

Guía 2: Espacio recíproco y difracción. Cap. 2 Kittel; Cap. 5 y 6 A-M. Vie.28/03/14

- Factor de forma del átomo de hidrógeno.** Considere el estado fundamental de átomo de hidrógeno, dado por $\phi(r) = (1/\pi a_0^3)^{1/2} e^{-r/a_0}$, donde a_0 es el radio de Bohr. Muestre que el factor de forma es $f_{\mathbf{G}} = 16/(4 + G^2 a_0^2)^2$.
- Factor de estructura.** Calcular el factor de estructura de las redes cubicas a) cúbica simple (*sc*) b) centrada en las caras (*fcc*) y c) centrada en el cuerpo (*bcc*). Discútase para que planos las reflexiones serán cero en cada una de ellas (también llamadas *extinciones*).
- Determinación de estructura.** En un diagrama de polvo de rayos X de una sustancia cúbica, obtenida con la radiación $K\alpha$ del cobre ($\lambda = 1,542 \text{ \AA}$), aparecen líneas para ángulos de Bragg $12,3; 14,1; 20,2; 24,0; 25,1; 29,3; 32,2; \text{ y } 33,1^\circ$. Asigne índices a estas líneas. Determine si la red es *sc*, *fcc* o *bcc*. Calcule el parámetro de red (longitud de la arista). La densidad de la sustancia es $8,31 \text{ g/cm}^3$. y su peso molecular 312. Encuentre el número de moléculas en una celda unidad cubica. Tome la unidad de masa atómica como $1,66 \times 10^{-24} \text{ g/mol}$.
- Planos y anillos de difracción.** Determine el número de anillos de difracción que pueden aparecer en un diagrama de polvo de un cristal de CsCl ($d=4,11 \text{ \AA}$), si la longitud de onda de los rayos X utilizados es $\lambda = 2,74 \text{ \AA}$.
- Considere un plano (*hkl*) de una red cristalina. (a) Demuestre que el vector de la red recíproca $\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3$ es perpendicular a este plano. (b) Pruebe que la distancia entre dos planos adyacentes es $d(hkl) = 2\pi/|\mathbf{G}|$. (c) Pruebe que para una red cúbica simple $d(hkl) = a/\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$.
- El ancho del máximo de difracción.** Imaginemos un cristal lineal que contiene centros de dispersión (o *scattering*) idénticos en cada punto de la red $\mathbf{r}_m = m\mathbf{a}$, donde m es entero. Considere que la amplitud de onda difractada es proporcional a $F = \sum_m \exp[-im\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k}]$.
(a) Usando la relación

$$\sum_{m=0}^{M-1} x^m = \frac{1 - x^M}{1 - x}$$

demuestre que F sumada sobre M puntos de la red da

$$F = \frac{1 - \exp[-iM\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k}]}{1 - \exp[-i\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k}]}$$

(b) La intensidad de la onda difractada es proporcional a $|F|^2$. Demuestre que

$$|F|^2 = \frac{\sin^2[\frac{1}{2}M\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k}]}{\sin^2[\frac{1}{2}\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k}]}$$

(c) Como es sabido, la expresión anterior es máxima cuando $\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k} = 2\pi h$, con h entero. Considere un ligero cambio de $\Delta\mathbf{k}$ y definamos ϵ en la expresión $\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k} = 2\pi h + \epsilon$ de tal modo

que ϵ entregue la posición del primer cero en $\sin^2[\frac{1}{2}M\mathbf{a} \cdot \Delta\mathbf{k}]$. Muestre que $\epsilon = 2\pi/M$, y por tanto el ancho del máximo de difracción es proporcional a $1/M$, llegando a ser un peak muy angosto para valores macroscópicos de M . Este mismo resultado es cierto para un cristal en tres dimensiones.

7. La estructura de diamante, tomada como su celda convencional, se compone de 8 átomos. Encuentre el factor de estructura S_G de esta base. Encuentre los ceros de la S_G y muestre que las reflexiones permitidas de la estructura de diamante satisfacen $v_1 + v_2 + v_3 = 4n$ donde los índices son pares y n es un entero o sino todos los índices son impares.
8. En la Tabla I aparecen las líneas correspondientes al patrón de difracción de un cristal con simetría cúbica. Determine, explicando claramente lo realizado, que columna pertenece a sc, fcc, o bcc.

TABLA I

N	Cúbico $N=h^2+k^2+l^2$			N	Cúbico $N=h^2+k^2+l^2$		
	P hkl	F hkl	I hkl		P hkl	F hkl	I hkl
1	100			19	331	331	
2	110		110	20	420	420	420
3	111	111		21	421		
4	200	200	200	22	332		332
5	210			23			
6	211		211	24	422	422	422
7				25	500		
8	220	220	220	25	430		
9	300			26	510		510
9	221			26	431		431
10	310		310	27	511	511	
11	311	311		27	333	333	
12	222	222	222	28			
13	320			29	520		
14	321		321	29	432		
15							
16	400	400	400				
17	410						
17	322						
18	411		411				
18	330						