

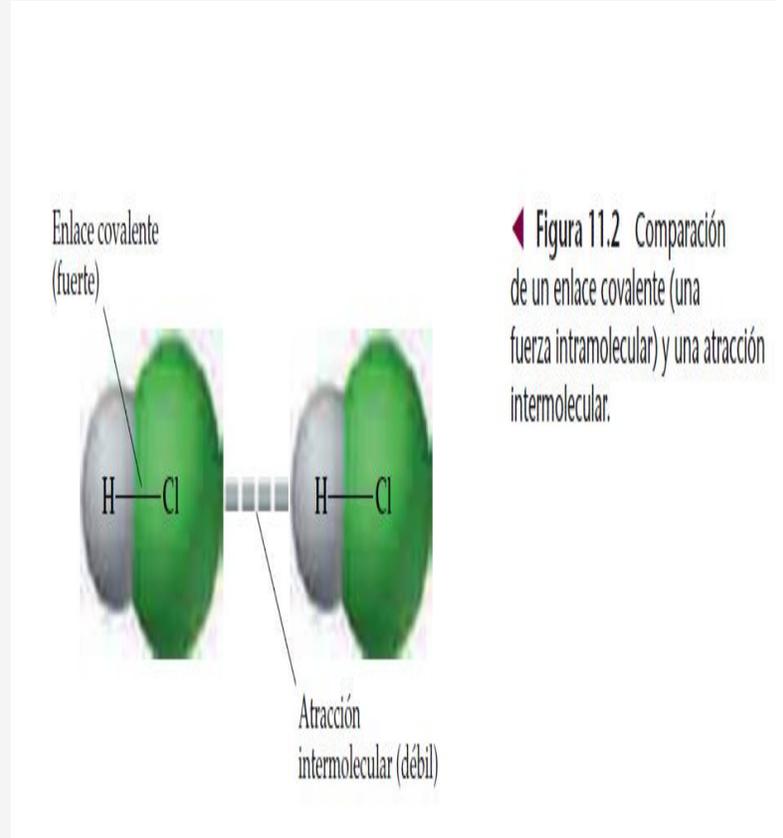
Subunidad 3.1. Descripción de los líquidos y sólidos según la teoría cinética molecular

Líquidos:

- En los líquidos, las moléculas están juntas, hay muy poco espacio vacío; por ello son difíciles de comprimir.
- En los líquidos, las fuerzas de atracción intermoleculares son lo bastante fuertes como para mantener juntas las moléculas., por eso las moléculas no escapan a las fuerzas de atracción y por ello los líquidos tienen un volumen definido.
- Las moléculas se mueven con libertad y los líquidos puede fluir, derramarse y adoptar la forma del recipiente que lo contiene.

Fuerzas intermoleculares

Las intensidades de las fuerzas intermoleculares de diferentes sustancias son mucho más débiles que los enlaces iónicos o covalentes (Figura 11.2). Se requiere menos energía para evaporar un líquido o fundir un sólido que para romper enlaces covalentes en las moléculas.



Tipos de fuerzas intermoleculares

Existen 4 tipos de fuerzas de atracción entre moléculas neutras:

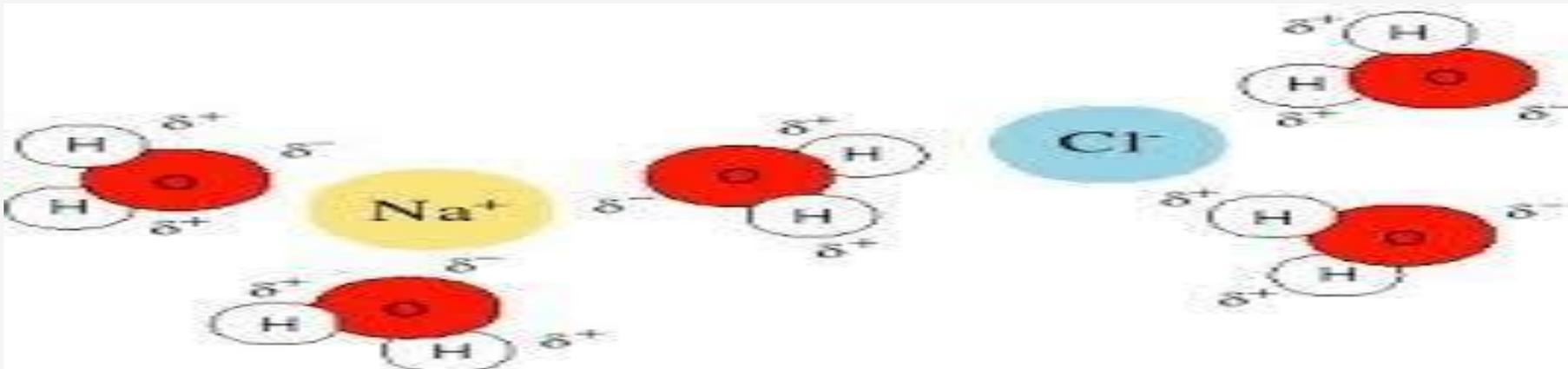
- Fuerza ion-dipolo,
- Fuerzas dipolo-dipolo,
- Fuerzas de dispersión de London
- Fuerzas de puente de hidrógeno y
- Fuerza de dipolo inducido

Las 5 tipos de fuerzas son de naturaleza electrostática, implican atracciones entre especies positivas y negativas.

Tipos de fuerzas intermoleculares

Fuerzas ion-dipolo. - entre un ion y la carga parcial de un extremo de una molécula polar. Las moléculas polares son dipolos; tienen un extremo positivo y uno negativo, por ejemplo, que el HCl es una molécula polar a causa de la diferencia de electronegatividad de los átomos de H y de Cl.

Los iones positivos son atraídos hacia el extremo negativo de un dipolo, mientras que los iones negativos son atraídos hacia el extremo positivo, como se muestra en la figura 11.3 A. La magnitud de la atracción aumenta al incrementarse la carga del ion o la magnitud del momento dipolar. Las fuerzas ion-dipolo tienen especial importancia en las disoluciones de sustancias iónicas en líquidos polares, Así: disolución de NaCl en agua.

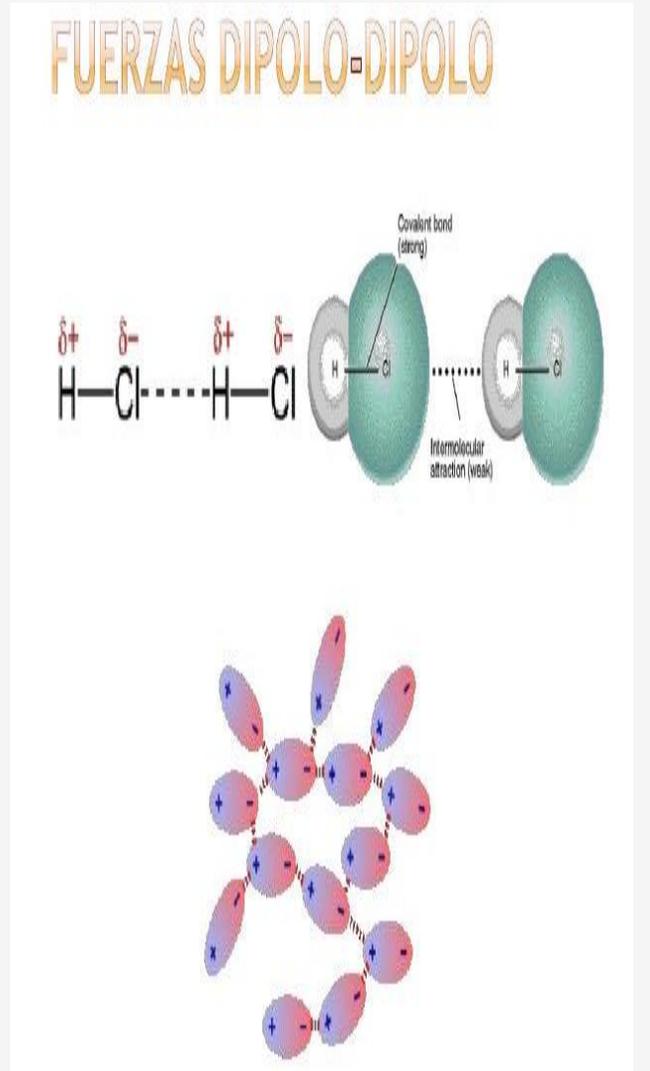


Tipos de fuerzas intermoleculares

Fuerzas dipolo-dipolo

Las moléculas polares neutras se atraen cuando el extremo positivo de una de ellas está cerca del extremo negativo de otra, H-Cl.....H-Cl, como en la figura 11.4(a) <<. Estas **fuerzas dipolo- dipolo** sólo son eficaces cuando las moléculas polares están muy juntas, y generalmente son más débiles que las fuerzas ion-dipolo.

En los líquidos, las moléculas polares están en libertad de moverse unas respecto a otras. Como se aprecia en la figura 11.4(b), a veces están en orientaciones que son atractivas y a veces en orientaciones repulsivas. , *la intensidad de las atracciones intermoleculares aumenta al incrementarse la polaridad y os pesos moleculares*. Los puntos de ebullición están en función de las diferencias de electronegatividades HF>HCl >HBr.



Tipos de fuerzas intermoleculares

Fuerzas de dispersión de London. - se da en todo tipo de moléculas, pero solo las moléculas no polares presentan este tipo de fuerzas intermoleculares, estas fuerzas son debidas a dipolos no permanentes o temporales, (H_2 , F_2 , Cl_2 , He), es decir en un instante dado la nube electrónica puede estar concentrada en una de los del átomo una fracción de segundos, más tarde puede estar en el otro extremo. La nube electrónica de la primera molécula está en una posición y los electrones de la segunda molécula son atraídos por el núcleo. Esta interacción atractiva se denomina **fuerza de dispersión de London**, estas fuerzas son significativas cuando las moléculas están muy cercanas unas a otras y en la misma dirección.

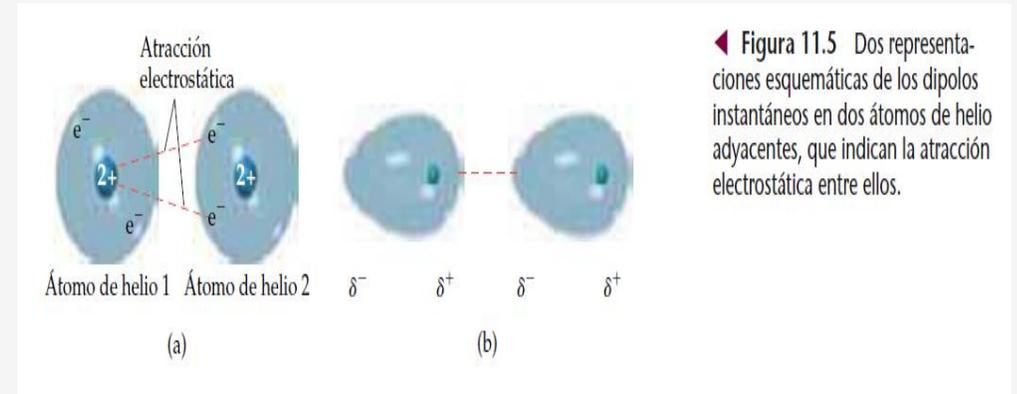


TABLA 11.3 Puntos de ebullición de los halógenos y los gases nobles

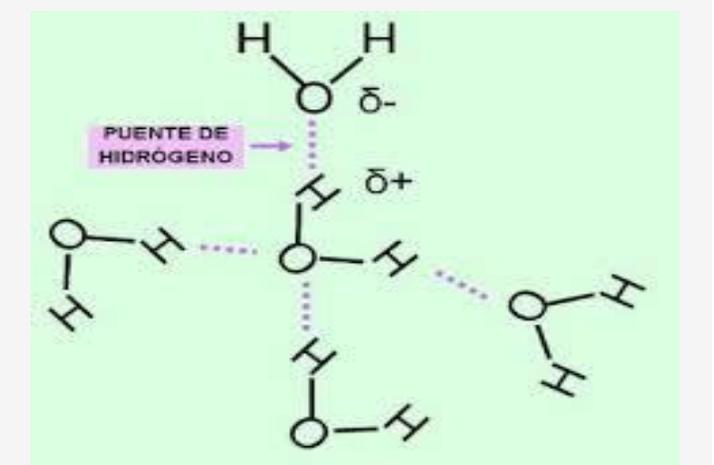
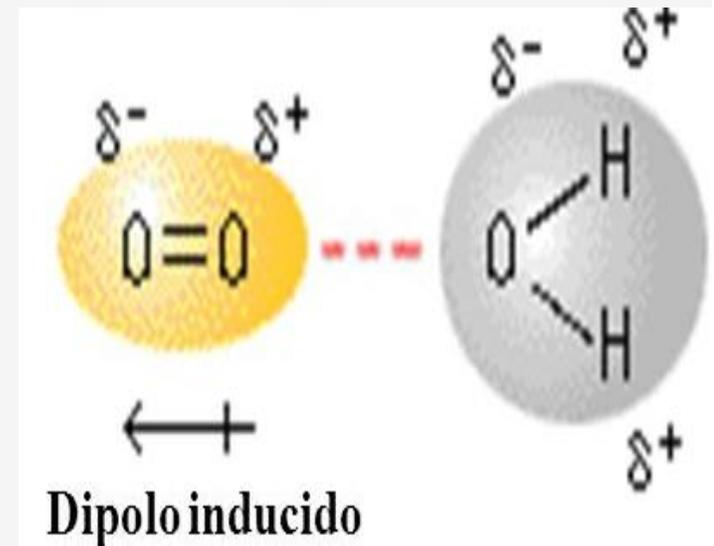
Halógeno	Masa molecular (uma)	Punto de ebullición (K)	Gas noble	Masa molecular (uma)	Punto de ebullición (K)
F_2	38.0	85.1	He	4.0	4.6
Cl_2	71.0	238.6	Ne	20.2	27.3
Br_2	159.8	332.0	Ar	39.9	87.5
I_2	253.8	457.6	Kr	83.8	120.9
			Xe	131.3	166.1

Tipos de fuerzas intermoleculares

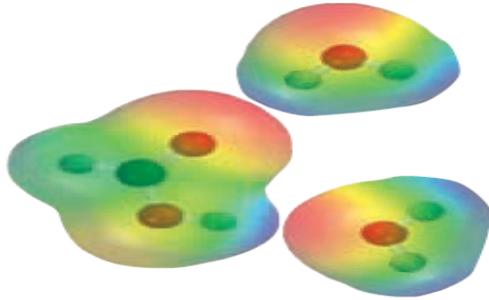
Fuerzas dipolo inducido.- Es un **dipolo temporal** que se forma en una **molécula no polar**, cuando es perturbado por un **campo eléctrico externo**, normalmente generado por: un **ion**, una **molécula polar**, u otro dipolo (instantáneo o permanente).

Esta perturbación **desplaza momentáneamente la nube electrónica**, generando una **separación de cargas parciales (δ^+ y δ^-)** dentro de la molécula no polar \rightarrow aparece un **dipolo inducido**. Ocurre porque **los electrones son móviles**. En presencia de una carga o dipolo cercano. Ejemplo el O₂ (apolar) y el H₂O polar (estas fuerzas permite la disolución del O₂ en H₂O)

Puentes de hidrógeno. - existen atracciones intermoleculares más fuertes en el NH₃, H₂O y HF, en comparación con otras moléculas de los mismos grupos. De hecho, este tipo particularmente fuerte de atracción intermolecular se denomina puente (o enlace) se da entre el hidrógeno y un átomo electronegativo de O, N o F, estos átomos poseen al menos un par de electrones libres capaces de interactuar con el átomo de hidrogeno en el enlace de hidrogeno. Los puentes de hidrogeno tienen un fuerte efecto en la estructura y propiedades de muchos compuestos.



ejemplos



El HCOOH forma puentes de hidrógeno con dos moléculas de H₂O.

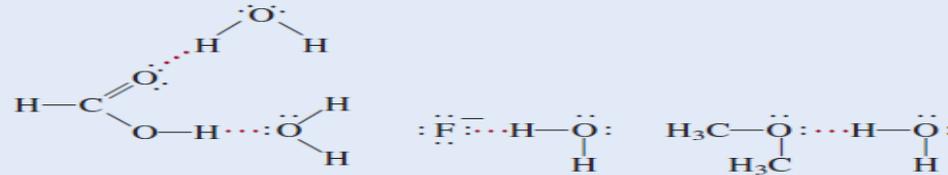
Problema similar: 11.12.

EJEMPLO 11.2

¿Cuáles de las siguientes especies pueden formar puentes de hidrógeno con el agua? CH₃OCH₃, CH₄, F⁻, HCOOH, Na⁺.

Estrategia Una especie puede formar puentes de hidrógeno con el agua si contiene uno de tres elementos electronegativos (F, O o N) o tiene un átomo de H enlazado a uno de esos tres elementos.

Solución No hay elementos electronegativos (F, O o N) en CH₄ o en Na⁺; por tanto, sólo las especies CH₃OCH₃, F⁻ y HCOOH pueden formar puentes de hidrógeno con el agua.



Verificación Observe que el HCOOH (ácido fórmico) puede formar puentes de hidrógeno con el agua de dos formas diferentes.

Ejercicio de práctica ¿Cuáles de las siguientes especies pueden formar puentes de hidrógeno entre sí? a) H₂S, b) C₆H₆, c) CH₃OH.

Ejemplo 2: Qué fuerzas intermoleculares habrá en el H₂, CCl₄, OCS y NH₃

Solución:

El H₂ y el CCl₄ son no polares por lo que solo presentarán fuerzas de dispersión entre moléculas vecinas. El OCS y el NH₃ son moléculas polares. Se presentan fuerzas dipolares y puentes de hidrógeno.

Ejemplo:

EJERCICIO TIPO 11.2

¿En cuáles de las sustancias siguientes es probable que los puentes de hidrógeno desempeñen un papel importante para determinar las propiedades físicas: metano (CH_4), hidracina (H_2NNH_2), fluoruro de metilo (CH_3F) o sulfuro de hidrógeno (H_2S)?

Solución Todos estos compuestos contienen hidrógeno, pero suele haber puentes de hidrógeno cuando el hidrógeno está unido directamente a N, O o F. También debe haber un par no compartido de electrones en un átomo electronegativo (por lo regular N, O o F) de una molécula cercana. Estos criterios eliminan a CH_4 y H_2S , que no contienen H unido a N, O o F. También eliminan a CH_3F cuya estructura de Lewis muestra un átomo central de C rodeado por tres átomos de H y uno de F. (El carbono siempre forma cuatro enlaces, mientras que el hidrógeno y el flúor forman uno cada uno.) Puesto que la molécula contiene un enlace C—F y no un enlace H—F, no forma puentes de hidrógeno. En H_2NNH_2 , empero, encontramos enlaces N—H. Por tanto, se forman puentes de hidrógeno entre las moléculas.

EJERCICIO DE APLICACIÓN

¿En cuáles de las sustancias siguientes puede haber puentes de hidrógeno apreciables: cloruro de metileno (CH_2Cl_2), fosfina (PH_3), peróxido de hidrógeno (HOOH) o acetona (CH_3COCH_3)?

Respuesta: HOOH

Ejemplo 2:

EJEMPLO 11.1

¿Qué tipos de fuerzas intermoleculares existen entre los siguientes pares? a) HBr y H₂S, b) Cl₂ y CBr₄, c) I₂ y NO₃⁻ y d) NH₃ y C₆H₆.

Estrategia Clasifique las especies en tres categorías: iónica, polar (que posee un momento dipolar) y no polar. Recuerde que existen fuerzas de dispersión entre *todas* las especies.

Solución a) Tanto el HBr como el H₂S son moléculas polares



Por tanto, las fuerzas intermoleculares presentes son fuerzas dipolo-dipolo, así como fuerzas de dispersión.

b) Tanto el Cl₂ como el CBr₄ son moléculas no polares, de manera que entre ellas sólo existen fuerzas de dispersión.



c) El I₂ es una molécula diatómica homonuclear y por tanto es no polar, así que las fuerzas entre ella y el ion NO₃⁻ son fuerzas del tipo ion-dipolo inducido y fuerzas de dispersión.

d) El NH₃ es polar y el C₆H₆ es no polar. Entre estas especies se establecen fuerzas del tipo dipolo-dipolo inducido y fuerzas de dispersión.

Ejercicio de práctica Señale el (los) tipo(s) de fuerzas intermoleculares que existen entre las moléculas (o unidades básicas) en cada una de las siguientes especies: a) LiF, b) CH₄ y c) SO₂.

Subunidad 3.1: sólidos

- En los sólidos, las fuerzas de atracción intermoleculares son más intensas no sólo para mantener muy juntas las moléculas, sino para fijarlas prácticamente en su sitio.
- En un sólido hay aún menos espacio vacío que en un líquido, las moléculas ocupan una posición rígida y prácticamente no tienen libertad para moverse. Por ello, los sólidos son casi incompresibles, y su forma y volumen están bien definidos.
- Dado que las partículas de un sólido no están en libertad de tener movimientos de largo alcance, los sólidos son rígidos.

ESTRUCTURA DE LOS SÓLIDOS:

Respecto a los arreglos moleculares de los sólidos hay dos tipos de estructuras sólidas: ***sólidos amorfos y***

sólidos cristalinos:

- sólido iónico,
- sólido molecular,
- sólido atómico también conocido como red covalente y
- sólido metálico

Subunidad 3.1: sólidos

Sólidos amorfos. – es un sólido cuyas partículas no tienen una estructura ordenada, *carecen de una distribución tridimensional regular de átomos* y de un ordenamiento bien definido y de un orden molecular repetido. Muchos sólidos amorfos son mezclas de moléculas que no se empaquetan bien entre sí, otros están compuestos de moléculas grandes y complicadas. Entre los sólidos amorfos están el caucho y el vidrio. Por ello los sólidos amorfos no funden a temperaturas específicas.

Sólidos cristalinos. – los sólidos cristalinos es un sólido cuyos átomos, moléculas o iones están ordenados en arreglos bien definidos, disponen de una red de unidades estructurales, que pueden ser de átomos, moléculas o iones. Las propiedades físicas de un sólido dependen de la naturaleza de sus unidades estructurales y de las fuerzas existentes entre ellas. Las fuerzas que mantienen la estabilidad de un cristal pueden ser iónicas, covalentes, de van der Waals, de puentes de hidrógeno o una combinación de todas ellas.

Subunidad 3.1: tipos de sólidos cristalinos

Tenemos cuatro tipos comunes de sólidos, clasificados según la estructura de las partículas.

- Compuestos iónicos (como el NaCl, KBr) constituidos por cationes y aniones
- Especies moleculares (como el I₂) constituidos por moléculas discretas
- Materiales formados por redes covalentes (como el SiO₂, C) en los que los átomos no metálicos están unidos mediante una red de enlaces covalentes, estas sustancias no están constituidas por moléculas discretas.
- Sustancias metálicas (como el Na, o el Fe) formados por cationes metálicos, rodeados de electrones móviles.

Sólidos iónicos. – consisten en iones que se mantienen unidos por enlaces iónicos. La fuerza de un enlace iónico depende en gran medida de las cargas de los iones. Así, el NaCl, en el que los iones tienen cargas de +1 y -1, tiene un punto de fusión de 801°C, mientras que el MgO, en el que las cargas son +2 y -2, funde a 2852°C. Sus características son:

- No son volátiles y tienen altos puntos de fusión (entre 600 a 2000°C).
- No son conductores eléctricos. Sin embargo, son buenos conductores cuando están disueltos en agua o fundidos.
- Muchos compuestos iónicos son solubles en agua, un disolvente polar, e insolubles en solventes no polares como por ejemplo el benceno (C₆H₆) o el tetracloruro de carbono (CCl₄).

Subunidad 3.1: tipos de sólidos cristalinos

Sólidos moleculares.- consisten en átomos o moléculas unidos por fuerzas intermoleculares (fuerzas dipolo-dipolo, fuerzas de dispersión de London y puentes de hidrógeno. Casi todas las sustancias que son gases o líquidos a temperatura ambiente forman sólidos moleculares a temperaturas bajas. Ejemplos podemos citar a Ar, H₂O y CO₂. Las sustancias moleculares suelen ser:

1. No conductoras de la electricidad cuando están en estado puro (líquido o sólido) puesto que las mismas no están cargadas.
2. Suelen tener puntos de fusión relativamente bajos (por lo regular de menos de 200°C).
3. Insolubles en agua, pero solubles en disolventes no polares, como el CCl₄ o benceno
4. Son volátiles con presiones de vapor apreciables a temperatura ambiente
5. Los puntos de fusión y ebullición son bajos, muchos son gases a temperaturas de 25°C, y 1 atm (ej. No, O₂, CO₂), esto se debe a que las fuerzas intermoleculares existentes entre las moléculas son débiles.

Subunidad 3.1: tipos de sólidos cristalinos

Metales.- La red metálica es discreta como una red de iones positivos (átomos metálicos sin sus electrones de valencia), que están anclados en sus posiciones como boyas en el mar de electrones móviles. Los electrones están deslocalizados no están sujetos a ningún ion positivo, si no que pueden moverse en la red. Sus propiedades son:

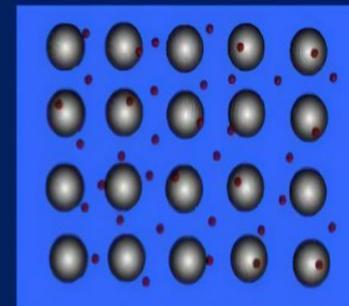
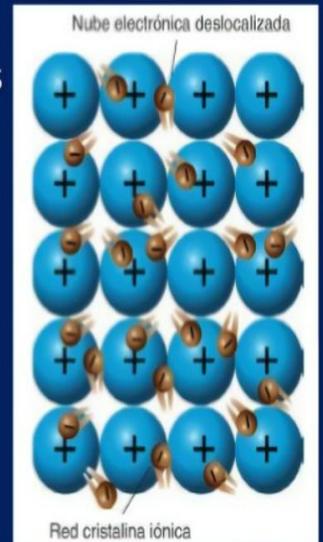
1. Son no volátiles, a excepción del mercurio
2. So insolubles en agua y en los disolventes comunes
3. maleabilidad, ductilidad y conductividad térmica y eléctricas muy alta

Se debe a que presentan una estructura donde los electrones tienen una alta movilidad.

Enlace metálico

Modelo del mar de electrones (o del gas electrónico):

- Cada átomo de metal cede electrones de valencia, convirtiéndose en un ion positivo. Los iones positivos se ordenan de forma compacta en una **red cristalina tridimensional**.
- Los electrones cedidos se mueven libremente en la red, formando un **mar o gas electrónico** que rodea los iones positivos y los mantiene unidos.



Subunidad 3.1: SÓLIDOS Y ESTRUCTURA CRISTALINA

Casi todos los sólidos se encuentran como **crisales** debido a la agrupación ordenada de los iones, átomos o moléculas que los componen, su estructura tiene una forma geométrica diferente porque las partículas que los forman están ordenadas en una estructura tridimensional definida. Estas partículas pueden ser todo el mismo tipo, como ocurre con los átomos de un metal, o bien de tipos diferentes como, por ejemplo, cationes y aniones en los compuestos iónicos. La estructura cristalina se describe fácilmente mediante la llamada

La celda unidad. - es la unidad más pequeña que repetida una y otra vez en tres dimensiones, engendra la red del cristal. Cada sólido cristalino se representa con uno de los siete tipos de celdas unitarias que se muestran en la figura 11.15. La geometría de la celda unitaria cubica es particularmente simple porque todos los lados y ángulos son iguales. Cualesquiera de las celdas unitarias, al reproducirlas en el espacio tridimensional, forman una estructura reticular característica de un sólido cristalino.

Figura 11.14 a) Una celda unitaria y b) su extensión en tres dimensiones. Las esferas negras representan átomos o moléculas.

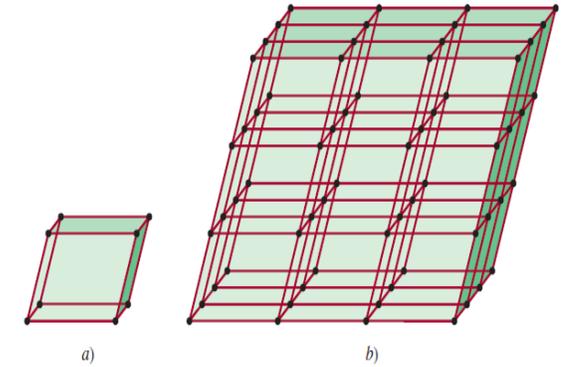
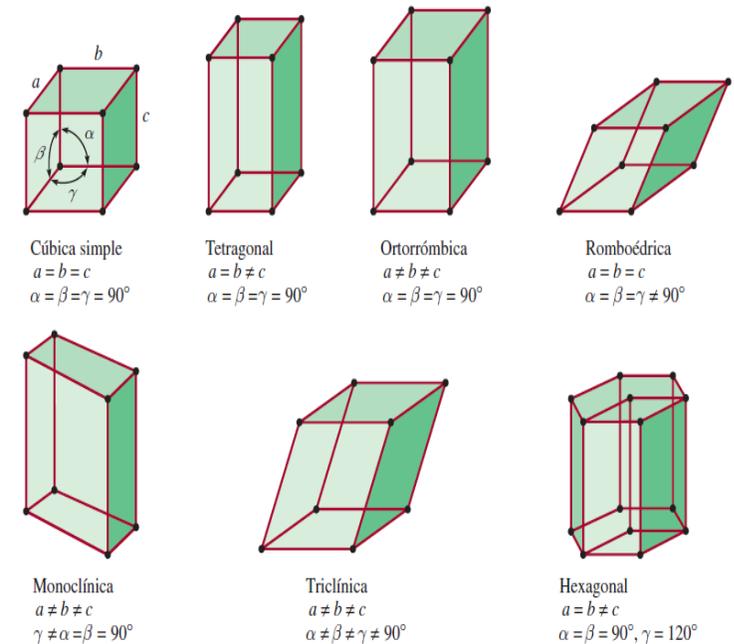


Figura 11.15 Los siete tipos de celdas unitarias. El ángulo α está definido por las aristas b y c , el ángulo β mediante las aristas a y c , y el ángulo γ mediante las aristas a y b .



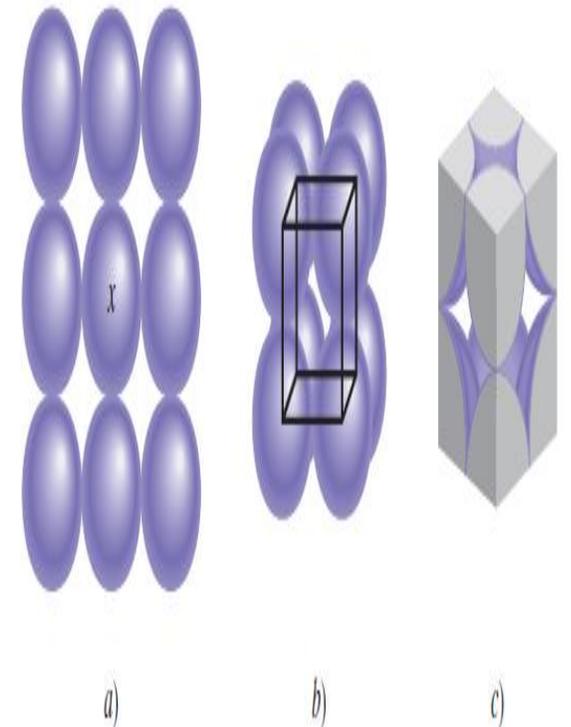
Subunidad 3.1: SÓLIDOS Y ESTRUCTURA CRISTALINA

Empaquetamiento de esferas

Los requisitos geométricos generales para que se forme un cristal se entienden si se analizan las distintas formas en que se pueden empaquetar varias esferas idénticas (átomos) para formar una estructura tridimensional ordenada. La manera en que las esferas se acomodan en capas determina el tipo de celda unitaria final.

En el caso más simple, una capa de esferas se puede distribuir como lo muestra la figura 11.16a). La estructura tridimensional se genera al colocar una capa encima y otra debajo de esta capa, de tal manera que las esferas de una capa cubren totalmente las esferas de la capa inferior. Este procedimiento se repite para generar muchas capas como las de un cristal. Se dice que cada esfera con este arreglo tiene un *número de coordinación* de 6 porque tiene seis vecinos inmediatos. El **número de coordinación** se define como el *número de átomos (o iones) que rodean a un átomo (o ion) en una red cristalina*.

Figura 11.16 Distribución de esferas idénticas en una celda cúbica simple. a) Vista superior de una capa de esferas. b) Definición de una celda cúbica simple. c) Debido a que cada esfera está compartida por ocho celdas unitarias y cada cubo tiene ocho vértices, existe el equivalente de una esfera completa al interior de una celda unitaria cúbica simple.



Subunidad 3.1: Tipos de celdas cristalinas:

Celda cúbica simple. - (scc, por sus siglas en inglés, simple cubic cell) consta de 8 átomos idénticos dispuesto en los vértices de un cubo. Dado que cada esfera en el vértice del cubo es compartida por 8 celdas unitarias y hay 8 vértices en el cubo. Es equivalente a tener una esfera completa dentro de la celda cúbica unitaria:

$$8(\text{vértices}) \times 1/8 (\text{cada celda adyacente}) = 1 \text{ átomo en toda la celda}$$

El la figura 11.17 se observa la distribución de la CCS, se encuentra pocas veces en la naturaleza, ya que es inestable porque contienen un espacio relativamente grande vacío. Su eficiencia de empaquetamiento es del 52,36% está ocupado por átomos un poco más de la mitad del volumen total, mientras que el resto del espacio (47,64%) son huecos entre los átomos que están en contacto entre sí.

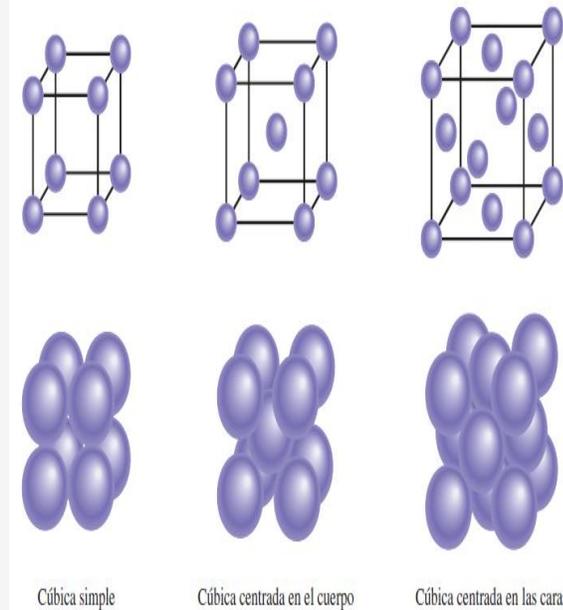
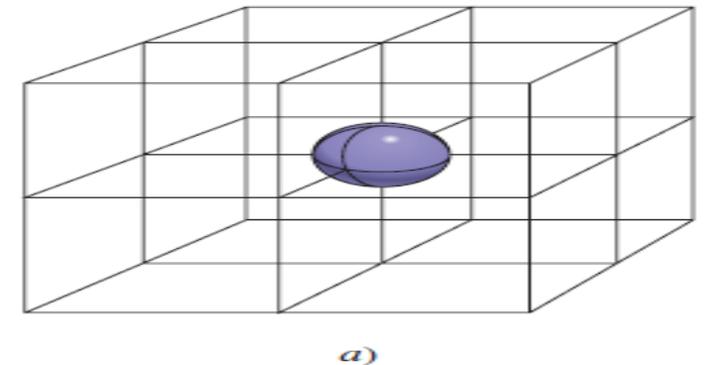


Figura 11.17 Tres tipos de celdas cúbicas. En realidad, las esferas representan átomos, moléculas o iones que están en contacto entre sí en estas celdas cúbicas.



Subunidad 3.1: Tipos de celdas cristalinas:

Geometría de la celda cúbica simple:

$$V \text{ de una esfera} = V = \frac{4\pi r^3}{3}$$

$$\text{Volumen celda unitaria } V = a^3$$

$$V \text{ de las esferas dentro de la celda} = V = \frac{4\pi r^3}{3} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{a}{2}\right)^3$$

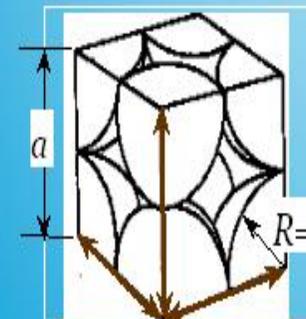
Eficiencia del empaquetamiento: $\frac{\text{Volumen de las esferas dentro de la celda}}{\text{volumen de la celda}}$
x 100

$$\text{Eficiencia del empaquetamiento} = \frac{\frac{4\pi}{3} \left(\frac{a}{2}\right)^3}{a^3} \times 100\% = \frac{4\pi a^3}{\frac{24}{a^3}} \times 100 = \frac{\pi}{6} \times 100 = 52\%$$

FACTOR DE EMPAQUETAMIENTO

$$FE = \frac{\text{Volumen de átomos en celda unitaria}^*}{\text{Volumen de celda unitaria}}$$

*Asumiendo esferas sólidas



Direcciones compactas

Contienen $8 \times 1/8 =$

1 átomo/celda unitaria

$$FE = \frac{\text{átomos Celda unitaria} \cdot \frac{4}{3} \pi (0.5a)^3}{a^3}$$

volumen átomos

volumen Celda unitaria

• FE para una estructura simple = 0.52

Subunidad 3.1: Tipos de celdas cristalinas:

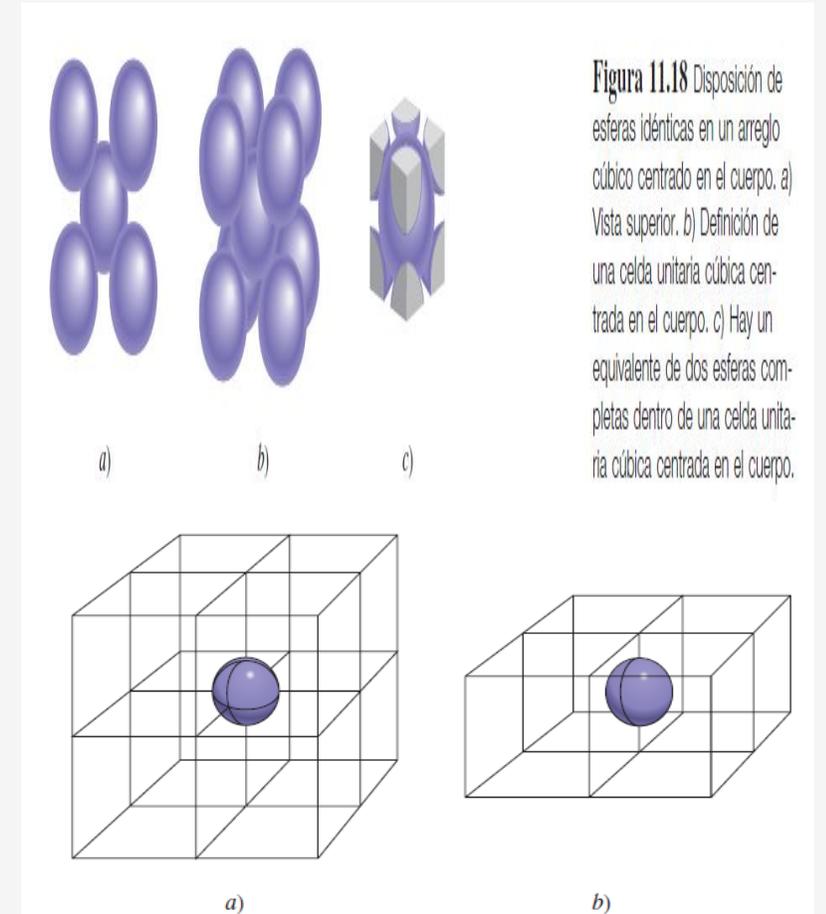
2. Cubica centrada en el cuerpo. –(bcc, por sus siglas en inglés, *body-centered cubic cell*) es un cubo con un átomo en cada vértice y otro en el centro del mismo. El número de átomos en esta celda es:

$$\text{No. Átomos} = 8(\text{vértices}) \times \frac{1}{8} (\text{cada vértice}) + 1 \text{ átomo en el centro de la celda} = 2 \text{ átomos}$$

Se explica como un cubo simple en que la segunda capa de esferas se acomoda en los huecos de la primera capa, y en la tercera lo hace en los huecos de la segunda capa (figura 11.18). Cada esfera de esta estructura tiene un número de coordinación de 8 (cada una está en contacto con cuatro esferas de la capa superior y cuatro de la capa inferior).

Geometría de la celda cúbica centrada en el cuerpo

En esta celdilla los átomos están más empaquetados que en la cúbica simple, ya que más de los 2/3 del volumen total (68,02%) están ocupados por átomos. Todos los metales del grupo 1 y el bario, del grupo 2, cristalizan con esta estructura. (Li, Na, K, Rb, Cs, Ba). el contacto de los átomos se realiza a lo largo de la diagonal del cubo, esto es que el átomo central, está en contacto con los átomos de los vértices, si formamos los triángulos rectángulos tenemos las siguientes relaciones:

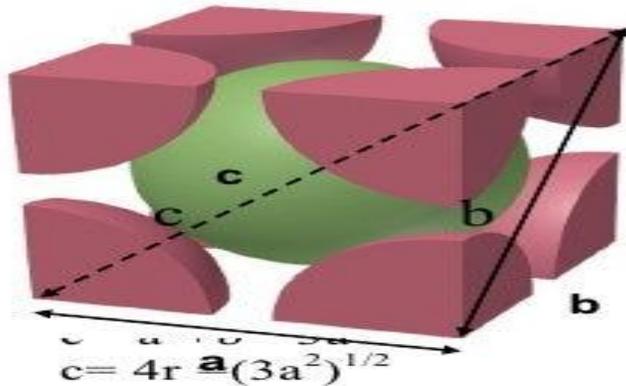


Subunidad 3.1: Tipos de celdas cristalinas:

2. Cubica centrada en el cuerpo. Eficiencia de empaquetamiento:

SÓLIDOS CRISTALINOS

● Celda cúbica centrada en el cuerpo (bcc)



$$c = 4r = \sqrt{3}a$$
$$b^2 = a^2 + a^2$$
$$c^2 = a^2 + b^2 = 3a^2$$
$$c = 4r = (\sqrt{3}a)$$

Nº de coordinación: 8

Átomos por celda: 8 aristas * 1/8 + 1 centro = 2

Relación entre la longitud de arista y el radio del átomo:

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

Eficacia del empaquetamiento: 68%

$$\frac{V_{\text{ocupado}}}{V_{\text{celda}}} = \frac{2 \left(\frac{4}{3}\right) \pi r^3}{a^3} = \frac{2 \left(\frac{4}{3}\right) \pi r^3}{\left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0.68$$

1er. triángulo: $b^2 = a^2 + a^2$
2do. Triángulo: $C^2 = a^2 + b^2$
 $C^2 = a^2 + (a^2 + a^2)$
 $C^2 = 3a^2$

$$C = \sqrt{3}a = 4r \text{ (de los 4 radios en contacto)}$$

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

Subunidad 3.1: Tipos de celdas cristalinas:

3. **Cúbica centrada en las caras.** – El número de átomos que se encuentran en una celda unidad centrada en las caras es de 8 átomos en los vértices, los mismos que son compartidos por 8 celdas adyacentes y cada átomo ubicado en las caras es compartido por dos celdas (1/2 cada celda) y como existen 6 caras tenemos:

$$\text{No. Átomos} = 8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4 \text{ átomos}$$

$$= 8(\text{vértices}) + 6(\text{caras}) \times 1/2(\text{cada cara}) = 4 \text{ átomos}$$

En esta estructura los átomos están empaquetados de la forma más compacta posible ya que las $3/4$ partes del volumen total están ocupados por átomos, tienen este tipo de celdillas unidad el calcio y el estroncio en el grupo 2, y muchos de los metales de transición: (Ca, Sr, grupo 2: Be, Mg, Ba, Ra)

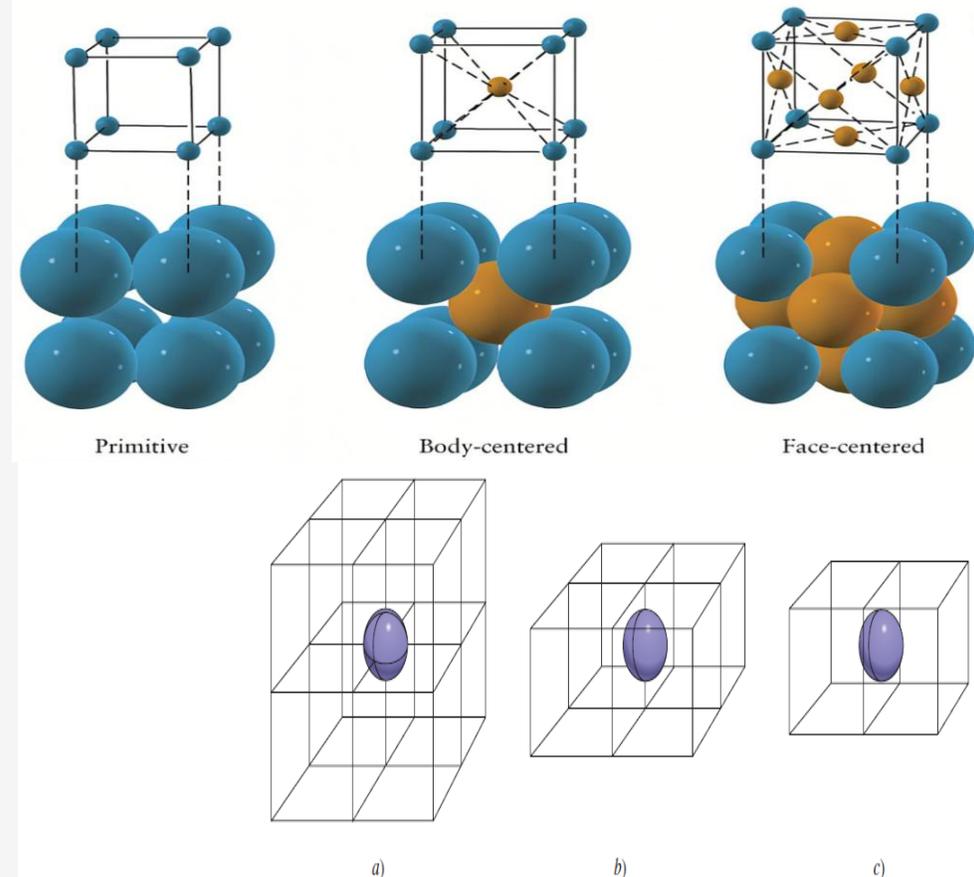
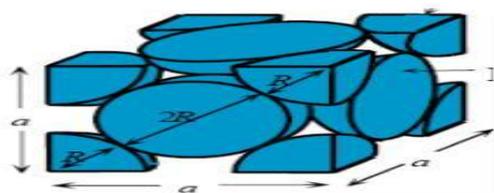


Figura 11.19 a) Un átomo del vértice en cualquier celda es compartido por ocho celdas unitarias. b) Un átomo situado en una arista es compartido por cuatro celdas unitarias. c) Un átomo centrado en las caras en una celda cúbica es compartido por dos celdas unitarias.

Subunidad 3.1: Tipos de celdas cristalinas:

Geometría de la celda cúbica centrada en las caras (CCC) los átomos colocados en los vértices no se tocan entre sí, pero si lo hacen los que se encuentran sobre la diagonal de las diferentes caras del cubo, como se muestra en el siguiente diagrama: En el contacto de los átomos se realiza a lo largo de la diagonal del cubo, el átomo central está en contacto con los átomos de los vértices. La longitud de la diagonal b es igual:

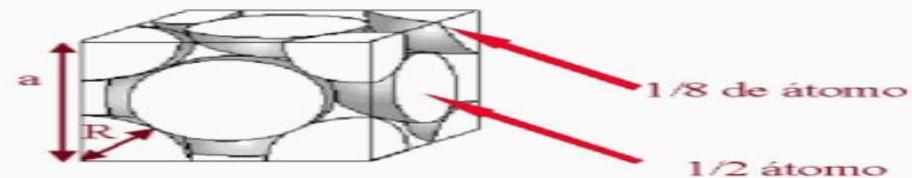
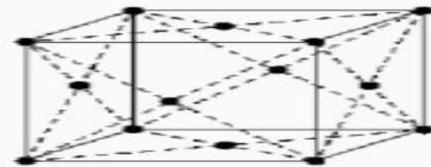
En esta estructura los átomos están empaquetados de la forma más compacta posible, es decir ocupan las $\frac{3}{4}$ partes del volumen total. Tienen este tipo de celdas unidad: Ca, Sr del grupo 2 y muchos metales de transición.



Cálculo do parâmetro da rede, a

Teorema de Pitágoras

$$(4R)^2 = a^2 + a^2 \Rightarrow a = \frac{4R}{\sqrt{2}}$$



Número de átomos na célula unitária
 $N_a = 6 \times 1/2 + 8 \times (1/8) = 4$

Cálculo do factor de empacotamento

$$FE = \frac{\left(\frac{\text{n}^\circ \text{ de átomos}}{\text{célula}} \right) \left(\frac{4}{3} \pi r^3 \right)}{a^3} = \frac{(4) \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right)}{\left(\frac{4R}{\sqrt{2}} \right)^3} = \frac{16 \times \pi \times R^3 \times (\sqrt{2})^3}{4^3 R^3 \times 3} = \frac{\sqrt{2}}{6} \pi = 0.74$$

Subunidad 3.1: ejemplos

Ejemplo: 1.- El oro cristaliza en una estructura cúbica compacta (cúbica centrada en las caras: CCC). *Calcule la densidad del oro.* El radio atómico del oro es de 144pm

Respuesta: Según la figura de CCC tenemos: la relación entre la longitud a y el radio r es: $a = \sqrt{8} r$

$$a = \sqrt{8} r$$

$$a = \sqrt{8} \times (144\text{pm}) = 407\text{pm}$$

el volumen de la celda unitaria es $V = a^3$

$$V = (407\text{pm})^3 = 6,74 \times 10^7 \text{pm}^3 \times \frac{(10^{-12}\text{m})^3}{1\text{pm}^3} \times$$

$$\frac{(100\text{cm})^3}{1\text{m}^3} = 6,74 \times 10^{-23} \text{cm}^3$$

Cada celda unidad tiene 8 vértices y 6 caras por tanto total de átomos es 4:

$$m = \frac{(4 \text{ átomos})}{1 \text{ celda unit}} \times \frac{(197\text{g})}{1 \text{ mol}} \times \frac{1 \text{ mol}}{6,02 \times 10^{23} \text{ átomos}} =$$

$$1,31 \times 10^{-21} \text{g/celda unitaria.}$$

$$d = m/v = \frac{1,31 \times 10^{-21} \text{g}}{6,74 \times 10^{-23} \text{cm}^3} = 19,4 \text{g/cm}^3$$

valor que concuerda con el valor experimental de 19,3g/cm³

Subunidad 3.1: ejemplos

Ejemplo: 2.- el zinc metálico tienen una estructura cúbica centrada en las caras con una densidad de $7,14\text{g/cm}^3$. Calcule el radio de un átomo de zinc en picómetros.

Datos:

Zn=CCC

D=7.14g/cc

¿R Zn =? Pm

calculo el Volumen ocupado por un mol de las CCC para el Zn, sea el V_{CCC} , el volumen molar. Por lo que se

$$\text{escribe: } V_{\text{CCC}} = \frac{\text{masa molar del Zn}}{\text{densidad Zn}} = \frac{\frac{63,39\text{gZn}}{\text{mol}} \text{Zn}}{\frac{7,14\text{g}}{\text{cm}^3}} = 9,16\text{cm}^3 \text{ mol Zn}$$

El volumen molar en el que se encuentran 6.022×10^{23} atm de Zn. A partir de la eficiencia del empaquetamiento en la estructura de la CCC e sabe que el 74% del volumen estará ocupado por átomos de Zn (el 26% está vacío) esto es:

$$V.\text{mol. Zn} = 0,74 \times \frac{9,16 \text{ cm}^3}{\text{mol}} \text{ Zn} = \frac{6,78 \text{ cm}^3}{\text{mol}} \text{ Zn.}$$

El Volumen de un átomo de Zn está dado por:

$$V \text{ at. Zn} = \frac{6,78\text{cm}^3}{1\text{mol}} \times \frac{1\text{mol Zn}}{6,02 \times 10^{23} \text{ atm.Zn}} = 1,13 \times 10^{-23}\text{cm}^3$$

El volumen de la esfera de radio r es: $V = 4/3\pi r^3$. Por lo que para 1 átomo esférico de Zn tenemos:

$$1,13 \times 10^{-23}\text{cm}^3 = 4/3\pi r^3: r^3 = 2,70 \times 10^{-24}\text{cm}^3$$

$$r = 1,39 \times 10^{-8}\text{cm} \times \frac{1\text{pm}}{10^{-12}\text{m}} \times \frac{1\text{m}}{100\text{cm}} = 139\text{pm} \text{ (valor experimental } 138\text{pm)}$$

Subunidad 3.1: ejemplos

Ejemplo 3: el sodio cristaliza en la estructura cúbica centrada en el cuerpo con una densidad de $0,971\text{g/cm}^3$. Calcular el tamaño de la celda unidad y el radio del átomo de sodio (Pat. Na= 23 No. Avogadro= $6,02 \times 10^{23}$).

Solución:

Na: CCB

$D=0,971\text{g/cm}^3$

a) ¿Tamaño celda unidad?

b) r: ¿Na=?

a) 1 mol de Na=23g y contiene $6,02 \times 10^{23}$ at

masa de 1 at Na= $\frac{23\text{g}}{6,02 \times 10^{23}\text{atm.}}$ Como hay dos átomos en la CCB $\frac{\frac{2 \times 23\text{g}}{\text{mol}}}{6,02 \times \frac{10^{23}\text{atm.}}{\text{mol}}}$,

masa de cada celda unidad de Na= $7,64 \times 10^{-23}\text{g}$

$$V=m/d = \frac{7,64 \times 10^{-23}\text{g}}{\frac{60,971\text{g}}{\text{cm}^3}} = 78,7 \text{ \AA}^3$$

b) Longitud de la arista del cubo es:

$$V=a^3 \quad a = \sqrt[3]{V} = a = \sqrt[3]{78,7 \text{ \AA}^3} = 4,29 \text{ \AA}^0$$

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}} \quad r = a \frac{\sqrt{3}}{4} = 4,29 \text{ \AA}^0 \frac{\sqrt{3}}{4} = 1,858 \text{ \AA}^0$$