

**Tema 2.** Ideas básicas sobre materiales. Clasificación y propiedades de los materiales. Cohesión. Enlace de Van der Waals. Energía de repulsión. Enlace iónico. Ideas sobre el enlace covalente y el enlace metálico. Tipos de sólido según el enlace.

### Problemas

1) La función de onda del orbital 1s del hidrógeno es  $\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$  y la del 2s es

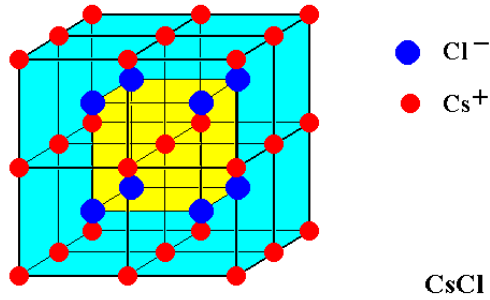
$$\psi_{200} = \frac{\sqrt{2}}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right) e^{-\frac{r}{2a_0}}. \text{ Donde } a_0 = 0,529 \text{ nm es el llamado radio de Bohr.}$$

- a) Comparar la densidad de probabilidad de encontrar al electrón a distancia  $r = 3 \text{ nm}$  del núcleo en ambos orbitales, calculando  $|\psi|^2$ . ¿A qué distancia se cumple que la densidad de probabilidad sea exactamente igual a cero para el electrón en el orbital 2s?
- b) ¿Cuál es la energía asociada al electrón para cada uno de los dos orbitales?
- 2) Hallar la posición  $R_{0,2\text{atomos}}$  que minimiza la energía en el potencial de Lennard-Jones entre dos átomos de gas noble idénticos en función del parámetro  $\sigma$ . Compararlo con el valor de  $R_0$  obtenido para el cristal de gas noble.
- 3) Calcular la energía de la red (por ion y por mol) de los cristales NaCl y KCl, con estructura de NaCl (parámetro  $\alpha = 1,75$ ). Tomar los datos necesarios de la siguiente tabla.

	Separación entre vecinos más próximos $R_0$ , en Å	Módulos de compresibilidad $B$ , en $10^{11} \text{ din/cm}^2$ o $10^{10} \text{ N/m}^2$	Parámetro de energía repulsiva $\lambda$ , en $10^{-8} \text{ erg}$	Parámetro de alcance repulsivo $\rho$ , en Å	Energía de la red comparada con los iones libres en kcal/mol	
					Experimental	Calculada
LiF	2.014	6.71	0.296	0.291	242.3[246.8]	242.2
LiCl	2.570	2.98	0.490	0.330	198.9[201.8]	192.9
LiBr	2.751	2.38	0.591	0.340	189.8	181.0
LiI	3.000	(1.71)	0.599	0.366	177.7	166.1
NaF	2.317	4.65	0.641	0.290	214.4[217.9]	215.2
NaCl	2.820	2.40	1.05	0.321	182.6[185.3]	178.6
NaBr	2.989	1.99	1.33	0.328	173.6[174.3]	169.2
NaI	3.237	1.51	1.58	0.345	163.2[162.3]	156.6
KF	2.674	3.05	1.31	0.298	189.8[194.5]	189.1
KCl	3.147	1.74	2.05	0.326	165.8[169.5]	161.6
KBr	3.298	1.48	2.30	0.336	158.5[159.3]	154.5
KI	3.533	1.17	2.85	0.348	149.9[151.1]	144.5
RbF	2.815	2.62	1.78	0.301	181.4	180.4
RbCl	3.291	1.56	3.19	0.323	159.3	155.4
RbBr	3.445	1.30	3.03	0.338	152.6	148.3
RbI	3.671	1.06	3.99	0.348	144.9	139.6

Datos según diversas tablas por M. P. Tosi, *Solid state physics* 16, 1 (1964).

- 4) Determinar el número de electrones libres en Ni, asumiendo que cada átomo contribuye con dos electrones al gas de electrones. Calcularlo de dos formas: a) sabiendo que la masa molar del níquel es  $0,05869 \text{ kg mol}^{-1}$  y su densidad  $8907 \text{ kg m}^{-3}$ ; b) sabiendo que es FCC y su parámetro de red es  $a = 3,52 \text{ Å}$
- 5) Obtener los tres primeros términos de la constante de Madelung para la estructura de CsCl (ver siguiente figura, parámetro de red  $a = 4.11 \text{ Å}$ ).



- 6) ¿Cuáles son las expresiones de la distancia de equilibrio entre primeros vecinos,  $R_0$ , y la energía de la red,  $U_{total}$ , en un cristal iónico si, en vez de considerar la expresión exponencial decreciente como término de repulsión (Born-Mayer) se utiliza la expresión

$$E_{rep}(r) = \frac{\lambda}{r^n} ?$$

- 7) Utilizando la expresión para el potencial repulsivo del ejercicio 6, obtener cómo se ven afectadas la distancia de equilibrio entre primeros vecinos,  $R_0$ , y la energía de la red,  $U_{total}$ , del cloruro sódico al doblar la carga de los iones.

- 8) Con la expresión para el potencial repulsivo del ejercicio 6, calcular la energía reticular del óxido iónico CaO. *Datos:* a) la configuración electrónica fundamental del Ca es  $[Ar]4s^2$  y la del O es  $[He]2s^2p^4$ , b) el cristal tiene estructura tipo NaCl, con  $\alpha = 1,75$ ,  $n = 9$  y  $r_0 = 2,4 \text{ \AA}$ .

- 9) Indicar a qué tipo de material corresponde el siguiente diagrama de energías. Estimar la energía de cohesión molar del cristal a partir del diagrama.

