

DIFRACCIÓN DE BRAGG CON MICROONDAS

Tomás R. Basile¹ & Julia Hernández Monterde²

26 de septiembre de 2022

Correos Electrónicos: tbasilealvarez@ciencias.unam.mx¹ & juliahm@ciencias.unam.mx²

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México 01000, México

RESUMEN. En este trabajo se usó la ley de Bragg para calcular las distancias interplanares en dos cubos macroscópicos que simulan ser un arreglo cristalino cúbico simple. Se usó un emisor de microondas para hacer incidir la radiación sobre los cubos y un detector para medir las ondas difractadas. Usando la ley de Bragg, se calcularon distancias interplanares para los planos (100), (110), (120) y se obtuvieron resultados con errores de a lo sumo 20 % respecto al valor teórico. Además, se complementó el trabajo con una simulación computacional del experimento, en la que se obtuvieron resultados con errores de menos del 2 % respecto a los teóricos.

ABSTRACT. In this work we used Bragg's law to calculate the interplanar distances in two macroscopic cubes that simulate crystalline simple cubic arrangements. We used a microwave emitter to send radiation to the cubes and a detector to measure the diffracted waves. Using Bragg's law, we calculated the interplanar distances for the planes (100), (110), (120) and obtained results with an error of at most 20 % with respect to the theoretical value. Furthermore, we complemented the work by doing a computational simulation of the experiment, in which we obtained results with errors of less than 2 % with respect to the theoretical value.

1. Introducción

1.1. Antecedentes

En 1913 William Henry Bragg y su hijo William Lawrence Bragg estudiaron los patrones de difracción de rayos X reflejados por materiales cristalinos. Notaron que el ángulo de máxima intensidad de la reflexión depende de la longitud de la onda y de la distancia entre los planos del cristal. Esto les valió el premio Nobel en física en 1915 y dio nacimiento a la cristalografía de rayos X, que permite ver la estructura interna de materiales y ha sido utilizada en gran variedad de áreas [1]. En particular, la cristalografía de rayos X se ha utilizado para caracterizar materiales y obtener información sobre su estructura atómica y electrónica, o incluso para conocer la estructura de moléculas biológicas como proteínas o el ADN [4].

1.2. Conceptos Básicos

Para la realización de esta práctica, empezamos revisando el concepto de un **arreglo cristalino**. Un arreglo cristalino es un sólido formado por un arreglo periódico de átomos. Estos arreglos se construyen por la repetición de grupos idénticos de átomos a lo largo de una red de puntos en tres dimensiones. La red está determinada por tres vectores de traslación $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ definidos de tal

forma que el arreglo se ve igual en un punto \vec{r} y en uno

$$\vec{r} + n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3,$$

donde $n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{Z}$. Es decir, si nos movemos una cantidad entera de pasos en las direcciones de los vectores $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, el arreglo cristalino se sigue viendo igual [3].

La **Celda Unitaria** de un arreglo cristalino se define como el conjunto de átomos más pequeño posible en el arreglo tal que si se repite en todo el espacio forma al sólido completo [3]. En el caso de nuestro experimento, nos interesa el arreglo **cúbico simple**, en el que la celda unitaria es un cubo con lado de longitud a y con un átomo en cada una de sus esquinas, como se ve en la figura 1.

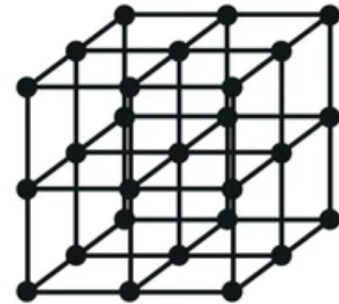


Figura 1: Arreglo cristalino cúbico simple.

En un arreglo cristalino como el cúbico simple que nos interesa en este experimento, se crean varios conjuntos de planos de átomos paralelos. Estos conjuntos de planos se caracterizan por tres índices conocidos como **Índices de Miller** y algunos se muestran en la figura 2. Dado un plano de átomos en el arreglo, para encontrar sus índices de Miller se siguen los siguientes pasos [3]:

1. Encontrar las intersecciones del plano con cada uno de los ejes de coordenadas.
2. Tomar el recíproco de estos números y reducirlo a la tercia de números enteros más pequeña posible que tengan las mismas razones entre ellos.

Siguiendo estos pasos, algunos de los planos y sus índices de Miller se muestran en la figura 2.

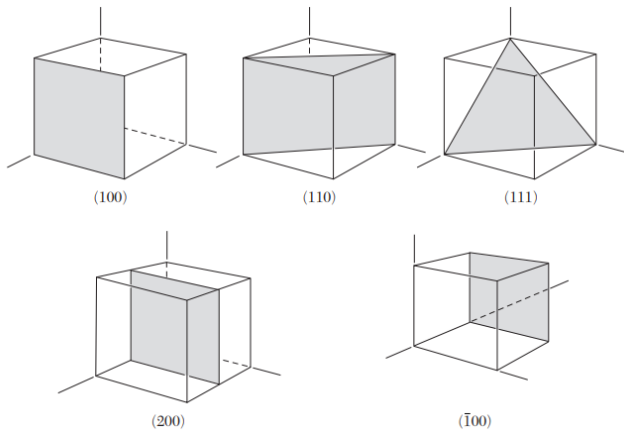


Figura 2: Planos en un cristal cúbico. Se usa una barra encima de un índice para simbolizar que tiene un signo negativo [3].

1.2.1. Ley de Bragg

La ley de Bragg permite encontrar la dirección en la que se produce interferencia constructiva cuando un haz electromagnético incide sobre un arreglo cristalino [4]. En la figura 3 se muestra un esquema que explica esta ley. Se muestran primero un par de planos en el arreglo cristalino separados por una distancia d , que pueden ser parte de cualquiera de las familias de planos paralelos que se mencionaron antes. Sobre estos planos incide radiación electromagnética con un ángulo de incidencia θ , la cual se refleja sobre ambos planos también a un ángulo θ .

Los haces difractados por cada plano interferirán entre ellos y habrá ángulos θ en los que la interferencia será constructiva y un detector del haz difractado medirá un máximo de intensidad. La ley de Bragg indica cómo encontrar el valor de este ángulo, pues la intensidad máxima se tendrá cuando ambos haces están en fase, para lo cual la distancia adicional que recorre el haz reflejado en el segundo plano tiene que ser un múltiplo de

la longitud de onda λ de la radiación. Es decir, el ángulo de máxima intensidad se encuentra cuando [1]:

$$n\lambda = 2d \sin \theta, \quad (1)$$

donde n es un número natural que indica el orden de la difracción. De esta forma, dada la longitud de onda λ y la distancia entre los planos sobre los que se incide d , se puede encontrar el ángulo θ de mayor intensidad de difracción. Para utilizar la ley de Bragg, es importante poder determinar la distancia entre cualquier conjunto de planos. Para ello, con argumentos geométricos se puede llegar a que para planos con índices (h, k, l) , la distancia entre planos es [3]:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}. \quad (2)$$

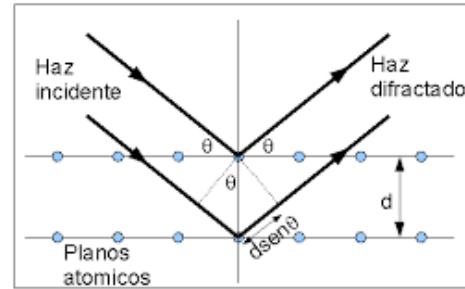


Figura 3: Diagrama de la ley de Bragg.

1.3. Objetivos

El objetivo de la práctica es comprobar la ley de Bragg utilizando un modelo macroscópico, en el que en vez de usar un sólido cristalino, se utiliza un cubo de canicas o imanes para simular los átomos y la radiación usada son microondas. Se encontrará el espectro de la radiación difractada por el cubo para distintas familias de planos paralelos y se usará la ley de Bragg para encontrar la distancia entre planos y comparar con el valor teórico.

2. Desarrollo Experimental

2.1. Materiales

- Emisor y receptor de microondas
- Cubo de unicel con canicas dentro y juego de magnetix.
- Riel y goniómetro.
- Multímetro y cables banana-banana

El procedimiento utilizado para desarrollar el experimento fue el siguiente:

1. Primero se mide la longitud de onda de las microondas creadas por el emisor. Para ello, se colocan el emisor y transmisor frente a frente en el riel.
2. Para diferentes distancias entre el receptor y el emisor, se mide la intensidad captada por el receptor usando el multímetro y se calcula la longitud de onda de la radiación tomando la distancia entre máximos de intensidad y multiplicándola por 2.
3. Se colocan el emisor y receptor en los brazos del goniómetro y el cubo de uniel en medio como se ve en la figura 4.

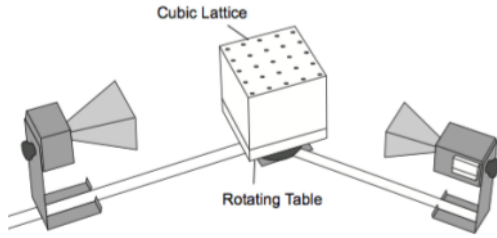


Figura 4: Montaje del experimento.

4. Alinear el cubo de forma que la radiación emitida incida sobre alguno de los planos (ya sea el (100), (110) o (120), que son los que mediremos) y poner el emisor y receptor a un ángulo $\theta = 20^\circ$.
5. Variar el ángulo θ desde 20° hasta 80° y en cada ángulo medir la intensidad en el receptor para encontrar los ángulos de máxima intensidad.
6. Repetir para los dos cubos y para los 3 planos.

3. Resultados

3.1. Longitud de Onda

Tras seguir los pasos 1 y 2 del procedimiento, se encuentra la intensidad medida en el receptor como función de la distancia entre emisor y receptor. Los resultados se grafican en la figura 5.

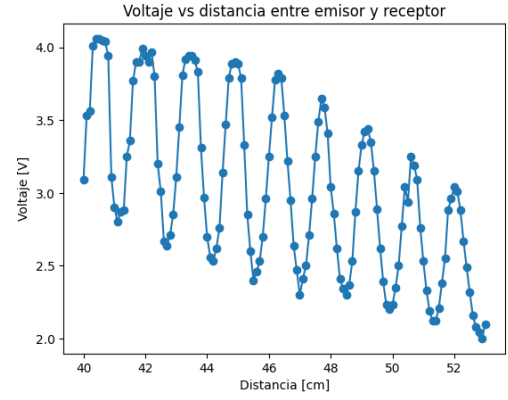


Figura 5: Mediciones del voltaje para distintas distancias entre el emisor y el receptor.

A partir de estos resultados, se puede medir la distancia entre máximos de intensidad, que es igual a la mitad de la longitud de onda. A partir de las distancias entre los 9 máximos de la figura 5, se encuentran el promedio y desviación estándar, que son $1.45 \pm 0.071\text{cm}$ y por lo tanto:

$$\lambda = 2.9 \pm 0.142\text{cm}.$$

3.2. Espectros

3.2.1. Cubo de Uniel

Reportamos primero los resultados para el cubo de uniel. Los espectros de intensidad medidos por el detector como función del ángulo de incidencia para los planos (100), (110), (120) se muestran en las figuras 6, 7, 8 respectivamente.

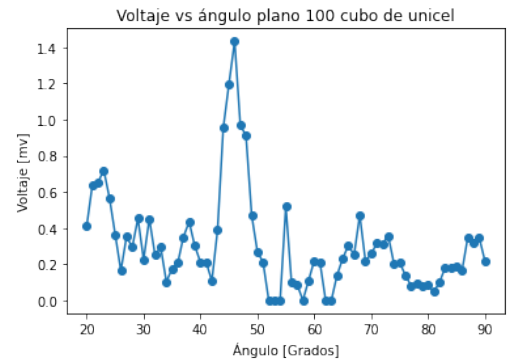


Figura 6: Espectro detectado para el plano (100), cubo de uniel.

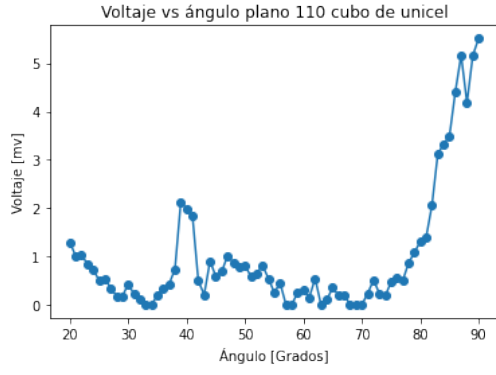


Figura 7: Espectro detectado para el plano (110), cubo de unice1.

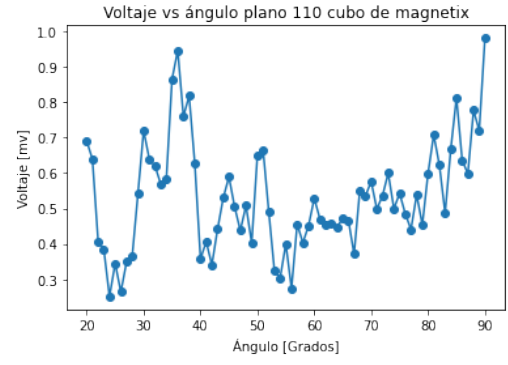


Figura 10: Espectro detectado para el plano (110), cubo de magnetix.

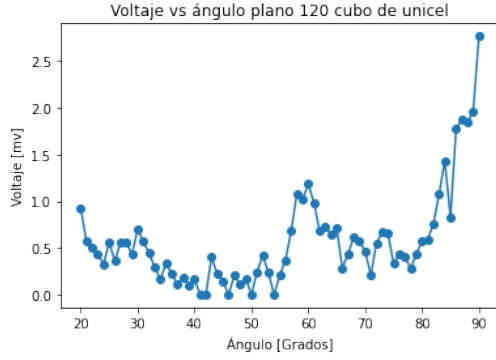


Figura 8: Espectro detectado para el plano (120), cubo de unice1.



Figura 11: Espectro detectado para el plano (120), cubo de magnetix.

3.2.2. Cubo de Magnetix

Ahora se reportan los resultados para el cubo de Magnetix. Al igual que antes, se muestran los espectros de intensidad medidos por el detector como función del ángulo de incidencia para los planos (100), (110), (120) en las figuras 9, 10, 11 respectivamente.

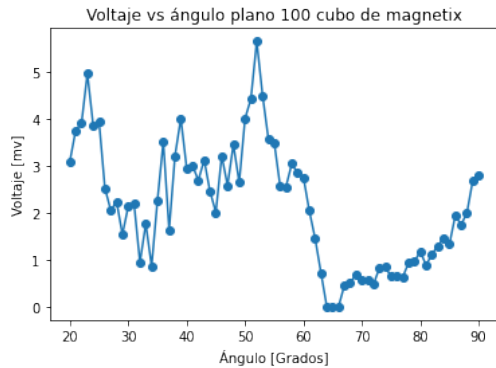


Figura 9: Espectro detectado para el plano (100), cubo de magnetix.

3.3. Simulación Computacional

Además de los resultados medidos en el laboratorio, se decidió simular este experimento computacionalmente y comparar los resultados. El algoritmo para la simulación se programó en Python y está basado en lo descrito en [2]. El algoritmo toma como entrada el ángulo con el que se ubica el arreglo cúbico (y que por tanto define a los planos), la distancia a entre átomos en el arreglo y la distancia del emisor y receptor al cubo y realiza los siguientes pasos:

1. Se itera sobre el ángulo de incidencia θ de las microondas desde 10° hasta 81° con pasos de 0.5 grados y para cada grado se hacen los pasos del 2 al 5.
2. Utilizando el ángulo θ , las distancias del emisor y receptor al cubo, la distancia entre átomos y la orientación del cubo, se calculan las coordenadas de los átomos del arreglo (se toma un cubo de $5 \times 5 \times 5$ átomos) y del receptor (la posición del emisor se toma como el origen de coordenadas).
3. Se asume que el emisor genera una onda esférica,

por lo que su campo eléctrico está descrito por

$$E_e(\vec{r}, t) = \frac{E_1}{r} e^{i(kr - \omega t)}, \quad (3)$$

donde E_1 es la amplitud del campo emitido (en este caso se toma un valor de 1, ya que no importa el valor en términos absolutos, pues sólo importará encontrar el máximo de intensidad), k el número de onda y ω la frecuencia angular (que se obtienen a partir de la longitud de onda).

- Usando 3 y la posición de los átomos del arreglo, se calcula la magnitud del campo eléctrico en la posición de cada átomo del arreglo. Por ejemplo, para un átomo dado con posición \vec{a} , el campo es

$$E_e(\vec{a}, t) = \frac{E_1}{|\vec{a}|} e^{i(k|\vec{a}| - \omega t)}$$

- Se asume que cada átomo en el arreglo refleja la onda incidente y la reemite en forma de una onda esférica, cuya magnitud en un punto \vec{r} será entonces

$$E_{\vec{a}}(\vec{r}, t) = E_e(\vec{a}, t) \frac{e^{i(k|\vec{r} - \vec{a}| - \omega t)}}{|\vec{r} - \vec{a}|}. \quad (4)$$

- Se utiliza la ec. 4 para calcular el campo eléctrico en la posición del detector generado por una partícula en \vec{a} . Se suman todos los campos generados por las partículas del arreglo para obtener el campo total y calcular su magnitud cuadrada para conseguir la intensidad medida por el detector.

Tras programar este algoritmo en Python, se obtuvieron los resultados de la intensidad medida en el receptor vs el ángulo de incidencia de las microondas para cada una de las orientaciones correspondientes a los planos (100), (110), (120). Las curvas de intensidad como función del ángulo de incidencia se presentan en las figuras 15, 16 y 17 en el apéndice, al igual que la tabla 1 con los ángulos en los que hay un máximo de intensidad.

4. Análisis y Discusión

A partir de los resultados experimentales, notamos que para el cubo de uncel hay máximos en 23° y 46° para el plano (100), un máximo en 39° para el plano (110) y un máximo en 60° para el (120). Por otro lado, para el cubo de magnetix tenemos dos máximos a ángulos de 23° y 52° para el plano (100), un máximo a 36° para el plano (110) y uno a 59° para el (120).

Con la ecuación 1 se puede encontrar el ángulo en el que teóricamente se debe encontrar el máximo de intensidad para cada uno de los planos. Las distancias teóricas

se calculan con la ecuación 2 y usando la distancia entre átomos a , que se puede medir directamente y es de 4cm . En la figura 12 se muestra el ángulo de máxima intensidad teórico, el encontrado para cada uno de los cubos y el encontrado con la simulación computacional.

Plano	Ángulo máximo teórico	Ángulo máximo uncel	Ángulo máximo magnetix	Ángulo máximo computacional
100	20.87	23	23	21
100	46.46	46	52	46.5
110	30.25	39	36	29.5
120	52.81	60	59	53

Figura 12: Ángulos de máxima intensidad detectada. Las medidas experimentales tienen una incertidumbre de 0.5° .

Con estos máximos, se puede usar la ecuación 1 para encontrar las distancias entre planos para cada caso y compararlas con las distancias teóricas, las cuales se encuentran con la ecuación 2. En la tabla 13 se muestran las distancias encontradas experimentalmente, computacionalmente y los valores teóricos para cada plano.

Plano	Distancia teórica [cm]	Distancia uncel [cm]	Distancia magnetix [cm]	Distancia computacional [cm]
100	4	3.71	3.71	4.05
100	4	4.03	3.68	3.99
110	2.83	2.29	2.47	2.94
120	1.79	1.67	1.69	1.81

Figura 13: Distancias entre planos.

5. Conclusiones

A partir de la tabla 13 podemos ver que las distancias interplanares encontradas experimentalmente son en general buenas y tienen errores de a lo sumo un 20%. Por otro lado, las distancias encontradas en la simulación son considerablemente mejores y muy cercanas a las teóricas.

Aunque el resultado experimental es bastante bueno, tomó varias repeticiones encontrarlo, pues en muchas ocasiones el detector arrojaba resultados sin sentido, que eran prácticamente 0 o incluso negativos. Tras muchos intentos, observamos que es fundamental que el cubo, el detector y el emisor estén bien alineados y se encuentren a la misma altura (para lo cual tuvimos que colocar el cubo sobre unos cuadernos). Además, es fundamental que el detector tenga baterías nuevas, pues cuando tiene baja batería no arroja buenos resultados.

Referencias

- [1] Beiser, A. and Kok, C. (2015). *Concepts of Modern Physics*. McGraw-Hill Education, 6th. edition.

- [2] Heidtmann, E. (2008). Simulating bragg diffraction to understand divergence from theory in an introductory laboratory experiment.
- [3] Kittel, C. (2019). *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley and Sons, 8th. edition.
- [4] Tipler, P. and Llewellyn, R. (2012). *Modern Physics*. W.H. Freeman, 5th edition.

6. Apéndice

6.1. Simulación Computacional

Vista de la simulación

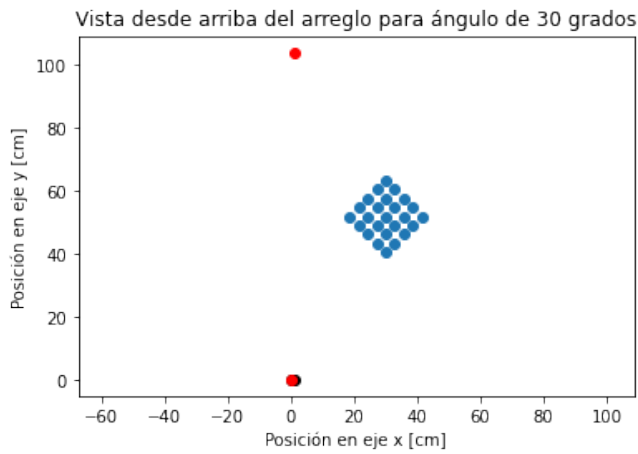


Figura 14: Vista de la simulación computacional para la orientación del plano (110). El punto rojo en el origen marca al emisor de microondas, el punto rojo en la parte de arriba marca la posición del receptor. Los puntos azules representan a los átomos del arreglo cristalino, que está en una orientación de 45° (para medir la distancia entre planos paralelos al 110). La vista es como una imagen del arreglo tomada desde arriba.

Simulación para el plano (100)

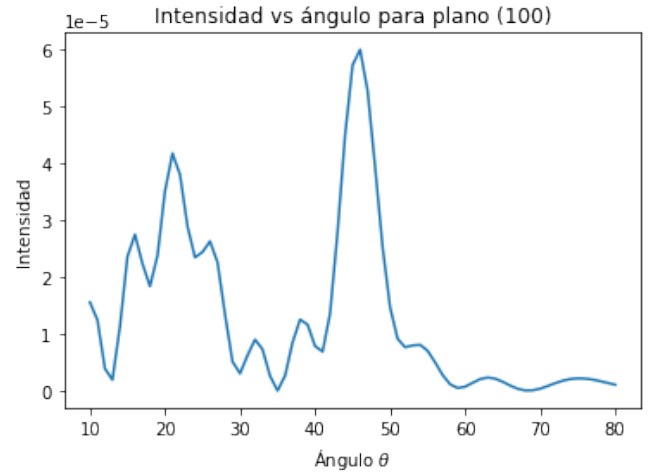


Figura 15: Espectro de la simulación computacional para planos paralelos al (100).

El espectro tiene un primer máximo de emisión en 21.0° y otro en 45.5° .

Simulación para el plano (110)

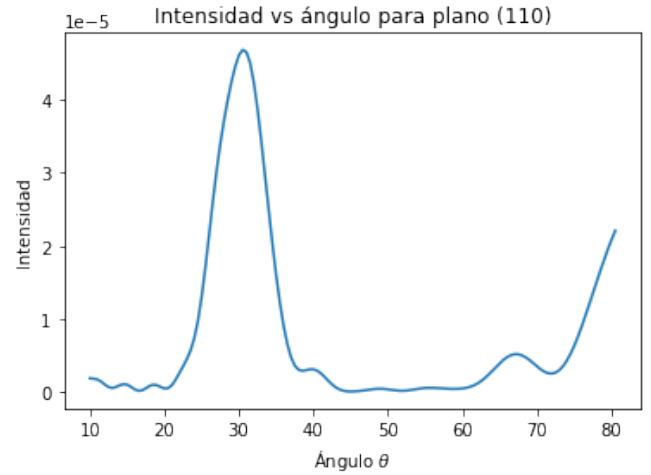


Figura 16: Espectro de la simulación computacional para planos paralelos al (110).

El espectro tiene un máximo de emisión en 29.5° .

Simulación para el plano (120)

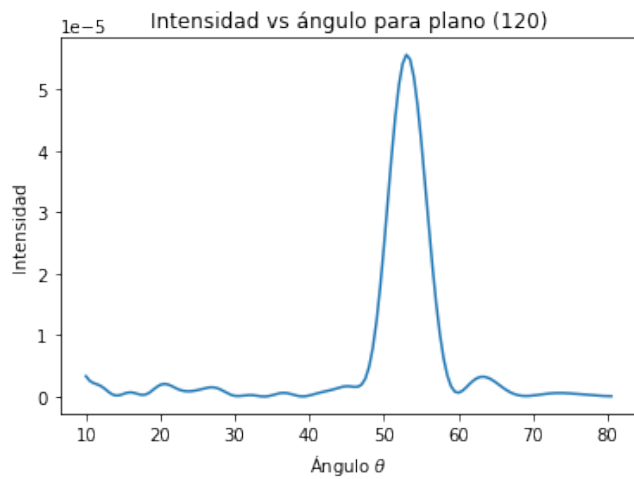


Figura 17: Espectro de la simulación computacional para planos paralelos al (120).

El espectro tiene un máximo de emisión en 53.0° .

Tabla con los resultados computacionales

Plano	Ángulo del Máximo $\pm 0.25^\circ$
(100)	21.0°
(100)	46.5°
(110)	29.5°
(120)	53.0°

Cuadro 1: Ángulos en los que se encuentra el máximo de intensidad detectado para cada uno de los planos.