



Universidade Estadual de Maringá
Centro de Ciências Exatas
Departamento de Física
Laboratório de Física Moderna II

Espalhamento de Raios X

Acadêmicos: Beatriz de Castro Bittencourt RA: 118013

Caroline Crivilin Carvalho RA: 90021

Enzo Caliali RA: 117180

João Gabriel Dareli Bellato RA 119957

Luiz Felipe Locatelli Giroldo RA: 117457

Mayra Saretti Ferreira RA: 110640

Vitor Hugo Ferrari Ribeiro RA: 112481

Professor: Anderson Reginaldo Sampaio

Turma: 31

Maringá, 20 de março de 2024

Conteúdo

Resumo	2
Introdução	3
1 Fundamentação Teórica	5
1.1 Produção dos Raios X	5
1.2 Condições de Difração	7
1.2.1 Planos Cristalinos	7
1.2.2 Lei de Bragg	8
2 Metodologia	10
2.1 Desenvolvimento Experimental	10
2.1.1 Materiais Utilizados	10
2.2 Descrição Experimental	10
3 Resultados e discussões	15
Conclusão	19
Referências Bibliográficas	20

Resumo

Os raios X foram descobertos por Wilhelm Röntgen em 1895, assim chamados pela incerteza de suas origens. Uma característica marcante desta radiação ionizante é a habilidade de atravessar a matéria, a depender de sua densidade. Assim, a criação de imagens do interior de objetos e seres vivos é possível, e os raios X se tornaram ferramentas cruciais nos campos da medicina e da segurança. Neste experimento, a fim de investigar a radiação X característica do tungstênio, um tubo de raios X com um ânodo de tungstênio gerou raios X colhidos por um monocristal em função do ângulo de Bragg. Um tubo Geiger-Müller mediu a intensidade da radiação. Os *glancing angles* das linhas características de raios X foram usados para determinar a energia dos mesmos. Ao colher os dados fornecidos pelo experimento e confeccionar gráficos do ângulo do cristal pela intensidade da radiação, foi encontrada a presença do espectro contínuo de *Bremmstrahlung* e interações construtivas dos raios X pelos *glancing angles*. Analisando os números e realizando cálculos da energia das radiações mencionadas, foram obtidos resultados muito similares aos já discutidos na literatura, com margens de erro entre 0,0009% e 0,01%. Ao final do experimento, foi possível visualizar efeitos de difração de raios X. Com este experimento, foi possível aprofundar os conhecimentos acerca dos raios X e da cristalografia.

Introdução

O físico alemão Wilhelm Conrad Röntgen, nascido em 27 de março de 1845, desempenhou um papel primordial na história da ciência, com descobertas que revolucionaram tanto a medicina quanto a física no final do século XIX. Röntgen mudou-se com a família para a Holanda ainda na infância, onde iniciou seus estudos, tornando-se engenheiro mecânico pela Universidade de Zurique, lecionando posteriormente no Instituto de Física de Wurzburg ([FILHO, 1995](#)).

Em seu laboratório na Universidade, ele repetiu o experimento de Thompson (1856-1940), ao buscar a radiação eletromagnética de alta frequência, a qual foi prevista por Heinrich Hertz (1857-1894). Utilizando um tubo de Crookes, Wilhelm investigou os raios catódicos que escapavam do tubo e iluminavam uma superfície com camada de material fosforescente posicionada a dada distância, fenômeno este observado e descrito por Philipp Lenard (1862-1947) ([LIMA, 1995](#)).

Com os experimentos, Röntgen observou que mesmo com a placa virada ao contrário, com o tubo embalado em papelão preto e as luzes apagadas (para evitar a luminosidade do vidro da ampola sobre as telas), era possível observar a iluminação. Segundo o físico, a radiação “produzia luminescência em certos materiais fluorescentes, sensibilizava chapas fotográficas, mas em si era invisível ao olho humano”. Além disso, ele complementa relatando que não parecia sofrer refração, reflexão ou polarização, não parecendo ser luz ou raios catódicos e ultravioleta, devido ao seu poder de penetração ([ROENTGEN, 1895](#); [ROENTGEN, 1896](#)).

O cientista concluiu se tratar de um novo tipo de raio não visível, com alto poder de penetração, despertando seu interesse para novas investigações e desenvolvimentos. É de 22/12/1895 a famosa chapa da mão de sua esposa, que pode ser considerada como a primeira radiografia da história. Alguns dias depois, foi feito o primeiro comunicado sobre os raios X, assim batizados devido à incerteza de sua origem ([LIMA, 1995](#)), o que rendeu a Röntgen o 1º Prêmio Nobel de Física em 1901.

Com base na descoberta realizada por Röntgen, inúmeros pesquisadores voltaram-se para essa nova área da física em ascensão. No âmbito dos estudos de materiais, os raios X mostraram ser capazes de fornecer grandes detalhes sobre a organização da estrutura cristalina com a formulação das teorias propostas por cientistas como Max Von Laue, W. Friedrich e P. Knipping e W. L. Bragg ([AUTHIER, 2013](#)).

O trabalho de Laue abriu novas perspectivas para a investigação da estrutura da matéria e teve um impacto significativo em várias áreas da ciência, incluindo física, química, mineralogia e biologia. Sua técnica de difração de raios X por cristais permitiu aos cientistas explorar a estrutura molecular de substâncias sólidas de uma maneira sem precedentes, proporcionando *insights* fundamentais sobre as propriedades dos materiais. Seu trabalho continua a ser fundamental na pesquisa científica até os dias de hoje, com a difração de raios X sendo uma técnica amplamente utilizada em muitas disciplinas científicas para investigar a estrutura da matéria em níveis atômicos e moleculares ([AUTHIER, 2013](#)).

Dentro de um ano da descoberta da difração de raios X, William Lawrence Bragg reinterpretou o fenômeno responsável pelo padrão de difração e determinou as primeiras dimensões da célula unitária de sais simples e, dentro de 2 anos, ele e seu pai (William Henry Bragg)

relataram as primeiras determinações da estrutura cristalina (MINGOS, 2020). O sucesso de von Laue dependia mais da intuição do que da análise cuidadosa da física subjacente, pois ele não tinha equações que o permitissem prever a possível aparência do padrão de interferência. Bragg Jr. interpretou os padrões de difração de raios X de von Laue e iniciou uma série de descobertas que permitiram aos químicos determinar as estruturas de compostos químicos em nível atômico pela primeira vez (MINGOS, 2020).

Em 1913, W.H. Bragg e W.L. Bragg descreveram a difração e a interferência dos raios X em um cristal como reflexões nos planos atômicos da rede cristalina. As descobertas de von Laue e Bragg deram origem a duas novas ciências, a cristalografia de raios X e a espectroscopia de raios X, e dois Prêmios Nobel: Max von Laue "por sua descoberta da difração de raios X por cristais" em 1914 e aos Braggs "por seus serviços na análise da estrutura cristalina por Cristalografia de raios X em 1915" (MINGOS, 2020).

O presente relatório apresenta uma Fundamentação Teórica que aborda e explica os pontos teóricos que pautam as análises realizadas, bem como a apresentação de equações e conceitos necessários para a completa compreensão do tema. Ademais, faz uma descrição da Metodologia empregada, elencando os materiais e equipamentos empregados, elaborando uma sequência lógica da experimentação realizada. Em sequência, faz-se a apresentação dos Resultados experimentais e Discussões a respeito dos dados coletados. Por fim, é levantada uma Conclusão a respeito de todos os elementos apresentados, apontando as partes mais importantes de toda a análise realizada.

Capítulo 1

Fundamentação Teórica

1.1 Produção dos Raios X

Os raios X são ondas eletromagnéticas de elevada energia que apresentam comprimento de onda que variam de 0,1 a 100 Å. Esse tipo de radiação ionizante pode ser produzido de duas maneiras, a primeira delas apresenta um espectro contínuo e origina-se da forte desaceleração sofrida por um elétron quando sujeito às poderosas forças de interações nas camadas mais internas da eletrosfera atômica. A criação de raios x também se dá nas transições eletrônicas de elétrons, que antes ocupavam camadas mais externas da eletrosfera e passam a ocupar posições mais internas e mais energéticas, essa transição libera energia em forma de um fóton cuja energia é bem definida pois depende da camada inicial e final da transição eletrônica, apresentando uma natureza discreta.

Para alguns casos, em especial neste experimento, os raios X são originários de dispositivos especialmente projetados constituídos de ampolas 1.1, cujo interior se encontra no estado de vácuo, em que estão instalados dois elementos metálicos que atuam como cátodo e ânodo. Aplicada uma grande diferença de potencial, os elétrons do cátodo são arrancados de seus átomos e viajam na direção do ânodo, acelerados pela tensão aplicada em um processo denominado emissão termiônica de um filamento metálico.

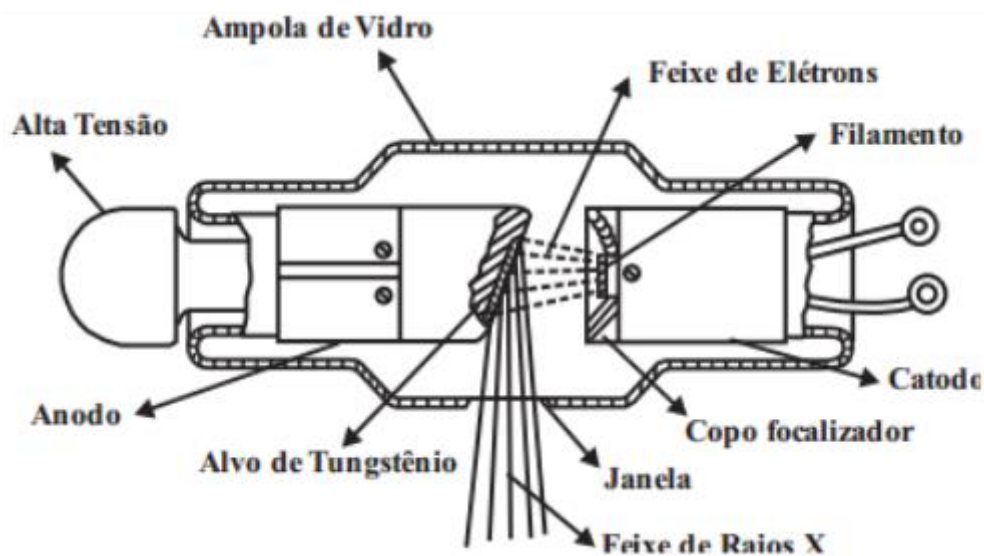


Figura 1.1: Diagrama de uma ampola de raio x.

Quando uma corrente elétrica passa pelo filamento e o aquece, os elétrons são liberados do metal e podem ser acelerados pela grande diferença de potencial entre o cátodo e o ânodo. A

voltagem aplicada entre esses terminais é crucial para o funcionamento do tubo de raios X: o alvo metálico (ânodo) é polarizado positivamente, enquanto o filamento (cátodo) é polarizado negativamente. Essa diferença de potencial, ou voltagem, é responsável por criar um campo elétrico dentro do tubo, que acelera os elétrons em direção ao alvo (SUZANA, 2017).

A corrente anódica refere-se à corrente elétrica que flui do cátodo para o ânodo dentro do tubo de raios X. A quantidade de corrente anódica é controlada pelo ajuste da voltagem aplicada e afeta diretamente a intensidade do feixe de raios X produzido. Aumentar a voltagem resulta em uma maior energia dos raios X e uma maior penetração, enquanto aumentar a corrente anódica aumenta a intensidade do feixe de raios X (SUZANA, 2017).

Ao atingir o ânodo, os elétrons experimentam o fenômeno de espalhamento que, essencialmente, os desacelera de tal maneira que a diferença de energia entre a que o elétron possuía antes de atingir o material e imediatamente depois é convertida em um pacote chamado fóton cuja energia é expressa como produto entre sua frequência ν e a constante de Planck:

$$E = h\nu \quad (1.1)$$

O bombardeamento de um alvo com elétrons provenientes da emissão termiônica provoca uma nova emissão dos elétrons das camadas mais internas do alvo, em particular, das camadas K e L. Essas emissões criam lacunas que serão preenchidas pelos elétrons das camadas mais externas. A este processo, está associada a emissão de um fóton que marca o retorno ao estado fundamental do elemento alvo. O preenchimento da lacuna deixada na eletrosfera é de natureza probabilística e define a energia do fóton emitido (TIPLER; LLEWELLYN, 2003).

Após o espalhamento, o comprimento de onda λ do fóton espalhado é menor que o comprimento inicial, e pode ser calculado a partir de uma análise feita em termos do momento e energia do fóton e do elétron alvo. Contudo, vale destacar o caso em que o elétron perde totalmente sua energia para a emissão do fóton, caso de comprimento de onda mínimo λ_{min} . Neste caso, a equação 1.1 sofre modificações e é escrita em termos do comprimento de onda, tornando-se:

$$E = \frac{hc}{\lambda} = K_0 - K_1 \longrightarrow K_0 = \frac{hc}{\lambda_{min}} \quad (1.2)$$

Em que K_0 e K_1 são as energias cinéticas do fóton emitido e do elétron, mas a energia cinética desse elétron é descrita pelo produto entre sua carga e a diferença de potencial que o acelera, sendo assim:

$$\lambda_{min} = \frac{hc}{eV} \quad (1.3)$$

O valor de λ_{min} é justamente o ponto inicial do espectro de difração de raios X de um material, conhecido como lei de Duane-Hunt. É o comprimento de onda associado ao fóton emitido quando o elétron acelerado perde a totalidade de sua energia cinética quando desacelerado. De uma forma mais geral, o espalhamento pode ser compreendido desenvolvendo o seguinte sistema de equações:

$$\begin{cases} \vec{P}_o = \vec{P} + \vec{P}_e \\ E_0 + mc^2 = E + E_e \end{cases} \quad (1.4)$$

Sendo \vec{P}_o o momento inicial do fóton incidente, \vec{P} o momento final do fóton e \vec{P}_e o momento do elétron. Enquanto $E_0 + mc^2$ expressa a energia inicial do fóton somada à parcela de repouso da energia inicial do elétron (considerado estático), com $E + E_e$ sendo a soma das energias finais de ambos após a colisão. O desenvolvimento segue, elevando a segunda equação ao quadrado e reescrevendo as energias em termos dos comprimentos de onda final λ e inicial λ_0 :

$$\begin{cases} \vec{P}_o = \vec{P} + \vec{P}_e \\ (mc^2)^2 + [(\vec{P}_0 - \vec{P})c]^2 = \frac{(hc)^2}{\lambda_0^2} + (mc^2)^2 + \frac{(hc)^2}{\lambda^2} + \frac{2mc^3h}{\lambda_0} - \frac{2(hc)^2}{\lambda_0\lambda} - \frac{2mc^3h}{\lambda} \end{cases}$$

$$(\vec{P}_0 - \vec{P})^2 = P_0^2 + P^2 - PP_0 \cos(\theta)$$

$$(\vec{P}_0 - \vec{P})^2 = \left(\frac{hf_0}{c}\right)^2 + \left(\frac{hf}{c}\right)^2 - \frac{2h^2ff_0 \cos(\theta)}{c^2}$$

Escrito em termos dos comprimentos de onda:

$$\frac{h^2}{\lambda_0^2} + \frac{h^2}{\lambda^2} - \frac{2h^2 \cos(\theta)}{\lambda \lambda_0}$$

Assim, a segunda equação do sistema torna-se:

$$\frac{-h^2 \cos(\theta)}{\lambda_0 \lambda} = \frac{hmc}{\lambda_0} - \frac{hmc}{\lambda} - \frac{h^2}{\lambda \lambda_0}$$

Por fim, agrupando λ_0 e λ a lei para o deslocamento de Compton:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \lambda_c [1 - \cos(\theta)] \quad (1.5)$$

Com $\lambda_c = \frac{h}{mc}$, razão entre a constante de Planck e a massa de repouso do elétron multiplicada pela velocidade da luz, sendo chamada comprimento de onda Compton do elétron. O ângulo θ varia entre 0 e 180°.

1.2 Condições de Difração

O fenômeno da difração, depende de uma serie de condições a serem cumpridas para que ocorra (KITTEL, 2006). Assemelhando-se à difração convencional feita geralmente com um feixe de luz no espectro visível, a difração de raios X acontece quando esses raios transpassam uma grade de difração de dimensões compatíveis com o comprimento de onda da radiação. Por esse motivo, a primeira observação de difração de raios x somente foi verificada pelos experimentos conduzidos por Von Laue, em 1912, via aplicação de uma rede cristalina de sulfeto de cobre.

1.2.1 Planos Cristalinos

A fim de compreender melhor a difração em redes de cristais é preciso conhecer melhor sua estrutura e teoria. A condição de interferência construtiva citada anteriormente envolve um parâmetro intrínseco da rede cristalina, a distância interplanar d . Naturalmente, a estrutura cristalina do material utilizado como alvo pode apresentar diferentes geometrias e, conseqüentemente, diferentes planos podem ser descritos em termos dos índices de Müller (KITTEL, 2006). Dessa forma, as orientações dos planos cristalinos com relação ao feixe incidente de raios X afetam a difração conforme o ângulo formado.

Dentre as estruturas cristalinas mais comumente encontradas, a rede cúbica carrega também, os casos mais simples de planos atômicos, sendo descritos pelos conjuntos de índices $([001];[010];[100])$, $([110];[101];[011])$ e $[111]$, referentes a planos paralelos às faces do cubo, diagonais às faces e diagonal ao cubo, com distâncias interplanares iguais a a , $a/\sqrt{2}$ e $a/\sqrt{3}$, respectivamente, sendo a , a distância entre dois átomos contidos numa aresta do cubo.

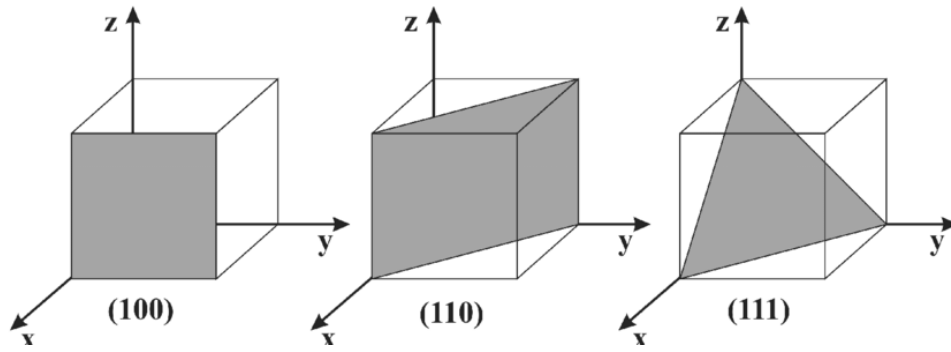


Figura 1.2: Principais planos cristalográficos em uma rede cúbica. Figura retirada da internet.

1.2.2 Lei de Bragg

No ano de 1913 William Lawrence Bragg e William Henry Bragg elucidaram ao plano científico uma explicação para a difração de raio x em cristais. Sua teoria leva em conta a diferença de caminho óptico entre feixes refletidos pelo cristal. Pai e filho postularam duas condições que deviam ocorrer para que o fenômeno de difração ocorresse. A primeira delas diz que os raios x devem ser refletidos de forma especular, isto é, o ângulo de incidência é igual ao de reflexão. A segunda condição diz que os raios refletidos devem interferir construtivamente (KITTEL, 2006).

Portanto, quando feixes refletidos por planos diferentes estiverem em fase, isto é, percorrendo o mesmo caminho, sem constante de fase, ocorrerá interferência construtiva, observada via um detetor de radiação que opera sobre o feixe refratado, no caso, um contador Geiger-Müller é apropriado, dada a natureza ionizante dos raios X. Para tal, é necessário que a diferença de caminho óptico entre os planos seja múltipla inteira do comprimento de onda λ . Equacionando, pode-se considerar o caso de planos paralelos, como ilustrado na figura 1.3.

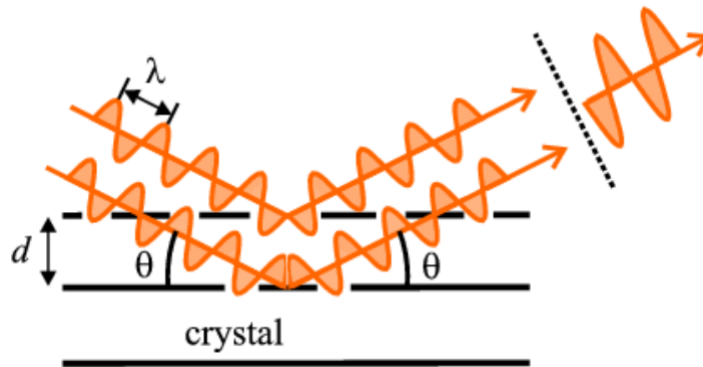


Figura 1.3: Ilustração da condição de Bragg para interferência construtiva entre planos paralelos (QUEIROZ; KUROSAWA; BARRETO, 2013).

Sendo assim, como expõe a imagem 1.4, a condição de difração proposta por Bragg, pode ser escrita na forma da equação apresentada em 1.6. Onde d representa a distância interplanar do cristal empregado, θ representa o ângulo de incidência, λ é o comprimento de onda dos raios X e n é um número inteiro.

$$n\lambda = 2d\sin(\theta) \quad (1.6)$$

Como discutido anteriormente, a produção de raios X via radiação de freamento, ou *Bremsstrahlung*, envolve um fenômeno semelhante ao efeito fotoelétrico em que a energia perdida pelos elétrons incidentes no alvo espalhador é convertida em fótons, cuja energia é definida pela

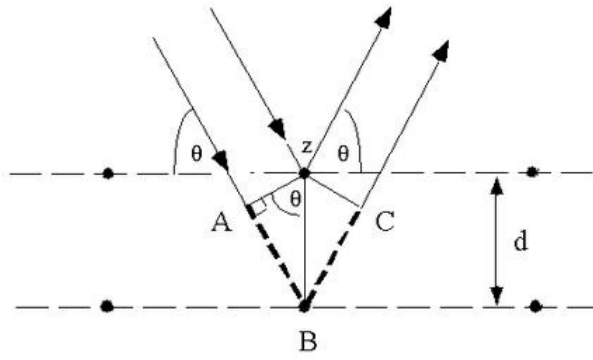


Figura 1.4: Diagrama que demonstra a reflexão dos raios x nos planos da rede do material provocando fenômenos de difração. Imagem retirada da internet.

equação 1.1. Ao aplicar esse resultado à condição de difração de Bragg, o resultado é uma expressão que relaciona a energia E ao ângulo de incidência θ e à velocidade da luz C (equação 1.7).

$$E = \frac{nhC}{2d\sin(\theta)} \quad (1.7)$$

Em laboratório, a difração de raios X por meio de cristais diversos pode ser realizada variando a tensão na ampola ou ainda o ângulo de incidência, sendo este o procedimento mais comum. Os dados obtidos podem ser interpretados em termos do número de contagens medidas pelo contador em função do ângulo θ , com foco para os picos evidentes, em que a condição de interferência construtiva foi alcançada.

Estes encontram-se sobrepostos a um espectro de fundo e o espectro como um todo se inicia no comprimento de onda mínimo, definido por λ_{min} (equação 1.3). Nota-se que o valor mínimo não depende do material empregado mais sim do potencial utilizado na análise. Conforme previsto em ensaios teóricos, ocorre a diminuição do comprimento de onda mínimo com o decréscimo do potencial empregado.

Capítulo 2

Metodologia

2.1 Desenvolvimento Experimental

2.1.1 Materiais Utilizados

Para o experimento, foram utilizados:

- Unidade de XR expert da marca Phywe, de 35kV;
- Goniômetro de raios X;
- Unidade *plug-in* de raios X com tubo de Tungstênio;
- Tubo Geiger-Müller, tipo B;
- Cristal de Ferreto de Lítio em um suporte;
- Software de medição de raios X 4.0 XRm;
- Cabo de dados USB, tipo A/B;
- Tubo de diafragma de raios X, $d = 2mm$.

Além disso, foi necessário um computador com sistema operacional Windows XP ou versões posteriores.

2.2 Descrição Experimental

Como primeiro passo, o goniômetro e o tubo Geiger-Müller foram conectados aos seus devidos *plugs*. Após isso, foi fixado o tubo de diafragma no tubo de saída de raios X, diâmetro de 2mm. Então, foi encaixado o bloco do goniômetro com o cristal na posição correta, bem como o tubo Geiger-Müller na parada correta. Além disso, o diafragma do tubo Geiger-Müller foi instalado.

Para calibração, o cristal utilizado foi inserido nos parâmetros do goniômetro e selecionado "Menu", "Goniômetro" e em seguida "Autocalibração". O aparato determinou de forma autônoma as melhores posições do cristal e do goniômetro, bem como posição dos picos.

Para começar as medições, a unidade de raio X foi conectada a um computador através do cabo USB. Então, foi aberto o *software* de medição, em que é possível alterar os parâmetros do experimento. Também é possível alterar os parâmetros do aparato de raios X nele próprio. No programa, foi primeiramente colocada a tensão de 35kV. Para começar a gravar as medições, foi utilizado o botão vermelho no canto superior esquerdo da tela do *software*.

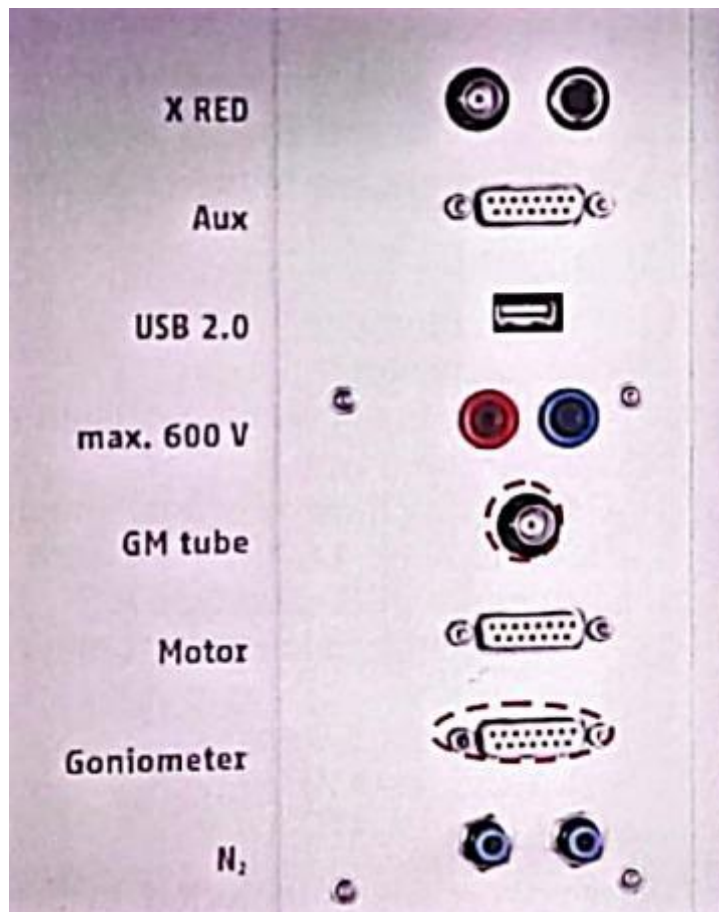


Figura 2.1: Conexões disponíveis no aparato utilizado, com suas devidas sinalizações.

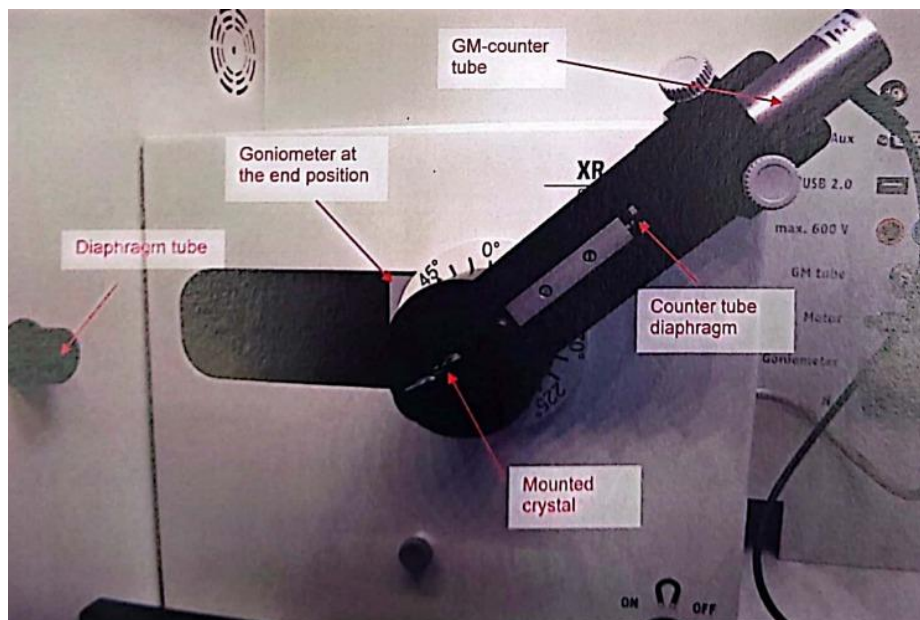


Figura 2.2: Esquema ilustrativo da montagem do experimento, no interior do aparato da Phywe.

A primeira parte do experimento teve como objetivo produzir o espectro característico do Tungstênio, para isso foi utilizada a seguinte configuração: Voltagem anódica de 35kV; corrente anódica de 1mA, tempo de integração de 5s variando a posição angular em passos de 0,1° da posição inicial de 4° até 30°.

Para uma segunda etapa, o intuito foi o de verificar as modificações espectrais para o



Figura 2.3: Montagem do experimento como feita em laboratório.



Figura 2.4: Montagem do experimento como feita em laboratório, dentro do aparato.

Tungstênio quando ao variar o potencial da ampola, indo então de 35kV até 10kV com mudanças de 5kV. Assim, fez-se o uso das mesmas condições iniciais da primeira parte do experimento, porém com um tempo de integração de 2s. A mudança de tempo de integração acelera a obtenção dos dados na medida em que não compromete demasiadamente a qualidade deles.

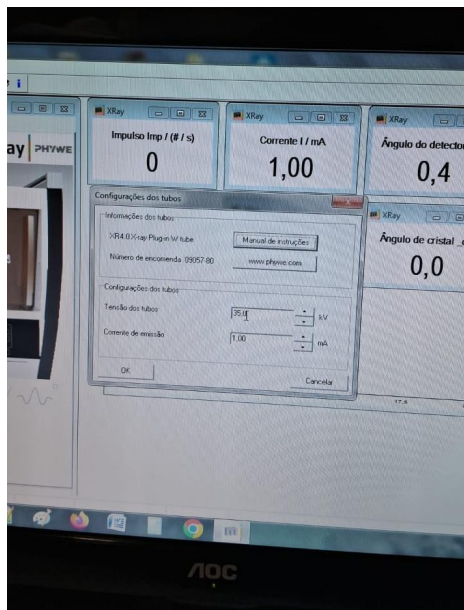


Figura 2.5: Tela inicial do *software*.

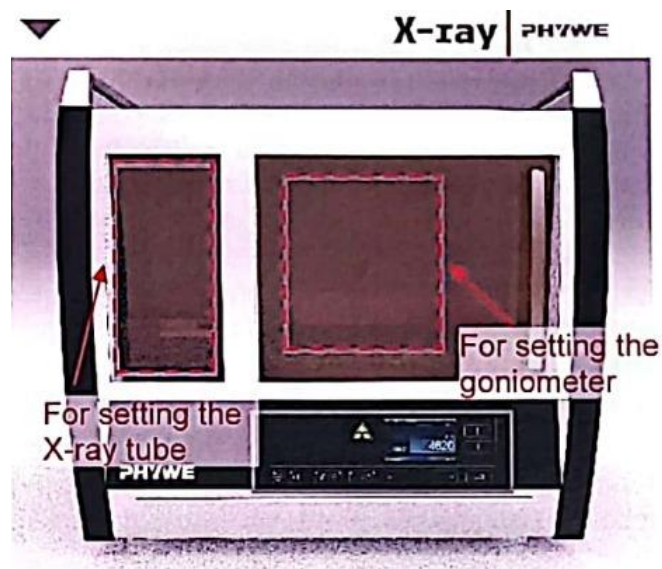


Figura 2.6: Tela do programa, que retrata o aparato.

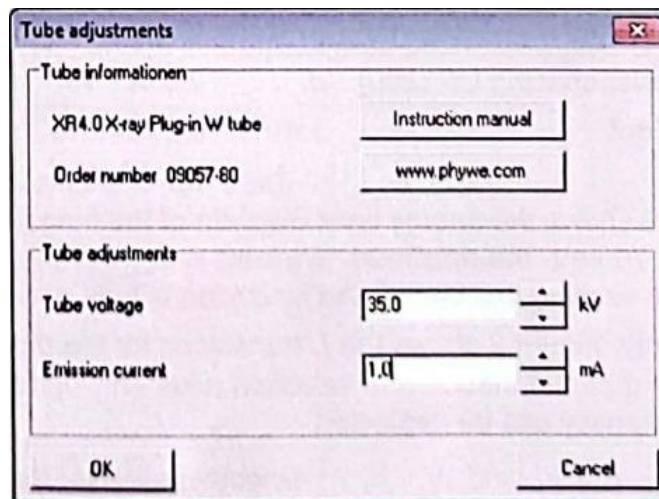


Figura 2.7: Tela de ajustes ao tubo Geiger-Müller, incluindo as configurações de tensão e corrente.

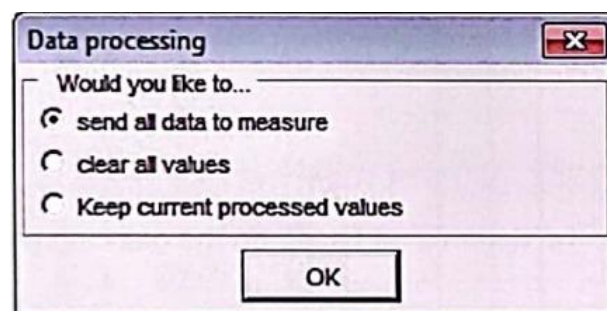


Figura 2.8: Tela pós-medição que oferece a opção de salvar os dados em um arquivo.

Capítulo 3

Resultados e discussões

Na primeira parte do experimento foi obtido o espectro do Tungstênio. Para tal, utilizou-se o equipamento descrito na metodologia com um potencial de 35kV e tempo de integração de 5s. Como resultado obteve-se o gráfico apresentado em 3.1, o qual indica a intensidade do raio x de Tungstênio em relação ao ângulo de Bragg com o auxílio do monocristal de LiFe.

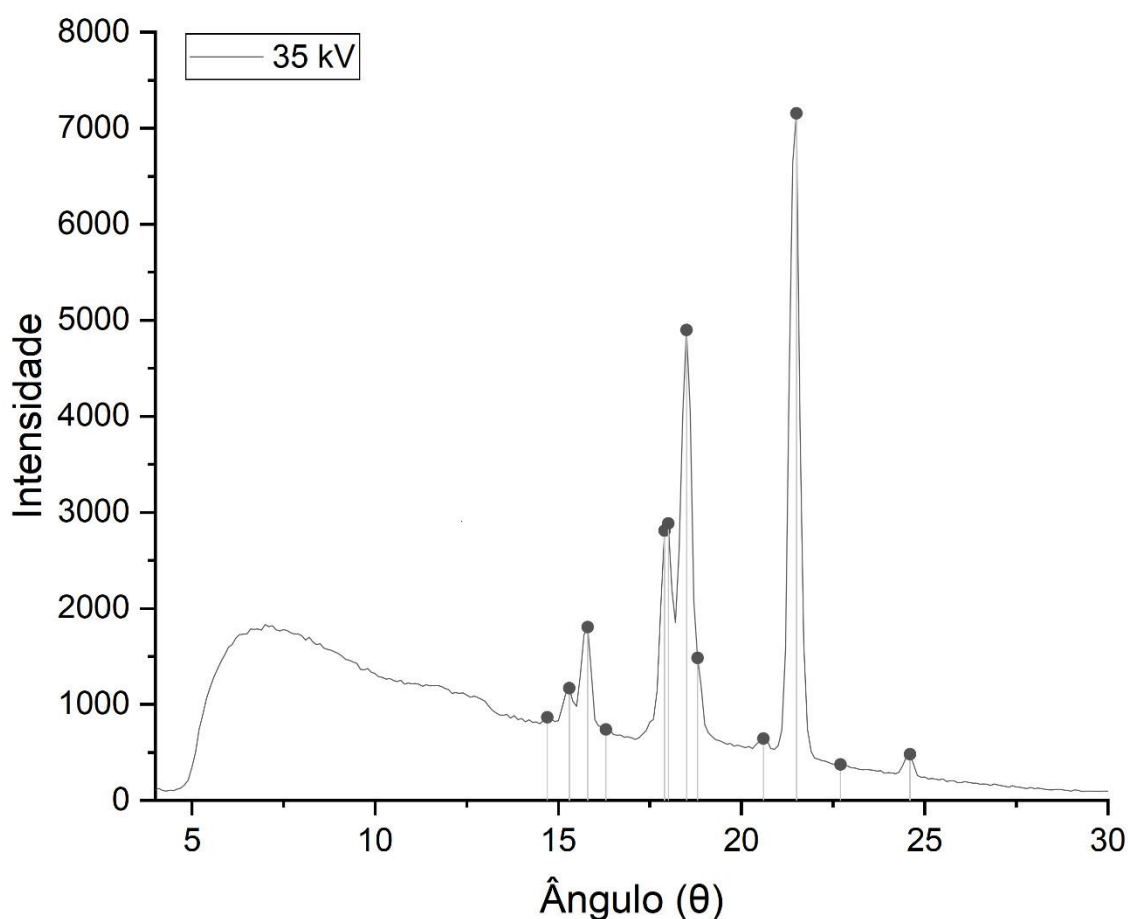


Figura 3.1: Espectro de raio X do Tungstênio para um potencial de 35kV e tempo de integração de 5s.

Como pode ser observado no gráfico acima existe a presença de duas características do experimento, sendo essas, a presença do espectro contínuo de *Bremstrahlung* e as linhas discretas onde à interações construtivas dos raios X pelos *Glancing Angles*. Podemos obter através do gráfico 3.1 os *Glancing Angles*, possibilitando a criação da seguinte tabela exposta em 3.1.

Com base nos dados presentes na tabela 3.1 é possível calcular os comprimentos de ondas

	Ângulo (θ)	Intensidade/(5s)
1	14,7	868
2	15,3	1.171
3	15,8	1.806
4	16,3	741
5	17,9	2.811
6	18,0	2.886
7	18,5	4.901
8	18,8	1.485
9	20,6	646
10	21,5	7.158
11	22,7	376
12	24,6	482

Tabela 3.1: Ângulos de Bragg e seus picos de intensidade.

refletidos de cada pico registrado na figura 3.1. Para isso, utiliza-se a equação (1.6), com base na posição angular de cada pico e com os respectivos números de orbital n . Como resultado, obteve-se a seguinte tabela:

	λ (m)	λ (Å)
1	$1,02214 \times 10^{-10}$	1,02214
2	$1,06288 \times 10^{-10}$	1,06288
3	$1,09674 \times 10^{-10}$	1,09674
4	$1,13053 \times 10^{-10}$	1,13053
5	$1,23803 \times 10^{-10}$	1,23803
6	$1,24472 \times 10^{-10}$	1,24472
7	$1,27810 \times 10^{-10}$	1,27810
8	$1,29809 \times 10^{-10}$	1,29809
9	$1,41722 \times 10^{-10}$	1,41722
10	$1,47627 \times 10^{-10}$	1,47627
11	$1,55443 \times 10^{-10}$	1,55443
12	$1,67678 \times 10^{-10}$	1,67678

Tabela 3.2: Comprimento de onda em m e Å.

Em posse do comprimento de onda de cada pico de raio x característico apresentado em 3.2, utiliza-se a equação (1.7) que fornece a energia das radiações mencionadas nesse experimento. A partir da energia calculada é possível comparar as energias obtidas pela literatura e apontar quais foram as transições que forneceram os picos observado no gráfico 3.1. Todo esse tratamento e cálculo foi agrupado e está apresentado na tabela 3.3. Nela, os valores presentes na literatura estão com o subscrito LiFe.

A análise da tabela 3.3 permite verificar uma grande concordância entre os valores experimentais calculados e os valores obtidos através da teoria quântica. Desse modo, com o intuito de quantificar a precisão oferecida pela aferição experimental realizada, foi confeccionado a tabela 3.4 que traz o erro percentual das medidas aferidas.

Na segunda etapa experimental, foi realizada uma série de análises espectrais do tungstênio variando o potencial da ampola. Como resultado dos dados coletados o gráfico 3.2 foi confeccionado e demonstra como o espectro de raio X do Tungstênio mantém sua forma, porém perde intensidade com a diminuição do potencial aplicado.

	λ (Å)	λ_{LIT} (Å)	Transições	E (eV)	E_{LIT} (eV)
1	1,02214	1,0215	L1O3	12.129,5	12.063
2	1,06288	1,0581	L1N3	11.664,6	
2	1,06288	1,0581	L1N2	11.664,6	
3	1,09674	1,0927	L2N4	11.304,4	11.286
4	1,13053	1,1292	L2N1	10.966,6	10.949
5	1,23803	1,2394	L3N5	10.014,3	9.961
6	1,24472	1,2587	L1M3	9.960,49	9.818
7	1,27810	1,2761	L2M4	9.700,34	9.673
8	1,29809	1,2975	L1M2	9.551,01	9.525
9	1,41722	1,4172	L2M1	8.748,15	8.725
10	1,47627	1,4743	L3M5/L3M4	8.398,23	
11	1,55443	1,5421		7.975,94	
12	1,67678	1,6749	L3M1	7.393,96	7.387

Tabela 3.3: Dados de comprimentos de onda e energias calculados. A coluna das transições estabelece qual transição eletrônica é a responsável por emitir o raio x característica do comprimento de onda e energia calculados.

	Margem de erro de λ em %	Margem de erro da E em %
1	0,0006	0,0055
2	0,0045	
3	0,0037	
4	0,0011	0,0016
5	-0,0011	0,0053
6	-0,0111	0,0145
7	0,0015	0,0028
8	0,0004	0,0027
9	0,0000	0,0026
10	0,0013	
11	0,0079	
12	0,0011	0,0009

Tabela 3.4: Percentual de erro obtido entre o comprimento de onda e a energia de cada pico de raio X característico obtido.

Analisando o gráfico 3.2 muito facilmente pode-se observar a relação inversamente proporcional entre as intensidades dos picos e o potencial aplicado na ampola. Este comportamento decorre do fato de que o feixe de raio x produzido é menos energético a cada diminuição realizada na DDP entre o cátodo e o ânodo. Desse modo, o raio emitido apresentava dificuldade em retirar elétrons da eletrosfera dos átomos do alvo metálico.

Outrossim, o número de fótons emitidos decai de forma progressiva o que combinado com a pontuação realizada anteriormente faz com que o espectro de raio x obtido apresente uma menor intensidade. No entanto, embora a intensidade sofra um decaimento a forma do espectro não é perdida para os valores de potencial empregados na experimentação, isso advém do fato de que o material e as condições estudadas se mantiveram inalteradas com a única diferença, como já foi explicitado, sendo a energia do feixe emitido e a quantidade de fótons liberada.

Por fim, com base em todos os dados coletados e tratados é possível comprovar a afirmação realizada na seção de Fundamentação Teórica, onde foi posicionado que o comprimento de onda mínimo não depende do material analisado, mas sim do potencial empregado. A análise

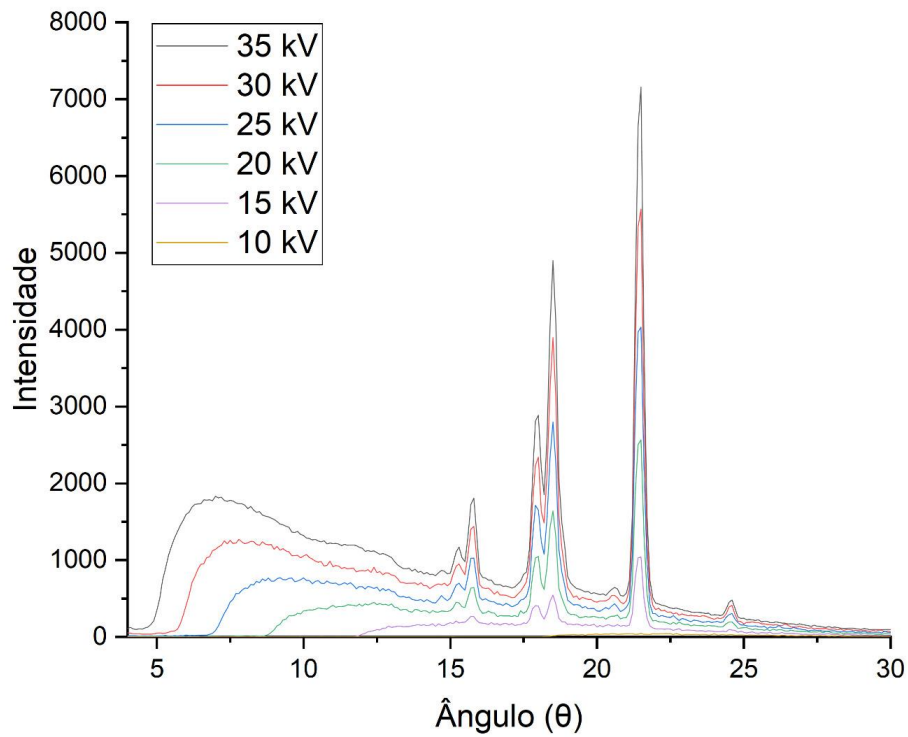


Figura 3.2: Espectro de raio X do Tungstênio para diferentes valores de potencial aplicados, tempo de integração utilizado de 2s.

do gráfico 3.3 demonstra justamente essa característica. É notável que o comprimento de onda mínimo aumenta quanto menor for o potencial aplicado, fato previsto teoricamente.

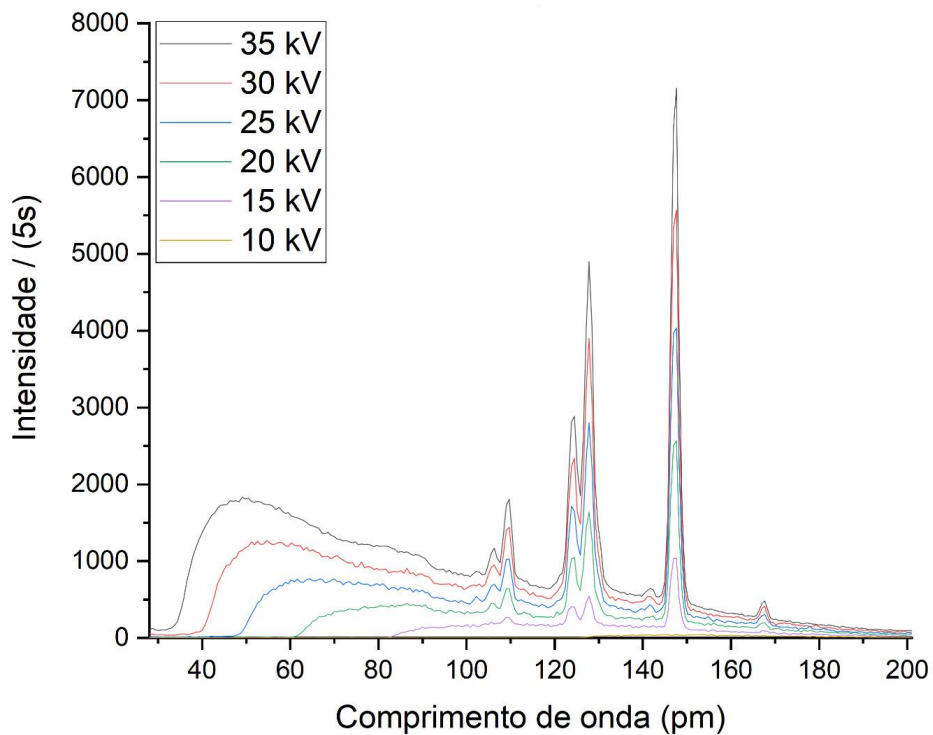


Figura 3.3: Gráfico da intensidade do espectro de raio x do tungstênio em função do comprimento de onda para diferentes potenciais aplicados na ampola.

Conclusão

O estudo do espalhamento de raios X revelou-se uma exploração fascinante das propriedades fundamentais da radiação e sua interação com a matéria. Ao longo deste experimento, explorou-se a produção dos raios X e suas condições de difração, fundamentadas em uma sólida base teórica. Desde a produção dos raios X em dispositivos projetados especificamente até a compreensão dos princípios da difração em redes cristalinas, cada etapa proporcionou conclusões valiosas sobre a natureza intrínseca desses fenômenos.

Inicialmente, compreendeu-se a produção de raios X por meio da interação entre elétrons acelerados e um alvo metálico, resultando na emissão de fótons característicos. Esse processo, conhecido como emissão termiônica, é essencial para a geração controlada de raios X em aparelhos específicos, como os utilizados neste experimento. Ao compreender as bases teóricas por trás da produção de raios X, permitiu-se avançar para a investigação do fenômeno de espalhamento, o principal foco deste estudo.

O espalhamento de raios X, como observado durante a experimentação, é um processo complexo que envolve a interação entre os fótons incidentes e os elétrons presentes no material alvo. Por meio da análise das equações fundamentais, como a Lei de Compton e a Lei de Bragg, pode-se compreender como a difração ocorre em cristais e como essa propriedade pode ser utilizada para determinar a estrutura cristalina dos materiais.

Durante a realização do experimento, foi empregada uma metodologia cuidadosamente planejada, que envolveu a utilização de equipamentos específicos, como a unidade de raio X, o goniômetro e o tubo Geiger-Müller. A calibração precisa desses dispositivos foi fundamental para garantir a precisão e confiabilidade dos resultados obtidos.

A análise dos dados experimentais permitiu observar padrões de difração característicos, confirmados pelos picos de intensidade observados nos espectros de difração. Esses resultados foram consistentes com as previsões teóricas e confirmaram a capacidade dos raios X de revelar informações sobre a estrutura atômica e molecular dos materiais.

No entanto, é importante ressaltar que o estudo também encontrou algumas limitações e desafios. A complexidade dos cálculos envolvidos na interpretação dos dados e a necessidade de controle preciso das condições experimentais destacam a importância da experiência e expertise na realização de experimentos de espalhamento de raios X.

Em última análise, este experimento proporcionou uma valiosa oportunidade para explorar os princípios físicos subjacentes ao espalhamento de raios X e para desenvolver habilidades práticas de análise e interpretação de dados. Os conhecimentos adquiridos neste estudo têm aplicações significativas em uma variedade de campos científicos, desde a cristalografia até a caracterização de materiais, e contribuem para o avanço contínuo do entendimento dos realizadores sobre as propriedades fundamentais da matéria.

Bibliografia

AUTHIER. *Early days of crystallography*. [S.l.]: Oxford University Press, 2013. 3

FILHO, O. S. Breve histórico dos cem anos da descoberta dos raios x. *Instituto de Química da USP*, v. 18, p. 574–583, 1995. Disponível em: <http://static.sites.sbq.org.br/quimicanova.sbq.org.br/pdf/Vol18No6_574_v18_n6_11.pdf>. Acesso em: 20 de março de 2024. 3

KITTEL, C. *Introdução à Física do Estado sólido*. 8. ed. [S.l.]: LTC, 2006. 594 p. ISBN 978-8521615057. 7, 8

LIMA, R. da S. Breve histórico dos cem anos da descoberta dos raios x. *Instituto de Química da USP*, 1995. 3

MINGOS, M. P. Early history of x-ray crystallography. *Structure and Bonding*, 2020. 4

QUEIROZ, A.; KUROSAWA, R.; BARRETO, R. Difração de raios-x. *Universidade Federal de São Paulo (USP). Laboratório Avançado de Física Computacional*, 2013. 8

ROENTGEN, W. On a new kind of rays. *Annalen der Physik und Chemie*, 1895. 3

ROENTGEN, W. C. On a new kind of rays. *Rev. Gen. Sci.*, 1896. 3

SUZANA. *O que ocorre dentro de uma ampola de raios x*. radiologiaconcurso, 2017. Disponível em: <<http://radiologiaconcurso.blogspot.com/2017/12/o-que-ocorre-dentro-de-uma-ampola-de.html>>. Acesso em: 20 de março de 2024. 6

TIPLER, P. A.; LLEWELLYN, R. *Modern physics*. [S.l.]: Macmillan, 2003. 6