



Ciencia de los materiales

ÍNDICE:

PRIMERA PARTE:

Tema 1: Sólidos cristalinos. **Pág. 5-13**

Tema 2: Diagramas de fase. **Pág. 14-19**

Tema 3: Propiedades mecánicas. **Pág. 20-29**

Tema 4-7: Polímeros. **Pág. 30-44**

Tema 8: Adhesivos. **Pág. 44-47**

Tema 9: Materiales compuestos. **Pág. 47-51**

Tema 10: Cerámicos. **Pág. 51-54**

SEGUNDA PARTE:

Tema 11: Imperfecciones en redes cristalinas. **Pág. 55-56**

Tema 12: Transformaciones líquido-sólido en materiales metálicos. **Pág. 57-58**

Tema 13: Transformaciones en estado sólido en materiales metálicos. **Pág. 59-60**

Tema 14: Deformación plástica de materiales metálicos.

Tema 15: Mecanismos de endurecimiento en materiales metálicos.

Tema 16: Fatiga.

Tema 17: Fluencia.

Tema 18: Oxidación y corrosión en materiales metálicos.

Tema 19.1 Aleaciones férreas I

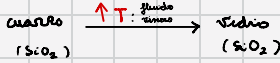
Tema 19.2 Aleaciones férreas II

Tema 19.3 Aleaciones férreas III

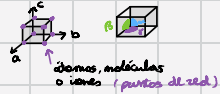
Tema 19.4 Aleaciones férreas IV

TEMA 1: Sólidos cristalinos

Sistema cristalino: sistema químico que presenta orden a largo alcance.

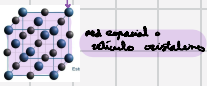


Crystal: estructura ordenada en las tres direcciones del espacio formada por átomos, iones o moléculas.
Alta unidad: unidad más pequeña cuya repetición genera el retículo cristalino.



Parámetros de red: $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

Base de la red: fto. de átomos, iones o moléculas que se repiten. Se representa mediante un punto reticular.



Tipos de sistemas cristalinos: Existen 7 tipos de sistemas cristalinos (tipos de celdilla) y 14 tipos de celda unidad. Lo que da lugar a 14 redes de Bravais diferentes.

Isotropía: aquel cuyos propiedades físicas son igual en todas las direcciones. Tipos:

- sistemas amorfos: desordenados
- sistemas policristalinos: cristales pequeños orientados de manera aleatoria.

 ↳ el contrario es la **anisotropía**.

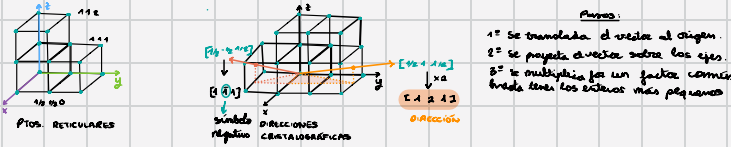
Polimorfismo: una sustancia en función de la **presión** y la **temperatura** distintas estructuras cristalinas. Es decir, puede cambiar la ordenación de una sustancia debido a factores como la **P** y **T**.

Celda unidad tipo BCC tipo FCC } por ej. el hierro.

Alotropía: cuando el polimorfismo se presenta en un elemento puro.

↳ esto se puede representar con los **diagramas de fase**.

Notación de Miller: se utiliza para: puntos reticulares, direcciones y planos cristalinos.



Direcciones equivalentes: direcciones no paralelas donde las distancias entre los puntos reticulares son iguales.

Familia de direcciones: fto. de direcciones en una red cristalina.
 n° de direcciones de una familia = $\frac{3!}{n!} \cdot 2^{(3-n)} = \frac{24}{n! \cdot 2^n}$
 n : número de índices iguales
 m : número de índices no iguales

Ejemplos: $\langle 100 \rangle$
 $n=4$, $m=2$
 n° direcciones = $\frac{24}{4! \cdot 2^2} = 6$

$\langle 110 \rangle$
 $n=2$, $m=1$
 n° direcciones = $\frac{24}{2! \cdot 2} = 6$



NOTACIÓN DE MILLER PARA PLANOS

Una red cristalográfica puede descomponerse en infinitos planos cristalográficos.



Es importante resaltar que los planos separados tienen una mayor densidad de puntos reticulares.



La intersección de Miller para planos se escribe entre paréntesis **PLANO**.

- 1) Los índices (hkl) indican por donde el plano corta a la red. (1/2 1 0) se pone infinito porque el plano no corta al plano z.
- 2) Se realiza el inverso para obtener n°. Enteros y el 0 se cambia por un 0.
(2 1 0)

Todos los planos paralelos y equidistantes tienen los mismos índices y constituyen un sistema de planos.

Por ejemplo:



Los planos y direcciones perpendiculares en el sistema cúbico tienen las mismas direcciones.

Por ejemplo:



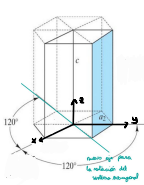
DISTANCIA INTERPLANAR



$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

SISTEMA HEXAGONAL: NOTACIÓN DE MILLER-BRAVES

Para el sistema hexagonal se utiliza un nuevo índice para representar la posición de los planos cristalográficos. De tal manera que aparece un nuevo índice i entre los anteriores tal que: (hklil) donde $l = -(h+k)$.



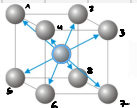
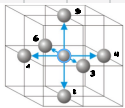
EN LA NOTACIÓN DE MILLER sería (0 1 0) porque el plano solo corta al eje y, pero como es un sistema hexagonal usamos la notación de Miller-Bravais (hklil) añadiendo un nuevo índice i tal que: $l = -(h+k) = -(0+1) = -1$

Entonces, la posición del plano a_2 es (0 1 $\bar{1}$ 0)

PAQUETAMIENTO EN REDES CRISTALINAS

Número o índice de coordinación: nº de átomos (o iones) más próximos y equidistantes que rodean a uno dado.

Por ejemplo:



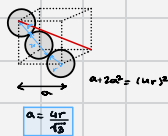
Relaciones entre la arista y el radio

r : radio átomo
 a : longitud de la arista de la célula unitaria
 \dots : célula unitaria
 \dashrightarrow : distancia entre radios

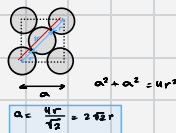
SC (Cúbica Simple)



BCC (centrada en el cuerpo)



FCC (centrada en las caras)

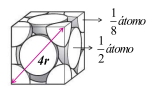




Factor de empaquetamiento atómico (FEA) o índice (PEI):

$FEA = \frac{n^{\circ} \text{ átomos} \cdot \text{volumen atómico}}{\text{volumen de la celda unidad}}$
 $\frac{4}{3} \pi r^3$
 a^3

Ejemplos: 1º FEA en la red FCC: Al, Cu, Ni, Pb, Fe y



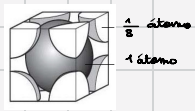
$FEA = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = 0.7405$

a para la FCC



$a^2 + a^2 = (4r)^2$
 $2a^2 = 16r^2$
 $a^2 = 8r^2$
 $a = 2\sqrt{2}r \rightarrow a^3 = (2\sqrt{2}r)^3 = 8 \cdot 2\sqrt{2}r^3 = 16\sqrt{2}r^3$

2º FEA en la red BCC



$FEA = \frac{2 \text{ átomos} \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3}$
 $FEA = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{8\pi r^3}{a^3} = \frac{8\pi}{8} = 0.6802$

a para la BCC



$a^2 + 2a^2 = (4r)^2$
 $3a^2 = 16r^2$
 $a = \sqrt{\frac{16r^2}{3}} = \frac{4r}{\sqrt{3}}$
 $a^3 = \frac{64r^3}{\sqrt{3}^3} = \frac{64r^3}{3\sqrt{3}}$

Ocupación

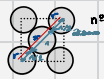
Definimos la ocupación de estas maneras:

- ADIMENSIONAL**
 - direcciones plano
 - espacio
- DIMENSIONAL**
 - direcciones at/nm Átomo/nanómetro
 - plano at/nm^2
 - volumen g/cm^3

- 1º **Densidad lineal**: nº de puntos reticulados por unidad de longitud a lo largo de una dirección.
Direcciones compactas: los átomos están en contacto directo a lo largo de una dirección.

$\text{Densidad atómica lineal} = \frac{n^{\circ} \text{ de átomos contados por su centro}}{\text{longitud de la línea}}$

Ejemplo: el aluminio tiene una red tipo FCC, el radio atómico es $r_{Al} = 0.143 \text{ nm}$. Calcule la densidad lineal a lo largo de las diagonales de la cara.



$n^{\circ} \text{ de átomos contados: } 2$
 $\text{densidad lineal} = \frac{2}{\sqrt{2}a} = \frac{2}{4r} = \frac{2}{4 \cdot 0.143} = 0.9485 \text{ at/nm}$

- 2º **Densidad atómica superficial** (o densidad planar): nº de átomos cuyo centro cae directamente sobre el plano.
Planos más compactos: los que mayor densidad presentan.

$\text{Densidad atómica superficial} = \frac{n^{\circ} \text{ de átomos contados por su centro}}{\text{área del plano}}$

$\text{Ocupación planar } \% = \frac{2\pi r^2}{a^2}$

Ejemplo: el aluminio tiene una red tipo FCC, el radio atómico es $r_{Al} = 0.143 \text{ nm}$. Calcule la densidad planar y el porcentaje ocupado correspondiente a la familia {100}.



$\text{densidad planar} = \frac{2 \text{ at}}{a^2} = \frac{2}{(2\sqrt{2}r)^2} = \frac{2}{4 \cdot 2r^2} = \frac{2}{8 \cdot 0.143^2} = 1.1115 \text{ at/nm}^2$

$a^2 = a^2 = 4r^2, a = 2\sqrt{2}r$

Redes cristalinas en materiales cerámicos

Sólidos cerámicos: covalentes e iónicos.

$$\% \text{ iónico} = \left(1 - e^{-\frac{x_A - x_B}{4}} \right)$$

electronegatividad

$$E_{\text{coh}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{2 \cdot z_+ z_- e^2}{d} \cdot A \cdot N_A \cdot \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

Diferencia entre enlace iónico y covalente:

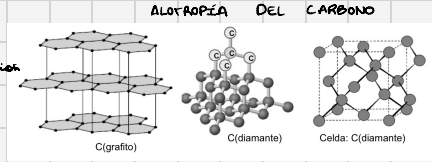
- $|x_A - x_B| < 0.5 \rightarrow$ enlace covalente (comparten e⁻)
- $|x_A - x_B| > 2 \rightarrow$ enlace iónico (se ceden e⁻)

Tipos de sólidos

Sólidos covalentes

Propiedades:

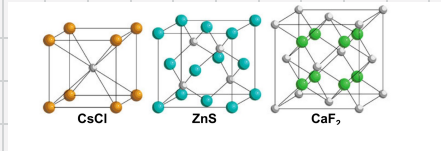
- Enlace fuerte **dirrecional** \rightarrow fu. de atracción entre moléculas depende de la orientación
- Gran dureza
- Ptos. de fusión y ebullición altos
- Insolubles
- Malos conductores
- Ejemplos: Si, Ge, CSI, SiO₂, NAl, C (diamante y grafito)








Sólidos iónicos

Propiedades:

- Ptos. de red ocupados por **cationes** y **aniones** que se mantienen unidos por fzas. electrostáticas.
- Los iones tienden a unirse del máximo número de iones de signo contrario
- **Enlace no dirrecional**
- Duros, frágiles, pto. de fusión alto
- Malos conductores de calor y electricidad



Estabilidad en la coordinación anión - catión en función de sus tamaños relativos.

Número de coordinación	$\frac{r_{\text{catión}}}{r_{\text{anión}}}$	Disposición de iones alrededor del ión central	Geometría de coordinación
2	< 0.155	alineados	
3	$0.155 - 0.225$	vértices triángulo	
4	$0.225 - 0.414$	vértices tetraedro	
6	$0.414 - 0.732$	vértices octaedro	
8	$0.732 - 1.0$	vértices cubo	

Estructura CsCl

$$\frac{r_{\text{Cs}^+}}{r_{\text{Cl}^-}} = \frac{0.149 \text{ nm}}{0.181 \text{ nm}} = 0.823$$

COORDINACIÓN: cúbica en anión y catión

REO DE PAQUETES: cúbica simple

IONES/celda unidad: $1 \text{Cs}^+ + 1 \text{Cl}^-$

Otros materiales con la misma estructura: CsBr, CsI, AlN, NH₄Br ...

Estructura NaCl

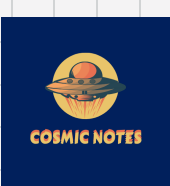
$$\frac{r_{\text{Na}^+}}{r_{\text{Cl}^-}} = \frac{0.102 \text{ nm}}{0.181 \text{ nm}} = 0.56$$

COORDINACIÓN: octaédrica $n=6$

EMPAQUETAMIENTO: FCC de Cl⁻ y FCC de Na⁺

IONES/celda unidad: $4 \text{Cl}^- + 4 \text{Na}^+$

Otros materiales con la misma estructura: MgO, CaO, NaO, FeO, MgS, BaS



Estructura ZnS

$$\frac{r_{Zn^{2+}}}{r_{S^{2-}}} = \frac{0.06 \text{ nm}}{0.174 \text{ nm}} = 0.345$$

COORDINACIÓN: **tetraédrica**

EMPAQUETAMIENTO: S^{2-} se colocan en FCC y Zn^{2+} en la mitad de los huecos tetraédricos

Iones/celda unidad: $4Zn^{2+} + 4S^{2-}$

Difracción de rayos X

- La difracción ocurre cuando los rayos X interactúan con una red cristalina, generando patrones de interferencia.
- Las interferencias pueden ser **destructivas** o **constructivas**.
↳ se da cuando la diferencia entre los rayos difractados es un múltiplo entero de la longitud de onda λ (diferencia de caminos ópticos).
- Ley de Laue:** para que se de una interferencia constructiva el rayo de impacción θ_i ha de ser igual al de difracción θ_r .

Ondas en fase: sus Amplitudes se suman
↓
Interferencia constructiva

Ondas no en fase: sus amplitudes se anulan
↓
Interferencia destructiva

Ley de Bragg (diferencia de caminos ópticos): $n\lambda = 2d \sin \theta$

sendo d la distancia interplanar: $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

Condiciones de difracción y extinción para los planos

Tipo de celdilla	Condición para la difracción de planos	Condición para la extinción de planos
BCC	$(h+k+l)$ par	$(h+k+l)$ impar
FCC	$(h+k+l)$ todos pares o impares	(h, k, l) no todos pares o impares
HCP	todos los otros casos	$(h+2k)$ múltiplo de 3 índice impar

Planos	$h^2 + k^2 + l^2$	FCC	BCC
(100)	1	No	No
(110)	2	No	Sí
(111)	3	Sí	No
(200)	4	Sí	Sí

Hay que tener en cuenta que: $2\theta = \text{ángulo difracción}$
 $\theta = \text{ángulo de Bragg}$

Ejemplo:

Una muestra de molibdeno BCC se introdujo en un difractómetro de rayos X. Utilizando una longitud de onda $\lambda = 0.1543 \text{ nm}$, se obtuvo difracción de los planos (200) a $2\theta = 58.618^\circ$. Calcular el radio atómico del molibdeno BCC. (Considérese sólo la difracción de primer orden, $n = 1$).

$$\begin{cases} 2\theta = 58.618^\circ \\ \theta = 29.309^\circ \end{cases} \quad n\lambda = 2d \sin \theta \quad ; \quad 0.1543 = 2d \cdot \sin 29.309^\circ \quad ; \quad d = 0.1576 \text{ nm}$$

$$\text{Plano } \{200\} \quad d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad ; \quad 0.1576 \text{ nm} = \frac{a}{\sqrt{2^2}} \quad ; \quad a = 0.3152 \text{ nm}$$

Para los planos BCC:

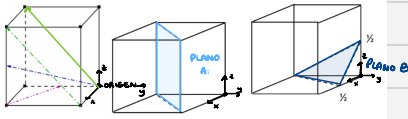


$$\begin{aligned} a^2 + 2a^2 &= (4r)^2 \\ 3a^2 &= 16r^2 \\ a &= \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad \rightarrow \quad 0.3152 = \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad ; \quad r = 0.1565 \text{ nm} \end{aligned}$$



PROBLEMAS TEMA 1: Sólidos cristalinos

1a.- Determine los índices de Miller de las direcciones y los planos de la figura.



Ueda: $[0, -1, 1]$
 Poca: $[-1, 1/2, 0] \rightarrow [\bar{2}, 1, 0]$
 Morado: $[1, -1, 1/2] \rightarrow [2, \bar{2}, 1]$
 Plano A: $(1, \bar{1}, \infty) \rightarrow (1, \bar{1}, 0)$
 Plano B: $(1/2, -1/2, \infty) \rightarrow (\bar{2}, \bar{2}, 2)$

2a.- El plomo cristaliza en el sistema cúbico centrado en las caras (FCC) y su radio atómico es 0,175 nm. ¿Cuál será el ángulo de Bragg de la primera difracción si se utiliza radiación X monocromática de longitud de onda 0,154 nm?

Datos: $\begin{cases} \text{estructura FCC} \\ r = 0.175 \text{ nm} \\ \lambda = 0.154 \text{ nm} \\ n = 1 \end{cases}$ ¿Ángulo de Bragg: θ ? la primera que se cumple es para la (111) FCC (100)

$n\lambda = 2d \sin\theta$; $0.154 = 2 \cdot 0.175 \sin\theta$; $\theta = 15.63^\circ$
 $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$; $d = \frac{2\sqrt{2} \cdot 0.175 \text{ nm}}{\sqrt{3}}$; $d = 0.175 \text{ nm}$

Para las FCC:



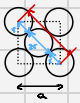
$a^2 + a^2 = (4r)^2$
 $2a^2 = 16r^2$
 $a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2}r$

2b.- Calcule la densidad planar, expresada como át/nm², del plano correspondiente a la segunda línea de difracción del diagrama de rayos X.

(200)

Densidad atómica superficial = $\frac{n^{\circ} \text{ de átomos cortados por su centro}}{\text{área del plano}} = \frac{2}{a^2} = \frac{2}{0.1495^2} = 8.1632 \text{ at/nm}^2$

Para las FCC:



$a^2 + a^2 = (4r)^2$
 $2a^2 = 16r^2$
 $a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2}r = 2\sqrt{2} \cdot 0.175 = 0.1495 \text{ nm}$

¿Y su porcentaje de ocupación?

Ocupación planar % = $\frac{2\pi r^2}{a^2} = \frac{2\pi \cdot 0.175^2}{0.1495^2} = 0.485$

2c.- Calcule la densidad del plomo.

Datos: Pb(masa atómica) = 207g/mol, $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ át/mol

$\rho = \frac{m}{V} = \frac{m}{\frac{1}{2} N_A \cdot a^3}$; $\rho = \frac{4 \text{ átomos} \cdot 207 \text{ g/mol}}{1.213 \cdot 10^{23} \text{ cm}^3 \cdot 6.022 \cdot 10^{23} \text{ átomos/mol}} = 11.34 \text{ g/cm}^3$

$V_c = a^3 = (0.1495 \text{ nm})^3 = \frac{10^{-24} \text{ cm}^3}{1 \text{ nm}^3} = 1.118 \cdot 10^{-23} \text{ cm}^3$



3.- En un meteorito que ha caído en la tundra siberiana se encuentran pequeños cristales metálicos cuya red es cúbica centrada en el cuerpo (BCC), pudiendo ser cromo, wolframio o vanadio. Se realiza un análisis de estos cristales mediante difracción de rayos X utilizando radiación monocromática de longitud de onda 0,154 nm observándose que el primer pico de difracción se obtiene para un ángulo de difracción de 42,0°. Sabiendo que el radio atómico del cromo es de 0,125 nm, del wolframio es 0,137 nm y el del vanadio es de 0,132 nm, determine de que metal se trata.

Datos:

- Red BCC
- $\lambda = 0,154 \text{ nm}$
- Primer pico de difracción para BCC es el (110) (ver tabla pag 9)
- $2\theta = 42^\circ \rightarrow \theta$ (ángulo de Bragg) = 21°
- Radio Cr = 0,125 nm
- rW = 0,137 nm
- rV = 0,132 nm

↓ Ley de Bragg:

$n\lambda = 2d \sin \theta$ → $0,154 \text{ nm} = 2 \cdot \frac{4r}{\sqrt{8}} \sin 21^\circ$; $r = \frac{0,154 \cdot \sqrt{8}}{8 \cdot \sin 21^\circ} = 0,142 \text{ nm}$ Este radio corresponde al radio del vanadio, así que este es el material que hemos analizado.

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}; \quad a = \frac{4r}{\sqrt{2}} = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

Para la estructura BCC:



4.- Se sabe que una sustancia cristaliza en el sistema cúbico. Se realiza un experimento de difracción de rayos X usando una radiación de longitud de onda $\lambda = 1,5405 \text{ \AA}$ y se obtienen los siguientes valores para los ángulos de difracción:

- 2 θ : 38,46° 44,74° 65,12° 78,22° 82,44° 99,08° 112,04°
 θ : 19,23° 22,37°

Determine si la red es BCC o FCC.

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

La 1ª línea de difracción para BCC es (110) y para FCC (111)

FCC		BCC
1ª Difracción (111) $\lambda = \frac{2a}{\sqrt{1^2+1^2+1^2}} \cdot \sin(19,23^\circ)$	(110)	$\lambda = \frac{2a}{\sqrt{1^2+1^2}} \cdot \sin(19,23^\circ)$
2ª Difracción (200) $\lambda = \frac{2a}{\sqrt{2^2}} \cdot \sin(22,37^\circ)$	(200)	$\lambda = \frac{2a}{\sqrt{2^2}} \cdot \sin(22,37^\circ)$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\sin 19,23^\circ}{\sin 22,37^\circ} &= \frac{\frac{\lambda \cdot \sqrt{3}}{2a}}{\frac{\lambda \cdot \sqrt{4}}{2a}} \\ &= \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4}} = 0,75 \end{aligned} \right\}$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\sin 19,23^\circ}{\sin 22,37^\circ} &= \frac{\frac{\lambda \cdot \sqrt{2}}{2a}}{\frac{\lambda \cdot \sqrt{4}}{2a}} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{4}} = 0,707 \end{aligned} \right\}$$

RESUMEN CONCISO TEMA 1: SÓLIDOS CRISTALINOS

Isotropía y anisotropía

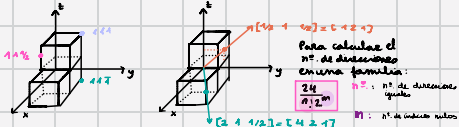
↳ material cuyas propiedades físicas son iguales en todas las direcciones.
Anisotropía es lo opuesto.

Polimorfismo y alotropía

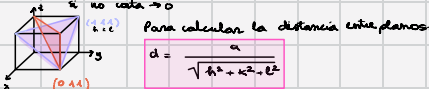
↳ sustancia cuya ordenación de materia, funciona en función de la P y T .

Notación de Miller

Puntos reticulares:



Planos se suman donde no corta a la celda.



SISTEMA HEXAGONAL (Miller-Bravais)

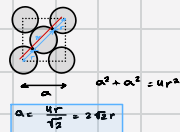
Aparte un nuevo índice $i = -(h+k)$ tal que para denotar un plano (h, k, i, l)

Empaquetamiento de redes cristalinas

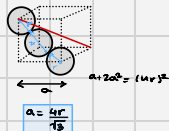
SC (Cúbica Simple)



FCC (centrada en las caras)



BCC (centrada en el cuerpo)



Factor de empaquetamiento atómico

$$FEA = \frac{n^\circ \text{ átomos} \cdot \text{volumen atómico}}{\text{volumen celda unidad}} = \frac{n^\circ \text{ átomos} \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3}$$

FEA para la red FCC: Al, Cu, Ni, Pb, Fe γ .

$$FEA = \frac{4 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{(2\sqrt{2}r)^3} = 0.7405$$

FEA para la red BCC:

$$FEA = \frac{2 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = 0.6802$$

Ocupación

Densidad lineal = $\frac{n^\circ \text{ átomos cotados por su ancho}}{\text{longitud línea}}$

Densidad planar = $\frac{n^\circ \text{ átomos cotados por su ancho}}{a^2}$

↳ ocupación planar = $\frac{2\pi r^2}{a^2}$

Densidad volumétrica = $\frac{n^\circ \text{ átomos en la celda} \cdot M}{a^3 \cdot N_A}$

Redes cristalinas más frecuentes:

RED	át / celda	Átomos oct/celda	Átomos tet/celda	Z.C.	estructura
FCC	4	4	8	12	ABCBC
HC	6	6	12	12	AAAAA
BCC	2	6	12	8	

Sólidos cerámicos

$$\% \text{ iónico} = \left(1 - e^{-\frac{X_A - X_B}{4}}\right)$$

$$E_{\text{ión}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2 \cdot e^2}{d} \cdot A \cdot N_A \cdot (1 - f_0)$$

$$f_0 = \begin{cases} |X_A - X_B| < 0.5 \rightarrow \text{enlace covalente} \\ |X_A - X_B| > 2 \rightarrow \text{enlace iónico} \end{cases}$$

Sólidos iónicos

Número de coordinación	Forma	Diagrama de la red iónica del ion central	Geometría de coordinación
2	línea	línea	línea
3	triángulo	triángulo	triángulo
4	tetraedro	tetraedro	tetraedro
6	octaedro	octaedro	octaedro
8	cubo	cubo	cubo

Estructura CsCl: $\frac{r_{Cs^+}}{r_{Cl^-}} = 0.94 > 0.732$

coordinación: octa en iones y cubo en iones
Íones/redes coordinadas: $1Cs^+ 1Cl^-$

otros materiales: Cs $_2$, Cs $_2$, AlN, AlN, Ga $_2$,...

Estructura NaCl: $\frac{r_{Na^+}}{r_{Cl^-}} = 0.56$

coordinación: octa en iones
Íones/redes coordinadas: $4Cl^- 4Na^+$

otros materiales: MgO, CaO, NiO, FeO, MgS, ZnS

Estructura CsCl: $\frac{r_{Cs^+}}{r_{Cl^-}} = 0.94$
coordinación: tetraédrica
Íones/redes coordinadas: $4Cs^+ 4Cl^-$

Difracción de rayos X

Ley de Bragg: $n\lambda = 2d \sin\theta$, siendo $d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

Ángulo de Bragg: θ

Ángulo de difracción: 2θ

Condiciones de difracción y extinción para los planos

Tipo de celda	Condición para la difracción de planos	Condición para la extinción de planos
BCC	$(h+k+l)$ par	$(h+k+l)$ impar
FCC	(h, k, l) todos pares o impares	(h, k, l) no todos pares o impares
HCP	todos los otros casos	$(h+k+l)$ impar