

Determinación estructural. Grupos A y C. Curso 2002-2003.

Examen de la parte Químico Física. Septiembre de 2003

Completa, en letras mayúsculas, los datos personales que aparecen a continuación. Lee atentamente las preguntas y responde en el espacio proporcionado. **No se corregirá lo que escribas en la parte de atrás de las hojas, que puedes utilizar para tus operaciones.**

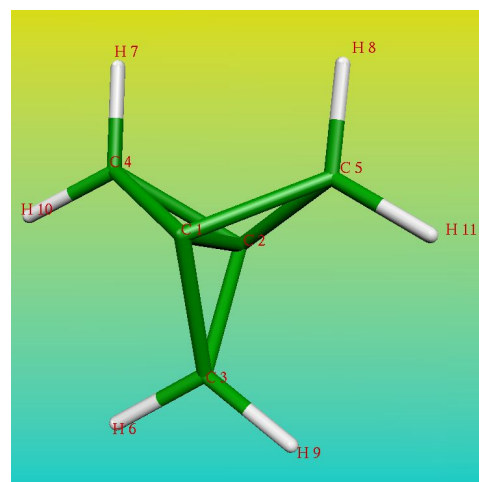
Nombre, apellidos, DNI, Teléfono y Grupo
--

Pregunta 1 (35 puntos)	
Pregunta 2 (35 puntos)	

Constantes útiles: $k_B = 1.38066 \times 10^{-16}$ erg/K, $\hbar = 1.05457266 \times 10^{-27}$ erg s, $h = 6.62608 \times 10^{-27}$ erg s, $N_A = 6.02214 \times 10^{23}$ mol⁻¹, $c = 2.99792458 \times 10^{10}$ cm s⁻¹, $R = 8.314$ J mol⁻¹ K⁻¹.

1. Un cálculo mecanocuántico ha producido las siguientes coordenadas para la molécula de [1,1,1]biciclopentano (C₅H₆, ver figura adjunta):

átomo	x (Å)	y (Å)	z (Å)
C1	0.0000000000	0.0000000000	-0.8160780447
C2	0.0000000000	0.0000000000	0.8160780447
C3	-0.6534165290	1.1317506268	0.0000000000
C4	-0.6534165290	-1.1317506268	0.0000000000
C5	1.3068330580	0.0000000000	0.0000000000
H6	-1.7241941418	1.1730926471	0.0000000000
H7	-0.1538309625	-2.0797422514	0.0000000000
H8	1.8780251043	-0.9066496043	0.0000000000
H9	-0.1538309625	2.0797422514	0.0000000000
H10	-1.7241941418	-1.1730926471	0.0000000000
H11	1.8780251043	0.9066496043	0.0000000000



- (a) (10 puntos) Calcula las distancias y ángulos que se indican en la siguiente tabla:

ij	d_{ij} (Å)	ijk	α_{ijk} (°)
C1-C2		C1-C5-C2	
C1-C3		H6-C3-H9	
C3-H6			

- (b) (10 puntos) La molécula pertenece al grupo puntual \mathcal{D}_{3h} . ¿Cuál es el orden del grupo? Identifica todos sus elementos de simetría. Determina las matrices 3×3 de todas sus operaciones de simetría en la representación cartesiana.

- (c) (15 puntos) Con ayuda de la tabla de caracteres adjunta determina y clasifica la simetría de los modos normales de vibración de la molécula indicando, brevemente, cómo lo haces. Dicho de otro modo: construye y reduce la representación Γ^{3N} . ¿Cuál es la dimensión de la representación? Indica qué modos son de traslación, rotación y vibración pura.

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$	
A'_1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
A'_2	1	1	-1	1	1	-1	R_z
E'	2	-1	0	2	-1	0	$(x, y), (x^2 - y^2, xy)$
A''_1	1	1	1	-1	-1	-1	
A''_2	1	1	-1	-1	-1	1	z
E''	2	-1	0	-2	1	0	$(R_x, R_y), (xz, yz)$
χ^{xyz}							
N_{at}							
χ^{3N}							

	A'_1	A'_2	E'	A''_1	A''_2	E''
Γ^{3N}						
Traslación						
Rotación						
Vibración						

2. El sulfuro de platino cristaliza, en condiciones ambiente, en una fase tetragonal de grupo espacial $P4_2/mmc$ (número 131). Los parámetros de red son $a = 3.48$ y $c = 6.11$ Å, el Pt ocupa las posiciones 2c y el sulfuro las 2f. Las Tablas Internacionales de Cristalografía indican que las posiciones 2c, 2f y general (16r) de este grupo son:

2c	$(0, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2)$
2f	$(1/2, 1/2, 1/4), (1/2, 1/2, 3/4)$
16r	$(x, y, z), (-x, -y, z), (-y, x, z + 1/2), (y, -x, z + 1/2)$ $(-x, y, -z), (x, -y, -z), (y, x, -z + 1/2), (-y, -x, -z + 1/2)$ $(-x, -y, -z), (x, y, -z), (y, -x, -z + 1/2), (-y, x, -z + 1/2)$ $(x, -y, z), (-x, y, z), (-y, -x, z + 1/2), (y, x, z + 1/2)$

- (a) (10 puntos) ¿Cuál es el orden del grupo factor? Escribe las matrices que corresponden a las operaciones de simetría del grupo. ¿Alguna de las operaciones es no simórfica? Si es así, indica cuáles.

- (b) (5 puntos) Determina la densidad (en g/cm^3) del cristal. Masas: 32.06 (S) y 195.09 g/mol (Pt).

- (c) (5 puntos) Determina la distancia Pt-S y Pt-Pt.

(d) (**5 puntos**) Obtén la expresión y calcula los parámetros y el volumen de la celda recíproca.

(e) (**5 puntos**) Calcula la distancia entre planos sucesivos de cada una de las familias (100), (001), (110), (101), y (111), así como el ángulo de Bragg para cada familia si la radiación utilizada proviene de la línea $K\alpha$ del Cu-I y vale $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$.

(f) (**5 puntos**) Escribe los factores de estructura F_{hkl} del cristal en función de los factores atómicos, y determina su valor para los planos (000), (100), (001), (110), y (101).

