

4. GAIA

EGOERA SOLIDOA



KIMIKA EZORGANIKOA I

2019/2020

Kimika Fakultatea

eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

NAZIOARTEKO
BIKAINASUN
CAMPUSA

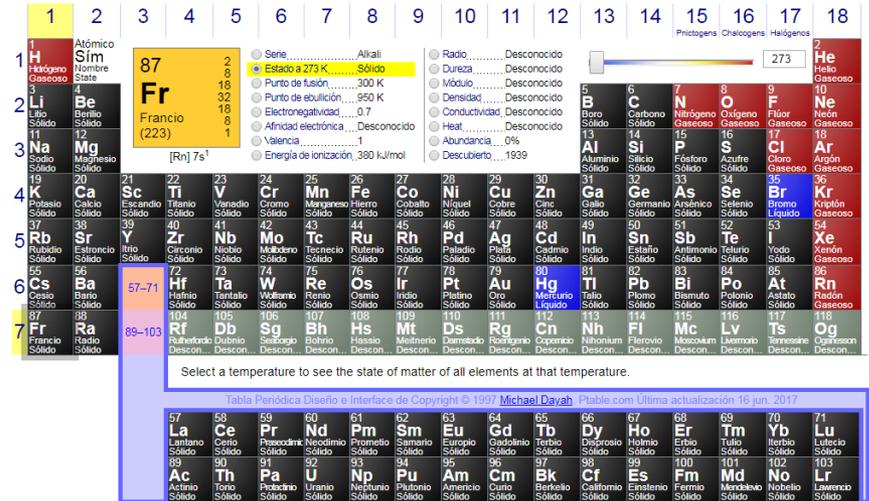
CAMPUS DE
EXCELENCIA
INTERNACIONAL

Egoera solidoa:

Materiak aurkeztu ditzakeen 4 agregazio egoeretako bat.

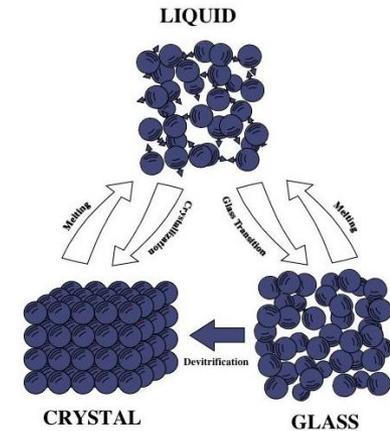
Materia solidoa:

- Makromolekularki:
Forma eta bolumen egonkorra duten elementuen/konposatuen materiaren egoera.
 - ✓ Ezin dira estutu (konprimitu): Bolumen konstantea.
 - ✓ Ez dira isuritzen/jarioten: Ez dira hedatzen
 - ✓ Orokorrean zurrinak, gogorrak eta erresistentekak.
- Atomikoki:
Atomo, molekula edo ioien agregatuak, osagaien artean lotura sendoak.



Solido motak

Solido Mota	Atomoak Molekulak loiak	Ezaugarriak	
Amorfoak	Ez daude ordenaturik	Isotropikoak	Norabide guztietan berdin
Kristalinoak	Ordenaturik	Anisotropikoak	Norabidearekin aldatu



ESTEKA 4.1- <https://ptable.com>



SOLIDO KRISTALINOAK. SAILKAPENA LOTURAREN ARABERA.

- ✓ Atomo, molekula edo ioiez osaturiko konglomeratuak, konexio indarrez elkarrekin mantentzen direnak fase kondentsatua osatuz.
- ✓ Bolumen/leku txikiena okupatuz sailkatzen dira osagaiak.
- ✓ Kristal osoa, gelaxka unitatea espazioko hiru dimentsiotan hedatuz osatzen da.

SOLIDO MOLEKULARRAK

- Molekula independenteez osaturiko sare kristalinoa.
- Fase kondentsatua sortzeko: Indar intermolekularrak

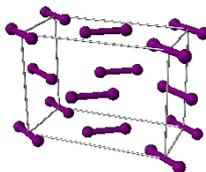
Elementu

ez metalikoak.

Molekula "txikiak"

Esteka 4.1.- Solido molekularrak.

Iodo solidoa

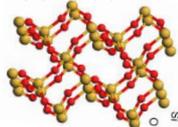
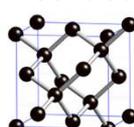
**SOLIDO KOBALENTEAK (kobalente atomikoak/molekularrak)**

- Atomo ez metalikoez osaturiko sare kristalinoa.
- Fase kondentsatua: Lotura kobalente sendoak atomoen artean.

Elementu ez metalikoak.

"Molekula" "erraldoiak"

Esteka 4.3.- Solido kobalenteak.

SiO₂
solidoaKarbono
solidoa

SOLIDO KRISTALINOAK. SAILKAPENA LOTURAREN ARABERA.

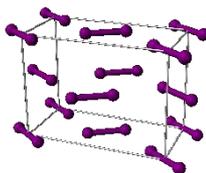
- ✓ Atomo, molekula edo ioiez osaturiko konglomeratuak, konexio indarrez elkarrekin mantentzen direnak fase kondentsatua osatuz.
- ✓ Bolumen/leku txikiena okupatuz sailkatzen dira osagaiak.
- ✓ Kristal osoa, gelaxka unitatea espazioko hiru dimentsiotan hedatuz osatzen da.

SOLIDO MOLEKULARRAK

- Molekula independenteez osaturiko sare kristalinoa.
- Fase kondentsatua sortzeko: Indar intermolekularrak

Elementu
ez metalikoak.
Molekula "txikiak"

Iodo solidoa



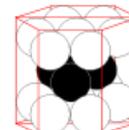
Esteka 4.1.- Solido molekularrak.

SOLIDO METALIKOAK.

- Atomo metalikoen sailkapen erregularra duen sare kristalinoa.
- Fase kondentsatua sortzeko: Atomoen artean lotura metalikoa.

Elementu metalikoak.

Zink solidoa

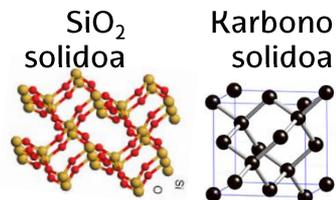


Esteka 4.4.- Solido metalikoak.

SOLIDO KOBALENTEAK (kobalente atomikoak/molekularrak)

- Atomo ez metalikoez osaturiko sare kristalinoa.
- Fase kondentsatua: Lotura kobalente sendoak atomoen artean.

Elementu ez metalikoak.
"Molekula" "erraldoiak"



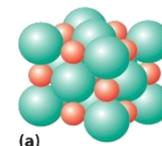
Esteka 4.3.- Solido kobalenteak.

SOLIDO IONIKOAK

- Elementu desberdinen ioiez osaturiko sare kristalinoa.
- Fase kondentsatua sortzeko: Ioien arteko elkarrekintza elektrostatikoak (ionikoak)

Metala + Ez metala

NaCl solidoa



Esteka 4.2.- Solido ionikoak.

	Molekularrak	Ionikoak	Kobalenteak	Metalikoak
Osagaiak	Molekulak	ioiak	Atomiko/Molekular	Metalak
Loturak <u>INTRA</u>	vdW	Ionikoak	Kobalenteak	Metalikoak
IP eta FP	Baxuak	Altuak	Oso altuak	Denetarik
Eroankortasuna	Isolatzaileak	Disoluzioan /Urtutak	Isolatzaileak	Beroa eta korrente elektriko
Adibideak	Xe, N ₂	NaCl, MgO	C, P, SiO ₂ , GaAs	Na, Fe, Cu

SOLIDO KRISTALINOAK. SAILKAPENA LOTURAREN ARABERA.**Ariketa.**

Sailkatu hurrengo sustantziak, egoera solidoan daudenen: Solido molekular, kobalente (atomiko/molekular) ioniko de metaliko.

- Iodo (I_2)
- Izotza (H_2O)
- Gatz arrunta ($NaCl$)
- Diamantea (C)
- Kuartzoa (SiO_2)

Ariketa

Solido bakoitzari (1-4), esleitu fusio T^a bat (a-d). Arrazoitu zure erantzuna.

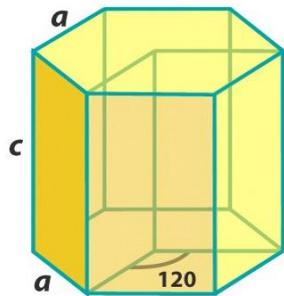
- | | |
|--------------------|--------------------|
| 1. C (diamante) | a. $0^\circ C$ |
| 2. MgO | b. $3600^\circ C$ |
| 3. H_2O (izotza) | c. $2800^\circ C$ |
| 4. I_2 | d. $113.5^\circ C$ |

	Molekularrak	Ionikoak	Kobalenteak	Metalikoak
Osagaiak	Molekulak	loiak	Atomiko/Molekular	Metalak
Loturak <u>INTRA</u>	vdW	Ionikoak	Kobalenteak	Metalikoak
IP eta FP	Baxuak	Altuak	Oso altuak	Denetarik
Eroankortasuna	Isolatzaileak	Disoluzioan /Urtutak	Isolatzaileak	Beroa eta korrente elektriko
Adibideak	Xe, N_2	$NaCl$, MgO	C , P , SiO_2 , $GaAs$	Na , Fe , Cu

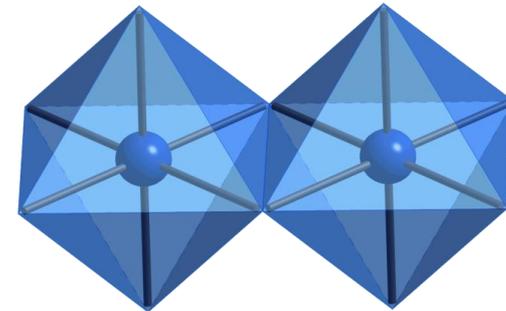
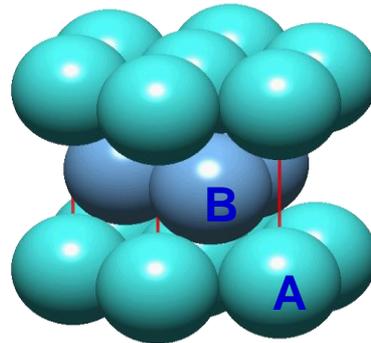
❑ SOLIDO KRISTALINOEN EGITURAREN DESKRIBAPENA

- ✓ Solido kristalino batean, atomoak, ioiak edo molekulak era ordenatu batean kokatzen dira.
- ✓ Egiturak deskribitzeko metodo ugari daude:

- ❑ GELAXKA-UNITATEA.
- ❑ ESFEREN PAKETATZEA. TRINKOA eta EZ TRINKOA.
- ❑ POLIEDROZ BETERIKO ESPAZIOA.



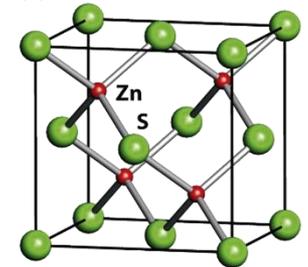
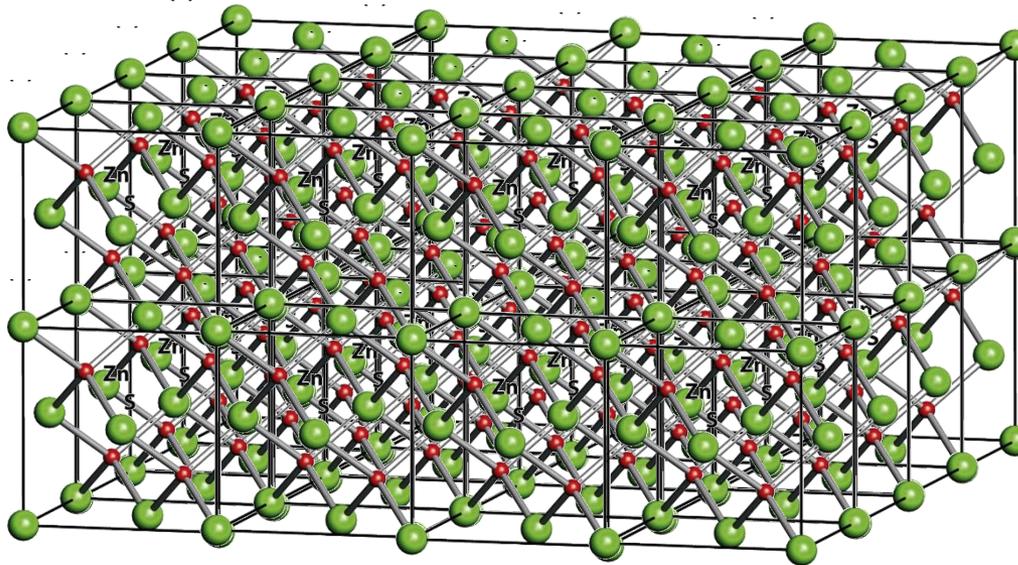
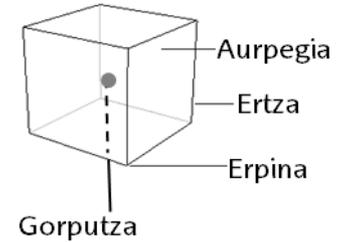
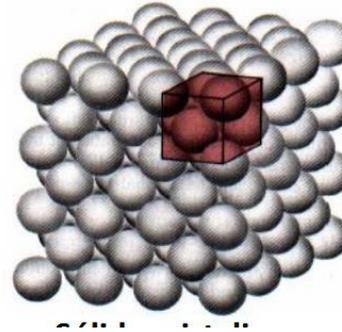
Hexagonal



□ SOLIDO KRISTALINOEN EGITURAREN DESKRIBAPENA.

GELAXKA UNITATEA

- ✓ Sare kristalinoa, GELAXKA UNITATEa hiru dimentsiotan errepikatuz osa daiteke.
- ✓ Gelaxka unitateak paralelepipedo bat izan behar du, errepikakorra den zati 3D txikiena.



□ SOLIDO KRISTALINOEN EGITURAREN DESKRIBAPENA.

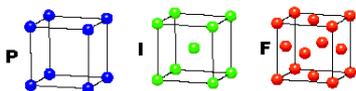
GELAXKA UNITATE MOTAK

✓ Bravais (1848):

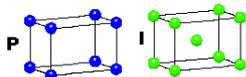
Zazpi gelaxka mota (sare)	}	Kubikoa	(P, I, F)	} 14 sistema kristalografiko
		Tetragonala	(P, I)	
		Ortorrombikoa	(P, I, F, C)	
		Hexagonala	(P)	
		Monoklinikoa	(P, C)	
		Triklinikoa	(P)	
		Trigonala	(P)	

	Erpin	Gorputz	Aurpegi	Ertz
Simplea (P, primitiboa)	x			
Gorputzean zentratua (I)	x	x		
Aurpegietan Zentratua (F)	x		x	
Alboetan zentratua (C)	x			x

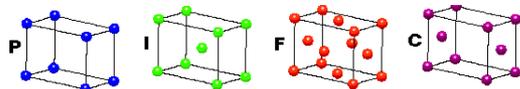
CUBIC
a = b = c
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



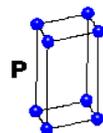
TETRAGONAL
a = b ≠ c
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



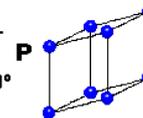
ORTHORHOMBIC
a ≠ b ≠ c
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



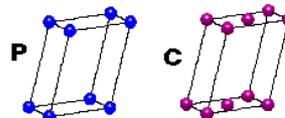
HEXAGONAL
a = b ≠ c
 $\alpha = \beta = 90^\circ$
 $\gamma = 120^\circ$



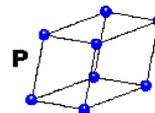
TRIGONAL
a = b = c
 $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$



MONOCLINIC
a ≠ b ≠ c
 $\alpha = \gamma = 90^\circ$
 $\beta \neq 120^\circ$



TRICLINIC
a ≠ b ≠ c
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



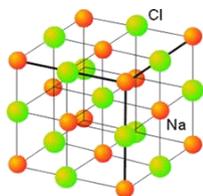
4 Types of Unit Cell
 P = Primitive
 I = Body-Centred
 F = Face-Centred
 C = Side-Centred
 +
7 Crystal Classes
 → **14 Bravais Lattices**

□ SOLIDO KRISTALINOEN EGITURAREN DESKRIBAPENA.

GELAXKA UNITATEA. FORMULA KOPURUA (Z)

✓ Gelaxka unitatea: Espazioan hedatuz solido kristalinoaren egitura guztia sortzeko gaitasuna duen zati errepikakor txikiena.

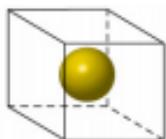
✓ Formula kopurua: Z
NaCl-ren gelaxka unitatearen adibidea.



- ✓ Gelaxka batean 27 esfera irudikaturik.
- ✓ 27 esferetatik, 26, partekatuak inguruko gelaxkekin.

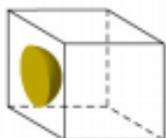
12 ertz : 12 Cl
6 aurpegi : 6 Na
Gorputz erdia : 1 Cl
8 erpin : 8 Na

Partekatu gabe, 4 Na eta 4 Cl
Beraz 4 NaCl
Gelaxka/egitura MOTA honetan:
Z=Formula kopurua = 4



✓ **GORPUTZ ERDIKO ATOMOA:**
Ez da partekatzen.

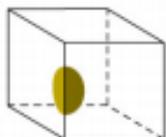
Gelaxka bakoitzari **1 Cl** dagokio



✓ **AURPEGIETAKO ATOMOAK:**
Gelaskaren aurpegietako atomo bakoitza 2 gelasken artean partekaturik dago.

6 aurpegi gelaxkako: 6 atomo aurpegietan
Bakoitza 2 gelaxkakin banatuta. $6 \cdot 1/2 = 3 \text{ Na}$
Gelaxka bakoitzari **3 Na** atomo dagozkio

4 Na

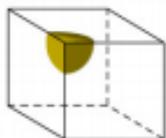


✓ **ERTZETAKO ATOMOAK:**
Gelaskaren ertzetako atomo bakoitza 4 gelasken artean banatuta dago.

12 atomo ertzetan. Atomo 1 ertzeko
Ertz bakoitza 4 gelaxkakin banatuta. $12 \cdot 1/4 = 3 \text{ Cl}$
Gelaxka bakoitzari **3 Cl** atomo dagozkio

4 Cl

4 NaCl



✓ **ERPINETAKO ATOMOAK:**
Gelaskaren erpinetako atomoa bakoitza zortzi gelasken artean banatuta dago.

8 atomo erpinetan. Atomo 1 erpineko
Erpin bakoitza 8 gelaxkakin banatuta. $8 \cdot 1/8 = 1 \text{ Na}$
Gelaxka bakoitzari **1 Na** atomo dagozkio

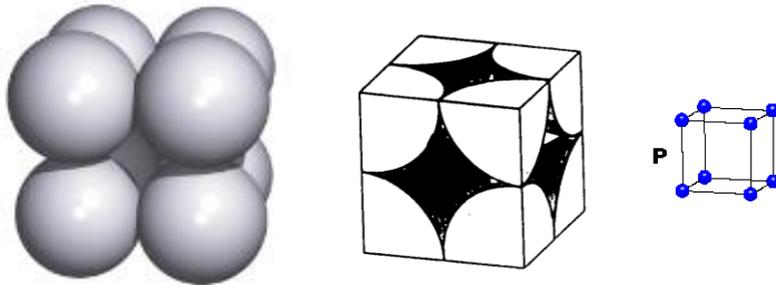
❑ SOLIDO KRISTALINOEN EGITURAREN DESKRIBAPENA.

GELAXKA UNITATEA. FORMULA KOPURUA (Z)

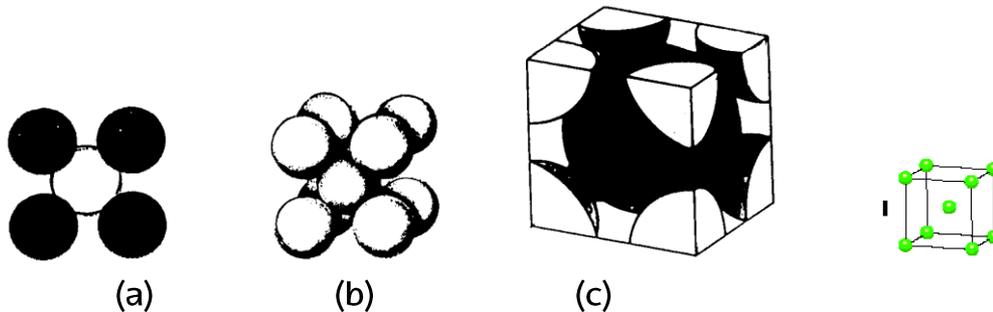
ARIKETAK

Kalkulatu hurrengo solido kristalinoen gelaxka unitateen Z parametroa.

Polonioaren gelaxka unitatea (Kubiko Simplea edo Kubiko Primitiboa, P)



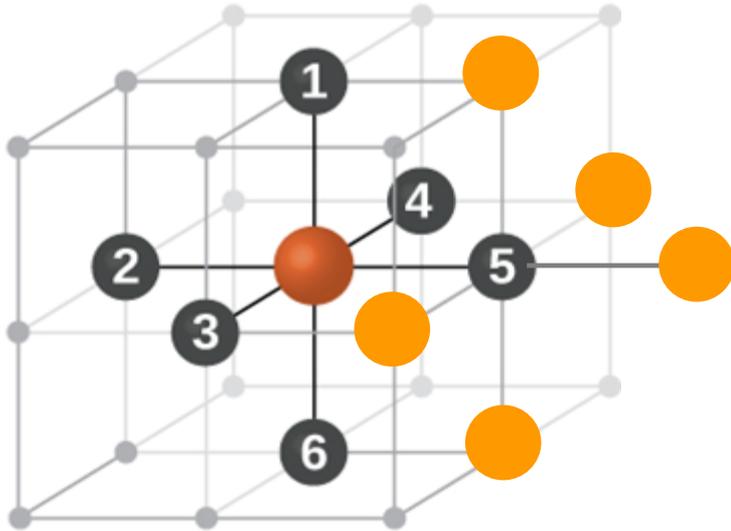
Kromoaren gelaxka unitatea (Gorputzean Zentraturiko Gelaxka Kubikoa, I)



❑ SOLIDO KRISTALINOEN EGITURAREN DESKRIBAPENA.

GELAXKA UNITATEA. ESFEREN KOORDINAZIO ZENBAKIA (K.Z)

- ✓ Esferen Koordinazio zenbakia (K.Z.): Atomo batek gertuen eta distantzia berdinerat dituen atomo kopurua.



- ✓ Esfera laranja bakoitzak, 6 esfera gris dauzka inguruan.
Esfera laranja KZ = 6
- ✓ Esfera gris bakoitzak, 6 esfera laranja dauzka inguruan
Esfera gris KZ = 6
- ✓ Egitura osoan:
KZ : 6:6

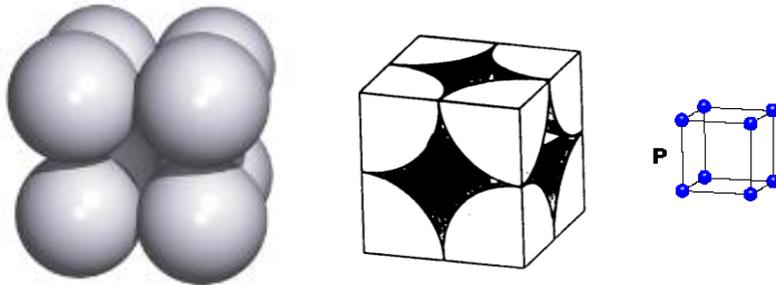
❑ SOLIDO KRISTALINOEN EGITURAREN DESKRIBAPENA.

GELAXKA UNITATEA. ESFEREN KOORDINAZIO ZENBAKIA (K.Z)

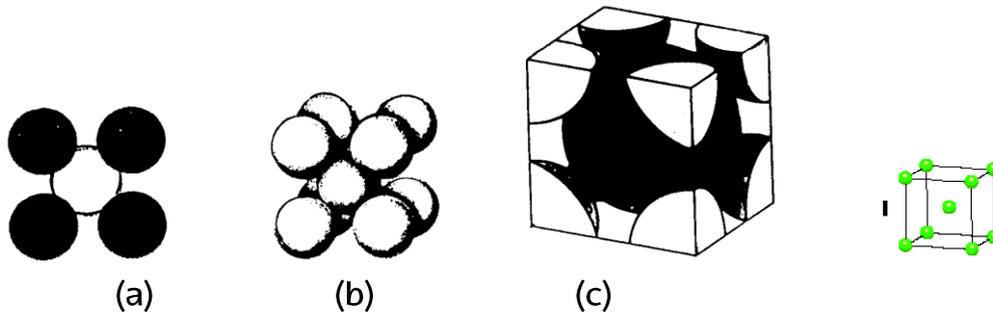
ARIKETAK

Kalkulatu hurrengo solido kristalinoen gelaxkako esferen K.Z. parametroa.

Polonioaren gelaxka unitatea (Kubiko Simplea edo Kubiko Primitiboa, P)



Kromoaren gelaxka unitatea (Gorputzean Zentraturiko Gelaxka Kubikoa, I)

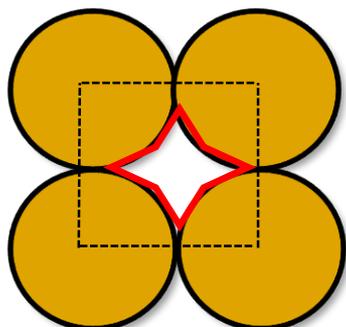


□ SOLIDO KRISTALINOEN EGITURAREN DESKRIBAPENA.

ESFEREN PAKETATZEA.

✓ Atomoak/molekulak/ioiak esfera modura kontsideratzen dira.

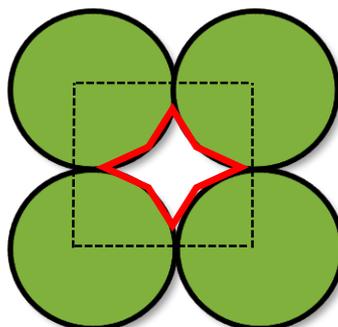
1. PAKETATZE EZ TRINKOA edo SINPLEA (NO COMPACTA)



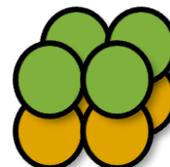
Geruza 1
Ez trinkoa



Hutsune
handia

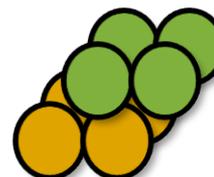


Geruza 1
Ez trinkoa



PAKETATZE KUBIKO
SINPLEA

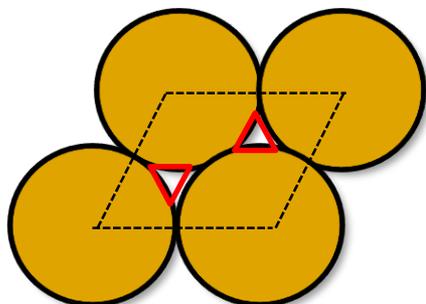
ESTEKA 4.9. Paketatze ez trinkoak. PKS.



PAKETATZE KUBIKO
GORPUTZEAN
ZENTRATUA

ESTEKA 4.10. Paketatze ez trinkoak. GZE.

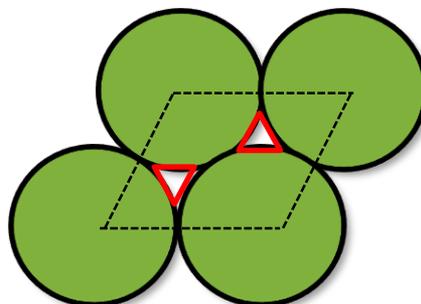
2. PAKETATZE TRINKOA (COMPACTA)



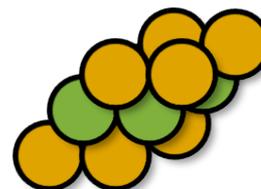
Geruza 1
trinkoa



Hutsune
txikiak

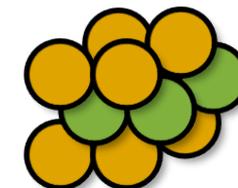


Geruza 1
trinkoa



PAKETATZE
KUBIKO
TRINKOA.

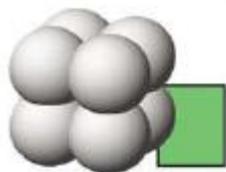
**Esteka 4.5.-
Paketatze trinkoak**



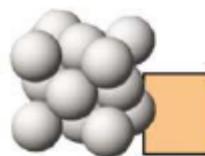
PAKETATZE
HEXAGONAL
TRINKOA

Esteka 4.0.-Solidoen dentsitatea
Solido metalikoen
Paketatzea

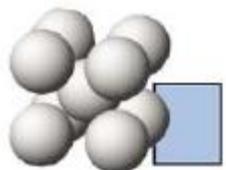
H																	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac															



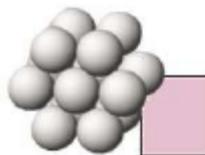
**Kubiko
sinplea**



**Kubikoa Trinkoa
(Kubikoa aurpegietan zentratua)**



**Kubikoa
Gorputzean
Zentratua**

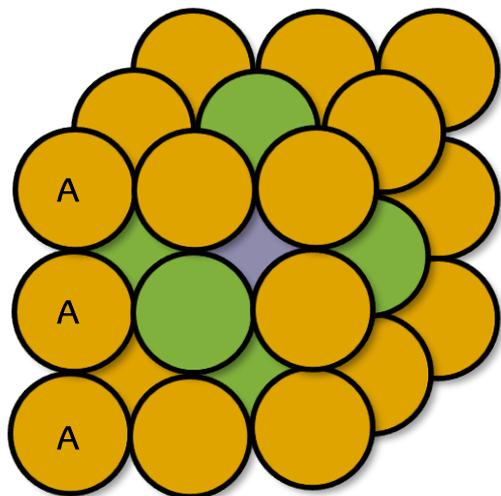


Hexagonal Trinkoa

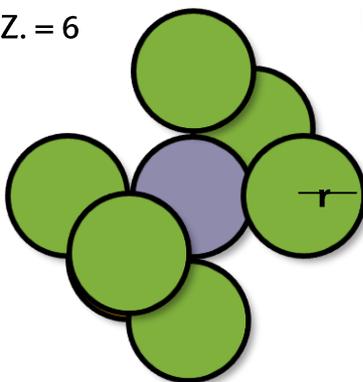
□ PAKETATZE EZ TRINKOA edo SINPLEA.

□ PAKETATZE KUBIKO SINPLEA (PKS)

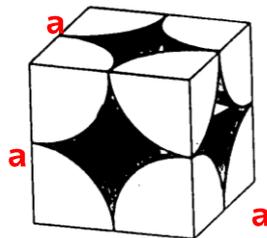
✓ Oso arraroa metaletan. Polonioa



K.Z. = 6



Esferak Tangenteak dira kuboaren ertzetan



PKS egitura duen solidoaren deskribapena.

- ✓ Gelaxka mota: Kubikoa (**Primitibo/Simple**)
- ✓ Gelaxka parametroak: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- ✓ Formula kopurua: $Z = 1$
- ✓ Koordinazio zenbakia: K.Z. = 6
- ✓ Paketatze efikazia: P.E. : %52
- ✓ Esferak tangenteak dira kuboaren ertzetan (a)

$$\text{P.E.} = \frac{\text{esferen } V \text{ gelaska barnean}}{\text{gelaskaren } V} \times 100$$

Esferaren Bolumena $\rightarrow V = \frac{4}{3} \pi r^3$
Gelaskaren ertzaren luzera $\rightarrow a = 2r$

Gelaskaren $V = a^3$

$$\text{PE} = \frac{\frac{4}{3} \pi (a/2)^3}{a^3} \times 100 = \% 52$$

□ SOLIDOEN DENTSITATEA KALKULATZEN

$$\rho = \frac{\text{masas}}{\text{bolumena}} = \frac{PM \cdot Z}{NA \cdot V_{gu}}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N_A = \text{molekula/atomo-kopurua moleko} \\ Z = \text{molekula/atomo-kopurua gelaskako} \\ PM = \text{Masa molekularra/masa atomikoa} \\ V_{gu} = \text{Gelaska unitatearen bolumena} \end{array} \right.$$

ARIKETA: Paketatze kubiko sinplea (PKS). Polonio-aren kasua (I)

Polonioaren masa atomikoa 209 gr/mol da. PKS sarea daukala jakinda, eta bere **gelaxka unitatearen ertzaren tamaina** 335 pm izanda, zein da bere dentsitatea gr/cm³-tan?

Polonioaren dentsitatea kalkulatzeko, gelaxka unitatearen bolumena eta masa beharko dut. Gelaxkaren bolumena kalkulatzeko, ertzaren luzera (a) besterik ez dut behar. Beraz:

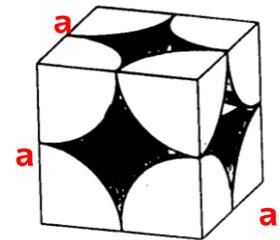
$$V_{gu} = a^3 = (3,35)^3 \text{Å}^3$$

Gelaxka unitate bakoitzean dauden Polonio atomo kopurua kalkulatzeko badugu (Z=1, PKS), eta masa atomikoa ezaguna izanda, ordea, gelaxka unitate bakoitzaren masa kalkulatu ahal izango dugu.

Beraz, Polonioaren dentsitatea horrela kalkulatu daiteke:

$$\frac{Z (\text{atomo/gu}) \cdot PM (\text{gr/mol}) \cdot 10^{24} \cdot 3 \cdot 3}{NA (\text{atomo/mol}) \cdot V (\text{Å}^3/\text{gu})} = \frac{209 \times 1}{6,023 \times 10^{23} \times (3,35)^3} = 9,20 \text{ gr/cm}^3$$

Nehurturikoa:
9,23 gr/cm³



□ SOLIDOEN DENTSITATEA KALKULATZEN

ARIKETA: Paketatze kubiko sinplea (PKS). Polonio-aren kasua (II)

Polonioaren masa atomikoa 209 gr/mol da. PKS sarea daukala jakinda, eta bere **erradio metalikoa** 168 pm izanda, zein da bere dentsitatea gr/cm³-tan?

Polonioaren dentsitatea kalkulatzeko, gelaxka unitatearen bolumena eta masa beharko dut. Gelaxkaren bolumena kalkulatzeko, ertzaren luzera (a) besterik ez dut behar.

PKS batean, esferak, kuboaren ertzean dira tangenteak, beraz $a = 2r$. Ondorioz, gelaxka unitatearen bolumena horrela kalkula daiteke:

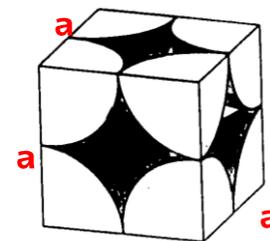
$$V_{gu} = a^3 = (2r)^3 = (1,68 \times 2)^3 \text{ \AA}^3$$

Gelaxka unitate bakoitzean dauden Polonio atomo kopurua kalkulatzaren badugu ($Z=1$, PKS), eta masa atomikoa ezaguna izanda, ordea, gelaxka unitate bakoitzaren masa kalkulatu ahal izango dugu.

Beraz, Polonioaren dentsitatea horrela kalkulatu daiteke:

$$\frac{Z \text{ (atomo/gu)} * PM \text{ (gr/mol)} * 10^{24} \text{ A/cm}^3}{NA \text{ (atomo/mol)} * V \text{ (A}^3\text{/gu)}} = \frac{209 \times 1}{6,023 \times 10^{23} \times (3,35)^3} = 9,20 \text{ gr/cm}^3$$

Nehurturikoa:
9,23 gr/cm³

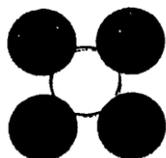
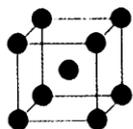
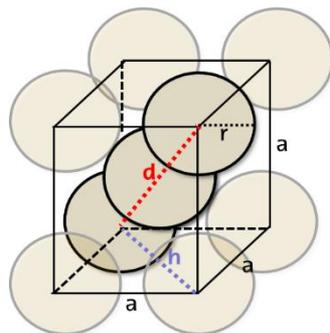
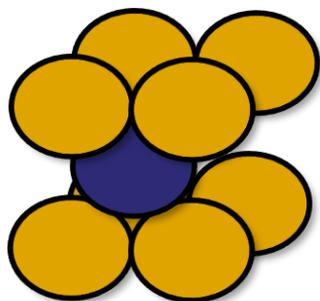


□ PAKETATZE EZ TRINKOA edo SINPLEA.

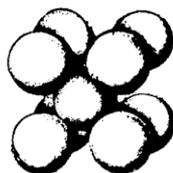
□ PAKETATZE KUBIKO GORPUTZEAN ZENTRATUA

✓ Oso arrunta metaletan.

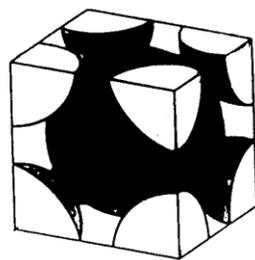
Cr, Mo, W, Ba, Li, Na, Rb, Cs.



(a)



(b)



(c)

(a) Goikaldetik ikusita.

(b) Gelaska-unitatea.

(c) Gelaka-unitateari bi esfera bi dagozkie.

GZE egitura duen solidoaren deskribapena.

✓ Gelaxka mota: Kubikoa (**Gorputzean zentratua; I; GZE**)

✓ Gelaxka parametroak: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

✓ Formula kopurua: $Z = 2$

✓ Koordinazio zenbakia: K.Z. = 8

✓ Paketatze efikazia: P.E. : %68

✓ Esferak tangenteak dira kuboaren diagonalean (d)

$$\text{P.E.} = \frac{\text{esferen } V \text{ gelaska barnean}}{\text{gelaskaren } V} \times 100$$

$$\begin{aligned} d &= 4r \\ h^2 &= a^2 + a^2 = 2a^2 \\ d^2 &= a^2 + h^2 = a^2 + 2a^2 = 3a^2 \\ d &= \sqrt{3} a \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} 4r = \sqrt{3} a \rightarrow a = 4r/\sqrt{3}$$

$$\text{PE} = \frac{2 \times (4/3) \pi r^3}{(4r/\sqrt{3})^3} \times 100 = \% 68$$

□ SOLIDOEN DENTSITATEA KALKULATZEN

ARIKETA: Aurpegian zentratuako pakete kubikoa (AZE). Aluminioaren kasua (I)

Aluminioaren masa atomikoa 26,97 gr/mol da. AZE sarea daukala jakinda, eta bere **gelaxka unitatearen ertzaren luzera** 4,049 Å izanda, zein da bere dentsitatea gr/cm³-tan?

Aluminioaren dentsitatea kalkulatzeko, gelaxka unitatearen bolumena eta masa beharko dit. Gelaxkaren bolumena kalkulatzeko, ertzaren luzera (a) besterik ez dut behar. Beraz:

$$V_{\text{gu}} = a^3 = (4,049)^3 \text{Å}^3$$

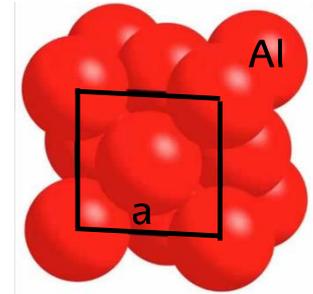
Gelaxka unitate bakoitzean dauden Aluminio atomo kopurua kalkulatu badugu (Z=4, AZE), eta masa atomikoa ezaguna denez, ordea, gelaxka unitate bakoitzaren masa kalkulatu ahal izango dugu.

Aluminioak Aurpegietan Zentratuako Egitura duenez (AZE), Z=4.

Beraz, Aluminioaren dentsitatea horrela kalkulatu daiteke:

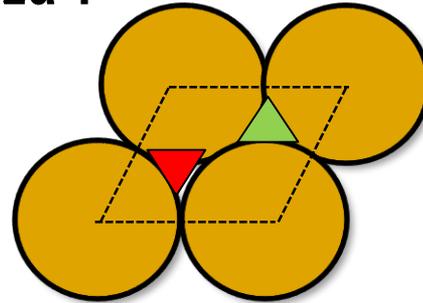
$$\frac{Z (\text{atomo/gu}) * PM (\text{gr/mol}) * 10^{24} \cdot 3^3}{NA (\text{atomo/mol}) * V (\text{Å}^3/\text{gu})} = \frac{26,97 * 4}{6,023 * 10^{23} * (4,049)^3} = 2,70 \text{ gr/cm}^3$$

Nehurturikoa:
2,70 gr/cm³

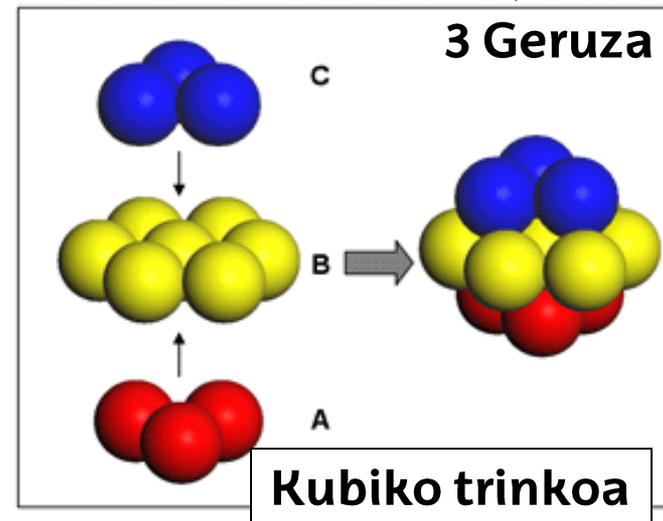
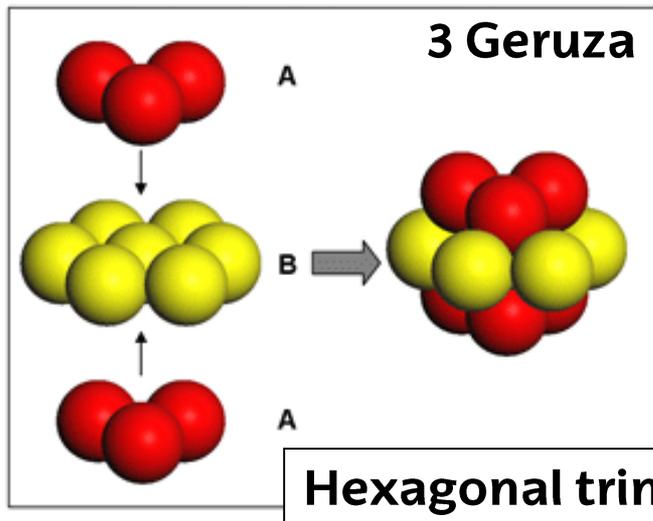


□ PAKETATZE TRINKOA. 2D

Geruza 1



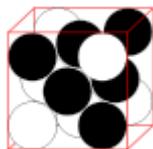
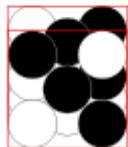
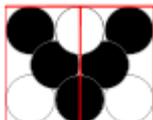
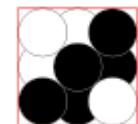
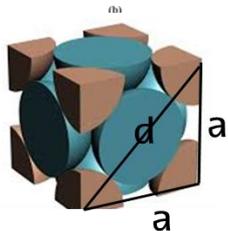
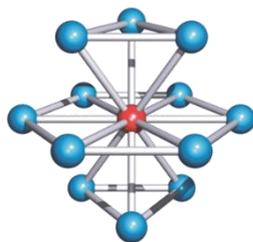
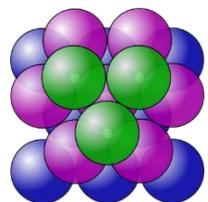
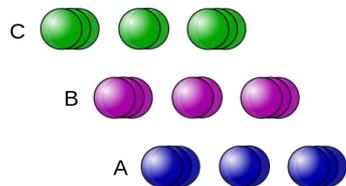
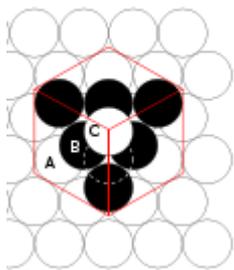
Hutsune txikiak (TRINKOA)



□ PAKETATZE TRINKOA. 3D

□ Paketatze kubiko trinkoa (Aurpegian zentratu-rikoko egitura kubikoa - AZE)

Ag, Al, Au



AZE egitura duen solidoaren deskribapena

- ✓ Gelaxka mota: Kubikoa (**F, Aurpegia zentratua; AZE**)
- ✓ Gelaxka parametroak: $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- ✓ Formula kopurua: $Z = 4$
- ✓ Koordinazio zenbakia: K.Z. = 12
- ✓ Paketatze efikazia: P.E. : %74
- ✓ Esferak tangenteak dira kuboaren aurpegien diagonaletan

$$\text{P.E.} = \frac{\text{esferen } V \text{ gelaska barnean}}{\text{gelaskaren } V} \times 100$$

$$\left. \begin{array}{l} d^2 = a^2 + a^2 = 2a^2 \\ d = 4r \rightarrow d^2 = 16r^2 \end{array} \right\} 2a^2 = 16r^2 \rightarrow a = 4r/\sqrt{2}$$

$$\text{PE} = \frac{4 \cdot (4/3\pi r^3)}{a^3} = \frac{16\pi r^3}{3(4r/\sqrt{2})^3} = \%74$$

□ SOLIDOEN DENTSITATEA KALKULATZEN

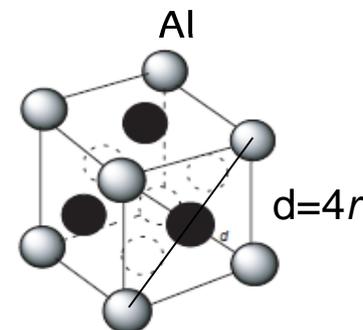
ARIKETA: Aurpegian zentratutako paketatze kubikoa (AZE). Aluminioaren kasua (II)

Aluminioaren masa atomikoa 26,97 gr/mol da eta bere **erradio atomikoa** 143pm (1,43 Å). AZE sarea daukela jakinda, zein da bere dentsitatea gr/cm³-tan?

Aluminioaren dentsitatea kalkulatzeko, gelaxka unitatearen bolumena eta masa beharko dit. Gelaxkaren bolumena kalkulatzeko, ertzaren luzera (a) besterik ez dut behar. AZE batean, atomoak kuboaren aurpegiaren diagonalean (d) dira tangenteak, eta ertzaren luzerarekin horrela erlazionatzen da:

$$a = 4r/\sqrt{2} \quad a = 4 \times 1,43 / \sqrt{2} = 4,044 \text{ \AA} \quad V_{\text{gu}} = a^3 = (4,044)^3 \text{ \AA}^3$$

Gelaxka unitate bakoitzean dauden Aluminio atomo kopurua kalkulatzeko badugu (Z=4, AZE), eta masa atomikoa ezaguna denez, ordea, gelaxka unitate bakoitzaren masa kalkulatu ahal izango dugu.

**Beraz, Aluminioaren dentsitatea horrela kalkulatu daiteke:**

$$\frac{Z \text{ (atomo/gu)} * PM \text{ (gr/mol)} * 10^{24} \text{ }^3 \text{ }^3}{NA \text{ (atomo/mol)} * V \text{ (\AA}^3 \text{ /gu)}} = \frac{26,97 * 4}{6,023 * 10^{23} * (4,044)^3} = 2,71 \text{ gr/cm}^3$$

Nehurturikoa:
2,70 gr/cm³

□ SOLIDOEN DENTSITATEA KALKULATZEN

ARIKETA: Aurpegian zentratutako paketatze kubikoa (AZE). Nikel-aren kasua.

Nikel-aren masa atomikoa 58,69 gr/mol da eta bere **erradio metalikoa 125pm** (1,25 Å). AZE egitura daukela jakinda, zein da bere dentsitatea gr/cm³-tan?

Nikel-aren dentsitatea kalkulatzeko, gelaxka unitatearen bolumena eta masa beharko dit. Gelaxkaren bolumena kalkulatzeko, ertzaren luzera (a) besterik ez dut behar. AZE batean, atomoak kuboaren aurpegiaren diagonalean (d) dira tangenteak, beraz, diagonalaren luzera $d=4r$.

$d=4r$, nun r Ni-ren erradio metalikoa den.

Pitagoras aplikatuz d eta a (ertzaren luzera) horrela erlazionatzen dira: $a = 4r/\sqrt{2}$

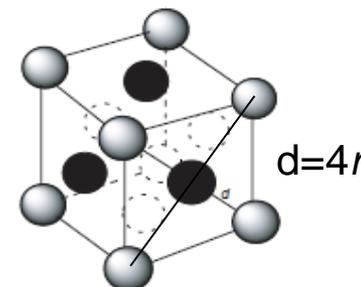
Beraz, gelaxka unitatearen bolumena horrela adierazi dezakegu:

$$V_{\text{gu}} = a^3 = (4r/\sqrt{2})^3 \text{Å}^3 = (4 \times 1,25/\sqrt{2})^3 = 44,19 \text{Å}^3$$

Gelaxka unitate bakoitzean dauden Nikel atomo kopurua (Z) 4 denez (AZE), gelaxka unitate bakoitzaren masa kalkulatu ahal izango dugu (Z x PM).

Beraz, Nikel-aren dentsitatea horrela kalkulatu daiteke:

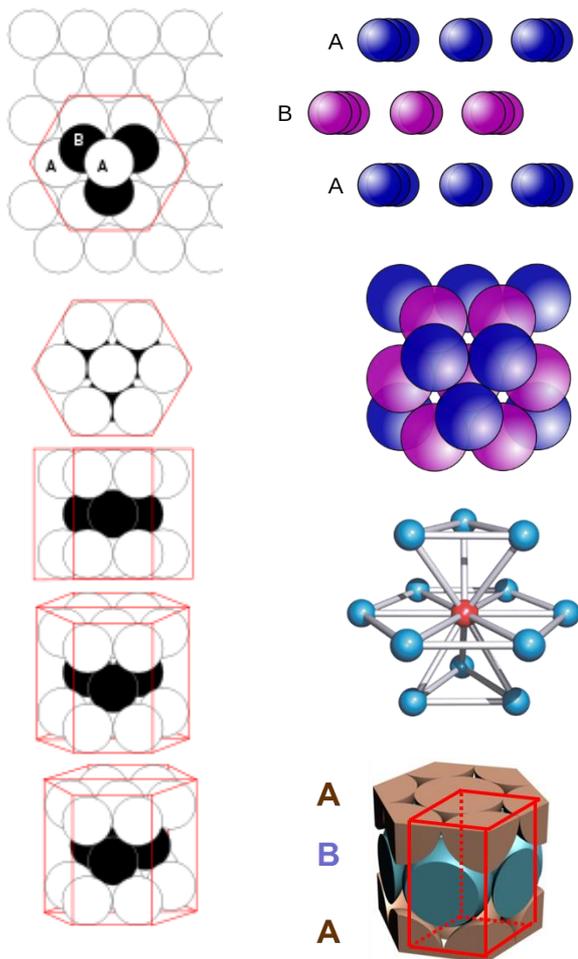
$\frac{Z \text{ (atomo/gu)} * PM \text{ (gr/mol)} * 10^{24} \text{ }^3 \text{ }^3}{NA \text{ (atomo/mol)} * V \text{ (Å}^3\text{gu)}} = \frac{58,69 \times 4}{6,023 \times 10^{23} \times 44,19} = 8,82 \text{ gr/cm}^3$	Nehurturikoa: 8,90 gr/cm³
--	---



□ PAKETATZE TRINKOA. 3D

□ Paketatze hexagonal trinkoa (PHT)

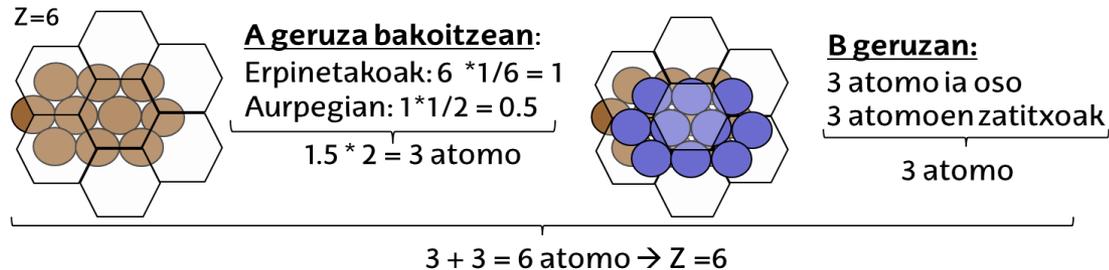
Cd, Mg eta Zn

**PHT egitura duen solidoaren deskribapena**

- ✓ Gelaxka mota: Hexagonalala (P)
- ✓ Gelaxka parametroak: $a = b, c = 1.63a, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
- ✓ Formula kopurua: $Z = 6$
- ✓ Koordinazio zenbakia: K.Z. = 12
- ✓ Paketatze efikazia: P.E. : %74
- ✓ Esferak tangenteak dira kuboaren aurpegien diagonaletan

$$\text{P.E.} = \frac{\text{esferen V gelaska barnean}}{\text{gelaskaren V}} \times 100 = 74\%$$

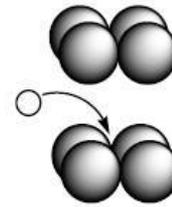
Z=6



□ SOLIDO IONIKOAK. HUTSUNEAK BETETZEN

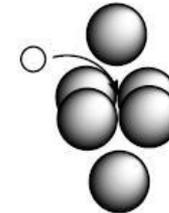
- ✓ Elementu baten paketatze mota jakin batek uzten dituen hutsuneak, bigarren elementu batek bete ditzake guztiz edo partzialki, **solido ioniko bat** sortuz.

Hutsuneen tamina
 $K > O > T$



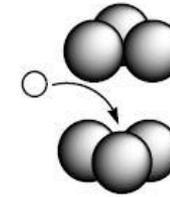
kubikoa

Hutsune
kubikoa
8 esferen artean
(paketatze ez trinko)

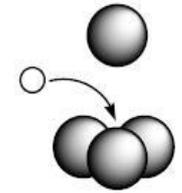


oktaedrikoa

Hutsune
oktaedrikoa
6 esferen artean
(paketatze trinko)



oktaedrikoa



tetraedrikoa

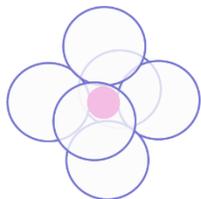
Hutsune
tetraedrikoa
4 esferen artean
(paketatze trinko)

□ SOLIDO IONIKOAK. HUTSUNEAK BETETZEN

- ✓ Anioiak paketatuta eta eskura dauden hutsunetan, katio bat edo bestea sartu ahal izango dugu, hutsune eta katioi hauen tamainaren arabera, .

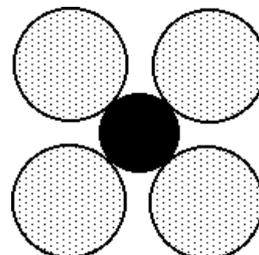
○ Anioia ● Katioia
 $r_{\text{halogenuro}} > r_{\text{katio}}$

$r_- > r_+$

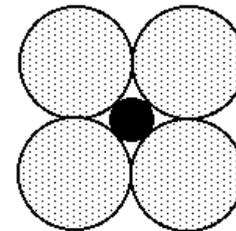


Anioiek utzitako hutsunetan, katioiak sartu.

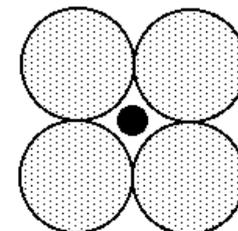
Katioia → tangentea izaten saiatzen da hutsunea eratzten duten anioi guztiekiko



$r_{\text{katioi}} / r_{\text{anioi}} > \text{ideala}$
egonkorra



$r_{\text{katioi}} / r_{\text{anioi}} = \text{ideala}$
egonkorra



$r_{\text{katioi}} / r_{\text{anioi}} < \text{ideala}$
desegonkorra

Esteka 4.6. Erradioen erratioen araua

Erradioen erlazioaren araua

Hutsuneen tamaina
 $K > O > T$

$$\left[\begin{array}{l} \frac{r_{\text{Hutsune tetraedriko}}}{r_{\text{esfera anioi}}} \geq 0,225 \\ \frac{r_{\text{Hutsune oktaedriko}}}{r_{\text{esfera anioi}}} \geq 0,414 \\ \frac{r_{\text{Hutsune kubiko}}}{r_{\text{esfera anioi}}} \geq 0,732 \end{array} \right.$$

□ SOLIDO IONIKOAK. HUTSUNEA BETETZEN

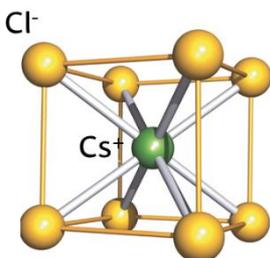
□ HUTSUNE KUBIKOAK BETETZEN

Erradioen erlazioaren araua

Demagun **CsCl** Solido Ionikoa dugula.

- Kloruroek paketatze kubiko sinplea dutela suposatuko dugu.
- Beraz, hutsune kubiko handi bat gelaxkaren erdian.
- Hutsune hori katioi batek dezake, horretarako, **erradioen erratioaren** baldintza bete behar da.

$$\frac{r_{\text{Hutsune kubiko/katioi}}}{r_{\text{esfera/anioi}}} \geq 0,732$$



Cl- erradioa 181pm baldin bada (r_{anioi}), zein da hutsunean sartzen den katioi baten erradio txikiena? **$181\text{pm} \times 0,732 = 132,5\text{pm}$**

Hau da, Cl- anioien paketatzeak uzten duen hutsune kubikoan sartzen den katioaren erradioa, gutxienez, 132,5pm-koa izango da, bestela ez da sartuko. **Izatez, Cs+ erradio ionikoa = 169 pm**

Beraz, erradioen araua betetzen da eta CsCl solido ionikoaren egitura hórrela deskribatu daiteke: Anioien paketatzen kubiko sinplea eta katioiek hutsune kubikoak (1) betetzen dituzte.

□ ARIKETA

Demagun NaCl Solidoa.

- Kloruroek paketatze kubiko sinplea dutela suposatuko dugu.
- Beraz, hutsune kubiko handi bat gelaxkaren erdian.
- Hutsune hori sodioak beteko al du? Hau da, NaCl eta CsCl egitura mota berdina al dute_

Kloruro $r_{\text{anioi}} = 181 \text{ pm}$

Sodio $r_{\text{katioi}} = 95 \text{ pm}$

□ SOLIDO IONIKOAK. HUTSUNEA BETETZEN

Erradioen erlazioaren araua

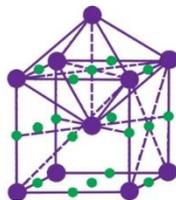
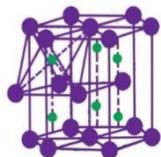
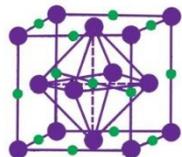
$$\left[\begin{array}{l} \frac{r_{\text{Hutsune tetraedriko}}}{r_{\text{esfera anioi}}} \geq 0,225 \\ \frac{r_{\text{Hutsune oktaedriko}}}{r_{\text{esfera anioi}}} \geq 0,414 \\ \frac{r_{\text{Hutsune kubiko}}}{r_{\text{esfera anioi}}} \geq 0,732 \end{array} \right.$$

□ HUTSUNE OKTAEDRIKO ETA TETRAEDRIKOAK BETETZEN

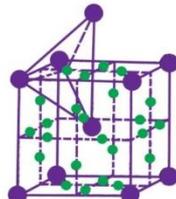
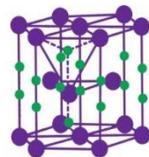
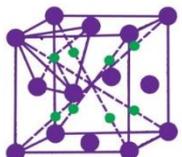
Nun daude eta zenbat dira?

Hutsune kopurua

O
Hutsuneak
(berdeak)



T
Hutsuneak
(berdeak)



FCC

Face Centered Cubic-
Closed Cubic Packing
AZE

HCP

Hexagonal Closed
Packing
PHT

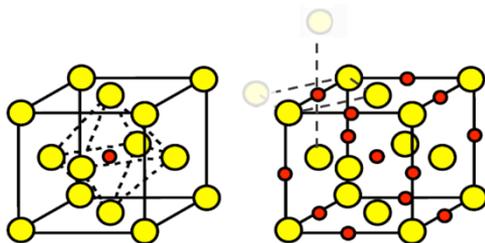
BCC

Body Centered
Cubic
GZE

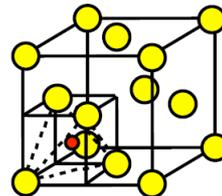
□ SOLIDO IONIKOAK. HUTSUNEAK BETETZEN



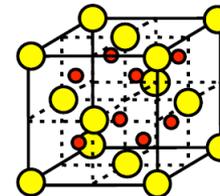
Anioiak, AZE.



Hutsune oktaedrikoa



Hutsune tetraedrikoa



Hutsuneak ere partekatzen dira gelaxken artean!!!

- # Hutsune oktaedriko kopurua = Z
- # Hutsune tetraedriko kopurua = 2Z

Sare Mota	Z	Hutsune Kopurua
Kubiko simple	1	1 Kubikoa
Kubiko G.Z.	2	--
PKT edo AZE	4	4 Okt + 8 tetra
PHT	6	6 Okt + 12 tetra

□ ARIKETA

Demagun NaCl Solidoa.

- Kloruroek AZE edo PKT dutela suposatuko dugu.
- Beraz, 4 hutsune oktaedriko eta 8 tetraedriko uzten dituzte. Ikusi goiko irudiak.
- Sodioak beteko al ditu hutsune horiek? Zeintzu, tetraedrikoak edo oktaedrikoak?

Kloruro $r_{\text{anion}} = 181 \text{ ppm}$

Sodio $r_{\text{kation}} = 95 \text{ ppm}$

□ SOLIDO IONIKOAK. HUTSUNEAK BETETZEN

- ✓ Anioi eta katioen erradioen arteko erlazioaren arabera, egitura desberdinak sortzen dira, hutsune mota desberdinak modu desberdinean betez.
- ✓ Paketatze kubiko trinkoetatik eratorritako 4 solido ioniko mota (egitura aldetik).
Paketatze hexagonal trinkoetatik eratorritako 2 solido ioniko mota (egitura aldetik).
- ✓ Estekiometriaren arabera, MX, MX₂ eta M₂X estekiometriako solido ionikoak.

Egitura Mota	Erreferentzia **	Anioien* Sarea	Katioiez Hutsuneen Okupazioa	K.Z	Z
MX estekiometria					
Zesio kloruro	CsCl	Kubiko simplea	Kubiko guztiak	8:8	1
Sodio kloruro	NaCl	Kubiko trinkoa	Oktaedriko guztiak	6:6	4
Blenda	ZnS	Kubiko trinkoa	1/2 Tetraedriko (txandakatuta)	4:4	4
Wurtzita	ZnS	Hexagonal trinkoa	1/2 Tetraedriko	4:4	6
Nikel arseniuro / Nikelina	NiAs	Hexagonal trinkoa	Oktaedriko guztiak	6:6	6
MX₂ / M₂X estekiometria					
Fluorita	CaF ₂	Kubiko trinkoa (Ca ²⁺)	Tetraedriko guztiak (F ⁻)	8:4	4
Antifluorita	Na ₂ O	Kubiko trinkoa (O ²⁻)	Tetraedriko guztiak (Na ⁺)	8:4	4

* Fluoritan izan ezik

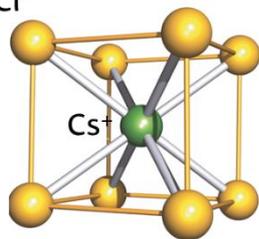
** Erreferentzia bezala erabiltzen den solido ionikoa.

Esteka 4.7.- Solido ionikoak 3D applet

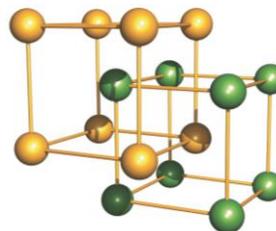
□ SOLIDO IONIKOEN SAREEN DESKRIBAPENA

- ✓ MX estekiometria.
- Zesio kloruro**
- egitura mota.

Egitura Mota	Erreferentzia **	Anioien* Sarea	Katioiez Hutsuneen Okupazioa	K.Z	Z
MX estekiometria					
Zesio kloruro	CsCl	Kubiko simplea	Kubiko guztiak	8:8	1

Cl⁻

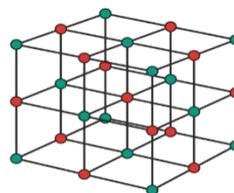
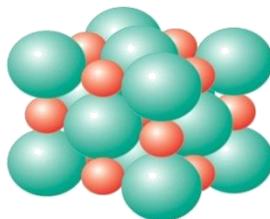
Anioien sare kubiko simplea, katioiek hutsune kubikoak betetzen dituztelarik



Anioien sare kubiko simplea eta katioien sare kubiko simplea elkargurutzatuta

- ✓ MX estekiometria.
- Sodio kloruro**
- egitura mota.

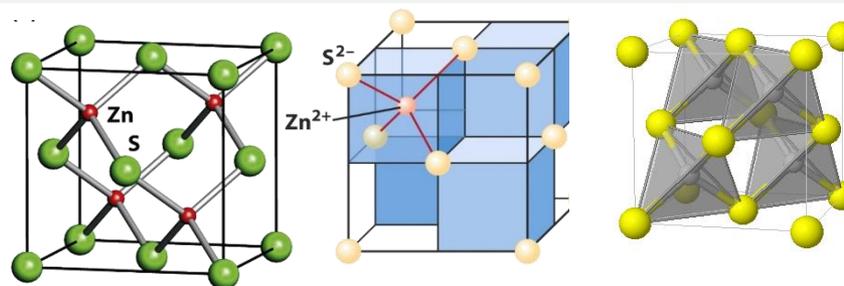
Egitura Mota	Erreferentzia **	Anioien* Sarea	Katioiez Hutsuneen Okupazioa	K.Z	Z
MX estekiometria					
Sodio kloruro	NaCl	Kubiko trinkoa	Oktaedriko guztiak	6:6	4



□ SOLIDO IONIKOEN SAREEN DESKRIBAPENA

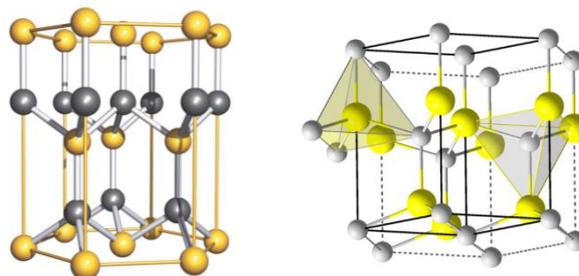
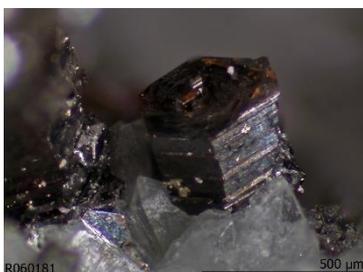
- ✓ MX estekiometria.
- Blenda**
- egitura mota.

Egitura Mota	Erreferentzia **	Anioien* Sarea	Katioiez Hutsuneen Okupazioa	K.Z	Z
MX estekiometria					
Blenda	ZnS	Kubiko trinkoa	1/2 Tetraedriko (txandakatuta)	4:4	4



- ✓ MX estekiometria.
- Wurtzita**
- egitura mota.

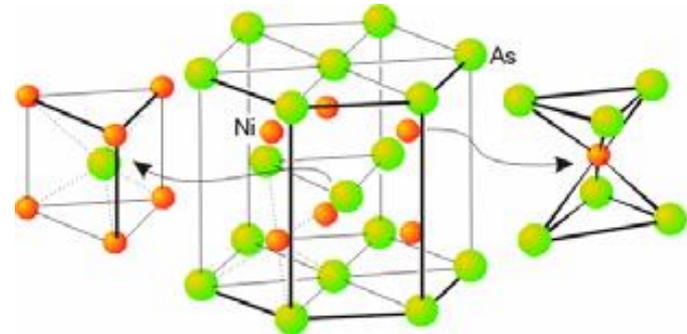
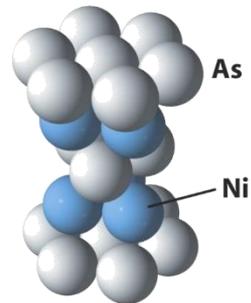
Egitura Mota	Erreferentzia **	Anioien* Sarea	Katioiez Hutsuneen Okupazioa	K.Z	Z
MX estekiometria					
Wurtzita	ZnS	Hexagonal trinkoa	1/2 Tetraedriko	4:4	6



□ SOLIDO IONIKOEN SAREEN DESKRIBAPENA

- ✓ MX estekiometria. **Nikel Arseniuro** egitura mota.

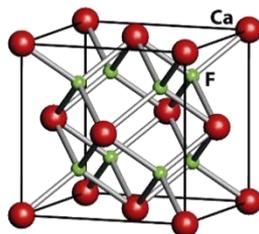
Egitura Mota	Erreferentzia **	Anioien* Sarea	Katioiez Hutsuneen Okupazioa	K.Z	Z
MX estekiometria					
Nikel arseniuro/Nikelina	NiAs	Hexagonal trinkoa	Oktaedriko guztiak	6:6	6



□ SOLIDO IONIKOEN SAREEN DESKRIBAPENA

✓ MX_2 estekiometria. **Fluorita** egitura mota.

Egitura Mota	Erreferentzia	Katioien Sarea	Anioiez-Hutsuneen Okupazioa	K.Z	Z
MX_2 estekiometria					
Fluorita	CaF_2	Kubiko trinkoa (Ca^{2+})	Tetraedriko guztiak (F^-)	8:4	4

✓ M_2X estekiometria. **Antifluorita** egitura mota.

Egitura Mota	Erreferentzia	Anioien Sarea	Katioiez Hutsuneen Okupazioa	K.Z	Z
M_2X estekiometria					
Antifluorita	Na_2O	Kubiko trinkoa (O^{2-})	Tetraedriko guztiak (Na^+)	8:4	4

