PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

QUI100E-3 Taller N°1, 1° semestre 2020

07-04-2020

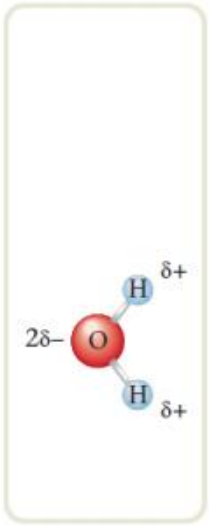
Romina Bassi Castillo

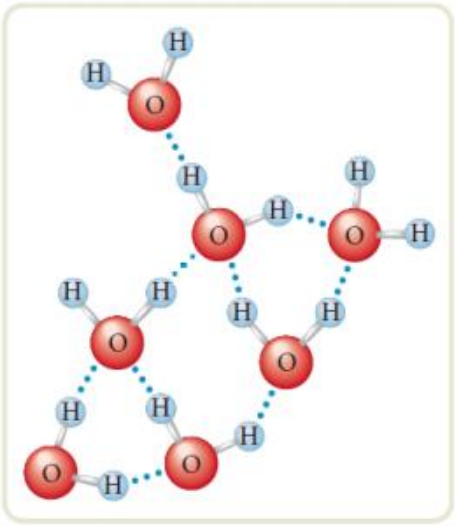
robassi@uc.cl

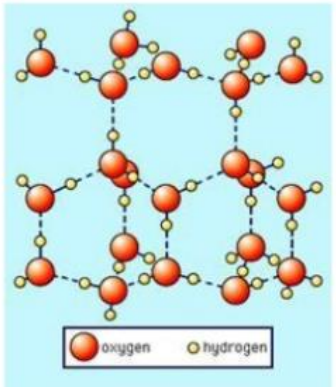
Ejercicio N°1

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

a) Fundir el hielo: **Para fundir el hielo es necesario romper los puentes de hidrógeno que son un tipo de enlace intermolecular.**





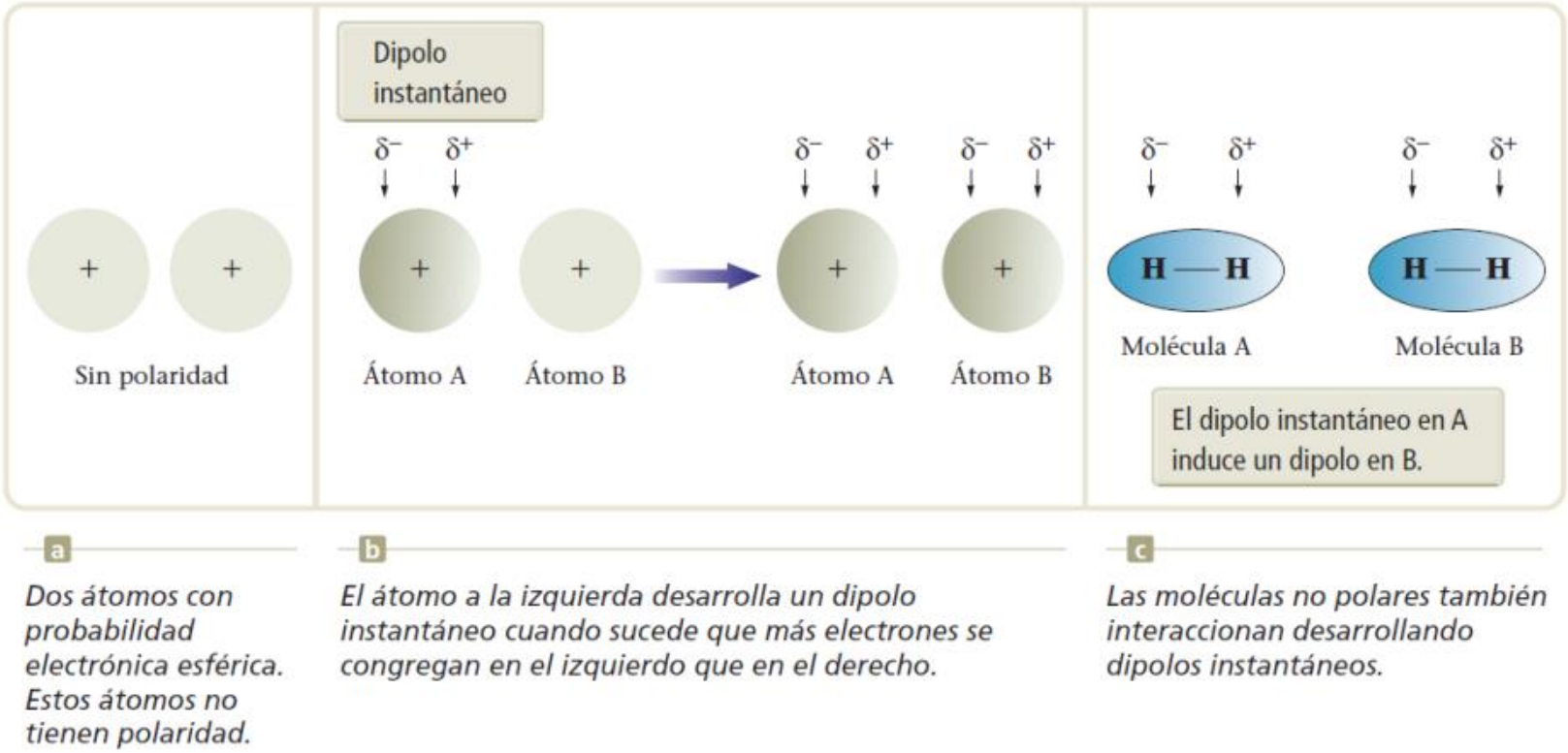


Ejercicio N°1

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

b) Hacer que entre en ebullición el bromo molecular: Fuerzas de London

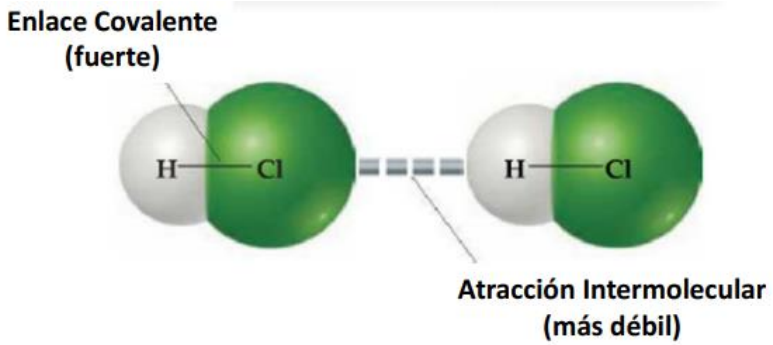
c) Fundir el yodo solido: Fuerzas de London.



Ejercicio N°1

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

d) Hacer que entre en ebullición el ácido clorhídrico (HCl): Fuerza dipolo-dipolo.



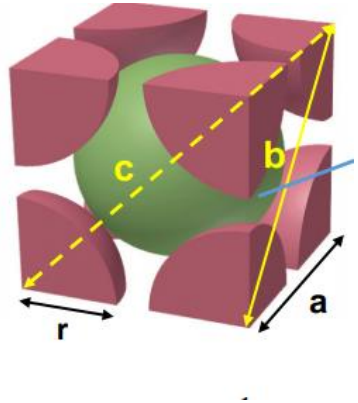


Ejercicio N°2

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

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

BCC: Estructura centrada en el cuerpo



$$átomos\ por\ celda = 8\ vértices \times \frac{1}{8} + 1\ átomo\ en\ el\ centro = 2$$

$$relación\ longitud\ de\ arista\ y\ radio\ del\ átomo: r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$$\mathrm{r} = 0{,}3294\ nm \times \frac{10^{-7} cm}{1\ nm} \times \frac{\sqrt{3}}{4}$$

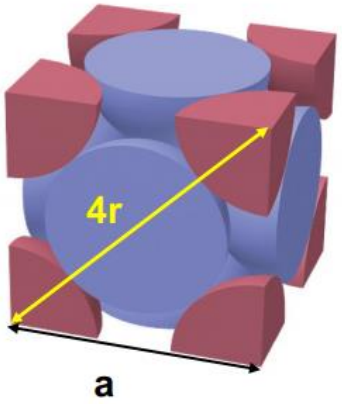
$$r = 1{,}43 \times 10^{-8}\ \mathrm{cm}$$

Ejercicio N°2

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

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

FCC: Estructura cúbica centrada en las caras.



$$átomos\ por\ celda = 8\ vértices \times \frac{1}{8} + 6\ caras \times \frac{1}{2} = 4$$

$$relación\ longitud\ de\ arista\ y\ radio\ del\ átomo: a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$

$$a = \ 4{,}0862\ \text{Å}$$

$$4{,}0862\ \text{Å} \times \frac{10^{-8}\ cm}{1\text{Å}} = \frac{4 \times r}{\sqrt{2}}$$

$$r\ = 1{,}44\ \times 10^{-8}\ \text{cm}$$

Ejercicio N°3

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

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

Estructura	Átomos por celda	Relación a/r
CS	1	$a = 2r$
BCC	2	$a = 4r/\sqrt{3}$
FCC	4	$a = 4r/\sqrt{2}$

$$a = 4 \times 1{,}75\text{Å}/\sqrt{2}$$

$$a = 4{,}95\text{Å}$$

Por lo tanto, es una estructura **FCC**

Ejercicio N°3

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

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

Estructura	Átomos por celda	Relación a/r
CS	1	$a = 2r$
BCC	2	$a = 4r/\sqrt{3}$
FCC	4	$a = 4r/\sqrt{2}$

$$a = 4 \times 0{,}1858\ \text{Å}/\sqrt{3}$$

$$a = 0{,}4291\ \text{Å}$$

Por lo tanto, es una estructura **BCC**

Ejercicio N°3

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

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

Estructura	Átomos por celda	Relación a/r
CS	1	$a = 2r$
BCC	2	$a = 4r/\sqrt{3}$
FCC	4	$a = 4r/\sqrt{2}$

$$a = 4 \times 1{,}43\ nm/\sqrt{2}$$

$$a = 0{,}405\ nm$$

Por lo tanto, es una estructura **FCC**

Ejercicio N°4

4.- Un metal de estructura cúbica tiene una densidad de 2,6 g/cm3, una masa molar de 87,62 g/mol y un parámetro de red de 0,60849 nm. Determine la estructura cristalina del metal.

$$p = \frac{n°\ átomos_{celda} \times masa\ atómica}{volumen\ celda\ unitaria \times N_{avogadro}}$$

$$2{,}6\ \ g/cm^3 = \frac{n°\ átomos_{celda} \times 87{,}62\ \ g/mol}{[0{,}60849nm \times \frac{10^{-7}cm}{1\ nm}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

Estructura	Átomos por celda
CS	1
BCC	2
FCC	4

$$r = 4$$

Por lo tanto, la estructura cristalina del metal es **FCC.**

Ejercicio N°5

5.- Un metal de estructura cristalina BCC y constante de red de 0,287 nm tiene una densidad de 7,9 g/ cm3. ¿De qué metal se trata?

Estructura	Átomos por celda
CS	1
BCC	2
FCC	4

$$p = \frac{n°\ átomos_{celda} \times masa\ atómica}{volumen\ celda\ unitaria \times N_{avogadro}}$$

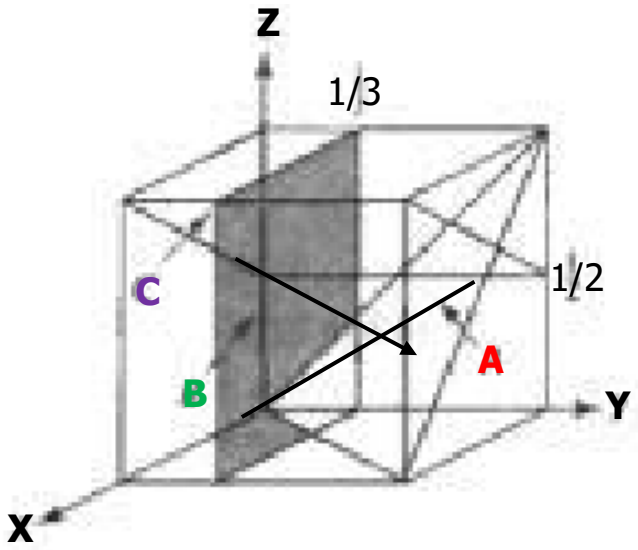
$$7{,}9\ \ g/cm^3 = \frac{2\ átomos \times masa\ atómica}{[0{,}287nm \times \frac{10^{-7}cm}{1\ nm}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

$$\boldsymbol{masa\ atómica = 56{,}2\ g/mol}$$



Ejercicio N°6

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



Plano A	X	Y	Z
Cortes	1	-1	1
Recíproco	1	-1	1
Plano	[1	$\overline{1}$	1]

Plano B	X	Y	Z
Cortes	∞	1/3	∞
Recíproco	0	3	o
Plano	[0	3	0]

Plano C	X	Y	Z
Cortes	-1	∞	1/2
Recíproco	-1	0	2
Plano	[$\overline{1}$	0	2]

Ejercicio N°7

7.- 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

$$r_+/r_- \longrightarrow permite\ predecir\ la\ geometría\ o\ numero\ de\ coodinación.$$

NaCl: $r_+/r_- = {}^{0{,}097\ nm}/_{0{,}181\ nm}$ = 0,536

MgO: $r_+/r_- = {}^{0{,}066\ nm}/_{0{,}132\ nm}$ = 0,500

Número de Coordinación	Geometría	r+/r-
4	Tetraédrica	0,225-0,414
6	Octaédrica	0,414-0,732
8	Cúbica	0,732-1,0

Ejercicio N°7

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

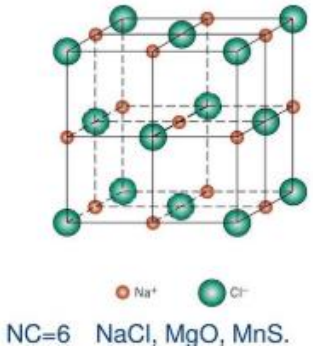
$$r_+/r_- \longrightarrow permite\ predecir\ la\ geometría\ o\ numero\ de\ coodinación.$$

NaCl: $r_+/r_- = {}^{0{,}097\ nm}/_{0{,}181\ nm} = 0{,}536$

MgO: $r_+/r_- = {}^{0{,}066\ nm}/_{0{,}132\ nm} = 0{,}500$

Número de Coordinación	Geometría	r+/r-
4	Tetraédrica	0,225-0,414
6	Octaédrica	0,414-0,732
8	Cúbica	0,732-1,0

Ambos poseen la misma estructura cristalina en donde los aniones (Cl^- o O^{2-}) forman un empaquetamiento FCC, en el cual todos los huecos octaédricos están ocupados por Na^+ o Mg^{2+}, respectivamente, en tanto los huecos tetraédricos están desocupados.



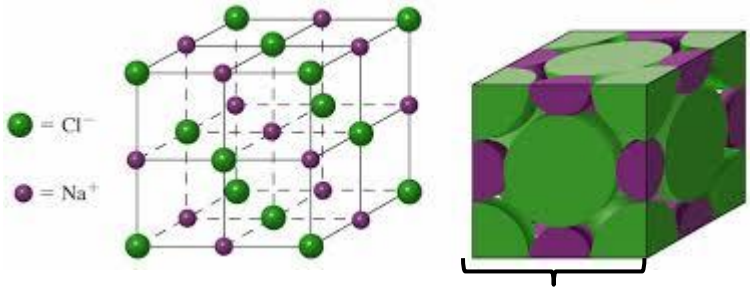
NC=6 NaCl, MgO, MnS.

Ejercicio N°7

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

r_{Na+} = 0,097 nm

r_{Cl-} = 0,181 nm



$a = 2r(Na^+) + 2r(Cl^-)$

$$p = \frac{n°\ átomos_{celda} \times masa\ atómica}{volumen\ celda\ unitaria \times N_{avogadro}}$$

$$p_{NaCl} = \frac{\left[\frac{1}{8}\ Cl^- \times 8\ vértices + \frac{1}{2}\ Cl^- \times 6\ caras\right] \times 35{,}35\ g/mol + [1\ Na^+ centro + \frac{1}{4}\ Na^+ \times 12] \times 22{,}99\ g/mol}{[(2\ x\ 0{,}097 + 2\ x\ 0{,}181)nm \times \frac{10^{-7} cm}{1\ nm}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

$$p_{NaCl} = \frac{[4\ átomos\ Cl^- \times 35{,}35\ g/mol + 4\ átomos\ Na^+ \times 22{,}99\ g/mol]}{[(2\ x\ 0{,}097 + 2\ x\ 0{,}181)nm \times \frac{10^{-7} cm}{1\ nm}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

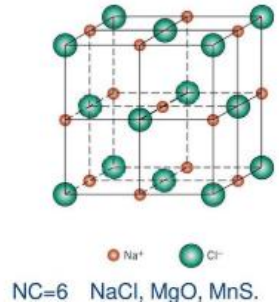
$$p_{NaCl} = 2{,}26\ g/cm^3$$

Ejercicio N°7

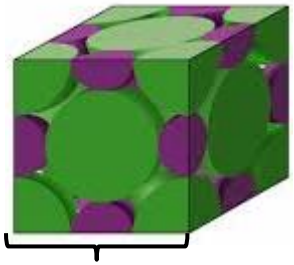
7.- Demuestre que el NaCl tiene la misma estructura cristalina del MgO y calcule su densidad.

r_{Mg+2} = 0,066 nm

r_{O-2} = 0,132 nm



NC=6 NaCl, MgO, MnS.



$a = 2r(Mg^{2+}) + 2r(O^{2-})$

$$p = \frac{n°\ átomos_{celda} \times masa\ atómica}{volumen\ celda\ unitaria \times N_{avogadro}}$$

$$p_{MgO} = \frac{\left[\frac{1}{8}\ O^{2-} \times 8\ vértices + \frac{1}{2} O^{2-} \times 6\ caras\right] \times 15{,}99\ g/mol + [1\ Mg^{2+} centro + \frac{1}{4}\ Mg^{2+} \times 12] \times 24{,}3\ g/mol}{[(2\ x\ 0{,}066 + 2\ x\ 0{,}132) nm \times \frac{10^{-7} cm}{1\ nm}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

$$p_{MgO} = \frac{[4 átomos\ O^{2-} \times 15{,}99\ g/mol + 4 átomos\ Mg^{2+} \times 24{,}3\ g/mol]}{[(2\ x\ 0{,}066 + 2\ x\ 0{,}132) nm \times \frac{10^{-7} cm}{1\ nm}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

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

Ejercicio N°8

8.- Determine si el NiO (r_{Ni+2} = 0,069 nm r_{O-2} = 0,132 nm ; masa atómicas 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:

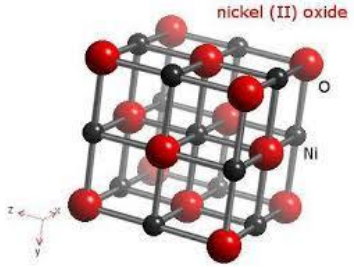
a) Parámetro de la celda

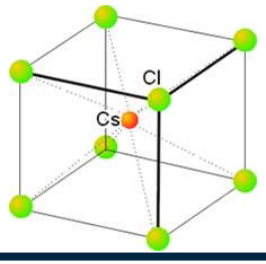
$$r_+/r_- \longrightarrow permite\ predecir\ la\ geometría\ o\ numero\ de\ coodinación.$$

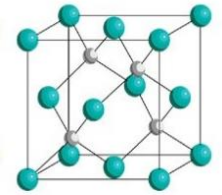
Número de Coordinación	Geometría	r+/r-
4	Tetraédrica	0,225-0,414
6	Octaédrica	0,414-0,732
8	Cúbica	0,732-1,0

NiO: $r_+/r_- = {}^{0,069\ nm}/_{0,,132\ nm} = 0,53$

Geometría octahédrica, posee la misma estructura que el NaCl, pero distinta al CsCl, ya que éste último posee una estructura cúbica simple. Si comparamos la estructura del NiO con la de ZnS ambos poseen una estructura FCC, pero el ión niquél se ubica en los huecos octaédricos, formando una estructura octaédrica, mientras que la blenda de zinc (ZnS) el S^{2-} se ubica en los huecos tetraédricos.





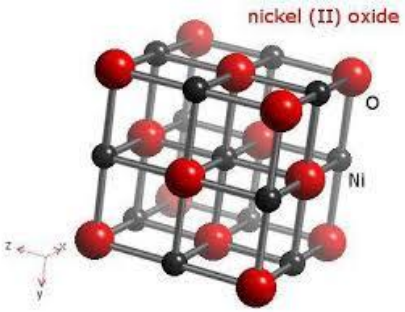

ZnS

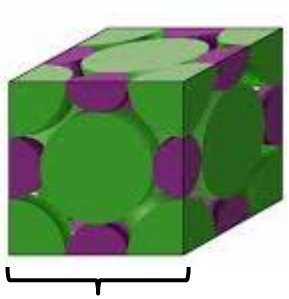
CsCl: $r^+(Cs^+)/r^-(Cl^-) = {}^{1,69\ A}/_{1,81\ A} = 0,93$ **CsCl:** $r^+(Zn^{2+})/r^-(S^{2-}) = {}^{0,74A}/_{1,84\ A} = 0,40$

Ejercicio N°8

8.- Determine si el NiO (r_{Ni+2} = 0,069 nm r_{O-2} = 0,132 nm ; masa atómicas 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) Parámetro de la celda





$$a = 2\mathrm{r}(\mathrm{Ni}^{2+}) + 2\mathrm{r}(\mathrm{O}^{2-})$$

$$a = (2\ x\ 0{,}069 + 2\ x\ 0{,}132)nm \times \frac{10^{-7}cm}{1\ nm}$$

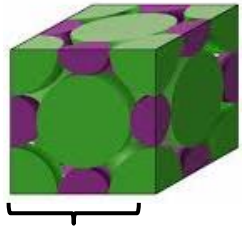
$$\boldsymbol{a = 4{,}02 \times 10^{-8}\ cm}$$

Ejercicio N°8

8.- Determine si el NiO (r_{Ni+2} = 0,069 nm r_{O-2} = 0,132 nm ; masa atómicas 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:

b) Densidad

$$p = \frac{n°\ átomos_{celda} \times masa\ atómica}{volumen\ celda\ unitaria \times N_{avogadro}}$$



$a = 2r(Ni^{2+}) + 2r(O^{2-})$

$$p_{NiO} = \frac{\left[\frac{1}{8}\ O^{2-} \times 8\ vértices + \frac{1}{2} O^{2-} \times 6\ caras\right] \times 16{,}00\ g/mol + [1\ Ni^{2+} centro + \frac{1}{4}\ Ni^{2+} \times 12] \times 58{,}69\ g/mol}{[(2\ x\ 0{,}069 + 2\ x\ 0{,}132) nm \times \frac{10^{-7} cm}{1\ nm}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

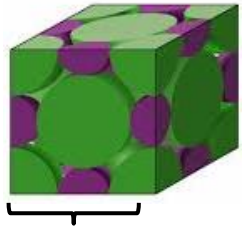
$$p_{NiO} = \frac{[4 átomos\ O^{2-} \times 16{,}00\ g/mol + 4 átomos\ Ni^{2+} \times 58{,}69\ g/mol]}{[(2\ x\ 0{,}069 + 2\ x\ 0{,}132) nm \times \frac{10^{-7} cm}{1\ nm}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

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

Ejercicio N°8

8.- Determine si el NiO (r_{Ni+2} = 0,069 nm r_{O-2} = 0,132 nm ; masa atómicas 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:

c) Factor de empaquetamiento



$a = 2r(Ni^{2+}) + 2r(O^{2-})$

$$APF = \frac{Volumen\ átomos\ celda}{Volumen\ celda\ unitaria}$$

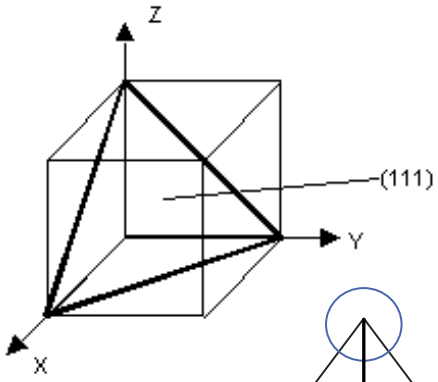
$$APF = \frac{4O^{2-} \times ({}^{4}/_{3}\,\pi r^3) + 4Ni^{2+} \times ({}^{4}/_{3}\,\pi r^3)}{(2r(Ni^{2+}) + 2r(O^{2-}))3}$$

$$APF = \frac{[{}^{16}/_{3}\,\pi(0{,}132nm)^3] + [{}^{16}/_{3}\,\pi(0{,}069nm)^3]}{(2\ x\ 0{,}069nm + 2\ x\ 0{,}132nm)^3}$$

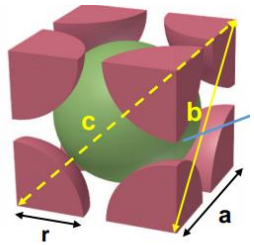
$APF = 0{,}68$ **68% ocupado por átomos en la celda**

Ejercicio N°9

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

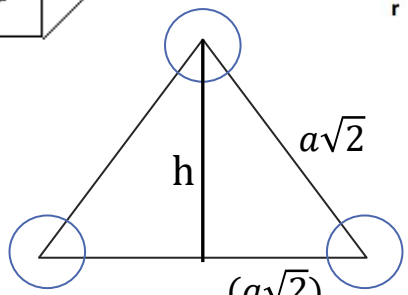


BCC



$$\text{átomos por celda} = 8\ \text{vértices} \times \frac{1}{8} + 1\ \text{átomo en el centro} = 2$$

$$\text{relación longitud de arista y radio del átomo: } r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$



$$h = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\, a$$

$$p = \frac{n°\ de\ átomos\ dentro\ del\ plano}{área\ del\ plano}$$

$$p = \frac{1/6\ átomos \times 3\ vértices}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{1/2\ átomos}{\frac{\sqrt{3}}{2} \times (\frac{4r}{\sqrt{3}})^2}$$

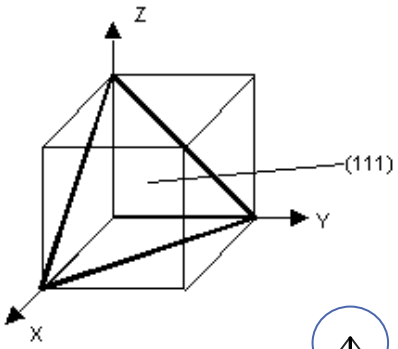
$$\text{Área plano} = \frac{Base\ x\ h}{2} = \frac{a\sqrt{2} \times \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} a}{2}$$

$$\boldsymbol{p = \frac{3}{16\sqrt{3}r^2}}$$

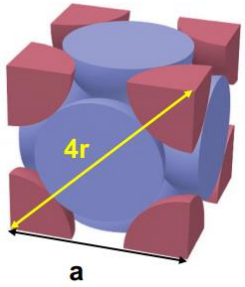
$$\text{Área plano} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$

Ejercicio N°9

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

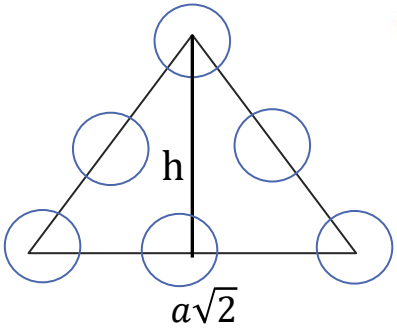


FCC



$$\text{átomos por celda} = 8\ \text{vértices} \times \frac{1}{8} + 6\ \text{caras} \times \frac{1}{2} = 4$$

$$\text{relación longitud de arista y radio del átomo: } a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$



$$p = \frac{n°\ de\ átomos\ dentro\ del\ plano}{área\ del\ plano}$$

$$p = \frac{1/6\ átomos \times 3\ vértices + 1/2 \times 3\ caras}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{2\ átomos}{\frac{\sqrt{3}}{2} \times (\frac{4r}{\sqrt{2}})^2}$$

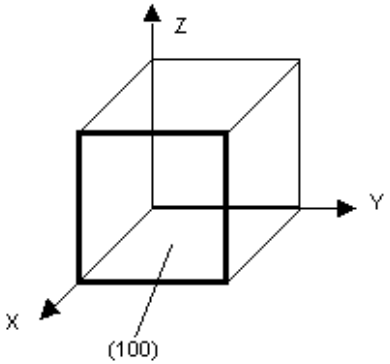
$$\text{Área plano} = \frac{Base\ x\ h}{2} = \frac{a\sqrt{2} \times \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}a}{2}$$

$$\text{Área plano} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$

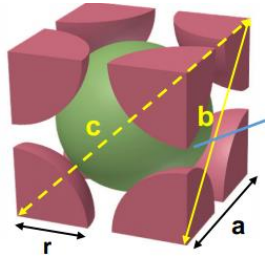
$$\boldsymbol{p = \frac{3}{4\sqrt{3}r^2}}$$

Ejercicio N°9

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

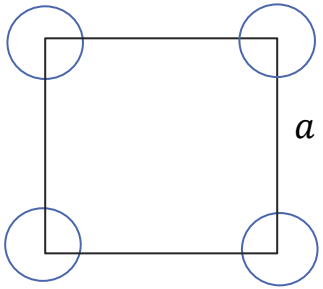


BCC



$$\text{átomos por celda} = 8\ \text{vértices} \times \frac{1}{8} + 1\ \text{átomo en el centro} = 2$$

$$\text{relación longitud de arista y radio del átomo: } r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$



$$p = \frac{n°\ de\ átomos\ dentro\ del\ plano}{área\ del\ plano}$$

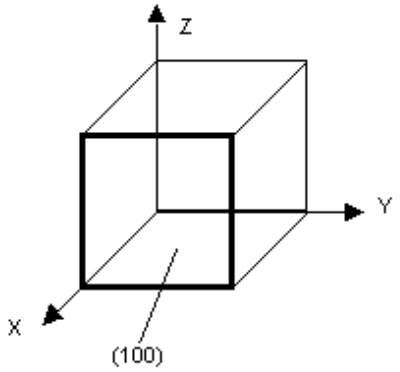
$$p = \frac{1/4\ átomos \times 4\ vértices}{(a)^2} = \frac{1\ átomo}{(\frac{4r}{\sqrt{3}})^2}$$

Área plano = $a^2 = (\frac{4r}{\sqrt{3}})^2$

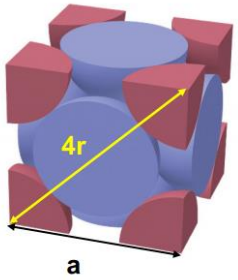
$$\boldsymbol{p = \frac{3}{16r^2}}$$

Ejercicio N°9

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

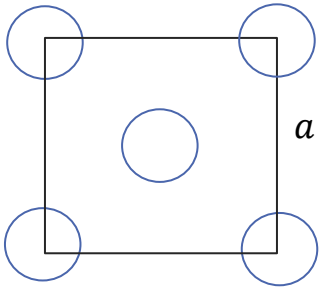


FCC



$$átomos\ por\ celda = 8\ vértices \times \frac{1}{8} + 6\ caras \times \frac{1}{2} = 4$$

$$relación\ longitud\ de\ arista\ y\ radio\ del\ átomo: a = \frac{4r}{\sqrt{2}}$$



Área plano = $a^2 = (\frac{4r}{\sqrt{3}})^2$

$$p = \frac{n°\ de\ átomos\ dentro\ del\ plano}{área\ del\ plano}$$

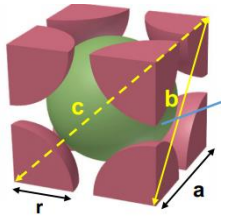
$$p = \frac{1/4\ átomos \times 4\ vértices + 1\ átomo}{(a)^2} = \frac{2\ átomo}{(\frac{4r}{\sqrt{3}})^2}$$

$$\boldsymbol{p = \frac{3}{8r^2}}$$

Ejercicio N°10

Determine la densidad teórica del Mo, considerando los siguientes datos (a temperatura ambiente): radio atómico = 0,1363 nm; estructura BCC; peso atómico = 95,94 g/mol; NA = 6,022*1023.

BCC



$$átomos\ por\ celda = 8\ vértices \times \frac{1}{8} + 1\ átomo\ en\ el\ centro = 2$$

$$relación\ longitud\ de\ arista\ y\ radio\ del\ átomo: r = \frac{a\sqrt{3}}{4}$$

$$p = \frac{n°\ átomos_{celda} \times masa\ atómica}{volumen\ celda\ unitaria \times N_{avogadro}}$$

$$p = \frac{2\ átomos_{celda} \times 95{,}94\ \ g/mol}{[\frac{4\ x\ 0{,}1363nm \times \frac{10^{-7}cm}{1\ nm}}{\sqrt{3}}]^3 \times \frac{6{,}022 \times 10^{23} átomos}{1\ mol}}$$

$$p_{Mo} = 10{,}24\ \mathrm{g/cm^3}$$

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

QUI100E-3 Taller N°1, 1° semestre 2020

07-04-2020

Romina Bassi Castillo

robassi@uc.cl