

12 Empacotamento

1. Determine as razões dos raios dos átomos nas cavidades octaédricas e tetragonais da estrutura *fcc*.
2. Os cristais de FeCl_2 são lamelares, o que indica uma estrutura formada por camadas de átomos. A difração de raios X indica que esta estrutura é descrita por uma malha hexagonal centrada **R** com $a=3.579 \text{ \AA}$, $c=17.536 \text{ \AA}$ e três unidades de FeCl_2 por malha. Uma malha romboédrica descrita em um sistema hexagonal é uma malha de multiplicidade 3, com coordenadas dos pontos indicados por um rede de translação $000, \frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{3}, \frac{1}{3}\frac{2}{3}\frac{2}{3}$. Os raios iônicos são $r_{\text{Fe}^{2+}} = 0.80 \text{ \AA}$ e $r_{\text{Cl}^-} = 1.81 \text{ \AA}$.
 - (a). Calcule a fração do volume das malhas *fcc* e *hcp* ocupadas por átomos? Considere os átomos como esferas rígidas.
 - (b) Calcule a fração de do volume ocupado por átomos de Cl. O que V_c pode deduzir? Tente esquematizar a estrutura.
 - (c) Coloque um átomo de Cl na estrutura levando em conta que se trata de uma malha **R**. Das suas sequência de empilhamento $\text{ABAB}\{\}$ e $\text{ABCABC}\{\}$ qual é a compatível com a sua malha? Para facilitar a abordagem deste problema, analise a estrutura no plano paralelo ao eixo **c** que passa ao longo da diagonal da base.
 - (d) Qual é o número de coordenação em torno do Fe^{2+} , indicado pela proporção dos raios $r_{\text{Fe}^{2+}}/r_{\text{Cl}^-}$?
 - (e) Como incluir os íons de Fe^{2+} na estrutura?
 - (f) A estrutura resultante é centrossimétrica?