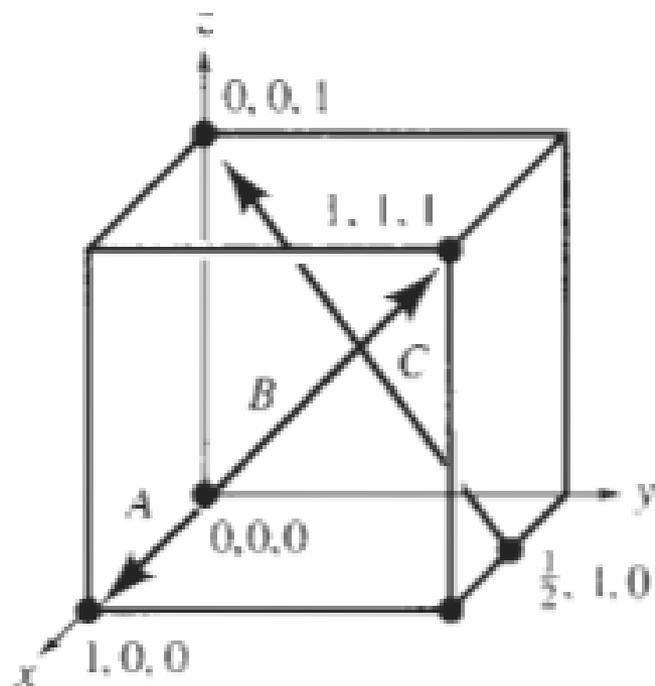


FIGURA 3-11 Direcciones y coordenadas cristalográficas requeridas para el ejemplo 3-6.

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 $x = 1, y = 2, y z = \infty$.

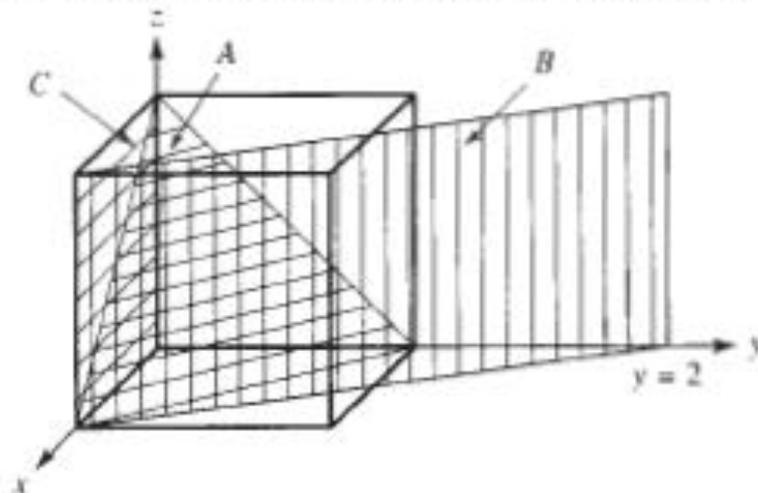


FIGURA 3-14 Planos cristalográficos e intersecciones para el ejemplo 3-7.



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

3. 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, $x = 1, y = -1, z = \infty$.

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 3-9

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 $(hkil)$. 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 $h + k = -i$.

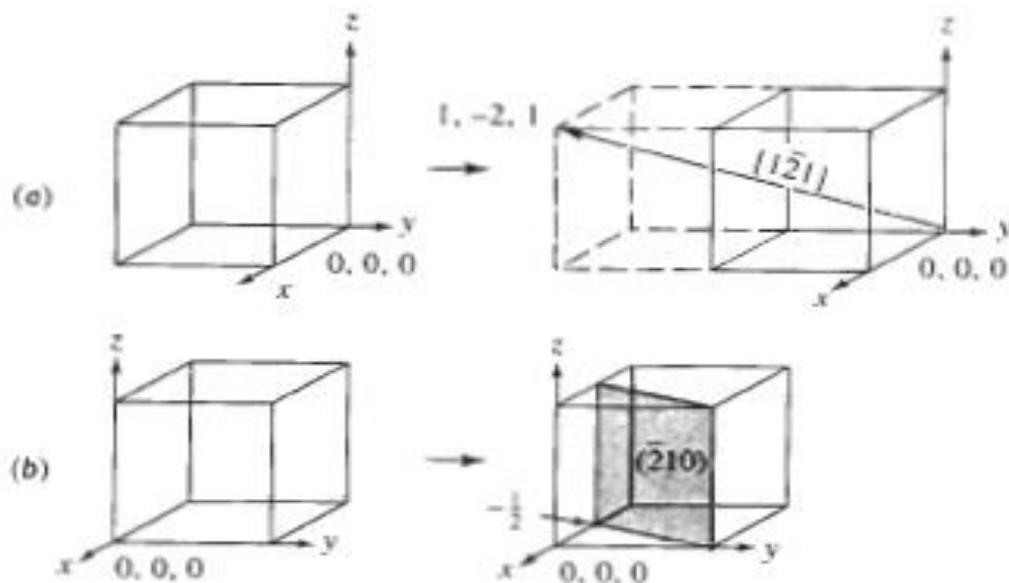


FIGURA 3-16 Construcción de una dirección (a) y de un plano (b) dentro de la celda unitaria (vea el ejemplo 3-9).

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-

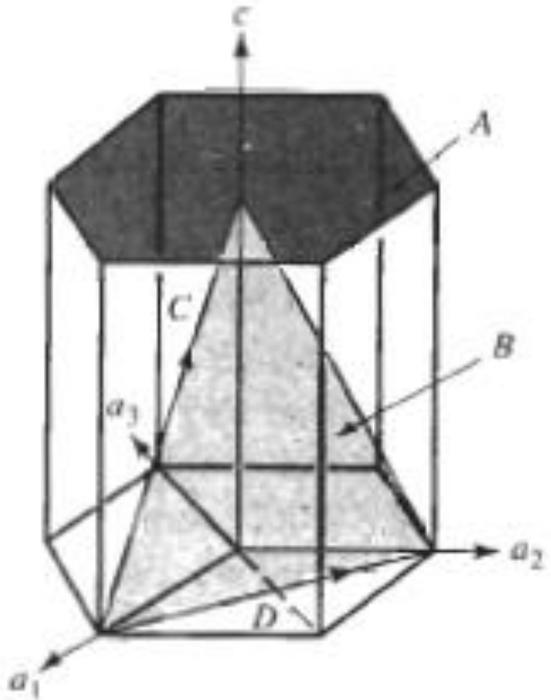


FIGURA 3-17 Índices de Miller-Bravais obtenidos para planos cristalográficos en celdas unitarias HC utilizando un sistema de coordenadas de cuatro ejes.



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.

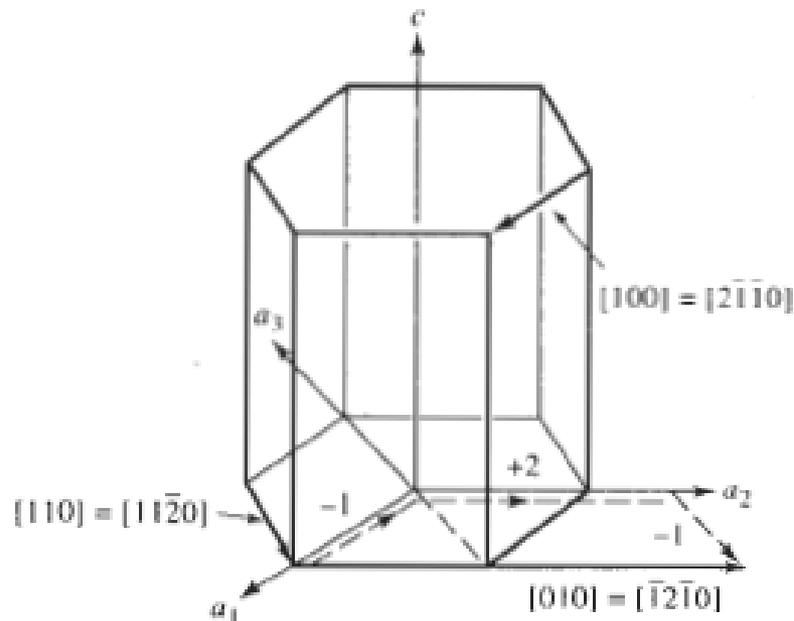


FIGURA 3-18 Direcciones típicas en la celda unitaria HC, utilizando los sistemas tanto de tres como de cuatro ejes. Las líneas punteadas muestran que la dirección $[1210]$ es equivalente a la dirección $[010]$.

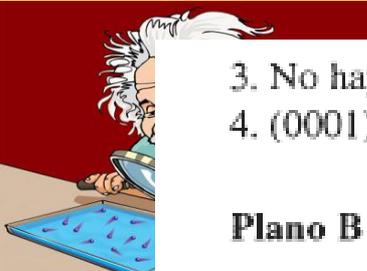
EJEMPLO 3-10

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

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



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 $[2\bar{1}13]$

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.

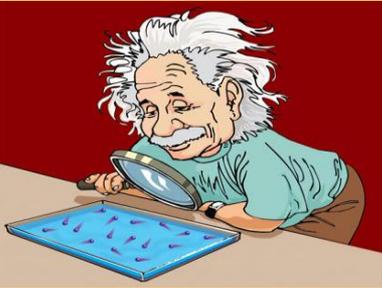


TABLA 3-5 Planos y direcciones compactos

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.

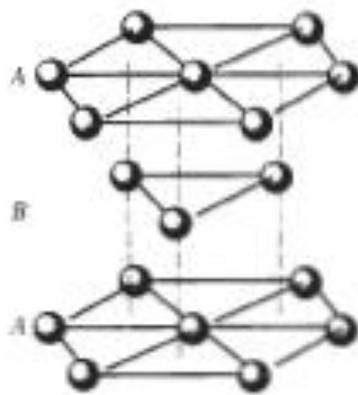


FIGURA 3-19 La secuencia de apilamiento *ABABAB* de planos compactos produce la estructura HC.

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.

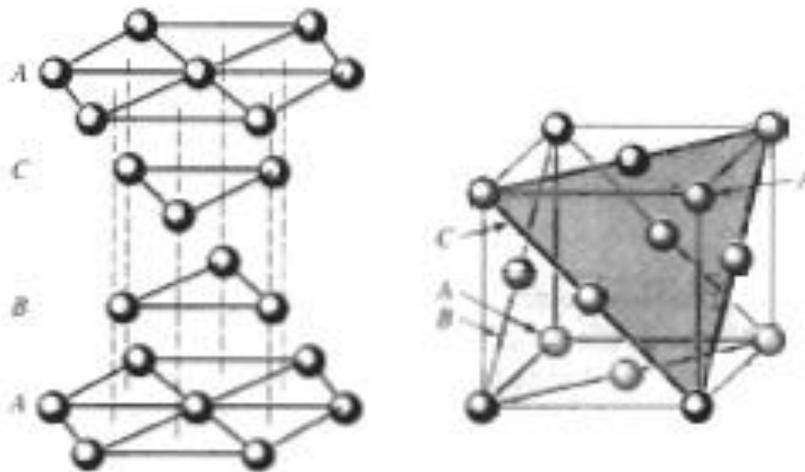


FIGURA 3-20 La secuencia de apilamiento *ABCABCABC* de planos compactos produce la estructura CCC.