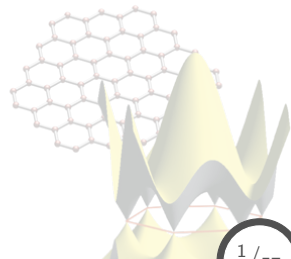


2. Enlace químico



Contenido: Tema 02

2. Enlace químico

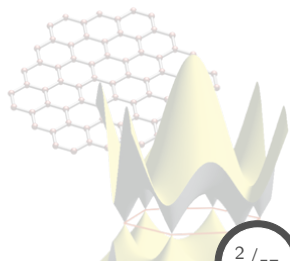
2.1 Enlaces Cristalinos

2.2 Enlace de van der Waals

2.3 Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

2.4 Enlace iónico

2.5 Ecuación de estado, módulo de compresibilidad



Contenido: Tema 02

2. Enlace químico

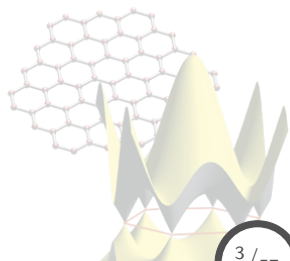
2.1 Enlaces Cristalinos

2.2 Enlace de van der Waals

2.3 Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

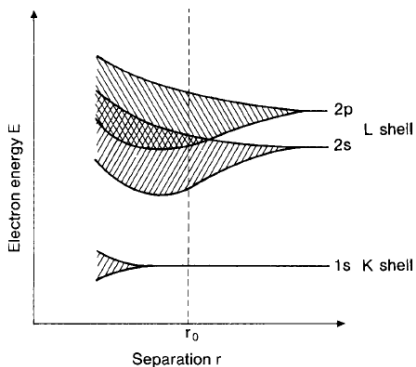
2.4 Enlace iónico

2.5 Ecuación de estado, módulo de compresibilidad



Enlaces cristalinos

Formación de un sólido

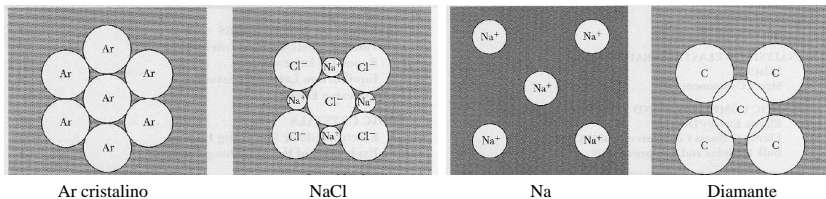


- Los niveles de un átomo aislado son valores **discretos** de energía.
- Conforme los átomos se acercan, existirá un **desdoblamiento** en sus niveles de energía.
- Si el número de átomos es alto (como en un sólido), los niveles forman un **continuo**, que se conoce como **bandas de energía**, cuyo ancho dependerá del traslape de las funciones de onda.
- El origen del **enlace químico** es la reducción de la energía electrónica, la cual resulta del ensanchamiento de las bandas de energía.
- El tipo de **enlace** del sólido dependerá del grado de traslape que exista entre las funciones de onda de los átomos.

Enlaces cristalinos

Tipos y definición de enlaces cristalinos

La materia se mantiene en **estado sólido**, debido enteramente a la interacción electrostática atractiva entre los **electrones** (carga negativa) y los **iones** (carga positiva).



Las diferencias entre los sistemas en estado sólido provienen de la **distribución** de las capas de electrones mas externas, así como del *core* de los iones, dando lugar a diferentes tipos de **enlaces químicos**:

- **van der Waals**
- **Metálico**
- **Puente de hidrógeno**
- **Covalente**
- **Iónico**

Contenido: Tema 02

2. Enlace químico

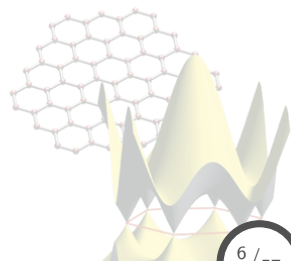
2.1 Enlaces Cristalinos

2.2 Enlace de van der Waals

2.3 Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

2.4 Enlace iónico

2.5 Ecuación de estado, módulo de compresibilidad



Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Propiedades

Gases Nobles

- Tienen **llenas** sus capas de configuración electrónica.
Ejem: Ne(10) $\rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$.
- Son aislantes **transparentes**, con **altas** energías de ionización.
- La distribución de carga electrónica en el átomo aislado es **esféricamente** simétrica.
- Forman estructuras cristalinas lo mas empaquetadas posible: fcc.¹
- Poseen un enlace muy **débil** (**van der Waals**), **bajas** energías de cohesión y **bajas** temperaturas de fusión.

Energía de Cohesión

Es la energía que se debe adicionar a un cristal para separar sus componentes en átomos libres neutros en reposo a una separación infinita, con la misma configuración electrónica.

¹Excepto He³ y He⁴.

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Energía de ionización

Table 5 Ionization energies

The total energy required to remove the first two electrons is the sum of the first and second ionization potentials. (Source: National Bureau of Standards Circular 467.)

H																	He
13.595																	24.58
																	78.98
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
5.39	9.32											8.30	11.26	14.54	13.61	17.42	21.56
81.01	27.53											33.45	35.64	44.14	48.76	52.40	62.63
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
5.14	7.64											5.98	8.16	10.55	10.36	13.01	15.76
52.43	22.67											24.80	24.49	30.20	34.0	36.81	43.38
← Energy to remove one electron, in eV →																	
← Energy to remove two electrons, in eV →																	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
4.34	6.11	6.56	6.83	6.74	6.76	7.43	7.90	7.86	7.63	7.72	9.39	6.00	7.88	9.81	9.75	11.84	14.00
36.15	17.98	19.45	20.46	21.39	23.25	23.07	24.08	24.91	25.78	27.93	27.35	26.51	23.81	30.0	31.2	33.4	38.56
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
4.18	5.69	6.5	6.95	6.77	7.18	7.28	7.36	7.46	8.33	7.57	8.99	5.78	7.34	8.64	9.01	10.45	12.13
31.7	16.72	18.9	20.98	21.22	23.25	22.54	24.12	25.53	27.75	29.05	25.89	24.64	21.97	25.1	27.6	29.54	33.3
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
3.89	5.21	5.61	7	7.88	7.98	7.87	8.7	9	8.96	9.22	10.43	6.11	7.41	7.29	8.43		10.74
29.0	15.21	17.04	22	24.1	25.7	24.5	26		27.52	29.7	29.18	26.53	22.44	23.97			
Fr	Ra	Ac															
	5.28	6.9	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
	15.42	19.0	6.91	5.76	6.31		5.6	5.67	6.16	6.74	6.82				6.2	5.0	
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Energía de cohesión

Table 1 Cohesive energies

Energy required to form separated neutral atoms in their ground electronic state from the solid at 0 K at 1 atm. The data were supplied by Prof. Leo Brewer.

Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
158	320.											561	711.	474.	251.	81.0	1.92
1.63	9.32											5.81	7.37	4.92	2.60	0.84	0.020
37.7	76.5											134	170.	113.4	60.03	19.37	0.46
.....																	
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
107.	145.											327	446	331.	275.	135.	7.74
1.113	1.51											3.39	4.63	3.43	2.85	1.40	0.080
25.67	34.7											78.1	106.7	79.16	65.75	32.2	1.85
←----- kJ/mol ----->																	
←----- eV/atom ----->																	
←----- kcal/mol ----->																	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
90.1	178.	376	468.	512.	395.	282.	413.	424.	428.	336.	130	271.	372.	285.3	237	118.	11.2
0.934	1.84	3.90	4.85	5.31	4.10	2.92	4.28	4.39	4.44	3.49	1.35	2.81	3.85	2.96	2.46	1.22	0.116
21.54	42.5	89.9	111.8	122.4	94.5	67.4	98.7	101.3	102.4	80.4	31.04	64.8	88.8	68.2	56.7	28.18	2.68
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
82.2	166.	422.	603.	730.	658	661.	650.	554.	376.	284.	112.	243.	303.	265.	211	107.	15.9
0.852	1.72	4.37	6.25	7.57	6.82	6.85	6.74	5.75	3.89	2.95	1.16	2.52	3.14	2.75	2.19	1.11	0.16
19.64	39.7	100.8	144.2	174.5	157.2	158.	155.4	132.5	89.8	68.0	26.73	58.1	72.4	63.4	50.34	25.62	3.80
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
77.6	183.	431.	621.	782.	859.	775.	788.	670.	564.	368.	65.	182.	196.	210.	144.		19.5
0.804	1.90	4.47	6.44	8.10	8.90	8.03	8.17	6.94	5.84	3.81	0.67	1.88	2.03	2.18	1.50		0.202
18.54	43.7	103.1	148.4	186.9	205.2	185.2	188.4	160.1	134.7	87.96	15.5	43.4	46.78	50.2	34.5		4.66
Fr	Ra	Ac															
	160.	410.															
	1.66	4.25															
	38.2	98.															
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	
			417.	357.	328.		206.	179.	400.	391.	294.	302.	317.	233.	154.	428.	
			4.32	3.70	3.40		2.14	1.86	4.14	4.05	3.04	3.14	3.29	2.42	1.60	4.43	
			99.7	85.3	78.5		49.3	42.8	95.5	93.4	70.2	72.3	75.8	55.8	37.1	102.2	
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	
			598.		536.	456	347.	264.	385								
			6.20		5.55	4.73	3.60	2.73	3.99								
			142.9		128.	109.	83.0	63.	92.1								

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Temperatura de fusión

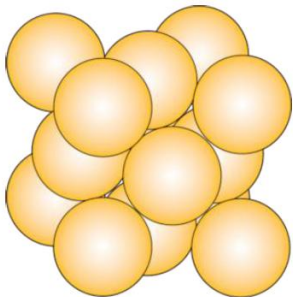
Table 2 Melting points, in K.
(After R. H. Lamoreaux)

Li 453.7	Be 1562											B 2365	C	N 63.15	O 54.36	F 53.48	Ne 24.56
Na 371.0	Mg 922											Al 933.5	Si 1687	P 317.63	S 388.4	Cl 172.2	Ar 83.81
K 336.3	Ca 1113	Sc 1814	Ti 1946	V 2202	Cr 2133	Mn 1520	Fe 1811	Co 1770	Ni 1728	Cu 1358	Zn 692.7	Ga 302.9	Ge 1211	As 1089	Se 494	Br 265.9	Kr 115.8
Rb 312.6	Sr 1042	Y 1801	Zr 2128	Nb 2750	Mo 2895	Tc 2477	Ru 2527	Rh 2236	Pd 1827	Ag 1235	Cd 594.3	In 429.8	Sn 505.1	Sb 903.9	Te 722.7	I 386.7	Xe 161.4
Cs 301.6	Ba 1002	La 1194	Hf 2504	Ta 3293	W 3695	Re 3459	Os 3306	Ir 2720	Pt 2045	Au 1338	Hg 234.3	Tl 577	Pb 600.7	Bi 544.6	Po 527	At	Rn
Fr	Ra 973	Ac 1324	Ce 1072	Pr 1205	Nd 1290	Pm	Sm 1346	Eu 1091	Gd 1587	Tb 1632	Dy 1684	Ho 1745	Er 1797	Tm 1820	Yb 1098	Lu 1938	
			Th 2031	Pa 1848	U 1406	Np 910	Pu 913	Am 1449	Cm 1613	Bk 1562	Cf	Es	Fm	Md	No	Lw	

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Interacción de van der Waals

Estructura fcc



Propiedades de gases nobles

	Nearest-neighbor distance, in Å	Experimental cohesive energy		Melting point, K	Ionization potential of free atom, eV
		kJ/mol	eV/atom		
He	(liquid at zero pressure)				24.58
Ne	3.13	1.88	0.02	24.56	21.56
Ar	3.76	7.74	0.080	83.81	15.76
Kr	4.01	11.2	0.116	115.8	14.00
Xe	4.35	16.0	0.17	161.4	12.13

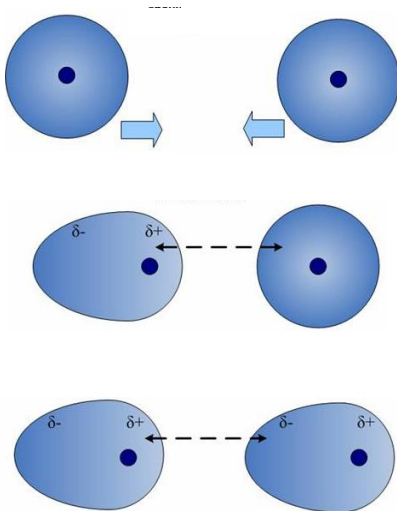
Datos extrapolados a 0 K y presión cero.

La energía de **cohesión** es alrededor (o menos) del **1%** de la energía de **ionización** \Rightarrow la distorsión de la carga electrónica en el sólido es extremadamente sutil en referencia al caso de átomo aislado.

Esa pequeña diferencia de energía proviene de la interacción de **van der Waals**.

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Enlace de van der Waals: Interacción dipolar



Dos átomos que poseen una distribución electrónica esféricamente simétrica no interactúan entre ellos, evitando así que condense el sólido.

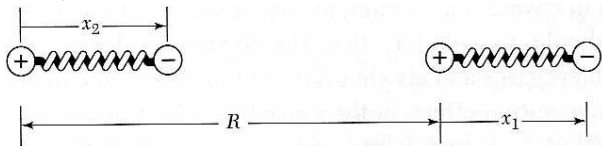
Sin embargo, los átomos poseen un **momento dipolar** instantáneo $\neq 0$, debido a las fluctuaciones de carga, induciendo en el otro átomo un **momento dipolar** efectivo.

Los dipolos inducidos generarán una interacción **atractiva** entre los átomos en un periodo corto de tiempo.

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Modelo de interacción de van der Waals

Se consideran dos osciladores armónicos idénticos, separados una distancia R , en donde cada uno posee cargas $\pm e$ con separación x_1 y x_2 tal que $R \gg x_i$.



Expresando el Hamiltoniano del sistema **sin interacción**:

$$H_0 = \frac{1}{2m}p_1^2 + \frac{1}{2}Cx_1^2 + \frac{1}{2m}p_2^2 + \frac{1}{2}Cx_2^2,$$

en donde p_i denotan los momentos, y C la constante de fuerza.

Ahora, considerando la **interacción** Coulómbica entre las diferentes cargas de los dos osciladores, se obtiene:

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

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Modelo de interacción de van der Waals

De la expresión anterior de interacción Coulómbica,

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

tomando la aproximación $|x_i| \ll R$ se tiene que:

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

Aplicando la transf. a modos **simétrico** (s) y **anti-simétrico** (a):

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s + x_a), & x_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s - x_a), \\ p_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p_s + p_a), & p_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(p_s - p_a), \end{aligned}$$

se tiene que el Hamiltoniano total $H = H_0 + H_1$ viene dado como:

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

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Modelo de interacción de van der Waals

Del Hamiltoniano obtenido para los dos osciladores acoplados,

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

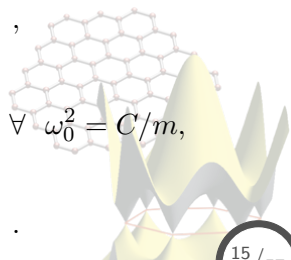
se observa que puede ser diagonalizado en los modos s y a , teniendo un comportamiento de **oscilador armónico** cada uno, con frecuencias:

$$\omega_s = \left[\frac{C - 2e^2/R^3}{m} \right]^{1/2} = \omega_0 \left[1 - \frac{2e^2}{CR^3} \right]^{1/2} \quad \forall \quad \omega_0^2 = C/m,$$

$$= \omega_0 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 - \dots \right],$$

$$\omega_a = \left[\frac{C + 2e^2/R^3}{m} \right]^{1/2} = \omega_0 \left[1 + \frac{2e^2}{CR^3} \right]^{1/2} \quad \forall \quad \omega_0^2 = C/m,$$

$$= \omega_0 \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right)^2 + \dots \right].$$



Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Modelo de interacción de van der Waals

La energía para este sistema viene dada como,

$$U = \frac{1}{2}\hbar(\omega_s + \omega_a) = U_{des} + \Delta U,$$

en donde U_{des} es la energía del sistema **sin acoplamiento**,

$$U_{des} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 + \frac{1}{2}\hbar\omega_0 = \hbar\omega_0,$$

mientras que ΔU es la **energía de interacción**, dada por:

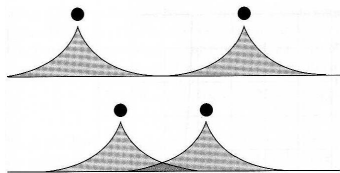
$$\Delta U = U - U_{des} = \frac{1}{2}\hbar(\omega_s + \omega_a) - \hbar\omega_0 = -\hbar\omega_0 \cdot \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{CR^3} \right)^2,$$

$$\Delta U = -\frac{A}{R^6} \quad \forall \quad A = \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{C} \right)^2 \hbar\omega_0,$$

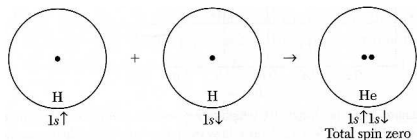
donde esta interacción **atractiva** se conoce como **interacción de van der Waals**, y es inducida por la inter. dipolo-dipolo.

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

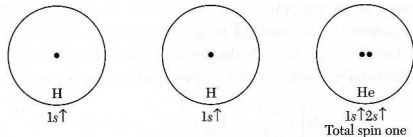
Principio de exclusión de Pauli: Interacción repulsiva



Si los átomos se acercan, las nubes electrónicas empezarán a traslaparse, y si la dist. entre ellos se reduce, existirá una interacción **repulsiva** debido al **principio de exclusión de Pauli**.



Al ser las conf. electrónicas **diferentes**, no existe violación del principio de Pauli, dando una energía de enlace de -78.98 eV.



Las conf. electrónicas son **iguales**, por tanto un elec. es promovido: $1s \uparrow \Rightarrow 2s \uparrow$, dando una energía de enlace de -59.38 eV.

Tal diferencia en energía entre los dos casos (19.60 eV) da la **contribución repulsiva** al enlace, originada del principio de exclusión.

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

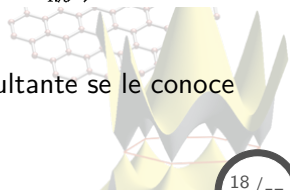
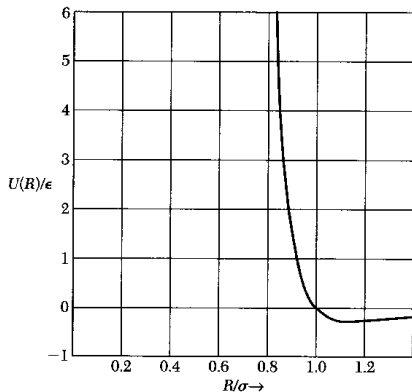
Potencial de Lennard-Jones: Inclusión de la interacción repulsiva

La interacción **repulsiva** puede ser modelada mediante un potencial de la forma B/R^{12} , en donde $B > 0$ es una cte., y R es la separación entre átomos.

Lo anterior, aunado a la interacción **atractiva** dipolo-dipolo, arroja:

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

en donde $4\epsilon\sigma^6 \equiv A$, $4\epsilon\sigma^{12} \equiv B$, y al potencial resultante se le conoce como **potencial de Lennard-Jones**.



Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

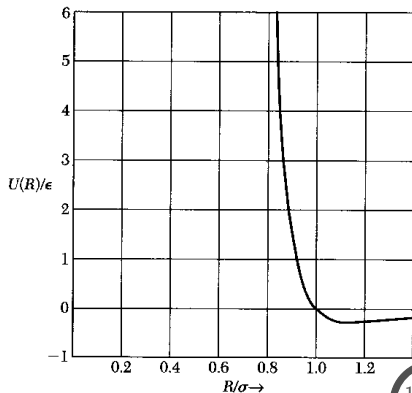
Potencial de Lennard-Jones: Inclusión de interacción repulsiva

Para el potencial de **Lennard-Jones**:

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

se necesitan de los parámetros ϵ y σ , los cuales se obtienen de datos del sistema en fase gaseosa,

Parameters in Lennard-Jones potential		
	ϵ , in 10^{-16} erg	σ , in Å
He	14	2.56
Ne	50	2.74
Ar	167	3.40
Kr	225	3.65
Xe	320	3.98



Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Potencial de Lennard-Jones: Constantes de red en equilibrio

Para el caso de un cristal formado por N átomos de gases inertes, la **energía de cohesión** puede ser calculada sumando en el potencial de **L-J** sobre todos los pares de átomos en el cristal,

$$\begin{aligned} U_{tot} &= \frac{1}{2}N(4\epsilon) \left[\sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^{12} - \sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^6 \right], \\ &= \frac{1}{2}N(4\epsilon) \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} \sum_j \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \sum_j \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^6 \right], \end{aligned}$$

en donde $p_{ij}R$ es la distancia entre los átomos i y j en términos de la distancia a primeros vecinos R .

Las sumatorias, al depender solo de la geometría del cristal, pueden ser evaluadas para diferentes estructuras:

$$\sum_j \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^{12} = \begin{cases} 12.13188 & fcc, \\ 12.13299 & hcp, \end{cases} \quad \sum_j \left(\frac{1}{p_{ij}} \right)^6 = \begin{cases} 14.45392 & fcc, \\ 14.45489 & hcp \end{cases}$$

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Potencial de Lennard-Jones: Constantes de red en equilibrio

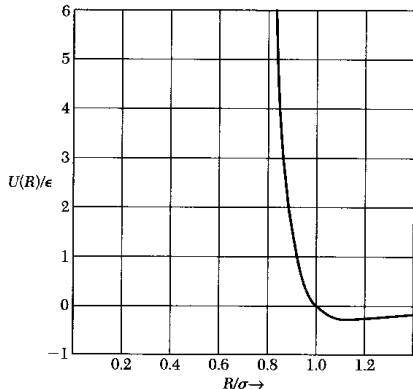
Utilizando el potencial **L-J** es posible calcular el valor de equilibrio R_0 (considerando una estruct. *fcc*):

$$0 = \frac{dU_{tot}}{dR},$$

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

por tanto, se tiene un valor **universal** para todos los elementos con estructura **fcc**:

$$R_0/\sigma = 1.09.$$



Experimentalmente se tiene para los gases nobles:

	Ne	Ar	Kr	Xe
R_0/σ	1.14	1.11	1.10	1.09

Cristales de gases nobles: Enlace de van der Waals

Potencial de Lennard-Jones: Energía de cohesión

Calculando también la **energía de cohesión** del cristal, sustituyendo los valores de las sumatorias y R_0/σ obtenido:

$$U_{tot}(R_0) = -2.15(4N\epsilon),$$
$$\Rightarrow U_{tot}(R_0)/N\epsilon = -8.60/\text{atom},$$

siendo éste un valor **universal**.

Sin embargo, experimentalmente se tiene para los gases nobles:

	Ne	Ar	Kr	Xe
$-U_{tot}(R_0)/N\epsilon$	6.41	7.68	8.26	8.51

Se observa que, al igual que en la distancia de equilibrio, existen discrepancias muy grandes para los elementos más ligeros, debido a que las **vibraciones de punto cero** se hacen más evidentes cuando la masa atómica decrece.

Contenido: Tema 02

2. Enlace químico

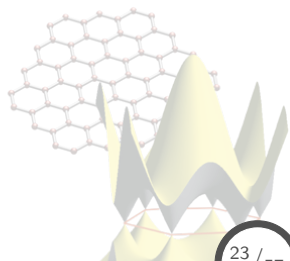
2.1 Enlaces Cristalinos

2.2 Enlace de van der Waals

2.3 Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

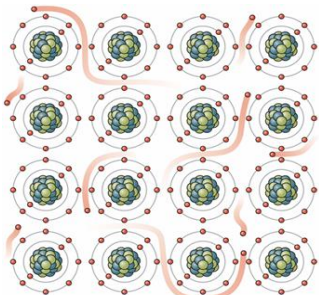
2.4 Enlace iónico

2.5 Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

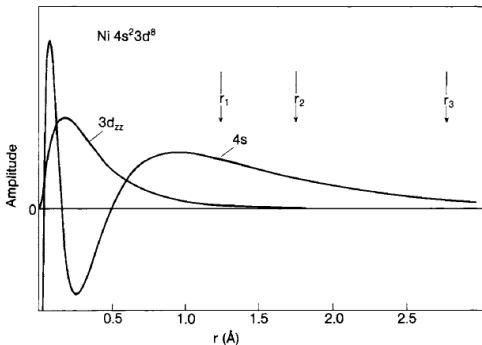


Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Enlace metálico



Copyright © 2006 Pearson Prentice Hall, Inc.



- El **enlace metálico** se considera como un caso extremo de enlace químico, en donde los electrones se aglomeran en el espacio entre los iones.
- En estos sistemas las funciones de onda tienden a ser muy **extendidas** en comparación con la separación interatómica.
- Poseen bandas de valencia **parcialmente** llenas y estados que hibridizan.

Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Enlace metálico

<http://www.kjf-split.hr/periodni/en/>

1 IA		2 IIA										3 IIIA										4 IVA										5 VA										6 VIA										7 VIIA										8 VIIIA																																																															
1	1.0079											B																																																		He																																																															
HYDROGEN																		BORON																																																																								HELIUM																																			
LITHIUM BERYLLIUM																		ALUMINUM SILICON																		PHOSPHORUS SULPHUR																		CHLORINE ARGON																		NEON																																																					
SODIUM MAGNESIUM																		GALLIUM GERMANIUM																		ARSENIC SELENIUM																		BROMINE KRYPTON																		NEON																																																					
POTASSIUM CALCIUM																		ZINC CADMIUM																		MERCURY THALLIUM																		LEAD BISMUTH																		POLONIUM ASTATINE																		RADON																																			
RUBIDIUM STRONTIUM																		COPPER ZINC																		SILVER CADMIUM																		MERCURY THALLIUM																		LEAD BISMUTH																		POLONIUM ASTATINE																		RADON																	
CÆSIUM BARIUM																		GOLD MERCURY																		MERCURY THALLIUM																		LEAD BISMUTH																		POLONIUM ASTATINE																		RADON																																			
FRANCIUM RADIUM																		MERCURY THALLIUM																		MERCURY THALLIUM																		LEAD BISMUTH																		POLONIUM ASTATINE																		RADON																																			

RELATIVE ATOMIC MASS (1)
GROUP IUPAC
GROUP CAS
ATOMIC NUMBER
SYMBOL
ELEMENT NAME

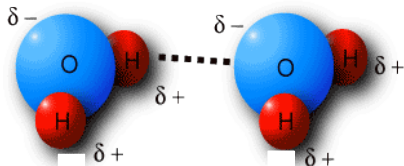
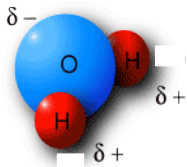
Metals: Metal, Semimetal, Nonmetal
1 Alkali metal, 2 Alkaline earth metal, 3 Transition metals, 4 Lanthanide, 5 Actinide
16 Chalcogens element, 17 Halogens element, 18 Noble gas
STANDARD STATE (25 °C; 101 kPa)
Ne - gas, Fe - solid, Ga - liquid, Tc - synthetic

- **Alcalinos:** El estado s más externo está parcialmente ocupado.
- **Alcalino-térreos:** Estados híbridos sp parcialmente ocupados.
- **M. de Transición:** Hibridación de estados sp , con poca participación de estados d (mucho más localizados).

Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Enlace de hidrógeno

El **enlace de H** ocurre cuando el hidrógeno se enlaza a otros dos átomos.



- El H se enlaza de manera covalente a un átomo altamente **electronegativo**, es decir, su único electrón es transferido al enlace.
- El protón del H ($\delta+$) ejerce una fuerza neta atractiva en un segundo átomo cargado negativamente ($\delta-$).
- Debido a lo extendido de la nube electrónica del átomo enlazante, la interacción atractiva del protón es apantallada, evitando así un **tercer** átomo enlazado.

Para la existencia del **enlace de hidrógeno** se debe cumplir que la separación A—H debe ser menor a la correspondiente del enlace **VdW**

Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente

El enlace **covalente** depende, además del grado de **traslape** de las funciones de onda, de la **direccionalidad** del mismo, en donde la distancia a primeros vecinos es de crucial importancia.

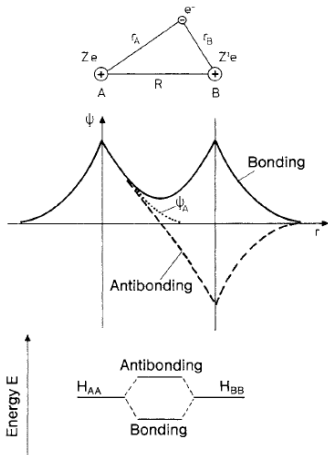
Considerando como modelo del enlace una **molécula diatómica** con un solo electrón participando en dicho enlace, entonces el H del sistema será:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r_A} - \frac{Z'e^2}{r_B} + \frac{ZZ'e^2}{R},$$

en donde la ec. de Schödinger será,

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad \forall \quad |\psi\rangle = \sum c_i |\psi_i\rangle,$$

siendo que ψ representa la función de onda u **orbital** de la molécula.



Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente

Para resolver el problema, se propone calcular el valor esperado de la energía para un **orbital de prueba**:

$$E' = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad \forall \quad E \leq E',$$

en donde el orbital de prueba representa una **combinación lineal** de los orbitales de los dos átomos por separado:

$$|\psi\rangle = c_A |\psi_A\rangle + c_B |\psi_B\rangle \quad \forall \quad c_A, c_B \in \mathbb{R}.$$

Para obtener la energía del **estado base**, E , se debe encontrar una combinación de c_A , c_B tal que minimize la expresión del valor esperado de energía, E' :

$$E' = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle c_A \psi_A + c_B \psi_B | H | c_A \psi_A + c_B \psi_B \rangle}{\langle c_A \psi_A + c_B \psi_B | c_A \psi_A + c_B \psi_B \rangle}.$$

Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente

De la ecuación anterior se reducen las expresiones como sigue:

$$\begin{aligned}\langle \psi | H | \psi \rangle &= \langle c_A \psi_A + c_B \psi_B | H | c_A \psi_A + c_B \psi_B \rangle, \\ &= c_A^2 H_{AA} + c_B^2 H_{BB} + c_A c_B (H_{AB} + H_{BA}). \\ \langle \psi | \psi \rangle &= \langle c_A \psi_A + c_B \psi_B | c_A \psi_A + c_B \psi_B \rangle, \\ &= c_A^2 + c_B^2 + 2c_A c_B S.\end{aligned}$$

En donde se ha definido lo siguiente:

$$\begin{aligned}\langle \psi_A | H | \psi_A \rangle &= H_{AA}, & \langle \psi_B | H | \psi_B \rangle &= H_{BB}, \\ \langle \psi_A | H | \psi_B \rangle &= H_{AB}, & \langle \psi_B | H | \psi_A \rangle &= H_{BA}, \\ \langle \psi_A | \psi_B \rangle &= S, & \langle \psi_i | \psi_i \rangle &= 1 \quad \forall \quad i = A, B.\end{aligned}$$

Por tanto, la expresión del valor esperado de E' es:

$$E' = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{c_A^2 H_{AA} + c_B^2 H_{BB} + c_A c_B (H_{AB} + H_{BA})}{c_A^2 + c_B^2 + 2c_A c_B S}.$$

Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente

Para encontrar la energía del **estado base**, se calcula:

$$\frac{\partial E'}{\partial c_i} = 0 \quad \forall \quad i = A, B,$$

obteniendo el siguiente sistema de ecuaciones:

$$c_A(H_{AA} - E') + c_B(H_{int} - E'S) = 0,$$

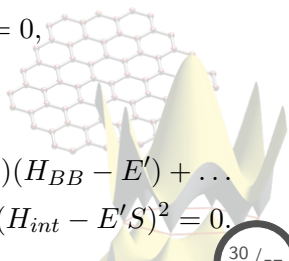
$$c_A(H_{int} - E'S) + c_B(H_{BB} - E') = 0 \quad \forall \quad H_{int} = \frac{1}{2}(H_{AB} + H_{BA}),$$

donde lo anterior se puede observar como un sistema matricial:

$$\begin{bmatrix} H_{AA} - E' & H_{int} - E'S \\ H_{int} - E'S & H_{BB} - E' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \end{bmatrix} = 0,$$

por tanto, el determinante se debe anular:

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - E' & H_{int} - E'S \\ H_{int} - E'S & H_{BB} - E' \end{vmatrix} = 0 \quad \Rightarrow \quad (H_{AA} - E')(H_{BB} - E') + \dots \\ \dots - (H_{int} - E'S)^2 = 0.$$



Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente: Bonding y antibonding

Resolviendo la ecuación secular para E' se tiene:

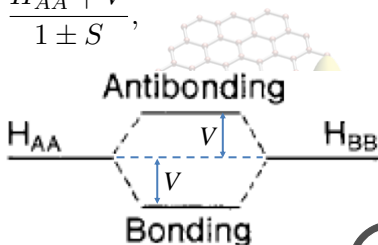
$$0 = (H_{AA} - E')(H_{BB} - E') - (H_{int} - E'S)^2,$$
$$\Rightarrow E' = \frac{H_{AA} + H_{BB} - 2SH_{int}}{2(1 - S^2)} \pm \frac{1}{1 - S^2} \left[\left(\frac{H_{AA} - H_{BB}}{2} \right)^2 + \dots \right. \\ \left. \dots - SH_{int}(H_{AA} + H_{BB}) + S^2 H_{AA} H_{BB} + H_{int}^2 \right].$$

Para el caso de **átomos idénticos**, se tiene $H_{AA} = H_{BB}$, además de que $H_{int} = -V \quad \forall \quad V > 0$, por tanto, E' viene dada como:

$$E' = \frac{H_{AA} \pm H_{int}}{1 \pm S} = \frac{H_{AA} \mp V}{1 \pm S},$$

Bonding: $E_b = \frac{H_{AA} - V}{1 + S},$

Antibonding: $E_a = \frac{H_{AA} + V}{1 - S}.$



Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente: Bonding y antibonding

De las expresiones de las energías del estado **bonding** y **antibonding** obtenidas,

$$E_b = \frac{H_{AA} - V}{1 + S} \quad \& \quad E_a = \frac{H_{AA} + V}{1 - S},$$

se observa claramente que $E_b < H_{AA}$ y $E_a > H_{AA}$:

$$H_{AA} > E_b \Rightarrow H_{AA} > \frac{H_{AA} - V}{1 + S} \Rightarrow SH_{AA} > -V \quad \text{ok !}$$

$$H_{AA} < E_a \Rightarrow H_{AA} < \frac{H_{AA} + V}{1 - S} \Rightarrow -SH_{AA} < V \quad \text{ok !}$$

con lo cual se demuestra que el sólido puede condensar en presencia de tal interacción.

El siguiente paso es calcular la expresión del **orbital molecular** para las energías de bonding y antibonding:

$$|\psi\rangle = c_A |\psi_A\rangle + c_B |\psi_B\rangle,$$

en donde habrá un set $\{c_A, c_B\}$ para cada caso: $E = E_b$ y $E = E_a$.

Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente: Orbital molecular

Calculando el **orbital molecular** usando el sistema matricial:

$$\begin{bmatrix} H_{AA} - E' & -V - E'S \\ -V - E'S & H_{AA} - E' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \end{bmatrix} = 0,$$

Bonding

$$E' = E_b = \frac{H_{AA} - V}{1 + S},$$

$$\therefore H_{AA} - E' = \frac{V + SH_{AA}}{1 + S},$$

$$-V - E'S = -\frac{V + SH_{AA}}{1 + S},$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$\therefore |\psi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_A\rangle + |\psi_B\rangle).$$

Antibonding

$$E' = E_a = \frac{H_{AA} + V}{1 - S},$$

$$\therefore H_{AA} - E' = -\frac{V + SH_{AA}}{1 - S},$$

$$-V - E'S = -\frac{V + SH_{AA}}{1 - S},$$

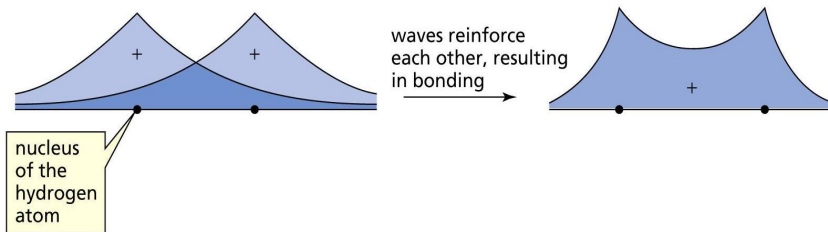
$$\Rightarrow \begin{bmatrix} c_A \\ c_B \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix},$$

$$\therefore |\psi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_A\rangle - |\psi_B\rangle).$$

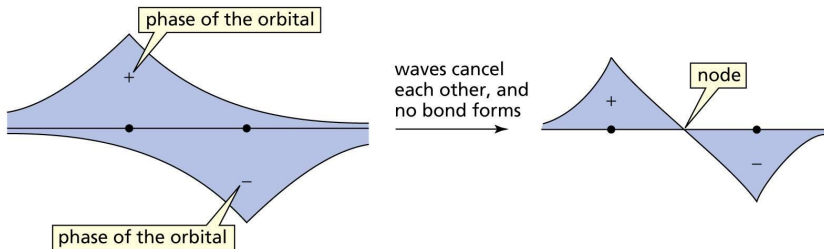
Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente: Orbital molecular

Orbital del estado bonding

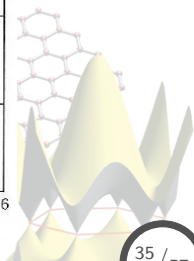
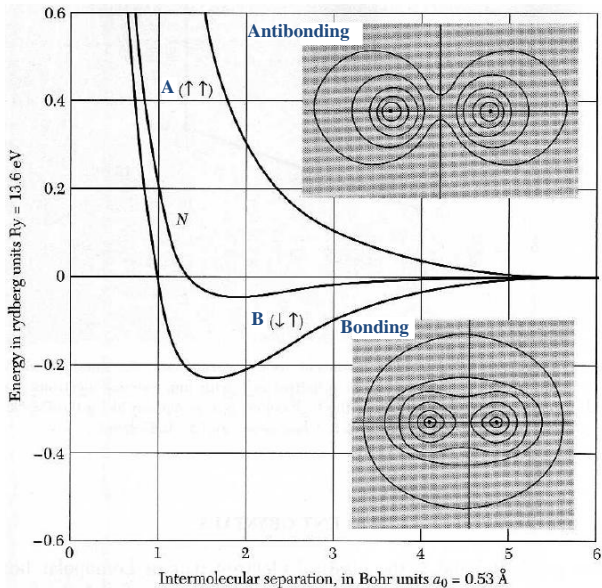


Orbital del estado antibonding



Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente: Densidad de carga

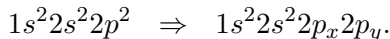


Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

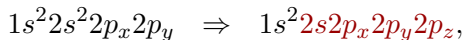
Modelo del enlace covalente: Estados híbridos

Carbón ($Z = 6$)

- Configuración electrónica del estado base (átomo aislado):



- En el sólido, la configuración electrónica cambia:



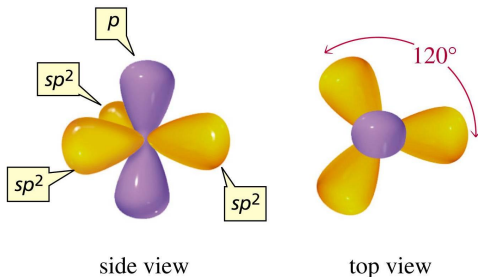
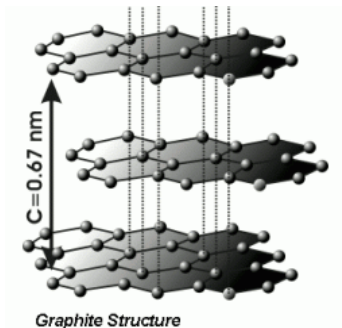
de tal manera que se pueda **maximizar** el traslape de los orbitales, y promover la creación de enlaces **covalentes**.

- Para ello, se crean cuatro nuevos **orbitales** dados como una combinación lineal de los originales (s , p_x , p_y , p_z), de tal manera que la formación de estos nuevos orbitales compensen la pérdida energética inicial de promover un electrón s a p .

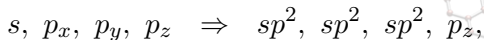
Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente: Estados híbridos

Carbón ($Z = 6$): Estructura grafito/grafeno



La configuración electrónica consiste de **híbridos**:

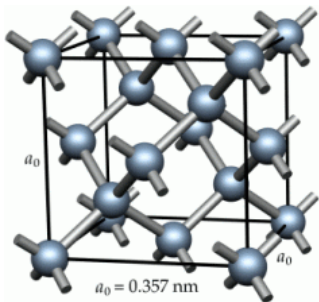


conocidos como **orbitales** o **enlaces** sp^2 , con una naturaleza **cova-lente** en el plano (sp^2), mientras que fuera del plano (p_z) la interacción es débil, tipo **VdW**.

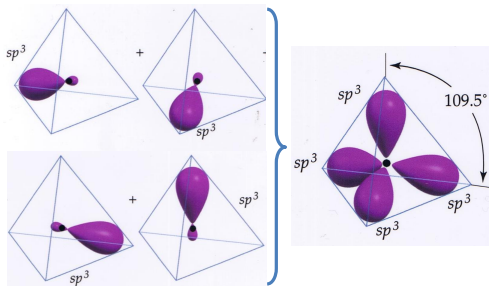
Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

Modelo del enlace covalente: Estados híbridos

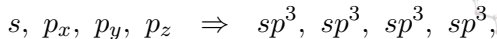
Carbón ($Z = 6$): Estructura diamante



Diamond Structure



La configuración electrónica consiste de **híbridos**:



conocidos como **orbitales** o **enlaces** sp^3 , con una naturaleza **covalente** en las direcciones del centro a los vértices del tetrahedro.

Contenido: Tema 02

2. Enlace químico

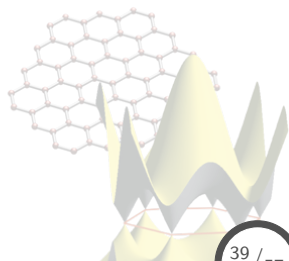
2.1 Enlaces Cristalinos

2.2 Enlace de van der Waals

2.3 Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

2.4 Enlace iónico

2.5 Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

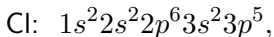
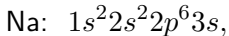


Enlace iónico

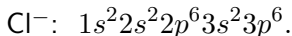
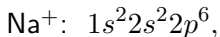
Densidad de carga

El enlace **iónico** es resultado de la interacción electrostática entre iones de carga opuesta.

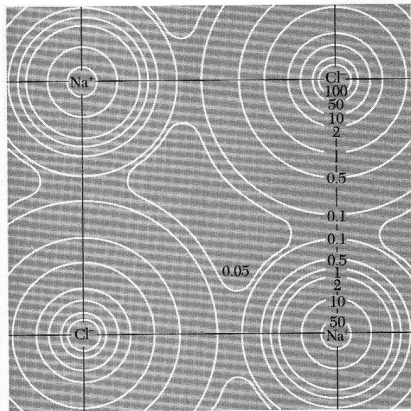
El Na y Cl presentan las sig. config. electrónicas en estado **neutro**:



al formarse el **crystal iónico**, la conf. electrónica de los iones corresponde a la de átomos con **capas cerradas**:



La conf. electrónica alrededor de cada ión es de **simetría esférica**, con cierta distorsión cerca de la región de contacto con los átomos vecinos

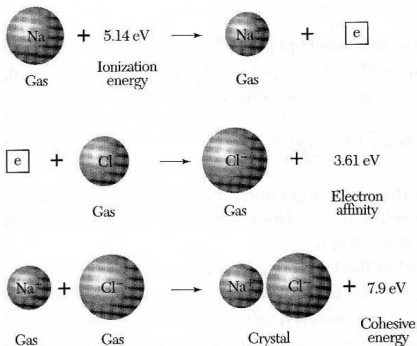


Enlace iónico

Energía de ionización y afinidad electrónica

Energía de ionización, I : Energía que se debe aplicar para **remove** un e^- de un átomo neutro.

Afinidad electrónica, A : Ganancia energética cuando un e^- es **añadido** a un átomo neutro.



1. Al Na se le debe **invertir 5.14 eV** para remover un e^- .
2. El Cl **gana 3.61 eV** al añadirle un e^- .
3. Al formarse el sólido, se tiene una **energía de cohesión** de **7.91 eV**, respecto a los iones aislados.
4. Por tanto, se tiene una energía neta del sólido de **6.4 eV** más baja que la de átomos aislados.

Enlace iónico

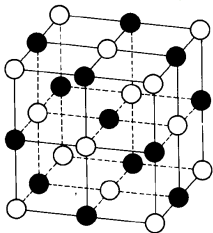
Estructura cristalina de un cristal iónico

La estructura exacta es determinada por los siguientes factores:

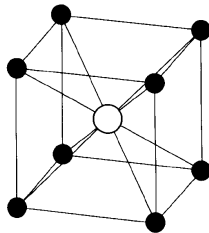
1. El uso óptimo del espacio respecto al radio iónico de los elementos que forman el cristal.
2. La interacción **atractiva** Coulómbica entre los iones de carga opuesta debe ser mayor que la **repulsión** entre iones de misma carga.

Las estructuras más comunes para cristales iónicos de dos especies, son la **cloruro de sodio (NaCl)** o **B1** y la **cloruro de cesio (CsCl)** o **B2**.

Cloruro de Sodio, B1

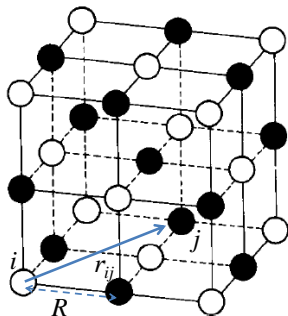


Cloruro de Cesio, B2



Enlace iónico

Modelo de interacción: Energía de Madelung



- **Interacción Coulómbica:** $\pm q^2/r$, la cual será **atractiva** o **repulsiva** si los iones poseen carga opuesta o la misma, respectivamente.
- **Interacción de Pauli:** existe un aparte **repulsiva** entre los iones con configuración electrónica de capas cerradas, debida al principio de **exclusión de Pauli**.

La energía de enlace en un cristal iónico se le conoce como **energía de Madelung** y viene dada como:

$$U_i = \sum_{j \neq i} U_{ij} \quad \forall \quad U_{ij} = \lambda \exp(-r/\rho) \pm q^2/r,$$

en donde la **fuerza** λ y el **rango** ρ son parámetros que se determinan de observaciones del parámetro de red y módulo de compresibilidad.

Enlace iónico

Modelo de interacción: Energía de la red

De la energía de **Madelung** se puede calcular la **energía de la red**:

$$U_{tot} = NU_i,$$

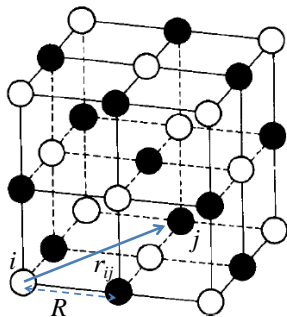
en donde N es el número de moléculas, y U_{tot} representa la energía requerida para separar al cristal en iones individuales a una dist. de separación infinita.

Considerando sólo interacción repulsiva (Pauli) a **primeros vecinos**,

$$U_{ij} = \begin{cases} \lambda \exp(-R/\rho) - q^2/R, & \text{primeros vecinos,} \\ \pm q^2/(p_{ij}R), & \text{otros casos,} \end{cases}$$

se obtiene que la energía de la red es:

$$U_{tot} = NU_i = N \left(z \lambda \exp(-R/\rho) - \sum_{j \neq i} \frac{\pm q^2}{p_{ij}R} \right) \quad \forall z = \text{1eros vecinos.}$$



Enlace iónico

Modelo de interacción: Constante de Madelung

Observando la ecuación de **energía de la red**,

$$U_{tot} = N \left(z\lambda \exp(-R/\rho) - \sum_{j \neq i} \frac{\pm q^2}{p_{ij} R} \right),$$
$$= N \left(z\lambda \exp(-R/\rho) - \alpha \frac{q^2}{R} \right) \quad \forall \quad \alpha = \sum_{j \neq i} \frac{(\pm)}{p_{ij}},$$

en donde α se conoce como la **constante de Madelung**, y representa una relación puramente geométrica, dependiendo de la estructura cristalina que adopta el sistema:

Estructura	α
Cloruro de Sodio, NaCl (B1)	1.747565
Cloruro de Cesio, CsCl (B2)	1.762675
Zinc blenda, cúbica ZnS	1.6381

Enlace iónico

Modelo de interacción: Condiciones de equilibrio

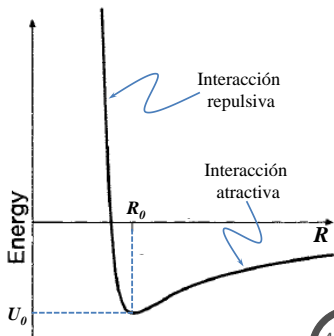
De la energía de la red o de Madelung, se pueden calcular las propiedades de **equilibrio** del cristal:

$$U_{tot} = N \left(z\lambda \exp(-R/\rho) - \sum_{j \neq i} \frac{\pm q^2}{p_{ij}R} \right),$$
$$\Rightarrow \frac{dU_{tot}}{dR} = N \left[-z\lambda \exp(-R/\rho)/\rho + \alpha q^2/R^2 \right]_{R=R_0} = 0,$$

$$\therefore R_0^2 \exp(-R_0/\rho) = \alpha \rho q^2 / z\lambda,$$

en donde R_0 representa la dist. a primeros vecinos de la configuración en equilibrio, con lo cual se puede calcular la **energía de cohesión** del cristal:

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



Contenido: Tema 02

2. Enlace químico

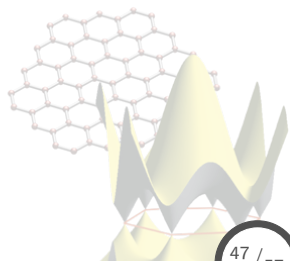
2.1 Enlaces Cristalinos

2.2 Enlace de van der Waals

2.3 Enlace metálico, de hidrógeno y covalente

2.4 Enlace iónico

2.5 Ecuación de estado, módulo de compresibilidad



Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

Ecuación de estado

La **ecuación de estado** es una relación de energía vs volumen² que describe el comportamiento de un sólido bajo compresión o expansión.

Las relaciones obtenidas anteriormente para diferentes cristales representan ecuaciones de estado:

Gases nobles $\Rightarrow U(R) = \frac{1}{2}N(4\epsilon) \left[\sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^{12} - \sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}R} \right)^6 \right],$

Covalentes $\Rightarrow E_b(R) = \frac{H_{AA}(R) - U(R)}{1 + S(R)},$

Iónicos $\Rightarrow U_{tot}(R) = N \left(z\lambda \exp(-R/\rho) - \alpha \frac{q^2}{R} \right),$

en donde para cada caso se tiene que $R = f(V)$, con lo cual se puede obtener una función $E(V)$.

²O también de presión vs volumen.

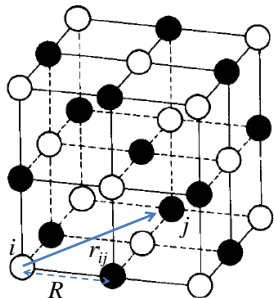
Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

Ecuación de estado PV

Para el caso en el cual se desea obtener una **ecuación de estado PV** , se utiliza la siguiente relación termodinámica,

$$P(V) = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T.$$

Por ejemplo, calculando la ec. de estado PV para un cristal **iónico** con estructura B1,



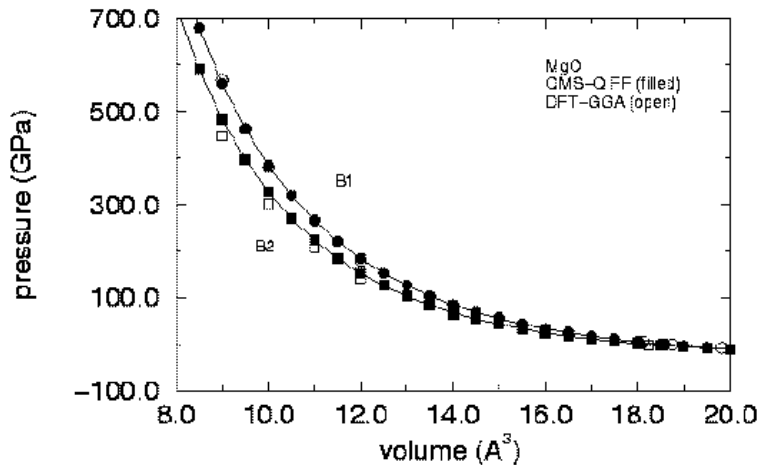
- $[U]$ = energía/molécula.
- $V/\text{celda} = a^3 = (2R)^3$.
- Tiene 4 moléculas/celda.
- $\Rightarrow V/\text{molécula} = 2R^3$.

Por tanto, se tiene:

$$\begin{aligned} P(V) &= - \frac{\partial U}{\partial V} = - \frac{\partial U}{\partial R} \frac{\partial R}{\partial V}, \\ &= \frac{V^{-2/3}}{3 \cdot 2^{1/3}} \left[- \frac{2^{2/3} \alpha q^2}{V^{2/3}} + \dots \right. \\ &\quad \left. \dots + \frac{z\lambda}{\rho} \exp \left(- \frac{V^{1/3}}{2^{1/3} \rho} \right) \right]. \end{aligned}$$

Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

Ecuación de estado PV

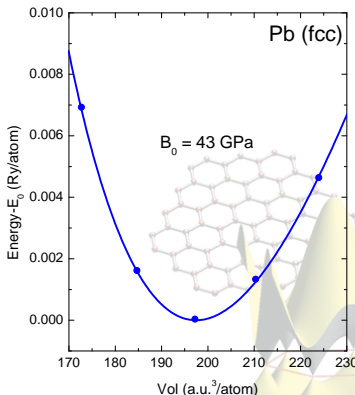
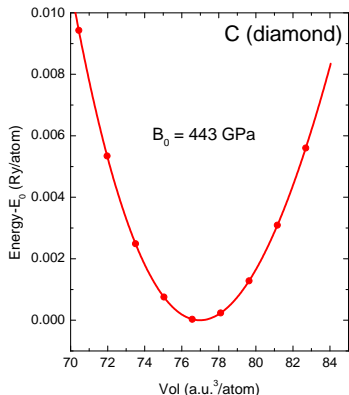


Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

Módulo de compresibilidad

Módulo de compresibilidad: Medida de la habilidad de un material para resistir los cambios en el volumen debido a una compresión o expansión uniforme,

$$B_0 = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T = V \left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2} \right)_T$$



Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

Ecuaciones de estado

A falta de modelos *adecuados*, se realizan cálculos de **primeros principios**, obteniendo datos $\{V, E\}$, los cuales se ajustan a EOS E vs V .

EOS³

$$E(V) = a + bV^{-1/3} + cV^{-2/3} + dV^{-1},$$
$$P(V) = \frac{1}{3}bV^{-4/3} + \frac{2}{3}cV^{-5/3} + dV^{-2}.$$

Murnaghan EOS⁴

$$E(V) = E_0 + \frac{B_0 V}{B'} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} \frac{1}{B' - 1} + 1 \right] - \frac{B_0 V_0}{B' - 1},$$
$$P(V) = \frac{B_0}{B'} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right].$$

³PRB **52**, 8064 (1995).

⁴Proc. Nat. Acad. Sci. USA, **30**, 244 (1944).

Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

Ecuaciones de estado

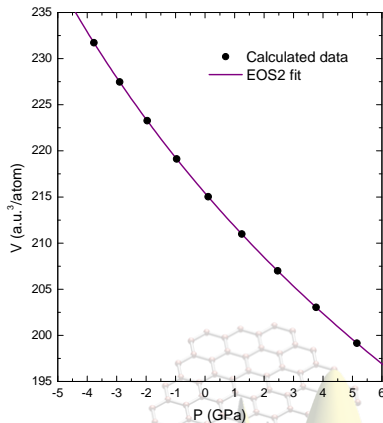
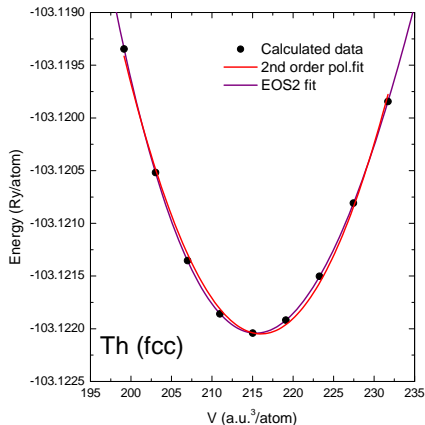
Birch-Murnaghan EOS⁵

$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^3 B' + \dots \right. \\ \left. \dots + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \right\},$$
$$P(V) = \frac{3B_0}{2} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{7/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{5/3} \right] \times \dots \\ \dots \times \left\{ 1 + \frac{3}{4} (B' - 4) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right] \right\}.$$

⁵PR 71, 809 (1947).

Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

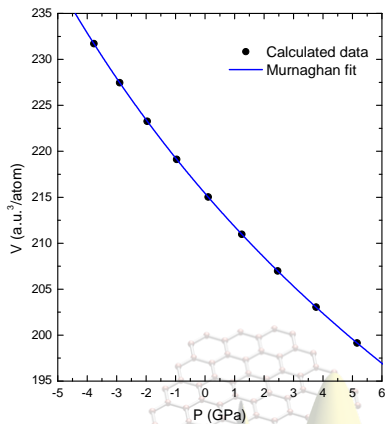
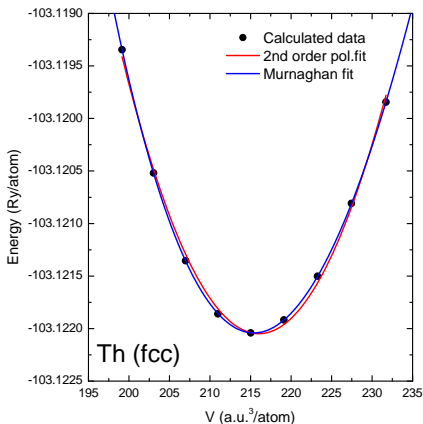
Ecuaciones de estado: EOS2



	a_0 (a.u.)	V (a.u. ³)	B_0 (GPa)
EOS2	9.5172	215.4093	57.9839
Exp.	9.6169	222.3576	58

Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

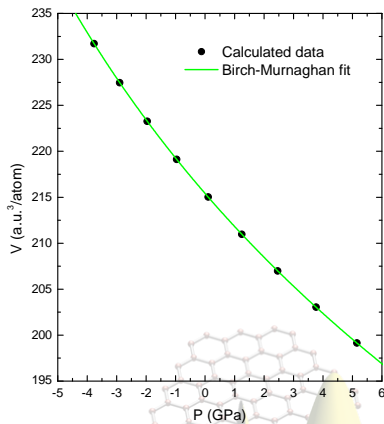
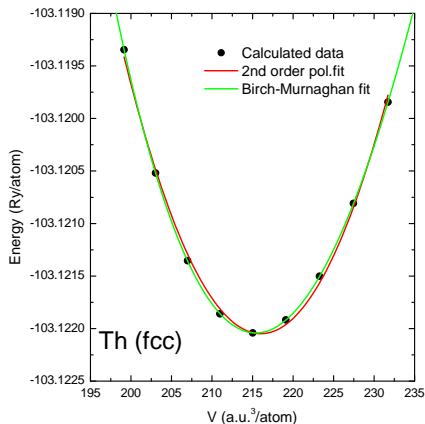
Ecuaciones de estado: Murnaghan



	a_0 (a.u.)	V (a.u. ³)	B_0 (GPa)
Murnaghan	9.5157	215.4105	57.9163
Exp.	9.6169	222.3576	58

Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

Ecuaciones de estado: Birch-Murnaghan



	a_0 (a.u.)	V (a.u. ³)	B_0 (GPa)
Birch-Murnaghan	9.5157	215.4091	58.0219
Exp.	9.6169	222.3576	58

Ecuación de estado, módulo de compresibilidad

Ecuaciones de estado: eosfit (Wien2K)

Equation of state: EOS2 (PRB52,8064)		info		2
a,b,c,d	-99.932789	-34.439409	69.084774	136.432145
U0,B(GPa),BP,E0	215.4093	57.9839	3.1657	
Equation of state: Murnaghan		info		7
E=E0+[B*U/BP*(1/(BP-1)*(U0/U)**BP +1)-B*U0/(BP-1)]/14703.6				
Pressure=B/BP*((U0/U)**BP -1)				
U0,B(GPa),BP,E0	215.4105	57.9163	3.1557	-103.122041
vol	energy	de(EOS2)	de(Murnaghan)	Pressure(GPa)
199.1495	-103.119346	0.000002	0.000002	5.158
203.0416	-103.120519	-0.000003	-0.000004	3.765
206.9840	-103.121354	-0.000001	-0.000001	2.463
210.9772	-103.121860	0.000003	0.000003	1.245
215.0213	-103.122042	0.000002	0.000002	0.105
219.1169	-103.121918	-0.000001	-0.000001	-0.962
223.2641	-103.121503	-0.000002	-0.000002	-1.961
227.4633	-103.120809	0.000000	-0.000001	-2.897
231.7148	-103.119844	0.000001	0.000001	-3.774
Sigma:		0.000002	0.000002	
Equation of state: Birch-Murnaghan		info		7
E = E0 + 9/16*(B/14703.6)*U0*[(eta**2-1)**3*BP + (eta**2-1)**2*(6-4*eta**2)]				
--> eta = (U0/U)**(1/3)				
Pressure = 3/2*B*(eta**7 - eta**5)*(1 + 3/4*(BP-4)*[eta**2 - 1])				
U0,B(GPa),BP,E0	215.4091	58.0219	3.1688	-103.122042
vol	energy	de(Birch-Murnaghan)	Pressure(GPa)	
199.1495	-103.119346	0.000002	5.150	
203.0416	-103.120519	-0.000003	3.765	
206.9840	-103.121354	-0.000001	2.465	
210.9772	-103.121860	0.000003	1.247	
215.0213	-103.122042	0.000001	0.105	
219.1169	-103.121918	-0.000001	-0.964	
223.2641	-103.121503	-0.000002	-1.963	
227.4633	-103.120809	0.000000	-2.896	
231.7148	-103.119844	0.000001	-3.768	
Sigma:		0.000002		

