

Nel legame ionico e metallico gli ioni hanno la forma di una **sfera** (a causa dell'agitazione termica gli ioni finiscono per occupare un dominio spaziale di forma approssimativamente sferica).

I raggi ionici si possono definire come raggi degli ioni assimilabili a sfere.

Il calcolo delle dimensioni dei raggi degli ioni è stato fatto in passato da diversi autori: Landè (1920), Wasastjerna (1923), Goldschmidt(1926-1954), Pauling & Sherman(1932), Ahrens(1952) e Shannon(1976)

Valori dei raggi ionici, in Å, secondo Wasastjerna (1923), Goldschmidt (1926-1954), Pauling (1932) ed Ahrens (1952).

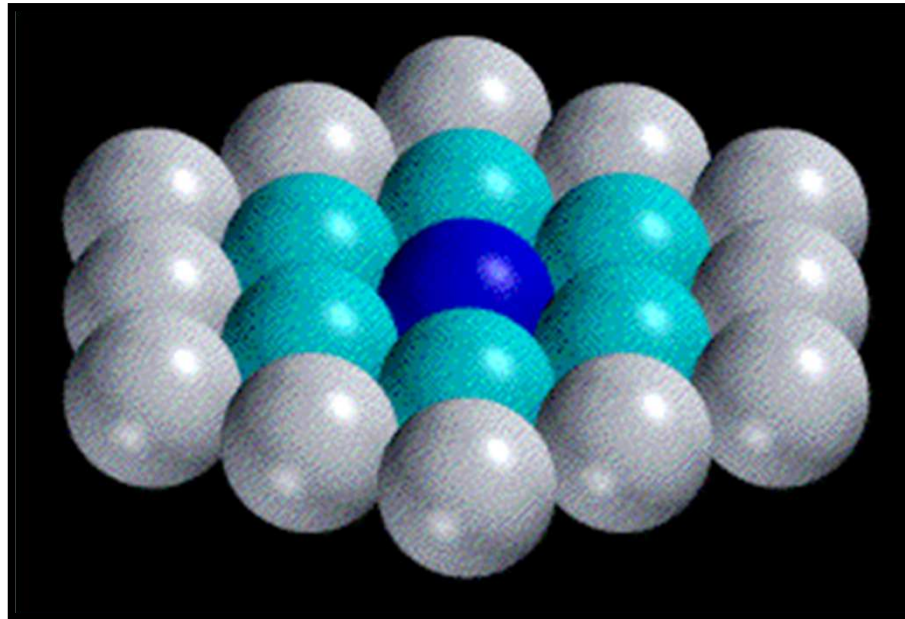
Ione	Wasastjerna	Goldschmidt	Pauling	Ahrens	Ione	Wasastjerna	Goldschmidt	Pauling	Ahrens
Ac ⁺³				1,18	F ⁻	1,33	1,33	1,36	1,33
Ag ⁺		1,13	1,26	1,26	Fe ⁺²		0,83	0,75	0,74
Ag ⁺²				0,89	Fe ⁺³		0,67	0,60	0,64
Al ⁺³		0,57	0,50	0,51	Fr ⁺				1,80
Am ⁺³				1,07	Ga ⁺³		0,62	0,62	0,62
Am ⁺⁴				0,92	Gd ⁺³		1,11		0,97
As ⁺³				0,58	Ge ⁺²		0,78		0,73
As ⁺⁵			0,47	0,46	Ge ⁺⁴		0,44	0,53	0,53
At ⁺⁷				0,62	Hf ⁺⁴		0,86		0,78
Au ⁺			1,37	1,37	Hg ⁺²		1,12	1,10	1,10
Au ⁺³				0,85	Ho ⁺³		1,05		0,91
B ⁺³			0,20	0,23	I ⁻	2,19	2,20	2,16	0,81
Ba ⁺²	1,40	1,43	1,35	1,34	In ⁺³		0,92	0,81	0,68
Be ⁺²		0,34	0,31	0,35	Ir ⁺⁴		0,66	0,64	1,33
Bi ⁺³		1,10		0,96	K ⁺	1,30	1,33	1,33	1,14
Bi ⁺⁵			0,74		La ⁺³		1,22	1,15	0,68
Br ⁻	1,92	1,96	1,95		Li ⁺		0,70	0,60	0,85
C ⁺⁴		0,20	0,15	0,16	Lu ⁺³		0,99	0,65	0,66
Ca ⁺²	1,02	1,06	0,99	0,99	Mg ⁺²	0,75	0,78	0,80	0,80
Cd ⁺²		1,03	0,97	0,97	Mn ⁺²		0,91	0,80	0,66
Ce ⁺³		1,18		1,07	Mn ⁺³		0,70	0,62	0,60
Ce ⁺⁴		1,02	1,01	0,94	Mn ⁺⁴		0,52	0,50	0,60
Cl ⁻	1,72	1,81	1,81		Mn ⁺⁷			0,46	0,46
Co ⁺²		0,82	0,72	0,72	Mo ⁺⁴		0,68	0,66	0,70
Co ⁺³				0,63	Mo ⁺⁶		0,69	0,62	0,62
Cr ⁺³		0,64	0,64	0,63	N ⁺³			0,11	0,16
Cr ⁺⁶		0,3-0,4	0,52	0,52	N ⁺⁵		0,1-0,2	0,13	0,13
Cs ⁺	1,75	1,65	1,69	1,67	Na ⁺	1,01	0,98	0,95	0,97
Cu ⁺		0,96	0,96	0,96	Nb ⁺⁴		0,69	0,67	0,74
Cu ⁺²		0,80		0,72	Nb ⁺⁵		0,69	0,70	0,69
Dy ⁺³		1,07		0,92	Nd ⁺³		1,15		1,04
Er ⁺³		1,03		0,89	Ni ⁺²		0,78	0,70	0,69
Eu ⁺³		1,12		0,98	Np ⁺³			0,70	1,10

segue

IMPACCHETTAMENTI COMPATTI DI SFERE

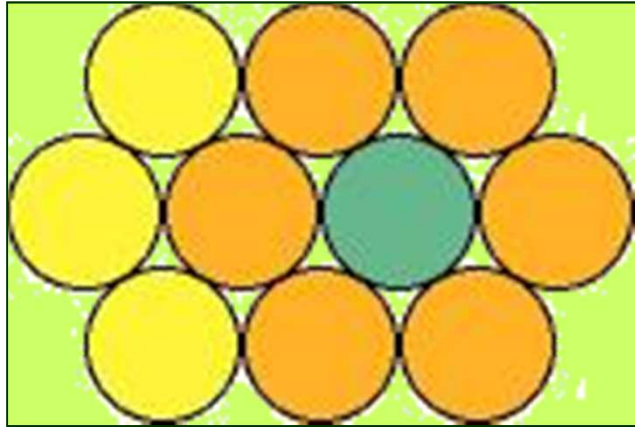
In presenza di legami NON DIREZIONALI (legame ionico e metallico) gli ioni possono essere assimilati a SFERE. Tutte le sfere tendono ad occupare il MAX spazio (strutture compatte di sfere).

Partendo da un piano ideale di atomi si osserva che ogni atomo è sempre a contatto con altri 6 atomi

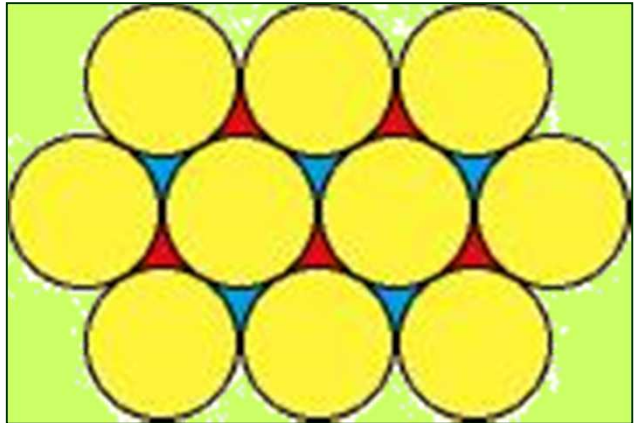


Sviluppando un impacchettamento tridimensionale si possono avere due casi distinti

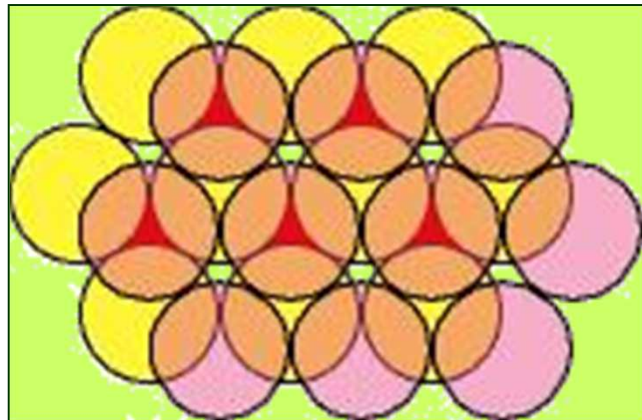
IMPACCHETTAMENTI COMPATTI DI SFERE



Su ogni piano (layer) ogni sfera è in contatto con sei sfere identiche. STRATO A



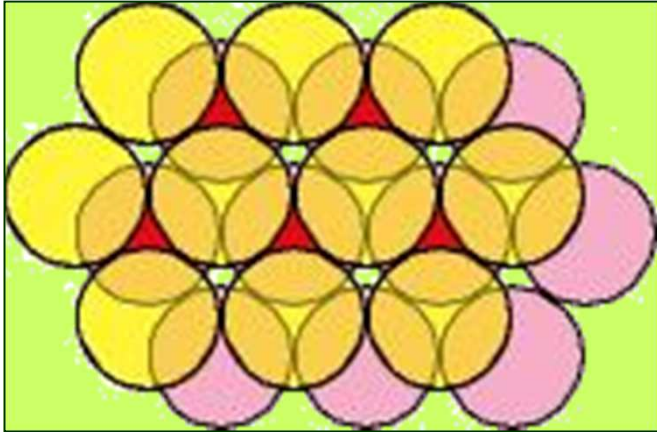
Nel piano dello strato esistono due tipi di vuoti (voids, interstices) distinti per l'orientazione della forma triangolare che li caratterizza: vuoti B e vuoti C



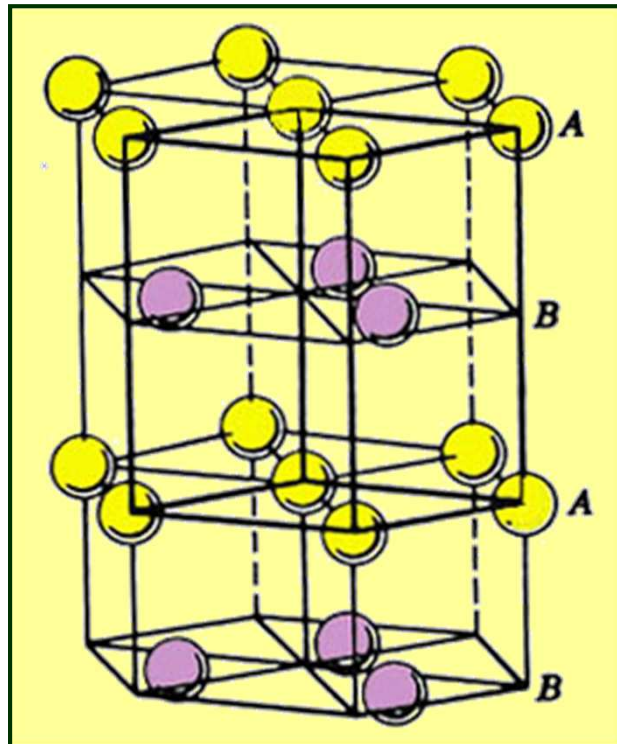
A questo strato A giallo sovrapponiamo un altro strato (STRATO B) centrato sui vuoti B (denominati lacune triangolari) e otteniamo una sequenza AB

Il terzo strato compatto potrà:

CASO 1

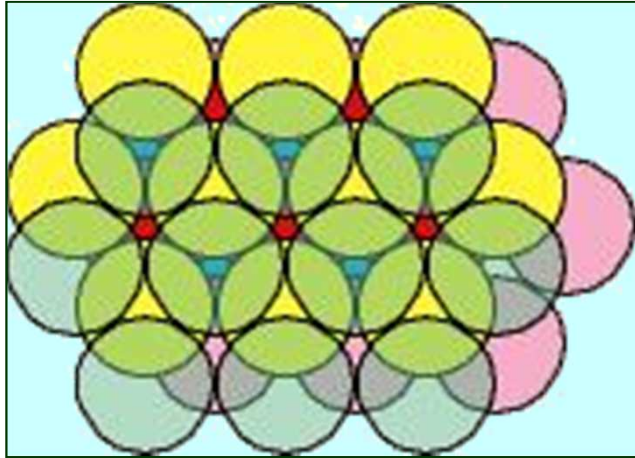


Se alla **sequenza AB** sovrapponiamo un nuovo strato centrato sulle sfere del primo strato A otteniamo una **sequenza di impilamento AB, AB, AB...**

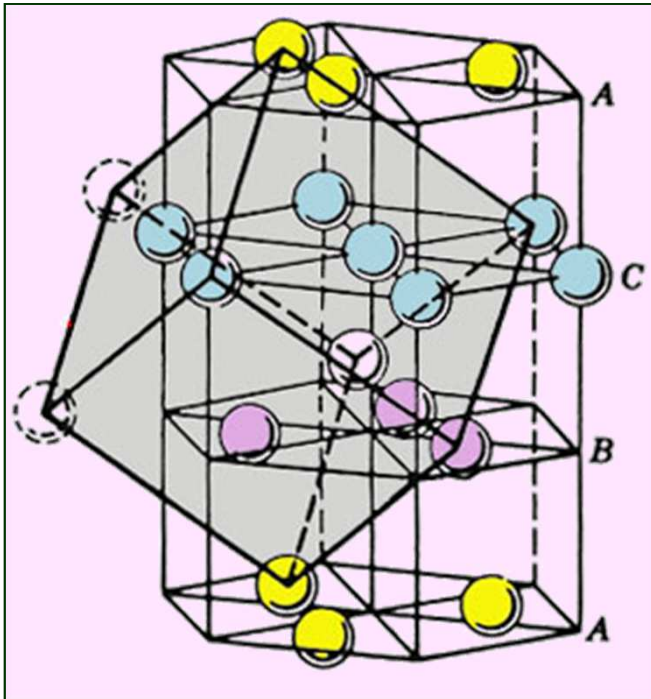


Otteniamo un reticolo primitivo composto e la struttura viene chiamata struttura esagonale compatta e l'impacchettamento compatto viene anche chiamato **HEXAGONAL CLOSEST PACKING (HCP)**

CASO 2



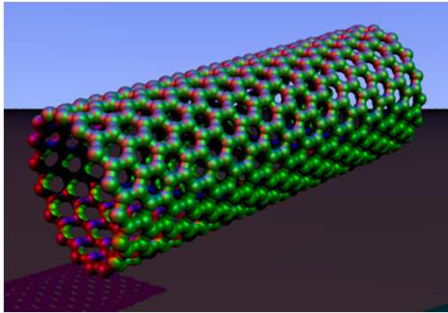
Se alla **sequenza AB** sovrapponiamo un nuovo strato C centrato sui **vuoti C** del primo STRATO otteniamo una **“Stacking Sequence ABC, ABC, ABC...”**



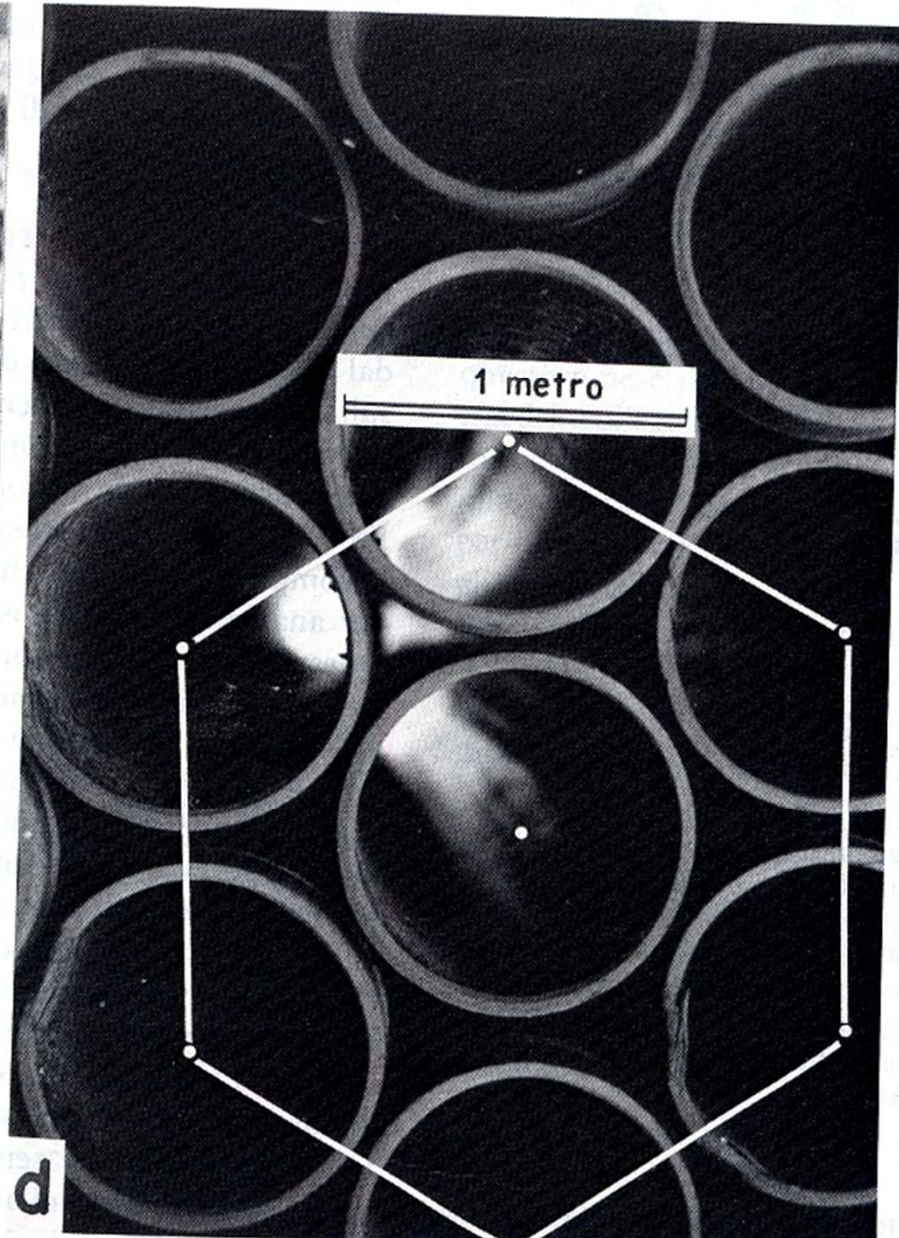
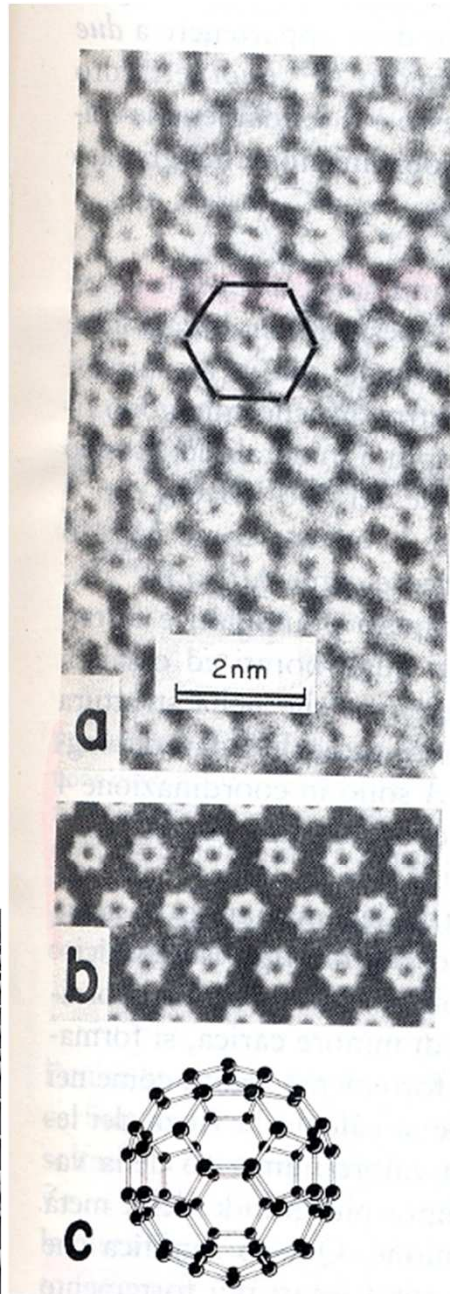
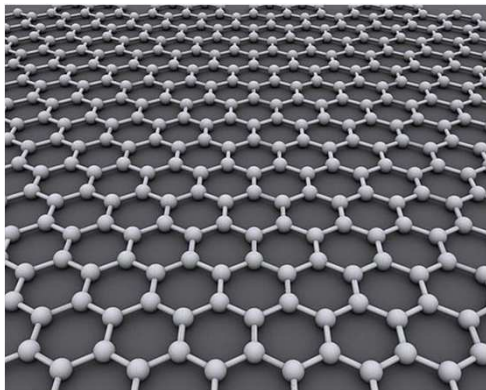
La **“Stacking Sequence ABC, ABC, ABC...”** sottende una reticolo cubico a facce centrate (STRUTTURA CUBICA COMPATTA) e per questo motivo questo tipo di impacchettamento compatto viene anche chiamato **CUBIC CLOSEST PACKING (CCP)**

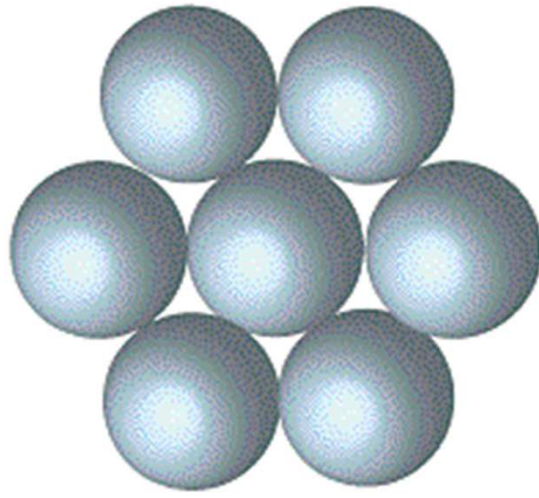
Fullereni

HCP di una
molecola
 C_{60}



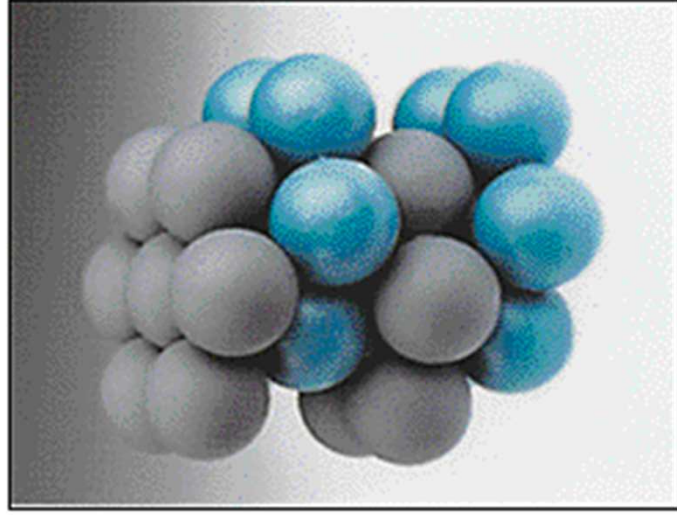
Grafene



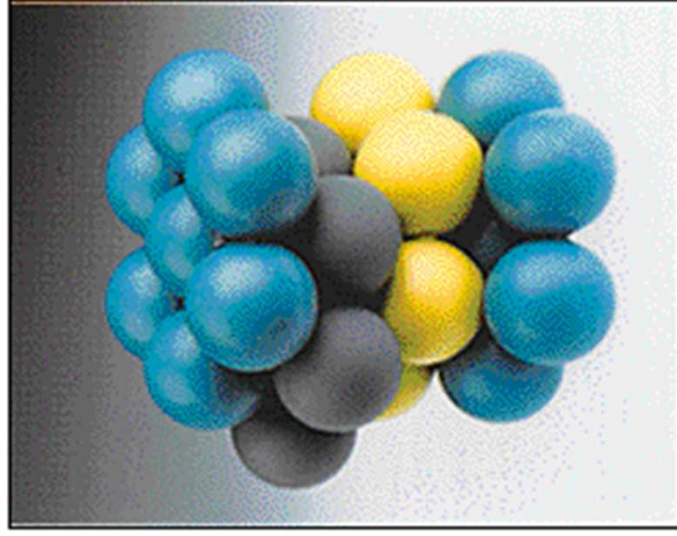


Close-packed
layer of spheres

(a)

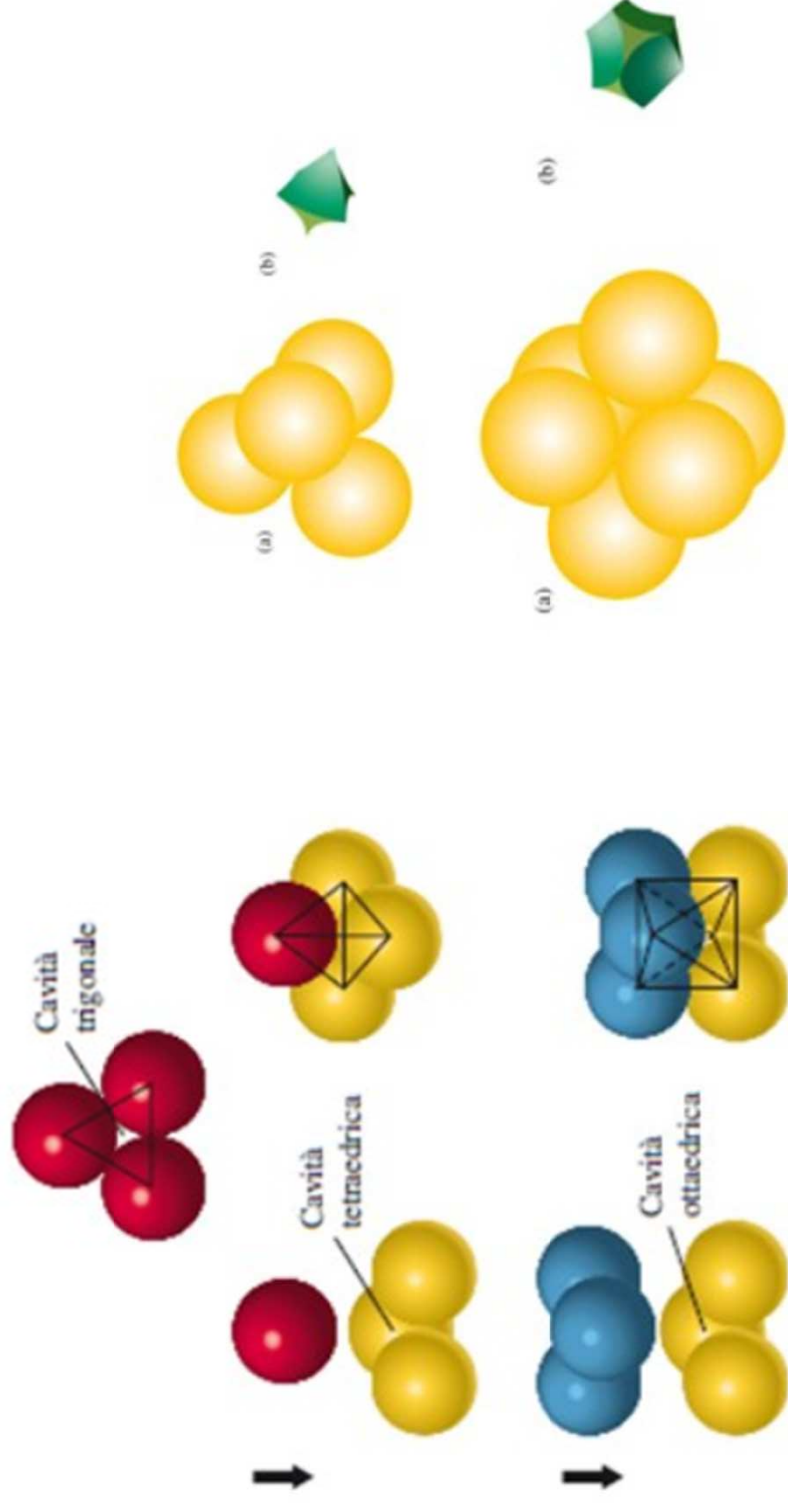


(b)

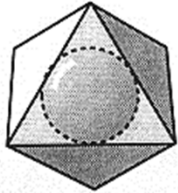


(c)

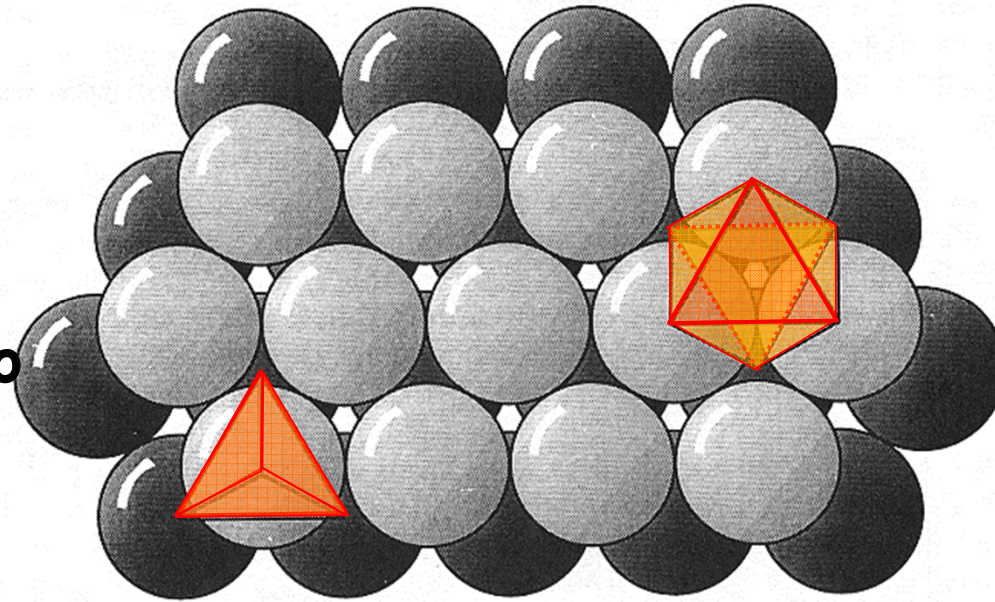
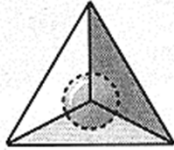
Cavità nelle strutture a massimo impacchettamento



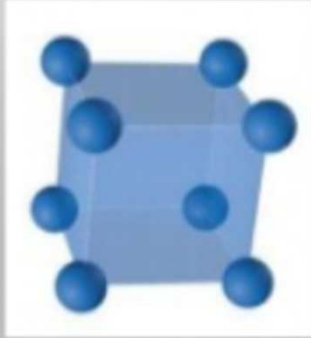
**Sito
ottaedrico**



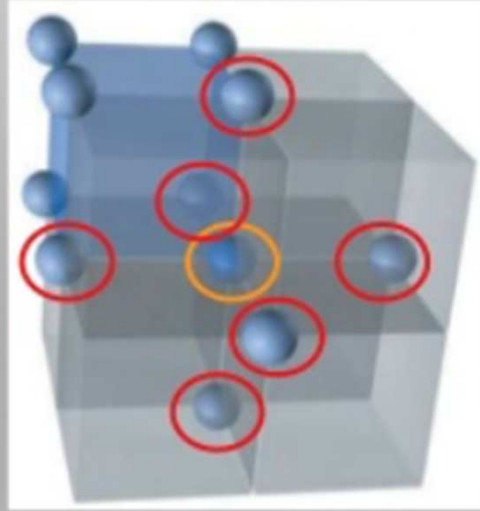
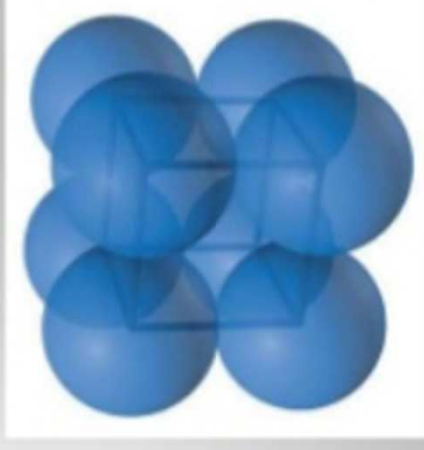
**Sito
tetraedrico**



Le tre celle elementari cubiche



Cella elementare cubica semplice



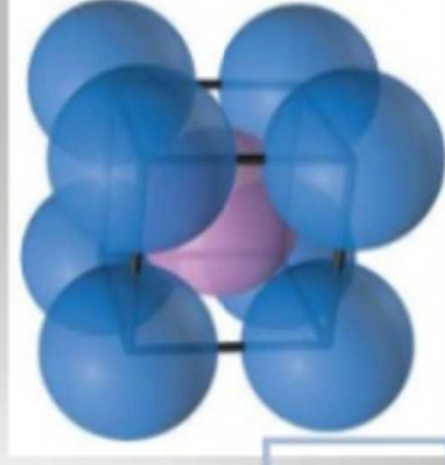
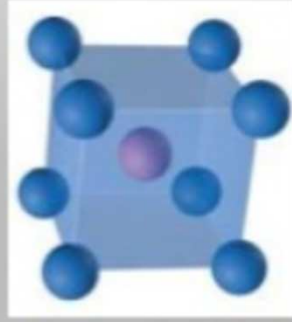
numero di coordinazione = 6

1/8 di atomo
in 8 vertici

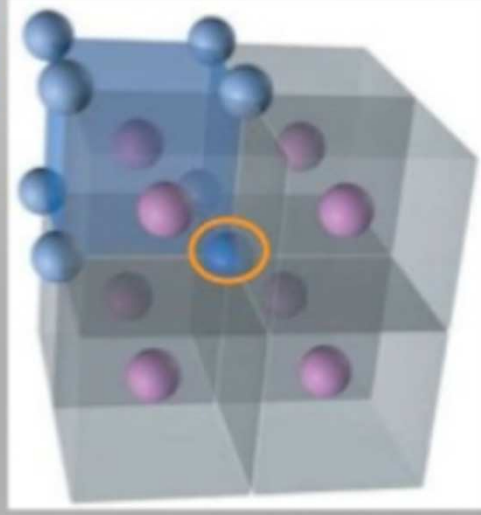


$$\text{atomi/cella elementare} = 1/8 * 8 = 1$$

Le tre celle elementari cubiche



Cella elementare cubica a corpo centrato



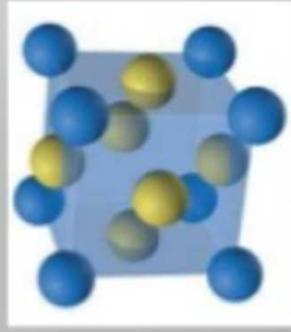
1/8 di atomo in 8 vertici

1 atomo nel centro della cella

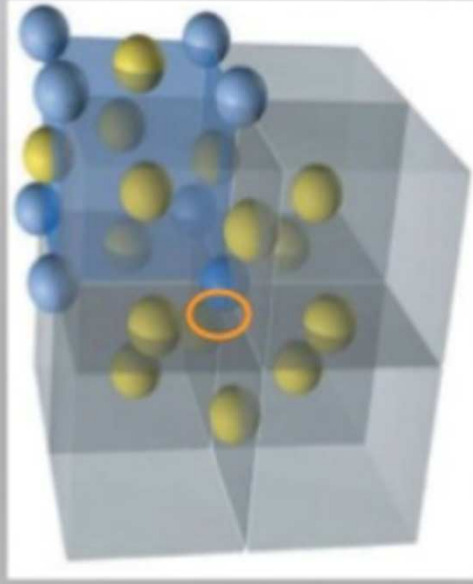
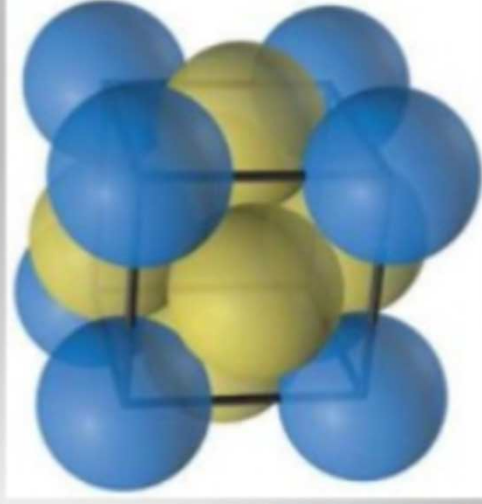
$$\text{atomi/cella elementare} = (1/8 * 8) + 1 = 2$$

numero di coordinazione = 8

Le tre celle elementari cubiche



Cella elementare cubica a facce centrate



numero di coordinazione = 12

1/8 di atomo in 8 vertici
1/2 di atomo nel centro di 6 facce

$$\text{atomi/cella elementare} = (1/8 \cdot 8) + (1/2 \cdot 6) = 4$$