

FRANCESCO SGARLATA

LE PROPRIETA' FISICHE DI CRISTALLI CONTENENTI
ATOMI CON ELETTRONI 'd' DI VALENZA
(PIRITE, HAUERITE, EMATITE, RUTILO,
PENTOSSIDO DI VANADIO)

(*Riassunto*)

Per interpretare il comportamento chimico-fisico degli atomi nel reticolo cristallino sulla base della configurazione elettronica sono perfezionati i parametri strutturali delle sostanze in esame, eseguendo accurate misure al diffrattometro XRD-3 della General Electric con tubo ad anticatodo di Mo. Mediante un filtro di Mo si diminuisce il disturbo da parte dello spettro continuo.

Particolare attenzione è rivolta ai fenomeni di sfaldatura ed al parametro B del fattore di temperatura, che dipendono dal tipo di legame nel reticolo cristallino. Le osservazioni eseguite portano a concludere che nella pirite vi è legame covalente, mentre nella hauerite legame ionico; la differenza della distanza S-S nella pirite (2,178 Å) da quella nell'hauerite (2,071 Å) è attribuita all'uso degli orbitali 3d dello S. L'affinità elettronica dello O giustifica il legame covalente della ematite. Nel pentossido di vanadio si ha un doppio legame covalente nel gruppo V-O con distanza (1,54 Å) minore di quella osservata nel gruppo paramagnetico V-O del $\text{VOSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ (1,67 Å).