

TRABAJO PRÁCTICO

Aplicaciones de la cristalografía: DIFRACCION DE RX

1) Una muestra de metal BCC fue colocada en un difractómetro de Rayos X con una longitud de onda de 0,1541nm. La difracción de los planos [221] se obtuvo para un ángulo $2\theta = 88,838^\circ$. Determina el valor del parámetro de red "a" para este metal asumiendo que la difracción es de primer orden ($n = 1$). **Rta: $a = 0,3303 \text{ nm}$.**

2) Se tiene una muestra de Au sobre la cual incide un haz de rayos X de una longitud de onda desconocida, en donde se observa para los planos [22] un pico característico para $2\theta = 64,582^\circ$. Determinar la longitud de onda de los Rayos X utilizados si el parámetro de red del oro es de 0,40788nm. **Rta: $\lambda = 0,154 \text{ nm}$.**

3) Se obtiene un difractograma empleando una radiación incidente cuya longitud de onda fue de 0,15405nm. La muestra es de un elemento dado que tiene una estructura BCC o FCC. Dicho diagrama muestra picos de difracción para ángulos 2θ : $36,191^\circ$; $51,974^\circ$ y $64,982^\circ$. determinar: a) La estructura cristalina del elemento. b) La constante de la celdilla elemental "a". c) Identificar el elemento usando los valores obtenidos. **Rta: a) BCC. $a = 0,3501 \text{ nm}$. c) Li**

4) Se estudia mediante DRX una muestra de acero con microestructura ferrítica, empleando una lámpara de emisión de cobre, cuya radiación tiene una longitud de onda de 1,54Å. Sabiendo que el parámetro de celda unitaria del hierro-ferrita tiene 2,87Å, determinar los dos primeros ángulos de giro del goniómetro del difractómetro para los que se producen líneas de difracción. **Rta: a) $44,58^\circ$; $64,9^\circ$.**

5) Se tiene una muestra de la cual se pretende determinar el tipo de pigmento blanco que se ha utilizado como colorante en un termoplástico (ver tabla). Para ello se examina una muestra pulverizada mediante difracción de Rayos X, empleando radiación $\text{Cu K}\alpha$ de $\lambda = 1,541\text{Å}$. Se obtuvo un espectro de difracción con picos en los ángulos $2\theta = 31,72^\circ$, $57,73^\circ$ y $39,12^\circ$. Determinar: a) el tipo de pigmento utilizado. b) ¿Sería posible resolver la cuestión mediante análisis químico?

Pigmento	d_1 (Å)	D_2 (Å)	D_3 (Å)
TiO ₂ (rutilo)	3,24	1,68	1,36
TiO ₂ (anatasa)	3,47	1,88	1,69
TiO ₂ . PbO	2,82	1,69	2,30
Pb ₂ O ₃	3,18	1,95	1,66

Rta: a) TiO₂ . PbO

6) Una muestra de Aluminio finamente dividida se somete a un ensayo de difracción de Rayos X. Se utilizó una radiación monocromática $\text{Cu K}\alpha$ de $\lambda = 1,541\text{Å}$. El espectro obtenido se muestra en la figura. Determinar: a) Las distancias interplanares que producen difracción. b) El parámetro de red, sabiendo que es una red cúbica. c) diferenciar si se trata de una red FCC o de una red BCC. d) El radio atómico del Aluminio. **Rta: a) $2,337 \text{ nm}$; $2,024 \text{ nm}$; $1,431 \text{ nm}$; $1,221 \text{ nm}$. b) $a = 4,048$ c) FCC d) $r = 1,431 \text{ Å}$**

