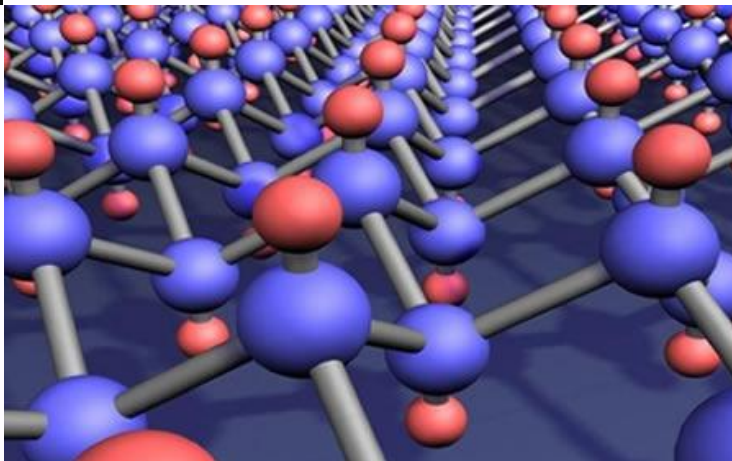


Sólidos Covalentes



* Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999. **Capítulo 15 y 17.**

* Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994. **Capítulo 5.**

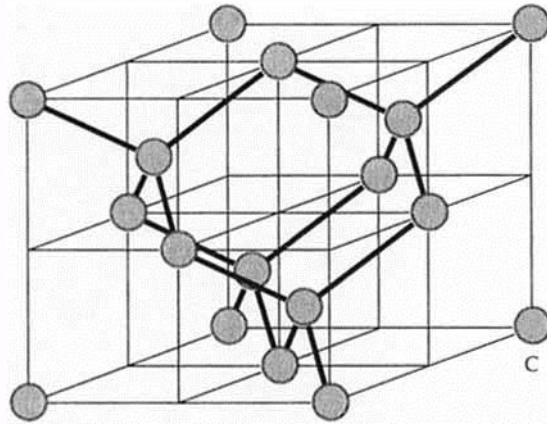
* Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F., (Shriver-Atkins) “*Inorganic Chemistry*”, 4ª Ed., Oxford University Press, 2006. Traducción española de la 4ª Ed. “*Química Inorgánica*”, McGraw-Hill Interamericana, 2008. **Capítulo 23.**

Sólidos Covalentes

Átomos unidos covalentemente a sus vecinos, con el par electrónico delocalizado en la zona internuclear delimitada por los dos átomos enlazados. Situación intermedia entre dos casos límite.

Sólidos metálicos, delocalización electrónica a lo largo de toda la red.

Sólidos iónicos, electrones localizados en los iones.



Cúbica tipo diamante, forma alotrópica del carbono, junto con grafito y C_{60}

Fig - 59

Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 334.

C: $s^2 p^2 \Rightarrow$ Hibridación $sp^3 \Rightarrow$ Estereoquímica tetraédrica.

Disposición espacial tetraédrica, geometría tetraédrica.

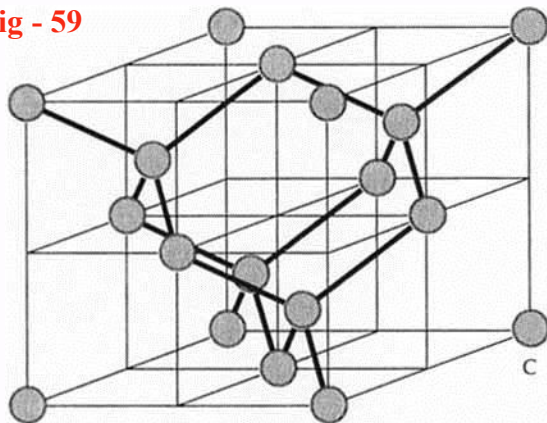
Tetraedros tetraédricamente coordinados compartiendo vértices, ...

***Sólidos Covalentes:
NO existen moléculas discretas***

Sólidos Covalentes

Cúbica tipo diamante

Fig - 59



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 334.

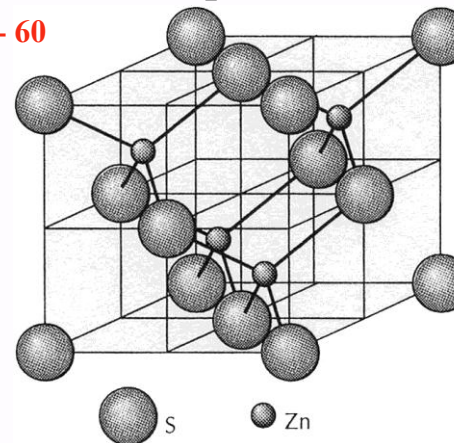
Una única partícula: Átomos iguales

Interacción enlace covalente
Fuertemente direccional

Red expandida, distorsionada, sin tangencia en
las caras, empaquetamiento menos compacto

ZnS tipo blenda

Fig - 60



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 307.

Empaquetamiento C.C. S^{2-} , 1/2 huecos Td Zn^{2+}

Coordinación 4:4 $[ZnS_4]$ o bien $[SZn_4]$

Dos partículas: anión y catión

Interacción electrostática
no direccional

Empaquetamiento más eficiente

Sólidos Covalentes

Sólido formado por un único tipo de partícula, fuertemente unido mediante una interacción covalente fuertemente direccional.

Las propiedades físicas son un reflejo de dicha configuración:

- | | |
|---------------------------|--|
| * Punto de fusión elevado | consecuencia de su fuerte interacción
Diamante 3500 °C |
| * Materiales duros | consecuencia de su fuerte interacción
Diamante, 10 escala de Mohs |
| * Sólidos aislantes | sin delocalización electrónica, par confinado en una región |
| * No son mecanizables | consecuencia de su direccionalidad.
ni plásticos, ni elásticos, ni deformables, ... |

Estructura de los Cristales Covalentes

Estudio sistemático:

Sólidos metálicos	Empaquetamiento de esferas
Sólidos iónicos	Empaquetamiento de iones
Sólidos covalentes	A. F. Wells estudio geométrico y topológico

Ciertos “*condicionamientos*”:

- 1) **La geometría de coordinación** depende de la estructura electrónica.
Diamante (C–C) cada **nudo** de la red se ramifica en cuatro direcciones formando un tetraedro, **Conectividad** o **Ramificación de la red**, dependiente de la Configuración electrónica de los átomos.
- 2) Dado un poliedro de coordinación, su orientación e interconexión (Problema geométrico):
 - * debe ser compatible con las exigencias de valencia de todos los átomos
 - * debe llenar completamente el espacio de forma periódica y ordenada

Estructura de los Cristales Covalentes

Poliedros de coordinación:

Plano trigonal

Plano cuadrada

Tetraédrica

Bipirámide trigonal

Octaédrica

Interconexión de poliedros:

“debe llenar completamente el espacio de forma periódica y ordenada”

Compartiendo vértices, 1 ó más

Compartiendo aristas, 1 ó más

Compartiendo caras

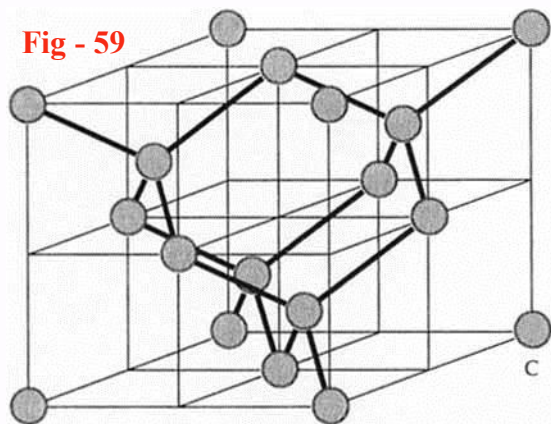
Modelo de empaquetamiento de poliedros

Tetraedros: Poliedro ampliamente utilizado en la naturaleza
Presente en los elementos del grupo 14 (C, Si, ...)

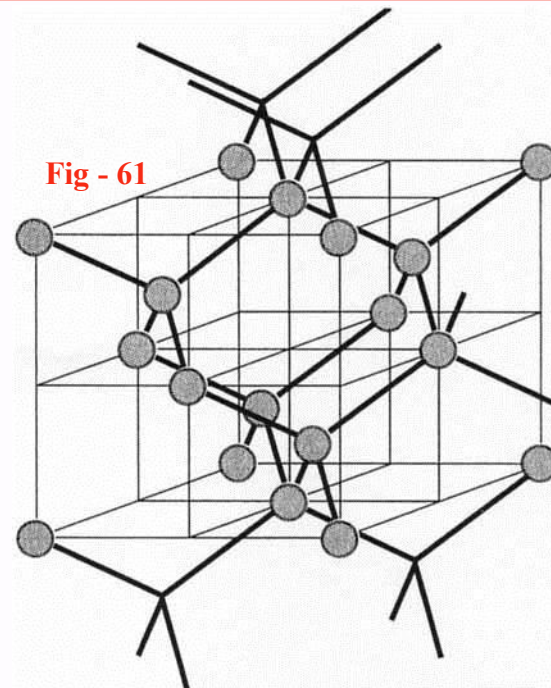
Octaedros: Más brevemente

Estructuras basadas en redes de tetraedros

Red Cúbica tipo diamante



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 334.



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 337.

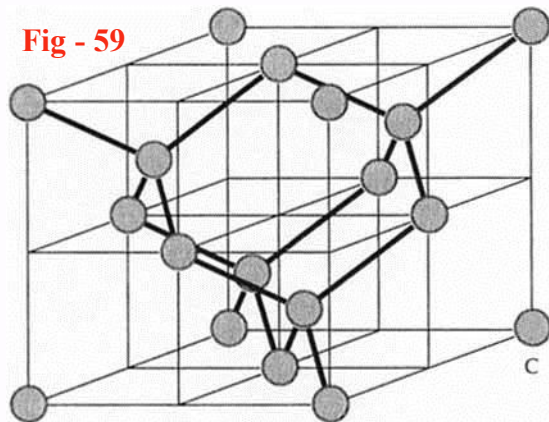
Pregunta

**La forma termodinámicamente estable, a P y T normales,
no es el diamante sino el grafito.**

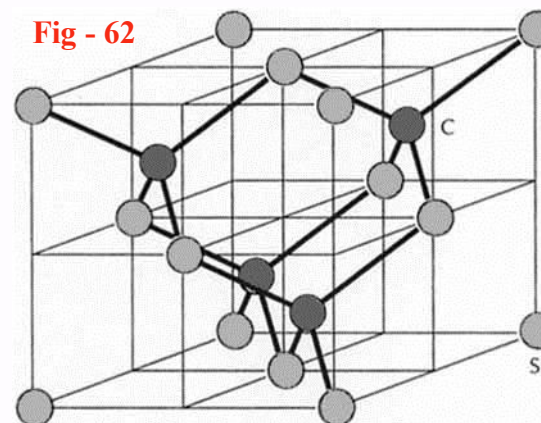
**¿Un diamante se transformaría en grafito, y se
ennegrecería con los años?, ¿Por qué?**

Estructuras basadas en redes de tetraedros

Red Cúbica tipo diamante



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 334.



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 338.

Especies isoelectrónicas

BN BP

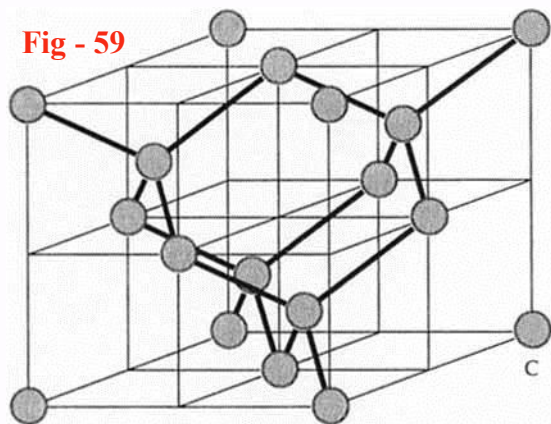
Carborundo, SiC



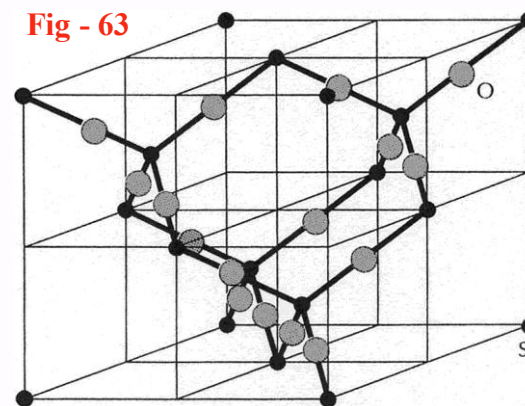
Más duro que el diamante
Usado en herramientas de corte y abrasión
Polvo de SiC en el pulido de diamantes

Estructuras basadas en redes de tetraedros

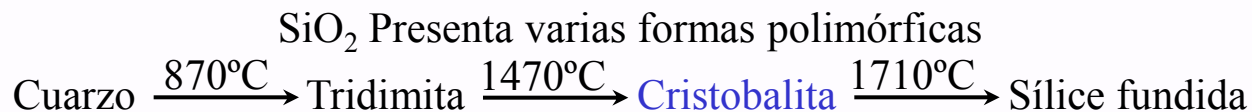
Red Cúbica tipo diamante



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 334.



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 339.



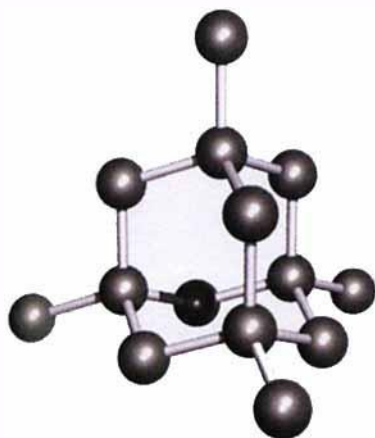
Cristobalita, tetraedros [SiO₄] compartiendo los cuatro vértices,
en un empaquetamiento **cúbico**.

Deriva del Silicio cúbico tipo diamante, insertando oxígenos
entre cada pareja de átomos de silicio.

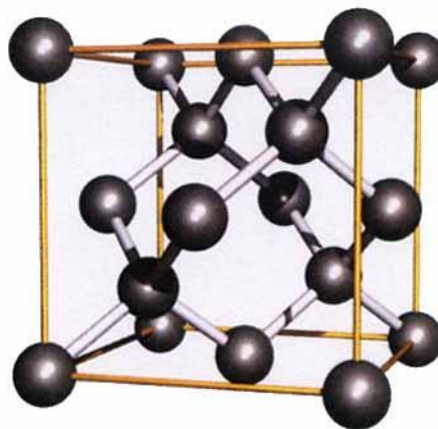
Estructuras basadas en redes de tetraedros

Red Cúbica tipo diamante

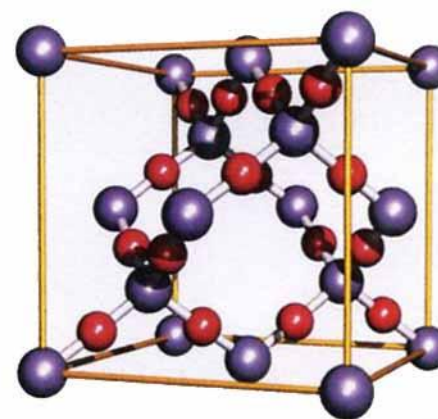
Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 169.



Típica
representación del
carbono



Paralelismo con la
blenda

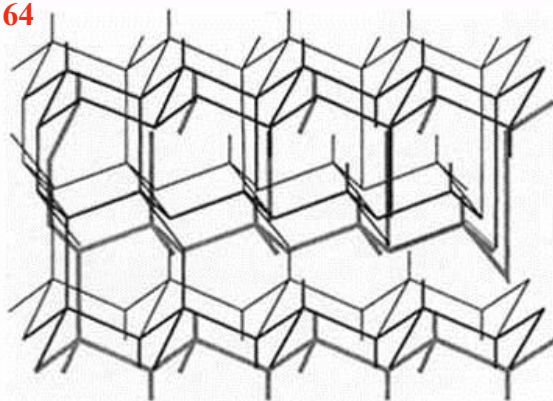


Cristobalita

Estructuras basadas en redes de tetraedros

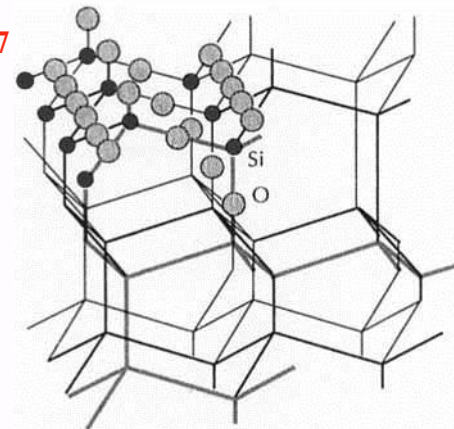
Red hexagonal tipo diamante

Fig - 64

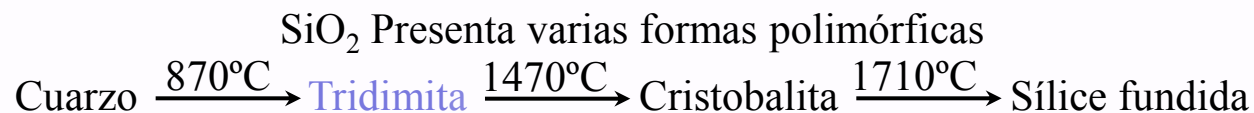


Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 340.

Fig - 67



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico",
Reverté, 1999, pp 340.

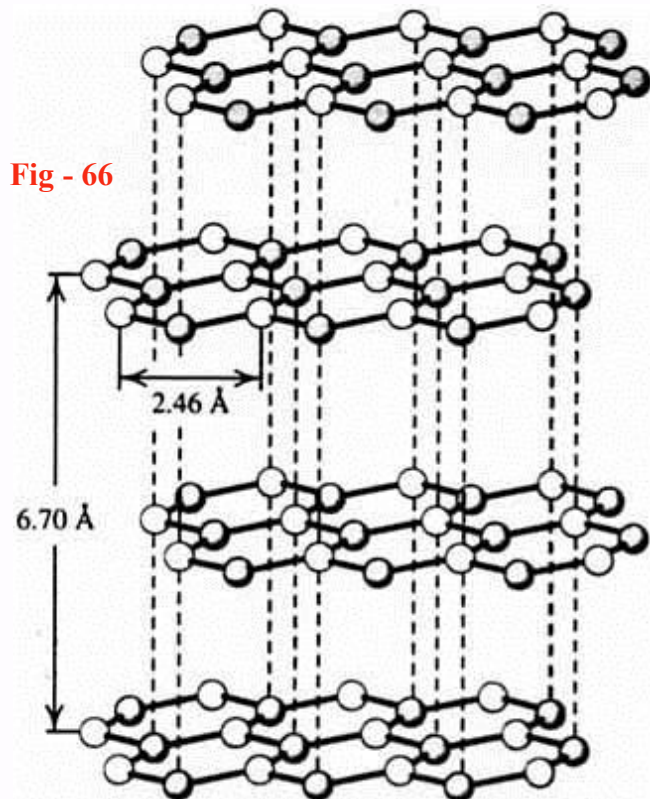


Tridimita, tetraedros [SiO₄] compartiendo los cuatro vértices, en un empaquetamiento **hexagonal**.

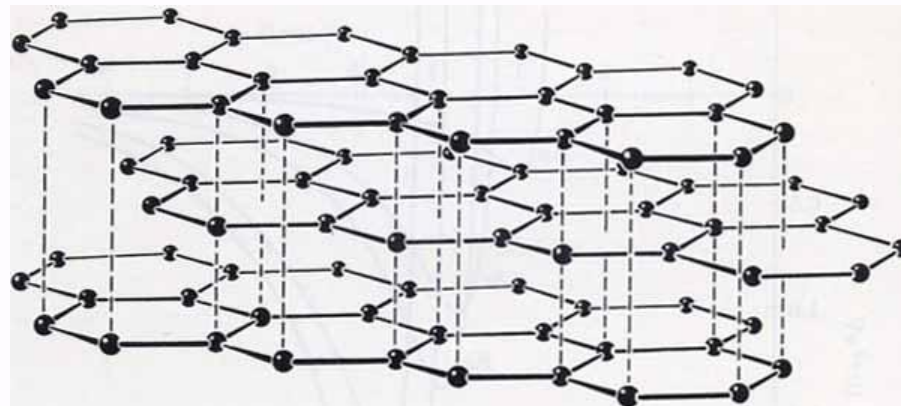
Estructuras basadas en redes de tetraedros

Otras formas alotrópicas del carbono

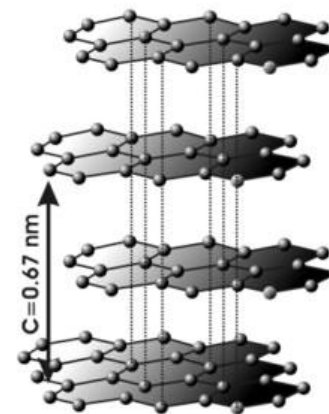
Grafito



Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 284.



Alonso, M.; Finn E. J., "Física: Fundamentos cuánticos y estadísticos", Volumen III, Fondo educativo interamericano, S. A., 1976, pp 246.



Estructuras basadas en redes de tetraedros

Otras formas alotrópicas del carbono

Fulereo - C₆₀

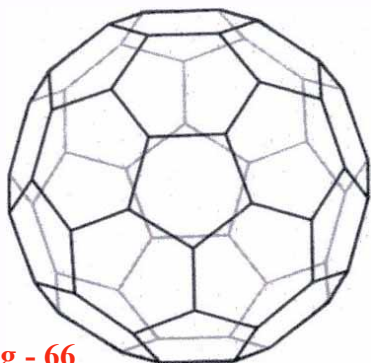


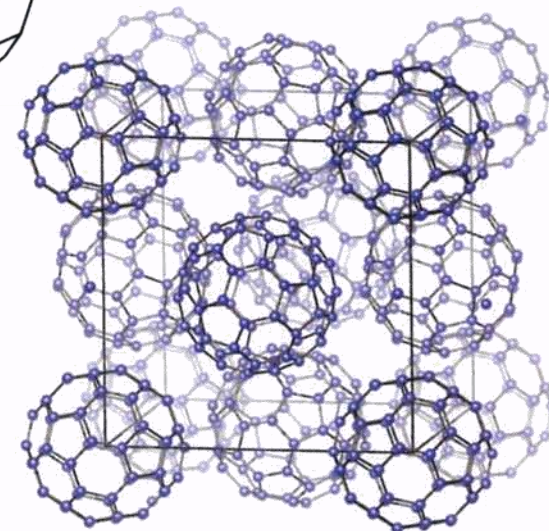
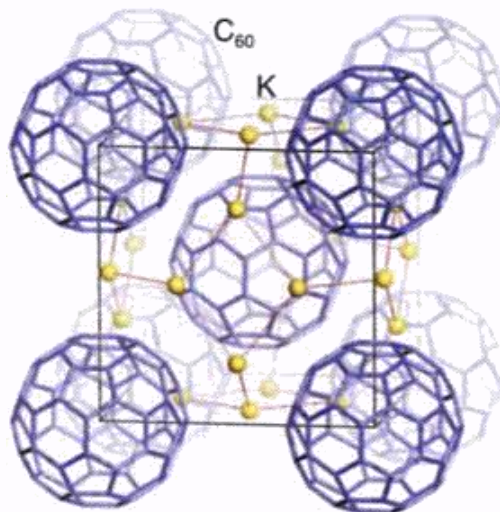
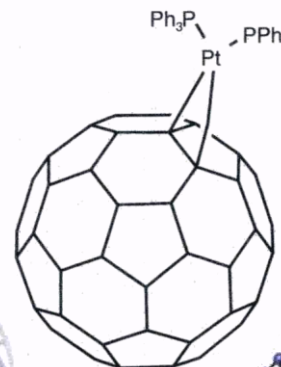
Fig - 66

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., *"Inorganic Chemistry"*, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 387-394. Traducción española de la 2ª Ed. *"Química Inorgánica"*, Pearson Prentice Hall, 2006, 348-353.

Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. *"Química Inorgánica"*, McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 321-323, 636-637.

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., *"Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry"*, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 58.

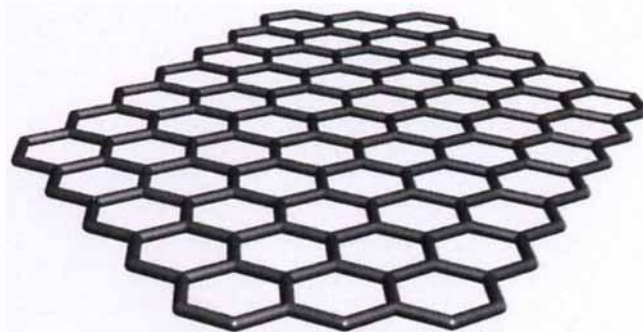
Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. *"Química Inorgánica"*, McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 322.



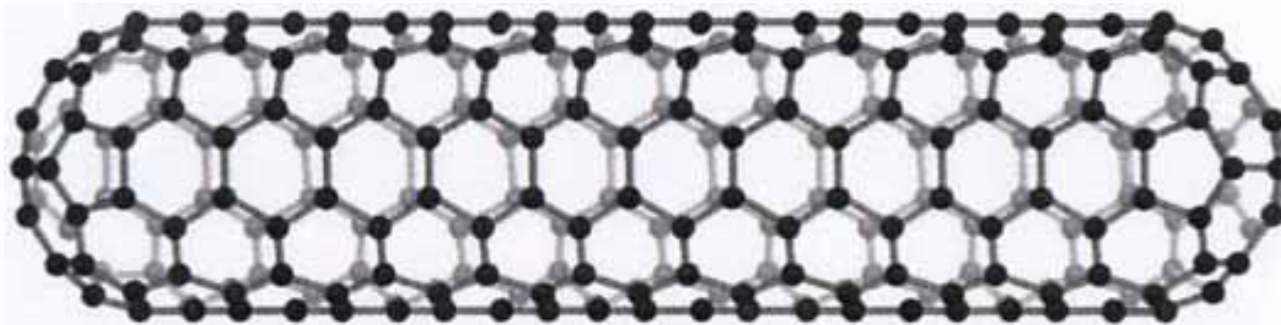
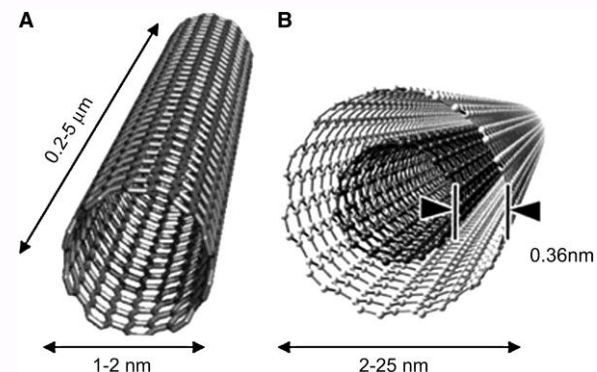
Estructuras basadas en redes de tetraedros

Otras formas alotrópicas del carbono

Nanotubos



Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., *"Inorganic Chemistry"*,
3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 955.

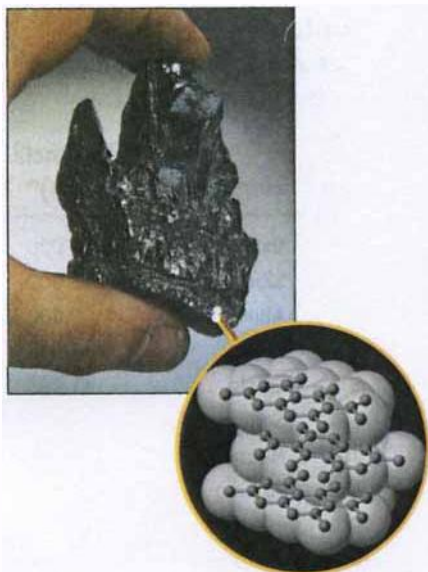


Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., *"Química general"*, 8ª
Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 507.

Estructuras basadas en redes de tetraedros

Otras formas alotrópicas del carbono

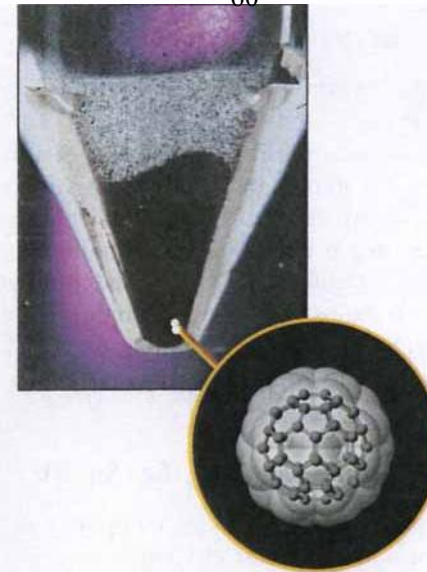
Grafito



Diamante



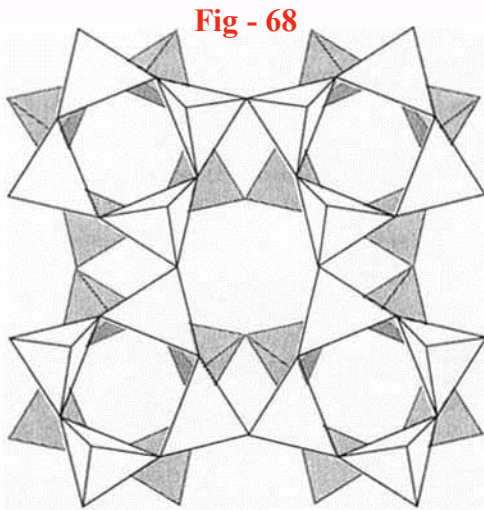
Fulereo - C₆₀



Kotz, J. C.; Treichel, P. M., "Química y Reactividad Química", 5ª Ed., Thomson Paraninfo, 2003, pp 68.

Estructuras basadas en redes de tetraedros

Feldespatos



Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 341.

Tetraedros $[\text{SiO}_4]$

Feldespatos: familia de silicatos minerales de fórmula compleja que incorporan una amplia gama de cationes metálicos.

Sustitución Isomórfica (radio covalente similar) - Aluminosilicatos

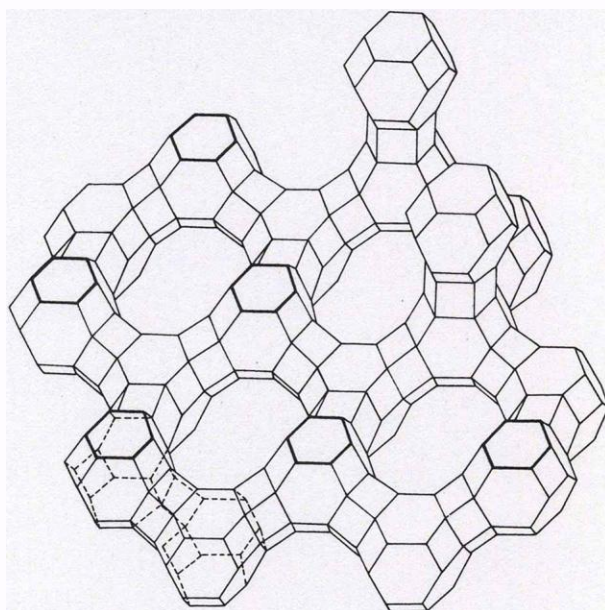


...

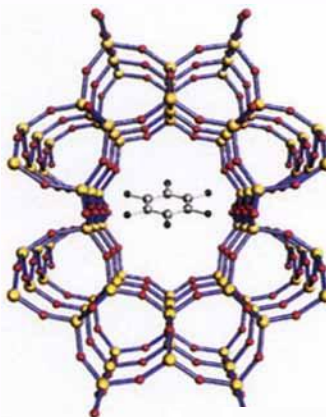
"Mal de la piedra"

Estructuras basadas en redes de tetraedros

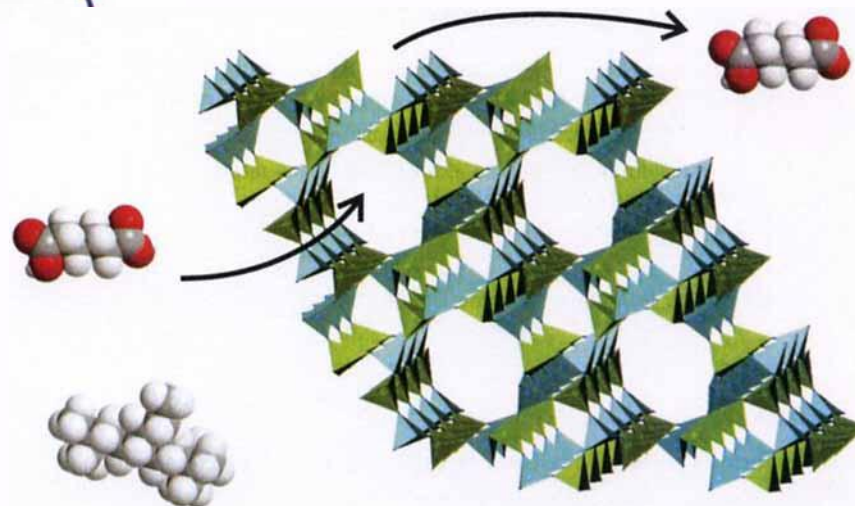
Zeolitas



Gutiérrez Ríos, E, "Química Inorgánica",
2ª Ed. Reverté, 1984, pp 783.



Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F.
Traducción española de la 4ª Ed. "Química Inorgánica",
McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 695.



Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F.
Traducción española de la 4ª Ed. "Química Inorgánica",
McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 625.

Intercambiador
iónico

Estructuras basadas en redes de octaedros

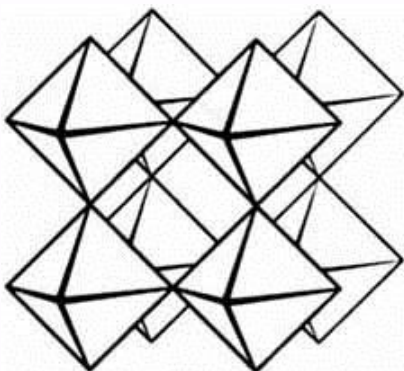


Fig - 70

Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 209.

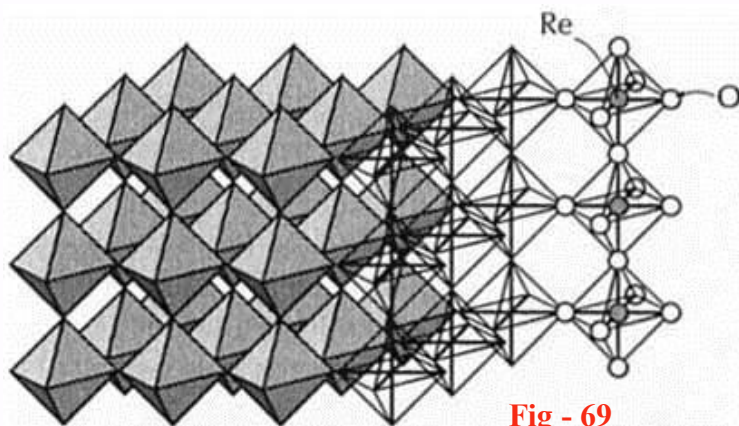
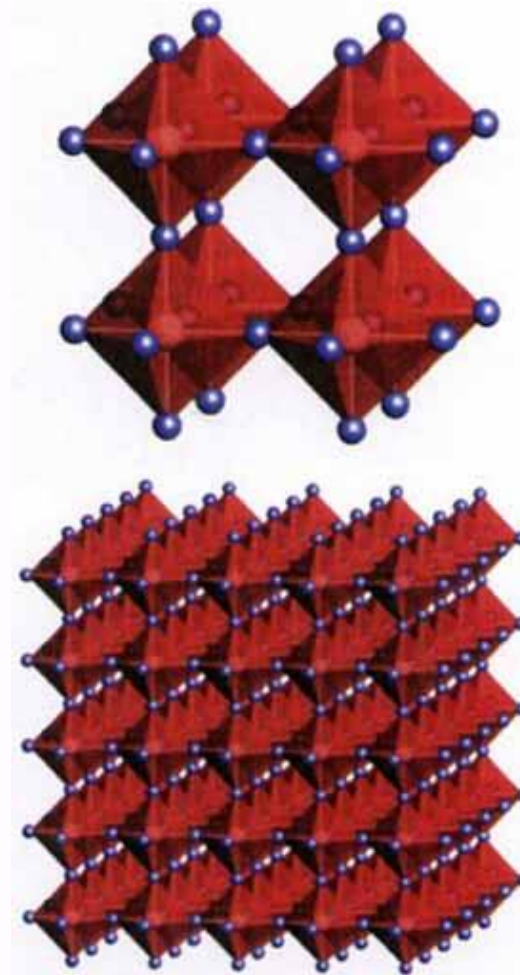


Fig - 69

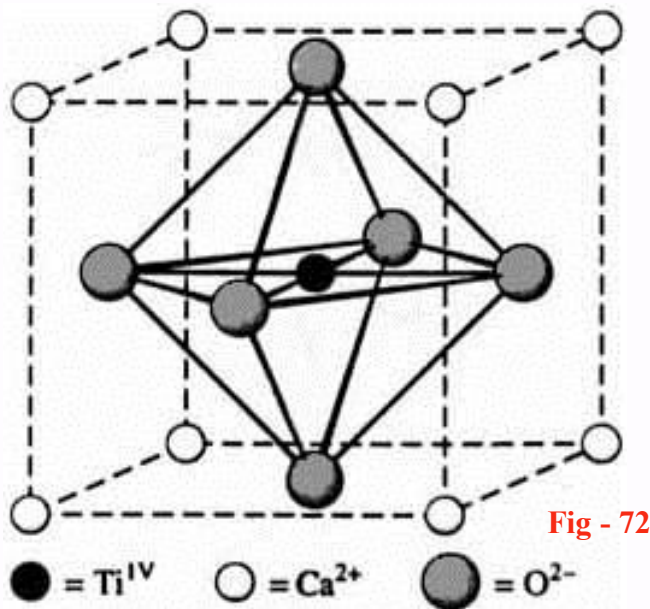
Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 343.



Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F. Traducción española de la 4ª Ed. "Química Inorgánica", McGraw-Hill Interamericana, 2008, pp 607.

Estructuras basadas en redes de octaedros

Perovskita / Perowskita / Perouskita



Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., "Concepts and Models of Inorganic Chemistry", 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994, pp 209.

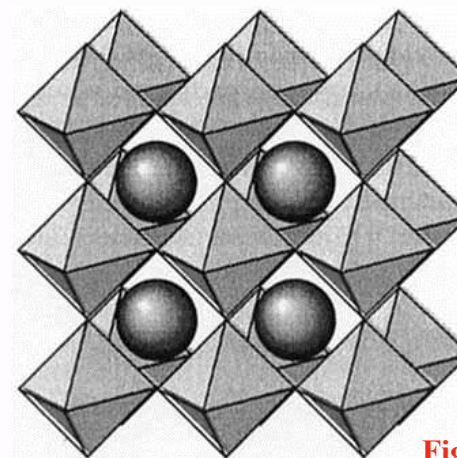
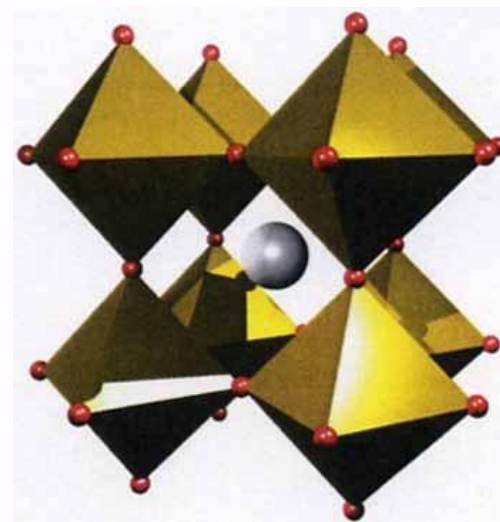


Fig - 71

Casabó i Gispert, J., "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 344.



Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 944.