

FACULTAD DE QUÍMICA Y DE FARMACIA
PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

Química del Estado Sólido

Primer semestre 2024

Objetivos

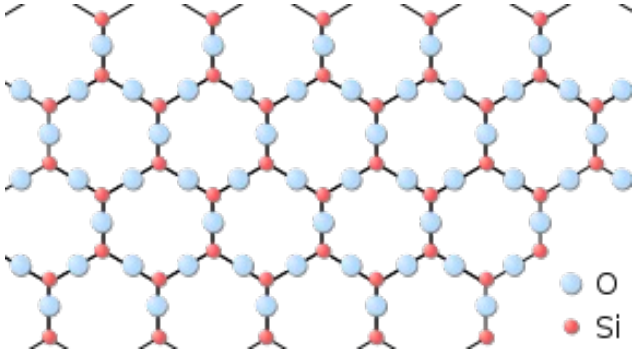
Química del Estado Sólido

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

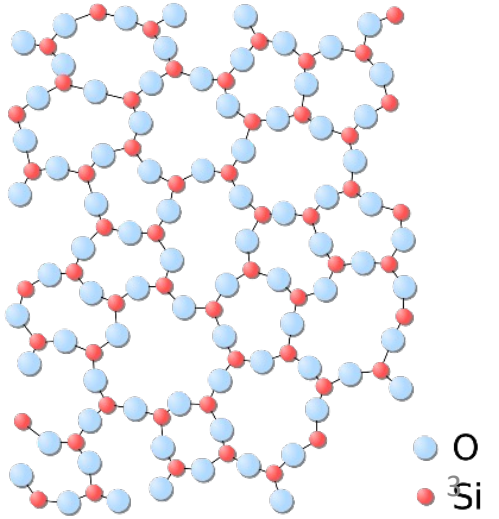
Características estructurales de los sólidos

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.

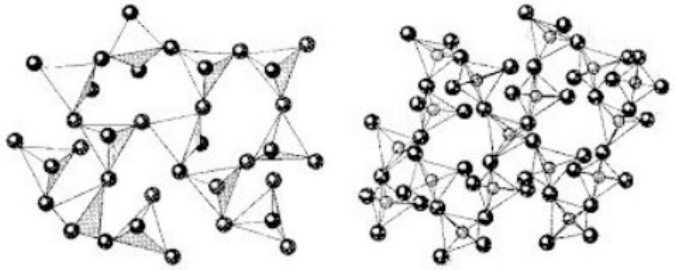


- **Sólidos amorfos**: tienen formas pobremente definidas por carencia de orden molecular extensivo.



Características estructurales de los sólidos

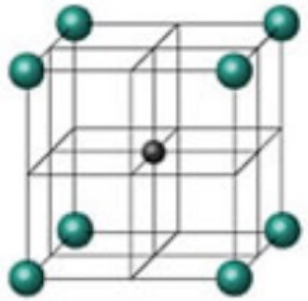
Sólidos Amorfos



- Presentan atracciones lo suficientemente fuertes para impedir que la sustancia fluya, obteniendo un sólido rígido y con cierta dureza.
- No presentan arreglo interno ordenado sino que sus partículas se agregan al azar.
- Al romperse se obtienen formas irregulares.
- Se ablandan dentro de un amplio rango de temperatura y luego funden o se descomponen.

Ejemplos: Asfalto, Parafina, Ceras, Vidrios, algunos polímeros y algunos materiales cerámicos.

Sólidos Cristalinos

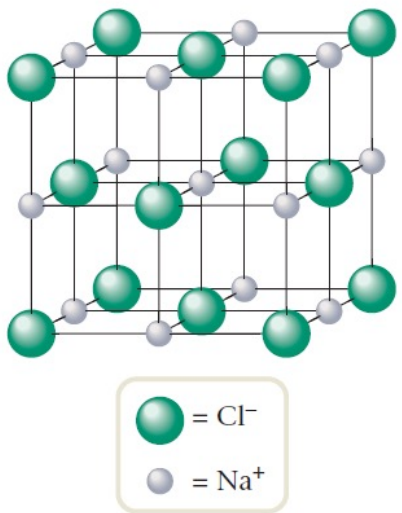


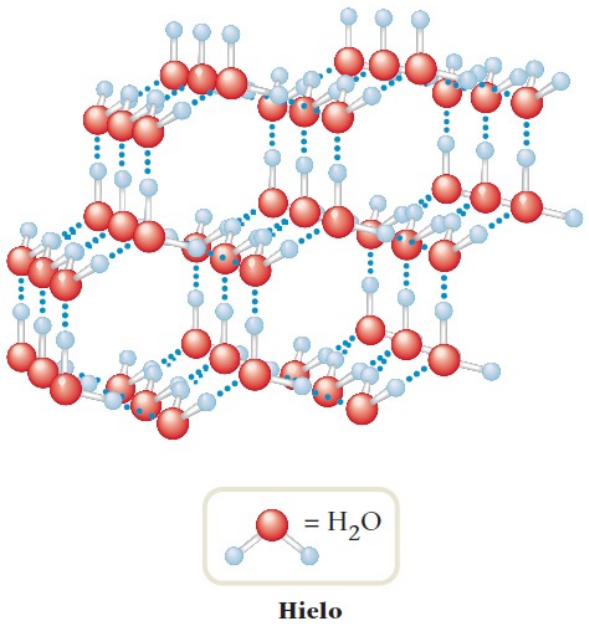
- Presentan un arreglo interno ordenado, basado en minúsculos cristales individuales cada uno con una forma geométrica determinada.
- Los cristales se obtienen como consecuencia de la repetición ordenada y constante de las unidades estructurales (átomos, moléculas, iones)
- Al romperse se obtienen caras y planos bien definidos.
- Presentan puntos de fusión definidos, al calentarlos suficientemente el cambio de fase ocurre de una manera abrupta.

Ejemplos: NaCl, Sacarosa, Sales en general, Metales, Algunos polímeros, y algunos materiales cerámicos

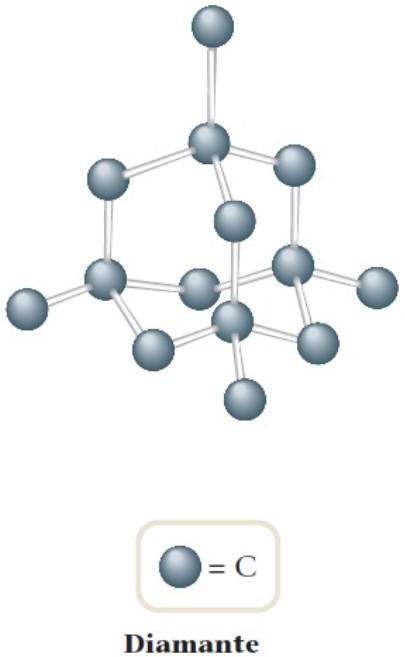
Sólidos cristalinos

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





Hielo



Diamante

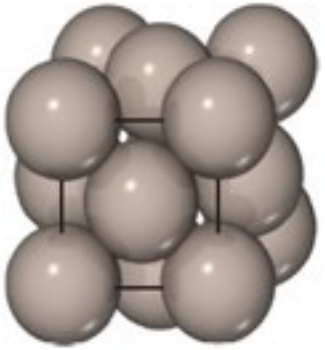
Características estructurales de los sólidos

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

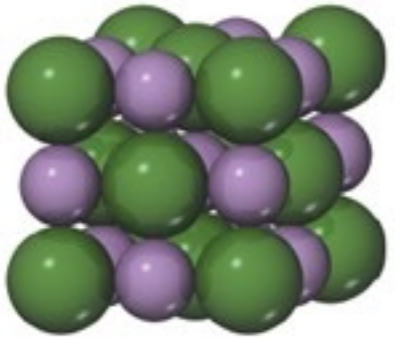
Sólidos Atómicos

Características estructurales de los sólidos



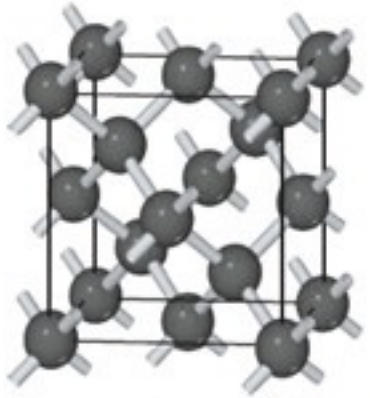
Sólidos metálicos

Redes extendidas de átomos unidos por enlace metálico (Cu, Fe)



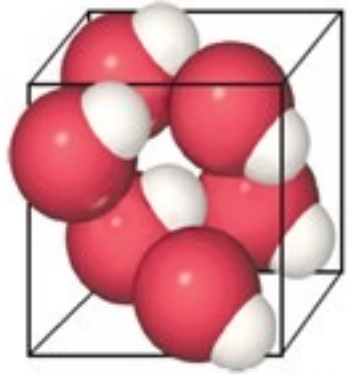
Sólidos iónicos

Redes extensas de iones que se mantienen unidos por interacciones ion-ion (NaCl, MgO)



Sólidos de red covalente

Redes extensas de átomos unidos por enlaces covalentes (C, Si)



Sólidos moleculares

Moléculas discretas que se mantienen unidas por fuerzas intermoleculares (HBr, H_2O)

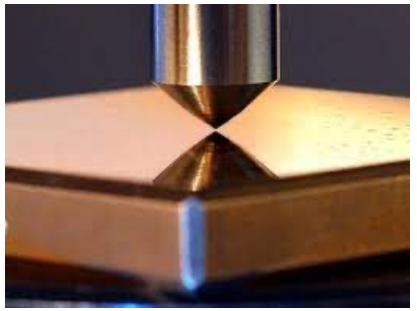
Propiedades del Estado Sólido

Dependiendo de la naturaleza del sólido estos pueden tener propiedades fundamentalmente diferentes (ej. Argón sólido vs. Cobre vs Diamante)

- **Ductilidad**: Es la capacidad que posee algunos solidos para transformarse en hilos



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

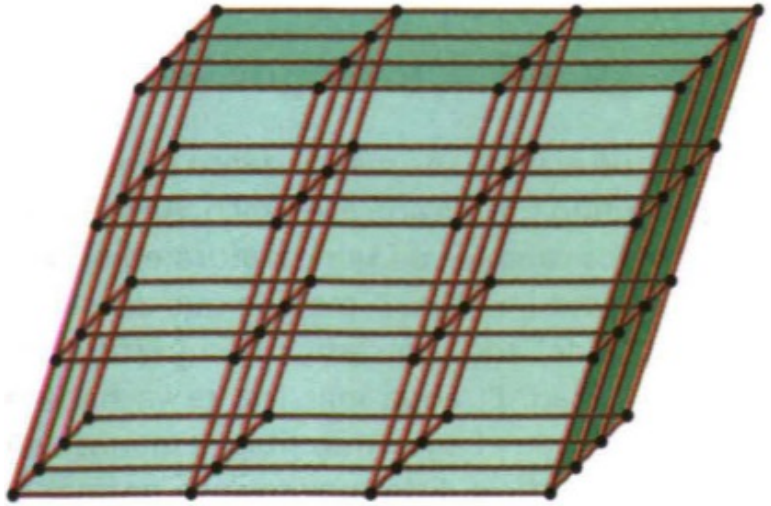


- **Maleabilidad**: Es la propiedad que tiene ciertos sólidos para formar láminas



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.

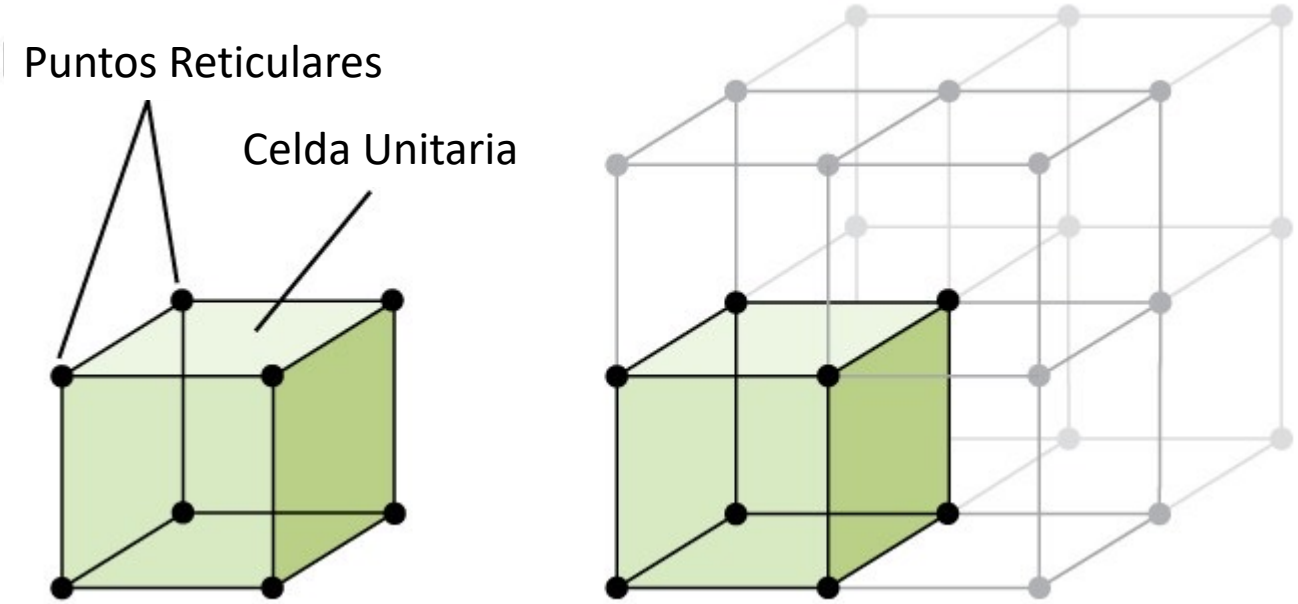


- Un sólido cristalino posee un arreglo regular y de gran alcance. Sus átomos, moléculas o iones ocupan posiciones específicas en una red virtualmente infinita

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.

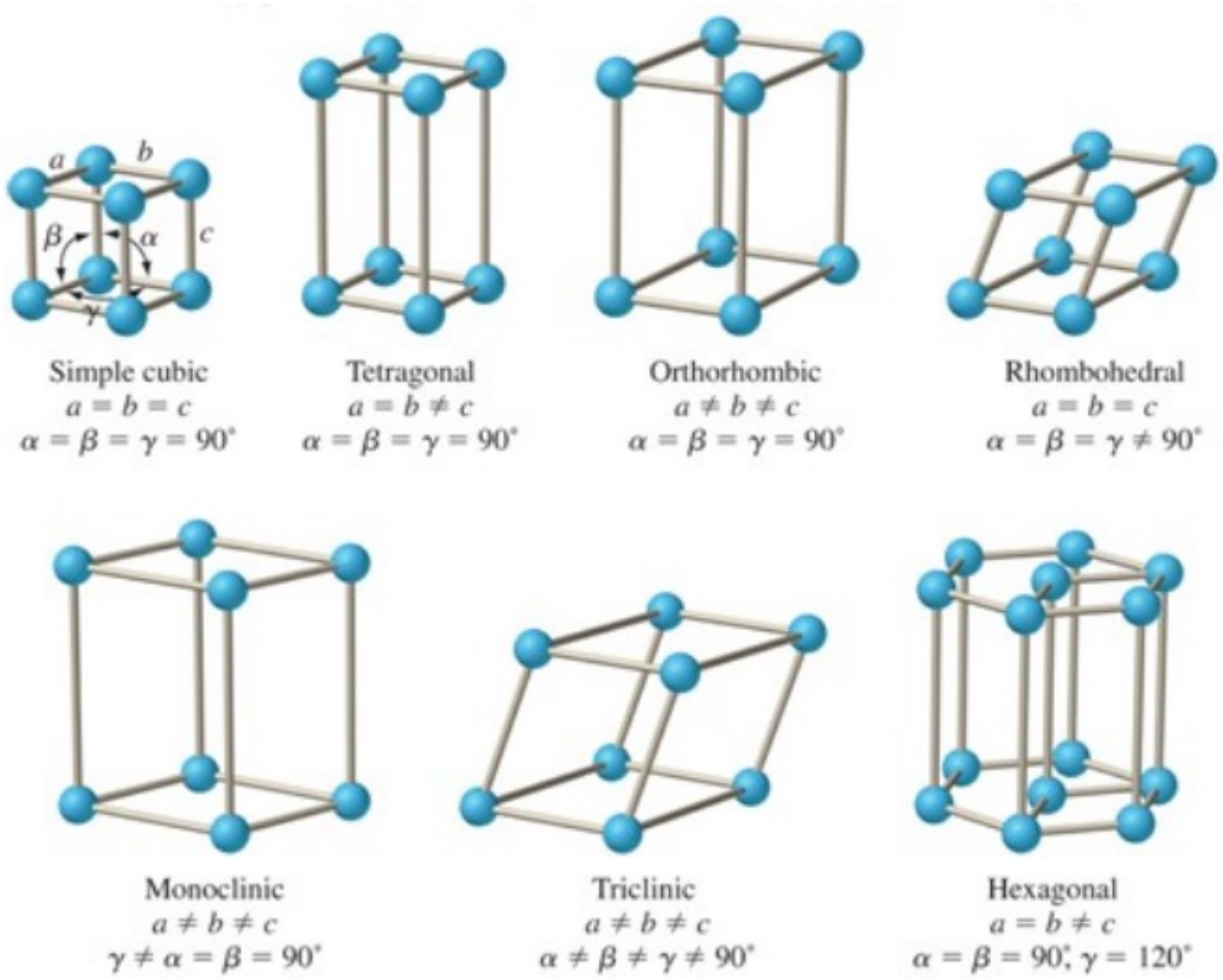


- **Puntos reticulares:** Pueden representar un átomo, un ión, una molécula o una combinación de estos

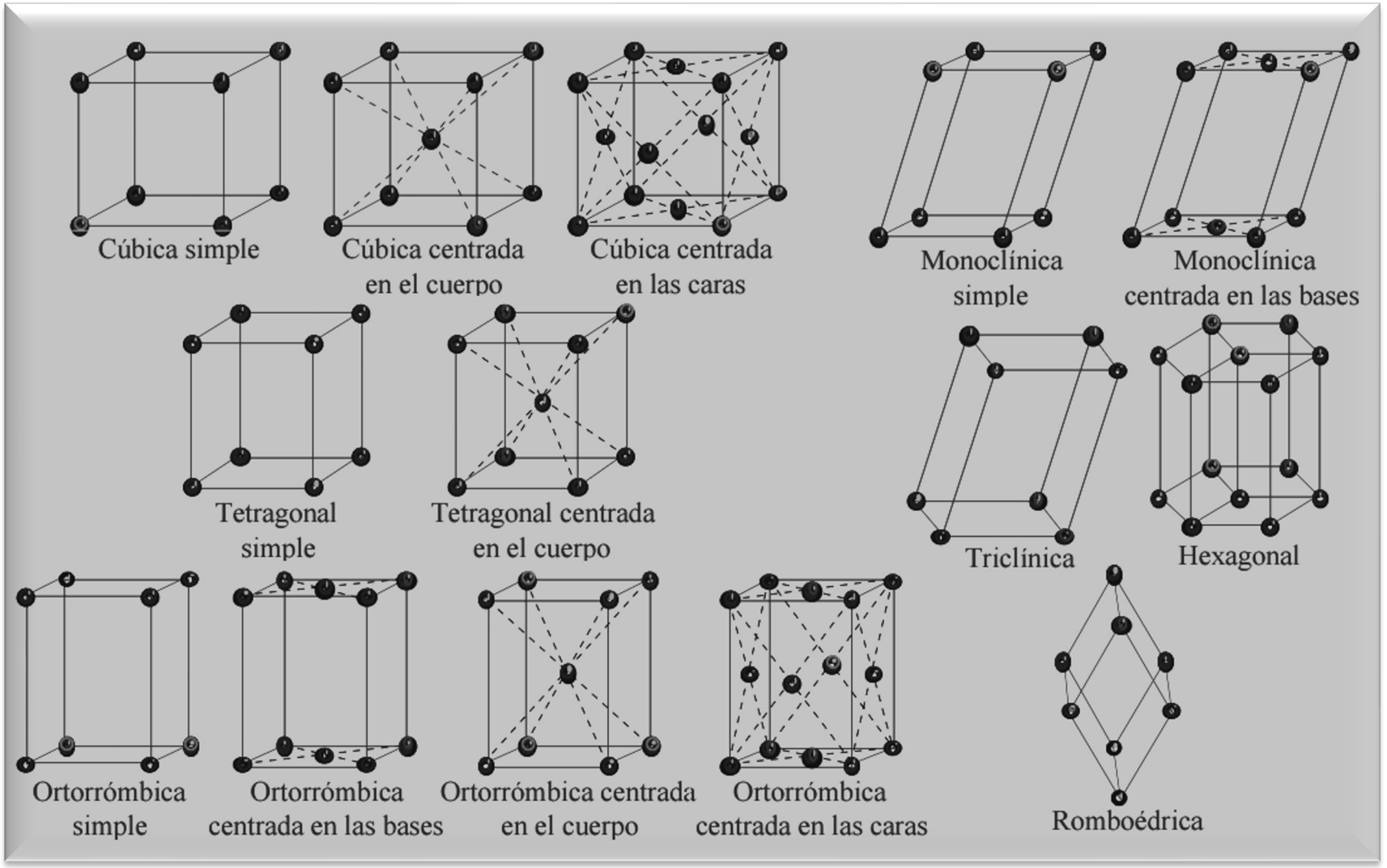
Empaquetamiento Compacto de Esferas y los 7 Sistemas Cristalinos

7 sistemas cristalinos

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



Las 14 Redes de Bravais



Las 14 Redes de Bravais

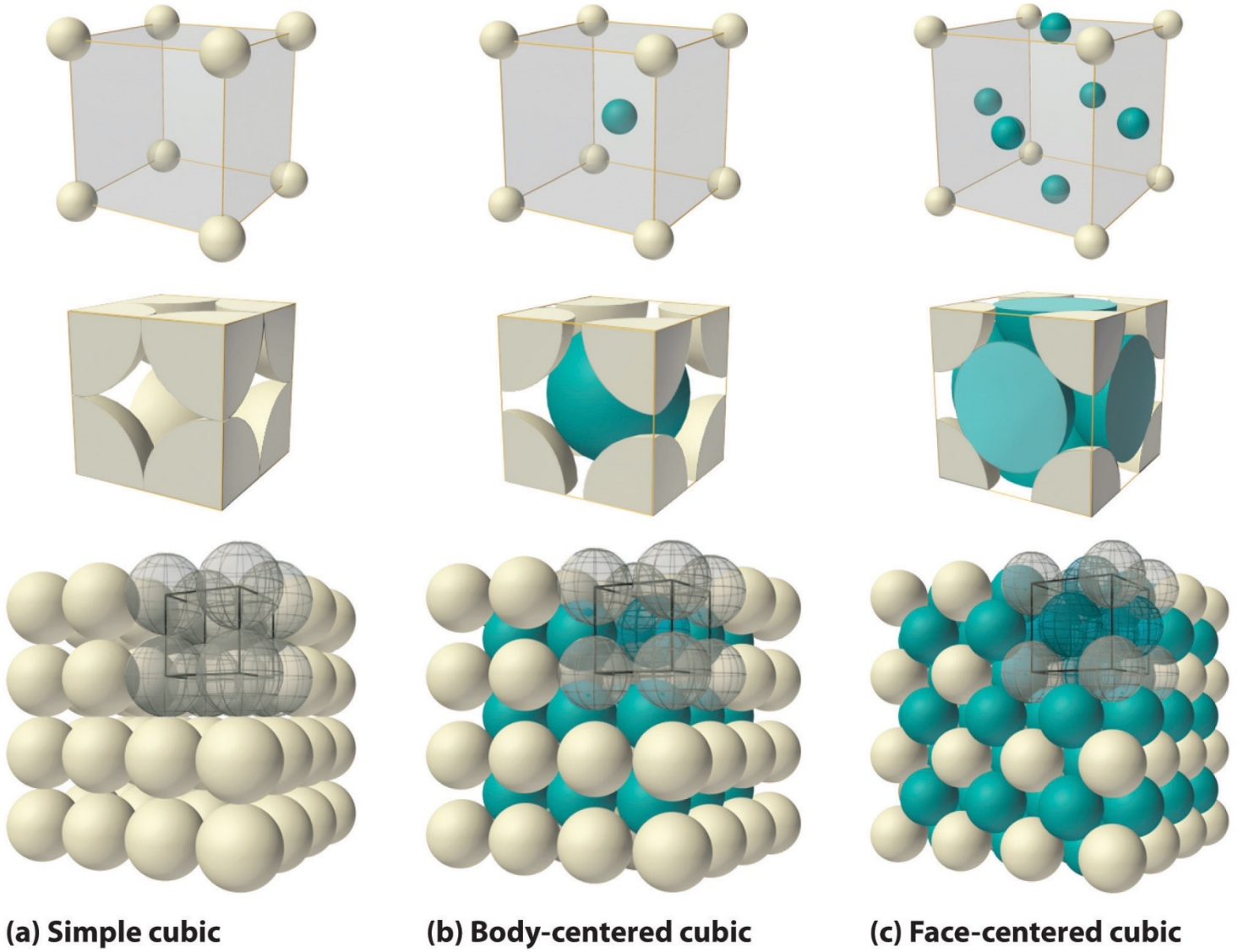
Sistema Cristalino	Redes de Bravais	Nomenclatura
CÚBICO	Simple Centrado en el Cuerpo Centrado en las Caras	P o S (CS) **(SC)** I (CC) **(BCC)** F (CCC) **(FCC)**
TETRAGONAL	Simple Centrado en el Cuerpo	P o S (TS) I (TC)
ORTORRÓMBICO	Simple Centrado en el Cuerpo Centrado en las Caras Centrado en la Base	P o S (OS) I (OC) F (OCC) C (OB)
ROMBOÉDRICO	Simple	P o S (R)
HEXAGONAL	Simple	P o S (H)
MONOCLÍNICO	Simple Centrado en la Base	P o S (MS) C (MB)
TRICLÍNICO	Simple	P o S (TS)

Celdas Unitarias en Sistemas Cúbicos

Celda unitaria de esfera dura

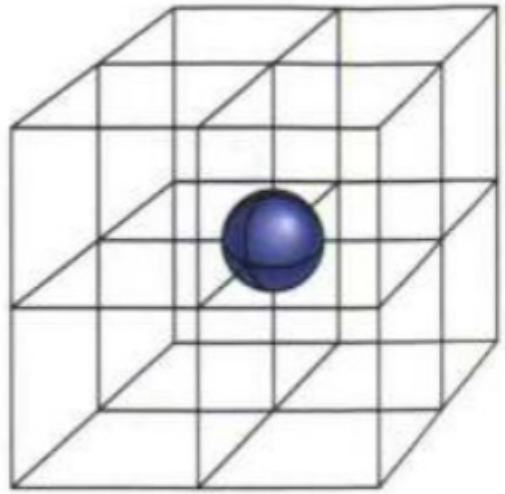
Celda unitaria de esfera reducida

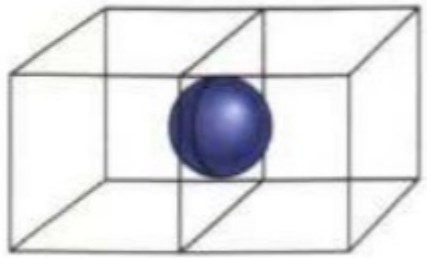
Agregado de muchos átomos



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

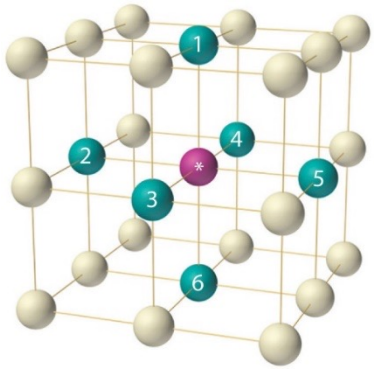
Un átomo del vértice de una celda cúbica es compartido por 8 celdas unitarias



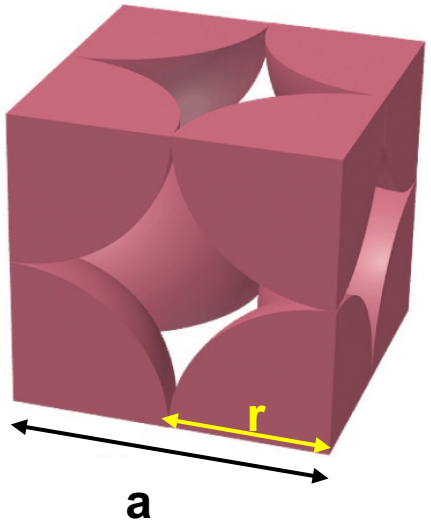


Un átomo centrado en la cara de una celda cúbica es compartido por 2 celdas unitarias

Estructura Cúbica Simple



- **N° de coordinación:** Número de átomos (o iones) que rodean a un átomo ión en una red cristalina

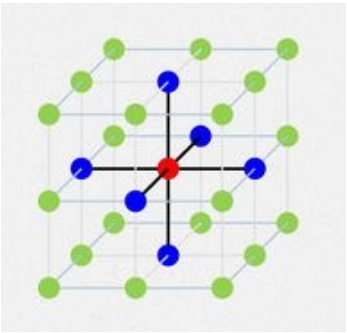


$$N° \; de \; coordinación = 6$$

$$átomos \; por \; celda = 8 \; vértices \times \frac{1}{8} = 1$$

$$relación \; longitud \; de \; arista \; y \; radio \; del \; átomo: 2r = a$$

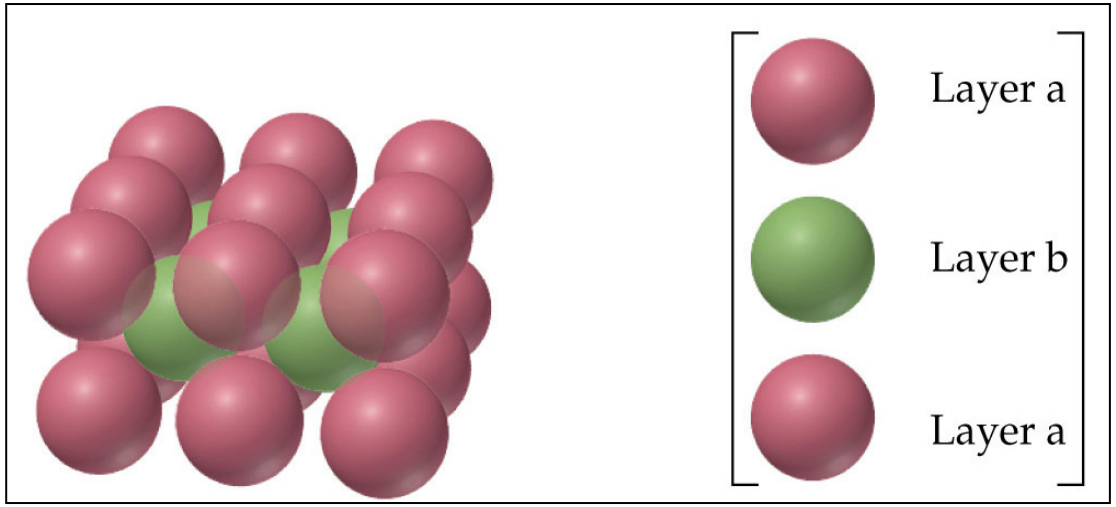
$$factor \; de \; empaquetamiento \; (APF) = 52\%$$

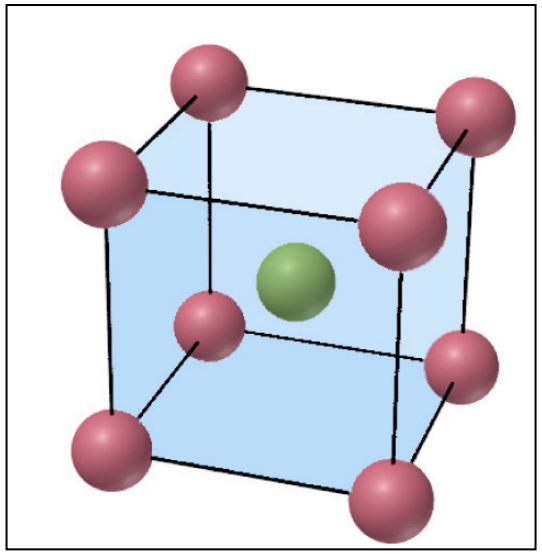


$$Factor \; de \; empaquetamiento \; (APF) = \frac{Volumen \; de \; átomos \; en \; la \; celda \; unitaria}{volumen \; de \; la \; celda}$$

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

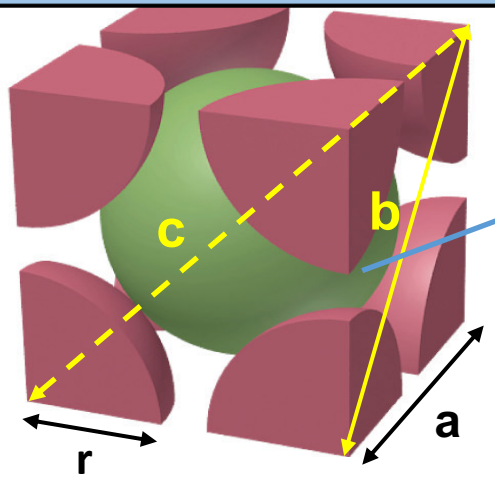
Estructura Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC)





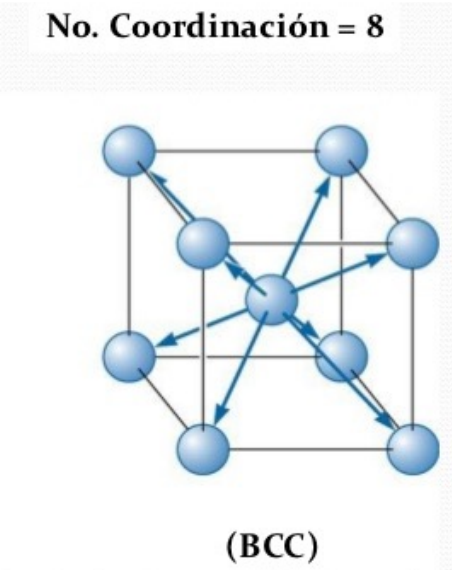
Ejemplos: Fe, Cr, Mo, W, Ta, Ba

Estructura Cúbica Centrada en el Cuerpo (BCC)



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

$$N° \; de \; coordinación = 8$$



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

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

$$factor \; de \; empaquetamiento \; (APF) = 68\%$$

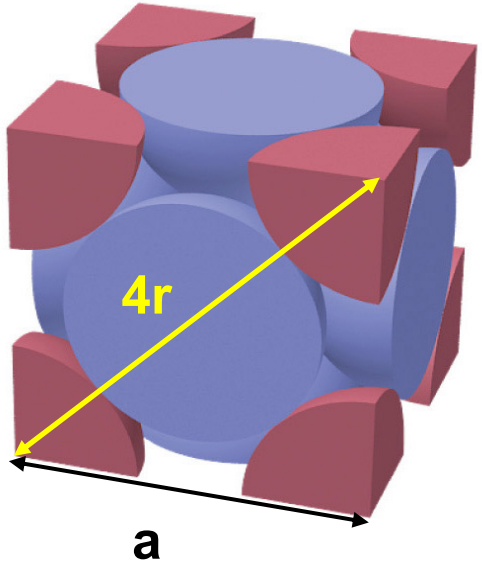
$$\frac{V_{ocupado}}{V_{celda}} = \frac{2 \times \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{a^3} = \frac{2 \times \left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0{,}68$$

Ejemplos

Celda cúbica centrada en el cuerpo (BCC)

metal	Constante de red a (nm)	radio atómico r (nm)
Cromo	0,289	0,125
Hierro	0,287	0,124
Molibdeno	0,315	0,136
Potasio	0,533	0,231
Sodio	0,429	0,186
Tántalo	0,330	0,143
Volframio	0,316	0,137
Vanadio	0,304	0,132

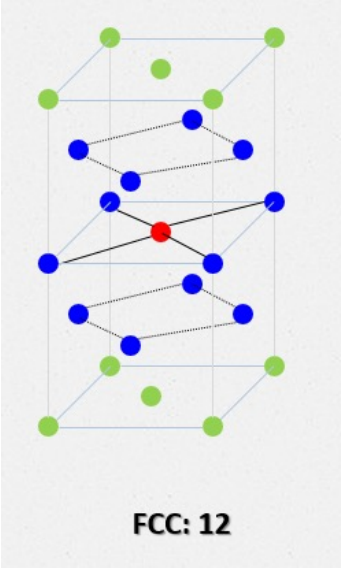
Celda Cúbica Centrada en las Caras (FCC)



$$N° \; de \; coordinación = 12$$

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

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



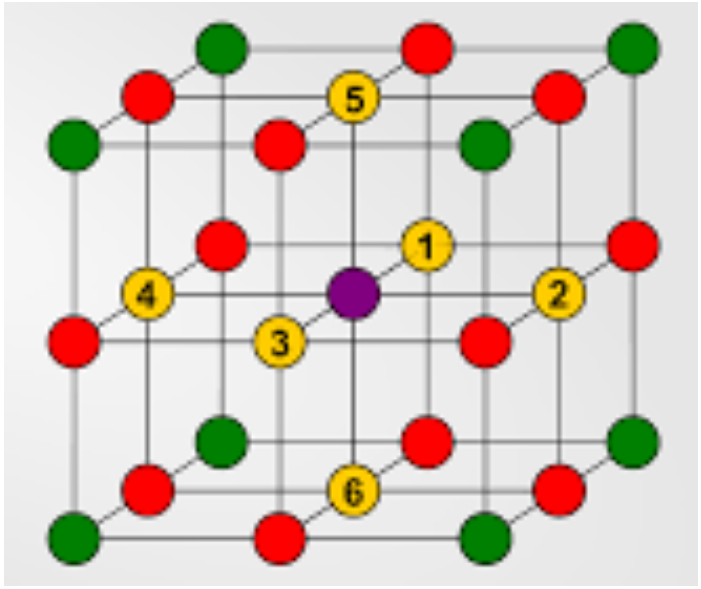
$$factor \; de \; empaquetamiento \; (APF) = 74\%$$

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

Estructuras cristalinas

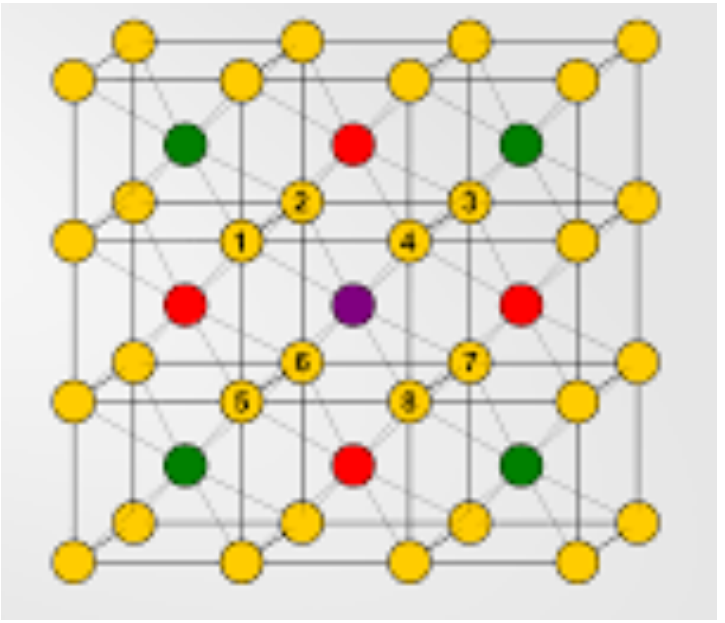
Celda cúbica centrada en las caras (fcc)

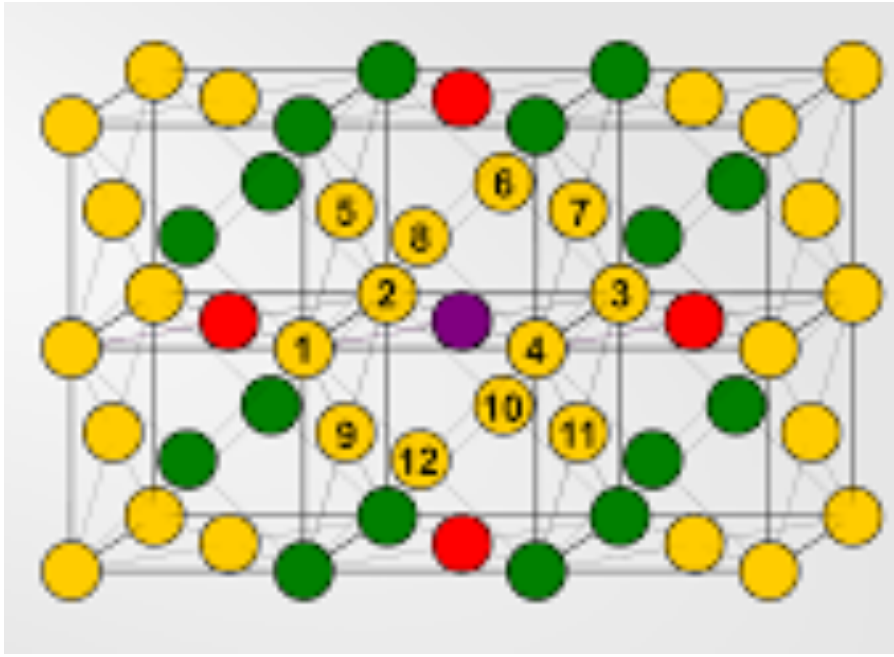
metal	Constante de red a (nm)	radio atòmico r (nm)
Aluminio	0,405	0,143
Cobre	0,3615	0,128
Oro	0,408	0,144
Plomo	0,495	0,175
Níquel	0,352	0,125
Platino	0,393	0,139
Plata	0,409	0,144



SC

BCC





FCC

Bibliografía

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

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