

**Propiedades mecánicas y térmicas de sólidos y fluidos.**  
**HOJA 3: ENLACES**

---

1) Utilizando el potencial de Lennard-Jones calcular la razón entre las energías de cohesión que tendría una "gas" noble en fase sólida, para las estructuras bcc y fcc. ¿Cuál es teóricamente más estable? la suma para toda la red de los inversos de las distancias a los primeros y sucesivos vecinos para la red bcc son:

$$\sum \frac{1}{p_{ij}^{12}} = 9.11418; \quad \sum \frac{1}{p_{ij}^6} = 12.2533$$

2) Calcular  $\sum \frac{1}{p_{ij}^{12}}$ ,  $\sum \frac{1}{p_{ij}^6}$  sumando hasta los terceros vecinos para la red fcc y para la bcc. Disponiendo de

ordenador es un problema interesante hacer un programa de ordenador para calcularlos con un gran número de términos. Se sugiere hacerlo modificando ligeramente el programa dado para la constante de Madelung. Ayuda: para fcc sólo hay que eliminar de la suma los iones de un signo y poner el potencial como  $1/r^6$  o  $1/r^{12}$  en lugar de  $1/r$ , que es el electrostático.

3) Consideremos una línea de  $2N$  átomos con cargas alternantes  $\pm q$ , sometidas además a un potencial repulsivo  $A/R^n$ , siendo  $A$  una constante conocida y  $R$  la distancia entre vecinos.

a) Escribir la energía del sistema (considerar  $N$  muy grande para las sumas) y determinar la posición de equilibrio,  $R_0$ .

b) Se aplica una fuerza  $F$  de tracción a los extremos de la cadena. ¿Cuál es la nueva posición de equilibrio? Demostrar que el trabajo realizado al alargarla hasta que la distancia entre vecinos sea  $R_0(1+\delta)$  es  $C\delta^2/2$ ,

$$\text{siendo: } C = (n-1) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q^2}{R_0} \ln 2$$

4) Determinar la compresibilidad a baja temperatura para:

a) Un sólido de van der Waals con estructura fcc. Tomar datos de  $e$  y  $s$  de un gas noble.

b) Un sólido iónico con estructura de NaCl

c) Un sólido iónico con estructura CsCl.

Se define  $B \equiv \frac{1}{k_T} \cong \frac{1}{k_S} \equiv -V \left( \frac{\partial P}{\partial V} \right)_S \equiv V \left( \frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_S$ , donde  $U$  es la energía interna en equilibrio

(energía de cohesión) para un volumen  $V$  de material. Tómese por ejemplo  $V =$  volumen de la celda unidad.

5) Una buena aproximación para la energía de interacción entre dos átomos unidos por enlace covalente es el potencial de Morse (notar que el cero de energías no está tomado para  $R \rightarrow \infty$ ):

$$U(R) = D \left[ 1 - e^{-\alpha(R-R_0)} \right]^2$$

donde  $D$  tiene unidades de energía,  $\alpha$  es un parámetro con dimensiones de longitud<sup>-1</sup> y  $R_0$  es la distancia de equilibrio para una molécula formada por dos átomos, con un solo enlace. El gas etano ( $\text{CH}_3\text{-CH}_3$ ) tiene un enlace covalente C-C y se observa (Handbook of Physics and Chemistry) que la distancia C-C es  $1.5351 \text{ \AA}$ , la energía de disociación del enlace C-C es de  $376 \text{ kJ/mol}$  y la constante de fuerza del mismo es  $C \equiv$

$(dF/dR)_{eq} = 50 \text{ N/cm}$ . Determinar la constante  $\alpha$  para el etano. Con esos datos determinar para el diamante:

a) La energía de cohesión para un mol de diamante y el parámetro de celda.

b) La compresibilidad a partir de la energía de interacción atómica.

Buscar datos experimentales del diamante y comparar con lo obtenido a partir de datos del etano. Sacar conclusiones.

6) Tenemos un sólido que cristaliza en una estructura cúbica simple, con un solo átomo por celda unidad.

a) Calcular su energía de cohesión con las siguientes aproximaciones:

\* Los átomos interactúan con un potencial de Lennard Jones con parámetros del argón.

\* Sólo se tiene en cuenta la interacción entre primeros y segundos vecinos.

b) Obtener el parámetro de red del sólido y su compresibilidad.