

# TAREA N4

Soriano Matos Sebastian

May 10, 2024

**Problema 1.** ¿Cual es el rango de longitudes de onda para los rayos-X usados en difracción?

Los Rayos X son un tipo de radiación electromagnética, con una longitud de onda ( $\lambda$ ) en el rango de angstrom ( $\text{\AA}$ ) es la unidad de medida en la región de los rayos X y es igual a  $10^{-10}$  m. Los rayos X usados en difracción tienen longitudes de onda en el rango 0.5 - 2.5  $\text{\AA}$ , con radiación con  $\lambda \sim 1 \text{\AA}$  se puede estudiar la materia a escala atómica. [1]

**Problema 2.** Describa brevemente el origen y características del espectro continuo y del espectro característico (en la emisión de rayos-X)

(a) Espectro continuo

Cuando un electrón de alta energía, al pasar cerca del núcleo, se desvía debido a la interacción electromagnética. Como consecuencia de este proceso de desvío (frenado), el electrón pierde energía emitiendo radiación(rayos X), cuya longitud de onda es tanto menor cuanto mayor es la rapidez del electrón antes de chocar contra el objeto.

- Surgen ondas de todas las longitudes, desde la onda mínima o de corte.

(b) Espectro característico

Cuando los electrones, en el campo acelerador, adquieren una velocidad suficientemente alta para penetrar en el interior del átomo del ánodo y arrancar uno de los electrones de su capa interna, entonces su lugar lo ocupa un electrón de una capa mas alejada, irradiando un cuanto de energía.

- Tiene rigurosamente determinadas longitudes de onda, propias solo del elemento químico que forma el ánodo.
- Los picos están asociados con la transición de electrones desde capas externas hacia capas internas del átomo.

**Problema 3.** ¿Qué diferencia hay entre un material cristalino y un material amorfo? Define celda unidad y primeros vecinos en amorfo.

(a) Diferencias entre un material cristalino y un material amorfo

Table 1: Diferencias entre un material cristalino y un material amorfo. [2]

Material cristalino	Material amorfo
Tienen un orden geométrico que forma redes cristalinas.	Las moléculas están distribuidas al azar.
Las fuerzas de atracción intermoleculares son máximas.	Carecen de un ordenamiento al interior de sus moléculas.
La temperatura de fusión de un cristalino sólido es precisa y está bien definida.	No tienen una temperatura de fusión definida.

(b) Define Celda unidad en un material amorfo.

La celda unidad de un material amorfo, es la mínima estructura en la red. En corta escala no se puede representar un patrón para toda la red.

(c) Define Primeros vecinos en un material amorfo.

Los Primeros vecinos son una estructura repetitiva y organizada a lo largo de la red, en un material amorfo no existe tales características por tanto se podría decir que los primeros vecinos en un material amorfo no estarían bien definidos.

**Problema 4.** Responde a las siguientes cuestiones:

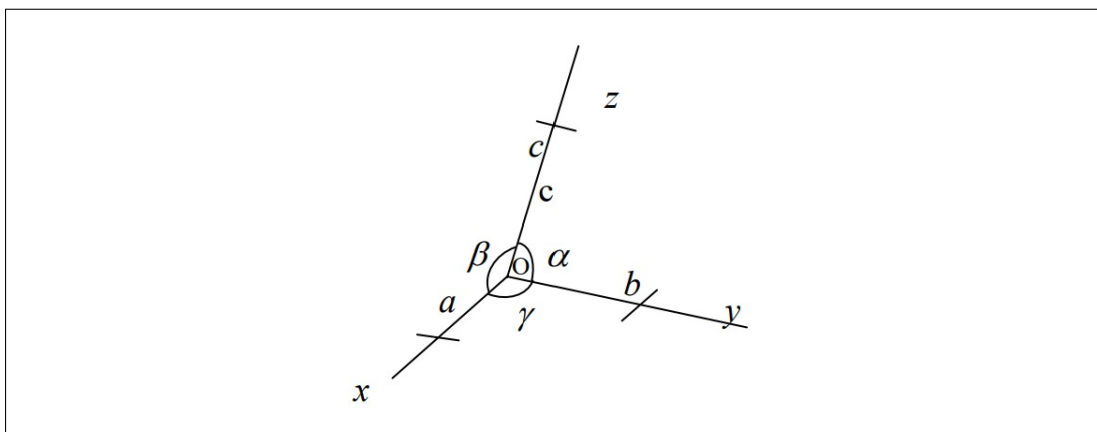
(a) Enumera los sistemas cristalinos.

Table 2: Sistemas cristalinos.

Sistema	Celda unitaria
Triclínico	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ $a \neq b \neq c$
Monoclínico	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ $a \neq b \neq c$
Ortorrómbico	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a \neq b \neq c$
Trigonal	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ $a = b = c$
Hexagonal	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ $a = b \neq c$
Tetragonal	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b \neq c$
Cúbico	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ $a = b = c$

(b) ¿Cuántos parámetros son necesarios para describir la celda de un material que cristaliza en el sistema cúbico?

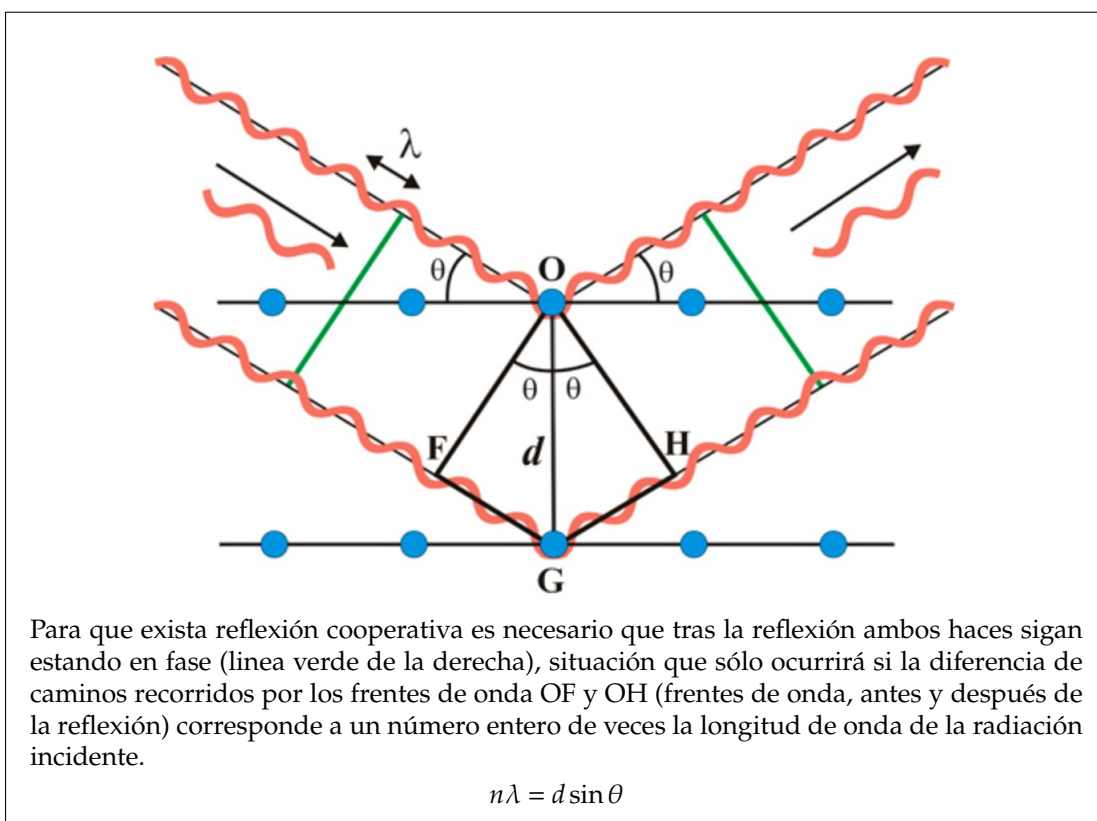
Los parámetros son: a, b, c. Y están dispuestos como se muestran:



**Problema 5.** En qué consiste el fenómeno de la difracción. Enuncia la Ley de Bragg.

(a) Ley de Bragg

Predice la dirección en la que se da interferencia constructiva entre haces de rayos X dispersados coherentemente por un cristal



**Problema 6.** Un material cristaliza con una red cúbica de arista 4.110 Å. Utilizando radiación de longitud de onda 1.5406 Å, obtenga los ángulos de Bragg para las reflexiones con índices de Miller (100) y (110).

La distancia interplanar en una red cubica esta dado por:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (1)$$

Ahora, despejando  $\theta$  de la ley de Bragg

$$\theta = \sin^{-1} \frac{\lambda}{2d} \quad (2)$$

(a) Índice de Miller (100),  $n = 1$

$$d_{100} = \frac{4.110}{\sqrt{1^2 + 0^2 + 0^2}} = 4.110 \quad (3)$$

$$\theta_{100} = \sin^{-1} \frac{1.5406}{2 * 4.110} = 10.80 \quad (4)$$

(b) Índice de Miller (110),  $n = 1$

$$d_{110} = \frac{4.110}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} = 2.906 \quad (5)$$

$$\theta_{110} = \sin^{-1} \frac{1.5406}{2 * 2.906} = 15.37 \quad (6)$$

**Problema 7.** ¿Qué diferencia hay entre un monocristal y un material policristalino?

Table 3: Diferencias entre un material monocristal y policristalino.

Monocristal	Policristal
Compuesto por una única estructura cristalina.	Compuesto por múltiples estructuras cristalinas o granos.
No tiene límites de grano o interfaces entre diferentes estructuras cristalinas.	Los granos están separados por límites de grano.
Mejor rendimiento en ciertas aplicaciones debido a su estructura uniforme.	Puede tener un rendimiento ligeramente inferior debido a la presencia de límites de grano, que pueden introducir defectos.

(a)

**Problema 8.** Describe un tubo para generar rayos-X y sus distintas variantes.

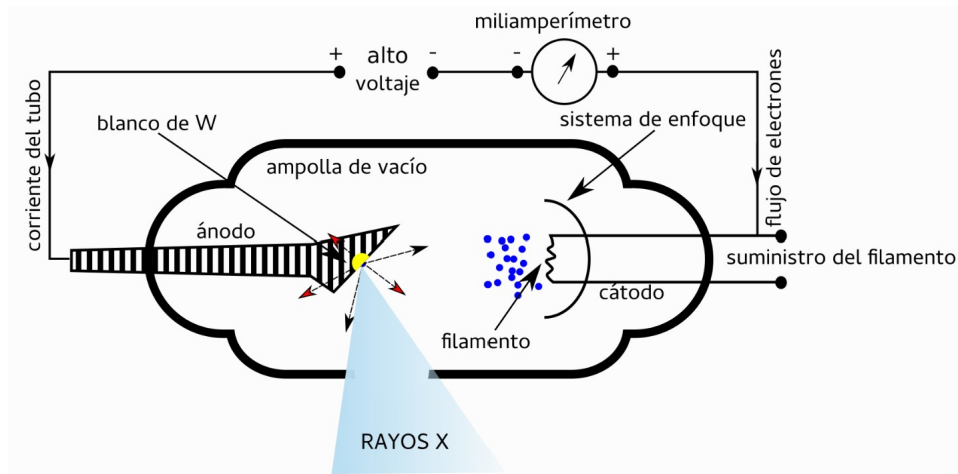
“Tubo de rayos X” al lugar físico donde los electrones acelerados son frenados al colisionar contra un material blanco.

(a) Principales Componentes

Compuesto básicamente por un ánodo y un cátodo alojados en una cavidad donde se ha practicado vacío. Esta cavidad suele ser una ampolla de vidrio y el proceso de producción de rayos X se da al emerger electrones del cátodo e impactar en el ánodo.

- **Cátodo.-** Es donde se generan los electrones. Generalmente está hecho de un filamento de tungsteno o de otro material resistente al calor. Cuando se le aplica una corriente eléctrica, el filamento se calienta y emite electrones por efecto termoiónico.
- **Ánodo.-** El ánodo es el electrodo positivo del tubo de rayos X, que se coloca frente al cátodo. Cuando los electrones generados por el cátodo son acelerados hacia el ánodo y chocan contra él, se produce la radiación de rayos X.
- **Generador de diferencia de potencial.-** Se encarga de proporcionar la energía necesaria para acelerar los electrones desde el cátodo hacia el ánodo, donde se produce la radiación de rayos X.
- **Generador de corriente.-** Controla la cantidad de corriente eléctrica que fluye a través del filamento del cátodo, lo que a su vez afecta la intensidad de los electrones liberados y, por lo tanto, la cantidad de radiación de rayos X producida.

- **Ampolla con vacío.-** Tiene como finalidad contener el vacío, evitar la degradación del filamento, mejorar la eficiencia y prevenir los arcos eléctricos.



(b) Distintas Variantes

- **Tubo de rayos X de diagnóstico médico:** Estos tubos están diseñados para producir una radiación de rayos X constante y controlable. Utilizado en radiografías y fluoroscopias para diagnóstico médico.
- **Tubo de rayos X de alta energía:** Utilizado en aplicaciones industriales y de investigación que requieren rayos X de alta energía, como pruebas no destructivas, difracción de rayos X y radiografías industriales.

**Problema 9.** ¿Qué datos se obtienen a partir de un patrón de difracción de rayos-X, de un material? Ejemplo como el de la muestra AZ.

(a) Datos que se obtienen a partir de un patrón de difracción de rayos-X. [3]

- **Distancia Interplanar.-** La posición y la intensidad de los picos en el patrón de difracción proporcionan información sobre el espaciado de los planos cristalinos en el material.
- **Identificación de fases cristalinas.-** Al comparar el patrón de difracción de un material desconocido con bases de datos de patrones de difracción conocidos, es posible identificar las fases cristalinas presentes en el material.
- **Tamaño de cristalito.-** El ancho de los picos de difracción está relacionado con el tamaño promedio de los cristalitos en el material.
- **Estructura cristalina.-** Proporcionar información como la simetría cristalina, la presencia de defectos cristalinos, la orientación preferencial de los cristales y la presencia de tensiones residuales.
- **Parámetros de red.-** Mediante el análisis de los picos de difracción, es posible determinar los parámetros de red del material, fundamentales para caracterizar la estructura cristalina del material.

**Problema 10.** ¿De qué dependen las direcciones en las que se produce la difracción en un experimento de difracción de rayos-X (los valores de espaciado para los picos observados en un difractograma)?

(a) Direcciones y valores de espaciado

Dependen de la estructura cristalina del material, la longitud de onda de los rayos X utilizados y la orientación cristalográfica del cristal.

**Problema 11.** Indica los factores que determinan la intensidad de los picos de difracción.

(a) Intensidad de los picos de difracción

La intensidad de los picos de difracción en un difractograma de rayos X está determinada por una combinación de factores relacionados con la estructura del material y las condiciones experimentales.

- **Factor de estructura ( $F_{hkl}$ ).**- Determina la intensidad del pico de difracción correspondiente.
- **Distancia interplanar ( $d$ ).**- Cuanto mayor sea el espaciado entre los planos cristalinos que difractan los rayos X, mayor será la intensidad del pico de difracción.
- **Número atómico ( $Z$ ).**- Los átomos con un número atómico más alto y un mayor factor de dispersión tienden a contribuir más a la intensidad de difracción.
- **Longitud de onda de los rayos X ( $\lambda$ ).**- Los materiales con estructuras cristalinas más pequeñas o con una dispersión de electrones más grande difractarán mejor los rayos X de menor longitud de onda, lo que resultará en picos de difracción más intensos.
- **Orientación cristalográfica.**- La intensidad de los picos de difracción puede variar según la orientación cristalográfica del cristal.
- **Condiciones experimentales.**- Factores como la temperatura, la geometría de la muestra, la calidad de la muestra y la configuración del detector pueden influir en la intensidad de los picos de difracción observados en un difractograma de rayos X.

**Problema 12.** Describe las aplicaciones más importantes de la difracción de rayos-X.

(a) Aplicaciones de los rayos-X

- **Identificación de fases.**- Consiste en identificar los patrones que mejor se ajustan a los picos del difractograma imponiendo restricciones en la composición química de la fase o mediante los picos de mayor intensidad en el difractograma.
- **Pureza de muestras.**- La difracción de r-x también puede utilizarse para identificar impurezas. La impureza debe ser cristalina, además la capacidad para detectar una impureza depende de la capacidad de ésta para dispersar la radiación y eso depende de  $Z$ .
- **Medida de tensiones.**- Esta aplicación es crucial para comprender y controlar las propiedades mecánicas y estructurales de los materiales en una variedad de industrias.
- **Determinación de diagramas de fase.**- Proporciona información detallada sobre las fases cristalinas presentes en una muestra y permitiendo la construcción de diagramas de fase que son fundamentales para comprender el comportamiento de los materiales en diferentes condiciones.
- **Determinación de estructuras cristalinas.**- Proporciona información detallada sobre la disposición atómica en materiales cristalinos y permitiendo avanzar en numerosos campos científicos y tecnológicos.

**Problema 13.** Como se compara, los patrones de difracción obtenidos con distintas longitudes de onda

- (a) Proporcionar una comprensión más completa de la estructura cristalina de un material y revelar información valiosa sobre sus propiedades físicas y químicas.

- **Resolución.-** Las longitudes de onda más cortas proporcionan una mejor resolución espacial y pueden sondear estructuras cristalinas más pequeñas.
- **Desplazamiento en los Picos.-** Comparar los desplazamientos en los picos de difracción puede proporcionar información sobre el tamaño y la orientación de los cristales en la muestra.
- **Propiedades específicas de la muestra.-** Algunas muestras pueden ser más sensibles a ciertas longitudes de onda de los rayos X debido a sus propiedades específicas, como la absorción de rayos X o la dispersión anómala de rayos X.

**Problema 14.** Como funciona un sincrotrón, que diferencias hay con un difractómetro de laboratorio.

- (a) Como funciona un sincrotrón

Un acelerador de partículas acelera electrones a velocidades cercanas a la velocidad de la luz. Esto se logra utilizando campos electromagnéticos para desacelerar y guiar los electrones a lo largo de un camino circular dentro de un anillo de almacenamiento. A medida que los electrones viajan a través del anillo de almacenamiento, emiten radiación sincrotrón debido a su aceleración en curvas cerradas. Esta radiación sincrotrón abarca una amplia gama de longitudes de onda, desde rayos X hasta luz ultravioleta e infrarroja, y es altamente intensa y colimada.[4]

- (b) Diferencias entre un Sincrotrón y un Difractómetro

Los sincrotrones ofrecen ventajas significativas sobre los difractómetros de laboratorio en términos de intensidad, calidad de los rayos X producidos, lo que los convierte en herramientas poderosas para una amplia gama de investigaciones en ciencia de materiales, química, biología y física.

Table 4: Diferencias entre un Sincrotrón y un Difractómetro.

Característica	Sincrotrón	Difractómetro
Fuente de radiación	altamente intensa y colimada	menos intensa y colimada
Intensidad	Muy alta	Menor
Rango	Amplio	Fija
Resolución espacial	Alta	Menor
Costo	Muy alto	Menor

**Problema 15.** Describa el método de refinamiento Rietveld

- (a) Método de refinamiento Rietveld

Consiste en ajustar un perfil teórico de difracción a los datos experimentales, refinando parámetros como la posición de los átomos y los factores de escala y fondo. Se utiliza software especializado para optimizar el ajuste, evaluando la calidad mediante factores como el factor de Rietveld.

**Problema 16.** Cada punto de la red directa que representa

Cada punto de la red directa en la cristalografía representa una posición en el espacio tridimensional donde se encuentra un átomo en una estructura cristalina, correspondiente a los sitios ocupados por los átomos. Estos puntos de la red directa son esenciales para

describir la disposición espacial de los átomos en un cristal y determinar su estructura cristalina. [5] [6]

**Problema 17.** Cada punto de la red recíproca que representa

En la red recíproca, cada punto representa un vector de onda que corresponde a un plano en el espacio real. Estos planos se denominan planos de reflexión y están asociados con la difracción de rayos X por la estructura cristalina.[5] [6]

**Problema 18.** Para que haya difracción que ley se debe cumplir

Para que ocurra la difracción de rayos X en un cristal, la Ley de Bragg debe cumplirse, lo que garantiza que los rayos X reflejados por los planos de átomos en la red cristalina interfieran constructivamente y se observen picos de difracción en posiciones específicas.

**Problema 19.** Donde se construye la esfera de Ewald

La esfera de Ewald se construye en el espacio recíproco en la cristalografía de rayos X y se utiliza para visualizar y analizar la difracción de los rayos X por una red cristalina. Es una herramienta fundamental que ayuda a determinar las condiciones de difracción válidas y a comprender cómo los vectores de onda difractada se relacionan con la estructura cristalina del material. [7]

## References

- [1] J. Sarmiento, "Técnicas de caracterización de polímeros: Difracción de rayos x," 2022.
- [2] K. Chang, R. y Goldsby, "Química," McGraw-Hill, 2017.
- [3] Vesga, R. Tarazona, and Y. Castellanos, "Simulación de perfiles de difracción de rayos x de muestras problema para aplicaciones académicas," *Educación Química*, vol. 34, pp. 3–10, 01 2023.
- [4] A. Fuentes-Penna, J. Ruiz-Vanoye, O. Díaz-Parra, and R.-T. Fernando, "Estructura y aplicaciones de un sincrotrón," *Inventio. La Génesis de la Cultura Universitaria en Morelos*, vol. 13, pp. 55–59, 04 2017.
- [5] N. W. A. y N. D. Mermin, "solid state physics," Editorial Brooks/Cole, 1976.
- [6] C. Kittel, "introduction to solid state physics," Editorial Wiley, 8va edición.
- [7] G. Demyanov, A. Onegin, and P. Levashov, "N-convergence in one-component plasma: Comparison of coulomb, ewald, and angular-averaged ewald potentials," *Contributions to Plasma Physics*, 02 2024.