

Lista de estudos 2 - Cristalografia

- 1) Construa os vetores-base da rede recíproca de um cristal tetragonal com os seguintes parâmetros de rede: $\{2\text{nm}, 2\text{nm}, 4\text{nm}, 90^\circ, 90^\circ, 90^\circ\}$. Instruções: Construa essa rede orientando o eixo “c” da rede real perpendicular ao plano da folha de papel. Plote os pontos da rede $ghkl$ com $l=0$, isto é, os pontos $(h,k,0)$. Plote até $\pm 2h$ e $\pm 2k$. Repita o mesmo procedimento, mas agora construindo a rede recíproca com o eixo “a” da rede real perpendicular ao plano da folha de papel. Plote os pontos da rede $ghkl$ com $h=0$, isto é, os pontos $(0,k,l)$. Plote até $\pm 2k$ e $\pm 2l$. Qual a principal diferença em termos de simetria rotacional entre os pontos de rede para as duas orientações?
- 2) Usando o resultado obtido no item acima, desenhe o eixo da rede real sobre o eixo da rede recíproca (com origens coincidentes), plote o plano (120) e mostre que o vetor g_{120} da rede recíproca é perpendicular ao plano (120) da rede real.
- 3) Derive a equação para cálculo de espaçamento interplanar em um cristal cúbico, com parâmetro de rede “a”.
- 4) Calcule o ângulo entre os planos (101) e (011) de um cristal cúbico, utilizando o tensor métrico.
- 5) Calcule o ângulo entre os planos (101) e (011) utilizando a projeção estereográfica e a rede de Wulff. Compare o resultado com o valor calculado no item 4). Calcule esse valor também utilizando o software JEMS (versão de estudante).
- 6) Sabendo que a lei de Bragg é dada por $n\lambda = 2d\sin\theta$ ou $\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta$, onde λ é o comprimento de onda da radiação empregada, d_{hkl} é o espaçamento interplanar dos planos (hkl), e θ é o ângulo de difração. Além disso, é usual reportarmos os ângulos de difração em função de 2θ . Faça uma tabela de ângulos 2θ (de 5 a 120°) vs. (hkl) vs. d_{hkl} para um cristal cúbico, com $a=4\text{ A}$, que represente os ângulos de difração observados quando esse material é analisado em um difratômetro que utiliza radiação Cu-K α ($1,54\text{ A}$). OBS: Considere que a difração apenas ocorre, para esse cristal, quando além da lei de Bragg ser satisfeita, a seguinte condição também seja: apenas difratam (hkl) quando h,k,l são todos pares ou todos ímpares (ex: não pode haver difração de planos do tipo (110), (001), mas pode haver difração (111), (222), (200), etc..).
- 7) Plote, esquematicamente, a projeção estereográfica dos planos (hkl) e direções [uvw] de um sistema tetragonal com $a=b=4\text{ A}$ e $c=10\text{ A}$. Para construir essa projeção, posicione a direção [001] apontando para o polo norte da esfera. Plote apenas os planos e direções com índices com valores entre -1 e 1 e apenas as projeções que encontram a parte superior da esfera.
- 8) Calcule o eixo de zona ao qual os planos (111) e (101) pertencem.
- 9) Verifique quais dos seguintes planos pertencem ao eixo de zona [111]: (001), (100), (101), $(10\bar{1})$, $(\bar{1}01)$, (2,0,2), $(\bar{2}02)$.