Estado Solido

Tarea 3b

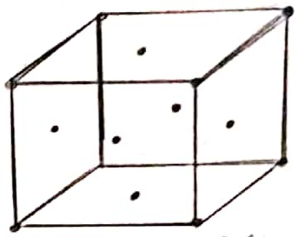
Marco Antonio Rodríguez de León [1941556]

Instrucciones: Responder de manera detallada las preguntas formuladas en este cuestionario. Se debe apoyar cada respuesta, según el caso, con fórmulas y graficas esquematicas.

1,. *Una difracción maxima de tercer orden es observada desde el plano:* (1 1 1) *de un cristal de cobre, usando rayos X de longitud de onda* $\lambda = 0.862\AA = 0.0862nm$. *Los rayos incidentes y refractados son observados en un angulo de* $\theta = 38.26°$. *Encontrar la distancia entre planos* ((1 1 1) *adyacentes en el cobre. Si el cobre es un arreglo FCC, determinar la longitud del borden de la celda unitaria cubica.*

Partiendo de ley de Bragg, para difracción de orden n:

$$d_{hkl} = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta)}$$



FCC

En este caso, el plano es $(h\ k\ l) = (1\ 1\ 1)$,
$\lambda = 0.862\AA$, $\theta = 38.26°$ y al ser de tercer orden: $n=3$

$$\Rightarrow d_{111} = \frac{3(0.862\AA)}{2\sin(38.26°)}$$

$$d_{111} = 0.2088\AA$$

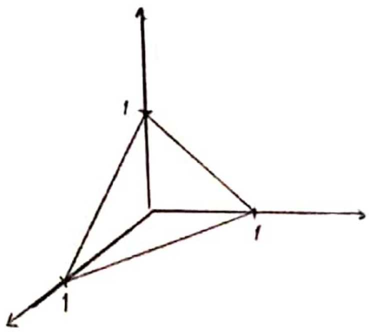
Ahora, de la expresión $d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2}}$, en este caso $a=b=c$

$$d_{111} = \frac{1}{\sqrt{1/a^2 + 1/a^2 + 1/a^2}}$$

$$\Rightarrow d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

$$\Rightarrow a = \sqrt{3}(0.2088\AA)$$

$$\therefore a = 0.3616\AA$$



2.- Una reflexión de Bragg de primer orden es observada a un angulo de $\theta = 23.5°$ con respecto al conjunto de cristales en el plano. Determinar el angulo que se creara por la reflexión de segundo orden con esos planos.

De la ley de Bragg, de orden n:

$$d = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta_n)}$$

Para difracción de orden 1 y 2

$$d = \frac{\lambda}{2\sin(\theta_1)} \quad \wedge \quad d = \frac{2\lambda}{2\sin(\theta_2)}$$

Donde d_{hkl} y λ permanecen invariantes. Entonces:

$$1 = \frac{d}{d}$$

$$\Rightarrow 1 = \frac{\lambda / 2\sin(\theta_1)}{2\lambda / 2\sin(\theta_2)}$$

$$\Rightarrow 1 = \frac{\sin(\theta_2)}{2\sin(\theta_1)}$$

$$\theta_2 = \arcsin(2\sin(\theta_1))$$

Sea $\theta_1 = 23.5°$, entonces

$$\theta_2 = \arcsin(2 \cdot \sin(23,5°))$$

$$\theta_2 = 52.89°$$

3.- *Encontrar la expresión general relacionando el m-esimo y n-esimo orden de una reflexión angular de Bragg para rayos X difractados desde un conjunto de cristales en el plano dados.*

De la ley de Bragg de orden n

$$d = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta_n)}$$

Para dos difracciones, una de orden n y otra de orden m:

$$d = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta_n)} \quad \wedge \quad d = \frac{m\lambda}{2\sin(\theta_m)}$$

Donde, n y λ son invariantes. Entonces

$$1 = \frac{d}{d}$$

$$\Rightarrow \quad 1 = \frac{n\lambda/2\sin(\theta_n)}{m\lambda/2\sin(\theta_m)}$$

$$\Rightarrow \quad 1 = \frac{n}{m}\,\frac{\sin(\theta_m)}{\sin(\theta_n)}$$

$$n\sin(\theta_m) = m\sin(\theta_n)$$

Por tanto: $\theta_m = \arcsin\left(\frac{m}{n}\sin(\theta_n)\right)$

4.- *Un cristal orthorhombic simple tiene una celda unitaria ortogonal, con dimensiones* $a = 2.0\text{Å}$, $b = 3.0\text{Å}$, $c = 4.0\text{Å}$. *Los rayos X con longitud de onda* $\lambda = 0.40\text{Å}$ *son difractados por un arreglo de planos* (3 1 1). *Determinar cuantos haces difractados pueden ser observados, y cual sera el angulo de Bragg en el que se observaran/encontran.*

Partiendo de la relación:

$$d_{hkl} = \frac{1}{\sqrt{h^2/a^2 + k^2/b^2 + l^2/c^2}}$$

Para el plano: $(h,k,l) = (3,1,1)$ y $(a,b,c) = (2.0, 3.0, 4.0)\text{Å}$

$$d_{311} = \left[\left(\frac{3}{2.0\text{Å}}\right)^2 + \left(\frac{1}{3.0\text{Å}}\right)^2 + \left(\frac{1}{4.0\text{Å}}\right)^2\right]^{-1/2}$$

$$\rightarrow d_{311} = \frac{12}{\sqrt{349}}\text{Å} \approx 0.6423\text{Å}$$

Ahora, de la ley de Bragg.

$$d_{hkl} = \frac{n\lambda}{2\sin(\theta_n)}$$

$$\rightarrow n = \frac{2\sin(\theta_n)}{\lambda} d_{hkl}$$

Tomando θ_n como el angulo maximo de difracción $\theta_n = 90°$.

$\lambda = 0.40\text{Å}$ $\wedge$ $d_{hkl} = 0.6423\text{Å}$

$$\Rightarrow n = 2\sin(90°)\frac{0.6423\text{Å}}{0.40\text{Å}}$$

$$n = 3.2777$$

Como $n \in \mathbb{N}$, entonces: $n = \{1, 2, 3\}$. De:

$$\sin(\theta_n) = \frac{n\lambda}{2d_{hkl}} \Rightarrow \theta_n = \arcsin\left(\frac{n\lambda}{2d_{hkl}}\right)$$

Para. $n=1$ $\theta_1 = \arcsin\left(\frac{0.40\text{Å}}{2(0.6423\text{Å})}\right) = 18.14°$

$n=2$ $\theta_2 = \arcsin\left(\frac{2(0.40\text{Å})}{2(0.6423\text{Å})}\right) = 38.51°$

$n=3$ $\theta_3 = \arcsin\left(\frac{3(0.40\text{Å})}{2(0.6423\text{Å})}\right) = 69.09°$

5.- *Mostrar que el factor de estructura geometrica para los arreglos FCC, son dados por* (2.5 – 16).
Tambien, determinar cual de los siguientes rayos X reflectados se perderan:
{(1 0 0), (1 1 0), (1 1 1), (2 0 0), (2 2 0), (2 2 1), (2 1 1), (2 1 0), (3 2 1)}

De la definición de factor de estructura:

$$F_\varepsilon := \sum_{\forall j} e^{-2\pi i(h x_j + K y_j + l z_j)}$$

En este caso: $(x_j, y_j, z_j) \in \{(0,0,0), (0, 1/2, 1/2), (1/2, 0, 1/2), (1/2, 1/2, 0)\}$ para una FCC:

$$\Rightarrow F_\varepsilon = e^{-2\pi i(0h + 0K + 0l)} + e^{-2\pi i(0h + \frac{1}{2}K + \frac{1}{2}l)} + e^{-2\pi i(\frac{1}{2}h + 0K + \frac{1}{2}l)} + e^{-2\pi i(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}K + 0l)}$$

$$\Rightarrow F_\varepsilon = 1 + e^{-\pi i(K+l)} + e^{-\pi i(h+l)} + e^{-\pi i(h+K)}$$

De: $e^{-\pi i(a+b)} = 1$ si: $a \equiv b \mod 2$ (misma paridad)

$e^{-\pi i(a+b)} = -1$ si: $a \not\equiv b \mod 2$ (distinta paridad)

Entonces: $F_\varepsilon = \{0, 4\}$

Para

h	K	l	F_ε
1	0	0	1 - 1 - 1 + 1 = 0
1	1	0	1 - 1 + 1 - 1 = 0
1	1	1	1 + 1 + 1 + 1 = 4
2	0	0	1 + 1 + 1 + 1 = 4
2	2	0	1 + 1 + 1 + 1 = 4
2	2	1	1 - 1 + 1 - 1 = 0
2	1	1	1 - 1 - 1 + 1 = 0
2	1	0	1 + 1 - 1 - 1 = 0
3	2	1	1 + 1 - 1 - 1 = 0

Entonces, las perdidas se encuentran en {(1, 0, 0), (1, 1, 0), (2, 2, 1), (2, 1, 1), (2, 1, 0), (3, 2, 1)}

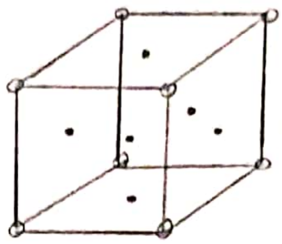
6.- *Mostrar que el factor de estructura de una estructura FCC (2.5 – 16) puede ser determinada por la inclusión de todos los atomos en una red unitaria de FCC, asignando un valor de peso de 1/8 para cada atomo en la esquina, 1/4 para los atomos en los bordes y 1/2 para atomos centrados en las caras.*

Sean los puntos de una red FCC con 1/8:

$$(x_j, y_j, z_j) = \{(0,0,0), (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1), (1,1,0), (0,1,1), (1,0,1), (1,1,1)\}$$

con $j \in [1,8]$

FCC



$0 \rightarrow 1/8$

$\bullet \rightarrow 1/2$

Para los puntos de una red FCC con 1/2:

$$(x_j, y_j, z_j) = \{(1/2, 1/2, 0), (1/2, 0, 1/2), (0, 1/2, 1/2), (1/2, 1/2, 1), (1/2, 1, 1/2), (1, 1/2, 1/2)\}$$

Entonces

$$F_\xi = \frac{1}{8}\sum_{j=1}^{8} e^{-2\pi i(hx_j + Ky_j + \ell z_j)} + \frac{1}{2}\sum_{j=9}^{14} e^{-2\pi i(hx_j + Ky_j + \ell z_j)}$$

$$\Rightarrow F_\xi = \frac{1}{8}\Big[e^{-2\pi i(0h+0K+0\ell)} + e^{-2\pi i(1h+0K+0\ell)} + e^{-2\pi i(0h+1K+0\ell)} + e^{-2\pi i(0h+0K+1\ell)} + \dots$$
$$+ e^{-2\pi i(1h+1K+0\ell)} + e^{-2\pi i(1h+0K+1\ell)} + e^{-2\pi i(0h+1K+1\ell)} + e^{-2\pi i(1h+1K+1\ell)}\Big] +$$
$$+ \frac{1}{2}\Big[e^{-2\pi i(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}K+0\ell)} + e^{-2\pi i(\frac{1}{2}h+0K+\frac{1}{2}\ell)} + e^{-2\pi i(0h+\frac{1}{2}K+\frac{1}{2}\ell)} + e^{-2\pi i(\frac{1}{2}h+\frac{1}{2}K+1\ell)} +$$
$$+ e^{-2\pi i(\frac{1}{2}h+1K+\frac{1}{2}\ell)} + e^{-2\pi i(1h+\frac{1}{2}K+\frac{1}{2}\ell)}\Big]$$

$$\Rightarrow F_\xi = \frac{1}{8}\Big[1 + e^{-2\pi iK} + e^{-2\pi ih} + e^{-2\pi i\ell} + e^{-2\pi i(h+K)} + e^{-2\pi i(h+\ell)} + e^{-2\pi i(K+\ell)}\Big] + \text{A}$$
$$\text{A} + \frac{1}{2}\Big[e^{-\pi i(h+K)} + e^{-\pi i(h+\ell)} + e^{-\pi i(K+\ell)} + e^{-\pi i(h+K+2\ell)} + e^{-\pi i(h+2K+\ell)} + e^{-\pi i(2h+K+\ell)}\Big]$$

Donde: $e^{2\pi i\alpha} = 1 \quad \forall \alpha \in \mathbb{N}$

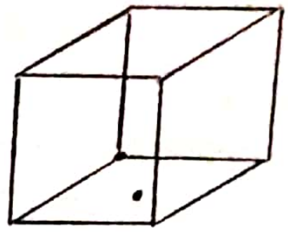
$$\Rightarrow F_\xi = \frac{1}{8}[1+1+1+1+1+1+1+1] + \frac{1}{2}\Big[e^{-\pi i(h+K)} + e^{-\pi i(h+\ell)} + e^{-\pi i(K+\ell)} + e^{-\pi i(h+\ell)} + e^{-\pi i(h+K)} +$$
$$+ e^{-\pi i(K+\ell)}\Big]$$

$$\therefore F_\xi = 1 + e^{-\pi i(h+\ell)} + e^{-\pi i(h+K)} + e^{-\pi i(K+\ell)}$$

El cual es el mismo factor de estructura al de una FCC común.

9.- Encontrar el factor de estructura para un arreglo ortorrómbico BC de la forma

Determinar qué estructuras no se mostrarán $\{(1,0,0),(1,1,0),(1,1,1),(2,0,0),(2,2,0),(2,2,1),(2,1,1),(2,1,0),(3,2,1)\}$



De la definición del factor de estructura:

$$F_E = \sum_{v_j} e^{-2\pi i(h x_j + k y_j + l z_j)}$$

Para este caso $(x_j, y_j, z_j) \in \{(0,0,0), (1/2, 1/2, 0)\}$

$$\Rightarrow F_E = e^{-2\pi i(0h + 0k + 0l)} + e^{-2\pi i(\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + 0l)}$$

$$\Rightarrow F_E = e^0 + e^{-\pi i(h+k)} \qquad / e^{\pi i} = -1 /$$

$$F_E = 1 + (-1)^{h+k}$$

De: $(-1)^{h+k} = \begin{cases} 1, & h \equiv k \mod 2 \\ -1, & h \not\equiv k \mod 2 \end{cases}$

Entonces: $F_E = \begin{cases} 2, & h \equiv k \mod 2 \\ 0, & h \not\equiv k \mod 2 \end{cases}$

Para los planos:

h	k	l	F_E
1	0	0	$1-1=0$
1	1	0	$1+1=2$
1	1	1	$1+1=2$
2	0	0	$1+1=2$
2	2	0	$1+1=2$
2	2	1	$1+1=2$
2	1	1	$1-1=0$
2	1	0	$1-1=0$
3	2	1	$1-1=0$

Por tanto, no se observarán: $\{(1,0,0), (2,1,1), (2,1,0), (3,2,1)\}$

Scanned with CamScanner

8 · Encontrar el factor de estructura para el diamante (arreglo cúbico):
Determinar cual plano no se verá reflejado: $\{(1,0,0), (1,1,0), (1,1,1), (2,0,0), (2,2,0), (2,2,1), (2,1,1), (2,1,0), (3,2,1)\}$

Partiendo de la definición de factor de estructura:

$$F_\varepsilon := \sum_{\forall j} e^{-2\pi i (h x_j + k y_j + l z_j)}$$

En este caso, se tiene: $(x_j, y_j, z_j) \in \{(0,0,0), (0,1/2,1/2), (1/2,0,1/2), (1/2,1/2,0), (1/4,1/4,1/4), (3/4,1/4,3/4), (3/4,3/4,1/4), (1/4,3/4,3/4)\}$

Entonces

$$F_\varepsilon = e^{-2\pi i (0h + 0k + 0l)} + e^{-2\pi i (0h + \frac{1}{2}k + \frac{1}{2}l)} + e^{-2\pi i (\frac{1}{2}h + 0k + \frac{1}{2}l)} + e^{-2\pi i (\frac{1}{2}h + \frac{1}{2}k + 0l)} + \text{Ⓐ}$$

$$\text{Ⓐ} + e^{-2\pi i (\frac{1}{4}h + \frac{1}{4}k + \frac{1}{4}l)} + e^{-2\pi i (\frac{1}{4}h + \frac{3}{4}k + \frac{3}{4}l)} + e^{-2\pi i (\frac{3}{4}h + \frac{1}{4}k + \frac{3}{4}l)} + e^{-2\pi i (\frac{3}{4}h + \frac{3}{4}k + \frac{1}{4}l)}$$

$$\Rightarrow F_\varepsilon = e^0 + e^{-\pi i (h+k)} + e^{-\pi i (h+l)} + e^{-\pi i (k+l)} + e^{-\frac{1}{2}\pi i (h+k+l)} + e^{-\frac{1}{2}\pi i (h+3k+3l)} + e^{-\frac{1}{2}\pi i (3h+k+3l)} + \text{Ⓑ}$$

$$\text{Ⓑ} + e^{-\frac{1}{2}\pi i (3h+3k+l)}$$

Para los planos:

h	k	l	F_ε
1	0	0	1-1-1+1 -1 +1 - 1+1 = 0
1	1	1	1 -1+1-1 - 1 - 1+1+1 = 0
1	1	1	1+1+1+1 +1 - 1-1-1 = 1
2	0	0	1+1+1+1 -1 - 1 - 1 - 1 = 0
2	2	0	1+1+1+1 +1+ 1+ 1+1 = 8
2	2	1	1 -1+1-1 -1-1 -1 -1 = 0
2	1	1	1-1-1+1 + 1 -1+1 - 1 = 0
2	1	0	1+1-1 -1 -1+1- 1+1 = 0
3	2	1	1+1-1-1 -1+1+1-1 = 0