

- 3.1 Desenhe o plano $(11\bar{2})$ para um cristal cúbico. Desenhe o plano $(10\bar{2})$ para um cristal hexagonal com $c/a = 0.5$.
- 3.2 Considere um plano (hkl) numa rede cristalina.
- Prove que o vector da rede recíproca $\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ é perpendicular a esse plano.
 - Prove que a distância entre dois planos adjacentes que passam por pontos da rede é $d(hkl) = 2\pi/|\vec{G}|$.
 - Mostre que para uma rede cúbica simples $d(hkl) = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$.
- 3.3 Calcule usando o método de Bragg os quatro menores ângulos de difração (2θ) para um cristal de CsCl (constante de rede 4.123 \AA) analisado por raios-X com uma energia de 17.9 keV .
- 3.4 Um feixe de electrões com uma energia de 59.32 keV incide num mono-cristal de silício. A estrutura é diamante: rede fcc com constante de rede $a = 5.43 \text{ \AA}$ e dois átomos por célula primitiva em $(0, 0, 0)$ e $\frac{1}{4}(a, a, a)$.
- Determine os mais curtos vectores \vec{G} de rede recíproca, escrevendo-os sob a forma $\frac{2\pi}{a}(h, k, l)$.
 - Determine os quatro menores ângulos de difração (2θ).
 - Supondo que a densidade de electrões é uma soma de densidades de carga atómicas, mostre que não vai ser observado o pico de difracção correspondente a $\frac{2\pi}{a}(2, 0, 0)$.

Problema numérico para fazer em casa

3.5 Vamos observar as propriedades das transformadas de Fourier de funções periódicas usando o Mathematica. Começamos por definir e desenhar a nossa função “atómica”:

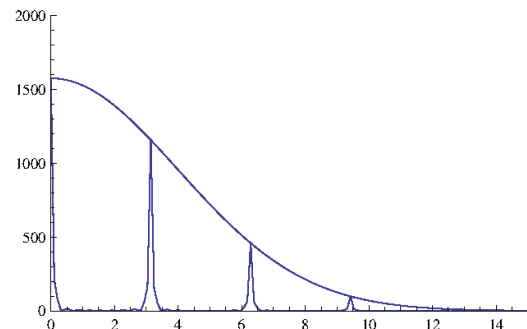
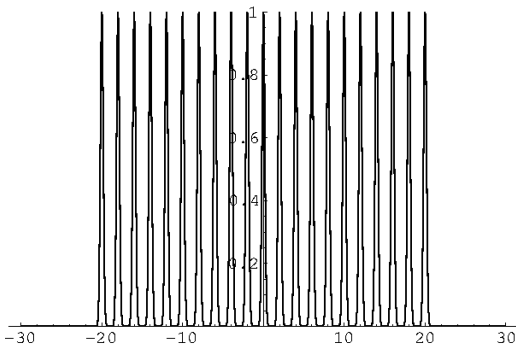
```
atom[x_] = Exp[-16 x^2]
Plot[atom[y], {y, -1, 1}]
```

Em seguida vamos definir um “cristal” finito com $2n + 1$ “átomos” e uma constante de rede de 2.

```
lattconst = 2
cristal[x_, n_] = Sum[atom[x - m lattconst], {m, -n, n}]
Plot[cristal[y, 10], {y, -25, 25}]
```

Podemos agora calcular a transformada de Fourier da função “cristal”, e fazer o gráfico do quadrado do seu módulo, que se relaciona com a intensidade de radiação difractada para uma densidade de centros de espalhamento definida pela função cristal.

```
diff[w_] = FourierTransform[cristal[x, 10], x, w]
Plot[Arg[diff[w]]^2, {w, -10, 10}, PlotRange->Full]
```



Vamos agora ver como a intensidade varia com várias modificações do “cristal” (antes de fazer a modificação seguinte, volte sempre às condições iniciais!). Comente se o resultado obtido é o esperado.

- Modifique a função “atómica” para $\exp(-200x^2)$.
- Considere um “cristal” com apenas 6 “átomos”.
- Mude a constante de rede para $3/2$.
- Ponha dois “átomos” iguais na mesma célula, $\exp(-16x^2) + \exp(-16(x - 1/3)^2)$.
- Ponha dois “átomos” diferentes na mesma célula, $\exp(-16x^2) + 5 \exp(-50(x - 1/3)^2)$.
- Dê um piparote aleatório a cada um dos “átomos”, verifique o efeito do aumento do tamanho do piparote no “cristal” e na sua transformada de Fourier.

```
For[i=-10, i<11, i++, piparote[i] = 0.3 (Random[]-1/2)]
cristal[x_] = Sum[atom[x-n lattconst+piparote[n]], {n, -10, 10}]
```