

15 Estrutura do Silício

O Silício se cristaliza no grupo de espaço $Fd\bar{3}m$, $a = 5.431 \text{ \AA}$ (Batschelder & Simmons, Journal of Physics 1964, T=298 K). Apenas a posição de Wyckoff a ($000, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$, + centragem F) é ocupada por um átomo (a simetria do sítio é $\bar{4}3m$, multiplicidade 8).

1. A qual sistema cristalino esta estrutura pertence? Justifique sua resposta.
2. Qual a rede cristalina do grupo de espaço?
3. Partindo de uma posição geral, quantos pontos equivalentes possui esta estrutura?
4. Esta estrutura é centrossimétrica? Justifique sua resposta.
5. Quantos átomos encontramos na malha?
6. Esboce uma projeção da estrutura do Si. Quantos vizinhos próximos possui cada átomo? Qual a forma geométrica do poliedro de coordenação em torno de cada átomo de Si?
7. A estrutura do Si pode ser considerada como um empilhamento compacto rígido? Por que?
8. Se pudéssemos deduzir por medidas espectroscópicas a ordem do grupo de simetria de cada átomo de Si, qual valor encontraríamos?
9. Calcule a densidade do cristal de Si. A massa do silício é 28,08 g/mol.