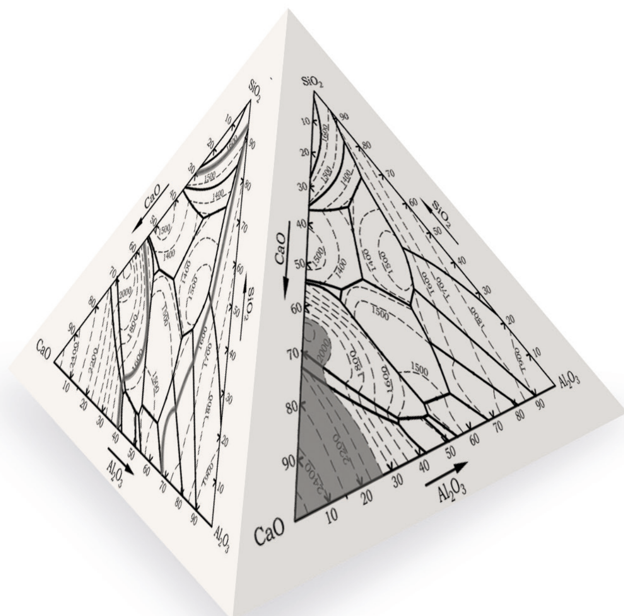
académica

Problemas de Ciencia de Materiales

Fidel Salas Vicente
E. Francisco Segovia López
Ángel Vicente Escuder



Editorial
Universitat Politècnica
de València

PROBLEMAS DE CIENCIA DE MATERIALES

AUTORES:

Fidel Salas Vicente

Francisco Segovia López

Ángel Vicente Escuder

Sumario

Capítulo 1: Estructura atómica y enlace

1.1. Introducción

1.1.1. La dualidad onda-corpúsculo y la energía de una partícula

Cuando De Broglie propuso que los fotones se comportan como partícula y también como onda estableció que la onda asociada a una partícula tiene una longitud de onda λ dada por:

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

donde *h* es la constante de Planck, *m* la masa de la partícula y *v* su velocidad.

Esta fórmula es válida para velocidades de la partícula inferiores a la de la luz, *c*, ya que en ese caso las partículas (fotones) carecen de masa.

La energía de una partícula en movimiento se puede calcular de dos formas, según cual sea su velocidad. Si $v < c$, la energía viene dada por la conocida ecuación de Einstein:

$$E = m \cdot v^2$$

En el caso de que la partícula se desplace a la velocidad de la luz se usa la ecuación de Planck-Einstein, que puede ser escrita de dos formas sabiendo que la frecuencia *f* equivale a *c/λ*:

$$E = h \cdot f = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

Nota: En algunas ocasiones se suele trabajar con el llamado "número de onda" y no con la frecuencia o la longitud de onda. Este parámetro se define como:

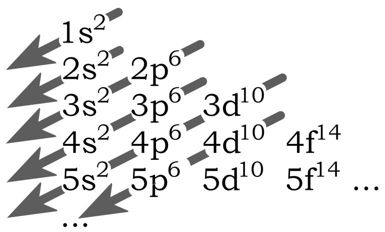
$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$$

1.1.2. La estructura atómica

En un átomo los electrones se encuentran rodeando a un núcleo atómico compuesto por neutrones y protones. Son varias las reglas que debe cumplir un átomo, siendo las más importantes:

- El átomo debe tener carga nula. Es decir, el número de electrones (negativos) debe ser igual al de protones (positivos). Cuando esta regla no se cumple debido a la ganancia o pérdida de electrones, se dice que el átomo se ha "ionizado" o se habla de "iones".

- Los electrones se organizan en orbitales cada vez más alejados del núcleo. El orden de llenado sigue el siguiente ordenamiento dado por el principio de Aufbau, plasmado en el diagrama de Moeller que describe el orden de llenado de los subniveles energéticos (se comienza por arriba):



El superíndice indica el número de electrones que puede contener el subnivel. Hasta que un subnivel no está lleno no se pasa al siguiente, aunque hay algunas excepciones.

- Un subnivel energético lleno cuenta con la mitad de electrones con el *spin* en un sentido y la otra mitad en el otro. Hay preferencia por llenar primero el orbital con todos los electrones con el mismo *spin* y se dice que están desapareados (regla de máxima multiplicidad de Hund).

Un átomo puede describirse usando 2 números:

- El número atómico Z, que es la cantidad de protones, o electrones, que tiene un átomo.

- El número másico A, que es la suma de neutrones y protones del núcleo.

1.1.3. Niveles energéticos

La energía que posee un electrón en un átomo depende del orbital en el que se encuentra y del átomo de que se trate. Esta energía viene dada por la ecuación:

$$E=\frac{-m_e \cdot e^4 \cdot Z^2}{8 \cdot \varepsilon_0^2 \cdot h^2 \cdot n^2}$$

En esta fórmula m_e es la masa del electrón, e su carga, Z el número atómico, ε_o la constante dieléctrica del vacío, h la constante de Planck y n el número cuántico principal (v.gr., n=3 para $3s^2$ o $3p^6$).

Cuando un electrón pasa de un orbital a otro es porque o se libera energía en forma de fotón o porque se ha absorbido. Este fenómeno permite generar fotones o arrancar electrones de su órbita.

1.1.4. Atracción entre partículas y enlace atómico

Básicamente lo que mantiene los átomos unidos es la fuerza culómbica de atracción que aparece entre los electrones y los protones debido al distinto signo de su carga eléctrica. Esta fuerza también actúa entre iones. Lo que hace que no se unan es la fuerza de repulsión que aparece a corta distancia. Cuando se trata de iones, la de atracción viene dada por la fórmula:

$$F_c=\frac{(V_1 \cdot e) \cdot (V_2 \cdot e)}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0} \cdot a^2$$

donde V_i es la valencia de cada ión, e la carga del electrón, a la separación y ε_o la constante dieléctrica del vacío

1.2. Problemas

01. Calcule la energía de un fotón cuya longitud de onda es de 254 nm. ¿Cuál sería la masa de este fotón si estuviese en reposo y se pudiese aplicar la ecuación $E=m\cdot c^2$?.

$h = 6.63\cdot10^{-34}$ J·s. $c = 3\cdot10^8$ m/s.

Solución:

La energía de un fotón viene dada por la expresión:

$$E=h\cdot f=\frac{h\cdot c}{\lambda}$$

donde h es la constante de Planck, f la frecuencia, c la velocidad de la luz y λ la longiud de onda.

Sustituyendo en la fórmula se obtiene:

$$E=\frac{6.63\cdot10^{-34}\cdot3\cdot10^{8}}{254\cdot10^{-9}}=7.83\cdot10^{-19}\,J$$

Si esta cantidad se quiere expresar en eV (electronvoltios):

$$E=7.83\cdot10^{-19}\,J\cdot\frac{1\,eV}{1.6\cdot10^{-19}\,J}=4.89\,eV$$

En cuanto a la masa, es preciso hacer uso de la ecuación de Einstein $E=m\cdot c^2$:

$$E=h\cdot f=\frac{h\cdot c}{\lambda}=mc^2\rightarrow m=\frac{h}{\lambda\cdot c}=\frac{6.63\cdot10^{-34}}{254\cdot10^{-9}\cdot3\cdot10^{8}}=8.7\cdot10^{-36}kg$$

No obstante, debe recordarse que los fotones viajan siempre a la velocidad de la luz y, por lo tanto, su masa se considera nula.

02. Calcule la longitud de onda asociada a una partícula alfa emitida en una reacción nuclear que tiene una energía cinética de 5 MeV. $m_\alpha=6.68\cdot10^{-27}$ kg. $h = 6.63\cdot10^{-34}$ J·s.

Solución:

La longitud de onda asociada a una partícula que no se desplaza a la velocidad de la luz se calcula suponiendo que las relaciones que se establecen para un fotón son válidas también en este caso. Es decir, que se cumple:

$$\left.\begin{array}{l} E=h\cdot f=\dfrac{h\cdot v}{\lambda} \\ E=m\cdot v^2 \end{array}\right\} \rightarrow \frac{h\cdot v}{\lambda}=m\cdot v^2 \rightarrow \lambda=\frac{h}{m\cdot v}$$

donde v es la velocidad de la partícula.

Se conoce la energía cinética de la partícula en eV, pero hay que hacer una conversión a Julios:

$$E_c=5\cdot 10^6 eV=5\cdot 10^6 eV\cdot\frac{1.6\cdot 10^{-19} J}{1 eV}=8\cdot 10^{-13} J$$

Conocida la energía cinética y la masa de la partícula alfa se puede obtener la velocidad de la misma mediante la ecuación clásica:

$$E_c=\frac{1}{2}\cdot m\cdot v^2 \rightarrow 8\cdot 10^{-13}=\frac{1}{2}\cdot 6.68\cdot 10^{-27}\cdot v^2 \rightarrow v=15.476\cdot 10^6 m/s$$

Dado que se considera que la energía de la onda asociada es la energía cinética de la partícula ($E=E_c$):

$$\lambda=\frac{h}{m\cdot v}=\frac{6.63\cdot 10^{-34}}{6.68\cdot 10^{-27}\cdot 15.476\cdot 10^6}=6.41\cdot 10^{-15} m=6.41 fm$$

03. Un electrón con una energía cinética de 100 keV choca contra un átomo al que le transfiere una energía de 70 keV. El átomo libera esa energía en forma de fotón. ¿Cuál será la longitud de onda de ese fotón?. ¿Y su frecuencia y número de onda? h = $6.63\cdot 10^{-34}$ J·s. c = $3\cdot 10^8$ m/s.

Solución:

El fotón tendrá la energía liberada por el átomo, es decir: 70keV. Esa cantidad se puede convertir a julios:

$$E=70000\, eV=70000\, eV\cdot\frac{1.6\cdot 10^{-19} J}{1 eV}=1.12\cdot 10^{-14} J$$

Con este valor ya se puede aplicar la fórmula de la energía para hallar su longitud de onda:

$$E = 1.12 \cdot 10^{-14} = \frac{h \cdot c}{\lambda} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{\lambda} \rightarrow \lambda = 1.77 \cdot 10^{-11}\, m = 17.7\, pm$$

La frecuencia f del fotón será:

$$f = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \cdot 10^{8}}{1.77 \cdot 10^{-11}} = 1.7 \cdot 10^{19}\, Hz$$

El número de onda es un parámetro usado en espectroscopía y que se define como el número de vibraciones por unidad de distancia por lo que se corresponde con la inversa de la longitud de onda:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{1.77 \cdot 10^{-11}} = 5.65 \cdot 10^{10}\, m^{-1} = 56.5\, nm^{-1}$$

Nota: Esta forma de generar fotones de alta energía es básicamente la empleada para generar los rayos-X (fotones muy energéticos) usados en radiografía.

04. Represente gráficamente la energía en eV de un fotón en función de la longitud de onda entre 10 nm y 1000 µm (use una escala logarítmica). Este rango abarca los espectros ultravioleta, visible e infrarrojo.

h = $6.63 \cdot 10^{-34}$ J·s. c = $3 \cdot 10^{8}$ m/s. 1 eV=$1.602 \cdot 10^{-19}$ J

Solución:

La representación gráfica de la energía se hace calculando esa energía para distintas longitudes de onda a partir de la ecuación:

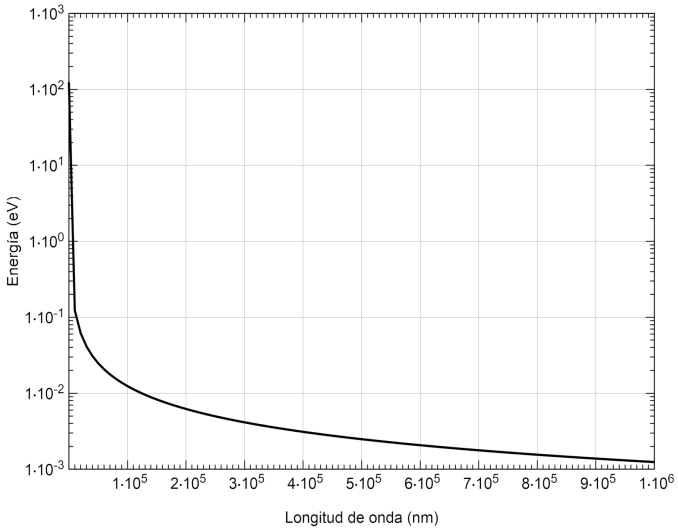
$$E = h \cdot \nu = \frac{h \cdot c}{\lambda} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{\lambda \cdot 10^{-9}}$$

donde λ va de 10 nm a 10^{6} nm. El factor 10^{-9} es para convertir los nm a metros.

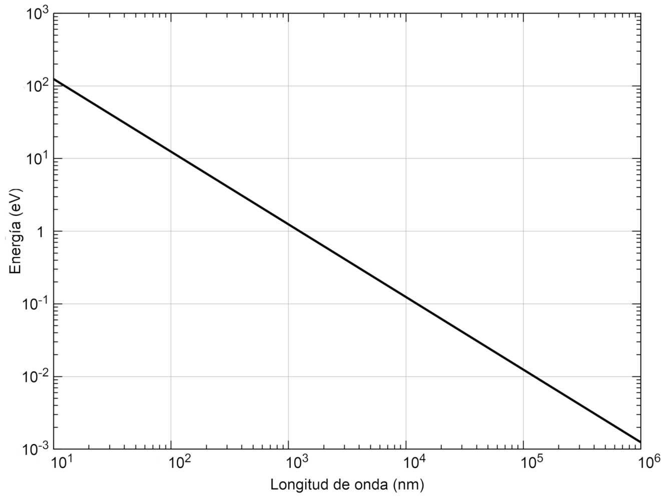
Como pide el enunciado, hay que convertir los Julios en los que se obtiene esta energía a eV. Para ello se debe multiplicar por el factor de conversión que da el enunciado:

$$E = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{\lambda \cdot 10^{-9}}\, J = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^{8}}{\lambda \cdot 10^{-9}}\, J \cdot \frac{1}{1.602 \cdot 10^{-19}}\, eV/J = \frac{1241}{\lambda}\, eV$$

Si se usa una escala logarítmica para el eje Y, en la gráfica resultante se puede ver como la energía aumenta rápidamente para longitudes de onda bajas.



Otra opción es usar una escala logarítmica tanto para el eje Y como para el eje X. En ese caso la curva se convierte en una recta con pendiente negativa.



05. Calcule la masa de un átomo de U-235 sabiendo que su número atómico Z es 96. Indique cuantos electrones, protones y neutrones contiene el átomo. $m_e=9.1\cdot10^{-31}$ kg, $m_p=1.673\cdot10^{-27}$ kg.

Solución:

El número atómico es la cantidad de protones que tiene un átomo, por lo que el U-235 tendrá 96 protones. Para mantener la neutralidad eléctrica es preciso que el átomo contenga también 96 electrones.

El "235" que acompaña al símbolo del Uranio identifica el isótopo del cual se trata y es el número másico A, es decir, la suma del número de neutrones y protones del núcleo. Como lo que hace variar este número para distintos isótopos del mismo átomo es el número de neutrones, el U-235 tendrá 235-96=139 neutrones.

Con estos datos ya es posible calcular la masa del átomo:

$$m_{U235}=m_e\cdot N_e+m_p\cdot(N_p+N_n)=m_e\cdot Z+m_p\cdot A=$$
$$9.1\cdot10^{-31}\cdot96+1.673\cdot10^{-27}\cdot235=3.9324\cdot10^{-25}kg$$

Si se hubiese despreciado la masa del electrón, el resultado habría sido $3.9316\cdot10^{-25}$ kg. Esta diferencia supone un error porcentual de:

$$error=\frac{3.9324\cdot10^{-25}-3.9316\cdot10^{-25}}{3.9324\cdot10^{-25}}=2\cdot10^{-4}=0.02\%$$

El error cometido al despreciar el peso de los electrones es realmente muy bajo.

06. Determine la estructura electrónica del azufre, con número atómico Z=16.

Solución:

Dado que Z=16, el azufre tendrá 16 electrones a repartir entre los distintos subniveles energéticos. La siguiente tabla ayuda a ir completándolos:

$1s^2$
$2s^2$ $2p^6$
$3s^2$ $3p^6$ $3d^{10}$
$4s^2$ $4p^6$ $4d^{10}$ $4f^{14}$
$5s^2$ $5p^6$ $5d^{10}$ $5f^{14}$ …
…

Siguiendo la tabla de arriba hacia abajo y el orden de las flechas hasta completar los 16 electrones se llega a:

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2\ \ 3p^4$

Como puede verse, el último orbital queda sin ocupar completamente.

07. Represente la estructura electrónica del magnesio, con Z=12, y del ion Mg^{2+}. Haga lo mismo con el oxígeno (Z=8) y con el ion O^{2-}.

Solución:

De acuerdo con la regla descrita en el ejercicio 10, la configuración electrónica del magnesio será, tras repartir los 12 electrones que contiene:

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$

El ion Mg^{+2} ha perdido 2 electrones, por lo que su estructura atómica pasa a ser:

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6$

La estructura electrónica del oxígeno es:

$1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

Al ganar 2 electrones, la estructura del ion es:

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6$

Como puede verse, tanto el Mg^{2+} como el O^{2-} tienen la misma estructura electrónica, aunque sean muy distintos. Cuando esto sucede se dice que son isoelectrónicos.

08. Determine la estructura electrónica del cromo, con número atómico Z=24.

Solución:

Dado que Z=24, el cromo tendrá 24 electrones a repartir entre los distintos orbitales. La configuración que se esperaría que tuviese siguiendo las reglas descritas anteriormente sería:

$1s^2$ (↑↓) $2s^2$ (↑↓) $2p^6$ (↑↓↑↓↑↓) $3s^2$ (↑↓) $4s^2$ (↑↓) $3p^6$(↑↓↑↓↑↓) $3d^4$ (↑↑↑↑-)

No obstante, se configuración electrónica es la siguiente:

$1s^2$ (↑↓) $2s^2$ (↑↓) $2p^6$ (↑↓↑↓↑↓) $3s^2$ (↑↓) $3p^6$(↑↓↑↓↑↓) $4s^1$ (↑) $3d^5$ (↑↑↑↑↑).

Esto se debe a que el cromo, igual que el cobre, es una excepción a la regla de Aufbau y la estructura electrónica con seis electrones en el subnivel 3d es más estable.

Para poder conseguir los seis electrones en subniveles semiocupados, uno de los electrones debe estar ocupando el subnivel 3d, en lugar de ocupar el 4s, siendo 3d de mayor energía que 4s. Este hecho se explica haciendo referencia a una diferencia de energía pequeña que se encuentra compensada por la mayor estabilidad que alcanza el átomo.

09. Calcule la longitud de onda que debe tener un fotón para poder ionizar un átomo de hidrógeno. $m_e=9.11\cdot10^{-31}$. e=1eV. $H=6.63\cdot10^{-34}$. $\varepsilon_0=8.85\cdot10^{-12}$ C^2/mN^2.

Solución:

La ionización consiste en arrancar un electrón de la órbita de un átomo. El átomo de hidrógeno contiene un sólo electrón, el cual se sitúa en el primer orbital (número cuántico principal n=1).

La energía del fotón será aquella correspondiente a la que tiene el electrón en su orbital, pero de signo contrario al valor obtenido:

$$E=\frac{-m_e\cdot e^4\cdot Z^2}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}=\frac{-9.11\cdot10^{-31}\cdot(1.6\cdot10^{-19})^4\cdot1^2}{8\cdot(8.85\cdot10^{-12})^2\cdot(6.63\cdot10^{-34})^2\cdot1^2}=-2.167\cdot10^{-18}\,J$$

La longitud de onda del fotón será:

$$E=\frac{h\cdot c}{\lambda}\rightarrow\lambda=\frac{h\cdot c}{E}=\frac{6.63\cdot10^{-34}\cdot3\cdot10^8}{2.167\cdot10^{-18}}=9.18\cdot10^{-8}m=91.8\,nm$$

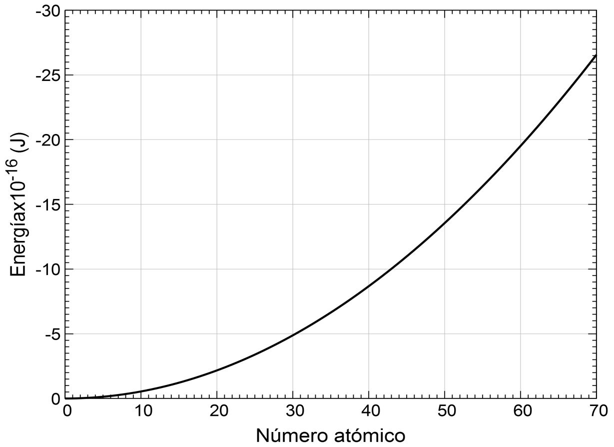
10. Determine la energía de un electrón con número cuántico n=2 en función del número atómico del átomo al que pertenece (hasta Z=70). $m_e=9.11\cdot10^{-31}$. e=1eV. $H=6.63\cdot10^{-34}$. $\varepsilon_0=8.85\cdot10^{-12}$ C^2/mN^2.

Solución:

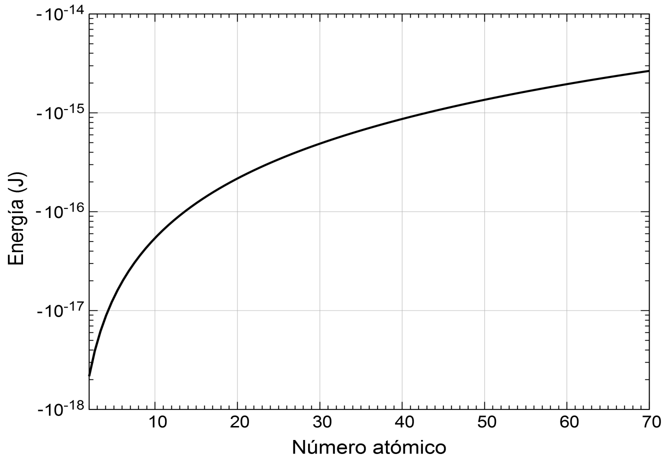
La energía de un electrón viene dada por la fórmula:

$$E=\frac{-m_e\cdot e^4\cdot Z^2}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}=\frac{-9.11\cdot10^{-31}\cdot(1.6\cdot10^{-19})^4\cdot Z^2}{8\cdot(8.85\cdot10^{-12})^2\cdot(6.63\cdot10^{-34})^2\cdot2^2}=-5.42\cdot10^{-19}\cdot Z^2$$

Es decir, la energía del electrón crecerá con el cuadrado del número atómico. Esta evolución se representa en la siguiente gráfica, donde se ha comenzado con Z=3 ya con átomos con Z menores no es posible aplicar n=2.



Si se usa una escala logarítmica para el eje Y el resultado es:



11. Calcule la longitud de onda de un fotón que es emitido por un átomo de wolframio (Z=74) cuando un electrón pasa del nivel energético 4 a uno inferior. m_e=9.11·10^{-31}. e=1eV. h=6.63·10^{-34}. ε_0=8.85·10^{-12} C^2/mN^2.

Solución:

La solución a este problema requiere calcular la diferencia energética para el electrón entre el nivel 4 y los inferiores. Esas diferencias energéticas se corresponderán a la energía del fotón emitido. La energía para cada uno de los niveles es:

$$E_{n=4}=\frac{-m_e\cdot e^4\cdot Z^2}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}=\frac{-9.11\cdot10^{-31}\cdot(1.6\cdot10^{-19})^4\cdot74^2}{8\cdot(8.85\cdot10^{-12})^2\cdot(6.63\cdot10^{-34})^2\cdot4^2}=-0.742\cdot10^{-15}J$$

$$E_{n=3}=\frac{-m_e\cdot e^4\cdot Z^2}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}=\frac{-9.11\cdot10^{-31}\cdot(1.6\cdot10^{-19})^4\cdot74^2}{8\cdot(8.85\cdot10^{-12})^2\cdot(6.63\cdot10^{-34})^2\cdot3^2}=-1.319\cdot10^{-15}J$$

$$E_{n=2}=\frac{-m_e\cdot e^4\cdot Z^2}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}=\frac{-9.11\cdot10^{-31}\cdot(1.6\cdot10^{-19})^4\cdot74^2}{8\cdot(8.85\cdot10^{-12})^2\cdot(6.63\cdot10^{-34})^2\cdot2^2}=-2.967\cdot10^{-15}J$$

$$E_{n=1}=\frac{-m_e\cdot e^4\cdot Z^2}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}=\frac{-9.11\cdot10^{-31}\cdot(1.6\cdot10^{-19})^4\cdot74^2}{8\cdot(8.85\cdot10^{-12})^2\cdot(6.63\cdot10^{-34})^2\cdot1^2}=-11.870\cdot10^{-15}J$$

La diferencia energética entre el nivel 4 y el resto, que es también la energía del fotón emitido es:

$$E_{4\to3}=-0.742\cdot10^{-15}-(-1.319\cdot10^{-15})=0.577\cdot10^{-15}J$$

$$E_{4\to2}=-0.742\cdot10^{-15}-(-2.967\cdot10^{-15})=2.225\cdot10^{-15}J$$

$$E_{4\to1}=-0.742\cdot10^{-15}-(-11.870\cdot10^{-15})=11.128\cdot10^{-15}J$$

La longitud de onda de cada uno de los fotones emitidos se calcula a partir de su energía:

$$E=\frac{h\cdot c}{\lambda}\to\lambda=\frac{h\cdot c}{E}$$

$$E_{4\to3}=\frac{6.63\cdot10^{-34}\cdot3\cdot10^8}{0.577\cdot10^{-15}}=3.45\cdot10^{-10}m=344.7\,pm$$

$$E_{4\to2}=\frac{6.63\cdot10^{-34}\cdot3\cdot10^8}{2.225\cdot10^{-15}}=8.94\cdot10^{-11}m=89.4\,pm$$

$$E_{4\rightarrow 1}=\frac{6.63\cdot 10^{-34}\cdot 3\cdot 10^{8}}{11.128\cdot 10^{-15}}=1.79\cdot 10^{-11}\,m=17.9\,pm$$

12. La transición de un electrón desde el nivel 2 al 1 se denomina K_{α}. En difracción de rayos X se emplean con frecuencia los rayos X correspondientes a esta transición en el cobre. Determine cuál será la longitud de onda, en Ångström, de la radiación generada. $M_e=9.11\cdot 10^{-31}$, e=1eV, $h=6.63\cdot 10^{-34}$, $\varepsilon_0=8.85\cdot 10^{-12}$ C^2/mN^2, $Z_{Cu}=29$.

Solución:

Los rayos X, y también los γ, están compuestos por fotones cuya energía corresponde a la diferencia energética entre el nivel de origen y el de destino entre los que salta un electrón. En este caso el salto se produce entre n=2 y n=1, por lo que la energía del fotón emitido será:

$$\left.\begin{array}{l} E_{n=2}=\dfrac{-m_e\cdot e^4\cdot Z^2}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}=\dfrac{-9.11\cdot 10^{-31}\cdot(1.6\cdot 10^{-19})^4\cdot 29^2}{8\cdot(8.85\cdot 10^{-12})^2\cdot(6.63\cdot 10^{-34})^2\cdot 2^2}=-0.456\cdot 10^{-15}\,J \\ E_{n=1}=\dfrac{-m_e\cdot e^4\cdot Z^2}{8\cdot\varepsilon_0^2\cdot h^2\cdot n^2}=\dfrac{-9.11\cdot 10^{-31}\cdot(1.6\cdot 10^{-19})^4\cdot 29^2}{8\cdot(8.85\cdot 10^{-12})^2\cdot(6.63\cdot 10^{-34})^2\cdot 1^2}=-1.823\cdot 10^{-15}\,J \end{array}\right\}\rightarrow$$

$$E_{2\rightarrow 1}=-0.456\cdot 10^{-15}-(-1.823\cdot 10^{-15})=1.367\cdot 10^{-15}\,J$$

La longitud de onda será:

$$E=\frac{h\cdot c}{\lambda}\rightarrow\lambda=\frac{h\cdot c}{E}=\frac{6.63\cdot 10^{-34}\cdot 3\cdot 10^{8}}{1.367\cdot 10^{-18}}=1.455\cdot 10^{-10}\,m=145.5\,pm$$

Como 1 Å=100pm, la longitud de onda será 1.455Å

Nota: En realidad la longitud de onda correspondiente a la transición K_{α} del cobre es de 1.541 Å, pero las ecuaciones usadas son una buena aproximación.

13. a) Estime la fuerza de atracción entre un átomo de cloro y otro de sodio cuando se encuentran separados 500 pm. b) Si el radio iónico del Na^+ es 0.095 nm y el del Cl^- es 0.181 nm, determine la fuerza de repulsión entre los iones de la molécula NaCl. $e=0.16\cdot 10^{-18}$ C y $\varepsilon_0=8.854\cdot 10^{-12}$ C^2/Nm^2.

Solución:

a) La fuerza de atracción colúmbica F_C en el enlace covalente que se forma entre el Cl y el Na viene dada por la ecuación siguiente, donde "V_i" es la valencia de cada ión, "e" la carga del electrón y "a" la separación:

$$F_C = \frac{(V_1 \cdot e) \cdot (V_2 \cdot e)}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot a^2} \text{ , por lo tanto:}$$

$$\frac{(1 \cdot 0.16 \cdot 10^{-18}) \cdot (1 \cdot 0.16 \cdot 10^{-18})}{4 \cdot \pi \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot (500 \cdot 10^{-12})^2} = 9.203 \cdot 10^{-10} N$$

Nota: Debe recordarse que: Na + Cl → NaCl y que, por lo tanto, $V_1=V_2=1$.

b) En el compuesto NaCl los iones que lo componen están separados una distancia igual a la suma de los radios de ambos iones:

$$a = R(Cl^-) + R(Na^+) = 0.181 + 0.095 = 0.276 nm$$

No se dispone de datos para calcular la fuerza de repulsión F_R entre los iones, pero en el compuesto NaCl, los iones se encuentran separados por la distancia de equilibrio, que es aquella en la que la fuerza de repulsión iguala a la de atracción, y ésta última sí que puede calcularse.

Por lo tanto, igual que se ha hecho en el apartado a):

$$F_R = F_C = \frac{(V_1 \cdot e) \cdot (V_2 \cdot e)}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot a^2} = \frac{(1 \cdot 0.16 \cdot 10^{-18}) \cdot (1 \cdot 0.16 \cdot 10^{-18})}{4 \cdot \pi \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot (276 \cdot 10^{-12})^2} = 3.023 \cdot 10^{-9} N$$

14. Represente la fuerza de atracción entre los iones del Yodo (I^-) y Plata (Ag^+) en función de la distancia que los separa entre 0.1 y 1 nm. $e=0.16 \cdot 10^{-18}$ C y $\varepsilon_0=8.854 \cdot 10^{-12}$ C^2/Nm^2

Solución:

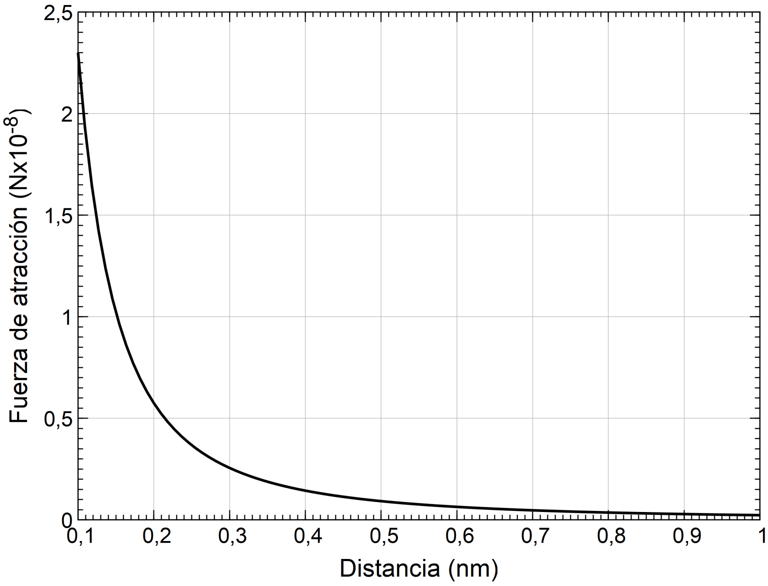
La fuerza de atracción colúmbica viene dada por la fórmula:

$$F = \frac{(V_1 \cdot e) \cdot (V_2 \cdot e)}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot a^2}$$

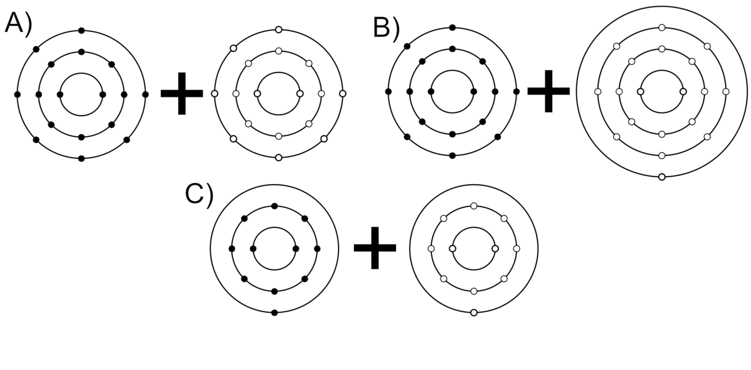
Como las valencias del Yodo y la Plata son 1:

$$F = \frac{(1 \cdot 0.16 \cdot 10^{-18}) \cdot (1 \cdot 0.16 \cdot 10^{-18})}{4 \cdot \pi \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot a^2} = \frac{2.30 \cdot 10^{-28}}{a^2} \ N$$

Esta es una función polinómica de grado 2 que si se representa gráficamente (p.e., tomando varios puntos) da como resultado la siguiente gráfica:

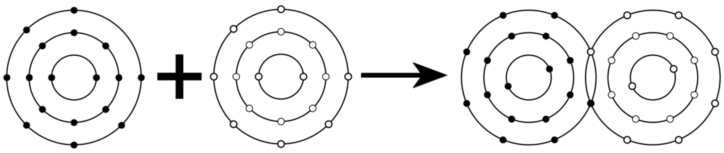


15. Determine cuál será el tipo de enlace que aparecerá entre los siguientes átomos:



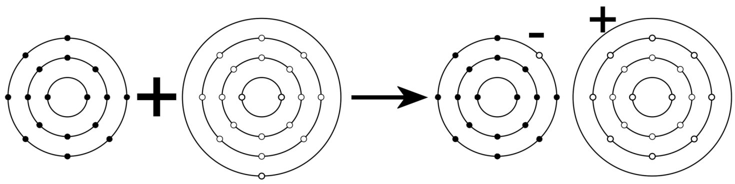
Solución:

a) A ambos átomos, que son iguales, les falta un electrón para completar su orbital más externo. La mejor forma que tienen estos átomos para alcanzar una mayor estabilidad es compartir dos electrones, uno de cada átomo, de forma que se complete la capa más externa de ambos. El enlace será, por lo tanto, covalente:



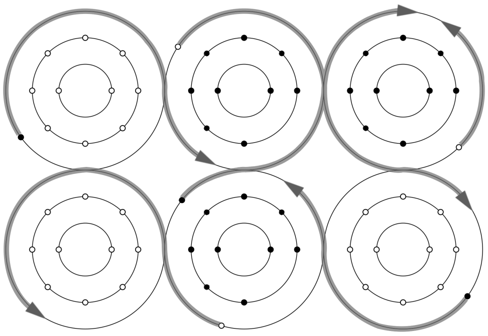
Nota: Se trata de 2 átomos de cloro (Cl), que dan lugar a la molécula Cl_2.

b) Al primer átomo le falta un electrón para completar su última capa mientras que el segundo tiene un solo electrón en su último orbital. Si el segundo átomo cede un electrón al primero ambos tendrán sus orbitales completos, aunque quedarán cargados, negativamente el primero al ganar un electrón y positivamente el segundo al perderlo. Esta diferencia de carga hace que se atraigan y queden unidos, restaurándose el equilibrio de cargas. El enlace es de tipo iónico:



Nota: El primer átomo es de cloro y el segundo de potasio. Ambos forman la sal cloruro potásico (KCl).

c) Ambos átomos son el mismo y tienen un sólo electrón en su orbital más externo. Esto hace que las soluciones anteriores no sean posibles. No obstante, los orbitales más externos de cada átomo se superponen de forma que los electrones que contienen pueden moverse libremente de un átomo a otro. Esta circunstancia forma una especie de "nube electrónica" que rodea a los átomos, restaurando el equilibrio de cargas. Se trata de un enlace de tipo metálico:



Nota: Se trata de 2 átomos de sodio (Na), el cual es un metal aunque no se suele encontrar en esa forma.

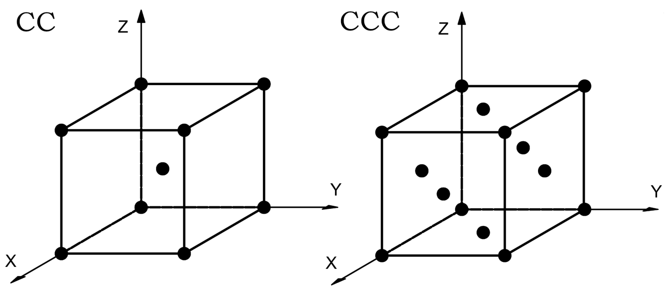
Capítulo 2: Estructura cristalina

2.1. Introducción

2.1.1. Celdas cristalinas

En los metales y las cerámicas cristalinas los átomos no se encuentran como en un bote lleno de canicas sino que se colocan en posiciones determinadas unos respecto a otros, creando una estructura tridimensional que se repite en las 3 direcciones del espacio.

La unidad más pequeña de esta estructura cristalina es un paralelepípedo que se conoce como "celda cristalina". Los ejemplos más sencillos son las estructuras cúbica centrada en el cuerpo (CC ó BCC) y la cúbica centrada en las caras (CCC ó FCC)., aunque existen en total 7 sistemas cristalinos en función de la longitud de las aristas y los ángulos entre las caras y 14 redes de Bravais en función de donde se colocan los átomos en esos paralelepípedos.



Si nos centramos en las estructuras cúbicas, estas celdas cristalinas se caracterizan por varios parámetros:

- Número de átomos por celda: debe tenerse en cuenta que el volumen de un átomo, considerado una esfera sólida, puede repartirse entre varias celdas adyacentes.

- Factor de empaquetamiento atómico: porcentaje de volumen de una celda ocupado por átomos.

- Parámetro de red: longitud de la arista de la celda.

- Número de coordinación: número de átomos con los que está en contacto cualquier átomo de la estructura cristalina.

Si se usa el modelo de esferas rígidas para representar los átomos, es posible obtener valores como la densidad de un material a partir de las características de la celda (en el caso de la densidad basta con dividir el peso de los átomos que incluye la celda entre su volumen) o establecer una relación de tamaño entre el parámetro de red y el radio atómico.

2.1.2. Direcciones y planos cristalinos

Las direcciones cristalinas se corresponden con las coordenadas del punto de corte del vector, que parte del origen de coordenadas de la celda, con la superficie de la celda, pero multiplicando las coordenadas de ese punto por un valor que produzca números enteros.

Los planos cristalográficos se nombran usando los *índices de Miller (h k l)*. Estos índices se obtienen multiplicando la inversa de los puntos de corte del plano con los ejes por un factor que produzca números enteros.

Como la celda es una estructura que se repite en el espacio, existen muchas direcciones y planos que se consideran equivalentes y que se agrupan en *familias*.

Las direcciones de escriben entre “[ ]” y las familias de direcciones entre “< >”. Para los planos se usan “( )” y “{ }” respectivamente.

2.1.3. Huecos

Aunque se ha comentado que los átomos se posicionan en lugares definidos de una celda cristalina, también es posible que átomos más pequeños puedan colocarse en los huecos que quedan en la celda. Los huecos pueden ser tetraédricos u octaédricos y para saber con cuantos átomos puede estar en contacto a la vez otro átomo que se sitúe en un hueco se recurre a la relación de radios y la tabla siguiente:

Relación de radios	Número de coordinación	Tipo de hueco
≥ 0.732	8	cubo
≥ 0.414	6	octaedro
≥ 0.225	4	tetraedro
≥ 0.155	3	triángulo

2.1.4. Difracción de rayos-X

Una de las formas más usuales de estudiar estructuras cristalinas es mediante la técnica de difracción de rayos-x, en ella se hace incidir un haz monocromático (una sola longitud de onda) sobre una superficie cristalina con un ángulo que se va variando de forma continua. El haz se refleja siempre que se cumpla:

$$n\cdot\lambda=2\cdot d_{hkl}\cdot sen(\theta)$$

donde n es un entero, normalmente 1, λ es la longitud de onda, d_{hkl} es la distancia entre los planos paralelos que reflejan el haz y θ es el ángulo de incidencia del haz (de igual valor que el reflejado), aunque en un diagrama de difracción se representa $2\cdot\theta$.

Además de esta hace falta que se cumplan otras condiciones, que en las estructuras CC y CCC son:

CC → La suma de los 3 índices de Miller es par (h+k+l = par)

CCC → Todos los índices de Miller son pares o impares, considerando el "0" como par.

Además, en las estructuras cúbicas se cumple que la distancia entre los planos paralelos (h k l) es:

$$d_{hkl}=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

donde a es el parámetro de red.

2.2. Problemas

01. Calcular el factor de empaquetamiento atómico F.E.A. del hierro según el modelo de esferas rígidas. Radio del Fe R = 0.124 nm, celda cristalina: cúbica centrada en el cuerpo (C.C. o B.C.C.). Número de átomos pertenecientes a la celda N = 2. Parámetro de red (arista de la celda unidad) a = 0.286 nm.

Solución:

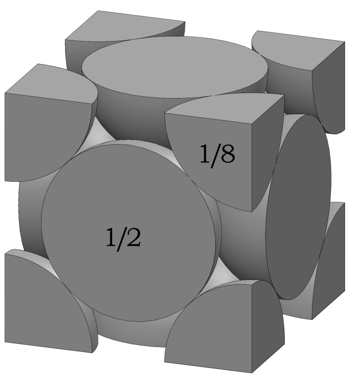
El factor de empaquetamiento se define como el porcentaje unitario del volumen de una celdilla ocupado por los átomos. En este caso hay un átomo completo en el centro de la celdilla cúbica y 8 octavas partes de átomo en los vértices. Por ello la celdilla contien exactamente 1+8·1/8= 2 átomos. Como su volumen viene dado por el cubo de la arista:

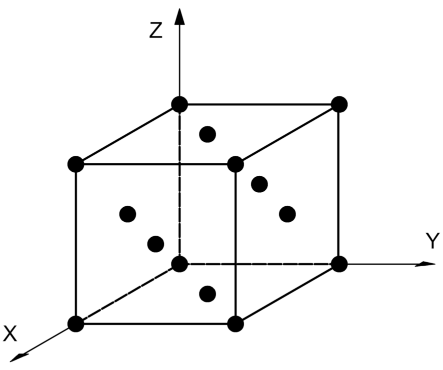
$$FEA=\frac{N\cdot V_{at}}{V_{cu}}=\frac{2\cdot\left(\frac{4}{3}\cdot\pi\cdot 0.124^3\right)}{0.286^3}=0.68$$

02. Calcular el radio y el factor de empaquetamiento F.E.A. del aluminio. Celda cristalina del Al: cúbica centrada en las caras (C.C.C. o F.C.C.). Parámetro de red a = 0.405 nm.

Solución:

En una celdilla C.C.C. los átomos se distribuyen como muestran las figuras siguientes:





Para seguir leyendo haga click aquí