

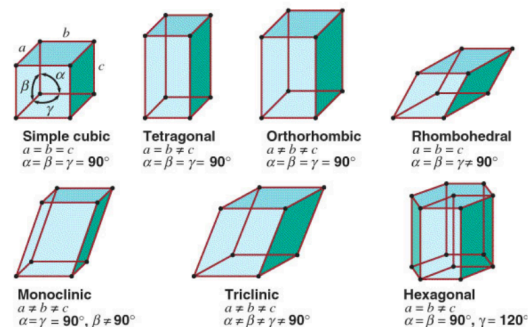
Capítol 2 – INTRODUCCIÓ A L'ESTAT SÒLID

L'**estat sòlid** és un estat d'agregació de la matèria que es caracteritza perquè les unitats que el formen (àtoms, ions o molècules) s'ordenen d'una manera compacta sense adquirir la forma del recipient que les conté, i perquè tenen una llibertat de moviment restringida, no poden traslladar-se ni rotar, només vibrar. Si les unitats del sòlid es distribueixen de manera uniforme i ordenada diem que és un **sòlid cristal·lí** o, si no, un **sòlid amorf**.

○ Sòlids cristal·lins:

Els sòlids cristal·lins estan formats per xarxes cristal·lines, la unitat estructural de les quals és la **cel·la unitat**. La cel·la unitat és la porció més simple de l'estructura cristal·lina que en repetir-se per translació reproduïx tot el cristall. Els angles (α, β, γ) i els vèrtexs (a, b, c) que s'utilitzen per definir la mida i forma d'una cel·la unitat són els **paràmetres de cel·la**. En funció d'aquests diferenciem diferents tipus de cel·les unitàries que anomenem **cel·les elementals**:

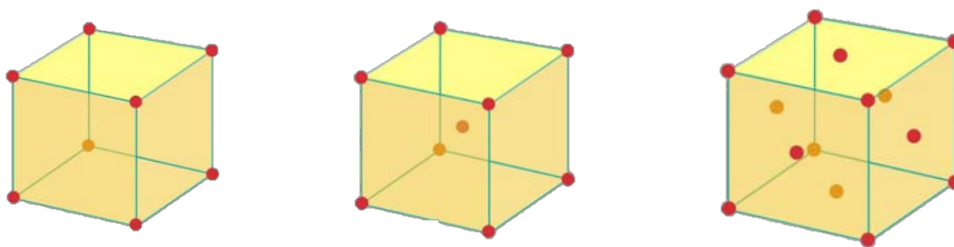
- 1) Cúbica simple: $a = b = c$ i $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- 2) Tetragonal: $a = b \neq c$ i $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- 3) Ortoròmbica: $a \neq b \neq c$ i $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- 4) Romboèdrica: $a = b = c$ i $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
- 5) Monoclínica: $a \neq b \neq c$ i $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
- 6) Triclínica: $a \neq b \neq c$ i $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
- 7) Hexagonal: $a = b \neq c$ i $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma = 120^\circ$



○ Model d'empaquetament d'esferes rígides:

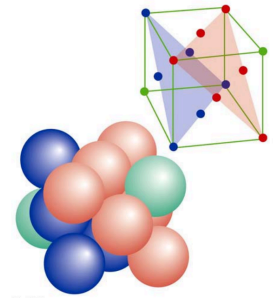
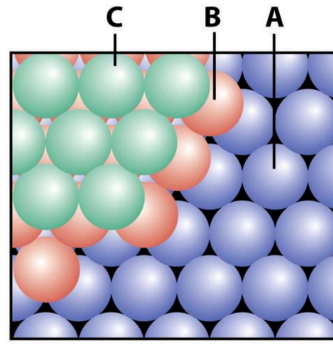
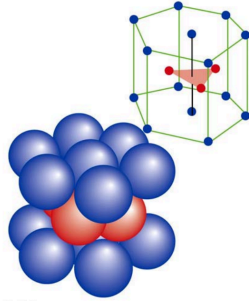
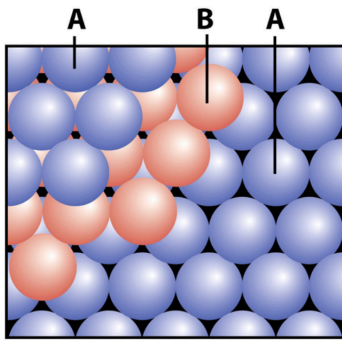
La major part dels sòlids inorgànics es poden representar amb un model idealitzat d'empaquetament d'esferes rígides idèntiques. En aquest considerem les unitats que formen els sòlids (àtoms, ions o molècules) com a esferes rígides empaquetades de manera que la capacitat sigui màxima, ja que l'enllaç que les uneix no és direccional i poden col·locar-se tan a prop com la geometria ho permeti.

Amb aquest model, podem distingir tres tipus d'estructures cúbiques: la cúbica simple o primitiva, que té una esfera rígida a cada un dels seus 8 vèrtexs, la cúbica centrada al cos (BCC), que a més de tenir esferes a tots els vèrtexs en té una al centre, i la cúbica centrada a les cares (FCC), que té una esfera a cada cara i una a cada vèrtex. L'empaquetament més compacte s'aconsegueix amb la FCC o amb una hexagonal compacta.

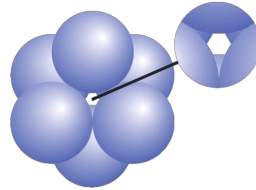


Perquè l'empaquetament sigui màxim les esferes es disposen tangencialment al llarg d'un plànol. Una primera capa d'esferes es col·loca en una disposició que anomenarem A. La segona capa B es formarà amb les esferes col·locant-se per sobre de la A però no superposant-la, sinó tapant els forats de la primera capa. La tercera es pot col·locar de dues maneres:

- a) igual que la primera: les esferes de la tercera capa estan en la mateixa posició que les de la primera. Les capes seguiran una seqüència ABA, característica de les estructures hexagonal compacta.
- b) tapant els forats de la segona capa, formant una capa C i, per tant, una seqüència ABC característica de l'estructura cúbica compacta (FCC)



Una de les característiques dels empaquetaments és el tipus de buits que es generen entre les esferes. Per una estructura compacta, la quantitat d'espai buit és del 26% del volum total. Existeixen dos tipus de buits: Els **buits octaèdrics** es donen entre dos triangles (formats per 3 esferes cadascun) oposats entre si. Cada buit presenta simetria octaèdrica perquè els sis àtoms que el formen es disposen als vèrtexs d'un octaedre. Es poden acomodar àtoms de radi $0.414r_a$.



Els **buits tetraèdrics** apareixen com a conseqüència de la presència d'una esfera sobre el triangle que formen altres tres. Es poden acomodar àtoms amb un radi de, com a màxim, $0.225r_a$. N esferes empaquetades generen $2N$ buits tetraèdrics i N buits octaèdrics. Els buits octaèdrics són més grans.

