

Estructura de la Materia 2

Clase 5 - Teoría

Docentes

Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Juan Herrera Mateos

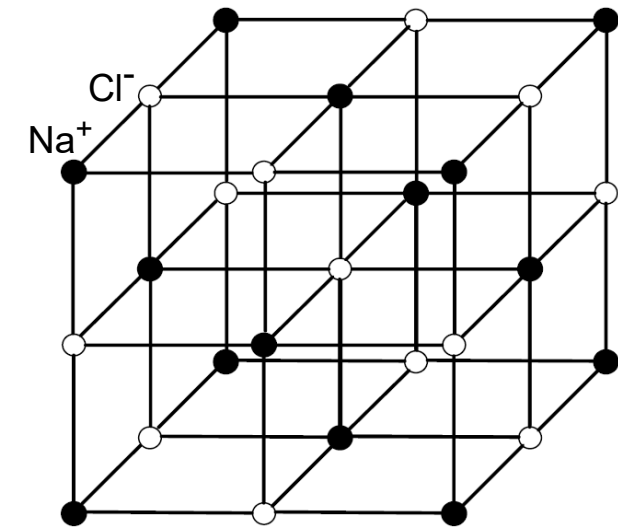
Departamento de Física, FCEN, UBA – Curso de Verano, 2022

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

Cohesión en sólidos: Cristal iónico

Energías de ionización

Li	Be	Energía para remover $1e^-$ (eV)										B	C	N	O	F	Ne
5.39	9.32											8.30	11.26	14.54	13.61	17.42	21.56
81.01	27.53	Energía para remover $2e^-$ (eV)										33.45	35.64	44.14	48.76	52.40	62.63
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
5.14	7.64	5.98	8.15	10.55	10.36	13.01	15.76										
52.43	22.67	24.80	24.49	30.20	34.0	36.81	43.38										
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
4.34	6.11	6.56	6.83	6.74	6.76	7.43	7.90	7.86	7.63	7.72	9.39	6.00	7.88	9.81	9.75	11.84	14.00
36.15	17.98	19.45	20.46	21.39	23.25	23.07	24.08	24.91	25.78	27.93	27.35	26.51	23.81	30.0	31.2	33.4	38.56
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
4.18	5.69	6.5	6.95	6.77	7.18	7.28	7.36	7.46	8.33	7.57	8.99	5.78	7.34	8.64	9.01	10.45	12.13
31.7	16.72	18.9	20.98	21.22	23.25	22.54	24.12	25.53	27.75	29.05	25.89	24.64	21.97	25.1	27.6	29.54	33.3
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
3.89	5.21	5.61	7.	7.88	7.98	7.87	8.7	9.	8.96	9.22	10.43	6.11	7.41	7.29	8.43		10.74
29.0	15.21	17.04	22.	24.1	25.7	24.5	26.		27.52	29.7	29.18	26.53	22.44	23.97			



Cloruro de sodio

Cohesión en sólidos: Cristal iónico

Parámetros para algunos haluros alcalinos

Compuesto	r (Å)	u_0^{exp} (eV)	u_0^{teo} (eV)	m
NaF	2.31	-9.29	-9.36	6.90
NaCl	2.82	-7.93	-7.80	7.77
NaBr	2.99	-7.55	-7.36	8.09
NaI	3.24	-7.05	-6.80	8.46
KF	2.67	-8.24	-8.24	7.92
KCl	3.15	-7.18	-7.05	8.69
KBr	3.30	-6.87	-6.74	8.85
KI	3.53	-6.49	-6.37	9.13

Cohesión en sólidos

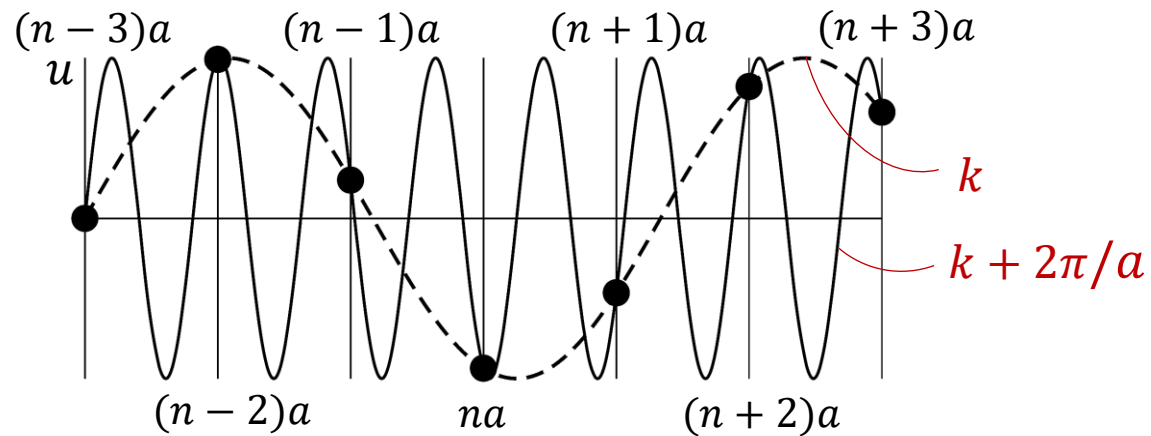
Energía de cohesión y temperatura de fusión

Energía de cohesión/átomo (eV)																	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
158.	320.											561	711.	474.	251.	81.0	1.92
1.63	3.32											5.81	7.37	4.92	2.60	0.84	0.020
37.7	76.5											134	170.	113.4	60.03	19.37	0.46
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
107.	145.											327.	446.	331.	275.	135.	7.74
1.113	1.51											3.39	4.63	3.43	2.85	1.40	0.080
25.67	34.7											78.1	106.7	79.16	65.75	32.2	1.85
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
90.1	178.	376	468.	512.	395.	282.	413.	424.	428.	336.	130	271.	372.	285.3	237	118.	11.2
0.934	1.84	3.90	4.85	5.31	4.10	2.92	4.28	4.39	4.44	3.49	1.35	2.81	3.85	2.96	2.46	1.22	0.116
21.54	42.5	89.9	111.8	122.4	94.5	67.4	98.7	101.3	102.4	80.4	31.04	64.8	88.8	68.2	56.7	28.18	2.68
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
82.2	166.	422.	603.	730.	658	661.	650.	554.	376.	284.	112.	243.	303.	265.	211	107.	15.9
0.852	1.72	4.37	6.25	7.57	6.82	6.85	6.74	5.75	3.89	2.95	1.16	2.52	3.14	2.75	2.19	1.11	0.16
19.64	39.7	100.8	144.2	174.5	157.2	158.	155.4	132.5	89.8	68.0	26.73	58.1	72.4	63.4	50.34	25.62	3.80
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
77.6	183.	431.	621.	782.	859.	775.	788.	670.	564.	368.	65.	182.	196.	210.	144.		19.5
0.804	1.90	4.47	6.44	8.10	8.90	8.03	8.17	6.94	5.84	3.81	0.67	1.88	2.03	2.18	1.50		0.202
18.54	43.7	103.1	148.4	186.9	205.2	185.2	188.4	160.1	134.7	87.96	15.5	43.4	46.78	50.2	34.5		4.66

Temperatura de fusión (K)																	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
453.7	1562											2365		63.15	54.36	53.48	24.56
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
371.0	922											933.5	1687	317 r 863	388.4	172.2	83.81
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
336.3	1113	1814	1946	2202	2133	1520	1811	1770	1728	1358	692.7	302.9	1211	1089	494	265.9	115.8
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
312.6	1042	1801	2128	2750	2895	2477	2527	2236	1827	1235	594.3	429.8	505.1	903.9	722.7	386.7	161.4
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
301.6	1002	1194	2504	3293	3695	3459	3306	2720	2045	1338	234.3	577	600.7	544.6	527		

Modos vibracionales: Cadena unidimensional

Modos normales de una RB unidimensional: Cadena finita



Ambas ondas toman el mismo valor sobre los distintos puntos de la red, y difieren solo entre ellos.

Como la onda física está definida solo sobre los puntos de la red, entonces ambas ondas son completamente equivalentes.

Resumen

- Cohesión en cristales iónicos
- Distancia y energía de equilibrio, módulo de compresibilidad
- Posición de núcleos en un cristal real
- Aproximación armónica en 1D
- Modos normales de una cadena lineal (RB)
- Sólidos finitos y condiciones de contorno periódicas

