

Estructura de la Materia 2

Clase 3 - Teoría

Docentes

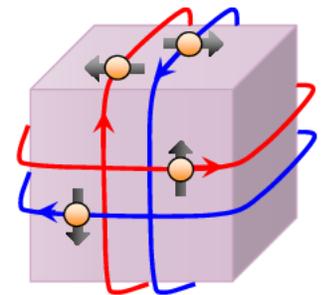
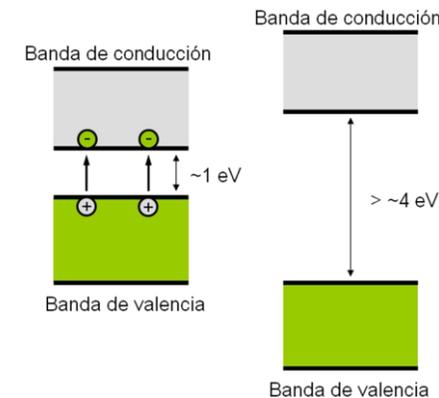
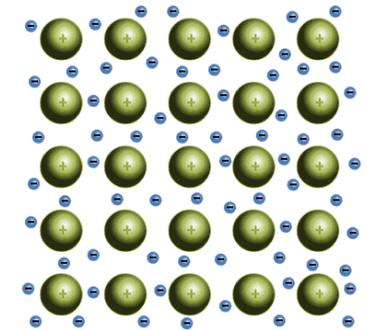
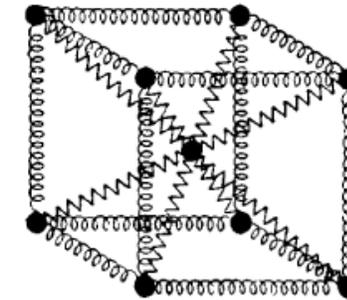
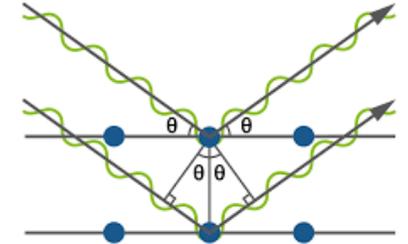
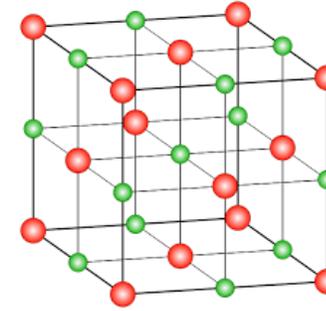
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Tomás Bortolin, Agustina Casafuz

Departamento de Física, FCEN, UBA – 2do Cuatrimestre, 2020

Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2020c2>

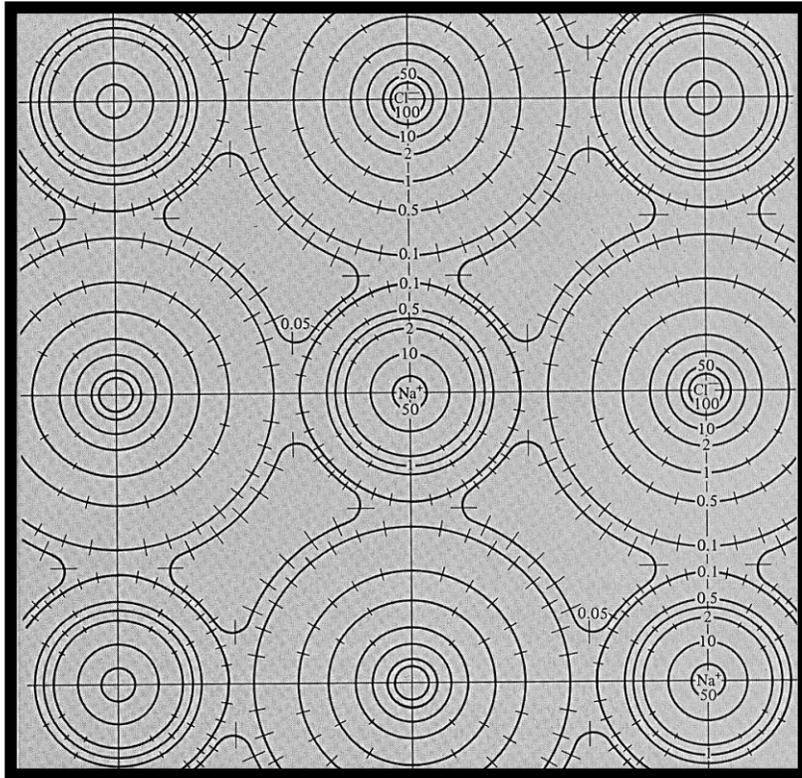
Programa de la materia

- 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
- Magnetismo en sólidos
- Introducción a los aisladores topológicos

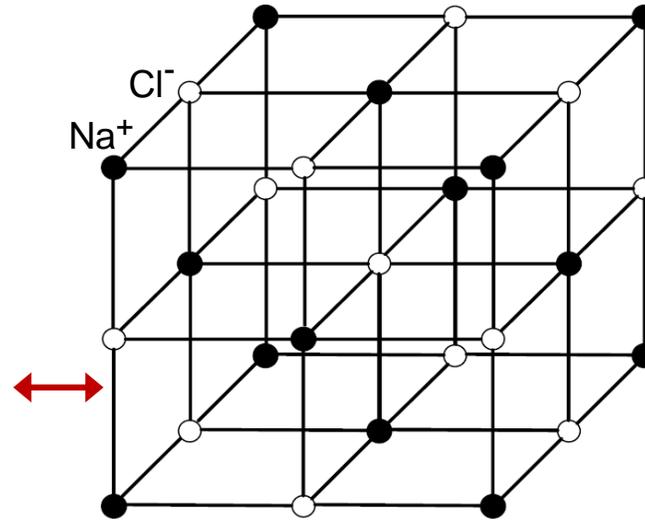


Clasificación de los sólidos

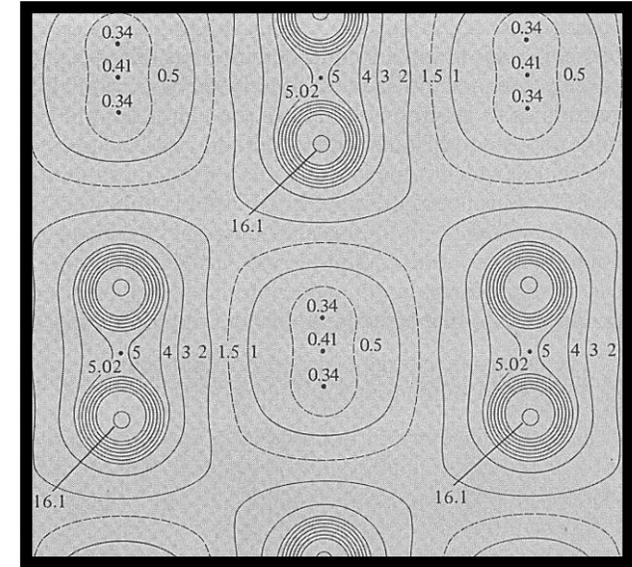
Evidencia experimental por rayos X de la distribución electrónica en sólidos



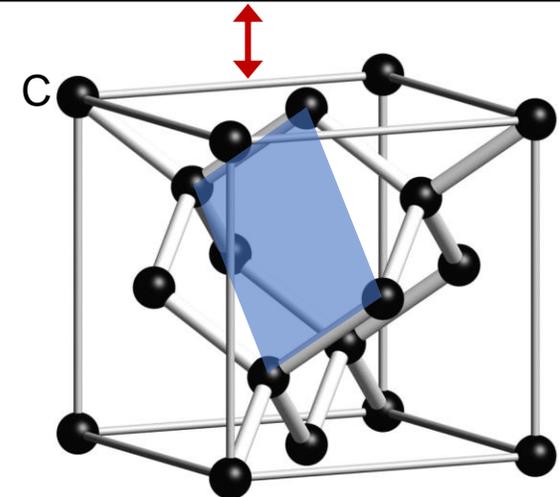
Los números indican densidad electrónica en $e^{-}/\text{Å}^3$.



Cristal iónico

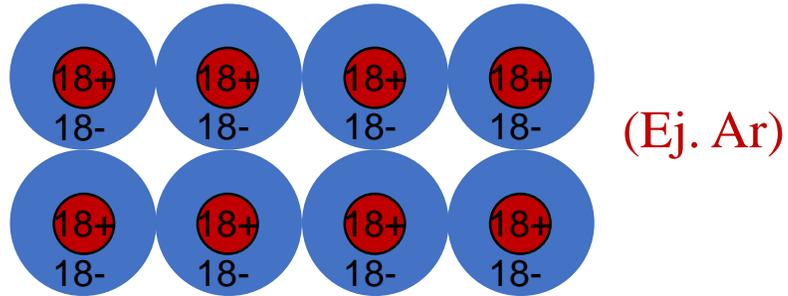


Cristal covalente



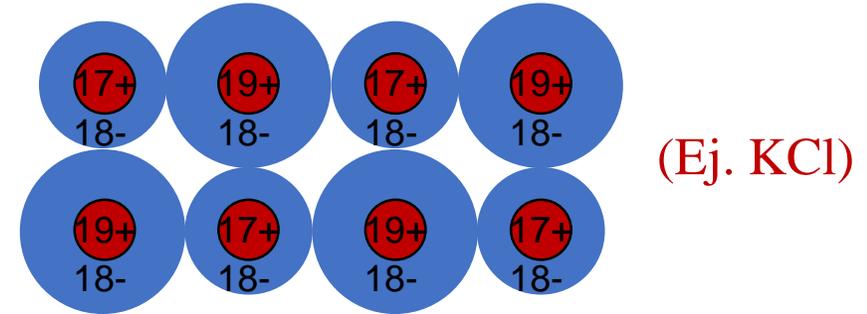
Clasificación de los sólidos

Cristal molecular (aislante)



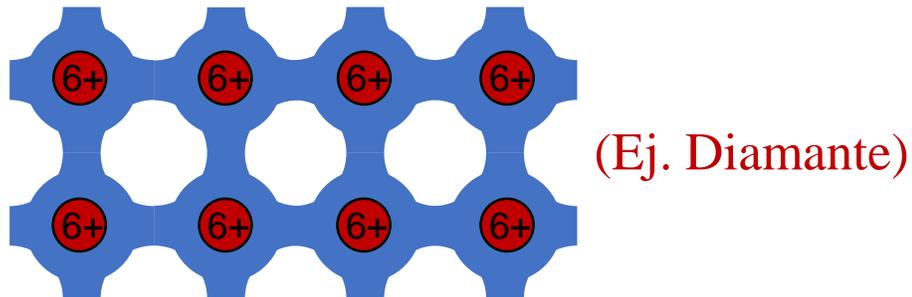
La densidad electrónica es esencialmente nula entre átomos. La atracción es débil.

Cristal iónico (aislante)



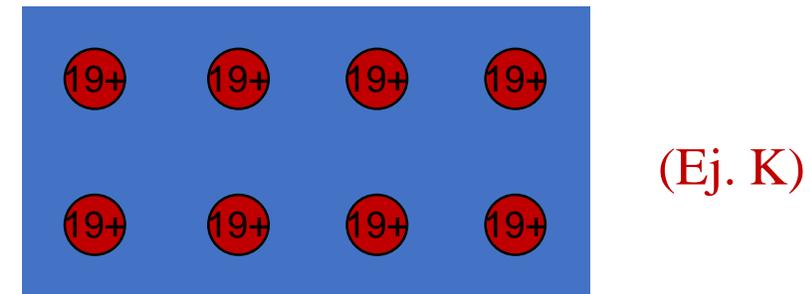
Compuesto de dos elementos diferentes, con e^- de una clase de átomo que se ligan al átomo opuesto. La atracción es más fuerte que en el cristal molecular.

Cristal covalente (aislante/semiconductor)



Los e^- no se encuentran fuertemente localizados en torno a los núcleos, y se acomodan a lo largo de direcciones preferenciales entre ellos.

Metal (conductor)



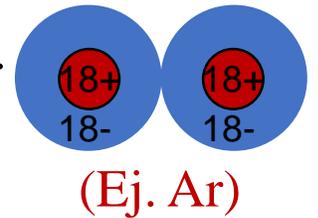
Los e^- se encuentran totalmente deslocalizados y se comportan como libres.

Clasificación de los sólidos

Cristales moleculares

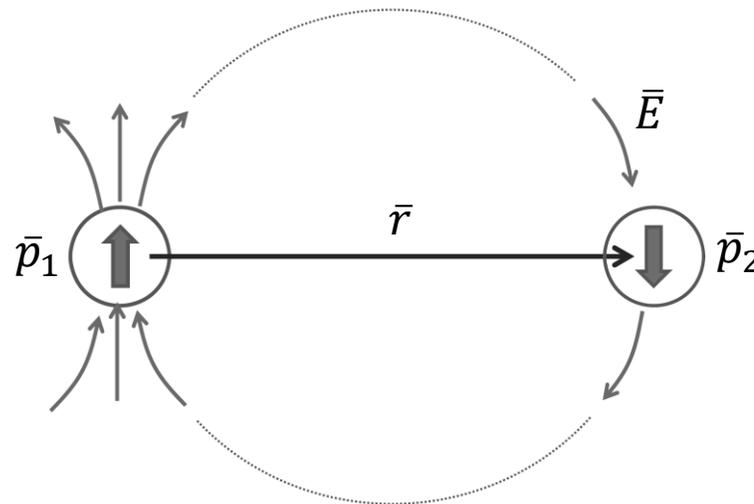
La atracción es débil (*fuerzas de van der Waals*) porque ocurre entre átomos neutros. La estructura del átomo en el sólido no difiere notablemente del átomo aislado. Suelen acomodarse en la estructura FCC.

Ejemplos por excelencia son Ne, Ar, Kr, Xe (gases nobles). Tienen un punto de fusión bajo. Otros ejemplos son O₂ y N₂ (cada entidad en el cristal es una molécula unida covalentemente).



¿Cómo ocurre la atracción?

El momento dipolar de un átomo de gas noble es nulo promediado en el tiempo. Sin embargo, se producen momentos instantáneos transitorios que polarizan átomos vecinos.



Campo eléctrico inducido: $E \propto \frac{p_1}{r^3}$

Momento dipolar inducido: $p_2 \propto E \propto \frac{p_1}{r^3}$

Energía de interacción: $\frac{p_2 p_1}{r^3} \propto \frac{p_1^2}{r^6}$

Repulsión: La impenetrabilidad entre átomos surge del principio de exclusión de Pauli y de la alta energía requerida para que un e⁻ pase de un átomo a un nivel excitado del otro átomo.

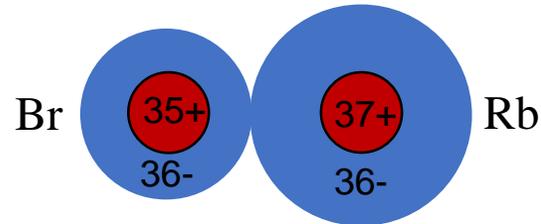
Clasificación de los sólidos

Cristales iónicos

Formados por un elemento metálico y uno no metálico. Suelen acomodarse en la estructura del NaCl y CsCl. Ocurre una transferencia electrónica de un elemento al otro, formando iones positivos y negativos que se atraen por fuerza coulombiana.

Ejemplo

Cuando se forma un cristal de RbBr, cada átomo de Br “toma” un e⁻ de un átomo vecino de Rb, produciendo iones Rb⁺ y Br⁻ (formando ambas capas electrónicas cerradas).



- Afinidad electrónica del Br: 3.5 eV
 - Energía de ionización del Rb: 4.2 eV
 - Atracción coulombiana: $-e^2/3.4\text{\AA} = -4.2\text{ eV}$
- $4.2\text{ eV} - 3.5\text{ eV} - 4.2\text{ eV} = -3.5\text{ eV}$
 (Energía al formar el par)

Cristales iónicos (I-VII; II-VI)

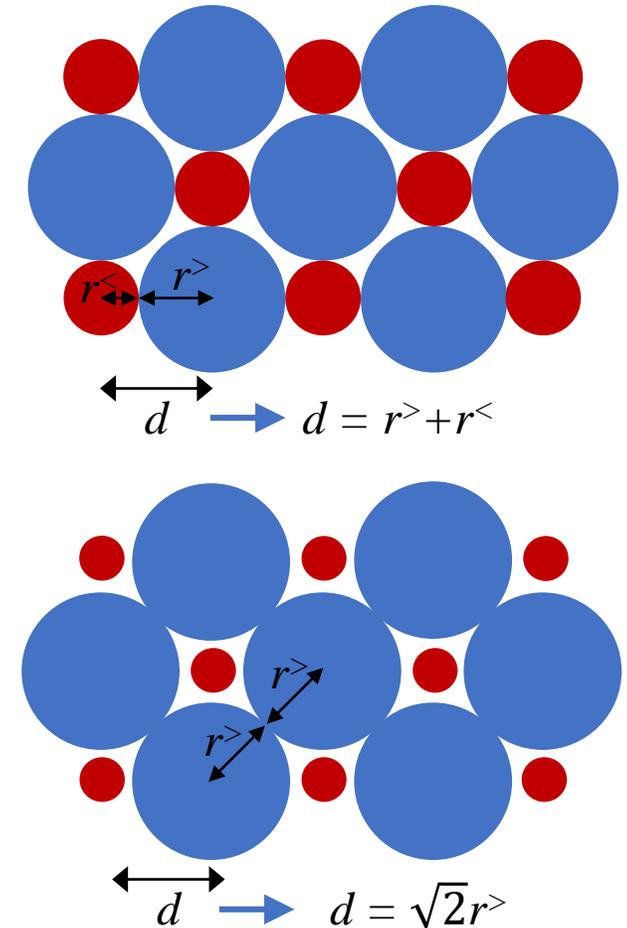
1	IA	1	1.008	2	IIA	13	IIIA	14	IVA	15	VA	16	VIA	17	VIIA	18	VIIIA																				
1	H	1	1.008	2	He	2	4.0026																														
2	Li	3	6.94	4	Be	5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne																				
2	Li	3	6.94	4	Be	5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne																				
3	Na	11	22.990	12	Mg	13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar																				
3	Na	11	22.990	12	Mg	13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar																				
4	K	19	39.098	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
4	K	19	39.098	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
5	Rb	37	85.468	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
5	Rb	37	85.468	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
6	Cs	55	132.91	56	Ba	57-71	La-Lu	72	Hf	73	Ta	74	W	75	Re	76	Os	77	Ir	78	Pt	79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn
6	Cs	55	132.91	56	Ba	57-71	La-Lu	72	Hf	73	Ta	74	W	75	Re	76	Os	77	Ir	78	Pt	79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn
7	Fr	87	(223)	88	Ra	89-103	Ac-Lr	104	Rf	105	Db	106	Sg	107	Bh	108	Hs	109	Mt	110	Ds	111	Rg	112	Cn	113	Nh	114	Fl	115	Mc	116	Lv	117	Ts	118	Og
7	Fr	87	(223)	88	Ra	89-103	Ac-Lr	104	Rf	105	Db	106	Sg	107	Bh	108	Hs	109	Mt	110	Ds	111	Rg	112	Cn	113	Nh	114	Fl	115	Mc	116	Lv	117	Ts	118	Og

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. Entre [] se especifica el valor de $\sqrt{2}r^>$.

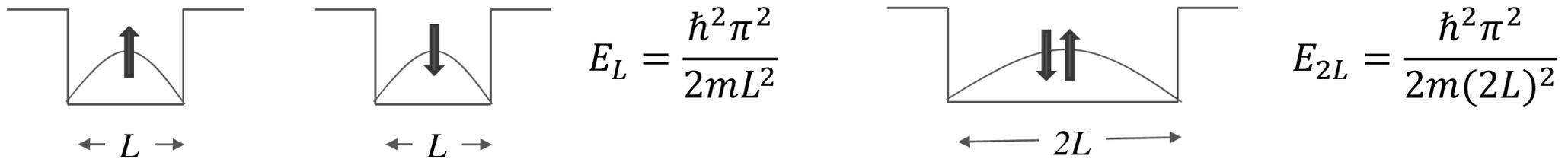


Clasificación de los sólidos

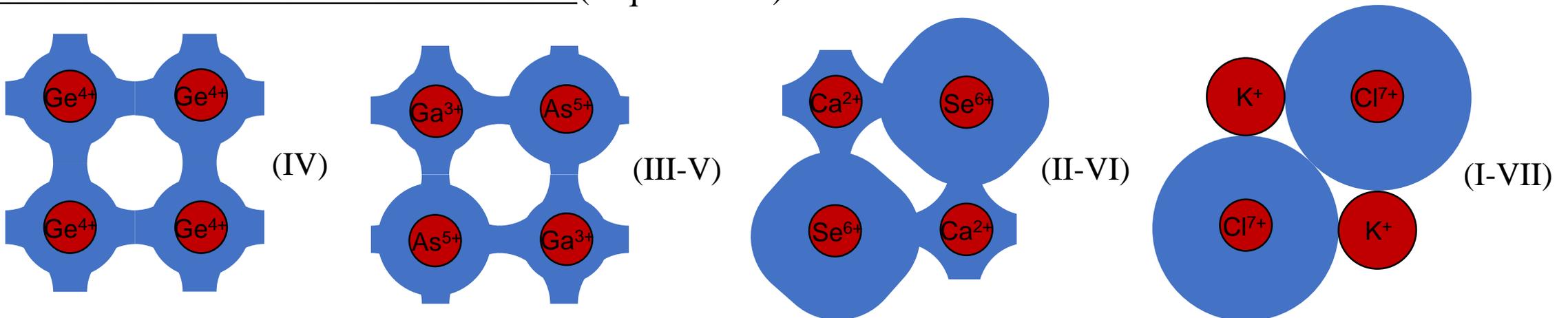
Cristales covalentes

Los electrones se encuentran parcialmente deslocalizados y se comparten entre átomos. No hay una barrera de impenetrabilidad entre nubes electrónicas como en el cristal molecular en donde las capas electrónicas están cerradas. Suelen acomodarse en la estructura de diamante (IV) o blenda de zinc (III-V).

Cualitativamente: Un esquema simple es el de un e^- en una caja. Su energía baja si la caja es de mayor tamaño.



Transición de cristal covalente a iónico (esquemático)



Clasificación de los sólidos

Metales

Los metales se caracterizan por su elevada conductividad eléctrica. Los metales alcalinos de la columna I son los que se describen adecuadamente por el modelo de Sommerfeld de electrones libres, en consistencia con la presente clasificación.

Para otros metales, como los nobles (Ag, Au, Cu), se requiere de un estudio más profundo del comportamiento electrónico, como veremos más adelante.

1 1.008 H HIDRÓGENO	2 4.0026 He HELIO																
3 6.94 Li LITIO	4 9.0122 Be BERILIO	13 10.81 B BORO	14 12.011 C CARBONO	15 14.007 N NITRÓGENO	16 15.999 O OXIGENO	17 18.998 F FLÚOR	18 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 ESCANDIO	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 KRIPCIÓN
37 85.468 Rb RUBIDIO	38 87.62 Sr ESTRONCIO	39 88.906 Y ITRIO	40 91.224 Zr CIRCONIO	41 92.906 Nb NIOBIO	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 RUTERFORDIO	105 (268) Db DUBNIO	106 (271) Sg SEABORGIO	107 (272) Bh BOHRIO	108 (277) Hs HASIO	109 (276) Mt MEITNERIO	110 (281) Ds DARMSTADTIO	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

Cristales moleculares

Sólidos en general

No todos los sólidos pueden clasificarse en una de estas cuatro categorías, y en general presentan características de más de una de ellas.

Cohesión en sólidos

Energía de cohesión

Es la energía requerida para separar a un sólido en sus partes constitutivas.

Átomos, iones, moléculas.

Es la energía del estado fundamental del sólido, y determina si un sólido va a ser estable (< 0) o no (> 0).

Cohesión en cristales moleculares

La estructura interna del átomo en el sólido molecular no difiere notablemente de la del átomo aislado.

Energía de interacción entre dos partículas separadas en r :

$$\phi(r) = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}$$

Resultado empírico
 $A, B > 0$
(se determinan empíricamente de mediciones en la fase gaseosa)

Distancia entre átomos \rightarrow r^6
Interacción entre nubes electrónicas (fuerza repulsiva) \rightarrow r^{12}
Van der Waals (fuerza atractiva) \rightarrow r^6

$$\begin{aligned}\phi(r) &= \frac{A^2}{B} \left(\frac{B^2/A^2}{r^{12}} - \frac{B/A}{r^6} \right) \\ &= \frac{A^2}{B} \left(\frac{(B^{1/6}/A^{1/6})^{12}}{r^{12}} - \frac{(B^{1/6}/A^{1/6})^6}{r^6} \right) \\ &= 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad \begin{cases} \sigma = (B/A)^{1/6} \\ \epsilon = A^2/4B \end{cases}\end{aligned}$$

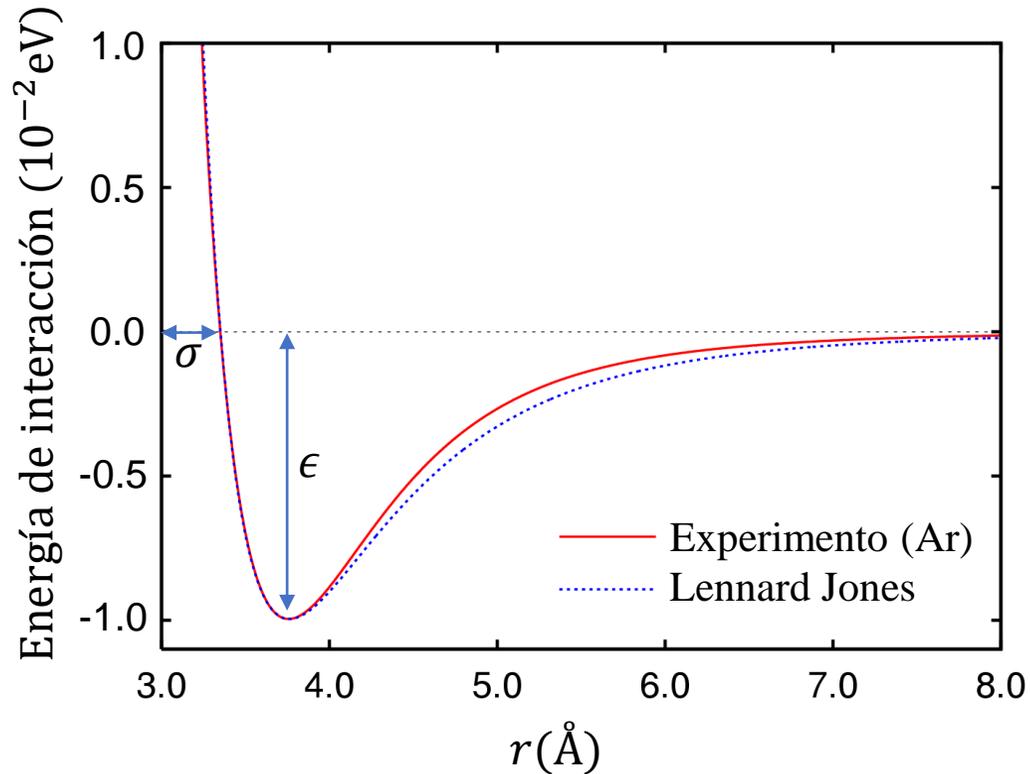
Cohesión en sólidos: Cristal molecular

Cohesión en cristales moleculares

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

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

Energía por partícula (sólido)

Tratamos a los átomos como partículas fijas en las posiciones de la red con energía cinética nula.

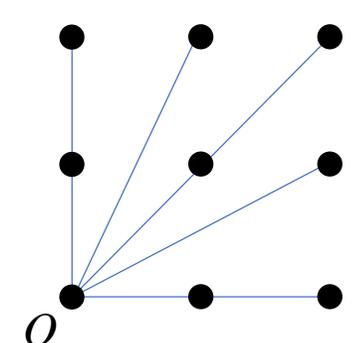
Interacción del átomo en el origen con todos los demás en la RB.

$$\sum_{\vec{R} \neq \vec{0}} \phi(\vec{R})$$

Energía total: $U = \frac{N}{2} \sum_{\vec{R} \neq \vec{0}} \phi(\vec{R})$

N: N° de átomos

Energía por partícula: $u = \frac{1}{2} \sum_{\vec{R} \neq \vec{0}} \phi(\vec{R})$



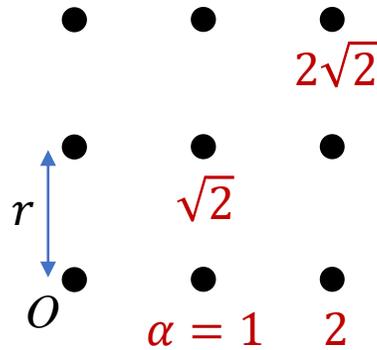
Cohesión en sólidos: Cristal molecular

Cohesión en cristales moleculares: Energía por partícula

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \text{ Potencial de Lennard-Jones} \\ u = \frac{1}{2} \sum_{\bar{R} \neq 0} \phi(\bar{R}) \text{ Energía por partícula} \end{array} \right.$$

$|\bar{R}| = \alpha(\bar{R})r$

\uparrow N° adimensional
 \downarrow Distancia a 1^{eros} vecinos



$$\rightarrow u = \frac{1}{2} \sum_{\bar{R} \neq 0} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{\alpha(\bar{R})r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{\alpha(\bar{R})r}\right)^6 \right]$$

$$u = 2\epsilon \left[\sum_{\bar{R} \neq 0} \frac{1}{\alpha(\bar{R})^{12}} \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \sum_{\bar{R} \neq 0} \frac{1}{\alpha(\bar{R})^6} \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]$$

$$= 2\epsilon \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - A_6 \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right]; \quad A_n = \sum_{\bar{R} \neq 0} \frac{1}{\alpha(\bar{R})^n}$$

A_n depende solo de la geometría de la red (y de n)

$n \rightarrow \infty, A_n \rightarrow$ N° de primeros vecinos

A medida que n disminuye, vecinos de órdenes mayores empiezan a contribuir y A_n aumenta.

- SC: $A_{12} = 6.20, A_6 = 8.40$
- BCC: $A_{12} = 9.11, A_6 = 12.25$
- FCC: $A_{12} = 12.13, A_6 = 14.45$

Cohesión en sólidos: Cristal molecular

Cohesión en cristales moleculares: Separación de equilibrio

$$u = 2\epsilon \left[A_{12} \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - A_6 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \longrightarrow \frac{du}{dr} = 0 \longrightarrow -\frac{12}{r} A_{12} \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} + \frac{6}{r} A_6 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 = 0$$

$$\longrightarrow A_6 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 = 2 A_{12} \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} \longrightarrow A_6 \left(\frac{r}{\sigma} \right)^6 = 2 A_{12} \longrightarrow r_0 = \left(\frac{2 A_{12}}{A_6} \right)^{1/6} \sigma = 1.09\sigma$$

↓
FCC

Energía de cohesión de equilibrio por partícula

$$u_0 = 2\epsilon \left[A_{12} \left(\frac{A_6}{2 A_{12}} \right)^2 - A_6 \left(\frac{A_6}{2 A_{12}} \right) \right]$$

$$= 2\epsilon \left[\frac{A_6^2}{4 A_{12}} - \frac{A_6^2}{2 A_{12}} \right] = -\frac{\epsilon}{2} \left(\frac{A_6^2}{A_{12}} \right) \downarrow = -8.6\epsilon$$

↓
FCC

Parámetros para sólidos de gases nobles

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

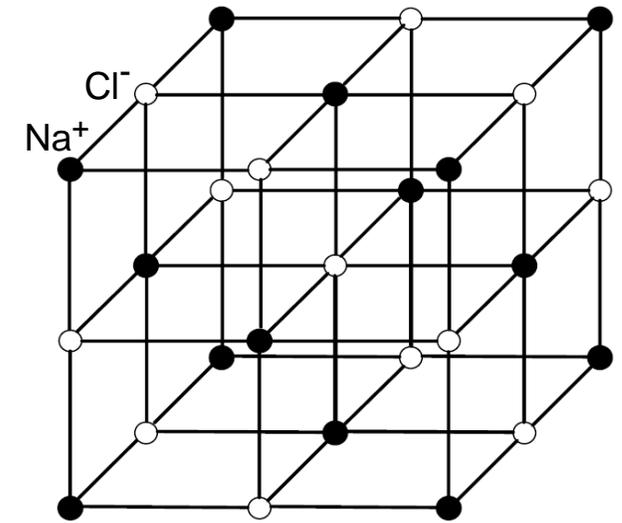
Cohesión en sólidos: Cristal iónico

Cohesión en cristales iónicos

El cristal iónico está formado por iones positivos y negativos. La estructura interna de los iones no difiere notablemente de la del ion aislado. Se desprecian las fuerzas de *Wan der Waals*.

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											33.45	35.64	44.14	48.76	52.40	62.63
Na	Mg	Energía para remover 2e ⁻ (eV)										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

Cohesión en cristales iónicos

El cristal iónico está formado por iones positivos y negativos. La estructura interna de los iones no difiere notablemente de la del ion aislado. Se desprecian las fuerzas de *Wan der Waals*.

Interacción coulombiana del ion del origen con los demás de la red

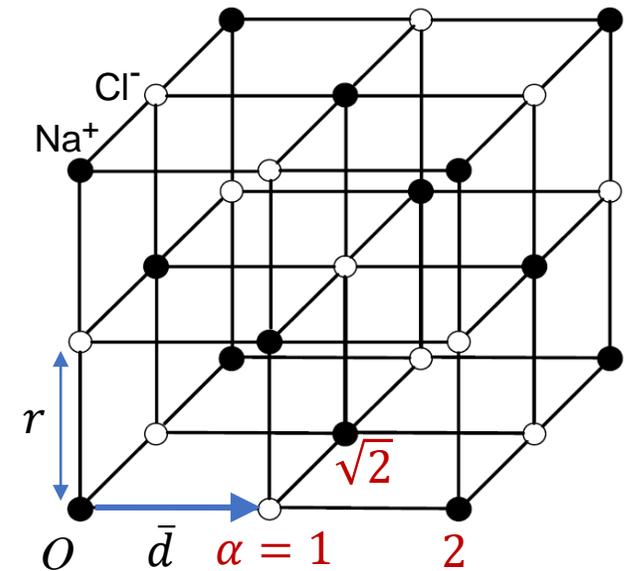
$$\rightarrow -\frac{e^2}{r} \left[\frac{1}{\alpha(\bar{d})} + \sum_{\bar{R} \neq 0} \left(\frac{1}{\alpha(\bar{R} + \bar{d})} - \frac{1}{\alpha(\bar{R})} \right) \right]$$

N° de iones

$$U_{Coulomb} = -\frac{N e^2}{2 r} \left[\frac{1}{\alpha(\bar{d})} + \sum_{\bar{R} \neq 0} \left(\frac{1}{\alpha(\bar{R} + \bar{d})} - \frac{1}{\alpha(\bar{R})} \right) \right]$$

(por par de iones)

$$u_{Coulomb} = -\frac{e^2}{r} \left[\frac{1}{\alpha(\bar{d})} + \sum_{\bar{R} \neq 0} \left(\frac{1}{\alpha(\bar{R} + \bar{d})} - \frac{1}{\alpha(\bar{R})} \right) \right]$$



$$|\bar{R}| = \alpha(\bar{R})r$$

$$|\bar{R} + \bar{d}| = \alpha(\bar{R} + \bar{d})r$$

Cohesión en sólidos: Cristal iónico

Cohesión en cristales iónicos

Energía coulombiana por par de iones:

$$u_{Coulomb} = -\frac{e^2}{r} \left[\frac{1}{\alpha(\bar{d})} + \underbrace{\sum_{\bar{R} \neq 0} \left(\frac{1}{\alpha(\bar{R} + \bar{d})} - \frac{1}{\alpha(\bar{R})} \right)} \right]$$

Constante de Madelung: α

α depende sólo de la estructura de la red.

- CsCl: $\alpha = 1.763$
- NaCl: $\alpha = 1.748$
- Blenda de zinc: $\alpha = 1.638$

Energía total por par de iones y distancia de equilibrio

$$u = u_{Coulomb} + u_{núcleo} = -\frac{\alpha e^2}{r} + \frac{C}{r^m}$$

$$\frac{du}{dr} = 0 \rightarrow \frac{\alpha e^2}{r^2} - m \frac{C}{r^{m+1}} = 0 \rightarrow r_0^{m-1} = \frac{mC}{e^2 \alpha}$$

Problema: No contamos con una determinación independiente de C como en los cristales moleculares.

Cohesión en sólidos: Cristal iónico

Cohesión en cristales iónicos: energía de cohesión (por par de iones)

Interacción coulombiana

$$r_0^{m-1} = \frac{mC}{e^2\alpha} \rightarrow C = \frac{e^2\alpha r_0^{m-1}}{m} \rightarrow u_0 = -\frac{\alpha e^2}{r_0} + \frac{C}{r_0^m} = -\frac{\alpha e^2}{r_0} + \frac{e^2\alpha}{mr_0} = -\frac{\alpha e^2}{r_0} \frac{m-1}{m}$$

Podemos usar el valor experimental de r_0 , pero necesitamos una determinación independiente de m .

Módulo de compresibilidad

Parámetros para algunos haluros alcalinos

$$\left\{ \begin{array}{l} B = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T \\ P = -\frac{dU}{dV} \end{array} \right. \rightarrow B = V \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)$$

NaCl
Guía 2, P. 6

$$B_0 = \frac{m-1}{18} \frac{\alpha e^2}{r_0^4}$$

$$\rightarrow m = \frac{18r_0^4 B_0}{\alpha e^2} + 1$$

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: Cristal covalente y metal

Cohesión en cristales covalentes y metales

En cristales covalentes y metales, la configuración electrónica de los átomos/iones se ve fuertemente modificada respecto de los átomos/iones aislados, y no puede hacerse una aproximación clásica.

Debe calcularse cómo se modifican los niveles electrónicos. Las capas electrónicas externas se encuentran parcialmente llenas, permitiendo a los e^- acomodarse con más flexibilidad al formar el sólido.

Energía de cohesión y temperatura de fusión

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

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

Resumen

- Clasificación de los sólidos según distribución electrónica
- Energía de cohesión
- Cohesión en cristales moleculares (atracción débil)
- Cohesión en cristales iónicos (atracción fuerte)
- Distancia y energía de equilibrio, módulo de compresibilidad
- Cohesión en cristales covalentes y metales (cualitativo)

