

Ecuación de Bragg a partir de la condición de Laue.

De la condición de Laue, tenemos que

$$\bar{G} = k' - k \Rightarrow \bar{G} + k = k'$$

Si elevamos al cuadrado,

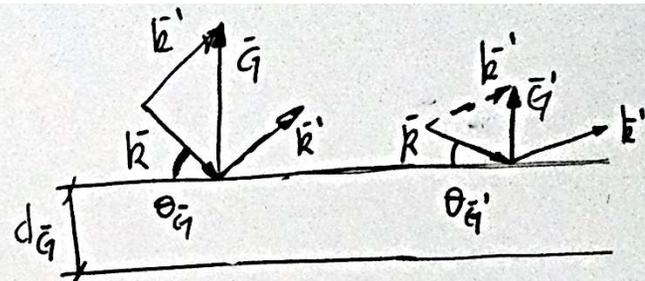
$$(\bar{G} + k)^2 = (k')^2$$

$$|\bar{G}|^2 + |k|^2 + 2 \bar{G} \cdot k = |k'|^2$$

Como analizamos al caso de la dispersión elástica, $|k| = |k'|$

luego, $|\bar{G}|^2 = -2 \bar{G} \cdot k$ ①

Recordemos que cada \bar{G} está asociado a una familia de planos, cuya distancia entre planos es $d_{\bar{G}}$



En la figura puede verse la construcción que describe la condición de Laue.

Desarrollando la ecuación ① tenemos que,

$$\left| \frac{2\pi}{d_{\bar{G}}} \right|^2 = -2 \frac{2\pi}{d_{\bar{G}}} \frac{2\pi}{\lambda} \cos \hat{G}k$$

en nuestro caso, $\cos \hat{G}k = -\cos \theta_{\bar{G}}$

Simplificando y reemplazando

$$\boxed{\lambda = 2d_{\bar{G}} \cos \theta_{\bar{G}}} \text{ Ecuación de Bragg}$$

$$n=1$$

Ecuación de Bragg a partir de la condición de Laue.

Generalizando para $\vec{G}' = n \vec{G}$ $\vec{G}' \parallel \vec{G}$

$$|\vec{G}'|^2 = |n \vec{G}|^2 = n^2 \left(\frac{2\pi}{d_{\vec{G}}}\right)^2$$

$$n^2 \left(\frac{2\pi}{d_{\vec{G}}}\right)^2 = -2n \frac{2\pi}{d_{\vec{G}}} \frac{2\pi}{\lambda} \cos \hat{\vec{G}}' \hat{k}$$

$\cos \hat{\vec{G}}' \hat{k} = -\cos \theta_{\vec{G}'}$

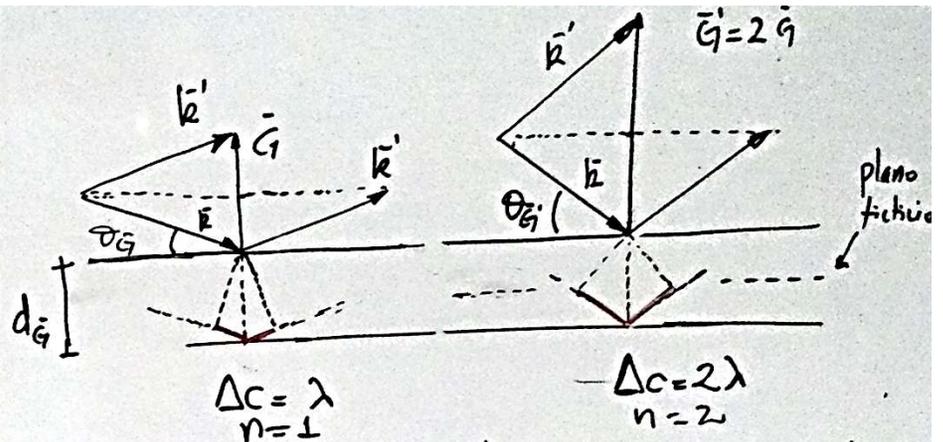
Simplificando y reemplazando,

$$\frac{n}{d_{\vec{G}}} = \frac{2}{\lambda} \cos \theta_{\vec{G}'}$$

$$\Rightarrow \boxed{n\lambda = 2 d_{\vec{G}} \cos \theta_{\vec{G}'}}$$

Si $|\vec{G}'| > |\vec{G}|$ y además $\vec{G}' \parallel \vec{G}$
el ángulo donde se produce el máximo es,

$$\theta_{\vec{G}'} > \theta_{\vec{G}}$$

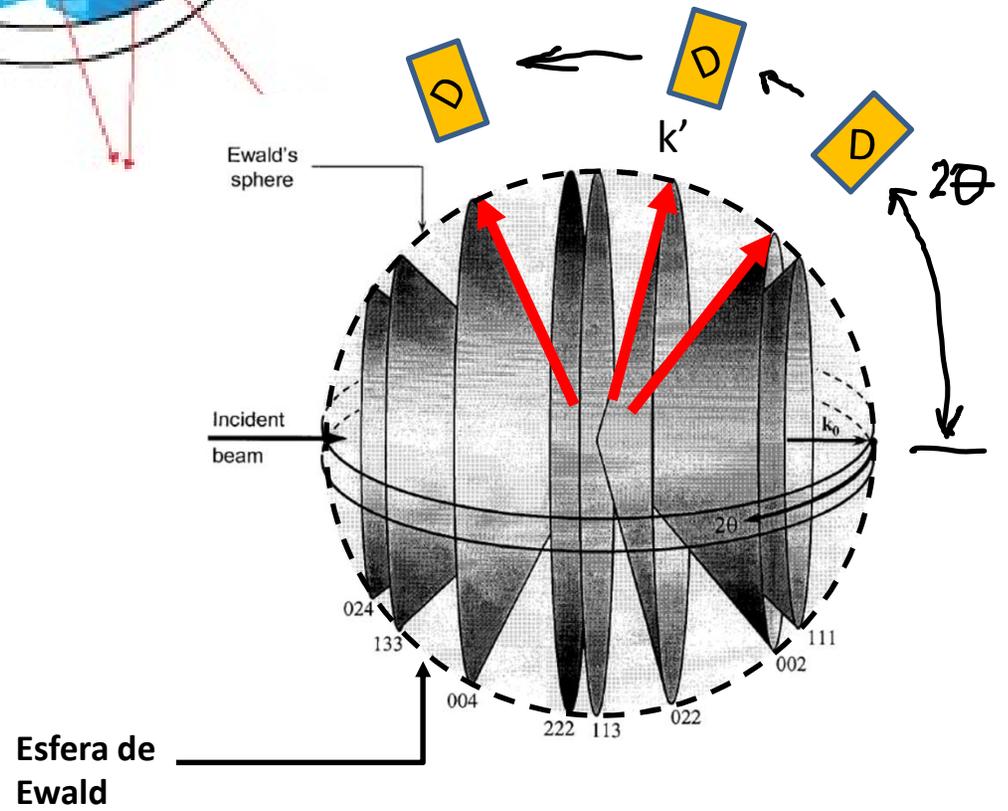
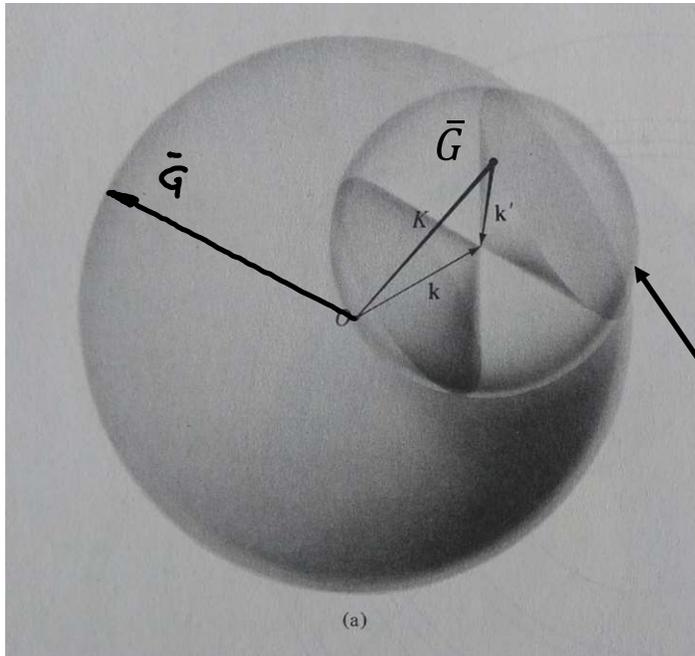
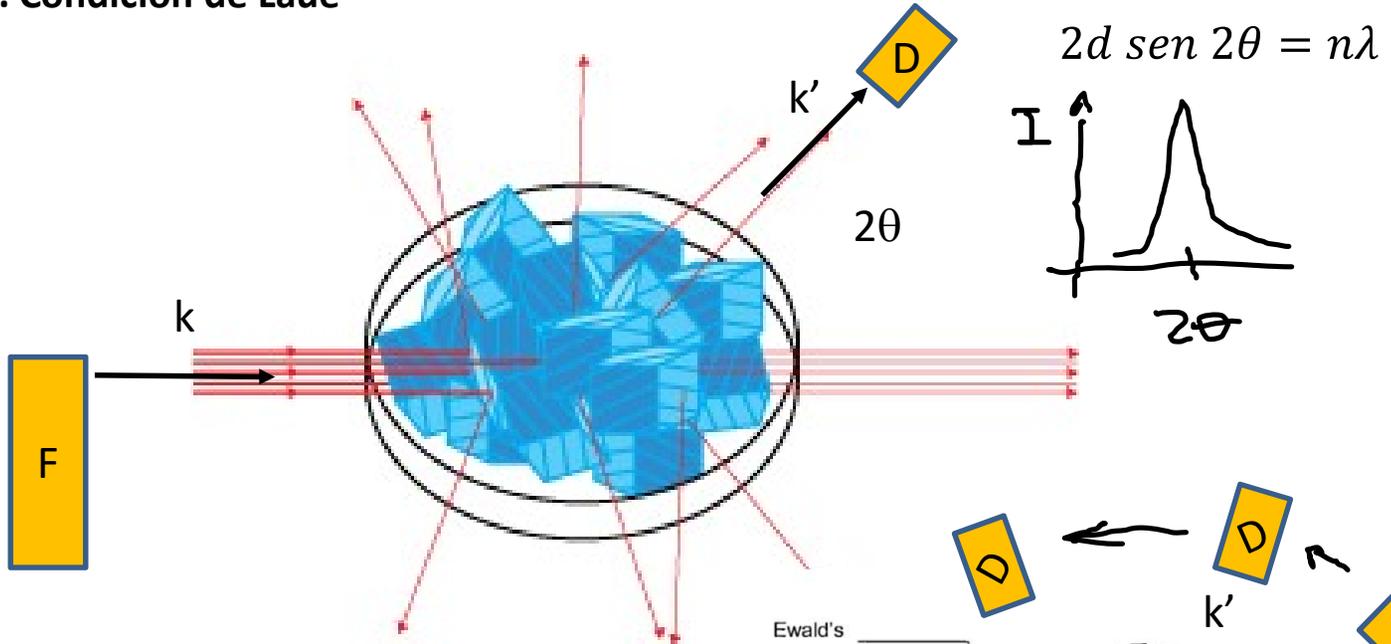
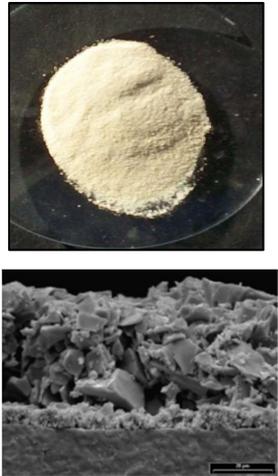


aparecen planos ficticios a una distancia $\frac{d_{\vec{G}}}{n}$ que generan entre sí un diferencia de camino entre los haces de una longitud de onda. Esto se ve si reescribimos la ecuación de Bragg como

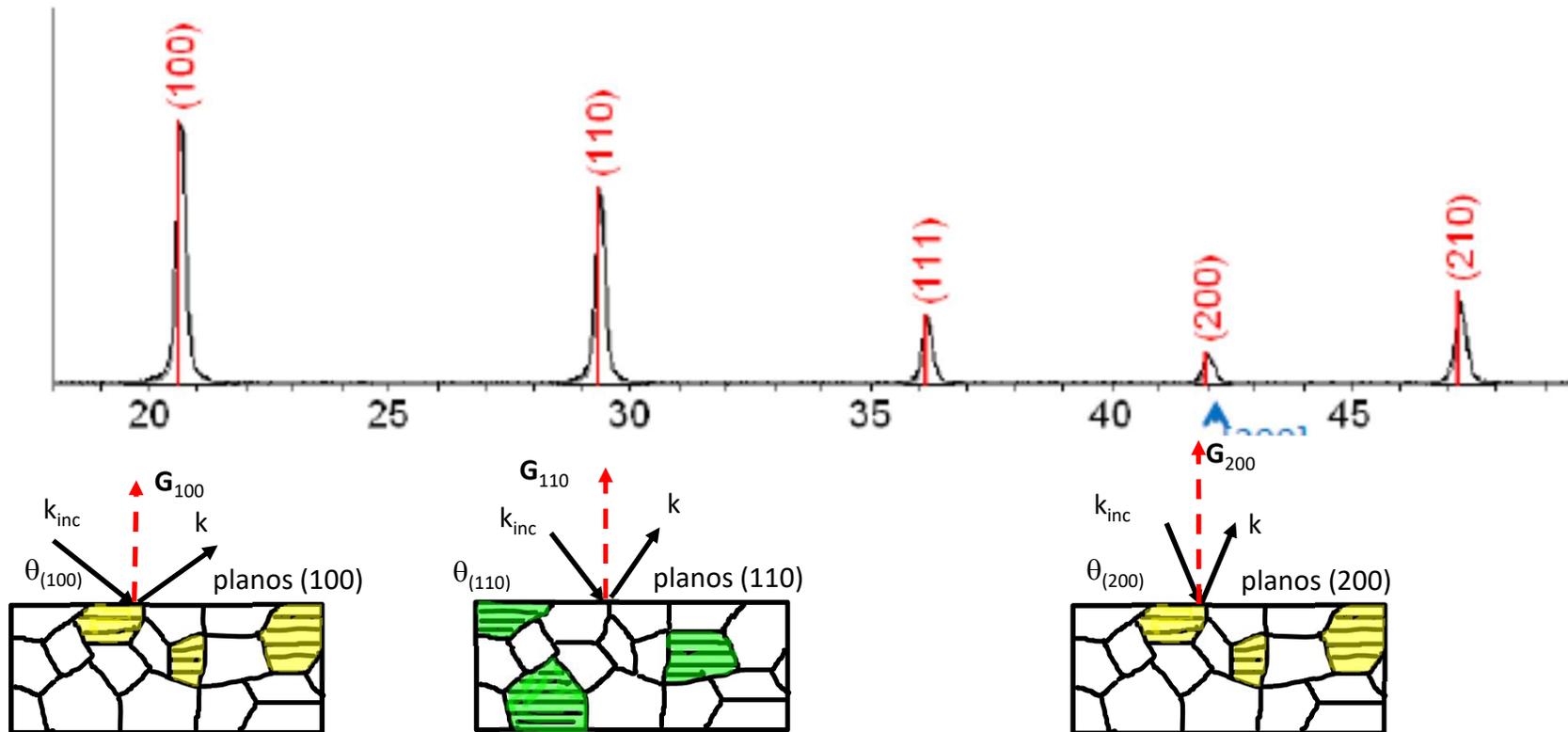
$$\lambda = 2 \frac{d_{\vec{G}}}{n} \cos \theta_{\vec{G}'}$$

$$\lambda = 2 (d_{\vec{G}'}) \cos \theta_{\vec{G}'} \quad d_{\vec{G}'} = \frac{d_{\vec{G}}}{n}$$

Método de polvo. Condición de Laue



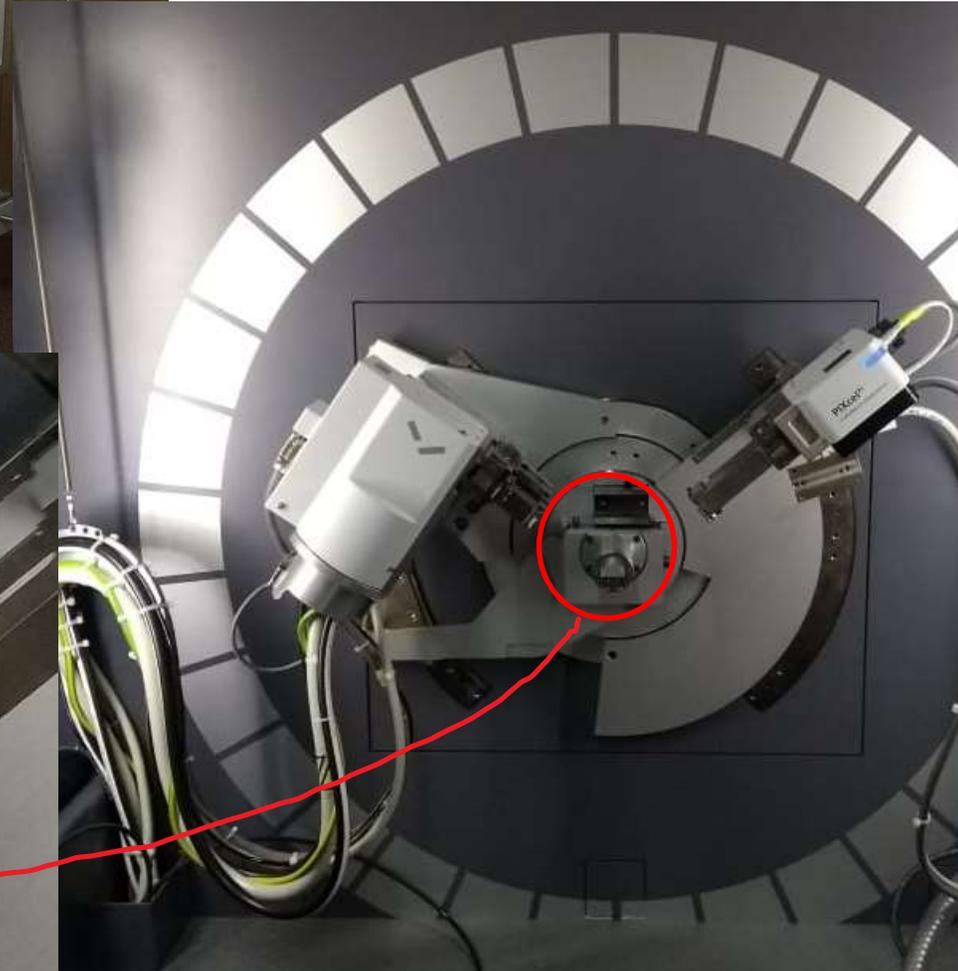
Método de polvo.



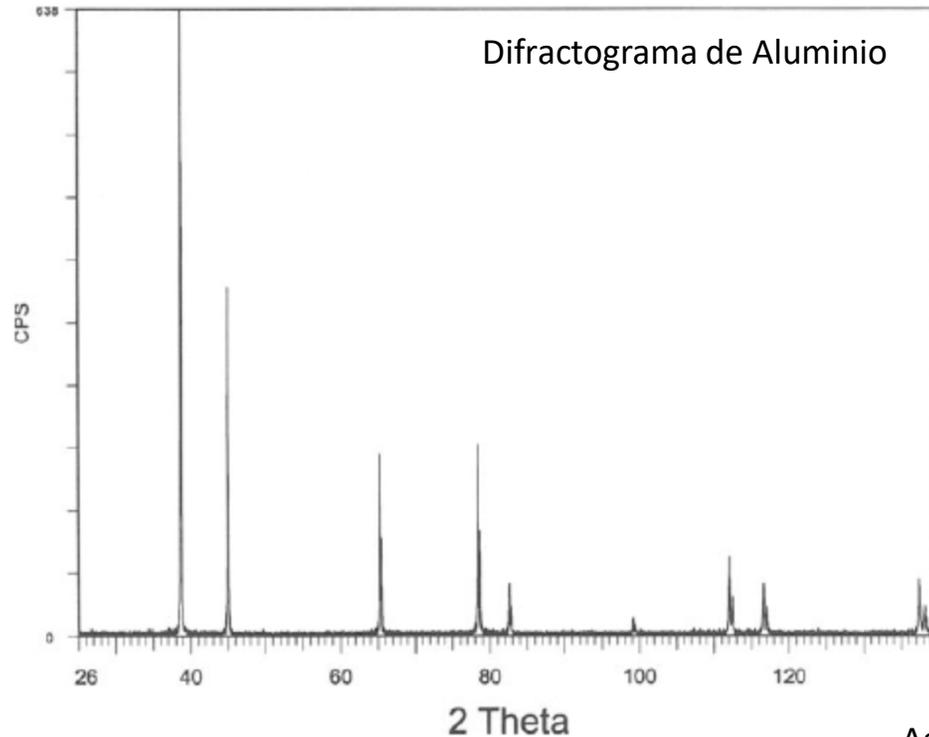
- Para cada conjunto de planos hay una cantidad de cristales que se encuentran orientados adecuadamente para difractar en la condición de Bragg, es decir con los planos (h,k,l) paralelos al plano focal.
- Básicamente se asume que para cada conjunto de planos de red vamos a encontrar un número igual de cristales en condiciones de difracción



**Método de polvo.
Difractómetro Panalytical
Modelo Empyrean III
Departamento de Física - UNS**



Método de polvo. Determinación estructura cúbica (Al).



#pico	2θ	θ
1	38,52	19,26
2	44,76	22,38
3	65,14	32,57
4	78,26	39,13
5	82,47	41,235
6	99,11	49,555
7	112,03	56,015
8	116,60	58,3
9	137,47	68,735

Anteriormente vimos que la relación entre un vector de la red recíproca y los índices de Miller es:

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

También vimos que el vector de la red recíproca \vec{G} está relacionado con una determinada familia de planos, más específicamente con la distancia entre los planos que forman esa familia:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{d_{\vec{G}}} \vec{n}$$

Asumiendo que la celda del Aluminio es cúbica, los vectores $\vec{b}_i = \frac{2\pi}{a} \vec{e}_i$ son la base de vectores de la Red recíproca donde a es el parámetro de red de la celda cúbica del Aluminio, es decir:

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} h\vec{e}_x + \frac{2\pi}{a} k\vec{e}_y + \frac{2\pi}{a} l\vec{e}_z$$

Método de polvo. Indexación de reflexiones de una celda cúbica y determinación del parámetro de red

Igualando ambas expresiones para el módulo de \bar{G} ,

$$|\bar{G}| = \frac{2\pi}{d_{\bar{G}}} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}$$

Utilizando ahora la ecuación de Bragg que relaciona la distancia entre planos y el ángulo del máximo de difracción,

$$2d_{\bar{G}} \sin \theta_{\bar{G}} = \lambda$$

Obtenemos,

$$\frac{4a^2 \sin^2 \theta}{\lambda^2} = h^2 + k^2 + l^2$$

Reordenando,

$$\frac{4a^2}{\lambda^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{\sin^2 \theta}$$

Como $\lambda = 1.5405 \text{ \AA}$, resulta,

$$\frac{4a^2}{\lambda^2} = 27,57 \Rightarrow a_{Al} \approx 4.05 \text{ \AA}$$

$h^2+k^2+l^2$				1	2	3	4	5	6	8	9	10	11	12	13	14	16	17	18	19	20	21	22	24
(h,k,l)				(1,0,0)	(1,1,0)	(1,1,1)	(2,0,0)	(2,1,0)	(2,1,1)	(2,2,2)	(3,0,0)	(3,1,0)	(3,1,1)	(2,2,2)	(3,2,0)	(3,2,1)	(4,0,0)	(4,1,0)	(4,1,1)	(3,3,1)	(4,2,0)	(4,2,1)	(3,3,2)	(4,2,2)
#	2θ	θ	(sin θ) ²	$(h^2+k^2+l^2) / \sin^2(\theta)$																				
1	38,52	19,26	0,1088046	9,191	18,38	27,57	36,76	45,95	55,14	73,53	82,72	91,91	101,1	110,3	119,5	128,7	147,1	156,2	165,4	174,6	183,8	193	202,2	220,6
2	44,76	22,38	0,1449688	6,898	13,8	20,69	27,59	34,49	41,39	55,18	62,08	68,98	75,88	82,78	89,67	96,57	110,4	117,3	124,2	131,1	138	144,9	151,8	165,6
3	65,14	32,57	0,2897988	3,451	6,901	10,35	13,8	17,25	20,7	27,61	31,06	34,51	37,96	41,41	44,86	48,31	55,21	58,66	62,11	65,56	69,01	72,46	75,91	82,82
4	78,26	39,13	0,3982646	2,511	5,022	7,533	10,04	12,55	15,07	20,09	22,6	25,11	27,62	30,13	32,64	35,15	40,17	42,69	45,2	47,71	50,22	52,73	55,24	60,26
5	82,47	41,235	0,4344774	2,302	4,603	6,905	9,206	11,51	13,81	18,41	20,71	23,02	25,32	27,62	29,92	32,22	36,83	39,13	41,43	43,73	46,03	48,33	50,64	55,24
6	99,11	49,555	0,5791652	1,727	3,453	5,18	6,906	8,633	10,36	13,81	15,54	17,27	18,99	20,72	22,45	24,17	27,63	29,35	31,08	32,81	34,53	36,26	37,99	41,44
7	112,03	56,015	0,687546	1,454	2,909	4,363	5,818	7,272	8,727	11,64	13,09	14,54	16	17,45	18,91	20,36	23,27	24,73	26,18	27,63	29,09	30,54	32	34,91
8	116,6	58,3	0,7238795	1,381	2,763	4,144	5,526	6,907	8,289	11,05	12,43	13,81	15,2	16,58	17,96	19,34	22,1	23,48	24,87	26,25	27,63	29,01	30,39	33,15
9	137,47	68,735	0,8684617	1,151	2,303	3,454	4,606	5,757	6,909	9,212	10,36	11,51	12,67	13,82	14,97	16,12	18,42	19,57	20,73	21,88	23,03	24,18	25,33	27,64

- Observar que los índices de Miller de todas las reflexiones son o todos pares o todos impares. Este resultado corresponde a una Red de Bravais FCC.
- Si la red es simple cúbica, se observan reflexiones para todo los índices de Miller (h,k,l).
- Si la red es una BCC, se observan reflexiones para los índices de Miller tal que h+k+l resulta par.

Método de difracción de polvo.

El método de polvo puede utilizarse para obtener información sobre:

- 1) Que fases se encuentran presentes en una muestra.
- 2) Es posible determinar las cantidades relativas en una mezcla de fases tomando como referencia mezclas conocidas.
- 3) Determinar los parámetros de red y la simetría de la Red de Bravais en estructuras sencillas (cúbica, tetragonal, ...)
- 4) Determinar la evolución de la estructura cristalina en función de la composición, temperatura, tensiones, etc
- 5) Refinar los parámetros de una estructura cristalina conocida mediante el uso del método Rietveld
- 6) Determinar tamaño de partícula y microtensiones a partir del análisis del ancho de las reflexiones
- 7)

Problema propuesto 6.

Indexar las reflexiones (asignar los índices de Miller de los planos de reflexión) de los difractogramas del Po y γ Fe obtenidos con radiación de longitud de onda 1.54 Å. Considerar en ambos casos una simetría cúbica.

