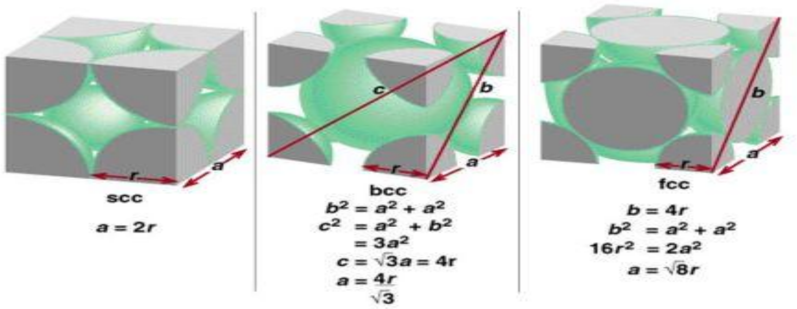
1era EVALUACIÓN QUÍMICA GENERAL I / 08 DE JULIO de 2009 /ESPOL / ICQA /

PARA LA EVALUACIÓN EL SIGNO COMA (,) SE TOMARÁ PARA REPRESENTAR MILES, EJEMPLO: 10^{+3} = 1,000. EL PUNTO (.) SE TOMARÁ PARA REPRESENTAR DECIMALES, EJEMPLO: 10^{-1} = 0.1

Tema #6 (10 puntos). Determinación de parámetros de una celda a partir de datos macroscópicos

El oro (Au) cristaliza en una estructura cúbica compacta (un cubo centrado en las caras) y tiene una densidad de 19.3 g/cm^3. Calcule (con una estrategia de tres pasos) el radio iónico del oro en picómetros. Au = 197.0 g/mol. Para sus cálculos puede hacer uso de la figura insertada.

Posteriormente, sírvase dibujar la estructura referida, en tres dimensiones. En su estructura indicar los lados a, b y c y los ángulos α, β y γ.



Estrategia: Se desea calcular el radio atómico del oro. Para una celda unitaria cúbica centrada en las caras, la relación entre el radio (r) y la longitud de la arista (a), de acuerdo al gráfico dado, es a=raíz cuadrada de 8r.Por lo tanto, para determinar el r de un átomo de Au, se necesita encontrar la arista. El volumen de un cubo es V= a^{+3} (arista al cubo) o a = raíz cubica del V. Por lo tanto, al determinar el volumen de una celda unitaria (CU), se puede calcular a.

Aquí se conoce la densidad y su relación con la masa y volumen:

Densidad (dada) = masa (se necesita encontrar)/ volumen (se desea calcular)

La secuencia de los pasos se resume a continuación:

Densidad CU → Volumen CU → longitud arista CU → Radio atómico del Au

Solución:

Se conoce la densidad, así que con el fin de determinar el volumen de la CU, se debe encontrar la masa de la celda unitaria. Cada celda unitaria tiene ocho vértices y seis caras. De acuerdo con la figura, en cada una de las celdas existe un total.

$$(8 *1/8) + (6 *1/2) = 4$$

La masa de la celda unitaria es:

m= (4 átomos/ celda unitaria) (1 mol / 6.022 x 10^{23}) (197.0 g Au/ 1 mol Au) = 1.31 x 10 $^{-21}$ g / celda unitaria

A partir de la definición de densidad (d=m/V), se calcula el volumen de la celda unitaria como sigue.

V=m/d= 1.31 x 10 $^{-21}$ / 19.3 g/cm^3 = 6.79 x 10^{-23} cm^3.

Como el volumen es la longitud elevada al cubo, se saca la raíz cúbica del volumen de la CU para obtener la longitud de la arista (a) de la celda:

a= raíz cúbica del V = (raíz cúbica 6.79 x 10^{-23} cm^3)= 4.08 x 10^{-8} cm.

En la figura se puede apreciar que el radio (r) de una esfera de Au está relacionado con la longitud de la arista mediante la expresión: a = (raíz cuadrada de 8) (r).

Por lo tanto:

r= a / (raíz cuadrada 8) = 4.08 x 10^{-8} cm / (raíz cuadrada 8) = 1.44 x 10^{-8} cm.

r= (1.44 x 10^{-8} cm) (1 x 10^{-2} m/1cm) (1pm/1 x 10^{-12} m)

$r = 144$ pm.