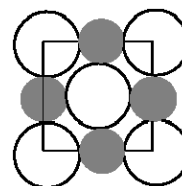


Problemas – Estado Sólido

$$N = 6,023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

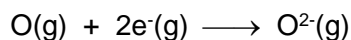
- Calcule o número de esferas na célula unitária, a relação entre a aresta do cubo e o raio da esfera e a fracção de volume ocupado nas seguintes estruturas:
 - Cúbica compacta (cfc).
 - Cúbica de corpo centrado (ccc)
 - Cúbica simples (primitiva)
- O cobre cristaliza com uma estrutura cúbica compacta. A célula unitária é um cubo de 360,8 pm de aresta. Calcule a densidade do metal em g/cm^3 e o seu raio em pm
- A prata cristaliza com uma estrutura cfc. Sabendo que a sua densidade é $10,50 \text{ g/cm}^3$, calcule o raio de um átomo de prata em pm.
- O crómio cristaliza com uma estrutura cúbica. A aresta da célula unitária é 288,5 pm e a densidade relativa do metal é 7,14. Determine de que tipo de estrutura cúbica se trata.
- O sódio metálico adopta uma estrutura ccc com uma densidade de 970 kg/m^3 . Determine o comprimento da célula unitária (em pm)
- Calcule o volume da célula unitária do KCl e a densidade deste sal, considerando que a figura representa uma face da célula unitária e sabendo que $r(\text{Cl}) = 181 \text{ pm}$ e $r(\text{K}) = 133 \text{ pm}$
 - Calcule a fracção de espaço ocupada na célula unitária.



- Calcule a densidade do cloreto de sódio, sabendo que cristaliza numa estrutura cfc de aniões em que os catiões ocupam todas as cavidades octaédricas.
- Sabendo que o cloreto de cézio cristaliza com uma estrutura ccc, calcule o comprimento da aresta da célula unitária e a densidade do cloreto de cézio.
- Calcule o raio do ião Mg^{2+} considerando que a densidade do sulfureto de magnésio é de $2,14 \text{ g/cm}^3$ e que o MgS cristaliza com a estrutura do cloreto de sódio. O raio iónico do Mg^{2+} é igual a 72 pm.
- Nas espinelas normais, $\text{A}[\text{B}_2]\text{O}_4$, os dicatiões A^{2+} ocupam $1/8$ das cavidades tetraédricas e os tricatiões B^{3+} metade das octaédricas. Nas inversas, $\text{B}[\text{AB}]\text{O}_4$ os tricatiões B^{3+} estão distribuídos pelas duas geometrias. Verifique se as seguintes espinelas são normais ou inversas: MgAl_2O_4 , ZnFe_2O_4 , Mn_3O_4 e Co_3O_4 .

Energética de sólidos iônicos

11. a) Calcule a energia de rede do MgO usando a equação de Kapustinskii.
 b) Utilizando um ciclo de Born-Haber determine a variação de entalpia correspondente ao processo:

Dados (kJ/mol)

Entalpia de sublimação do Mg(s)	148
1. ^a Energia de ionização do Mg(g)	738
2. ^a Energia de ionização do Mg(g)	1450
Energia de ligação O-O	498
Entalpia de formação do MgO(s)	-602
Raio iônico do O ²⁻	1,40 Å
Raio iônico do Mg ²⁺	0,72 Å

$$U = \frac{1202 \nu z_+ z_-}{r_0} \left(1 - \frac{0,345}{r_0} \right)$$

$$e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$N = 6,023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$$

12. a) Calcule a energia reticular do cloreto de sódio usando a equação de Kapustinskii.
 b) Construa o ciclo de Born-Haber para o cloreto de sódio. Com o valor de energia reticular determinado na alínea anterior e os dados termodinâmicos seguintes, calcule a entalpia de formação do NaCl.

Dados (kJ/mol)

Entalpia de sublimação do Na(s)	107
1. ^a Energia de ionização do Na(g)	502
Energia de ligação Cl-Cl	240
1. ^a Electroafinidade do Cl	-349
Raio iônico do Cl ⁻	1,67 Å
Raio iônico do Na ⁺	1,16 Å

$$U = \frac{1202 \nu z_+ z_-}{r_0} \left(1 - \frac{0,345}{r_0} \right)$$

13. a) Calcule a energia reticular do cloreto de césio, usando a equação de Born-Landé
 b) Construa o ciclo de Born-Haber para o cloreto de césio. Com o valor de energia reticular determinado na alínea anterior e os dados termodinâmicos seguintes, calcule a entalpia de formação do cloreto de césio.

Dados (kJ/mol)

Entalpia de sublimação do Cs(s)	79
1. ^a Energia de ionização do Cs(g)	375,7
Energia de ligação Cl-Cl	240
1. ^a Electroafinidade do Cl	-349
Raio iônico do Cl ⁻	1,67 Å
Raio iônico do Cs ⁺	1,81 Å

$$e = 1,602 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$N = 6,023 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$$

$$\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$$

$$U = -A \frac{|z_+ z_-| e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} N \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

	Const. de Madelung	CE	n
NaCl	1,748	He	5
CsCl	1,763	Ne	7
Blenda	1,638	Ar	9
Wurtzite	1,641	Kr	10
CaF ₂	2,408	Xe	12
TiO ₂	2,191		