

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

1) O padrão de pó de alumínio, cuja estrutura é cúbica, foi obtido com radiação Cu K $\alpha$  ( $\lambda = 1,5418 \text{ \AA}$ ) e contém 10 linhas, cujos valores de  $\text{sen}^2\theta$  são:

0,1118; 0,1487; 0,294; 0,403; 0,439; 0,583; 0,691; 0,727; 0,872; 0,981.

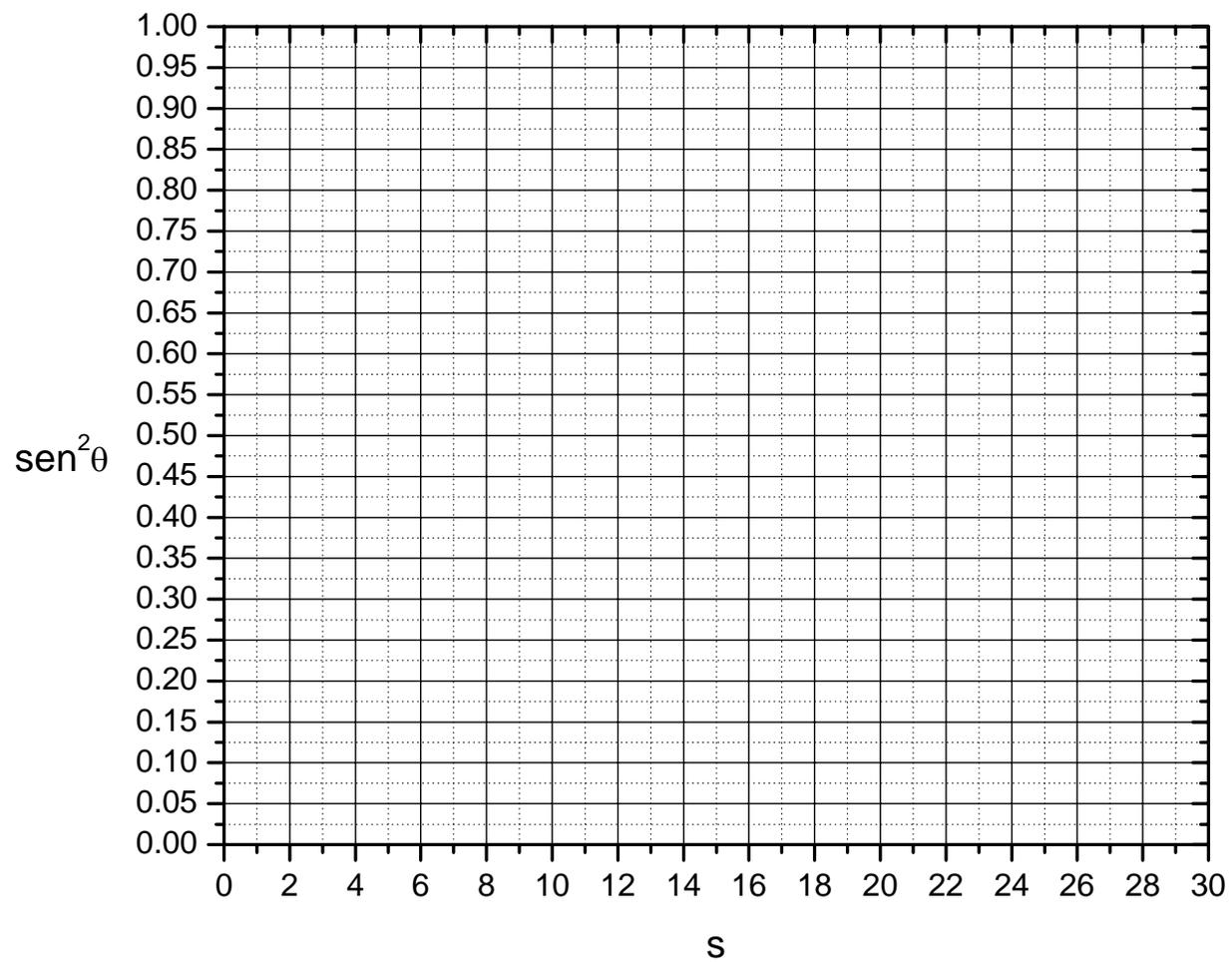
a) Indexe essas linhas .

b) Construa um gráfico de  $\text{sen}^2\theta$  em função de  $s$ , e determine o parâmetro de rede do alumínio através do gráfico.

Dados:  $m \lambda = 2 d_{hkl} \text{sen}\theta_{hkl}$  e  $d_{hkl} = a/\sqrt{s}$ , onde  $a$  é o parâmetro de rede

Tabela I

hkl	$s = h^2+k^2+l^2$	FCC	BCC	DIAMANTE
100	1	-	-	-
110	2	-	2	-
111	3	3	-	3
200	4	4	4	-
210	5	-	-	-
211	6	-	6	-
220	8	8	8	8
300,221	9	-	-	-
310	10	-	10	-
311	11	11	-	11
222	12	12	12	-
320	13	-	-	-
321	14	-	14	-
400	16	16	16	16
410,322	17	-	-	-
411,330	18	-	18	-
331	19	19	-	19
420	20	20	20	-
421	21	-	-	-
332	22	-	22	-
422	24	24	24	24
500	25	-	-	-
510	26	-	26	-
511,333	27	27	-	27



- 2) Numa experiência de difração de raios X à temperatura de 270°C pretende-se indentificar a fase do óxido de níquel presente na amostra, ou seja, identificar o NiO com estrutura cúbica ou hexagonal. Na tabela abaixo, temos as fichas dos padrões de pó de ambas as fases.

**Estrutura hexagonal**

d (Å)	I/I <sub>1</sub>	hkl	2θ° λ=0,7107 Å MoKα	2θ° λ=1,5418 Å CuKα	2θ° λ=1,7903 Å CoKα	2θ° λ=1,9374 Å FeKα	2θ° λ= 2,2910 Å CrKα
2,412	60	101					
2,088	100	012					
1,477	35	110					
1,476	35	104					
1,260	18	113					
1,2586	12	015					
1,2064	16	202					
1,0445	8	024					
0,9588	6	211					
0,9581	4	205					
0,9576	4	107					
0,9345	12	122					
0,9337	10	116					
0,8529	10	300					
0,8519	6	018					
0,8041	4	303 033					
0,8039	4	125					

**Estrutura cúbica**

d (Å)	I/I <sub>1</sub>	hkl	2θ° λ=0,7107 Å MoKα	2θ° λ=1,5418 Å CuKα	2θ° λ=1,7903 Å CoKα	2θ° λ=1,9374 Å FeKα	2θ° λ= 2,2910 Å CrKα
2,41	91	111					
2,088	100	200					
1,476	57	220					
1,259	16	311					
1,206	13	222					
1,0441	8	400					
0,9582	7	331					
0,9338	21	420					
0,8527	17	422					
0,8040	7	511					

- a) Que tipo de estrutura cúbica possui o NiO?
- b) Quais são as principais diferenças entre os padrões de difração da fase cúbica e da fase hexagonal? Que tubo você escolheria para medir a amostra de forma a melhor distinguir as duas fases? Justifique sua resposta.
- c) Com o tubo que você escolheu no item b) determine a faixa angular (em  $2\theta^\circ$ ) que você deve medir a amostra para obter todas as linhas mostradas nas tabelas.
- d) Determine o parâmetro de rede da fase cúbica utilizando a reflexão mais intensa.
- e) Qual seriam as duas reflexões mais intensas que você escolheria para determinar os parâmetros de rede da fase hexagonal? Justifique sua resposta.