
PROBLEMAS REFERENTES AL TEMA 4

1.-La red cúbica simple consiste en 8 esferas idénticas de radio r , todas en contacto, colocadas en las esquinas de un cubo.

- a) ¿Cuál es el volumen de la celda unidad en ese empaquetamiento?
 b) ¿Qué porcentaje de este volumen está ocupado realmente por las esferas?

Rtas: a) $V = 8 r^3$ b) 52,4 %

2.- Un hipotético metal tiene una estructura cúbica simple. Si su peso atómico es de 70,4 g/mol y el radio atómico es 0,126 nm. Calcular su densidad.

Rta: $d = 7,5 \text{ g/cm}^3$

- 3.- a) Demuestre que el radio atómico r de un elemento que cristaliza en unidades cúbicas centradas en las caras es $r = (2^{1/2}/4)l$, donde l es la arista del cubo.
 b) Demuestre que el radio atómico de un elemento que cristaliza en unidades cúbicas centradas en el cuerpo es $r = (3^{1/2}/4)l$.
 c) Calcule el radio atómico del Cu y del Rb (Cu: estructura FCC; Rb: estructura BCC), sabiendo que la longitud de las aristas de sus celdas unidades son 3,60 Å y 5,62 Å, respectivamente.

Rta: c) $r(\text{Cu}) = 1,27 \text{ Å}$ $r(\text{Rb}) = 2,43 \text{ Å}$

4.-Si el radio atómico del plomo vale 1,75 Å. Calcular el volumen de la celda unidad en metros cúbicos. El Pb cristaliza en FCC.

Rta: $1,2 \times 10^{-28} \text{ m}^3$

5.- El gas noble Ar cristaliza con un empaquetamiento cúbico centrado en las caras y el K lo hace con un empaquetamiento cúbico centrado en el cuerpo.

- a) Esquematice la celda unidad en los dos casos.
 b) Calcule la longitud de la arista de la celda unidad, sabiendo que los radios atómicos son: $r(\text{Ar}) = 1,92 \text{ Å}$ y $r(\text{K}) = 2,25 \text{ Å}$.

Rtas: b) $l(\text{Ar}) = 5,43 \text{ Å}$ $l(\text{K}) = 5,20 \text{ Å}$

6.-El Au existe en forma de celda cúbica centrada en las caras y la longitud de la arista de la celda unidad es 4,07 Å. Determine:

- a) el número de átomos presentes en la celda unidad del oro,
 b) la densidad del oro.

Rtas: a) $Z = 4$ b) $d = 19,4 \text{ g/cm}^3$

7.-Calcular el radio de un átomo de Tantalio (Ta) sabiendo que tiene una estructura cristalina BCC, una densidad de $16,6 \text{ g/cm}^3$ y un peso atómico de 180,9 g/mol.

Rta: 1,43 Å

8.-El elemento cromo existe en forma de retículo cúbico centrado en el cuerpo y la longitud de la arista de la celdilla unidad es 2,88 Å. La densidad del cromo es $7,20 \text{ g/cm}^3$. ¿Cuántos átomos contienen 52 g de cromo?

Rta: $N = 6,042 \cdot 10^{23}$ átomos

9.- El Niobio (Nb) tiene un radio atómico de 0,1430 nm y una densidad de $8,57 \text{ /cm}^3$. Determinar si tiene una estructura cristalina FCC ó BCC.

- 10.-Prediga la fórmula empírica de los compuestos M_aX_b en los siguientes casos:
- Cuando los átomos M están en los vértices y X en el centro de una red cúbica centrada en el cuerpo.
 - Cuando los átomos X ocupan la mitad de los vértices y M el resto de los vértices y el centro de una red cúbica centrada en el cuerpo.
 - Cuando M ocupa todos los huecos tetraédricos de una red cúbica centrada en las caras de X.
 - Cuando M está en los vértices y X en el centro de las caras de una red cúbica centrada en las caras.

11.-Calcule el valor de las relaciones de radios límites para los empaquetamientos iónicos de los números de coordinación 8 (CsCl), 6 (NaCl) y 4 (ZnS).

12.-Basándose en la correspondiente relación de radios, diga qué tipo de geometría cristalina presentan, probablemente, los siguientes compuestos iónicos: KCl, NaCl, ZnS y SrS.

- 13.-La estructura del NaCl se puede describir como un empaquetamiento cúbico compacto de iones Cl^- , donde los iones Na^+ se ubican en los huecos octaédricos. La densidad del NaCl es $\delta = 2,163 \text{ g/cm}^3$ y la longitud de la arista de la celda unidad es $l = 5,64 \text{ \AA}$.
- Dibuje la celda unidad del NaCl.
 - Calcule el valor del número de Avogadro.
 - ¿Cuál es el índice de coordinación del ión Cl^- en el NaCl?

- 14.- Los siguientes compuestos que cristalizan con la estructura del NaCl tienen, respectivamente las siguientes longitudes de aristas de celda elemental. MgSe (5,45 Å), CaSe (5,9 Å), SrSe (6,23 Å), BaSe (6,62 Å).
- Determine los radios de los cationes (para determinar el radio del Se^{2-} , considere que en el MgSe los iones están en contacto por la diagonal de la cara)
 - Calcular en cada caso la diagonal de la cara. ¿A qué se deben las diferencias?
 - Calcular el volumen de la celda unidad para cada uno.
 - Verificar si efectivamente la estructura es la del NaCl.

- 15.-a) ¿Cuáles son las dimensiones de un cubo que contiene un mol de NaCl(s), si la distancia entre los centros de los iones adyacentes Na^+ y Cl^- es $2,819 \times 10^{-8} \text{ cm}$.
b) ¿Cuántos iones de cada carga se encuentran a lo largo de la arista del cubo?

Rtas.: a) $L = 3 \text{ cm}$ b) $n = 5,3 \cdot 10^7$ iones

- 16.- Experimentalmente la densidad molar del Molibdeno (Mo) es $10,2 \text{ g/cm}^3$. Si tiene una estructura cristalina BCC con un radio atómico de $1,36 \text{ \AA}$ y un peso atómico de $95,94 \text{ g/mol}$, calcular y comparar su densidad molar con el valor experimental. ¿A que puede deberse la diferencia entre ambos valores?

17.-En el CsCl la distancia más corta entre los centros de los iones Cs^+ y Cl^- es de $3,56 \text{ \AA}$ y el radio del ión Cl^- es $1,81 \text{ \AA}$, averiguar:

- la longitud de la arista de la celda unidad,
- el volumen molar,
- la densidad del CsCl.

$$\text{Rtas: a) } l = 4,11 \text{ \AA} \quad \text{b) } V_m = 41,8 \text{ cm}^3 \quad \text{c) } d = 4,03 \text{ g/cm}^3$$

18.-En el AgCl, el radio del Cl^- es $1,81 \text{ \AA}$ y el radio de la Ag^+ es $1,26 \text{ \AA}$. Averiguar:

- qué estructura presenta el cristal,
- el volumen de la celda unidad

$$\text{Rta: b) } V = 2,315 \cdot 10^{-22} \text{ cm}^3$$

19.-La densidad del AgCl es de $5,56 \text{ g/cm}^3$. Calcular el volumen de la celda a partir de este dato. Compare este resultado con el obtenido en el problema anterior ¿a qué atribuye la diferencia?

$$\text{Rta: } V = 1,706 \cdot 10^{-22} \text{ cm}^3$$

20.-La arista de la celda unidad del diamante mide $3,57 \text{ \AA}$. Averiguar:

- la densidad del mismo,
- la distancia entre dos átomos de carbono adyacentes.

$$\text{Rtas: a) } d = 3,51 \text{ g/cm}^3 \quad \text{b) } 2r = 1,55 \text{ \AA}$$

21.-La longitud de la arista de la celda unidad del sulfuro de cinc (ZnS) es de $5,96 \text{ \AA}$ y su densidad es $\delta = 3,06 \text{ g/cm}^3$, determine:

- el número de Avogadro,
- la distancia más próxima entre los iones Zn^{2+} y S^{2-} .

$$\text{Rta: b) } d = 2,58 \text{ \AA}$$

22.- Recordando que la energía reticular (U_g) puede calcularse según la ecuación:

$$U_g = - (M e^2 / r) N (z_+ z_-) (1 - 1 / n)$$

y sabiendo que los sólidos iónicos MgO y NaF cristalizan en redes de tipo NaCl:

- Deduzca cuál de ellos tiene una energía reticular mayor ($n=7$ para todos los iones con configuración de Ne).
- Calcule la U_g para NaF, sabiendo que para el MgO la energía reticular vale 3889 kJ/mol .
- Compare el resultado de b) con el obtenido en el problema 19 del Tema 2. ¿Son coherentes ambos resultados?

$$\text{Rta: b) } -972,25 \text{ kJ/mol}$$