

# 14 Estrutura do SiO<sub>2</sub>

---

1. Os dados cristalográficos da estrutura cristalina da fase  $\alpha$  do quartzo,  $SiO_2$ , são os seguintes.

Sistema Cristalino	Trigonal
Grupo de espaço	$P3_221$
$a$	4.93 Å
$c$	5.41 Å
Coordenada do Si	(0.47, 0.00, 0.17)
Coordenada do O	(0.41, 0.26, 0.29)

(a) Com a ajuda das informações contidas na Tabela Internacional, esquematize a projeção da estrutura do  $SiO_2$  segundo as direções [001] ( $2 \times 2$  malhas) e [100] ( $2 \times 2$  malhas) deixando explícito nos desenhos os átomos ligados e indicando por + e - as cotas com relação ao eixo z.

(b) Indique nos diagramas as ligações SiO e calcule o valor das distâncias SiO mais curtas. (c) Quantas moléculas de  $SiO_2$  existem na célula unitária, i.e. qual o valor de Z? (d) Determine a geometria da coordenação do sício pelos oxigênios e dos oxigênios pelo sício.

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

6	$c$	1	(1) $x, y, z$	(2) $\bar{y}, x-y, z+\frac{2}{3}$	(3) $\bar{x}+y, \bar{x}, z+\frac{1}{3}$
			(4) $y, x, \bar{z}$	(5) $x-y, \bar{y}, \bar{z}+\frac{1}{3}$	(6) $\bar{x}, \bar{x}+y, \bar{z}+\frac{2}{3}$

3	$b$	.2.	$x, 0, \frac{1}{6}$	$0, x, \frac{5}{6}$	$\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2}$
---	-----	-----	---------------------	---------------------	---------------------------------

3	$a$	.2.	$x, 0, \frac{2}{3}$	$0, x, \frac{1}{3}$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$
---	-----	-----	---------------------	---------------------	-----------------------