

DESENVOLVIMENTO DE UM APLICATIVO ANDROID PARA CALCULAR O TAMANHO DE NANOCRISTAIS

Fecha de envío: 21/06/2024

Fecha de aceptación: 01/07/2024

Erasto Vergara Hernández

Instituto Politécnico Nacional, UPIIH
San Agustín Tlaxiaca, Hidalgo, México

León Loa Pelcastre

Tecnológico de Estudios Superiores de
Coacalco
Coacalco de Berriozabal, México

Irving Mendoza Paz

Tecnológico de Estudios Superiores de
Coacalco
Coacalco de Berriozabal, México

RESUMEN: La ecuación de Scherrer es una herramienta ampliamente utilizada para calcular el tamaño promedio de nanocristales mediante la técnica de difracción de rayos X (DRX). En este trabajo se implementa el uso de una calculadora para encontrar el tamaño de nanocristales haciendo uso de la ecuación de Scherrer desarrollándose en la plataforma de programación Android. El diseño de la aplicación se realizó para ser considerada una herramienta portátil, fácil de usar e interactiva con el usuario. Al crearse a través del entorno de Android Studio, la aplicación se puede ejecutar en la mayoría de teléfonos celulares y

tabletas del mercado, transformándose en una herramienta muy potente para su uso en las metodologías de enseñanza de los alumnos de ingeniería de las ciencias de los materiales e ingeniería en nanotecnología.

PALABRAS CLAVE: Difracción de rayos X, ecuación de Scherrer, Android.

ABSTRACT: The Scherrer equation is a widely used tool for calculating the size of nanocrystals using the X-ray diffraction (XRD) technique, through the use of mobile application programming. In this paper, the use of a calculator to find the size of the nanocrystals and the use of the Scherrer equation in the Android programming platform is implemented. The design of the application has become a portable tool, easy to use and interactive. By designing using Android Studio you can run on most cell phones and tablets. The application becomes a very powerful tool for use in teaching methodologies of engineering students of materials science and nanotechnology engineering.

KEYWORDS: X-ray diffraction, Scherrer equation, Android, application

INTRODUCCIÓN

Hoy en día la enseñanza en el campo de la ingeniería y de la ciencia de los materiales presenta nuevos retos; se deben buscar nuevas alternativas a las metodologías tradicionales de enseñanza que permitan a los alumnos incorporarse activamente al proceso de enseñanza-aprendizaje. Diferentes tipos de metodologías y conceptos se han desarrollado e implementado para llevarse a cabo en el aula: aprendizaje basado en problemas (PBL, por sus siglas en inglés), aprendizaje basado en proyectos, Aprendizaje de Indagación Guiada Orientada a Procesos (POGIL, por sus siglas en inglés), así como también, metodologías para las cuales los docentes se han visto en la necesidad de ir incorporado las herramientas de las tecnologías de la información para mejorar la calidad de la enseñanza.

En años recientes y en respuesta al entorno que viven los jóvenes alumnos con el mundo digital, dónde es frecuente que ellos utilicen los dispositivos móviles para hacer distintas tareas, desde jugar videojuegos portátiles en línea, realizar comunicaciones inalámbricas, hasta desenvolverse en un ambiente de realidad virtual, ha hecho que las instituciones educativas estén atentas a estos cambios y han introducido el uso de los dispositivos móviles en el ambiente del aprendizaje como una herramienta en el proceso de enseñanza.

Para el desarrollo de aplicaciones móviles, el sistema Android presenta varias ventajas para su uso, es un sistema operativo de código abierto, el cual está compuesto principalmente por el núcleo de Linux. Android es usado por una gran cantidad de dispositivos, desde teléfonos celulares hasta tabletas y consolas de videojuegos junto con una amplia gama de otros electrónicos de consumo. Además, el sistema operativo Android está presente en cerca del 70% del mercado de teléfonos inteligentes en todo el mundo, por lo que desarrollar aplicaciones en esta plataforma tiene el potencial de llegar a un gran número de usuarios móviles.

En este trabajo se desarrolla una aplicación en ambiente Android para calcular el tamaño promedio de nanocristales haciendo uso de la técnica de difracción de rayos X.

DESARROLLO

Una de las técnicas fundamentales en la caracterización de materiales es la difracción de rayos X, es una técnica no destructiva que proporciona información fundamental de la estructura del material que se desea estudiar, además de ser una técnica accesible en gran parte de los laboratorios de investigación [1]. La difracción de rayos X es también un método para poder determinar el tamaño de las nanopartículas de los cristales o bien el tamaño de los cristalitas de los nanomateriales. Paul Scherrer, fue el primer científico en investigar el tamaño de la nanopartícula a partir de los patrones de difracción de rayos X publicando sus resultados en 1918 donde se incluía la conocida ecuación de Scherrer [2]. La ecuación es:

$$D_{hkl} = \frac{K\lambda}{\Delta(2\theta)\cos\theta} \quad (1)$$

dónde:

D_{hkl} es el tamaño del cristal

hkl son los índices de Miller de los planos que se estudian.

K es un factor numérico en dependencia del factor de forma del cristal.

λ es la longitud de onda de la fuente de emisión de rayos X.

$\Delta(2\theta)$ es la anchura a medida altura del pico de difracción de rayos X en radianes.

θ es el ángulo de Bragg de la reflexión evaluada.

Además de depender de la forma del cristal, el valor del factor K también depende de la distribución del tamaño y de la manera en que se determina el ancho del pico. Usando la información anterior se considera un valor de $K=0.9$ como una buena aproximación para el cálculo del tamaño del cristal de una forma esférica.

Es importante tener en cuenta que la ecuación de Scherrer solo se puede aplicar para tamaños promedio de cristales de hasta 100–200 nm debido a que el ensanchamiento del pico de difracción disminuye con el aumento del tamaño del cristal, haciéndose difícil separar el ensanchamiento del pico causado por el tamaño del cristal de otros factores que ensanchen el pico.

La aplicación está realizada mediante programación por bloques, en la cual el usuario es capaz de elegir mediante un botón la acción a realizar. El diagrama de flujo de programación se muestra en la Figura 1. Una vez dentro de esta opción el usuario introduce los valores de la ecuación (1) en dependencia del espectrograma de difracción de rayos X del material a estudiar; se presenta un valor por defecto para el valor K el cual usualmente es de 0.9 para formas esféricas, aunque es posible cambiarlo. Una vez ingresados los valores y al presionar el botón de Calcular se obtiene el resultado del tamaño promedio del nanocristal [3-5].

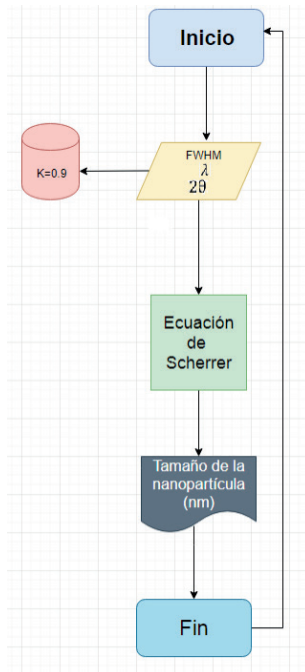


Figura 1 – Diagrama de flujo de la aplicación.

El diagrama de flujo se implementó bajo el entorno de programación de Android Studio, por lo cual se utiliza la programación por medio de bloques y orientada a objetos. En la Figura 2 se muestra la programación realizada para la creación de la pantalla de inicio de la aplicación, y en la Figura 3 se muestra el código de programación para la tarea del cálculo del tamaño del nanocristal.

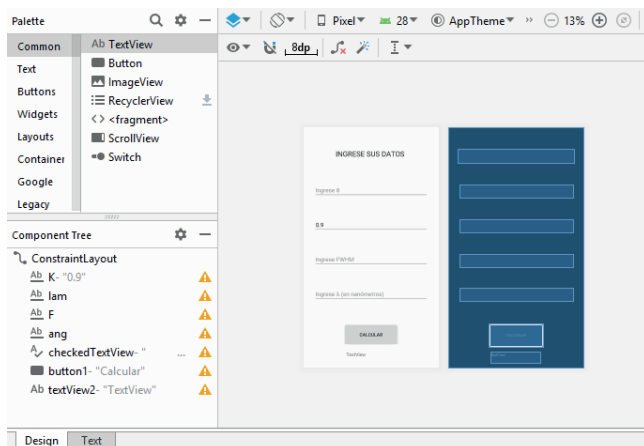


Figura 2 – Ventana de programación para la pantalla de inicio

```

} else if (lam.getText().toString().equals(""))
{
    Toast.makeText(getBaseContext(), "Por favor ingresa todos los datos", Toast.LENGTH_SHORT).show();
} else if (F.getText().toString().equals(""))
{
    Toast.makeText(getBaseContext(), "Por favor ingresa todos los datos", Toast.LENGTH_SHORT).show();
} else if (ang.getText().toString().equals(""))
{
    Toast.makeText(getBaseContext(), "Por favor ingresa todos los datos", Toast.LENGTH_SHORT).show();
} else {
    k = Double.parseDouble(K.getText().toString());
    l = Double.parseDouble(lam.getText().toString());
    f = Double.parseDouble(F.getText().toString());
    a = Double.parseDouble(ang.getText().toString());
    l=l*0.00000001;
    rad=Math.toRadians(a/2);
    rad2=Math.toRadians(f);
    res = ((k * l) / (rad2 * Math.cos(rad)))/0.00000001;

    display = (TextView) findViewById(R.id.textView2);
    display.setText(String.format("o1= %.3f",res)+ " Nanómetros");
    display.setTextColor(Color.parseColor("#ffa31a"));
}

```

Figura 3 – Código de programación para el cálculo del tamaño de nanocrystal

RESULTADOS

En principio, la aplicación se usó para calcular el tamaño de la nanopartícula de ZnO cuyo espectrograma de difracción de rayos X se muestra en la Figura 4, y que corresponde al depósito de películas delgadas de ZnO crecidas por la técnica de rocío pirolítico.

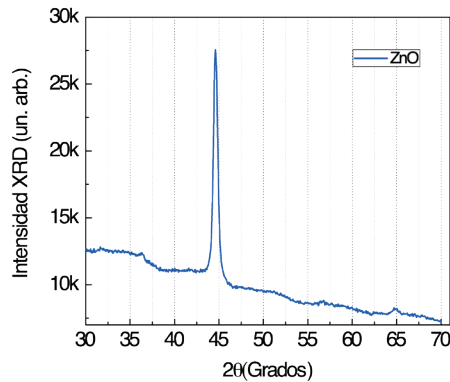


Figura 4 – Espectrograma de DRX de depósito de película delgada de ZnO.

Los datos con los que se programó la ecuación de Scherrer para el espectro de DRX de la Figura 4 se muestran en la Tabla 1. El valor de K se consideró de 0.9, y la longitud de onda para el equipo utilizado es de una emisión de cobre con $\lambda=0.15406$ nm. El ancho medio del pico obtenido en el espectrograma es de 0.5118° , por último el ángulo en el que se presentó el pico está centrado en 44.6186° .

Variable	Valor
K	0.9
λ	0.15406 (nm)
Δ (2 θ)	0.5118 (°)
2 θ	44.6186 (°)

Tabla 1 – Datos para la aplicación de la ecuación de Scherrer

Los datos de la Tabla 1 son ahora introducidos en la aplicación desarrollada, la cual se muestra en la Figura 5, luego se realiza el cálculo en función de los parámetros establecidos y con el uso de la ecuación de Scherrer se obtiene el resultado final que se muestra en la Figura 6 y que da un valor de tamaño de nanocristal para la muestra del espectro DRX de la Figura 4 de 14.76 nm, tal como se muestra en la Figura 6.

The screenshot shows a mobile application interface with a green header 'Ecuación de Scherer'. Below the header, the text 'INGRESE SUS DATOS' is centered. There are four input fields, each with a label on the right and a value on the left:

- Label: **2θ** (in red), Value: 44.6186
- Label: **K** (in red), Value: 0.9
- Label: **FWHM** (in red), Value: .5118
- Label: **Longitud de onda (nm)** (in red), Value: 0.15406

 At the bottom of the input area is a grey button labeled 'CALCULAR'. The bottom of the screen shows a purple Android navigation bar with back, home, and recent apps icons.

Figura 5 – Pantalla para adquisición de datos



Figura 6 – Pantalla de resultados

La aplicación también se usó para el estudio del cálculo del tamaño de nanocristales de silicio de películas delgadas de nitruro de silicio enriquecido de silicio depositadas de acuerdo al procedimiento detallado en [9].

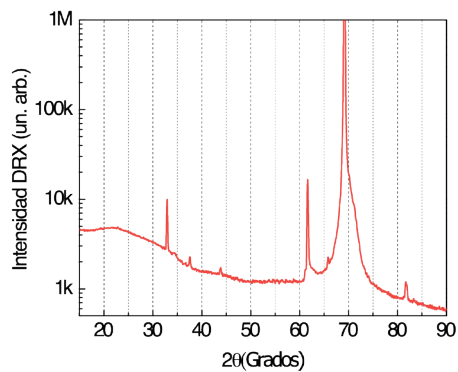


Figura 7 – Espectrograma de DRX de depósito de Nitruro de silicio no estequiométrico [9].

El espectrograma de difracción de rayos X obtenido se muestra en la Figura 7, para implementar la ecuación de Scherrer se consideró el pico de mayor intensidad, que corresponde al centrado en 69.125° , y aplicando los datos de la Tabla 2 para el correspondiente pico, en la calculadora de tamaño de nanocristales de la Figura 8 se obtuvo un valor de nanocristal de 23.41 nm que corresponde al reportado en [9].

Variable	Valor
K	0.9
λ	0.15406 (nm)
$\Delta (2\theta)$	0.4120 ($^\circ$)
2θ	69.125 ($^\circ$)

Tabla 2 – Datos para la aplicación de la ecuación de Scherrer para el espectrograma de la Figura 7.

The image shows a mobile application interface with a green header titled "Ecuación de Scherer". Below the header, the text "INGRESE SUS DATOS" is centered. There are four input fields, each containing a numerical value: 69.125, 0.9, 0.4120, and 0.15406. A grey button labeled "CALCULAR" is positioned below the input fields. The bottom of the screen shows a purple navigation bar with standard Android icons (back, home, recent apps).

Figura 8 – Pantalla para adquisición de datos

Es importante establecer que el cálculo del tamaño del nanocristal mediante la ecuación de Scherrer es una estimación aproximada y no considera los esfuerzos presentes en el material, sin embargo, es una técnica en la cual los problemas para obtener resultados representativos en el tamaño del nanocristal son menos exigentes que en otras [1].



Figura 9 – Pantalla de resultados

CONCLUSIONES

En este trabajo se desarrolló en el sistema operativo Android una aplicación para dispositivos móviles con el fin de calcular el tamaño promedio de los nanocristales de las estructuras de un sólido a partir del pico de mayor intensidad obtenido a través de un difractograma de rayos X, así como de los parámetros requeridos por la ecuación de Scherrer; la aplicación resulta ser una herramienta potente para su uso en diferentes ambientes, tanto dentro del aula como en los laboratorios de investigación, y dado que el sistema operativo Android, en que se programó, permite una gran adaptabilidad, la aplicación puede implementarse en teléfonos celulares, tabletas y dispositivos móviles llegando de esta manera a una gran cantidad de usuarios por su gran portabilidad.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Secretaría de Investigación y Posgrado del Instituto Politécnico Nacional (SIP-IPN) de México (Proyecto 20242596 y Proyecto 20242940) por el apoyo otorgado.

REFERENCIAS

1. U. Holzwarth and N. Gibson, "The Scherrer equation versus the Debye-Scherrer equation;," Nat. Publ. Gr., vol. 6, no. 9, p. 534, 2011.
2. H. Stille, "Aus den Nachrichten der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen," Naturwissenschaften, vol. 17, no. 21, pp. 393–394, 1929.
3. M. Aparicio and G. Carbajal, "Utilidad de la difracción de rayos x en las nanociencias," Mundo Nano, vol. 3, no. 2, pp. 62–72, 2010.
4. X. Li, X. Lian, and F. Liu, "Rear-End Road Crash Characteristics Analysis Based on Chinese In-Depth Crash Study Data," pp. 1536–1545, 2016.
5. R. E. Ted Kroon, "Nanoscience and the Scherrer equation versus the 'Scherrer-Göttingen equation,'" S. Afr. J. Sci., vol. 109, no. 5–6, pp. 5–6, 2013.
6. Amaro Soriano José Enrique, Android programación de dispositivos móviles a través de ejemplos. Marcombo Ediciones técnicas, 2017.
7. Hébuterne Sylvain., Guía de desarrollo de aplicaciones Java para smartphones y Tabletas. Ediciones Eni, Tercera edición.
8. R. Vinodkumar, I. Navas, K. P. Porsezian, N. V Unnikrishnan, and V. P. M. Pillai, "Structural, spectroscopic and electrical studies of nanostructured porous ZnO thin films prepared by pulsed laser deposition," Spectrochim. ACTA PART A Mol. Biomol. Spectrosc., 2013
9. Vergara H. E, "Caracterización óptica y estructural de nanocristales de silicio embebidos en dos matrices: nitruro de silicio y óxido de aluminio". IPN, 2015.