

CRISTALOGRAFIA E DIFRAÇÃO DE RAIOS X (2012)

1ª LISTA DE EXERCÍCIOS

1. a) Mostre que a rede tetragonal de face centrada é equivalente a rede tetragonal de corpo centrado.

b) Se os parâmetros de rede de uma rede tetragonal de face centrada são a e c , quais são os novos parâmetros de rede da tetragonal de corpo centrado usando a transformação do item a)?

2. a) Faça um esquema das estruturas monoatômicas: cúbica simples (CS), cúbica de face centrada (CFC) e cúbica de corpo centrado (CCC), com base na origem (0, 0, 0).

b) Qual é o número de coordenação de cada uma das três estruturas acima?

c) Quais são as coordenadas dos primeiros vizinhos em relação à coordenada da base?

3. Suponha um empacotamento de esferas rígidas idênticas. Mostre que o fator de empacotamento ou fração de volume ocupado para as estruturas cúbicas são:

$$\text{CFC: } \frac{\sqrt{2}}{6} \pi = 0,74$$

$$\text{CCC: } \frac{\sqrt{3}}{8} \pi = 0,68$$

$$\text{CS: } \frac{\pi}{6} = 0,52$$

4. O composto MgO cristaliza-se em uma estrutura cuja a rede é cúbica de face centrada, com parâmetro de rede $a = 4,2130 \text{ \AA}$.

a) Quantos átomos de Mg e O estão presentes por célula unitária?

b) Qual é o número de fórmulas por célula unitária?

c) Quais são as coordenadas das bases da estrutura?

d) Qual é o número de coordenação do Mg?

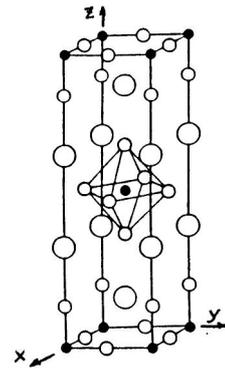
e) Se Mg ocupa a coordenada (0,0,0) na rede, quais são as coordenadas dos primeiros vizinhos?

f) Qual é a distância entre os primeiros vizinhos? E a distância entre os segundos vizinhos?

g) Calcule a densidade de MgO em g/cm^3 .

5. As coordenadas da base de uma célula unitária do composto La-Cu-O, mostrado na figura são:

La: (0, 0, u)
 Cu: (0, 0, 0) u = 0,362
 O(1): (0, 1/2, 0) v = 0,182
 O(2): (0, 0, v)



Os parâmetros de rede são: $a = 3,77 \text{ \AA}$ e $c = 13,18 \text{ \AA}$

- Qual é o tipo de rede?
- Identifique os átomos na figura.
- É conhecido que uma célula unitária contém duas fórmulas ($Z = 2$). Qual é a sua fórmula?
- Qual é o número de coordenação dos átomos de Cu?
- Calcule a densidade do composto em g/cm^3 .
- Determine as distâncias interatômicas entre Cu-O e La-O.

6. Uma rede CFC pode ser transformada em uma rede romboédrica através das seguintes relações:

$$\vec{A}_1 = \frac{a}{2}(\hat{a}_2 + \hat{a}_3), \quad \vec{A}_2 = \frac{a}{2}(\hat{a}_3 + \hat{a}_1) \quad \text{e} \quad \vec{A}_3 = \frac{a}{2}(\hat{a}_1 + \hat{a}_2)$$

- Verifique que $|| \vec{A}_1 || = || \vec{A}_2 || = || \vec{A}_3 ||$.
- Mostre que o ângulo entre \vec{A}_1 e \vec{A}_2 é 60° .
- Mostre que o volume da célula romboédrica é $\frac{1}{4}$ do volume da célula cúbica.

7. Determine o parâmetro de rede a teórico dos compostos cúbicos relacionados abaixo, a partir dos raios iônicos dos elementos atômicos constituintes (veja por ex. no Handbook da CRC). Compare o parâmetro de rede teórico com o valor experimental em porcentagem.

- CsCl, CsBr e CsI;
- LiF, LiCl, LiBr e LiI.

8. Usando os valores do parâmetro de rede dos compostos LiCl, NaCl e KCl, calcule as distâncias interplanares dos planos indexados por: (111), (200) e (220).

9. A partir dos parâmetros de rede do composto La-Cu-O dados no ex. 5, calcule as distâncias interplanares dos planos indexados por: (101), (004), (103) e (110). Faça um esquema destes planos.

10. O número de planos equivalentes, ou seja, planos com diferentes orientações, porém, com a mesma distância interplanar, é chamado de fator de multiplicidade. Mostre quais são os planos equivalentes aos planos indicados.

- Plano (220) no sistema cúbico;
- Plano (021) no sistema tetragonal;
- Plano (102) no sistema ortorrômbico.