

GEOMETRÍA CRISTALINA:

- 1.- Determinar los índices de Miller de una cara del cubo.
- 2.- Representar en el espacio del sistema cúbico, los planos cuyos índices de Miller son $(1,0,3)$, $(1,1,1)$ y $(1,0,1)$ y las direcciones $[1,0,3]$, $[1,1,1]$ y $[1,1,0]$.
- 3.- Calcular y comparar las densidades atómicas lineales de las direcciones: $[1,0,0]$, $[1,1,0]$ y $[1,1,1]$ en la red FCC y en la red BCC.
- 4.- Calcular y comparar las densidades atómicas planares de los planos cuyos índices de Miller son: $(1,0,0)$, $(1,1,0)$ y $(1,1,1)$ en la red FCC y en la red BCC.
- 5.- Determinar en el espacio cúbico los índices de las direcciones correspondientes a una arista, la diagonal de una cara y la diagonal del cubo.
- 6.- Representar las direcciones, los planos y los puntos más representativos de una estructura cúbica simple.
- 7.- Representar las direcciones, los planos y los puntos más representativos de una estructura cúbica centrada en el cuerpo.
- 8.- Representar las direcciones, los planos y los puntos más representativos de una estructura cúbica centrada en las caras.
- 9.- Representar las direcciones, los planos y los puntos más representativos de una estructura hexagonal compacta, considerando el sistema de tres ejes coplanares y un cuarto perpendicular al plano definido por los anteriores.
- 10.- Calcular el tamaño de un átomo que se pueda alojar en el centro del cubo y en el centro de las caras de una estructura cúbica simple, sabiendo que los átomos que componen la red tienen R como radio.

REDES CRISTALINAS METALICAS:

- 1.- El **Al** tiene un radio atómico de 1.431 Å y una estructura cúbica centrada en las caras. Su peso atómico es 26.97. Calcular la densidad y el índice de coordinación de este metal así como su factor de empaquetamiento atómico.
- 2.- La distancia entre planos (1,1,0) de una red cúbica centrada en el cuerpo es de 2.03 Å. Calcular la constante reticular y el radio de los cationes.
- 3.- La celdilla fundamental del **Cr** es cúbica centrada en el cuerpo, su masa atómica es 52.01 y su constante reticular $a = 2.88$ Å. Calcular la densidad teórica y su factor de empaquetamiento atómico.
- 4.- La celdilla fundamental del **Al** es cúbica de caras centradas, su masa atómica es 26.97 y su densidad 2699 Kg m^{-3} . Calcular:
 - a) La masa de la celdilla fundamental
 - b) El parámetro y el volumen de la red.
 - c) El radio del catión metálico.
 - d) El factor de empaquetamiento atómico
 - e) La densidad atómica lineal en la dirección [1, 1, 0].
- 5.- El **Zn** cristaliza en el sistema hexagonal compacto. Calcular los parámetros de la red conociendo su densidad (7136 Kg m^{-3}) y su masa atómica (65.38).
- 6.- La celda fundamental del **K** es cúbica centrada en el cuerpo, su masa atómica es 39.096 y su constante reticular $a = 534.37$ pm. Calcular la densidad teórica, el radio atómico, el índice de coordinación y el **FEA**.
- 7.- El **Fe** experimenta a 910°C una transformación alotrópica desde una red cúbica centrada en el cuerpo a una red cúbica centrada en las caras. Suponiendo que el radio atómico del metal permanece constante, calcúlese la relación de densidades.
- 8.- El **W** cristaliza en el sistema cúbico en una red **BCC** con un parámetro $a = 316.48$ pm y una densidad de 19300 Kg m^{-3} . Calcular la masa, el radio y el volumen atómicos, y la densidad atómica lineal en la dirección [1, 1, 0] y superficial en el plano (1, 1, 0).
- 9.- Un investigador está tratando de determinar si una estructura de un acero inoxidable es cúbica centrada en las caras o cúbica centrada en el cuerpo. Por difracción de rayos X encuentra que la distancia entre planos (1, 1, 1) es de 2.1 Å. Sabiendo que para el **Fe BCC**, a vale 2.86 Å y que para el **Fe FCC** vale 3.63 Å, deducir que estructura presenta dicho acero.
- 10.- El Molibdeno tiene una estructura cristalina **BCC**, un radio atómico de 0.1363 nm y una masa atómica de 95.94 g/mol. Calcular y comparar su densidad con el valor experimental que se puede encontrar en cualquier sistema periódico.

- 11.- Calcular el radio de un átomo de Paladio, sabiendo que el Pd tiene una estructura cristalina FCC, una densidad de 12.0 g/cm^3 y una masa atómica de 106.4 g/mol .
- 12.- El Zirconio tiene una estructura cristalina HCP y una densidad de 6.51 g/cm^3 . (a) ¿Cuál es el volumen de la celdilla unidad? (b) Si la relación c/a es 1.593 , calcular los valores de c y de a .
- 13.- El Niobio tiene un radio atómico de 1.430 \AA y una densidad de 8.57 g/cm^3 . Determinar si tiene estructura cristalina BCC o FCC.

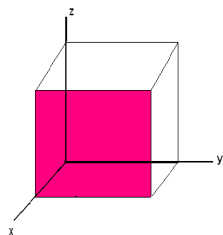
CRISTALES IÓNICOS:

- 1.- Demostrar que el MgO puede tener la estructura cristalina del cloruro sódico, y calcular la densidad del mismo MgO. ($r_{\text{Mg}^{2+}} = 0.66 \text{ \AA}$; $r_{\text{O}^{2-}} = 1.32 \text{ \AA}$)
- 2.- Basándose en el balance de cargas y la relación de radios, ¿cuál de las estructuras cúbicas es más probable para el BeO? ($r_{\text{Be}^{2+}} = 0.35 \text{ \AA}$; $r_{\text{O}^{2-}} = 1.32 \text{ \AA}$)
- 3.- Se considera un carburo de Wolframio que cristaliza en el sistema hexagonal compacto; los átomos de W ocupan las bases del prisma mientras que los átomos de C se sitúan en la sección media. Determinar la fórmula de este carburo y calcular su densidad ($c = 0.2906 \text{ nm}$; $a = 0.2837 \text{ nm}$). $M_{\text{at W}} = 184$; $M_{\text{at C}} = 12$.
- 4.- Mediante el cálculo de la relación de radios iónicos, determinar el número de coordinación esperado para los siguientes compuestos:
a) Al_2O_3 b) TiO_2 c) SiO_2 d) MgO e) CuZn
 $r(\text{Al}^{3+}) = 0.51 \text{ \AA}$ $r(\text{Ti}^{4+}) = 0.68 \text{ \AA}$ $r(\text{Si}^{4+}) = 0.42 \text{ \AA}$ $r(\text{Mg}^{2+}) = 0.66 \text{ \AA}$ $r(\text{Cu}^{2+}) = 0.96 \text{ \AA}$
 $r(\text{O}^{2-}) = 1.32 \text{ \AA}$ $r(\text{Zn}^{2+}) = 0.74 \text{ \AA}$
- 5.- Calcular el factor de empaquetamiento iónico (FEI o IPF) del MgO sabiendo que tiene la estructura del ClNa.
- 6.- Calcular la densidad lineal de iones de MgO en la dirección [1,1,1].
- 7.- Calcular la densidad superficial de iones de MgO en el plano (1,1,1).
- 8.- Calcular la densidad de MgO. ($M_{\text{Mg}} = 24.31$; $M_{\text{O}} = 16.00$)
- 9.- Calcular el factor de empaquetamiento iónico (FEI o IPF) del (a) CaO, (b) FeO y (c) NiO sabiendo que comparten la misma estructura del tipo ClNa. Explicar los resultados.
- 10.- Determinar la densidad teórica del CaTiO_3 . [$r(\text{Ti}^{4+}) = 0.68 \text{ \AA}$; $r(\text{O}^{2-}) = 1.32 \text{ \AA}$; $r(\text{Ca}^{2+}) = 0.99 \text{ \AA}$]

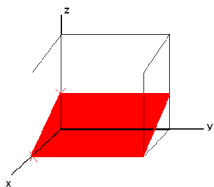
SOLUCIONES A LOS PROBLEMAS DEL TEMA 1:

GEOMETRÍA CRISTALINA:

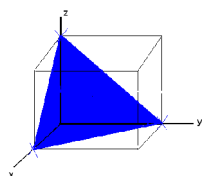
- 1.- Cortes con los ejes: $x = 1; y = \infty; z = \infty$
 Inversas: 1 0 0
 Índices de Miller: (1,0,0)



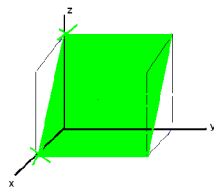
2.-



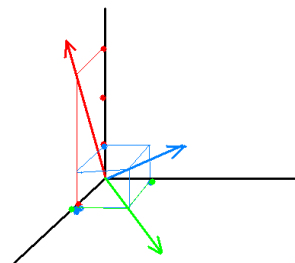
$\pi (1,0,3)$



$\pi (1,1,1)$



$\pi (1,0,1)$



3.-

Densidad lineal	FCC	BCC
$\rho [1,0,0]$	$1/a$	$1/a$
$\rho [1,1,0]$	$2/a\sqrt{2}$	$1/a\sqrt{2}$
$\rho [1,1,1]$	$1/a\sqrt{3}$	$2/a\sqrt{3}$

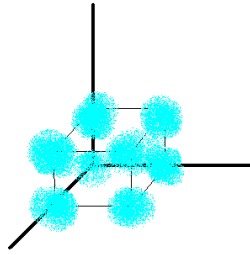
4.-

Densidad planar	FCC	BCC
$\rho (1,0,0)$	$2/a^2$	$1/a^2$
$\rho (1,1,0)$	$1/a^2 \sqrt{2}$	$2/a^2 \sqrt{2}$
$\rho (1,1,1)$	$5/a^2 \sqrt{3}/2$	$3/a^2 \sqrt{3}/2$

5.-

arista [1,0,0]; diagonal cara[1,1,0]; Diagonal cubo[1,1,1]

6.-



dirección compacta:

arista $[1,0,0]$ $a=2r^+$ cara $(1,0,0)$ apilamiento simple de planos cuadrados (no tiene planos compactos)7.- arista $[1,0,0]$ dirección compacta diagonal del cubo $[1,1,1]$ $a\sqrt{3}=4r^+$

no tiene planos compactos

8.- arista $[1,0,0]$ dirección compacta diagonal de la cara $[1,1,0]$ $a\sqrt{2}=4r^+$ si tiene planos compactos $(1,1,1)$ 9.- centro cara: $r_H = 0.414 R$ centro cubo: $r_H = 0.732 R$

REDES CRISTALINAS METALICAS:

1.- $\rho(\text{Al}) = 2,699 \text{ g cm}^{-3}$; i.d.c. = 12 ; F.E.A. = 74%

2.- $a = 2,87 \text{ \AA}$; $r^+ = 1,24 \text{ \AA}$

3.- $\rho(\text{Cr}) = 7,229 \text{ g cm}^{-3}$; F.E.A. = 68%

4.- $M(\text{celdilla}) = 1,79 \cdot 10^{-22} \text{ g}$; $V(\text{celdilla}) = 66,3 \text{ \AA}^3$; $a = 4,05 \text{ \AA}$; $r^+ = 1,43 \text{ \AA}$; F.E.A. = 73,9% $\rho [1,1,0]$
 $= 0,35 \text{ \AA}^3$;

5.- $a = 2,78 \text{ \AA}$; $c = 4,54 \text{ \AA}$;

6.- $\rho(\text{K}) = 0,851 \text{ g cm}^{-3}$; $r^+ = 2,31 \text{ \AA}$; i.d.c. = 8 ; F.E.A. = 68% ;

7.- $\rho(\text{BCC}) / \rho(\text{FCC}) = 0,92$

8.- $r^+ = 1,12 \text{ \AA}$; $V(\text{atomo}) = 0,59 \text{ \AA}^3$; $M(\text{W}) = 170,52 \text{ g mol}^{-1}$; $\rho [1,1,0] = 0,223 \text{ \AA}^3$;
 $\rho(1,1,0) = 0,141 \text{ \AA}^2$;

9.- F.C.C.

10.- $\rho(\text{Mo})_{\text{calculada}} = 10,21 \text{ g cm}^{-3}$; $\rho(\text{Mo})_{\text{real}} = 10,22 \text{ g cm}^{-3}$;

11.- $r^+(\text{Pd}) = 0,138 \text{ nm}$

12.- $V = 1,4 \cdot 10^{-28} \text{ m}^3$; $a = 0,323 \text{ nm}$; $c = 0,515 \text{ nm}$

13.- B.C.C.

CRISTALES IÓNICOS:

1.- Es posible porque $r^+/R^- = 0.5$; $\rho (\text{MgO}) = 4.31 \text{ g cm}^{-3}$

2.- $r^+/R^- = 0.265$ =====estructura de la blenda FCC

3.- C_3W_3 =====CW ; $\rho (\text{CW}) = 16.07 \text{ g cm}^{-3}$

4.- a) $r^+/R^- = 0.386$ ====idc = 4; b) $r^+/R^- = 0.515$ ====idc = 6; c) $r^+/R^- = 0.318$ ====idc =4;
d) $r^+/R^- = 0.5$ ====idc = 6; e) $r/R = 0.77$ ====idc = 8;

5.- IPF = 0.70

6.- $\rho [1,1,1] = (0.146 \text{ O}^{-2} + 0.146 \text{ Mg}^{2+}) / \text{Å}$

7.- $\rho(1,1,1) = (0.147 \text{ O}^{-2} + 0.147 \text{ Mg}^{2+}) / \text{Å}^2$

8.- $\rho (\text{MgO}) = 4.31 \text{ g cm}^{-3}$

9.- (a) CaO IPF = 0.554; (b) FeO IPF = 0.647 y (c) NiO IPF = 0.676

10.- $\rho (\text{CaTiO}_3) = 2.29 \text{ g cm}^{-3}$