

المحور الرابع

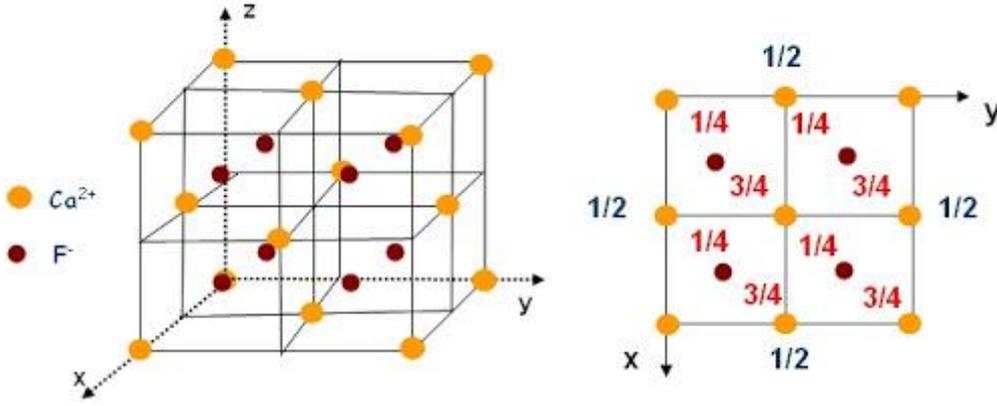
الدرس الرابع

2. المركبات من الصنف AB_2

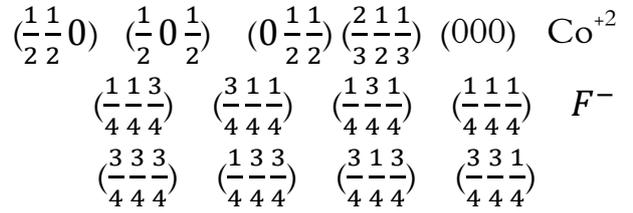
2.2 البنى من الصنف CoF_2 فيلورين

وصف الخلية: أيونات Co^{+2} تشكل شبكة مكعبة ممرزة الأوجه CFC و أيونات F^- تشغل كل مراكز الفجوات الرباعية

تمثيل الخلية



الإحداثيات المختزلة



عدد النماذج

$$n_{F^-} = 8 \times \frac{1}{8} = 8$$

$$n_{Co^{+2}} = 6 \times \frac{1}{2} + 8 \times \frac{1}{8} = 4$$

$$4 = n_{CoF_2} \text{ إذن}$$

عدد التناسق

كل أيون من Co^{+2} محاط بـ 8 أيونات من F^- على مسافة $\frac{a\sqrt{3}}{4}$

و كل أيون من F^- محاط بـ 4 أيونات من Co^{+2} على مسافة $\frac{a\sqrt{3}}{4}$

إذن عدد التناسق 8 - 4

(1)..... $R^- + R^+ = \frac{a\sqrt{3}}{4}$ تلامس الأيونات المتعاكسة يكون على مستوى قطر المكعب الصغير أي

(2)..... $4R^- \leq \frac{a}{2}$ تلامس الأيونات المتشابهة (عادة السالبة) يكون على مستوى الأضلاع أي

من (1) و (2) نجد: $\frac{R^+}{R^-} \geq \sqrt{3} - 1$

$$1 \leq \frac{R^+}{R^-} \leq 0.732$$

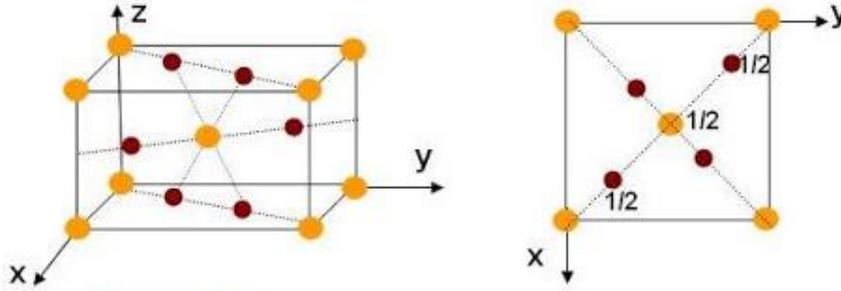
ومنه شرط إستقرار CoF_2 كالتالي:

2.2. البنى من الصنف TiO_2 الروتيل Rutil

وصف الخلية: : أيونات Ti^{+4} تشكل شبكة رباعية ممركة وكذلك $a > c$ و أيونات O^{-2} رباعي الوجوه غير منتظم حول

أيونات Ti^{+4}

تمثيل الخلية



الإحداثيات المختزلة

$$Ti^{+4} (000) \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$O^{-2} (xx0) \pm \left(x + \frac{1}{2}, -x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \pm x \text{ تساوي } 0.305$$

عدد النماذج

$$n_{O^{-2}} = 1 \times 2 + 4 \times \frac{1}{2} = 4$$

$$n_{Ti^{+4}} = 1 \times 1 + 8 \times \frac{1}{8} = 2$$

$$2 = n_{TiO_2} \text{ إذن}$$

عدد التناسق

كل أيون من Ti^{+4} محاط ب6 أيونات من O^{-2}

و كل أيون من O^{-2} محاط ب3 أيونات من Ti^{+4}

إذن عدد التناسق 6 - 3

الشروط الهندسية لإستقرار البنية

لا يمكن تحديد شروط الإستقرار لأن قيمة c غير معروفة بالنسبة لـ $a > c$