

# Estudio Experimental del Orden Cristalino

## INTRODUCCIÓN(1/2)

### Comportamiento propio de cristales

Por su comportamiento, existía evidencia indirecta (pps. S.XX) de que muchos materiales de ingeniería, particularmente metales y cerámicas, son cristalinos.

Dependiendo del número de granos, una material cristalino puede ser monocristalino o policristalino. Nos interesan los dos.

## INTRODUCCIÓN(2/2) La Técnica de Difracción

- La difracción de ondas por cristales es la principal técnica para estudiar el orden atómico.
- Para obtener la información es necesario interpretar diagramas de difracción, para lo cual se requiere una teoría.

- Ejemplos que revelan indirectamente el carácter cristalino de muchos sólidos

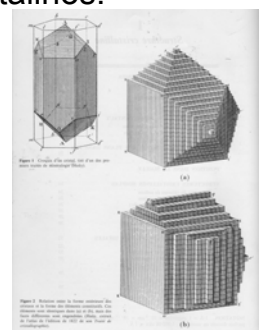
## Cristales Reales Monocristalinos (caso LiF)



## Manifestación del orden cristalino: forma externa de minerales monocristalinos.

Imagen del Tratado de Cristalografía de Hauy (1822).

Relación entre la forma externa y la estructura.

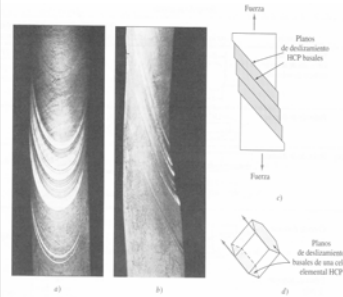


## Manifestación del orden cristalino: fractura por clivaje

- Fractura por clivaje en un monocristal iónico (NaCl).
- La fractura se produce especularmente según ciertos planos cristalinos, en cristales frágiles



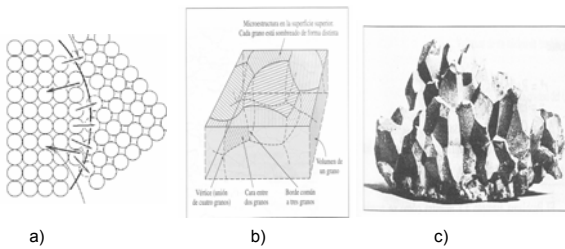
## Manifestación del Orden Cristalino, en Monocristales Dúctiles



Tracción de un monocristal de Zn (HC).

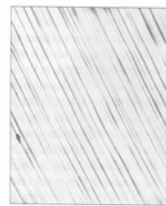
Deformación plástica por deslizamiento de los planos más densos del Zn; estos son los planos hexagonales compactos.

## Granos y Fractura Intergranular

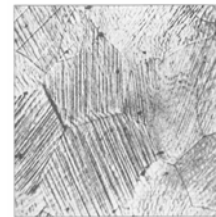


- a) Esquema de Granos y Bordes de Grano  
b) Esquema de un Policristal  
d) Fractura de un Policristal por sus Bordes de Grano

## Bandas de deslizamiento en superficies planas pulidas de probetas deformadas plásticamente por tracción



Cu monocristalino



Al policristalino

Mismo mecanismo de deformación plástica por deslizamiento que en la anterior probeta de Zn. Tal mecanismo se da en todos los metales.

## Otros ejemplos de evidencia de orden atómico

La ANISOTROPÍA  
(magnética, óptica, elástica, etc.),  
de Monocristales,  
en oposición a la ISOTROPÍA  
de los Materiales Amorfos.

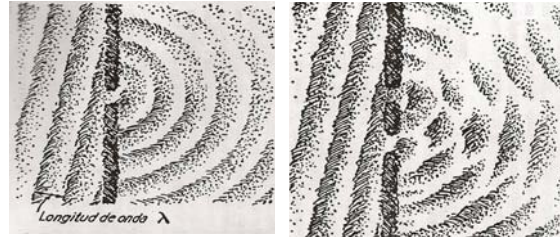
## Difracción por cristales

- [http://www.xtal.igfr.csic.es/Cristalografia/parte\\_02.html](http://www.xtal.igfr.csic.es/Cristalografia/parte_02.html) (Referencia principal)
- Ciencia e Ingeniería de Materiales, W.F. Smith, McGraw Hill, 3a ed., 2004, Colombia.

## Información de objetos

- Consideremos objetos que son centros de dispersión de ondas y que están dispuestos periódicamente.
- Esos objetos pueden ser rendijas, átomos, etc.
- La difracción involucra suma de ondas.
- Las imágenes de difracción contienen información sobre la disposición geométrica de objetos idénticos dispuestos regularmente (2 o más).

## Difracción por “olas” y rendijas.



- Ondas planas en el agua y una rendija que es centro de dispersión de ondas circulares.
- Difracción de ondas provenientes de dos centros de dispersión.

Desde el diagrama de difracción se puede deducir información sobre las rendijas.

Se requiere que  $\lambda$  sea del orden de magnitud del ancho de las rendijas

## Rendijas y Átomos

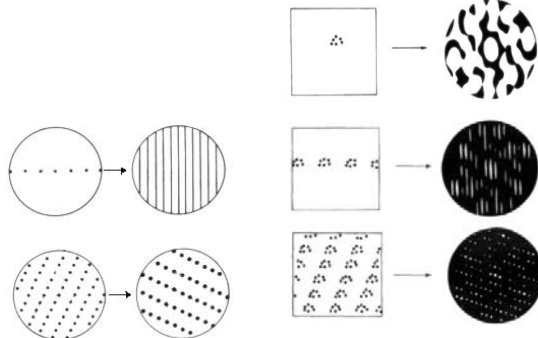
- En óptica (luz visible, 380-750 nm) tales objetos podrían ser rendijas.
- La difracción también proporciona información sobre el ordenamiento cristalino. Aquí los centros de dispersión son átomos. Se requieren ondas muy cortas (0,1nm, 1Å°).

| Color  | Wavelength |
|--------|------------|
| violet | 380–450 nm |
| blue   | 450–495 nm |
| green  | 495–570 nm |
| yellow | 570–590 nm |
| orange | 590–620 nm |
| red    | 620–750 nm |

## Tamaño de los Objetos y Longitud de Onda

- Regla básica para producir difracción: la longitud de onda empleada debe ser próxima a la distancia de primeros vecinos.

Al aumentar el número de objetos regulares, los máximos de difracción se hacen más finos. Se tiene información más precisa del objeto



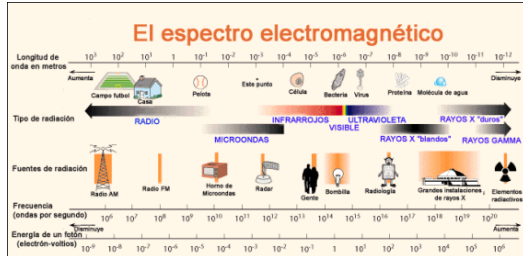
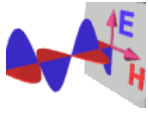
## Radiaciones Útiles para Difracción por Cristales

Para difracción en cristales podemos usar:

- ondas electromagnéticas de  $\lambda$  apropiada (Rayos X),
- partículas que también tienen un carácter ondulatorio: neutrones, protones y electrones, de  $\lambda$  apropiada.

$\lambda$  apropiada:

*próxima a las distancias interatómicas*



Los rayos X que más interesan en difracción de cristales son aquellos denominados RAYOS X cuya  $\lambda$  es próxima a 1 Angstrom (0,1 nm).

## Los Rayos X

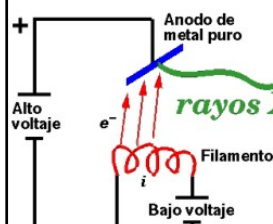


- W. K. Röntgen (Alemania, 1855) descubrió una radiación, invisible, los rayos X, que permitían penetrar los cuerpos opacos.
- Esta capacidad de obtener imágenes por transparencia ha tenido importantes aplicaciones en medicina y materiales.
- Además, los R-X permitieron un enorme avance científico y tecnológico al interactuar como onda con los átomos de los cristales.

## Tipos de radiación para difracción en cristales

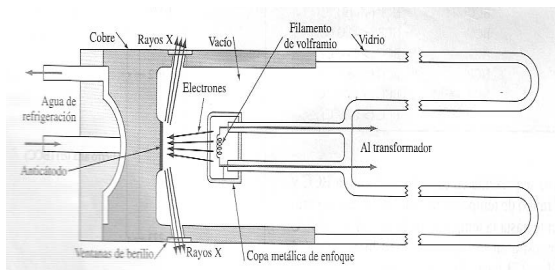
- Los rayos X se obtienen excitando los niveles electrónicos de los átomos: son baratos y su  $\lambda$  está "calibrada".
- En los microscopios electrónicos es obvio el uso de electrones para difractar.
- Las otras partículas se justifican para aplicaciones especiales. Por ejemplo, el haz de neutrones se puede obtener en un reactor nuclear.

## Emisión Atómica de Rayos-X

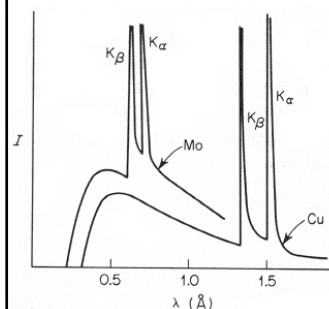


- Cañón de electrones: hay un filamento (en rojo) que produce electrones para excitar al ánodo.
- Los átomos del ánodo (en verde) son los que emiten los rayos X de energía hv.
- El voltaje V del cañón tiene que ser alto, p.e. 35Kev, para lograr emitir las ondas cortas de alta energía de los R-X.
- El ánodo debe ser un metal refrigerado.

## Esquema de un tubo de rayos-X



## 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  $K\alpha$  y  $K\beta$  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.

## Emisión de R-X y espectro

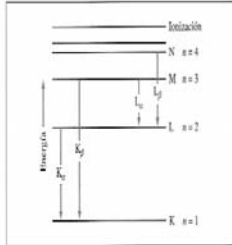


FIGURA 3.27. Niveles de energía de electrones en el molibdeno mostrando el origen de las radiaciones  $K_\alpha$  y  $K_\beta$ .

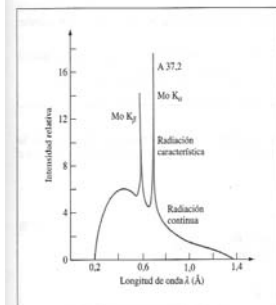
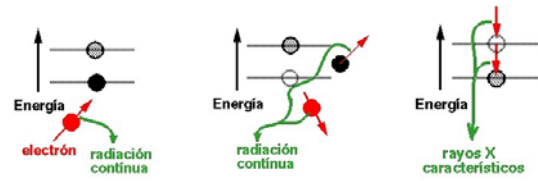


FIGURA 3.28. Espectro de emisión de rayos X producidos cuando el molibdeno metal es utilizado como anticátodo en un tubo de rayos X operando a 35 kV.

## Emisión de R-X por los niveles electrónicos de un átomo



- Un electrón emitido por el filamento alcanza a un electrón en un nivel interno de un átomo del ánodo.
- El electrón interno ya desplazado deja un nivel libre.
- Un electrón más externo del átomo baja de nivel y emite fotones de energía, como rayos X, llamados característicos.

## Diagrama a interpretar. Ejemplo de difracción por un monocristal



- Max von Laue, Nobel 1914.
- Nótese la simetría de orden tres en rotación del diagrama.
- Se necesita una teoría para la interpretación.
- Una primera teoría sencilla es la Ley de Bragg, que veremos.