

Entrega 1: Difracció (X-RD)

Identificació de cristall a partir de dades en CSV

IMPORTANT: REALITZAR L'EXERCICI AMB EL FITXER FACILITAT PER MOODLE. CADA ALUMNE REBRÀ UN FITXER DIFERENT.

Objectiu

A partir del fitxer CSV, que conté la intensitat mesurada en funció de l'angle (2θ), analitzar el patró de difracció, processar les dades, indexar els pics, determinar el tipus de cel·la unitària (SC, BCC, FCC o altre), estimar el paràmetre de xarxa i justificar quina substància o tipus de cristall podria correspondre.

Dades d'entrada

Es proporciona un fitxer CSV amb les següents columnes:

```
angle_deg,intensity
10.0, 12
10.1, 15
10.2, 11
...
```

on:

- `angle_deg`: l'angle 2θ en graus.
- `intensity`: comptatge del detector o intensitat relativa.

Supòsit experimental: utilitzarem radiació Cu $K\alpha$ amb longitud d'ona $\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$.

Tasques

1. Preparació i visualització (1 punt):

- (a) Carregueu el CSV i representeu intensitat vs 2θ .

2. Processat de senyal (2 punts):

- (a) Localitzeu les posicions exactes dels pics. Per trobar pics automàticament, useu la funció `find_peaks`, que podreu usar si la carregueu amb
`from scipy.signal import find_peaks`

(b) Feu una taula amb els pics principals i marquei-los al gràfic.

3. **Conversió i càlculs (2 punts):**

(a) Convertiu cada pic en una separació d'espais d usant la llei de Bragg:

$$2d \sin \theta = n\lambda, \quad d = \frac{\lambda}{2 \sin \theta}$$

(b) Calculeu $1/d^2$ i comenteu per què és proporcional a $h^2 + k^2 + l^2$ en cel·les cúbiques.

4. **Indexació i determinació de la cel·la (3 punts):**

(a) Indexeu els primers 30 pics d'una cel·la cúbica convencional (feu un petit programa que ho faci) i en cada cas, seleccioneu els pics observables assumint SC, BCC, FCC i Diamant a través del factor d'estructura.

(b) Per a cada estructura cristal·lina ordena els pics observats i els predits teòricament a la llista anterior.

(c) Demostreu que per a una cúbica convencional s'ha de complir que

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

(d) Feu la gràfica $1/d^2$ vs $h^2 + k^2 + l^2$.

5. **Identificació i justificació (2 punts):**

(a) Identifiqueu el tipus de cel·la tot triant la millor de les regressions i determineu el paràmetre de xarxa a través del pendent de la recta obtinguda.

Pistes

- Successió de $h^2 + k^2 + l^2$ per cel·les cúbiques convencionals:
 - **SC (Simple Cúbica):** tots els hkl són permesos, seqüència 1, 2, 3, 4, 5, 6, ...
 - **BCC (Cúbica centrada en cos):** només apareixen els hkl amb $h + k + l$ parell; seqüència teòrica: 2, 4, 6, 8, 10, ...
 - **FCC (Cúbica centrada en cares):** només apareixen els hkl amb tots els índexs parells o tots senars; seqüència: 3, 4, 8, 11, 12, 16, ...
 - **Diamant:** estructura FCC amb un àtom addicional a la diagonal, només pics amb (h, k, l) tots parells o tots senars i $(h+k+l) \bmod 4 = 2$; seqüència: 3, 8, 11, 16, 19, ...

Entregable

Informe en PDF amb les respostes al guió i amb els gràfics, taules i codi Python utilitzats. Identifiqueu el nom del CSV utilitzat de forma clara.