

## 12 Empacotamento

---

1. Determine as razões dos raios dos átomos nas cavidades octaédricas e tetragonais da estrutura *fcc*.
2. Os cristais de  $\text{FeCl}_2$  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  $\text{FeCl}_2$  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  $\text{Fe}^{2+}$ , indicado pela proporção dos raios  $r_{\text{Fe}^{2+}}/r_{\text{Cl}^-}$ ?
  - (e) Como incluir os íons de  $\text{Fe}^{2+}$  na estrutura?
  - (f) A estrutura resultante é centrossimétrica?