QUÍMICA DE LOS MATERIALES

EDITORIAL
UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Petr Urban, Raquel Astacio López,
Eduardo Sánchez Caballero y Fátima Ternero Fernández

QUÍMICA DE LOS MATERIALES

Problemas resueltos
de Estructura interna de los materiales

EDITORIAL
UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Escuela Técnica Superior de
INGENIERÍA DE SEVILLA

SEVILLA 2024

Colección: Monografías de la Escuela Técnica Superior de Ingeniería
de la Universidad de Sevilla

Núm.: 29

Motivo de cubierta: Postal enviada por J. C. Maxwell a P. G. Tait.

C/ Porvenir, 27 - 41013 Sevilla.
Tfnos.: 954 487 447; 954 487 451
Correo electrónico: info-eus@us.es
Web: https://editorial.us.es

Impreso en papel ecológico
Impreso en España-Printed in Spain

ISBN 978-84-472-2645-0
Depósito Legal: SE 2461-2024

Diseño de cubierta: Santi García Hernández
Maquetación: Escuela Técnica Superior de Ingeniería de la Universidad de Sevilla
Impresión: Podiprint

Resumen

Este libro nace de la necesidad de servir de apoyo al material didáctico disponible para nuestro alumnado y, de este modo, poder complementar e interrelacionar los conceptos teóricos de la asignatura con los ejercicios prácticos.

La serie de problemas que conforma el volumen está indicada como una herramienta de estudio para estudiantes universitarios del Grado de Ingeniería Civil que cursan la asignatura de Química de los Materiales.

Se tratan los aspectos más importantes de la ciencia de los materiales desde la estructura íntima pasando por los metales, cerámicas y polímeros, además de estudiar las imperfecciones en sólidos y la difusión y transformaciones de fases. Cada uno de los diferentes apartados del libro presentan problemas solucionados, los más característicos de cada uno de los temas, siempre dándole una cierta orientación industrial.

Con esta obra se pretende que los estudiantes entiendan y comprendan el papel fundamental de los materiales en Ingeniería.

Fe de erratas del libro:
https://personal.us.es/purban/fedeerratas/materiales1.html

Calculadora de los problemas:
https://personal.us.es/purban/materiales/problemas/index.html

Índice

1. ESTRUCTURA ÍNTIMA

Con la estructura íntima, en este capítulo, se refiere a todas las estructuras más pequeñas que la microscópica. También se suelen llamar como nanoestructura o microestructura a nanoescala. El intervalo aproximado de tamaños va desde 0.1 μm (100 nm o 10^{-7} m) hasta 100 pm (0.1 nm o 10^{-10} m). Las partículas típicas que existen en este rango de tamaños son los átomos, iones y moléculas.

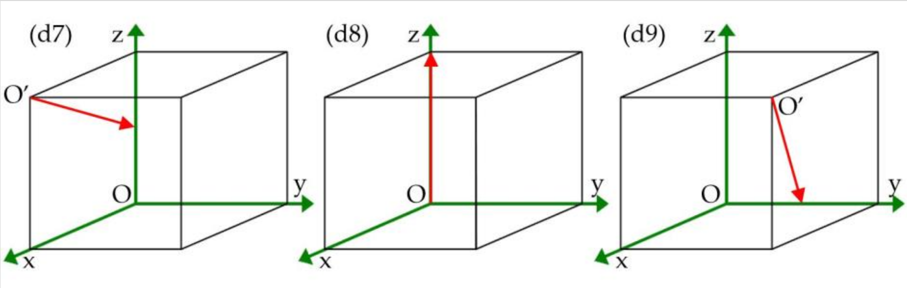
Este capítulo se va a centrar en:

- Los índices de Miller de las direcciones y planos cristalográficos
- Ángulo entre dos direcciones cristalográficas
- Intersección de dos planos cristalográficos
- Porcentaje del enlace iónico
- Densidad de la mezcla

Problema 01: Índices de Miller (direcciones)

a) Dibuje en una celdilla cúbica direcciones (d1) $[\bar{2}\ 1\ \bar{3}]$, (d2) $[1\ 0\ 0]$, (d3) $[0\ \bar{2}\ 2]$, (d4) $[\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1}]$, (d5) $[\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{2}]$y (d6) $[2\ 1\ 2]$.

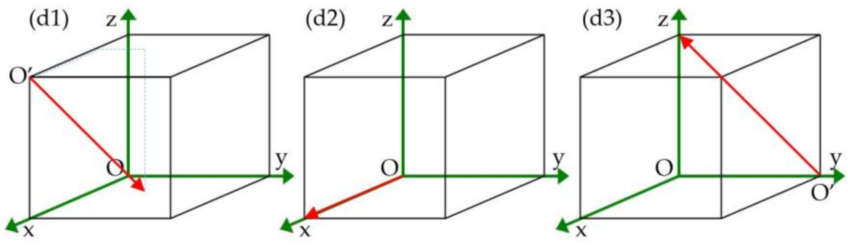
b) Determine los índices de Miller de las direcciones mostrados en las figuras siguientes:



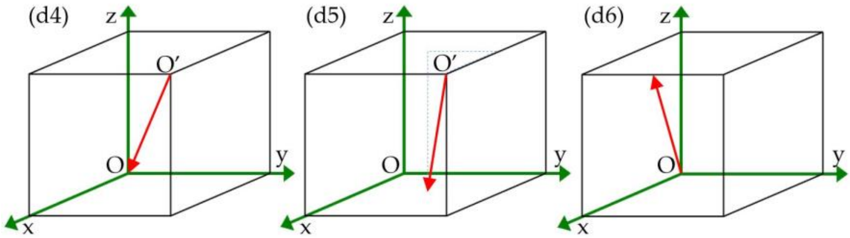
Solución

a) Las direcciones y los planos cristalográficos de las estructuras cristalinas se identifican con tres números enteros llamados índices de Miller.
Para dibujar una dirección cristalográfica tenemos que mover el origen en las direcciones cuyos índices de Miller sean negativos. Luego hay que dividir todos los índices de Miller (menos el cero) con el valor absoluto del índice más grande. A partir del origen O u origen O′ hay que trazar la longitud en la dirección x, luego seguir trazando la dirección y y, por último, continuar en la dirección z. Finalmente, se conecta origen con el punto final, creando así una dirección cristalográfica.
Dirección d1 $[\bar{2}\ 1\ \bar{3}]$: Tenemos que mover el origen en eje x y z porque x y z tienen valores negativos, $\bar{2}$ y $\bar{3}$, respectivamente. Todos los índices se dividen por 3, como se ve en la tabla abajo. A partir del nuevo origen O′ se traza la longitud -2/3 en la dirección del eje x, 1/3 en y y -1 en z. Finalmente, se conecta el origen O′ con el punto final.
Si algún índice de Miller (eje) tiene valor cero, la dirección será perpendicular a este eje, como es el caso de la dirección d2 $[1\ 0\ 0]$. Esta dirección es perpendicular al eje y y z.
Las demás direcciones se construyen a partir de los datos resumidos en la siguiente tabla.

Dirección	Mover origen	Dividir
d1 $[\bar{2}\ 1\ \bar{3}]$	si (en x y z)	$(\bar{2}\ 1\ \bar{3}) \longrightarrow \frac{-2}{3}; \frac{1}{3}; \frac{-3}{3} \longrightarrow -2/3; 1/3; -1$
d2 $[1\ 0\ 0]$	no	$(1\ 0\ 0) \longrightarrow \frac{1}{1}; 0; 0 \longrightarrow 1; 0; 0$
d3 $[0\ \bar{2}\ 2]$	si (en y)	$(0\ \bar{2}\ 2) \longrightarrow 0; \frac{-2}{2}; \frac{2}{2} \longrightarrow 0; -1; 1$
d4 $[\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1}]$	si (en x, y y z)	$(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1}) \longrightarrow \frac{-1}{1}; \frac{-1}{1}; \frac{-1}{1} \longrightarrow -1; -1; -1$
d5 $[\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{2}]$	si (en x, y y z)	$(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{2}) \longrightarrow \frac{-1}{2}; \frac{-1}{2}; \frac{-2}{2} \longrightarrow -0.5; -0.5; -1$
d6 $[2\ 1\ 2]$	no	$(2\ 1\ 2) \longrightarrow \frac{2}{2}; \frac{1}{2}; \frac{2}{2} \longrightarrow 1; 0.5; 1$



d1: $[\bar{2}\ 1\ \bar{3}]$ d2: $[1\ 0\ 0]$ d3: $[0\ \bar{2}\ 2]$



d4: $[\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1}]$ d5: $[\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{2}]$ d6: $[2\ 1\ 2]$

b) Dirección d7: Esta dirección es perpendicular al eje y, por lo cual, el eje y tendrá índice de Miller igual a 0. Desde el origen O\` hay que recorrer una distancia de -1 en el eje x y -0.5 en el eje z, por lo cual, los índices de Miller son $[\bar{1}\ 0\ \overline{0.5}]$. Los índices tienen que ser números enteros, así que hay que multiplicar todos los índices por 2. Finalmente, los índices de Miller de la dirección d7 son $[\bar{2}\ 0\ \bar{1}]$.

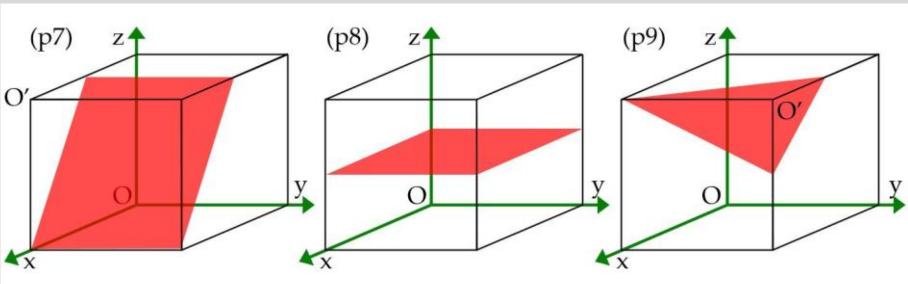
Dirección d 8: Es perpendicular a x e y → $x = 0$, $y = 0$. Desde el origen O hay que recorrer una distancia de 1 en el eje z, por lo cual, los índices de Miller son $[0\ 0\ 1]$.

Dirección d 9: Desde el origen O\` hay que recorrer una distancia de -1 en el eje x, -0.5 en el eje y y -1 en el eje z, por lo cual, los índices de Miller son $[\bar{1}\ \overline{0.5}\ \bar{1}]$. Los índices tienen que ser números enteros, así que hay que multiplicar todos los índices por 2. Finalmente, los índices de Miller de la dirección d9 son $[\bar{2}\ \bar{1}\ \bar{2}]$.

Problema 02: Índices de Miller (planos)

a) Dibuje en una celdilla cúbica los planos: (p1) $(\bar{2}\ 1\ \bar{3})$, (p2) $(1\ 0\ 0)$, (p3) $(0\ \bar{2}\ 2)$, (p4) $(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1})$, (p5) $(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{2})$ y (p6) $(2\ 1\ 2)$.

b) Determine los índices de Miller de los planos mostrados en las figuras:



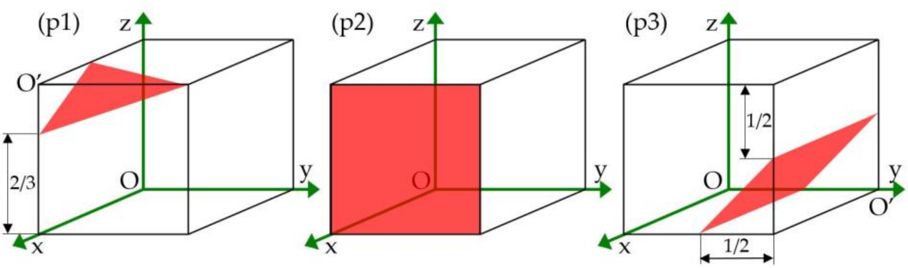
Solución

a) Para dibujar un plano cristalográfico tenemos que mover el origen en las direcciones cuyos índices de Miller sean negativos. Luego hay que calcular valores recíprocos de los índices de Miller. Y, por último, a partir del origen O u origen O′ hay que trazar las longitudes en el eje x, y y z.

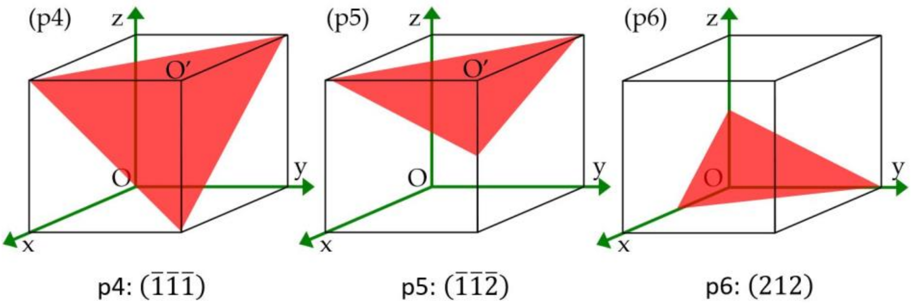
Plano p1 $(\bar{2}\ 1\ \bar{3})$: Tenemos que mover el origen en eje x y z porque x y z tienen valores negativos, $\bar{2}$ y $\bar{3}$, respectivamente. Los valores recíprocos se ven en la tabla abajo. A partir del nuevo origen O′ se dibuja el plano con tres vértices a una distancia de -0.5 en x, 1 en y y -1/3 en z.

Si algún índice de Miller (eje) tiene valor cero, el plano será paralelo a este eje, como es el caso del plano p2 (1 0 0). Este plano es paralelo al eje y y z.
Los demás planos se construyen a partir de los datos resumidos en la siguiente tabla.

Plano	Mover origen	Valores recíprocos
p1 $(\bar{2}\ 1\ \bar{3})$	si (en x y z)	$(\bar{2}\ 1\ \bar{3}) \longrightarrow \frac{1}{-2}; \frac{1}{1}; \frac{1}{-3} \longrightarrow -0.5; 1; -1/3$
p2 (1 0 0)	no	$(1\ 0\ 0) \longrightarrow \frac{1}{1}; \frac{1}{0}; \frac{1}{0} \longrightarrow 1; \infty; \infty$
p3 $(0\ \bar{2}\ 2)$	si (en y)	$(0\ \bar{2}\ 2) \longrightarrow \frac{1}{0}; \frac{1}{-2}; \frac{1}{2} \longrightarrow \infty; -0.5; 0.5$
p4 $(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1})$	si (en x, y y z)	$(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{1}) \longrightarrow \frac{1}{-1}; \frac{1}{-1}; \frac{1}{-1} \longrightarrow -1; -1; -1$
p5 $(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{2})$	si (en x, y y z)	$(\bar{1}\ \bar{1}\ \bar{2}) \longrightarrow \frac{1}{-1}; \frac{1}{-1}; \frac{1}{-2} \longrightarrow -1; -1; -0.5$
p6 (2 1 2)	no	$(2\ 1\ 2) \longrightarrow \frac{1}{2}; \frac{1}{1}; \frac{1}{2} \longrightarrow 0.5; 1; 0.5$



p1: $(\bar{2}1\bar{3})$ p2: (100) p3: $(0\bar{2}2)$



b) Plano p7: Este plano es paralelo al eje y, por lo cual, eje y tendrá índice de Miller igual a 0. Desde el origen es posible intersectar el plano en la dirección x, pero no en la dirección z, por lo cual, hay que mover el origen en x y z. Desde el nuevo origen el plano intersecta el eje x en -0.5 y el eje z en -1. El valor recíproco de -0.5 es -2 y de -1 es -1. Finalmente, los índices de Miller del plano p7 son $(\bar{2}\ 0\ \bar{1})$.

Plano p8: Es paralelo con x y y → $x = 0$, $y = 0$. El plano intersecta al eje z en 0.5 → recíproco = 2. Finalmente, los índices de Miller del plano p8 son $(0\ 0\ 2)$.

Plano p9: Mover el origen en x, y y z. El plano intersecta al eje x en -0.5 (el recíproco es -2), eje y en -1 (el recíproco es -1) y eje z en -0.5 (el recíproco es -2). Finalmente, los índices de Miller del plano p9 son $(\bar{2}\ \bar{1}\ \bar{2})$.

Problema 03: Perpendicularidad entre dos direcciones cristalográficas
Calcule si dos direcciones cristalográficas de una estructura cristalina cúbica son perpendiculares entre sí.
a) $[0\ 1\ 1]$ y $[0\ 1\ \bar{1}]$.
b) $[0\ 0\ \bar{1}]$ y $[1\ 0\ \bar{1}]$.
c) $[3\ 0\ 4]$ y $[\bar{2}\ 0\ \bar{1}]$.
d) Dibuje las direcciones en una celdilla cúbica.

Solución

Dos vectores (direcciones cristalográficas) son perpendiculares entre sí, cuando su producto escalar es cero.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = 0 \longrightarrow \mathrm{a} \perp \mathrm{b}$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3$$

a) Para vectores $[0\ 1\ 1]$ y $[0\ 1\ \bar{1}]$.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = [0\ 1\ 1] \cdot [0\ 1\ \bar{1}] = (0 \cdot 0) + (1 \cdot 1) + \big(1 \cdot (-1)\big) = 0 + 1 + (-1) = 0$$

Las direcciones $[0\ 1\ 1]$ y $[0\ 1\ \bar{1}]$ son perpendiculares entre sí.

b) Para vectores $[0\ 0\ \bar{1}]$ y $[1\ 0\ \bar{1}]$.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = [0\ 0\ \bar{1}] \cdot [1\ 0\ \bar{1}] = (0 \cdot 1) + (0 \cdot 0) + \big((-1) \cdot (-1)\big) = 0 + 0 + 1 = 1 \neq 0$$

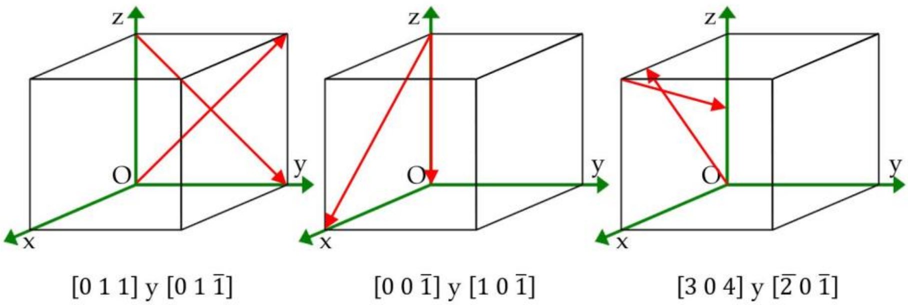
Las direcciones $[0\ 0\ \bar{1}]$ y $[1\ 0\ \bar{1}]$ no son perpendiculares entre sí.

c) Para vectores $[3\ 0\ 4]$ y $[\bar{2}\ 0\ \bar{1}]$.

$$[3\ 0\ 4] \cdot [\bar{2}\ 0\ \bar{1}] = \big(3 \cdot (-2)\big) + (0 \cdot 0) + \big(4 \cdot (-1)\big) = -6 + 0 + (-4) = -10 \neq 0$$

Las direcciones $[3\ 0\ 4]$ y $[\bar{2}\ 0\ \bar{1}]$ no son perpendiculares entre sí.

d)



Problema 04: Ángulo entre dos direcciones cristalográficas
Calcule el ángulo entre dos direcciones cristalográficas de una estructura cristalina cúbica.
a) $[1\ 1\ 0]$ y $[\bar{1}\ 1\ 0]$.
b) $[1\ 0\ \bar{1}]$ y $[0\ 1\ \bar{1}]$.
c) $[0\ 1\ \bar{2}]$ y $[0\ \bar{5}\ 4]$.
d) Dibuje las direcciones en una celdilla cúbica.

Solución.

Ángulo entre dos vectores (direcciones cristalográficas):

$$\cos\alpha = \frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\cdot|\vec{b}|}$$

$$producto\ escalar: \vec{a}\cdot\vec{b} = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3$$

$$Módulo\ del\ vector: |\vec{a}| = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}$$

a) Para vectores [1 1 0] y [$\bar{1}$ 1 0].

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = [1\ 1\ 0]\cdot[\bar{1}\ 1\ 0] = \big(1\cdot(-1)\big) + (1\cdot 1) + (0\cdot 0) = -1 + 1 + 0 = 0$$

$$|\vec{a}| = \sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2} = \sqrt{2}$$

$$|\vec{b}| = \sqrt{(-1)^2 + 1^2 + 0^2} = \sqrt{2}$$

$$\cos\alpha = \frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\cdot|\vec{b}|} \longrightarrow \alpha = \cos^{-1}\left(\frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\cdot|\vec{b}|}\right) = \cos^{-1}\left(\frac{0}{\sqrt{2}\cdot\sqrt{2}}\right) = 90.0°$$

El ángulo entre vectores [1 1 0] y [$\bar{1}$ 1 0] es 90°.

b) Para vectores [1 0 $\bar{1}$] y [0 1 $\bar{1}$].

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = [1\ 0\ \bar{1}]\cdot[0\ 1\ \bar{1}] = (1\cdot 0) + (0\cdot 1) + \big((-1)\cdot(-1)\big) = 0 + 0 + 1 = 1$$

$$|\vec{a}| = \sqrt{1^2 + 0^2 + (-1)^2} = \sqrt{2}$$

$$|\vec{b}| = \sqrt{0^2 + 1^2 + (-1)^2} = \sqrt{2}$$

$$\cos\alpha = \frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\cdot|\vec{b}|} \longrightarrow \alpha = \cos^{-1}\left(\frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\cdot|\vec{b}|}\right) = \cos^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2}\cdot\sqrt{2}}\right) = 60°$$

El ángulo entre vectores [1 0 $\bar{1}$] y [0 1 $\bar{1}$] es 60°.

c) Para vectores [0 1 $\bar{2}$] y [0 $\bar{5}$ 4].

$$\vec{a}\cdot\vec{b} = [0\ 1\ \bar{2}]\cdot[0\ \bar{5}\ 4] = (0\cdot 0) + \big(1\cdot(-5)\big) + \big((-2)\cdot 4\big) = 0 - 5 - 8 = -13$$

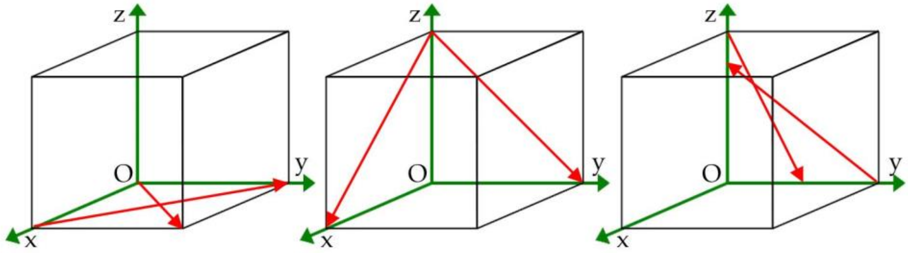
$$|\vec{a}| = \sqrt{0^2 + 1^2 + (-2)^2} = \sqrt{5}$$

$$|\vec{b}| = \sqrt{0^2 + (-5)^2 + 4^2} = \sqrt{41}$$

$$\cos\alpha = \frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\cdot|\vec{b}|} \longrightarrow \alpha = \cos^{-1}\left(\frac{\vec{a}\cdot\vec{b}}{|\vec{a}|\cdot|\vec{b}|}\right) = \cos^{-1}\left(\frac{-13}{\sqrt{5}\cdot\sqrt{41}}\right) = 155.2°$$

El ángulo entre vectores $[0\ 1\ \bar{2}]$ y $[0\ \bar{5}\ 4]$ es 155.2°.

d)



$[1\ 1\ 0]$ y $[\bar{1}\ 1\ 0]$ $[1\ 0\ \bar{1}]$ y $[0\ 1\ \bar{1}]$ $[0\ 1\ \bar{2}]$ y $[0\ \bar{5}\ 4]$

Problema 05: Intersección de dos planos cristalográficos
Determine analíticamente los índices de Miller de la intersección entre dos planos cristalográficos en una estructura cúbica.
a) $(\bar{1}\ 1\ 0)$ y $(0\ 1\ 0)$.
b) $(\bar{1}\ 1\ 0)$ y $(1\ 1\ 1)$.
c) $(\bar{2}\ 3\ 4)$ y $(1\ 0\ \bar{2})$.
d) Resuelve todas las intersecciones gráficamente.

Solución

Producto vectorial de dos vectores:

$$\vec{a}\times\vec{b} = [a_1\ a_2\ a_3]\times[b_1\ b_2\ b_3] = \begin{vmatrix} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} =$$

$$= \vec{\imath}(a_2\cdot b_3 - a_3\cdot b_2) - \vec{\jmath}(a_1\cdot b_3 - a_3\cdot b_1) + \vec{k}(a_1\cdot b_2 - a_2\cdot b_1) =$$

$$= x\vec{\imath} - y\vec{\jmath} + z\vec{k} = [x\ \ -y\ z]$$

a) Para los planos $(\bar{1}\ 1\ 0)$ y $(0\ 1\ 0)$:

Se determina el producto vectorial de los dos vectores normales (direcciones perpendiculares) de los dos planos. El vector normal tiene los mismos índices de Miller que su plano.

$$\vec{a} \times \vec{b} = [\bar{1}\ 1\ 0] \times [0\ 1\ 0] = \begin{vmatrix} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{vmatrix} =$$

$$= \vec{\imath}(1 \cdot 0 - 0 \cdot 1) - \vec{\jmath}(-1 \cdot 0 - 0 \cdot 0) + \vec{k}(-1 \cdot 1 - 1 \cdot 0) =$$

$$= 0\vec{\imath} - 0\vec{\jmath} + (-1)\vec{k} = [0\ 0\ \bar{1}]$$

La dirección que pertenece a ambos planos es $[0\ 0\ \bar{1}]$.

Comprobación del resultado: La dirección $[0\ 0\ \bar{1}]$ tiene que ser perpendicular tanto a la dirección $[\bar{1}\ 1\ 0]$, como a la dirección $[0\ 1\ 0]$. Para eso el producto escalar resultante tiene que ser igual a cero.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = [0\ 0\ \bar{1}] \cdot [\bar{1}\ 1\ 0] = \big(0 \cdot (-1)\big) + (0 \cdot 1) + \big((-1) \cdot 0\big) = 0 + 0 + 0 = 0$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = [0\ 0\ \bar{1}] \cdot [0\ 1\ 0] = (0 \cdot 0) + (0 \cdot 1) + \big((-1) \cdot 0\big) = 0 + 0 + 0 = 0$$

b) Para los planos $(\bar{1}\ 1\ 0)$ y $(1\ 1\ 1)$:

$$\vec{a} \times \vec{b} = [\bar{1}\ 1\ 0] \times [1\ 1\ 1] = \begin{vmatrix} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix} =$$

$$= \vec{\imath}(1 \cdot 1 - 0 \cdot 1) - \vec{\jmath}(-1 \cdot 1 - 0 \cdot 1) + \vec{k}(-1 \cdot 1 - 1 \cdot 1) =$$

$$= 1\vec{\imath} - (-1)\vec{\jmath} + (-2)\vec{k} = [1\ 1\ \bar{2}]$$

La dirección que pertenece a ambos planos es $[1\ 1\ \bar{2}]$.

Comprobación del resultado: La dirección $[1\ 1\ \bar{2}]$ tiene que ser perpendicular tanto a la dirección $[\bar{1}\ 1\ 0]$, como a la dirección $[1\ 1\ 1]$. Para eso el producto escalar resultante tiene que ser igual a cero.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = [1\ 1\ \bar{2}] \cdot [\bar{1}\ 1\ 0] = \big(1 \cdot (-1)\big) + (1 \cdot 1) + \big((-2) \cdot 0\big) = -1 + 1 + 0 = 0$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = [1\ 1\ \bar{2}] \cdot [1\ 1\ 1] = (1 \cdot 1) + (1 \cdot 1) + \big((-2) \cdot 1\big) = 1 + 1 - 2 = 0$$

c) Para los planos $(\bar{2}\ 3\ 4)$ y $(1\ 0\ \bar{2})$:

$$\vec{a} \times \vec{b} = [\bar{2}\ 3\ 4] \times [1\ 0\ \bar{2}] = \begin{vmatrix} \vec{\imath} & \vec{\jmath} & \vec{k} \\ -2 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & -2 \end{vmatrix} =$$

$$= \vec{\imath}(3 \cdot (-2) - 4 \cdot 0) - \vec{\jmath}(-2 \cdot (-2) - 4 \cdot 1) + \vec{k}(-2 \cdot 0 - 3 \cdot 1) =$$

$$= -6\vec{\imath} - 0\vec{\jmath} + (-3)\vec{k} = [\bar{6}\ 0\ \bar{3}]$$

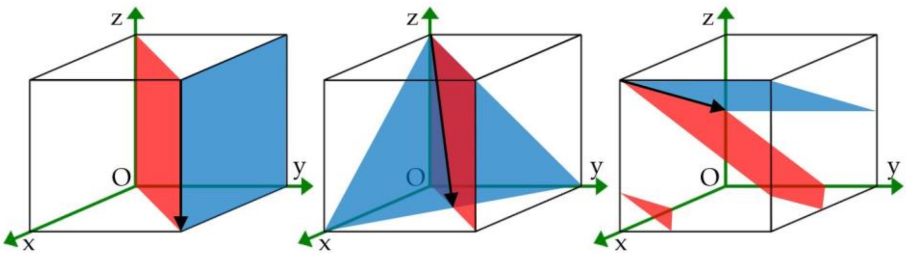
La dirección que pertenece a ambos planos es $[\bar{6}\ 0\ \bar{3}]$.

Comprobación del resultado: La dirección $[\bar{6}\ 0\ \bar{3}]$ tiene que ser perpendicular tanto a la dirección $[\bar{2}\ 3\ 4]$, como a la dirección $[1\ 0\ \bar{2}]$. Para eso el producto escalar resultante tiene que ser igual a cero.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = [\bar{6}\ 0\ \bar{3}] \cdot [\bar{2}\ 3\ 4] = \big((-6) \cdot (-2)\big) + (0 \cdot 3) + \big((-3) \cdot 4\big) = 12 + 0 - 12 = 0$$

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = [\bar{6}\ 0\ \bar{3}] \cdot [1\ 0\ \bar{2}] = \big((-6) \cdot 1\big) + (0 \cdot 0) + \big((-3) \cdot (-2)\big) = -6 + 0 + 6 = 0$$

d)



$(\bar{1}\ 1\ 0)$ y $(0\ 1\ 0)$ $(\bar{1}\ 1\ 0)$ y $(1\ 1\ 1)$ $(\bar{2}\ 3\ 4)$ y $(1\ 0\ \bar{2})$

Problema 06: Porcentaje del enlace iónico

El clínker de cemento portland es un material hidráulico que se obtiene por sinterización de una mezcla de varios compuestos entre los cuales podemos encontrar el CaO, SiO_2, Al_2O_3, Fe_2O_3 y MgO.

a) Determine el porcentaje de carácter iónico que se puede esperar en los compuestos CaO y MgO.
¿Qué tipo de enlace predominante se puede esperar en cada pareja de iones?

b) Indique, en una tabla, para diferentes tipos de enlaces covalentes e iónicos el intervalo típico de la diferencia de electronegatividades, $\Delta\chi$, y un material típico para cada tipo de enlace y su porcentaje de carácter iónico.

c) Dibuje en una gráfica el cambio de la diferencia de electronegatividad, $\Delta\chi$, en función del porcentaje de carácter iónico. Identifique, para un material hipotético con 50% de carácter iónico su correspondiente $\Delta\chi$.

Nota: Los valores de las electronegatividades los puedes encontrar en el anexo.

Solución

a) En el anexo, los valores de electronegatividades son:
Ca = 1.0, Mg = 1.31 y O = 3.44.
El porcentaje de enlace iónico entre dos iones se calcula utilizando siguiente ecuación:

$$c_i = 100 \cdot [1 - \exp(-0.25 \cdot (\chi_A - \chi_B)^2)]$$

Para el compuesto CaO:

$$c_{i(CaO)} = 100 \cdot [1 - \exp(-0.25 \cdot (1.0 - 3.44)^2)] = 77\%$$

Entre los iones de Ca y O predomina un enlace de carácter iónico.

Para compuesto MgO:

$$c_{i(MgO)} = 100 \cdot [1 - \exp(-0.25 \cdot (1.31 - 3.44)^2)] = 68\%$$

Entre los iones de Mg y O predomina un enlace de carácter iónico.

b) A parte de CaO y MgO hay que buscar otros compuestos que tengan la diferencia de electronegatividades, $\Delta\chi$, más baja para poder completar la tabla de abajo.

Para una molécula O_2:

$$c_{i(O_2)} = 100 \cdot [1 - \exp(-0.25 \cdot (3.44 - 3.44)^2)] = 0\%$$

Entre los átomos de una molécula O_2 hay un 100% de enlaces covalentes y 0% de enlaces iónicos.

Para el compuesto CO:

$$c_{i(CO)} = 100 \cdot [1 - \exp(-0.25 \cdot (2.55 - 3.44)^2)] = 22.1\%$$

Entre los iones de CO hay un 22.1% de enlaces iónicos.

Para el compuesto HF:

$$c_{i(HF)} = 100 \cdot [1 - \exp(-0.25 \cdot (2.2 - 3.98)^2)] = 54.7\%$$

Entre los iones de HF hay un 54.7% de enlaces iónicos.

Para el compuesto ZnO:

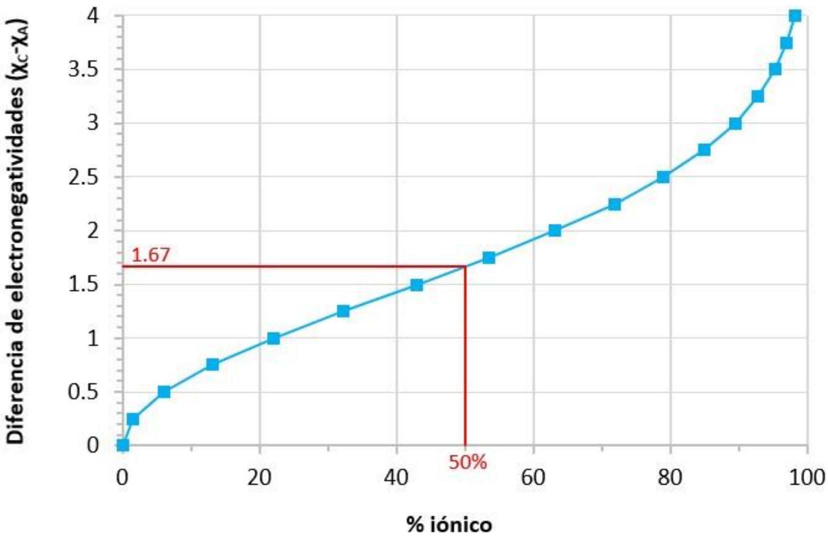
$$c_{i(ZnO)} = 100 \cdot [1 - \exp(-0.25 \cdot (1.65 - 3.44)^2)] = 55.1\%$$

Entre los iones de ZnO hay un 55.1% de enlaces iónicos.

El resumen se puede observar en la siguiente tabla:

$\Delta\chi$	Tipo de enlace	Material
0-0.5	Covalente no polar	Molécula O_2 = 0%
0.5-1.7	Covalente polar	CO: $\Delta\chi$ = 0.89, c_i = 22.1%
1.7-2.0	Covalente polar (si ambos iones son no metales)	HF: $\Delta\chi$ =1.78, c_i = 54.7%
1.7-2.0	Iónico (si un ion es metal)	ZnO: $\Delta\chi$ = 1.79, c_i = 55.1%
>2.0	Iónico (si ambos iones son no metálicos)	CaO: $\Delta\chi$ = 2.44, c_i = 77%

c) Dibuje en una gráfica el cambio de la diferencia de electronegatividad, $\Delta\chi$, en función del porcentaje de carácter iónico. Identifique, para un material hipotético con 50% de carácter iónico su correspondiente $\Delta\chi$.



Para un material hipotético con un 50% de electronegatividad la diferencia de electronegatividades de los elementos ha de ser 1.67 aproximadamente.

Problema 07: Densidad de la mezcla

¿Qué densidad tiene una mezcla de dos materiales en los siguientes supuestos?

a) El material 1 pesa 5 g y el material 2 pesa 5 g.

b) El material 1 tiene un volumen de 5 cm^3 y el material 2 tiene un volumen de 5 cm^3.

c) Dibuje un gráfico de densidades de mezcla para fracciones en peso y fracciones volumétricas de 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9 y 1.

Datos: densidad del material 1, $\delta_1 = 2$ g/cm^3 y densidad del material 2, $\delta_2 = 8$ g/cm^3.

Solución

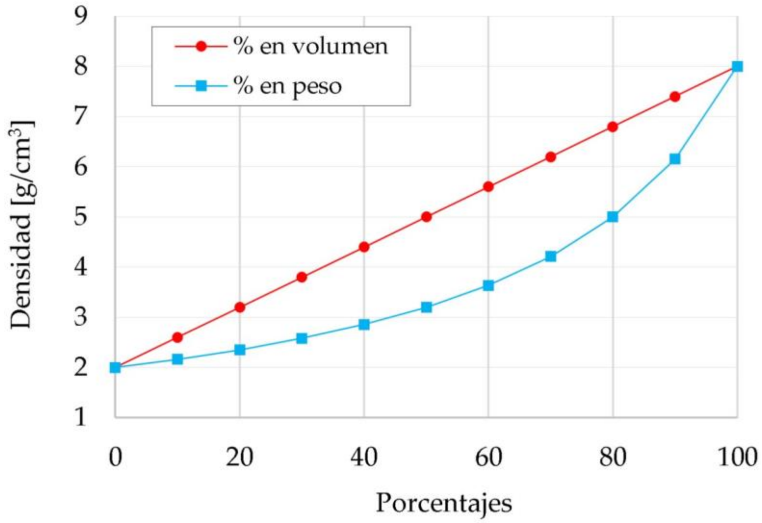
a) El material 1 pesa 5 g y el material 2 pesa 5 g.
Calculando con el porcentaje en peso:

$$\delta = \frac{m}{V} = \frac{m_1 + m_2}{V_1 + V_2} = \frac{m_1 + m_2}{\frac{m_1}{\delta_1} + \frac{m_2}{\delta_2}} = \frac{5[g] + 5[g]}{\frac{5[g]}{2\left[\frac{g}{cm^3}\right]} + \frac{5[g]}{8\left[\frac{g}{cm^3}\right]}} = 3.2\ \frac{g}{cm^3}$$

b) El material 1 tiene un volumen de 5 cm^3 y el material 2 tiene un volumen de 5 cm^3.
Calculando con el porcentaje en volumen:

$$\delta = \frac{m}{V} = \frac{m_1 + m_2}{V_1 + V_2} = \frac{\delta_1 V_1 + \delta_2 V_2}{V_1 + V_2} = \frac{2\left[\frac{g}{cm^3}\right] \cdot 5[cm^3] + 8\left[\frac{g}{cm^3}\right] \cdot 5[cm^3]}{5 + 5[cm^3]} = 5\ \frac{g}{cm^3}$$

c) Dibuje un gráfico para fracciones en peso y fracciones volumétricas.


% en volumen
% en peso
Densidad [g/cm3]
Porcentajes
9
8
7
6
5
4
3
2
1
0
20
40
60
80
100