

Física Experimental IV

Práctica V Rayos X

Funes, Gustavo
Giordano, Leandro
Gulich, Damían
Sotuyo, Sara

Departamento de Física – Facultad de Ciencias Exactas – UNLP

Sinopsis

En el siguiente informe se detalla la experiencia para determinar los índices de Miller de un cristal mediante la difracción de rayos X.

Introducción

Los rayos X fueron descubiertos por Roentgen en 1895. Estos rayos son radiaciones altamente penetrantes que se producen cuando electrones de alta energía inciden sobre la materia. Se propagan en línea recta y no son desviados al pasar a través de campos eléctricos o magnéticos; por lo tanto, no están constituidos por partículas cargadas. Pueden atravesar fácilmente materia opaca, hacer relucir sustancias fosforescentes e impresionar placas fotográficas.

Poco tiempo después de su descubrimiento, se empezó a suponer que los rayos X eran radiación electromagnética, ya que la teoría electromagnética afirma que una carga eléctrica acelerada emite ondas electromagnéticas, y un electrón que se mueve rápidamente y es llevado bruscamente a la posición de reposo sufre también una aceleración. Recién en 1912 quedó establecida la naturaleza ondulatoria de los rayos X cuando se realizaron experimentos de difracción en cristales. La retícula cristalina actuó como una red de difracción tridimensional. Se pudo medir su longitud de onda, la que resultó del mismo orden de magnitud que la distancia entre los átomos de una red cristalina.

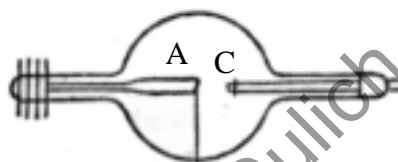


Figura 1: Tubo de rayos X.

El cátodo (C) es calentado por un filamento adyacente, por el que pasa una corriente eléctrica, produce una cantidad de electrones por emisión termiónica. La alta diferencia de potencial que existe entre el cátodo y un ánodo o blanco metálico (A), acelera los electrones hacia este último. La superficie del ánodo forma un ángulo con el haz de electrones, y los rayos X que salen del ánodo atraviesan la parte lateral del tubo. El vacío que se hace en el tubo tiene por objeto permitir que los electrones lleguen al ánodo sin impedimento.

Se ha encontrado que la intensidad de los rayos X procedentes de cualquier tubo dependen del elemento utilizado como ánodo, de la potencia suministrada al tubo y de la diferencia de potencial aplicada entre el cátodo y el ánodo.

Cuando el haz heterogéneo de rayos X proveniente de un blanco fue resuelto mediante el espectrómetro de cristal, resultó estar compuesto de dos espectros distintos: un espectro continuo y un espectro de líneas agudas superpuesto sobre el espectro continuo. Los espectros de rayas definidas se producen por los cambios energéticos del átomo, y que siguen a la transferencia de energía al átomo debida al impacto de un electrón. El espectro continuo, resulta de la radiación emitida por los electrones que son acelerados en el campo de fuerzas de Coulomb de los núcleos atómicos del blanco.

Un cristal está formado por una distribución regular de átomos, cada uno de los cuales es capaz de dispersar directamente cualquier onda electromagnética que incida sobre él.

Un haz monocromático de rayos X que llegue a un cristal se dispersará en todas las direcciones dentro de él, pero, debido a la distribución regular de los átomos, en ciertas direcciones las ondas dispersadas interferirán constructivamente. Se puede considerar que los átomos de un cristal pertenecen a grupos que definen familias de planos paralelos, teniendo cada grupo una separación característica entre los planos que lo componen. Estos planos se conocen con el nombre de *planos de Bragg*, ya que esta idea fue sugerida por Bragg en 1913.

Del siguiente diagrama podemos deducir las condiciones que debe cumplir la radiación dispersada por los átomos del cristal para que la interferencia sea constructiva.

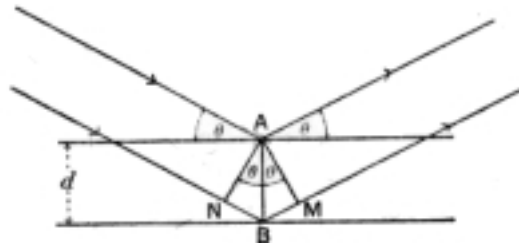


Figura 2: Reflexión de los rayos X en el cristal.

Consideremos un haz de rayos X de longitud de onda λ que incida formando un ángulo θ con la superficie de un cristal que contiene una familia de planos de Bragg separados entre sí una distancia d . El haz llega al átomo A en el primer plano y al átomo B en el siguiente. La interferencia constructiva tendrá lugar solamente entre aquellos rayos dispersos que sean paralelos y cuyos recorridos difieran en múltiplos de λ .

De la figura se puede observar que se producirá interferencia constructiva cuando

$$2 \cdot d \cdot \sin(\theta) = n \cdot \lambda \quad \text{con } n \in \mathbb{Z} \quad (1)$$

Para describir una estructura cristalina primero es necesario elegir un juego de ejes dados en el cristal, a los cuales las direcciones de las caras pueden ser referidas, y, para este propósito son usadas tres líneas paralelas a las líneas de intersección de tres caras que no estén en el mismo plano. En teoría, tres caras cualesquiera servirían, pero en la práctica hay algún juego de ejes que se sugiere a sí mismo como el más conveniente. En un cristal cúbico, por ejemplo siempre se deberían elegir tres vértices del mismo, por dar un juego de ejes rectangulares.

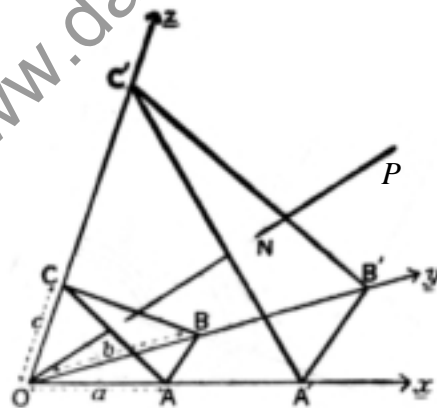


Figura 3: Ejes de un cristal.

Tres caras, por lo tanto, definen los ejes; debemos ahora tomar una cuarta cara, que debe cortar a los tres ejes, como plano estándar. Sea ABC (Fig. 3) tal plano y que haga las intersecciones OA ($=a$), OB ($=b$), OC ($=c$), en los ejes Ox, Oy, Oz, respectivamente. Se ha encontrado que la ley experimental que gobierna las direcciones de las otras caras del cristal puede establecerse como sigue:

Una cara paralela a un plano cuyas intersecciones con los tres ejes son Ha, Kb, Lc , donde H, K, L son números enteros, es una posible cara del cristal, y para los planos que se dan comúnmente, H, K y L son números

enteros pequeños.

Para todos los planos paralelos a una dirección dada, el **radio** de las intersecciones sobre los ejes es el mismo, tal que si $A'B'C'$ es una posible cara del cristal, tenemos, por la regla dada antes,

$$OA' : OB' : OC' = Ha : Kb : Lc = a/KL : b/LH : c/HK = a/h : b/k : c/l \quad (2)$$

donde h, k, l son, de nuevo, números enteros pequeños. Los números h, k, l definen el plano, al cual se le puede dar el símbolo (hkl) , y son llamados sus índices de Miller, por Miller, que fue quien los introdujo. Los índices de Miller son siempre números enteros, y para las caras que comúnmente se dan en un cristal, enteros pequeños, y la ley que acabamos de considerar es conocida como la **Ley de Índices Racionales**.

Para un valor dado del radio $a:b:c$, los índices de Miller de un plano son inversamente proporcionales a sus intersecciones con los ejes. La razón geométrica de usarlos en vez de a los números H, K, L que son directamente proporcionales a las intersecciones, es que $h/a, k/b, l/c$, son proporcionales a los cosenos de la normal al plano (hkl) , y, como hemos visto, es la normal al plano la que se usa para definirlo cristalográficamente.

Procedimiento experimental

En esta experiencia fueron analizados los datos obtenidos al hacer incidir un haz monocromático de rayos X sobre una muestra de *bromuro de potasio* (KBr) en un caso, y *fosfato de galio* (GaP) en otro.

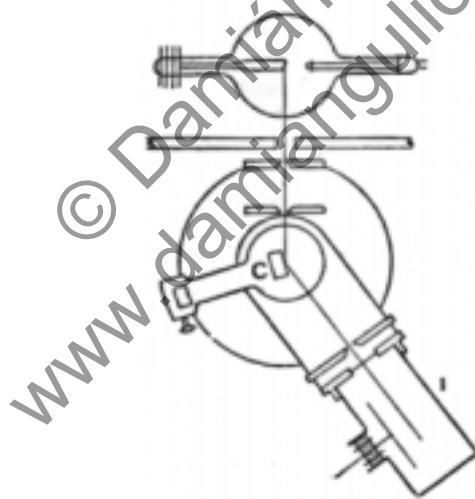


Figura 4: Arreglo experimental.

Como se conoce el material de que se trata, su estructura y su densidad, es posible calcular el volumen y con ello la arista a del cubo que forma el cristal.

Sabiendo la relación entre a, d y los índices de Miller (h,k,l) se puede determinar la familia de planos:

$$\left(\frac{a}{d}\right)^2 = h^2 + k^2 + l^2 \quad (3)$$

Cabe destacar que el valor a/d debería resultar un número entero.

En el caso del KBr, como la celda unitaria está formada por cuatro moléculas, para obtener la

masa de dicha celda se multiplica por cuatro la masa de una molécula, que se halla dividiendo la masa molecular por el número de Avogadro.

Resultados

Teniendo en cuenta las densidades de los cristales emplados, se calcularon las aristas de las celdas de cada cristal, obteniendo:

$$a_{\text{KBr}} = 6,578 \cdot 10^{-10} \text{ m} \quad a_{\text{GaP}} = 5,436 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Para el KBr los resultados fueron

Nº de máximo (n)	2-ángulo	ángulo	d	(a/d) ²	Índices de Miller
1	23,42	11,71	2,70992E-10	6	(2;1;1), (1;2;1), (1;1;2)
2	27,1	13,55	4,69496E-10	2	(1;0;1), (1;1;0), (1;0;1)
3	38,6	19,3	4,99222E-10	2	(1;0;1), (1;1;0), (1;0;1)
4	45,64	22,82	5,67248E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
5	47,78	23,89	6,79043E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
6	55,76	27,88	7,05699E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
7	61,24	30,62	7,55877E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
8	63	31,5	8,42108E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
9	39,82	19,91	1,45356E-09	0	(0;0;0)
10	74,76	37,38	9,05949E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
11	82,7	41,35	9,15755E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
12	87,4	43,7	9,553E-10	0	(0;0;0)
13	88,98	44,49	1,02028E-09	0	(0;0;0)
14	95,24	47,62	1,04238E-09	0	(0;0;0)
15	101,54	50,77	1,06505E-09	0	(0;0;0)
16	114,76	57,38	1,0448E-09	0	(0;0;0)
17	121,9	60,95	1,06955E-09	0	(0;0;0)

Tabla 1: Resultados para el KBr.

Para el GaP:

Nº de máximo (n)	2-ángulo	ángulo	d	(a/d) ²	Índices de Miller
1	28,52	14,26	2,23285E-10	6	(2;1;1), (1;2;1), (1;1;2)
2	32,88	16,44	3,88677E-10	2	(1;0;1), (1;1;0), (1;0;1)
3	47,16	23,58	4,1247E-10	2	(1;0;1), (1;1;0), (1;0;1)
4	55,94	27,97	4,69074E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
5	58,64	29,32	5,61583E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
6	68,86	34,43	5,83659E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
7	76,06	38,03	6,24925E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
8	78,44	39,22	6,95872E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
9	87,62	43,81	7,1504E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
10	94,52	47,26	7,48869E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
11	106,16	53,08	7,56747E-10	1	(1;0;0), (0;1;0), (0;0;1)
12	113,48	56,74	7,89294E-10	0	(0;0;0)

Tabla 2: Resultados para el GaP.

Conclusiones

Mediante esta experiencia, y conociendo algunos datos elementales sobre un cristal es posible describir la estructura del mismo por medio del cálculo de sus índices de Miller. De manera inversa, puede determinarse mediante el conocimiento de estos índices la disposición espacial de los átomos que componen al cristal.-

© Damián Gulich
www.damiangulich.com.ar