

Determinación experimental de las dimensiones de una red bidimensional mediante difracción

José M. Llorens¹. Carlos M. Pina². Carlos Pimentel²

¹ Instituto de Micro y Nanotecnología, IMN-CNM, CSIC (CEI UAM+CSIC)

Isaac Newton, 8. 28760 Tres Cantos. Madrid

² Departamento de Mineralogía y Petrología. Facultad de Ciencias Geológicas. Universidad Complutense de Madrid. C/ José Antonio Nováis, 2. 28040 Madrid.

Instituto de Geociencias (CSIC, UCM). C/ José Antonio Nováis, 2. 28040 Madrid.

jose.llorens@imm.cnm.csic.es cmpina@geo.ucm.es cpimentelguerra@geo.ucm.es

Resumen: en este artículo se muestra cómo calcular las dimensiones de una malla bidimensional de nylon a partir de las medidas realizadas en el patrón de difracción que se produce cuando es atravesada por un láser. El experimento de difracción que se describe puede considerarse como un simulador del fenómeno de la difracción de rayos X por la estructura de un cristal, pero empleando luz visible y una malla de dimensiones mayores a las dimensiones características de las redes de un cristal.

Palabras clave: Cristalografía. Redes bidimensionales. Difracción. Simulador. Experimento.

INTRODUCCIÓN

Cuando una onda atraviesa una red cuyas dimensiones son similares a su longitud de onda se produce un fenómeno de interferencia que conduce a la generación de un patrón de difracción. Este patrón de difracción consiste en una distribución periódica de puntos alrededor de un punto central, el cual corresponde a la parte de la onda que no ha sufrido desviación alguna a consecuencia de la interferencia con la red o rejilla de difracción. El conjunto de puntos producidos por la difracción de la onda incidente nos proporciona información sobre la rejilla de difracción y a partir de él se puede, en principio, determinar sus dimensiones. Teniendo en cuenta este fenómeno, en 1912, Max von Laue y sus colaboradores Walter Friedrich y Paul Knipping diseñaron un dispositivo experimental para hacer incidir un haz de rayos X sobre un cristal de sulfato de cobre (Autor, 2014; Authier, 2015). Con ello consiguieron registrar en una película fotográfica la primera difracción de rayos X empleando la estructura de un cristal como rejilla de difracción (Fig. 1). Este experimento demostró que los rayos X se podían comportar como ondas y que los cristales estaban constituidos por una repetición periódica de átomos según redes tridimensionales, los cuales podían también emplearse como diminutas rejillas de difracción. El experimento de Laue abrió la puerta a un nuevo campo de la investigación de la materia y condujo en poco tiempo a nuestro actual conocimiento de la disposición de los átomos dentro de cristales de minerales,

aleaciones, sustancias orgánicas e inorgánicas sintéticas y grandes biomoléculas. Este conocimiento es, además, fundamental para explicar y modificar muchas de las propiedades químicas, mecánicas, térmicas, ópticas, electrónicas y magnéticas de numerosos materiales. Por ello, la descripción y explicación del fenómeno físico de la difracción de rayos X por cristales constituye un aspecto esencial de la enseñanza de la Cristalografía.

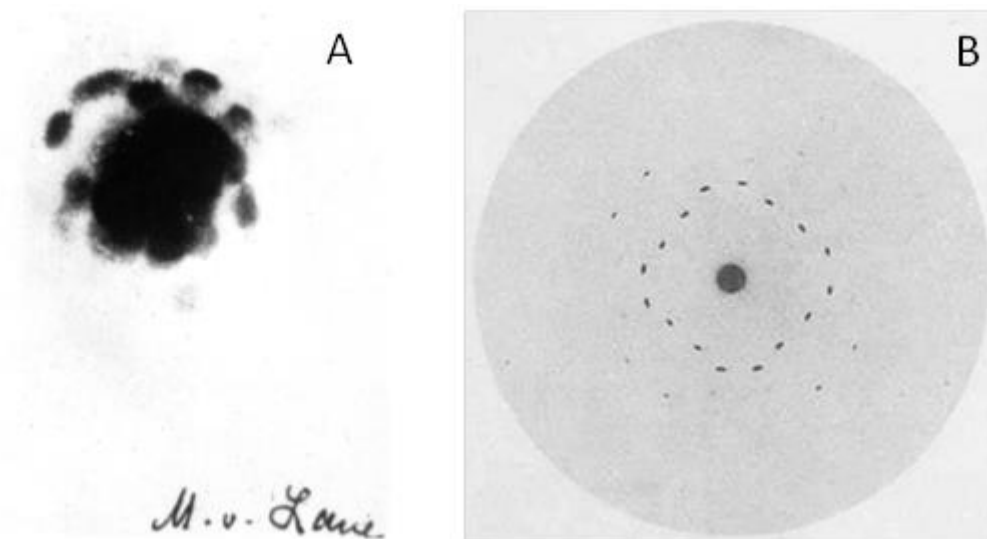


Figura 1. (A) Registro fotográfico firmado por Max von Laue de la primera difracción de rayos X por un cristal. Para este experimento de difracción se utilizó un cristal de sulfato de cobre y una fuente de rayos X poco colimada. Aunque la placa fotográfica estuvo sobreexpuesta a la radiación, se puede distinguir en ella una mancha central, correspondiente a la radiación incidente no difractada, y una serie de impresiones que la rodean, producidas por los rayos X difractados por el cristal. (B) Fotografía de una difracción de rayos X producida por un cristal de esfalerita (ZnS), un haz de rayos X colimados y una menor exposición a la radiación que en (A). (Friedrich *et al.*, 1913).

Para conseguir patrones de difracción empleando cristales es necesario atravesarlos con una radiación que tenga una longitud de onda similar a las distancias que separan a los átomos dentro de las estructuras de esos cristales. Esa es la razón por la que Laue y sus colaboradores utilizaron rayos X en su famoso experimento de difracción. Estos rayos tienen una longitud de onda del orden de 0,1 nm (10^{-9} m) y no son visibles, por lo que resulta necesario emplear una placa fotográfica especial en la que quede registrado el patrón de difracción.

En principio, el fenómeno de la difracción puede observarse empleando radiaciones con cualquier longitud de onda y una rejilla de difracción de dimensiones adecuadas. Teniendo esto en cuenta, aquí proponemos la realización de un sencillo experimento para obtener patrones de difracción empleando luz visible y una malla textil. Estos patrones quedarán proyectados en una pantalla y sobre ellos se realizarán observaciones y medidas. La analogía del experimento propuesto con el experimento de Laue nos permitirá explicar los fundamentos de la difracción de rayos X por cristales de una forma sencilla.

FENOMENOLOGÍA DE LA DIFRACCIÓN

La difracción de una onda por un objeto es un fenómeno que aparece en múltiples disciplinas científicas. El caso de la difracción de los rayos X por un cristal periódico es solo uno de los muchos contextos en que podemos encontrarla, pues es posible observar la difracción en experimentos de acústica, óptica, radiofrecuencia y en muchos otros ámbitos científicos y tecnológicos. Sin embargo, hay un principio subyacente a todos ellos cuando se trata de disposiciones periódicas de elementos difractivos. Por una parte, tendremos las particularidades de la periodicidad, que dará lugar al factor de forma, y por otra, el detalle del elemento difractivo, que viene descrito por el factor de estructura. El primero establece las direcciones en las que la radiación difractada se propagará y el segundo qué proporción de la intensidad incidente acabará en cada una de las direcciones de propagación. Las ecuaciones de Max von Laue consiguen de forma compacta establecer el factor de forma para cualquier disposición tridimensional de planos cristalinos. Sin embargo, la descripción completa del patrón de difracción requiere de un conocimiento detallado de los átomos o conjuntos de átomos que configuran los planos. Aquí nos vamos a centrar exclusivamente en el factor de forma y nos ocuparemos únicamente de los condicionantes periódicos de la generación de patrones de difracción, es decir, del análisis de las direcciones de propagación de la radiación por redes.

En primer lugar, vamos a analizar la generación de un patrón de difracción a partir de una única familia de rendijas horizontales separadas por una distancia a . Cuando un haz láser de longitud de onda λ incide sobre ella, se producirá una serie de puntos de difracción visibles en una pantalla situada a cierta distancia (Fig. 2A). Como puede verse en esa figura, los puntos de difracción se disponen perpendicularmente a la dirección de las rendijas. En este patrón de difracción existe un punto que corresponde al haz no desviado del láser que se denominan orden 0 de difracción ($h=0$ en la Fig. 2A). El resto de los puntos del patrón se desvía con ángulos crecientes con respecto a éste ($h = \dots -2, -1, 1, 2 \dots$ en la Fig. 2A). Los ángulos de desviación de los distintos órdenes de difracción se obtienen a través de la expresión $\tan(\theta_h) = d_h/L$, donde d_h es la distancia entre el punto del haz no desviado y el punto correspondiente a una difracción de orden h y L es la distancia entre las rendijas y la pantalla.

La relación entre los ángulos de desviación y la periodicidad de la rendija, a , se puede obtener fácilmente a través del principio de Huygens. Según este principio, al incidir el haz en la rendija, cada punto se convierte en un emisor. Los haces propagantes son aquellos en los que se cumple una condición de interferencia constructiva. Como puede verse en la Figura 2B, la interferencia constructiva se produce cuando la trayectoria, t , de los haces difractados es un número entero de longitudes de onda, $h\lambda$:

$$\sin(\theta_h) = \frac{t}{a} = \frac{h\lambda}{a}. \quad (1)$$

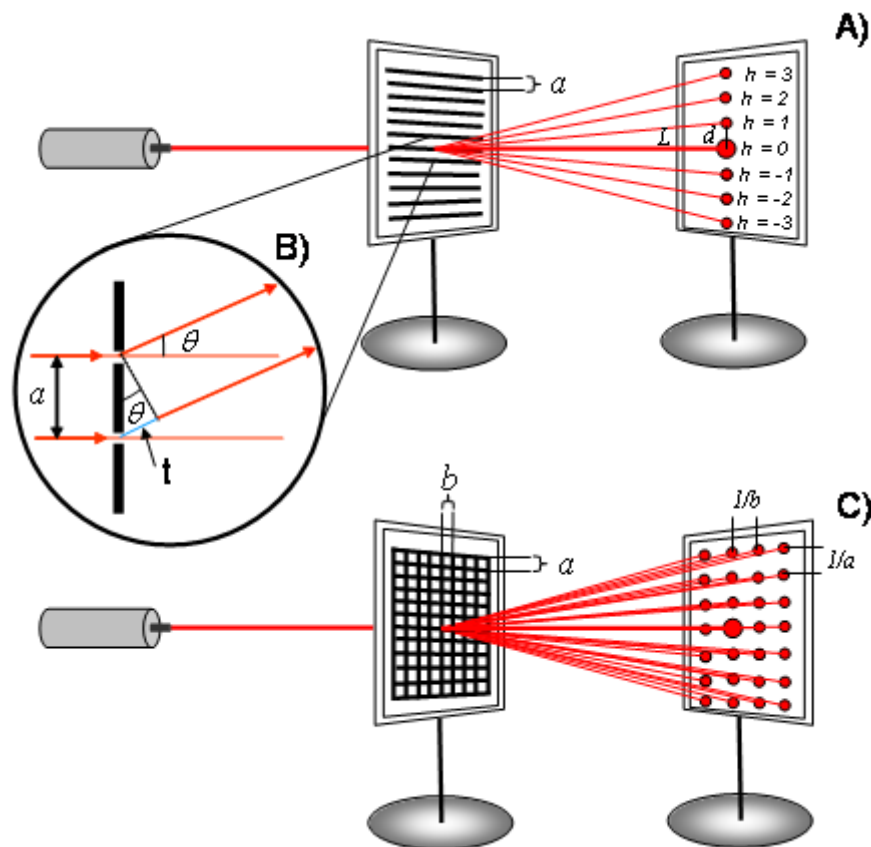


Figura 2. (A) Patrón de difracción generado por una familia de rendijas horizontales con periodicidad a . (B) Esquema de las trayectorias de los rayos directo y difractados en el entorno de las rendijas de difracción (C) Patrón de difracción generado por una rejilla formada por dos familias de rendijas perpendiculares con periodicidades a y b .

El problema de tener dos familias de rendijas perpendiculares (una horizontal y otra vertical) se describe de forma análoga. En el Apéndice se puede encontrar una generalización de la Ecuación (1) para estas dos familias de rendijas. La Fig. 2C ilustra esta situación. El haz láser ilumina una rejilla rectangular, que tiene dos periodicidades diferentes a y b . En la pantalla aparece entonces una distribución rectangular de puntos. A la secuencia de puntos que vimos en la Fig. 2A se suma ahora una nueva secuencia en la dirección perpendicular y, además, puntos de difracción en direcciones oblicuas. Todos estos puntos de difracción corresponden a todas las periodicidades que se pueden identificar en la rejilla de difracción. A cada uno de estos puntos se puede asignar un par de índices que determinan su orden de difracción en el plano. Así, al índice h se añade el índice k formando el índice compuesto (h, k) . En Cristalografía, y con el objeto de simplificar la notación, este índice compuesto se expresa mediante dos números hk , prescindiendo del uso del paréntesis y la coma, y colocando los signos negativos sobre los números (Fig.3).

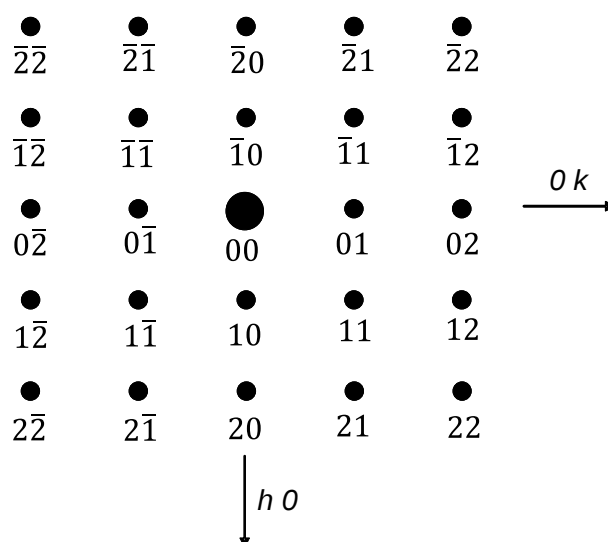


Figura 3. Esquema de patrón de difracción indexado.

A partir de la simple descripción del fenómeno de la difracción que se ha dado arriba, podemos extraer dos conclusiones de carácter general:

1. Para que se produzca difracción, la relación entre λ y a , debe ser próxima a la unidad. Si λ es mayor que a , el ángulo de difracción es complejo indicando que únicamente el orden $h = 0$ se propaga. Por el contrario, si λ es mucho menor que a el ángulo de difracción es muy pequeño y los haces difractados son indistinguibles del directo.
2. Existe una relación inversa entre distancias de la rejilla y las que separan los puntos del patrón de difracción. Así, puntos más distantes del centro del patrón de difracción corresponden a periodicidades más pequeñas en la rejilla.

OBJETIVO DE LA PRÁCTICA

Esta práctica consiste en diseñar un simulador de la difracción de rayos X por una red cristalina. En muchos campos de la ciencia, los simuladores son experimentos que reproducen de manera controlada una parte de las condiciones de otro experimento. Su principal ventaja reside en que el experimento del simulador resulta menos costoso o más simple de realizar que el experimento objeto de estudio. Posiblemente, uno de los simuladores más conocidos sea el túnel de viento, dónde se estudia experimentalmente la aerodinámica de un tren o un avión a una escala más reducida. En nuestro caso, sustituiremos en primer lugar los rayos X por la luz de un diodo láser. Ambas radiaciones pertenecen a distintas partes del espectro electromagnético y presentan una alta coherencia. Es importante tener un alto grado de coherencia para que la difracción tenga lugar. En una fuente incoherente, como la luz blanca, la interferencia entre las ondas incidentes y las difractadas se produce de forma temporalmente aleatoria por lo que los resultados no generan un patrón definido y no

se reproducirán las condiciones de los experimentos de difracción en cristales. En segundo lugar, sustituiremos la red tridimensional del cristal por una rejilla bidimensional de material textil. Esto simplificará el análisis del patrón de difracción. Así, nuestro simulador únicamente describirá el factor de forma de la difracción. El factor de estructura no podrá ser estudiado, pues la interacción entre los rayos X y los átomos de un cristal es de naturaleza muy diferente a la interacción entre la luz visible y el material que constituye la rejilla.

Los objetivos específicos de la práctica son:

1. Producir un patrón de difracción empleando un láser de longitud de onda conocida y una malla de difracción y observar que presenta el mismo aspecto que el obtenido en un experimento de rayos X.
2. Determinar el parámetro de red de la rejilla de difracción a partir del análisis del patrón de difracción.
3. Identificar cuál es la mayor fuente de error en la determinación de las dimensiones de la rejilla.

MATERIALES Y DESCRIPCIÓN DE LA PRÁCTICA

Los materiales necesarios para la realización de esta práctica son:

- Un diodo láser con longitud de onda conocida (láser verde: $\lambda = 544$ nm; láser rojo: $\lambda = 660$ nm).
- Una malla de tejido fino (una malla de nylon, un tamiz o un pañuelo de seda).
- Un bastidor de bordar para tensar la malla.
- Soportes para el bastidor y el láser.
- Una pizarra o una pantalla de proyección.
- Una cinta métrica de 5 metros o más.
- Una regla (preferiblemente transparente).
- Lápiz y cuaderno.
- Calculadora científica.

Para una correcta validación de los resultados experimentales es preciso conocer el parámetro de red de la malla de la forma más precisa posible. Para ello hemos realizado un análisis de una imagen de microscopía electrónica de barrido cuyos resultados se muestran en la Figura 4A. En esta imagen se muestran dos medidas correspondientes a los periodos verticales y otras dos para los horizontales. Promediando sobre las dos medidas horizontales y los diez periodos que cubren cada medida obtenemos un parámetro de red $a = 138.4$ μm . Procediendo de forma similar para la medida vertical, obtenemos un valor de $b = 146.4$ μm . Encontramos una diferencia de un 5 % en el periodo entre las dos direcciones. En lo sucesivo y para

simplificar el análisis en la parte experimental, asumiremos que la rejilla es cuadrada y su parámetro de red es igual al valor medio: 142.4 μm . Dado que no es una rejilla rígida, sino una tela de nylon, es previsible que exista una deformación residual que dé lugar a esa diferencia. Por otra parte, la imagen ha sido tomada de un trozo de tela recortada y nos resulta imposible saber cómo se alinean estos ejes con respecto a los ejes de la pantalla, a fin de poder determinar unívocamente qué parámetro de red es a y cuál es b .

En la Figura 4A también hemos incluido tres posibles celdas unidad a partir de las cuales es posible generar la malla o rejilla de difracción. Las tres son totalmente equivalentes. La red tiene un factor de llenado igual a $3/4$, esto es, tres cuartas partes de la celda unidad están “llenas” de nylon y únicamente $1/4$ lo está de aire. Esta red se puede comparar, por ejemplo, con la red de cristal cúbico proyectada sobre una de sus caras (ver Figura 4B).

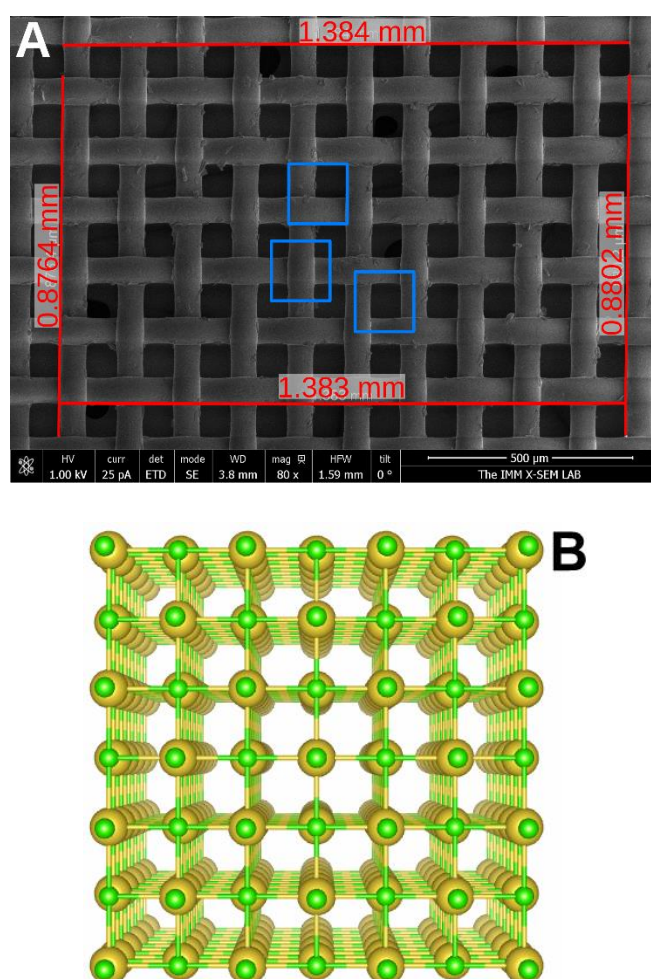


Figura 4. A. Imagen de microscopía electrónica de barrido de la rejilla de difracción con cuatro medidas del periodo. En vertical se han medido 6 periodos y en horizontal 10. En azul se han indicado tres posibles celdas unidad que al repetirse según los parámetros a y b darían lugar a la rejilla de difracción. **B.** Proyección de la estructura cúbica de la halita (NaCl) sobre una de sus caras. Los átomos de sodio se han representado en color amarillo y los átomos de cloro en color verde. Esta proyección se ha realizado utilizando el programa VESTA (Momma e Izumi, 2011).

En la Figura 5 se muestra la disposición del láser, la malla y la pantalla para realizar el experimento de difracción que se propone en esta práctica. En esta disposición, es importante asegurarse de que la malla y la pantalla estén situadas paralelamente. Además, la distancia entre una y otra debe ser igual o superior a 0,5 m para que los puntos de difracción estén suficientemente separados del haz no difractado y puedan realizarse medidas sobre la pantalla con suficiente precisión.

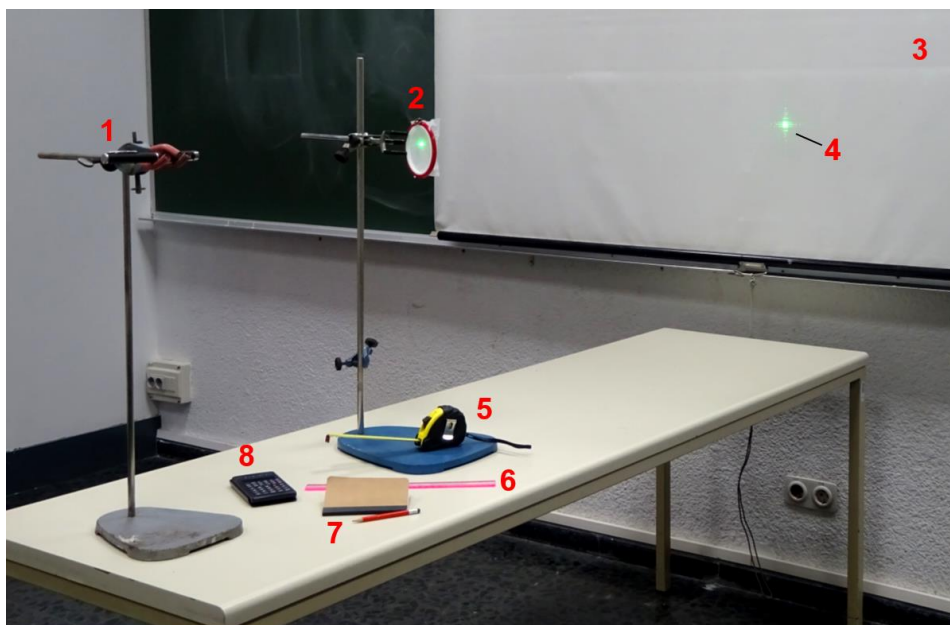


Figura 5. Dispositivo experimental para la realización de la práctica. Diodo láser (1); malla colocada sobre un bastidor (2); pantalla de proyección (3); patrón de difracción (4); cinta métrica (5); regla (6); lápiz y cuaderno (7); calculadora (8).

Una vez encendido el láser y generado el patrón de difracción sobre la pantalla, mediremos con la cinta métrica la distancia entre la malla y el punto en el patrón de difracción correspondiente al haz directo, L . Seguidamente mediremos con la regla graduada las distancias entre el punto del haz directo y los primeros puntos de difracción situados arriba (o abajo) y a la derecha (o izquierda) de él. Estas medidas las denominaremos $d_{h=1}$ ($d_{h=-1}$) y $d_{k=1}$ ($d_{k=-1}$), respectivamente. De forma alternativa se pueden medir distancias mayores (p. ej., $d_{h=2}$ y $d_{k=2}$, $d_{h=3}$ y $d_{k=3}$, etc.). De este modo se conseguirá una mayor precisión en los cálculos para determinar las dimensiones de la malla.

El procedimiento del cálculo de la constante de red se divide en dos partes. En primer lugar se determinan los ángulos de difracción: con las medidas obtenidas, calcularemos primero los ángulos de difracción $\theta_h = \arctan(d_h/L)$ y $\theta_k = \arctan(d_k/L)$. En un segundo paso, introduciremos los ángulos y la longitud de onda en la Ecuación (1), de la que obtendremos los siguientes valores:

$$a = \frac{h\lambda}{\sin(\theta_h)}, \quad (2a)$$

$$b = \frac{k\lambda}{\sin(\theta_k)}. \quad (2b)$$

Los valores a y b son las dimensiones de la rejilla de difracción. Obviamente, en el caso de una rejilla cuadrada a y b serán iguales.

Es posible realizar la sustitución en un único paso, evitando tener que recurrir a las funciones trigonométricas. Para ello es suficiente con saber la definición de la función tangente ($\tan(\theta) = \sin(\theta)/\cos(\theta)$) y que siempre se verifica que $\cos^2(\theta) + \sin^2(\theta) = 1$. Haciendo unas simples substituciones concluimos que:

$$\left(\frac{d}{L}\right)^2 = \tan^2(\theta) = \frac{\sin^2(\theta)}{\cos^2(\theta)} = \frac{\sin^2(\theta)}{1 - \sin^2(\theta)} = \frac{1}{\left(\frac{a}{h\lambda}\right)^2 - 1}. \quad (3)$$

Y de forma sencilla obtenemos una expresión compacta para a y b :

$$a = h\lambda \sqrt{1 + \left(\frac{L}{d_h}\right)^2}, \quad (4a)$$

$$b = k\lambda \sqrt{1 + \left(\frac{L}{d_k}\right)^2}. \quad (4b)$$

Por último, es posible determinar el error con el que estamos midiendo las constantes de red a partir de las incertidumbres de L y d . Para el caso de a :

$$\Delta a = \left| \frac{\partial a}{\partial L} \right| \Delta L + \left| \frac{\partial a}{\partial d_h} \right| \Delta d_h = \left| \frac{(h\lambda)^2 L}{d_h^2 a} \right| \Delta L + \left| \frac{(h\lambda)^2 L}{d_h^3 a} \right| \Delta d_h. \quad (5)$$

De esta expresión se pueden extraer varias conclusiones:

1. La incertidumbre de la constante de red crece con el valor de la distancia. Esto implica que para valores muy grandes de la distancia rejilla-pantalla (L) estaremos cometiendo un error mayor en la determinación de la constante de red.
2. Sucede al contrario con la distancia d_h en la pantalla, la incertidumbre aumenta cuando ésta se reduce. De hecho, la dependencia es más “fuerte” ya que d_h aparece con potencias cuadrada y cúbica y en el denominador. Será preciso entonces situar la pantalla de forma que la distancia d_h sea lo mayor posible.

3. Las conclusiones 1) y 2) afectan de forma opuesta a la incertidumbre. Sin embargo, la dependencia con una potencia inversa es más fuerte que con una potencia directa, por lo que resultará en una incertidumbre menor aumentar d_h a costa de también aumentar L .

Para ejemplificar la dependencia del error de la constante de red a con las distancias L y d hemos representado en la Figura 6 dicho error asumiendo que tanto a como λ son conocidas. Además, consideraremos que podemos medir la distancia L con una incertidumbre de $\Delta L = 5$ mm y la distancia d_h con una incertidumbre $\Delta d = 1$ mm. La gráfica ejemplifica las conclusiones arriba mencionadas. Cuanto mayor es la distancia L el error se reduce debido al aumento en d_h . Además, se puede comprobar la dependencia de ese error. Para valores pequeños de L , el error cometido es muy grande. Sin embargo, cuando L aumenta el error se reduce drásticamente hasta mostrar una dependencia débil. La forma de las curvas es igual a la que describe la función inversa de una potencia. Esta pequeña discusión nos lleva a recomendar medidas donde $L > 2.5$ m de forma que el error relativo que estemos cometiendo sea menor a un 10 %. El uso que vayamos a hacer del valor medido determinará el error considerado como admisible. Si pretendemos calcular otra magnitud derivada de a , quizá debamos reducir aún más el error relativo para evitar que la propagación de errores conduzca a una medida donde la incertidumbre sea mayor que el propio valor de la medida. En esta práctica buscamos verificar el fenómeno de difracción, por lo que una medida con un error de un 10 % es suficiente. Por último, destacaremos que al medir órdenes mayores estamos midiendo distancias d_h mayores, por lo que el error en a será menor. La gráfica de la Figura 6 nos muestra cómo esto es así sobre todo al pasar de $h = 1$ a $h = 2$, y de $h = 2$ a $h = 3$. Para órdenes mayores el beneficio ya no es tan destacado, mostrando una mejora más moderada el caso $h = 4$.

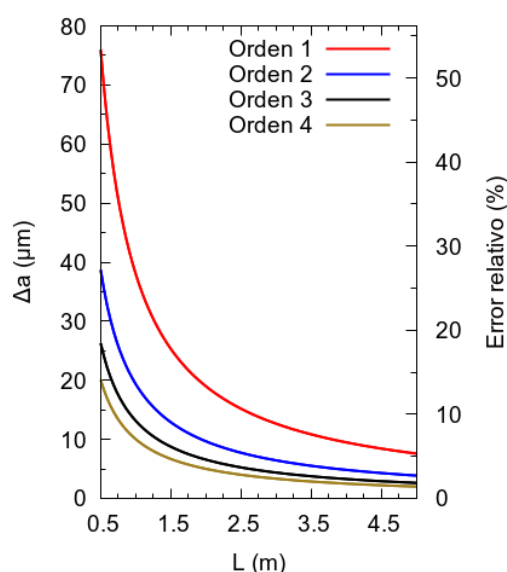


Figura 6. Evolución del error o incertidumbre en la determinación de la constante de red. Se ha considerado $a = 142.4$ μm y $\lambda = 544$ nm. En el eje de ordenadas izquierdo mostramos el valor del error en las mismas unidades que a y en el derecho el error relativo ($|\Delta a/a|$) en tanto por ciento. En cada curva se ha considerado la distancia d_h correspondiente al primer orden ($h = 1$), segundo orden ($h = 2$) y así hasta el cuarto.

EJEMPLO DE REALIZACIÓN DE LA PRÁCTICA Y CÁLCULO DE ERRORES

La Figura 7 muestra una foto de los órdenes de difracción proyectados en la pantalla. En ella podemos distinguir claramente el orden cero en el centro y los órdenes mayores de difracción que se disponen en una retícula cuadrada. La Tabla 1 muestra las medidas de d_h en función de la distancia rejilla-pantalla, L , los resultados del cálculo del parámetro de red empleando la Ecuación (4) y la estimación del error cometido en su determinación. El error experimental viene determinado por la diferencia con respecto al valor medio obtenido del análisis de la imagen de microscopía electrónica (Fig. 4A) y el error relativo aparece expresado en tanto por cien. Este error relativo es la magnitud que nos indica la calidad de cada medida de forma más directa. De su evolución se deduce que existe una gran indeterminación en la medida. La teoría de errores ejemplificada en la Figura 6 anticipaba una reducción del error relativo para valores de L mayores. En su lugar vemos cómo ϵ_{rel} parte de un valor muy pequeño (4 %) y aunque muestra una tendencia a reducir su valor a partir de $L = 2$ m, hay ciertas medidas que duplican su valor. Para mostrar de forma más clara esta evolución, mostramos en la Figura 8 la evolución del error relativo con respecto al valor conocido junto con el error relativo que se deriva de la Ecuación (5).

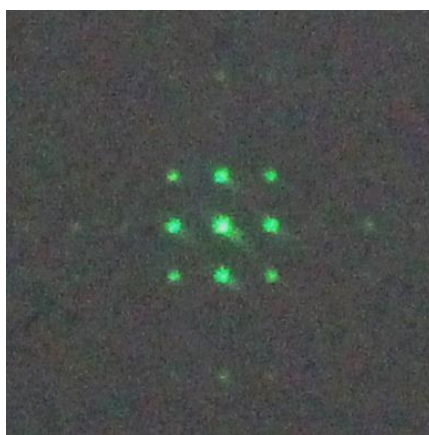


Figura 7. Fotografía del patrón de difracción proyectado sobre la pantalla.

Medidas		Análisis de las medidas		
$L (\pm 0,005 \text{ m})$	$d_1 (\pm 1 \text{ mm})$	$a (\mu\text{m})$	$\Delta a (\mu\text{m})$	$\epsilon_{rel} (\%)$
0,500	2	136	-7	4
1,000	4	136	-7	4
1,500	5	160	20	15
2,000	7	155	13	9
2,500	9	151	9	6
3,000	11	148	6	4
3,500	12	159	16	11
4,000	15	145	3	2
4,500	16	153	11	7
5,000	17	160	18	12

Tabla 1. Valores experimentales (L , d_1) y parámetro de red (a) junto con el error cometido con respecto al valor obtenido por microscopía (Δa) y su error relativo en porcentaje (ϵ_{rel}).

De la comparación de ambas curvas se puede concluir que, en efecto, existen medidas que difieren del comportamiento esperable. Posiblemente esto se deba a la dificultad en la medida de d_1 que, como hemos visto, es el parámetro más sensible. Además, resulta complicado discernir con claridad su posición cuando las distancias son muy pequeñas. Para las distancias entre 1,5 m y 3 m, así como la distancia de 4 m, muestran la misma evolución predicha por la teoría de errores. Obsérvese que, en el caso de no tener acceso al parámetro que se está midiendo (en este caso el valor de α obtenido de la imagen de microscopía electrónica), la Ecuación (5) sería nuestra única aproximación al error que se está cometiendo. En este experimento controlado podemos saber que la tendencia está bien determinada, aunque el valor en términos absolutos está sobreestimado. Un mejor ajuste se podría conseguir analizando con más detalle los valores de los errores experimentales ΔL y Δd_1 .

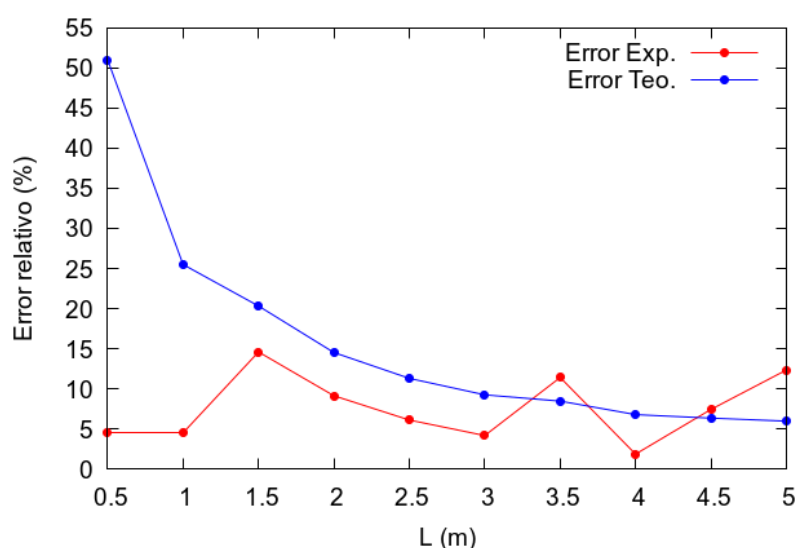


Figura 8. Evolución del error relativo de las medidas con respecto al valor experimental (Error Exp.) y al error relativo teórico (Error Teo.) de la Ecuación (5).

CONCLUSIONES

En esta práctica hemos descrito un sencillo experimento de difracción de un láser que permitirá a quien lo realice medir el parámetro de red de una rejilla de material textil. Sustituyendo el diodo láser por una fuente de rayos X y la rejilla por un cristal sería posible determinar de forma similar los parámetros de la red que define la estructura de dicho cristal. Así, esta práctica constituye un simulador de los aspectos más fundamentales del fenómeno de la difracción. Los dispositivos experimentales que se utilizan en cristalografía para determinar las estructuras de los cristales se basan tanto en estos aspectos como en otros que quedan fuera de los objetivos de esta práctica. Entre ellos cabe destacar el efecto de la simetría de la red en el patrón de difracción, los factores de estructura debidos a combinación de átomos con diferente respuesta a la radiación incidente, la coexistencia de dominios reticulares con distinta orientación, etc. No obstante, es preciso entender los conceptos aquí mostrados antes de abordar sistemas más complejos. Únicamente mediante el análisis de todos los factores que

afectan a la difracción será posible determinar tanto las dimensiones de las redes cristalinas como las posiciones de los átomos dentro de ellas.

APÉNDICE: MODELO MATEMÁTICO DE LA DIFRACCIÓN

La descripción más sencilla de campo electromagnético propagante, como es el caso de la luz, es una onda plana transversal. Un vector de onda indica cuál es la dirección, sentido y frecuencia espacial de la propagación. Los campos eléctrico y magnético de la onda se orientan perpendicularmente al vector de onda y oscila su orientación a medida que la onda se propaga. Para describir el fenómeno de difracción por la rendija podemos prescindir de los campos y fijarnos únicamente en el vector de onda y los vectores de la red directa y recíproca, es decir, la red que constituye la rejilla de difracción y la red definida por los puntos que forman el patrón de difracción. Suponiendo que el láser, la rendija y la pantalla están correctamente alineados a lo largo de un eje, supongamos z , nuestro modelo vendrá descrito por las siguientes expresiones:

- Un vector de onda incidente:

$$\vec{k}_{\text{inc}} = \left(0, 0, \frac{2\pi}{\lambda}\right). \quad (A1)$$

- Un vector de la red directa para una red rectangular de parámetros a y b :

$$\vec{R} = (ha, kb, 0). \quad (A2)$$

- Un vector de la red recíproca para la misma red:

$$\vec{G} = 2\pi \left(\frac{h}{a}, \frac{k}{b}, 0\right). \quad (A3)$$

Debido a la interacción de la onda plana incidente y la rejilla, la luz se descompone en múltiples ondas con vectores de red. Esta familia de ondas no toma valores arbitrarios, sino únicamente aquellos que satisfacen la conservación del vector de onda en el plano de la rejilla:

$$\vec{k}_{\text{inc}}^{\parallel} + \vec{G} = \vec{k}_{\text{D}}^{\parallel}, \quad (A4)$$

$$\vec{k}_{\text{D}} = (G_x, G_y, k_{z,\text{D}}), \quad (A5)$$

donde los diferentes valores de los índices h y k definen el vector de onda de cada una de las ondas difractadas. Para conocer completamente la propagación de la onda difractada nos falta determinar $k_{z,\text{D}}$. La condición de conservación de la energía impone que el módulo del vector de onda incidente y difractado sean iguales:

$$|\vec{k}_{\text{D}}| = |\vec{k}_{\text{inc}}|, \quad (A6)$$

de donde podemos despejar

$$k_{z,D}^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 - G_x^2 - G_y^2. \quad (A7)$$

Con este simple conjunto de expresiones se puede determinar cuál va a ser el efecto de la rejilla. En principio, la rejilla descompone la onda incidente en una serie de ondas múltiples cuya dirección vendrá dada por los índices h y k . Sin embargo, es la componente z la que va a determinar si esa determinada onda se puede propagar o no. Para ello es necesario que esta última componente sea real, o dicho de otro modo, que su cuadrado sea mayor que cero. Si el cuadrado fuese negativo, la componente z sería un número complejo, indicando que tal onda se extingue en lugar de propagarse. Los ángulos de difracción se obtienen por geometría a partir de la relación entre $k_{z,D}$ y las componentes en el plano. En primer lugar, tenemos:

$$\cos(\theta) = \frac{k_{z,D}}{k_D} = \frac{\sqrt{\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 - \left(\frac{2\pi h}{a}\right)^2 - \left(\frac{2\pi k}{b}\right)^2}}{\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2}. \quad (A8)$$

Elevando al cuadrado ambos lados de la ecuación y simplificando, obtenemos:

$$\cos^2(\theta) = 1 - \lambda^2 \left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} \right), \quad (A9)$$

Finalmente se obtiene:

$$\sqrt{\cos^2(\theta) - 1} = \sin(\theta) = \lambda \sqrt{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} \right)}, \quad (A10)$$

donde se ha recurrido a la relación trigonométrica $1 = \cos^2(\theta) + \sin^2(\theta)$. Para el caso de una red de difracción en una dimensión ($a = b$ y $k = 0$), la Ecuación (A10) se simplifica

$$\sin(\theta) = \frac{h\lambda}{a}. \quad (A11)$$

Esta expresión es la misma que se obtiene al buscar la condición de interferencia constructiva (ver Ecuación (1)). Vemos por tanto que los tratamientos del problema son equivalentes. Sin embargo, la ecuación (A10) permite determinar el ángulo de difracción para cualquier red bidimensional rectangular. El estudio de otras redes bidimensionales se puede realizar partiendo de los vectores de la de la red recíproca (Ecuación (A3)) y sustituyendo su valor en las Ecuaciones (A5) y (A7).

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos el servicio del Laboratorio MiNa del IMN, así como la financiación recibida de la CM (proyecto SpaceTec S2013/ICE2822), del MINECO (proyecto CSIC13-

4E-1794) y de la UE (FEDER, FSE). Este artículo se enmarca dentro de los proyectos de la Universidad Complutense de Madrid Innova-Docencia números 85 (2017) y 118 (2018).

BIBLIOGRAFÍA

Authier, A. 2015. *Early Days of X-ray Crystallography*. International Union of Crystallography Book. Oxford University Press; Reprint edition (December 29, 2015) 456 pages.

Friedrich, W.; Knipping, P. y Laue, M. 1913. Interferenzerscheinungen bei Röntgenstrahlen. *Annalen der Physik*, 346: 971 – 988.
<https://doi.org/10.1002/andp.19133461004>

Momma, K. e Izumi, F. 2011. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *J. Appl. Crystallogr.*, 44: 1272-1276.
<https://onlinelibrary.wiley.com/iucr/doi/10.1107/S0021889811038970>

RECURSOS ELECTRÓNICOS

En el canal de YouTube “Ciencia a martillazos” se puede encontrar un vídeo explicativo con un ejemplo de realización de la práctica. <https://youtu.be/IVYF1j09G3w>

Recibido: 27 septiembre 2018.

Aceptado: 27 diciembre 2018.