Estructura de la Materia 2

Clase 3 - Teoría

Docentes

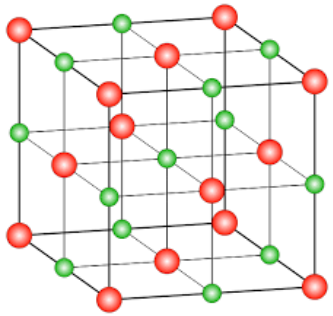
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Adán Garros

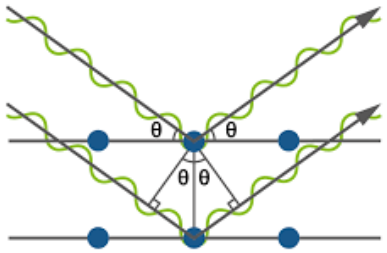
Departamento de Física, FCEN, UBA – Primer Cuatrimestre, 2025

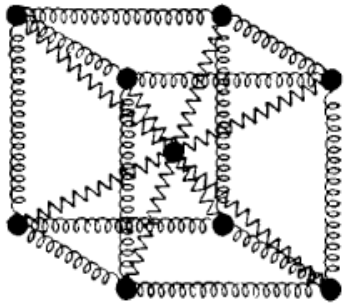
Web: https://asignaturas.df.uba.ar/edlm2-grinblat/

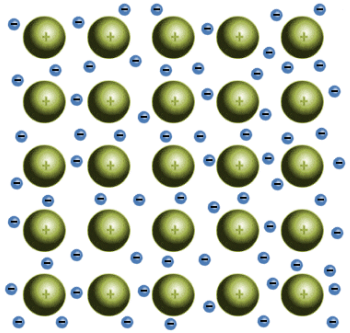
Programa de la materia

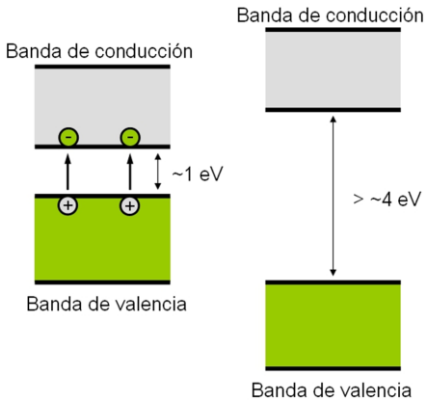
- Red cristalina, red recíproca y difracción de rayos X ✔
- Clasificación de los sólidos y energía de cohesión
- Vibraciones, fonones y propiedades térmicas
- Electrones en sólidos (potencial periódico)
- Semiconductores y juntura semiconductora
- Magnetismo en sólidos
- Introducción a los aisladores topológicos

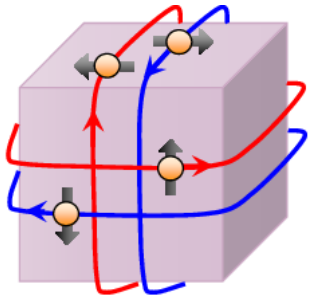






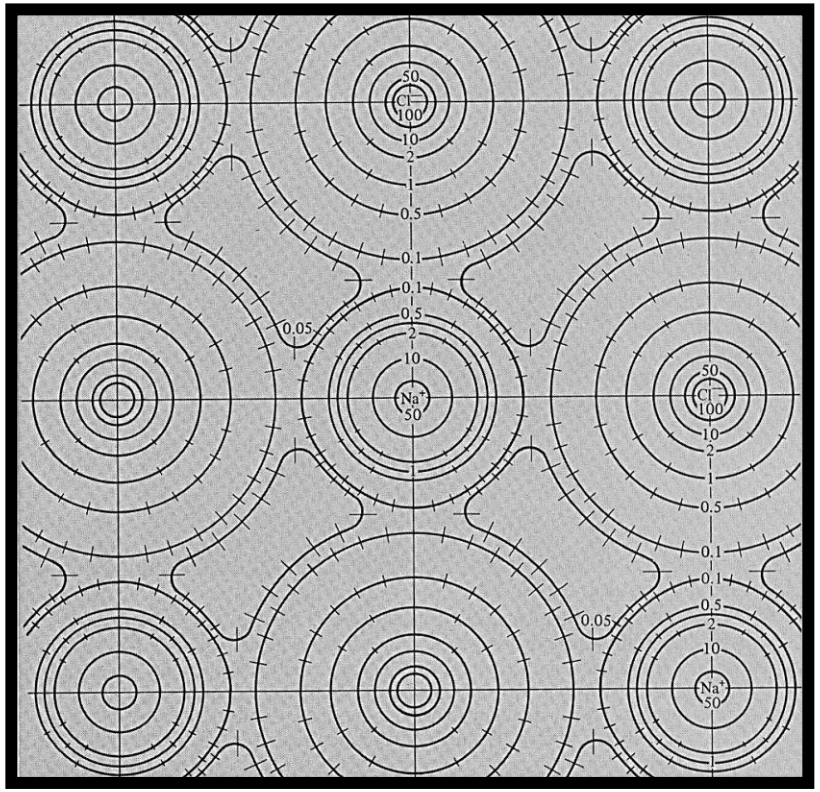




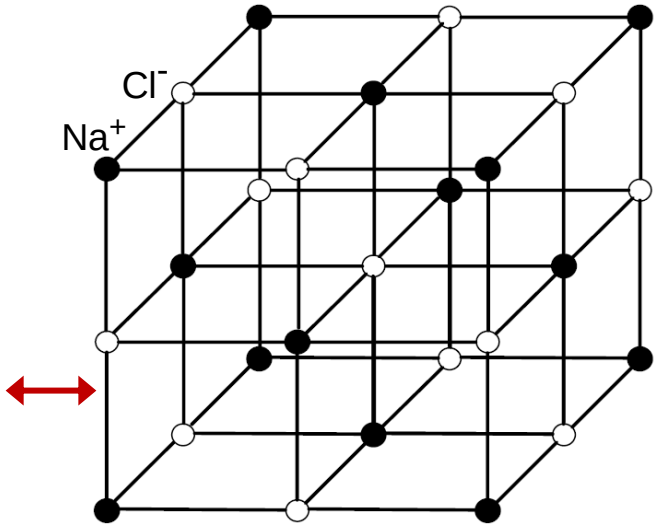


Clasificación de los sólidos

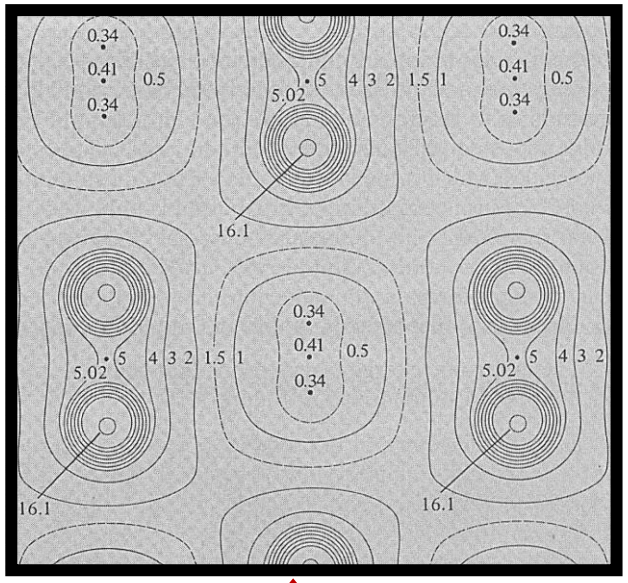
Evidencia experimental por rayos X de la distribución electrónica en sólidos



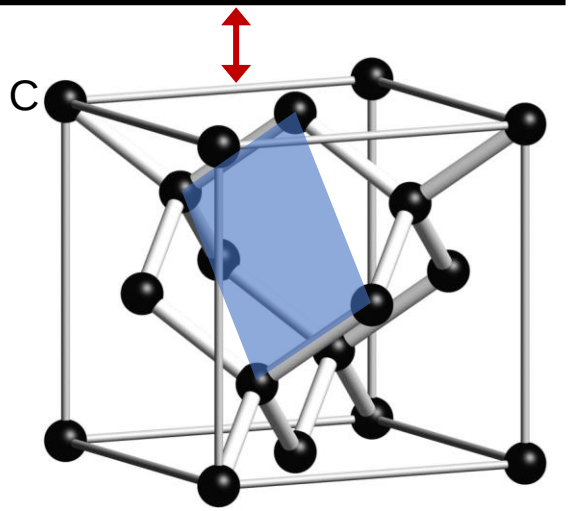
Los números indican densidad electrónica en $e^-/Å^3$.



Cristal iónico

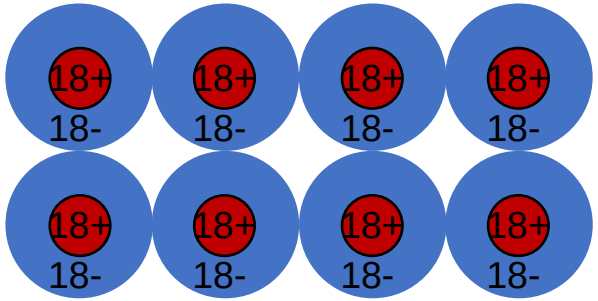


Cristal covalente



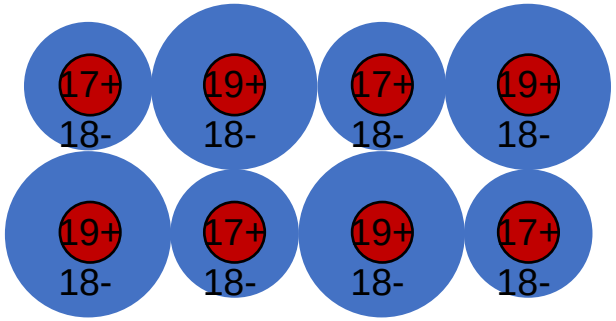
Clasificación de los sólidos

<u>Cristal molecular</u> (aislante)



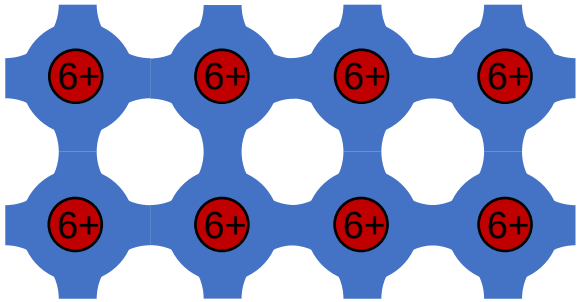
(Ej. Ar)

<u>Cristal iónico</u> (aislante)



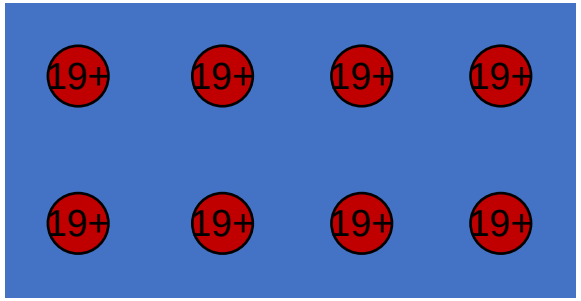
(Ej. KCl)

<u>Cristal covalente</u> (aislante/semiconductor)



(Ej. Diamante)

<u>Metal</u> (conductor)



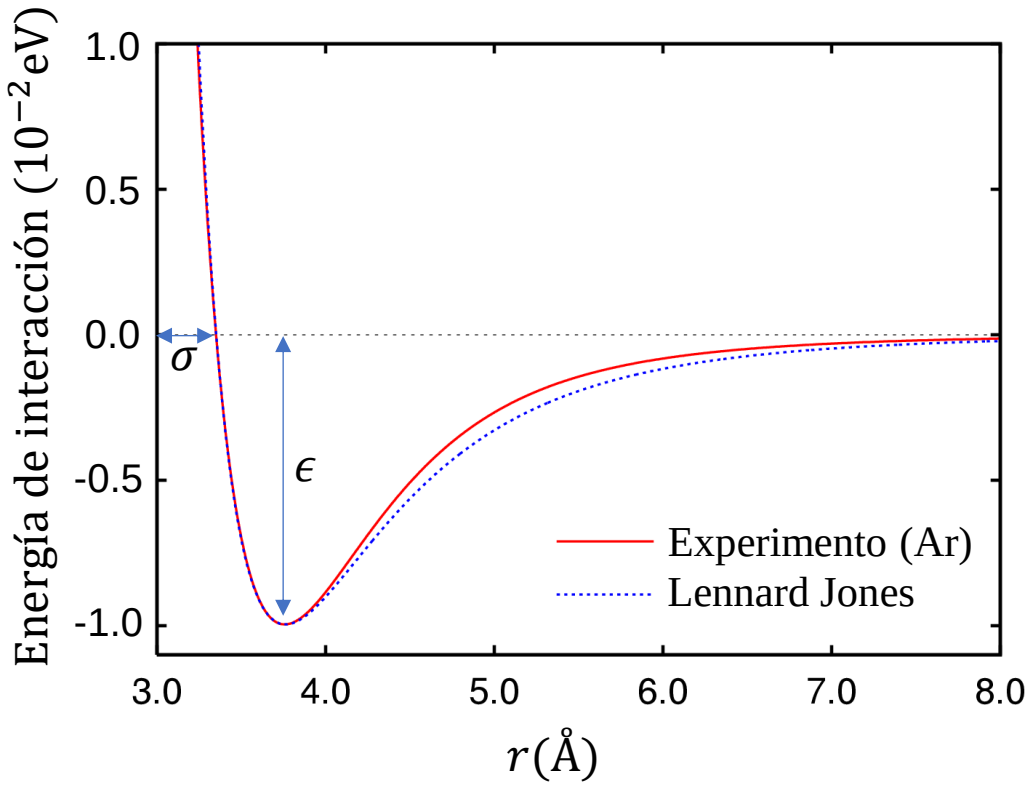
(Ej. K)

Cohesión en sólidos: Cristal molecular

Cohesión en cristales moleculares

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

ϵ: Magnitud de la atracción
σ: Radio del núcleo repulsivo



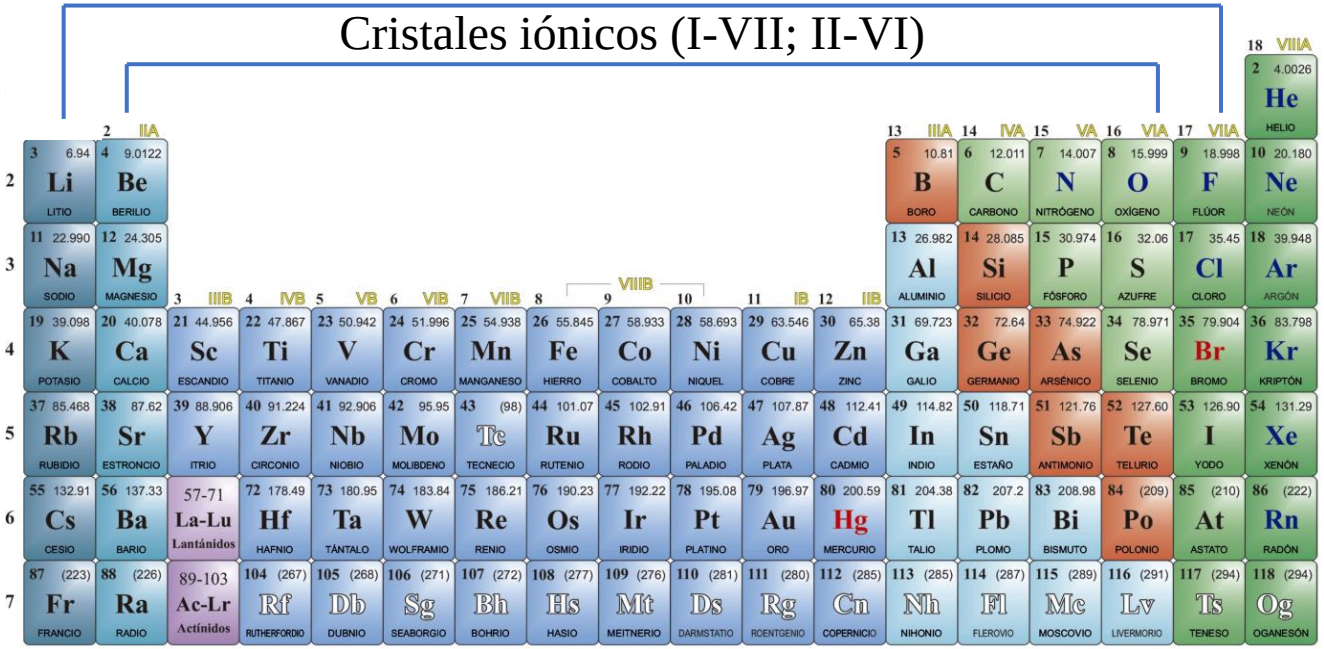
Parámetros para gases nobles

	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

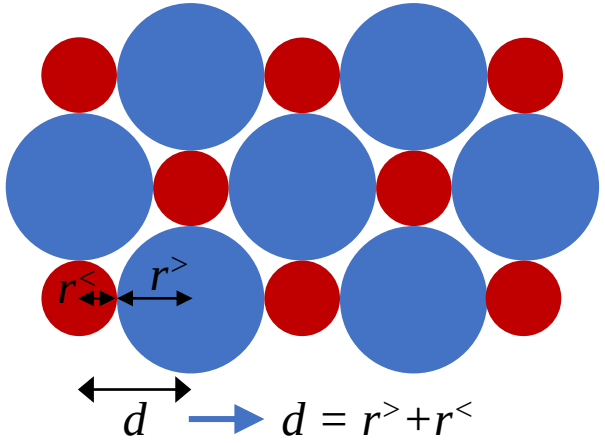
Cristal iónico

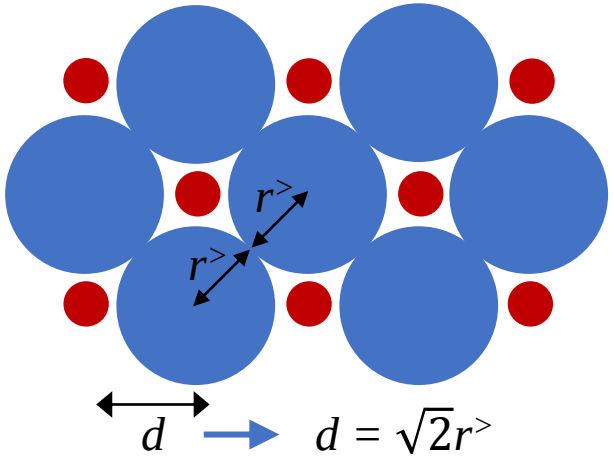


Cristal iónico

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

	Li^+ (0.60)	Na^+ (0.95)	K^+ (1.33)	Rb^+ (1.48)	Cs^+ (1.69)
F^- (1.36)					
d (exp.)	2.01	2.31	2.67	2.82	3.00
$r^+ + r^-$	1.96	2.31	2.69	2.84	3.05
Cl^- (1.81)					
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
Br^- (1.95)					
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
I^- (2.16)					
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 $\sqrt{2}r^>$.

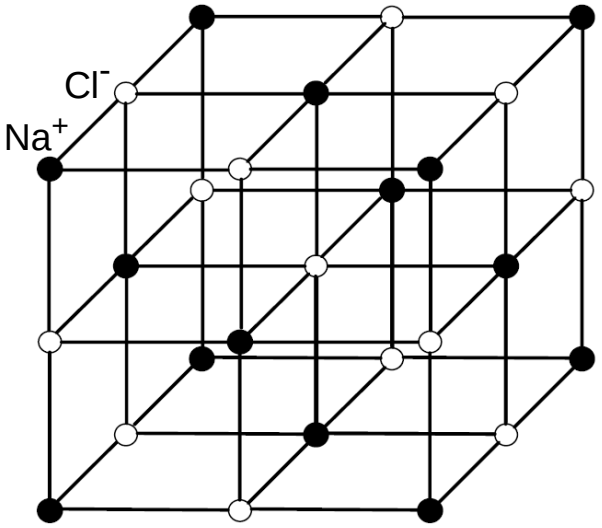
Cohesión en sólidos: Cristal iónico

Energías de ionización

Energía para remover $1e^-$ (eV)

Energía para remover $2e^-$ (eV)

Li	Be											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											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

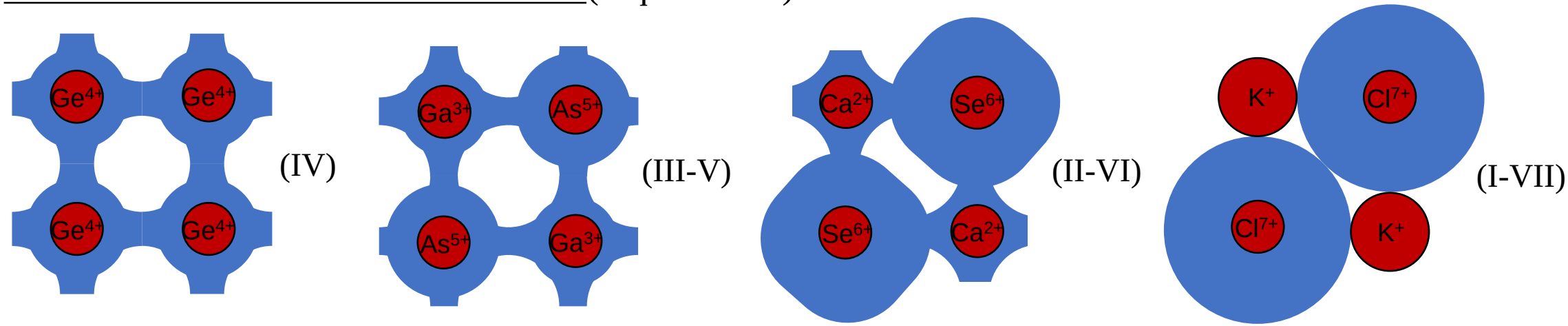
Cohesión en sólidos: Cristal iónico

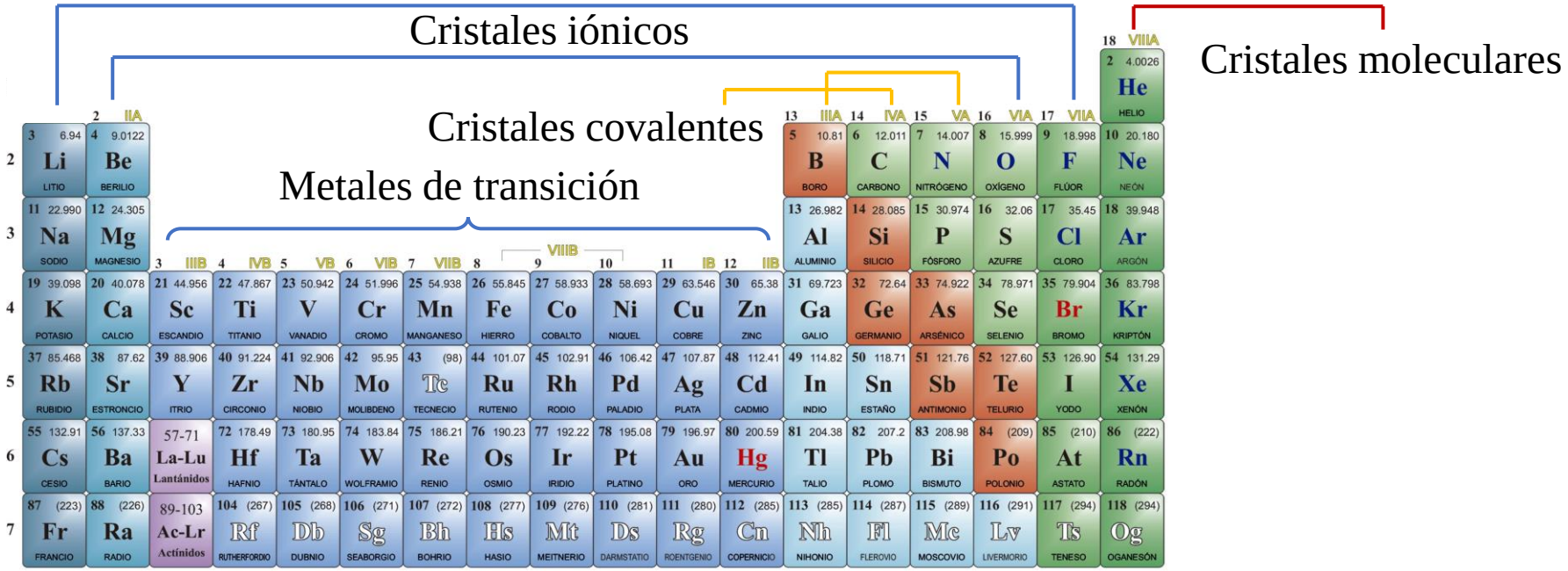
Parámetros para algunos haluros alcalinos

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

Clasificación de los sólidos

Transición de cristal covalente a iónico (esquemático)





Cohesión en sólidos

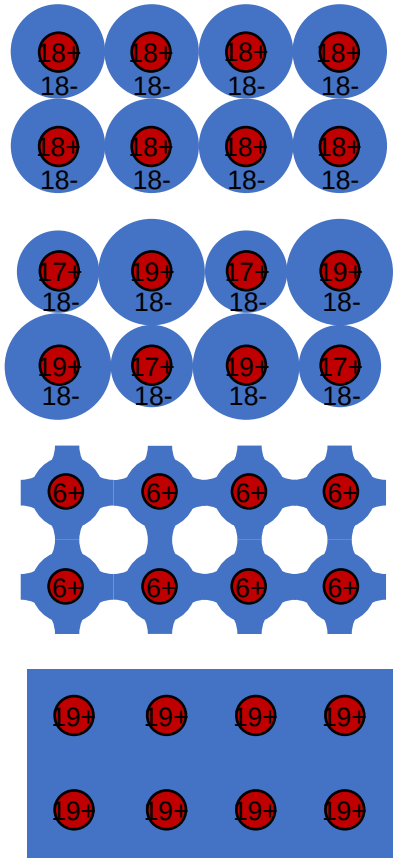
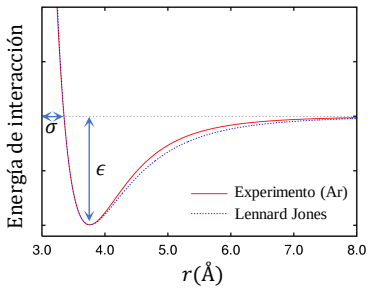
Energía de cohesión y temperatura de fusión

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)