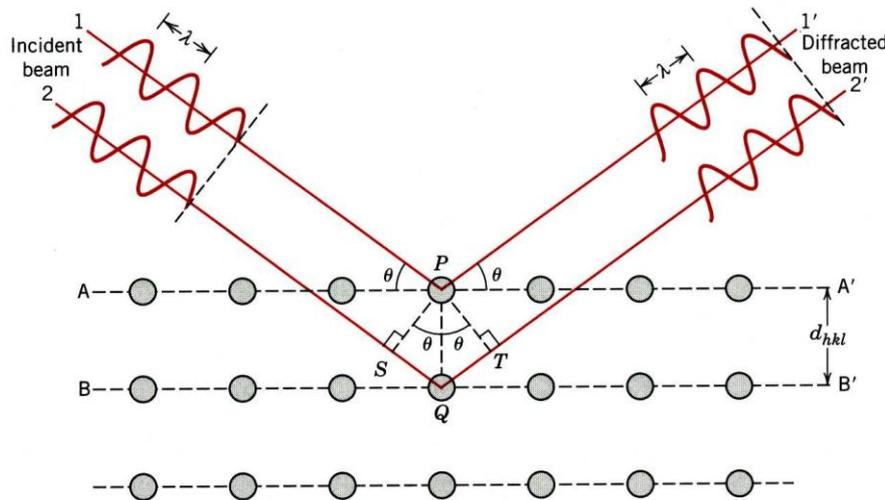


# Identificação de fases cristalinas

# DIFRAÇÃO DE RAIOS X

## LEI DE BRAGG



$$n\lambda = 2 d_{hkl} \cdot \sin\theta$$

$\lambda$  é comprimento de onda\*

$N$  é um número inteiro de ondas

$d$  é a distância interplanar

$\theta$  é ângulo de incidência

\* no nosso caso, utilizamos  $C\alpha$

$$d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$$

Válido  
para  
sistema  
cúbico

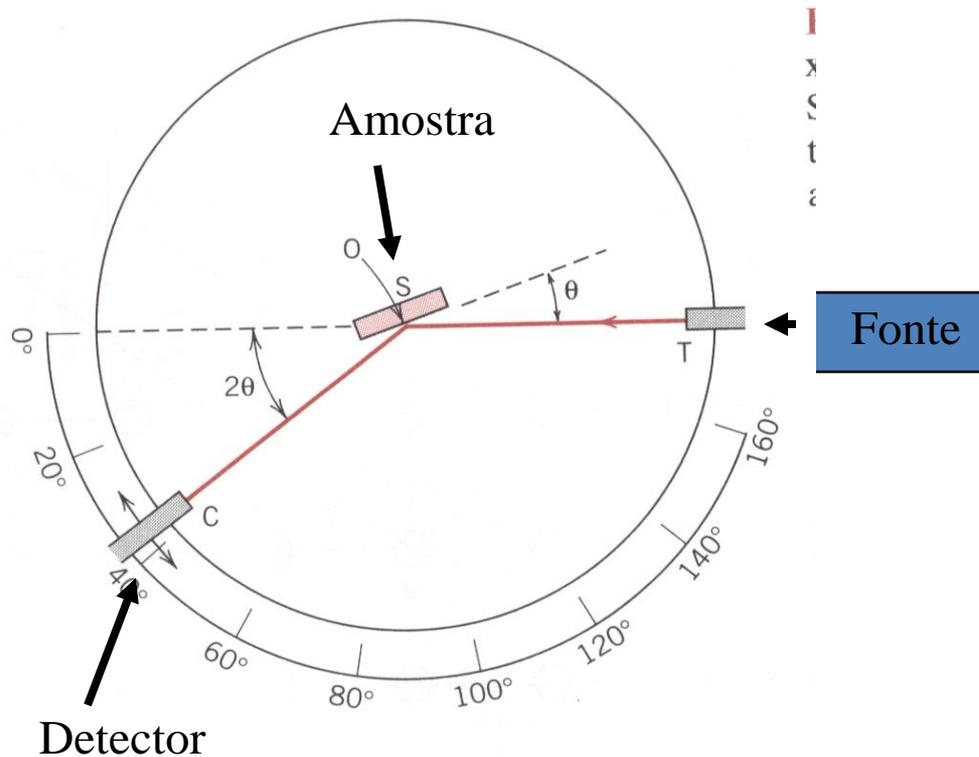
# DISTÂNCIA INTERPLANAR ( $d_{hkl}$ )

- É uma função dos índices de Miller e do parâmetro de rede

$$d_{hkl} = \frac{a}{(h^2 + k^2 + l^2)^{1/2}}$$

# O DIFRATOMÊTRO DE RAIOS X

O ângulo entre o eixo do feixe incidente e o anel é chamado ângulo de difração e representado por  $2\theta$ .

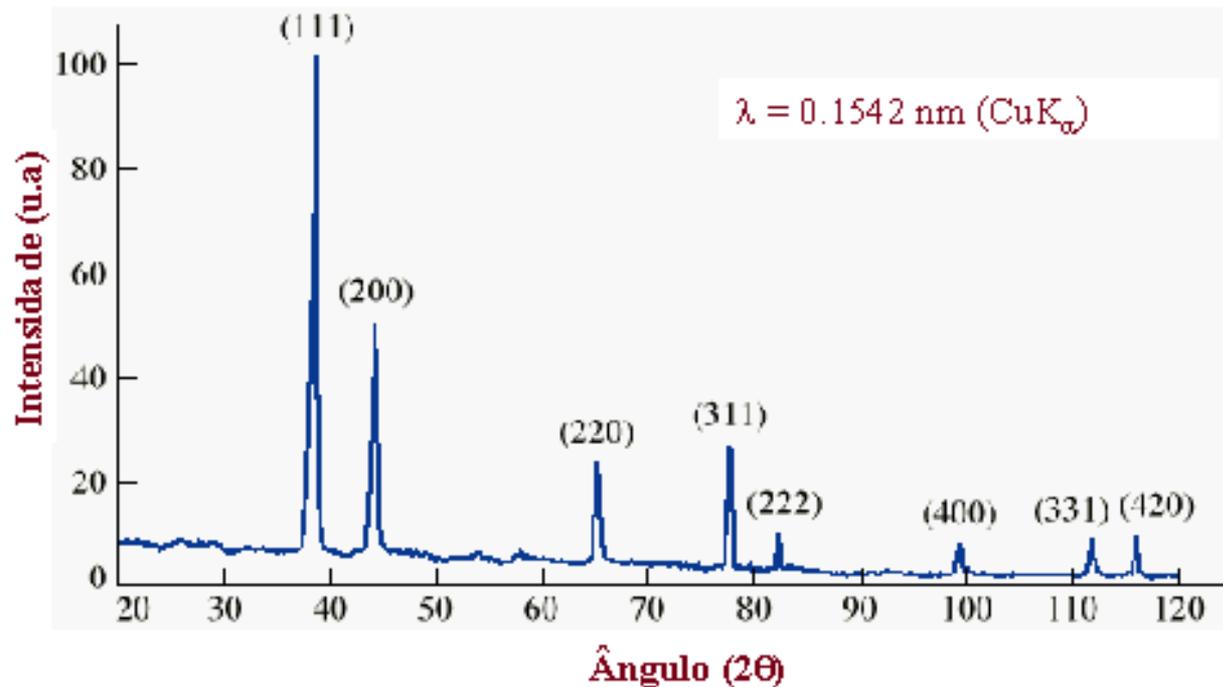


- T= fonte de raio X
- S= amostra
- C= detector
- O= eixo no qual a amostra e o detector giram
- $\lambda (Co) = 0.179026$

# DIFRATOGRAMA

65

- Ex: Espectro de difração para Al



Uma amostra desconhecida é analisada e seus picos comparados com os de materiais conhecidos e tabelados, permitindo assim a identificação do material.

# Identificação das fases

- <http://crystallographica-search-match.software.informer.com/2.1/>
- ✓ Settings (radiation: Co)
- ✓ Importar (import profile data)
- ✓ Procurar picos (restrictions – símbolo tubinho colorido)
- ✓ Selecionar as fases
- Obs.: para que 1 fase seja identificada, é obrigatório que o pico principal (mais alto) seja coincidente com o difratograma obtido experimentalmente

## Apresentação resultados dos difratogramas

Os gráficos deverão ser plotados utilizando programas gráficos, como, p.e., Origin e Excel, com a identificação de todos os picos.