

# Física del Estado Sólido I

## Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Introducción

¿Qué interacción es responsable de la cohesión en los cristales?

- La interacción **magnética** tiene un efecto débil en la cohesión
- La interacción **nuclear fuerte** es responsable de la cohesión de los núcleos atómicos, pero es nula fuera de ellos
- La interacción **nuclear débil** tampoco interviene fuera del núcleo
- La interacción **gravitatoria** es despreciable frente a la electrostática

La responsable es la **interacción electrostática** atractiva entre las cargas negativas de los

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORIAS TECNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVIA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

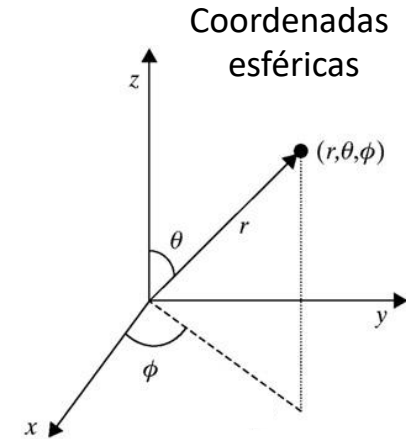
## Niveles electrónicos en el átomo de hidrógeno aislado

Con la ecuación de Schrödinger estacionaria se calculan los niveles de energía,  $E$ , asociados a las distintas funciones de onda (*f.d.o.*),  $\psi$

$$H\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \psi = E\psi$$

Potencial electrostático de Coulomb: (simetría esférica)

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



En este caso las *f.d.o.* dependen de tres números cuánticos:  $n$ ,  $l$  y  $m_l$

$$\psi(x, y, z) = \psi(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) \cdot Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Niveles electrónicos en el átomo de hidrógeno aislado

En física cuántica, el módulo al cuadrado de las f.d.o. proporciona la **probabilidad** de encontrar el electrón en un pequeño volumen alrededor de cada punto del espacio

$$P(\vec{r}) \propto |\psi(\vec{r})|^2$$

Las *f.d.o.* son en general funciones complejas: poseen parte real y parte imaginaria

$$\psi(\vec{r}) = \underbrace{\text{Re}(\psi(\vec{r}))}_{\substack{\text{Parte real} \\ \text{(función real)}}} + i \underbrace{\text{Im}(\psi(\vec{r}))}_{\substack{\text{Parte imaginaria} \\ \text{(función real)}}$$

Se define su complejo conjugado:

$$\psi^*(\vec{r}) = \text{Re}(\psi(\vec{r})) - i \text{Im}(\psi(\vec{r}))$$

El módulo al cuadrado se calcula:

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Niveles electrónicos en el átomo de hidrógeno aislado

A partir de las *f.d.o.*, podemos analizar dos aspectos que nos van a interesar para analizar los enlaces:

La **localización en el espacio** del electrón y la **energía del nivel** para cada *función de onda*

Ambas se obtienen de la ecuación de Schrödinger:

- La energía y la *f.d.o.* se obtienen directamente de la ecuac. estacionaria  $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi = E\psi$
- La localización en el espacio se obtiene a partir de la probabilidad  $P(\vec{r}) \propto |\psi(\vec{r})|^2$

En el átomo de hidrógeno la energía sólo depende de  $n$  el nº cuántico principal

The logo for Cartagena99, featuring the text 'Cartagena99' in a stylized font with a blue and orange gradient background.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

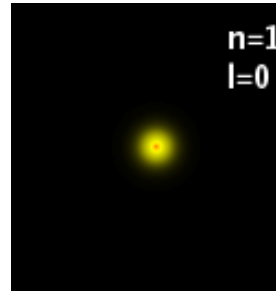
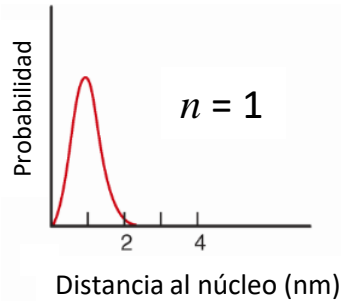
- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

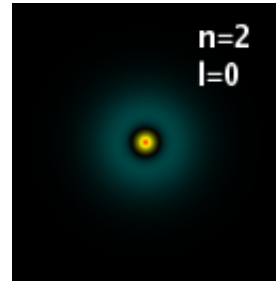
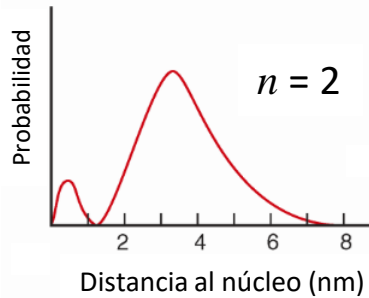
# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Niveles electrónicos en el átomo de hidrógeno al variar $n$ , su número cuántico principal

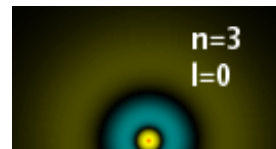
### Localización:



Más cercano al núcleo → más ligado (energía más negativa)



Menos cercano al núcleo → menos ligado que  $n = 1$



Menos cercano al núcleo aún

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

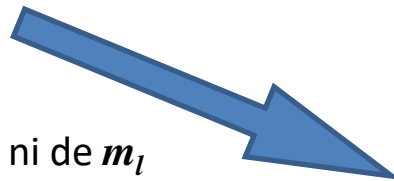
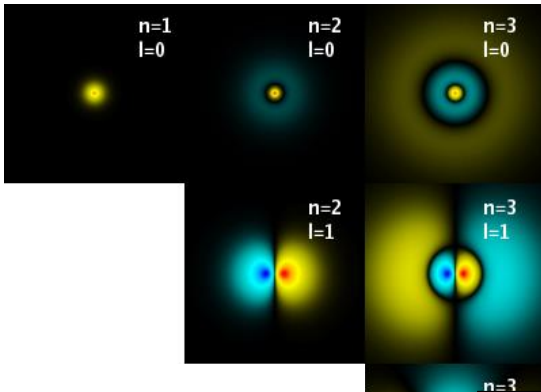
# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Niveles electrónicos en el átomo de hidrógeno aislado

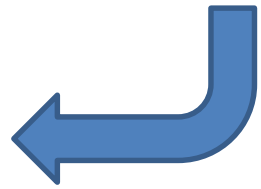
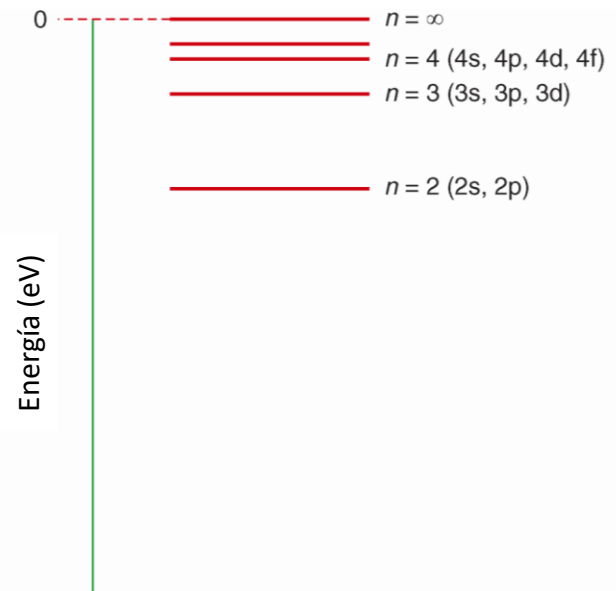
Energía de los niveles  $E_n = \frac{-13.6}{n^2} \text{ eV}$

La energía del nivel electrónico no depende de  $l$  ni de  $m_l$  (hay degeneración de niveles)

La función de onda, por tanto la probabilidad de encontrar al electrón, sí depende de  $n, l, m_l$



Un nivel de energía positiva corresponde a un electrón no ligado, libre



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

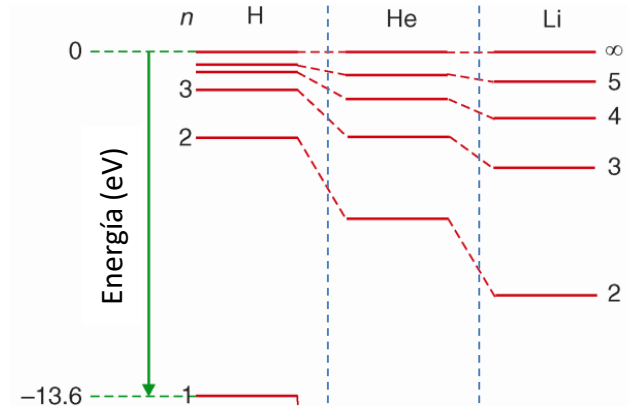
## Niveles electrónicos en otros átomos

Según vamos aumentando el número de protones  $Z$  en el núcleo, la energía de ligadura aumenta muy rápidamente

Si tuviera un único electrón, éste estaría ligado con una energía:

$$E_n = \frac{-Z^2 \cdot 13.6}{n^2} \text{ eV}$$

Que sigue dependiendo únicamente del número cuántico principal  $n$



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70



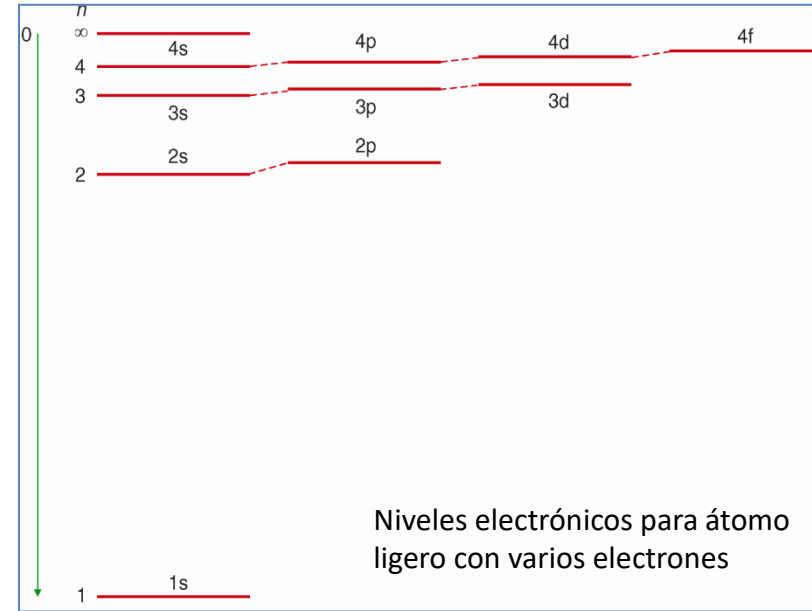
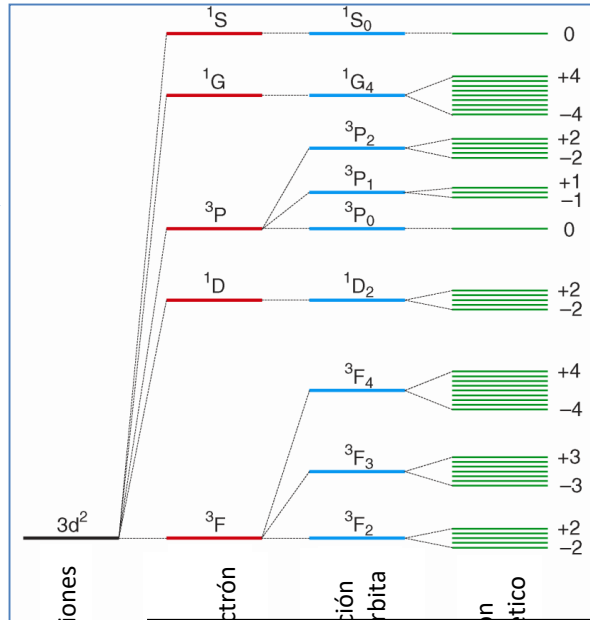
# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Niveles electrónicos en átomos con más electrones

Al incluir más electrones los niveles degenerados se desdoblan

Los cálculos se complican cada vez más, teniendo en cuenta:

- repulsión electrón-electrón
- interacción espín-órbita
- campo magnético



Niveles electrónicos para átomo ligero con varios electrones

!!!Las escalas de energía son muy diferentes!!!

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

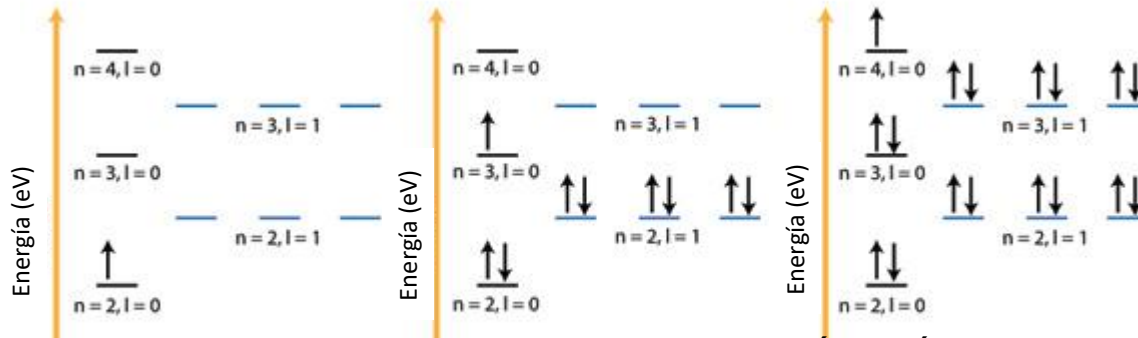
## Ocupación de los niveles electrónicos en los átomos

Los electrones son fermiones (están regidos por la estadística de Fermi-Dirac).

Esto implica que dos electrones no pueden tener los mismos números cuánticos (principio de exclusión de Pauli)

Por tanto, en el estado fundamental, los electrones van ocupando los niveles electrónicos del átomo/ión, empezando por el de menor energía (2 electrones, espín arriba y espín abajo), luego el siguiente con menos energía (2 electrones), el siguiente...

Los electrones con mayor energía, los menos ligados, normalmente poseen la localización más alejada del núcleo



Cartagena99

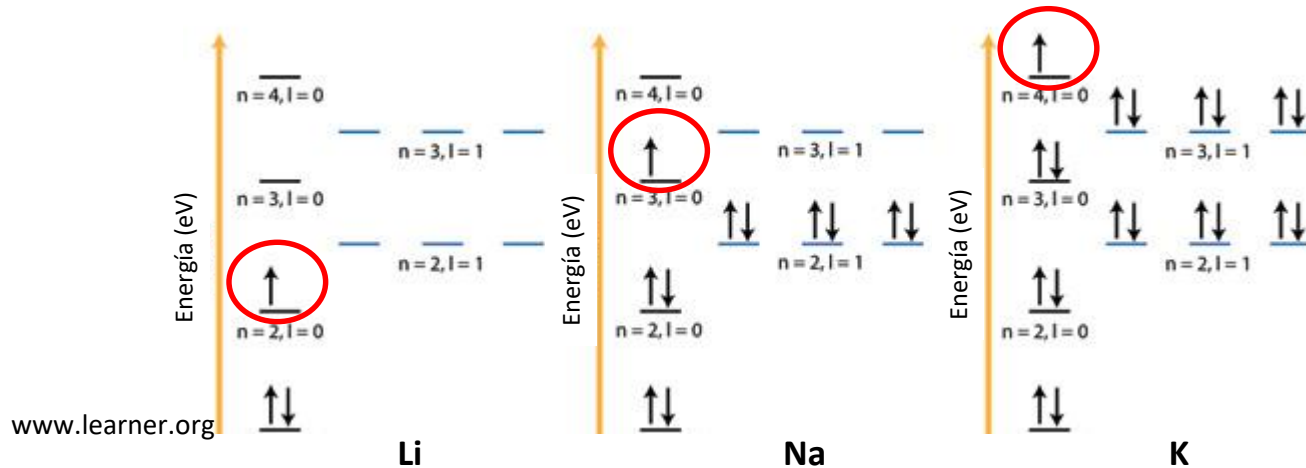
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

Para analizar los enlaces que dan lugar a la materia condensada, nos interesan los “electrones externos” o electrones de valencia, los que poseen menor energía de ligadura (menos negativa)



Para analizarlo, es necesario utilizar la mecánica cuántica.

Las funciones de onda que debemos analizar son las correspondientes a los niveles ocupados de mayor energía.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Tipos de enlace

### - *Van der Waals*

interacción dipolo-dipolo, no se debe a los electrones de valencia

### - *Iónico*

$e^-$  de valencia asociados firmemente a los núcleos atómicos. Enlace por atracción de Coulomb entre iones

### - *Covalente*

$e^-$  de valencia compartidos en orbitales extendidos sobre varios núcleos

### - *Metálico*

$e^-$  de valencia prácticamente libres por todo el material. La mayoría de los elementos de la tabla periódica son metales

Salvo los cristales de gases inertes (van der Waals), todos los materiales presentan enlaces que se pueden considerar predominantemente iónico, covalente o metálico.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Definiciones importantes sobre la energía de un cristal

Para que se produzca enlace entre los átomos que forman un cristal, se tiene que reducir la energía del sistema. Esto ocurre de varias formas, dependiendo del tipo de enlace cristalino

Energía de cohesión de un cristal: energía que debe añadirse al cristal para separar sus componentes en átomos libres neutros en reposo, a separación infinita, con la misma configuración electrónica.

Energía de la red o energía reticular (de cristales iónicos): energía que debe añadirse al

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, green, serif font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a light blue and orange gradient background that resembles a stylized wave or a banner.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace de van der Waals

Es el enlace responsable de la formación de cristales de gases inertes.

Algunas características de los gases inertes:

- energía de ionización muy elevada
- capas electrónicas exteriores están completas
- distribución electrónica con simetría esférica

Son cristales aislantes, transparentes, débilmente ligados y con temperaturas de fusión bajas (de 24 a 160 K)

**Estructura cristalina FCC** (salvo He<sup>3</sup> y He<sup>4</sup>)

La interacción de van der Waals se debe a un efecto cuántico de los momentos dipolares inducidos

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, green, serif font. The '99' is significantly larger and more prominent than the 'Cartagena' part. The text is set against a light blue and white background with a subtle gradient and a soft shadow effect.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

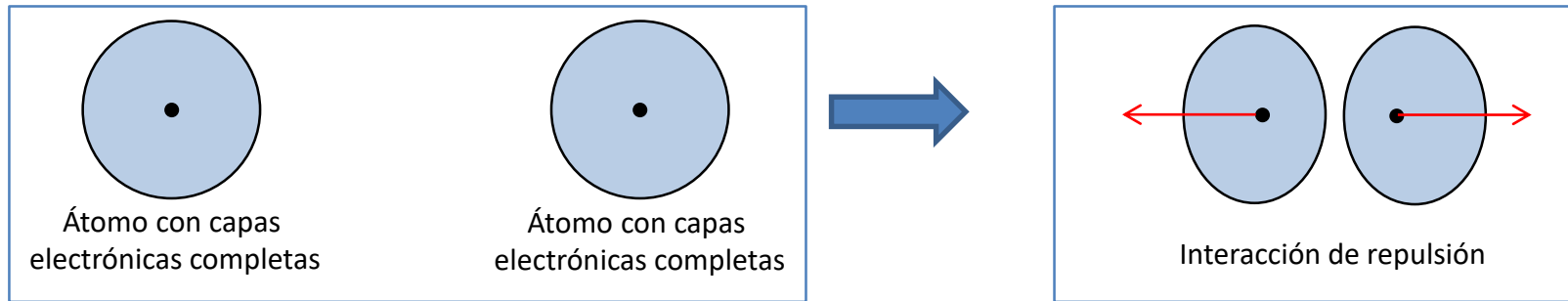
# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace de van der Waals

Además de la interacción (energía) atractiva, aparece a **muy cortas distancias una interacción repulsiva**. Veamos por qué:

Son gases inertes, por tanto, tienen todas sus capas electrónicas completas.

La repulsión aparece por que los electrones son fermiones → el principio de exclusión de Pauli prohíbe que dos de ellos tengan todos los números cuánticos idénticos ocupando el mismo espacio



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace de van der Waals

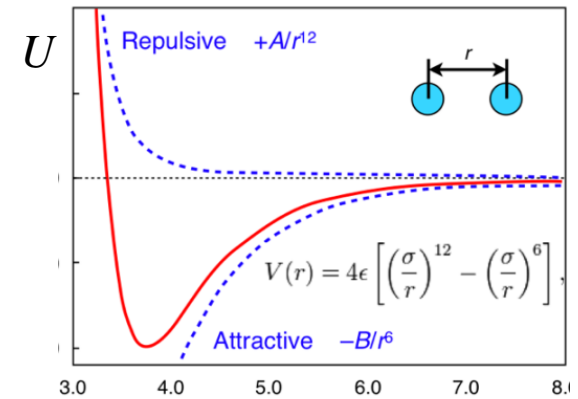
Esta interacción repulsiva se puede ajustar muy bien mediante un potencial de forma  $\frac{A}{r^{12}}$  donde  $B$  es una constante positiva.

Por tanto, la interacción total entre dos átomos separados por una distancia  $r$  es:

$$U(r) = 4\epsilon \left[ \underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}}_{\text{Repulsivo}} - \underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6}_{\text{Atractivo}} \right]$$

Siendo  $\epsilon$  y  $\sigma$  dos constantes que dependen de las constantes atómicas.

Este es el potencial de Lennard-Jones.



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

la energía de cohesión (energía total para  $r_0$ ) de los cristales de gases inertes.



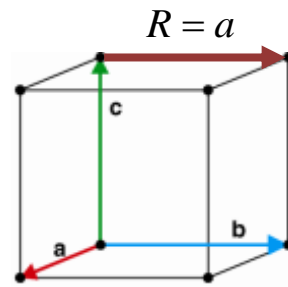
# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace de van der Waals

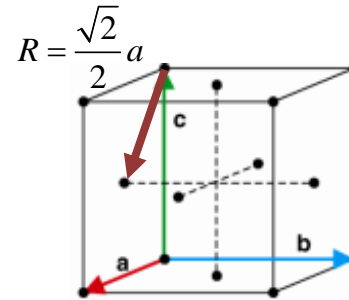
La **energía total de un cristal** con  $N$  átomos se puede expresar

en función de  $R$ : separación entre vecinos más próximos

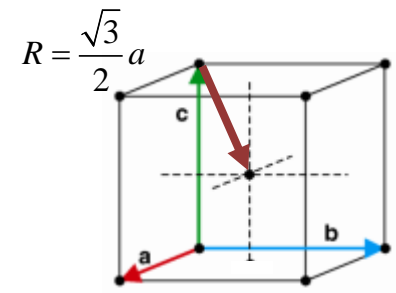
Ejemplo, en redes cúbicas:



Cúbica simple



FCC



BCC

Con esta definición de  $R$ , la **energía total** se expresa así:

$$U_{total} = \frac{1}{2} N \cdot 4\varepsilon \sum_{j \neq i} \left[ \left( \frac{\sigma}{p_{ij} R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{p_{ij} R} \right)^6 \right] = \frac{1}{2} N \cdot 4\varepsilon \left[ \frac{\sigma^{12}}{R^{12}} \sum_{j \neq i} p_{ij}^{-12} - \frac{\sigma^6}{R^6} \sum_{j \neq i} p_{ij}^{-6} \right]$$

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

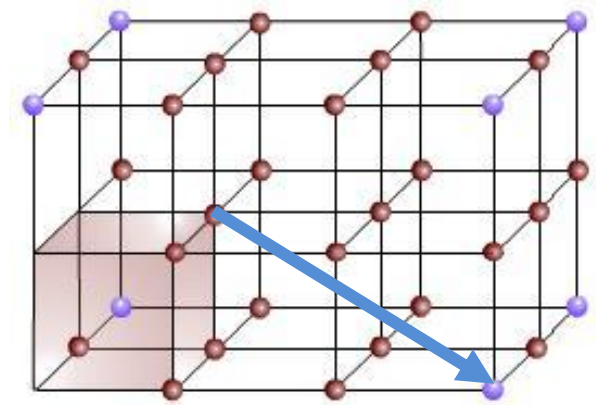
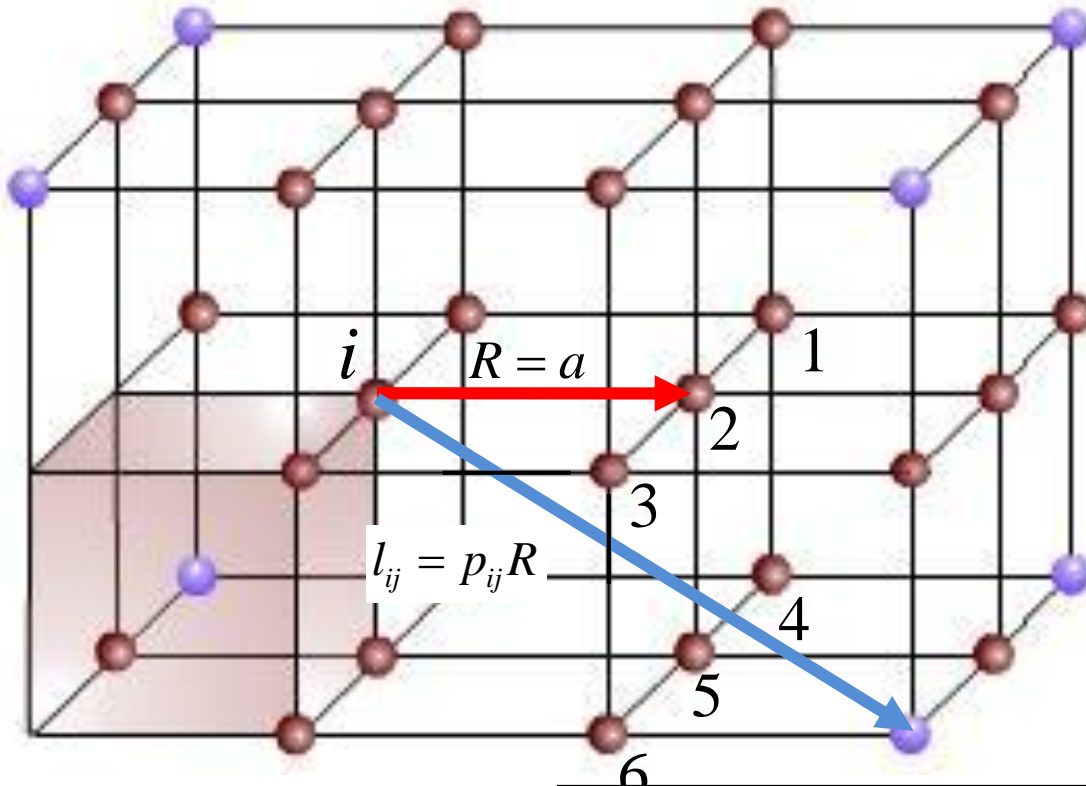
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

La suma se hace para todos los átomos del cristal (infinitos), salvo el átomo de referencia ( $i$ )

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace de van der Waals

Ejemplo de cálculo de términos  $p_{ij}$



Será idéntico en otro cristal con parámetro de red distinto pero misma estructura cristalina

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70  
- - -  
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace de van der Waals

Para una red cristalina dada, los términos

$$\sum_{j \neq i} p_{ij}^{-12}$$

y

$$\sum_{j \neq i} p_{ij}^{-6}$$

no cambian, son independientes del parámetro de red

**Ejemplo:** para la estructura cristalina de los gases inertes (FCC):

$$\sum_{j \neq i} p_{ij}^{-12} = 12.13188$$

$$\sum_{j \neq i} p_{ij}^{-6} = 14.45392$$

A partir de ello, se calcula la **posición de equilibrio**, el valor de  $R$  que minimiza la energía del Sistema,  $R_0$ , imponiendo un mínimo de la energía

The logo for Cartagena99, featuring the text 'Cartagena99' in a stylized font with a blue and orange gradient background.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

(a completar en clase)

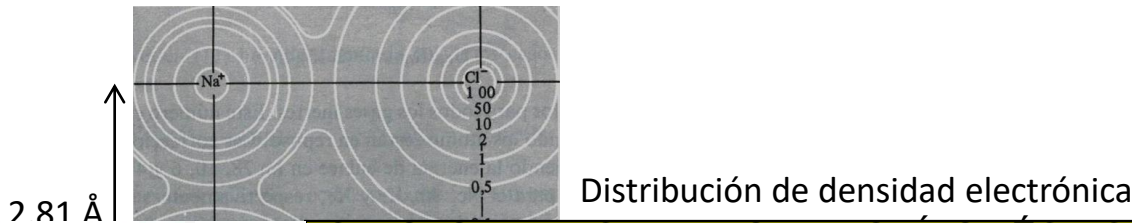
# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

Ciertos átomos tienden a ionizarse, cediendo electrones (cationes) o aceptando electrones (aniones). Así minimizan su energía, ya que quedan con una configuración electrónica de capas electrónicas completas.

El enlace iónico se basa en la atracción electrostática (de Coulomb) entre iones positivos y negativos. Es una interacción fuerte, de largo alcance, no direccional. Para iones, domina completamente sobre la de van der Waals.

Las configuraciones electrónicas de los iones, con capas electrónicas completas (tipo gases inertes), tienen simetría muy aproximadamente esférica.



Distribución de densidad electrónica

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

Queremos estimar la energía de la red y la constante de equilibrio en los cristales iónicos, igual que hicimos para los gases inertes

La interacción coulombiana entre los iones domina y su forma matemática explícita para dos iones con cargas  $\pm q$  a una distancia  $r$  :

$$U_{coulomb} = \pm \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Además, existen otras interacciones, cuyo resultado es esencialmente de repulsión.

La energía de la red o reticular es la suma de las interacciones debidas a todos los iones del cristal sobre un ion de referencia.

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

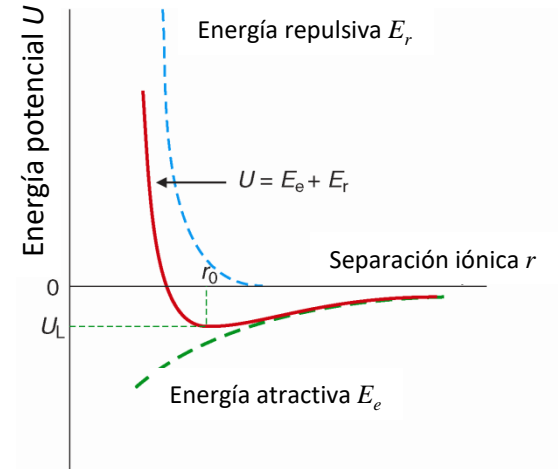
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

Llamamos  $U_{ij}$  a la energía de interacción entre dos iones  $i$  y  $j$

Hay una posición de equilibrio,  $r_0$  en que se compensan la atracción coulombiana y la repulsión



La energía total de un ion  $i$  es la suma: 
$$U_i = \sum_{j \neq i} U_{ij}$$

Conocemos la expresión de Coulomb. El resto de interacciones se pueden incluir en un término,  $E_r$ .

$E_r$  es de repulsión y también depende de la distancia

II. se escribe entonces:

**Cartagena99**

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

Hay dos formas habituales de estimar matemáticamente el término de repulsión  $E_r$ :

- función exponencial decreciente:

$$E_r(r) = \lambda \cdot e^{-r/\rho}$$

$\rho$  es la constante que indica el alcance de la interacción. Es del orden de 0,3 Å (muy corto alcance)  
 $\lambda$  es una constante empírica

Por tanto, **esta interacción de repulsión es de mucho menor alcance que la atracción coulombiana.**

**Utilizaremos esta función exponencial**

- función polinomial:

$$E_r(r) = \frac{\lambda}{r^n}$$

The logo for Cartagena99 features the text 'Cartagena99' in a stylized, green, serif font. The '99' is significantly larger and more prominent than 'Cartagena'. The text is set against a background of light blue and orange geometric shapes.

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

Como la interacción repulsiva es de muy corto alcance, para simplificar, sólo tenemos en cuenta la energía de repulsión de los primeros vecinos.

$z$  es el número de primeros vecinos para cada ion.

$R$  es la separación entre vecinos más próximos en el cristal (como en el enlace de *van der Waals*).

$$U_{ij} = \begin{cases} E_r(r) - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \\ \pm \frac{1}{p_{ij}} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \end{cases}$$

para los vecinos más próximos (están a distancia  $R$  del ion de referencia)

para el resto de iones. Se utiliza el **signo + si  $i$  y  $j$  son iones iguales**

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70



# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

La suma sobre todos los iones es:

$$U_{total} = NU_i = N \sum_{j \neq i} U_{ij} = N \left( \sum_{\substack{\text{vecinos mas} \\ \text{próximos}}} \lambda \cdot e^{-R/\rho} - \sum_{j \neq i} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R p_{ij}} \right)$$

Y por tanto, queda

$$U_{total} = N \left( z\lambda \cdot e^{-R/\rho} - \alpha \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R} \right)$$

donde:

$\alpha$  es la **constante de Madelung**: 
$$\alpha = \sum_{j \neq i} \frac{(\pm)}{p_{ij}}$$

*El valor de la constante de Madelung es esencial para la teoría de cristales iónicos.*

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

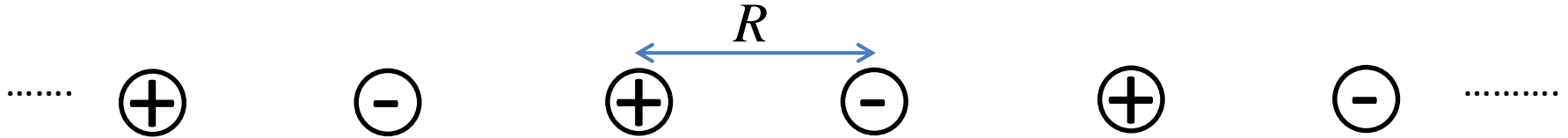
---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

Ejemplo de cálculo de la constante de Madelung en una red unidimensional infinita:



*(a completar en clase)*

Por tanto, para esta cadena unidimensional, la energía total es:

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

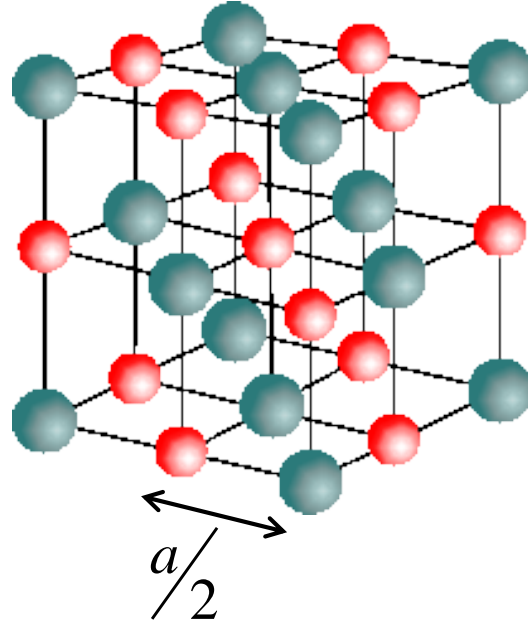
- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

Ejemplo de los primeros términos de la constante de Madelung en la red NaCl:



$R = a/2$  es la separación entre vecinos más próximos en el cristal

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

*(a completar en clase)*

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

- Separación de equilibrio:  $R_0$ , el valor de  $r$  que minimiza la energía total

$$\left. \frac{dU_{total}}{dR} \right|_{R_0} = N \left( -\frac{z\lambda}{\rho} e^{-R_0/\rho} + \alpha \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 R_0^2} \right) = 0$$

$$R_0^2 e^{-R_0/\rho} = \alpha \cdot \rho \frac{q^2}{z\lambda 4\pi\epsilon_0}$$

- Sustituyendo esta expresión para  $R_0$  en la expresión de la energía total de la estructura del cristal (3 diapositivas atrás), obtenemos la energía en función de  $R_0$

(a completar en clase)

Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

---

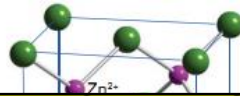
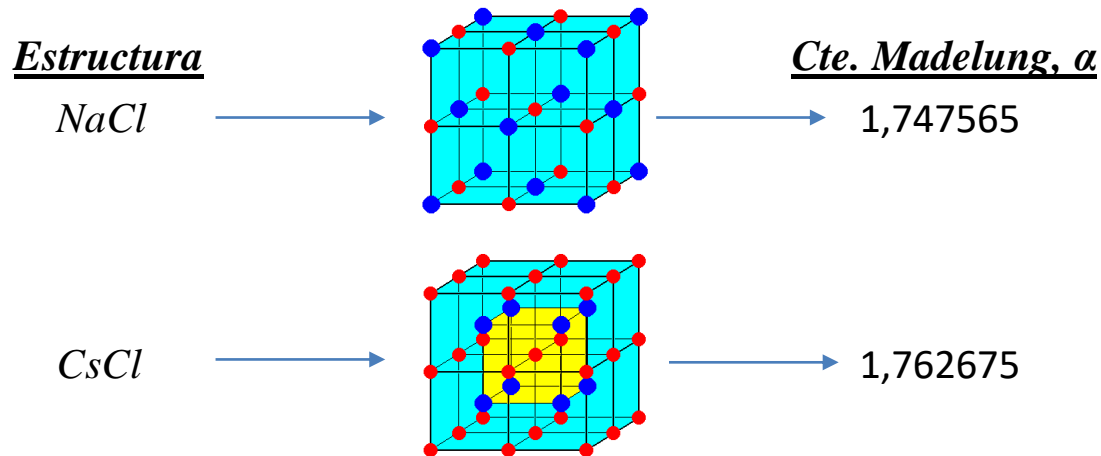
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP: 689 45 44 70

# Tema 2: Enlace y propiedades de los materiales

## Enlace iónico

Como vemos, los cálculos de estructura de cristales iónicos se hacen en función de la cte. de Madelung.

En 3 dimensiones el cálculo puede ser muy complicado. Algunos valores:



Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE  
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

- - -

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS  
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70