

PRÁCTICA 2 SIMULACIÓN DE LA DIFRACCIÓN DE RAYOS X

2.1. Simulaciones de redes planas monoatómicas. Mínimo: 2 orientaciones con familias de planos diferentes y al menos 3 de las cuatro redes planas.

2.1.1. Red plana cuadrada. Parámetros elegidos: $a =$, $b =$, $\gamma =$

Orientación = 0° , $(h,k) = (0,1)$

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

Orientación = , $(h,k) =$

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

Orientación = , $(h,k) =$

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

2.1.2. Red plana rectangular. Parámetros elegidos: $a =$, $b =$, $\gamma =$

Orientación = 0° , $(h,k) = (0,1)$

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

NOMBRE:
FECHA:

GRUPO:

Orientación = , (h,k) =

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

Orientación = , (h,k) =

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

2.1.3. **Red plana hexagonal.** Parámetros elegidos: a = , b = , γ =

Orientación = 0°, (h,k) = (0,1)

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

Orientación = , (h,k) =

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

NOMBRE:
FECHA:

GRUPO:

Orientación = , (h,k) =

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

2.1.4. Red plana monoclinica. Parámetros elegidos: a = , b = , γ = .

Orientación = 0°, (h,k) = (0,1)

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

Orientación = , (h,k) =

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

Orientación = , (h,k) =

Calcula el valor del espaciado entre planos esperado según la orientación elegida,

d_{familia} (teórica) =

Difractograma

2q					
d_{hk}					

d_{familia} (simulación) =

NOMBRE:
FECHA:

GRUPO:

2.2. Simulaciones de redes planas con más de un átomo en la CELDA UNIDAD. Definir al menos una celda unidad que contenga dos o tres átomos con factores atómicos y posiciones diferentes.

2.2.1. Celda unidad 1. Parámetros elegidos: $a =$, $b =$, $\gamma =$

Posición y factores atómicos de los átomos del motivo

$$(x_1, y_1) = (0, 0) \quad f_1 = 1$$

$$(x_2, y_2) = (\quad , \quad) \quad f_2 = \text{$$

$$(x_3, y_3) = (\quad , \quad) \quad f_3 = \text{$$

Orientación elegida =

Difractograma esperado para la celda unidad elegida (red monoatómica):

2q					
I _{hk} (*)					

(*) I_{hk} es el valor de la intensidad del pico de difracción

Difractograma de la red di- o tri-atómica elegida

2q					
I _{hk}					

¿Existen diferencias en las intensidades del difractograma? ¿Para qué vectores (h,k)?

2.2.2. Con la misma celda, elige (x_2, y_2) , (x_3, y_3) , f_2 y f_3 (mínimo dos átomos en la celda) para observar una extinción sistemática.

$$(x_1, y_1) = (0, 0) \quad f_1 = 1$$

$$(x_2, y_2) = (\quad , \quad) \quad f_2 = \text{$$

$$(x_3, y_3) = (\quad , \quad) \quad f_3 = \text{$$

Calcular el factor de estructura $F(h,k)$ esperado, aplicando la expresión [2,4],

$$F(h,k) = 1 + \text{$$

¿Existen valores de (h,k) que anulen el factor de estructura?

En caso contrario redefinir las posiciones y/o los factores atómicos antes de continuar

Orientación elegida =

Difractograma de la red di- o tri-atómica elegida

2q					
I _{hk}					

¿Observas una extinción sistemática de algunos de los picos de difracción (con respecto a los que se obtendrían en la correspondiente red monoatómica)?

¿Para qué vector (h,k)?

¿Coincide con el obtenido del factor de estructura?

Si alguna de las respuestas a estas 3 preguntas fuese NO, volver a repetir el difractograma del cristal en la orientación adecuada.

NOMBRE:
FECHA:

GRUPO:

2.3. Cristales problema: cristales PLANOS. Aplica lo aprendido en los dos apartados anteriores y, después de realizar los difractogramas necesarios, rellena las casillas con los resultados que se os piden.

Cristal 1

Simetría Tipo de red

Espaciado de planos cristalinos

d					
(h,k)					

Parámetros de red: a = , b = , γ = .

Posición y factores atómicos de los átomos del motivo: $(x_1, y_1) = (0,0)$ $f_1 = 1$
 $(x_2, y_2) = (\quad , \quad)$ $f_2 = \text{$ $(x_3, y_3) = (\quad , \quad)$ $f_3 = \text{$ (si los hay)

Cristal 2

Simetría Tipo de red

Espaciado de planos cristalinos

d					
(h,k)					

Parámetros de red: a = , b = , γ = .

Posición y factores atómicos de los átomos del motivo: $(x_1, y_1) = (0,0)$ $f_1 = 1$
 $(x_2, y_2) = (\quad , \quad)$ $f_2 = \text{$ $(x_3, y_3) = (\quad , \quad)$ $f_3 = \text{$ (si los hay)

Cristal 3

Simetría Tipo de red

Espaciado de planos cristalinos

d					
(h,k)					

Parámetros de red: a = , b = , γ = .

Posición y factores atómicos de los átomos del motivo: $(x_1, y_1) = (0,0)$ $f_1 = 1$
 $(x_2, y_2) = (\quad , \quad)$ $f_2 = \text{$ $(x_3, y_3) = (\quad , \quad)$ $f_3 = \text{$ (si los hay)

GRUPO:

[illegible]

NOMBRE:
FECHA:

GRUPO:

(h,kl) →										
$d_{\max}/d_{hkl}$ HEXAG										

Cristal 1.

Completar con los datos experimentales del difractograma de polvo

2q										
$\sin q / \sin q_{\min}$										

Compara la secuencia con los $d_{\max}/d_{hkl}$ de las distintas estructuras:

Estructura

Parámetros de red: a = , c =

Posición del motivo: $(x_1, y_1, z_1) = (0, 0, 0)$

$(x_2, y_2, z_2) = (\quad , \quad)$ $(x_3, y_3, z_3) = (\quad , \quad)$ (si los hay)

Cristal 2.

Completar con los datos experimentales del difractograma de polvo

2q										
$\sin q / \sin q_{\min}$										

Estructura

Parámetros de red: a = , c =

Posición del motivo: $(x_1, y_1, z_1) = (0, 0, 0)$

$(x_2, y_2, z_2) = (\quad , \quad)$ $(x_3, y_3, z_3) = (\quad , \quad)$ (si los hay)

Cristal 3

Completar con los datos experimentales del difractograma de polvo

2q										
$\sin q / \sin q_{\min}$										

Compara la secuencia con los $d_{\max}/d_{hkl}$ de las distintas estructuras:

Estructura

Parámetros de red: a = , c =

Posición del motivo: $(x_1, y_1, z_1) = (0, 0, 0)$

$(x_2, y_2, z_2) = (\quad , \quad)$ $(x_3, y_3, z_3) = (\quad , \quad)$ (si los hay)