

Estudio de la difracción de rayos X por la materia condensada mediante los potenciales retardados

JESÚS PALACIOS GÓMEZ

*Departamento de Ciencia de Materiales
Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN
Apartado postal 75-544, 07300 México, D.F., México*

Recibido el 14 de agosto de 1991; aceptado el 6 de octubre de 1992

RESUMEN. Se presenta un tratamiento semiclásico para la obtención de las expresiones de la difracción de rayos X por la materia condensada, considerando la muestra bajo irradiación como una densidad de carga oscilando en fase con el fotón incidente y empleando el potencial vectorial retardado, a partir del cual se calcula el campo eléctrico y de ahí se determina la intensidad difractada. La ecuación maestra resultante se aplica al caso particular de una red cristalina.

ABSTRACT. A semiclassical treatment is shown to obtain the X-ray diffraction equations for condensed matter. The irradiated sample is considered as a charge density oscillating in phase with the incident photon and the retarded vector potential is applied to obtain the electric field, from which the diffracted intensity is determined. The resulting master equation is applied to the special case of a crystalline lattice.

PACS: 61.45.+s

1. INTRODUCCIÓN

Normalmente las expresiones para la difracción de rayos X en el estudio de la estructura atómica de la materia condensada, son derivadas en los textos a partir de la radiación de un electrón oscilando armónicamente. De ahí se suma sobre los electrones de un átomo y finalmente se suma sobre los átomos de la muestra.

Un tratamiento alternativo del problema consiste en considerar la muestra de materia condensada como una densidad de carga en movimiento y aplicar los potenciales retardados para evaluar el campo producido. En el presente trabajo se presenta un tratamiento semiclásico usando este enfoque. Se considera a los átomos sólo como una densidad de carga $\rho(\mathbf{x})$. Partiendo entonces del potencial vectorial retardado $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ de un sistema de cargas en movimiento, se introduce la densidad de corriente en la muestra, producida por la densidad de carga oscilando según la onda incidente. Luego se calcula el campo eléctrico producido por dicho potencial en un punto de observación dado por el vector \mathbf{r} y de ahí se evalúa la intensidad difractada. La expresión resultante se aplica al caso de un cristal y se obtienen las ecuaciones de Laue. La Fig. 1 muestra el sistema bajo consideración.

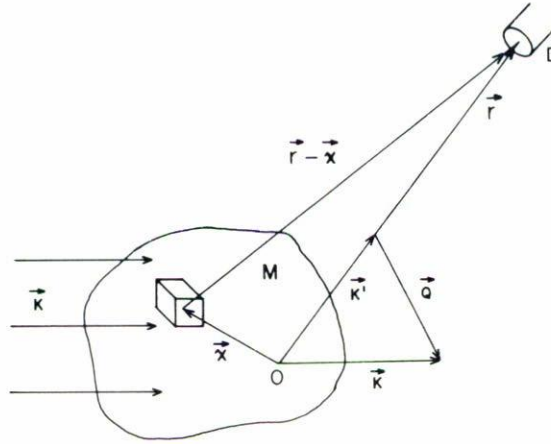


FIGURA 1. Arreglo esquemático para la observación de la difracción de rayos X. *M* es la muestra y *D* el detector.

2. POTENCIAL VECTORIAL RETARDADO DE UN CONJUNTO DE ÁTOMOS SOMETIDOS A UN CAMPO ELÉCTRICO

Suponemos que el sólido, o líquido, consiste de un conjunto de átomos cuyas cargas oscilan ante el campo eléctrico de un fotón. Consideramos al fotón como una onda plana dada por

$$\mathbf{E}_f(\mathbf{r}, t) = E_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \hat{\mathbf{p}},$$

donde E_0 es la amplitud de la onda, \mathbf{k} el vector de onda, ω la frecuencia angular y $\hat{\mathbf{p}}$ un vector unitario que indica la polarización de la onda. \mathbf{r} y t son el punto y el instante respectivamente en que se observa el campo eléctrico. Además, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, donde λ es la longitud de onda.

Suponemos también que las cargas de la muestra responden a dicha onda, oscilando en fase con ella. El movimiento oscilatorio de las cargas produce un campo electromagnético que se puede obtener mediante los potenciales retardados. Si consideramos este campo en zonas fuera de la muestra, de la ecuación de Maxwell correspondiente a la generalización de la ley de Ampère [1]:

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \tag{1}$$

con \mathbf{H} la intensidad de campo magnético, \mathbf{j} la densidad de corriente y \mathbf{D} el desplazamiento eléctrico, se tiene

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \tag{2}$$

puesto que $\mathbf{j} = 0$. Aquí hemos hecho además $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E}$ con ϵ_0 la permitividad en el vacío y \mathbf{E} el campo eléctrico.

Si las cargas de la muestra oscilan en fase con el campo eléctrico \mathbf{E}_f que produce el movimiento, es plausible suponer que el campo eléctrico reemitido de la Ec. (2) debe tener la forma

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}.$$

Con esta suposición, la Ec. (2) queda

$$\nabla \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t). \quad (3)$$

Además [1]

$$\mu_0 \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A},$$

donde μ_0 es la permeabilidad en el vacío. De la Ec. (3) se sigue entonces

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = i \frac{c}{k} \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}), \quad (4)$$

donde hemos usado las identidades

$$\epsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c^2},$$

$$\frac{\omega}{c} = k,$$

con c la velocidad de la luz.

Por otra parte, para las ondas planas, el campo magnético \mathbf{B} es en magnitud

$$B \sim \frac{1}{c} E.$$

La contribución magnética en la fuerza de Lorentz es del orden de

$$-qvB = -q \frac{v}{c} E,$$

con q la carga y v la magnitud de la velocidad de la carga. De aquí vemos que, salvo para el caso de velocidades relativistas, la contribución del campo magnético es muy pequeña comparada con la del campo eléctrico. Por lo anterior en lo que sigue sólo consideramos el campo eléctrico.

El potencial vectorial correspondiente al conjunto de átomos moviéndose por el campo del fotón es [1]

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J} \left(\mathbf{x}, t - \frac{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|}{c} \right)}{|\mathbf{r}-\mathbf{x}|} d\mathbf{x}. \quad (5)$$

La integral se lleva a cabo en el volumen de la muestra iluminado por la radiación. El denominador se puede expresar como

$$|\mathbf{r} - \mathbf{x}| = \{(\mathbf{r} - \mathbf{x}) \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{x})\}^{1/2} = r \left(1 + \left(\frac{x}{r}\right)^2 - 2\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{x}}{r^2} \right)^{1/2}.$$

En un difractor comercial de rayos X, la distancia entre muestra y detector, es decir r , es aproximadamente 30 cm, en tanto que la zona de la muestra iluminada por el haz es de algunos milímetros. Si suponemos además que el origen de coordenadas se halla en la muestra (Fig. 1), entonces, como la variable de integración \mathbf{x} recorre la zona iluminada, se tiene que $r \gg x$. Así pues, el término cuadrático se desprecia, se desarrolla en serie de Taylor y se obtiene la aproximación

$$|\mathbf{r} - \mathbf{x}| = r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{x},$$

con $\hat{\mathbf{r}}$ un vector unitario en la dirección de \mathbf{r} .

En forma similar se obtiene la aproximación

$$|\mathbf{r} - \mathbf{x}|^{-1} \sim r^{-1},$$

con ambas aproximaciones (5) queda

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi r} \int \mathbf{J} \left(\mathbf{x}, t - \frac{r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{x}}{c} \right) d\mathbf{x}. \quad (6)$$

Ignorando el movimiento de las cargas por la excitación térmica, el movimiento de las cargas es producido fundamentalmente por el campo eléctrico de la onda incidente.

Aplicando la segunda ley de Newton a un elemento diferencial de volumen con carga δq y masa δm , en un sistema de referencia en el cual el eje Z coincide con el vector $\hat{\mathbf{p}}$, se tiene

$$\delta m \frac{d^2 Z}{dt^2} = \delta q E_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}, \quad (7)$$

donde Z es la coordenada correspondiente de la posición \mathbf{x} del elemento diferencial de volumen. Obviamente \mathbf{k} es perpendicular a Z por tratarse de una onda plana.

Proponemos la solución

$$Z(t) = Z_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}. \quad (8)$$

La mínima carga que físicamente se puede considerar como diferencial es el electrón y por lo tanto el mínimo elemento diferencial de volumen de carga es aquel que sólo contiene un electrón. Siendo δm la masa de dicha carga, ésta es entonces la del electrón, luego haciendo $\frac{\delta q}{\delta m} = -\frac{e}{m_e}$, la relación carga a masa, y substituyendo en (7) se obtiene

$$Z_0 = \frac{eE_0}{m_e \omega^2}.$$

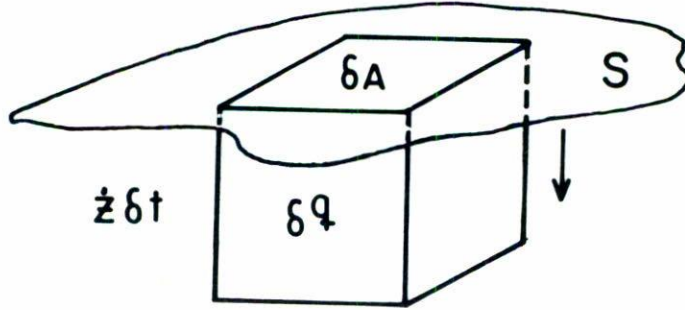


FIGURA 2. Elemento diferencial de volumen con carga δq , área transversal δA y longitud $\dot{z}\delta t$. \dot{z} es la velocidad del elemento y δt el tiempo que tarda en atravesar la superficie S .

La corriente sólo toma lugar en la dirección z , y empleando la definición de densidad de corriente

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x})\dot{z} \delta t \delta A \frac{1}{\delta t \delta A} \hat{\mathbf{p}},$$

donde δt es el tiempo necesario para que δq cruce una superficie con normal colineal con la dirección de movimiento, y δA es el área transversal del elemento diferencial de volumen (Fig. 2). Entonces

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = -i\rho(\mathbf{x}) \frac{e}{m_e} \frac{E_0}{\omega} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega t)} \hat{\mathbf{p}}. \quad (9)$$

Substituyendo esta ecuación en (6) se tiene

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = iC_e e^{-i\omega t} \frac{1}{r} e^{\frac{i\omega}{c}r} \int \rho(\mathbf{x}) e^{i\left(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \frac{\omega}{c}\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{x}\right)} d\mathbf{x} \hat{\mathbf{p}}, \quad (10)$$

con

$$C_e = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0 C^2} \frac{e}{m_e} \frac{E_0}{\omega}. \quad (11)$$

Puesto que $\frac{\omega}{c} = k$, podemos entonces definir

$$\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}},$$

el cual es un vector de onda en la dirección de la observación (Fig. 1). Se define además

$$\mathbf{Q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}', \quad (12)$$

que es un vector que sólo depende del arreglo experimental puesto que \mathbf{k} caracteriza la onda incidente y \mathbf{k}' la parte de la onda reemitida en la dirección de observación, por las cargas oscilando, como lo veremos más adelante. En otras palabras, \mathbf{k} está definida por la posición del tubo emisor de rayos X y \mathbf{k}' por la posición del detector.

La Ec. (7) queda entonces

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = iC_e e^{-i\omega t} \frac{1}{r} e^{ikr} \int \rho(\mathbf{x}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} \hat{\mathbf{p}}. \quad (13)$$

En cada punto dentro de la muestra se tiene una probabilidad finita de hallar un electrón de cualquier átomo de la muestra, luego si ρ_j es la densidad de carga, y \mathbf{x}_j el vector de posición del centro de masa del j -ésimo átomo, la densidad de carga es

$$\rho(\mathbf{x}) = \sum_j \rho_j(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \quad (14)$$

donde la sumatoria incluye todos los átomos de la muestra.

Sustituyendo (14) en (13) y haciendo el cambio de variable $\mathbf{r}_j = \mathbf{x} - \mathbf{x}_j$, se obtiene

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = iC_e e^{-i\omega t} \frac{1}{r} e^{ikr} \sum e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x}_j} \int \rho_j(\mathbf{r}_j) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_j} d\mathbf{r}_j \hat{\mathbf{p}}.$$

Reconocemos de inmediato a la última integral como el factor de dispersión del átomo j en función del arreglo de observación. Esta integral se lleva a cabo en el átomo j . Así pues la sumatoria del potencial vectorial queda

$$\sum f_j(\mathbf{Q}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x}_j}, \quad (15)$$

con

$$f_j(\mathbf{Q}) = \int \rho_j(\mathbf{r}_j) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_j} d\mathbf{r}_j. \quad (16)$$

Definimos también al factor general de estructura $\mathcal{F}(\mathbf{Q})$

$$\mathcal{F}(\mathbf{Q}) = \sum_j f_j(\mathbf{Q}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x}_j}, \quad (17)$$

el cual contiene los detalles de la estructura de la muestra a través de los vectores \mathbf{x}_j . El potencial vectorial queda entonces

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = iC_e e^{-i\omega t} \frac{1}{r} e^{ikr} \mathcal{F}(\mathbf{Q}) \hat{\mathbf{p}}. \quad (18)$$

3. INTENSIDAD DE LA ONDA DIFRACTADA

Para la substitución en la Ec. (4) notamos que la única dependencia de \mathbf{A} en \mathbf{r} proviene del factor $\frac{1}{r} e^{ikr}$. Luego, haciendo uso de las técnicas del análisis vectorial [2]:

$$\nabla \times \left(\frac{1}{r} e^{ikr} \hat{\mathbf{p}} \right) = \frac{1}{r} e^{ikr} \left(ik - \frac{1}{r^2} \right) \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}.$$

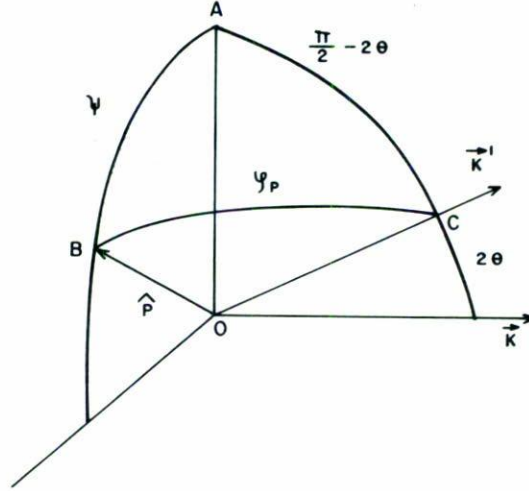


FIGURA 3. Relación de los vectores $\hat{\mathbf{p}}$, \mathbf{k} y \mathbf{k}' . Se ha elegido un sistema de coordenadas tal que \mathbf{k} coincide con el eje X y \mathbf{k}' está en el plano X - Y .

Para la zona de radiación $r \gg \lambda$ y despreciando a $\frac{1}{r^2}$,

$$\nabla \times \left(\frac{1}{r} e^{ikr} \hat{\mathbf{p}} \right) = ik \frac{1}{r} e^{ikr} \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}.$$

Nuevamente, evaluando el rotacional

$$\nabla \times \left(\nabla \times \frac{1}{r} e^{ikr} \hat{\mathbf{p}} \right) = ik \nabla \times \left(\frac{1}{r^2} e^{ikr} \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} \right).$$

Para la evaluación del último rotacional utilizamos la identidad [2]

$$\nabla \times (\mathbf{u} \times \mathbf{v}) = (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \mathbf{v} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mathbf{u} (\nabla \cdot \mathbf{v}) - (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{v},$$

con $\mathbf{u} = \mathbf{r}$ y $\mathbf{v} = \hat{\mathbf{p}}$ y aplicamos la condición de la zona de radiación

$$\nabla \times \left(\frac{1}{r^2} e^{ikr} \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} \right) = \frac{ik}{r^2} e^{ikr} (-2\hat{\mathbf{p}} + ikr \{ \hat{\mathbf{r}} \times (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) \}).$$

En la zona de radiación $kr \gg 1$ y el término $2\hat{\mathbf{p}}$ resulta despreciable, luego de la Ec. (4)

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -i \frac{k}{c^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_e} E_0 \frac{1}{r} e^{i(kr - \omega t)} \mathcal{F}(\mathbf{Q}) (\hat{\mathbf{r}} \times (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}})). \quad (19)$$

Evaluando el triple producto vectorial con la notación de la Fig. 3, se tiene

$$\hat{\mathbf{r}} \times (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}) = (\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{p}} = \cos \varphi_p \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{p}},$$

o bien

$$(\hat{\mathbf{r}} \times (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}))^2 = \text{sen}^2 \varphi_p.$$

La intensidad de la onda definida como el flujo de energía por unidad de tiempo y de área (véase p. ej., Ref. [3]), es proporcional al cuadrado de la amplitud del campo eléctrico, luego, de (19) y la última igualdad,

$$|\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2 = E_0^2 \frac{k^2}{c} \frac{1}{4(4\pi\epsilon_0)^2} \left(\frac{e}{m_e^2} \right)^2 \frac{1}{r^2} |\mathcal{F}(\mathbf{Q})|^2 \sin^2 \varphi_p.$$

La intensidad relativa $I_p(\mathbf{Q})$ será por lo tanto

$$I_p(\mathbf{Q}) = \frac{|E^2|}{E_0^2} = K_e \frac{1}{r^2} |\mathcal{F}(\mathbf{Q})|^2 \sin^2 \varphi_p, \quad (20)$$

con

$$K_e = \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{k}{c^2} \frac{e}{m_e} \right]^2 \quad (21)$$

y E_0^2 es la intensidad de la onda incidente.

Puesto que la generación de fotones en el tubo de rayos X es aleatoria, suponemos que la superposición de los efectos de los fotones es incoherente, por lo tanto la intensidad registrada por el detector es el promedio de la Ec. (20) sobre las posibles orientaciones de polarización $\hat{\mathbf{p}}$. De la Fig. 3, aplicando la ley de los cosenos de la trigonometría esférica al sector OABC [4],

$$I(\mathbf{Q}) = \overline{I_p(\mathbf{Q})} = K_e \frac{1}{r^2} |\mathcal{F}(\mathbf{Q})|^2 \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2}. \quad (22)$$

La expresión (22) es la ecuación maestra de la difracción de rayos X por la materia condensada, puesto que es el punto de partida para el estudio de estructuras cristalinas, morfología de pequeñas partículas, cuantificación de fases, etc. A continuación la aplicamos a un cristal consistente de un conjunto de N celdas unitarias y con una base de M átomos en cada celda unitaria.

4. APLICACIÓN AL CASO DE UNA RED CRISTALINA

Para este caso, la posición del j -ésimo átomo queda

$$\mathbf{x}_j = \mathbf{R}_\ell + \mathbf{r}_m,$$

donde \mathbf{R}_ℓ es el vector de posición que define el origen de la celda unitaria ℓ a la que pertenece el átomo j , y \mathbf{r}_m es la posición del centro de masa del átomo j , referido al

sistema de coordenadas definido por los vectores de la celda unitaria, como es usual. La sumatoria de la Ec. (17) se descompone, por lo tanto, en 2 sumatorias:

$$\sum_j \rightarrow \sum_{\ell}^N \sum_m^M,$$

donde la primera recorre las N celdas unitarias y la segunda recorre los átomos de la base. La Ec. (17) queda

$$\mathcal{F}(\mathbf{Q}) = \sum_{\ell}^N e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{\ell}} \sum f_m(\mathbf{Q})e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_m},$$

o bien

$$|\mathcal{F}(\mathbf{Q})|^2 = \left| \sum_{\ell}^N e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{\ell}} \right|^2 |F(\mathbf{Q})|^2, \tag{23}$$

donde $F(\mathbf{Q})$ es el factor de estructura

$$F(\mathbf{Q}) = \sum_m^M f_m(\mathbf{Q})e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_m} \tag{24}$$

que contiene los detalles de la estructura de la celda unitaria.

El factor

$$\left| \sum_{\ell}^N e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}_{\ell}} \right|^2$$

en el espacio recíproco es una superposición de ondas planas con amplitud 1 y diferentes longitudes de onda. Esta función es conocida de la óptica y para N grandes consiste principalmente de picos muy pronunciados de altura proporcional a N^2 y ancho proporcional a $\frac{1}{N}$ (véase, por ejemplo, Ref. [5]). La posición de los picos está dada por la condición

$$\mathbf{Q} \cdot \mathbf{R}_{\ell} = 2\pi n,$$

con n un entero.

De aquí, recordando que el producto escalar de un vector de la red recíproca por un vector de la red cristalina es siempre un múltiplo entero de 2π [6], vemos que \mathbf{Q} debe coincidir con algún vector \mathbf{G} de la red recíproca para que se observe la difracción:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{G}. \tag{25}$$

Estas son las ecuaciones de Laue.

5. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

En el tratamiento aquí empleado, se hace la suposición de que la materia condensada está formada por átomos, pero la respuesta de cada elemento diferencial de carga al paso de la onda incidente se trata mediante la electrodinámica clásica. Cada elemento de carga oscila sólo ante el paso de la onda electromagnética incidente y como resultado de esta oscilación emite radiación electromagnética. Esta radiación reemitida es la que registra el detector y su intensidad para el caso más general está dada por la Ec. (22). Para el caso particular de una red cristalina, la intensidad se puede representar mediante las Ecs. (23), (24) y (25).

Estrictamente, cada elemento de carga no sólo oscila por la onda incidente, sino también por la onda difractada por las otras cargas. El hecho de ignorar esta última contribución nos restringe a no observar efectos dinámicos, tales como la extinción. (Para el tratamiento de la difracción dinámica, véase por ejemplo la Ref. [7]).

Por otro lado, hemos supuesto que cada elemento de carga no sufre efectos de viscosidad, la cual amortiguaría el movimiento. Esta suposición, sin embargo, es procedente debido a que la onda incidente suministra constantemente la energía para vencer el amortiguamiento. Hemos considerado también que la onda incidente no se debilita al pasar por la muestra. Estrictamente, puesto que la onda incidente suministra la energía a los elementos de carga para emitir radiación y para vencer la viscosidad, debe disminuir su amplitud al penetrar en el material. Este debilitamiento puede tomarse en cuenta mediante las técnicas ya conocidas para el tratamiento de la absorción (véase, por ejemplo la Ref. [8]).

En conclusión, este tratamiento es riguroso y parte desde principios básicos, pero sólo es válido para la difracción cinemática, es decir, no toma en cuenta efectos dinámicos. Además, es muy general, ya que de la Ec. (22) se pueden derivar múltiples aplicaciones. Aquí sólo se expuso el caso de un cristal.

REFERENCIAS

1. J.R. Reitz, y F. J. Milford, *Foundations of Electromagnetic Theory*, 2a. Ed., Addison-Wesley (1967).
2. H. Lass, *Vector and Tensor Analysis*, Mc Graw-Hill (1950).
3. R.T. Weidner y R.L. Sells, *Elementary Classical Physics*, Vol. 2, Ed. Allyn y Bacon Inc. (1965).
4. W.H. Zachariasen, *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals*, Dover (1945).
5. R.W. Ditchburn, *Optica*, Editorial Reverté (1982).
6. Ch. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 5a. Ed. John Wiley (1976).
7. L.H. Schwartz y J.B. Cohen, *Diffraction from Materials*, 2a. Ed. Springer Verlag, (1987).
8. B.D. Cullity, *Elements of X-Ray Diffraction*, Addison Wesley (1978).