

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 (1)

- 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 semitransparentes a la radiación.

Algunas consideraciones (2)

- Los planos cristalinos se consideran como espejos semitransparentes de la radiación.
- El haz tiene suficiente energía como para penetrar un cierto espesor de cristal. Así interactúa con muchos planos paralelos.
- Se aplica que el ángulo de incidencia es igual al de reflexión.

Algunas consideraciones (3)

- Se desprecia el efecto de refracción.
Existe, aunque 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.

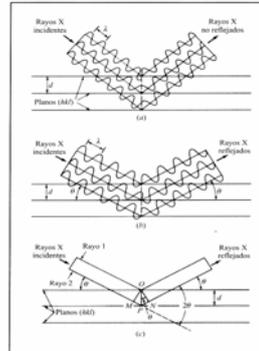
Máximos y Mínimos de Difracción

- 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 derechamente 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.

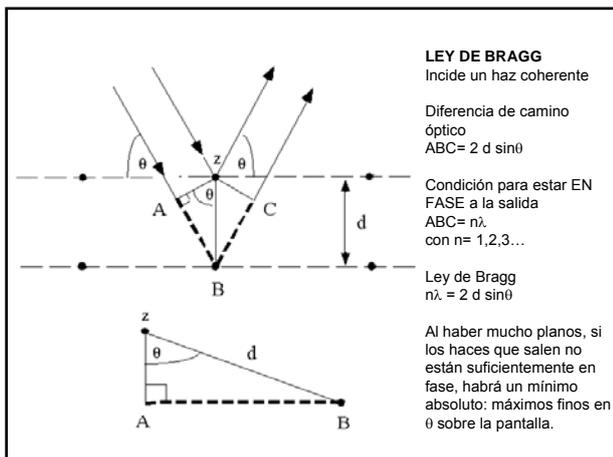
- Los dos factores anteriores significan que los máximos serán finos en θ , contribuyendo a la buena resolución de la técnica.

Condición de difracción o de reflexión (Smith)



Dado d y λ :

- a) para un ángulo θ cualquiera, en general NO habrá haz reflejado
- b) para un ángulo llamado ángulo de Bragg, $\theta = \theta_B$, SÍ habrá reflexión.
- c) mismo caso b), para deducir la Ley de Bragg. $\theta_B = \theta(d, \lambda, n)$.



La Ley de Bragg

Para que haya reflexión debe cumplirse:
 $n\lambda = 2d \sin\theta$

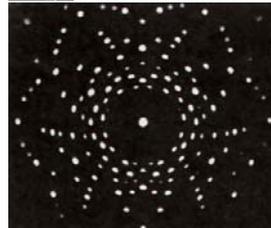
donde:

- 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.

Difracción por un monocristal (1)

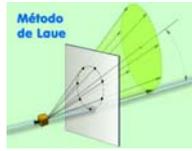


- Max von Laue, Nobel 1914.
- Nótese la simetría de orden tres en rotación del diagrama.
- Aquí se ha usado una luz policromática. Ello da muchas soluciones según la Ley de Bragg

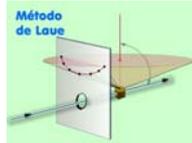
Difracción por un monocristal (2)

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

- Imagen de transmisión



- Imagen de reflexión



Problemas 1.

- Considere un conjunto de planos (hkl) con

$d = 0,2 \text{ nm}$.

Determine las soluciones de Bragg, $\theta(n)$, para:

- $\lambda = 20 \text{ nm}$. $\theta = \text{arc sin } (n\lambda/2d)$
- $\lambda = 0,0002 \text{ nm}$

Finalmente, discuta sus soluciones:

¿Cuánto conviene que valga λ para tener un número razonable de soluciones?

Solución parte a)

a)

$$\theta = \text{arc sin}(n \cdot 20 / 0,4)$$

$$= \text{arc sin}(n \cdot 50)$$

n tiene que ser mayor o igual 1.

No hay solución, ni siquiera para $n=1$.

Comentario

$\lambda(20 \text{ nm})$ no cabe ni una vez en la diferencia de camino óptico $ABC=2d \sin \theta$, (con $d=0,2 \text{ nm}$).

Para que haya a lo menos 1 solución:

$$\lambda < 2d$$

Solución parte b)

b)

$$\theta = \text{arc sin}(n \cdot 0,0002 / (2 \cdot 0,2)) = \text{arc sin}(n/2.000)$$

n tiene que ser mayor o igual 1.

Hay unas 2000 soluciones $\theta(n)$.

Comentario

Como λ es pequeño (0,0002 nm), λ puede caber hasta muchas veces en la diferencia de camino óptico $ABC=2d \sin \theta$, ($d=0,2 \text{ nm}$).

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

Para ciertas aplicaciones, habrá demasiadas soluciones como para que sea experimentalmente conveniente.

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

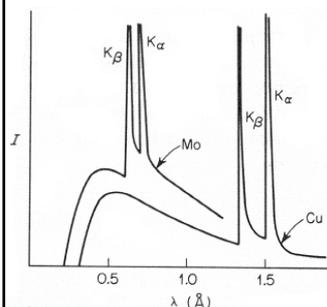
Problema 2.

- Se tiene un monocristal de Fe alfa (CC) y difracción por planos $\{110\}$, con $d = 1,181 \text{ \AA}$.
- Los R-X son emitido por un blanco de Cu. Se considera la línea K alfa: $\lambda = 1,540 \text{ \AA}$.

SE PIDE:

Encuentre todas las soluciones posibles, $\theta(n)$.

Espectros de Emisión del Mo y del Cu



En cada caso se ven dos máximos característicos de R-X y un fondo continuo.

Los máximos K_α y K_β corresponden a las transiciones 2-1 y 3-2, respectivamente.

El espectro se puede filtrar, cuando se quiere trabajar con un haz esencialmente monocromático basado en un máximo característico.

Solución

$$n \lambda = 2 d \sin \theta$$

Reemplazando

$$\theta = \sin^{-1}(n \lambda / 2d) = \sin^{-1}(n * 1,540 / 2 * 1,181)$$

$$\theta = \text{arc sin } (n * 0,652)$$

n	1	2	3	...
θ	40,7°	X	X	

Hay sólo una solución.

Problema 3.

- Como antes, se tiene un monocristal de Fe alfa (CC) y difracción por planos {110}, con $d=1,181 \text{ \AA}$.
- Pero ahora los R-X son emitido por un blanco de W y se considera su línea K alfa: $\lambda=0,090 \text{ \AA}$.

SE PIDE:

Encuentre todas las soluciones posibles, $\theta(n)$.

Solución

$$n \lambda = 2 d \sin \theta$$

Reemplazando

$$\theta = \sin^{-1}(n \lambda / 2d) = \sin^{-1}(n * 0,2090 / 2 * 1,181)$$

$$\theta = \text{arc sin } (n * 0,08848)$$

n	1	2	...	11	12
θ	5°	10,2		76,7	X

Hay 11 soluciones angulares.

Problema 4.

- Se tiene un monocristal fijo, sobre el cual incide luz blanca (espectro de RX, sin filtrar).

El haz contiene todos los λ superiores a 0,5 \AA .

Además: $\theta=60^\circ$ y $d=1 \text{ \AA}$.

Se pide: determine todos los λ reflejados

¿Qué hay que hacer?

- Hay que aplicar $n \lambda = 2 d \sin \theta$
- Para que un λ sea reflejado, previamente debe haber incidido.
- De modo que las soluciones en λ (λ s emergentes) se limitan a aquellas superiores a 0,5 \AA .

Desarrollo de la solución

$$\bullet n \lambda = 2 d \sin \theta$$

$$n \lambda = 2 \sin 60^\circ$$

$$\lambda = (1,732/n) (\text{\AA})$$

n	1	2	3	4
----------	----------	----------	----------	----------

λ (A)	1,73	0,86	0,5546	NO
---------------------------------	-------------	-------------	---------------	-----------

Nótese que aquí se tiene el principio de un filtro para R-X.

•FIN

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