

## INTRODUÇÃO TEÓRICA

### 1. Este documento

- Contém os pontos essenciais da explicação apresentada oralmente pelo professor nos vídeos correspondentes à parte teórica. Use-o como referência de consulta. As instruções sobre os procedimentos experimentais encontram-se em outro documento, o Roteiro Experimental.
- Os slides da apresentação do professor também estão disponíveis no website e no moodle da disciplina e também servem para referência posterior.

### 2. Objetivos da aula de difração de raio-X

- O experimento tem duas grandes partes:
  - **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 *Bremstrahlung*.

As descrições dos procedimentos experimentais encontram-se no documento Roteiro experimental, disponível no website e no moodle da disciplina.

### 3. Relatório

As informações sobre o relatório encontram-se nos documentos Roteiro para Elaboração do Relatório e Modelo de Relatório, disponíveis no website e no moodle da disciplina.

### 4. Equipamento utilizado na aula presencial:

- Difrátômetro de Raio X 554 800 (LD Didatic GmbH)

#### 4.1. O difratômetro

Este é um equipamento de raio X compacto para fins didáticos. Como pode ser observado na figura 1, possui um tubo de raio X com anodo de molibdênio (Mo), alimentado por fontes capazes de suprir tensão máxima de 35 kV e corrente máxima de 1 mA. Está equipado com goniômetro com suporte para o cristal e movido por motor de passo, detector de radiação tipo Geiger-Muller e uma tela fluorescente de tungstato de cálcio (CaWO<sub>4</sub> - xilita). Nesse equipamento é possível regular tensão, corrente, ângulo do detector e ângulo do cristal (acoplados ou não) pelo painel do equipamento e pelo software de controle de medida ().

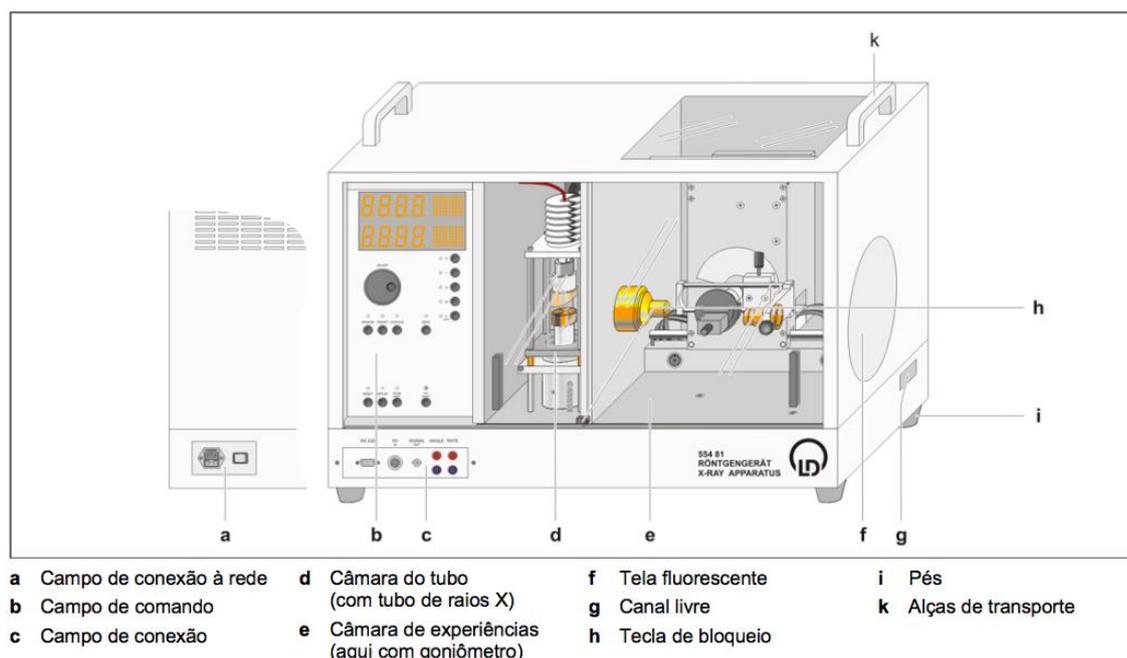


Figura 1 – Equipamento didático para experimentos com raio X

#### 4. Princípio de funcionamento

O tubo de raio X (fig.2) possui dois eletrodos: catodo ( negativo ) e anodo ( positivo ). Aplica-se uma corrente ao filamento do catodo, que o aquece e o induz a emitir elétrons por efeito termoeletrônico. Aplica-se independentemente uma tensão elevada (da ordem de kV) entre o catodo e o anodo, produzindo-se um campo que acelera os elétrons emitidos pelo catodo, direcionando-os ao anodo. Esses elétrons adquirem grande energia cinética (da ordem de keV) e penetram no anodo, interagindo com os átomos de Mo, resultando na emissão de raio X.

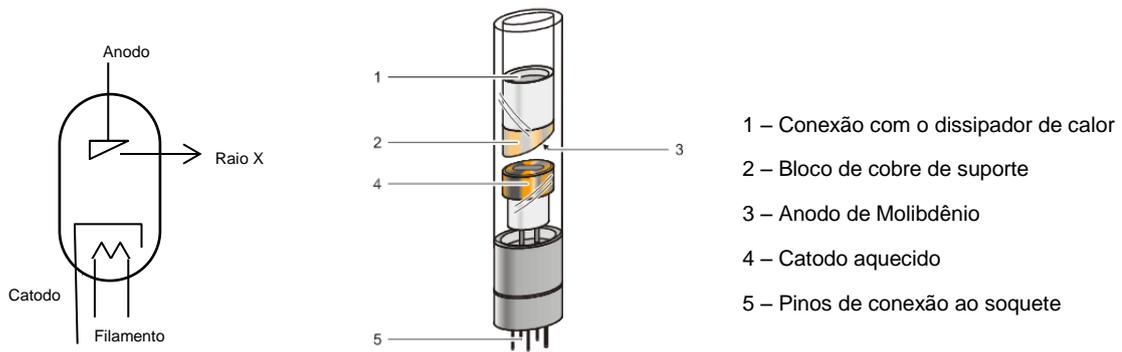


Figura 2 – Tubo de raio X

Os fótons de raio X emitidos pelo anodo são de dois tipos:

- Fótons produzidos por Bremsstrahlung e,
- Fótons produzidos por transição de elétrons das camadas L e M para a camada K dos átomos de molibdênio (há duas transições K possíveis:  $K\alpha$ , de L para K, e  $K\beta$ , de M para K).

As energias dos fótons produzidos por *Bremsstrahlung* são distribuídas conforme a curva em vermelho na fig.3, que lembra a forma da distribuição de radiação de Planck. Os fótons produzidos pelas transições K no molibdênio aparecem em quantidades nitidamente maiores que os produzidos por *Bremsstrahlung*, resultando em picos que se destacam em relação à distribuição de *bremsstrahlung*. Por isso se diz que os fótons de *bremsstrahlung* constituem uma radiação de fundo em relação aos picos (fig.3).

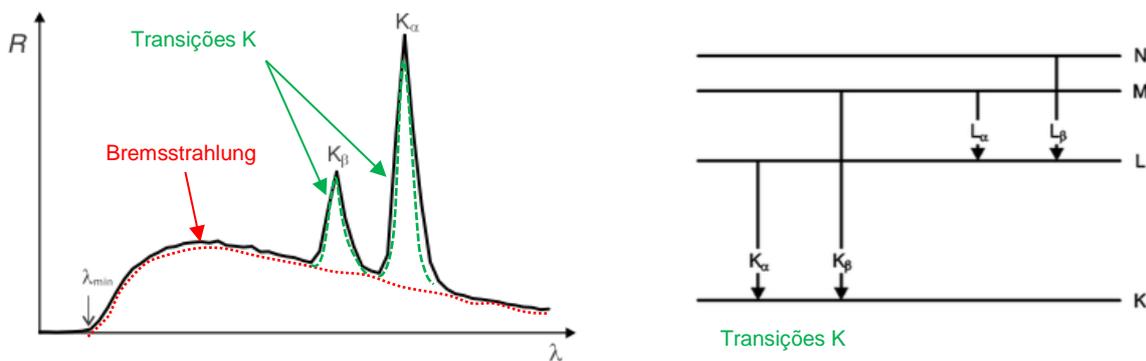


Figura 3 – A ordenada **R** indica a taxa de contagem de fótons pelo detector

Os fótons emitidos pelo tubo de raio X são colimados em um feixe estreito interpondo-se em seu percurso uma fenda que seleciona apenas aqueles cujas trajetórias encontrarem-se em um ângulo de pequena abertura. Para fins práticos, considerando-se as distâncias envolvidas, pode-se supor que os fótons no feixe colimado seguem trajetórias praticamente paralelas. A fig.4a apresenta uma visão esquemática da montagem usada nos experimentos aqui considerados. Esse esquema refere-se aos componentes indicados no item (e) da fig.1.

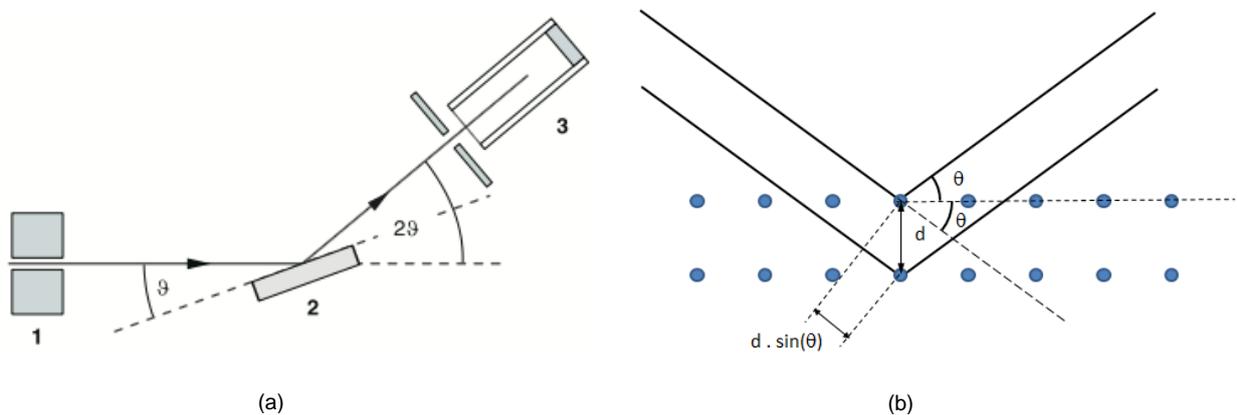


Figura 4 – a) Visão esquemática do arranjo experimental utilizado. b) Lei de Bragg.

O arranjo experimental mostrado na fig.4a, corresponde à determinação de características estruturais de um cristal empregando-se difração de raio X pelo método de Bragg. Na fig.4a, o componente (1) é o colimador do feixe, em (2) encontra-se o cristal e em (3) o detector de fótons espalhados pelo cristal. O feixe de raio X colimado incide sobre o cristal e é espalhado pela estrutura cristalina. Os fótons de raio X espalhados sofrerão interferência decorrente do espalhamento, produzindo uma figura de difração cujos picos estarão espacialmente localizados em função da relação entre a geometria da estrutura cristalina e o comprimento de onda associado às energias dos fótons que se superpõem por interferência. A fig.4b ilustra essa relação entre os parâmetros envolvidos, que conduz à enunciação da lei de Bragg:

$$n\lambda=2d.\sin(\theta)$$

### Difração de Bragg

A difração de Bragg é o método de espalhamento de um feixe raio X em que um cristal regular atua como rede de difração e a detecção do feixe difratado é feita em um ângulo de espalhamento igual ao ângulo de incidência do feixe. A frente de onda correspondente aos fótons no feixe incidente será espalhada por átomos situados em diversos planos da rede cristalina, e a superposição das ondas espalhadas produz interferência. A diferença de caminho ótico entre ondas depende da camada de átomos que espalhou a onda. Para um ângulo de incidência igual a  $\theta$  em relação ao plano do cristal sobre o qual incide, e sendo  $d$  o espaçamento entre dois planos cristalinos paralelos adjacentes, resulta uma diferença de caminho igual a  $2d.\sin(\theta)$ . Se esse valor for múltiplo inteiro do comprimento de onda dos fótons de raio X, as ondas associadas aos fótons alcançarão o detector em fase, produzindo interferência construtiva acarretando um máximo de difração para aquele comprimento de onda.

A expressão da Lei de Bragg é  $n\lambda=2d.\sin(\theta)$  determinando os máximos de difração, sendo n a ordem do máximo. O difratômetro de Bragg é construído de modo a explorar a condição manifesta nessa lei, colocando-se o detector de fótons espalhados orientado de acordo com a fig.4a. Um goniômetro solidário ao detector permite medir o ângulo a  $\theta$  . No caso do equipamento usado, descrito na fig.1, a medida do ângulo é obtida contando-se passos de dados por um motor de passo que aciona automaticamente o goniômetro.

Todavia, o feixe produzido pelo tubo de raio X constitui-se de fótons de diversos comprimentos de onda propagando-se concomitantemente e, portanto, em um mesmo ângulo de observação há superposição por interferência de fótons com várias energias correspondentes a distintas ordens de difração. Esse fato impede a discriminação dos picos de difração do fundo contínuo de Bremsstrahlung, porém não afeta a observação com boa resolução dos picos correspondentes às linhas discretas correspondentes a  $K\alpha$  e  $K\beta$ , que se destacam em relação ao fundo de Bremsstrahlung. Os pares de linhas  $K\alpha$  e  $K\beta$ , aparecerão em diversas ordens de difração. A fig.5 apresenta a aparência da figura de difração obtida com o difratômetro de Bragg utilizando raio X produzido com anodo de Mo e incidência sobre um cristal de rede cúbica.

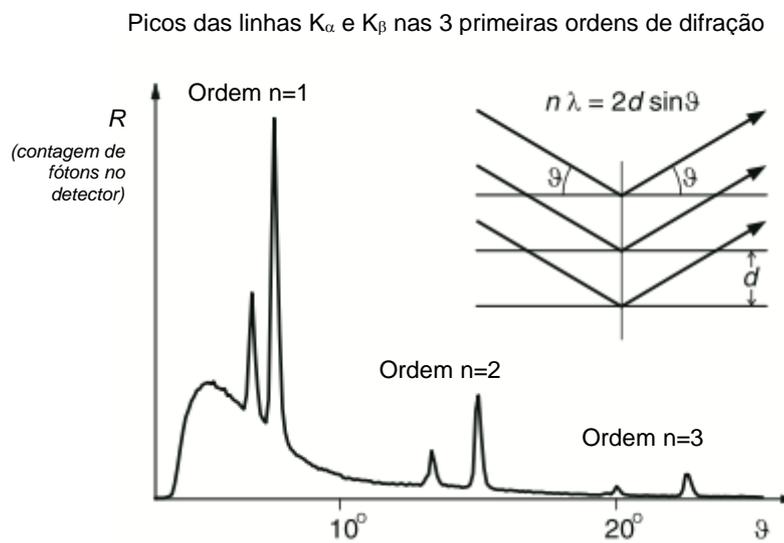


Figura 5 – Figura de difração obtida para raio X de anodo de Mo e cristal de rede cúbica

### Determinação da constante de Planck

Na segunda parte da atividade de laboratório, realizaremos a determinação da constante de Planck utilizando-se o arranjo experimental do difratômetro de Bragg. Porém, em vez de considerarmos os picos na figura de difração devidos às linhas espectrais difratadas do Mo, utilizaremos o fundo de *bremsstrahlung* aplicando-se a relação de Duane-Hunt.

A quantidade de fótons emitidos e a sua distribuição de energia dependem dos parâmetros de geração dos fótons de raio X (corrente e tensão, respectivamente) e do material que constitui o alvo. A tensão aplicada além de determinar o valor da energia máxima (comprimento de onda mínimo), modifica a quantidade de fótons emitidos por *bremstrahlung*, pois a seção de choque de ocorrência desse fenômeno cresce com a energia cinética dos elétrons. A corrente anódica corresponde aos elétrons acelerados entre o catodo e o anodo do tubo, e é aproximadamente proporcional ao número de fótons produzidos pelo tubo de raios X.

A banda de *bremstrahlung* em espectros de emissão de raio X é caracterizada por um comprimento de onda limite ( $\lambda_{min}$ ) que diminui com o aumento da tensão no tubo. Em 1915, os físicos americanos Willian Duane e Franklin L. Hunt descobriram que o comprimento de onda limite varia com o inverso da tensão  $\lambda_{min} \sim \frac{1}{U}$

O comprimento de onda é dado por  $\lambda = \frac{c}{\nu}$  sendo  $c$  a velocidade da luz no vácuo (igual a  $2,9979 \times 10^8$  m.s<sup>-1</sup>) e  $\nu$  a frequência da onda.

A frequência máxima  $\nu_{max}$  emitida corresponderá, portanto, ao comprimento de onda mínimo  $\lambda_{min}$ .

Da relação de Einstein, a máxima energia de fóton emitido será então  $E_{max} = h \nu_{max}$ , onde  $h$  é a constante de Planck.

O fóton de raio X de *bremstrahlung* corresponde à irradiação pelo elétron de sua energia cinética adquirida por aceleração eletrostática entre o anodo e o catodo. Portanto, a máxima energia do fóton de comprimento de onda máximo  $\lambda_{max}$ , corresponderá à energia cinética  $E = e.U$  (carga elemental  $e=1,6022 \times 10^{-19}$  C) do elétron totalmente desacelerado no anodo.

Então:

$$\nu_{max} = \frac{e}{hU}$$

e, finalmente,

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{e} \cdot \frac{1}{U} \rightarrow \text{equação de Duane - Hunt.}$$

O fator de proporcionalidade:  $A = \frac{h \cdot c}{e}$  pode ser usado para determinar a constante de Planck  $h$ , quando  $c$  e  $e$  são conhecidos.