

# Estructura 2

Difracción de Rayos X  
(DRX/XRD)

# Introducción

- **CARACTERIZACION ESTRUCTURAL DE MATERIALES**  
- *Materiales Cristalinos* -

- Técnicas espectroscópicas y de resonancia (IR, RMN, Raman, etc.)
- Técnicas “difractométricas” (*DR-X, ME*, etc)

Difracción de Rayos-X  $\Rightarrow$  **CRISTALOGRAFIA**

**ESTRUCTURA**  $\rightarrow$  **DIFRACCION** = *Respuesta Característica del material*



- Rayos X
- Neutrones
- Electrones

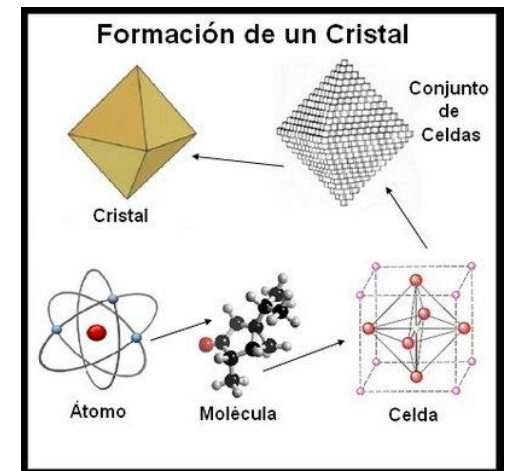
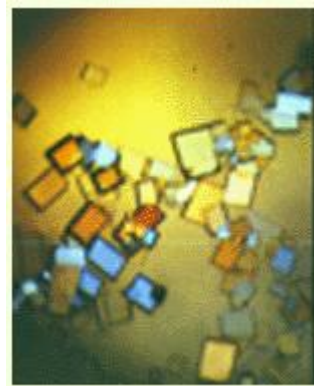
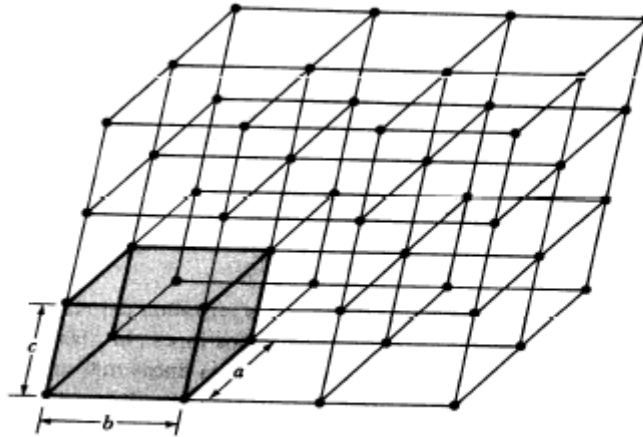
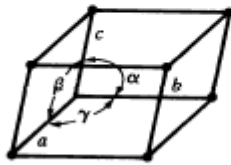
**PATRON DE DIFRACCIÓN**

- **TECNICA ANALITICA**

- ¿**Qué** contiene una determinada muestra (sólida)?
- ¿**Cuánto** de éllo contiene dicha muestra?
- ¿Qué parámetros de celda tiene la muestra?

# Materiales Cristalinos

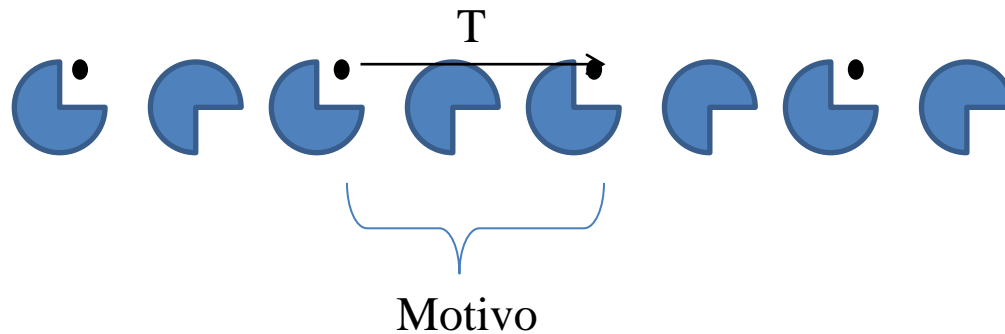
- Aquellos en donde existe una unidad básica (celda unidad) que se repite de manera indefinida en tres dimensiones.



# Aspectos fundamentales de los cristales


Primer elemento de simetría: la traslación

Nodo → Punto arbitrario donde aplico la traslación



- ✓ Aparición de otros elementos de simetría: ejes, planos, centros de inversión
- ✓ Hay infinitos elementos de simetría
- ✓ Los elementos de simetría son de todo el cristal y forman grupos
- ✓ Grupos de simetría: identidad, inversa y clausura
- ✓ Los elementos de simetría se pueden representar con operaciones

Celda primitiva: no tengo nodos dentro

Celda centrada: tengo nodos dentro  Red de Bravais

Si permitimos celdas centradas para mostrar la simetría de la mejor forma, entonces obtenemos las 14 redes de Bravais.

Elemento de simetría requerido	Sistema cristalino	Red de Bravais	Restricciones sobre la celda (en las condiciones mencionadas en la transparencia anterior)
Ninguno	Tricínico	Primitiva (P)	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Eje 2 ó plano espejo	Monoclínico	Primitiva (P) Centrada en la cara C (C)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Combinación de tres ejes 2 mutuamente perpendiculares	Ortorrómbico	Primitiva (P) Centrada en la cara C (C) Centrada en el cuerpo (I) Centrada en las caras (F)	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Un eje 3	Trigonal	Primitiva (P)  [Centrada R (R)]	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$  [ $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ ]
Un eje 6	Hexagonal	Primitiva (P)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$
Un eje 4	Tetragonal	Primitiva (P) Centrada en el cuerpo (I)	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cuatro ejes 3	Cúbico	Primitiva (P) Centrada en el cuerpo (I) Centrada en las caras (F)	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Conclusión: Los sistemas cristalinos son celdas primitivas, pero algunas permiten descripción centrada (red de Bravais)

Si se combinan los 32 grupos puntuales con las 14 redes de Bravais, se obtienen 72 grupos espaciales (grupos simórficos).

Cambiando los ejes de rotación por rototraslación y los planos espejos por planos con deslizamiento se completan los 230 grupos espaciales cristalográficos



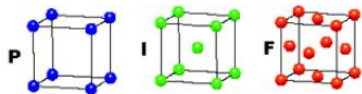
Toda la info en  
Actas cristalográficas

Crystal system	Point group	Space groups
Triclinic	<b>1</b> 1	P1 P $\bar{1}$
Monoclinic	<b>2</b> m 2/m	P2, P2 <sub>1</sub> , C2 Pm, Pc, Cm, Cc P2/m, P2 <sub>1</sub> /m, C2/m, P2/c, P2 <sub>1</sub> /c, C2/c
Orthorhombic	<b>222</b>  mm2  mmm	P222, P222 <sub>1</sub> , P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2, P2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> , C222 <sub>1</sub> , C222, F222, I222, I2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> Pmm2, Pmc2 <sub>1</sub> , Pcc2, Pma2 <sub>1</sub> , Pca2 <sub>1</sub> , Pnc2 <sub>1</sub> , Pmn2 <sub>1</sub> , Pba2, Pna2 <sub>1</sub> , Pnn2, Cmm2, Cmc2 <sub>1</sub> , Ccc2, Amm2, Abm2, Ama2, Aba2, Fmm2, Fdd2, Imm2, Iba2, Ima2 Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna, Pmna, Pcca, Pbam, Pccn, Pbcm, Pnmm, Pmnm, Pbcn, Pbca, Pnma, Cmcm, Cmca, Cmmm, Cccm, Cmna, Ccca, Fmmm, Fddd, Immm, Ibam, Ibca, Imma
Tetragonal	<b>4</b> 4 4/m <b>422</b>  4mm  4m  4/mmm	P4, P4 <sub>1</sub> , P4 <sub>2</sub> , P4 <sub>3</sub> , I4, I4 <sub>1</sub> P4, I4 P4/m, P4 <sub>2</sub> /m, P4/n, P4 <sub>2</sub> /n, I4/m, I4 <sub>1</sub> /a P422, P4 <sub>2</sub> 2, P4 <sub>1</sub> 22, P4 <sub>1</sub> 2 <sub>1</sub> 2, P4 <sub>2</sub> 22, P4 <sub>2</sub> 2 <sub>1</sub> 2, P4 <sub>3</sub> 22, P4 <sub>3</sub> 2 <sub>1</sub> 2, I422, I4 <sub>1</sub> 22 P4mm, P4bm, P4 <sub>3</sub> cm, P4 <sub>3</sub> nm, P4cc, P4nc, P4 <sub>2</sub> mc, P4 <sub>2</sub> bc, I4mm, I4cm, I4 <sub>1</sub> md, I4 <sub>1</sub> cd P4 <sub>2</sub> m, P4 <sub>2</sub> c, P4 <sub>2</sub> m, P4 <sub>2</sub> c, P4 <sub>1</sub> m2, P4 <sub>1</sub> c2, P4 <sub>1</sub> b2, P4 <sub>1</sub> n2, I4m2, I4c2, I42m, I42d P4/mmm, P4/mcc, P4/nbm, P4/nnc, P4/mbm, P4/mnc, P4/nmm, P4/ncc, P4 <sub>2</sub> /mmc, P4 <sub>2</sub> /mcm, P4 <sub>2</sub> /nbc, P4 <sub>2</sub> /nmm, P4 <sub>2</sub> /mbc, P4 <sub>2</sub> mnm, P4 <sub>2</sub> /nmc, P4 <sub>2</sub> /ncm, I4/mmm, I4/mcm, I4 <sub>1</sub> /amd, I4 <sub>1</sub> /acd
Trigonal-hexagonal	<b>3</b> 3 <b>32</b> 3m 3m <b>6</b> 6 6/m <b>622</b> 6mm 6m 6/mmm	P3, P3 <sub>1</sub> , P3 <sub>2</sub> , R3 P3, R3 P312, P321, P3 <sub>1</sub> 12, P3 <sub>2</sub> 12, P3 <sub>2</sub> 21, P3 <sub>1</sub> 21, R32 P3m1, P31m, P3c1, P31c, R3m, R3c P31m, P31c, P3m1, P3c1, R3m, R3c P6, P6 <sub>1</sub> , P6 <sub>5</sub> , P6 <sub>3</sub> , P6 <sub>2</sub> , P6 <sub>4</sub> P6 P6/m, P6 <sub>3</sub> /m P622, P6 <sub>2</sub> 22, P6 <sub>3</sub> 22, P6 <sub>2</sub> 22, P6 <sub>4</sub> 22, P6 <sub>5</sub> 22 P6mm, P6cc, P6 <sub>3</sub> cm, P6 <sub>3</sub> mc P6m2, P6c2, P62m, P62c P6/mmm, P6/mcc, P6 <sub>3</sub> /mcm, P6 <sub>3</sub> /mmc
Cubic	<b>23</b> m3 <b>432</b> 43m m3m	P23, F23, I23, P2 <sub>1</sub> 3, I2 <sub>1</sub> 3 Pm3, Pn3, Fm3, Fd3, Im3, Pa3, Ia3 P432, P4 <sub>3</sub> 2, F432, F4 <sub>3</sub> 2, I432, P4 <sub>3</sub> 2, P4 <sub>3</sub> 2, I4 <sub>3</sub> 2, I4 <sub>3</sub> 2 P43m, F43m, I43m, P43n, F43c, I43d Pm3m, Pn3n, Pm3n, Pn3m, Fm3m, Fm3c, Fd3m, Fd3c, Im3m, Ia3d

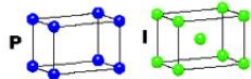


# Sistemas cristalinos

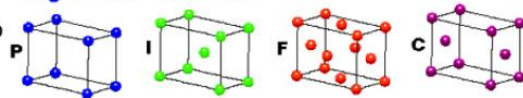
**CÚBICO**  
 $a=b=c$   
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



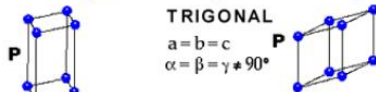
**TETRAGONAL**  
 $a=b \neq c$   
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



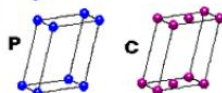
**ORTORÓMBICO**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$



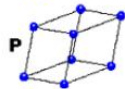
**HEXAGONAL**  
 $a=b \neq c$   
 $\alpha=\beta=90^\circ$   
 $\gamma=120^\circ$



**MONOCLÍNICO**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha=\gamma=90^\circ$   
 $\beta \neq 120^\circ$



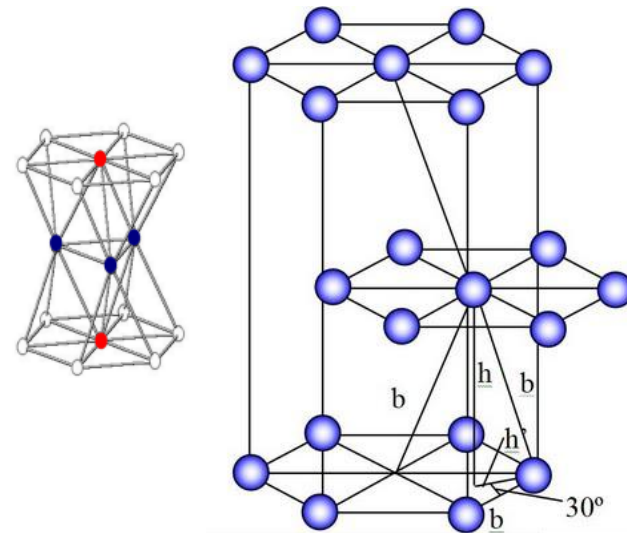
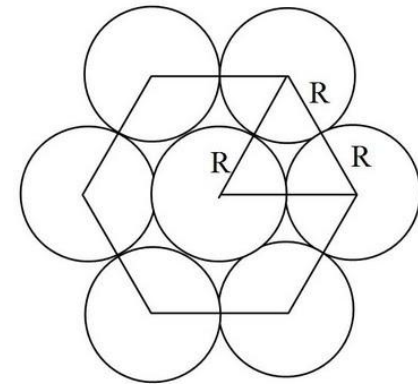
**TRICLÍNICO**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



## Distancia interplanar

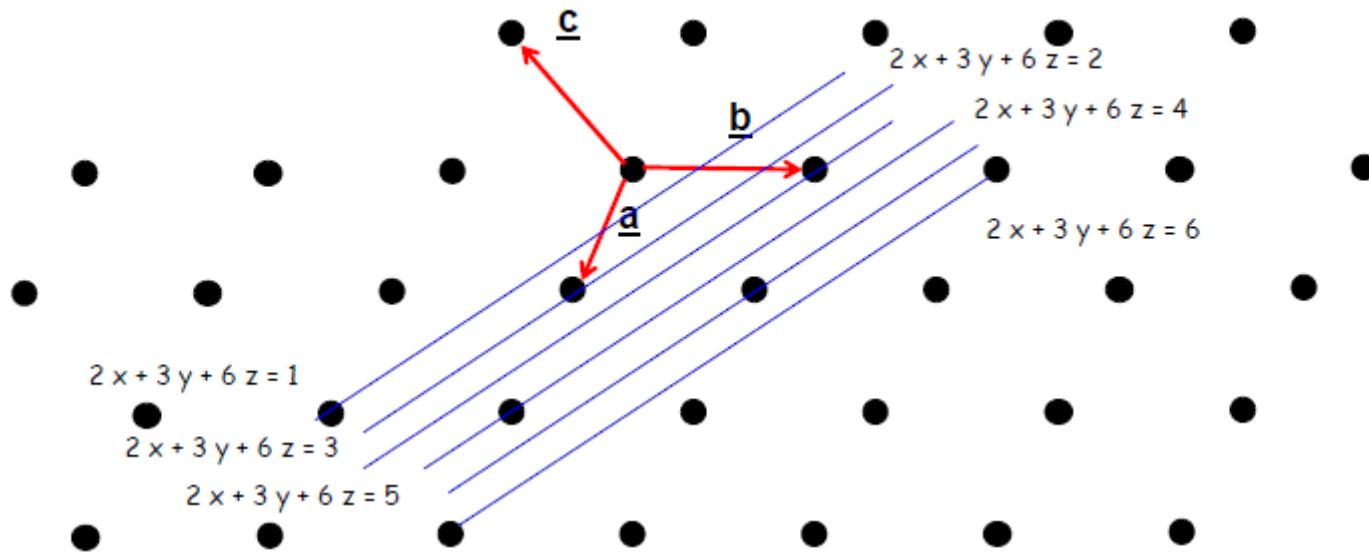
Ortorrómbico	Tetragonal	Cúbico
$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left[ h^2 + k^2 + l^2 \left( \frac{a}{c} \right)^2 \right] \frac{1}{a^2}$	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = (h^2 + k^2 + l^2) \frac{1}{a^2}$
Monoclínico	Hexagonal	
$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \gamma} + \frac{k^2}{b^2 \sin^2 \gamma} - \frac{2hk \cos \gamma}{ab \sin^2 \gamma} + \frac{l^2}{c^2}$	$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \left[ \frac{4}{3} (h^2 + k^2 + hk) + l^2 \left( \frac{a}{c} \right)^2 \right] \frac{1}{a^2}$	
Triclínico		
$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \begin{vmatrix} \frac{h}{a} \cos \gamma \cos \beta & 1 & \frac{h}{a} \cos \alpha & 1 & \cos \gamma \frac{h}{a} \\ \frac{h}{a} \frac{k}{b} & \cos \gamma \frac{k}{b} \cos \alpha & + \frac{k}{b} & \cos \gamma & 1 & \frac{k}{b} \\ \frac{l}{c} \cos \alpha & \cos \beta \frac{l}{c} & 1 & \cos \beta \cos \alpha & \frac{l}{c} \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} 1 & \cos \gamma \cos \beta \\ \cos \gamma & 1 \cos \alpha \\ \cos \beta \cos \alpha & 1 \end{vmatrix}^{-1}$		
Trigonal (romboédrico)		
$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{[(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + lh) (\cos^2 \alpha - \cos \alpha)]}{A^2 (1 + 2 \cos^3 \alpha - 3 \cos^2 \alpha)}$		

## Fracción de empaquetamiento para una celda hcp (hexagonal compacta)



<http://blog.utp.edu.co/metalografia/2012/07/30/3-cristalografia/>

## Índices de Miller: ejemplo



Ecuación de este plano:  
 $1/3 x + 1/2 y + 1 z = 1$

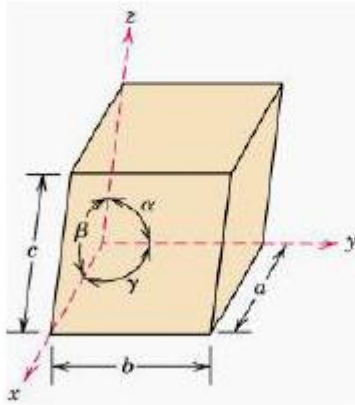
Ecuación equivalente de este plano:  
 $2 x + 3 y + 6 z = 6$

Notar que el plano  $2 x + 3 y + 6 z = 1$   
corta  $\underline{a}$  en  $1/2$ ,  $\underline{b}$  en  $1/3$  y  $\underline{c}$  en  $1/6$ .

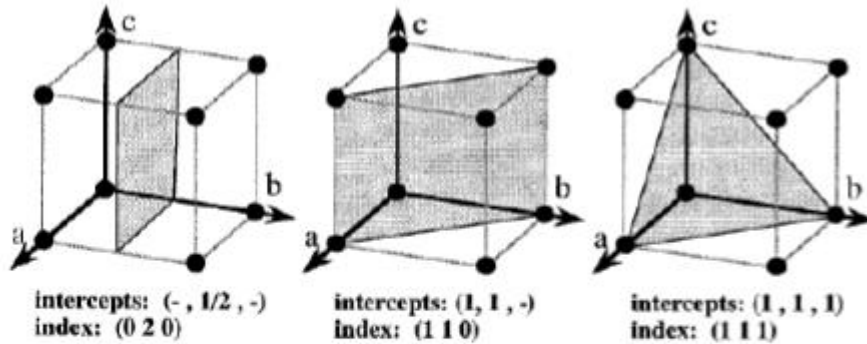
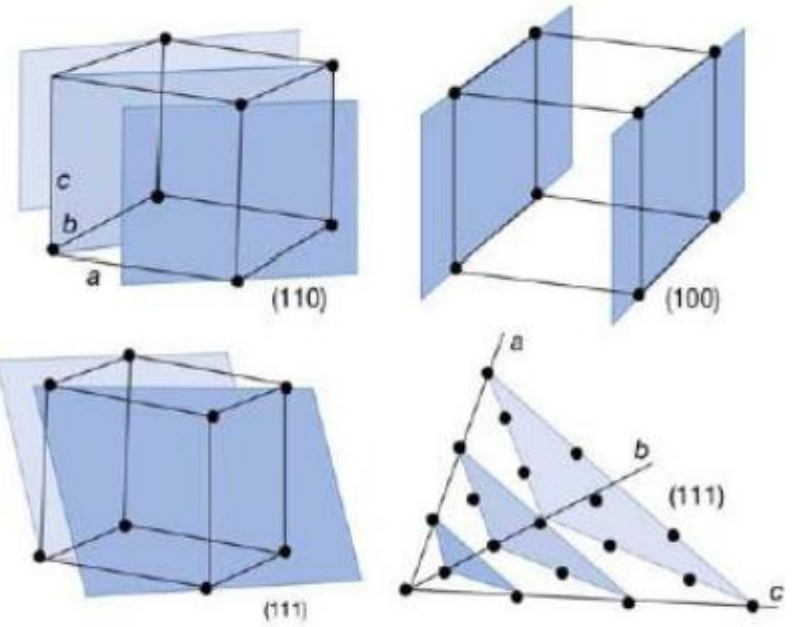
Se definen los índices de Miller de este plano como (2, 3, 6)



## Planos cristalinos



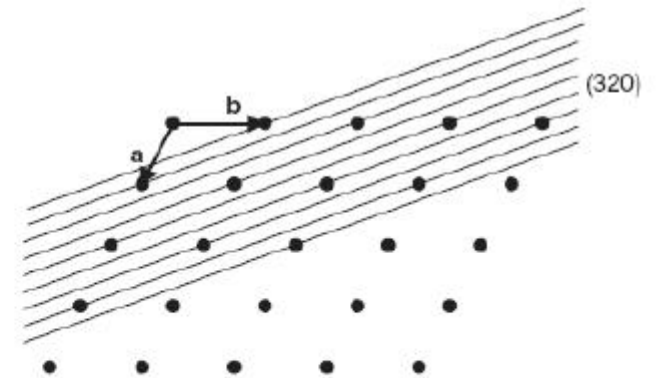
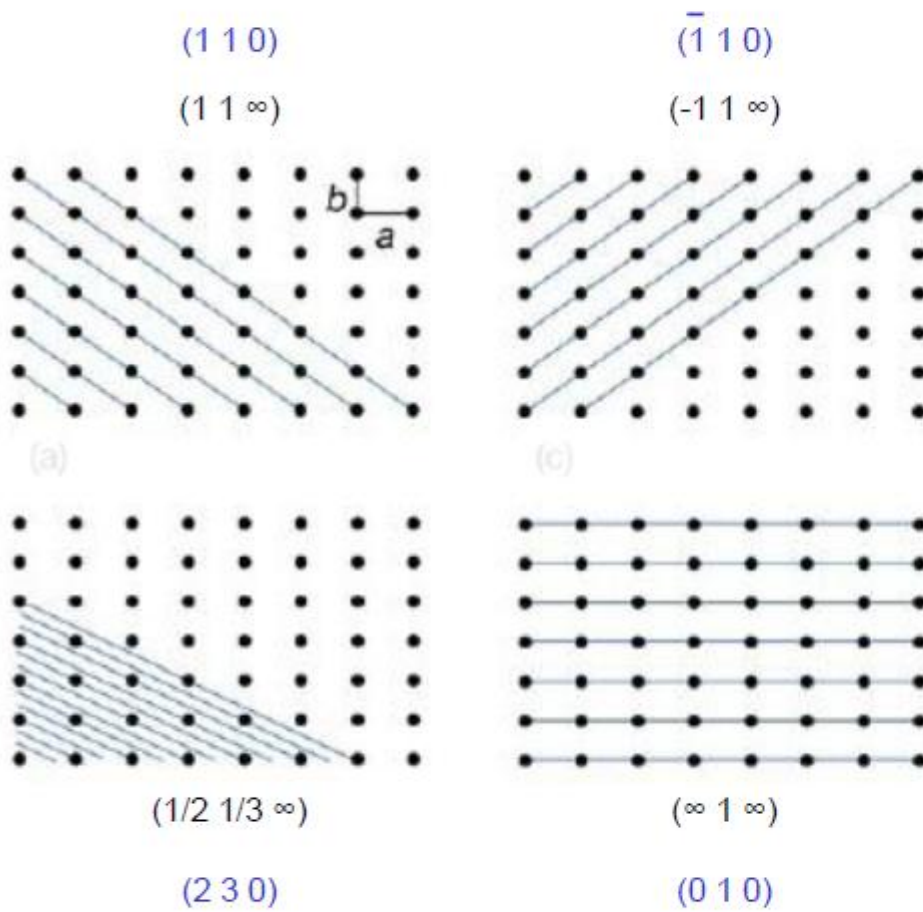
## Planos equivalentes



$d_{hkl}$  es el espaciamento entre planos equivalentes

Índices de Miller: son índices para planos definidos por los valores recíprocos  $(h\ k\ l)$  de las intercepciones en los ejes  $(a/h\ b/k\ c/l)$  donde  $a, b, c$  son los vectores de la red.

## Determinación de los índices de Miller



**Figure 2.13** Determination of Miller indices: count the spaces crossed on passing along each cell edge, to give  $(320)$

# La red recíproca

- Red directa. Vectores traslación.  $\underline{a}$ ,  $\underline{b}$  y  $\underline{c}$
- Podemos definir otra red. Vectores traslación.  $\underline{a^*}$ ,  $\underline{b^*}$  y  $\underline{c^*}$
- Definidos por las siguientes relaciones:
- $\underline{a^*} \cdot \underline{b} = \underline{a^*} \cdot \underline{c} = \underline{b^*} \cdot \underline{a} = \underline{b^*} \cdot \underline{c} = \underline{c^*} \cdot \underline{a} = \underline{c^*} \cdot \underline{b} = 0$
- $\underline{a^*} \cdot \underline{a} = \underline{b^*} \cdot \underline{b} = \underline{c^*} \cdot \underline{c} = 1$
  
- Propiedades por definición:
- $\underline{a^*}$  es perpendicular al plano generado por ( $\underline{b}$  y  $\underline{c}$ ).
- $\underline{b^*}$  es perpendicular al plano generado por ( $\underline{c}$  y  $\underline{a}$ ).
- $\underline{c^*}$  es perpendicular al plano generado por ( $\underline{a}$  y  $\underline{b}$ ).
  
- Se puede ver que
- $\underline{a^*} = 1/V \cdot (\underline{b} \times \underline{c})$ ; para que  $\underline{a^*} \cdot \underline{a} = 1 = 1/V (\underline{b} \times \underline{c}) \cdot \underline{a} = 1/V V$
- $\underline{b^*} = 1/V \cdot (\underline{c} \times \underline{a})$
- $\underline{c^*} = 1/V \cdot (\underline{a} \times \underline{b})$

# La red recíproca

- Usando módulos:
- $|\underline{a}^*| = 1/V \cdot b c \sin \alpha$
- $|\underline{b}^*| = 1/V \cdot c a \sin \beta$
- $|\underline{c}^*| = 1/V \cdot a b \sin \gamma$
  
- Valen las relaciones inversas (recíprocas de las recíprocas)
  
- $\underline{a} = 1/V^* \cdot (\underline{b}^* \times \underline{c}^*)$
- $\underline{b} = 1/V^* \cdot (\underline{c}^* \times \underline{a}^*)$
- $\underline{c} = 1/V^* \cdot (\underline{a}^* \times \underline{b}^*)$

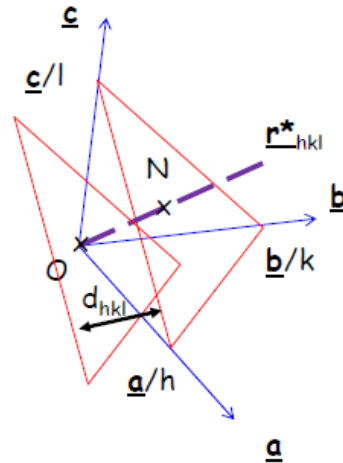
# Propiedades de la red recíproca

$$|\underline{r}_{hkl}^*| = 1/d_{hkl}$$

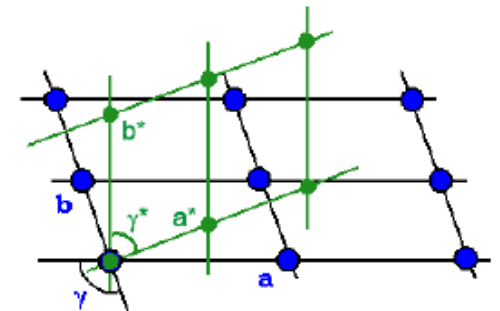
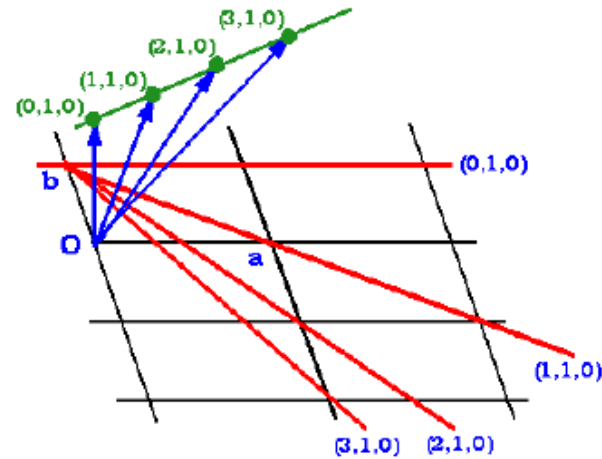
$$d_{hkl} = \underline{a}/h \cdot (\underline{ON})$$

(ON): vector unitario dirección  $\underline{r}_{hkl}^*$

$$d_{hkl} = \underline{a}/h \cdot (\underline{r}_{hkl}^* / |\underline{r}_{hkl}^*|) = 1 / |\underline{r}_{hkl}^*|$$



## La red recíproca



# Difracción

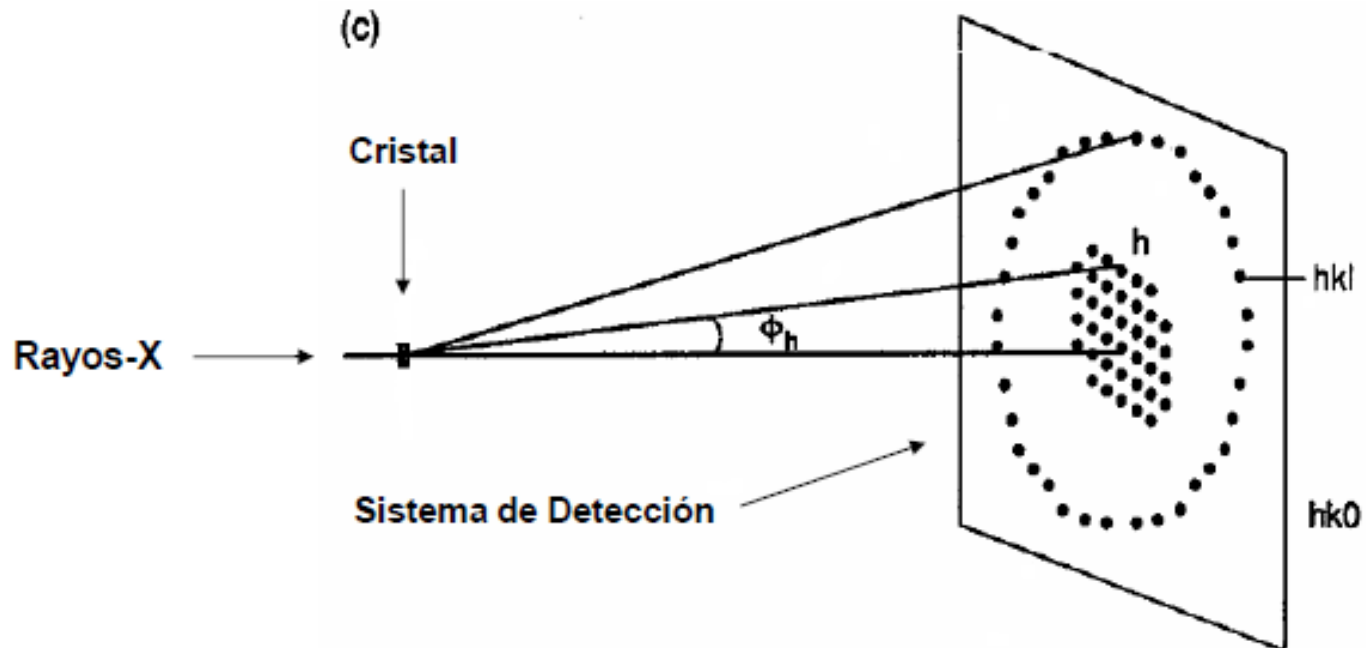
TIPO DE MUESTRA

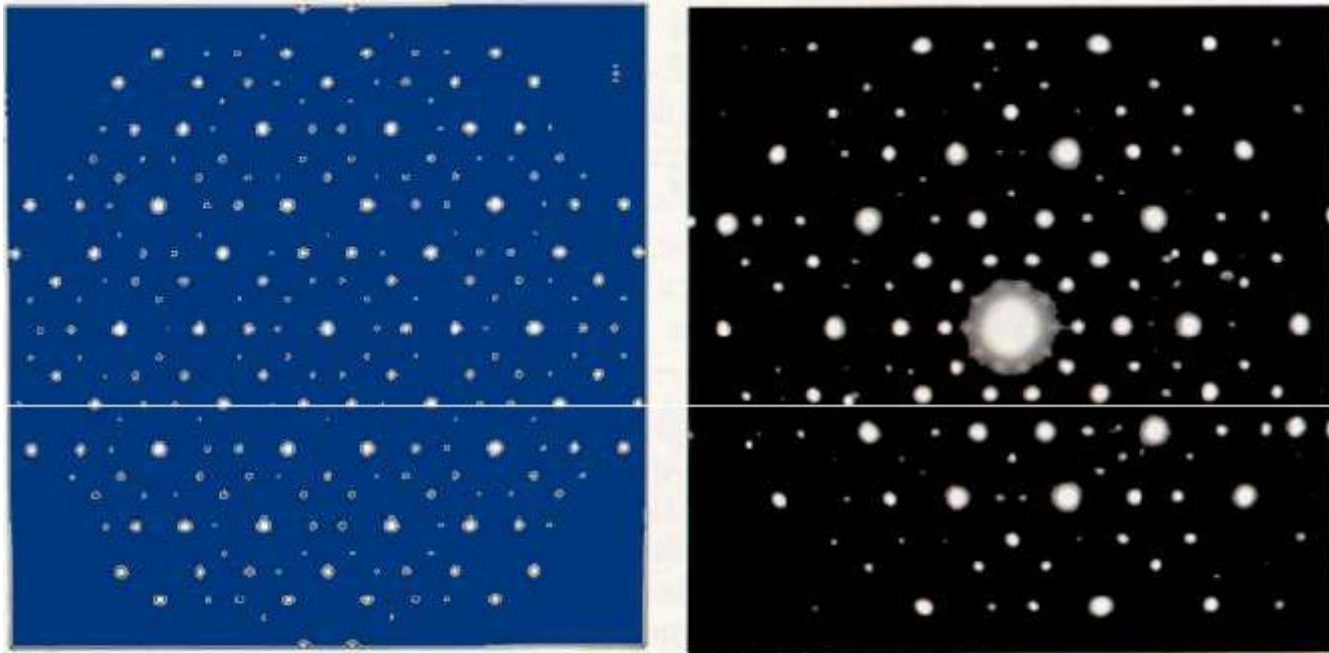
Monocristal

Policristales (Polvos)

## DIFRACCION DE CRISTAL UNICO:

**Registro tridimensional** de la red recíproca asociada a la estructura de un material cristalino para medir las intensidades de **cientos o miles de reflexiones** producidas por la interacción de un haz incidente (rayos-X, neutrones, electrones) con el monocristal bajo estudio



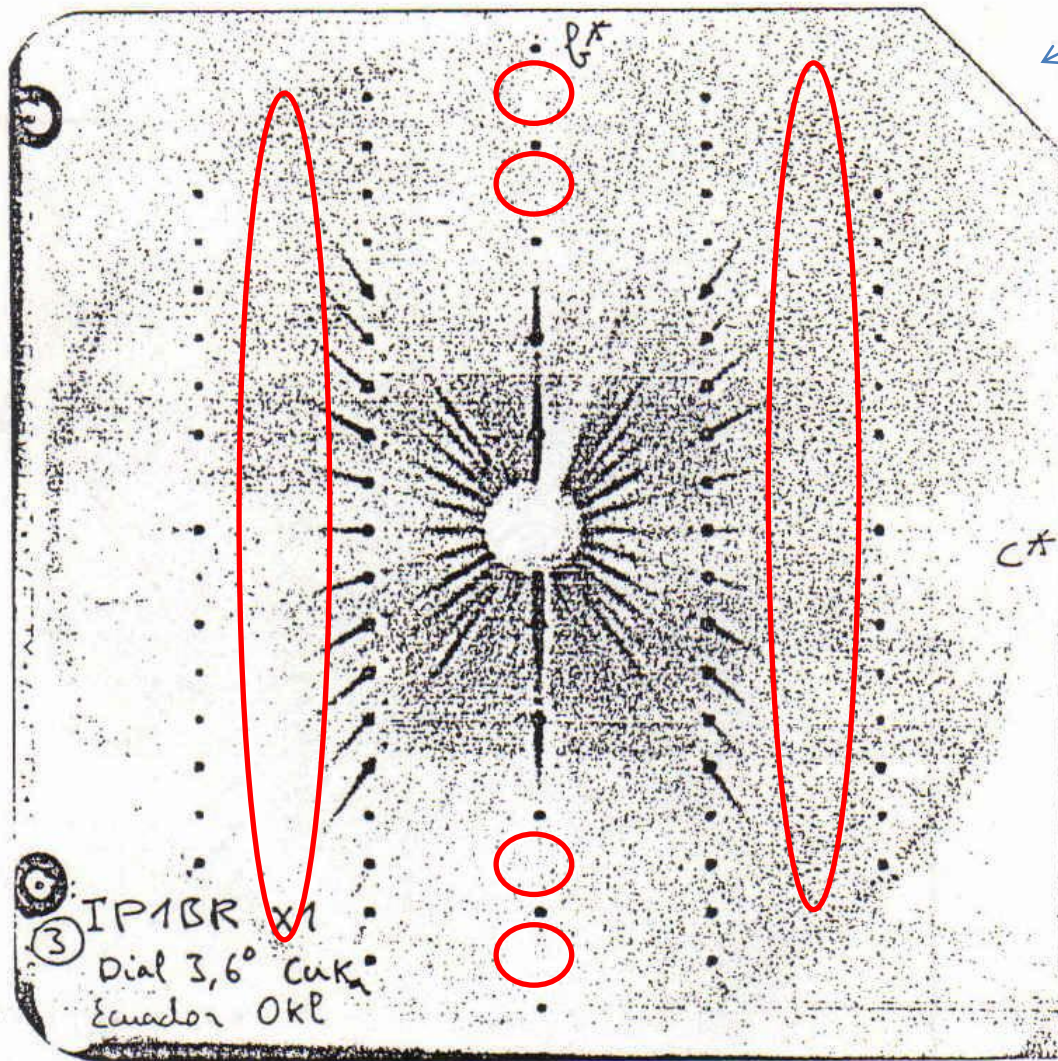


Comparación del patrón de difracción observado (der.)  
y el calculado (izq)

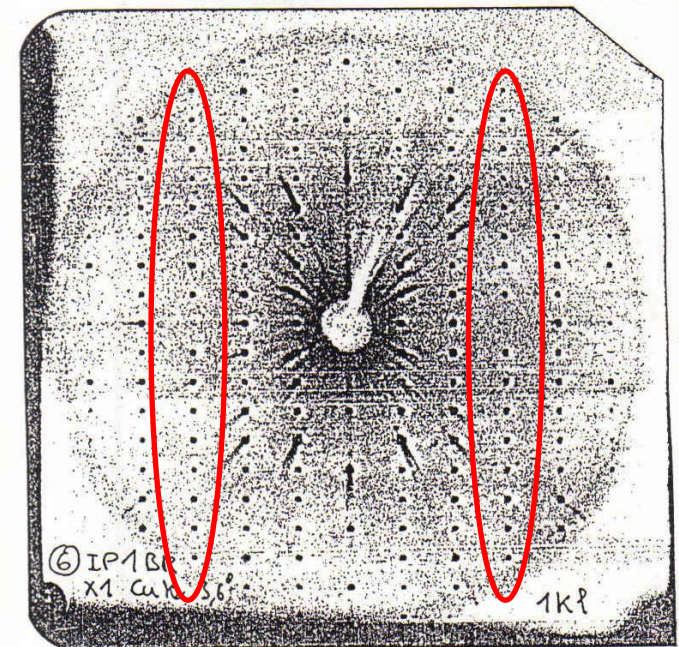
D. Levine, P.J. Steinhardt (1984)



# Ejemplo de ausencia sistemática



Medido en el  $(0, k, l)$

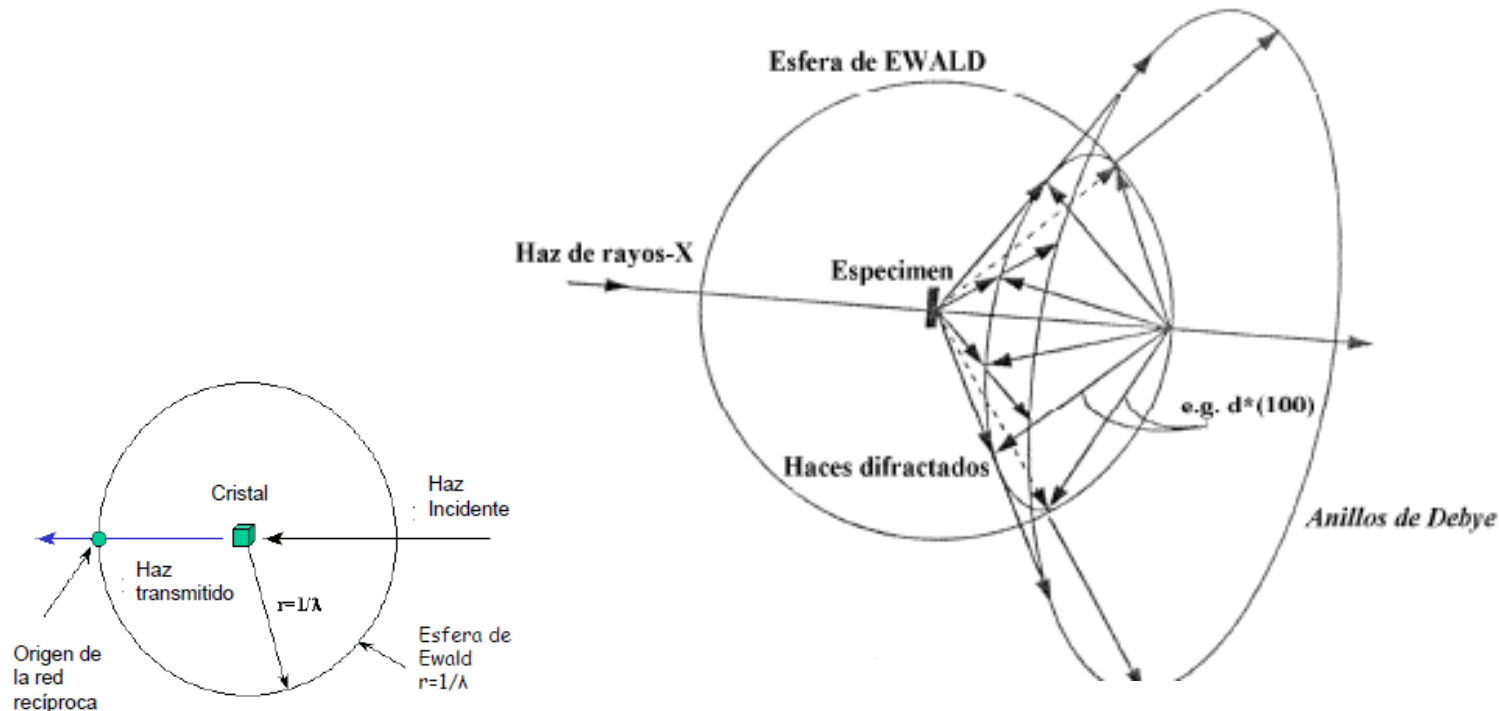


Medido en el  $(1, k, l)$

# DIFRACCION EN MUESTRAS POLICRISTALINAS:

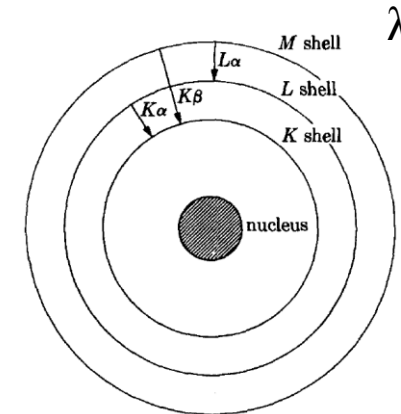
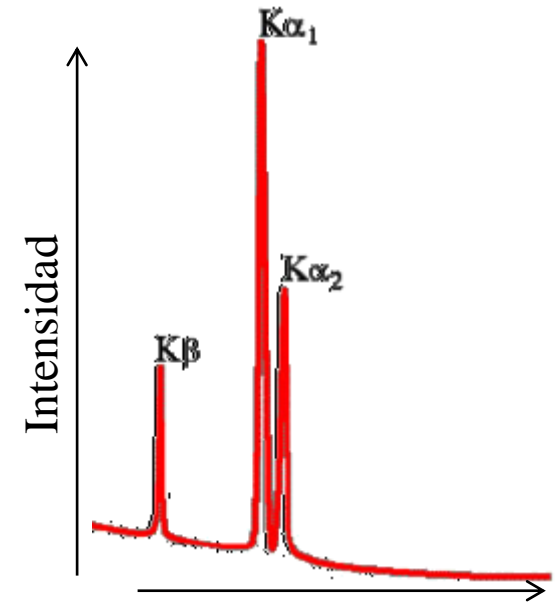
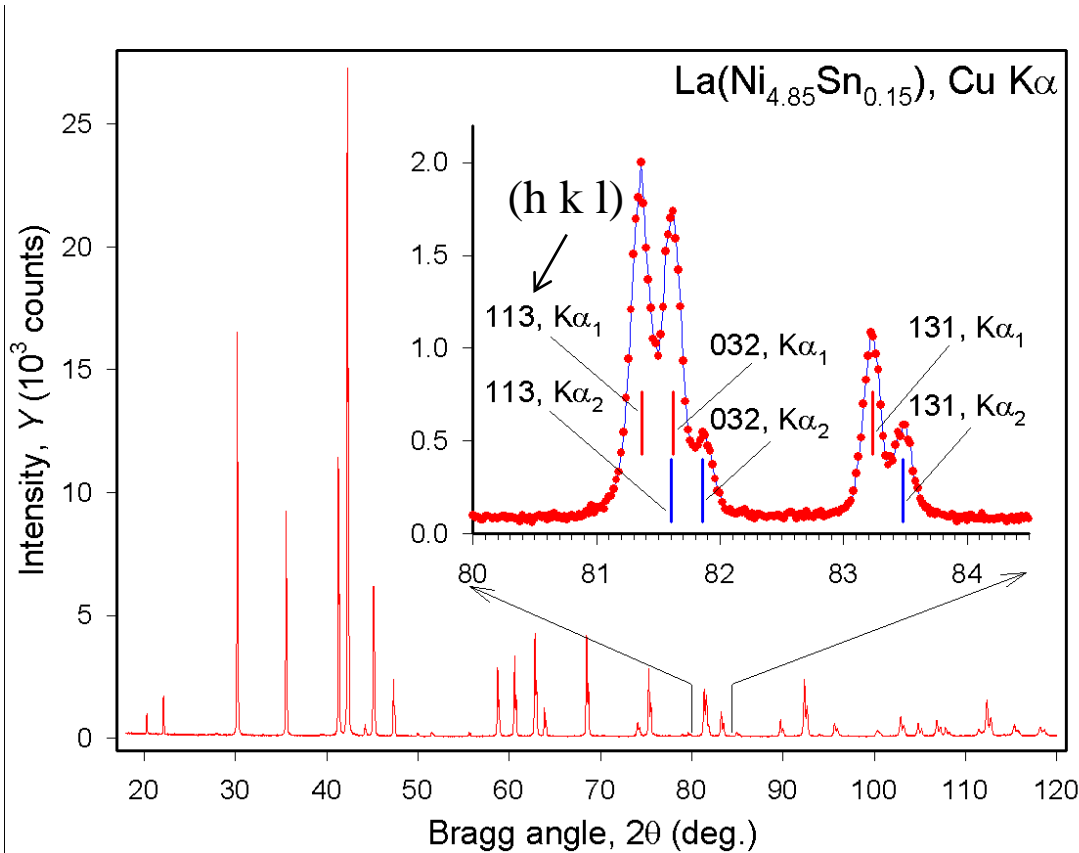
Registro unidimensional de la red recíproca asociada a la estructura de un material cristalino para medir las intensidades de unos pocos máximos producidos por la superposición de la reflexiones que se originan por interacción de un haz incidente (rayos-X, neutrones, electrones) con la muestra policristalina bajo estudio.

**Muestra Policristalina (polvo):** Agregado de un gran número de monocristales muy pequeños.



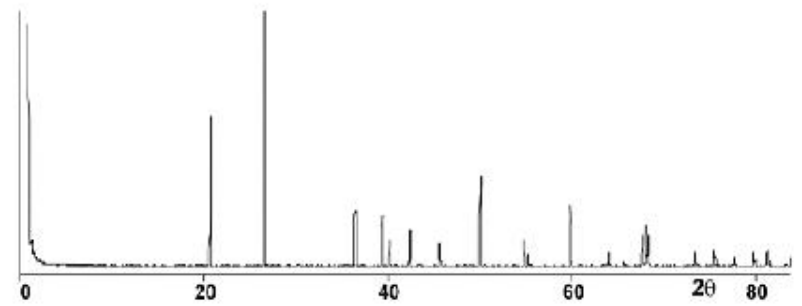
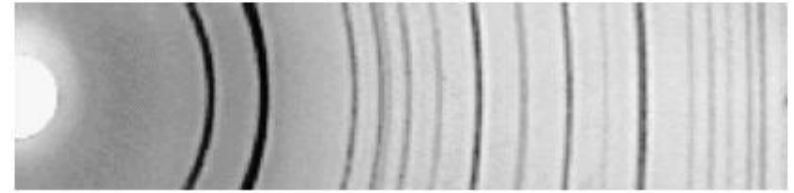
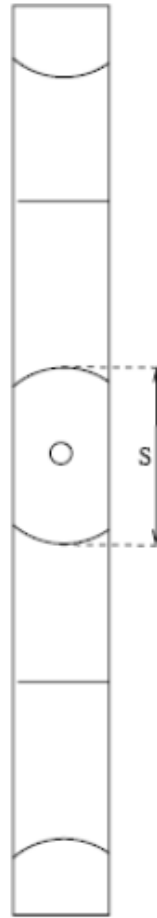
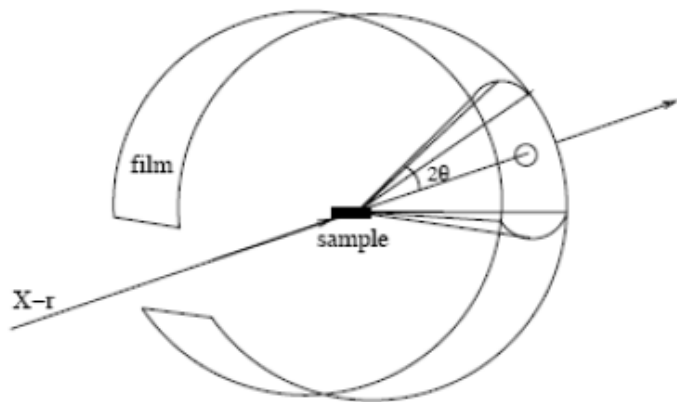
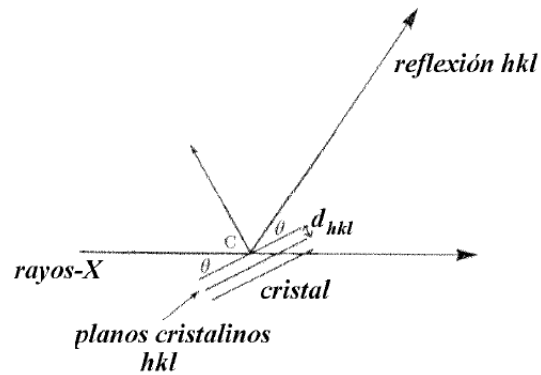


# Difractograma



Transiciones electrónicas  
en un átomo

- De las posiciones de las intensidades obtengo información sobre la geometría de la celda y la deformación
- De las intensidades obtengo de qué átomos se trata (cuáles hay), cuántos hay y en qué posición están

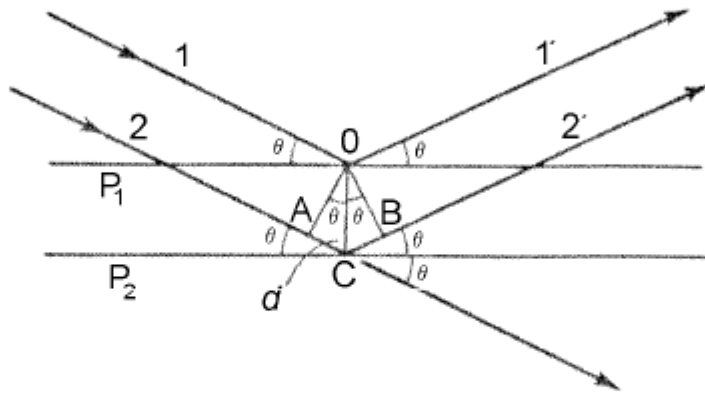


## Indexo

- Indexar es un proceso por el cual los índices  $hkl$  se son asignados a los picos del difractograma. La asignación de índices implica poder calcular la celda unitaria.
- Para calcular la posición de todos los picos de un difractograma se requieren como mínimo los parámetros de celda ( $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ ) y una longitud de onda. ¿Cuántos picos se requieren para el proceso inverso? La respuesta no es obvia.

## El fenómeno de difracción

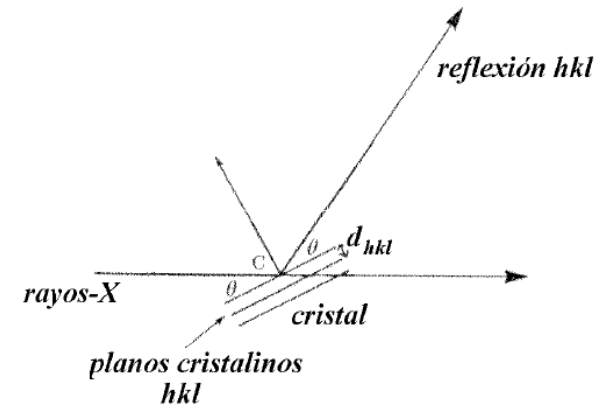
### LEY DE BRAGG



$$\langle AOC \rangle = \langle BOC \rangle \quad \Rightarrow \quad AC = BC$$

Los haces 1' y 2' estarán en fase si la diferencia de camino  $AC + BC = 2AC$  es un número entero de longitudes de onda. Esto es,  $2AC = n \lambda$

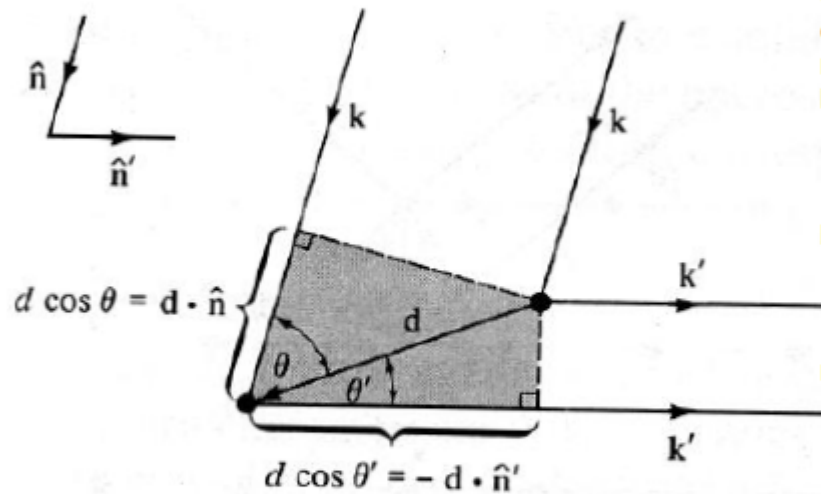
Como  $\text{Sen } \theta = AC/d$ ,  $\Rightarrow \text{Sen } \theta = n\lambda/2d$ , por lo tanto:  $n \lambda = 2d \text{ sen } \theta$



## La formulación de von Laue

No supone reflexiones especulares en los planos de la red. Suponemos que el cristal está compuesto por un conjunto de objetos microscópicos idénticos (iones o átomos) colocados en los sitios  $\mathbf{R}$  de la red de Bravais, cada uno puede re-irradiar la radiación incidente en todas las direcciones. Observaremos picos agudos de difracción solo en las direcciones y a las longitudes de onda donde toda la radiación dispersada desde todos los puntos de la red interfiere constructivamente.

Para encontrar la condición de interferencia constructiva consideremos dos fuentes de dispersión separadas por el vector de desplazamiento  $\mathbf{d}$ .



Observaremos un rayo disperso en la dirección  $\mathbf{n}'$  con vector de onda  $\mathbf{k}' = 2\pi\mathbf{n}'/\lambda$  si la diferencia de camino óptico entre los rayos dispersos por las dos fuentes es un número entero de longitudes de onda. La diferencia de camino es:

$$d \cos \theta + d \cos \theta' = \vec{d} \cdot (\vec{n} - \vec{n}')$$

la condición de interferencia constructiva es:

$$\vec{d} \cdot (\vec{n} - \vec{n}') = n\lambda$$

multiplicando cada lado por  $2\pi/\lambda$ :

$$\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi n$$

Consideremos ahora un arreglo de fuentes de dispersión en los sitios de la red de Bravais. Como los sitios están separados por los vectores de red  $\mathbf{R}$ , la condición para que todos los rayos dispersos interfieran constructivamente es que la ecuación superior sea válida simultáneamente para todos los valores de  $\mathbf{d}$  que son vectores de la red de Bravais, es decir:

$$\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi n \quad \forall n, \vec{R}$$

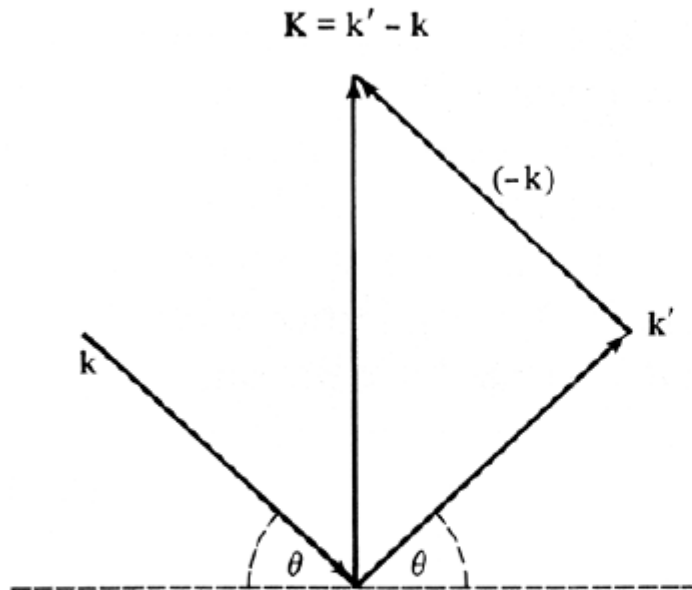
que es lo mismo que:

$$e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}} = 1 \quad \longrightarrow$$

Condición de von Laue: ocurrirá interferencia constructiva si el cambio de vector de onda  $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  es un vector de la red recíproca

## Equivalencia de las formulaciones de Bragg y de von Laue

La equivalencia de estos dos criterios para la interferencia constructiva de rayos X por un cristal tiene una conexión directa con la relación entre los vectores de la red recíproca y las familias de planos de la red directa.



Como  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$  tienen la misma magnitud entonces forman el mismo ángulo con el plano perpendicular a  $\mathbf{K}$  y por lo tanto la dispersión puede ser vista como una reflexión de Bragg con un ángulo de Bragg  $\theta$  desde una familia de planos de la red directa perpendiculares al vector de la red recíproca  $\mathbf{K}$ .

Como  $\mathbf{K}$  es un vector de la red recíproca entonces su módulo es igual a:

$$K = \frac{2\pi n}{d}$$

$$K = 2k \sin \theta$$

$$k \sin \theta = \frac{\pi n}{d} = \frac{2\pi}{\lambda} \sin \theta \Rightarrow 2d \sin \theta = n\lambda$$

Por lo tanto, un pico de difracción de Laue correspondiente a un cambio en el vector de onda dado por un vector de la red recíproca  $\mathbf{K}$  corresponde a una reflexión de Bragg desde la familia de planos de la red directa perpendiculares a  $\mathbf{K}$ . El orden  $n$  de la reflexión de Bragg es el módulo de  $\mathbf{K}$  dividido por la longitud del vector de la red recíproca más corto paralelo a  $\mathbf{K}$ .



# En resumen:

## ALGUNAS DE LAS APLICACIONES DE LA DIFRACCION DE RAYOS-X EN MUESTRAS POLICRISTALINAS

- Identificación de fases cristalinas.
- Análisis cuantitativo de agregados policristalinos.
- Seguimiento de reacciones en el estado sólido.
- Determinación de parámetros de la celda unidad.
- Estudio de la microestructura de materiales.
- Determinación del grado de cristalinidad.
- Análisis estructural de materiales (*Determinación y Refinamiento Estructural*).

# Ejemplo: difracción en grafeno

- Grafeno: el material del futuro (<http://grafeno.com/>)
- El **grafeno** es una sustancia formada por carbono puro, con átomos dispuestos en un patrón regular hexagonal similar al grafito, pero en una hoja de un átomo de espesor. Es muy ligero, una lámina de 1 metro cuadrado pesa tan sólo 0,77 miligramos.

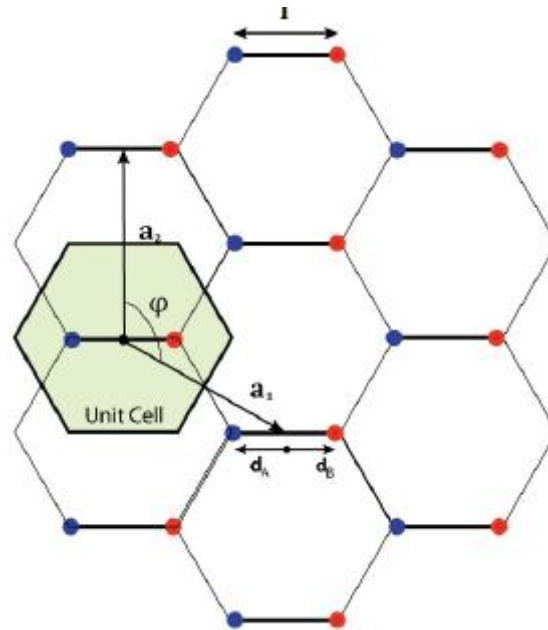
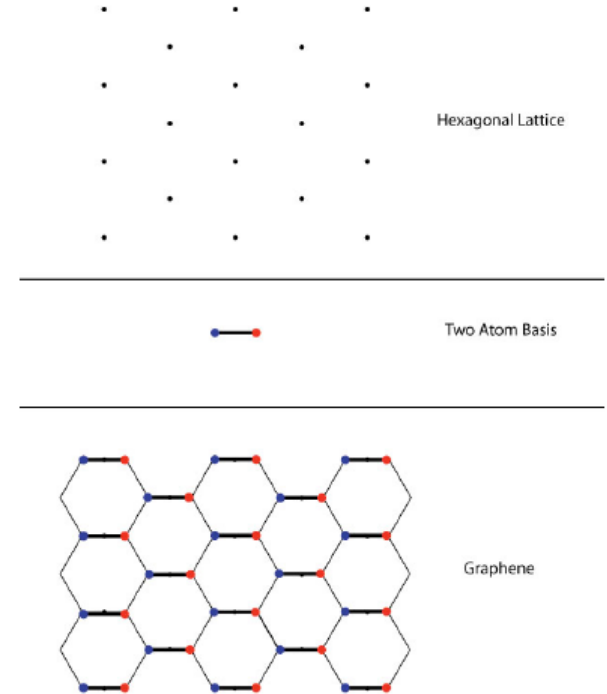
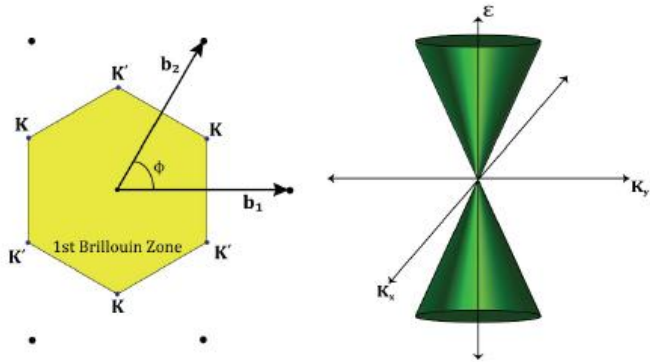


FIG. 4: Graphene consists of a two atom basis superimposed onto a hexagonal lattice. Each unit cell contains one lattice point and a two atom basis. Any lattice point can be reached by adding an integral number of primitive vectors. The vectors  $\mathbf{d}_A$  and  $\mathbf{d}_B$  point from a lattice point to an atom in the basis and are used in calculating the structure factor.  $|\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}l$ ,  $|\mathbf{d}_A| = |\mathbf{d}_B| = \frac{l}{2}$ ,  $\phi = 120^\circ$



Aplicación en tecnología de nanoescala como transistores de alta velocidad y láseres

# Ejemplo: difracción en grafeno



Dependencia de la energía con k

Distancia en el espacio recíproco  $q \equiv \frac{\theta}{\lambda} \Rightarrow q = \frac{2}{3l} \sqrt{m_1^2 + m_1 m_2 + m_2^2}$

Factor de estructura  $S_G = \sum_{\text{basis}} f_j \exp[i\mathbf{G} \cdot \mathbf{d}_j]$   
 $\mathbf{d}_j = \text{base}$   
 $S_G = 2f \cos \left[ \frac{\pi}{3} (2n_1 + n_2) \right]$

Vector primitivo  $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2,$

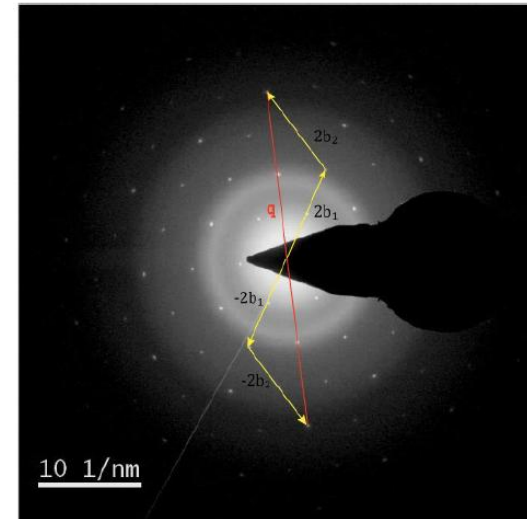
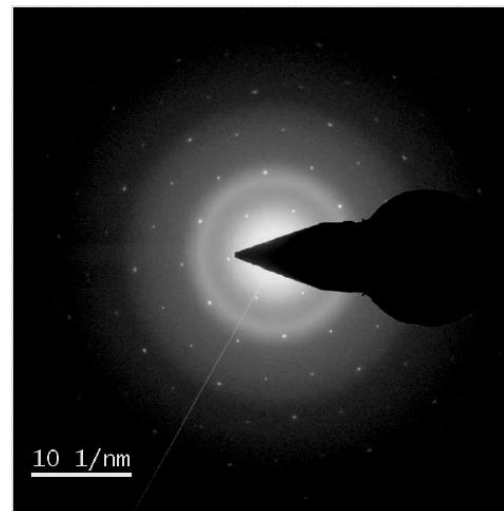
Vector recíproco  $\mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2,$

Vectores primitivos

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{3l}{2} \left( \hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{3} \hat{y} \right), \\ \mathbf{a}_2 = \sqrt{3}l \hat{y}, \\ \mathbf{a}_3 = \hat{z}, \end{cases}$$

Vectores recíprocos

$$\begin{cases} \mathbf{b}_1 = \frac{4\pi}{3l} \hat{x} \\ \mathbf{b}_2 = \frac{4\pi}{3l} \left( \frac{1}{2} \hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right) \\ \mathbf{b}_3 = 2\pi \hat{z} \end{cases}$$

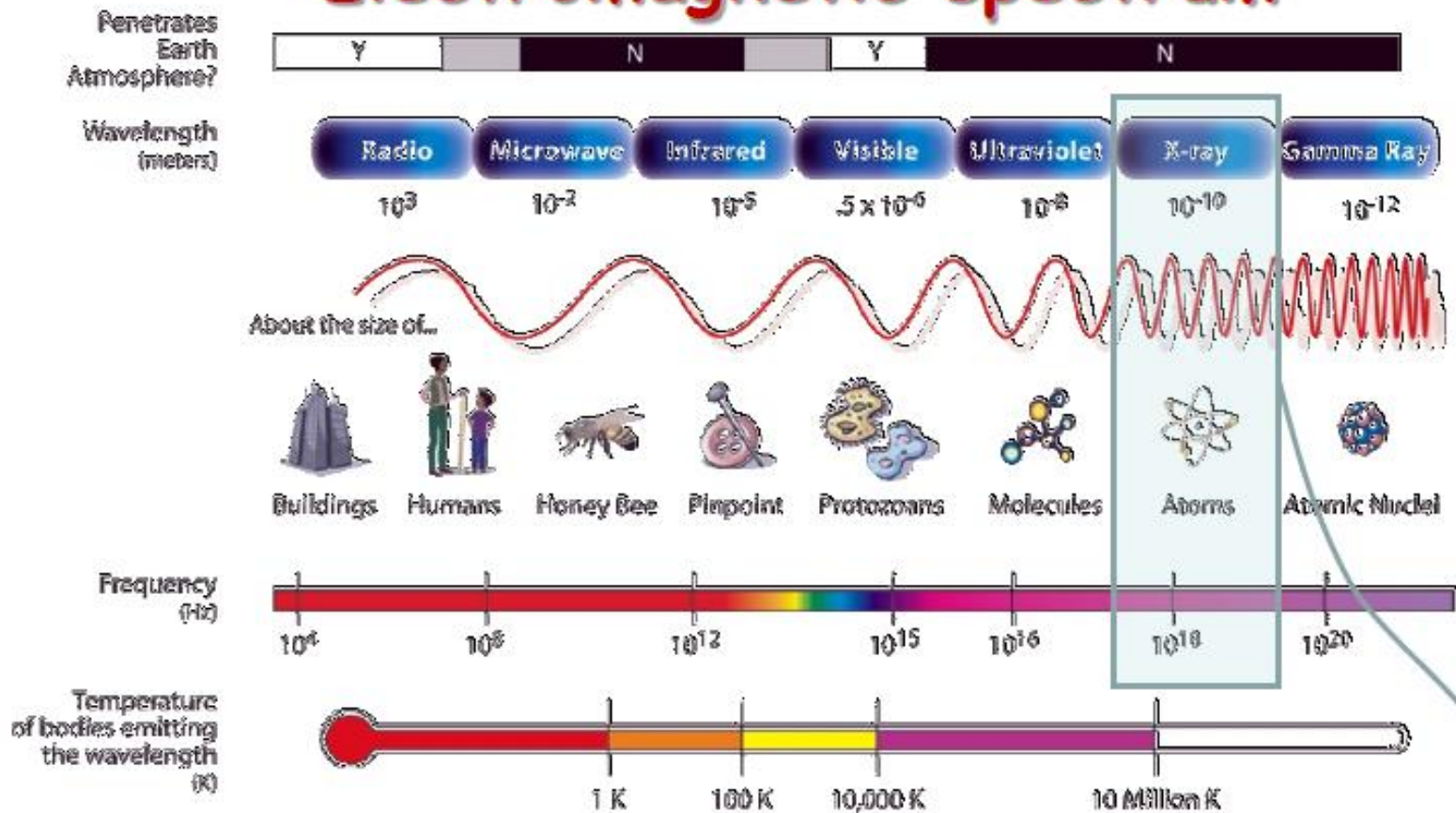


Se comprueba con drx que el grafeno tiene una red hexagonal

Otros comentarios

# Rayos X: breve intro

## Electromagnetic spectrum



Conclusión: si uso luz visible no puedo ver la estructura cristalina

- $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 0,1 \text{ nm}$
- X-rays:  $\sim 0,5 \text{ \AA} - 2,5 \text{ \AA}$
- Visible light:  $\sim 4000 - 8000 \text{ \AA}$

# X-rays

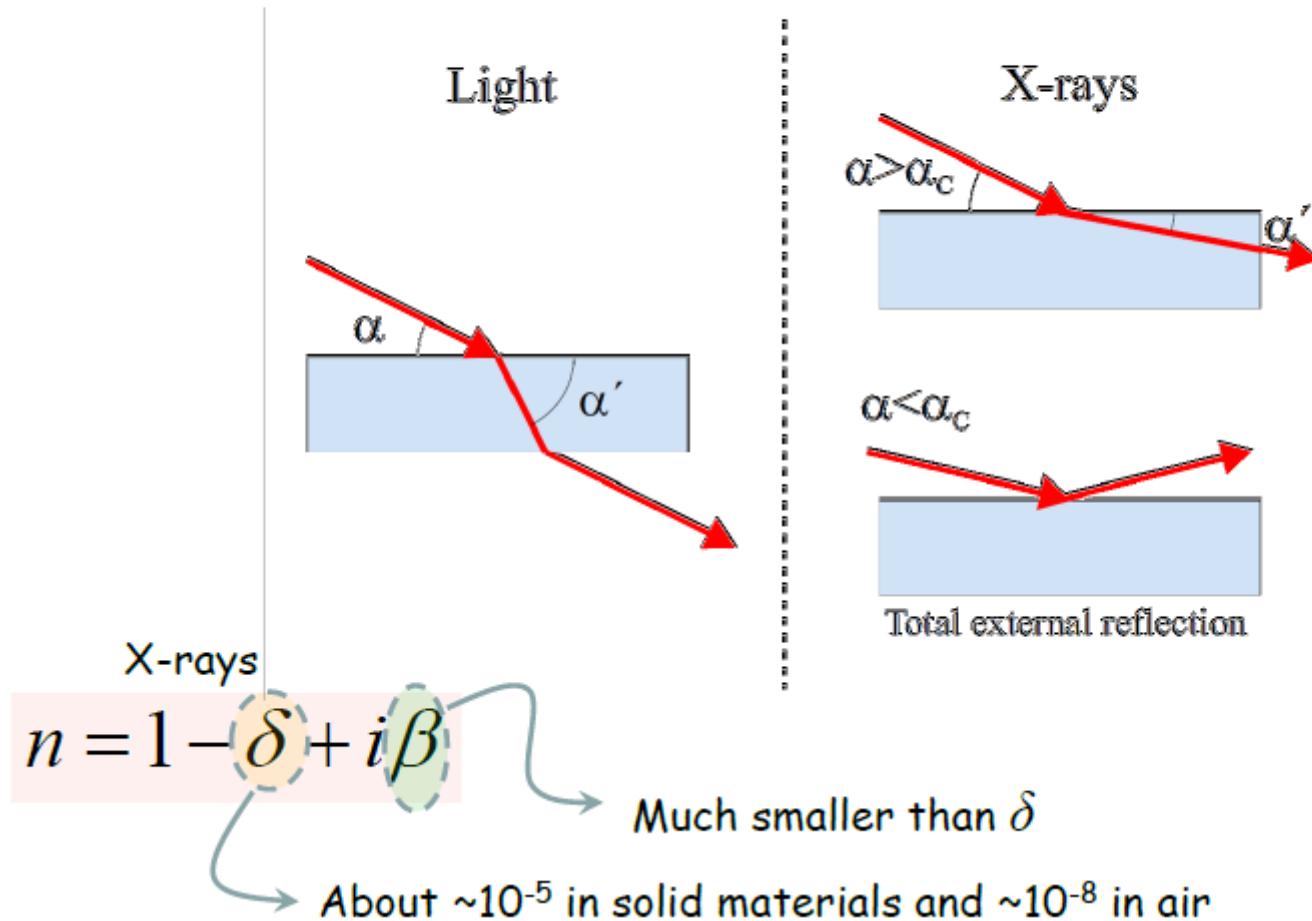
Like all electromagnetic radiation from ondulatory nature, X-rays suffer

**interference**, **polarization**, **refraction**, **diffraction** and **reflection**.

Although it has a much smaller wavelength, its electromagnetic nature is identical to the **light**

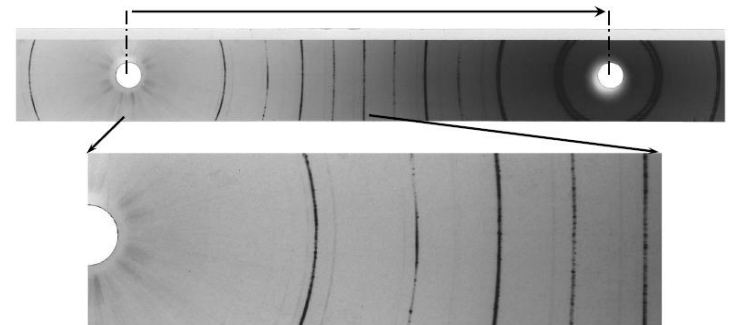
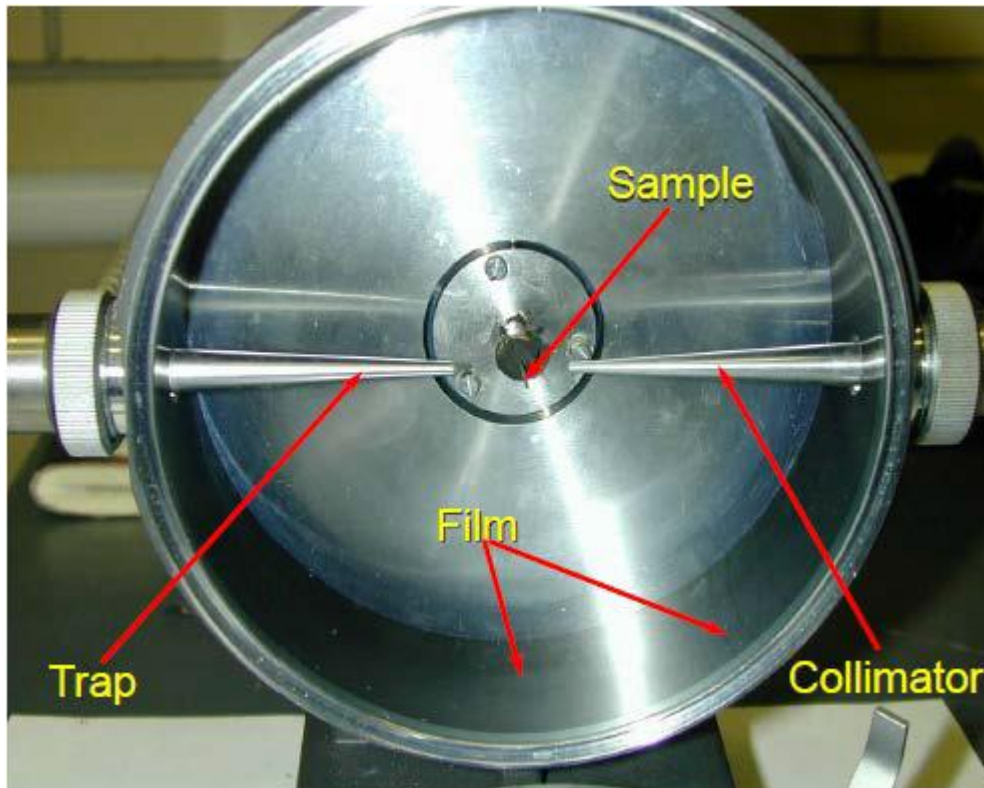
# Refraction and reflection

Refraction and reflection of light and X-rays

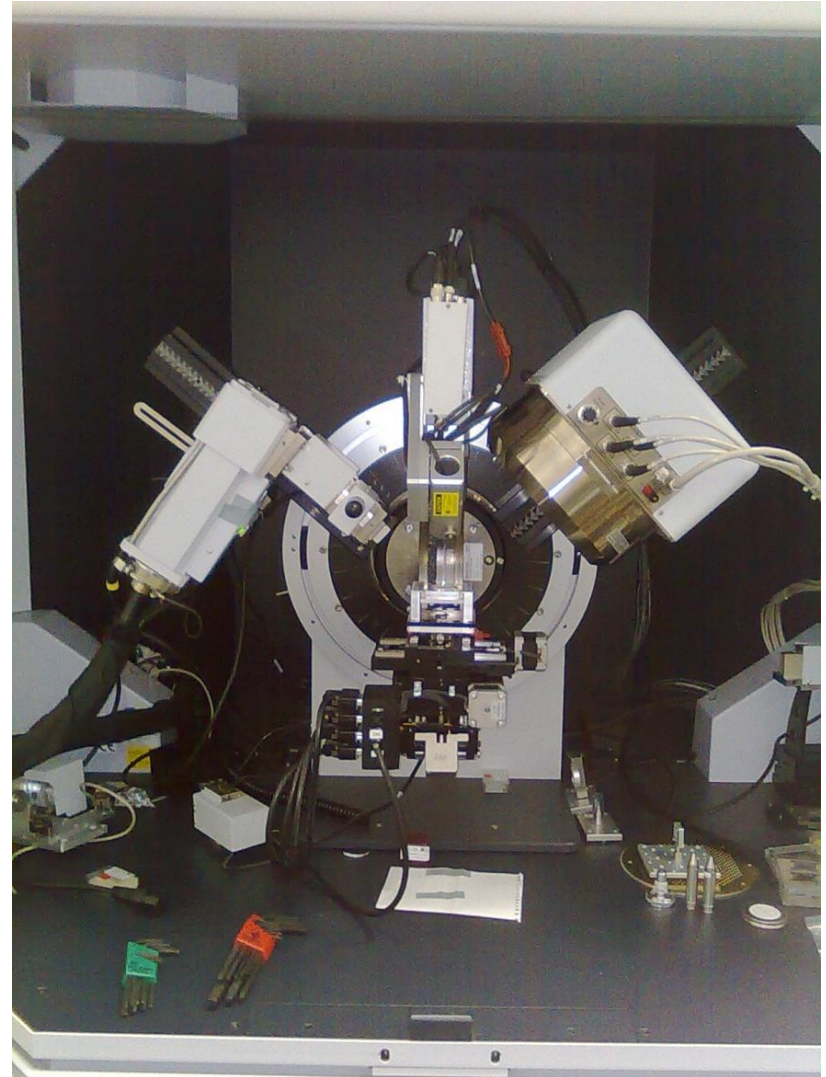
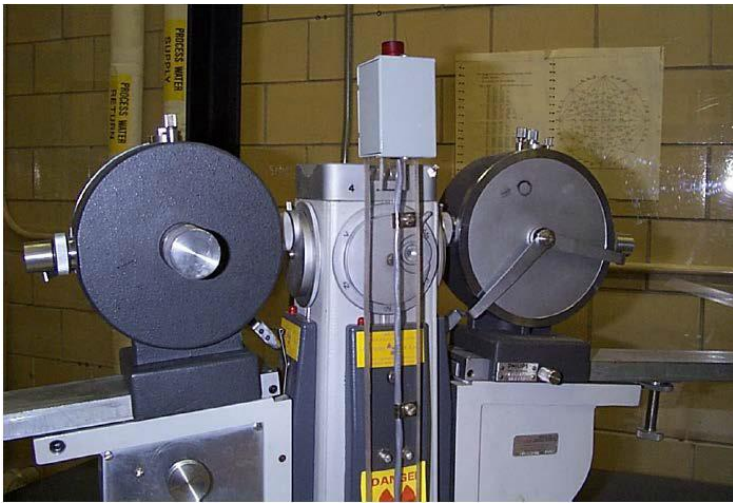




# Experimento de Debye-Scherrer



# Experimento de Debye-Scherrer



# Bragg-Brentano geometry (reflection)

