

SOLIDOS- estructura y propiedades

CB 040 Química básica

Departamento de Química



.UBAfiuba 
FACULTAD DE INGENIERÍA

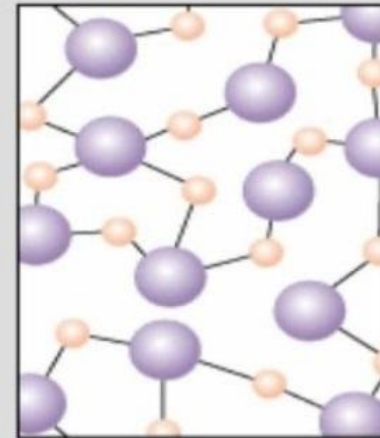
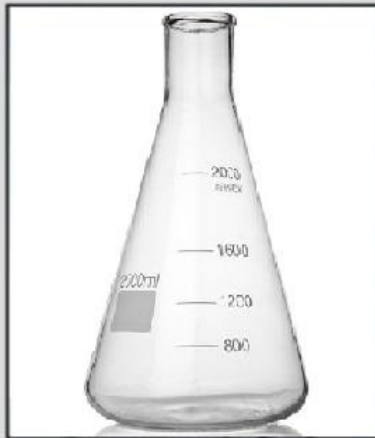
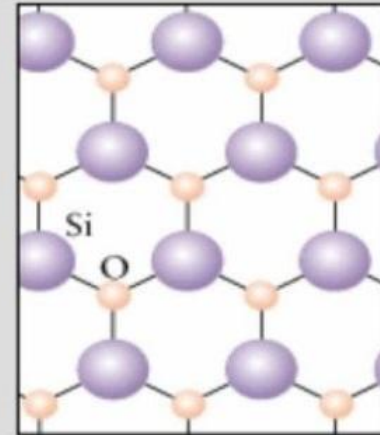
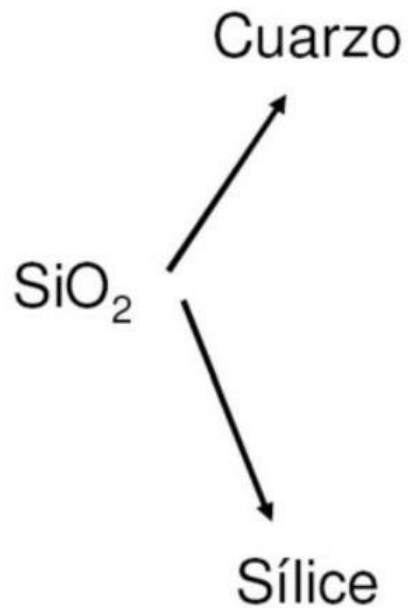
Ing. Alejandro Gobbi

Clasificación de los Sólidos

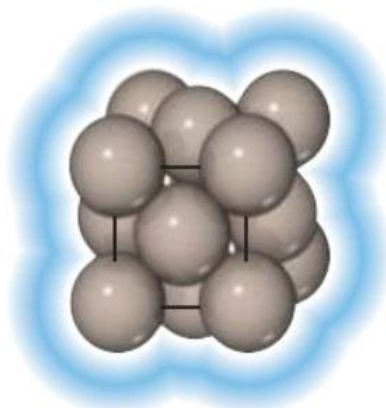
Tipos de Sólidos	Amorfo	Vidrios
		Ciertos Polímeros
	Cristalino	Iónico
		Atómico
		Molecular
		Metálico



Diferencia entre sólido cristalino y amorfo

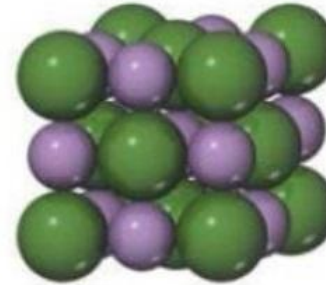


Distintos sólidos cristalinos



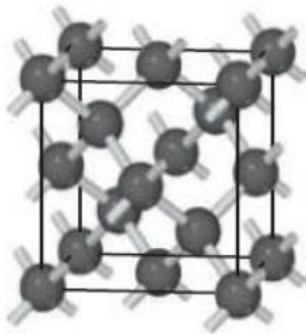
Sólidos metálicos

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



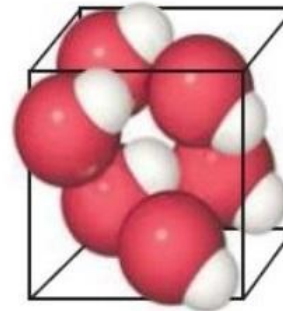
Sólidos iónicos

Redes cristalinas de iones unidos
por interacciones catión-anión (NaCl, MgO)



Sólidos de red covalente

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

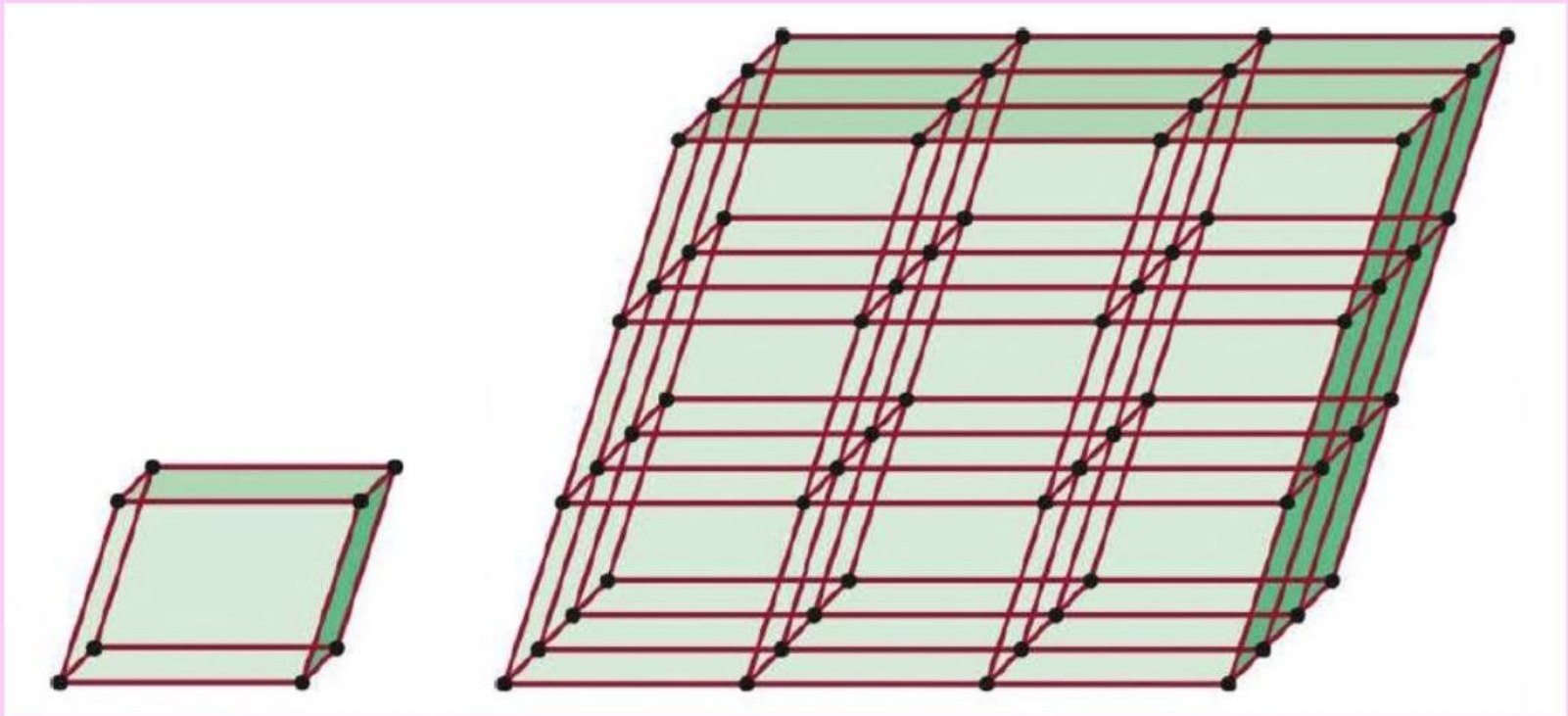


Sólidos moleculares

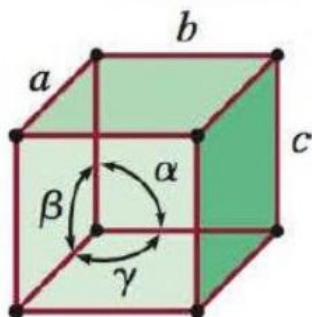
Moléculas sujetas entre sí por
fuerzas intermoleculares (HBr, H₂O)



Red cristalina y celda unitaria



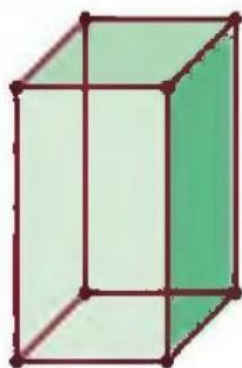
Clasificación de las celdas unitarias



Cúbico simples

$$a = b = c$$

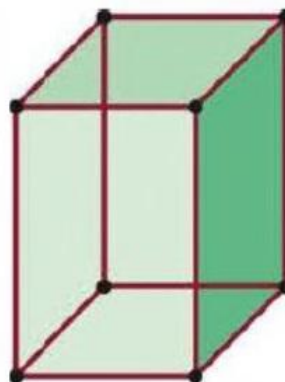
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Tetragonal

$$a = b \neq c$$

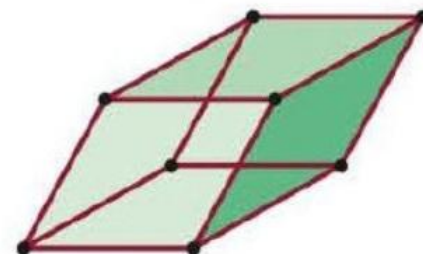
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Ortorrômbico

$$a \neq b \neq c$$

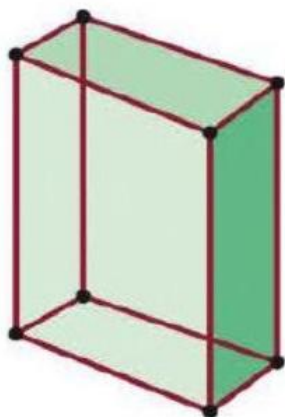
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Romboédrico

$$a = b = c$$

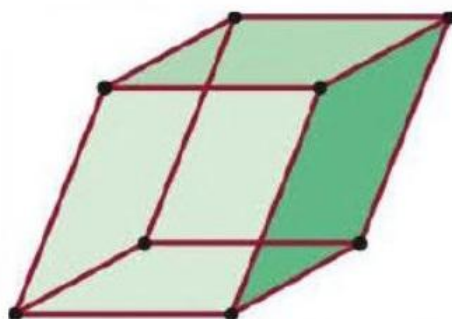
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



Monoclínico

$$a \neq b \neq c$$

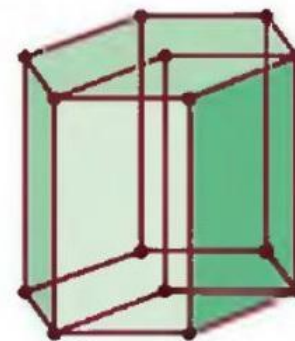
$$\gamma \neq \alpha = \beta = 90^\circ$$



Triclínico

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



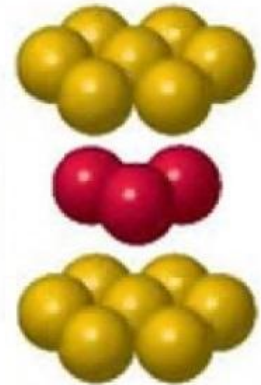
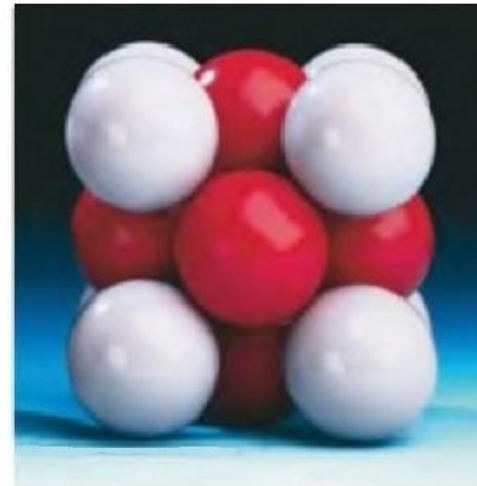
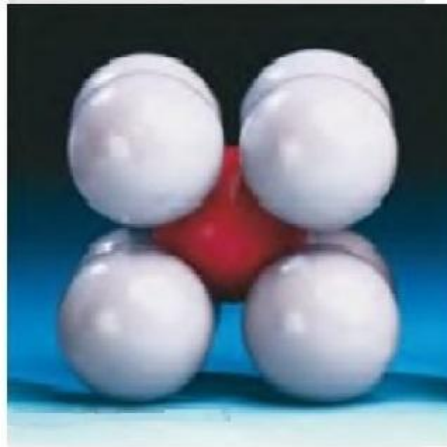
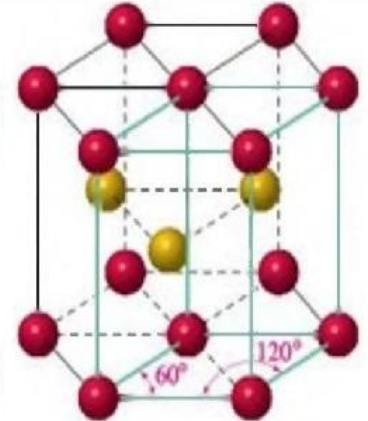
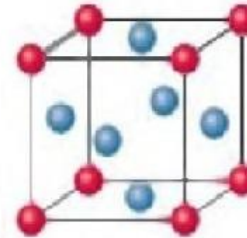
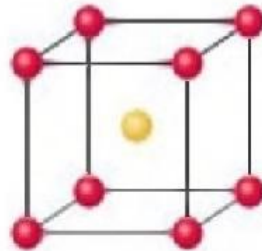
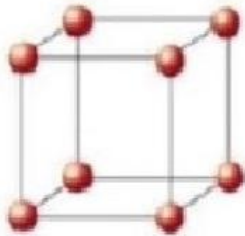
Hexagonal

$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$



Celdas unitarias frecuentes



Cúbica simple

Ejemplo: Po

Cúbica centrada
en el cuerpo

Ejemplo: Na, K, Fe

Cúbica centrada
en las caras

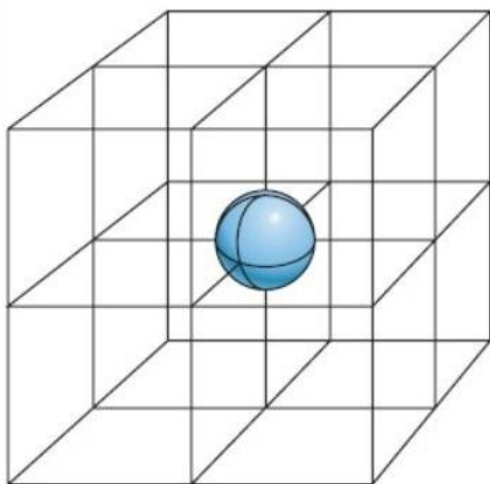
Ejemplo: Ag, Cu, Pb

Hexagonal
compacta

Ejemplo: Ti, Zn

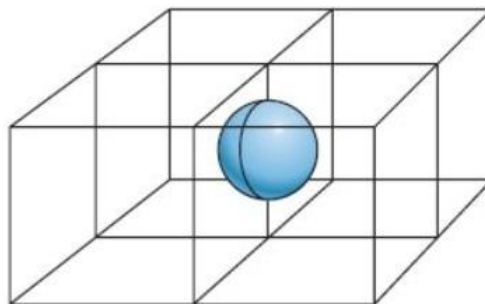


Reparto de unidades elementales entre celdas unitarias cúbicas



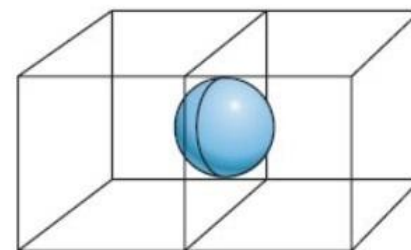
Unidad elemental
en el vértice

$1/8$ de u.e.



Unidad elemental
en el centro de una arista

$1/4$ de u.e.



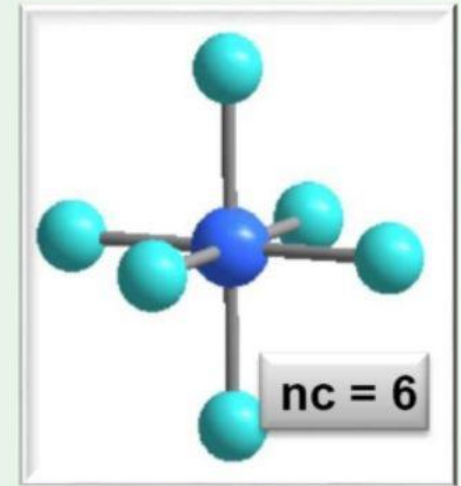
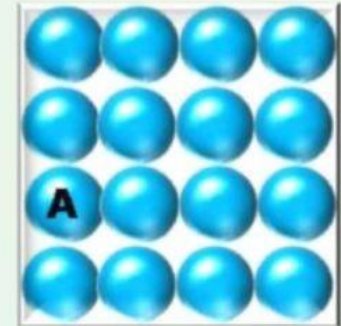
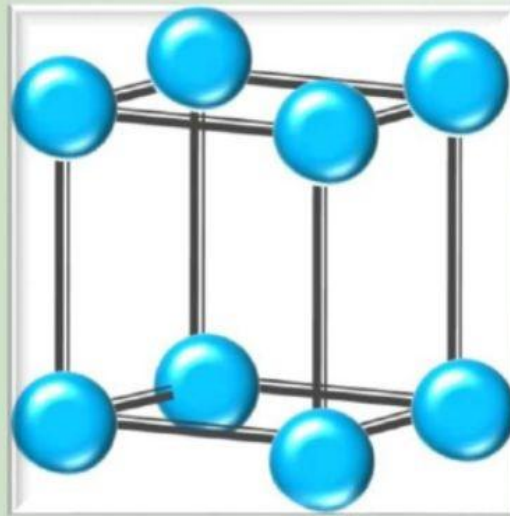
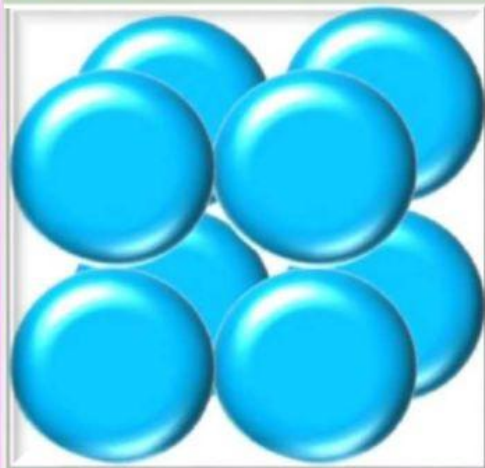
Unidad elemental
en el centro de una cara

$1/2$ de u.e.



Red Cristalina Cúbica Simple

Estructura cúbica simple (SC)



Nº de u.e. por celda unitaria = **8 vértices** * **1/8 (u.e./vért.)** = **1 u.e.**

Número de coordinación = **6** \rightarrow # de átomos inmediatamente próximos a un átomo dado en la red cristalina

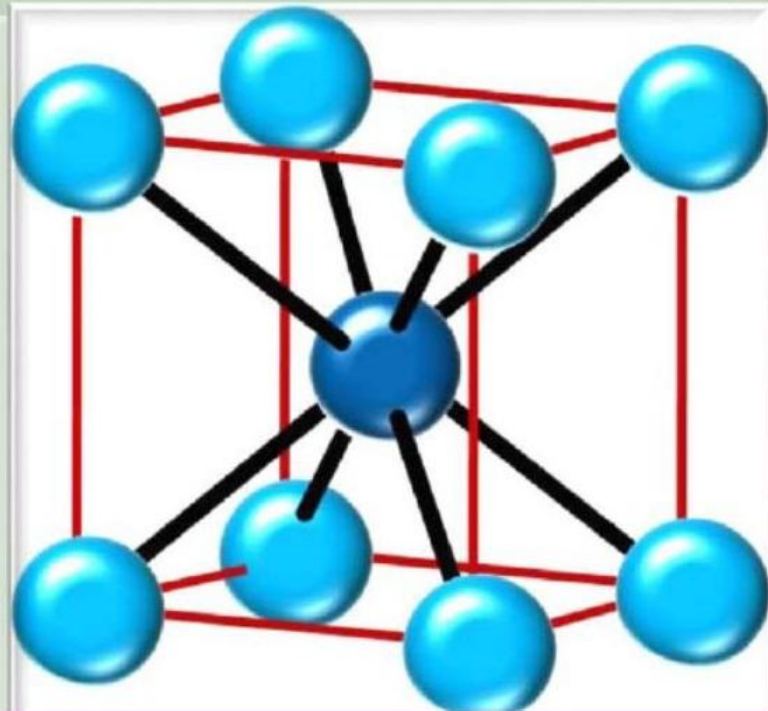
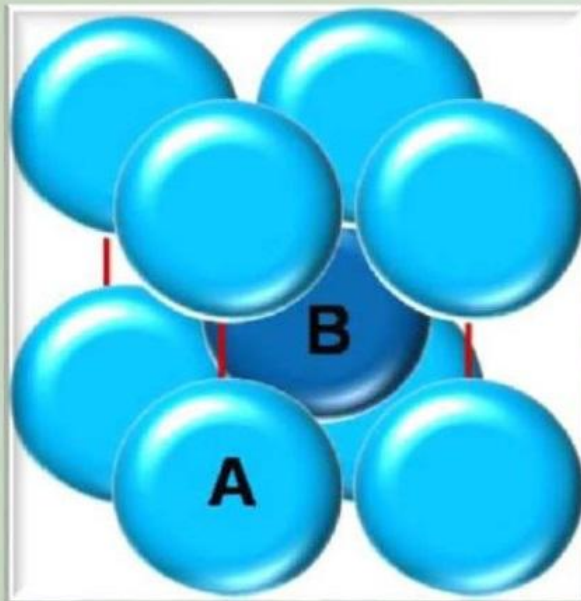


Empaquetamiento cúbico centrado en el cuerpo

Número de coordinación = 8

Nº de u.e. por celda unit. = 1 (u.e. al centro) + 8 vért. * 1/8 (u.e./vért.) = 2 u.e.

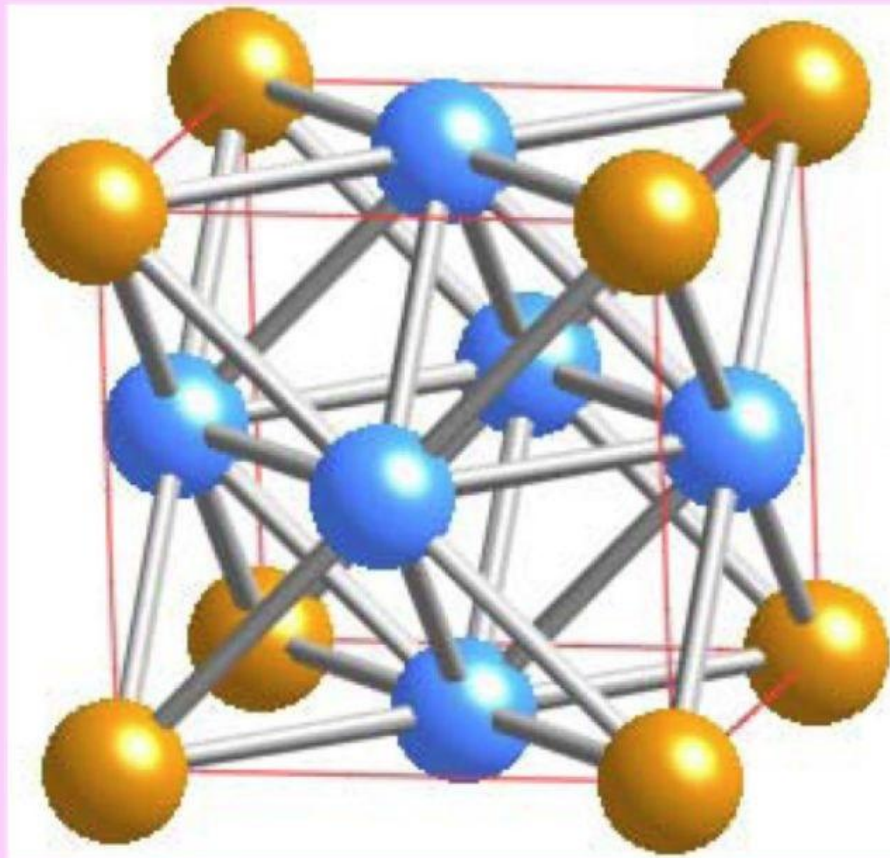
Se da en menor proporción aunque existen metales con este empaquetamiento



Empaquetamiento cúbico centrado en las caras

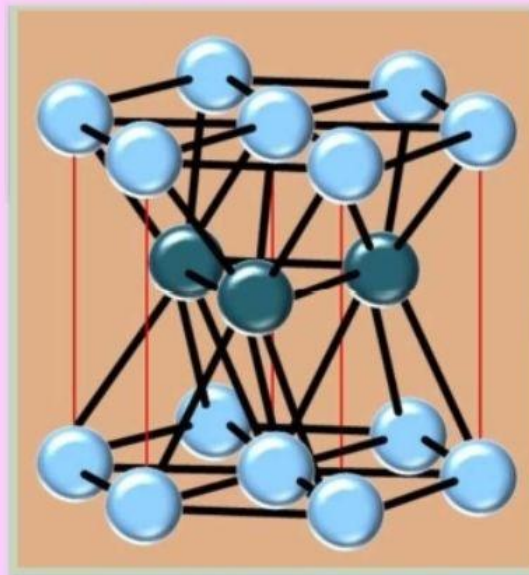
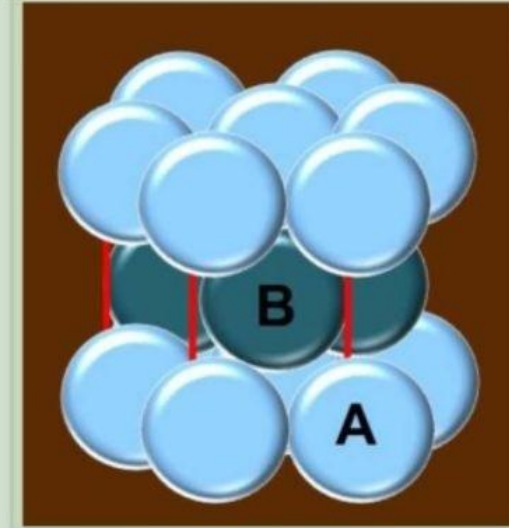
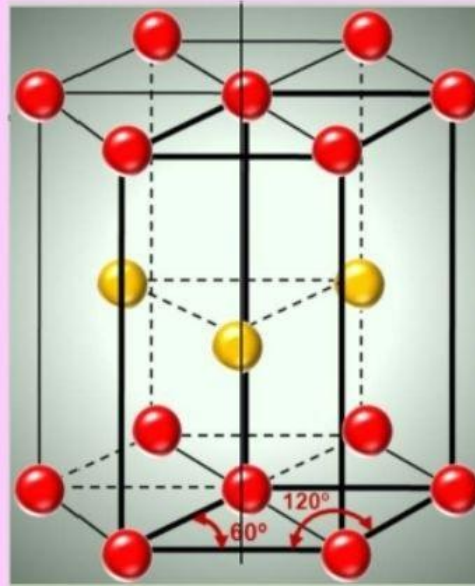
Número de coordinación = 12

Nº de u.e. por celda unit. = 6 caras * 1/2 (u.e./cara) + 8 vért. * 1/8 (u.e./vért.) = 4 u.e.

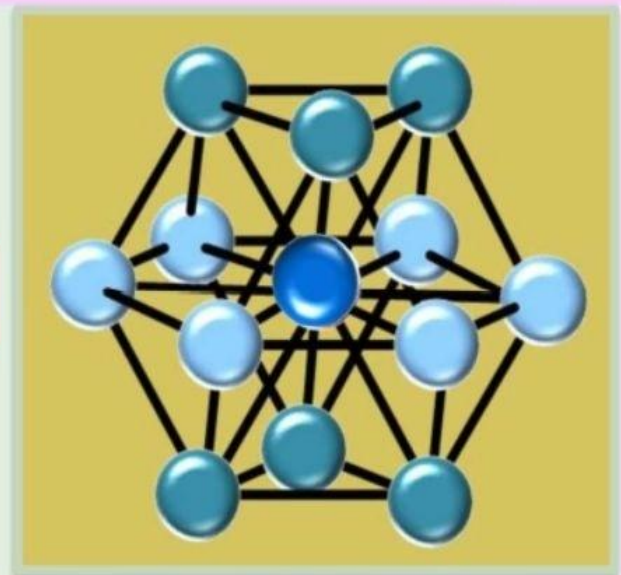


Empaquetamiento hexagonal compacto

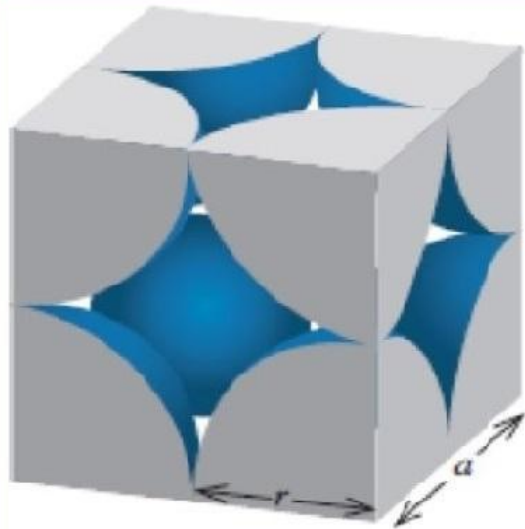
Nº de u.e. por celda unit. = $12 \text{ vért.} \cdot \frac{1}{6} (\text{u.e./vért.}) + 2 \text{ caras} \cdot \frac{1}{2} (\text{u.e./cara}) + 3 (\text{u.e. al centro}) = 6 \text{ u.e.}$
Número de coordinación = 12



$$nc = 12$$

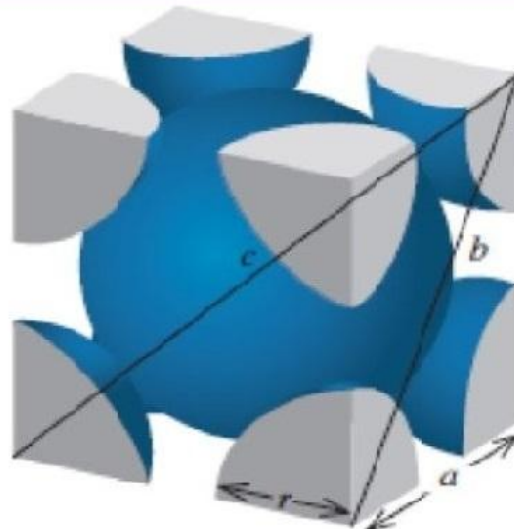


Relaciones geométricas en las estructuras cúbicas



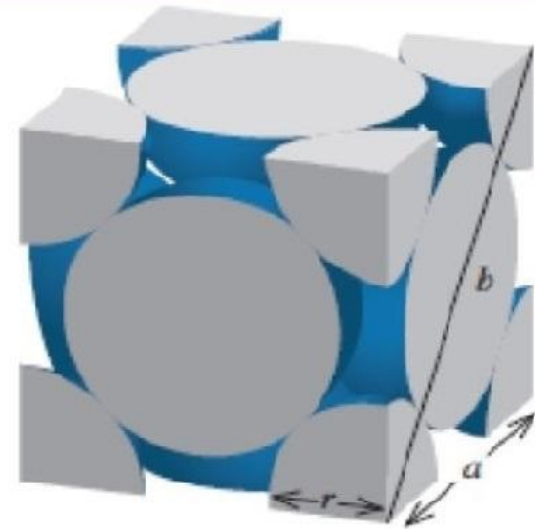
Cúbica simple

$$a = 2r$$



Cúbica centrada en el cuerpo

$$\begin{aligned}b^2 &= a^2 + a^2 \\c^2 &= a^2 + b^2 \\&= 3a^2 \\c &= \sqrt{3}a = 4r \\a &= \frac{4r}{\sqrt{3}}\end{aligned}$$



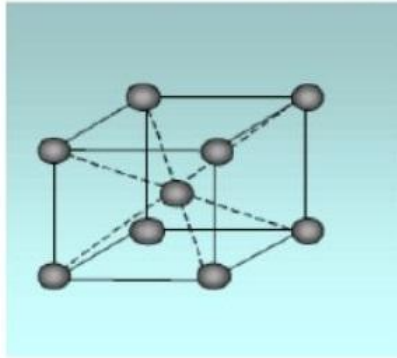
Cúbica centrada en las caras

$$\begin{aligned}b &= 4r \\b^2 &= a^2 + a^2 \\16r^2 &= 2a^2 \\a &= \sqrt{8}r\end{aligned}$$

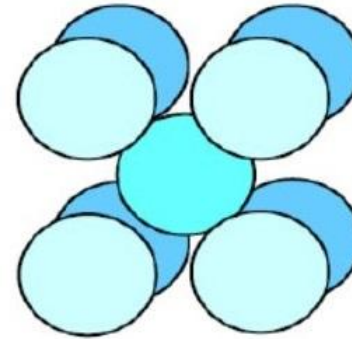


El 90% de los metales cristaliza en alguna de estas tres estructuras:

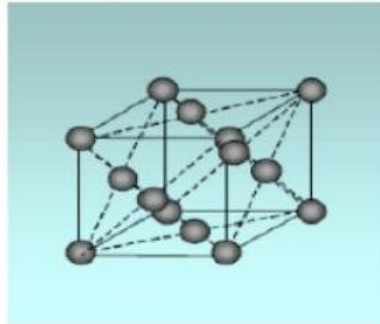
Ej: Fe- α (estable baja T^a), Cr, Mo, K, V, W, aleaciones



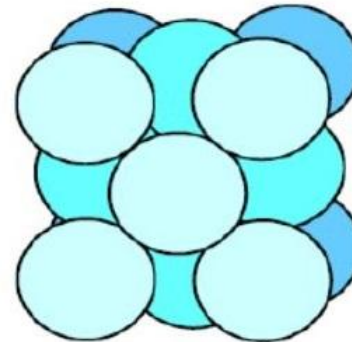
BCC



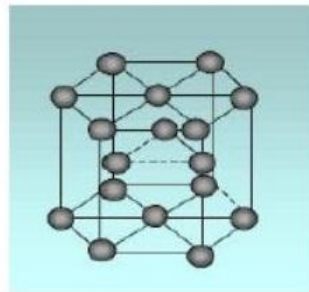
Ej: Fe- γ , Al, Cu, Ni, Pt, Ag, Au



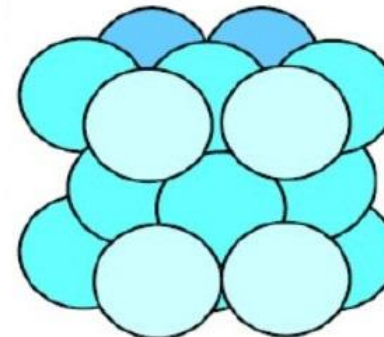
FCC



Ej: Be, Cd, Mg, Co, Ti- α , Zn



HCP



Ejemplo de cálculo de la densidad de un metal en base a datos de su estructura cristalina.

Calcular la densidad de la plata sabiendo que sus cristales son cúbicos de cara centrada y que la arista de la celda tiene $4,086\text{\AA}$. El mol de plata tiene una masa de $107,87\text{g}$.

Primero determinamos la masa de la celda unitaria, que es la masa de cuatro átomos de plata, luego determinamos la densidad de la celda unitaria dividiendo su masa por su volumen, y esa es la densidad de la plata.

$$\begin{aligned}\frac{? \text{ g de Ag por}}{\text{celda unitaria}} &= \frac{4 \text{ átomos de Ag}}{\text{celda unitaria}} \times \frac{1 \text{ mol de Ag}}{6.022 \times 10^{23} \text{ átomos de Ag}} \times \frac{107.87 \text{ g de Ag}}{1 \text{ mol de Ag}} \\ &= 7.165 \times 10^{-22} \text{ g de Ag/celda unitaria}\end{aligned}$$

$$V_{\text{celda unitaria}} = (4.086 \text{ \AA})^3 = 68.22 \text{ \AA}^3 \times \left(\frac{10^{-8} \text{ cm}}{\text{\AA}}\right)^3 = 6.822 \times 10^{-23} \text{ cm}^3/\text{celda unitaria}$$

$$\text{Densidad} = \frac{7.165 \times 10^{-22} \text{ g de Ag/celda unitaria}}{6.822 \times 10^{-23} \text{ cm}^3/\text{celda unitaria}} = 10.50 \text{ g/cm}^3$$



Propiedades de los Sólidos

Propiedades de los Sólidos	TÉRMICAS	-Punto de fusión -Conductividad
	MECÁNICAS	-Dureza -Tenacidad -Elasticidad -Plasticidad (Maleabilidad y/o Ductilidad)
	ELÉCTRICAS	-Conductividad



Propiedades de los Sólidos Cristalinos

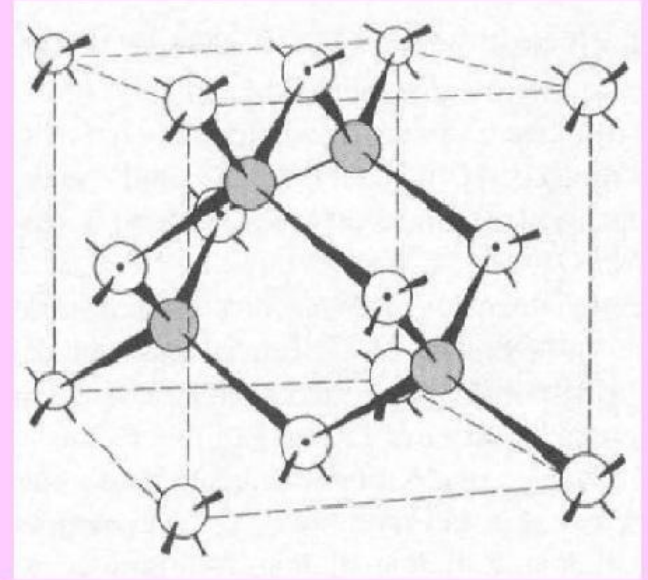
Tipo de Sólido		Atómico o covalente	Iónico	Molecular		Metálico
Unidad elemental en nodo		átomo no metálico	Catión o Anión	Molécula		Catión
Interacciones entre nodos		Enlace covalente	Enlace Iónico	Atracción Intermolecular de Van der Waals	Atracción Intermolecular por Puente de Hidrógeno	Enlace Metálico
Carácter de la Interacción		Muy fuerte	Fuerte	Débil	Medianamente débil	Generalmente fuerte
Propiedades Térmicas	Pto. fusión Pto. ebullición	Muy altos	Altos	Bajos	Medianos	Generalmente altos
	Conductividad	Baja	Baja	Baja	Baja	Alta
Propiedades mecánicas	Dureza	Muy duros	Duros	Blandos	Medianamente duros	Variada
	Elasticidad y Plasticidad	Frágil	Frágil	Deformación plástica.	Frágil	Rango de deformación elástica y rango de deformación plástica.
Propiedades eléctricas	Conductividad eléctrica	Baja	Como Sólido es Aislante. Fundido o en solución es conductor.	Baja	Baja	Alta
Ejemplos		C diamante, Carburo de Silicio (SiC), SiO ₂ (cuarzo)	NaCl, CsCl (Cloruro de Cesio)	Gases enfriados, "Hielo seco" (CO ₂) O ₂ , N ₂ , Ne	Hielo	Cobre, Hierro, Magnesio



Sólidos atómicos o de red covalente



DIAMANTE



Cada átomo de carbono está unido por enlace covalente a otros cuatro átomos formando un tetrahedro.

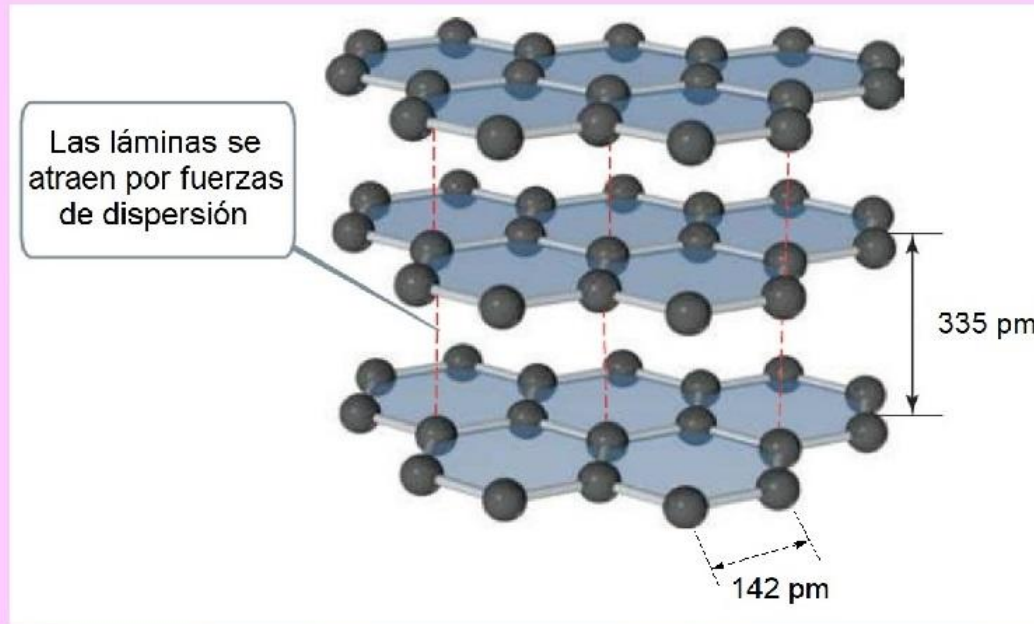


Diamante



Sólidos atómicos o de red covalente

GRAFITO

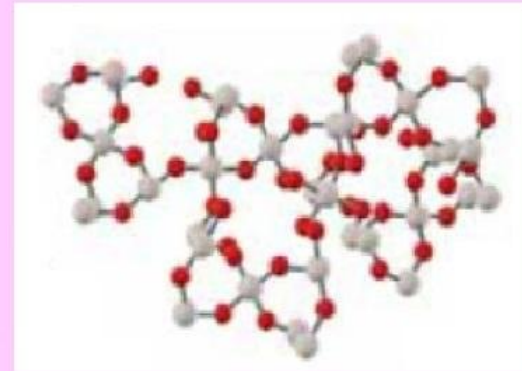


En el grafito cada átomo de carbono se une por unión covalente con otros tres átomos en un mismo plano formando una capa, las distintas capas se atraen entre sí por fuerzas de van der Waals.



Sólidos atómicos o de red covalente

CUARZO



Cada átomo de silicio
está unido en forma
tetrahédrica a cuatro
átomos de carbono

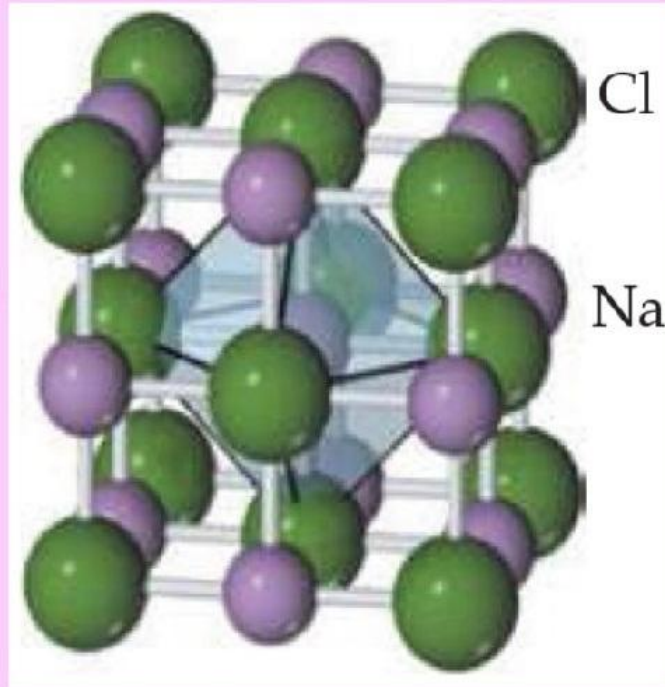


Sólidos iónicos

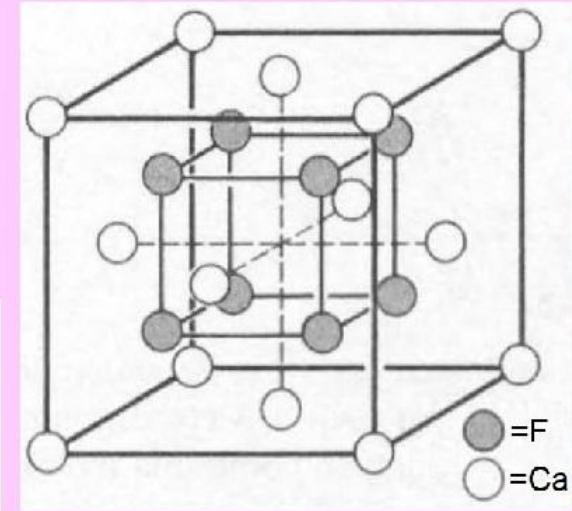
Importa el tamaño de los
iones
iones más chicos \rightarrow fuerzas de
atracción
mayores



RUBÍ



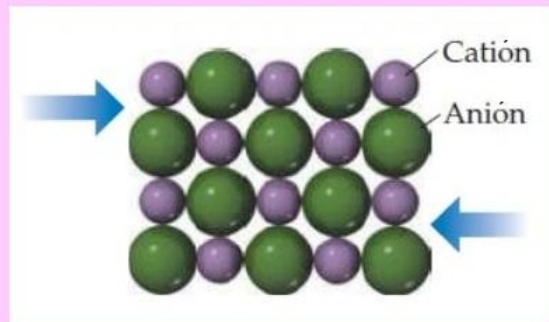
NaCl



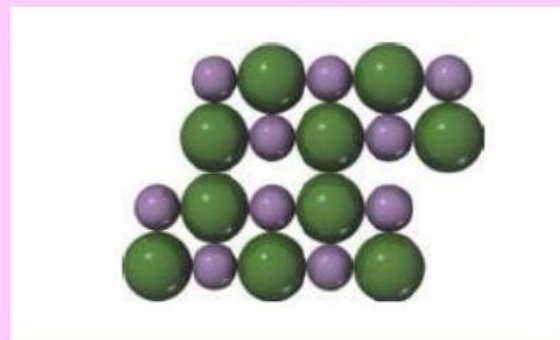
CaF_2



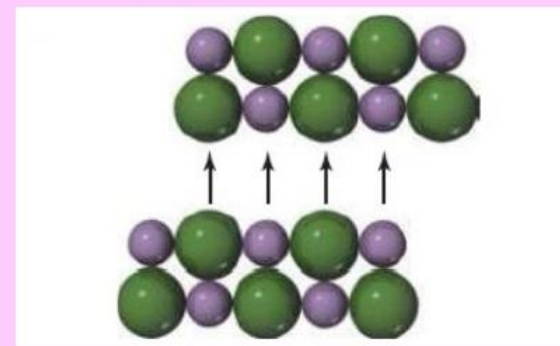
Sólidos iónicos



Cuando se aplica un esfuerzo de corte a un cristal iónico



el esfuerzo hace que se deslicen los planos de átomos



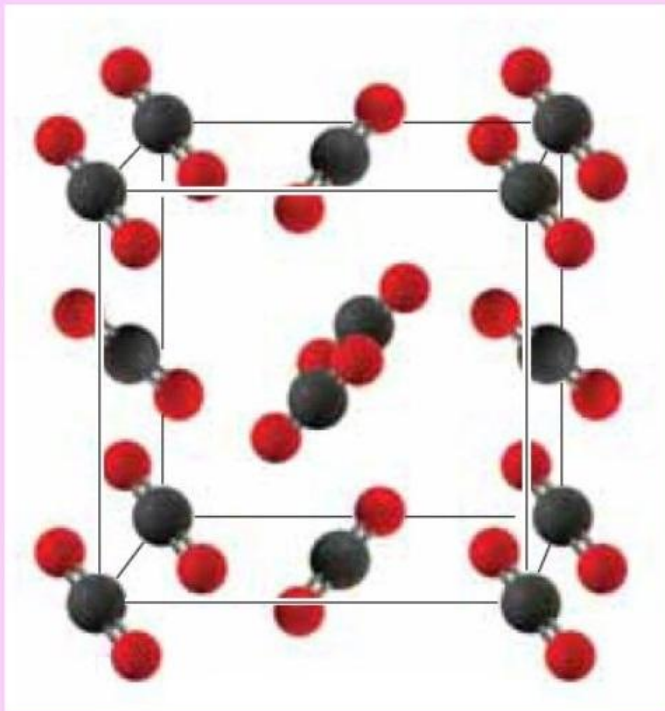
y la fuerza de repulsión entre los iones de igual carga hace que los planos se separen



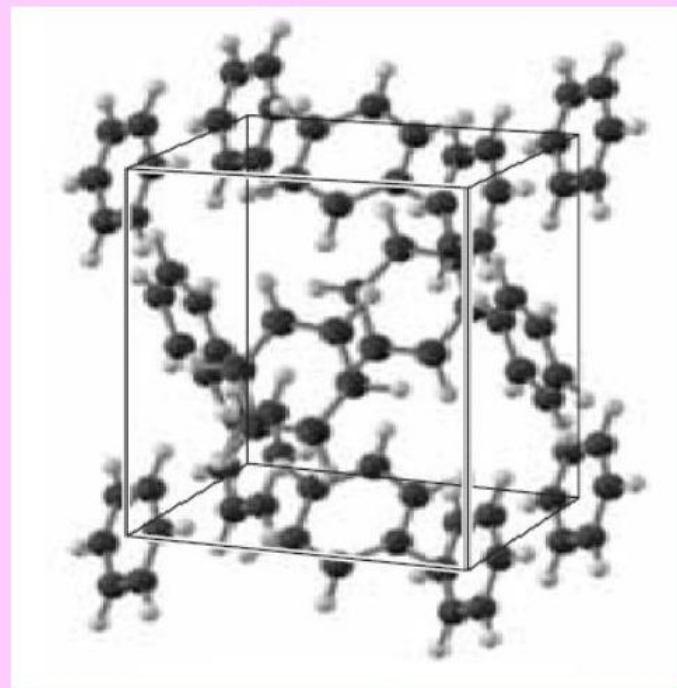
Cuando el cristal iónico se somete a un esfuerzo que provoca el deslizamiento a lo largo de un plano, el incremento de la fuerza de repulsión entre los iones de igual carga hace que el cristal se rompa a lo largo de un plano cristalino.



Sólidos moleculares



Dióxido de carbono



Benceno

Las moléculas se atraen entre sí por fuerzas de atracción intermoleculares del tipo van der Waals o puente de hidrógeno y se disponen ordenadamente en el espacio.

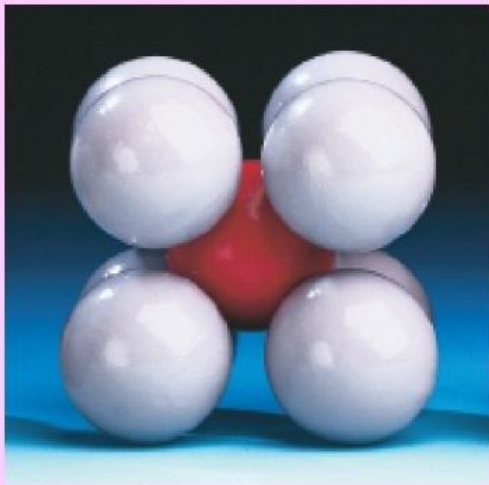


Sólidos metálicos

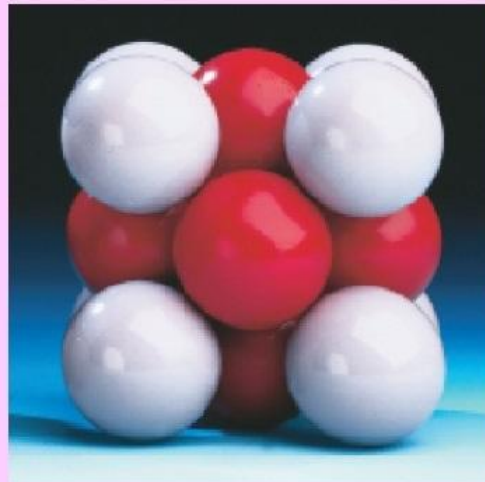
HIERRO



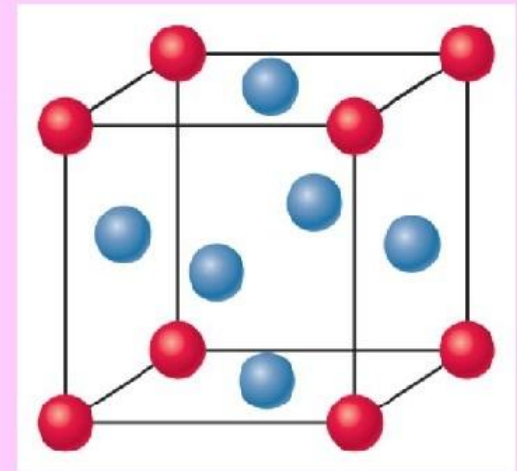
COBRE



hierro alfa



hierro gama



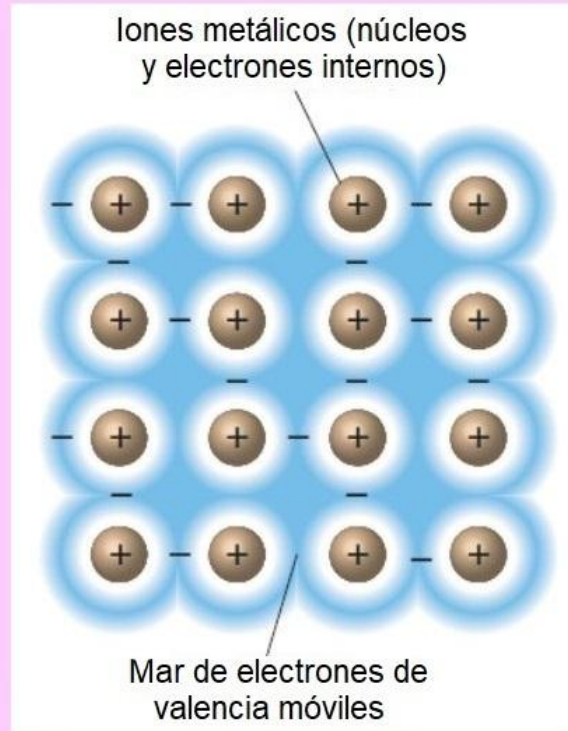
cobre



Sólidos metálicos

TEORÍA DEL "MAR DE ELECTRONES"

Las fuerzas son tan fuertes q' no se pueden explicar con las fuerzas covalentes



Nadie es dueño de los electrones. Los e^- son de todos
Fue re yurdita quedé

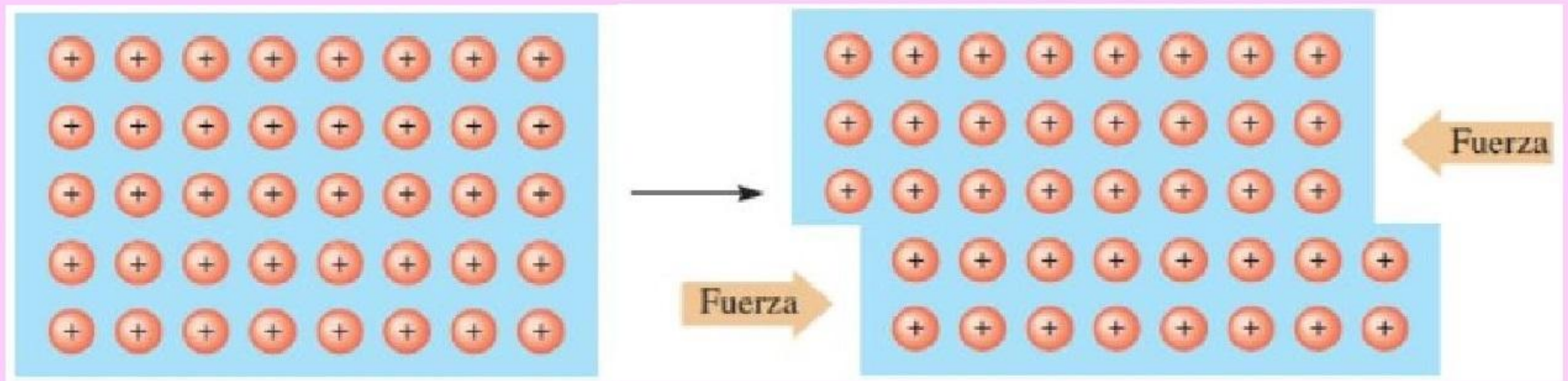
Los electrones de valencia se deslocalizan y forman un mar de electrones móviles que rodea y une a los iones metálicos en una red cristalina.

El modelo permite justificar la buena conductividad térmica y eléctrica de los metales además de su ductilidad.



Sólidos metálicos

TEORÍA DEL "MAR DE ELECTRONES"



Como los cationes metálicos están inmersos en una "nube de electrones" deslocalizados, cuando el metal se somete a un esfuerzo de corte y desliza un plano, el entorno que rodea a los átomos metálicos casi no cambia, no aparecen nuevas fuerzas de repulsión, y el metal puede deformarse sin rotura.

Se observa q' a lo largo de un período los p. de f. crecen y luego decrecen. No es consistente con este modelo xq' cuantos más e⁻ se comportan más fuerte debería ser la atracción



Sólidos metálicos

TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR

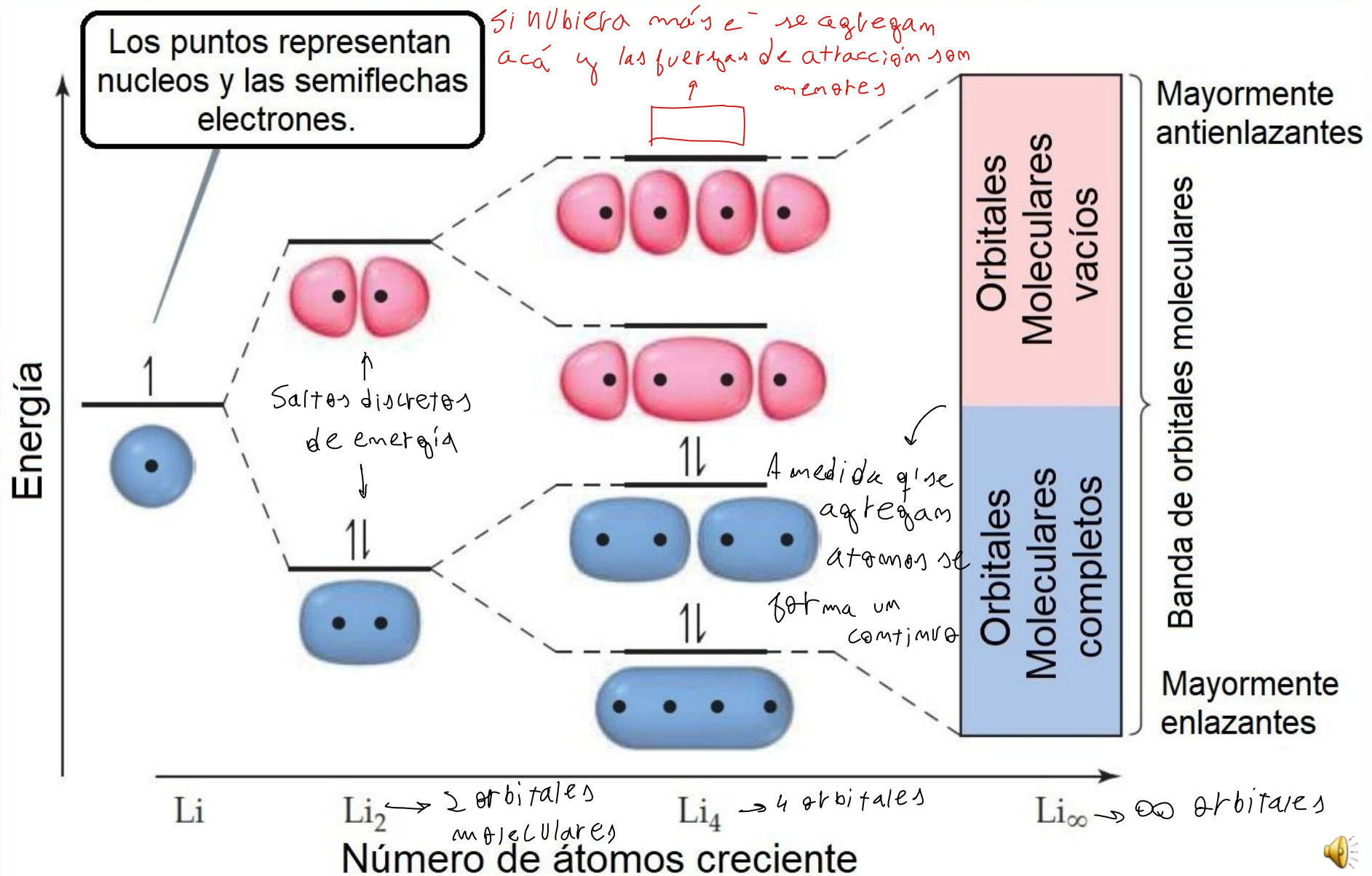
- Los orbitales atómicos se combinan para hacer orbitales moleculares que se extienden por toda la molécula.
- Un orbital molecular puede contener 0, 1 ó 2 electrones.
- El número de orbitales moleculares en una molécula es igual al número de orbitales atómicos que se combinan para formar los orbitales moleculares.
- El agregado de electrones a un orbital molecular enlazante fortalece el enlace, mientras que el agregado de electrones a un orbital molecular antienlazante debilita el enlace.

¿¿??



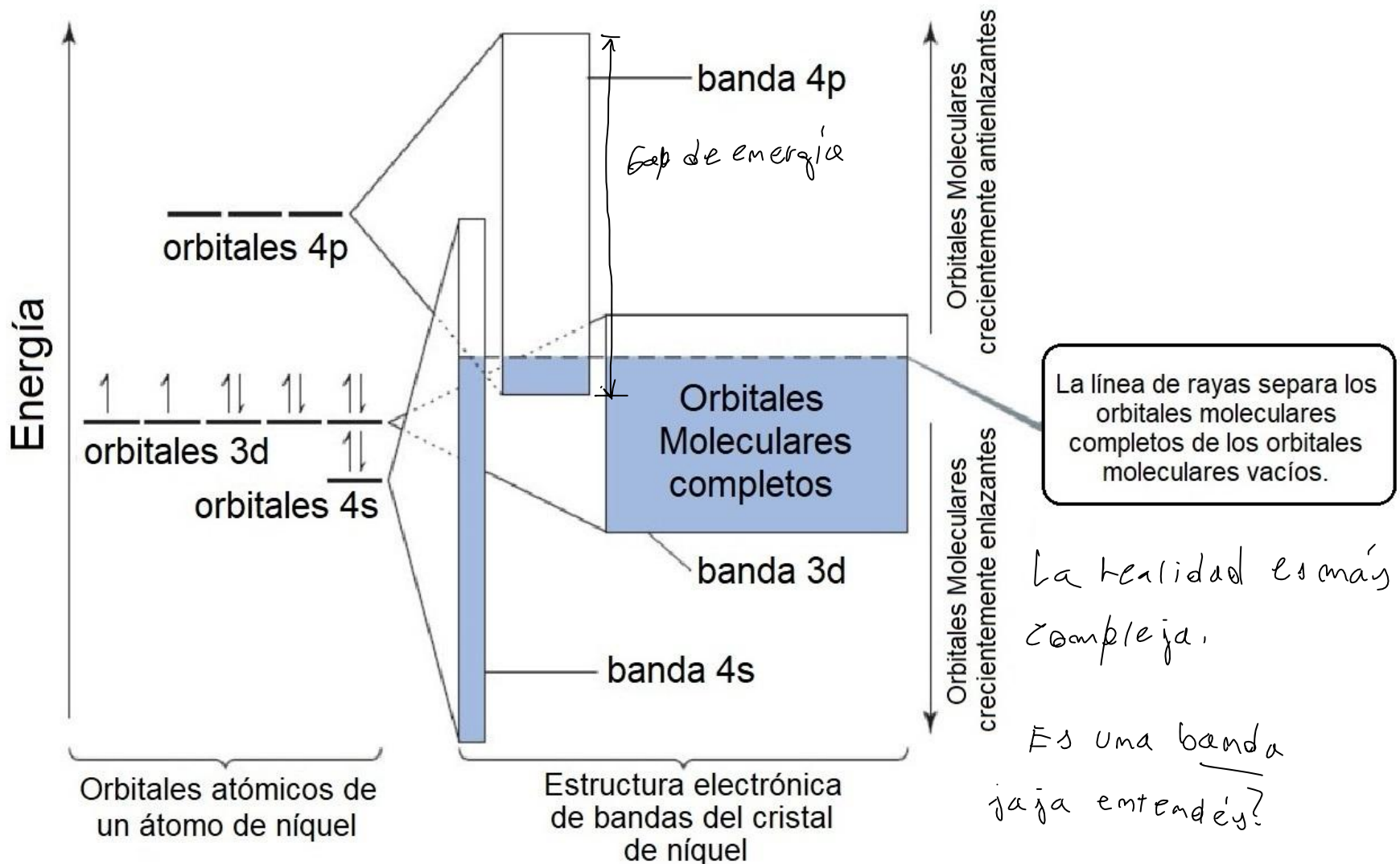
Sólidos metálicos

TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR



Sólidos metálicos

TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR

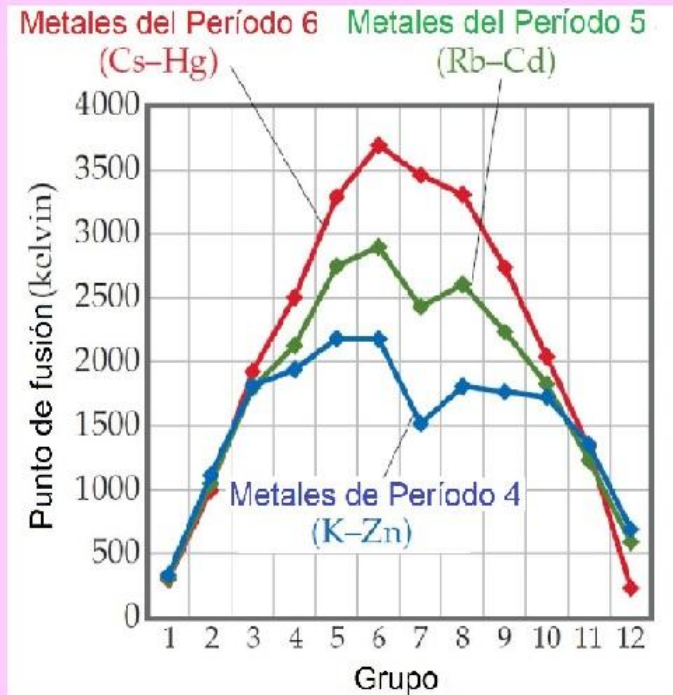


Estructura electrónica de bandas para el níquel



Sólidos metálicos

TEORÍA DEL ORBITAL MOLECULAR



A lo largo de un período las fuerzas de atracción entre los átomos metálicos en un comienzo crece y luego disminuye, reflejándose en propiedades como el punto de fusión.

El modelo del mar de e^- se queda corto ■

19 K 39.0983	20 Ca 40.078	21 Sc 44.955910	22 Ti 47.867	23 V 50.9415	24 Cr 51.9961	25 Mn 54.938049	26 Fe 55.845	27 Co 58.933200	28 Ni 58.6934	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39
37 Rb 85.4678	38 Sr 87.62	39 Y 88.90585	40 Zr 91.224	41 Nb 92.90638	42 Mo 95.94	43 Tc [98]	44 Ru 101.07	45 Rh 102.90550	46 Pd 106.42	47 Ag 107.8682	48 Cd 112.411
55 Cs 132.90545	56 Ba 137.327	71 Lu 174.967	72 Hf 178.49	73 Ta 180.9479	74 W 183.84	75 Re 186.207	76 Os 190.23	77 Ir 192.217	78 Pt 195.078	79 Au 196.96655	80 Hg 200.59