

# Física Aplicada a Farmacia

Fernando Herranz  
[fherranz@pdi.ucm.es](mailto:fherranz@pdi.ucm.es)

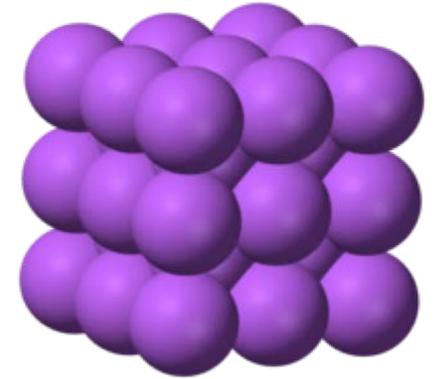
Tutorías L,X,V 17.30  
(avisad antes !)

# Parte 2ª. ESTADOS DE AGREGACIÓN DE LA MATERIA

## TEMA 2. Estado sólido

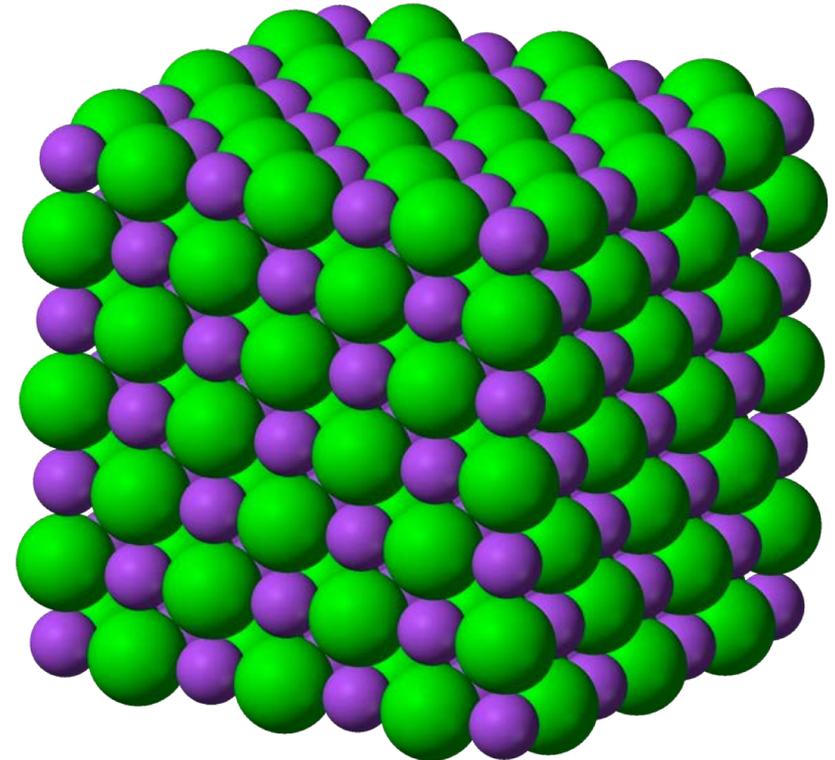
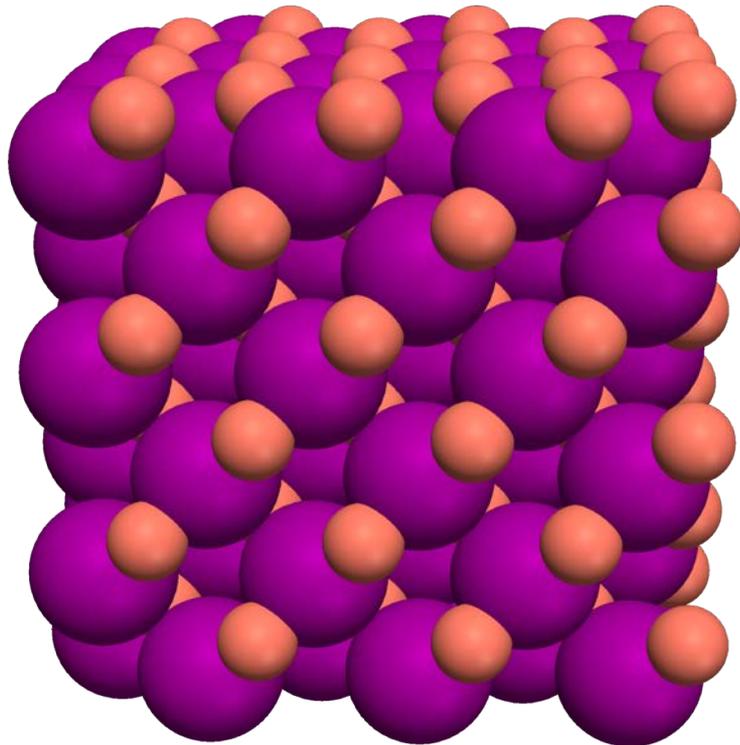
Sólidos amorfos y cristalinos. Propiedades mecánicas de los sólidos. Cristales líquidos.

En el estado sólido las partículas se encuentran unidas por grandes fuerzas que las mantienen unidas a distancias relativamente pequeñas.

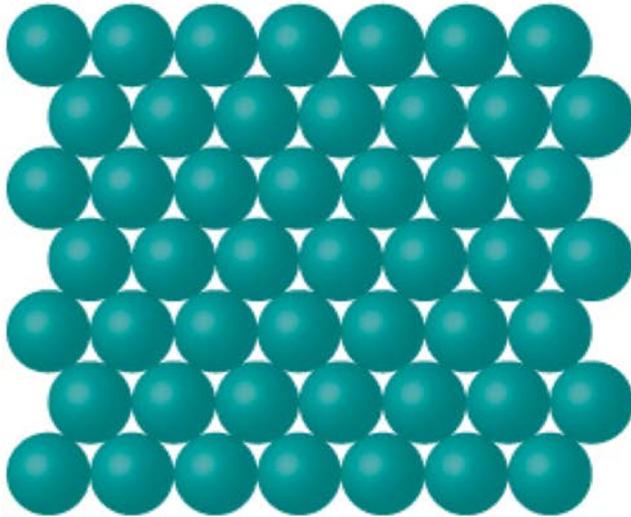


El movimiento de las partículas se limita a ser de vibración, sin que se puedan desplazar.

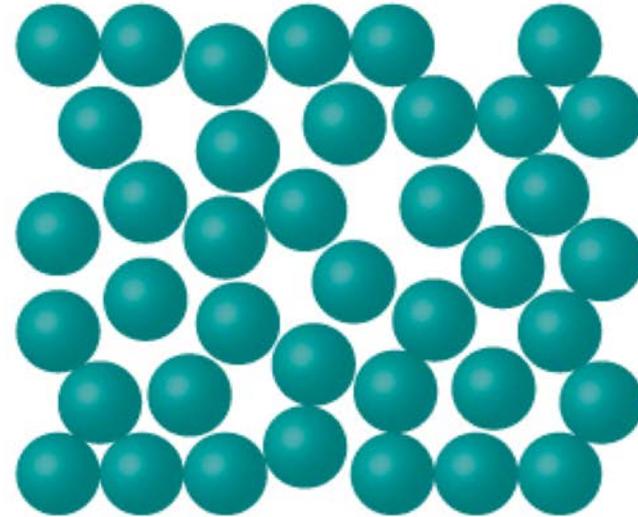
Conforme aumenta la temperatura, la amplitud de la vibración de las partículas se hace mayor por lo que el sólido se dilata.



Los sólidos se dividen en dos categorías: cristalinos y amorfos.

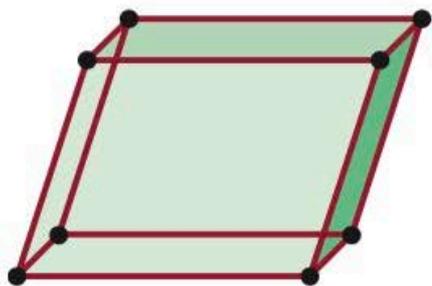


**sólido cristalino** que posee un ordenamiento estricto y regular, es decir, sus átomos, moléculas o iones ocupan posiciones específicas.

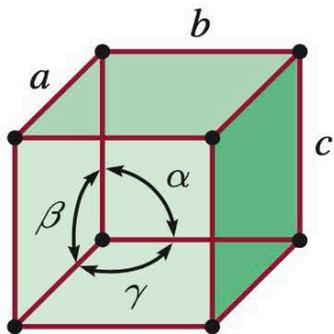


Un **sólido amorfo**, como el vidrio, carece de un ordenamiento bien definido y de un orden molecular repetido.

Una **celda unitaria** es la unidad estructural básica que se repite en un sólido cristalino.



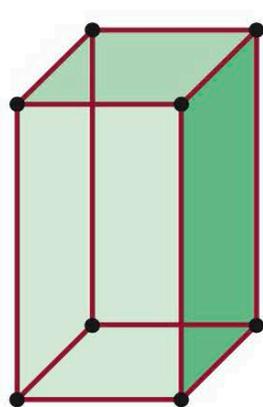
*a)*



Cúbica simple

$$a = b = c$$

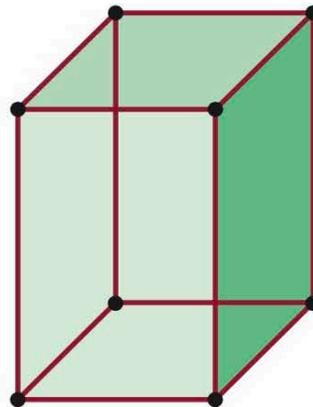
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Tetragonal

$$a = b \neq c$$

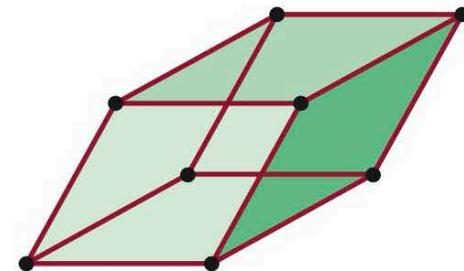
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Ortorrómbica

$$a \neq b \neq c$$

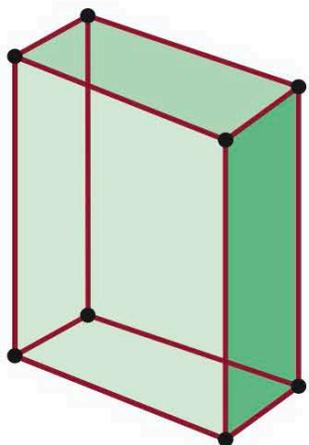
$$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$



Romboédrica

$$a = b = c$$

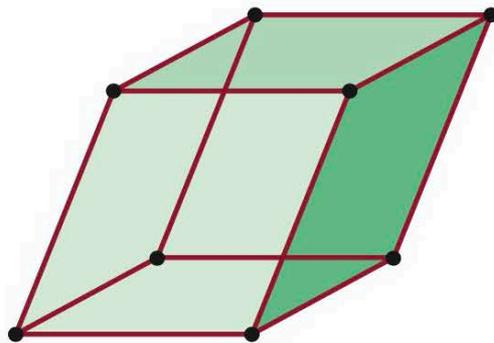
$$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$$



Monoclínica

$$a \neq b \neq c$$

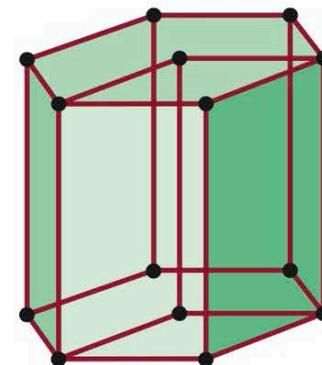
$$\gamma \neq \alpha = \beta = 90^\circ$$



Triclínica

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Hexagonal

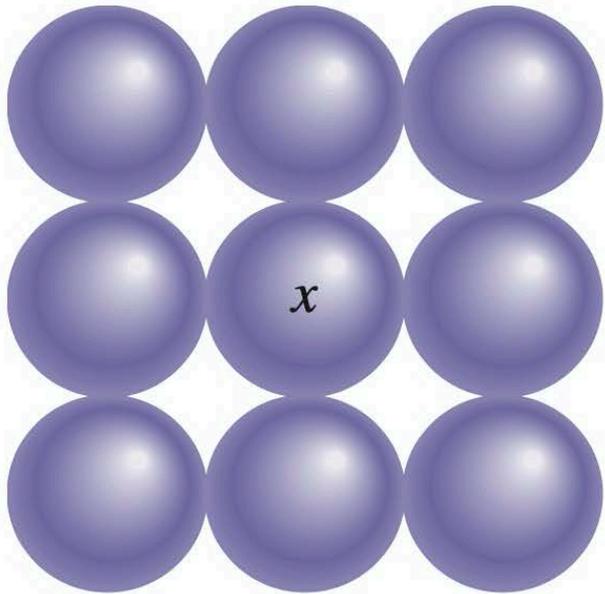
$$a = b \neq c$$

$$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$$

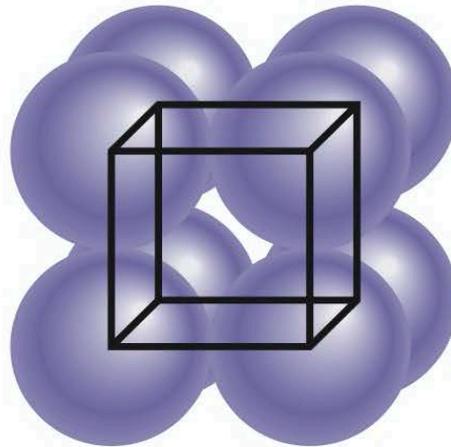
# Empaquetamiento de esferas

Los requisitos geométricos generales para que se forme un cristal se entienden si se analizan las distintas formas en que se pueden empaquetar varias esferas idénticas para formar una estructura tridimensional ordenada.

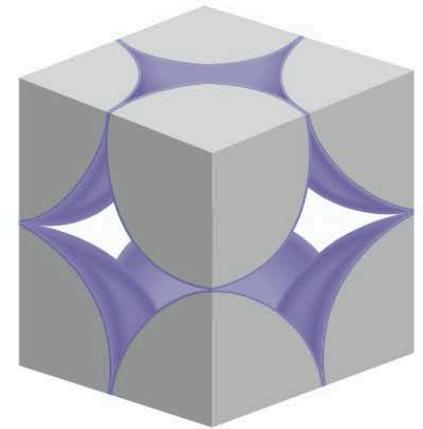
La manera en que las esferas se acomodan en capas determina el tipo de celda unitaria final.



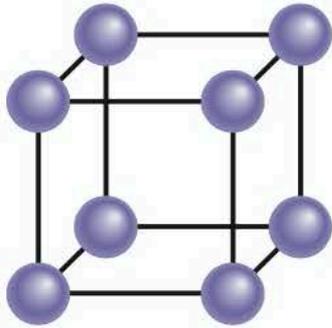
*a)*



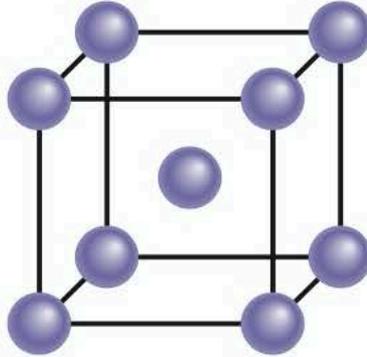
*b)*



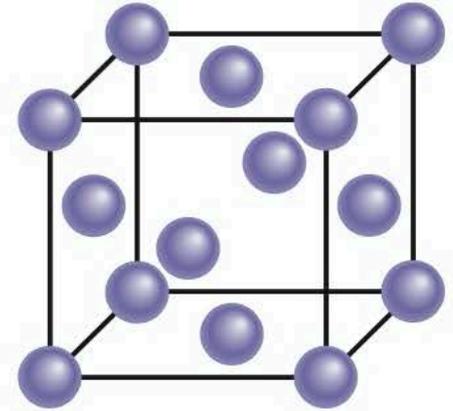
*c)*



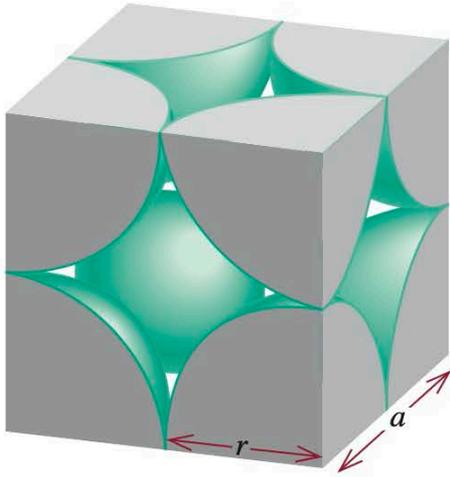
Cúbica simple



Cúbica centrada en el cuerpo

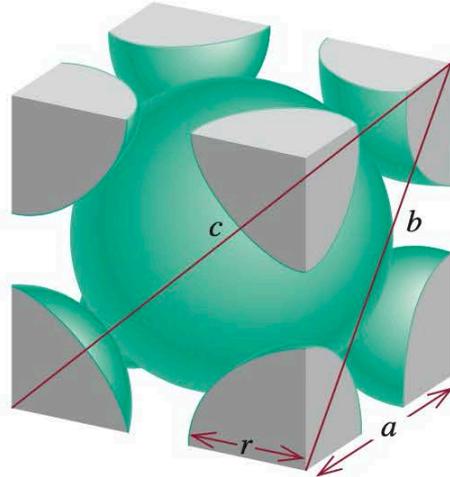


Cúbica centrada en las caras



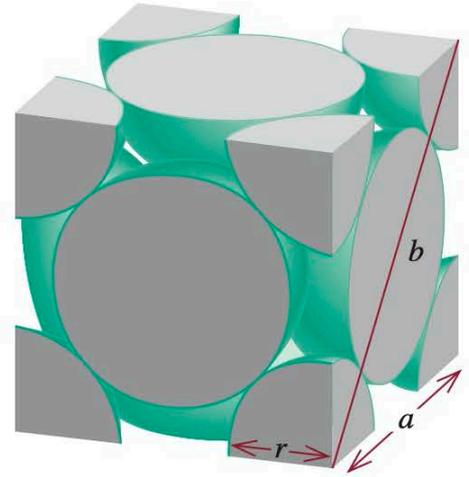
scc

$$a = 2r$$



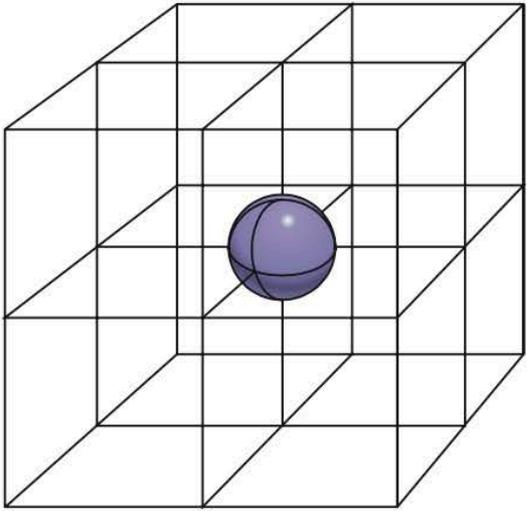
bcc

$$\begin{aligned}
 b^2 &= a^2 + a^2 \\
 c^2 &= a^2 + b^2 \\
 &= 3a^2 \\
 c &= \sqrt{3}a = 4r \\
 a &= \frac{4r}{\sqrt{3}}
 \end{aligned}$$

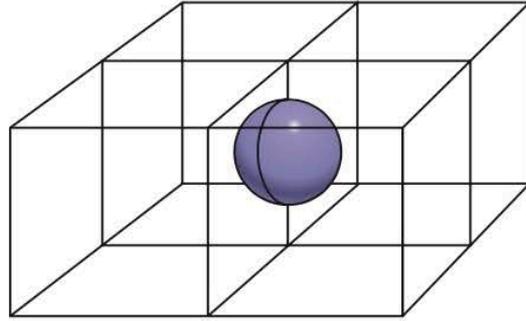


fcc

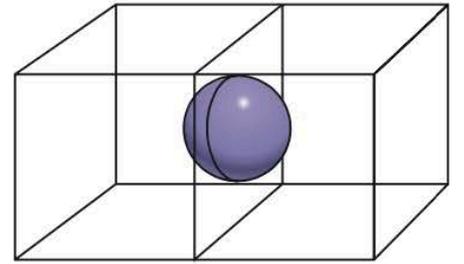
$$\begin{aligned}
 b &= 4r \\
 b^2 &= a^2 + a^2 \\
 16r^2 &= 2a^2 \\
 a &= \sqrt{8}r
 \end{aligned}$$



*a)*



*b)*



*c)*

El oro (Au) cristaliza en una estructura cúbica compacta (un cubo centrado en las caras) y tiene una densidad de  $19.3 \text{ g/cm}^3$ . Calcule el radio atómico del oro en picómetros.

densidad de la celda unitaria  $\longrightarrow$  volumen de la celda unitaria  $\longrightarrow$  longitud de la arista de la celda unitaria  $\longrightarrow$  radio atómico del Au

Conocemos la densidad, así que para determinar el volumen, debemos encontrar la masa de la celda unitaria. Cada celda unitaria tiene ocho vértices y seis caras. De acuerdo con la figura 11.19, el número total de átomos en cada una de estas celdas es de

$$\left(8 \times \frac{1}{8}\right) + \left(6 \times \frac{1}{2}\right) = 4$$

La masa de una celda unitaria en gramos es

Como el volumen es la longitud elevada al cubo, tomamos la raíz cúbica del volumen de la celda unitaria para obtener la longitud de la arista ( $a$ ) de la celda

$$\begin{aligned} a &= \sqrt[3]{V} \\ &= \sqrt[3]{6.79 \times 10^{-23} \text{ cm}^3} \\ &= 4.08 \times 10^{-8} \text{ cm} \end{aligned}$$

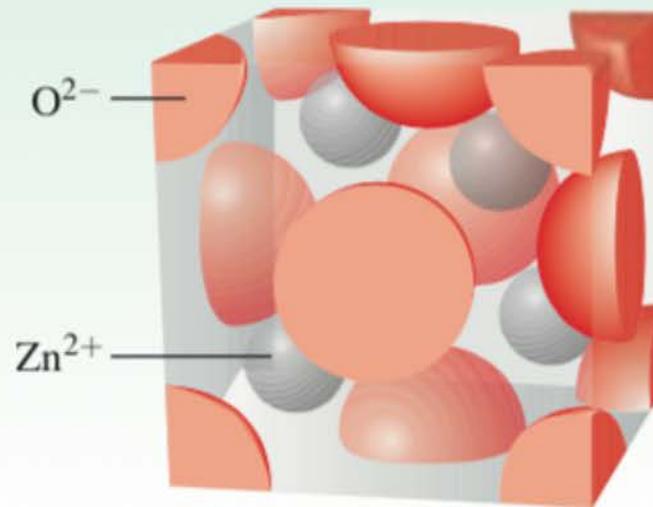
En la figura 11.22 podemos ver que el radio ( $r$ ) de una esfera de Au está relacionado con la longitud de la arista mediante la expresión

$$a = \sqrt{8}r$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} r &= \frac{a}{\sqrt{8}} = \frac{4.08 \times 10^{-8} \text{ cm}}{\sqrt{8}} \\ &= 1.44 \times 10^{-8} \text{ cm} \\ &= 1.44 \times 10^{-8} \text{ cm} \times \frac{1 \times 10^{-2} \text{ m}}{1 \text{ cm}} \times \frac{1 \text{ pm}}{1 \times 10^{-12} \text{ m}} \\ &= 144 \text{ pm} \end{aligned}$$

Lo que se muestra es la celda unitaria de óxido de zinc. ¿Cuál es la fórmula del compuesto?



La longitud de la arista de la celda unitaria de NaCl es de 564 pm. ¿Cuál es la densidad del NaCl en  $\text{g/cm}^3$ ?

Na - 22.9 g/mol

Cl - 35.4 g/mol

**Estrategia** Para calcular la densidad, necesitamos saber la masa de la celda unitaria. El volumen se puede calcular a partir de la longitud conocida de la arista debido a que  $V = a^3$ . ¿Cuántos iones  $\text{Na}^+$  y  $\text{Cl}^-$  hay en una celda unitaria? ¿Cuál es la masa total en uma? ¿Cuáles son los factores de conversión entre uma y g, y entre pm y cm?

**Solución** A partir del ejemplo 11.5 sabemos que cada celda unitaria tiene cuatro iones  $\text{Na}^+$  y cuatro iones  $\text{Cl}^-$ . La masa total (en uma) de una celda unitaria es, por tanto

$$\text{masa} = 4(22.99 \text{ uma} + 35.45 \text{ uma}) = 233.8 \text{ uma}$$

Convirtiendo uma en gramos, tenemos la siguiente ecuación

$$233.8 \text{ uma} \times \frac{1 \text{ g}}{6.022 \times 10^{23} \text{ uma}} = 3.882 \times 10^{-22} \text{ g}$$

El volumen de la celda unitaria es  $V = a^3 = (564 \text{ pm})^3$ . Si  $\text{pm}^3$  se convierte a  $\text{cm}^3$ , el volumen estará dado por

$$V = (564 \text{ pm})^3 \times \left( \frac{1 \times 10^{-12} \text{ m}}{1 \text{ pm}} \right)^3 \times \left( \frac{1 \text{ cm}}{1 \times 10^{-2} \text{ m}} \right)^3 = 1.794 \times 10^{-22} \text{ cm}^3$$

Por último, a partir de la definición de densidad

$$\begin{aligned} \text{densidad} &= \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} = \frac{3.882 \times 10^{-22} \text{ g}}{1.794 \times 10^{-22} \text{ cm}^3} \\ &= 2.16 \text{ g/cm}^3 \end{aligned}$$

Un haz de rayos X de longitud de onda de 0.154 nm incide en un cristal de aluminio; los rayos se reflejan con un ángulo de  $19.3^\circ$ . Suponiendo que  $n = 1$ , calcule la distancia que hay entre los planos de los átomos de aluminio (en pm), que es la responsable de este ángulo de reflexión. El factor de conversión es  $1 \text{ nm} = 1\,000 \text{ pm}$ .

**Estrategia** Este problema es una aplicación de la ecuación (11.1).

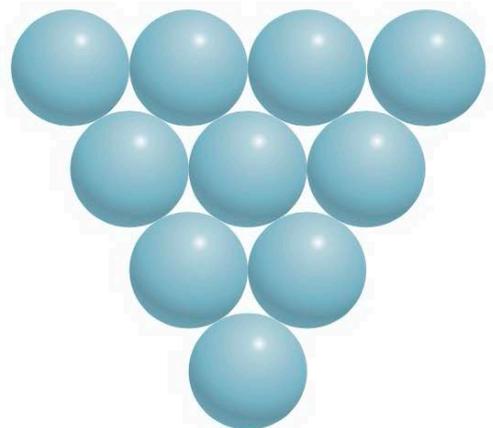
**Solución** Transformando la longitud de onda en picómetros y sustituyendo el ángulo de reflexión ( $19.3^\circ$ ), podemos escribir:

$$\begin{aligned}d &= \frac{n\lambda}{2 \operatorname{sen} \theta} = \frac{\lambda}{2 \operatorname{sen} \theta} \\&= \frac{0.154 \text{ nm} \times \frac{1000 \text{ pm}}{1 \text{ nm}}}{2 \operatorname{sen} 19.3^\circ} \\&= 233 \text{ pm}\end{aligned}$$

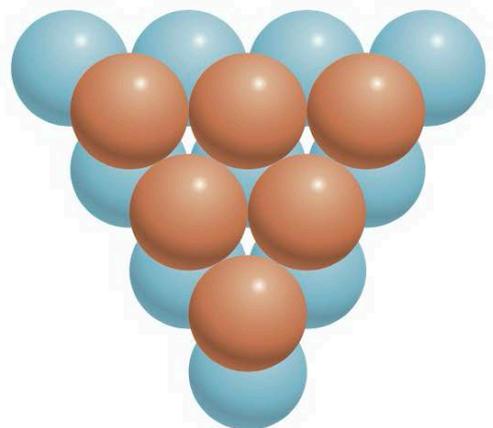
# Empaquetamiento compacto

En las celdas cúbicas simple y centrada en el cuerpo hay más espacio vacío que en la celda cúbica centrada en las caras.

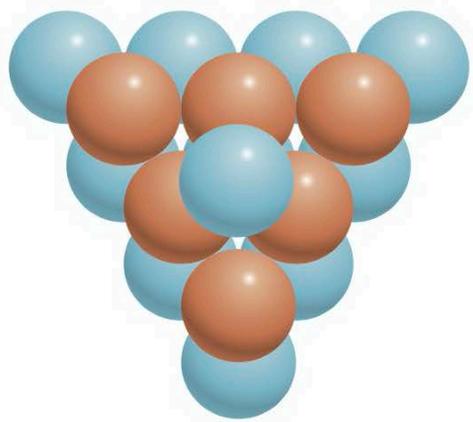
El arreglo más eficiente de las esferas, denominado **empaquetamiento compacto**, se inicia con la primera estructura, que se llamará capa A. Examinando la única esfera encerrada, se ve claramente que la rodean seis vecinas próximas en la capa. En la segunda capa (que se llamará B) las esferas se empaquetan en los huecos que quedan entre las esferas de la primera capa, de manera que todas las esferas están lo más juntas posible



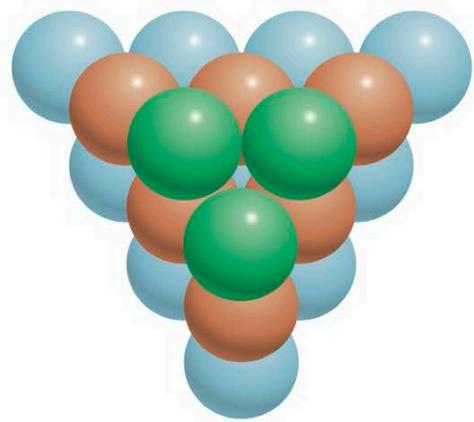
a)



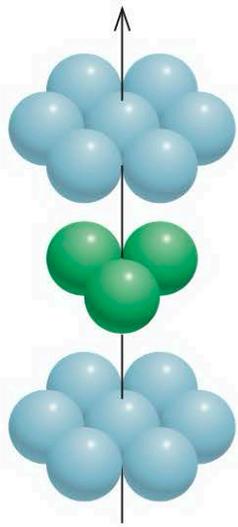
b)



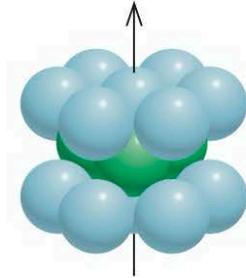
c) ABA  
Hexagonal compacto



d) ABC  
Cúbico compacto

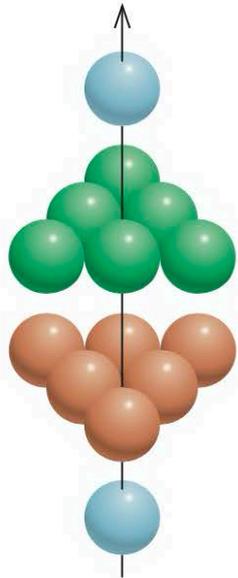


Vista separada

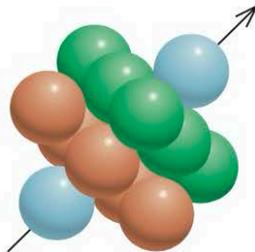


Estructura de empaquetamiento hexagonal compacto

a)



Vista separada



Estructura de empaquetamiento cúbico compacto

b)

la estabilidad relativa de una estructura cristalina está determinada por las fuerzas intermoleculares.



Galena



Quartz



Pyrite



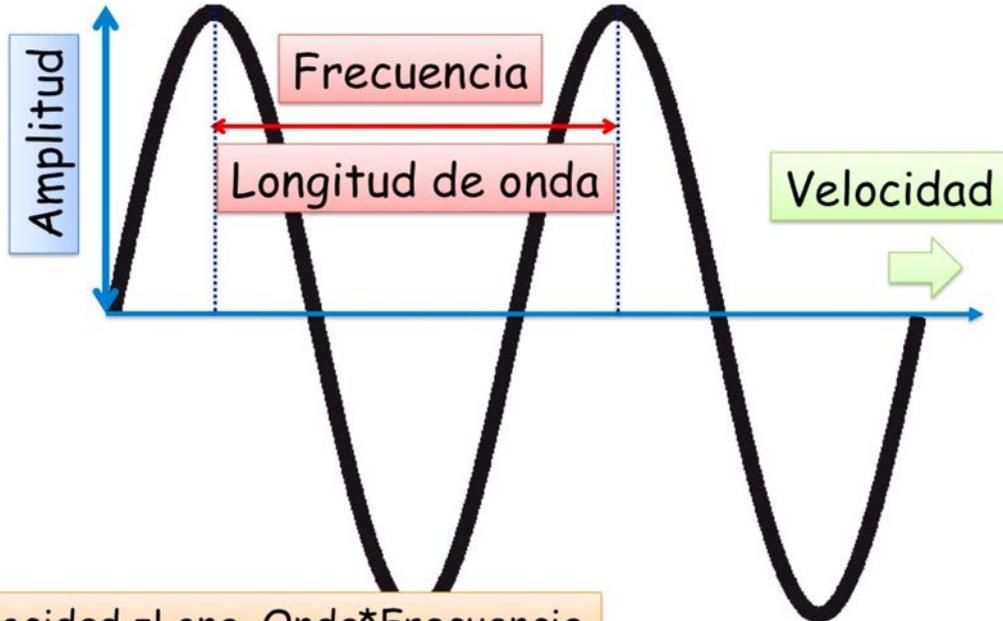
# Difracción de rayos X de estructuras cristalinas

La **difracción de rayos X** se refiere a la dispersión de los rayos X debida a las unidades de un sólido cristalino.

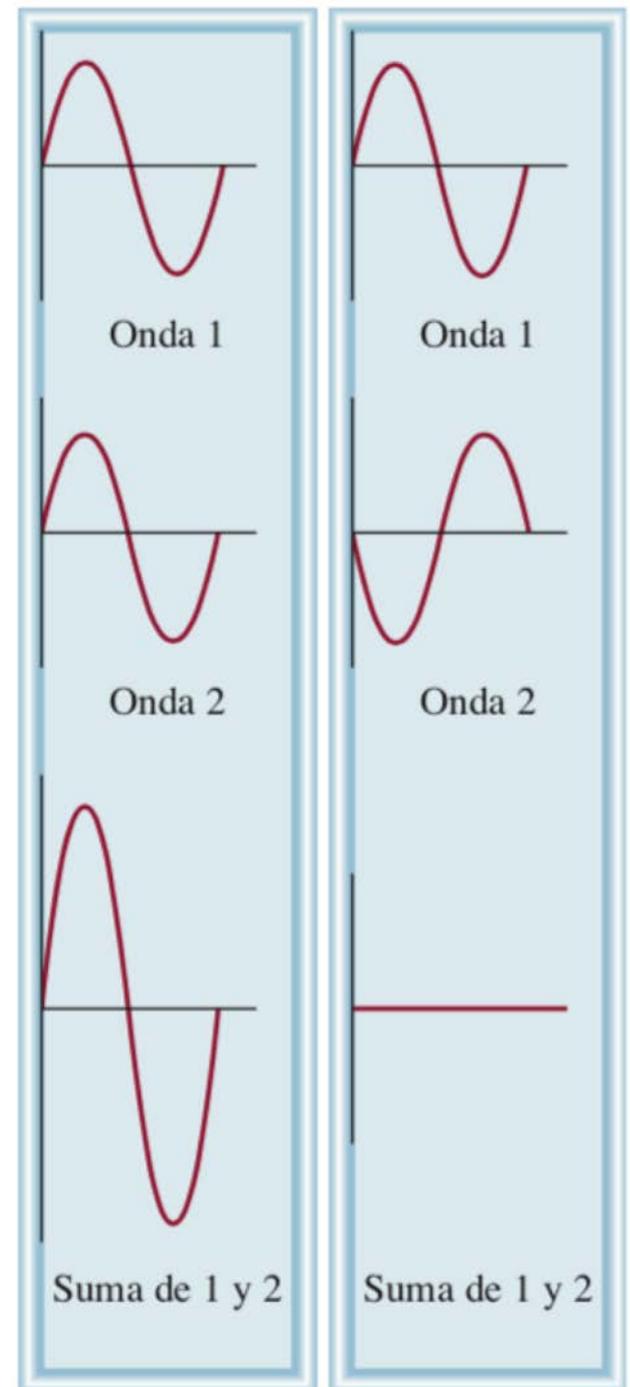
Gracias a los **patrones de dispersión (o difracción)** es posible deducir el ordenamiento de las partículas en la red sólida.

Una propiedad exclusiva de las ondas es que ondas del mismo tipo interactúan de tal manera que la onda resultante puede tener una amplitud mayor o menor. En el primer caso, la interacción recibe el nombre de *interferencia constructiva*; en el segundo, se trata de una *interferencia destructiva*

Una onda es una perturbación que se propaga desde el punto en el que se origina hacia el ambiente que la rodea. Tal perturbación transporta energía sin un transporte neto de materia.

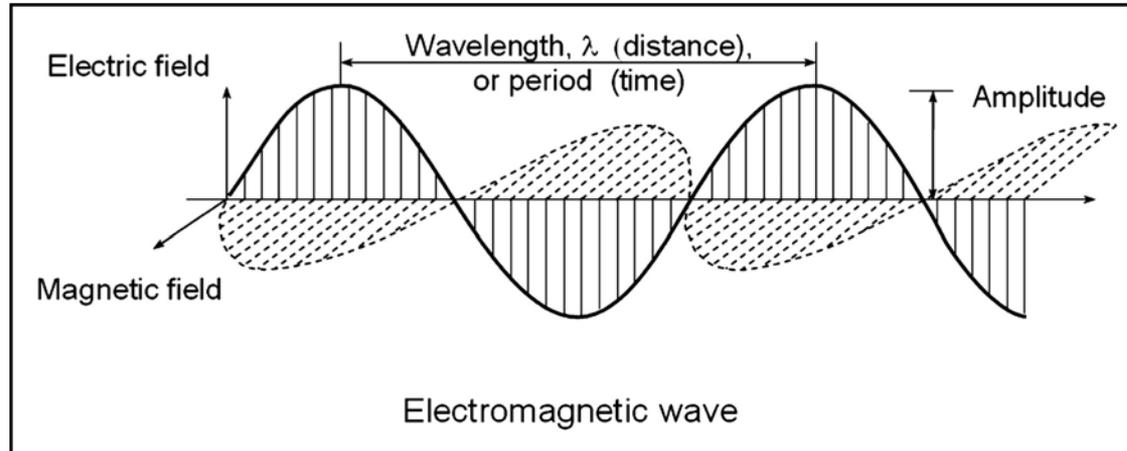


$$\text{Velocidad} = \text{Long. Onda} \times \text{Frecuencia}$$

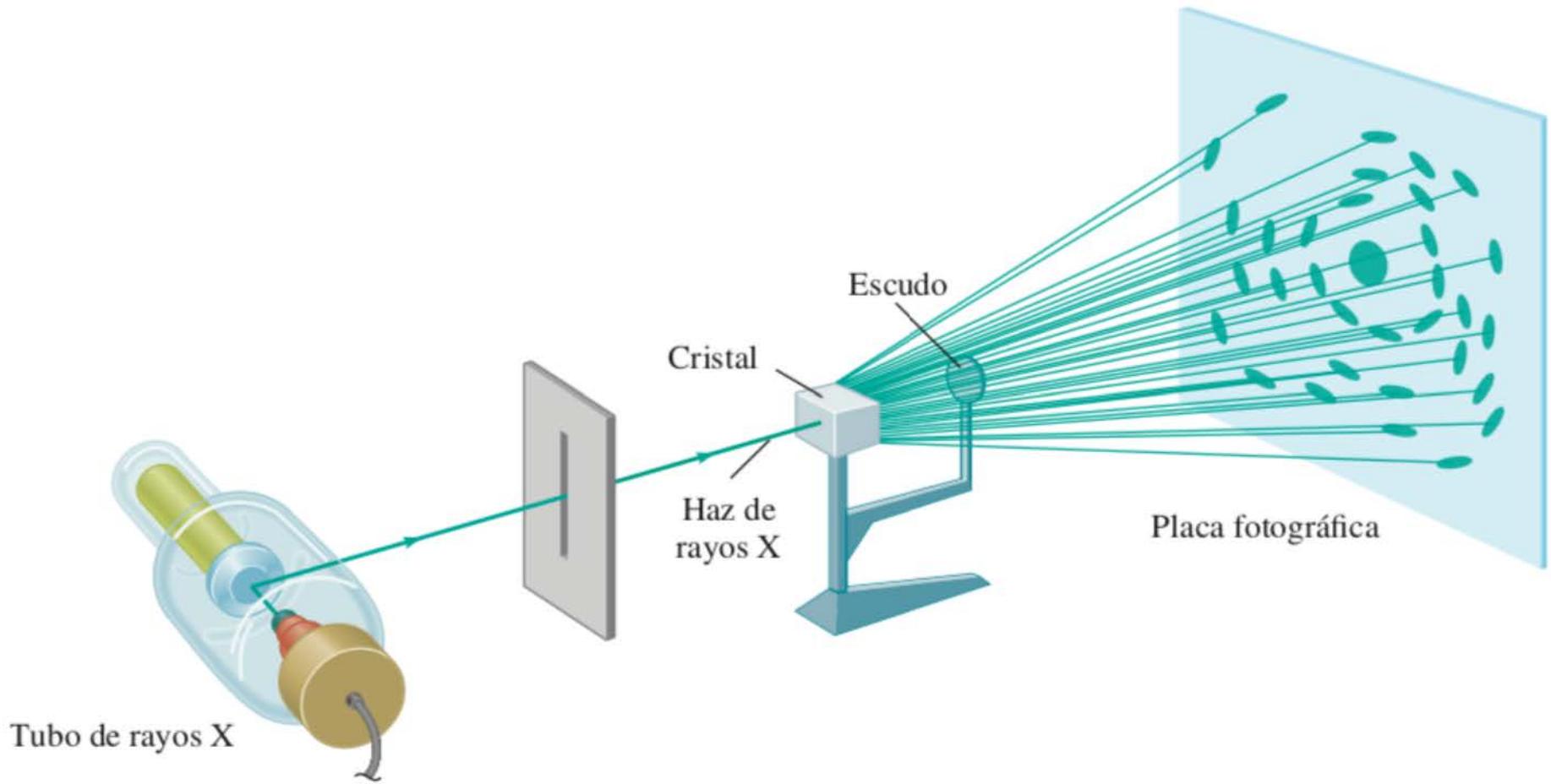


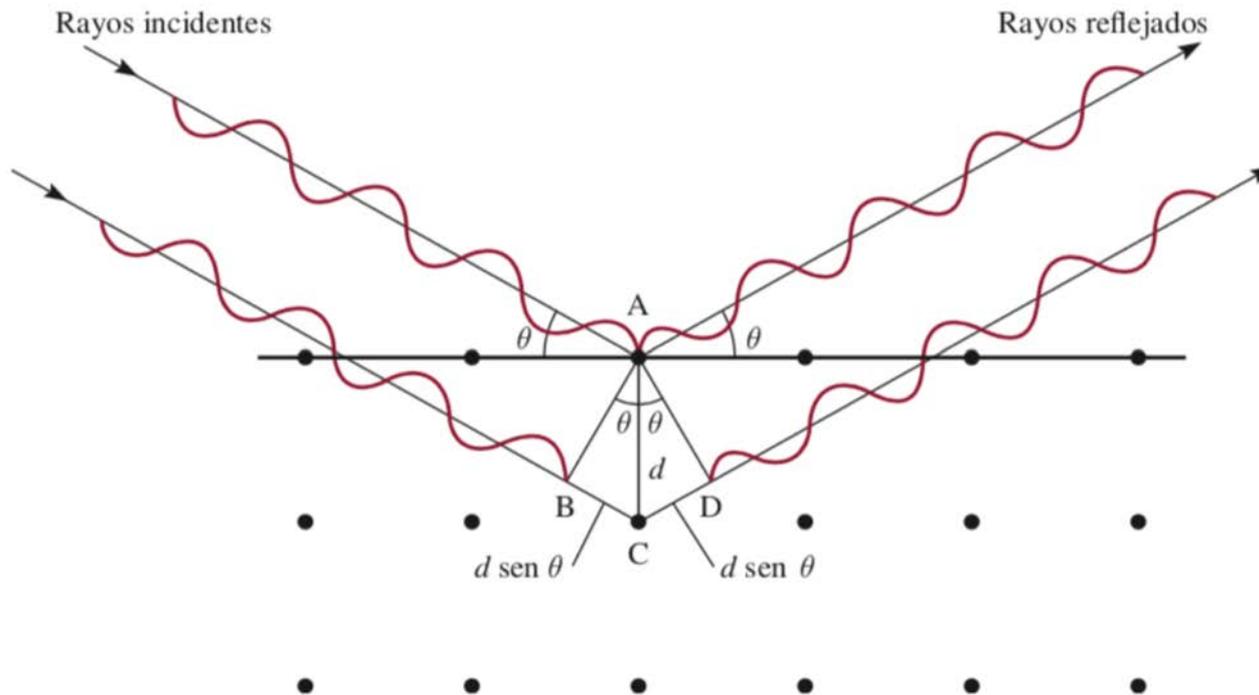
# Difracción de rayos X de estructuras cristalinas

Dado que los rayos X son una forma de radiación electromagnética, y por tanto de ondas, cabe esperar que manifiesten un comportamiento ondulatorio en condiciones adecuadas.



En 1912, el físico alemán Max von Laue sugirió correctamente que **debido a que la longitud de onda de los rayos X es comparable con la magnitud de las distancias que hay entre los puntos reticulares en un cristal, la red sería capaz de *difractar* los rayos X.** *Un patrón de difracción de rayos X es consecuencia de las interferencias en las ondas asociadas a los rayos X.*



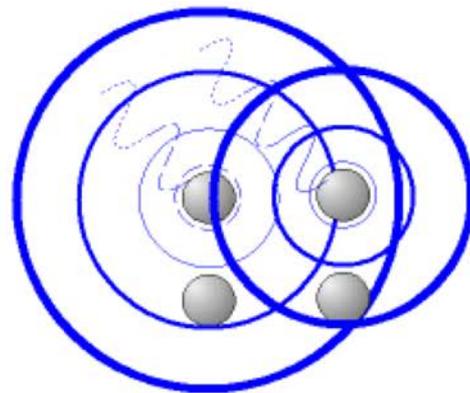
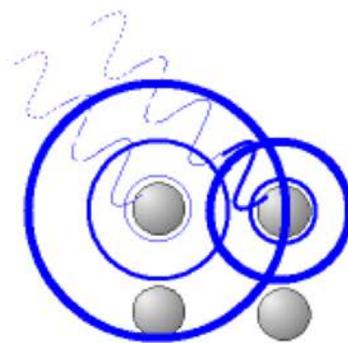
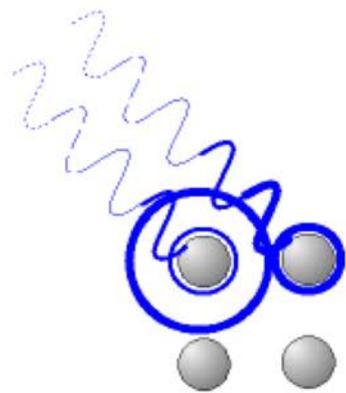
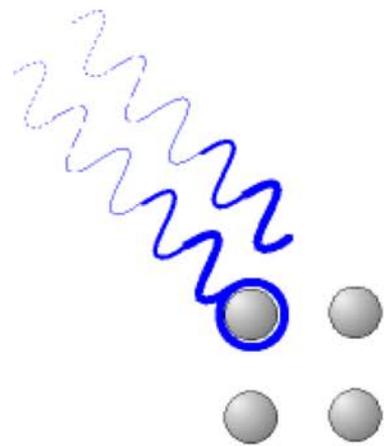


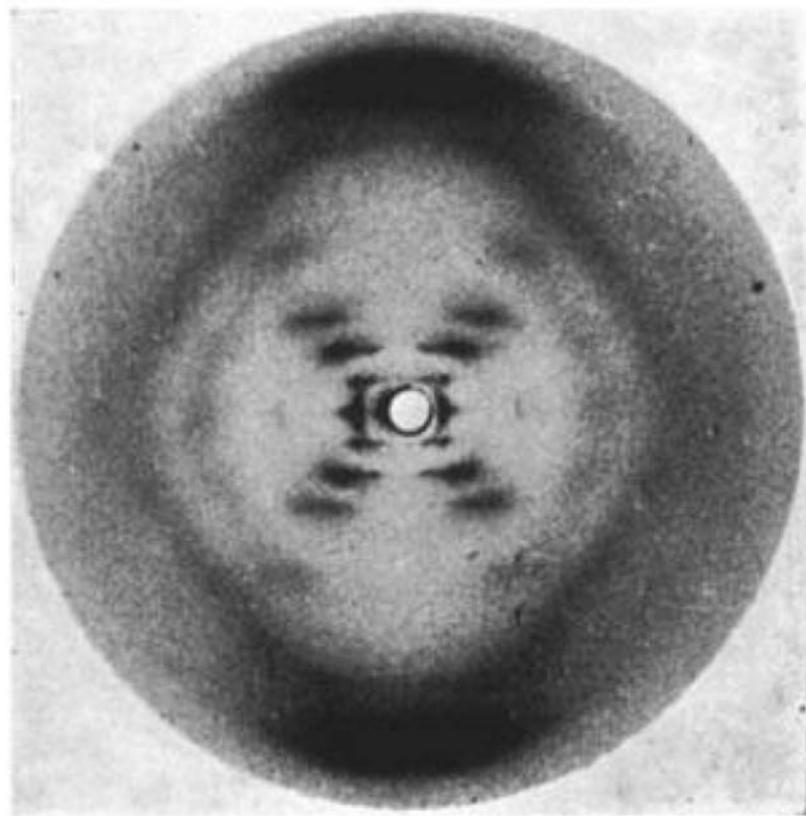
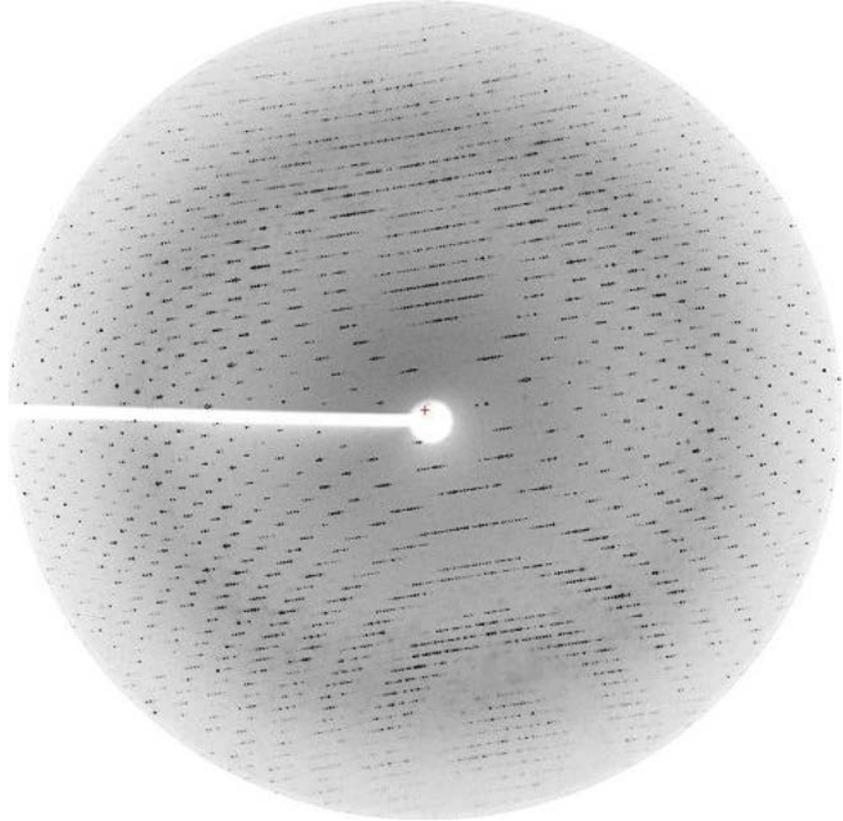
Al principio, los dos rayos incidentes están *en fase*, uno respecto del otro (sus máximos y mínimos coinciden en las mismas posiciones). La onda superior es dispersada, o reflejada, por un átomo del primer plano, en tanto que la onda inferior es dispersada por un átomo del segundo plano. **Para que estas dos ondas dispersadas entren en fase de nuevo, la distancia adicional que recorre la onda inferior debe ser un múltiplo entero de la longitud de onda ( $\lambda$ ) de los rayos X; es decir**

$$BC + CD = 2d \sen \theta = n\lambda \quad n = 1, 2, 3\dots$$

$$2d \sen \theta = n\lambda$$

Las ondas reforzadas producen una mancha oscura en una película fotográfica para cada valor de  $\theta$  que satisfaga la ecuación de Bragg.





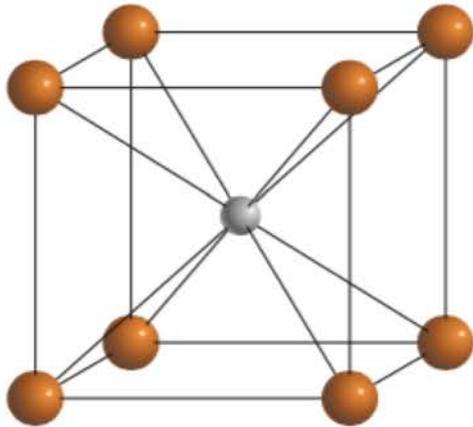
# Tipos de cristales

Las estructuras y propiedades de los cristales, como punto de fusión, densidad y dureza, están determinadas por el tipo de fuerzas que mantienen unidas a las partículas. Cualquier cristal se puede clasificar en uno de cuatro tipos: iónico, covalente, molecular o metálico.

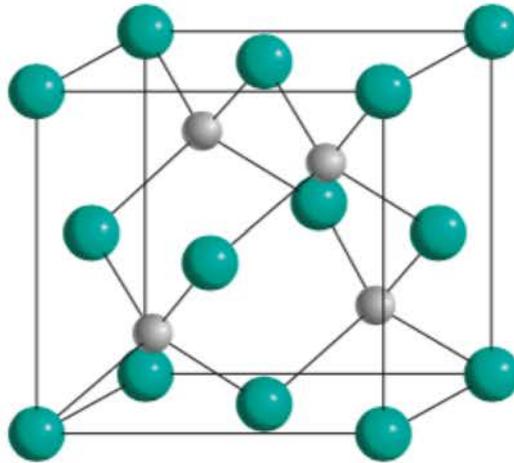
## Cristales iónicos

Los cristales iónicos tienen dos características importantes:

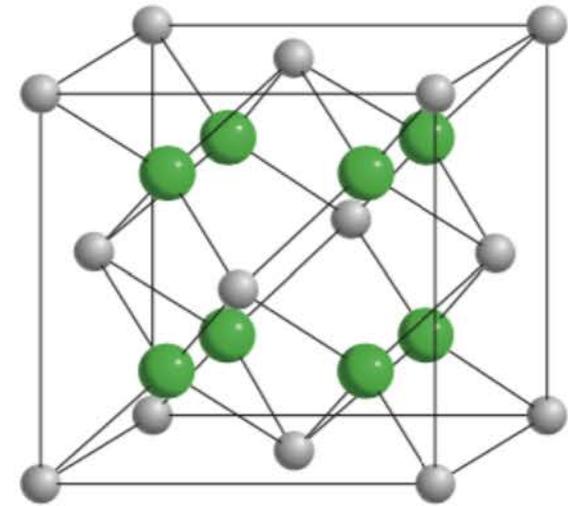
- (1) están formados de especies cargadas
- (2) los aniones y los cationes suelen ser de distinto tamaño.



CsCl



ZnS

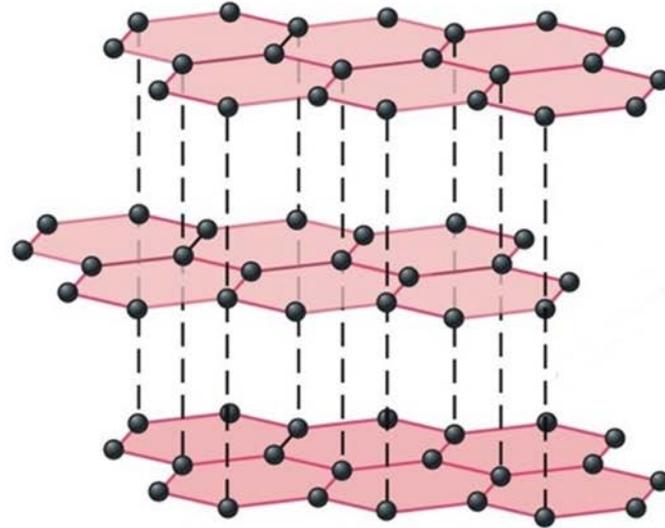
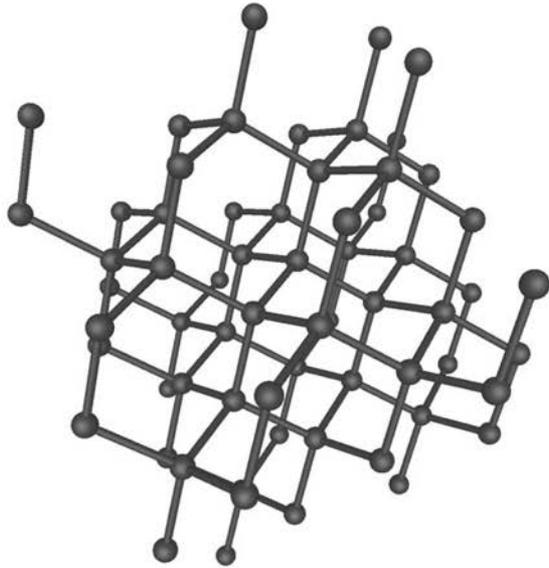


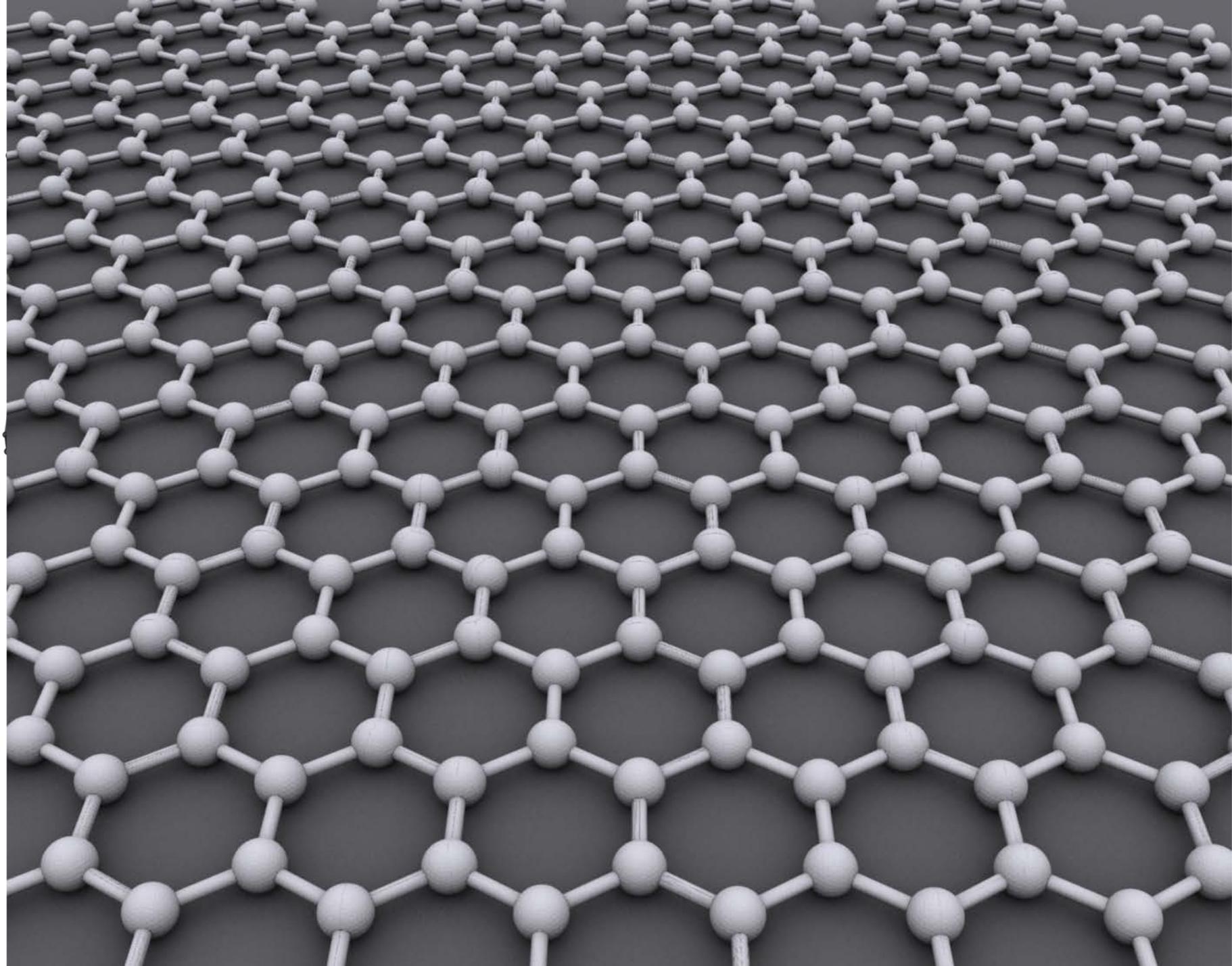
CaF<sub>2</sub>

La mayor parte de los cristales iónicos tienen puntos de ebullición elevados, lo cual refleja la gran fuerza de cohesión que mantiene juntos a los iones.

## Cristales Covalentes

Los átomos de los cristales covalentes se mantienen unidos en una red tridimensional únicamente por enlaces covalentes.







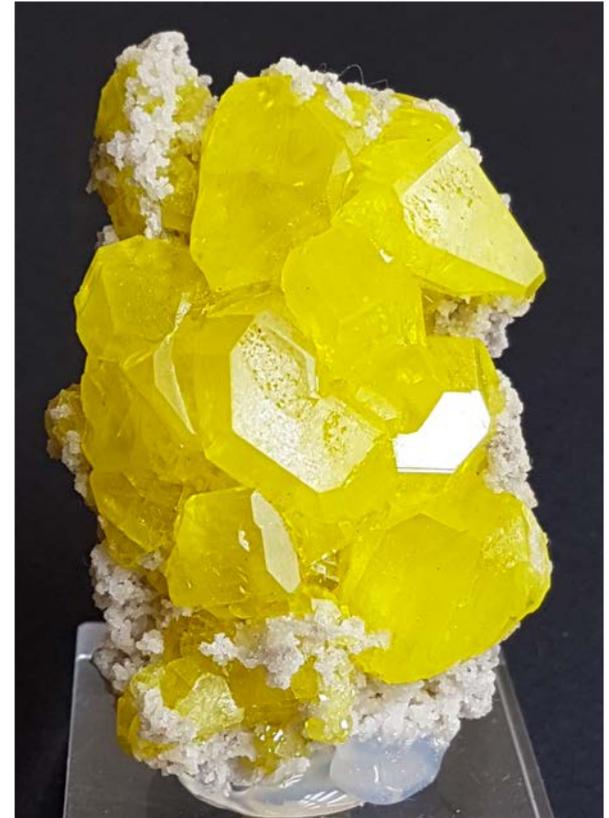
## Cristales Moleculares

En un cristal molecular, los puntos reticulares están ocupados por moléculas que se mantienen unidas por fuerzas de van der Waals y de puentes de hidrógeno.

El dióxido de azufre ( $\text{SO}_2$ ) sólido es un ejemplo de un cristal molecular, en el que la fuerza de atracción predominante es una interacción dipolo-dipolo.

Los puentes de hidrógeno intermoleculares son los que mantienen la red tridimensional del hielo.

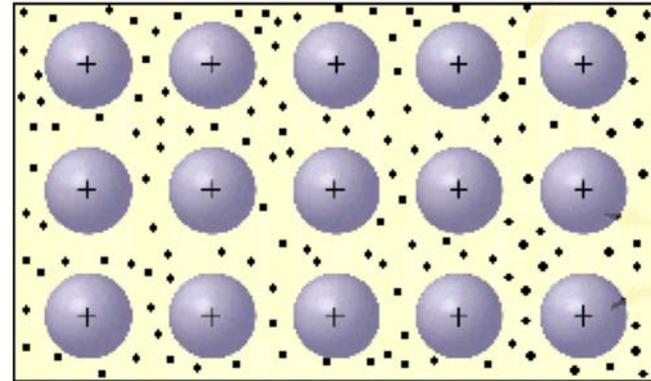
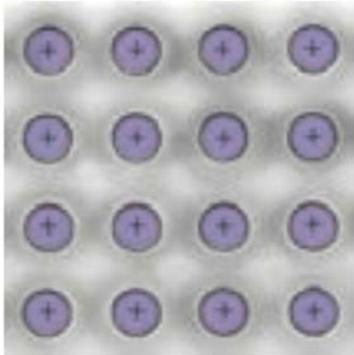
Los cristales de  $\text{I}_2$ ,  $\text{P}_4$  y  $\text{S}_8$  son otros ejemplos de cristales moleculares.

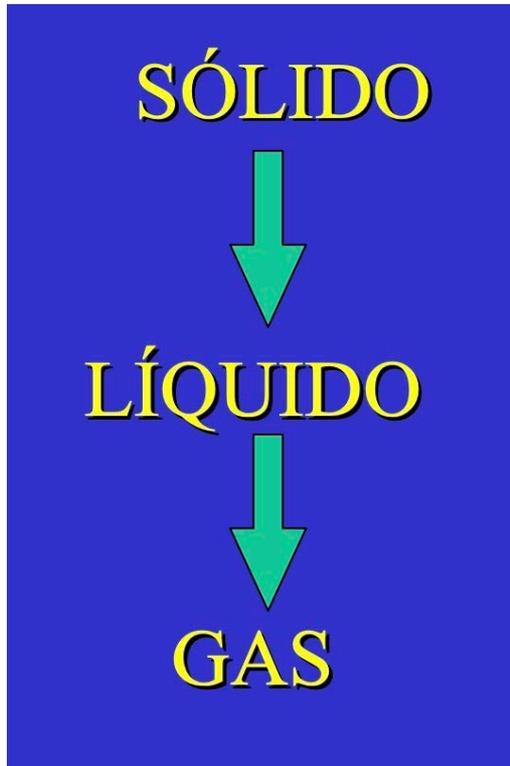


## Cristales Metálicos

la estructura de los cristales metálicos es, en cierto modo, la más simple porque cada punto reticular del cristal está ocupado por un átomo del mismo metal.

Los cristales metálicos por lo regular tienen una estructura cúbica centrada en el cuerpo o centrada en las caras; también pueden ser hexagonales de empaquetamiento compacto. Por consiguiente, los elementos metálicos suelen ser muy densos.



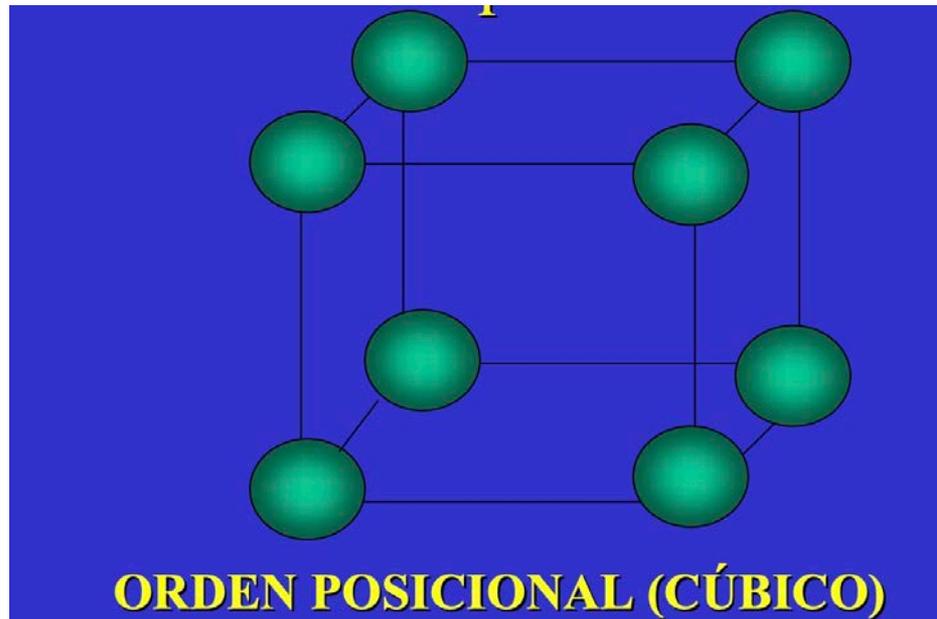


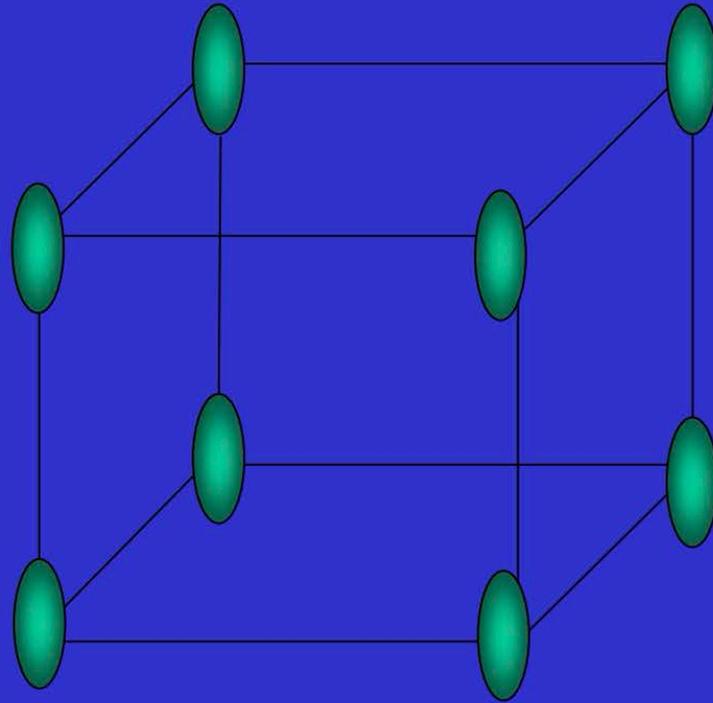
La palabra “meso” en griego significa “entre”. En la actualidad se conocen dos fases estables intermedias entre las fases sólida y líquida:

- **CRISTAL PLÁSTICO:** Forma y volumen constantes, como en un sólido.
- **CRISTAL LÍQUIDO:** Forma y volumen de la vasija que lo contiene, como en un líquido.

La condición necesaria, pero no suficiente, para que una sustancia química pueda formar una mesofase, es que sus moléculas posean un factor geométrico que las haga orientables en el espacio

Una sustancia mesógena (es decir, que puede generar fase de Cristal Líquido o Cristal Plástico) ha de poseer, en estado sólido, dos órdenes: “posicional” y “orientacional”.

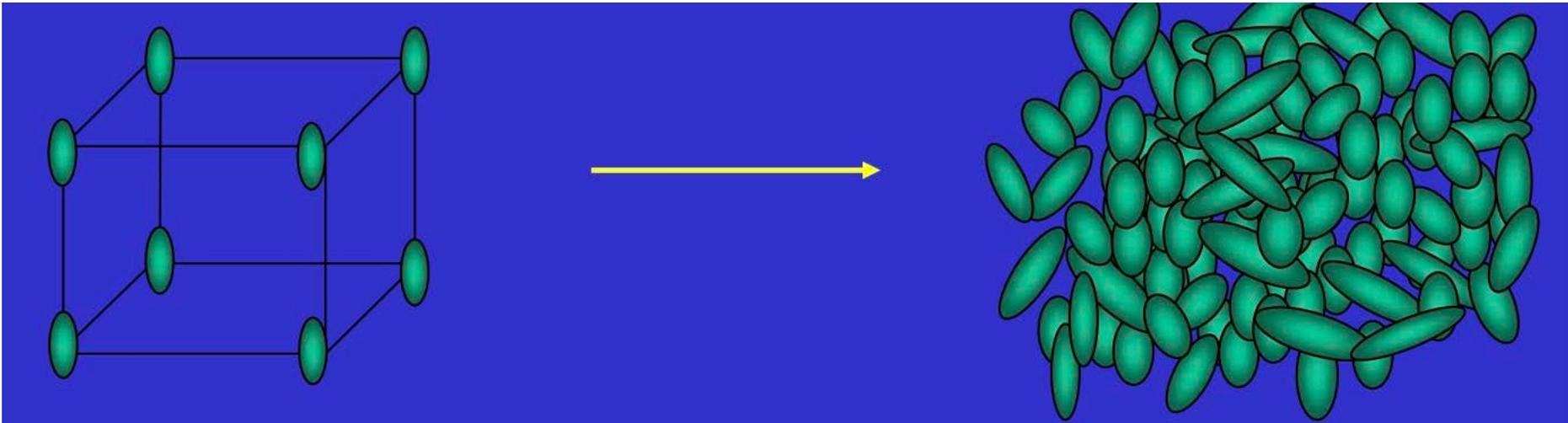




**CRISTAL CON ORDEN POSICIONAL Y ORIENTACIONAL**

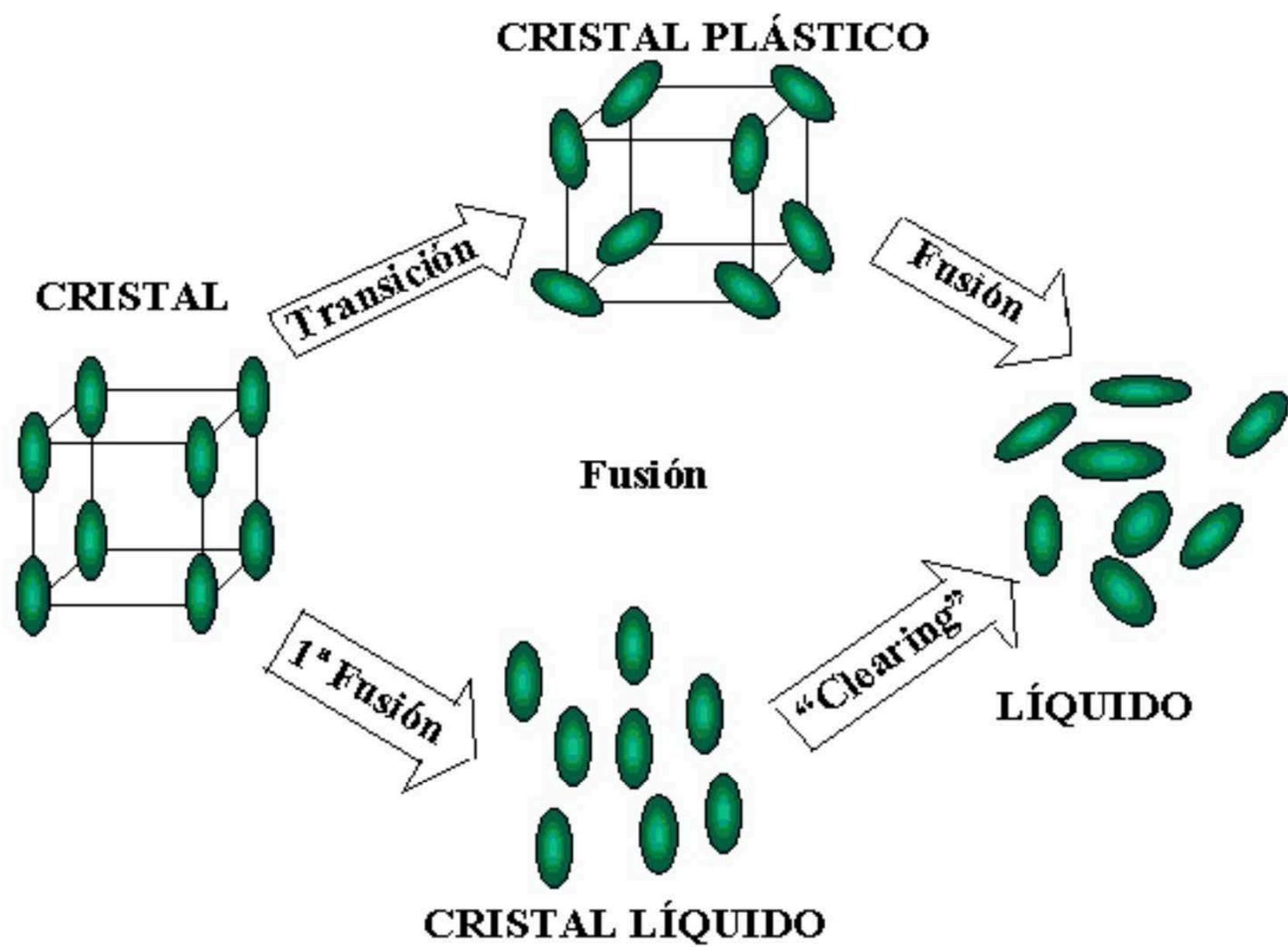
Al calentar una sustancia de estas características (dos órdenes) pueden ocurrir tres procesos diferentes al llegar a una cierta temperatura:

**1.- pierde simultáneamente tanto el orden orientacional como el posicional, pasando a un Líquido Ordinario (isotrópico), a la temperatura de fusión**



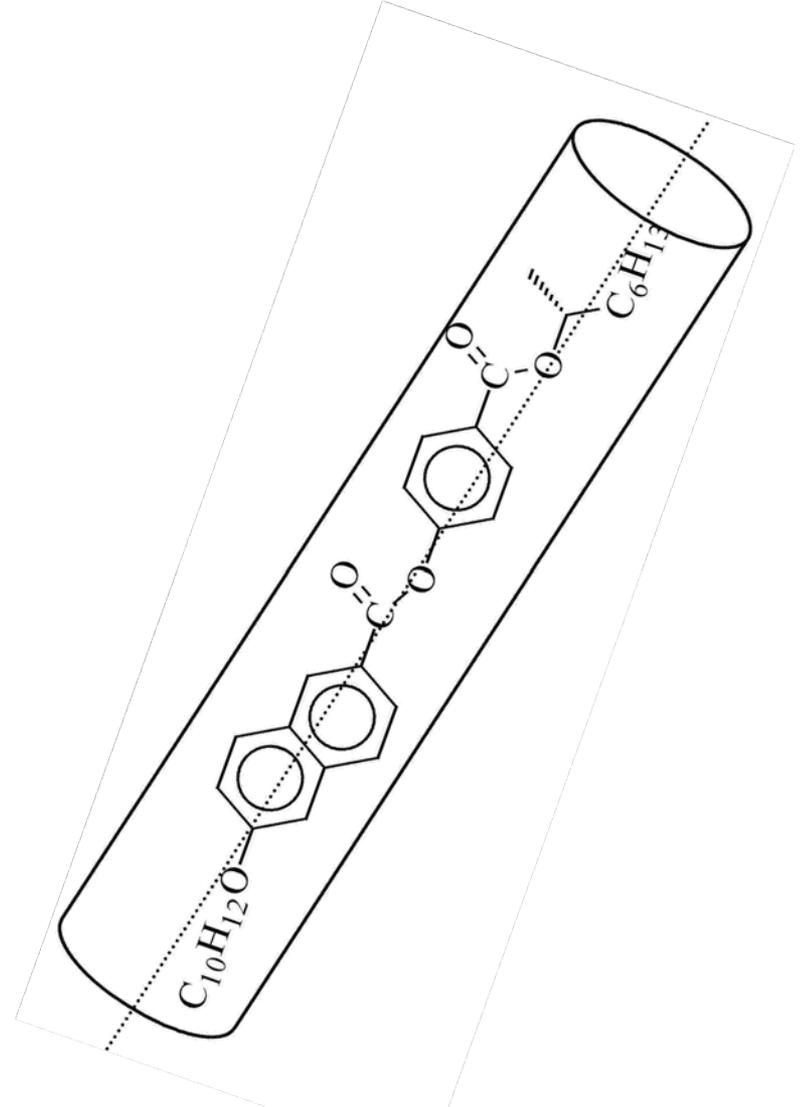
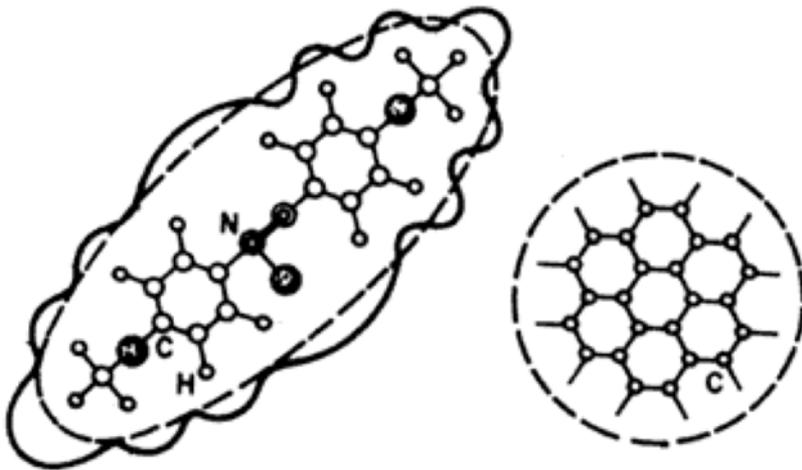
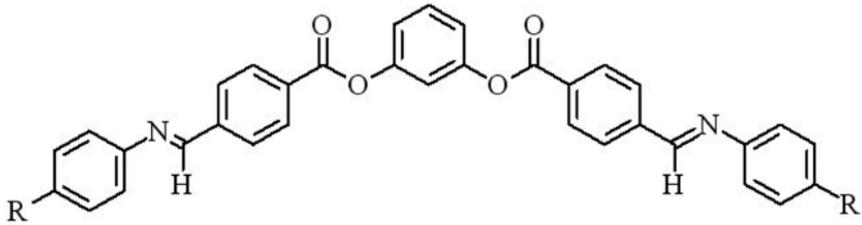
**2.- pierde totalmente el orden orientacional, conservando todo el posicional, pasando a una mesofase llamada *Cristal Plástico* (transición sólido-sólido), y, posteriormente, a líquido isotrópico (temperatura de fusión) .**

**3.- pierde total o parcialmente el orden posicional, pero conservando totalmente el orientacional (temperatura de fusión) y se obtiene una mesofase de Cristal Líquido, pasando posteriormente a líquido isotrópico (temperatura de isotropización o “clearing)**



“Cristal”, porque posee orden “orientacional orientacional”, y puede conservar orden “posicional” (en una o dos dimensiones)

“Líquido”, porque es fluido (generalmente muy viscoso), y se adapta a la forma de la vasija que lo contiene



<b>Tipo de cristal</b>	<b>Fuerza(s) que mantiene unidas a las unidades</b>	<b>Propiedades generales</b>	<b>Ejemplos</b>
Iónico	Atracción electrostática	Duro, quebradizo, punto de fusión alto, mal conductor del calor y la electricidad	NaCl, LiF, MgO, CaCO <sub>3</sub>
Covalente	Enlace covalente	Duro, punto de fusión alto, mal conductor del calor y la electricidad	C (diamante), <sup>†</sup> SiO <sub>2</sub> (cuarzo)
Molecular*	Fuerzas de dispersión, fuerzas dipolo-dipolo, puentes de hidrógeno	Suave, punto de fusión bajo, mal conductor de la electricidad	Ar, CO <sub>2</sub> , I <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, C <sub>12</sub> H <sub>22</sub> O <sub>11</sub> (sacarosa)
Metálico	Enlace metálico	Suave a duro, punto de fusión bajo a alto, buen conductor del calor y la electricidad	Todos los elementos metálicos; por ejemplo, Na, Mg, Fe, Cu

## Propiedades elásticas de los sólidos

Todos los objetos son deformables en cierta medida

Según se presentan estos cambios las fuerzas internas del sólido resisten la deformación.

La deformación de los sólidos se explica con los conceptos de **esfuerzo** y **deformación**.

**Esfuerzo:** fuerza externa que actúa en un objeto por unidad de área de sección transversal.

**Deformación:** medida del grado de modificación del sólido

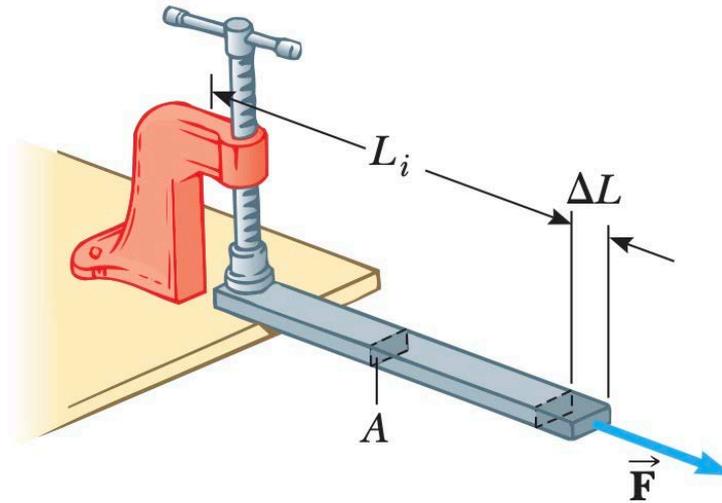
La constante de proporcionalidad entre el esfuerzo y la deformación se llama **módulo elástico**.

$$\text{Módulo elástico} \equiv \frac{\text{esfuerzo}}{\text{deformación}}$$

Se consideran tres tipos de deformación y se define un módulo elástico para cada uno:

1. El **módulo de Young** mide la resistencia de un sólido a un cambio en su longitud.
2. El **módulo de corte** mide la resistencia al movimiento de los planos dentro de un sólido paralelos unos con otros. *→ módulo de corte*
3. El **módulo volumétrico** mide la resistencia de los sólidos o líquidos a cambios en su volumen.

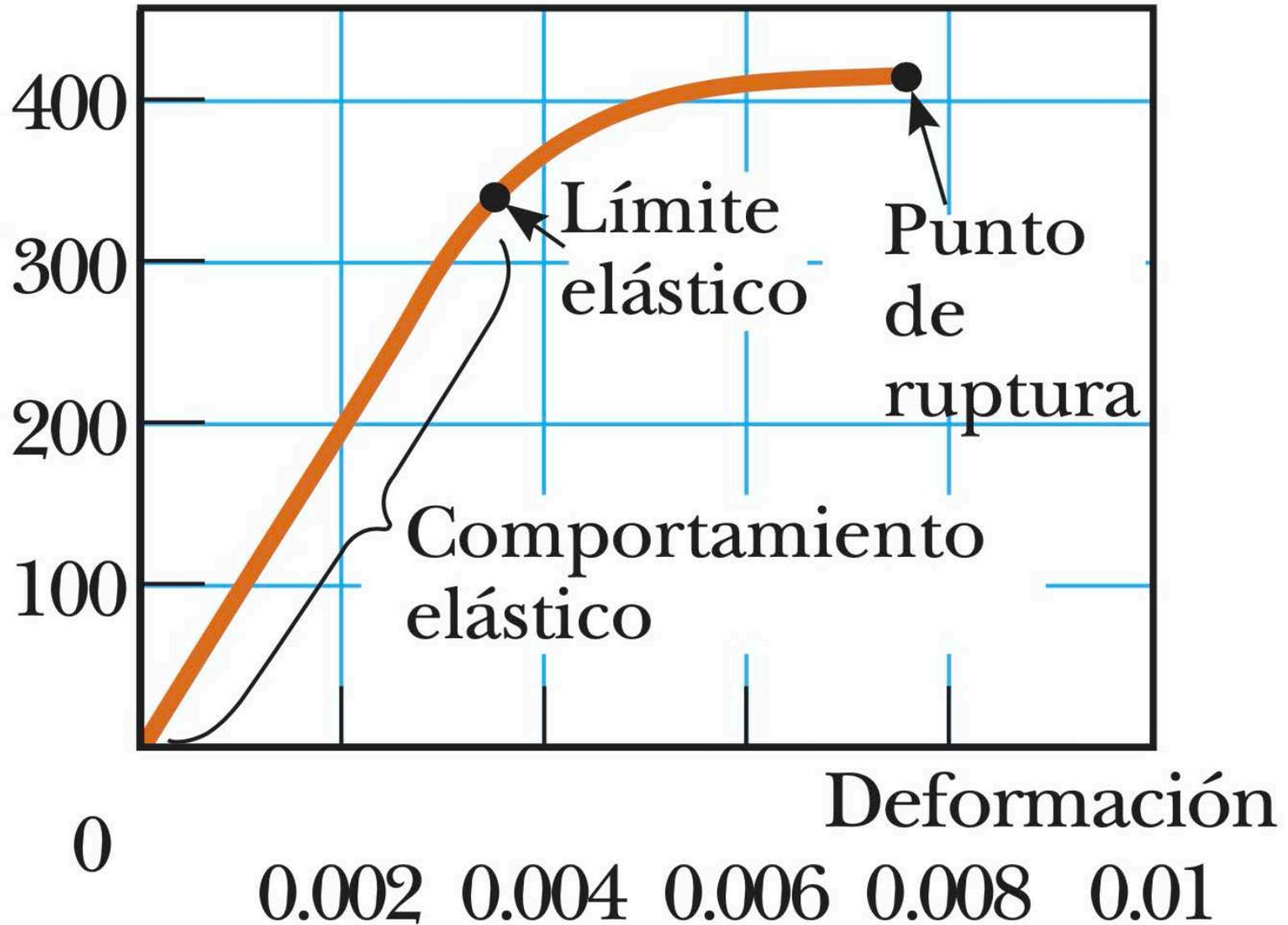
# Módulo de Young: elasticidad en longitud



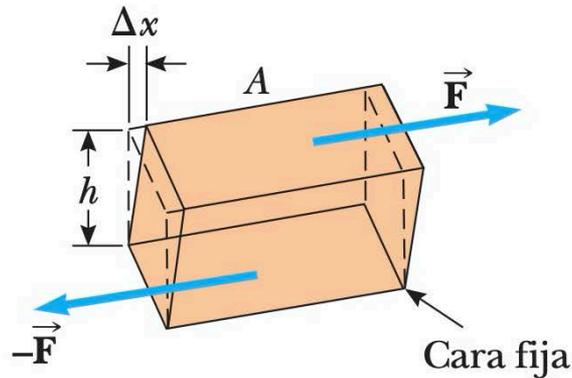
En tal situación, se dice que la barra está sobrecargada. El **esfuerzo de tracción** (o tensión de tracción) se define como la relación de la magnitud de la fuerza externa  $F$  al área de sección transversal  $A$ . La **deformación por tensión** (o deformación por tracción) en este caso se define como la relación del cambio en longitud  $\Delta L$  a la longitud original  $L_i$ . El **módulo de Young** se define mediante una combinación de estas dos relaciones:

$$Y \equiv \frac{\text{esfuerzo de tracción}}{\text{deformación por tensión}} = \frac{F/A}{\Delta L/L_i}$$

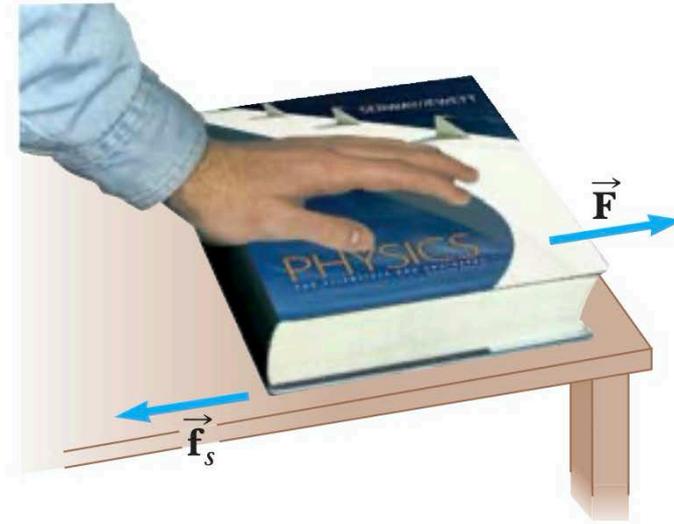
Esfuerzo  
(MPa)



# Módulo de corte: elasticidad de forma



a)



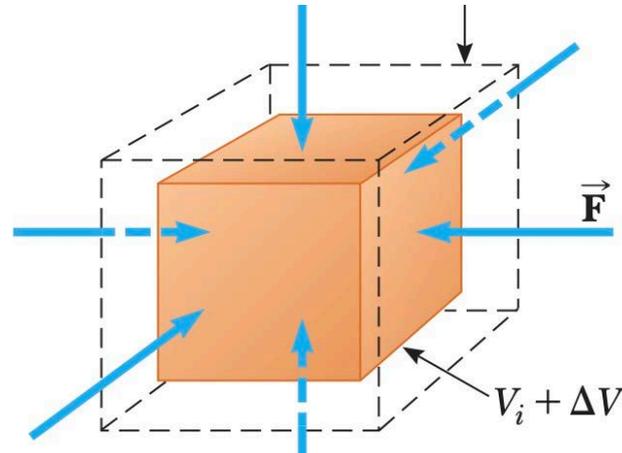
b)

El **esfuerzo de corte** se define como  $F/A$ , la relación de la fuerza tangencial al área  $A$  de la cara a cortar. La **deformación de corte** se define como la relación  $\Delta x/h$ , donde  $\Delta x$  es la distancia horizontal que se mueve la cara cortada y  $h$  es la altura del objeto. En términos de estas cantidades, el **módulo de corte** es

$$\hookrightarrow S \equiv \frac{\text{esfuerzo de corte}}{\text{deformación de corte}} = \frac{F/A}{\Delta x/h}$$

# Módulo volumétrico: elasticidad del volumen

El módulo volumétrico caracteriza la respuesta de un objeto a cambios en una fuerza de magnitud uniforme aplicada perpendicularmente sobre toda la superficie del objeto,



Un objeto sujeto a este tipo de deformación se somete un cambio en volumen pero no un cambio en forma. El **esfuerzo volumétrico** se define como la relación de la magnitud de la fuerza total  $F$  ejercida sobre una superficie al área  $A$  de la superficie. La cantidad  $P = F/A$  se llama **presión**, que se estudiará con más detalle en el capítulo 14. Si la presión sobre un objeto cambia en una cantidad  $\Delta P = \Delta F/A$ , el objeto experimenta un cambio de volumen  $\Delta V$ . La **deformación volumétrica** es igual al cambio en volumen  $\Delta V$  dividido por el volumen inicial  $V_i$ . Por lo tanto, a partir de la ecuación 12.5, una compresión volumétrica se caracteriza en términos del **módulo volumétrico**, que se define como

$$B \equiv \frac{\text{esfuerzo volumétrico}}{\text{deformación volumétrica}} = - \frac{\Delta F/A}{\Delta V/V_i} = - \frac{\Delta P}{\Delta V/V_i}$$