

ROTEIRO DE ANÁLISES

1. Análise dos Dados

- Este documento contém a descrição das etapas de análise dos dados coletados na etapa de obtenção de dados, sobre o Experimento de Difração de Raio-X.

2. Objetivos da aula de difração de raio-X

Conforme mencionado nos demais documentos:

- O experimento tem duas grandes partes realizadas na 1ª aula (1ª semana):
 - **Parte 1** – difração de Bragg, para determinar a distância Inter atômica dos componentes da célula do cristal (d).
 - **Parte 2** – determinação da constante de Planck (h) via *Bremsstrahlung*.

3. Relatório

As informações sobre o relatório encontram-se no documento Modelo de Relatório, disponível no website e no moodle da disciplina. Abra o documento e veja seu conteúdo antes de prosseguir com as análises. Ele dirá como deverá ficar seu relatório.

4. Organização das análises

Parte 1 – Determinação da distância inter atômica entre o Na e o Cl no NaCl.

- Assista o Vídeo 3.2 - Análise de Bragg
- Execute o programa 2-Análise de Bragg.
- No programa você deverá obter dados conforme descrito na seção 5 deste documento a seguir (Análise de Bragg).

Parte 2 – Cálculo da constante de Planck

- Assista o Vídeo 3.3 – Análise de Duane-Hunt.
- Execute o programa 3-Análise de Duane-Hunt.
- Assista o Vídeo 3.4 – Análise de Planck.
- Execute o programa 4-Análise de Planck.

5. Análise de Bragg

Conforme descrito na parte teórica, o objetivo da difração de Bragg é analisar estruturas cristalinas através de difração de raio x. No presente experimento, utilizaremos esse método para determinar o parâmetro da célula unitária de um monocristal de cloreto de sódio, que consiste na separação Inter atômica entre um átomo de Na e um átomo de Cl adjacentes.

Conforme descrito nos vídeos 2.1, 2.2 e 2.3 da parte teórica, isso é feito identificando-se os picos de difração de emissões de radiação característica de raio x de um alvo de Molibdênio situado no anodo do tubo de raio x.

Para cada pico vale a relação de Bragg:

$$n\lambda = 2d \sin(\theta) \quad (1)$$

Conhecendo-se n , λ e θ pode-se calcular d , que é o parâmetro desejado (distância ente o Na e o Cl adjacentes, no cristal de NaCl).

Nos dados adquiridos com o programa 1-Difração de Bragg, identifica-se até 6 picos de difração para cada uma das três tensões (para $U=25$ kV nem sempre é possível conseguir os 6 picos, apenas alguns deles). A figura 1 a seguir ilustra esses picos para $U= 35$ kV. Para as demais tensões os resultados são similares.

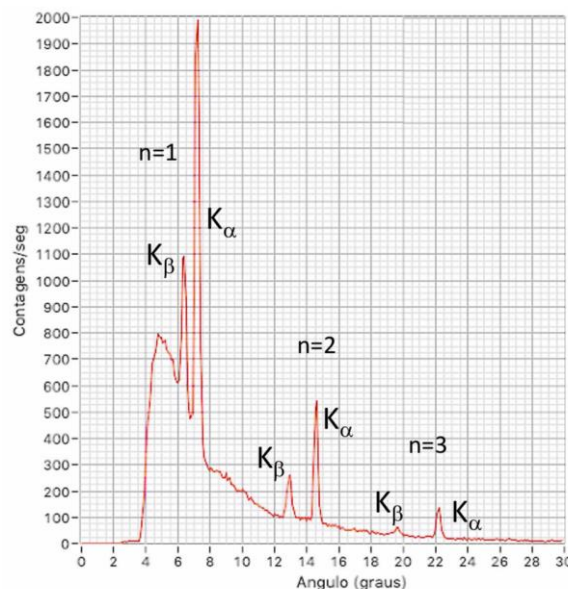


Figura 1 – Resultados de experimento de difração de Bragg para $U = 35$ kV.

Os valores de n estão indicados na figura acima. Os valores do comprimento de onda $\lambda_{K\alpha}$ e $\lambda_{K\beta}$ são apresentados na Tabela 1 a seguir. Os valores de θ_{pico} serão determinados com o programa 2-Análise de Bragg.

TABELA 1

	$\frac{E}{\text{keV}}$	$\frac{\nu}{\text{EHz}}$	$\frac{\lambda}{\text{pm}}$
K_{α}	17.443	4.2264	71.080
K_{β}	19.651	4.8287	63.095

$\text{keV} = 10^3 \text{ eV}$, $\text{EHz} = 10^{18} \text{ Hz}$, $\text{pm} = 10^{-12} \text{ m}$

Tabela 1 - Valores das energias, frequências e comprimentos de onda das transições K do Mo
 Substituindo-se esses valores na expressão (1), obtém-se:

$$d = n\lambda / 2 \sin(\theta_{\text{pico}}) \quad (2)$$

na qual λ deve ser substituído por $\lambda_{K_{\alpha}}$ ou $\lambda_{K_{\beta}}$ (obtidos da Tabela 1 acima), conforme o pico utilizado.

Os valores do θ_{pico} são obtidos do arquivo salvo com o programa 2-Análise de Bragg. Vide exemplo na figura 2, a seguir:

Tensao: 35 kV	Pico: 22,20	Desvio: 0,20
Tensao: 30 kV	Pico: 22,16	Desvio: 0,18
Tensao: 25 kV	Pico: 22,16	Desvio: 0,16
Tensao: 30 kV	Pico: 6,46	Desvio: 0,24
Tensao: 30 kV	Pico: 7,19	Desvio: 0,16
Tensao: 35 kV	Pico: 12,90	Desvio: 0,22
Tensao: 35 kV	Pico: 14,56	Desvio: 0,16

Figura 2 – Exemplo de resultados de θ_{pico} e seus desvios obtidos com o programa 2-Análise de Bragg

Os valores dos desvios $\Delta\theta_{\text{pico}}$ no ângulo de pico θ_{pico} devem ser utilizados para computar o desvio na distância Inter atômica d , de modo a fornecer o resultado o de $d \pm \Delta d$ para cada pico correspondente. Todos os valores de θ_{pico} e $\Delta\theta_{\text{pico}}$ são fornecidos pelo programa em graus.

Para se calcular o desvio Δd a partir do desvio $\Delta\theta_{\text{pico}}$, deve-se levar em consideração a expressão (2) e deduzir a expressão de cálculo da propagação de desvios para relações não-lineares. Maiores detalhes sobre como fazê-lo podem ser encontrados no item “dependência funcional genérica”, no artigo:

Kogler Jr, J.E. (2008) – Propagação de erros – artigo disponível em

<https://jkogler.wordpress.com/2008/03/18/hello-world/>

A dedução que você deve fazer da fórmula de Δd deve ser apresentada no relatório.

Deve-se também tomar cuidado ao computar os valores de desvio Δd em utilizar os valores do desvio $\Delta\theta_{\text{pico}}$ em radianos. O programa 2-Análise de Bragg fornece todos os valores em graus.

Realizados os cálculos dos valores de $d \pm \Delta d$, é necessário sumarizar os dados na forma de um valor único de $d \pm \Delta d$ representativo de todas suas análises. Para tanto não se pode proceder a nenhum método de cálculo estatístico, pois cada valor de $d \pm \Delta d$ é obtido de uma situação experimental diferente, portanto não correspondem a dados proveniente de um mesmo arranjo experimental (cada valor é medido sob um ângulo diferente, ou sob uma tensão diferente ou correspondendo a um comprimento de onda de radiação característica diferente). Portanto, nos resta realizar a intersecção de todos intervalos de $d \pm \Delta d$ e achar o intervalo comum.

Isso é feito determinando-se o menor dentre os extremos superiores $d + \Delta d$ e o maior dentre os extremos inferiores $d - \Delta d$ e tomando-se o centro intervalo resultante como sendo a estimativa de d , isto é, o centro de

$$[\min(d + \Delta d) , \max(d - \Delta d)] \quad (3)$$

E o desvio da estimativa de d será, conseqüentemente, a metade do valor desse intervalo. Seu relatório deverá detalhar todos esses cálculos.

6. Análise de Planck

A análise de Planck deve ser precedida pela Análise de Duane-Hunt.

6.1. Análise de Duane-Hunt

Nesta etapa de análise, os dados adquiridos no experimento de obtenção de dados, com o programa 1-Difração de Bragg produzem um segundo arquivo, que corresponde ao experimento de Duane-Hunt, cujos resultados são ilustrados na figura a seguir.

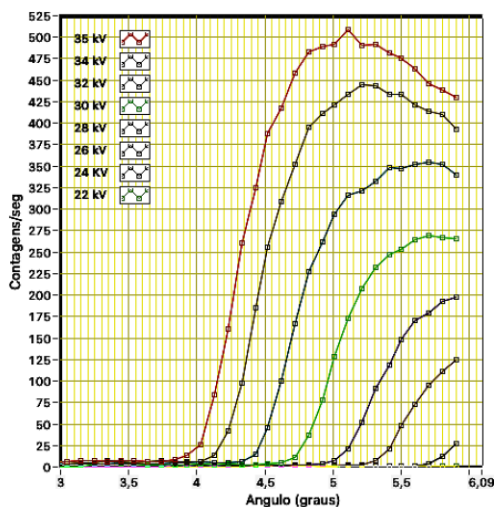


Figura 2 – Resultados do experimento de Duane-Hunt

Essas curvas são utilizadas para se determinar os valores de λ_{\min} correspondentes a cada valor de tensão, seguindo-se a relação de Duane-Hunt:

$$\lambda_{\min} = (h c / e) \cdot (1/U) \quad (4)$$

Na qual h é a constante de Planck, c é a velocidade da luz no vácuo e e é a carga do elétron, sendo U a tensão aceleradora correspondente ao valor de λ_{\min} , o menor comprimento de onda observável no espectro de radiação de Bremsstrahlung para aquela tensão U .

O Vídeo 3.3 – Análise de Duane-Hunt, explica o procedimento para a determinação dos valores de λ_{\min} para cada valor de tensão aceleradora U . Esse procedimento é feito através do uso do programa 3-Análise de Duane-Hunt, que fornece como resultado um arquivo contendo os valores de λ_{\min} determinados segundo o processo descrito no vídeo.

6.2. – Análise de Planck

Na análise de Planck propriamente dita, após a análise de Duane-Hunt, parte-se do arquivo contendo os valores de λ_{\min} obtido na etapa anterior, o qual é lido pelo programa 4-Análise de Planck, conforme descrito no Vídeo 3.4 – Análise de Planck.

Como resultado do programa, obtém-se o valor do coeficiente angular do ajuste linear aos pontos correspondentes à expressão (4) acima. Desse coeficiente angular, pode-se calcular a constante de Planck, tomando-se os valores da velocidade da luz e da carga do elétron como conhecidos. O resultado deve ser apresentado em seu relatório, acompanhado do erro percentual ao se comparar com o valor conhecido da constante de Planck e de uma breve discussão acerca da qualidade dessa determinação, tendo-se em consideração o erro obtido.