

Trabajo Práctico de Difracción de Rayos X - CRYSTALOGRAFÍA
 cálculo de $d_h \rightarrow a$ (FCC)

BCC
 1) $\lambda = 0,1541 \text{ nm}$
 Dico plano [221] $\rightarrow 2\theta = 88,838^\circ$
 $a = ?$
 $\theta = 44,419^\circ$

$n\lambda = d \cdot 2 \sin \theta$
 $d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{0,1541}{2 \cdot 0,69} = 0,1101 \text{ nm}$
 $d(hkl) = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \Rightarrow a = 0,1101 \text{ nm} \cdot \sqrt{2^2 + 2^2 + 1^2}$
 $a = 0,3303 \text{ nm}$

2) $\lambda = ?$
 Muestra Au
 $2\theta = 64,582^\circ \rightarrow [220]$
 $a = 0,40788 \text{ nm}$
 $n = 1$
 $\theta = 32,291^\circ$

$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \rightarrow d = \frac{0,40788 \text{ nm}}{\sqrt{2^2 + 2^2}} = 0,1442 \text{ nm}$

$n\lambda = d \cdot 2 \sin \theta$
 $\lambda = 0,1442 \text{ nm} \cdot 2 \cdot \sin 32,291^\circ$
 $\lambda = 0,154 \text{ nm}$

3)
 $\lambda = 0,15405 \text{ nm}$ (Cu)
 BCC o FCC?
 $a = ?$
 Identificac
 Conozco $2\theta \rightarrow \text{picos}$

Aplico relación $\sin^2 \theta$ $\begin{cases} 0,75 \text{ (FCC)} \\ 0,5 \text{ (BCC)} \end{cases}$

	2θ	$\sin^2 \theta$	
a	41,069	0,1231	} $\frac{\sin^2 \theta_1}{\sin^2 \theta_2} = \frac{0,1231}{0,1640} \approx 0,75$ ↓ FCC
b	47,782	0,1640	
c	68,879	0,3280	
d	84,396	0,4512	

- 41,069°
- 47,782°
- 68,879°
- 84,396°

b) conozco hkl porq al ser FCC deben ser o todas pares o todas impares para q haya difracción
 - Empiezo a combinar por los mas bajos de manera creciente

Indices de Miller FCC para que haya difraccion

(111), (200) (220) (311)

Seo "d" para estos planos y calculo "a" promedio

• (111) $\rightarrow d(111) = \frac{\lambda}{2 \sin \theta} = \frac{0,15405}{2 \cdot 0,3508} = 0,2196 \text{ nm}$

200

$d(200) = 0,1902 \text{ nm}$

$d(220) = 0,1345 \text{ nm}$

$d(311) = 0,1147 \text{ nm}$

Calculo

$d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

$\left\{ \begin{array}{l} a(111) = 0,3804 \text{ nm} \\ a(200) = 0,3804 \text{ nm} \\ a(220) = 0,3804 \text{ nm} \\ a(311) = 0,3804 \text{ nm} \end{array} \right\}$

$a = 0,3804 \text{ nm}$

4) Acero (Ferrita)

$\lambda = 1,54 \text{ \AA}$

$\text{Fe}_{(2)} \rightarrow a = 2,87 \text{ \AA} \rightarrow \text{BCC} \left\{ \begin{array}{l} h+k+l=2n \Rightarrow \\ (110) (200) (211) (220) \\ * \quad * \end{array} \right\}$ Planos de difraccion

$2\theta = ? \left\{ \begin{array}{l} 2\theta_1 \\ 2\theta_2 \end{array} \right.$

$|n\lambda = 2d \sin \theta|$

* $d_{(hkl)} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$

$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} \left\{ \begin{array}{l} \sin \theta_1 = 0,3794 \\ \sin \theta_2 = 0,5365 \end{array} \right.$

$d_{(110)} = 0,2029$

$\theta_1 = 22,29^\circ \rightarrow 2\theta_1 = 44,58^\circ$

$d_{(200)} = 0,1435$

$\theta_2 = 32,45^\circ \rightarrow 2\theta_2 = 64,90^\circ$

