



UNIVERSIDAD  
**COMPLUTENSE**  
MADRID

Proyecto de Innovación

Convocatoria 2017/2018

Nº de proyecto: 287

Título del proyecto: Diseño e implementación de un laboratorio virtual para el estudio de las "Estructuras cristalinas más representativas de los Materiales Cerámicos", y de los "Defectos extensos en cristales iónicos"

Yanicet Ortega Villafuerte

Facultad de Ciencias Físicas

Departamento de Física de Materiales

## 1. Objetivos propuestos en la presentación del proyecto

Los objetivos propuestos en este proyecto fueron diseñar y programar dos módulos nuevos que se incorporarán al programa **Laboratorio Virtual de Materiales Cerámicos**, creado durante la ejecución del proyecto PIMCD\_225 (2015).

El primero de estos módulos está dedicado a las "*Estructuras cristalinas más representativas de los Materiales Cerámicos*" y el segundo módulo está relacionado con los "*Defectos extensos en cristales iónicos*", con este último se pretende ampliar el módulo de defectos, que estaba dedicado inicialmente a los de baja dimensionalidad (defectos puntuales).

## 2. Objetivos alcanzados

Los objetivos propuestos en este proyecto se cumplieron, ya que se diseñaron los dos nuevos módulos previstos. Además, para la mejor comprensión de las estructuras cristalinas estudiadas, se incluyó un módulo nuevo dedicado al estudio de las "*Reglas de Pauling*".

En el módulo de "*Estructuras cristalinas más representativas de los Materiales Cerámicos*", se estudian distintas estructuras de tipo AX, AX<sub>2</sub>, y ABO<sub>3</sub>. En cada una de las estructuras estudiadas se hace uso de la primera regla de Pauling para conocer el índice de coordinación catiónico, y posteriormente se determina el índice de coordinación aniónico con ayuda de la segunda regla de Pauling. En todos los casos se calcula el porcentaje del carácter iónico de los enlaces catión-anión, y se visualizan tridimensionalmente las estructuras, con la ayuda de los videos creados con el programa *Diamond*.

En el proyecto anterior se había desarrollado un único módulo dedicado a los defectos puntuales, y con la ejecución de este nuevo proyecto se ha conseguido ampliar el estudio a defectos de mayor dimensionalidad. En este caso se han dado a conocer las características fundamentales que distinguen a las dislocaciones de los materiales cerámicos frente a las de los materiales metálicos, como son: la presencia de núcleos cargados o las dimensiones del vector de Burgers. Ambas características condicionan la interacción de las dislocaciones con otros defectos puntuales cargados, y determina sus propiedades mecánicas.

## 3. Metodología empleada en el proyecto

Al igual que en el proyecto anterior, la herramienta informática elegida para la programación fue el software "*Microsoft Visual Studio 2008*" con el compilador de "*Visual Basic 2008*".

Inicialmente se realizó un diseño general de todas las ventanas que se incluyen en el programa, así como de su contenido. Para diseñar y construir las figuras en

3D, y los videos, se usó el software DIAMOND 3.1 (*“Crystal and Molecular Structure Visualization”*).

Una vez se finalizó la programación se comprobó el funcionamiento del mismo por parte de los integrantes del proyecto, realizándose los cambios oportunos.

#### 4. Recursos humanos

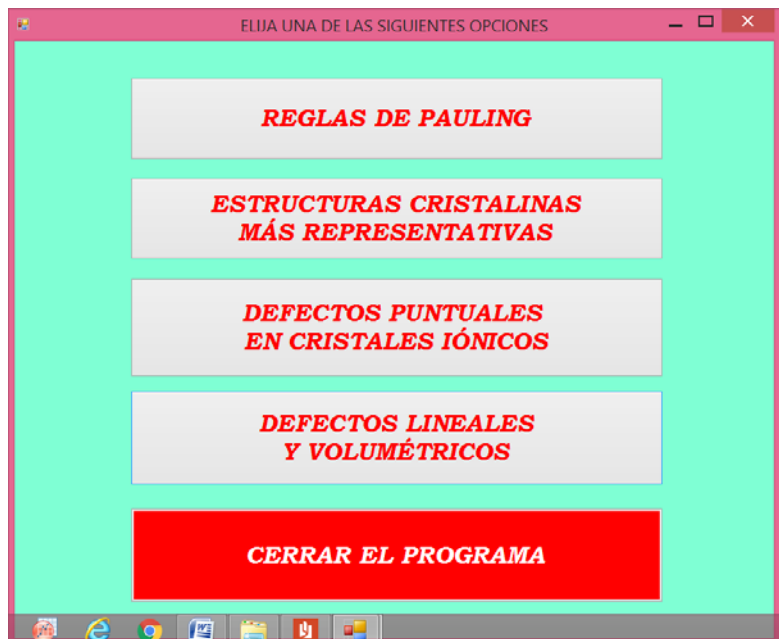
Integrantes del Proyecto:

- Carlos Cifuentes
- Daniel Voces
- Cristian Pastor
- Robert Gavilanes
- Hector Sánchez
- Noemí Carmona Tejero.
- Yanicet Ortega Villafuerte.

#### 5. Desarrollo de las actividades

Para la elaboración del proyecto se ejecutaron distintas actividades que se relacionan cronológicamente a continuación:

Inicialmente se diseñó el diagrama de flujo del programa y se seleccionaron los contenidos de cada una de las ventanas de los distintos módulos. La ventana principal desde la cual se puede acceder a las distintas partes del programa contiene los siguientes apartados nuevos: Reglas de Pauling, Estructuras cristalinas más representativas y Defectos lineales y volumétricos.



- **Reglas de Pauling**

En este apartado se estudian las 5 reglas de Pauling, y se ponen algunos ejemplos para su mayor comprensión.

- **Estructuras cristalinas más representativas**

En este módulo se estudian las estructuras NaCl, CsCl, ZnS de tipo AX, CaF<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub> de tipo AX<sub>2</sub>, y BaTiO<sub>3</sub> como representación de las estructuras ABO<sub>3</sub>.

**ESTRUCTURAS CRISTALINAS MÁS REPRESENTATIVAS**

**I.2. ESTRUCTURAS CRISTALINAS DE TIPO AX<sub>2</sub>**

**TiO<sub>2</sub> (rutilo)**

- La celdad unidad del rutilo es tetragonal, donde los **iones Ti<sup>+4</sup>** ocupan los vértices y el centro del tetraedro.
- La relación  $Rc/Ra = 0.061\text{nm} / 0.140\text{nm} = 0.4357$ , lo que indica que los cationes  $Ti^{+4}$  se coordinan **octaédricamente** con los iones oxígeno.
- La fuerza del enlace Ti-O es 2/3, por lo que los aniones oxígeno se coordinan **triangulamente** con los cationes  $Ti^{+4}$ .
- El porcentaje del carácter iónico del enlace es de un 63%, para esta estructura.
- Si orientamos el cristal paralelo **al eje c**, observamos la existencia de túneles a lo largo del eje c, los cuales actúan como caminos de difusión rápidos para iones de pequeño tamaño como pueden ser los iones  $Li^+$  o  $H^+$ .
- Existen otras cerámicas con una estructura similar al rutilo como son :  $GeO_2$ ,  $PbO_2$ ,  $SnO_2$ ,  $MnO_2$ .

Estructura cristalina del TiO<sub>2</sub>

reset

Lista de reproducción

- **Defectos lineales y volumétricos**

Tanto los defectos puntuales como los lineales se unificaron en un solo módulo. Con la creación de una dislocación de arista se ejemplificarán las características más relevantes de las dislocaciones en los materiales iónicos. Para mantener la electroneutralidad de la estructura es necesario introducir dos semiplanos cargados lo que contribuye a

**Defectos extensos**

**DEFECTOS LINEALES**

**Defectos lineales**

En los materiales cerámicos cristalinos existen menos sistemas de deslizamiento que en los materiales metálicos debido, fundamentalmente al carácter iónico de las cerámicas.

El carácter iónico provoca que determinadas direcciones de deslizamiento estén prohibidas, ya que de lo contrario se generarían fuerzas de repulsión electrostática grandes que conducirían a una situación de inestabilidad dentro del cristal.

En la figura se observan **2 planos** de deslizamiento de la estructura del NaCl. En el plano **(100)**, la dirección de deslizamiento **<010>** está prohibida, mientras que la dirección **<110>** es energéticamente posible.

Por otra parte los **núcleos** de las dislocaciones pueden estar cargados, debido a la presencia de iones en los extremos de los semiplanos añadidos. Los núcleos cargados de las dislocaciones constituyen centros de atracción electrostática para los iones con **carga opuesta**.

Además el Vector de Burguers de las dislocaciones en los cerámicos suele ser mayor que en los metálicos.

Dislocaciones en cerámica nanoestructurada de ZnO (Al)

incrementar el valor del vector de Burguers si lo comparamos con los materiales no iónicos. Además, la presencia de carga en las cerámicas provoca que los núcleos de las dislocaciones puedan aparecer cargados contribuyendo a una mayor interacción electrostática con otros defectos puntuales presentes en la estructura.

En el estudio de los defectos volumétricos se prestó atención a la influencia que tiene la porosidad de las cerámicas en la disminución del módulo de Young.

**Defectos extensos**

**DEFECTOS VOLUMÉTRICOS**

**Defectos volumétricos**

El objetivo final del proceso de sinterización de un material cerámico es obtener un material con una densidad experimental muy similar a su densidad teórica.

La presencia de poros en los materiales cerámicos determina en gran medida las propiedades mecánicas de estos materiales, además de influir en procesos de propagación del calor y de conducción eléctrica.

Una de las magnitudes físicas que depende de la porosidad es el módulo elástico, como se aprecia en la siguiente fórmula:

$$E = E_0(1 - 1.9P + 0.9P^2)$$

en donde P es un parámetro que representa la porosidad del material y puede tomar valores entre [0 y 1].

No obstante existen determinadas aplicaciones en las que es favorable la presencia de poros, como son los procesos de catálisis en los que una elevada relación superficie/volumen puede garantizar una buena eficiencia de las reacciones catalíticas. Ejemplo de estos materiales avanzados son las cerámicas mesoporosas.

Poros en una cerámica nanoestructurada de ZnO-Sn

**TEM**

100 nm

**E0 (GPa)**

**Porosidad (%)**

Módulo elástico para el material no poroso

1

0

**E (GPa) =**

En los dos últimos meses del proyecto se procedió a realizar las comprobaciones necesarias para garantizar el funcionamiento correcto de los distintos módulos, enlaces y videos. Estas comprobaciones se realizaron tanto *in-situ* como remotamente.

Una vez se concluyó la programación se actualizó el Guión de la práctica, que se incluirá al inicio del segundo cuatrimestre en el Campus Virtual de la asignatura "Materiales Cerámicos".

En el próximo proyecto se pretende crear un nuevo módulo dedicado a las propiedades físicas de los materiales cerámicos.