

Práctica Laboratorio de Materiales aeroespaciales No. 1

Caracterización y análisis de estructuras cristalinas

Daniel Andrés González Llano, Pablo Ruiz Arias, Daniel Martínez Ferreira,
David Sebastián Álvarez Torres, Francisco Javier Sierra, Daniel
Enrique Aldana Lopera, Andrea Rodríguez Ospina

March 2, 2019

1 Introducción

Las estructuras cristalinas son primordiales para describir la organización de los átomos, permitiéndoles a los materiales asociarse en un estado más compacto, termodinámica-mente estable y proveyéndoles un orden claro a lo largo de los mismos; esto ocurre en la estructuración simétrica de los átomos, la cual surge en el estado sólido de la materia, en donde estos se disponen muy juntos.

En este registro experimental se pretende identificar y analizar mediante parámetros teóricos y técnicas de reconocimiento visual (como la refracción de rayos X en este caso) las estructuras que presentan los materiales más comúnmente usados en la industria aeronáutica actual, concretamente las estructuras cúbica simple (SC), cúbica centrada en las caras (FCC), cúbica centrada en el cuerpo (BCC) y hexagonal compacta (HCP).

2 Metodología

En primera instancia, para la adecuada realización e interpretación de la práctica que concierne al estudio y caracterización general de las estructuras cristalinas, se hizo necesario comprender las particularidades de las disposiciones atómicas en dichas estructuras, compuestas por una base y una red.

La construcción de las estructuras cristalinas en el software de diseño informático CATIA con base en los planteamientos de modelos y la representación de las estructuras tomados de *askeland2013essentials*, [1], permite una mejor comprensión de los conceptos enmarcados. Consiguientemente se procede a realizar la apreciación del número de coordinación, el número de átomos, el parámetro de red, el factor de empaquetamiento, el volumen de los átomos y las densidades de algunos materiales que corresponden a cada estructura con el fin de profundizar en la caracterización de las mismas. Esto se realiza de la forma siguiente:

2.1 Estructura simple cúbica (SC).

- Organización y número de coordinación de la estructura:

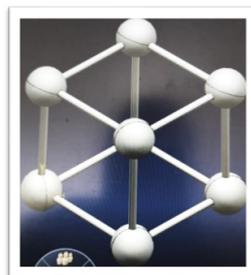


Figure 1: Simple cubic crystalline structure

Se observa que en esta estructura, las esferas no están empaquetadas tan contiguamente como se es posible, allí los átomos solo ocupan aproximadamente el 52% del volumen de la celda, lo que conlleva a que esta sea una disposición relativamente ineficiente. Un sólido con este tipo de disposición consiste en planos en los que cada átomo tiene contacto sólo con los cuatro vecinos más cercanos, un átomo directamente encima de él en el plano superior y un átomo directamente debajo de él en el plano inferior. El número de coordinación de este tipo de estructuras cristalinas corresponde a seis, y se puede apreciar en la figura 2. Las estructuras cúbicas simples tienen un sistema de deslizamiento cúbico, sin embargo están presentes en muy pocos materiales en la naturaleza.

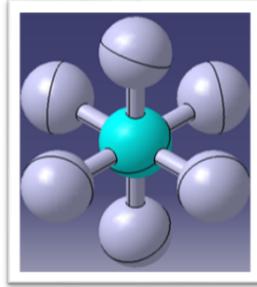


Figure 2: SC coordination number

- **Número de átomos de la estructura:**

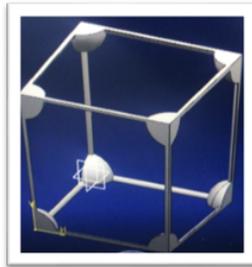


Figure 3: SC unit cell

$$\text{Número de átomos} = \frac{1 \text{ átomo}}{8 \text{ vértices}} \cdot 8 \text{ vértices} \quad (1)$$

- **Parámetro de red de la estructura:**

$$a_0 = r + r \quad (2)$$



Figure 4: SC lattice parameter

- **Factor de empaquetamiento de la estructura:**

$$FE = \frac{\frac{4\pi}{3}}{(2r)^3} \cdot (r^3) = \frac{4\pi(r)^3}{24r^3} \quad (3)$$

2.2 Estructura cúbica centrada en el cuerpo (BCC).

- Organización y número de coordinación de la estructura:

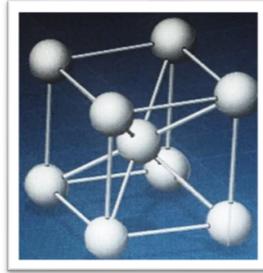


Figure 5: Body centered cubic crystalline structure

La estructura cúbica centrada en el cuerpo tiene átomos en cada una de las ocho esquinas del cubo más un átomo en el centro del mismo. Cada uno de los átomos del vértice es respectivamente el vértice de otro cubo, por lo que los átomos de la esquinas se comparten entre ocho celdas unitarias; de esta forma, se dice que tiene un número de coordinación de 8. La disposición BCC no permite que los átomos se agrupen tan cerca como las disposiciones FCC o HCP, pero aún así esta estructura es a menudo la forma común en metales a alta temperatura que se empaquetan a temperaturas más bajas; siendo más duros y menos maleables que los metales compactos. Estos cuentan con 48 sistemas de deslizamiento compactos permitiendo que el metal tenga ductilidad.

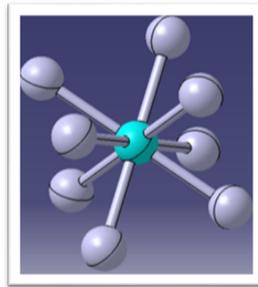


Figure 6: BCC coordination number

- Número de átomos de la estructura:

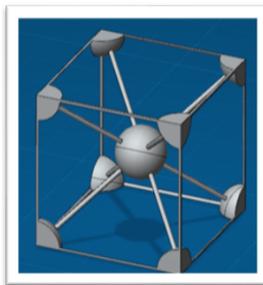


Figure 7: BCC unit cell

$$\text{Número de átomos} = \frac{1 \text{ átomo}}{8 \text{ vértices}} \cdot 8 \text{ vértices} + 1 \text{ átomo} \quad (4)$$

- Parámetro de red de la estructura:

$$4r = \sqrt{((\sqrt{2})a_0)^2 + a_0^2} \quad (5)$$

$$4r = \sqrt{2a_0^2 + a_0^2} \quad (6)$$

$$4r = \sqrt{3}a_0 \quad (7)$$

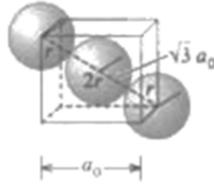


Figure 8: BCC lattice parameter

- **Factor de empaquetamiento de la estructura:**

$$FE = \frac{\frac{2 \cdot 4\pi}{3} \cdot (r^3)}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{8\pi(r)^3}{\frac{64\sqrt{3}}{3}r^3} \quad (8)$$

2.3 Estructura cúbica centrada en las caras (FCC).

- **Organización y número de coordinación de la estructura:**

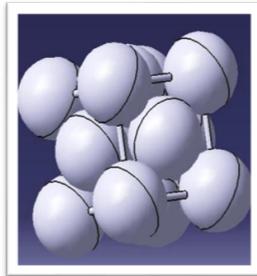


Figure 9: Face centered cubic crystalline structure

La estructura cúbica centrada en las caras tiene átomos ubicados en cada uno de los vértices y los centros de todas las caras. Cada uno de los átomos de los vértices es consiguientemente el vértice de otro cubo, por lo que los átomos de la esquina se comparten entre ocho celdas unitarias. Además, cada uno de sus seis átomos centrados en la cara se comparte con un átomo adyacente. Dado que se comparten 12 de sus átomos, se dice que tiene un número de coordinación de 12. En la estructura FCC hay 12 sistemas de deslizamiento y allí, los átomos pueden agruparse más juntos que en la estructura BCC. Los átomos de una capa se anidan en el espacio vacío entre los átomos de la capa adyacente.

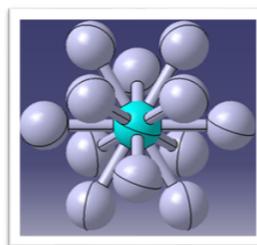


Figure 10: FCC coordination number

- **Número de átomos de la estructura:**

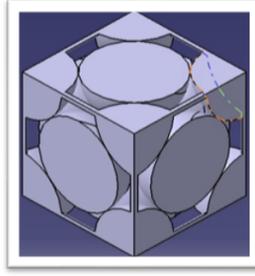


Figure 11: FCC unit cell

$$\text{Número de átomos} = \frac{1 \text{ átomo}}{8 \text{ vértices}} \cdot 8 \text{ vértices} + \frac{1 \text{ átomo}}{2 \text{ vértices}} \cdot 6 \text{ vértices} \quad (9)$$

- **Parámetro de red de la estructura:**

$$4r = \sqrt{a_0^2 + a_0^2} \quad (10)$$

$$4r = \sqrt{2a_0^2} \quad (11)$$

$$4r = \sqrt{2}a_0 \quad (12)$$

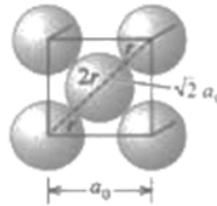


Figure 12: FCC lattice parameter

- **Factor de empaquetamiento de la estructura:**

$$FE = \frac{\frac{4 \cdot 4\pi}{3} \cdot (r^3)}{\left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3} = \frac{16\pi(r)^3}{48\sqrt{2}r^3} \quad (13)$$

2.4 Volúmenes y densidades de las estructuras de los materiales:

$$\text{Volúmen del átomo} = \frac{4\pi r^3}{3} \quad (14)$$

$$\rho = \frac{\text{Número de átomos} \cdot \text{masa}}{\text{Volúmen de la celda unitaria} \cdot \text{Número de Avogadro}} \quad (15)$$

FCC, BCC Y SC:

$$\text{Volúmen de la celda unitaria} = a_0^3 \quad (16)$$

HCP:

$$\text{Volúmen de la celda unitaria} = 0,833a_0^2 \cdot 1,633a_0 \quad (17)$$

Finalmente, se realizó un análisis mediante difracción de rayos x (XRD por sus siglas en inglés) a partir del cual se puede estimar el parámetro de red de una estructura cristalina, mediante los picos de difracción y los índices de Miller que se asocian a ellos, permitiendo encontrar de manera experimental dicho parámetro de red asociado al Fluoruro de Litio. La determinación experimental del parámetro de red para el cristal de LiF se hace empleando el equipo de rayos X marca PHYWE X-ray 4.0, mostrada en el anexo 15 . El procedimiento a seguir se enuncia a continuación:

- Obtener la gráfica del patrón de difracción para el cristal de LiF. A partir de dicha gráfica especifique los picos de difracción con ayuda de la figura 13, esto es, identifique la línea a la que corresponde cada pico, el orden de difracción al que está asociado y el índice de Miller que le corresponde.
- Obtener la separación entre planos d utilizando para ello la ecuación (1) y use este resultado para estimar el valor del parámetro a a partir de la ecuación (2). Tenga en cuenta que para realizar dicho cálculo debe conocer cuál es el valor de los índices de Miller asociados a los diferentes máximos de difracción presentes en el patrón del monocristal de LiF. Para el cálculo de los índices de Miller, tenga en cuenta que se utiliza un monocristal de Fluoruro de Litio, cortado paralelamente a una de las caras de la celda unitaria.

2.5 Procedimiento para determinar los índices:

- Se elige un plano que no pase por el origen de las coordenadas (0,0,0).
- Se determinan las intersecciones del plano de la función de los ejes cristalográficos para un cubo unidad. Estas intersecciones pueden ser fraccionarias.
- Se obtiene el recíproco de las intersecciones.
- Se simplifican las fracciones y se determina el conjunto más pequeño de números enteros que existen en las mismas proporciones que las intersecciones. La notación (h,k,l) se utiliza para indicar los índices de Miller en un sentido general.

2.6 Procedimiento para determinar la dirección:

- Determinar las coordenadas inicial y final. 2. Restar final menos inicial. 3. Reducir a enteros mínimos. 4. Representar los resultados entre [] y usando un guion sobre aquel número que resulte negativo. • a qué familias de planos se podrían asociar los índices de Miller (1 0 0)? Cúbica simple • a qué familias de planos se podrían asociar los índices (1 1 1)? Centrada en las caras

3 Resultados

3.1 Estructuras cristalinas

Table 1:

Elemento	Tipo de celda	Átomos por celda	masa atómica (g/mol)	Radio atómico (nm)
Fe - FCC	FCC	4	55,845	0,126
Cu	FCC	4	63,546	0,128
Au	FCC	4	196,967	0,166
Ag	FCC	4	107,868	0,172
Ni	FCC	4	58,693	0,163
Fe - BCC	BCC	2	55,845	0,126
Ti - BCC	BCC	2	47,867	0,147
Nb	BCC	2	92,906	0,215
Ta	BCC	2	180,948	0,220
Cr	BCC	2	51,996	0,128
Ti - HCP	HCP	6	47,867	0,215
Mg	HCP	6	24,305	0,173
Zn	HCP	6	65,380	0,139
Co	HCP	6	58,933	0,200
Cd	HCP	6	112,411	0,158
Po	SC	1	209,000	0,190
Mn- α .	SC	1	54,938	0,112

Table 2:

Elemento	Volumen átomo (nm ³)	Volumen celda (nm ³)	Densidad (g/cm ³)
Fe - FCC	0,008	0,045	8,198
Cu	0,009	0,047	8,898
Au	0,019	0,104	12,644
Ag	0,021	0,115	6,225
Ni	0,018	0,098	3,980
Fe - BCC	0,008	0,025	7,530
Ti - BCC	0,013	0,039	4,065
Nb	0,042	0,122	2,522
Ta	0,045	0,131	4,584
Cr	0,009	0,026	6,688
Ti - HCP	0,042	0,112	4,251
Mg	0,022	0,203	1,196
Zn	0,011	0,105	6,202
Co	0,034	0,313	1,877
Cd	0,017	0,154	7,261
Po	0,029	0,055	6,327
Mn- α .	0,006	0,011	8,120

Table 3:

Elemento	Ecuación parámetro de red	Parámetro de red (nm)
Fe - FCC	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	0,356
Cu	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	0,362
Au	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	0,470
Ag	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	0,486
Ni	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	0,461
Fe - BCC	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	0,291
Ti - BCC	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	0,339
Nb	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	0,497
Ta	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	0,508
Cr	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	0,296
Ti - HCP	$a_0 = 2r$	0,430
Mg	$a_0 = 2r$	0,346
Zn	$a_0 = 2r$	0,278
Co	$a_0 = 2r$	0,400
Cd	$a_0 = 2r$	0,316
Po	$a_0 = 2r$	0,380
Mn- α .	$a_0 = 2r$	0,224

3.2 Difracción de rayos X

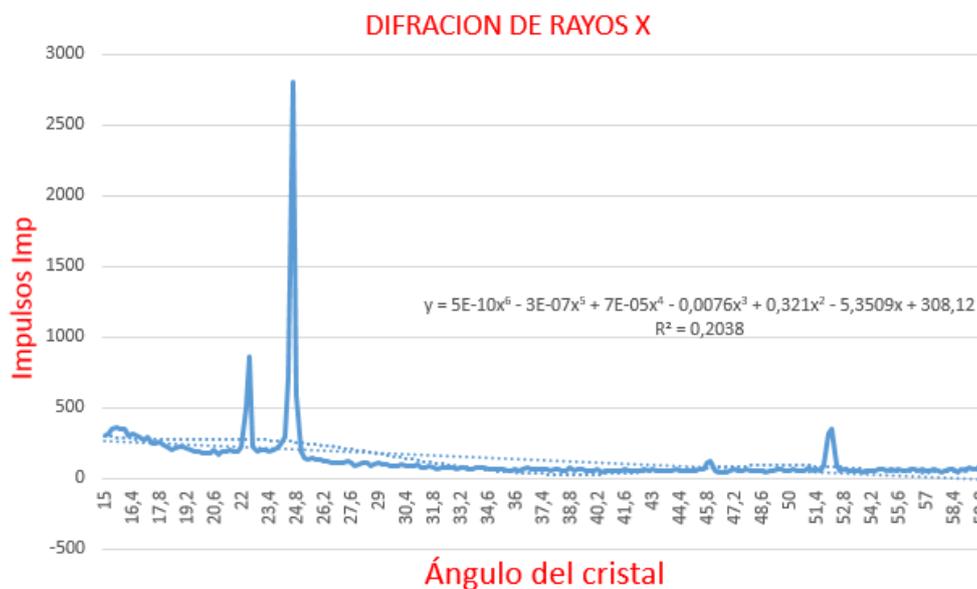


Figure 13: Difracción de rayos X

Índice de Miller (1 1 1)

4 Análisis

Tomando en cuenta toda la información anteriormente presentada, se puede evidenciar como las propiedades mecánicas de los materiales cambian según su estructura cristalina, estructura la cual depende de variables como el factor de empaquetamiento, el parámetro de red, los planos de deslizamiento, entre otros. Por ejemplo, teniendo la estructura BCC, se puede observar que los átomos están más juntos, esto hace que el material sea más duro, pero al mismo tiempo, menos

dúctil. Mientras que, en la estructura FCC, ocurre todo lo contrario, los átomos no se encuentran tan juntos debido a su parámetro de red y , por lo tanto, estas estructuras se hacen más dúctiles, pero con menor dureza. Los planos de deslizamiento juegan un papel muy importante en las propiedades mecánicas de cualquier material. El plano de deslizamiento es aquel que contiene la línea de dislocación y el vector de Burgers. Ambos permiten que al momento en que un esfuerzo cortante sea aplicado en dirección paralela al vector de Burgers a un cristal que tenga al menos una dislocación, este tenga la capacidad de deslizarse. Este proceso es lo que permite la deformación plástica de los materiales.

Con la ayuda del instrumento de difracción de rayos X y posterior a su acomodación y comprensión de funcionamiento apoyada en *Quantitative interpretation of X-ray diffraction patterns of mixtures. II*, [2]. El principal fenómeno que se evidencia en el experimento es el de la difracción de ondas lumínicas, que permite modelar el comportamiento de una onda cuando encuentra un obstáculo de dimensión comparable a su longitud de onda, generando interferencia constructiva cuando el ángulo de incidencia sobre el obstáculo es un múltiplo entero de la longitud de onda. Existen cuatro picos porque en el experimento se observan dos órdenes de difracción (las ondas del rayo de fotones se reflejan en dos planos adyacentes), y a cada uno de estos corresponden dos ángulos que satisfacen la ecuación de Bragg, ya que el valor del seno de un ángulo en verdad corresponde a otro ángulo también. Éstos ángulos se encuentran en el primer y segundo cuadrante del plano cartesiano, y los puntos de intersección sobre la circunferencia unitaria tienen la misma componente vertical, esto se puede apreciar en el texto *X-ray diffraction in crystals, imperfect crystals, and amorphous bodies*, [3].

5 Conclusiones

lalalala

6 Anexos



Figure 14: Celda de fluoruro de litio



Figure 15: Maquina de X-ray PHYWE



Figure 16: Computado para la toma de datos de la maquina X-RAY

References

- [1] D. R. Askeland and W. J. Wright, *Essentials of materials science & engineering*. Cengage Learning, 2013.
- [2] F. H. Chung, "Quantitative interpretation of x-ray diffraction patterns of mixtures. ii. adiabatic principle of x-ray diffraction analysis of mixtures," *Journal of Applied Crystallography*, vol. 7, no. 6, pp. 526–531, 1974.
- [3] A. Guinier, *X-ray diffraction in crystals, imperfect crystals, and amorphous bodies*. Courier Corporation, 1994.