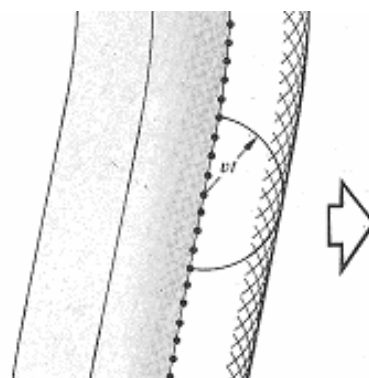

TEMA 2: FÍSICA DE LA DIFRACCIÓN

I. INTERFERENCIA Y DIFRACCIÓN

Los fenómenos que distinguen las ondas de las partículas son los de interferencia y de difracción. **La interferencia** es la combinación por superposición de dos o más frentes de onda que se encuentran en un punto del espacio. **La difracción** es la desviación que sufren las ondas alrededor de los bordes que se produce cuando un frente de onda (ya sea sonora, material o electromagnética) es obstruido por algún obstáculo. No hay una distinción física significativa entre interferencia y difracción.

El esquema de la onda resultante puede calcularse considerando cada punto del frente de la onda original como una fuente puntual de acuerdo con el principio de Huygens y calculando el diagrama de interferencia que resulta de considerar todas las fuentes. **El principio de Huygens** dice que cada punto en el frente de una onda sirve de fuente de onda esféricas secundarias tales que la forma del frente de onda primario un instante de tiempo más tarde es la envolvente de esas ondas secundarias. Además estas ondas secundarias avanzan en cada punto del espacio con una rapidez y frecuencia igual a la de la onda primaria.



El principio de Huygens no puede explicar el proceso de difracción. Las ondas de sonido se «doblan» fácilmente alrededor de objetos grandes como los postes de teléfono y los árboles, los cuales por el contrario forman sombras muy definidas cuando se iluminan con luz. Sin embargo, el principio de Huygens es independiente de cualquier consideración de longitud de onda y predecirá las mismas configuraciones de onda en ambas situaciones.

Esta dificultad fue resuelta por Fresnel con su adición del concepto de interferencia. **El principio de Huygens-Fresnel** establece que cada punto sin obstrucción de un frente de onda, en un instante de tiempo dado, sirve como una fuente de ondas secundarias esféricas (de la misma frecuencia de la onda primaria). La amplitud del campo óptico en cualquier punto adelante es la superposición de todas estas ondas considerando sus amplitudes y fases relativas.

Cuando se combinan dos ondas armónicas procedentes de dos focos de la misma frecuencia y longitud pero de diferente fase, la onda resultante es una onda armónica cuya amplitud depende de la diferencia de fase. Si la diferencia de fase es cero o un número entero de veces 360° (2π radianes) las ondas están en fase y la **interferencia** es **constructiva**. La amplitud resultante es igual a la suma de amplitudes individuales y la intensidad (que es proporcional al cuadrado de la amplitud) es máxima. Si la diferencia de fase es 180° (π radianes) o un número entero impar de veces 180° (π radianes) las ondas están desfasadas y la **interferencia** es **destructiva**. En este caso la amplitud resultante es igual a la diferencia entre las amplitudes individuales y la intensidad es un

mínimo. Si las amplitudes individuales son iguales, la intensidad máxima es cuatro veces la intensidad de cada uno de los focos y la intensidad mínima es cero. En general, una diferencia de trayectos de Δr contribuye a una diferencia de fase δ dada por:

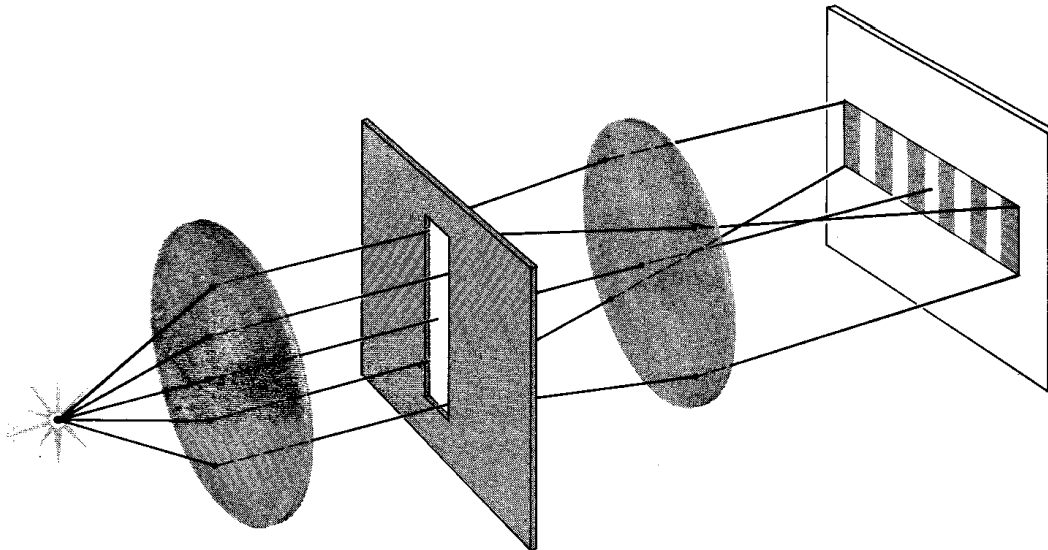
$$\delta = 2\pi \frac{\Delta r}{\lambda}$$

Otra causa de diferencias de fase es el cambio de fase en 180° (π radianes) que sufre una onda cuando se refleja en una superficie límite determinada en cuyo material la velocidad de la onda es menor. Por ejemplo, Cuando la luz que se propaga en aire incide sobre la superficie de un medio en el que la luz se desplaza más lentamente, como un vidrio o el agua, existe un cambio de fase de 180° en la luz reflejada.

La interferencia de ondas procedentes de dos focos no se observa a no ser que los focos sean **coherentes**, es decir, la diferencia de fase entre las ondas procedentes de los focos debe ser constante con el tiempo. Esto no es habitual porque normalmente un haz de luz es el resultado de millones de átomos que irradian independientemente. Habitualmente en óptica se consigue la coherencia dividiendo, en dos o más haces, el haz de luz procedente un foco. Los láseres son hoy en día la fuente más importante en el laboratorio de luz coherente en el laboratorio.

II. DIFRACCIÓN DE FRESNEL Y DIFRACCIÓN DE FRAUNHOFER.

Consideremos un blindaje opaco, y un frente de ondas procedente de una fuente puntual



cuando colocamos una pantalla frente a la ranura podemos observar dos situaciones límite:

- La pantalla este cercana a la ranura. Se observa una imagen que corresponde a la Difracción de Campo Cercano o **Difracción de Fresnel**.

- La pantalla este alejada de la ranura. Se observa una imagen que corresponde a la Difracción de Campo Lejano o **Difracción de Fraunhofer**.

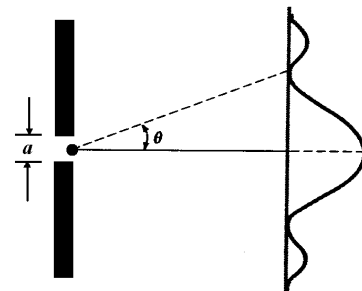
Estos dos fenómenos son manifestaciones de un mismo proceso, la interferencia. Analizaremos el proceso de campo lejano por que permite un tratamiento matemático más simple.

III. DIFRACCIÓN DE FRAUNHOFER.

Consideremos la difracción de Fraunhofer con una rendija única de anchura a . Supondremos que se divide en N intervalos la rendija de anchura a y que existe un foco puntual de ondas en el punto medio de cada intervalo. Si la distancia entre dos fuentes adyacentes es l y a es la anchura de la abertura tenemos que $l = a / N$.

Como la pantalla está muy alejada, los rayos procedentes de las fuentes puntuales y que llegan a un punto P de dicha pantalla son aproximadamente paralelos. La diferencia de los trayectos entre dos fuentes cualesquiera adyacentes es entonces $l \text{ sen } \theta$ y la diferencia de fases es:

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} l \text{ sen } \theta$$



Si A es la amplitud de una sola fuente, la amplitud en el punto máximo central en donde $\theta = 0$ y todas las ondas están en fase, es $A_{\text{máx}} = NA$. El valor de la intensidad en otro punto cualquiera en un cierto ángulo θ se obtiene sumando las ondas armónicas y se obtiene:

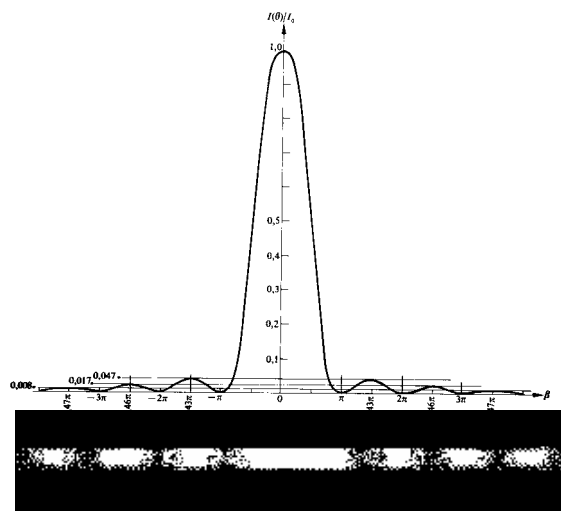
$$I = I_0 \left(\frac{\text{sen } \phi}{\phi} \right)^2$$

donde I_0 es la intensidad del punto central que es máxima y ϕ es la semidiferencia de fase entre la primera y última onda y vale:

$$\phi = \frac{\pi}{\lambda} a \text{ sen } \theta$$

Los extremos de $I(\theta)$ se presentan para valores que hacen que $\frac{dI}{d\phi}$ sea cero, esto es:

$$\frac{dI}{d\phi} = I_0 \frac{2 \text{ sen } \phi (\phi \cos \phi + \text{sen } \phi)}{\phi^3} = 0$$



La función de difracción presenta mínimos en cuando el seno de ϕ se anula, es decir:

$$\phi = k\pi \quad k \in \mathbb{Z}$$

Mientras que los máximos de esta función aparecen a valores de ϕ donde se vuelve cero la expresión $\phi \cos \phi - \text{sen } \phi = 0$ o lo que es igual $\tan \phi = \phi$, es decir:

$$\phi = (\pm 1.4303\dots \cdot \pi, \pm 2.4590\dots \cdot \pi, \pm 3.4707\dots \cdot \pi, \dots)$$

Cuando se tienen dos o más rendijas, el diagrama de intensidad obtenido en una pantalla lejana es una combinación del diagrama de difracción de una sola rendija y el diagrama de interferencia de varias rendijas. La intensidad obtenida para este caso es:

$$I = 4I_0 \left(\frac{\text{sen } \phi}{\phi} \right)^2 \cos^2 \chi$$

donde I_0 es la intensidad del punto central que es máxima y ϕ es la semidiferencia de fase entre la primera (parte superior) y última onda (parte inferior) de una misma rendija de anchura a y vale:

$$\phi = \frac{\pi}{\lambda} a \text{sen } \theta$$

y χ es la semidiferencia de fase entre los rayos que proceden de los centros de las dos rendijas, que se relaciona con la separación d de las rendijas por:

$$\chi = \frac{\pi}{\lambda} d \text{sen } \theta$$

Si ahora analizamos la expresión completa, esta puede considerarse como un término de interferencia, modulado por uno de difracción,

$$I = 4I_0 \underbrace{\left(\frac{\text{sen } \phi}{\phi} \right)^2}_{\text{difracción}} \underbrace{\cos^2 \chi}_{\text{interferencia}}$$

Es posible obtener ahora los máximos y mínimos de ambas funciones; la función de difracción presenta mínimos en los valores mostrados anteriormente. En cuanto a la función de interferencia, esta presenta mínimos a los siguientes valores de χ :

$$\chi = \frac{(2k-1)}{2} \pi \quad k \in \mathbb{Z}$$

Los máximos de la función de interferencia aparecen a los siguientes valores de χ :

$$\chi = k\pi \quad k \in \mathbb{Z}$$

Es inmediato comprobar que los máximos tienen lugar cuando $d \operatorname{sen}\theta = k\lambda$:

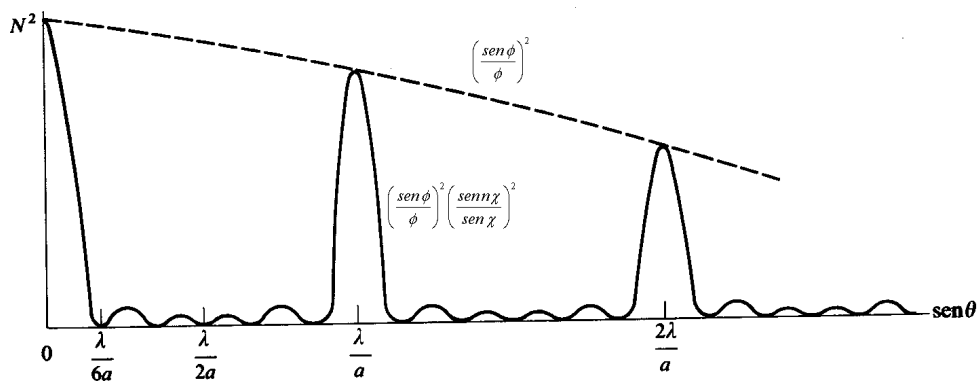
$$\left. \begin{array}{l} \chi = \frac{\pi}{\lambda} d \operatorname{sen}\theta \\ \chi = k\pi \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{\pi}{\lambda} d \operatorname{sen}\theta = k\pi \Rightarrow d \operatorname{sen}\theta = k\lambda$$

Y los mínimos cuando $d \operatorname{sen}\theta = (k + \frac{1}{2})\lambda$.

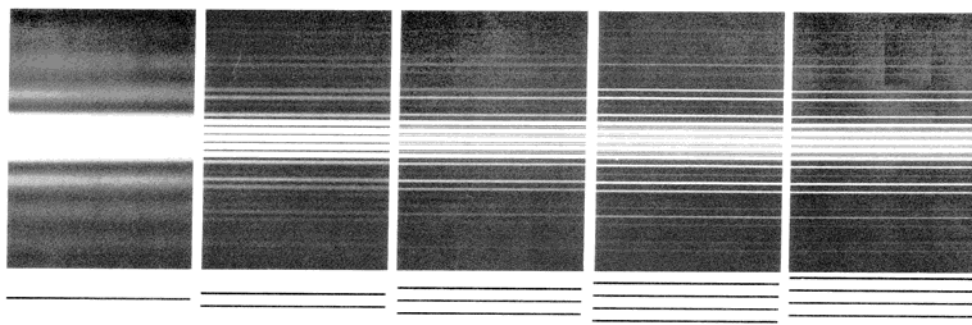
Para n rendijas la intensidad viene dada por la expresión:

$$I = n^2 I_0 \underbrace{\left(\frac{\operatorname{sen} \phi}{\phi} \right)^2}_{\text{difracción}} \underbrace{\left(\frac{\operatorname{sen} n\chi}{\operatorname{sen} \chi} \right)^2}_{\text{interferencia}}$$

La grafica siguiente muestra la intensidad de un sistema de seis rendijas donde la distancia entre rejillas es el cuádruplo de la anchura de éstas. Se puede observar que la intensidad puede expresarse por un término principal de interferencia modulado por el término de difracción.



Cuando existen muchas rendijas equiespaciadas se presentan los máximos de interferencia en los mismos puntos que cuando había dos rendijas, pero los máximos son mucho más intensos y mucho más estrechos. En el caso de n rendijas, la intensidad de los máximos principales es $n^2 I_0$ (modulado por el término de difracción) y existen $n-2$ máximos secundarios entre cada par de máximos principales. En la figura se observan los diferentes patrones de difracción para una, dos, tres, cuatro y cinco rendijas; en las que se puede apreciarlos anteriormente dicho.



IV. REDES DE DIFRACCIÓN.

Es un conjunto repetitivo de elementos difractores de una onda emergente, bien sean aberturas u obstáculos que producen alteraciones de la fase, la amplitud o ambas.

Una de las redes más simples es una disposición múltiple de rendijas. Se atribuye su invención al astrónomo norteamericano David Rittenhouse en 1785, pero posteriormente fue ampliamente estudiado por Fraunhofer. Existen varios tipos de dispositivos, entre ellos:

- Redes de transmisión en amplitud. Físicamente son rejillas de alambre fino
- Redes de transmisión o reflexión en fase. Se construyen mediante vidrios con hendiduras.

Las redes bidimensionales están constituidas por distribuciones de N objetos difractores idénticos cuyo resultado se puede ver como el de N patrones de Fraunhofer que se superponen.

Si la disposición bidimensional es irregular se obtiene una intensidad que aumenta con N^2 en la región central. No se observan interferencias constructivas a ángulos altos, es decir cuando nos alejamos del centro del patrón.

Si la disposición bidimensional es regular se puede considerar como una disposición de rendijas alineadas. El patrón obtenido es la suma de los patrones de difracción de conjuntos de rendijas. La intensidad del máximo central depende de los difractores y de la potencia del emisor. Se obtiene interferencia a altos ángulos.

Las redes tridimensionales revelan patrones de Fraunhofer de interferencia tridimensional. Los sólidos cristalinos son redes de difracción tridimensionales.

A cada red le corresponde una radiación de longitud de onda (λ) adecuada. Los rayos-X tienen longitudes de onda en el rango de unos pocos Å (10-10 m) y los sólidos cristalinos son distribuciones moleculares con una periodicidad de Å.

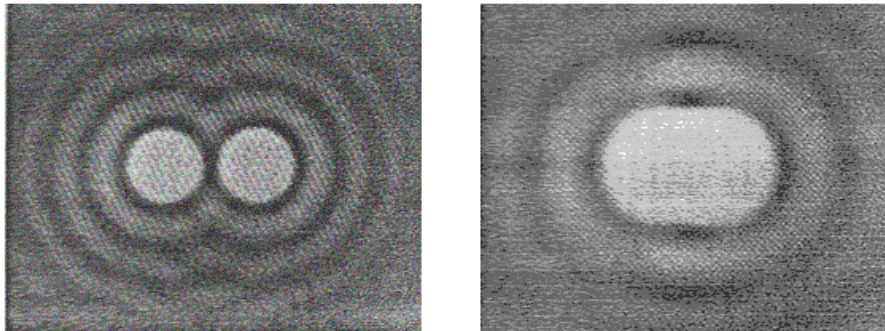
El experimento de Laue en 1912 obtuvo un patrón de Fraunhofer tridimensional utilizando como red de difracción un cristal para la radiación de rayos-X y obteniendo máximos de difracción que responden a $2d \sin \theta = m\lambda$ donde d son las distancias entre planos del cristal.

V. PODER DE RESOLUCIÓN DE UNA RED

El fenómeno de la difracción provoca una cierta extensión en cada punto de la imagen difractada de un objeto. Esta extensión constituye un límite para la calidad de la imagen observada en el sistema formador de imágenes, por ejemplo en la lente de un microscopio. La medida de la capacidad de separación de un instrumento formador de imágenes se denomina **resolución**.

Supongamos la existencia de dos fuentes luminosas o focos que están muy próximos entre sí. Para la observación de estos focos la luz ha de pasar por una abertura, general-

mente de tipo circular (pupila del ojo, lente, etc.). Los diagramas de difracción pueden solaparse, si el solapamiento es demasiado grande, no pueden resolverse las dos fuentes separadas.



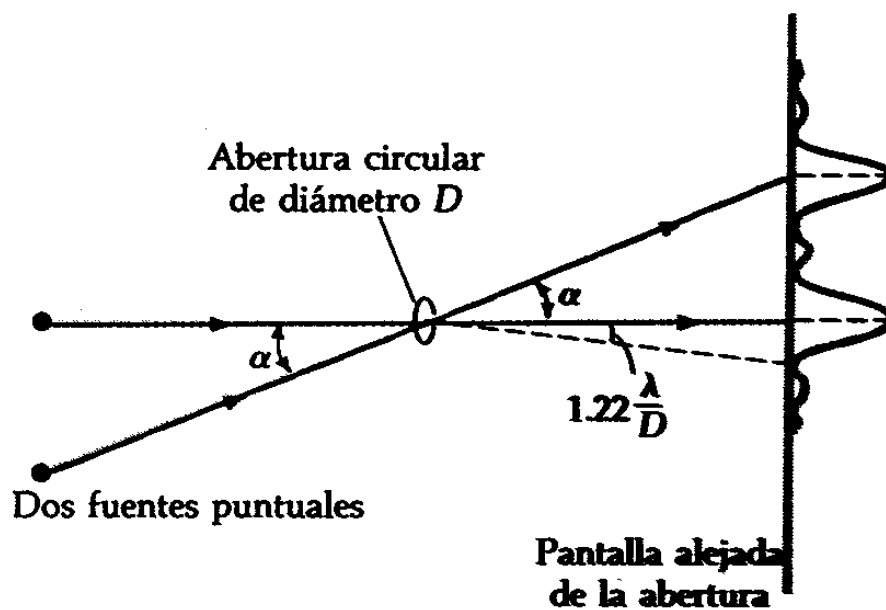
En el caso de una abertura circular, el ángulo α subtendido por el primer mínimo de difracción está relacionado con la longitud de onda λ y el diámetro de la abertura D por la ecuación:

$$\text{sen } \alpha = 1.22 \frac{\lambda}{D}$$

En la mayoría de las aplicaciones el ángulo α es muy pequeño de manera que puede hacerse la aproximación:

$$\alpha \approx 1.22 \frac{\lambda}{D}$$

La figura muestra dos focos puntuales que subtenden un ángulo α respecto a una abertura circular alejada de los focos.



Si a es mucho mayor que $1.22 \lambda/D$ se verán como dos focos. Sin embargo, al disminuir a aumenta el solapamiento de los diagramas de difracción y resulta más difícil distinguir los dos focos de un solo foco.

Para la **separación angular crítica** de α_c dada por

$$\alpha_c = 1.22 \frac{\lambda}{D}$$

el máximo central de difracción de un foco coincide con el mínimo de difracción del otro, se dice que las dos fuentes están al límite de resolución según el denominado **criterio de Rayleigh para la resolución**.

Se define el **poder de resolución** de una red de difracción como

$$\frac{\lambda}{|\Delta\lambda|}$$

en $\Delta\lambda$ donde es la diferencia más pequeña entre dos longitudes de onda próximas que pueden ser resueltas, cada una de ellas aproximadamente igual λ . El poder de resolución es proporcional al número de rendijas iluminadas porque cuantas más rendijas estén iluminadas, más nítido será el máximo de interferencia. Puede mostrarse que el poder de resolución R en una red de rendijas es:

$$R = \frac{\lambda}{|\Delta\lambda|} = m \cdot n$$

en donde n es el número de rendijas y m es el número de orden.

Para una red tridimensional el primer mínimo aparece cuando $d \sin\theta = \frac{1}{2} \lambda$, luego la resolución máxima viene dada por:

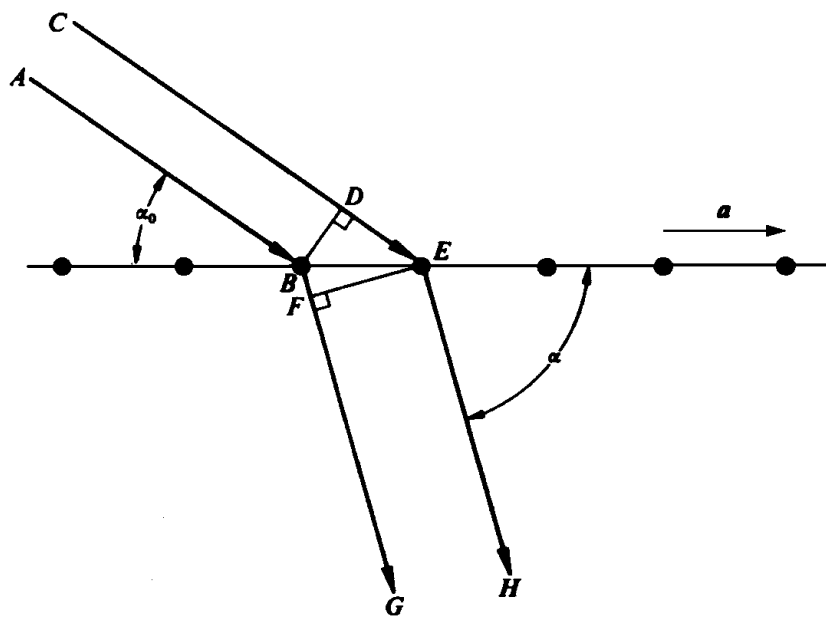
$$d_{min} = \frac{\lambda}{2(\sin\theta)_{max}} = \frac{\lambda}{2}$$

VI. ECUACIONES DE VON LAUE

La teoría completa de los grupos espaciales fue publicada en 1891 y cuatro años más tarde Röntgen descubría los rayos-X. En los años siguientes se hicieron unos esfuerzos grandes para determinar la naturaleza de esta radiación. Fue en 1912 cuando los defensores de la teoría ondulatoria tuvieron una evidencia experimental que apoyaba su punto de vista. Ese año Von Laue apuntó la posibilidad de usar cristales como redes tridimensionales de difracción naturales. Los experimentos realizados inmediatamente probaron que su idea era correcta. Este hecho demostró por una parte el carácter periódico de la materia cristalina y por otra parte la naturaleza ondulatoria de los rayos-X; sentando las bases para el nacimiento de dos grandes campos de investigación: el estudio de los rayos-X y el estudio de la materia cristalina. La mejora de la técnica experimental debida

a W.H. y W. L. Bragg (padre e hijo) contribuyó al rápido desarrollo de ambos campos. La geometría de la interferencia de los rayos-X en cristales puede ser explicada satisfactoriamente mediante unas bases bastantes elementales mientras que el tratamiento de las intensidades requiere unas consideraciones teóricas mucho más intrincadas y extensas.

Una rejilla lineal de difracción puede ser definida como una línea recta a lo largo de la cual se encuentran situados puntos equivalentes equidistantes y cuyo período es el vector de separación \mathbf{a} entre dos nodos vecinos. Una onda plana de radiación electromagnética incidente sobre la rejilla será dispersada en todas las direcciones por un elemento de la línea. A causa de la naturaleza periódica de los máximos de difracción tendrán lugar en direcciones donde la diferencia de caminos recorridos sea igual a un número entero de veces la longitud de onda λ .



El haz incidente es monocromático y su dirección viene dada por el vector unitario \mathbf{s}_0 que forma un ángulo α_0 con la rejilla lineal. El haz difractado, sin cambio en λ , sigue la dirección del vector unitario \mathbf{s} formando un ángulo α con el vector \mathbf{a} . Dos rayos difractados por vecinos inmediatos en la red tendrán una diferencia de caminos ópticos:

$$\overline{BF} - \overline{DE} = a \cos \alpha - a \cos \alpha_0 = \mathbf{a} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0)$$

Para que la interferencia sea constructiva ha de ser un número entero de veces la longitud de onda:

$$\mathbf{a} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = h \lambda \quad h \in \mathbb{Z}$$

Se suele definir el vector de difusión o “scattering” \mathbf{R} como:

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{s} - \mathbf{s}_0}{\lambda}$$

Para una red de difracción tridimensional se han de cumplir simultáneamente la condi-

ción de difracción para cada una de las tres direcciones de la red:

$$\left. \begin{aligned} a \cdot (\cos \alpha - \cos \alpha_0) &= h \lambda \\ b \cdot (\cos \beta - \cos \beta_0) &= k \lambda \\ c \cdot (\cos \gamma - \cos \gamma_0) &= l \lambda \end{aligned} \right\} \quad \left. \begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \mathbf{R} &= h \\ \mathbf{b} \cdot \mathbf{R} &= k \\ \mathbf{c} \cdot \mathbf{R} &= l \end{aligned} \right\} \quad h, k, l \in \mathbb{Z}$$

donde $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ son los ángulos que forma el haz incidente con cada uno de los tres vectores no coplanarios que definen la red y α, β, γ son los ángulos que forma el haz difractado con esos mismo vectores. Las anteriores ecuaciones se llaman **ecuaciones de Laue**.

Siguiendo las ideas de P. P. Ewald podemos aunar las tres ecuaciones de Laue en una única ecuación vectorial. Sea \mathbf{q} un vector cualquiera del espacio recíproco:

$$\mathbf{q} = q_1 \cdot \mathbf{a}^* + q_2 \cdot \mathbf{b}^* + q_3 \cdot \mathbf{c}^*$$

se pueden calcular los siguientes productos escalares:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \cdot \mathbf{q} &= \mathbf{a} \cdot (q_1 \cdot \mathbf{a}^* + q_2 \cdot \mathbf{b}^* + q_3 \cdot \mathbf{c}^*) = q_1 \cdot \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}^* + q_2 \cdot \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}^* + q_3 \cdot \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}^* = q_1 \\ \mathbf{b} \cdot \mathbf{q} &= \mathbf{b} \cdot (q_1 \cdot \mathbf{a}^* + q_2 \cdot \mathbf{b}^* + q_3 \cdot \mathbf{c}^*) = q_1 \cdot \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}^* + q_2 \cdot \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}^* + q_3 \cdot \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}^* = q_2 \\ \mathbf{c} \cdot \mathbf{q} &= \mathbf{c} \cdot (q_1 \cdot \mathbf{a}^* + q_2 \cdot \mathbf{b}^* + q_3 \cdot \mathbf{c}^*) = q_1 \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{a}^* + q_2 \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{b}^* + q_3 \cdot \mathbf{c} \cdot \mathbf{c}^* = q_3 \end{aligned}$$

por lo que el vector \mathbf{q} puede ser reescrito como

$$\mathbf{q} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{q}) \cdot \mathbf{a}^* + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{q}) \cdot \mathbf{b}^* + (\mathbf{c} \cdot \mathbf{q}) \cdot \mathbf{c}^*$$

en particular el vector \mathbf{R} se expresaría como

$$\mathbf{R} = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{R}) \cdot \mathbf{a}^* + (\mathbf{b} \cdot \mathbf{R}) \cdot \mathbf{b}^* + (\mathbf{c} \cdot \mathbf{R}) \cdot \mathbf{c}^*$$

y de ahí, a través de las ecuaciones de Laue, obtenemos la ecuación vectorial:

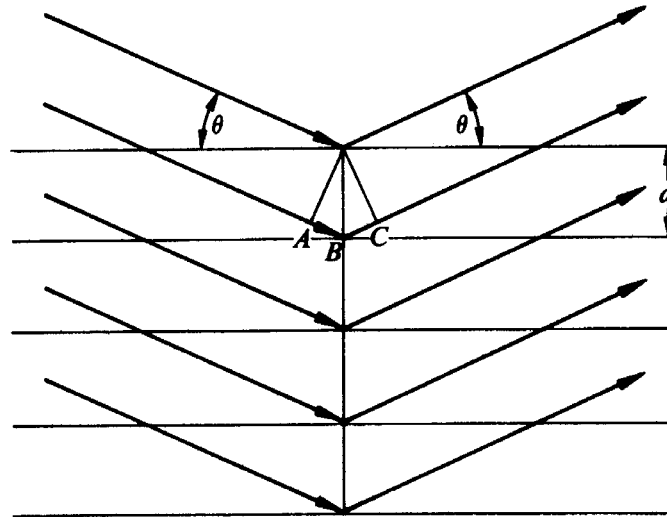
$$\mathbf{R} = h \cdot \mathbf{a}^* + k \cdot \mathbf{b}^* + l \cdot \mathbf{c}^* = \mathbf{h}$$

donde \mathbf{h} es el vector normal a la familia de planos (h, k, l) . Esta ecuación pone de manifiesto la relación entre la condición de difracción y las familias de planos reticulares.

VII. LEY DE BRAGG

Poco después del descubrimiento de la difracción de rayos-X, W.H. y W. L. Bragg descubrieron que la geometría de este proceso era análoga a la de una reflexión de la luz por un espejo plano. En el tema anterior, habíamos visto que una consecuencia de la periodicidad tridimensional de una estructura cristalina es la construcción de un conjunto de planos paralelos entre sí, igualmente espaciados y que contienen idénticas disposiciones atómicas.

Supongamos un haz incidente sobre una familia de estos planos. Este haz forma un ángulo θ con ese conjunto de planos. El haz reflejado forma también un ángulo θ con los planos de ese conjunto. Se deduce que el ángulo entre ambos haces es 2θ . Los rayos-X tienen un gran poder de penetración en la materia, por lo que este fenómeno no se limita a los planos superficiales exclusivamente.



Puesto que hay muchos planos paralelos implicados en la dispersión de los rayos-X, las reflexiones procedentes de los sucesivos planos interferirán entre sí, y habrá una interferencia constructiva sólo cuando la diferencia de longitud de camino entre los rayos procedentes de planos sucesivos es igual a un número entero de veces la longitud de onda. Echando un vistazo al dibujo, se observa que el rayo incidente sobre el segundo plano recorre una distancia $\overline{AB} + \overline{BC}$ mayor que la del que incide sobre el primer plano. Estos dos rayos estarán en fase si

$$\overline{AB} + \overline{BC} = n\lambda \quad n \in \mathbb{Z}$$

Por geometría elemental se obtiene que

$$\overline{AB} = \overline{BC} = d \operatorname{sen} \theta$$

Por consiguiente:

$$2d \operatorname{sen} \theta = n\lambda \quad n \in \mathbb{Z}$$

donde d es la distancia entre dos planos consecutivos y n es un entero que llamaremos orden de la reflexión. A esta ecuación se la conoce como la **ley de Bragg**.

Conviene en este momento aclarar una cuestión referente a los índices de Miller. Desde el punto de vista de la difracción de rayos-X, no existe diferencia entre la reflexión de orden n de la familia de planos (h, k, l) y la reflexión de primer orden del conjunto de planos (nh, nk, nl) ; ahora bien éstos últimos hemos visto que son un conjunto de planos ficticios y no tienen sentido dentro de la cristalografía clásica. Es conveniente evitar referirse a órdenes diferentes de reflexión y absorber el factor n de la ecuación de Bragg en los índices de Miller. Utilizaremos, por tanto, la ley de Bragg en la forma siguiente:

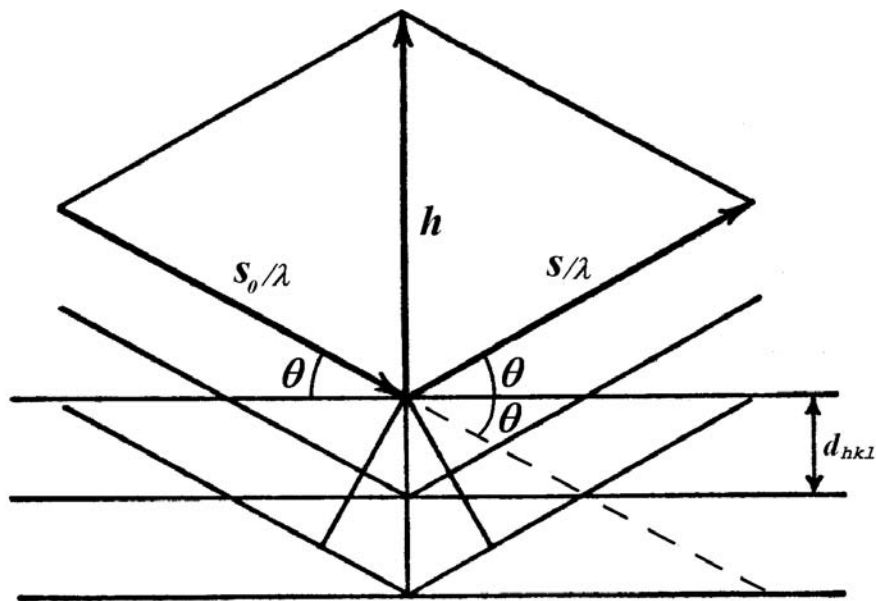
$$2d \sin \theta = \lambda$$

sin tener en cuenta si los planos tienen o no existencia física.

VIII. EQUIVALENCIA ENTRE AMBAS FORMULACIONES

A continuación vamos a demostrar que las formulaciones de Laue y Bragg son equivalentes. Para ellos partimos de la construcción geométrica de Bragg. En ella los vectores unitarios \mathbf{s}_0 y \mathbf{s} indican las direcciones del haz incidente y difractado respectivamente. Según Laue:

$$\mathbf{R} = h \cdot \mathbf{a}^* + k \cdot \mathbf{b}^* + l \cdot \mathbf{c}^* = \frac{1}{\lambda} (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = \mathbf{h}$$



multiplicando ambos miembros de la última igualdad por $\lambda \mathbf{s}$ se obtiene:

$$\mathbf{s} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = \lambda \mathbf{s} \cdot \mathbf{h}$$

$$\mathbf{s} \cdot \mathbf{s} - \mathbf{s} \cdot \mathbf{s}_0 = \lambda \mathbf{s} \cdot \mathbf{h}$$

pero como hemos dicho \mathbf{s}_0 y \mathbf{s} son vectores unitarios por lo que sus productos escalares pueden expresarse en función de sus módulos y el ángulo que forman como:

$$\underbrace{1 - \cos 2\theta}_{2 \sin^2 \theta} = \lambda \underbrace{|\mathbf{h}|}_{\frac{1}{d_{hkl}}} \underbrace{\cos(\frac{\pi}{2} - \theta)}_{\sin \theta}$$

Reordenando se obtiene la ecuación de Bragg $2d_{hkl} \sin \theta = \lambda$, como queríamos demostrar.

IX. CONSTRUCCIÓN DE LA ESFERA DE EWALD

La formulación del fenómeno de difracción, que hizo de Bragg, como una reflexión de un haz incidente sobre planos de la red es conveniente para muchos propósitos. Sin embargo la construcción gráfica en el espacio recíproco, que propuso P. P. Ewald, de los vectores unitarios de incidencia y de difracción es mucho más útil para una discusión general de varios métodos experimentales. Partimos de la condición de Laue:

$$\frac{1}{\lambda}(\mathbf{s} - \mathbf{s}_0) = \mathbf{h}$$

$$\frac{\mathbf{s}}{\lambda} - \frac{\mathbf{s}_0}{\lambda} = \mathbf{h}$$

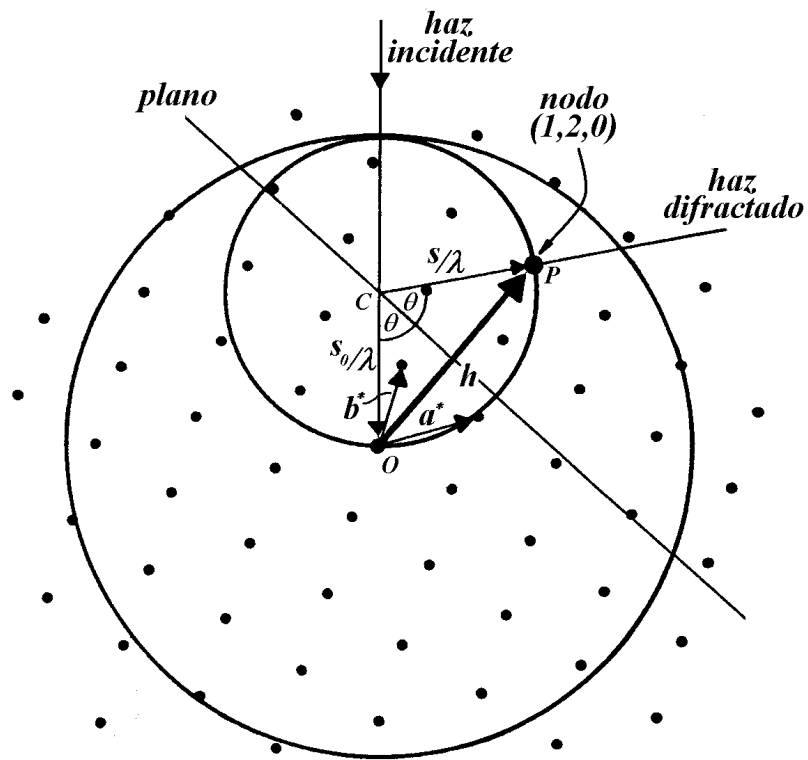
Se construye una esfera de radio $1/\lambda$. de modo que su centro esté situado en el haz incidente y su superficie contenga el origen de la red recíproca. El punto O es el origen de la red recíproca. Colocamos un vector en el centro de la esfera a lo largo de la dirección del haz incidente (\mathbf{s}_0) que tenga por módulo el recíproco de la longitud de onda de los rayos X incidentes.

El conjunto de planos caracterizados por el vector \mathbf{h} está en posición difractante cuando este vector tiene por extremo un punto de la superficie de la esfera. El punto P es un punto de la red recíproca que está situado en la superficie de la esfera. Es decir, el módulo del vector \mathbf{h} es el recíproco del espacio interplanar.

Asimismo, el haz difractado sale en la dirección CP, que designaremos por el vector \mathbf{s}/λ . El seno del ángulo OCQ (el ángulo θ de Bragg) vale:

$$\text{sen } \theta = \frac{|\mathbf{h}|/2}{1/\lambda} = \frac{\lambda}{2d_{hkl}}$$

lo que nos da la ley de Bragg.



De la figura se obtiene que $\mathbf{h} = \frac{\mathbf{s}}{\lambda} - \frac{\mathbf{s}_0}{\lambda}$. A través del cálculo del módulo de \mathbf{h} se deduce la ley de Bragg. Por una parte:

$$|\mathbf{h}| = \frac{1}{d_{hkl}}$$

y por otra:

$$|\mathbf{h}| = +\sqrt{\mathbf{h} \cdot \mathbf{h}} = +\sqrt{\left(\frac{\mathbf{s}}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{\mathbf{s}_0}{\lambda}\right)^2 - 2\frac{\mathbf{s}}{\lambda} \cdot \frac{\mathbf{s}_0}{\lambda}} = +\sqrt{\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{\lambda^2} - 2\left(\frac{1}{\lambda}\right)^2 \cos 2\theta}$$
$$|\mathbf{h}| = +\sqrt{\frac{2}{\lambda^2}(1 - \cos 2\theta)} = +\sqrt{\frac{4}{\lambda^2} \sin^2 \theta} = \frac{2}{\lambda} \sin \theta$$

y combinando ambas expresiones obtenemos, de nuevo, la ley de Bragg.

Una importante consecuencia que se deduce de la ley de Bragg es la siguiente. Puesto que $|\sin \theta| \leq 1$, se obtiene que

$$\sin \theta = \frac{\lambda}{2d_{hkl}} = \frac{\lambda}{2} \frac{1}{|\mathbf{h}|} \leq 1$$

o lo que es lo mismo:

$$|\mathbf{h}| \leq \frac{2}{\lambda}$$

De esta desigualdad se deduce que para una determinada radiación de longitud de onda λ , el número de posibles reflexiones está limitado. Sólo pueden ser observadas aquellas reflexiones en el espacio recíproco que están dentro de una esfera de radio $2/\lambda$. Es la llamada **esfera límite**. Como tenemos un nodo de la red recíproca (o lo que lo mismo una reflexión) por cada volumen de la celdilla unidad recíproca V^* , si llamamos a n el número de reflexiones posibles, se verifica que:

$$nV^* = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{2}{\lambda}\right)^3$$
$$n = \frac{32\pi}{3} \frac{1}{V^* \lambda^3} = \frac{32\pi}{3} \frac{V}{\lambda^3}$$

Enviar comentarios y errores a aap@sauro.quimica.uniovi.es