

### 3

## Fundamentos teóricos para a montagem experimental

### 3.1.

#### Disposição geométrica

Dos muitos processos de monocromatização conhecidos, o princípio fundamental foi mantido para a montagem experimental a que se propõe esse trabalho [14]. Pois, como a disposição geométrica da câmara, da fonte de raios-X e das mesas transladoras é muito peculiar, faz-se necessário que o feixe emergente do sistema de monocromatização – seja este qual fosse o escolhido – siga o mesmo sentido do feixe imergente, em outras palavras, dever-se-ia utilizar uma montagem onde ocorresse no feixe incidente um pequeno desvio de tal modo que ele emergisse numa direção paralela à direção anterior. Desta forma, uma melhor montagem para o experimento seria manter os dois cristais paralelos entre si fixando um afastamento em relação à direção do feixe principal - o proveniente da fonte.

Para isso, criou-se um sistema de referência como o apresentado na Figura 1, onde  $y$  é a distância entre os planos PA e PB, paralelos às faces dos cristais A e B respectivamente, e  $x$  é a distância entre os planos NA e NB, perpendiculares às faces, respectivamente, e que passam pelo seu centro. O centro de rotação do goniômetro foi adotado como centro do sistema de referência.

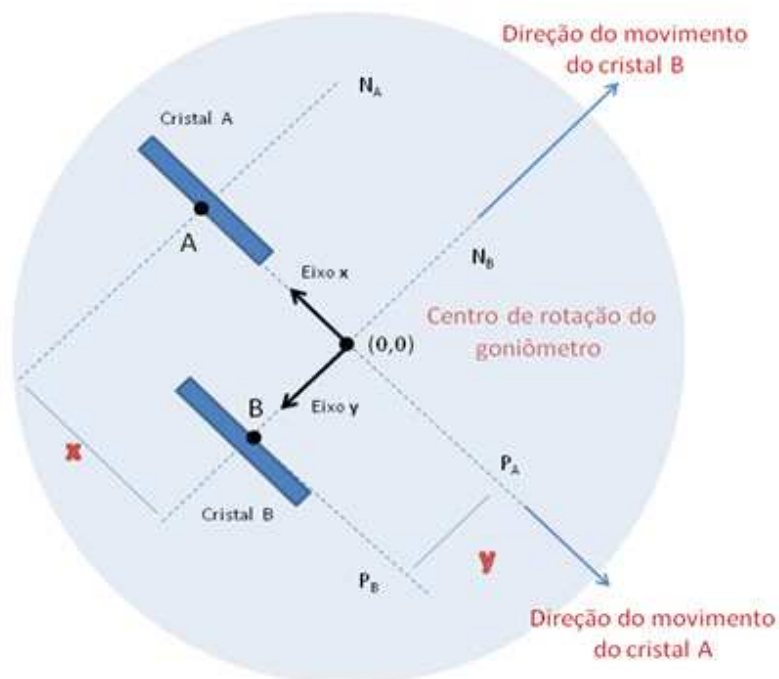


Figura 1 - Eixos de referências do experimento.

Como o cristal A está fixo ao motor que só tem movimento na direção paralela a este cristal, e o cristal B só tem movimento na direção perpendicular à face deste cristal, então se obtêm dois graus de liberdade para a posição, além da livre rotação do goniômetro. Desta forma, podemos configurar as posições  $x$ ,  $y$  e o ângulo de incidência  $\theta$  de maneira a gerar um feixe difratado sempre paralelo ao feixe incidente.

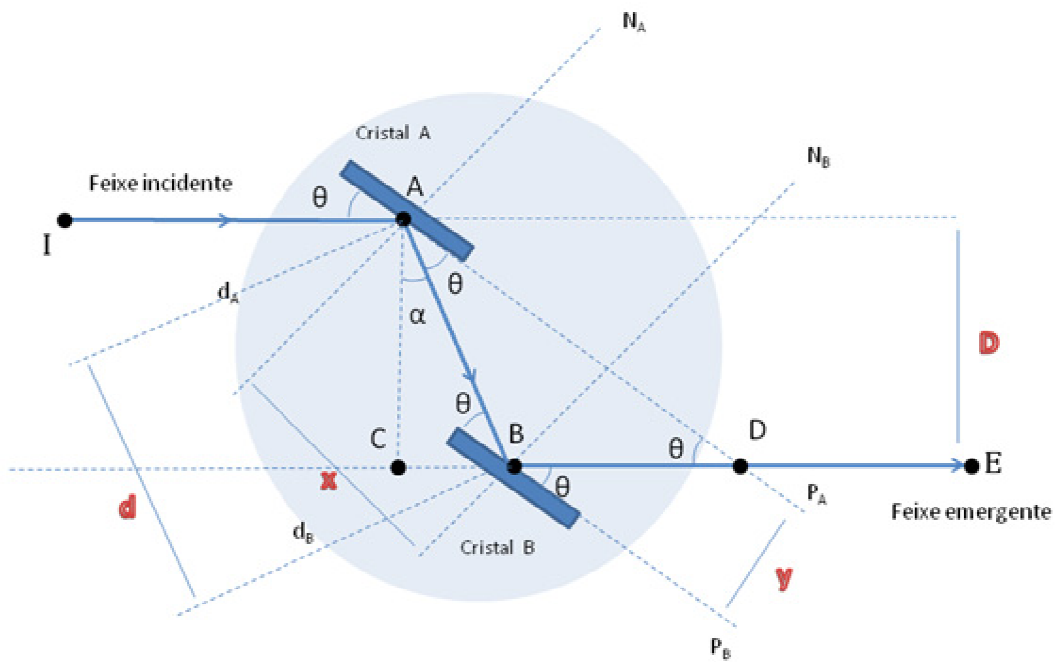


Figura 2 - Geometria da difração.

Assim, vamos chamar o segmento AB de  $d$ . Ele varia em função da posição dos cristais e da rotação, como pode ser visto na Figura 2, obedecendo à dependência geométrica descrita pelas seguintes equações abaixo:

$$\begin{cases} x = d \cos \theta \\ y = d \sin \theta \end{cases} \quad 1$$

No triângulo  $\Delta ACD$ , aplicando o teorema angular de Tales, chegaremos à relação entre  $\alpha$  e  $\theta$ , como mostra a equação (30):

$$\text{Teorema de Tales: } \alpha + \theta + \theta + 90^\circ = 180^\circ$$

$$\alpha + 2\theta = 90^\circ$$

$$\alpha = 90^\circ - 2\theta \quad 2$$

Logo,

$$\cos \alpha = \cos 90^\circ - 2\theta$$

$$\Rightarrow \cos \alpha = \sin 2\theta \quad 3$$

Já para o triângulo  $\Delta ABC$ , tem-se que:

$$D = d \cos \alpha \quad 4$$

$$d = \frac{D}{\cos \alpha} \quad 5$$

Substituindo eq. (31) em eq. (33) obtém-se:

$$d = \frac{D}{\sin 2\theta} \quad 6$$

Agora podemos expressar os valores de  $x$  e  $y$  em função de  $D$  - que corresponde ao afastamento fixo entre os feixes imergentes e emergentes ao sistema - e do ângulo de difração apenas substituindo  $d$  da equação (34) no sistema de equações (29).

$$\begin{cases} x = \frac{D \cos \theta}{\sin 2\theta} \\ y = \frac{D \sin \theta}{\sin 2\theta} \end{cases} \quad 7$$

Como a energia requerida no feixe de saída depende apenas do ângulo de incidência  $\theta$  e do parâmetro de rede  $a$  do material, então com um ângulo  $\theta$  de incidência temos como calcular as posições  $x$  e  $y$  dos cristais.

A demonstração acima prova que a montagem com o afastamento entre os feixes fixo é possível, desde que, para cada energia selecionada, se obtenha uma configuração diferente de  $x$  e  $y$  nos cristais que obedeçam as relações do sistema de equações (35).

Contudo, para os cálculos feitos até agora, desprezaram-se as dimensões reais do feixe. Alguns efeitos percebidos são explicados pela geometria do feixe. Por exemplo, a largura do sinal detectado. Essa largura está relacionada não só com a eficiência e a resolução do detector, mas também com a geometria do feixe. Apesar de colimado, o feixe ainda possui uma dispersão angular. Desde a saída do colimador até a incidência sobre a face do primeiro cristal há um pequeno desvio angular, o que provocará difrações diferentes segundo a lei de Bragg. Conforme se pode perceber na Figura 3, um feixe primário que emerge do colimador de diâmetro  $\phi_0$  e chega até o detector com um diâmetro  $\phi$ , incidindo no cristal sob um ângulo  $\theta$ , sofre uma abertura angular. Então, qualquer raio que componha o feixe e não esteja na direção AB, incidirá sobre o cristal num ângulo diferente de  $\theta$  - podendo ser maior ou menor -, de tal maneira que no limite, os maiores e menores ângulos que os raios poderão formar são  $\theta_+$  e  $\theta_-$ , conforme podemos perceber no esquema da Figura 3.

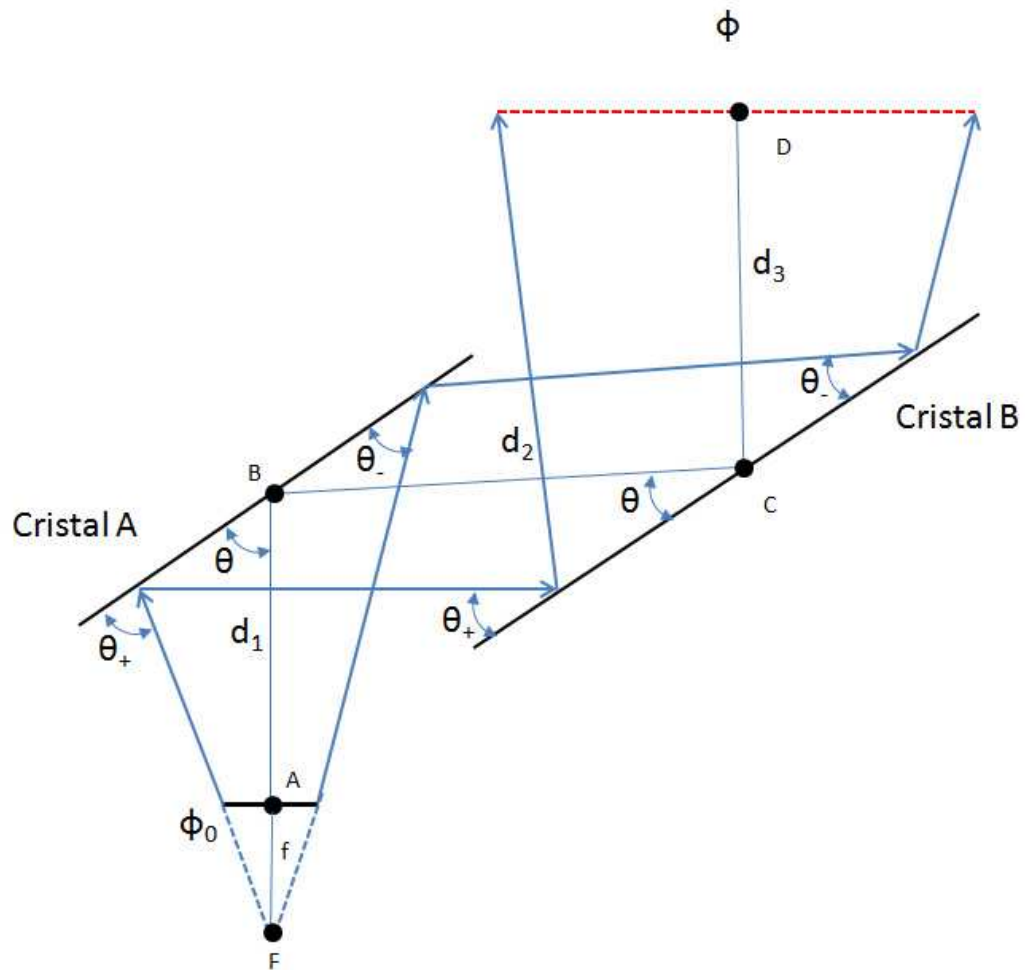


Figura 3 - Esquema da difração considerando a abertura do feixe primário.

Seja, então,  $f$  a distância entre o ponto focal do tubo de raio-X e a saída do colimador,  $d_1$  o caminho percorrido entre o colimador e o cristal A pelo feixe unidimensional de referência segundo a direção AB,  $d_2$  o caminho percorrido entre o cristal A e o cristal B pelo feixe unidimensional de referência segundo a direção BC e  $d_3$  o caminho percorrido entre o cristal B e o detector pelo feixe unidimensional de referência segundo a direção CD. Vamos agora estudar a dependência da abertura com os parâmetros variáveis  $f$ ,  $d_1$ ,  $d_2$ ,  $d_3$  e  $\theta$ .

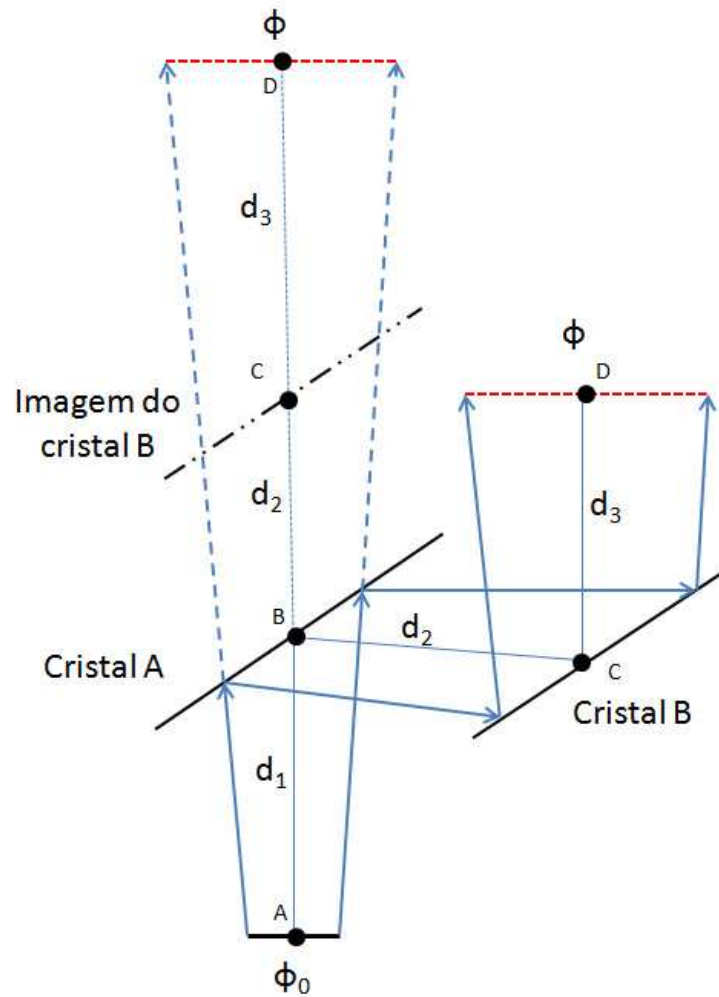


Figura 4 - Configuração geométrica da irradiação.

Fazendo uso das propriedades da ótica geométrica, já que, como foi dito nos capítulos anteriores, a difração comporta-se como uma reflexão nesse aspecto, então a configuração geométrica da irradiação pode ser redesenhada como é mostrado na Figura 4. Assim, pode-se usar uma simples semelhança de triângulos para mostrar que:

$$\frac{\phi_0}{f} = \frac{\phi}{f+d_1+d_2+d_3} \quad 8$$

Como  $d_2 = \frac{y}{\sin \theta}$ , onde  $y$  é o afastamento entre os cristais definido anteriormente na equação (29), a equação (36) poderá ser escrita como:

$$\phi = \frac{\phi_0(f+d_1+d_2+d_3)}{f} = \frac{\phi_0(f+d_1+\frac{y}{\sin \theta}+d_3)}{f} \quad 9$$

$$\Rightarrow \phi = \phi_0 + \phi_0 \frac{(d_1 + d_3)}{f} + \frac{\phi_0 y}{f \sin \theta} \quad 10$$

Deve-se notar que as medidas  $\phi_0$  e  $f$  são constantes para um mesmo colimador. Quando se varia o ângulo de incidência  $\theta$ , a medida  $(d_1 + d_3)$  é praticamente constante. Contudo, essa pequena variação ocorre ao se modificar  $x$  e  $y$  segundo a equação (29). Por isso, pode-se dizer que a abertura do feixe está mais diretamente relacionada com a posição relativa entre os cristais A e B, para uma montagem fixa e com um mesmo colimador. Essa conclusão é reforçada voltando-se para o último termo do somatório da equação (38) e percebendo que há nele duas variáveis que reforçam seus efeitos:  $y$  e  $\theta$ .