Estrutura Cristalina.

3.56 A Fig. 3.20 mostra um difratograma de raios X para o ferro α, tirado utilizando-se um difratômetro e uma radiação X monocromática com comprimento de onda de 0,1542 nm; cada pico de difração no padrão foi indexado. Calcule o espaçamento interplanar para cada conjunto de planos que foi indexado; determine também o parâmetro de rede do Fe para cada um dos picos.

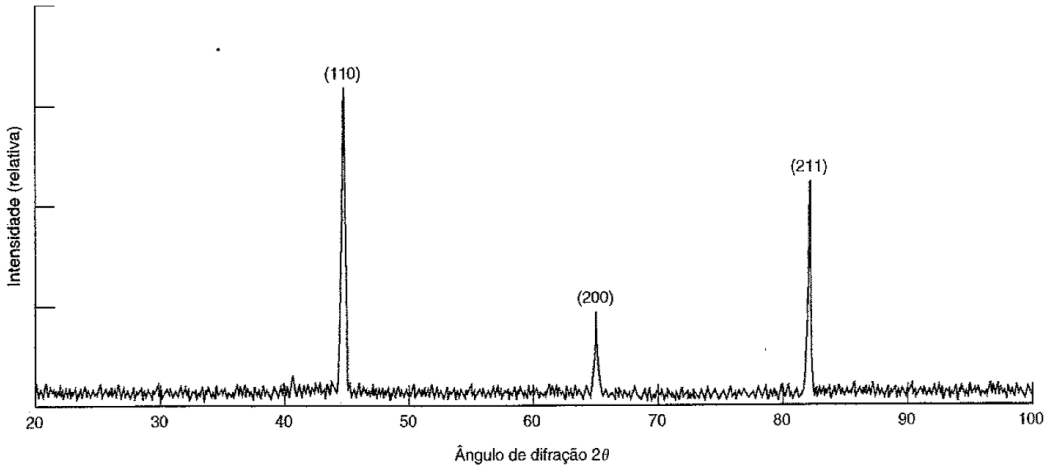


Fig. 3.20 Difratograma para o ferro α policristalino.

Note, pelas regras de seleção, que é uma estrutura CCC.

3.56 For each peak, in order to compute the interplanar spacing and the lattice parameter we must employ Equations (3.10) and (3.9), respectively. For the first peak which occurs at 45.0°

$$d_{110} = \frac{n\lambda}{2\sin\theta} = \frac{(1)(0.1542\text{ nm})}{(2)\left(\sin\frac{45.0^\circ}{2}\right)} = 0.2015\text{ nm}$$

And

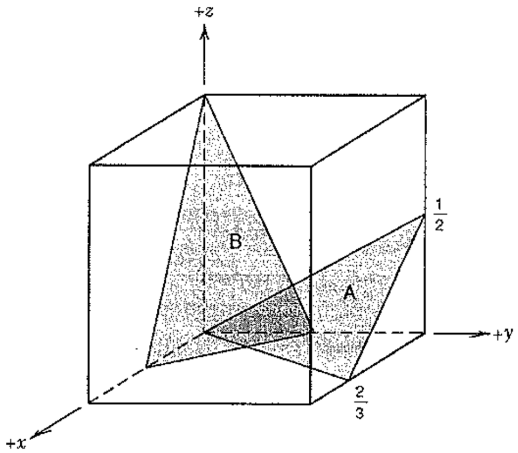
$$a = d_{hkl}\sqrt{(h)^2 + (k)^2 + (l)^2} = d_{110}\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (0)^2}$$

$$= (0.2015\text{ nm})\sqrt{2} = 0.2850\text{ nm}$$

Similar computations are made for the other peaks which results are tabulated below:

Peak Index	2θ	d_{hkl}(nm)	a (nm)
200	65.1	0.1433	0.2866
211	82.8	0.1166	0.2856

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



3.35 For plane **A** since the plane passes through the origin of the coordinate system as shown, we will move the origin of the coordinate system one unit cell distance to the right along the **y** axis; thus, this is a $(\bar{3}24)$ plane, as summarized below.

	x	y	z
Intercepts	$\frac{2a}{3}$	-b	$\frac{c}{2}$
Intercepts in terms of **a**, **b**, and **c**	$\frac{2}{3}$	-1	$\frac{1}{2}$
Reciprocals of intercepts	$\frac{3}{2}$	-1	2
Reduction	3	-2	4
Enclosure		$(\bar{3}24)$	

For plane **B** we will leave the origin at the unit cell as shown; this is a (221) plane, as summarized below.

	x	y	z
Intercepts	$\frac{a}{2}$	$\frac{b}{2}$	c
Intercepts in terms of **a**, **b**, and **c**	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1
Reciprocals of intercepts	2	2	1
Enclosure		(221)	

3.57 Os picos de difração mostrados na Fig. 3.20 estão indexados de acordo com as regras de reflexão para uma estrutura cristalina CCC (isto é, a soma $h + k + l$ deve ser igual a um número par). Cite os índices h, k e l para os quatro primeiros picos de difração em cristais CFC consistentes com o fato de todos os índices h, k e l serem par ou ímpar.

Faça você mesmo.

3.58 A Fig. 3.23 mostra os quatro primeiros picos do difratograma de raios X para o cobre, que possui uma estrutura cristalina CFC; foi usada radiação X monocromática com comprimento de onda de 0,1542 nm.
(a) Faça uma indexação (isto é, forneça os índices h, k e l) de cada um desses picos.
(b) Determine o espaçamento interplanar para cada um dos picos.
(c) Para cada pico, determine o raio atômico para o Cu e compare esses valores com o valor apresentado na Tabela 3.1.

3.58 (a) Since Cu has an FCC crystal structure, only those peaks for which **h**, **k**, and **l** are all either odd or even will appear. Therefore, the first peak results by diffraction from (111) planes.

(b) For each peak, in order to calculate the interplanar spacing we must employ Equation (3.9). For the first peak which occurs at 43.8°

$$d_{111} = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{(1)(0.1542 \text{ nm})}{(2)\left(\sin \frac{43.8°}{2}\right)} = 0.2067 \text{ nm}$$

(c) Employment of Equations (3.10) and (3.1) is necessary for the computation of **R** for Cu as

$$R = \frac{a}{2\sqrt{2}} = \frac{(d_{hkl})\sqrt{(h)^2 + (k)^2 + (l)^2}}{2\sqrt{2}}$$

$$= \frac{(0.2067 \text{ nm})\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (1)^2}}{2\sqrt{2}}$$

$$= 0.1266 \text{ nm}$$

Similar computations are made for the other peaks which results are tabulated below:

Peak Index	2θ	d_{hkl} (nm)	R (nm)
200	50.8	0.1797	0.1271
220	74.4	0.1275	0.1275
311	90.4	0.1087	0.1274

The value cited in Table 3.1 is 0.1278 nm, which is relatively close to these values.

3.50 Usando os dados para o molibdênio listados na Tabela 3.1, calcule o espaçamento interplanar para o conjunto de planos (111).

Tabela 3.1 Raios Atômicos e Estruturas Cristalinas para 16 Metais

Metal	*Estrutura Cristalina*[a]	*Raio Atômico*[b] *(nm)*	*Metal*	*Estrutura Cristalina*	*Raio Atômico (nm)*
Alumínio	CFC	0,1431	Níquel	CFC	0,1246
Cádmio	HC	0,1490	Ouro	CFC	0,1442
Chumbo	CFC	0,1750	Platina	CFC	0,1387
Cobalto	HC	0,1253	Prata	CFC	0,1445
Cobre	CFC	0,1278	Tântalo	CCC	0,1430
Cromo	CCC	0,1249	Titânio (α)	HC	0,1445
Ferro (α)	CCC	0,1241	Tungstênio	CCC	0,1371
Molibdênio	CCC	0,1363	Zinco	HC	0,1332

[a]CFC = cúbico de faces centradas; HC = hexagonal compacto; CCC = cúbico de corpo centrado.
[b]Um nanômetro (nm) equivale a 10^{-9} m; para converter unidades de nanômetros em angstrons (Å), multiplique o valor em nanômetros por 10.

3.50 From the table, molybdenum has a BCC crystal structure and an atomic radius of 0.1363 nm. Using Equation (3.3), the lattice parameter **a** may be computed as

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} = \frac{(4)(0.1363\ \text{nm})}{\sqrt{3}} = 0.3148\ \text{nm}$$

Now, the interplanar spacing $\mathbf{d_{111}}$ maybe determined using Equation (3.10) as

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{(1)^2 + (1)^2 + (1)^2}} = \frac{0.3148}{\sqrt{3}} = 0.1818\ \text{nm}$$