

Métqf q'f g'Naue

Princf k'f q'b 2 vqf q

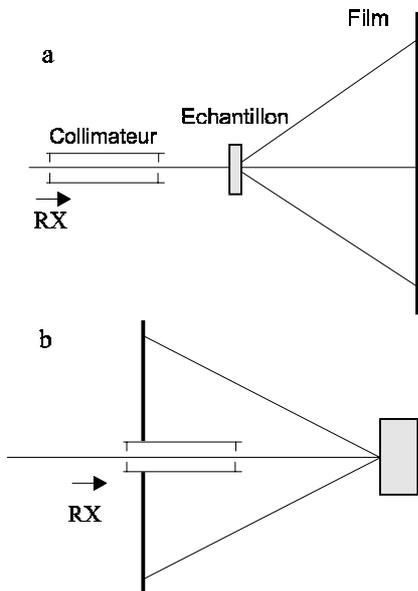


Figura 1

Com um único feixe de raios - X policromático é possível iluminar um monocristal imóvel. O padrão de difracção é registado numa película colocada, por norma, perpendicularmente ao feixe incidente.

As imagens são registadas tanto em **transmissão** (amostras finas ou pouco absorventes) com a configuração da figura 1.a, como em **retorno** (amostras mais espessas) com a configuração da figura 1.b.

A direcção do feixe incidente permanece fixa relativamente à amostra. Uma família de planos reticulares (hkl) de equidistância d_{hkl} , fazem um ângulo com o feixe directo difractado, de comprimento de onda $\theta\lambda$, quando a condição de Bragg $n \cdot \lambda_{\theta} = 2 \cdot d_{hkl} \cdot \sin \theta$ está satisfeita.

Cada ponto do diagrama de Laue corresponde a uma família de planos reticulares, cuja **orientação** relativa ao feixe incidente pode ser deduzida pelas condições de reflexão.

Construção de um digrama teórico

Considere-se um primeiro ponto de referência (tri-ortonormal) relacionado com o cristal, tal que: $Ox \parallel \vec{a}$; $Oy \parallel \vec{a} \wedge \vec{C}^*$; $Oz \parallel \vec{C}^*$; (a, b, c : rede directa ; A^*, B^*, C^* : rede recíproca) e um segundo ponto de referência, tal que OX e OY estão no plano da película e OZ é paralelo ao feixe incidente. Seja a linha directa

$$\vec{OP} = [uvw] \text{ que na experiência é colocada paralelamente ao feixe.}$$

Em Oxyz, as coordenadas de P são:

$$\begin{aligned} x_p &= ua + vb \cdot \cos \gamma + wc \cdot \cos \beta \\ y_p &= vb \cdot \sin \gamma - wc \cdot \sin \beta \cdot \cos \alpha^* \\ z_p &= wc \cdot \sin \beta \cdot \sin \alpha^* \end{aligned}$$

e a norma de

$$\vec{OP} \text{ é } l_p = \sqrt{x_p^2 + y_p^2 + z_p^2} .$$

Seja φ o ângulo entre Oz e OM (M projecção de P sobre zOx) e ρ o ângulo entre Oz e OP.

Temos : $\tan \varphi = x_p / z_p$ e $\cos \rho = y_p / l_p$

Daqui temos que OP sobre OZ origina uma rotação de ângulo $-\varphi$ em torno de Oz e de ângulo $\theta = (\pi/2 - \rho)$ em torno de Ox.

A expressão da matriz de rotação é:

$$(R) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & 0 & -\sin \varphi \\ -\sin \theta \cdot \sin \varphi & \cos \theta & -\sin \theta \cdot \cos \varphi \\ \cos \theta \cdot \sin \varphi & \sin \theta & \cos \theta \cdot \cos \varphi \end{pmatrix} . \text{ A malha recíproca}$$

$\vec{N}_{hkl}^* = h\vec{A}^* + k\vec{B}^* + l\vec{C}^*$ tem como componentes no referencial e Oxyz :

$$\begin{aligned} m_x &= hA^* \cdot \sin \beta^* \cdot \sin \gamma \\ m_y &= -hA^* \cdot \sin \beta^* \cdot \cos \gamma + kB^* \cdot \sin \alpha^* \\ m_z &= hA^* \cdot \cos \beta^* + kB^* \cdot \cos \alpha^* + lC^* \end{aligned}$$

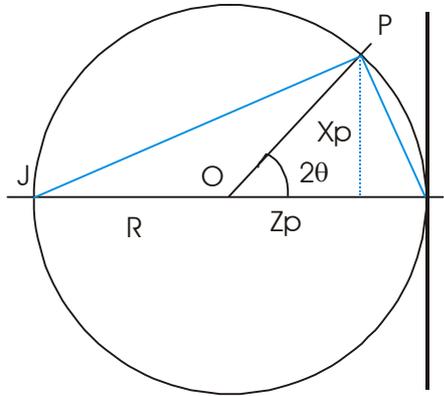
Depois da rotação em Oxyz, esta rede recíproca tem como coordenadas:

$$\begin{pmatrix} nx \\ ny \\ nz \end{pmatrix} = (R) \cdot \begin{pmatrix} mx \\ my \\ mz \end{pmatrix}$$

com norma $\|N\| = \sqrt{nx^2 + ny^2 + nz^2}$

Definimos um vector recíproco unitário de componentes:

$$N_x = nx / \|N\|; \quad N_y = ny / \|N\|; \quad N_z = nz / \|N\|$$



Ocorre difracção se o vector recíproco \vec{IP} é tal que para um determinado comprimento de onda λ , o ponto P está situado na esfera de Ewald de raio $R = 1/\lambda$

$$\vec{IP} = \mu \cdot N_x \cdot \vec{i} + \mu \cdot N_y \cdot \vec{j} + \mu \cdot N_z \cdot \vec{k}$$

$$\vec{JP} = \vec{JI} + \vec{IP} = -2 \cdot \vec{k} + \vec{IP}$$

Como P está na esfera : $\vec{IP} \cdot \vec{JP} = 0$

Portanto, o coeficiente de semelhança μ é igual a $2N_z$.

Deduzimos as coordenadas X_p , Y_p e Z_p de P , bem como o valor do ângulo de difracção θ .

Como $\|N_{hkl}\| \cdot d_{hkl} = 1$, da relação de Bragg:

$2 \cdot d_{hkl} \cdot \sin\theta = \lambda$, deduzimos o valor do comprimento de onda que origina difracção nos nós de índices h , k e l .

Verificamos que este comprimento de onda está entre λ_{\min} e λ_{\max} .

No programa supõe-se que λ_{\max} é igual a 3 \AA porque, além deste valor, a energia fornecida pelos anticátodos é muito baixa.

As coordenadas do ponto hkl na película são : $x_f = R \cdot X_p / Z_p$ et $y_f = R \cdot Y_p / Z_p$.

Se os valores obtidos são inferiores ao tamanho da película, traçamos o ponto correspondente. Obtém-se do varrimento do espaço recíproco uma conjugação tripla nos índices h , k e l .

Por cada tripla, testamos se o ponto é visível na película.

Normalmente, apenas os pontos de índices baixos são visíveis no espectro experimental. É geralmente inútil que os índices excedam valores superiores a 10.

[Regresso ao applet](#)