

Resolución a la Tarea 5. Densidad y arreglos cristalinos

Química inorgánica I

Contesta las siguientes preguntas.

1. Volúmen en una celda.

1.1. Encuentra algebraicamente la ecuación que describe el volumen de una celda unitaria cúbica en términos del radio atómico de los átomos en ella para:

a) Cúbico simple

$$V_{c. simple} = (2r)^3 = 8 r^3$$

b) Cúbico compacto (fcc)

$$V_{fcc} = (\sqrt{8r^2})^3 = 22.627 r^3$$

c) Cúbico centrado en el cuerpo (bcc)

$$V_{bcc} = \left(\sqrt{\frac{16}{3}} r\right)^3 = 12.317 r^3$$

2. Cálculo de densidad

2.1. ¿Cuál es la densidad del Au, si sabemos que su acomodo cristalino es cúbico centrado en las caras y su radio metálico es de 144 pm?

$$\rho = 19.364 \text{ g/cm}^3$$

2.2. ¿Cuál es la densidad del hierro, si éste presenta un radio metálico de 126 pm y su acomodo cristalino es de cúbico centrado en el cuerpo?

$$\rho = 7.527 \text{ g/cm}^3$$

2.3. Determina que estructura cristalina presenta el Pd, si se sabe que el radio metálico es de 137.5 pm y se sabe que tiene una densidad de 12.02 g/cm³.

Presenta un acomodo cúbico compacto o cúbico centrado en las caras (Z=4 y V=12.317 r³)

2.4. Se desconoce la naturaleza de un sólido brillante que se sabe es puro y compuesto solamente de un elemento. Por difracción de rayos X se conoce el arreglo cristalino; ortorrómbico simple **compuesto de 8 átomos por celda** con las siguientes dimensiones; a= 451.97 pm; b= 766.33 pm y c= 452.6 pm. La densidad del sólido es de 5.91 g/cm³. ¿De qué elemento se trata?

Se trata de un elemento de masa 69.74 g/mol que corresponde al Galio (Ga)
(Z = 8; Volumen de la celda = 1.5676 x 10⁻²²)

2.5. Determina cuál es el radio del vanadio si su densidad es de 6 g/cm^3 y su arreglo cristalino es cúbico centrado en el cuerpo.

Radio del vanadio = 131.8 pm

($Z = 2$; $V = 2.82 \times 10^{-23}$)

2.5.1. Busca en la literatura el radio atómico, el radio covalente y el radio metálico del vanadio y compáralo con tu resultado obtenido. ¿A cuál se parece más? ¿Por qué? Argumenta tu respuesta brevemente.

$r_{\text{metálico}} = 134 \text{ pm}$

$r_{\text{covalente}} = 125 \text{ pm}$

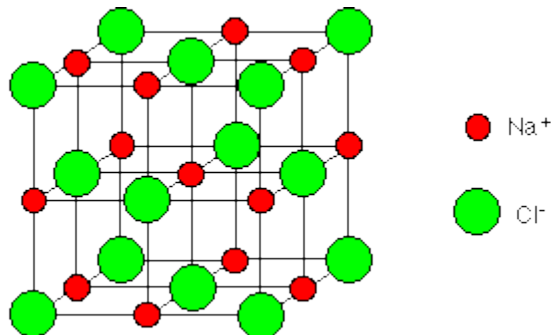
$r_{\text{iónico (V(III))}} = 0.79 \text{ pm}$

Es más parecido al radio metálico. Debido a la forma en la que se calculan los radios de manera experimental; para el caso del radio metálico se conoce a partir de las distancias entre los átomos del vanadio en un metal, a diferencia del radio covalente, en el que se promedia la distancia del vanadio hacia otros átomos con los que forma compuestos covalentes. Sin embargo, la diferencia es mínima si se compara con el radio iónico, en donde el átomo pierde electrones y disminuye su tamaño de manera notable.

3. BONUS

3.1. Determina cuál es la densidad del NaCl, si el acomodo cristalino del Na en la red es cúbico compacto, al igual que el Cl. El radio iónico de los iones son; $r_{\text{Na}} = 102 \text{ pm}$ y $r_{\text{Cl}} = 181 \text{ pm}$.

Considerando que el acomodo de los átomos es alternado entre cloruros y sodio de tal manera que se cumpla que los dos tengan un arreglo cristalino de cúbico centrado en las caras. Los átomos de cloro ocuparán los sitios vacantes que aparecen en la estructura cristalina.



Por lo tanto, en una arista del cubo se tocarán los átomos de las esquinas (cloruro en la figura) con un átomo de del contraíón en (sodio) y la celda contendrá 4 átomos de sodio y 4 átomos de cloruro.

$$m = \frac{Z_c(PM_c) + Z_a(PM_a)}{N_A} = \frac{4(23) + 4(35.5)}{N_A}$$

$$V = (a)^3 = (2 r_c + 2 r_a)^3$$

Por lo tanto la densidad de la celda es de **2.143 g/cm³**