

Información General sobre Materiales, Seguridad y Equipos para la Nanotecnología

ESC 211

Traducción: Prof. Rogerio Furlan – Universidad de Puerto Rico en Humacao

© 2013 The Pennsylvania State University

Unidad 3

Visión General de Materiales

Conferencia 5

Clasificando los Materiales según su Estructura

Contenido

- Los bloques de construcción básicos de los materiales - Átomos
- Átomos, moléculas y materiales
- Maneras de clasificar los materiales
 - * Tipo de enlace químico
 - * Orgánico e Inorgánico
 - * Fase
 - * Estructura
 - * Propiedades Químicas
 - * Propiedades Físicas

Contenido de esa Lectura

- **Maneras de clasificar los materiales**
 - * **¿Qué se entiende por "Estructura"?**
 - * **Tipos de Estructuras**

Clasificando los materiales según su estructura

Organización estructural de los materiales

- Cuando hablamos de estructura nos estamos limitando nosotros mismos a los materiales en la **fase sólida**.
- Por estructura entendemos como los átomos o moléculas se posicionan dentro del material.
- Existen tres organizaciones estructurales básicas que los átomos o moléculas pueden tener en un sólido:
 - **Cristalina** (un solo tipo de cristal)
 - **Policristalina** (muchos cristales)
 - **Amorfa** (¡ningún cristal!)

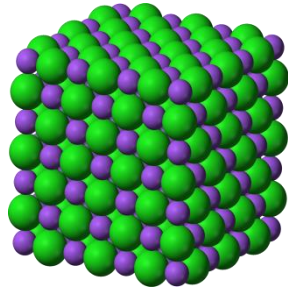
Organización Estructural (Continuación)

- **Cristalina**

- Los átomos están dispuestos en un patrón de rejilla regular y repetitivo en todas las dimensiones; los alrededores de cada tipo de átomo (o molécula) son idénticos.
- Cuando materiales cristalinos tienen enlace covalente esos pueden ser frágiles como las láminas de silicio.
- En el otro extremo, materiales cristalinos pueden ser maleables como Au cuando tienen enlaces metálicos.

Materiales Monocristalinos

Ejemplo: la Sal de Mesa (Halita)



Estructura de nano-escala de la **halita** (material iónico). Se muestra aquí como un solo cristal. La estructura se repite continuamente (púrpura corresponde a iones de sodio; iones de cloro son verde). Como se ve, hay **simetría cúbica** en el arreglo de los átomos. **Tenga en cuenta que los diferentes planos son distintos.**

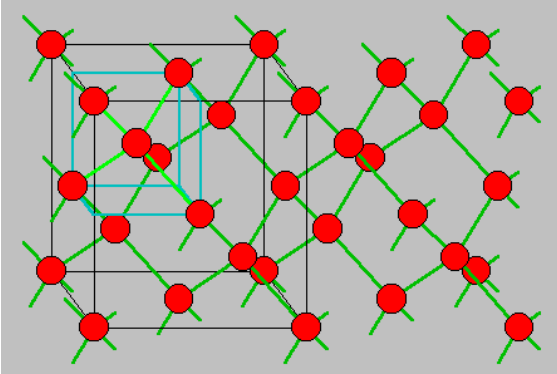


Estructura de macro-escala de la **halita** (material iónico). La muestra tiene 10 cm de ancho y se observan muchos cristales. El ángulo recto entre facetas cristalinas es debido a la simetría cúbica del arreglo de los átomos.

<http://en.wikipedia.org/wiki/File:Halite-36944.jpg>

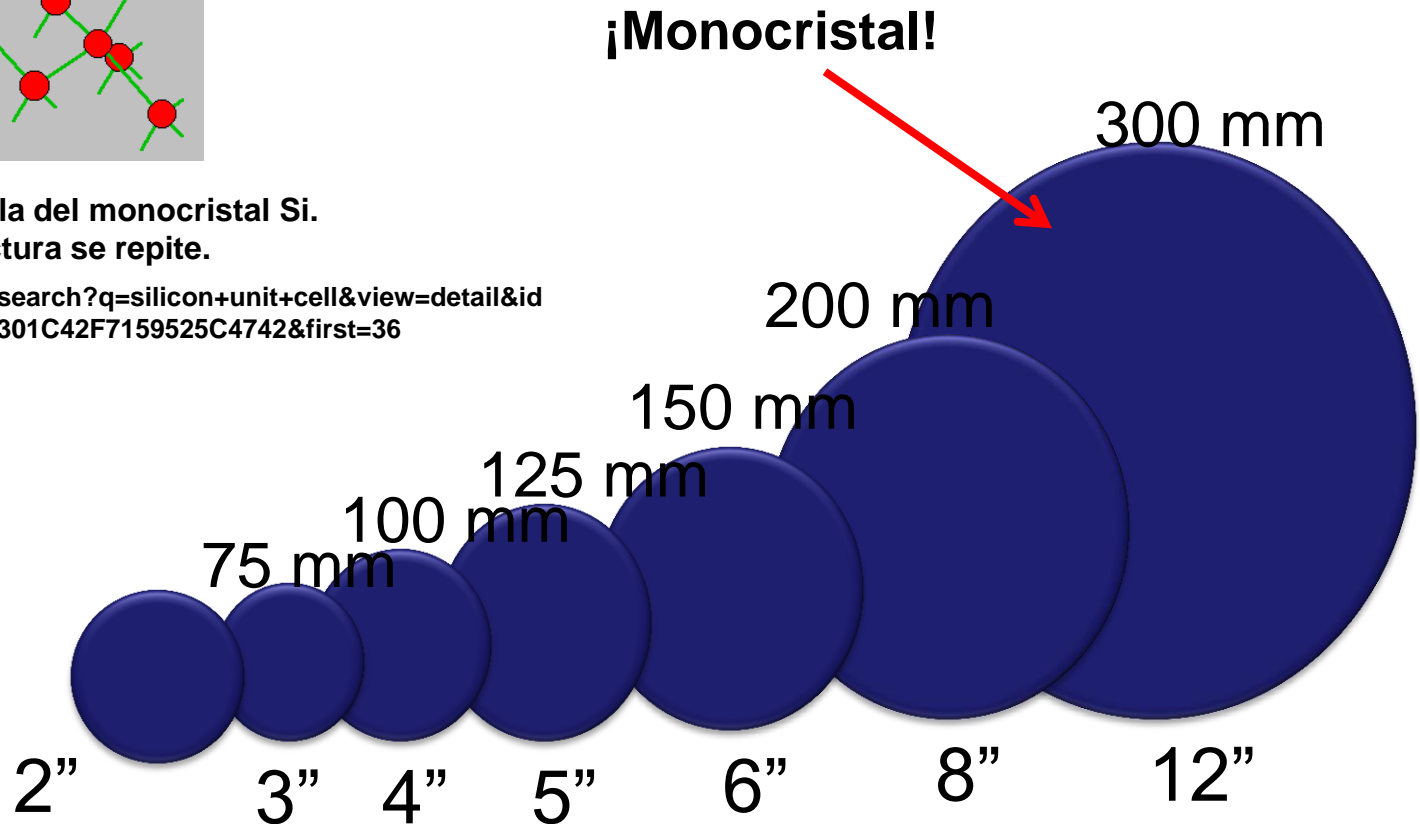
Materiales Monocristalinos

Otro ejemplo: Láminas de silicio



Estructura de nano-escala del monocristal Si.
Se observa que la estructura se repite.

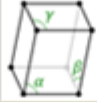

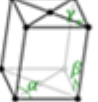
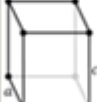



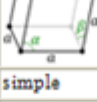
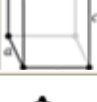
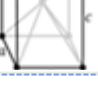
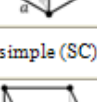
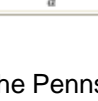
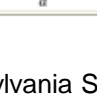
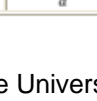
<http://www.bing.com/images/search?q=silicon+unit+cell&view=detail&id=2A7B169FA7BD26B4A6CED301C42F7159525C4742&first=36>



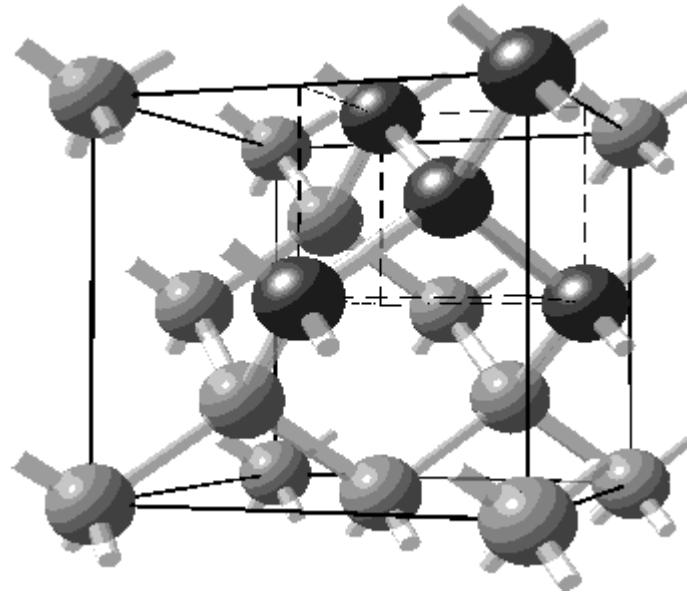
Celdas Unitarias y Estructuras Cristalinas

- **Celda unitaria** es la estructura básica que cuando repite construye un cristal.
- Las posiciones de los átomos (o moléculas) siguen una **red** y una **receta** dentro de la celda unitaria.

Celdas Unitarias y Estructura Cristalina

The 7 unit cells (From least to most symmetric)	The 14 Bravais Lattices			
1. <u>triclinic</u> (none)	$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 			
2. <u>monoclinic</u> (1 diad)	simple $\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 	base-centered $\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$ 		
3. <u>orthorhombic</u> (3 perpendicular diads)	simple $a \neq b \neq c$ 	base-centered $a \neq b \neq c$ 	body-centered $a \neq b \neq c$ 	face-centered $a \neq b \neq c$ 
4. <u>rhombohedral</u> (1 triad)	$a=b \neq c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$ 			
5. <u>tetragonal</u> (1 tetrad)	simple $a \neq c$ 	body-centered $a \neq c$ 		
6. <u>hexagonal</u> (1 hexad)				
7. <u>cubic</u> (4 triads)	simple (SC) 	body-centered (bcc) 	face-centered (fcc) 	

Las posiciones de los átomos (o moléculas) siguen una **red** y una **receta** dentro de la celda unitaria. Usando Si como ejemplo:

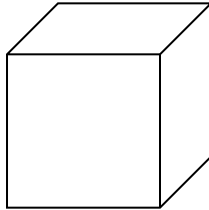


<http://www.bing.com/images/search?q=si+atoms+in+a+unit+cell&view=detail&id=065340CC047843E9EA5AE85E93A4E8D14CCB4E5A&first=1>

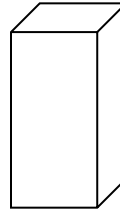
Estructuras Cristalinas

7 sistemas cristalinos

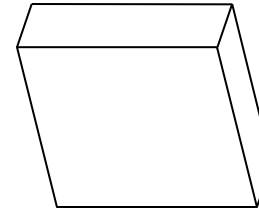
Ejemplos:



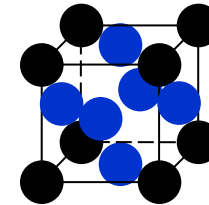
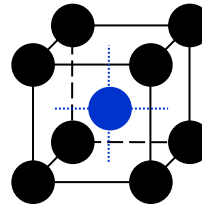
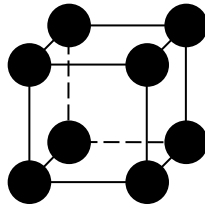
Cúbico



Tetragonal



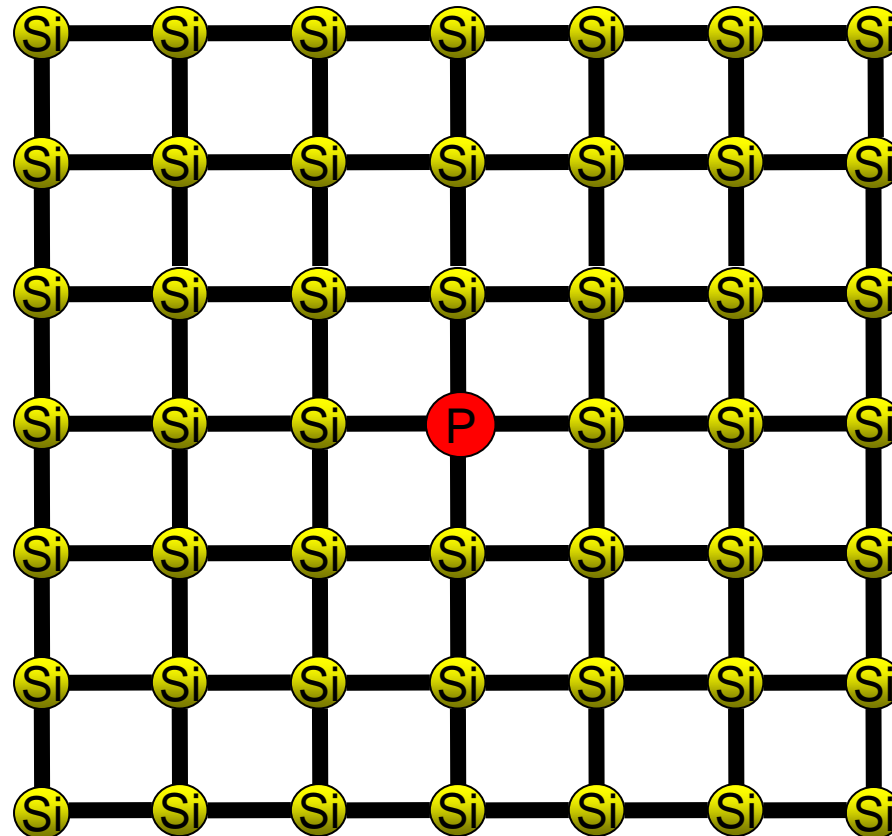
Triclínico



Difracción de rayos x es una herramienta muy útil para determinar:

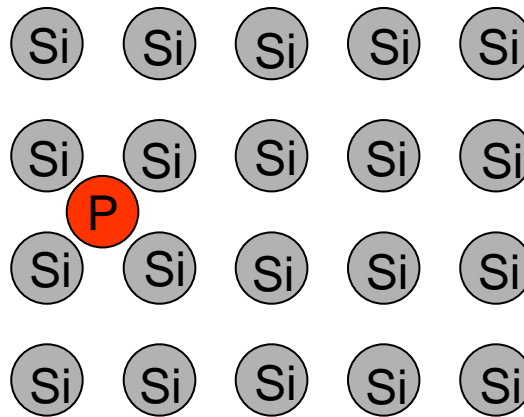
- Si es un material cristalino.
- Los parámetros de red del cristal.
- Para cristales individuales, la disposición 3-D exacta de átomos o moléculas puede calcularse a partir de las intensidades de difracción de rayos x medidas (¡incluso para las estructuras de proteínas con miles de átomos por celda unitaria!).

Defectos de la Red Cristalina: Defectos sustitucionales (mediante representación 2-D)

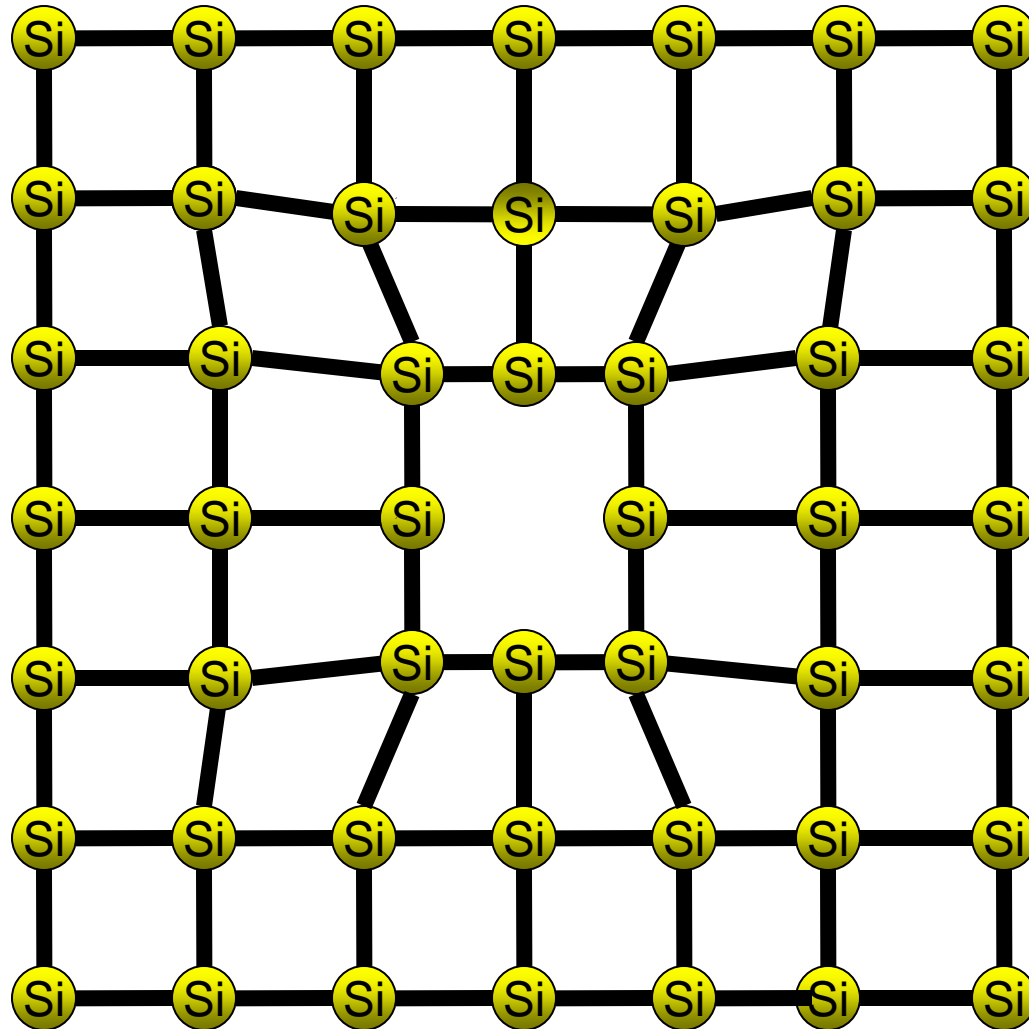


Dominio público: Imagen de uso libre generada por el personal del CNEU

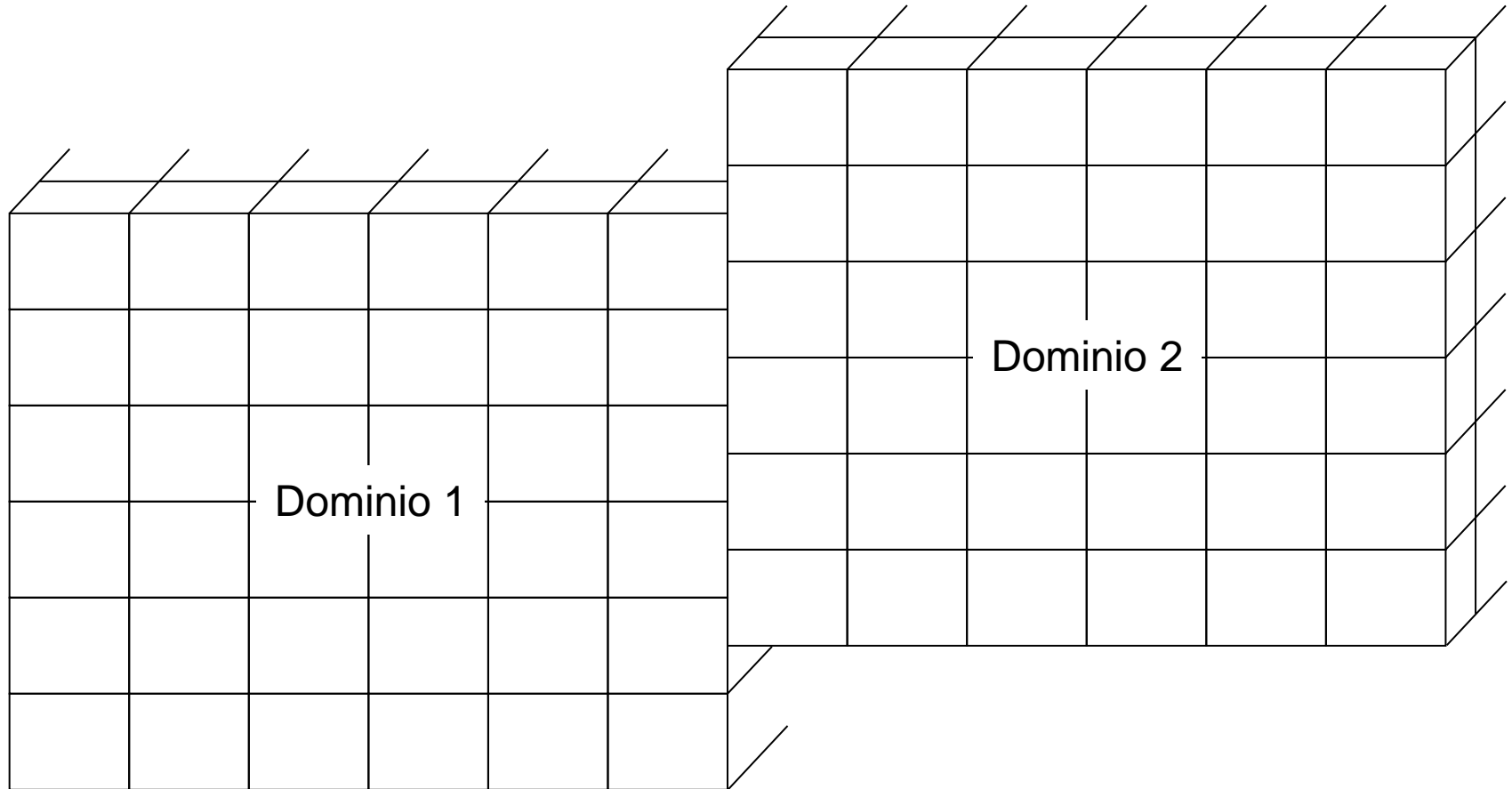
Defectos de la Red Cristalina: Intersticial



Defectos de la Red Cristalina: Vacante



Defectos de la Red Cristalina: Dislocaciones

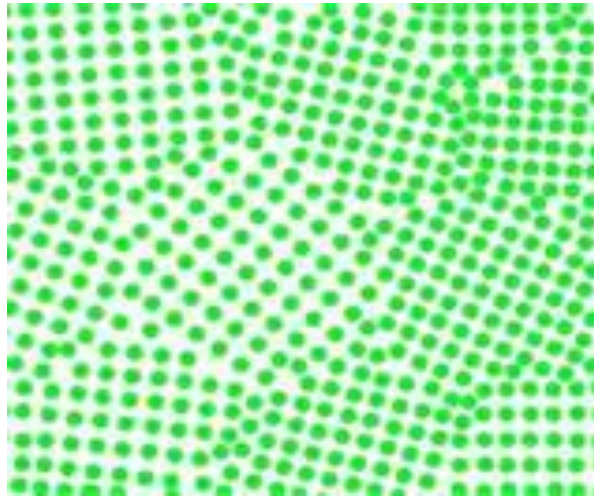


Organización Estructural (Continuación)

Policristalina

- Muchas orientaciones de cristal diferentes dentro de un determinado sólido.
- Estructuras policristalinas poseen orden dentro de un cristal dado (también llamado “**grano**”).
- La región de cambio entre un cristal y otro se llama “**borde, frontera o límite de grano**”.
- Interfaces y límites de grano son áreas de **mayor energía libre** en comparación con un monocristal.

Materiales Policristalinos



<http://www.bing.com/images/search?q=images+of+polycrystalline+materials&qpv=images+of+polycrystalline+materials&FORM=IQFRML>

Materiales Policristalinos

Un Ejemplo: Si Policristalino



Silicio policristalino se utiliza en las células solares.

<http://www.solar-energy-at-home.com/solar-cell.html>

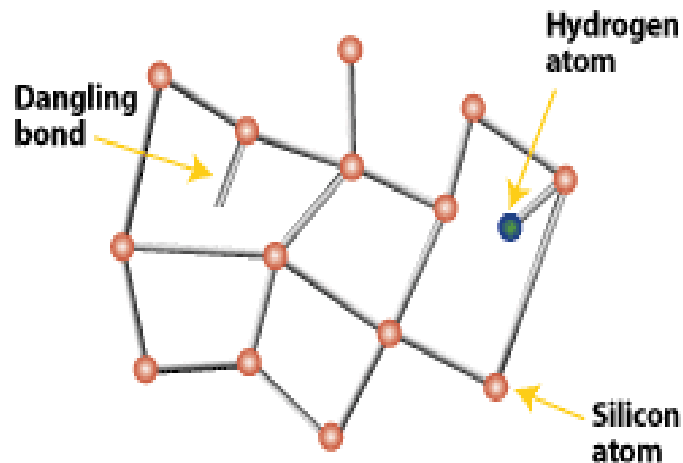
Organización Estructural (Continuación)

Amorfo

- Un material sólido que **carece de cualquier estructura repetitiva** y demuestra desorden estructural a nivel atómico o molecular.
- Estructuras amorfas no tienen ninguna orden de largo alcance.
- No existe tal cosa como un grano o un límite de grano en un sólido amorfo.
- En una más vieja literatura, el término se ha utilizado como sinónimo de **vidrio**. En la actualidad, "sólido amorfo" se considera ser el concepto, y "vidrio" el caso más especial: **un vidrio es un sólido amorfo que se transforma en un líquido al calentar a través de la temperatura de transición vítrea.**

Materiales Amorfos

Un Ejemplo: Silicio Amorfo

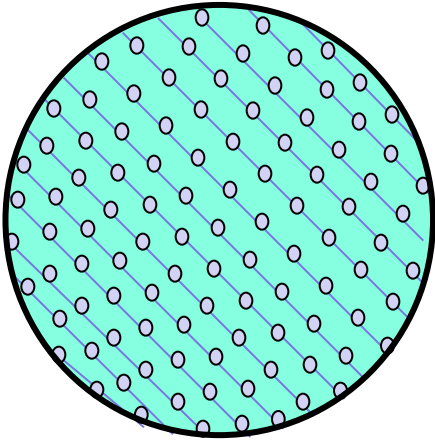


Silicio amorfo--- generalmente hecho como una aleación de Si con hidrógeno y denotado por a-Si:H. Note que resultan enlaces de Si no satisfechos y enlaces de silicio satisfechos con hidrógeno.

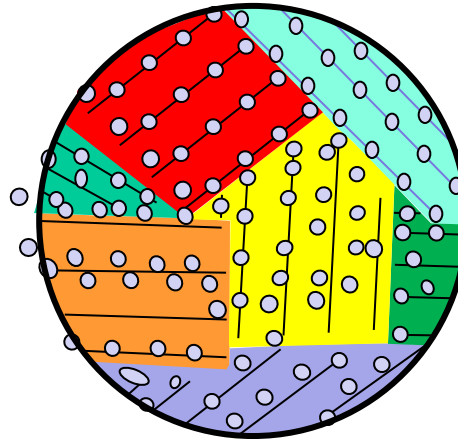
Comúnmente utilizados en **TFTs** (transistores de películas delgadas) para pantallas.

<http://www.bing.com/images/search?q=image+of+amorphous+silicon&view=detail&id=CD519A79241E3644649BA487DDC323BD76489F1B&first=>

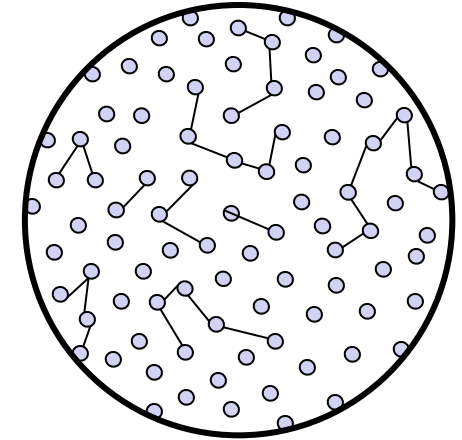
Organización Estructural (Continuación)



Cristalina — Todo el sólido tiene un arreglo ordenado

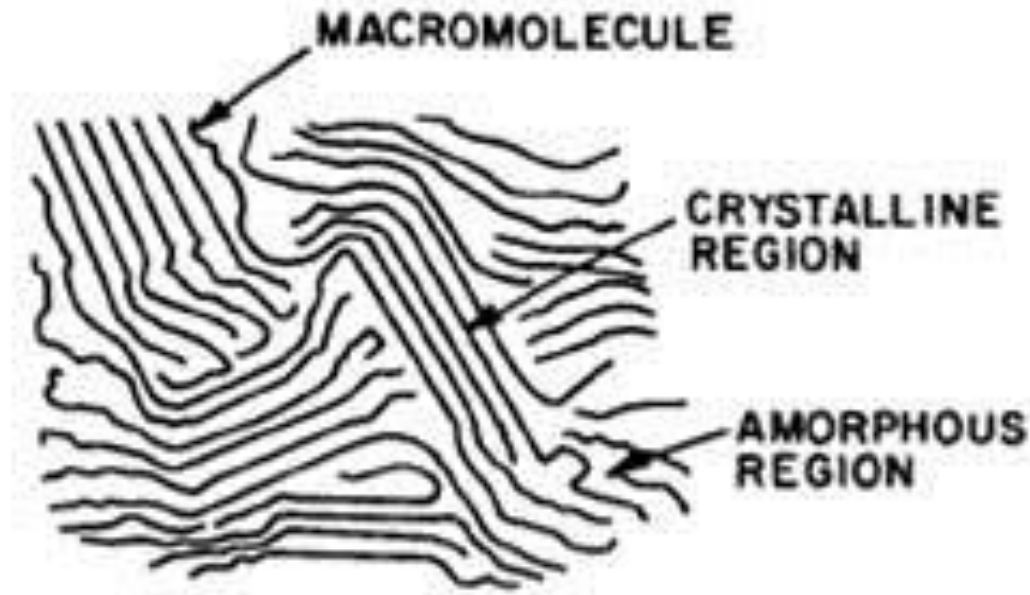


Policristalina — Orden de corto alcance completo en segmentos (granos)



Amorfa — No hay orden de largo alcance reconocible

Estructuras Diferentes Pueden Estar Presentes en el Mismo Material. Un Ejemplo



Sólidos orgánicos que contienen regiones amorfas y cristalinas. Algunas de las moléculas del polímero que constituyen este sólido se encuentran en ambas regiones (es decir, en **ambas fases**).

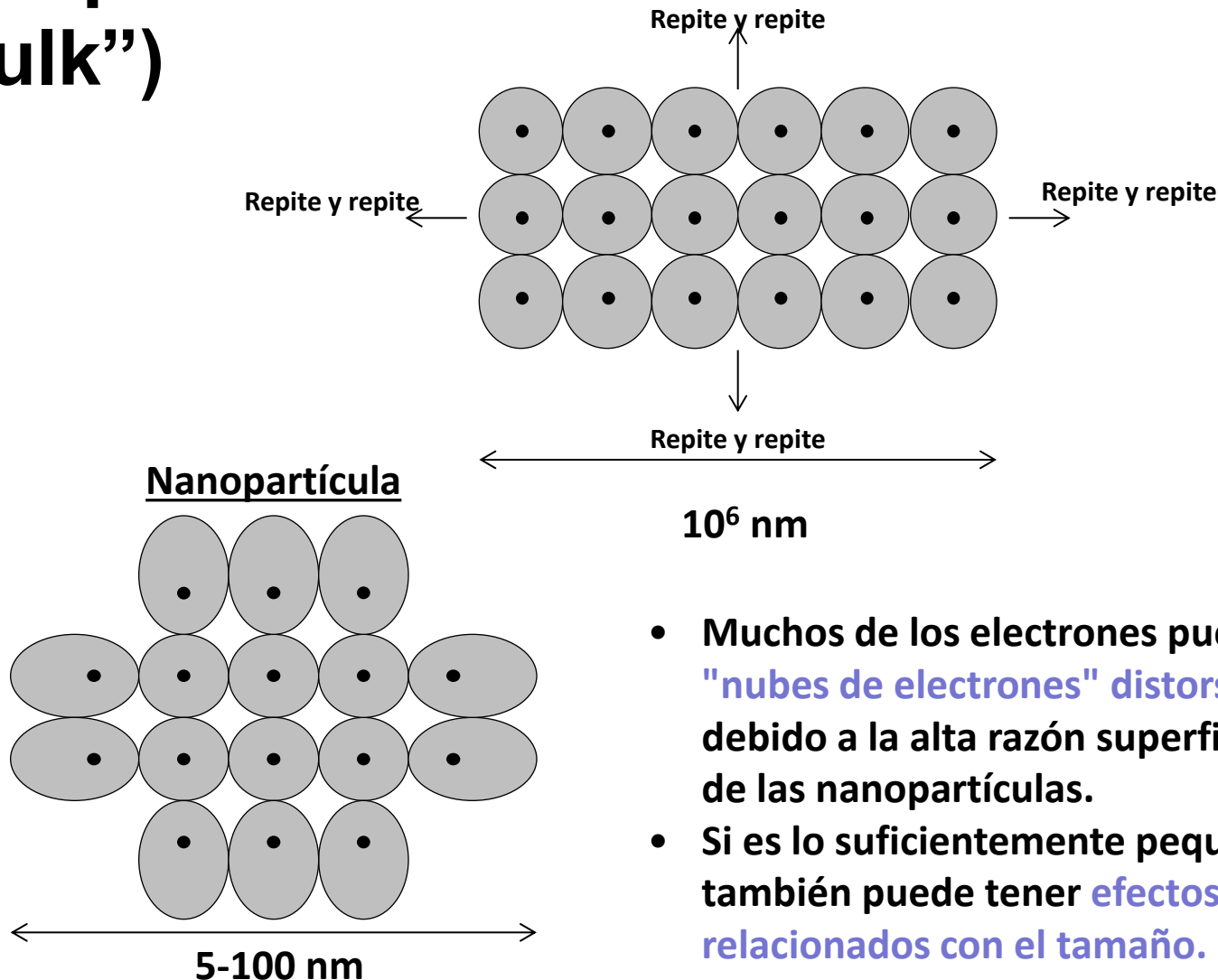
Fonash, S. J. Solar Cell Device Physics (Second Edition)
Copyright © 2010 Elsevier Inc

**Estructura (monocristal,
policristalino, amorfo) puede
afectar las propiedades---pero de
igual manera el tamaño de la
escala.**

Nanopartículas y Efectos del Tamaño

- Las nanopartículas son generalmente consideradas como estructuras con dimensión de $\sim 100\text{nm}$ o menos. Pueden ser amorfas, policristalinas, o cristalinas.

La distribución de electrones y niveles de energía permitidos en una **partícula de tamaño nano** puede ser diferente de la del cuerpo (“bulk”)

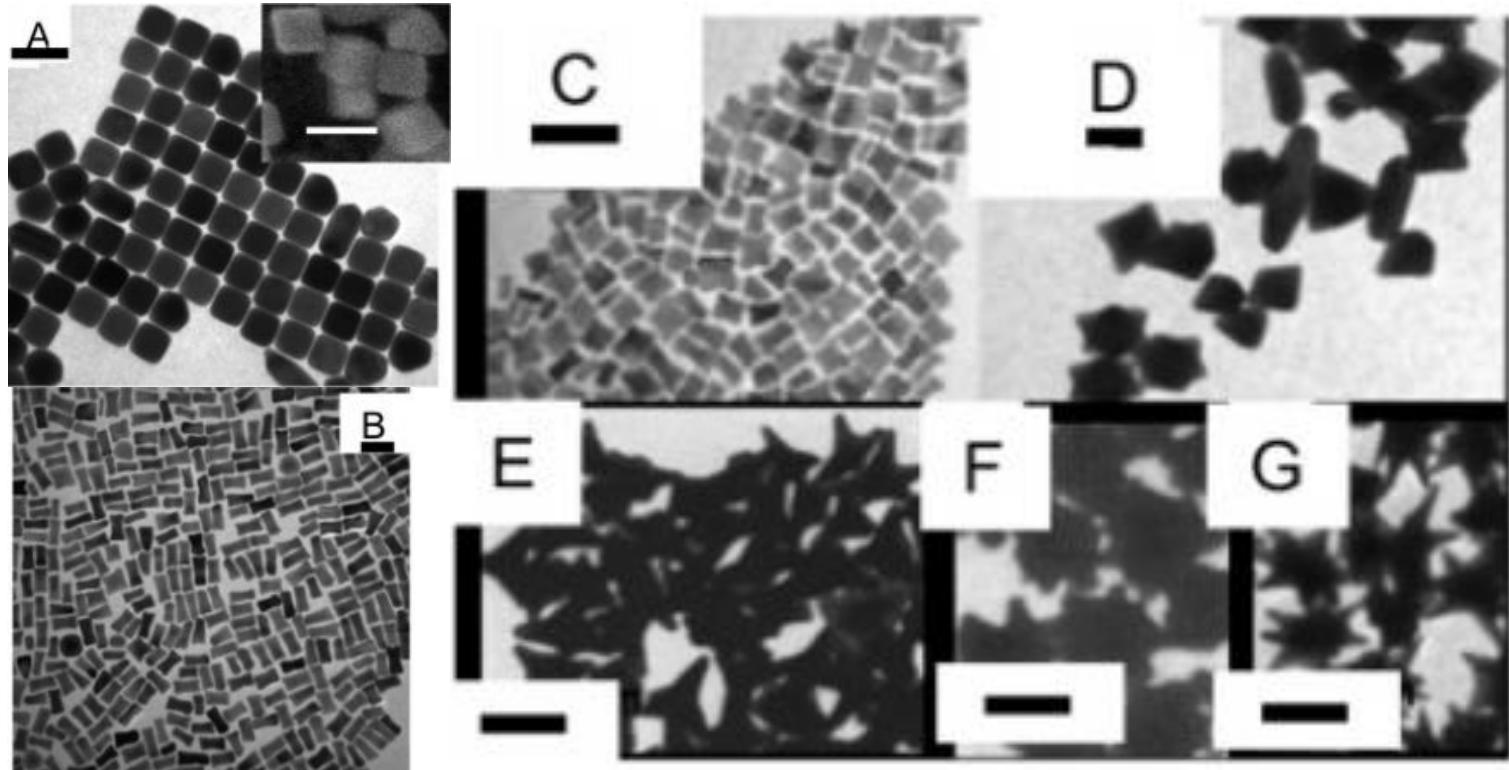


- Muchos de los electrones pueden tener "**nubes de electrones**" **distorsionadas** debido a la alta razón superficie/volumen de las nanopartículas.
- Si es lo suficientemente pequeño, también puede tener **efectos cuánticos relacionados con el tamaño**.

Efectos cuánticos relacionados con el tamaño pueden aparecer en nanopartículas muy pequeñas.

- Cuando efectos cuánticos relacionados con el tamaño están presentes, el impacto, digamos en una nanopartícula cristalina, por ejemplo, puede ser cambios en las propiedades catalíticas, eléctricas y ópticas comparados con los de la contraparte (cuerpo).

Diferentes Formas de Nanopartículas

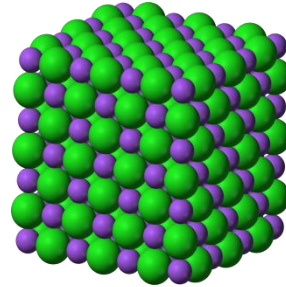


Diferentes formas de nanopartículas de oro. Las barras de escala son 100nm para A, B, C, D y 500nm para E, F, G.

C. J. Murphy et. al, J. Phys. Chem. B., 109, 13857 (2005)

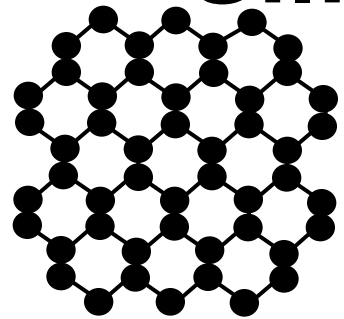
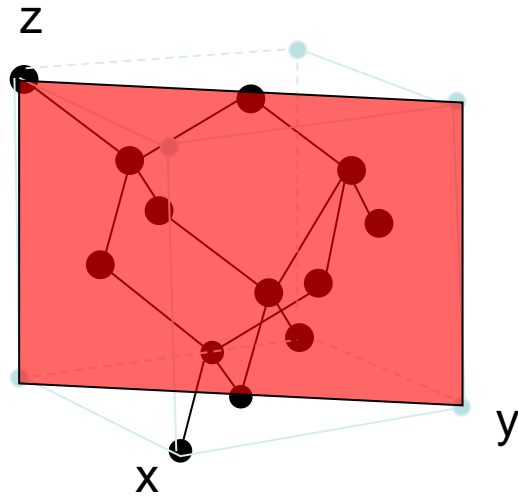
**Volviendo a los sólidos
(cuerpo), las propiedades
pueden ser diferentes en
distintos planos y direcciones
cristalinas.**

Estructura de Nano-Escala en un Plano de un Único Cristal de Sal de Mesa

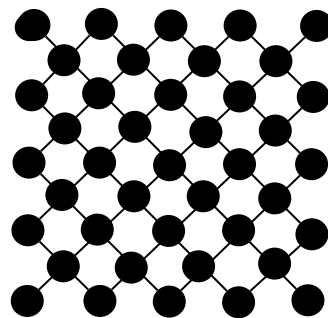
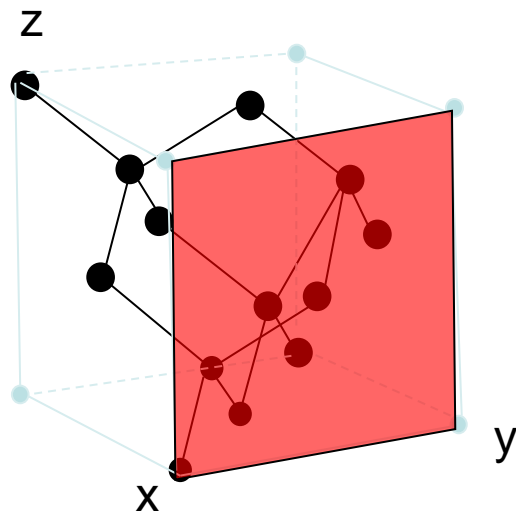
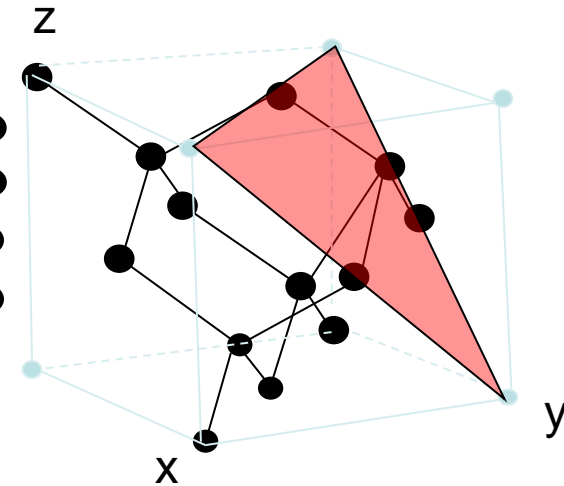
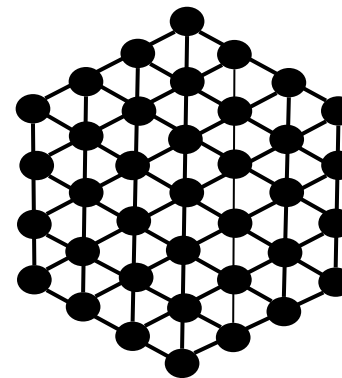


<http://en.wikipedia.org/wiki/File:Halite-36944.jpg>

Estructura Nano-Escala en un Plano de un Único Cristal de Silicio



Tenga en cuenta que los distintos planos son diferentes



Dominio público: Imagen de uso libre generada por el personal de CNEU

**¿Cómo los ingenieros,
científicos y técnicos
describen planos y
direcciones en un cristal?**

**Mediante el uso de “Índices
Miller”**

Índices de Miller para los Planos Cristalográficos

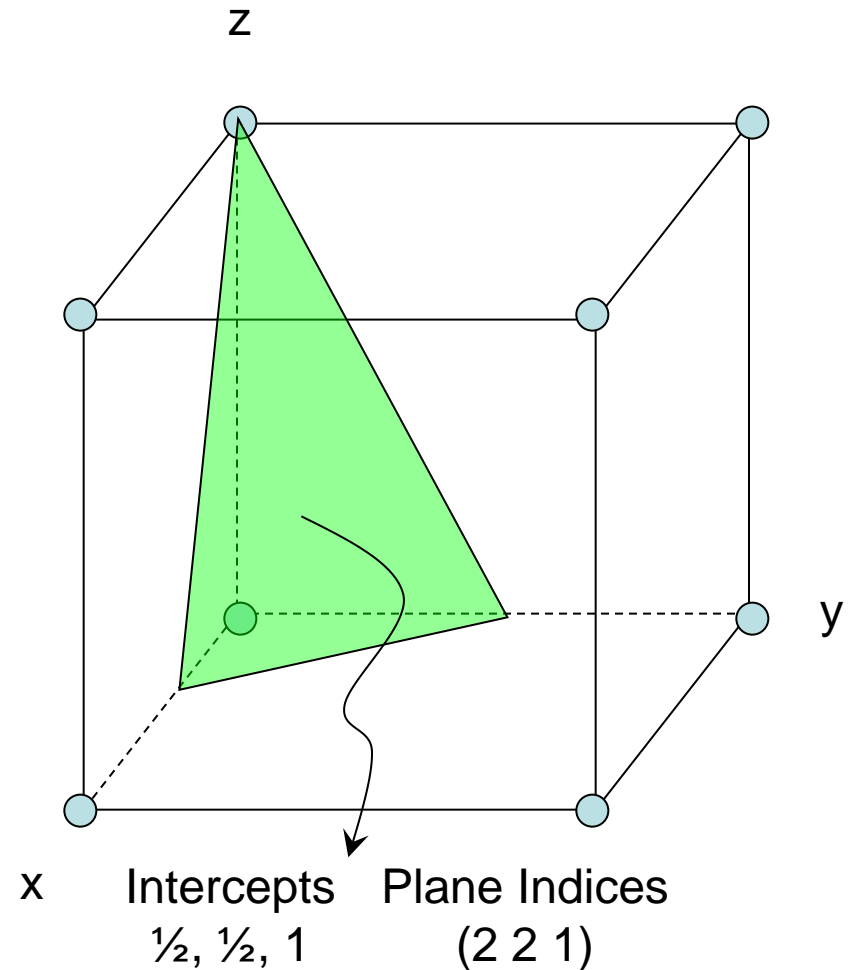
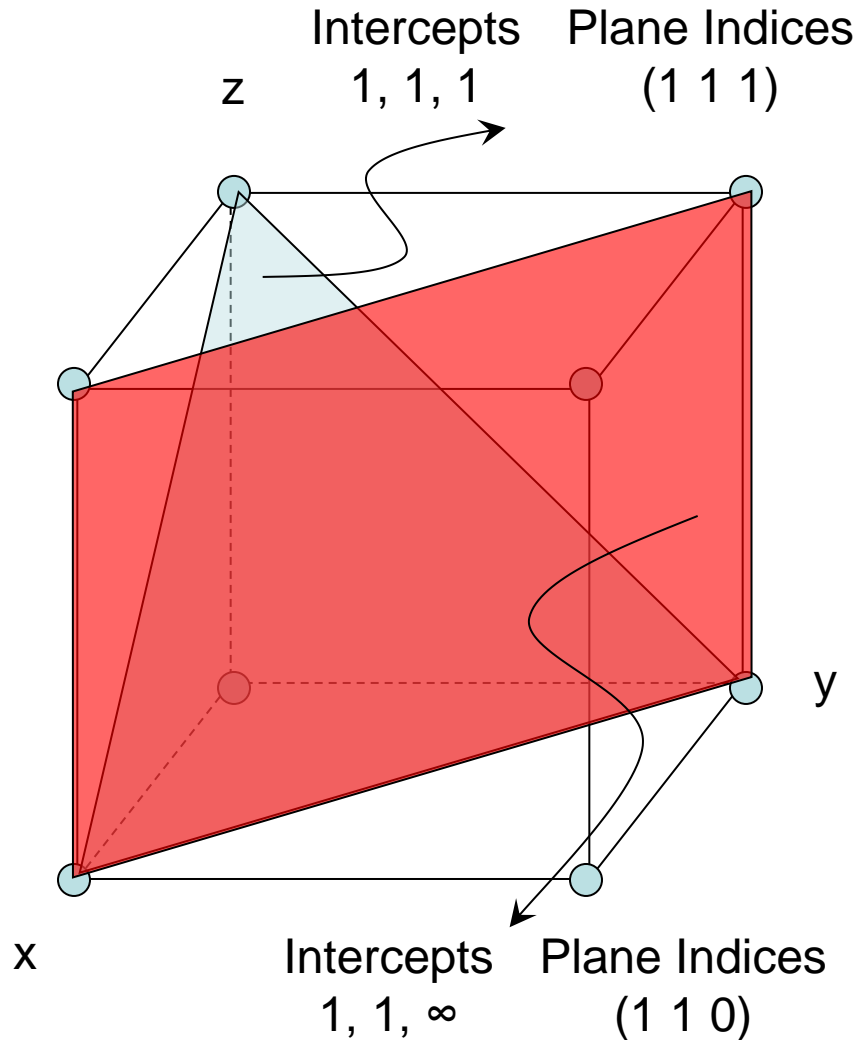
- La celda unitaria y la red cristalina, vistas desde los puntos de referencia diferentes, revelan diferentes planos de átomos.
- Estos planos son identificados por una serie de tres números, conocidos como índices de Miller.
- Direcciones en un cristal pueden ser diferentes y también pueden ser descritas por los índices de Miller.

Reglas de los Índices de Miller para los Planos

Reglas para los Índices de Planos en un Sistema Cúbico

1. Identificar donde los planos se cruzan con los ejes x, y, z.
2. Si el plano es paralelo a un eje, el intercepto es ∞ .
3. Si el plano pasa por el origen, considere un plano en una celda unitaria adyacente.
4. Tome el recíproco de las intercepciones.
5. Escribir planos entre paréntesis sin comas (h k l) y utilizar barras sobre valores negativos.

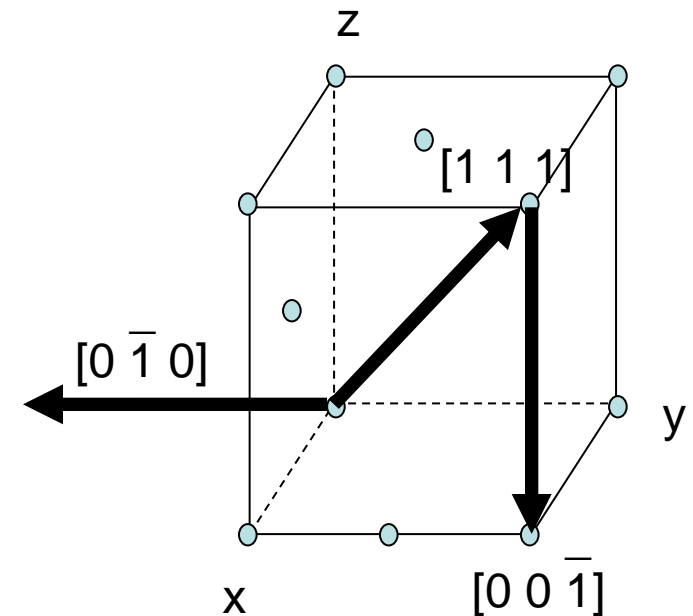
Miller Indices



Reglas de Índices de Miller para Direcciones

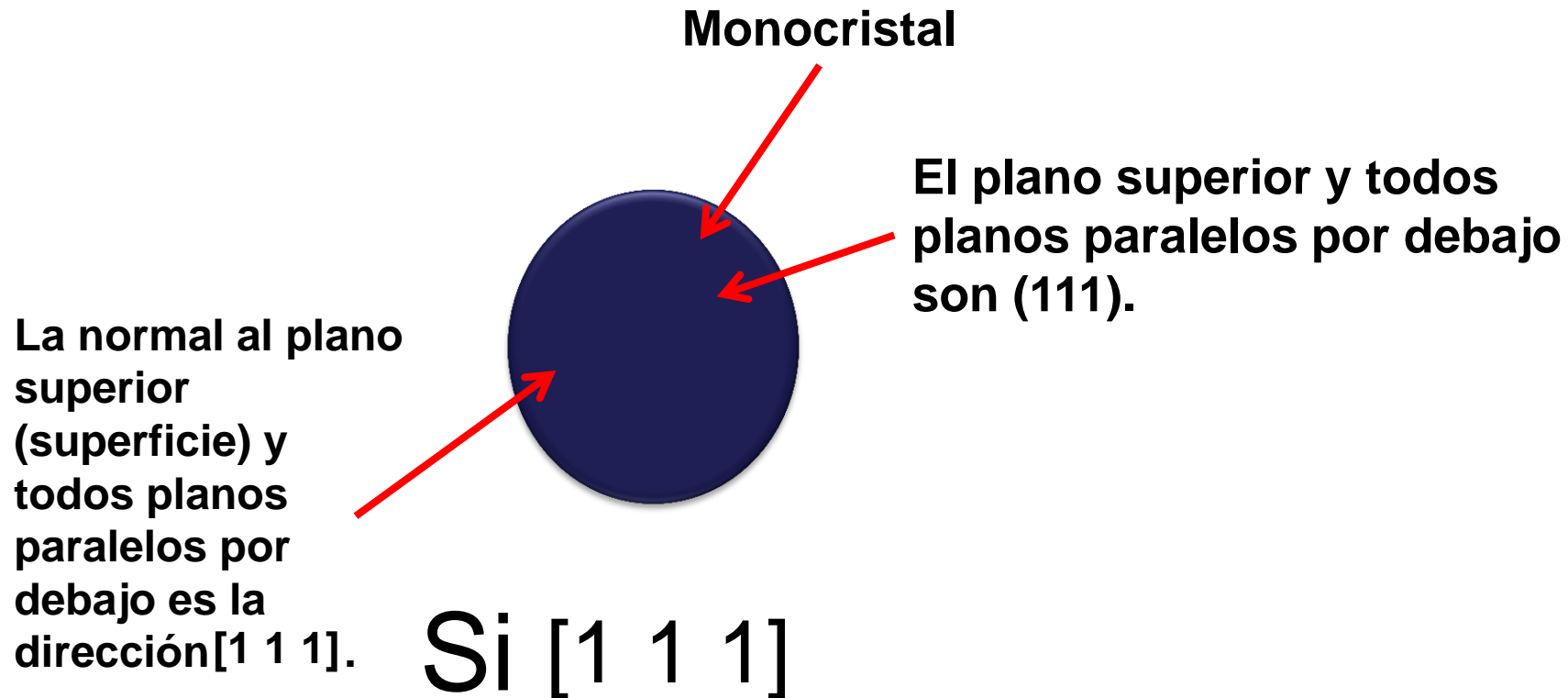
Reglas para los índices de direcciones en un sistema cúbico

1. Determinar dos puntos que se encuentran en la dirección de interés.
2. Restar las coordenadas del primer punto 1 de las coordenadas del segundo.
3. Escribir entre corchetes sin comas.
4. Indican negativos poniendo una barra sobre el entero.



Dominio público: Imagen de uso libre generada por el personal del CNEU

Ejemplo del Uso de Índices de Miller



Repaso de la Terminología

Termino	Que significa	Comentarios
Nanopartícula	Tamaño de partícula < 100 nm Puede monocristalino, policristalino, o amorfo	En forma de esfera o de columna. Efectos cuánticos relacionados al tamaño son posibles para las partículas < 10 nm. Nanopartículas semiconductoras son llamadas puntos cuánticos cuando los efectos del tamaño están presentes.
Cristalino	Monocristal—sin granos y sin límites de grano	Todo material es un cristal único.
Amorfo	Ninguna orden de largo alcance	Ejemplo: gafas son materiales amorfos.
Policristalino-- Nanocristalino (nc)	Hecho de granos monocristalinos menores que 100 nm	Policristalino. En el caso de Si, también llamado silicio microcristalino (μ c-Si). En el caso de Si, nc-Si tiene granos pequeños de silicio cristalino dentro de una fase de Si amorfa. Efectos cuánticos relacionados al tamaño son posibles para las partículas < 10 nm.
Policristalino-- Microcristalino (μc)	Granos monocristalinos < 1000 μ m a 100 nm	Pollicristalino. A menudo llamado material policristalino.
Policristalino-- Multi cristalino (mc)	Granos monocristalinos > 1 mm	Policristalino. Granos pueden ser de muchos cm o más grandes. Algunas veces son llamados semicristalinos.