

**Medición de distancias interplanares mediante difracción de ondas sonoras.**

**Clave de registro:** CIN2015A50150

**Escuela de procedencia:** Escuela Tomás Alva Edison

**Autores:**

Carrillo Vázquez, Claudia Sofía

Sánchez Tejeda, Manuel Guillermo

Sánchez Tejeda Juan Francisco

**Asesores:**

Govea Anaya Guillermo Alberto

Zarzosa Pérez Alicia

**Área de conocimiento:** Áreas de Convergencia

**Disciplina principal:** Física

**Tipo de investigación:** Experimental

**Lugar:** México, D.F

**Fecha:** 20 de febrero del 2015

## **Resumen**

Una técnica ampliamente utilizada en la caracterización de materiales es la difracción de rayos X. En este procedimiento, el análisis del patrón de difracción generado por esta radiación electromagnética permite obtener las distancias existentes entre los planos atómicos de un material cristalino. Este trabajo propone realizar una simulación de este método de estudio utilizando el patrón de difracción generado por ondas sonoras de 10 kHz de frecuencia, que inciden en un arreglo periódico cúbico formado por esferas de unicel. Las distancias existentes entre las esferas se calcularon a partir de los máximos relativos del patrón utilizando la ley de Bragg.

Palabras Clave: Estructura cristalina, cristalografía, Rayos X, difracción, red, punto de red, ley de Bragg, sólidos, sonido.

## **Abstract**

A widely used material characterization technique is X-ray diffraction. In this procedure, it is possible to obtain the distances between the atomic planes of the crystalline material by analyzing the diffraction pattern generated by this electromagnetic radiation. This paper proposes a simulation of this method of analysis using the diffraction pattern generated by sound waves of 10 kHz frequency that is incident on a cubic periodic arrangement consisting Styrofoam spheres. The distances between the planes generated by the spheres were calculated from the relative maximum readings in the pattern using Bragg's law .

Keywords: Crystal structure, crystallography, X ray, diffraction, lattice, lattice point, Bragg's law, solid, sound.

## **Introducción**

### **Planteamiento del problema**

La difracción de rayos X es una técnica muy utilizada para la caracterización de materiales cristalinos en la cual el estudio de las direcciones y las intensidades de los haces difractados permite conocer la estructura de diversos materiales inorgánicos, orgánicos y biológicos.

De acuerdo con la teoría ondulatoria; una onda luminosa puede difractarse si interacciona con un objeto cuyas dimensiones son comparables con su longitud de onda; de esta forma, los rayos X poseen una longitud de onda del orden del Armstrong, que corresponde a las dimensiones de los átomos o las moléculas. Para que exista un patrón de difracción que posea regiones de interferencia constructiva y regiones de interferencia destructiva, es necesario que los átomos se coloquen de forma ordenada y periódica.

Para entender el proceso de la difracción de rayos X se propone un modelo a gran escala en el cual ondas sonoras incidan sobre un arreglo periódico de "átomos" hechos de unícel. ¿Es posible que las ondas sonoras se difracten al igual que lo hacen los rayos X y se produzca así un patrón de difracción? ¿Es posible medir las distancias interplanares existentes en el arreglo de unícel a partir de dicho patrón?

### **Hipótesis**

Las ondas sonoras incidentes sobre un arreglo periódico con dimensiones comparables con su longitud de onda generarán un patrón de difracción a partir del cual será posible medir las distancias existentes entre los planos formados por los elementos del arreglo.

### **Justificación y sustento teórico**

En el momento en que un haz de luz coherente de rayos X incide sobre una muestra de material cristalino, los rayos interactúan con los electrones de los átomos que conforman el cristal. Los rayos son reflejados por los electrones y en consecuencia modifican la dirección en la que originalmente viajaban. Posteriormente, los rayos

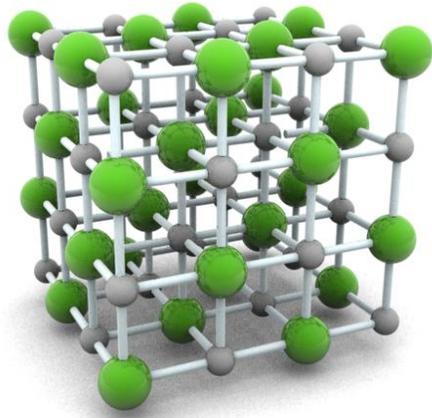


Figura 1. Cloruro de sodio: una estructura cristalina formada por átomos de sodio y de cloro ubicados en un arreglo ordenado y periódico.

Imagen tomada de  
<https://abcienciade.wordpress.com/2009/01/21/la-sal-no-funde-el-hielo/cristall-sal/>

reflejados interfieren constructivamente o destructivamente para así generar un patrón de difracción.

Las ondas sonoras emitidas por una bocina, al igual que un haz de rayos X coherente, son reflejadas por los objetos sobre los cuales éstas inciden. El proceso de reflexión del sonido sigue exactamente las mismas leyes que la reflexión de radiación electromagnética y la consecuente interferencia es un fenómeno común en todo proceso ondulatorio.

La física de los fenómenos ondulatorios no distingue entre los fenómenos de difracción de ondas electromagnéticas y la difracción de ondas sonoras; por tanto, se puede esperar que un arreglo cristalino macroscópico hecho con esferas de unicel produzca un patrón de difracción muy similar al producido por las ondas electromagnéticas que se difractan en un cristal microscópico.

## **Objetivos**

### **Objetivo General**

Observar la difracción de ondas sonoras en un arreglo periódico construido con esferas de unicel y registrar mediante un decibelímetro el patrón de difracción formado.

### **Objetivos Específicos**

Medir las distancias interplanares existentes entre las esferas de unicel que componen un arreglo periódico que simule una estructura cúbica simple y comparar los resultados obtenidos con las mediciones teóricas de dichas distancias

## Fundamentación teórica

### Estructuras cristalinas

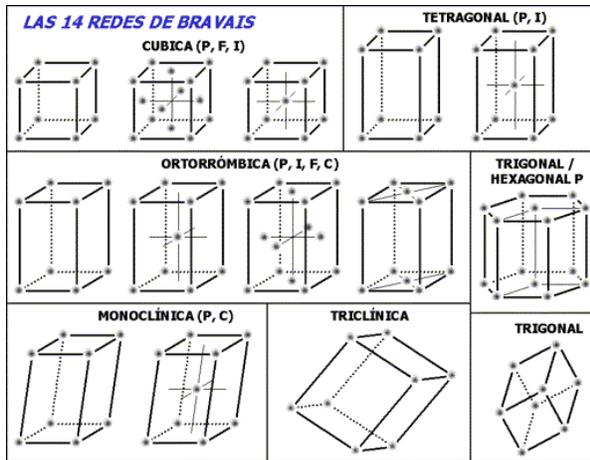


Figura 2. Las catorce redes de Bravais.  
Imagen tomada de <https://dequimica.wikispaces.com/Redes+de+Bravais>

Un cristal (Figura 1) es un arreglo espacial periódico y ordenado de átomos o moléculas que posee una alta simetría. Los cristales pueden clasificarse en dos tipos: monocristales y policristales. Un monocristal es un material cuyo ordenamiento atómico es completamente uniforme; en cambio, el **policristal presenta discontinuidades y está** compuesto por un conjunto de varios monocristales unidos y orientados en direcciones distintas.

El arreglo ordenado de un cristal puede obtenerse mediante la repetición de una pequeña estructura llamada celda unidad. Un conjunto de celdas repetidas de manera periódica dan lugar al ordenamiento periódico del cristal llamado red. Cada celda unidad está formada por un número mínimo de paralelepípedos cuyas dimensiones y ángulos caracterizan por completo a todo el cristal. Así, cada celda posee tres longitudes diferentes así como tres ángulos distintos; las longitudes determinan tanto el largo como el ancho y el grosor de la celda unitaria y reciben el nombre de parámetros de red. Los ángulos, por otro lado, definen el grado de simetría que poseerá la celda unitaria.

Los elementos que componen a una celda unitaria se llaman puntos de red. Cada punto de red es una ubicación en la cual pueden encontrarse uno o varios átomos o moléculas que dan forma a la sustancia cristalina. Los parámetros de red y los tres ángulos de la celda unitaria se miden utilizando

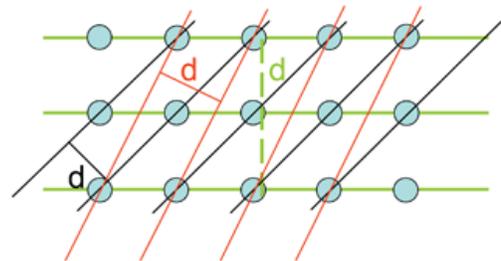


Figura 3. Los planos interatómicos de una estructura cristalina están denotados por líneas verdes, rojas y negras.  
Imagen tomada de <http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2011/nr/c0nr00561d/unauth#!divAbstract>

los puntos de red como referencia.

De acuerdo con las proporciones entre los ángulos y los parámetros de red, las celdas unitarias pueden dar origen a redes que se clasifican dentro de catorce tipos distintos conocidos como redes de Bravais (figura 2). Este trabajo se concentrará en el estudio y análisis de la red más común de todas: la cúbica simple.

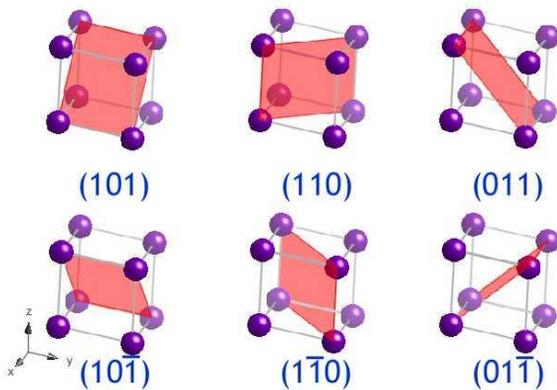


Figura 4. Planos interatómicos en un cristal descritos por sus índices de Miller.

Imagen tomada de

[http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller\\_indices/printall.php](http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller_indices/printall.php)

### Distancias interplanares e Índices de Miller

Los átomos o moléculas en un sólido cristalino están dispuestos de forma ordenada en planos paralelos adyacentes (figura 3). Cada plano es designado por un índice de Miller.

La forma en que funcionan los índices de Miller es la siguiente: los índices de Miller están compuestos por tres números que corresponden a las coordenadas de un vector

en tres dimensiones colocado dentro de un cubo de longitud igual a 1. Si el índice de Miller corresponde a un número mayor que 1 (por ejemplo 2 o 3), esto significa que el vector en cuestión tiene una coordenada igual al inverso multiplicativo de dicho número. Así, por ejemplo, el índice (2,1,1) en realidad describe a un vector cuya coordenada en "x" es 1/2 y la coordenada en "y" es 1 al igual que la coordenada en "z". El plano descrito por un índice de Miller es aquel que es perpendicular al vector representado por las coordenadas indicadas en el índice. Así, por ejemplo, el plano descrito por el índice (1,0,0) es un plano que es perpendicular al eje "x" y se encuentra a una distancia igual a 1 del origen del sistema de coordenadas. Los números negativos contienen todos una pequeña barra encima. Algunos ejemplos de planos y de índices de Miller se muestran en la figura 4.

Las distancias interplanares son precisamente las distancias existentes entre los dos planos paralelos más cercanos. Existen diferentes fórmulas para calcular las distancias interplanares una vez conocidos los parámetros de red. En este trabajo, se concentrará

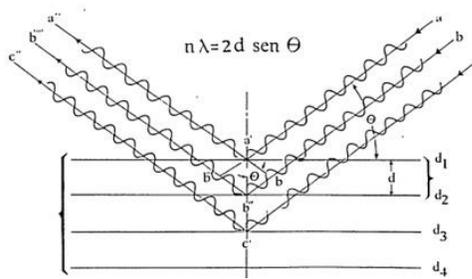


Figura 5. Interferencia constructiva de rayos reflejados según la ley de Bragg.

la atención únicamente en las distancias interplanares existentes en una estructura cúbica simple.

### La estructura cúbica simple

La estructura cristalina cúbica simple es la más sencilla de todas las estructuras que puede poseer un material cristalino. Materiales como el cloruro de sodio (la sal de mesa) y la blenda de zinc se caracterizan por tener este tipo de ordenamiento. La celda unitaria que da origen a esta estructura tiene forma de cubo, por lo tanto sus tres parámetros de red son exactamente iguales y sus ángulos son todos iguales a 90°.

Las distancias interplanares en una estructura cúbica simple se pueden obtener a partir de la siguiente expresión deducida de la geometría:

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

En donde:

d: es la distancia interplanar de la estructura

h, k l: son los índices de miller del plano en cuestión.

a: es el parámetro de red de la estructura cúbica simple.

### Difracción de Rayos X

La difracción de rayos X es una técnica no destructiva de análisis y caracterización de materiales cristalinos entre los que se encuentran materiales cerámicos, poliméricos, metálicos, etcétera.

Los rayos X son ondas electromagnéticas que poseen longitudes de onda que van desde los 10 nm hasta 0.1 nm. Por su longitud de onda tan pequeña, los rayos X pueden difractarse con objetos con dimensiones comparables con dicha longitud de

onda. Así, los átomos y las moléculas son capaces de difractar a los rayos X. Este fenómeno es aprovechado para la medición de distancias interplanares en materiales cristalinos.

Un haz de radiación coherente que incide sobre un material cristalino con un ángulo  $\theta$  puede reflejarse en dos o más planos paralelos de tal forma que los haces reflejados interfieran uno con el otro. La interferencia constructiva entre los haces reflejados se produce siempre y cuando se cumpla la condición determinada por la ley de Bragg:

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

Donde  $d$  es la distancia existente entre los planos cristalográficos,  $\theta$  es el ángulo de incidencia del rayo,  $n$  es el orden de difracción (para este trabajo  $n=1$ ) y  $\lambda$  es la longitud de onda de los rayos X incidentes. (Figura 5)

Utilizando la expresión anterior, y una vez conocida la longitud de onda de la radiación incidente y el ángulo de interferencia constructiva de los rayos reflejados es posible encontrar la distancia existente entre los planos.

Es importante destacar que para que una onda electromagnética se difracte al momento de incidir en un objeto, las dimensiones del objeto deben ser del mismo orden de magnitud que la longitud de onda de la radiación o bien mayores. De lo contrario, el efecto de la difracción será tan pequeño que se considerará despreciable.

### Sonido

El sonido consiste en ondas longitudinales que viajan en gases, líquidos y sólidos y consisten en sucesiones de compresiones y dilataciones que transportan energía de un lugar a otro mediante oscilaciones de la materia. En el aire, la velocidad del sonido es de 343 m/s y su longitud de onda está vinculada con la frecuencia mediante la expresión:

$$v = \lambda f \quad (3)$$

donde  $v$  es la velocidad del sonido en el aire,  $\lambda$  es la longitud de onda del sonido y  $f$  es su frecuencia.

## **Metodología de Investigación**

Se construyó un arreglo periódico compuesto por 125 esferas de unicel de tal manera que éste tuviera una estructura cúbica simple y un parámetro de red de 9.7 cm. Las esferas se unieron unas con otras utilizando palillos de unicel.

Posteriormente, se construyó un goniómetro con el cual fue posible medir los ángulos de incidencia y de reflexión. Se colocaron dos brazos extensibles alrededor de una base graduada en grados. El arreglo de unicel se colocó en la base y cada uno de los brazos soportó al emisor –una bocina –y al receptor –el decibelímetro – respectivamente.

Inicialmente, el emisor y el receptor se colocaron en ángulo llano. Se emitió una onda sonora con una frecuencia de 10 kHz (longitud de onda de 3.43 cm) sobre el arreglo y su intensidad fue registrada con el decibelímetro. El decibelímetro se movió en cada medición de tal manera que el ángulo existente entre la bocina y el decibelímetro cambiara de dos en dos grados hasta llegar al ángulo mínimo permitido por la estructura del goniómetro.

Con los datos obtenidos de los ángulos y las intensidades se elaboró una gráfica de intensidad contra ángulo; es decir, se graficó el patrón de difracción de las ondas sonoras. Posteriormente, se utilizaron los máximos relativos de dicho patrón para calcular mediante la ley de Bragg (fórmula (2)) las distancias interplanares existentes entre las esferas de unicel.

Para verificar la validez de los resultados obtenidos, las distancias interplanares se calcularon de forma teórica mediante la fórmula (1) utilizando el parámetro de red con que se construyó el arreglo de unicel (9.7 cm).

## **Resultados y Análisis**

### **El Patrón de Difracción**

Después de hacer incidir las ondas de sonido sobre el arreglo periódico, éstas fueron detectadas por un decibelímetro común colocado en diferentes posiciones con respecto a la posición del emisor. El patrón de difracción producido por el arreglo se muestra en la figura 6.

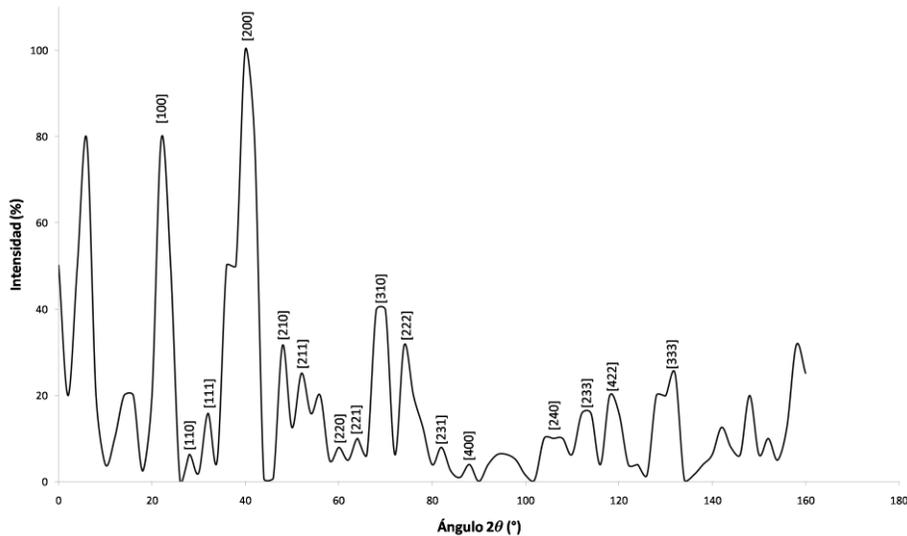


Figura 6. Patrón de difracción obtenido.

Como puede observarse en la figura anterior, los máximos relativos en el patrón de difracción indican la presencia de posiciones particulares en las cuales se presenta interferencia constructiva de las ondas sonoras; por otra parte, los mínimos relativos denotan posiciones en las cuales predomina la interferencia destructiva. Así, en conjunto, el patrón que se presenta en la figura 6 muestra que las ondas sonoras, al igual que las ondas electromagnéticas se difractan cuando inciden sobre un arreglo cristalino con dimensiones comparables a su longitud de onda.

El grosor de los picos del patrón de difracción se puede deber a la escala utilizada en el goniómetro: recuérdese que la variación del ángulo existente entre el emisor y el receptor cambió en intervalos de dos grados. Así, la amplitud de dichos intervalos se convirtió en un problema de resolución en el patrón de difracción obtenido. Obsérvese en la figura 6 que algunos picos parecen estar compuestos en realidad por dos picos muy unidos entre sí, es posible que la escala utilizada en el goniómetro haya barrido dos picos ubicados en ángulos cuya diferencia sea menor a dos grados.

## Distancias Interplanares

A partir del patrón de difracción obtenido (figura 6), se obtuvieron aquellos ángulos en los cuales se produjo interferencia constructiva de las ondas sonoras. Utilizando esos ángulos y la ecuación (2) de la ley de Bragg, se calcularon las diferentes distancias interplanares existentes en el arreglo de unícel. A continuación se presentan en la siguiente tabla las distancias obtenidas a partir del patrón de difracción en comparación con las distancias interplanares medidas de forma teórica.

<b>Tabla 1: Valores medidos para las distancias interplanares del arreglo cúbico de unícel.</b>					
Plano	Distancia teórica (cm)	Distancia experimental (cm)	Plano	Distancia teórica (cm)	Distancia Experimental (cm)
<b>100</b>	9.00	9.70	<b>222</b>	2.84	2.80
<b>110</b>	7.08	6.86	<b>231</b>	2.61	2.59
<b>111</b>	6.22	5.60	<b>400</b>	2.46	2.42
<b>200</b>	5.01	4.85	<b>114</b>	2.30	2.29
<b>210</b>	4.21	4.33	<b>240</b>	2.14	2.16
<b>211</b>	3.91	3.96	<b>233</b>	2.05	2.07
<b>220</b>	3.42	3.42	<b>422</b>	2.00	1.98
<b>221</b>	3.23	3.23	<b>333</b>	1.87	1.87
<b>310</b>	3.02	3.06			

Obsérvese que los datos teóricos y los datos experimentales concuerdan y caen dentro de un margen de error menor al 10%. Las variaciones obtenidas pueden deberse a la falta de resolución del patrón de difracción así como a pequeños errores en la estructura y forma del arreglo cristalino construido con las esferas de unícel.

## Conclusiones

Las ondas sonoras con una frecuencia 10 kHz y una longitud de onda de 3.43 cm incidieron en un arreglo periódico con un parámetro de red de 9.7 cm se difractaron y se

comportaron de acuerdo con lo predicho por la ley de Bragg. A partir del patrón de difracción obtenido, fue posible obtener las distancias entre los planos en la estructura cristalina macroscópica. Las distancias obtenidas mediante difracción de ondas sonoras y aquellas calculadas a partir de una fórmula derivada de la geometría concuerdan dentro de un margen de error menor al 10%. Esto indica que una onda, mecánica como el sonido o electromagnética como la luz o los rayos X permite conocer las distancias existentes entre elementos de un arreglo cristalino cuyas dimensiones sean del mismo orden de magnitud que la longitud de onda de la onda utilizada. Mientras menor sea la longitud de onda, menores serán las dimensiones del cristal que pueda medirse; de esta manera, como los rayos X tienen una longitud de onda del orden de nanómetros, es de esperar que sean capaces de medir las distancias de arreglos cristalinos con parámetros de red con este mismo orden de magnitud, es decir, con parámetros de red con distancias comparables con el tamaño de los átomos.

Se propone para trabajos posteriores el análisis de imperfecciones en una estructura cristalina; es decir, el estudio de huecos o bien de deslizamientos que "deformen" o agreguen "impurezas" al cristal. Un análisis de este tipo de defectos podrá proporcionar más información acerca del método de difracción por rayos X y se podrá deducir características más específicas acerca del fenómeno de difracción. Así, si la difracción de rayos X sólo funciona con materiales simétricos y periódicos, sería interesante saber qué ocurriría con el patrón de difracción cuando el cristal pierde su simetría gracias a un conjunto de defectos.

## **Referencias**

1. Perutz, M. (2013). "Introducción. Bienvenidos al mundo de la Cristalografía." Recuperado de <http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/> el día 21 de octubre del 2013.
2. Desconocido (s.f.). "Introducción en Cristalografía" Recuperado de <http://www.ibt.unam.mx/computo/pdfs/met/Cristalografia.pdf> el día 21 de octubre del 2013.
3. Frey, G. (2013) "La importancia de la cristalografía de rayos X en las ciencias biológicas y de los materiales". Recuperado de [www.iycr2014.org/about/media-kit/ferry-sp](http://www.iycr2014.org/about/media-kit/ferry-sp) el día 17 de febrero del 2014.
4. Sands, D. (1969). Introduction to Crystallography. Estados Unidos de América: W.A. Benjamin, Inc.
5. C. Giacovazzo, H.L. Monaco, D. Viterbo et al (2000). Fundamentals of Crystallography. Estados Unidos de América: Oxford University.
6. León.(1984) *Física de los Cristales*, México: Limusa
7. Cullity B.D, Stock, S.R. (2000) Elements of X Ray Diffraction, Estados Unidos: Addison Wesley Publishing Company
8. Askeland, R. (1998) Ciencia e Ingeniería de los materiales , México: Thompson