

EJERCICIOS PROPUESTOS

1. El radio atómico del níquel CCC es 1.243 Å. Calcular: a) el parámetro de red y b) la densidad del níquel, si se sabe que la masa atómica del níquel es de 58.71 g/mol.

Datos:

$$a_0 = 1.243 \text{ \AA}$$

$$M = 58.71 \text{ g/mol}$$

$$\text{Átomos/celda} = 4 \text{ átomos (por teoría)}$$

$$N. \text{ de Avogadro} = 6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol}$$

Solución:

a) Parámetro de red. En la celda CCC los átomos se contactan entre sí a través de la diagonal de las caras del cubo, de forma que la relación entre la longitud del lado de cubo a_0 y el radio atómico r es:

$$\sqrt{2}a_0 = 4r \text{ o bien } a_0 = \frac{4r}{\sqrt{2}} \quad (1)$$

Entonces, sustituyendo los datos en la relación anterior

$$a_0 = \frac{4(1.243 \times 10^{-8} \text{ cm})}{\sqrt{2}}$$

$$a_0 = 3.5157 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

b) Densidad. Para determinar la densidad del níquel, basta con calcular el volumen de celda y sustituir su valor con los datos en la relación:

$$\rho = \frac{(\text{número de átomos/cel da})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})} \quad (2)$$

Cálculo del volumen de celda: Por ser una celda cúbica los valores de lados son iguales, de manera que el volumen viene dado por:

$$\text{Volumen de celda} = a_0^3$$

$$\text{Volumen de celda} = (3.5157 \times 10^{-8})^3$$

$$\text{Volumen de celda} = 4.3455 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

Ahora bien, sustituyendo en (2)

$$\rho = \frac{(4 \text{ átomos})(5871 \text{ g/mol})}{(4.3455 \times 10^{-23} \text{ cm}^3)(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}$$

$$\rho = 8.977 \text{ g/cm}^3$$

2. La densidad del potasio, que tiene una estructura CC y un átomo por punto de red es 0.855 g/cm^3 . La masa atómica del potasio es 39.09 g/mol . Calcule:

- el parámetro de red y
- el radio atómico del potasio

Solución:

Datos:

$$\rho = 0.855 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Masa atómica} = 39.09 \text{ g/mol}$$

$$\text{Átomos/celda} = 2 \text{ átomos (por teoría)}$$

$$\text{N. de Avogadro} = 6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol}$$

a) Parámetro de red. Como el potasio tiene una estructura cúbica, su volumen de celda $= a_0^3$, el cual puede obtenerse a través de la relación:

$$\rho = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}$$

donde:

$$\text{volumen de celda} = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica})}{\rho(\text{número de Avogadro})}$$

Entonces, sustituyendo los valores:

$$\text{volumen de celda} = \frac{(2 \text{ átomos})(39.09 \text{ g/mol})}{(0.855 \text{ g/cm}^3)(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}$$

$$\text{volumen de celda} = 1.5189 \times 10^{-22} \text{ cm}^3$$

y como volumen de celda = a_0^3 , despejando se obtiene el parámetro de red

$$a_0 = \sqrt[3]{\text{volumen de celda}}$$

$$a_0 = \sqrt[3]{1.5189 \times 10^{-22} \text{ cm}^3} \Leftrightarrow a_0 = 5.3355 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$a_0 = 5.3355 \text{ \AA}$$

b) Radio atómico. Como en la celda CC los átomos se contactan entre sí a través de la diagonal del cubo, la relación entre la longitud de la diagonal de cubo a_0 y el radio atómico r es: $\sqrt{3}a_0 = 4r$, por lo que el radio atómico puede calcularse despejando dicha relación

$$r = \frac{\sqrt{3}a_0}{4}$$

$$r = \frac{\sqrt{3}(5.3355 \times 10^{-8} \text{ cm})}{4}$$

$$r = 2.3103 \times 10^{-8} \text{ cm} \text{ ó } 2.3103 \text{ \AA}$$

3. Un metal con una estructura cúbica tiene una densidad de 1.892 g/cm³, un peso atómico de 132.91 g/mol y un parámetro de red de 6.13 Å. Un

átomo asociado a cada punto de la red. Determinar la estructura cristalina del metal.

Solución:

Datos:

$$\rho = 1.892 \text{ g/cm}^3$$

$$\text{Masa atómica} = 132.91 \text{ g/mol}$$

$$a_0 = 6.13 \text{ \AA}$$

$$\text{N. de Avogadro} = 6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol}$$

Para determinar la estructura cristalina y en base a los datos obtenidos, basta con calcular el número de átomos por celda.

De la fórmula de densidad, se tiene

$$\rho = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}$$
$$\text{átomos/celda} = \frac{\rho(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}{\text{masa atómica}} \quad (1)$$

• Cálculo de volumen de celda. Como el metal tienen una estructura cúbica, el volumen de celda = a_0^3 , entonces:

$$\text{volumen de celda} = (6.13 \times 10^{-8} \text{ cm})^3$$

$$\text{volumen de celda} = 2.3035 \times 10^{-22} \text{ cm}^3$$

Una vez determinado el volumen de celda y con los datos obtenidos, determinamos el tipo de estructura sustituyendo en la relación (1)

$$\text{átomos/celda} = \frac{\rho(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}{\text{masa atómica}}$$

$$\text{átomos/celda} = \frac{(1.892\text{g/cm}^3)(2.3035 \times 10^{-22} \text{cm}^3)(6.02 \times 10^{23} \text{átomos/mol})}{(132.91\text{g/mol})}$$

$$\text{átomos/celda} = 1.974 \text{átomos} \approx 2 \text{átomos}$$

Finalmente, en base al resultado, se puede decir que el metal tiene una estructura CC

4. El galio tiene una estructura ortorrómbica, con $a_0=0.45258$ nm, $b_0=0.45186$ nm y $c_0=0.76570$ nm. El radio atómico es 0.1218 nm. La densidad es de 5.904g/cm^3 y la masa atómica es de 69.72g/mol . Determine

- el número de átomos en cada celda unitaria y
- el factor de empaquetamiento de la celda unitaria

Solución:

Datos:

$$a_0 = 0.45258\text{nm}$$

$$b_0 = 0.45186\text{nm}$$

$$c_0 = 0.76570\text{nm}$$

$$\rho = 5.904\text{g/cm}^3$$

$$\text{Masa atómica} = 69.72\text{g/mol}$$

$$\text{N. de Avogadro} = 6.02 \times 10^{23} \text{átomos/mol}$$

a) Número de átomos por celda. Se determinan despejándolos de la relación de densidad

$$\rho = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}$$

$$\text{átomos/celda} = \frac{\rho(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}{\text{masa atómica}} \quad (1)$$

- Cálculo del volumen de celda. Para determinar el volumen se multiplican cada uno de los parámetros de red, es decir

$$\text{volumen de celda} = a_0 \times b_0 \times c_0$$

$$\text{volumen de celda} = (0.45258 \times 10^{-7} \text{ cm})(0.45186 \times 10^{-7} \text{ cm})(0.76570 \times 10^{-7} \text{ cm})$$

$$\text{volumen de celda} = 1.5659 \times 10^{-22} \text{ cm}^3$$

ahora, sustituyendo los valores en (1)

$$\text{átomos/celda} = \frac{\rho(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}{\text{masa atómica}}$$

$$\text{átomos/celda} = \frac{(5.904 \text{ g/cm}^3)(1.5659 \times 10^{-22} \text{ cm}^3)(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}{69.72 \text{ g/mol}}$$

$$\text{átomos/celda} = 7.98 \text{ átomos} \approx 8 \text{ átomos}$$

- b) Factor de empaquetamiento. Se calcula por medio de la relación

$$FE = \frac{(\text{átomos / celda})(\text{volumen de átomo})}{(\text{volumen de celda})} \quad (2)$$

- Cálculo del volumen de átomo. Considerando a los átomos como esferas rígidas, se obtiene a través de la expresión

$$\text{volumen de átomo} = \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$\text{volumen de átomo} = \frac{4}{3} \pi (0.1219 \times 10^{-7} \text{ cm})^3$$

$$\text{volumen de átomo} = 7.5875 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$$

Ahora bien, sustituyendo los datos en la ecuación (2)

$$FE = \frac{(8)(7.5875 \times 10^{-24} \text{ cm}^3)}{(1.5659 \times 10^{-22} \text{ cm}^3)}$$

$$FE = 0.3876$$

5. Una de las formas del manganeso tiene un radio atómico de 1.12 Å, un parámetro de red de 8.931 Å, y un factor de empaquetamiento de 0.479. ¿Cuántos átomos hay en la celda unitaria?

Datos:

$$r = 1.12 \text{ \AA} \approx 1.12 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$a_0 = 8.931 \text{ \AA} \approx 8.931 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$FE = 0.479$$

Solución: En base a los datos suministrados, el número de átomos por celda unitaria se puede obtener mediante un simple despeje de la expresión:

$$FE = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{volumen de átomo})}{\text{volumen de celda}}$$
$$\text{átomo/celda} = \frac{(FE)(\text{volumen de celda})}{\text{volumen de átomo}} \quad (1)$$

Para ello, se determinan el volumen de átomos y el volumen de celda

- Cálculo del volumen de átomo: Considerando a los átomos como esferas sólidas

$$\text{volumen de átomo} = \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$\text{volumen de átomo} = \frac{4}{3} \pi (1.12 \times 10^{-8} \text{ cm})^3$$

$$\text{volumen de átomo} = 5.8849 \times 10^{-24} \text{ cm}^3$$

- Cálculo del volumen de celda:

$$\text{volumen de celda} = a_0^3$$

$$\text{volumen de celda} = (8.931 \times 10^{-8} \text{ cm})^3$$

$$\text{volumen de celda} = 7.1236 \times 10^{-22} \text{ cm}^3$$

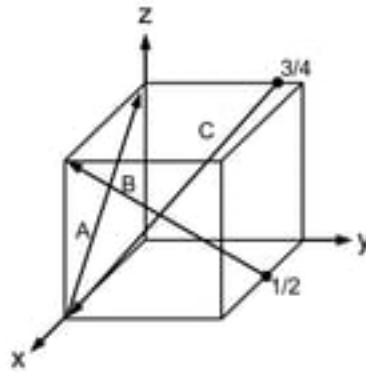
Sustituyendo en (1)

$$\text{átomo/celda} = \frac{(0.479)(71236 \times 10^{-22} \text{cm}^3)}{5.8849 \times 10^{-24} \text{cm}^3}$$

$$\text{átomo/celda} = 57.98$$

$$\text{átomos/celda} = 58 \text{ átomos}$$

Determine los índices de Miller correspondientes a las direcciones de la celda cúbica que aparece en la figura



Solución:

- **Dirección A**

1) Se determinan coordenadas iniciales (1,0,0) y coordenadas finales (0,0,1)

2) Se restan las coordenadas finales menos las iniciales:
 $(0,0,1) - (1,0,0) = -1, 0, 1$

3) No hay fracciones por simplificar o enteros por reducir

4) $[\bar{1} 0 1]$

- **Dirección B**

1) Se determinan coordenadas iniciales $(1/2, 1, 0)$ y coordenadas finales $(1, 0, 1)$

2) Se restan las coordenadas finales menos las iniciales:
 $(1, 0, 1) - (1/2, 1, 0) = -1/2, -1, 1$

3) Se simplifican fracciones: $2(-1/2, -1, 1) = -1, -2, 2$

4) $[\bar{1} \bar{2} 2]$

- **Dirección C**

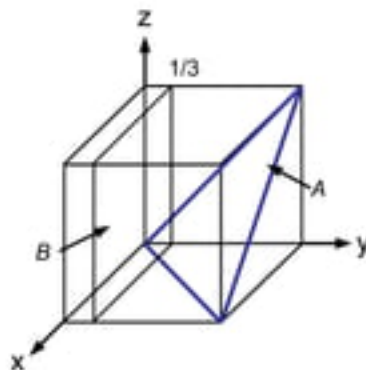
1) Se determinan coordenadas iniciales $(0, 3/4, 1)$ y coordenadas finales $(1, 0, 0)$

2) Se restan las coordenadas finales menos las iniciales:
 $(1, 0, 0) - (0, 3/4, 1) = 1, -3/4, -1$

3) Se simplifican fracciones: $4(1, -3/4, -1) = 4, -3, -4$

4) $[4 \bar{3} \bar{4}]$

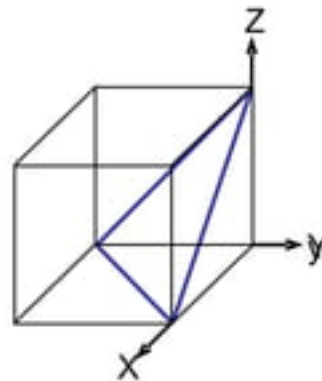
6. Determine los índices para los planos de la celda unitaria cúbica que aparece en la figura



Solución:

- **Plano A**

1) Se deberá mover el origen, ya que el plano pasa a través de 0, 0,0. Se mueve también el origen un parámetro de red en la dirección "y" (ver figura). Entonces $x = 1, y = -1, z = 1$



2) Se determinan los recíprocos de las intersecciones:

$$\frac{1}{x} = 1; \frac{1}{y} = -1; \frac{1}{z} = 1$$

3) No hay fracciones que simplificar

4) $(\bar{1}11)$

- **Plano B**

1) Se determinan las intersecciones: $x = \infty, y = 1/3, z = \infty$

2) Se determinan los recíprocos de las intersecciones:

$$\frac{1}{x} = 0; \frac{1}{y} = 3; \frac{1}{z} = 0$$

3) No hay fracciones que simplificar

4) (030)

7. Un vector dirección pasa a través de cubo unidad (o celda unitaria) desde la posición $(\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4})$ a la $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 1)$. ¿Cuáles son los índices de dirección?

Solución: Se sigue el mismo procedimiento que el presentado en el ejercicio 5

1) Se restan las coordenadas finales menos las iniciales:
 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 1) - (\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4}) = 0, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$

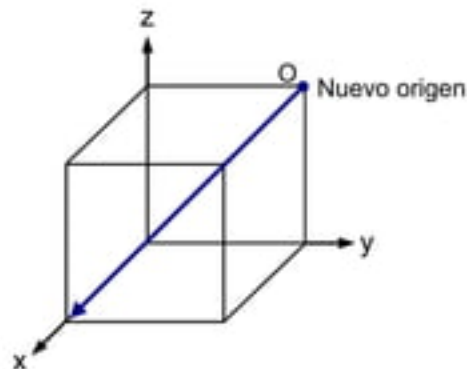
2) Se simplifican fracciones: $4(\frac{0}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}) = 0, 3, 3$

3) $[0\ 3\ 3]$

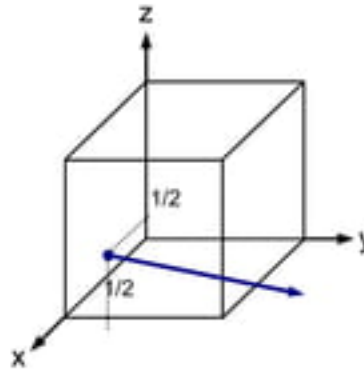
8. Dibuje los vectores dirección en celdas unitarias para las siguientes direcciones cúbicas: a) $[1\bar{1}\bar{1}]$; b) $[\bar{1}2\bar{1}]$ y c) $[\bar{1}10]$

Solución:

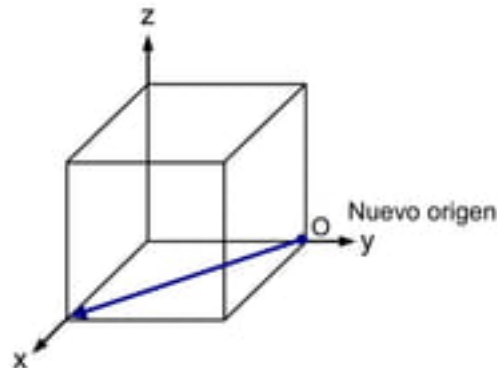
- Para $[1\bar{1}\bar{1}]$: Las coordenadas de posición para la dirección son (1,-1,-1). Para su representación tendrá que llevarse el origen del vector dirección al vértice inferior izquierdo de la parte trasera del cubo.



- Para la dirección $[\bar{1}2\bar{1}]$: Las coordenadas posición para la dirección, se obtienen dividiendo los índices de dirección por 2 de modo que puedan estar dentro de la celda unitaria. Son, por tanto $(\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2})$.

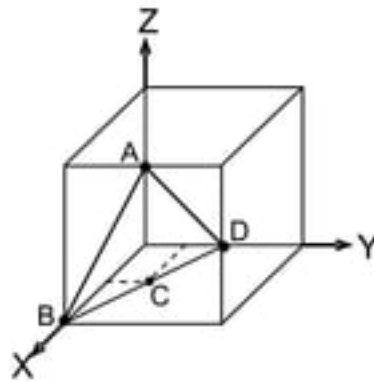


- Para la dirección $[1\bar{1}0]$: Las coordenadas posición para la dirección, son $(1, -1, 0)$. El origen del vector dirección tiene que llevarse al vértice inferior izquierda de la parte trasera del cubo.



9. Determine los índices de Miller del plano cristalino cúbico que cortan las siguientes coordenadas de posición: $(0,0, \frac{1}{2})$; $(1,0,0)$; $(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0)$

Solución: Primero, se localiza como A, B y C las tres coordenadas de posición tal como se indica en la figura



A continuación, se unen B y C y se prolonga BC hasta D, y se unen A y B. Por último, se unen A y D hasta completar el plano ABD. El origen para este plano en el cubo puede ser elegido en E, que da las intersecciones axiales con el plano ABD en $x=1, y=1/2, z=1/2$. Los recíprocos de estas intersecciones axiales son: 1, 2, 2. No hay fracciones que eliminar y finalmente, los índices de Miller para el plano dado: (12 2)

10. El hierro puro experimenta un cambio polimórfico de CC a CCC calentándolo al pasar los 912 °C. Calcular el cambio de volumen asociado con el cambio de estructura de CC a CCC si a 912 °C la celda unitaria CC tiene un parámetro de red de 0.293 nm y la celda unitaria CCC 0.363 nm.

Datos:

Para CC

$$a_0 = 0.293 \text{ nm}$$

$$\text{Átomos/celda} = 2 \text{ átomos (teoría)}$$

Para CCC

$$a_0 = 0.363 \text{ nm}$$

$$\text{Átomos/celda} = 4 \text{ átomos (teoría)}$$

Solución: El cambio volumétrico durante la transformación puede calcularse a partir de datos cristalográficos. El volumen por átomo para la red cristalina del hierro CC antes de transformarse es:

$$V_{CC} = \frac{a_0^3}{2}$$
$$V_{CC} = \frac{(0.293 \text{ nm})^3}{2}$$
$$V_{CC} = 0.0251 \text{ nm}^3$$

El volumen por átomo para la red cristalina CCC que tiene cuatro átomos por celda unitaria es

$$V_{CCC} = \frac{a_0^3}{4}$$
$$V_{CCC} = \frac{(0.363 \text{ nm})^3}{4}$$
$$V_{CCC} = 0.01196 \text{ nm}^3$$

El cambio porcentual en volumen durante la transformación CC a CCC, viene dado por:

$$\Delta V = \frac{V. \text{ después de la transformación} - V. \text{ antes de la transformación}}{V. \text{ antes de la transformación}} \times 100\%$$
$$\frac{\Delta V}{V_{CC}} = \frac{0.01196 \text{ nm}^3 - 0.01258 \text{ nm}^3}{0.01258 \text{ nm}^3} \times 100\%$$
$$\frac{\Delta V}{V_{CC}} = -4.9\%$$

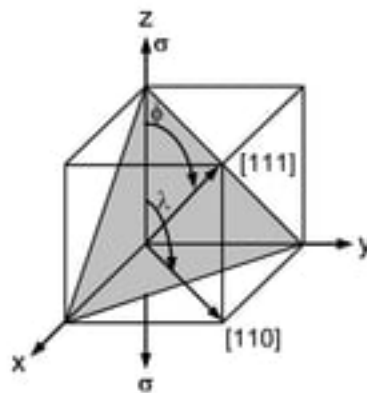
Esto indica que el hierro se contrae al calentarse 4.9%

11. Un cristal único de un metal CCC está orientado de tal forma que la dirección [001] es paralela a un esfuerzo aplicado de 5000 psi. Calcular el

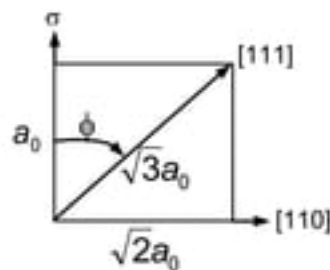
esfuerzo cortante resultante que actúa sobre el plano de deslizamiento (111) en las direcciones de deslizamiento [110] y [011].

Solución:

- Para (111)/ [110]: Se aplica un esfuerzo normal σ en la dirección [001] de la celda unitaria. Esto produce un ángulo λ de 90° (por inspección) con la dirección de deslizamiento [110] y un ángulo ϕ con la normal al plano (111) (dirección [111] por ser celda cúbica). En la gráfica se muestra lo planteado anteriormente



Cálculo de ϕ : Aplicando identidades geométricas



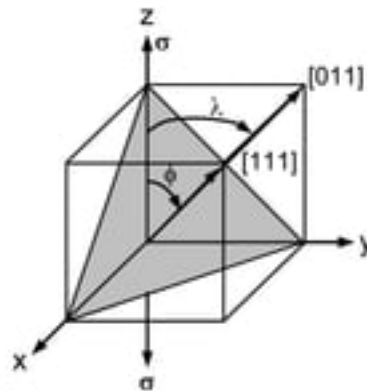
$$\cos\phi = \frac{a_0}{\sqrt{3}a_0} \Leftrightarrow \phi = \text{Arccos}\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

$$\phi = 54.76^\circ$$

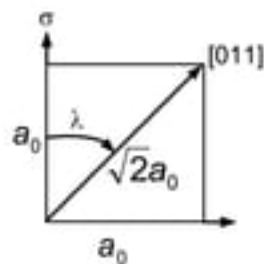
Cálculo del esfuerzo cortante: Aplicando la relación $\tau = \sigma \cos \lambda \cdot \cos \phi$ y sustituyendo los valores obtenidos

$$\tau = 5000 \text{psi} (\cos 90^\circ) (\cos 54.76^\circ)$$
$$\tau = 0$$

- Para (111)/ [011]: Se aplica un esfuerzo normal σ en la dirección [001] de la celda unitaria. Esto produce un ángulo λ con la dirección de deslizamiento [011] y un ángulo ϕ con la normal al plano (111) (dirección [111] por ser celda cúbica). En la gráfica se muestra lo planteado anteriormente



Cálculo de λ : Aplicando identidades geométricas



$$\cos \phi = \frac{a_0}{a_0} \Leftrightarrow \phi = \text{Arccos}(1)$$

$$\phi = 45^\circ$$

Cálculo del esfuerzo cortante: Aplicando la relación $\tau = \sigma \cos \lambda \cdot \cos \phi$ y sustituyendo los valores obtenidos

$$\begin{aligned}\tau &= 5000 \text{ psi} (\cos 45^\circ) (\cos 54.76^\circ) \\ \tau &= 2040 \text{ psi}\end{aligned}$$

12. Determinar la distancia entre los planos adyacentes (121) en el cobre, el cual tiene un parámetro de red de 3.615 Å.

Solución: Sustituyendo los valores dados en la ecuación general

$$\begin{aligned}d_{(hkl)} &= \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \\ d_{(121)} &= \frac{3.615 \text{ Å}}{\sqrt{1^2 + 2^2 + 1^2}} \\ d_{(121)} &= 1.476 \text{ Å}\end{aligned}$$

13. El litio CC tiene un parámetro de red de 3.5089×10^{-8} cm y contiene una vacancia por cada 200 celdas unitarias. Calcule:

- el número de vacancias por centímetro cúbico
- la densidad del litio

Datos:

$$a_0 = 3.5089 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\text{Vacancias} = \frac{1}{200}$$

Masa atómica = 6.94 g/mol (Por tabla)

N. de Avogadro = 6.02×10^{23} átomos/mol

Solución:

a) Vacancias por centímetro cúbico: Para determinarlas, se emplea la siguiente relación:

$$\frac{\text{Vacancias}}{\text{cm}^3} = \frac{\text{Número de vacancias}}{\text{Volumen de celda}} \quad (1)$$

- Cálculo del volumen de celda

$$\text{volumen de celda} = a_0^3$$

$$\text{volumen de celda} = (3.5089 \times 10^{-8} \text{ cm})^3$$

$$\text{volumen de celda} = 4.32029 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

Sustituyendo

$$\frac{\text{Vacancias}}{\text{cm}^3} = \frac{1/200}{4.32029 \times 10^{-23} \text{ cm}^3}$$
$$\frac{\text{Vacancias}}{\text{cm}^3} = 1.157 \times 10^{20} \text{ Vacancias/cm}^3$$

b) Densidad del litio. Se obtiene aplicando la relación de densidad.

- Cálculo del número de átomos por celda. Considerando que la celda presenta defectos, es necesario obtener el número de átomos (átomos calculados), mediante la definición de vacancias y asumiendo que la celda en condiciones normales presenta 2 átomos

$$\text{Vacancias} = \text{Átomos en condiciones normales} - \text{Átomos calculados}$$

$$\text{Átomos calculados} = \text{Átomos en condiciones normales} - \text{Vacancias}$$

$$\text{Átomos calculados} = 2 - \frac{1}{200}$$

$$\text{Átomos calculados} = 1.995 \text{ átomos}$$

Ahora sustituyendo en la relación de densidad

$$\rho = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}$$
$$\rho = \frac{(1.995 \text{ átomos})(694 \text{ g/mol})}{(4.32029 \times 10^{-23} \text{ cm}^3)(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}$$
$$\rho = 0.5323 \text{ g/cm}^3$$

14. Una aleación de niobio se produce al introducir átomos sustitucionales de tungsteno en la estructura CC; finalmente se produce una aleación con un parámetro de red de 0.32554 nm y una densidad de 11.95 g/mol. Calcular la fracción de átomos de tungsteno dentro de la aleación.

Datos:

$$a_0 = 0.32554 \text{ nm} \approx 0.32554 \times 10^{-7} \text{ cm}$$
$$\rho = 11.95 \text{ g/mol}$$
$$\text{Masa atómica del niobio} = 92.91 \text{ g/mol}$$

Solución: Para determinar la fracción de átomos de tungsteno dentro de la aleación, se debe obtener primeramente el número de átomos por celda unitaria de la aleación, el cual se calcula a partir de la relación de densidad.

$$\rho = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}$$
$$\text{átomos/celda} = \frac{\rho(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}{\text{masa atómica del niobio}} \quad (1)$$

- Cálculo del volumen de celda: Por ser una celda cúbica los valores de lados son iguales, de manera que el volumen viene dado por:

$$\text{volumen de celda} = a_0^3$$
$$\text{volumen de celda} = (0.32554 \times 10^{-7} \text{ cm})^3$$
$$\text{volumen de celda} = 3.44995 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

Una vez determinado el volumen de celda, se sustituye en (1)

$$\text{átomos/celda} = \frac{(11.95 \text{ g/mol})(3.44995 \times 10^{-23} \text{ cm}^3)(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}{92.91 \text{ g/mol}}$$

$$\text{átomos/celda} = 2.671 \text{ átomos}$$

Una vez conseguidos el número de átomos por celda unitaria de la aleación, se emplea la definición de átomos sustitucionales para determinar así, el número de átomos de tungsteno introducido en la aleación

$$\text{átomos sustitucionales} = \text{átomos en condiciones normales} + \text{átomos de tungsteno} \quad (2)$$

Es importante destacar, que los átomos sustitucionales representa el número de átomos por celda en la aleación y los átomos en condiciones normales son el número de átomos por red cristalina en una celda CC (2 átomos). De ahí que el número de átomos por celda de tungsteno se calcula a través de un simple despeje de la expresión (2)

$$\text{átomos de tungsteno} = \text{átomos sustitucionales} - \text{átomos en condiciones normales}$$

$$\text{átomos de tungsteno} = 2.671 \text{ átomos} - 2 \text{ átomos}$$

$$\text{átomos de tungsteno} = 0.671 \text{ átomos}$$

- Cálculo de la fracción de átomos de tungsteno: Se miden por medio de la relación siguiente

$$\text{Fracción de átomos} = \frac{\text{átomos de tungsteno}}{\text{átomos en condiciones normales}}$$

$$\text{Fracción de átomos} = \frac{0.671 \text{ átomos}}{2 \text{ átomos}}$$

$$\text{Fracción de átomos} = 0.335$$

15. El platino CCC tiene una densidad de 21.45 g/cm^3 y un parámetro de red de 3.9231 \AA . En promedio ¿qué porcentaje de los puntos de red contiene vacantes? (asúmase un átomo por punto de red)

Datos:

$$\rho = 21.45 \text{ g/cm}^3$$

$$a_0 = 3.9232 \text{ \AA} \approx 3.9232 \times 10^{-8} \text{ cm}$$

$$\text{Masa atómica} = 195.09 \text{ g/mol (tabla)}$$

$$\text{N. de Avogadro} = 6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol}$$

$$\text{Puntos de red} = 4 \text{ (teoría)}$$

Solución: Para saber el número de vacancias, es necesario determinar el número de átomos por celda, el cual se determina despejándolo de la expresión de densidad

$$\rho = \frac{(\text{átomos/celda})(\text{masa atómica})}{(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}$$
$$\text{átomos/celda} = \frac{\rho(\text{volumen de celda})(\text{número de Avogadro})}{\text{masa atómica}} \quad (1)$$

• Cálculo del volumen de celda: Por ser una celda cúbica los valores de lados son iguales, de manera que el volumen viene dado por:

$$\text{volumen de celda} = a_0^3$$

$$\text{volumen de celda} = (3.9231 \times 10^{-8} \text{ cm})^3$$

$$\text{volumen de celda} = 6.0379 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

Sustituyendo en (1)

$$\text{átomos/celda} = \frac{(21.45 \text{ g/cm}^3)(6.0379 \times 10^{-23} \text{ cm}^3)(6.02 \times 10^{23} \text{ átomos/mol})}{195.09 \text{ g/mol}}$$

$$\text{átomos/celda} = 3.9964529 \text{ átomos}$$

Como puede observarse, de haber 4 átomos/celda sería un cristal perfecto de platino; de aquí la diferencia se debe a la presencia de vacantes. Para obtener el número de vacantes se aplica la definición

$$\text{Vacancias} = \text{Átomos en condiciones normales} - \text{Átomos calculados}$$

$$\text{Vacancias} = 4 - 3.9964529$$

$$\text{Vacancias} = 0.0035471$$

- Cálculo del porcentaje de vacantes por puntos de red: Se obtienen a través de:

$$\frac{\text{Vacantes}}{\text{Ptos de red}} = \frac{0.0035471}{4}$$
$$\frac{\text{Vacantes}}{\text{Ptos de red}} = 0.000886$$

16. Determinar el ángulo θ de un borde de grano de ángulo pequeño en el cobre CCC cuando las dislocaciones están separadas 1000 Å. El parámetro de red del cobre es de 3.615 Å.

Datos:

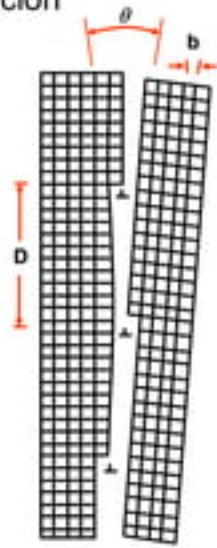
$$a_0 = 3.615 \text{ \AA}$$

$$D = 1000 \text{ \AA}$$

Dirección compacta = [110] (Teoría)

Solución: Los granos se encuentran inclinados un vector de Burgers en cada dirección cada 1000 Å. El vector de Burgers en el cobre CCC es [110], de manera que la longitud del vector de Burgers es de d_{110} (distancia interplanar)

- Cálculo de la longitud del vector de Burgers: Se determina mediante la relación



$$d_{(h,k,l)} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

$$d_{110} = \frac{3.615 \text{ \AA}}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}}$$

$$d_{110} = 2.557 \text{ \AA}$$

- Cálculo del ángulo θ : Aplicando identidades trigonométricas

$$\text{Sen} \frac{\theta}{2} = \frac{b}{D}$$

$$\text{Sen} \frac{\theta}{2} = \frac{2.557 \text{ \AA}}{1000 \text{ \AA}}$$

$$\text{Sen} \frac{\theta}{2} = 0.002557$$

$$\theta = 0.293^\circ$$