

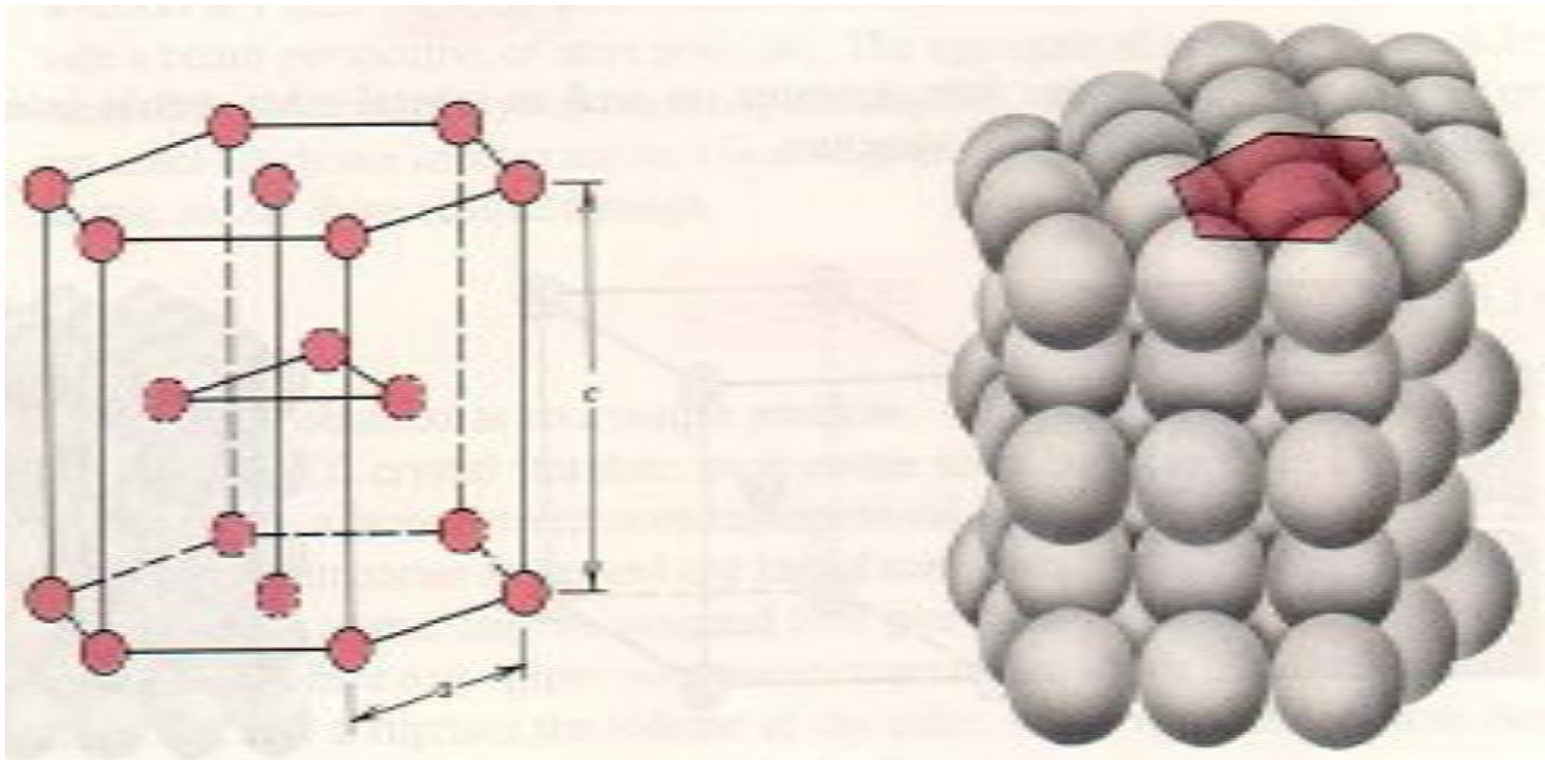
Química Tecnológica

Metales

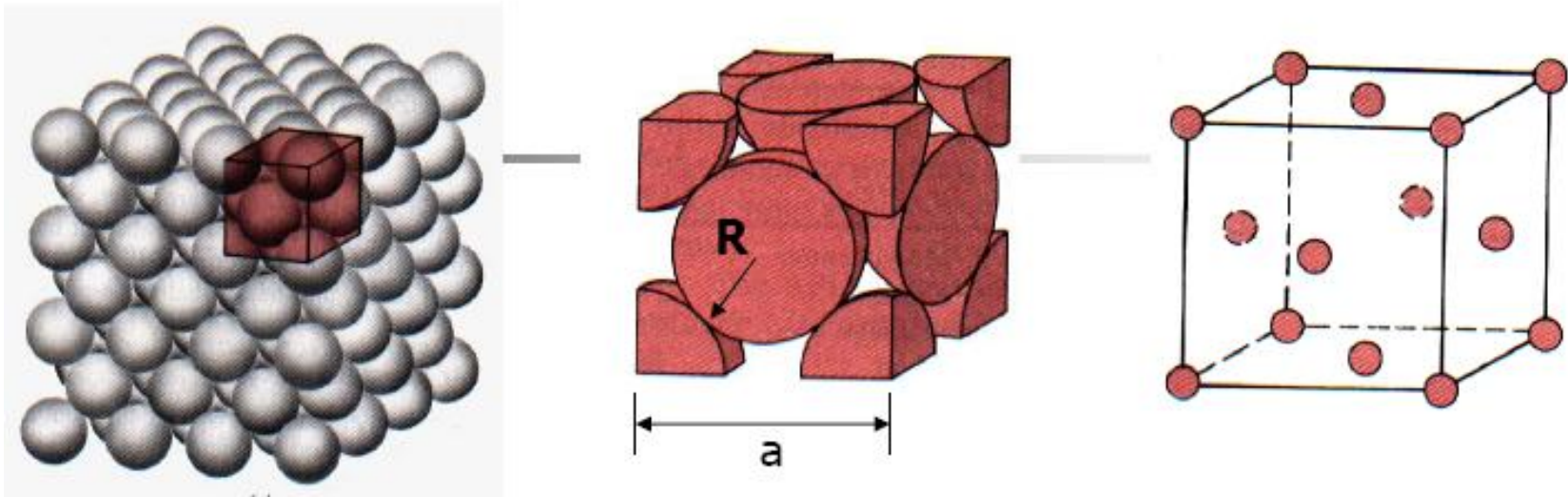
18/11/2010

Estructura cristalina de los metales

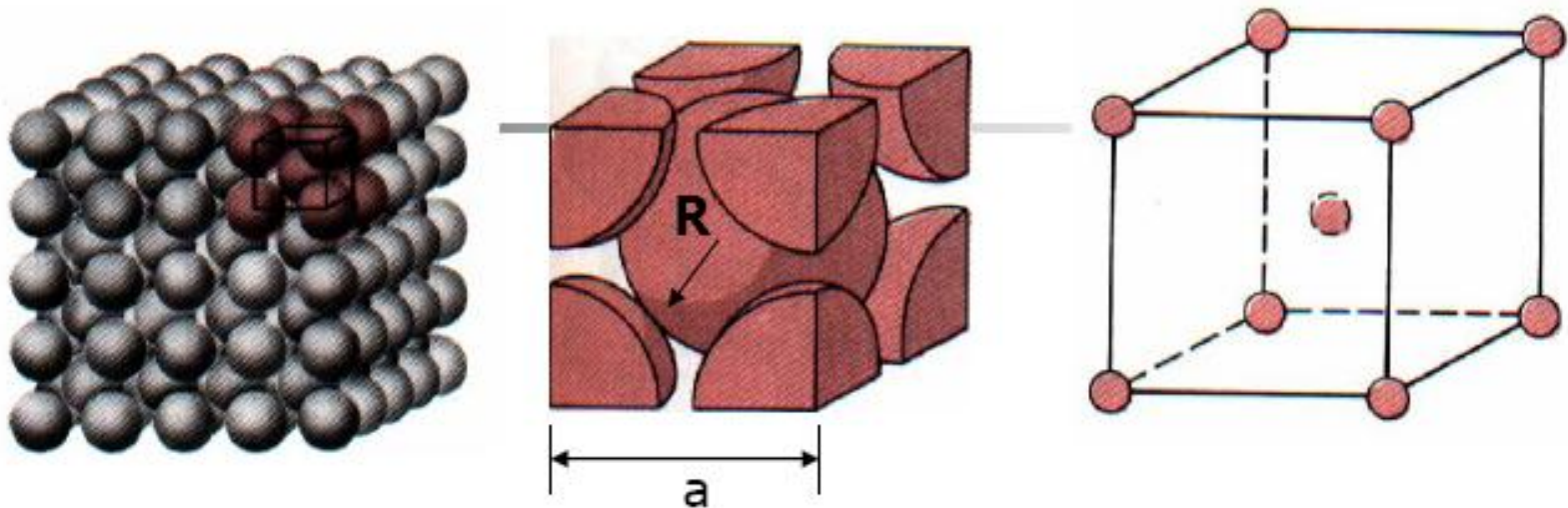
- **Empaquetamiento hexagonal compacto, IC: 12, “estructura del Mg”**



- **Empaquetamiento cúbico compacto, IC: 12,**
“estructura del Au”



- Empaquetamiento cúbico centrado en el cuerpo, IC: 8, “estructura del W”. Si se consideran los 6 átomos más que son vecinos muy próximos, el IC se eleva a 14. Ej: metales alcalinos, Sr, Ba, elevados radios atómicos.

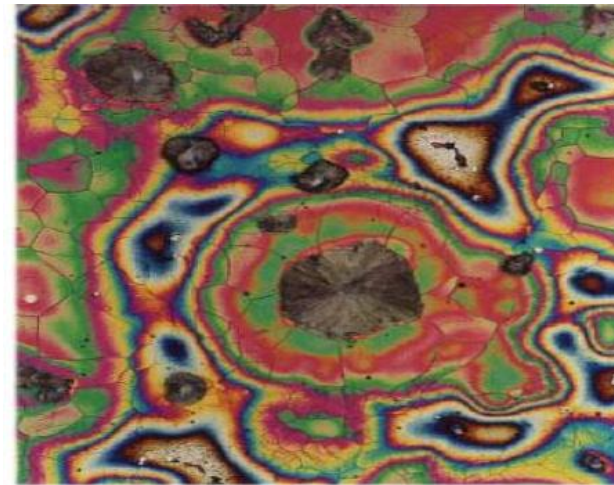
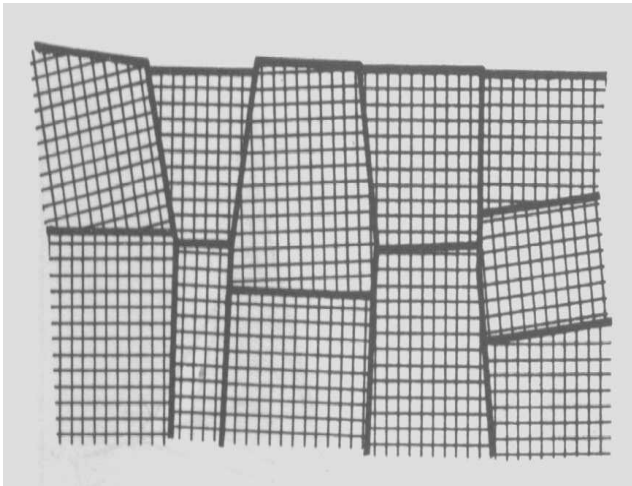


Materiales monocristalinos y policristalinos

Monocristalinos: presentan la misma estructura cristalina en toda la extensión del material sin interrupciones.



- ***Policristalinos: constituídos de varios cristales o granos.***

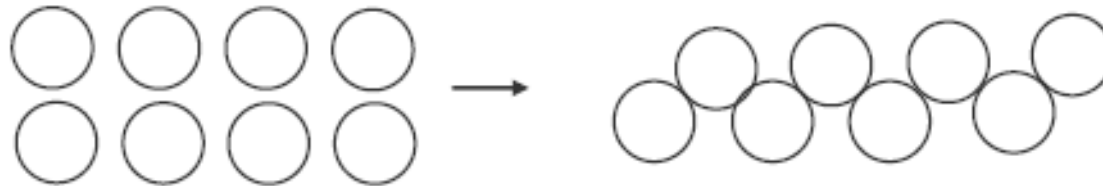
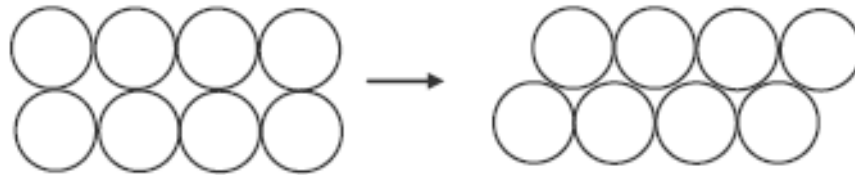


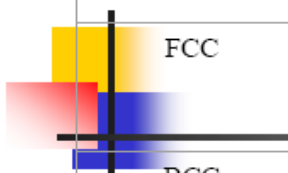
- ***Los límites de grano son regiones que separan cristales de diferentes orientaciones en un material policristalino.***

Deformabilidad plástica

La deformación plástica de los metales se produce por deslizamientos de láminas del cristal con relación a otras.

- *Planos de deslizamiento*
 - *Direcciones de deslizamiento*
- } *Sistemas de deslizamiento*

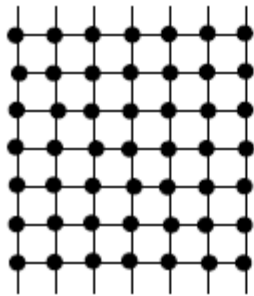




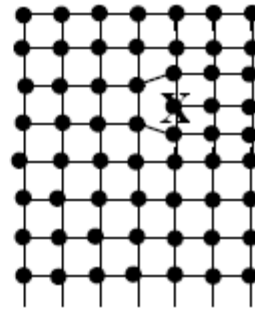
<i>Estructura</i>	<i>Dirección de Deslizamiento</i>	<i>Planos de Deslizamiento</i>	<i>Ejemplos</i>
FCC	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$	Cu, Al, Ni, Pb, Au, Ag, Fe
BCC	$\langle 111 \rangle$	$\{110\}$	Fe, W, Mo, Latón, Nb, Ta
BCC	$\langle 111 \rangle$	$\{210\}$	Fe, Mo, W, Na
BCC	$\langle 111 \rangle$	$\{321\}$	Fe, K
HCP	$\langle 1120 \rangle$	$\{0001\}$	Cd, Zn, Mg, Ti, Be, Co
HCP	$\langle 1120 \rangle$	$\{1010\}$	Ti, Mg, Zr, Be
HCP	$\langle 1120 \rangle$	$\{1011\}$	Ti, Mg

Teoría de las dislocaciones

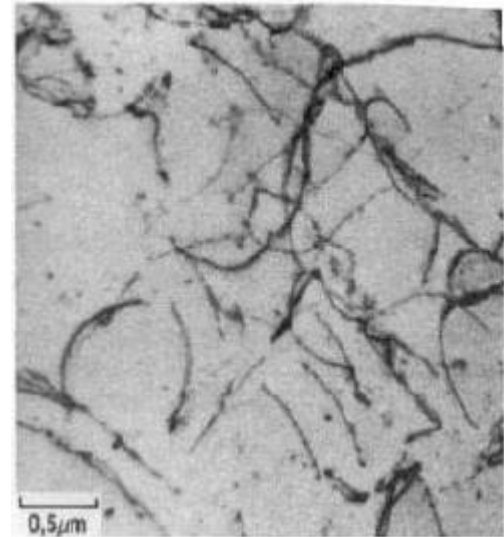
- La deformabilidad metálica depende en forma esencial de la presencia de un determinado tipo de dislocaciones, en forma de escalón o de espiral.

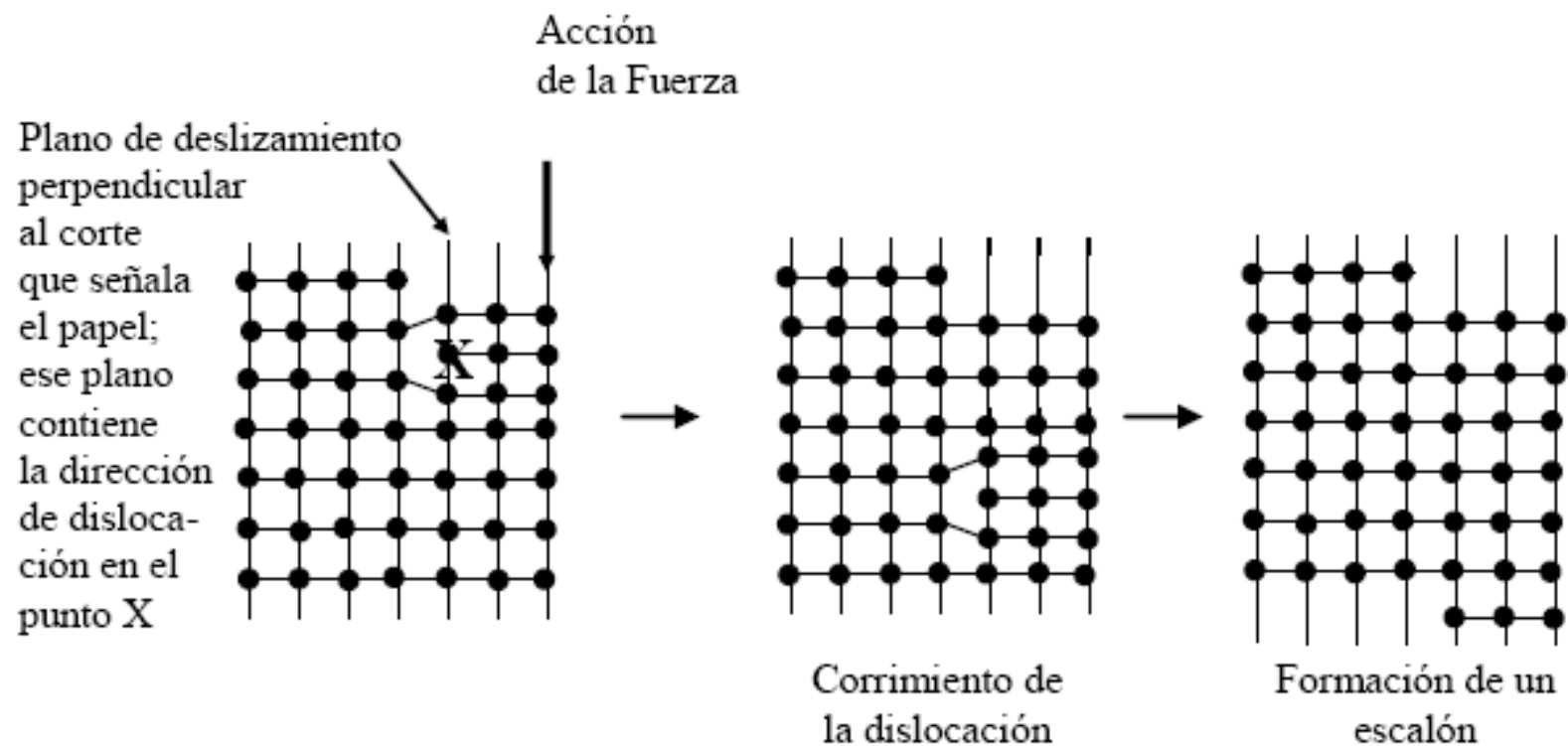


Estructura no
Perturbada (ideal)

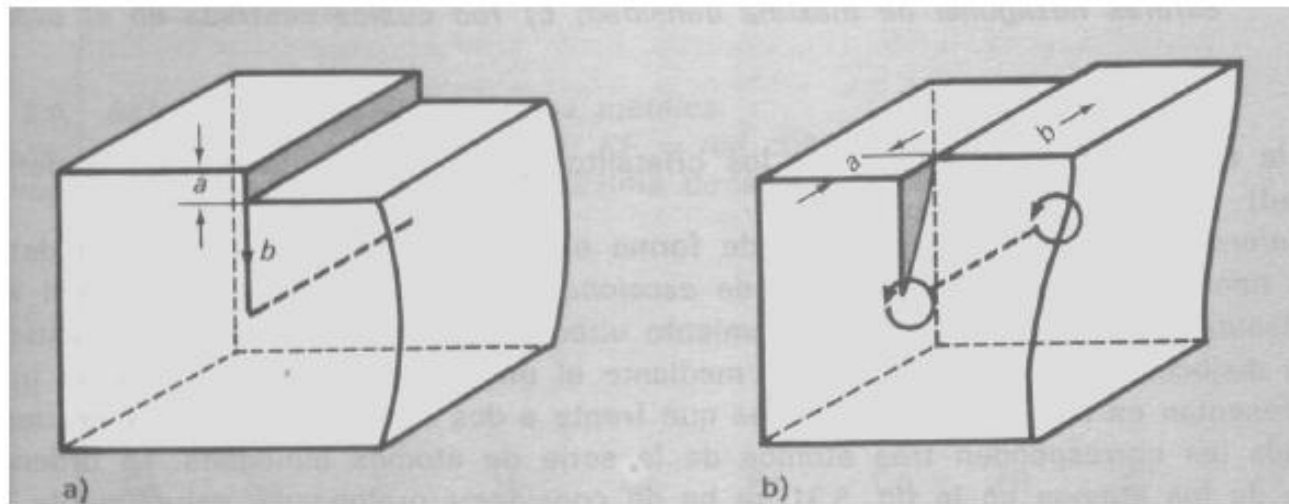


Estructura
con dislocación (X)





- Durante la deformación plástica se desplazan las dislocaciones sobre los planos de deslizamiento. La acción de fuerzas deformadoras hace aparecer nuevas dislocaciones que facilitan la deformación

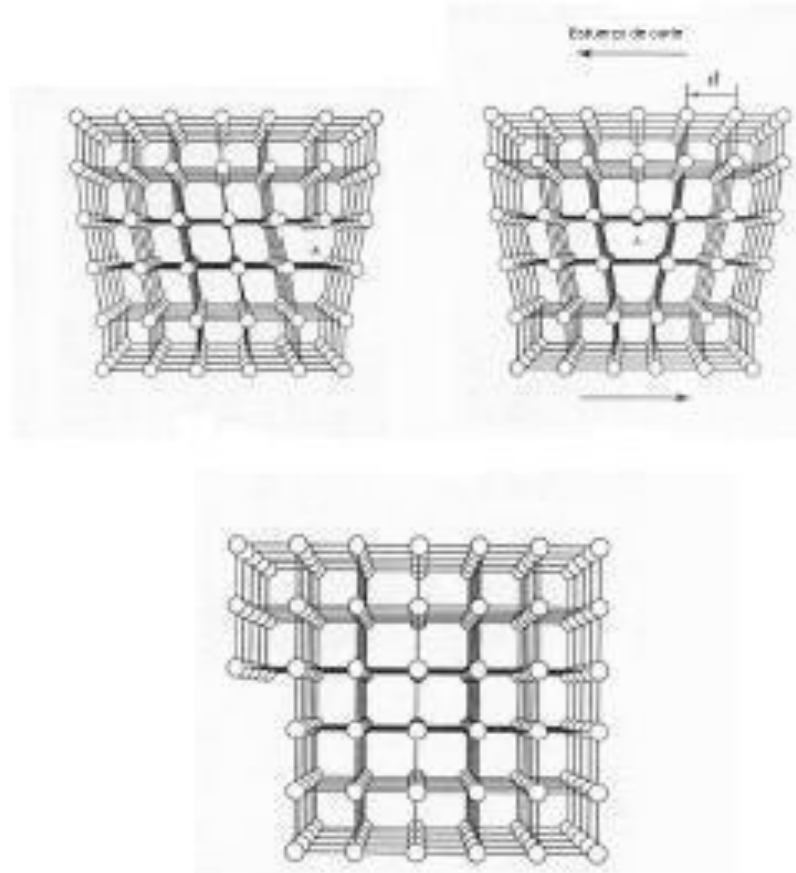


Representación esquemática de una dislocación en forma:

a) escalón, b) de espiral

a- escalón de deslizamiento, b- sentido de deslizamiento

- Los límites de grano se interpreta que se comportan como si fueran una pared para la propagación de las dislocaciones. La dureza entonces, aumenta con la finura de grano en los metales policristalinos.

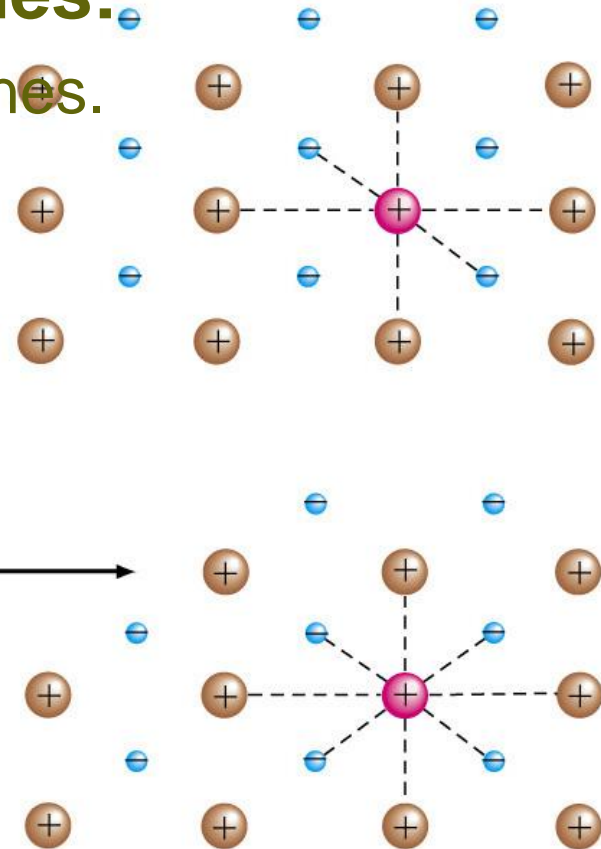


El enlace en los metales

- **Modelo de mar de electrones:**

- Núcleos en un mar de electrones.
- Brillo metálico.
- Maleabilidad.
- Se utilizó la teoría de gases para justificar propiedades

Fuerza aplicada



- De acuerdo a la teoría cuántica, se puede aplicar ecuación Schrödinger

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi = E \psi \quad V(r) = 0$$

- Normalizando y con el uso de condiciones de límite se obtiene la función de onda no estacionaria

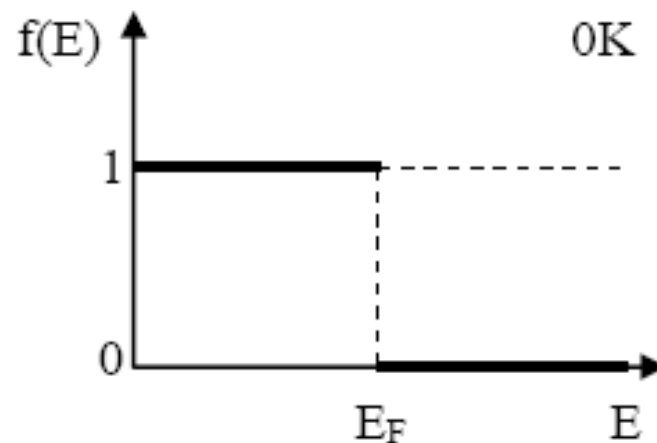
$$\psi_n = \left(\frac{1}{L} \right)^{3/2} e^{i \frac{2\pi}{L} (n_x x + n_y y + n_z z)}$$

- La función de onda transporta energía y viene dada por:

$$E_n = \frac{h^2}{8ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

- Mediante un análisis estadístico se encuentra los niveles energético ocupados y no ocupados, para ello se utiliza Fermi-Dirac:

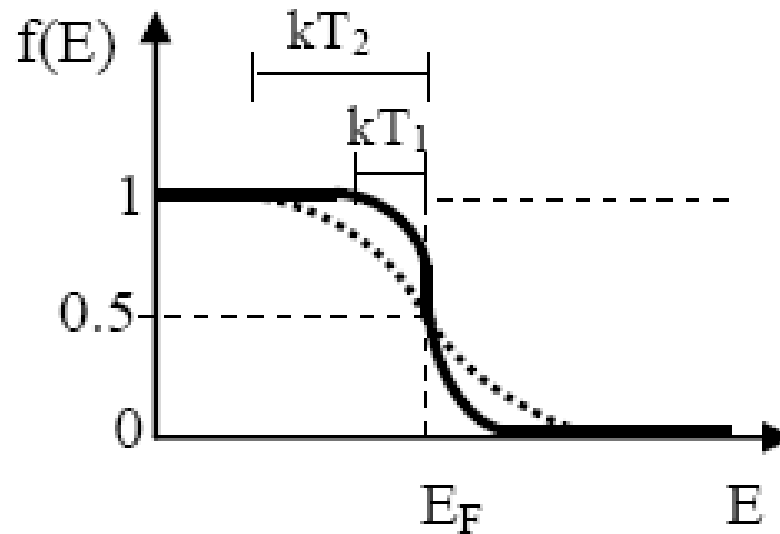
$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \text{ Función de distribución de Fermi-Dirac}$$



- Si $E < E_F$, $(E - E_F)/kT < 0$ y para $T \rightarrow 0$, $e^{(E - E_F)/kT} \rightarrow e^{-\infty}$, $f(E) \rightarrow 1$
- Si $E > E_F$, $(E - E_F)/kT > 0$ y para $T \rightarrow 0$, $e^{(E - E_F)/kT} \rightarrow e^{\infty}$, $f(E) \rightarrow 0$

- A temperaturas mayores que el 0K:

$$T_2 > T_1$$

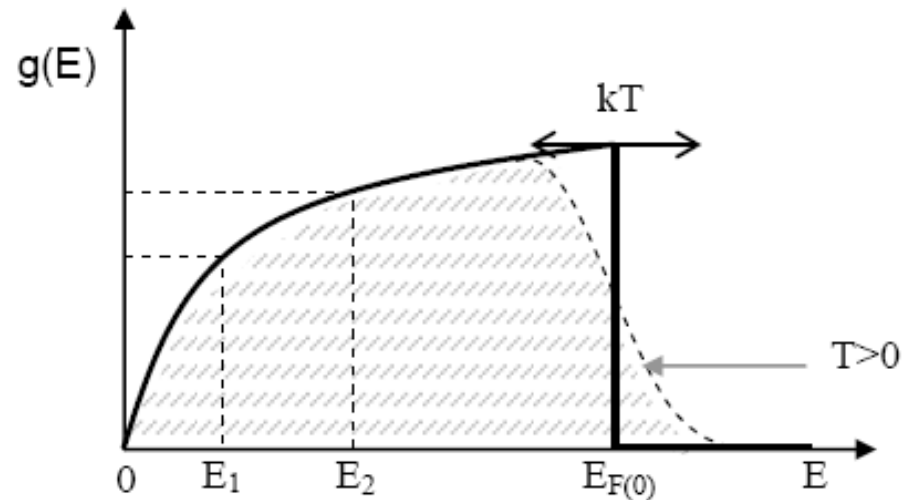


- La E_F es característica del gas o mar de electrones a una T dada para un cristal determinado.

$$E_F = \frac{h^2}{8 m_e} \left(\frac{3 n}{\pi} \right)^{2/3} \quad n = \frac{N_A \rho}{M}$$

- La función densidad de estado $g(E)$ nos permite calcular el número de estados (niveles de energía) por unidad de intervalo de energía y por unidad de volumen del sólido:

$$g(E) = \frac{8\pi\sqrt{2}m^{3/2}}{h^3} E^{1/2}$$



- Combinando la función de densidad de estados y la función de Fermi-Dirac, es posible calcular el número de “electrones” con energías comprendidas en un cierto intervalo y por unidad de volumen, $N(E)$

$$N(E) = \int_0^{E_F} g(E) \cdot f(E) \cdot dE$$

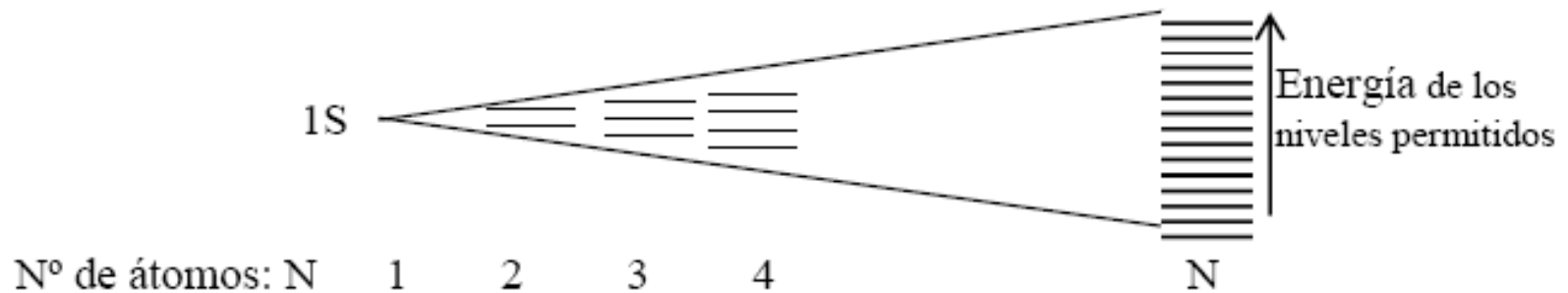
- La función para una celda cúbica de parámetro a , donde el volumen de la celda es a^3 nos da el número de niveles de energía en función de la energía según:

$$N(E) = \frac{\pi a^3}{4} \left[\frac{8m_{e^-}}{h} \right]^{3/2} E^{1/2}$$

Teoría de bandas en los sólidos

- **Extensión de la teoría de los OM:**

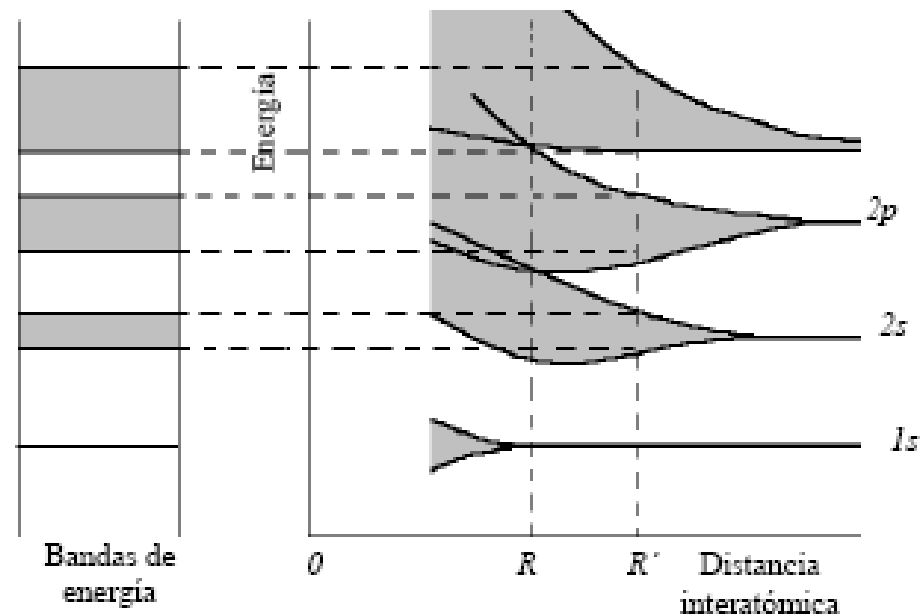
N átomos dan N orbitales que tienen una separación extremadamente pequeña entre cada par de niveles de energía sucesivos.

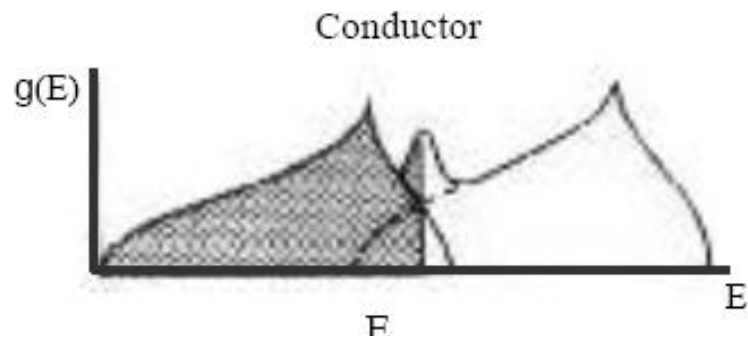


- En un sólido macroscópico, N es del orden de 10^{23} , de modo que cada nivel se divide en un número muy grande de niveles energéticos llamados una banda. Los niveles están espaciados casi continuamente dentro de una banda.
- Las bandas de energía, llamadas también bandas permitidas, se encuentran separadas unas de otras por brechas, denominadas bandas prohibidas. El ancho de estas bandas dependerá del tipo de átomo y el tipo de enlace en el sólido. Las bandas se designan por las letras s , p , d etc. de acuerdo al valor del momentum angular orbital del nivel energético al cual están asociadas.

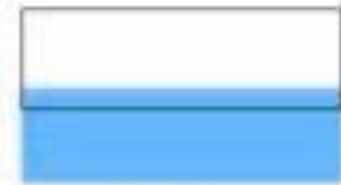
La teoría de bandas y las propiedades conductoras de los metales

Figura 1 Formación de bandas de energía como función de la separación de los átomos. Si existen muchos átomos cada nivel de energía se divide en un conjunto casi continuo de niveles que constituyen una banda.





(a) Metal



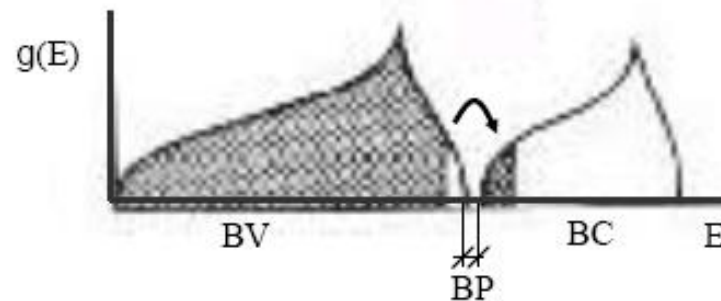
(b) Metal



(d) Aislante



(c) Semiconductor



$BV = \text{Banda de valencia}$

$BP = \text{Banda prohibida}$

$BC = \text{Banda de conducción}$

Semiconductores

- Se denomina semiconductor **intrínseco** al sólido que presenta bandas de energía permitida próximas y la banda prohibida es estrecha. En esos casos es posible por excitación suave el pasaje de un pequeño número de electrones (los de máximo nivel energético dentro de la banda ocupada) a la banda de conducción, y a la vez, el pasaje de los de energía alta, a esos niveles que quedaron desocupados en la banda de valencia.

Gap de Energía (eV)

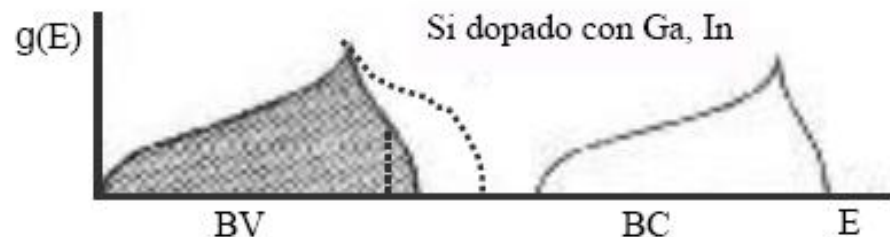
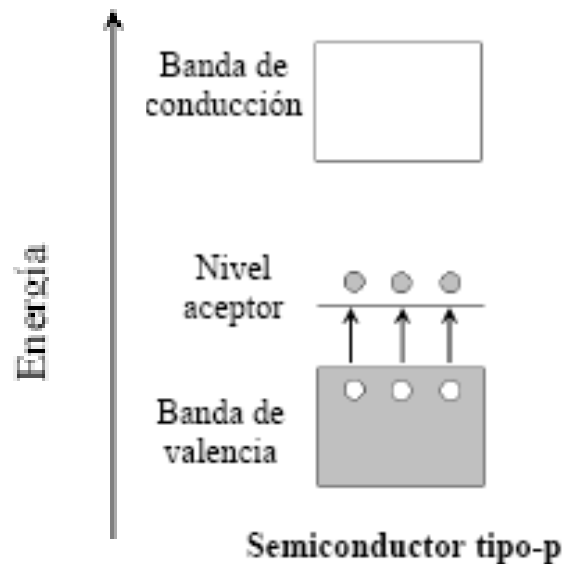
Aisladores	eV	Semiconductores	eV
Diamante	5,33	Silicio	1,14
Oxido de Zinc	3,2	Germanio	0,67
Cloruro de Plata	3,2	Telurio	0,33
Sulfuro de Cadmio	2,42	Antimoniuro de Indio	0,23

- Se denomina semiconductor **extrínseco** a aquellos sólidos que requieren un tratamiento químico para que sus bandas de valencia y conducción se acerquen y estrechen adecuadamente la banda prohibida. Este fenómeno se logra incorporando al sólido impurezas en forma controlada y en nano proporciones (doping), de modo que aparecen nuevos niveles energéticos en las bandas, los que acercan las bandas permitidas.

Semiconductores tipo p

Se crean “huecos positivos” en la red, por la deficiencia electrónica en los puntos donde el Si es sustituido por Ga o In y si consideramos que, virtualmente, esos huecos positivos pueden moverse, en sentido inverso a los electrones que realmente circulan, hay un transporte de corriente “positiva” que se genera. Estos semiconductores disponen entonces de pocos electrones que pueden saltar dentro de la

banda, pero son considerados como si fueran los huecos positivos correspondientes los que se movieran.



Semiconductores tipo n

En el caso de que se sustituyan en una red de un elemento puro, como el Si, algunas posiciones por átomos con mayor número de electrones (P, Sb), también se deformarán las bandas, aproximándose y en este caso, la banda de valencia y en parte de la de conducción quedarán llenas y además, la

banda de conducción se deformará y estrechará la banda prohibida. Este semiconductor conducirá a través de electrones.

