

Estructura de la Materia 2

Clase 4 - Teoría

Docentes

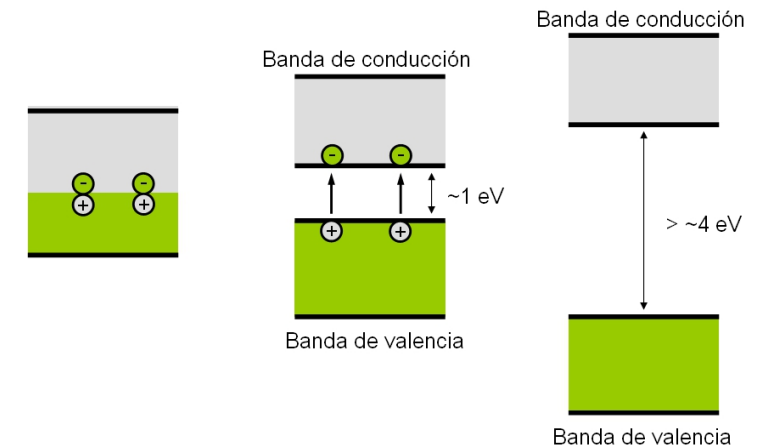
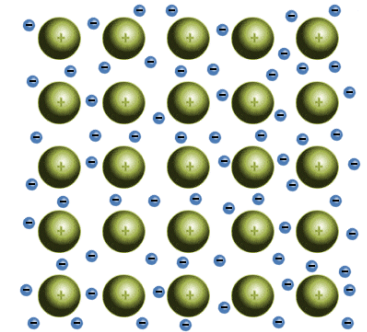
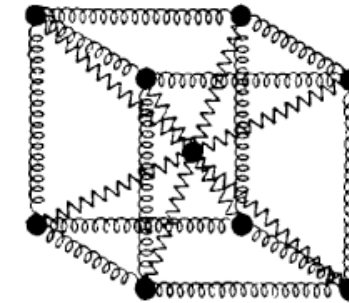
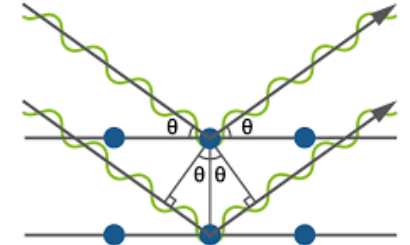
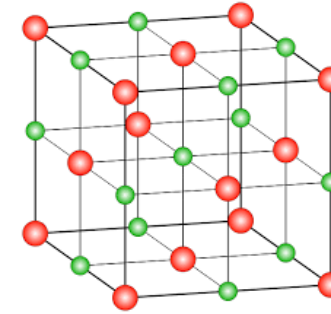
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Juan Herrera Mateos

Departamento de Física, FCEN, UBA – Curso de Verano, 2022

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2022v>

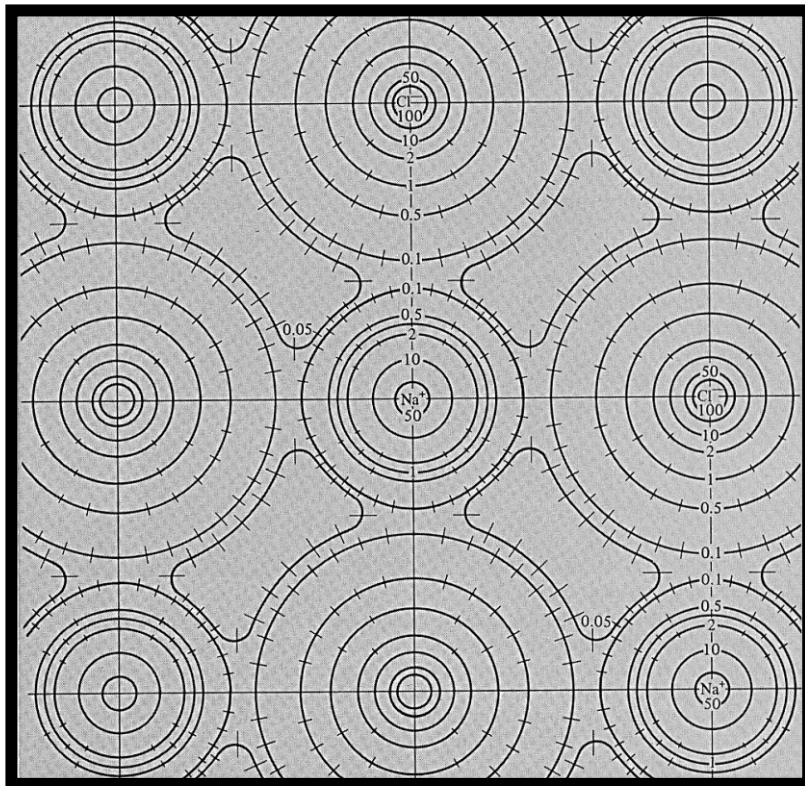
Programa de la materia

- Red cristalina, red recíproca y difracción de rayos X ✓
- Clasificación de los sólidos y energía de cohesión
- Vibraciones, fonones y propiedades térmicas
- Electrones en sólidos (potencial periódico)
- Semiconductores y juntura semiconductor

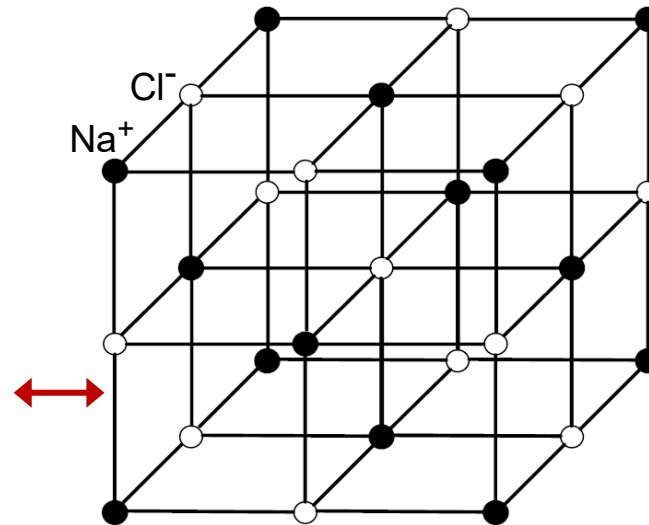


Clasificación de los sólidos

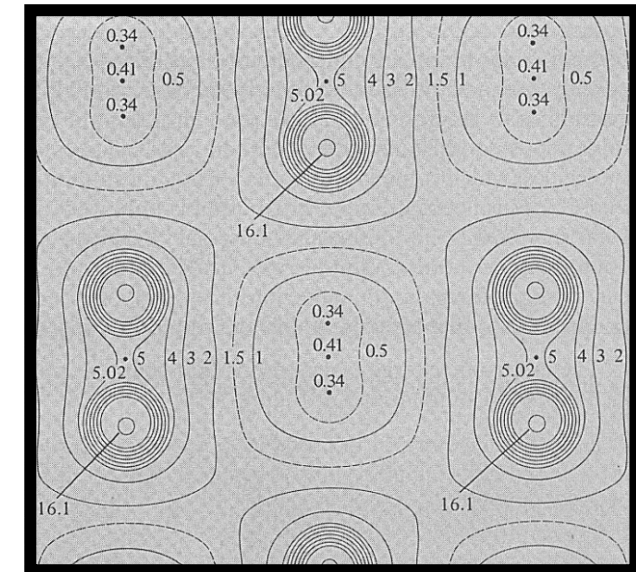
Evidencia experimental por rayos X de la distribución electrónica en sólidos



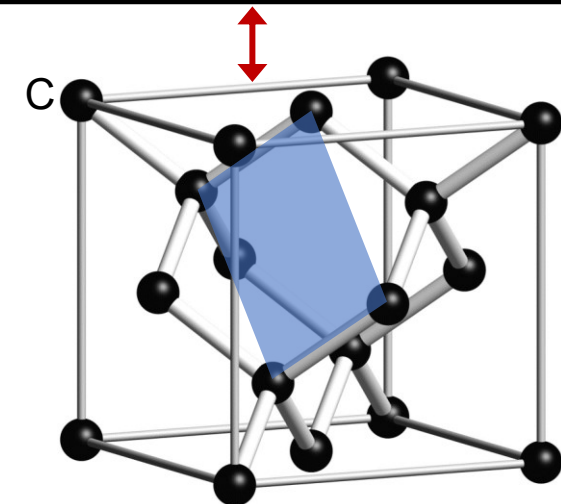
Los números indican densidad electrónica en e⁻/Å³.



→ Cristal iónico

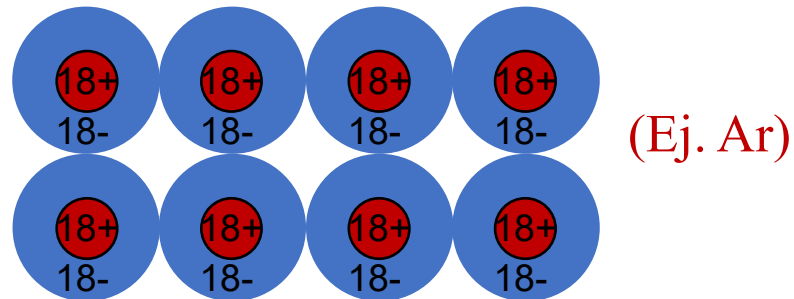


→ Cristal covalente

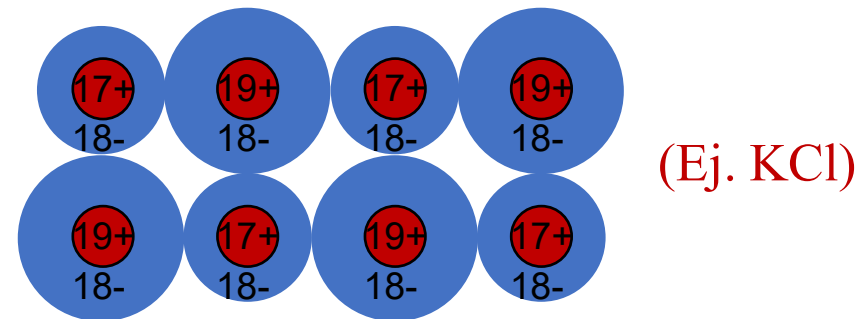


Clasificación de los sólidos

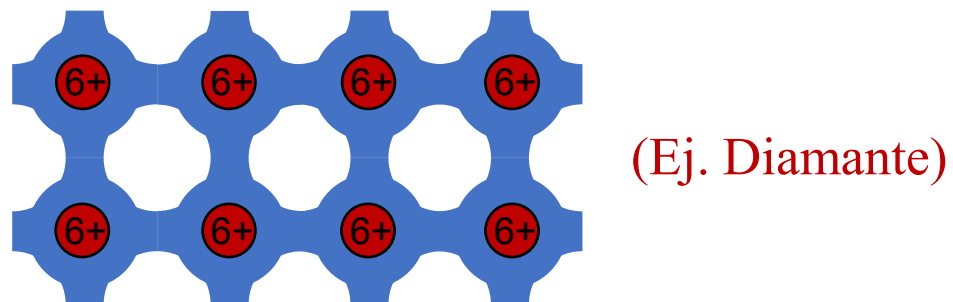
Cristal molecular (aislante)



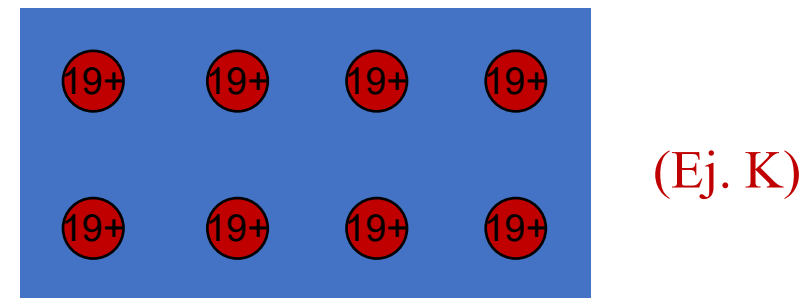
Cristal iónico (aislante)



Cristal covalente (aislante/semiconductor)



Metal (conductor)

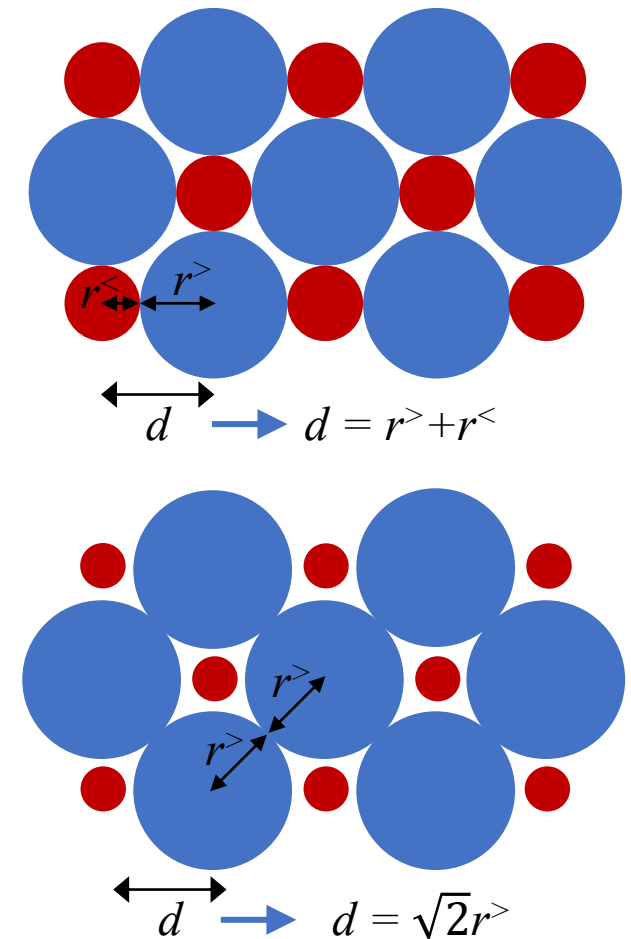


Clasificación de los sólidos

Cristales iónicos: Modelo de esferas rígidas (cristales I-VII)

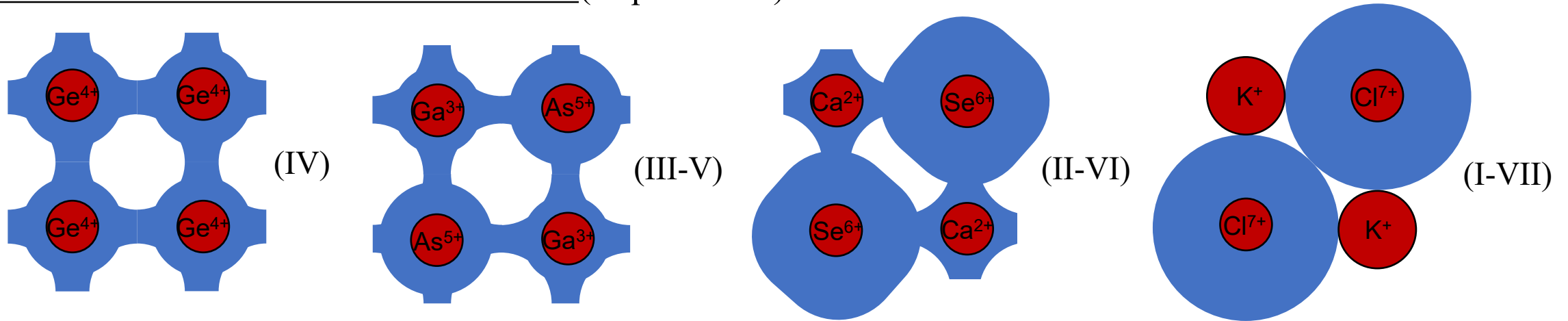
	Li ⁺ (0.60)	Na ⁺ (0.95)	K ⁺ (1.33)	Rb ⁺ (1.48)	Cs ⁺ (1.69)
<u>F⁻ (1.36)</u>					
d (exp.)	2.01	2.31	2.67	2.82	3.00
$r^+ + r^-$	1.96	2.31	2.69	2.84	3.05
<u>Cl⁻ (1.81)</u>					
d (exp.)	2.57	2.82	3.15	3.29	3.57
$r^+ + r^-$	2.41 [2.56]	2.76	3.14	3.29	3.50
<u>Br⁻ (1.95)</u>					
d (exp.)	2.75	2.99	3.30	3.43	3.71
$r^+ + r^-$	2.55 [2.76]	2.90	3.28	3.43	3.64
<u>I⁻ (2.16)</u>					
d (exp.)	3.00	3.24	3.53	3.67	3.95
$r^+ + r^-$	2.76 [3.05]	3.11	3.49	3.64	3.85

Los números se encuentran en Å. Entre () se especifican los radios iónicos propuestos.



Clasificación de los sólidos

Transición de cristal covalente a iónico (esquemático)



Cristales iónicos

Cristales covalentes

Metales de transición

Cristales moleculares

																		18 VIIIA 2 4.0026 He HELIO	
3 6.94 Li LITIO	4 9.0122 Be BERILIO											5 10.81 B BORO	6 12.011 C CARBONO	7 14.007 N NITRÓGENO	8 15.999 O OXÍGENO	9 18.998 F FLÚOR	10 20.180 Ne NEÓN		
11 22.990 Na SODIO	12 24.305 Mg MAGNESIO											13 26.982 Al ALUMINIO	14 28.085 Si SILICIO	15 30.974 P FÓSFORO	16 32.06 S AZUFRE	17 35.45 Cl CLORO	18 39.948 Ar ARGÓN		
19 39.098 K POTASIO	20 40.078 Ca CALCIO	21 44.956 Sc ESCANADIO	22 47.867 Ti TITANIO	23 50.942 V VANADIO	24 51.996 Cr CROMO	25 54.938 Mn MANGANESO	26 55.845 Fe HIERRO	27 58.933 Co COBALTO	28 58.693 Ni NIQUEL	29 63.546 Cu COBRE	30 65.38 Zn ZINC	31 69.723 Ga GALIO	32 72.64 Ge GERMANIO	33 74.922 As ARSENICO	34 78.971 Se SELENIO	35 79.904 Br BROMO	36 83.798 Kr KRIPTÓN		
37 85.468 Rb RUBIDIO	38 87.62 Sr ESTRONCIO	39 88.906 Y ITRIO	40 91.224 Zr CIRCONIO	41 92.906 Nb NIÓBIO	42 95.95 Mo MOLIBDENO	43 (98) Tc TECNECIO	44 101.07 Ru RUTENIO	45 102.91 Rh RODIO	46 106.42 Pd PALADIO	47 107.87 Ag PLATA	48 112.41 Cd CADMIO	49 114.82 In INDIO	50 118.71 Sn ESTAÑO	51 121.76 Sb ANTIMONIO	52 127.60 Te TELURIO	53 126.90 I YODO	54 131.29 Xe XENÓN		
55 132.91 Cs CESIO	56 137.33 Ba BARIO	57-71 La-Lu Lantánidos	72 178.49 Hf HAFNIO	73 180.95 Ta TANTALO	74 183.84 W WOLFRAMIO	75 186.21 Re RENIÓ	76 190.23 Os OSMIO	77 192.22 Ir IRIDIO	78 195.08 Pt PLATINO	79 196.97 Au ORO	80 200.59 Hg MERCURIO	81 204.38 Tl TALIO	82 207.2 Pb PLOMO	83 208.98 Bi BISMUTO	84 (209) Po POLONIO	85 (210) At ASTATO	86 (222) Rn RADÓN		
87 (223) Fr FRANCIO	88 (226) Ra RADIO	89-103 Ac-Lr Actínidos	104 (267) Rf RUTHERFORDIO	105 (268) Db DUBNIO	106 (271) Sg SEABORGIO	107 (272) Bh BOHRIO	108 (277) Hs HASIO	109 (276) Mt MEITNERIO	110 (281) Ds DARMSTATIO	111 (280) Rg ROENTGENIO	112 (285) Cn COPERNICIO	113 (285) Nh NIHONIO	114 (287) Fl FLEROVIO	115 (289) Mc MOSCOVIO	116 (291) Lv LIVERMORIO	117 (294) Ts TENESO	118 (294) Og OGANESÓN		

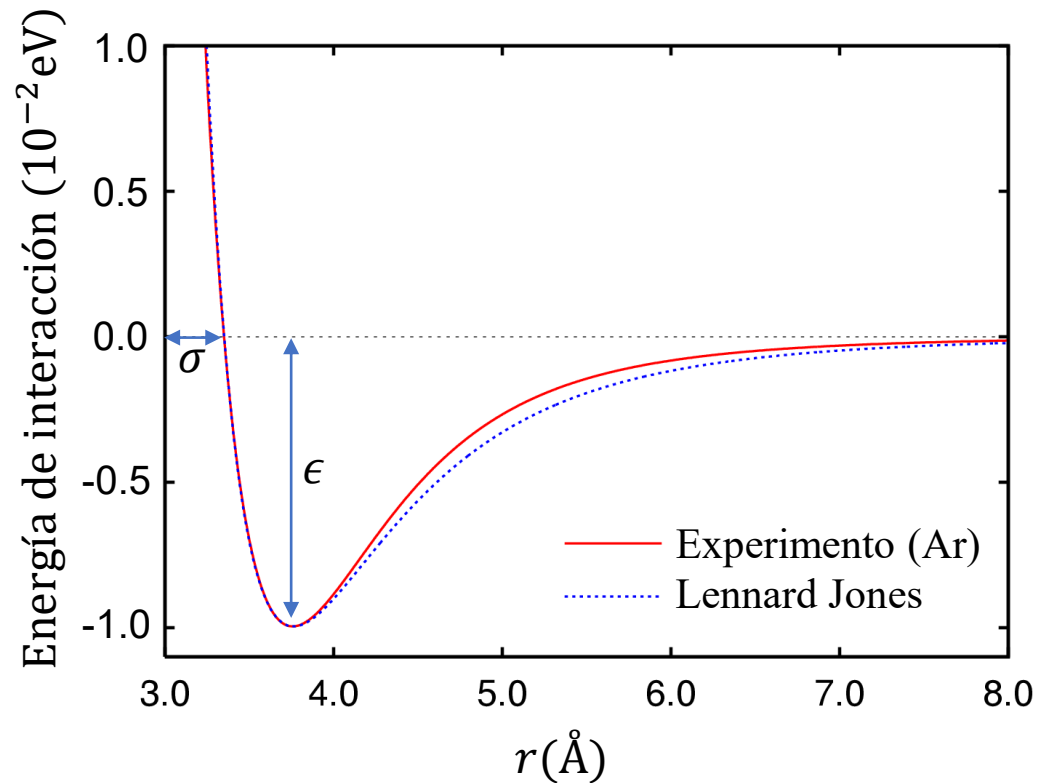
Cohesión en sólidos: Cristal molecular

Cohesión en cristales moleculares

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad \text{Potencial de Lennard-Jones}$$

ϵ : Magnitud de la atracción

σ : Radio del núcleo repulsivo



Parámetros para gases nobles

	Ne	Ar	Kr	Xe
ϵ (eV)	0.0031	0.0010	0.014	0.0020
σ (Å)	2.74	3.40	3.65	3.98

Parámetros para sólidos de gases nobles

	Ne	Ar	Kr	Xe
r_0 (Å)				
Exp.	3.13	3.75	3.99	4.33
Teo.	2.99	3.71	3.98	4.34
u_0 (eV)				
Exp.	-0.02	-0.08	-0.11	-0.17
Teo.	-0.027	-0.089	-0.12	-0.17

Resumen

- Clasificación de los sólidos según distribución electrónica
- Energía de cohesión
- Cohesión en cristales moleculares (atracción débil)
- Distancia y energía de equilibrio

