LISTA DE EXERCÍCIOS / ROTEIRO DE ESTUDOS

FI089 – Técnicas com Luz Síncrotron – 1s2018
Prof. Eduardo Granado

Difração I – Nielsen & McMorrow, Cap. 4

1. Considere um espalhamento por uma densidade eletrônica gerada por átomos acomodados em uma estrutura periódica em três dimensões (cristal). Demonstre a condição de Laue para difração (**q**=**G**), onde $\mathbf{q}=\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_f$ e $\mathbf{G}=h\mathbf{a}^*+k\mathbf{b}^*+l\mathbf{c}^*$ é um vetor da rede recíproca.

2. Mostre que a intensidade difratada para cada conjunto de índices h,k,l é proporcional a $|F_{hkl}|^2$, onde $F_{hkl}=\sum_j f_j^{(0)}(q)e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)}$.

3. Discuta o efeito de vibração dos átomos nas intensidades das reflexões de Bragg. Mostre que o fator de estrutura pode ser corrigido para: $F_{hkl}=\sum_j f_j^{(0)}(q)e^{2\pi i(hx_j+ky_j+lz_j)}e^{-\frac{1}{2}q^2\langle u^2\rangle}$. Discuta o efeito prático nesta correção para reflexões a baixos ângulos e a altos ângulos.

4. Mostre a equivalência entre a lei de Bragg e a condição de Laue para difração.

5. Para um experimento de difração de pó, discuta sobre os seguintes termos que podem ter influência nas intensidades: multiplicidade, fator de Lorentz, extinção.

6. Em um experimento de difração de pó com luz síncrotron, discuta as vantagens e desvantagens das possíveis opções para detecção: detetor pontual, detetor linear e detetor de área. Comente sobre a vantagem e desvantagem do emprego de um cristal analisador no braço 2Θ. Qual o sentido de manter a amostra girando em um experimento de difração de pó ?

7. Quais são as condições de reflexão (i.e. quais são os hkl permitidos) para uma rede cristalina pertencente aos sistemas (i) cúbico de face centrada (FCC), (ii) cúbico de corpo centrado (BCC), e (iii) ortorrômbico de lado centrado.

8. O que é o método de Rietveld ? Quais são os parâmetros estruturais refinados ? Quais são as informações estruturais que se deve conhecer de antemão ?