



Universidade Federal do ABC

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

✓ **Exercícios – estrutura cristalina e caracterização**

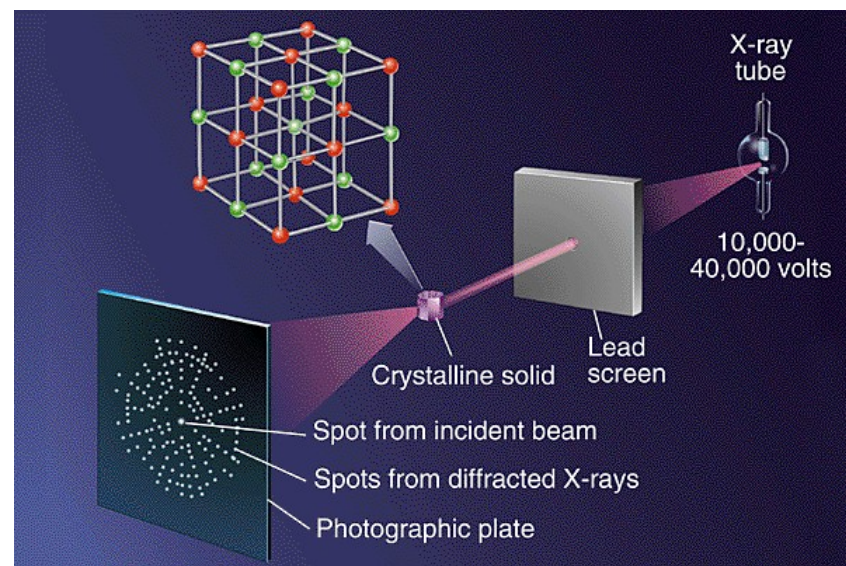
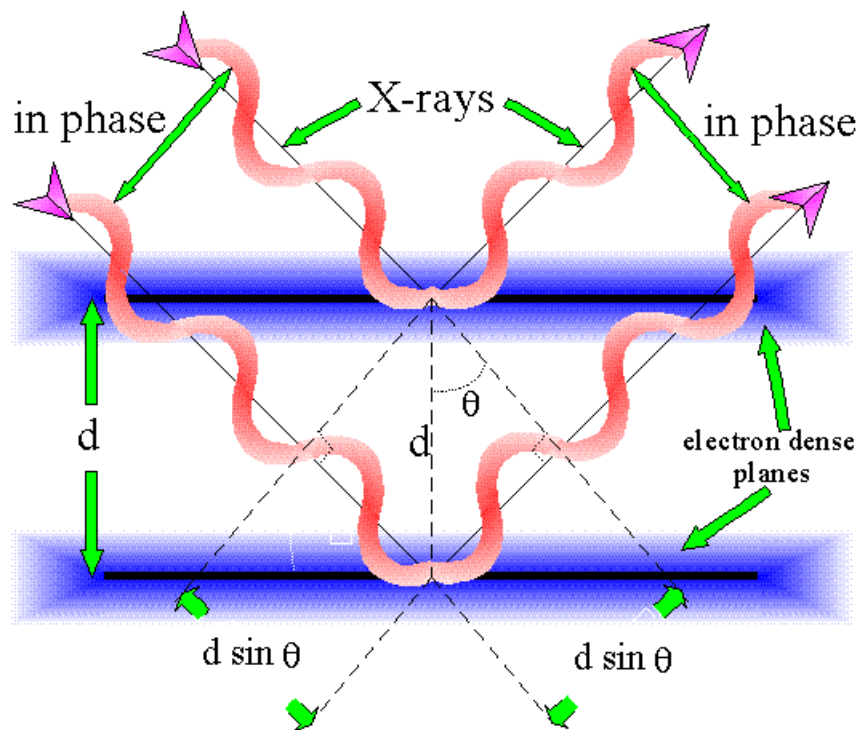
Prof. Dr. Renata Ayres Rocha



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES



http://www.chem.ufl.edu/~itl/2041_f97/lectures/lec_h.html

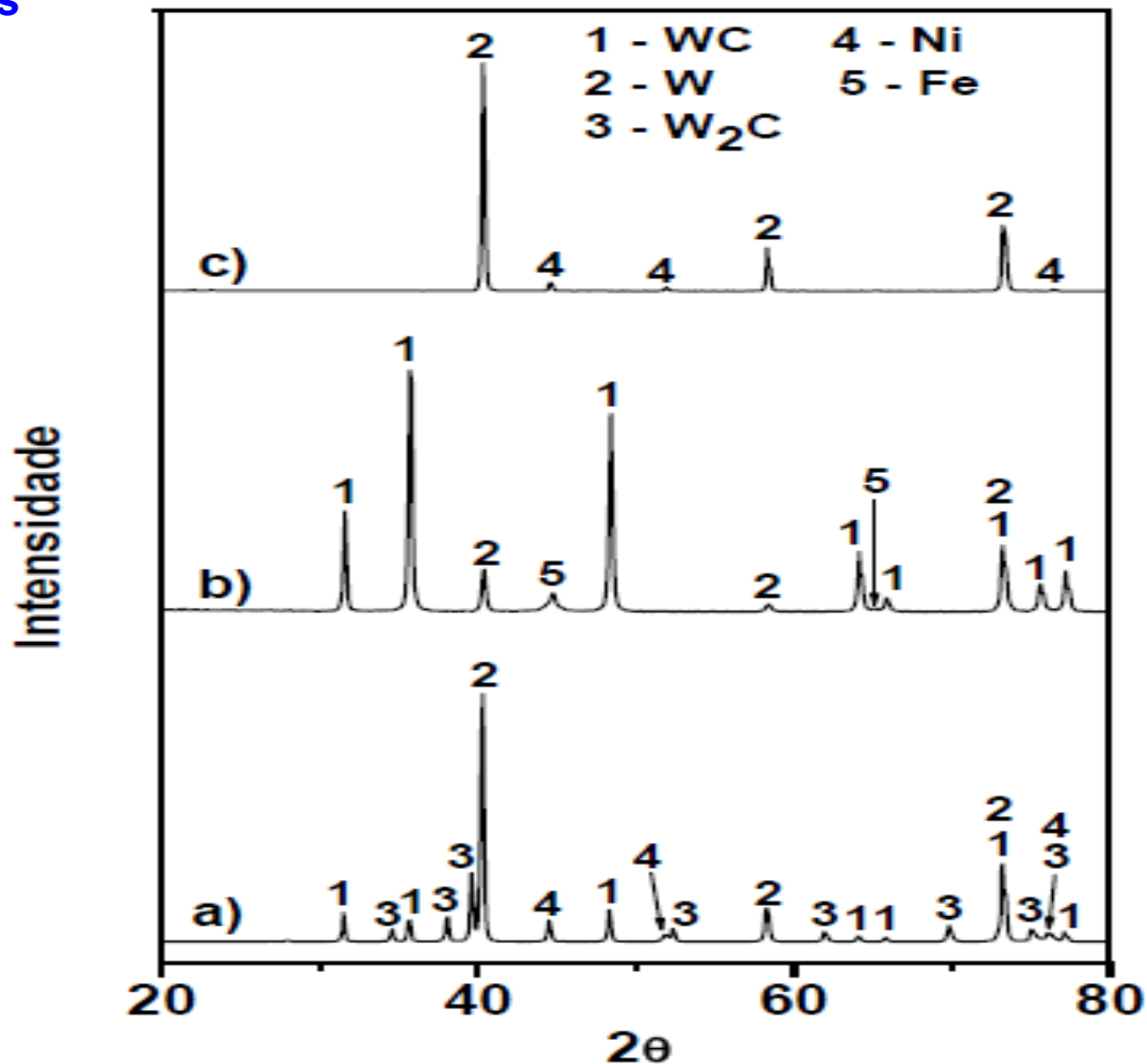


Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Identificação de fases em misturas de pós





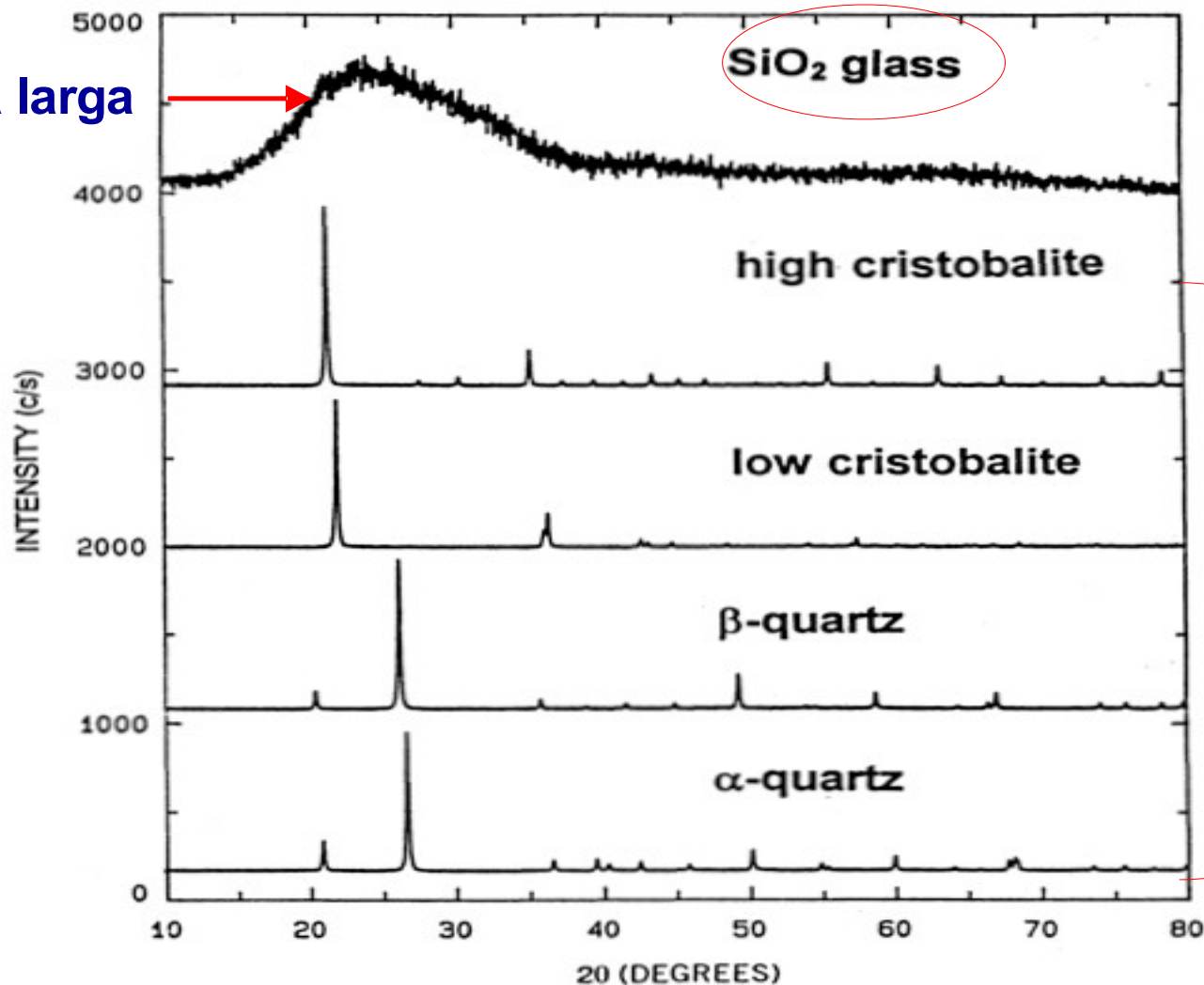
Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Identificação de fases para um mesmo composto

Banda larga



Polimorfos da sílica (SiO_2)



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Exemplo de ficha padrão de DRX

- 2.2019

Pattern : 33-1160

Radiation = 1.540560

Si_3N_4		<table><thead><tr><th>$d\text{ (Å)}$</th><th>I</th><th>h</th><th>k</th><th>l</th></tr></thead><tbody><tr><td>6.58300</td><td>34</td><td>1</td><td>0</td><td>0</td></tr><tr><td>3.80000</td><td>35</td><td>1</td><td>1</td><td>0</td></tr><tr><td>3.29300</td><td>100</td><td>2</td><td>0</td><td>0</td></tr><tr><td>2.66000</td><td>99</td><td>1</td><td>0</td><td>1</td></tr><tr><td>2.48900</td><td>93</td><td>2</td><td>1</td><td>0</td></tr><tr><td>2.31000</td><td>9</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td></tr><tr><td>2.19390</td><td>10</td><td>3</td><td>0</td><td>0</td></tr><tr><td>2.17970</td><td>31</td><td>2</td><td>0</td><td>1</td></tr><tr><td>1.90130</td><td>8</td><td>2</td><td>2</td><td>0</td></tr><tr><td>1.89160</td><td>5</td><td>2</td><td>1</td><td>1</td></tr><tr><td>1.82750</td><td>12</td><td>3</td><td>1</td><td>0</td></tr><tr><td>1.75250</td><td>37</td><td>3</td><td>0</td><td>1</td></tr><tr><td>1.59110</td><td>12</td><td>2</td><td>2</td><td>1</td></tr><tr><td>1.54670</td><td>6</td><td>3</td><td>1</td><td>1</td></tr><tr><td>1.51080</td><td>15</td><td>3</td><td>2</td><td>0</td></tr><tr><td>1.45340</td><td>15</td><td>0</td><td>0</td><td>2</td></tr><tr><td>1.43680</td><td>8</td><td>4</td><td>1</td><td>0</td></tr><tr><td>1.43250</td><td>5</td><td>4</td><td>0</td><td>1</td></tr><tr><td>1.41970</td><td>1</td><td>1</td><td>0</td><td>2</td></tr><tr><td>1.35790</td><td>1</td><td>1</td><td>1</td><td>2</td></tr></tbody></table>					$d\text{ (Å)}$	I	h	k	l	6.58300	34	1	0	0	3.80000	35	1	1	0	3.29300	100	2	0	0	2.66000	99	1	0	1	2.48900	93	2	1	0	2.31000	9	1	1	1	2.19390	10	3	0	0	2.17970	31	2	0	1	1.90130	8	2	2	0	1.89160	5	2	1	1	1.82750	12	3	1	0	1.75250	37	3	0	1	1.59110	12	2	2	1	1.54670	6	3	1	1	1.51080	15	3	2	0	1.45340	15	0	0	2	1.43680	8	4	1	0	1.43250	5	4	0	1	1.41970	1	1	0	2	1.35790	1	1	1	2
$d\text{ (Å)}$	I	h	k	l																																																																																																											
6.58300	34	1	0	0																																																																																																											
3.80000	35	1	1	0																																																																																																											
3.29300	100	2	0	0																																																																																																											
2.66000	99	1	0	1																																																																																																											
2.48900	93	2	1	0																																																																																																											
2.31000	9	1	1	1																																																																																																											
2.19390	10	3	0	0																																																																																																											
2.17970	31	2	0	1																																																																																																											
1.90130	8	2	2	0																																																																																																											
1.89160	5	2	1	1																																																																																																											
1.82750	12	3	1	0																																																																																																											
1.75250	37	3	0	1																																																																																																											
1.59110	12	2	2	1																																																																																																											
1.54670	6	3	1	1																																																																																																											
1.51080	15	3	2	0																																																																																																											
1.45340	15	0	0	2																																																																																																											
1.43680	8	4	1	0																																																																																																											
1.43250	5	4	0	1																																																																																																											
1.41970	1	1	0	2																																																																																																											
1.35790	1	1	1	2																																																																																																											
Lattice : Hexagonal		Mol. weight = 140.28																																																																																																													
S.G. : P63/m (176)		Volume [CD] = 145.61																																																																																																													
a = 7.60440	Z = 2	Dx = 3.200																																																																																																													
c = 2.90750																																																																																																															

Prof. Renata Ayres

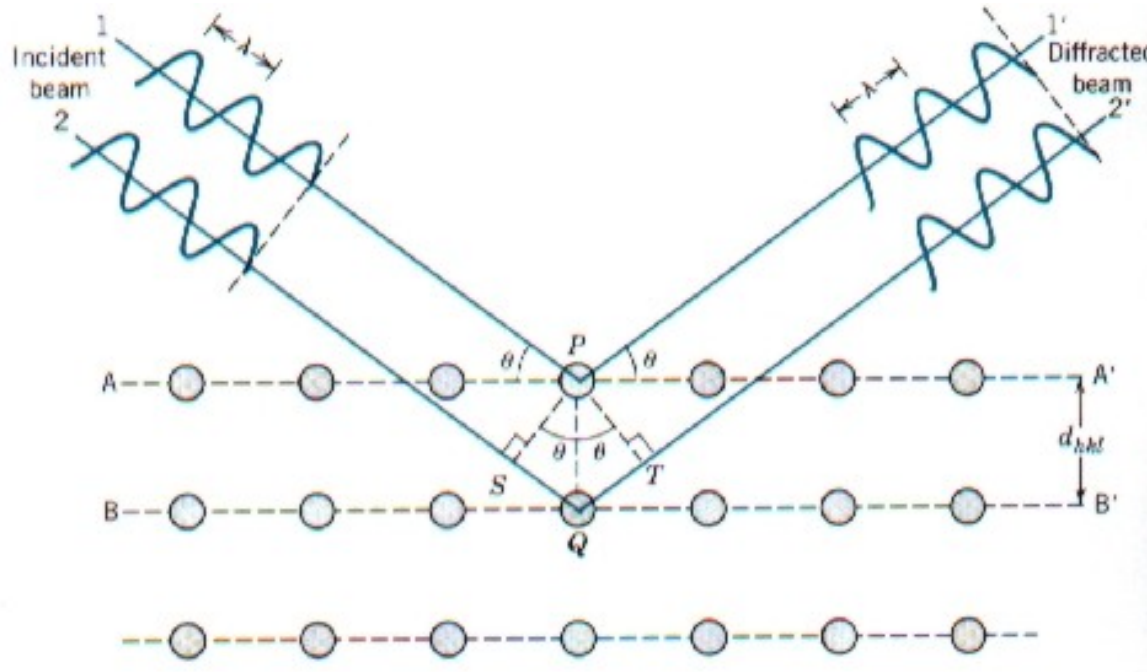


Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

DIFRAÇÃO DE RAIOS X (X-RAY DIFFRACTION)



$$n\lambda = \overline{SQT} \quad \text{Para interferência construtiva}$$

$$n\lambda = d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta = 2d_{hkl} \sin \theta$$

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \quad (\text{Lei de Bragg})$$

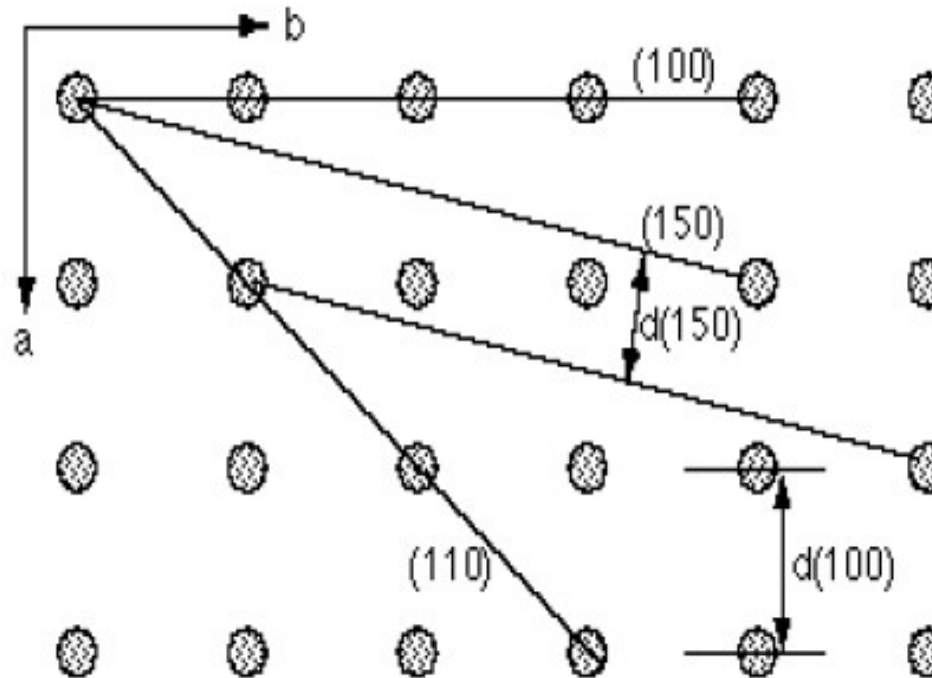


Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Picos de difração de intensidades diferentes:



A intensidade de um RX difratado é proporcional à densidade de átomos do plano da estrutura que o originou



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Distância ou espaçamento interplanar - d_{hkl}

- Ⓢ Distância entre dois planos atômicos paralelos adjacentes, i.e., com os mesmos índices de Miller

Para estruturas cúbicas, d_{hkl} é dado por:

$$d_{hkl} = \frac{a_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Onde a_0 é o parâmetro de rede e h, k, l são os índices de Miller do plano

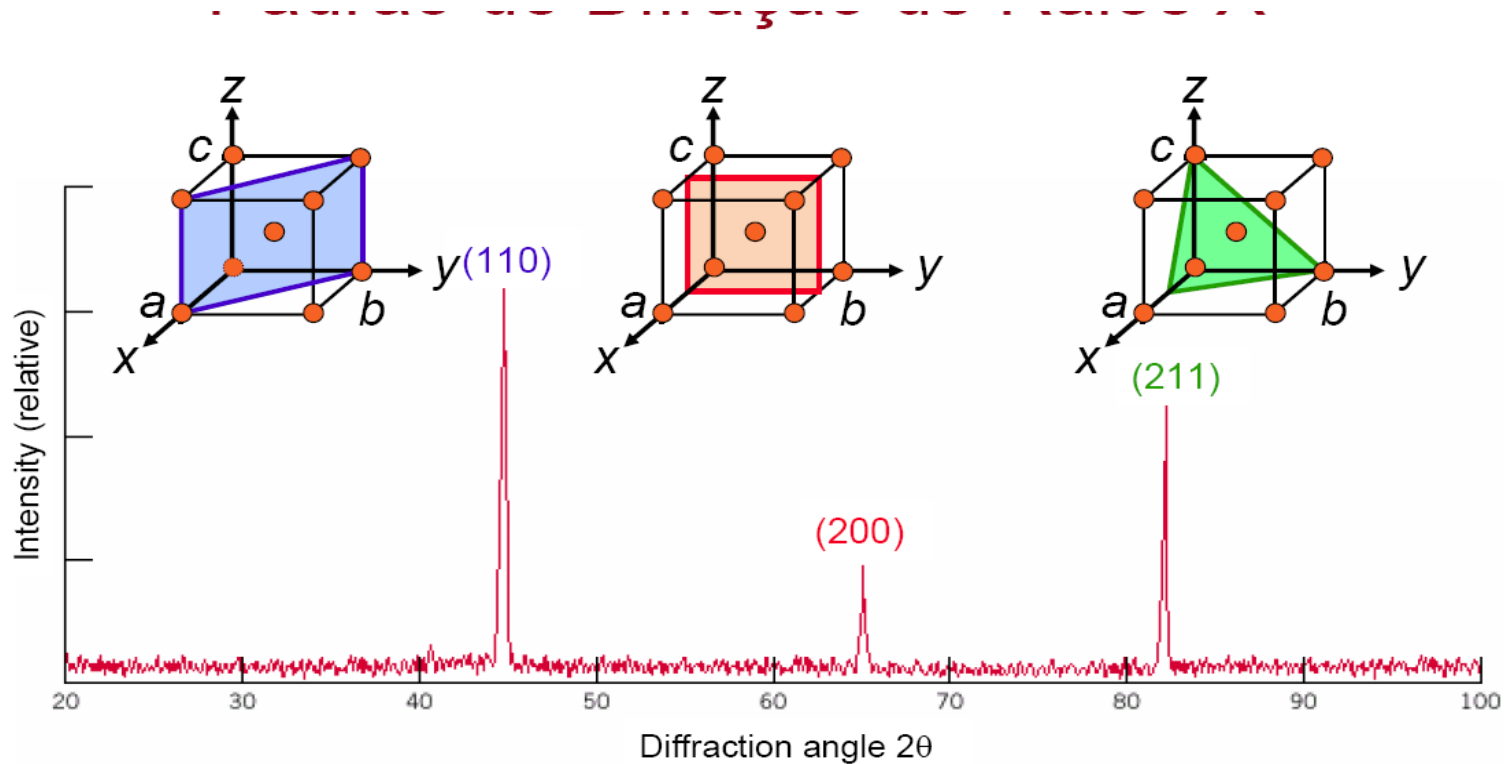


Unive

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Exemplo de padrão de difração (difratograma)



Padrão de difração de raios X para o α -Fe policristalino (CCC)



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Intensidade de pico de difração de raios X (I_{hkl})

$$I_{hkl} = |F|^2 p \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right) e^{-2M}$$

Fator de estrutura:

relacionado ao arranjo dos átomos

Fator multiplicidade:
relacionado à quantidade de planos que contribuem na reflexão

Fator de temperatura:

relacionado à vibração térmica dos átomos

Fator de Lorentz e polarização:
fator geométrico que causa variação da intensidade com ângulo de reflexão



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Fator de estrutura (F)

- Independe da forma e tamanho da célula unitária
- Quando $F = 0 \Rightarrow$ intensidade do pico é nula

Estrutura	Reflexões possivelmente presentes	Reflexões necessariamente ausentes ($F = 0$)
Cúbica simples - CS	Todos os planos (100), (110), (111), (200), (210), (211), (220), (300), (221), (310), (311), (222), (320), (321), (400), (410), (312), (411), (330), (331), (420) ...	Nenhum plano
Cúbica de corpo centrado - CCC	$(h + k + l)$ pares (110), (200), (211), (220), (310), (222), (321), (400), (411), (330), (420) ...	$(h + k + l)$ ímpares (100), (111), (210), (300), (221), (311), (320), (410), (312), (331) ...
Cúbica de face centrada - CFC	h, k e l não misturados (111), (200), (220), (311), (222), (400), (331), (420) ...	h, k e l misturados (100), (110), (210), (211), (300), (221), (310), (320), (321), (410), (312), (411), (330) ...

Nota: Misturado e não misturado referem -se aos números inteiros h, k e l pares ou ímpares (considerando zero como par)



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Indexação de padrões de cristais cúbicos

$$\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \quad + \quad d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$



$$\frac{\sin^2 \theta}{(h^2 + k^2 + l^2)} = \frac{\sin^2 \theta}{S} = \frac{\lambda^2}{4a^2}$$

$$\frac{\lambda^2}{4a^2} = \text{cte} \quad S = h^2 + k^2 + l^2$$

Estrutura	$S = h^2 + k^2 + l^2$
CS	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 ...
CCC	2, 4, 6, 8, 10, 12, 14 ...
CFC	3, 4, 8, 11, 12, 16 ...

Exemplo

Line	$\sin^2 \theta$	$s = (h^2 + k^2 + l^2)$	$\frac{\lambda^2}{4a^2}$	$a(\text{\AA})$	hkl
1	0.140	3	0.0467	3.57	111
2	0.185	4	0.0463	3.59	200
3	0.369	8	0.0461	3.59	220
4	0.503	11	0.0457	3.61	311
5	0.548	12	0.0457	3.61	222
6	0.726	16	0.0454	3.62	400
7	0.861	19	0.0453	3.62	331
8	0.905	20	0.0453	3.62	420



Distâncias interplanares

Algumas vezes é necessário conhecer a **distancia interplanar**, d ($\rightarrow d_{hkl}$), de uma família de planos, a distância é determinada pelas equações:

Envolvem os parâmetros de rede $\rightarrow a, b, c$

CÚBICO	$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \quad \rightarrow \quad d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$
TETRAGONAL	$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$
HEXAGONAL	$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}$
ROMBOÉDRICO	$\frac{1}{d^2} = \frac{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)}{a^2(1 - 3\cos^2 \alpha + 2\cos^3 \alpha)}$
ORTORRÔMBICO	$\frac{1}{d^2} = \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right)$
MONOCLÍNICO	$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{\sin^2 \beta} \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2 \sin^2 \beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right)$
TRICLÍNICO	$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2} (S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl)$ <p style="text-align: center;"> $V = \text{Volume da célula;}$ $S_{11} = b^2c^2\sin^2\alpha \quad S_{22} = a^2c^2\sin^2\beta \quad S_{33} = a^2b^2\sin^2\gamma$ $S_{12} = abc^2(\cos\alpha \cos\beta - \sin\gamma)$ $S_{23} = a^2bc(\cos\beta \cos\gamma - \sin\alpha)$ $S_{13} = ab^2c(\cos\gamma \cos\alpha - \sin\beta)$ </p>



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Exemplos de Aplicação da Análise de Difração de raios-X

- @ Identificação de fases cristalinas presentes no material, incluindo polimorfos**
- @ Determinação quantitativa ou semi-quantitativa das fases presentes**
- @ Cálculo das dimensões da cela unitária**
- @ Determinação de tensão residual no material**
- @ Determinação de orientação cristalográfica preferencial (textura)**
- @ Determinação do tamanho dos cristalitos (cristais nanométricos)**



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

Informações básicas que podem ser obtidas de um difratograma

- ④ Intensidade relativa dos picos de difração
- ④ Distância interplanar do plano (hkl) que gerou o pico de difração
- ④ Parâmetros de rede da fase cristalina
- ④ Estrutura cristalina da fase



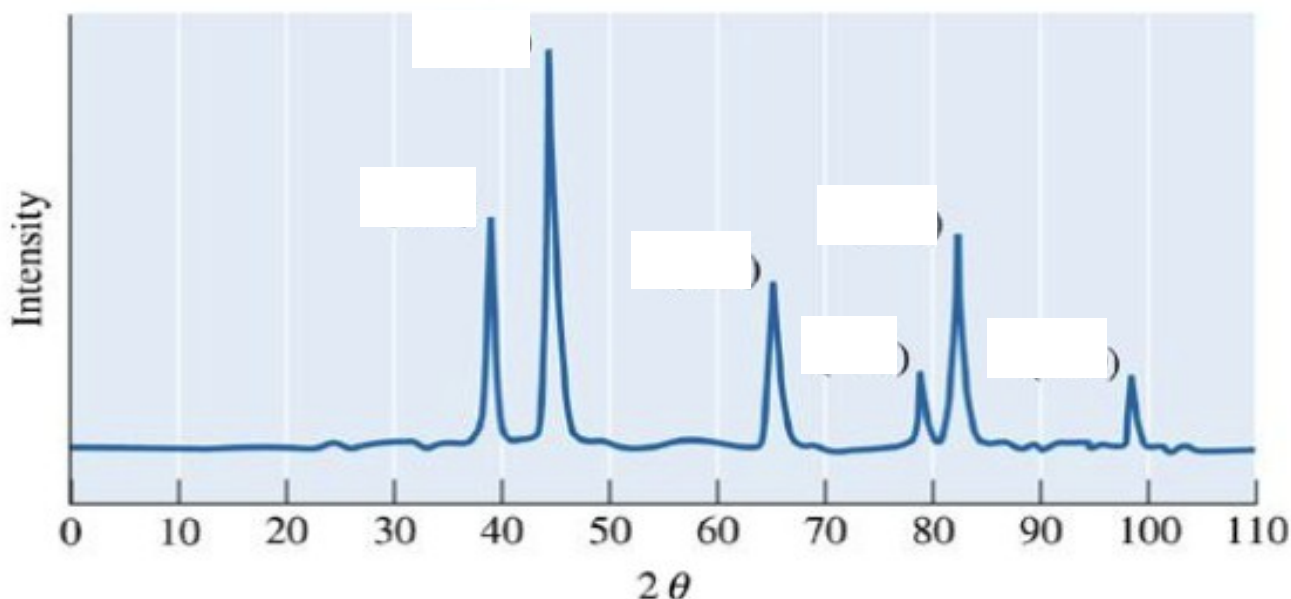
Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

EXERCÍCIO

Análise do padrão de difração de um metal com estrutura cúbica



Raios X incidente de Cu ($K\alpha$): $\lambda = 0,1541838$ nm

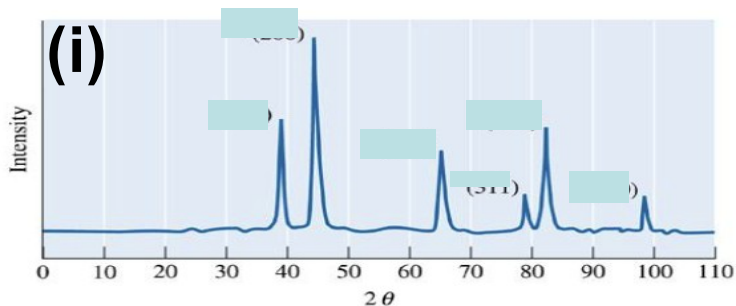
i) Plotar o difratograma em uma planilha Excel (Intensidade versus 2θ);



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES



ii) Determinar o ângulo 2θ e a intensidade relativa de cada pico de difração (normalizar pelo pico mais intenso);

$$\lambda_{Cu} = 0,154184$$

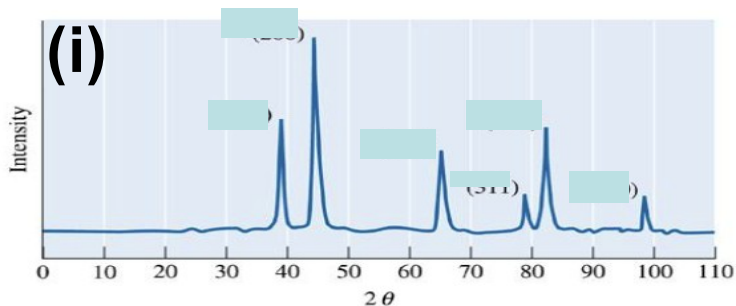
2θ	L mm	Ir %									
39	45										
44,6	78										
65,3	33										
78,9	15										
82,6	42										
98,7	14										



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES



ii) Determinar o ângulo 2θ e a intensidade relativa de cada pico de difração (normalizar pelo pico mais intenso);

$$\lambda_{Cu} = 0,154184$$

2θ	L mm	Ir %									
39	45	58									
44,6	78	100									
65,3	33	42									
78,9	15	19									
82,6	42	54									
98,7	14	18									



Universidade Federal do ABC

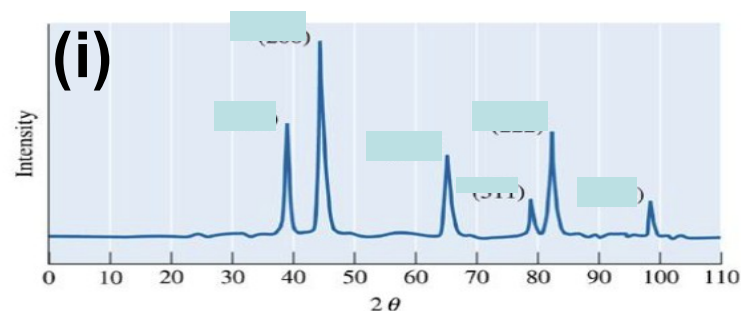
CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

iii) Calcular o espaçamento interplanar, d_{hkl} , de cada pico de difração;

$$d_{hkl} = \lambda / 2 \sin \theta$$

$$\lambda_{Cu} = 0,154184$$



(ii)	L	Ir			(iii)
2θ	mm	%	θ	$\sin \theta$	d_{hkl}

39	45	58
44,6	78	100
65,3	33	42
78,9	15	19
82,6	42	54
98,7	14	18



Universidade Federal do ABC

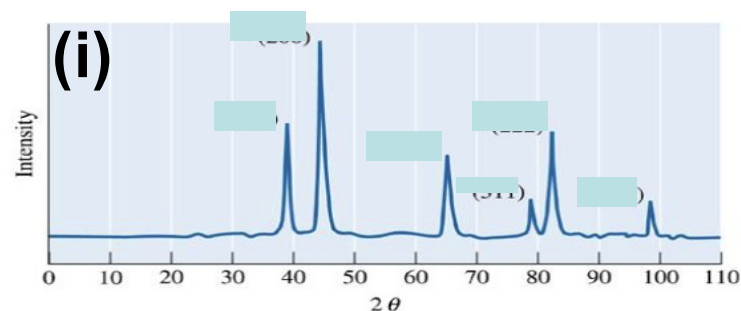
CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

iii) Calcular o espaçamento interplanar, d_{hkl} , de cada pico de difração;

$$d_{hkl} = \lambda / 2 \sin \theta$$

$$\lambda_{Cu} = 0,154184$$



(ii)	L	Ir			(iii)						
2θ	mm	%	θ	$\sin \theta$	d_{hkl}						
39	45	58	19,5	0,334	0,231						
44,6	78	100	22,3	0,379	0,203						
65,3	33	42	32,65	0,540	0,143						
78,9	15	19	39,45	0,635	0,121						
82,6	42	54	41,3	0,660	0,117						
98,7	14	18	49,35	0,759	0,102						



Universidade Federal do ABC

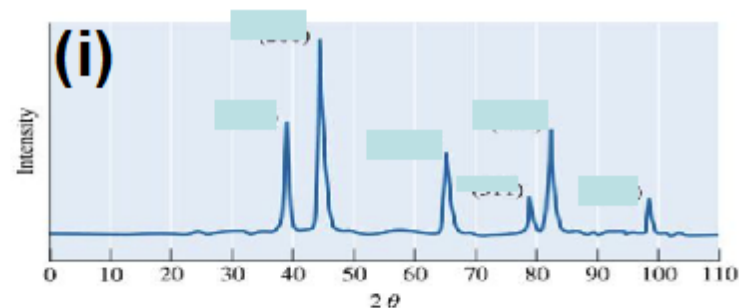
CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

(iv) determinar o tipo de estrutura, calculando os valores de $\text{sen}^2\theta$ e S

$$d_{hkl} = \lambda / 2 \text{sen}\theta$$

$$\lambda_{\text{Cu}} = 0,154184$$



(ii)	L mm	Ir %	θ	sen θ	(iii) d_{hkl}	sen 2 θ	CS	CCC	CFC	h k l	a
							sen $^2\theta$	sen $^2\theta$	sen $^2\theta$		
							S	S	S		
2 θ											
39	45	58	19,5	0,334	0,231		constante?				
44,6	78	100	22,3	0,379	0,203						
65,3	33	42	32,65	0,540	0,143						
78,9	15	19	39,45	0,635	0,121						
82,6	42	54	41,3	0,660	0,117						
98,7	14	18	49,35	0,759	0,102						



Universidade Federal do ABC

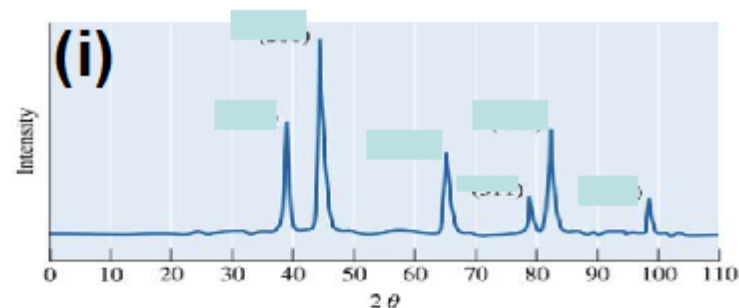
CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

(iv) determinar o tipo de estrutura, calculando os valores de $\text{sen}^2\theta$ e S

$$d_{hkl} = \lambda / 2 \text{sen}\theta$$

$$\lambda_{\text{Cu}} = 0,154184$$



(ii)	L mm	Ir %	θ	sen θ	(iii) d_{hkl}	sen ² θ	CS	CCC	CFC	h k l	a
							sen ² θ	sen ² θ	sen ² θ		
							S	S	S		
2 θ											
39	45	58	19,5	0,334	0,231	Estrutura	S = h ² + k ² + l ²				
44,6	78	100	22,3	0,379	0,203	CS	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9 ...				
65,3	33	42	32,65	0,540	0,143	CCC	2, 4, 6, 8, 10, 12, 14 ...				
78,9	15	19	39,45	0,635	0,121	CFC	3, 4, 8, 11, 12, 16 ...				
82,6	42	54	41,3	0,660	0,117	Estrutura		Reflexões possivelmente presentes			
98,7	14	18	49,35	0,759	0,102	Cúbica simples - CS		Todos os planos (100), (110), (111), (200), (210), (211), (220), (300), (221), (310), (311), (222), (320), (321), (400), (410), (312), (411), (330), (331), (420) ...			
						Cúbica de corpo centrado - CCC		(h + k + l) pares (110), (200), (211), (220), (310), (222), (321), (400), (411), (330), (420) ...			
						Cúbica de face centrada - CFC		h, k e l não misturados (111), (200), (220), (311), (222), (400), (331), (420) ...			



Universidade Federal do ABC

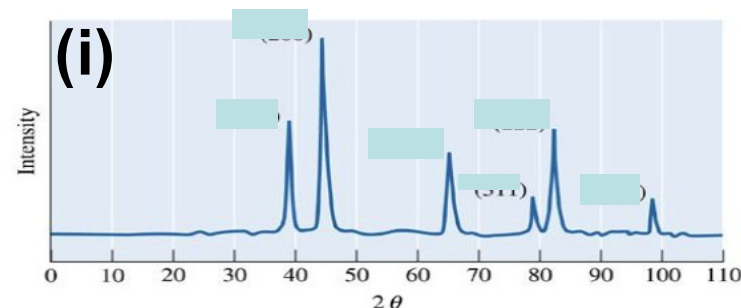
CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

(v) determinar os planos de difração
(índices de Miller)

$$d_{hkl} = \lambda / 2 \sin \theta$$

$$\lambda_{Cu} = 0,154184$$



(ii)

2θ

L
 mm

Ir
 $\%$

θ

$\sin \theta$

(iii)

d_{hkl}

\sin^2
 θ

CS

$\frac{\sin^2 \theta}{S}$

CCC

$\frac{\sin^2 \theta}{S}$

CFC

$\frac{\sin^2 \theta}{S}$

(v)

$h k l$

a

39

45

58

19,5

0,334

0,231

0,111

44,6

78

100

22,3

0,379

0,203

0,144

65,3

33

42

32,65

0,540

0,143

0,291

78,9

15

19

39,45

0,635

0,121

0,403

82,6

42

54

41,3

0,660

0,117

0,436

98,7

14

18

49,35

0,759

0,102

0,576

0,111

0,056

0,037

0,072

0,036

0,036

0,097

0,049

0,036

0,101

0,051

0,037

0,087

0,044

0,036

0,096

0,048

0,036



Universidade Federal do ABC

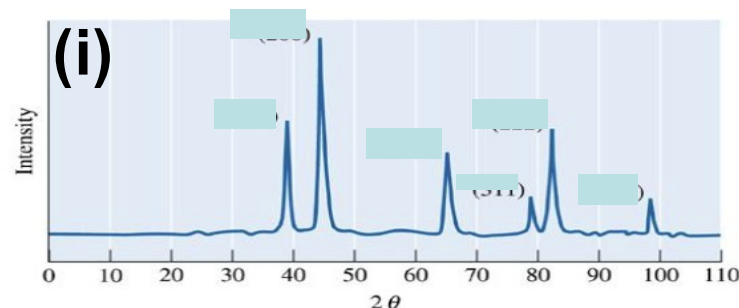
CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

(v) determinar os planos de difração
(índices de Miller)

$$d_{hkl} = \lambda / 2 \sin \theta$$

$$\lambda_{Cu} = 0,154184$$



(ii)

2θ	L mm	Ir %	θ	$\sin \theta$	(iii) d_{hkl}	$\sin^2 \theta$
39	45	58	19,5	0,334	0,231	0,111
44,6	78	100	22,3	0,379	0,203	0,144
65,3	33	42	32,65	0,540	0,143	0,291
78,9	15	19	39,45	0,635	0,121	0,403
82,6	42	54	41,3	0,660	0,117	0,436
98,7	14	18	49,35	0,759	0,102	0,576

CS

CCC

CFC

(v)

$\frac{\sin^2 \theta}{S}$	$\frac{\sin^2 \theta}{S}$	$\frac{\sin^2 \theta}{S}$	h k l	a
---------------------------	---------------------------	---------------------------	-------	---

0,111	0,056	0,037	111	
0,072	0,036	0,036	200	
0,097	0,049	0,036	220	
0,101	0,051	0,037	311	
0,087	0,044	0,036	222	
0,096	0,048	0,036	400	



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

- vi) Indexar o difratograma (os planos em cada pico);
- vii) Determinar o parâmetro de rede da estrutura;

$$\lambda_{Cu} = 0,154184$$

$$a = \lambda (h^2 + k^2 + l^2)^{1/2} / 2 \cdot \sin \theta$$

	(ii)	L	Ir	(iii)		(iv)			(v)	(vii)
	2θ	mm	%	θ	senθ	d _{hkl} = nm	sen ² θ		hkl	a
	39	45	58	19,5	0,334	0,231	0,111		111	0,40002175
	44,6	78	100	22,3	0,379	0,203	0,144		200	0,40638903
	65,3	33	42	32,65	0,540	0,143	0,291		220	0,40416886
	78,9	15	19	39,45	0,635	0,121	0,403		311	0,40265391
	82,6	42	54	41,3	0,660	0,117	0,436		222	0,40462806
	98,7	14	18	49,35	0,759	0,102	0,576		400	0,40644259
									Média	0,40405070
									DS	0,00180858



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES

$$\lambda \text{ (nm)} = 0,154184$$

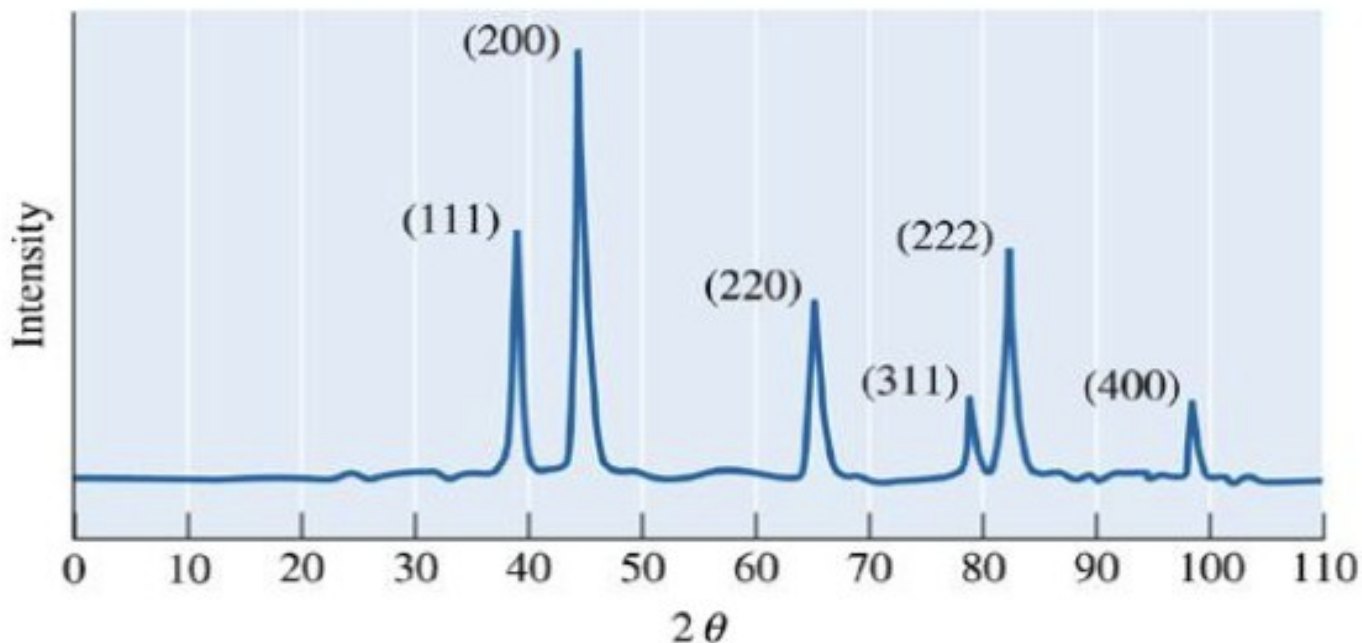
2 θ	I (mm)	Ir (%)	θ	sen(θ)	d _{hkl} (nm)	sen ² (θ)	S _{CS}	sen ² (θ)/S _{CS}	S _{CCC}	sen ² (θ)/S _{CCC}	S _{CFC}	sen ² (θ)/S _{CFC}	(hkl)	(h ² +k ² +l ²) ^{1/2}	a (nm)
39,0	45	58%	19,5	0,334	0,231	0,111	1	0,111	2	0,0557	3	0,0371	(111)	1,73	0,400
44,6	78	100%	22,3	0,379	0,203	0,144	2	0,072	4	0,0360	4	0,0360	(200)	2,00	0,406
65,3	33	42%	32,7	0,540	0,143	0,291	3	0,097	6	0,0485	8	0,0364	(220)	2,83	0,404
78,9	15	19%	39,5	0,635	0,121	0,404	4	0,101	8	0,0505	11	0,0367	(311)	3,32	0,402
82,6	42	54%	41,3	0,660	0,117	0,436	5	0,087	10	0,0436	12	0,0363	(222)	3,46	0,405
98,7	14	18%	49,4	0,759	0,102	0,576	6	0,096	12	0,0480	16	0,0360	(400)	4,00	0,406
							Sequência incorreta		Sequência incorreta		Sequência correta				0,404
											Estrutura CFC				0,002
													média		
													desvio-padrão		



Universidade Federal do ABC

CENTRO DE ENGENHARIA, MODELAGEM E CIÊNCIAS SOCIAIS APLICADAS

MATERIAIS E SUAS PROPRIEDADES



Raios X incidente de Cu ($K\alpha$): $\lambda = 0,1541838$ nm

Ouro (Au):

CFC

$a = 0,40786$ nm

Fonte: Cullity, Elements of X-ray diffraction, 2 ed.