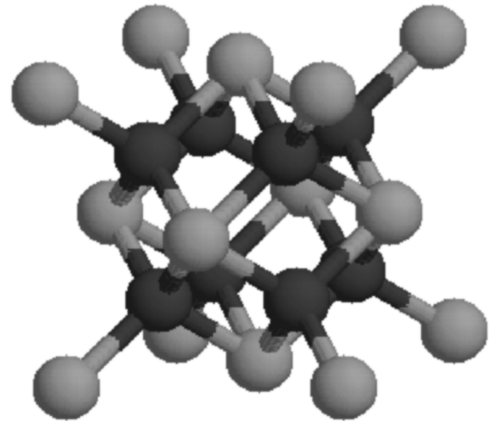


3.1 A figura da esquerda mostra a célula cúbica convencional do  $\text{CaF}_2$ . Os átomos “claros” nos vértices do cubo e no centro das faces são de Ca. Os átomos “escuros” são de F, e todas as ligações químicas desenhadas têm o mesmo comprimento. (Teste de 2010)



- Identifique a rede deste cristal. Qual é a base?
  - Quantos primeiros vizinhos tem cada átomo de Ca? De que tipo são? Quantos primeiros vizinhos tem cada átomo de F? De que tipo são?
  - Quantos segundos vizinhos tem cada átomo de F?
- 3.2 Desenhe o plano  $(11\bar{2})$  para um cristal cúbico. Desenhe o plano  $(10\bar{2})$  para um cristal hexagonal com  $c/a = 0.5$ .
- 3.3 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  $d(hkl) = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$ .

3.4 Calcule usando o método de Bragg os quatro menores ângulos de difração ( $2\theta$ ) para um cristal de CsCl (constante de rede  $4.123 \text{ \AA}$ ) analisado por raios-X com uma energia de  $17.9 \text{ keV}$ .

### 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”:

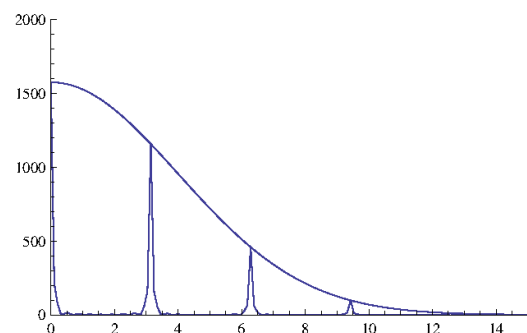
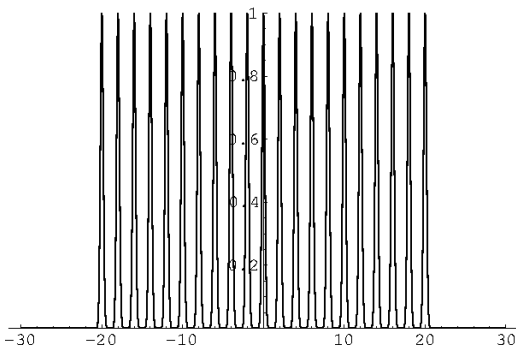
```
atom[x_] = Exp[-16 x^2]
Plot[atom[y], {y, -1, 1}]
```

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}]
```