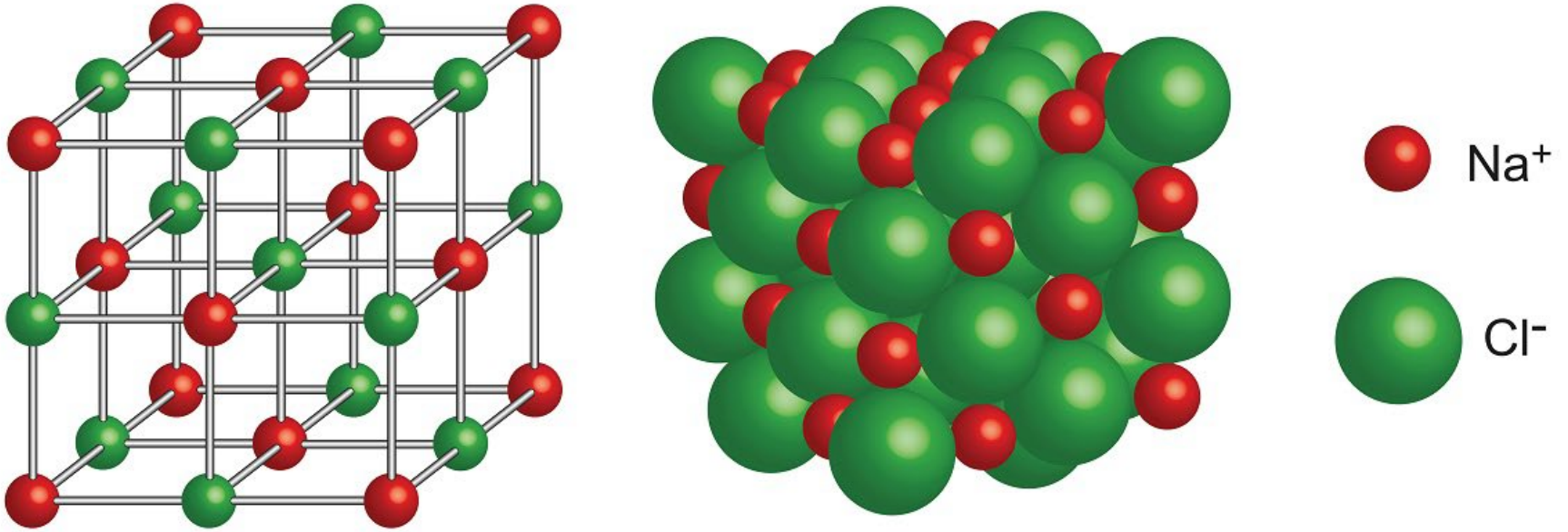
Química del estado sólido

Clase III

Temas

- Enlaces en sólidos
- Estructuras cristalinas
- El Concepto de Celda Unitaria

Sólidos

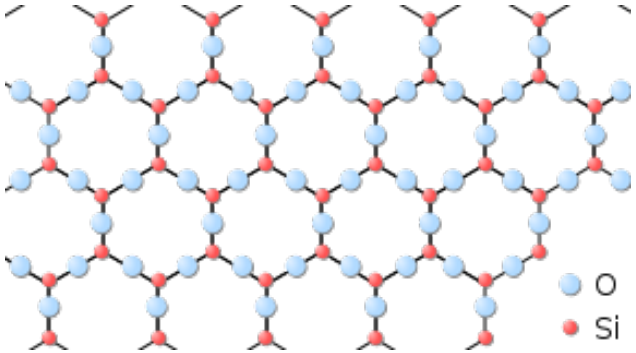


¿Qué podemos decir de los sólidos?

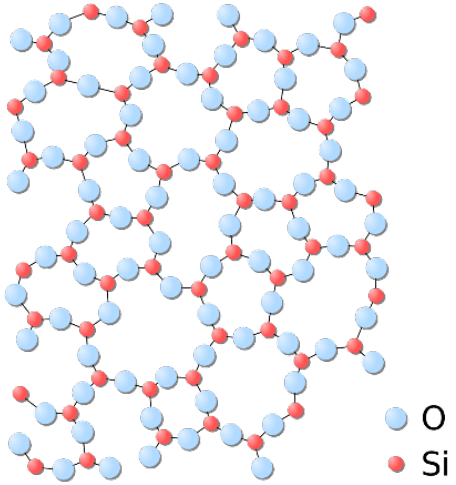
Características estructurales de los sólidos

Basado en el ordenamiento de sus formas, los sólidos se pueden dividir en dos categorías principales:

- **sólidos cristalinos**: generalmente tienen una forma bien definida y un patrón de repetición (sales inorgánicas, metales)



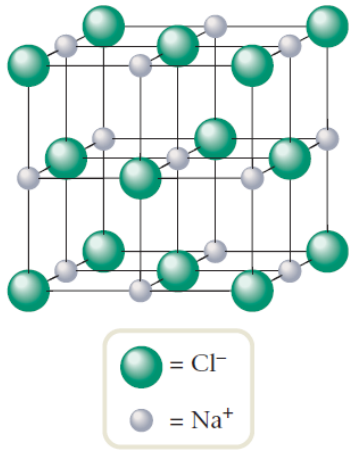
- **sólidos amorfos**: tienen formas pobremente definidas por carencia de orden molecular extensivo (vidrio, fósforo rojo, azufre amorfo)

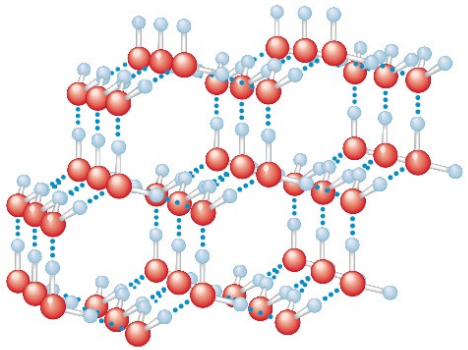


Tipos de sólidos cristalinos

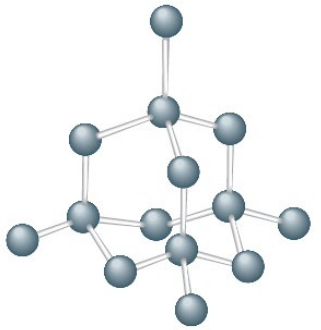
Sólidos cristalinos

Sólidos iónicos	Sólidos moleculares	Sólidos atómicos
Los componentes son iones	Los componentes son moléculas	Los componentes son átomos





Hielo



Diamante

Características estructurales de los sólidos



Tipos de Cristales

Tipo de cristal	Fuerzas que mantienen las especies unidas	Propiedades generales	Ejemplos
Molecular	Fuerzas de dispersión, fuerzas dipolo-dipolo, puentes de hidrógeno	Blandos, bajo punto de fusión, malos conductores del calor y la electricidad.	Ar, H_2O, I_2, CO_2, $C_{12}H_{22}O_{11}$ (sucralosa)
Covalente	Enlace Covalente	Duros, alto punto de fusión, malos conductores del calor y la electricidad.	C(diamante), SiO_2
Iónico	Atracción electroestática	Duros, frágiles, alto punto de fusión, malos conductores del calor y la electricidad.	NaCl, LiF, MgO, $CaCO_3$
Metálico	Enlace Metálico	Blandos a duros, bajo a alto punto de fusión, conductores del calor y la electricidad	Todos los elementos metálicos, por ejemplo: Na, Mg, Fe, Cu

Sólidos Atómicos

Propiedades del Estado Sólido

- Dependiendo de la naturaleza del sólido estos pueden tener propiedades fundamentalmente diferentes:

Ductilidad: Es la capacidad que posee algunos sólidos para transformarse en hilos



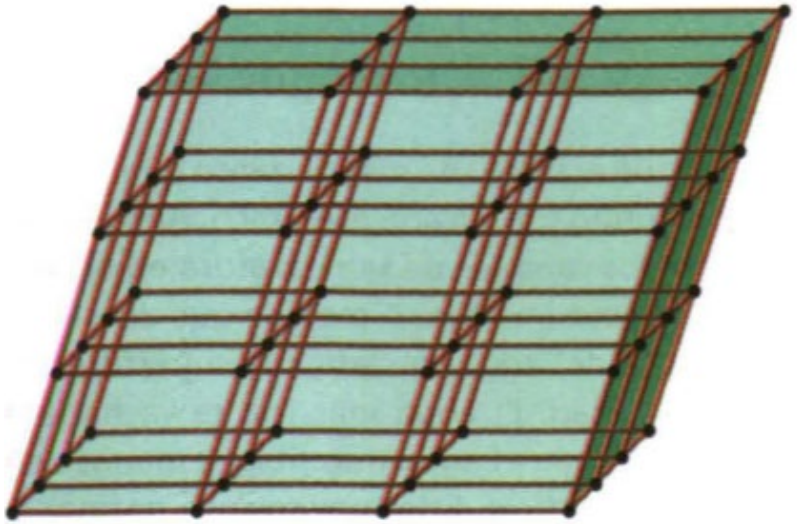
Dureza: Es la resistencia que posee algunos cuerpos a ser rayados

Maleabilidad: Es la propiedad que tiene ciertos sólidos para formar láminas



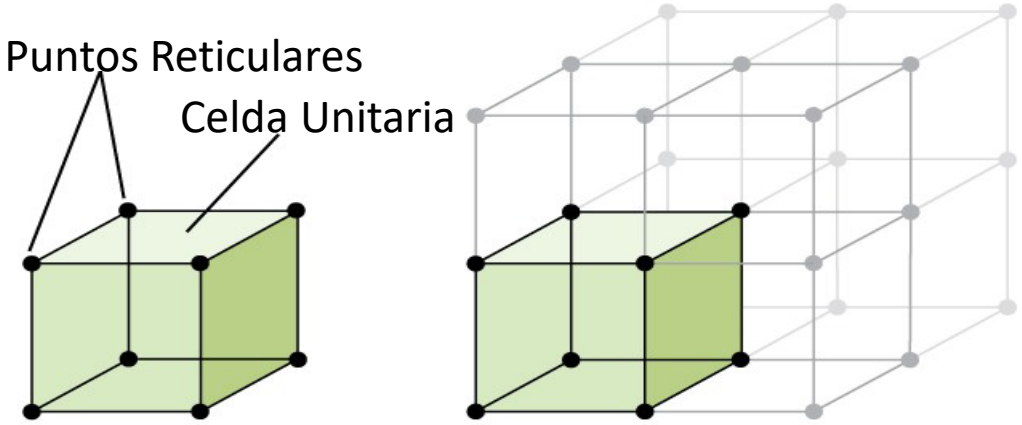
Estructuras cristalinas

- Los átomos, iones o moléculas están ordenados en disposiciones bien definidas. Estos sólidos suelen tener superficies planas o caras que forman ángulos definidos entre sí.
- Un sólido cristalino posee un arreglo regular y de gran alcance. Sus átomos, moléculas o iones ocupan posiciones específicas en una red virtualmente infinita.



Definiciones

- **Estructura Cristalina:** ordenamiento periódico de los átomos en el cristal.
- **Celda unitaria:** la porción más simple de la estructura cristalina que al repetirse mediante traslación reproduce todo el cristal. Todos los materiales cristalinos adoptan una distribución regular de átomos o iones en el espacio.

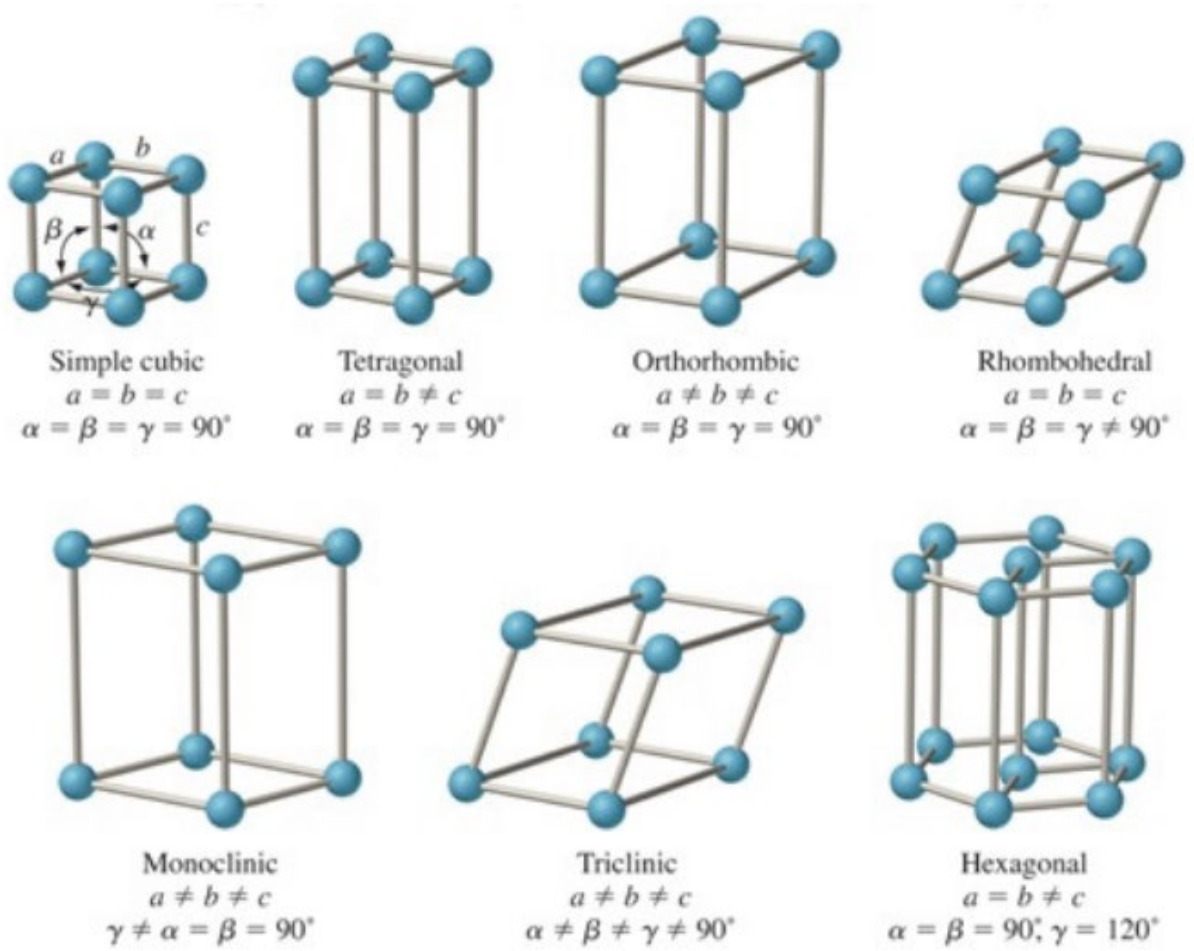


- **Puntos reticulares:** Pueden representar un átomo, un ión, una molécula o una combinación de estos.
- **Parámetros de red:** son las longitudes o dimensiones axiales de la celda unitaria y se indican por convención con las letras a, b, c.

Empaquetamiento Compacto de Esferas y los 7 Sistemas Cristalinos

7 sistemas cristalinos

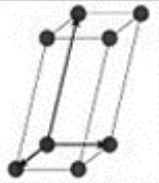
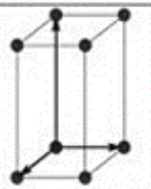
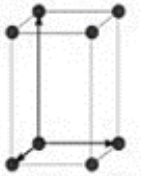
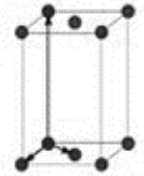
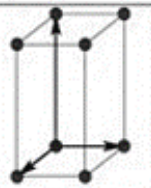
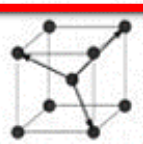
1. Cúbica
2. Tetragonal
3. Ortorrómbica
4. Romboédrica
5. Monoclínica
6. Triclínica
7. Hexagonal



Redes de Bravais

Definición: corresponden a las celdas unitarias que constituyen la menor subdivisión de una red cristalina la cual conserva las características generales de toda la retícula, de modo que por simple traslación del mismo, puede reconstruirse el sólido cristalino completo.

- Existen 14 redes de Bravais que representan las conformaciones básicas de las celdas unitarias.

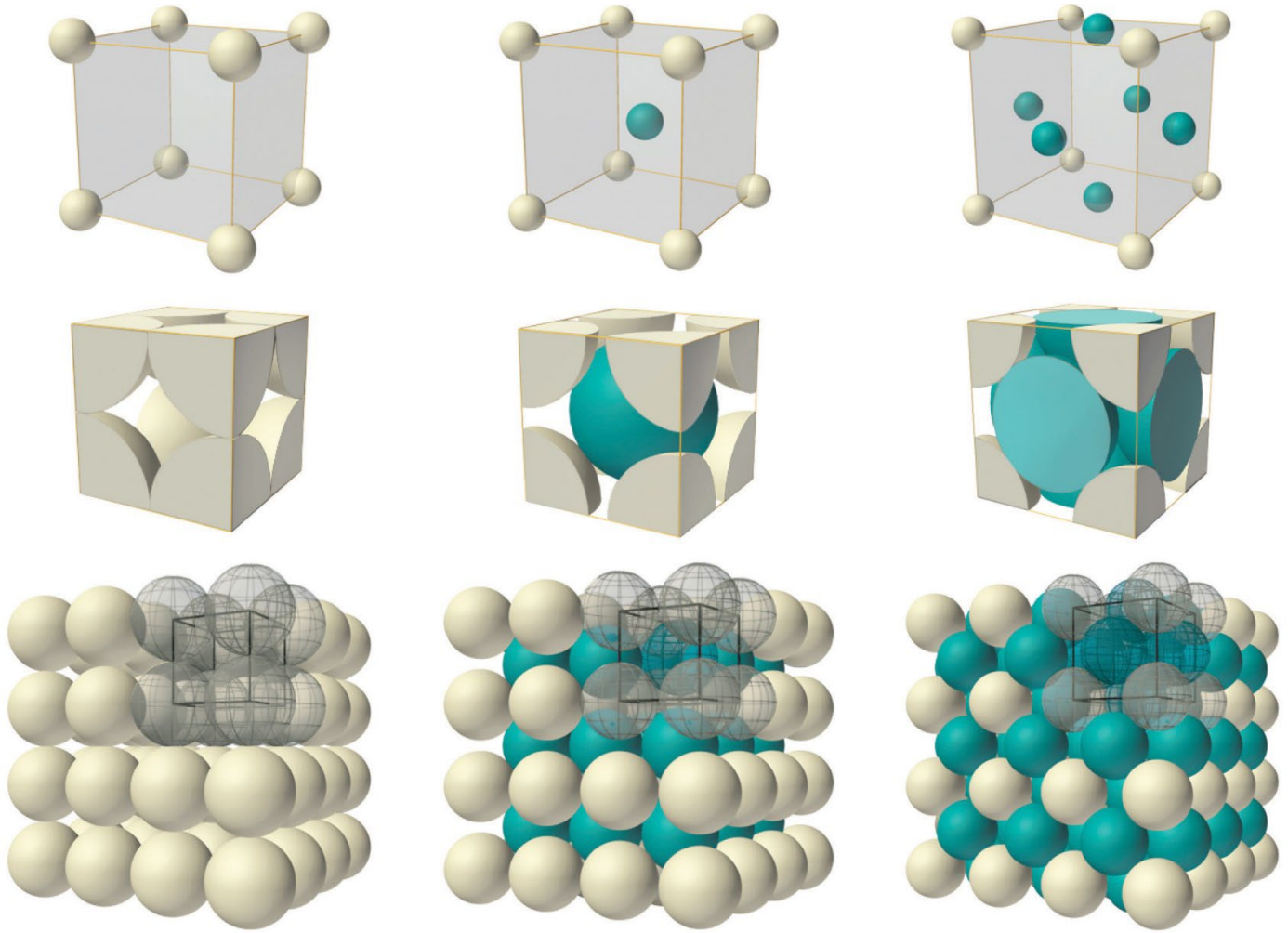
Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$ $\alpha_{12} \neq 90°$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120°$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120°$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$				

Celdas Unitarias en Sistemas Cúbicos

Celda unitaria de esfera dura

Celda unitaria de esfera reducida

Agregado de muchos átomos



(a) Simple cubic (b) Body-centered cubic (c) Face-centered cubic

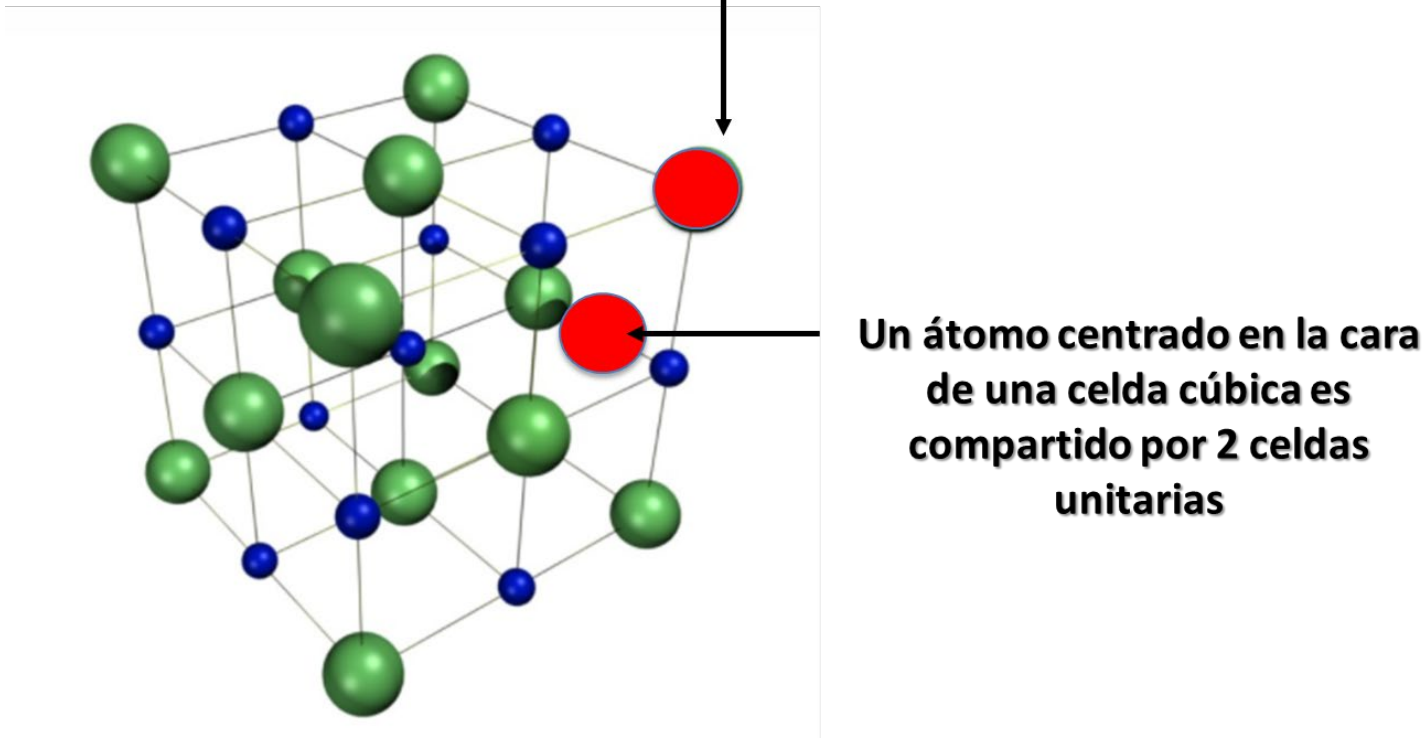
http://calistry.org/calculate/latticePlanesMillerIndices

Visualizando una celda cúbica

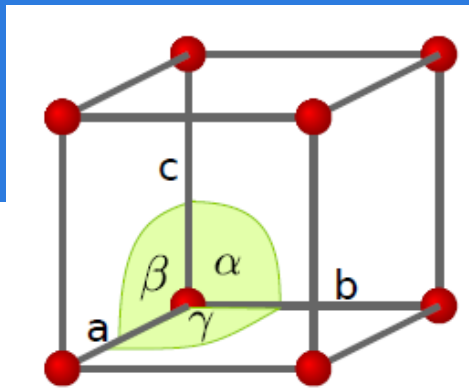
- **N° de coordinación:** Número de átomos (o iones) que se encuentran unidos directamente a él.

- **Radio atómico:** son las direcciones en la celda unitaria a lo largo de las cuales los átomos están en contacto continuo.

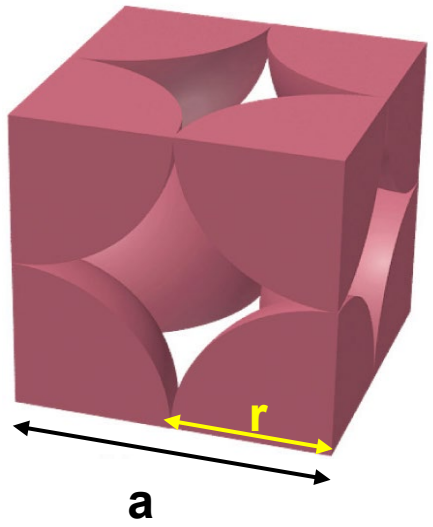
- **Factor de empaquetamiento:** es la fracción del espacio ocupado por los átomos suponiendo que los átomos son esferas duras.



Estructura Cúbica:



Cúbica simple:



$$\text{N° de coordinación} = 6$$

$$\text{Átomos por celda} = 8 \text{ vértices} \times \frac{1}{8} = 1$$

Relación longitud de arista y radio del átomo: $a = 2r$

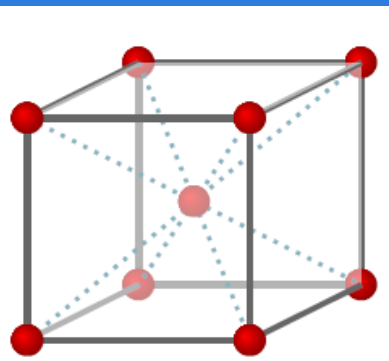
$$\text{Factor de empaquetamiento (APF)} = 52\%$$

$$(\text{APF}) = \frac{(\text{N° átomos celda}) \times (\text{Volumen de átomos en la celda unitaria})}{\text{volumen de la celda}}$$

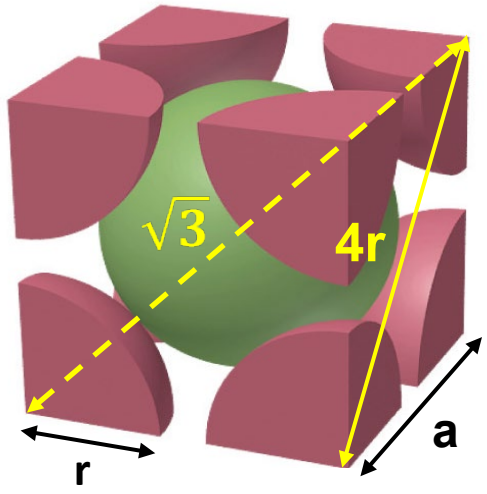
Donde:
r : radio atómico
a : relación long. y radio

$$\frac{V_{ocupado}}{V_{celda}} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{(2r)^3} = \frac{\pi}{6} = 0{,}52$$

Estructura Cúbica:



Cúbica centrada en el cuerpo (BCC):



Nota: Todos los átomos son iguales. El central está en otro color para clarificar el empaquetamiento.

N° de coordinación = 8

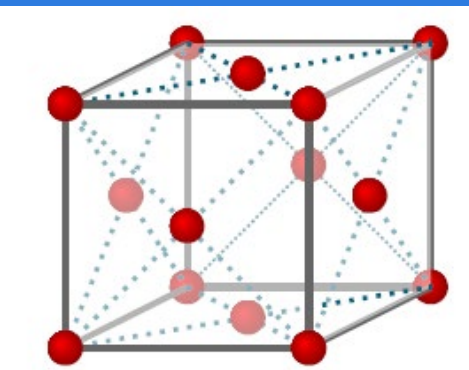
$$\text{átomos por celda} = 8 \text{ vértices} \times \frac{1}{8} + 1 \text{ átomo en el centro} = 2$$

$$\text{Relación longitud de arista y radio del átomo: } a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

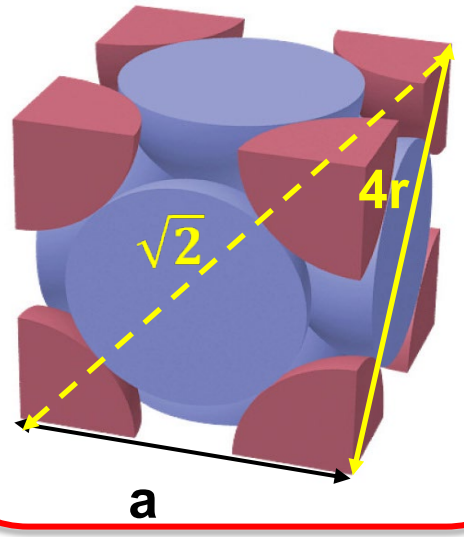
Factor de empaquetamiento (APF) = 68%

$$\frac{V_{ocupado}}{V_{celda}} = \frac{2 \times \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{a^3} = \frac{2 \times \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0{,}68$$

Estructura Cúbica:



Cúbica centrada en las caras (FCC):



$$\text{N° de coordinación} = 12$$

$$\text{Átomos por celda} = 8\ \text{vértices} \times \frac{1}{8} + 6\ \text{caras} \times \frac{1}{2} = 4$$

$$\text{Relación longitud de arista y radio del átomo: } a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

$$\text{Factor de empaquetamiento (APF)} = 74\%$$

$$\frac{V_{ocupado}}{V_{celda}} = \frac{4 \times \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{a^3} = \frac{4 \times \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{\left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3} = 0{,}74$$

Bibliografía

- Askeland, Donald R. (2004) La ciencias e ingeniería de los materiales, 3er edición. Capitulo 2-3.

- Callister, W. Ciencia e ingeniería de los materiales, tomo 1 (1996). Reverte. Capitulo 2.