

Química del Estado Sólido

Estados de agregación y sus características físicas más generales.

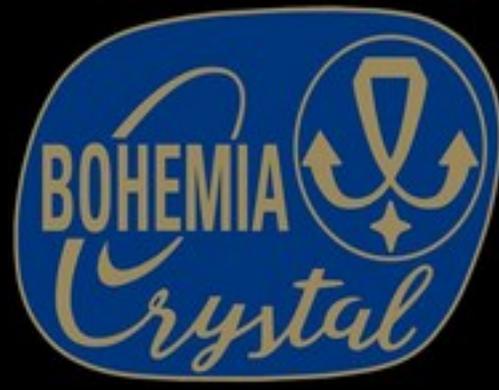
- Gases
- Líquidos
- Sólidos
 - a) amorfos
 - b) cristalinos
- Cristales líquidos
- plasma
- Campo electromagnético

Existe alguna característica
(microscópica o macroscópica ?) que
verdaderamente podría distinguirlos ?

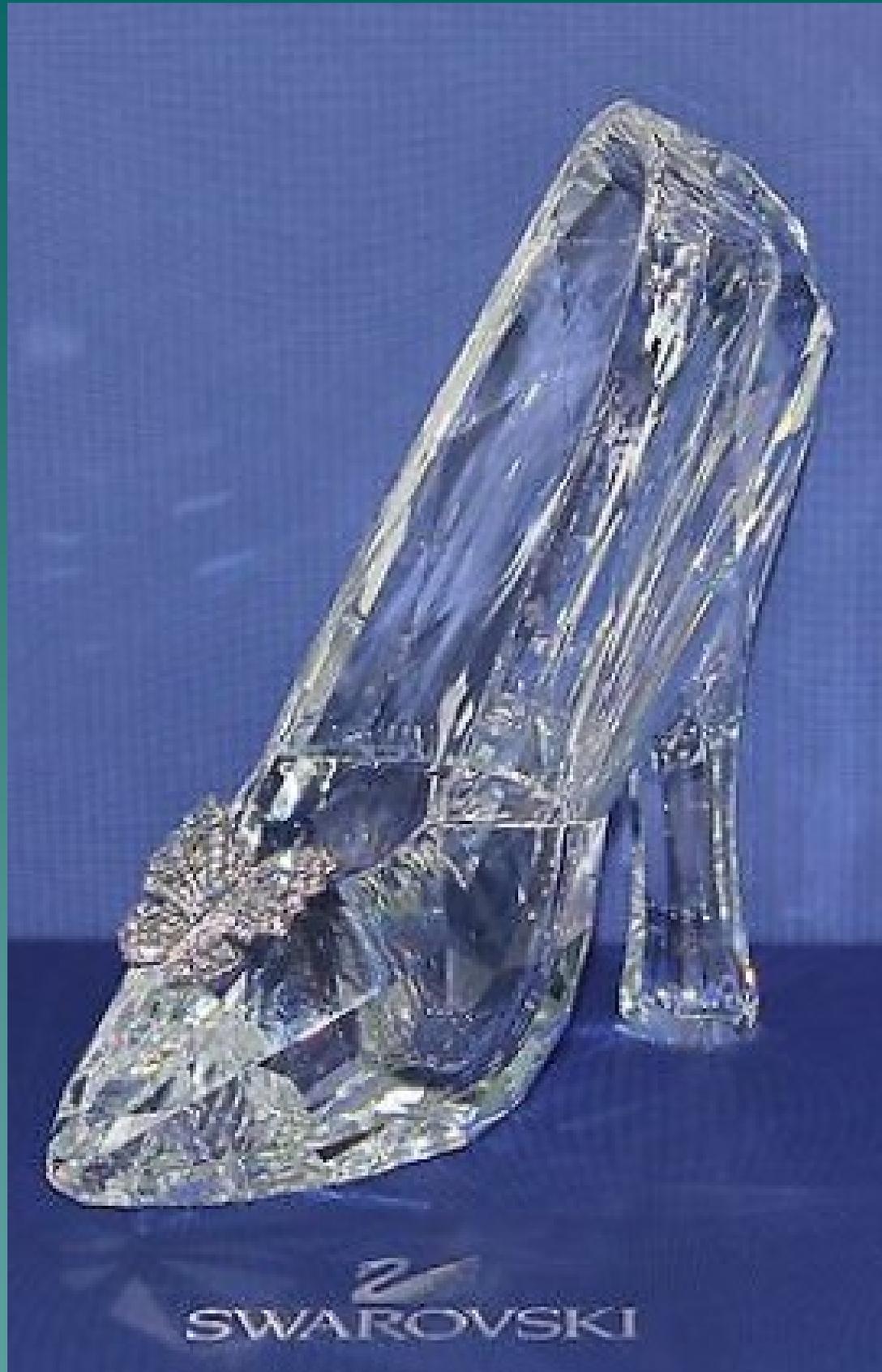
Primero entre ellos

Para los sólidos en particular ?

Una breve introducción a los vidrios



The Throne



5×10^5 USD

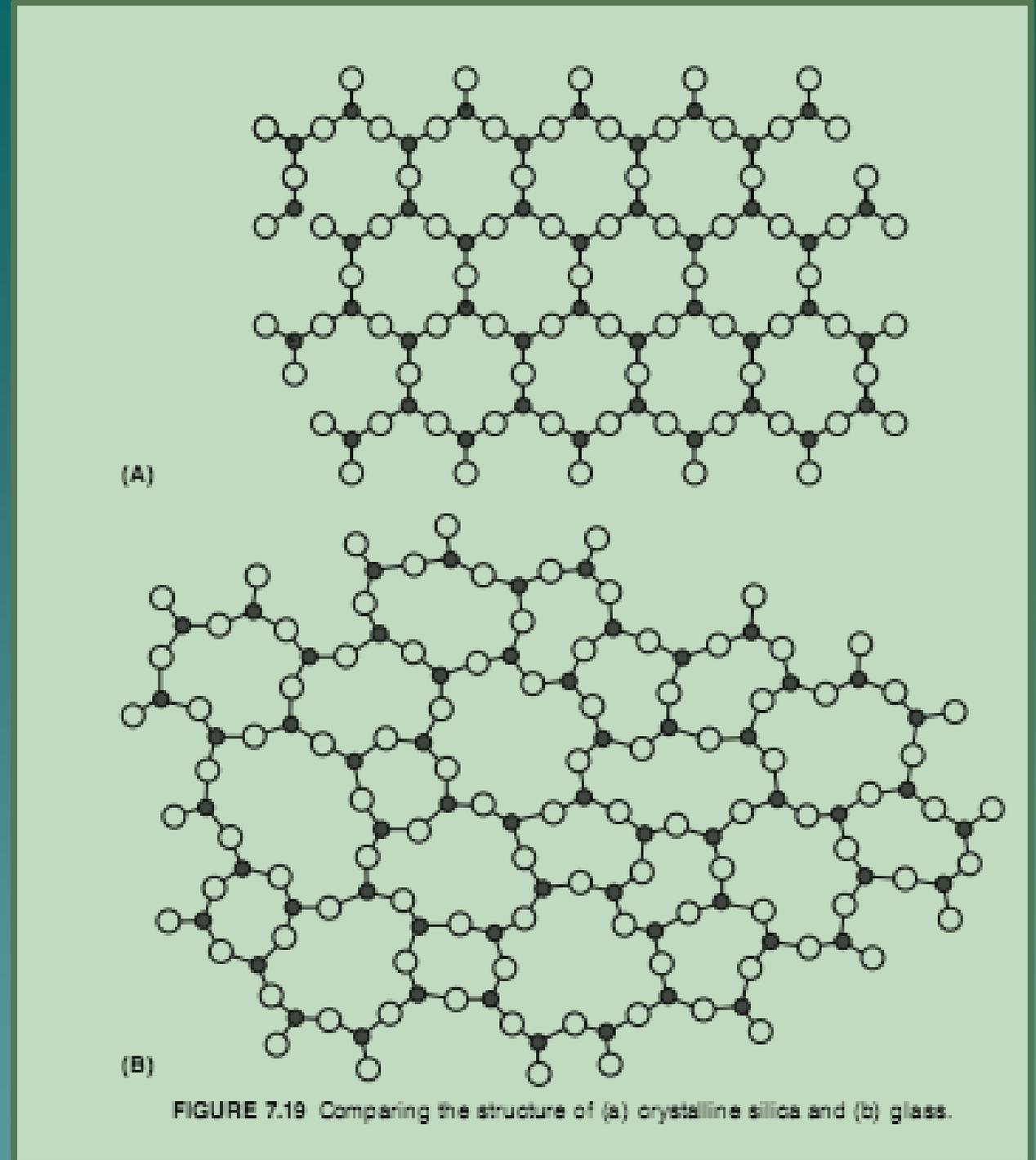
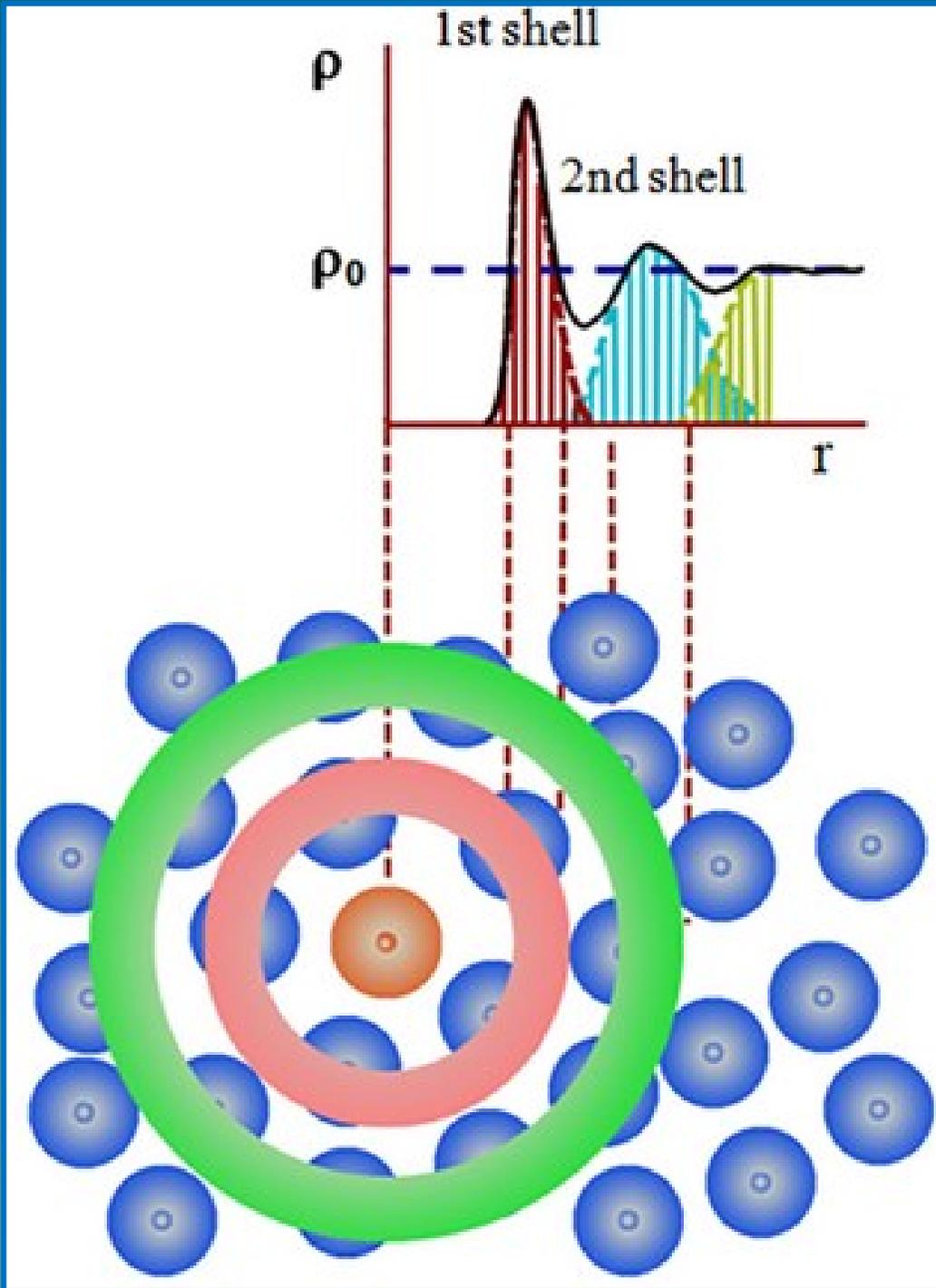
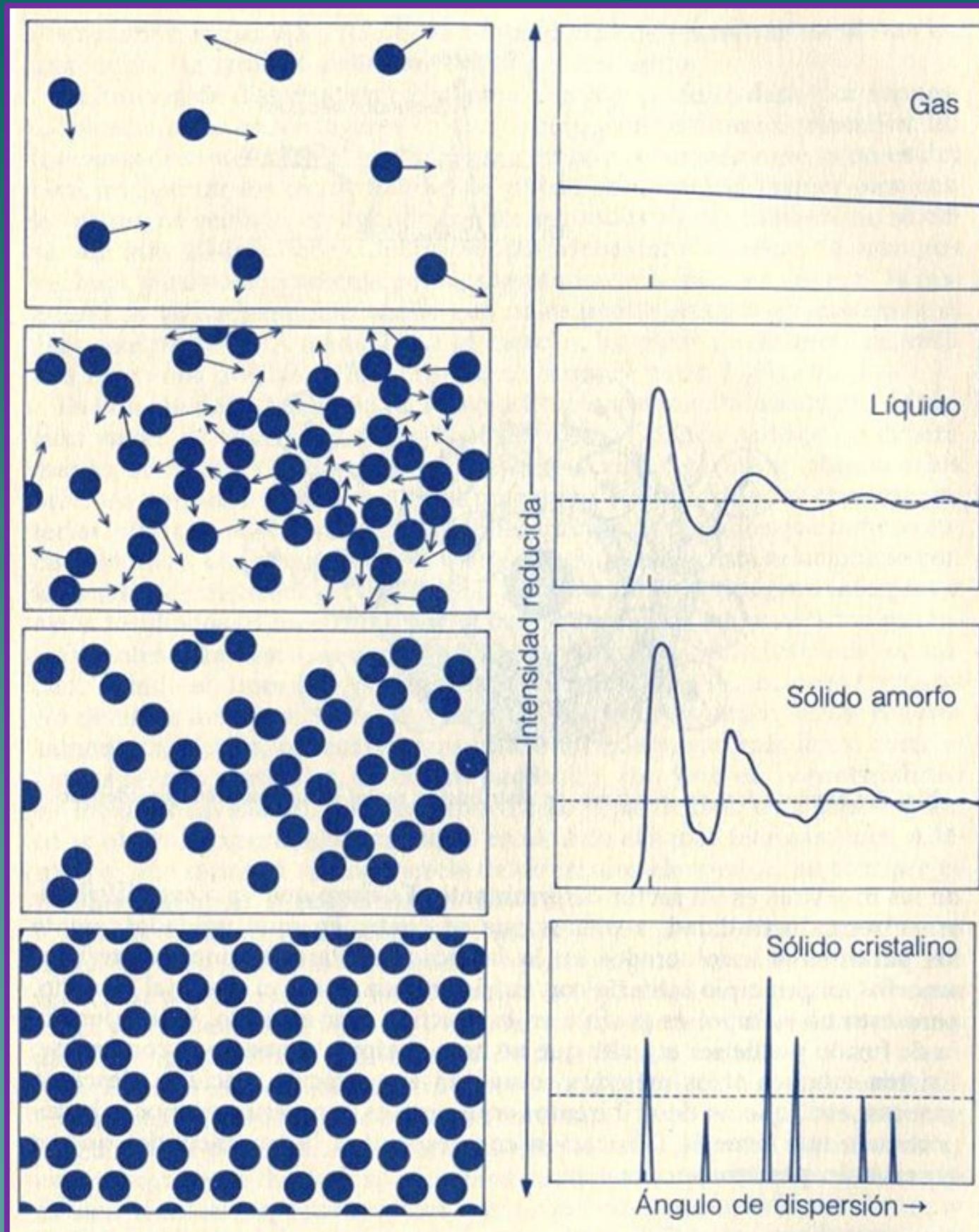


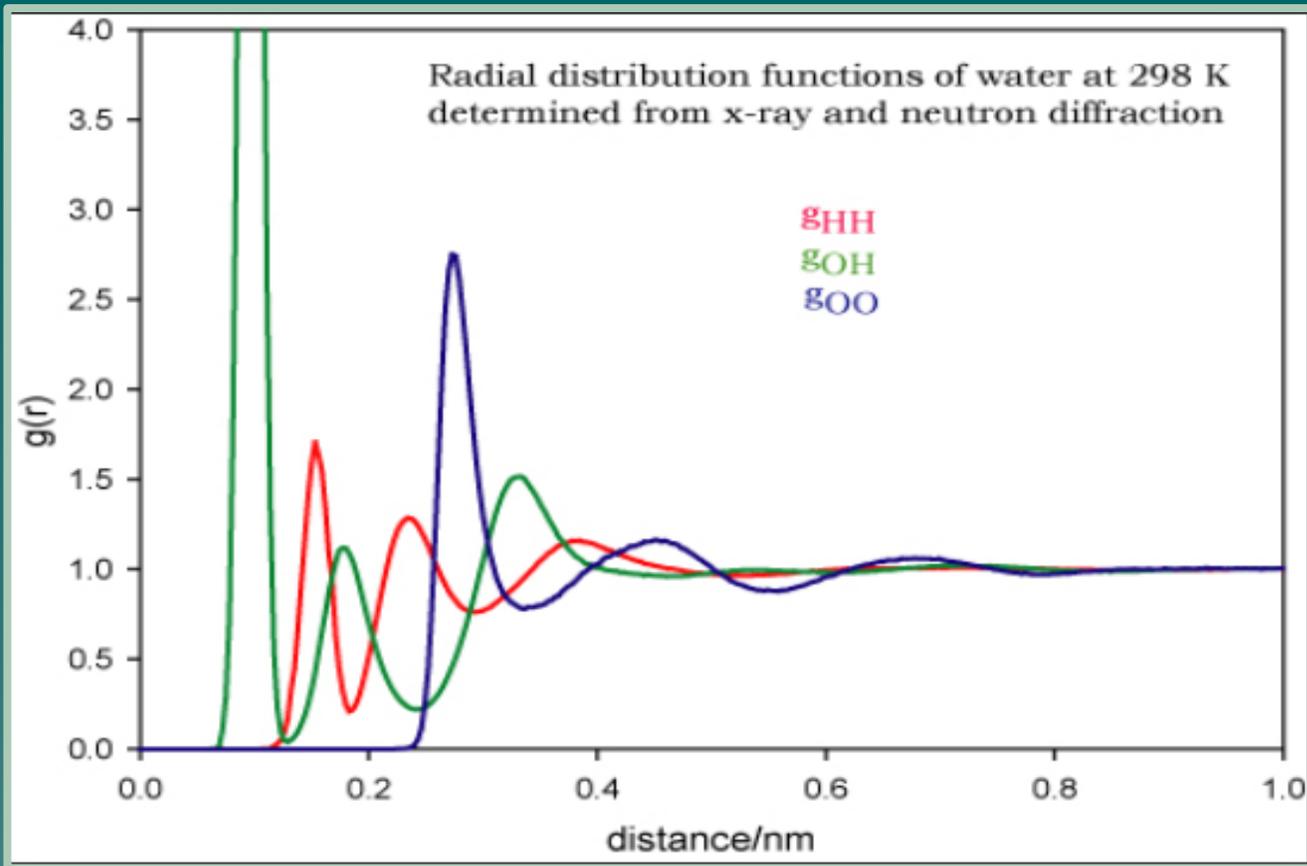
FIGURE 7.19 Comparing the structure of (a) crystalline silica and (b) glass.

http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1516-14392017000200326

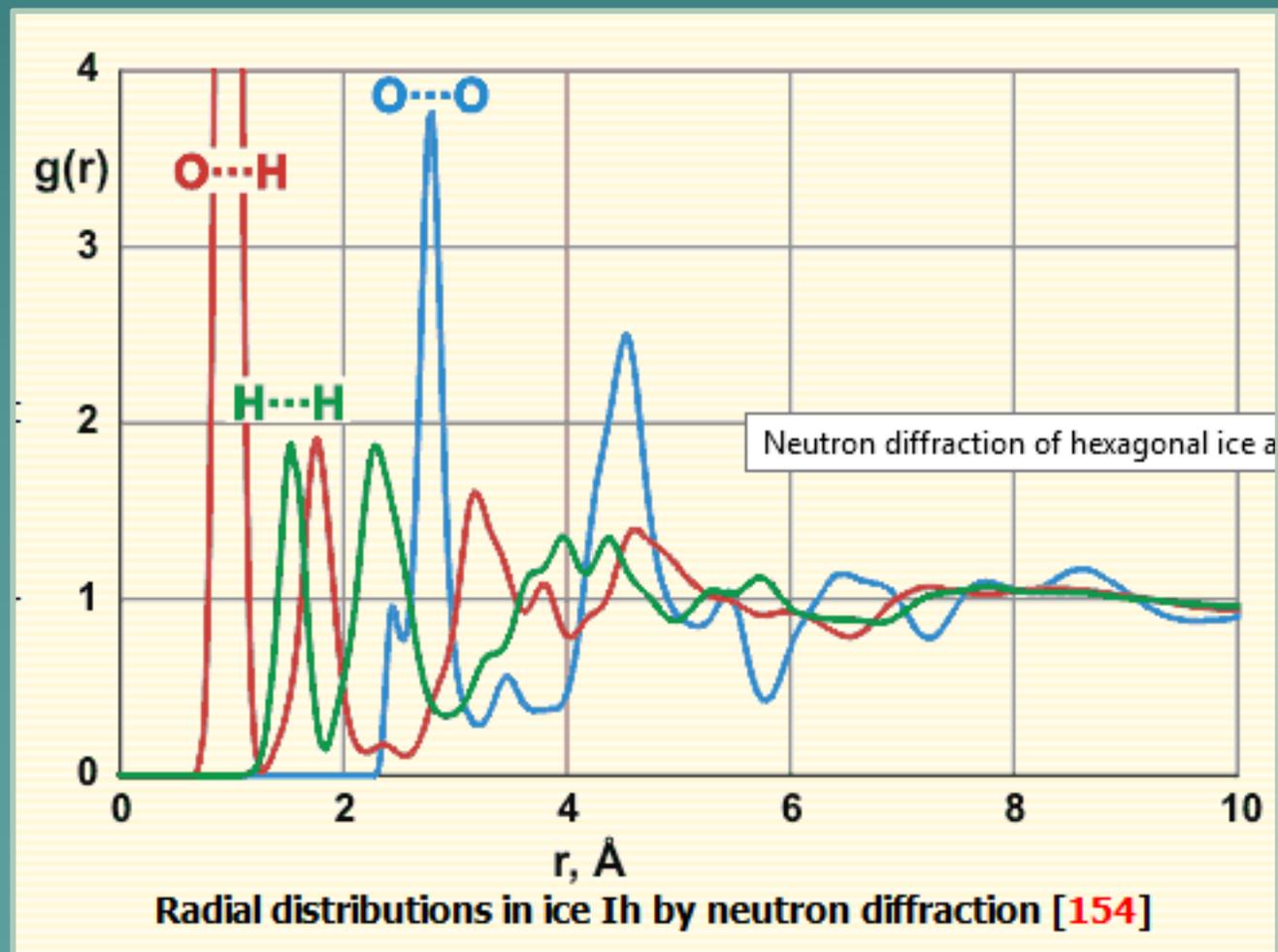
Estructura de cristobalita (111) y vidrio
Ambos tienen una composición SiO_2

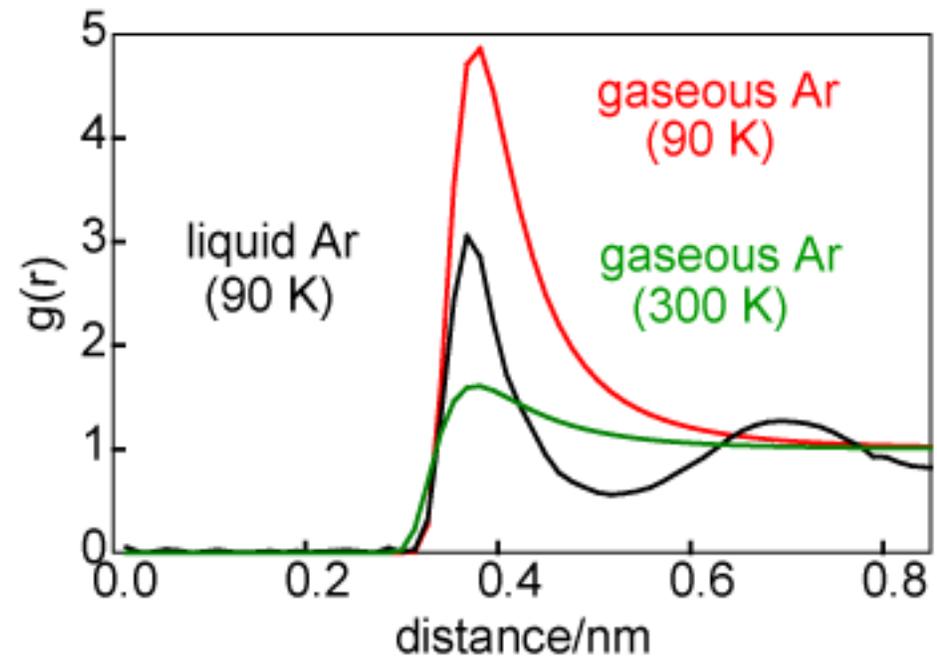
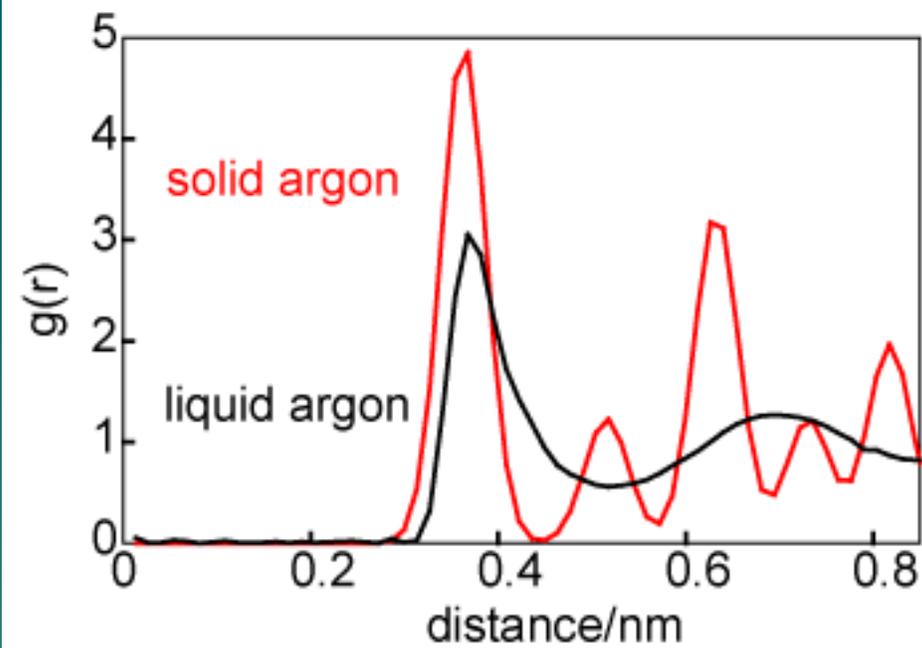
Maneras en las que se verían las PDF para diferentes “agregados”



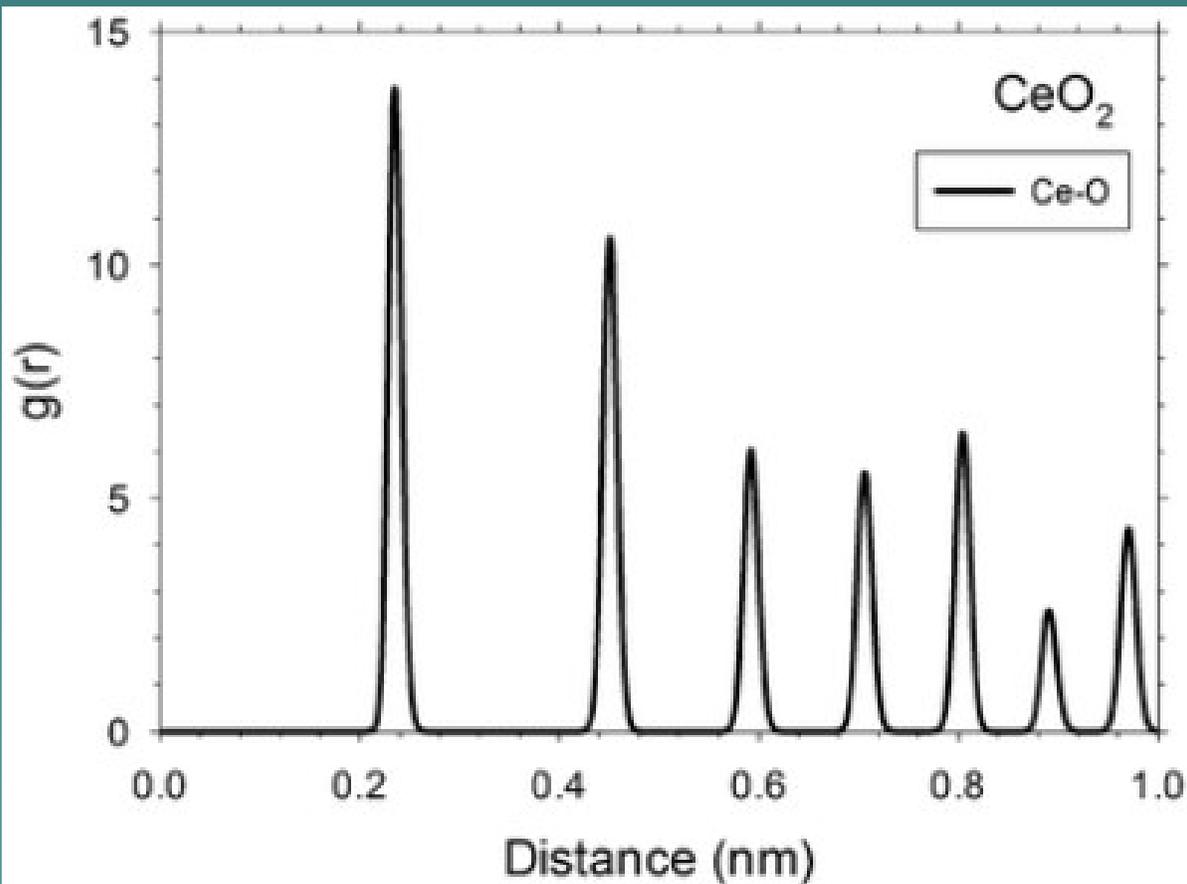


http://www1.lsbu.ac.uk/water/water_methods.html





<http://rkt.chem.ox.ac.uk/lectures/liqsolns/liquids.html>



Función radial de pares para ceria

<http://pubs.rsc.org/-/content/articlelanding/2013/ra/c2ra22745b#!divAbstract>

No viene mal una definición:

The American Society for Testing and Materials (ASTM) definition: *An inorganic product of fusion that has cooled to a rigid condition without crystallizing.*

Alternative definition 1: *Glass is a solid material that does not show long-range order.*

Alternative definition 2: *Glass is a liquid that has lost its ability to flow.*

Alternative definition 3: *A solid assembly of vertex-sharing tetrahedra lacking long-range order.*

Pero, y los polímeros? y los metales vidriados?

Los óxidos (cationes) que forman los vidrios se consideran:

1. Formadores de cadenas. Son los cationes que forman los poliedros de coordinación en el vidrio (como Si)
2. Modificadores de cadenas y que no participan directamente en la red (como Na)
3. Cationes intermediarios que juegan un papel dual (Al)

<i>Formers</i>		<i>Intermediates</i>		<i>Modifiers</i>	
<i>Dopant</i>	<i>CN</i>	<i>Dopant</i>	<i>CN</i>	<i>Dopant</i>	<i>CN</i>
Si	4			Li	1
Ge	4			Na	1
B	3			K	1
Al	3	Al	3	Cs	1
P	5			Rb	1
V	5	Be	2	Be	2
As	5			Mg	2
Sb	5			Ca	2
Zr	4	Zr	4	Ba	2
				Sr	2
		Zn	2	Zn	2
		Cd	2	Cd	2
				Hg	2
				Ga	3
				Sn	4
		Pb	2	Pb	4

Ocurre un cambio de estado?

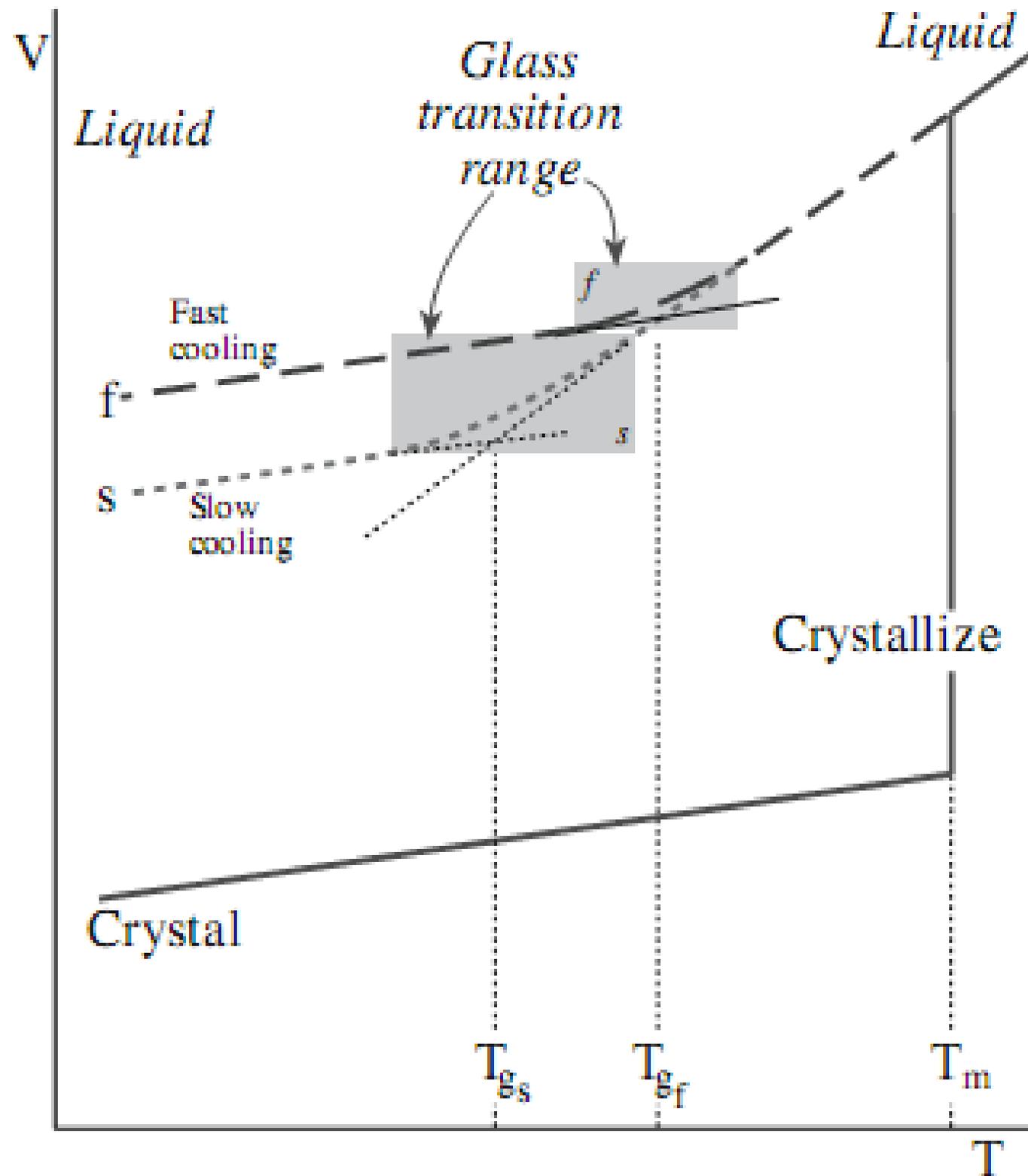


TABLE 21.2 Viscosity “Milestones”

<i>Viscosity</i>	<i>Example</i>
10^{-2} dPa·s	Water at 20°C
10^0 dPa·s	Light machine oil
10^1 dPa·s	Heavy machine oil
10^2 dPa·s	Olive oil at 20°C
10^4 dPa·s	Runny honey at 20°C; some measure it to be 10^2 dP-s
10^4 dPa·s	Glass at its working point; begin working at 10^3
$10^{7.6}$ dPa·s	Shortening point (deforms under its own weight; softening at $10^{7.7}$) ^a
10^9 dPa·s	Upper limit for low viscosity
10^{13} dPa·s	Annealing point (ASTM)
$10^{13.4}$ dPa·s	Glass at T_g
$10^{14.6}$ dPa·s	The strain point of glass (ASTM)
$>10^{15}$ dPa·s	Solid
10^{18} dPa·s	Upper limit for measuring viscosity

^aThe shortening point is also called the softening point.

VISCOSITY AND POISE

If a force of 1 dyn is required to move an area of 1 cm² of liquid or gas relative to a second layer 1 cm away at a speed of 1 cm s⁻¹, then the viscosity is one P (poise).

$$1 \text{ P} = 1 \text{ dPa}\cdot\text{s}$$

<i>Viscosity</i>	<i>Example</i>
10^{-2} dPa·s	Water at 20°C
10^0 dPa·s	Light machine oil
10^1 dPa·s	Heavy machine oil
10^2 dPa·s	Olive oil at 20°C
10^4 dPa·s	Runny honey at 20°C; some measure it to be 10^2 dP-s
10^4 dPa·s	Glass at its working point; begin working at 10^3
$10^{7.6}$ dPa·s	Shortening point (deforms under its own weight; softening at $10^{7.7}$) ^a
10^9 dPa·s	Upper limit for low viscosity
10^{13} dPa·s	Annealing point (ASTM)
$10^{13.4}$ dPa·s	Glass at T_g
$10^{14.6}$ dPa·s	The strain point of glass (ASTM)
$>10^{15}$ dPa·s	Solid
10^{18} dPa·s	Upper limit for measuring viscosity

TABLE 21.4 Colors Produced by the Inclusion of Different Ions in a Glass

Copper	Cu^{2+}	Light blue (red ruby glass for Cu nanoparticles)
	Cu^+	Green and blue (includes turquoise blue)
Chromium	Cr^{3+}	Green
	Cr^{6+}	Yellow
	$\text{Cr}^{3+} + \text{Sn}^{4+}$	Emerald green
Manganese	Mn^{3+}	Violet (present in some Egyptian glasses)
	Mn^{2+}	Weak yellow/brown (orange/green fluorescence)
Iron	Fe^{3+}	Yellowish-brown or yellow-green
	Fe^{2+}	Bluish-green
	FeS	Dark amber
Cobalt	Co^{2+}	Intense blue (especially if K^+ is present); in borates and borosilicates, pink
	Co^{3+}	Green
Nickel	Ni^{2+}	Grayish-brown, yellow, green, blue to violet, depending on glass
Vanadium	V^{3+}	Green in silicates; brown in borates
Titanium	Ti^{3+}	Violet (melting under reducing conditions)
Neodymium	Nd^{3+}	Reddish-violet
Praseodymium	Pr^{3+}	Light green
Cerium	Ce^{3+}	Green
	Ce^{4+}	Yellow
Uranium	U	Yellow (known as "Vaseline glass")
Gold	Au	Ruby (ruby gold, Au nanoparticles)

TABLE 21.6 Approximate Composition (wt%) of Some Commercial Glasses

<i>Glass</i>	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	BaO	Na_2O	K_2O	SO_3	F_2	ZnO	PbO	B_2O_3	<i>Se</i>	<i>CdO</i>	<i>CuO</i>
Container flint	72.7	2.0	0.06	10.4		0.5	13.6	0.4	0.3	0.2						
Container amber	72.5	2.0	0.1	10.2		0.6	14.4	0.2	S-0.02	0.2						
Container flint	71.2	2.1	0.05	6.3	3.9	0.5	15.1	0.4	0.3	0.1						
Container flint	70.4	1.4	0.06	10.8	2.7	0.7	13.1	0.6	0.2	0.1						
Window green	71.7	0.2	0.1	9.6	4.4		13.1		0.4							
Window	72.0	1.3		8.2	3.5		14.3	0.3	0.3							
Plate	71.6	1.0		9.8	4.3		13.3		0.2							
Opal jar	71.2	7.3		4.8			12.2	2.0		4.2						
Opal illumination	59.0	8.9		4.6	2.0		7.5			5.0	12.0	3.0				
Ruby selenium	67.2	1.8	0.03	1.9	0.4		14.6	1.2	S-0.1	0.4	11.2		0.7	0.3	0.4	
Ruby	72.0	2.0	0.04	9.0			16.6	0.2		Trace						0.05
Borosilicate	76.2	3.7		0.8			5.4	0.4					13.5			
Borosilicate	74.3	5.6		0.9		2.2	6.6	0.4					10.0			
Borosilicate	81.0	2.5					4.5						12.0			
Fiber glass	54.5	14.5	0.4	15.9	4.4		0.5			0.3			10.0			
Lead tableware	66.0	0.9		0.7		0.5	6.0	9.5				15.5	0.6			
Lead technical	56.3	1.3					4.7	7.2				29.5	0.6			
Lamp bulb	72.9	2.2		4.7	3.6		16.3	0.2	0.2				0.2			
Heat absorbing	70.7	4.3	0.8	9.4	3.7	0.9	9.8	0.7		Trace			0.5			

El vidrio es inerte. Esto depende del ambiente. Es Casi cierto si el vidrio es un silicato y es importante si va a contener desechos radiactivos, pero no todos los vidrios Son inertes. **Bioglass**® está diseñado para no ser inerte.

El vidrio es homogéneo. Esto depende de cómo fue formado y de su composición Podemos procesar vidrio para hacer que no sea homogéneo.

El vidrio puede ser casi absolutamente reformado. Esto es generalmente cierto y es el Por lo que el vidrio es tan reciclable. Algunos vasos son Diseñados de manera que puedan modificarse por la luz, fusión, por irradiación, etc.

El vidrio tiene un pequeño coeficiente de expansión. Esto suele ser cierto, pero no todo el vidrio es Pyrex.

El vidrio es transparente. Esto es esencial para las fibras ópticas, pero podemos hacerla translúcida u opaca. La mayoría de las primera gafas no eran muy transparentes porque contenían impurezas e inclusiones.

El vidrio es barato. Esto es cierto para los vidrios de ventana desde la invención del proceso de vidrio flotado. Las películas finas pueden ser costoso. Algunos vidrios pueden ser de color rojo, dopándolo con Au. Algunos floreros pueden costar > \$ 50 k.

El vidrio es un material de bulto. Esto es cierto a menos que crezcamos como película delgada o está presente como una película intergranular (IGF) o como una fase especial dentro o sobre una cerámica cristalina (haciendo un compuesto).

Propiedades eléctricas. Es un buen dieléctrico, pero no tan bueno como para ser usado como dieléctrico en los dispositivos de electricidad, como las resinas fenólicas y algunos polímeros.

Propiedades ópticas: El dopaje de vidrio con tierras raras (RE); las RE tienen bandas de emisión particularmente estrechas. De los 13 iones de RE, (Dy, Tm, Ce y Tb) se pueden excitar con UV y radiación utilizada en microscopía de fluorescencia, pero interfiere con otras marcas fluorescentes

Propiedades térmicas:

Vidrios heterogéneos con regiones de inmiscibilidad, vidrios Vycor y biovidrios

Vidrio de fosfato

Los vidrios de fosfato son importantes porque son semiconductores; una aplicación se encuentra en la fabricación de multiplicadores (por lo tanto, amplificadores) usando dopaje con Er (con Er_2O_3). Los cationes aquí son generalmente V y P, pero Oak Ridge National Laboratory (ORNL) desarrolló un vidrio de fosfato de indio que tiene un alto índice de refracción, una baja temperatura de fusión, y es transparente en una amplia gama de longitudes de onda. Dado que también puede disolver concentraciones significativas de elementos de tierras raras (puede ser un contenedor de desechos radiactivos), se está estudiando para nuevos dispositivos ópticamente activos (por ejemplo, amplificadores de fibra óptica y láseres). Nd-dopado (usando Nd_2O_3) lentes de fosfato se utilizan en los láseres de estado sólido (1.054 μm de

Dado que también puede disolver concentraciones significativas de elementos de tierras raras (puede ser un contenedor de desechos radiactivos), se está estudiando Para nuevos dispositivos ópticamente activos (por ejemplo, amplificadores de fibra óptica y láseres). Nd-dopado (usando Nd_2O_3) lentes de fosfato se utilizan en los láseres de estado sólido ($1.054 \mu\text{m}$ de longitud de onda). La composición típica es $60\text{P}_2\text{O}_5\text{-}10\text{Al}_2\text{O}_3\text{-}30\text{M}_2\text{O}$ (o MES); las concentraciones de Nd son $\sim 0,2\text{-}2,0\%$ molar.

TABLE 21.6 Approximate Composition (wt%) of Some Commercial Glasses

Glass	SiO_2	Al_2O_3	Fe_2O_3	CaO	MgO	BaO	Na_2O	K_2O	SO_3	F_2	ZnO	PbO	B_2O_3	<i>Se</i>	<i>CdO</i>	<i>CuO</i>
Container flint	72.7	2.0	0.06	10.4		0.5	13.6	0.4	0.3	0.2						
Container amber	72.5	2.0	0.1	10.2		0.6	14.4	0.2	S-0.02	0.2						
Container flint	71.2	2.1	0.05	6.3	3.9	0.5	15.1	0.4	0.3	0.1						
Container flint	70.4	1.4	0.06	10.8	2.7	0.7	13.1	0.6	0.2	0.1						
Window green	71.7	0.2	0.1	9.6	4.4		13.1		0.4							
Window	72.0	1.3		8.2	3.5		14.3	0.3	0.3							
Plate	71.6	1.0		9.8	4.3		13.3		0.2							
Opal jar	71.2	7.3		4.8			12.2	2.0		4.2						
Opal illumination	59.0	8.9		4.6	2.0		7.5			5.0	12.0	3.0				
Ruby selenium	67.2	1.8	0.03	1.9	0.4		14.6	1.2	S-0.1	0.4	11.2		0.7	0.3	0.4	
Ruby	72.0	2.0	0.04	9.0			16.6	0.2		Trace						0.05
Borosilicate	76.2	3.7		0.8			5.4	0.4					13.5			
Borosilicate	74.3	5.6		0.9		2.2	6.6	0.4					10.0			
Borosilicate	81.0	2.5					4.5						12.0			
Fiber glass	54.5	14.5	0.4	15.9	4.4		0.5			0.3			10.0			
Lead tableware	66.0	0.9		0.7		0.5	6.0	9.5				15.5	0.6			
Lead technical	56.3	1.3					4.7	7.2				29.5	0.6			
Lamp bulb	72.9	2.2		4.7	3.6		16.3	0.2	0.2				0.2			
Heat absorbing	70.7	4.3	0.8	9.4	3.7	0.9	9.8	0.7		Trace			0.5			

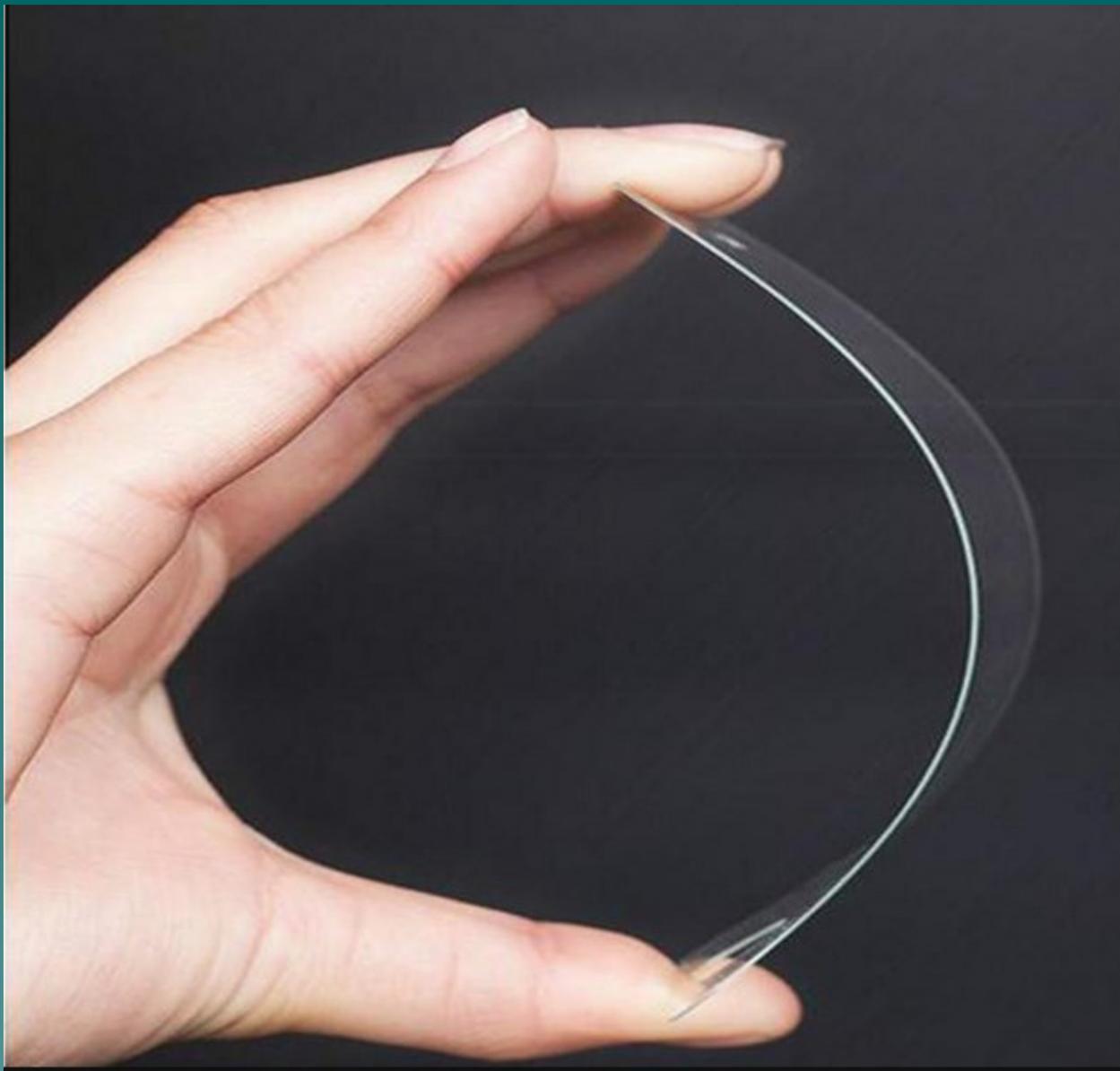


Physical Property	Units	Single Crystal	Glass					Sintered Ceramics	
		Sapphire	Gorilla Glass™ (Corning)	Xensation™ (Schott)	Dragontrail™ (AGC)	Soda Lime Glass	Fused Silica	ALON™	Spinel
Density	g/cm ³	3.97 ¹	2.42 ³	2.48 ⁴	2.48 ⁹	2.50 ⁹	2.2 ¹⁷	3.69 ¹⁰	3.58 ⁷
Young's Elastic Modulus	GPa	345 ¹	71.5 ³	74 ⁴	74 ⁹	73 ⁹	73 ¹⁷	323 ¹⁰	276 ⁷
Mean Flexure Strength	MPa	895 ¹	—	—	—	40 ⁵	50 ²²	379 ¹⁰	170 ⁷
Shear Modulus	GPa	145 ¹	29.6 ³	30 ⁴	30 ⁹	30 ⁹	31 ¹⁷	130 ¹⁰	130 ¹⁸
Fracture Toughness	MPa√m	2.3 ²	0.68 ³	—	—	0.7-0.8 ⁵	0.66 ¹⁸	2.0 ¹⁰	1.5 ⁷
Knoop Hardness	GPa	18.6 ³	6.17 ³	6.26 ⁴	6.95 ⁹	6.03 ⁹	4.9 ¹⁹	13.8 ⁸	12.1 ⁸
Vickers Hardness	kg/mm ²	2200 ¹¹	649 ³	681 ⁴	673 ⁹	580 ¹⁴	1000 ²⁰	16.2 ²¹	1650 ⁷
Dielectric Constant	k'	9.39 ¹	7.23 ³	6.7 ¹³	—	7.75 ¹⁴	3.82 ¹⁷	9.2 ¹⁰	8.2 ¹⁵
Refractive Index	η	1.76 ¹²	1.51 ³	1.52 ¹³	1.51 ⁹	1.52 ⁹	1.45 ¹⁹	1.78 ¹⁰	1.72 ⁷

Corning Gorilla Tempered Glass



0.15mm





PREMIUM CURVE & FLEXIBLE GLASS

SCREEN PROTECTOR

- Delicate Touch
- Oleophobic Coating
- Whole Transparency

9H G TEMPERED GLASS

- HD Clarity
- Long Life
- Bubble Free
- Anti Shatter

INSTALLATION GUIDE :



CAUTION :

- When removed for re-use the adhesive properties might wear off to an extent. It's generally not recommended to reuse the glass once it's been applied.
- Using excessive force when installing or removing the screen protector may damage the product.



Made in India

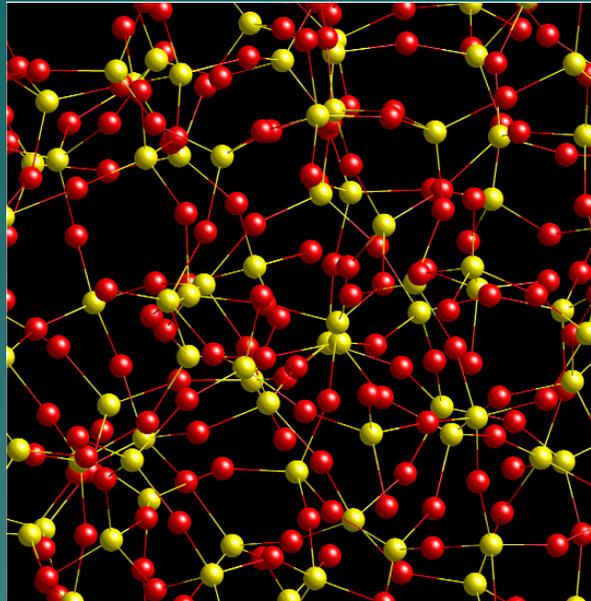
FEATURES

- 9H 9H HARDNESS TEMPERED GLASS**
2 Times Stronger than PET Material
- Anti Scratch & Anti Shatter**
Made with advanced heat tempered glass
- OLEOPHOBIC NANO COATING**
Fingerprint, oil and smudge resistant
- HD Ultra - Clearness**
Pure Transparency and perfect clarity
- Maximum Touch RESPONSIVENESS**
Smooth touch and universal sensitivity
- Ultra - Slim Tempered Glass**
Almost invisible layer



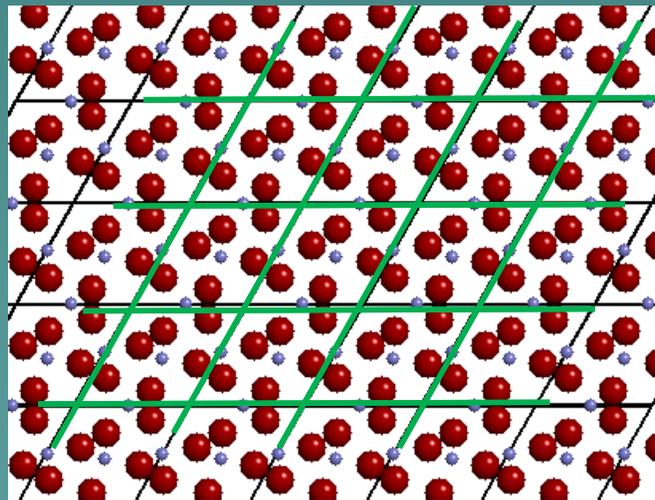
the most trusted brand for mobile Curve glass and Flexible glass

Dos grandes divisiones de los sólidos

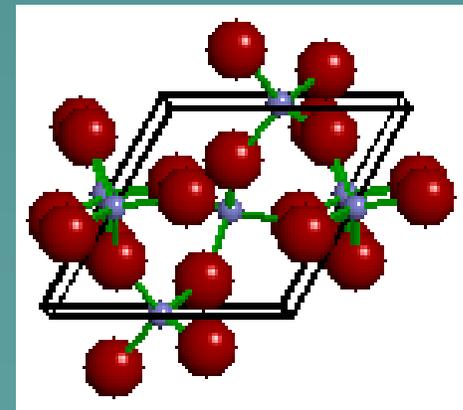


SiO₂ vidrio

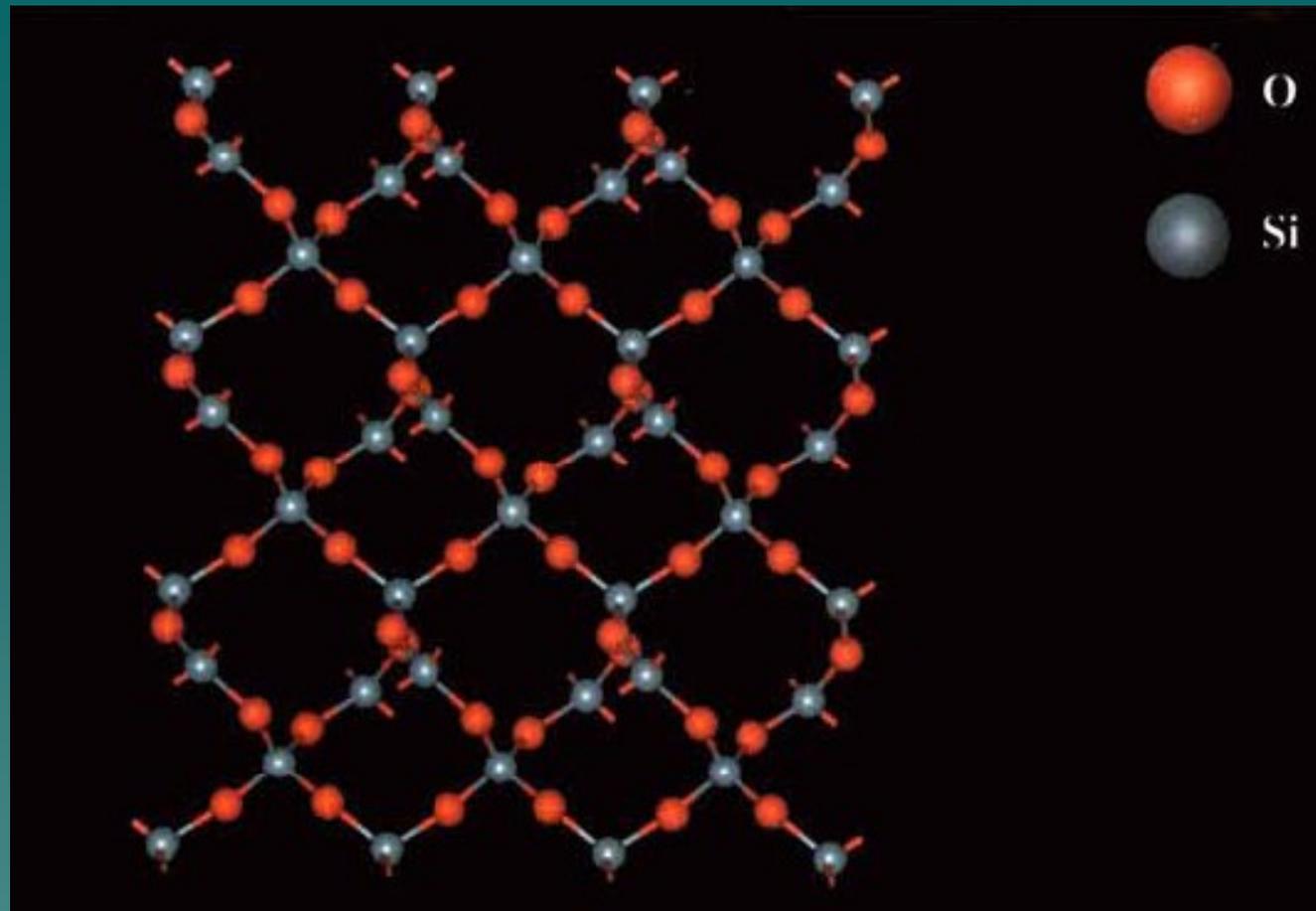
Se trata de una simulación por computadora con las restricciones de composición de un vidrio de SiO₂



Proyección en un plano de la estructura del cuarzo SiO₂



Aquí se muestra la estructura de cuarzo en 3D



Habito cristalino de un cristal de cuarzo

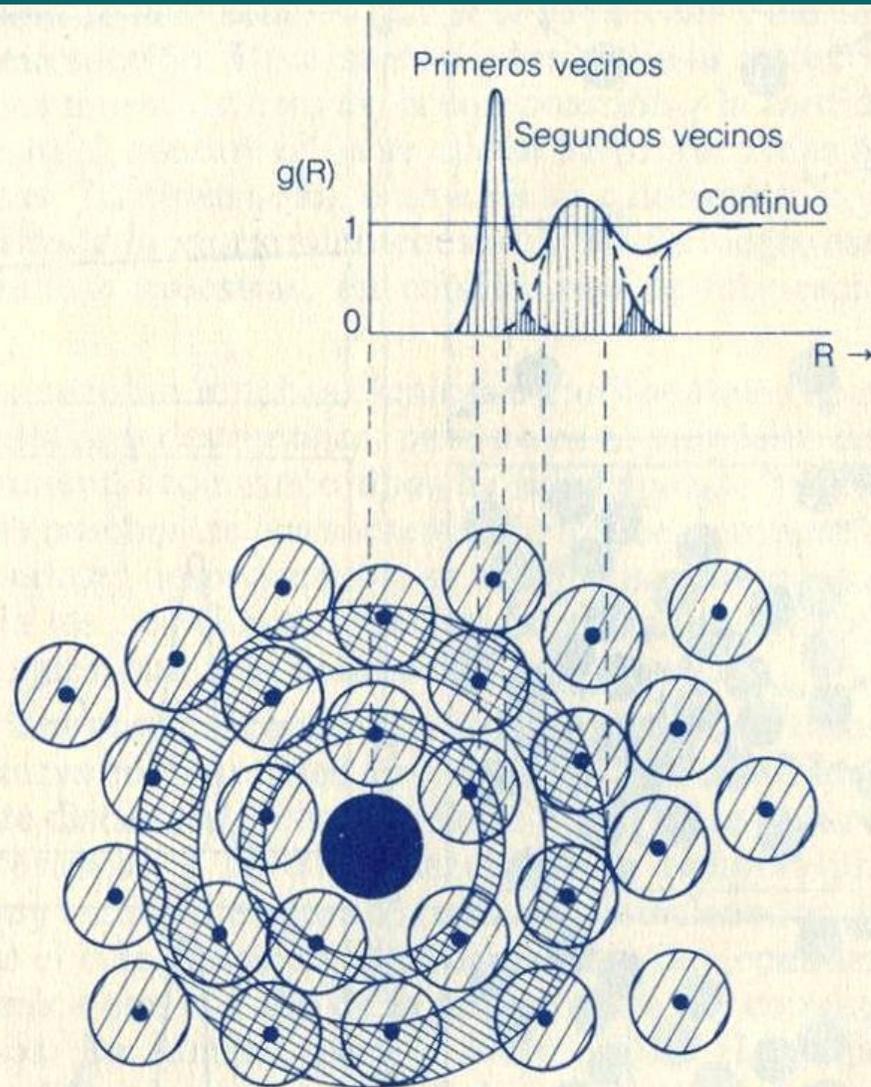


Fig. 6. Características de la función de distribución radial en un material desordenado.

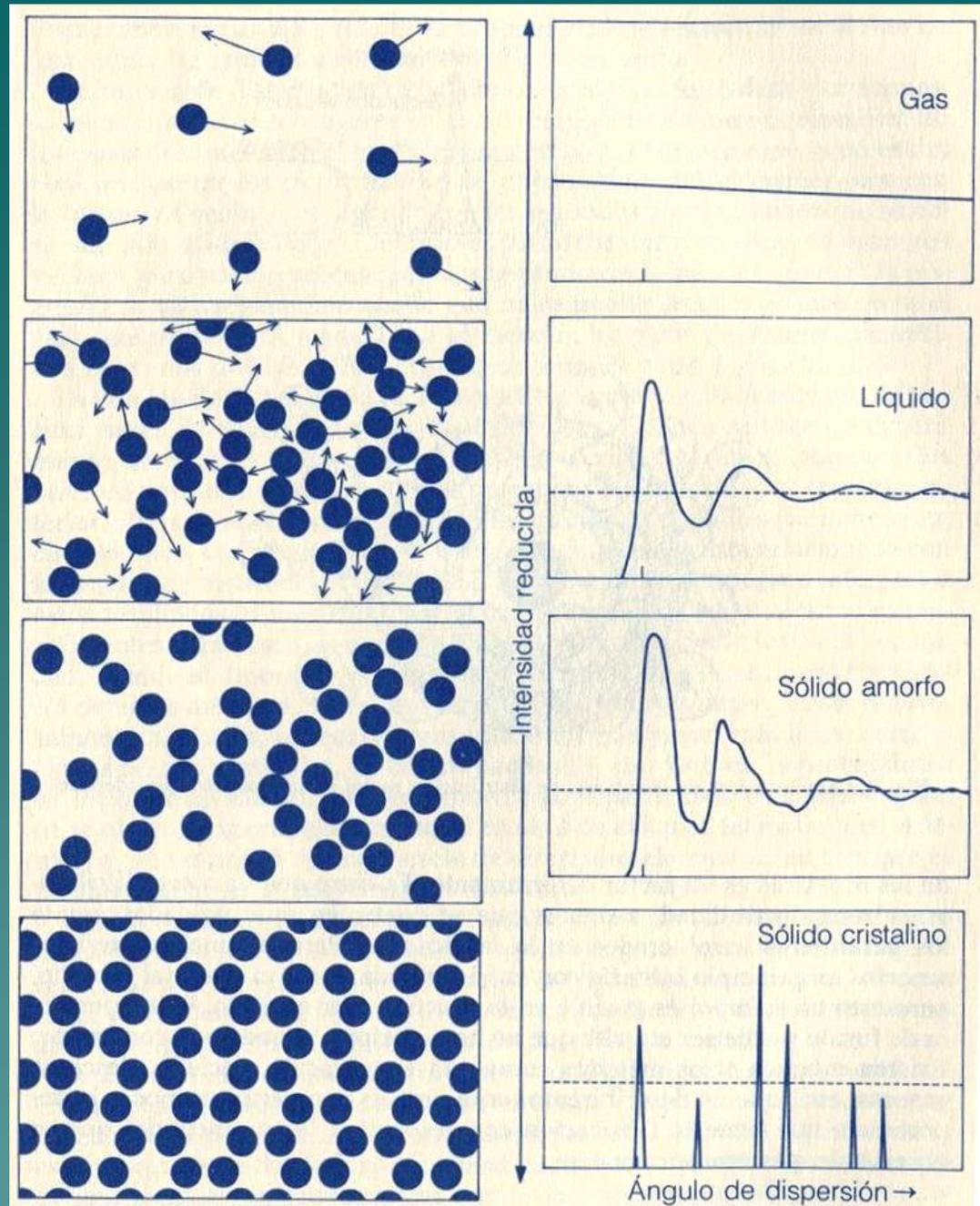
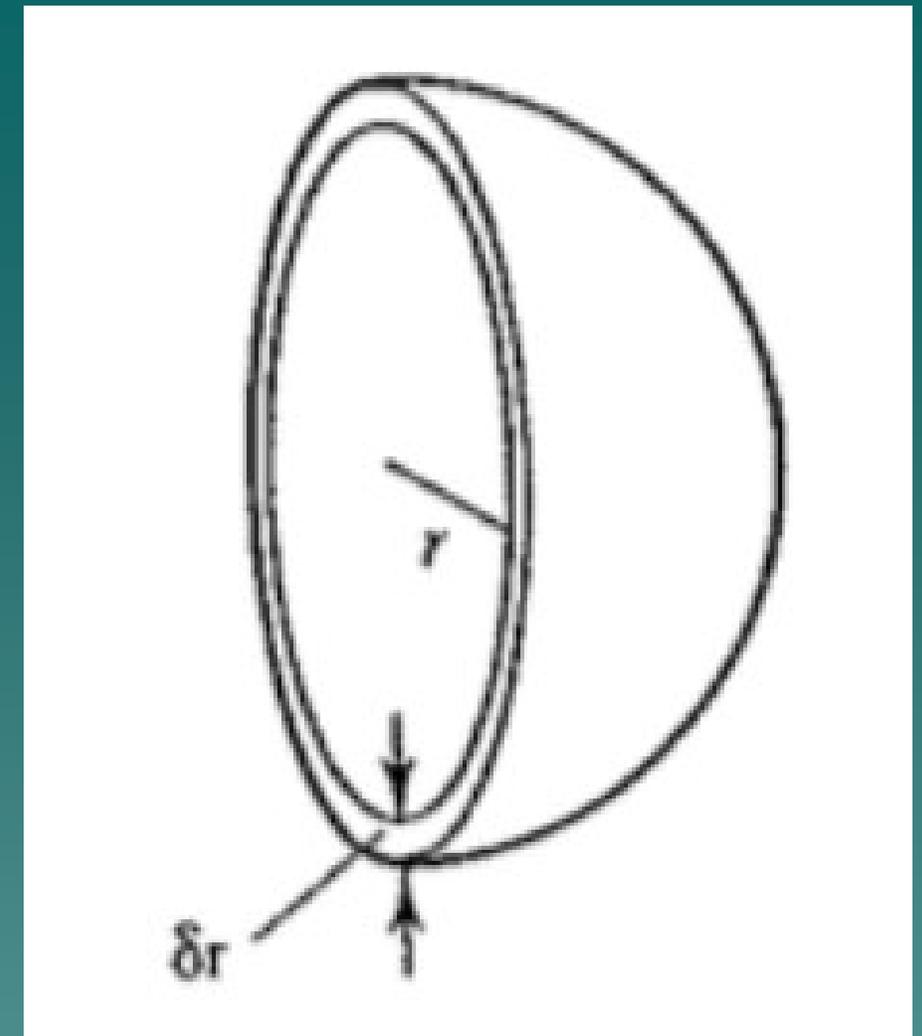
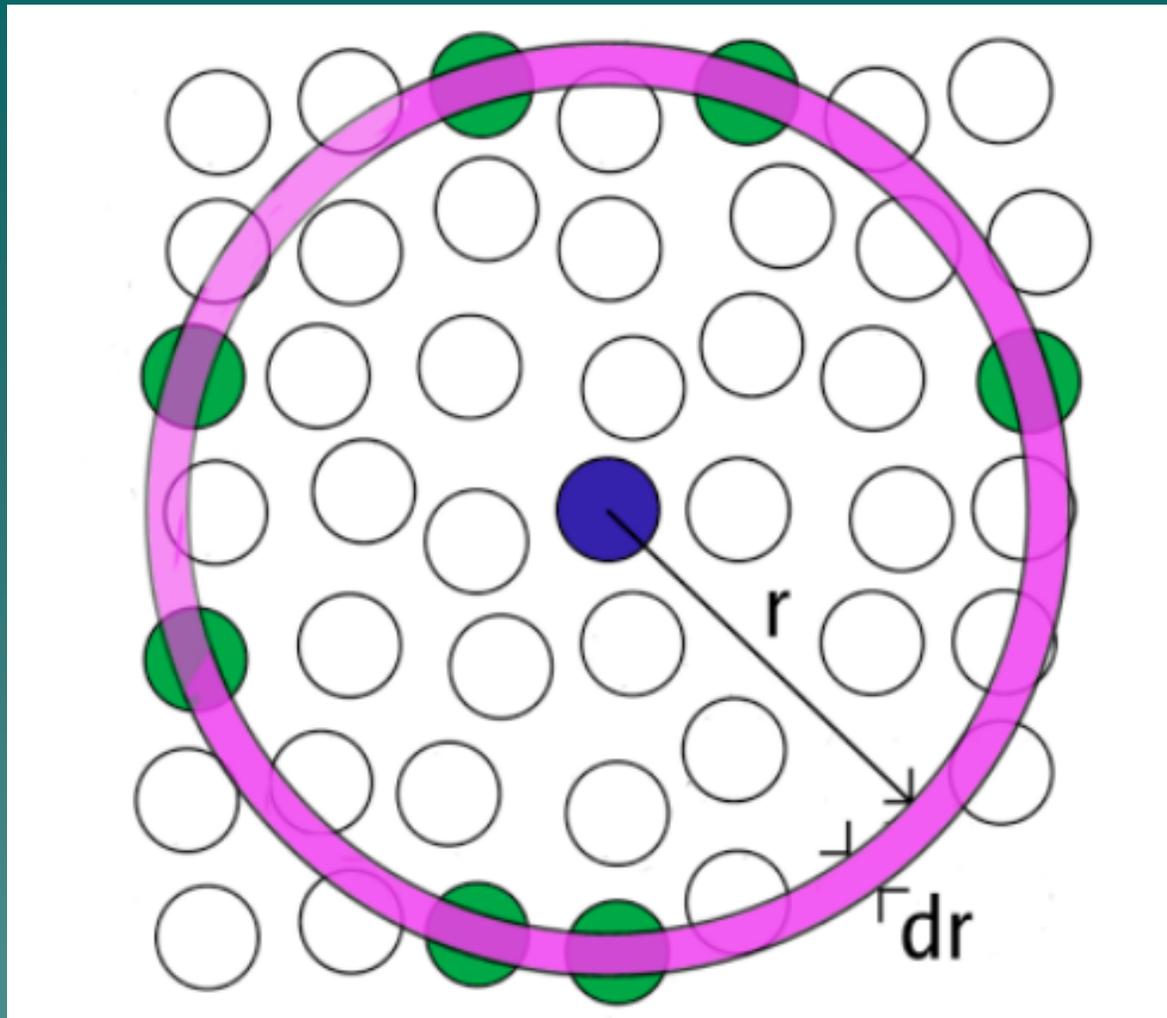


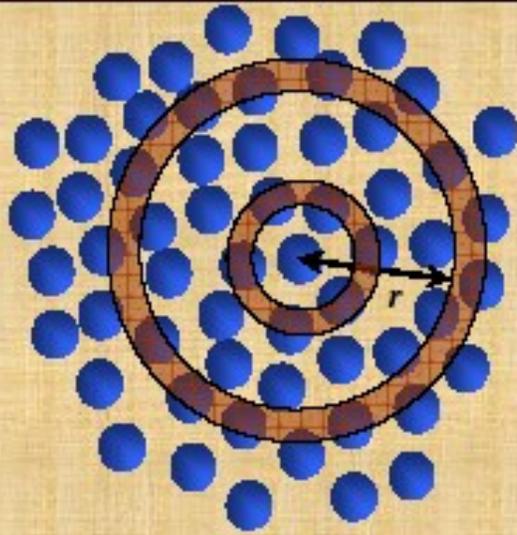
Fig. 7. La distribución de los átomos se puede obtener de experimentos de difracción de rayos X. Se muestra la intensidad reducida de la radiación dispersada como función del ángulo de dispersión.

Imágenes de las funciones de distribución radial para gases reales, líquidos, sólidos amorfos y sólidos cristalinos



Una idea de lo que representa un elemento de volumen en la función de distribución radial. Las esferas en verde representan a las esferas cuyos centros han sido interceptados por el elemento de volumen, que se halla mostrado a la derecha como la mitad de una cáscara.

Radial distribution function



$\rho(r)$ radial density
mean number of atoms per
unit volume at radius r

$\rho(r) = 0$ for $r <$ interatomic
separation

$\rho(r) = \rho_0$ for large r

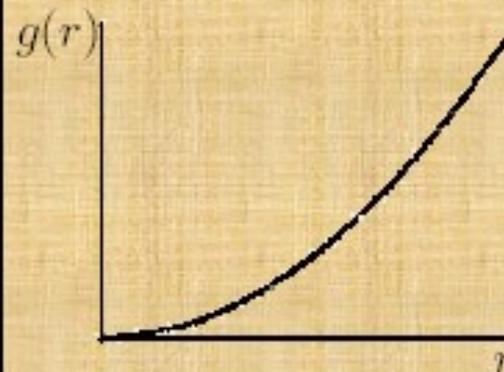
Total number of atoms in
the layer from r to $(r + dr)$:

$$\rho(r) dV = \rho(r) 4\pi r^2 dr = g(r) dr$$

$g(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$
Radial Distribution
Function (RDF)

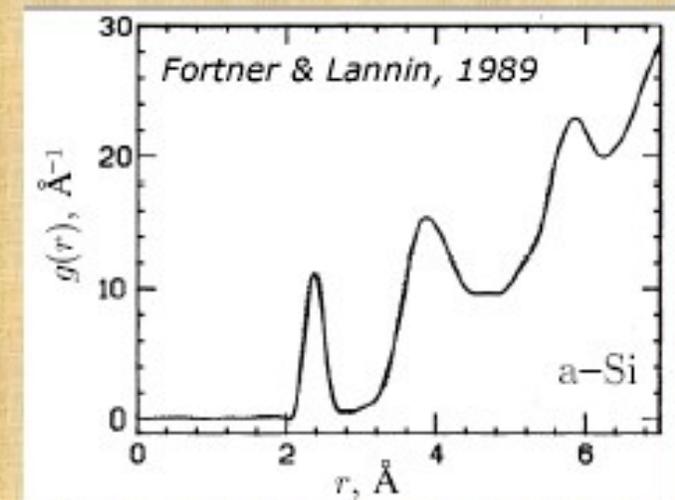
Radial distribution function

$$g(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$$



$$g(r) = 4\pi r^2 \rho_0$$

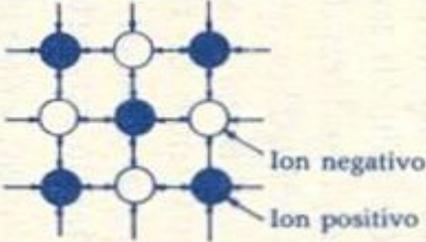
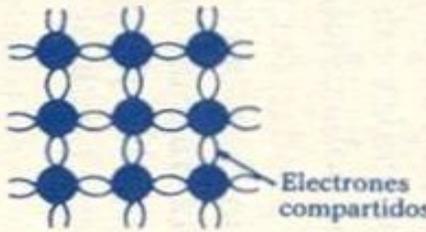
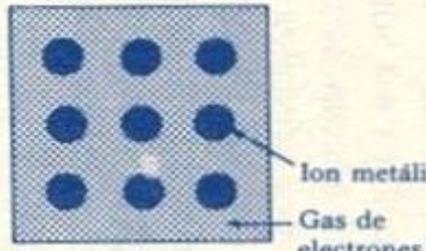
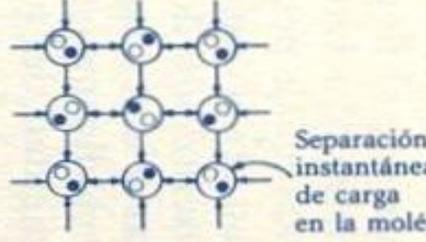
RDF for a random
distribution of atoms



$$g(r) = 4\pi r^2 \rho(r)$$

RDF for an amorphous solid
(similar for liquids)

Enlaces que mantienen unidos a los sólidos

<i>Cristal</i>	<i>Enlace</i>	<i>Tipo</i>	<i>Características</i>	<i>Ejemplo</i>	<i>Principales propiedades</i>
 <p>Ion negativo Ion positivo</p>	Atracción electrostática	Iónicos u homopolar	Transferencia de electrones de valencia de un átomo a otro. Cristal formado por iones positivos y negativos.	NaCl MgO	Aislantes eléctricos transparentes en el visible. Alta energía de amarre → alta temperatura de fusión.
 <p>Electrones compartidos</p>	Electrones compartidos	Covale-ntes o hetero-polar	Intercambio de electrones entre átomos vecinos. (No hay carga asociada con cualquier átomo del cristal.)	SiC, C, Ge	Semiconductores transparentes a λ larga. Alta energía de amarre → alta temperatura de fusión.
 <p>Ion metálico Gas de electrones</p>	Gas de electrones	Metálico	Electrones libres (gas) interaccionando con una red de iones positivos.	Cu, Au, Ag	Alta conductividad, alta reflectividad óptica. Energía de amarre menor que en los casos anteriores.
 <p>Separación instantánea de carga en la molécula</p>	Fuerzas de Van der Waals	Van der Waals	Interacción dipolar. (Debido a momento dipolar fluctuante.)	A, gases inertes	Malos conductores eléctricos y térmicos. Amarre muy débil → bajo punto de fusión.

Muchos de los sólidos de este curso estarían contenidos entre sólidos iónicos, covalentes, metálicos y sólidos moleculares

Elementos de energética de sólidos:

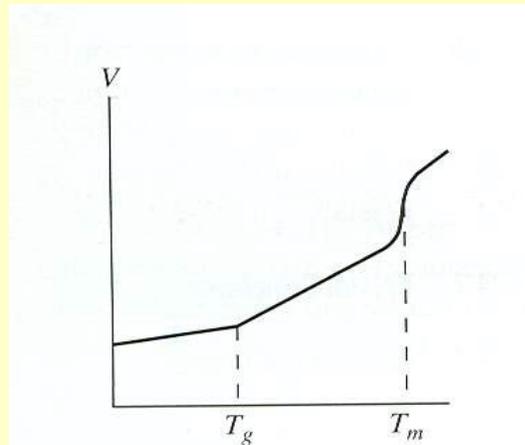


Figure 24.1

Typical plot of volume versus temperature for a semicrystalline polymer. T_g and T_m are the glass-transition temperature and the melting point.

El enlace químico en los sólidos:

Los sólidos iónicos: NaCl, MgO, CaCl₂, KNO₃.

Covalentes: C, Si, SiO₂, SiC...

Cristales metálicos: Na, Cu, Fe, aleaciones...

Cristales moleculares: moléculas individuales (casi todos covalentes) los que sus moléculas se cohesionan por fuerzas intermoleculares

van der Waals: Ar, CO₂, O₂, HgCl₂, SnCl₄, CH₃CH₂Br,

de puente de H: H₂O, HF, NH₃, aminoácidos

Energía de Unión o Energía de Cohesión:

Metales (20-200 kCal/mole) (1-9 eV átomo)

Algunos valores de Energías de Cohesión de algunos metales a 0 K en kJ/mole

Na	K	Be	Mg	Cu	Ag	Cd	Al	Fe	W	Pt
108	90	320	146	337	284	112	324	414	348	564

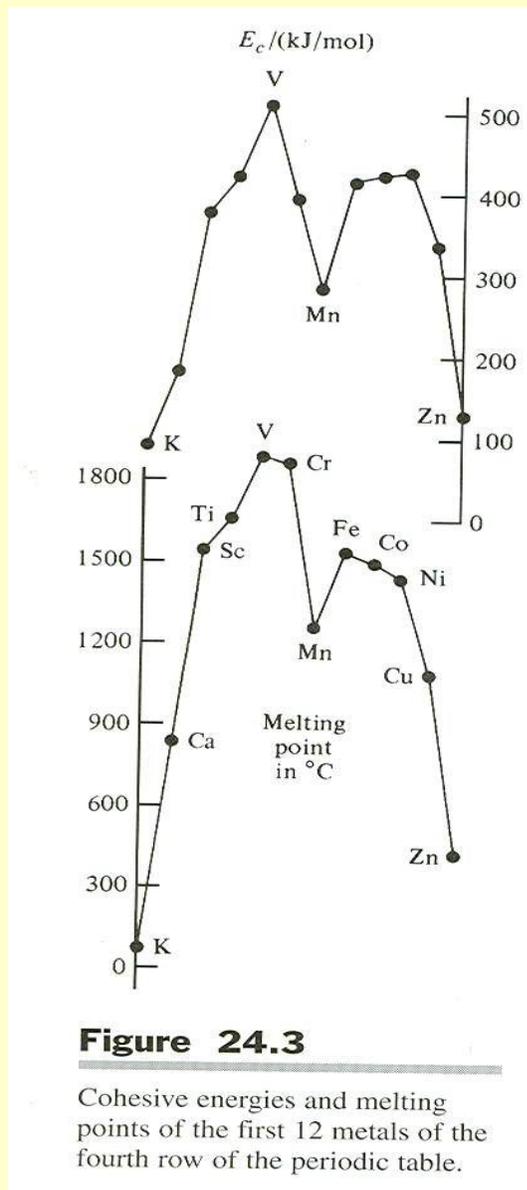


Figure 24.3

Cohesive energies and melting points of the first 12 metals of the fourth row of the periodic table.

Energías de cohesión de algunos sólidos covalentes a 0 K en kJ/mole

C(diamante)	C (grafito)	Si	SiC	SiO ₂
709	711	451	1227	1851

Energías de cohesión de sólidos iónicos a 0 K en kJ/mole

NaCl	NaBr	LiF	CsCl	ZnCl ₂	MgCl ₂	MgO	CaO
786	751	1041	668	2728	2519	3800	3400

Energías de cohesión de algunos sólidos moleculares a 0 K en kJ/mole

Ar	Kr	CH ₄	n-C ₁₉ H ₄₀	H ₂ O	H ₂ S	Cl ₂	I ₂
7.5	10.5	9.6	113	51	21	27	61

Table 1.5 Examples of Substances with Different Types of Interatomic Bonding

Type of Bond	Substance	Bond Energy, kJ/mol	Melting Point, (°C)	Characteristics
Ionic	CaCl	651	646	Low electrical conductivity, transparent, brittle, high melting point
	NaCl	768	801	
	LiF	1008	870	
	CuF ₂	2591	1360	
	Al ₂ O ₃	15,192	3500	
Covalent	Ge	315	958	Low electrical conductivity, very hard, very high melting point
	GaAs	~315	1238	
	Si	353	1420	
	SiC	1188	2600	
	Diamond	714	3550	
Metallic	Na	109	97.5	High electrical and thermal conductivity, easily deformable, opaque
	Al	311	660	
	Cu	340	1083	
	Fe	407	1535	
	W	844	3370	
van der Waals	Ne	2.5	-248.7	Weak binding, low melting and boiling points, very compressible
	Ar	7.6	-189.4	
	CH ₄	10	-184	
	Kr	12	-157	
	Cl ₂	31	-103	
Hydrogen bonding	HF	29	-92	Higher melting point than van der Waals bonding, tendency to form groups of many molecules
	H ₂ O	50	0	

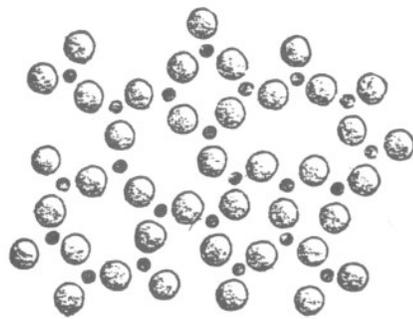
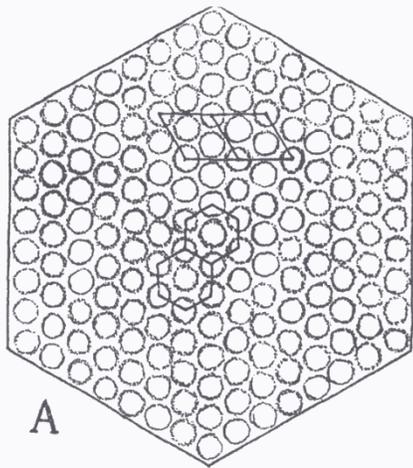


Fig. 11. THE ATOMIC ARRANGEMENT IN A GLASS has no order extending a long distance, but there is usually some short-range orderliness. In this example each black atom has three white atoms around it, at a fixed distance and at the corners of an equilateral triangle.



A



B



C

Fig. 77. THE CLOSE-PACKED ARRANGEMENT in two dimensions (A) can be constructed of the hexagonal building block (B) or the rhombic building block (C). Each building block accounts for three atoms.

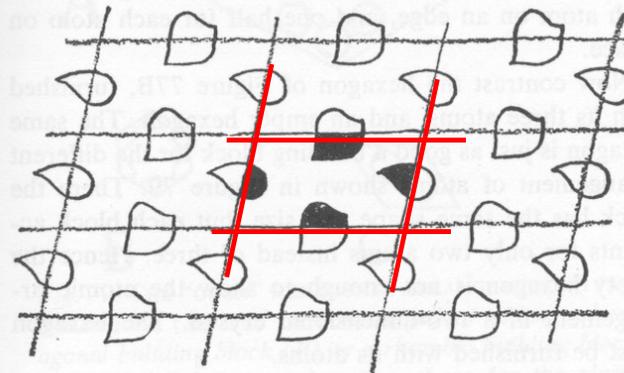
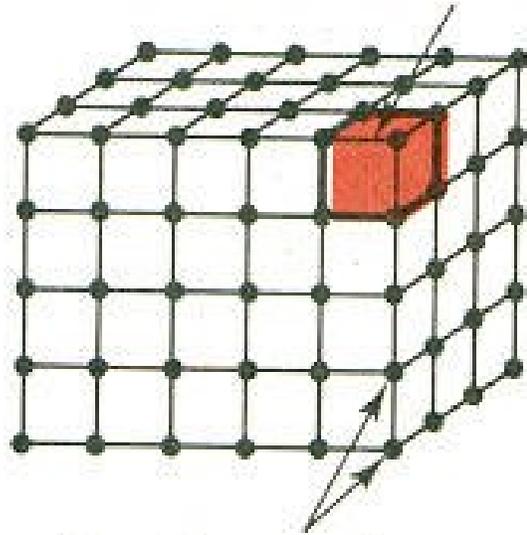


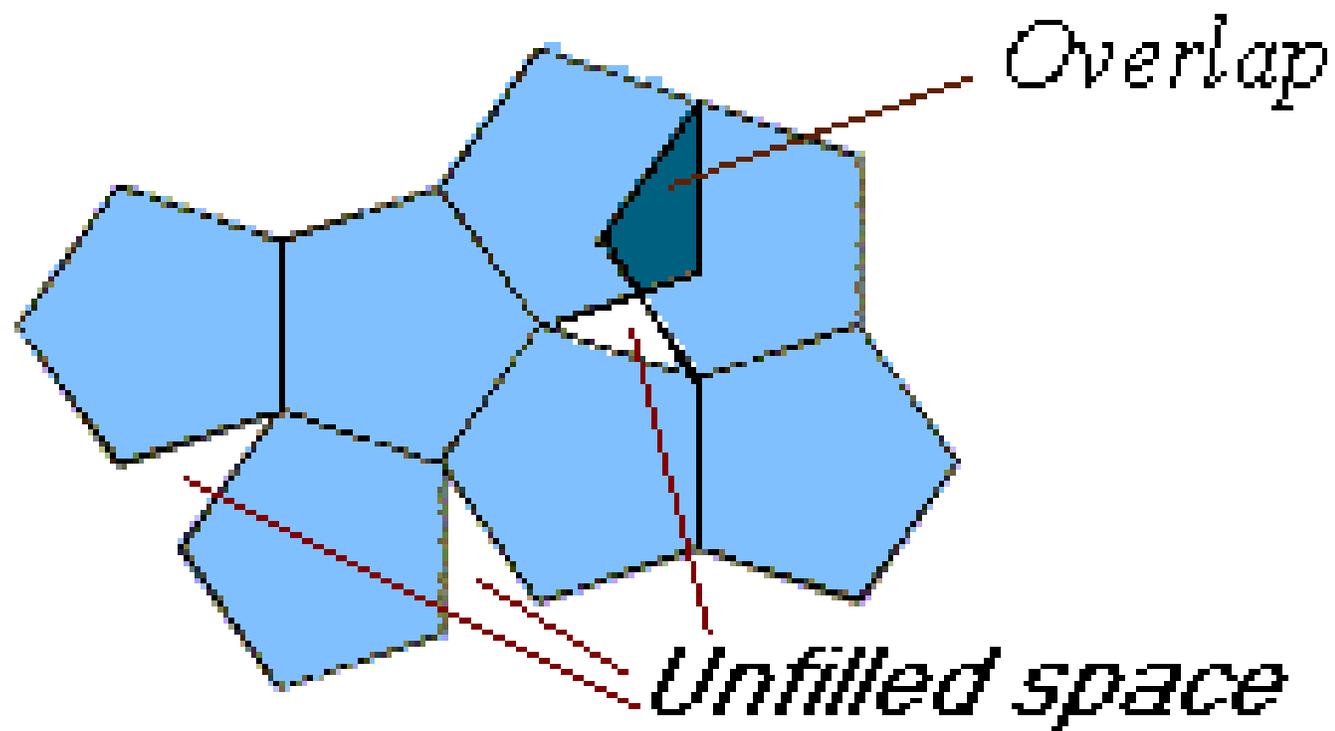
Fig. 78. COUNTING THE ATOMS in a two-dimensional block. An atom on a side of a block counts one half in calculating the contents of the block. If the block is a true building block any atom on one side of the block must have a companion on the opposite side, and the two atoms contribute a count of one to the contents of the block.

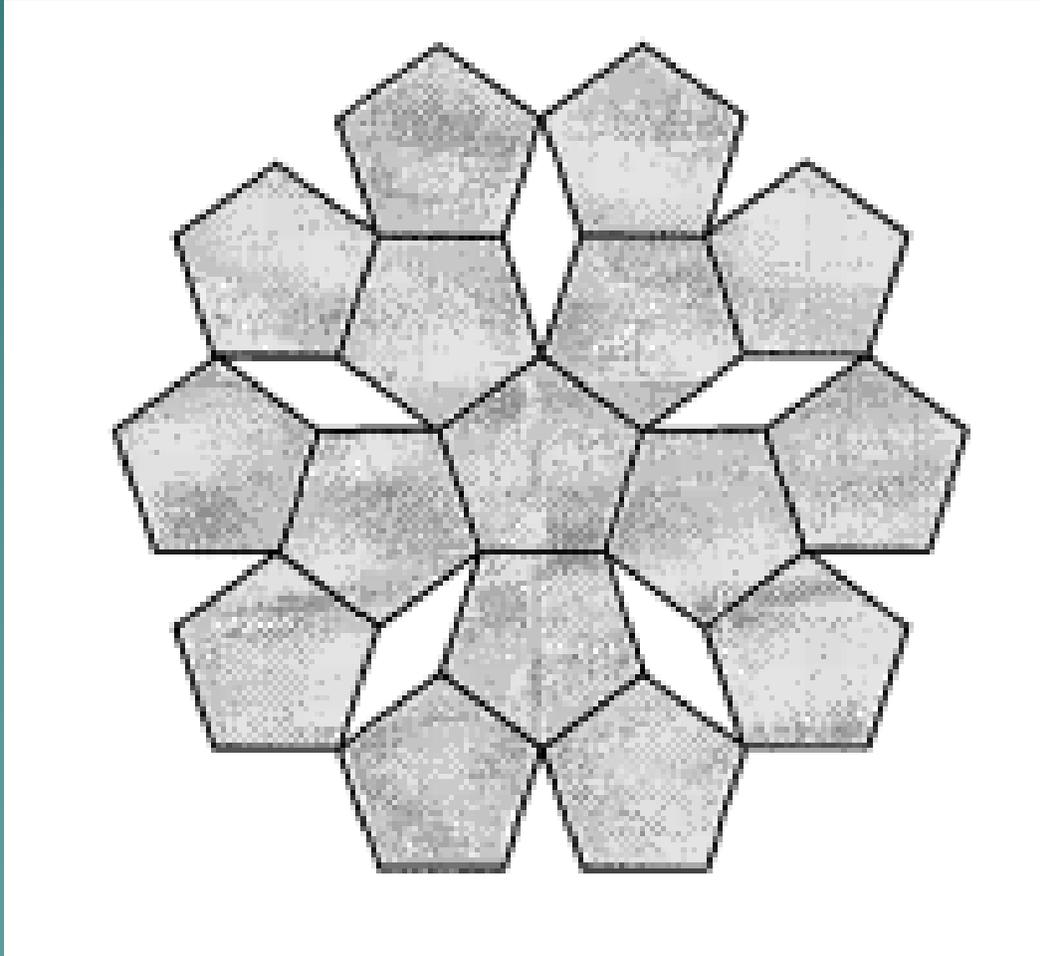
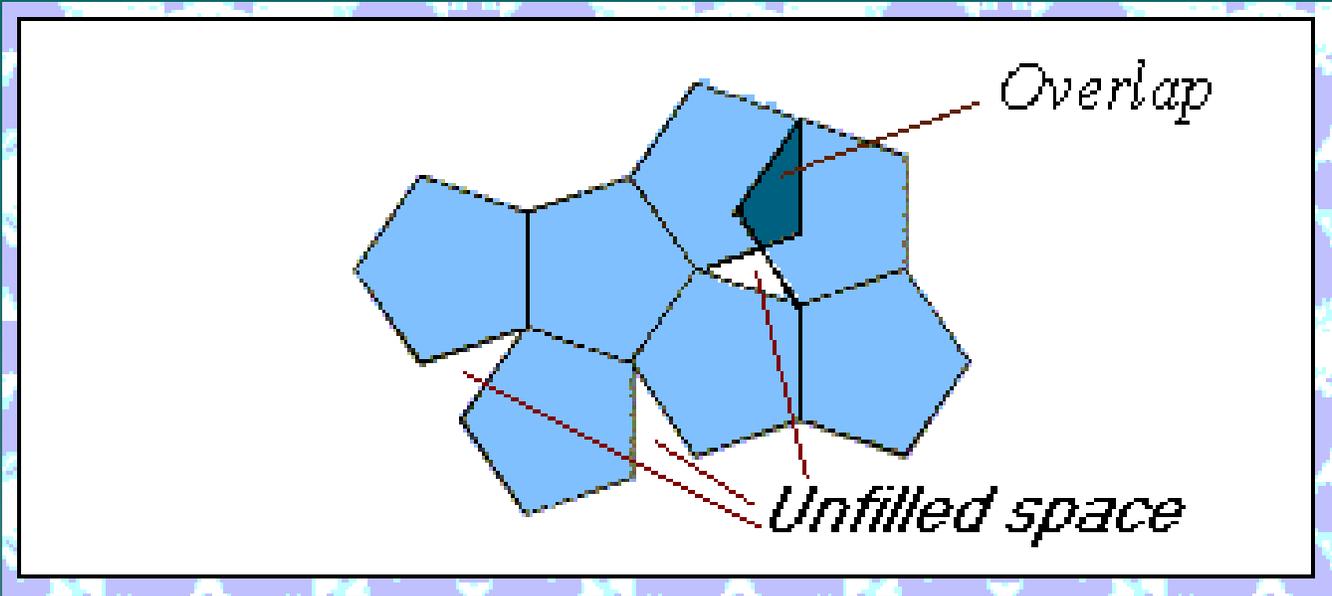
Unit cell



Lattice points

FIGURE 3. A lattice is a periodic array of points that define space. The unit cell (heavy outline) is a subdivision of the lattice that still retains the characteristics of the lattice.





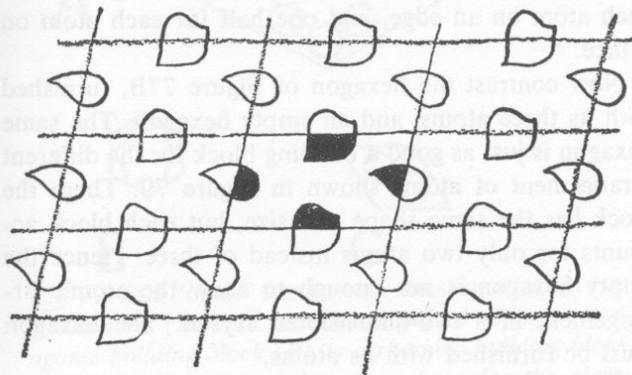
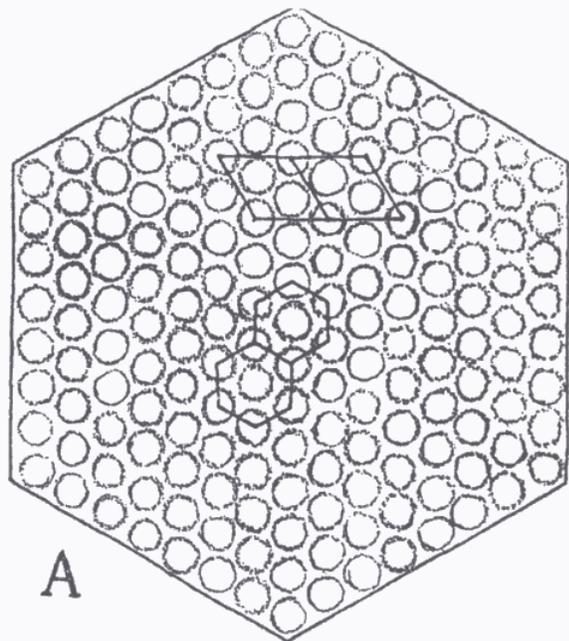


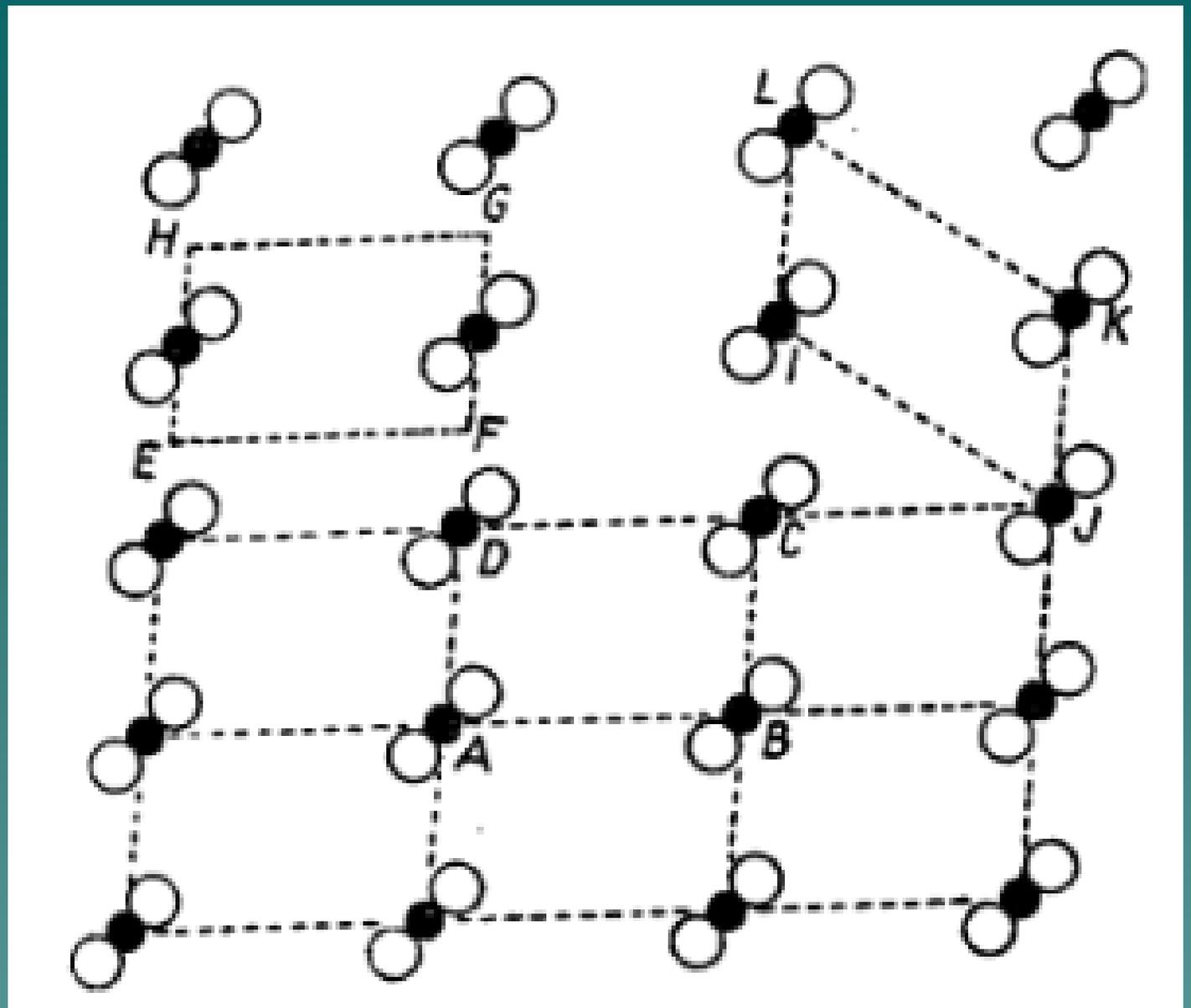
Fig. 78. COUNTING THE ATOMS in a two-dimensional block. An atom on a side of a block counts one half in calculating the contents of the block. If the block is a true building block any atom on one side of the block must have a companion atom on the opposite side, and the two atoms contribute a count of one to the contents of the block.

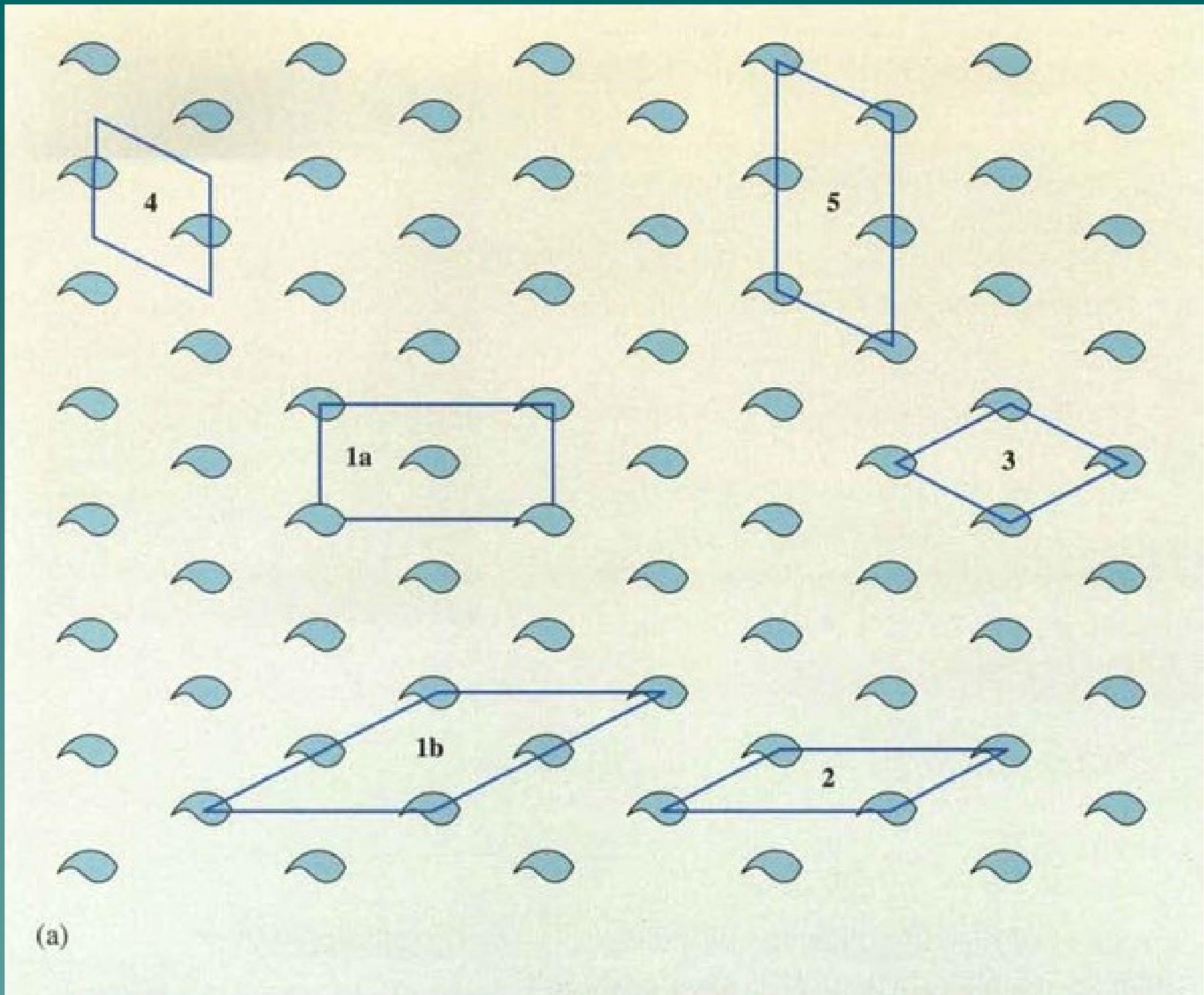


B

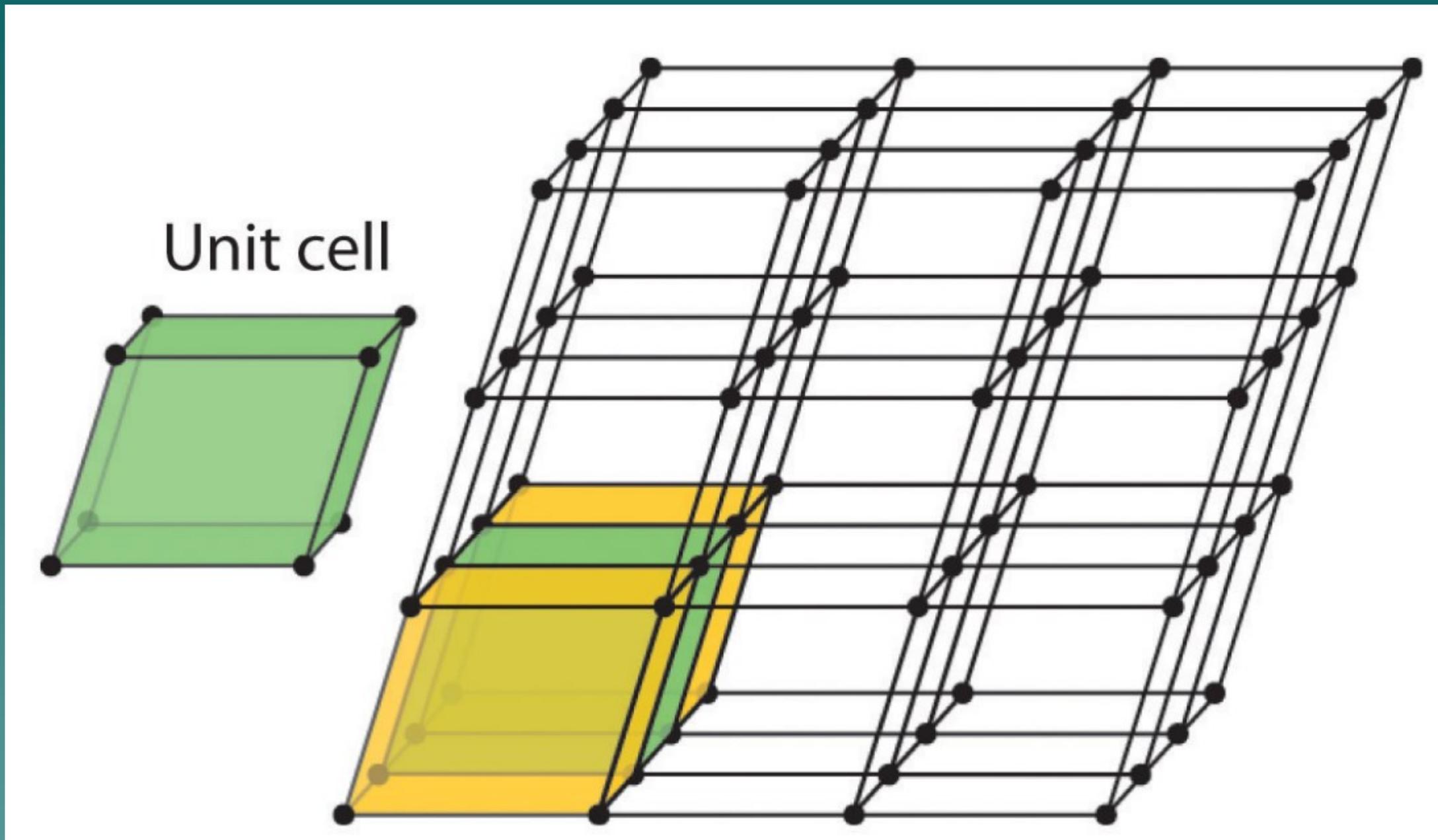
C

Fig. 77. THE CLOSE-PACKED ARRANGEMENT in two dimensions (A) can be constructed of the hexagonal building block (B) or the rhombic building block (C). Each building block accounts for three atoms.



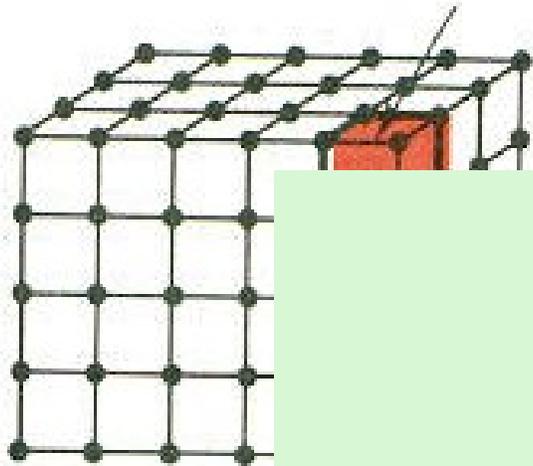


Para un mismo patrón en dos dimensiones, existe mas de una forma de definir un patrón de repetición



La celda unitaria es la unidad de replicación y por operaciones de translación es capaz de generar toda la estructura, mediante las indicaciones del operador de translación

Unit cell



Lattice

FIGURE 3. A lattice is a periodic array of points in space.

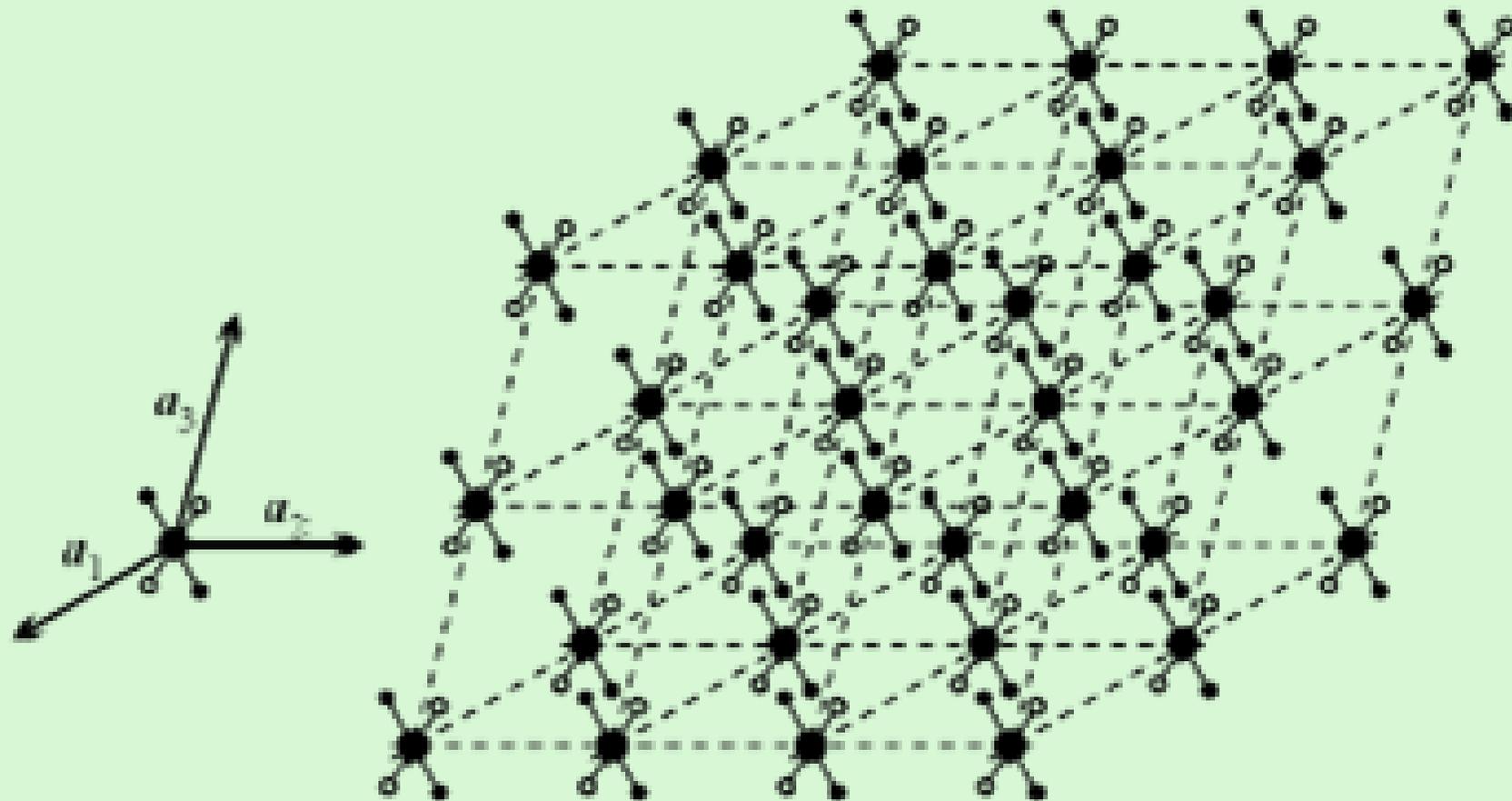
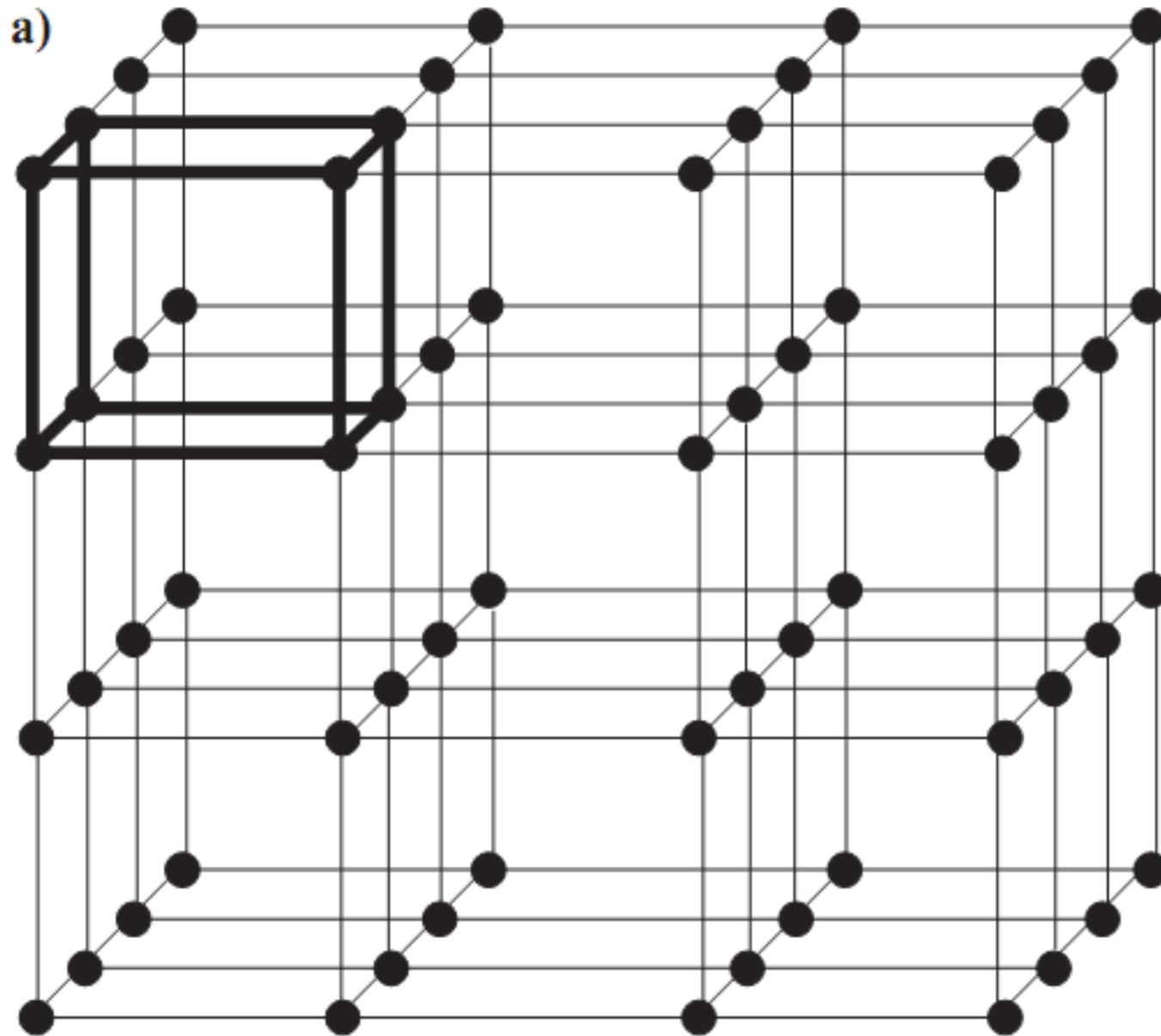


Fig. 5.1. A finite crystalline structure: a finite regular three-dimensional array of identical groups of atoms

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{t}_n = \mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$



En esta figura, notar que cada uno de las esferas resaltadas puede ser el origen de una celda y que, una vez que se da la regla de translación, no hace falta dar las coordenadas de cada uno de los elementos de la celda.

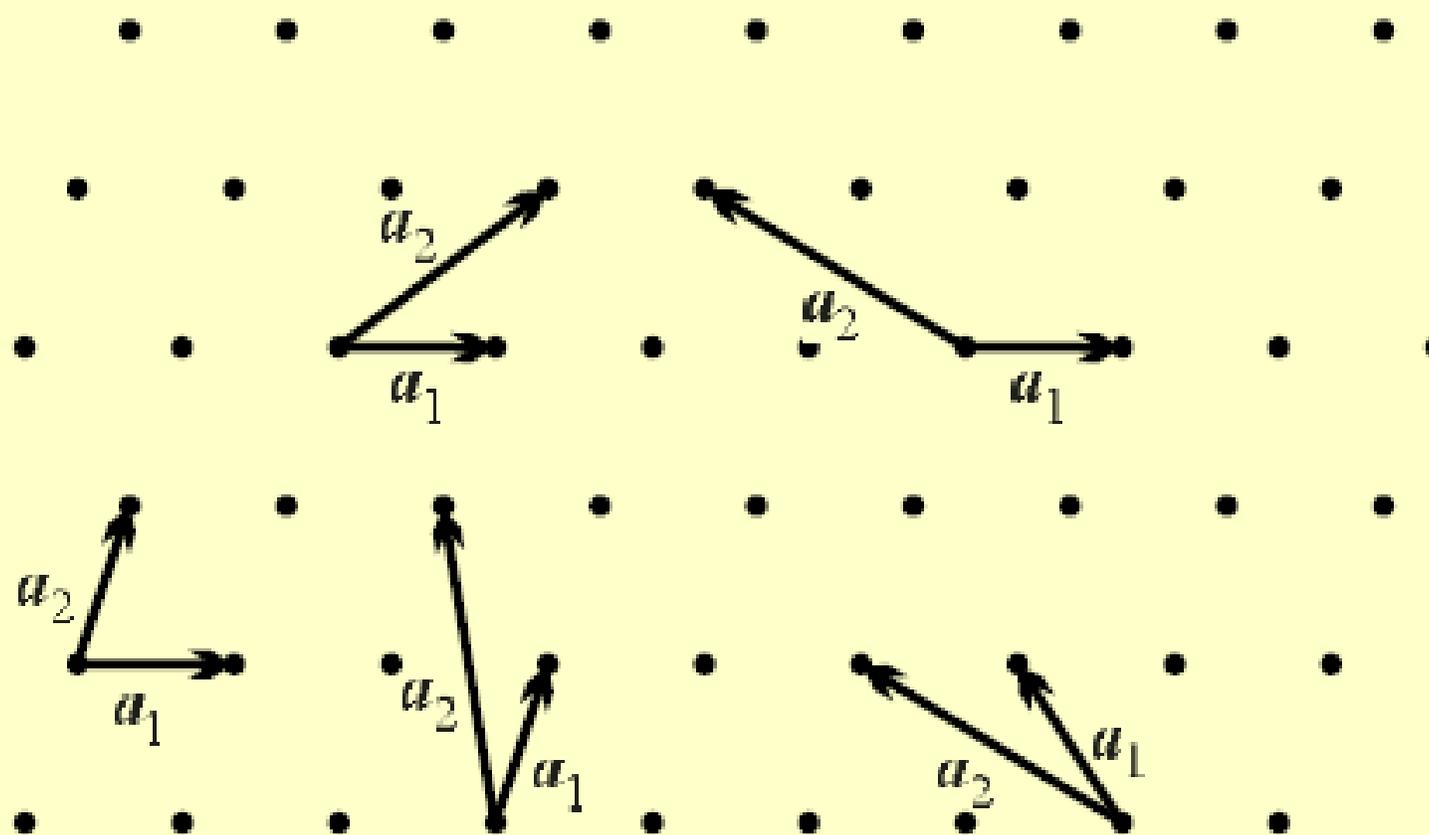
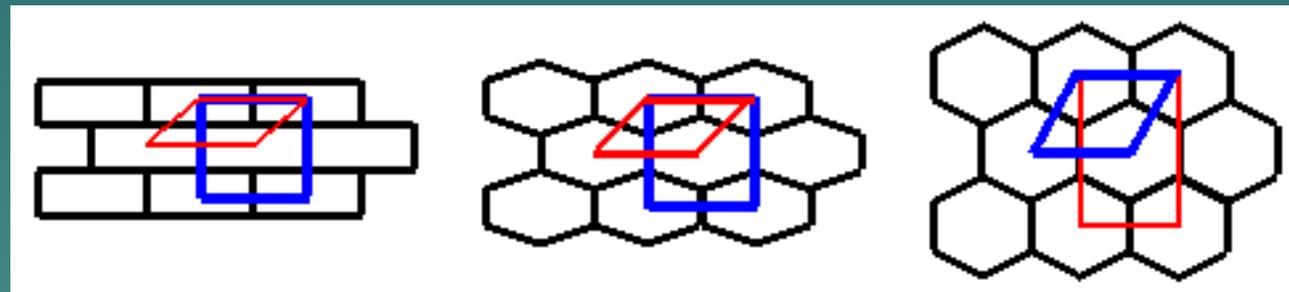
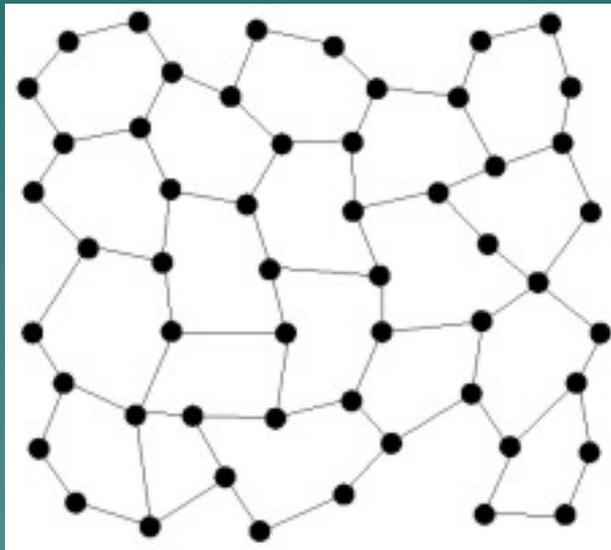
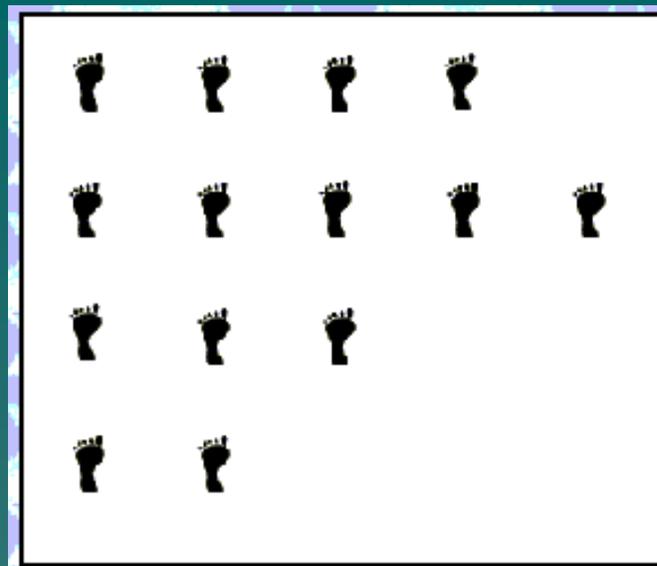


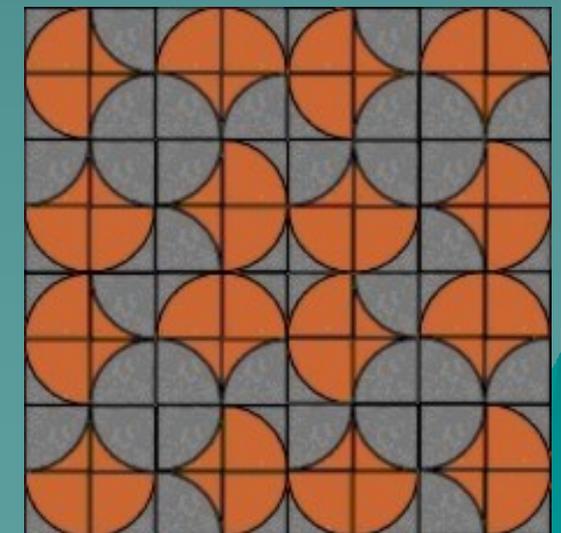
Fig. 5.3. Several possible choices for the pair of primitive vectors in a two-dimensional crystal. In each case every equivalent point can be reached by a integer linear combination of the primitive vectors

Caso de varios vectores primitivos de un mismo arreglo. Lo que resulta de esta figura es que para una misma configuración periódica de elementos de la celda bidimensional, hay mas de una celda que bien puede representarla o que cumple con la ecuación de periodicidad previamente enunciada

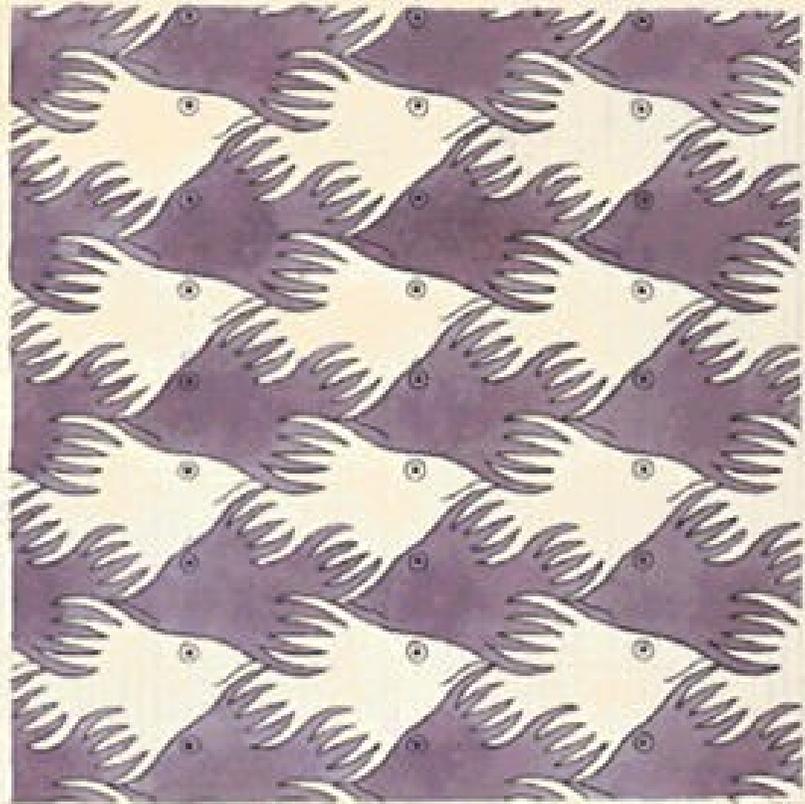


Dos redes de tipo P

Dos redes de tipo C.
La de la derecha es la más acorde con la simetría del motivo



93



Jan. 2, '99

Illustration for book (189) small original white lithograph 8 1/2 x 11 in. 14

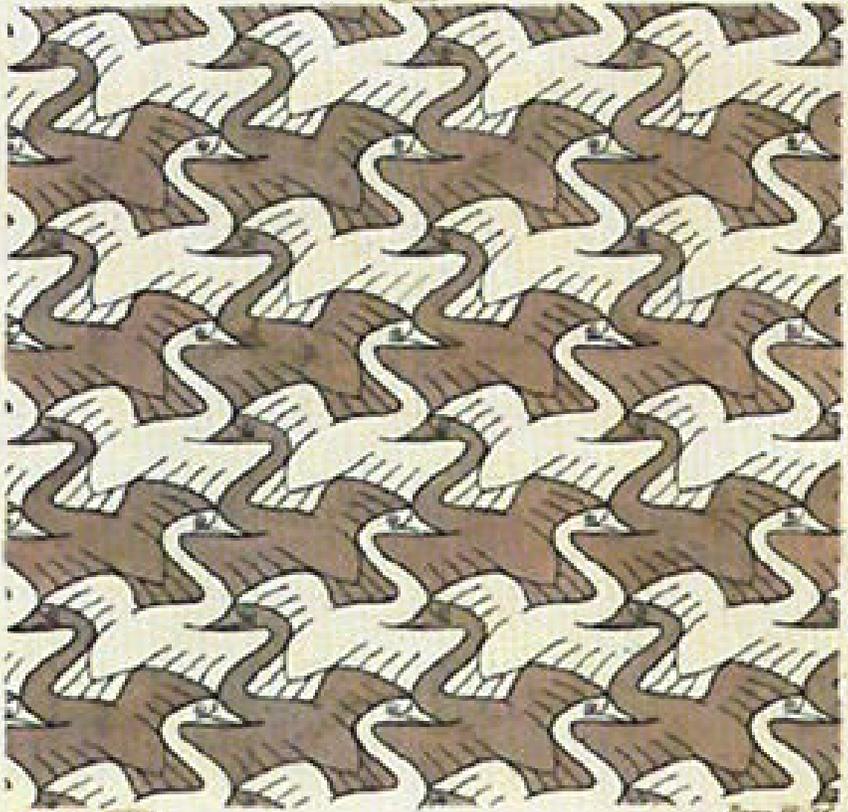
94



Jan. 12, '99

(discrete system) IB₂ type 1

x 95



Jan. 12, '99

Illustration (189)

x 91

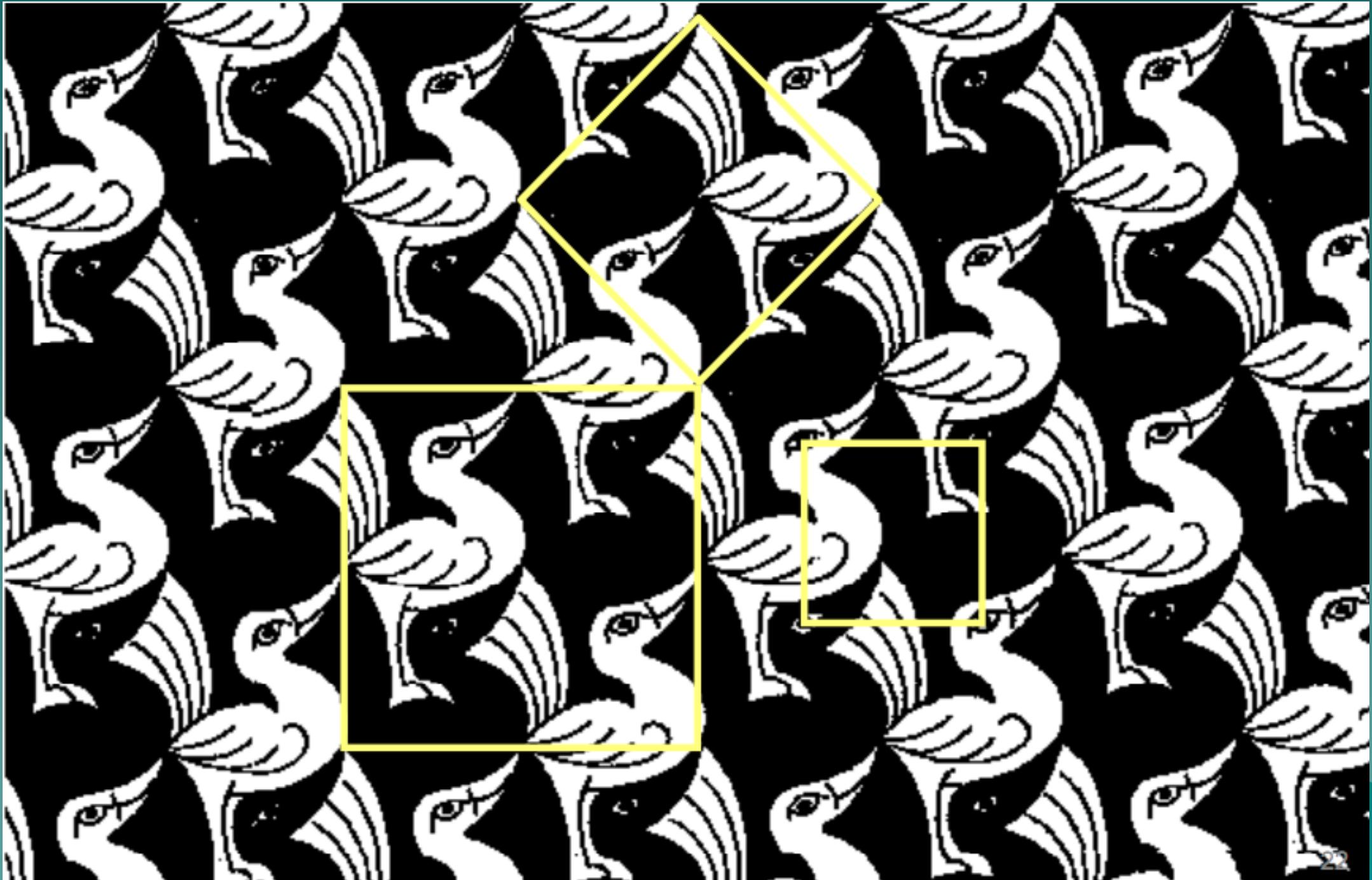


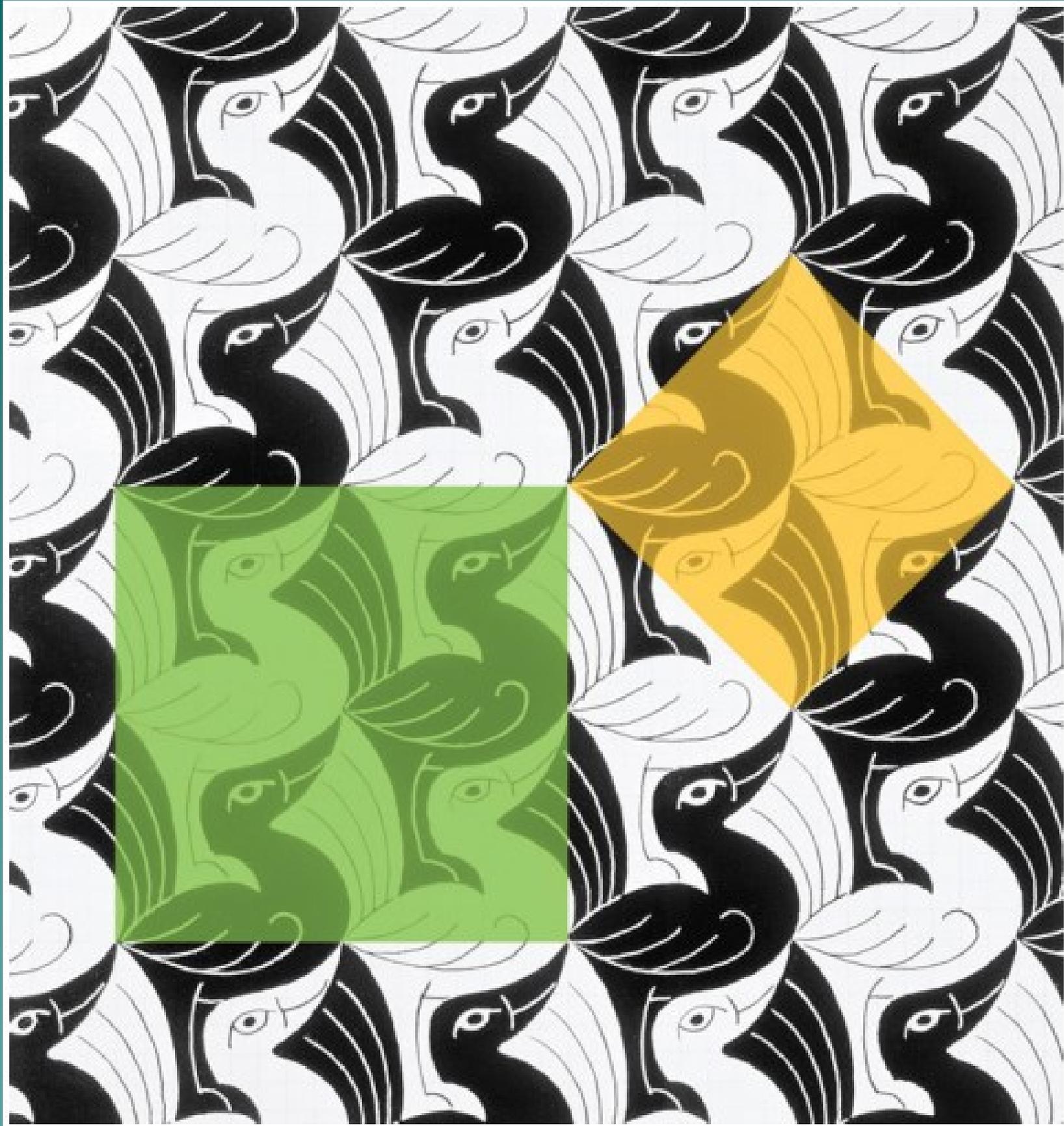
Jan. 12, '99

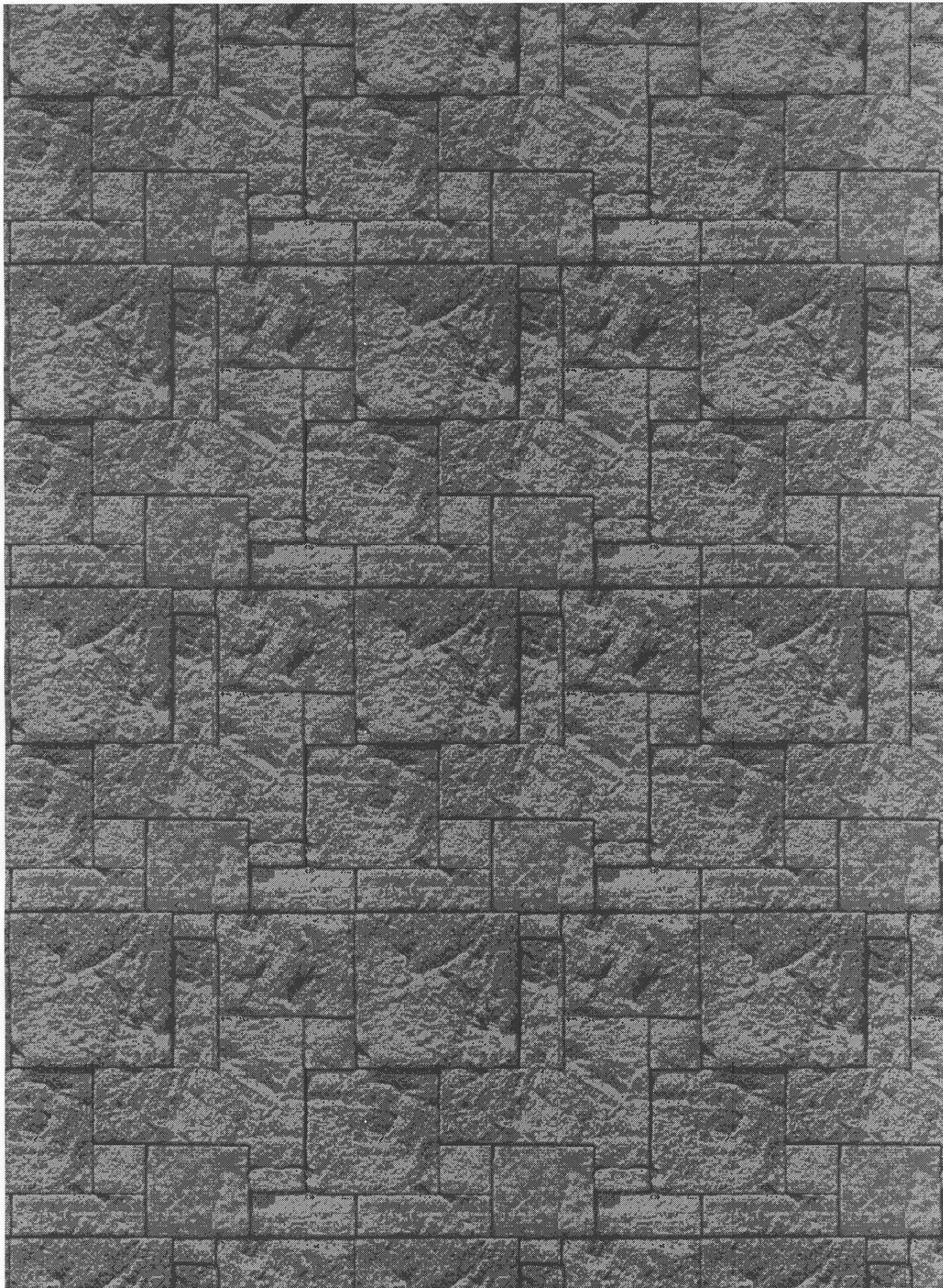
(189)

La elección de una celda de replicación

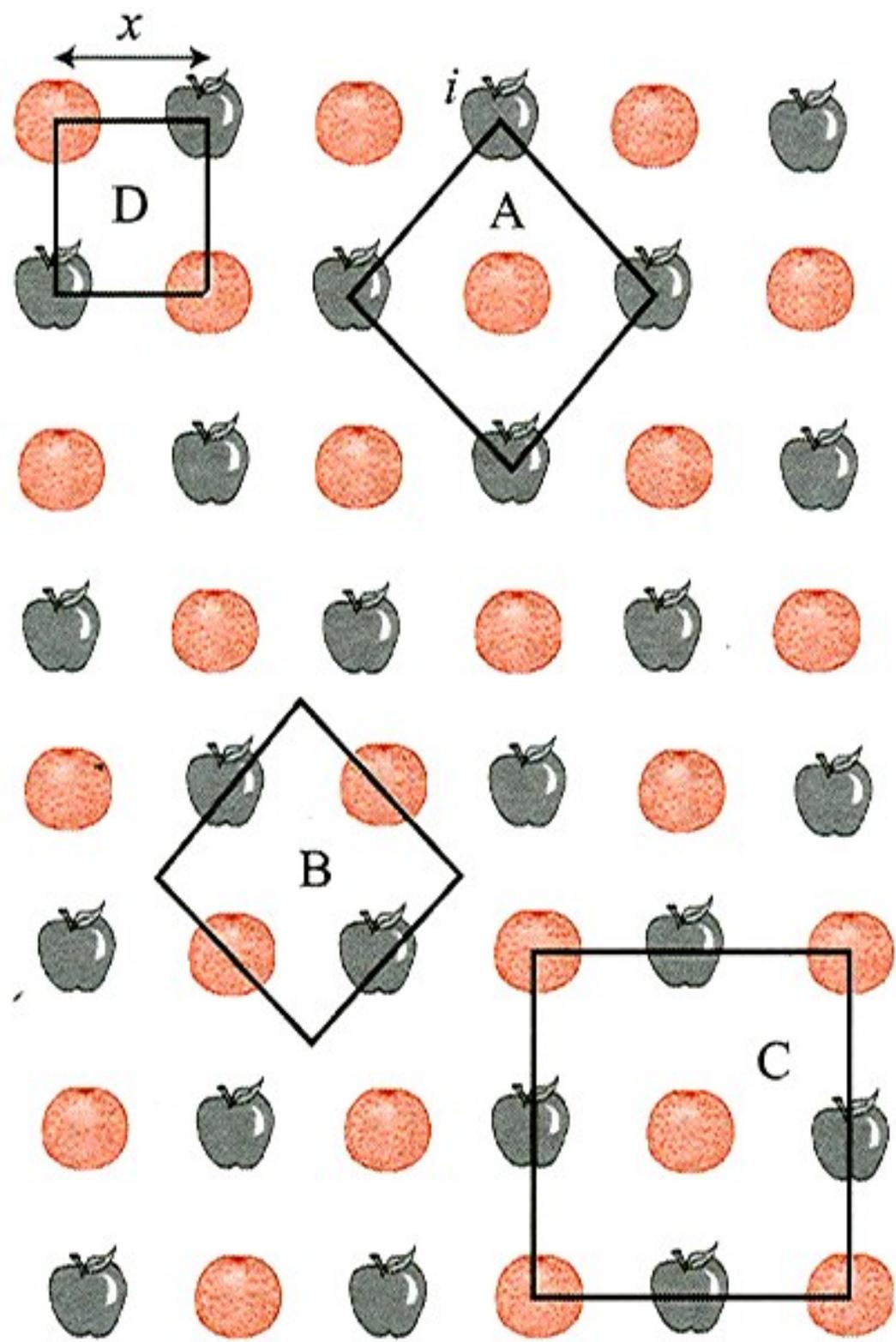
Las tres mostradas abajo, serán celdas de replicación?

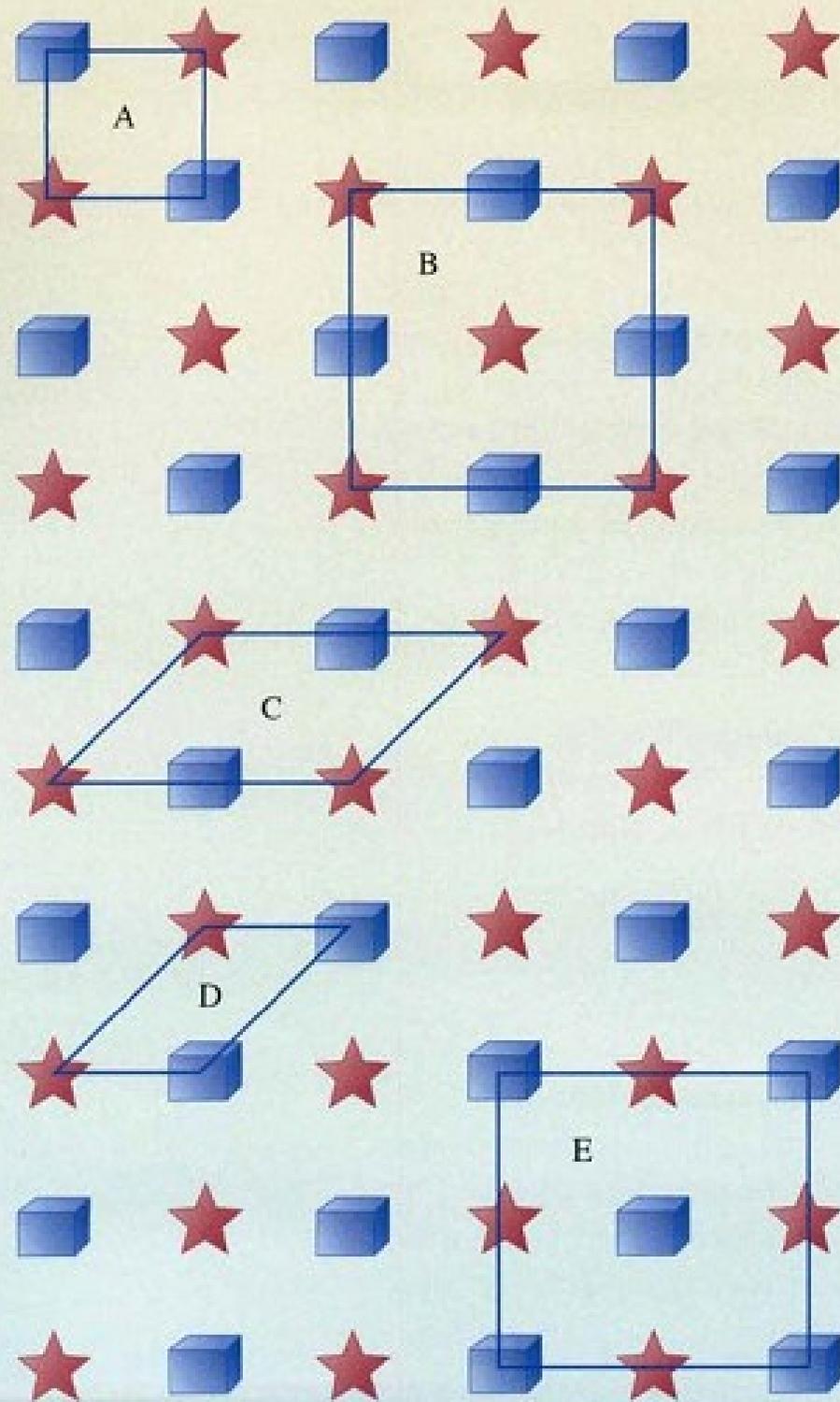








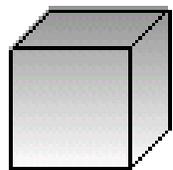




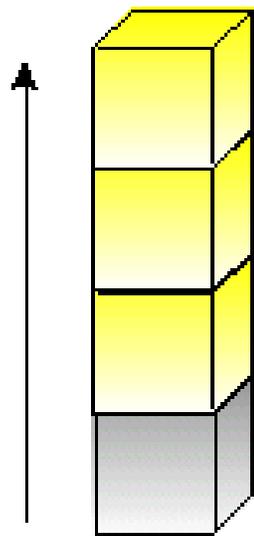
- ◆ **Base o Motivo:** Átomo o conjunto de átomos que se asocian con un punto de la malla
- ◆ **Malla o Lattice:** Es un arreglo infinito de puntos en el espacio, en el cual cada uno de los puntos tiene un ambiente exactamente idéntico a los otros
- ◆ **Estructura cristalina:** Es un sistema de periodicidad espacial, donde un elemento (el motivo) se reproduce de acuerdo con el arreglo definido por la malla
- ◆ **Celda Unitaria:** Se define como la unidad de repetición más pequeña que muestra la simetría completa de la estructura cristalina
- ◆ **Celda Primitiva:** es la celda que contiene sólo un punto de malla

NOTA: No confunda átomos con puntos de malla, los puntos de malla son puntos infinitesimales en el espacio (son entes matemáticamente definidos, como la malla entera)...los átomos son entes reales y no siempre corresponde un átomo con un punto de malla.

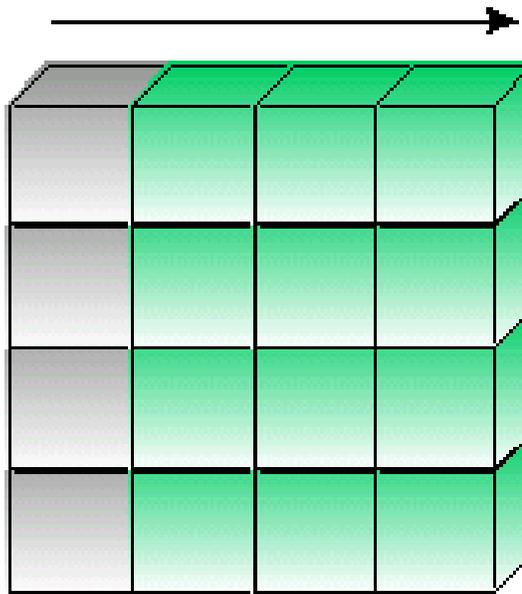
A Crystalline Solid Can Be Constructed From A "Unit Cell" Plus Translational Operators



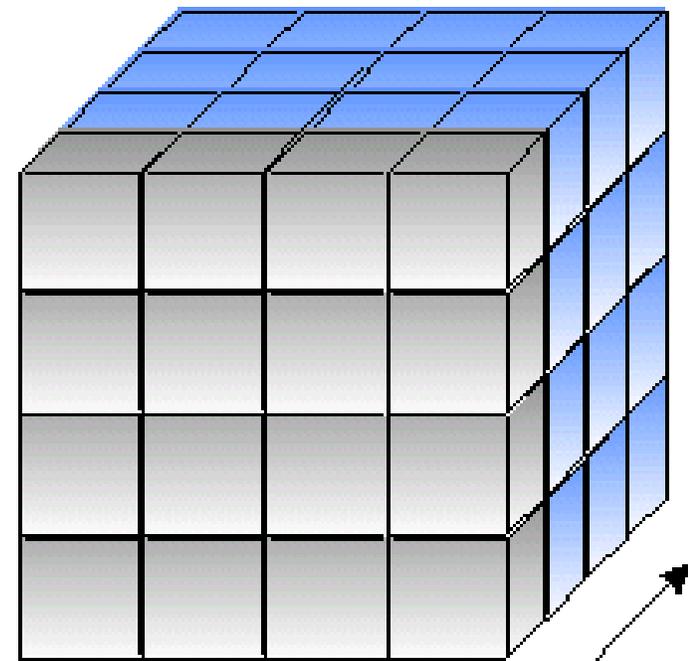
Unit Cell



Translation along y axis



Translation along x axis



Translation along z axis

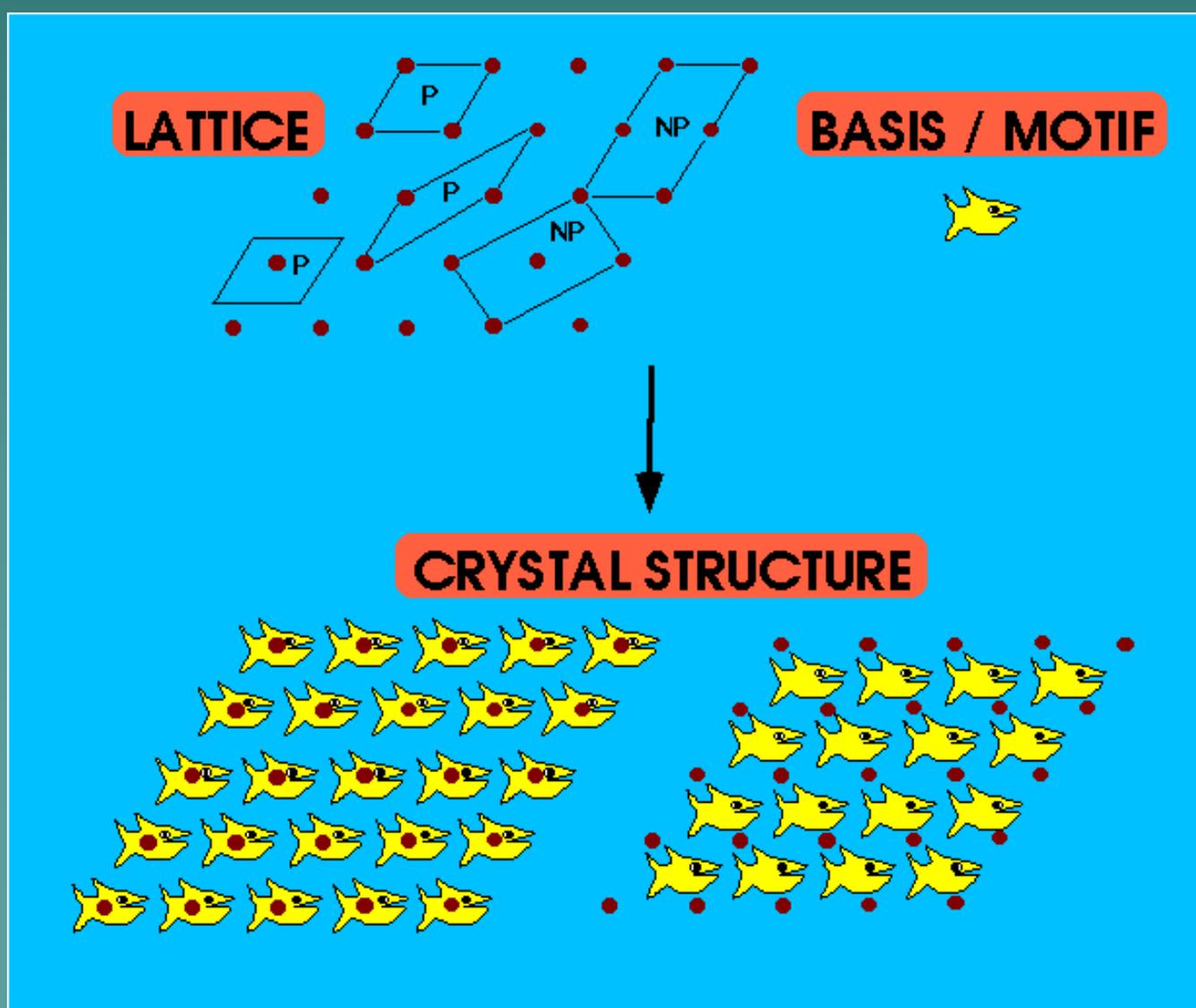
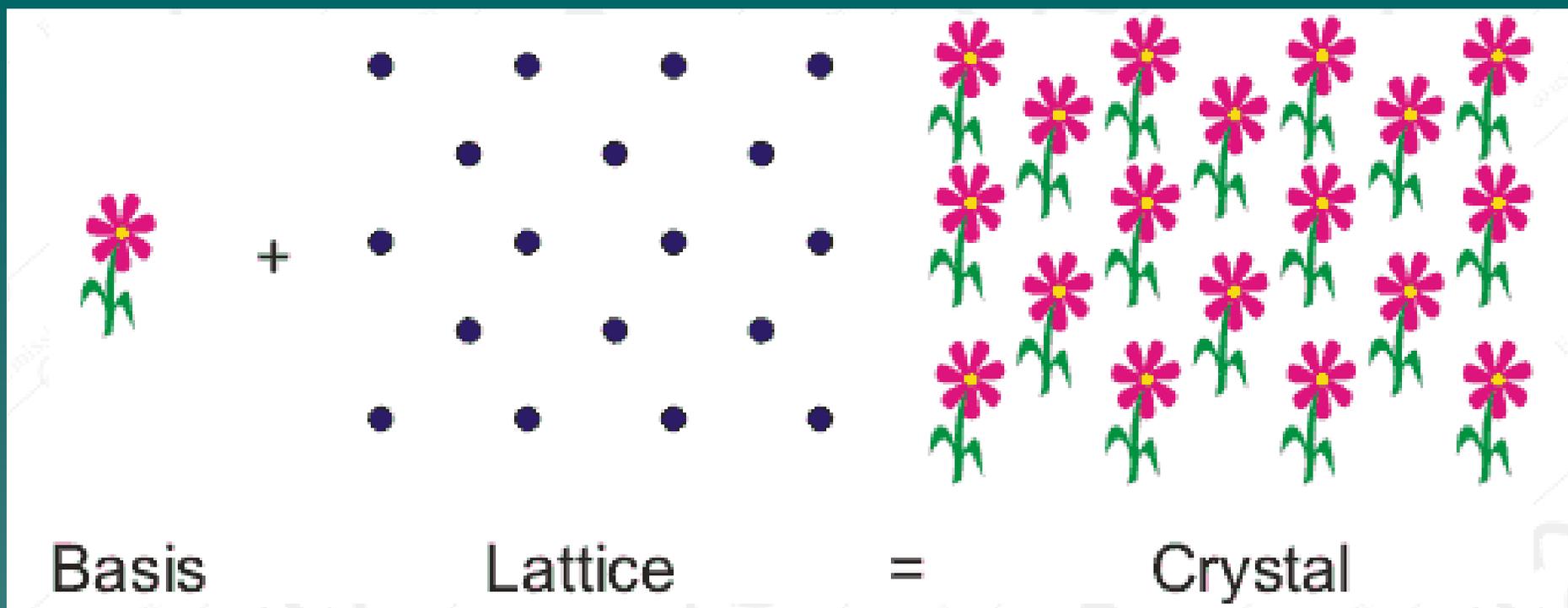




Figure 2.6 Lattice plus basis yields a crystal structure.

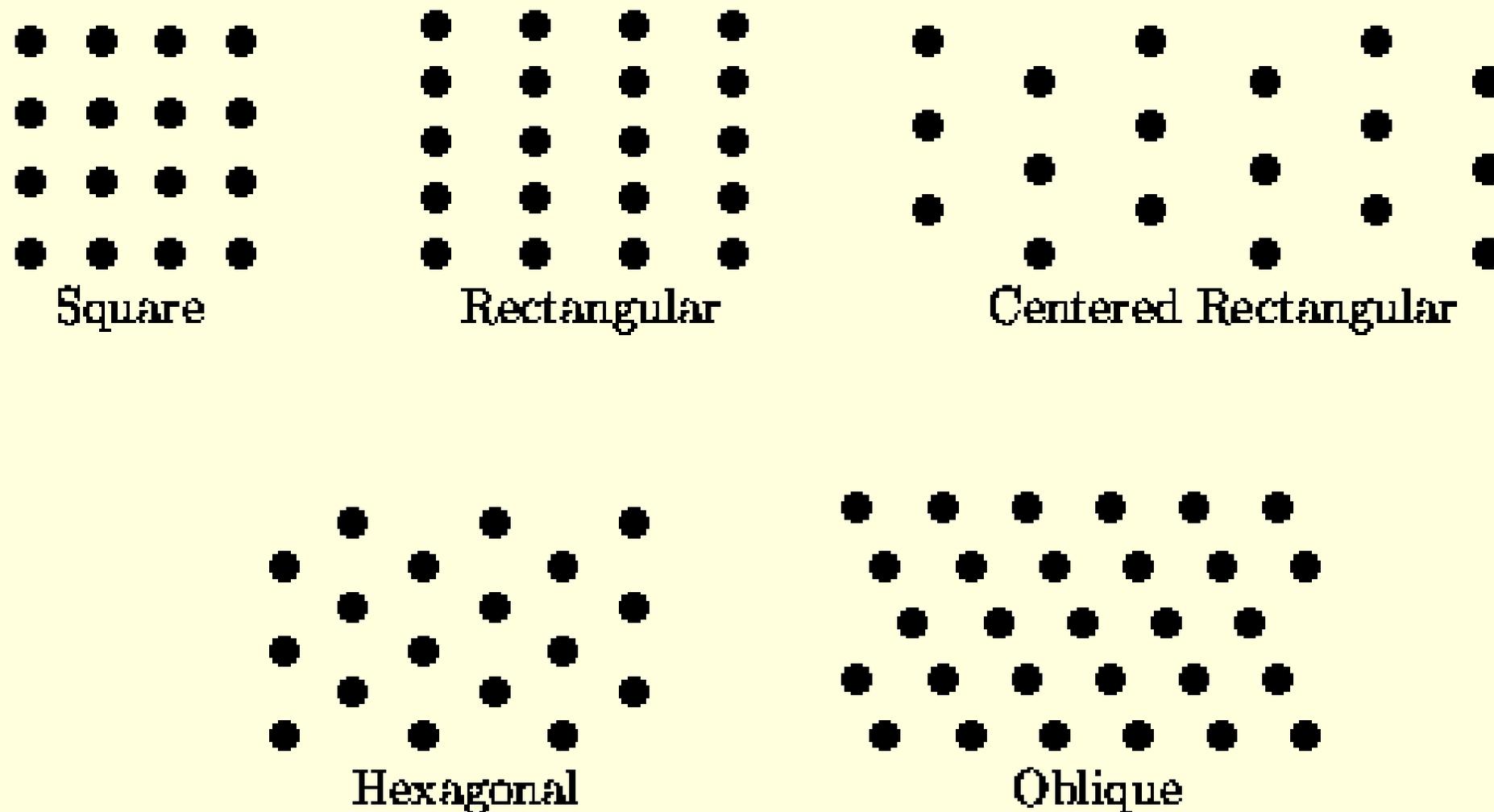


Figure 1.3: Two-dimensional Bravais lattices.

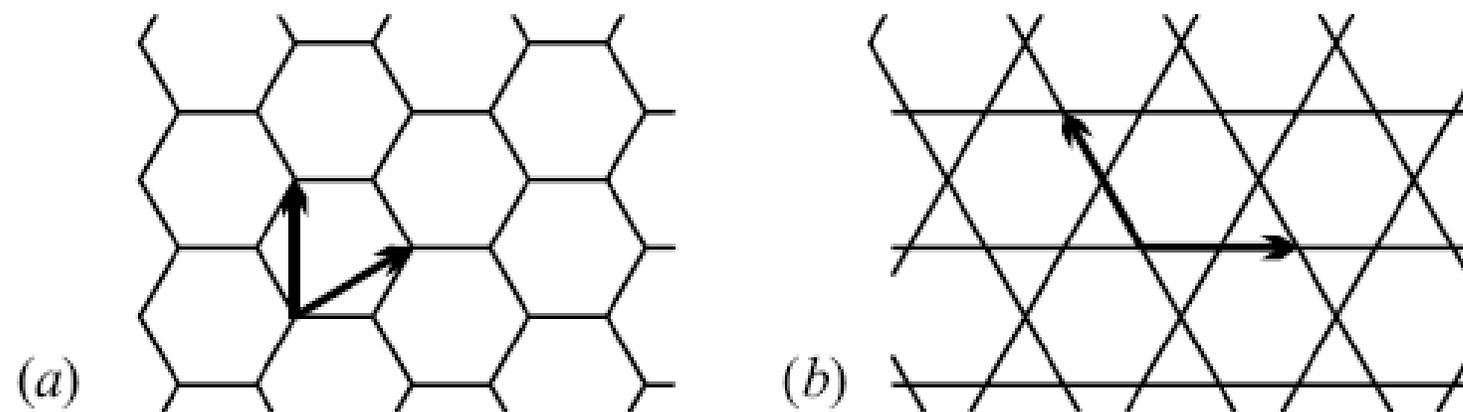


Fig. 5.4. “Lattices” that are not Bravais lattices, and their primitive vectors: (a) honeycomb lattice; (b) kagome lattice

Sistemas cristalinos

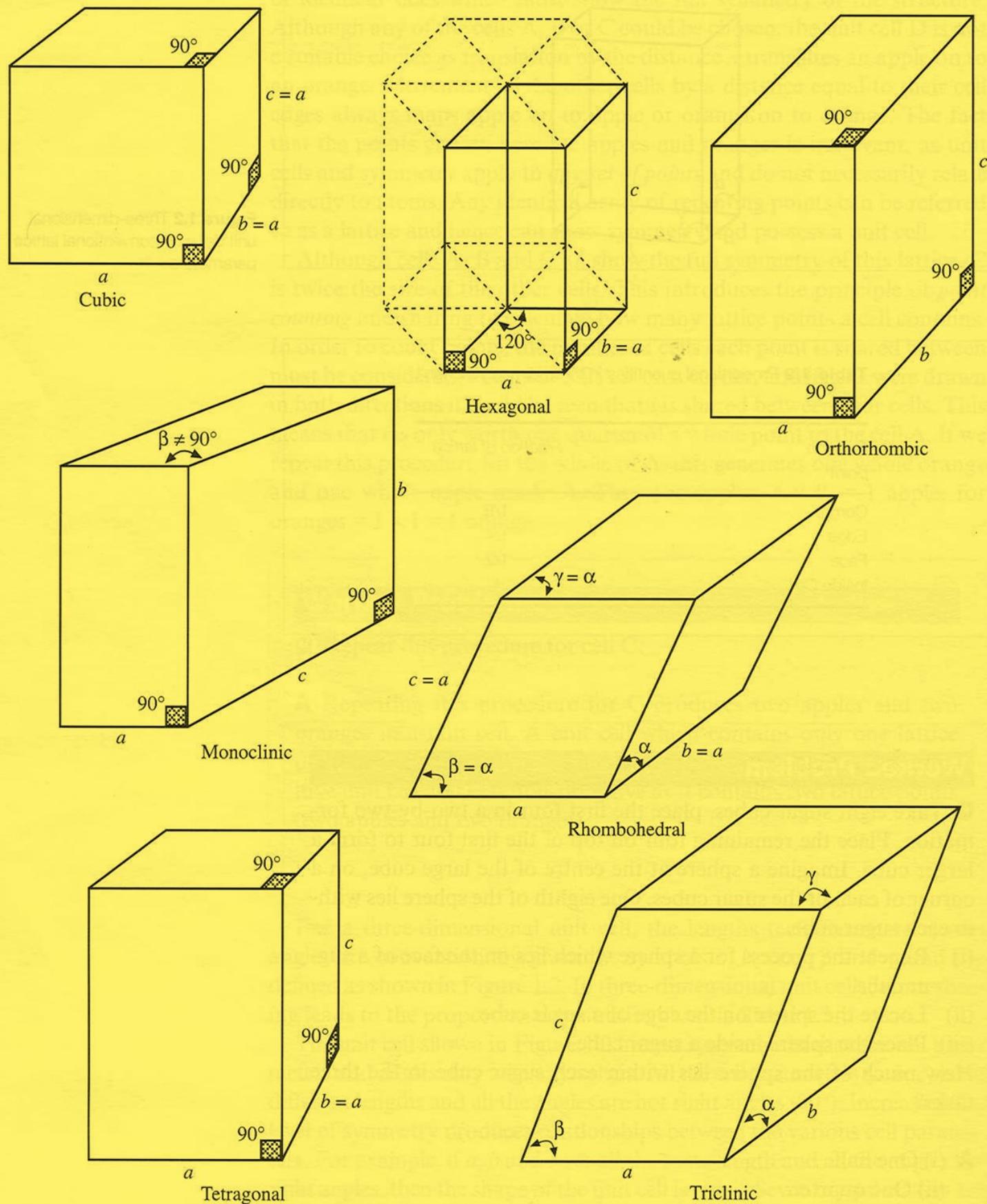
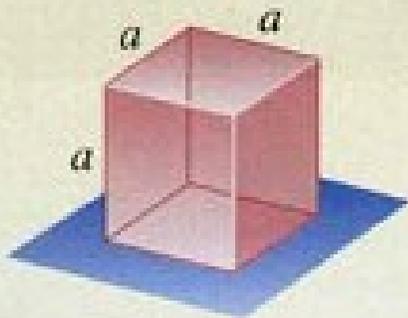
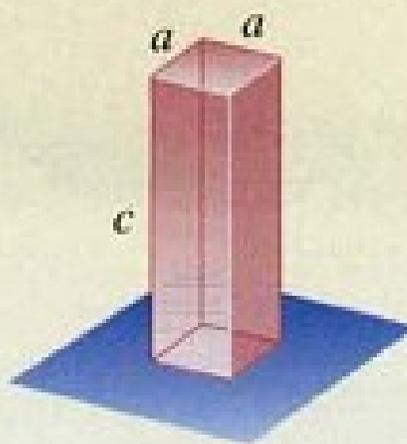


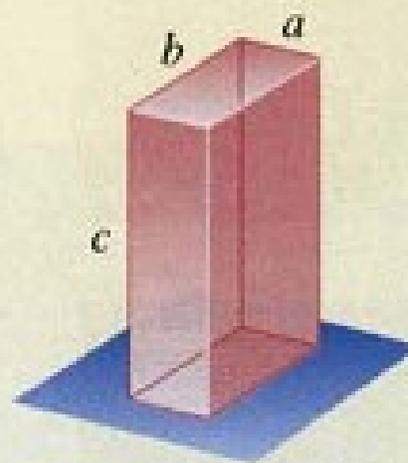
Figure 1.3 The seven crystal systems



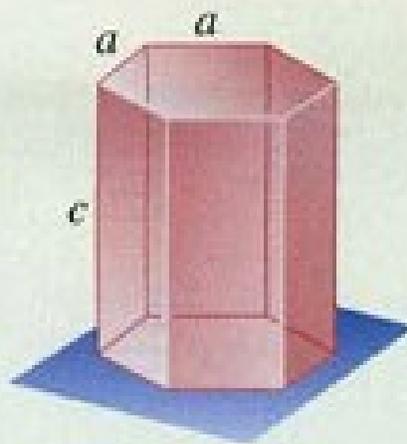
cubic



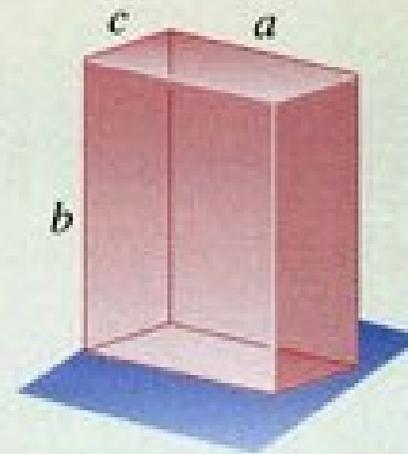
tetragonal



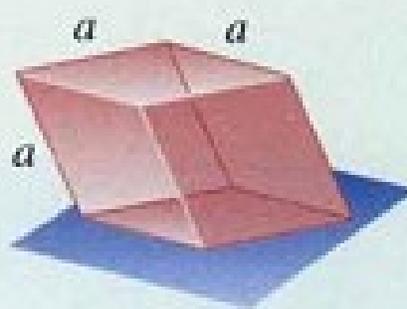
orthorhombic



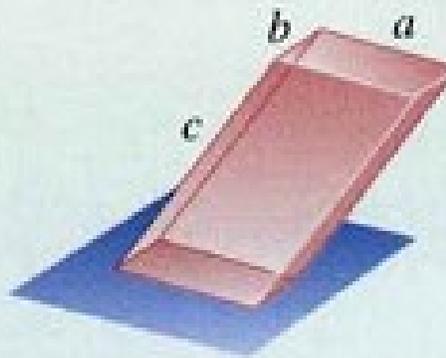
hexagonal



monoclinic

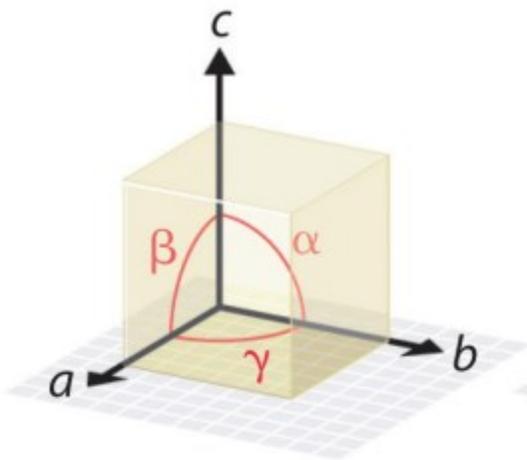


trigonal

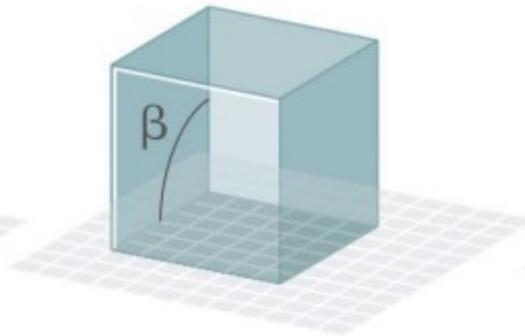


triclinic

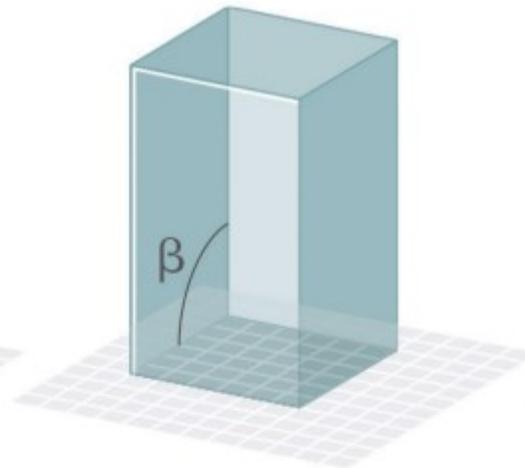
(a)



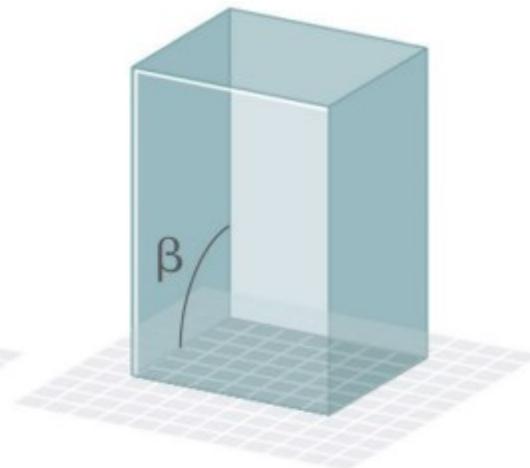
Edges and angles



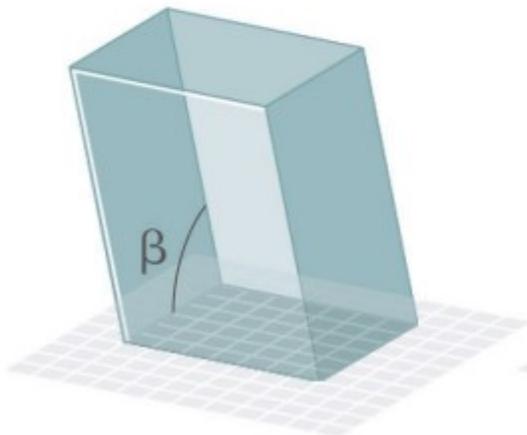
Cubic
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



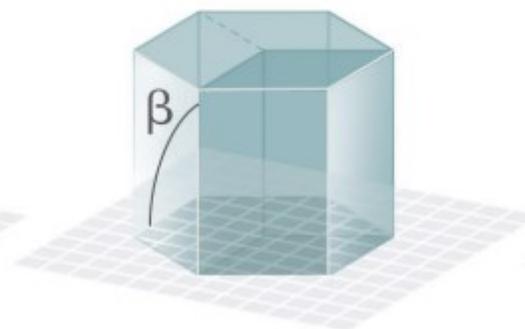
Tetragonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



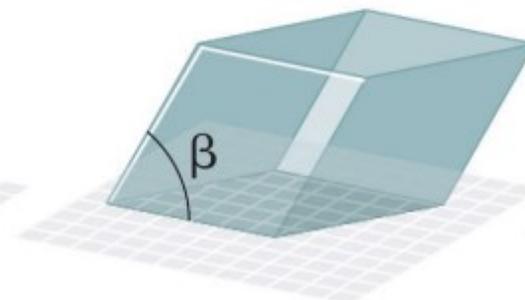
Orthorhombic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



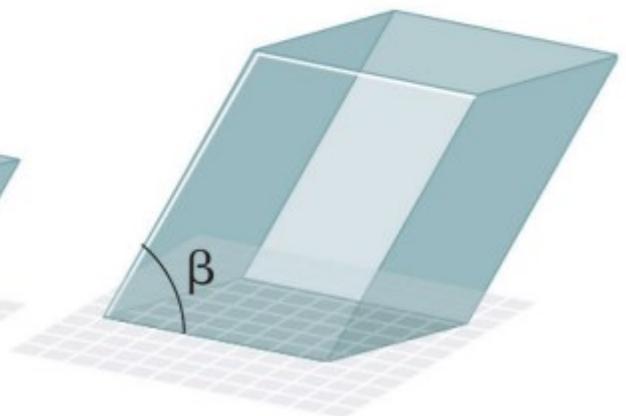
Monoclinic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$



Hexagonal
 $a = b \neq c$
 $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$



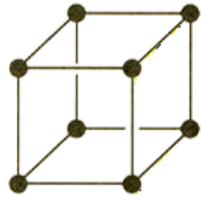
Rhombohedral
 $a = b = c$
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



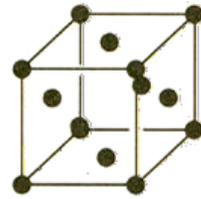
Triclinic
 $a \neq b \neq c$
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

Los siete sistemas cristalinos de los parámetros que definen la celda. Note que el trigonal de la lámina anterior, aquí es romboedral

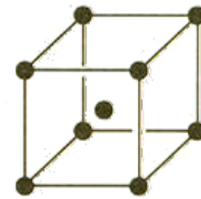
Chapter 3 Atomic Arrangement



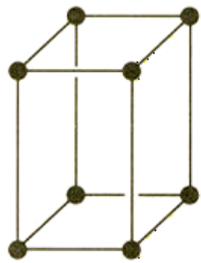
Simple cubic



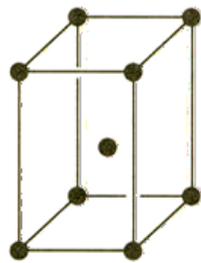
Face-centered cubic



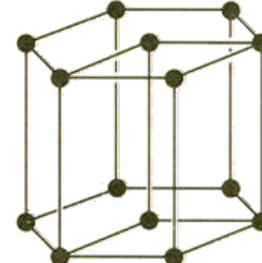
Body-centered cubic



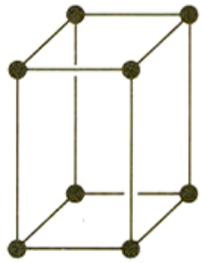
Simple tetragonal



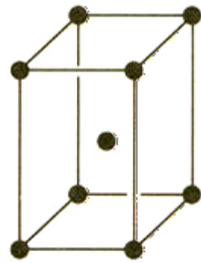
Body-centered tetragonal



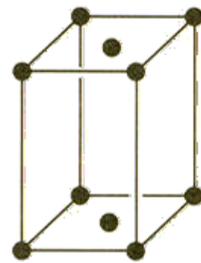
Hexagonal



Simple orthorhombic



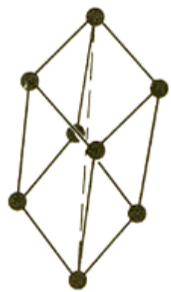
Body-centered orthorhombic



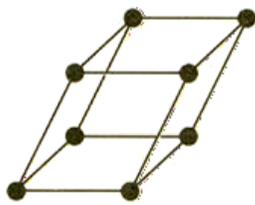
Base-centered orthorhombic



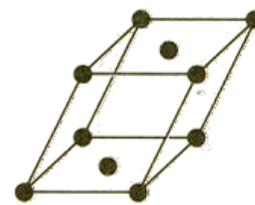
Face-centered orthorhombic



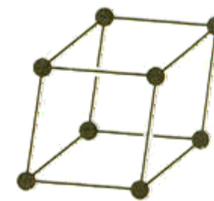
Rhombohedral



Simple monoclinic

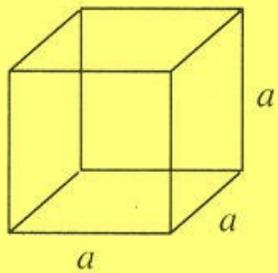
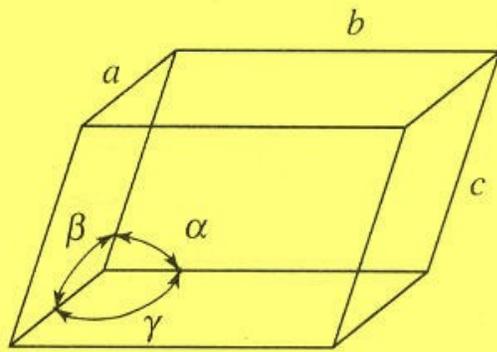


Base-centered monoclinic

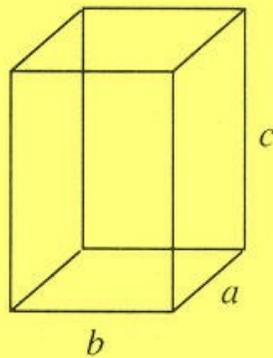


Triclinic

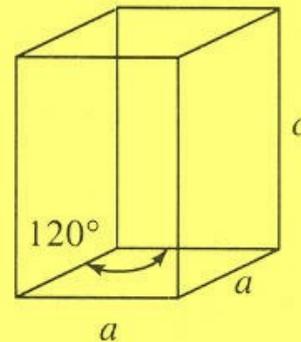
FIGURE 3-4 The fourteen types of unit cells, or Bravais lattices, grouped in seven crystal systems. Characteristics of the crystal systems are summarized in Table 3-1.



Cubic



Orthorhombic

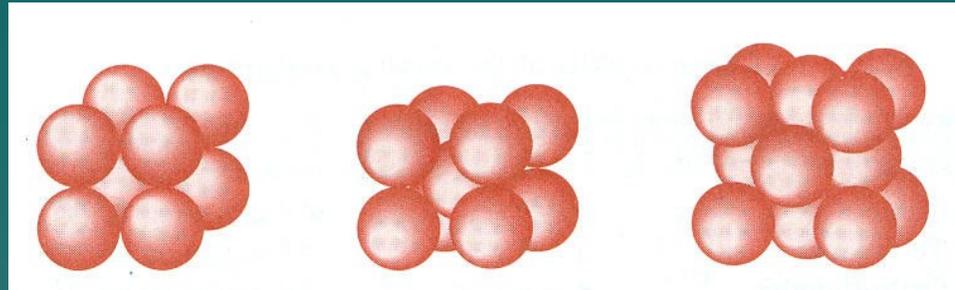


Hexagonal

FIGURE 3-5 Definition of the lattice parameters and their use in three crystal systems.

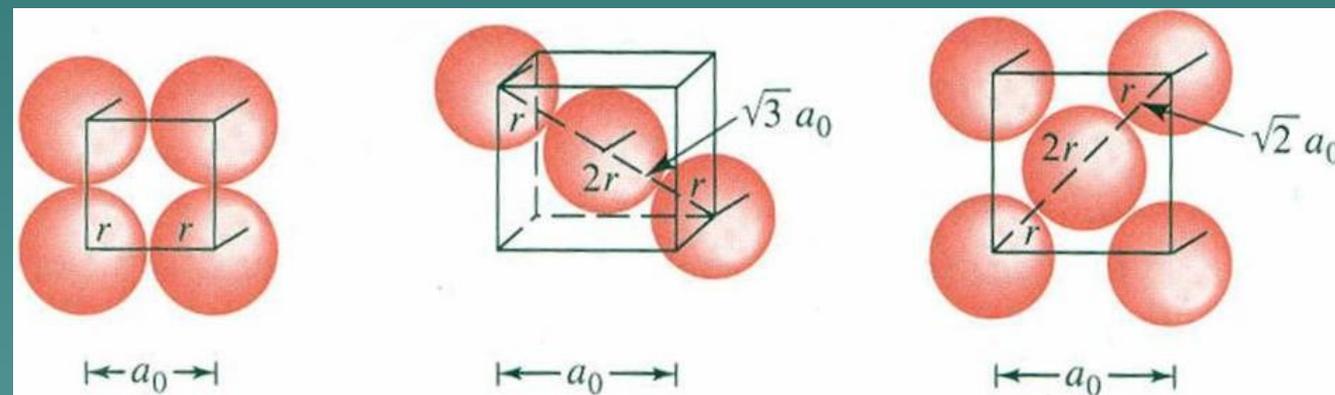
Structure	Axes	Angles between Axes
Cubic	$a = b = c$	All angles equal 90° .
Tetragonal	$a = b \neq c$	All angles equal 90° .
Orthorhombic	$a \neq b \neq c$	All angles equal 90° .
Hexagonal	$a = b \neq c$	Two angles equal 90° . One angle equals 120° .
Rhombohedral	$a = b = c$	All angles are equal and none equals 90° .
Monoclinic	$a \neq b \neq c$	Two angles equal 90° . One angle (β) is not equal to 90° .
Triclinic	$a \neq b \neq c$	All angles are different and none equals 90° .

Modelo de esferas empacadas de SC, BCC y FCC con un átomo por punto de red (malla)



¿ Cuántos átomos hay por celda unitaria ?

Cuente ahora el número de primeros vecinos de cada átomo



Para SC

$$2r = a_o$$

Para Cúbico I

$$a_o = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

Para cúbico F

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

Definiendo un factor de empacamiento como....

¿Cuál es el factor de empacamiento para cada una de estas tres ?

- Si Polonio (el único en condición estándar) es cúbico P y tiene una masa molar de 0.209 Kg $a_0 = 3.34 \text{ \AA}$ (9196 kg/m³)
- Molibdeno 0.09594 Kg es BCC $a_0 = 3.1468 \text{ \AA}$ (10.2 g/cm³)
- Oro 0.19697 Kg es FCC $a_0 = 4.0786 \text{ \AA}$ (19.300 g/m³)

¿Cuál es la densidad de cada uno de ellos ?

$$\rho = \frac{N_c M}{N_A V_c}$$

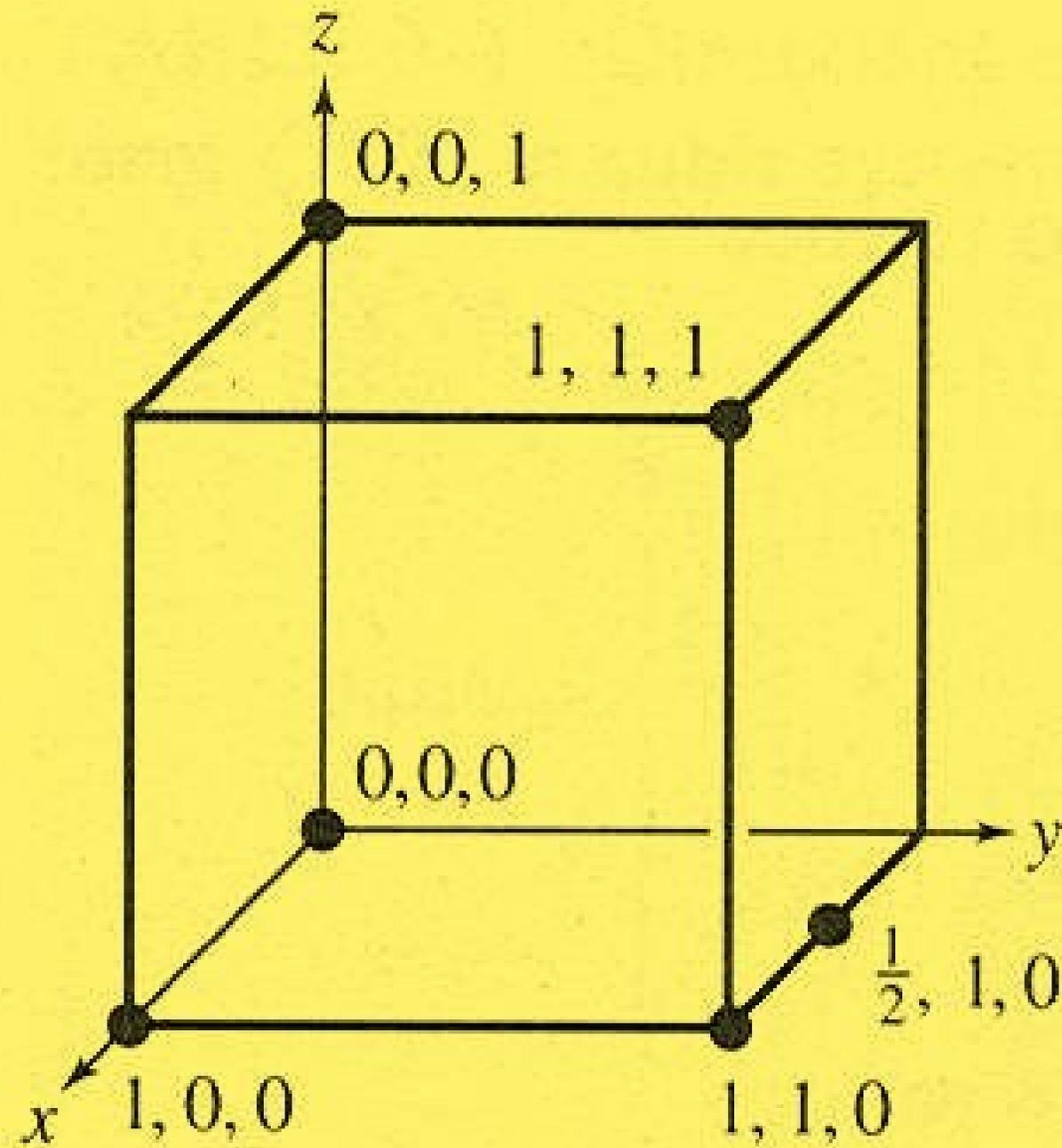
N_c = átomos o moléculas por celda

M = masa molar

N_A = número de Avogadro

V_c = volumen de celda

Coordenadas internas de una celda cristalina



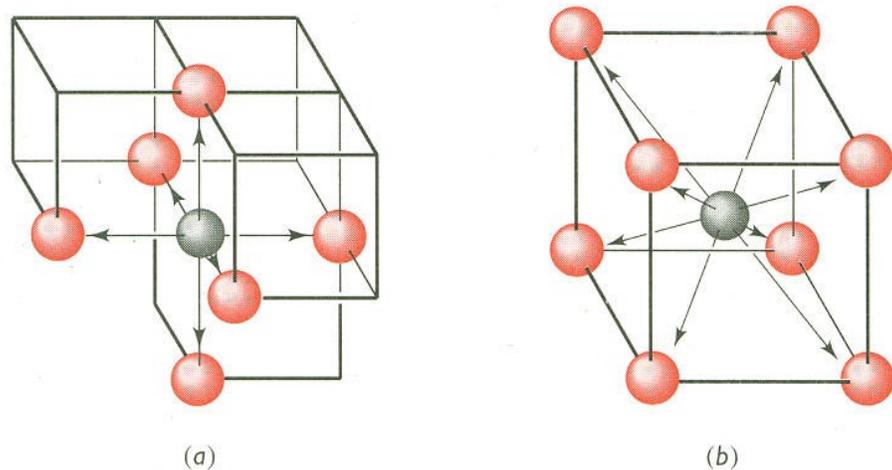
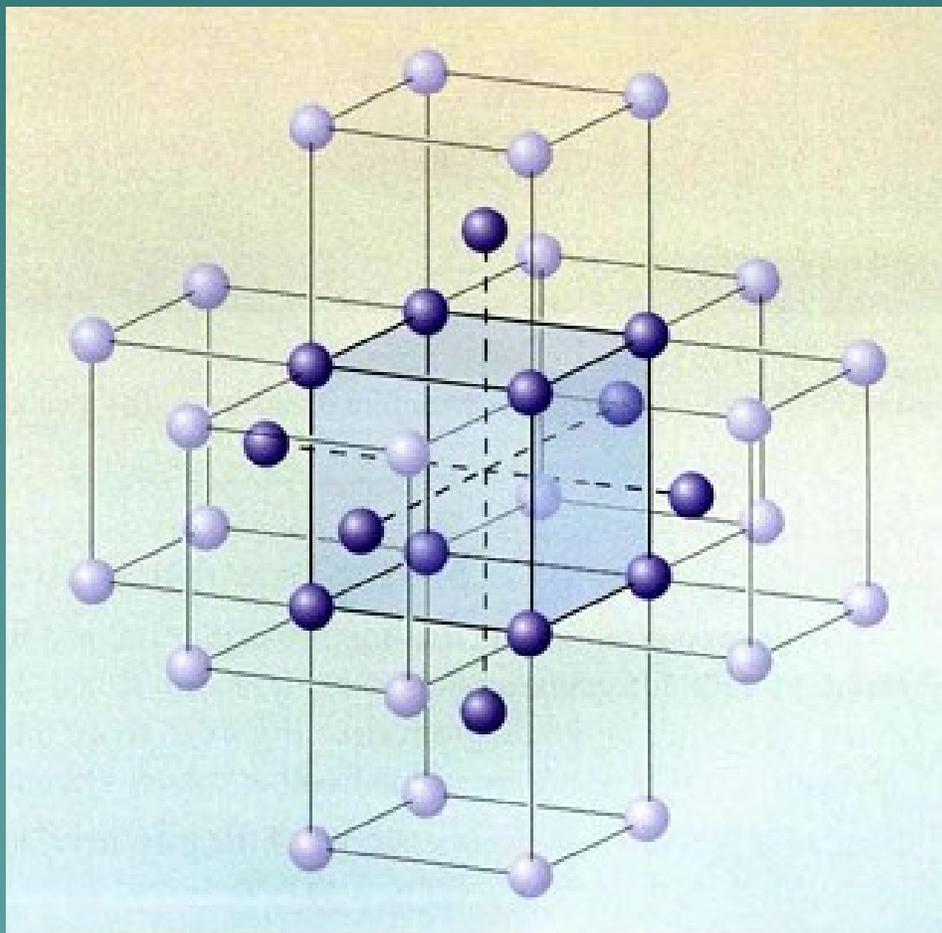


FIGURE 3-8 Illustration of coordination in SC (a) and BCC (b) unit cells. Six atoms touch each atom in SC, while the eight corner atoms touch the body-centered atom in BCC.

Ya que vio los primeros vecinos, trate ahora de ver los segundos vecinos y cuéntelos



Esta es una malla cúbica I, aquí si podría contar hasta la tercera vecindad. Trate ahora de hacerlo con cada uno de los átomos, recuerde que son mallas de Bravais

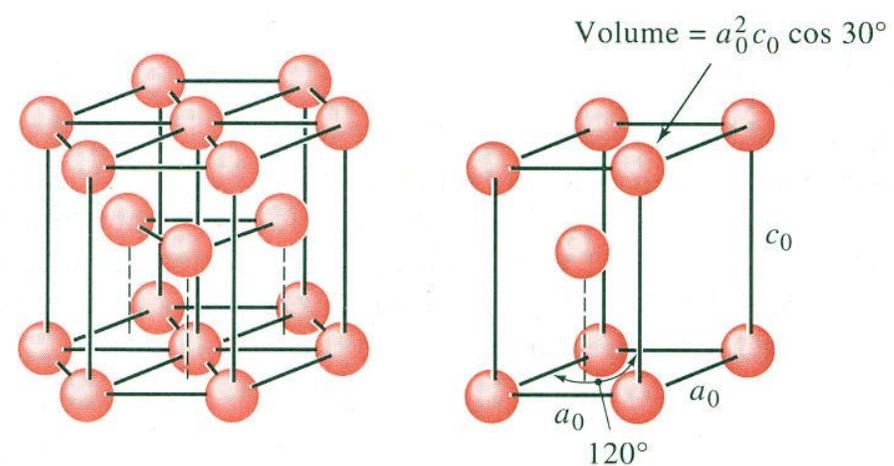


FIGURE 3-9 The hexagonal close-packed (HCP) lattice (left) and its unit cell (right).

Notar aquí la coordinación de cada esfera

TABLE 3-2 Characteristics of common metallic crystals

Structure	a_0 versus r	Atoms per Cell	Coordination Number	Packing Factor	Typical Metals
Simple cubic (SC)	$a_0 = 2r$	1	6	0.52	None
Body-centered cubic (BCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{3}$	2	8	0.68	Fe, Ti, W, Mo, Nb Ta, K, Na, V, Cr, Zr
Face-centered cubic (FCC)	$a_0 = 4r/\sqrt{2}$	4	12	0.74	Fe, Cu, Al, Au, Ag, Pb, Ni, Pt
Hexagonal close-packed (HCP)	$a_0 = 2r$ $c_0 = 1.633a_0$	2	12	0.74	Ti, Mg, Zn, Be, Co, Zr, Cd

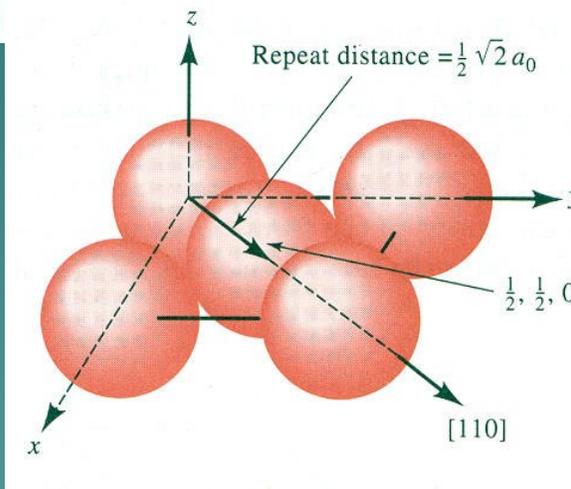


FIGURE 3-13 Determining the repeat distance, linear density, and packing fraction for a [110] direction in FCC copper.

También se puede mencionar la **densidad lineal**, que sería en número de puntos de red (menos 1) por unidad de longitud.

También una **densidad de cara** = átomos por cara/área de cara

Fracción de empacamiento de cara = área de átomos por cara/área de cara

Para contar el número de átomos en una celda unitaria de tres dimensiones, debe tenerse en cuenta que:

- Un átomo en un vértice es compartido por **8** celdas por lo que solo cuenta por **$\frac{1}{8}$**
- Un átomo colocado en una arista es compartido por **4** celdas por lo que sólo cuenta por **$\frac{1}{4}$**
- Un átomo colocado en una cara es compartido por **2** celdas por lo que sólo contribuye con **$\frac{1}{2}$**
- Un átomo colocado dentro de la celda, pertenece sólo a esa celda y se cuenta como **1**

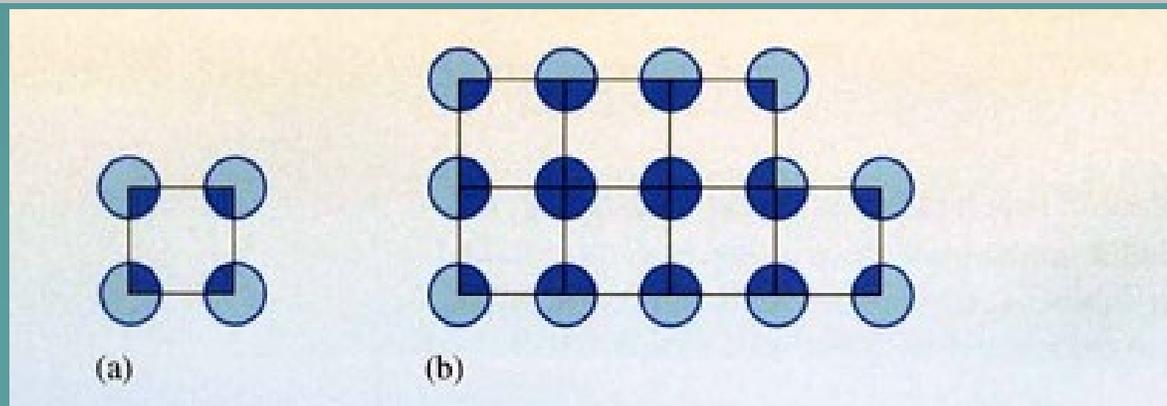
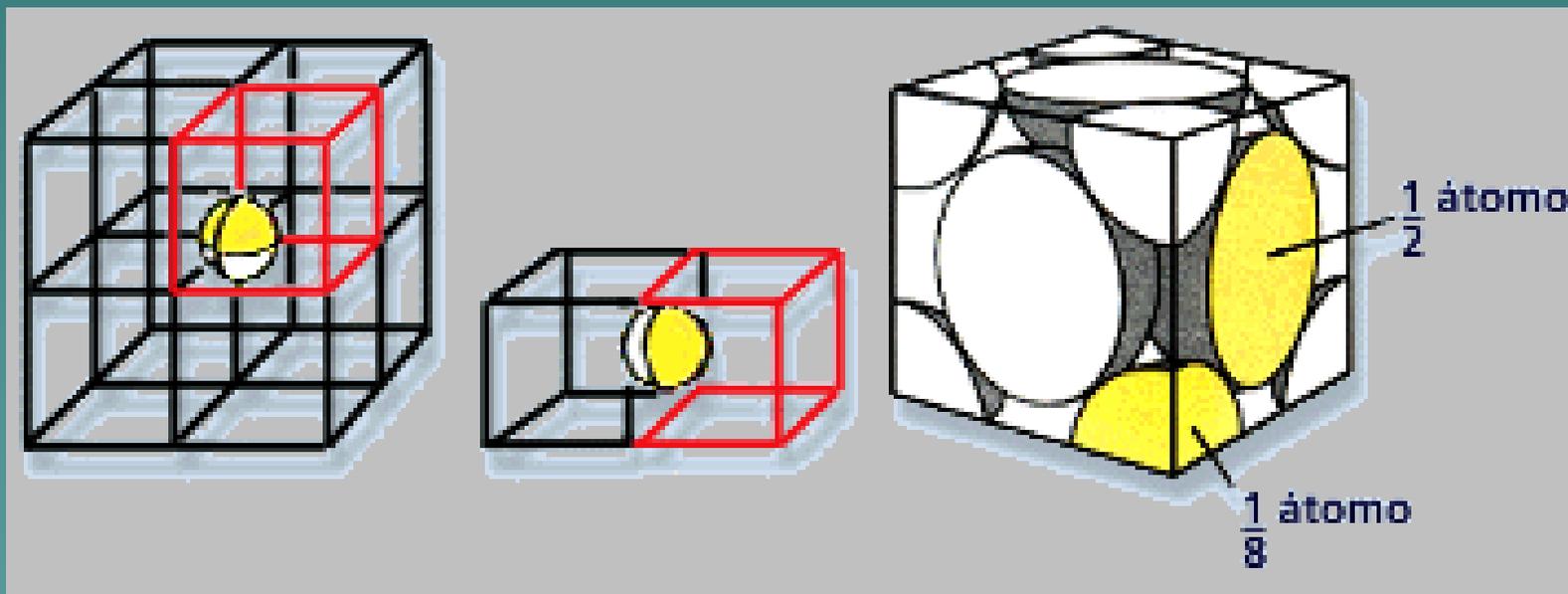


Figure 3.16

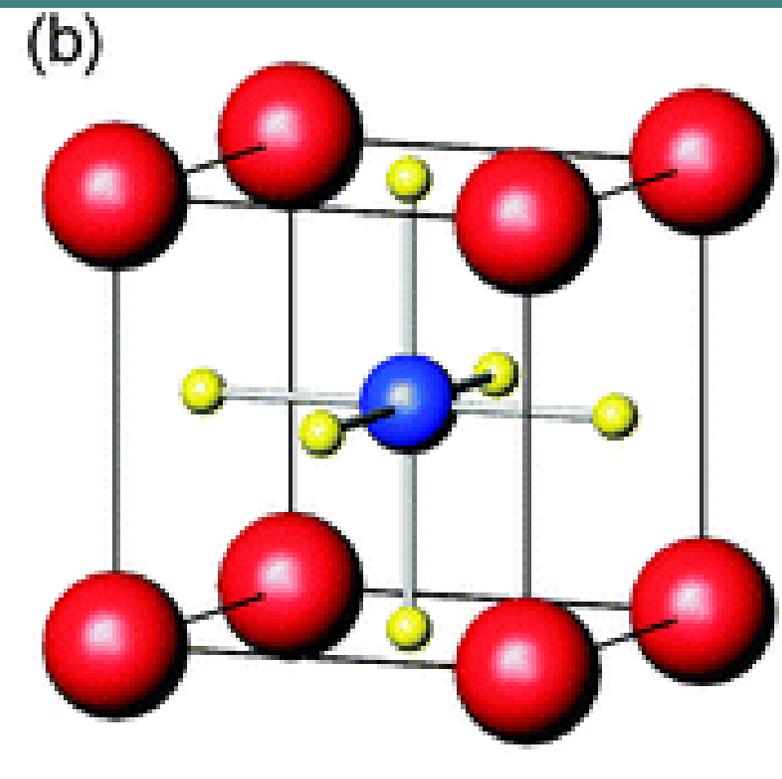
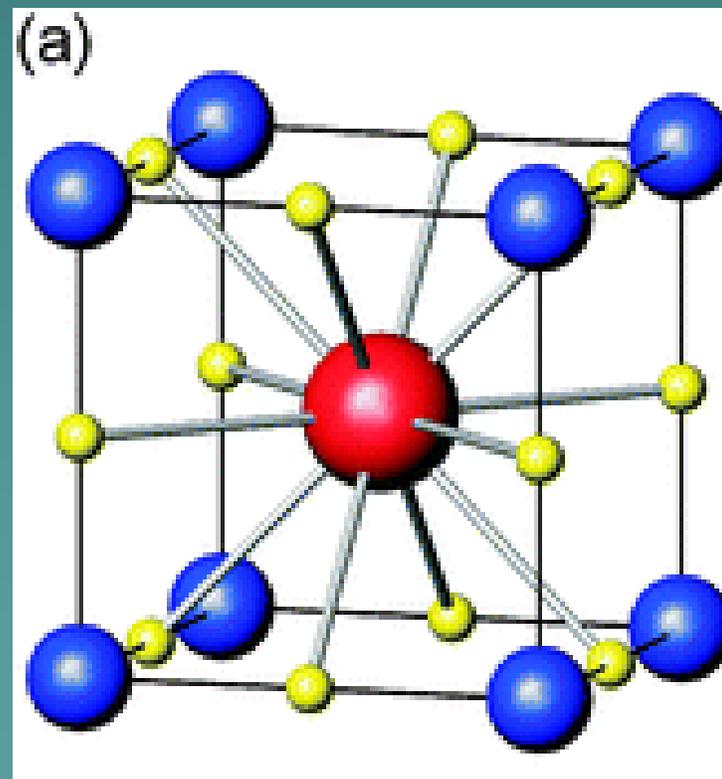
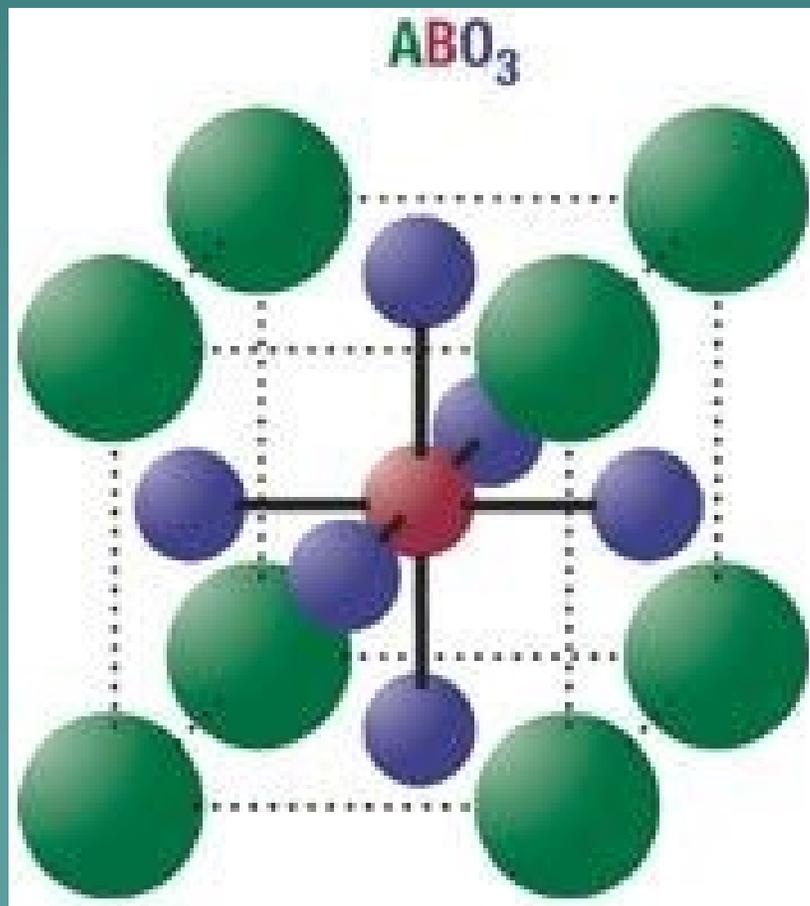
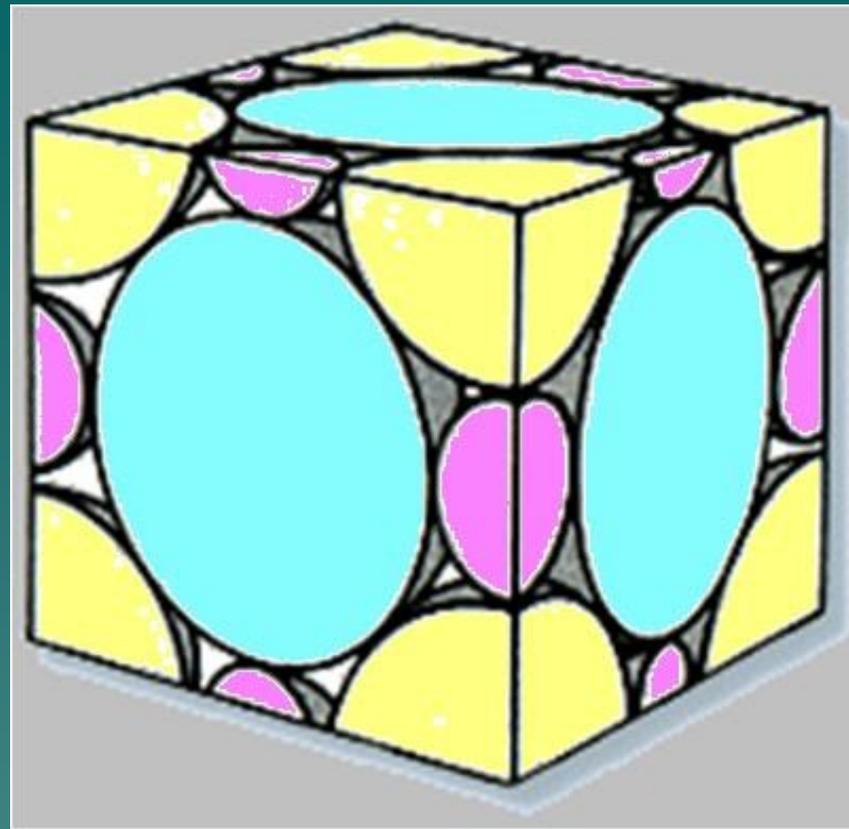
(a) The unit cell of the array in Figure 3.15, showing the quarter atoms in dark blue; (b) the array generated by repeating the unit cells.

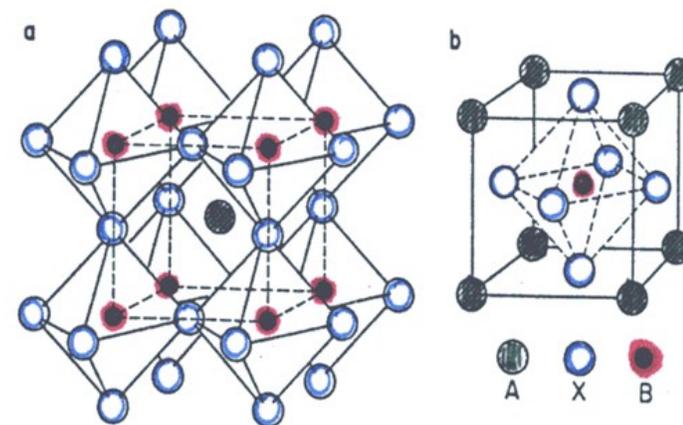
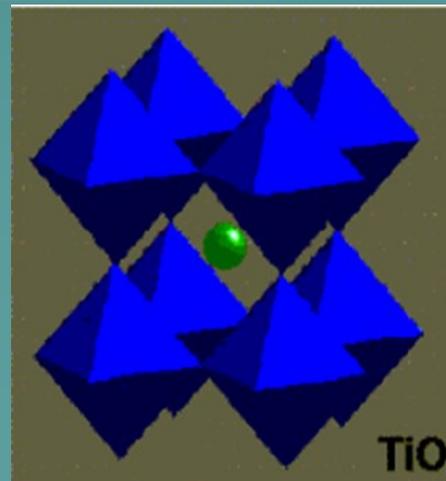
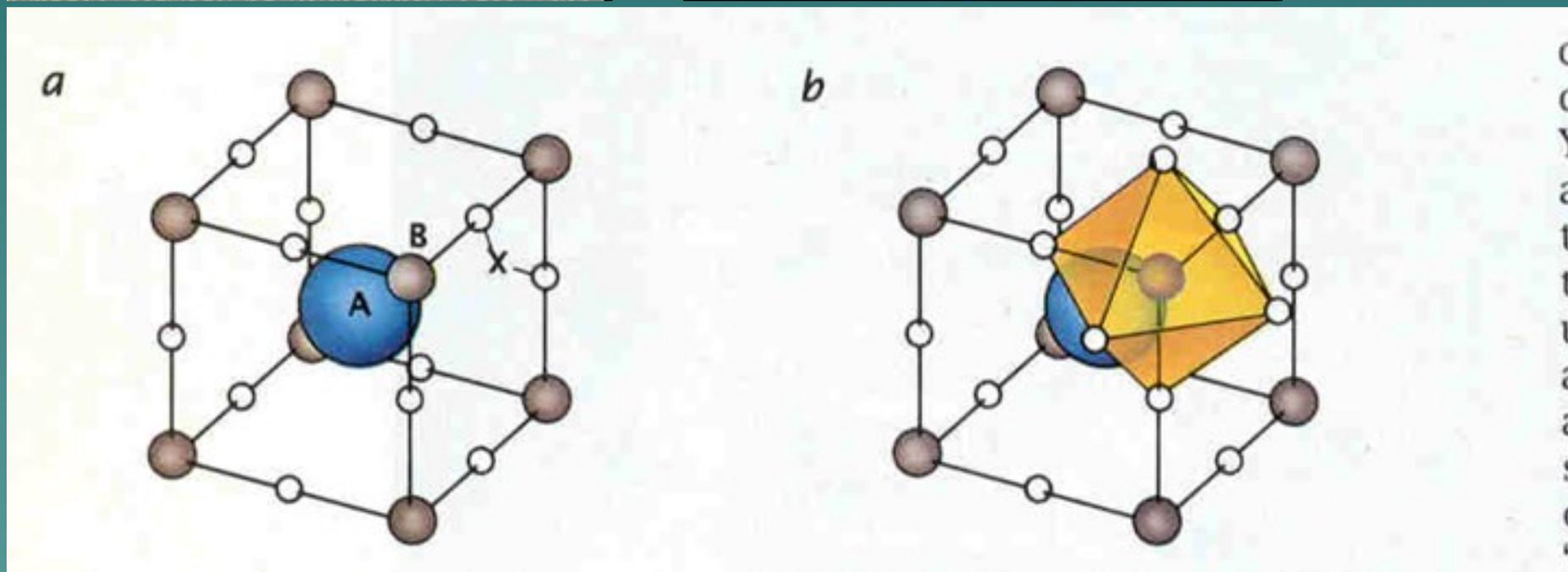
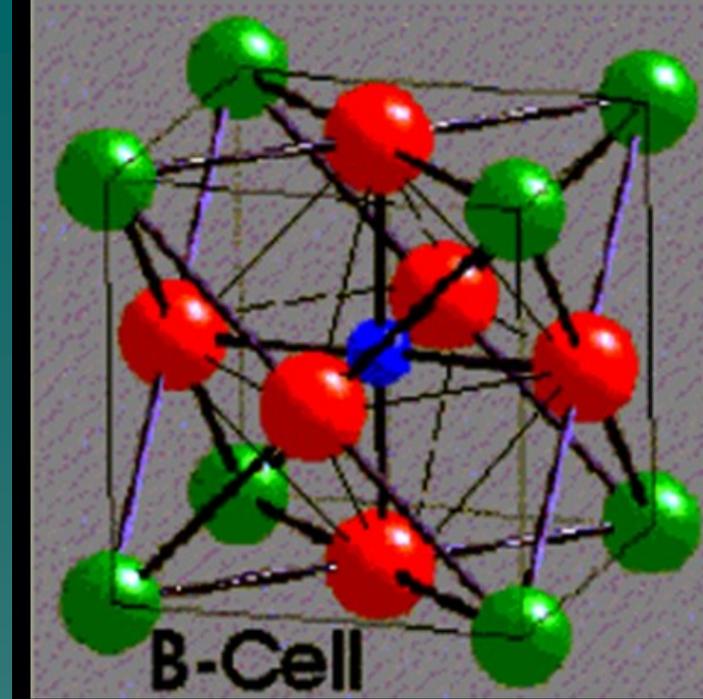
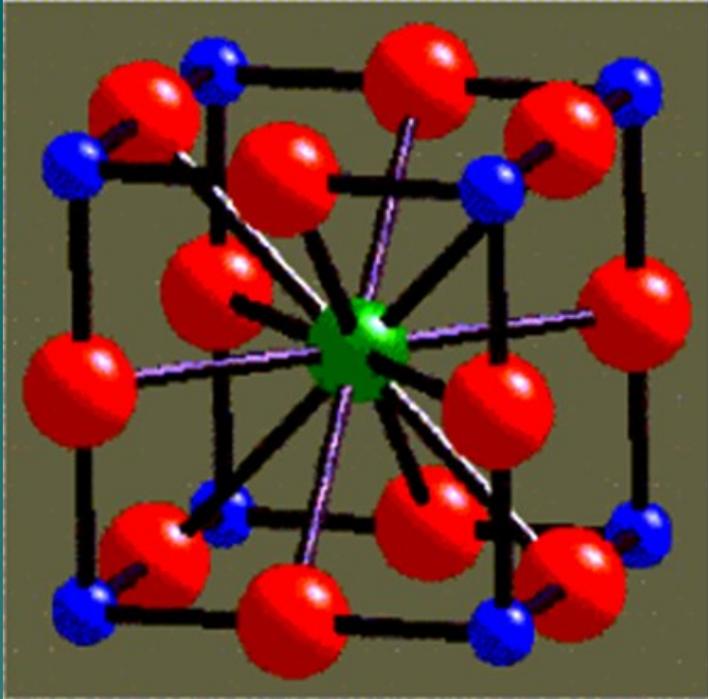
Structure	Percentage of Space Occupied by Atoms	Coordination Number
simple cubic	52	6
body-centered cubic	68	8
hexagonal close packed	74	12
cubic close packed (identical to face-centered cubic)	74	12

Cúbico “simple” será cúbico P o CP

Cúbico centrado en cuerpo será Cúbico I o simplemente CI

Cúbico centrado en caras, será Cúbico F o simplemente CF





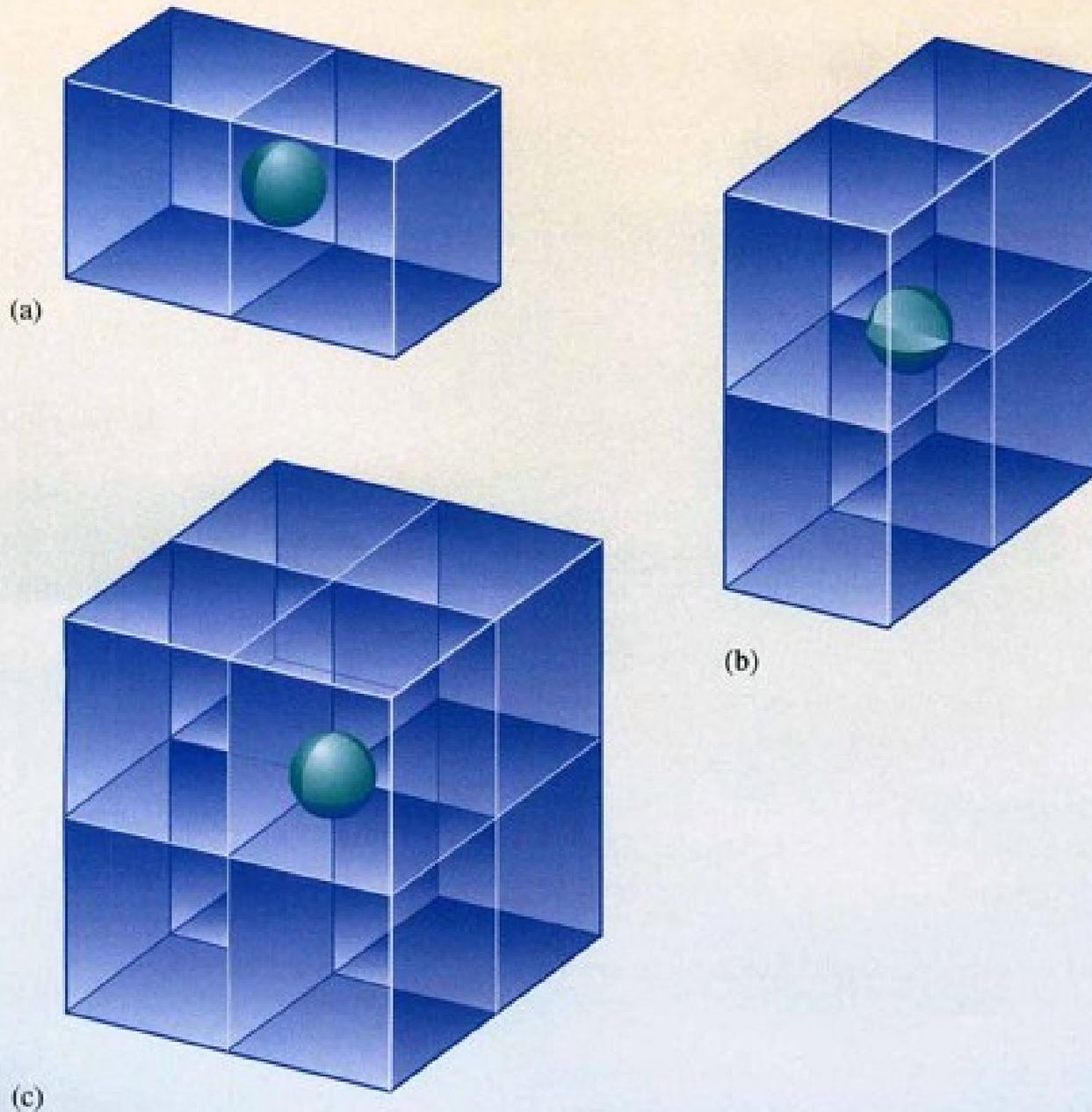


Figure 3.17 Unit cells meeting at (a) a face (two unit cells), (b) an edge (four unit cells), and (c) a corner (eight unit cells).

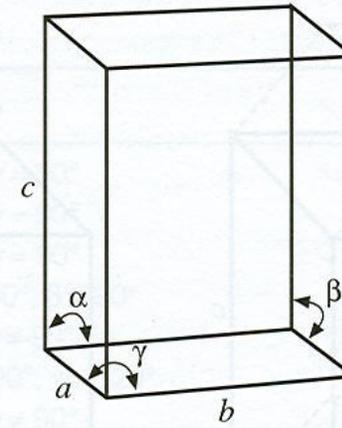
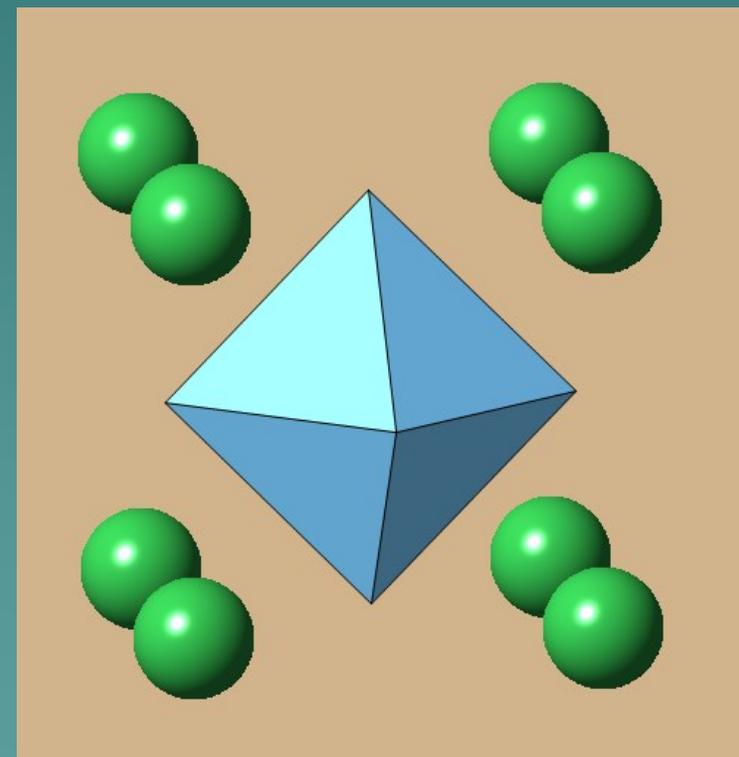
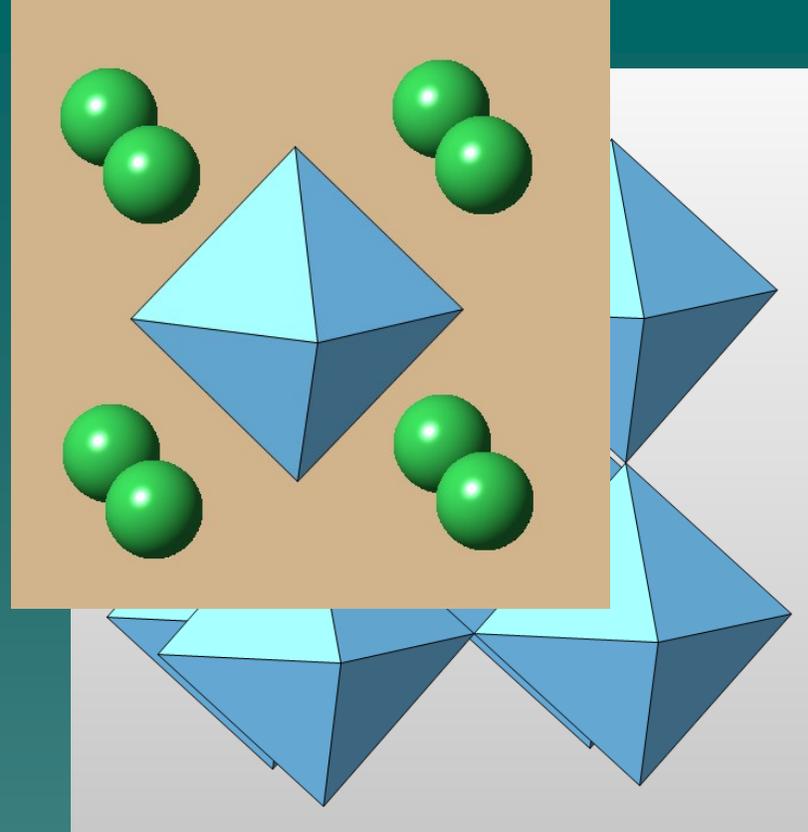


Table 1.2 Proportional quantities in three-dimensional unit cells

<i>Position point</i>	<i>Fraction of lattice</i>
Corner	1/8
Edge	1/4
Face	1/2
Inside Cell	1



Se ve claro que se trata de la misma estructura con una translación del origen??

Coordenadas internas de una celda cristalina

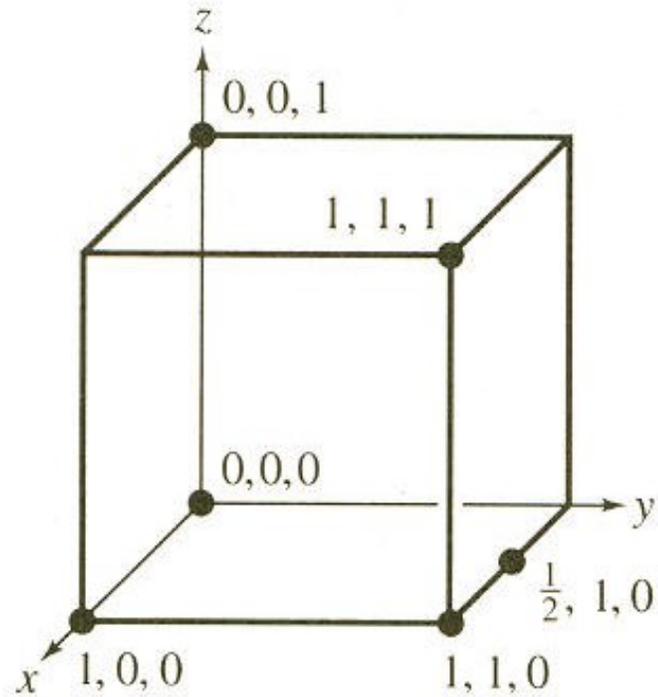
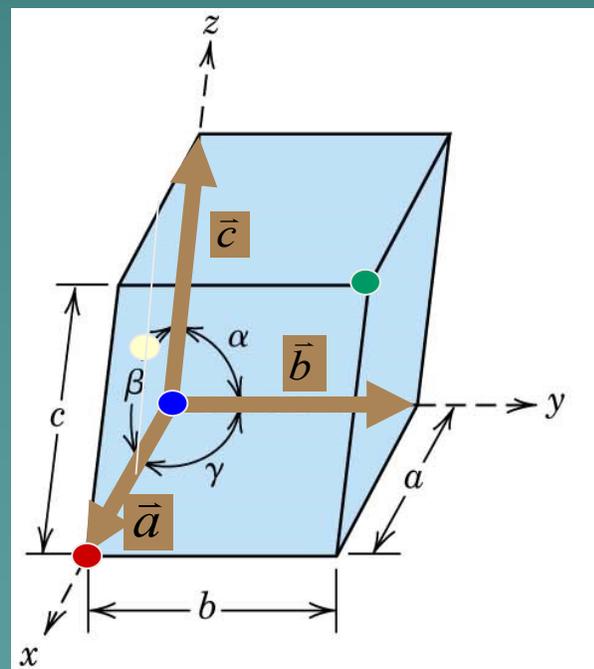


FIGURE 3-10 Coordinates of selected points in the unit cell. The numbers refer to the distance from the origin in terms of the numbers of lattice parameters.

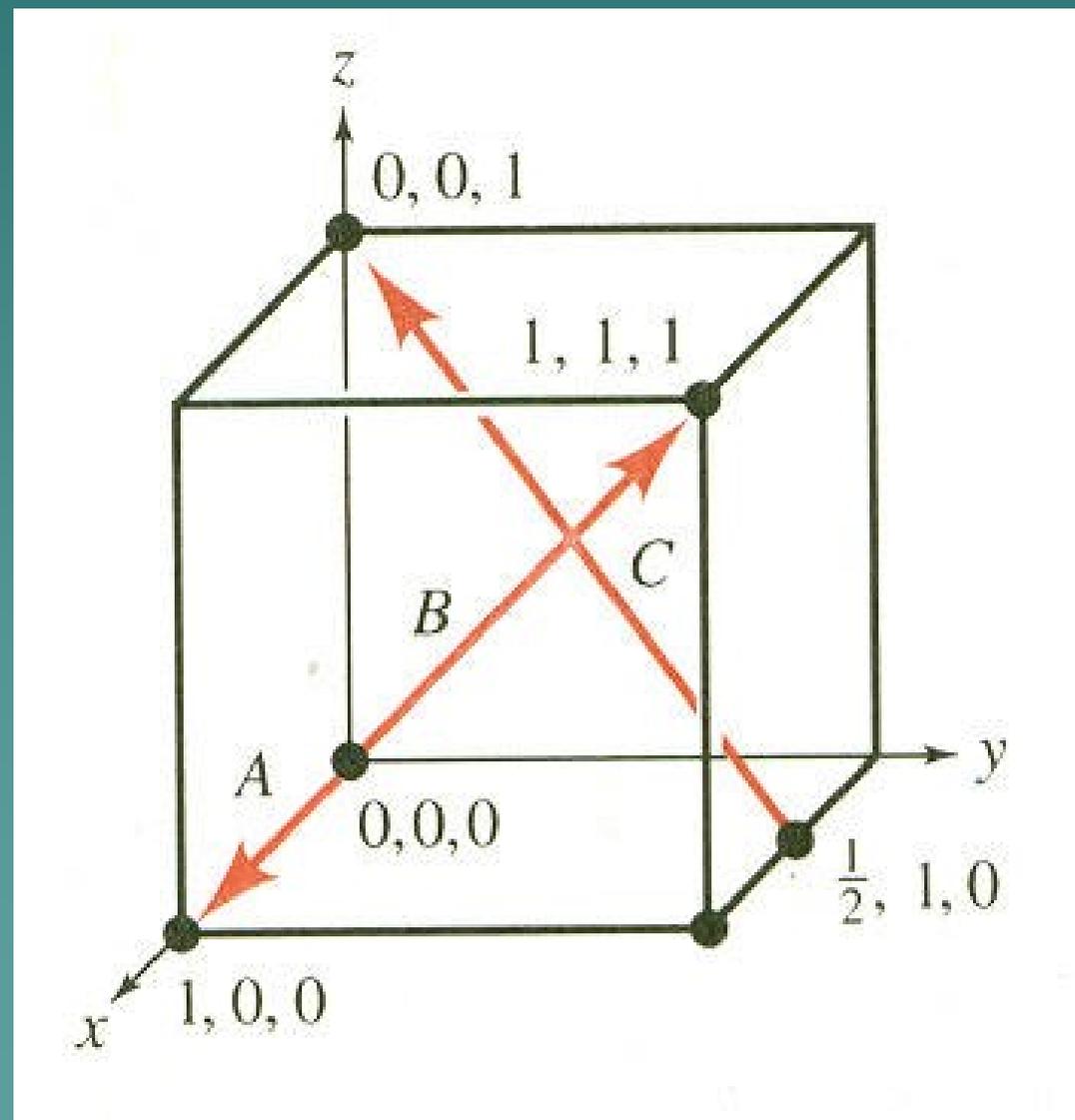


coordenadas de un punto

pt.	x (a)	y (b)	z (c)
●	0	0	0
●	1	0	0
●	1	1	1
●	1/2	0	1/2

Para determinar direcciones con índices de Miller:

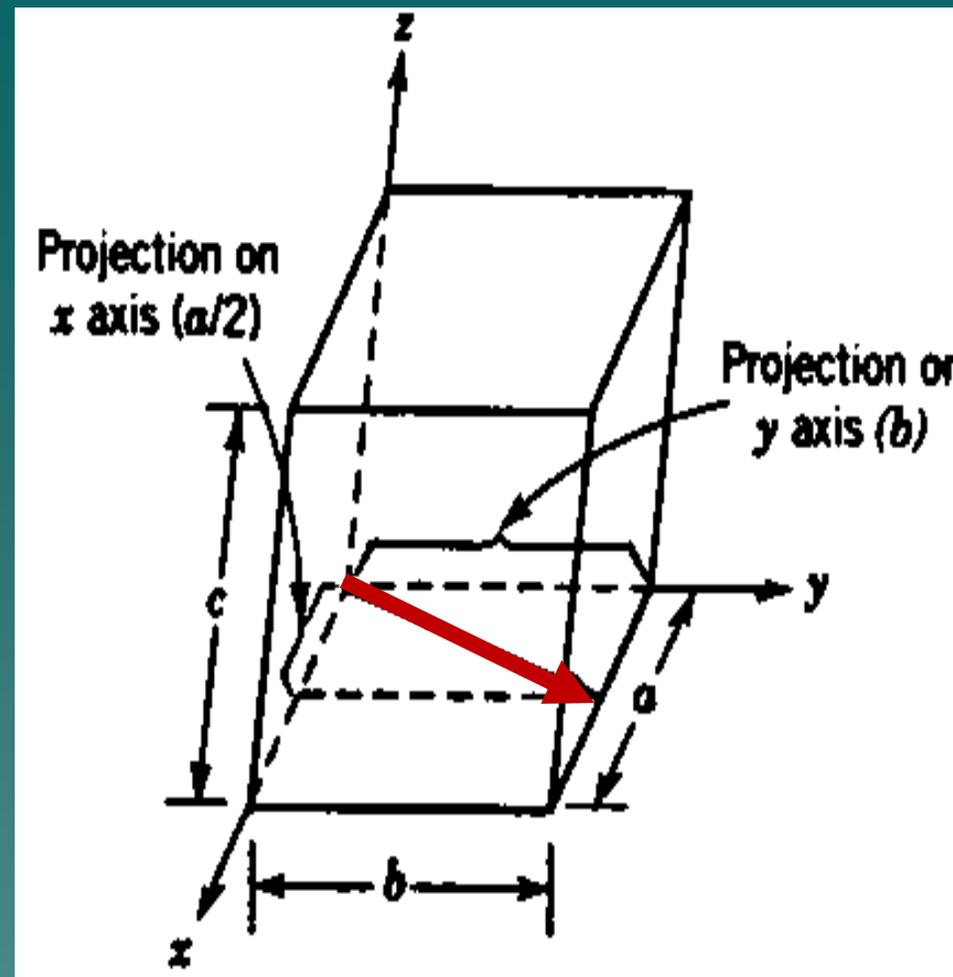
- Use un eje coordenado derecho y determine las coordenadas de dos puntos que caigan en la línea de la dirección que usted desea
- Sustraiga las coordenadas de la "cola" de las coordenadas de la "cabeza"
- Lleve usted la sustracción a números enteros simples y bajos
- Encierre los números en paréntesis rectangulares []



Sobre las direcciones cristalográficas

Una dirección cristalográfica se define como una línea entre dos **puntos (un vector)**

1. Un vector de una longitud adecuada se coloca tal que éste pase a través del origen del sistema coordinado. Cualquiera vector puede ser trasladado a través de la malla cristalina, con la condición de que se mantenga paralelo al original.
2. La longitud de la proyección del vector sobre cada uno de los tres ejes se determina en términos de la dimensiones de la celda a , b , y c .
3. Estos tres números se multiplican o se dividen por un factor común para reducirlos a un conjunto de valores enteros.
4. Los tres índices se encierran por corchetes $[uvw]$. Los enteros u , v , y w corresponden a las proyecciones reducidas a lo largo de los ejes x , y , y z respectivamente.



1. El vector pasa por el origen y no se requiere de translación.
2. Las proyecciones de este vector a lo largo de los ejes x , y , y z son $a/2$, b , y $0c$. En términos de la celda unitaria serán $1/2$, 1 , 0 .
3. La reducción de estos números al **conjunto más pequeño de enteros** puede conseguirse multiplicando por 2 para darnos 1 , 2 , y 0
4. La dirección cristalográfica será entonces $[120]$

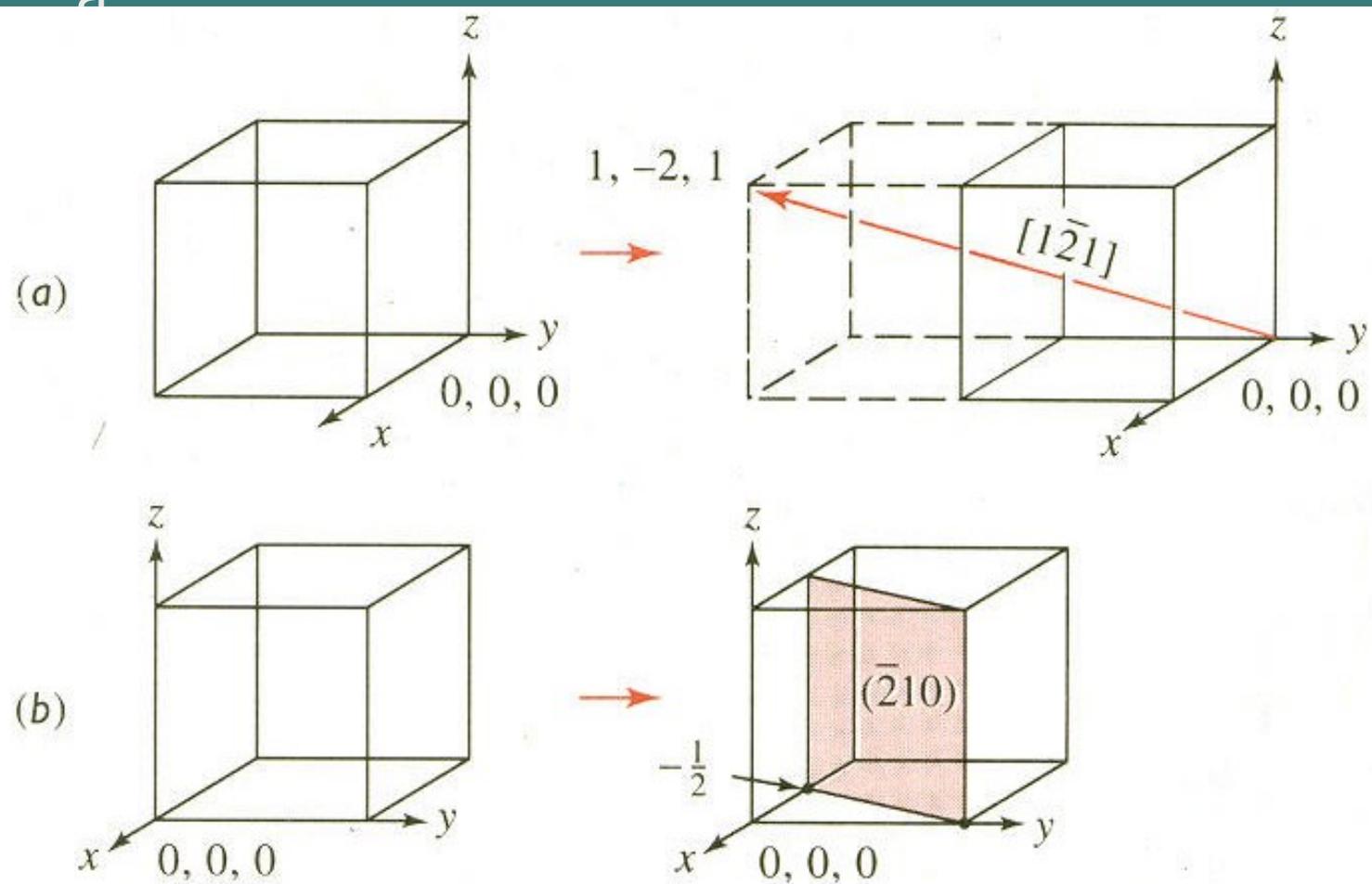
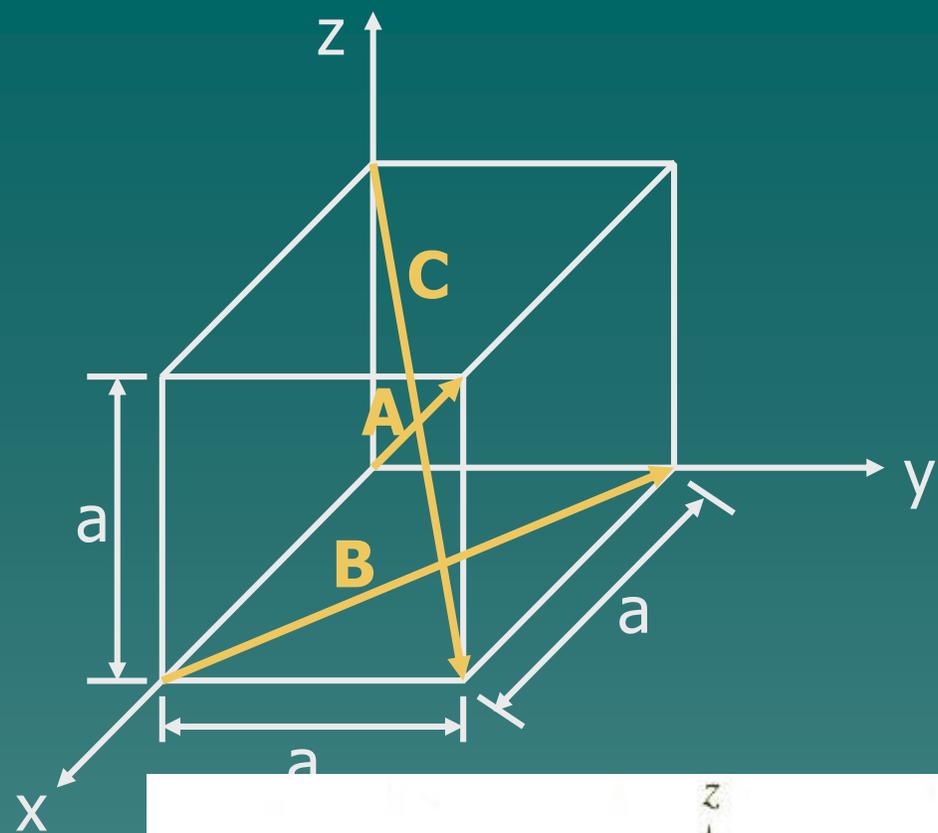


FIGURE 3-16 Construction of a direction (a) and plane (b) within a unit cell.

Note que :

- a) $[100]$ no es la misma que $[010]$
- b) Una dirección y su múltiplo son las mismas
 $[100]=[200]$
- c) Existen direcciones equivalentes que dependen de la elección del sistema coordenado. Se llaman direcciones de forma y se denotan por $\langle \ \rangle$

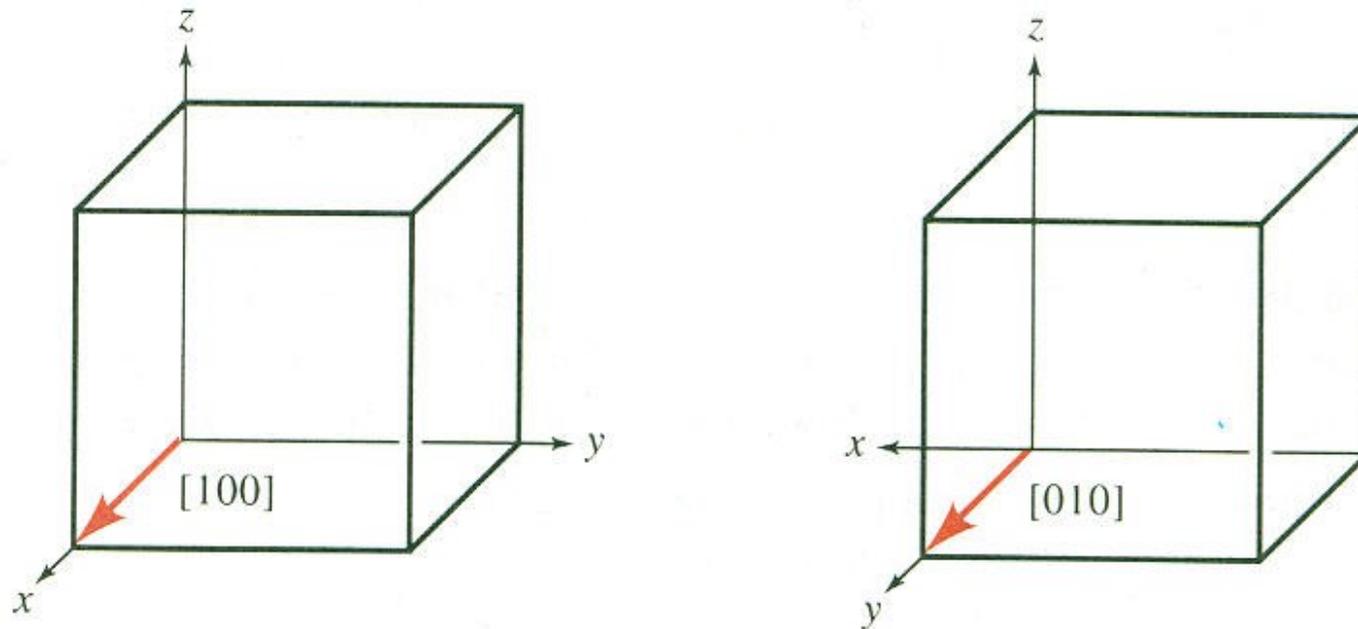


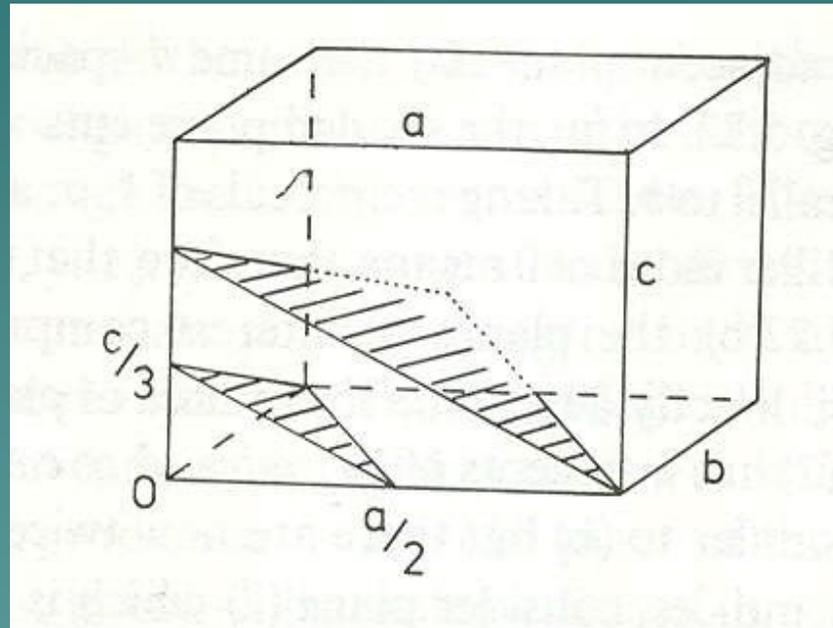
FIGURE 3-12 Equivalency of crystallographic directions of a form in cubic systems.

TABLE 3-3 Directions of the form $\langle 110 \rangle$ in cubic systems

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

Procedimiento para asignar índices de Miller:

- Considere un plano adyacente a aquél que pasa por el origen
- Considere las intersecciones de este plano con los tres ejes de la celda cristalina y escriba estas intersecciones en términos de fracciones de a , b o c .
- Si el plano en cuestión corta al eje x en $a/2$; al y en b y al z en $c/3$, las intersecciones fraccionales son $1/2$, 1 , $1/3$



- Los recíprocos de estos números le darán 2,1,3
- Enciérrelos en un paréntesis (sin coma) (213)

Estos son los índices de Miller de este plano y de todos los que sean paralelos de éste. Dos planos adyacentes de estos estarán separados una distancia d .

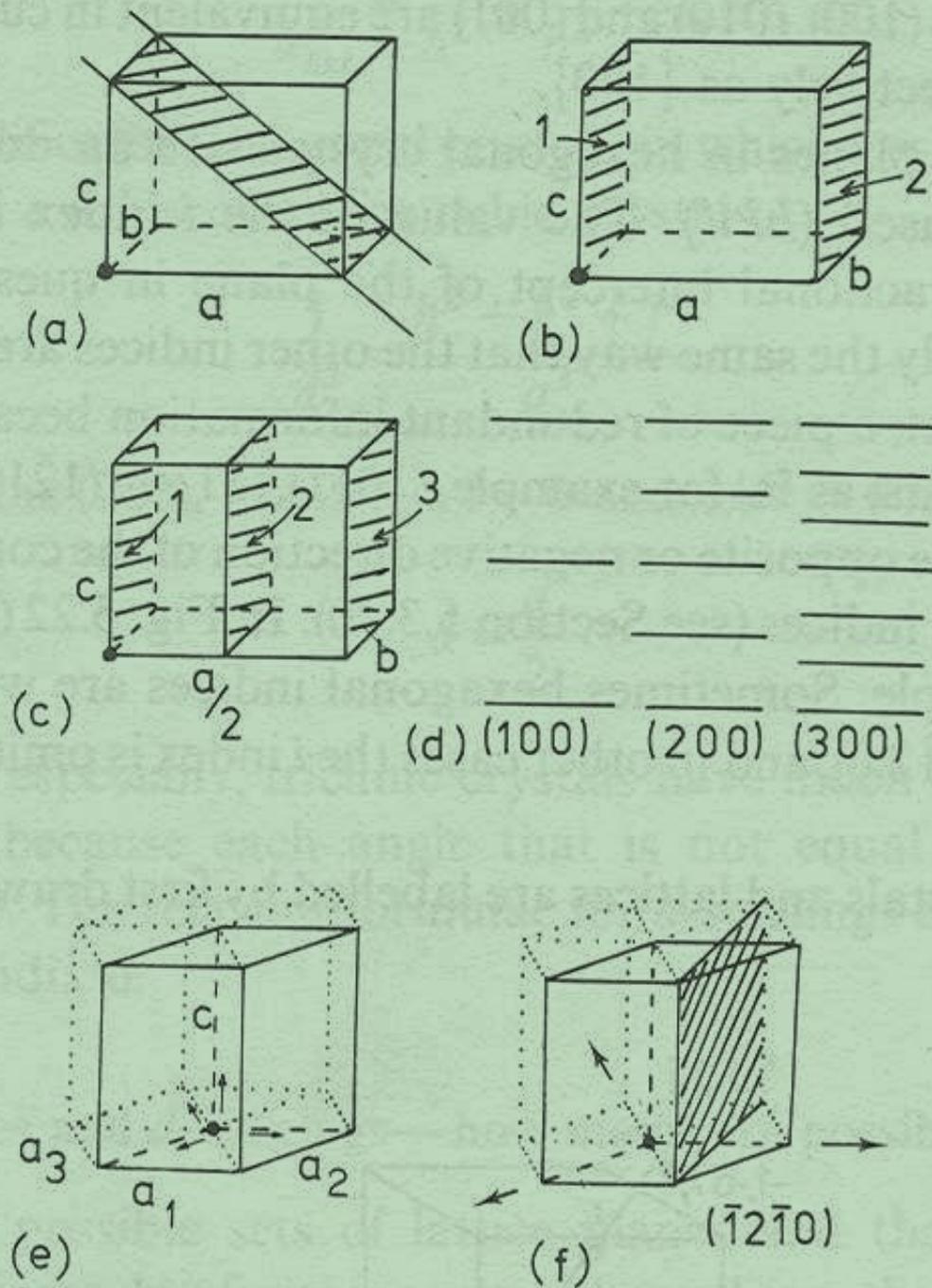
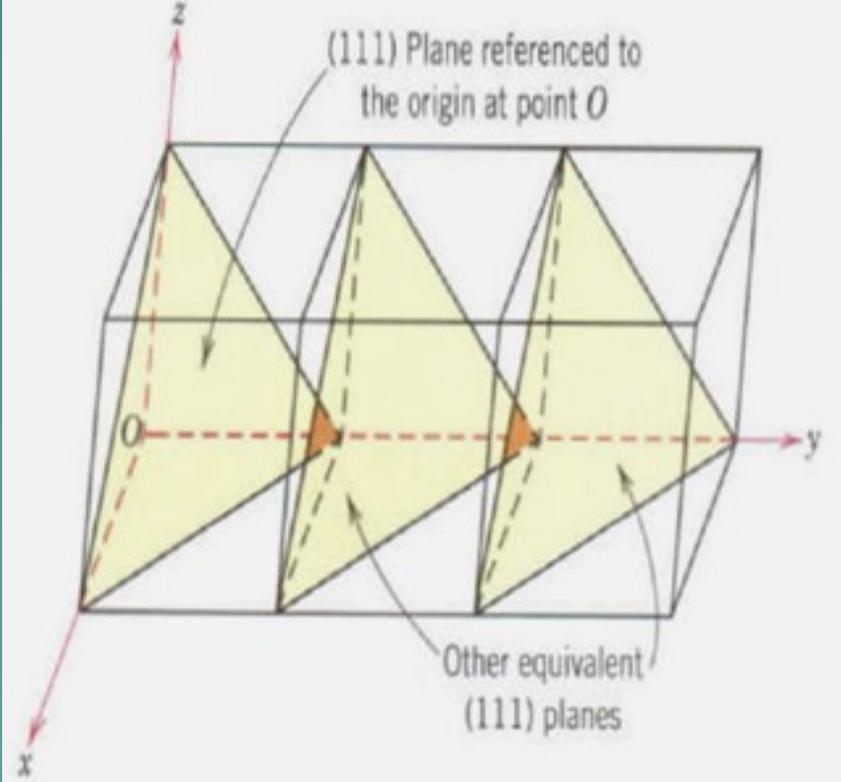
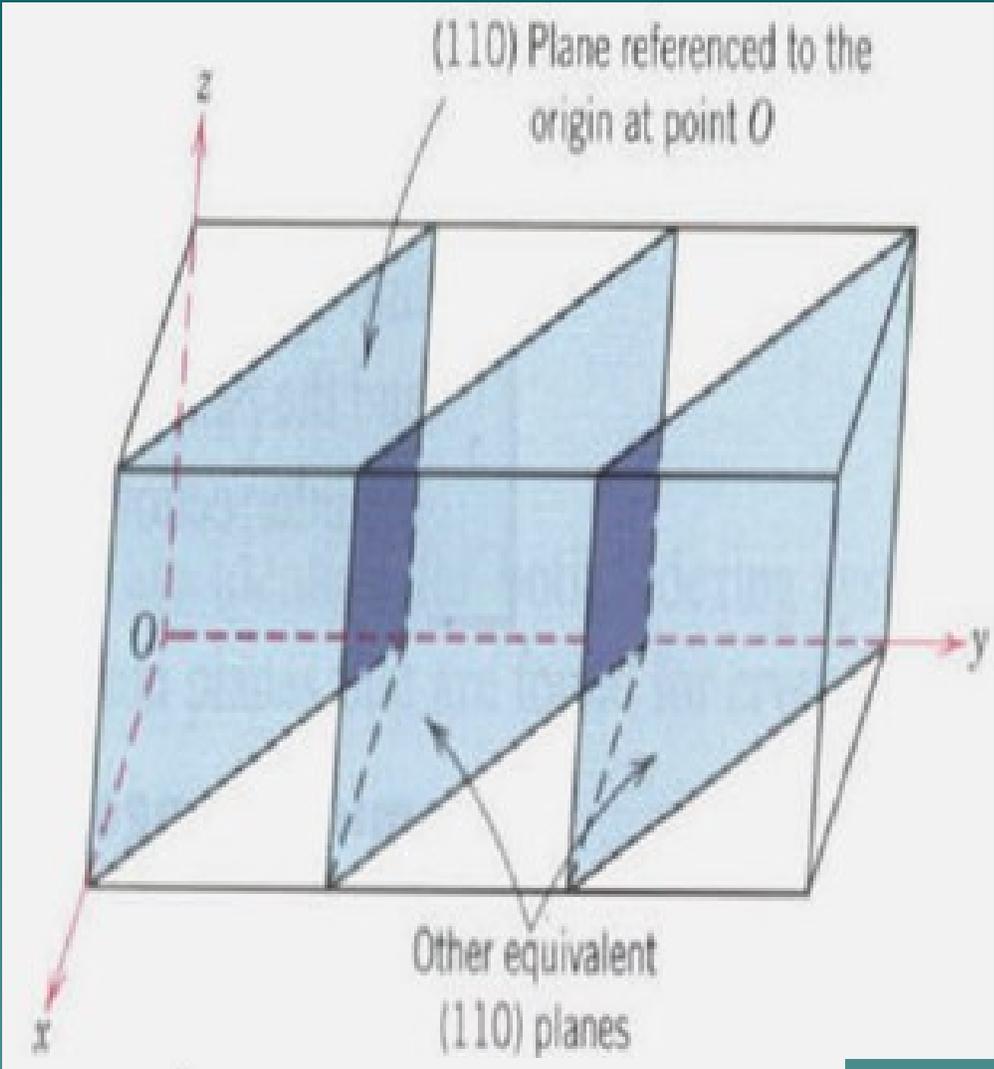
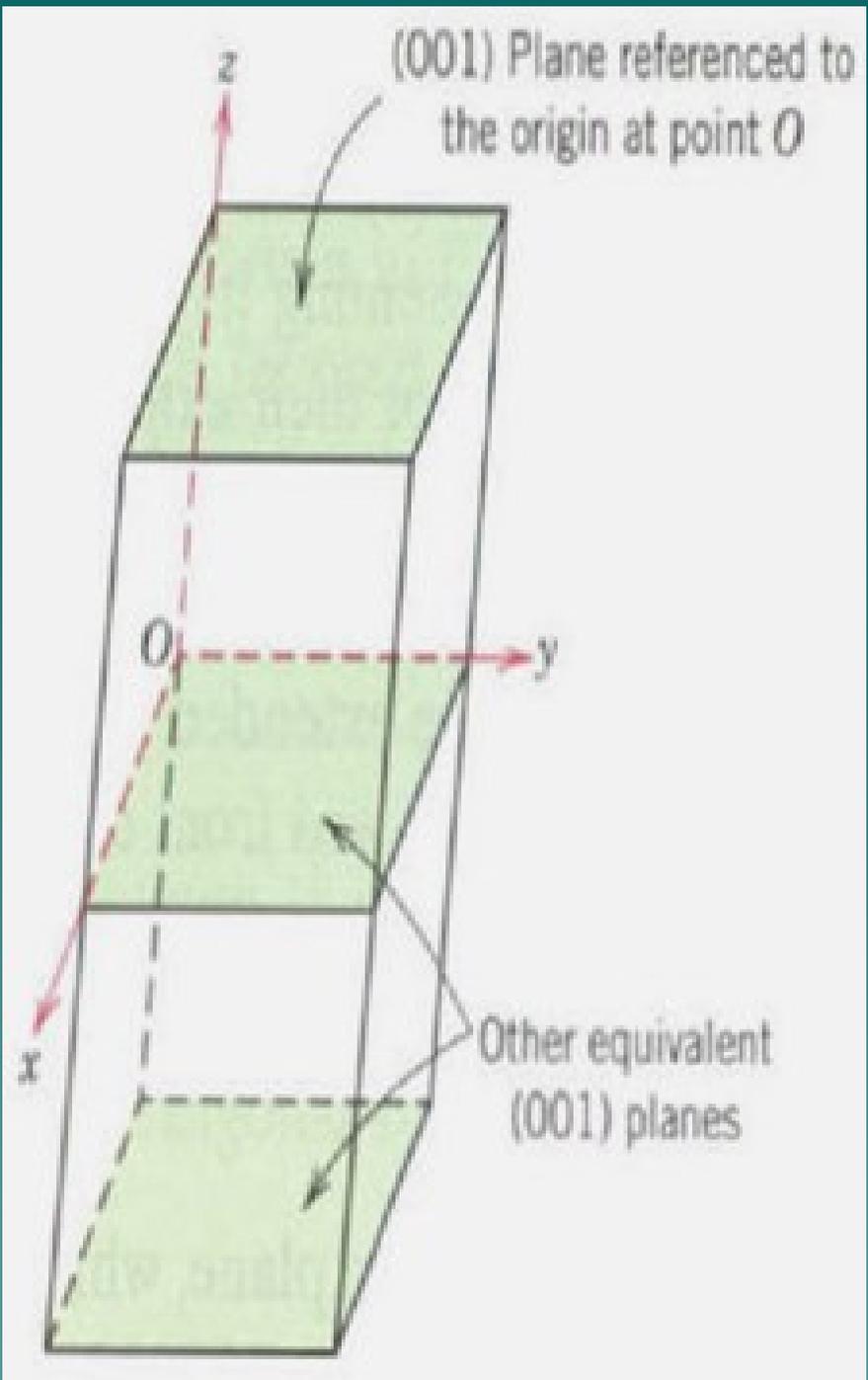
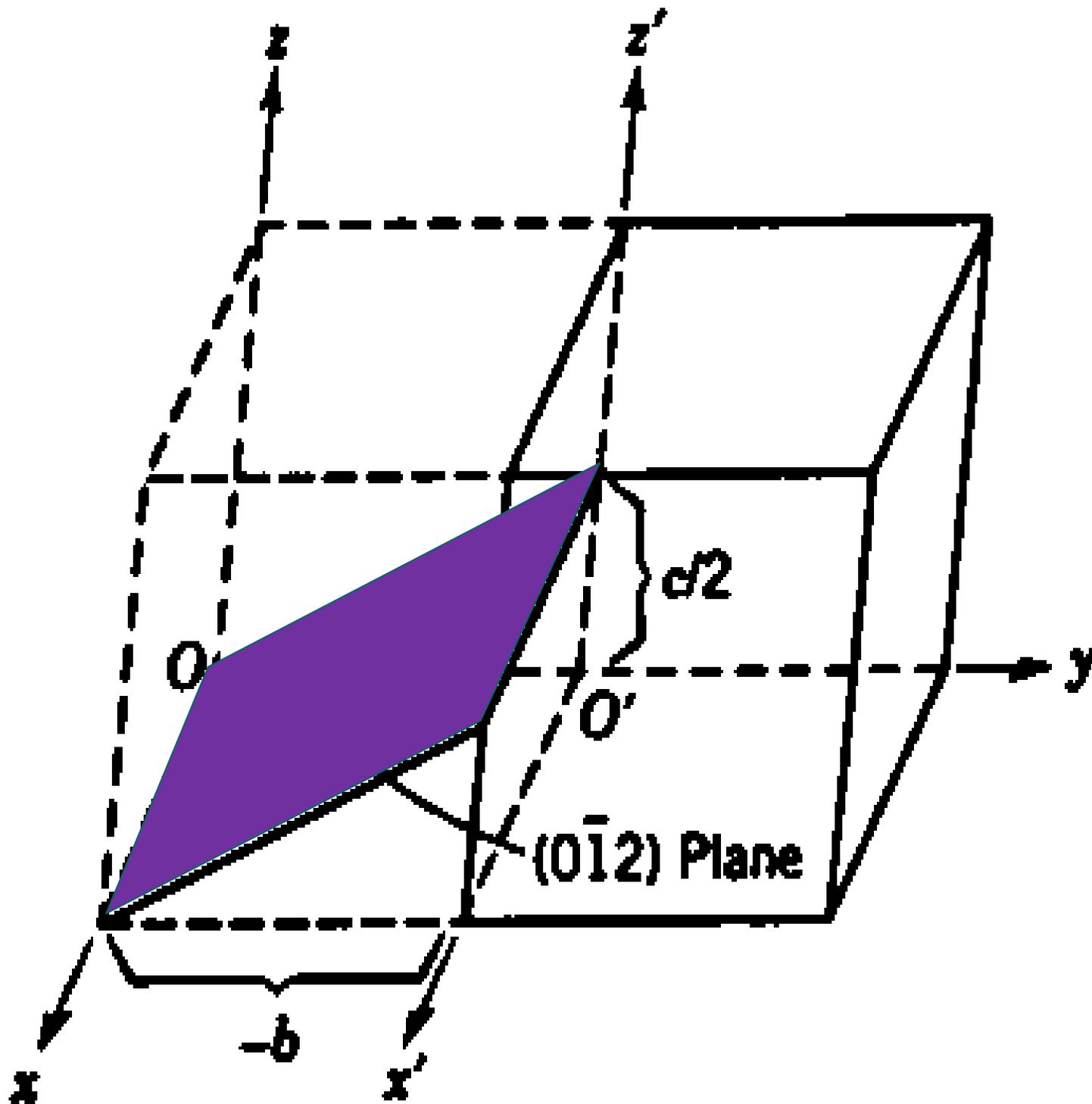
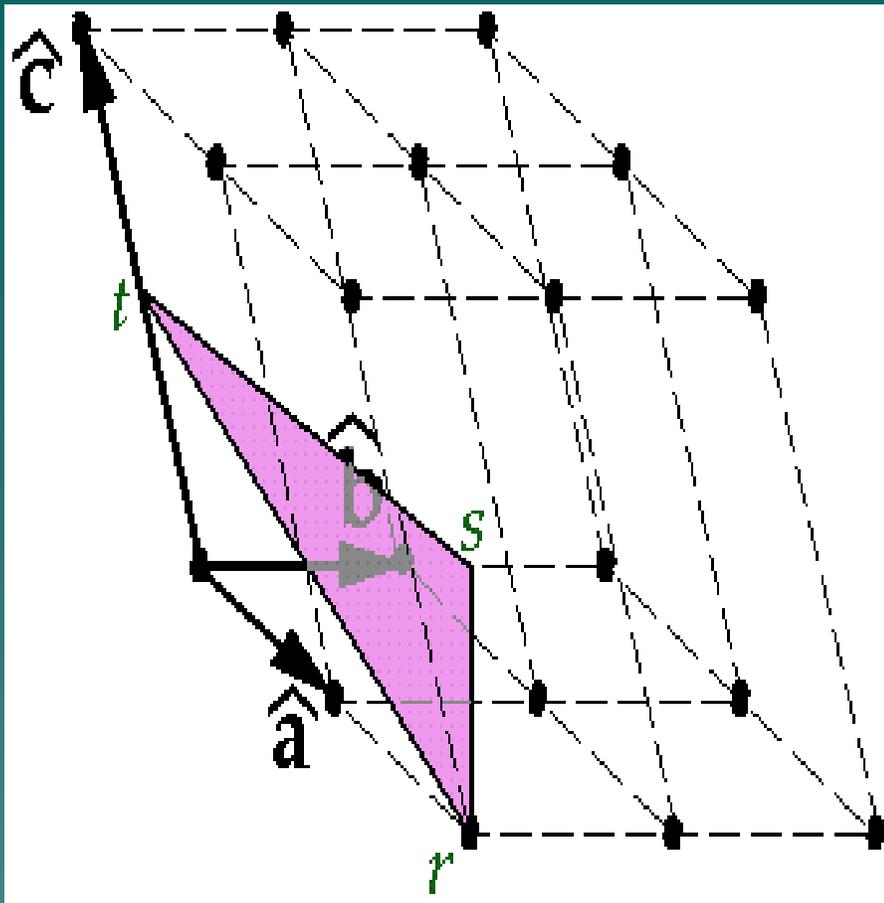


Fig. 5.22 Examples of Miller indices: (a) (101), (b) (100), (c) (200), (d) (h00), (e) labelling of axes in a hexagonal cell, (f) $(\bar{1}2\bar{1}0)$ plane, origin at solid circle, positive a directions indicated by arrows





1. Para una mejor apreciación, el origen se desplaza hacia O' .
2. El plano es paralelo al eje X' , por lo que la intersección puede tomarse como ∞a .
3. La intersección Y' y Z' son en $-b$ y $c/2$.
4. Los recíprocos de ∞ , -1 y $1/2$, son $0, -1$ y 2
5. El plano cristalográfico es (012)



Cuales son los índices de Miller de este plano?

Cortes en $x=2$, $y=4/3$, $c=1/2$

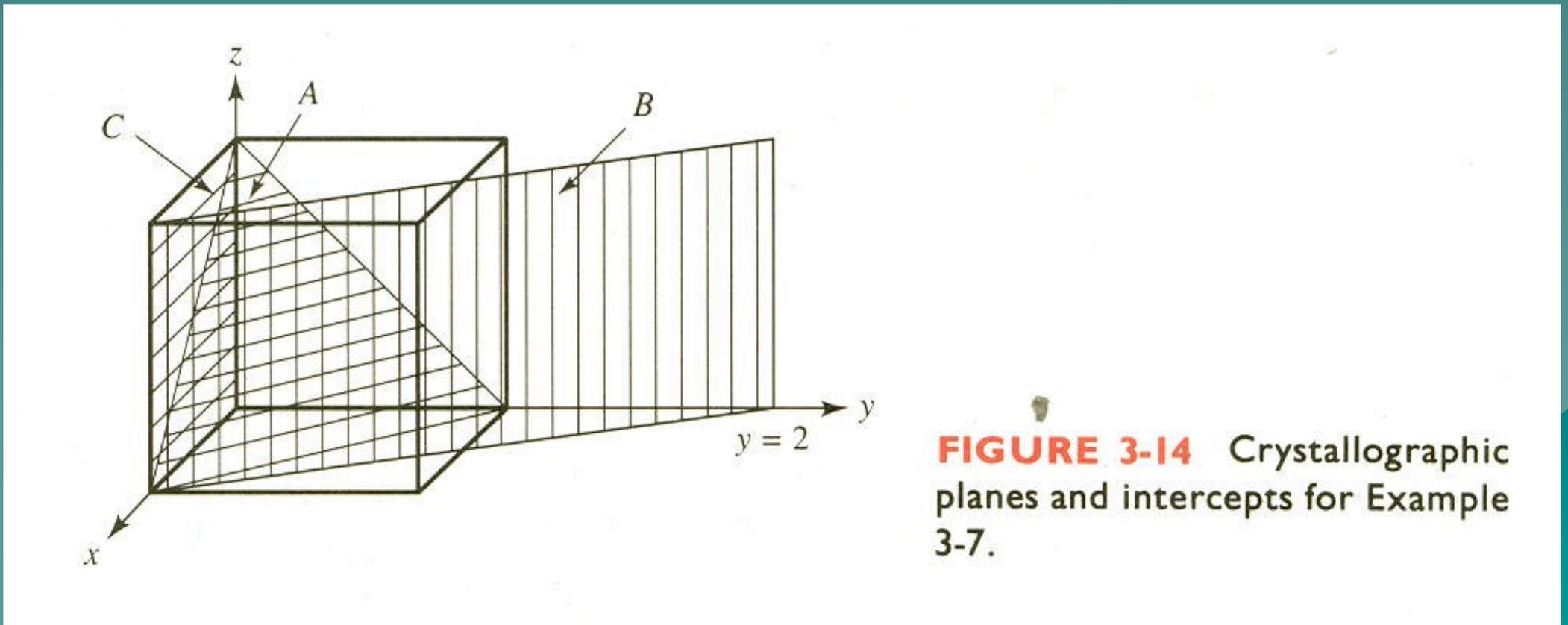
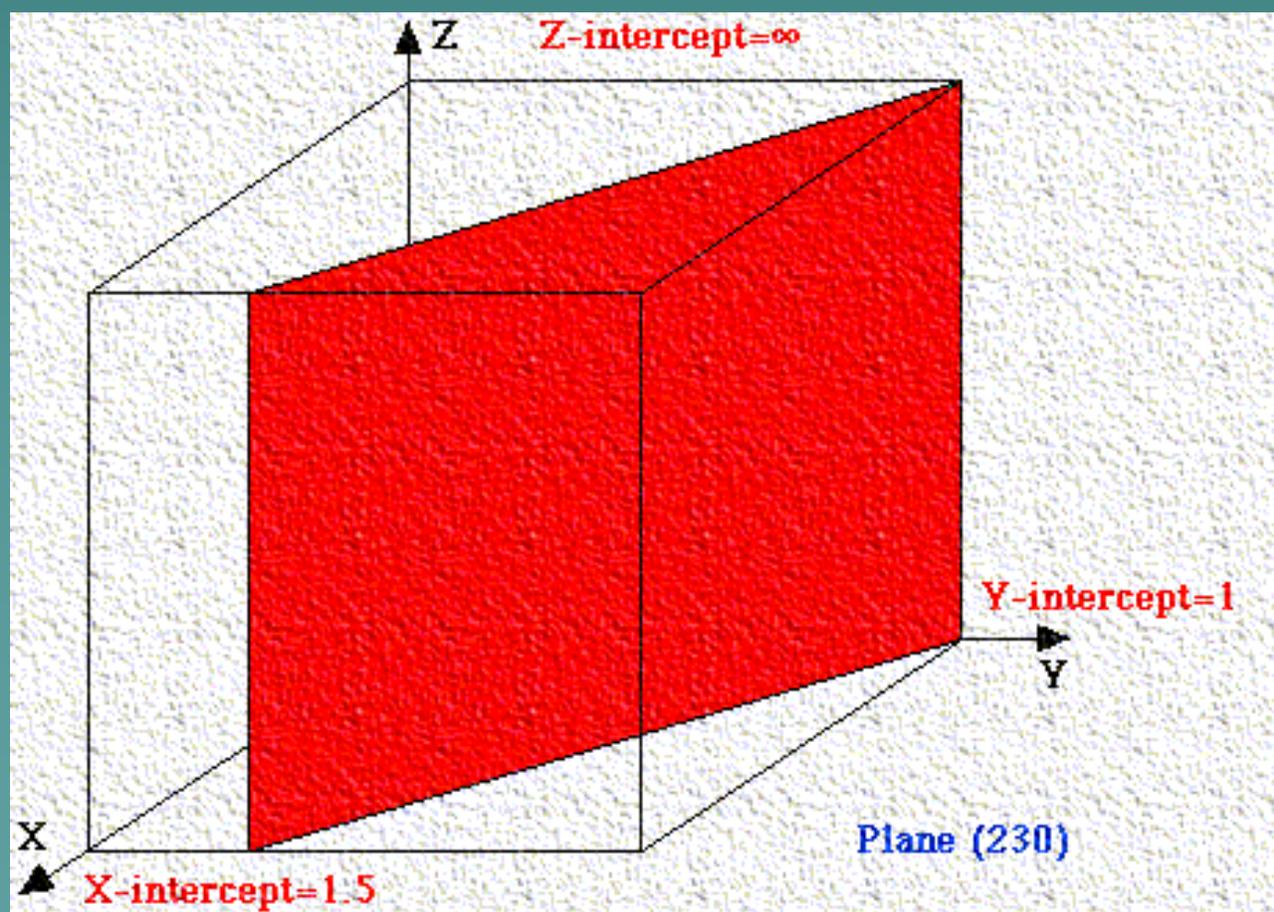
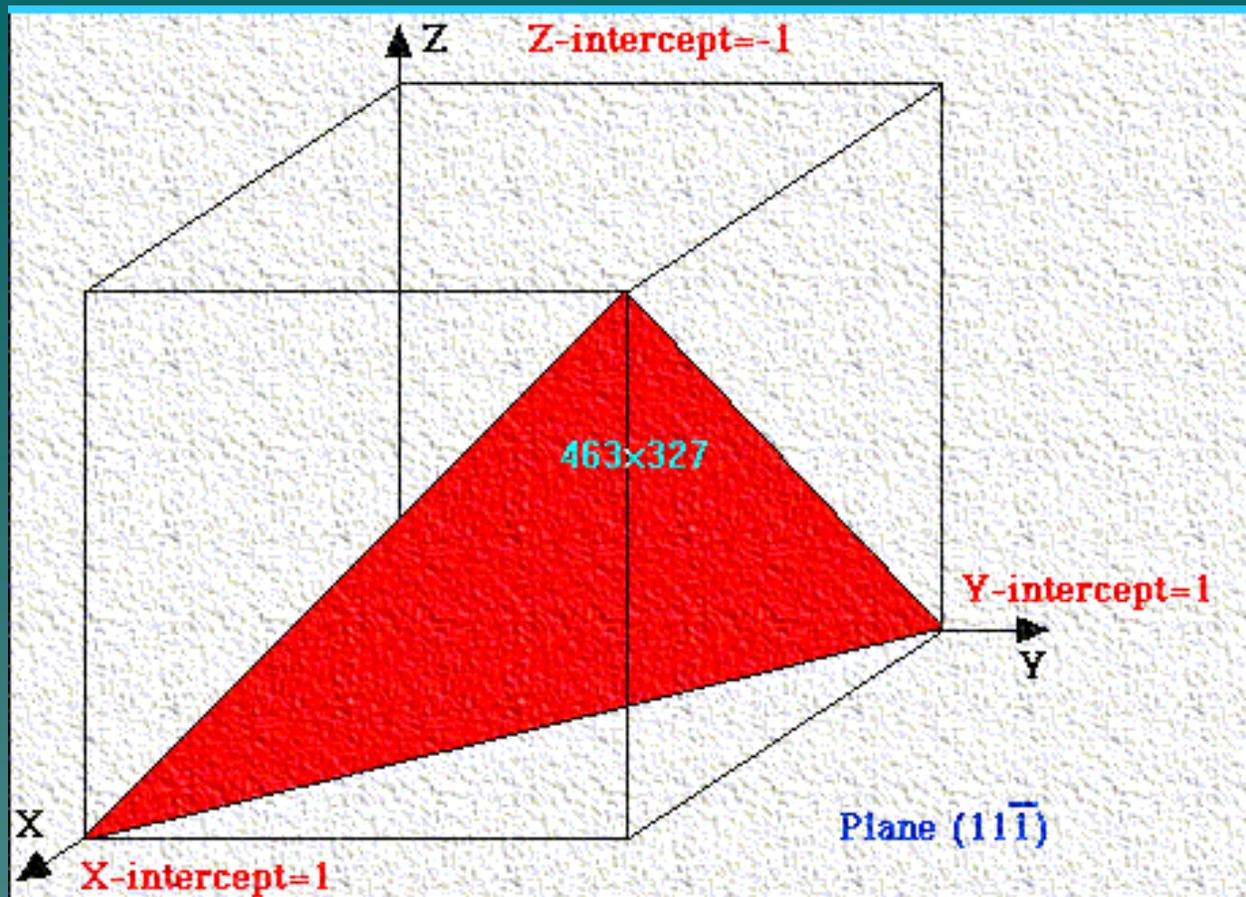
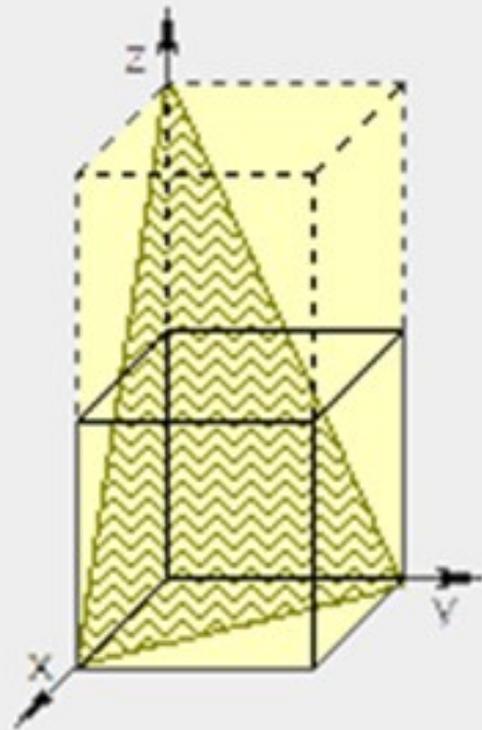
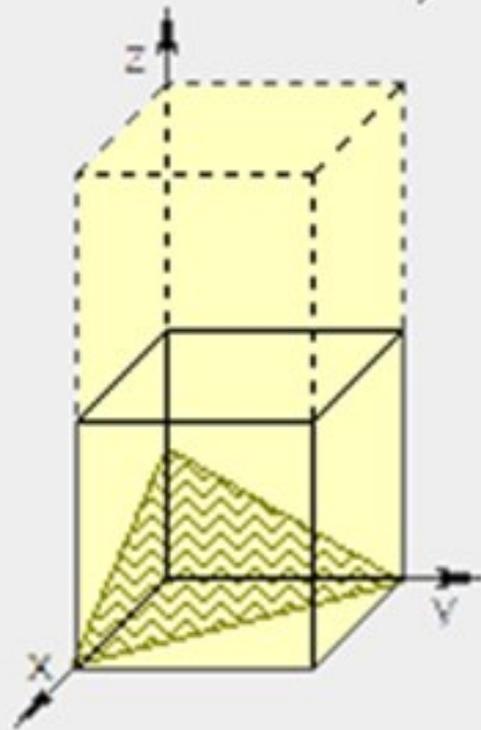
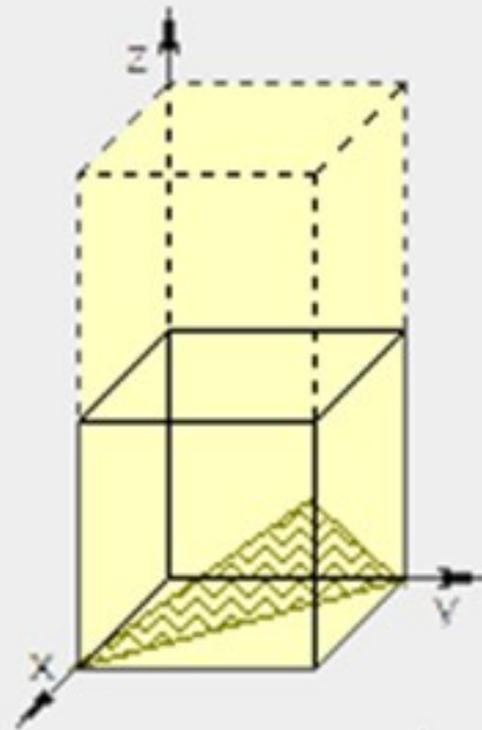
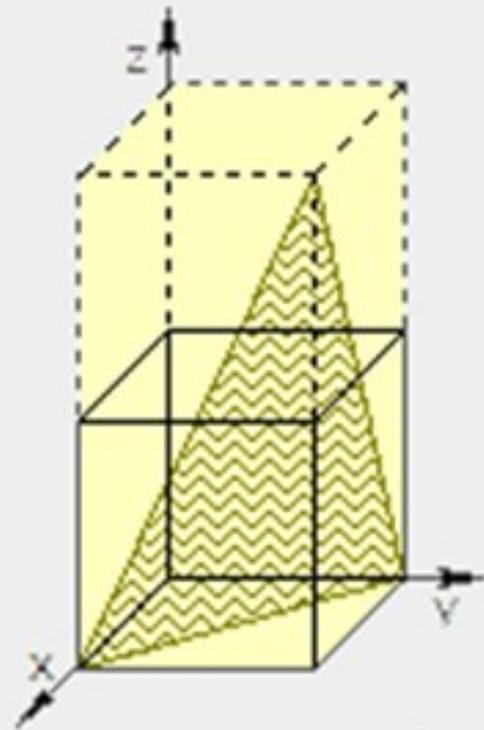
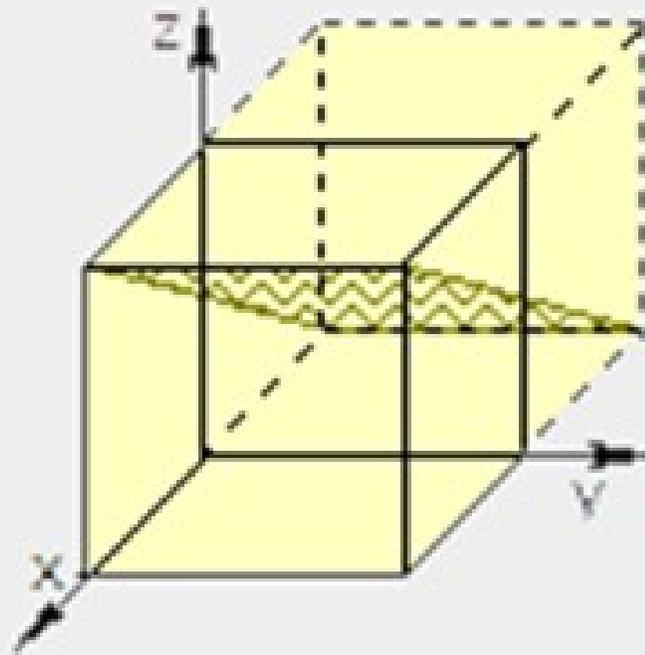
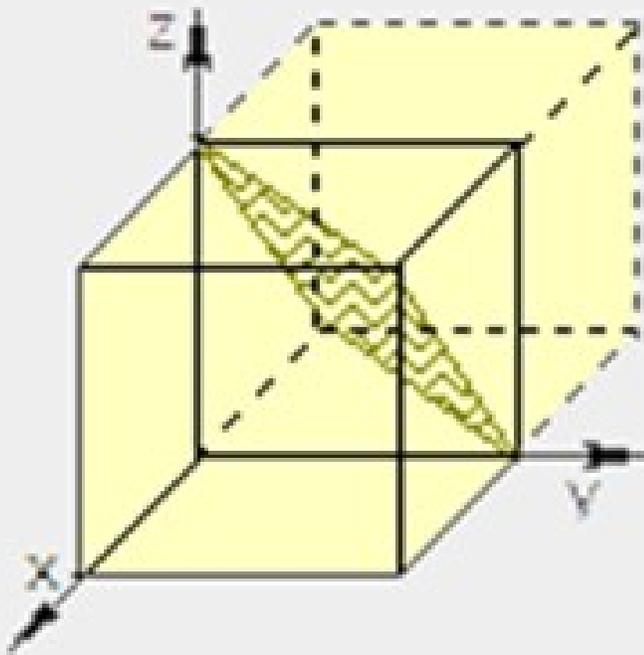
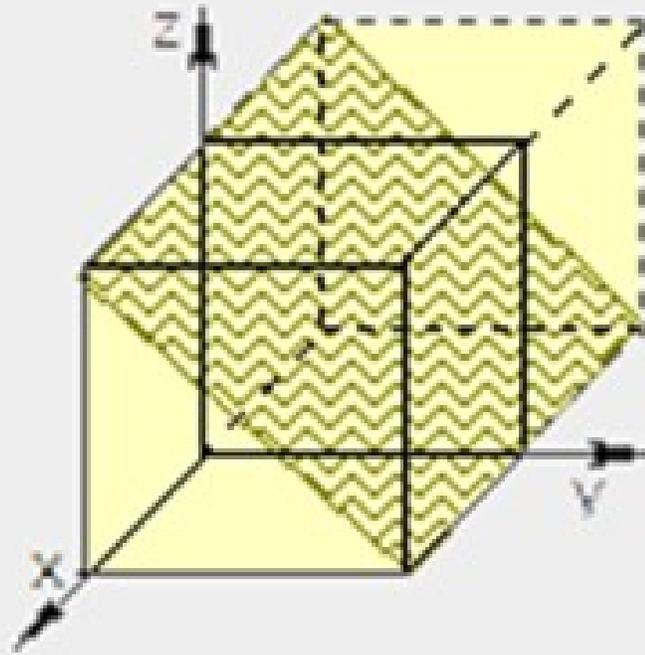
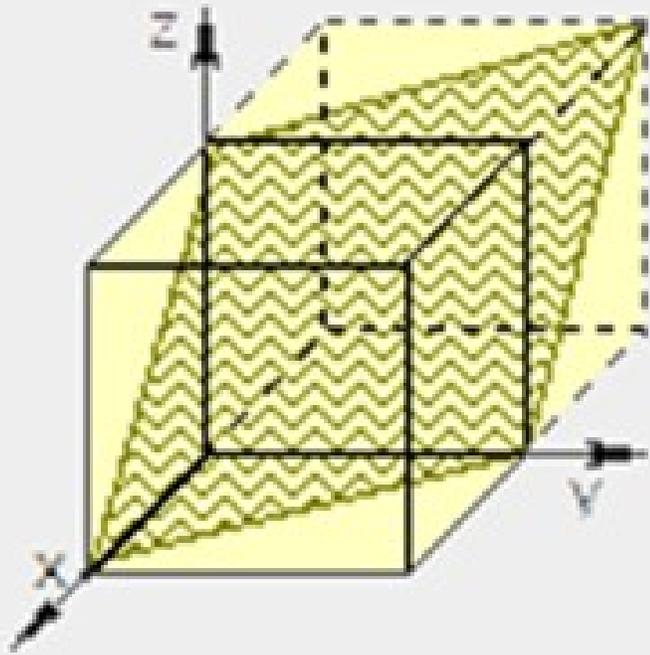
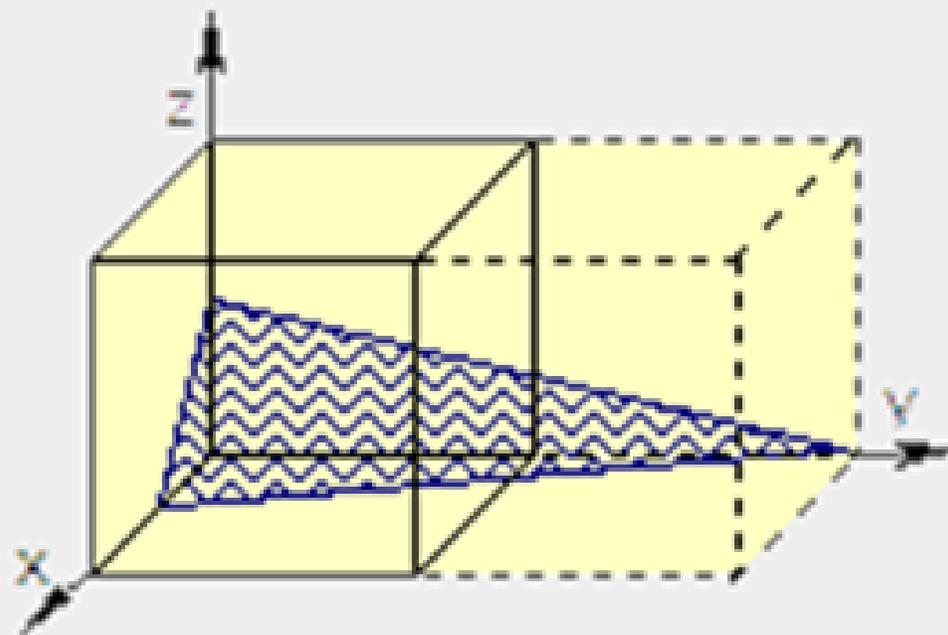
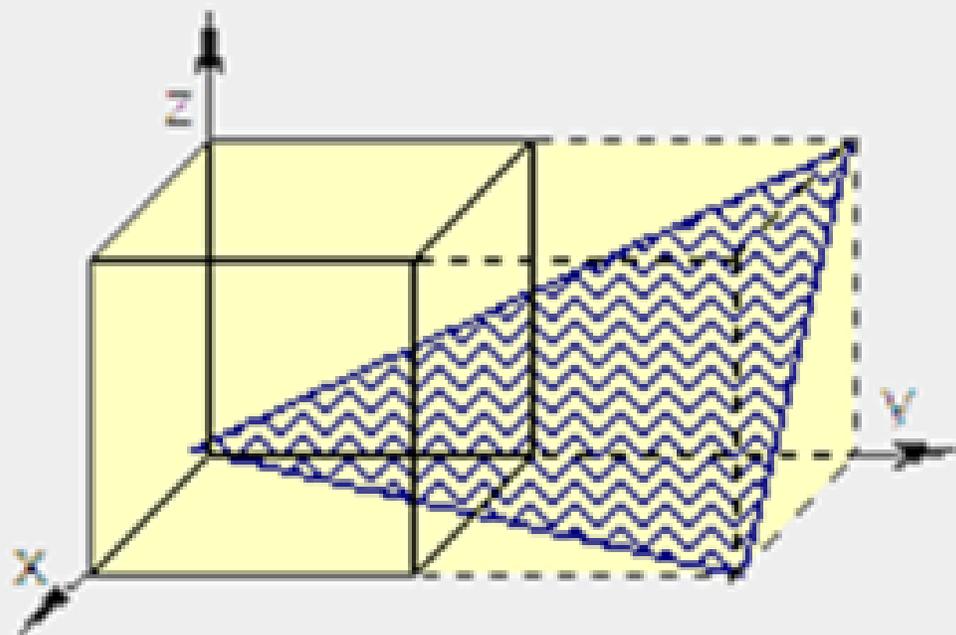
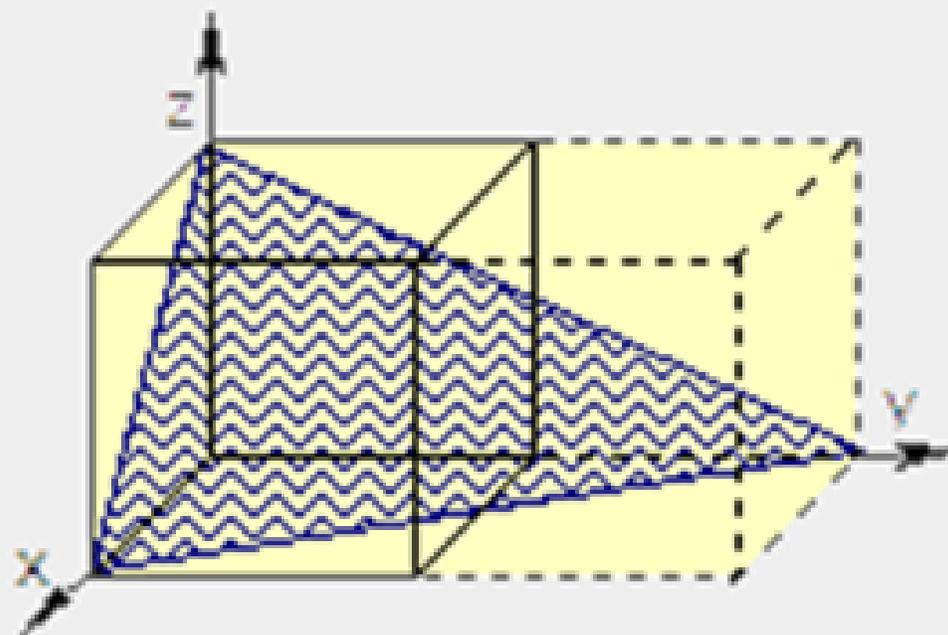
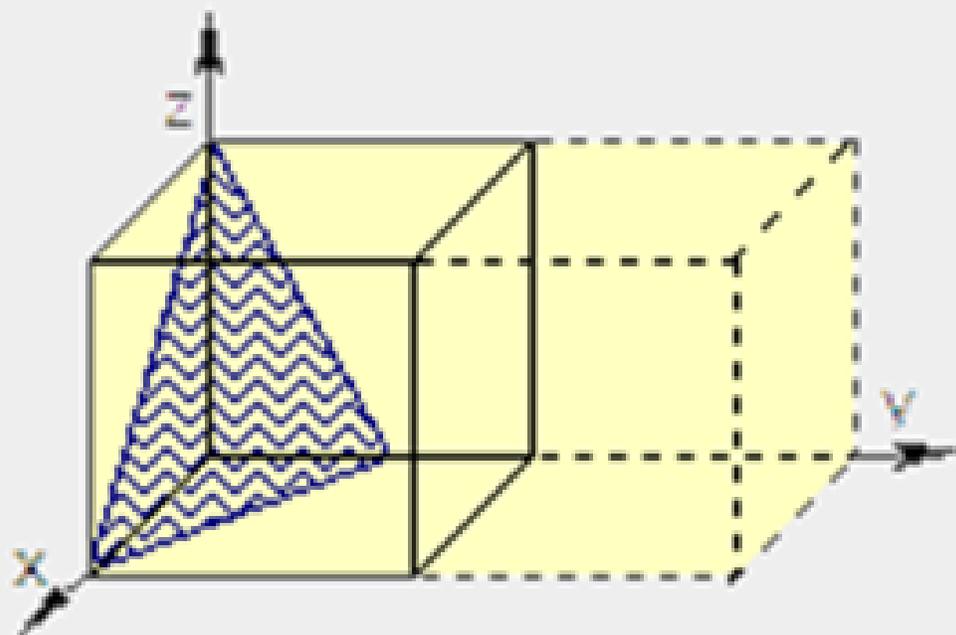


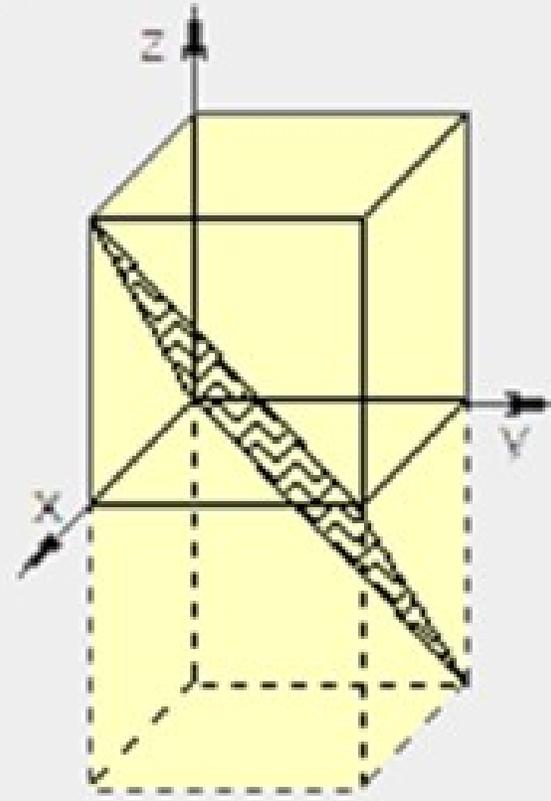
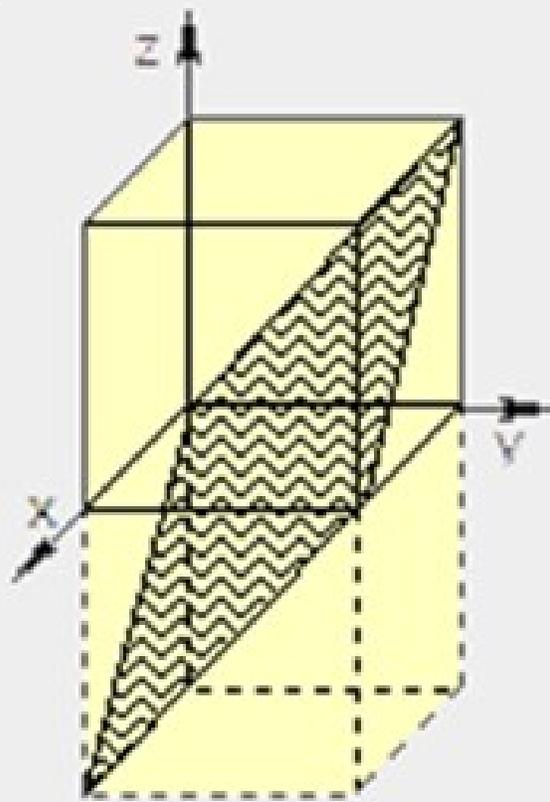
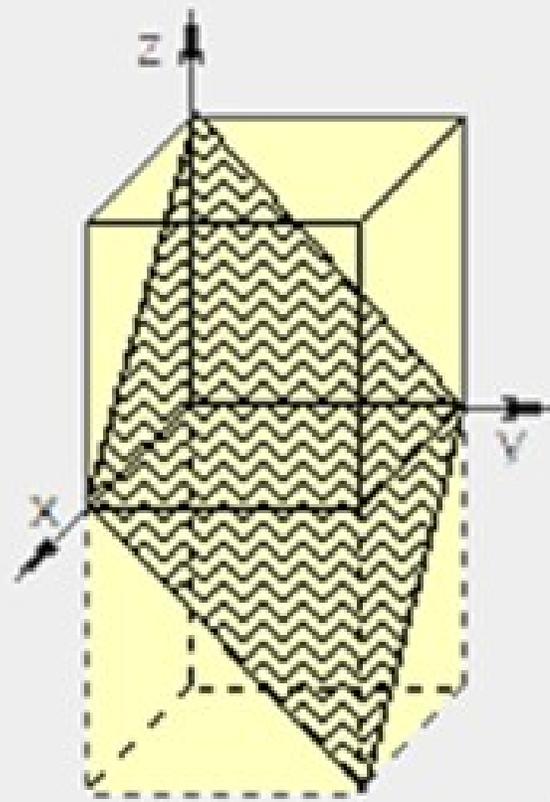
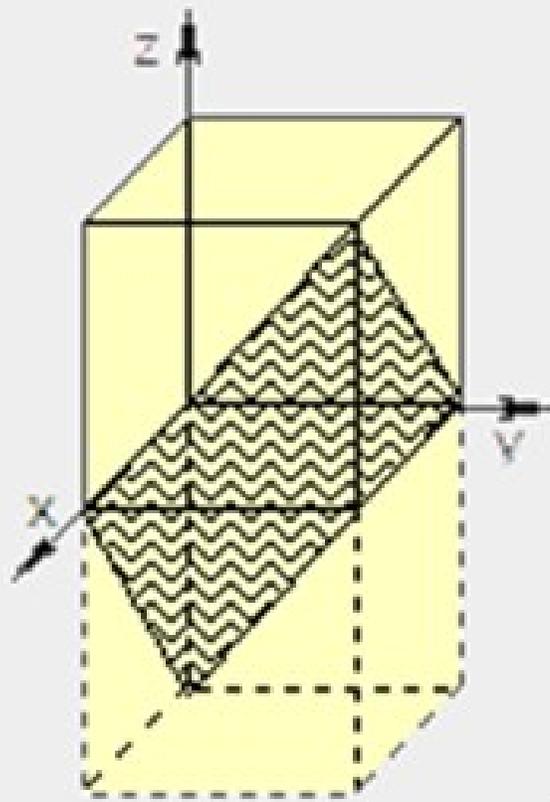
FIGURE 3-14 Crystallographic planes and intercepts for Example 3-7.

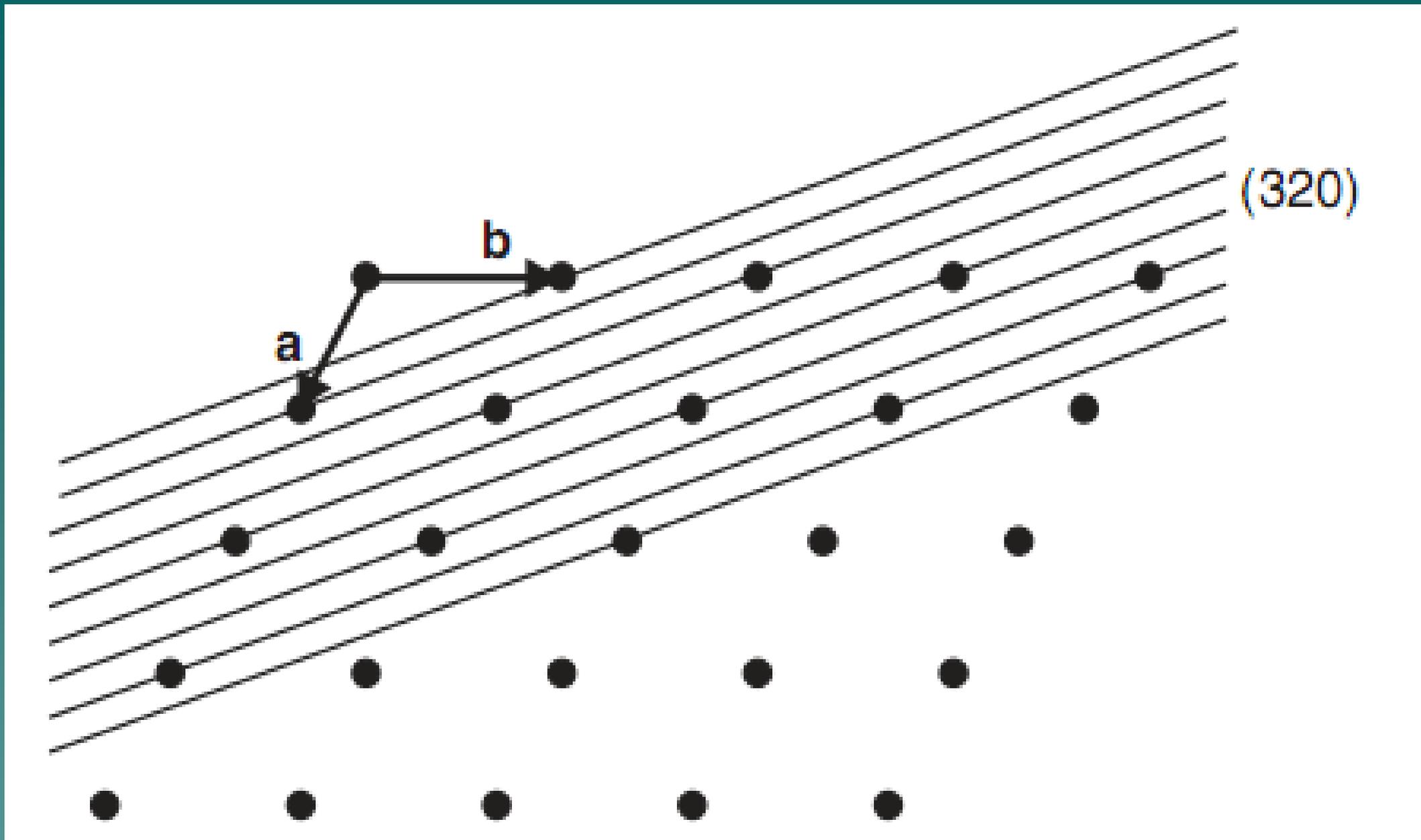


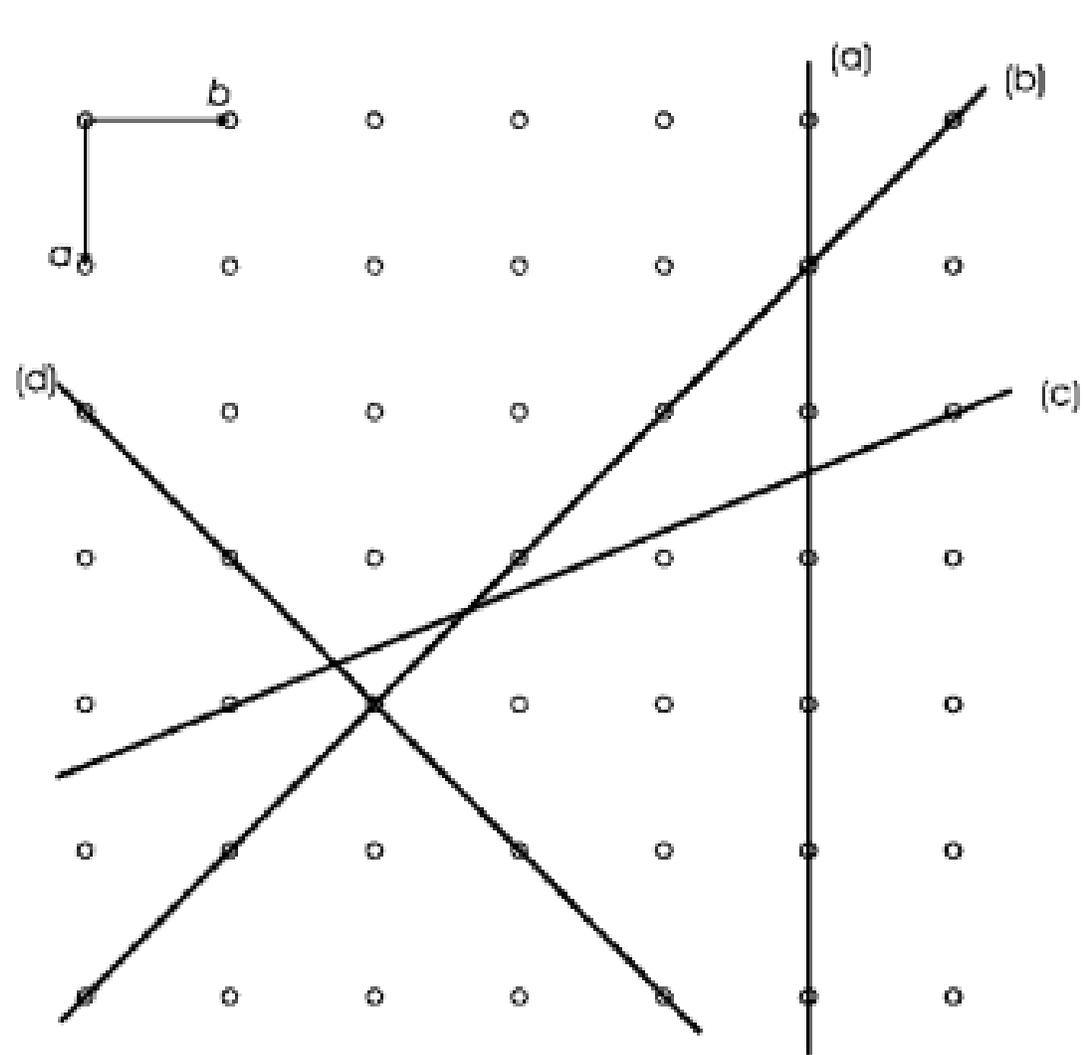




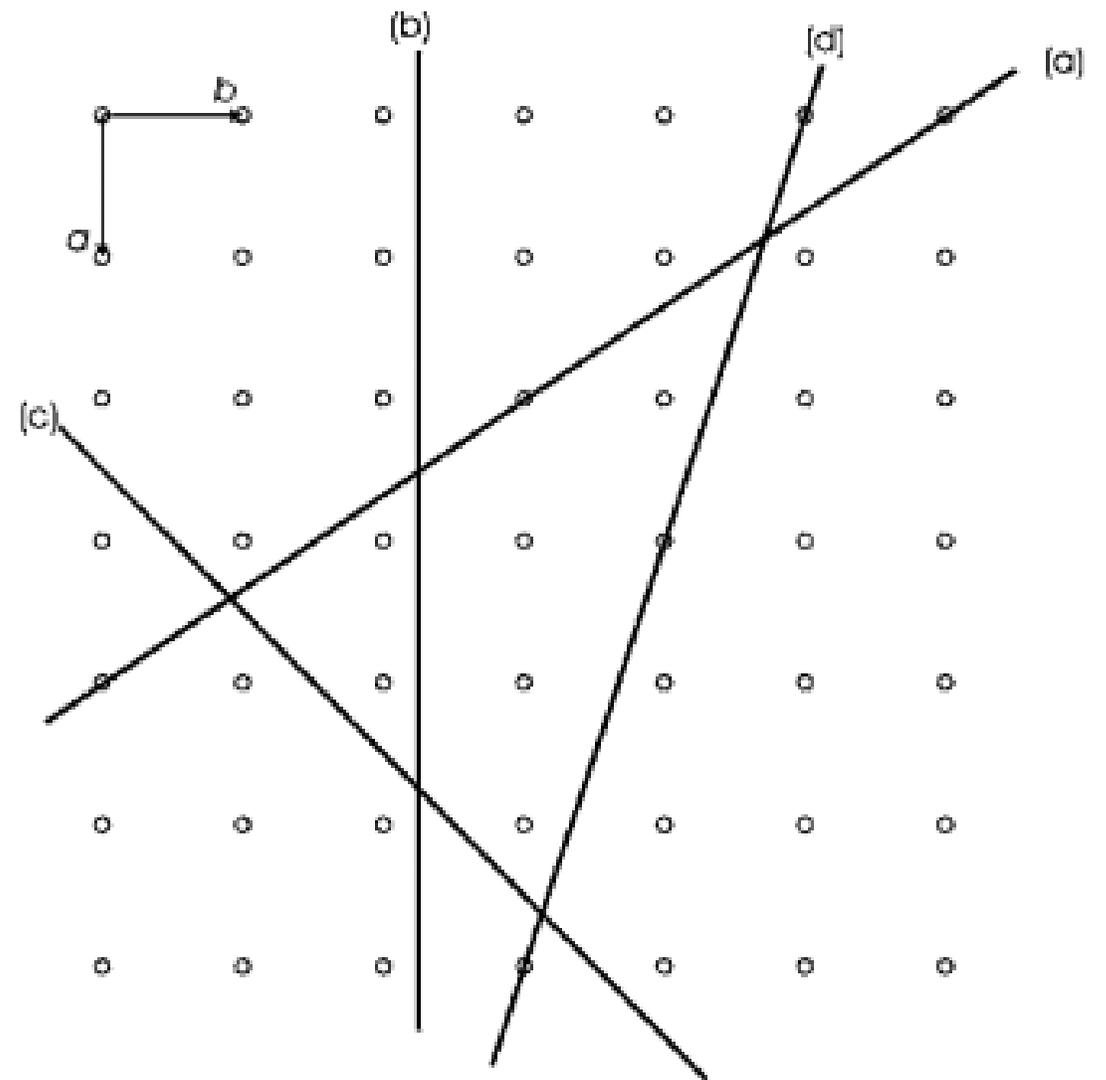




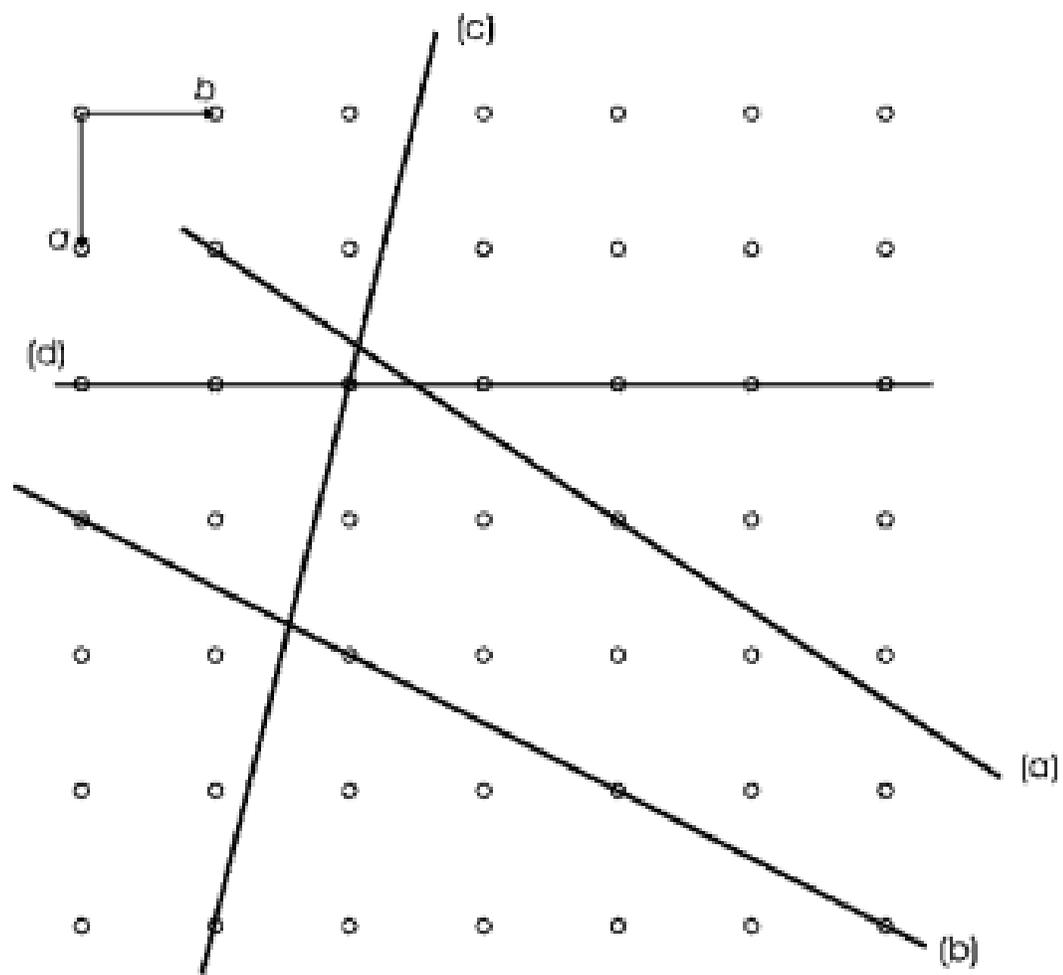




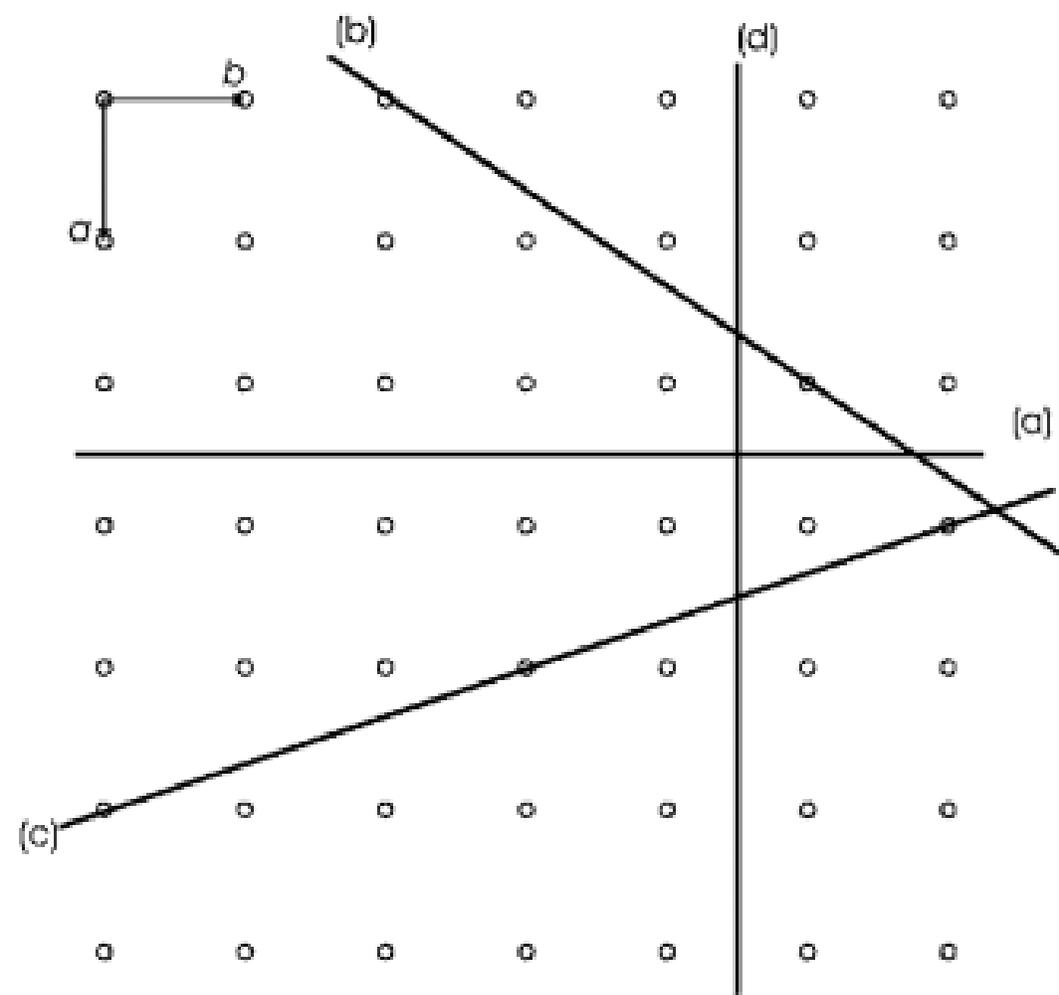
(A)



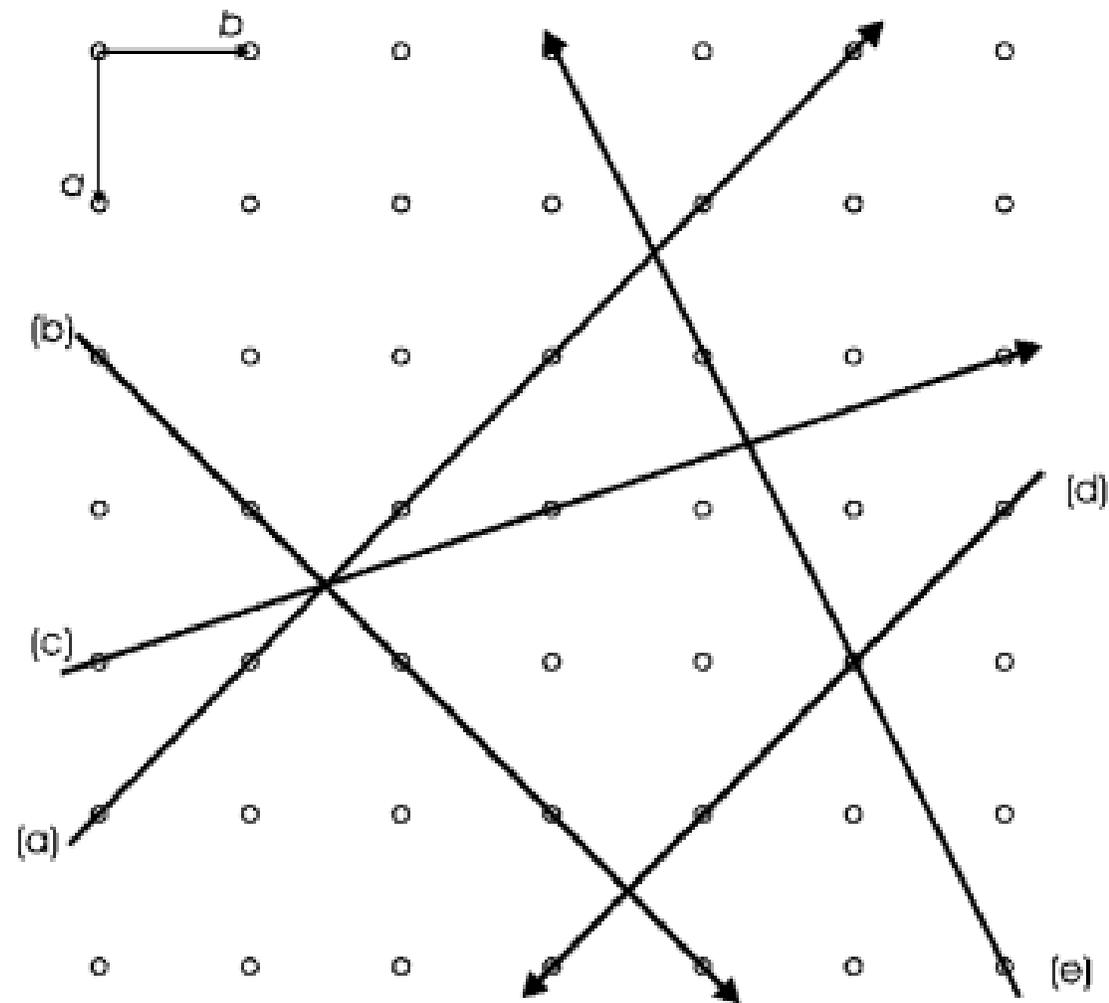
(B)



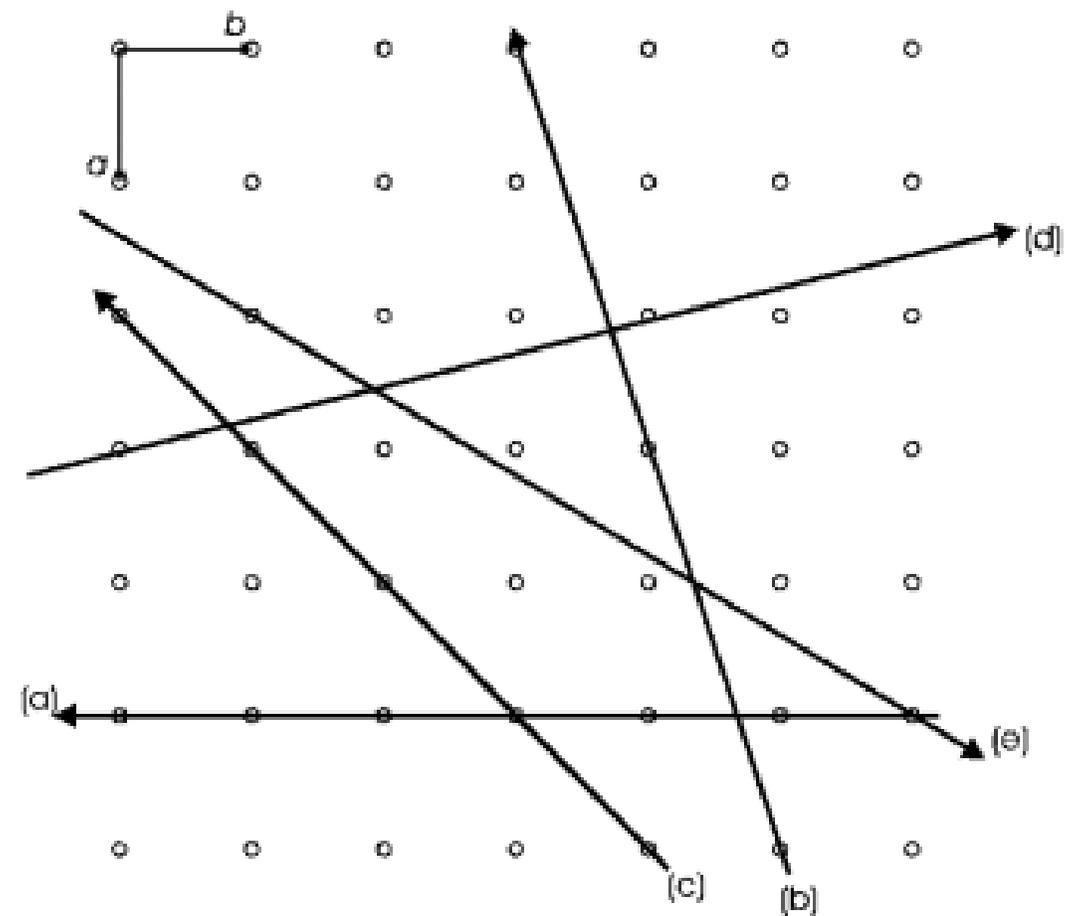
(C)



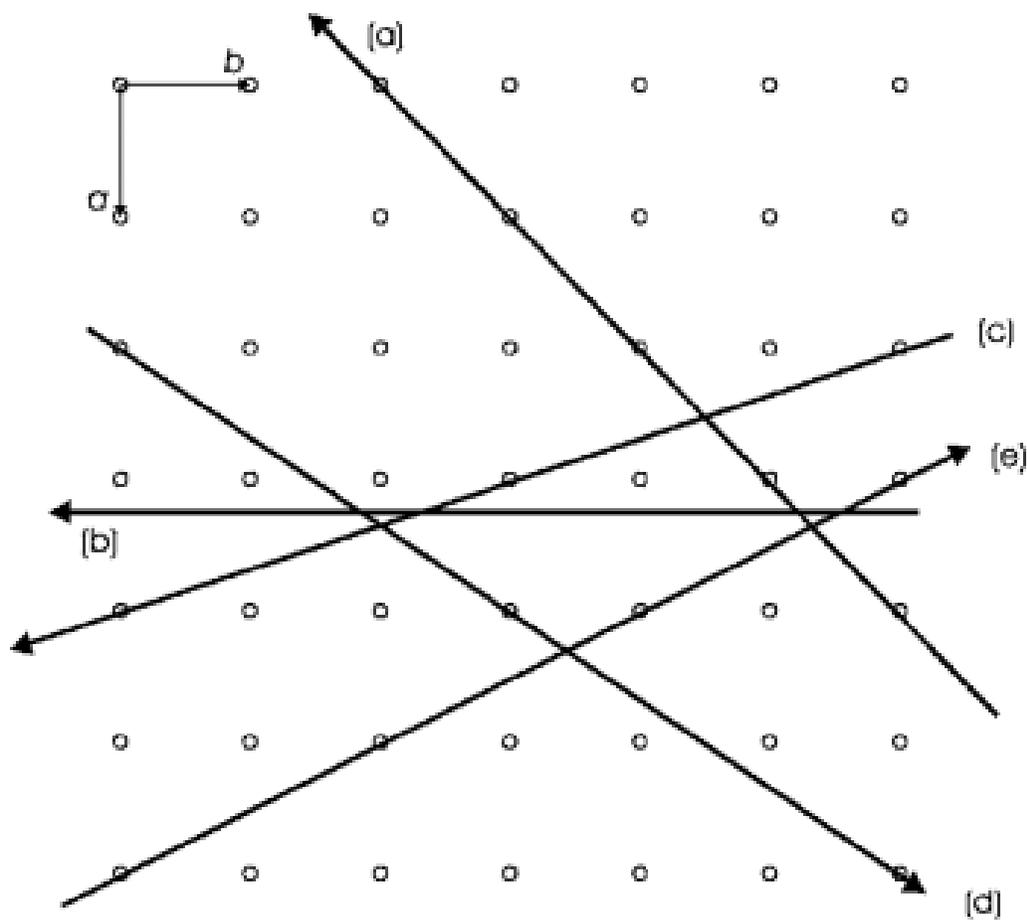
(D)



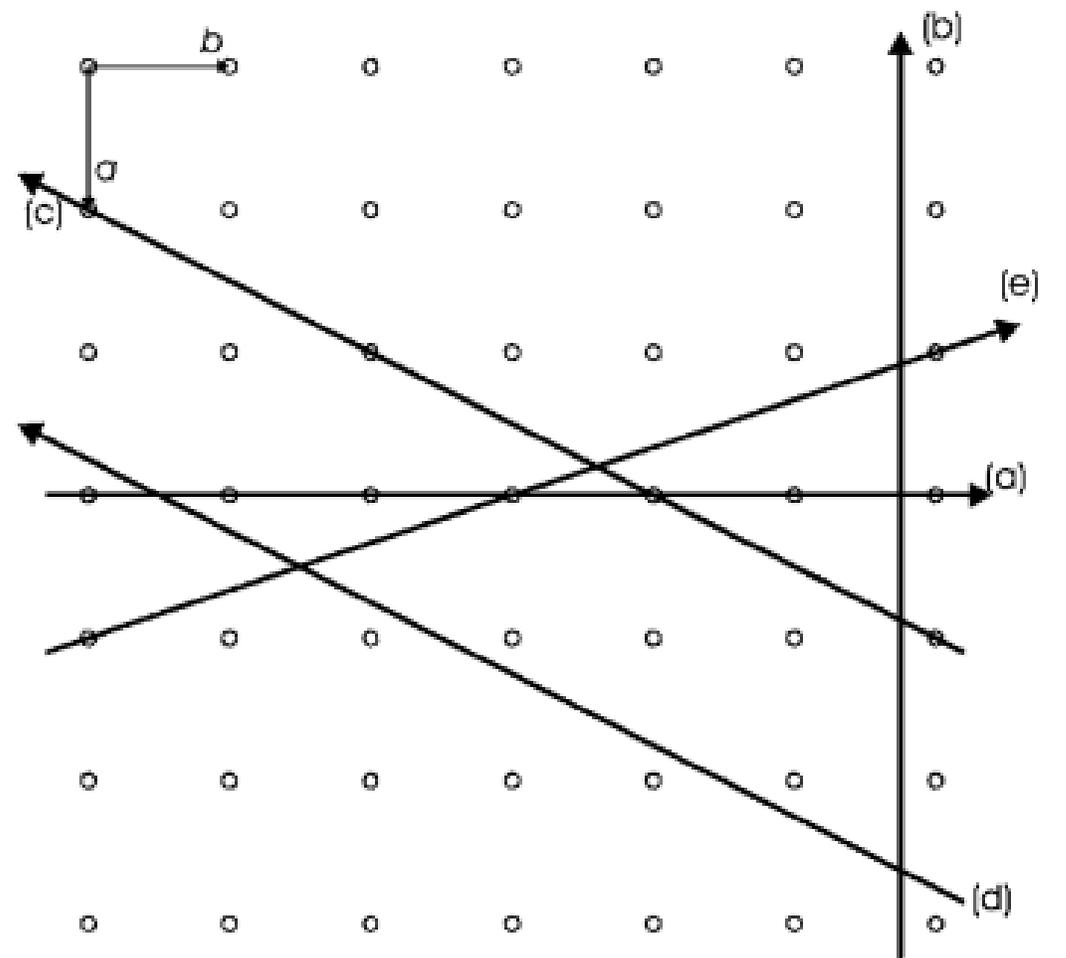
(A)



(B)



(C)



(D)



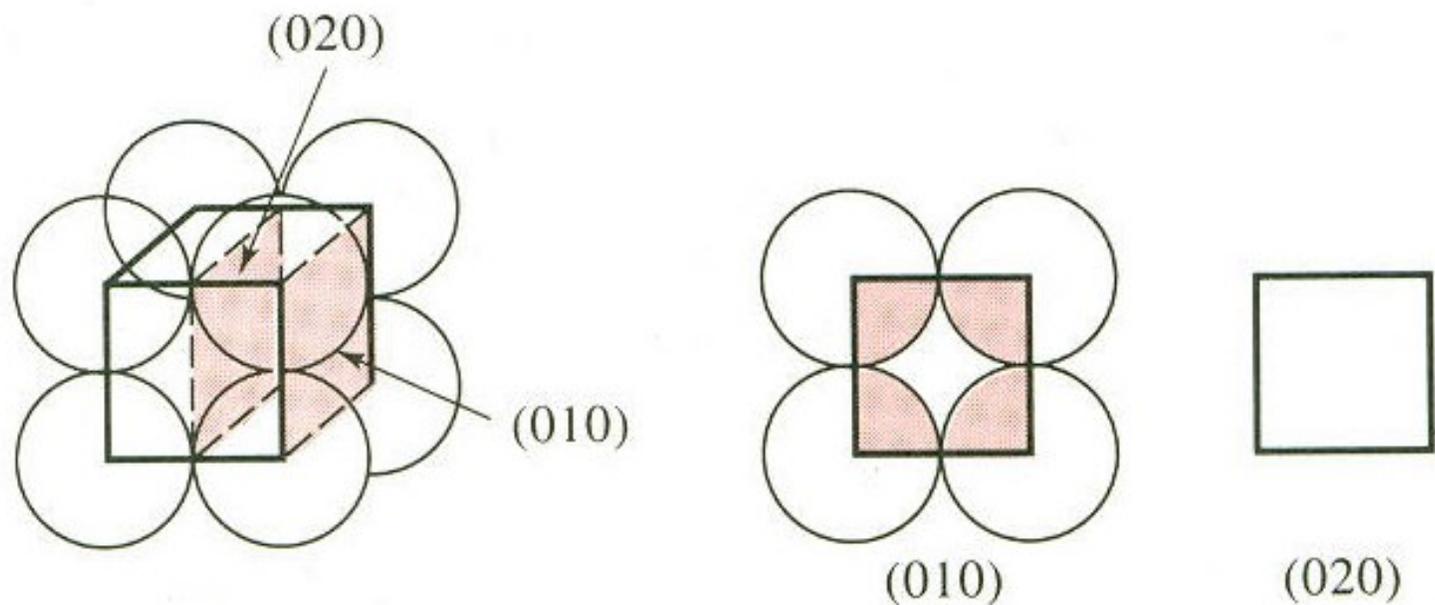


FIGURE 3-15 The planar densities of the (010) and (020) planes in SC unit cells are not identical.

TABLE 3-4 Planes of the form $\{110\}$ in cubic systems

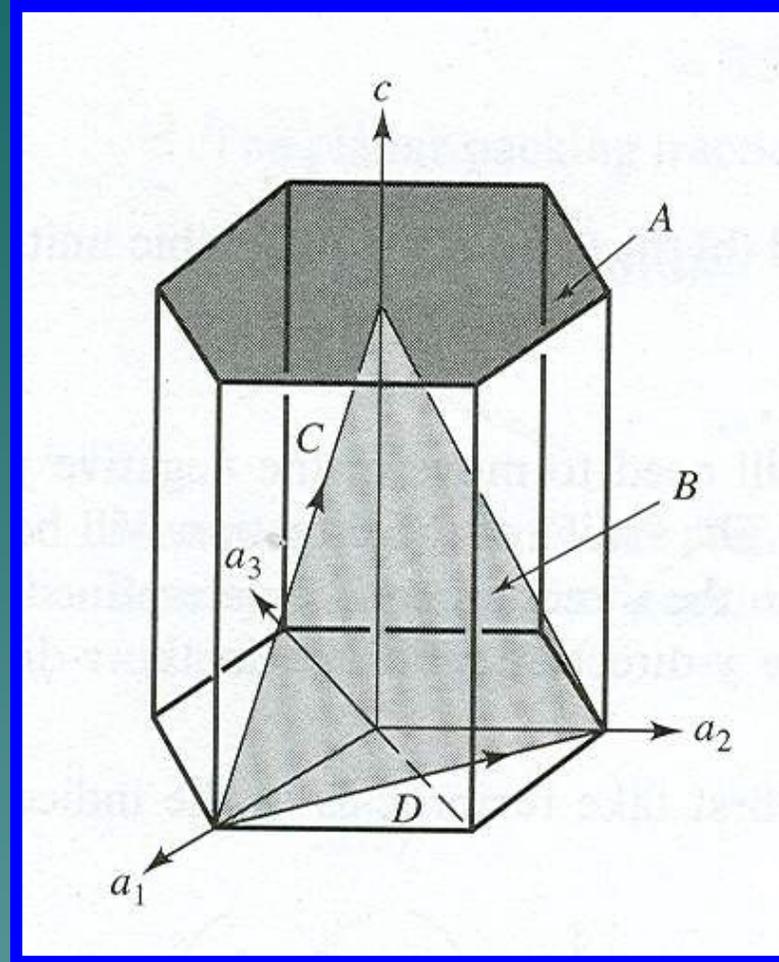
- $\{110\}$ {
- (110)
 - (101)
 - (011)
 - ($1\bar{1}0$)
 - ($10\bar{1}$)
 - ($01\bar{1}$)

Note: The negatives of the planes are not unique planes.

El símbolo $\{ \}$ se utiliza para indicar un conjunto de planos que son equivalentes, por ejemplo, el conjunto (100), (010) y (001) son equivalentes para un cristal cúbico y pueden ser representados por la notación $\{100\}$.

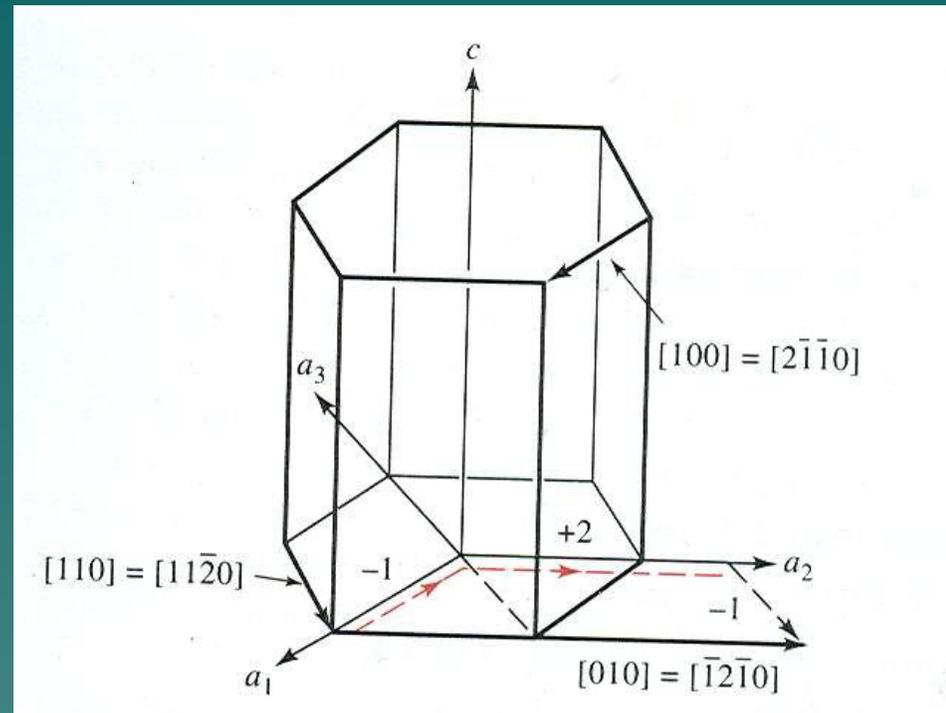
Índices de Miller_Bravais

$h+k = -i$ y pasamos de una notación (hkl) a una $(hkil)$



Cuáles son los índices de Miller para los planos A y B ??

Direcciones de la celda Miller-Bravais



$$h = \frac{1}{3}(2h' - k')$$

$$k = \frac{1}{3}(2k' - h')$$

$$i = -\frac{1}{3}(h' + k')$$

$$l = l'$$

Donde las h, k y l primas son los índices en el sistemas de tres ejes

En la figura de la lamina anterior , ¿Cuáles son las direcciones de C y D? Hágalo en sistema de tres ejes y convierta a cuatro ejes