**Κρυσταλλογραφία - Άσκηση 2β Be(OH)2**

**Ονοματεπώνυμο .............................................................................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 Be(OH)2 ανήκει στο ορθορομβικό σύστημα με
a = 4.620, b = 7.039, c = 4.535 Å και ομάδα συμμετρίας χώρου την P212121. 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 Å. β) τις θέσεις των ατόμων. Υποθέστε ότι είναι σφαίρες με διάμετρο 1 Å.



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 Ο αναλογούν ανά κυψελίδα? Αν συμπεριλάβετε και τα άτομα του Η, οι θέσεις των οποίων δεν έχουν προσδιοριστεί κρυσταλλογραφικά (2 άτομα Η στην ασύμμετρη μονάδα σύμφωνα με τον τύπο Be(OH)2), μπορείτε να προβλέψετε την πυκνότητα του κρυστάλλου σε gr/cm3 (ατομικές μάζες: Be = 9, Ο = 16, Η=1). Αν μακροσκοπικά (με μέτρηση της μάζας και του όγκου όλου του μονοκρυστάλλου) μετρήθηκε ότι η πυκνότητα του είναι 1936,6 kg/m3, μπορείτε να υπολογίσετε τον αριθμό Avogadro;

4) Υπολογίστε και σχεδιάστε **στο παραπάνω σχήμα** τη γωνία θ για την οποία θα παρατηρείται ανάκλαση 1ης τάξης (n=1) από τo επίπεδo *bc* σε προσπίπτουσα ακτινοβολία με λ= 1,54 Å. Αν ο ανιχνευτής είναι επίπεδη επιφάνεια τοποθετημένη 10 cm μακριά από τον κρύσταλλο κάθετα στη συγκεκριμένη δέσμη ακτίνων-Χ, 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 A-1), την σφαίρα Ewald (θεωρήστε ότι η δέσμη ακτίνων-Χ συμπίπτει με τον άξονα b ) και βρείτε ποιες από τις hk0 ανακλάσεις πιθανόν θα παρατηρηθούν (υποθέστε ότι οι ακτίνες-Χ 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 Ι της ανάκλασης 100. Οι ατομικοί παράγοντες σκέδασης του Be είναι 4 και του O είναι 8.