

Estructura de la Materia 2
Curso de Verano 2018
Guía 3: Difracción

1. Dibuje para una red SC los planos descritos por los índices de Miller (100), (110) y (111). Describa la red bidimensional sobre esos planos y calcule la distancia entre planos. Idem para una red FCC y una BCC.
2. Considere la celda convencional de una estructura ortorrómbica ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$), de lados $a = 2 \text{ \AA}$, $b = 3 \text{ \AA}$, $c = 4 \text{ \AA}$. ¿Cuál es la distancia entre planos de la familia $\{112\}$?
3. Si (100) y (001) son los índices de Miller de dos planos de la red FCC respecto del conjunto de vectores primitivos $\vec{a}_i = 1/2a(\hat{j} + \hat{k})$, calcule los índices de Miller de esos mismos planos respecto del conjunto de vectores primitivos:

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= a\hat{x} \\ \vec{a}_2 &= 1/2a(\hat{x} + \hat{y}) \\ \vec{a}_3 &= 1/2a(\hat{y} + \hat{z})\end{aligned}$$

4. Frecuentemente es conveniente representar una red FCC como una SC de parámetro de red a con una base de cuatro puntos.
 - a) Muestre que el factor de estructura es 0 ó 4 en todos los puntos de la red recíproca de la SC.
 - b) Muestre que cuando los puntos con factor de estructura nulo son removidos de la red, los restantes forman una red BCC de parámetro de red $4\pi/a$. ¿Por qué debe esperarse esto?
5. Considerando a la red BCC como una SC de parámetro de red $a = 4 \text{ \AA}$ con una base:
 - a) Encontrar las condiciones de extinción para la difracción.
 - b) Si en una experiencia de Debye-Scherrer se incide con Rx de $\lambda = 2,5 \text{ \AA}$, ¿cuáles son los tres primeros ángulos ϕ ($\phi = 2\theta$) para los que se espera ver máximos de intensidad?

- c) Si en una experiencia de Laue se incide con un haz de Rx paralelo al eje \hat{z} , de longitudes de onda $2,5 \text{ \AA} < \lambda < 3 \text{ \AA}$ ¿qué espera observar?
6. Polvo cristalino de tres diferentes cristales es examinado en una cámara de Debye-Scherrer. Se sabe que una muestra es FCC, otra BCC y la tercera es tipo diamante. Las posiciones aproximadas de los primeros cuatro anillos de difracción se indican en la Tabla 1.
- a) Identifique la estructura cristalina de A, B y C.
- b) Si λ del haz de Rx es de $1,5 \text{ \AA}$ ¿cuál es el parámetro de red en cada caso?
- c) Si la estructura de diamante fuera reemplazada por una blenda de Zn con una celda unitaria de la misma medida, ¿a qué ángulos estarían ahora los primeros cuatro anillos?

Cuadro 1: Mediciones de $\phi(2\theta)$ para las distintas muestras

Muestra A	Muestra B	Muestra C
42.2°	28.8°	42.8°
49.7°	41.0°	73.2°
72.0°	50.8°	89.0°
87.3°	59.6°	115.0°

7. Considere un cristal cuya red de Bravais es rectangular centrada, de lados de la celda convencional $a = 10 \text{ \AA}$ y $b = 5 \text{ \AA}$ y con una base de átomos idénticos en $(0,0)$ y $(1/2, 1/2)$.
- a) Si se hace un diagrama de polvo con Rx de $\lambda = 2 \text{ \AA}$ encuentre el ángulo de Bragg θ para las tres reflexiones de más bajo índice de Miller (sin contar las que son idénticas por simetría).
- b) ¿Hay ausencias sistemáticas? Explique cuáles y por qué.
- c) Si suponemos que los electrones están esencialmente alrededor de los núcleos y la base es de C ($Z = 6$) y O ($Z = 8$), ¿cuál es la intensidad relativa de las líneas observadas?

8. El α -Co (cobalto alfa) tiene estructura *hcp* con parámetros de red $a = 2.51 \text{ \AA}$ y $c = 4.07 \text{ \AA}$; El β -Co es *fcc*, con parámetro de red (convencional) $a = 3.55 \text{ \AA}$. ¿Cuál es la diferencia de densidad entre ambas estructuras?

9. **Difracción de polvo de cristales *hcp* y *fcc*.**

El cobalto tiene dos estructuras (ver problema anterior): α -Co, con estructura *hcp* ($a = 2.51 \text{ \AA}$) y β -Co, con estructura *fcc* ($a = 3.55 \text{ \AA}$). Suponga que la estructura *hcp* es ideal ($\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$). Calcule y compare la posición de los cinco primeros picos de difracción. La cantidad $K = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}$ puede utilizarse para caracterizar la posición de los picos (λ es la longitud de onda y 2θ es el ángulo de dispersión).