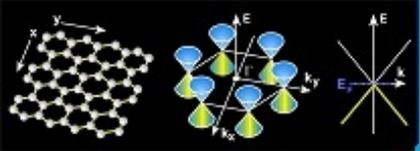


04 - DIFRAÇÃO DE RAIOS X E DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA CRISTALINA

PROF. CÉSAR AUGUSTO DARTORA - UFPR

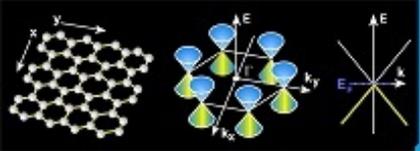
E-MAIL: CADARTORA@ELETRICA.UFPR.BR

CURITIBA-PR



Roteiro do Capítulo:

- Por que utilizar Raios X para determinar a estrutura cristalina?
- Condição de Bragg
- Abordagem de von Laue
- Métodos Experimentais
- Fator Geométrico e Fator de Estrutura Atômica

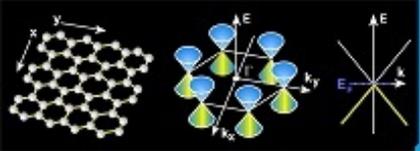


Por que utilizar Raios X na determinação da Estrutura Cristalina?

⇒ O espaçamento interatômico nos materiais em estado sólido está na ordem de uns poucos angstroms ($\sim 1\text{\AA} = 10^{-10}\text{m}$).

⇒ Da teoria de difração, sabe-se que a resolução de imagem de um objeto está associada ao comprimento de onda λ da radiação utilizada para visualizá-lo.

⇒ Quanto menor o λ maior a resolução dos detalhes do objeto, sendo que o limite de difração implica que não podemos enxergar detalhes de dimensão menor do que o comprimento de onda.

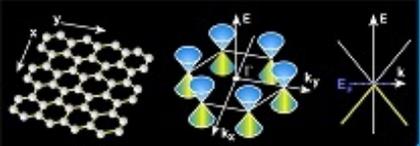


⇒ Portanto, para visualizar a estrutura cristalina precisamos utilizar comprimentos de onda $\lambda < 1\text{\AA}$.

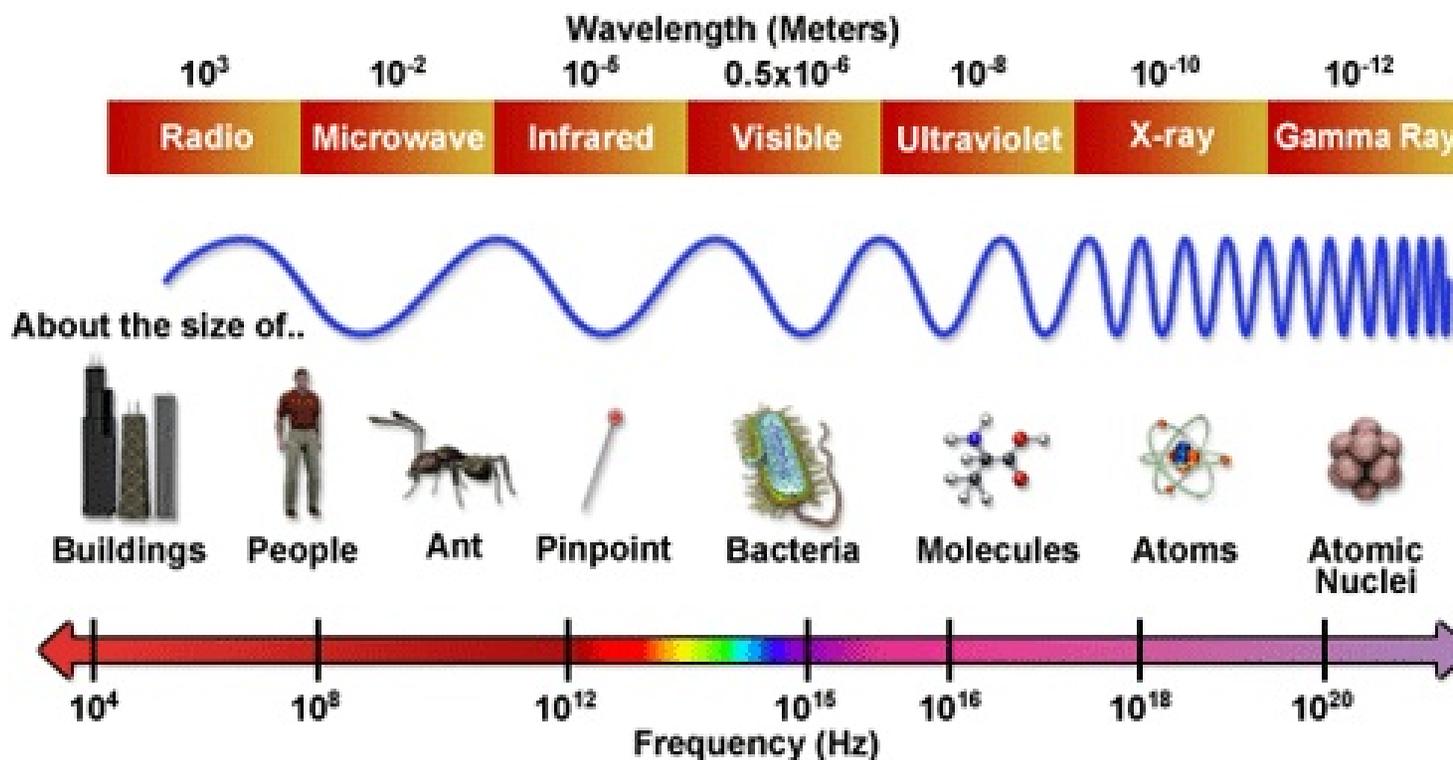
Utilizando $\lambda = 10^{-10}\text{m}$ podemos determinar a energia do fóton associado:

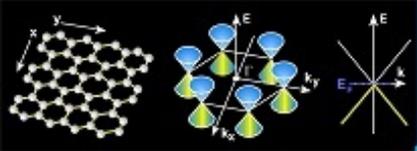
$$E = \frac{hc}{\lambda} \approx 12.4\text{keV} ,$$

valor que está no espectro de raios X, definido no intervalo de energia entre 100eV e 100keV.



Electromagnetic Spectrum





A Lei de Bragg para a difração de Raios X

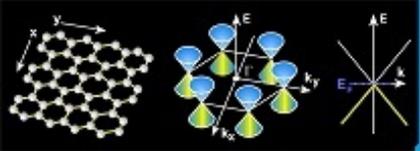
⇒ William Henry Bragg e William Lawrence Bragg (pai e filho): receberam o prêmio Nobel de Física de 1915 "pela análise da estrutura cristalina através da difração de raio X".

⇒ A expressão de campo elétrico para uma onda plana uniforme é dada por:

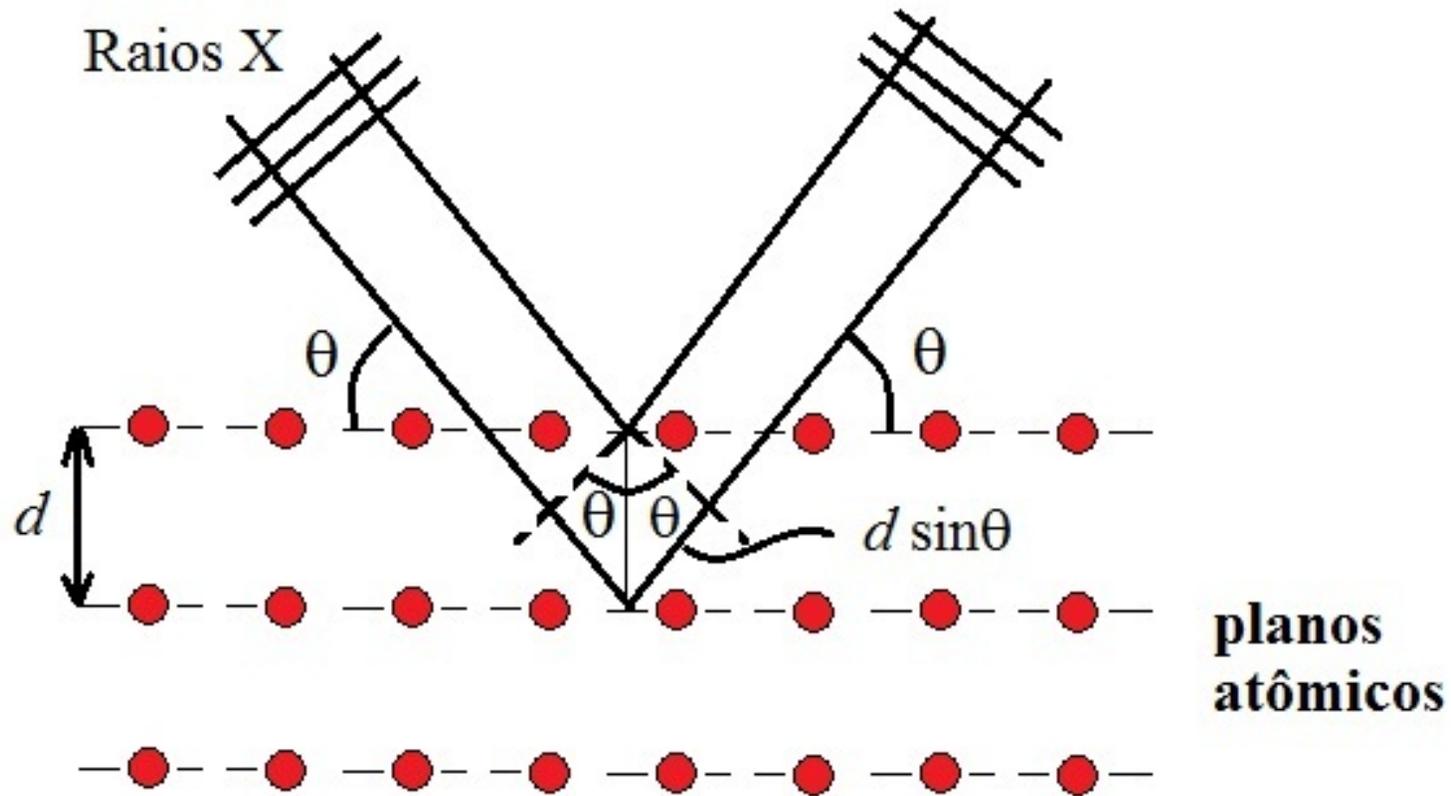
$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)},$$

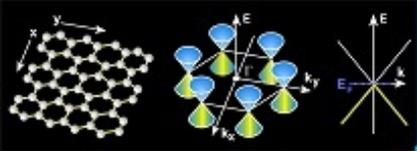
e o acúmulo de fase por conta do caminho de propagação é dado por $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}$.

⇒ Quanto a diferença de caminho de duas ondas é Δr a diferença de fase será dada então por $k\Delta r$.



A lei de Bragg:

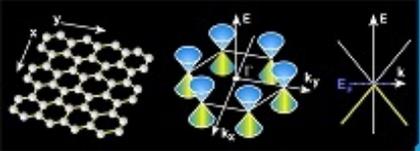




- Quando os raios X incidem sobre o cristal, são refletidos pelos planos atômicos.
- A diferença de caminho das ondas refletidas por dois planos atômicos consecutivos vale $\Delta r = 2d \sin \theta$.

\Rightarrow A interferência entre essas ondas será construtiva somente se $k\Delta r = 2m\pi$, onde $m = 1, 2, 3, \dots$ é um inteiro. Usando $k = 2\pi/\lambda$ tem-se o resultado final:

$$2d \sin \theta = m\lambda . \quad (1)$$



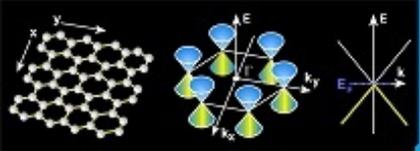
- Dada a lei de Bragg

$$2d \sin \theta = m\lambda, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

e fixando-se o comprimento de ondas λ do raio X pode-se variar o ângulo θ de incidência para descobrir as distâncias entre os planos atômicos nas diversas famílias de planos do cristal.

⇒ Quando a condição de Bragg é satisfeita, para um dado ângulo θ um pico de interferência construtiva é observado.

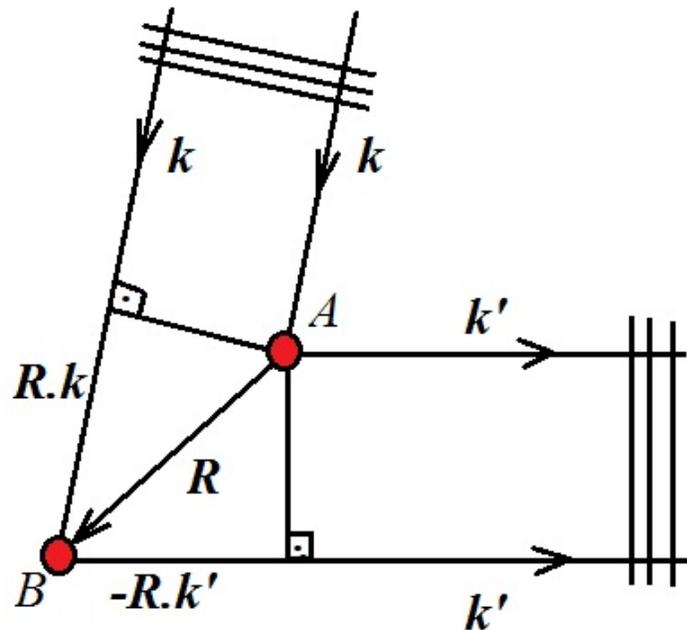
⇒ Descobre-se assim a estrutura do cristal, uma vez que a relação de Bragg é uma característica específica de cada estrutura cristalina.

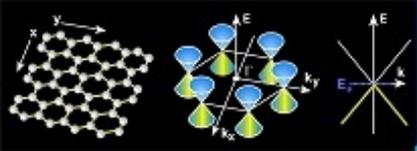


A abordagem de von Laue

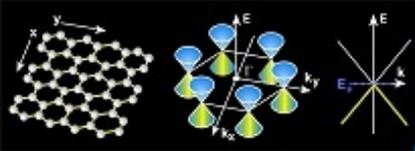
⇒ Max von Laue: ganhador do prêmio Nobel de Física de 1914 pela "descoberta da difração dos raios-X pela matéria cristalina".

⇒ Os pontos da rede de Bravais são espalhadores idênticos capazes de rerradiar a onda incidente em todas as direções. Considere dois espalhadores com posição relativa $\mathbf{R} = \mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A$:





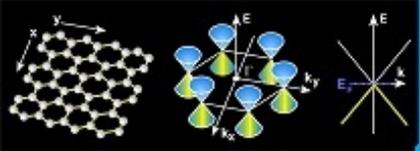
- A onda incidente nos espalhadores tem a forma de onda plana uniforme $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, onde \mathbf{k} é o vetor de onda da onda incidente.
- Da mesma forma existe uma onda espalhada, aproximada por uma onda plana uniforme cujo vetor de onda é \mathbf{k}' , ou seja, o fator de fase é da forma $e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}$.
- Uma vez que os dois espalhadores estão situados em posições diferentes, as ondas rerradiadas terão uma diferença de fase, correspondente à diferença de caminho.



- Suponha o espalhador A na origem $\mathbf{0} = (0, 0, 0)$ do sistema.
- A onda incidente em B terá caminhado uma distância $\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{k}}$ a mais do que para atingir A e acumulará uma fase adicional $\mathbf{R} \cdot \mathbf{k}$.

Da mesma forma, a onda espalhada, caminhará uma distância $-\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{k}}'$ adicional em relação à onda espalhada em A o que dá uma fase adicional $-\mathbf{R} \cdot \mathbf{k}'$. Somando as contribuições a diferença de fase total acumulada será dada por:

$$\Delta\phi = \mathbf{R} \cdot \mathbf{k} - \mathbf{R} \cdot \mathbf{k}' = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') .$$



⇒ Temos então para a onda espalhada a forma $e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}}(1 + e^{i\Delta\phi})$.
A interferência somente será construtiva se $\Delta\phi = 2\pi m$, com $m = 1, 2, 3, \dots$

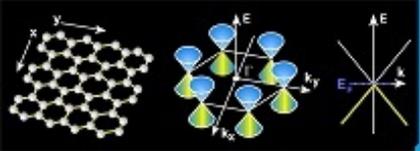
⇒ Essa condição é reescrita na forma:

$$\mathbf{R} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}') = 2\pi m, \quad m = 1, 2, 3, \dots$$

⇒ Em uma rede de Bravais, a distância entre os dois espalhadores será correspondente a um vetor da rede direta \mathbf{R} . Conforme vimos anteriormente, a relação acima se cumpre desde que a diferença $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ é um vetor da rede recíproca, \mathbf{K} :

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{K} . \quad (2)$$

⇒ A relação acima é equivalente à lei de Bragg.



⇒ Para espalhamento elástico de raios X, a onda incidente e a onda espalhada tem o mesmo comprimento de onda, o que significa que $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'| = k$ e podemos escrever a última expressão na forma:

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} - \mathbf{K} . \quad (3)$$

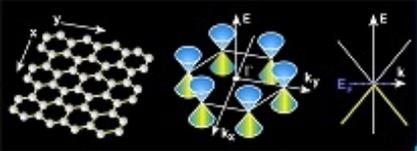
Tomando o módulo esta última temos

$$k = |\mathbf{k} - \mathbf{K}| \Rightarrow k^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{K}|^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{K}) \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{K}) = k^2 + K^2 - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{K} \quad (4)$$

e finalmente rearranjando os termos obtemos a condição:

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{K}} = \frac{1}{2}K , \quad (5)$$

onde $\hat{\mathbf{K}} = \mathbf{K}/K$ é o vetor unitário na direção de \mathbf{K} .



⇒ Uma vez o vetor \mathbf{K} é perpendicular a uma família de planos da rede direta e o menor deles tem tamanho $2\pi/d$, onde d é a separação entre esses planos, podemos escrever:

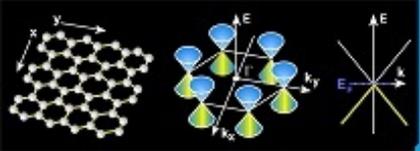
$$K = \frac{2\pi m}{d}, m = 1, 2, 3 \dots$$

⇒ O produto escalar da última equação pode ser colocado na forma:

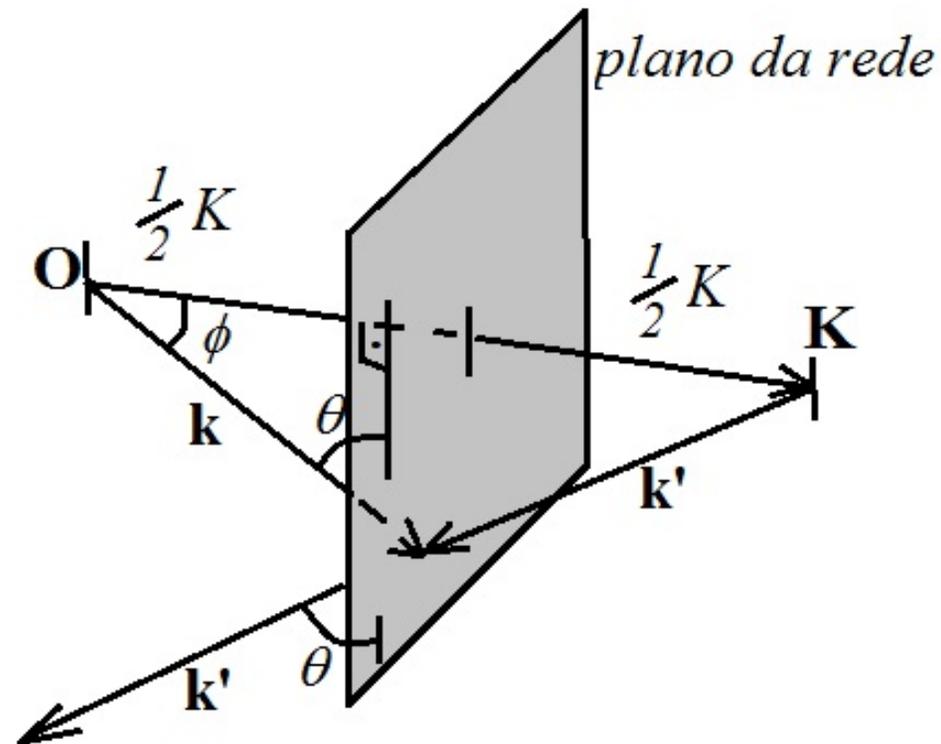
$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{K}} = k \cos \phi = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta$$

$$\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{K}} = \frac{1}{2} K \Rightarrow \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta = \frac{1}{2} \frac{2\pi m}{d}$$

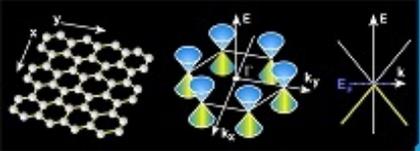
o resultado final é a lei de Bragg. A formulação de von Laue e Bragg são equivalentes.



⇒ Visualização da condição de Laue e equivalência com a Lei de Bragg:

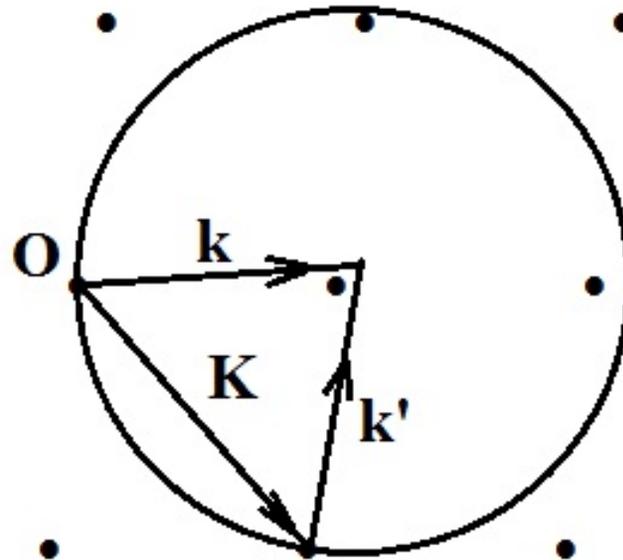


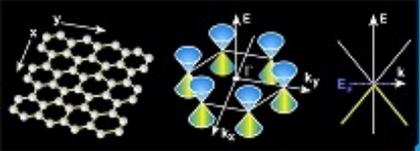
$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{K} \Rightarrow \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{K}} = \frac{1}{2}K \Rightarrow 2d \sin \theta = m\lambda, m = 1, 2, 3, \dots$$



A Esfera de Ewald

⇒ Construída no espaço \mathbf{k} : considera-se uma esfera de raio $k = 2\pi/\lambda$ e a origem em um ponto da rede recíproca. Haverá interferência construtiva para dois pontos localizados na esfera conectados por um vetor da rede recíproca \mathbf{K} .



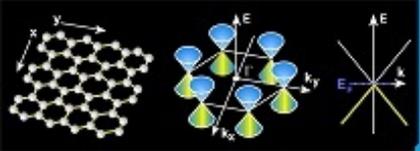


Técnicas de Difração de Raio X:

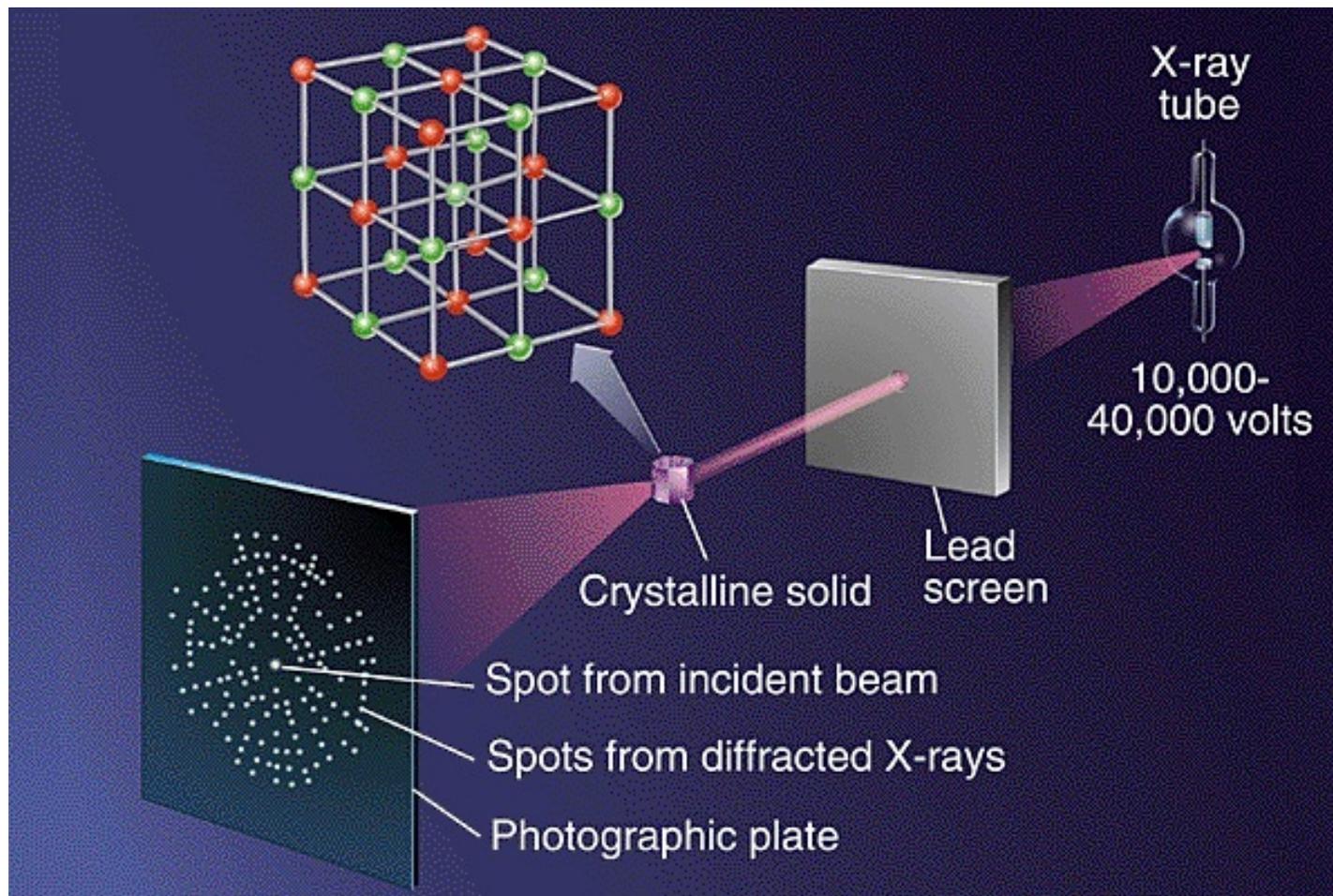
⇒ **Método de Laue:** Um cristal de orientação fixa é irradiado com raios X a partir de uma direção $\hat{\mathbf{k}}$. A procura pelos picos de interf. construtiva utiliza um feixe de raios X contendo um espectro entre λ_0 e λ_1 . A esfera de Ewald expande entre $k_0 = 2\pi/\lambda_0$ e $k_1 = 2\pi/\lambda_1$.

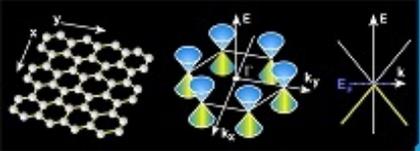
⇒ **Método do Cristal em Rotação:** Utiliza um feixe de raios X monocromático com ângulo de incidência variado continuamente pela rotação do cristal. A rede recíproca e os planos da rede direta giram à mesma taxa que o cristal. Em certos ângulos a lei de Bragg será satisfeita.

⇒ **Método de Debye-Scherrer ou de Pó:** equivalente ao método cristal em rotação, mas ao invés de girar um monocristal utiliza amostra policristalina ou pó cujos grãos são grandes em relação à escala atômica, preservando a estrutura cristalina e ficam randomicamente orientados em relação ao feixe de raio X incidente.

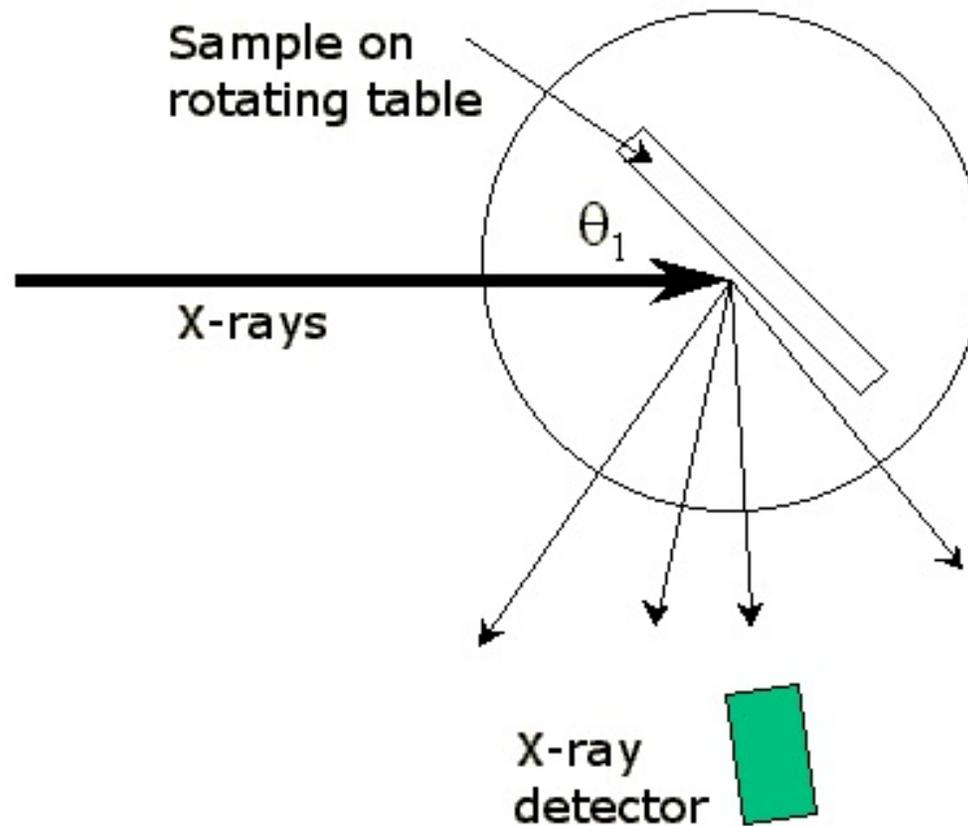


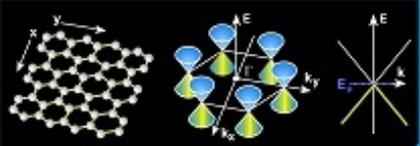
Experimento de difração de Raios X:





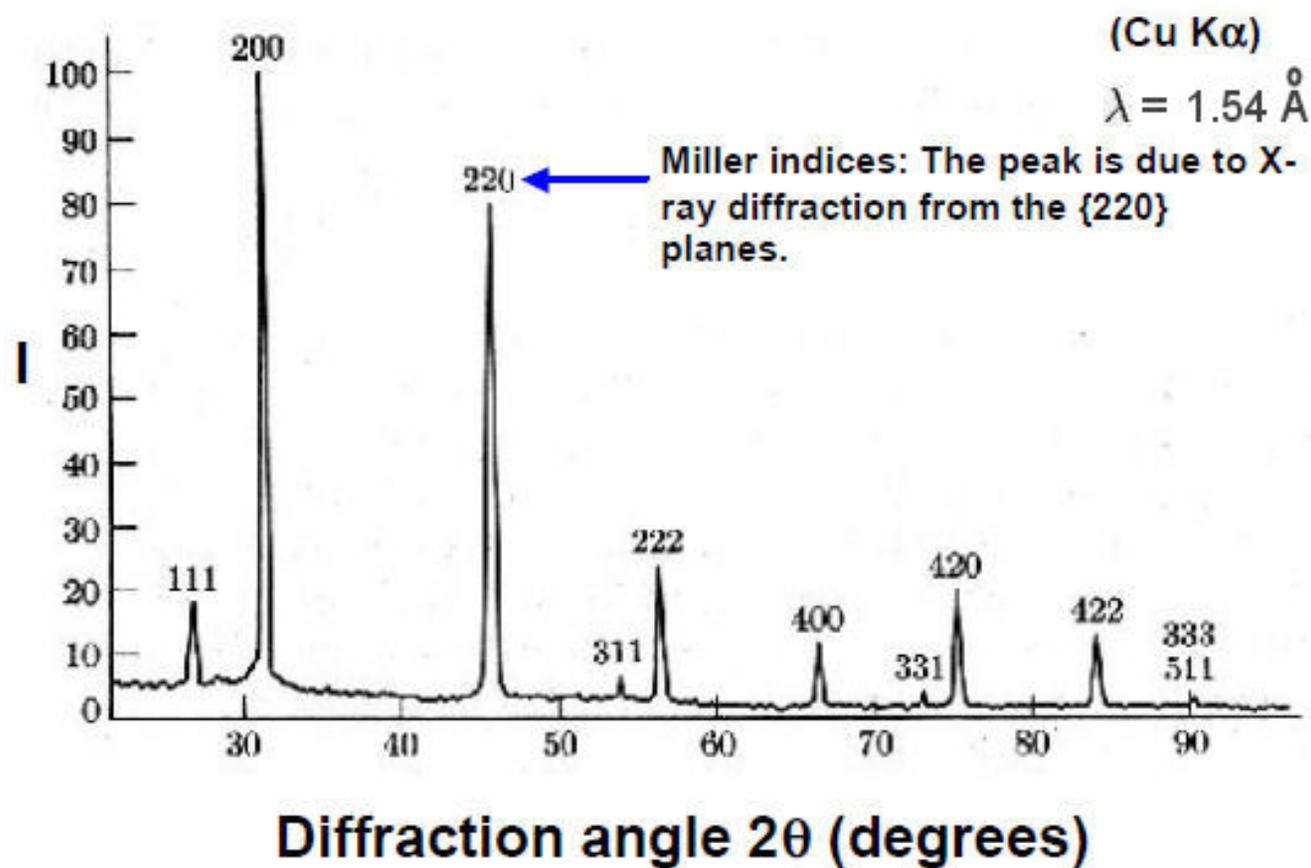
Método do Cristal em Rotação:

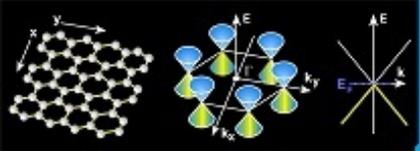




Resultado típico de XRD

XRD Pattern of NaCl Powder





Fator de Estrutura Geométrico

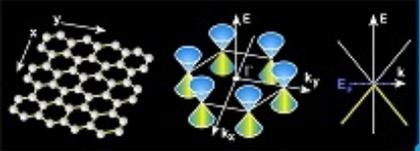
⇒ O fator de estrutura geométrico descreve uma rede de Bravais com uma base para um cristal monoatômico.

⇒ Se base é composta por n átomos, adicionalmente à interferência característica da rede de Bravais, dada pelo acúmulo de fase $\Delta\phi = \mathbf{R} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, há ainda um fator que deve descrever a separação entre os átomos da base em um único ponto da rede de Bravais.

⇒ Suponha a base composta de n átomos, localizados nas posições $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \dots, \mathbf{d}_n$, então haverá um fator de estrutura geométrico dado por:

$$S_{\mathbf{k}} = \sum_{j=1}^n e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{d}_j} . \quad (6)$$

⇒ Haverá picos de interferência construtiva para os máximos de $|S_{\mathbf{k}}|^2$.



⇒ As redes de Bravais mais comuns podem ser representadas por uma rede SC com base. Exemplo: a Rede BCC é representada por uma rede SC com base de átomos em $\mathbf{d}_1 = \mathbf{0}$ e $\mathbf{d}_2 = (a/2)(\hat{\mathbf{x}} + \hat{\mathbf{y}} + \hat{\mathbf{z}})$.

• Escrevendo \mathbf{K} em termos dos vetores da rede SC:

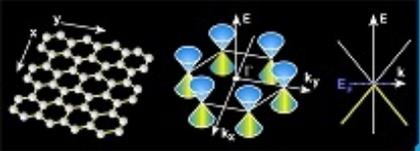
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{z}},$$

e então

$$\mathbf{K} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3,$$

onde n_1, n_2, n_3 são três números inteiros. Substituindo no fator geométrico $S_{\mathbf{k}}$ tem-se

$$S_{\mathbf{k}} = 1 + e^{i\pi(n_1+n_2+n_3)} = \begin{cases} 2 & , \text{ se } n_1 + n_2 + n_3 \text{ par} \\ 0 & , \text{ se } n_1 + n_2 + n_3 \text{ impar} \end{cases}$$



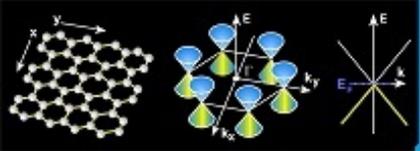
⇒ Para um cristal poliatômico, a base é formada por átomos diferentes, cada um com uma estrutura eletrônica diferente, então o fator de estrutura geométrico deve ser escrito na forma:

$$S_{\mathbf{k}} = \sum_{j=1}^n f_j(\mathbf{K}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{d}_j} . \quad (7)$$

onde $f_j(\mathbf{K})$ é o fator de forma atômico do j -ésimo átomo da base, calculado pela expressão a seguir:

$$f_j(\mathbf{K}) = -\frac{1}{e} \int d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \rho_j(\mathbf{r}) , \quad (8)$$

onde ρ_j é a distribuição de carga eletrônica do j -ésimo íon na base.

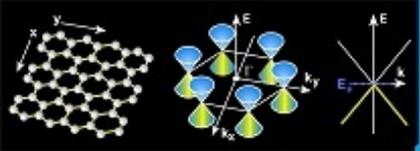


Exercício 1 - Capítulo 6 - Ashcroft/Mermin - Solid State Physics: Amostras em pó de três cristais cúbicos monoatômicos foram analisados em uma câmara de Debye-Scherrer. Sabe-se que um deles é FCC, outro BCC e o último tem estrutura Diamante. As posições aproximadas dos 4 primeiros picos de difração em cada caso são dados na tabela abaixo:

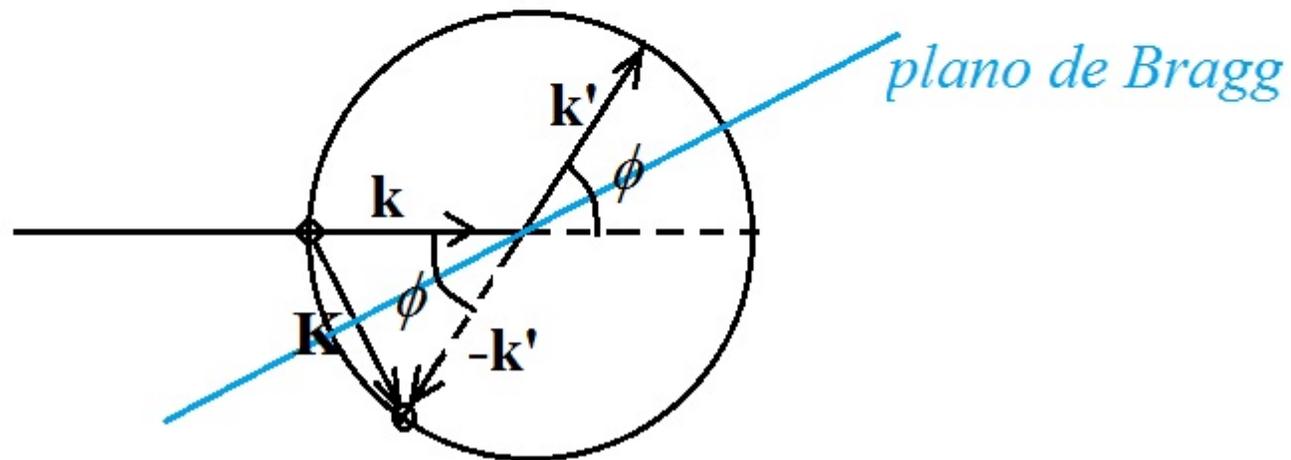
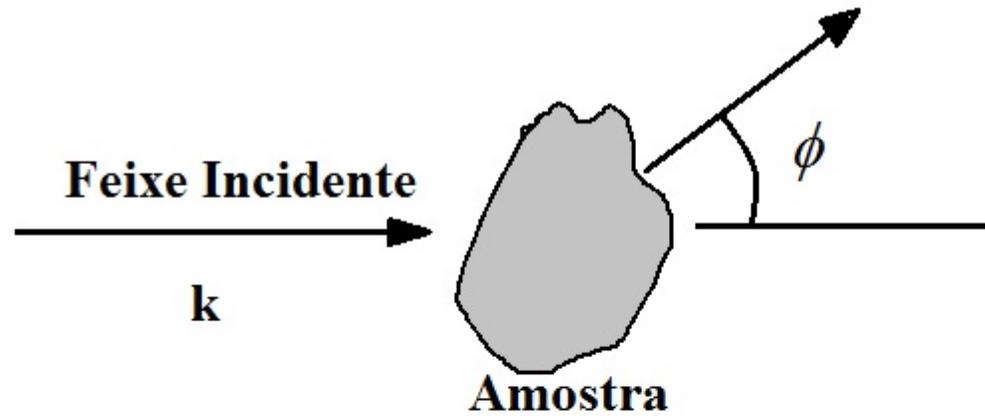
<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>
42.2°	28.8°	42.8°
49.2°	41.0°	73.2°
72.0°	50.8°	89.0°
87.3°	59.6°	115.0°

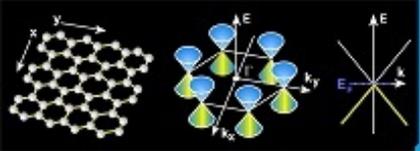
Tabela 1: Valores de ϕ para as Amostras *A*, *B*, *C*.

- Identifique as estruturas cristalinas de *A*, *B*, *C*.
- Se o comprimento de onda do raio X incidente é 1.5 angstrom, qual é o tamanho da aresta da célula cúbica convencional em cada caso?
- Se a estrutura diamante fosse substituída pela estrutura blenda de zinco com cela cúbica unitária de mesmo tamanho, quais seriam os ângulos de ocorrência dos primeiros 4 anéis de difração?



Experimento de XRD e Construção de Ewald





Solução

⇒ Primeiro devemos determinar os vetores da rede recíproca e as relações angulares, bem como o fator de estrutura para as redes FCC, BCC e diamante. Veja que:

$$\frac{K_1}{K_2} = \frac{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_1\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_2\right)}$$

⇒ Esta última relação surge da fórmula 6.12 do livro Solid State Physics, Ashcroft/Mermin:

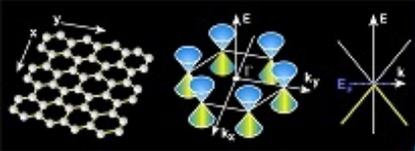
$$K = 2k \sin\left(\frac{1}{2}\phi\right)$$

A rede cúbica SC tem os seguintes vetores primitivos na rede direta e recíproca:

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{a}_2 = a\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{a}_3 = a\hat{\mathbf{z}}$$
$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{x}}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{y}}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}\hat{\mathbf{z}},$$

e podemos expressar os vetores da rede recíproca na forma

$$\mathbf{K} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$$



- Em termos dos índices de Miller (h, k, l) temos a seguinte expressão:

$$K_{hkl} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} .$$

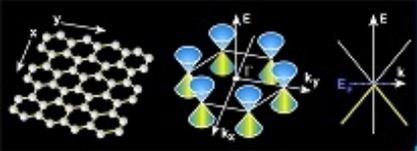
- Para uma rede SC, todas as combinações (h, k, l) são possíveis e temos $(h, k, l) = \{100, 110, 111, 200, 210, 211, 220, 221 \dots\}$, cujos valores de K_{hkl} são dados por $K_{hkl} = \frac{2\pi}{a} \{1, \sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{4}, \sqrt{5}, \sqrt{6}, \sqrt{8}, \sqrt{9} \dots\}$, respectivamente.

As razões K_i/K_j são dadas por:

$$\frac{K_{110}}{K_{100}} = \sqrt{2} , \frac{K_{111}}{K_{100}} = \sqrt{3} , \frac{K_{200}}{K_{100}} = \sqrt{4} , \frac{K_{111}}{K_{110}} = \sqrt{3/2} , \frac{K_{200}}{K_{111}} = \sqrt{4/3} \text{ etc}$$

o que permite determinar as relações entre os senos dos ângulos.

- Deve-se também considerar agora o fator de estrutura, pois quando o mesmo se anula, não há pico de difração.



Rede BCC

⇒ Corresponde a uma rede SC com base de 2 átomos em $\mathbf{d}_1 = (0,0,0)$ e $\mathbf{d}_2 = (a/2)(1,1,1)$.

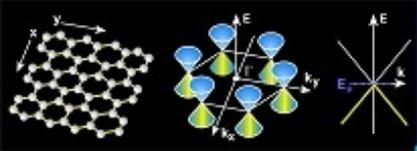
O fator de estrutura é dado por:

$$S_{\mathbf{k}}^{bcc} = \begin{cases} 2 & , \text{ se } n_1 + n_2 + n_3 \text{ par} \\ 0 & , \text{ se } n_1 + n_2 + n_3 \text{ impar} \end{cases}$$

- $S_{\mathbf{k}}$ não se anula e haverá portanto um pico de difração para rede BCC nos planos definidos pelos índices de Miller 110, 200, 211, 220.

Serão possíveis para a rede BCC as seguintes relações:

$$\frac{K_1}{K_2} = \frac{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_1\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_2\right)} = \sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{3/2}, \sqrt{4} \dots$$



Rede FCC

⇒ Corresponde a uma rede SC com base de 4 átomos em $\mathbf{d}_1 = (0, 0, 0)$, $\mathbf{d}_2 = (a/2)(1, 1, 0)$, $\mathbf{d}_3 = (a/2)(0, 1, 1)$, $\mathbf{d}_4 = (a/2)(1, 0, 1)$.

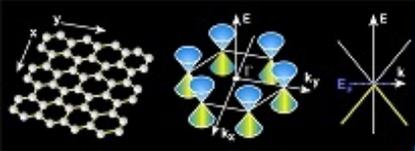
O fator de estrutura é dado por:

$$S_{\mathbf{k}}^{fcc} = 1 + e^{i\pi(h+k)} + e^{i\pi(k+l)} + e^{i\pi(h+l)} .$$

• $S_{\mathbf{k}}$ não se anula e haverá portanto um pico de difração para a rede FCC nos planos definidos pelos índices de Miller 111, 200, 220, ... mas não em 100, 110, 210, 211, 221, etc.

Serão possíveis para a rede FCC as seguintes relações:

$$\frac{K_1}{K_2} = \frac{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_1\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_2\right)} = \sqrt{4/3}, \sqrt{2}, \sqrt{8/2}, \dots$$



Rede com Estrutura Diamante

⇒ Corresponde a uma rede SC com base de 8 átomos pois são duas FCCs interpenetrantes. A base está dada em $\mathbf{d}_1 = (0, 0, 0)$, $\mathbf{d}_2 = (a/2)(1, 1, 0)$, $\mathbf{d}_3 = (a/2)(0, 1, 1)$, $\mathbf{d}_4 = (a/2)(1, 0, 1)$, $\mathbf{d}_5 = (a/4)(1, 1, 1)$, $\mathbf{d}_6 = (a/4)(3, 3, 1)$, $\mathbf{d}_7 = (a/4)(3, 1, 3)$, $\mathbf{d}_8 = (a/4)(1, 3, 3)$.

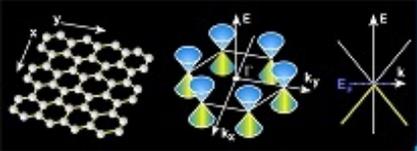
O fator de estrutura é dado por:

$$S_{\mathbf{k}}^{dia} = S_{\mathbf{k}}^{fcc} [1 + e^{i\pi(h+k+l)/2}] .$$

- $S_{\mathbf{k}}$ não se anula e haverá portanto um pico de difração para a estrutura diamante nos planos definidos pelos índices de Miller 111, 311... com amplitude relativa $4(1 \pm i)$ e nos planos 220... com amplitude 8, anulando-se em 100, 110, 200, 210, 211, 221, 222, 300, 310, ... etc.

Serão possíveis para a rede FCC as seguintes relações:

$$\frac{K_1}{K_2} = \frac{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_1\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_2\right)} = \sqrt{8/3}, \sqrt{11/8}, \sqrt{11/3}, \dots$$



Sumarizando:

- Cristal SC:

$$\frac{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_i\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_j\right)} = \sqrt{3/2}, \sqrt{2}, \sqrt{3} \dots = 1.225, 1.41, 1.73, 2.0, 1.1547 \dots$$

- Cristal BCC:

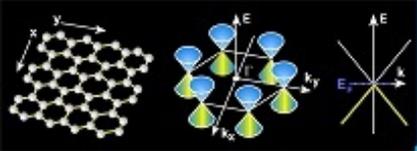
$$\frac{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_i\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_j\right)} = \sqrt{2}, \sqrt{3}, \sqrt{3/2}, \sqrt{4} \dots = 1.225, 1.41, 1.73, 2.0 \dots$$

- Cristal FCC:

$$\frac{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_i\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_j\right)} = \sqrt{4/3}, \sqrt{2}, \sqrt{8/2}, \sqrt{4} \dots = 1.1547, 1.41, 1.633 \dots$$

- Cristal Diamante:

$$\frac{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_i\right)}{\sin\left(\frac{1}{2}\phi_j\right)} = \sqrt{11/8}, \sqrt{8/3}, \sqrt{11/3}, \dots = 1.1726, 1.633, 1.91485 \dots$$



Fazendo o cálculo para os cristais A, B, C :

- Cristal A: $\phi = \{42.2^\circ, 49.2^\circ, 72.0^\circ, 87.3^\circ\}$ obtemos as relações 1.1563, 1.4114, 1.6327, 1.1743, 1.917...

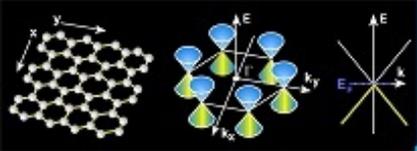
Comparando com a tabela obtida este é um cristal FCC.

- Cristal B: $\phi = \{28.8^\circ, 41.0^\circ, 50.8^\circ, 59.6^\circ\}$ obtemos as relações 1.41, 1.225, 1.7247, 2...

Comparando com a tabela obtida este é um cristal BCC.

- Cristal C: $\phi = \{42.8^\circ, 73.2^\circ, 89.0^\circ, 115.0^\circ\}$ obtemos as relações 1.634, 1.175, 1.203, 1.921...

Comparando com a tabela obtida este é um cristal de estrutura Diamante.



Determinação da dimensão da célula cúbica:

Utilizando a fórmula $K = 2k \sin(\phi/2)$, $k = 2\pi/\lambda$, $\lambda = 1.5$ angstrom:

Para o cristal A FCC, utilizamos o menor $\phi = 42.2^\circ$:

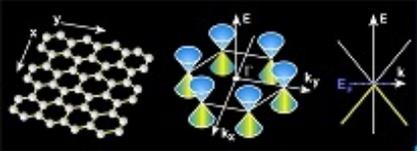
$$K_{111} = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a} = 2\frac{2\pi}{\lambda} \sin(\phi/2), \Rightarrow a = 3.6 \text{ angstrom}$$

Para o cristal B, BCC, $\phi = 28.8^\circ$:

$$K_{110} = \frac{2\pi\sqrt{2}}{a} = 2\frac{2\pi}{\lambda} \sin(\phi/2) \Rightarrow a = 4.265 \text{ angstrom}$$

Para o cristal C, estrutura diamante, $\phi = 42.8^\circ$:

$$K_{111} = \frac{2\pi\sqrt{3}}{a} = 2\frac{2\pi}{\lambda} \sin(\phi/2) \Rightarrow a = 3.56 \text{ angstrom}$$

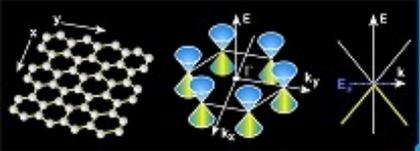


Com relação ao item c) Se a estrutura for blenda de zinco, a base é composta de dois tipos de átomos.

Os átomos do tipo A em $\mathbf{d}_1 = (0,0,0)$, $\mathbf{d}_2 = (a/2)(1,1,0)$, $\mathbf{d}_3 = (a/2)(0,1,1)$, $\mathbf{d}_4 = (a/2)(1,0,1)$, e os átomos do tipo B em $\mathbf{d}_5 = (a/4)(1,1,1)$, $\mathbf{d}_6 = (a/4)(3,3,1)$, $\mathbf{d}_7 = (a/4)(3,1,3)$, $\mathbf{d}_8 = (a/4)(1,3,3)$.

Nesse caso o fator de estrutura permitiria a aparição dos outros máximos da rede FCC, com amplitudes diferentes:

Para $a = 3.56$ angstrom e $\lambda = 1.5$ angstrom, fica fácil determinar que os máximos ocorrerão para $K_{111}, K_{200}, K_{220}, K_{222}, K_{311}$ e aparecerão os picos em 42.8° , 49.8° , 73.2° , 88.3° .



Referências deste Capítulo

[1] Ashcroft/Mermin, **Solid State Physics**

[2] C. Kittel, *Introduction to Solid State Theory*.