

**Universidad Nacional Autónoma de México**

**Facultad de Química**



# Química del Estado Sólido

## 3. Estructuras tipo

**Víctor Fabián Ruiz Ruiz.**

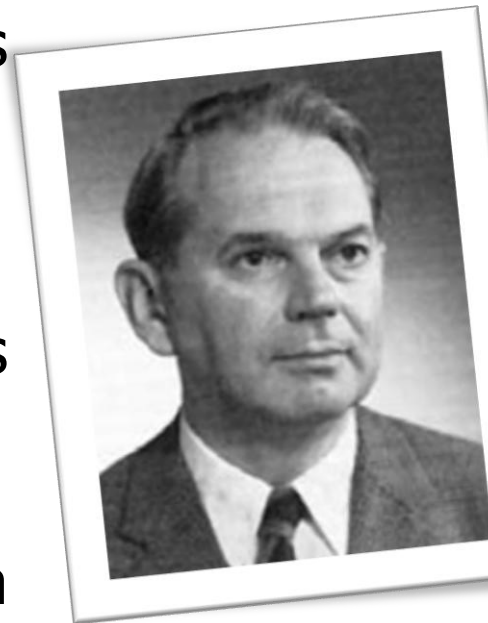
### 3. ESTRUCTURAS TIPO



#### Principios de Laves

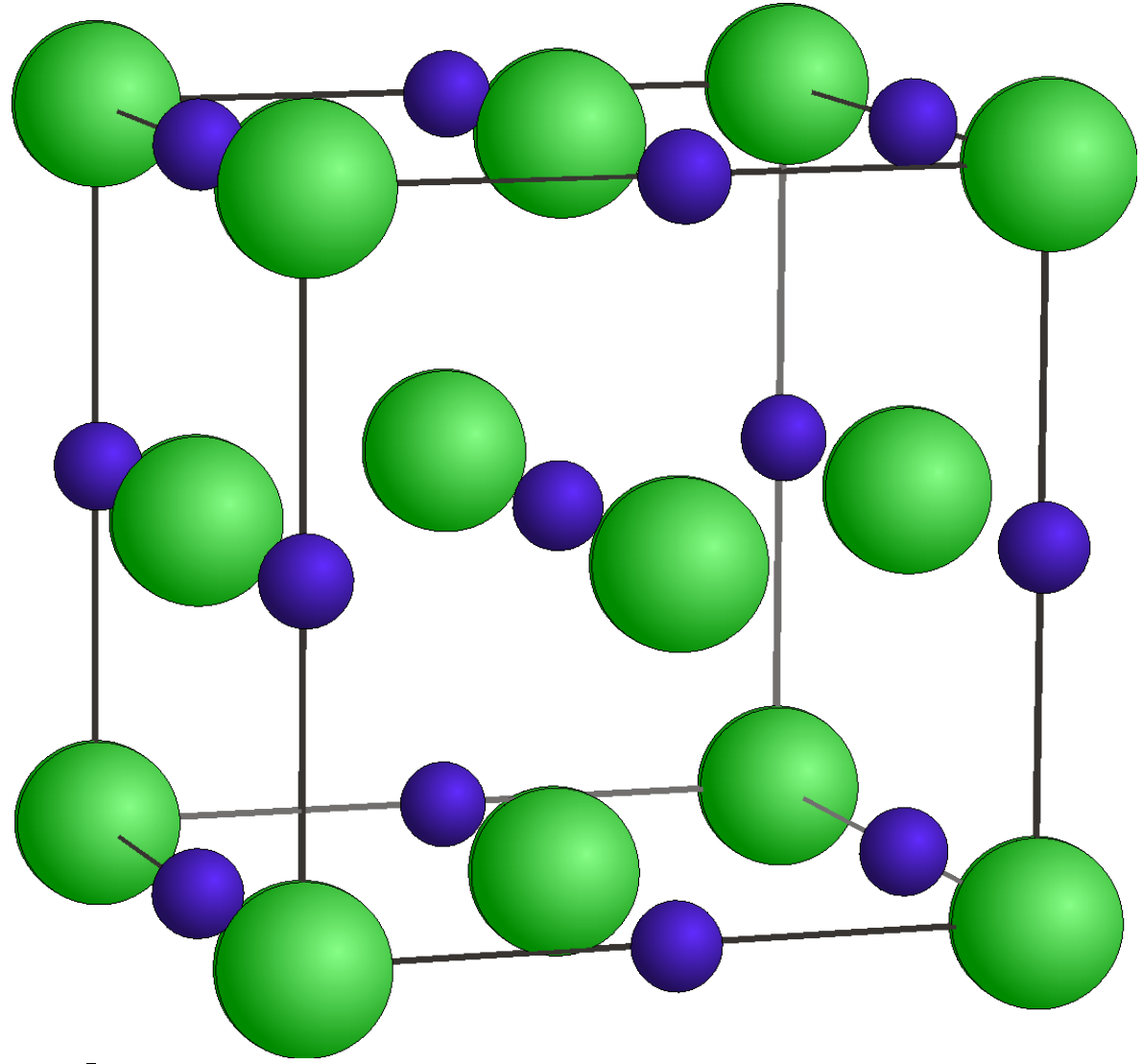
Para racionalizar las estructuras iónicas debemos tomar en cuenta:

1. El espacio se ocupa de la manera más **eficiente** posible.
2. La simetría que se adopta es la más **alta** posible.
3. El número de conexiones posibles entre los componentes será el más alto posible.



**Fritz Laves**  
(1906-1978)

# NaCl, sal de roca, halita



**Números de Coordinación:**

**Na<sup>+</sup> =**  
**Cl<sup>-</sup> =**

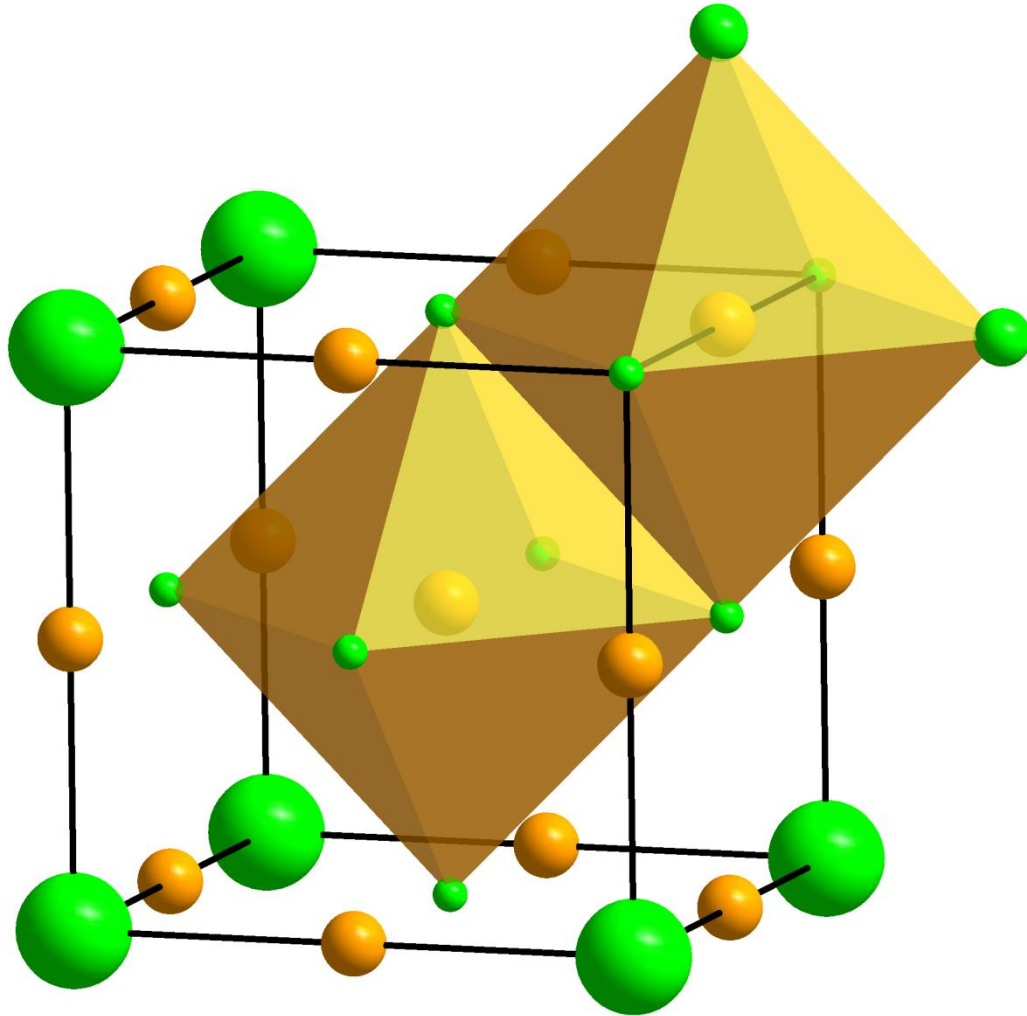
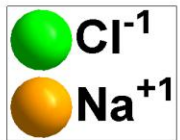
**Número de átomos:**

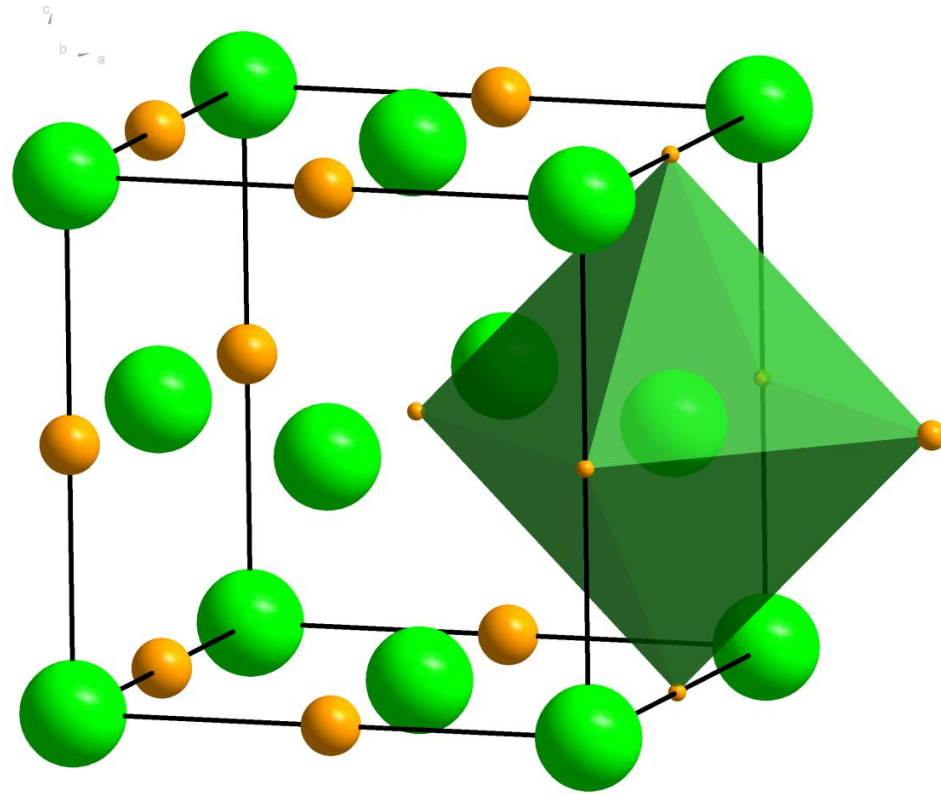
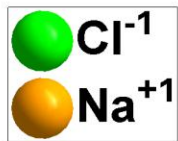
**Na<sup>+</sup> =**  
**Cl<sup>-</sup> =**

**Z =**

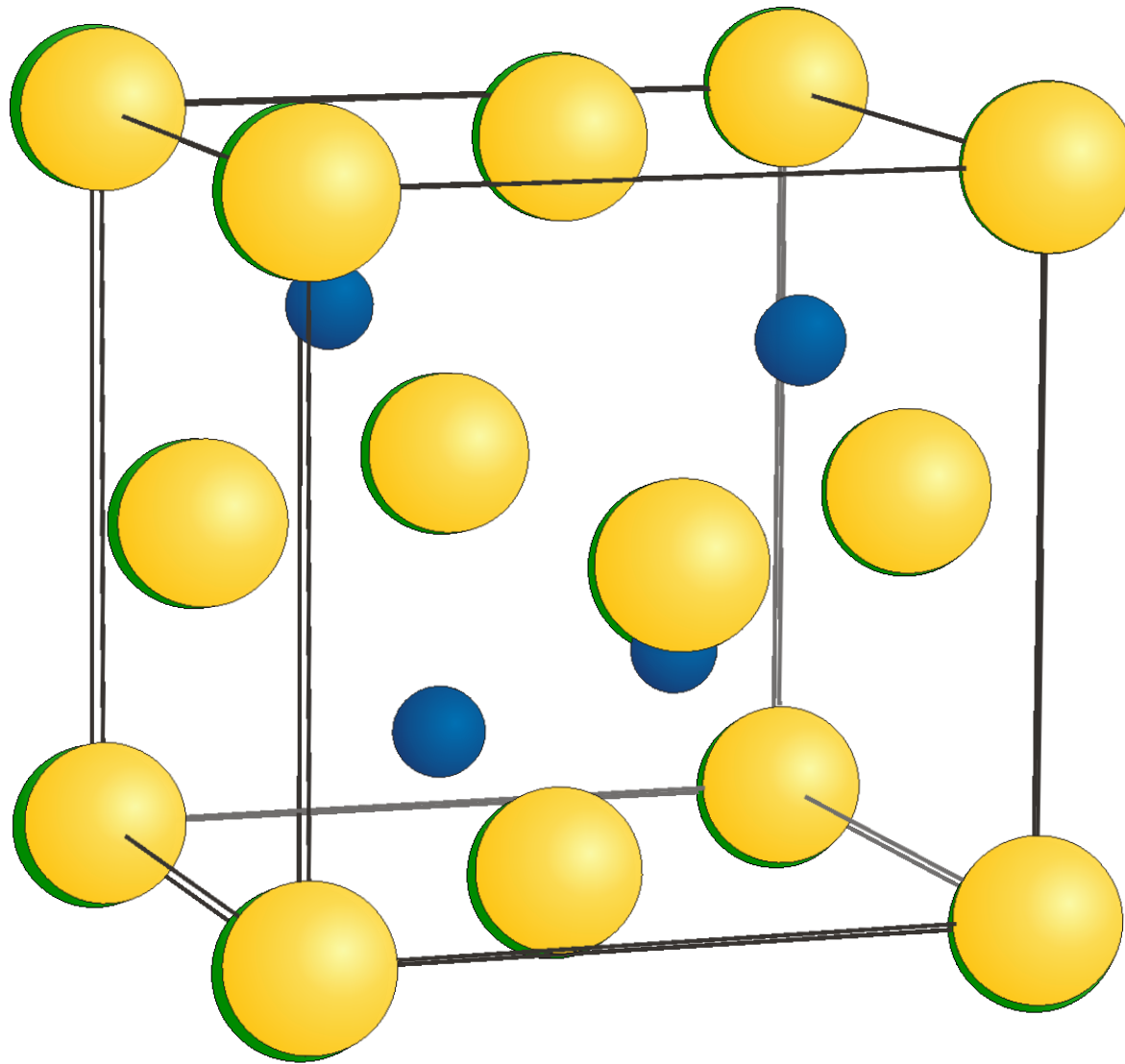
## Otros ejemplos:

**NaF, NaBr, NaI, NaH, haluros de Li, K, Rb; CsF, AgF, AgCl, MgO, CaO, SrO, MnO, CoO, NiO, MgS, CaS, BaS.**





# ZnS, blenda o esfarelita



**Números de Coordinación:**

**Zn<sup>2+</sup> =**

**S<sup>2-</sup> =**

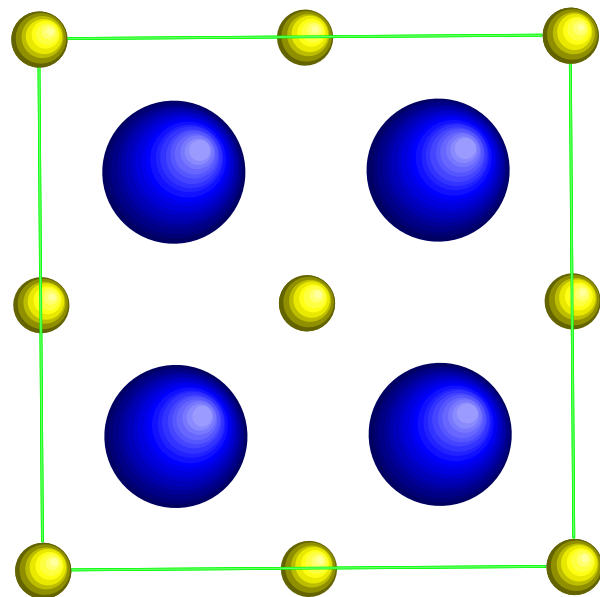
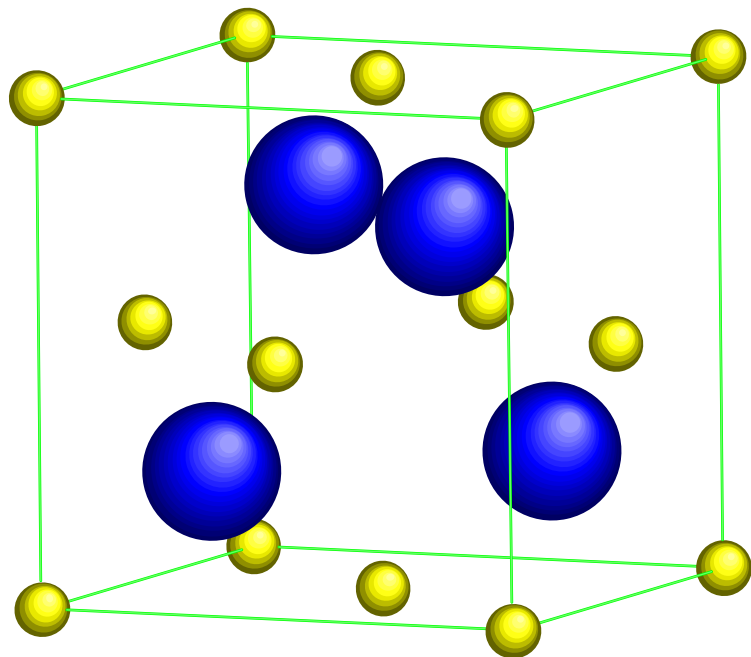
**Número de átomos:**

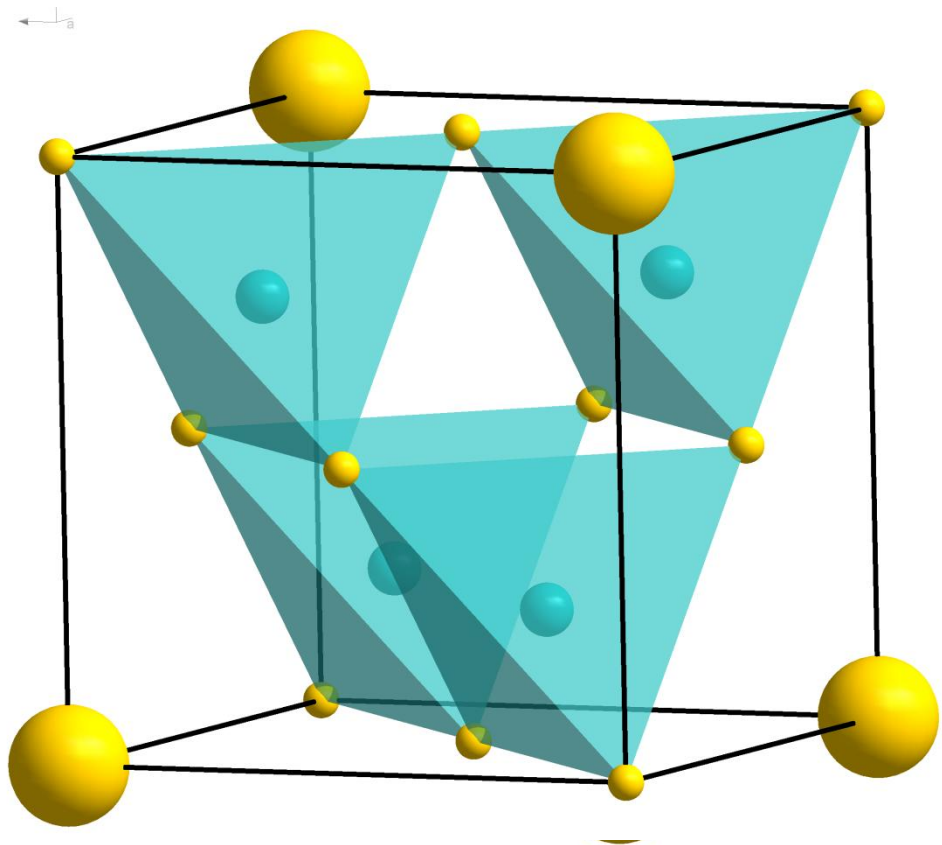
**Zn<sup>2+</sup> =**

**S<sup>2-</sup> =**

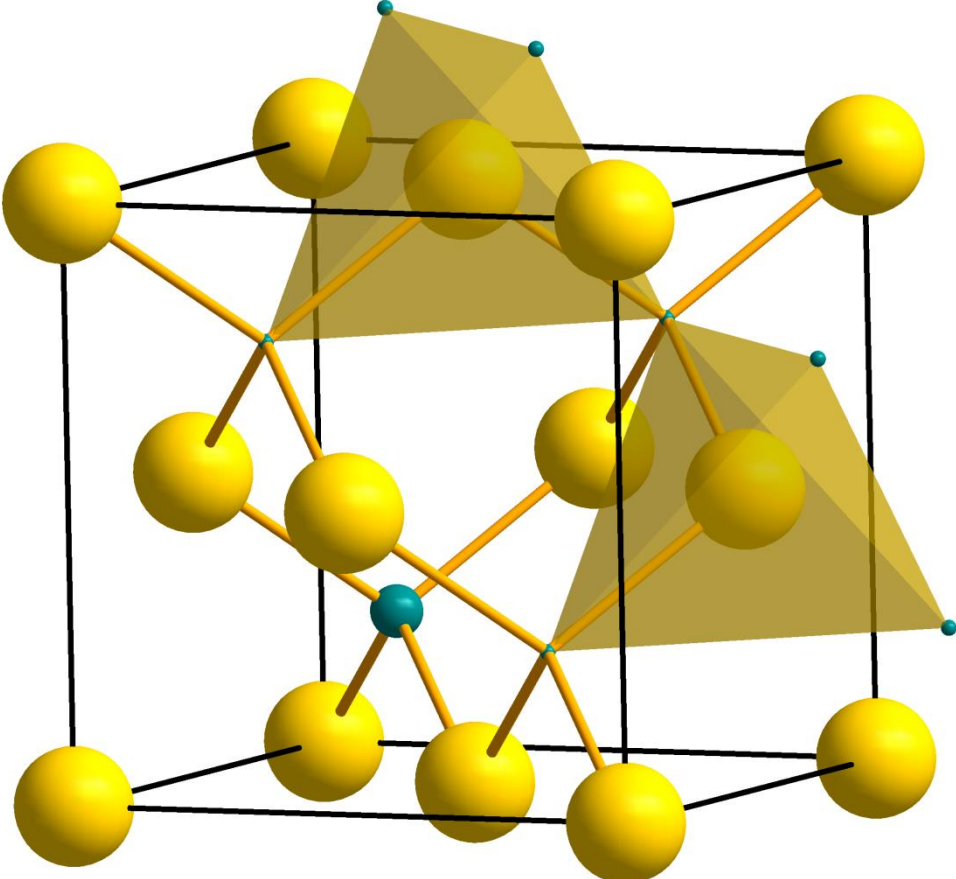
**Z =**

**Otros ejemplos:  
Diamante, Si,  $\beta$ -cristobalita (SiO<sub>2</sub>)**

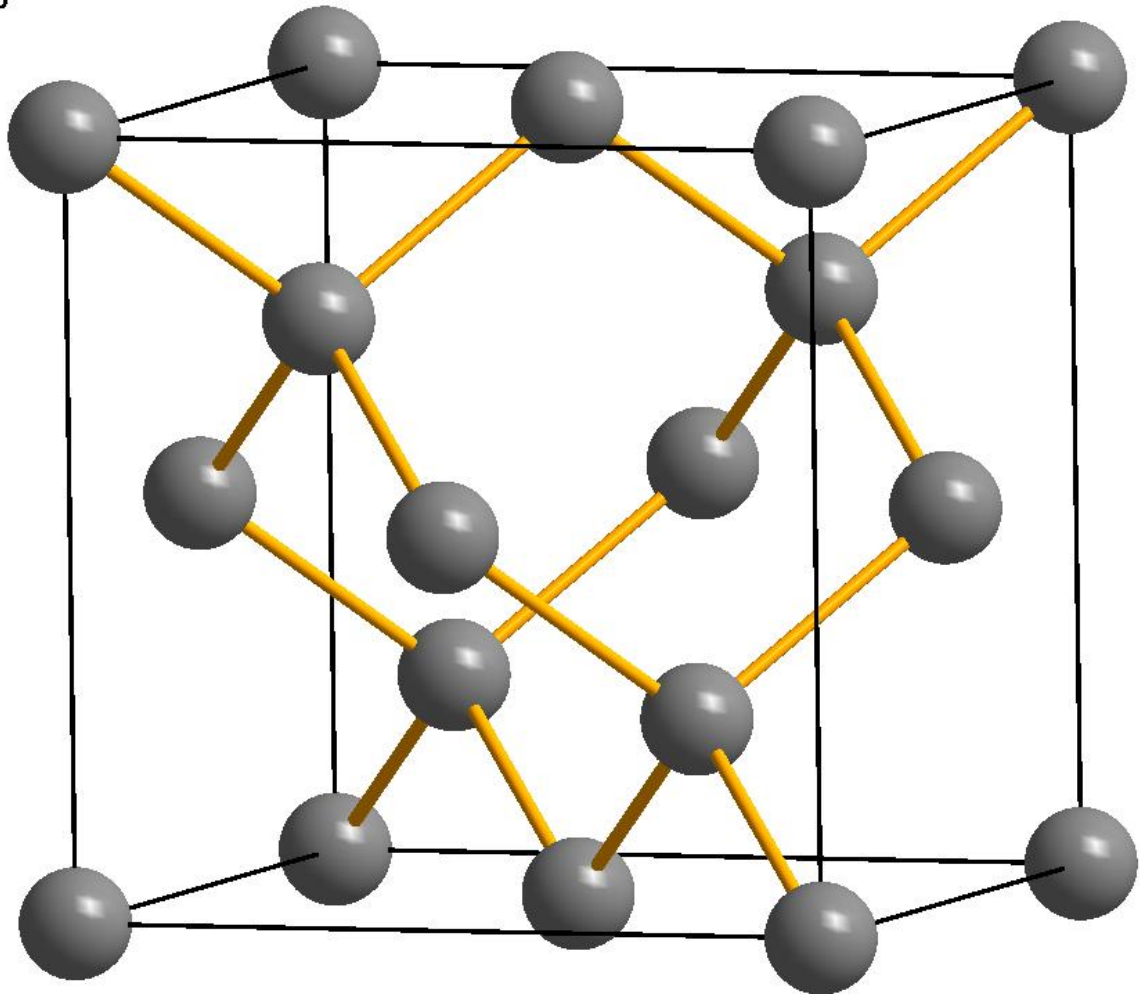




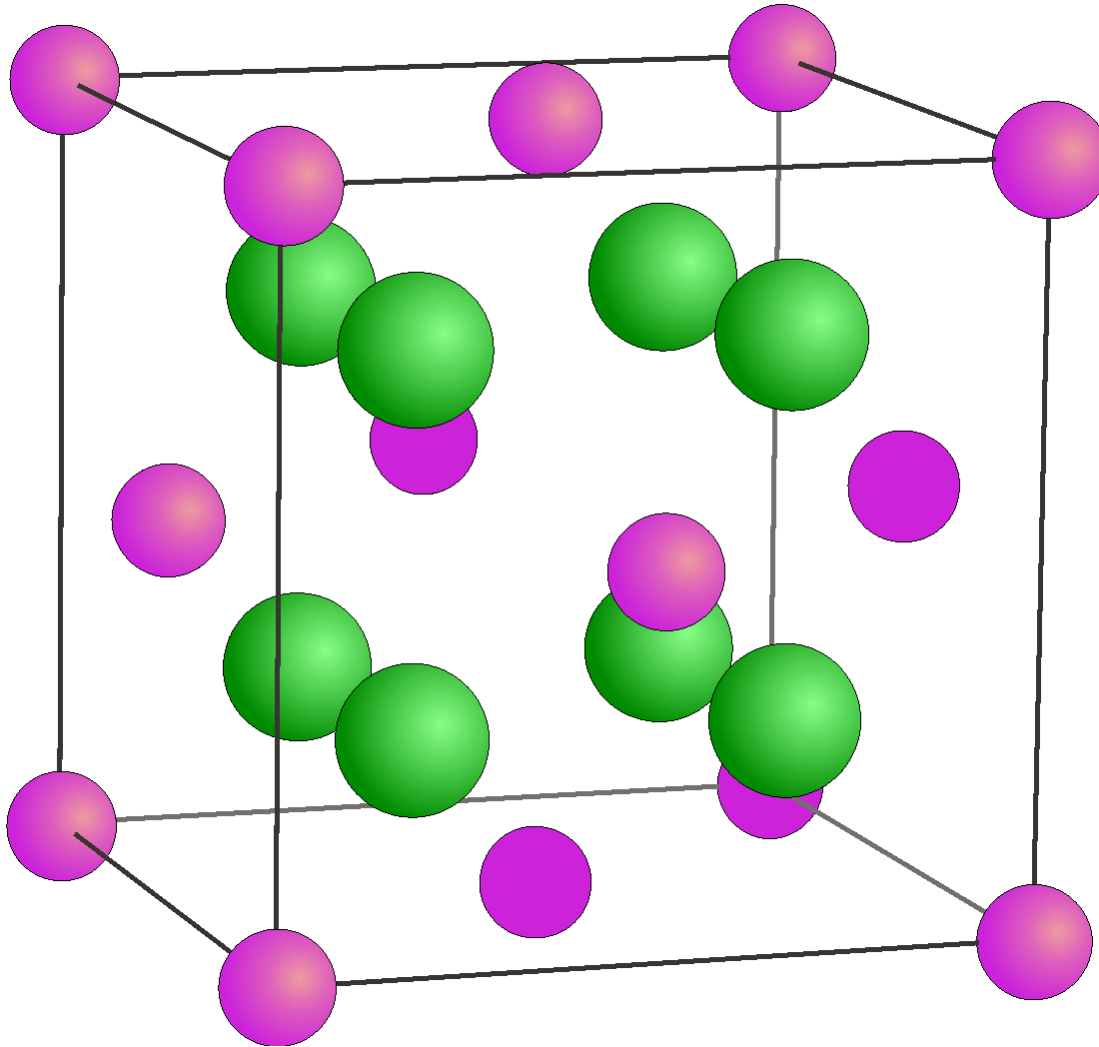




2



# CaF<sub>2</sub>, fluorita



**Números de Coordinación:**

**Ca<sup>2+</sup> =**

**F<sup>-</sup> =**

**Número de átomos:**

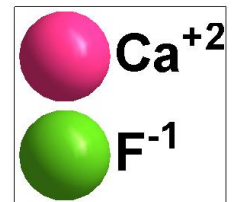
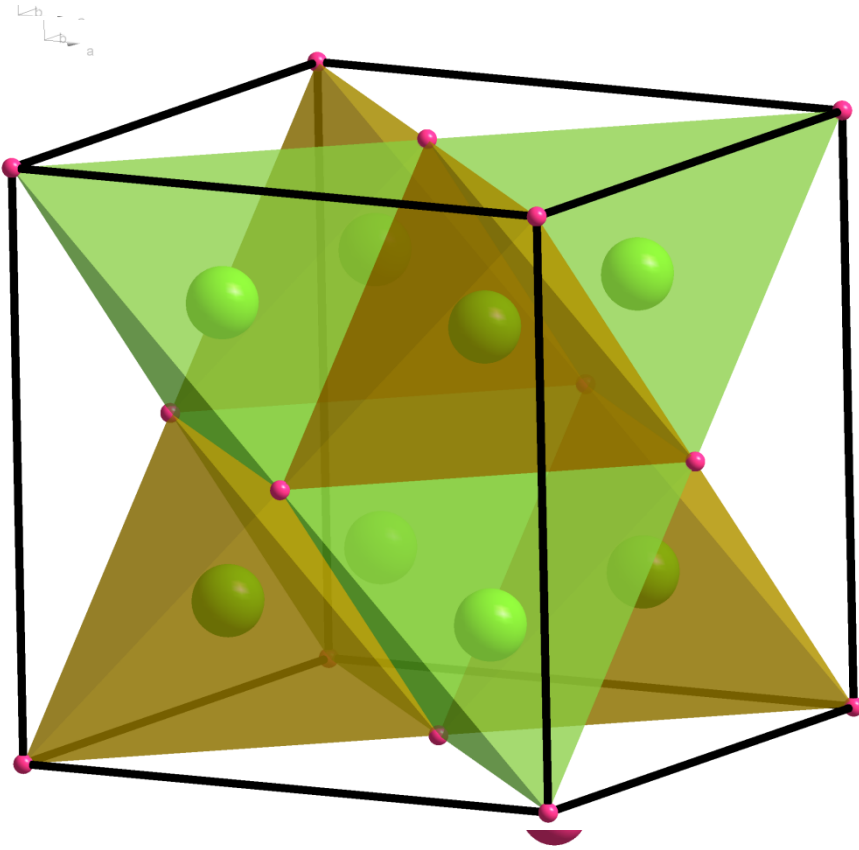
**Ca<sup>2+</sup> =**

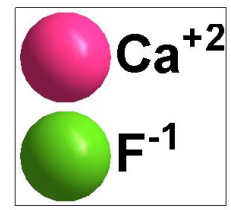
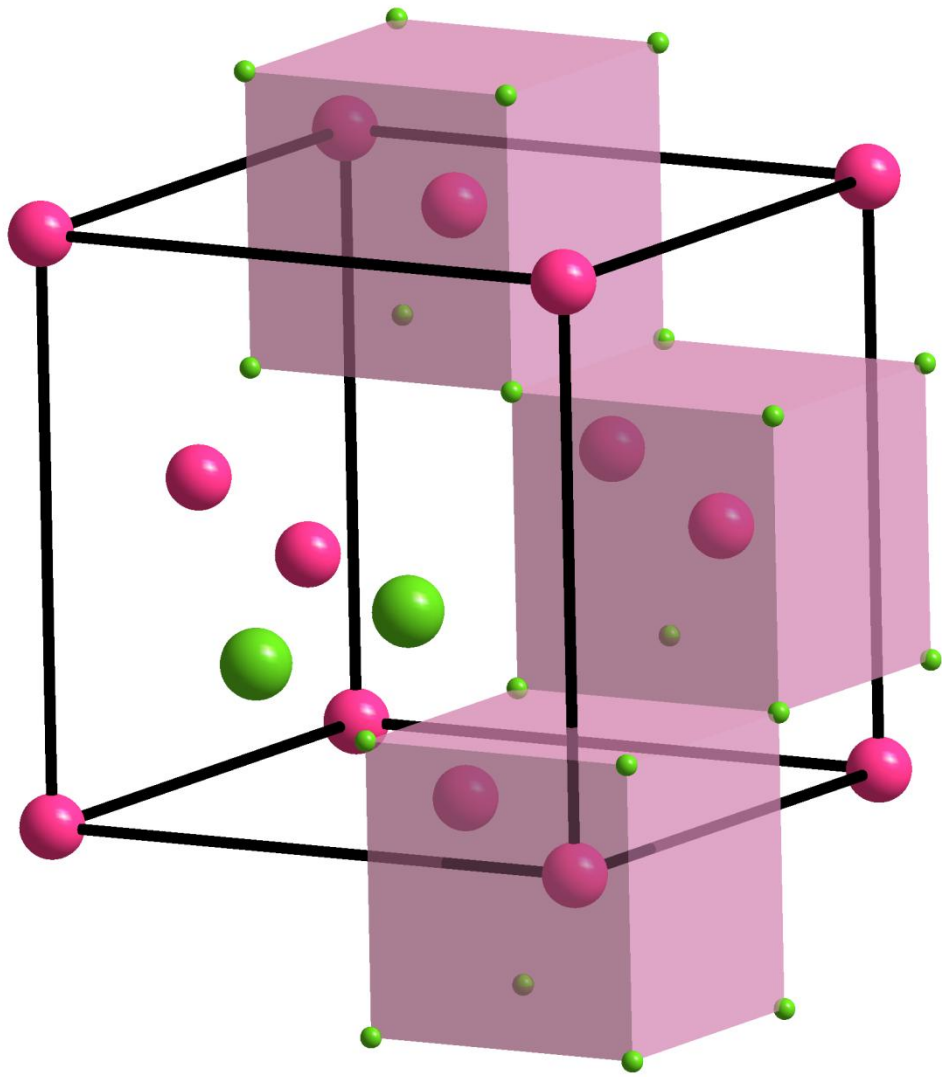
**F<sup>-</sup> =**

**Z =**

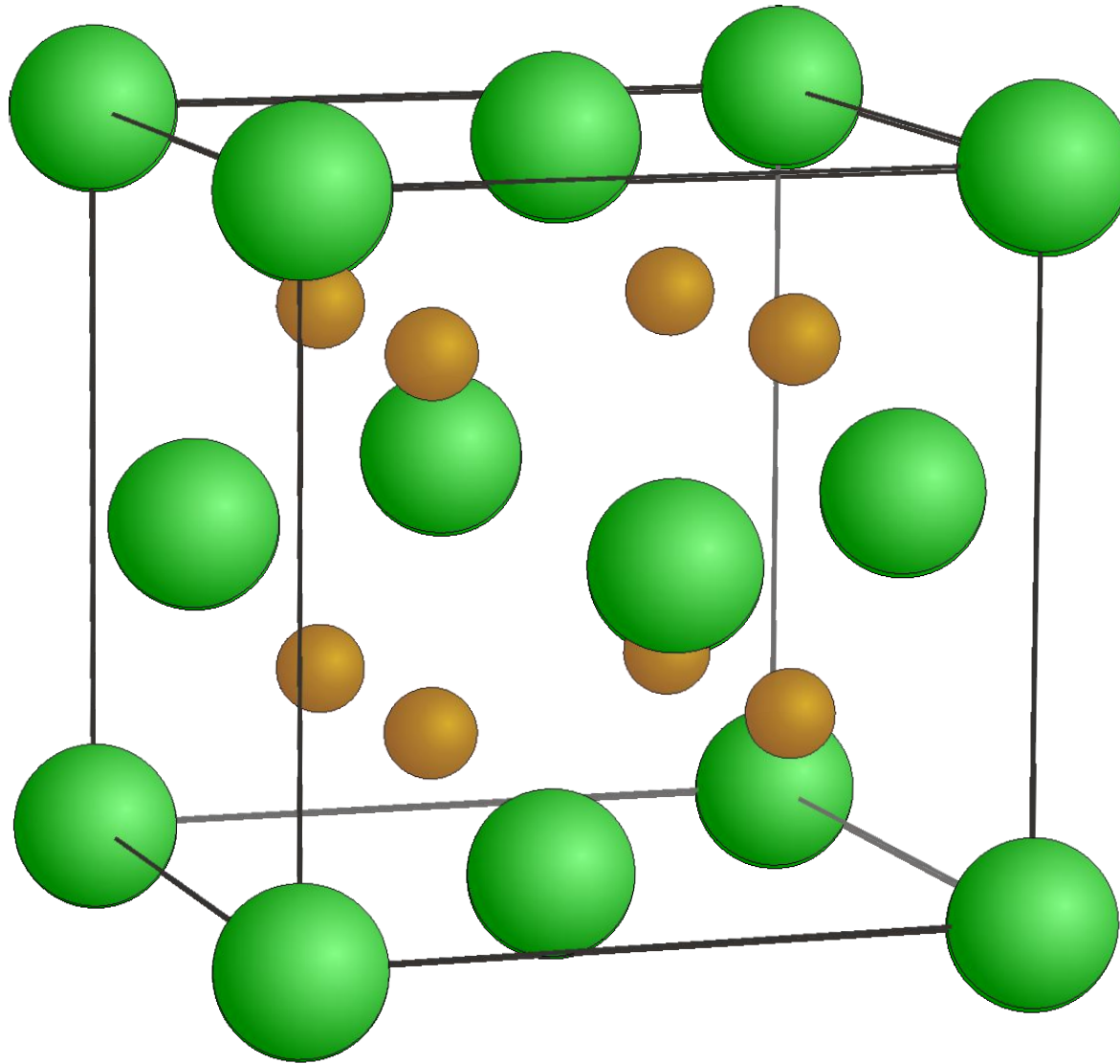
**Otros ejemplos:**

**Fluoruros del grupo IIA, BaCl<sub>2</sub>, dióxidos de metales *f*.**





# $K_2O$ , antifluorita



**Números de Coordinación:**

$K^+ =$

$O^{2-} =$

**Número de átomos:**

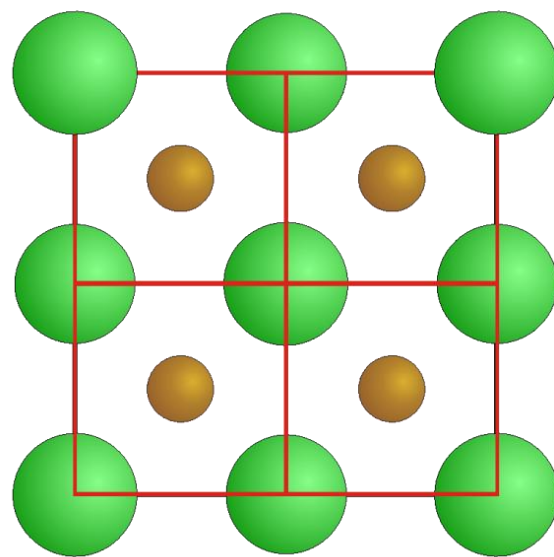
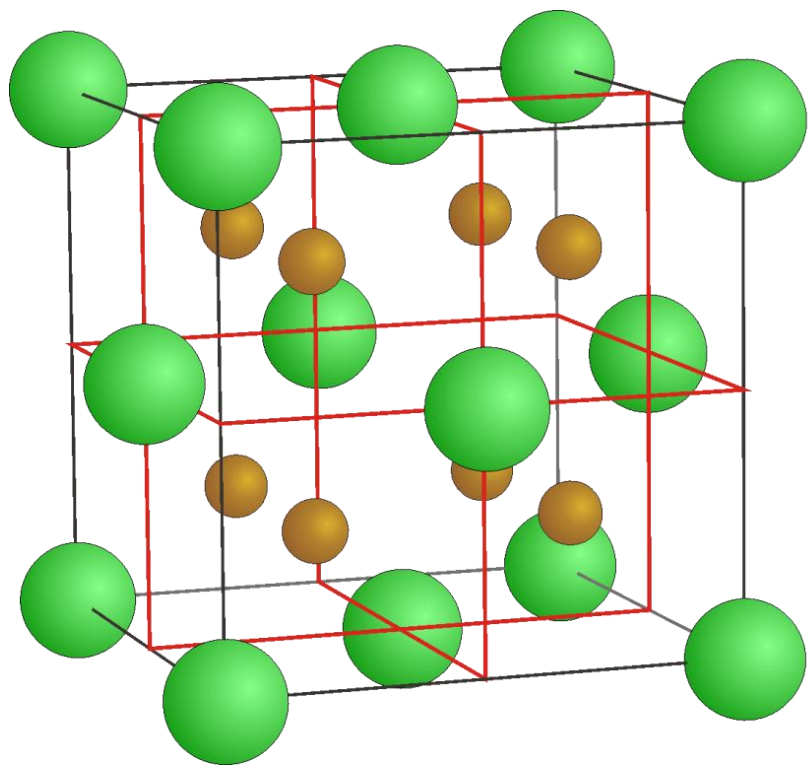
$K^+ =$

$O^{2-} =$

$Z =$

**Otros ejemplos:**

**Óxidos y sulfuros del grupo IA, de la forma  $M_2X$ , excepto Cs.**



# BaTiO<sub>3</sub>, óxido doble, perovskita

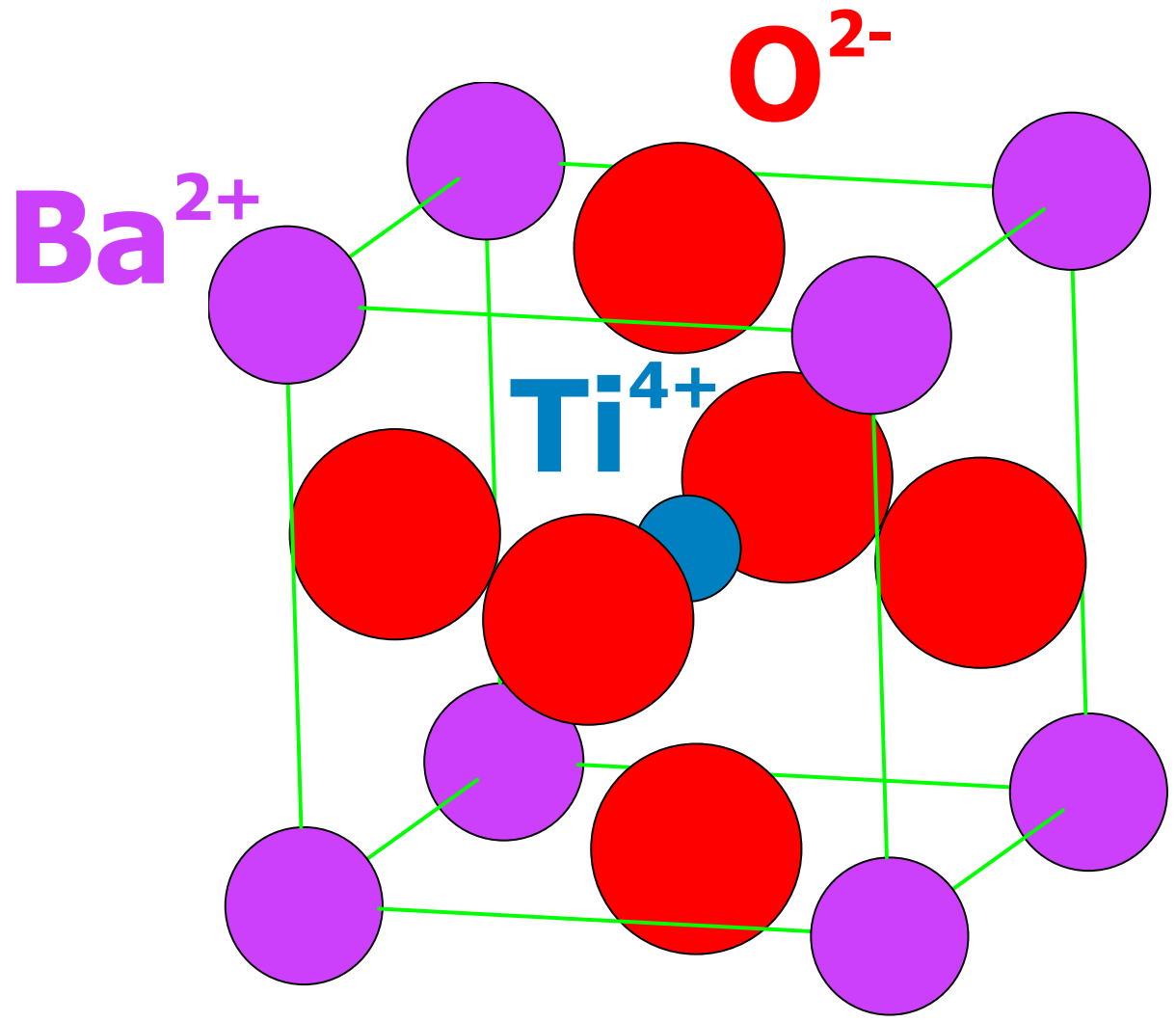
Números de Coordinación:

Ba<sup>2+</sup> =  
Ti<sup>4+</sup> =  
O<sup>2-</sup> =

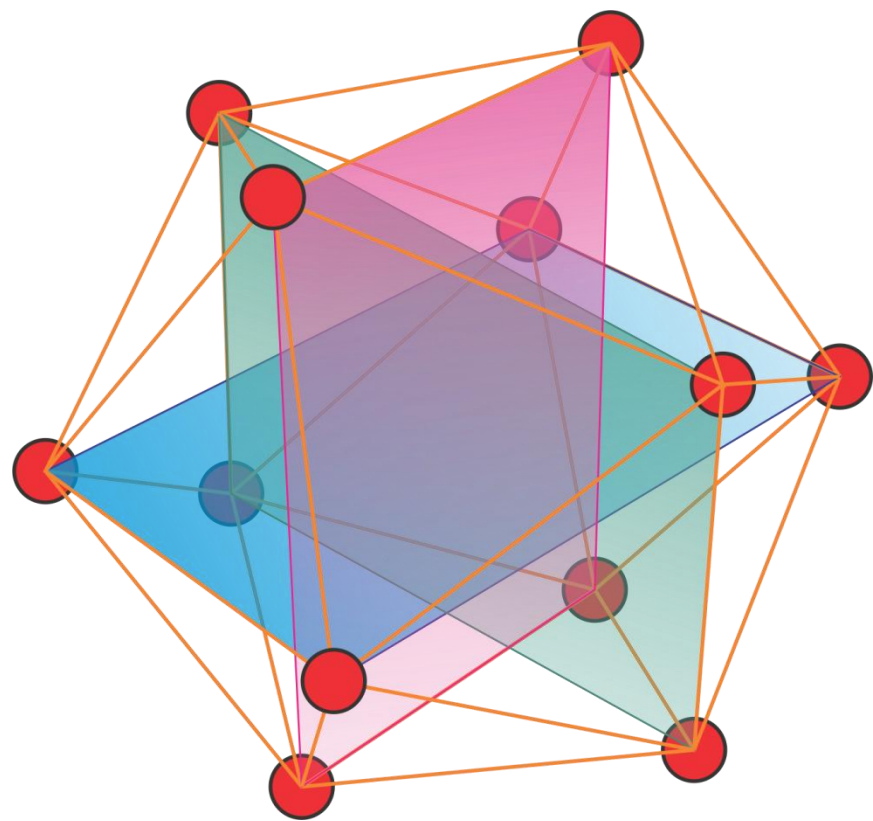
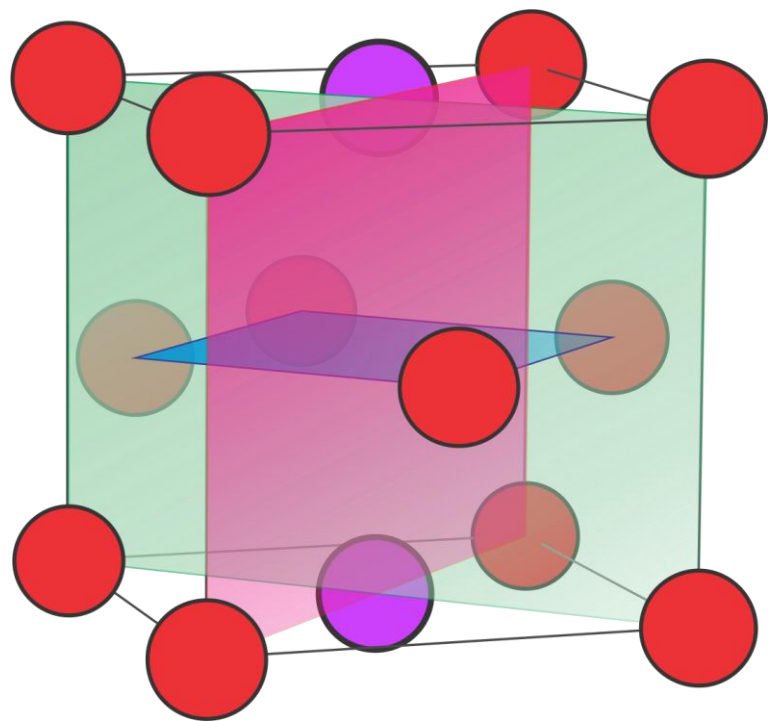
Número de átomos:

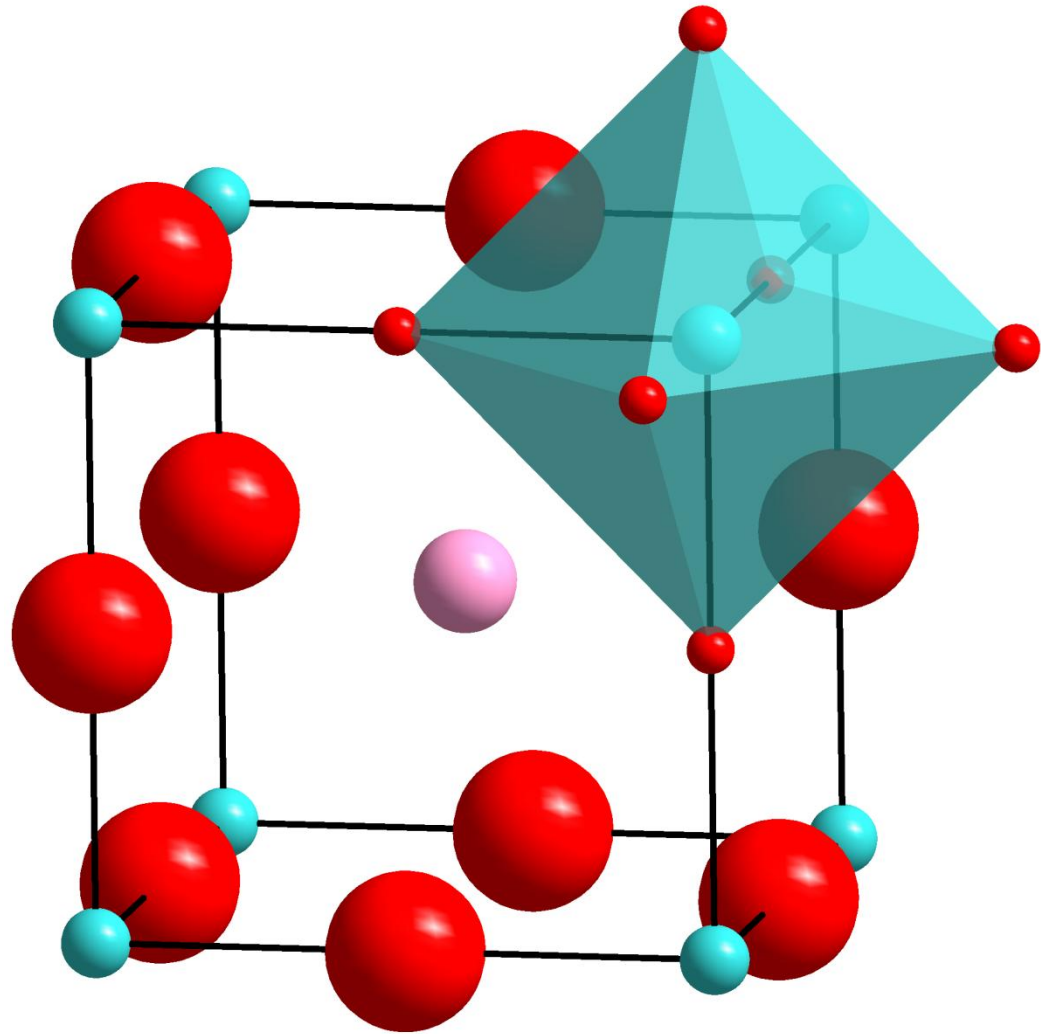
Ba<sup>2+</sup> =  
Ti<sup>4+</sup> =  
O<sup>2-</sup> =

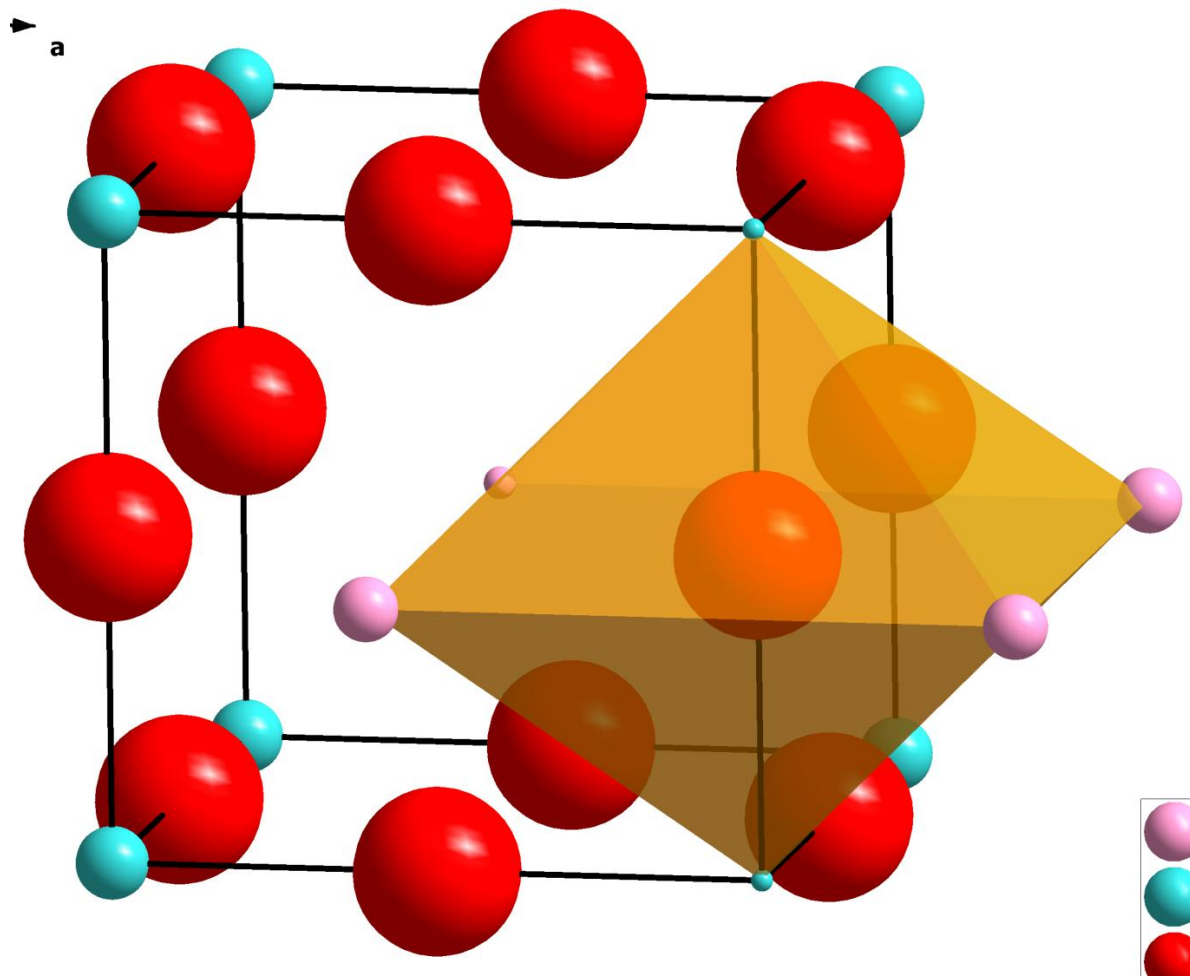
Z =



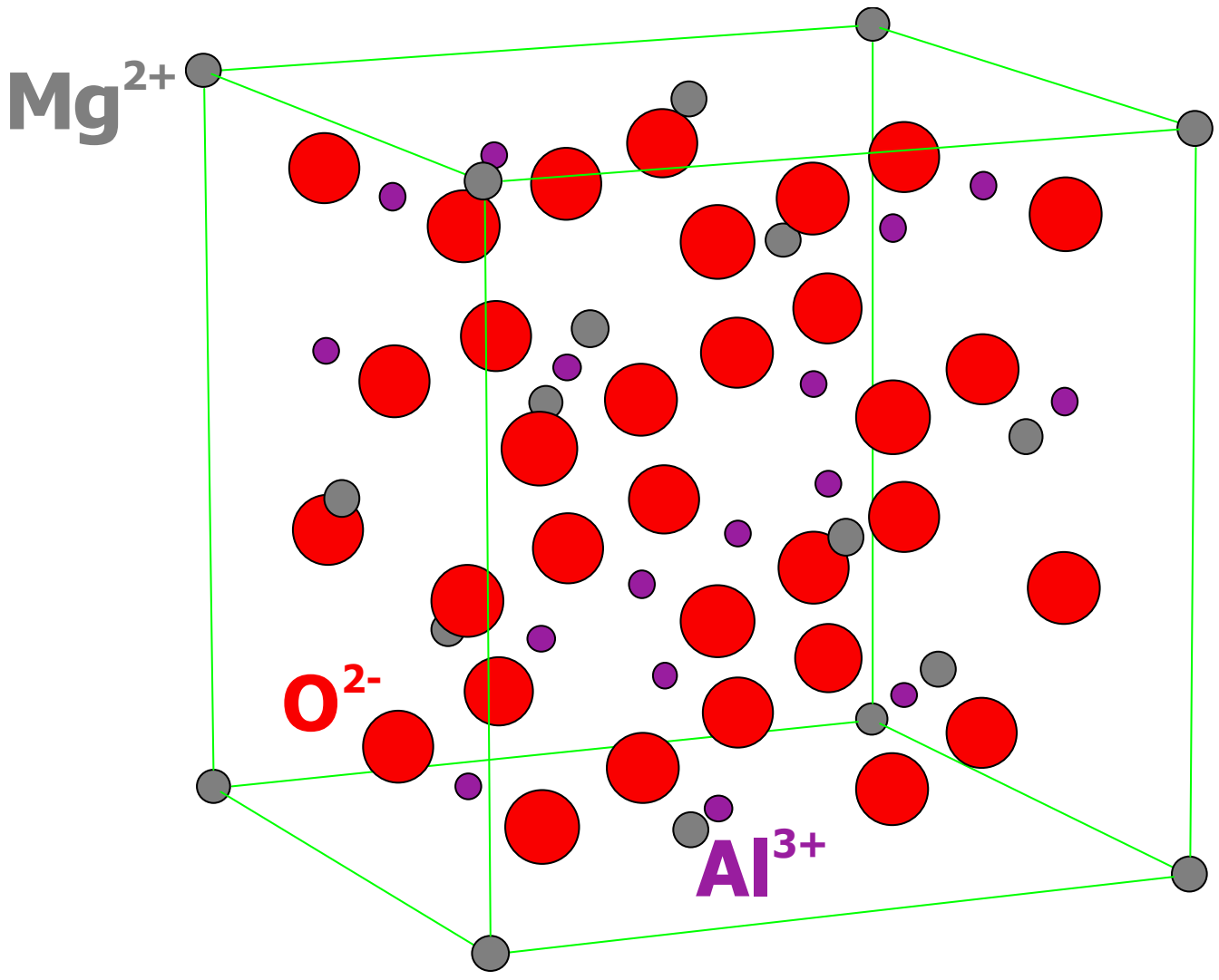








# MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, otro óxido doble, espinela



Números de Coordinación:

Mg<sup>2+</sup> =

Al<sup>3+</sup> =

O<sup>2-</sup> =

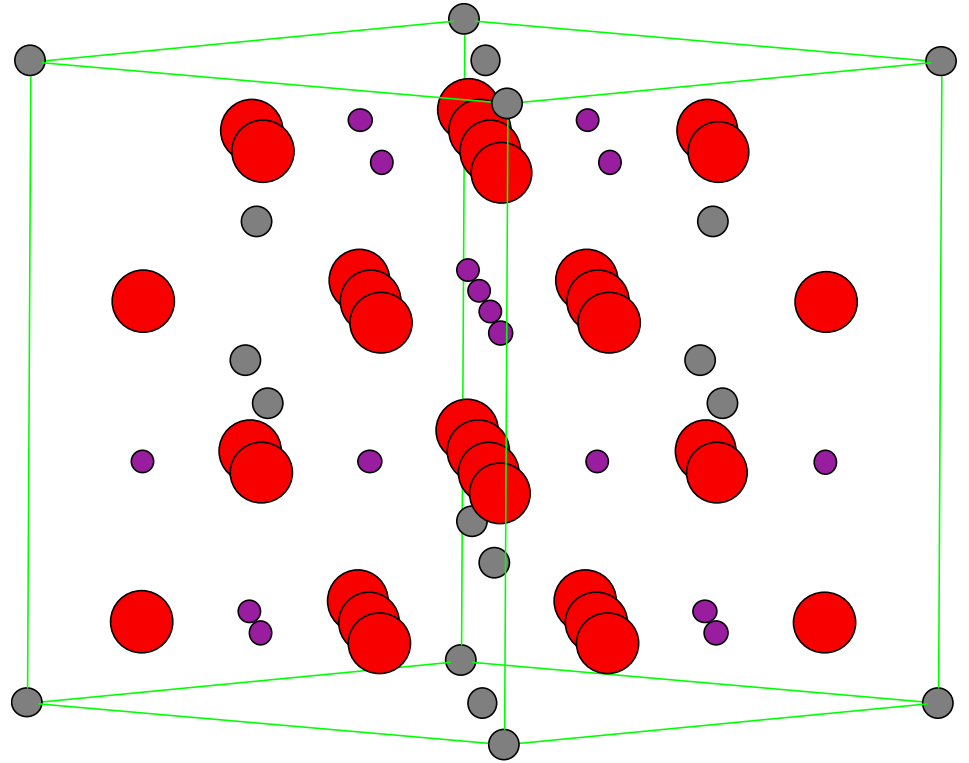
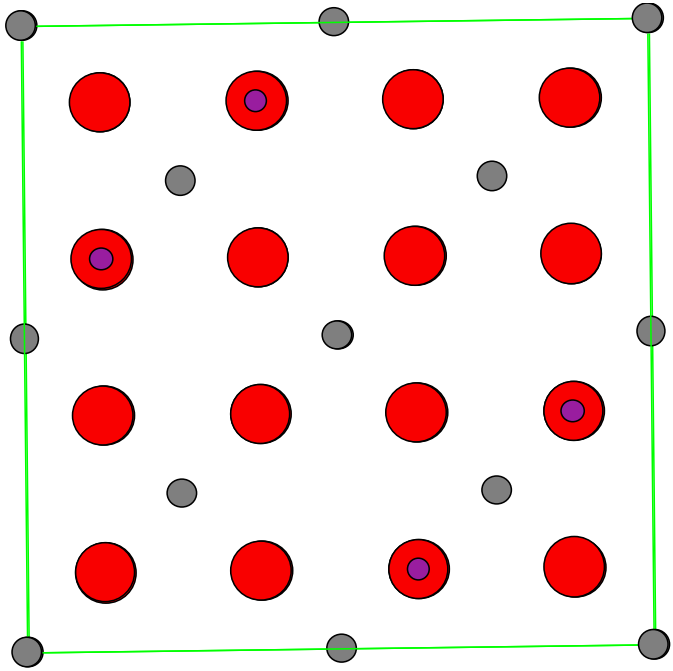
Número de átomos:

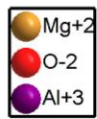
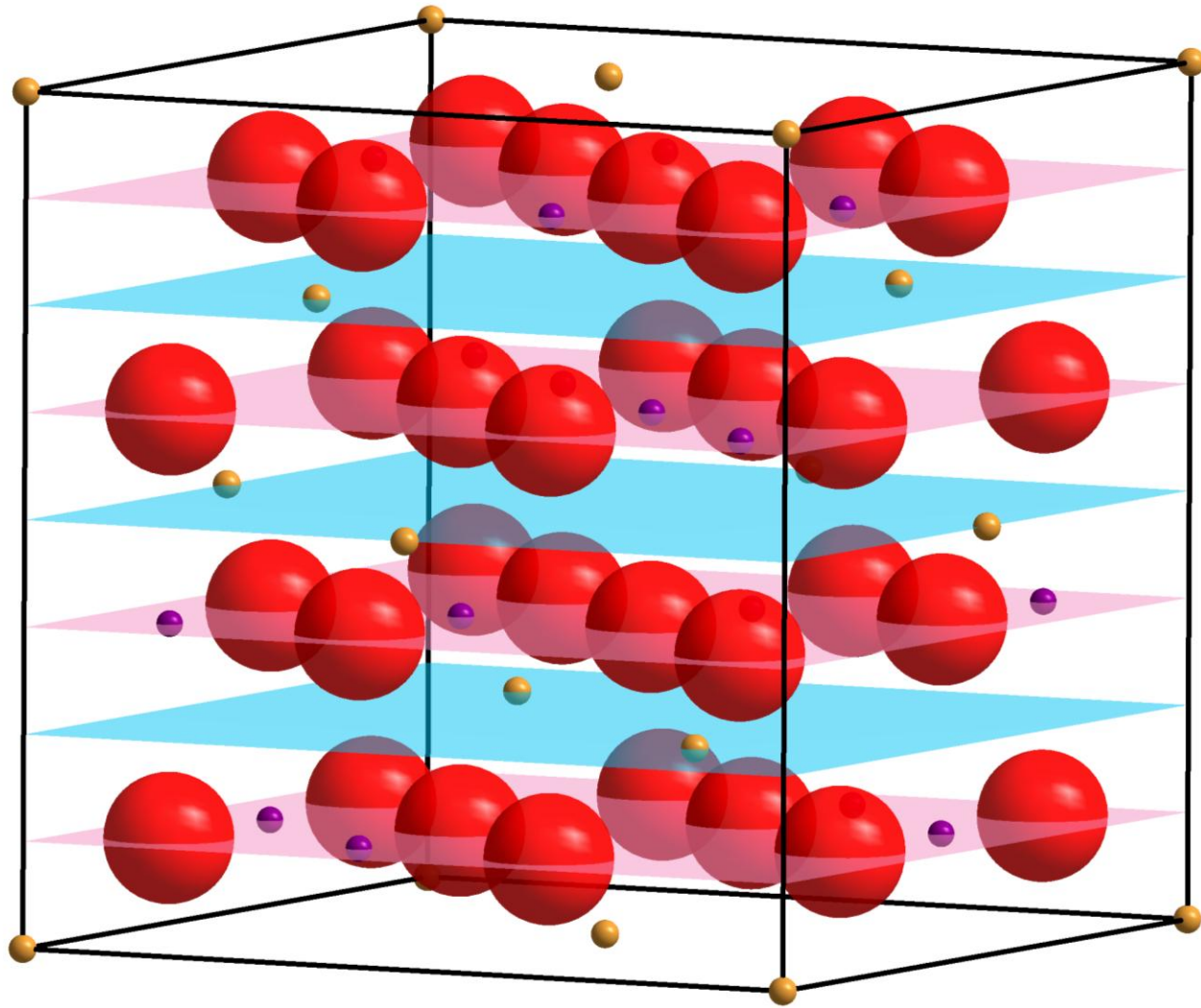
Mg<sup>2+</sup> =

Al<sup>3+</sup> =

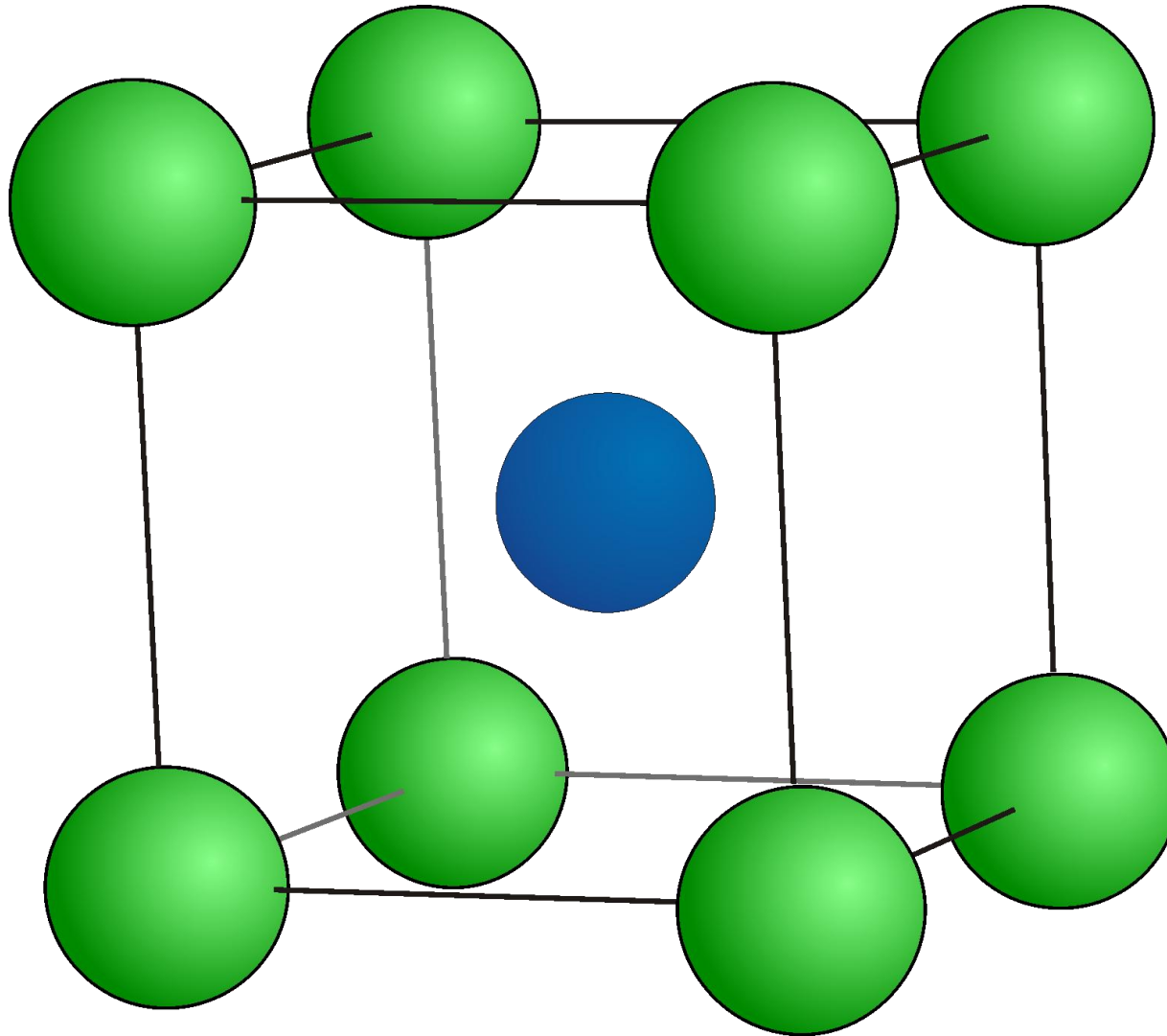
O<sup>2-</sup> =

Z =





# CsCl, cúbica primitiva\*



**Números de Coordinación:**

**Cs<sup>+</sup> =**

**Cl<sup>-</sup> =**

**Número de átomos:**

**Cs<sup>+</sup> =**

**Cl<sup>-</sup> =**

**Z =**

**Otros ejemplos:**

**CsBr, CsI, halogenuros de amonio, excepto NH<sub>4</sub>F, TlCl, TlBr, TlCN, CsSH, CsSeH.**

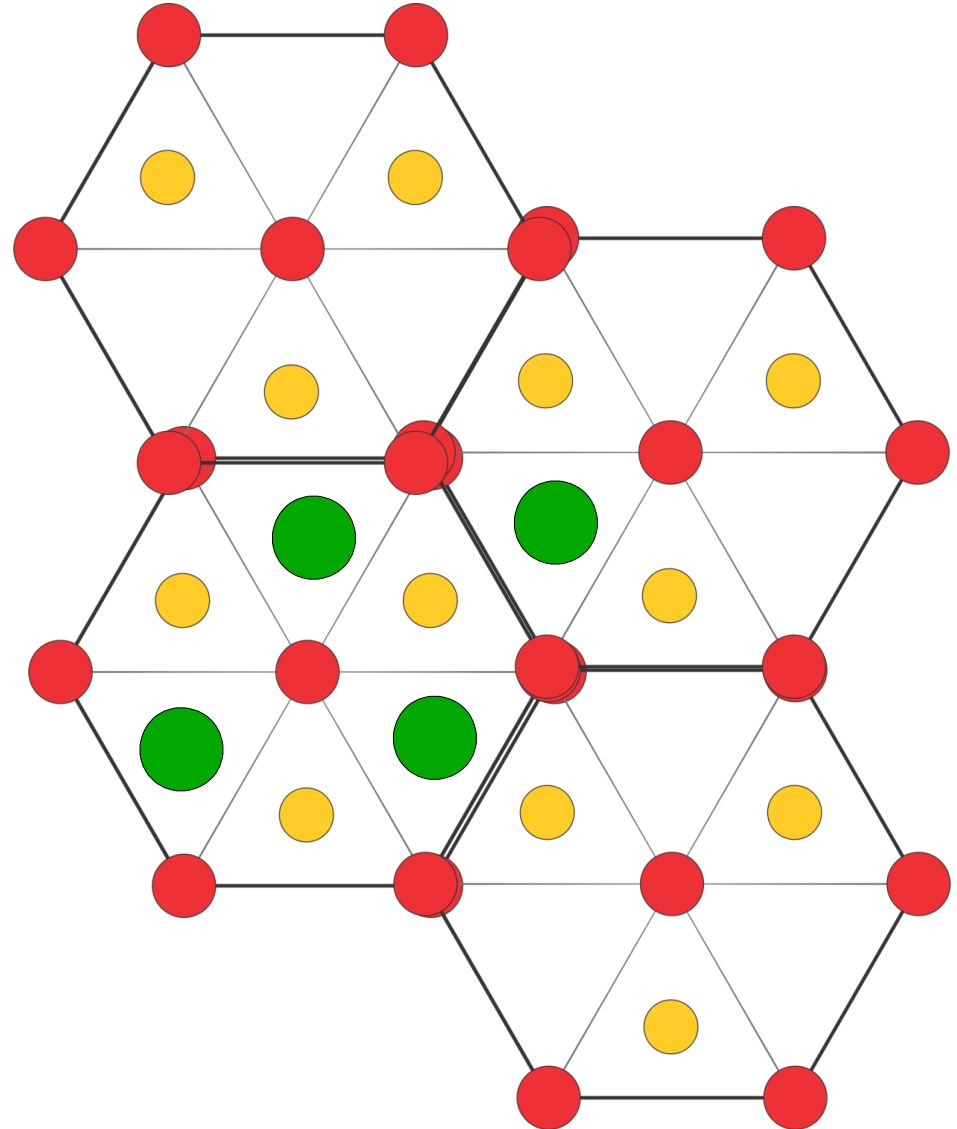
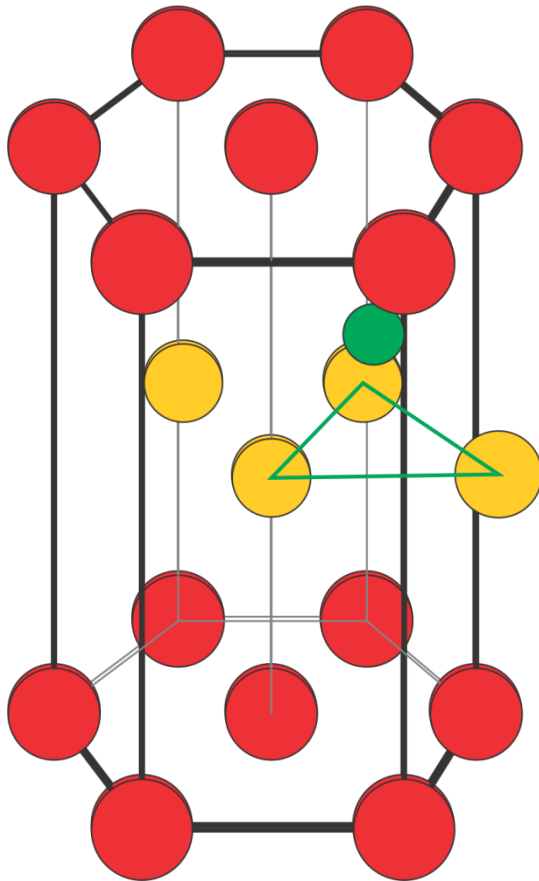
## En resumen



	Estructura Tipo	Oct.	T+	T-
<b>Cúbica</b>	NaCl	1		
<b>(ccp)</b>	K <sub>2</sub> O (antifluorita)		1	1
	CaF <sub>2</sub>		1	1
	ZnS (blenda)		1	
	CdCl <sub>2</sub>	1/2		
	BaTiO <sub>3</sub> (perovskita)	1/4		
	MgAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> (espinela)	1/2	1/4	1/4



# Empaquetamiento hexagonal



# NiAs, niquelina

Números de Coordinación:

Número de átomos:

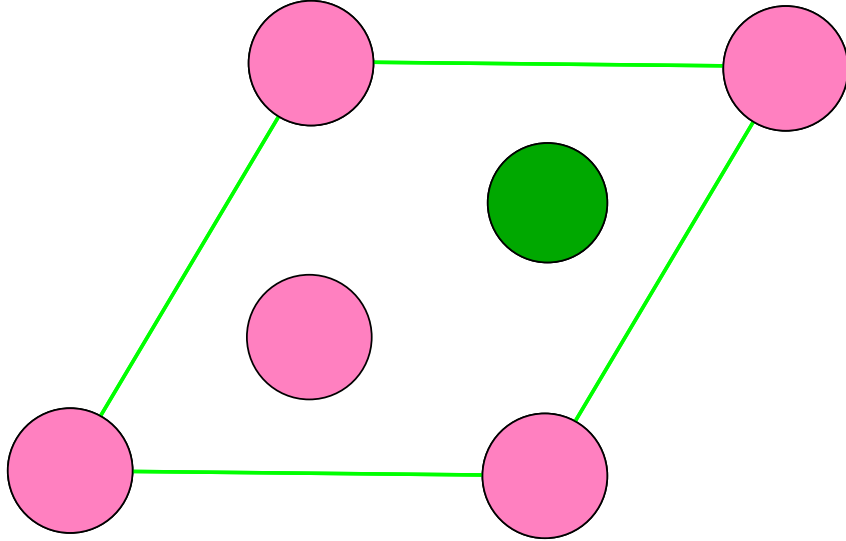
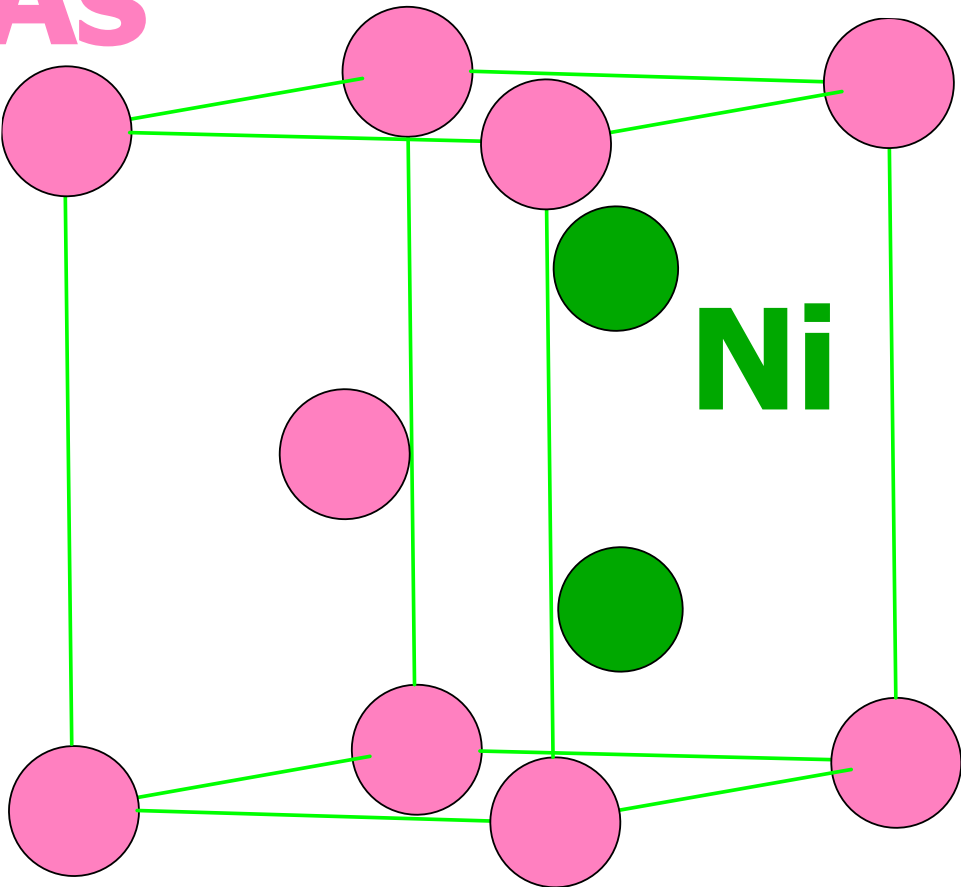
As =  
Ni =

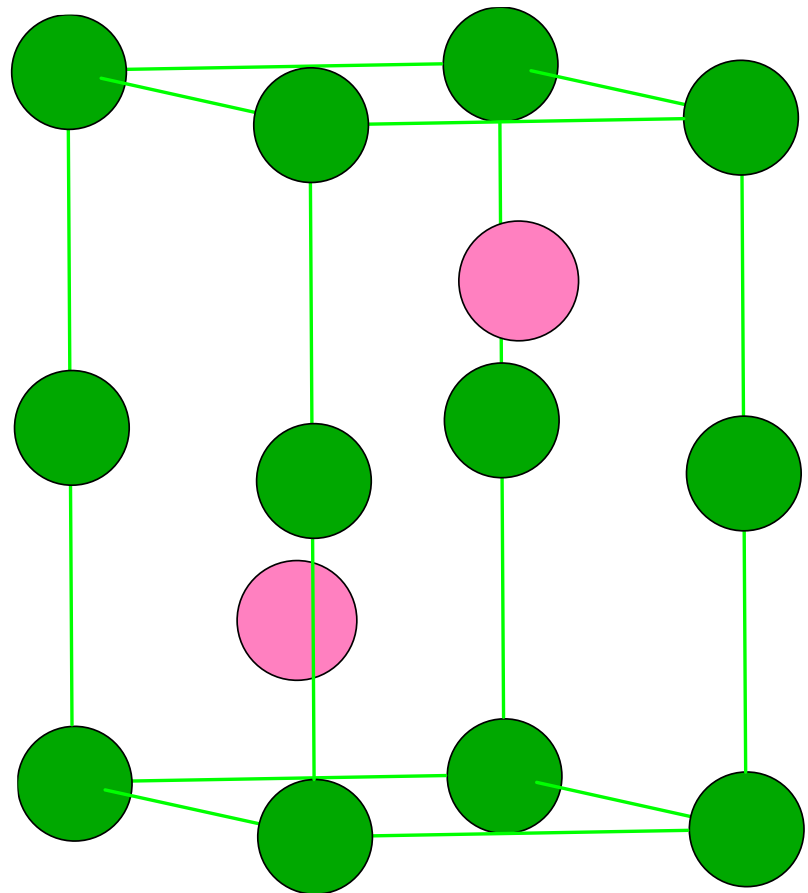
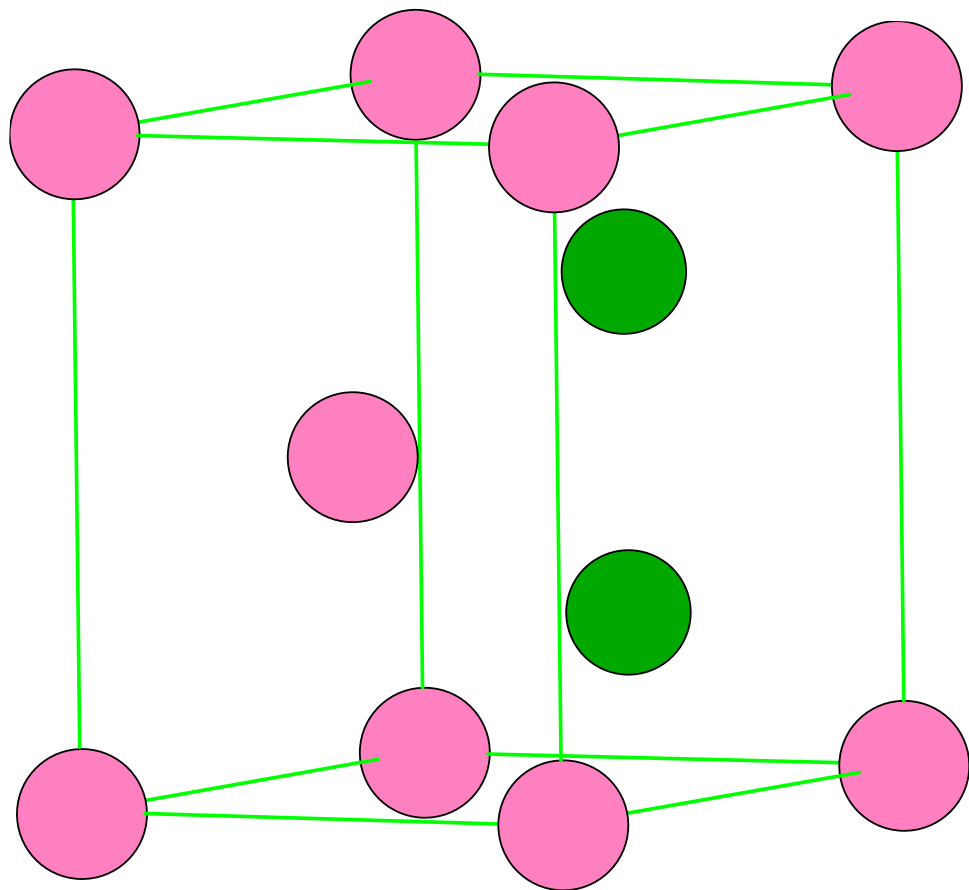
As =  
Ni =

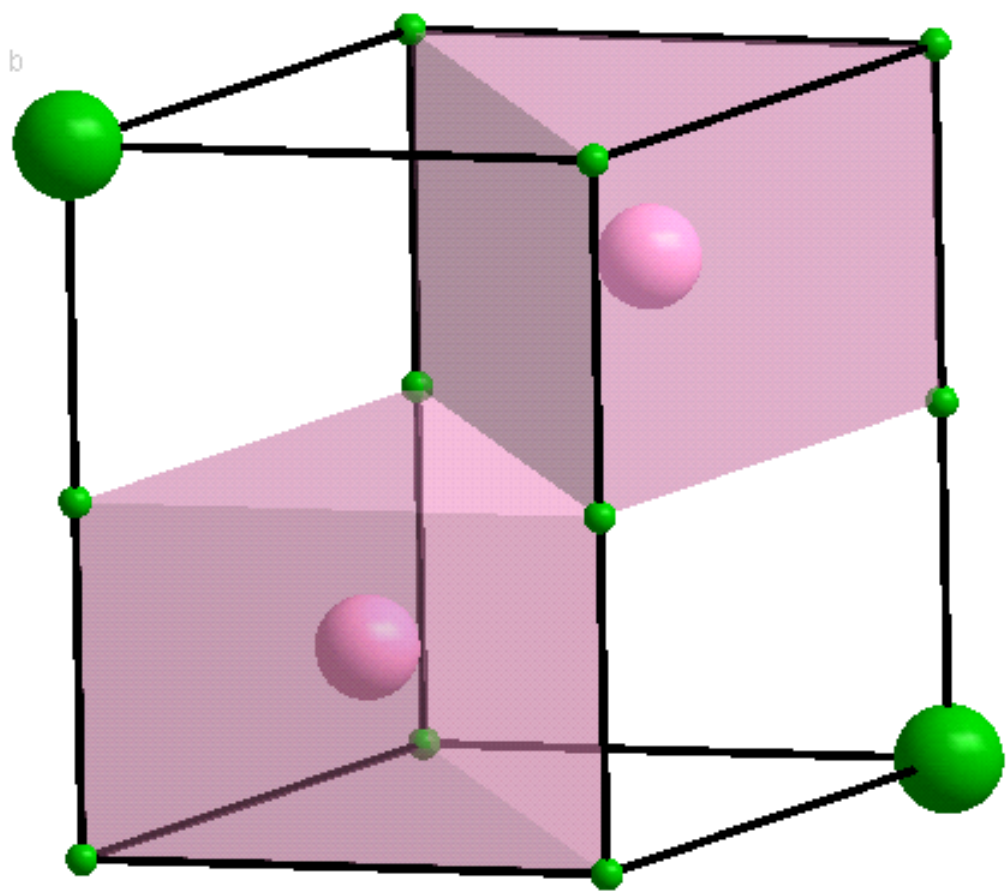
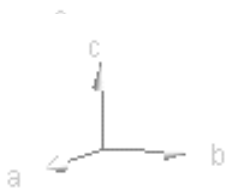
Z =

As

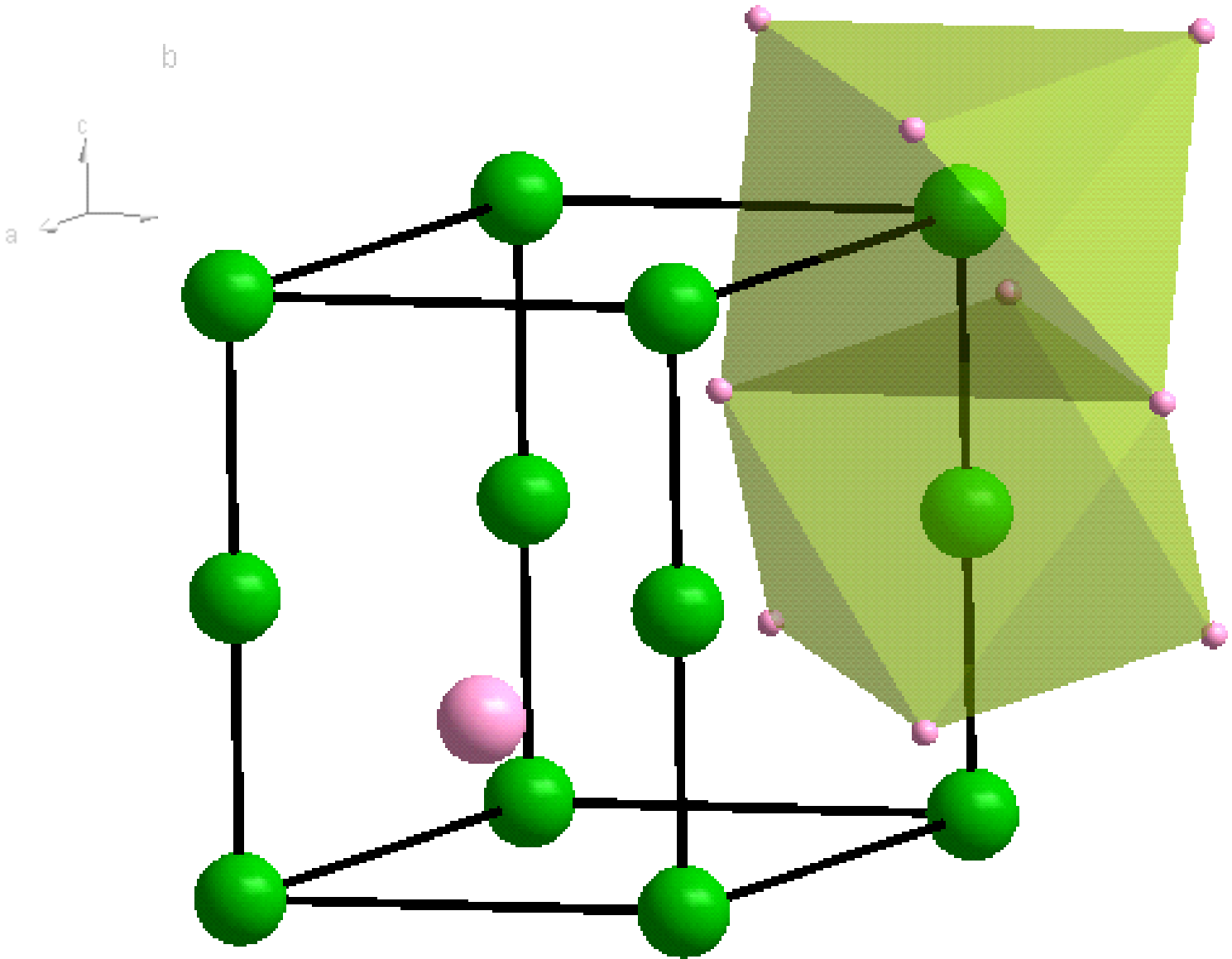
Ni



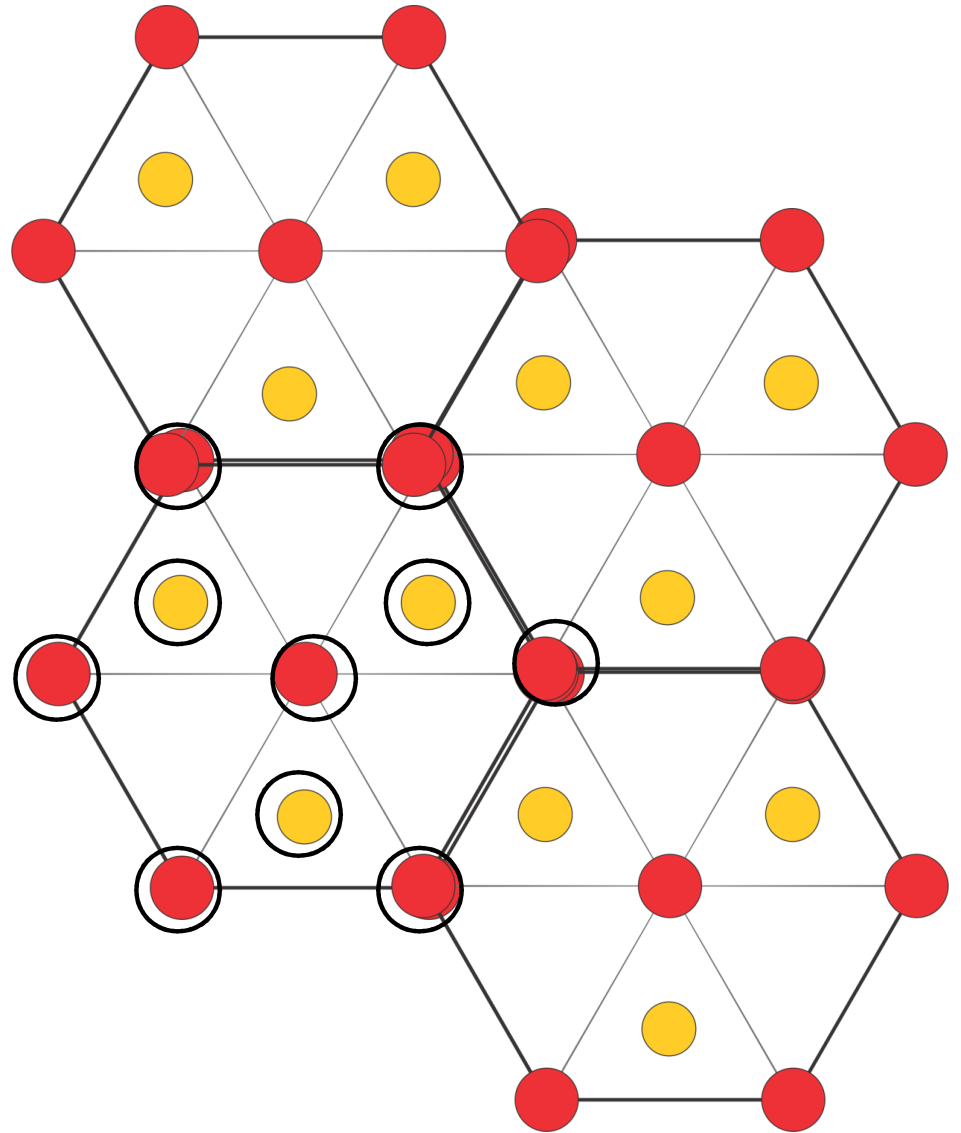
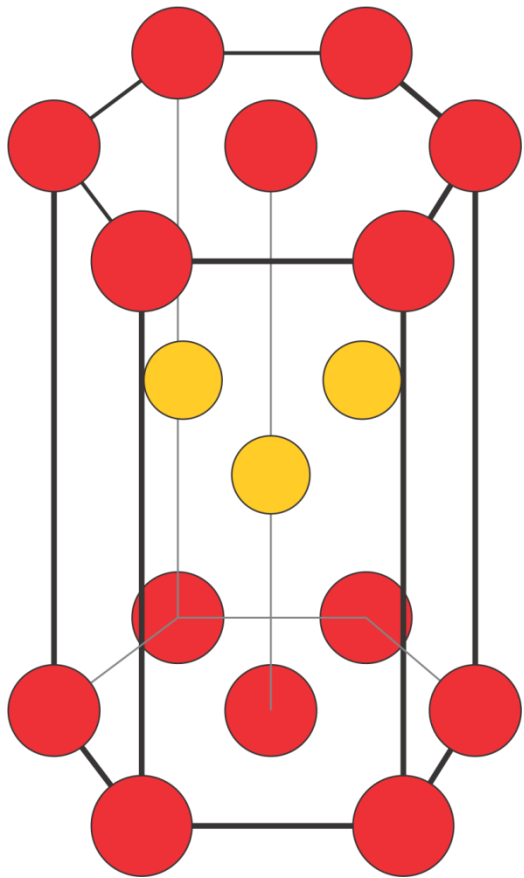




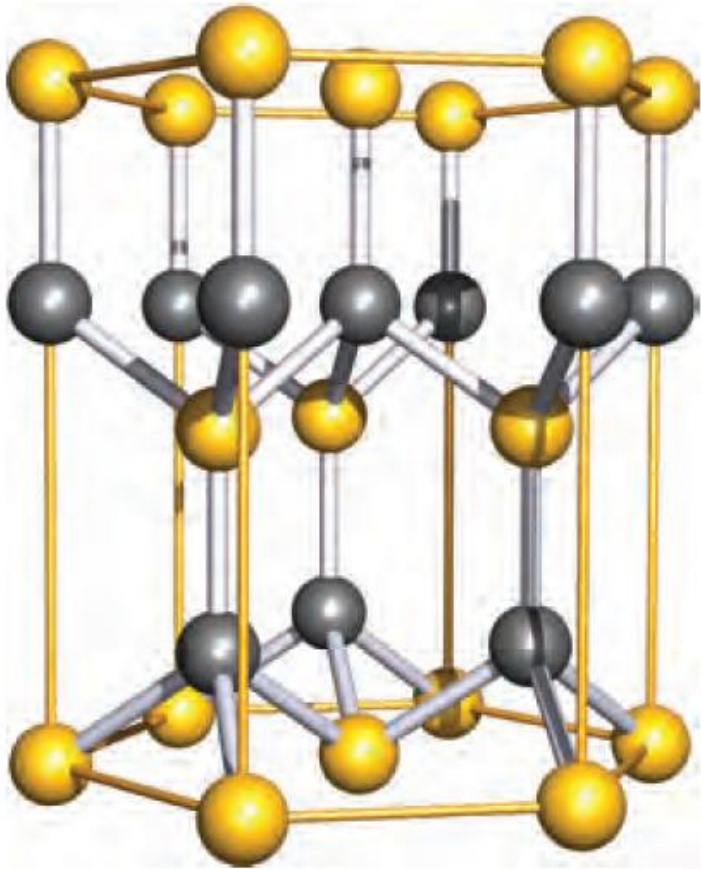
● Ni  
● As



# Empaquetamiento hexagonal



# ZnS, wurtzita



**Números de  
Coordinación:**

**Zn<sup>2+</sup> =**

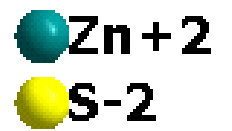
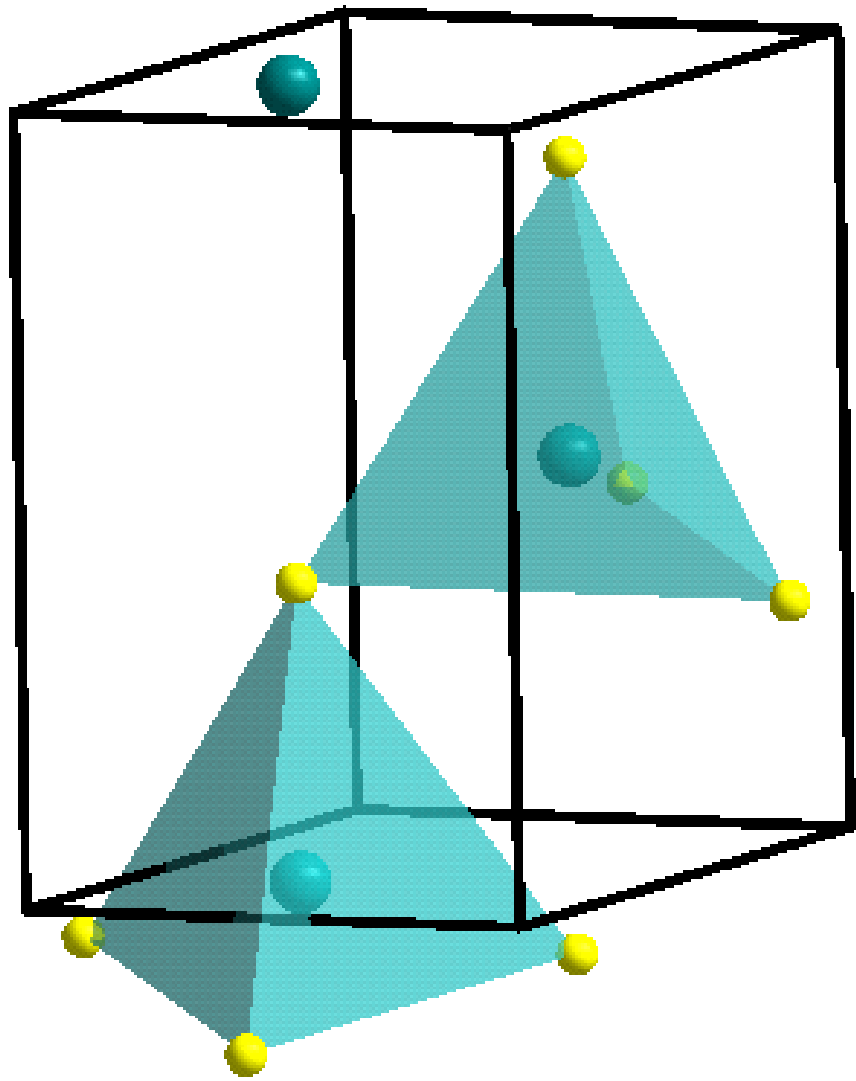
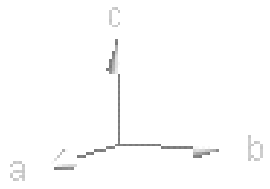
**S<sup>2-</sup> =**

**Número de  
átomos:**

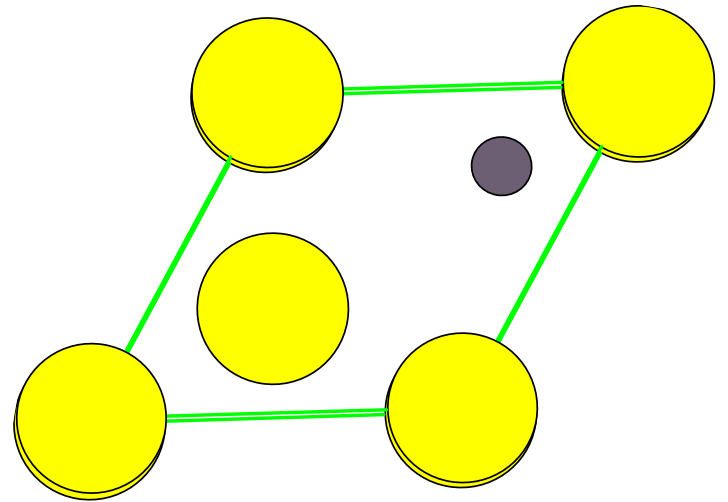
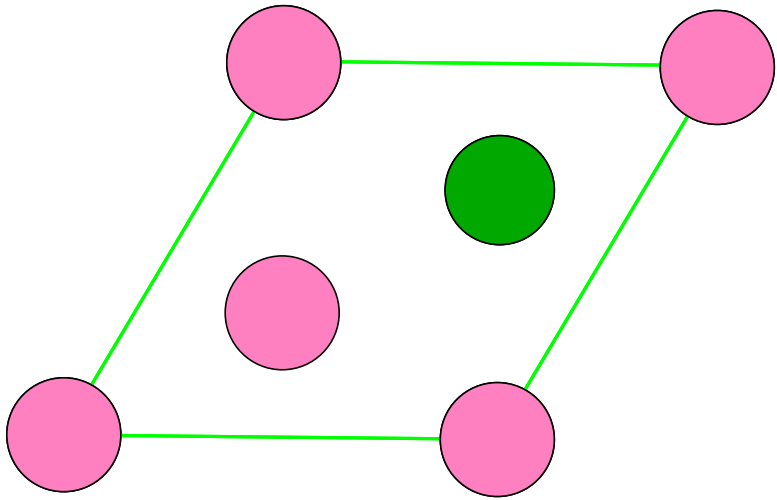
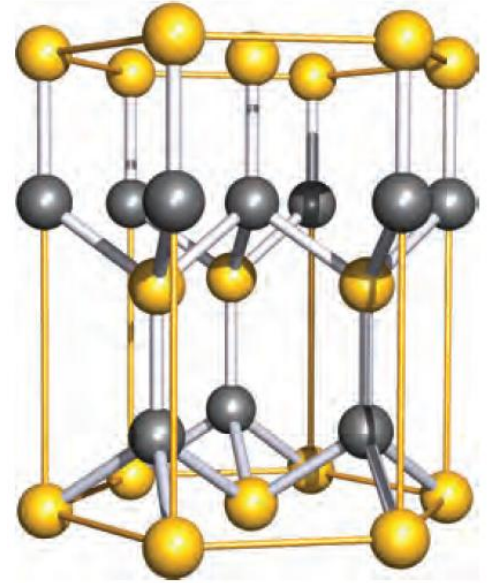
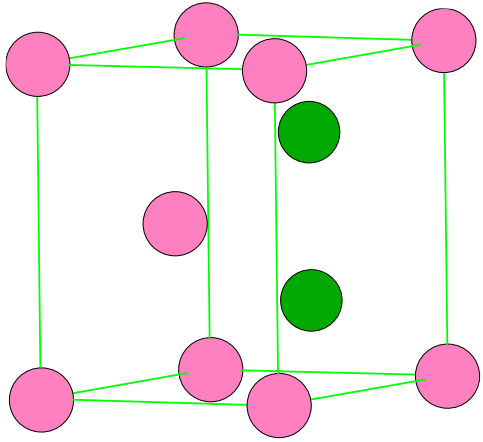
**Zn<sup>2+</sup> =**

**S<sup>2-</sup> =**

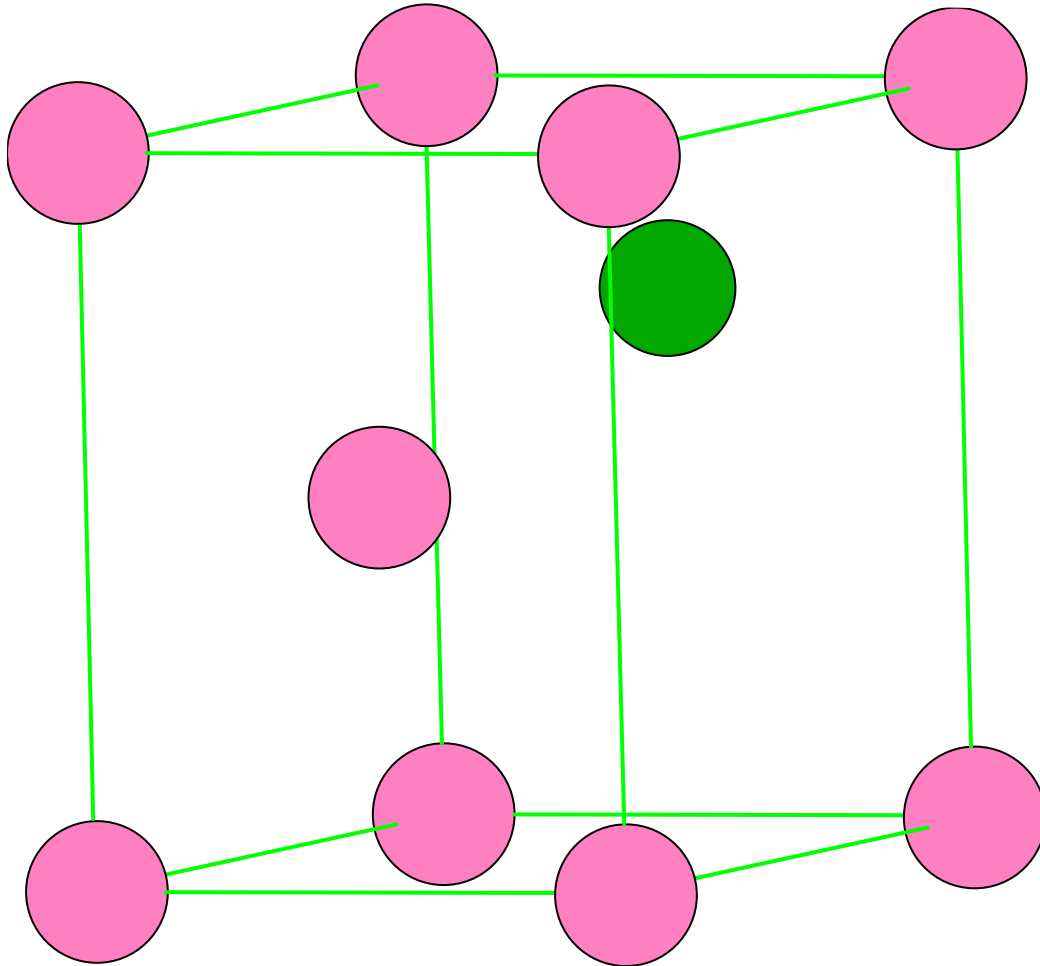
**Z =**







**CdI<sub>2</sub>**



**Números de Coordinación:**

**Cd<sup>2+</sup> =**

**I<sup>-</sup> =**

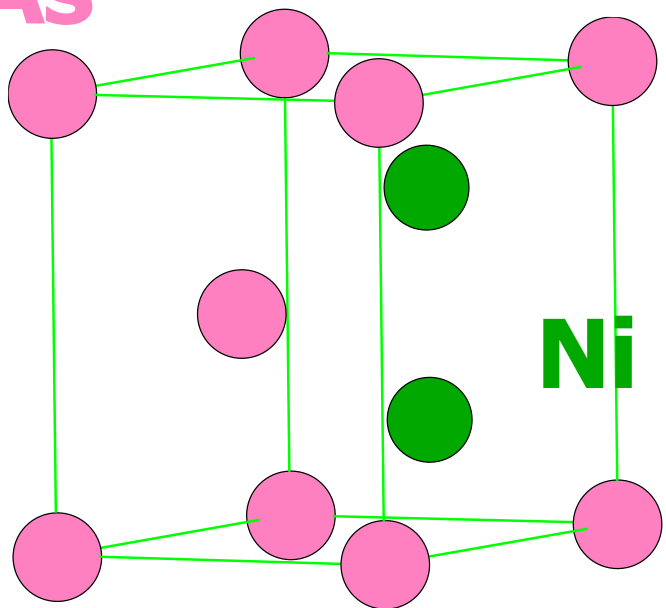
**Número de átomos:**

**Cd<sup>2+</sup> =**

**I<sup>-</sup> =**

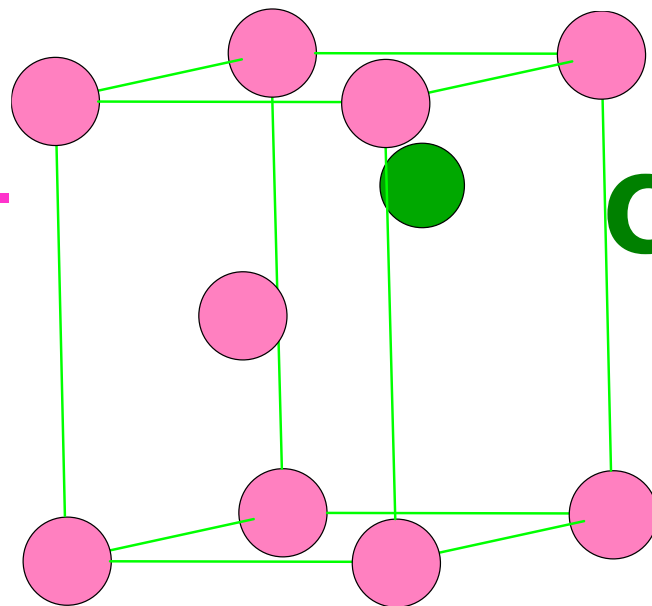
**Z =**

**As**

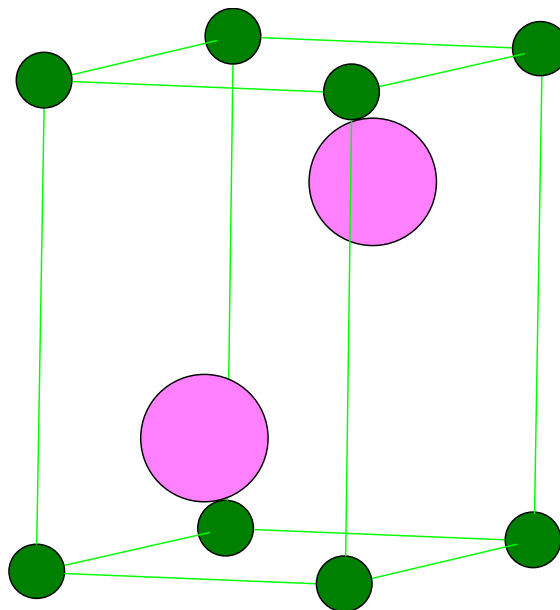
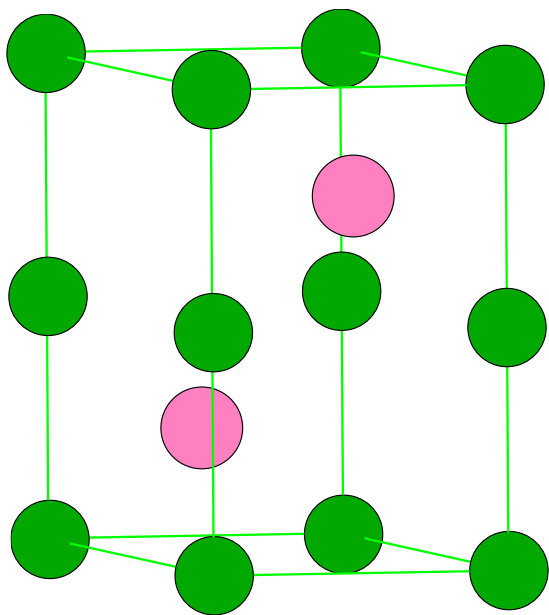


**Ni**

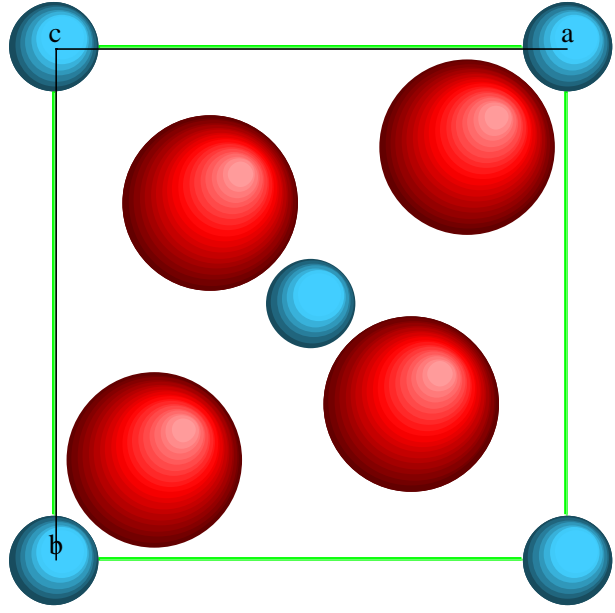
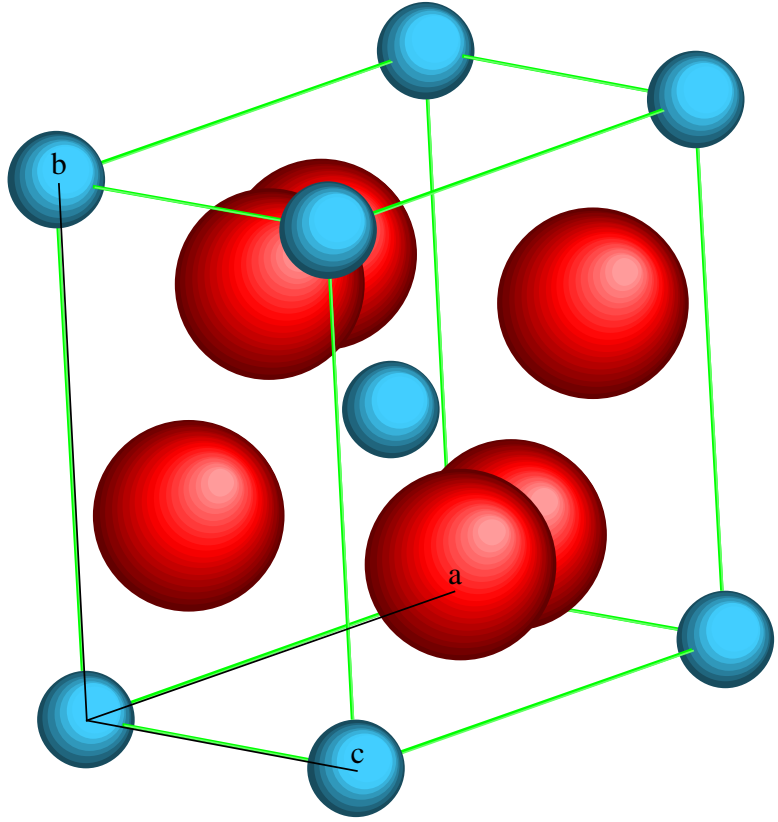
**I<sup>-</sup>**



**Cd<sup>2+</sup>**



# TiO<sub>2</sub>, rutilo



**Números de Coordinación:**

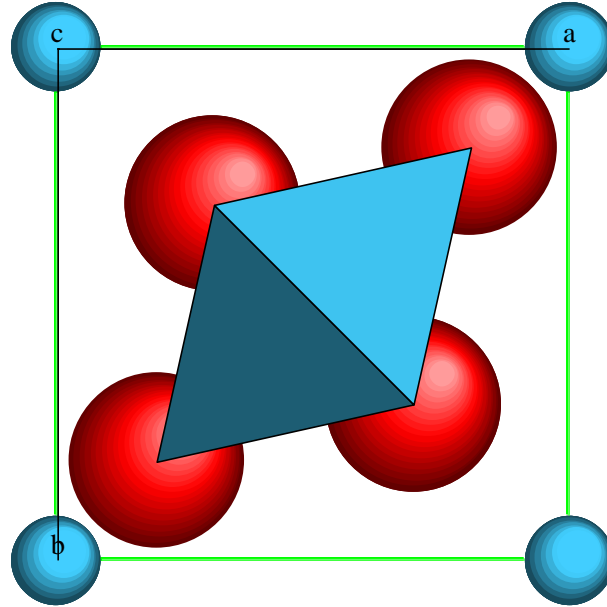
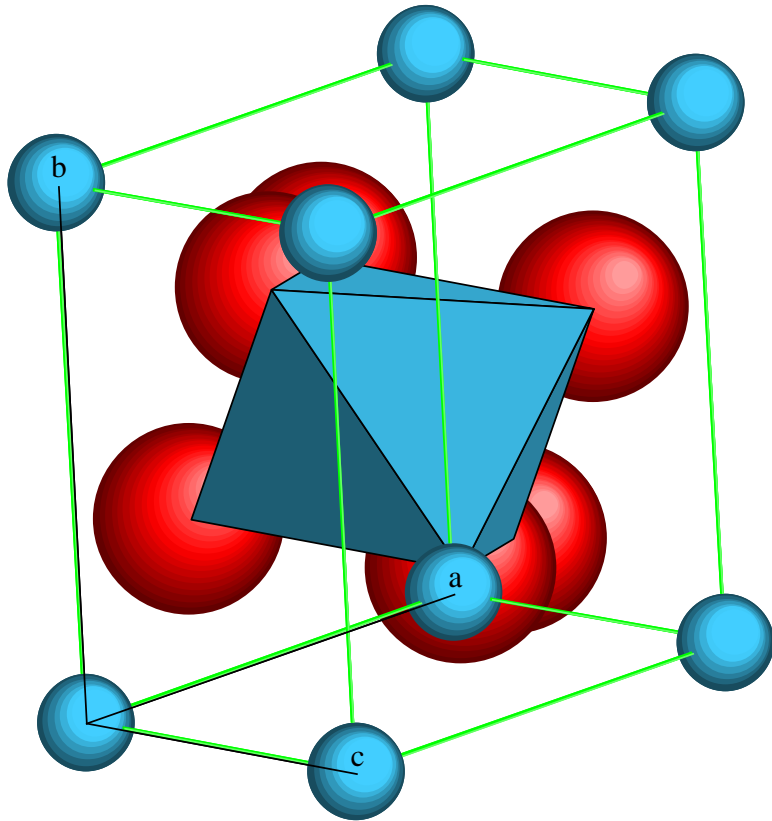
**Ti<sup>4+</sup> =**  
**O<sup>2-</sup> =**

**Número de átomos:**

**Ti<sup>4+</sup> =**  
**O<sup>2-</sup> =**

**Z =**

# TiO<sub>2</sub>, rutilo



**Números de Coordinación:**

**Ti<sup>4+</sup> =**

**O<sup>2-</sup> =**

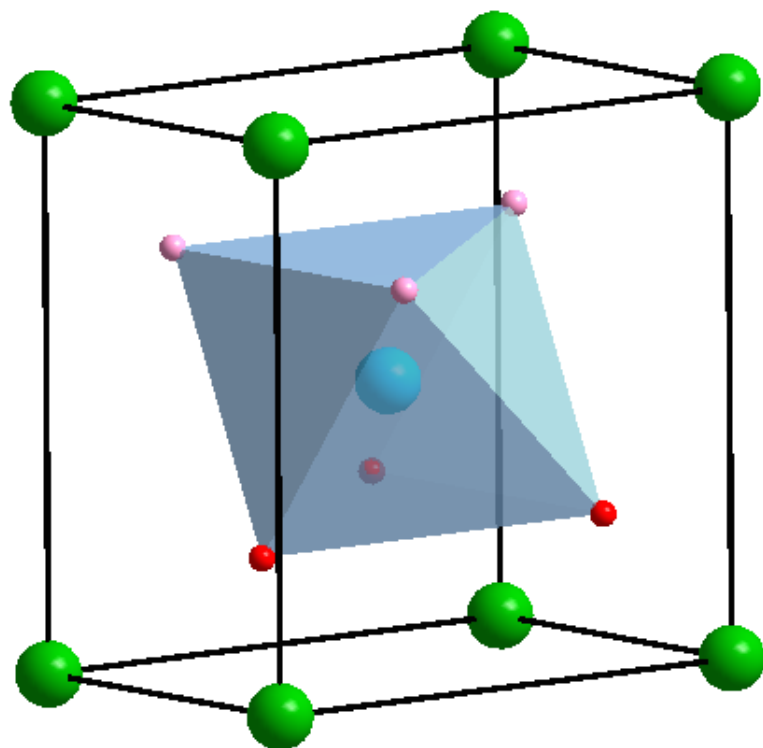
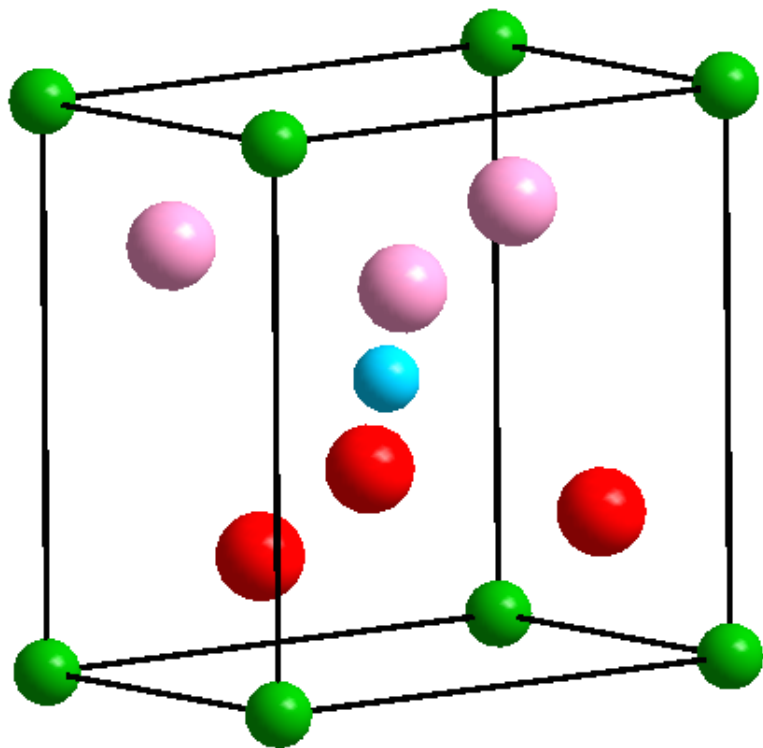
**Número de átomos:**

**Ti<sup>4+</sup> =**

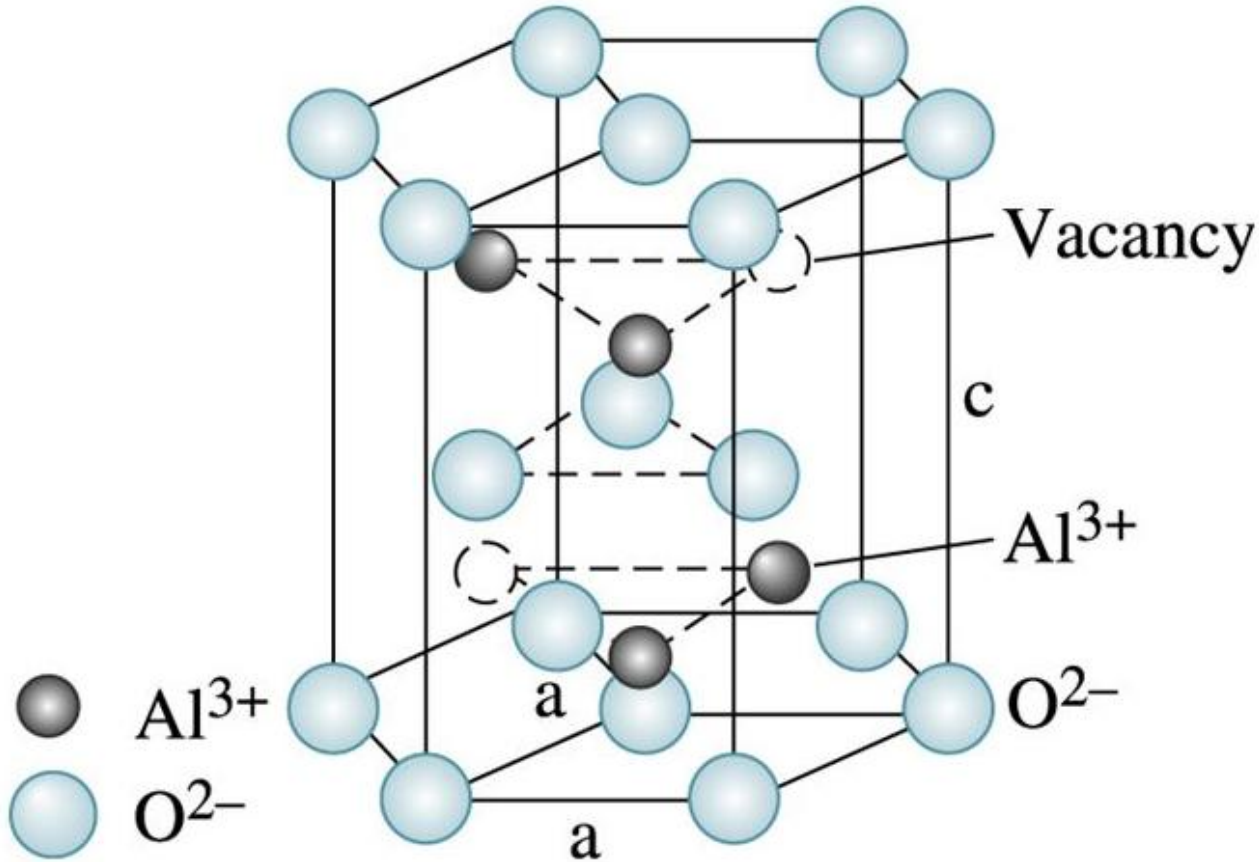
**O<sup>2-</sup> =**

**Z =**

# TiO<sub>2</sub>, rutilo



# $\text{Al}_2\text{O}_3$ , corindón



**Números de Coordinación:**

$\text{Al}^{3+} =$

$\text{O}^{2-} =$

**Número de átomos:**

$\text{Al}^{3+} =$

$\text{O}^{2-} =$

**Z =**

## En resumen



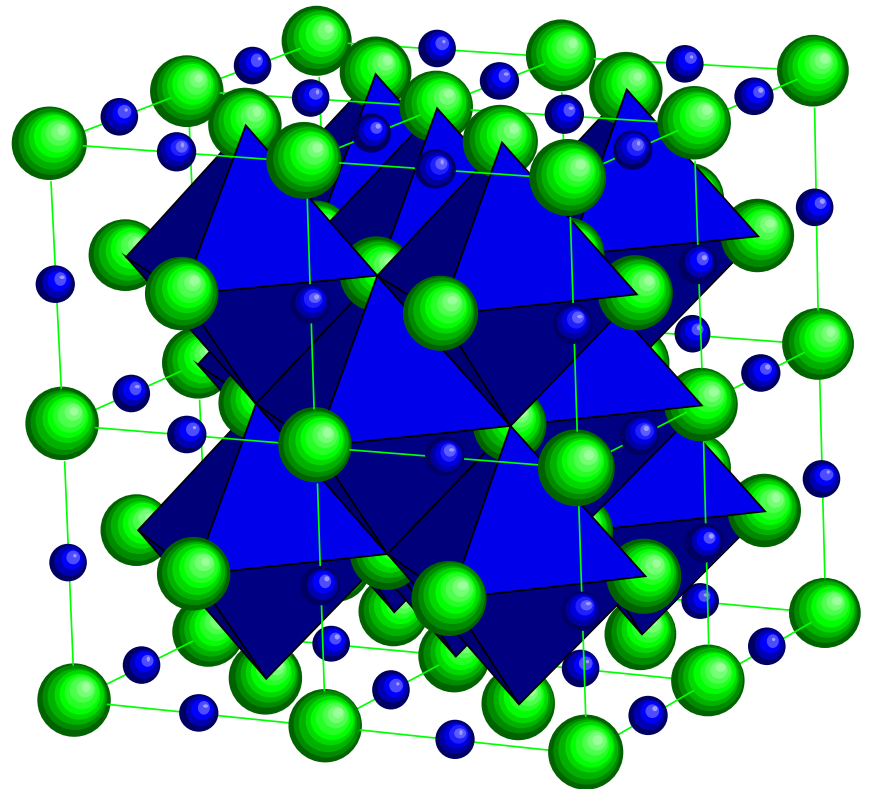
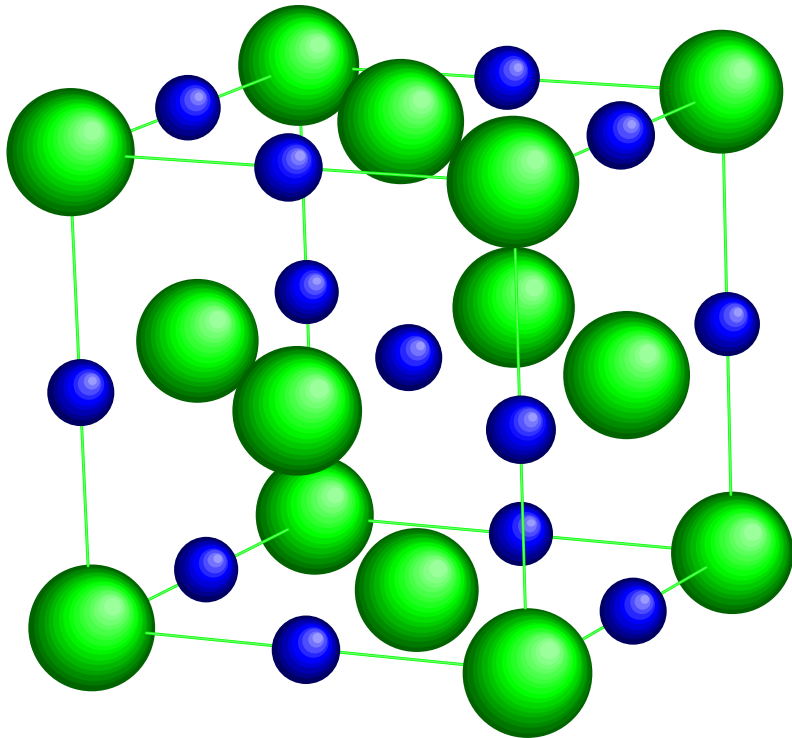
	Estructura Tipo	Oct.	T+	T-
<b>Hexagonal</b>	NiAs	1		
<b>(hcp)</b>	ZnS (wurtzita)		1	
	CdI <sub>2</sub>	1/2		
	TiO <sub>2</sub> (rutilo) *	1/2		



# REGLAS DE PAULING



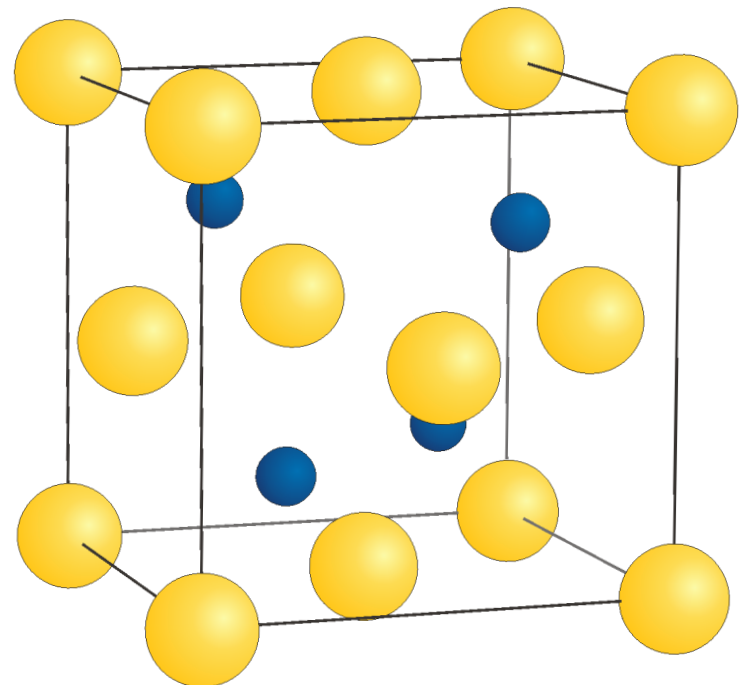
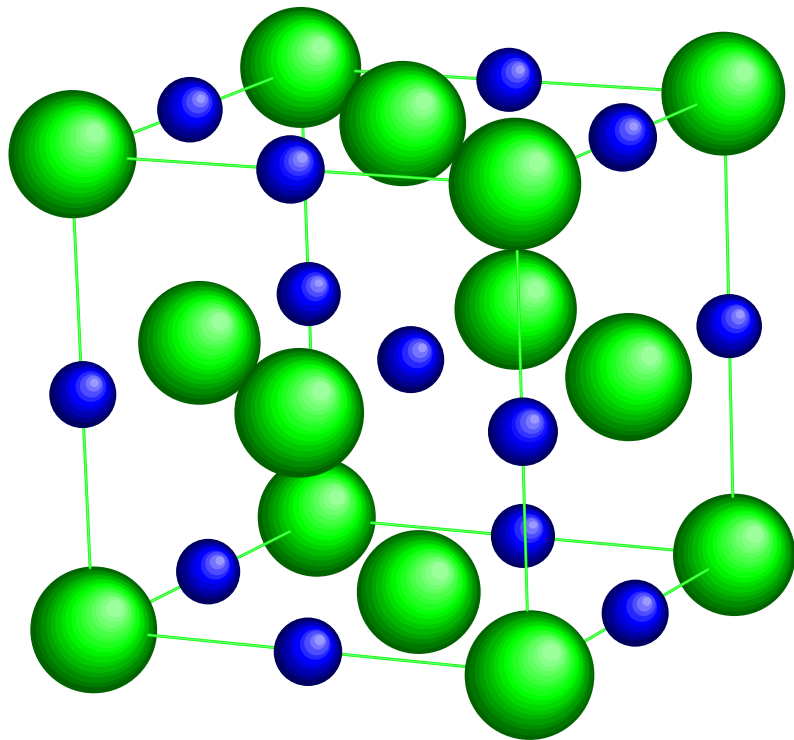
**1. Poliedro de coordinación.** Alrededor de cada **cación** se forma un poliedro de coordinación con los **aniones** y viceversa. Será estable sólo si el **cación está en contacto** con sus aniones vecinos.



# REGLAS DE PAULING

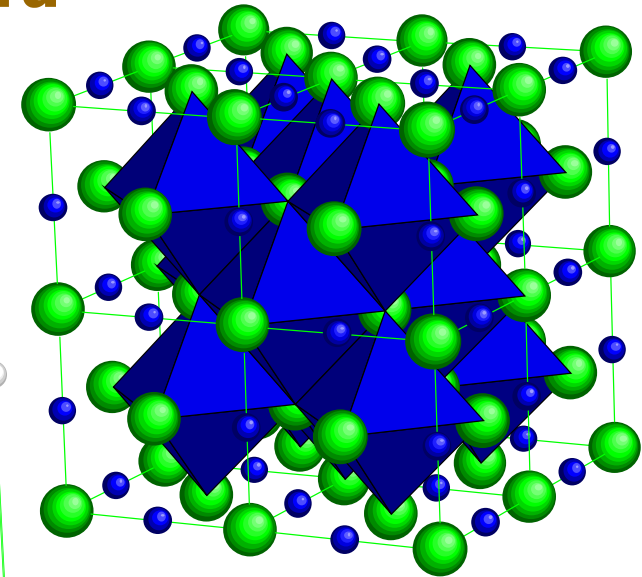
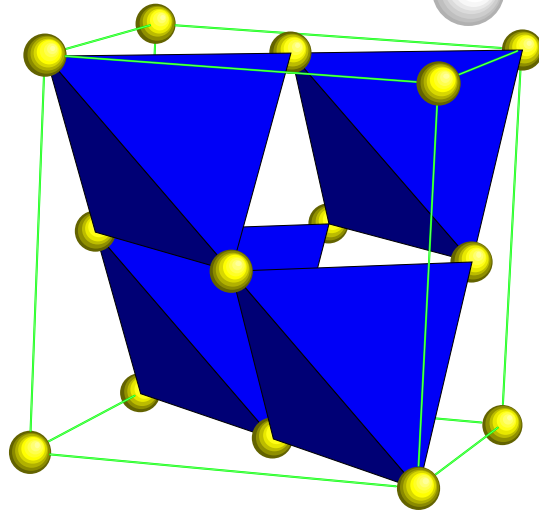
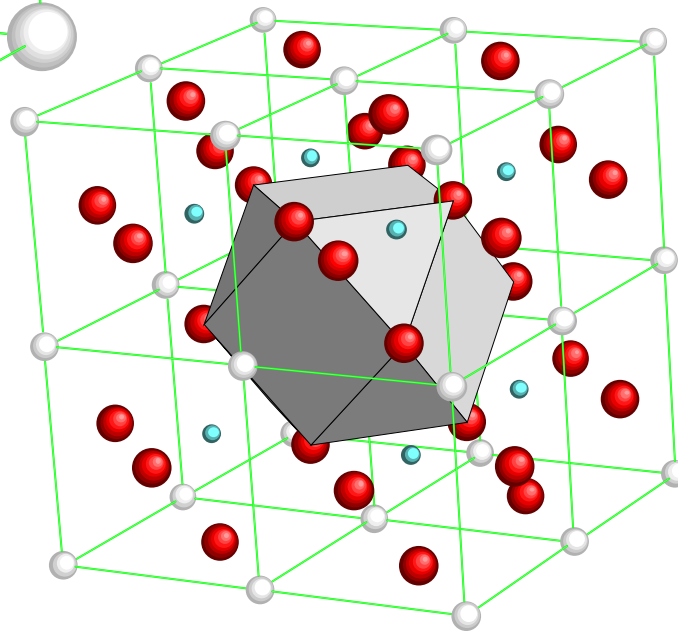
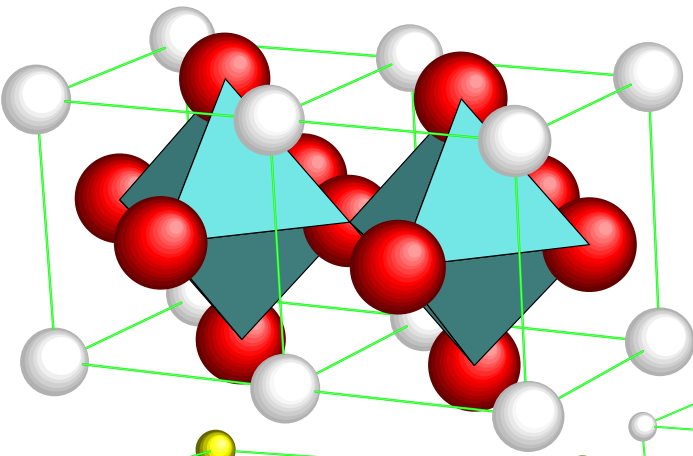


**2. Principio electrostático.** En una estructura estable el orden debe ser tal que se conserve la **electroneutralidad** local.



**3. Compartición de poliedros.** La estabilidad de la estructura depende de las uniones entre poliedros. El efecto es mayor cuando el catión tiene más carga y menor número de coordinación.

**Vértice > Arista > Cara**



**4. Principio de parismonia (homogeneidad).** Átomos químicamente similares tienden a adquirir estructuras similares, esto es, entornos similares.

Todas las reglas tienden a maximizar las interacciones de atracción **cación-anión**.

Y minimizar las repulsiones **cación-cación** y **anión-anión**.

**5. Evasión de cationes.** En una estructura que contienen **varios cationes**, aquellos con **mayor estado de oxidación** y **bajo número de coordinación** tienen a **no** compartir elementos del poliedro entre sí.

