

Estructura de la Materia 2

Clase 3 - Teoría

Docentes

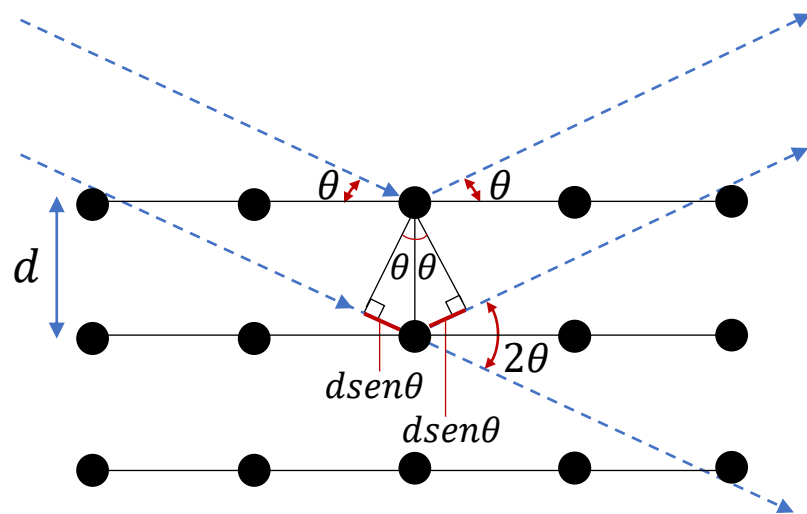
Gustavo Grinblat, Andrea Barral, Juan Herrera Mateos

Departamento de Física, FCEN, UBA – Curso de Verano, 2022

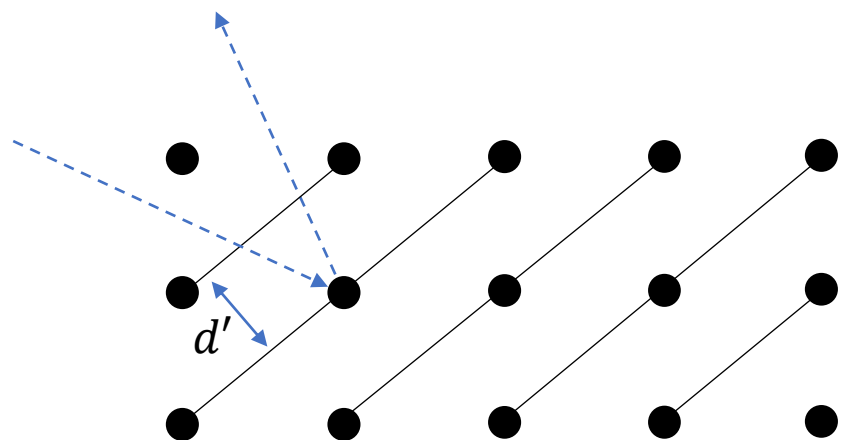
Web: <http://materias.df.uba.ar/edlm2a2022v>

Difracción de rayos X

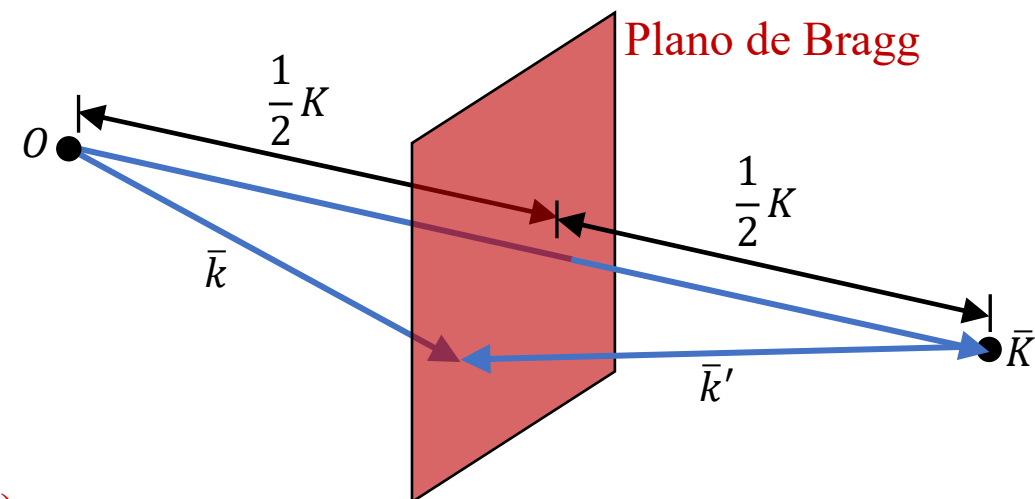
Formulación de Bragg



Interferencia constructiva: $2d \text{sen} \theta = n\lambda, n \in \mathbb{Z} \ (\lambda \leq 2d)$



Formulación de von Laue



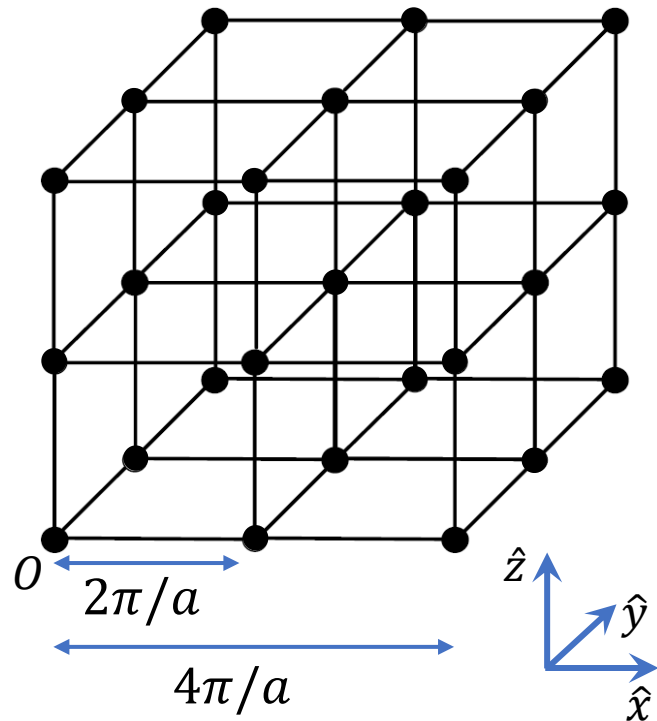
Un haz que contenga un rango de longitudes de onda daría lugar a múltiples reflexiones.

Difracción de Rayos X: Factor de estructura

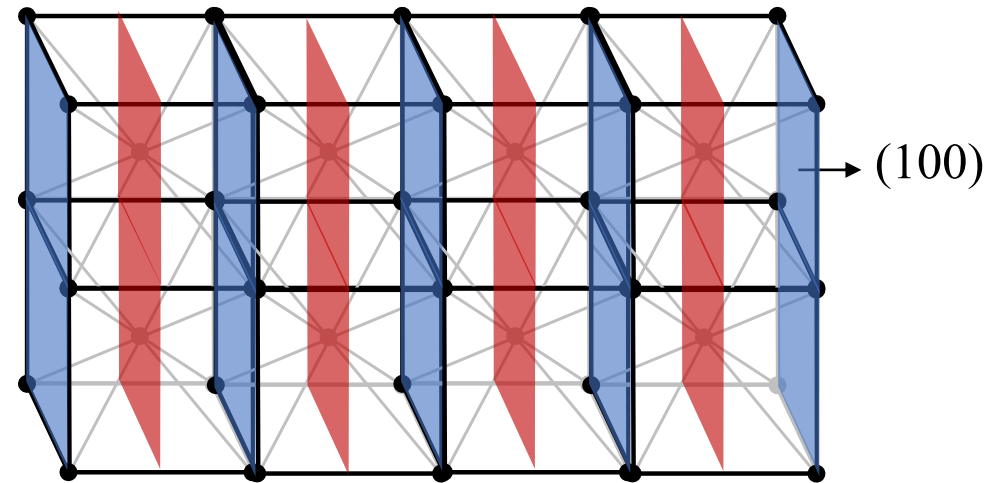
Ejemplo: BCC como SC con una base

$$S_K = \begin{cases} 2, & h + k + l \text{ par} \\ 0, & h + k + l \text{ impar} \end{cases}$$

$$\bar{K} = (2\pi/a)(h\hat{x} + k\hat{y} + l\hat{z})$$



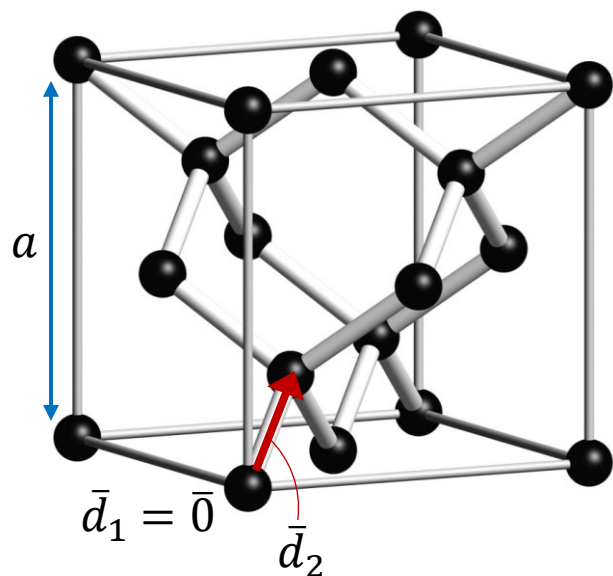
¿Cómo se entiende en el espacio real?



Ocurre interferencia destructiva entre los planos determinados por los distintos elementos de la base.

Difracción de Rayos X: Factor de estructura

Ejemplo: Estructura de diamante



$$\begin{cases} \bar{a}_1 = (a/2)(\hat{x} + \hat{y}) \\ \bar{a}_2 = (a/2)(\hat{x} + \hat{z}) \\ \bar{a}_3 = (a/2)(\hat{y} + \hat{z}) \end{cases} \xrightarrow{\text{RR}} \begin{cases} \bar{b}_1 = (2\pi/a)(\hat{y} + \hat{z} - \hat{x}) \\ \bar{b}_2 = (2\pi/a)(\hat{z} + \hat{x} - \hat{y}) \\ \bar{b}_3 = (2\pi/a)(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) \end{cases}$$

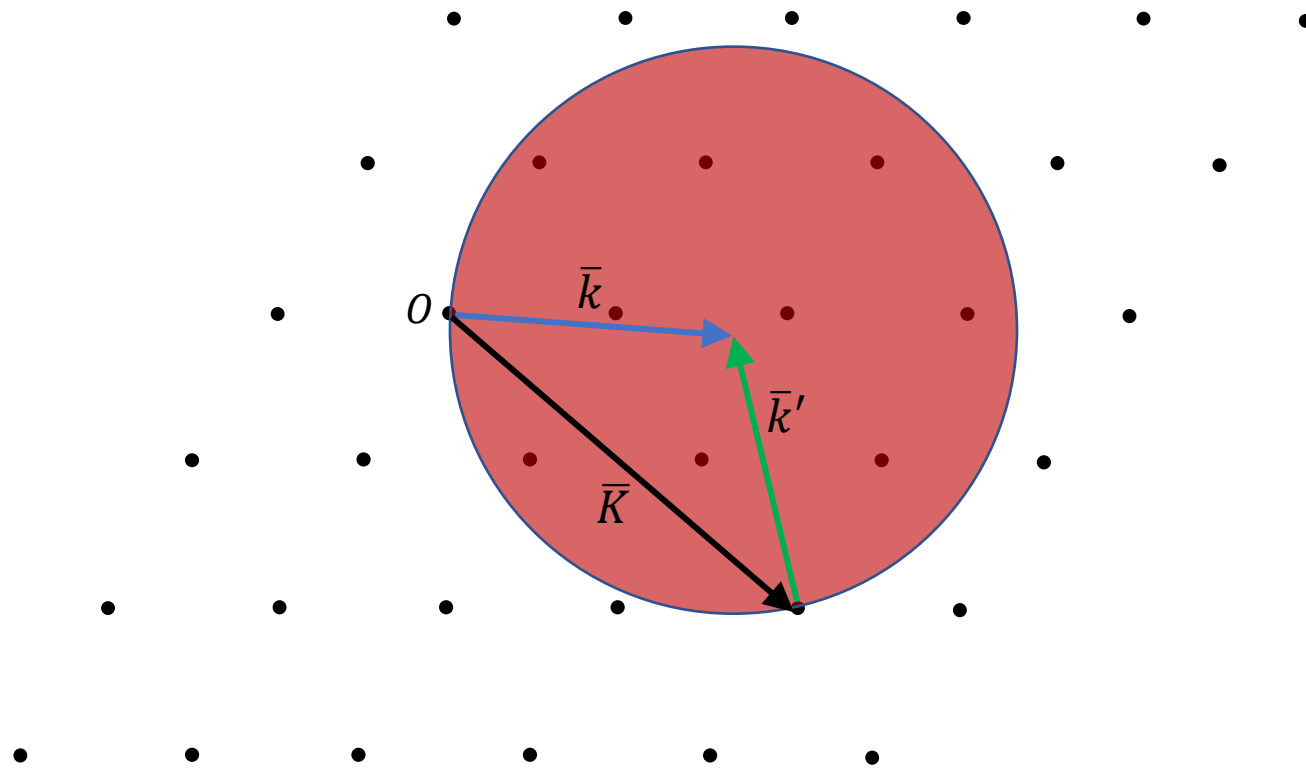
$$\begin{cases} \bar{d}_1 = \bar{0} \\ \bar{d}_2 = (a/4)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z}) \end{cases}$$

$$\longrightarrow \bar{K} = h\bar{b}_1 + k\bar{b}_2 + l\bar{b}_3 = (2\pi/a)[(k + l - h)\hat{x} + (h + l - k)\hat{y} + (h + k - l)\hat{z}]$$

$$S_K = \sum_{j=1}^n e^{i\bar{K} \cdot \bar{d}_j} = 1 + e^{i\bar{K} \cdot \frac{a}{4}(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})} = 1 + e^{i\frac{\pi}{2}(h+k+l)} = 1 + i^{h+k+l} = \begin{cases} 2, & h + k + l \text{ doble de } n^\circ \text{ par} \\ 1 \pm i, & h + k + l \text{ impar} \\ 0, & h + k + l \text{ doble de } n^\circ \text{ impar} \end{cases}$$

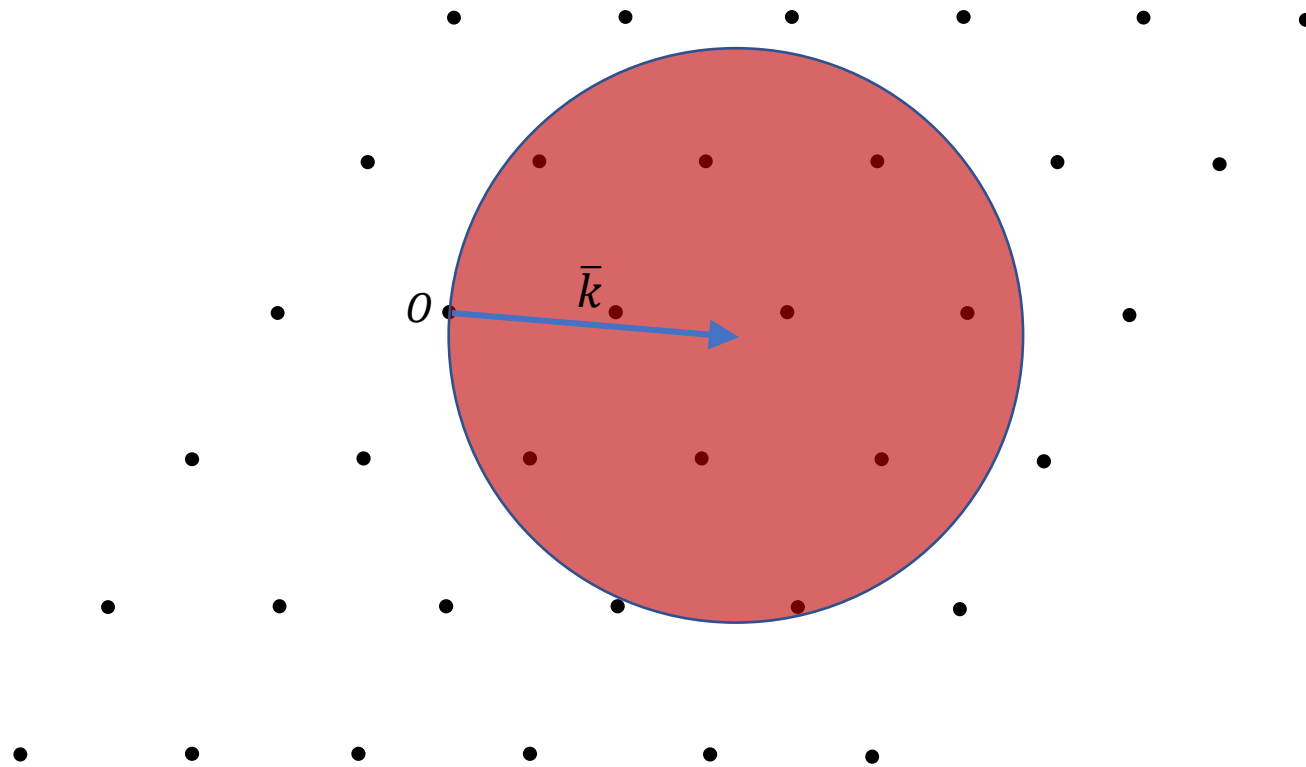
Difracción de Rayos X: Construcción de Ewald

Construcción de Ewald (espacio k)



Difracción de Rayos X: Construcción de Ewald

Construcción de Ewald (espacio k)



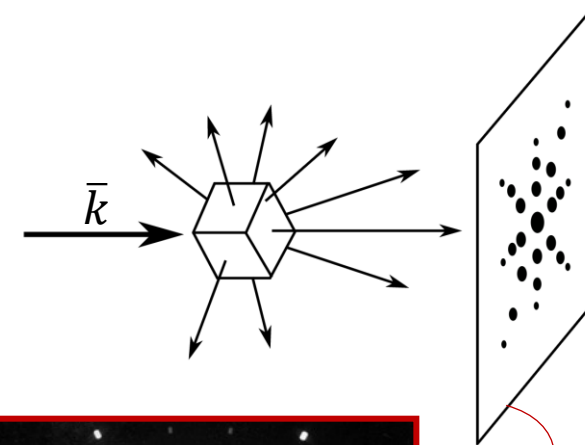
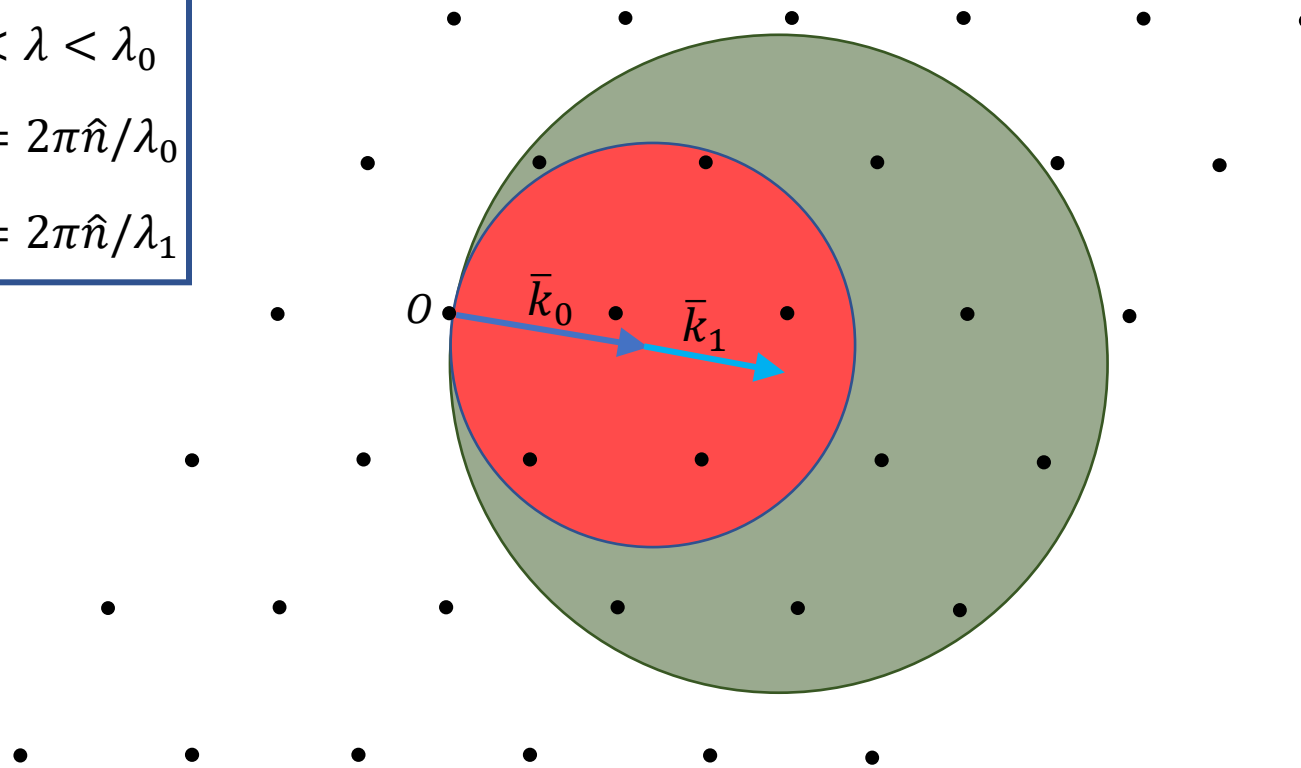
Difracción de Rayos X: Método de Laue

Método de Laue

$$\lambda_1 < \lambda < \lambda_0$$

$$\bar{k}_0 = 2\pi\hat{n}/\lambda_0$$

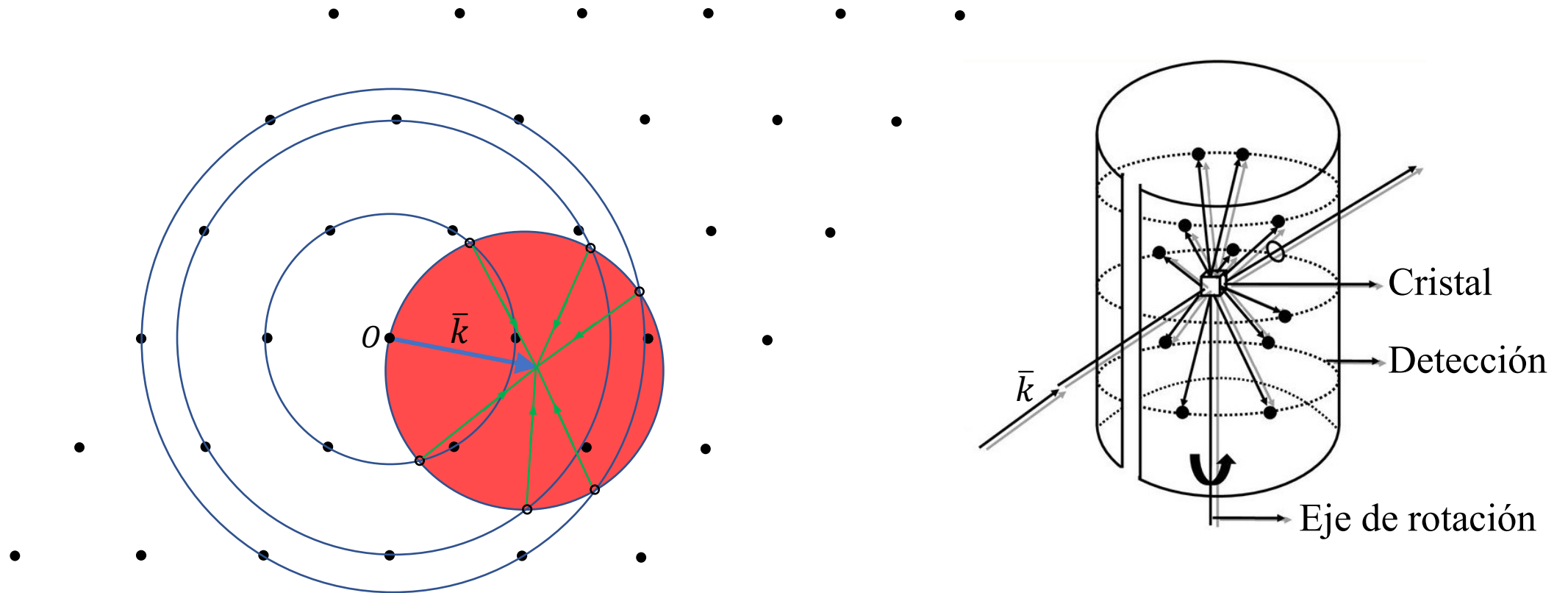
$$\bar{k}_1 = 2\pi\hat{n}/\lambda_1$$



Difracción de Rayos X: Cristal rotante

Método del cristal rotante

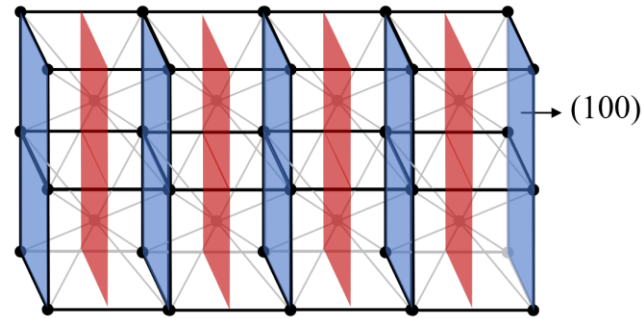
Se utiliza un haz de rayos X monocromático y se rota continuamente al cristal.



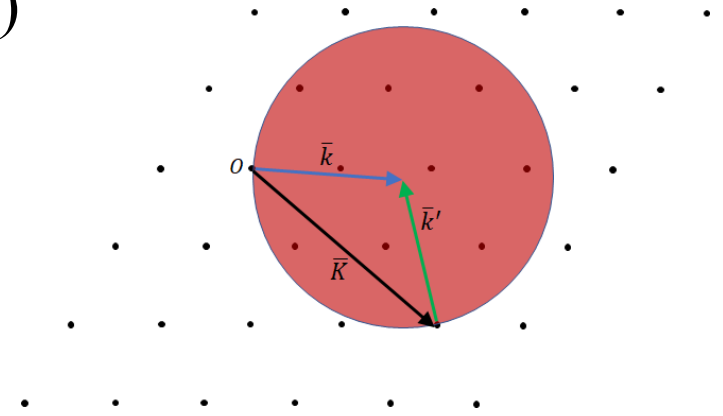
Se producen reflexiones de Bragg cuando puntos de la RR intersecan la superficie de la esfera.

Resumen

- Difracción de rayos X (formulaciones de Bragg y von Laue)

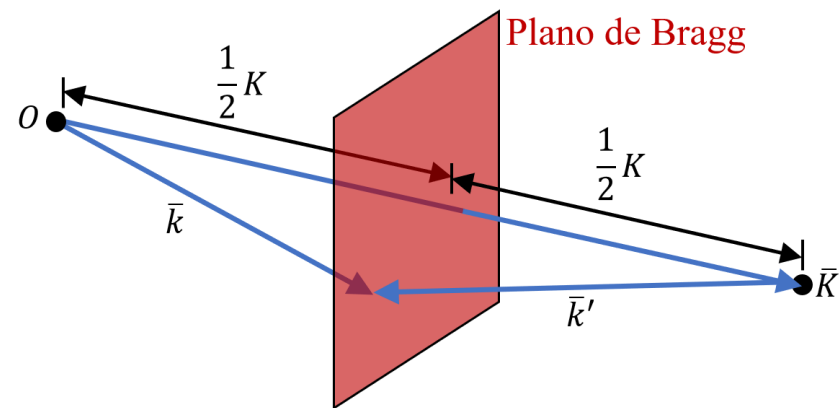


- Construcción de Ewald



- Métodos de DRX

- Factor de estructura



- Factor de forma

