

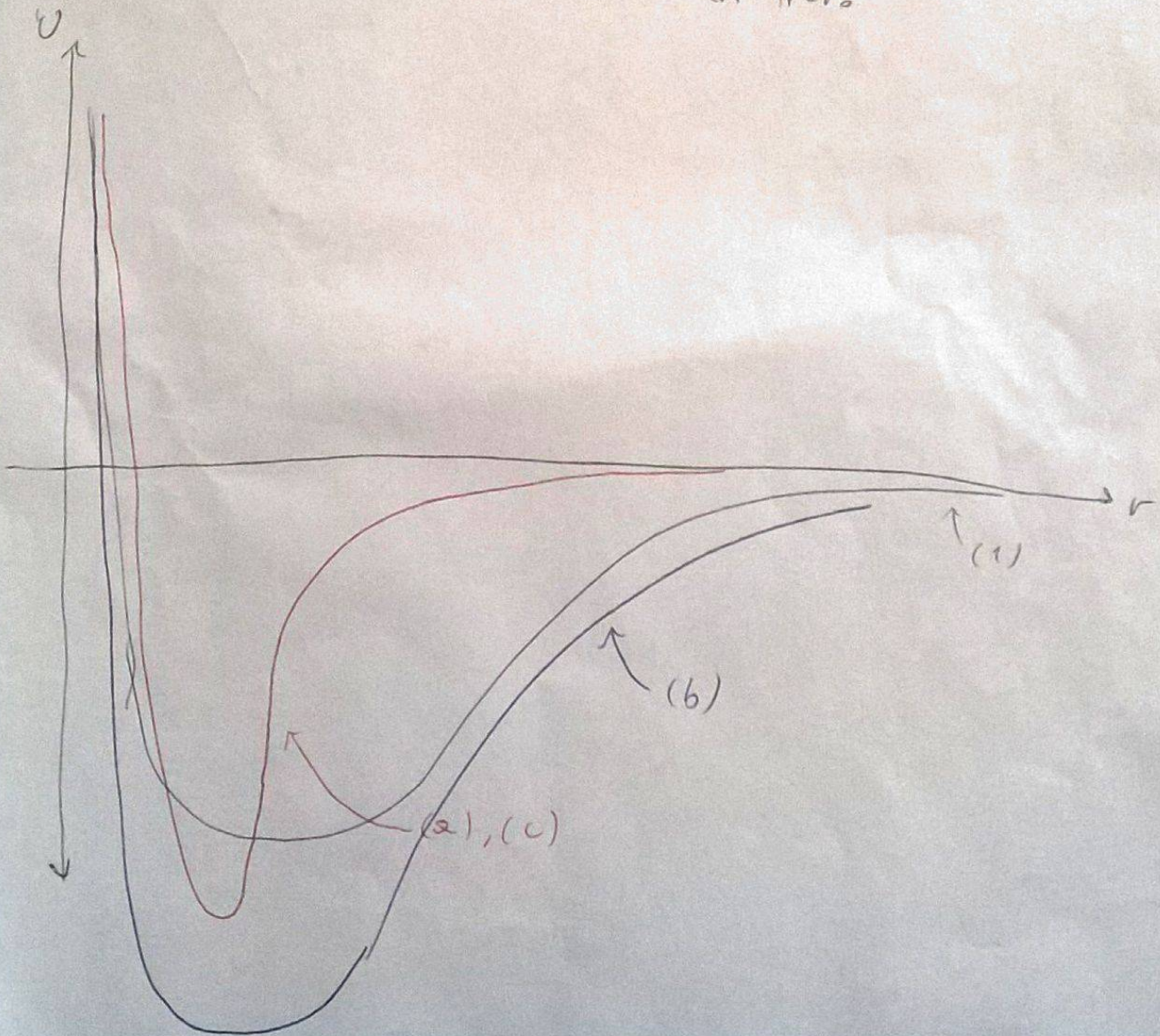
Pauta Aux N°1 ME3601

a) Falso: La dureza de ciertos del comportamiento plástico, mientras que E , es el mismo (fenómenos diferentes).

b) Verdadero: La T^* de fusión aumenta con la energía de enlace, ya que se necesita mayor energía para realizar el cambio de fase.

c) Falso: Todos los sólidos están formados por átomos (discretos)
No todos los sólidos son isotrópicos y homogéneos (Madera)

d) Verdadero Por eqn $E = \frac{1}{r} S_0$; $S_0 = \left. \frac{d^2U}{dr^2} \right|_{r=r_0} \Rightarrow$ A mayor U , mayor E



(1). Curva U vs r estándar. Posee un mínimo de energía donde se encuentra la distancia interatómica de equilibrio. $U > U_r$ indica predominio de fuerzas repulsivas. $U < U_r$ indica predominio de energía atractiva.

(a), (c): Curva U vs r con alta T° de sublimación / pequeña distorsión lineal. El ancho del pozo potencial es pequeño, se podría decir que el enlace vibra mucho. También indica T° de sublimación alta por profundidad de pozo potencial.

(b): Curva U vs r con alto módulo de Young. La profundidad del pozo potencial indica que el enlace es fuerte, y por ende, E es alta.

P3) Módulo elástico: $E = \frac{S_0}{r_0}$; $S_0 = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right|_{r=r_0}$; $r_0 = \text{Dist. molar de equilibrio}$

* En $r=r_0$, las fuerzas de atracción núcleo- e^- de los átomos se igualan a las fzas. de repulsión núcleo-núcleo y e^-e^- . Luego:

$$F|_{r_0} = 0 \Rightarrow \left. \frac{dU}{dr} \right|_{r_0} = 0$$

a) * Dado que se tiene que encontrar E a fn. de A, B, n , es necesario encontrar una expresión para r_0 :

$$U(r) = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n} \Rightarrow \left. \frac{dU}{dr} \right|_{r_0} = \frac{A}{r_0^2} - \frac{Bn}{r_0^{n+1}} = 0$$

$$\rightarrow Ar_0^{n+1} = Bnr_0^2 \rightarrow Ar_0^{n-1} = Bn$$

$$\therefore r_0 = \left(\frac{Bn}{A} \right)^{\frac{1}{n-1}}$$

* Calculando S_0 :

$$S_0 = \left. \frac{d^2 U}{dr^2} \right|_{r_0} = \left. \frac{dF}{dr} \right|_{r_0} = -\frac{A}{r_0^3} + \frac{Bn(n+1)}{r_0^{n+2}}$$

* Finalmente:

$$E = \frac{S_0}{r_0} = -\frac{A}{r_0^4} + \frac{Bn(n+1)}{r_0^{n+3}}$$

* Reemplazando:

$$E = A^{\frac{n+3}{n-1}} \cdot (Bn)^{-\frac{4}{n-1}}$$

b) Utilizando $r_0 = \left(\frac{B}{A} n\right)^{\frac{1}{n-1}}$ $n E = -\frac{A}{r_0^n} + \frac{Bn(nr^{n-1})}{r_0^{n+1}}$

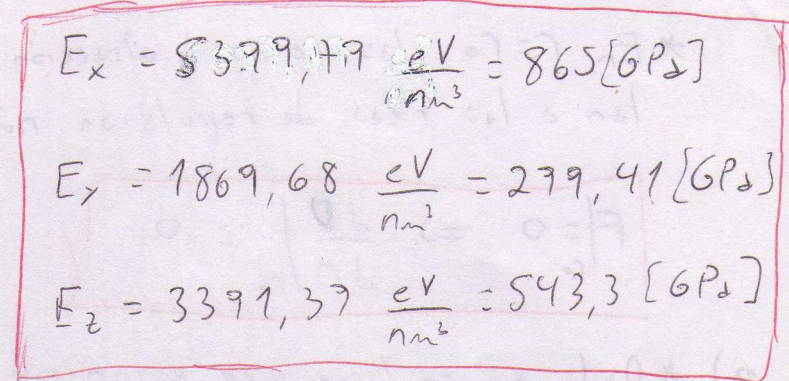
	r_0	S_0	E
X	0,25		
Y	0,34		
Z	0,29		

=>

$$E_x = 5399,79 \frac{\text{eV}}{\text{cm}^3} = 865 [\text{GPa}]$$

$$E_y = 1869,68 \frac{\text{eV}}{\text{nm}^2} = 279,41 [\text{GPa}]$$

$$E_z = 3391,37 \frac{\text{eV}}{\text{nm}^2} = 543,3 [\text{GPa}]$$



$$\left(\frac{B}{A} n\right)^{\frac{1}{n-1}}$$

$$\frac{A}{r_0^n} = \frac{A}{\left(\frac{B}{A} n\right)^{\frac{n}{n-1}}}$$

$$E = \frac{2A}{r_0} = -\frac{A}{r_0^n} + \frac{Bn(nr^{n-1})}{r_0^{n+1}}$$

$$E = A \left(\frac{B}{A} n\right)^{\frac{n}{n-1}}$$

P4]

$$U(r) = -\frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n} \quad ; m=2, n=10$$

$$\rightarrow U_0(r_0) = -\frac{A}{r_0^m} + \frac{B}{r_0^n} \quad (*)$$

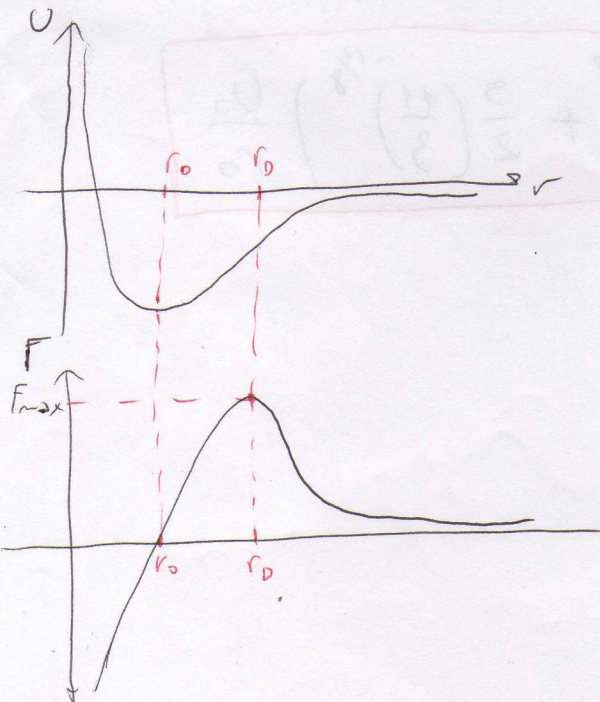
$$\rightarrow \left. \frac{dU}{dr} \right|_{r_0} = F|_{r_0} = 0 \Rightarrow \frac{Am}{r_0^{m+1}} - \frac{Bn}{r_0^{n+1}} \Rightarrow \boxed{A = \frac{n}{m} B r_0^{m-n}} \quad (**)$$

* Reemplazando (**) en (*)

$$U_0 = -\frac{n}{m} B \frac{r_0^{m-n}}{r_0^m} + \frac{B}{r_0^n} = \frac{B}{r_0^n} \left(-\frac{n}{m} + 1 \right)$$

$$\begin{aligned} \therefore B &= \frac{m}{m-n} U_0 r_0^n &= -\frac{1}{4} U_0 r_0^{10} \\ A &= \frac{n}{m-n} U_0 r_0^m &= -\frac{5}{4} U_0 r_0^2 \end{aligned}$$

* Para calcular la fuerza de ruptura:



$$F_{ruptura} = F_{max}!$$

$$\hookrightarrow \left. \frac{d^2U}{dr^2} \right|_{r_0} = \left. \frac{dF}{dr} \right|_{r_0} = 0$$

$$\frac{d^2 U}{dr^2} = -\frac{A_m(n+1)}{r_0^{n+2}} + \frac{B_n(n+1)}{r_0^{n+2}} = 0$$

$$\Rightarrow A_m(n+1) r_0^{n+2} = B_n(n+1) r_0^{n+2}$$

$$\frac{A_m(n+1)}{B_n(n+1)} = \frac{r_0^{n+2}}{r_0^{n+2}} = r_0^{n-n}$$

$$\therefore r_0 = \left(\frac{A_m(n+1)}{B_n(n+1)} \right)^{\frac{1}{n-n}} = \left(\frac{6A}{110B} \right)^{-1/8}$$

$$\left[\rightarrow F(r_0) = F_D = \frac{A_m}{r_0^{n+1}} - \frac{B_n}{r_0^{n+1}} = \dots \right]$$

$$r_D = \left(\frac{11}{3} \right)^{1/8} \cdot r_0$$

$$\Rightarrow F(r_0) = F_D = \frac{A_m}{r_0^{n+1}} - \frac{B_n}{r_0^{n+1}} = \frac{2 \cdot \frac{5}{4} U_0 r_0^2}{\left(\frac{11}{3} \right)^{3/8} \cdot r_0^3} = \frac{10 \cdot \frac{1}{4} U_0 r_0^{20}}{\left(\frac{11}{3} \right)^{11/8} \cdot r_0^{11}}$$

$$\therefore F_D = \left(-\frac{5}{2} \left(\frac{11}{3} \right)^{-3/8} + \frac{5}{2} \left(\frac{11}{3} \right)^{-11/8} \right) \frac{U_0}{r_0}$$