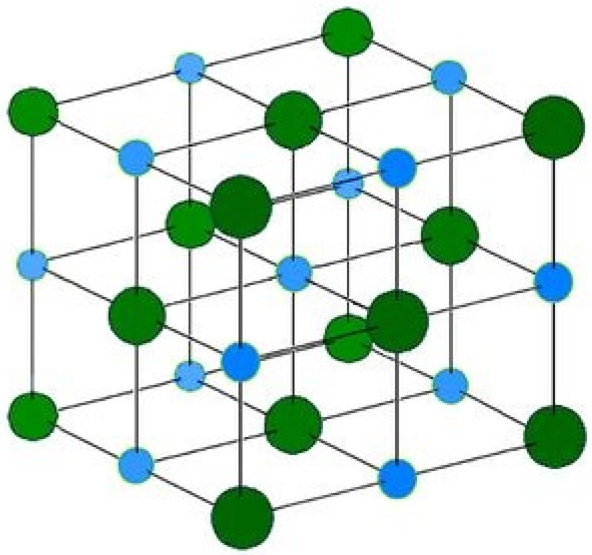
Física IV (IF 2022)
Aula 14

- Objetivos de aprendizagem:
  - Representar a posição de um átomo em uma rede cristalina
  - Descrever matematicamente a onda espalhada em um átomo da rede cristalina
  - Obter o padrão de intensidade de difração por um cristal com uma geometria simples
  - Reconhecer as condições de Laue e suas consequências para obtenção das direções dos máximos de difração.
  - Reconhecer e aplicar a Lei de Bragg
  - Descrever o funcionamento genérico de um difratômetro de Bragg

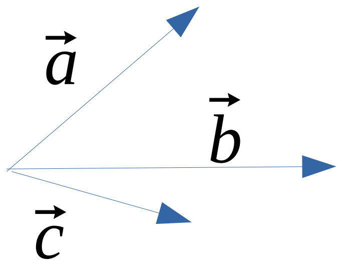
Rede cristalina

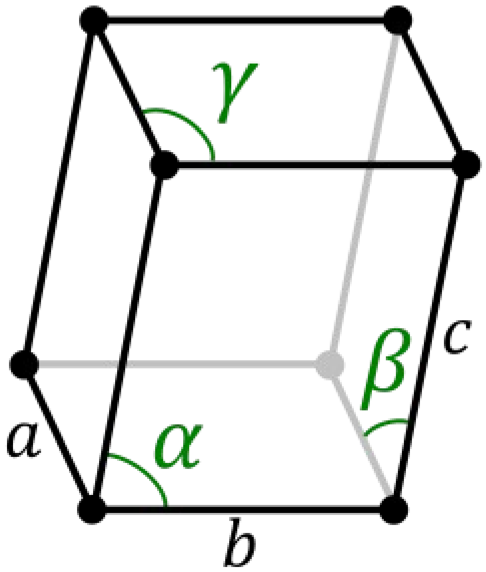
- Estrutura periódica em 3 dimensões



Vetores de base

- Períodos de translação da rede



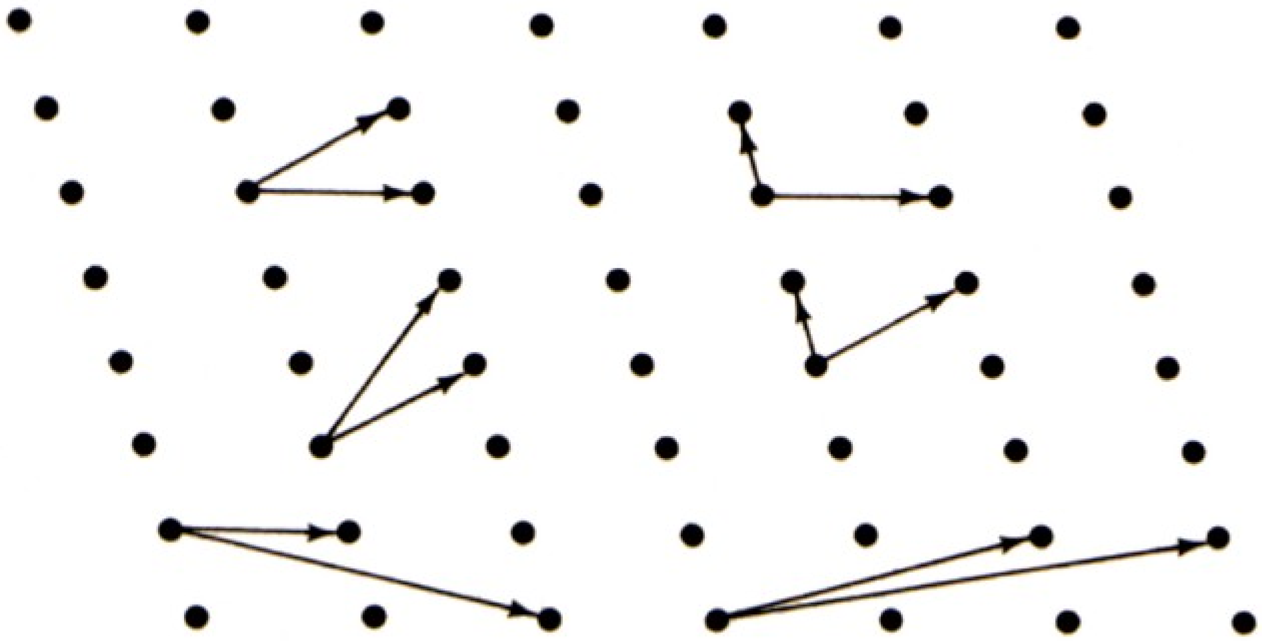


- Vetor posição de um átomo

$\vec{r}=n\vec{a}+p\vec{b}+q\vec{c}$ $\quad n, p, q$ inteiros $\quad l=(n,p,q)$ terna

Obs.: Escolhas alternativas dos vetores de base

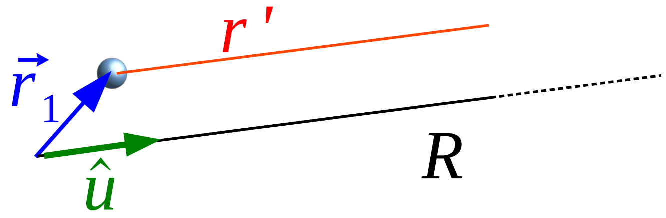
- Exemplo bidimensional:



Espalhamento por átomo

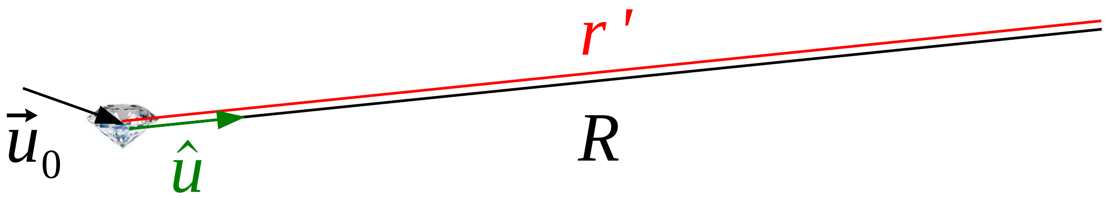
- Onda incidente (onda plana): $v_0(\vec{r}) = Ae^{ik\hat{u}_0.\vec{r}}$
- Onda espalhada por um átomo no ponto 1:

$$v_1(P) = v_0(\vec{r}_1) f_1(\hat{u}) \frac{e^{ikr'}}{r'}$$



- A grandes distâncias (>> dimensões do cristal):

$$r' = R - \hat{u}.\vec{r}_1$$



Função de onda em P

- 1 átomo: $v_1(P) = \frac{Ae^{ikR}}{R} f_1(\hat{u}) e^{-ik(\hat{u}-\hat{u}_0).\vec{r}_1}$
- N átomos (soma sobre todas as ternas): $l = (n, p, q)$

$$v(P) = \frac{Ae^{ikR}}{R} f_1(\hat{u}) \sum_l e^{-ik(\hat{u}-\hat{u}_0).\vec{r}_l}$$

$$\vec{r}_l = n\vec{a} + p\vec{b} + q\vec{c}$$

$$\Delta_a = k(\hat{u}-\hat{u}_0).\vec{a}, \Delta_b = \ldots$$

Supondo átomos iguais (paralelepípedo inclinado), separar em
3 somatórias, uma para cada vetor de base :

→ $$\boxed{I(\hat{\mathbf{u}}) = I_1(\hat{\mathbf{u}}) \cdot \frac{\operatorname{sen}^2\left(\frac{1}{2} N \Delta_a\right)}{\operatorname{sen}^2\left(\frac{1}{2} \Delta_a\right)} \cdot \frac{\operatorname{sen}^2\left(\frac{1}{2} P \Delta_b\right)}{\operatorname{sen}^2\left(\frac{1}{2} \Delta_b\right)} \cdot \frac{\operatorname{sen}^2\left(\frac{1}{2} Q \Delta_c\right)}{\operatorname{sen}^2\left(\frac{1}{2} \Delta_c\right)}}$$

Máximos principais

- Interferência construtiva simultânea das 3 componentes: $\Delta_a = 2\, m_a \pi$; $\Delta_b = 2\, m_b \pi$ e $\Delta_c = 2\, m_c \pi$

Obs.: Zeros de $\operatorname{sen}(\Delta/2)$.

Condições de Laue:

$$(\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}_0)\cdot \mathbf{a} = m_a \lambda \quad ; \quad (\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}_0)\cdot \mathbf{b} = m_b \lambda \quad ; \quad (\hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}}_0)\cdot \mathbf{c} = m_c \lambda$$

$$m_a = (0, \pm 1, \ldots) \quad ; \quad m_b = (0, \pm 1, \ldots) \quad ; \quad m_c = (0, \pm 1, \ldots) \quad ;$$

Picos de intensidade proporcional a $(NPQ)^2$, >> que qualquer outro máximo secundário

Obtenção dos máximos

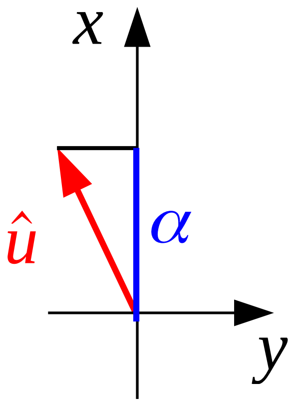
- Achar as direções que obedecem simultaneamente às 3 equações
- O versor direção de observação tem somente 2 graus de liberdade
- Somente alguns comprimentos de onda permitem satisfazer todas as equações

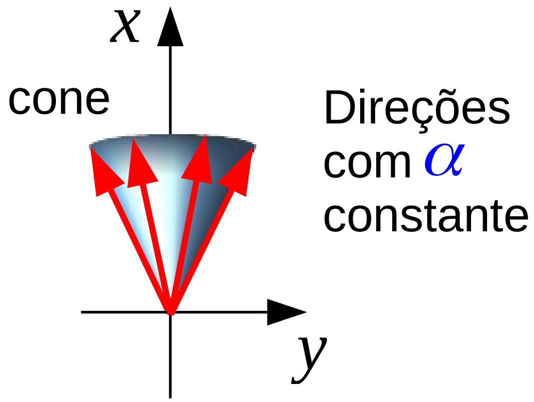
Caso de vetores base perpendiculares

- Onda incidente na direção de um deles $(\hat{u}_0 \| \vec{c} \| \hat{k})$
- $\rightarrow$ $$\alpha = m_a \frac{\lambda}{a} \,, \quad \beta = m_b \frac{\lambda}{b}$$ $$\gamma - 1 = m_c \frac{\lambda}{c}$$

$\vec{a} \| \hat{i}$

$\vec{b} \| \hat{j}$

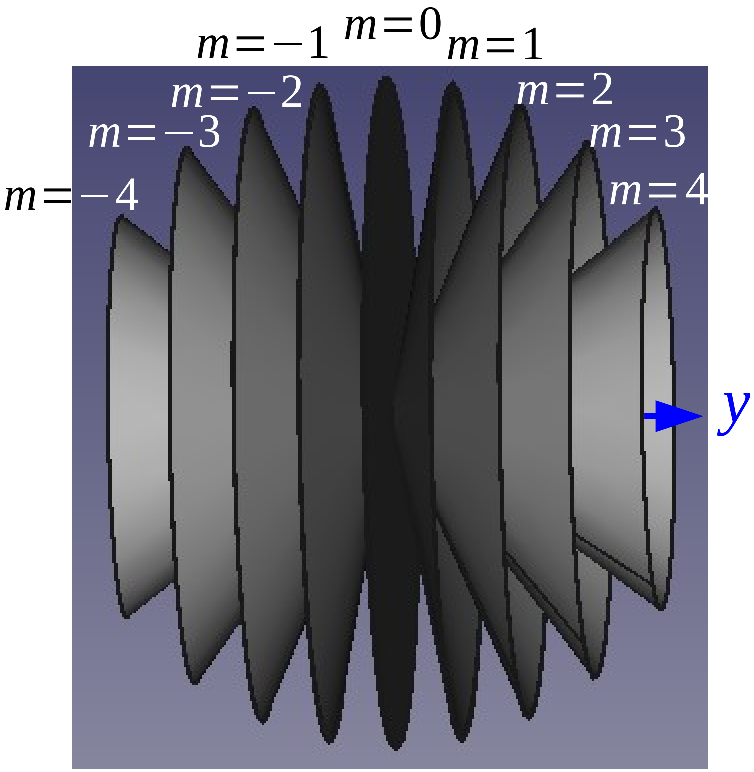




- Soluções para cada cosseno diretor formam superfícies cônicas (ângulo de abertura constante)
- Máximos seriam soluções simultâneas dos 3 cossenos

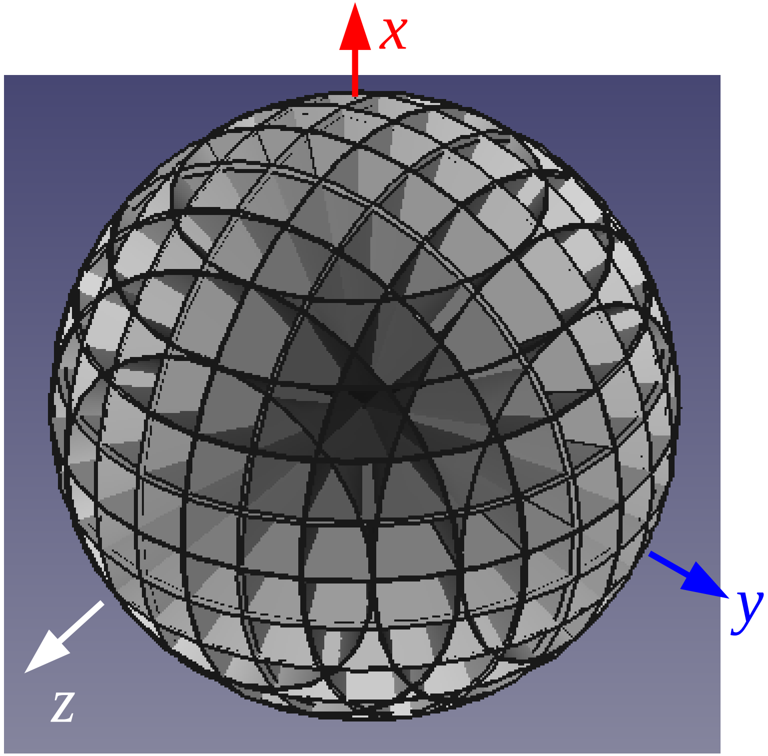
Soluções em uma direção

- Família de cones de uma dada direção, um para cada m



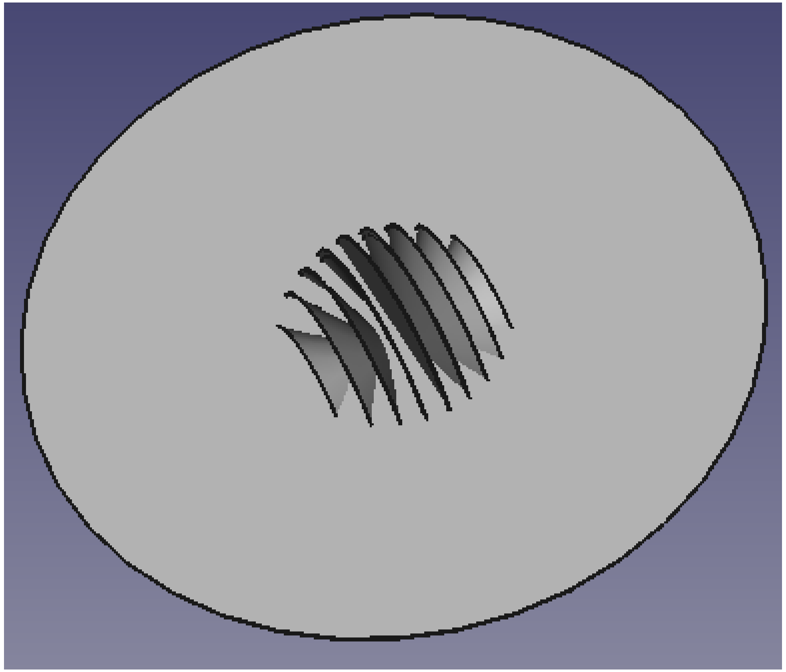
3 famílias de cones juntas

- Uma para cada eixo

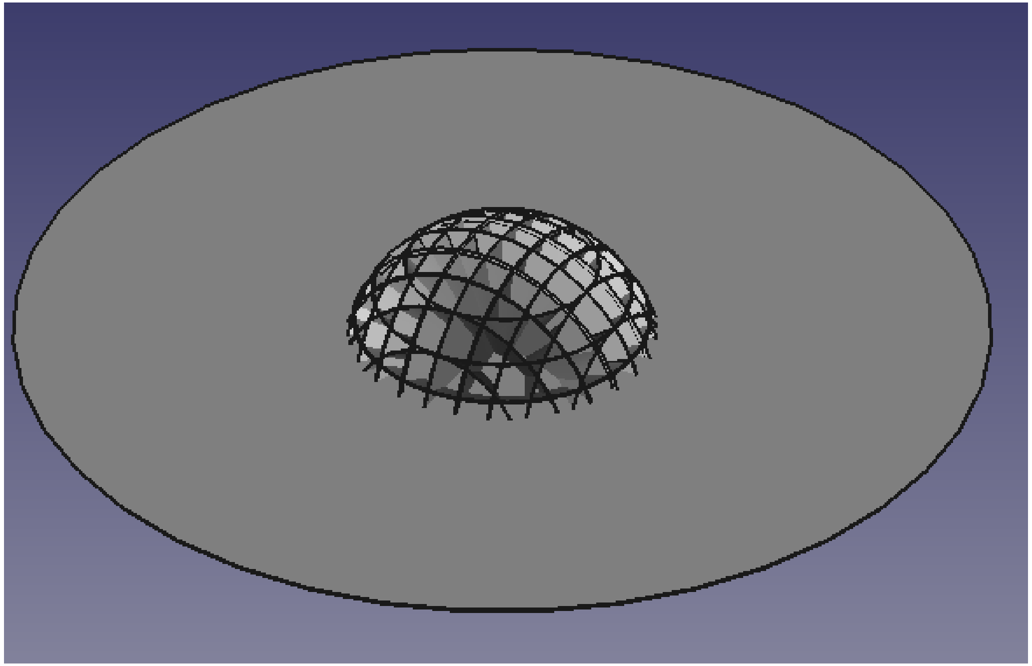


Plano de corte

1 família (1 direção)

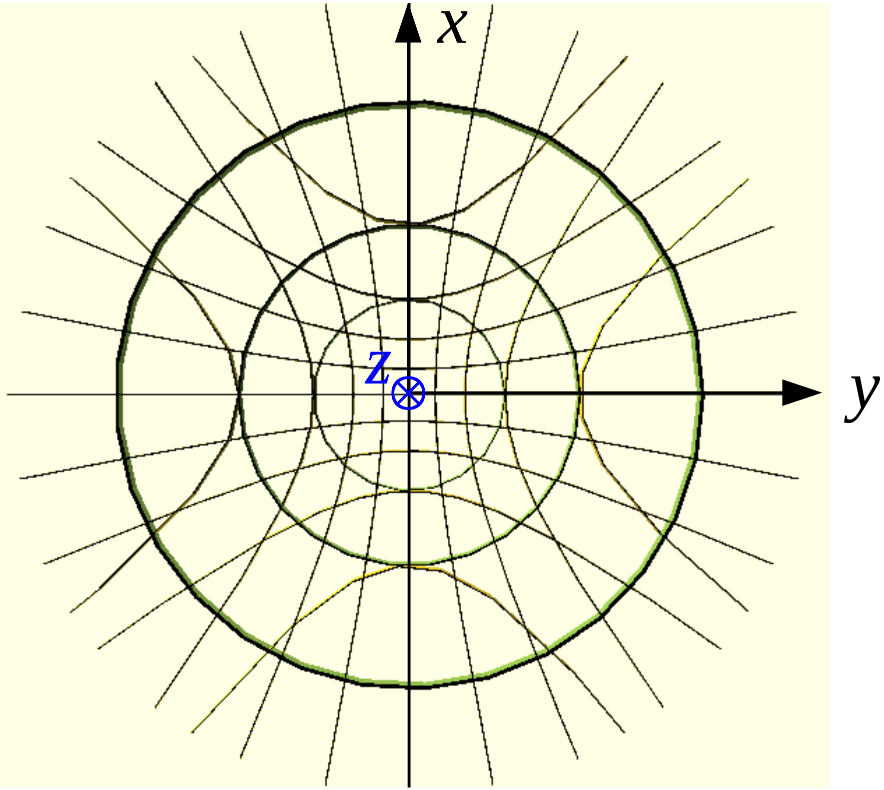


Todas as famílias (3 direções)



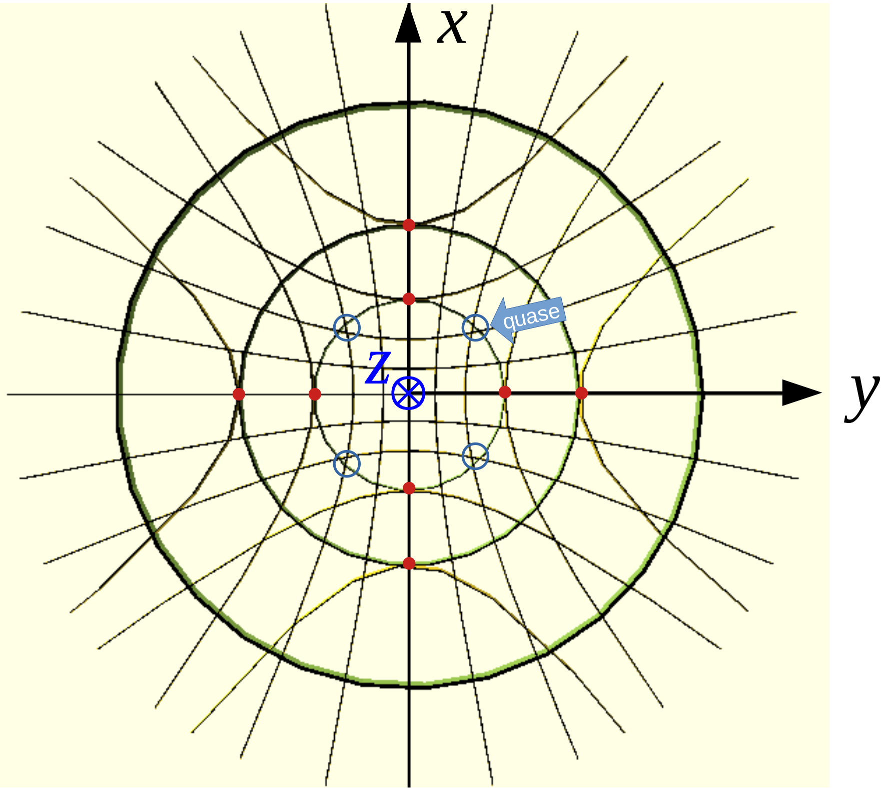
Linhas no plano de corte

- Intersecção com todos os cones



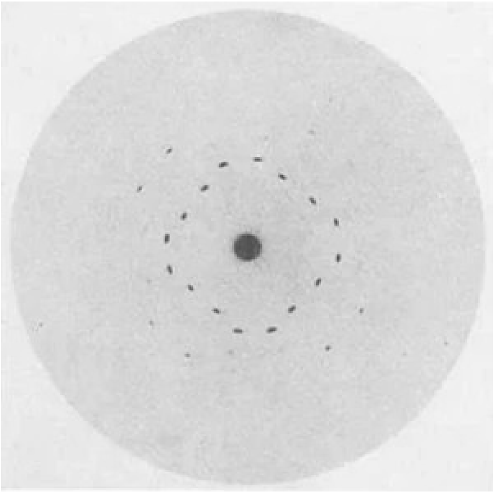
Linhas no plano de corte

- Soluções



Espectro contínuo

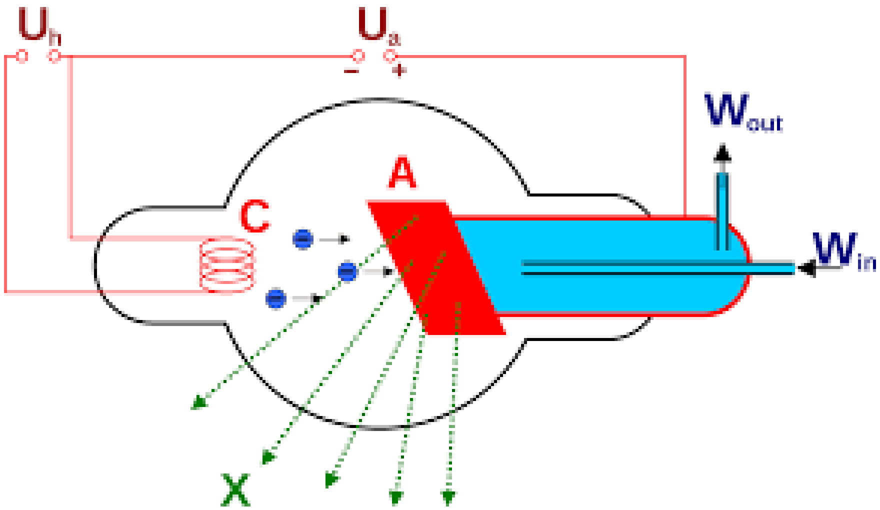
- Radiação de Bremsstrahlung
- Para alguns comprimentos de onda são satisfeitas todas as condições



X-ray diffraction pattern from a zinc-blende (ZnS) crystal. W. Friedrich et al. Annalen der Physik 346, 971–988 (1913)

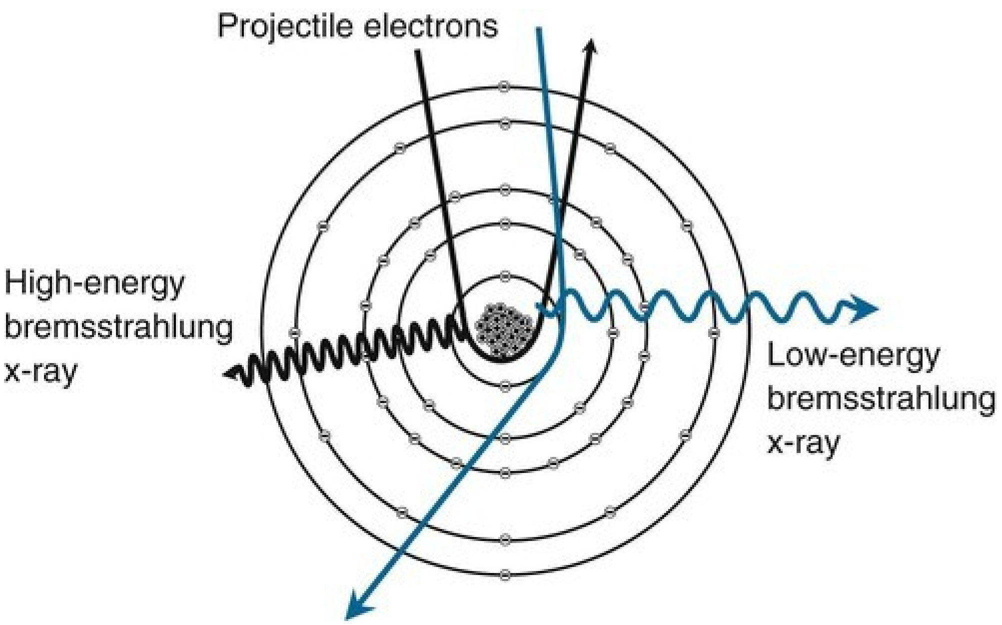
→ Raio X: onda eletromagnética!

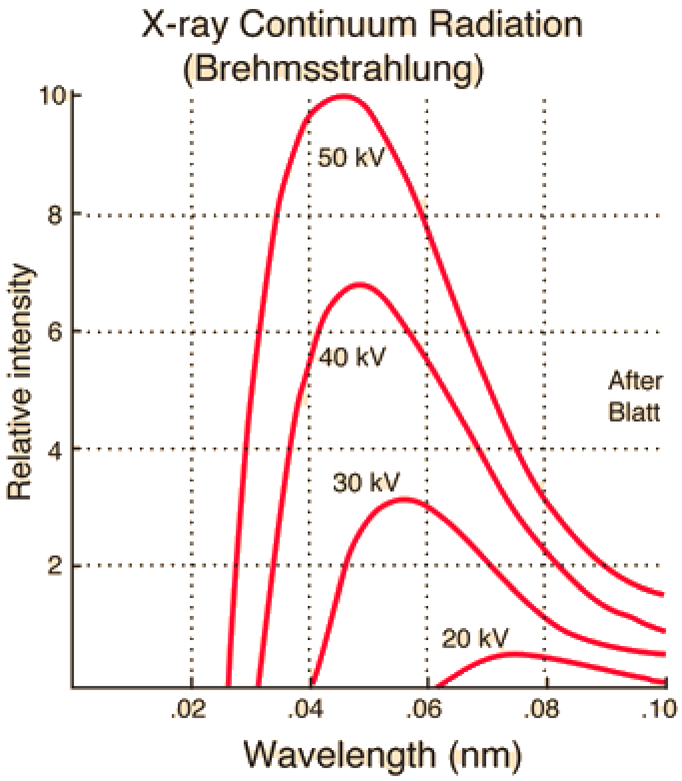
Tubo de raios X



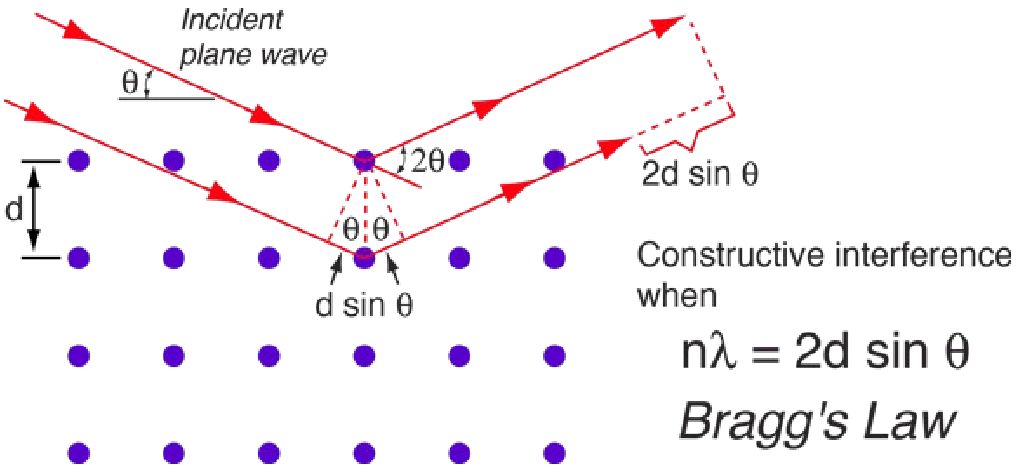
Radiação de freamento

- *Bremsstrahlung*





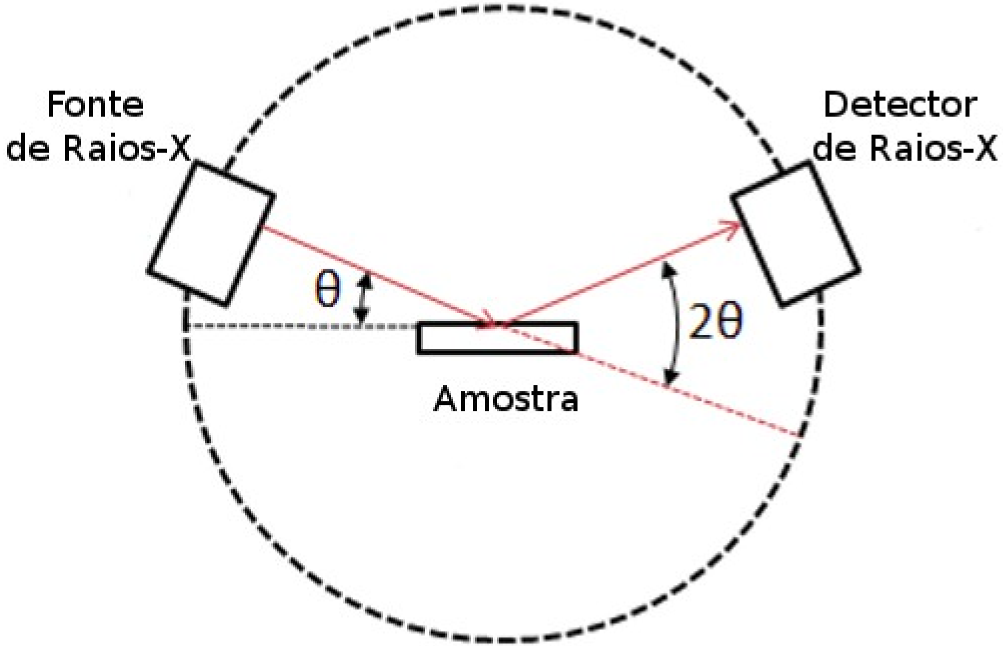
Difração de Bragg

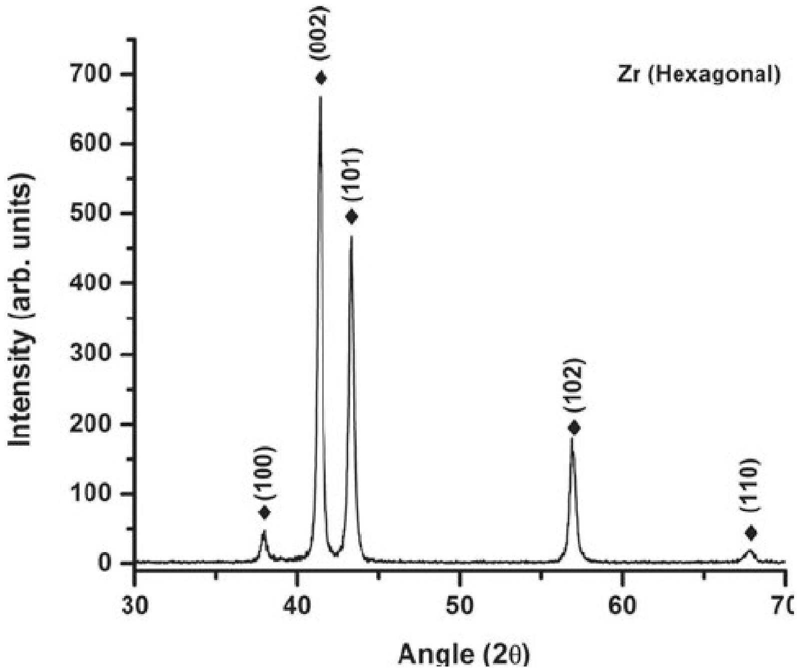


- Radiação monocromática
- “Reflexão” nos planos cristalinos
- Condição de Bragg: $2d\,\text{sen}\,\theta = m\lambda \;\; (m = 1,2,3,\ldots)$

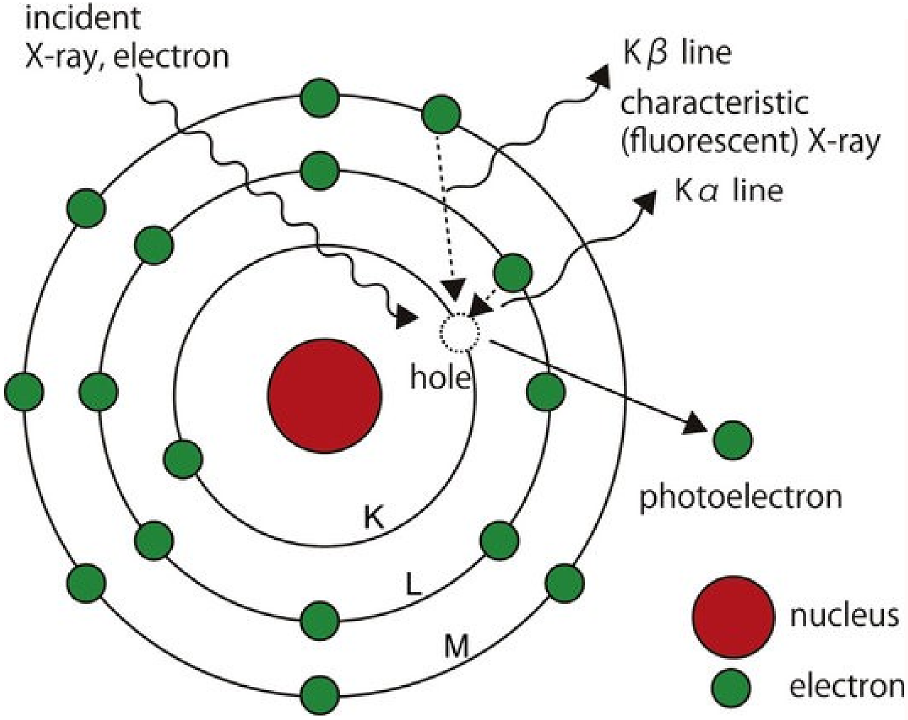
Difratômetro de Bragg

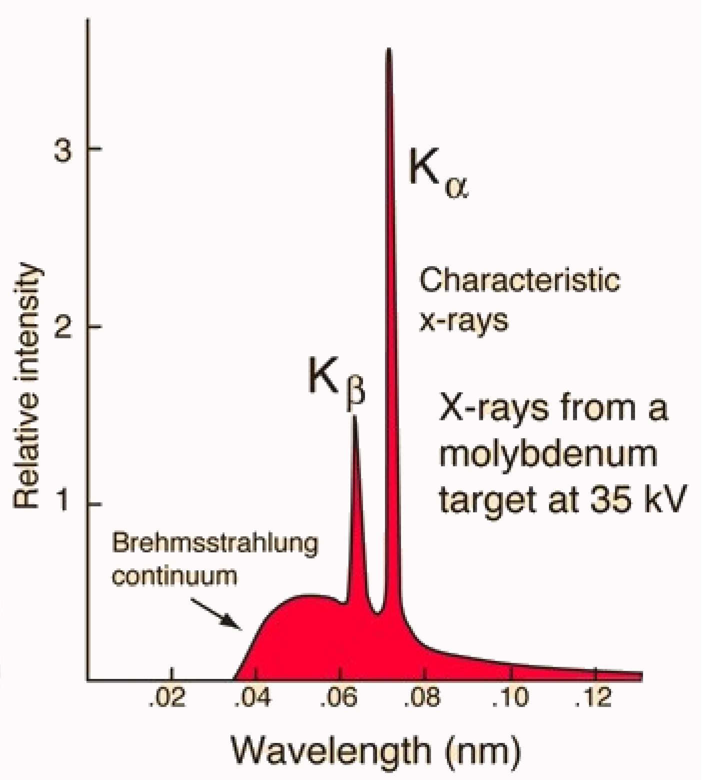
- Medida do espectro de raios X



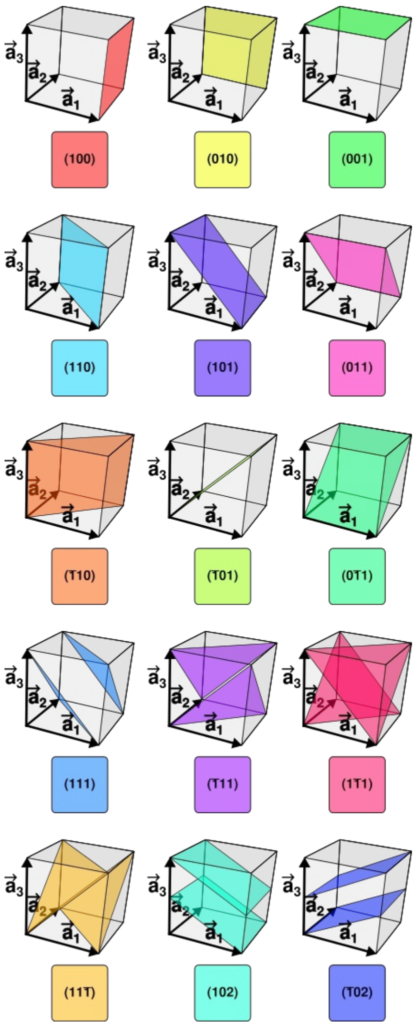


Raios X característicos





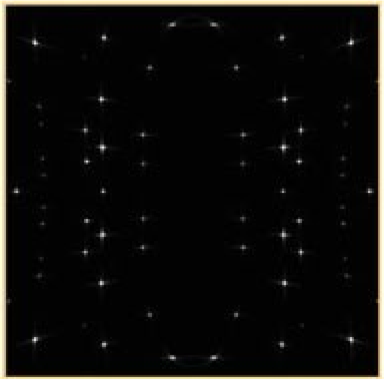
Famílias de planos cristalinos



Difração por pó microcristalino

- Direções dos planos cristalinos orientadas ao acaso
- Figura de difração: círculos

monocristal



policristal/pó