

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

Parâmetros experimentais e teóricos da radiação X

PMT 3301 – Fundamentos de Cristalografia e Difração;



Conceito da difração

 Difração é um fenômeno que acontece quando uma onda encontra um obstáculo;

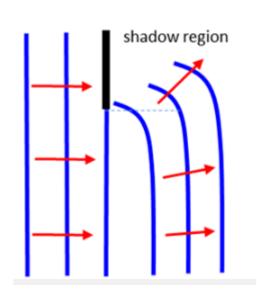


- Em física clássica, o fenômeno da difração é descrito como um espalhamento das ondas após atravessar orifícios ou fendas;
- O fenômeno da difração acontece com todos os tipos de ondas;
- Entretanto, este fenômeno somente ocorre quando o comprimento das ondas é comparável com a dimensão do obstáculo;



Conceito da difração

- http://www.physics.usyd.edu.au/teach_res/hsp/sp/mod31/m31_superposition.htm;



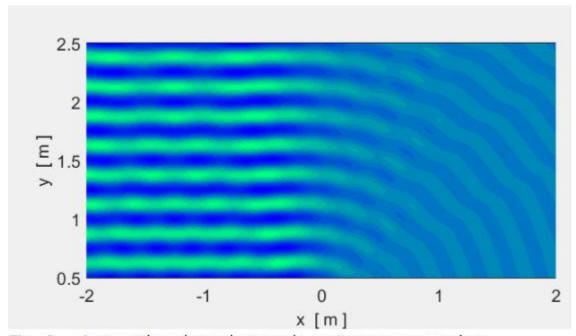
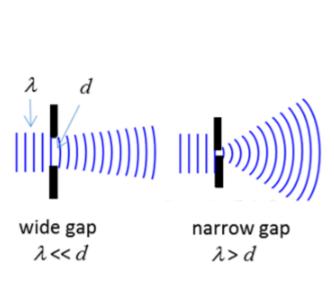


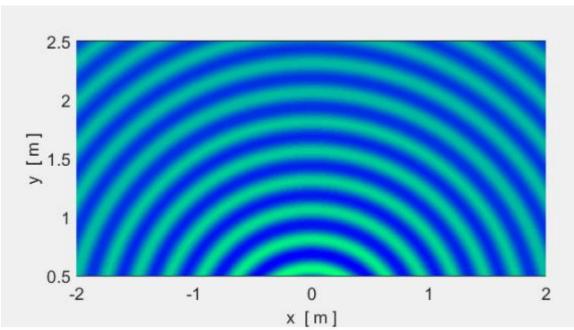
Fig. 2. A wave bends and spreads as it passes an edge.



Conceito da difração

- http://www.physics.usyd.edu.au/teach_res/hsp/sp/mod31/m31_superposition.htm;





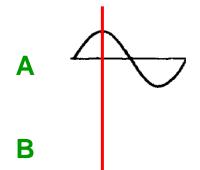


Difração ou interferência

 Richard Feynman escreveu: "Ninguém nunca foi capaz de definir a diferença entre interferência e difração satisfatoriamente. É somente uma questão de linguagem, e não há diferenças físicas específicas ou importantes entre elas. Tem-se, entretanto, que difração é o fenômeno devido a um obstáculo, já interferência refere-se mais a uma interação entre dois ou mais fenômenos ondulatórios".

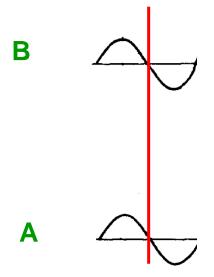


<u>Difração</u>





<u>Difração</u>





Difração

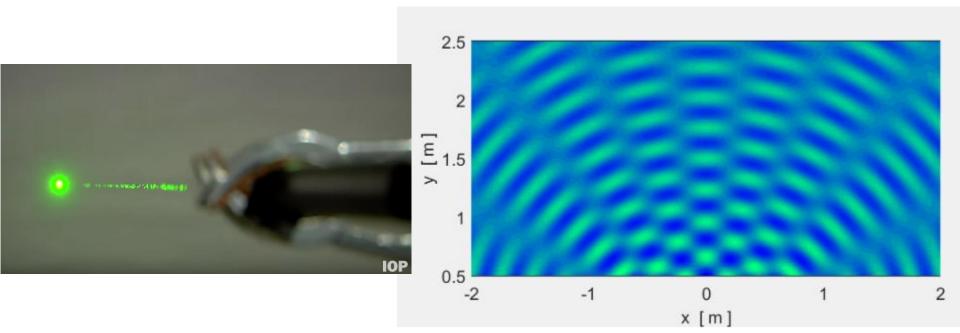
A

E



Conceito da difração

- Se o objeto obstrutor apresentar múltiplas fendas, poderá resultar em um padrão complexo de intensidade variável;





Conceito da difração de raios X

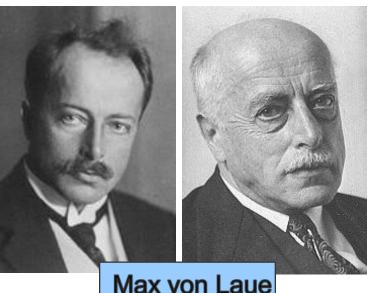
- Até o momento, discutimos isoladamente os conceitos físicos do raios e a geometria dos cristais;
- Historicamente, foi exatamente dessa forma que a ciência se desenvolveu;
- Por muitos anos, cristalógrafos estudaram os cristais para determinar as propriedades químicas e físicas;
- Mas não se tinha conhecimento sobre como os cristais eram formados;
- Embora existisse uma ideia de que os cristais eram formados por átomos ou moléculas espaçadas de 1-2 Á.
- Na mesma época, existiam indicações de que os raios X fossem ondas eletromagnéticas com um comprimento de onda entre 1-2 Á.



Max von Laue (1879 – 1960)

- Este era o estado do conhecimento em 1912 quando o físico alemão von Laue encontrou o problema;
- Se um cristal for composto por átomos espaçados regularmente;

1 nanometer = 10^{-9} m = 10 Å.

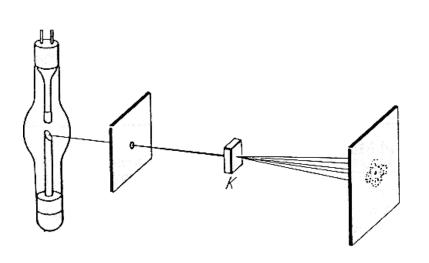


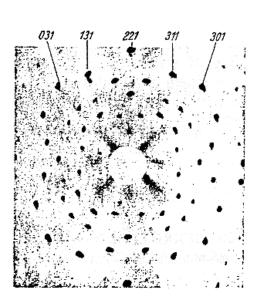
- Se as ondas de raios X possuem um comprimento de onda próximo da distância interatômica;
- Seria esperado que os raios X sejam difratados pelo cristal;



Max von Laue (1879 – 1960)

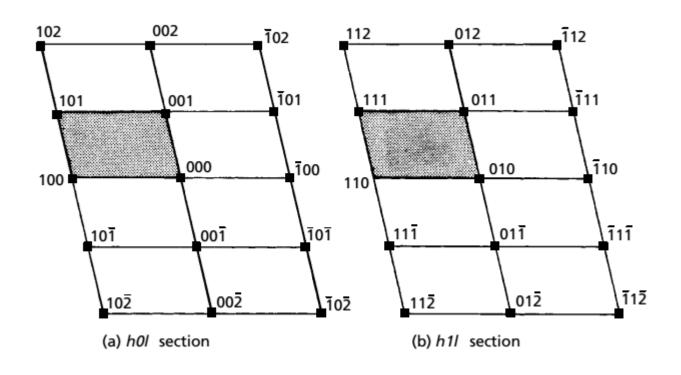
- Na segunda tentativa, Max von Laue mostrou a primeira difração de raios X por um cristal de sulfato de cobre;
- Esta experiência provou a natureza ondulatória das ondas de raios X e que os átomos são organizados de forma periódica no cristal.







Rede recíproca





Materials and Design

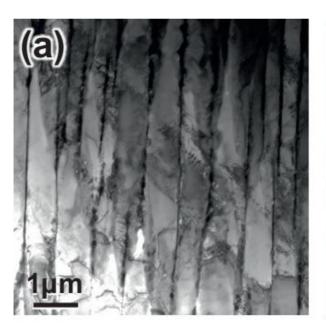
journal homepage: www.elsevier.com/locate/matdes



Effect of scanning strategy on texture formation in Ni-25 at.%Mo alloys fabricated by selective laser melting



Shi-Hai Sun a,b, Koji Hagihara b,c, Takayoshi Nakano a,b,*



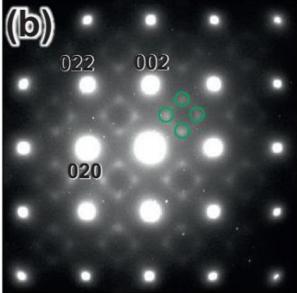
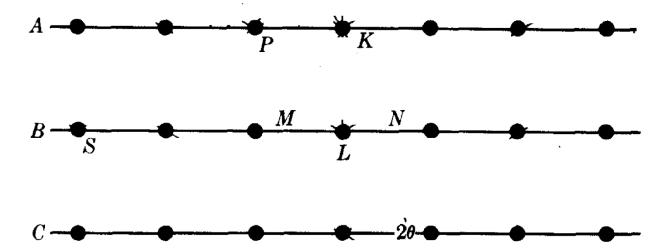


Fig. 3. (a) TEM bright field image of the microstructure and (b) corresponding SAED pattern observed in the Ni-25 at. Mo sample fabricated in the XY-scan. The observed plane was nearly parallel to the yz-plane, and the specimen was slightly tilted to adjust the observed direction parallel to (100).

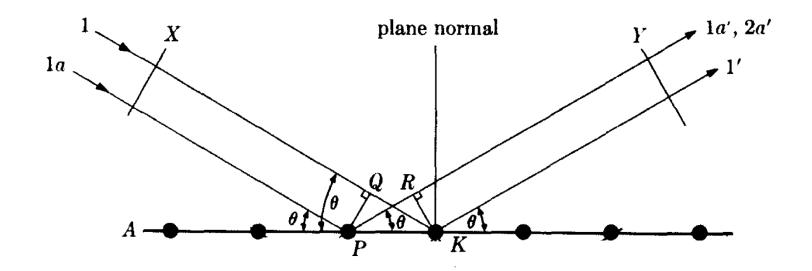


Difração

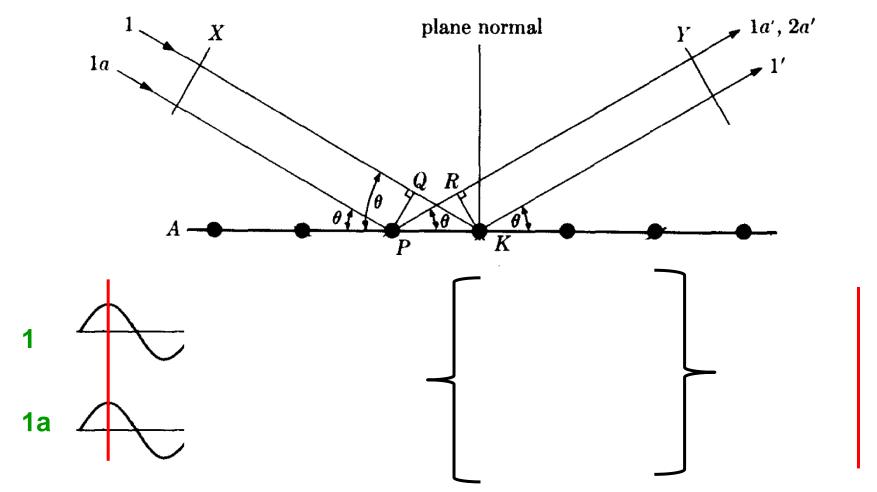
- Como ocorre a difração dentro de um material?
- Imagine uma rede de um cristal organizados em fileira planas chamadas de A, B e C



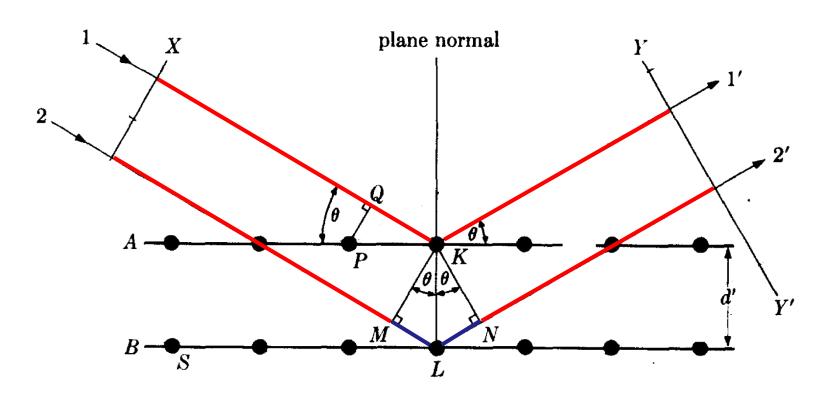












- Duas principais conclusões:
 - A diferença de distância percorrida por duas ondas parciais gera uma diferença de fases entre as mesmas;
 - A alteração das fases das ondas parciais gèra uma variação na amplitude da onda resultante.



Principais conclusões

- Um raio difratado pode ser definido como um raio composto por um grande número de raios espalhados que se reforçam.
- Duas ondas estarão em fase quando a diferença de distância percorrida for 0 ou um número inteiro do comprimento de onda.

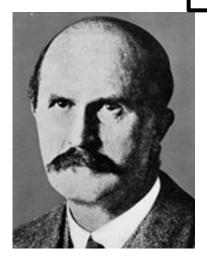


Família Bragg

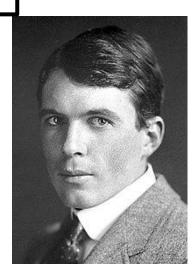
- Os resultados experimentais de Laue foram lidos por dois físicos ingleses;
- Em 1912, William Lawrence Bragg (1890-1971) expressou matematicamente a condição para que a difração ocorra;

- Lei de Bragg;

 $n\lambda = 2dsen\theta$



William Henry Bragg



William Lawrence Bragg



Difração de segunda ordem

- Segundo a lei de Bragg, para que ocorra a difração, o comprimento de onda da radiação precisa ser da mesma ordem de magnitude da distância interatômica;

$$\frac{n\lambda}{2d'} = \sin \theta < 1$$
. - Onde o menor valor possível para "n" é 1.

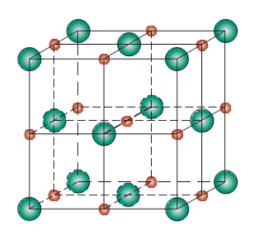
- Assim, a condição para que ocorra a difração será: $\lambda < 2d'$.

- Sabendo que a distância interplanar é por volta de 3 Å, diga para quais comprimentos de onda o fenômeno da difração ocorrerá.
- Seria possível usar a radiação gamma para promover a difração? Quais seriam os problemas experimentais?



Família Bragg

- Já o William Henry Bragg (1862-1942), desenvolveu um detector de raios X e que, em conjunto com o cristal difratado do filho, formam a base da espectroscopia de raios X.
- Com isso foi possível determinar as estruturas cristalinas de alguns sais como o NaCl, KCl, KBr e Kl



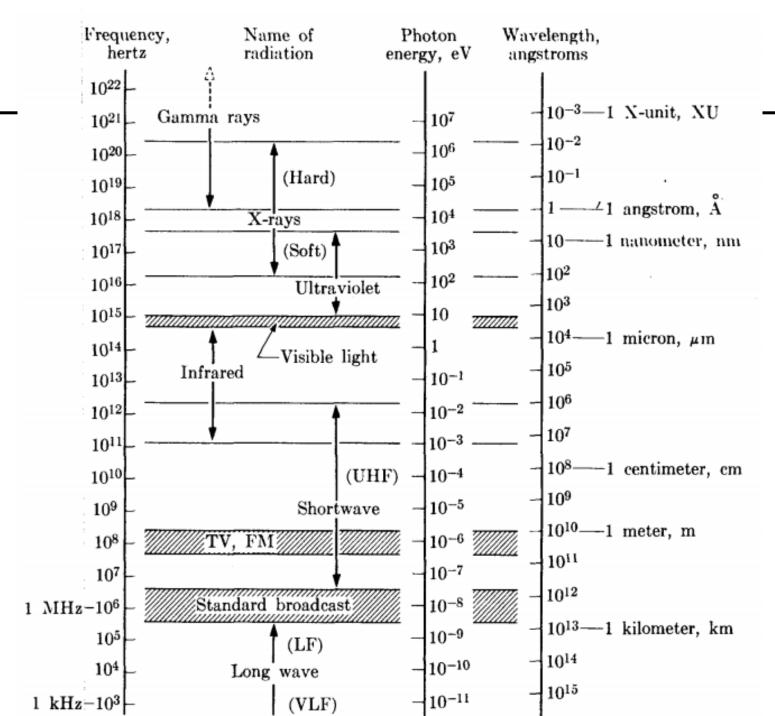




Reflexão e refração – qual a diferença

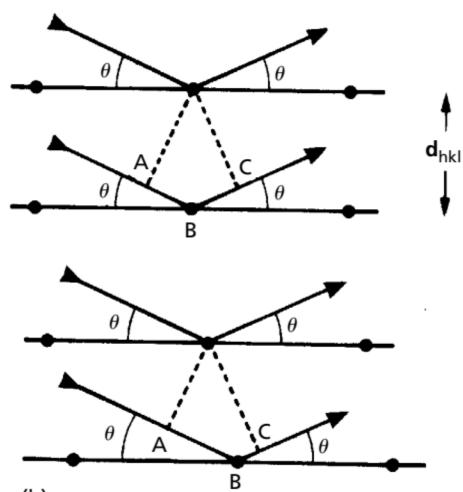
- Em uma primeira análise, você pode associar que os raios de raios X são refletidos pelos átomos;
- Cuidado! Isso é uma analogia errada;
- Existem 3 diferenças principais entre difração e reflexão
- 1. A difração dos raios X monocromáticos acontece somente para os ângulos que satisfazem a lei de Bragg. A reflexão da luz visível ocorre para todos os ângulos de incidência.
- 2. A reflexão da luz visível é 100% eficiente. A intensidade do raio X difratado é muito menor que o feixe incidente.
- O raio difratado por um cristal é composto pelos raios espalhados por todos os átomos do cristal que foram atingidos pelo raio A reflexão da luz visível acontece somente em uma pequena camada da superfície;







Lei de Bragg



- Costuma-se representar a difração pela Lei de Bragg com os átomos dispostos de forma simétrica;

- E se os átomos não forem organizados de forma simétrica, a difração ocorrerá?

Prove matematicamente que a difração ocorrerá.



Lei de Bragg

- Logo, a Lei de Bragg está relacionada com a distância interplanar somente;
- Já a posição dos átomos no plano não é relevante;
- Lembrando que a radiação incidente e refletida precisam ser iguais sempre.

