

# Difração de Raios X e do Elétron.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL. Instituto de Física. Departamento de Física. Física do Século XXB (FIS1056). Prof. César Augusto Zen Vasconcelos. **Lista 9** (*Site: [www.cesarzen.com](http://www.cesarzen.com)*)

**Tópicos.** Difração de Raios X e do Elétron. A Lei de Bragg da Difração (William Henry Bragg<sup>1</sup> (1862-1942) e William Lawrence Bragg (1890-1971)). Experiência de Davisson e Germer<sup>2</sup> (Clinton Davisson (1881-1958) e Lester Germer (1896-1971)).

## Lei de Bragg

Max von Laue sugeriu, em 1912, que os cristais, por estarem organizados em arranjos atômicos regulares, poderiam servir como redes de difração de raios-X. Isto porque, os raios-X tem comprimentos de onda da ordem de grandeza do angström ( $\text{Å}$ ), ou seja, da ordem de grandeza das dimensões espaciais interatômicas típicas dos átomos em um cristal<sup>3</sup>.

<sup>1</sup>William Henry Bragg e seu filho William Lawrence Bragg ganharam o Prêmio Nobel de física de 1915 pela descoberta da Lei da Difração.

<sup>2</sup>Em um experimento realizado em 1927, Clinton Davisson e Lester Germer confirmaram as hipóteses de De Broglie.

<sup>3</sup>Raios X são emissões eletromagnéticas. Os raios-X têm natureza semelhante à da luz visível, embora seus comprimentos de onda característicos sejam muito menores do que a da luz visível, sendo constituídos portanto por fótons. Seu comprimento de onda vai de  $0,05\text{Å}$  ( $5\text{ pm}$ ) a dezenas de angströms ( $1\text{ nm}$ ). Raios-X foram descobertos em 1895, pelo físico alemão Wilhelm Conrad Röntgen (1845 - 1923), ganhador do Prêmio Nobel de física em 1901. A energia dos fótons é da or-

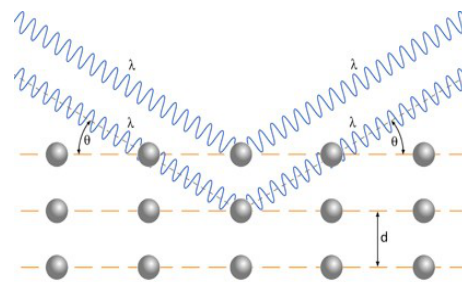


Figura 1: Lei de Bragg da difração.

Créditos: <http://ralc.tistory.com/>

Baseado nestas observações, Sir William Henry Bragg e seu filho William Lawrence Bragg desenvolveram, em 1913, a teoria da difração de raios-X em cristais, conhecida hoje como Lei de Bragg. Nesta teoria, eles demonstraram que um plano de átomos em um cristal (plano de Bragg), reflete radiação de maneira exatamente igual ao que ocorre com a reflexão da luz em um espelho plano (ver figuras (1)) e (2)). Ao se considerar a radiação que é refletida por sucessivos planos paralelos de Bragg, planos estes separados por

dem de grandeza do *kilo* elétron-volt (keV), variando entre alguns keV e algumas centenas de keV. Raios-X são gerados por meio da transição de elétrons em átomos, ou por meio da desaceleração de partículas carregadas (processo denominado de *bremsstrahlung*). Devido à sua natureza eletromagnética, raios-X apresentam a dualidade onda-partícula e podem sofrer interferências as mais diversas como efeitos de polarização, refração, difração, reflexão, entre outros. Embora de comprimento de onda muito menor, sua natureza eletromagnética é idêntica à da luz.

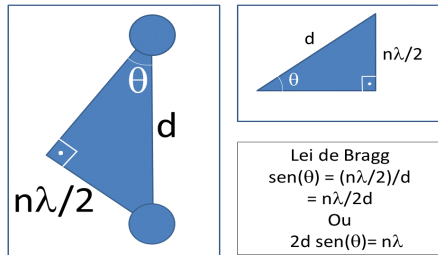


Figura 2: Lei de Bragg da difração. Esta figura se refere à anterior e mostra dois átomos do cristal. Desenhamos um triângulo retângulo com dois átomos do cristal ocupando dois de seus vértices e a hipotenusa sendo igual ao espaçamento entre os dois primeiros planos de Bragg. Da figura anterior vemos que o cateto oposto corresponde a uma quantidade, que designamos genericamente por  $n$ , de meios comprimentos de onda  $\lambda$ .

uma distância  $d$ , é possível que os feixes refletidos de cada plano sofram interferência construtiva entre si, produzindo então um feixe refletido de maior intensidade. A condição para interferência construtiva é que a diferença de caminho percorrido entre os feixes seja igual a um número inteiro de comprimentos de onda. Assim, os máximos e mínimos das ondas que sofrem interferência coincidem e o feixe refletido resultante apresentará maior intensidade. Das figuras (1) e (2) é possível notar que esta condição pode ser escrita na forma:

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

onde  $n$  representa um número inteiro que caracteriza os distintos planos de Bragg. Sendo os parâmetros  $n$  e  $d$  conhecidos, o comprimento de onda pode ser determinado por meio de medições do ângulo de espalhamento,  $2\theta$ , entre os feixes transmitido e difratado. Nos cristais, podem ser formadas muitas famílias de planos de Bragg, por meio de cortes apropriados do cristal, cada um deles com seu próprio



Figura 3: Padrão de difração circular.

Créditos: <http://www.sciencephoto.com/>

espaçamento. E cada uma destas famílias de planos de Bragg origina difrações de um feixe de raios-X. Neste tipo de processo, um feixe de raios-X origina, em uma película de filme colocada em um arranjo geométrico apropriado, um padrão de difração (por exemplo, círculos concêntricos quando consideramos o espalhamento de feixes de raios-X por cristais de pequenas dimensões, aleatoriamente orientados, sendo que cada círculo caracteriza o padrão de difração definido por uma particular família de planos de Bragg).

### Experiência de Clinton Davisson e Lester Germer

Os primeiros experimentos de difração foram realizados por Clinton Davisson e Lester Germer. Estes experimentos consistiram no espalhamento de elétrons por um alvo de cristal e a observação de fenômenos de interferência. Nestes experimentos, um feixe de elétrons de 54eV colidia com cristais de Níquel, cujo espaçamento interatômico era conhecido de outros processos de espalhamento ( $d = 2,15\text{Å}$ ). Foram determinadas, nestas experiências, as intensidades dos elétrons espalhados. Caso não houvesse efeitos de difração, se esperaria que a intensidade dos elétrons

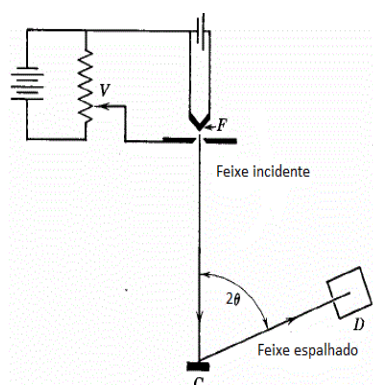


Figura 4: Arranjo experimental no estudo da difração de elétrons em cristais realizado por Davisson e Germer. Na figura são indicados a fonte de elétrons (F), o cristal-alvo (C), o detector (D), bem como o ângulo de espalhamento  $2\theta$ .

Créditos: <http://labman.phys.utk.edu/>

espalhados decrescesse de forma monotônica<sup>4</sup> com o ângulo de espalhamento. Ao invés disso, os resultados mostraram um pico pronunciado na intensidade eletrônica para um ângulo de espalhamento de  $50^\circ$ . O comprimento de onda obtido nestes experimentos está em bom acordo com os resultados esperados pela teoria de De Broglie<sup>5</sup>. Neste experimento, um feixe de elétrons é emitido, por meio de emissão termo-iônica, de um filamento mantido aquecido a alta temperatura pela corrente gerada

<sup>4</sup>Em matemática, uma função  $f$  é dita monotônica, ou monótona, se puder ser classificada como crescente, estritamente crescente, decrescente ou estritamente decrescente.

<sup>5</sup>O experimento de Davisson-Germer, realizado em 1927, confirmou a hipótese de De Broglie de que as partículas de matéria (elétrons por exemplo), possuem propriedades ondulatórias, ou seja, o experimento possibilitou, em combinação com o experimento de Arthur Compton, a confirmação da dualidade onda-partícula. O experimento ademais confirmou a hipótese de Max von Laue e a Lei de Bragg. Este experimento foi replicado de maneira independente por George Paget Thomson. Davisson e Thomson ganharam por estas descobertas o Prêmio Nobel de Física em 1937.

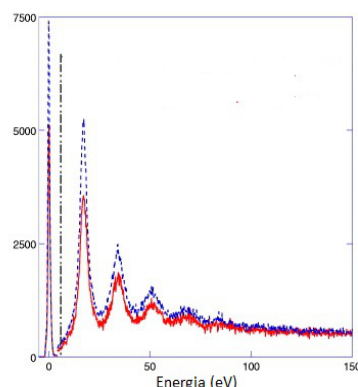


Figura 5: Espectro típico de difração de raios-X. A figura apresenta resultados de difração de feixes de elétrons por cristais de silício. Na figura são mostrados resultados correspondentes a duas regiões de variação angular distintas de difração. É importante assinalar, na análise destes resultados, que fixando-se o parâmetro  $n$  e  $d$  na lei de Bragg,  $\lambda$  e  $\theta$  devem variar de maneira proporcional entre si.

Créditos: New J. Phys. 12 (2010) 053001.

pela diferença de potencial,  $V_1$ , da fonte de tensão situada no lado direito da figura. O feixe de elétrons é posteriormente acelerado desde o filamento até uma placa colimadora pela diferença de potencial  $V_2$  da fonte de tensão situada à esquerda da figura. Ao passar pela placa colimadora, o feixe incide em um cristal sofrendo então dispersão. Um detector permite medir a intensidade do feixe de elétrons dispersados em função do ângulo  $2\theta$ , para valores diferentes do potencial acelerador  $V_2$ , ou seja, para diferentes energias dos elétrons incidentes no cristal.

A figura (5) mostra resultados típicos de difração de raios-X em função da quantidade de energia perdida pelos elétrons incidentes em um cristal.

Na figura (6) são mostrados de maneira esquemática os resultados de experimentos nos quais a intensidade da luz difratada foi medida para o ângulo  $2\theta$ , mas com valores difer-

entes do potencial acelerador, ou seja, para feixes com diferentes energias. No eixo das abscissas aparece a raiz quadrada do potencial acelerador de forma que os máximos e mínimos de intensidade fiquem mais ou menos a uma mesma distância uns dos outros. Os resultados apresentados na figura são típicos da distribuição de intensidades da dispersão de ondas. Máximos e mínimos de difração, iguais a esses, aparecem nos experimentos de difração de Bragg, onde raios-X e raios gama são espalhados pelos átomos que constituem um cristal. No experimento de Davisson e Germer, os elétrons difratados são observados usando-se a mesma geometria dos experimentos de difração de Bragg com raios-X e verifica-se que a corrente de elétrons registrada pelo detector é máxima toda vez que é satisfeita a condição de Bragg obtida, originalmente, para os raios-X. Portanto, a experiência de Davisson e Germer mostra portanto, para os elétrons, um comportamento típico da difração ondulatória.

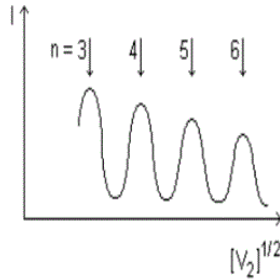


Figura 6: Espectro típico da intensidade de difração de raios-X em função

Os elétrons<sup>6</sup> foram tratados, classicamente, como um esfera, com raio clássico  $R_c$ .

<sup>6</sup>O elétron, representado pelo símbolo  $e^-$ , é uma partícula subatômica. Como vimos no estudo do átomo de Bohr, elétrons circundam os núcleos atômicos. O elétron foi identificada em 1897 pelo inglês John Joseph Thomson. Sua carga elétrica é negativa, estando associada a campos magnéticos e elétricos. O valor de sua carga elétrica é  $1,6 \times 10^{-19}$  Coulomb e sua

O raio  $R_c$  pode ser determinado usando como ponto de partida a energia potencial de Coulomb ( $E_{pC}$ ):

$$E_{pc} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R_c} = k \frac{e^2}{R_c}, \quad (2)$$

onde  $k$  é a constante de Coulomb,  $\epsilon_0$  é a permissividade do espaço livre, e o símbolo  $e$  representa a carga do elétron.

Considerando que a energia acima representa a energia Coulombiana total do elétron, e que é esta energia que gera a correspondente energia de repouso do elétron,  $E_{re} = m_e c^2$ , por meio da igualdade:

$$E_{pc} = k \frac{e^2}{R_c} = E_{re} = m_e c^2, \quad (3)$$

ou ainda

$$R_c = \frac{ke^2}{m_e c^2}. \quad (4)$$

Usando os valores:

- $k = 8,9876 \times 10^9 \text{ Nm}^2\text{C}^{-2}$
- $e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$
- $ke^2 = 1,44 \text{ MeV fm}$
- $m_e c^2 = 0,511 \text{ MeV}$

massa é  $9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$  ( $0,51 \text{ MeV}/c^2$ ), que é aproximadamente 1/1840 a massa do próton. O elétron tem spin semi-inteiro, sendo portanto classificado como um férmion, ou seja, uma partícula que obedece à estatística quantum-mecânica de Fermi-Dirac. O elétron, além de interagir com outras partículas por meio da força eletromagnética, também interage por meio da força nuclear fraca, onde normalmente vem acompanhado do seu neutrino associado. Sua anti-partícula é o pósitron, com idêntico valor de massa, mas contendo uma unidade de carga elétrica positiva. Existe uma constante física chamada raio clássico do elétron, cujo valor é  $2,8179 \times 10^{-15}$  metros. Este é o raio que se pode aferir a partir da carga do elétron descrita sob o ponto de vista da eletrodinâmica clássica, mas não do ponto de vista da mecânica quântica.

obtemos  $R_c = 2,81800391 fm$ .

O espalhamento de elétrons através de um cristal é portanto semelhante ao espalhamento de raios-X através de um cristal. A intensidade de elétrons espalhados é medida também em função do ângulo de espalhamento. Para algumas combinações da tensão aplicada, a intensidade dos elétrons apresenta um máximo, que corresponde à condição de Bragg de interferência construtiva:

$$2d\sin(\theta) = n\lambda_e. \quad (5)$$

A relação entre a tensão de aceleração do potencial elétrico,  $eV_a$ , e a energia cinética clássica dos elétrons,  $\frac{1}{2}m_e v^2$ , onde  $v$  representa a velocidade dos elétrons, pode ser expressa na forma

$$eV_a = \frac{1}{2}m_e v^2, \quad (6)$$

dando lugar à seguinte expressão para a velocidade:

$$v = \sqrt{\frac{2eV_a}{m_e}}. \quad (7)$$

Podemos ademais escrever uma expressão que relaciona o comprimento de onda dos elétrons espalhados e a tensão de aceleração

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{m_e v} = \frac{hc}{\sqrt{2m_e c^2 eV_a}} \\ &= 1,227 nm \sqrt{eV_a (eV)^{-1/2}}. \end{aligned} \quad (8)$$

É importante salientar, ao analisar a equação acima, que  $\sqrt{eV_a}$  representa a tensão do potencial elétrico enquanto que  $(eV)^{-1/2}$  representa uma unidade de  $eV$  elevada à potência  $-1/2$ . Assim, o produto  $\sqrt{eV_a}(eV)^{-1/2}$  é adimensional.

#### Problemas

- Um feixe de nêutrons de  $0,083eV$  colide com uma amostra desconhecida sendo observado um pico de reflexão de Bragg centrado em  $22^\circ$ . Qual é o espaçamento dos planos de Bragg da amostra? Suponha que o pico observado corresponda à uma difração de primeira ordem ( $n = 1$ ). Solução:  $1,33\text{\AA}$ .
- Nêutrons térmicos incidentes em um cristal de sódio com distância inter-atômica de  $2,81\text{\AA}$ , sofrem difração de primeira ordem entre planos de Bragg, em um ângulo de  $20^\circ$ . Qual é a energia dos nêutrons térmicos incidentes? Solução:  $0,0221eV$ .
- Um feixe de elétrons de  $60keV$  passa através de uma fina folha cristalina de prata, com espaçamento inter-atômico de  $4,08\text{\AA}$ . Calcule o raio do padrão de difração de primeira ordem dos planos principais de Bragg observado em um filme colocado  $40cm$  atrás da folha de cristal. Solução:  $0,478cm$ .
- Um material cristalino é caracterizado por um conjunto de planos de Bragg separados por uma distância de  $1,1\text{\AA}$ . Para nêutrons de  $2eV$  de energia cinética, qual é a reflexão de Bragg de mais alta ordem? Solução:  $n = 10$ .
- Um cristal extenso é usado para extrair energia de nêutrons de um feixe que emerge de um reator. O espaçamento dos planos de Bragg do cristal é igual a  $4,08\text{\AA}$ . Se o ângulo de Bragg é igual a  $30^\circ$ , qual é a energia observada dos nêutrons para reflexões de primeira ordem. Solução:  $0,0676eV$ .
- Se o cristal do problema anterior não for perfeito, de forma que seu espaçamento de Bragg varie em torno de  $1,1 \pm 0,01\text{\AA}$ , calcule a variação correspondente na energia do feixe difratado. Solução:  $\pm 1,23 \times 10^{-3}eV$ .

7. Determine o espaçamento inter-atômico de um cristal de NaCl se sua densidade é  $2,16 \times 10^3 \text{kg/m}^3$ , sendo os pesos atômicos do Na e do Cl dados, respectivamente, por 23,00 e 35,46. Solução:  $2,82\text{Å}$ .
8. O espaçamento entre os átomos em um cristal é  $1,2\text{Å}$ . Para que ângulo de espalhamento irá ocorrer uma reflexão de Bragg de primeira ordem para nêutrons com energia cinética de  $0,020\text{eV}$ ? Solução:  $57,4^\circ$ .
9. Deduza a lei de Bragg.
10. A lei de Bragg é universal, isto é, a lei é válida para qualquer partícula com qualquer energia (e portanto, qualquer comprimento de onda)?
11. Em uma de suas experiências, Clinton Davisson e Lester Germer usaram elétrons incidindo na superfície de um cristal de níquel, em um ângulo de 90 graus com a superfície do cristal (incidência normal). Eles observaram interferência construtiva em um ângulo de 50 graus correspondentemente à linha normal à superfície. Sabendo que o espaçamento inter-atômico do níquel é  $2,15\text{Å}$ , encontre o comprimento de onda associado ao feixe de elétrons. Solução:  $1,65\text{Å}$ .
12. No experimento descrito no problema anterior, Clinton Davisson e Lester Germer usaram elétrons com energia de  $54\text{eV}$ . Determine o potencial efetivo de aceleração dos elétrons no cristal de níquel. Solução:  $1,3\text{V}$ .