

CAPÍTOL 3

TIPUS DE SÒLIDS.

Tipus de sòlids:

El tema del progrés, visualitzat amb estructures com l'empaquetament cúbic compacte o l'empaquetament hexagonal compacte, en el seu moment fou innovador.

Personalment, i rememorant aquelles tardes d'infant, me les vaig empescar per construir tals empaquetaments amb boles de plastilina.

Ara em posaré a descriure els tipus de sòlids:

Cristalls iònics: (els descriu a Born-Haber).

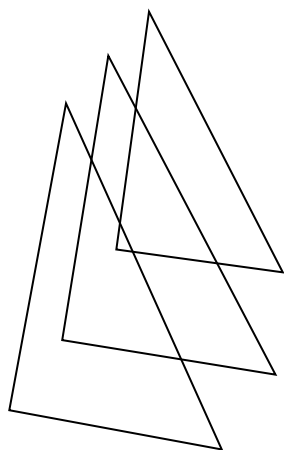
Cristalls moleculars: unitat de repetició: àtom o molécula sense càrrega efectiva.

Se cohesionen per forces de Van Der Waals (depenent de la polaritat i el n° d'e⁻); com que $F_{vdw} < F_{iònica} \Rightarrow$ la E enllaç molecular és relativament petita.

Són força volàtils: $\downarrow P_f$ i $\downarrow P_{eb}$.

Tenen dèbils *forces intermoleculares* i se componen de *plans reticulars* i entre ells les forces no varien.(fig.3)

Fig. 3:



Sòlids reds covalents: sòlids en què els atòms estan units per enllaços de parells electrons. Tots els cristalls formen una sola molécula, en 3-D. En el cas del diamant, se busca d'una banda la *cel·la unitat* i de l'altra les capes que en el cas del grafit estan unides per forces de V.d.W.

Cristalls metàl·lics: molécules que se poden estirar o doblegar sense que se trenquin.

Només diré una cosa: el metall se considera com una sèrie de d'ions positius submergits en un mar d'e⁻ mòbils.

Degut a la malaltia que he contret (esquizofrenia) tinc una sensibilitat especial per a veure la puresa de les coses i per això observo la natura i en trec informació comparable amb l'home i les formes geomètriques com ara les pedres de quars, cargols, (i si recordeu haver llegit "El codi Da Vinci" es parla de la successió de Fibbonacci), l'arc de St. Martí....

Una altra curiositat és que el món aquàtic té similitud amb el terrestre. D'altra part els arbres semblen pulmons (tan per la seva forma com per la seva funció).

I la difracció de Bragg esdevé un mecanisme, per intentar descriure un fenomen natural com ara la dilucidació de les reds cristal·lines (a través també de R-X).

Comencem per analitzar l'**equació de difracció de Bragg**

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin \theta:$$

1. A partir de θ i de la radiació difractada se'ns permet descobrir les estructures de les *reds o xarxes* i els seus punts.
2. A partir de la equació de Bragg i l'angle θ podem obtenir la *distància interplanar*.
3. Els e^- de la molécula causen la *dispersió dels raigs R-X*.
4. La *dispersió* i la *intensitat* depenen de la distribució dels e^- en la xarxa i del seu n° .

Fins i tot recordo, de l'adolescència, les preguntes vitals que em feia, provinents del no-res (igual que les següents figures que intenten explicar els sòlids) i que al capítol 6 anomenaré.

Conèixer als altres no implica cap esforç físic sinó que cal delicadesa i mà esquerre.

La unió pot basar-se en enllaçar, cuidar i acaronar l'èxit o la satisfacció d'ésser coherent i agraït amb qui cal.

També analitzem diferents **tipus d'empaquetaments** a partir dels ions:

Empaquetament hexagonal compacte → fig.4. Quan la successió és ababab...ens trobem davant un empaquetament hexagonal compacte. (fig.5)

Empaquetament cúbic compacte → fig.6. Quan la successió és abcabcabc...l'empaquetament és cúbic compacte. (fig.7)

Fig.4:

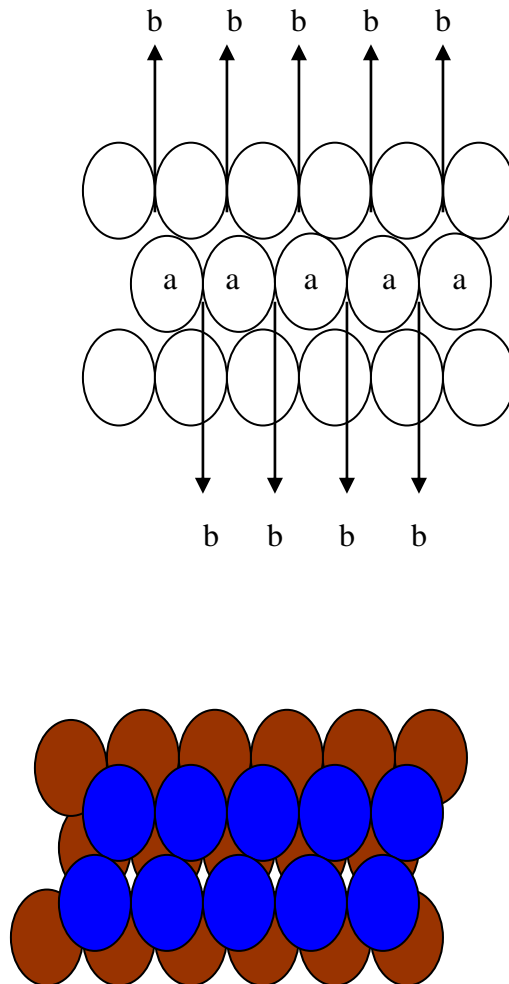


Fig. 5:

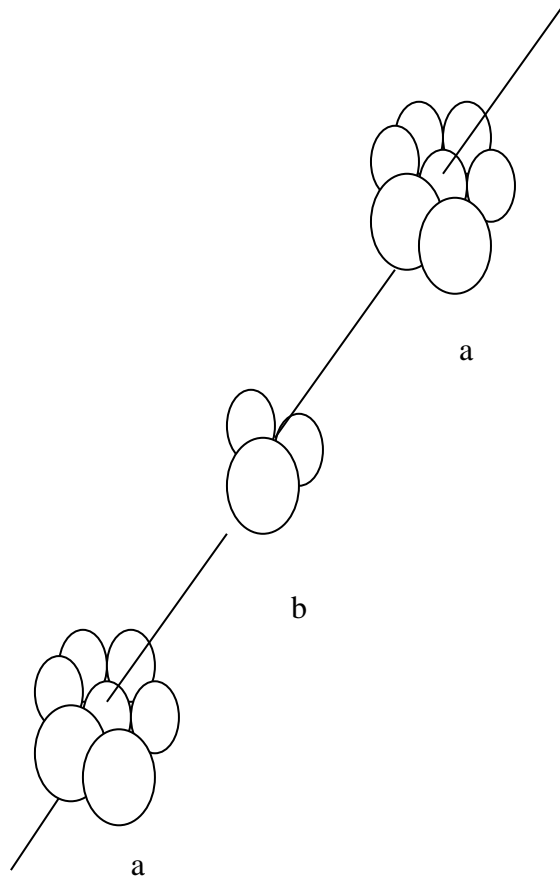


Fig. 6:

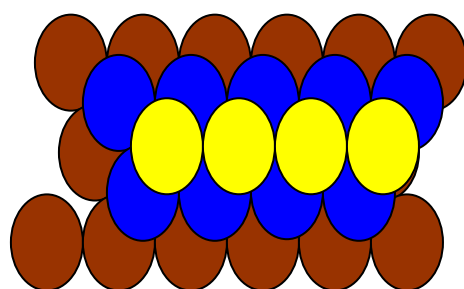
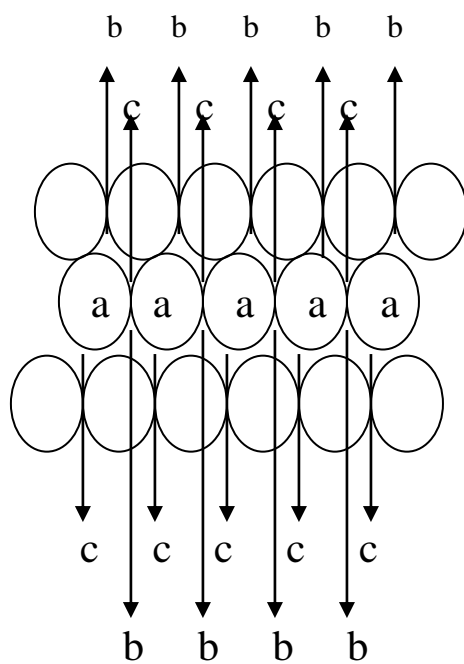


Fig. 7:

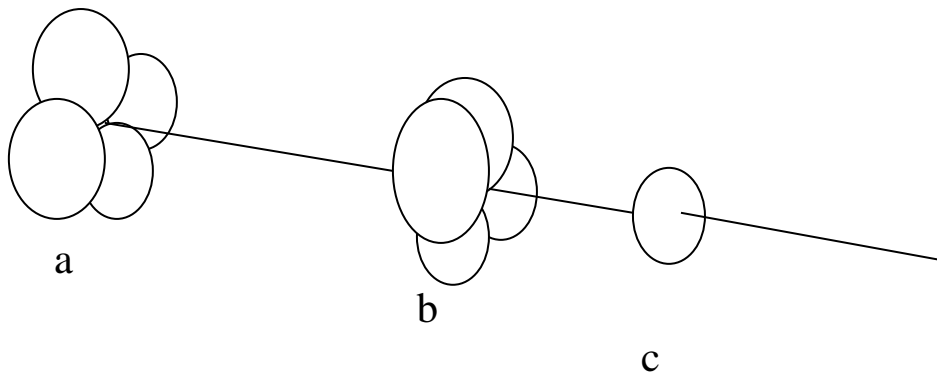


Fig. 8:

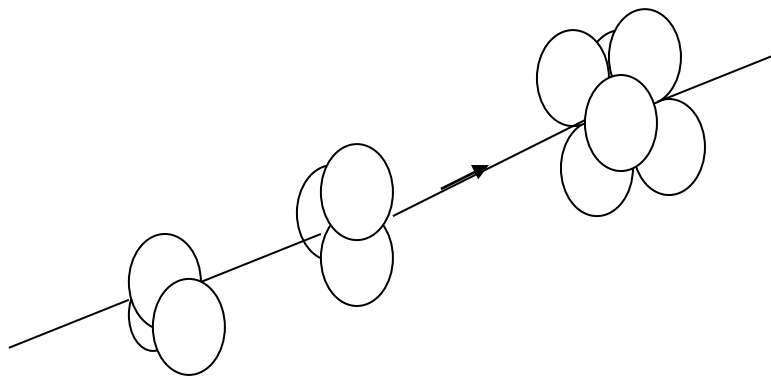
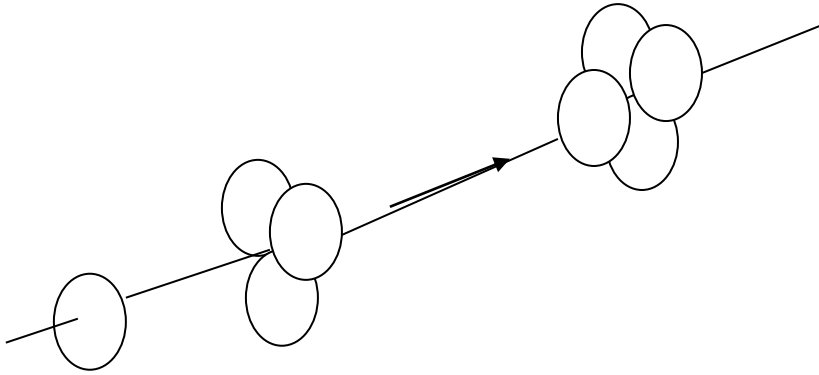


Fig. 9:



Estructures relacionades amb empaquetament compacte:

Tetraedre \longrightarrow 4 cares. (fig.9)

Octaedre \longrightarrow 8 cares. (fig.8)

Nº de coordinació és el nº d'àtoms que conté més aprop. És l'*esfera de coordinació*; donen o *generen estequiometria*.

D = 8, D = 6, D = 4, són nºs de coordinació.

Per a calcular l'estequiometria o el nº d'àtoms, procedim de la següent manera segons la ocupació de cada estructura en 3-D.

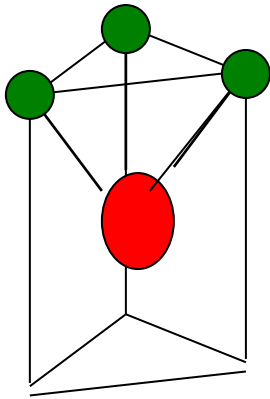
En el cas de cubs:

1. si l'àtom es troba al mig, val 1 ja que totes les seves esferes de coordinació estan dins el cub.
2. si es troba en un vèrtex pot valdre 1/8
3. si es troba al mig d'una aresta pot valdre 1/4
4. mentre que si es troba al centre d'una cara valdrà 1/2.

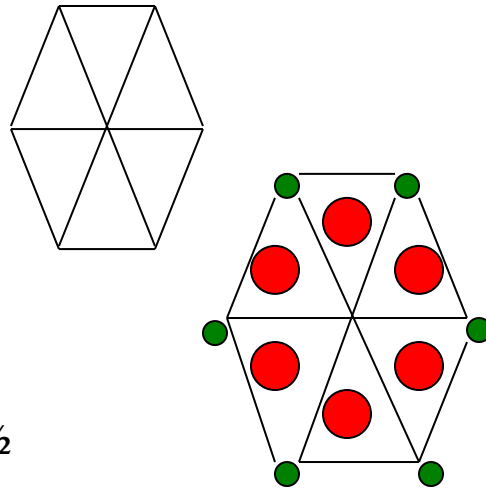
Exemples a la fig.10 a, b, c, d, e. Existeixen problemes per a trobar la cel·la unitat; un cop es té, calcular l'estequiometria esdevé immediat.

En l'apartat d i e, depenent de si el cristall té continuïtat en forma de capes superior o inferior, els vèrtexs en contacte se coordinen en forma de 1/2.

Fig.10 (a):



O vist en 2 dimensions:



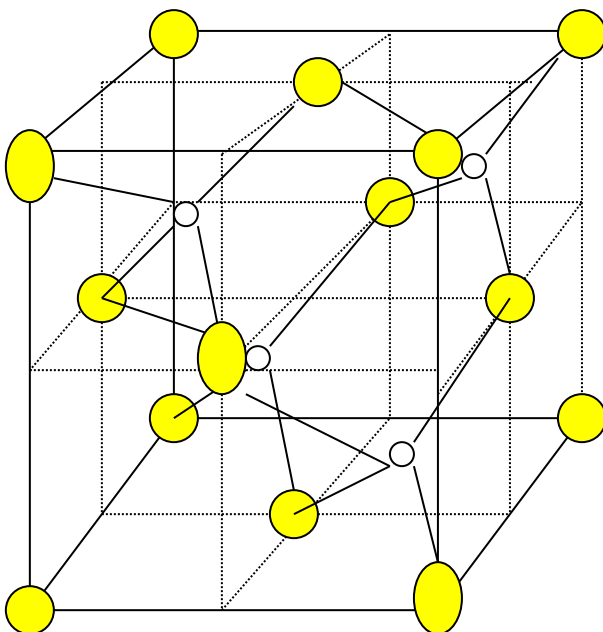
L'esfera vermella correspon al Iode (I) i l'esfera verda al Cadmi (Cd).

Per calcular l'estequiometria:

- Cd: $3 \times 1/6$, que equival a $1/2$
- I: 1 per cada cel·la

Aleshores: $Cd_{1/2}I_1$ o CdI_2

Fig. 10 (b):



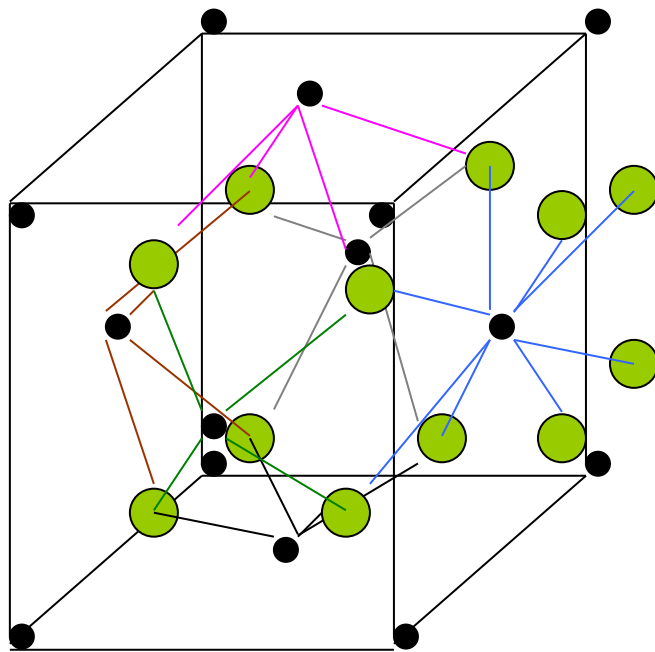
On les esferes grogues són sofre i les blanques de Zn.

Per calcular l'estequiometria:

- Zn: 4
- S: $(8 \times 1/8) + (6 \times 1/2), \Rightarrow 4$

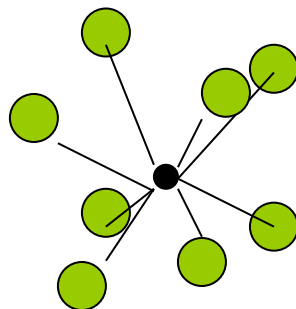
Per tant ZnS .

Fig. 10 (c):



Un poliedre.

O sigui:

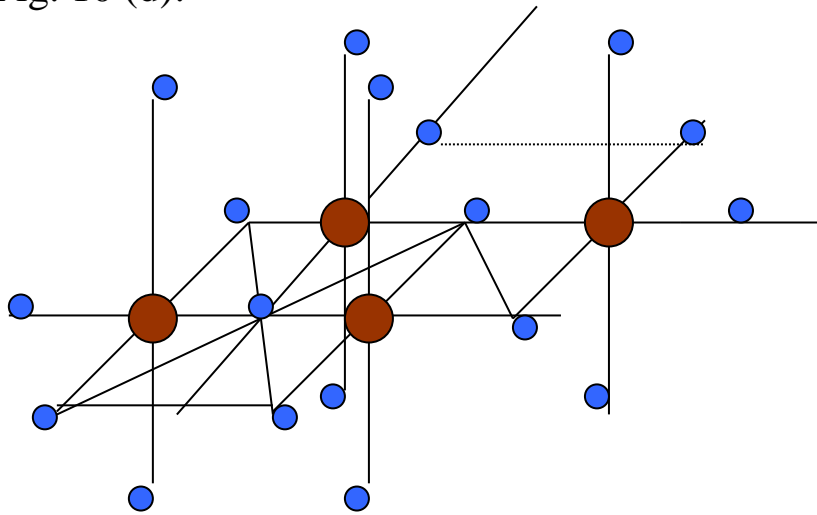


El Calci (negre) té la següent estequiometria:

➤ Ca: $(6 \times 1/2) + (8 \times 1/8) \Rightarrow 4$

➤ Fluor (verd clar): $(8 \times 1) \Rightarrow 8$. aleshores CaF_2 .

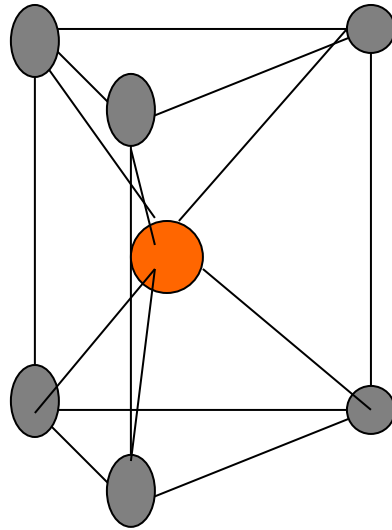
Fig. 10 (d):



Està clar que parlem d'un octaedre que s'extén en 2 dimensions.

- W (marró): 1
- (blau): $(4 \times 1/4) + (2 \times 1) \Rightarrow 3$

Fig. 10 (e):



➤ Níquel (gris): $(6 \times 1/6) \Rightarrow 1$

➤ Arseni (taronja): 1

Per tant tenim NiAs.

El **sistema cristal·lí** és definit per l'angle que formen els 3 eixos.

Existeix el *cúbic*: $a = b = c$ i $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Ortorròmbic: $a \neq b \neq c$ i $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Tetragonal: $a \neq b = c$ i $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

Monoclínic: $a \neq b \neq c$ i $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

Romboèdric: (similar a un paral·lelogram en 3-D)

Triclínic: $a \neq b \neq c$ i $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$.

Hexagonal: com per exemple grafit o diamant.

Només de llegir o deixar-te portar pel magnetisme que desprenen molts grans pensadors o científics se m'obre la gana de participar jo també en aquest joc. I és que descobrir que pots prendre part en el coneixement universal és bo i pots afegir-t'hi a través de molts "links" o connexions, fins i tot observant la senzillesa de moviments de la gata de casa (atenció que l'amor que puc treure de mi cap als altres éssers vius genera confiança i pau i és un fil conductor).

Conductors, semiconductors, aïllants, superconductors:

Electrons en un metal en absència d'un camp elèctric: es mouen en \forall direccions però sense una quantitat de moviment net en cap direcció.

La *conducció* és deguda a un excés d' e^- o a una deficiència d' e^- .

Els semiconductors són compostos que mostren conductivitat (es troben entre conductors i aïllants).

Aïllants:

1. en un model simple i sense E_0 (*camp elèctric*) l'àtom es comporta com un cos neutre, on la $q (+)$ $\longrightarrow +Z.e$
i la $q (-)$ $\longrightarrow -Z.e$
se superposen i coincideixen en posició, $\Rightarrow p$ (o moment dipolar, que és el producte de la càrrega per la distància) = 0
2. en un model on s'hi incideix E_0 degut a l'efecte del *rotor rígid*, no se superposen $+Z.e$ i $-Z.e$, i per tant existeix *moment dipolar induït*.
3. En el cas de l'aigua, té un *moment dipolar permanent*.

La **semiconducció** pot ésser:

- a) **Intrínseca** \longrightarrow basada en cristalls perfectes.
- b) **Extrínseca** \longrightarrow on analitzarem els defectes de les estructures sòlides, com ara:

- 1- estructures cristal·lines on \exists places vacants.
- 2- Estructures cristal·lines on hi ha àtoms en places incorrectes.
- 3- Estructures cristal·lines on hi ha àtoms amb valències que generen $q(+)$ o $q(-)$ netes.

Recordo que a les aules de la univesitat també hi havia “empaquetaments”: sempre ens asseiem a 1^a fila i preniem apunts com bojos per a que no se’ns escapés res; inclús els professors ens deien que havíem de consultar més els llibres de la biblioteca.

En un cas extrem un tal Joan Miró del departament de Química- Física de la UdG (un dels pares d’aquesta pàgina web) deia que les hores en què impartia classes podien molt ben ésser de resolució de dubtes.

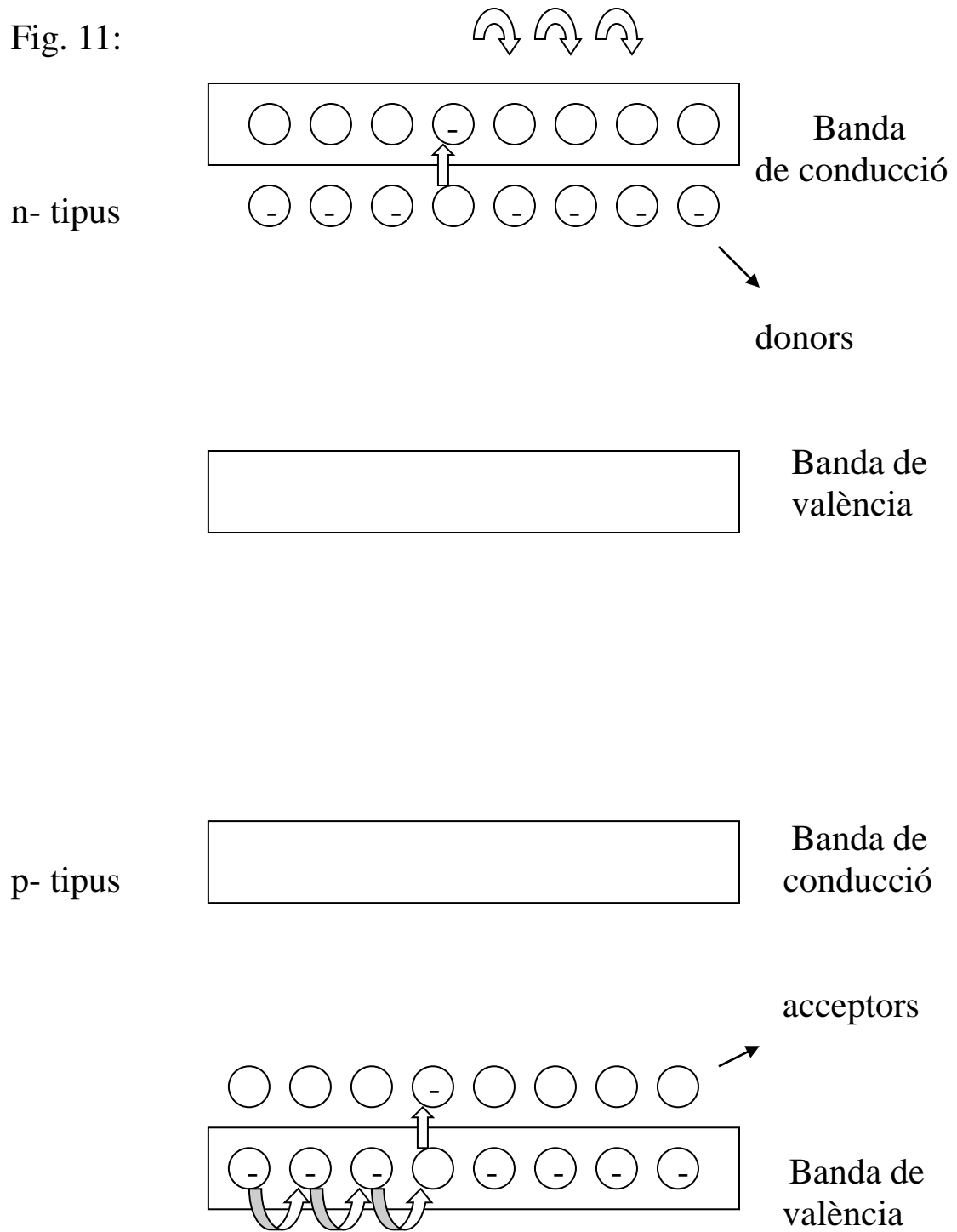
Incloem **la teoria de bandes** per a analitzar els cristalls metàl·lics: *banda de valència* i *banda de conducció*;

La primera comença a baix de tot quan a e^- , i arriba fins a l’últim nivell d’ e^- (incomplerts). Aleshores, al augmentar la T, els e^- són excitats des de la banda de valència fins a la banda de conducció, passant pel “gap”.

La **semiconducció extrínseca**: parla de **donors** i **d’acceptors**.

El 1^{er} tipus s’anomena n-tipus, mentre que el segon és: p-tipus.
(Vegem fig.11)

Fig. 11:



Passem a parlar dels superconductors:

A una determinada T, com si es tractés d'un *contrari a l'estat magma*.

Els *e⁻ de conducció* (*e⁻ lliures de moure's pel metall*) baixen al disminuir també la T. La *Ec* dels *e⁻* baixa també, i quedarien atrapats al voltant dels ions del metall.

Hi incloem la resistència elèctrica: $R = V/I$. nosaltres usarem un nou concepte: *resistivitat*, ja que la R varia amb la llargada i l'amplada del conductor; per comparar la resistència entre els diferents materials s'usa la **resistivitat** (resistència d'un conductor per unitat de secció i llargada).

Llavors *la variació de la resistivitat amb la T és inversa*.

Cert científic anomenat Onnes descobrí que al baixar la T no sempre s'augmentava la resistivitat, sinó que arribava un punt en què s'entrava en un nou estat.

Per a estudiar tal fenòmen usà Hg perquè és un dels materials que en condicions normals era dels més purs.

I al introduir impureses tampoc ↑ la resistivitat.

Per tant deduïm que certs metalls, a molt baixa T, condueixen l'electricitat sense cap mena de resistència.