

## **Semana 3. Enlace cristalino.**

### Bibliografía:

Introduction to Solid State Physics, 8<sup>th</sup> edition, C. Kittel.  
Chapter 3.

### Tópicos:

Cristales de gases inertes (nobles)

Cristales iónicos

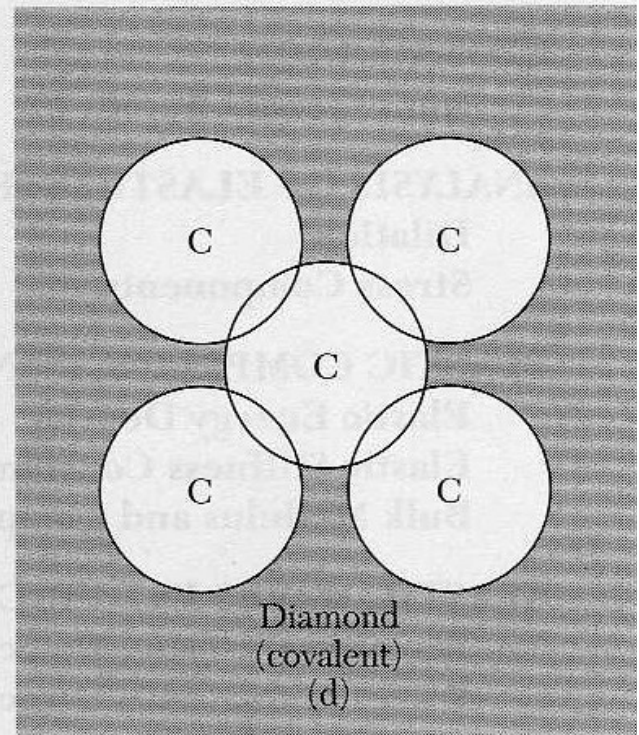
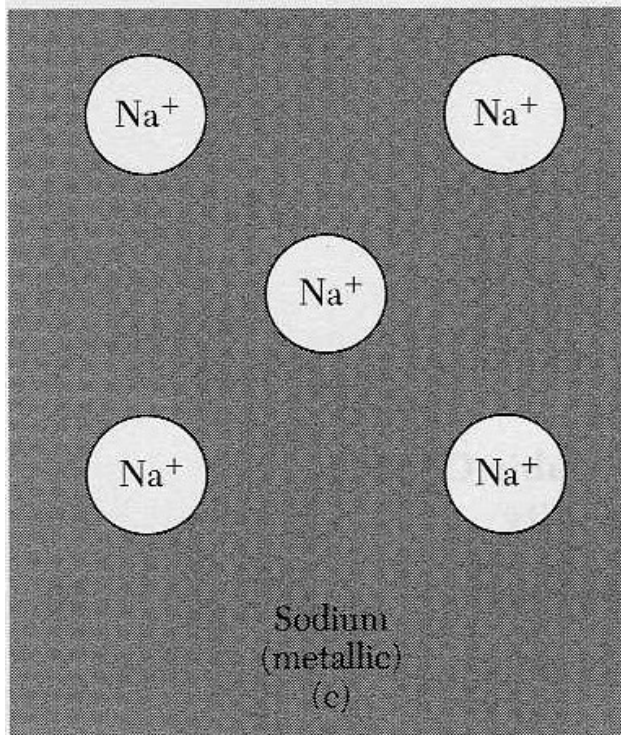
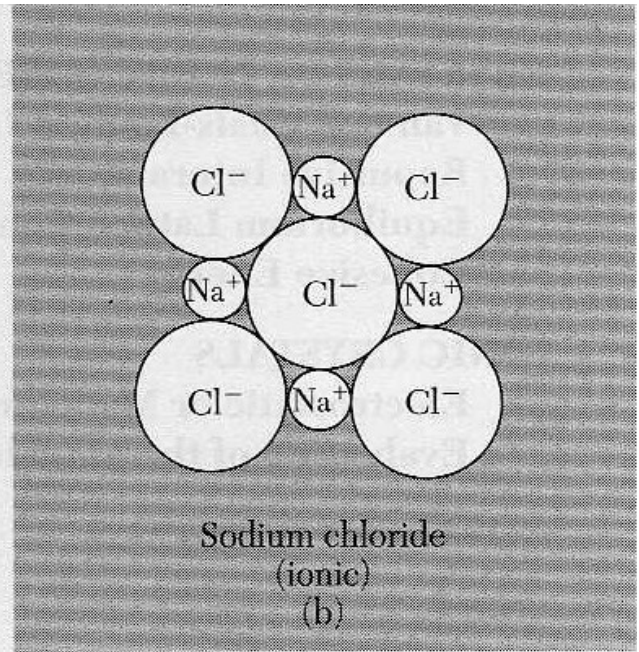
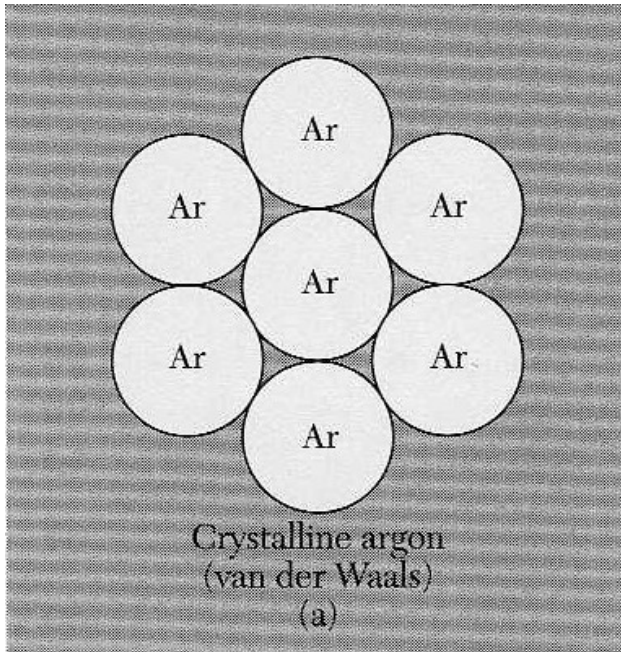
Cristales covalentes

Metales

Enlaces de hidrógeno

Radios atómicos

## Tipos de enlace cristalino



Energía de cohesión es la energía que debe suministrarse a un cristal para separarlo en átomos libres neutros en reposo, separados infinitamente.

Energía de la red. Concepto usado para cristales iónicos. Es la energía que debe darse al cristal para separarlo en iones libres en reposo, infinitamente separados.

Se debe casi enteramente a la energía de atracción entre las cargas positivas de los núcleos y las negativas de los electrones. Las fuerzas magnéticas son secundarias. La gravitación es despreciable (excepto en materia neutrónica).

Energía de cohesión ordenada por clases

Cristales de gases inertes < Metales alcalinos < Metales de transición

## **Cohesión de cristales de gases inertes**

Aislantes transparentes.

Debilmente ligados.

Altas energías de ionización.

Capas cerradas.

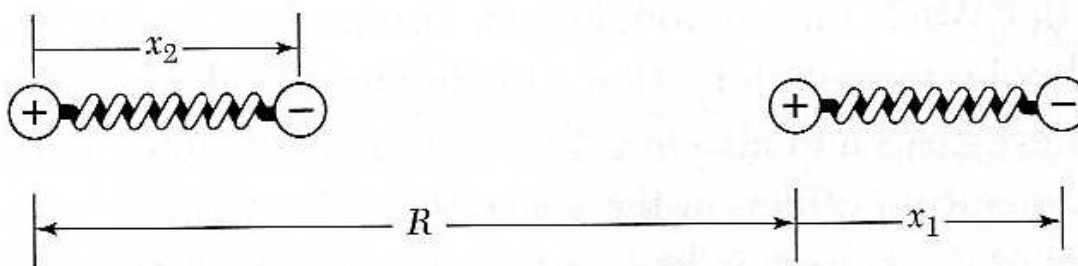
Se empaquetan de la forma más compacta posible (fcc, excepto He líquido).

La interacción electrostática es casi completamente apantallada.

La atracción se origina en dipolos inducidos entre los átomos.

## Origen de la interacción van der Waals-London.

Consideremos un modelo de dos osciladores lineales 1 y 2, muy separados en  $R$ .



Cada oscilador lleva cargas  $\pm e$ , separadas  $x_1$  y  $x_2$ .

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = \frac{1}{2m} p_1^2 + \frac{1}{2} C x_1^2 + \frac{1}{2m} p_2^2 + \frac{1}{2} C x_2^2,$$

$$H_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + x_1 - x_2} - \frac{e^2}{R + x_1} - \frac{e^2}{R - x_2}.$$

Si se aproxima  $|x_1| < 1, |x_2| < 1$  se puede expandir

$$\frac{1}{R + \alpha} = \frac{1}{R} \left( 1 + \frac{\alpha}{R} \right)^{-1} \simeq \frac{1}{R} \left( 1 - \frac{\alpha}{R} + \frac{\alpha^2}{R^2} - \dots \right)$$

$$\sum \alpha = x_1 - x_2 - x_1 + x_2 = 0$$

$$\sum \alpha^2 = (x_1 - x_2)^2 - x_1^2 - (-x_2)^2 = -2x_1x_2$$

$$H_1 \simeq -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}$$

Este hamiltoniano se separa en osciladores independientes mediante la transformación

$x_s = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}, \quad x_a = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}}$	$x_1 = \frac{x_a + x_s}{\sqrt{2}}, \quad x_2 = \frac{x_a - x_s}{\sqrt{2}}$
--	--

Para los momentos se obtiene la misma relación

$$p_1 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1}, \quad p_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_2}$$

Usando la regla de la cadena

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial x_s} \frac{\partial x_s}{\partial x_1} + \frac{\partial f}{\partial x_a} \frac{\partial x_a}{\partial x_1} = \frac{\partial f}{\partial x_s} \frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{\partial f}{\partial x_a} \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = \frac{\partial f}{\partial x_s} \frac{\partial x_s}{\partial x_2} + \frac{\partial f}{\partial x_a} \frac{\partial x_a}{\partial x_2} = \frac{\partial f}{\partial x_s} \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{\partial f}{\partial x_a} \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$p_1 = \frac{p_s + p_a}{\sqrt{2}}, \quad p_2 = \frac{p_s - p_a}{\sqrt{2}}$$

Con lo cual el hamiltoniano expresado en las nuevas variables

$$H = \left[ \frac{p_s^2}{2m} + \frac{1}{2} \left( C - \frac{2e^2}{R^3} \right) x_s^2 \right] + \left[ \frac{p_a^2}{2m} + \frac{1}{2} \left( C + \frac{2e^2}{R^3} \right) x_a^2 \right]$$

$$= \left[ \frac{p_s^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_s^2 x_s^2 \right] + \left[ \frac{p_a^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_a^2 x_a^2 \right],$$

donde  $\omega_s = \sqrt{(C - 2e^2/R^3)/m}$ ,  $\omega_a = \sqrt{(C + 2e^2/R^3)/m}$ .

Similarmente definimos  $\omega_0 = \sqrt{C/m}$ .

Si se cumple la condición de “enlace fuerte”

$$C \gg 2e^2/R^3$$

se puede expandir

$$\omega_{s,a} = \sqrt{(C \mp 2e^2/R^3)/m} \simeq \omega_0 \left[ 1 \mp \frac{1}{2} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right) - \frac{1}{8} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 \pm \dots \right]$$

La energía del estado básico del sistema de dos osciladores es

$$E_0(R) = \frac{1}{2} (\hbar \omega_s + \hbar \omega_a) = \hbar \omega_0 - \hbar \omega_0 \frac{1}{8} \left( \frac{2e^2}{CR^3} \right)^2,$$

$$E_0(R) = \hbar \omega_0 - \frac{A}{R^6}$$

El término  $-A/R^6$  representa una interacción atractiva y se conoce como interacción de van der Waals o interacción de London o interacción entre dipolos inducidos.

Físicamente, podemos pensar que los dos dipolos oscilantes se correlacionan de manera que hay dos cargas opuestas mas cerca y dos mas lejos, dando una energía neta negativa.

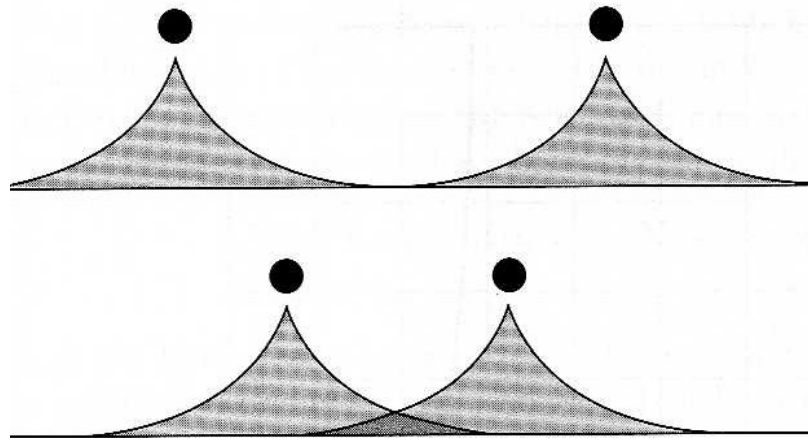
$$H_1 \simeq -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3} = -\frac{2d_1 d_2}{R^3}$$

Es un efecto cuántico, pues desaparece cuando  $\hbar \rightarrow 0$  .

Efecto relacionado *Resonance Förster Energy Transfer*.

## **Interacción repulsiva entre átomos**

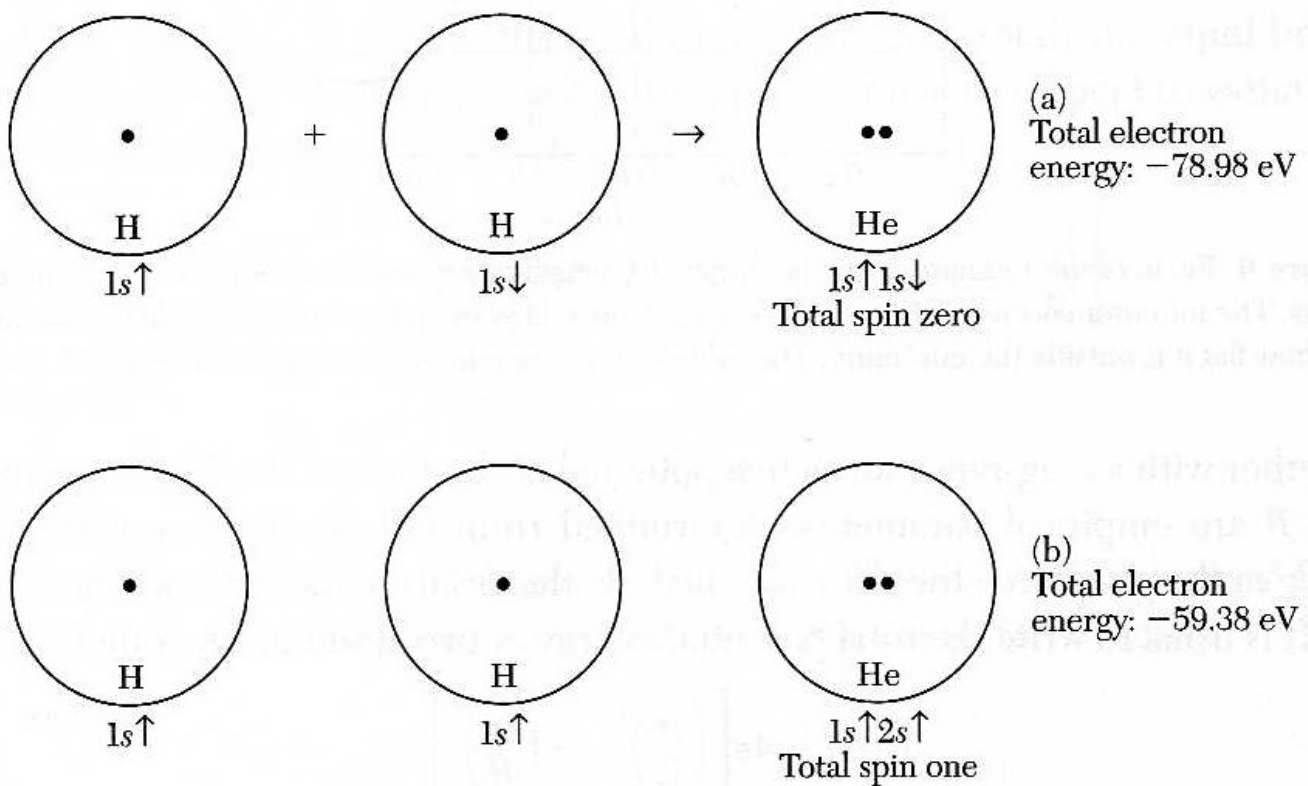
Solapamiento de densidades de carga



El principio de exclusión de Pauli sintetiza el hecho de que no puede haber dos electrones con los mismos números cuánticos (de espín y orbitales). Si hay tendencia a que esto ocurra, el sistema se reacomoda en un estado de mayor energía. El efecto es mayor en sistemas de capas cerrada, donde cualquier reajuste de los estados implica poblar un estado de mayor energía. Esta explicación parece algo difusa. Para tener mas precisión hay que estudiar las funciones de onda multielectrónicas por un formalismo al estilo de Hatree-Fock.



Consideremos el caso de 2 hidrógenos aproximándose, hasta formar algo parecido a un He.



Un caso extremo es el de dos átomos de hidrógeno que se acercan hasta formar idealmente un Helio. Cuando los espines son antiparalelos, los dos electrones pueden ocupar el estado  $1s$  del He. Si los espines son paralelos, los dos electrones no pueden ocupar el mismo estado y se promueve un electrón al estado  $2s$ . El efecto neto es aumentar la energía. Si uniera dos He, las capas están cerradas y en cualquier caso hay que promover electrones a estados superiores.

La energía de overlap es compleja de calcular, pero se puede ajustar bien mediante una forma empírica

$$E_{Pauli} = \frac{B}{R^{12}}.$$

En el caso de los gases nobles, las constantes A y B (van der Waals-London y Repulsión de Pauli) se determinan a partir de propiedades de los gases (ej. viriales y viscosidad), y se utilizan para el sólido frío.

Es usual escribir la interacción en la forma de Lennard-Jones

$$U(R) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$$

donde  $4\epsilon\sigma^6 = A$ ,  $4\epsilon\sigma^{12} = B$ .

Constante de red en equilibrio

$$U_{tot} = \frac{N}{2} (4\epsilon) \sum_j \left[ \left( \frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^6 \right], \quad p_{ij}R = |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|.$$

Los factores  $p_{ij}$  dependen de la estructura. Para la red fcc

$$\sum_j \left( \frac{1}{p_{ij}} \right)^{12} = 12.13188\dots, \quad \sum_j \left( \frac{1}{p_{ij}} \right)^6 = 14.45392\dots$$

Nótese que en la red fcc hay 12 vecinos más próximos, para los que  $p_{ij}=1$ . Estos contribuyen la mayor parte de la energía de cohesión.

La condición de mínima energía se obtiene de

$$\frac{dU_{tot}}{dR} = 0 = -2N \epsilon \left[ (12)(12.13) \frac{\sigma^{12}}{R^{13}} - (6)(14.45) \frac{\sigma^6}{R^7} \right] .$$

de donde se obtiene

$$R_0 = 1.09 \sigma$$

Los valores medidos tiene un acuerdo notable

	Ne	Ar	Kr	Xe
$R_0/\sigma$	1,14	1,11	1,10	1,09

Energía de cohesión

$$U_{tot}(R_0) = 2 N \epsilon \left[ (12.13) \frac{\sigma^{12}}{R_0^{12}} - (14.45) \frac{\sigma^6}{R_0^6} \right] = -(2.15)(4 N \epsilon)$$

Esta energía es la misma para todos los gases inertes. Hay correcciones cuánticas derivada del movimiento del punto 0 que reducen la energía de enlace en 20, 10, 6 y 4 % para Ne, Ar, Kr y Xe. Para He, las correcciones cuánticas hacen que no sea sólido.

Modelo supersimple de las correcciones

Átomo confinado en longitud  $\lambda$ .

Momento  $p = \hbar/\lambda$

Energía cinética  $p^2/2M = (\hbar/\lambda)^2/2M$  .

**Menor masa** → **mayor energía cinética** y **menor energía de enlace**.

Otro ejemplo  $\text{Ne}^{20}$  vs  $\text{Ne}^{22}$  . El isótopo de menor masa tiene mayor energía cinética, para compensar adquiere mayor constante de red (lo cual reduce la cinética).

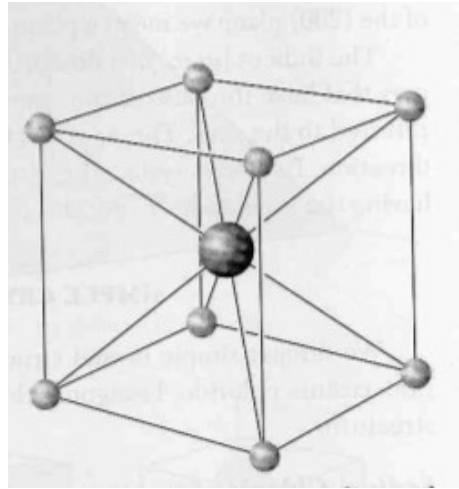
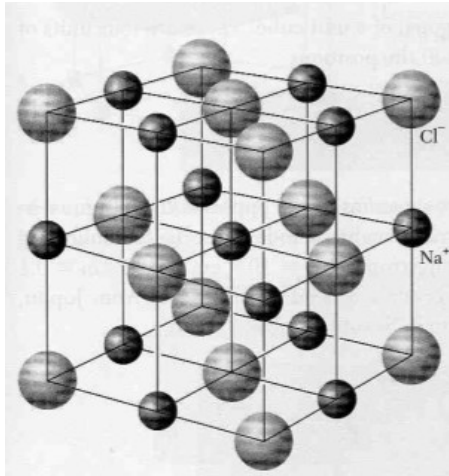
Isótopo	Parámetro de red
$\text{Ne}^{20}$	4,4644 Å
$\text{Ne}^{22}$	4,4559 Å

## Cristales iónicos

Se componen de iones positivos y negativos.

La cohesión resulta de la atracción electrostática.

Estructuras más comunes: NaCl y CsCl.



Cada ion tiene una estructura de capas llenas.

Ejemplo: LiF

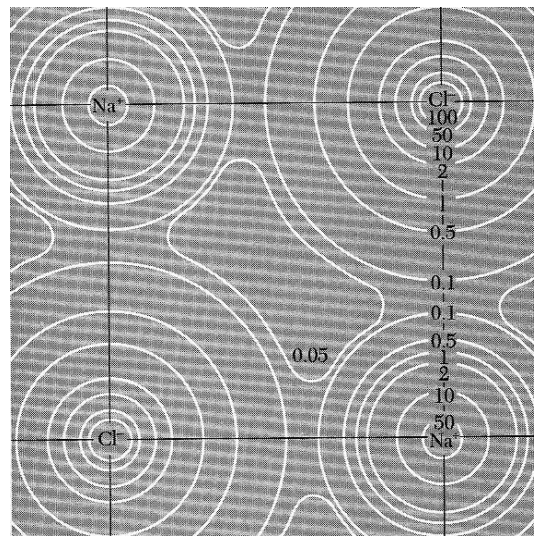
Átomos neutros. Li:  $1s^2 2s$ . F:  $1s^2 2s^2 2p^5$  .

Átomos ionizados:  $\text{Li}^+$ :  $1s^2$ .  $\text{F}^-$ :  $1s^2 2s^2 2p^6$  .

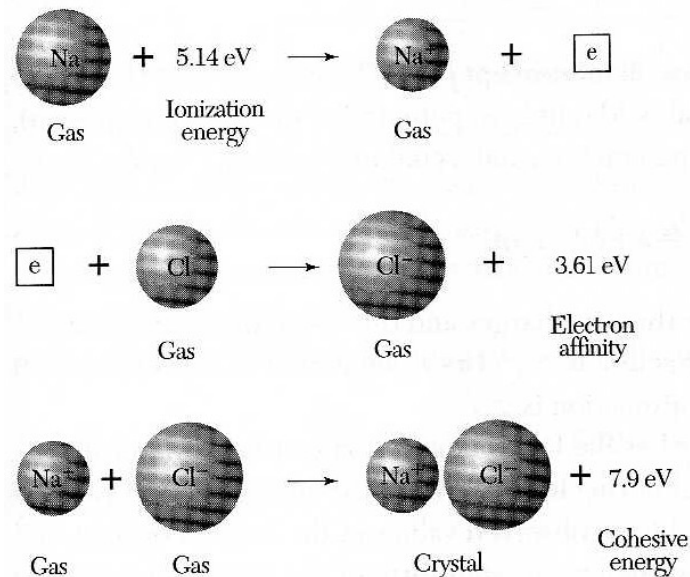
La tendencia química es a llenar las capas, similar a los gases nobles. La diferencia es que los iones tienen carga neta.

La distribución de carga es casi esférica.

## Densidad de carga obtenida a partir de RX, en NaCl.



## Balance energético



Energía de enlace:  $7.9 + 3.61 - 5.14 = 6.4 \text{ eV}$ .

Sin los 7.9 eV liberados por la formación de la red, no sería estable la ionización del Cl y el Na. Por eso los átomos son neutros en estado gaseoso (termodinámicamente).

## Energía de interacción de un ion con los demás

$$U_{ij} = \lambda \exp(-r_{ij}/\rho) \pm \frac{q^2}{r_{ij}}$$

No hay datos de fase gas que permitan determinar los parámetros independientemente. Se usan propiedades del cristal.

Sea  $r_{ij} = p_{ij} R$ , siendo  $R$  la distancia de vecinos .

$$U_{ij} = \begin{cases} \lambda \exp(-R/\rho) - \frac{q^2}{R} & , \text{vecinos próximos} \\ \pm \frac{1}{p_{ij}} \frac{q^2}{R} & , \text{iones lejanos} \end{cases}$$

Si hay  $N$  moléculas del cristal ( $2N$  átomos), la energía total es

$$U_{tot} = N \sum_{j=1}^N U_{ij} = N \left( z \lambda e^{-R/\rho} - \frac{\alpha q^2}{R} \right),$$

donde  $z$  es el número de primeros vecinos de cada ion y

$$\alpha = \sum_j \frac{(\pm 1)}{p_{ij}} \equiv \text{Constante de Madelung}$$

$$\text{Condición de equilibrio } \frac{dU_{tot}}{dR} = 0.$$

$$- Nz \frac{\lambda}{\rho} \exp(-R/\rho) + N \alpha \frac{q^2}{R^2} = 0$$

$$\frac{R_0}{\rho} \exp(-R_0/\rho) = \frac{\alpha q^2}{z \lambda}$$

La ecuación anterior se resuelve numéricamente. La energía total es

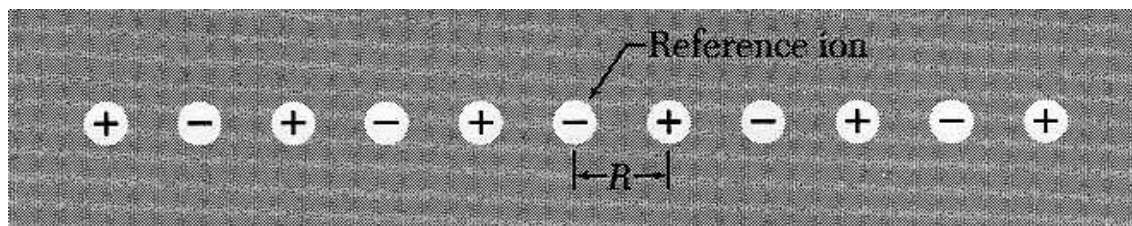
$$U_{tot} = \frac{N \alpha q^2}{R_0} \left( 1 - \frac{\rho}{R_0} \right).$$

La energía de Madelung es  $N \alpha q^2 / R_0$ . Es la mayor contribución a la energía de enlace, pues  $\rho / R_0 \sim 0.1$ .

Evaluación de la constante de Madelung

$$\alpha = \sum_j \frac{(\pm 1)}{p_{ij}} = \sum_j (\pm 1) \frac{R}{r_{ij}}$$

Consideremos el caso simple de una red lineal





$$\frac{\alpha}{R} = 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{j+1}}{jR} = 2 \left[ \frac{1}{R} - \frac{1}{2R} + \frac{1}{3R} - \dots \right] = \frac{2}{R} \left[ 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \dots \right]$$

La serie se suma conociendo el desarrollo en serie de potencias

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots$$

Poniendo  $x = 1$  obtenemos  $\alpha = 2 \ln 2$ .

La serie anterior es condicionalmente convergente. Se podría reordenar de forma que la suma de un valor diferente. En tres dimensiones es más complicado y el reordenamiento puede ocasionar divergencia.

El reordenamiento se hace de forma que los  $p_{ij}$  se arreglan en capas de carga nula, de forma que el aporte de cada capa sea decreciente. Esto se justifica físicamente por la neutralidad de las superficies.

Ejemplo estructura NaCl.

$$R = a/2, \quad r_{ij} = R p_{ij} = (a/2) |(l \hat{x} + m \hat{y} + n \hat{z})|$$

$$\alpha = \sum_{l, m, n = -\infty}^{\infty} \frac{(-1)^{l+m+n}}{\sqrt{l^2 + m^2 + n^2}}$$

Un problema fundamental es el orden en que se suman los términos, pues la serie converge condicionalmente.

Frecuentemente se utiliza el **método de Ewald**. Se suma por grupo de átomos que tienen carga y momento dipolar nulos.

P. P. Ewald. Die berechnung optischer und elektrostatischer gitterpotentiale. Ann. Phys., 64:253–287, 1921.

## Algunos valores

Estructura	$\alpha$
NaCl	1,7476
CsCl	1,7627
ZnS (blenda de zinc)	1,6381

## Comparación teoría experimento

**Table 7 Properties of alkali halide crystals with the NaCl structure**

All values (except those in square brackets) at room temperature and atmospheric pressure, with no correction for changes in  $R_0$  and  $U$  from absolute zero. Values in square brackets at absolute zero temperature and zero pressure, from private communication by L. Brewer.

	Nearest-neighbor separation $R_0$ in Å	Bulk modulus $B$ , in $10^{11}$ dyn/cm <sup>2</sup> or $10^{10}$ N/m <sup>2</sup>	Repulsive energy parameter $z\lambda$ , in $10^{-8}$ erg	Repulsive range parameter $\rho$ , in Å	Lattice energy compared to free ions, in kcal/mol	
					Experimental	Calculated
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

Data from various tables by M. P. Tosi, Solid State Physics 16, 1 (1964).

## Cristales covalentes

Es análogo al enlace de compartición de electrones de la química orgánica.

Fortaleza comparable al enlace iónico.

Los electrones del enlace tienden a localizarse en la región entre los átomos enlazados, con espines apareados.

Direccional.

Enlace tetraédrico. Tiene 4 vecinos. Baja fracción de volumen ocupado.

La naturaleza del enlace covalente es más simple de entender considerando la molécula H<sub>2</sub>.

La función de onda de los 2 electrones en una molécula H<sub>2</sub>, se puede expresar de la forma

$$\Psi(1,2) = \begin{vmatrix} \psi_a(\mathbf{r}_1)\alpha_a(s_1) & \psi_a(\mathbf{r}_2)\alpha_a(s_2) \\ \psi_b(\mathbf{r}_1)\alpha_b(s_1) & \psi_b(\mathbf{r}_2)\alpha_b(s_2) \end{vmatrix}$$

Si  $\alpha_a, \alpha_b$  son funciones de spin “arriba” y “abajo”, entonces el estado de mínima energía se puede aproximar por

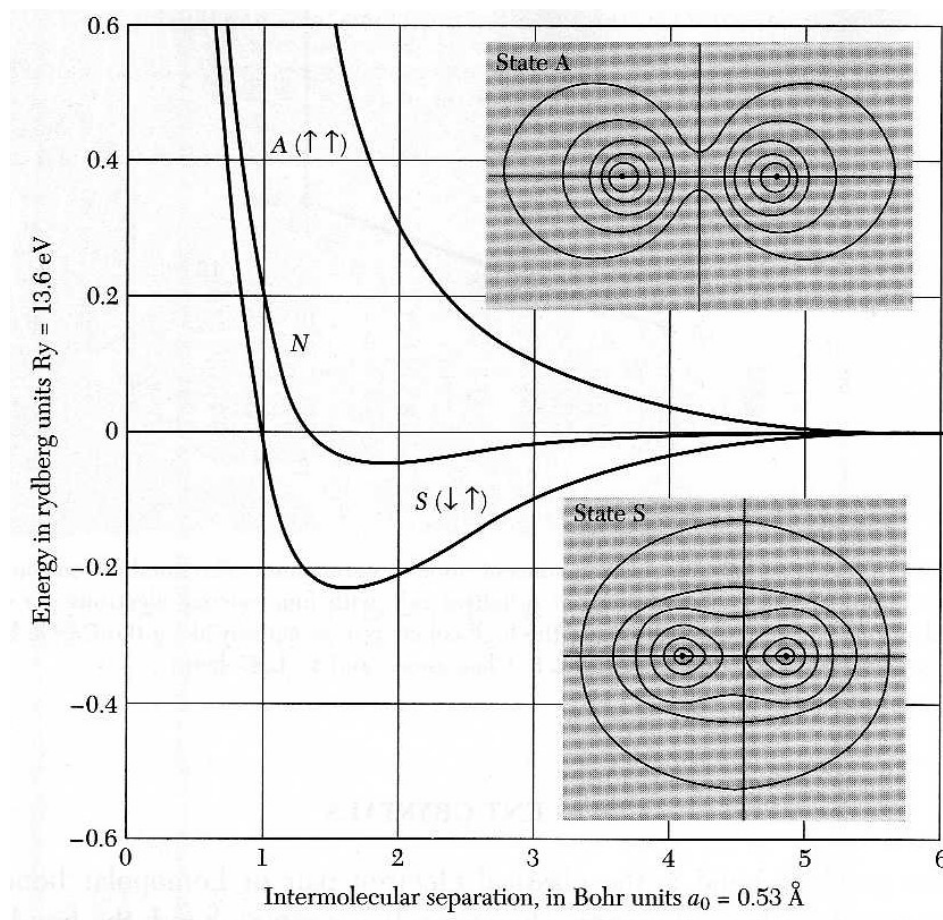
$$\psi_a(\mathbf{r}) = \psi_b(\mathbf{r}) = \frac{\phi_{H1}(\mathbf{r}) + \phi_{H2}(\mathbf{r})}{\sqrt{2(1+S)}}$$

donde  $\phi_X(\mathbf{r})$  son las funciones de onda atómicas de cada hidrógeno y  $S$  es la integral de traslape. En esta condición la

energía de cada nivel electrónico es igual a

$$E(R) = E_{1s} + \frac{e^2}{R} - \frac{V_{AA} + V_{AB}}{1 + S}$$

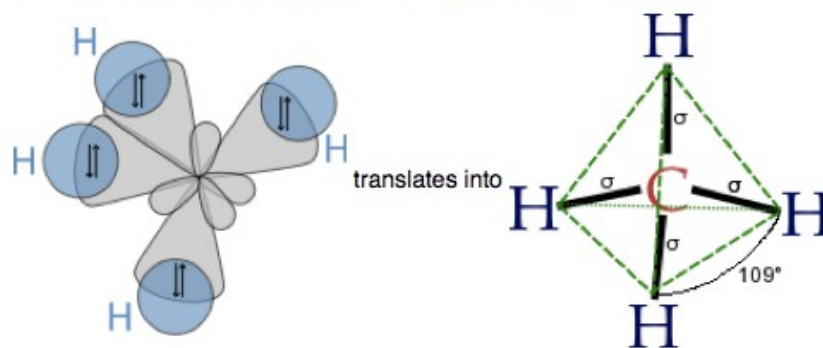
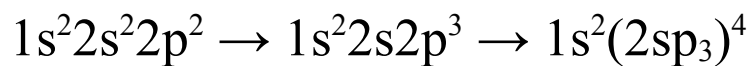
En cambio, si  $\alpha_a, \alpha_b$  son funciones de spin “arriba” y “arriba” o “abajo” y “abajo”, entonces las funciones orbitales  $\psi_a, \psi_b$  tienen que ser diferentes e inevitablemente es mayor. La energía es repulsiva



Hemos visto como la mecánica cuántica predice o justifica

que el H<sub>2</sub> se estabiliza en una configuración de baja energía mediante el apareamiento de espines y la adopción de una configuración que minimiza la energía potencial electrostática del sistema de 2 electrones y 2 protones. De forma general, esto ocurre cuando interactúan átomos que no tienen totalmente ocupada la capa electrónica exterior, y tienden a lograrlo compartiendo electrones.

El prototipo de cristal covalente es el diamante y el silicio. El carbono tiene los electrones en configuración  $1s^2 2s^2 2p^2$ , necesitando 4 electrones para completar la capa 2. La formación del enlace se da por la formación de enlaces entre orbitales híbridos del tipo  $sp^3$ . Virtualmente ocurre este proceso



Las energías de los estados atómicos excitado e híbridos son mayores que las del estado base del carbono, pero se compensa en la formación de enlace con los átomos vecinos.

## Escala de ionicidad

**Table 8 Fractional ionic character of bonds in binary crystals**

Crystal	Fractional ionic character	Crystal	Fractional ionic character
Si	0.00		
SiC	0.18	GaAs	0.31
Ge	0.00	GaSb	0.26
ZnO	0.62	AgCl	0.86
ZnS	0.62	AgBr	0.85
ZnSe	0.63	AgI	0.77
ZnTe	0.61	MgO	0.84
CdO	0.79	MgS	0.79
CdS	0.69	MgSe	0.79
CdSe	0.70		
CdTe	0.67	LiF	0.92
		NaCl	0.94
InP	0.42	RbF	0.96
InAs	0.36		
InSb	0.32		

After J. C. Phillips, *Bonds and bands in semiconductors*.

## Enlace metálico

Hay un alto número de electrones libres (del orden de 1 por cada átomo), no ligados a los átomos individuales. Estos son llamados **electrones de conducción**.

Se originan de la capa de valencia de los átomos.

El enlace se origina en disminución de la energía cinética de los electrones de valencia en el cristal.

El origen de la disminución de energía cinética es parecido a l caso visto antes de las correcciones cuánticas a la energía de enlace de los gases inertes. Si el electrón está confinado en longitud  $\lambda$ .

Momento  $p = \hbar / \lambda$

Energía cinética  $p^2 / 2m = (\hbar / \lambda)^2 / 2m$  .

En un metal se forman estados delocalizados que tienen una energía cinética menor que en los átomos aislados. La disminución se favorece con grandes distancias interatómicas. Por otra parte predominan las estructuras compactas: fcc, hcp, bcc.

En los metales alcalinos, la energía de enlace es relativamente baja.

En los metales de transición y los que siguen inmediatamente en las filas de la tabla periódica, hay capas *d* semillenas o llenas, que inducen muchos electrones adicionales al enlace y se caracterizan por alta energía de enlace.

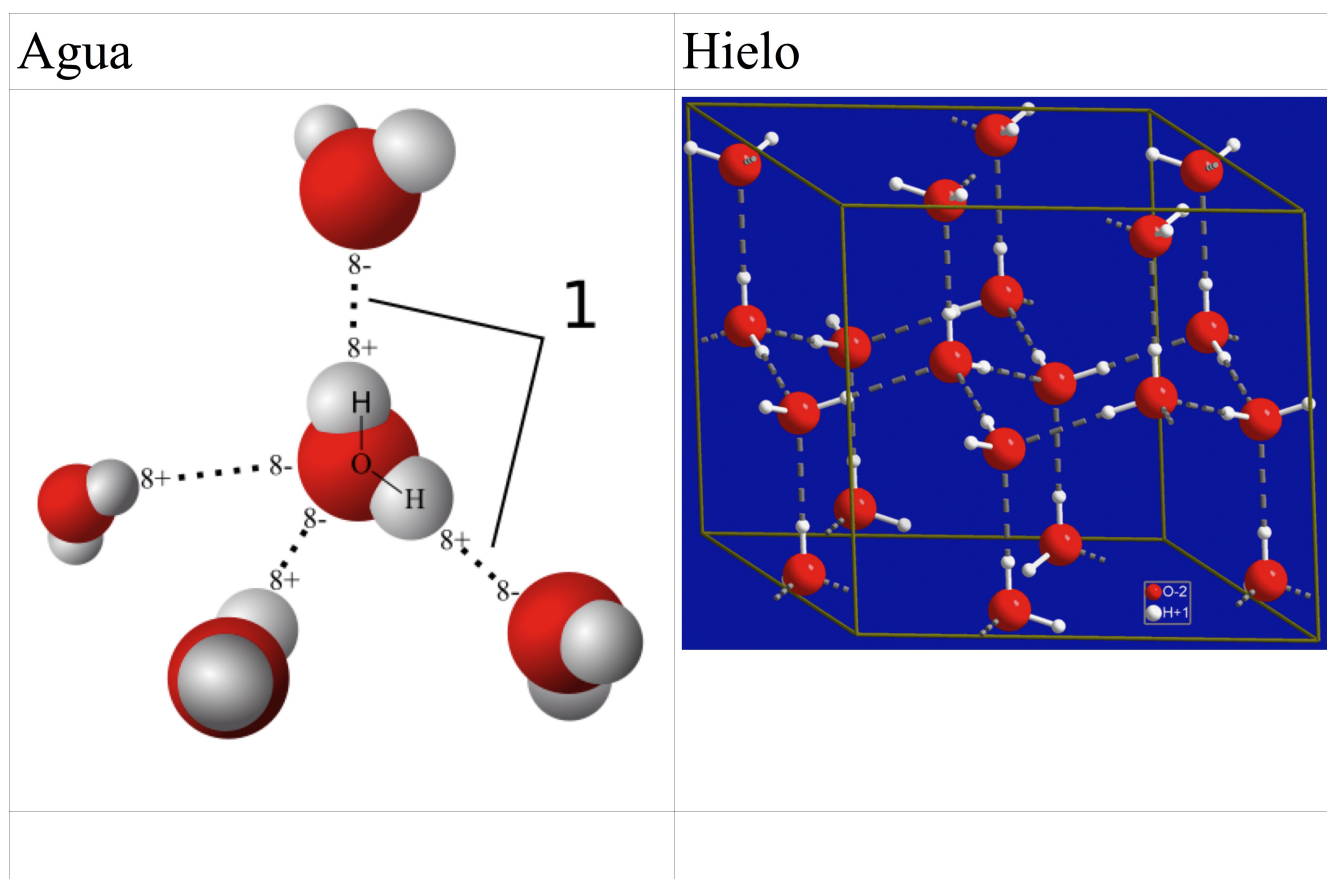
### **Enlace de hidrógeno.**

No son el factor determinante en ningun tipo de cristal, pero influyen en las propiedades.

El hidrógeno tiene un solo electrón para compartir y se puede enlazar covalentemente con un sólo átomo.

Con átomos muy electronegativos como F, O, N, puede formar enlaces con 2 átomos, con energías del orden de 0.1 eV. En  $\text{H}_2\text{O}$ , Se puede pensar que el electrón enlazado con un O se desplaza fuertemente hacia el O, quedando el protón muy expuesto y susceptible de atraerse con un O de otra molécula.

Usualmente se describe como una interacción dipolar. Tiene direccionalidad parecido al enlace covalente.



Representación y distancias típicas

$\text{X-H}\cdots\text{Y}$ ,  $d(\text{X-H})\sim 1.1 \text{ \AA}$ ,  $d(\text{H}\cdots\text{Y})\sim 1.6 \text{ a } 2.0 \text{ \AA}$



## Energías típicas

F–H...:F (161.5 kJ/mol or 38.6 kcal/mol)

O–H...:N (29 kJ/mol or 6.9 kcal/mol)

O–H...:O (21 kJ/mol or 5.0 kcal/mol)

N–H...:N (13 kJ/mol or 3.1 kcal/mol)

N–H...:O (8 kJ/mol or 1.9 kcal/mol)

En sólidos no cristalinos puede ser mucho más importante para las propiedades. Ejemplos:

1. El hielo es menos denso que el agua debido a la estructura cristalina estabilizada por los enlaces de hidrógeno.
2. Líquidos que se solidifican al aumentar su temperatura.  $\alpha$ -cyclodextrine ( $\alpha$ CD), agua and 4-methylpyridine (4MP).
3. Polímeros inteligentes, que se mantienen cohesionados por enlaces de hidrógeno. Cuando sufren desgarror, se vuelven a pegar.
4. Resistencia de las fibras de nylon y celulosa.

## Energías de enlace características

- van der Waals-London 0.02-0.17 eV/atom
- ionico 150-250 kcal/mol = 4-8 eV por molecula
- covalente: 3-7 eV por molécula.
- metalico 0.8-1.6 eV/atomo (metales alcalinos) 8.9 eV en W
- puente de hidrogeno 0.08-1.6 eV

## Radios atómicos

Estrictamente no se puede asignar un tamaño a un átomo, dado que los electrones externos están compartidos, transferidos, o deslocalizados. Sin embargo, se pueden hacer dos cosas.

La primera son conjuntos consistentes de radios covalentes, iónicos, o de van der Waals, de modo que la suma de radios de átomos vecinos se aproxima a la distancias de enlace. Estos radios tienen capacidad predictiva. Se pueden predecir distancias interatómicas o, conociendo las distancias por medio de RX, determinar la configuración electrónica. Una visión moderna se encuentra en <http://www.webelements.com/>

La segunda es un método basado en la mecánica cuántica y la topología, para particionar el espacio y asignar a cada átomo su propio volumen (no esférico). Bader, Richard (1994). *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*. USA: Oxford University Press.

Ejemplo: Distancia Cd-Te en CdTe

[http://www.webelements.com/cadmium/atom\\_sizes.html](http://www.webelements.com/cadmium/atom_sizes.html)

Covalent radius (2008 values): 144 pm

Ionic Radius

Cd(II) 4-coordinate, tetrahedral, R=92 pm

[http://www.webelements.com/tellurium/atom\\_sizes.html](http://www.webelements.com/tellurium/atom_sizes.html)

Te(-II) 221 pm (radio de Pauling)

Covalent radius (2008 values): 138 pm

Estimación de la distancia de enlace

suma de radios iónicos = 313 pm

suma de radios covalentes = 282 pm. **Coincide con distancia experimental.**

La pagina [www.webelements.com](http://www.webelements.com) se basa en datos de la literatura científica. En un caso serio en que se requieran, deben consultarse las fuentes originales.

1. R.D. Shannon, *Acta Cryst.*, 1976, **A32**, 751.
2. R.D. Shannon and C.T. Prewitt, *Acta Cryst.*, 1969, **B25**, 925.
3. R.D. Shannon and C.T. Prewitt, *Acta Cryst.*, 1970, **B26**, 1046.
4. J.E. Huheey, E.A. Keiter, and R.L. Keiter in *Inorganic Chemistry : Principles of Structure and Reactivity*, 4th edition, HarperCollins, New York, USA, 1993.