



Difração da luz: do laser ao Difratómetro de raio-X para medidas da estrutura atómica dos materiais

Grupo #1:

- Érica Moutinho
- João Neves
- João Nogueira
- Margarida Miguel

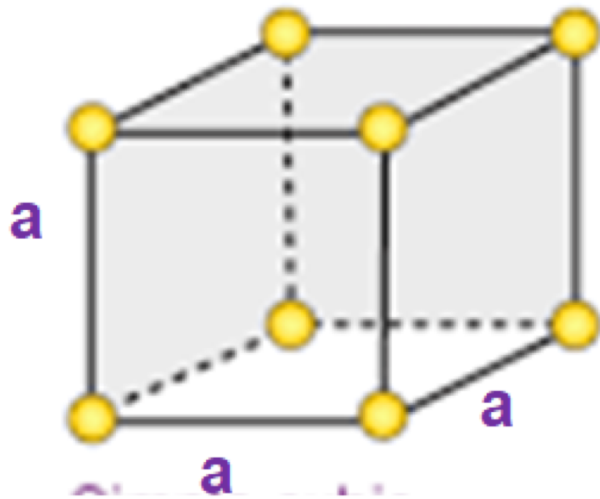


Objetivos:

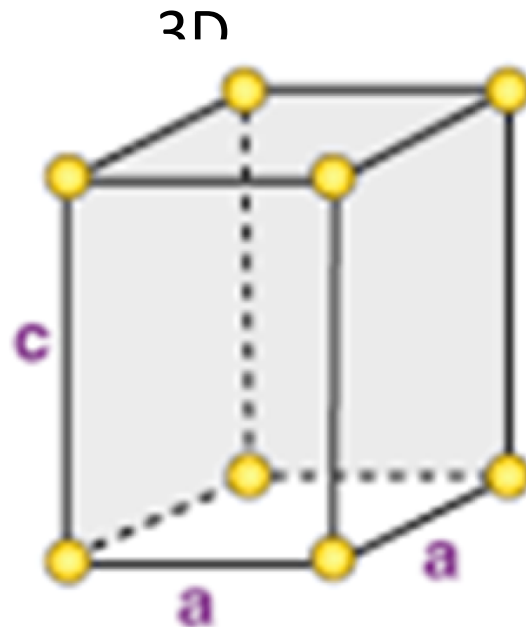
- Estudar e interpretar o fenômeno de difração da luz: 
Fizemos a experiência utilizando as redes de difração
- Observar um material a modificar a sua rede estrutural usando difração da luz: 
Analisamos padrões de difração a diferentes pressões para determinar como mudam os parâmetros de rede

Redes cristalinas

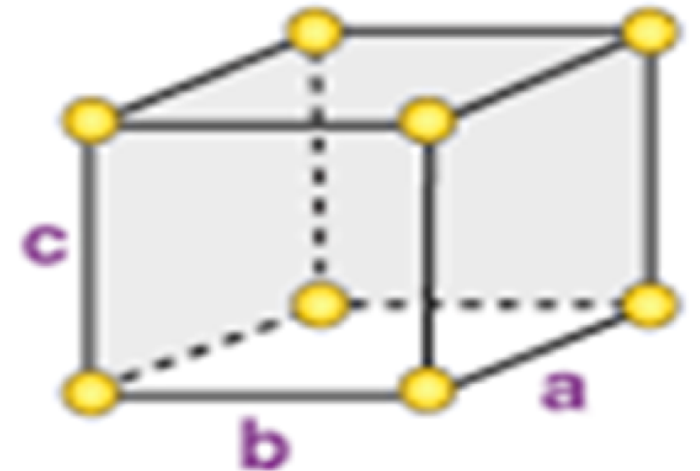
Um material é cristalino quando tem uma ordem perfeita que se repete indefinidamente.



- $a = b = c$
Rede cúbica

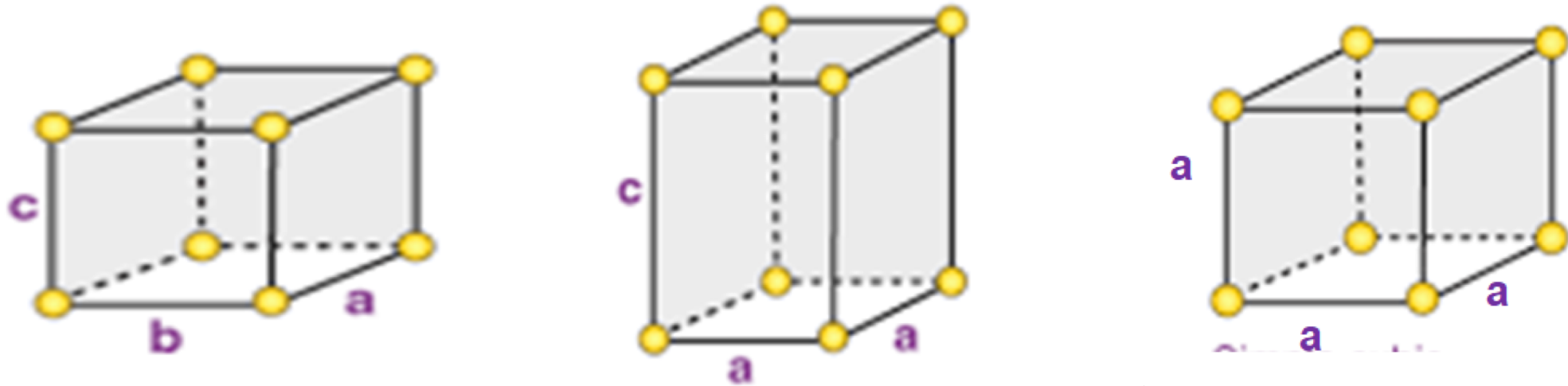


- $a = b \neq c$
Rede tetragonal



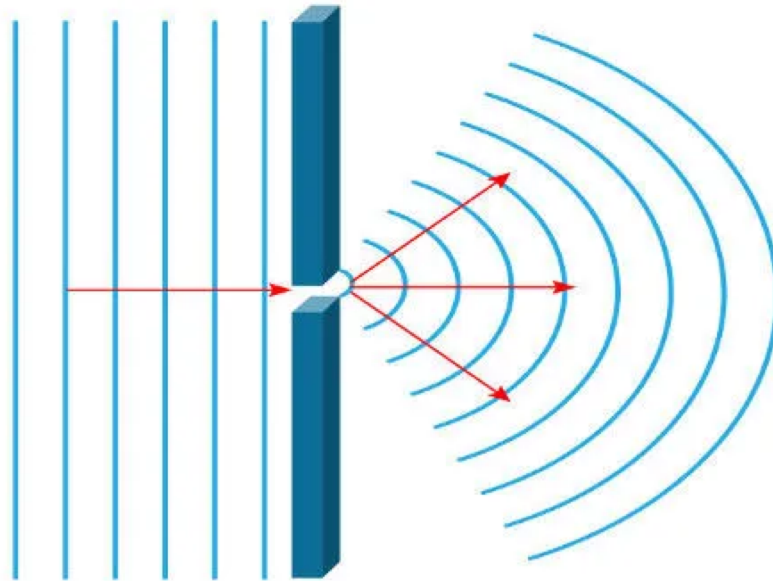
- $a \neq b \neq c$
Rede ortorrômbica

Transições estruturais

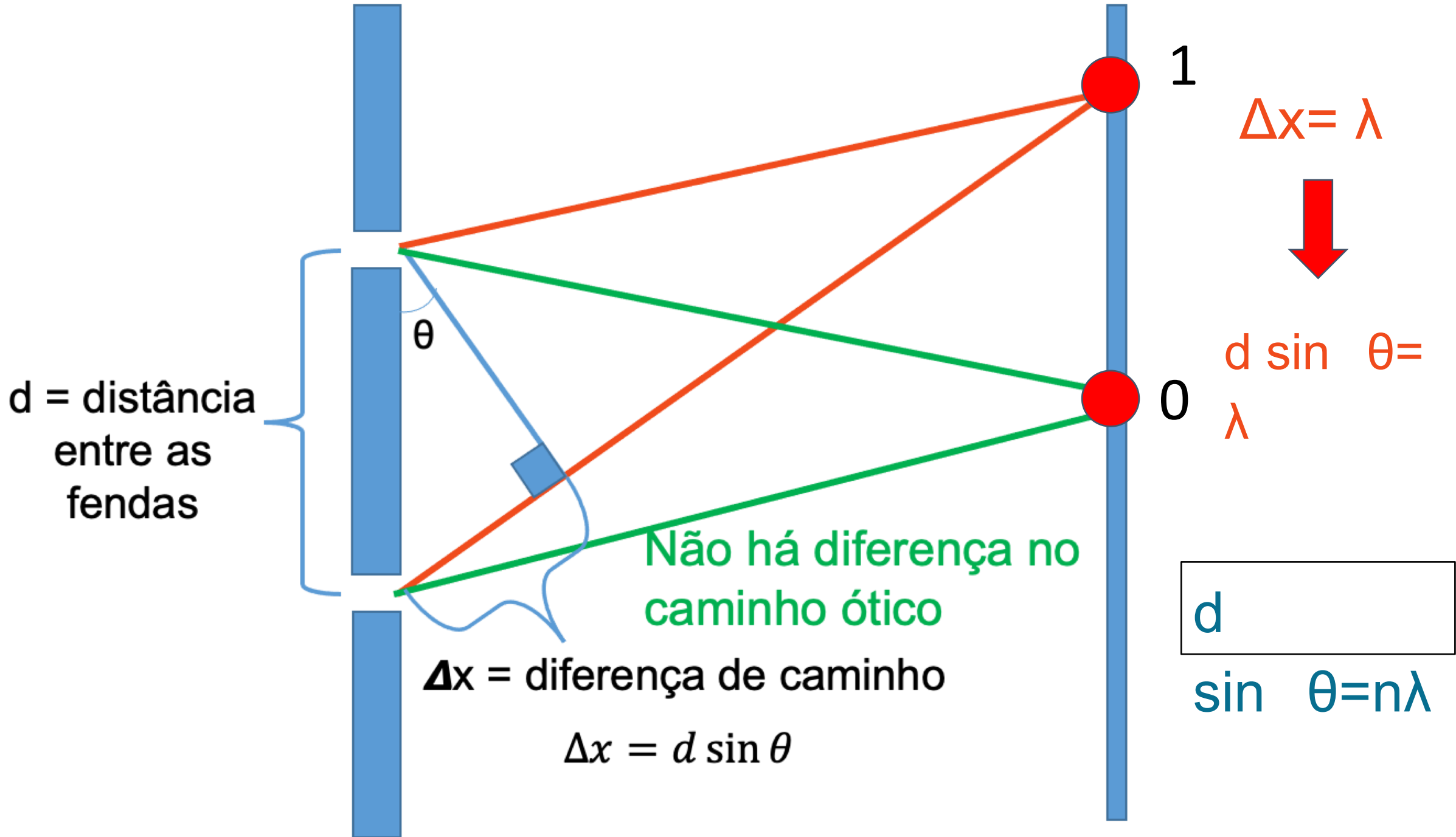


Temperatura, pressão

Difração da luz

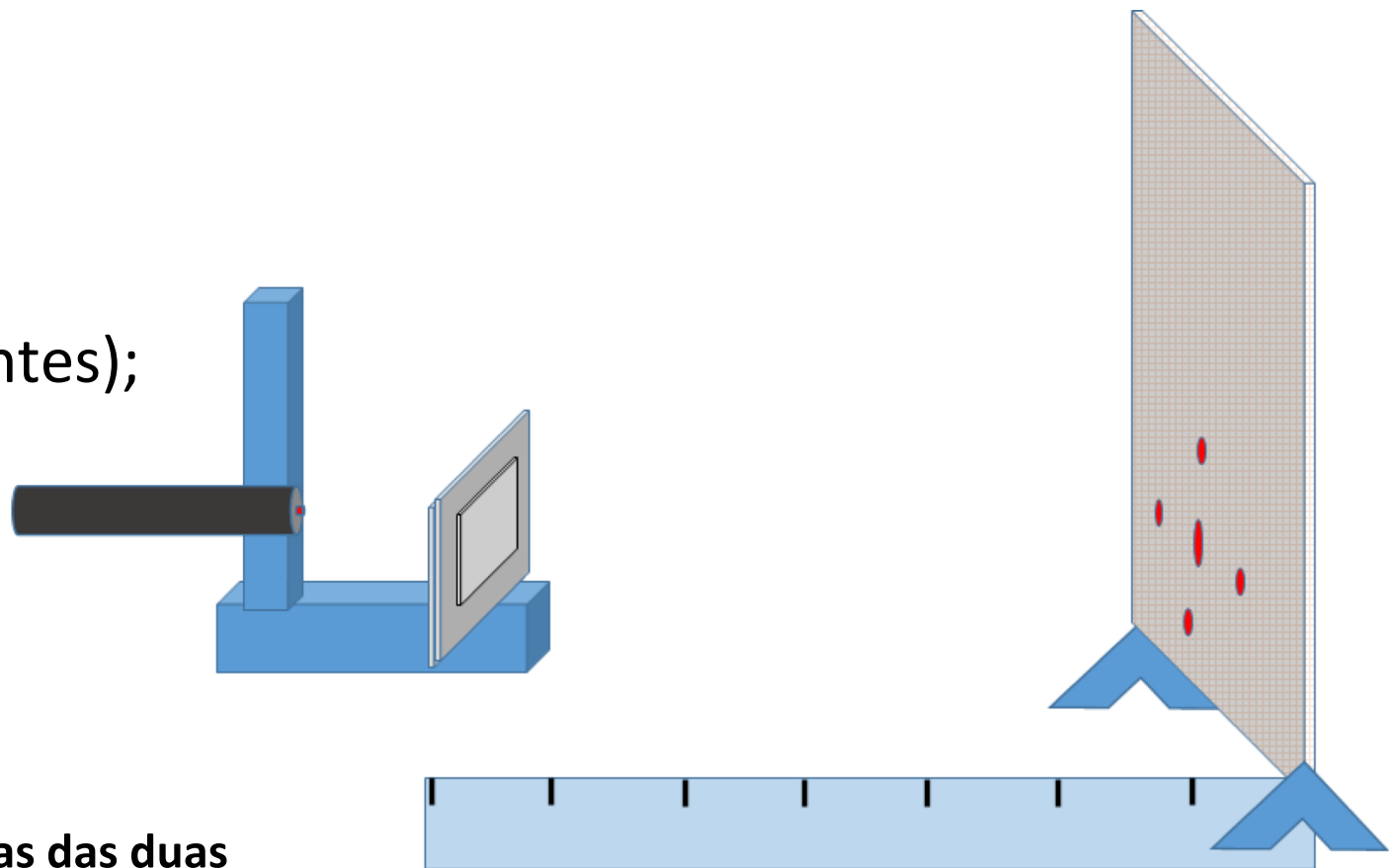


A difração é um fenómeno em que uma onda, ao encontrar uma fenda cuja dimensão é semelhante ao seu comprimento de onda, se espalha, formando uma onda semicircular.



Material utilizado na experiência (KIT) e montagem do mesmo

- Laser vermelho;
- Suporte para o laser;
- Tela com papel milimétrico;
- 4 redes de difração (2 pares diferentes);
- Régua de 15cm;
- Livros ou caixa.



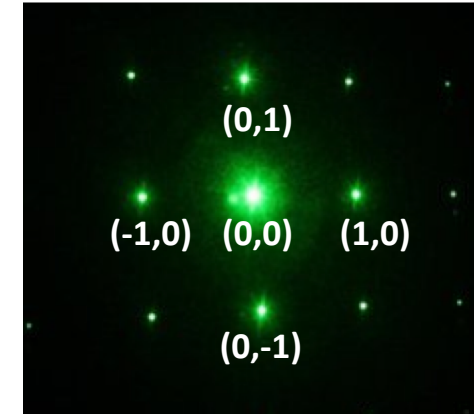
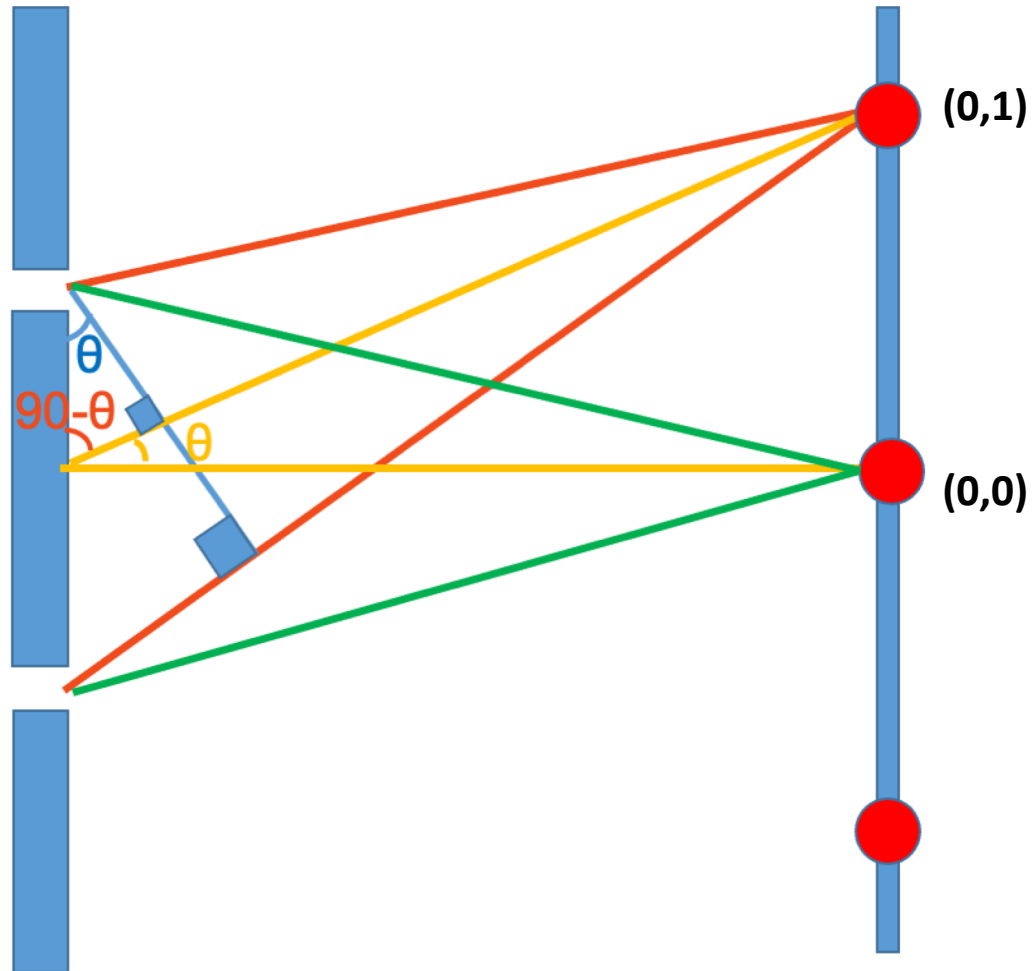
O nosso objetivo é determinar a distância das fendas das duas redes.

- Experiência e fórmulas necessárias:

- 2D: $\frac{1}{d_{hk}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2}$

- $d_{hk} \sin \theta_{hk} = n\lambda$

- $\tan^{-1} \theta = \frac{\text{cateto oposto}}{\text{cateto adjacente}}$



$(h,k) = (x,y)$

Comprimento de onda = 650 nm.

Resultados obtidos

- Ao realizar a experiência, os integrantes do grupo obtiveram resultados diferentes para as distâncias entre as fendas das redes de difração (“a” e “b”), por isso foi efetuada uma média.

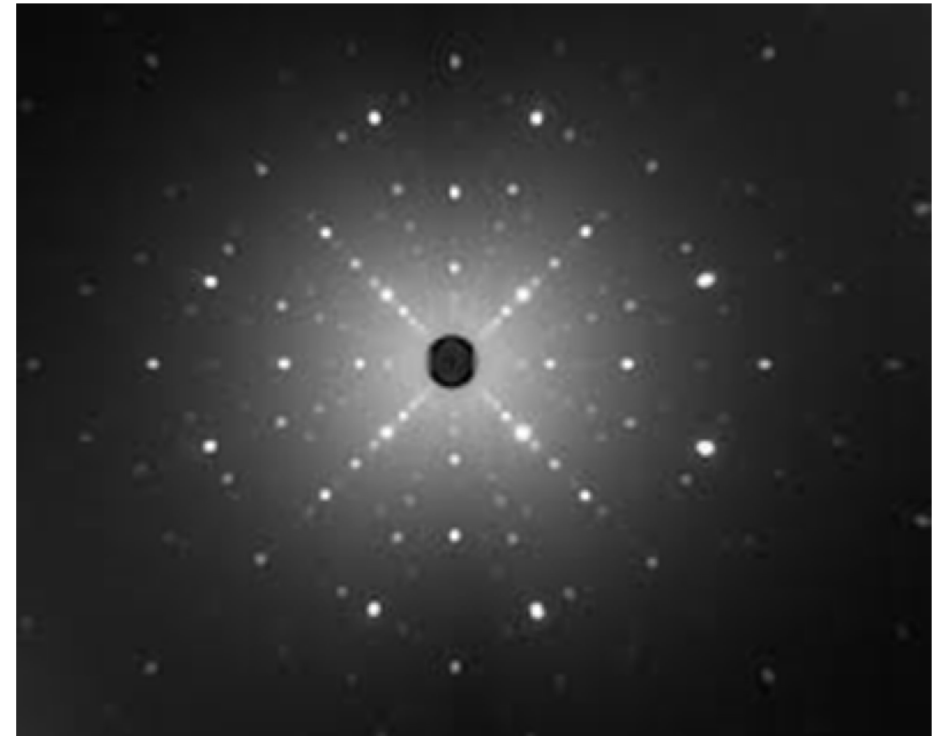
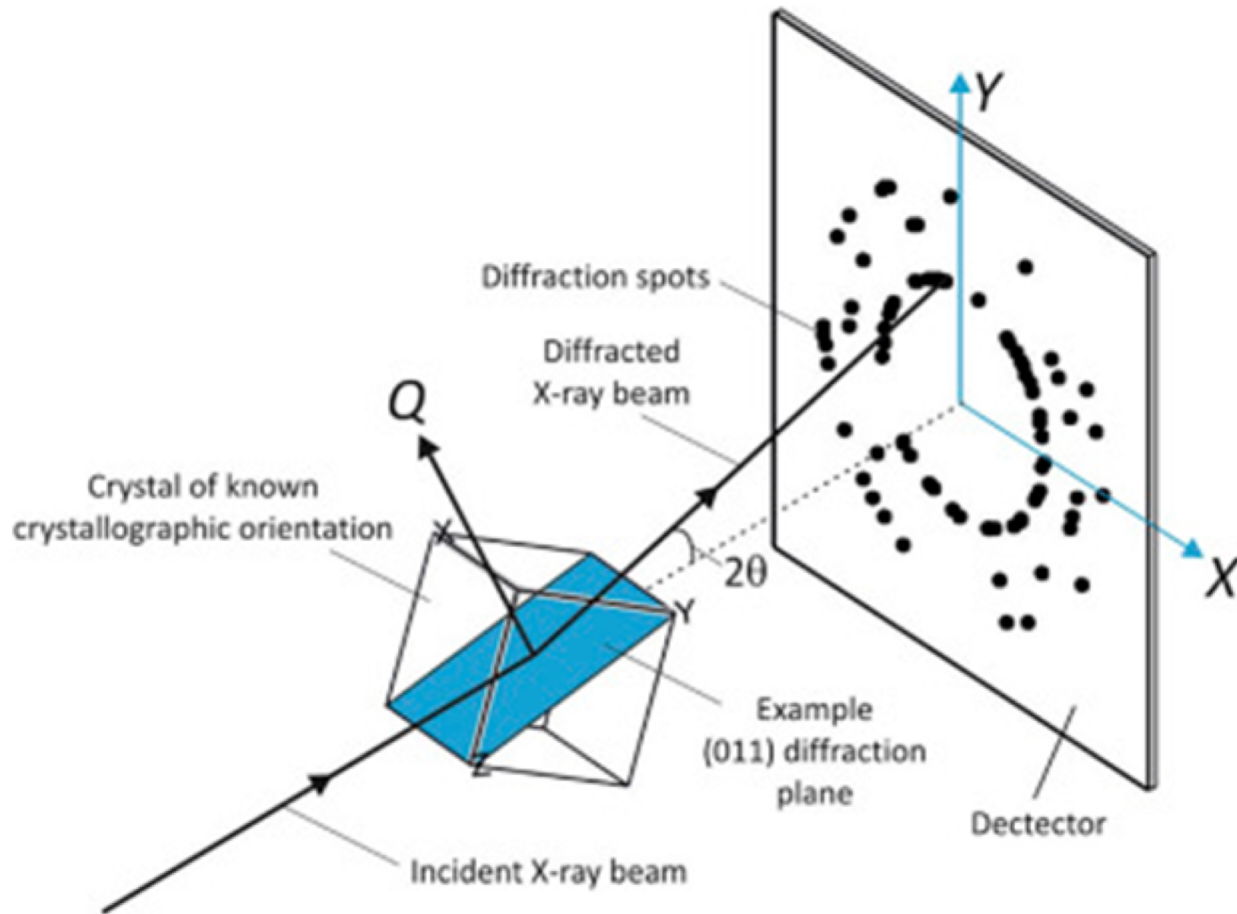
Redes de difração	Distância entre as fendas	Erro
a	1922 ±14 nanómetros	3,9%
b	992 ±14 nanómetros	0,8%

Valor teórico de a: 2000 nm
Valor teórico de b: 1000 nm

Incerteza da régua: 0,05 cm
Incerteza do laser: 10 nm

$\Delta d = \Delta \lambda / \sin \Delta \theta$
Incerteza do papel milimétrico: 0,05 cm

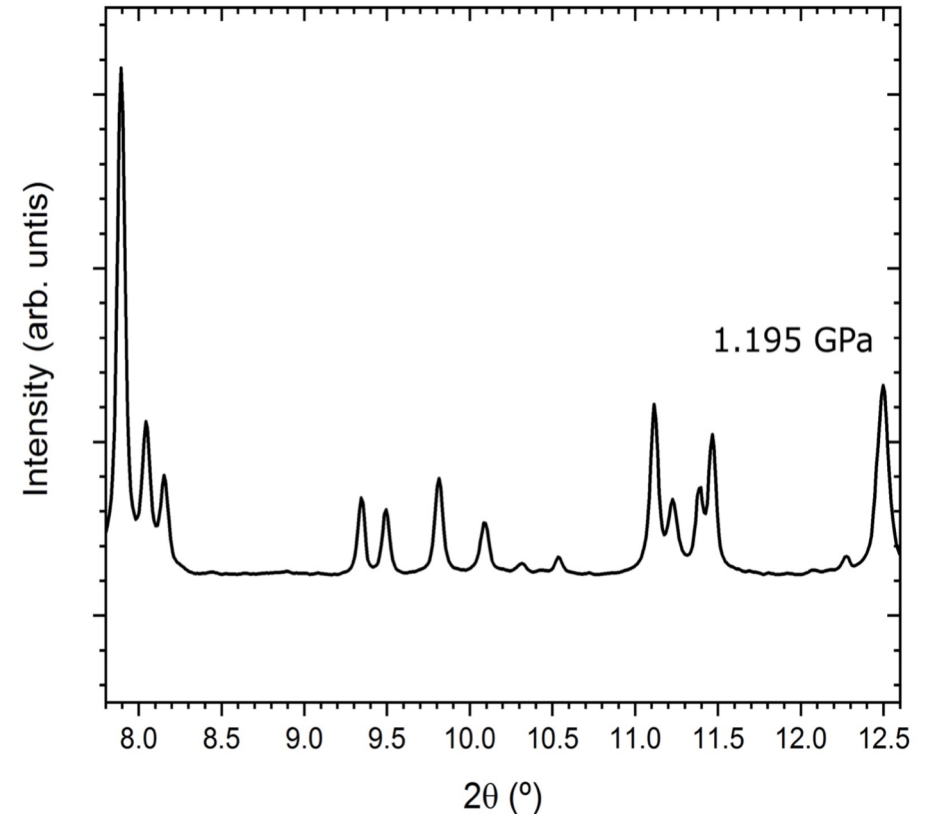
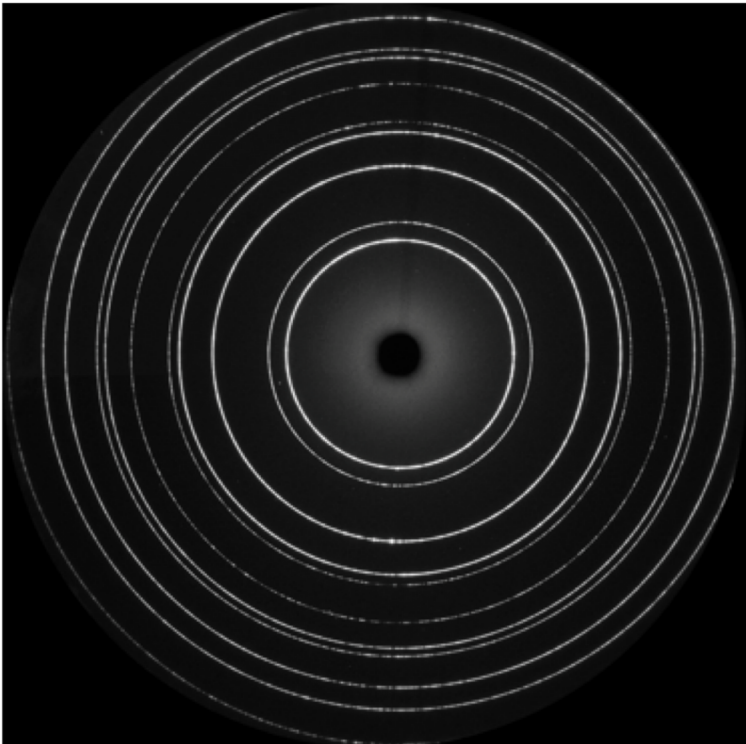
Difração de raio-X



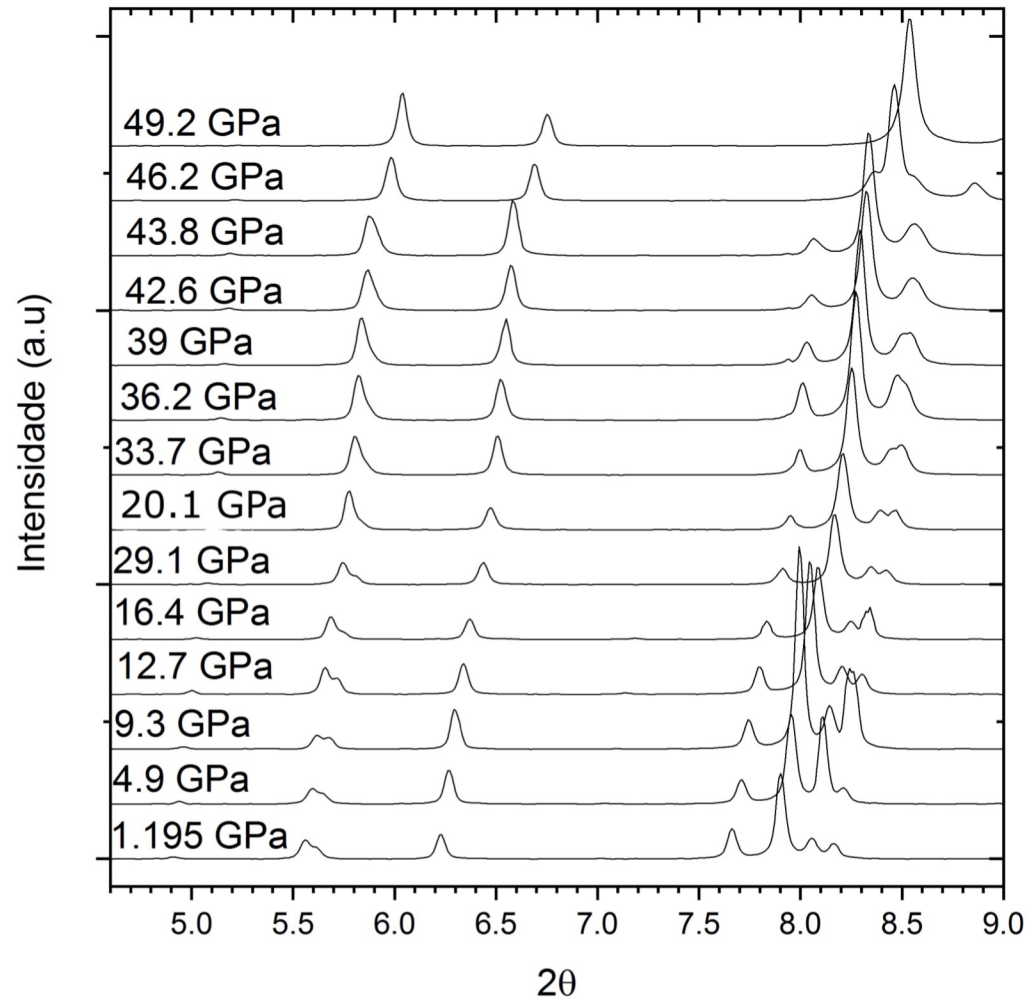
Lei de Bragg \longrightarrow $2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = n\lambda$

Dados Experimentais

- Mediu-se a difração de raio-X para o Ferrite de Térbio (TbFeO_3);
- Obteve-se um padrão de difração de Lauê, a partir do qual foi possível obter um padrão de difração em função de 2θ ;



- Recorrendo ao mesmo pó, mas a diferentes pressões, obteve-se padrões de Lauê diferentes, que, por sua vez, se traduziram no seguinte gráfico:



Para 1.195GPa...
a = 5.319Å
b = 5.591Å
c = 7.639Å

1º Objetivo (para 1.195A):



- Identificar os planos de difração...mas como?

O que sabemos?

→ Parâmetros de rede

Logo, a partir de:

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

calculámos d

calculámos
teta

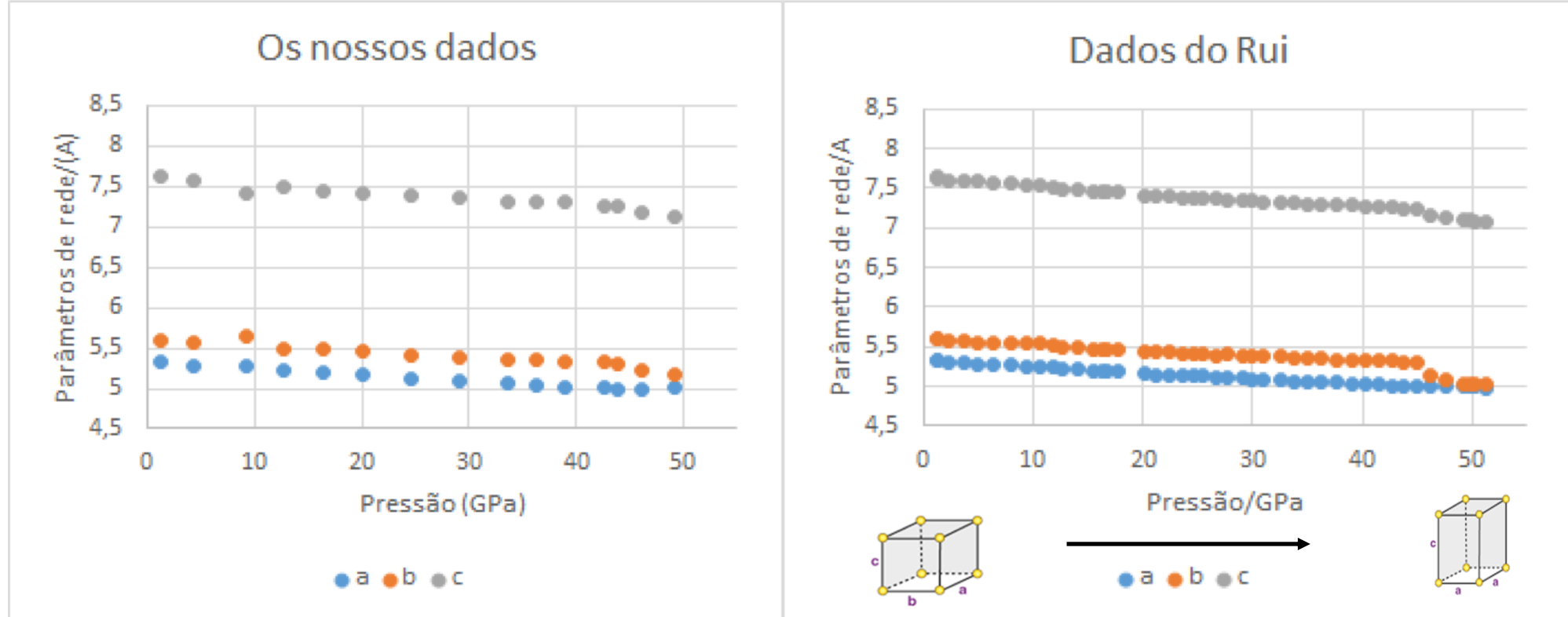
e, assim, recorrendo à Lei de Bragg

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

2º Objetivo:



Parâmetros de rede nossos VS Aluno de doutoramento

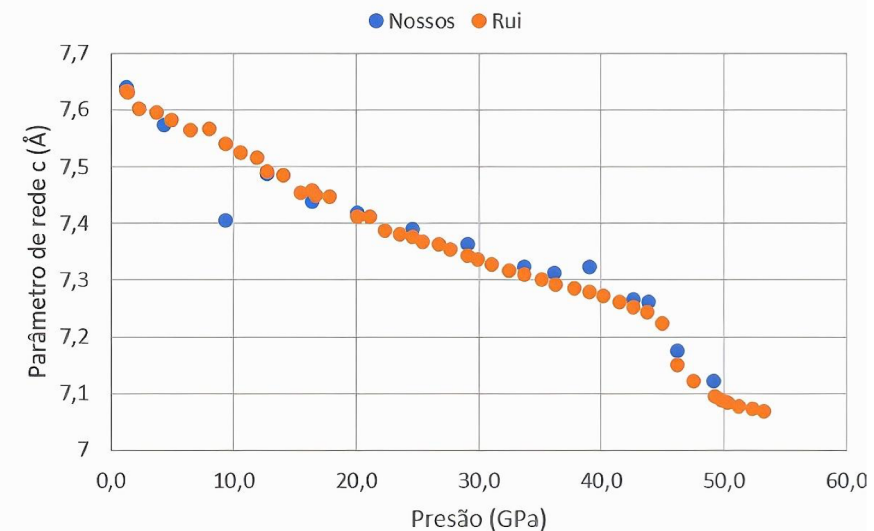
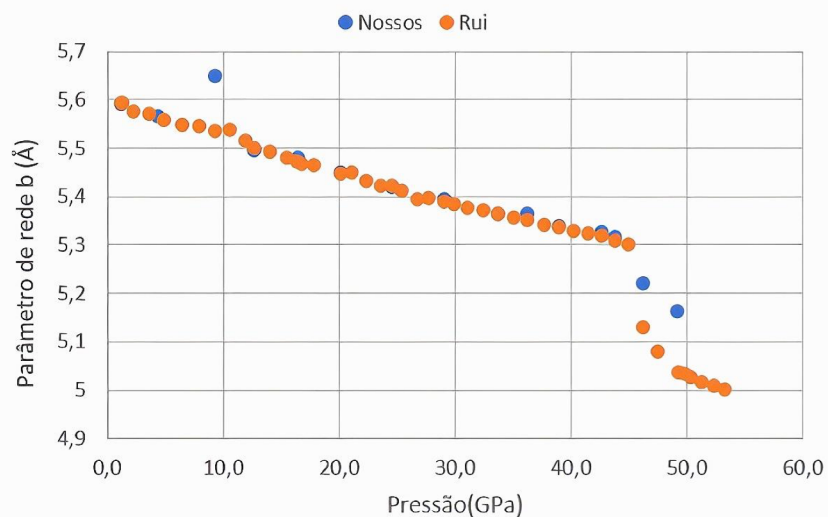
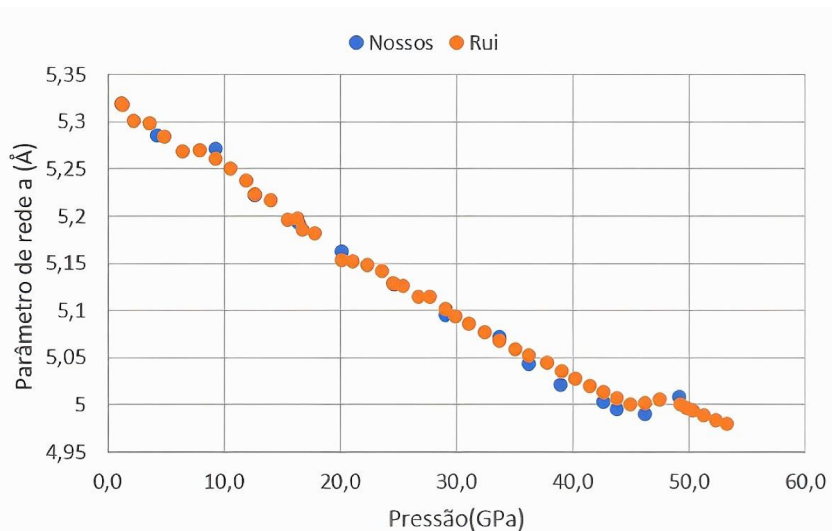


Programas utilizados:

Análise dos nossos dados: Excel

Análise do aluno de doutoramento: Software específico (PowderCell)

Relação entre pressão e os parâmetros de rede



Aqui representados, podemos ver os dados das experiências realizadas pelo nosso grupo (a azul), juntamente com os dados de um doutorado (a laranja)

Conclusões:

- Aprendemos a calcular os parâmetros de rede (distâncias entre fendas) das várias redes de difração. Aqui estão os nossos resultados:

Redes de difração	Distância entre as fendas	Erro
a	1922±14 nanómetros	3,9%
b	992±14 nanómetros	0,8%

- Os parâmetros de rede da ferrite de térbio, como pôde ser observado, foram muito semelhantes aos dados obtidos pelo aluno doutorado;
- Concluimos que ao aumentar a pressão imposta sobre a ferrite de térbio (TbFeO_3), a sua rede cristalina ia mudar de ortorrômbica para tetragonal.