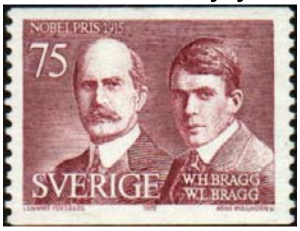
Interpretación de Diagramas de Difracción

Teoría: Ley de Bragg

- Para interpretar los diagramas de difracción se requiere una teoría.
- W.H. Bragg y su hijo fueron pioneros en el tema y desarrollaron una sencilla teoría, que es la que veremos (Ley de Bragg).
- Hoy existen teorías mucho más rigurosas, complejas y poderosas.

LOS BRAGG: William Henry y William Lawrence



- Los Bragg recibieron el premio Nobel en 1915 por sus trabajos en Difracción de Rayos X aplicada a la Cristalografía.

Algunas consideraciones

- Se emplea un haz incidente monocromático y coherente, con λ adecuado.
- El diagrama se registra sobre una pantalla (película) o con un contador Geiger.
- Se analiza la interacción de un haz con un conjunto de planos paralelos, equiespaciados y supuestos <u>semitransparentes</u> a la radiación.

- El haz tiene suficiente energía como para penetrar un cierto espesor de cristal. Así interactúa con <u>muchos</u> planos paralelos.
- Se aplica que el ángulo de incidencia es igual al de reflexión.

- Se desprecia el efecto de refracción.

  Existe, pero es pequeño debido a la alta energía de estas ondas cortas. En los modelos más completos, este efecto se considera y corrige.
- Las distancias recorridas por el haz incidente y por el haz reflejado, así como el diámetro del haz, son muchísimo mayores que las distancias interatómicas.

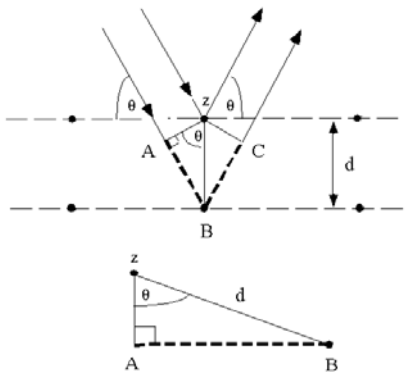
  Esto permite sumar las ondas reflejadas que llegan a un punto de la pantalla o película como si fuesen paralelas, una aproximación.

Máximos y Mínimos de Difracción

1) Los haces emergentes en fase, darán máximos. Veremos la condición geométrica para que los haces estén en fase.

2) Los haces emergentes que no estén en fase, darán mínimos absolutos.
   Esto se debe a que el número de planos paralelos equiespaciados que participa es muy grande. Como consecuencia, si hay un pequeño desfase entre los haces paralelos emergentes de dos planos sucesivos, la suma total, de muchos planos, será nula.

- Los dos factores anteriores significan que los máximos serán finos en θ, contribuyendo a la buena resolución de la técnica.



LEY DE BRAGG
Incide un haz coherente

Diferencia de camino óptico
ABC= 2 d sinθ

Condición para estar EN FASE a la salida
ABC= nλ
con n= 1,2,3…

Ley de Bragg
nλ = 2 d sinθ

Al haber mucho planos, si los haces que salen no están suficientemente en fase, habrá un mínimo absoluto: máximos finos en θ sobre la pantalla.

La Ley de Bragg

Para que haya reflexión debe cumplirse:

n λ= 2 d sinθ

donde:

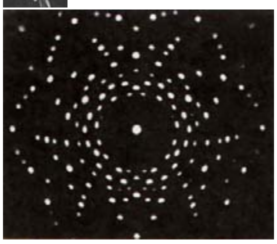
θ es el ángulo de incidencia
λ es la longitud de onda
d es la distancia interplanar de los planos paralelos considerados,
n, un número entero igual o mayor que uno; es el orden de la difracción

Precisiones

a) Cuando un haz incide sobre un monocristal, el ángulo de incidencia θ es diferente para cada plano (hkl) del cristal.
(Recuérdese que cuando aquí nos referimos a un plano, de hecho se trata de un conjunto enorme de planos cristalográficos paralelos entre sí).

b) El ángulo de difracción θ es independiente del ángulo que forma el haz con la superficie del cristal en el lugar de incidencia.

Diagrama de difracción por un monocristal

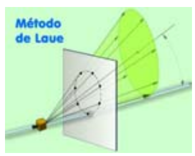


- Max von Laue, Nobel 1914.
- Nótese la simetría de orden tres en rotación del diagrama.

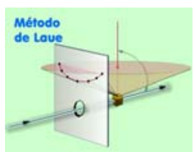
Difracción por un monocristal

Cada punto en la pantalla corresponde a la reflexión de un tipo de planos (hkl) del monocristal.

- Imagen de transmisión



- Imagen de reflexión



Problemas propuestos

- Considere un conjunto de planos (hkl) con d= 0,2 nm.
  Determine las soluciones de Bragg, θ(n), para:
  a) λ= 20 nm. **θ= arc sin (nλ/2d)**
  b) λ= 0,0002 nm

  Finalmente, discuta sus soluciones: ¿Cuánto conviene que valga λ para tener un número razonable de soluciones?

Solución a)

a)
θ= arc sin(n*20/0,4)
= arc sin(n*50)
n tiene que ser mayor o igual 1.
No hay solución, ni siquiera para n=1.

<u>Comentario</u>
λ(20nm) no cabe ni una vez en la diferencia de camino óptico ABC=2d sin θ, (con d= 0,2nm).
Para que haya a lo menos 1 solución:
λ< 2d

Solución b)

b)
θ= arc sin(n*0,0002/(2*0,2))=
arc sin(n/2.000)
n tiene que ser mayor o igual 1.
Hay unas 2000 soluciones θ(n).

<u>Comentario</u>
Como λ es pequeño (0,0002 nm), λ puede caber hasta muchas veces en la diferencia de camino óptico ABC=2d sin θ, (d= 0,2nm).

Hay unas 2.000 soluciones angulares, muy próximas entre sí sobre la pantalla. Tan cerca que no se pueden <u>resolver</u> (separar).

Para ciertas aplicaciones, habrá <u>demasiadas</u> soluciones como para que sea experimentalmente conveniente.

Corolario de a) y b): λ< 2d, pero no siempre conviene demasiado menor.

•FIN

- Próximo tema: Técnicas de Difracción para el estudio de cristales sencillos.