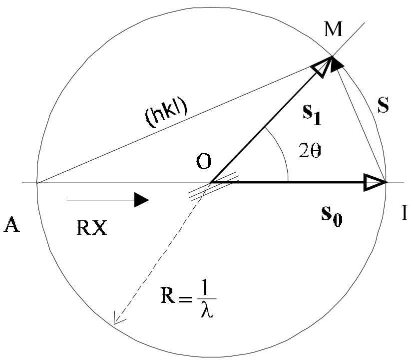
Regresso ao applet

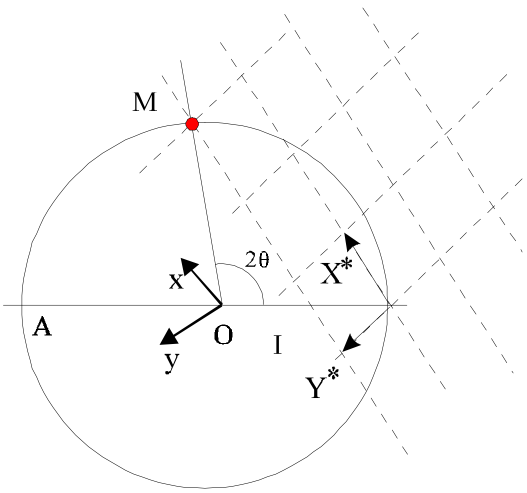
Construção de Ewald



O cristal difractor colocado em **O** recebe um feixe de vector de onda $\mathbf{s_0}$. Seja a esfera dita «Esfera de Ewald », de centro **O** e raio R = 1/λ. O feixe incidente **AO** atravessa a esfera em **I**.

Se o vector $\mathbf{IM} = \mathbf{S} = \frac{\mathbf{s_1} - \mathbf{s_0}}{\lambda}$ é tal que **OM** é uma direcção de difracção, então **M** é um nó da rede recíproca construida com o ponto **I** como origem (nó **000**). A recta **AM** é paralela aos planos recticulares que deram origem à difracção.

Por outro lado, as direcções de difracção possíveis são as direcções definidas pelas rectas que ligam a origem **O** aos nós da rede recíproca, localizados na esfera de Ewald. Com um cristal orientado aleatoriamente não há, geralmente, raio difractado. É preciso girar o cristal em torno de **O** para trazer um nó da rede recíproca para a esfera.



Ao rodar o cristal em torno de **O**, a rede recíproca gira em torno do ponto **I**.
A figura representa a intersecção da esfera de Ewald pelo plano reticular (001)* da rede recíproca.
O nó **M**, estando na esfera, define a direcção de difracção **OM**.
No exemplo representado por esta figura, ocorre difracção nos planos reticulares (310).

NOTA: Se a esfera de Ewald é construída com um raio igual a $\mathbf{R_0}$, a rede recíproca deve ser construída à escala $\sigma^2 = R_0.\lambda$ ($\mathbf{a.A^*} = \sigma^2$, $\mathbf{b.A^*} = 0$…)

Relação de Bragg

Segundo a construção de Ewald pode escrever-se : $\mathbf{IM} = \mathbf{S} = \mathbf{N_{hkl}} = h.\mathbf{A^*} + k.\mathbf{B^*} + l.\mathbf{C^*}$

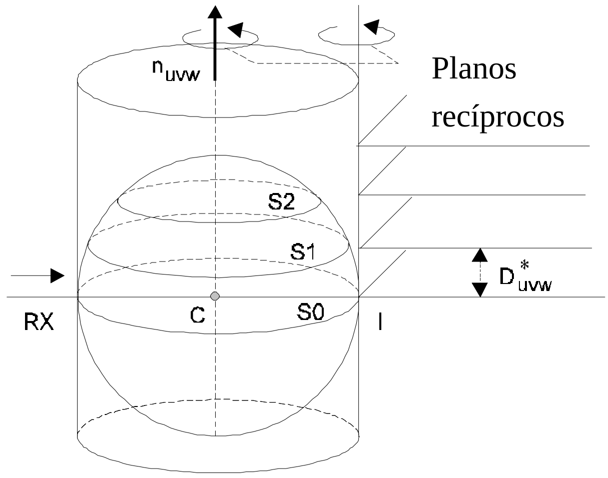
A norma do vector recíproco é: $\|\mathbf{N_{hkl}}\| = \frac{2.\text{sen}\,\theta}{\lambda}$ Ela está ligada à equidistância dos planos (hkl) par $\|\mathbf{N_{hkl}}\|.d_{hkl} = 1$.

Deduz-se a seguinte relação que constitui a Lei de Bragg: $\boxed{2.\, d_{hkl}.\text{sen}\,\theta = \lambda}$

Método do cristal girante (Bragg)

Quando um feixe monocromático de raio **X** ilumina um cristal, só ocorre difracção num nó da rede recíproca que se encontra na superfície da esfera de reflexão. Para trazer os nós da rede recíproca para a superfície da esfera de Ewald, faz-se girar o cristal em torno de um eixo normal ao feixe incidente.
A rotação do cristal envolve a própria rede recíproca.
Se o eixo de rotação do cristal apresenta uma orientação qualquer em relação à rede cristalina, o diagrama de difracção é em geral muito complexo e impraticável. Se, pelo contrário, o cristal gira em torno de

uma linha $\mathbf{n}_{UVW}$, a figura de difracção é particularmente simples. Efectivamente, a família de planos reticulares $(uvw)^*$ da rede recíproca, com uma equidistância designada D_{uvw}^*, é normal ao eixo de rotação e, durante a rotação, estes planos vão cortar a superfície da esfera de Ewald dos círculos S_0, S_1, S_2 … à distância D_{uvw}^*.



Os raios difractados são distribuídos por uma série de cones de revolução, com vértice **C** que se apoiam nos círculos S_0, S_1, S_2, cujos raios são dados por:

$$R_p = \sqrt{R^2 - p^2 . D^2_{uvw}}$$

Na película, os pontos de difracção distribuem-se nos **planos**.

Regresso ao applet