

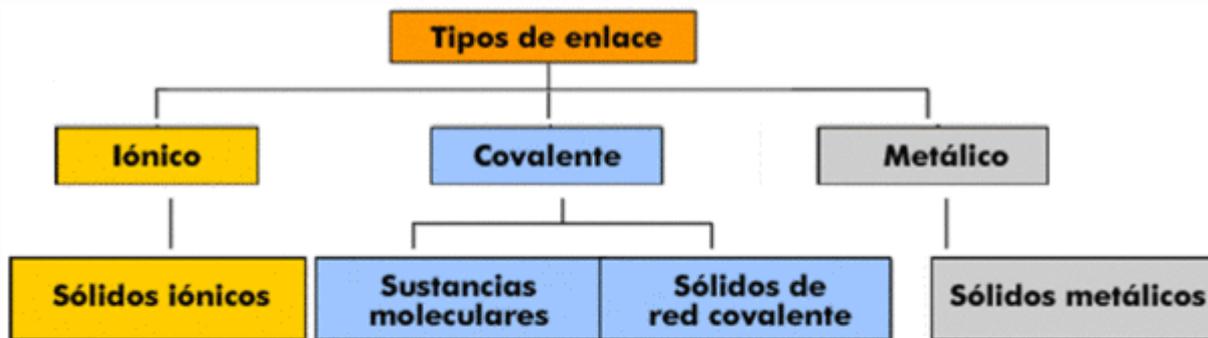
Esta obra está licenciada bajo una Licencia Creative Commons



Reconocimiento-NoComercial-SinObraDerivada 3.0 España
Attribution-NonCommercial-NoDerivs 3.0 Unported
CC BY-NC-ND 3.0

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/es/>

Las fases condensadas (1)



- * Huheey, J. E., Keiter, R. L., Keiter, E. A., “*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*”, 4ª Ed., Harper Collins, 1993. **Capítulo 4 y 7.**
- * Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999. **Capítulo 12 y 13.**
- * Rodgers, G. E., “*Introduction to Coordination, Solid-state and Descriptive Inorganic Chemistry*”, McGraw-Hill, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica, Introducción a la Química de Coordinación, del Estado Sólido y Descriptiva*”, McGraw-Hill, 1995. **Capítulo 7.**
- * Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., “*Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, **Capítulo 6.** Traducción española de la 2ª Ed. “*Química Inorgánica*”, Pearson Prentice Hall, 2006. **Capítulo 5.**

- * Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 5.**
- * Douglas, B.; McDaniel, D.; Alexander, J., “*Problems for Concepts and Models of Inorganic Chemistry*”, 3ª Ed., John Wiley & Sons, 1994. **Capítulo 5.**
- * Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999. **Capítulo 17.**
- * Paraira, M.; Pérez González, J. J., “*Cálculos básicos en estructura atómica y molecular*”, Ed. Vicens-Vives, 1988. **Capítulo 9.**
- * Moeller, T., “*Inorganic Chemistry. A Modern Introduction*”, John Wiley & Sons, 1994. Traducción española: “*Química Inorgánica*”, Reverté, 1994. **Capítulo 4.**
- * Atkins, P.; Overton, T.; Rourke, J.; Weller, M.; Armstrong, F., (Shriver-Atkins) “*Inorganic Chemistry*”, 4ª Ed., Oxford University Press, 2006. Traducción española de la 4ª Ed. “*Química Inorgánica*”, McGraw-Hill Interamericana, 2008. **Capítulo 3.**

Las fases condensadas

Hasta ahora hemos estudiado las moléculas independientes de todo influjo externo.

Gases: He, Ne, Cl₂, O₂, N₂, NH₃, CO, CO₂, HCl, SO₂, ...

Líquidos: Br₂, H₂O, EtOH, ...

Sólidos: I₂, S₈, azúcar, ...

} Fases condensadas

Estado Líquido

Todo gas se puede licuar \Rightarrow existen fuerzas intermoleculares, **Tema 5.1**

* Predominan las fuerzas atractivas (no dependen de T), las moléculas colapsan para formar la fase líquida o sólida.

* Predominan las fuerzas dispersivas (dependen de T), permanece en estado gaseoso.

T \uparrow Gas
T \downarrow Líquido
T $\downarrow\downarrow\downarrow$ Sólido

Movimiento de traslación de las moléculas severamente limitado, Fuerzas intermoleculares.

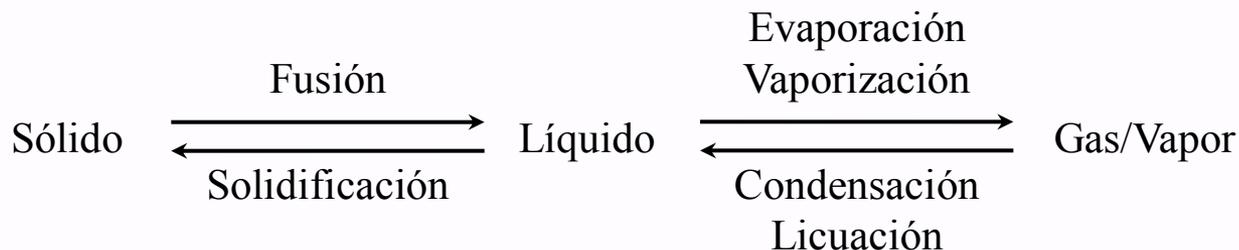
Movimiento de las moléculas en el seno del líquido \Rightarrow **Fluidez**, *adaptan su forma a la del recipiente que lo contiene.*

Viscosidad, depende de la calidad de las Fuerzas intermoleculares.

Presión de vapor

Las fases condensadas

Estado Sólido



Movimiento de traslación de las moléculas totalmente impedido, Fuerzas intermoleculares.

Movimiento de las moléculas se limita a rotación y vibración.

Forma rígida.

Condiciones normales de presión y temperatura:

- * Líquidos y gases constituidos por átomos (He, Ne) o moléculas (H₂O, CO, CO₂)
- * Sólidos constituidos por átomos (Au, Pb), iones (Na⁺Cl⁻) o moléculas (I₂) con fuerzas de interacción muy fuertes: interatómicas, interiónicas, intermoleculares.

Tipos de Sólidos

Sólidos Moleculares

Formados por moléculas (I_2), unidas por fuerzas intermoleculares, atractivas, **Tema 5.1**

Sólidos Iónicos

Formados por iones (Na^+Cl^-), unidas por interacciones de tipo electrostático, tanto atractivas como repulsivas, no direccionales, lo que llamaremos enlace iónico, **Tema 4.4**

Elementos con gran diferencia de electronegatividad.
Traslación impedida, pero con vibración y rotación.

Sólidos Metálicos

Formados por átomos (Au, Pb), unidos por interacciones de tipo atractivo, no direccionales, lo que llamaremos enlace metálico, **Tema 4.3**

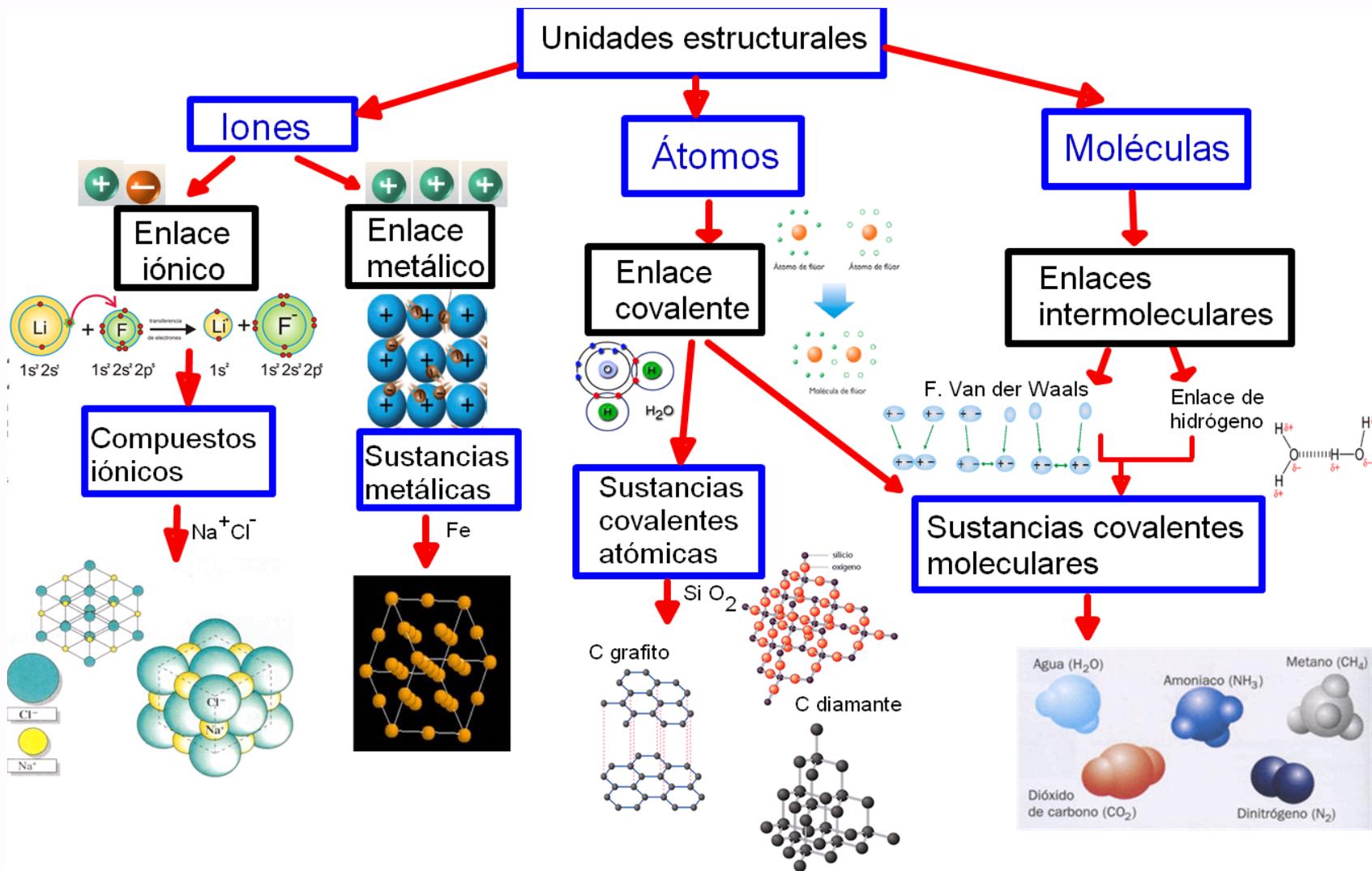
Elementos muy electropositivos.

Sólidos Covalentes

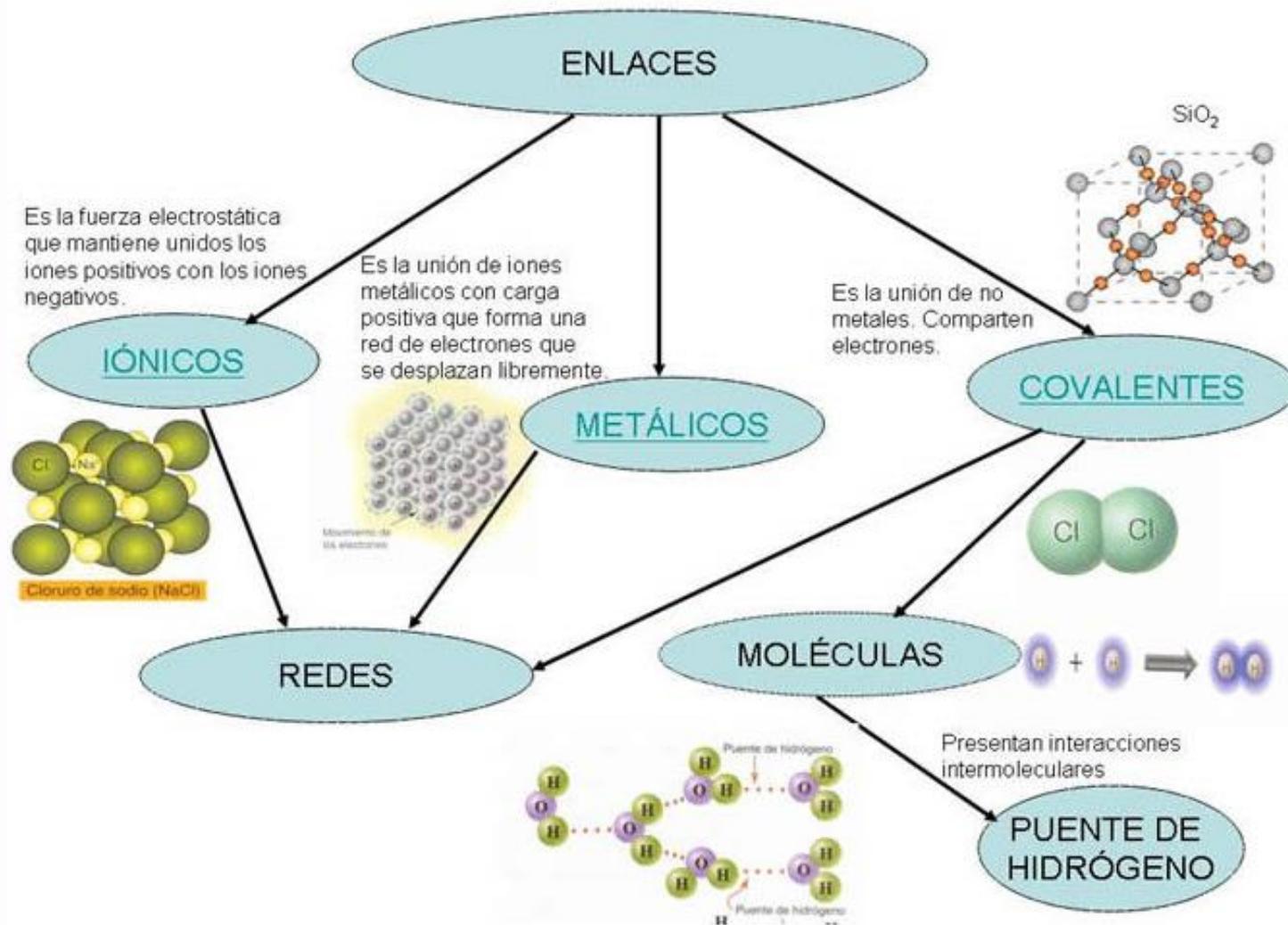
Formados por átomos (C), unidos por interacciones de enlace covalente, fuertemente direccionales, lo que llamaremos sólidos covalentes o sólidos tridimensionales, **Tema 4.2**

Elementos de electronegatividad similar, y relativamente elevada.

Tipos de Sólidos



Tipos de Sólidos



Tipos de Sólidos

Comparación entre los distintos tipos de sólidos

Fuerzas de cohesión iónicas, covalentes y metálicas son muy intensas.

Fuerzas intermoleculares son comparativamente muy débiles. Clasificación “*formal*”

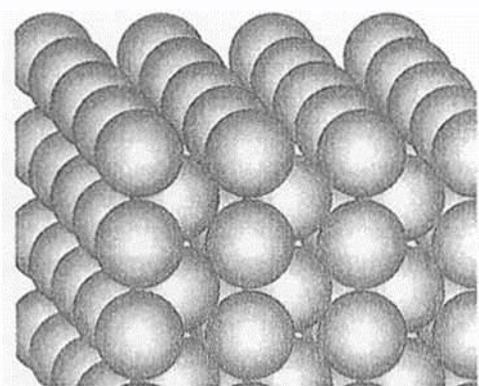
- * Puntos de fusión y ebullición altos para sólidos iónicos, covalentes y metálicos, (excep Hg)
Puntos de fusión y ebullición bajos para sólidos moleculares, que suelen ser gases (excep H₂O)
- * Elementos con electronegatividad similar y elevada, frontera entre metal y no metal \Rightarrow sólidos covalentes \Rightarrow interacción muy fuerte, marcadamente direccional.
- * Elementos con electronegatividad similar que forman unidades discretas \Rightarrow sólidos moleculares \Rightarrow interacción débil, habitualmente no direccional.
- * Elementos con electronegatividad diferente \Rightarrow sólidos iónicos \Rightarrow interacción muy fuerte, no direccional.
- * Elementos con electronegatividad similar y baja (electropositivos) \Rightarrow sólidos metálicos \Rightarrow interacción muy fuerte, no direccional.

Redes Cristalinas

Qué es un sólido cristalino

Sólido cristalino, red cristalina, *disposición ordenada de las partículas que lo componen*, cada una tiene su posición.

Veamos que significa esto con un ejemplo: α -hierro



Disposición ordenada de los átomos de Fe en un cristal de α -Fe

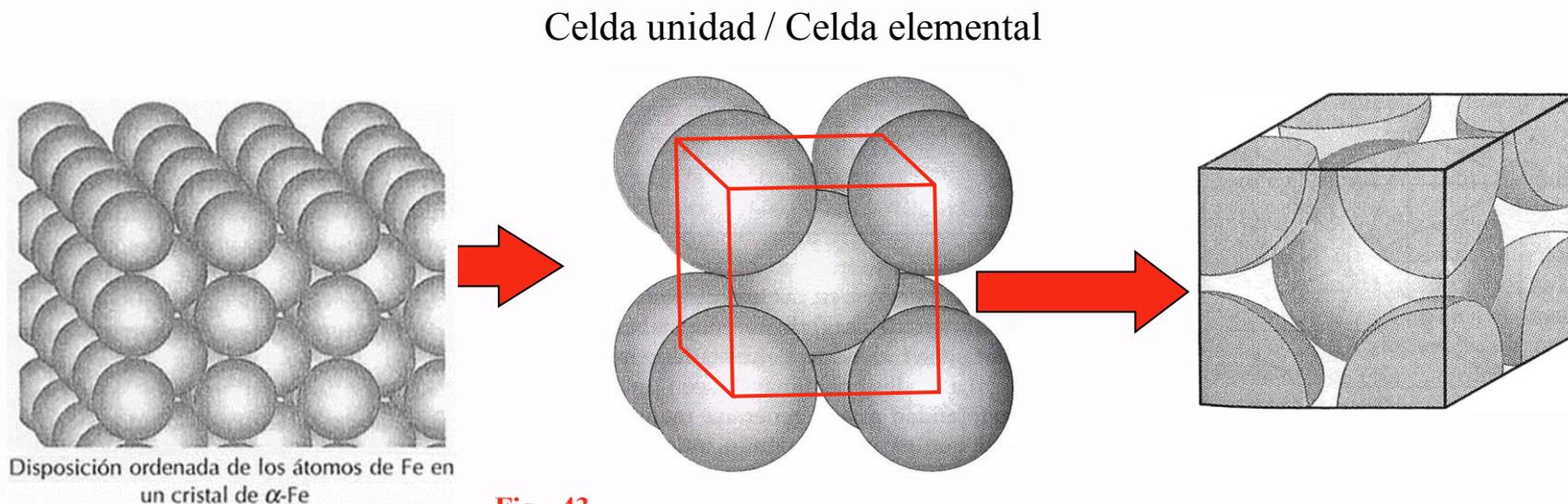
Fig - 43

Germen cristalino / Cristal
Monocristal / Granos

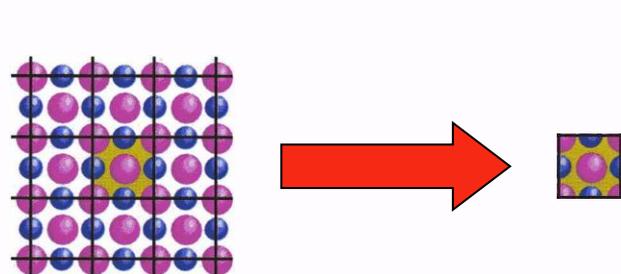
Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 262.

Redes Cristalinas

Celda unidad



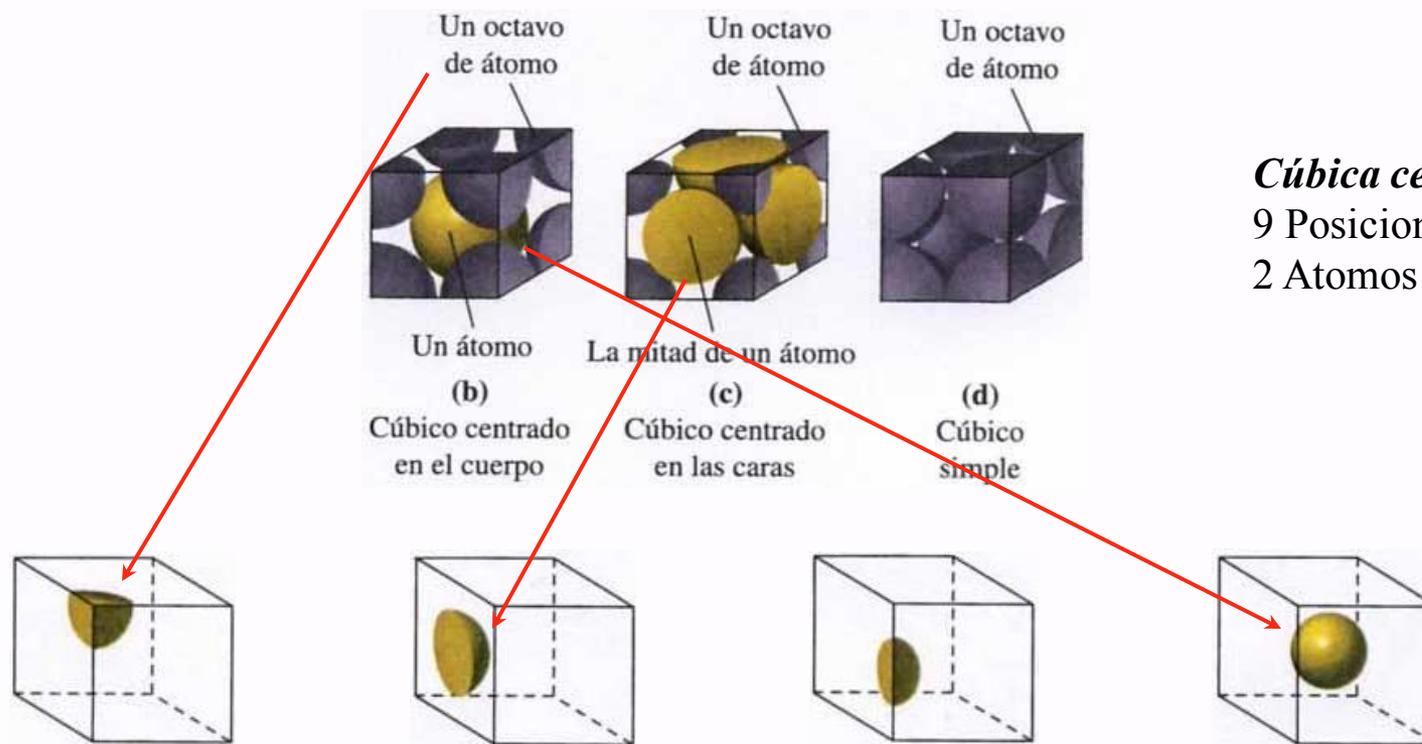
Casabó i Gispert, J, “Estructura Atómica y Enlace Químico”, Reverté, 1999, pp 262, 264 y 263.



Celda unidad: fragmento más pequeño del cristal, que contiene todos los elementos de simetría, y que repetido en las tres direcciones del espacio regenera el cristal original.

Redes Cristalinas

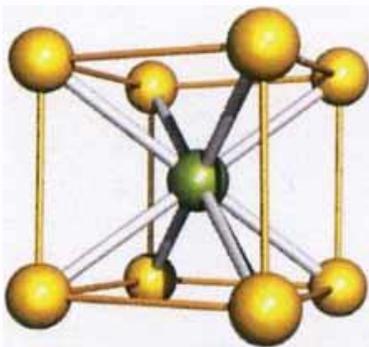
Celda unidad - N° de átomos en la celda unidad



Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., "Química general", 8ª Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 513.

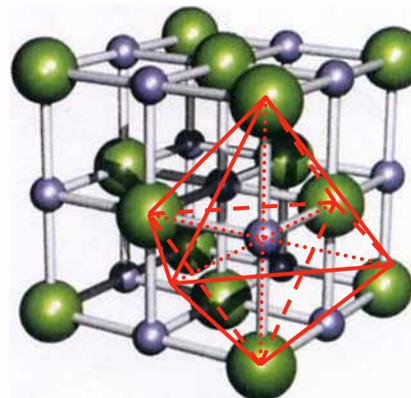
Redes Cristalinas

Celda unidad - N° de coordinación



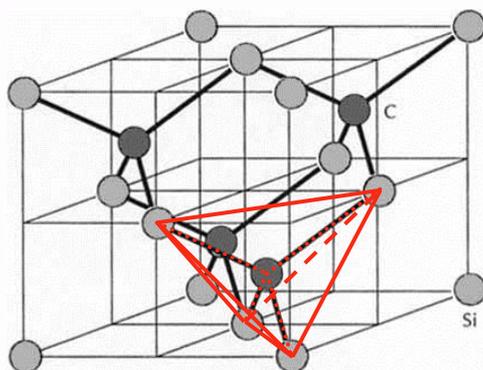
CsCl

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., *"Inorganic Chemistry"*,
3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 168.



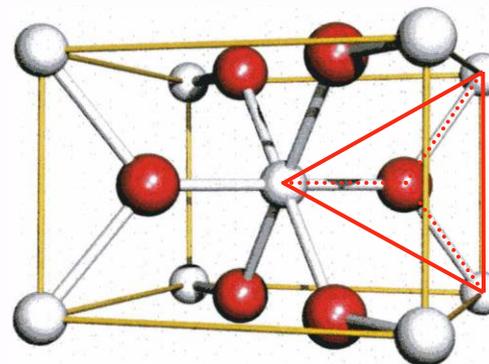
NaCl

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., *"Inorganic Chemistry"*,
3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 165.



SiC

Casabó i Gispert, J., *"Estructura Atómica y Enlace Químico"*,
Reverté, 1999, pp 338.

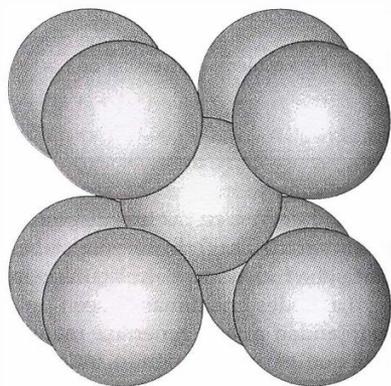


Rutilo

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., *"Inorganic Chemistry"*,
3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 170.

Redes Cristalinas

Celda unidad - Factor de ocupación

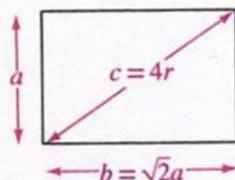
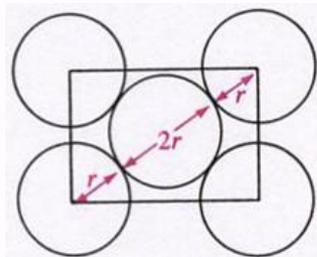


$$\text{Volumen ocupado} = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3$$

$$\text{Volumen total} = a^3$$

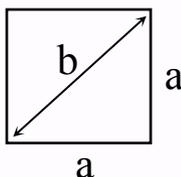
$$\text{Fracción ocupada} = \frac{\text{Volumen ocupado}}{\text{Volumen total}}$$

$$a = f(r)$$



$$(4r)^2 = a^2 + 2 a^2 = 3 a^2$$

$$a = \frac{4r}{\sqrt{3}}$$



$$(4r)^2 = a^2 + b^2$$

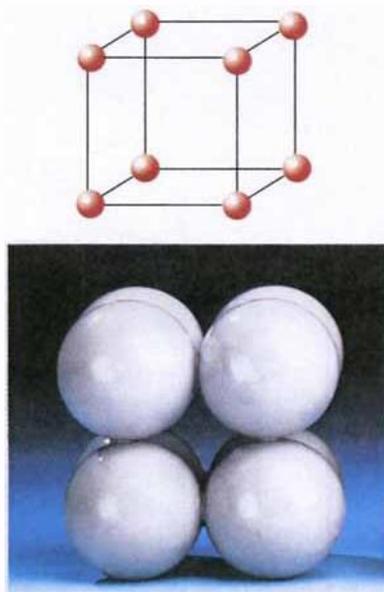
$$b^2 = a^2 + a^2 = 2 a^2$$

0,68

68 %

Redes Cristalinas

Cúbica Simple



Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., "*Química general*", 8ª Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 509.

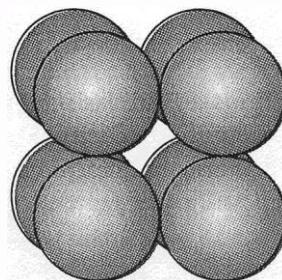
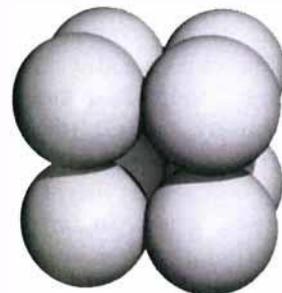


Fig - 42

Casabó i Gispert, J, "*Estructura Atómica y Enlace Químico*", Reverté, 1999, pp 270.



Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "*Inorganic Chemistry*", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 151.

8 posiciones ocupadas - los 8 vértices

1 átomo por celda

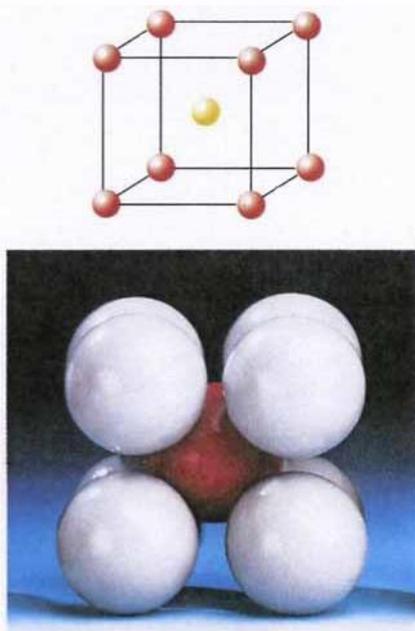
Tangencia en la arista

Nº Coordinación 6, octaédrica

Ocupación 52,3 %

Redes Cristalinas

Cúbica Centrada



Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., "*Química general*", 8ª Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 509.

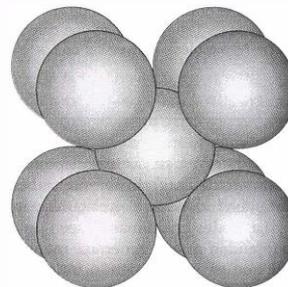
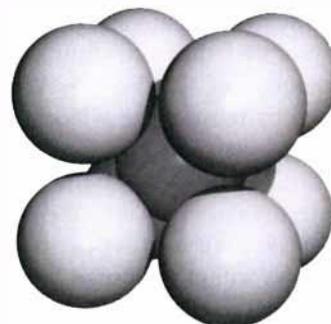


Fig - 43

Casabó i Gispert, J, "*Estructura Atómica y Enlace Químico*", Reverté, 1999, pp 264.



Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "*Inorganic Chemistry*", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 151.

9 posiciones ocupadas - los 8 vértices y el centro del cubo

2 átomo por celda

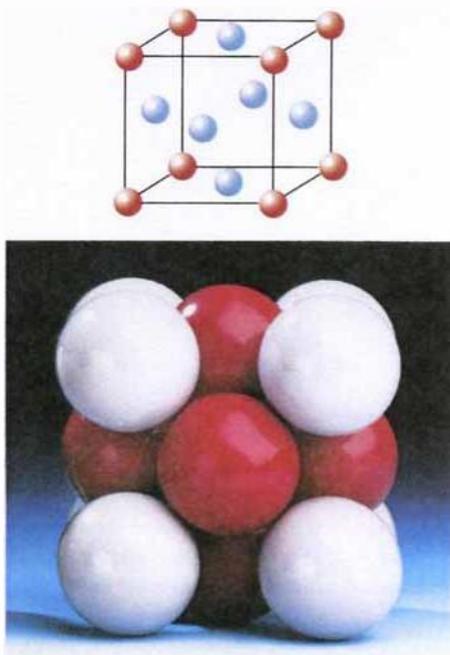
Tangencia con el centro del cubo

Nº Coordinación 8, cúbica

Ocupación 68 %

Redes Cristalinas

Cúbica Compacta



Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., "Química general", 8ª Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 509.

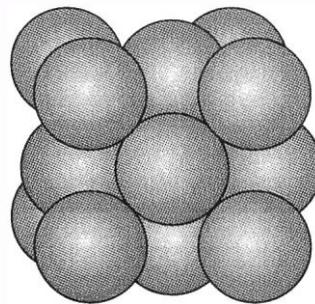


Fig - 44

Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 272.



Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 150.

14 posiciones ocupadas - los 8 vértices y los 6 centros de las caras

4 átomo por celda

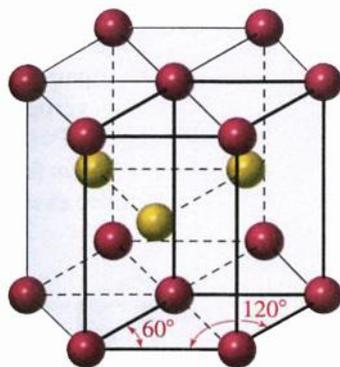
Tangencia en la cara

Nº Coordinación 12, compacta

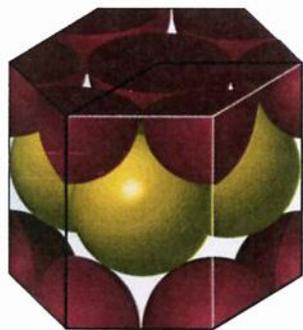
Ocupación 74 %

Redes Cristalinas

Hexagonal Compacta



(a)



(b)

Petrucci, R. H.; Harwood, W. S.; Herring, F. G., "Química general", 8ª Ed., Prentice Hall, 2003, reimpresión 2006, pp 511.

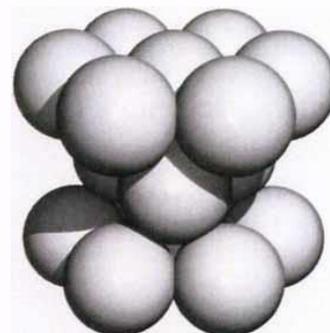
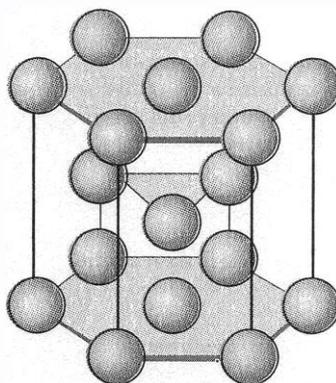


Fig - 45

Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 274.

Housecroft, C. E.; Sharpe, A. G., "Inorganic Chemistry", 3ª Ed., Pearson Prentice Hall, 2008, pp 150.

17 posiciones ocupadas - los 12 vértices, los 2 centros de las caras hexagonales y 3 posiciones interiores

6 átomo por celda

Nº Coordinación 12, compacta

Ocupación 74 %