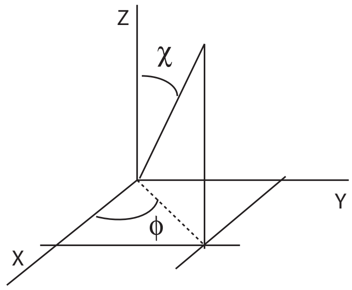
20 Fator de Forma

A função $f(\mathbf{h}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(r) exp(2\pi i \mathbf{h} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}$ representa o fator de forma atômico no qual volume de integração corresponde à vizinhança do átomo. Desejamos calcular esta integral supondo que a densidade eletrônica em torno do átomo possua uma simetria esférica. Para tanto devemos usar um sistema de coordenadas esféricas no qual o elemento de volume é $d\mathbf{r} = r^2 Sen\chi dr d\chi d\phi$. Podemos, sem perda de generalidade, orientar o sistema de referência de tal forma que $\mathbf{h}$ seja paralelo à direção Z. Desta forma os limites de integração serão $0 \leq r \leq \infty$; $0 \leq \chi \leq \pi$; e $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Conforme mostrado a seguir



Podemos simplificar ainda mais a integral considerando que a densidade eletrônica dos pontos $P(r, \chi, \phi)$ e $P(r, \pi - \chi, \pi + \phi)$ são idênticas.

1. Utilizando as informações anteriores, mostre que
$$f(\mathbf{h}) = 4\pi \int_o^\infty \rho(r) r^2 \left[\frac{Sen(2\pi r h)}{2\pi r h} \right] dr;$$

2. Supondo a densidade eletrônica satisfaça a condição $\rho(r) = 1$ se $0 < r \leq R$ e $\rho(r) = 0$ se $r > R$ calcule $f(\mathbf{h})$. Mostre graficamente o comportamento de $f(\mathbf{h})$.

3. Para o carbono, a distribuição de elétrons pode ser dada pela fórmula de Slater
$$\rho_{1s} = \frac{c_1^3}{\pi} exp(-2c_1 r) \qquad \text{e} \qquad \rho_{2s} = \frac{c_2^5}{96\pi} r^2 exp(-2c_2 r)$$
sendo c_l=10.77 Å^{-1} e c_2=6.15 Å^{-1}. Na aproximação radial, os elétrons 2s e 2p tem uma distribuição equivalente. Calcule a contribuição dos elétrons 1s para o fator de forma e desenhe a função $f(\mathbf{h})$. Calcule a razão entre o fator de forma do carbono para um ângulo 2θ=60° e para 2θ=0°. Considere λ = 0.71069 Å.

4. Calcule $f(\mathbf{h})$. para uma distribuição de elétrons descrita pela função Delta de Dirac. Lembre-se que esta função satisfaz a seguinte condição:
$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$$