



Materiales de Ingeniería  
Química

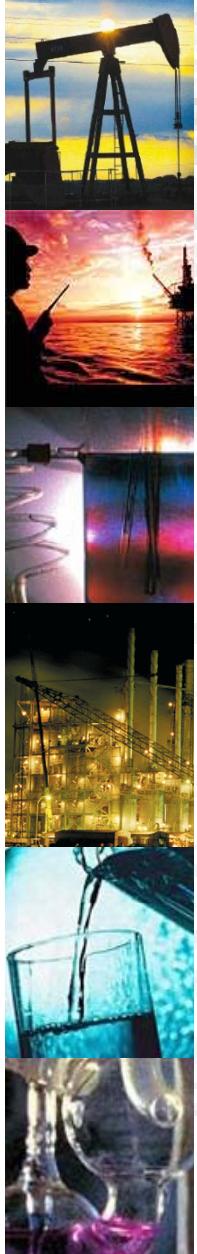
# Estructura atómica de los Materiales

Reaction  
catalyst  
Surface

Prof. Juan P. Urbina C.

Semestre A-2009

Mérida, 24 de Abril de 2009



## INTRODUCCIÓN

Existen diferentes niveles de estructura: estructura atómica, nanoestructura, microestructura y macroestructura

El objetivo de este tema es entender la relación existente entre la estructura, los átomos, los enlaces y las propiedades de los materiales en la ingeniería.

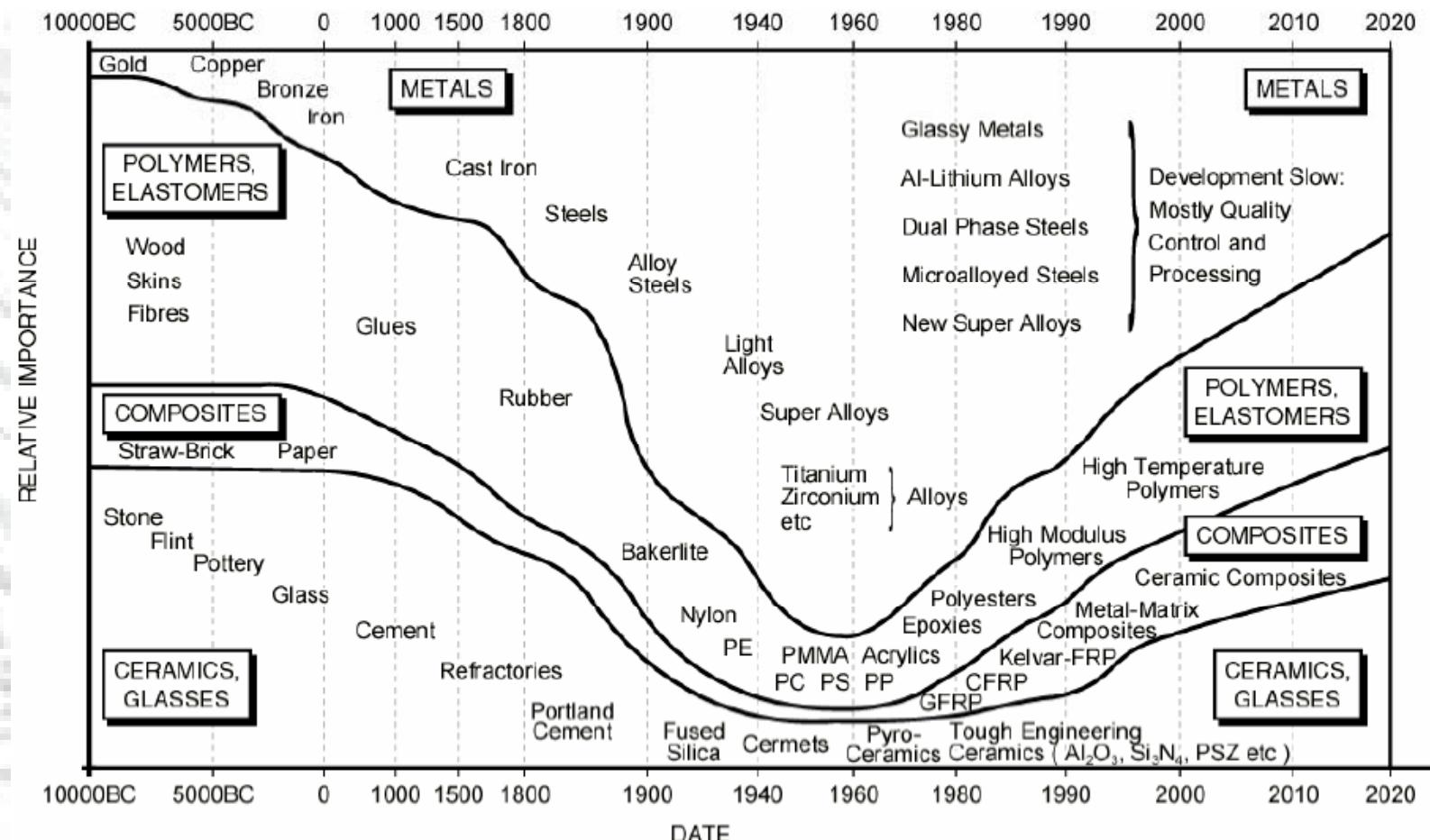
**Catalyst**

Además se intenta describir los conceptos físicos relacionados con la estructura de la materia

¿Por qué es importante el estudio de la estructura atómica de los materiales?



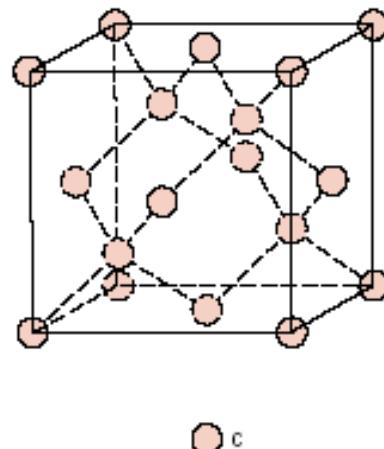
# INTRODUCCIÓN



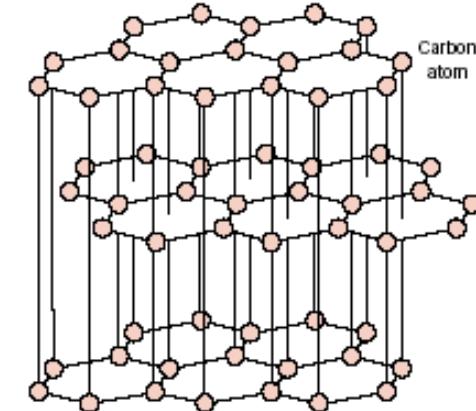


## INTRODUCCIÓN

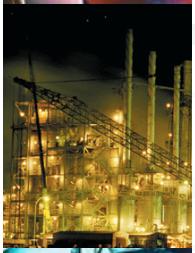
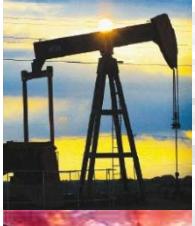
Ejemplo: Carbono en la forma de grafito y en la forma de diamante



Celda unitaria del  
diamante. Estructura  
cúbica cristalina



Estructura del Grafito



[Niveles estructurales](#)

Nanoestructura

Microestructura

Macroestructura

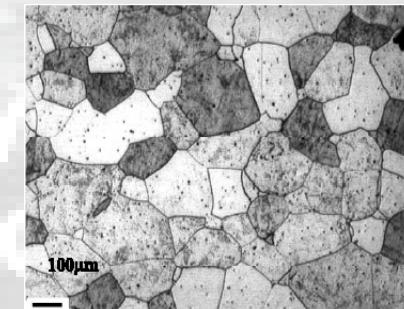
## INTRODUCCIÓN

[Ejemplos de tecnologías](#)

Nanopartículas de óxido de hierro- Ferrofluidos

Dureza mecánica de aleaciones metálicas

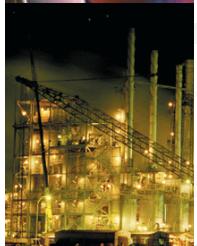
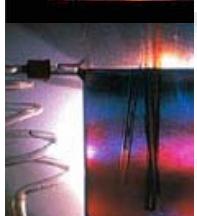
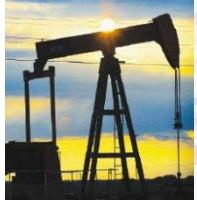
Pintura de automóviles, resistencia a la corrosión





## Estructura del átomo

- El NUMERO ATÓMICO de un elemento se refiere a la cantidad de electrones o protones en cada átomo. El Fe tiene 26 electrones y 26 protones,  $NA = 26$ .
- La MASA ATÓMICA de un elemento es igual la suma de protones y neutrones dentro del núcleo del átomo.
- El PESO ATÓMICO se refiere a la masa por mol de sustancia. El NÚMERO DE AVOGADRO de un elemento, es el número de átomos o moléculas en un mol.  $Na = 6.02 \times 10^{23}$  átomos/mol.



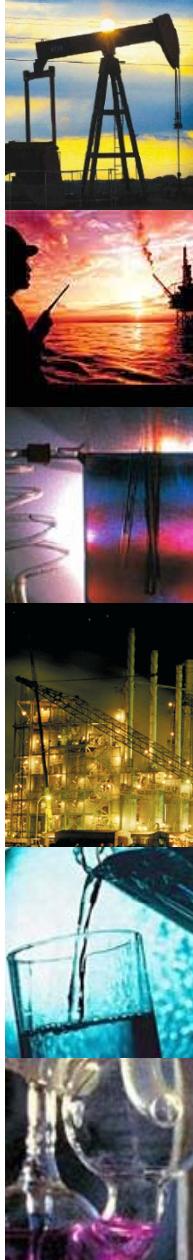
## Estructura del átomo

### Ejemplo:

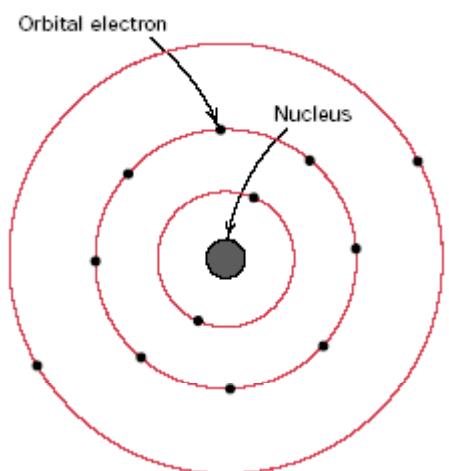
Calcular el número de átomos en 100 gramos de plata. (Se multiplica la masa por el número de avogadro y se divide entre el peso atómico)

$$NA = \frac{(100 \text{ g})(6.023 \times 10^{23} \text{ atm/mol})}{(107.868 \text{ g/mol})}$$

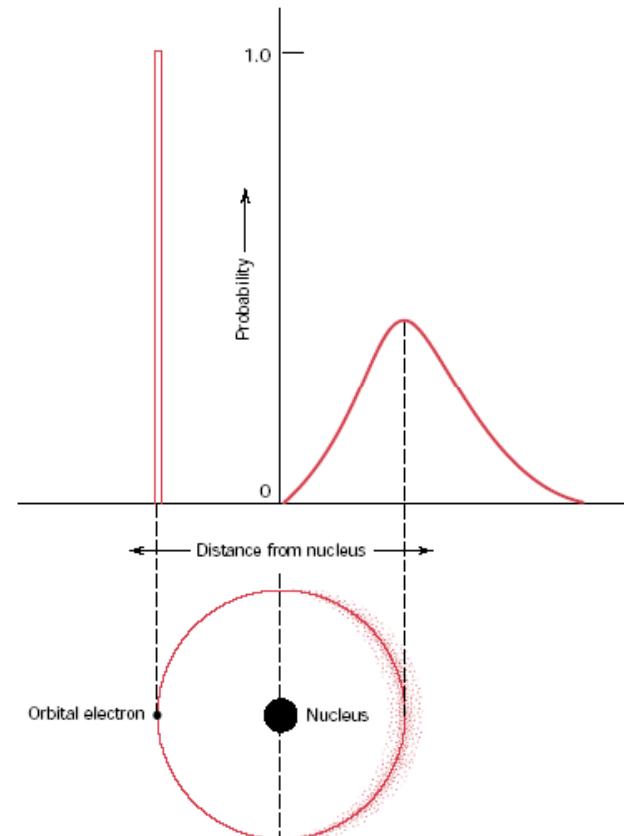
$$= 5.58 \times 10^{23} \text{ atm/gr}$$



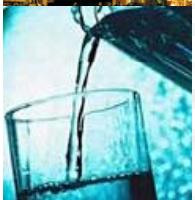
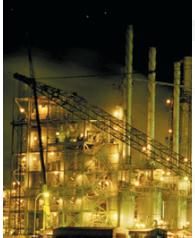
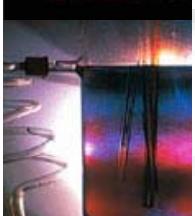
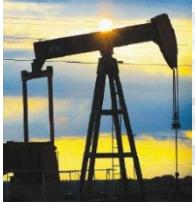
## Estructura electrónica del átomo



Representación  
esquemática del  
átomo de Bohr  
“Limitaciones”



Comparación del modelo  
atómico de Bohr y el modelo  
mecánico de Ondas (distribución)



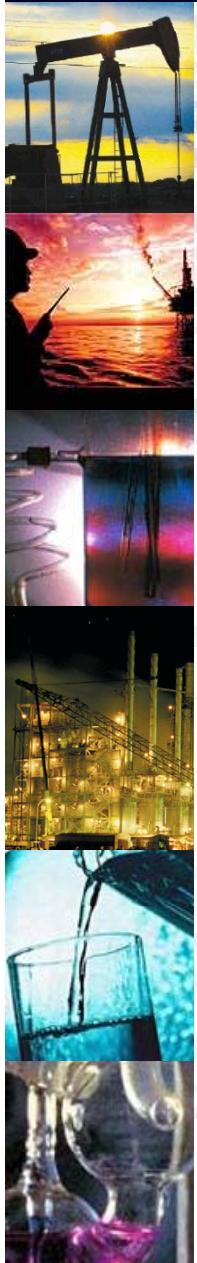
## La estructura electrónica del átomo

- **NUMEROS CUÁNTICOS:** se refiere a los cuatro números que describen el nivel de energía al cual pertenece cada electron en el átomo.
  - Principal (n): capa cuantica a la que pertenece cada electrón (1,2,3)
  - Azimutal (l): se refiere a la forma de los subniveles energéticos (0,1,2)
  - Magnético(m):Número de niveles de energía para cada número cuantico azimutal (desde  $-l$  hasta  $+l$  pasando por cero)
- **LA CAPA CUÁNTICA** es el conjunto de niveles de energía fijos a los que pertenece cada electrón.
- **PRINCIPIO DE EXCLUSIÓN DE PAULÍ** especifica que no mas de dos electrones en un material pueden tener la misma energía, es decir, no más de dos electrones pueden estar presentes en el mismo orbital.

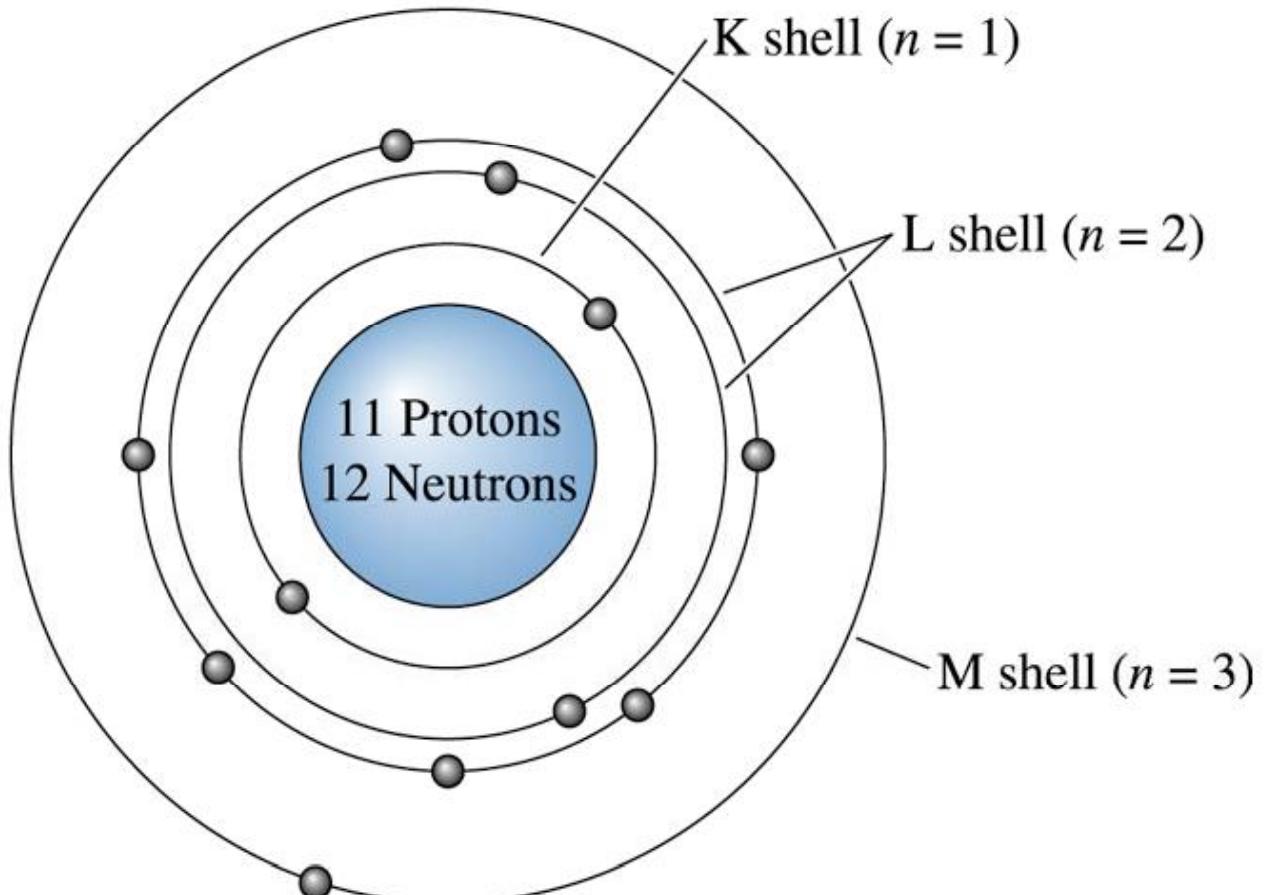
## La estructura electrónica del átomo

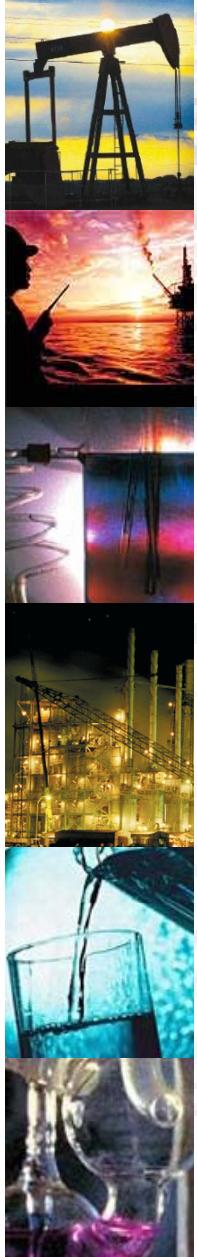
Número de estados electrónicos disponibles en algunas capas y subcapas electrónicas

Principal Quantum Number <i>n</i>	Shell Designation	Subshells	Number of States	Number of Electrons	
				Per Subshell	Per Shell
1	<i>K</i>	<i>s</i>	1	2	2
2	<i>L</i>	<i>s</i>	1	2	8
		<i>p</i>	3	6	
		<i>s</i>	1	2	
3	<i>M</i>	<i>p</i>	3	6	18
		<i>d</i>	5	10	
		<i>s</i>	1	2	
4	<i>N</i>	<i>p</i>	3	6	32
		<i>d</i>	5	10	
		<i>f</i>	7	14	



## Estructura atómica del sodio, NA=11





## Conjunto completo de números cuánticos de cada uno de los 11 electrones de sodio

$3s^1$	electron 11 $n = 3, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$ or $-\frac{1}{2}$
$2p^6$	electron 10 $n = 2, l = 1, m_l = +1, m_s = -\frac{1}{2}$ electron 9 $n = 2, l = 1, m_l = +1, m_s = +\frac{1}{2}$
	electron 8 $n = 2, l = 1, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$ electron 7 $n = 2, l = 1, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$
	electron 6 $n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = -\frac{1}{2}$ electron 5 $n = 2, l = 1, m_l = -1, m_s = +\frac{1}{2}$
$2s^2$	electron 4 $n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$ electron 3 $n = 2, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$
$1s^2$	electron 2 $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2}$ electron 1 $n = 1, l = 0, m_l = 0, m_s = +\frac{1}{2}$

© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

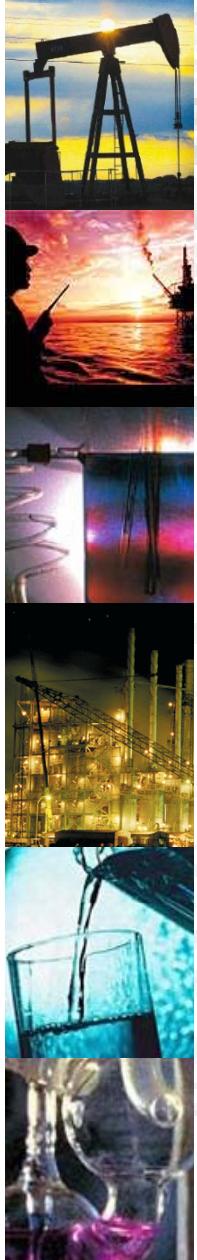
- VALENCIA es la cantidad de electrones de un átomo que participan en el enlace o en reacciones químicas.
- ELECTRONES DE VALENCIA son aquellos que ocupan los niveles de energía externos sp
- ELECTRONEGATIVIDAD es la tendencia de un átomo a ganar electrones

Listas de las  
configuraciones  
electrónicas de  
algunos de los  
elementos más  
comunes

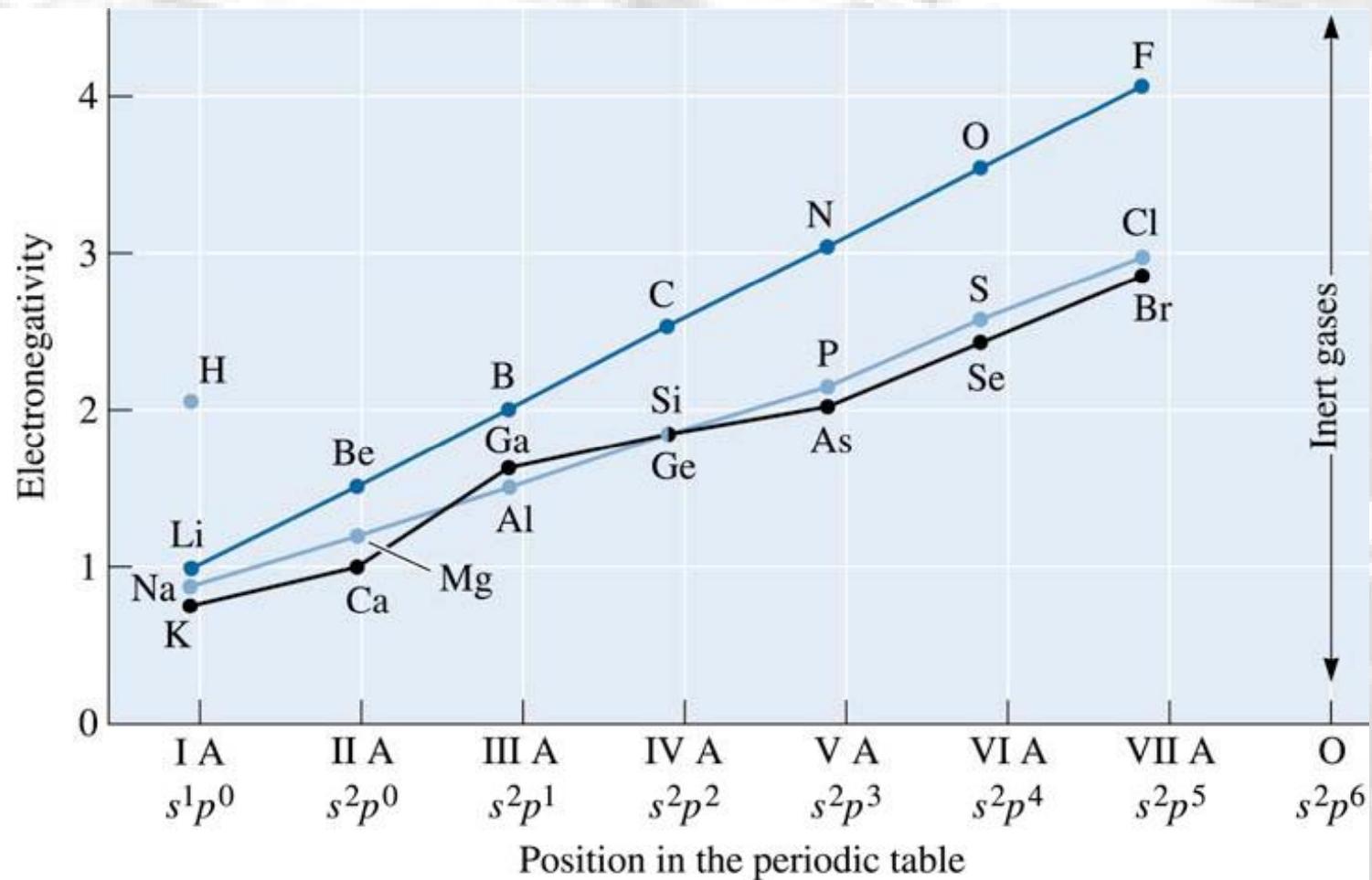


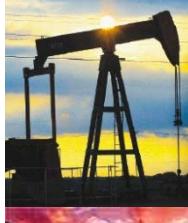
Cuarzo citrino

Element	Symbol	Atomic Number	Electron Configuration
Hydrogen	H	1	$1s^1$
Helium	He	2	$1s^2$
Lithium	Li	3	$1s^2 2s^1$
Beryllium	Be	4	$1s^2 2s^2$
Boron	B	5	$1s^2 2s^2 2p^1$
Carbon	C	6	$1s^2 2s^2 2p^2$
Nitrogen	N	7	$1s^2 2s^2 2p^3$
Oxygen	O	8	$1s^2 2s^2 2p^4$
Fluorine	F	9	$1s^2 2s^2 2p^5$
Neon	Ne	10	$1s^2 2s^2 2p^6$
Sodium	Na	11	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$
Magnesium	Mg	12	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$
Aluminum	Al	13	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$
Silicon	Si	14	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$
Phosphorus	P	15	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$
Sulfur	S	16	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$
Chlorine	Cl	17	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$
Argon	Ar	18	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$
Potassium	K	19	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^1$
Calcium	Ca	20	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2$
Scandium	Sc	21	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^1 4s^2$
Titanium	Ti	22	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$
Vanadium	V	23	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3 4s^2$
Chromium	Cr	24	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^1$
Manganese	Mn	25	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$
Iron	Fe	26	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6 4s^2$
Cobalt	Co	27	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7 4s^2$
Nickel	Ni	28	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8 4s^2$
Copper	Cu	29	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$
Zinc	Zn	30	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$
Gallium	Ga	31	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
Germanium	Ge	32	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$
Arsenic	As	33	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$
Selenium	Se	34	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4$
Bromine	Br	35	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$
Krypton	Kr	36	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6$

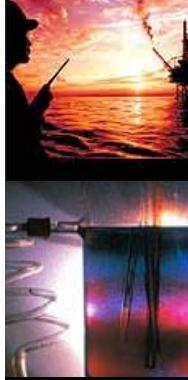


## Electronegatividad de algunos elementos en función de su posición en la tabla periódica

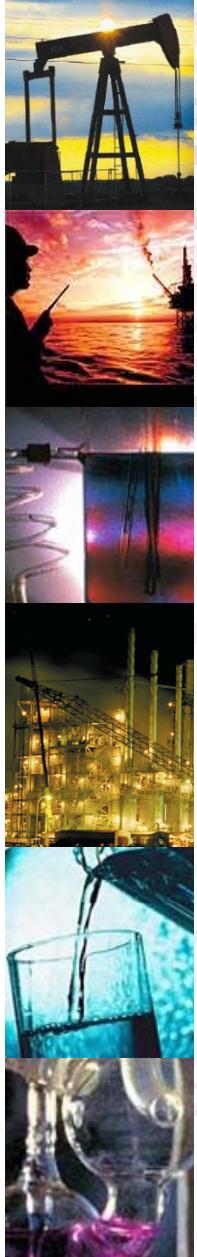




© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™



1	1A	1	1s <sup>1</sup>	1.01
		1	1s <sup>1-1</sup>	H
		1	Hydrogen	
		-259	0.09	
		-253	2.1	
1	2A	2		
		3	6.94	4 9.01
		1	[He] 2s <sup>1</sup>	Be
		2		Beryllium
2		1	181	0.53
		2	1277	1.85
		1	1330	1.0
		2	2970	1.5
11	12	22.99	24.23	1
		[Ne] 3s <sup>1</sup>	[Ne] 3p <sup>2</sup>	1
3	3A	1	Na	Mg
		2	Sodium	Magnesium
		3	98	0.97
		4	892	0.9
		5	1107	1.2
19	39	10	20	40.08
		1	[Ar] 4s <sup>1</sup>	[Ar] 4s <sup>2</sup>
		2	[Ar] 3d 4s <sup>2</sup>	[Ar] 3d 4s <sup>2</sup>
4	4	Ca	Sc	Ti
		3	Scandium	Titanium
		4	1539	3.0
		5	1668	4.54
		6	1900	6.1
		7	2370	1.5
		8	3260	1.5
		9	3450	1.5
		10	2200	1.6
		11	2097	1.5
		12	3000	1.8
		13	2900	1.5
37	85	47	38	87.62
		1	[Kr] 5s <sup>1</sup>	[Kr] 5s <sup>2</sup>
		2	[Kr] 4d <sup>5</sup>	[Kr] 4d <sup>5</sup>
5	5	Rb	Sr	Y
		3	Strontium	Zirconium
		4	1299	4.94
		5	1852	8.71
		6	2927	1.2
		7	3580	1.4
		8	4927	1.6
		9	5560	1.8
		10	5560	1.9
55	132	91	56	137.33
		1	[Xe] 6s <sup>1</sup>	[Xe] 6s <sup>2</sup>
		2	[Xe] 4f <sup>14</sup> 5d 6s <sup>2</sup>	[Xe] 4f <sup>14</sup> 5d 6s <sup>2</sup>
6	6	Cs	Ba	Lu
		3	Barium	Lutetium
		4	1652	9.84
		5	2222	13.3
		6	5400	1.3
		7	5425	1.5
		8	5930	1.7
		9	3327	1.2
		10	714	3.76
		11	1640	0.9
		12	700	5.0
		13	700	0.9
		14	1140	0.9
		15	*	0.7
		16	*	0.7
		17	*	0.7
		18	*	0.7
		19	*	0.7
		20	*	0.7
		21	*	0.7
		22	*	0.7
		23	*	0.7
		24	*	0.7
		25	*	0.7
		26	*	0.7
		27	*	0.7
		28	*	0.7
		29	*	0.7
		30	*	0.7
		31	*	0.7
		32	*	0.7
		33	*	0.7
		34	*	0.7
		35	*	0.7
		36	*	0.7
		37	*	0.7
		38	*	0.7
		39	*	0.7
		40	*	0.7
		41	*	0.7
		42	*	0.7
		43	*	0.7
		44	*	0.7
		45	*	0.7
		46	*	0.7
		47	*	0.7
		48	*	0.7
		49	*	0.7
		50	*	0.7
		51	*	0.7
		52	*	0.7
		53	*	0.7
		54	*	0.7
		55	*	0.7
		56	*	0.7
		57	*	0.7
		58	*	0.7
		59	*	0.7
		60	*	0.7
		61	*	0.7
		62	*	0.7
		63	*	0.7
		64	*	0.7
		65	*	0.7
		66	*	0.7
		67	*	0.7
		68	*	0.7
		69	*	0.7
		70	*	0.7
		71	*	0.7
		72	*	0.7
		73	*	0.7
		74	*	0.7
		75	*	0.7
		76	*	0.7
		77	*	0.7
		78	*	0.7
		79	*	0.7
		80	*	0.7
		81	*	0.7
		82	*	0.7
		83	*	0.7
		84	*	0.7
		85	*	0.7
		86	*	0.7
		87	*	0.7
		88	*	0.7
		89	*	0.7
		90	*	0.7
		91	*	0.7
		92	*	0.7
		93	*	0.7
		94	*	0.7
		95	*	0.7
		96	*	0.7
		97	*	0.7
		98	*	0.7
		99	*	0.7
		100	*	0.7
		101	*	0.7
		102	*	0.7
		103	*	0.7
		104	*	0.7
		105	*	0.7
		106	*	0.7
		107	*	0.7
		108	*	0.7
		109	*	0.7
		110	*	0.7
		111	*	0.7
		112	*	0.7
		113	*	0.7
		114	*	0.7
		115	*	0.7
		116	*	0.7
		117	*	0.7
		118	*	0.7
		119	*	0.7
		120	*	0.7
		121	*	0.7
		122	*	0.7
		123	*	0.7
		124	*	0.7
		125	*	0.7
		126	*	0.7
		127	*	0.7
		128	*	0.7
		129	*	0.7
		130	*	0.7
		131	*	0.7
		132	*	0.7
		133	*	0.7
		134	*	0.7
		135	*	0.7
		136	*	0.7
		137	*	0.7
		138	*	0.7
		139	*	0.7
		140	*	0.7
		141	*	0.7
		142	*	0.7
		143	*	0.7
		144	*	0.7
		145	*	0.7
		146	*	0.7
		147	*	0.7
		148	*	0.7
		149	*	0.7
		150	*	0.7
		151	*	0.7
		152	*	0.7
		153	*	0.7
		154	*	0.7
		155	*	0.7
		156	*	0.7
		157	*	0.7
		158	*	0.7
		159	*	0.7
		160	*	0.7
		161	*	0.7
		162	*	0.7
		163	*	0.7
		164	*	0.7
		165	*	0.7
		166	*	0.7
		167	*	0.7
		168	*	0.7
		169	*	0.7
		170	*	0.7
		171	*	0.7
		172	*	0.7
		173	*	0.7
		174	*	0.7
		175	*	0.7
		176	*	0.7
		177	*	0.7
		178	*	0.7
		179	*	0.7
		180	*	0.7
		181	*	0.7
		182	*	0.7
		183	*	0.7
		184	*	0.7
		185	*	0.7
		186	*	0.7
		187	*	0.7
		188	*	0.7
		189	*	0.7
		190	*	0.7
		191	*	0.7
		192	*	0.7
		193	*	0.7
		194	*	0.7
		195	*	0.7
		196	*	0.7
		197	*	0.7
		198	*	0.7
		199	*	0.7
		200	*	0.7
		201	*	0.7
		202	*	0.7
		203	*	0.7
		204	*	0.7
		205	*	0.7
		206	*	0.7
		207	*	0.7
		208	*	0.7
		209	*	0.7
		210	*	0.7
		211	*	0.7
		212	*	0.7
		213	*	0.7
		214	*	0.7
		215	*	0.7
		216	*	0.7
		217	*	0.7
		218	*	0.7
		219	*	0.7
		220	*	0.7
		221	*	0.7
		222	*	0.7
		223	*	0.7
		224	*	0.7
		225	*	0.7
		226	*	0.7
		227	*	0.7
		228	*	0.7
		229	*	0.7
		230	*	0.7
		231	*	0.7
		232	*	0.7
		233	*	0.7
		234	*	0.7
		235	*	0.7
		236	*	0.7
		237	*	0.7
		238	*	0.7
		239	*	0.7
		240	*	0.7
		241	*	0.7
		242	*	0.7
		243	*	0.7
		244	*	0.7
		245	*	0.7
		246	*	0.7
		247	*	0.7
		248	*	0.7
		249	*	0.7
		250	*	0.7
		251	*	0.7
		252	*	0.7
		253	*	0.7
		254	*	0.7
		255	*	0.7
		256	*	0.7
		257	*	0.7
		258	*	0.7
		259	*	0.7
		260	*	0.7
		261	*	0.7
		262	*	0.7
		263	*	0.7
		264	*	0.7
		265	*	0.7
		266	*	0.7
		267	*	0.7
		268	*	0.7
		269	*	0.7
		270	*	0.7
		271	*	0.7
		272		



## Enlaces atómicos

- Tipos de enlace:
  - Enlaces interatómicos Primarios
    - Enlace Metálico
    - Enlace covalente
    - Enlace Iónico
  - Enlaces interatómicos secundarios
    - Fuerzas de Van de Waals

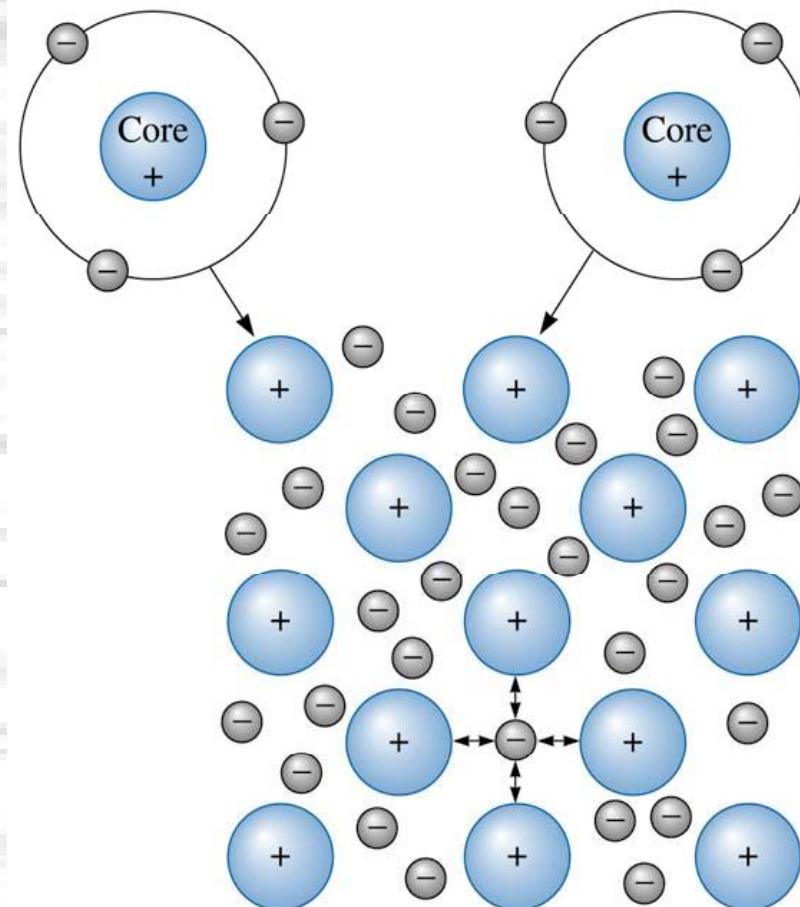
catalyst  
surface

### Ejemplo:

La ductilidad por ejemplo de los metales es característico del tipo de enlace que se presenta y se refiere a la capacidad del material a deformarse sin sufrir ruptura

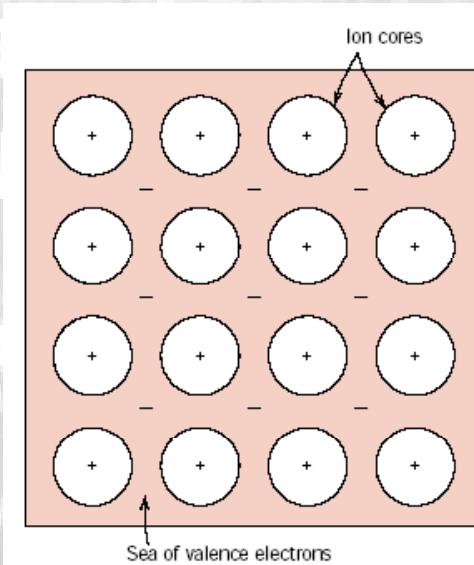


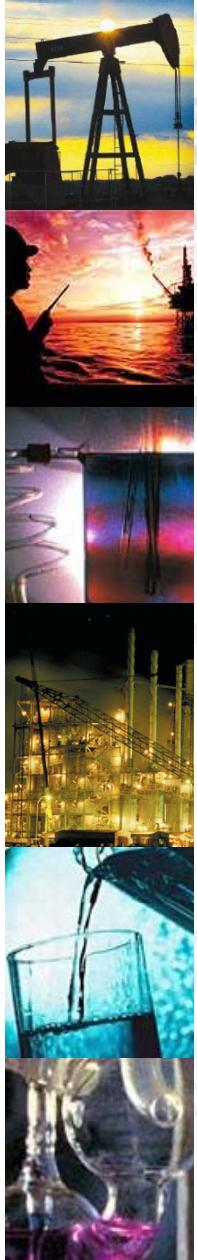
© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™



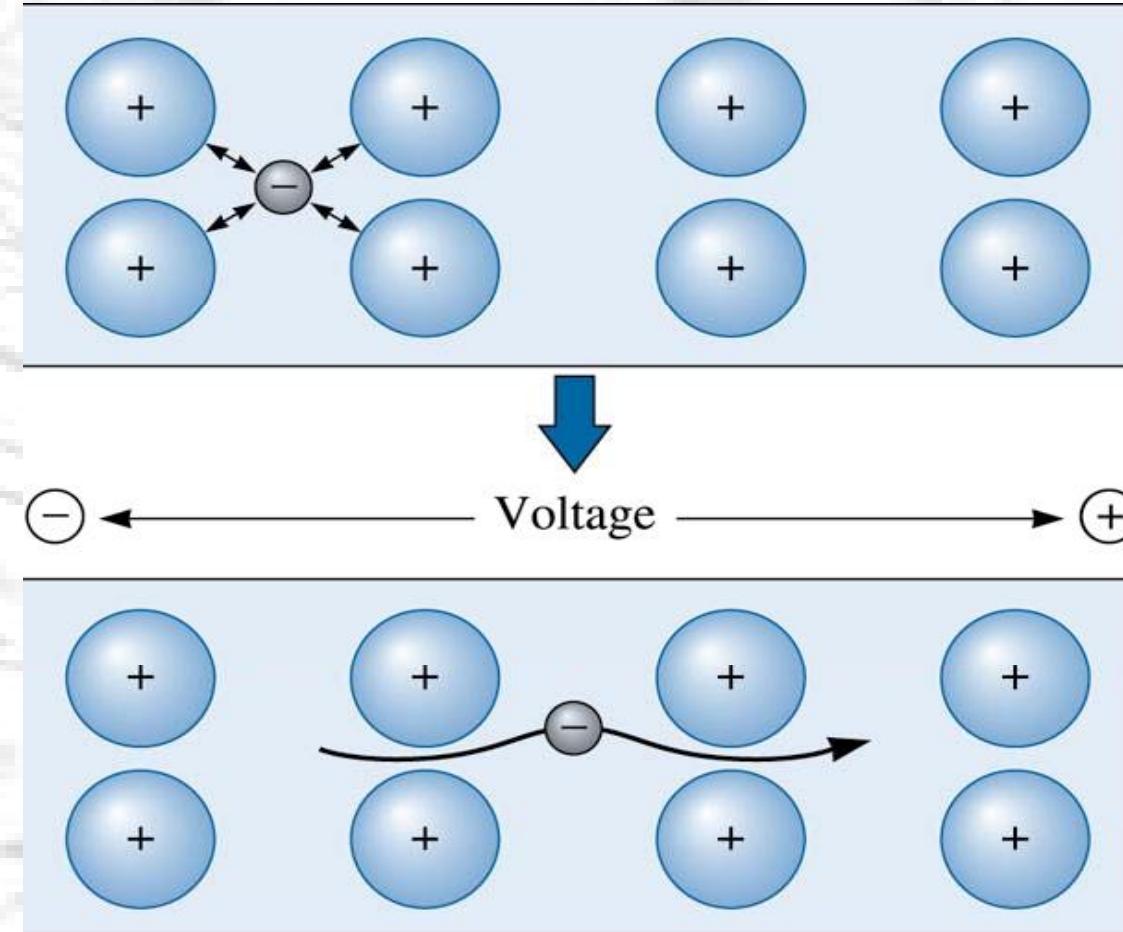
Funciona como pegamento para mantener  
unidos los núcleos iónicos

Ocurre cuando los átomos ceden sus electrones de valencia para formar un mar de electrones. Los núcleos iónicos positivos de los átomos son atraídos por los electrones negativos compartidos





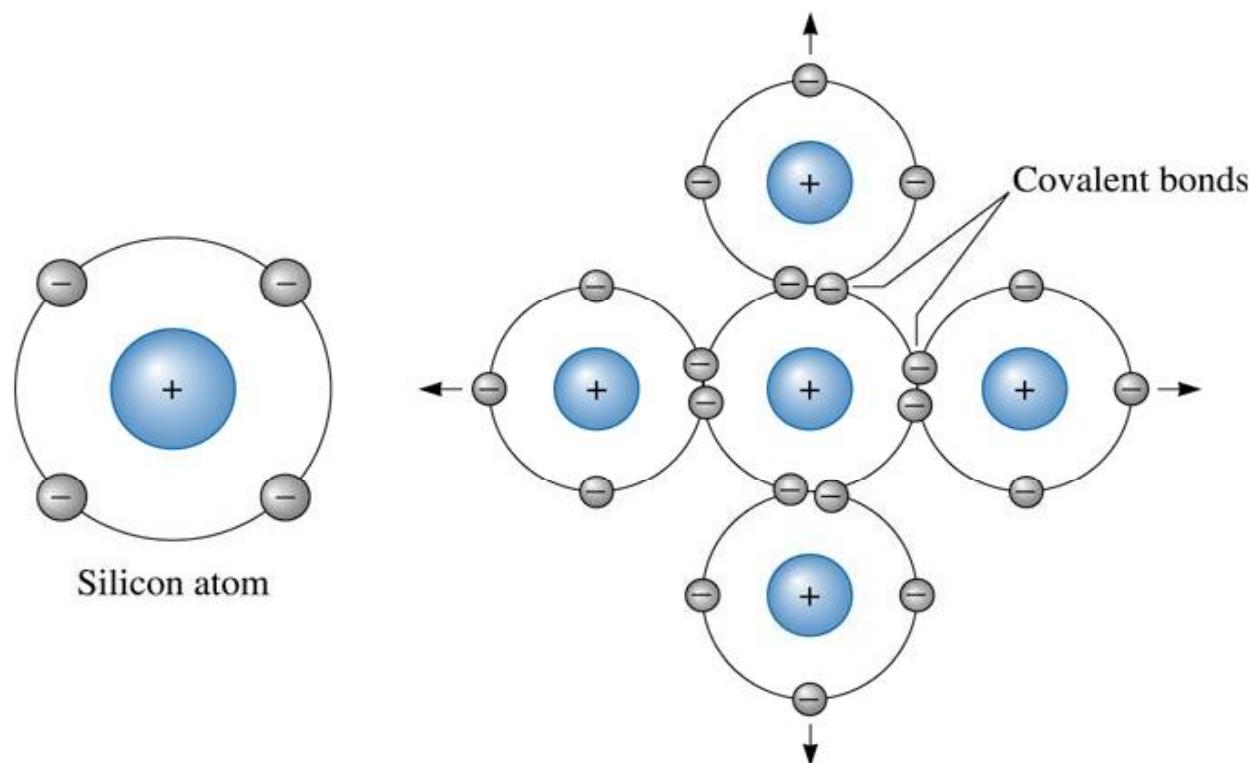
## Enlace Metálico



Cuando se aplica corriente eléctrica, los electrones se desplazan libremente a través de los intersticios de los núcleos, es por esto que los metales son buenos conductores



## Enlace Covalente



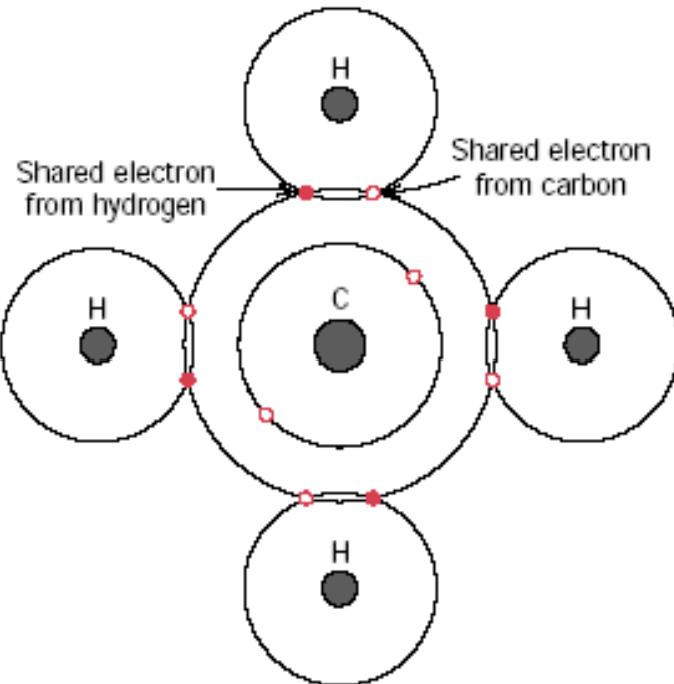
© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

En el enlace covalente, los electrones son compartidos por los átomos de tal manera que cada átomo tenga sus últimos orbitales  $sp$  llenos.

En este ejemplo, la sílice tiene una valencia de cuatro, permite que se formen cuatro enlaces covalentes



## Enlace Covalente

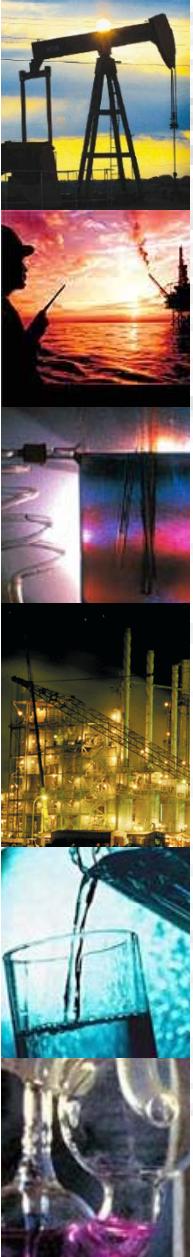


- Carbono tiene 4 átomos de valencia
- Hidrógeno tiene 1 átomo de valencia
- Cuatro enlaces covalentes

Los átomos que están enlazados covalentemente contribuyen con al menos un electrón en el enlace, y los electrones compartidos pertenecen a ambos átomos

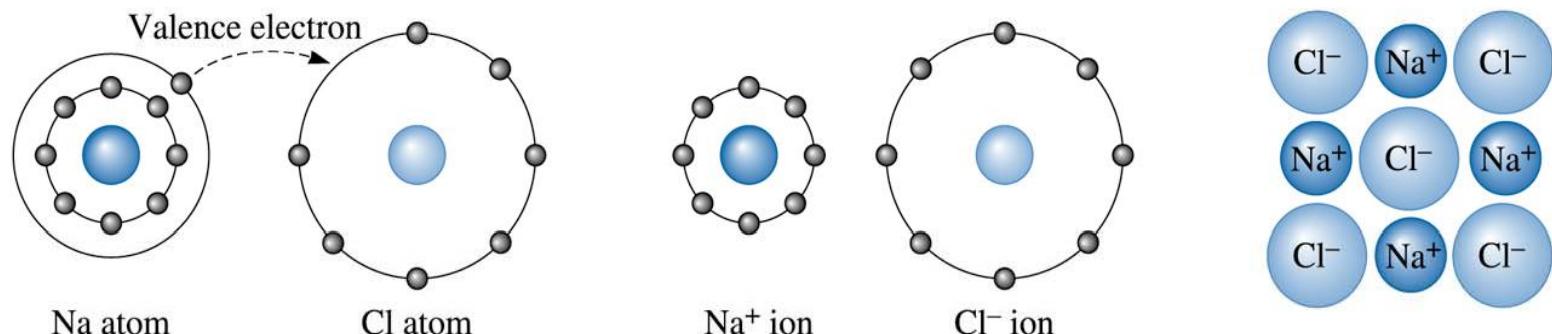
catalyst  
S

El enlace covalente es direccional; esto es, que puede existir únicamente en la dirección entre los dos átomos que comparten el (los) electrón (es)



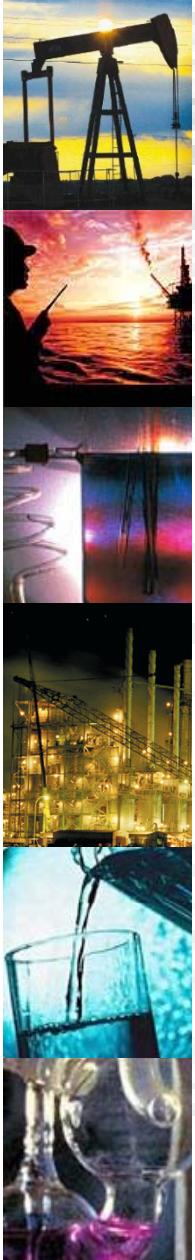
## Enlace Iónico

Un enlace iónico se crea entre dos átomos distintos, con diferente electronegatividad. En este caso, el sodio dona sus electrones de valencia al cloro, la atracción ocurre y en enlace iónico se forma

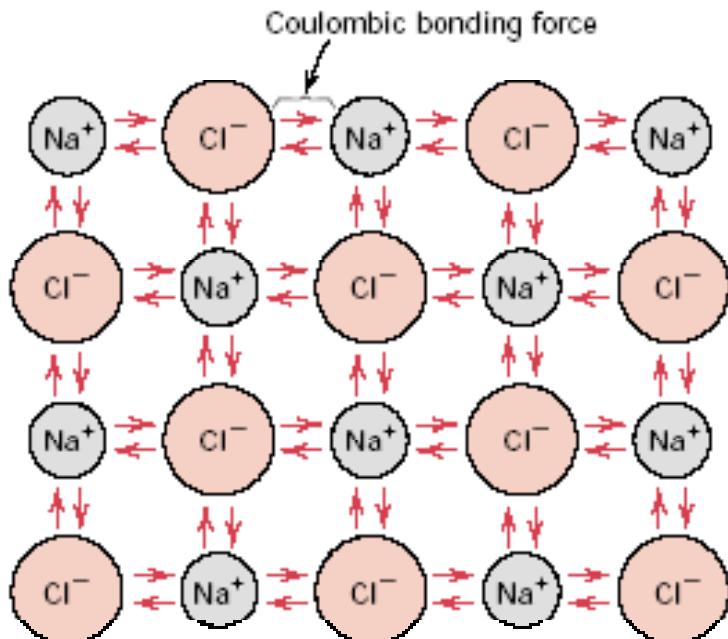


© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Siempre se encuentra en moléculas compuestas ambos átomos; metálicos y no metálicos.



## Enlace Iónico



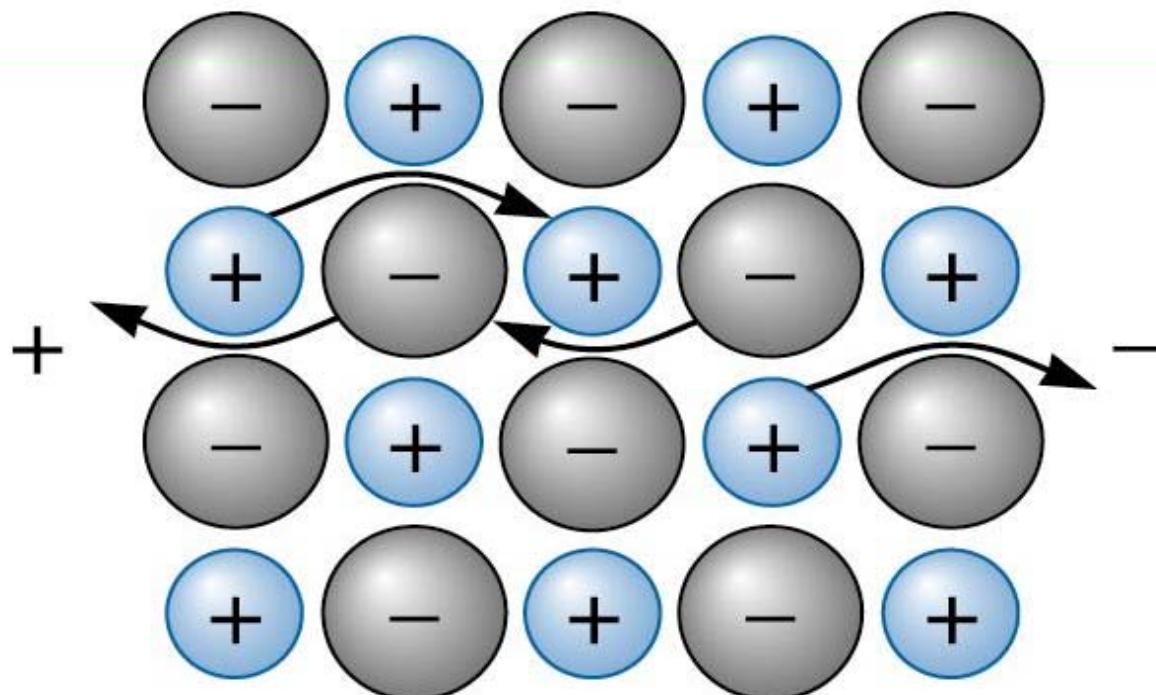
Los enlaces resultantes no son direccionales. Esto es, que para que sea estable, los iones positivos de los materiales iónicos deben tener vecinos negativamente cargados en un esquema tridimensional (o viceversa)

En las cerámicas, el esquema de enlace predominante es iónico



Cuando se aplica un voltaje a un material con enlace iónico, los iones enteros deben reordenarse para provocar el flujo de corriente. Los iones se mueven lentamente por lo cual la conductividad es pobre

## Enlace Iónico

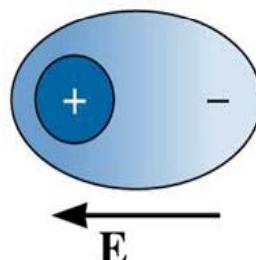
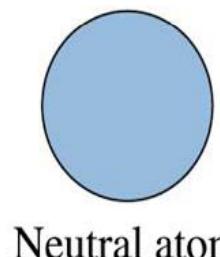




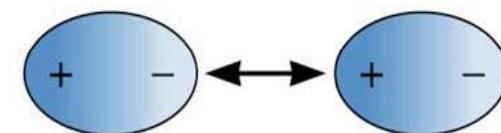
## Fuerzas de Van der Waals

Son débiles en comparación a los otros tipos de enlaces primarios mencionados

### London forces



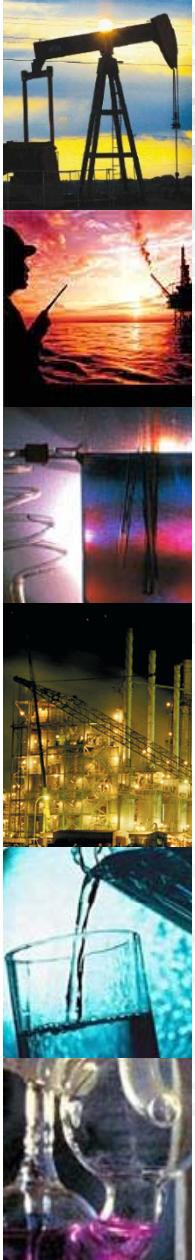
Polarized atom  
has a net dipole  
moment



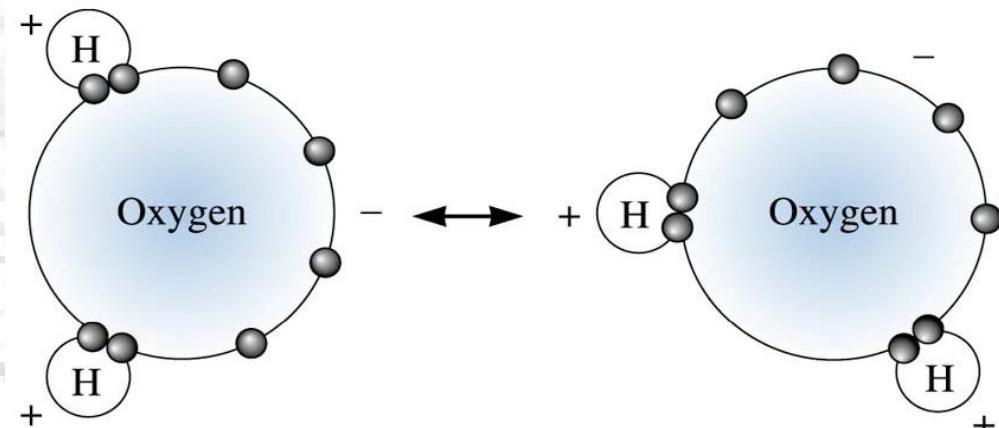
Polarized atoms  
attract each other

© 2003 Brooks/Cole Publishing / Thomson Learning™

Las fuerzas de London son un tipo de fuerzas de Van der Waals entre átomos



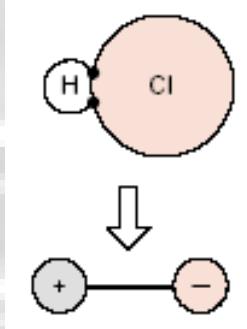
## Fuerzas de Van der Waals

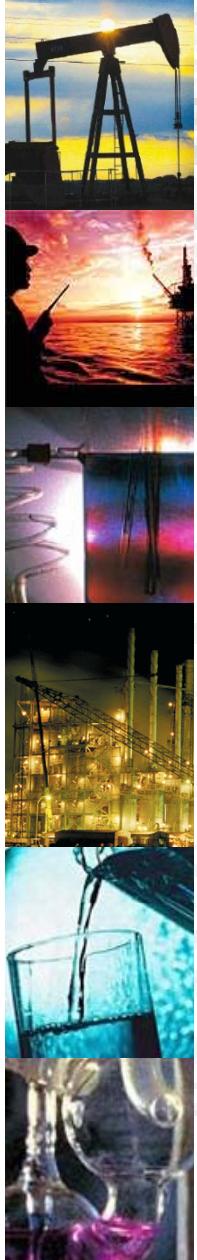


© 2003 Brooks/Cole  
Publishing / Thomson  
Learning™

Entre dos moléculas de agua, los electrones del oxígeno tienden a agruparse lejos del hidrógeno

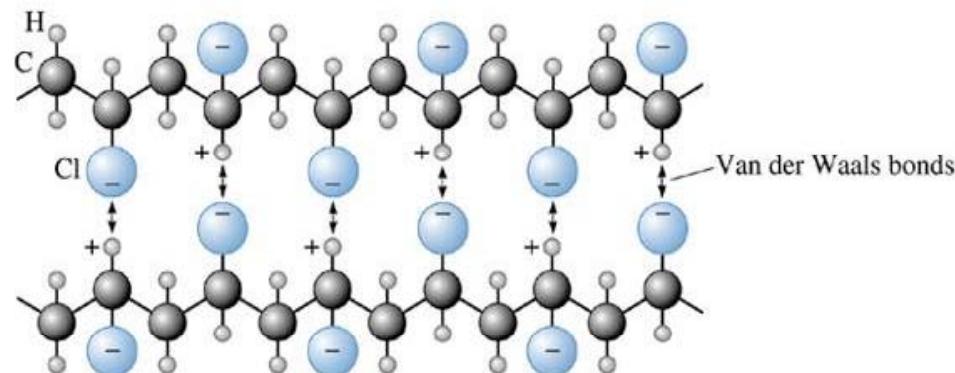
Las fuerzas de Keesom son considerablemente mayores que las de London y son otro tipo de fuerzas de Van der Waals, pero esta vez entre moléculas o grupos de átomos



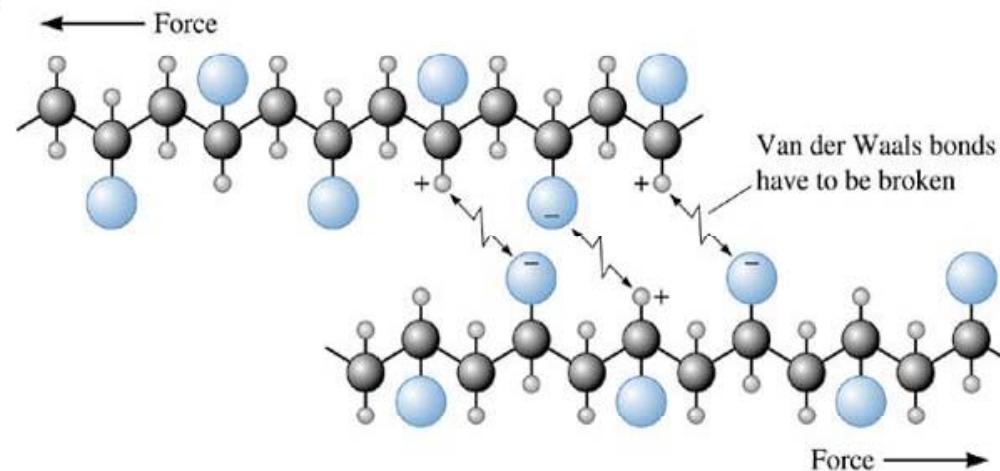


## Fuerzas de Van der Waals

(a)



(b)



En el PVC (polivinil cloruro), los átomos adheridos a la molécula de polímero tienen una carga negativo y los átomos de hidrógeno están cargados positivamente. Se presentan fuerzas débiles de Van der Waals

## Energía de enlace y temperatura de fusión de algunas sustancias

<i>Bonding Type</i>	<i>Substance</i>	<i>Bonding Energy</i>		<i>Melting Temperature</i> (°C)
		<i>kJ/mol</i> ( <i>kcal/mol</i> )	<i>eV/Atom, Ion, Molecule</i>	
Ionic	NaCl	640 (153)	3.3	801
	MgO	1000 (239)	5.2	2800
Covalent	Si	450 (108)	4.7	1410
	C (diamond)	713 (170)	7.4	>3550
Metallic	Hg	68 (16)	0.7	−39
	Al	324 (77)	3.4	660
	Fe	406 (97)	4.2	1538
	W	849 (203)	8.8	3410
van der Waals	Ar	7.7 (1.8)	0.08	−189
	Cl <sub>2</sub>	31 (7.4)	0.32	−101
Hydrogen	NH <sub>3</sub>	35 (8.4)	0.36	−78
	H <sub>2</sub> O	51 (12.2)	0.52	0