

SIMETRIA EM DIAGRAMAS DE DIFRAÇÃO MÚLTIPLA

C.B.R. Parente, V.L. Mazzocchi - IPEN-CNEN/SP
J.M. Sasaki, L.P. Cardoso - IFGW-UNICAMP

Em 1972, ao estudar a difração múltipla de nêutrons em um monocristal de alumínio, Parente observou a existência de dois picos, em posições simétricas com relação a um dos espelhos de simetria do diagrama experimental, obtido com a reflexão primária 111, que, contrariamente ao esperado, não tinham mesma intensidade (Parente, C.B.R., "Difração Múltipla de Nêutrons em um Cristal de Alumínio", Tese de Doutorado, Instituto de Física, USP, 1972). Em uma estrutura cúbica, como a do alumínio, as direções $\{111\}$ são eixos de simetria de ordem 3. Com esta simetria são esperados espelhos a cada 60° . Entretanto, o diagrama obtido, de extensão reduzida, mostrou dois espelhos distanciados de 30° , com o pormenor de que em torno de um dos espelhos estavam os dois picos de intensidade diferentes. Recentemente, Sasaki observou a ocorrência do mesmo fenômeno em diagrama obtido com a reflexão primária 222 de um cristal de arseneto de gálio (GaAs), usando radiação $\text{CuK}\alpha_1$. Com o auxílio do programa de computador MULTX, de simulação de diagramas de difração múltipla de raios-X, foi simulado um diagrama dessa reflexão e comprovada a simetria verificada experimentalmente (Sasaki, J.M., "Diagramas Renninger com Radiação de Freamento de Elétrons e Síncrotron. no Estudo de Estruturas Heteroepitaxiais", Tese de Doutorado, Instituto de Física Gleb Wataghin, UNICAMP, 1993). Neste trabalho, é apresentado um estudo da simetria em diagramas de difração múltipla de raios-X e de nêutrons. Diagramas experimentais foram obtidos, com diversos monocristais, e comparados com diagramas simulados com os programas MULTX e MULTI, este último utilizado no caso de nêutrons. Para uma melhor visualização da simetria dos diagramas, muitos foram graficados em uma escala circular, permitindo a fácil identificação de espelhos de simetria plena, que foram chamados de 'espelhos isomórficos', e de simetria parcial, chamados de 'espelhos anamórficos'. Embora não seja ainda possível uma generalização, os resultados obtidos mostram que, no caso de estruturas cúbicas, eixos de ordem par produzem apenas espelhos isomórficos, enquanto que os de ordem ímpar produzem espelhos anamórficos, intercalados com espelhos isomórficos. No caso particular das fases α (trigonal) e β (hexagonal) do quartzo (SiO_2), foram observados somente espelhos isomórficos, para o eixo de ordem 3 na direção c da cela hexagonal do quartzo- α , e espelhos dos dois tipos, para o eixo de ordem 6 na mesma direção da cela do quartzo- β .

Apoio financeiro: "International Atomic Energy Agency" (IAEA) e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).