GRAU: Enginyeria Matemàtica i Física

Assignatura: FISICA DEL ESTAT SÒLID i SUPERFICIES (CRISTAL·LOGRAFIA; SIMETRIA)

Prof. Dra. M. AGUILÓ

Universitat Rovira i Virgili.

Tarragona, setembre 2023

GRAU: EMIF
Assignatura: FISICA DEL ESTAT SÒLID i SUPERFICIES (CRISTAL·LOGRAFIA; SIMETRIA)
Prof. Dra. M. AGUILÓ
Universitat Rovira i Virgili.

<u>CRISTAL·LOGRAFIA; SIMETRIA</u>

Introducció conceptes bàsics de **CRISTAL·LOGRAFIA. Nomenclatura IUCr. Periodicitat i simetria**. Material cristal·lí bidimensional. Material cristal·lí tridimensional. **Sistemes cristal·lins. Elements de simetria. Xarxes de Bravais.**

Sistema real i sistema recíproc. Punt, direcció i pla cristal·logràfic. Càlculs geomètrics: distàncies entre punts, angles i distàncies entre plans.

Simetria puntual: Elements de simetria. Simetria puntual de sòlids cristal·lins. Objectes finits. Visió macroscòpica. Sistema de referencia exterior al cristall. **32 grups puntuals cristal·logràfics.** Representació d'elements de simetria. Projecció estereogràfica. Nomenclatura de Herman-Mauguin. Nomenclatura de Schoenflies

Simetria espacials: **230 Grups espacials cristal·lografics**. Objectes infinits. Cristalls. Visió amb sistema de referencia definit per els vectors de periodicitat a sobre de distribució ordenada (ions, àtoms, o molècules). Nomenclatura de Herman-Mauguin.

GRAU: EMIF
Assignatura: FISICA DEL ESTAT SÒLID i SUPERFICIES (CRISTAL·LOGRAFIA; SIMETRIA)
Prof. Dra. M. AGUILÓ
Universitat Rovira i Virgili.

Estructura Cristal·lina: cel·la, posicions atòmiques, grup espacial, Z número de fórmules estequiomètriques. Descripció d'un material cristal·lí.

Difracció de R-X. Llei vectorial de la difracció. Llei de Bragg. Caracterització per difracció de RX. Tècniques de difracció de RX.

Exemples d'algunes estructures.
Defectes cristal·lins: defectes puntuals, defectes linials, defectes en altres dimensions.
Anisotropia de les propietats fisiques: Tensors.
Nomenclatura tensors de 2on, 3rt i 4rt ordre.
Principi de Newmann.
Principi de Curie.

Bibliografia:

1.- M. Aguiló, documents Moodle per l'assignatura de "Física Estado Solido i Superficies", Tarragona 2023.

2.- M. Aguiló, document problemes, practiques i Taules de "Física Estado Solido i Superficies", Tarragona 2023

3.- A. Putnis, Introduction to the mineral Sciences, Cambridge University Press, 1992,
ISBN 0 521 42947 1, Chap 1

4.- International Tables for Crystallography (IUCr Series. International Tables for Crystallography).
C. P. Brock is the editor of International Tables for Crystallography, published by Wiley, 2016. Volum A.

5.- J.F.Nye, Physics Properties of Crystals. Their Represention by Tensors and Matrices. Pu. In the USA by Oxford University Press, 1957, 1987.

6.- X. Solans, Introducció a la cristal·lografia. Textos docentes 158. Ed. Universidad de Barcelona, 1999.

7.- S. Galí, *Cristal·lografia. Teoria Reticular, grups puntuals i grups espacials.* PPU, Barcelona, 1988.

8.- Hammond, C. , The basics of crystallography and diffraction IUCr Texts on Crystallography,
IUCR- Oxford Science Pu., 1997

Difracció de R-X.

Expressions generals.

Llei 3D de la difracció de R-X

Llei de Bragg

Intensitat de la difracció i Factor d'estructura i Extincions sistemàtiques

Tècniques de difracció

Difracció de pols cristal·lina

Orientacio d'un monocristall

Veure doc: taules

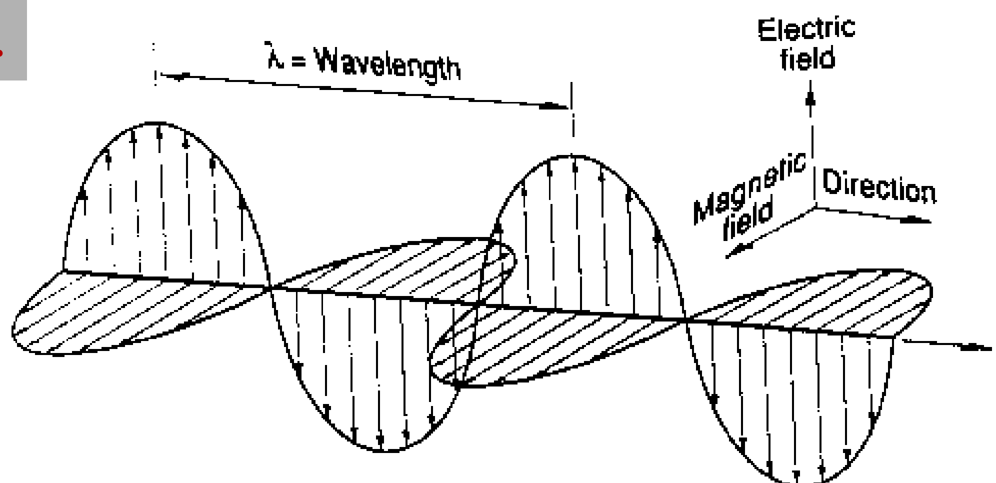
Veure doc: full de problemes i pràctiques

DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

- Fins 1910 $\longrightarrow$ només propietats macroscòpiques d'estat sòlid
- Amb R-X $\longrightarrow$ estructura interna
  - explicació de propietats
  - identificació de substàncies
  - noves tecnologies

Raig X : és una radiació electromagnètica

1.



$\left\{ \begin{array}{l} \lambda\text{, amplitud} \\ \text{vector d'ona } \vec{k}\ ;\ \ |\vec{k}| = \dfrac{1}{\lambda} \\ \vec{k}\text{, direcció i sentit} \\ \text{de propagació} \end{array} \right.$

λ baixa Radiació energètica

2. Radiació electromagnètica: pot considerar-se com la difusió d'unes partícules (fotons), que es desplacen en la direcció i sentit de l'ona, amb una energia

$$E = h\nu = \frac{h}{2\pi} 2\pi\nu = \frac{h}{2\pi}\omega = \hbar\omega$$

$$E = \hbar\frac{2\pi}{T} = 2\pi\hbar\frac{c}{\lambda} = \frac{hc}{\lambda}$$

Així

λ baixa $\longrightarrow$ Radiació energètica

DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

INTERACCIÓ AMB LA MATÈRIA

Aquest fotons, que porten implícits un camp elèctric i un magnètic, variables amb el temps, interaccionen amb la matèria produint variacions en els estats energètics d'un àtom, d'una molècula o d'electrons.

Quan menor és λ, la radiació és capaç d'afectar a defectes més petits.

Els raigs-X afecten als electrons dels àtoms

DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

RAIGS-X:

Radiació electromagnètica de $\lambda<100$Å

Cristal·lografia $0.2< \lambda<2.0$

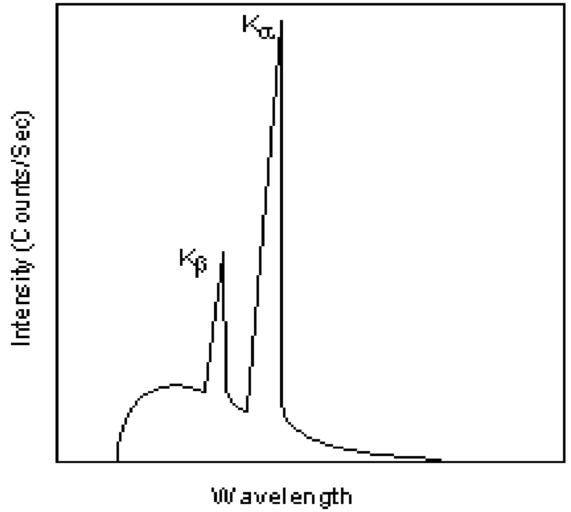
Característiques:

- gran poder de penetració
- capaç de ionitzar gasos
- capaç d'impressionar fotografies
- es propaguen en línia recta
- no són desviats per camps elèctrics i magnètics , no tenen massa ni càrrega.

DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

L'ESPECTRE DE RAIGS-X

La radiació emitida pel tub de RAIG X no és mai monocromàtica, si no que cobreix un ampli camp de l'espectre.



<u>Radiació blanca</u>: És la radiació emitida pels electrons que es desacceleren quan xoquen, perdent energia: EMISSIÓ CONTÍNUA.

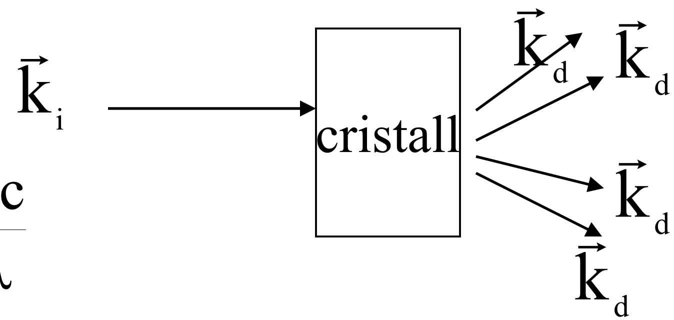
- La λ mínima depèn de V, NO depèn de la substància anticàtode.
- La intensitat depèn de V i de la substància anticàtode.

DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

DIFRACCIÓ ELÀSTICA

És el procés en el que el fotó en incidir sobre el cristall i sorgir d'ell no sofreix variació en la seva energia ni en el mòdul de la seva quantitat de moviment, **només** canvia la direcció.

$$|\vec{k}| = \frac{1}{\lambda}$$



$$E_i = \frac{hc}{\lambda} \qquad E_d = \frac{hc}{\lambda}$$

$$\vec{p}_i = h\vec{k}_i \qquad \vec{p}_d = h\vec{k}_d$$

$$\boxed{E_i = E_d} \longrightarrow |\vec{p}_i| = |\vec{p}_d|$$

El fet que el fotó només varii la seva trajectòria fa que INFORMI DE COM ÉS L'INTERIOR DEL CRISTALL

DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

DRX: quan els RX pasen a través de la materia cristal·lina, es mostra la xarxa recíproca

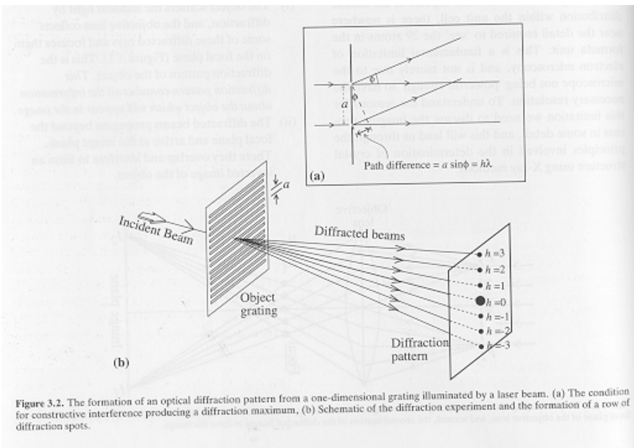


Figure 3.2. The formation of an optical diffraction pattern from a one-dimensional grating illuminated by a laser beam. (a) The condition for constructive interference producing a diffraction maximum, (b) Schematic of the diffraction experiment and the formation of a row of diffraction spots.

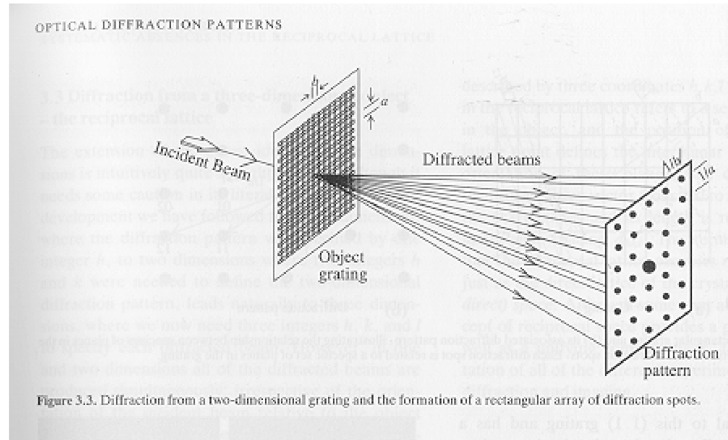


Figure 3.3. Diffraction from a two-dimensional grating and the formation of a rectangular array of diffraction spots.

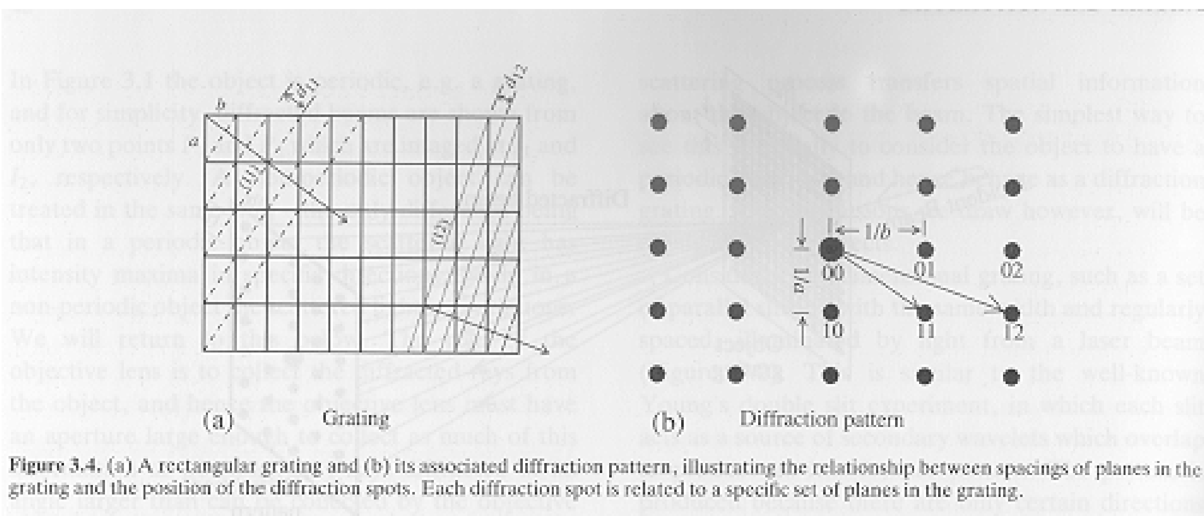


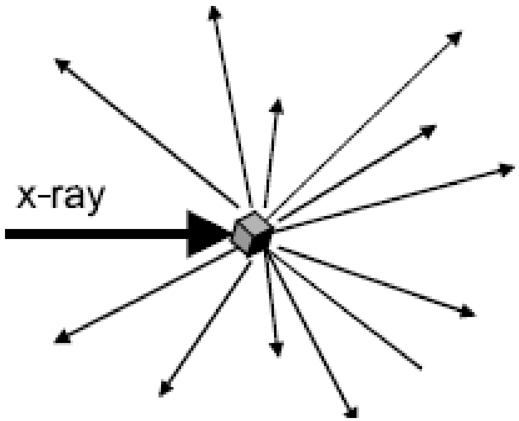
Figure 3.4. (a) A rectangular grating and (b) its associated diffraction pattern, illustrating the relationship between spacings of planes in the grating and the position of the diffraction spots. Each diffraction spot is related to a specific set of planes in the grating.

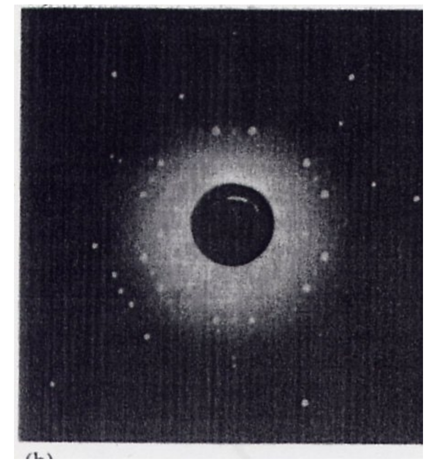
Es veu la xarxa recíproca

DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

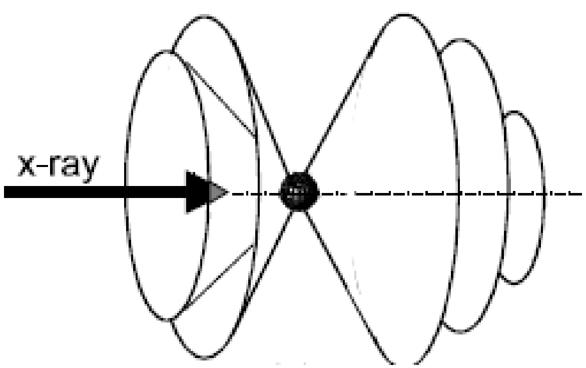
$$\vec{K}_d - \vec{K}_i = \vec{r}^{\,*}_{hkl}$$

Difracció de Raigs X **monocristall**

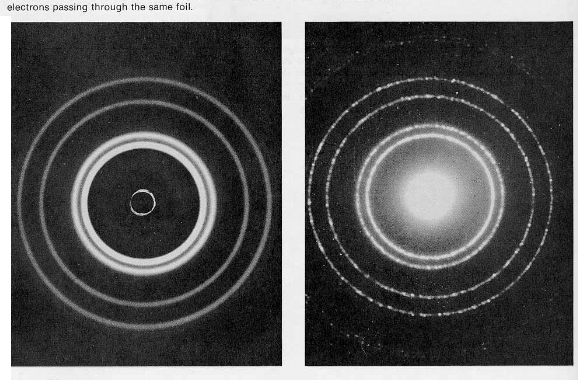




Difracció de Raigs X de **pols cristal·lina**



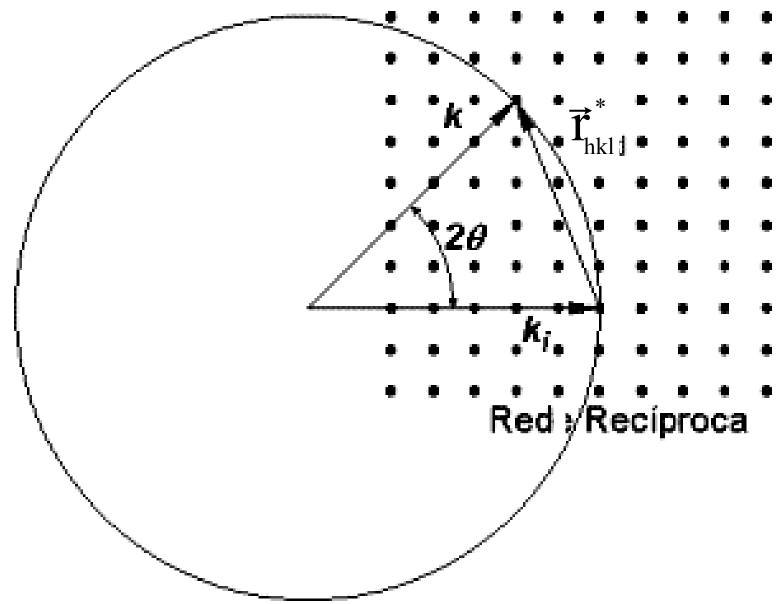
The diffraction pattern on the left was made by a beam of x rays passing through thin aluminum foil. The diffraction pattern on the right was made by a beam of electrons passing through the same foil.



DIFRACCIÓ ELÀSTICA

$$|\vec{K}_d| = |\vec{K}_i| = \frac{1}{\lambda}$$

ESFERA D'EWALD



LLEI VECTORIAL DE LA DIFRACCIÓ

$$\boxed{\vec{K}_d - \vec{K}_i = \vec{r}^{\,*}_{hkl}}$$

$\vec{K}_i$: Direcció radiació incident

$\vec{K}_d$: Direcció radiació difractada

$\vec{r}^{\,*}_{hkl}$: Xarxa recíproca

2θ : angle entre $\vec{K}_i$ i $\vec{K}_d$

θ: angle entre $\vec{K}_i$ i (hkl)pla

θ: angle entre $\vec{K}_d$ i (hkl)pla

$$|r^*_{hkl}| = 2\frac{\text{sen}\theta}{\lambda}$$

DIFRACCIÓ ELASTICA

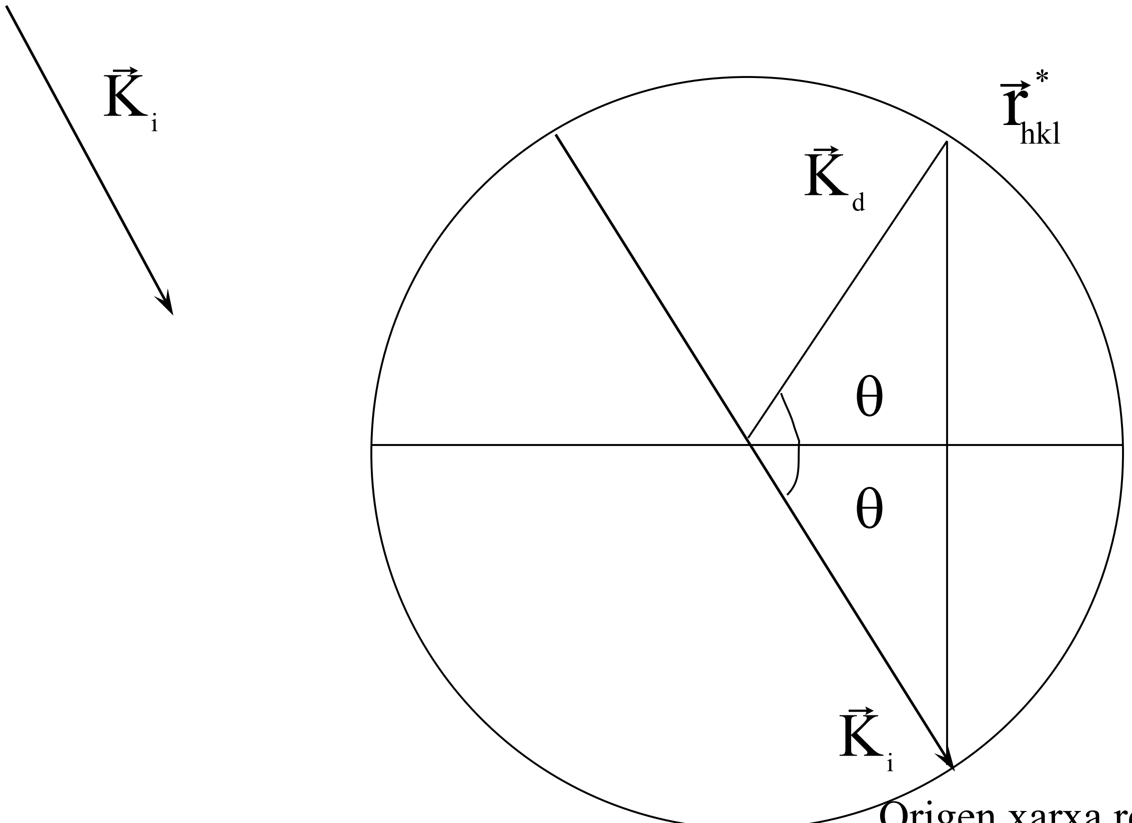
ESFERA D'EWALD I CONSTRUCCIÓ D'EWALD

$$\boxed{\vec{K}_d - \vec{K}_i = \vec{r}^{\,*}_{hkl}}$$

$$\left|\vec{K}_d\right| = \left|\vec{K}_i\right| = \frac{1}{\lambda}$$

$$\left|r^*_{hkl}\right| = 2\,\frac{\mathrm{sen}\theta}{\lambda}$$

$$\frac{1}{d_{hkl}} = 2\,\frac{\mathrm{sen}\theta}{\lambda}$$



Origen xarxa recíproca

$$\boxed{2\,d_{hkl}\,\mathrm{sen}\theta = \lambda}$$

M. AGUILÓ

DIFRACCIÓ ELASTICA

LLEI DE BRAGG

$$\boxed{2\, d_{hkl}\, \mathrm{sen}\theta = \lambda}$$

1.

$$\left|\vec{K}_d - \vec{K}_i\right| = \left|r^*_{hkl}\right| = 2\,\frac{\mathrm{sen}\theta}{\lambda}$$

$$\left|r^*_{hkl}\right| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

$$2\,\frac{\mathrm{sen}\theta}{\lambda} = \frac{1}{d_{hkl}}$$

$$\boxed{2\, d_{hkl}\, \mathrm{sen}\theta = \lambda}$$

2.

$$\left|\vec{K}_d-\vec{K}_i\right|^2=\left(\vec{K}_d-\vec{K}_i\right)\cdot\left(\vec{K}_d-\vec{K}_i\right)=\vec{K}_d\cdot\vec{K}_d-2\vec{K}_d\cdot\vec{K}_i+\vec{K}_i\cdot\vec{K}_i=$$

$$\left|\vec{K}_d\right|^2-2\left|\vec{K}_d\right|\cdot\left|\vec{K}_i\right|\cdot\cos 2\theta+\left|\vec{K}_i\right|^2$$

$$\left|\vec{K}_d-\vec{K}_i\right|^2=\frac{1}{\lambda^2}-2\frac{1}{\lambda^2}\cos 2\theta+\frac{1}{\lambda^2}=\frac{2}{\lambda^2}\left(1-\cos 2\theta\right)=\frac{4\operatorname{sen}^2\theta}{\lambda^2}$$

$$\left|\vec{K}_d-\vec{K}_i\right|=2\frac{\operatorname{sen}\theta}{\lambda}$$

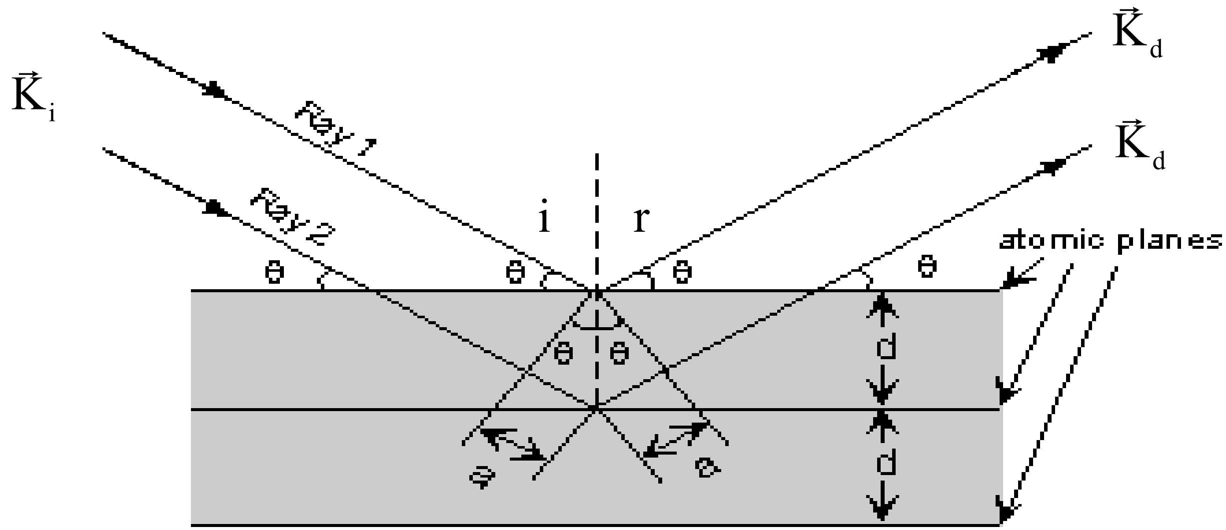
Per un (hkl) que $\vec{r}^{\,*}_{hkl}=\left|\vec{K}_d-\vec{K}_i\right|$

$$\boxed{2\,d_{hkl}\operatorname{sen}\theta=\lambda}$$

DIFRACCIÓ ELÀSTICA

LLEI DE BRAGG

$$2\ d_{hkl}\ \mathrm{sen}\theta = \lambda$$



BASES SIMIL ÒPTIC:

- Cada pla reticular actua com un mirall
- part de la radiació X serà difractada cap a dintre dels cristalls i part cap a fora, complint la llei de DESCARTES de la refracció.

angle d'incidència=angle de refracció

DISCUSSIÓ

1. Atoms localitzats en el espai: Estructura cristal·lina
   Red real y red recíproca corresponent.

	λ=const		$\lambda_{K\alpha}$	$\lambda_{K\beta}$
r_1	d_1	θ_1	θ_1	θ_1'
r_2	d_2	θ_2	θ_2	θ_2'
r_3	d_3	θ_3	θ_3	θ_3'

2. Per una determinada orientació en l'espai només difracten els plans, que el seu vector $\vec{r}^{\,*}_{hkl}$, estigui a sobre de l'esfera Ewald

3. Si $\left.\begin{array}{ll}(hkl) & d_{hkl} \\ (hkl)' & d_{hkl}'\end{array}\right\}$ Si $d_{hkl}=d_{hkl}'$ $\Longrightarrow$ $\theta_{hkl} = \theta_{hkl}'$ VALOR PERÒ NO ORIENTACIÓ

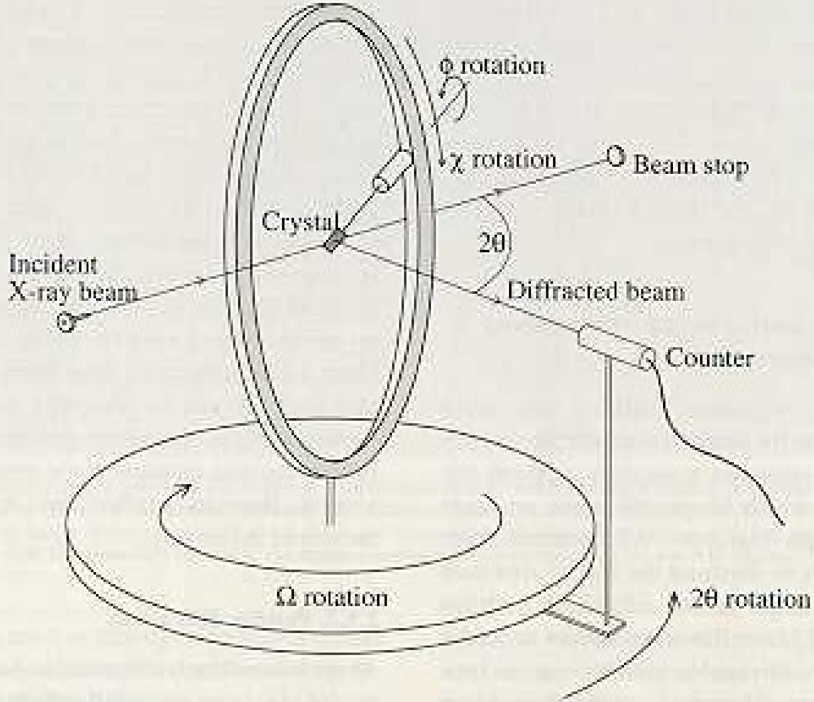
4. RADIACIÓ POLICROMÀTICA: Cristall separar longitud d'ona

$$\lambda_1 \Rightarrow 2d_{hkl} \text{ sen } \theta_1 = \lambda_1$$
$$\lambda_2 \Rightarrow 2d_{hkl} \text{ sen } \theta_2 = \lambda_2$$
$$\lambda_3 \Rightarrow 2d_{hkl} \text{ sen } \theta_3 = \lambda_3$$

TÈCNIQUES DE DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

DIFRACTÒMETRE automàtic ó de 4 cercles

Mostra: Monocristall Mòbil
Radiació: Monocromàtica
Mètode de detecció: ·Comptador
·Pantalla de Vídeo (Image Plate)



igure 3.24. A schematic figure of a four-circle single crystal diffractometer, in which a crystal, centrally mounted in a circular ring can be atomatically rotated around three different axes: the ϕ, χ and Ω rotations, while the detector moves on the 2θ rotation. This instrument nables the positions and intensities of several thousand *hkl* reflections to be recorded automatically.

TÈCNIQUES DE DIFRACCIÓ DE RAIGS-X

MÈTODE DE LAUE

Mostra: Monocristall fixe
Radiació: Policromàtica
Mètode de detecció: Placa fotog

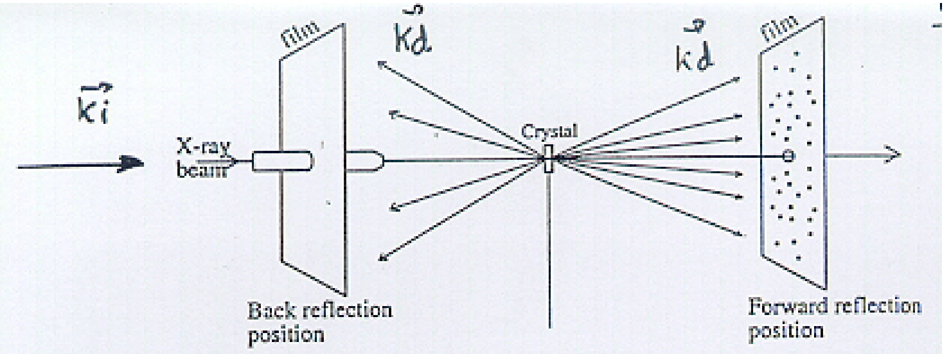


Figure 3.18. A schematic diagram illustrating Laue diffraction on a flat plate film, in either the forward reflection position (collecting X-ray beams diffracted through small angles) or the back reflection position (diffraction through large angles).

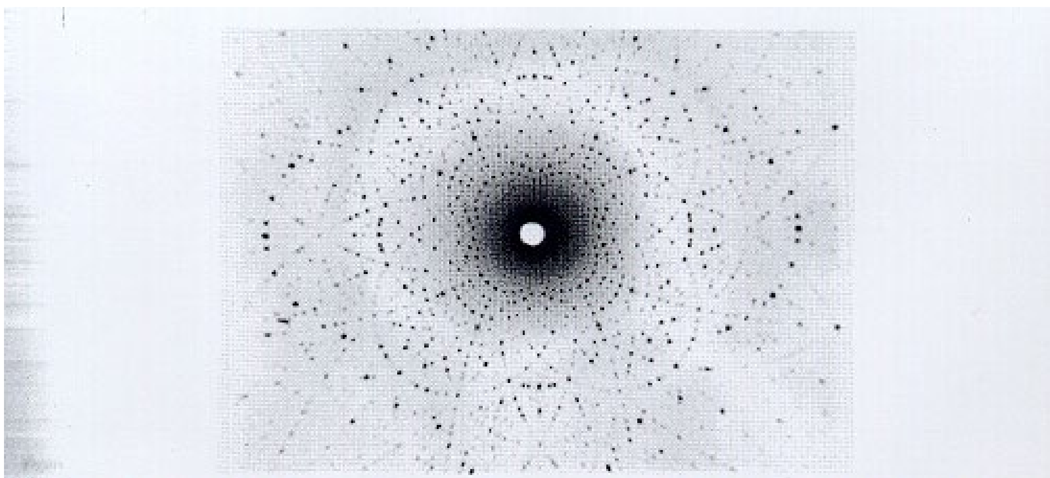
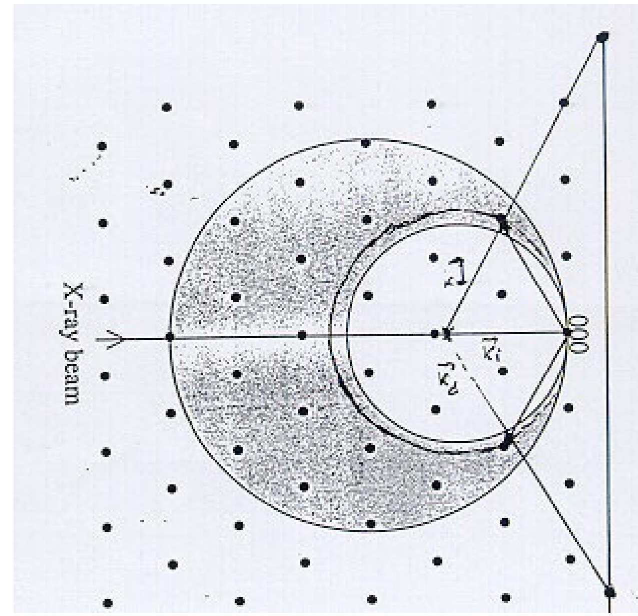


Figure 3.20. Photograph of a Laue diffraction pattern of zircon, $ZrSiO_4$, taken with the X-ray beam parallel to the *c* axis. Zircon is tetragonal, point group 4/*mmm*. The 4-fold symmetry axis and the mirror planes are evident in the symmetry of the diffraction pattern.



MÈTODES DE DIFRACCIÓ DE POLS CRISTAL·LINA

DIFRACTÒMETRE BRAGG-BRENTANO

Mostra: Agregat de multitud de cristalls orientats a l'atzar . Pols cristal·lina
Radiació: Monocromàtica
Mètode de detecció: -placa fotogràfica

-comptador de centelleig

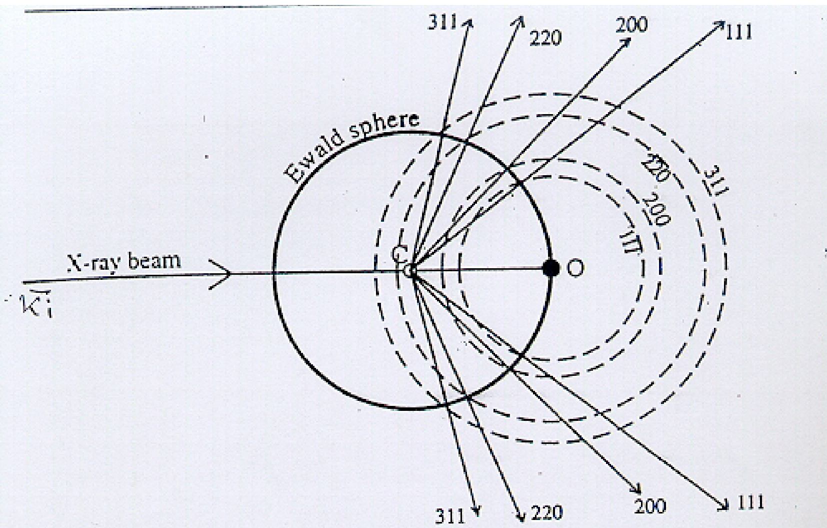
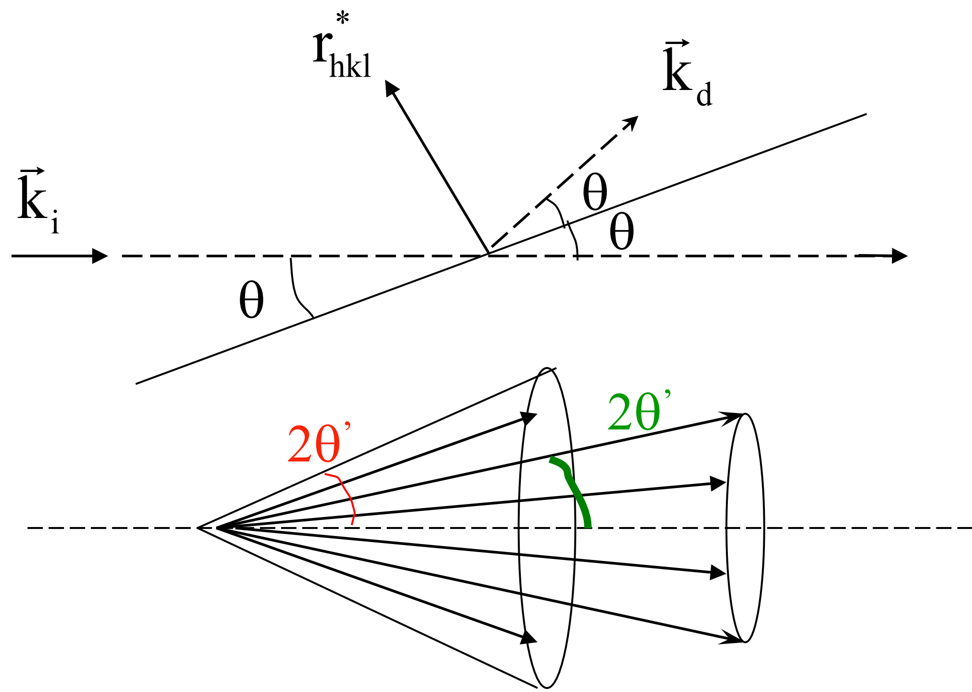


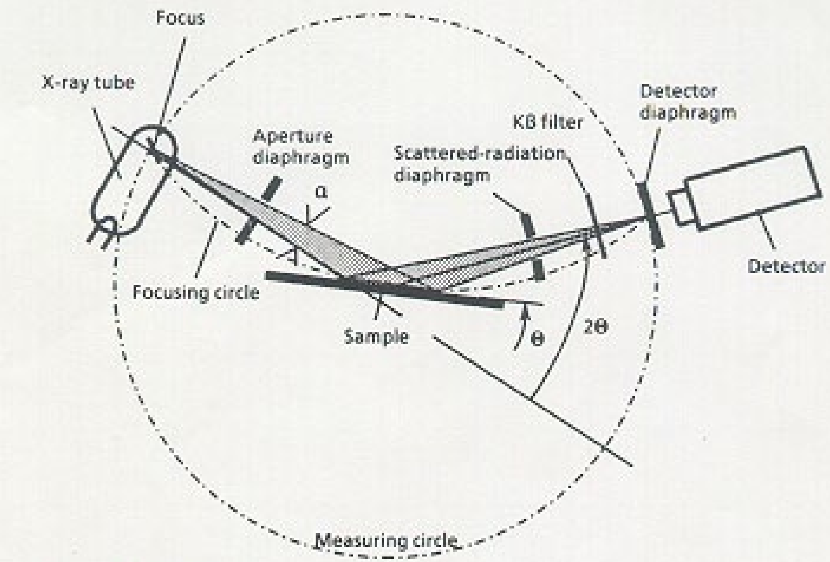
Figure 3.25. Powder diffraction and the Ewald sphere construction. The reciprocal lattices of the powdered crystals coalesce into spheres around the origin of reciprocal space, the radius of each sphere being the reciprocal of a *d* spacing in the crystal. (In this case the sequence of *hkl* reflections indicates a face-centred lattice.) When the Ewald sphere is drawn through the origin, its intersection with the reciprocal lattice sphere defines a set of cones, in the same way as shown in Fig. 3.13.



$$2\, d_{hkl}\, \text{sen}\theta = \lambda$$

MÈTODES DE DIFRACCIÓ DE POLS CRISTAL·LINA

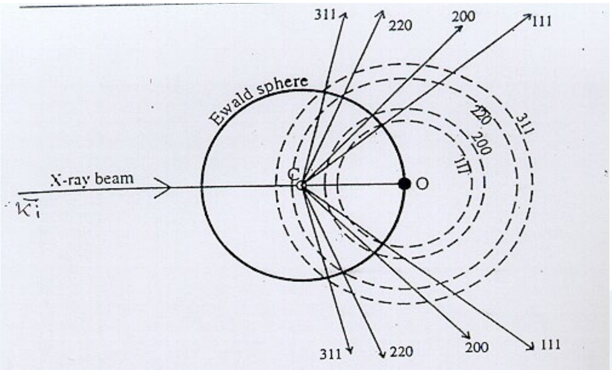
DIFRACTÒMETRE BRAGG-BRENTANO

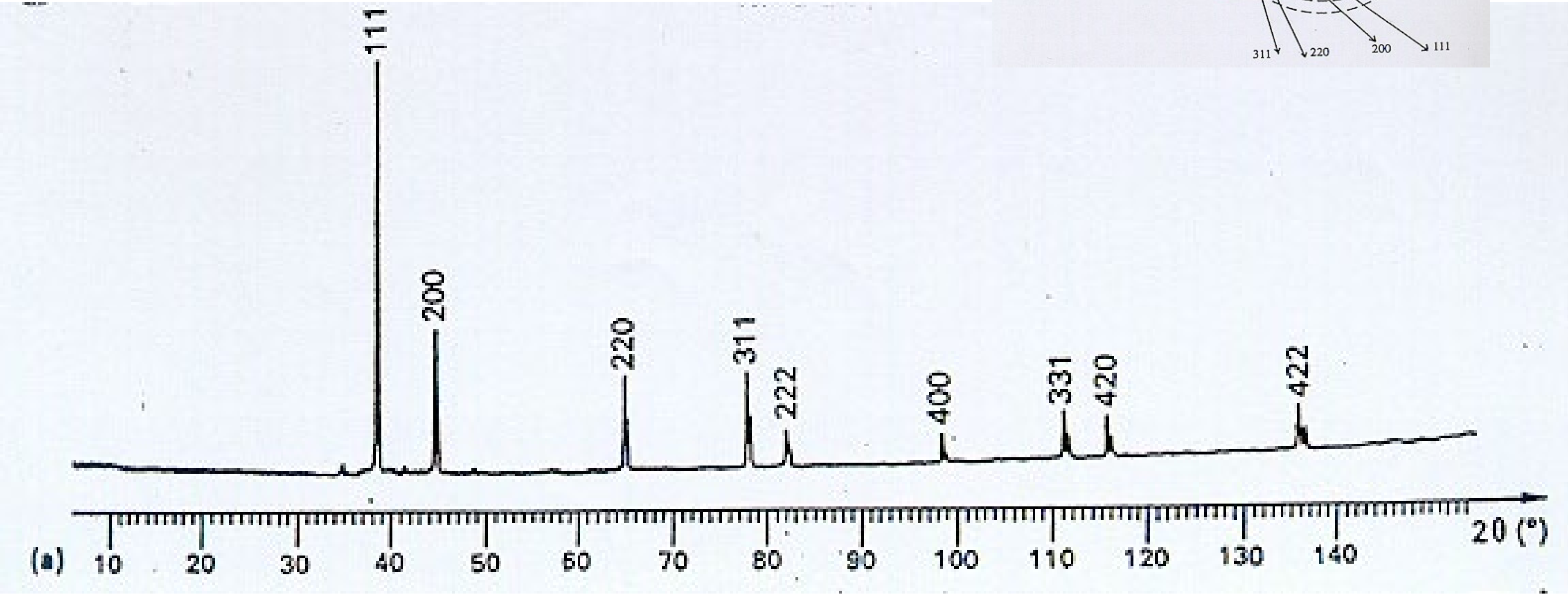


θ Glancing angle
2θ Diffraction angle
α Aperture angle

Fig. 2-1 Diffractometer beam path in θ/2θ mode

Difractograma de pols d'or amb $\lambda(k_\alpha Cu)$= 1.5405
Au, FCC   a= 4.07825, Fm3m.





$$2\ d_{hkl}\ \text{sen}\theta = \lambda$$

DIFRACCIÓ DE RAIGS-X de pols cristal·lina

Difractograma de pols d'or, Au, amb estructura FCC, a= 4.078, Fm3m, posicions atòmiques:(0,0,0) (1/2,1/2,0) (1/2, 0,1/2) (0,1/2,1/2). $\lambda(k_\alpha Cu)$= 1.5406

(hkl)	d_{hkl}	F_{hkl}	2 θ
100	4.078	0	2x10.89
110	2.884	0	2x15.49
111	2.355	$\neq 0$	2x19.10 (pic difracció)
200	2.039	$\neq 0$	2x22.20 (pic difracció)
210	1.824	0	2x24.98
211	1.665	0	2x27.56
220	1.442	$\neq 0$	2x32.29 (pic difracció)
221	1.359	0	2x34.52
300	1.359	0	2x32.29
310	1.290	0	2x36.68
311	1.230	$\neq 0$	2x38.79 (pic difracció)
222	1.177	$\neq 0$	2x40.87 (pic difracció)

Llei de Bragg

$2\ d_{hkl}\ \text{sen}\theta = \lambda$

Recollida de **radiació difractada** segons el **DETECTOR**

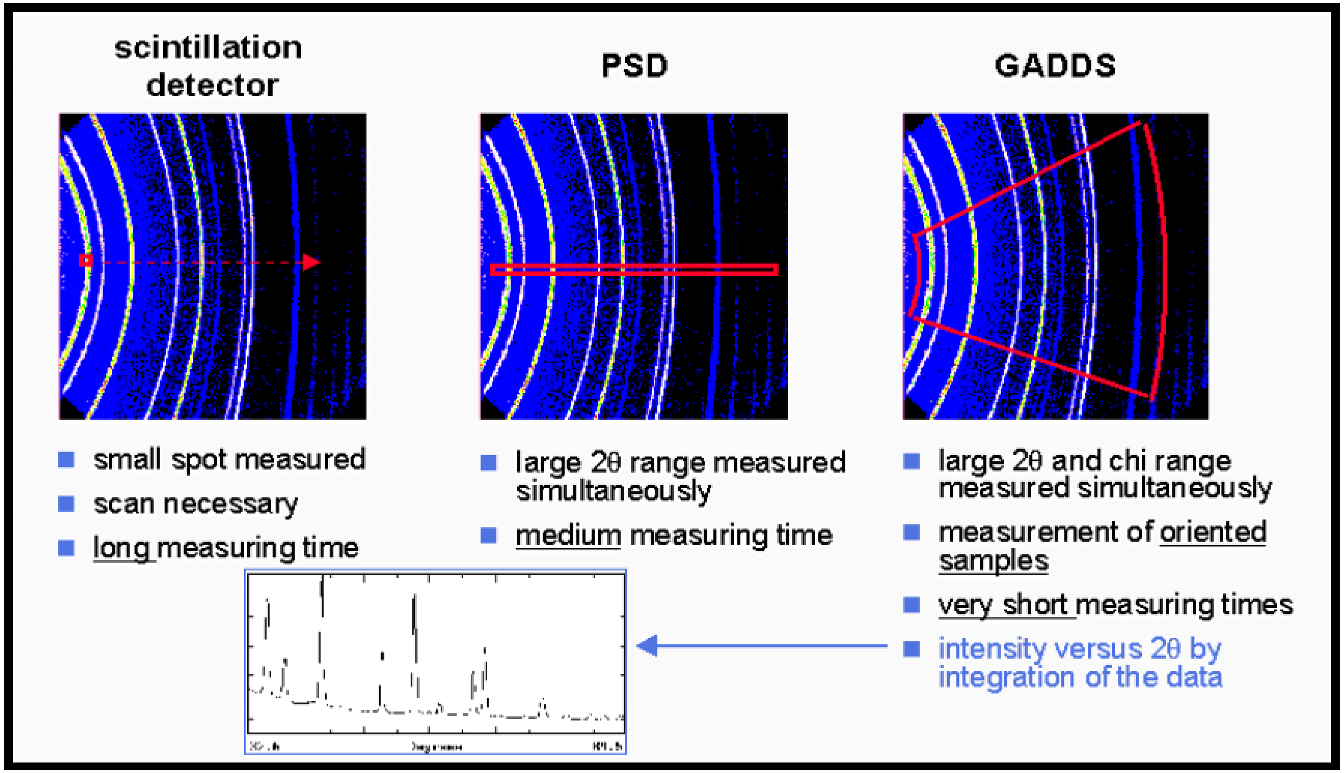
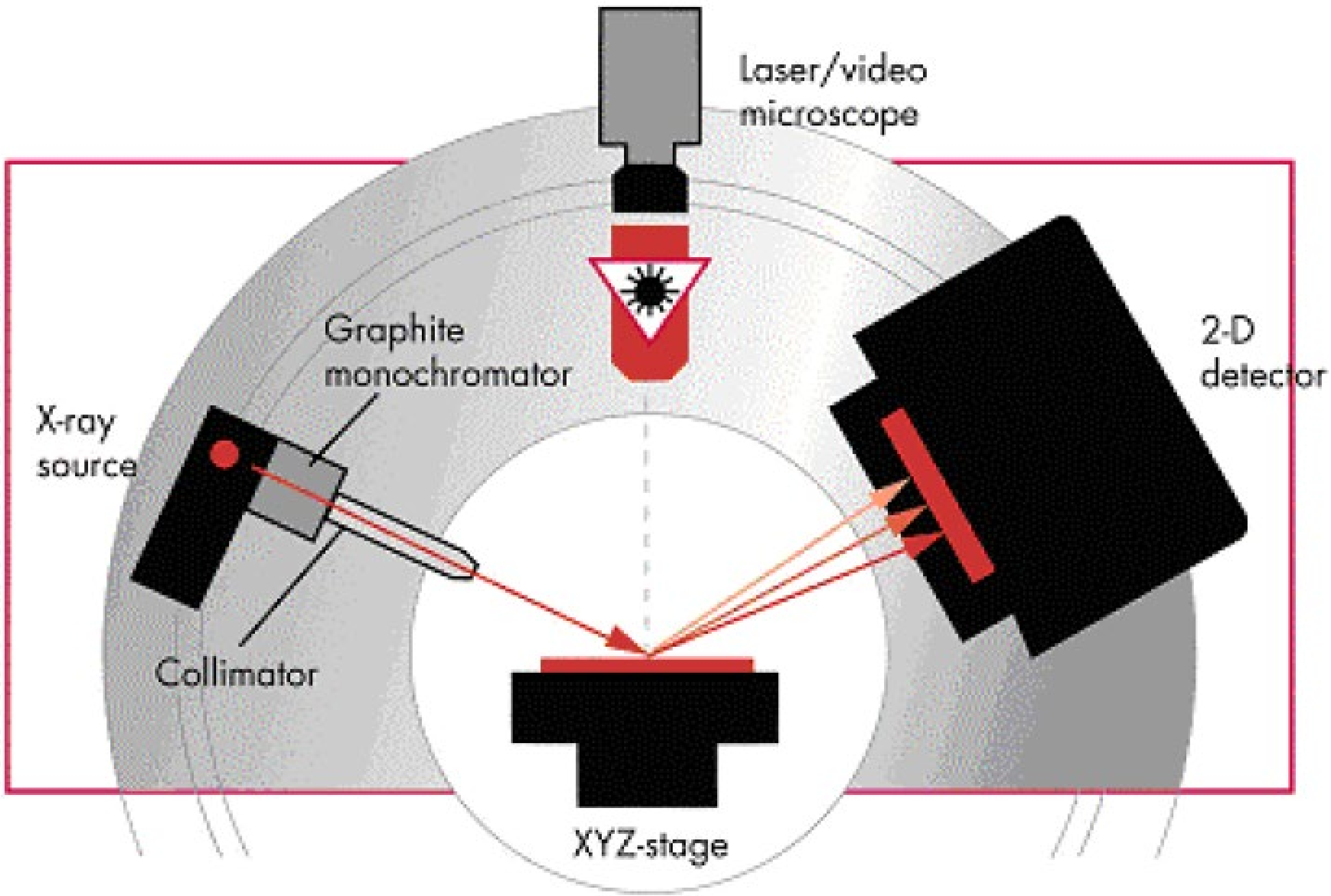


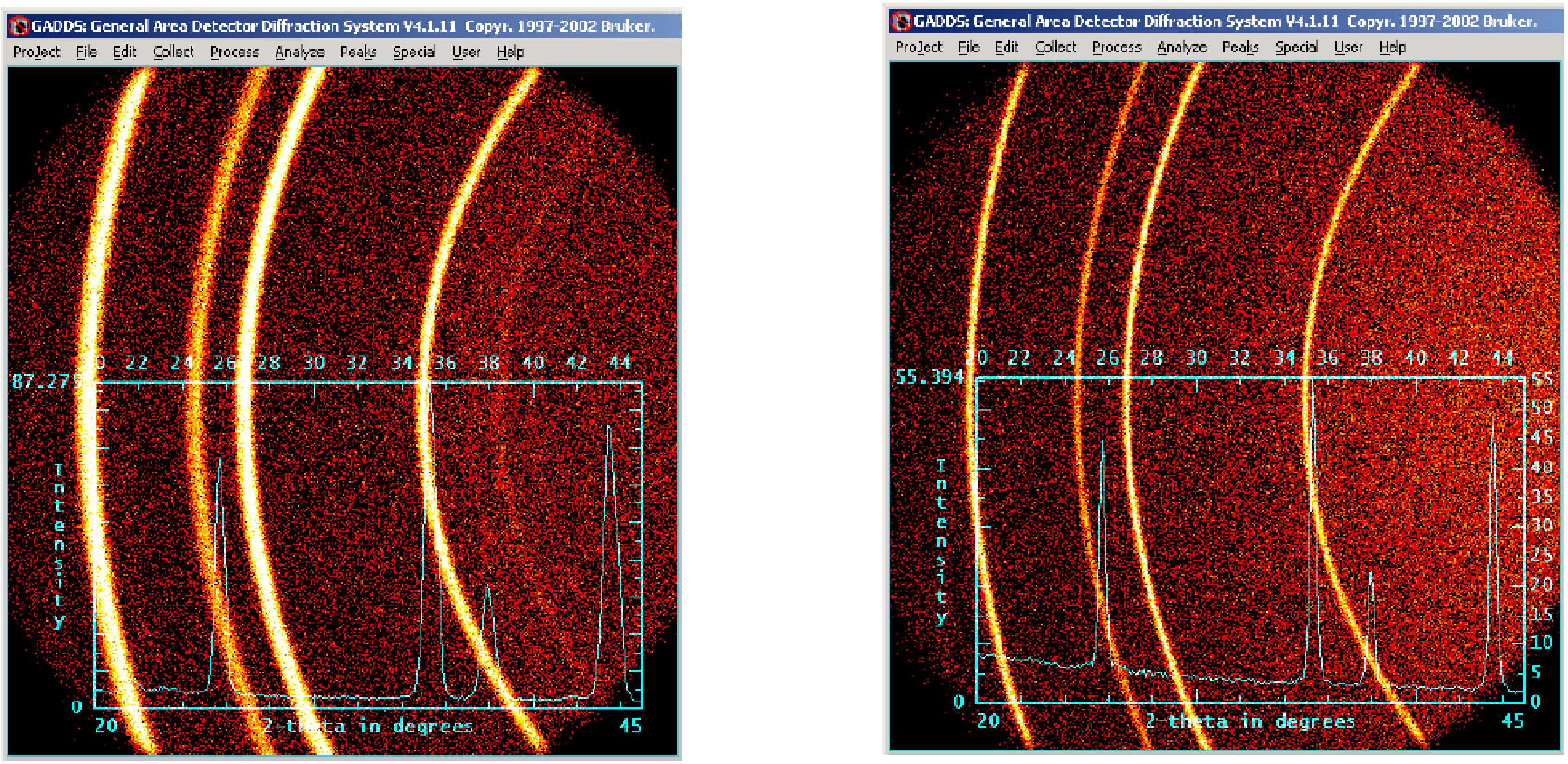
Figure 1.4 - Coverage comparison: point, line, and area detectors

EQUIP DE DIFRACCIÓ DE RAIGS-X amb detector d'àrea



Radiació difractada amb el **DETECTOR d'àrea**

Resultat obtingut amb detector d'area, i la seva equivalencia amb un difractograma convencional de pols crist., Intensitat en relació 2θ.



(a) (b)

Figure 2.24 - Diffraction pattern from corundum:
(a) reflection mode diffraction 5° incident angle,
(b) transmission mode diffraction with perpendicular incident beam

INTENSITAT DIFRACTADA

$$I_{(hkl)} \propto \left| F_{(hkl)} \right|^2$$

$F_{(hkl)}$: porta tota la informació de L'ESTRUCTURA CRISTAL·LINA

- ÀTOMS (TIPUS) DINTRE DE LA CEL·LA
- POSICIONS DELS ATOMS DINTRE DE LA CEL·LA
- VIBRACIONS ATÒMIQUES

$F_{(hkl)}$ = TF [DENSITAT ELECTRÒNICA DE TOTS ELS ÀTOMS DINTRE DEL CRISTALL]

$I_{(hkl)}$ EXPERIMENTAL $\quad F_{(hkl)} \Rightarrow \rho\,(x_i, y_i, z_j)$ densitat electrònica

$$\rho\,(x_i, y_i, z_j) = \sum_h \sum_k \sum_l F_{(hkl)} \exp\,[\,-2\pi i\,(hx_j+ky_j+lz_j)]$$

FACTOR D'ESTRUCTURA

$$F_{(hkl)} = \sum_j f_j \cdot \exp\left[2\pi i\left(\vec{r}^* \cdot \vec{r}_j\right)\right] \cdot \exp\left[-B_j\left(\frac{\text{sen}\,\theta}{\lambda}\right)\right]$$

f_j = FACTOR DE DIFUSIÓ ATÒMICA DE COORDENADA (x_i, y_i, z_j)

$$\vec{r}^* = h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*$$

$$\vec{r}_j = x_j\vec{a} + y_j\vec{b} + z_j\vec{c}$$

B_j = Depèn del DESPLAÇAMENT DELS ÀTOMS (vibracions atòmiques) al voltant de les posicions d'equilibri

$$\vec{r}^* \cdot \vec{r}_j = h \cdot x_j + k \cdot y_j + l \cdot z_j$$

FACTOR D'ESTRUCTURA

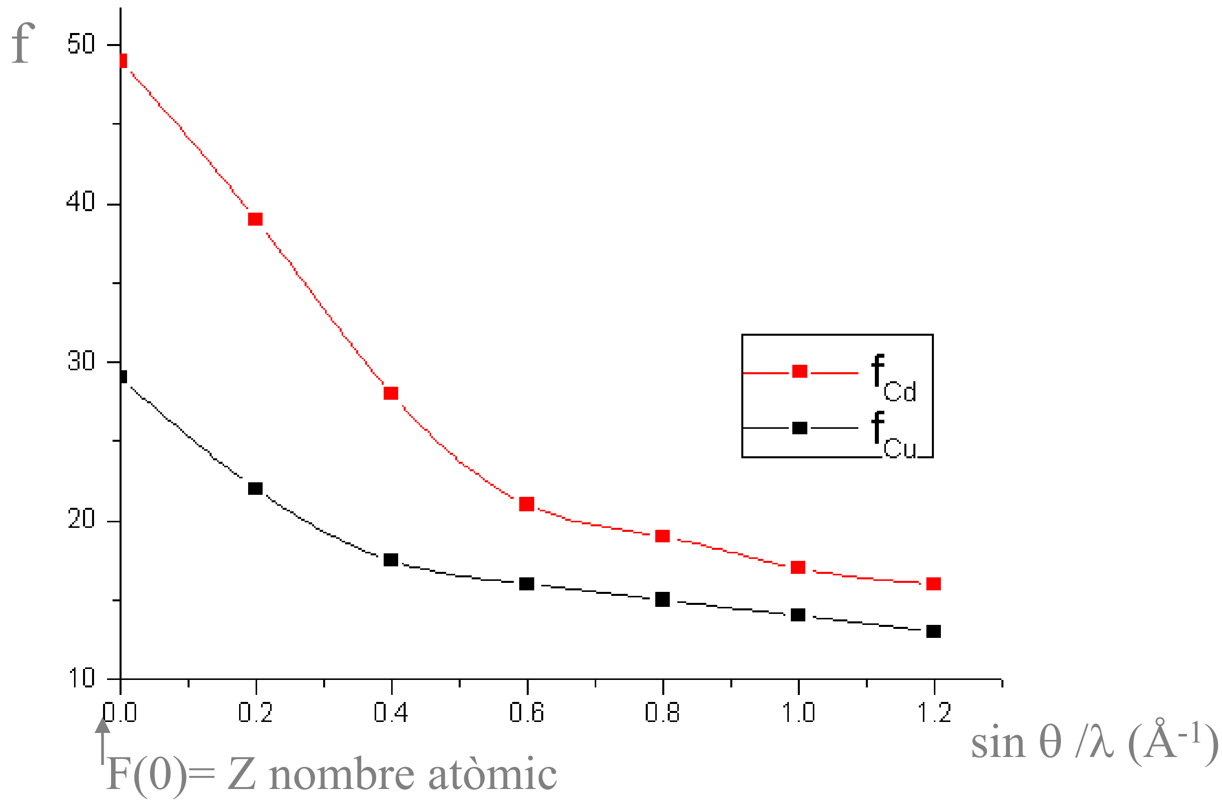
- ELECTRONS participen en la interacció de la radiació incident
- Quantificació de la intensitat difractada per un àtom és funció de la DENSITAT ELECTRÒNICA DE L'ÀTOM

$$f_j(\vec{q}) = TF\left[\rho(\vec{r}_j)\right] = \iiint \rho(\vec{r}_j) \cdot e^{2\pi i(\vec{q}\cdot\vec{r}_j)}\, d^3\vec{r}$$

$$\vec{q} = \vec{k}_d - \vec{k}_i$$

- FACTORS DE DIFUSIÓ ATÒMICA dels diferents àtoms estan en les TAULES INTERNACIONALS DE CRISTAL·LOGRAFIA, PER DIFERENTS $\vec{q}$

FACTOR D'ESTRUCTURA



Cd (Z=48)
Cu (Z=29) $\Longrightarrow$ Si Z ↓ f_Z ↓

f_j = FACTOR DE FORMA DEPÈN DE COM ESTAN DISTRIBUITS ELS ELECTRONS ALS VOLTANT DEL NUCLI

FACTOR D'ESTRUCTURA

hkl	d_{hkl}	sen θ	θ	sen θ/λ	f_{Cu}
100	a				
110	$a/\sqrt{2}$				
111	$a/\sqrt{3}$	0.369	21.7	0.24	22.1
200	$a/\sqrt{4}$		25.3	0.27	20.9
210	$a/\sqrt{5}$				
220	$a/\sqrt{8}$	0.603	37.1	0.39	16.8

FACTOR DE TEMPERATURA

* FACTOR QUE INTRODUEIX LES VIBRACIONS ATÒMIQUES ALVOLTANT DE LES DE LES POSICIONS D'EQUILIBRI.

L'AMPLITUD DE LES VIBRACIONS AUGMENTA AMB LA TEMPERATURA.

$$\exp\left[-B_j\left(\frac{\operatorname{sen}\theta}{\lambda}\right)\right]$$

EN UNA PRIMERA APROXIMACIÓ EL CONSIDEREM INCLOS DINTRE DEL FACTOR DE DIFUSIÓ

FACTOR D'ESTRUCTURA: UN NOMBRE COMPLEXE

$$F_{hkl} = \sum_{j} f_j \cdot e^{\left[2\pi i\left(\vec{r}^{\,*} \cdot \vec{r}_j\right)\right]}$$

$$F_{hkl} = \sum_{j} f_j \cdot e^{[2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)]}$$

$F_{hkl} \Rightarrow$ NOMBRE COMPLEXE

$$F_{hkl} = A_{hkl} + i\, B_{hkl}$$

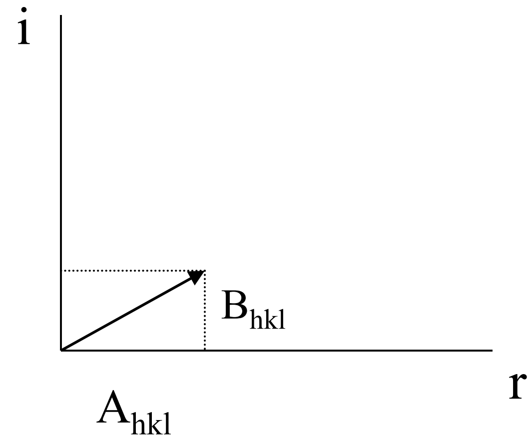
Angle de fase : φ_{hkl} $\qquad$ $tg\varphi_{hkl} = \dfrac{B_{hkl}}{A_{hkl}}$

RECORDATORI

$$F_{hkl} = A_{hkl} + i\,B^{hkl}$$

$$tg\varphi_{hkl} = \frac{B_{hkl}}{A_{hkl}}$$

$$F_{hkl} = \left|F_{hkl}\right| \cdot \left(\cos\varphi_{hkl} + i\sin\varphi_{hkl}\right) = \left|F_{hkl}\right| \cdot e^{i\,\varphi_{hkl}}$$



MODUL D’UN COMPLEXE

$$F = |F|\,(\cos\phi + i\,\mathrm{sen}\,\phi) = |F|\,e^{i\phi}$$

$$|F|^2 = (A + i\,B)(A - iB) = A^2 + B^2$$

$$|F|\,e^{i\phi} \cdot |F|\,e^{-i\phi} = |F|^2\,(\cos\phi + i\,\mathrm{sen}\,\phi)\,(\cos\phi - i\,\mathrm{sen}\,\phi) =$$
$$|F|^2\,(\cos^2\phi + \mathrm{sen}^2\phi) = |F|^2$$

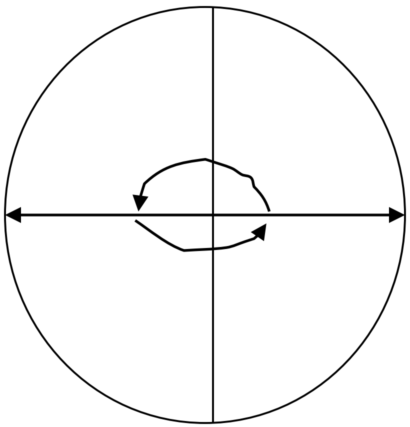
Si $F = |F|\,e^{i\phi}$; $F^* = |F|\,e^{-i\phi}$

$$|F|^2 = F \cdot F^*$$

RECORDATORI

- $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \operatorname{sen} \varphi$
- $e^{-i\varphi} = \cos(-\varphi) + i \operatorname{sen}(-\varphi) = \cos \varphi - i \operatorname{sen} \varphi$
- $e^{n\pi i} = \cos(n\pi) + i \operatorname{sen}(n\pi) = \pm 1 \begin{cases} +1; \text{ si n Parell} \\ -1; \text{ si n Imparell} \end{cases}$

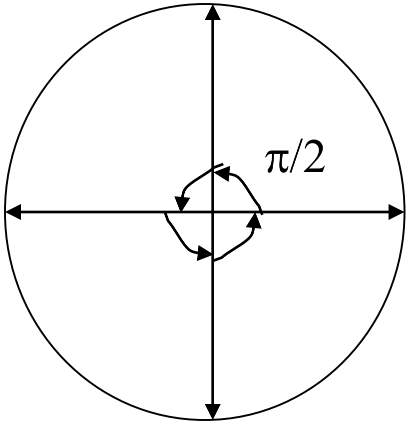
$$\begin{cases} e^{\pi i} = \cos \pi + i \operatorname{sen} \pi = -1 \\ e^{2\pi i} = \cos 2\pi + i \operatorname{sen} 2\pi = 1 \\ e^{3\pi i} = \cos 3\pi + i \operatorname{sen} 3\pi = -1 \\ e^{4\pi i} = \cos 4\pi + i \operatorname{sen} 4\pi = 1 \end{cases}$$



RECORDATORI

- $e^{n\pi/2\ i} = \cos(n\pi/2) + i\ \text{sen}\ (n\pi/2) =$

$$\begin{cases} P \begin{cases} +1;\ \text{si}\ \ n = \dot{4} \\ -\ 1;\ \text{si}\ \ n = \dot{4} + 2 \end{cases} \\ I \begin{cases} +\ i;\ \text{si I i}\ (\dot{4}\ \ +1) \\ -\ i;\ \text{si I i}\ (\dot{4}\ +3) \end{cases} \end{cases}$$



$$e^{\pi/2\ i} = \cos(\pi/2) + i\ \text{sen}\ (\pi/2) = i$$

$$e^{3\pi/2\ i} = \cos(3\pi/2) + i\ \text{sen}\ (3\pi/2) = -i$$

$$e^{5\pi/2\ i} = \cos(5\pi/2) + i\ \text{sen}\ (5\pi/2) = i$$

$$e^{7\pi/2\ i} = \cos(7\pi/2) + i\ \text{sen}\ (7\pi/2) = -i$$

$$e^{2\pi/2\ i} = -1$$

$$e^{4\pi/2\ i} = 1$$

$$e^{6\pi/2\ i} = -1$$

PROBLEMA DE LES FASES

1. ESTRUCTURA CRISTAL·LINA $\Rightarrow F_{hkl} \Rightarrow I_{hkl}$
2. $I_{hkl} \Rightarrow F_{hkl} \Rightarrow$ ESTRUCTURA CRISTAL·LINA

   Camí més llarg del que sembla donat que per un valor de I_{hkl} hi ha molts F_{hkl} que poden ésser solució. <u>PROBLEMA DE LES FASES</u>

$$I_{hkl} = |F_{hkl}|^2 = A_{hkl}^2 + B_{hkl}^2$$

$|F|^2 = 10 \Rightarrow$ Possibles solucions $\Rightarrow$ moltes!!

$F = -\sqrt{5} + \sqrt{5}\, i$	$\operatorname{tg} \phi = \sqrt{5} / -\sqrt{5}$
$F = 3 + i$	$1 / 3$
$F = 3 - i$	
$F = 2 - \sqrt{6}\, i$	
$F = \sqrt{6} - 2\, i$	
$F = \sqrt{5} - \sqrt{5}\, i$	
$F = \sqrt{10}$	
$F = -\sqrt{5}\, i$	

Expressió General del F_{hkl} del NaCl. (Grup espacial Fm3m)

Cl: (0,0,0) (1/2,1/2,0) (1/2,0,1/2) (0,1/2,1/2)

Na: (1/2,0,0) (0,0,1/2) (0,1/2,0) (1/2,1/2,1/2)

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \cdot e^{\left[2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right]}$$

$$F_{hkl} = f_{Cl}\, e^{2\pi i 0} + f_{Cl}\, e^{2\pi i\left(\frac{h+k}{2}\right)} + f_{Cl}\, e^{2\pi i\left(\frac{h+l}{2}\right)} + f_{Cl}\, e^{2\pi i\left(\frac{k+l}{2}\right)} +$$
$$f_{Na}\, e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}\right)} + f_{Na}\, e^{2\pi i\left(\frac{l}{2}\right)} + f_{Na}\, e^{2\pi i\left(\frac{k}{2}\right)} + f_{Na}\, e^{2\pi i\left(\frac{h+k+l}{2}\right)}$$

Expressió General del F_{hkl} del NaCl. (Grup espacial Fm3m)

$$F_{hkl} = f_{Cl}\left\{1 + e^{\pi i(h+k)} + e^{\pi i(h+l)} + e^{\pi i(k+l)}\right\} + f_{Na}\left\{e^{\pi i(h)} + e^{\pi i(l)} + e^{\pi i(k)} + e^{\pi i(h+k+l)}\right\}$$

h	**k**	**l**	**h+k**	**h+l**	**k+l**	**h+k+l**	$\mathbf{F_{hkl}}$
P	P	P	P	P	P	P	$4\ (f_{Cl}+f_{Na})$
I	P	P	I	I	P	I	0
P	I	P	I	P	I	I	0
P	P	I	P	I	I	I	0
I	I	P					0
I	P	I					0
P	I	I					0
I	I	I	P	P	P	I	$4\ (f_{Cl}-f_{Na})$

1. LLEI DE FRIEDEL

$$I_{hkl} = I_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$$

$$I_{hkl} = |F_{hkl}|^2 = F_{hkl} \cdot F^*_{hkl}$$

$$F^*_{hkl} = \sum_j f_j e^{-2\pi i\left(\vec{r}^* \cdot \vec{r}_j\right)} =$$

$$\sum_j f_j e^{2\pi i\left(\bar{h}x_j + \bar{k}y_j + \bar{l}z_j\right)} = F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$$

$$I_{hkl} = F_{hkl} \cdot F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}} = I_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$$

CONSEQÜÈNCIA DE LA LLEI DE FRIEDEL

GRUPS DE LAUE

Si les INTENSITATS DIFRACTADES ELÀSTICAMENT sempre tenen simetria centrosimètrica, independentment del grup puntual de simetria que tingui el cristall li correspondrà un GRUP PUNTUAL CENTRAT

DELS 32 GRUPS PUNTUALS $\left\{ \begin{array}{l} \text{CENTRE DE SIMETRIA} \\ \text{NO CENTRE DE SIMETRIA} \end{array} \right.$

GRUPS DE LAUE

11 GRUPS PUNTUALS (dels 32 cristal·logràfics)

SÓN CENTRATS

$\bar{1}$	$2/m$	mmm	$\bar{3}$	$4/m$	$6/m$	$m\bar{3}$
			$\bar{3}m$	$4/m\,mm$	$6/m\,mm$	$m\bar{3}m$

2. LES INTENSITATS DIFRACTADES PER PLANS RETICULARS RELACIONATS PER ELEMENTS DE SIMETRIA SÓN IGUALS.

Si $2 \,//\, \vec{a}$; $$F_{hkl} = F_{h\bar{k}\bar{l}} \Rightarrow I_{hkl} = I_{h\bar{k}\bar{l}}$$

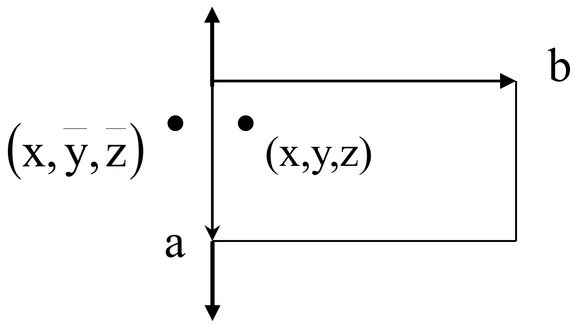
Si $2_1 // \vec{a}$; $$F_{hkl} = \pm F_{h\bar{k}\bar{l}} \Rightarrow I_{hkl} = I_{h\bar{k}\bar{l}}$$

... Etc

CONSEQÜÈNCIA

LES INTENSITATS PRODUÏDES PER DIFRACCIÓ TENEN LA SIMETRIA DEL GRUP PUNTUAL QUE SE DERIVA DEL GRUP ESPACIAL DE LA SUBSTÀNCIA

$$2 \,//\, \vec{a} \quad \Rightarrow \quad I_{hkl} = I_{h\bar{k}\bar{l}}$$



$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} =$$

$$\sum_{j}^{N/2} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} + \sum_{j=N/2}^{N} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j - ky_j - lz_j\right)}$$

(hkl) té com a pla imatge per l'eix 2//a $\Rightarrow \left(h\bar{k}\bar{l}\right)$

$$F_{h\bar{k}\bar{l}} = \sum_{j}^{N/2} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + \bar{k}y_j + \bar{l}z_j\right)} + \sum_{j=N/2}^{N} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)}$$

$$F_{hkl} = F_{h\bar{k}\bar{l}} \Rightarrow I_{hkl} = I_{h\bar{k}\bar{l}}$$

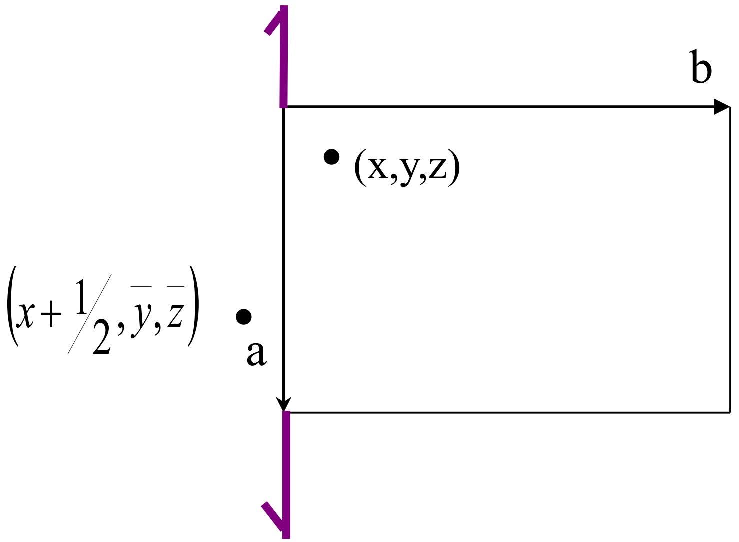
$$I_{hkl} = F_{hkl} \cdot F^{*}_{hkl} = F_{hkl} \cdot F_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}} = F_{h\bar{k}\bar{l}} \cdot F_{\bar{h}kl} = F_{h\bar{k}\bar{l}} \cdot F^{*}_{h\bar{k}\bar{l}} = I_{h\bar{k}\bar{l}}$$

$2_1 \parallel \vec{a} \qquad I_{hkl} = I_{h\bar{k}\bar{l}}$

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \, e^{2\pi i \left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} + \sum_{j=N/2+1}^{N} f_j \, e^{2\pi i \left(hx_j + k\bar{y}_j + l\bar{z}_j + \frac{h}{2}\right)}$$

$$= \sum_{j=1}^{N/2} f_j \, e^{2\pi i \left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} \pm \sum_{j=N/2+1}^{N} f_j \, e^{2\pi i \left(hx_j + k\bar{y}_j + l\bar{z}_j\right)}$$

ja que $e^{2\pi i\, h/2} = \begin{cases} 1 \text{ si h = parell} \\ -1 \text{ si h = imparell} \end{cases}$



$$F_{h\bar{k}\bar{l}} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + \bar{k}y_j + \bar{l}z_j\right)} + \sum_{j=N/2+1}^{N} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + \bar{k}\bar{y}_j + \bar{l}\bar{z}_j + \frac{h}{2}\right)}$$

$$= \sum_{j=1}^{N/2} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + \bar{k}y_j + \bar{l}z_j\right)} \pm \sum_{j=N/2+1}^{N} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)}$$

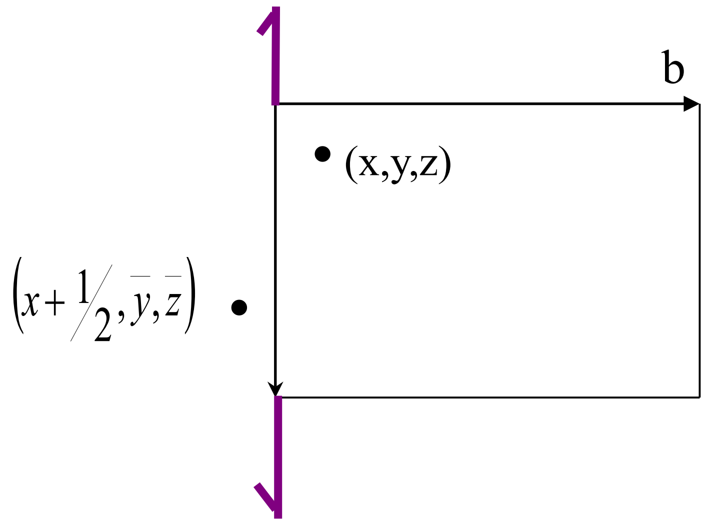
$$F_{hkl} = \pm F_{h\overline{kl}}$$

$$\left|F_{hkl}\right|^2 = \left|F_{h\overline{kl}}\right|^2 \qquad I_{hkl} = I_{h\bar{k}\bar{l}}$$

EXTINCIÓ PER $2_1 \,//\, \vec{a}$

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} +$$

$$\sum_{j=N/2+1}^{N} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j + k\bar{y}_j + l\bar{z}_j + \frac{h}{2}\right)}$$



- Si k=0, l=0

$$F_{h00} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j\right)} \left(1 + e^{2\pi i\left(\frac{h}{2}\right)}\right)
\begin{cases}
h = 2n+1\ ;\ F_{h00} = 0 \\
h = 2n\ ;\quad F_{h00} = 2\sum_{j=1}^{N/2} f_j\, e^{2\pi i\left(hx_j\right)}
\end{cases}$$

3. EXTINCIONS SISTEMÀTIQUES

a) SI CEL·LA es centrada, alguns (hkl) per algunes condicions són extinció.

Si $\mathbf{F_{hkl}=0} \Rightarrow \mathbf{I_{hkl}} = 0$ **(hkl) ÉS UNA EXTINCIÓ**

b) UN ELEMENT DE SIMETRIA AMB LLISCAMENT (EIX O PLA) PROVOCA QUE EL FACTOR D'ESTRUCTURA DE **alguns (hkl) $\perp$ A L'ELEMENT DE SIMETRIA, SIGUI NUL el factor d'estructura i la intensitat**.

Exemple:

Si $2_1 // \vec{a}$ actua (h00)

$$\left.\begin{array}{l}\text{actua (h00)}\\ F_{hoo}= 0;\ \text{si } h \neq 2n\end{array}\right\} \quad \begin{array}{l}F_{100} = 0\\ F_{200} \neq 0\end{array}$$

Si $a \perp \vec{b}$

$$\left.\begin{array}{l}a \perp \vec{b}\\ (010) \perp (h0l)\end{array}\right\} \quad \left. F_{h0l} = 0;\ \text{si } h \neq 2n \right\} \quad \begin{array}{l}F_{101} = 0\\ F_{201} \neq 0\end{array}$$

ESTUDIAR LA INFLUÈNCIA DE LA SIMETRIA EN LA MAGNITUD DE LA INTENSITAT DIFRACTADA.

PERMET CONÈIXER:

⇒ GRUP DE LAUE

- SISTEMA CRISTAL·LÍ

⇒ **EXTINCIONS PERMETEN DETERMINAR**

- **TIPUS DE XARXA**
- **ELEMENTS DE SIMETRIA DEL GRUP ESPACIAL**

Problema 1 Extinció per una cel·la tipus F

Calcular el factor d'estructura dels plans (hkl) d'una estructura amb Grup espacial Fm3m

$$F_{hkl} = \sum_j f_j \cdot e^{\left[2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right]}$$

Resolució:

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N_A/4} f_j e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} + \sum_{N_A/4+1}^{N_A/2} f_j e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j + h/2 + k/2\right)} +$$

$$\sum_{N_A/2+1}^{3N_A/4} f_j e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j + h/2 + l/2\right)} + \sum_{3N_A/4+1}^{N_A} f_j e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j + k/2 + l/2\right)} =$$

$$\sum_{j=1}^{N_A/4} f_j e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} \left[1 + e^{2\pi i\left(\frac{h+k}{2}\right)} + e^{2\pi i\left(\frac{h+l}{2}\right)} + e^{2\pi i\left(\frac{k+l}{2}\right)} \right]$$

Problema 1 Extincións per una cel·la tipus F

h	**k**	**l**	**h+k**	**h+l**	**k+l**	[ ]	F_{hkl}
P	P	P	P	P	P	4	$4\ (f_{Cl}+f_{Na})$
P	P	I	P	I	I	0	0
P	I	P	I	P	I	0	0
I	P	P	I	I	P	0	0
I	I	P	P	I	I	0	0
I	P	I	I	P	I	0	0
P	I	I	I	I	P	0	0
I	I	I	P	P	P	4	$4\ (f_{Cl}-f_{Na})$

Problema 2 Extincións per una cel·la tipus I $F_{hkl} = \sum_j f_j \cdot e^{\left[2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right]}$

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \, e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} + \sum_{N/2+1}^{N} f_j \, e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j + h/2 + k/2 + l/2\right)} =$$

$$= \sum_{j=1}^{N/2} f_j \, e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} \left[1 + e^{2\pi i\left(\frac{h+k+l}{2}\right)} \right] =$$

$$F_{hkl} = 0 \; ; \quad \left[1 + e^{2\pi i\left(\frac{h+k+l}{2}\right)} \right] = 0 \Rightarrow \left[e^{2\pi i\left(\frac{h+k+l}{2}\right)} \right] = -1$$

$$\Rightarrow \quad h + k + l \neq 2n$$

Problema 2 Extinció per una cel·la tipus I

hkl		d_{hkl}	$2\,d_{hkl}\,\mathrm{sen}\theta = \lambda$
(100)	Extinció		
(110)	No-Ext	$a/\sqrt{2}$	θ_{110}
(111)	Extinció		
(200)	No-Ext	$a/2$	θ_{200}
(210)	Extinció		
(211)	No-Ext	$a/\sqrt{6}$	θ_{211}
(220)	No-Ext	$a/\sqrt{8}$	θ_{221}
(221)	Extinció		
(222)	No-Ext	$a/2\sqrt{3}$	θ_{222}

$$d_{hn,\,kn,\,ln} = d_{hkl} / n$$

2θ: angle entre $\vec{k}_i$ i $\vec{k}_d$

Problema 3

El compost NiSi és ròmbic. El seu espectre de difracció presenta les següents reflexions:

1.	111	121	211	231	241	331	....	hkl
2.	022	013	026	051	046	011	....	0kl
3.	102	201	304	105	101	103	....	h0l
4.	210	220	410	420	630	650	....	hk0
5.	200	400	600	800	1000		....	h00
6.	020	040	060	080	0100		....	0k0
7.	002	004	006	008			....	00l

Determina el grup espacial del compost

Problema 3

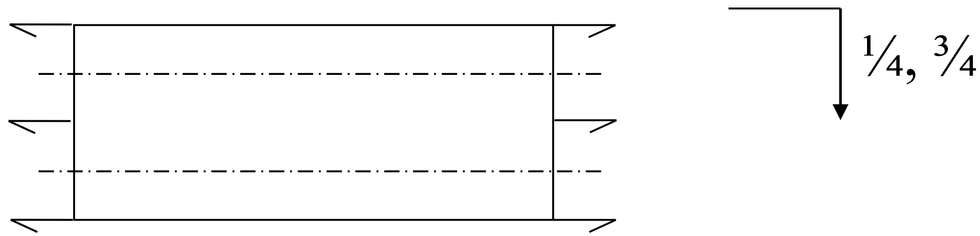
RESOLUCIÓ

1. No hi ha cap extinció sistemàtica del compost $\Rightarrow$ P
2. Només apareixen 0kl amb k+l=2n $\Rightarrow$que hi ha extinció per (0kl) k+l=2n+1 o F_{hkl}= si k+l=2n+1
   Aquesta condició $\Rightarrow$ pla perpendicular a $\vec{a}$
3. No hi ha extinció sistemàtica per (h0l) $\Rightarrow$ que no hi ha pla de lliscament perpendicular a $\vec{b}$. És possible que hi hagi un pla normal o no.
4. (hk0) presenta extinció per h=2n+1 $\Rightarrow$ pla perpendicular a $\vec{c}$ tipus a.
5. (h00) presenta extinció per h=2n+1 $\Rightarrow$ eix 2_1// $\vec{a}$ o pel cas 4
6. (0k0) té extinció per k= 2n+1 eix 2_1// $\vec{b}$ o pel cas 2
7. (00l) té extinció per l= 2n+1 eix 2_1// $\vec{c}$ o pel cas 2

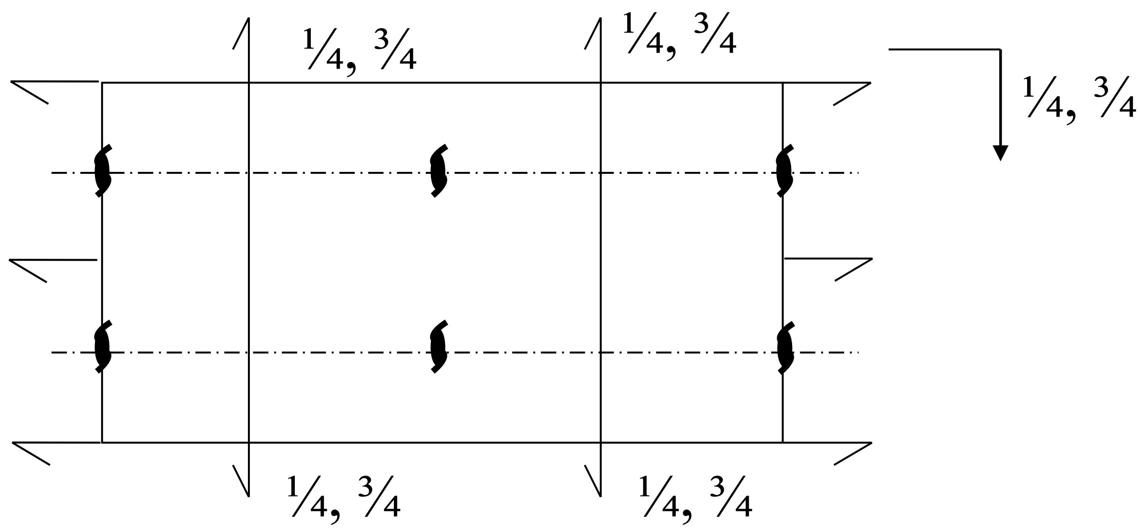
Problema 3

RESUM

Si el compost és nocentrosimètric la solució seria $Pn2_1a$



Si el compost és centrosimètric la solució seria Pnma



Problema 4

Buscar totes les extincions sistemàtiques de les intensitats difractades per un cristall que pertany el grup espacial Ccca.

Resolució:

Ccca és un grup espacial que pertany al sistema ROMBIC , derivat del grup puntual mmm (D_{2h})

C cel·la centrada tipus C $\Rightarrow$ $\vec{t} = \dfrac{\vec{a} + \vec{b}}{2}$

1. $(x_j, y_j, z_j) \xrightarrow{\vec{t}} (x_j + ½, y_j + ½, z_j)$
2. $(x_j, y_j, z_j) \xrightarrow{\text{Pla } c \perp \vec{a}} (\bar{x}_j, y_j, z_j + ½)$
3. $(x_j, y_j, z_j) \xrightarrow{\text{Pla } c \perp \vec{b}} (x_j, \bar{y}_j, z_j + ½)$
4. $(x_j, y_j, z_j) \xrightarrow{\text{Pla } a \perp \vec{c}} (x_j + ½, y_j, \bar{z}_j)$

Problema 4

Buscar els zeros de les funcions F_{hkl}, per a cada causa independent, és el mateix que buscar EXTINCIONS.

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N} f_j \, e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)}$$

1.
$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \, e^{2\pi i (hx_j + ky_j + lz_j)} \left[1 + e^{2\pi i \left(\frac{h+k}{2} \right)} \right]$$

$F_{hkl} = 0$ quan h+k = 2n+1 $\Rightarrow$ $e^{2\pi i \left(\frac{h+k}{2} \right)} = -1$

$F_{hkl} = 0$ si h+k = 2n+1 Condició d'extinció tipus cel·la C

Problema 4

2.

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \left[e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} + e^{2\pi i\left(-hx_j + ky_j + lz_j + \frac{1}{2}\right)} \right]$$

$F_{hkl} = 0$ si $h = 0$ i $l = 2n+1$

$F_{0kl} = 0$ si $l = 2n+1$ Condició d’extinció per un pla tipus $c \perp \vec{a}$

3.

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \left[e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} + e^{2\pi i\left(hx_j - ky_j + lz_j + \frac{1}{2}\right)} \right]$$

$F_{hkl} = 0$ si $h = 0$ i $l = 2n+1$

$F_{h0l} = 0$ si $l = 2n+1$ Condició d’extinció per un pla tipus $c \perp \vec{b}$

Problema 4

4.

$$F_{hkl} = \sum_{j=1}^{N/2} f_j \left[e^{2\pi i\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)} + e^{2\pi i\left(hx_j + \frac{h}{2} + ky_j - lz_j\right)} \right]$$

$F_{hkl} = 0$ si $l = 0$ i $h = 2n+1$

$F_{hk0} = 0$ si $h = 2n+1$ Condició d'extinció per un pla tipus $a \perp \vec{c}$

Taula: **CONDICIONS DE NO-EXTINCIONS**

Class of reflection	Condition for nonextinction (n = an integer)	Interpretation of extinction	Symbol of symmetry element
hkl	$h+k+l=2n$	Body-centered lattice	I
	$h+k=2n$	C-centered lattice	C
	$h+l=2n$	B-centered lattice	B
	$k+l=2n$	A-centered lattice	A
	$\begin{Bmatrix} h+k=2n \\ h+l=2n \\ k+l=2n \end{Bmatrix}$ = h, k, l, all even or all odd	Face-centered lattice	F
	$-h+k+l=3n$	Rhombohedral lattice indexed on hexagonal reference system	R
	$h+k+l=3n$	Hexagonal lattice indexed on rhombohedral reference system	H

Class of reflection	Condition for nonextinction (n = an integer)	Interpretation of extinction	Symbol of symmetry element
$0kl$	$k = 2n$	(100) glide plane, component $\frac{\mathbf{b}}{2}$	$b(P,B,C)$
	$l = 2n$	$\frac{\mathbf{c}}{2}$	$c(P,C,I)$
	$k + l = 2n$	$\frac{\mathbf{b}}{2} + \frac{\mathbf{c}}{2}$	$n(P)$
	$k + l = 4n$	$\frac{\mathbf{b}}{4} + \frac{\mathbf{c}}{4}$	$d(F)$
$h0l$	$h = 2n$	(010) glide plane, component $\frac{\mathbf{a}}{2}$	$a(P,A,I)$
	$l = 2n$	$\frac{\mathbf{c}}{2}$	$c(P,A,C)$
	$h + l = 2n$	$\frac{\mathbf{a}}{2} + \frac{\mathbf{c}}{2}$	$n(P)$
	$h + l = 4n$	$\frac{\mathbf{a}}{4} + \frac{\mathbf{c}}{4}$	$d(F)$, (S)
$hk0$	$h = 2n$	(001) glide plane, component $\frac{\mathbf{a}}{2}$	$a(P,B,I)$
	$k = 2n$	$\frac{\mathbf{b}}{2}$	$b(P,A,B)$
	$h + k = 2n$	$\frac{\mathbf{a}}{2} + \frac{\mathbf{b}}{2}$	$n(P)$
	$h + k = 4n$	$\frac{\mathbf{a}}{4} + \frac{\mathbf{b}}{4}$	$d(F)$

Class of reflection	Condition for nonextinction (n = an integer)	Interpretation of extinction	Symbol of symmetry element
hhl	$l = 2n$	(110) glide plane, component $\frac{c}{2}$	$c(P,C,F)$
	$h = 2n$	$\frac{a}{2} + \frac{b}{2}$	$b(C)$
	$h + l = 2n$	$\frac{a}{4} + \frac{b}{4} + \frac{c}{4}$	$n(C)$
	$2h + l = 4n$	$\frac{a}{2} + \frac{b}{4} + \frac{c}{4}$	$d(I)$

Class of reflection	Condition for nonextinction (n = an integer)	Interpretation of extinction	Symbol of symmetry element
$h00$	$h = 2n$	[100] screw axis, component $\frac{a}{2}$	2_1, 4_2
	$h = 4n$	$\frac{a}{4}$	4_1, 4_3
$0k0$	$k = 2n$	[010] screw axis, component $\frac{b}{2}$	2_1, 4_2
	$k = 4n$	$\frac{b}{4}$	4_1, 4_3
$00l$	$l = 2n$	[001] screw axis, component $\frac{c}{2}$	2_1, 4_2, 6_3
	$l = 3n$	$\frac{c}{3}$	3_1, 3_2, 6_2, 6_4
	$l = 4n$	$\frac{c}{4}$	4_1, 4_3
	$l = 6n$	$\frac{c}{6}$	6_1, 6_5
$hh0$	$h = 2n$	[110] screw axis, component $\frac{a}{2} + \frac{b}{2}$	2_1

DIFRACCIÓ

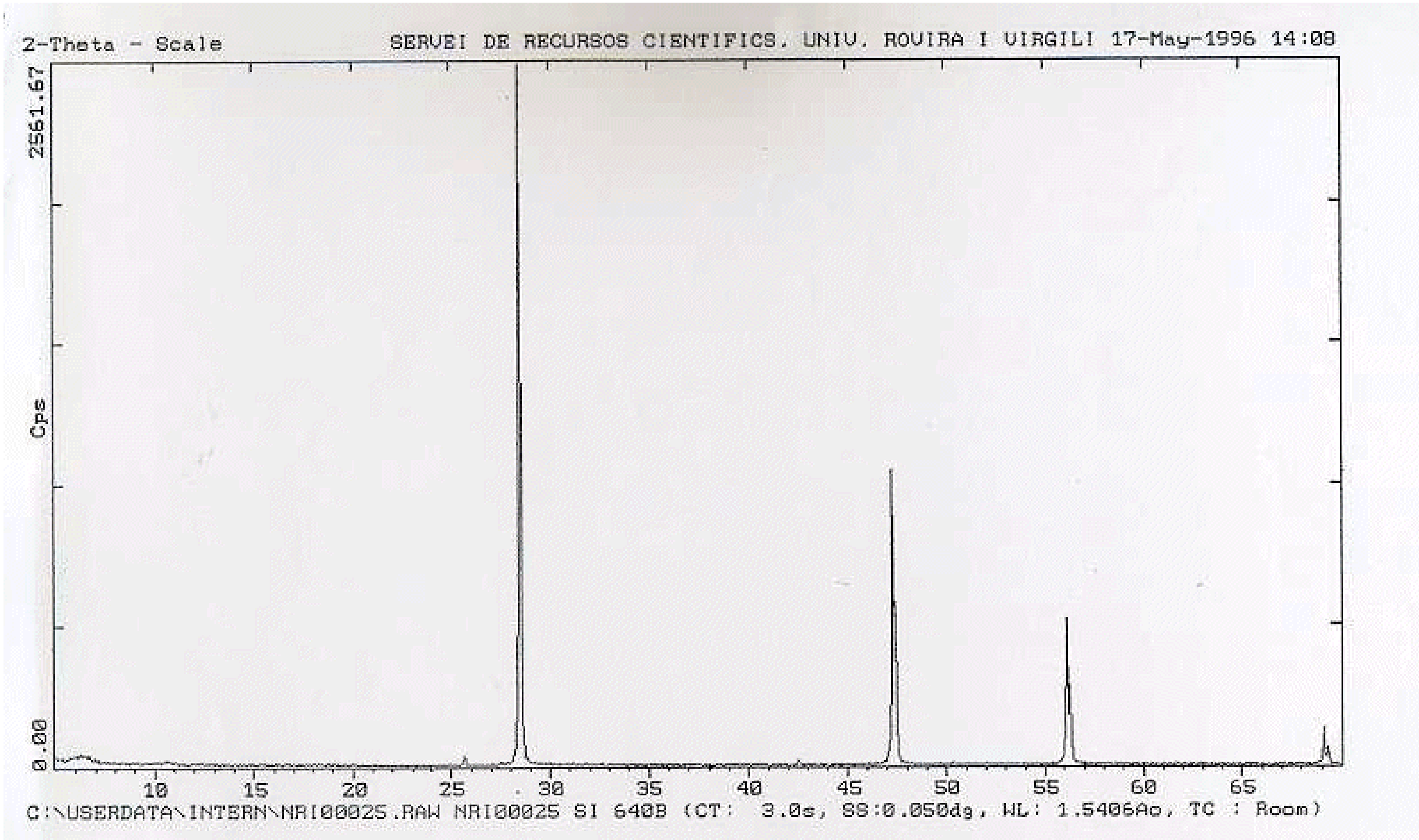
La difracció de Raigs-X com a tècnica de caracterització de pols cristal·lina i mostres de cristall únic?

La difracció de raigs X és una tècnica versàtil i no destructiva per a la identificació i determinació quantitativa de les diverses fases cristal·lines, dels compostos presents en mostres en pols i monocristali·lines

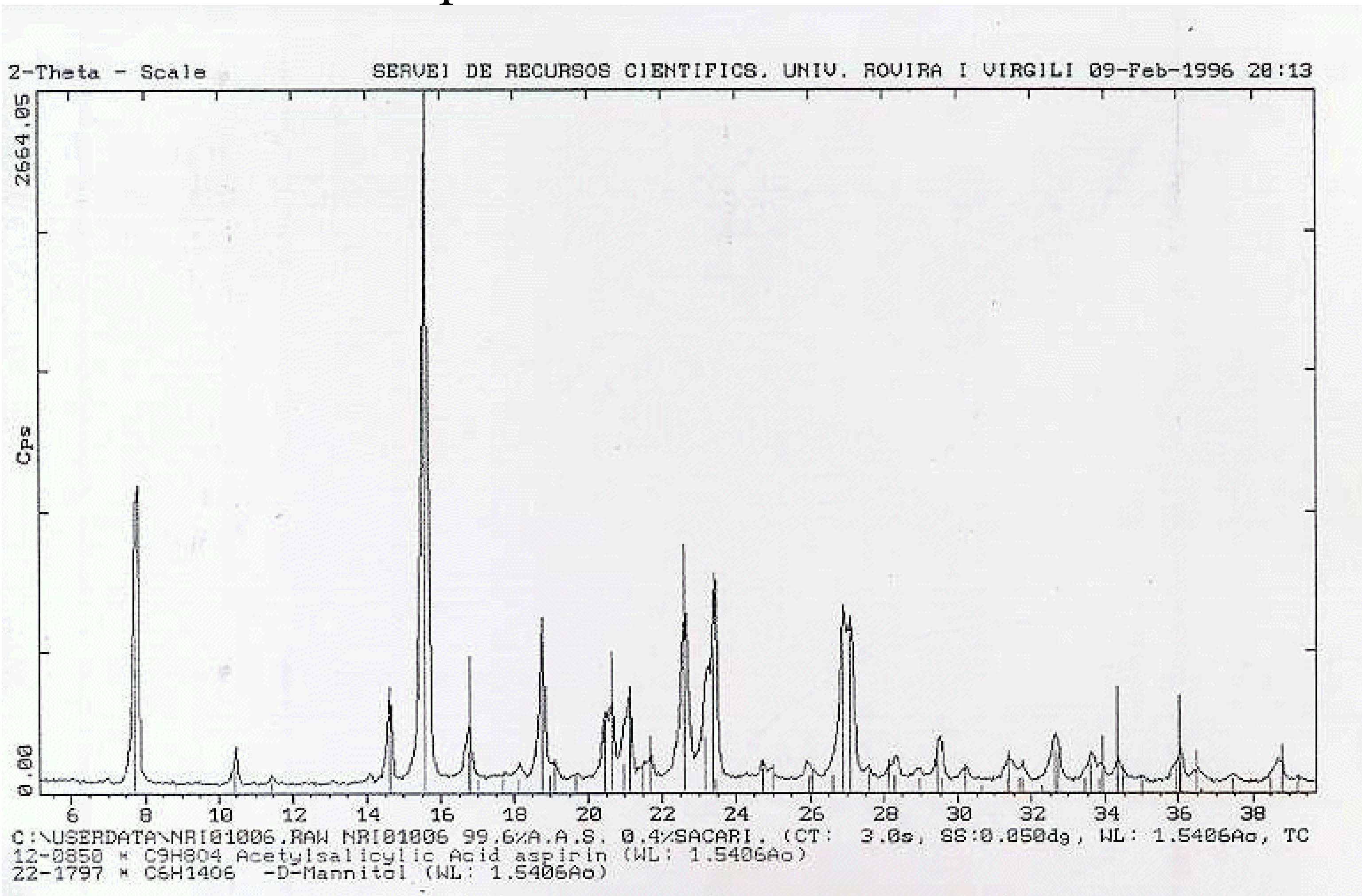
La identificació s'aconsegueix comparant el patró de difracció de raigs X - o "difractograma" - obtingut d'una mostra desconeguda amb una base de dades reconeguda internacionalment que conté patrons de referència. present en mostres sòlides i en pols. **ICDD 2007; 199.000 fases o patrons ICDD 2018; 298.000 fases o patrons. (Abans JCPDS; joint Comitee Powder Diffraction Standards)**

Els sistemes moderns de difractòmetres controlats per ordinador utilitzen rutines automàtiques per mesurar, registrar i interpretar els difractogrames únics produïts per components individuals fins i tot en mescles molt complexes.

Standard material: Crystalline Si



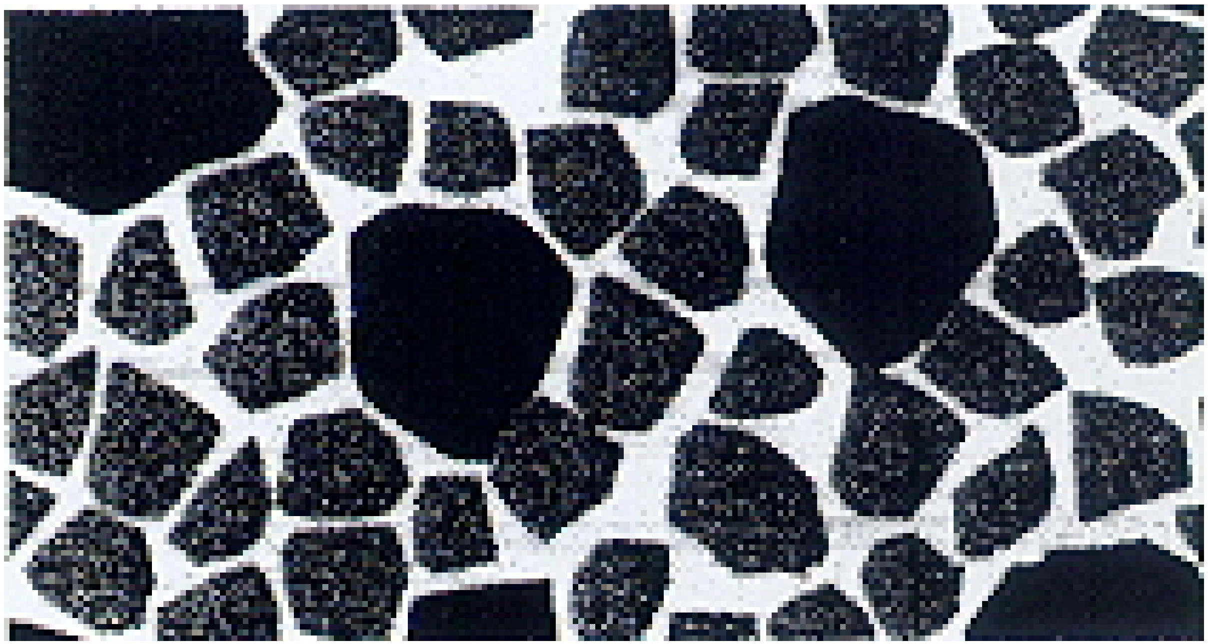
Crystalline material: Aspirine



DIFRACCIÓ

X-RAY CRYSTALLINE POWDER DIFFRACTION METHOD

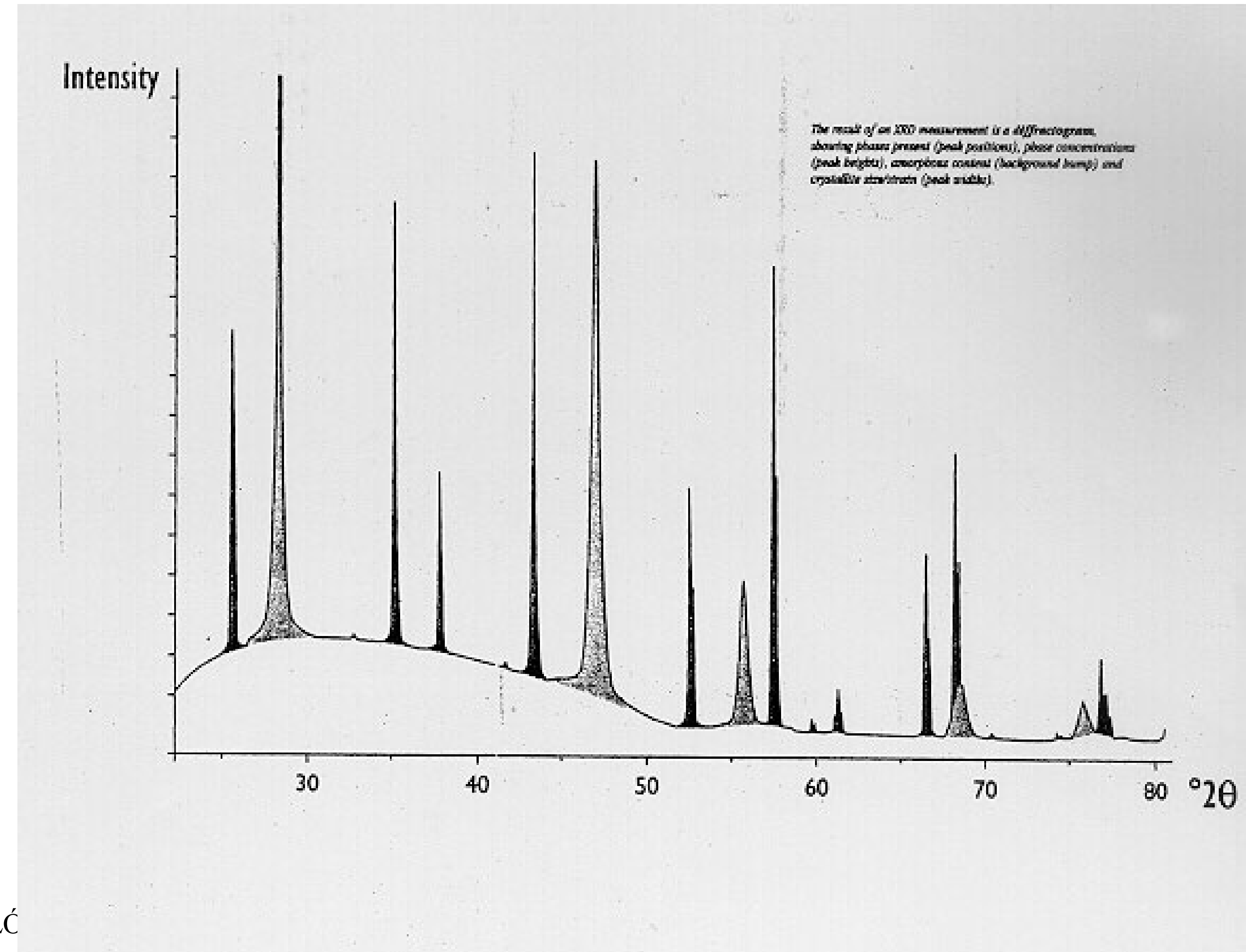
The sample



The diagram depicts a typical sample, comprising two cristalline phases (violet, grey), each with different average crystallite sizes, plus a proportion of amorphous material (beige). The features of the diffractogram shown below are colour coded to indicate the relevant components.

DIFRACCIÓ

- **Which phases are present?**
- **At what concentration levels?**
- **What is the amorphous content of the sample?**

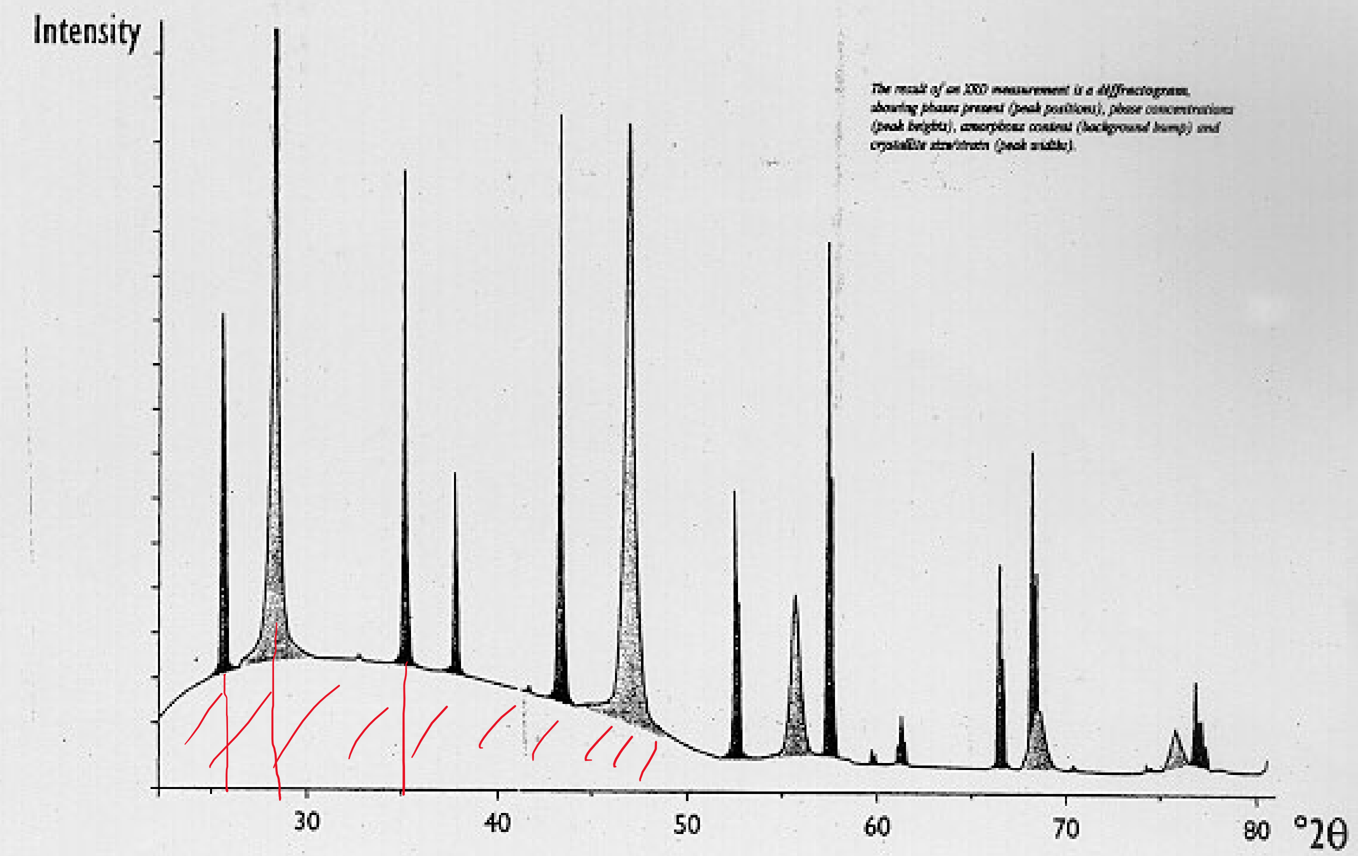


DIFRACCIÓ

·Which phases are present?

·At what concentration levels?

·What is the amorphous content of the sample?



DIFRACCIÓ

Fitxa de difracció de pols cristal·lina. Cada substancia coneguda, una fitxa

04-0836 Wavelength= 1.54056

Cu

Copper

Copper, syn

Rad.: CuKa1 λ: 1.5405 Filter: Ni Beta d-sp:

Cut off: Int.: Diffract. I/Icor.:

Ref: Swanson, Tatge, Natl. Bur. Stand. (U.S.), Circ. 539, I, 15 (1953)

Sys.: Cubic S.G.: Fm3m (225)

a: 3.6150 b: c: A: C:

α: β: γ: Z: 4 mp: 1083

Ref: Ibid.

Dx: 8.935 Dm: 8.950 SS/FOM: F_8 = 89(0.0112, 8)

Color: Red
Pattern taken at 26 C. Sample from metallurgical laboratory of NBS, Gaithersburg, MD, USA. CAS #: 7440-50-8. It had been heated in an H2 atmosphere at 300 C. Impurities from 0.001-0.01%, Ag, Al, Bi, Fe, Si, Zn. Opaque mineral optical data on specimen from unspecified locality, R3R%=60.65, Disp.=Std., VHN100=96-104, Ref.: IMA Commission on Ore Microscopy QDF. Measured density and color from Dana's System of Mineralogy, 7th Ed., I 99. Cu type. Gold group, gold subgroup. PSC: cF4. Mwt: 63.55. Volume[CD]: 47.24.

2θ	Int	h	k	l
43.297	100	1	1	1
50.433	46	2	0	0
74.130	20	2	2	0
89.931	17	3	1	1
95.139	5	2	2	2
116.919	3	4	0	0
136.507	9	3	3	1
144.714	8	4	2	0

DIFRACCIÓ
ICDD (DATA BASE). Cada fitxa, una substancia coneguda.

04-0802 Quality: *

CAS Number: 7440-06-4

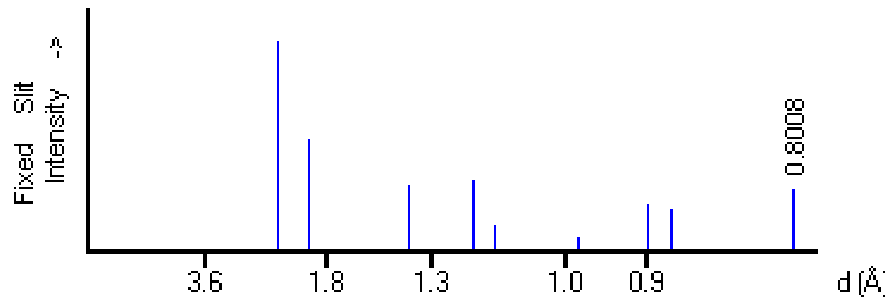
Molecular Weight: 195.09
Volume[CD]: 60.38
Dx: 21.461 Dm: 21.370

Sys: Cubic
Lattice: Face-centered
S.G.: Fm3m (225)
Cell Parameters:
a 3.923 b c
α β γ

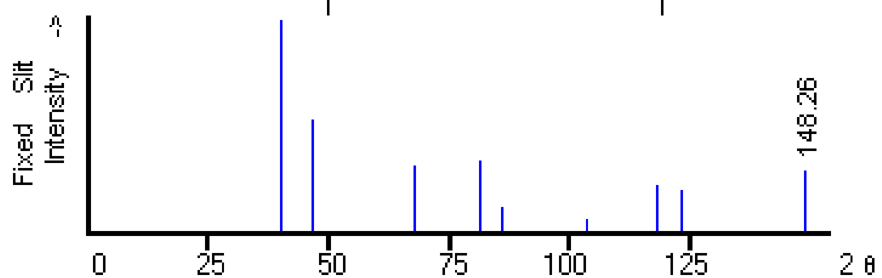
SS/FOM: F 9=143(.0070, 9)
I/Icor:
Rad: CuKa1
Lambda: 1.54056
Filter: Ni
d-sp:

Mineral Name:
Platinum, syn

Pt
Platinum
Ref: Swanson, Tatge, Natl. Bur. Stand. (U.S.), Circ. 539, I, 31 (1953)



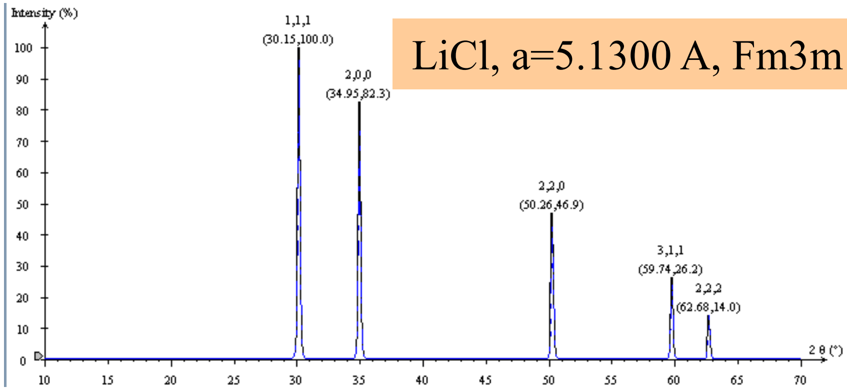
d(A)	Int-f	h	k	l	d(A)	Int-f	h	k	l	d(A)	Int-f	h	k	l
2.2650	100	1	1	1	1.1826	33	3	1	1	.90000	22	3	3	1
1.9616	53	2	0	0	1.1325	12	2	2	2	.87730	20	4	2	0
1.3873	31	2	2	0	.98080	6	4	0	0	.80080	29	4	2	2



2θ	Int-f	h	k	l	2θ	Int-f	h	k	l	2θ	Int-f	h	k	l
39.763	100	1	1	1	81.286	33	3	1	1	117.71	22	3	3	1
46.243	53	2	0	0	85.712	12	2	2	2	122.80	20	4	2	0
67.454	31	2	2	0	103.50	6	4	0	0	148.26	29	4	2	2

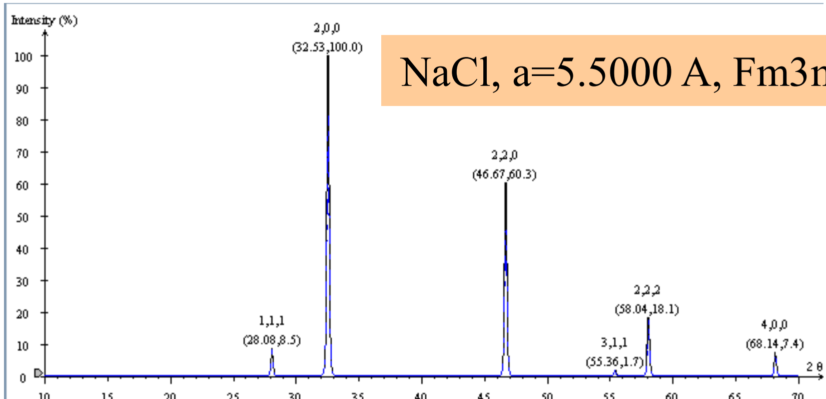
DIFRACCIÓ Difracció de pols cristal·lina.

LiCl, a=5.1300 A, Fm3m



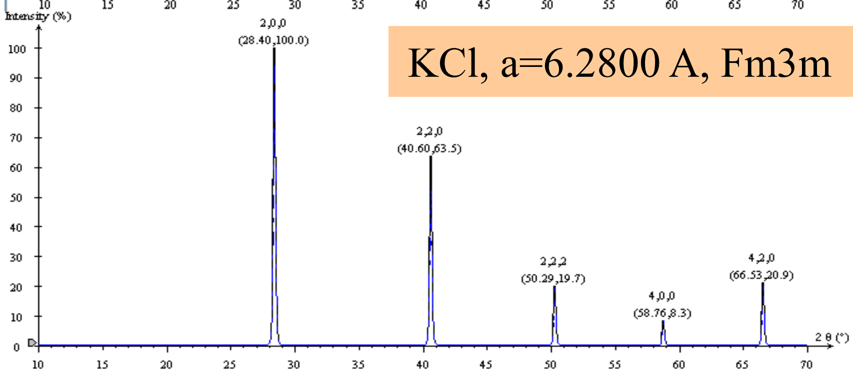
2θ	Int-f	h	k	l	2θ	Int-f	h	k	l	2θ	Int-f	h	k	l
30.071	999 *	1	1	1	59.569	228	3	1	1	81.512	72	3	3	1
34.861	792	2	0	0	62.507	117	2	2	2	84.104	117	4	2	0
50.127	416	2	2	0	73.610	47	4	0	0					

NaCl, a=5.5000 A, Fm3m



2θ	Int-f	h	k	l	2θ	Int-f	h	k	l	2θ	Int-f	h	k	l
27.422	92	1	1	1	53.984	16	3	1	1	73.239	7	3	3	1
31.768	999 *	2	0	0	56.595	161	2	2	2	75.468	152	4	2	0
45.543	560	2	2	0	66.376	63	4	0	0	84.197	101	4	2	2

KCl, a=6.2800 A, Fm3m



2θ	Int-f	h	k	l	2θ	Int-f	h	k	l	2θ	Int-f	h	k	l
24.486	6	1	1	1	50.189	176	2	2	2	73.708	114	4	2	2
28.347	999 *	2	0	0	58.644	70	4	0	0	79.013	1	5	1	1
40.520	594	2	2	0	64.506	1	3	3	1	87.667	31	4	4	0
47.914	4	3	1	1	66.395	171	4	2	0					

DIFRACCIÓ

Annex