

**Asignatura: Materiales Avanzados y Nanotecnología**  
**Docente: Sandra M. Mendoza**  
**Ciclo lectivo 2023, Facultad Regional Reconquista - UTN**

## **Capítulo 3**

# **Introducción a la nanofísica**

**Formas de energía. Fuerzas eléctricas. Física cuántica. Teoría de bandas. Cohesión y tensión superficial. Fuerzas de adhesión y capilaridad. Hidrofobicidad. Radiación electromagnética. Reflexión, refracción, difracción e interferencia . Difracción de rayos-X. Aplicaciones: materiales fotónicos, limpieza de superficies, miniaturización, sensores, MEMS, NEMS.**

# Fuerzas e interacciones

Escala	Fuerzas e interacciones de mayor influencia
Macro	Gravedad, eléctrica, magnética, fricción, térmica
Micro	Eléctrica, magnética térmica, van der Waals, Browniana, vibracional, química
Nano	Eléctrica, magnética, cuántica, química, van der Waals, Browniana, vibracional
Sub-nano	Cuántica, interacciones nucleares

A medida que cambia la escala, hay diferentes fuerzas e interacciones que se vuelven prioritarias. Pero todas están todo el tiempo presentes, simplemente algunas influyen de manera más marcada en las propiedades de un material.

# Formas de energía

Desde el punto de vista mecánico:

$$\text{Energía} = \text{fuerza} \times \text{distancia}$$

Unidad de energía: Joule (J)

Otra representación común es a partir de => trabajo y calor, que se requiere o crean como resultado de una interacción.



## Termodinámica:

Entalpía (H), representa el reservorio de energía térmica de un sistema. La diferencia de entalpía desde el comienzo hasta el final de un proceso se utiliza como una medida del calor generado o requerido (a presión constante).

Entropía (S) =  $k \cdot \ln(W)$

donde W es el número de arreglos moleculares que se distinguen en un sistema y k es la constante de Boltzmann ( $1,381 \times 10^{-23}$  J.K). k relaciona la energía de las moléculas con la temperatura.

Para un sistema a presión constante, la energía libre de Gibbs relaciona estas cantidades según:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

$\Delta G > 0$   cambio no espontáneo

$\Delta G < 0$   cambio espontáneo

# Fuerzas eléctricas

Vida cotidiana  Luz, televisión, horno de microondas, computadoras, teléfonos, etc.

Naturaleza  Rayos ultravioletas, rayos X, luz visible, ondas de radio, etc.

Cuerpo humano  Genera señales eléctricas. Ejemplo: músculos, nervios, corazón y cerebro están direccionados por impulsos eléctricos.

A escala nanométrica, las fuerzas eléctricas son las predominantes.

Las fuerzas que existen entre partículas cargadas se denominan **fuerzas electrostáticas**.

# Comparando fuerzas

## Ejercicio:

Considerar un electrón y un protón separados por una distancia de 0,3 m. Calcular la fuerza gravitacional y la fuerza eléctrica entre ellos. Comparar las magnitudes y discutir los resultados.

Datos:

Ley de Newton para gravitación universal:  $F_g = G \times m_1 \times m_2 / r^2$

Masa de un electrón =  $9,109 \times 10^{-31}$  Kg

Masa de un protón =  $1,673 \times 10^{-27}$  Kg

G = constante de gravitación universal =  $6,674 \times 10^{-11} \text{ m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-2}$

Ley de Coulomb:  $F_e = K_e \times q_1 \times q_2 / r^2$

Carga de un electrón (-) o de un protón (+) =  $1,602 \times 10^{-19}$  C

$K_e$  = constante de Coulomb =  $8,987 \times 10^9 \text{ Nm}^2\text{C}^{-2}$

# Mecánica cuántica

Existen varios modelos que permiten estudiar la estructura de átomos y moléculas, que se desarrollaron para explicar los fenómenos físicos que observamos en la naturaleza y predecir el comportamiento de los materiales. La mecánica cuántica ofrece un modelo para explicar el comportamiento de la materia a escala atómica y molecular, que es el más exacto y utilizado hasta la fecha.

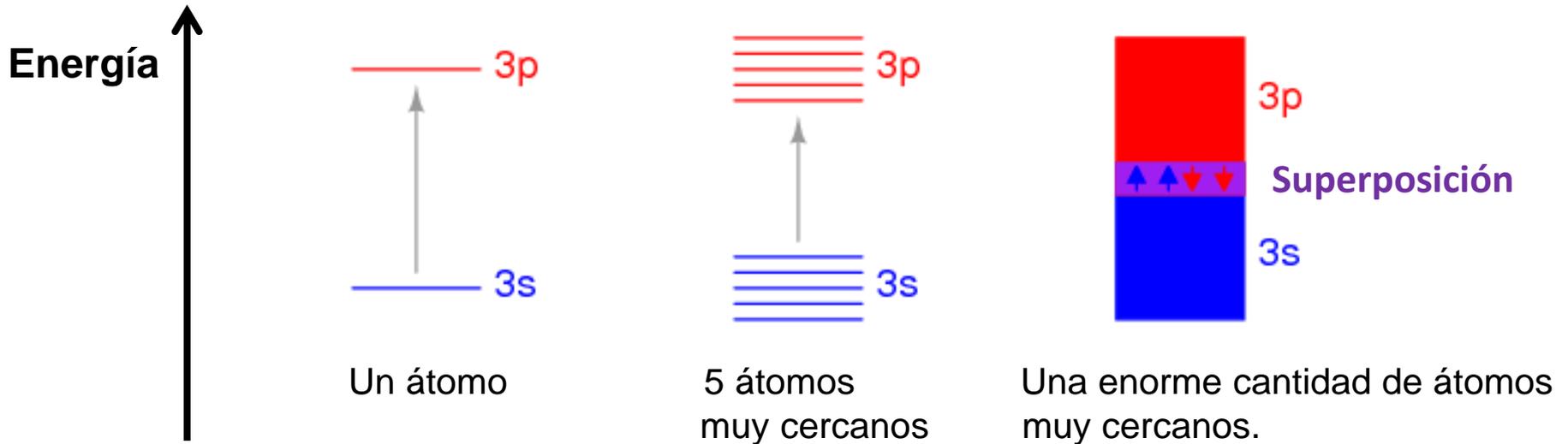


**Teoría de bandas**

Permite explicar, por ejemplo, la conductividad eléctrica de los materiales.

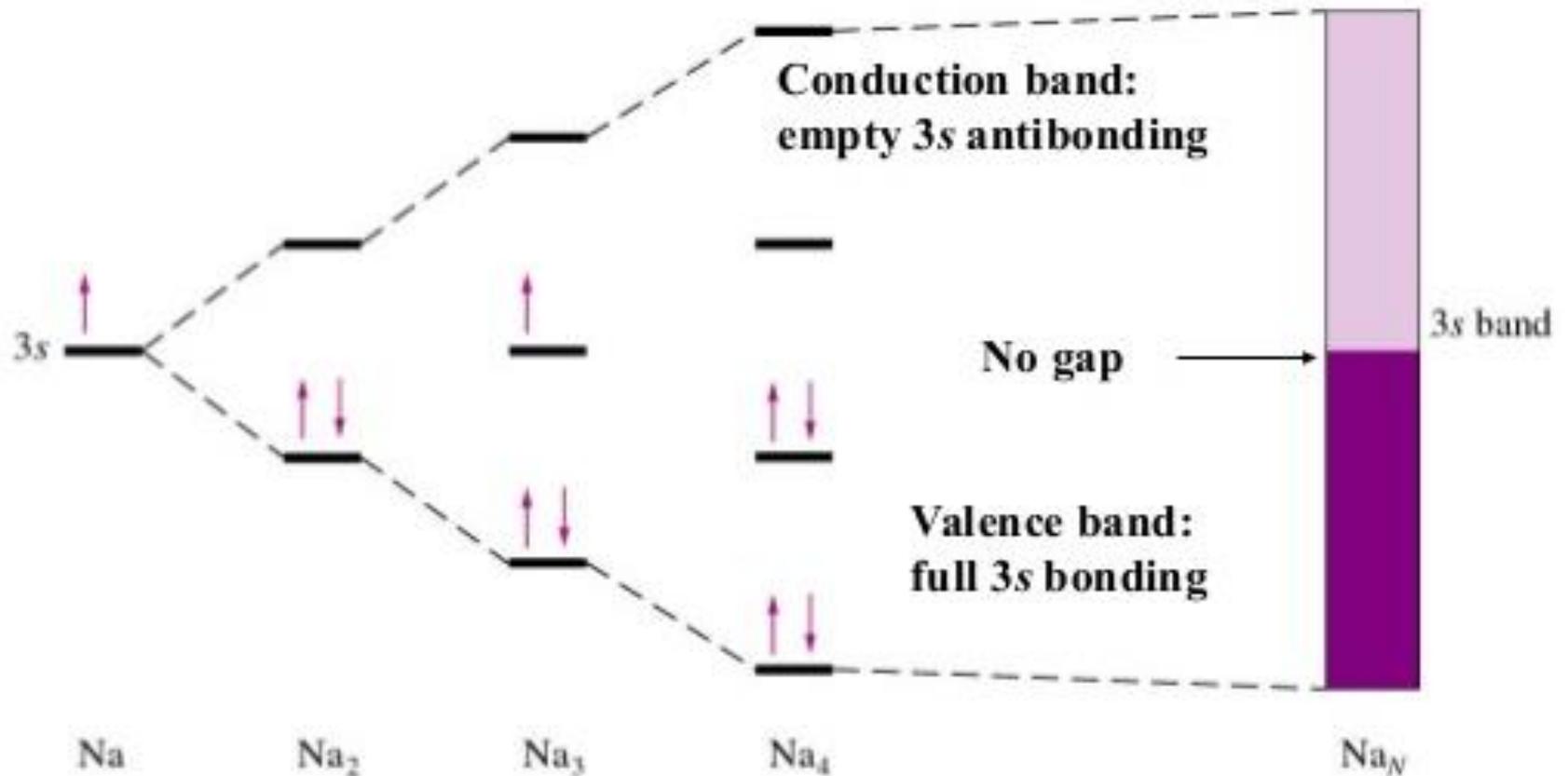
# Teoría de bandas

Teoría según la cual se describe la estructura electrónica de un material como una estructura de bandas electrónicas, o simplemente estructura de **bandas de energía**. La teoría se basa en el hecho de que en una molécula/átomo los orbitales se solapan produciendo un número discreto de orbitales moleculares.



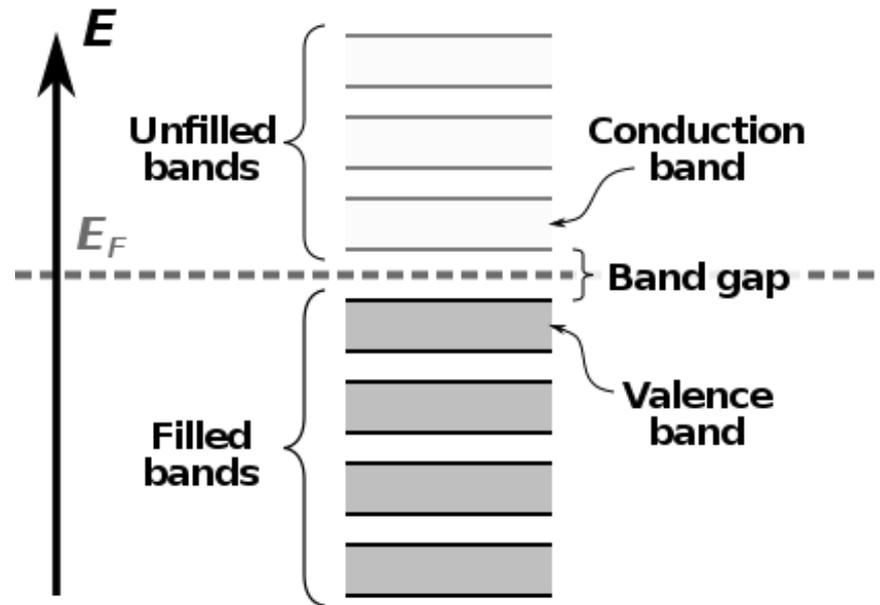
# Teoría de bandas

Ejemplo: electrones en el nivel 3s del sodio según la teoría de bandas



# Teoría de bandas

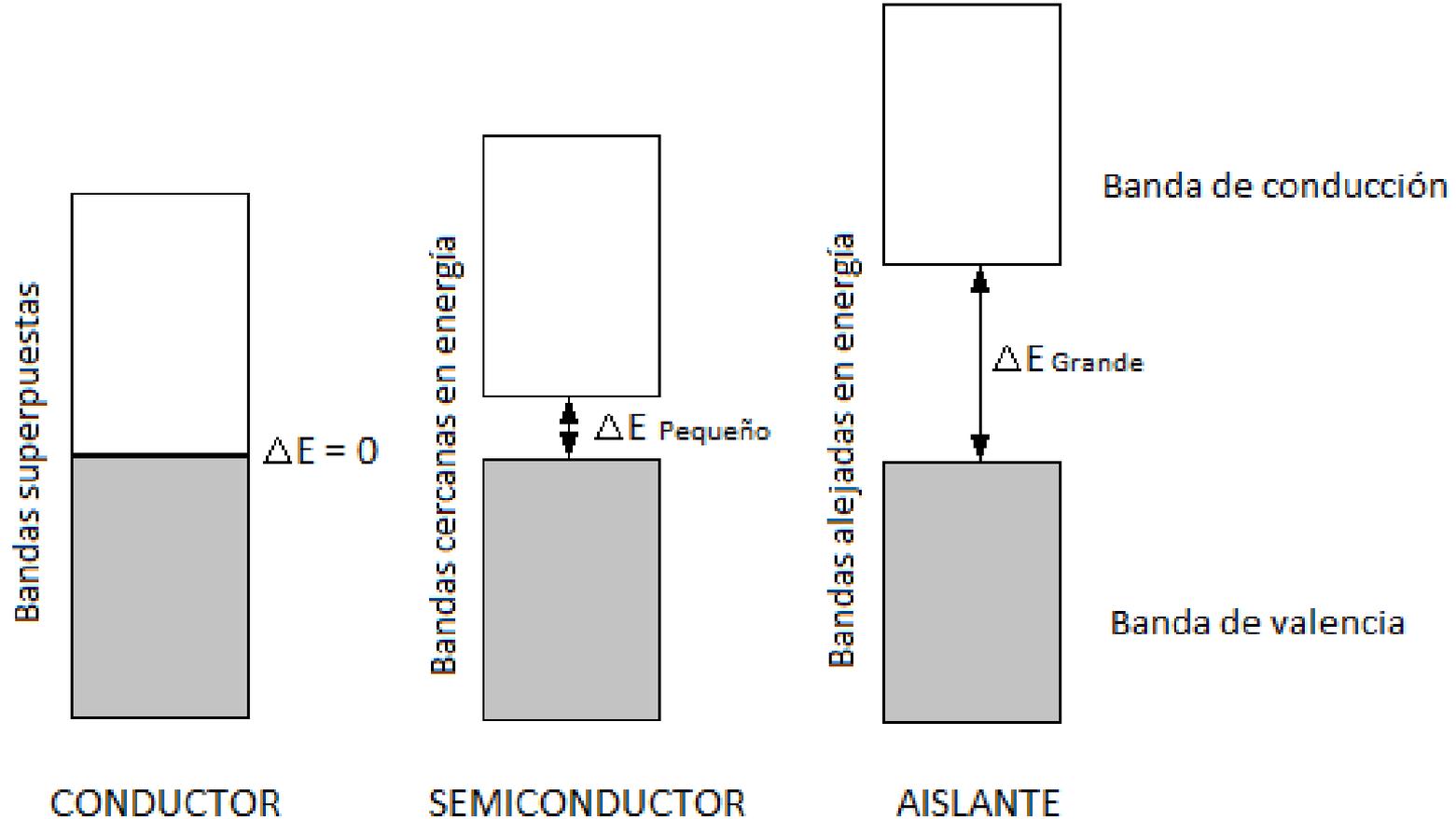
**Banda de valencia:** está ocupada por los electrones de valencia de los átomos, es decir, aquellos electrones que se encuentran en la última capa o nivel energético de los átomos. Los electrones de valencia son los que forman los enlaces entre los átomos, pero no intervienen en la conducción eléctrica.



**Banda de conducción:** está ocupada por los electrones libres, es decir, aquellos que se han desligado de sus átomos y pueden moverse fácilmente. Estos electrones son los responsables de conducir la corriente eléctrica.

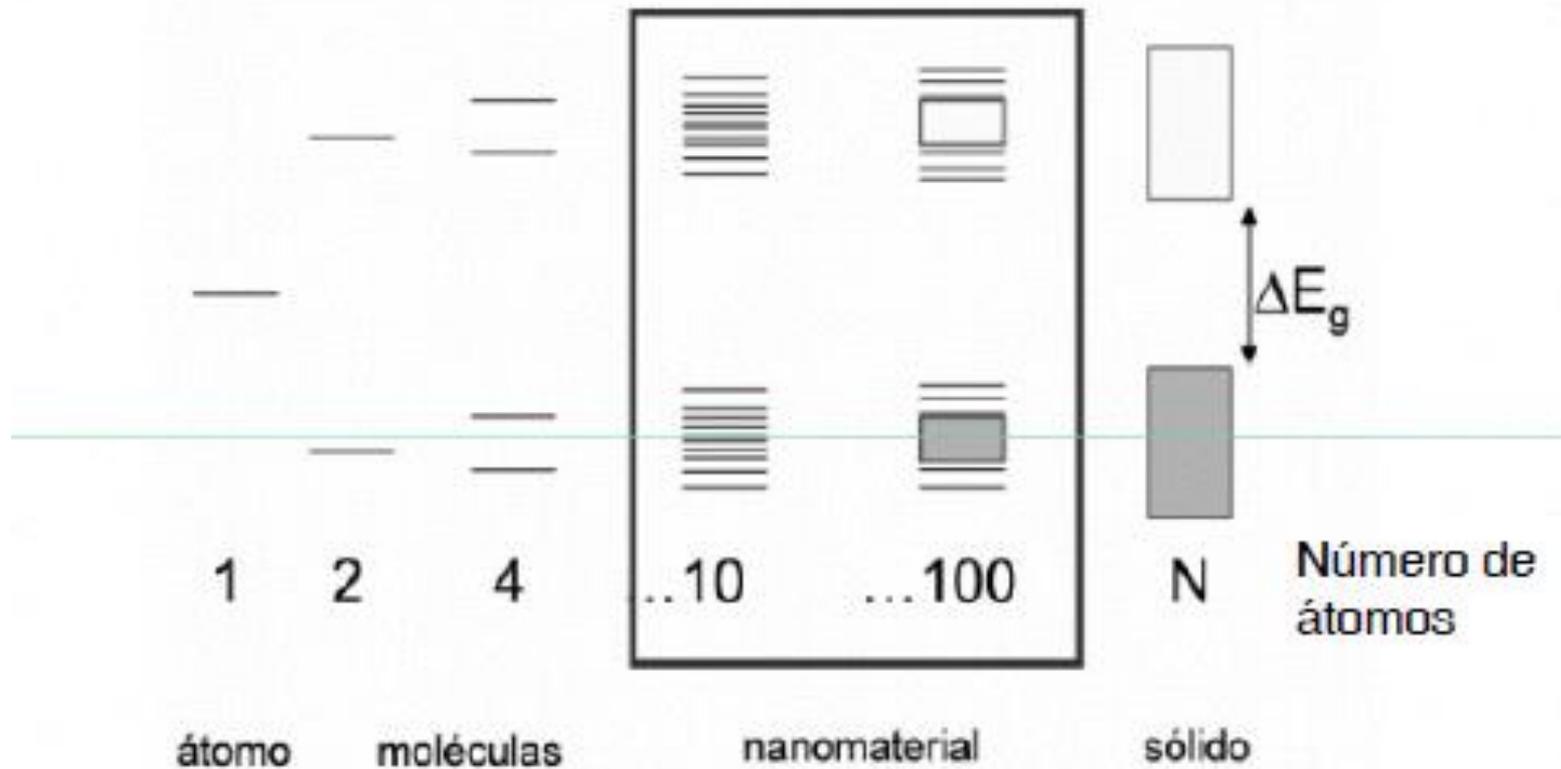
Entre la banda de valencia y la de conducción existe una zona denominada **banda prohibida o gap**, que separa ambas bandas y en la cual no pueden encontrarse los electrones.

# Teoría de bandas



- ❑ Conductor de la corriente eléctrica: existe poca o ninguna separación entre las bandas de valencia y conducción (que pueden llegar a solaparse), de manera que los electrones pueden saltar entre las bandas.
- ❑ Cuando la separación entre bandas es mayor, el material se comportará como un aislante.
- ❑ Si la separación entre bandas permite el salto entre las mismas de solo algunos electrones, el material se comportará como un semiconductor.

## En un nanomaterial, los electrones están “confinados”:



Evolución de los orbitales desde los niveles de energía discretos de un átomo a las bandas de energía de un sólido. Los niveles energéticos están “**cuantizados**”.

Cuando juntamos algunos cientos o miles de átomos, se obtienen bandas, aunque más angostas que las del material convencional. Esto hace que la velocidad de los electrones sea menor (menos niveles accesibles) y la conducción electrónica se vuelve más lenta. Además, el band-gap es mayor. Por eso las propiedades ópticas y electrónicas cambian con el tamaño.

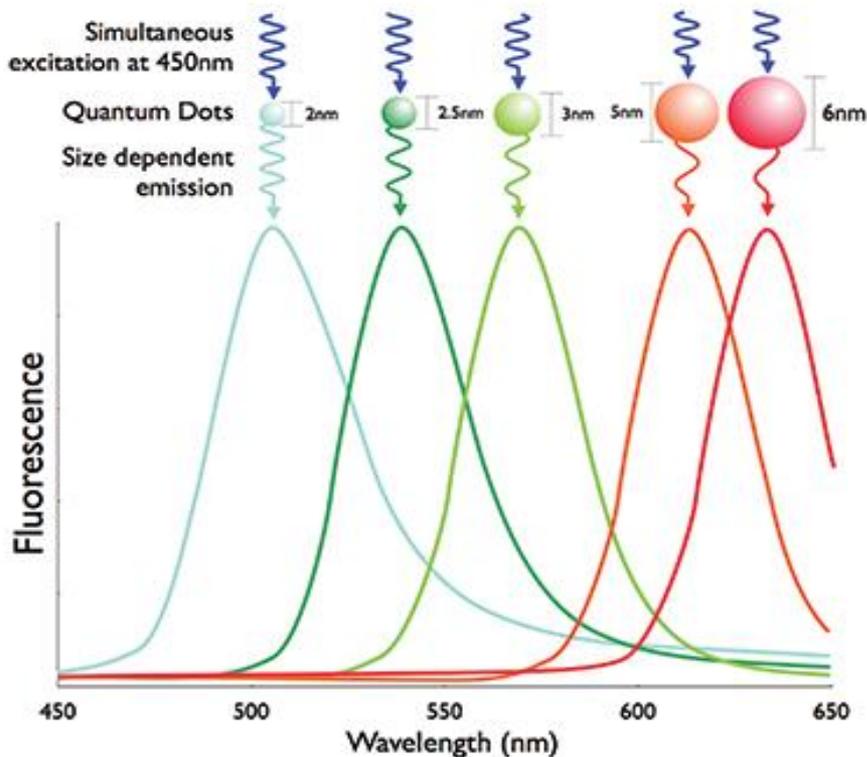
# Puntos cuánticos (quantum dots)

Material en forma de **nanopartículas**, que varía su comportamiento dependiendo del tamaño.

Por ejemplo, la emisión de radiación depende del tamaño de la nanopartícula. Note que se verá muy diferente al color que estamos acostumbrados a percibir en ese material.

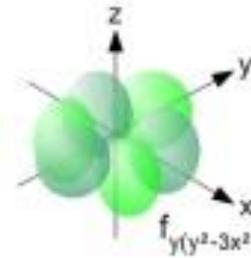
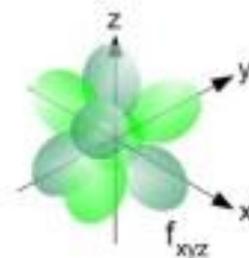
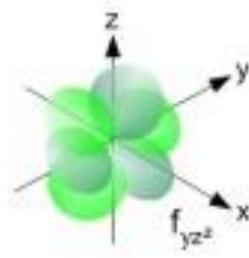
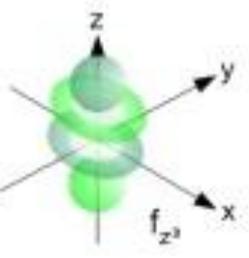
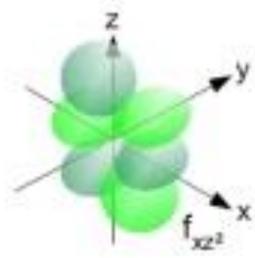
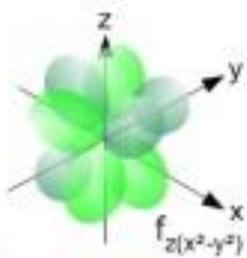
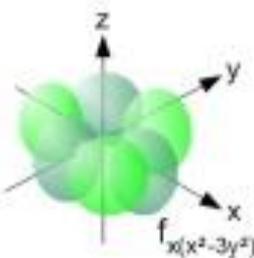
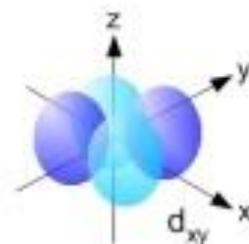
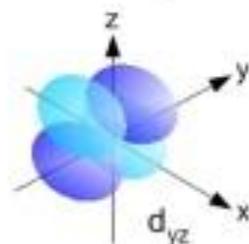
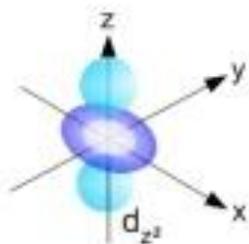
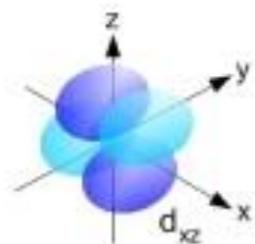
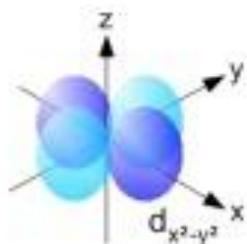
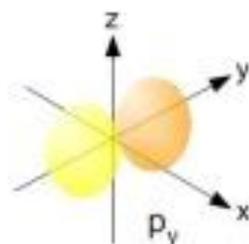
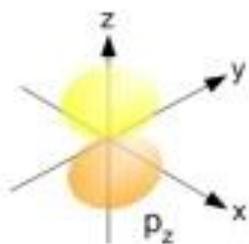
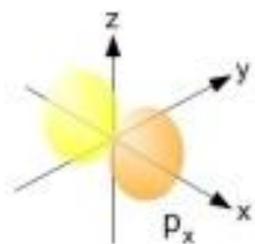
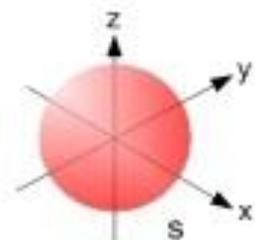
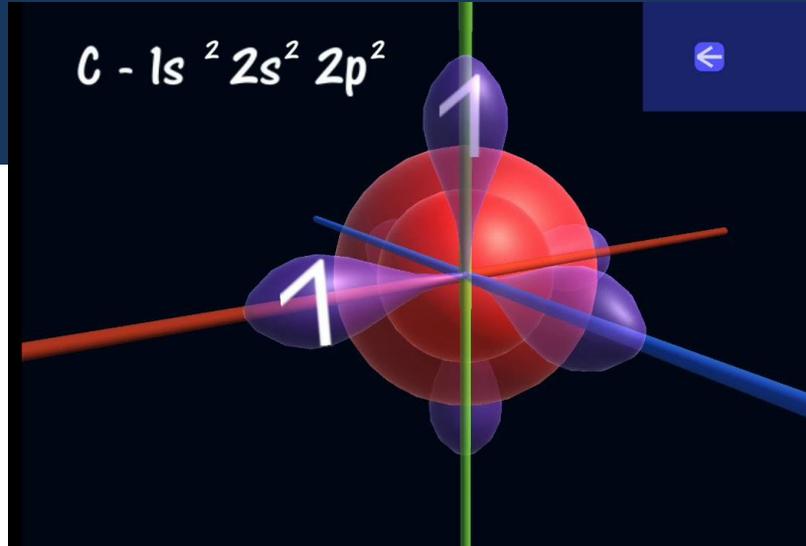


## Spectral Characteristics of Quantum Dots

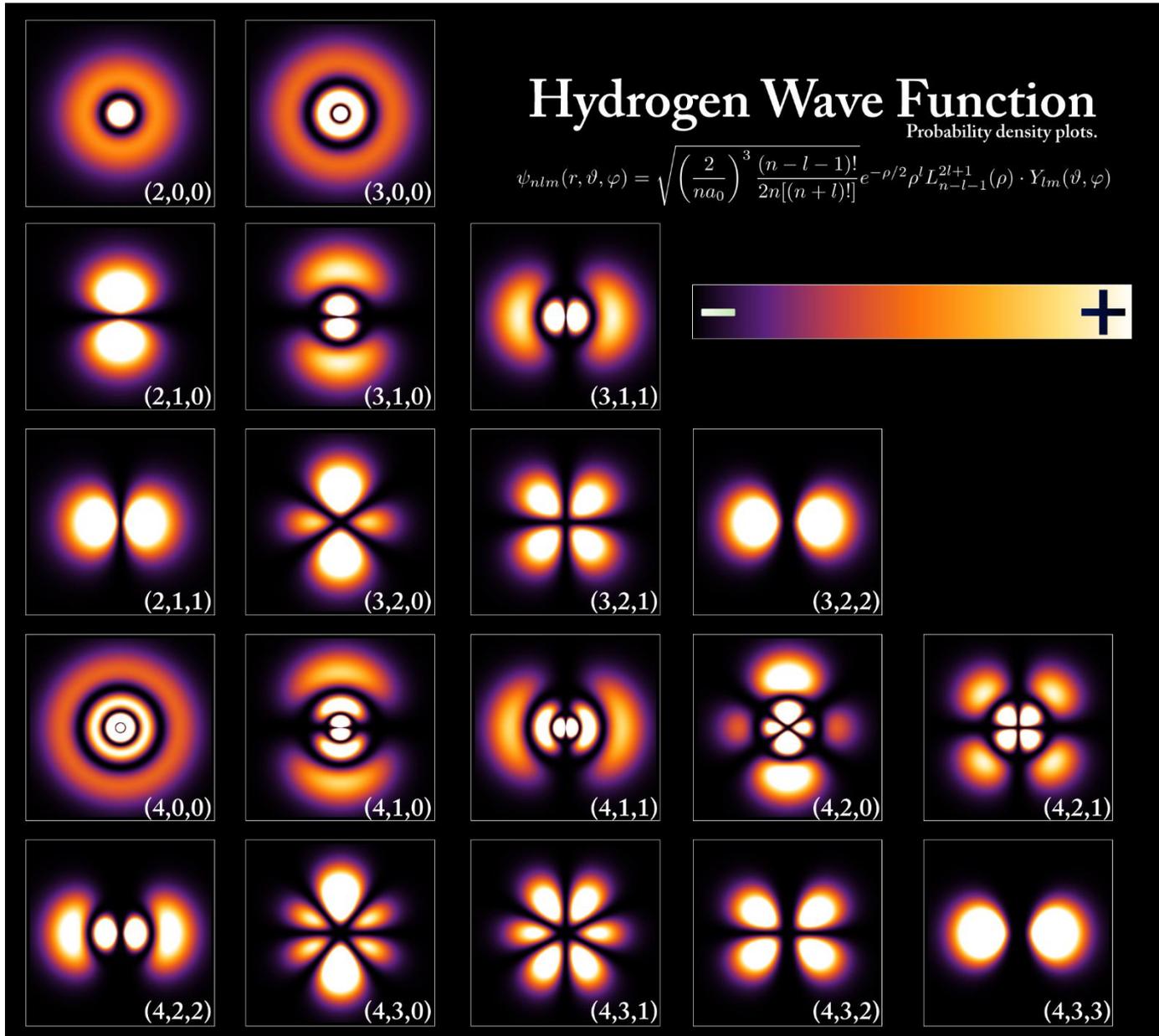


Puntos cuánticos en solución. Se aprecia la fluorescencia de cada tamaño de partículas.

# Orbitales atómicos

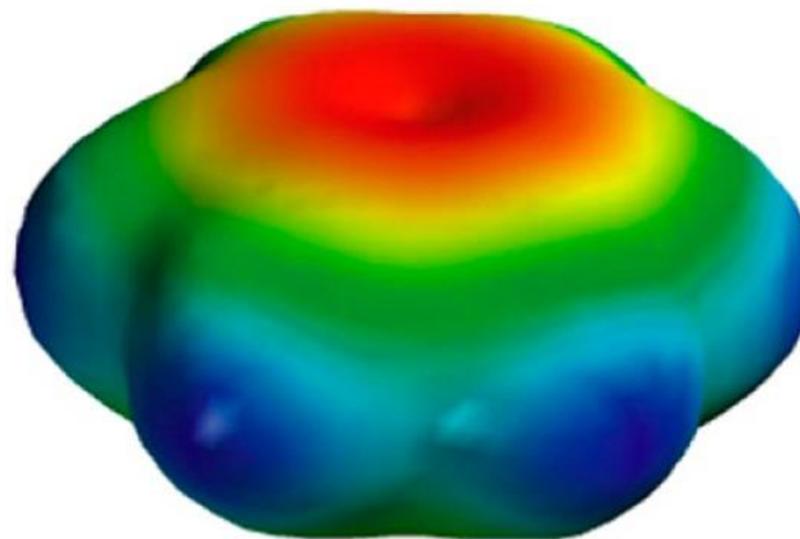
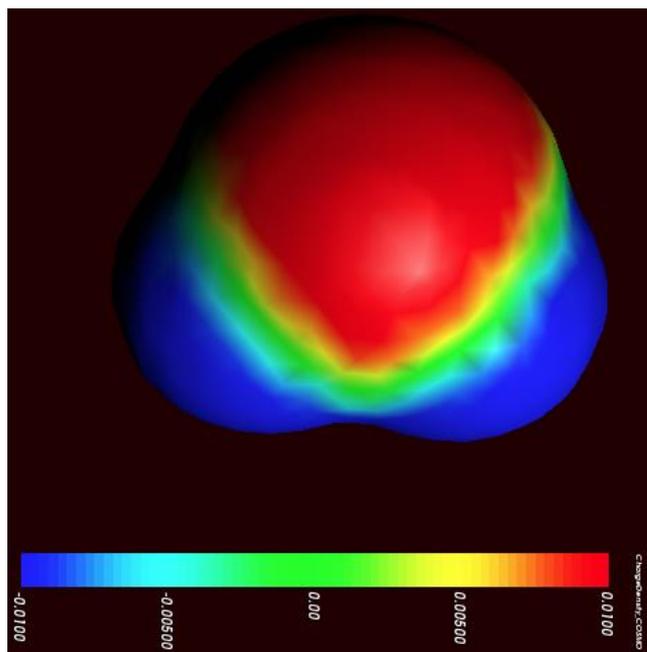
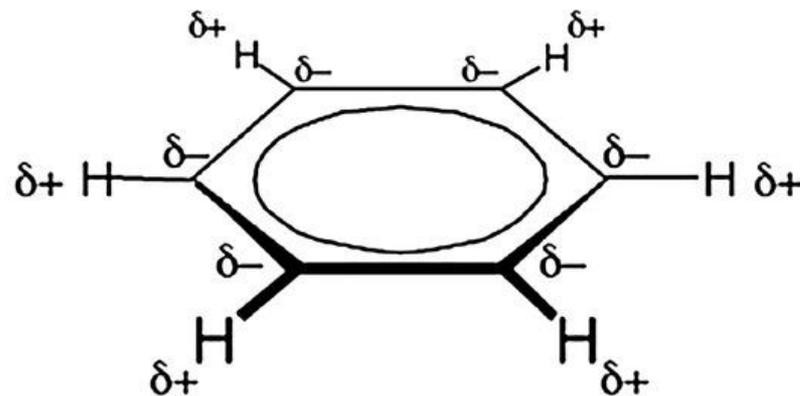
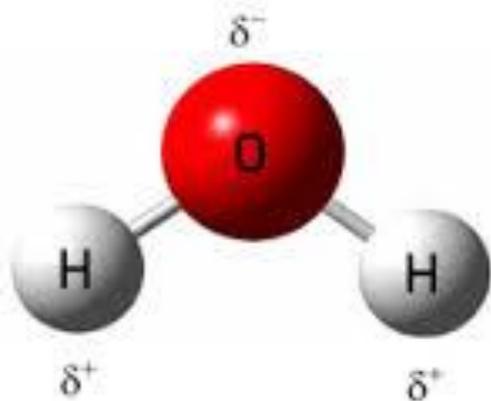


# Orbitales atómicos



# Distribución de cargas en moléculas. Ejemplos

Distribuciones de cargas de una molécula de agua (izquierda) y de una de benceno (derecha), obtenidas mediante modelos computacionales basados en la mecánica cuántica.

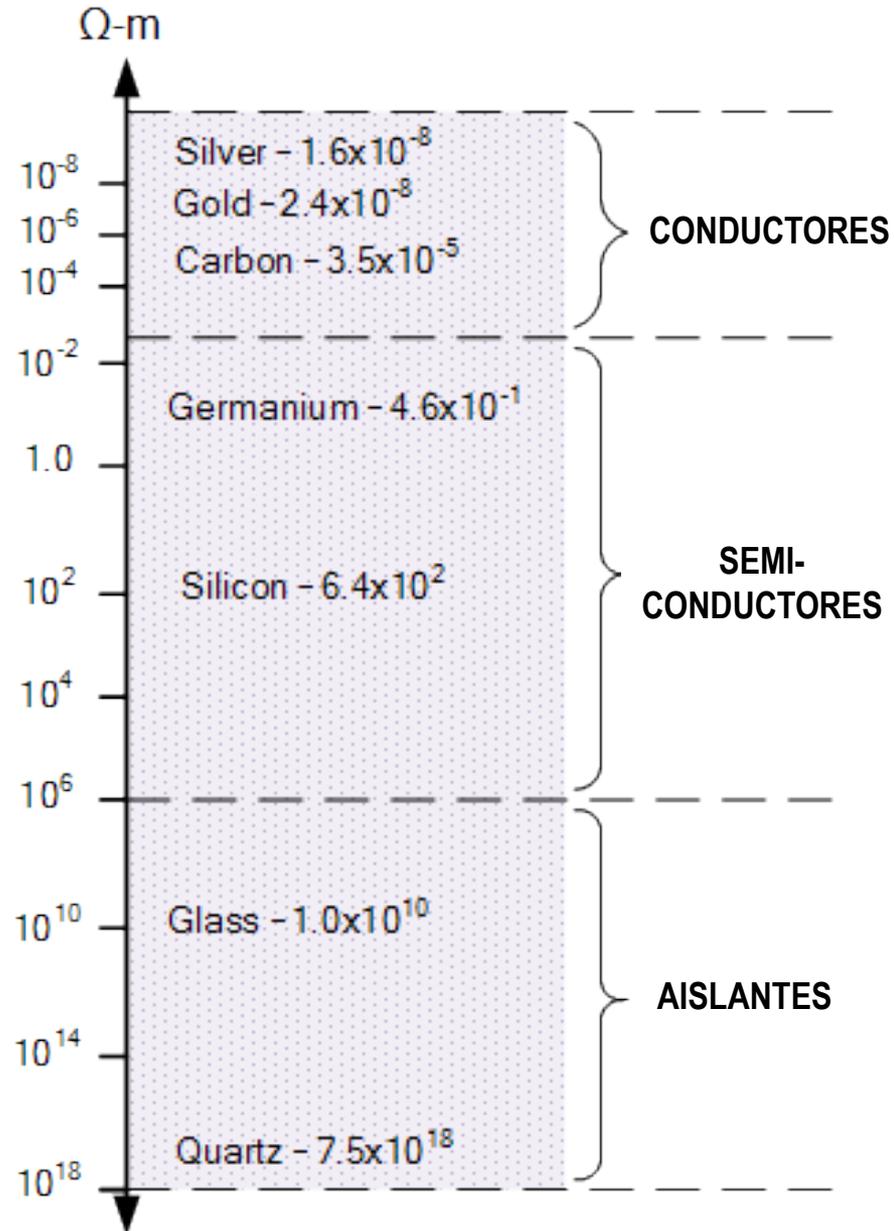


# Conductores, semiconductores y aislantes

La **conductividad** se refiere a la capacidad de un material o sustancia para dejar pasar libremente la corriente eléctrica. La conductividad de un material depende de su estructura atómica y molecular.

Un material es **semiconductor** cuando se comporta o bien como conductor o bien como aislante, dependiendo de diversos factores, como por ejemplo el campo eléctrico o magnético, la presión, la radiación que le incide, o la temperatura del ambiente en el que se encuentre. No es tan buen conductor como un metal, pero no es aislante.

El elemento semiconductor más usado es el silicio, el segundo el germanio.



# Semiconductores - ejemplos

## Elementos y compuestos inorgánicos:

**Boro:** Metaloide

**Aluminio:** como alúmina

**Galio:** como GaAs

**Indio:** como óxidos y sales

**Germanio:** Metaloide

**Silicio:** Metaloide

**Fósforo:** No metal

**Arsénico:** Metaloide

**Antimonio:** Metaloide

**Azufre:** No metal

**Selenio:** No metal

**Telurio:** Metaloide

## Compuestos orgánicos:

**Antraceno**

**Naftaleno**

**Ftalocianinas**

**Hidrocarburos**

**Polinucleares**

**Polímeros**

# Tipos de semiconductores según su pureza

- ❑ **Semiconductor intrínseco**: es capaz de transmitir electricidad en estado puro.
- ❑ **Semiconductor extrínseco**: contiene un pequeño porcentaje de impurezas. Ejemplo: a la estructura molecular cristalina del silicio o del germanio se le puede introducir cierta alteración para que permitan el paso de la corriente eléctrica en una sola dirección. El proceso de aplicación de impurezas se denomina “dopado”.

**Semiconductor tipo N**: Se añade material dopante para aumentar la cantidad de electrones libres, permitiendo así la conducción de la carga eléctrica. Sin embargo, el semiconductor tipo N no es tan buen conductor como un cuerpo metálico conductor.

**Semiconductor tipo P**: En lugar de agregarse material dopante que aumente la cantidad de electrones, se agrega al material átomos o impurezas que, al unirse a los átomos del semiconductor, crean huecos (la falta de un electrón). Así, el material se vuelve conductor con carga positiva. Ejemplo : dopaje trivalente en el caso de silicio.

## De la tabla periódica:

Elementos Grupo 13	Elementos Grupo 14	Elementos Grupo 15
3 electrones en la capa electrónica más externa	4 electrones en la capa electrónica más externa	5 electrones en la capa electrónica más externa
(5) Boro (B)	(6) Carbono (C)	
(13) Aluminio (Al)	(14) Silicio (Si)	(15) Fósforo (P)
(31) Galio (Ga)	(32) Germanio (Ge)	(33) Arsénico (As)
		(51) Antimonio (Sb)

# Semiconductores – características

## ❑ Conductividad variable

Mediante dopaje tipo n y p.

## ❑ Heterojunta

Se produce al unir dos materiales semiconductores dopados de forma diferente. Esto resulta en un intercambio de electrones y agujeros entre los materiales. La transferencia se produce hasta alcanzar el equilibrio (recombinación), Como resultado, se cargan iones que dan lugar a un campo eléctrico.

## ❑ Emisión de luz

En algunos casos la disipación de energía ocurre en forma de emisión de luz en vez de calor. Estos semiconductores se utilizan para hacer diodos emisores de luz y puntos cuánticos.

## ❑ Conversión de energía térmica

Los semiconductores tienen grandes factores de potencia termoeléctrica que los hacen útiles en generadores termoeléctricos. También son de utilidad en refrigeradores termoeléctricos.

# Semiconductores - Usos más comunes

- ❑ Rectificar la corriente alterna: uniendo semiconductores de tipo n y p, el desequilibrio electrónico (entre electrones y huecos) crea un voltaje.
- ❑ Detectar señales de radio.
- ❑ Amplificar señales de corriente eléctrica.
- ❑ Transistores de unión bipolar: interruptores o amplificadores que funcionan en unidades de procesamiento central de computadoras.
- ❑ Transistores de efecto de campo: se utilizan para almacenar la información (son la memoria de las computadoras).
- ❑ Termistores: sensores de temperatura.
- ❑ Transductores de presión: la presión permite que aumente la conductividad.

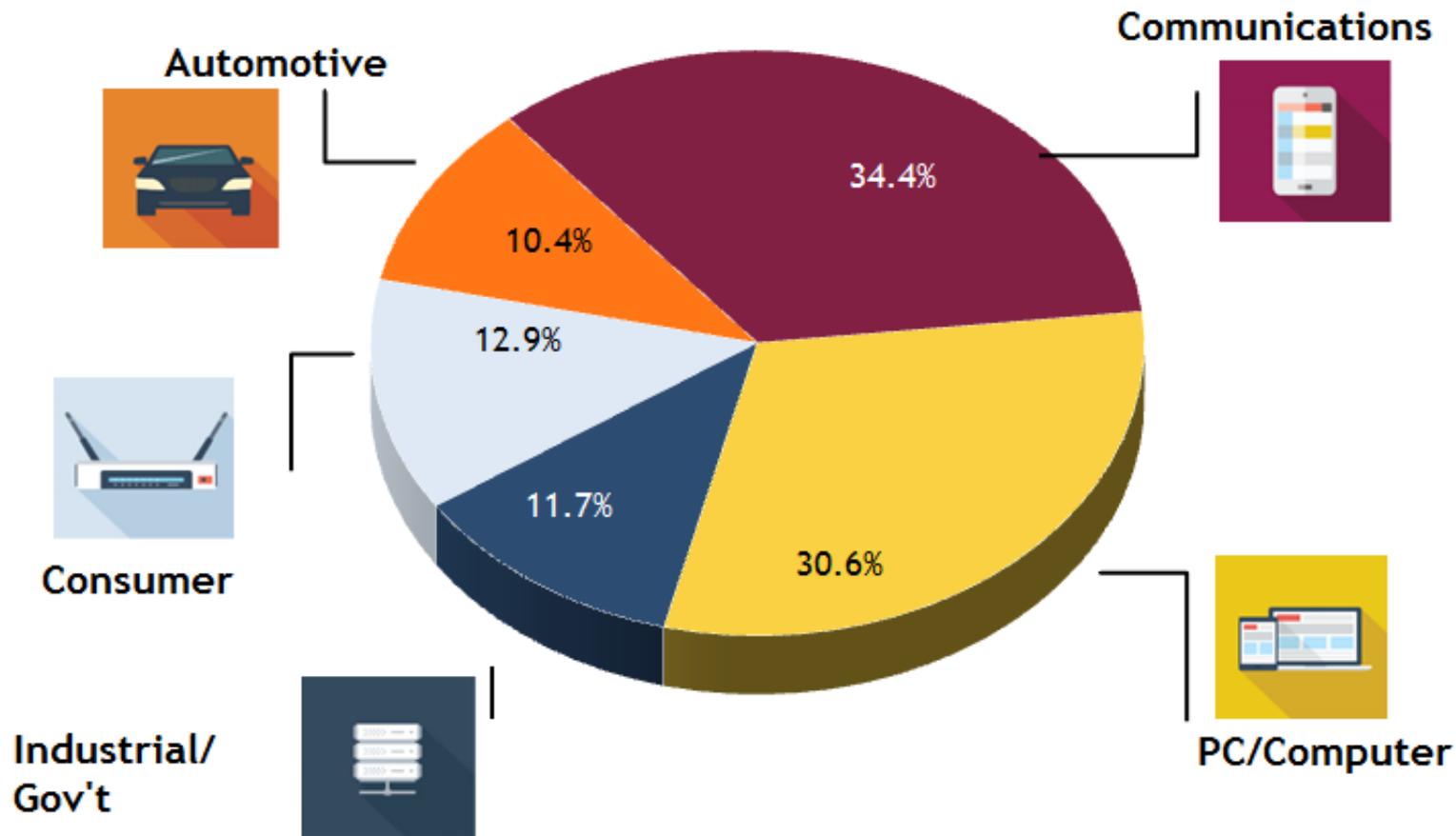
# Semiconductores - Usos más comunes



Material	Photonic device	Electronic device
GaAs	<p><b>Red laser</b>  <b>Red / Infrared LED</b>                      (DVD, PC, automotive and outdoor display applications)</p>	<p><b>High-frequency device</b>  <b>Low-noise amplifier</b>                      (Mobile phones, wireless base station and satellite communication systems)</p>
InP	<p><b>Infrared laser/ Photo-detector</b>                      (Optical communications)</p>	
GaN	<p><b>Blue-violet laser</b>  <b>Blue/White LED</b>                      (Blu-ray, LCD backlight, outdoor display and lighting applications)</p>	<p><b>High-frequency device</b>  <b>High-power device</b>                      (Wireless base stations, power controllers and electric vehicles)</p>
AlN	<p><b>Ultra-violet laser/ LED</b>                      (Sterilization, cleaning and processing)</p>	<p><b>Next-generation power device</b></p>

# Semiconductores

2014 Total Global Semiconductor Market \$336 Billion  
Percent of Semiconductor \$ Demand

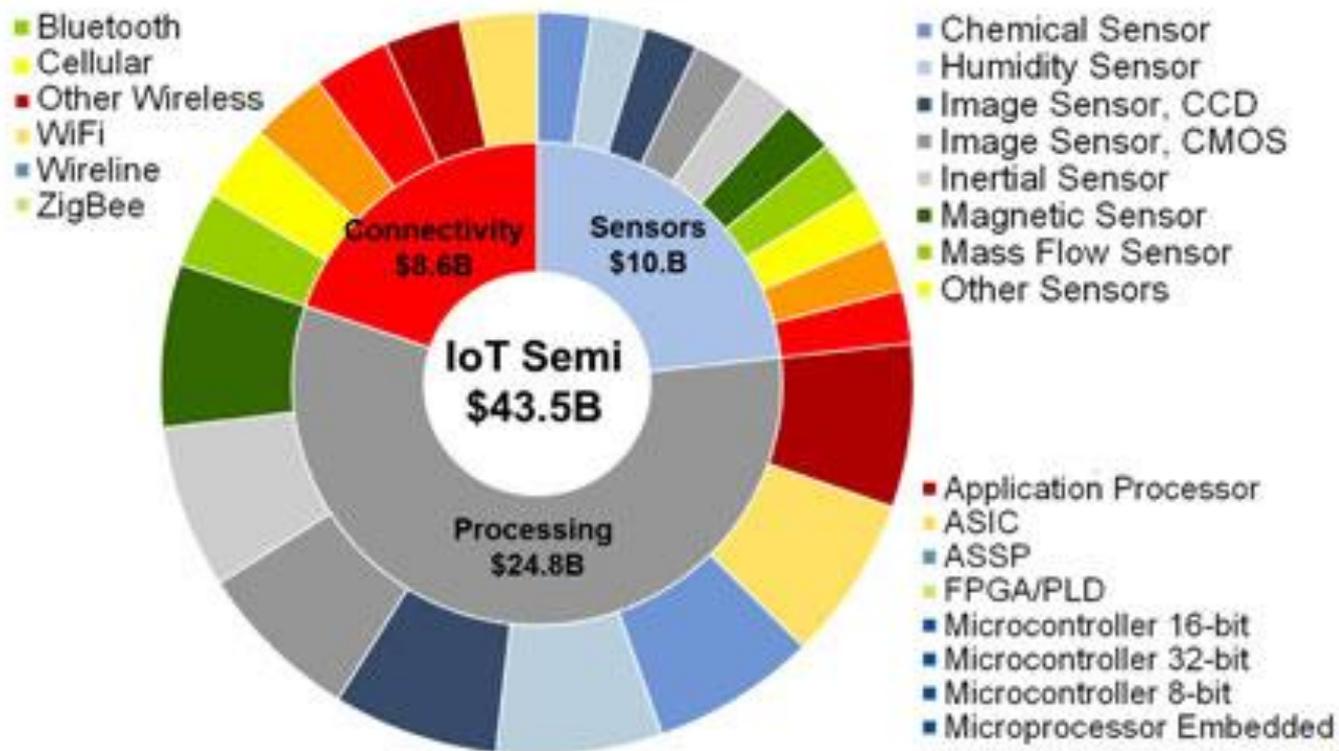


Note: Military is <1% and is included in Industrial.

Source: World Semiconductor Trade Statistics (WSTS) and SIA Estimates.

# Semiconductores

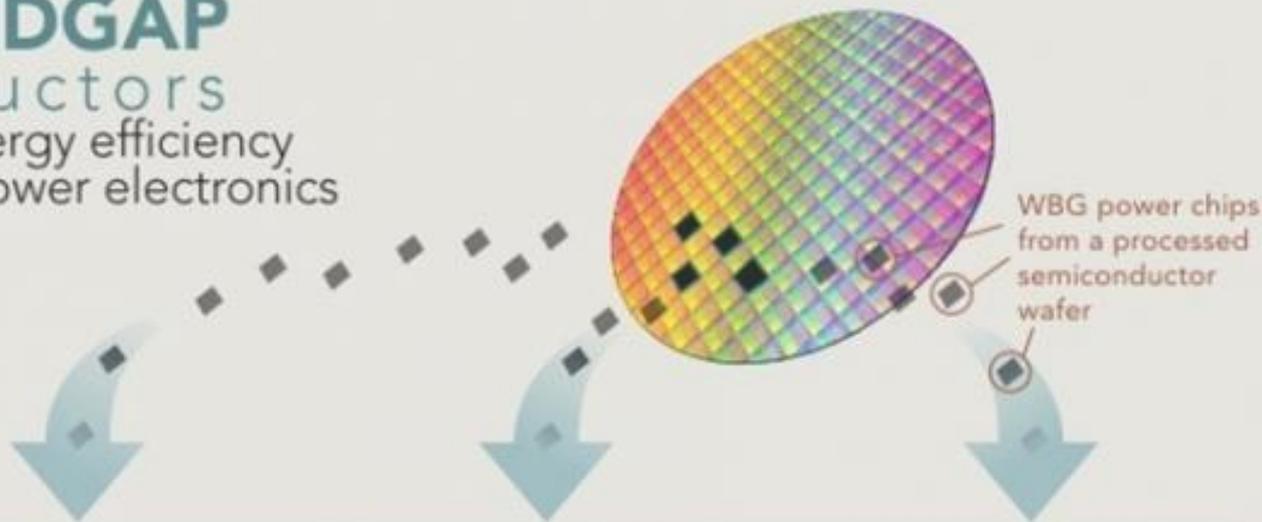
## Multiple Semiconductor Opportunities.



# WIDE BANDGAP

## Semiconductors

to increase the energy efficiency and reliability of power electronics

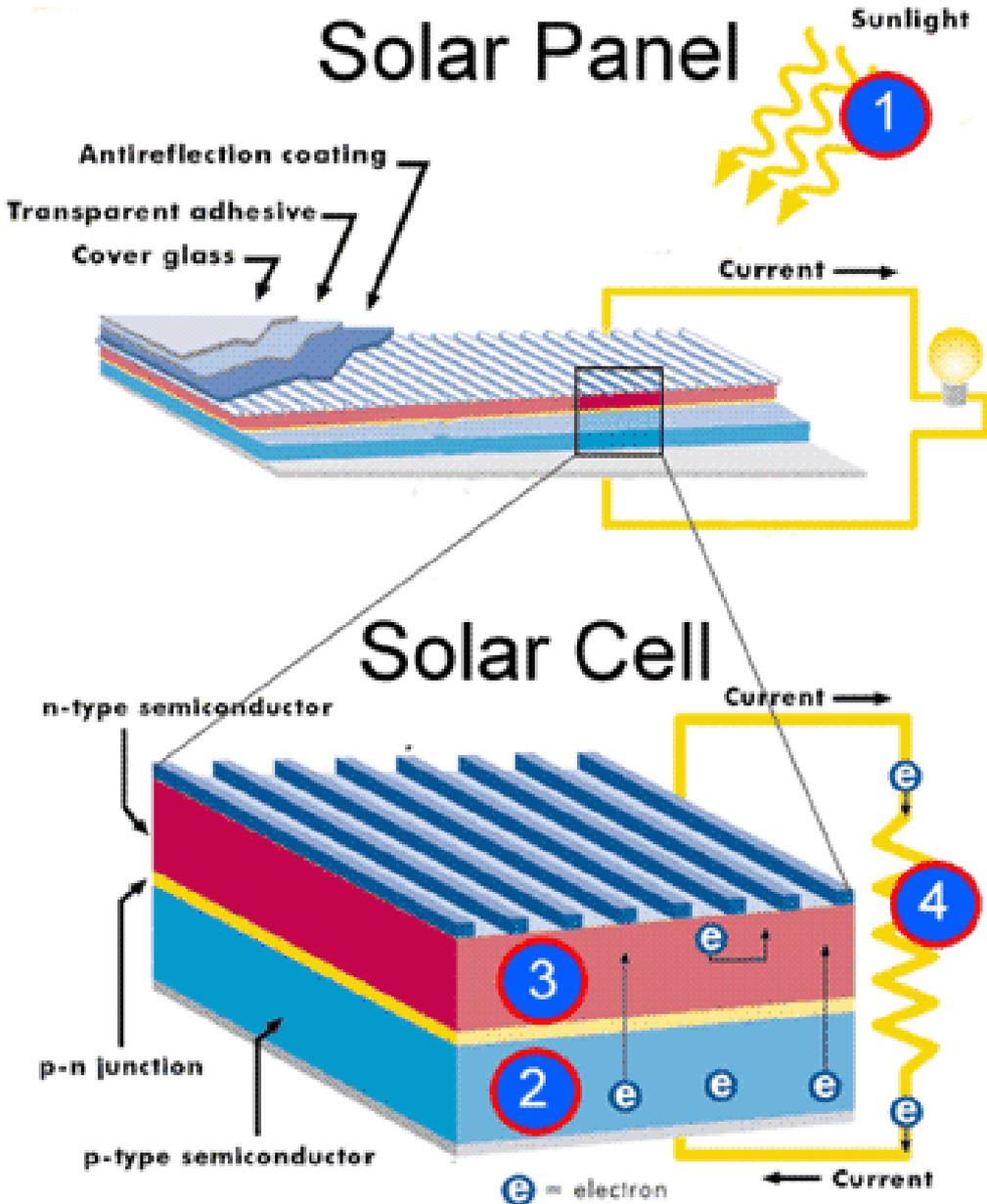


APPLICATION	Industrial Motor Systems	Consumer Electronics and Data Centers	Conversion of Solar and Wind Energy
POWER ELECTRONIC SYSTEM	<p>Variable Frequency Drive</p>	<p>Rectifier</p>	<p>Inverter</p>
END USE			
CURRENT ENERGY SAVINGS OPPORTUNITY*	<p>6.9 million homes</p>	<p>1.7 million homes</p>	<p>750,000 homes</p>

\* Annual U.S. household demand

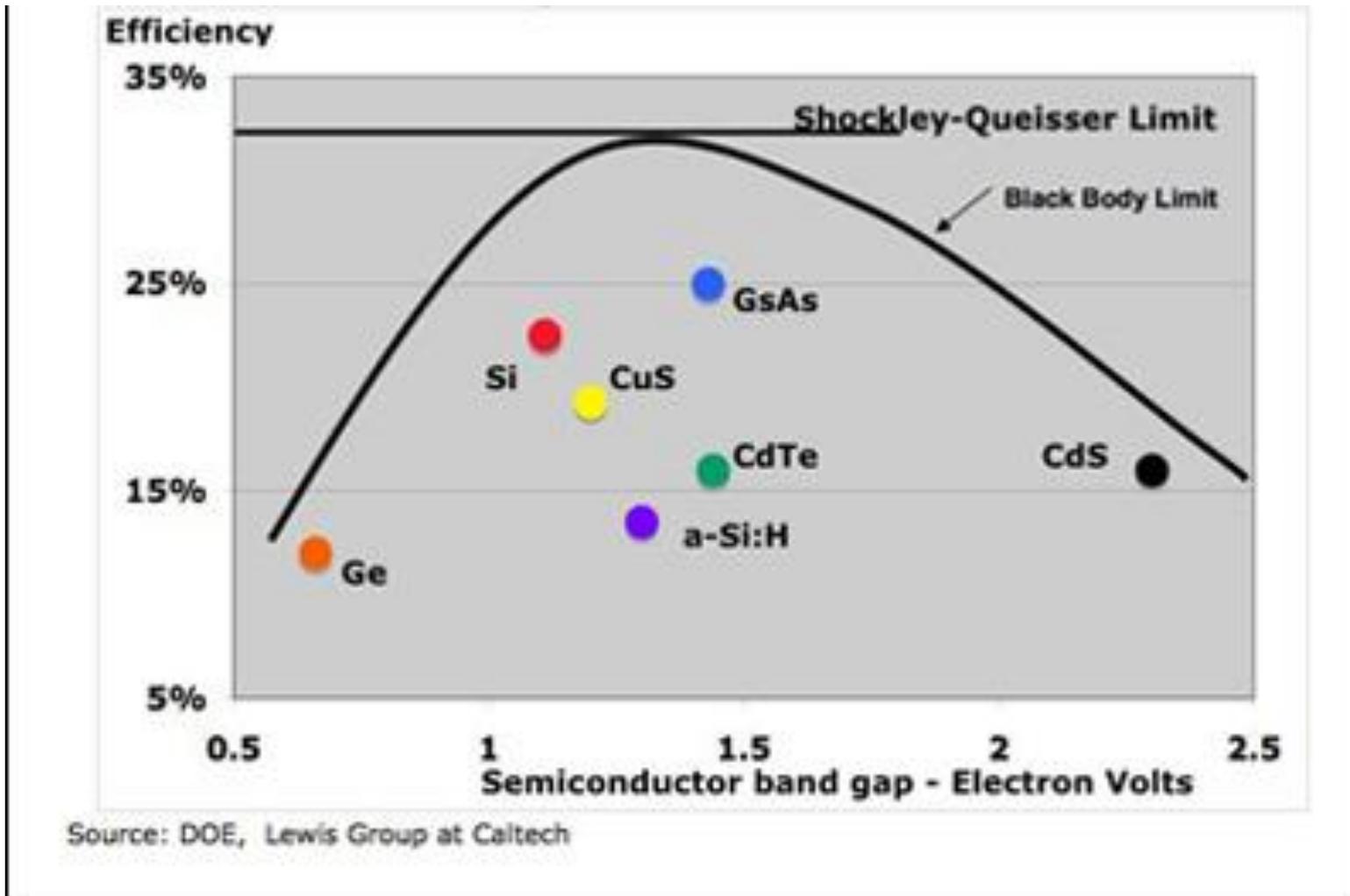
= 100,000 homes

# Celdas solares o fotovoltaicas (PV). Principio de funcionamiento



Video sobre cómo se produce la electricidad en una celda solar:  
<https://www.youtube.com/watch?v=ZYO83TkM0To> en inglés  
<https://www.youtube.com/watch?v=MgLGKMrsBX8> en castellano

# Celdas PV. Semiconductores más utilizados comercialmente



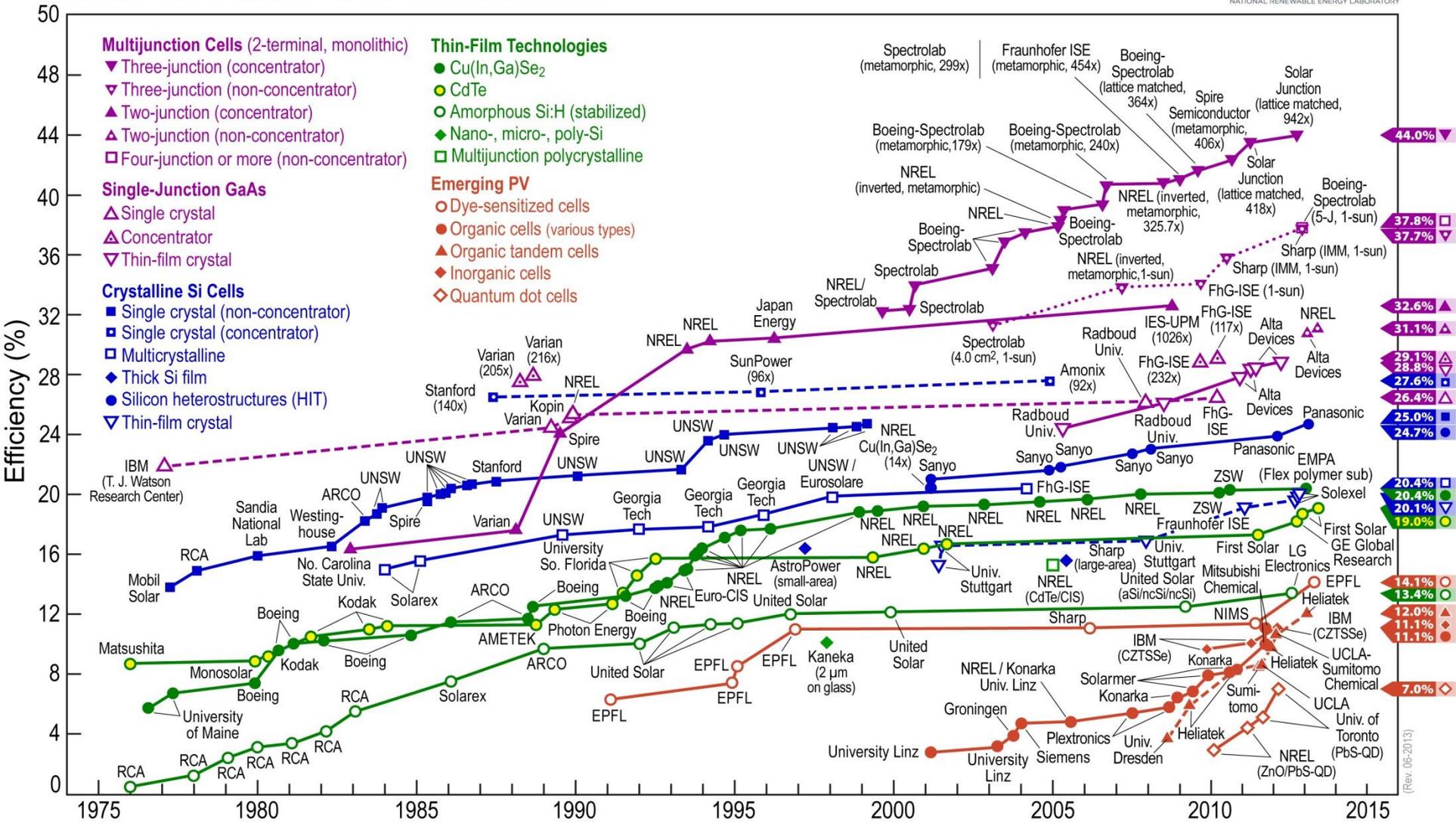
Eficiencia: % de energía solar convertida en energía eléctrica, en condiciones estándares de medición (temperatura, intensidad lumínica, etc).

# Estrategias para aumentar la eficiencia de las celdas PV

- 1) Utilizar más de un tipo de material semiconductor**
- 2) Utilizar más de una heterojunta P/N => “tandem cells”.**
- 3) Concentrar la luz solar mediante lentes.**
- 4) Combinar tecnologías para extraer y aprovechar la energía que se perdería en forma de calor.**

# Celdas PV. Avances científicos

## Best Research-Cell Efficiencies



(Rev. 06-2013)

# Celdas PV. Clasificación

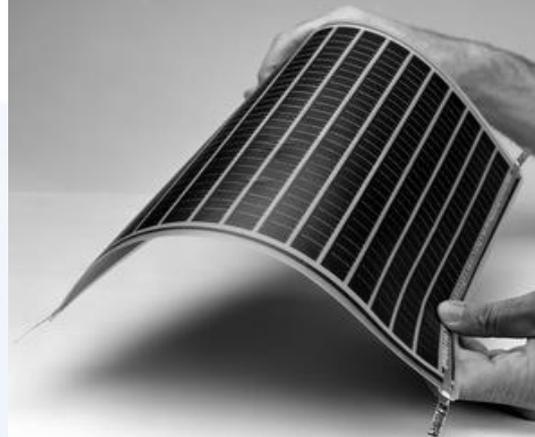
## Primera generación

*Single-crystal or monocrystalline silicon*  
*Polycrystalline or multicrystalline silicon*



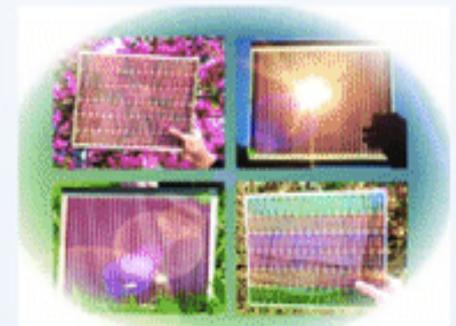
## Segunda generación

*Amorphous silicon (a-Si)*  
*cadmium telluride (CdTe),*  
*copper indium gallium selenide (CIGS)*



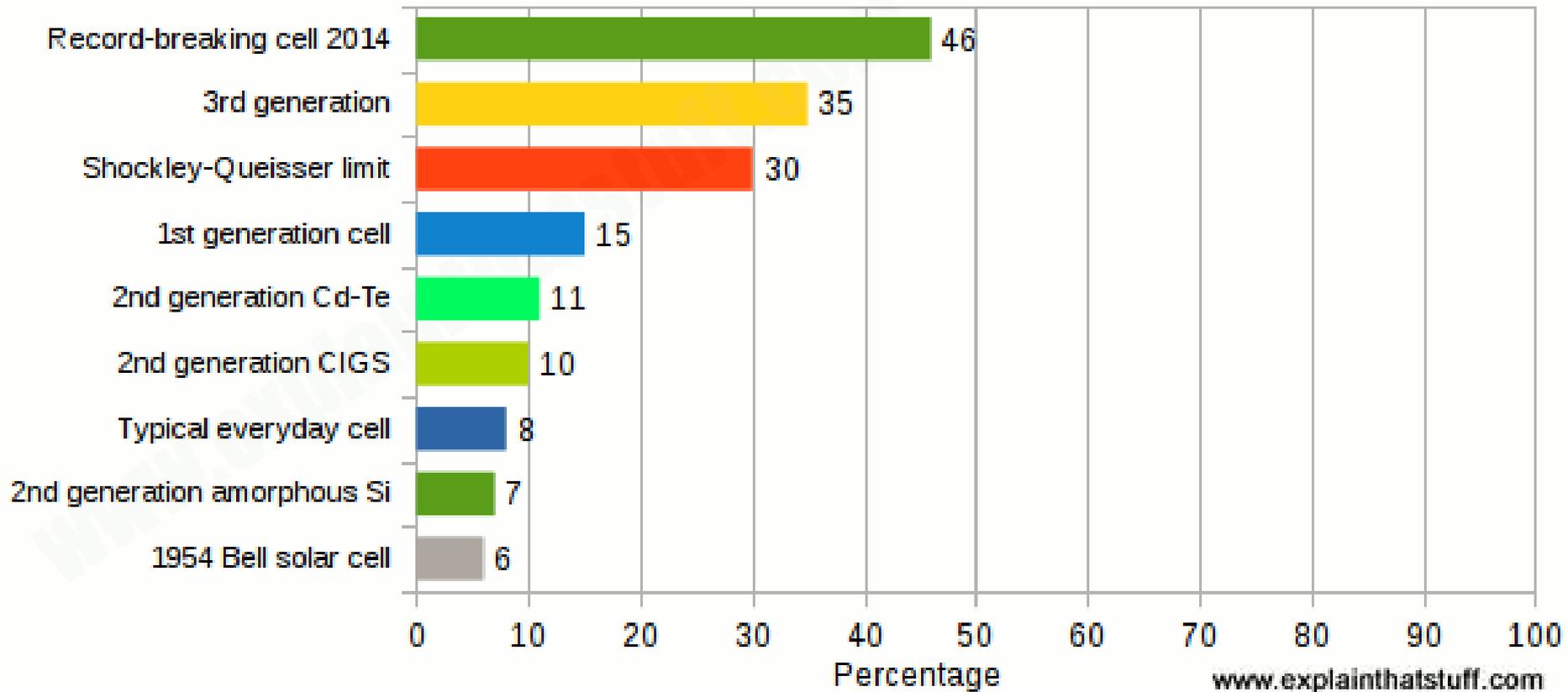
## Tercera generación

*Copper zinc tin sulphide (CZTS) PV cell*  
*Organic solar cell*  
*Perovskite Solar Cell*  
*Polymer PV cell*  
*Hybrid Solar Cell*  
*Buried Contact Solar Cell*  
*Concentrated PV Cell (CVP)*  
*Luminescent Solar Concentrator (LSC) Cell*  
*Multijunction Solar Cell (MJ)*  
*Nanocrystal Solar Cell*  
*Quantum Dot Solar Cell*  
*Dye-Sensitized Solar Cell (DSSC)*  
*Photoelectrochemical Cell (PEC)*  
*Etc.*



# Celdas PV. Eficiencia

## Eficiencias de solar cells



# Driving the next power revolution



## Oil and Gas

More efficient motors that perform in hotter, harsher environments to enhance oil recovery



## Hybrid Vehicles

10% longer driving range (e.g., additional 40 miles on car averaging 400 miles on a tank)



## Medical Imaging

Smaller, more efficient systems to lower the cost of healthcare, free up valuable hospital floor space



## Data Centers

>5% energy savings for fastest growing segment of electricity consumption



## Airplanes

Reduce weight by 1,000 lbs. with more compact, high efficiency power systems



## Renewables

More clean energy, 50% reduction in wasted power

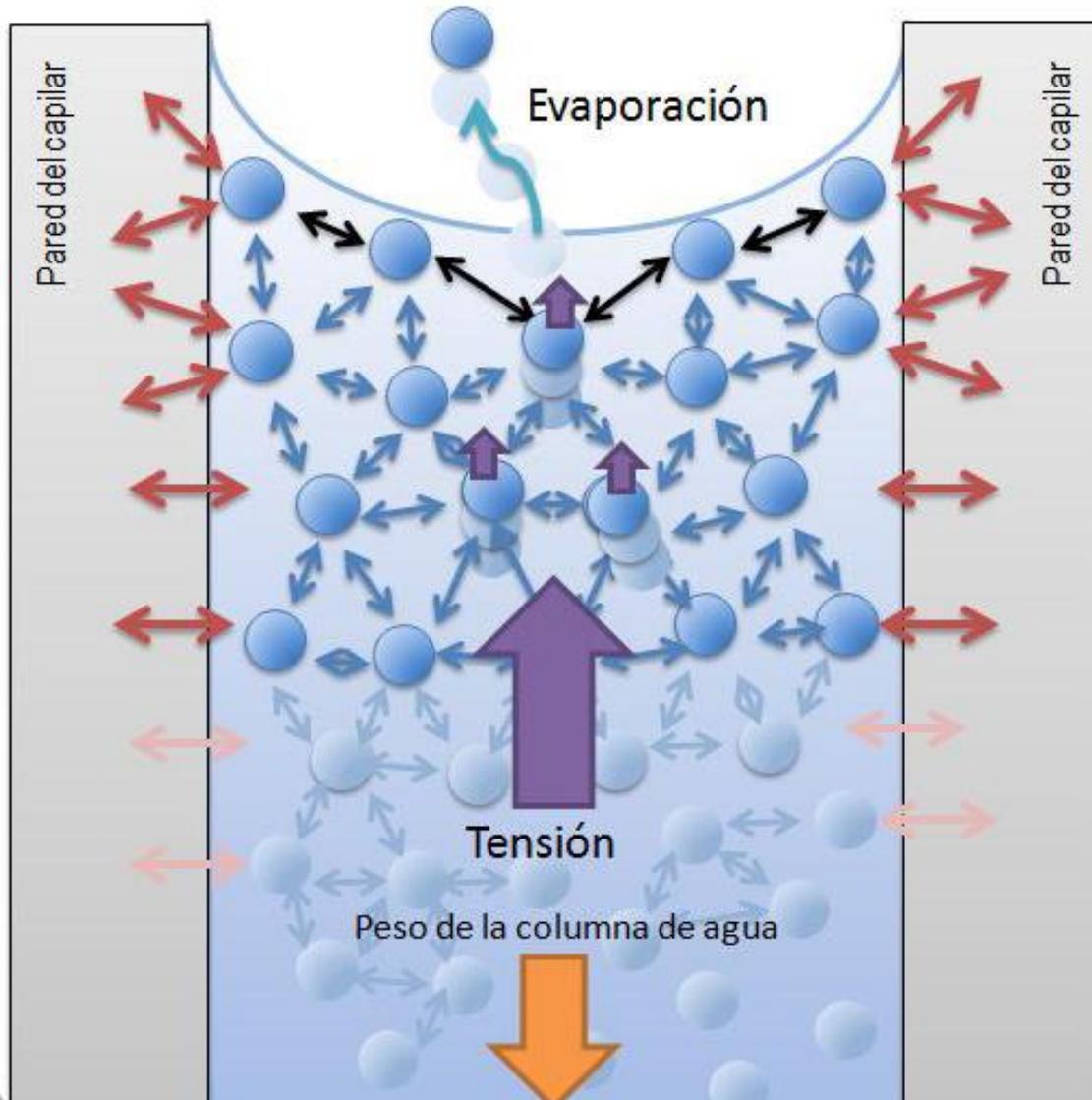


**Silicon carbide vs. current devices—will save enough electricity to power the entire state of New York.**

### GE's Advanced Silicon Carbide Power Semiconductors

- Higher temperature capability (>120°F higher) ... requires less cooling
- Reduced power losses by more than 50%
- 2X power density ... applications can be made at 1/3 the size and weight
- 2X reliability ... systems last longer, less maintenance

# Cohesión, adhesión, tensión superficial

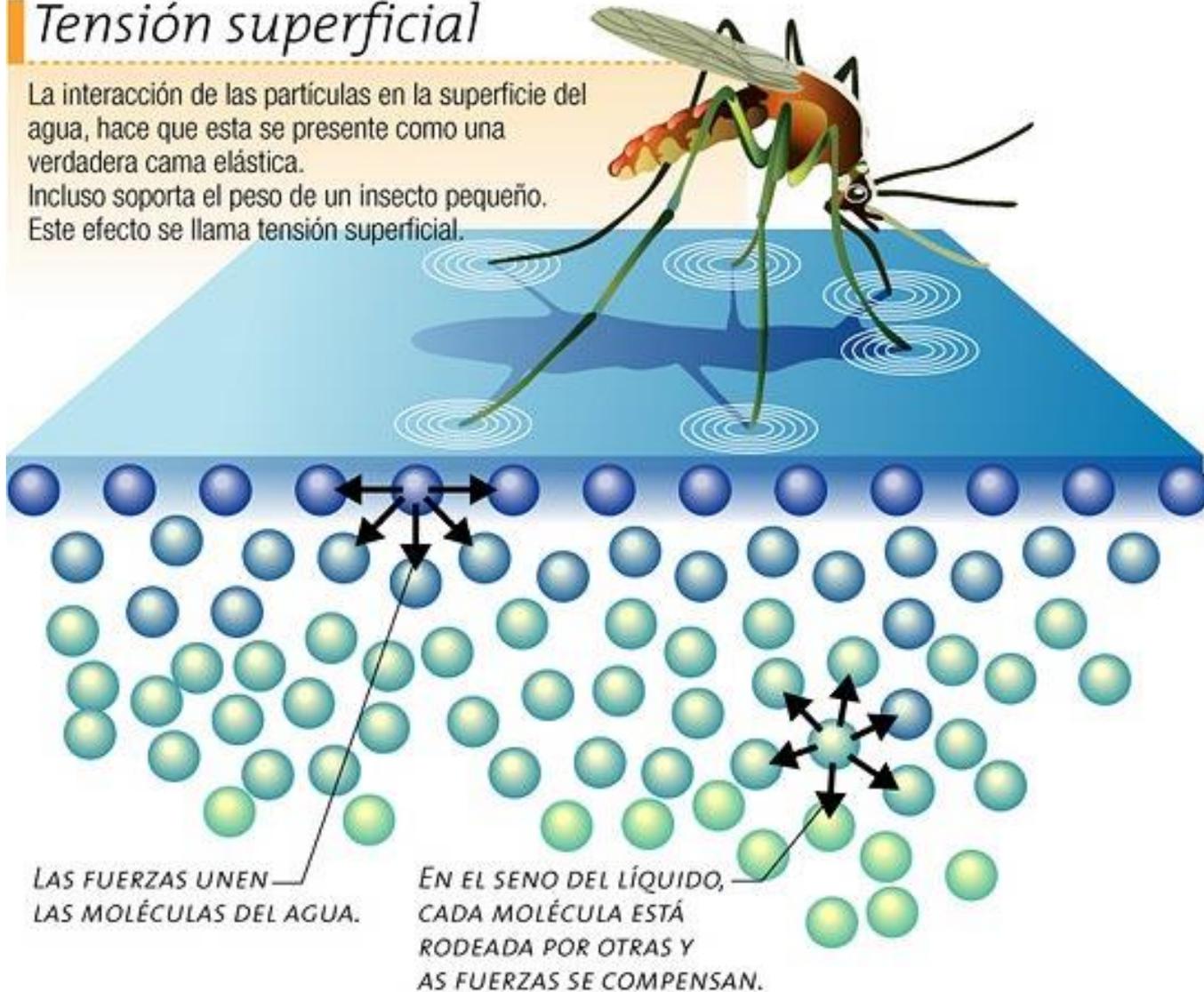


-  Fuerza de cohesión agua
-  Fuerza de cohesión agua superficie
-  Fuerzas de adhesión agua-pared capilar
-  Moléculas de agua
-  Evaporación
-  Tensión (presión negativa) generada por la evaporación en superficie

# Cohesión, adhesión, tensión superficial

## *Tensión superficial*

La interacción de las partículas en la superficie del agua, hace que esta se presente como una verdadera cama elástica. Incluso soporta el peso de un insecto pequeño. Este efecto se llama tensión superficial.



LAS FUERZAS UNEN  
LAS MOLÉCULAS DEL AGUA.

EN EL SENO DEL LÍQUIDO,  
CADA MOLÉCULA ESTÁ  
RODEADA POR OTRAS Y  
AS FUERZAS SE COMPENSAN.

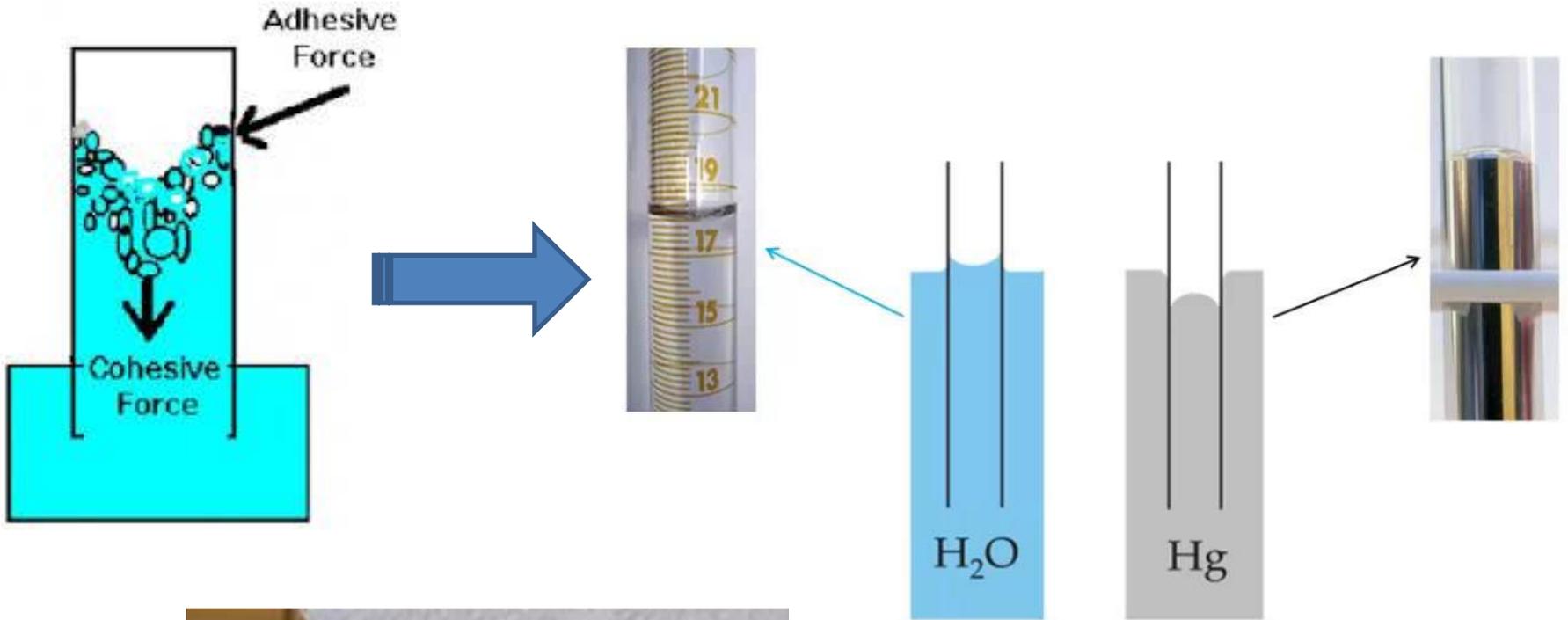
# Cohesión, adhesión, tensión superficial



## Tensión superficial

- Es una consecuencia de la cohesión o la atracción mutua, de las moléculas de agua.
  - Considere el goteo de agua e insectos caminando sobre un estanque.
- La **cohesión** es la unión de moléculas de la misma sustancia.
- La **adhesión** es la unión de moléculas de sustancias distintas.

# Fuerzas adhesivas y acción capilar



# Fuerzas adhesivas y acción capilar



Humedad por capilaridad



Capilaridad en las plantas



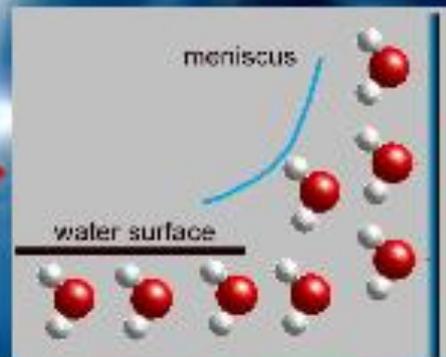
Mezclando colores por capilaridad.

Molécula de agua

Cohesión

Adhesión

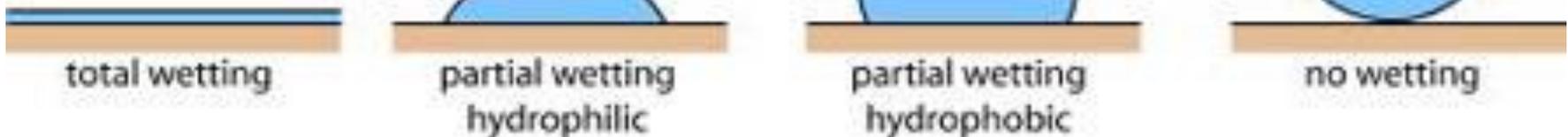
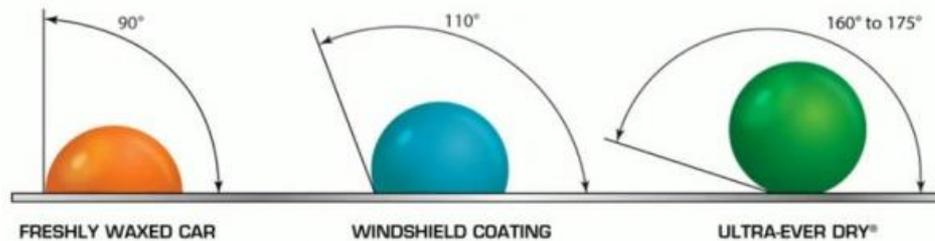
Tensión superficial



# Hidrofobicidad

Es una medida de la afinidad de la superficie de un material por el agua. Se puede medir a través del “ángulo de contacto” entre una gota de líquido y la superficie.

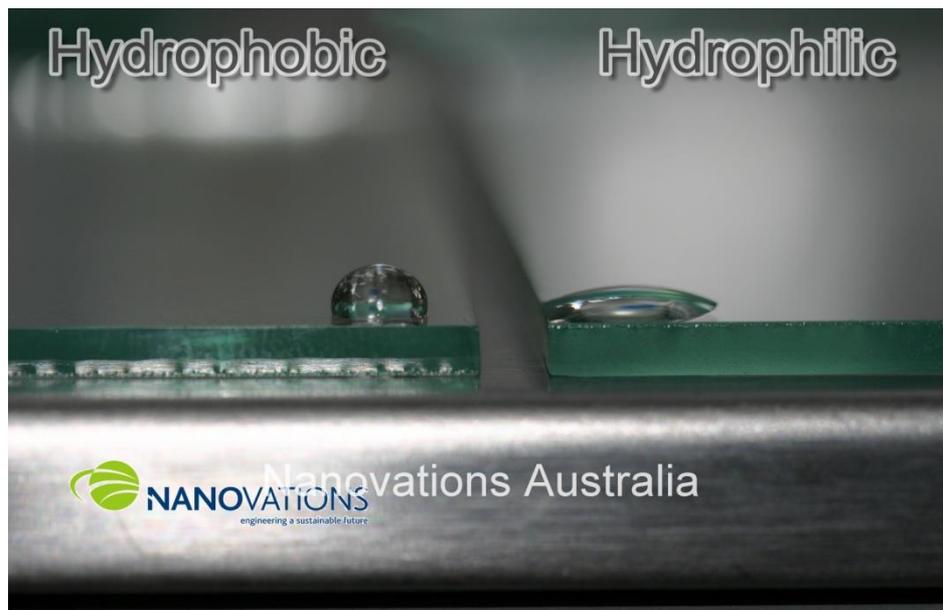
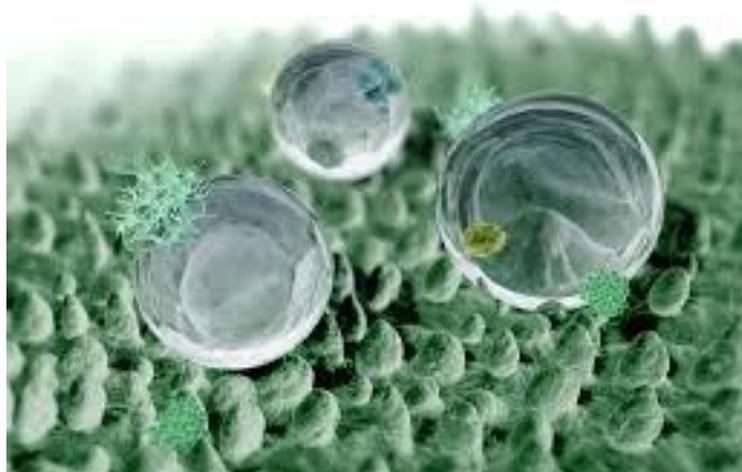
**DEGREES OF HYDROPHOBICITY CONTACT ANGLES  
GREATER THAN 90 DEGREES ARE CONSIDERED HYDROPHOBIC,  
AND ARE CONSIDERED SUPERHYDROPHOBIC IF GREATER THAN 150 DEGREES**



**Aumenta el carácter hidrofóbico** →

← **Aumenta el carácter hidrofílico**

# Hidrofobicidad

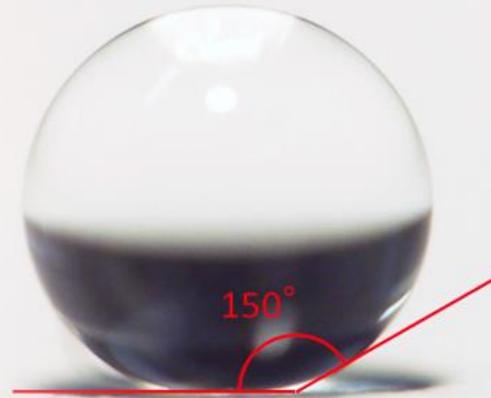


<http://spanish.peopledaily.com.cn/n/2015/0123/c92121-8840209.html>



**Nueva York, 23/01/2015 (El Pueblo en Línea)**- Científicos de la Universidad de Rochester, en Estados Unidos, presentaron un nuevo tratamiento con láser que es capaz de hacer que los metales repelan el agua de forma extrema, tanto que el líquido rebota al caer sobre ellos con un efecto parecido al del mercurio. Ello se consigue gracias al dibujo de ciertos patrones sobre la superficie del metal, que crea una compleja secuencia de estructuras a escala micro y nano que cambian las propiedades del material. "El material repele el agua con tanta fuerza que el agua rebota. Luego vuelve a caer sobre la superficie, vuelve a rebotar y después simplemente sale deslizándose por la superficie"

HIREC has an amazing contact angle as high as **150 degrees**.



Protect your infrastructural system and assets.

With HIREC



Without HIREC



**HIREC® is a super hydrophobic water repellent coating material (similar to paint) developed by NTT to protect its critical telecommunications equipment from snow, ice, and rain interference.**

<https://www.flotechps.com/advanced-coatings/super-hydrophobic-coatings/>

## Commercial Applications:

Some of the many ways that Ultra-Ever Dry can be used;

**Clothing – Boots, footwear & PPE**

**Building Material – Bricks, Cinder/Breeze Blocks, Concrete, Timber, Roofing Materials**

**Electronics – Printed Circuit Boards, Connectors, Housings, Motors**

**Tools, Equipment & Hardwear**

**Vehicles – Cement Trucks, Lorries, Loadbeds**

**General Corrosion prevention**

**General Protection from acids/bases**



# Hidrofobicidad –ejemplos

<http://spanish.peopledaily.com.cn/n/2015/0123/c92121-8840209.html>

<http://atriainnovation.com/tecnologias/nanoestructuracion/>

<http://www.hirecpaint.com/>

<https://www.flotechps.com/advanced-coatings/super-hydrophobic-coatings/>

# La naturaleza ondulatoria de la luz



## The Electromagnetic Spectrum

The light we can see with our eyes represents only a very small portion of the continuous range of electromagnetic waves that form the electromagnetic spectrum. On one end of the spectrum are radio waves, with wavelengths that can be as large as mountains. On the other end of the spectrum are gamma rays, with wavelengths as small as atomic nuclei. Frequency is a measure of the number of wave crests passing by a given point per second (or hertz). Shorter wavelengths have higher frequencies and higher energies than longer wavelengths.

Although our eyes can see only visible light, astronomers use all regions of the electromagnetic spectrum to study the universe. Each type of electromagnetic energy provides different clues about the properties of celestial objects. Scientists build devices that can detect different regions of the electromagnetic spectrum. Computer image-processing techniques then code the light into pictures that we can see.

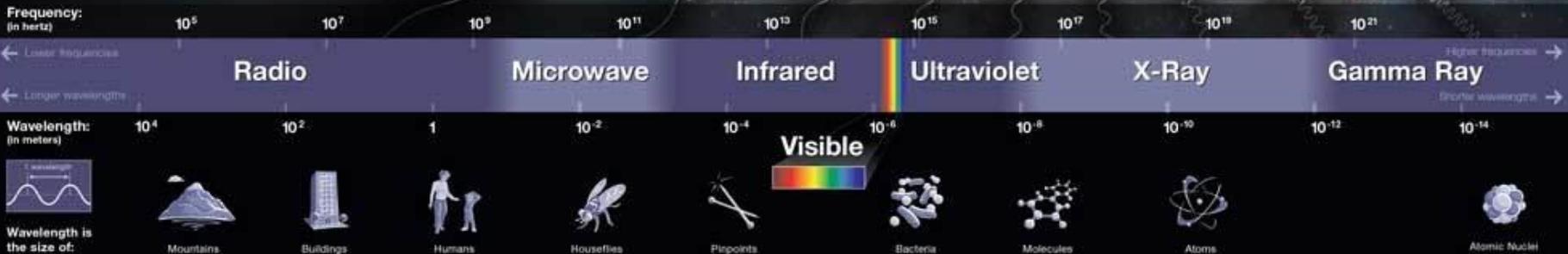
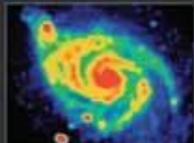


Image: The Whirlpool Galaxy in visible light, as seen by the Hubble Space Telescope



Radio



Infrared



Visible



Ultraviolet

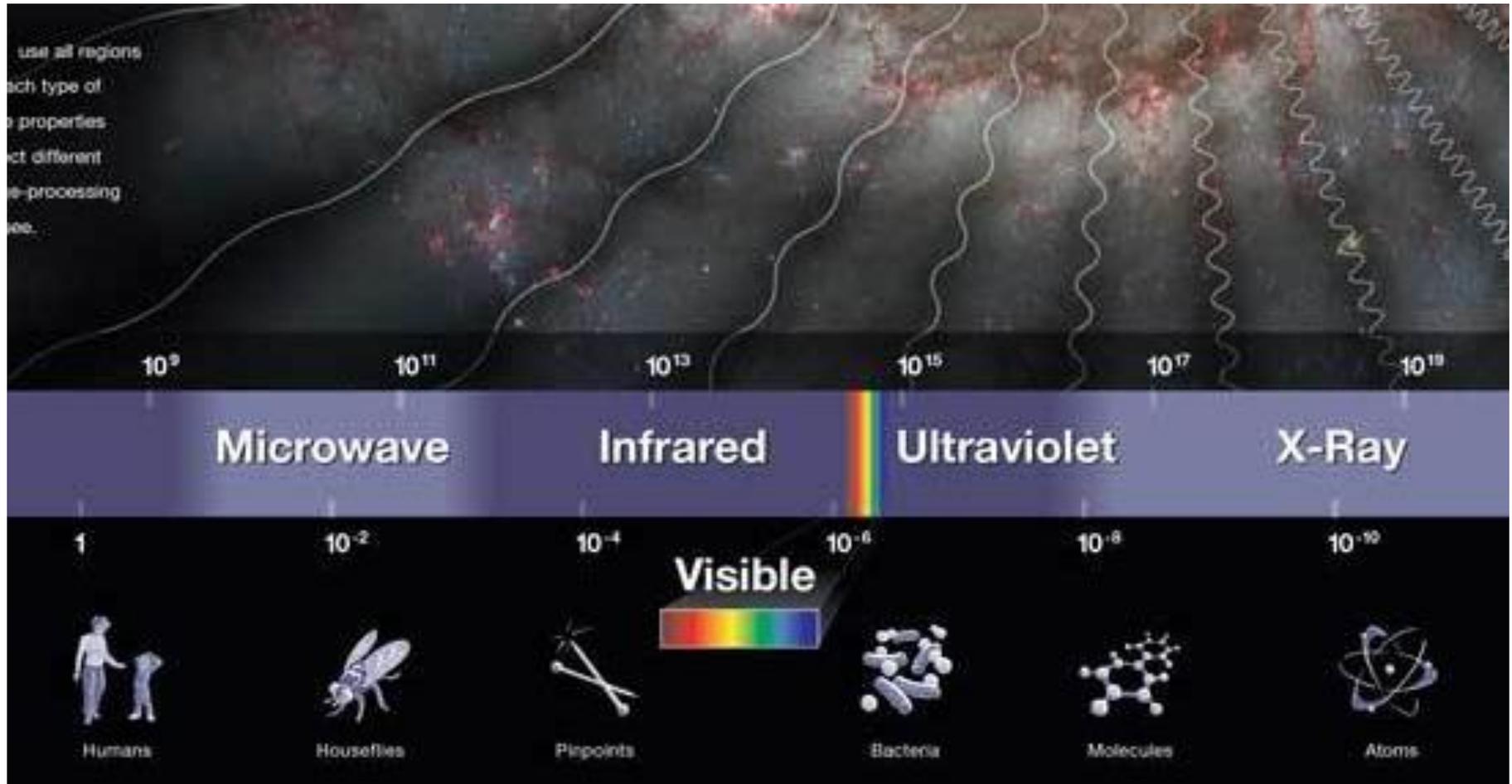


X-Ray

### The Whirlpool Galaxy at different wavelengths

Scientists use a variety of telescopes in space and on the ground to measure the full range of electromagnetic waves emitted by celestial objects.

# La naturaleza ondulatoria de la luz

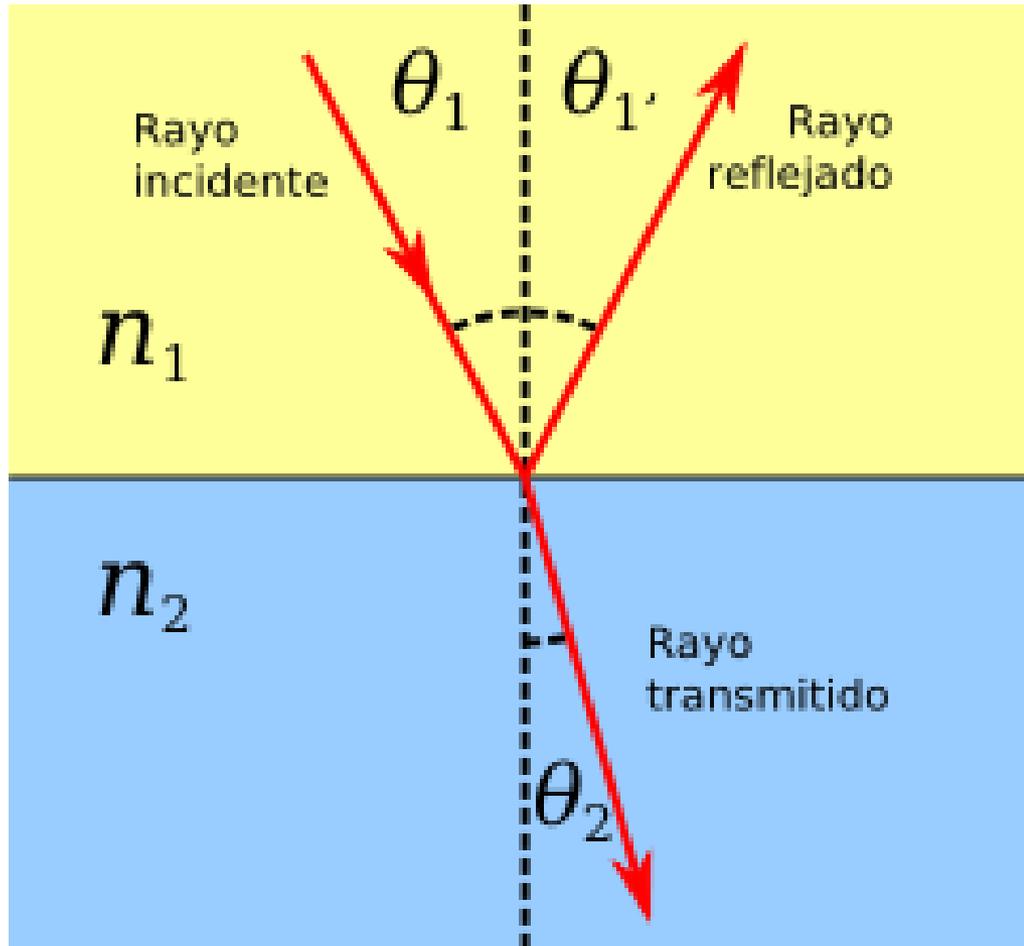


Interacción de la luz  
con la materia



Tamaño del objeto  $\leq \lambda$

# Reflexión, refracción e interferencia de onda



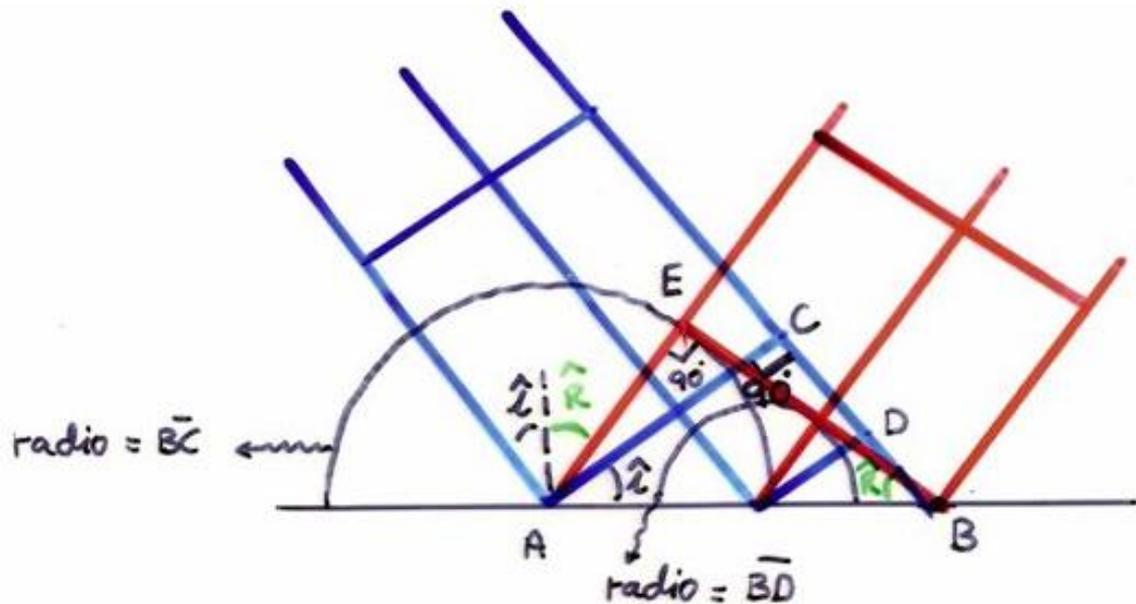
$$\frac{\text{Sen } \theta_1}{\text{Sen } \theta_2} = \frac{n_2}{n_1}$$

Donde  $n_1$  y  $n_2$  son los índices de refracción de cada medio de propagación (material).

# Reflexión, refracción e interferencia de onda

## REFLEXIÓN

- Reflexión** es el fenómeno por el cual una onda cambia su dirección de propagación al llegar a la superficie de separación de dos medios sin cambiar de medio.



$$\text{sen } \hat{i} = \frac{\overline{BC}}{\overline{AB}}$$

$$\text{sen } \hat{R} = \frac{\overline{AE}}{\overline{AB}}$$

Como  $\overline{AE} = \overline{BC}$

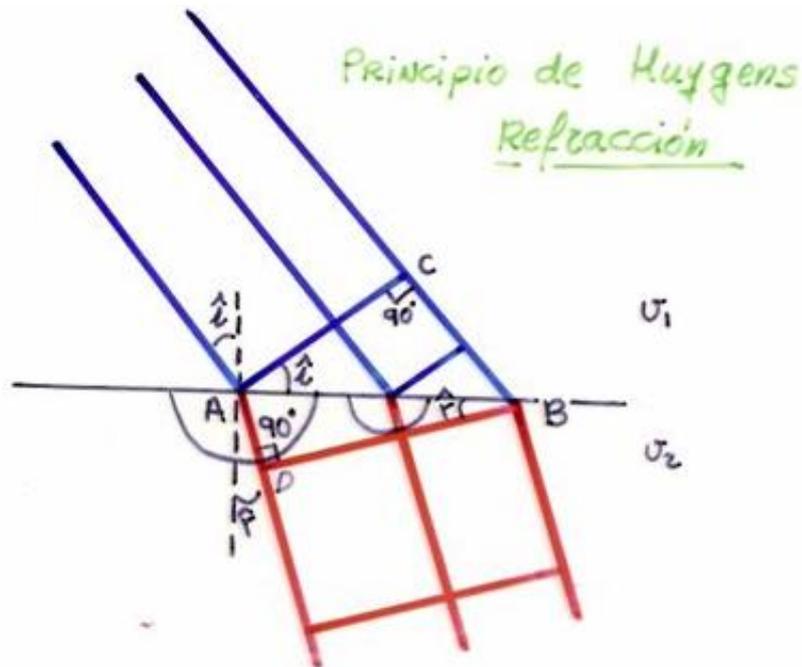
$$\text{sen } \hat{i} = \text{sen } \hat{R}$$

$$\hat{i} = \hat{R}$$

# Reflexión, refracción e interferencia de onda

## REFRACCIÓN

**Refracción** es el fenómeno por el cual una onda cambia su dirección de propagación al pasar de un medio a otro diferente. La velocidad de propagación en los dos medios también cambia.



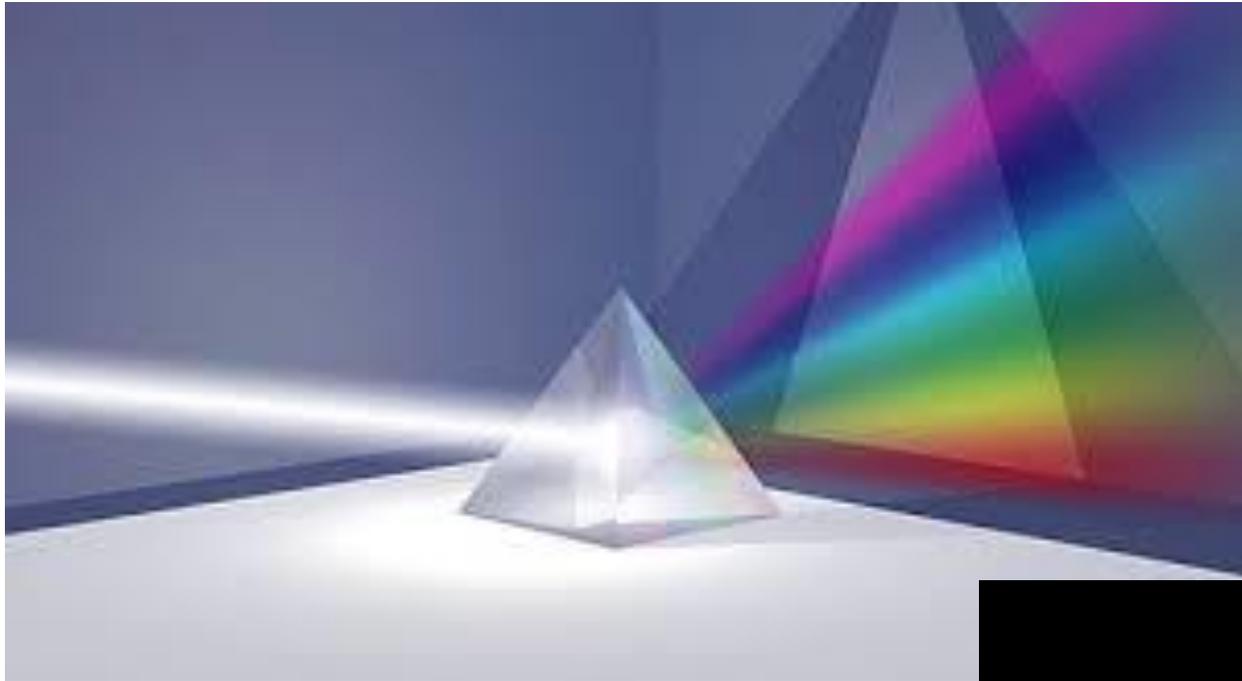
$$\left. \begin{aligned} \operatorname{sen} \hat{i} &= \frac{\overline{BC}}{\overline{AB}} = \frac{v_1 t}{\overline{AB}} \\ \operatorname{sen} \hat{r} &= \frac{\overline{AD}}{\overline{AB}} = \frac{v_2 t}{\overline{AB}} \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{dividiendo} \\ \frac{\operatorname{sen} \hat{i}}{\operatorname{sen} \hat{r}} = \frac{v_1}{v_2} \end{array}$$

Como el índice de refracción:  $n = \frac{c}{v}$

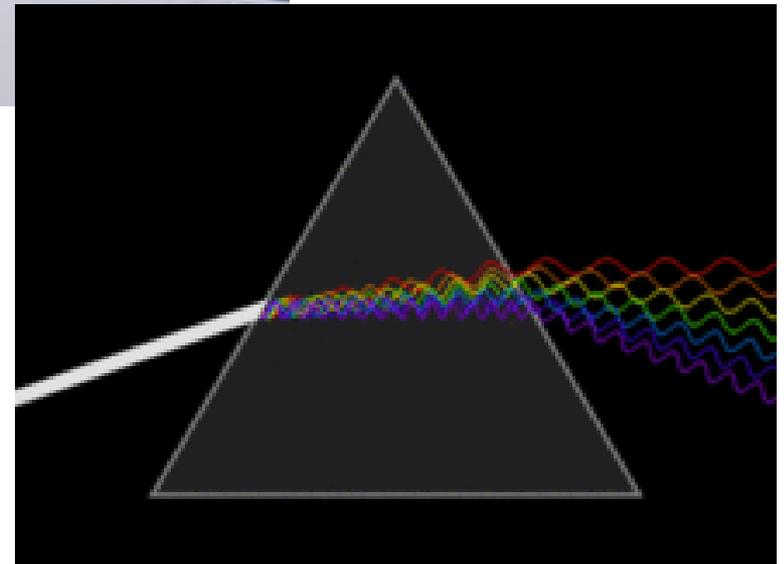
$$\frac{\operatorname{sen} \hat{i}}{\operatorname{sen} \hat{r}} = \frac{n_2}{n_1}$$

Ley de Snell

# Reflexión, refracción e interferencia de onda

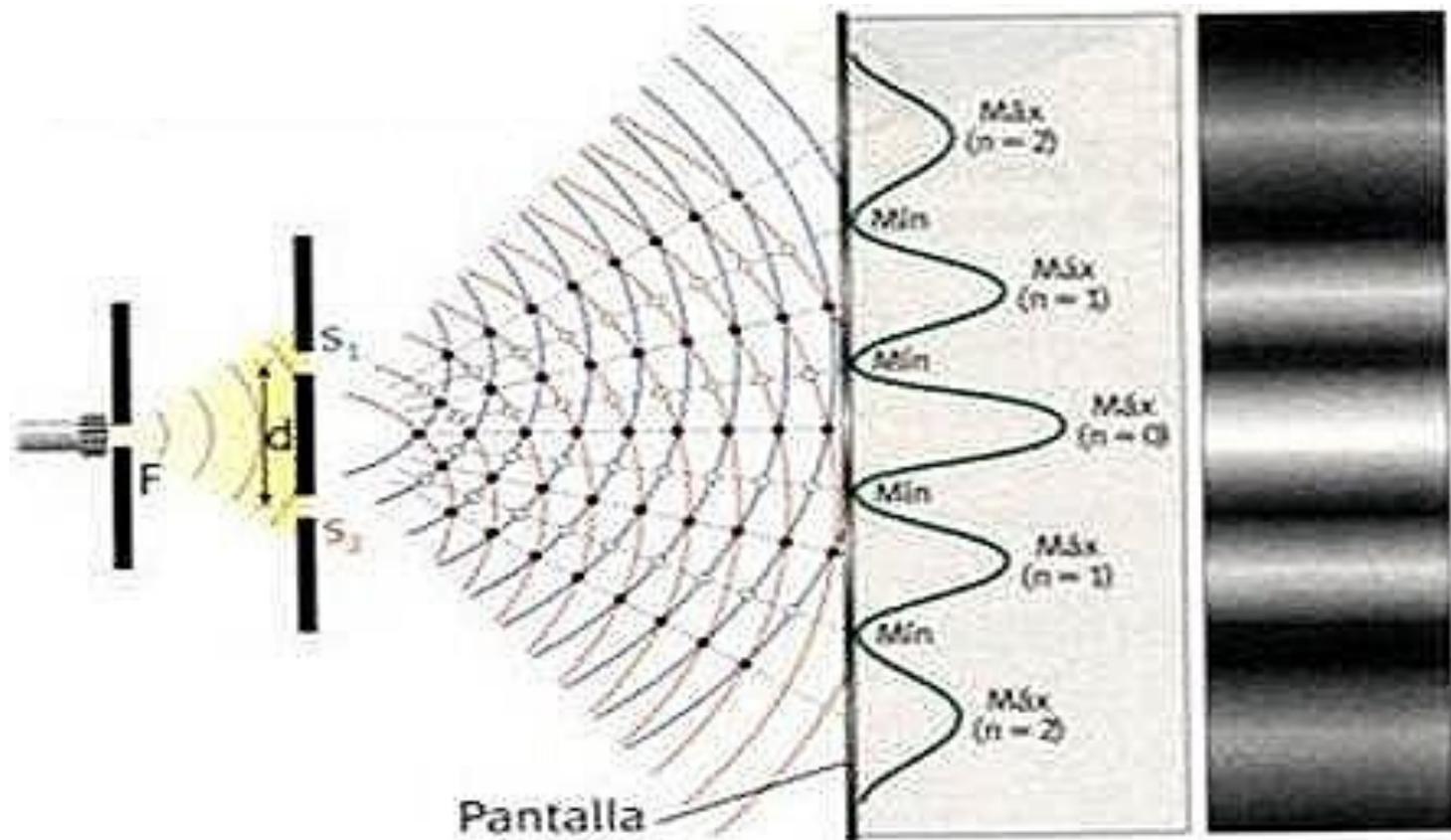


La luz blanca se descompone al pasar por un prisma (refracción).



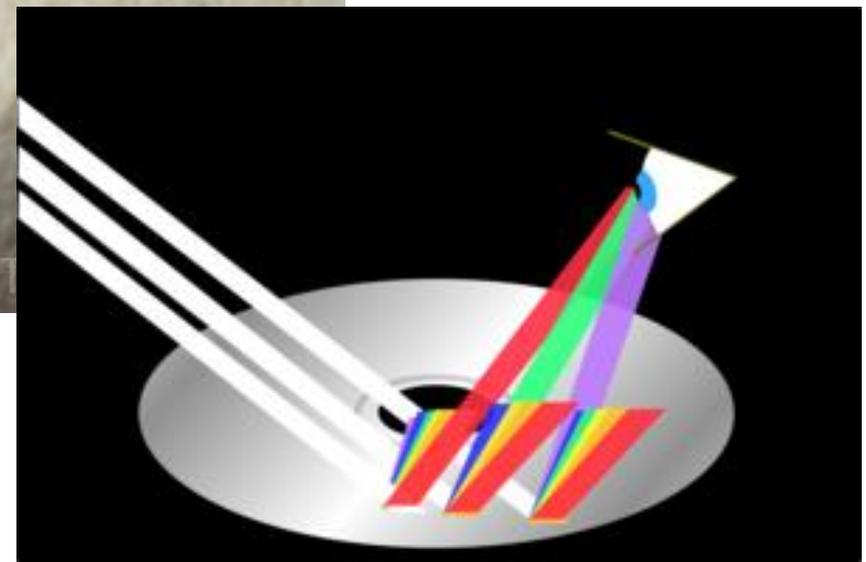
# Reflexión, refracción e interferencia de onda

La **difracción** es un fenómeno característico de las ondas que se basa en la desviación de éstas al encontrar un obstáculo o al atravesar una rendija. La difracción ocurre en todo tipo de ondas, desde ondas sonoras, ondas en la superficie de un fluido y ondas electromagnéticas como la luz visible y las ondas de radio.



# Reflexión, refracción e interferencia de onda

Ejemplo de difracción reflectiva



## Sustancia sólida

```
graph TD; A[Sustancia sólida] --> B[Cristalina]; A --> C[Amorfa];
```

**Cristalina**

(Átomos y moléculas ordenados)

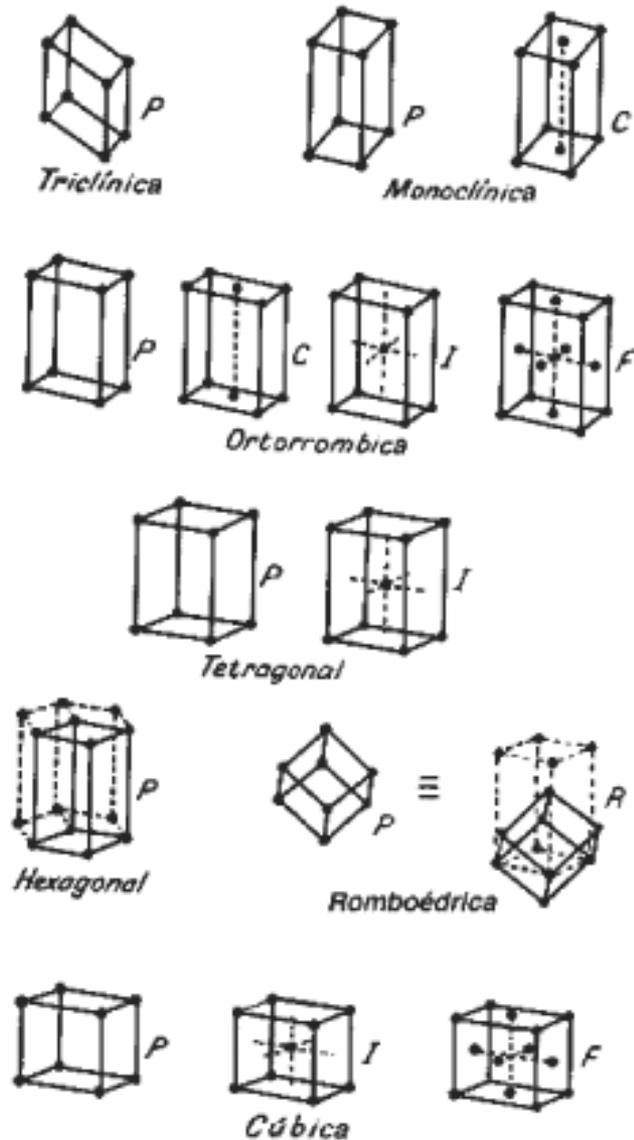
**Amorfa**

(Átomos sin un orden en particular)

Para un repaso del tema “estructura cristalina”, ver por ejemplo alguno de los siguientes libros:

- Smith, W. F. Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales. McGraw-Hill (2006).
- Askeland, D. R.; Phulé, P. P. La ciencia e ingeniería de los materiales. Thomson (2004)

# Cristales



Los cristales están formados por una repetición periódica de moléculas en tres dimensiones. El cristal se puede representar matemáticamente como una red tridimensional, llamada «red de Bravais», en la que todas las intersecciones, o nodos, son idénticas.



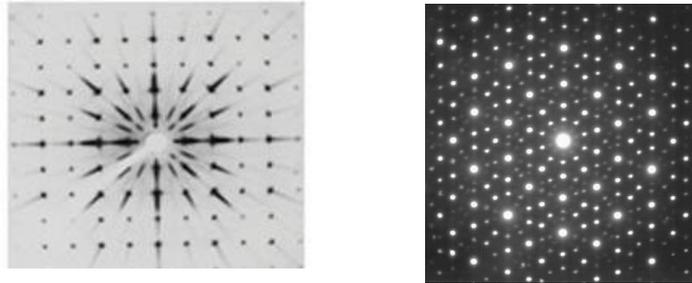
En física del estado sólido y química, un **crystal** es un sólido que presenta un **patrón de difracción** no difuso y bien definido.

*Representación de las 14 redes de Bravais.*

# Cristales

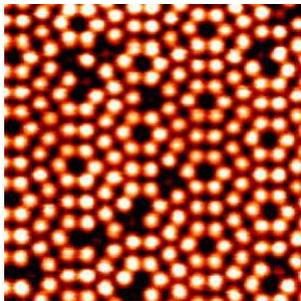
**Técnicas más usadas para determinar la estructura cristalina de un material:**

- ❑ **Difracción de rayos X → estructura cristalina del volúmen del sólido.**

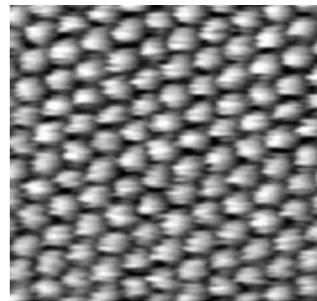


*Patrones de difracción*

- ❑ **Microscopía de efecto túnel (STM) → estructura cristalina de la superficie.**



*Superficie  
de silicio*



*Superficie  
de grafito*

- ❑ **Otras microscopías:** - de fuerza atómica (AFM)  
- de transmisión (TEM, de alta resolución)
- ❑ **Etc.**

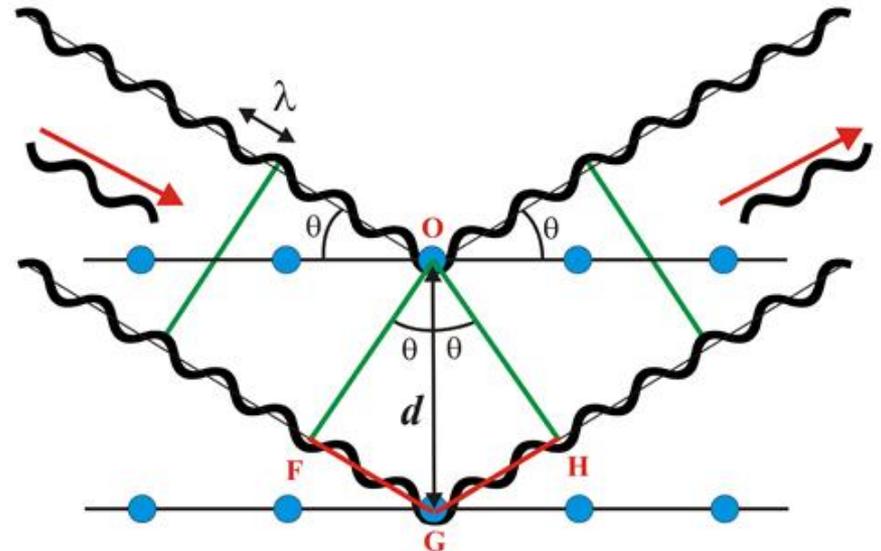
# Difracción de rayos X

La difracción es un fenómeno que se produce cuando una onda encuentra un obstáculo o una abertura al propagarse, de tamaño comparable a su longitud de onda.

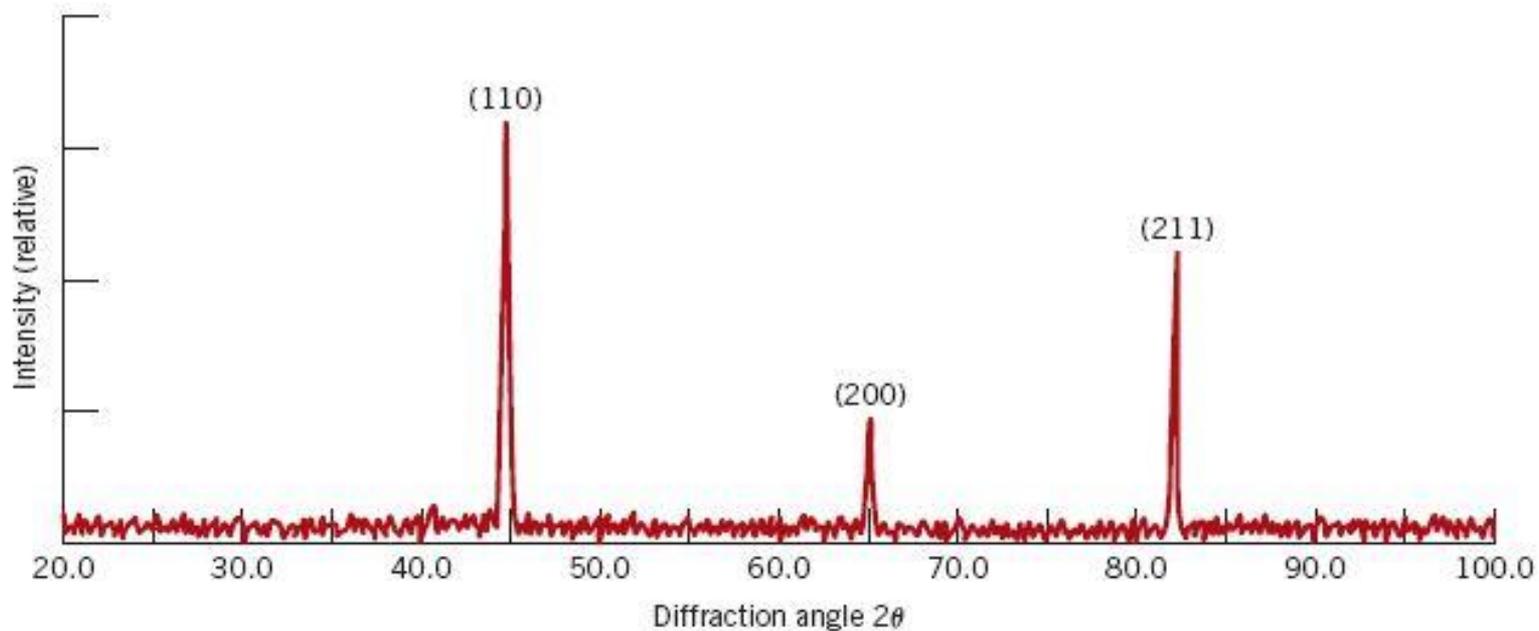
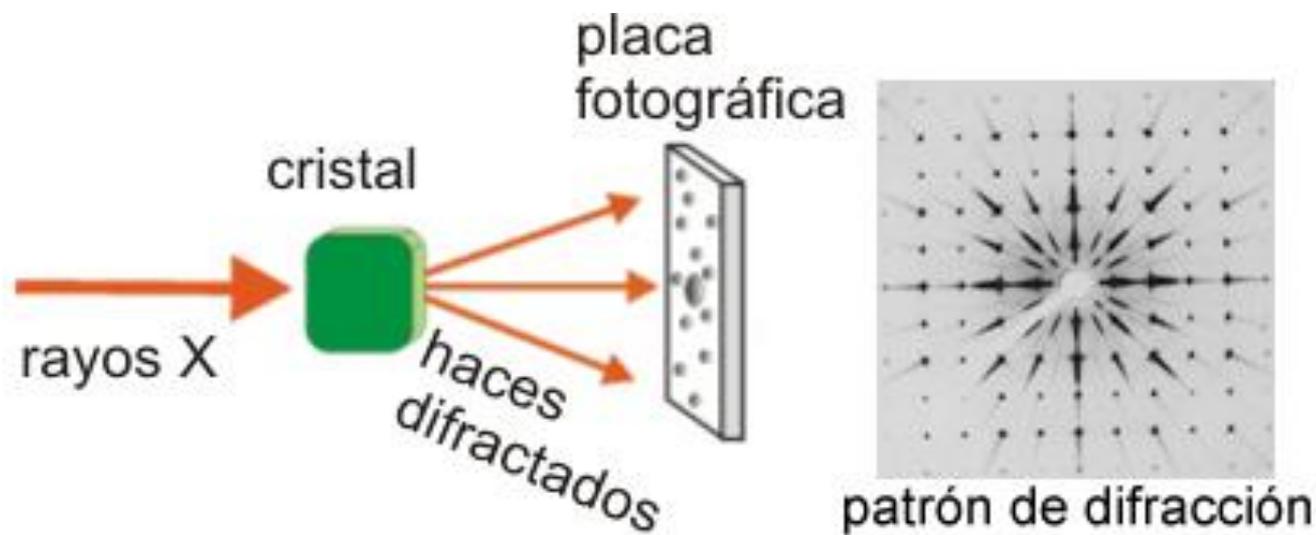
\* Este fenómeno es característico de todo tipo de ondas y genera una propagación no rectilínea de la onda.

\* El **patrón de difracción** es consecuencia del proceso de **interferencia** entre ondas generadas en puntos del espacio separados por distancias semejantes a la longitud de onda.

Los rayos X pueden difractarse al atravesar un cristal o ser dispersados por él, ya que el cristal está formado por redes de átomos regulares que actúan como redes de difracción muy finas.



# Difracción de rayos X



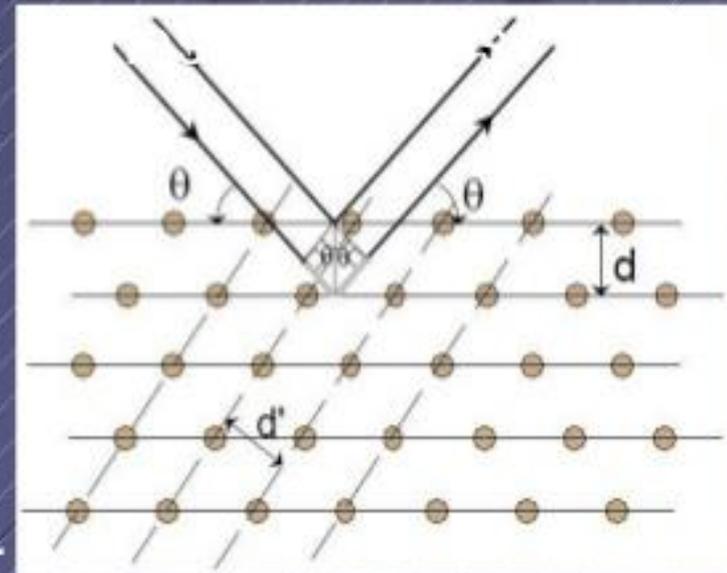
# Difracción de rayos X. Ley de Bragg

William H. Bragg (1862-1942) y William L. Bragg (1890-1971) fueron quienes demostraron la utilidad del fenómeno que descubrió Laue, para obtener la estructura interna de los cristales.

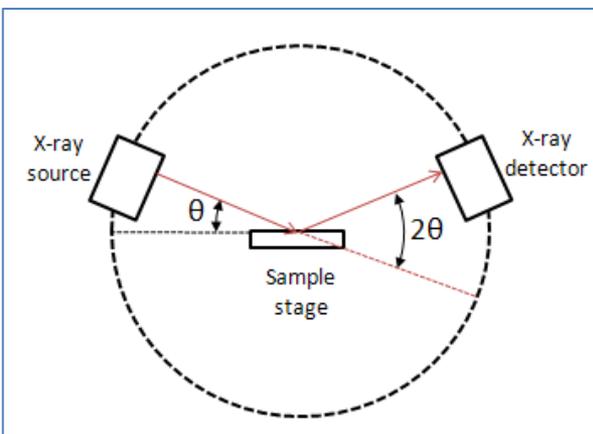
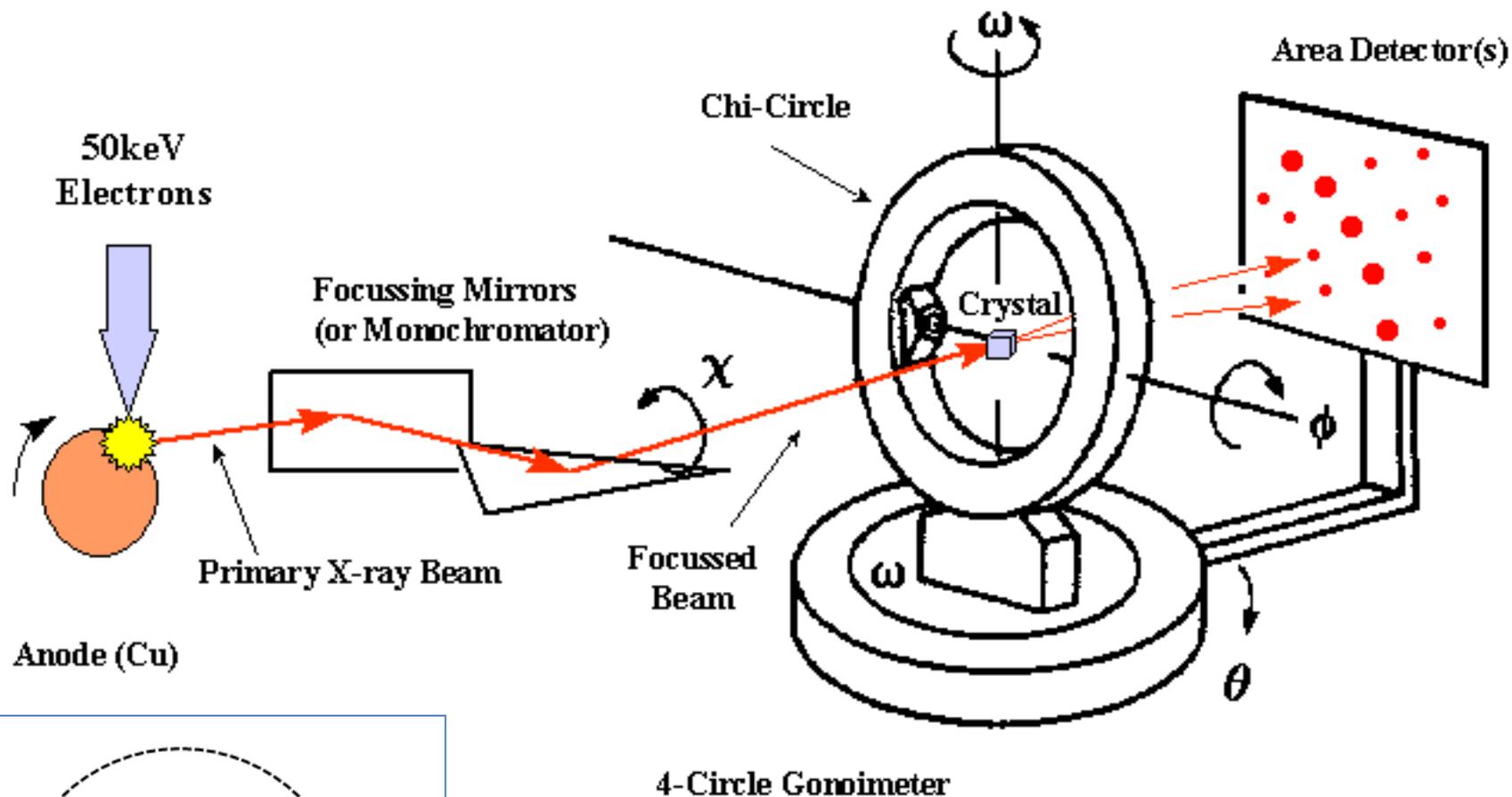
$$n \lambda = 2d \sin \theta$$

La variable  $d$  es la distancia entre los paralelos,  $\lambda$  la longitud de onda,  $n$  un número entero (1,2,3...),  $\theta$  el ángulo entre el haz difractado y la dirección original del haz.

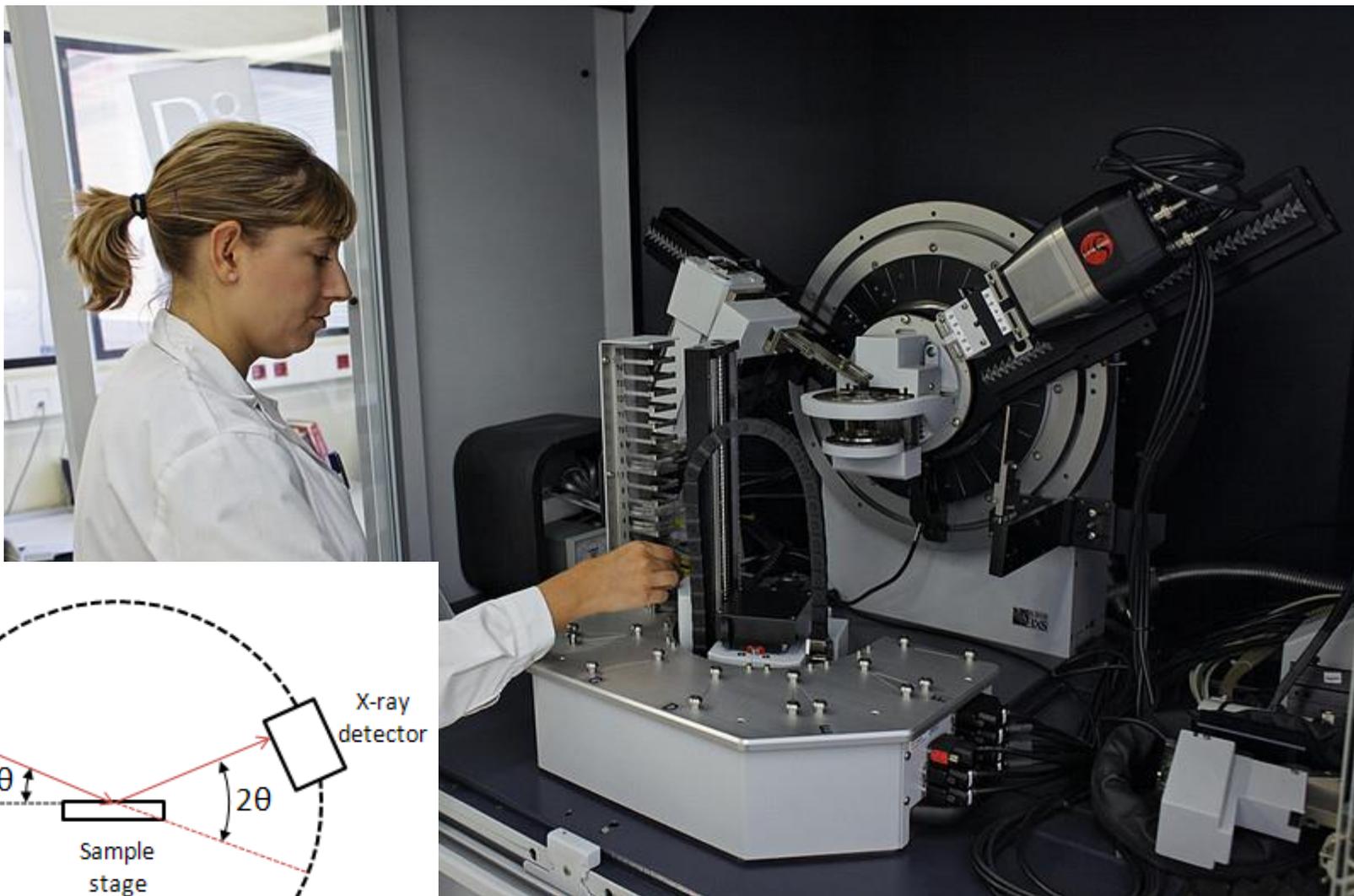
Para que se cumpla la ley de Bragg la interferencia debe ser constructiva.



# Difracción de rayos X. Equipo



# Difracción de rayos X. Equipo

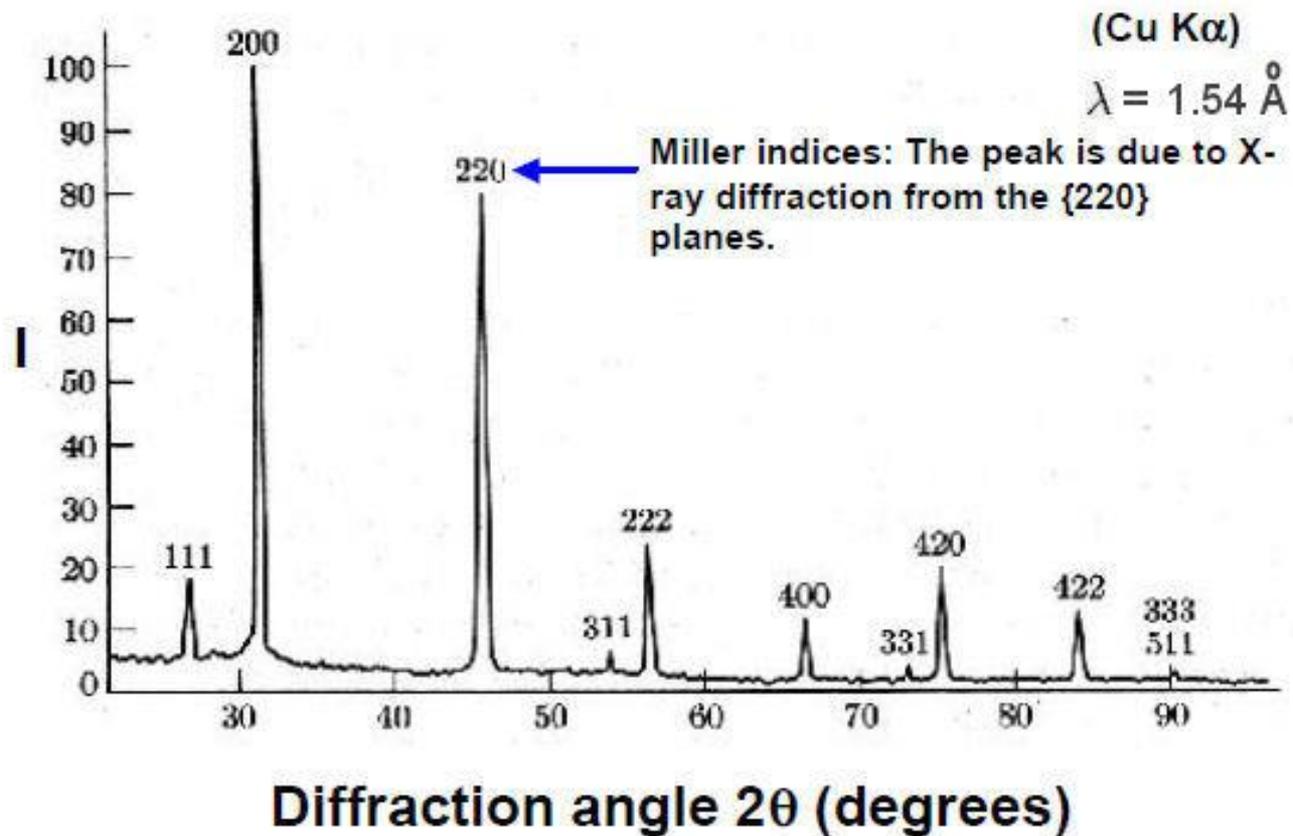


# Difracción de rayos X. Aplicaciones

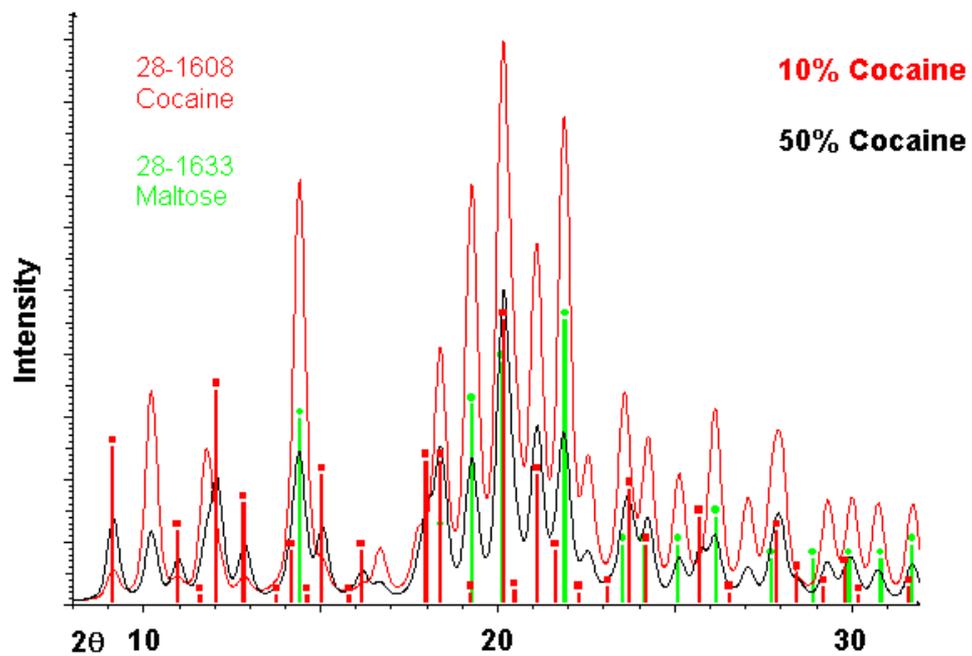
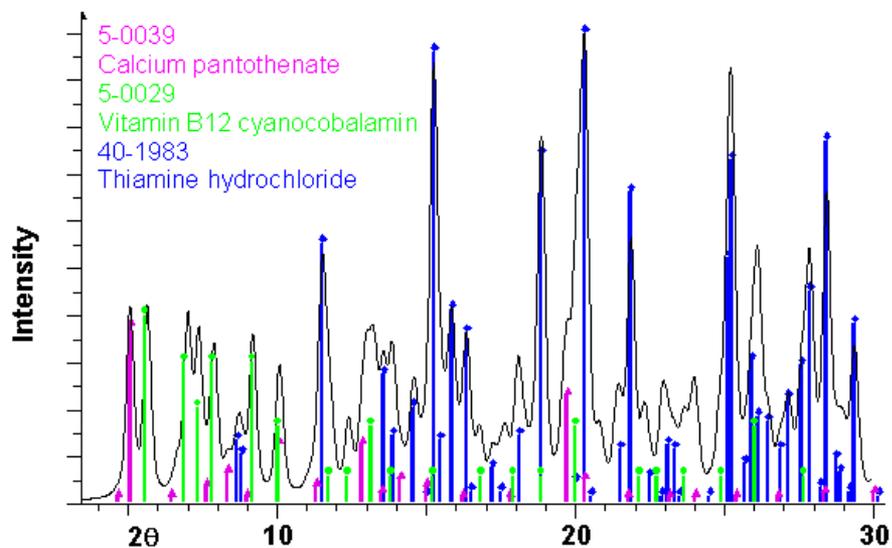
- Identificación de sustancias cristalinas desconocidas.
- Análisis cualitativo y cuantitativo de fases cristalinas.
- Caracterización y desarrollo de nuevos materiales.
- Control de calidad de materias primas y productos finales.
- Especiación de arcillas.
- Determinación de transformaciones de fase.
- Determinación de parámetros estructurales.
- Determinación del grado de orden estructural.
- Detección de imperfecciones cristalinas.

# Difracción de rayos X. Aplicaciones

## XRD Pattern of NaCl Powder

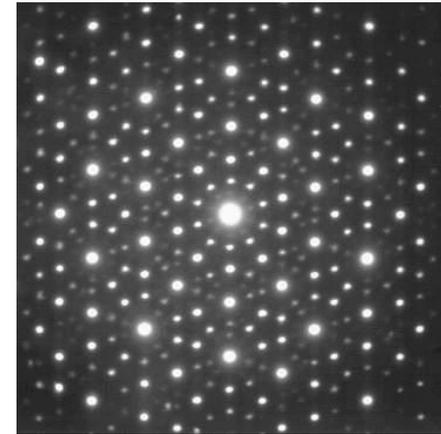
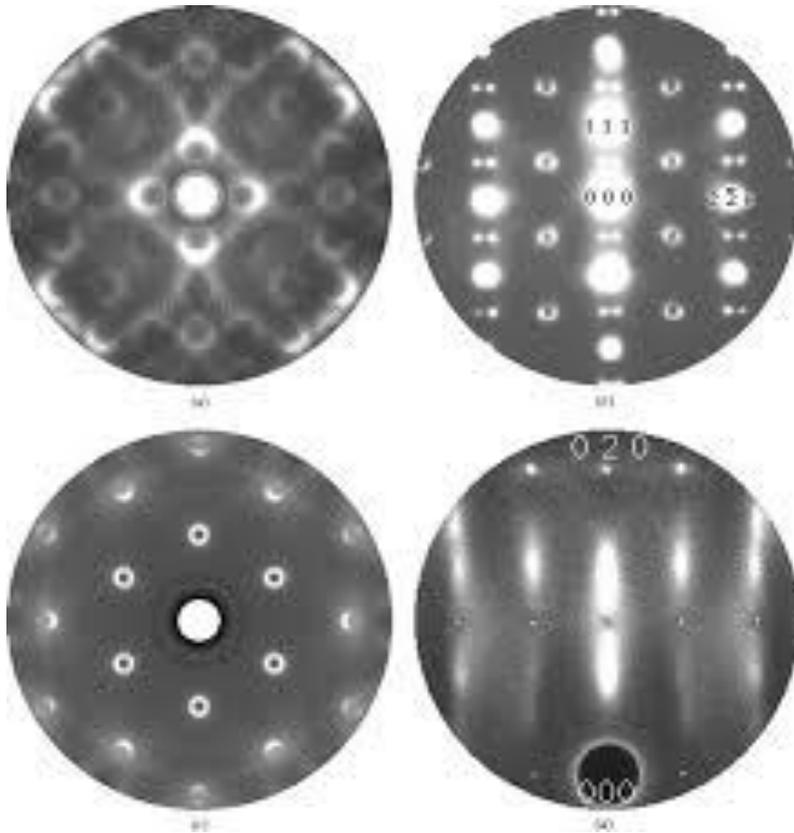


# Difracción de rayos X. Aplicaciones



# Difracción de rayos X.

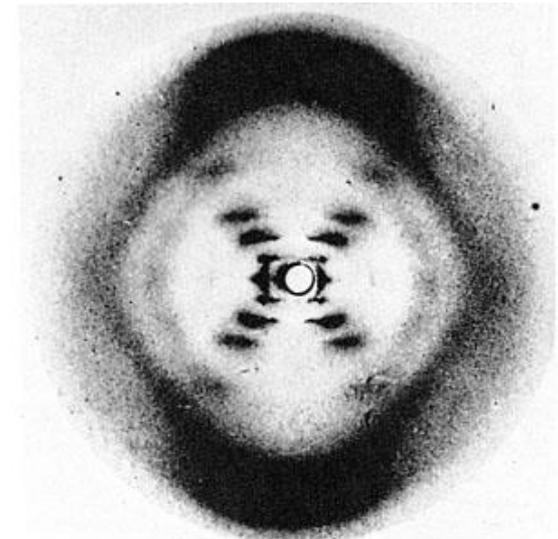
*Patrones de difracción de  $TiO_2$*



*icosahedral  $Ho-Mg-Zn$  quasicrystal*



(a) Rosalind Franklin

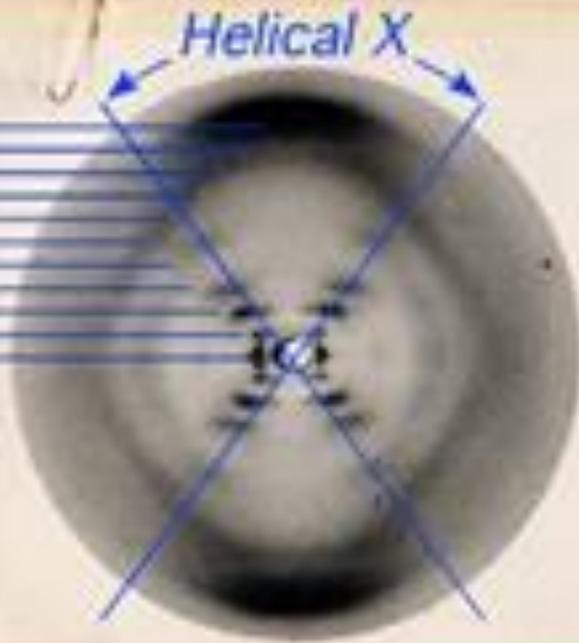


(b) Franklin's X-ray diffraction photograph of DNA

A

Layer Lines

10  
5  
0



Franklin &  
Wilkins  
DNA structure  
Type A

B

