

18 Difração

1. As intensidades difratadas por um cristal são relacionadas ao fator de estrutura. $F(\mathbf{h}) = \sum_j f_j \exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}_j)$ pela expressão $I(\mathbf{h}) \propto F(\mathbf{h}) \cdot F(\mathbf{h})^*$. A malha deste cristal é formada por vetores \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 e \mathbf{a}_3 e contém duas moléculas idênticas: uma está situada na na origem e outra no centro do volume da malha. Esta estrutura cristalina impõem condições precisas sobre as intensidades. Mostre quais condições deve ser impostas sobre os vetor \mathbf{h} para que $I(\mathbf{h})$ seja nula. Responda a mesma questão para o caso das moléculas estarem situadas sobre a origem e sobre o centro da face definida pelo plano $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2)$.
2. A malha de um cristal com simetria tetragonal tem parâmetros de rede $a=3.0 \text{ \AA}$ e $c=7.0 \text{ \AA}$. Este cristal é colocado dentro de um feixe de raios X monocromático com comprimento de onda $\lambda=0.5 \text{ \AA}$. Quantas reflexões (pontos do espaço recíproco) podemos medir?
3. Para um cristal de simetria cúbica com parâmetro de rede $a = 10.0 \text{ \AA}$, pode ser mostrado que $\sin^2\theta = (\lambda/2a)^2(h^2 + k^2 + l^2)$. Considere para este exercício que $\lambda = 1 \text{ \AA}$. Suponha que devido a um efeito de compressão, a malha cúbica se deforme ligeiramente formando uma nova malha tetragonal de largura a e de altura $c = 0.96a$.
 - (a) Mostre que para malha tetragonal $\sin^2\theta = (\lambda/2a)^2(h^2 + k^2) + (\lambda/2c)^2l^2$. Utilize para este exercício a equação de Bragg lembrando que $a_i \cdot a_j^* = \delta_{ij}$ e que $h = 1/d$.
 - (b) Construa um diagrama ilustrando a diferença dos valores de $2\theta_{hkl}$, entre o difratograma de sistemas cúbico e tetragonal indicando os índices de miller (hkl) para cada linha. Para este exercício considere unicamente as 10 primeiras linhas do difratograma do cristal cúbico com os menores ângulos. Considere que todas as linhas estejam presentes (ignore as extinções) e investigue o efeito da deformação sobre cada uma delas.