

**INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE MINERALOGIA E GEOTECTÔNICA  
GMG-106 – CRISTALOGRAFIA FUNDAMENTAL**

LISTA DE EXERCÍCIOS II

SIMETRIA INTERNA E PRINCÍPIOS DE CRISTALOGRAFIA DE RAIOS X

- 1) A. Faça um esquema dos retículos de Bravais. Indique para cada um as coordenadas  $(x,y,z)$  de seu nós (*pontos equivalentes*) e dê o Fator de Multiplicidade em cada caso.  
B. Dada uma posição com coordenadas  $(x,y,z)=(1/4,1/4,1/2)$ , dê as coordenadas de todas as posições relacionadas através da simetria implícita nas celas P, I e F.
  
- 2) A. Quais os tipos de simetria presentes nos Grupos Espaciais e quais as correlações com os Grupos Pontuais? Qual o significado nas notações de Herman-Mauguin F432, Imm2, Pmm2, I4/m2/m2/m, I4/a32/d, Pcc2, C2/m?  
B. Mostre através de desenhos e projeções ortográficas como operam os planos deslizantes **a**, **b**, **c** e **n** e os eixos helicoidais  $2_1$ ,  $3_1$ ,  $3_2$ ,  $4_2$ ,  $4_3$ ,  $6_1$ ,  $6_4$  e  $6_5$ .
  
- 3) A. Nas representações de Grupos Espaciais da Figura 1 (e também nas Figuras distribuídas nas aulas práticas que você tenha dúvidas !!) complete os desenhos adicionando a simetria ou as posições equivalentes conforme o caso. Por que os exemplos mostrados nas figuras 1 e 2 correspondem a celas P enquanto o da Figura 3 é uma cela I? Qual Grupo Espacial da estrutura da Figura 3?  
B. Para o Grupo Espacial Pcc2 (Figura 2) dê as coordenadas das posições equivalentes à posição genérica  $(x,y,z)$  e às posições especiais  $(1/2,0,z)$  e  $(0,0,z)$ .  
PS: posições genéricas não coincidem com nenhum elemento de simetria, posições especiais coincidem com um ou mais elementos.
  
- 4) O diamante (C) cristaliza em condições de altas pressões e temperaturas e apresenta simetria externa  $4/m\bar{3}2/m$  e estrutura F  $4/d\bar{3}2/m$ , em que  $a_0=3,56 \text{ \AA}$ . Nesta estrutura, tem-se átomos de C nas posições  $(x,y,z) = (0,0,0)$  e  $(1/4,1/4,1/4)$ .  
Faça um esquema da estrutura do diamante em escala adequada, adicionando uma projeção no plano  $(001)_0$ . Qual o valor de Z (*número de átomos de C por cela*)?
  
- 5) A. Interprete o difratograma do metal anexo identificando-o com ajuda das fichas JCPDS que você tem disponíveis. Faça uma leitura da ficha correspondente mostrando quais informações mineralógicas e cristalográficas são nelas destacadas.  
B. Como deve aparecer um difratograma de um material amorfo? Justifique.  
C. Difratogramas de materiais com simetria ortorrômbica devem, em geral, apresentar maior número de "reflexões" (picos) que os de simetria tetragonal e estes, por sua vez, maior número que os de simetria cúbica. Esta assertiva é verdadeira? Justifique.

6) Para um silicato de Mn (análogo artificial do mineral tefroíta,  $Mn_2SiO_4$ ) de simetria ortorrômbica, foram obtidos os seguintes dados através do método do pó em difratômetro convencional e indexação (determinação dos índices de Miller, h, k e l) com auxílio do fichário JCPDS:

Pico	$2\theta$	hkl	I/I <sub>0</sub>
01	22,05	021	60
02	24,65	111	70
03	31,35	130	80
04	34,62	131	80
05	35,30	112	100
06	38,80	140	60

- A. Calcule as constantes e o volume da cela unitária deste composto, justificando o procedimento adotado.
- B. Sabendo que a densidade deste material é  $4,113 \text{ g/cm}^3$ , calcule o valor de Z (o número de moléculas por cela unitária). As massas atômicas do Mn, Si e do O são, respectivamente, 54,938, 28,086 e 15,999. O número de Avogadro vale  $6,023 \times 10^{23}$ .