

## TRACCE ESERCITAZIONE 16

1. Dimostrare che il minimo rapporto dei raggi catione/anione per un numero di coordinazione pari a 6 è 0.414.
- 1) Quale dei cationi in tabella pensate possano formare fluoruri con numero di cationi e anioni uguale, quindi del tipo AX (cubica semplice tipo Cloruro di Cesio).

<i>Cation</i>	<i>Ionic Radius (nm)</i>	<i>Anion</i>	<i>Ionic Radius (nm)</i>
Al <sup>3+</sup>	0.053	Br <sup>-</sup>	0.196
Ba <sup>2+</sup>	0.136	Cl <sup>-</sup>	0.181
Ca <sup>2+</sup>	0.100	F <sup>-</sup>	0.133
Cs <sup>+</sup>	0.170	I <sup>-</sup>	0.220
Fe <sup>2+</sup>	0.077	O <sup>2-</sup>	0.140
Fe <sup>3+</sup>	0.069	S <sup>2-</sup>	0.184
K <sup>+</sup>	0.138		
Mg <sup>2+</sup>	0.072		
Mn <sup>2+</sup>	0.067		
Na <sup>+</sup>	0.102		
Ni <sup>2+</sup>	0.069		
Si <sup>4+</sup>	0.040		
Ti <sup>4+</sup>	0.061		

<i>Structure Name</i>	<i>Structure Type</i>	<i>Anion Packing</i>	<i>Coordination Numbers</i>		<i>Examples</i>
			<i>Cation</i>	<i>Anion</i>	
Rock salt (sodium chloride)	AX	FCC	6	6	NaCl, MgO, FeO
Cesium chloride	AX	Simple cubic	8	8	CsCl
Zinc blende (sphalerite)	AX	FCC	4	4	ZnS, SiC
Fluorite	AX <sub>2</sub>	Simple cubic	8	4	CaF <sub>2</sub> , UO <sub>2</sub> , ThO <sub>2</sub>
Perovskite	ABX <sub>3</sub>	FCC	12(A) 6(B)	6	BaTiO <sub>3</sub> , SrZrO <sub>3</sub> , SrSnO <sub>3</sub>
Spinel	AB <sub>2</sub> X <sub>4</sub>	FCC	4(A) 6(B)	4	MgAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub> , FeAl <sub>2</sub> O <sub>4</sub>

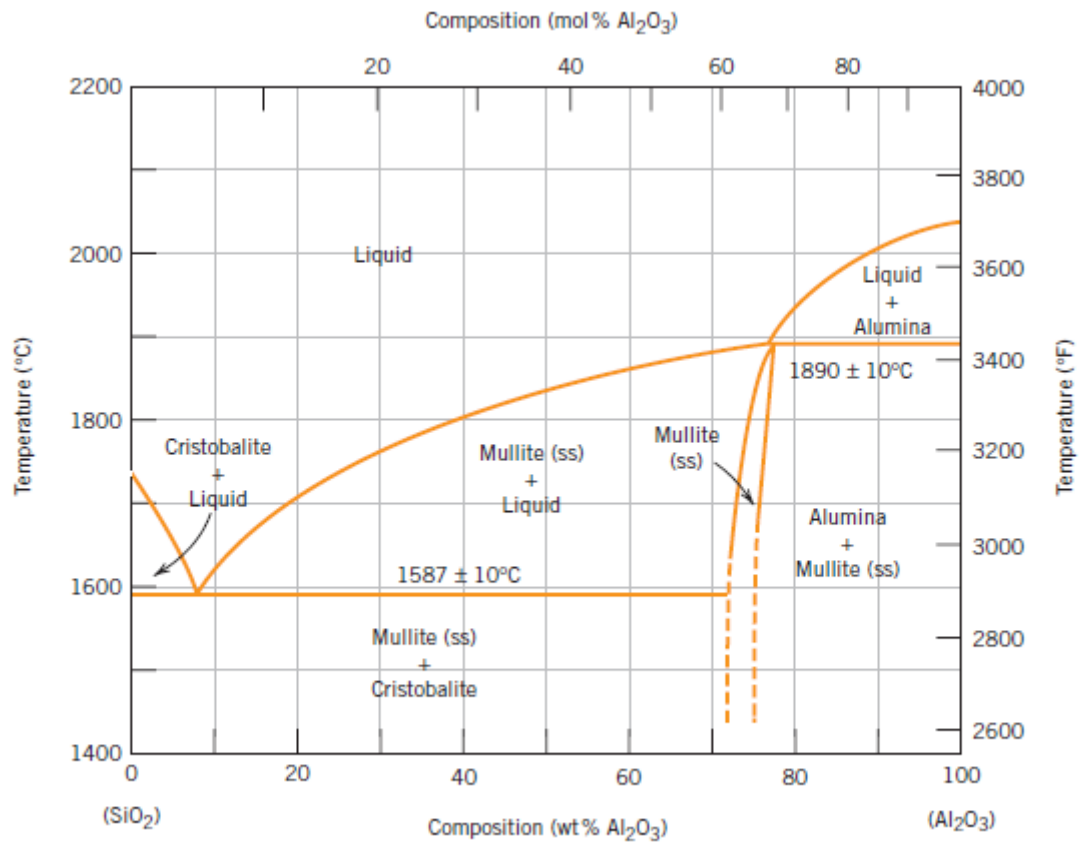
- 3) Calcolare il fattore di addensamento atomico per la struttura cristallina del cloruro di cesio.

4) L'ossido di magnesio ha la struttura AX tipo salgemma con densità 3,58 g/cm<sup>3</sup>. Determinare la lunghezza della costante reticolare della cella unitaria.

5) Quando la caolinite, idrata, [Al<sub>2</sub>(Si<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)(OH)<sub>4</sub>] viene riscaldata a una temperatura sufficientemente alta, l'acqua chimica viene espulsa.

(a) In queste circostanze, qual è la composizione del prodotto rimanente (in percentuale di peso Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)?

(b) A che temperature questo materiale è completamente liquido o completamente solido?



6) Calcola il numero di difetti di Schottky per metro cubo in cloruro di potassio a  $500^{\circ}\text{C}$ . L'energia richiesta per formare ogni difetto di Schottky è  $2.6 \text{ eV}$ , mentre la densità per KCl (a  $500^{\circ}\text{C}$ ) è  $1.955 \text{ g/cm}^3$