

CONTROL DE LECTURA 4
Ciencia de los Materiales, ME-3201
Prof. Aquiles Sepúlveda
03 octubre, 2010
Tiempo: 90 minutos

Pregunta 1

Considere un cristal cúbico de caras centradas, formado por átomos de radio R. Además considere un plano de ese cristal que es paralelo al eje Z, y que corta al eje X en 5 veces la arista y al eje Y en 3 veces la arista.

Se pide:

- Calcular la densidad 3D del cristal, ρ^{3D} [átoms./R³]. (1/6).
- Calcular la densidad del plano indicado, ρ^{2D} [átoms./R²]. (2/6).
- Calcular (correctamente) los índices de Miller del plano indicado, (hkl). Sea explícito en su procedimiento. (1/6)..
- Ocupando los índices de Miller, calcular la respectiva distancia interplanar, d[R]. (1/6)..
- Empleando los resultados de b) y d), y no por otro método, calcular la densidad del cristal, ρ^{3D} [átoms./R³]. Sea explícito en su procedimiento y cálculos. (1/6).

Respuesta

Cristal CCC, átomos de radio R

- Considerando un triángulo rectángulo en una cara se tiene $a^2+a^2=(4R)^2 \rightarrow a=2\sqrt{2} R$.
Considerando una celda: $\rho^{3D} = (8*1/8+6*1/2) \text{ átomos}/ a^3$, de donde $\rho^{3D} = 1/(4\sqrt{2}) \text{ áts./R}^3 = (0,177 \text{ áts./R}^3)$.
- Conviene considerar una figura del cristal con el eje Z perpendicular al papel, y distinguir átomos en los vértices y en el centro de las caras, ver Figura 1. Ya sobre el plano se puede considerar una celda con átomos en los vértices de esa celda y en el centro de ella, ver Figura 2. Las aristas de esa celda valen a y $\sqrt{34} a$. Entonces: $\rho^{2D} = (1*1+4*1/4) \text{ áts.}/(\sqrt{34}*a^2) = 1/(4*\sqrt{34}) \text{ áts./R}^2$.
- Para calcular los índices de Miller correctamente hay que recordar que la distancia interplanar es entre dos planos sucesivos de un conjunto de planos equiespaciados. Hay varias formas de hacer esto correctamente, una de ellas se ilustra en la Figura 3, donde se ha considerado un origen convenientemente situado en O' y varios planos de interés paralelos. Esos planos intersectan al eje X en 1/6 de a (equivalente a 1/3 de a/2), al eje Z en 1/10 de a y al eje Z en infinito: de modo que los índices de Miller son, calculando los inversos multiplicativos de los números, (6 10 0).
- La distancia interplanar de los planos (6 10 0) vale: $d_{(6\ 10\ 0)} = a/\sqrt{(6^2+10^2+0^2)} = (\sqrt{2}/\sqrt{34}) R$.
- Empleando los resultados de b) y d), y no por otro método, para el nuevo cálculo de ρ^{3D} [átoms./R³], se tiene: $\rho^{3D} = \rho^{2D}_{hkl} / d_{hkl} = (1/(4\sqrt{34}) / (\sqrt{2}/\sqrt{34})) \text{ áts./R}^2 = (1/4\sqrt{2}) \text{ (áts./R}^2$, en acuerdo con lo calculado en a). Calcular significa que hay que calcular.

Pregunta 2

- Calcule** el factor de esbeltez ideal c/a correspondiente a un cristal hexagonal compacto. Este problema está resuelto en los apuntes, ver Clase 9-10. Consideremos planos hexagonales compactos cuya perpendicular está según la vertical, y la celda respectiva de parámetros a y c (esa celda es un paralelepípedo de 6 caras). Es muy conveniente hacer un dibujo. Se trata de calcular el cociente c/a suponiendo que los átomos son perfectamente esféricos. Se tiene que $a=2R$, donde R es el radio atómico. Ahora hay

que calcular c ; una forma es calcular $c/2$, como sigue. Sabemos que un átomo cualquiera tiene tres vecinos en contacto arriba y tres abajo (eje c según la vertical, en acuerdo con lo especificado antes). Consideremos por ejemplo, los centros de un átomo y de los tres de abajo: se tiene la figura de un tetraedro regular, de aristas $2R$ y de altura $c/2$. Hay que calcular esa altura por método geométrico, sabiendo Pitágoras y que las alturas del triángulo equilátero de la base de ese tetraedro se intersectan en $2/3$ y $1/3$. Calculado $c/2$ en función de R , se calcula finalmente el cociente $c(R)/a(R)$, ya sabiendo que $a = 2R$. El factor de esbeltez ideal vale $c/a = \sqrt{8/3}$

- b) En la deducción de las condiciones de reflexión, explique cómo influye el número de planos que efectivamente están participando en la difracción.

La reflexión en fase solo dos planos que reflejen en fase, ya nos da la Ley de Bragg. Pero con solo dos planos eso da un máximo ancho sobre la pantalla. Ocurre que un ligero desfase solo disminuye también ligeramente la onda resultante. Sin embargo cuando se tienen muchos planos paralelos cumpliendo la Ley de Bragg, el máximo es fino, con una buena resolución. Conviene hacer una figura para complementar la explicación. En la práctica experimental, efectivamente, dado que el haz de R-X es de alta energía, participa un gran número de planos paralelos (como espejos semitransparentes) en la reflexión y los máximos sobre la pantalla son bastante finos.

- c) Explique cómo se producen los Rayos X en un laboratorio de difracción. Principio físico y montaje técnico.

Los rayos X en un laboratorio se obtienen de las transiciones electrónicas de los átomos de un material adecuado. Por tanto, hay que excitar ese material; esto se hace calentándolo y bombardeando con un cañón de electrones. Los rayos X corresponden a líneas espectrales de onda corta, parte del espectro de emisión (Ecuación de Planck y energía de los niveles electrónicos de un átomo). Corresponde hacer un dibujo con explicación del montaje técnico.

- d) Justifique por qué el listado de planos para cristales cúbicos adjunto se aplica considerando solo $n=1$.

Supongamos un cristal CCC y su plano más denso, (111). En principio, habría que considerar las reflexiones (111) con $n= 1, 2, 3$, etc. Pero, por comodidad del cálculo se trabaja en forma equivalente solamente con $n=1$ y con planos (111), (222), (333), etc.; nótese que salvo por el primero los otros planos no existen cristalográficamente, pero son útiles para facilitar el cálculo realizado al resolver diagramas.

Pregunta 3.

Se tiene el diagrama de polvos de un cristal que se sabe es un metal puro CC o CCC. Desafortunadamente, dicho diagrama ha sido maliciosamente intervenido por agentes de una potencia extranjera; como consecuencia de lo anterior, sólo constan los registros del segundo, cuarto y sexto máximos de difracción, ver diagrama adjunto. Sin embargo, se ha logrado establecer, a través de un doble agente, que se utilizó como radiación la línea K alfa del Cu, correspondiente a $\lambda = 1,540$ [Å]. Se pide:

- Determinar la estructura cristalina
- Calcular el parámetro de la celda

Haga explícito su procedimiento y cálculos.

Antecedentes

- Relación $d(hkl)$ para cristales del sistema cúbico.
- Ley de Bragg. Esta ecuación debe combinarse adecuadamente con la anterior.

- Para eliminar una constante por ahí conviene hacer unas divisiones.
 - Listado ordenado de índices de Miller de planos cristalográficos para cristales CC y CCC. Importante, estos listados se emplean con n= 1, exclusivamente.
 - Montaje y resultados de la difracción. Formación de conos que subtienden un ángulo 2θ . Los conos con θ creciente están en el mismo orden que los planos cristalográficos con (hkl) crecientes (del listado correcto).
 - En el difractograma dato solo se cuenta con datos del segundo, cuarto y sexto conos.
- Cuidado: en el difractograma aparece 2θ y en la Ley de Bragg θ

a) En la tabla adjunta se presentan los resultados, usando las ecuaciones y transformaciones adecuadas. Se observa que, dentro del error de cómo se leyeron los datos del difractograma, el ajuste de la columna normalizada de los senos cuadrados es mucho mejor con la columna de los cuadrados normalizados de los datos del cristal CCC que del CC. Como se sabe que es uno de los dos, se concluye que el cristal es CCC.

Del difractograma			De listados							
			Hipótesis			Hipótesis				
	2θ , grados	θ , grados	CC	CC	CC	CCC	CCC	CCC		
		$(\sin\theta)^2$	{hkl}	Cuadr	Div	{hkl}	Cuadr	Div		
Segundo cono	37	18,5	0,1007	1,0000	{2 0 0}	4	1	{2 0 0}	4	1
Cuarto cono	62,5	31,25	0,2691	2,6730	{2 2 0}	8	2	{3 1 1}	11	2,75
Sexto cono	77,5	38,75	0,3918	3,8913	{2 2 2}	12	3	{4 0 0}	16	4

b) Ya se sabe que el cristal es CCC y que el segundo, cuarto y sexto conos corresponden a los planos {200}, {311} y {400}, respectivamente.

$$a = (\lambda \cdot \sqrt{(h^2+k^2+l^2)}) / (2 \cdot \sin\theta)$$

Resultados b)

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

Indices	$(h^2+k^2+l^2)$	a [Å]
{2 0 0}	4	4,85336882
{3 1 1}	11	4,92275899
{4 0 0}	16	4,92071965

Se concluye que $a = 4,9 \text{ [Å]}$ (aprox)

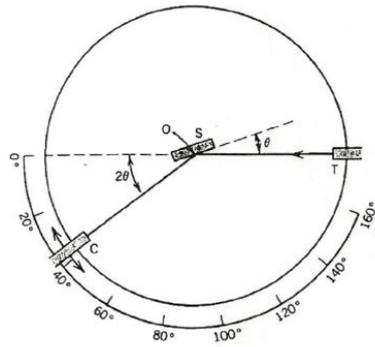
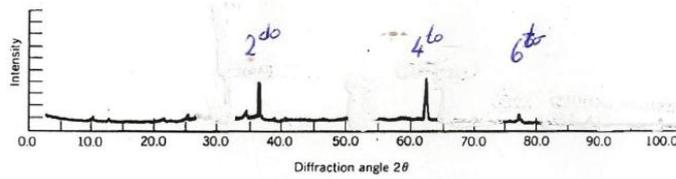


Figure 3.19 Schematic diagram of an x-ray diffractometer; T = x-ray source, S = specimen, C = detector, and O = the axis around which the specimen and detector rotate.



INDICES DE MILLER DE LAS FAMILIAS DE PLANOS REFLECTANTES PARA ESTRUCTURAS CUBICAS. (n=1)

Cúbico simple,C	Cúbico centrado en el cuerpo, CC	Cúbico centrado en las caras, CCC
{100}	-	-
{110}	{110}	-
{111}	-	{111}
{200}	{200}	{200}
{210}	-	-
{211}	{211}	-
{220}	{220}	{220}
{221}	-	-
{300}	-	-
{310}	{310}	-
{311}	-	{311}
{222}	{222}	{222}
{320}	-	-
{321}	{321}	-
{400}	{400}	{400}
{322}	-	-
{410}	-	-
{330}	{330}	-
{411}	{411}	-
{331}	-	{331}
{420}	{420}	{420}
{421}	-	-
{332}	{332}	-