Aula:

1) Pontos cristalográficos . q, r, s.

2) Direções cristalográficas. < > ⇒ [ ], [ ], ...

3) Planos Cristalográficos (hkl)

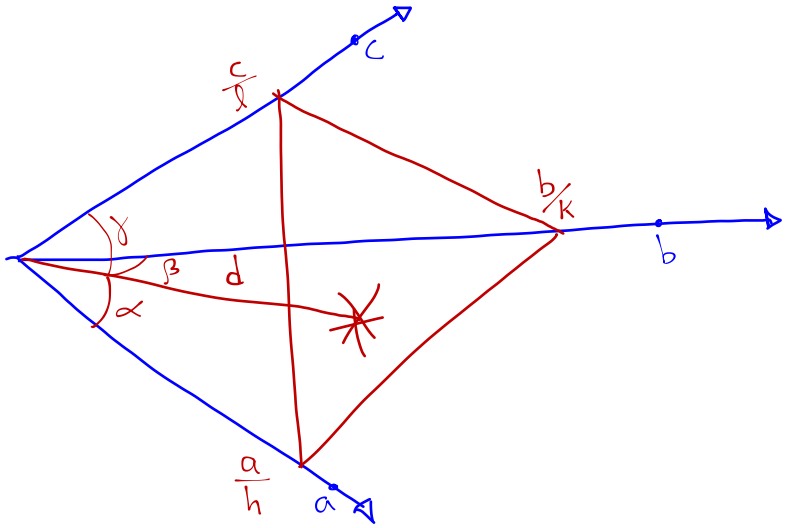
4) Difração de raios-X.

* Policristais
* Imperfeições.
* Problemas.

Aula:

Vimos:

Planos Cristalográficos.



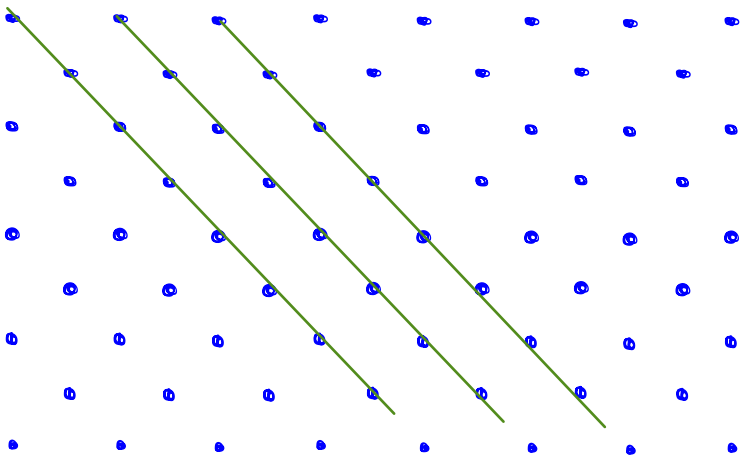
$$\cos(\alpha) = \frac{d}{a/h} \qquad \cos(\beta) = \frac{d}{b/k} \qquad \cos(\gamma) = \frac{d}{c/l}$$

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

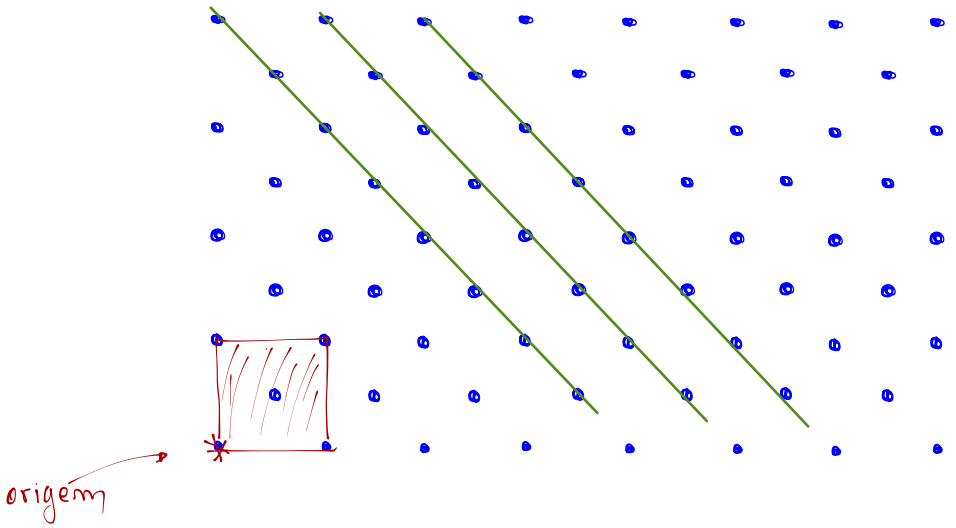
$\Rightarrow$ Cúbico $\Rightarrow$ $d_{hkl} = \dfrac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

Obs: Menor soma de $h^2 + k^2 + l^2 \Rightarrow$ maiores distâncias inter planares d.

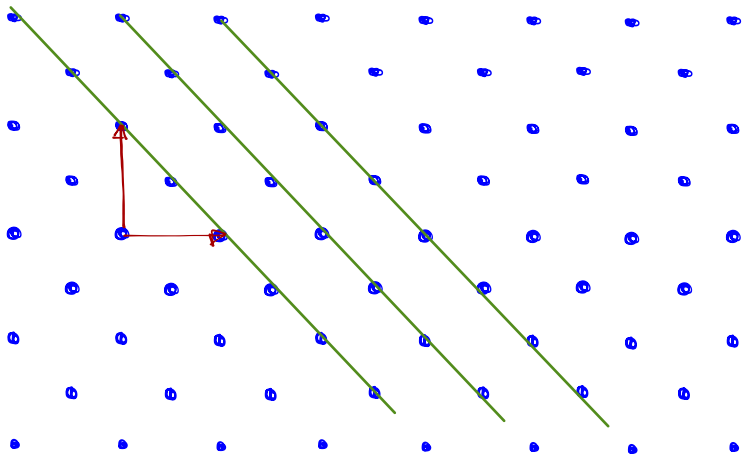
Ex: Obter d para $a = 0,110$ nm



$d = ?$



Colocar a origem o mais próximo possível de um plano qualquer.



⇒ Corta $x = 1$; $y = 1$; $z = \infty$

Inverte: $(1, 1, 0)$

* Já está nos menores inteiros.

$$\Rightarrow \quad d_{110} = \frac{0{,}110}{\sqrt{1+1+0}} \text{ mm}$$

$$d_{110} = \frac{0{,}110}{\sqrt{2}} \text{ mm}$$

$$d_{110} = 0{,}078 \text{ mm}$$

Problemas

3.9 Calcule o raio de um átomo de irídio dado que o Ir possui uma estrutura cristalina CFC, uma densidade de 22,4 g/cm^3, e um peso atômico de 192,2 g/mol.

$$\rho = \frac{n A}{V_c N_A}$$

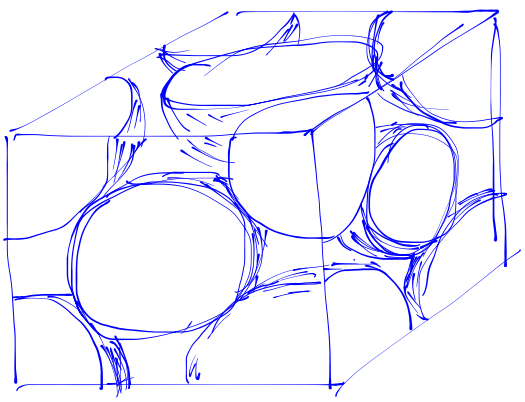
$$V_c = \frac{4 \times 192,2}{22,4 \times 6,02 \times 10^{23}} \frac{g}{g} cm^3$$

$$V_c = a^3$$

$$\frac{4R\sqrt{2}}{2} = a$$

$$4R = \frac{2a}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2}} \Rightarrow 4R = a\sqrt{2}$$

$$\Rightarrow a^3 = (2R\sqrt{2})^3$$



$$(2R\sqrt{2})^3 = \frac{4 \times 192,2}{22,4 \times 6,02} \times 10^{-23}$$

$$R^3 = \frac{4 \times 192,2}{8 \times 4\sqrt{2} \times 22,4 \times 6,02} \times 10^{-23}$$

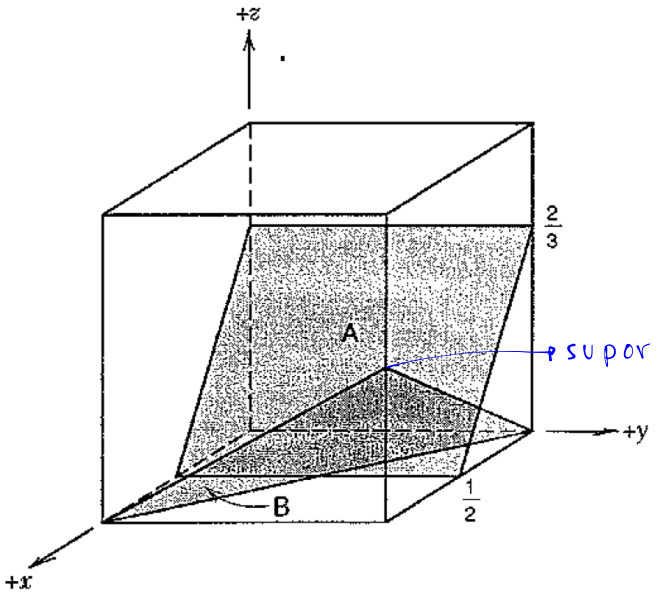
$$R = \left(\frac{192,2 \times 0,01}{4 \times \sqrt{2} \times 22,4 \times 6,02} \right)^{1/3} \times 10^{-7} \; cm$$

$$R = 0,136 \times 10^{-7} \times 10^{-2} \; m$$

$$R = 0,136 \; nm$$

(b) Faça a mesma conversão para os planos (010) e (101).

3.33 Determine os índices de Miller para os planos mostrados na seguinte célula unitária:



supor = 1/2

"supor porque o problema não deu".

Plano A) Interceptos: $x = 1/2$ $y = \infty$ $z = 2/3$

inverter $(2, 0, \frac{3}{2})$

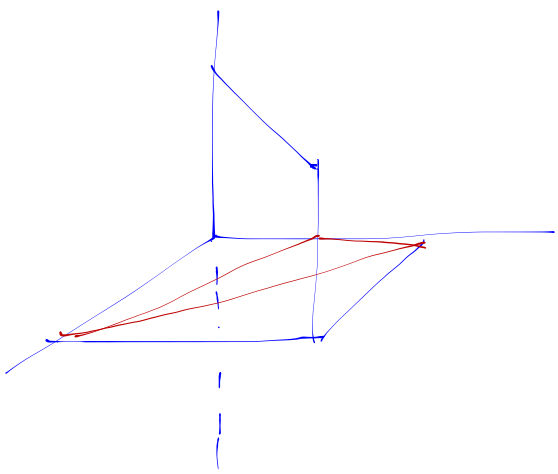
inteiro $(4, 0, 3)$ "Obs: fato mutiplicativo 2"

Neste caso a ordem do plano é 2

⇒ Para cálculo de d_{hkl}; o d_{hkl} obtido com $(4,0,3)$ deverá ser dividido por 2.

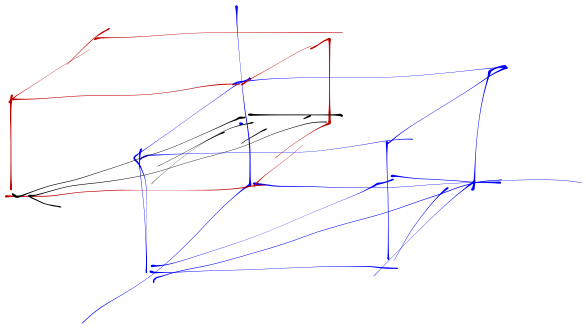
Plano B) $(1, 1, \bar{2})$ ou $(\bar{1}\,\bar{1}\,2)$

⇒



Obs: Não está claro, na figura original, onde o plano intercepta os eixos. Um deslocamento para um quadrante apropriado pode facilita a visualização.

ou



Corta $x = -1$, $y = -1$, $z = \frac{1}{2}$

inverte: $\left(\frac{1}{-1} \quad \frac{1}{-1} \quad \frac{2}{1}\right) = \left(\bar{1} \ \bar{1} \ 2\right)$

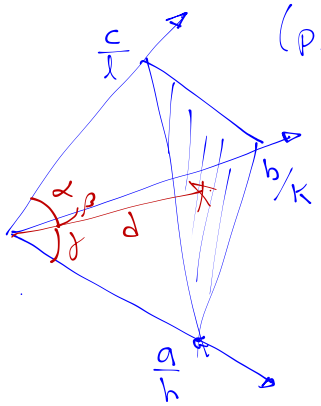
Difração de Raios-X

ex. an element that has either BCC or FCC structure shows diffraction peaks at following 2θ angles: 40, 58, 73, 86.8, 100.4 and 114.7. wavelength of x-ray $\lambda = 0.154$
a. BCC or FCC?
b. determine the lattice constant *a*.
c. identify the element.

Antes da solução, vamos entender os detalhes da técnica de difração de raios-X.

$\Rightarrow$ $d\,sen(\theta) = m\lambda$ $\rightarrow$ $d\,sen(\theta) = \lambda$ "picos"

Esta relação denota os ângulos de ocorrência interferência construtiva (picos).



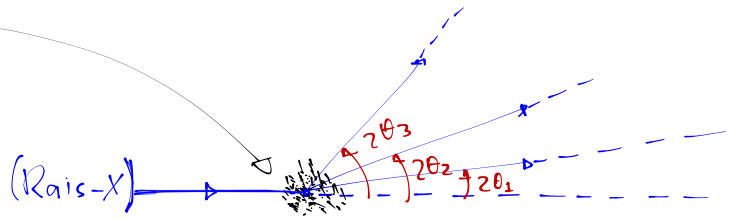
$$\cos^2(\alpha) + \cos^2(\beta) + \cos^2(\gamma) = 1$$

$$\frac{d^2}{\left(\frac{a}{h}\right)^2} + \frac{d^2}{\left(\frac{b}{k}\right)^2} + \frac{d^2}{\left(\frac{c}{l}\right)^2} = 1$$

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

Cúbico: $$d = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$$

Pó



$2d\,sen(\theta) = \lambda$

$d = \dfrac{\lambda}{2sen(\theta)}$ ⟹ menores "θ" ⟹ maiores "d".

Significa que; se $d = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

★ Então menores valores da soma $h^2+k^2+l^2$ estarão associados aos menores ângulos θ.

★ Regras de seleção: CCC não tem restrições para (hkl)
FCC hkl todos impares ou todos pares
BCC Soma = par

Obs: A demonstração é inadequada para nossa abordagem. mas pode ser verificada geometricamente.

★ Um procedimento que permite concluir-se se a estrutura analisada é BCC ou FCC é através da razão entre os dois primeiros picos. Devido às regras de seleção, esta razão depende da estrutura.

⟹ $sen(\theta) = \dfrac{\lambda}{2d}$ $\qquad d^2 = \dfrac{a^2}{h^2+k^2+l^2}$

$$\frac{sen^2(\theta_2)}{sen^2(\theta_1)} = \frac{(h^2+k^2+l^2)_{\theta_2}}{(h^2+k^2+l^2)_{\theta_1}}$$

lista-se em ordem crescente dos valores $h^2+k^2+l^2$

{h k l}	$\Sigma(h^2+k^2+l^2)$	FCC	BCC
{1 0 0}	1	×	×
{1 1 0}	2	✓	✓
{1 1 1}	3	✓	×
{2 0 0}	4	✓	✓
{2 1 0}	5	×	×
{2 1 1}	6	×	✓

No nosso exemplo, os dois primeiros ângulos são

$\theta_1 = 20°$ e $\theta_2 = 29°$

$$\frac{\text{sen}^2(29)}{\text{sen}^2(20)} \simeq 2$$

teste com {200} e {111} Para ver se é FCC.

$$\frac{(h^2+k^2+l^2)_{\theta_2}}{(h^2+k^2+l^2)_{\theta_1}} = \frac{2^2+0^2+0^2}{1^2+1^2+1^2} \longrightarrow \frac{4}{3} \simeq 1{,}33$$

"não é FCC"

teste com {200} e {110} para ver se é BCC.

$$\frac{(h^2+k^2+l^2)_{\theta_2}}{(h^2+k^2+l^2)_{\theta_1}} = \frac{2^2+0^2+0^2}{1^2+1^2+0^2} = \frac{4}{2} = 2 \checkmark$$

"é BCC"

$\frac{4}{} = 2$ BCC ✓

(b) $2 d \operatorname{sen}(\theta) = \lambda$ $\qquad d = \dfrac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

$$a = \frac{\lambda \sqrt{h^2+k^2+l^2}}{2\operatorname{sen}(\theta)}$$

$$a = \frac{0,154 \sqrt{2}}{2\operatorname{sen}(20^\circ)} \text{ mm}$$