

Tema 3: Enlace metálico

ENLACE: El enlace en los metales se explica a partir de la TOM introducida en el contexto del enlace covalente en el tema anterior.

ESTRUCTURA: La disposición de los átomos en las redes cristalinas metálicas se interpreta en términos de empaquetamiento de esferas y es común a los compuestos metálicos e iónicos.

Contenido

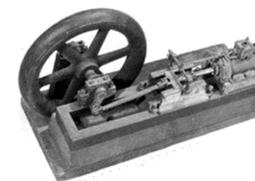
- Introducción
- Propiedades macroscópicas de los metales
- Enlace en los metales. Características y modelos
 - Modelo del mar de electrones
 - Modelo de bandas
 - Construcción de una Banda
 - Conductividad eléctrica
 - Metales, semiconductores y aislantes
 - Semiconductores
- Estructura de los metales
 - Empaquetamientos y redes cristalinas
 - Polimorfismo
- Aleaciones
 - Tipos de aleaciones
 - Amalgamas. Usos en ortodoncia

Introducción

- La extracción de los metales de sus menas coincide con el desarrollo de la civilización humana: Edad de Bronce, Edad de Hierro, etc.
 - Uso decorativo de metales como Au y Ag debido a su maleabilidad (metales nativos)
- Los metales son los elementos que dominan el mundo contemporáneo: **Fe**, Cu, Al y Zn



bronce (China)



máquina de vapor (s. XIX)

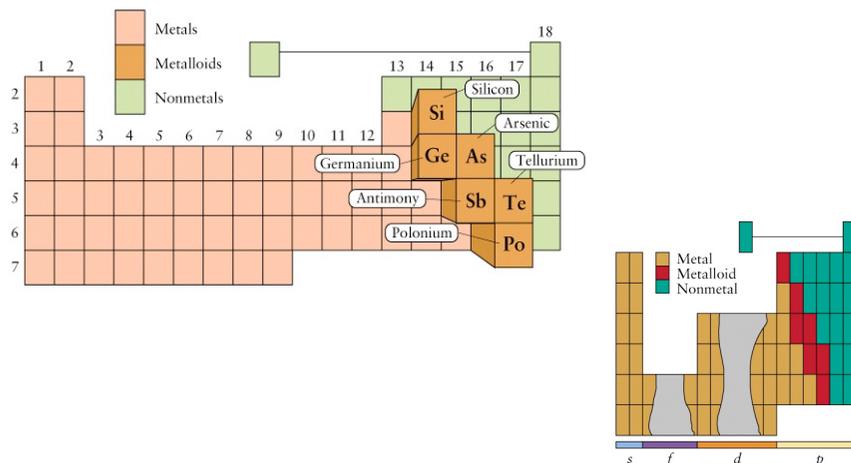


turbina de Ti (s. XX)

¿Siglo XXI?

Los elementos metálicos

• Los metales son mayoría en la Tabla Periódica.



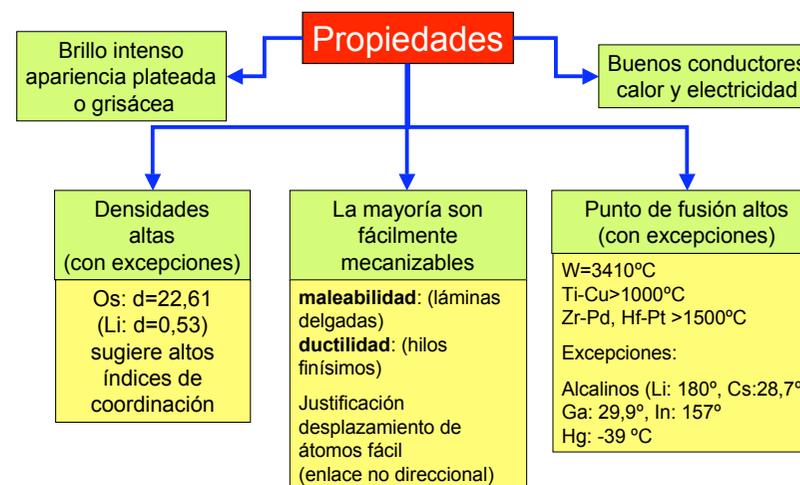
Propiedades de los metales

Propiedades de los metales

Table 7.4 Characteristics of metals and nonmetals

Metals	Nonmetals
Physical properties	
good conductors of electricity	poor conductors of electricity
ductile	not ductile
malleable, lustrous	not malleable
typically: solid	solid, liquid, or gas
high melting point	low melting point
good conductors of heat	poor conductors of heat
Chemical properties	
react with acids	do not react with acids
form basic oxides	form acidic oxides
(which react with acids)	(which react with bases)
form cations	form anions
form ionic halides	form covalent halides

Propiedades de los metales

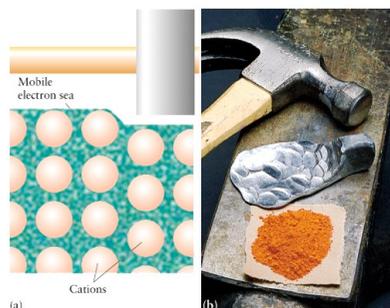
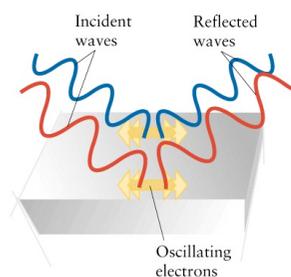


Cualquier modelo de enlace debe dar cuenta de estas propiedades

Enlace en los metales. Características y modelos

Propiedades y enlace metálico

- La **alta conductividad eléctrica y térmica** así como su reflectividad se explican por el libre movimiento de los electrones en la estructura metálica.
- **Maleabilidad y ductilidad** se explican por la ausencia de enlaces direccionales
- La **posibilidad de sinterización** de los metales se debe a la facilidad de formación de los enlaces metálicos
- Los enlaces metálicos se conservan en **estado líquido**
- La **fortaleza del enlace metálico es muy variable**. Se relaciona con los puntos de ebullición:
 - el Hg tiene un punto de ebullición de 357°C y una entalpía de atomización de 61 kJ·mol⁻¹.
 - el W tiene un punto de ebullición de 5660°C y una entalpía de atomización de 851 kJ·mol⁻¹.



Intensidad del enlace metálico

- La intensidad del enlace metálico es muy variable
 - Hg: es de una intensidad comparable con las fuerzas intermoleculares (líquido a T y P ambiente)
 - W: fuerza comparable a la de un enlace covalente

Valores de entalpías de atomización															
ΔH_s° (kJ/mol)															
Li	Be														
161	322														
Na	Mg											Al			
108	144											333			
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga			
90	179	381	470	515	397	285	415	423	422	339	131	272			
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn		
80	165	420	593	753	659	661	650	558	373	285	112	237	301		
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	
79	185	431	619	782	851	778	790	669	565	368	61	181	195	209	

Enlace en los metales

¿El enlace entre un átomo metálico y cada uno de sus vecinos **podría ser mediante compartición de un par de electrones**?

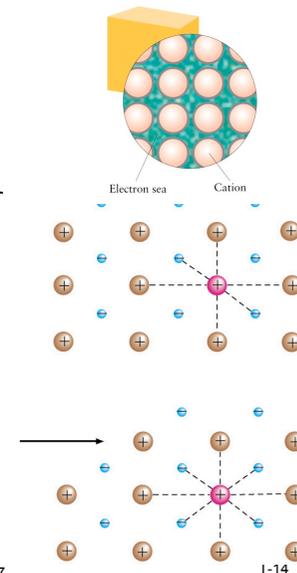
Los metales no tienen suficientes electrones de valencia para formar enlaces por pares de electrones

modelos de enlace

modelo del mar de electrones
modelo de bandas

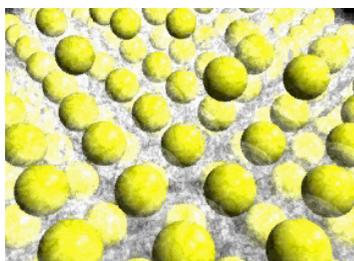
Modelo del mar de electrones

- Describe al metal como una red de iones positivos inmersa en un **mar de electrones**
- Los electrones no están unidos a ningún ion particular y son móviles: explica la **conductividad eléctrica**.
- Al no estar enlazados a ningún átomo, no están limitados en su capacidad de absorber fotones de luz visible. Los electrones de la superficie son capaces de irradiar luz de la misma frecuencia que la luz incidente: **brillo metálico**
- Por efecto de presión externa, se puede desplazar una capa de iones metálicos pero la estructura interna permanece inalterada y el mar de electrones se reajusta rápidamente: **maleabilidad y ductilidad**



modelo cualitativo muy sencillo

Modelo del mar de electrones

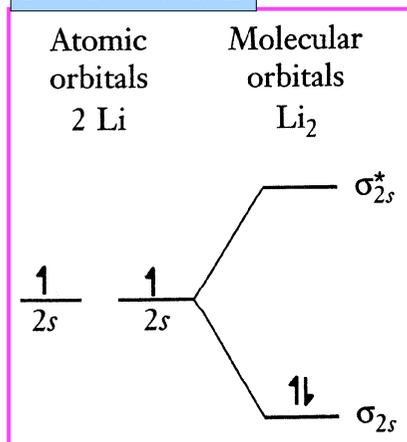


TOM aplicada a los metales. Modelo de bandas

Se aplica con éxito no solo a los metales sino a la estructura electrónica de los sólidos en general aplicando la TOM a un sólido que se trata como si fuera una molécula infinita

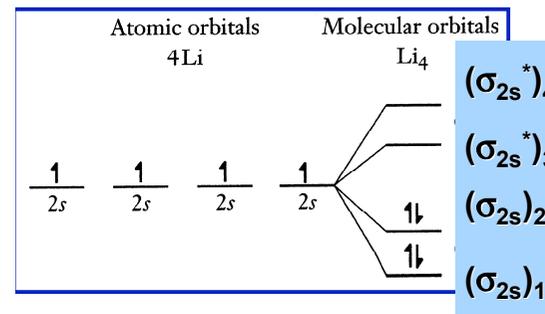
Construcción de una banda. Caso del Li

Dos átomos de Li



Construcción de una banda. Caso del Li

Cuatro átomos de Li

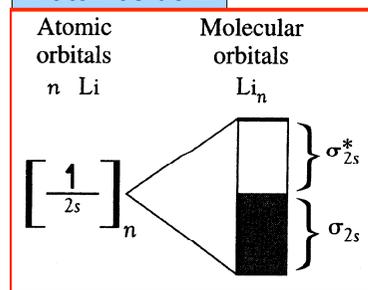


Al aumentar el nº de átomos que interactúan, aumenta lentamente la diferencia de energía entre el OM más enlazante y el más antienlazante

- La mitad de los OM's son esencialmente **enlazantes**
- La otra mitad de los OM's son **antienlazantes**

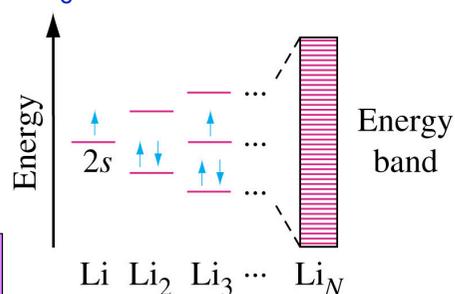
Construcción de una banda. Caso del Li

N átomos de Li



n OA's 2s ; n electrones

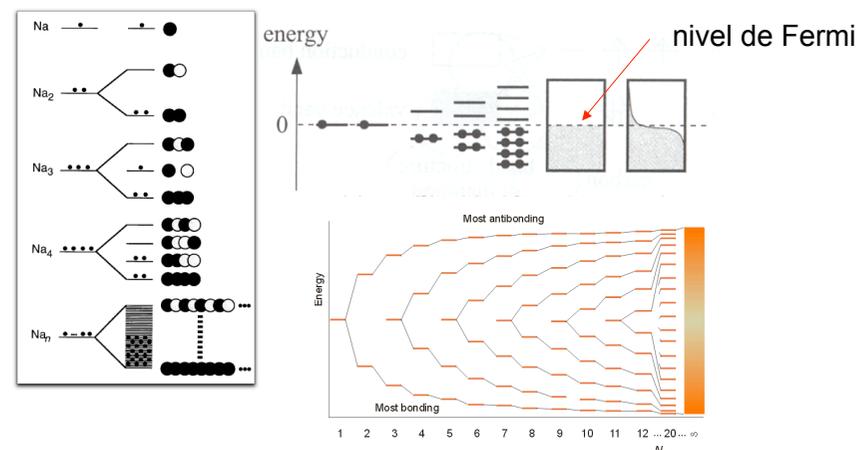
¿nº de OM's antienlazantes vacíos?
¿nº de OM's enlazantes llenos?



Se ocupan la mitad de los OM formados; la mitad de la banda

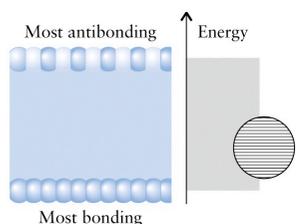
La anchura de la banda depende del **grado de solapamiento** entre los orbitales 2s del Li

Construcción de una banda



Energías de los orbitales formados cuando N átomos se alinean

Construcción de una banda. Caso del Li



entre 2 OM's consecutivos la diferencia energética es muy pequeña: **serie finita, discreta, de niveles de energía**

BANDA de NIVELES

1 mol de Li

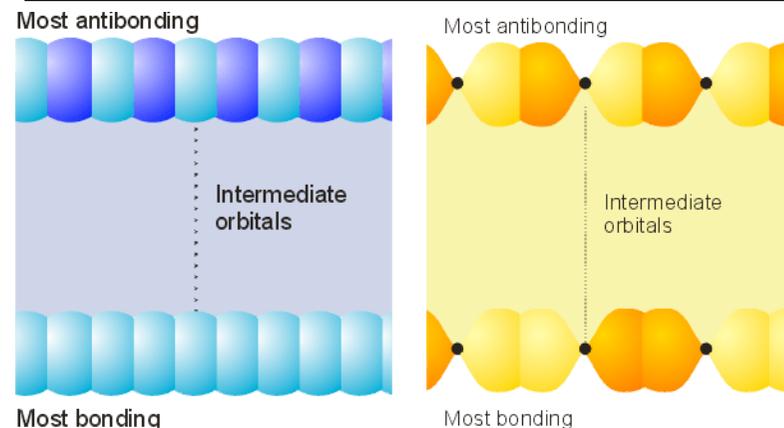
$d=0,534$; m.a. 6,941

$V=6,941/0,534=12,998 \text{ cm}^3$
(cubo de 2,351 cm arista)

$6,023 \times 10^{23}$ OA's 2s

Banda con OM's

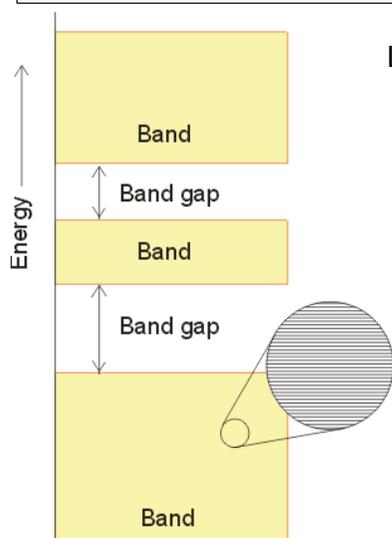
Bandas s y p



banda formada por el solapamiento de orbitales s

banda formada por el solapamiento de orbitales p

Sucesión de bandas



La estructura electrónica de un sólido está caracterizada por una serie de bandas de orbitales separadas entre sí.

Banda de valencia: la banda ocupada por los electrones de valencia de mayor energía
Banda de conducción: banda desocupada (con niveles vacíos) de menor energía

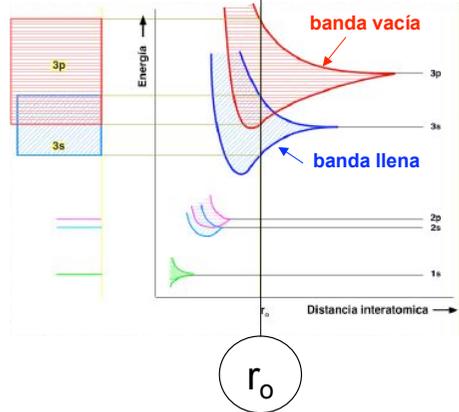
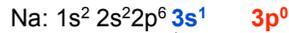
Teoría de bandas

Debes entender ...

- Extensión de la TOM
- Si se combinan N orbitales atómicos de un metal se forman N OM. Si N es muy grande, la separación de los niveles es muy pequeña de modo que se forma un continuo de niveles: **banda de energía**
- El llenado de esta banda depende del número de electrones aportados por el átomo metálico. En el caso del Li, sólo la mitad de los niveles de la banda están poblados (los de menor energía)
- Como las diferencias energéticas entre los niveles son muy escasas, los electrones se pueden excitar muy fácilmente desde los niveles llenos más altos a los vacíos inmediatamente por encima de ellos: explicación de la **conductividad eléctrica y térmica**
- La infinitud de niveles en la banda permite la absorción de radiación de cualquier longitud de onda, y también su emisión: explicación de su **alta reflectividad**

Efecto de la distancia interatómica sobre las bandas

Efecto de la distancia sobre las bandas del Na



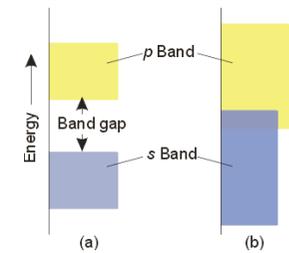
- La extensión del desdoblamiento (**anchura de la banda**) depende de la distancia interatómica.
- Comienza en las capas electrónicas más externas ya que son las más perturbadas cuando los átomos se unen.
- A la distancia interatómica de equilibrio puede que no tenga lugar la formación de bandas para las subcapas electrónicas más próximas al núcleo.

Aplicación de la Tª bandas al Be

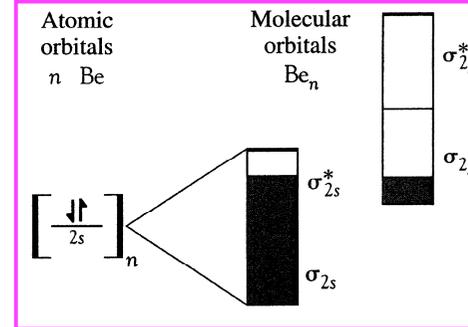


- Con 2 e⁻ de valencia por cada átomo de Be la **banda σ_{2s} - σ_{2s}^*** debería estar llena

Be(s) no debería presentar propiedades metálicas



Solapamiento de la banda s con la banda p permite la existencia de niveles vacíos accesibles a los electrones de valencia



Tª de bandas y conductividad eléctrica



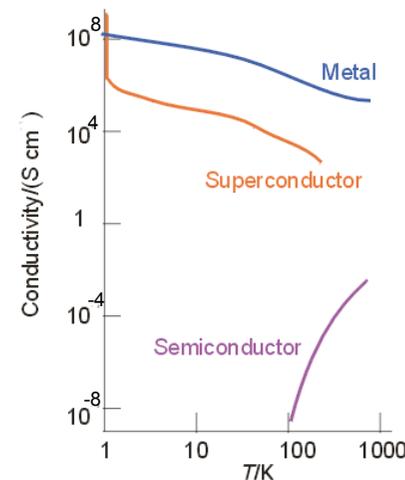
La conductividad es consecuencia del movimiento de los electrones a lo largo de las bandas



La teoría de bandas es capaz de dar cuenta de la principal propiedad de los metales: su **conductividad**. Además da argumentos para racionalizar por qué algunos sólidos son conductores, otros no y otros son semiconductores.

Las propiedades eléctricas de los sólidos son consecuencia directa de su estructura de bandas

Conductividad eléctrica



- Los materiales sólidos exhiben un asombroso intervalo de conductividad que se extiende sobre 27 órdenes de magnitud
- La conductividad de la mayoría de los semiconductores y aislantes aumenta rápidamente con la temperatura, mientras que la de los metales muestra una gradual disminución

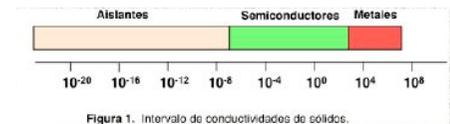
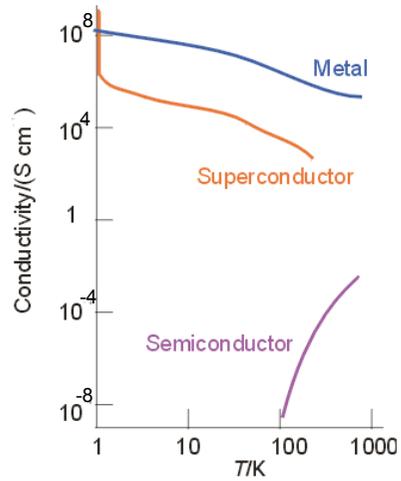
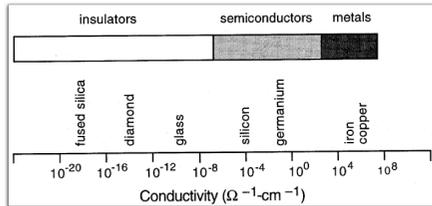


Figura 1. Intervalo de conductividades de sólidos.

Conductividad eléctrica



- Los materiales sólidos exhiben un asombroso intervalo de conductividad que se extiende sobre 27 órdenes de magnitud
- La conductividad de la mayoría de los semiconductores y aislantes aumenta rápidamente con la temperatura, mientras que la de los metales muestra una gradual disminución



Conductividad electrica

- Los sólidos conducen la electricidad cuando tienen electrones desapareados
- La conductividad se explica por la **movilidad electrónica** en la banda
- En un metal eso solo es posible en las cercanías del nivel de Fermi
- En un semiconductor, la presencia de impurezas aumenta el número de electrones desapareados
- Para que un electrón se *vuelva* libre debe ser promovido a uno de los estados de energía disponibles y vacíos de la banda de conducción.
- En un conductor, se necesita muy poca energía para esa promoción. La energía suministrada por una pequeña diferencia de potencial (campo eléctrico) es suficiente para excitar grandes cantidades de electrones a estos niveles de conducción.
- La conductividad **disminuye con la temperatura** debido a que el aumento de las vibraciones de los cationes en la red cristalina dificulta su movilidad

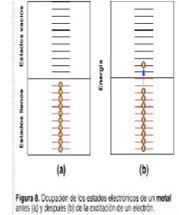
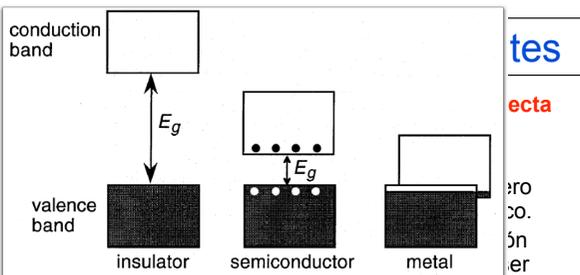


Figura 8. Ocupación de los estados electrónicos de un metal antes (a) y después (b) de la excitación de un electrón.

Conductores

- **Las propiedades de su estructura electrónica**
- Li: tiene semioocupada la banda de conducción (caso a). Conductor.
- Be: 1s². Tiene completamente ocupada la banda de conducción pero solapa con la banda de valencia (caso b). También es conductor eléctrico.
- **Semiconductor:** entre la banda de valencia y la banda de conducción hay una diferencia energética (*gap*). ~1eV. Los electrones pueden ser promovidos a la banda de conducción por diferentes medios. (caso c)
- **Aislante:** además de estar llena la capa de valencia, la banda de conducción está demasiado alejada para permitir la promoción electrónica. (caso d)



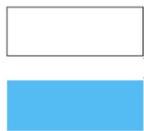
La conductividad depende de la separación de BV y BC



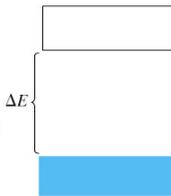
(a) Metal



(b) Metal



(c) Semiconductor



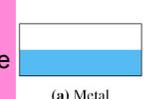
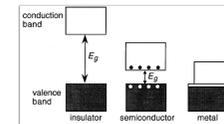
(d) Insulator

Conductores, semiconductores y aislantes

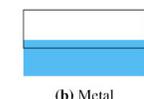
- **Las propiedades eléctricas de los sólidos son consecuencia directa de su estructura de bandas**
- Li: tiene semioocupada la banda de conducción (caso a). Conductor.
- Be: 1s². Tiene completamente ocupada la banda de conducción pero solapa con la banda de valencia (caso b). También es conductor eléctrico.
- **Semiconductor:** entre la banda de valencia y la banda de conducción hay una diferencia energética (*gap*). ~1eV. Los electrones pueden ser promovidos a la banda de conducción por diferentes medios. (caso c)
- **Aislante:** además de estar llena la capa de valencia, la banda de conducción está demasiado alejada para permitir la promoción electrónica. (caso d)



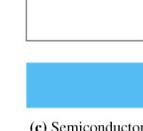
La conductividad depende de la separación de BV y BC



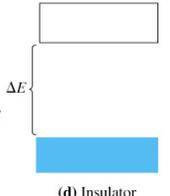
(a) Metal



(b) Metal



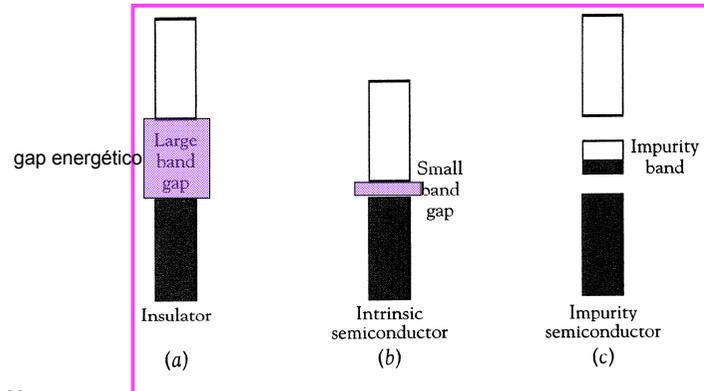
(c) Semiconductor



(d) Insulator

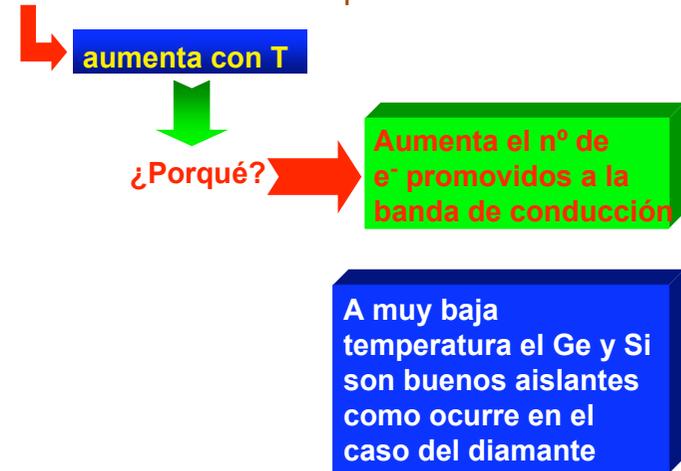
Estructura de bandas en los semiconductores

La energía térmica puede promover electrones a la banda vacía si la separación energética (gap energético) $\Delta E < 100 \text{ kJ/mol} (< 1 \text{ eV})$



Variación de la conductividad con T

¿Cómo varía la conductividad de un semiconductor con la temperatura?

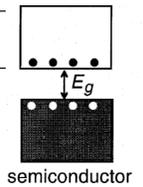


Semiconductores

- Nuestra tecnología depende del uso de semiconductores.
- ¿Qué son y para que sirven?

Tipos de semiconductores

- Según el origen de la conductividad, los semiconductores se clasifican en:
 - Semiconductores intrínsecos** son aquellos cuyo comportamiento se basa en la estructura electrónica inherente al material puro.
 - Ge ($\Delta E \approx 0,6 \text{ eV}$).
 - Si ($\Delta E \approx 1,1 \text{ eV}$) es el más utilizado.
 - Semiconductores extrínsecos:** son aquellos en los características eléctricas del material base (Ge o Si) vienen **moduladas por la presencia de átomos de impurezas**.
 - El comportamiento eléctrico viene determinado por el tipo y cantidad de impurezas. **DOPADO**
 - El Si puro (tetravalente) se puede dopar con pequeñas cantidades de elementos pentavalentes (P, As, etc.) o trivalentes (B, Al, etc.) para mejorar sus propiedades semiconductoras.
- Según el dopante pueden ser de dos tipos: **p o n**.



Dopado de semiconductores



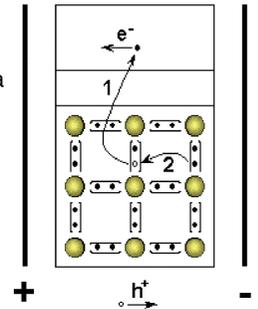
El **Dopado** consiste en la introducción de impurezas de un elemento dentro de cristales del material base durante su formación con el objeto de modificar sus propiedades. El dopante debe formar parte de la estructura cristalina sustituyendo al dopado.

Se pueden obtener semiconductores con unas propiedades eléctricas precisas según el uso al que estén dedicados.

Semiconductores intrínsecos

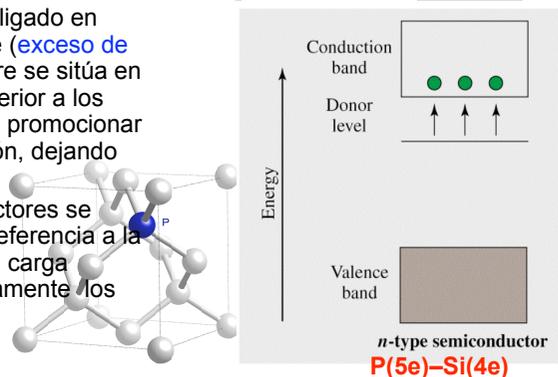
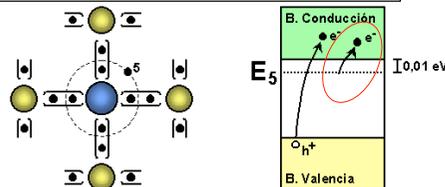
- Cuando el cristal se encuentra a temperatura ambiente, algunos electrones pueden, absorbiendo la energía necesaria, saltar a la banda de conducción, dejando el correspondiente **hueco** en la banda de valencia.
- Obviamente el proceso inverso también se produce, de modo que los electrones pueden *caer* desde el estado energético correspondiente a la banda de conducción, a un hueco en la banda de valencia liberando energía. A este fenómeno, se le denomina **recombinación**.
 - A una determinada temperatura, las velocidades de creación de pares e-h, y de recombinación se igualan, de modo que la concentración global de electrones y huecos permanece invariable. **NO HAY CORRIENTE**.
- Si se somete el cristal a una diferencia de tensión, se producen dos corrientes eléctricas:
 - La debida al movimiento de los electrones libres de la banda de conducción
 - La debida al desplazamiento de los electrones en la banda de valencia, que tenderán a *saltar* a los huecos próximos, originando una **corriente de huecos** en la dirección contraria al campo eléctrico cuya velocidad y magnitud es muy inferior a la de la banda de conducción.

Silicio



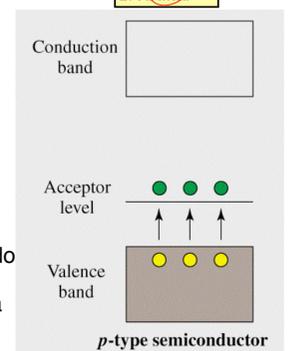
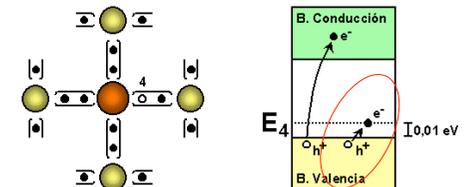
Semiconductores extrínsecos de tipo n

- **Tipo n:** Silicio (4e⁻) dopado con P (5e⁻).
- Al formarse la estructura, cada P utiliza 4 electrones para formar enlaces con cuatro átomos de Si vecinos.
- El 5º electrón no estará ligado en ningún enlace covalente (**exceso de carga**). Aún sin estar libre se sitúa en un nivel energético superior a los otros cuatro (**E₅**). Puede promocionar a la banda de conducción, dejando al P⁺.
- Este tipo de semiconductores se denomina de tipo n en referencia a la que los portadores de la carga eléctrica son mayoritariamente los electrones



Semiconductores extrínsecos de tipo p

- **Tipo p:** Silicio dopado con Al (3e⁻).
- Las impurezas aportan una **vacante electrónica**
- El nivel de energía de los átomos de Al se sitúa justo por encima de la banda de valencia del Si. Cada Al utiliza sus electrones para formar enlaces (por pares de electrones) con tres átomos de Si vecinos.
- El cuarto enlace Al-Si está formado por un solo electrón
- Un electrón es promovido fácilmente de la banda de valencia a un átomo de Al formando un ion negativo Al⁻ (**nivel E₄**). Se crea así un hueco positivo en la banda de valencia
- Los electrones saltarán a las vacantes con facilidad dejando huecos en la banda de valencia en mayor número que electrones en la banda de conducción, de modo que ahora son los huecos los portadores mayoritarios. Semiconductores de tipo p.

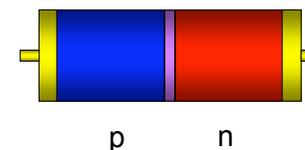


Difusión

- Como acabamos de ver, en un semiconductor sometido a una campo eléctrico, se producen dos corrientes de desplazamiento:
 - la de electrones en la banda de **conducción** y
 - la de huecos en la banda de valencia
- A éstas hay que añadir la difusión, que es el proceso mediante el cual las propiedades de un sólido se *reparten* a lo largo de su volumen hasta hacerse uniformes en todo él.

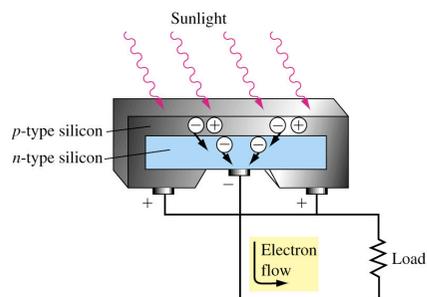
Dispositivos p-n

- Diodo semiconductor
 - si la corriente se aplica en un sentido determinado, esta atraviesa la unión
 - si cambiamos de sentido la corriente no pasa

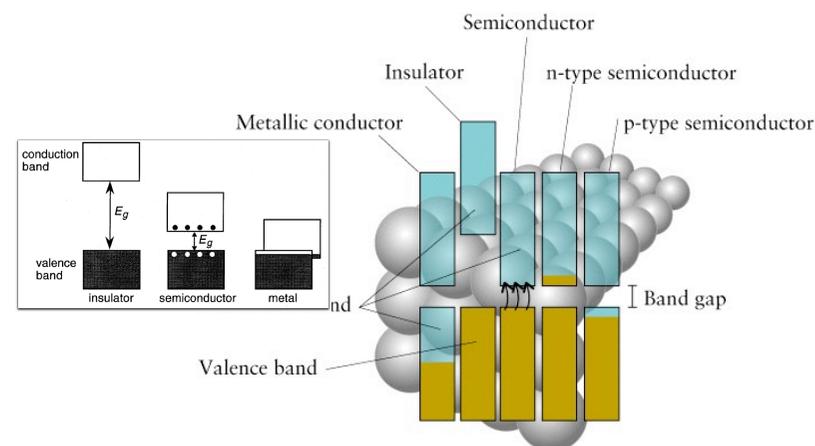


Dispositivos p-n

- Células fotovoltaicas combinación de semiconductores de tipo p y n.
 - El semiconductor de tipo p recibe radiación lumínica que excita los electrones de la banda de valencia a la banda de conducción, creando agujeros positivos en la banda de valencia
 - Los electrones pueden cruzar fácilmente la unión p-n (a diferencia de los huecos positivos que no pueden hacerlo)
 - Se produce así un flujo neto de electrones
 - Los electrones pueden ser transportados por cables a un circuito externo y a veces devueltos al semiconductor p donde llenan los huecos positivos
 - El proceso continua mientras la célula reciba luz solar



Estructura de bandas de diferentes sólidos



Recuerda que lo que distingue a un aislante de un conductor es la separación entre la banda de valencia y la banda de conducción

Conductividad térmica

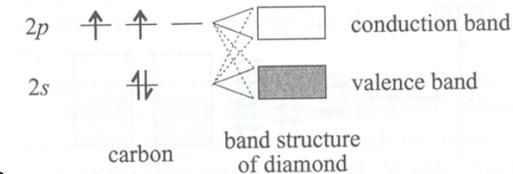
- Gran parte del transporte térmico en los sólidos se lleva a cabo por los electrones móviles de los niveles superiores de la banda
- Otros sólidos transportan el calor por vibraciones atómicas. **Caso del diamante.** Su alta conductividad térmica se debe a este mecanismo

Table 7.1. Thermal Conductivities of Various Substances

Material	Thermal Conductivity (watt/cm-K)
Air	0.00026
Glass wool	0.00042
Corkboard	0.00043
Carbon tetrachloride	0.0010
White pine	0.0011
Oak	0.0015
He	0.001520
Water	0.0061
Glass	0.0072–0.0088
Hg	0.083
Concrete	0.0086–0.013
SiC	0.090 (100 °F)
NaCl	0.092 (0 °C)
ZnS (zinc blende)	0.264 (0 °C)
Al ₂ O ₃	0.303 (100 °C)
Pb	0.353
Cs	0.359
MgO	0.360 (100 °F)
Rb	0.582
Fe	0.804
Li	0.848
K	1.025
C (graphite) ^a	1.1–2.2
Zn	1.16
Brass	1.2
Na	1.42
Mg	1.56
Be	2.01
BeO	2.20 (100 °F)
Al	2.37
Au	3.18
Cu	4.01
Ag	4.29
C (diamond) ^b	9.9–23.2

Bandas en sólidos covalentes

- C (diamante) es un aislante eléctrico
 - la banda de valencia está completamente ocupada
 - la banda de conducción está suficientemente alejada como para que los electrones puedan acceder a ella por simple excitación térmica.
 - Si y Ge tienen unos gaps menores. Por eso son semiconductores
- Sólidos como TiO₂ o CdS₂ tienen gaps pequeños de modo que si los irradiamos con luz se convierten en conductores o adquieren interesantes propiedades redox



Comportamiento metálico en otras fases

- El comportamiento metálico es frecuente en **fases sólidas**
- En **fase líquida** la mezcla de orbitales puede ser suficiente como para conservar las propiedades metálicas (caso del Hg)
- En **fase gaseosa** el comportamiento metálico deja de existir
 - En fase gaseosa los elementos metálicos están formando moléculas como el Li₂ o como átomos individuales (Be)

Estructura de los metales

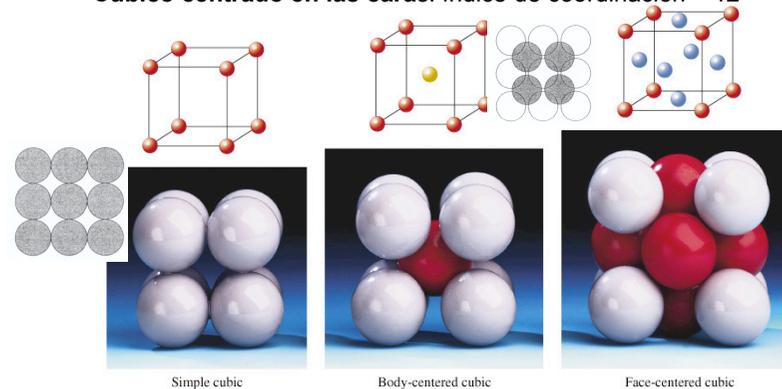
Empaquetamiento de esferas

- Las estructuras de los metales (y de sólidos iónicos) se racionalizan mediante el modelo de **empaquetamiento de esferas**
- El concepto de empaquetamiento supone que los átomos son **esferas rígidas** que se distribuyen para optimizar la ocupación del espacio disponible
- ¿Cómo podemos acomodar esferas de tamaño uniforme? Veámoslo en dos dimensiones

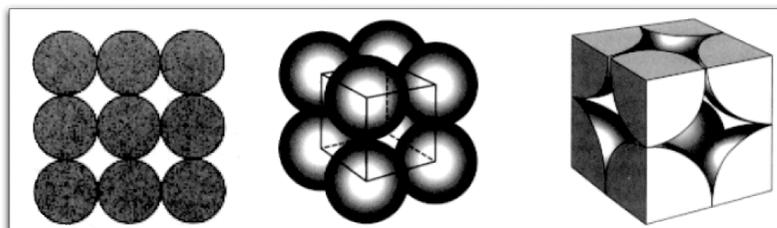


Empaquetamiento cúbico

- Cúbico simple**: no es muy compacto. Muy poco habitual. Uno de los escasos ejemplos: α -Po)
- Cúbico centrado en el cuerpo**: índice de coordinación = 8
- Cúbico centrado en las caras**: índice de coordinación = 12



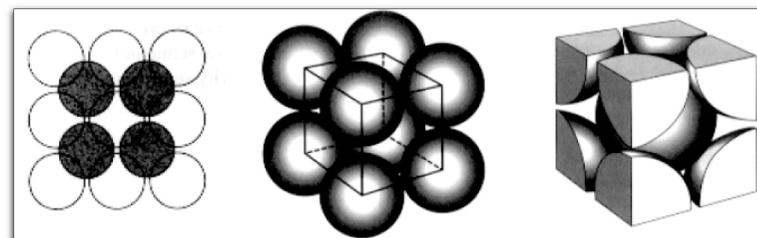
Empaquetamiento cúbico simple



empaquetamiento
bidimensional

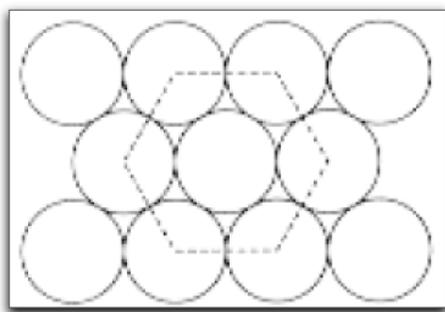
empaquetamiento
tridimensional

Cúbico centrado en el cuerpo

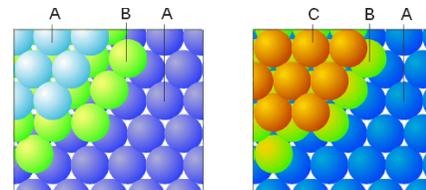


Empaquetamiento compacto

- Es el más eficiente en cuanto a la utilización del volumen
- El empaquetamiento compacto se basa en una **distribución de esferas tipo hexagonal**

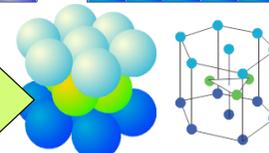


Empaquetamientos de máxima densidad



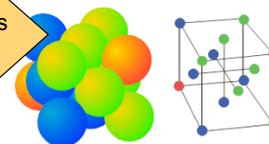
(a)

hexagonal compacta
ABABAB



(a)

cúbica centrada caras
ABCABC



(b)

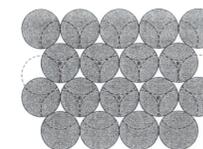


Figura 4.9 En el empaque hexagonal, la segunda capa (gris) encaja sobre huecos alternados de la primera capa. La distribución de empaque compacto hexagonal implica colocar la tercera capa (lugares marcados con asteriscos) sobre la parte superior de la primera capa.

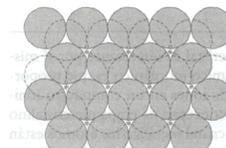
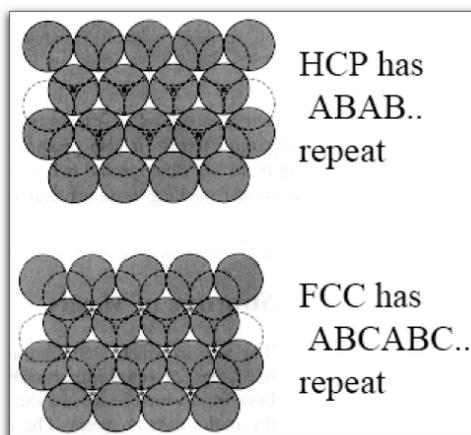


Figura 4.10 En la disposición de empaque compacto cúbico la tercera capa (lugares marcados con asteriscos) está colocada sobre los huecos de la primera y la segunda capa.

Empaquetamientos de máxima densidad

- Son los más habituales para los metales



HCP has
ABAB..
repeat

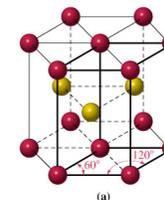
hexagonal

FCC has
ABCABC..
repeat

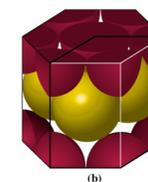
cúbico

Empaquetamiento hexagonal

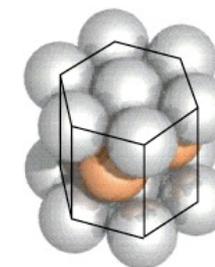
- **Hexagonal compacto:** índice de coordinación = 12



(a)



(b)

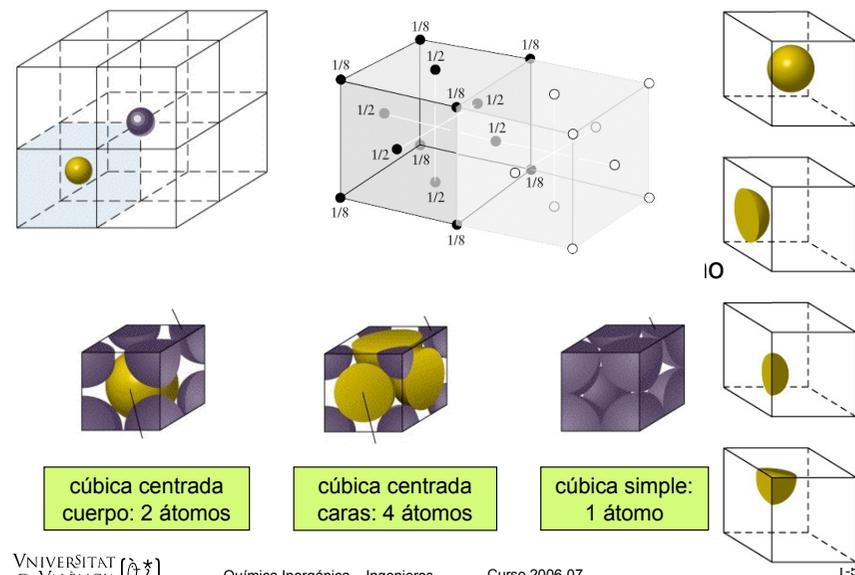


Eficacia del empaquetamiento

Tipo de empaquetamiento	Denominación (sajona)	Numero de coordinación	Ocupación	Ejemplos
Cúbico simple	cs (sc)	6	52	α -Po y algunos compuestos iónicos
Cúbico centrado en el cuerpo	ccc (bcc)	8	68	Fe, K, Na, W
Cúbico compacto (cúbico centrado en las caras)	cc (fcc, ccp)	12	74	Al, Cu, Pb, Ag
Hexagonal compacto	ch (hcp)	12	74	Cd, Mg, Ti, Zn

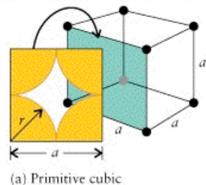
Los empaquetamiento de máxima densidad son los **cúbico y hexagonal compactos**. Son los preferidos por la mayoría de los metales ya que aseguran una máxima ocupación del espacio. El índice de coordinación máximo alcanzable es 12

Contando la ocupación de la red



Estimación de la densidad para diferentes estructuras

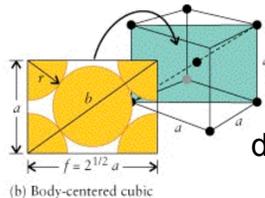
a) para una celda cúbica primitiva



el número de átomos por celda es =1

$$d = \frac{m}{V} = \frac{M/N_A}{a^3} = \frac{M/N_A}{(2r)^3} = \frac{M}{8N_A r^3}$$

b) para una celda cúbica centrada en el cuerpo



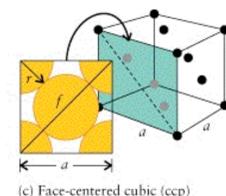
el número de átomos por celda es =2

$$\begin{cases} a^2 + f^2 = b^2 = (4r)^2 \\ f^2 = 2a^2 \end{cases} \Rightarrow 3a^2 = (4r)^2 \Rightarrow a = \frac{4r}{3^{1/2}}$$

$$d = \frac{m}{V} = \frac{2 \cdot M/N_A}{a^3} = \frac{2 \cdot M/N_A}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\sqrt{3} \cdot M}{32 \cdot N_A r^3}$$

Estimación de la densidad para diferentes estructuras

c) para una celda cúbica centrada en las caras



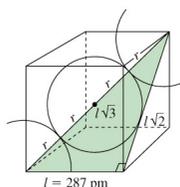
el número de átomos por celda es =4

$$a^2 + a^2 = (4r)^2 \Rightarrow 2a^2 = (4r)^2 \Rightarrow a = \sqrt{8} \cdot r$$

$$d = \frac{m}{V} = \frac{4 \cdot M/N_A}{a^3} = \frac{4 \cdot M/N_A}{(\sqrt{8} \cdot r)^3} = \frac{4 \cdot M}{8^{3/2} \cdot N_A r^3}$$

Ejercicio

El wolframio tiene una estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo. Utilizando un radio metálico de 139 pm para el átomo de W, calcula su densidad.



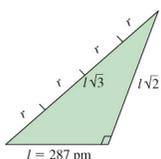
$$d(W) = \frac{m}{V}$$

$$m = 2 \text{ átomos W} \frac{183,85 \text{ g}}{6,023 \cdot 10^{23} \text{ átomos}} = 6,10 \cdot 10^{-22} \text{ g}$$

$$V = l^3$$

$$l^2 + 2l^2 = (2R + 2R)^2 = 16R^2$$

$$3l^2 = 16R^2 \Rightarrow l = R \sqrt{\frac{16}{3}} = 139 \cdot 10^{-10} \sqrt{\frac{16}{3}} \text{ cm} = 3,21 \cdot 10^{-8} \text{ cm}$$



$$d(W) = \frac{m}{V} = \frac{6,10 \cdot 10^{-24} \text{ g}}{(3,307 \cdot 10^{-23} \text{ cm})^3} = 18,44 \text{ g/cm}^3$$

Estructuras de algunos metales

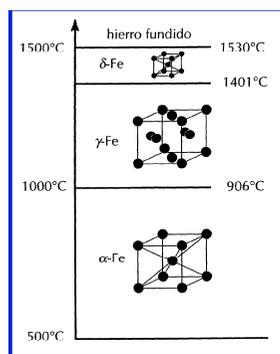
- Los metales son generalmente polimórficos:
 - presentan diferentes estructuras en función de P y T
 - en la tabla se presentan las estructuras estables comunes de los metales

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	Li	Be									
2	Na	Mg									
3	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu
4	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag
5	Cs	Ba	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pr	Au
6	Fr	Ra									

■ cc
■ ccc
■ ch

Polimorfismo

- El Fe es un caso especialmente rico de polimorfismo
 - Se denominan α , β , γ , δ ,...
 - La forma α suele identificar la más estable a baja temperatura.
- Sn:
 - β -Sn (estaño blanco) es mas denso que el estaño gris (α -Sn, de aspecto no metálico y quebradizo). Temperatura de transición 14.2 °C



Aleaciones

Presentan las propiedades típicas de los metales pero moduladas a tenor de la función para la que se diseñan.



Tienen una enorme importancia tecnológica



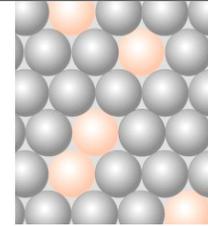
muchos cuadros de bicicletas están contruidos con aleaciones muy ligeras conteniendo Mn, Mo y Ti

Aleaciones

- **Aleación:**
 - Es un material compuesto por más de un elemento que presenta las propiedades típicas de metales
 - Es la fase sólida que se obtiene al enfriar una mezcla líquida de dos o más componentes
- **Clasificación**
 - **Disoluciones sólidas:** son mezclas homogéneas en las que los componentes están uniformemente dispersos (en términos de disolución: *los átomos del soluto se distribuyen al azar entre los átomos del disolvente*). Pueden ser de dos tipos:
 - **sustitucionales:** los átomos del soluto ocupan posiciones del disolvente
 - **intersticiales:** los átomos del soluto ocupan posiciones intersticiales de la red.
 - **Compuestos intermetálicos:** son aleaciones homogéneas que tienen propiedades y composición definida (Ej: duraluminio (Cu_2Al), Ni_3Al , Cr_3Pt)
 - **Aleaciones heterogéneas:** son aleaciones en las que los componentes no están uniformemente dispersos. Las propiedades de estas aleaciones dependen no sólo de la composición sino de la manera en que se ha formado el sólido

Disoluciones sólidas

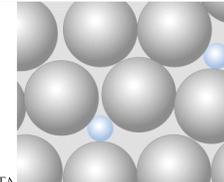
disolución sólida de sustitución



Condiciones:

- Los radios de ambos elementos deben ser similares para que no se inestabilice la red cristalina ($\text{dif} < 15\%$)
- Las estructuras cristalinas de los dos metales puros deben ser las mismas
- El carácter electropositivo de los componentes ha de ser semejante
- El Au y el Cu forman una sola fase en cualquier proporción

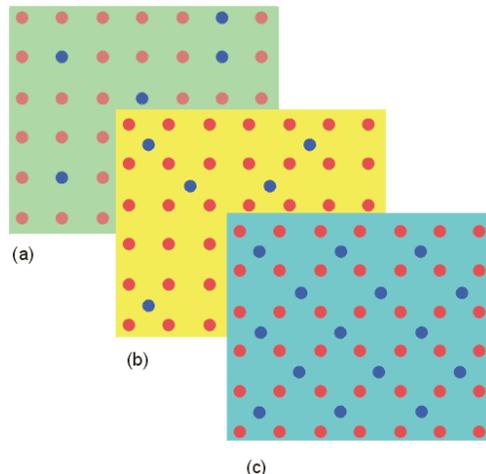
disolución sólida intersticial



Condiciones:

Los radios de ambos elementos deben ser muy diferentes. El alojamiento de átomos de H, B, C o N requiere que el radio del anfitrión no sea inferior a 90, 195, 188 o 180 pm, respectivamente

Disoluciones sólidas



(a) sustitucional
(b) y (c) intersticial

Aleaciones comunes

Nombre	Composición (%)	Propiedad	Usos
Latón	Cu: 70–85, Zn: 15–30	Más duro que el Cu	Fontanería
Oro de 18 quilates	Au: 75, Ag: 10–20, Cu: 5–15	Más duro que el Au (24 kilates)	Joyería
Acero inoxidable	Fe: 65–85, Cr: 12–20, C: 0,1...1, otros	Resistencia a la corrosión	Herramientas

- Quilate: sistema inventado por los británicos en 1300
- Oro puro: 24 K
- Oro 18 K contiene un 75% de oro

$$K=24 \cdot \text{fracción de masa de oro puro}$$

Amalgama de Hg en los dientes

- **Amalgama:** aleación de Hg con otros metales
- Composición utilizada en ortodoncia:
 - **Hg:** (50-55%)
 - **Ag:** (23-35 %)
 - **Sn:** (1-15%)
 - **Zn:** (1-20 %)
 - **Cu:** 5-20%)
- La fijación a los huecos de los dientes se asegura por la inclusión del Hg en la estructura del metal, expandiéndose su red cristalina
- A pesar de que el Hg es un elemento muy tóxico es aceptable su uso en ortodoncia ya que, amalgamado, disminuye drásticamente su presión de vapor
- **Problema en la actualidad:** incineraciones masivas de cadáveres que provoca la emisión a la atmósfera de Hg(g)



¿nuevos metales?

Vidrios metálicos

- Los metales no son necesariamente cristalinos
- **Vidrio:** sólidos en los que no hay orden a largo alcance. Son materiales termodinámicamente inestables respecto de la cristalización.
- **Vidrios metálicos** se consiguen mediante una rápida solidificación del metal fundido. Son materiales de gran interés tecnológico por su elevada tenacidad, indeformabilidad y resistencia mecánica.

The case for
bulk metallic glass

by Mark Telford

<http://www.materialstoday.com>

vol 7, nº3, marzo 2004 (pp. 36–43)

materialstoday

Space for bulk metallic glass
Enabling the biotech revolution
Glass gets smart



Fig. 5 A HEAD Radical tennis racket, which incorporates LIQUIDMETAL Technologies' Vitraloy technology, in the hands of Andre Agassi.

