

Primeira Lista de Materiais Cerâmicos

1. Demonstre as razões R_C/R_A limites para os números de coordenação $NC=3,4,6$ e 8.
2. Mostre a validade da primeira e segunda Leis de Pauling para o composto CsCl. Discuta a conexão entre os poliedros. Sabe-se que os compostos com esse tipo de estrutura são raros. Explique a razão desse fenômeno, a partir do ponto de vista da razão entre os raios iônicos e as densidades relativas entre os interstícios.
3. O óxido de lítio apresenta estrutura antifluorita.
 - a) Dê o valor do parâmetro de rede.
 - b) Qual o raio máximo do cátion que pode ser acomodado no interstício vazio do empacotamento aniônico?
4. Deduza a estrutura dos óxidos dados a seguir, utilizando-se das Regras de Pauling. Mostre que a estrutura selecionada obedece à Segunda regra de Pauling. Dê um exemplo de um óxido para cada estrutura. Se existir fases polimórfica, explique qual é a fase mais provável de ocorrer.
 - a) M_2O , onde $R(M^{+1}) = 0,52^\circ A$
 - b) MO , onde $R(M^{+2}) = 0,49^\circ A$
 - c) ABO_3 , onde $R(A^{+3}) = 1,25^\circ A$ e $R(B^{+3}) = 0,70^\circ A$
 - d) ABO_3 , onde $R(A^{+2}) = 0,73^\circ A$ e $R(B^{+4}) = 0,65^\circ A$
5. Discuta, com base nas regras de Pauling, porque alguns compostos de fórmula ABO_3 apresentam as estruturas da ilmenita e niobato de lítio ($FeTiO_3$, $LiNbO_3$), ao passo que outras formam a estrutura do tipo perovskita ($LaCaO_3$, $FeTiO_3$). Observe que as valências dos cátions variam.

6. Calcule o parâmetro de rede da estrutura do sal de rocha em termos dos raios do cátion e do ânion, R_C e R_A , respectivamente. Faça o mesmo para as estruturas da wurtzita e da fluorita. Usando dados dos raios iônicos, calcule os parâmetros de rede do MgO , ZnO e CeO_2 .
7. Descreva o poliedro de coordenação de ânions ao redor dos diferentes cátions na perovskita e compare com a estrutura idealizada do $Yb_2Cu_3O_8$ e aplique as regras de Pauling.