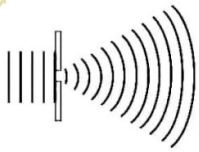
DIFRACCIÓ DE RAIGS X

La difracció és un fenòmen característic de les ones que es basa en la desviació d'aquestes quan troben un obstacle durant la seva propagació que té unes dimensions similars a la seva longitud d'ona.



Els raigs X són un tipus de radiació electromagnètica de longitud d'ona petita, del mateix ordre que la distància que hi ha entre àtoms o ions dins el cristall. Són invisibles per l'ull humà i molt penetrants.

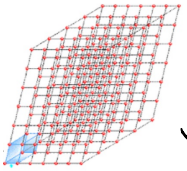
La DIFRACCIÓ DE RAIGS X és una tècnica que ens permet caracteritzar i estudiar sòlids i materials cristal·lins.

Quina informació ens aporta? →

Quines espècies químiques hi ha al cristall, les seves posicions i interaccions intermoleculars entre elles, estructura cristal·lina, dimensionalitat

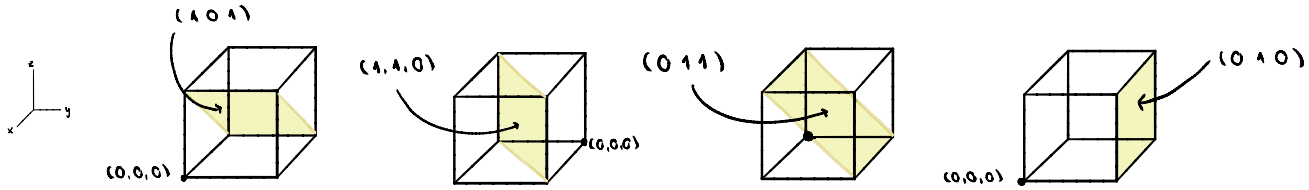
↓

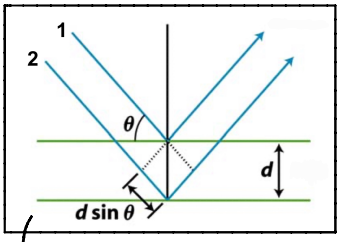
+ és un mètode no destructiu, la mostra analitzada roman intacte.



En un cristall els àtoms, ions o molècules es troben en una posició concreta. Els sòlids cristal·lins es caracteritzen per la seva ordenació i repetició periòdica d'àtoms.

↳ Cada plànol de la cel·la unitària es pot caracteritzar amb els índexs de Miller: un plànol es descriu amb les coordenades (h k l)





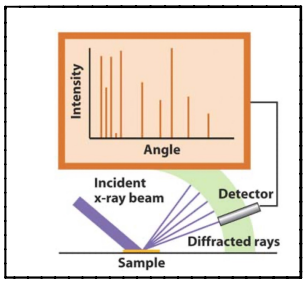
Si 2 plans adjacents i paral·lels estan separats per una distància d, l'angle en què es produirà una interferència constructiva, donada una longitud d'ona λ, ve donat per la llei de Bragg:

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

↳ Superposició de dues o + ones d'= λ que en interferir donen una ona de major intensitat.

interpreta les diferents capes d'àtoms com plànols reflectants.

↓ Els raigs X interfereixen de manera constructiva quan 2·sinθ és igual a un múltiple de la λ.



↗ Consisteix en irradiar la mostra amb raigs X. Els àtoms o ions del sòlid dispersen els raigs X amb una intensitat proporcional al quadrat del nombre d'electrons que tenen. El patró de difracció que s'obté és característic del tipus d'element present i de la seva posició a la xarxa cristal·lina.

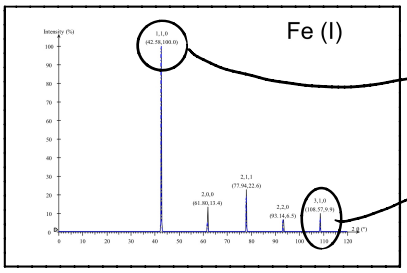
↳ DIFRACCIÓ DE RAIGS X
- DIFRACCIÓ EN POLS (m. policristal·lí)
- DIFRACCIÓ DE MONOCRISTALL

DIFRACCIÓ EN POLS

S'utilitza per determinar els paràmetres i tipus de cel·la del sòlid cristal·lí.

Feix de raigs X que incideix sobre la mostra i es dispersa en totes les direccions. → $\sin\theta = n\lambda/2d$ → interferència constructiva

plànols separats per una distància d = difracció.



pics del difractograma = difracció

Depèn dels paràmetres de cel·la, l'estructura cristal·lina i la λ usada.

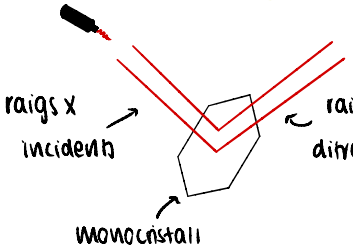
Les intensitats dels pics depèn del tipus d'àtoms presents i les seves posicions.

Difractograma de raigs X: recull les dades d'intensitat en funció de l'angle de difracció (2θ) i, com a resultat, s'obtenen una sèrie de pics. Se li assigna el valor de màxima intensitat (100) al pic més alt i els altres es re escalen.

DIFRACCIÓ DE MONOCRISTALLS

cristalls formats per un únic gra: cares llises, arestes ben definides, sense rugositat... (ordenació perfecta)

↳ mostra amb mida adequada (0.1 - 0.4 mm)



→ es mesura la direcció amb què surten els raigs i la seva intensitat

↓

\+ Tractament matemàtic

↓

= reconstrucció imatge monocristall

coordenades àtoms cel·la unitat

distàncies i angles d'enllaç, simetria i empaquetament cristall...