

# Universidade de São Paulo Instituto de Física

EVIDÊNCIAS EXPERIMENTAIS DA NATUREZA QUÂNTICA DA  
RADIAÇÃO E DA MATÉRIA

---

## AULA 10

**Profa. Márcia de Almeida Rizzutto**  
**Pelletron – sala 220**  
**rizzutto@if.usp.br**  
**rodrigo.fernandes.me@gmail.com**

**2º. Semestre de 2023**

**Monitores:** Rodrigo Fernandes de Almeida  
Samuel Pizzol

# Dualidade Onda-Partícula

- Max Born introduziu uma interpretação probabilística para a dualidade onda-partícula
- Como no caso da radiação eletromagnética, podemos descrever a propagação da matéria a partir de uma abordagem ondulatória  
Broglie diz: se ondas de luz tem propriedades de partículas, partículas devem ter propriedades de onda. E propôs que:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad \text{e} \quad E = h\nu$$

isto é, ambas as relações cima são válidas também para partículas

- Essa onda, chamada de *função de onda* e representada pela letra grega  $\Psi$ , determina a **probabilidade** da partícula ser observada em uma certa posição em um certo instante de tempo

Associaremos uma função de onda  $\psi$  (probabilidade da partícula ser observada em uma certa posição em um certo instante de tempo)

Função de onda

$$\Psi(x, t)$$

que é solução da equação de onda

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

v é a  
velocidade  
de fase

$$\Psi(x, t) = A \cos k(x - vt)$$

$$\Psi(x, t) = A \sin k(x - vt)$$

Uma solução simples é a chamada onda harmônica

Cujo nº de onda

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Velocidade da onda ou de fase

$$v = f\lambda$$

$$\Psi(x, t) = A \cos(kx - \omega t)$$

Curva que viaja na  
direção de x positivo

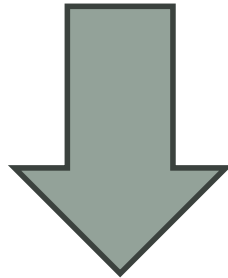
$\omega$  é a frequência  
angular  
 $\omega = 2\pi f = 2\pi/T$

# Teoria de Schroedinger

- Em 1925, Erwin Schroedinger desenvolve uma teoria para descrever o comportamento das funções de onda
- Ele propõe uma equação que permite obter a forma matemática da função de onda.
- Essa equação depende do potencial, isto é, das forças presentes no problema em questão
- Essa equação não pode ser deduzida, mas podemos dar um “palpite bem fundamentado” e verificar se ele descreve bem a natureza

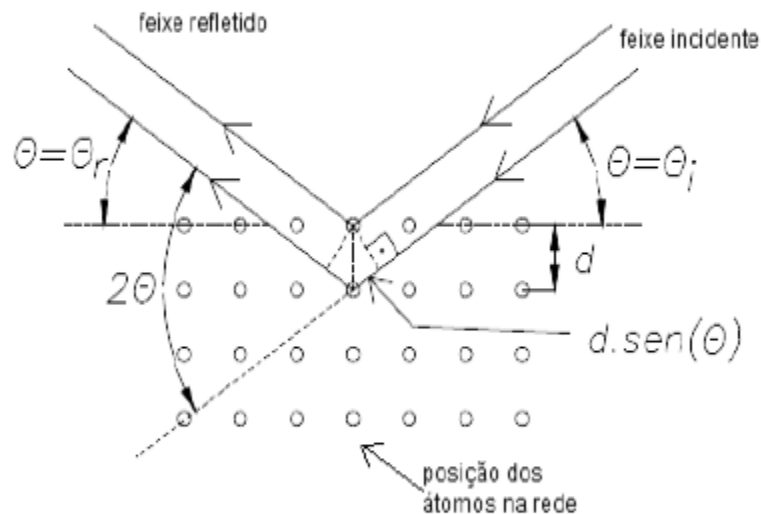
# Teoria de Schroedinger

- Essa equação deve ser consistente com as hipóteses de Einstein e de Broglie
- Ela deve reproduzir a conservação de energia
- Deve ser linear, para contemplar o princípio da superposição



Próximo curso

# Difração de RX em cristais







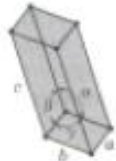


- **Lei de Bragg**  $n\lambda = 2d \text{sen}\theta$   $n = \text{ordem de difração}$

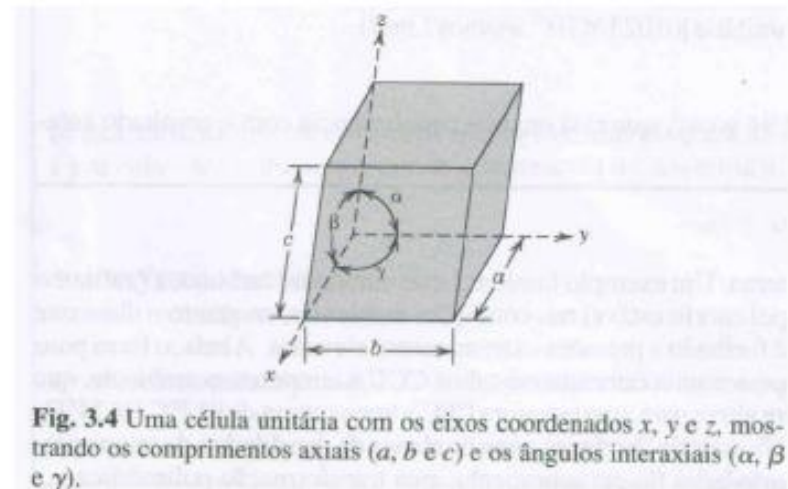
Lembre que  $E = hc/\lambda$

## Estrutura cristalina

Tabela 3.2 Relações entre os Parâmetros de Rede e Figuras Mostrando as Geometrias das Células Unitárias para Sete Sistemas Cristalinos

Sistema Cristalino	Relações Axiais	Ângulos Interaxiais	Geometria da Célula Unitária
Cúbico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<b>3</b> 
Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	<b>1</b> 
Tetragonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<b>2</b> 
Romboédrico	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	<b>1</b> 
Ortorrômbico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	<b>4</b> 
Monoclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	<b>2</b> 
Triclínico	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	<b>1</b> 

## Tipos de redes cristalinas



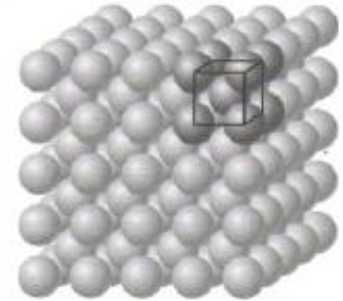
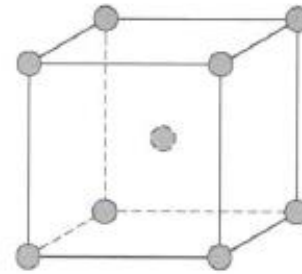
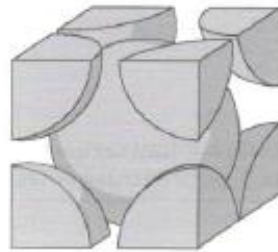
# Estrutura cristalina

Célula unitária com esferas rígidas

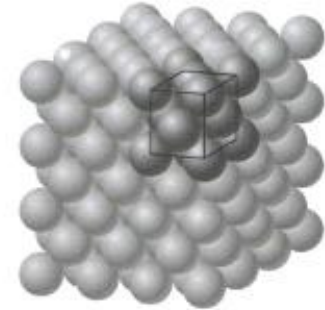
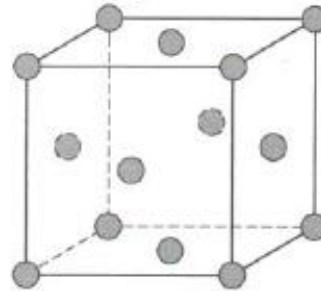
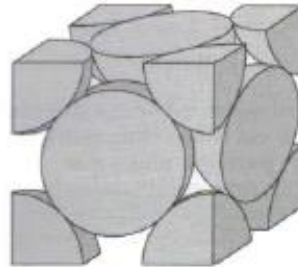
Célula unitária com esferas reduzidas

Agregado com muitos átomos

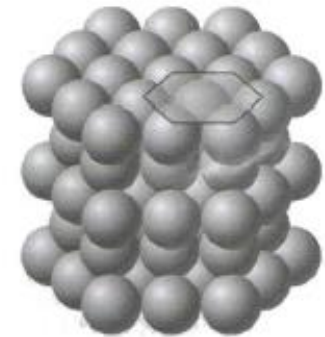
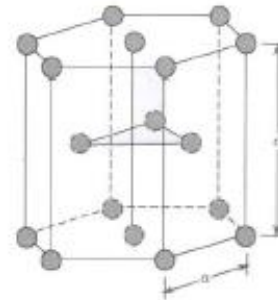
Rede cúbica de corpo centrado



Rede cúbica de face centrada



Rede hexagonal compacta





## Estrutura cristalina

### Difração de Raios X e Determinação de Estruturas Cristalinas

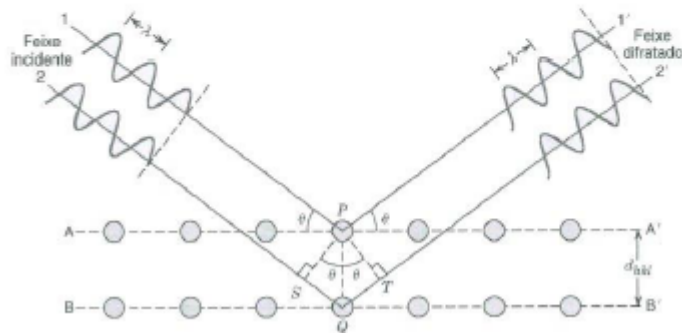


Fig. 3.18 Difração de raios X por planos de átomos (A-A' e B-B').

### Difração nas variações da densidade eletrônica e Lei de Bragg

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

Onde, para uma rede cúbica:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

### Técnica de Medida

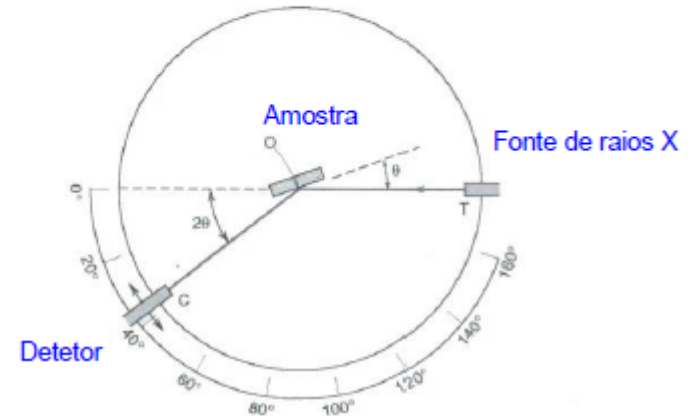


Fig. 3.19 Diagrama esquemático de um difratômetro de raios X; T = fonte de raios X, A = amostra, C = detector e O = o eixo em torno do qual a amostra e o detector giram.

- 1) Geometria simétrica ( $\theta$ - $2\theta$ ), onde visualizam-se planos cristalinos paralelos à superfície da amostra.
- 2) Geometrias assimétricas, em geral para aplicações específicas.

## Estrutura cristalina

### Difração de Raios X e Determinação de Estruturas Cristalinas

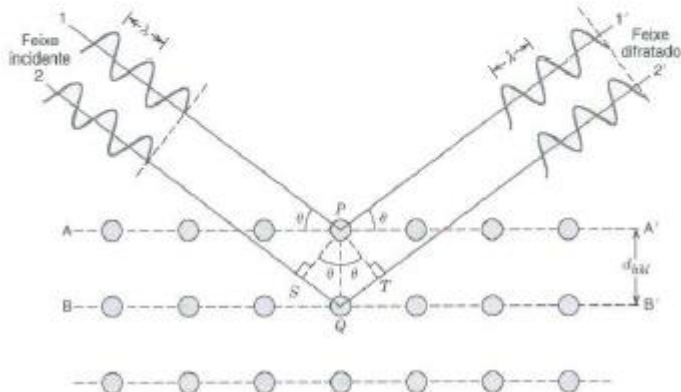


Fig. 3.18 Difração de raios X por planos de átomos (A-A' e B-B').

### Difração nas variações da densidade eletrônica e Lei de Bragg

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

Onde, para uma rede cúbica:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

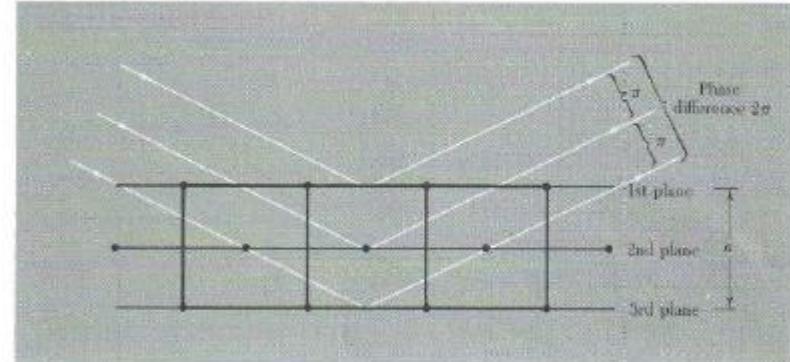
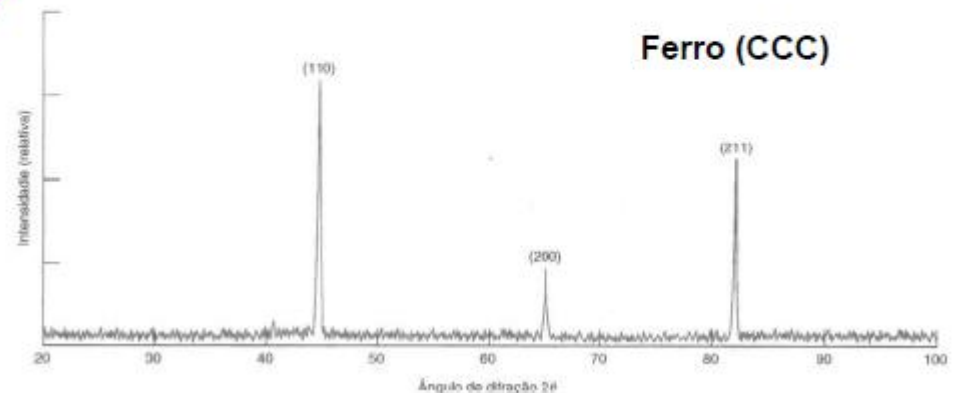


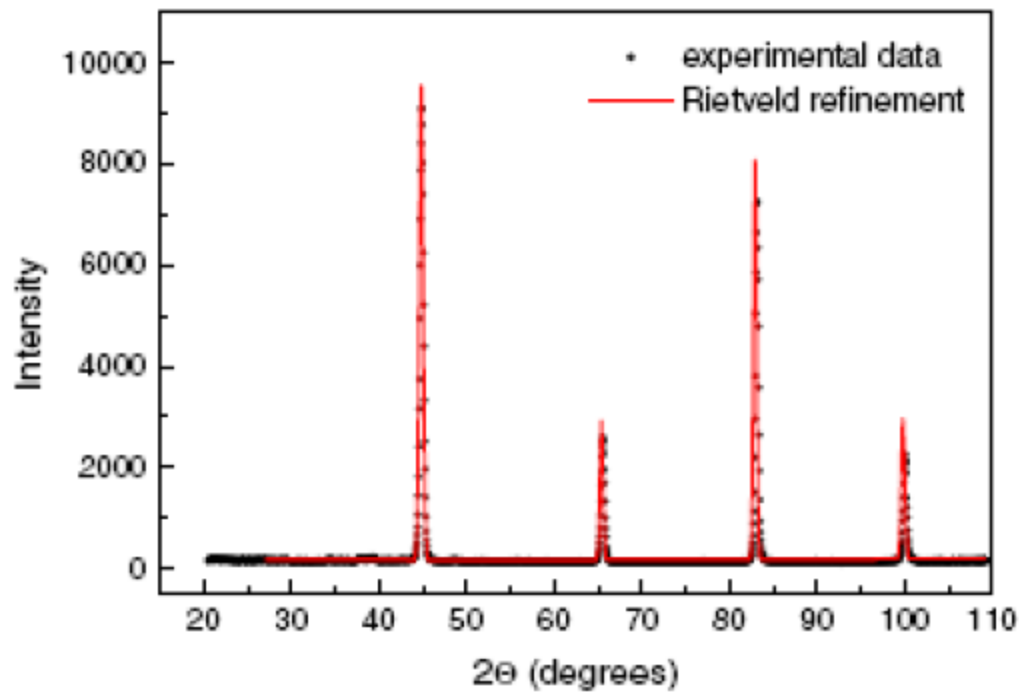
Figure 16 Explanation of the absence of a (100) reflection from a body-centered cubic lattice. The phase difference between successive planes is  $\pi$ , so that the reflected amplitude from two adjacent planes is  $1 + e^{-i\pi} = 1 - 1 = 0$ .

Para rede CCC, valores possíveis para (hkl) são tais que  $h+k+l = \text{inteiro par}$



## Estrutura cristalina

## Difração de neutrons

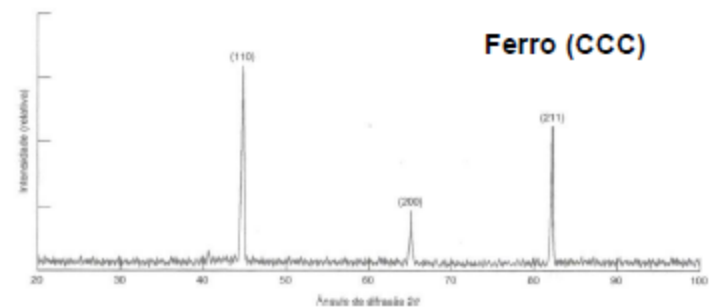


Material:

Aço Eurofer (CCC)

Fig. 1. Neutron diffraction data from Eurofer 97. The continuous line is a fit to the data after Rietveld refinement.

Para rede CCC, valores possíveis para (hkl) são tais que  $h+k+l = \text{inteiro par}$



# Difração de elétrons

## Parte Experimental

Usaremos estruturas cristalinas como objetos difratantes.

# Difração de elétrons

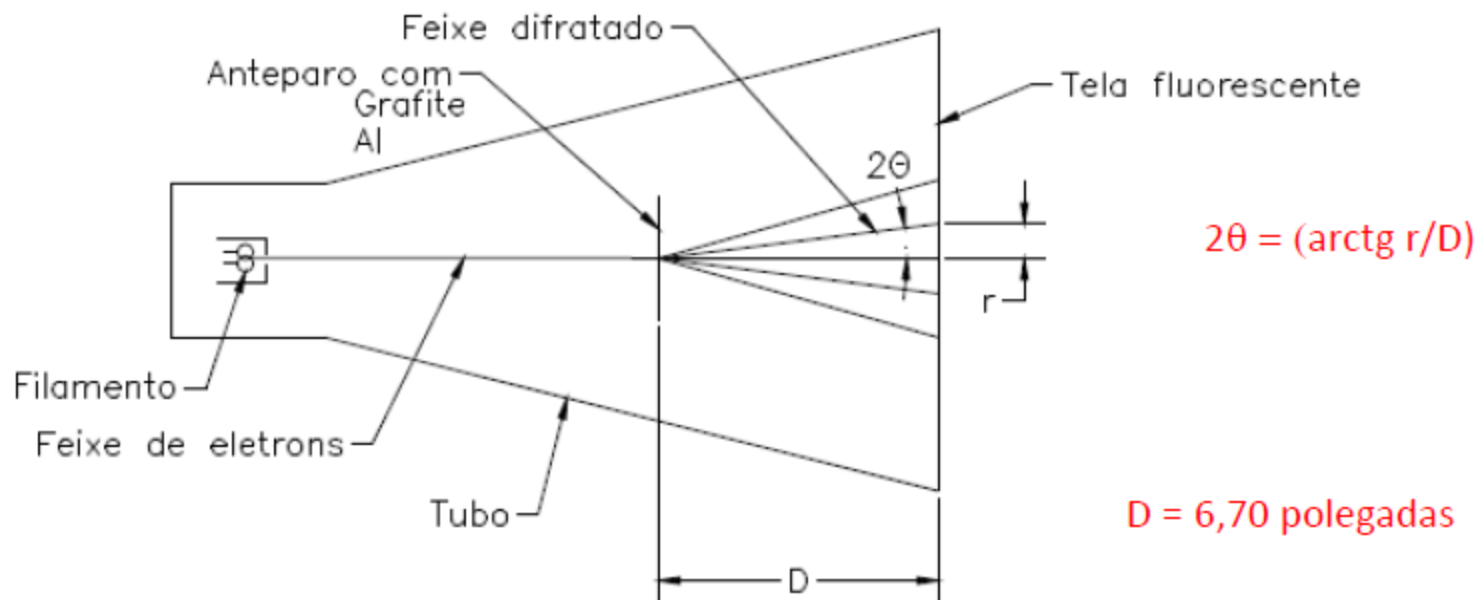
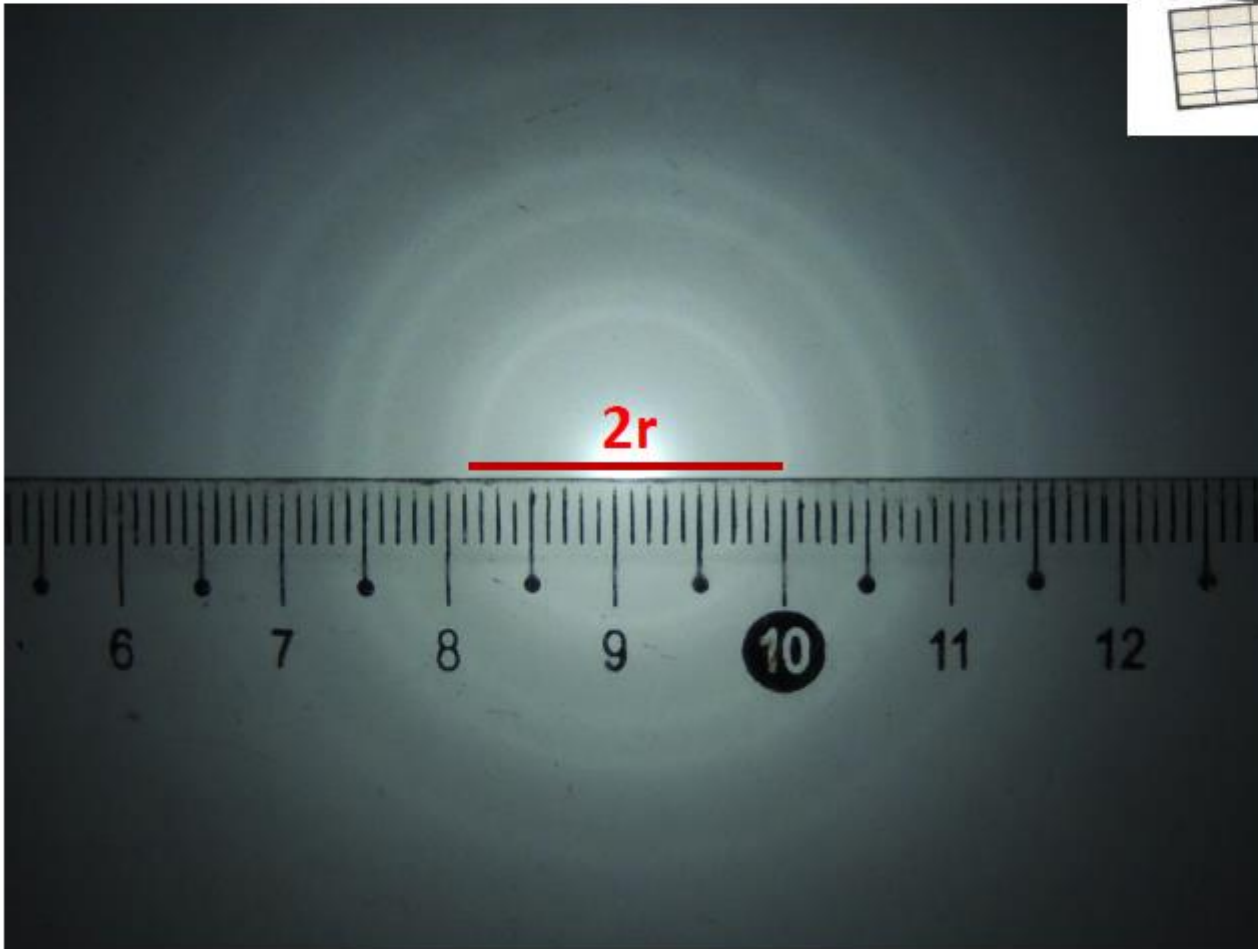
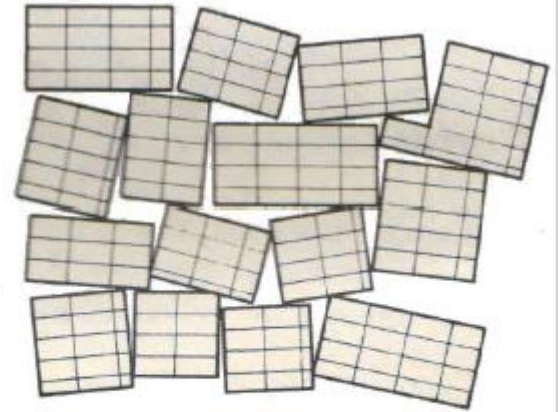


Figura c-1. Tubo de raios catódicos para medida de difração de elétrons.

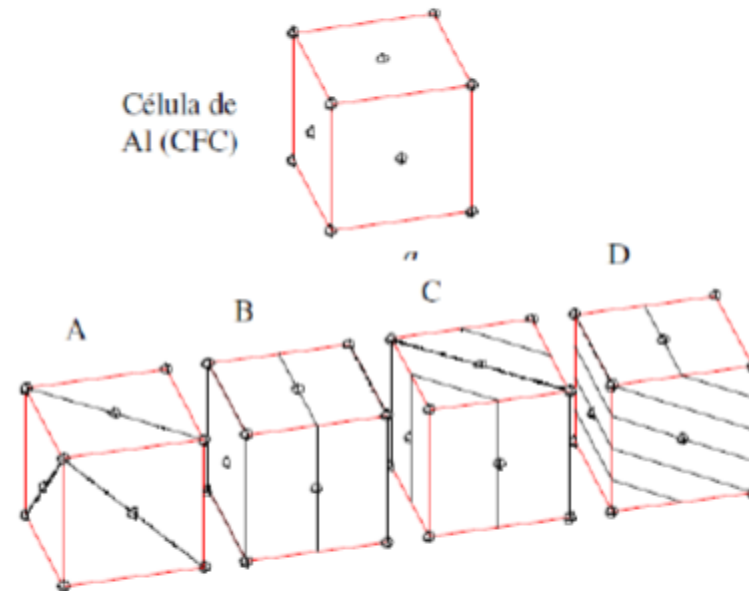
# Policristal de Al



Fórmula de Scherrer

$$t = \frac{0,9\lambda}{B \cos \theta_B}$$

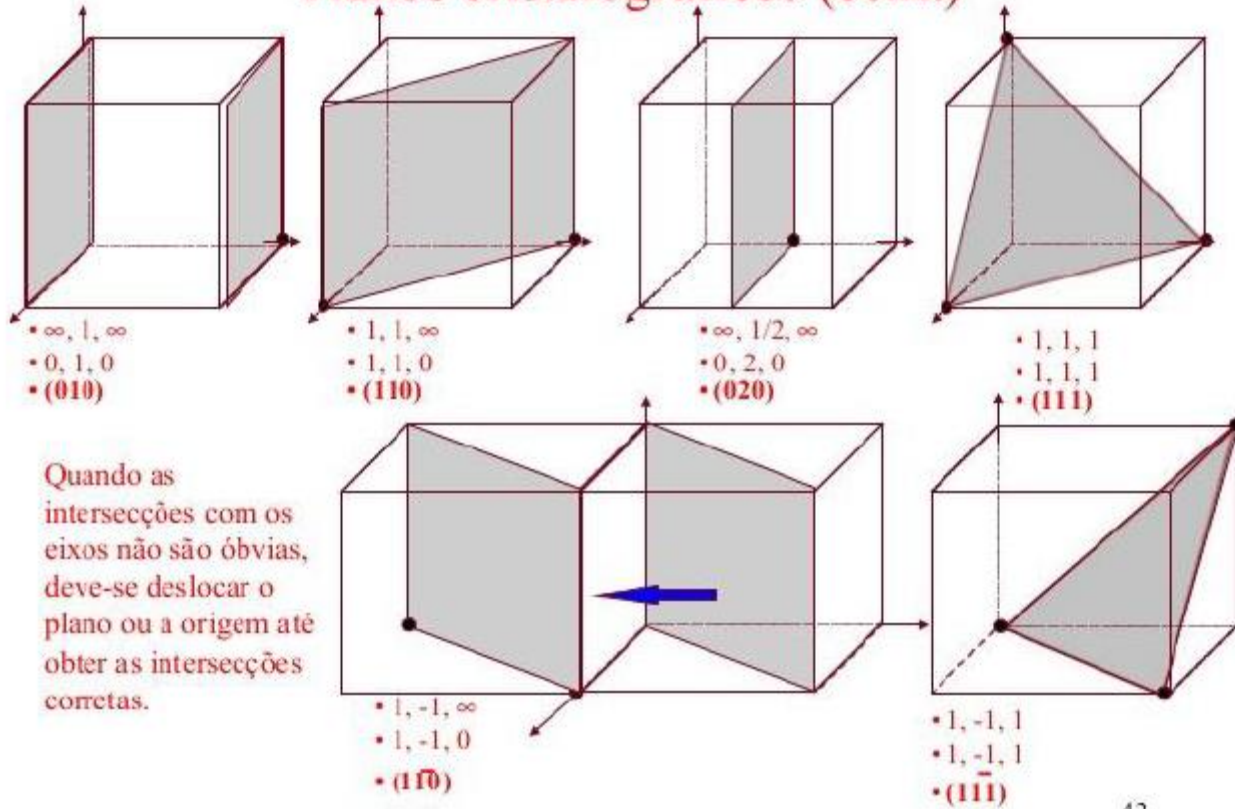
## A estrutura policristalina do alumínio



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

Figura c-4 - Célula cúbica de faces centradas e correspondentes famílias de planos cristalinos com  $d$  em ordem decrescente (A,B,C,D).

## Planos cristalográficos (cont.)





Os ângulos de difração são obtidos de:

$$2\theta = (\arctg r/D)$$

onde  $r$  é a distância entre o ponto de incidência do feixe direto e um ponto de máximo da figura de interferência, medida sobre a tela fluorescente, e  $D$  é a distância entre o alvo e a tela = 6,70 polegadas!

Lei de Bragg :

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

Tabela c-2 - Parâmetros de um cristal de alumínio (CFC),  $a = (4.04 \pm 0.01) \text{ \AA}$ .

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

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

Família	$d$	$n$	$\frac{2d}{n}$	Ângulo
A	$\frac{a}{\sqrt{3}}$	1	$\frac{2a}{\sqrt{3}}$	$\theta_1$
B	$\frac{a}{2}$	1	$a$	$\theta_2$
C	$\frac{a}{2\sqrt{2}}$	1	$\frac{a}{\sqrt{2}}$	$\theta_3$
D	$\frac{a}{\sqrt{11}}$	1	$\frac{2a}{\sqrt{11}}$	$\theta_4$
A	$\frac{a}{\sqrt{3}}$	2	$\frac{a}{\sqrt{3}}$	$\theta_5$
B	$\frac{a}{2}$	2	$\frac{a}{2}$	$\theta_6$

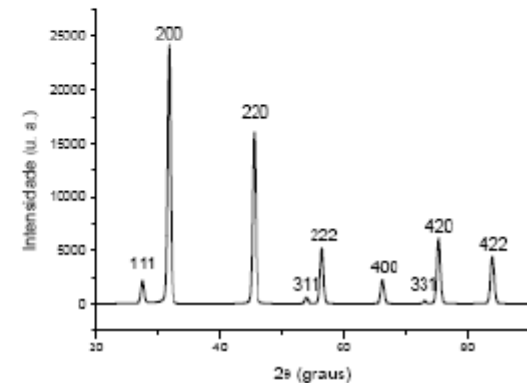


Figura 12. Padrão de difração de pó (difratograma) do NaCl

**Vamos analisar os 4 primeiros halos de difração e determinar  $\lambda$  (para cada halo)**

**Determinar valor médio de  $\lambda$  e respectiva incerteza e comparar com  $\lambda$  de deBroglie (lembrar que tensão de aceleração dos elétrons foi de 10 kV)**

# Cristal de grafite

Pela lei de Bragg:

$$\lambda = \frac{2d \sin(\theta)}{n} \quad (4)$$

onde  $d$  é a distância interplanar de uma certa família de planos cristalinos e  $n$  é a ordem da difração.

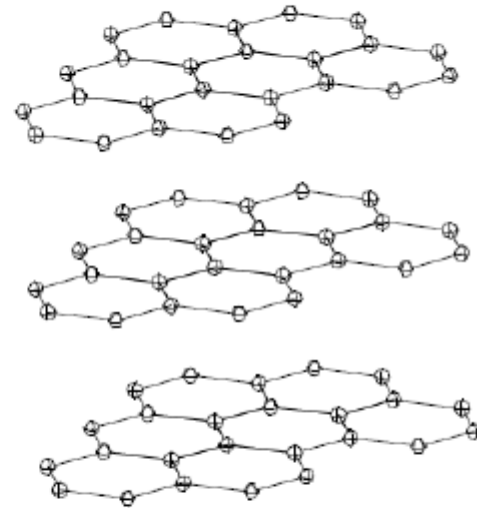


Figura c-2. Camadas de rês hexagonais de um cristal de grafite em perspectiva.

# Cristal de grafite

