

Κρυσταλλογραφία - Άσκηση 2

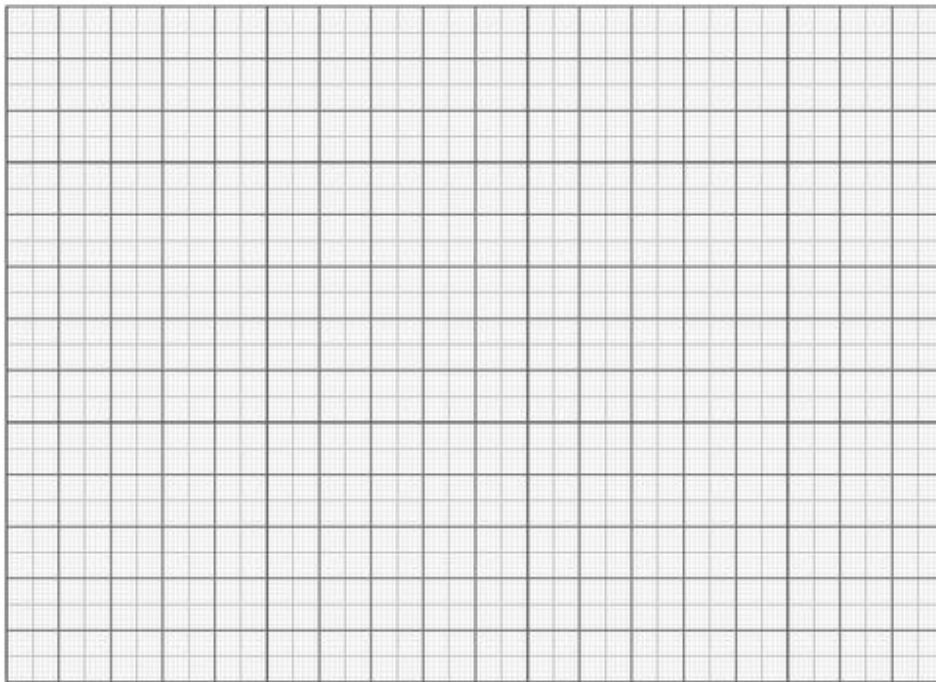
Όνοματεπώνυμο Ημ/νια.....

Σκοπός της άσκησης είναι η εξοικείωση με περιγραφή κρυστάλλων στον ευθύ και αντίστροφο χώρο και η εξαγωγή προβλέψεων για την περίθλαση.

Ένας κρύσταλλος της ουσίας $\text{Be}(\text{OH})_2$ ανήκει στο ορθορομβικό σύστημα με $a = 4.620$, $b = 7.039$, $c = 4.535 \text{ \AA}$ και ομάδα συμμετρίας χώρου την $P2_12_12_1$. Οι κλασματικές συντεταγμένες των ατόμων βηρυλλίου Be και οξυγόνου O είναι:

Be	0.04700	0.12500	0.22000
O1	0.34500	0.01500	0.09000
O2	0.14000	0.28500	0.44000

1) Παρακάτω σχεδιάστε σε προβολή στο επίπεδο ab (b οριζόντιος, a κατακόρυφος) :
α) την μοναδιαία κυψελίδα σε σύστημα συντεταγμένων σε \AA . β) τις θέσεις των ατόμων. Υποθέστε ότι είναι σφαίρες με διάμετρο 1 \AA .



2) Σχεδιάστε τα στοιχεία συμμετρίας και τις θέσεις όλων των ατόμων στην κυψελίδα. Οι σχέσεις συμμετρίας για την συγκεκριμένη ομάδα χώρου είναι (σε κλασματικές συντεταγμένες):

x, y, z

$1/2-x, -y, 1/2+z$

$1/2+x, 1/2-y, -z$

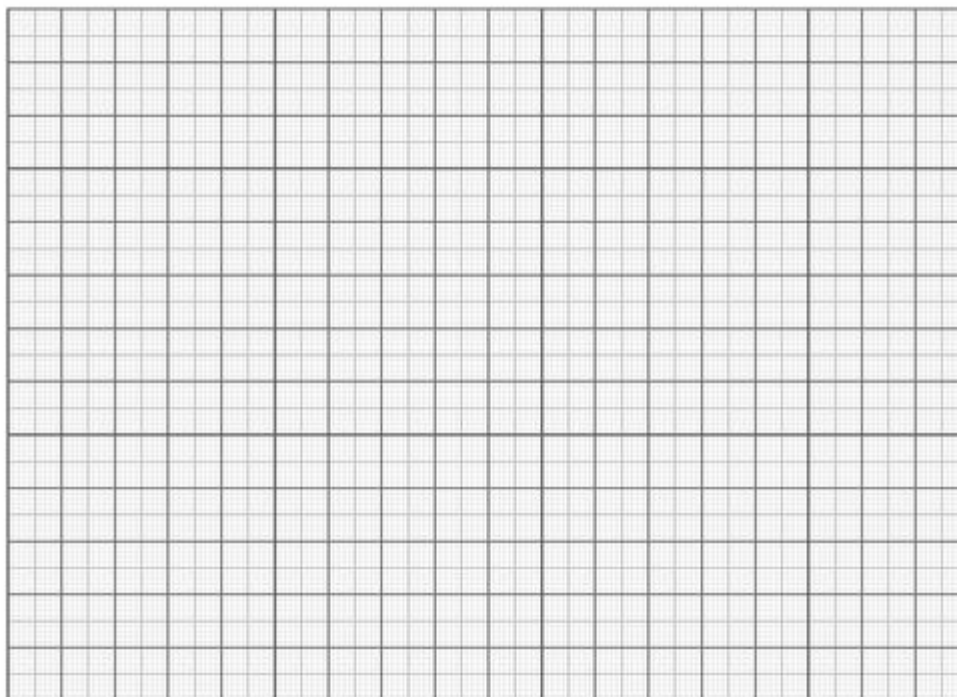
$-x, 1/2+y, 1/2-z$

Υπόδειξη: Για τις θέσεις που αλληλεπικαλύπτονται κατά την προβολή τους στο επίπεδο ab του σχήματός σας, χρησιμοποιείστε επιπλέον μοναδιαία (υπό την έννοια κλασματικών συν/νων) μετατόπιση στον άξονα που κρίνετε απαραίτητο.

3) Πόσα άτομα Be και O αναλογούν ανά κυψελίδα? Αν συμπεριλάβετε και τα άτομα του H, οι θέσεις των οποίων δεν έχουν προσδιοριστεί κρυσταλλογραφικά (2 άτομα H στην ασύμμετρη μονάδα σύμφωνα με τον τύπο $\text{Be}(\text{OH})_2$), μπορείτε να προβλέψετε την πυκνότητα του κρυστάλλου σε g/cm^3 (ατομικές μάζες: Be = 9, O = 16, H=1). Αν μακροσκοπικά (με μέτρηση της μάζας και του όγκου όλου του μονοκρυστάλλου) μετρήθηκε ότι η πυκνότητα του είναι $1936,6 \text{ kg}/\text{m}^3$, μπορείτε να υπολογίσετε τον αριθμό Avogadro;

4) Υπολογίστε και σχεδιάστε **στο παραπάνω σχήμα** τη γωνία θ για την οποία θα παρατηρείται ανάκλαση 1^{ης} τάξης ($n=1$) από το επίπεδο bc σε προσπίπτουσα ακτινοβολία με $\lambda = 1,54 \text{ \AA}$. Αν ο ανιχνευτής είναι επίπεδη επιφάνεια τοποθετημένη 10 cm μακριά από τον κρύσταλλο κάθετα στη συγκεκριμένη δέσμη ακτίνων-X, ποια θα είναι η απόσταση Δ της ανάκλασης από το κέντρο του ανιχνευτή σε cm?

5) Αφού υπολογίσετε τα a^* και b^* , σχεδιάστε παρακάτω το επίπεδο $hk0$ του αντίστροφου πλέγματος (θεωρήστε ότι 0,5 cm αντιστοιχεί σε 0,1 \AA^{-1}), την σφαίρα Ewald (θεωρήστε ότι η δέσμη ακτίνων-X συμπίπτει με τον άξονα b) και βρείτε ποιες από τις $hk0$ ανακλάσεις πιθανόν θα παρατηρηθούν (υποθέστε ότι οι ακτίνες-X έχουν κάποιο μικρό εύρος). Σχεδιάστε την προσπίπτουσα και τις διευθύνσεις των ανακλάσεων.



6) Υπολογίστε τον παράγοντα δομής F (πλάτος $|F|$ και φάση ϕ) και την ένταση I της ανάκλασης 100. Οι ατομικοί παράγοντες σκέδασης του Be είναι 4 και του O είναι 8.