

# T3 - Sólidos

Martin J. Klöckner - [mklockner@fi.uba.ar](mailto:mklockner@fi.uba.ar) - [kloeckner.com.ar](http://kloeckner.com.ar)

Química (63.01/83.01) - 2023 - FIUBA

## Sólidos

Sólidos cristalinos .....	1
Estructuras cristalinas .....	1
Celda unitaria .....	1
Número de unidades elementales por celda unitaria .....	1
Numero de coordinación .....	1
Eficiencia de empaquetamiento .....	1
Factor de empaquetamiento .....	1
Transformaciones alotrópicas .....	2
Tipos de redes cristalinas .....	2
Cúbica simple .....	2
Cúbica centrada en el cuerpo .....	4
Cúbica centrada en las caras .....	5
Hexagonal compacta .....	6
Radio atómico .....	7
Calculo del radio atómico .....	7
Sólidos iónicos .....	7
Sólidos atómicos .....	7
Sólidos moleculares .....	7
Solidos metálicos .....	8
Sólidos amorfos .....	8
Vidrios .....	8
Ciertos Polímeros .....	8
Fuerzas de interacción .....	8
Interacción iónica .....	8

# Sólidos

Los sólidos son sustancias que poseen volumen y forma propios, a diferencia de los gases y líquidos que toman la forma del recipiente que los contiene. Se categorizan principalmente en sólidos cristalinos y amorfos. La diferencia entre ambos es la manera en que se comportan las partículas que los componen. En los sólidos cristalinos las partículas poseen una estructura mucho más ordenada y estricta que en los sólidos amorfos, en los cuales las partículas carecen de un orden específico.

## Sólidos cristalinos

Los sólidos cristalinos poseen un ordenamiento estricto y regular de sus átomos, moléculas o iones, gracias a esto las fuerzas netas de atracción intermolecular son máximas. Las fuerzas que mantienen la estabilidad de un cristal pueden ser iónicas, covalentes, de van der Waals, de enlaces de hidrógeno o una combinación de todas ellas.

## Estructuras cristalinas

La estructura cristalina es la forma sólida en la que se ordenan y empaquetan las partículas en sólidos cristalinos.

### Celda unitaria

La celda unitaria es el mínimo modelo que representa a la red cristalina, en términos sencillos, es una pequeña caja que contiene uno o más átomos dispuestos en 3 dimensiones. Las celdas unitarias apiladas en un espacio tridimensional describen la disposición en masa de los átomos de los sólidos cristalinos. Existen 7 tipos de celdas cristalinas, de los cuales los que más frecuentan son las cúbicas y las hexagonales.

Las celdas unitarias se caracterizan principalmente por contener un único **nodo** de la red, de allí el adjetivo "unitaria". El nodo de una celda unitaria se posiciona en el centro de la misma.

### Número de unidades elementales por celda unitaria

El número de unidades elementales por celda unitaria es la cantidad neta de unidades elementales que caben en una celda unitaria según el arreglo.

### Número de coordinación

El número de coordinación es la cantidad de unidades elementales que se encuentran a la mínima distancia de una elegida al azar.

### Eficiencia de empaquetamiento

La eficiencia de empaquetamiento es una unidad porcentual que mide el volumen de un cubo ocupado por una esfera (representando un átomo). Por ejemplo, para la celda unitaria cúbica simple, el 52% de su volumen está ocupada por esferas ubicadas en su vértice, mientras que, la celda unitaria cúbica centrada en el cuerpo tiene una eficiencia de empaquetamiento mayor del 68%, debido a la esfera situada en el centro del cubo.

### Factor de empaquetamiento

El factor de empaquetamiento atómico (siglas en inglés: APF), es la fracción de volumen en una celda unidad que está ocupada por átomos. Este factor es adimensional a diferencia de la eficiencia

de empaquetamiento, que es porcentual. El factor de empaquetamiento se representa matemáticamente por:

$$APF = \frac{N_{\text{partículas}} \cdot V_{\text{partícula}}}{V_{\text{celda unitaria}}}$$

Siendo  $N_{\text{partículas}}$  la cantidad de partículas dentro de la celda unitaria, es decir, las unidades elementales por celda.  $V_{\text{partícula}}$  el volumen de una partícula (se puede relacionar con el radio atómico) y  $V_{\text{celda unitaria}}$  el volumen de la celda unitaria, es decir, el volumen del cubo (determinado por el radio atómico de las partículas).

### Transformaciones alotrópicas

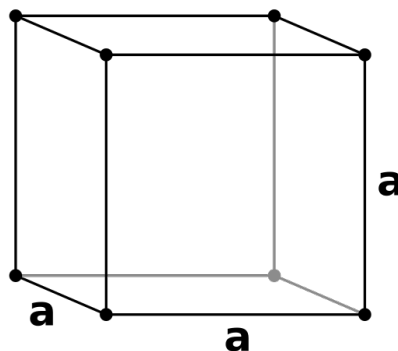
En la transformación alotrópica se produce una absorción de calor al ser calentado o en el caso del enfriamiento, un desprendimiento de calor latente verificándose estos procesos a temperatura constante; la denominada temperatura de transformación alotrópica.

En el caso del hierro, su estructura cristalina varía con la temperatura. A temperaturas de entre  $-273^{\circ}\text{C}$  y  $768^{\circ}\text{C}$  se conoce como hierro alfa, y cristaliza con una estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (BCC) además de tener carácter magnético. Entre las temperaturas de  $768^{\circ}\text{C}$  y  $912^{\circ}\text{C}$  se conoce como hierro beta, el cual respecto del hierro alfa incrementa levemente el volumen y pierde el carácter magnético, la estructura cristalina es la misma. Entre  $912^{\circ}\text{C}$  y  $1394^{\circ}\text{C}$  cambia su estructura cristalina a cúbica centrada en las caras (FCC). Entre  $1394^{\circ}\text{C}$  y  $1539^{\circ}\text{C}$  la estructura cristalina del hierro vuelve a ser cúbica centrada en el cuerpo, a mayores temperaturas que  $1539^{\circ}\text{C}$  el hierro se vuelve líquido.

### Tipos de redes cristalinas

#### Cúbica simple

La celda cúbica simple, también conocida como celda cúbica primitiva, es la unidad elemental más simple, contiene átomos ubicados en los vértices de un cubo. Las partículas ubicadas en los vértices están en contacto entre sí, por lo que se puede relacionar el radio atómico de cada partícula con la arista del cubo.



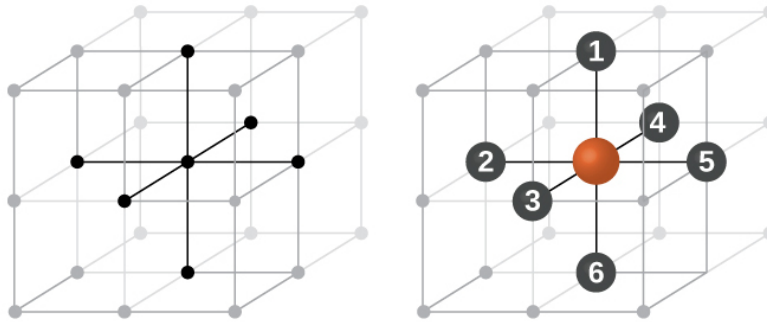
celda cúbica simple

En la estructura cúbica simple hay 1 unidad elemental por celda, ya que se cuenta solo lo que esté dentro del cubo, en el caso de los vértices las partículas (que se representan como esferas) solo tienen  $1/8$  de su cuerpo dentro, el resto queda fuera y pertenece a otra celda, como hay 8 vértices:

$$8 \text{ vértices} * \frac{1}{8} \text{ partícula} = 1 \text{ u.e. por celda}$$

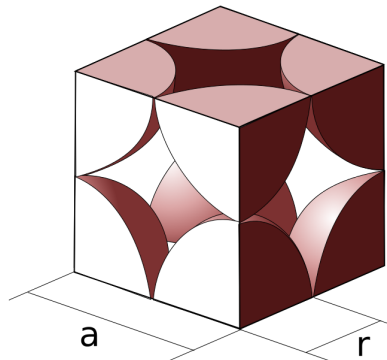
En cuanto al **numero de coordinación**: es 6, ya que cualquier partícula que se considere va a estar rodeada por 6 partículas más, 3 de la misma celda y tres de las celdas adyacentes.

$$\text{número de coordinación} = 6$$



visualización del número de coordinación

En cuanto a eficiencia de empaquetado esta estructura es una de las más **ineficientes** ya que hay mucho espacio entre las partículas en comparación con otros tipos de celdas elementales.



partículas en contacto en una celda cubica simple

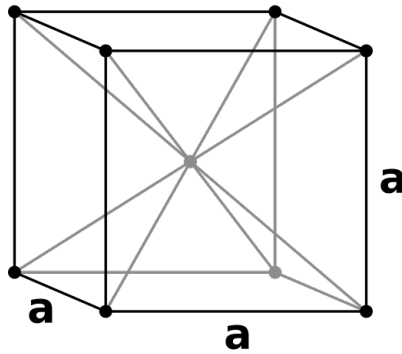
Sabiendo que las partículas en los vértices están en contacto entre si, se puede obtener una relación entre el radio atómico y la arista del cubo.

$$a = 2r$$

Siendo  $a$  la longitud de la arista del cubo y  $r$  el radio atómico de las partículas en los vértices.

## Cúbica centrada en el cuerpo

La celda cubica centrada en el cuerpo (siglas en ingles: BCC) se caracteriza por tener 4 partículas ubicadas en los vértices de un cubo y una partícula ubicada en el centro del cubo. Las partículas ubicadas en los vértices están en contacto con la partícula ubicada en el centro del cubo por lo que se puede trazar una diagonal desde un vértice pasando por el centro del cubo (o nodo de la celda) hasta otro vértice opuesto.



celda cúbica centrada en el cuerpo

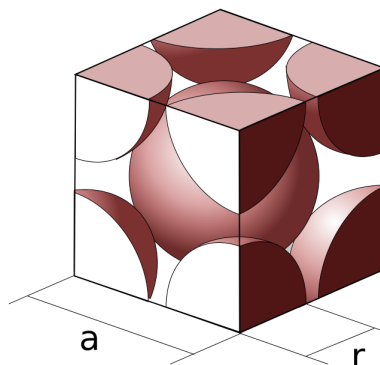
En la estructura cúbica centrada en el cuerpo hay 2 unidades elementales, ya que dentro de la celda hay 1 u.e. por tener  $1/8$  de partícula por vértice (hay 8 vértices) sumado a 1 u.e. por tener un átomo en el centro de la celda.

$$8 \text{ vértices} * \frac{1}{8} \text{ partícula} + 1 \text{ partícula} = 2 \text{ u.e.}$$

En cuanto al numero de coordinación es 8, ya que cualquier partícula que se considere va a tener 8 partículas más adyacentes (ubicados en los vértices del cubo)

$$\text{número de coordinación} = 8$$

En este caso sabiendo que las partículas de las esquinas están en contacto con la partícula en el centro del cubo (o nodo de la celda) se puede relacionar la arista con el radio atómico trazando una recta diagonal desde un vértice pasando por el centro del cubo hasta otro vértice opuesto.



partículas en contacto en una celda cubica centrada en el cuerpo

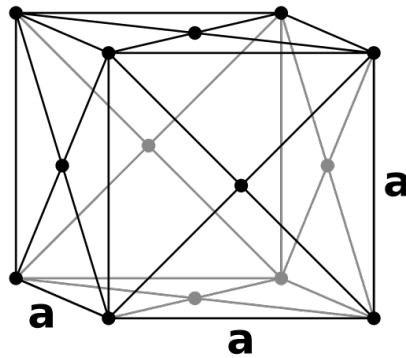
De esta manera la diagonal tiene una longitud de  $4r$  ya que cuando atraviesa la partícula central lo hace a través de la totalidad de la misma, es decir, por todo el diámetro, que es lo mismo que decir, dos veces el radio atómico ( $2r$ ) y las partículas en las esquinas solo tienen la mitad de su diámetro dentro, o una vez el radio ( $r$ ).

Por geometría, la longitud de la diagonal es  $a \cdot \sqrt{3}$ . Por lo tanto, la arista se puede relacionar con el radio de cada partícula mediante la siguiente fórmula:

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

### Cúbica centrada en las caras

La celda unitaria cubica centrada en las caras (siglas en ingles: FCC) se caracteriza por tener 4 partículas en los vértices de un cubo y además una partícula en el centro de cada cara del cubo. Cada partícula en los vértices toca a la partícula central por lo que si se traza una línea desde un vértice a su vértice opuesto diagonalmente (sobre la misma cara) se puede relacionar al radio atómico de las partículas con la longitud de esta línea y así también con la arista del cubo.



celda cúbica centrada en las caras

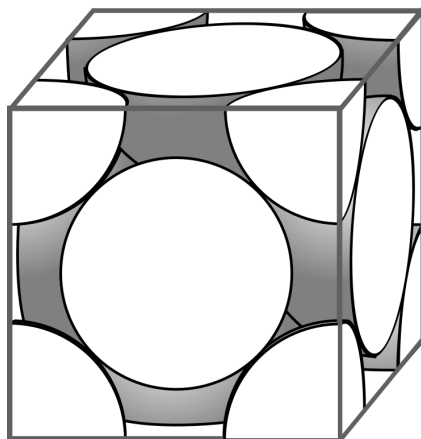
En la estructura cúbica centrada en las caras hay 4 unidades elementales, ya que hay  $1/8$  de partícula en cada vértice del cubo (hay 8 vértices) y además la mitad de un átomo en cada cara (hay 6 caras en un cubo) dando un total de 4 u.e.:

$$\left(8 \text{ vértices} * \frac{1}{8} \text{ partícula}\right) + \left(6 \text{ vértices} * \frac{1}{2} \text{ partícula}\right) = 4 \text{ u.e.}$$

En cuanto al **numero de coordinación** es 12, ya que cada partícula que se considere va a tener 12 partículas cercanas.

$$\text{número de coordinación} = 12$$

Sabiendo que las partículas en los vértices están en contacto con las partículas en el centro de las mismas, se puede trazar una recta diagonal sobre la misma cara partiendo de un vértice, pasando por el centro geométrico de la cara (donde está ubicado el centro de la partícula que está sobre la misma) y finalizando en el vértice opuesto diagonalmente al vértice de partida, de esta manera, como en la estructura cubica centrada en el cuerpo, la longitud de la diagonal es cuatro veces el radio atómico de las partículas dentro de la celda.



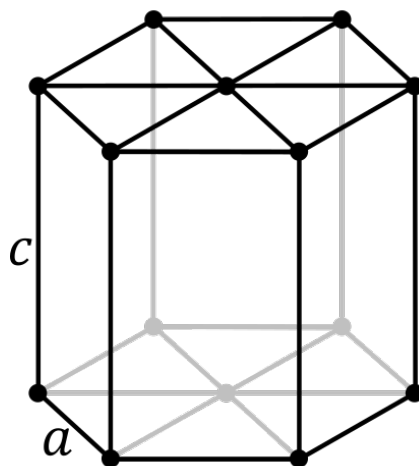
partículas en contacto en una celda cubica centrada las caras

Utilizando geometría nos damos cuenta que la longitud de la diagonal también vale dos veces la longitud de la arista al cuadrado ( $2r^2$ ), entonces se puede relacionar la longitud de la arista con el radio atómico de la siguiente manera:

$$a = 2\sqrt{2}r$$

### Hexagonal compacta

En la celda unitaria hexagonal compacta (siglas en ingles: HCP) las partículas están empaçadas juntas de manera muy cercana. En esta estructura, las partículas forman capas hexagonales apiladas unas sobre otras, y las mismas se alternan con capas de partículas más pequeñas situadas en los espacios intersticiales, o huecos, entre capas.



celda hexagonal compacta

En este tipo de celda unitaria hay 6 unidades elementales, ya que hay 12 vértices con  $\frac{1}{6}$  de partícula además de las 2 partículas que están en las caras que tienen la mitad del cuerpo dentro de la celda y las 3 partículas en la capa hexagonal más pequeña dentro del cuerpo, sumando todo:

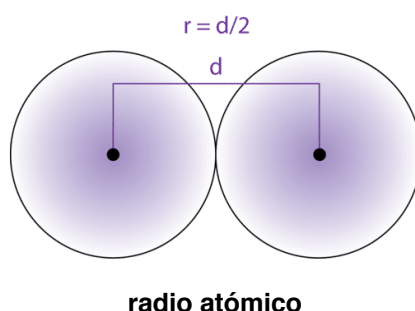
$$\left(12 \text{ vértices} * \frac{1}{6} \text{ partícula}\right) + \left(2 \text{ caras} * \frac{1}{2} \text{ partícula}\right) + 3 \text{ partículas} = 6 \text{ u.e.}$$

En cuanto al número de coordinación es 12, ya que cada partícula que se considere va a tener 12 partículas cercanas.

$$\boxed{\text{número de coordinación} = 12}$$

## Radio atómico

El radio atómico identifica la distancia media entre dos núcleos de un mismo elemento enlazados entre sí. Por medio del radio atómico es posible determinar el tamaño del átomo. Se utiliza la distancia entre dos núcleos para determinar el radio atómico ya que es mucho más fácil de medir que el radio a secas. Las moléculas que se utilizan para medir el radio atómico tienen que estar en estado sólido, ya que de lo contrario se abre un abanico de definiciones de lo que es el radio atómico, tal como el radio atómico de van der Waals, o el radio atómico iónico.



El radio atómico es una **propiedad periódica** es decir varía con la naturaleza del elemento considerado.

### Calculo del radio atómico

## Sólidos iónicos

En los sólidos iónicos, se encuentran aniones y cationes alternados en los nodos de las redes cristalinas. Dado el carácter fuerte del enlace iónico la temperatura de fusión de cualquier sólido iónico es relativamente alta.

## Sólidos atómicos

En los sólidos atómicos, también llamados **sólidos covalentes**, en los nodos de las celdas unitarias se encuentran átomos. Es el de mayor cohesión posible dada por enlaces covalentes entre todos los nodos del cristal es decir que se trata de una macromolécula, por lo tanto las propiedades son extremas, es el más duro de los sólidos.

El carbono grafito es un sólido atómico de estructura laminar y celda hexagonal simple, cada carbono tiene número de coordinación 3, es decir, el carbono da 3 enlaces covalentes simples, pero como es tetravalente, queda un electrón libre, por lo que un mol de átomos de carbono en la red de grafito proporciona un mol de electrones libres, por esto es un no metal buen conductor de la electricidad.

## Sólidos moleculares

En los sólidos moleculares, en los nodos de las celdas unitarias se encuentran moléculas.



## **Sólidos metálicos**

En los sólidos metálicos, en los nodos de las celdas unitarias se encuentran cationes.

## **Sólidos amorfos**

Los sólidos amorfos, a diferencia de los sólidos cristalinos, carecen de un ordenamiento bien definido y de un orden molecular repetido.

## **Vidrios**

Los vidrios son sólidos amorfos, por lo que las partículas no tienen una estructura cristalina definida.

Los vidrios se forman a partir de la fusión de materiales inorgánicos, durante el proceso de enfriamiento rápido, las moléculas no tienen suficiente tiempo para organizarse en una estructura cristalina y terminan quedando en una estructura desordenada.

## **Ciertos Polímeros**

## **Fuerzas de interacción**

### **Interacción iónica**

Es la atracción entre dos iones de distinta carga, esta prevista por la ley de coulomb. A mayor interacción mayor carga y/o menor radio.

Por ejemplo el cloruro de sodio (NaCl) y el oxido de magnesio (MgO).