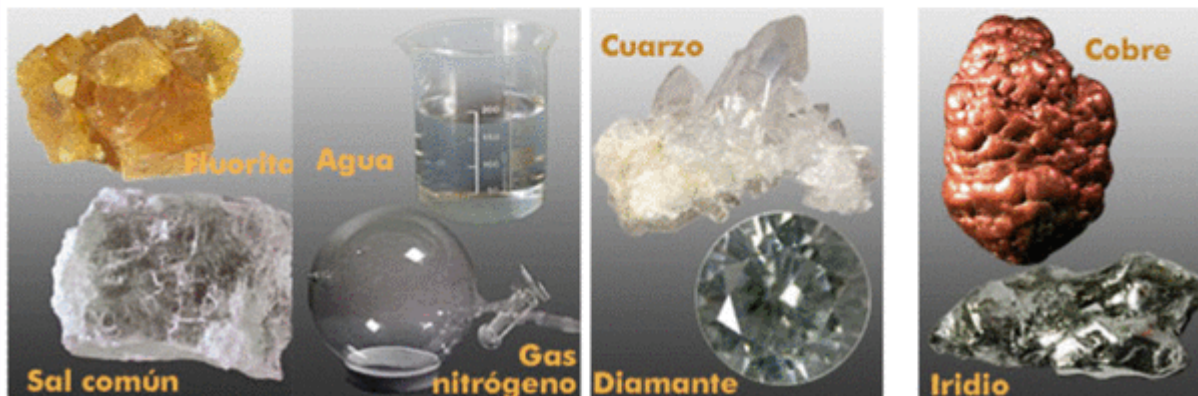


# Las fases condensadas (1)



- \* 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, Cl<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, NH<sub>3</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, HCl, SO<sub>2</sub>, ...

Líquidos: Br<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, EtOH, ...

Sólidos: I<sub>2</sub>, S<sub>8</sub>, 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.

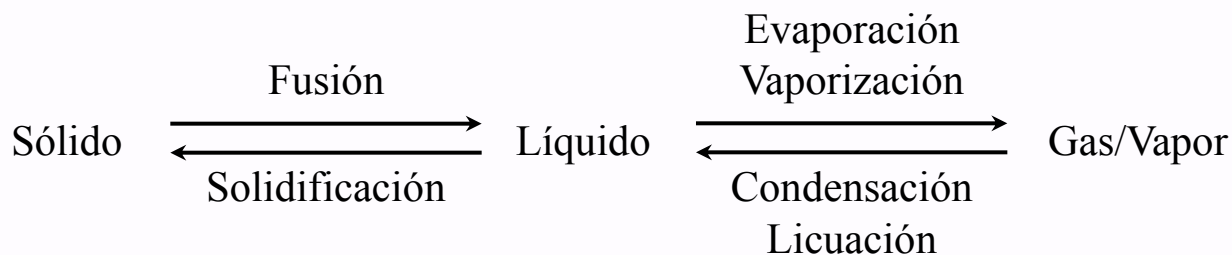
Movimiento de las moléculas en el seno del líquido  $\Rightarrow$  **Fluidez**, *adaptan su forma a la del recipiente que lo contiene.*

**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 (H<sub>2</sub>O, CO, CO<sub>2</sub>)
- \* Sólidos constituidos por átomos (Au, Pb), iones (Na<sup>+</sup>Cl<sup>-</sup>) o moléculas (I<sub>2</sub>) 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**

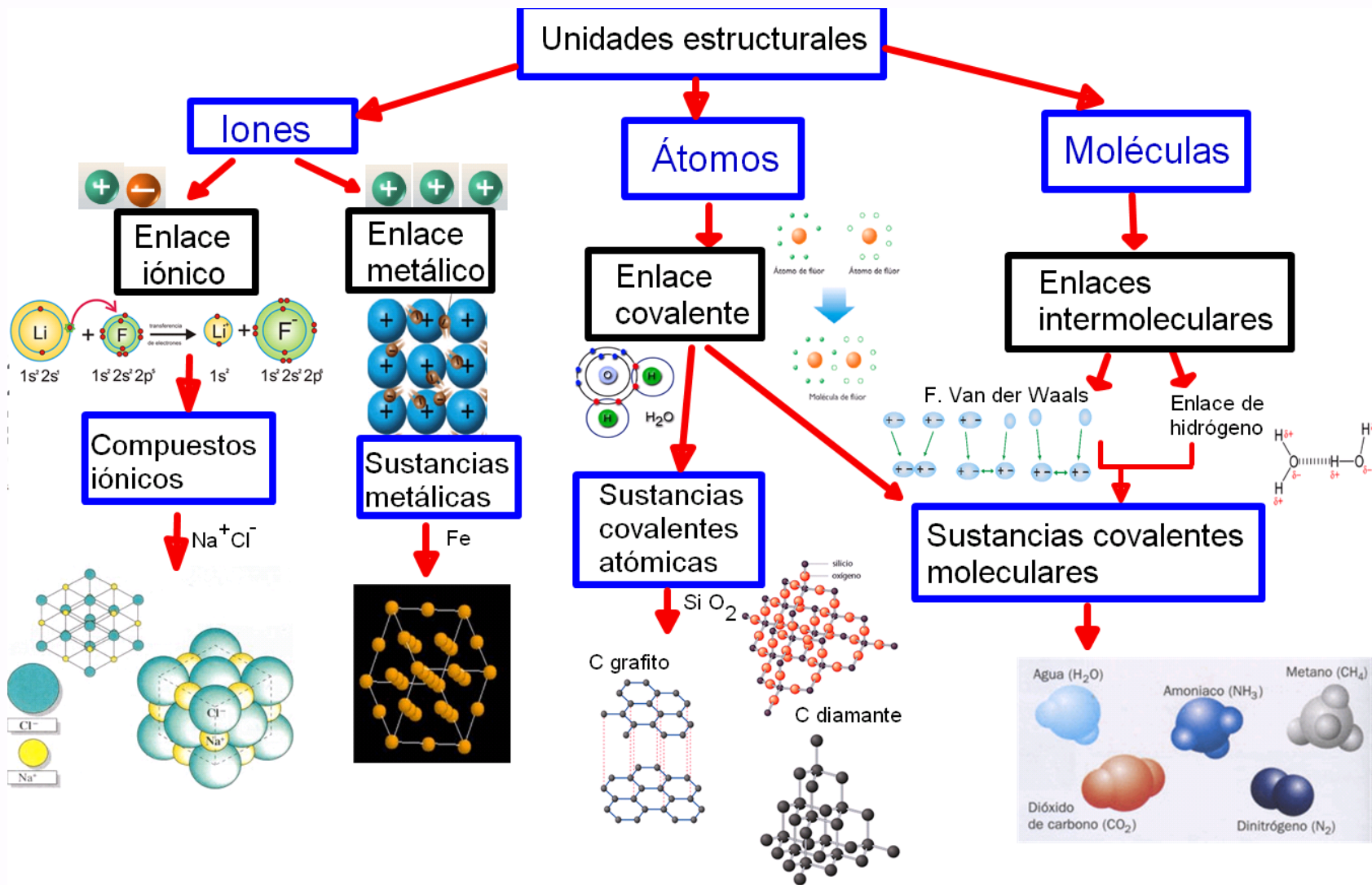
Elementos muy electropositivos.

### **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**

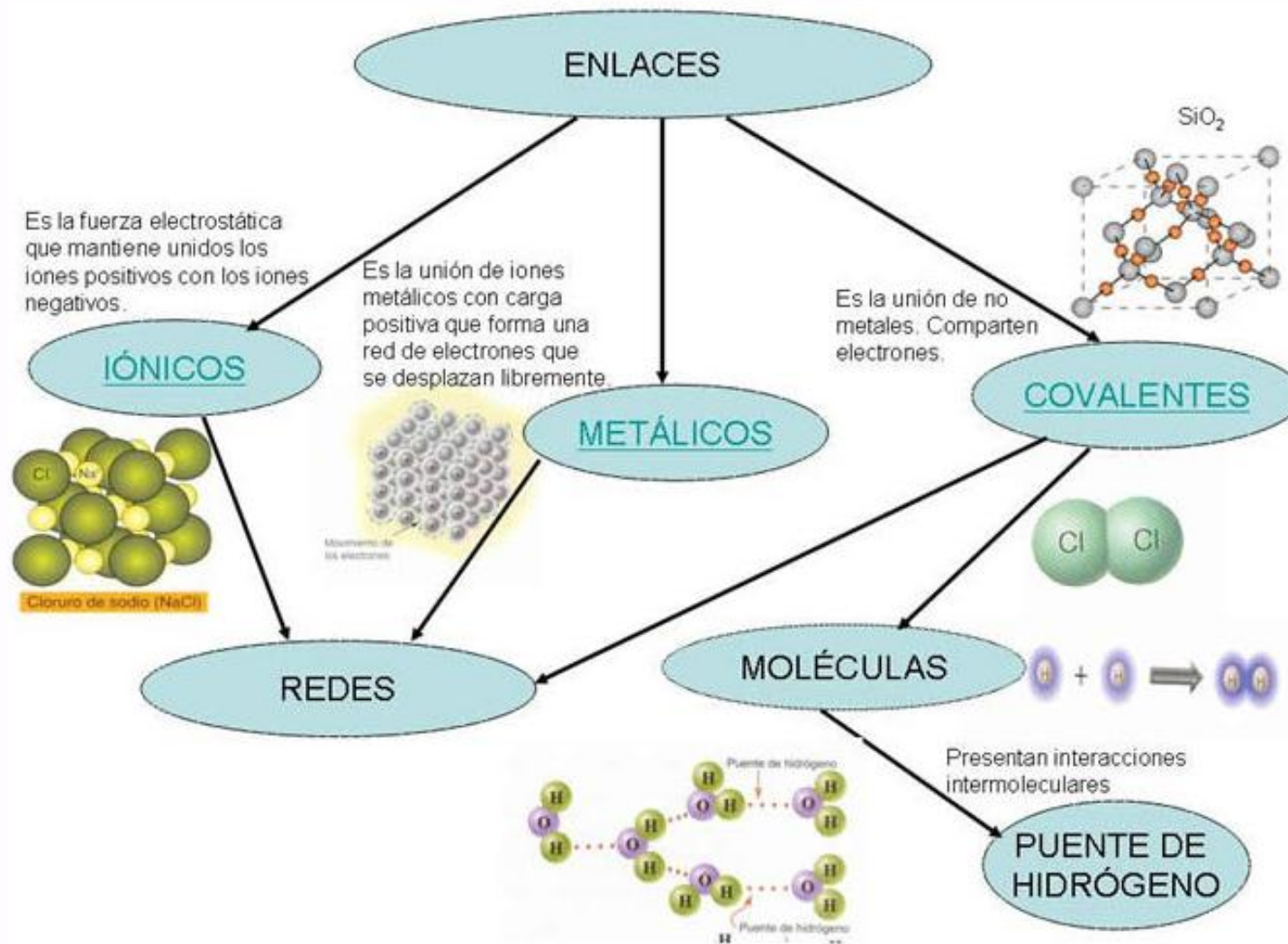
Elementos de electronegatividad similar, y relativamente elevada.

## 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 H<sub>2</sub>O)
- \* 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.

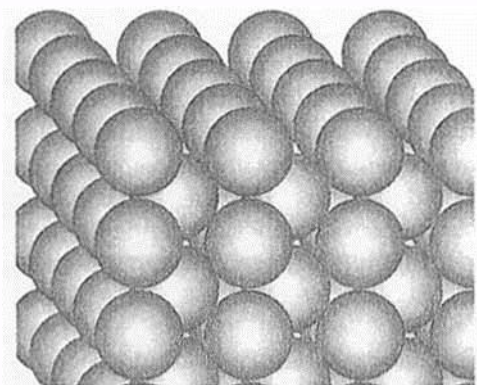


## Redes Cristalinas

### 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:  $\alpha$ -hierro



Disposición ordenada de los átomos de Fe en un cristal de  $\alpha$ -Fe

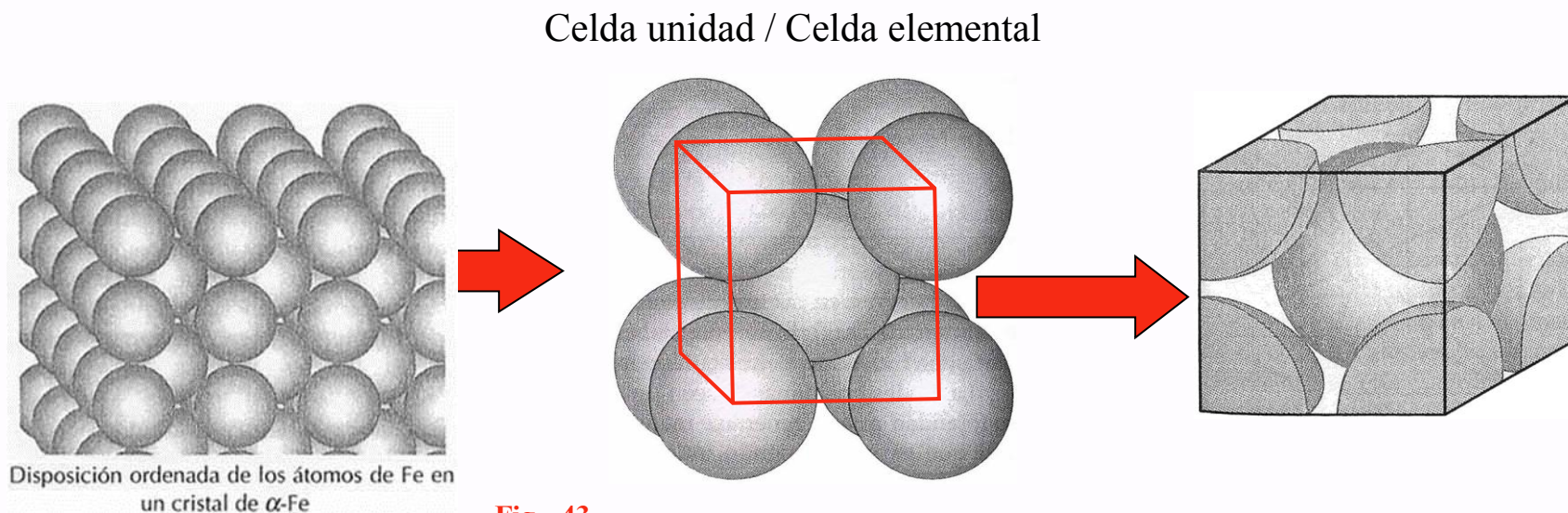
Fig - 43

Germen cristalino / Cristal  
Monocristal / Granos

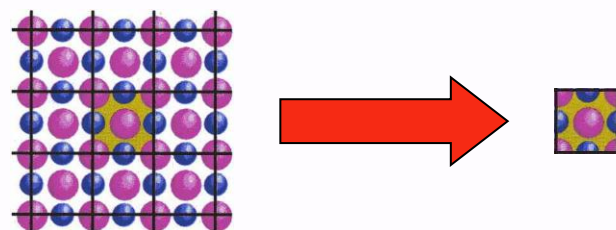
Casabó i Gispert, J, “*Estructura Atómica y Enlace Químico*”, Reverté, 1999, pp 262.

## Redes Cristalinas

### Celda unidad



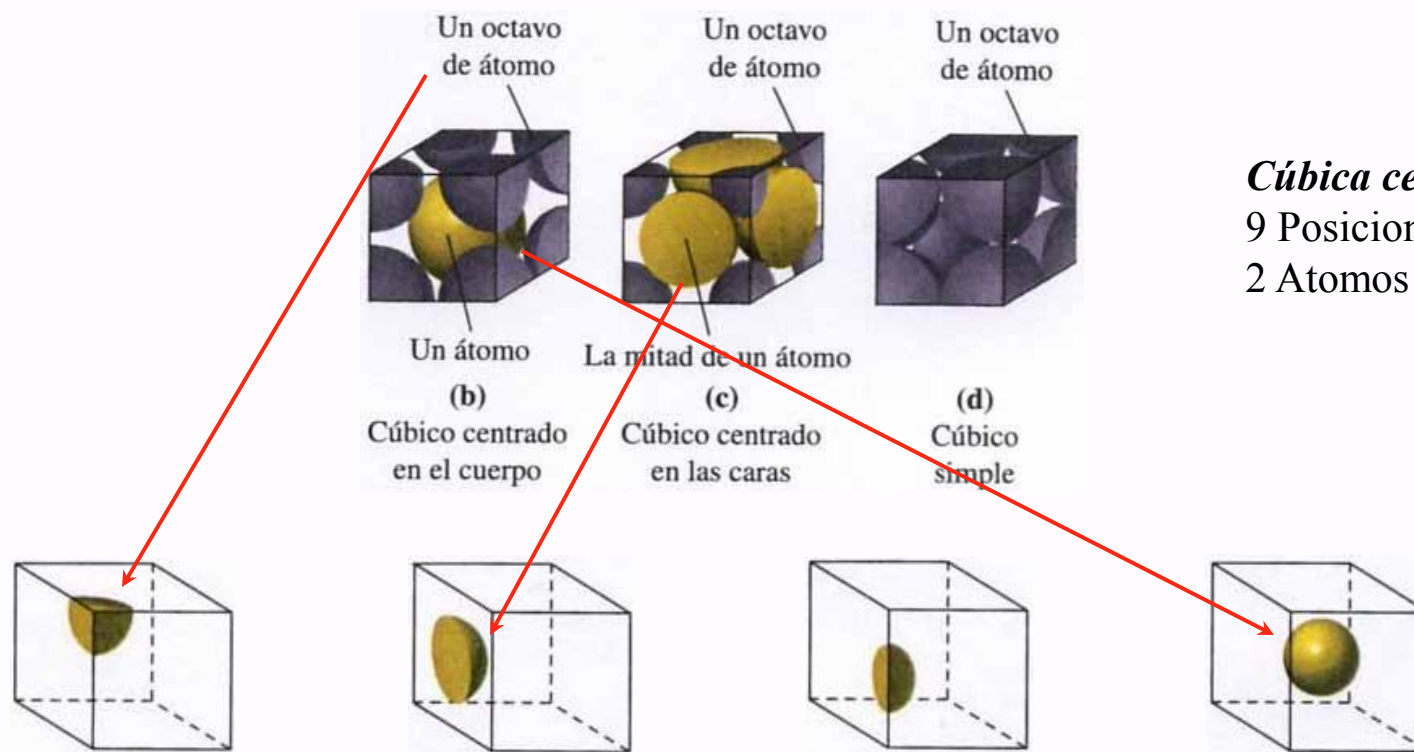
Casabó i Gispert, J, "Estructura Atómica y Enlace Químico", Reverté, 1999, pp 262, 264 y 263.



**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

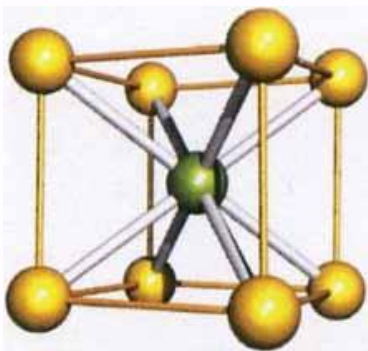
### Celda unidad - N° de átomos en la celda unidad



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

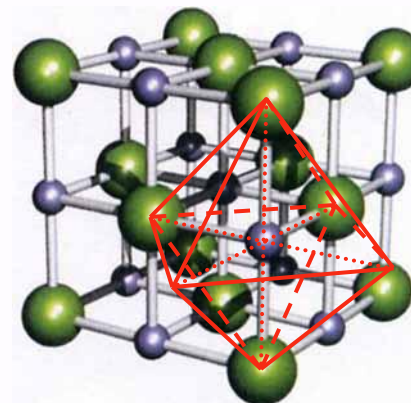
## Redes Cristalinas

### Celda unidad - N° de coordinación



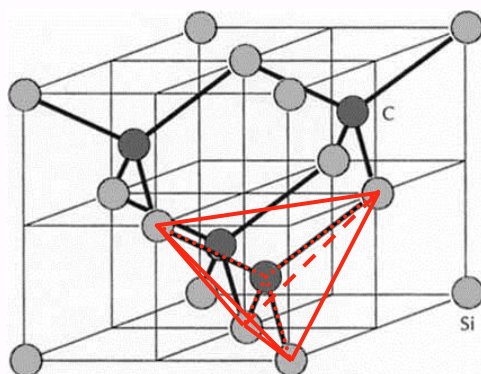
CsCl

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



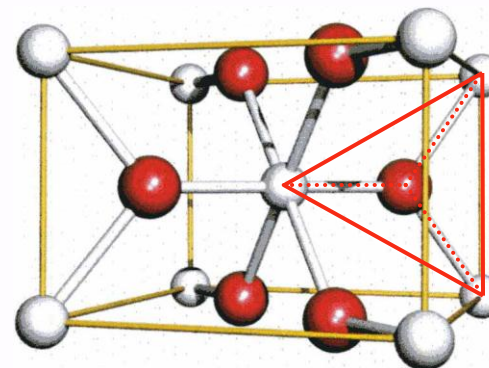
NaCl

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.



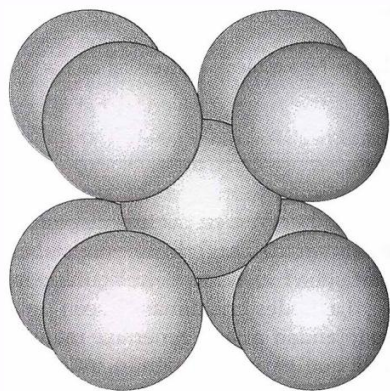
Rutilo

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



**Redes Cristalinas**

**Celda unidad - Factor de ocupación**

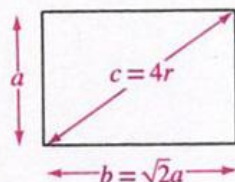
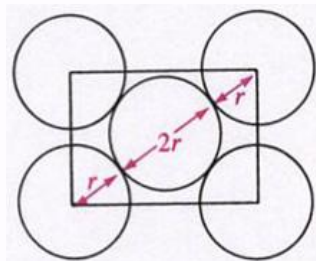


$$\text{Volumen ocupado} = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi r^3$$

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

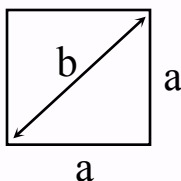
$$\text{Fracción ocupada} = \frac{\text{Volumen ocupado}}{\text{Volumen total}}$$

$$a = f(r)$$



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

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



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

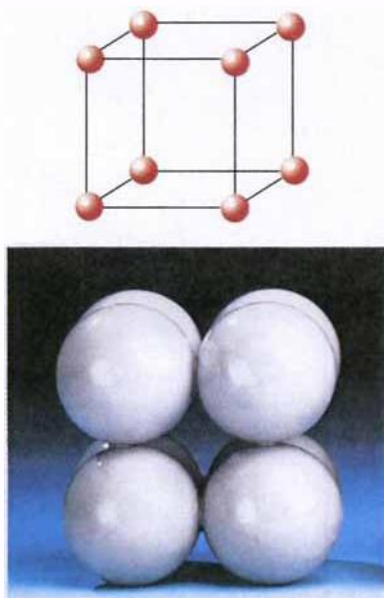
$$b^2 = a^2 + a^2 = 2 a^2$$

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.

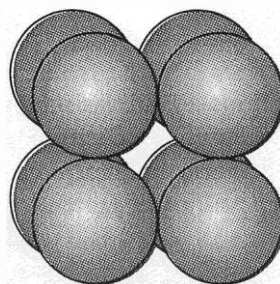


Fig - 42

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

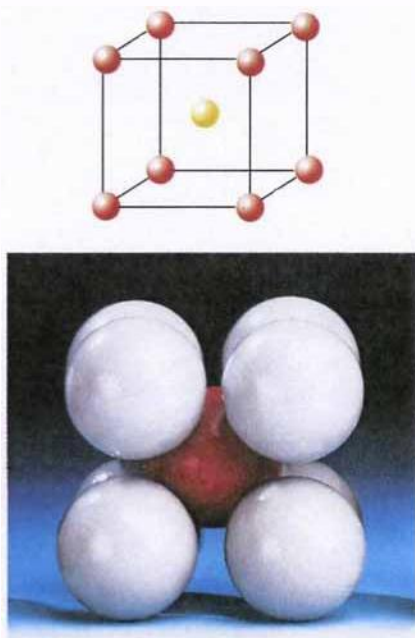
Tangencia en la arista

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.

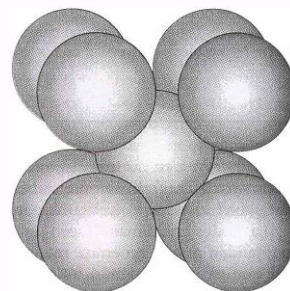


Fig - 43

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

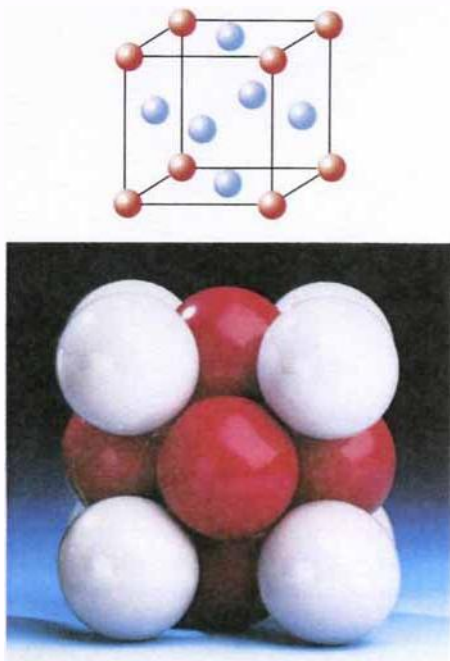
Nº Coordinación 8, cúbica

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.

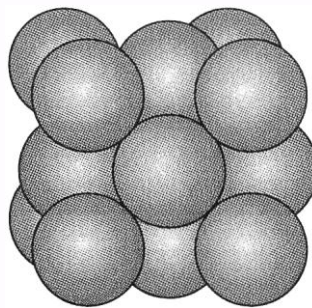


Fig - 44

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

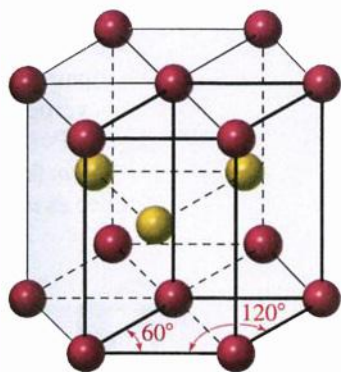
Tangencia en la cara

Nº Coordinación 12, compacta

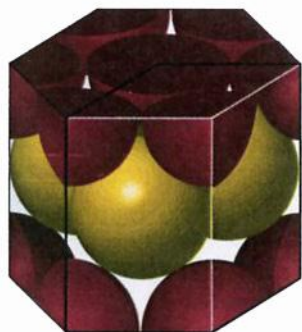
Ocupación 74 %

## 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.

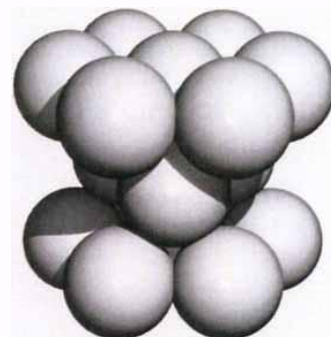
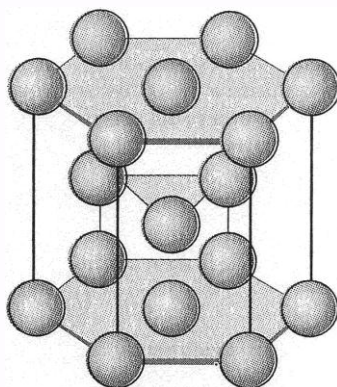


Fig - 45

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

4 átomo por celda

Nº Coordinación 12, compacta

Ocupación 74 %