

Anexo 1

Método de difracción con rayos X (DRX).

A1.1. Introducción.

Este método se ha utilizado para conocer la composición mineral del suelo de cultivo utilizado en la elaboración de las muestras para los ensayos que se presentan en el capítulo 10. Se trata de una técnica que permite identificar los minerales cristalinos formadores del medio, siempre y cuando se encuentren en un porcentaje superior al 1%.

Aunque no se trata de una técnica relacionada con el tema de la tesis, por el hecho de haberla utilizado he considerado interesante incluir un anexo explicándola brevemente, como información complementaria a esta tesis. Toda la información que aquí se recopila ha sido obtenida principalmente del libro de Bermúdez-Polonio (1981), complementado con el tratado de Wilson (1970) y el editado por Brindley en 1951 (Bradley et al., 1951). Para una mayor información acerca del tema pueden consultarse los mencionados trabajos.

Para aplicar esta técnica se utiliza radiación X, definida por su banda de frecuencias, que está comprendida entre la de la radiación ultravioleta y la de los rayos γ . Este tipo de radiación se produce cuando una partícula de masa pequeña pero altamente energética (con una elevada energía cinética) incide en un elemento material. La colisión produce una perturbación en la materia y parte de la energía se dedica a producir radiación X.

Para generar radiación X se suelen utilizar electrones como partículas para producir el impacto en la materia, ya que son muy eficaces y, al mismo tiempo, resultan sencillos de controlar y de generar.

La energía cinética del electrón en el instante que alcanza la placa puede expresarse según:

$$T = eV = \frac{1}{2}mv^2 \quad (A1.1)$$

Siendo T la energía cinética, $e=4.8 \times 10^{-10}$ la carga del electrón, V la diferencia de potencial entre ánodo y cátodo, m la masa del electrón y v la velocidad con la que el electrón incide en la placa.

A1.2. Tubos de rayos X.

Los tubos de rayos X son un dispositivo utilizado para generar este tipo de radiación. Consisten en una ampolla de vidrio en cuyo interior se ha generado un vacío del orden de 10^{-7} mmHg. En el interior de este tubo hay un cátodo, formado por un filamento, y un ánodo. Este último es una placa metálica enfrentada al filamento. Recibe también el nombre de placa o de anticátodo.

Normalmente el cátodo es una espiral de wolframio suficientemente resistente como para aguantar la fuerte atracción que se produce entre cátodo y ánodo debido a la gran diferencia de potencial que se ha de aplicar entre ambos.

Para obtener la radiación X, se pone incandescente el cátodo y entre el ánodo y el cátodo se aplica una diferencia de potencial de varios miles de voltios. De esta forma, los electrones emitidos por el filamento incandescente son acelerados en dirección al ánodo. Para obtener la dirección adecuada (hacia el ánodo), el filamento está rodeado por una pantalla metálica denominada focalizador. El focalizador está abierto únicamente en la dirección de salida deseada, y se mantiene a potencial negativo para que pueda repeler todos los electrones que no se dirijan hacia la placa. Al llegar a la placa se produce la colisión, y se emiten rayos X en todas direcciones. Para que salgan del tubo en unas direcciones concretas hay unas ventanas ubicadas en las posiciones adecuadas. Normalmente se trata de cuatro ventanas de salida diametralmente opuestas y situadas según las direcciones longitudinal y transversal de la zona de la placa en la que inciden los electrones. Con esta disposición de ventanas se consiguen dos pares de focos distintos para las experiencias. El sentido longitudinal del filamento proporciona el que se denomina foco lineal, mientras que el sentido perpendicular da lugar al llamado foco puntual.

Al conjunto de filamento y focalizador se le da en nombre de cañón de electrones. La zona de la placa en la que inciden los electrones recibe la denominación de huella focal o de foco.

El flujo de electrones presenta una intensidad, i , que depende de la temperatura que alcanza el filamento y que puede ser expresada mediante la ecuación:

$$i = A T^2 e^{-B/T} \quad (A1.2)$$

Donde T es la temperatura del cátodo y A y B dos constantes que dependen de las características del material del filamento. En el caso particular de un filamento de wolframio estas constantes valen: $A=1.8 \times 10^{11}$ y $B=5.2 \times 10^4$.

De la energía total de los electrones generados únicamente una pequeña fracción, inferior al 1%, se invierte en la generación de rayos X. El resto de la energía se transforma en calor que se concentra en una pequeña parte de la placa, concretamente en la huella focal. Esto obliga a que el material con el que se construye la placa tenga un punto de fusión y un calor específico muy elevados y además exige la existencia de una fuerte refrigeración de la placa para permitir que se pueda utilizar el tubo durante intervalos de tiempo indefinidos.

El rendimiento del tubo de rayos X, R, considerado como la relación entre la energía emitida y la energía de los electrones utilizados para bombardear la placa, puede obtenerse a partir de la siguiente ecuación:

$$R = 1.5 * 10^{-9} ZV \quad (A1.3)$$

Siendo Z el número atómico del material con el que se ha construido el ánodo y V la diferencia de potencial aplicada.

Para un correcto funcionamiento de un tubo de radiación X, además del tubo en sí, son necesarios una serie de dispositivos: los de control y seguridad y dos circuitos eléctricos, uno de alta tensión para alimentación del tubo de rayos X y otro de baja tensión para la alimentación general del equipo.

A1.3. Espectro de la radiación de un tubo de rayos X.

Por encima de una cierta tensión umbral, la radiación emitida por un tubo de rayos X presenta un espectro formado por radiaciones de distintas longitudes de onda que se extienden en un amplio intervalo espectral, sin que exista ningún tipo de discontinuidad. Se le llama espectro continuo, heterocromático o blanco.

A partir de esta tensión, conforme se va aumentando la diferencia de potencial el espectro resultante se desplaza hacia las altas frecuencias al mismo tiempo que se aumenta su intensidad.

Para una determinada tensión, el valor de la longitud de onda más corta que se alcanza recibe el nombre de λ límite o mínima. Este parámetro depende únicamente de la diferencia de potencial aplicada entre el ánodo y el cátodo, siendo inversamente proporcional a la tensión aplicada. El que exista esta longitud de onda límite indica que una fracción de los electrones pierde toda su energía en generar energía radiante, que puede expresarse según:

$$E = V e = h v_{\text{máx}} = h \frac{c}{\lambda_{\text{mín}}} \quad (\text{A1.4})$$

Donde h es la constante de Planck, c la velocidad de propagación de la luz, v la frecuencia y λ la longitud de onda.

Este espectro continuo que aparece puede explicarse a partir del efecto de las interacciones de los electrones en las proximidades de los núcleos de los átomos de la placa. El electrón experimenta, a consecuencia de estas interacciones, una pérdida gradual de su energía inicial, que se produce en cada una de ellas. Como la posibilidad de que el electrón pierda la totalidad de su energía en la primera interacción, la intensidad de la radiación que se corresponde con la frecuencia límite del espectro es muy baja.

Conforme se va aumentando la diferencia de potencial llega un momento que se alcanza un valor de la tensión por encima del cual el espectro siempre presenta unos máximos de intensidad muy acusados superpuestos al continuo. Este valor límite de la tensión recibe el nombre de potencial crítico de excitación. Los picos que aparecen son característicos del material utilizado para la construcción de la placa. Un mismo material presenta siempre, a partir de este valor de la tensión, las mismas líneas en el espectro a las mismas longitudes de onda. Son las llamadas líneas características. El espectro total obtenido recibe el nombre de espectro característico del ánodo.

Dentro de un espectro característico, las líneas espectrales aparecen formando series espectrales, designadas con las letras K, L, M, N, ..., de acuerdo con sus orígenes atómicos. Cada una de estas series tiene, para un mismo elemento, un potencial crítico de excitación. La longitud de onda de cada serie y su potencial de excitación aumentan en el mismo sentido en el que han sido nombradas.

Estas líneas espectrales pueden explicarse porque cuando la energía de los electrones que inciden sobre la placa es muy elevada (debido a una elevada diferencia de potencial entre ánodo y cátodo), la colisión de éstos puede producir la expulsión de electrones de los orbitales más profundos de los átomos de la placa. En este estado de ionización un átomo es muy inestable, ya que las vacantes electrónicas tienden a ocuparse rápidamente con transiciones electrónicas desde orbitales más exteriores. Debido a que cuando un átomo pasa de un estado inicial

con una energía E_1 a un estado final con una energía E_2 se emite una cierta radiación, en general las líneas comentadas. La frecuencia de la radiación generada puede expresarse como:

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_1 - E_2}{h} \quad (\text{A1.5})$$

Pero no todas las transiciones electrónicas son posibles ya que los números cuánticos que definen el momento angular orbital del electrón (l) y el momento angular total (j), solo pueden experimentar incrementos determinados, de manera que $\Delta l = \pm 1$ y $\Delta j = \pm 1$ ó 0 .

Las radiaciones de una misma serie espectral tienen en común que todas sus frecuencias vienen dadas por diferencias entre términos espectrales correspondientes al nivel de dicha serie y otro nivel de menor energía, ya que se originan por una vacante electrónica en el nivel que da lugar a la serie, con la inmediatamente posterior transición electrónica desde un nivel más exterior. Por ejemplo, la serie K se genera a partir de una vacante electrónica en el nivel K seguida de una transición desde un nivel más externo (L, M, N, ...). La transición más frecuente es la que genera una emisión más intensa. Por ejemplo, en el caso de la serie K, la transición más frecuente es la que corresponde con el paso de un electrón desde el subnivel L_{III} al nivel K. Esta transición genera la línea conocida como $K_{\alpha-1}$. La transición del subnivel L_{II} al nivel K genera la línea conocida como $K_{\alpha-2}$. Estas dos líneas forman el que se conoce como doblete K_{α} . En muchos casos se presenta de tal forma que no se puede resolver en sus dos componentes, de forma que se le asigna una longitud de onda promedio de las dos líneas individuales, ponderando como doble el valor de la línea $K_{\alpha-1}$ ya que tiene una mayor intensidad. Este doblete es el único que tiene interés para los estudios de difracción de rayos X, ya que constituyen la fuente de radiación monocromática más importante, y se utiliza en las diferentes técnicas.

La intensidad de las líneas del espectro característico de un mismo elemento no es constante, ya que varía fuertemente ya sea dentro de una misma serie espectral o de una serie a otra. En la serie K la línea más intensa es la llamada $K_{\alpha-1}$. A ésta se le suele asignar un valor 100 para su intensidad. La siguiente línea es la $K_{\alpha-2}$, que presenta un 50% aproximadamente de la intensidad de la anterior.

Pero aunque la intensidad de las líneas cambia, en 1913 Moseley observó que las frecuencias de las líneas características homólogas de una misma serie espectral aumentan con el número atómico del elemento emisor. Este principio, que se conoce como ley de Moseley, lleva consigo implícita la base del análisis de espectroscopia con rayos X, porque indica que si se identifica la frecuencia o la longitud de onda de una línea característica se está identificando el elemento que la ha producido, ya que se conoce su número atómico, Z . Además, si se mide la intensidad de la línea que corresponde con la frecuencia identificada, es posible estimar la concentración atómica del elemento en cuestión.

A1.4. Interacción entre la materia y la radiación X.

Si sobre un determinado material incide un haz de radiación X caracterizado por una intensidad I_0 y una longitud de onda λ_0 , la materia absorbe en mayor o menor medida la radiación, dependiendo de los distintos mecanismos de interacción que se producen. Estos mecanismos conllevan la producción de dos tipos generales de radiación: la llamada radiación de fluorescencia y la denominada radiación dispersa.

La primera se origina a consecuencia de la absorción fotoeléctrica que el material irradiado produce en la radiación incidente. La emisión de este tipo de radiación se acompaña siempre de liberación de electrones.

La segunda (radiación dispersa) puede estar constituida por la fracción de la energía incidente que se vuelve a emitir sin que cambie su longitud de onda. Se denomina radiación dispersa coherente. También puede estar formada por radiación que presenta una longitud de onda ligeramente superior a la de la radiación incidente. Es la que se denomina radiación dispersa incoherente o bien radiación Compton. La difracción de los rayos X es un caso particular de la radiación dispersa coherente.

Cuando la radiación incidente atraviesa la lámina experimenta una cierta atenuación que es función del espesor de la lámina, de los coeficientes de dispersión fotoeléctrica y de los coeficientes de dispersión de radiación.

A1.5. Dirección de los rayos difractados.

La difracción de rayos X es, básicamente, un proceso de interferencias constructivas de ondas electromagnéticas que se produce en unas direcciones concretas del espacio.

La difracción de la radiación X puede considerarse desde dos aspectos diferentes. Por un lado se puede analizar a partir de la geometría de las direcciones de los rayos difractados. Esta geometría depende del tamaño y de la forma de la celda elemental del cristal. Por otro lado se puede abordar el estudio analizando la intensidad de la radiación difractada. Esta intensidad se relaciona con la posición de los átomos dentro del retículo del cristal.

La fase y la amplitud de una onda son magnitudes que se repiten periódicamente en la dirección de la propagación de la energía. Estas magnitudes caracterizan el estado de vibración en un instante y en un punto del espacio determinado. La fase de una onda, en cualquier lugar del espacio que dista una distancia x del origen puede definirse como:

$$\phi_x = \frac{2\pi}{\lambda} x \quad (\text{A1.6})$$

De este modo se puede definir, a partir de la expresión A1.6 la ecuación que indica la diferencia de fase entre dos puntos (1 y 2) del espacio separados entre sí una distancia x_1 :

$$\phi_2 - \phi_1 = \frac{2\pi}{\lambda} x_1 \quad (\text{A1.7})$$

La amplitud, es decir, el módulo del vector eléctrico puede definirse en función de la distancia como:

$$A(x,0) = A_0 \cos \phi_x = A_0 \cos \left(\frac{2\pi}{\lambda} x \right) \quad (\text{A1.8})$$

Donde A_0 es el valor de la amplitud inicial en el origen.

También puede expresarse en función del tiempo como:

$$A(0, t) = A_0 \cos(\phi + \omega t) \quad (\text{A1.9})$$

Donde ω es la pulsación de la onda y t el tiempo.

Suponiendo el caso de un conjunto de focos puntuales y ordenados, que representan, por ejemplo, a los átomos ordenados periódicamente en un cristal, siendo cada uno de estos focos un emisor de ondas con idénticas frecuencias, para que se pueda producir una interferencia totalmente constructiva entre las ondas que se propagan en una determinada dirección del espacio, las amplitudes en un mismo punto de la trayectoria han de tener la misma dirección y la misma magnitud. Si se produce este fenómeno se dice que las ondas están completamente en fase. Como resultado de la interferencia de dos ondas completamente en fase se produce una nueva onda resultante cuya amplitud es la suma de las amplitudes de cada una de las componentes, es decir, que se produce un máximo en el movimiento ondulatorio. La condición que se ha de cumplir para que dos ondas estén completamente en fase es que las diferencias entre sus trayectorias han de ser nulas o bien han de ser un múltiplo entero de la longitud de onda, es decir, se ha de cumplir que:

$$\Delta x = n \lambda \quad \text{con } n \in (\mathbb{N}, 0) \quad (\text{A1.10})$$

Las diferencias de fase que se corresponden con estas diferencias de distancia son, según la expresión A1.7, múltiplos pares de π :

$$\Delta \phi = \frac{2\pi}{\lambda} x = 2 n \pi \quad (\text{A1.11})$$

En la expresión A1.8 se produce un mínimo cuando las diferencias de las distancias en la trayectoria son: $x = \frac{\lambda}{2}, 3\frac{\lambda}{2}, 5\frac{\lambda}{2}, \dots$. En estos casos las diferencias de fase, según la expresión A1.7 son múltiplos impares de π . Cuando se cumplen estas condiciones las amplitudes de las ondas concurrentes son iguales pero tienen signos (direcciones) opuestos. La amplitud de la onda resultante, en este caso, es nula, y se dice que la interferencia es totalmente destructiva.

Entre los dos casos extremos analizados (interferencia totalmente constructiva e interferencia totalmente destructiva) puede producirse cualquier otro caso de interferencia parcial.

Una dirección de difracción es aquella dirección del espacio en la cual las ondas coincidentes, dispersas por un conjunto de átomos de un cristal, están completamente en fase. En cualquier otra dirección del espacio la resultante se cancela en mayor o menor proporción.

Para analizar las condiciones de difracción de una celda tridimensional se pueden considerar tres sucesiones de puntos no coplanarias. Cada una de las sucesiones es lineal y el periodo de repetición de los puntos es t_i . Sobre este elemento incide un haz de radiación X con una longitud de onda λ , formando un ángulo de incidencia μ_i (con $i=1,2,3$, para cada una de las sucesiones de puntos). Si las radiaciones dispersas por dos puntos cualquiera están en fase, de manera que se origina un haz difractado en una dirección determinada del espacio que forma un ángulo ν_i con la dirección de t_i , se tiene que cumplir que las diferencias de trayectoria entre las ondas incidentes y difractadas sea un múltiplo entero de λ . De esta forma se obtienen las tres ecuaciones generales de difracción, conocidas como ecuaciones de Laue:

$$\begin{aligned} t_1(\cos \nu_1 - \cos \mu_1) &= H\lambda \\ t_2(\cos \nu_2 - \cos \mu_2) &= K\lambda \\ t_3(\cos \nu_3 - \cos \mu_3) &= L\lambda \end{aligned} \quad \text{con } H, K, L \in \mathbb{Z} \quad (\text{A1.12})$$

La condición de difracción en una red tridimensional es que las tres ecuaciones de Laue se satisfagan simultáneamente. Estas condiciones son tan estrictas que es muy difícil que se produzca un haz difractado. El encontrar una solución que lo sea de las tres ecuaciones al mismo tiempo puede simplificarse si se varía uno de los parámetros (la longitud de onda o el ángulo μ_i), mientras se mantiene constante el otro. La variación de la longitud de onda se consigue al utilizar radiación policromática, como es el caso de la radiación que produce el espectro continuo en el tubo de rayos X. Una longitud de onda constante puede obtenerse cuando se utiliza luz monocromática. La variación del ángulo puede obtenerse modificando, de forma controlada mediante un movimiento de rotación, la posición del cristal respecto al haz de la radiación incidente. Mantener el ángulo constante se consigue sin mover el cristal. Las distintas técnicas de difracción

existentes se diferencian entre sí por el parámetro que mantienen constante. La técnica con la que se pueden analizar materiales mezclados es la denominada del polvo policristalino. Las otras técnicas utilizan un único cristal. En la técnica del polvo se utiliza radiación monocromática, y el parámetro que varía es el ángulo, ya que depende de la orientación de cada uno de los diminutos cristalitos que componen el polvo.

A1.6. Método del polvo policristalino.

Este método es la única técnica de difracción que se puede aplicar para determinar la composición de elementos cristalinos en un material que no puede ser analizado a partir de un único cristal. Se basa en la utilización de una radiación monocromática y en la desorientación de los distintos cristales que forman parte de la mezcla, obteniéndose un espectro que refleja las distintas fases cristalinas que la componen y su orientación preferente. Dentro de esta técnica hay dos métodos: el de la cámara de polvo y el del difractómetro de polvo. En el primer caso el espectro se obtiene en papel fotográfico, mientras que en el segundo se obtiene un registro gráfico de las señales que producen en distintos detectores electrónicos de radiación las reflexiones. En este segundo caso es más precisa la medida de las intensidades, ya que en el primero se realiza este proceso considerando el ennegrecimiento de la película, mayor cuanto mayor sea la intensidad de las reflexiones. Los registros que se presentan en el capítulo 10 de la presente memoria (figura 10.4) se han obtenido mediante el segundo método, es decir, utilizando un difractómetro de polvo.

Como para aplicar este método debe existir la desorientación de los distintos cristalitos que forman la mezcla, ha de utilizarse la muestra en forma de polvo. Para ello debe prepararse una moltura que se utilizará en el ensayo. Esta moltura puede considerarse con un comportamiento isótropo ya que sus cristales están desorientados al azar, aunque cada uno de los elementos individuales que la componen conserve su particular anisotropía. Para favorecer la desorientación de los elementos cristalinos, se somete a la muestra a un movimiento de rotación sobre sí misma durante el ensayo.

La preparación de las muestras requiere un cierto cuidado para poder obtener los valores más representativos tanto de las posiciones angulares como de las intensidades. Para obtener un resultado satisfactorio deben obtenerse una muestra en la que el tamaño de los cristalitas sea lo suficientemente pequeño, más reducido que el que se precisa para otras técnicas, como por ejemplo la denominada cámara de polvo. Este reducido tamaño nos aproxima bastante a la situación ideal, en la cual la orientación de los cristalitas es totalmente al azar. Cuando se trabaja con una cámara de polvo la muestra está constantemente sometida a rotación, lo que favorece la condición de orientación al azar. Sin embargo, al trabajar con un difractómetro, la muestra debe permanecer casi inmóvil durante la irradiación por rayos X. Además, las reflexiones se producen preferentemente en los elementos más superficiales, el tiempo de registro es pequeño y además la muestra ha tenido que ser sometida a un proceso de alisamiento superficial para evitar irregularidades que impidan las condiciones de focalización que deben producirse. Estas condiciones favorecen la existencia de orientaciones preferenciales de los cristales que forman la muestra en la zona superficial. Para disminuir estos factores la única solución posible es reducir el tamaño de los cristales lo máximo posible. Teóricamente este tamaño debe ser inferior a $5\ \mu$, obteniéndose en este caso una desviación inferior al 1%. Sin embargo, en el caso de que no existan acusados efectos de orientaciones preferenciales pueden obtenerse resultados correctos con un tamaño de los cristales inferior a las $20\ \mu$. Como estos tamaños de grano son difíciles de conseguir, se pueden utilizar distintas técnicas para mejorar los resultados: se pueden utilizar procesos de sedimentación si se trabaja con una única fase cristalina, puede reducirse el efecto de la orientación preferencial si se pulveriza la muestra con un aglutinante viscoso (el inconveniente es que la muestra se vuelve más transparente a la radiación X que antes de recibir el tratamiento), puede someterse la muestra a un movimiento rápido de rotación respecto a un eje normal a su plano de manera que disminuyan los efectos ocasionados por las orientaciones preferenciales y puede también efectuarse un promediado de las medidas de las intensidades que se obtienen tras realizar los ensayos sobre varias muestras del mismo material.

Los resultados del ensayo de difracción que se muestran en el capítulo 10 se han obtenido a partir de dos molturas diferentes del mismo tipo de suelo de cultivo. La pulverización se ha realizado a partir de muestras aleatorias que han sido molidas utilizando un martillo hasta alcanzar un tamaño adecuado para los ensayos.

A1.7. Difractómetro de polvo.

El polvo policristalino produce unos conos de difracción que se registran en el papel fotográfico. El denominado difractómetro de polvo es un sistema diseñado para sustituir el sistema fotográfico de registro del espectro de difracción por un registro obtenido sobre una banda de papel que se denomina difractograma. Se trata de un dispositivo que permite deslizar la banda a lo largo de la zona en la que se producen las difracciones. El registro del difractograma consta de una serie de máximos de intensidad distribuidos en función de los valores angulares. Las áreas de estos máximos (de forma aproximada, sus alturas) dan una idea bastante representativa de las intensidades de las reflexiones, pudiendo de esta forma medirse este parámetro con una gran exactitud.

Este tipo de aparatos aparece comercialmente a principios de la década de los cuarenta. Los aparatos actuales son básicamente igual a los primeros en su sistema óptico-geométrico, aunque han incorporado importantes modificaciones en el apartado electrónico, de manera que actualmente la técnica tiene un importante grado de automatismo.

El sistema óptico que forma parte del difractómetro debe operar principalmente para focalizar la radiación, de manera que se puedan obtener niveles de energía lo suficientemente elevados para que puedan ser distinguidos claramente por el detector de radiación X. Estos detectores pueden ser de dos tipos distintos. Por un lado están los llamados detectores de gas y por otro los de estado sólido.

Los detectores de gas se basan en la ionización de los átomos de un gas inerte a consecuencia de la energía de los rayos X incidentes. Este gas está contenido en un recinto cerrado y a una determinada presión, sometido a una diferencia de potencial que evita la recombinación de los pares de iones que se producen. Este proceso de interacción genera unos electrones libres que son atraídos por un ánodo, traducándose en la producción de una débil corriente eléctrica. Esta corriente es representativa de las intensidades de los electrones incidentes y, en algunos aparatos, de su energía. Convenientemente amplificada, esta corriente eléctrica queda registrada indicando los mencionados parámetros.

El funcionamiento de los detectores de estado sólido se basa en las transferencias electrónicas que la incidencia de los fotones de la radiación X produce en determinados elementos sólidos. Cuando la energía de los fotones incidentes se invierte en desplazar los electrones de la banda de valencia de la sustancia activa a niveles electrónicos más elevados se trata de un detector de centelleo. Al retornar los electrones desplazados a su posición inicial, se emite la energía absorbida en forma de radiación, correspondiendo su longitud de onda al espectro visible o al ultravioleta. Esta radiación se transforma en energía eléctrica (que es posteriormente registrada) a partir de un fotocátodo y de un tubo multiplicador. Otro tipo de detectores son los denominados de semiconductores. En este caso la sustancia sensible es un semiconductor de silicio o de germanio tratado con impurezas de litio. Al incidir los rayos X en la sustancia, la ionización de los átomos del semiconductor genera pares de electrón-hueco, alterando las propiedades conductoras del semiconductor. El nivel de alteración que se produce es un indicativo tanto de la energía como de la intensidad de los fotones incidentes. Para obtener una mayor información acerca del proceso seguido y de los distintos tipos de detectores que existen se puede consultar, por ejemplo, la obra de Bermúdez Polonio (1981).

Los distintos impulsos eléctricos que se producen en el receptor se miden y se registran a partir de una serie de dispositivos electrónicos, obteniéndose el difractograma.