

Ingeniería de Materiales AEC-1

Alexander Sebastian Kalis

31 de marzo de 2024

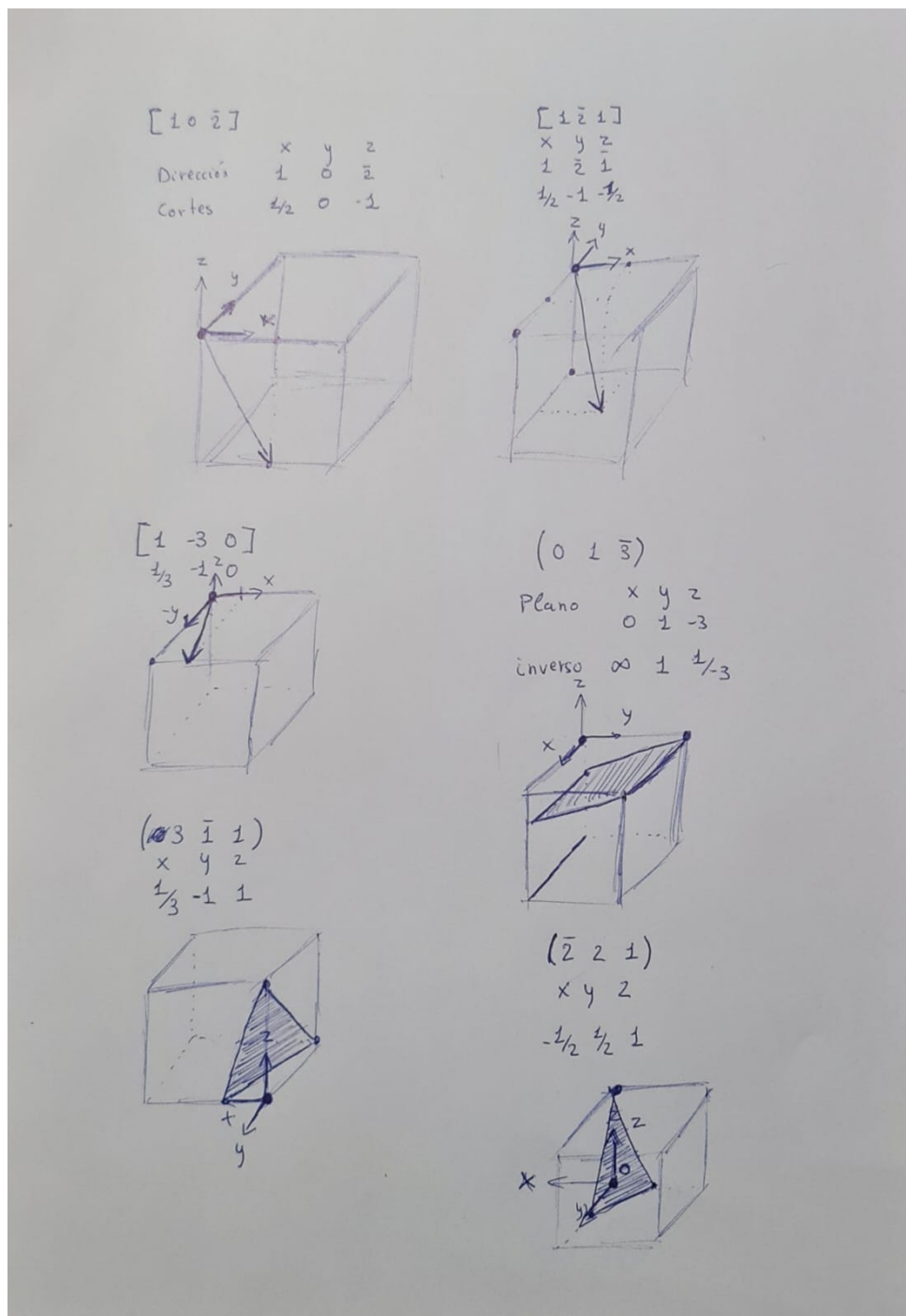
Índice

1. Ejercicio 1	3
2. Ejercicio 2	4
3. Ejercicio 3	5
4. Ejercicio 4	6
4.1. Dibujo y estructura	6
4.2. Volumen de la celda unidad para la estructura FCC	6
4.3. Cálculo del peso atómico	7
5. Ejercicio 5	8
6. Ejercicio 6	9

1. Ejercicio 1

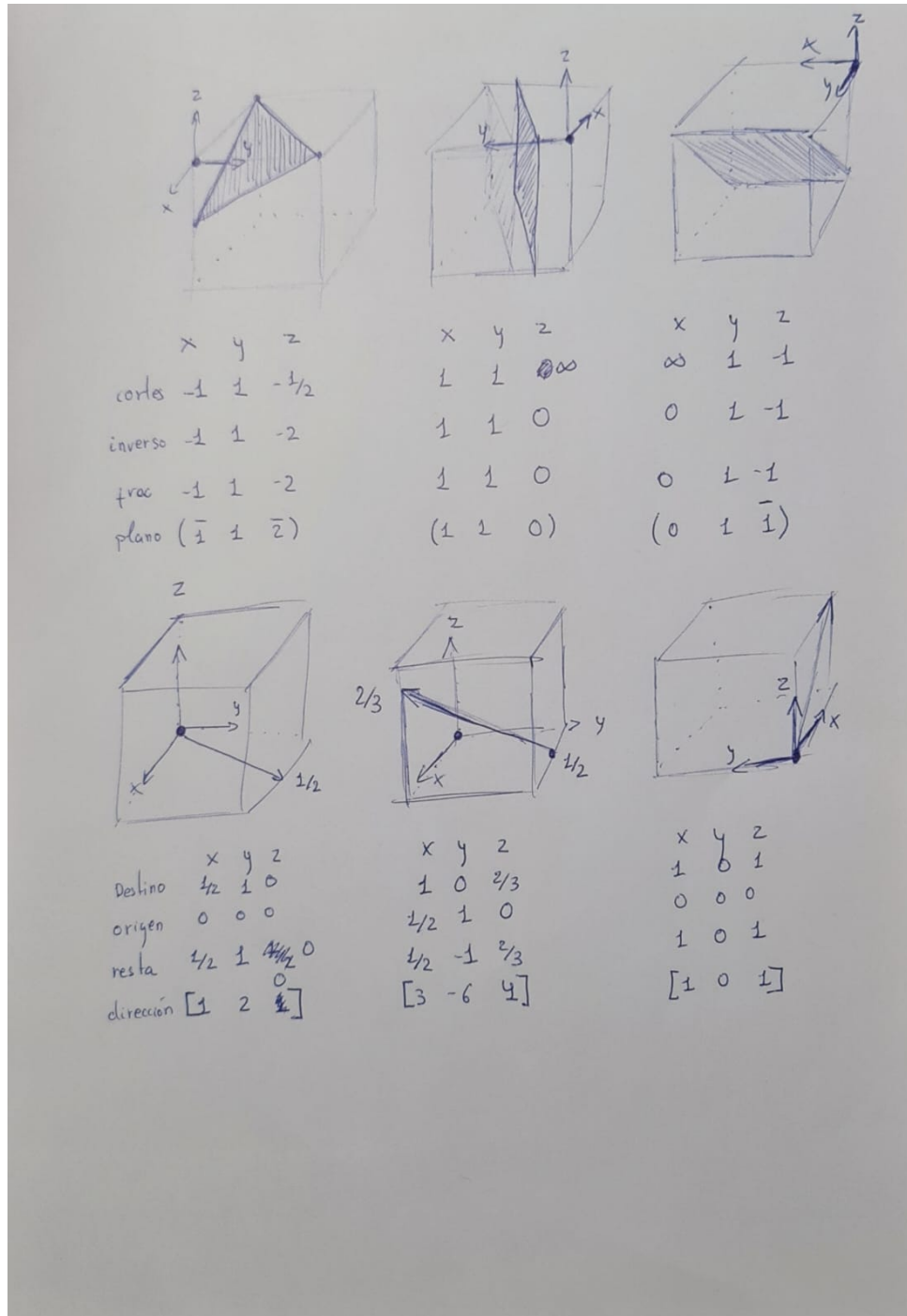
Dibujar las siguientes direcciones y planos en la celdilla cúbica unitaria (dibuja una celdilla por cada dirección o plano). Indicar la elección del origen y los ejes de coordenadas para cada una de las celdillas.

$$[10\bar{2}], [\bar{1}2\bar{1}], [\bar{1}30](01\bar{3}), (3\bar{1}1), (\bar{2}21)$$



2. Ejercicio 2

¿Cuáles son los índices de Miller de las siguientes direcciones y planos? Dibuje cada plano en una celdilla e indique la elección del origen y los ejes de coordenadas para cada uno de los planos que vaya a nombrar.



3. Ejercicio 3

Calcular la concentración de vacantes en el equilibrio en oro puro a 300°C sabiendo que la energía necesaria para la formación de una vacante es de 0.98 eV. Otros datos: Densidad (Au) = 19.32 g/cm³. Peso atómico (Au) = 196.9 g/mol. La constante de Boltzman es 8.62·10⁻⁵ eV/átomo·K.

Para calcular la concentración de vacantes en el equilibrio, utilizamos la ecuación:

$$n_v = N \exp \left(\frac{-E_f}{kT} \right)$$

donde:

- N es el número total de sitios atómicos en el material.
- E_f es la energía de formación de una vacante (0.98 eV).
- k es la constante de Boltzmann (8.62·10⁻⁵ eV/átomo·K).
- T es la temperatura en Kelvin. Para convertir 300°C a Kelvin, sumamos 273, resultando en $T = 573K$.

Primero, calculamos el número total de sitios atómicos (N) en el material usando la densidad (ρ), el peso atómico (A), y el número de Avogadro ($N_A = 6,022 \times 10^{23}$ átomos/mol):

$$N = \frac{\rho N_A}{A} = \frac{19,32 \text{ g/cm}^3 \times 6,022 \times 10^{23} \text{ átomos/mol}}{196,9 \text{ g/mol}} = 5,91 \times 10^{22} \text{ sitios/cm}^3$$

Luego, sustituimos los valores en la ecuación de la concentración de vacantes:

$$n_v = \exp \left(\frac{-0,98 \text{ eV}}{8,62 \times 10^{-5} \text{ eV/átomo} \cdot \text{K} \times 573 \text{ K}} \right) = 2,416 \times 10^{-9} \text{ vacantes/átomo}$$

Finalmente, para encontrar el número total de vacantes por cm³, multiplicamos esta concentración por el número total de sitios atómicos por cm³:

$$\text{Número de vacantes por cm}^3 = 2,416 \times 10^{-9} \times 5,91 \times 10^{22} = 1,428 \times 10^{14} \text{ vacantes/cm}^3$$

Esto significa que, en un cm³ de oro puro a 300°C, hay aproximadamente $1,428 \times 10^{14}$ sitios vacíos o vacantes.

4. Ejercicio 4

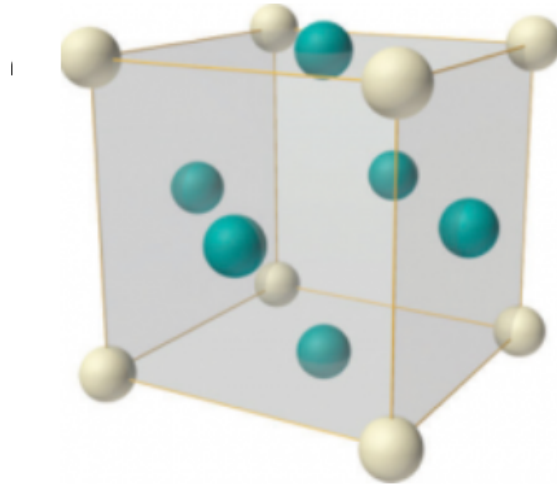
En la siguiente figura se presentan esquemas del empaquetamiento atómico en distintas direcciones cristalográficas de la red cúbica de la plata cuyo radio es 0.144 nm. La disposición de los átomos en las direcciones es la siguiente:

- Dibujar la celda unidad y decir como se denomina la estructura cristalina.
- Calcular el peso atómico si la densidad es 10.5 g/cm^3 .
- Calcular la densidad planar en átomos/ mm^2 de los planos (100) y (110) comparándolas entre sí.

Datos: $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$

4.1. Dibujo y estructura

La estructura de la plata es FCC (face centered cubic) por lo cual tendrá un átomo en cada vértice y luego en el centro de cada cara.



4.2. Volumen de la celda unidad para la estructura FCC

El volumen de la celda unidad en una estructura cúbica centrada en las caras (FCC) se calcula utilizando la relación entre el radio atómico y la arista de la celda:

$$V = (2\sqrt{2}r)^3$$

Dado que el radio atómico de la plata es 0.144 nm, convertimos esto a centímetros:

$$r = 0,144 \times 10^{-7} \text{ cm}$$

Entonces, el volumen de la celda unidad es:

$$V = (2\sqrt{2} \times 0,144 \times 10^{-7} \text{ cm})^3 = 6,76 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$$

4.3. Cálculo del peso atómico

El peso atómico se calcula usando la densidad, el volumen de la celda unidad y el número de Avogadro ($N_A = 6,02 \times 10^{23}$):

$$\text{Peso Atómico} = \frac{\text{Densidad} \times \text{Volumen de la celda} \times N_A}{\text{Número de átomos por celda}}$$

Para la estructura FCC, el número de átomos por celda es 4. Por lo tanto:

$$\text{Peso Atómico} = \frac{10,5 \times 6,76 \times 10^{-23} \times 6,02 \times 10^{23}}{4} \approx 106,77$$

Densidad planar en los planos (100) y (110)

La densidad planar en átomos por área se calcula dividiendo el número de átomos en el plano entre el área del plano. Para el plano (100):

$$\text{Densidad Planar}_{(100)} = \frac{1}{a^2}$$

Para el plano (110):

$$\text{Densidad Planar}_{(110)} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}/2}$$

Donde $a = 2\sqrt{2}r$ es la longitud de la arista de la celda.

Calculamos las densidades planares en átomos por milímetro cuadrado, convirtiendo las áreas a mm^2 ($1 \text{ cm}^2 = 100 \text{ mm}^2$):

$$\text{Densidad Planar}_{(100)} = \frac{1}{a^2} \times 100 \approx 6,03 \times 10^{16} \text{ átomos/mm}^2$$

$$\text{Densidad Planar}_{(110)} = \frac{2}{a^2\sqrt{2}/2} \times 100 \approx 1,71 \times 10^{17} \text{ átomos/mm}^2$$

Por lo tanto, el plano (110) tiene una densidad planar significativamente mayor que el plano (100).

5. Ejercicio 5

La superficie de un engranaje de acero 1030 (0.30 % en peso de C) va a ser carburizado para aumentar su dureza superficial con gas a 927°C. Calcular el tiempo necesario para incrementar el contenido en carbono a 0.50 % en peso a 0.20 mm por debajo de la superficie del engranaje. Considerar que el contenido en la superficie es 1.30 % en peso (para C en hierro y). D a 927°C = $1.28 \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$.

El tiempo necesario t para alcanzar la concentración deseada se encuentra usando la solución de la segunda ley de Fick para la difusión en estado estacionario y la función error inversa:

$$t = \left(\frac{x}{2\sqrt{D \cdot \operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{C(x,t) - C_s}{C_0 - C_s} \right)}} \right)^2$$

donde:

- D es el coeficiente de difusión del carbono en el acero.
- C_s es la concentración superficial, que es 1,30 %.
- C_0 es la concentración inicial de carbono, que es 0,30 %.
- $C(x, t)$ es la concentración objetivo de carbono a la profundidad x , que es 0,50 %.
- x es la profundidad, que es 0,20 mm o $2 \times 10^{-4} \text{ m}$.

Sustituyendo los valores conocidos:

$$t = \left(\frac{2 \times 10^{-4} \text{ m}}{2\sqrt{1,28 \times 10^{-11} \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \cdot \operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{0,50 \% - 1,30 \%}{0,30 \% - 1,30 \%} \right)}} \right)^2$$

Resolviendo para t , encontramos que el tiempo necesario es aproximadamente 0,239 horas.

6. Ejercicio 6

Si se difunde boro en una gruesa capa de silicio sin contenido previo de boro a una temperatura de 1100°C durante 5 horas. ¿Cuál es la profundidad bajo la superficie a la que la concentración es 10^{17} átomos/ cm^3 si la concentración en la superficie es 10^{18} átomos/ cm^3 ? $D = 4 \cdot 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$ para la difusión de boro en silicio a 1100°C .

- Temperatura de difusión: 1100°C
- Tiempo de difusión: 5 horas, lo cual es equivalente a $5 \times 3600 = 18000$ segundos.
- Concentración superficial (C_s): 10^{18} átomos/ cm^3
- Concentración deseada a una profundidad x ($C(x, t)$): 10^{17} átomos/ cm^3
- Coeficiente de difusión del boro en silicio (D): $4 \times 10^{-13} \text{ cm}^2/\text{s}$

Para determinar la profundidad x a la que se alcanza la concentración deseada, aplicamos de nuevo la segunda ley de Fick en la forma de la solución de error:

$$C(x, t) = C_s \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right)$$

Resolviendo para x :

$$x = 2\sqrt{Dt} \cdot \operatorname{erfc}^{-1} \left(\frac{C(x, t)}{C_s} \right)$$

Donde erfc^{-1} es la función inversa del complemento de la función de error. Sustituimos los valores conocidos para encontrar x :

$$x = 2\sqrt{4 \times 10^{-13} \times 18000} \cdot \operatorname{erfc}^{-1}(0,1)$$

Después de realizar el cálculo, encontramos que la profundidad x es aproximadamente $0,0002 \text{ cm}$, o 2 micrómetros .