

Detección de diferencias existentes en la estructura de compuestos iónicos

Clave de registro: CIN2017A50260

Escuela de procedencia: Escuela Tomás Alva Edison

Autores:

Alí-Ollín García Prado

Jorge Allan Gómez Mercado

Asesores:

Govea Anaya Guillermo Alberto

Zarzosa Pérez Alicia

Área de conocimiento: Áreas de convergencia.

Disciplina principal: Física

Tipo de investigación: Experimental

Lugar: México, D.F

Fecha: 17 de febrero del 2017

Resumen

Existen sustancias cuyos átomos o moléculas se enlazan formando estructuras periódicas, ordenadas llamadas estructuras cristalinas. Estas estructuras se analizan utilizando el método de difracción de rayos X. En este trabajo se simuló este método de análisis utilizando modelos macroscópicos y ondas de sonido de alta frecuencia. Se intentó encontrar las diferencias existentes entre una estructura cúbica simple y una estructura cúbica centrada en cuerpo a partir de la comparación entre los patrones de difracción generados por cada estructura.

Palabras Clave: Cristal, compuesto iónico, estructura cristalina, difracción, rayos X.

Abstract

There are different substances made of atoms or molecules whose chemical bonds build ordered periodic structures called crystalline structures. These structures are analyzed using a method called X-Ray diffraction. In this paper we simulated this method of analysis by using different macroscopic models and high frequency sound waves. We tried to find the differences between a simple cubic structure and a body centered cubic structure by comparing the diffraction patterns produced by each structure.

Keywords: crystal structure, ionic compound, diffraction, X-ray.

Introducción

Planteamiento del problema

Cuando dos elementos diferentes forman un compuesto o un alótropo, hay ocasiones en que los átomos se disponen en un arreglo periódico ordenado y bien definido. La naturaleza de los elementos que se enlazan determina no solo la naturaleza del enlace sino también la estructura periódica que se conforma. ¿Cómo se puede analizar la diferencia entre dos estructuras diferentes? ¿Cómo se ordenan los átomos en un compuesto iónico? ¿Cómo se puede detectar la diferencia entre compuestos como el cloruro de sodio y el yoduro de magnesio?

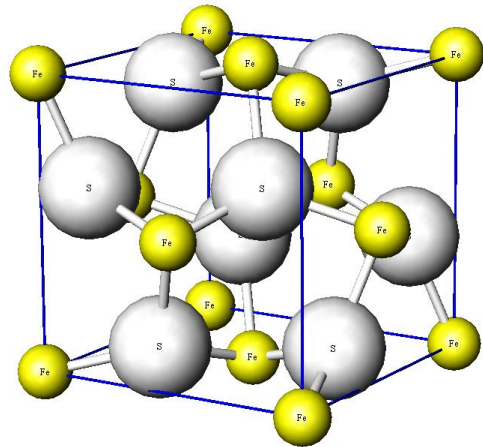


Figura 1. Diferentes átomos que se enlazan formando una estructura cristalina.
Imagen tomada de:
http://www.geocities.jp/ohba_lab_ob_page/structure6.html

Hipótesis

El fenómeno de difracción de ondas depende del tamaño y la forma del objeto con que una onda (electromagnética o mecánica) interactúa. Por tanto, cada compuesto iónico debe tener un patrón de difracción característico que actúa como su "huella digital" y lo distingue de otros compuestos con diferente estructura

Justificación y sustento teórico

Los átomos que existen en la naturaleza en ocasiones se enlazan formando estructuras ordenadas y periódicas que se llaman estructuras cristalinas (**Figura 1**). Las estructuras cristalinas suelen formarse debido a la presencia de enlaces covalentes o bien enlaces iónicos. Los compuestos que poseen este tipo de enlaces y por tanto poseen una estructura cristalina se analizan por un método de estudio llamado difracción de rayos X. Éste método consiste en que un haz de radiación que incide sobre el compuesto se difracta y se refleja con un ángulo que depende del tipo de estructura que posea dicho compuesto. La relación que existe entre el ángulo de reflexión y la estructura del

compuesto iónico se conoce como ley de Bragg. Utilizando este método de estudio, actualmente se han caracterizado una gran cantidad de sustancias que poseen estructura cristalina, entre ellas, a diversos compuestos iónicos y compuestos covalentes tales como el cloruro de magnesio, el grafito y el diamante.

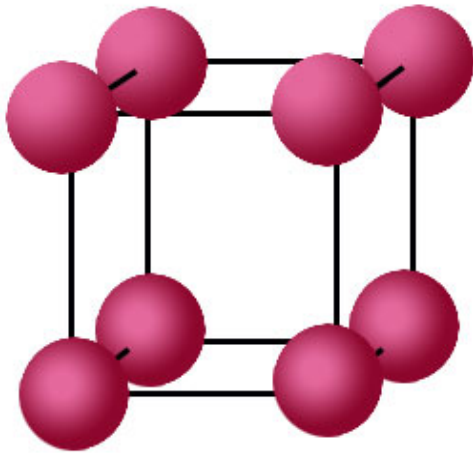


Figura 2. Una estructura cúbica simple (CS)

Imagen tomada de:
<http://staff.aub.edu.lb/~hyaghi/LessonSamples/Atom/pages/explanations/cmpds.htm>

Objetivos

Objetivo General

Entender cómo se distingue entre las diferentes configuraciones que pueden tener los átomos en un compuesto iónico y el método. Realizar un modelo a gran escala que permita simular el procedimiento con el cual se miden las diferencias entre diferentes compuestos iónicos.

Objetivos Específicos

Detectar diferencias en el patrón de difracción generado por una estructura cúbica simple y una estructura cúbica centrada en cuerpo.

Fundamentación teórica

Estructuras cristalinas

Algunos compuestos y elementos químicos enlazan a sus componentes de forma tal que su estructura es periódica y se repite continuamente. Este tipo de estructuras reciben el nombre de estructuras cristalinas.

El tipo de enlace que generalmente genera estructuras cristalinas es el enlace iónico debido a que la carga que adquieren los iones enlazantes genera fuerzas de atracción que dependen altamente de la simetría del compuesto formado.

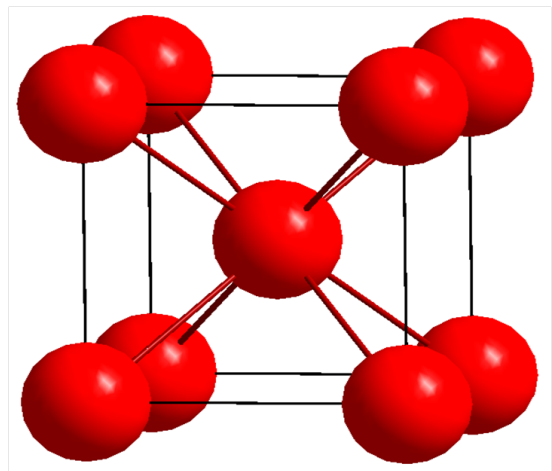


Figura 3. Una estructura cúbica centrada en cuerpo

imagen tomada de:

<http://biochem.co/2008/08/close-packing-metallic-elements/>

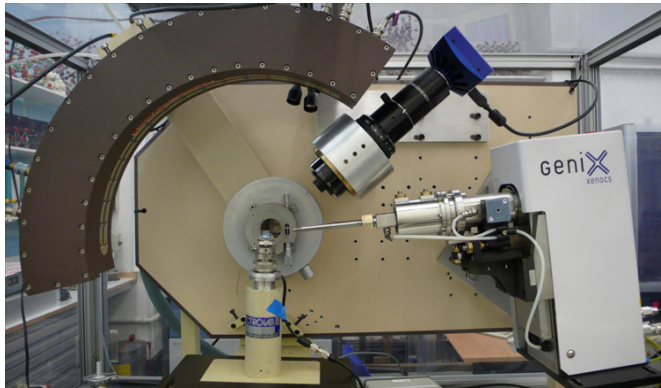


Figura 4. Un equipo de difracción de rayos X
Imagen tomada de: <http://www.nhm.ac.uk>

Por otro lado, sustancias con enlace covalente polar pueden poseer esta estructura debido al ángulo que se forma entre los enlaces químicos que a su vez se relaciona con la posición e hibridación de los orbitales que contienen a los electrones enlazantes.

La estructura cristalina más simple que existe es la cúbica simple (CS) (**Figura 2**) y está conformada por ocho átomos o

moléculas ubicadas en los vértices de un cubo. Esta estructura puede contener además un átomo o átomos ubicados en el centro del cubo o bien en el centro de cada una de sus caras. Si la estructura cúbica contiene uno o varios átomos ubicados en el centro del cubo, ésta recibe el nombre de estructura cúbica centrada en cuerpo (BCC) (**Figura 3**). Si por el contrario, existen átomos en el centro de cada una de las caras, la estructura se llama cúbica centrada en caras (FCC).

En este trabajo se estudiará la forma de distinguir entre una estructura cúbica simple y una estructura cúbica centrada en cuerpo. Algunos ejemplos de sustancias con estructura cúbica simple son el cloruro de sodio (NaCl), el silicio y el diamante. Por otro lado, algunas sustancias con una estructura cúbica centrada en cuerpo son el cloruro de Cesio (CsCl), el vanadio y el cromo.

Análisis de las estructuras de un compuesto.

El método para estudiar la estructura cristalina de alguna sustancia se llama difracción de rayos X (**Figura 4**). En este método un haz de radiación altamente

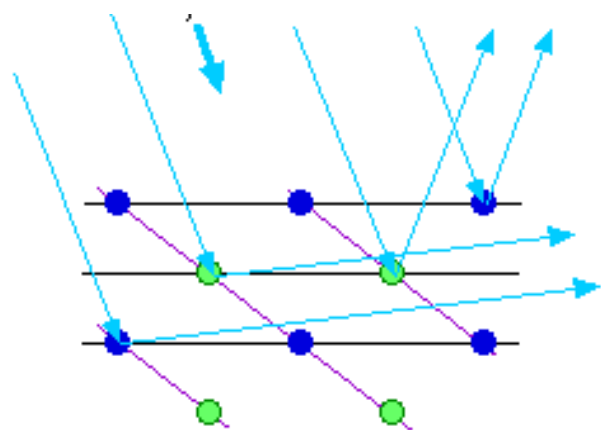


Figura 5. Los rayos X (en azul) inciden sobre los átomos ordenados en planos horizontales. Imagen tomada de: <http://buphy.bu.edu/py106/notes/DiffractionGrating.html>

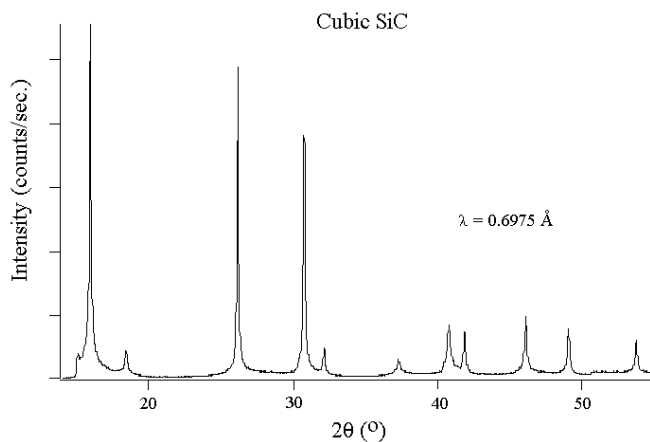


Figura 6. Un patrón de difracción

energética (rayos X) incide sobre la sustancia cristalina y se refleja con ángulo determinado.

Cuando incide el haz de radiación sobre el cristal, en realidad éste interactúa con el conjunto de átomos alineados en una estructura cristalina específica (**Figura 5**). Algunos haces de radiación inciden sobre el primer plano de átomos alineados y otros

inciden sobre el plano que le sucede. Sin embargo, sólo para algunos ángulos específicos, cuando éstos haces se reflejan en los planos atómicos éstos interfieren constructivamente y producen una onda con el doble de intensidad que los haces de radiación que inicialmente incidieron en el material.

Un detector se encarga de recibir y registrar la intensidad de los rayos que inciden y se reflejan en el cristal conforme el haz de radiación incide desde diferentes ángulos. Así, sólo cuando el haz incide en ángulos específicos, la intensidad registrada se elevará abruptamente generando un "pico" de intensidad. La gráfica de intensidad relativa contra el ángulo de incidencia del haz de radiación recibe el nombre de difractograma (también llamado en ocasiones patrón de difracción) (**Figura 6**). Cada difractograma se analiza utilizando la ley de Bragg, que es una expresión matemática que relaciona la intensidad de los rayos X reflejados con el ángulo de incidencia de dichos rayos:

$$\lambda = 2d \sin \theta$$

donde λ es la longitud de onda de la radiación utilizada, d es la distancia entre los planos formados por los átomos o moléculas del compuesto analizado y θ es el ángulo de incidencia de los haces de radiación.

El difractograma es una gráfica que funge como huella digital del material. Por tanto, diferentes sustancias generarán diferentes difractogramas de acuerdo con las

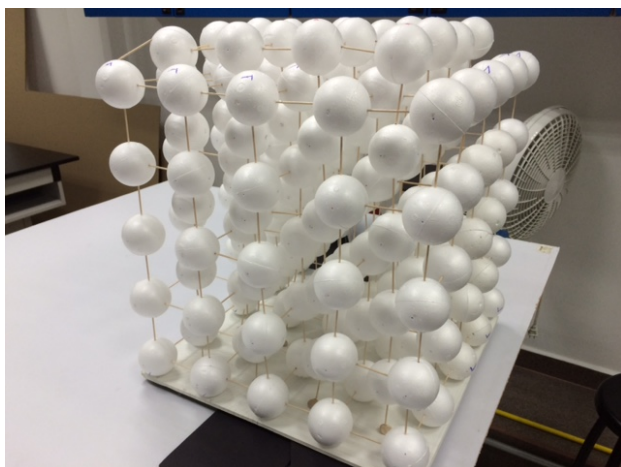


Figura 7. Modelo macroscópico de una estructura cristalina cúbica centrada en cuerpo

características de su estructura cristalina tales como la disposición de los átomos (tipo de estructura) y las distancias interatómicas existentes.

Metodología de Investigación

Con esferas de unicel y palillos de madera se construyeron modelos a gran escala que simulan las estructuras internas de un compuesto iónico con estructura cúbica simple y otro compuesto iónico con una

estructura cúbica centrada en cuerpo. Se utilizaron esferas de 5.7 cm de diámetro y cada esfera se separó por una distancia de 4 centímetros con la finalidad de que las ondas sonoras se difracten efectivamente sobre las esferas y se logre observar una reflexión sobre los "planos atómicos" generados por las esferas de unicel.

Sobre estos modelos se hicieron incidir ondas de sonido con una frecuencia de 10 000 Hz que incidieron, se difractaron, y se reflejaron en las estructuras cristalinas macroscópicas y posteriormente se detectaron por un decibelímetro ubicado en un ángulo que va de 180 a 42 ° con respecto a la posición en que se encuentra el emisor. Los valores para las intensidades y los ángulos fueron registrados para posteriormente elaborar una gráfica de intensidad contra ángulo (un difractograma).

reflejaron en los modelos a gran escala generó diferentes patrones de difracción que se analizaron y compararon con la finalidad de detectar diferencias y similitudes entre ambos. Se identificó y caracterizó la presencia de los diferentes picos en cada patrón



Figura 8. Modelo macroscópico de una estructura cristalina cúbica simple.

de difracción. Asimismo se analizó la estatura de cada uno de los picos presentes en los difractogramas.

Resultados y Análisis

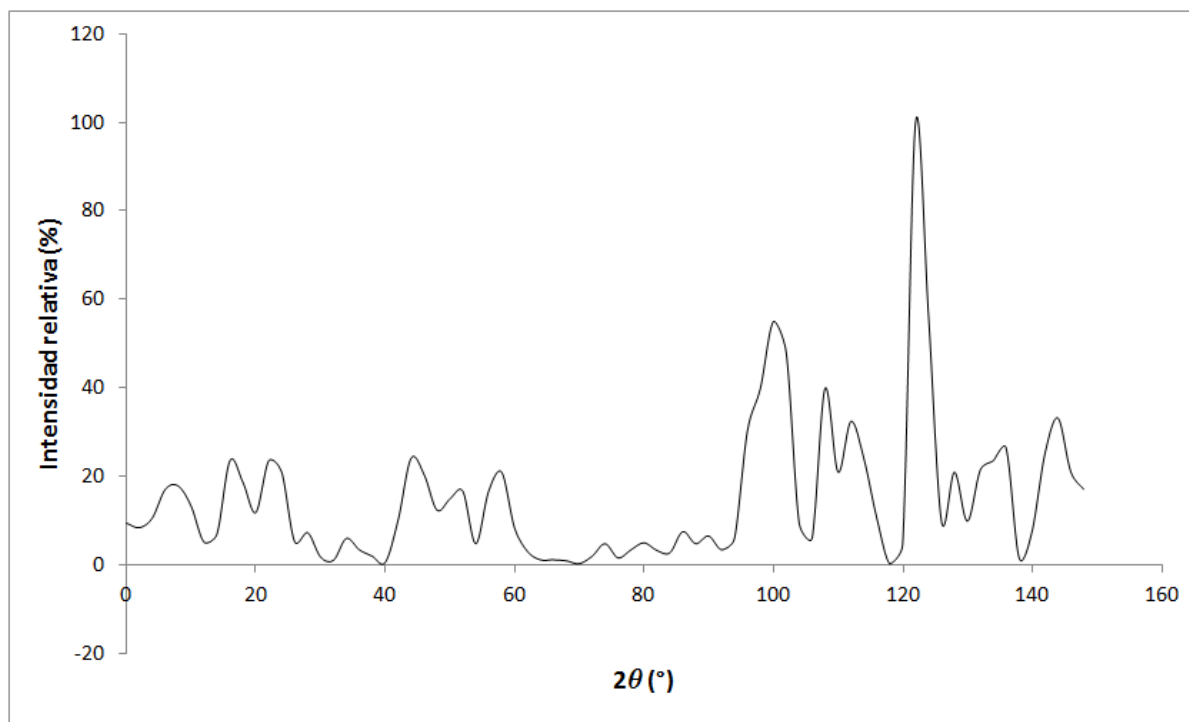


Figura 9. Patrón de difracción para el cristal con estructura cúbica simple.

En la **figura 9** se muestra el patrón de difracción que se generó cuando el sonido incidió en una estructura cúbica simple. Se observa la presencia de un total de 13 valores de 2θ para los cuales se observa un incremento mayor al 10% de la intensidad relativa del sonido. Por otro lado, obsérvese que los picos más altos del difractograma obtenido se encuentran en ángulos mayores a 90° y, de todos ellos, aquél con más intensidad se presentó en $2\theta = 122^\circ$.

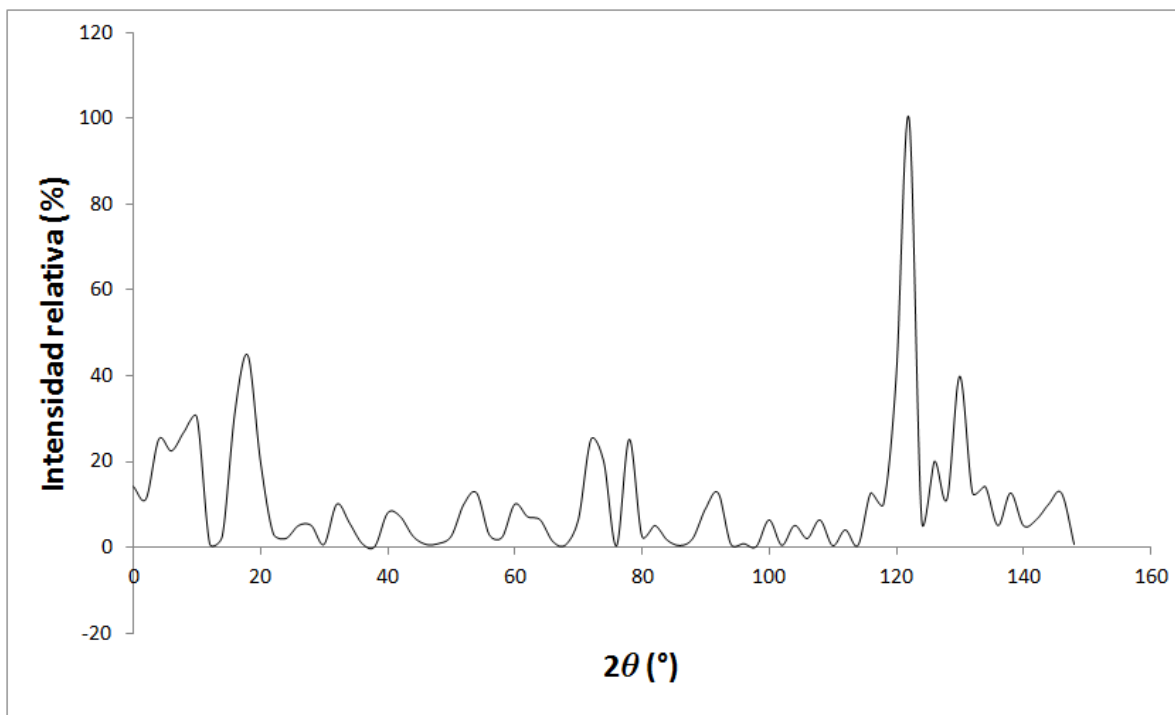


Figura 10. Patrón de difracción para el cristal con estructura cúbica centrada en cuerpo.

Por otro lado, el difractograma que se obtuvo para la estructura cúbica centrada en cuerpo se muestra en la Figura 8 donde puede observarse que, en esta ocasión, aparecen ocho picos con una intensidad considerablemente mayor al 10%. En la tabla 1 se presenta una tabla comparativa que contiene un comparativo entre la ubicación de los ángulos con mayor intensidad relativa para una estructura cúbica simple y para una estructura cúbica centrada en cuerpo. Obsérvese cómo algunos ángulos aparecen tanto en la estructura cúbica simple como en la estructura cúbica centrada en cuerpo. Sin embargo, hay picos de la estructura BC que se encuentran desplazados con respecto a los de la estructura C. Esto puede deberse al error experimental inherente en la posición inicial en la que se colocaron los modelos a gran escala o bien a pequeños defectos de fabricación en los modelos. No se pudo, sin embargo, cuantificar de alguna forma ese error experimental.

TABLA 1: Valores de los ángulos (2θ) que poseen las intensidades relativas más altas (superiores al 10%)			
Cúbica simple		Cúbica centrada en cuerpo	
2θ (°)	intensidad (%)	2θ (°)	intensidad (%)
8	17.8	10	30.2
16	23.4	18	44.7
22	23.4		
42	24.0		
52	16.60	54	12.6
58	20.8	72	25.1
100	55.0	78	25.1
108	39.8		
112	32.4		
122	100	122	100
128	20.9	126	20.0
134	23.4	130	39.8
144	33.11		

La **Figura 11** incluye el difractograma de ambas estructuras. Ahí se pueden observar las semejanzas que existen y las diferencias. Se observa claramente que los picos en 108° y 112° que se encuentran presentes para la estructura cúbica simple, desaparecen para la estructura centrada en cuerpo; sin embargo, se perciben evidencias y similitudes que se pueden atribuir a que ambas estructuras tienen como una base a la forma de un cubo. Esto lleva a razonar que al modificar la estructura cúbica al agregarle un punto más en el centro de cada celda, el difractograma producido en respuesta elimina picos presentes en estructuras simples.

Se observa también que en el difractograma de la estructura cúbica centrada en cuerpo aparecen otros máximos relativos que no se encuentran en el patrón generado por la cúbica simple. Sin embargo, en términos generales, se sigue observando en ambos difractogramas que las dos estructuras generan patrones de difracción similares y las

diferencias radican en la presencia o ausencia de picos ubicados en posiciones específicas.

No se logró encontrar alguna distinción característica en la altura de los picos de cada patrón de difracción.

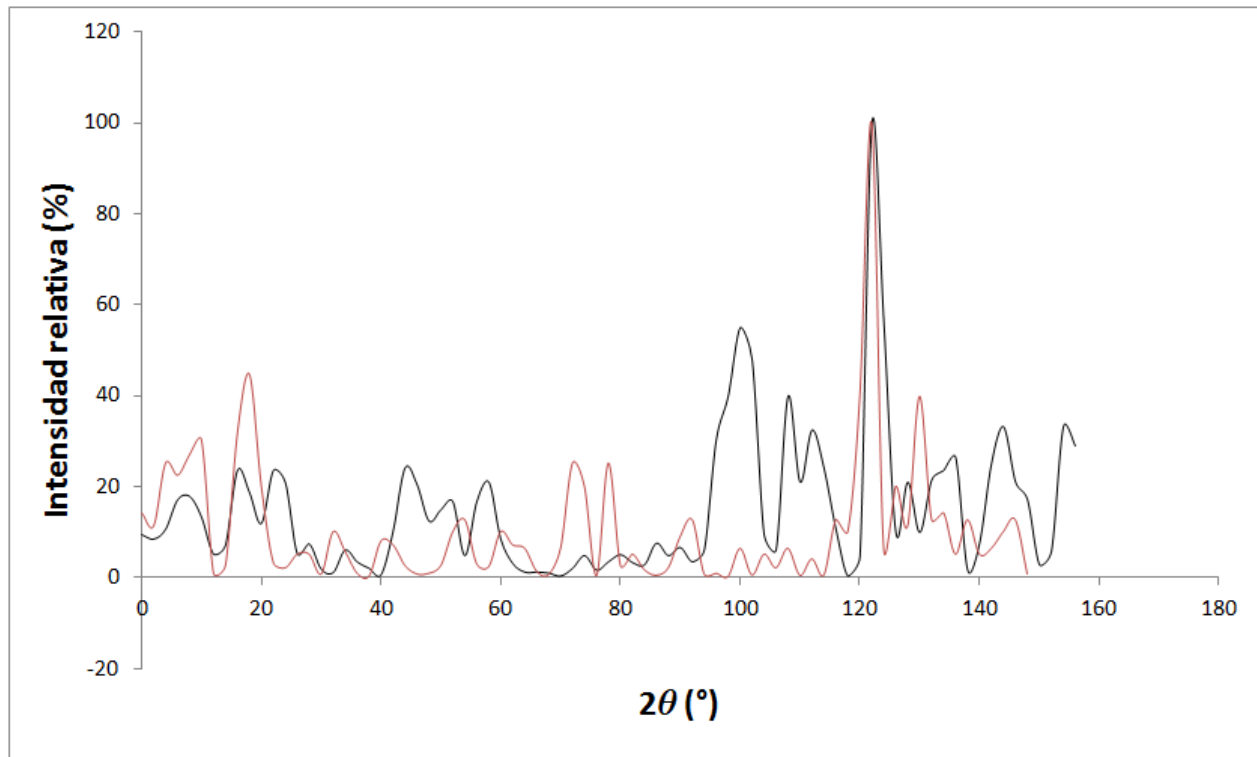


Figura 11. Comparación de difractogramas de la estructura cúbica simple (negro) y la estructura cúbica centrada en cuerpo.

En la **Figura 11**, se puede observar cómo ambos difractogramas comparten un conjunto de picos que se pueden considerar típicos de una estructura cúbica. Los picos adicionales o faltantes en cada difractograma corresponden a las diferencias existentes entre una estructura cúbica simple y una estructura cúbica centrada en cuerpo. Por desgracia, el desplazamiento existente entre algunos picos y el cambio en la altura de los mismos provoca que la plena identificación y caracterización de cada pico sea más difícil.

Conclusiones

Si los compuestos tienen una estructura cúbica pero ésta se ve modificada por puntos adicionales en su centro, entonces, se aprecian diferencias en los difractogramas que consiste en la desaparición de algunos de los picos que aparecían originalmente en el patrón de difracción de la estructura cúbica simple. Además, se observa el surgimiento de "nuevos" picos en la región intermedia del ángulo ubicada alrededor de los 90 grados. No se encontró relación o patrón alguno en el comportamiento de las alturas de los picos de los respectivos patrones de difracción.

A pesar de las diferencias en la presencia de algunos picos en los difractogramas de las estructuras cúbica simple y cúbica centrada en cuerpo, los difractogramas aún guardan muchas similitudes que corresponden a las características que comparten ambas estructuras cristalinas. Por tanto, es posible asociar un conjunto específico de picos al de una estructura cristalina cúbica y posteriormente detallar esa estructura mediante los picos característicos de una estructura simple o una centrada en cuerpo.

Se sugiere hacer un análisis posterior en el que se incluyan otras estructuras cristalinas tales como la estructura cúbica centrada en caras para determinar exactamente cuáles son los picos que forman parte de todas las estructuras cúbicas de un modo más general.

Referencias

Askeland, R. (1998) Ciencia e Ingeniería de los materiales , México: Thompson

Sands, D. (1969).Introduction to Crystallography. Estados Unidos de América: W.A. Benjamin, Inc

Chang, R., (2013) Química, México, McGraw Hill.

C. Giacovazzo, H.L. Monaco, D. Viterbo et al (2000). Fundamentals of Crystallography. Estados Unidos de América: Oxford University.