Pontificia Universidad Católica de Chile

Taller 1

Química para Ingeniería

QIM100E, 2022

Química del estado sólido

1.- Indica el tipo de fuerza de interacción se deben superar para

a) fundir el hielo

b) Hacer que entre en ebullición el bromo molecular

c) fundir el yodo solido

d) Hacer que entre en ebullición el ácido clorhídrico (HCl)

a) Puentes de Hidrógeno

b) London (dipolo inducido)

c) London (dipolo inducido)

d) Van der Waals (Dipolo-dipolo)

2.- Calcula el radio atómico (en cm), de:

a) Un metal con estructura BCC y parámetro de red 0,3294 nm

$a = 0{,}3294\ nm\ (x10^{-7}) = 3{,}294x10^{-8}\ cm$

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad \rightarrow \quad r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$$r = \frac{(3{,}294x10^{-8}\ cm)\ \sqrt{3}}{4}$$

$$\boldsymbol{r = 1{,}426x10^{-8}\ cm}$$

b) Un metal con estructura FCC y parámetro de red 4,0862 Å

$a = 4{,}0862\ Å\ (x10^{-8}) = 4{,}0862x10^{-8}\ cm$

$$a = \frac{4r}{\sqrt{2}} \quad \rightarrow \quad r = \frac{a\sqrt{2}}{4}$$

$$r = \frac{(4{,}0862x10^{-8}\ cm)\ \sqrt{2}}{4}$$

$$\boldsymbol{r = 1{,}445x10^{-8}\ cm}$$

3.- Determina la estructura cristalina en los siguientes casos:

a) Un metal con a= 4,9489 Å y radio atómico r= 1,75 Å.

$$a = 2r\ ;\ a = \frac{4r}{\sqrt{3}}\ ;\ a = \frac{4r}{\sqrt{2}} \quad \rightarrow \quad a = 2r\ ;\ a\sqrt{3} = 4r\ ;\ a\sqrt{2} = 4r$$

$$xa = 4r \ \rightarrow \quad x = ?$$

$$x = \frac{4r}{a} = \frac{4\ (1{,}75\ \text{Å})}{4{,}9489\ \text{Å}} = 1{,}414 = \sqrt{2}$$

$$xa = 4r \ \rightarrow \ \sqrt{2}\,a = 4r \ \rightarrow \ a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

$\rightarrow$ **FCC**

b) Un metal con a= 0,42906 Å y r= 0,1858 Å.

$$x = \frac{4r}{a} = \frac{4\ (0{,}1858\ \text{Å})}{0{,}42906\ \text{Å}} = 1{,}732 = \sqrt{3}$$

$$xa = 4r \ \rightarrow \ \sqrt{3}\,a = 4r \ \rightarrow \ a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$

$\rightarrow$ **BCC**

c) Un metal con radio atómico 0,143 nm y constante de red 0,405 nm.

$$x = \frac{4r}{a} = \frac{4\ (0{,}143\ \text{Å})}{0{,}405\ \text{Å}} = 1{,}412 = \sqrt{2}$$

$$xa = 4r \ \rightarrow \ \sqrt{2}\,a = 4r \ \rightarrow \ a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

$\rightarrow$ **FCC**

4.- Un metal de estructura cúbica tiene una densidad de 2,6 g/cm^3, una masa molar de 87,62 g/mol y un parámetro de red de 0,60849 nm. Determine la estructura cristalina del metal.

$$a = 0{,}60849\ nm\ (x10^{-7}) = 6{,}0849x10^{-8}\ cm$$

$$\rho = \frac{\left(\frac{\text{átomos}}{\text{celda}}\right)(\text{masa molar})}{(\text{vol. celda unitaria})\ (N_A)} \quad \rightarrow \quad \frac{\text{átomos}}{\text{celda}} = \frac{(\rho)\ (\text{vol. celda unitaria})\ (N_A)}{(\text{masa molar})}$$

$$\frac{\text{átomos}}{\text{celda}} = \frac{(2{,}6\ \cancel{g}/\cancel{cm^3})\ (6{,}0849x10^{-8}\ \cancel{cm})^3\ (6{,}022x10^{23}\ \text{átomos}/\cancel{mol})}{(87{,}62\ \cancel{g}/\cancel{mol})} = 4\ \text{átomos/celda}$$

4 átomos por celda → FCC

5.- Un metal de estructura cristalina BCC y constante de red de 0,287 nm tiene una densidad de 7,9 g/ cm^3. ¿De qué metal se trata?

$a = 0{,}287\ nm\ (x10^{-7}) = 2{,}87x10^{-8}\ cm$

$$\rho = \frac{\left(\frac{átomos}{celda}\right)(masa\ molar)}{(vol.celda\ unitaria)\ (N_A)} \quad \rightarrow \quad masa\ molar = \frac{(\rho)\ (vol.celda\ unitaria)\ (N_A)}{\left(\frac{átomos}{celda}\right)}$$

$$m.molar = \frac{(7{,}9\ g/\cancel{cm^3})\ (2{,}87x10^{-8}\ \cancel{cm})^3 (6{,}022x10^{23}\ \cancel{átomos}/mol)}{(2\ \cancel{átomos})} = 56{,}2\ g/mol$$

56,2 g/mol ≈ 55,85 g/mol → Fe

6.- Un metal con una estructura cúbica tiene una densidad de 2,6 g/cm^3, una masa molar de 87,62 g/mol y un parámetro de red de 0,60849 nm. Un átomo está asociado con cada uno de los puntos de la red. Determine la estructura cristalina del metal.

$a = 0{,}60849\ nm\ (x10^{-7}) = 6{,}0849x10^{-8}\ cm$

$$\rho = \frac{\left(\frac{átomos}{celda}\right)(masa\ molar)}{(vol.celda\ unitaria)\ (N_A)} \quad \rightarrow \quad \frac{átomos}{celda} = \frac{(\rho)\ (vol.celda\ unitaria)\ (N_A)}{(masa\ molar)}$$

$$\frac{átomos}{celda} = \frac{(2{,}6\ \cancel{g}/\cancel{cm^3})\ (6{,}0849x10^{-8}\ \cancel{cm})^3\ (6{,}022x10^{23}\ átomos/\cancel{mol})}{(87{,}62\ \cancel{g}/\cancel{mol})} = 4\ átomos/celda$$

4 átomos por celda → FCC

7.- Determine la densidad teórica del Mo, considerando los siguientes datos (a temperatura ambiente): Radio atómico= 0,1363 nm; estructura BCC; masa molar = 95,94 g /mol; N_{Av}= 6,022*10^{23} átomos o moléculas/mol.

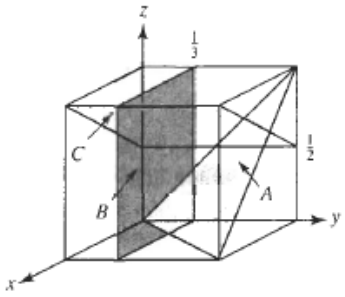
$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{4\ (0{,}1363\ nm)}{\sqrt{3}} = 0{,}3148\ nm$$

$a = 0{,}3148\ nm\ (x10^{-7}) = 3{,}148x10^{-8}\ cm$

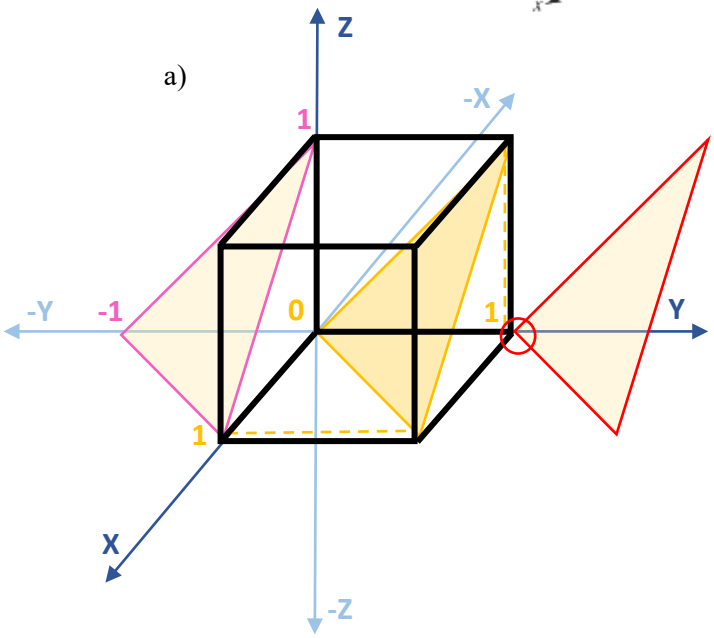
$$\rho = \frac{\left(\frac{átomos}{celda}\right)(masa\ molar)}{(vol.celda\ unitaria)\ (N_A)} = \frac{(2\ \cancel{átomos})(95{,}94\ g/\cancel{mol})}{(3{,}148x10^{-8}\ cm)^3 (6{,}022x10^{23}\ \cancel{átomos}/\cancel{mol})}$$

$$\boldsymbol{\rho = 10{,}21\ g/cm^3}$$

8.- Determine los índices de los planos de la celda unitaria cúbica que aparece en la siguiente figura.



a)



$$(x, y, z) \rightarrow \left(\frac{1}{x}\ \frac{1}{y}\ \frac{1}{z}\right) = (h\ k\ l)$$

*desplazando el plano hacia la izquierda:

- $(1, -1, 1) \rightarrow \left(\frac{1}{1}\ \frac{1}{-1}\ \frac{1}{1}\right) = (1\ \bar{1}\ 1)$

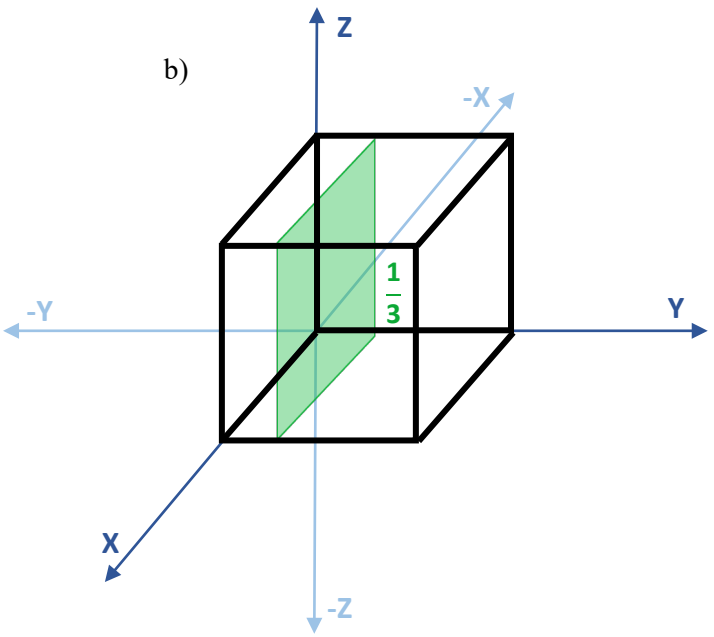
m. c. m. = 1

(1(1) 1(-1) 1(1)) → **(1 $\bar{1}$ 1)**

*desplazando el plano hacia la derecha:

El plano seguiría cortando en el nuevo origen y tampoco se aprecia donde corta en x o y (no se pueden determinar índices).

b)



$$(x, y, z) \rightarrow \left(\frac{1}{x}\ \frac{1}{y}\ \frac{1}{z}\right) = (h\ k\ l)$$

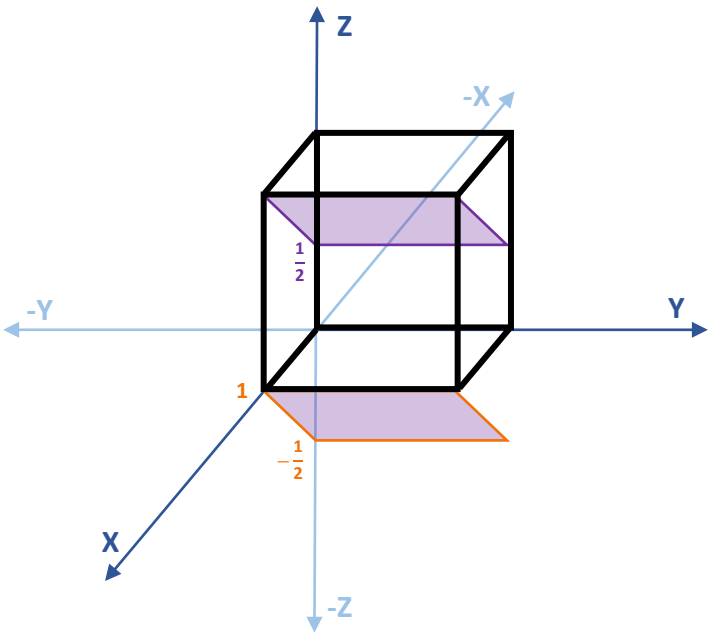
*el plano es paralelo al plano (x, z) = (∞,∞):

- $\left(\infty, \frac{1}{3}, \infty\right) \rightarrow \left(\frac{1}{\infty}\ \frac{1}{\frac{1}{3}}\ \frac{1}{\infty}\right) = (0\ 3\ 0)$

m. c. m. = 1

(1(0) 1(3) 1(0)) → **(0 3 0)**

c)



$$(x, y, z) \rightarrow \left(\frac{1}{x}\ \frac{1}{y}\ \frac{1}{z}\right) = (h\ k\ l)$$

*el plano es paralelo al eje y = (∞)

*se desplaza el plano hacia abajo para determinar dónde corta en el eje x = (1):

- $\left(1, \infty, -\frac{1}{2}\right) \rightarrow \left(\frac{1}{1}\ \frac{1}{\infty}\ \frac{1}{-\frac{1}{2}}\right) = (1\ 0\ \bar{2})$

m. c. m. = 1

(1(1) 1(0) 1(-2)) → = $(\mathbf{1\ 0\ \bar{2}})$

9.- Demuestre que el NaCl tiene la misma estructura cristalina del MgO y calcule su densidad.

r_{Mg+2} = 0,066 nm

r_{O-2} = 0,132 nm

r_{Na+} = 0,097 nm

r_{Cl-} = 0,181 nm

Masas molares Na= 22,99 g/mol Cl= 35,45 g/mol O= 16,0 g/mol Mg = 24,3 g/mol

$$razón\ radios\ iónicos = \frac{r_+}{r_-}$$

$$MgO \rightarrow \frac{r_+}{r_-} = \frac{0{,}066\ \cancel{nm}}{0{,}132\ \cancel{nm}} = 0{,}500$$

$$NaCl \rightarrow \frac{r_+}{r_-} = \frac{0{,}097\ \cancel{nm}}{0{,}181\ \cancel{nm}} = 0{,}536$$

$$0{,}414 < \mathbf{0{,}500\ y\ 0{,}536} < 0{,}732$$

(N° Coordinación: 6, Geometría: Octaédrica)

Ambos compuestos presentan el mismo número de coordinación (6 átomos coordinados al catión), y por tener una razón de radios iónicos similares, es posible que presenten la misma estructura cristalina con empaquetamiento FCC ya que entraría la misma cantidad de iones por celda unitaria en los huecos octaédricos.

$$a_{NaCl} = 2(r_+) + 2(r_-) = 2\ (0{,}097\ nm) + 2\ (0{,}181\ nm) = 0{,}556\ nm$$

$$a_{NaCl} = 0{,}556\ nm\ (x10^{-7}) = 5{,}56x10^{-8}\ cm$$

$$\rho_{NaCl} = \frac{\left(\frac{átomos}{celda}\right)(masa\ molar)}{(vol.\ celda\ unitaria)\ (N_A)}$$

$$\rho_{NaCl} = \frac{(4\ \cancel{átomos})\ (22{,}99\ g/mol) + (4\ \cancel{átomos})\ (35{,}45\ g/mol)}{(5{,}56x10^{-8}\ cm)^3 (6{,}022x10^{23}\ \cancel{átomos}/\cancel{mol})}$$

$$\boldsymbol{\rho_{NaCl} = 2{,}26\ g/cm^3}$$

$$a_{MgO} = 2(r_+) + 2(r_-) = 2\ (0{,}066\ nm) + 2\ (0{,}132\ nm) = 0{,}396\ nm$$

$$a_{MgO} = 0{,}396\ nm\ (x10^{-7}) = 3{,}96x10^{-8}\ cm$$

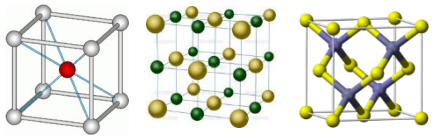
$$\rho_{MgO} = \frac{(4\ \cancel{átomos})\ (24{,}3\ g/mol) + (4\ \cancel{átomos})\ (16{,}0\ g/mol)}{(3{,}96x10^{-8}\ cm)^3 (6{,}022x10^{23}\ \cancel{átomos}/\cancel{mol})}$$

$$\boldsymbol{\rho_{MgO} = 4{,}31\ g/cm^3}$$

10.- Determine si el NiO (r_{Ni+2} = 0,069 nm r_{O-2} = 0,132 nm; masa molar Ni = 58,69 g/mol, O = 16,0 g/mol)) tiene la estructura del cloruro de cesio, del cloruro de sodio o blenda de zinc. Con base en la respuesta determine:

a) El parámetro de celda

b) Densidad



CsCl NaCl ZnS

$$NiO \rightarrow \frac{r_+}{r_-} = \frac{0{,}069\ \cancel{nm}}{0{,}132\ \cancel{nm}} = 0{,}523$$

$$0{,}414 < \mathbf{0{,}523} < 0{,}732$$

(N° Coordinación: 6, Geometría: Octaédrica)

Según la imagen:

CsCl → 8 átomos coordinados al Cs (N° Coordinación: 8), Geometría: Cúbica. BCC.

NaCl → 6 átomos coordinados al Na (N° Coordinación: 6), Geometría: Octaédrica. FCC.

ZnS → 4 átomos coordinados al Zn (N° Coordinación: 4), Geometría: Tetraédrica. FCC.

Por lo tanto, el NiO tiene estructura de NaCl (FCC).

a)

$$a_{NiO} = 2(r_+) + 2(r_-) = 2\ (0{,}069\ nm) + 2\ (0{,}132\ nm)$$

$$\boldsymbol{a_{NiO} = 0{,}402\ nm}$$

b)

$$a_{NiO} = 0{,}402\ nm\ (x10^{-7}) = 4{,}02x10^{-8}\ cm$$

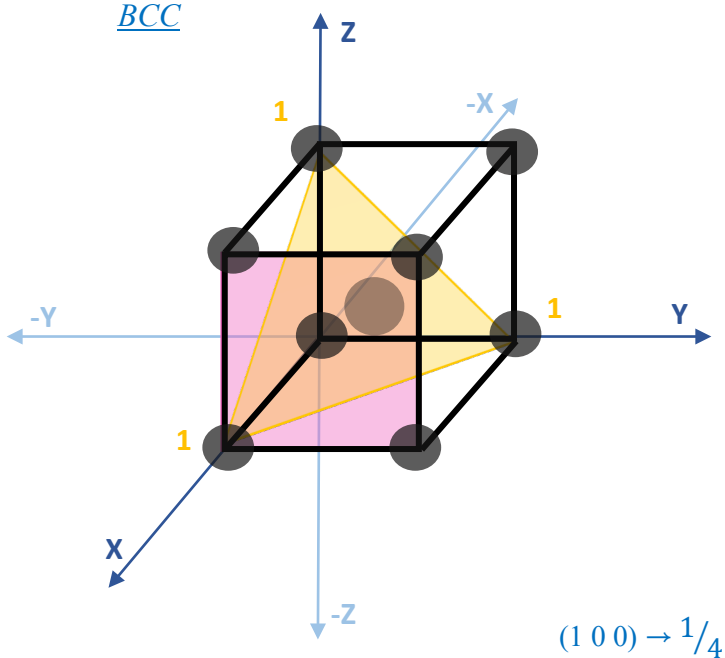
$$\rho_{NiO} = \frac{\left(\frac{átomos}{celda}\right)(masa\ molar)}{(vol.\ celda\ unitaria)\ (N_A)}$$

$$\rho_{NiO} = \frac{(4\ \cancel{átomos})\ (58{,}69\ g/mol) + (4\ \cancel{átomos})\ (16\ g/mol)}{(4{,}02x10^{-8}\ cm)^3 (6{,}022x10^{23}\ \cancel{átomos}/\cancel{mol})}$$

$$\boldsymbol{\rho_{NiO} = 7{,}64\ g/cm^3}$$

11.- Calcular y comparar las densidades planares de los planos (100) y (111) en la FCC y BCC.

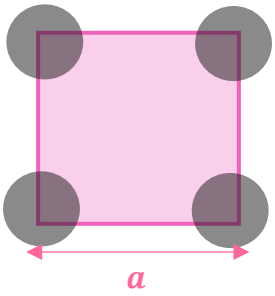
BCC



$$(h\ k\ l) \rightarrow \left(\frac{1}{h}\ \frac{1}{k}\ \frac{1}{l}\right) = (x, y, z)$$

$$(1\ 0\ 0) \rightarrow \left(\frac{1}{1}\ \frac{1}{0}\ \frac{1}{0}\right) = (1, \infty, \infty)$$

$$(1\ 1\ 1) \rightarrow \left(\frac{1}{1}\ \frac{1}{1}\ \frac{1}{1}\right) = (1,1,1)$$

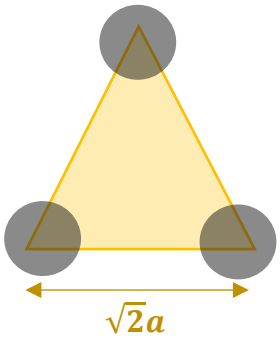


$(1\ 0\ 0) \rightarrow {}^{1}/_{4}$ (4 vértices) = **1 átomo** cortado por el plano

BCC $\rightarrow \sqrt{3}a = 4r \quad \left(a = \frac{4r}{\sqrt{3}}\right)$

$$\text{área de cuadrado} = \text{lado} \times \text{lado}$$

$$\text{área de triángulo equilátero} = \frac{\sqrt{3}\,(\text{lado})^2}{4}$$



*$(1\ 1\ 1) \rightarrow {}^{1}/_{6}$ (3 vértices) = **${}^{1}/_{2}$ átomo** cortado por el plano

***OJO que este plano NO corta el átomo central.**

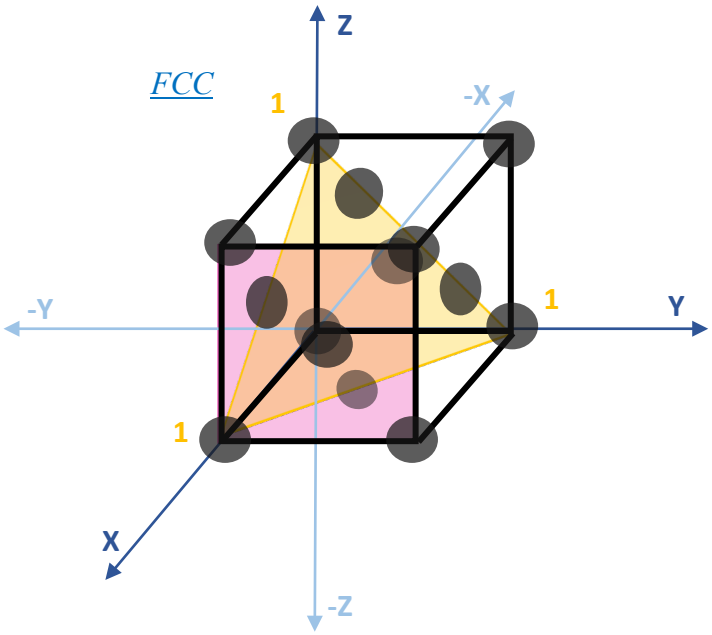
$$\text{área}_{(1\,0\,0)} = a^2 = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^2 = \mathbf{\frac{16r^2}{3}}$$

$$\text{área}_{(1\,1\,1)} = \frac{\sqrt{3}\,(\sqrt{2}a)^2}{4} = \frac{2\sqrt{3}\,(a)^2}{4} = \frac{\sqrt{3}\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^2}{2} = \frac{\cancel{\sqrt{3}}\left(\frac{4r}{\cancel{\sqrt{3}}}\right)\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)}{2} = \frac{16r^2}{2\sqrt{3}} = \mathbf{\frac{8r^2}{\sqrt{3}}}$$

$$\rho_{P\,(1\,0\,0)\,BCC} = \frac{(n°\ \text{átomos en plano})}{(\text{área del plano})} = \frac{1\ \text{átomo}}{\frac{16r^2}{3}} = \frac{3}{16}\frac{\text{átomos}}{r^2} = \mathbf{0,187\ átomos/r^2}$$

$$\rho_{P\,(1\,1\,1)\,BCC} = \frac{(n°\ \text{átomos en plano})}{(\text{área del plano})} = \frac{{}^{1}/_{2}\ \text{átomos}}{\frac{8r^2}{\sqrt{3}}} = \frac{\sqrt{3}}{16}\frac{\text{átomos}}{r^2} = \mathbf{0,108\ átomos/r^2}$$

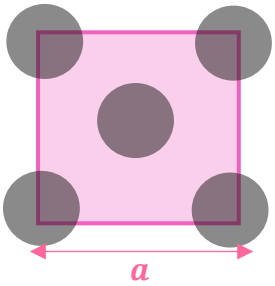
El plano (1 0 0) presenta mayor densidad de átomos que el (1 1 1) en estructura BCC.



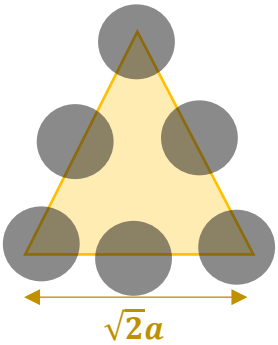
$$(h\ k\ l) \rightarrow \left(\frac{1}{h}\ \frac{1}{k}\ \frac{1}{l}\right) = (x, y, z)$$

$$(1\ 0\ 0) \rightarrow \left(\frac{1}{1}\ \frac{1}{0}\ \frac{1}{0}\right) = (1, \infty, \infty)$$

$$(1\ 1\ 1) \rightarrow \left(\frac{1}{1}\ \frac{1}{1}\ \frac{1}{1}\right) = (1,1,1)$$



(1 0 0) → $^1/_4$ (4 vértices) + 1 átomo central = **2 átomos** cortados por el plano



(1 1 1) → $^1/_6$ (3 vértices) + $^1/_2$ (3 lados) = **2 átomos** cortados por el plano

FCC → $\sqrt{2}a = 4r \quad \left(a = \frac{4r}{\sqrt{2}}\right)$

$$área_{\ (1\ 0\ 0)} = a^2 = \left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^2 = \mathbf{8r^2}$$

$$área_{\ (1\ 1\ 1)} = \frac{\sqrt{3}\left(\sqrt{2}a\right)^2}{4} = \frac{2\sqrt{3}\,(a)^2}{4} = \frac{\sqrt{3}\left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^2}{2} = \frac{\sqrt{3}\,(8r^2)}{2} = \mathbf{4\sqrt{3}\,r^2}$$

$$\rho_{P\ (1\ 0\ 0)} = \frac{(n°\ átomos\ en\ plano)}{(área\ del\ plano)} = \frac{2\ átomos}{8\,r^2} = \mathbf{0,250\ átomos/r^2}$$

$$\rho_{P\ (1\ 1\ 1)\ FCC} = \frac{(n°\ átomos\ en\ plano)}{(área\ del\ plano)} = \frac{2\ átomos}{4\sqrt{3}\,r^2} = \mathbf{0,289\ átomos/r^2}$$

El plano (1 1 1) presenta mayor densidad de átomos que el (1 0 0) en estructura FCC.

12.- Un metal desconocido presenta estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (BCC). Al calentarlo de 20°C a 200°C su volumen de celda unitaria aumenta un 20%, obteniéndose un volumen de 0,028248 nm^3.

a) Calcular el parámetro de celda (arista) a 20 °C
b) Calcular el radio del átomo a 20ºC. (5 puntos)
c) Calcular la densidad planar del plano (100) a 20ºC
d) Calcular la masa molar del metal si su densidad es 7,88 g/cm^3 a 20°C

a)

$$vol.celda_{\,200°C} = vol.celda_{\,20°C} + (0{,}2)\ vol.celda_{\,20°C}$$

$$0{,}028248\ nm^3 = vol.celda_{\,20°C} + (0{,}2) vol.celda_{\,20°C}$$

$$0{,}028248\ nm^3 = (1{,}2)\ vol.celda_{\,20°C}$$

$$vol.celda_{\,20°C} = \frac{0{,}028248\ nm^3}{1{,}2} = 0{,}02354\ nm^3$$

$$a = \sqrt[3]{0{,}02354\ nm^3}$$

$$\boldsymbol{a = 0{,}2866\ nm}$$

b)

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad \rightarrow \quad r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$$r = \frac{(0{,}2866\ nm)\ \sqrt{3}}{4}$$

$$\boldsymbol{r = 0{,}1241\ nm}$$

d)

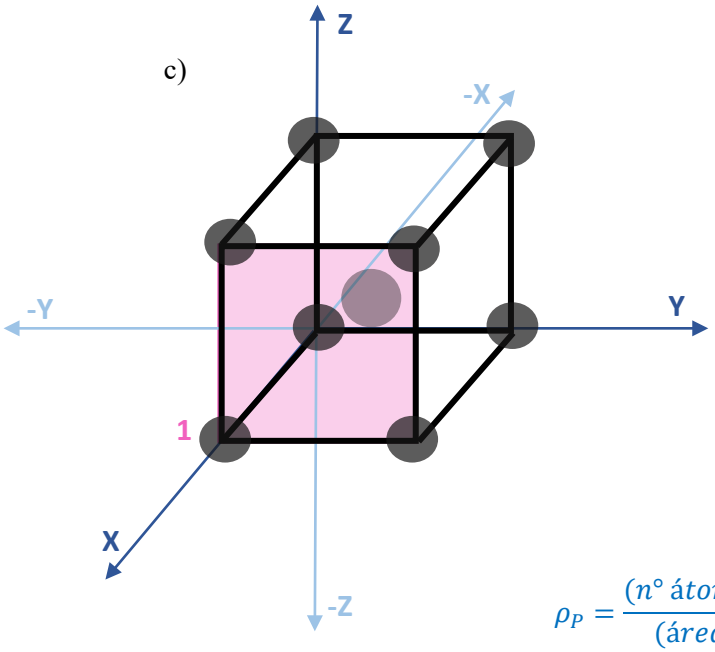
$$a = 0{,}2866\ nm\ (x10^{-7}) = 2{,}866x10^{-8}\ cm$$

$$\rho = \frac{\left(\frac{átomos}{celda}\right)(masa\ molar)}{(vol.celda\ unitaria)\ (N_A)} \quad \rightarrow \quad masa\ molar = \frac{(\rho)\ (vol.celda\ unitaria)\ (N_A)}{\left(\frac{átomos}{celda}\right)}$$

$$masa\ molar = \frac{(7{,}88\ g/\cancel{cm^3})\ (2{,}866x10^{-8}\ \cancel{cm})^3 (6{,}022x10^{23}\ \cancel{átomos}/mol)}{(2\ \cancel{átomos})}$$

$$\boldsymbol{masa\ molar = 55{,}85\ g/mol}$$

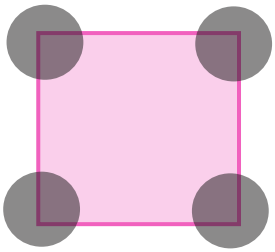
c)



$$(h\ k\ l) \rightarrow \left(\frac{1}{h}\ \frac{1}{k}\ \frac{1}{l}\right) = (x, y, z)$$

$$(1\ 0\ 0) \rightarrow \left(\frac{1}{1}\ \frac{1}{0}\ \frac{1}{0}\right) = (1, \infty, \infty)$$

1 átomo en el plano =



$$\rho_P = \frac{(n°\ átomos\ en\ plano)}{(área\ del\ plano)} = \frac{1\ átomo}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^2} = \frac{1\ átomo}{\frac{16\ (0{,}1241\ nm)^2}{3}}$$

$$\boldsymbol{\rho_P = 12{,}17\ átomos/nm^2}$$

13.- El cromo (masa molar 52 g/mol) tiene una estructura BCC cuyo radio atómico es 0,125 nm, determine:

a) Parámetro de Celda
b) Densidad Teórica en g/cm^3.
c) Densidad planar del plano (011)

a)

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} = \frac{4\,(0{,}125\ nm)}{\sqrt{3}}$$

$$\boldsymbol{a = 0{,}289\ nm}$$

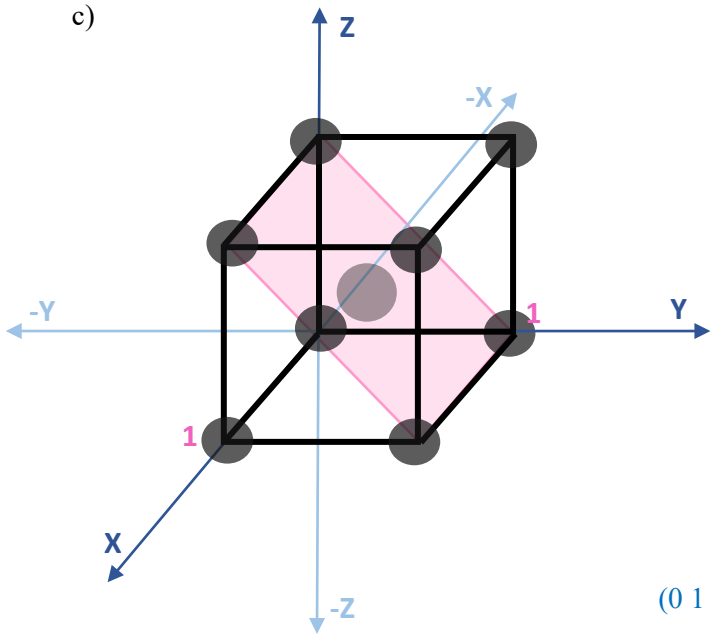
b)

$$a = 0{,}289\ nm\ (x10^{-7}) = 2{,}89x10^{-8} cm$$

$$\rho = \frac{\left(\frac{átomos}{celda}\right)(masa\ molar)}{(vol.celda\ unitaria)\ (N_A)} = \frac{(2\ \cancel{átomos})(52\ g/\cancel{mol})}{(2{,}89x10^{-8}\ cm)^3\ (6{,}022\ x\ 10^{23}\ \cancel{átomos}/\cancel{mol})}$$

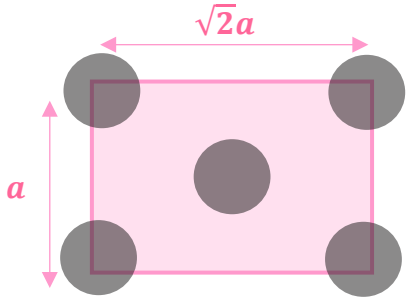
$$\boldsymbol{\rho = 7{,}15\ g/cm^3}$$

c)



$$(h\ k\ l) \rightarrow \left(\frac{1}{h}\ \frac{1}{k}\ \frac{1}{l}\right) = (x, y, z)$$

$$(0\ 1\ 1) \rightarrow \left(\frac{1}{0}\ \frac{1}{1}\ \frac{1}{1}\right) = (\infty, 1, 1)$$



(0 1 1) → $^1/_4$ (4 vértices) + 1 átomo central

= **2 átomos** cortados por el plano

BCC → $a\sqrt{3} = 4r \quad \left(a = \frac{4r}{\sqrt{3}}\right)$

$área\ de\ rectángulo = lado \times lado$

$$área_{(0\,1\,1)} = (a)\left(\sqrt{2}\,a\right) = \sqrt{2}\,a^2 = \sqrt{2}\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^2 = \frac{16\sqrt{2}\,r^2}{3} = \frac{16\sqrt{2}\,(0{,}125\ nm)^2}{3} = \boldsymbol{0{,}118\ nm^2}$$

$$\rho_{P\ (1\,1\,0)\ BCC} = \frac{(n°\ átomos\ en\ plano)}{(área\ del\ plano)} = \frac{2\ átomos}{0{,}118\ nm^2} = \boldsymbol{16{,}95\ átomos/nm^2}$$

Estructura Cúbica	Parámetro de Celda	Átomos por Celda	N° de Coordinación
CS	$a = 2r$	1	6
BCC	$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$	2	8
FCC	$a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$	4	12

Askeland 7ª ed. (2016), pp. 65.

Densidad Teórica $\rho = \frac{\left(\frac{átomos}{celda}\right)(masa\ molar)}{(vol.celda\ unitaria)\ (N_A)}$

Densidad Planar $\rho_P = \frac{(n°\ átomos\ en\ plano)}{(área\ del\ plano)}$

Volumen de Celda Cúbica a^3

Número de Avogadro $6{,}022\ x\ 10^{23}$ __/mol

Área de Plano a^2

Razón Radios Iones $\frac{r_+}{r_-}$

Parámetro de Celda (NaCl) $a = 2r_+ + 2r_-$

$\frac{r_+}{r_-}$	Ubicación Intersticial / Geometría	N° de Coordinación del Metal
0,225 – 0,414	Centro del Tetraedro	4
0,414 – 0,732	Centro del Octaedro	6
0,732 – 1,0	Centro del Cubo	8

Askeland 7ª ed. (2016), pp. 78.