

Lista 1 de Exercícios -FAP844 (2º semestre de 2008)- Márcia C.A. Fantini

1) Um monocristal de Si (estrutura cúbica tipo diamante, onde $h+k+l = 4n$), orientado na direção $\langle 100 \rangle$, é utilizado para determinar o comprimento de onda característico emitido por um tubo de raios X, cujo anodo é de um metal desconhecido. Ao se fazer o experimento, observa-se um único pico de difração em $2\theta = 30,31^\circ$. Calcule o parâmetro de rede do silício utilizando a expressão:

$$d_{100} = \left(\frac{\sum A/N}{\rho} \right)^{1/3}$$

onde A é massa atômica do Si, N é o número de Avogadro e ρ é a densidade do Si. A soma é feita sobre todos os átomos da cela unitária.

Após determinar o parâmetro de rede, utilize a Lei de Bragg para identificar o metal do tubo.

2) Deseja-se determinar a concentração de Al, Si, Pd e Ag de uma amostra composta por esses metais. Bombardeia-se a amostra com raios X de energia suficiente para provocar emissão fluorescente $K\alpha$ de todos os elementos. Dispõe-se de um detetor de energia com resolução de 300 eV e de um monocristal monocromador de Ge(111), cuja distância interplanar é 3,266 Å, para detetar o sinal proveniente da amostra.

a) Determine a mínima energia que os raios X de excitação devem possuir para que todos os elementos emitam radiação $K\alpha$.

b) Calcule as variações de energia emitida pelos elementos e discuta se o detetor de energia tem resolução suficiente para distinguí-los.

c) Utilizando a Lei de Bragg, calcule os ângulos de difração das radiações emitidas e analise se o monocromador de Ge(111) tem resolução suficiente para distinguir a emissão desses elementos.

3) Um sistema de indexação um pouco diferente é utilizado para a simetria hexagonal, na qual se constrói um eixo $\vec{a}_3 = -(\vec{a}_1 + \vec{a}_2)$ no plano perpendicular ao eixo \vec{c} , e representa-se os planos da rede através de 4 índices (hki) , onde o índice i é a fração da intersecção do plano com o eixo \vec{a}_3 . Mostre que:

$$h + k + i = 0$$

4) A tabela com resultados de difração de raios X, a estrutura tetragonal e o difratograma (2θ vs. I) mostrados abaixo pertencem a uma amostra de cassiterita (SnO_2), medida com radiação Cu- $K\alpha$.

Determine os parâmetros de rede do material, utilizando duas reflexões consecutivas e compare os resultados.

2θ	Intensidade	(hkl)
26.568	5431.973	110
33.852	4222.662	101
37.926	1223.775	200
38.951	239.287	111
42.608	91.262	210
51.736	3703.396	211
54.718	870.787	220
57.784	438.682	002

