

Química del estado sólido. Tarea No. 4. Respuestas a los ejercicios

1. Calcule usted el factor de empaquetamiento para una celda unitaria cúbica centrada en 2 caras (C)

Las notriciones atómicas fuerzan a que $\sqrt{2}a_0 = 4r$; mientras que el número de esferas por celda son $2\left(\frac{8}{8} + \frac{2}{2}\right)$. Así el espacio total es a^3 , mientras que el espacio ocupado es $2\left(\frac{4}{3}\pi r^3\right)$, con $r = \frac{\sqrt{2}a_0}{4} = \frac{a_0}{\sqrt{2} \cdot 2}$

$$F_e = \frac{2\left(\frac{4}{3}\pi\right)\left(\frac{a_0}{\sqrt{2} \cdot 2}\right)^3}{(2\sqrt{2})^3 a_0^3} = \frac{8\pi}{3(2\sqrt{2})^3} = 0.37 \frac{1}{1}$$

37% es el factor de empaquetamiento.

2. Explique si existe una contracción o una expansión cuando el titanio experimenta una transformación de fase y pasa de una fase hcp a una cúbica I (bcc) los radios atómicos son 145.8 pm en hcp y 142.5 pm en bcc

Sabiendo que $\rho = \frac{m}{V}$, los sistemas con menor densidad mostrarán un mayor volumen para un igual valor de la masa (recordar que ρ es una cantidad intensiva). $\bar{M} = 47.867 \text{ g/mole}$

$$\rho_{hcp} = \frac{2\bar{M}}{(\text{Vol de celda})N} = \frac{2\bar{M}}{1.633(2r)^3 \cos 30^\circ N} = 4.5351 \text{ g/cm}^3$$

$a = 2r$

$$\rho_{ci} = \frac{2\bar{M}}{a^3 N} \quad \text{como } \sqrt{3}a = 4r \quad \rho_{ci} = \frac{2\bar{M}}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}r\right)^3 N} = 4.4619 \text{ g/cm}^3$$

Por lo que para Ti en hcp \rightarrow CI se verá una menor ρ que implica mayor volumen y \therefore una expansión

3. ¿Existe una expansión o una compresión cuando el Fe se transforma de hcp a cúbica I (bcc)?; los radios son 126 pm en hcp y 122 pm en bcc

Para el caso de Fe ($\bar{M} = 55.847 \text{ g/mol}$) el tratamiento es similar
Pero cambian sus radios

$$\rho_{hcp} = \frac{2\bar{M}}{1.633(2r)^3 \cos 30^\circ N} = 7.1095 \text{ g/cm}^3$$

$$\rho_{ci} = \frac{2\bar{M}}{\left(\frac{4}{\sqrt{3}}r\right)^3 N} = 8.2957 \text{ g/cm}^3$$

Aquí hcp \rightarrow CI
implica mayor densidad \therefore
o sea una contracción