

UNIDAD 3:

Estructura de los materiales

3.1 CUESTIONES DE AUTOEVALUACIÓN

- 1 - El ataque químico de la superficie de la muestra se realiza con el fin de:
 - a) Determinar la estructura cristalina.
 - b) Determinar la distribución de fases.
 - c) Eliminar las inclusiones.
 - d) Determinar la composición química del material.
- 2 - En la red cúbica centrada en caras, los planos densos corresponden a la familia:
 - a) (1 0 0).
 - b) (1 1 0).
 - c) (1 1 1).
 - d) (2 1 1).
- 3 - La dirección compacta en el sistema cúbico centrado en el cuerpo es:
 - a) No hay direcciones compactas.
 - b) $\langle 100 \rangle$.
 - c) $\langle 110 \rangle$.
 - d) $\langle 111 \rangle$.
- 4 - Indica la secuencia correcta para la observación de inclusiones en un material metálico.
 - a) Desbaste, pulido y ataque.
 - b) Corte, ataque y pulido.
 - c) Corte, desbaste y pulido.
 - d) Corte y observación directa al microscopio.
- 5 - La estructura cristalina se determina mediante técnicas de
 - a) Metalografía.
 - b) Difracción.
 - c) Microdurezas.
 - d) Análisis químico.
- 6 - La celda unitaria del cobre tiene un parámetro reticular $a = 3,61$ Amgstroms. Calcule el radio atómico.
 - a) 1,80 Amgstroms.
 - b) 1,20 Amgstroms.
 - c) 1,27 Amgstroms.
 - d) 1,56 Amgstroms.

- 7 - En las operaciones de desbaste se deben realizar giros de 90° entre una lija y otra, cuyo objetivo es:
- Poder eliminar mejor los restos de materiales.
 - Observar mejor la eliminación del rayado anterior.
 - Facilitar el contacto del metal con el abrasivo.
 - Para eliminar las inclusiones.
- 8 - Los monocristales de tipo dendrítico adquieren fundamentalmente:
- Forma redondeada.
 - Forma poligonal con fronteras rectilneas.
 - Formas alargadas redondeadas.
 - Morfología especial según de la aleación de que se trate.
- 9 - La débil diferencia de coloración en una observación al microscopio es indicativo de:
- La diferencia de composición química de los granos.
 - Las distintas fases presentes en el material.
 - La distinta orientación cristalina.
 - Ninguna es correcta.
- 10 - La distinción entre distintas fases se puede realizar por:
- Observación microscópica.
 - Microdureza Vickers.
 - Microdureza Knoop.
 - Todas son correctas.
- 11 - La difracción de rayos X es una técnica aplicada para investigar:
- Materiales metálicos.
 - Sólidos con estructuras cristalinas.
 - Materiales poliméricos.
 - Sólidos amorfos.
- 12 - La técnica metalográfica nos revela:
- La organización espacial de las fases de un material metálico.
 - Las diferentes formas y tamaños que adoptan las fases en la estructura.
 - Las diferentes configuraciones entre las fases y compuestos.
 - Todas son correctas.
- 13 - Decimos que una estructura es cristalina cuando presenta:
- Una sucesión regular de planos cristalinos, necesariamente de máxima densidad.
 - Una sucesión regular de planos cristalinos, necesariamente de mínima densidad.
 - Una sucesión regular de planos cristalinos, no necesariamente de máxima densidad.
 - Una sucesión regular especial de planos cristalinos, necesariamente de máxima densidad.
- 14 - En la estructura cúbica centrada en las caras, son planos oscuros cuando:
- Los índices de Miller son pares.
 - Los índices de Miller son impares.
 - La suma de los índices de Miller es par.
 - La suma de los índices de Miller es impar.

- 15 - En la celdilla cúbica de caras centradas en el plano de máxima compactación es el:
- (1,1,1).
 - (1,1,0).
 - (1,0,0).
 - (2,0,0).
- 16 - La fuente de radiación X en difracción es monocromática para:
- Lograr la refracción de la radiación.
 - Aumentar la potencia del espectro.
 - Resolver el espectro característico.
 - Atravesar el material con la radiación.
- 17 - El espectro característico entre las estructuras c.c.c. del cobre y aluminio, se diferencian en:
- Los índices de los planos refractantes.
 - Los ángulos 2θ característicos del espectro.
 - La intensidad de la radiación difractante.
 - La energía y la longitud de onda de los electrones refractados.
- 18 - De las siguientes relaciones entre el parámetro de red y radio atómico, señala la incorrecta:
- $a = 4R/\sqrt{2}$
 - $a = 2R/\sqrt{2}$
 - $a = 4R/\sqrt{3}$
 - $a = 2R$
- 19 - Cuales son los índices de un plano que corta respectivamente a los ejes x,y,z en $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$, $\frac{1}{4}$.
- [2,3,4]
 - [3,2,1]
 - [1,2,3]
 - [4,3,2]
- 20 - Los materiales cuyas propiedades son independientes de la dirección de la medida se denominan:
- Anisotrópicas.
 - Alotrópicas.
 - Isotrópicas.
 - Cuasitrópicas.
- 21 - Mediante la metalografía podemos resolver:
- La estructura cristalina del material.
 - Las diferentes formas y tamaños que adoptan en la estructura.
 - La composición de las inclusiones.
 - Todas son correctas.
- 22 - Cual de las siguientes técnicas no es un método de análisis microestructural.
- Análisis de las estructuras cristalinas por difracción de rayos X.
 - Análisis químico de los componentes microestructurales.
 - Dureza Brinell y Rockwell.
 - Análisis metalográfico.

23 - Para la celdilla cúbica centrada en el cuerpo la suma de los índices de Miller:

- a) Debe ser un número par para que tenga lugar la difracción.
- b) Debe ser un número par o impar, para que tenga lugar la difracción.
- c) Deben ser todos los índices pares.
- d) Deben ser todos los índices impares.

24 - Para la celdilla cúbica de caras centradas los índices de Miller deben ser:

- a) Pares.
- b) Pares o impares.
- c) La suma de ellos debe ser par.
- d) La suma de ellos debe ser impar.

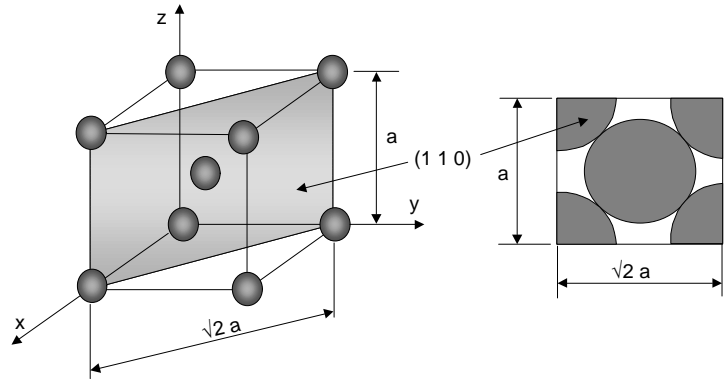
3.2 CUESTIONES DE HETEROEVALUACIÓN

1. ¿A qué se deben las colas de cometa? ¿Cómo debe efectuarse el pulido para evitarlas?
2. Indica las condiciones necesarias para que tenga lugar la difracción de R-X al incidir éstos sobre una muestra cristalina.
3. En la técnica de difracción más comúnmente utilizada indicar como se encuentra la muestra cristalina y los motivos.
4. Síntesis de la microestructura cristalina
5. Indica las ventajas de la observación de las probetas en campo oscuro.
6. Diferencia la aplicabilidad de las diferentes técnicas de microscopía óptica y electrónica.
7. Indicar un método que permita identificar los granos en un material metálico.
8. Razona el porqué de las diferentes etapas que constituyen la preparación metalográfica. Describe como se realiza cada una de ellas.
9. Comenta los medios de los que se disponen para identificar las fases de una aleación
10. Indica las propiedades de materiales que quedan justificadas por la estructura cristalina.
11. ¿Cómo se determinan los aumentos totales a los que se está observando en un microscopio?
12. Describe en qué consiste la microestructura general de un material metálico, a la vista de la observación realizada en el microscopio.
13. ¿Existe un espectro único característico para cada fase o estructura cristalina?.
14. ¿Qué espectro característico podemos esperar de una aleación que está conformada por dos estructuras diferentes?
15. Indica las condiciones que deben cumplir las huellas realizadas en el ensayo de microdurezas para que corresponda a una sola fase.
16. ¿De qué depende la resolución de un microscopio?

3.3 PROBLEMAS Y EJERCICIOS PRACTICOS PROPUESTOS

Problema 3.1 La distancia entre los planos de índices (110) en una red cúbica centrada c.c. es $d_{110} = 2.65 \text{ \AA}$. Calcular:

- La constante reticular.
- El radio atómico del elemento.



Problema 3.2 Calcular la densidad teórica del hierro a temperatura ambiente, sabiendo que presenta red c.c. con parámetro reticular $a = 2.866 \text{ \AA}$. Peso atómico de Fe: 55.847.

Nota: Cte de Avogadro: $6.0248 \cdot 10^{23}$ átomos/mol.

Problema 3.3 Se pretende determinar qué tipo de pigmento blanco se ha utilizado como colorante en un termoplástico. Para ello se examina una muestra pulverizada con difracción de rayos X, empleando radiación Cu K α de $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$. Se obtuvo un espectro de difracción con picos en los ángulos 2θ : Pico 1: 31.72° , Pico 2: 57.73° , Pico 3: 39.12° .

- Determinar el tipo de pigmento utilizado.
- ¿Sería posible resolver la cuestión mediante análisis químico?

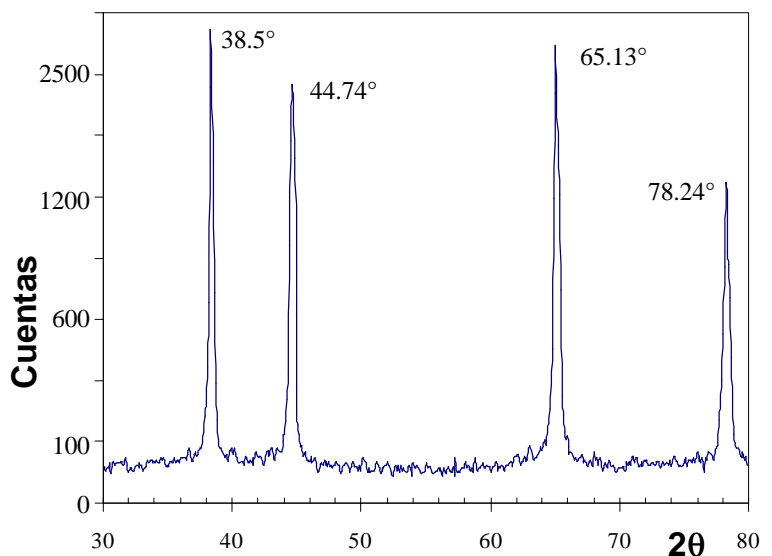
NOTA: Se dispone de las fichas JCPDS para los diversos pigmentos que se consideran posibles, de las que se extraen los datos sobre las tres distancias más significativas siguientes:

Pigmento	d_1 (Å)	d_2 (Å)	d_3 (Å)
TiO ₂ rutilo	3.24	1.68	1.36
TiO ₂ anatasa	3.47	1.88	1.69
PbO.TiO ₂	2.82	1.60	2.30
Pb ₂ O ₃	3.18	1.95	1.66

Problema 3.4. Una muestra de aluminio finamente pulverizado se somete a un ensayo de difracción de rayos X en un difractómetro de polvos. Se utilizó radiación monocromática Cu K α con longitud de onda $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$. El espectro obtenido se muestra en la figura siguiente.

Se pide determinar:

- distancias interplanares que producen difracción.
- calcular el parámetro reticular, sabiendo que es una red cúbica.



- c) determinar si se trata de una red C.C. o C.C.C.
- d) determinar el radio atómico del aluminio.

Problema 3.5. En una muestra de cobre se aprecia mediante observación metalográfica la existencia de un precipitado. Para identificarlo, se somete la muestra a un ensayo de difracción de rayos X. Se sabe que el cobre presenta estructura c.c.c con parámetro reticular $a = 3.616 \text{ \AA}$. Determinar si un pico para $d = 1.419 \text{ \AA}$ corresponde al cobre o al precipitado.

Problema 3.6. Caracterización mecánica de fases mediante microdurezas.

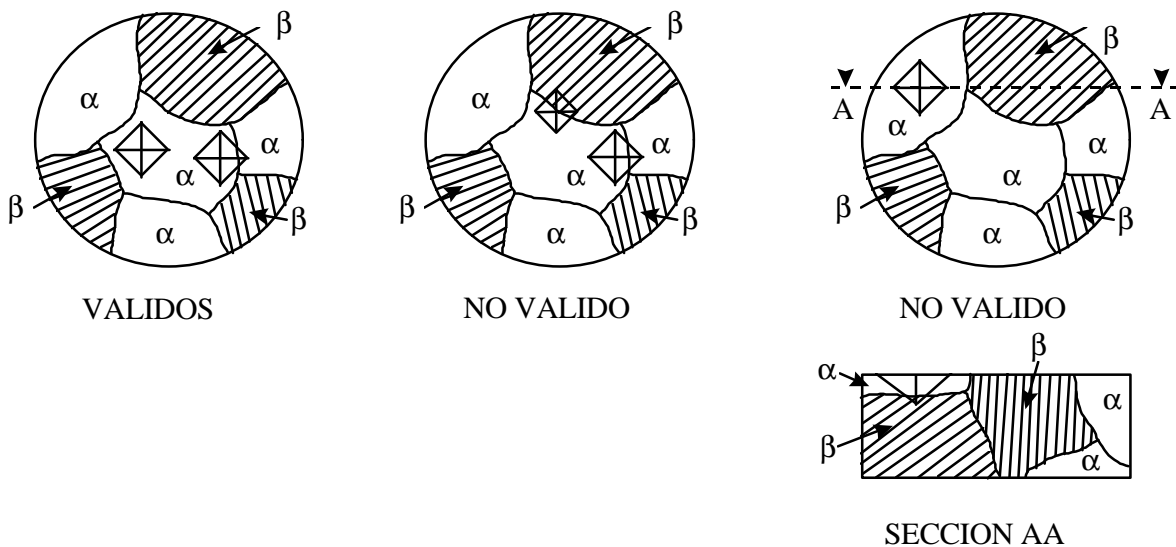
Se pretende caracterizar mecánicamente la dureza de las fases que componen una aleación bifásica. Para ello se efectúa una preparación metalográfica, determinándose el tamaño medio de los granos en unas 100 \mu m . También se ha determinado la dureza de la aleación, mediante un ensayo Vickers, con carga de 30 kg , obteniéndose una dureza 360 HV .

- a) Determinar cual es el rango aproximado de carga que deberá utilizarse en el microdurómetro para asegurar que las huellas de microdureza afectan a un solo grano.

Observación: El problema puede abordarse experimentalmente, mediante sucesivos ensayos de prueba y error. Es decir, se selecciona una carga al azar, por ejemplo 1000 g y se observa el tamaño de la huella producida. Si afecta a más de un grano, se reduce la carga, se hace otro ensayo y se vuelve a observar, así hasta que se consiguen huellas de tamaño inferior al de los granos de cada fase. No obstante, también puede iniciarse el problema de forma más aproximada, efectuando un cálculo de la carga necesaria para obtener huellas de tamaño apropiado, por ejemplo la mitad del tamaño de grano.

- b) Se realiza el ensayo sobre distintos granos, tomando medidas exclusivamente de las huellas que afectan a un solo grano o fase.

Nota: Aún así, es posible que alguna medida de dureza no corresponda a una sola fase, debido a la presencia de un grano de otra fase inmediatamente debajo del que se esta ensayando, tal como se indica en la figura.

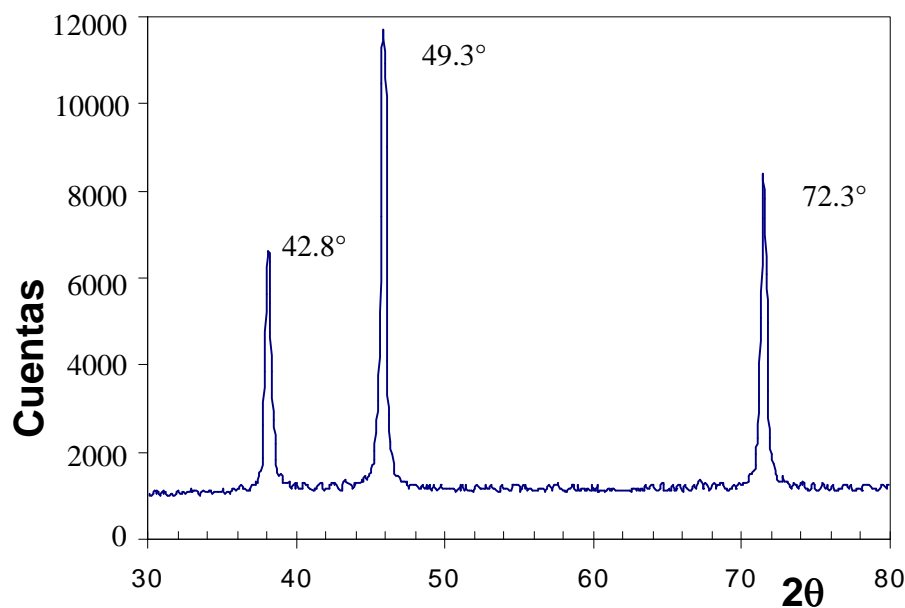


Los resultados que se obtienen se regogen en la tabla siguiente:

<i>Dureza</i>	<i>Situación huella</i>	<i>Fase o grano</i>	<i>Observaciones</i>
420	<i>Interior</i>	<i>A</i>	
435	<i>Interior</i>	<i>A</i>	
160	<i>Interior</i>	<i>B</i>	
250	<i>Borde</i>	<i>A + B</i>	<i>Huella sobre dos fases</i>
168	<i>Interior</i>	<i>B</i>	
428	<i>Interior</i>	<i>A</i>	
389	<i>Interior</i>	<i>B (+ A)</i>	<i>Huella sobre B. Posible A debajo</i>
171	<i>Interior</i>	<i>B</i>	

¿Cual es la microdureza de cada una de las fases presentes?

Problema 3.7 Una muestra de material finamente pulverizado se somete a un ensayo de difracción de rayos X en un difractómetro de polvos. Para ello, se emplea una radiación monocromática Cu K α con longitud de onda $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$. El espectro obtenido se muestra en la figura siguiente.



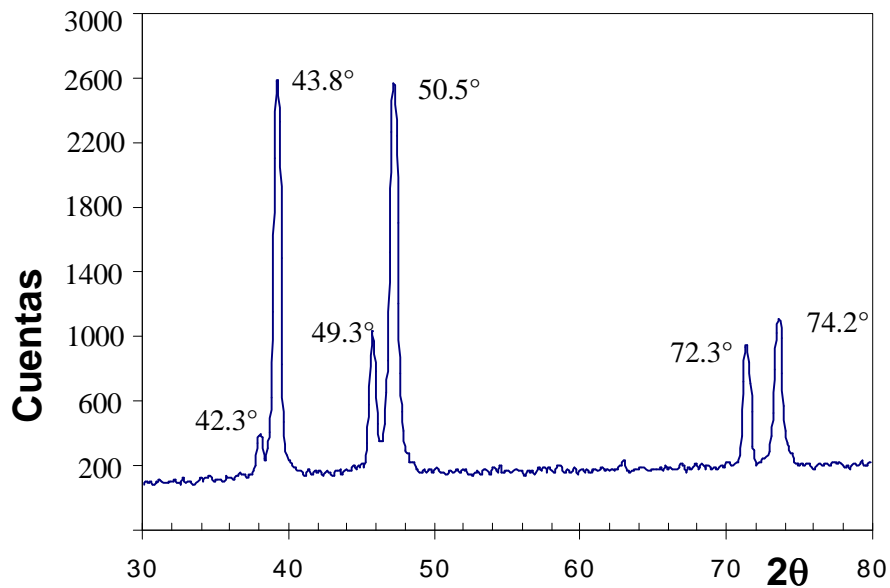
Se pide:

- Calcular las distancias de los planos que producen difracción, empleando para ello la ley de Bragg.
- Calcular el parámetro reticular, sabiendo que es una red cúbica.
- Determinar si se trata de una red C.C. o C.C.C.
- Sabiendo que la densidad de la muestra es de 8.01 g/cm^3 , calcular el peso atómico.

Problema 3.8 En el espectro de difracción de rayos X de la figura, aparecen los picos correspondientes a una mezcla de dos materiales metálicos, que se sabe presentan el mismo sistema cristalino cúbico.

Para la realización del espectro, se ha empleado radiación monocromática Cu K α con una longitud de onda $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$. Calcular:

- a) Las distancias interplanares correspondientes a cada metal.
 b) Calcular el parámetro reticular de cada metal.



- c) Determinar el tipo de red cúbica de la que se trata.

Problema 3.9 Calcular la densidad del níquel sabiendo que su estructura cristalina es una cúbica centrada en caras, su radio atómico es de 0.125 nm y su peso atómico de 58.68 g/mol. Número de Avogadro = $6.023 \cdot 10^{23}$ at./mol

Problema 3.10 En una chapa de latón (Cu-30% Zn) se pretende depositar un recubrimiento Sn-Ag, para lo cual se necesita proporcionar al metal base un recubrimiento previo de cobre. El análisis por difracción de rayos X del conjunto, empleando una radiación $K\alpha$ del Cu con una longitud de onda de 1.541 Å, presenta picos en los siguientes ángulos 2θ : 37.4°, 39.4°, 42.1°, 43.0°, 49.0°, 50.1°, 51.6°, 72.0° y 73.9°.

Disponemos de las fichas JCPDS de los tres materiales cuyos principales datos se recogen en la tabla siguiente:

Material	Distancias interplanares (Å)		
	Pico 1	Pico 2	Pico 3
Latón (Cu-30%Zn)	2.13	1.85	1.31
Cobre	2.09	1.81	1.28
Ag ₃ Sn	2.39	2.28	1.76

- a) Identificar a que material corresponde cada uno de los picos detectados, sabiendo que se cumple la ley de Bragg, donde:

$$l = 2 d \sin \theta$$

Identificados los tres picos que corresponden al cobre, determinar:

- b) El parámetro reticular, sabiendo que su estructura es cúbica.
 c) Si se trata de una red C.C. o C.C.C.

d) Sabiendo que el latón presenta una estructura cristalina idéntica al cobre, calcular el aumento en el parámetro reticular que supone la adición del 30% de zinc al cobre.

Problema 3.11 El ZINC cristaliza en el sistema hexagonal compacto. Determinense los parámetros de la red cristalina si su densidad es de 7136 kg/m^3 y su masa atómica, M_a , 65.38 g. Número de Avogadro = $6.023 \cdot 10^{23} \text{ at./mol}$

Relación entre parámetros reticulares, $\frac{c}{a} = \sqrt{3}$

Problema 3.12 Una radiación monocromática, de una longitud de onda de 0.1542 nm, incide sobre el cromo (c.c.), que tiene un radio atómico de 0.1249 nm, calcular para el conjunto de planos (211):

- a) la distancia interplanar, y,
- b) el ángulo de difracción.

Problema 3.13 En un ensayo de difracción de rayos X, se ha determinado, para el níquel, las distancias interplanares, de su espectro de difracción:

1^{er} pico, $d = 2.034 \text{ \AA}$ 2^a pico, $d = 1.762 \text{ \AA}$ 3^{er} pico, $d = 1.246 \text{ \AA}$

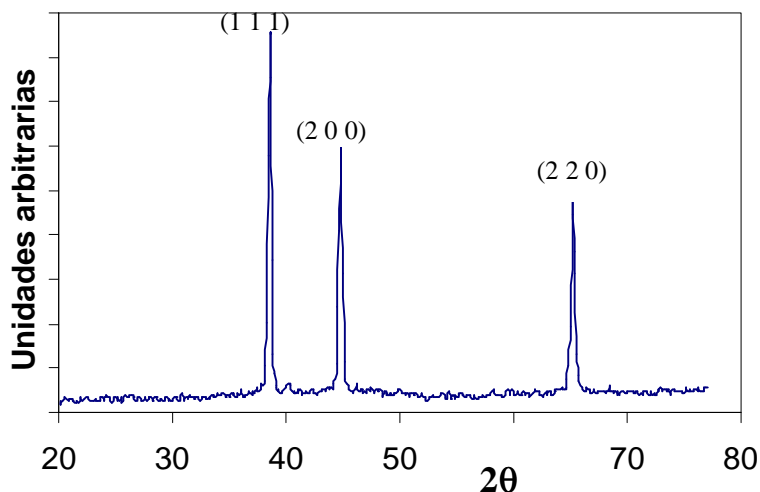
Calcular: a) Si cristaliza en un sistema cúbico, su parámetro fundamental de celdilla.

b) ¿De qué sistema se trata?

Problema 3.14 El cobre tiene una estructura cúbica centrada en las caras, un radio atómico de 0.1278 nm y una masa atómica de 63.54 g/mol. Considerando a los átomos como esferas rígidas en contacto a lo largo de las diagonales de la celdilla unidad, calcular:

- a) La densidad teórica
- b) El radio del mayor hueco de tipo intersticial que encontramos, sabiendo que se encuentra en las posiciones cristalinas del tipo $(\frac{1}{2}, 0, 0)$ $(0, \frac{1}{2}, 0)$ $(0, 0, \frac{1}{2})$

Problema 3.15. En la figura siguiente se muestran los tres primeros planos que proporcionan picos de difracción de rayos X para el aluminio, con radiación Cu Ka, $\lambda = 0,1542 \text{ nm}$



a) Dibújese cada plano, contenido en la celda unitaria de la estructura cúbico centrado en las caras, y señálense las posiciones atómicas dentro de los planos. (realícese, mejor, un dibujo separado para cada plano)

b) Empleando la ley de Bragg, $d = n\mathbf{l}/2 \text{ sen}\mathbf{q}$, calcúlese los ángulos de difracción ($2\mathbf{q}$) para estos picos, sabiendo que el lado de la celdilla es $a = 0,404 \text{ nm}$.

Problema 3.16. El hierro puro presenta las formas alotrópicas: Fe **a** (c.c.) de parámetro reticular $a = 2,90 \cdot 10^{-10} \text{ m}$ y a 910°C se transforma en Fe **g** (c.c.c.) de parámetro reticular $a = 3,65 \cdot 10^{-10} \text{ m}$. Se pide:

a) Demostrar si dilata o contrae al pasar de hierro **a** a hierro **g**

b) Calcular las variaciones de densidad de cada forma alotrópica sabiendo que la masa atómica del hierro es 55,85.

El número de Avogadro, N_A es igual a $6,02 \cdot 10^{23}$.

Problema 3.17. El litio es un metal que cristaliza en el sistema cúbico centrado en el cuerpo. Su parámetro de red es de $0,35092 \text{ nm}$. ¿Calcular los ángulos de difracción en los que aparecerán sus dos primeros picos?

La longitud de onda de rayos X emitidos que se utiliza es de $0,1542 \text{ nm}$.

Consideramos la ley de Bragg $n\mathbf{l} = 2 d \text{ sen } \mathbf{q}$

Problema 3.18 El espectro de difracción de rayos X de una muestra de litio en polvo, presenta picos de difracción en los ángulos $2\mathbf{q}$ de $36,2^\circ$, 52° , $65,1^\circ$ y $76,8^\circ$, con una radiación Cu **Ka** con una longitud de onda de $0,1542 \text{ nm}$.

a) Sabiendo que el litio cristaliza en el sistema cúbico centrado en el cuerpo, calcular su parámetro de red.

b) Empleando la ley de Bragg, $d = n\mathbf{l}/2 \text{ sen}\mathbf{q}$, calcular la distancia interplanar correspondiente a los planos (211).

c) Si su masa atómica es de $6,94 \text{ g}$, calcular la densidad teórica, considerando el número de Avogadro $= 6,023 \cdot 10^{23} \text{ at/mol}$.

d) Calcular el radio del mayor hueco intersticial que encontramos en posiciones octaédricas, sabiendo que se encuentran en las posiciones cristalinas del tipo $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$.

Problema 3.19 El análisis por difracción de rayos X de una chapa de cobre comercial realizado empleando una radiación **Ka** del Cu con $\mathbf{l} = 1,541 \text{ \AA}$, presenta picos en los siguientes ángulos $2\mathbf{q}$: $43,0^\circ$, $50,1^\circ$ y $73,9^\circ$.

a) Calcular el parámetro reticular sabiendo que la estructura cristalina corresponde a un sistema cúbico.

b) Determinar si es un sistema cúbico centrado en el cuerpo o cúbico centrado en caras.

c) La densidad teórica del material, si el peso atómico del mismo es de $63,54 \text{ g/mol}$.

Considerar el número de Avogadro $N_A = 6,023 \cdot 10^{23} \text{ átomos/mol}$

SOLUCION A LAS CUESTIONES DE AUTOEVALUACION:

1 - b, 2 - c, 3 - d, 4 - c, 5 - b, 6 - c, 7 - b, 8 - c, 9 - c, 10 - d, 11 - b, 12 - d, 13 - c, 14 - d, 15 - a,
16 - c, 17 - b, 18 - b, 19 - a, 20 - c, 21 - b, 22 - c, 23 - a, 24 - b.

3.4 RESOLUCIÓN DE LOS PROBLEMAS PROPUESTOS

Solución al problema 3.1

a) En las redes cúbicas, los planos de índices (110) son planos que pasan por una arista y la diagonal de una cara, tal como se muestra en la figura.

Para esta familia de planos, la relación geométrica entre la distancia d_{hkl} de otro plano paralelo y la constante reticular vale:

$$d_{hkl} = a / (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

de donde

$$a = d_{hkl} (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}$$

$$a = 2.65 \sqrt{1^2 + 1^2 + 0} = 2.65 \sqrt{2} = 3.747 \text{ \AA}$$

b) En una red c.c. la diagonal del cubo es compacta, es decir, los átomos de las esquinas y el central están tocándose. Por lo tanto, y asumiendo un modelo de esferas duras, la diagonal del cubo, cuya longitud es $a\sqrt{3}$, tiene la misma longitud que 4 radios atómicos (intersecta completamente al átomo central y hasta el centro a los dos átomos de las esquinas opuestas). Esto es:

$$a \sqrt{3} = 4 r_a$$

de donde:

$$r_a = a \frac{\sqrt{3}}{4} = 3.747 \frac{\sqrt{3}}{4} = 1.622 \text{ \AA}$$

Solución al problema 3.2

El número de átomos por celda en la red c.c. es de $1 + 8 (1/8) = 2$ átomos/celda.

La masa de cada átomo de hierro será:

$$\text{Peso atómico} / n^\circ \text{ Avogadro} = 55.847 / 6.0248 \cdot 10^{23} = 9.2695 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

y la masa de cada celda valdrá:

$$2 \text{ átomos} / \text{celda} \cdot 9.2695 \cdot 10^{-23} \text{ g} = 18.539 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

Por otra parte, el volumen de la celda es:

$$a^3 = (2.866 \cdot 10^{-8} \text{ cm})^3 = 2.354 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3$$

con lo que la densidad teórica vale:

$$d = \text{masa} / \text{vol} = 18.539 \cdot 10^{-23} / 2.354 \cdot 10^{-23} \text{ g/cm}^3 = 7.875 \text{ g/cm}^3,$$

valor prácticamente igual al valor experimental $d = 7.87 \text{ g/cm}^3$.

Solución al problema 3.3

a) A partir de los valores de ángulos 2θ y de la ecuación de Bragg, se determinan las distancias d_{hkl} correspondientes a cada pico.

$$\lambda = 2 d \text{ sen}\theta$$

de donde,

	$d = \lambda / 2 \sin\theta$, siendo $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$.		
Picos 2θ :	31.72	57.73	39.12
Angulos θ :	15.86	28.87	19.56
Sen θ :	0.27329	0.48275	0.33485
d (\AA):	2.819	1.596	2.301

Valores que coinciden significativamente con los correspondientes al producto $\text{PbO} \cdot \text{TiO}_2$.

b) Es evidente que un análisis químico informaría de la presencia de Pb y Ti. Pero no podría discernir si corresponden a un producto dado, como el $\text{PbO} \cdot \text{TiO}_2$ o bien es que existe una mezcla de óxidos de TiO_2 y Pb_2O_3 . El análisis químico resulta, por tanto, insuficiente para identificar las estructuras cristalinas presentes.

Solución al problema 3.4

a) Cálculo de distancias interplanares que producen difracción. Se determina en primer lugar los ángulos 2θ en los que aparece difracción.

Picos 2θ :	38.5	44.74	65.134	78.238
Angulos θ :	19.25	22.37	32.57	39.12
Sen θ :	0.32969	0.38059	0.53833	0.63095

A partir de la Ley de Bragg, $\lambda = 2 d \sin\theta$, puede obtenerse los valores de d:

	$d = \lambda / 2 \sin\theta$, donde $\lambda = 1.541 \text{ \AA}$.			
d (\AA):	2.34	2.02	1.43	1.22

b) Cálculo del parámetro reticular. En las redes cúbicas, la segunda raya del espectro corresponde a la difracción sobre planos de índices (200).

Sabiendo que para las redes cúbicas, la distancia entre planos de índices hkl vale:

$$d_{hkl} = a (h^2 + k^2 + l^2)^{-1/2}$$

para los planos (200) se tiene:

$$d_{(200)} = 2.02 \text{ \AA} = a/2,$$

de donde

$$a = 4.04 \text{ \AA}$$

c) Determinación del tipo de red. En la red c.c. sólo son observables los planos que cumplen:

$$h + k + l = 2n$$

En la red c.c.c. sólo son observables los planos donde todos los índices son pares, o impares, es decir:

$$h, k, l = 2n$$

$$h, k, l = 2n-1 \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Según estas reglas, los espectros característicos de cada red son:

Planos posibles	c.c.	c.c.c.
100	-	-
110	110	-
111	-	111
200	200	200
210	-	-
211	211	-
220	220	220

En la estructura c.c., se cumple:

$$\frac{d_{\text{segundo pico}}}{d_{\text{primer pico}}} = \frac{d_{200}}{d_{110}} = \frac{a/2}{a/\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} = 0.707$$

mientras que en la red c.c.c., se cumple:

$$\frac{d_{\text{segundo pico}}}{d_{\text{primer pico}}} = \frac{d_{200}}{d_{111}} = \frac{a/2}{a/\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{2} = 0.860$$

En nuestro caso:

$$\frac{d_{\text{segundo pico}}}{d_{\text{primer pico}}} = \frac{2.02}{2.34} = 0.863$$

luego se trata de una red c.c.c.

d) Determinación del radio atómico del aluminio. En las redes c.c.c, la dirección densa es la diagonal de una cara. Por lo tanto:

$$a\sqrt{2} = 4 r_a$$

de donde,

$$r_a = a \frac{\sqrt{2}}{4} = 4.04 \frac{\sqrt{2}}{4} = 1.428 \text{ \AA}$$

Solución al problema 3.5

Por ser c.c.c., el cobre presentará difracción en planos hkl que cumplan:

$$h,k,l = 2n$$

$$h,k,l = 2n-1 \quad n= 1,2,3,\dots$$

Es decir, para planos, en orden creciente, de índices: (111), (200), (220), (311), (222)...

Para cada uno de estos planos puede calcularse la distancia interplanar, d_{hkl} , según la expresión:

$$d_{hkl} = a (h^2 + k^2 + l^2)^{-1/2}$$

de donde:

$$d_{111} = \frac{3.616}{\sqrt{3}} = 2.088$$

$$d_{200} = \frac{3.616}{\sqrt{4}} = 1.808$$

$$d_{220} = \frac{3.616}{\sqrt{8}} = 1.278$$

$$d_{311} = \frac{3.616}{\sqrt{11}} = 1.090$$

por lo que resulta evidente que $d = 1.419 \text{ \AA}$ no puede corresponder a difracción sobre planos del cobre, confirmando la existencia de otras fases diferentes en la estructura.

Solución al problema 3.6

1) Selección de cargas

A partir de la ecuación para la dureza Vickers:

$$HV = 1854,4 P (g) / d^2 (\mu m^2)$$

podemos obtener $P (g)$, con la condición de que d sea menor que el tamaño del grano.

Tomando $d = \varnothing_{\text{grano}} / 2 = 50 \mu m$, y considerando que la dureza media es de 360 HV, se obtiene:

$$P (g) = HV (d^2 / 1854,4) = 360 (2500 / 1854,4) = 485,3 g$$

por lo que una carga de 500 g constituye la solución más adecuada para abordar el estudio.

2) Ejecución del ensayo. Análisis de resultados

Una vez desestimados los valores de 250 y 389, que claramente no corresponden a uno u otro tipo de grano, se calculan las propiedades para cada fase:

$$\text{Dureza fase A : } (420 + 435 + 428) / 3 = 428 \text{ HV}$$

$$\text{Dureza fase B : } (160 + 168 + 171) / 3 = 166 \text{ HV}$$

Solución al problema 3.7

a) Cálculo de distancias interplanares que producen difracción. Se determina en primer lugar los ángulos 2θ en los que aparece difracción.

Picos 2θ :	42.80	49.30	72.30
Ángulos θ :	21.40	24.65	36.15
Sen θ :	0.3649	0.4171	0.5899

A partir de la Ley de Bragg, $\lambda = 2 d \text{ sen}\theta$, puede obtenerse los valores de d :

$$d = \lambda / 2 \text{ sen}\theta, \quad \text{donde } \lambda = 1.541 \text{ \AA}$$

$d (\text{Å})$:	2.11	1.85	1.31
------------------	------	------	------

b) Cálculo del parámetro reticular. En las redes cúbicas, la segunda raya del espectro

corresponde a la difracción sobre planos de índices (200).

Sabiendo que para las redes cúbicas, la distancia entre planos de índices hkl vale:

$$d_{hkl} = a (h^2 + k^2 + l^2)^{-1/2}$$

para los planos (200) se tiene:

$$d_{(200)} = 1.85 \text{ \AA} = a/2,$$

de donde

$$a = 3.70 \text{ \AA}$$

c) Determinación del tipo de red.

En la estructura c.c., se cumple:

$$\frac{d_{\text{segundo pico}}}{d_{\text{primer pico}}} = \frac{d_{200}}{d_{110}} = \frac{a/2}{a/\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} = 0.707$$

mientras que en la red c.c.c., se cumple:

$$\frac{d_{\text{segundo pico}}}{d_{\text{primer pico}}} = \frac{d_{200}}{d_{111}} = \frac{a/2}{a/\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{2} = 0.860$$

En nuestro caso:

$$\frac{d_{\text{segundo pico}}}{d_{\text{primer pico}}} = \frac{1.85}{2.11} = 0.877$$

luego se trata de una red c.c.c.

d) Calcular el peso atómico. En las redes c.c.c, el número de átomos por celda es:

$$6 (1/2) + 8 (1/8) = 4 \text{ átomos/celda.}$$

y el volumen de la celda será:

$$a^3 = (3.70 \cdot 10^{-8} \text{ cm})^3 = 5.065 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3$$

sabiendo que la densidad = 8.01 g/cm^3 = masa / volumen, el peso atómico será:

$$P_a = \frac{\text{densidad} \times \text{volumen}}{\text{número de átomos}} N_A = \frac{8.01 \text{ g/cm}^3 \cdot 5.065 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3}{4} \cdot 6.0248 \cdot 10^{23} = 61.1 \text{ g}$$

Solución al problema 3.8

a) Las distancias interplanares se obtienen aplicando la ley de Bragg, $\lambda = 2 d \text{ sen}\theta$, de forma que:

$$d = \lambda / 2 \text{ sen}\theta, \quad \text{donde } \lambda = 1.541 \text{ \AA}$$

Picos 2θ :	42.30	43.40	49.30	50.50	72.30	74.20
Angulos θ :	21.15	21.70	24.65	25.25	36.15	37.10
Sen θ :	0.3608	0.3697	0.4171	0.4266	0.5899	0.6032
d (Å):	2.136	2.084	1.847	1.806	1.306	1.277

Las distancias interplanares serán: del metal A, 2.136, 1.847 y 1.306
del metal B, 2.084, 1.806 y 1.277

b) Cálculo de los parámetros reticulares. Como los dos metales presentan el mismo sistema cristalino cúbico, sabemos que:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

que para los planos (200) correspondientes a la segunda raya, tendremos:

$$d_{(200)} = a/2,$$

de donde:

$$\text{para el metal A, } a = 2 \times 1.847 = 3.694 \text{ \AA}$$

$$\text{para el metal B, } a = 2 \times 1.806 = 3.612 \text{ \AA}$$

c) Determinación del tipo de red de ambos metales

En ambos casos, al ser del mismo sistema cristalino, deberemos obtener la relación entre el segundo y primer pico de manera que:

	Metal A	Metal B
$\frac{d_{\text{segundo pico}}}{d_{\text{primer pico}}}$	0.864	0.867

que presentan valores similares a 0.860 correspondiente a la relación para estructuras cúbicas centradas en las caras, luego se trata de redes C.C.C.

Solución al problema 3.9

$$r = \frac{m}{V} = \frac{n \cdot A}{V_{\text{celda}} \cdot N_A}$$

Al tener el níquel una estructura c.c.c., n = 4 átomos, por lo que V_{celda} será:

$$V = a^3 = (2r_a \sqrt{2})^3 = (2 \cdot 0.125 \cdot 10^{-7} \sqrt{2})^3 \text{ cm}^3 = 4.42 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3$$

$$r = \frac{4 \text{ at} \cdot 58.68 \text{ g/mol}}{4.42 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3 \cdot 6.023 \cdot 10^{23} \text{ at/mol}} = 8.81 \text{ g/cm}^3$$

Solución al problema 3.10

a) Los diferentes datos del espectro, y la asignación de picos es la que se recoge en la tabla siguiente, tras aplicar la ley de Bragg.

2θ	θ	sen θ	d _{hkl}	Asignación material
37.4	18.7	0.3206	2.4032	1 - Ag ₃ Sn
39.4	19.7	0.3370	2.2857	2 - Ag ₃ Sn
42.1	21.05	0.3592	2.1451	1 - Latón

2θ	θ	$\text{sen } \theta$	d_{hkl}	Asignación material
43.0	21.5	0.3665	2.1023	1 - Cobre
49.0	24.5	0.4146	1.8580	2 - Latón
50.1	25.05	0.4235	1.8198	2 - Cobre
51.6	25.8	0.4352	1.7703	3 - Ag ₃ Sn
72.0	36.0	0.5878	1.3109	3 - Latón
73.9	36.95	0.6011	1.2818	3 - Cobre

b) Cuando la red es cúbica, el segundo pico corresponde al plano (2 0 0) por lo que considerando la relación:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \text{ de donde: } d_{200} = \frac{a}{2} = 1.8198 \text{ \AA}$$

con lo que el parámetro fundamental de la celdilla será: $a = 3.6395 \text{ \AA}$

c) Si la red es C.C., tendremos:

$$\frac{d_{2^\circ \text{ pico}}}{d_{1^\circ \text{ pico}}} = \frac{d_{200}}{d_{110}} = \frac{a/2}{a/\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} = 0.707$$

Si la red es C.C.C., entonces:

$$\frac{d_{2^\circ \text{ pico}}}{d_{1^\circ \text{ pico}}} = \frac{d_{200}}{d_{111}} = \frac{a/2}{a/\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{2} = 0.860$$

En nuestro caso:

$$\frac{d_{2^\circ \text{ pico}}}{d_{1^\circ \text{ pico}}} = \frac{1.8198}{2.1023} = 0.866$$

y por lo tanto es una red C.C.C.

d) En el caso del latón, siendo una red similar a la del cobre, tendremos que el parámetro fundamental de la celdilla será:

$$a = 2 d_{2^\circ \text{ pico}} = 2 \cdot 1.8580 = 3.7160 \text{ \AA}$$

y por lo tanto, el aumento del parámetro debido a la adición de zinc, vendrá expresado por:

$$\% \text{ aumento} = \frac{3.7160 - 3.6395}{3.6395} \cdot 100 = 2.1\%$$

Solución al problema 3.11

El número de átomos de la red hexagonal compacta será:

$$12 \cdot 1/6 \text{ (vértices)} + 2 \cdot 1/2 \text{ (caras)} + 3 \text{ (interior)} = 6$$

y el volumen de la celdilla, considerando la densidad del material será:

$$V_{\text{celdilla}} = \frac{n^{\circ} \text{ atomos} \cdot Ma}{N_A \cdot \text{densidad}} = \frac{6 \cdot 65.38 \text{ g/mol}}{7136 \cdot 10^3 \text{ g/m}^3 \cdot 6.023 \cdot 10^{23} \text{ at/mol}} = 9.13 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3$$

siendo:

$$V_{\text{celdilla}} = S_{\text{base}} \cdot c$$

y la superficie de la base es la superficie de un hexágono = (perímetro x apotema) / 2, o lo que es lo mismo:

$$S_{\text{base}} = 6a \frac{\sqrt{3}a}{4} = \frac{3\sqrt{3}a^2}{2}$$

con lo que, siendo $c = \sqrt{3}a$, el volumen será:

$$V_{\text{celdilla}} = \frac{3\sqrt{3}a^2}{2} \cdot \sqrt{3}a = 4.5a^3$$

$$\text{y de aquí: } a = \sqrt[3]{\frac{V_{\text{celdilla}}}{4.5}} = \sqrt[3]{\frac{9.13 \cdot 10^{-29}}{4.5}} = 2.72 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 2.72 \text{ \AA}$$

$$\text{y } c = 4.71 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 4.71 \text{ \AA}$$

Solución al problema 3.12

$$\text{a) } d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{4r/\sqrt{3}}{\sqrt{4+1+1}} = \frac{0.288}{\sqrt{6}} = 0.118 \text{ nm}$$

b) El valor de θ se puede calcular mediante la ley de Bragg, con $n = 1$.

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \Rightarrow \sin \theta = \frac{n\lambda}{2d_{hkl}}$$

$$\sin \theta = \frac{0.1542}{2 \cdot 0.118} = 0.6544$$

con lo que $\theta = 40.88^\circ$

El ángulo de difracción será, por tanto:

$$2\theta = 81.76^\circ$$

Solución al problema 3.13

a) $d_{(200)} \rightarrow 2^\circ$ pico en redes cúbicas

$$d_{200} = 1,762 = \frac{a}{\sqrt{2^2 + 0^2 + 0^2}} = \frac{a}{2} \rightarrow a = 1,762 \cdot 2 = 3,542 \text{ \AA}$$

$$\text{b) } \frac{d_{2^\circ}}{d_{1^\circ}} = \frac{1,762}{2,034} \approx 0,86 \quad \text{C.C.C.}$$

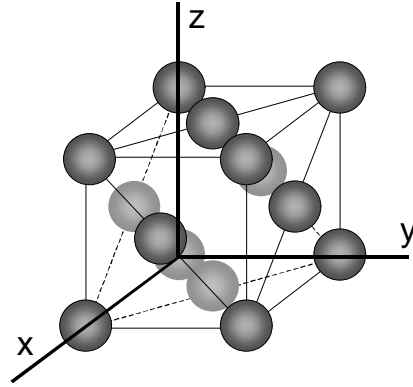
Solución al problema 3.14

a) La densidad vendrá expresada por:

$$d = \frac{m}{V} = \frac{n \cdot M_a}{a^3 \cdot N_A}$$

donde

$$n = 8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4 \text{ at./celdilla}$$



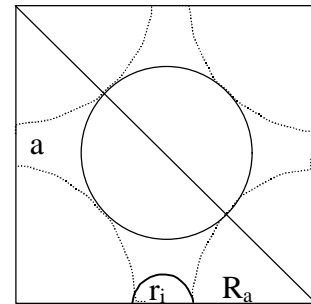
y, para este sistema cristalino, $a \cdot \sqrt{2} = 4 \cdot R_a \rightarrow a = \frac{4 \cdot R_a}{\sqrt{2}} = \frac{4 \cdot 0,1218}{\sqrt{2}}$

de donde, $a = 0,361 \text{ nm} = 0,361 \cdot 10^{-9} \text{ m}$

por lo que la densidad teórica será:

$$d = \frac{4 \text{ at./celdilla} \cdot 63,54 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}}{(0,361 \cdot 10^{-9} \text{ m})^3 / \text{celdilla} \cdot 6,025 \cdot 10^{23} \text{ at./mol}}$$

$$d = 8969 \text{ kg/m}^3$$



b) La arista de la celda elemental vendrá expresada por:

$$a = 2 \cdot R_a + 2 \cdot r_i$$

y operando,

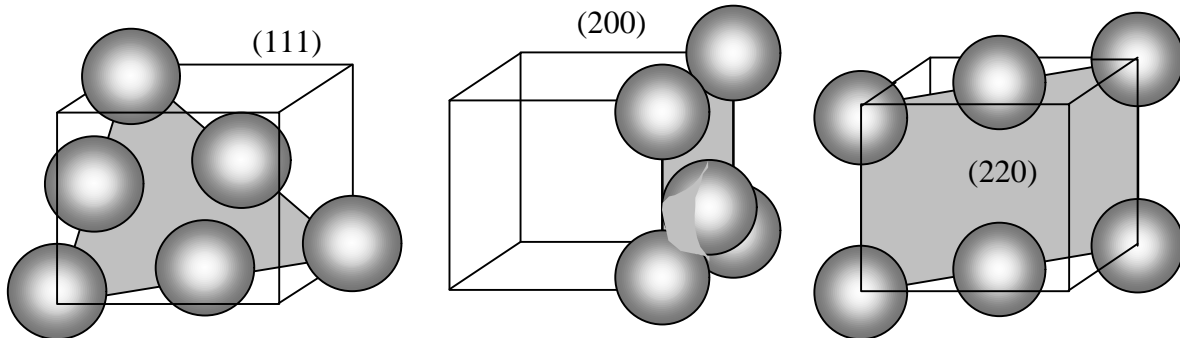
$$0,361 = 2 \cdot 0,1278 + 2 \cdot r_i$$

de donde,

$$r_i = 0,0527 \text{ nm}$$

Solución al problema 3.15

a)



b) Empleando la ley de Bragg,

$$d_{111} = \frac{0,404 \text{ nm}}{\sqrt{1+1+1}} = \frac{0,404 \text{ nm}}{\sqrt{3}} = 0,234 \text{ nm}$$

$$d_{200} = \frac{0,404 \text{ nm}}{\sqrt{2^2+0+0}} = \frac{0,404 \text{ nm}}{2} = 0,202 \text{ nm}$$

$$d_{220} = \frac{0,404 \text{ nm}}{\sqrt{2^2+2^2+0}} = \frac{0,404 \text{ nm}}{\sqrt{8}} = 0,143 \text{ nm}$$

para $n=1$, y para $\lambda = 0,1542 \text{ nm}$

$$q = \arcsen \frac{\lambda}{2d}$$

por lo que,

$$q_{111} = \arcsen \frac{0,1542}{2 \cdot 0,234} = 19,3^\circ \Rightarrow (2q)_{111} = 38,6^\circ$$

$$q_{200} = \arcsen \frac{0,1542}{2 \cdot 0,202} = 22,4^\circ \Rightarrow (2q)_{200} = 44,8^\circ$$

$$q_{220} = \arcsen \frac{0,1542}{2 \cdot 0,143} = 32,6^\circ \Rightarrow (2q)_{220} = 65,2^\circ$$

Solución al problema 3.16

- a) El Fe α , al ser cúbico centrado en cuerpo tiene 2 átomos por celdilla, mientras el Fe γ al ser cúbico centrado en cuerpo tiene cuatro átomos por celdilla. Por ello, el volumen para el mismo número de átomos, por ejemplo cuatro, sería:

$$\text{Para el Fe } \alpha \Rightarrow V = 2 \cdot (2,90 \cdot 10^{-10})^3 = 48,778 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3,$$

$$\text{Mientras que para el Fe } \gamma \text{ tendremos, } V = (3,65 \cdot 10^{-10})^3 = 48,627 \cdot 10^{-30} \text{ m}^3.$$

Que corresponde a una contracción.

- b) La densidad se calculará a través de la expresión:

$$d = \frac{N \cdot M_{Fe}}{V \cdot N_A} = \frac{4 \cdot 55,85}{V \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}$$

y por tanto, para el Fe α será:

$$d_a = \frac{4 \cdot 55,85}{48,778 \cdot 10^{-30} \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} = 7608 \text{ kg / m}^3$$

mientras para el Fe γ será:

$$d_g = \frac{4 \cdot 55,85}{48,627 \cdot 10^{-30} \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} = 7631 \text{ kg / m}^3$$

Solución al problema 3.17

Al tratarse de un sistema cúbico centrado en el cuerpo, sabemos que los dos primeros picos corresponden a los planos (1 1 0) y (2 0 0), y que:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

por lo que sustituyendo tendremos:

$$1^{\text{er}} \text{ pico} \quad d_{110} = \frac{0,35092}{\sqrt{2}} = 0,24814 \text{ nm}$$

y sustituyendo en la ley de Bragg,

$$\text{sen } \theta = \frac{n \cdot \lambda}{2d} = \frac{0,1542 \text{ nm}}{2 \cdot 0,24814 \text{ nm}} = 0,3107 \quad \rightarrow \quad \theta = 18,10^\circ \quad \rightarrow \quad 2\theta = 36,20^\circ$$

$$2^\circ \text{ pico} \quad d_{200} = \frac{0,35092}{2} = 0,17546 \text{ nm}$$

y sustituyendo en la ley de Bragg,

$$\text{sen } \theta = \frac{n \cdot \lambda}{2d} = \frac{0,1542 \text{ nm}}{2 \cdot 0,17546 \text{ nm}} = 0,4394 \quad \rightarrow \quad \theta = 26,07^\circ \quad \rightarrow \quad 2\theta = 52,13^\circ$$

Solución al problema 3.18

a) El parámetro de red vendrá expresado en función de la distancia interplanar del segundo pico del espectro, por:

$$a = d_{200} \sqrt{2^2 + 0 + 0} = 2 \frac{l}{2 \cdot \text{sen } 26^\circ} = \frac{0,1542 \text{ nm}}{0,4384} = 0,3518 \text{ nm}$$

b) La distancia interplanar correspondiente a los planos (211), será en función del parámetro reticular:

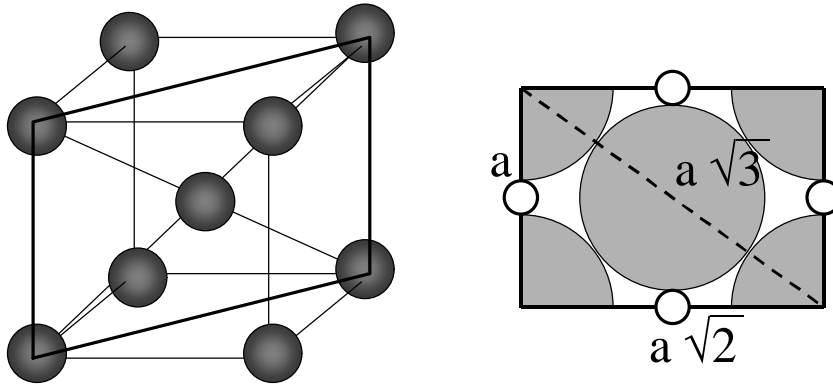
$$d_{211} = \frac{0,3518 \text{ nm}}{\sqrt{2^2 + 1 + 1}} = \frac{0,3518 \text{ nm}}{\sqrt{6}} = 0,1436 \text{ nm}$$

c) Para el sistema cúbico centrado en el cuerpo, el número de átomos por celdilla es de 2, por lo que:

$$\mathbf{r} = \frac{m}{V} = \frac{n_a \cdot P_a}{a^3 \cdot N_A} = \frac{2 \text{ átomos} \cdot 6,94 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}}{0,3518^3 \cdot 10^{-27} \text{ m}^3 \cdot 6,023 \cdot 10^{23} \text{ átomos/mol}} = 529,3 \text{ kg/m}^3 \text{ lo}$$

que corresponde a una densidad de $0,529 \text{ g/cm}^3$

d) Las posiciones octaédricas son las que corresponden al centro de las caras, tal como se representa en el dibujo.



Por tanto, sabiendo que $4 r_i = a \sqrt{3}$, entonces:

$$r_i = \frac{a \sqrt{3}}{4} = 0.1523 \text{ nm}$$

Por lo que el diámetro máximo del intersticio será:

$$d_i = a - 2 r_i = 0.3518 - 2 \cdot 0.1523 = 0.0472 \text{ nm}$$

Solución al problema 3.19

a) Para un sistema cúbico, el segundo pico corresponde al plano (2 0 0), por lo que de la expresión:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

siendo,

$$d_{200} = \frac{a}{2 \cdot \sin \theta} = \frac{0.1541 \text{ nm}}{2 \cdot \sin(25.05)} = 0.1820 \text{ nm}$$

por lo que:

$$a = 2 \cdot d_{hkl} = 2 \cdot 18.20 \text{ nm} = 0.3640 \text{ nm}$$

b) Para saber si es c.c. o c.c.c podemos obtener la relación entre el primer y segundo pico, para lo que necesitaremos conocer d_1 , que será:

$$d_1 = \frac{0.1541 \text{ nm}}{2 \cdot \sin(21.5)} = 0.2102 \text{ nm}$$

por lo que,

$$d_2/d_1 = 0.866,$$

igual al valor correspondiente al sistema **cúbico centrado en las caras**

c) La densidad vendrá expresada por:

$$\mathbf{r} = \frac{m}{V} = \frac{n_a \cdot P_a}{a^3 \cdot N_A}$$

siendo n_a el número de átomos por celdilla, que en un sistema c.c.c es de 4, P_a el peso atómico del material, a el parámetro fundamental de la celdilla unidad y N_A el número de Avogadro o átomos/mol, con lo que:

$$\mathbf{r} = \frac{n_a \cdot P_a}{a^3 \cdot N_A} = \frac{4 \text{ átomos} \cdot 63.54 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}}{0.364^3 \cdot 10^{-27} \text{ m}^3 \cdot 6.023 \cdot 10^{23} \text{ átomos/mol}} = 8750 \text{ kg/m}^3$$

que correspondería a una densidad de 8.75 g/cm^3