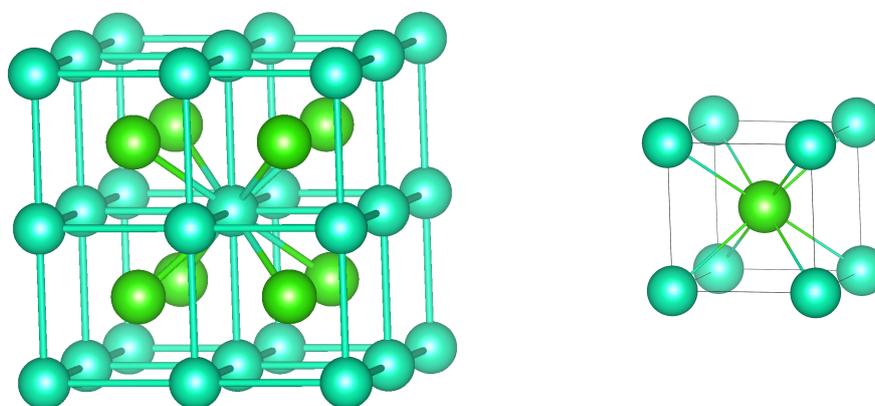
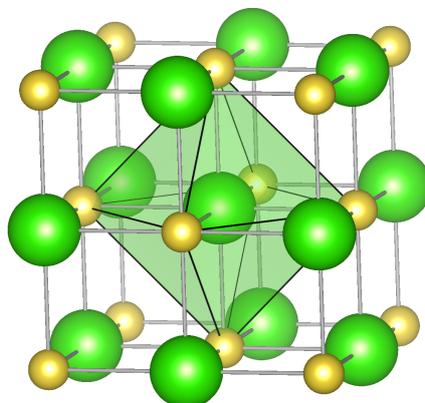


## Práctica 2: Difracción de rayos X

1. El sodio metálico tiene una estructura centrada en el cuerpo (bcc)
  - (a) Su espectro de difracción no contiene líneas tales como la (100), (300), (111), o (221), en tanto están presentes líneas tales como la (200), (110), y (222); dónde los índices (hkl) se han referido a la celda cúbica. Explicar esto mostrando que son casos particulares de las reglas de extinción correspondientes a una reflexión de Bragg general.
  - (b) ¿Cuál es la interpretación física de que la reflexión (100) es nula en una red b.c.c.?
2. El arreglo de los iones Cs y Cl en el ClCs es similar al de los átomos de Na en el sodio metálico (ver Figura). Sin embargo el razonamiento del problema anterior no puede aplicarse y la línea (100) resulta intensidad no nula. Explicar por qué.

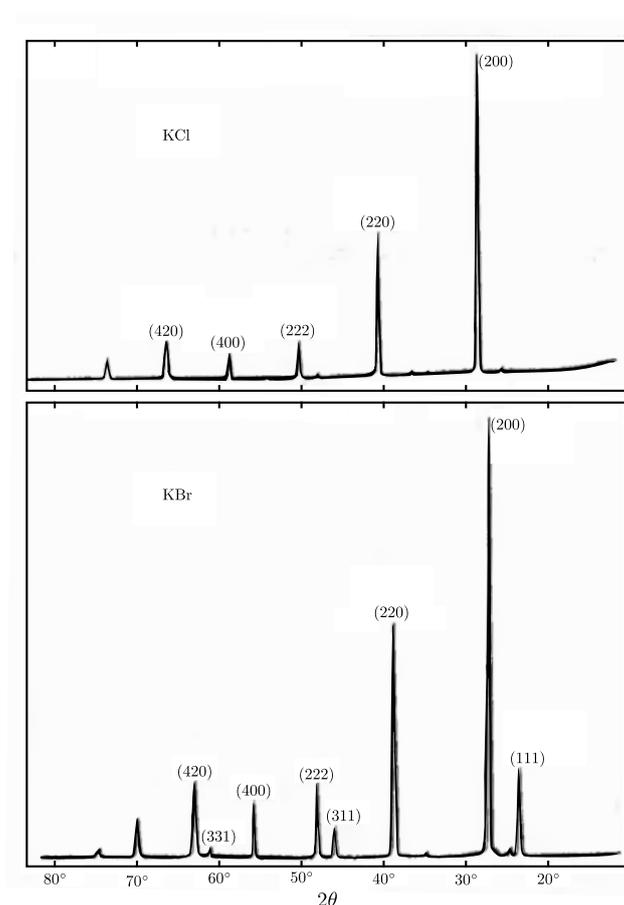


3. La estructura cristalina de las sales KCl y KBr (al igual que la del ClNa) consta de dos redes fcc asociadas con sendos iones e intercaladas desplazando una red de la otra en la mitad de la constante de la celda cúbica (ver Figura). En la Figura se muestran los difractogramas de polvos correspondientes a ambas sales.



- (a) Encontrar las reglas de extinción que cumplen los índices (hkl) de una reflexión general.

- (b) Explicar por qué no se observan (o aparecen muy débiles) las reflexiones (hkl) del KCl con algún índice de Miller impar, en tanto que tales reflexiones son claramente detectables en el caso del KBr.



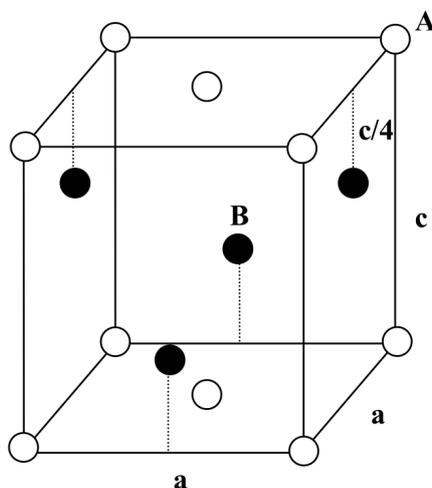
4. (a) Encontrar el factor de estructura correspondiente a la celda unidad para el diamante (ver problema 6 de la práctica 1). Mostrar que  $S_{hkl} \neq 0$  cuando los índices de Miller (hkl) satisfacen:
- $h+k+l = 4n$  con  $h$ ,  $k$ , y  $l$  pares y  $n$  entero cualquiera, o
  - todos los índices impares.
- (b) Mostrar que se puede dar cuenta de la detección experimental de la línea prohibida (222) introduciendo una concentración extra de electrones (resulta ser 0.4 electrones) a mitad de camino entre dos átomos de carbono próximos (covalencia).
5. La densidad electrónica del átomo de hidrógeno en su estado fundamental es

$$n(r) = \frac{1}{\pi a^3} e^{-2r/a}$$

donde  $a$  es el radio de Bohr. Mostrar que el factor de forma atómico es

$$f_G = \frac{16}{(4 + G^2 a^2)^2}$$

6. En un diagrama de polvo de rayos X de una sustancia cúbica obtenido con la radiación  $K\alpha$  del cobre ( $\lambda = 1.542\text{\AA}$ ) aparecen líneas para ángulos de Bragg de 12.3; 14.1; 20.2; 24.0; 25.1; 29.3; 32.2 y 33.1. Asignar índices a estas líneas. Decidir si la red es cúbica simple, centrada en el cuerpo o centrada en las caras, y calcular la arista de la celda. La densidad de la sustancia es  $8.31\text{ g/cm}^3$  y el peso molecular 312. Encontrar el número de moléculas en la celda unitaria.
7. Muestras de polvo de tres cristales cúbicos monoatómicos son analizadas en una cámara de Debye-Scherrer. Es sabido que una muestra es fcc, otra es cs, y la otra tiene la estructura del diamante. Las posiciones aproximadas de los cuatro primeros anillos de difracción en cada caso son:
- Muestra A: 42.2, 49.2, 72.0, 87.3  
 Muestra B: 28.8, 41.0, 50.8, 59.6  
 Muestra C: 42.8, 73.2, 89.0, 115.0
- (a) Identificar la estructura cristalina de A, B y C.  
 (b) Si la longitud de onda del XR incidente es  $1.5\text{ \AA}$ , ¿cuál es la constante de red de la celda convencional en cada caso?  
 (c) Si la estructura de diamante fuera reemplazada por la de zincblenda con la misma constante de red, ¿a qué ángulos aparecerían los cuatro primeros anillos de difracción?
8. Cierta compuesto que contiene elementos A y B tiene la estructura cristalina mostrada en la Figura. Determinar:
- (a) La composición química del compuesto.  
 (b) La red de Bravais subyacente y el motivo.  
 (c) Como puede ser caracterizado el patrón de difracción de Debye-Scherrer en términos de valores permitidos de  $h$ ,  $k$ , y  $l$ .



9. El constituyente común de la familia de materiales superconductores de alta temperatura crítica son los planos de cobre y oxígeno como el dibujado en la Figura. La distancia entre átomos de cobre (círculos llenos) es  $a$ . Asumamos por simplicidad que estos planos se apilan en la tercera dimensión con un espaciado  $c$ , no habiendo otros átomos en el cristal. En una primera aproximación consideremos que el cristal es tetragonal.

- Determinar la red de Bravais, indicar una posible elección de los vectores primitivos de la celda unitaria primitiva y del motivo. Determinar la red recíproca.
- En una inspección más cuidadosa de algunos de estos materiales uno descubre que los planos de  $\text{CuO}_2$  no son completamente chatos, sino que los oxígenos están desplazados levemente hacia arriba (denotado con  $+$ ) o hacia abajo (denotado con  $-$ ) como muestra la Figura. Determinar la celda primitiva, la constante de red, y la red recíproca de esta estructura. Describir (cualitativamente) que ocurre en el patrón de difracción de rayos X a medida que la distorsión de los oxígenos se reduce hasta desaparecer.

