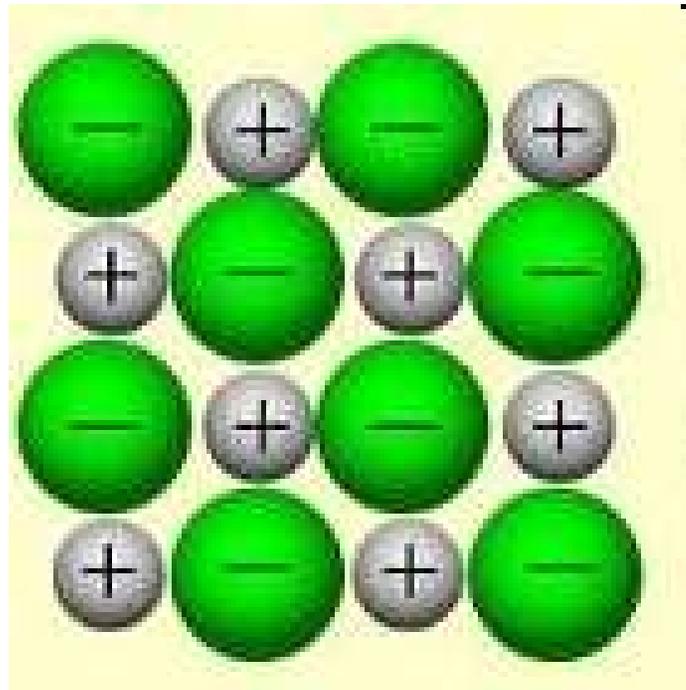


4. Estructura atómica, enlaces y Ordenamiento atómico de los metales



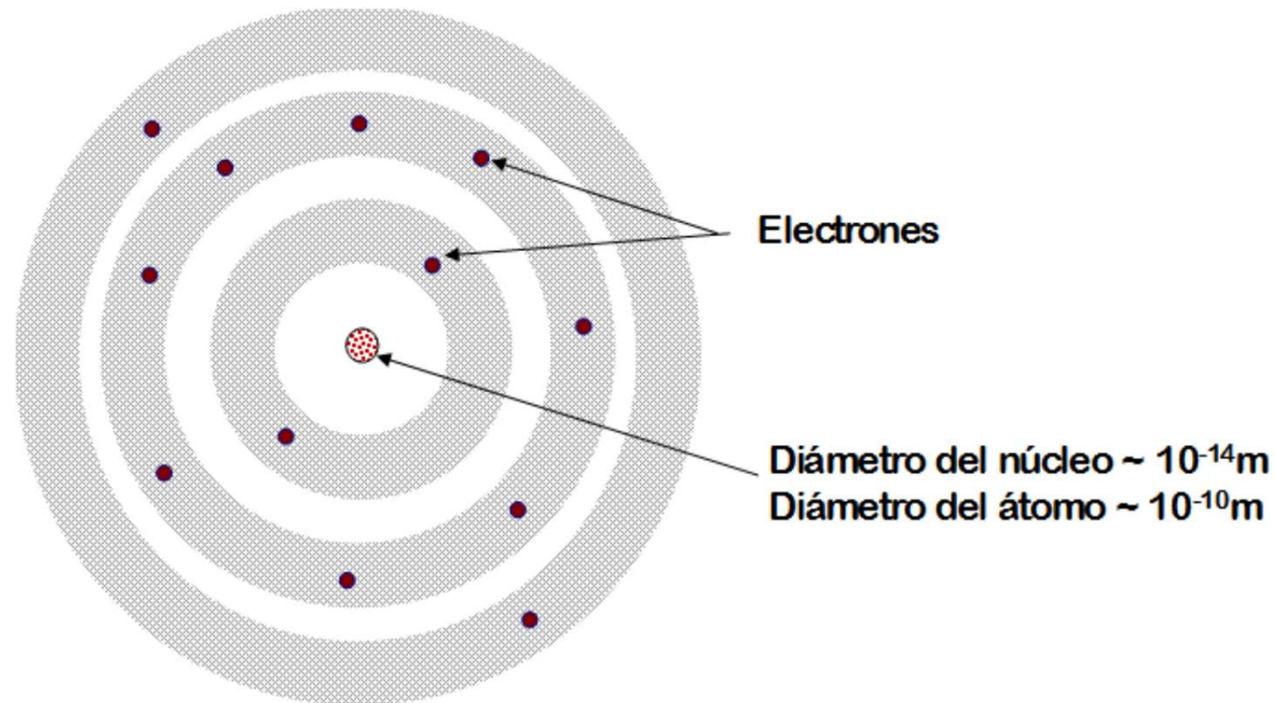
Atomo

- Unidad estructural básica de todos los materiales.
- En nuestro modelo, los átomos están constituidos por tres partículas subatómicas básicas:

Neutrones

Protones

Electrones.



Si el diámetro del núcleo fuera 1 cm, el átomo tendría aproximadamente 100 m de diámetro.

Protones, electrones y neutrones

	Protón	Neutrón	Electrón
Masa (Kg)	$1,673 \times 10^{-27}$	$1,675 \times 10^{-27}$	$9,109 \times 10^{-31}$
Carga (Coulomb)	$+ 1,602 \times 10^{-19}$	0 (Nula)	$- 1,602 \times 10^{-19}$

(Z) Número atómico de un elemento = Número de protones o de electrones

6
C
12,01115

Número atómico

Símbolo del elemento

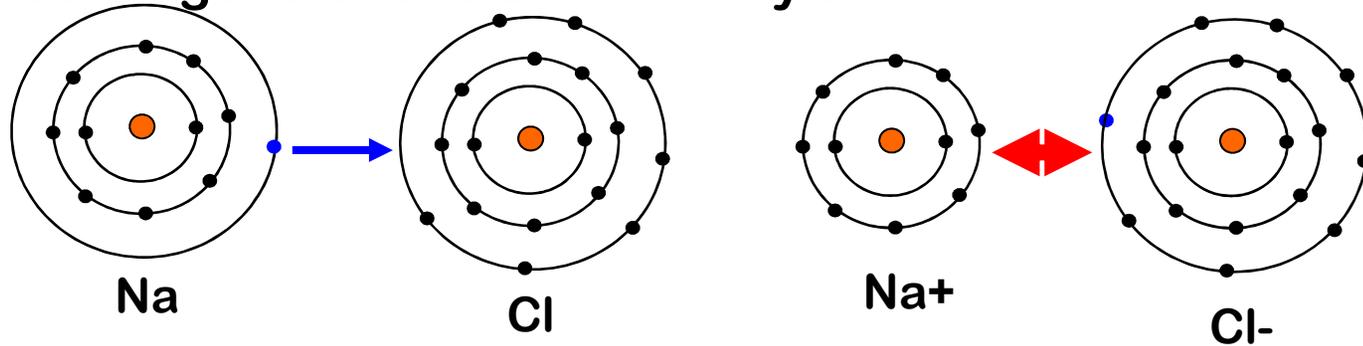
Todos los elementos tienen su número atómico en la parte superior de la celda de la **Tabla Periódica**

Elementos multielectrónicos

- En elementos multielectrónicos, los electrones se sitúan en capas o niveles de energía principales de altas densidades electrónicas (puede haber hasta 7 de ellos).
- La estructura electrónica la reactividad química y las propiedades dependen de la reactividad de los electrones más externos (electrones de valencia).
- Los gases nobles son los más estables y menos reactivos.
- Los otros elementos reaccionan y se enlazan entre sí. Los fuertes **enlaces** primarios entre átomos se forman cuando los electrones localizados en los orbitales externos (de valencia) se transfieren o comparten entre los átomos.

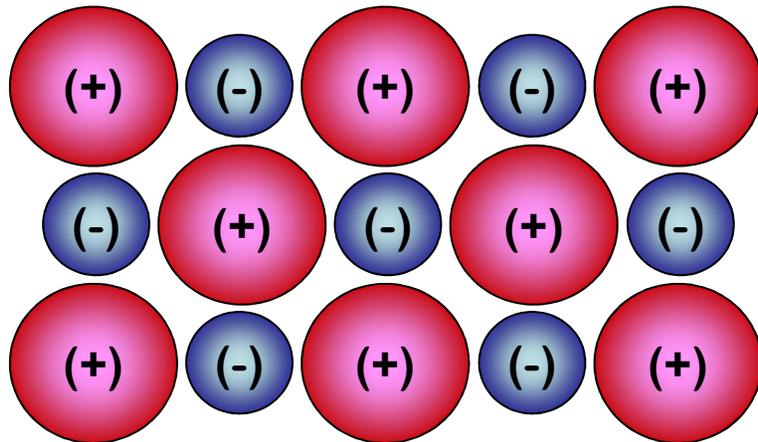
El enlace iónico

- El enlace iónico es el tipo de enlace resultado de una **transferencia de electrones**. Se forman iones: **cationes (ion +)** y **anión (ion -)**
- La transferencia de electrones se ve favorecida para establecer una estructura más estable.
- Se da en general entre un **metal** y un **no metal**.



- La unión entre iones es debida a fuerzas de atracción electrostática
- La mayor tendencia a ganar o apoderarse de electrones se llama **electronegatividad**.
- El enlace iónico se da fundamentalmente entre sustancias con grandes diferencias de electronegatividad

Cristal iónico

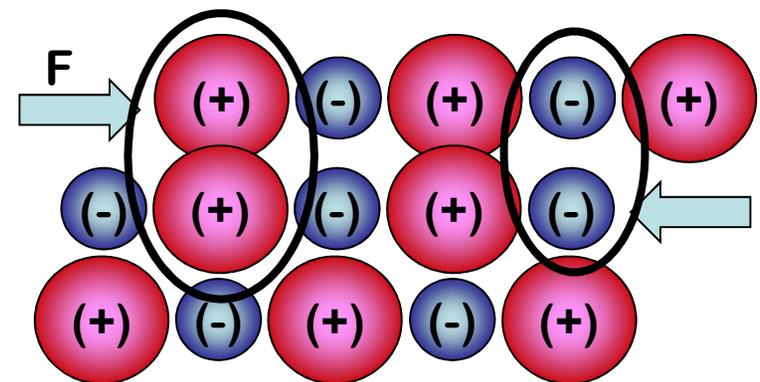
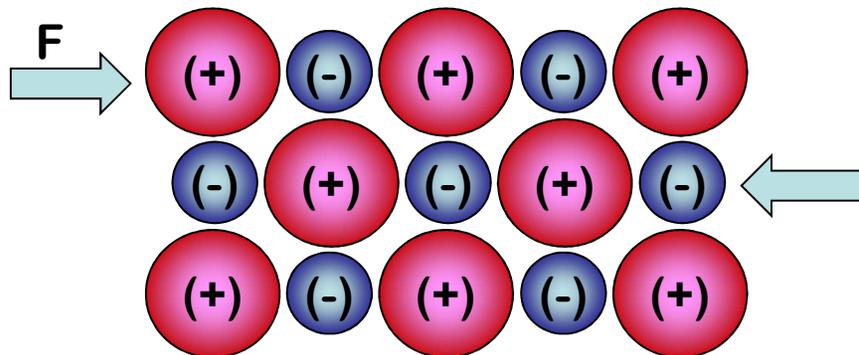


No hay molécula sino un cristal iónico
Forma un retículo espacial

No direccional

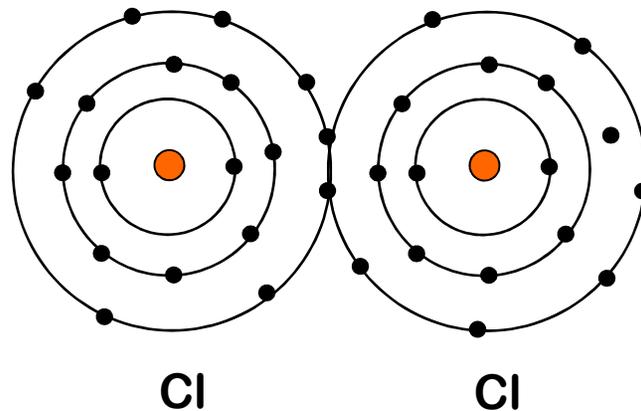
Enlaces fuertes: elevado punto de fusión

Materiales duros y resistentes pero frágiles (se rompen sin deformarse apreciablemente ya que se enfrentan cargas de igual signo)



El enlace covalente

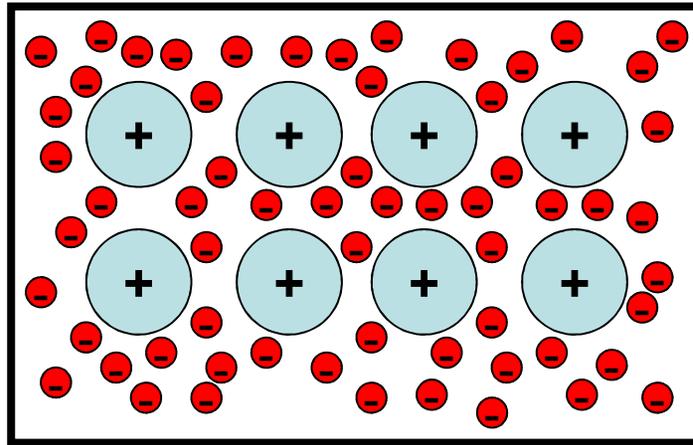
- El enlace covalente es el tipo de enlace resultado de una **compartición de electrones (electrones compartidos)**.
- La compartición de electrones se produce entre elementos de similares electronegatividades
- Los electrones que se comparten son los del orbital de enlace externo. Es un enlace direccional.
- Ejemplo: gas cloro (Cl_2)



- La diferencia fundamental con el sólido iónico, es que en el sólido covalente se forma una molécula

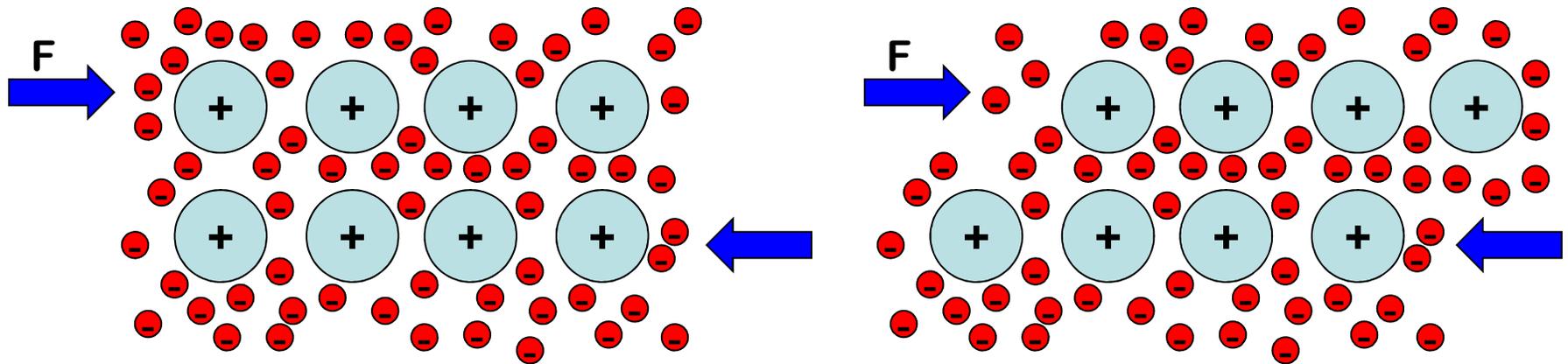
Enlace metálico

- El enlace metálico es el tipo de enlace resultado de una distribución compartida de electrones y es no direccional.
- Los electrones del orbital de enlace externo están deslocalizados (pertenecen a todos y ninguno a la vez) y son los que se contribuye al conjunto.
- Los electrones se mueven libremente en un mar de electrones.



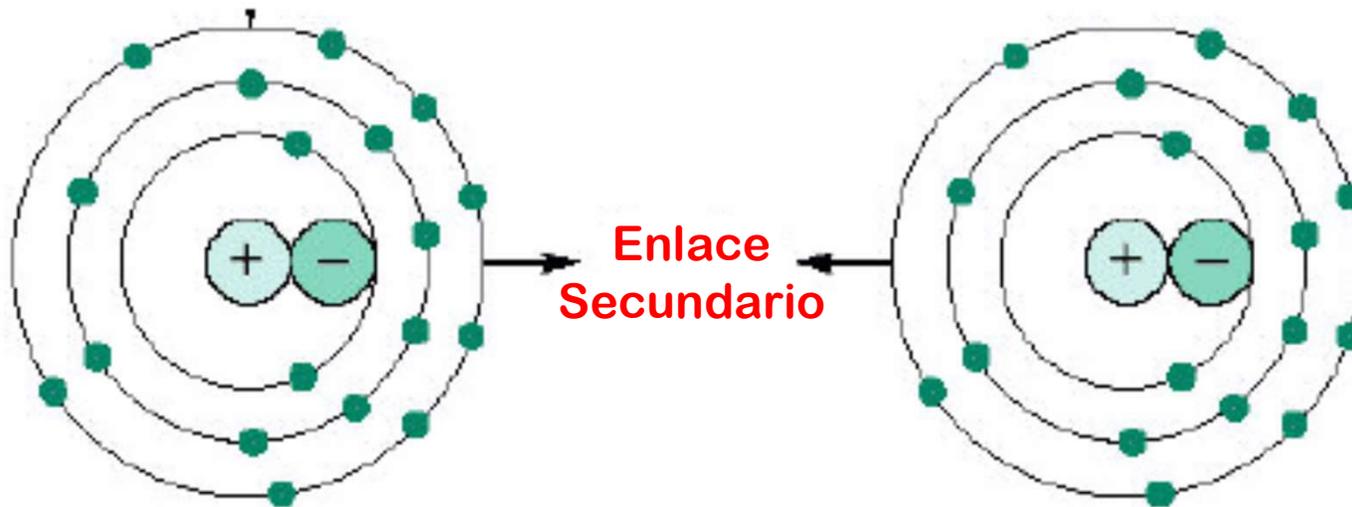
Enlace metálico

- La gran movilidad de los electrones justifica la gran conductividad eléctrica y térmica.
- También la ductilidad de la mayor parte de los metales



Enlaces secundarios

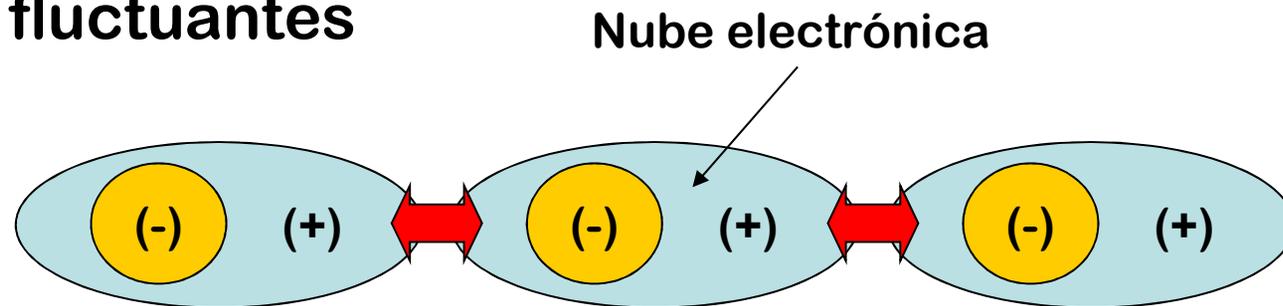
Debido a la naturaleza estadística del movimiento del electrón, ocasionalmente el centro de cargas negativas difiere del centro de cargas positivas y se produce un dipolo temporario.



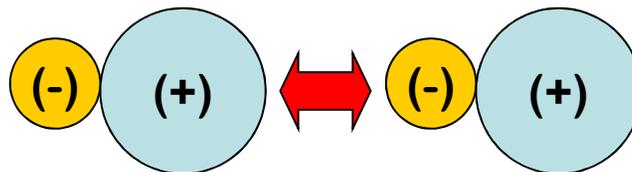
Enlaces secundarios

- **Fuerzas de Van Der Waals:** fuerzas intermoleculares débiles por aparición de dipolos (+ -). Son fuerzas cohesivas debidas a disequilibrios eléctricos.

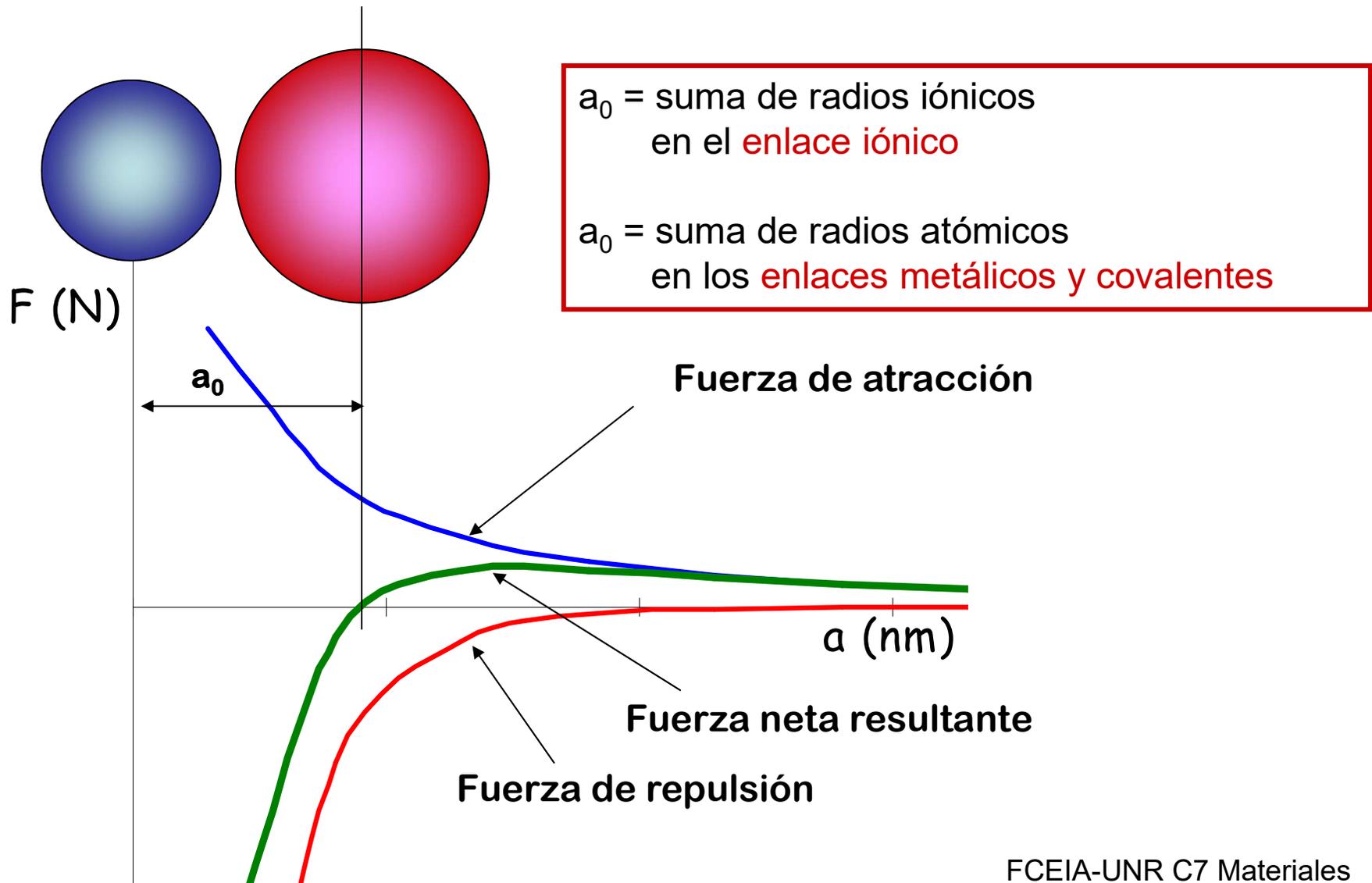
- **Dipolos fluctuantes**



- **Dipolos permanentes**



Fuerzas de enlace

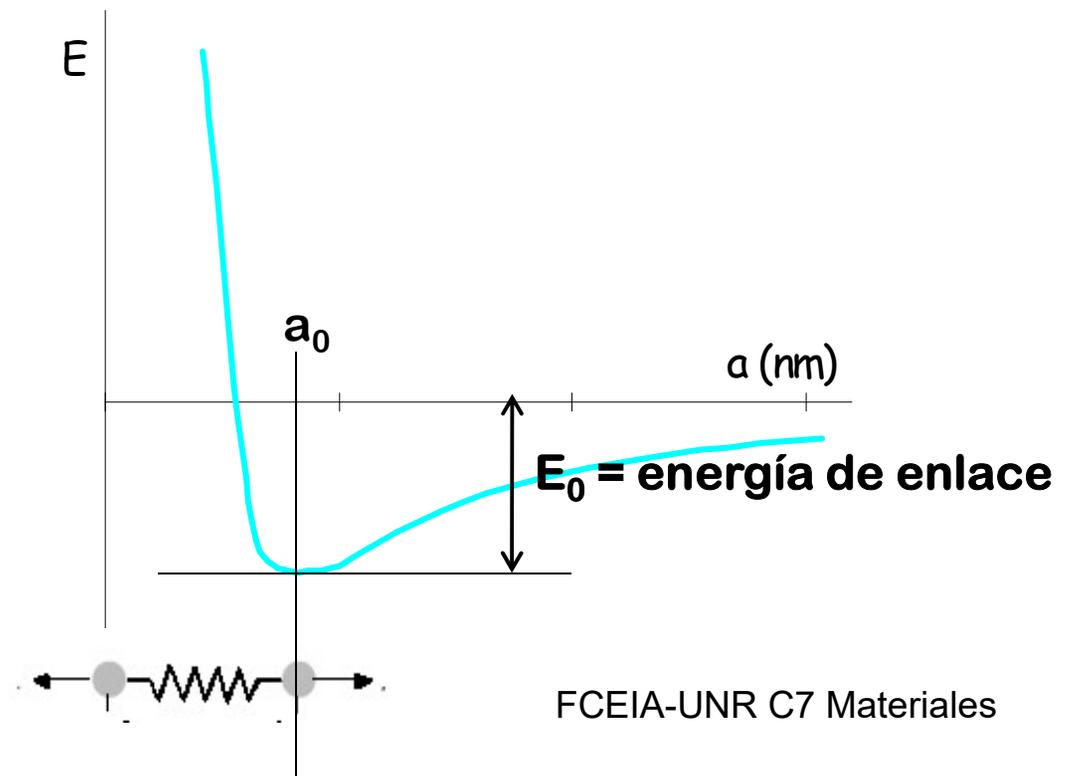


Energía de Enlace

Mayor E_0 en valor absoluto

- Mayor temperatura de fusión
- Mayor módulo elástico del material
- Menor coeficiente de expansión térmica

Tipo	Energía de Enlace(kcal/mol)
Iónico	150 - 370
Covalente	125 - 300
Metálico	25 - 200
Secundario	< 10



Resumen

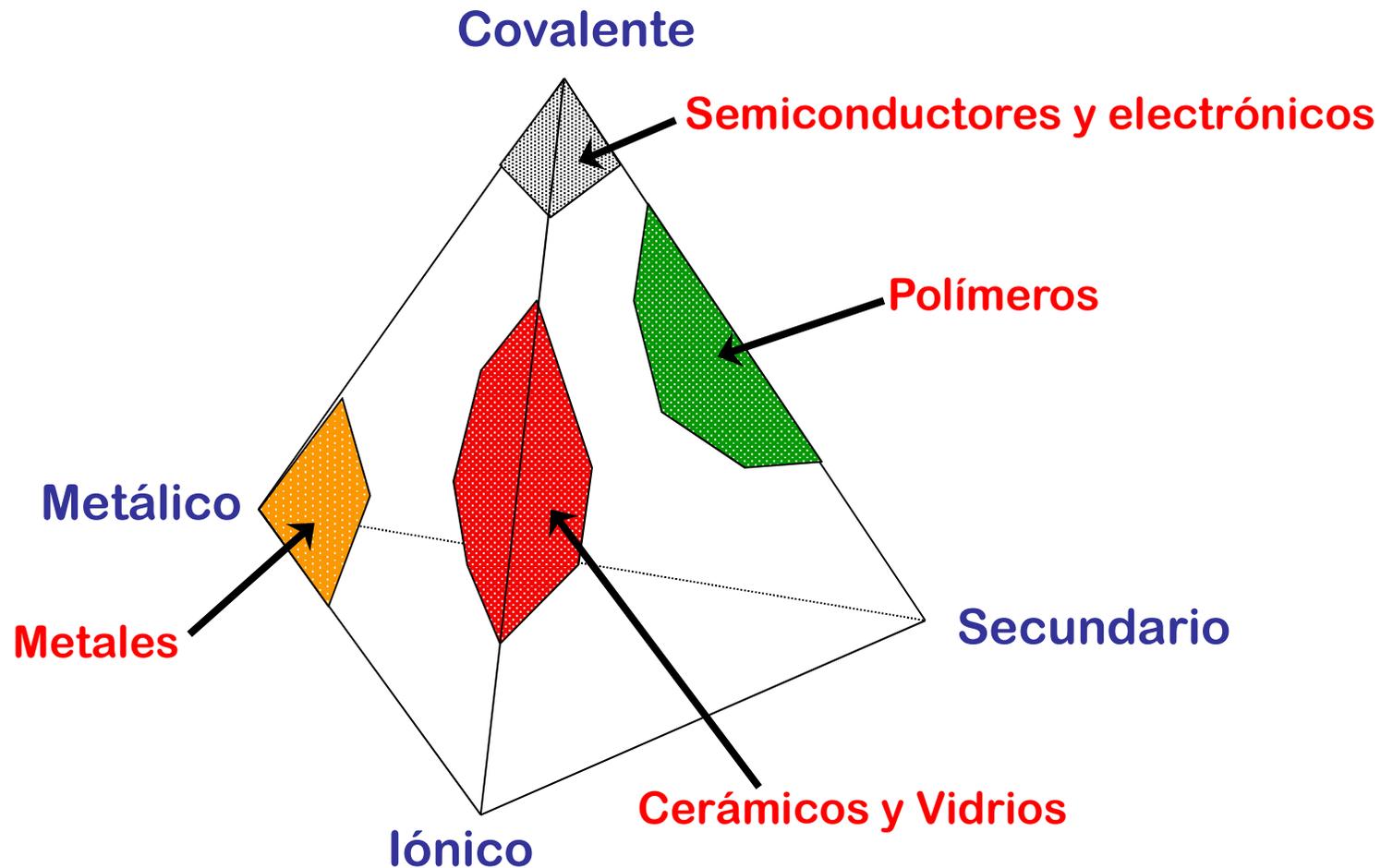
Tipo	Energía de Enlace	Comentarios
Iónico	Muy grande	No direccional
Covalente	Variable	Direccional
Metálico	Variable	No direccional
Secundario	Pequeña	Direccional

Cerámicos Enlaces iónicos y covalentes

Metales Enlaces metálicos

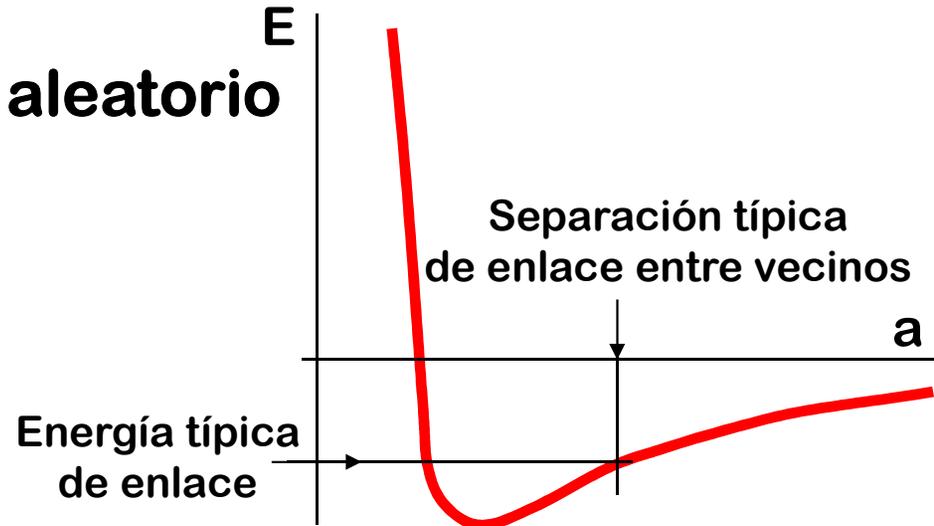
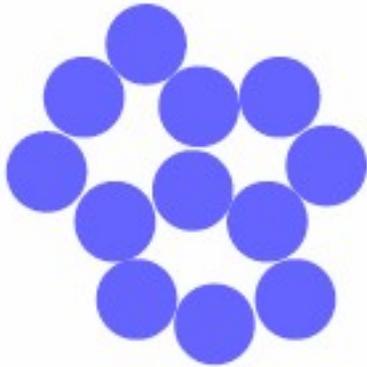
Polímeros Covalentes y secundarios

Los materiales y los enlaces

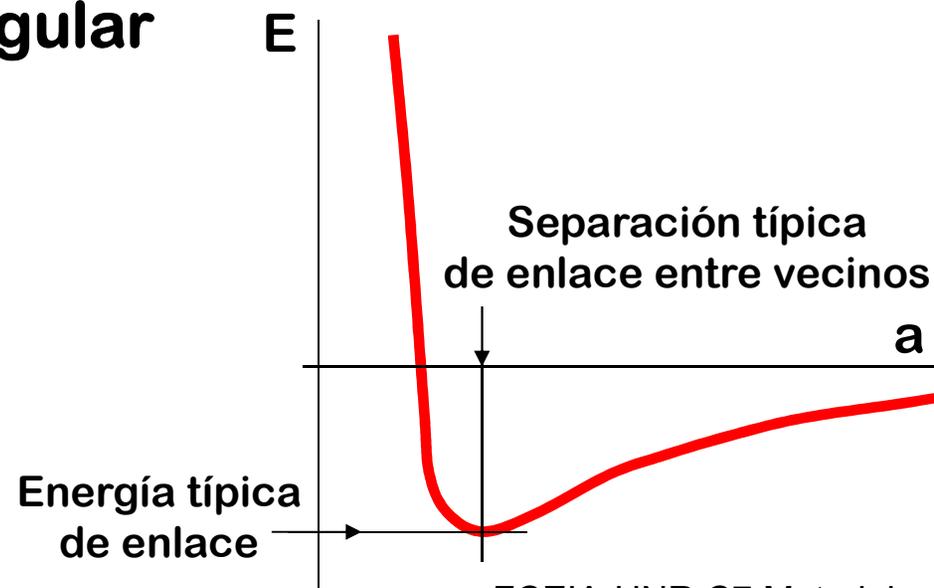
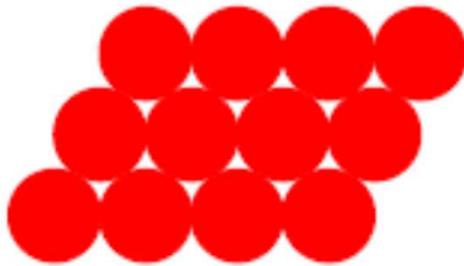


Energía y ordenamiento

No denso, de ordenamiento aleatorio



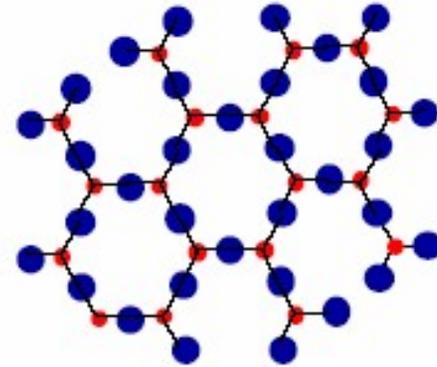
Denso, de ordenamiento regular



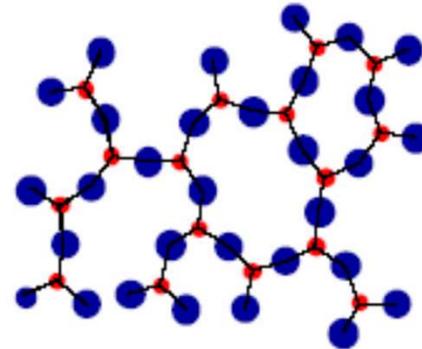
Estructuras densas de ordenamiento regular tienden a tener menores energías de enlace.

Ordenamiento atómico

- **Materiales cristalinos**
 - Los átomos se ordenan periódicamente en arreglos 3D
 - Estructura típica de metales, muchos cerámicos y algunos polímeros

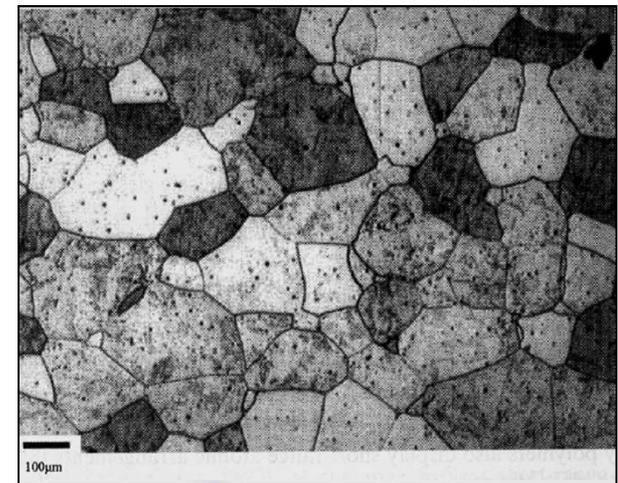
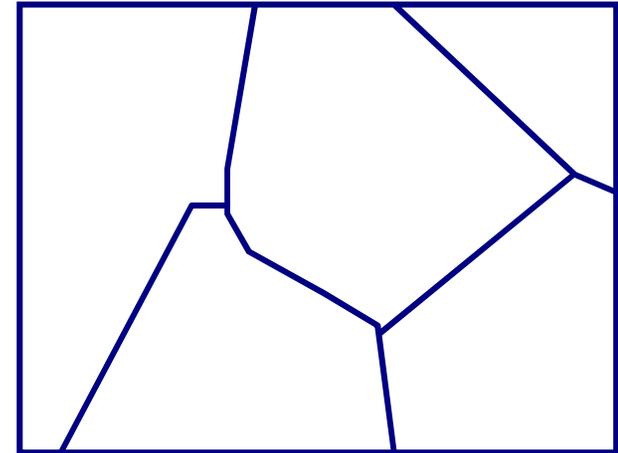


- **Materiales no cristalinos o amorfos**
 - Los átomos no siguen un ordenamiento periódico
 - Típicamente para estructuras complejas y enfriamientos rápidos



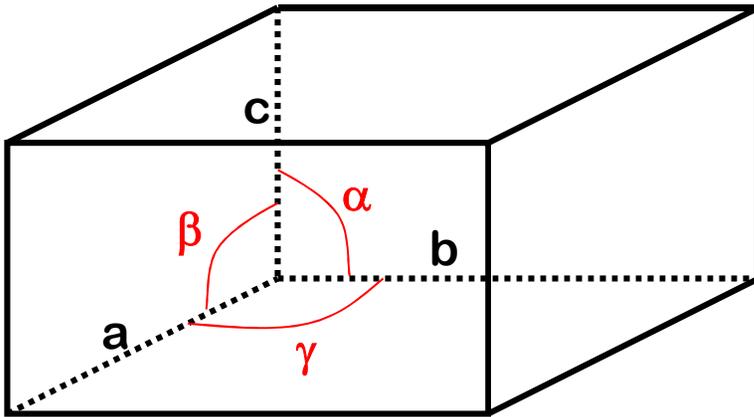
Materiales cristalinos

- **Cristal simple único:** Los átomos se ordenan periódica y repetitivamente en todo el volumen del material
- **Cristales policristalinos:** Los átomos se ordenan periódica y repetitivamente en pequeños volúmenes, formando **granos o cristales**.
- En general los materiales de ingeniería son policristalinos



Estructura cristalina

- Característica fundamental: **regular y repetitiva**
- Existe una unidad estructural que se repite. Se elige la estructura más sencilla → **Celda Unidad**

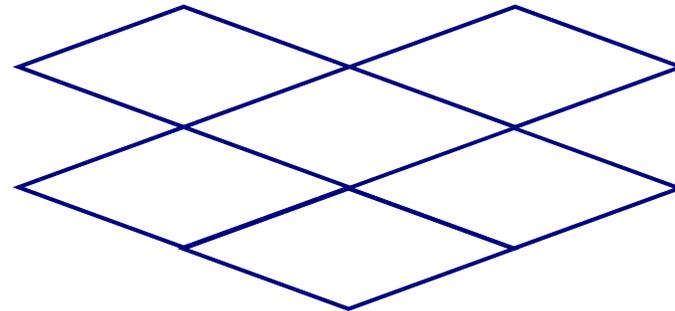
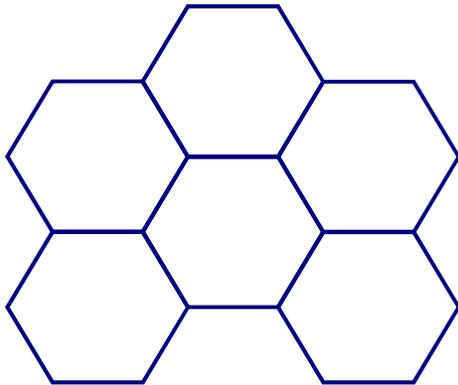
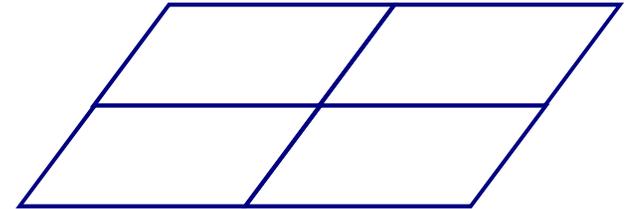
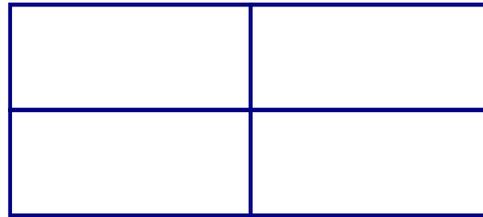
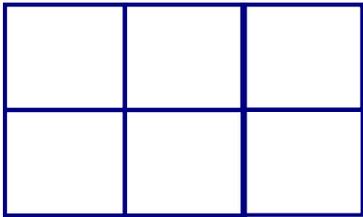


Constantes de red o parámetros de red:
Parámetros lineales a , b y c
Parámetros angulares α , β y γ

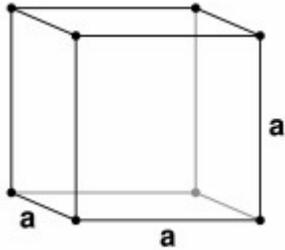
- La Celda unidad contiene la descripción completa de la estructura como un todo → Agrupamiento repetido de celdas en el espacio 3D.
- El agrupamiento periódico de celdas unidad genera puntos con idénticos contornos.

Sistemas cristalinos

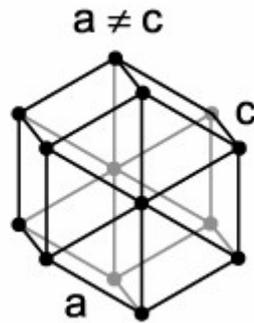
- Todas las estructuras posibles para llenar un espacio 3D se reducen a un pequeño número de celdas que constituyen los 7 sistemas cristalinos.
- En el caso bidimensional las posibilidades son sólo 5:



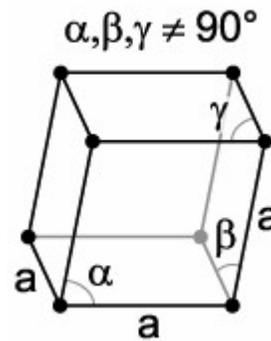
Sistemas cristalinos



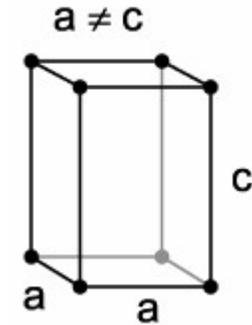
Cúbico



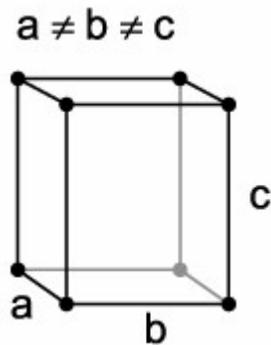
Hexagonal



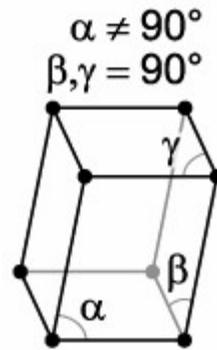
Romboédrica



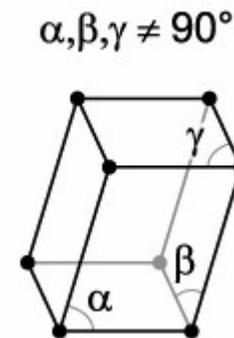
Tetragonal



Ortorrómbica



Monoclínica



Triclínica

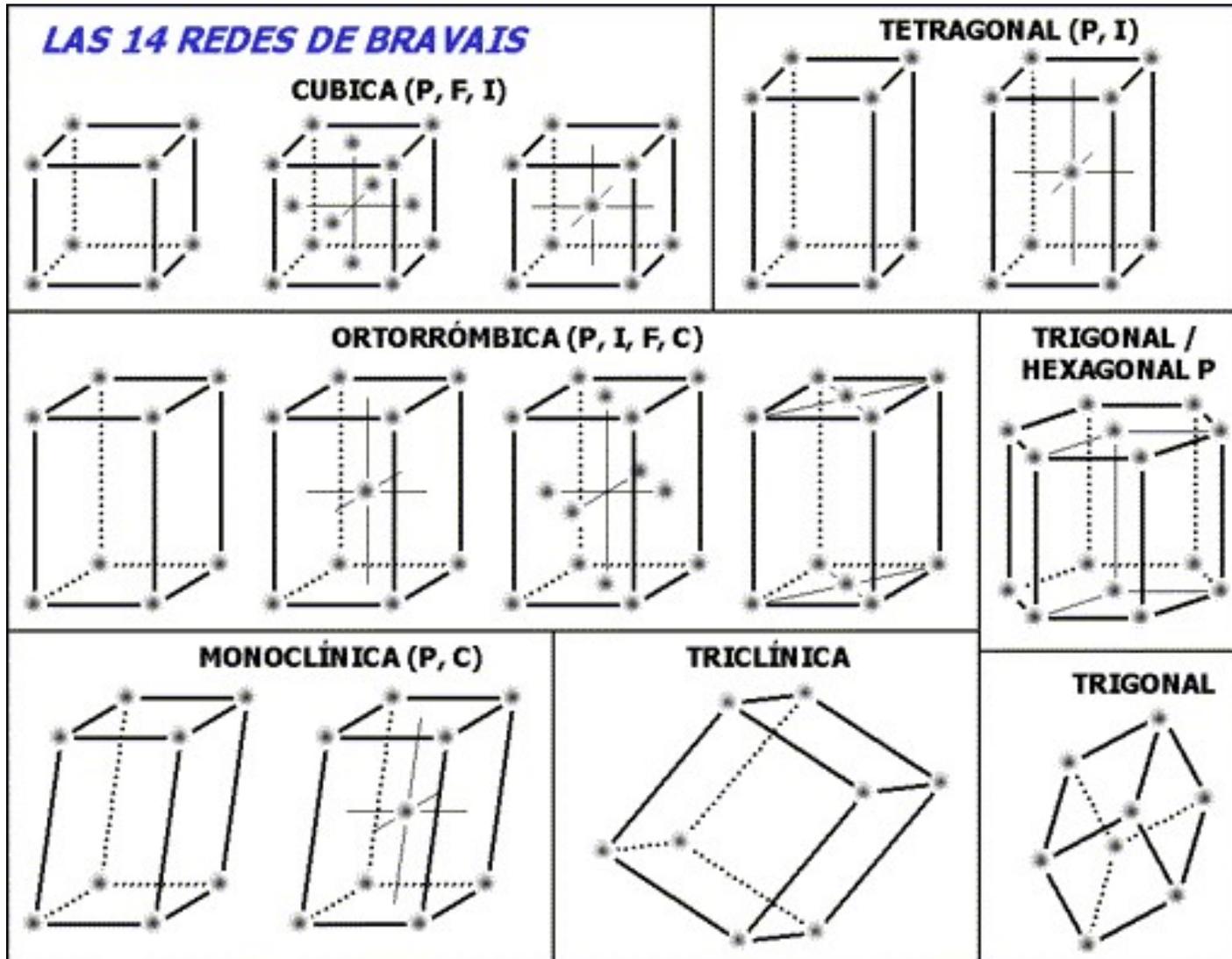
Sistemas cristalinos

Sistema Cristalino	Ejes	Angulos entre ejes
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Ortorrómbico	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ; \gamma = 120^\circ$
Trigonal (o Romboédrica)	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Monoclínico	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \gamma = 90^\circ; \beta \neq 90^\circ$
Triclínico	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Puntos reticulares

- Los átomos son vistos como esferas rígidas.
- El agrupamiento periódico de celdas unidad genera una red con puntos reticulares con idénticos contornos.
- **Puntos Reticulares:** Puntos teóricos dispuestos periódicamente en el espacio 3D. Para ello existe un número limitado de posibilidades conocidos como **14 Redes de Bravais**

Redes de Bravais

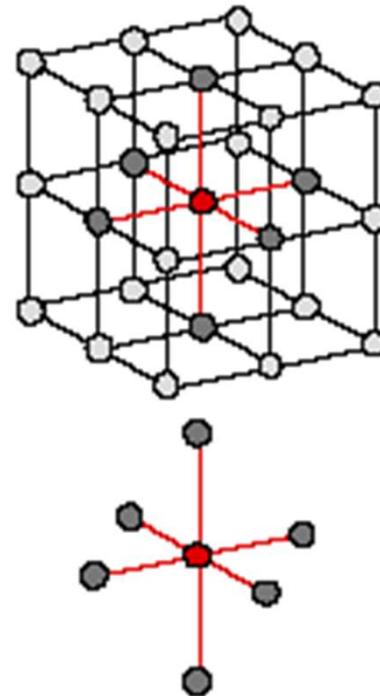
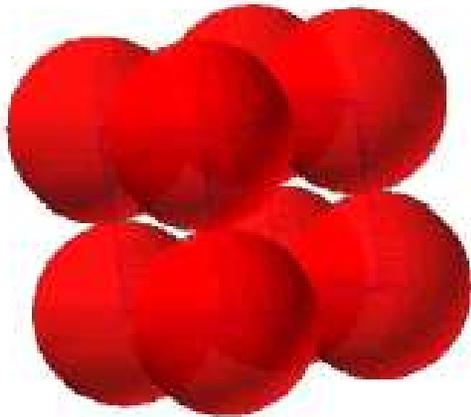


Cristales metálicos

- Los metales son materiales cristalinos
- Tienden a ser densamente ordenados
- Existen diferentes razones para este ordenamiento denso
 - Típicamente solamente hay un elemento químico presente por lo que todos los radios atómicos son iguales.
 - El enlace metálico es no direccional.
 - La distancia entre átomos vecinos más cercanos tiende a ser pequeña para tener la mayor energía de enlace (en valor absoluto).
 - Tienen las más simples estructuras cristalinas.
- La mayor parte de los metales (90 %), cristalizan en tres estructuras básicas densamente empaquetadas: BCC, FCC y HCP.

Estructura Cúbica Simple

- Es rara debido a que no es muy empaquetada.
- **Número de Coordinación (NC):** Número de átomos vecinos más cercanos.
- Los bordes del cubo son las direcciones de mayor empaquetamiento.



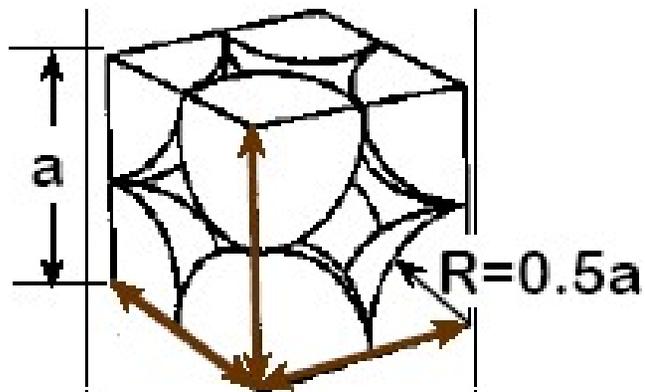
NC = 6

Factor de empaquetamiento atómico

Factor de empaquetamiento atómico APF

$$\text{APF} = \frac{\text{Volumen de átomos en la celda unidad}}{\text{Volumen de la celda unidad}}$$

Asume que los átomos son esferas rígidas
Esta celda contiene $8 \frac{1}{8}$ de átomos o sea contiene 1 átomo
de radio $R = 0,5 a$



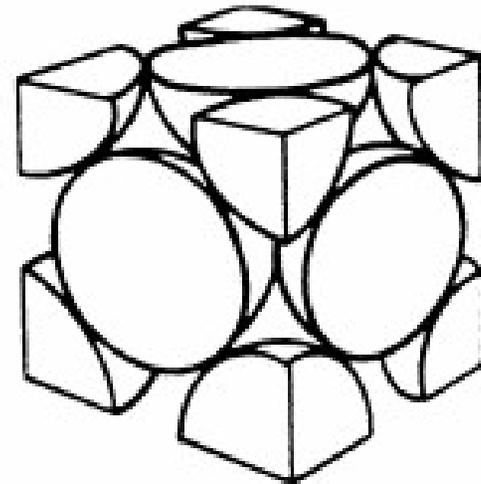
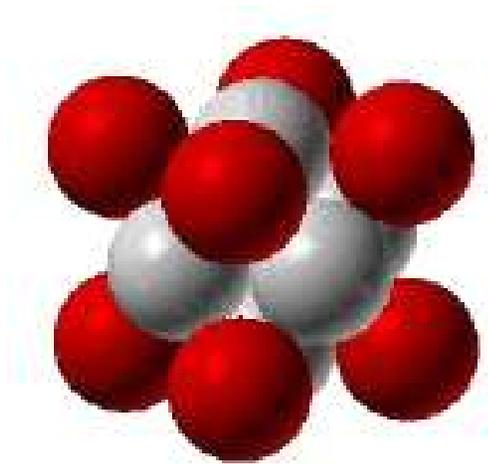
$$\text{Vol. Átomo} = \frac{4}{3} \pi (0,5 a)^3$$

$$\text{Vol. Celda} = a^3$$

$$\text{APF} = \frac{4}{3} \pi (0,5)^3 = 0,52$$

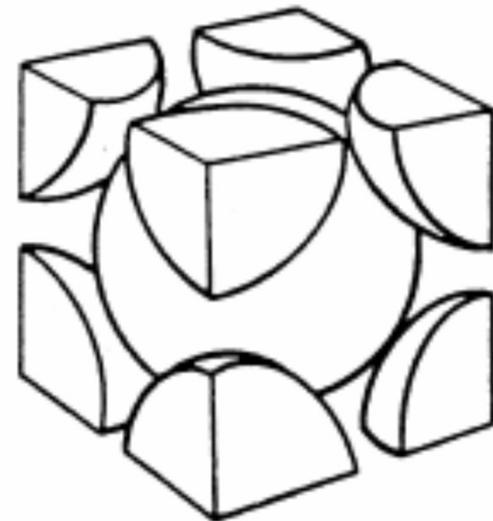
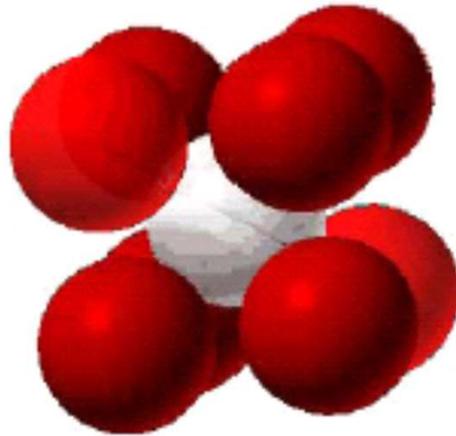
Cúbica centrada en las caras (FCC)

- FCC: Face Centered Cubic
- Las direcciones de mayor empaquetamiento son las diagonales de las caras del cubo.
- Todos los átomos son iguales pero los del centro tienen otro color para visualizarlo
- 4 átomos en cada celda unidad
- Número de coordinación NC = 12
- APF = 0,74



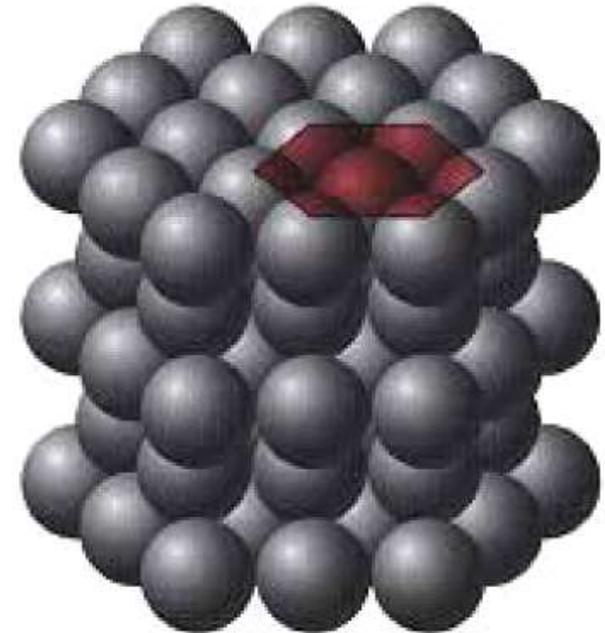
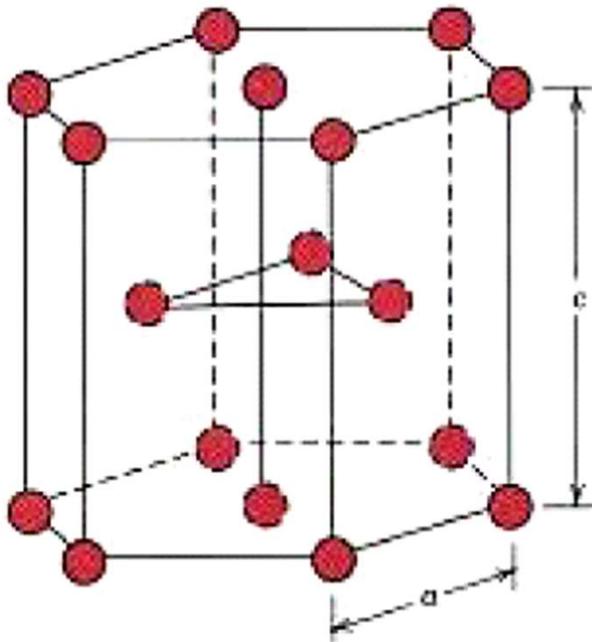
Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC)

- BCC: Body Centered Cubic
- Las direcciones de mayor empaquetamiento son las diagonales del cubo.
- Todos los átomos son iguales pero el del centro tiene otro color para visualizarlo
- 2 átomos en cada celda unidad
- Número de coordinación NC = 8
- APF = 0,68



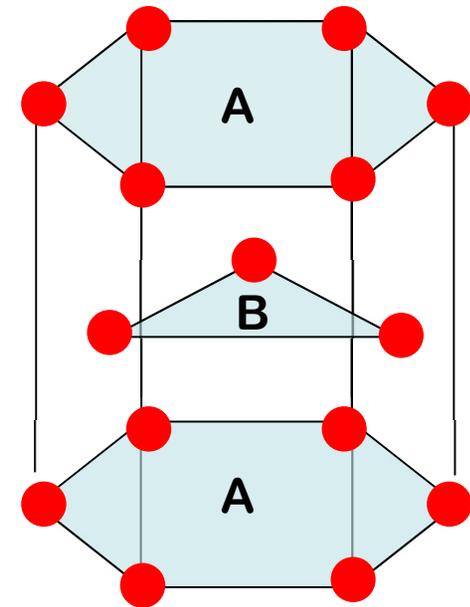
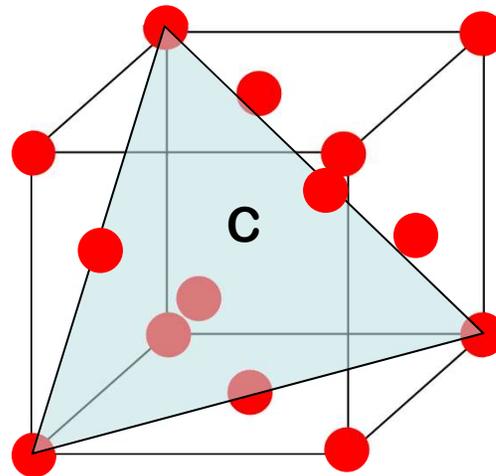
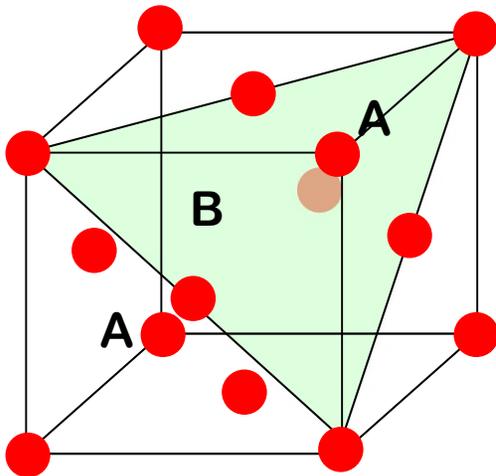
Hexagonal Compacta (HCP)

- HCP: Hexagonal Close – Packed
- Número de coordinación NC = 12
- APF = 0,74



Secuencia de apilamiento

- La Cúbica Centrada en las Caras (FCC) y la Hexagonal Compacta (HCP) tienen igual número de coordinación y factor de empaquetamiento. **¿Diferencias?**
- La diferencia está en la secuencia de apilamiento.
- En la FCC: ABCABCABC
- En la HCP: ABABABABA

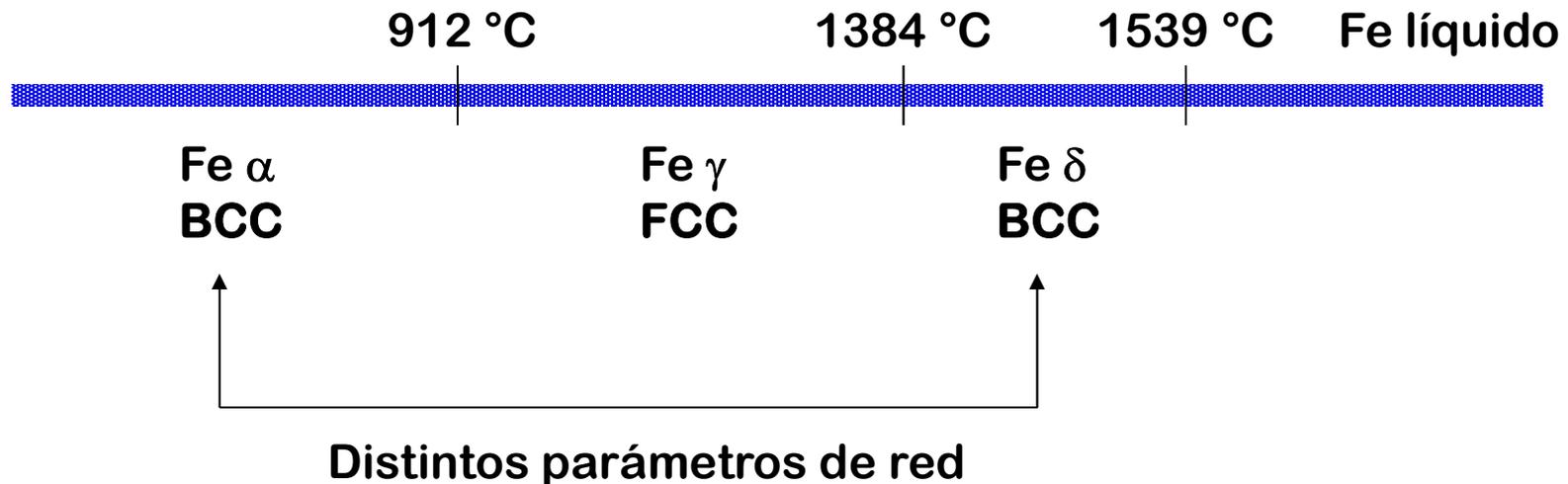


Sistemas de deslizamiento

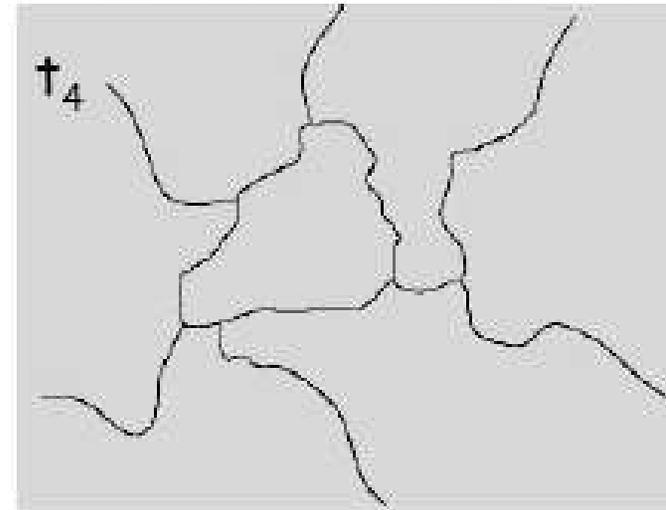
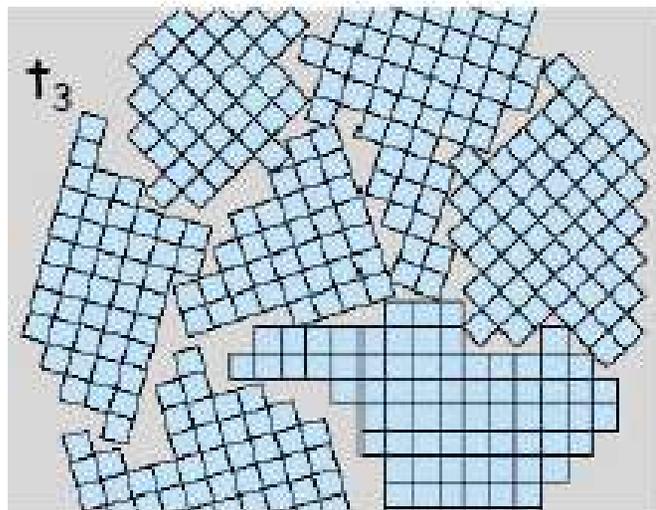
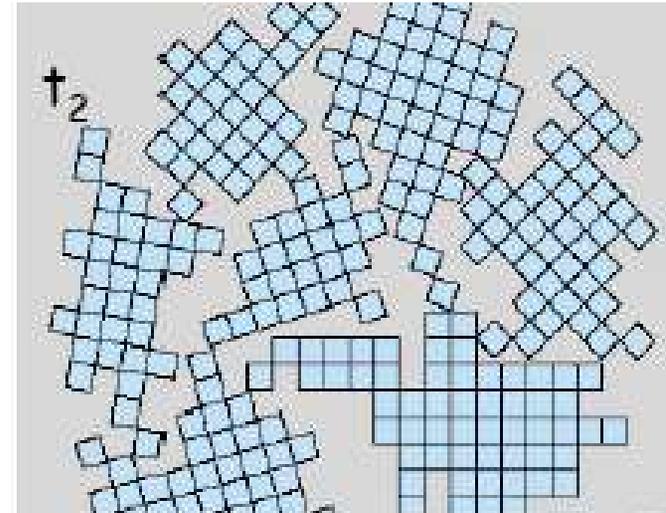
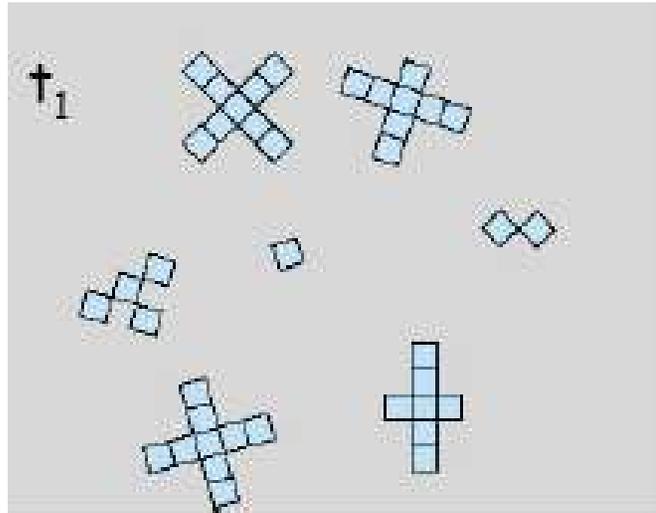
- En cristales simples hay planos preferenciales para el movimiento o planos de deslizamiento.
- Las direcciones y planos de deslizamiento son aquellos de mayor densidad de empaque. Los planos están más separados que los propios átomos y entonces es más fácil deslizarse unos sobre otros.
- Los cristales BCC y FCC tienen mayores sistemas de deslizamiento que los HCP.
- Entonces los materiales con **estructuras BCC y FCC son más dúctiles que los HCP.**

Polimorfismo o Alotropía

- Muchos elementos y compuestos existen en más de una forma cristalina bajo distintas condiciones de presión y temperatura. Este fenómeno se denomina **polimorfismo o alotropía**.
- El hierro Fe presenta distintas formas alotrópicas

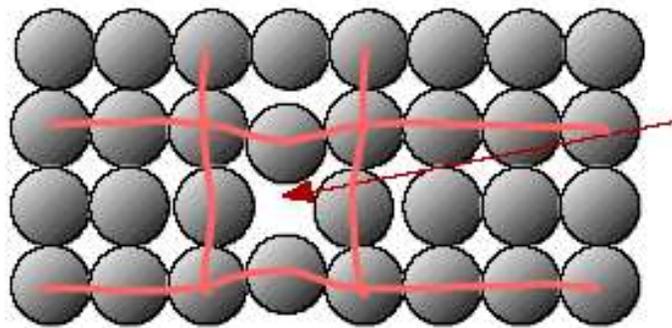


Proceso de cristalización

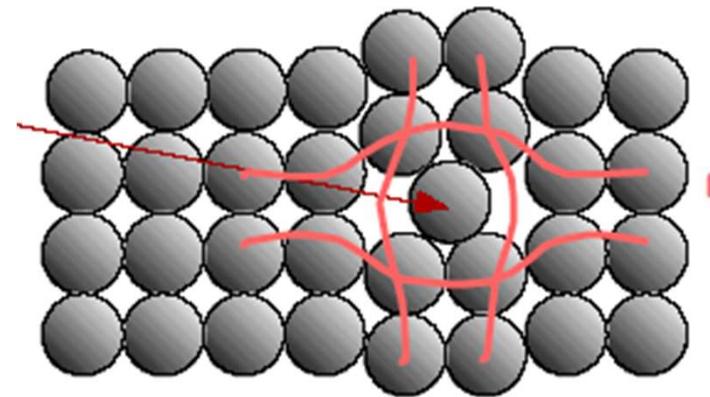


Imperfecciones cristalinas

- En la realidad, las estructuras cristalinas presentan imperfecciones. Estas imperfecciones pueden ser puntuales o de línea. Afectan las propiedades mecánicas como se verá más adelante.
- Entre las puntuales están las vacancias y los defectos

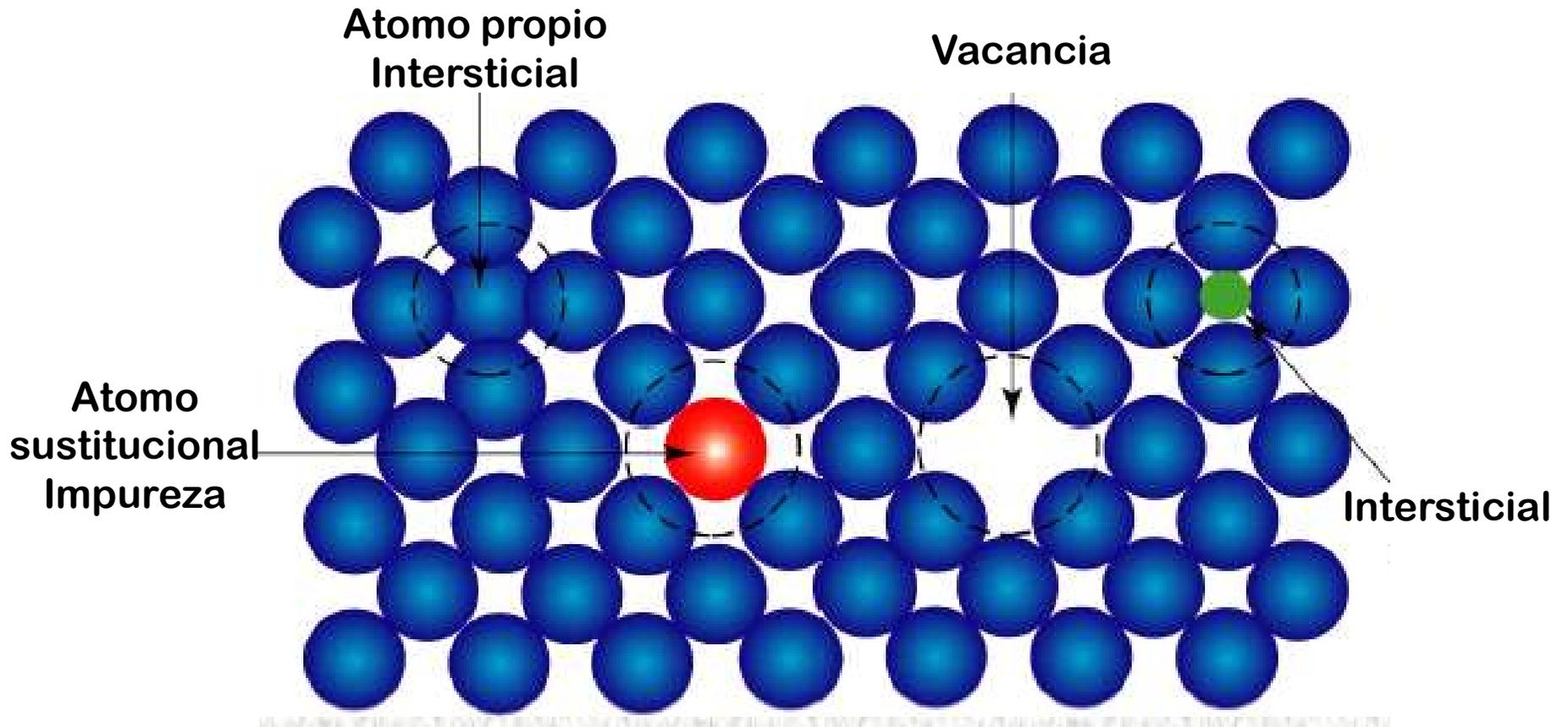


Vacancia



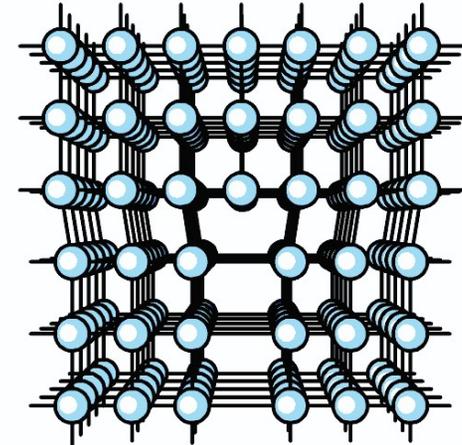
Intersticial

Imperfecciones cristalinas

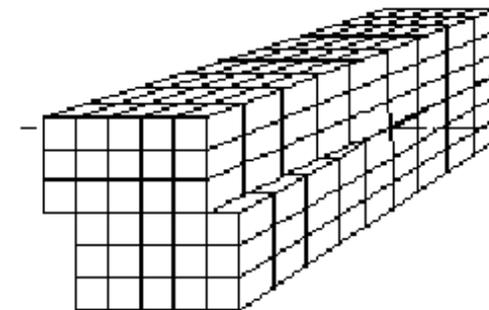


Imperfecciones de línea

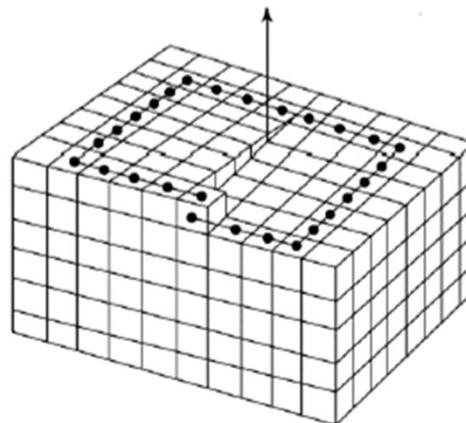
- Existen en general tres tipos de dislocaciones:
 - **De borde:** Comprende un plano extra de átomos dentro del reticulado. Arriba de la dislocación, la red está comprimida, por debajo está tensionada.



- **De tornillo:** Los planos cristalinos están desplazados o “retorcidos”



- **Combinadas**



Bordes de granos

- En los bordes de grano se rompe el ordenamiento y consecuentemente los átomos están más separados o apretados con energías de enlace “mayores” que en el caso ordenado.
- **Consecuencias?**

