

DIFFRAZIONE DEI RAGGI X

La diffrazione mediante Raggi X è il **metodo ideale per comprendere le strutture dei materiali cristallini su scala atomica.**

L'applicazione dei raggi X allo studio dei minerali ha dato un grande impulso alla mineralogia.

Prima del loro utilizzo i mineralogisti avevano solo supposto l'ordinamento periodico dei cristalli da osservazioni sulla morfologia, la sfaldatura, le proprietà ottiche...

Dopo i primi esperimenti sulla diffrazione dei cristalli fu possibile non solo misurare le distanze tra piani molecolari, ma anche localizzare le posizioni degli atomi e quindi determinare le strutture.

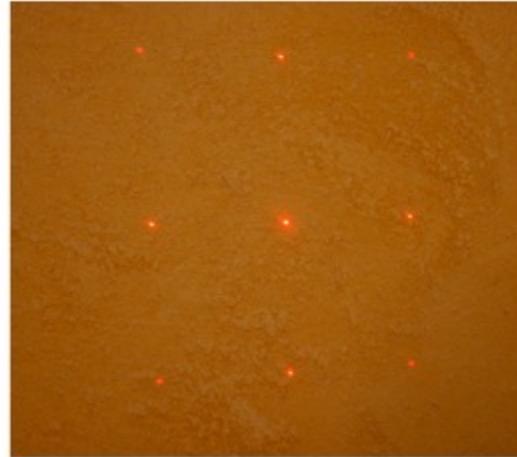
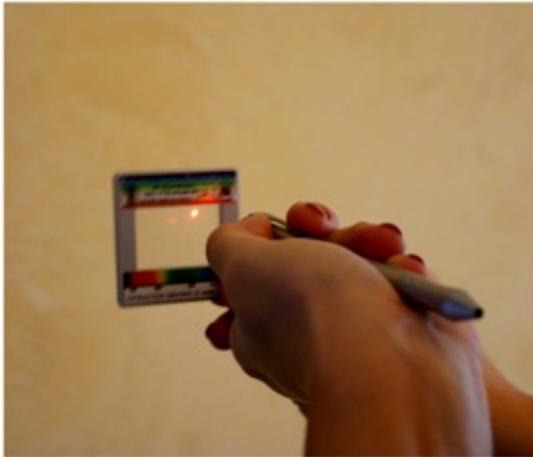
FENOMENO DELLA DIFFRAZIONE (SCATTERING)

La fisica della diffrazione di raggi X si fonda in gran parte sulla fisica della diffrazione di onde luminose da reticoli di fenditure e sulla teoria della riflessione "semplice".

La diffrazione è la **FRAMMENTAZIONE DI UN'ONDA DOVUTA ALL'INCONTRO TRA L'ONDA STESSA E UN OSTACOLO**. E' un fenomeno tipico di ogni tipologia di onda: onde sonore, onde sulla superficie dell'acqua e onde elettromagnetiche possono dare diffrazione.

FENOMENO DELLA DIFFRAZIONE (SCATTERING)
Gli effetti della diffrazione sono apprezzabili quando la lunghezza dell'onda incidente è paragonabile alle dimensioni dell'ostacolo.

Es. puntatore laser (radiazione di colore rosso con $\lambda=0.635$ micron) attraverso un reticolo bidimensionale la cui trama ha un passo di 2 micron. Si osserva diffrazione: la radiazione laser incidente si frammenta in più componenti, che danno luogo ad un'immagine detta **figura di diffrazione**



L'effetto del passaggio della radiazione laser attraverso un reticolo bidimensionale (un insieme ordinato e periodico di fessure nello spazio bidimensionale) è la creazione di un reticolo bidimensionale (un insieme ordinato e periodico di macchie nello spazio bidimensionale).

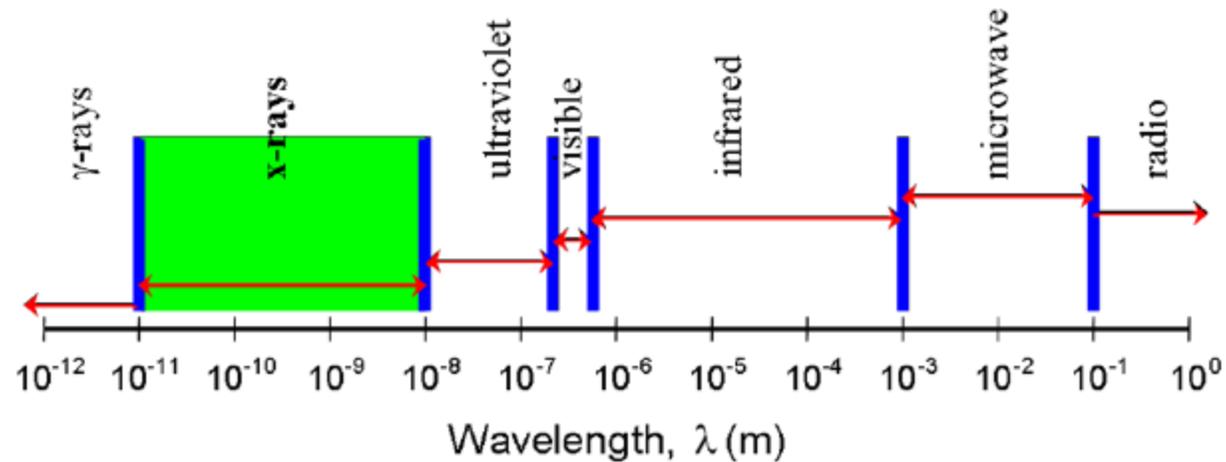
Noto il passo della figura di diffrazione si può ricostruire il passo del reticolo che l'ha generata.

I RAGGI X POSSONO DIFFRANGERE?

Ricordiamo che la radiazione X è quella porzione dello spettro elettromagnetico con lunghezze d'onda compresa tra 10 nm e 0.001 nanometri (1 picometro)

$\lambda > 0.1\text{nm}$ RAGGI X MOLLI

$\lambda < 0.1\text{nm}$ RAGGI X DURI



Qualunque tipo di onda è in grado di dare luogo a diffrazione se incontra ostacoli di dimensioni opportune, paragonabili alla sua lunghezza d'onda. Nel caso dei raggi X, gli ostacoli devono avere dimensioni atomiche, ovvero dell'ordine di

10^{-10} m.

SCOPERTA DEI RAGGI X

William Conrad Roentgen (1901) scoperta dei raggi X
(raggi incogniti)

Roentgen, bersagliando con un fascio di elettroni accelerato da un campo elettrico una lastra di metallo, scopre una radiazione con le seguenti proprietà:

- 1) ionizza i gas
- 2) impressiona le lastre fotografiche
- 3) non viene deviata dai campi elettrici
- 4) viene assorbita in modo differente dai materiali, a seconda della loro densità

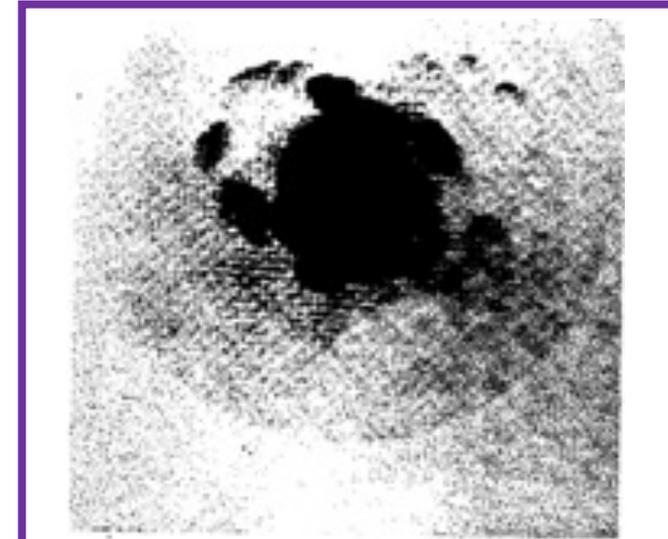


MA NON FU MAI IN GRADO DI TROVARE IL RETICOLO GIUSTO PER OSSERVARE UNA FIGURA DI DIFFRAZIONE

PRIMI ESPERIMENTI DI DIFFRAZIONE DI RAGGI X

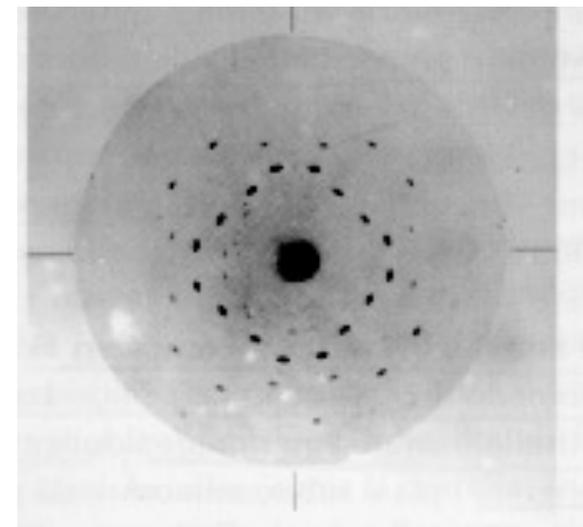
1912: Max Von Laue illumina con raggi X un cristallo di solfato di Cu idrato ottenendo una serie di macchie scure su una lastra fotografica. Era la prova che il cristallo deviava i raggi X in fasci secondo direzioni precise.

1914 : Bragg replicò l'esperimento usando cristalli di cloruro di sodio (salgemma) dandone un'interpretazione che avrebbe segnato la nascita della strutturistica chimica.



Prima figura di diffrazione di RX della storia

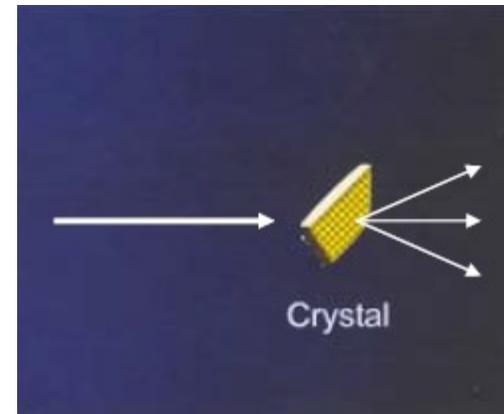
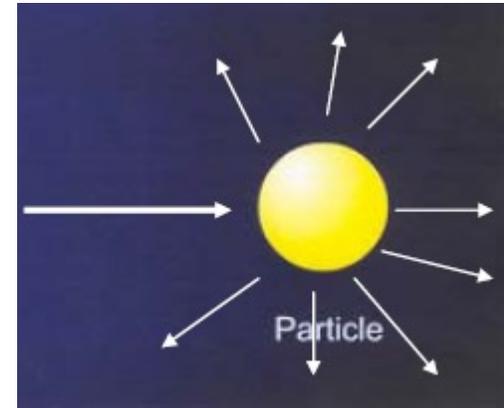
I CRISTALLI (in cui gli atomi sono distanziati tra loro di 1-2 Å) SONO L'OPPORTUNO oggetto PER PROVOCARE LA DIFFRAZIONE DEI RAGGI X . DALLE FIGURE DI DIFFRAZIONE È POSSIBILE RISALIRE AL TIPO E ALLA DISPOSIZIONE SPAZIALE DEGLI ATOMI COMPONENTI IL MATERIALE.



DIFFRAZIONE (SCATTERING) DEI RAGGI X CON LA MATERIA

Un reticolo cristallino può essere approssimato ad un reticolo di fenditure.
L'analogia tra un atomo ed una fenditura deriva dal fatto che l'atomo, come la fenditura che riceve una certa onda incidente, diventa una **sorgente secondaria di radiazione**

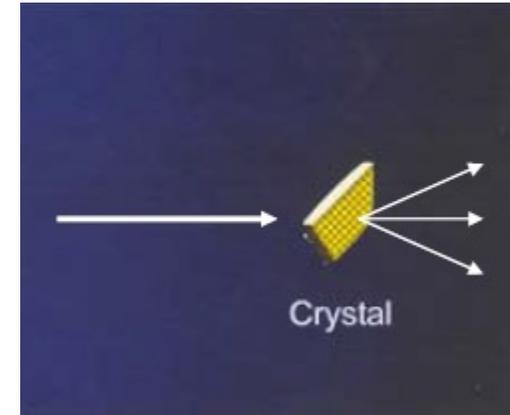
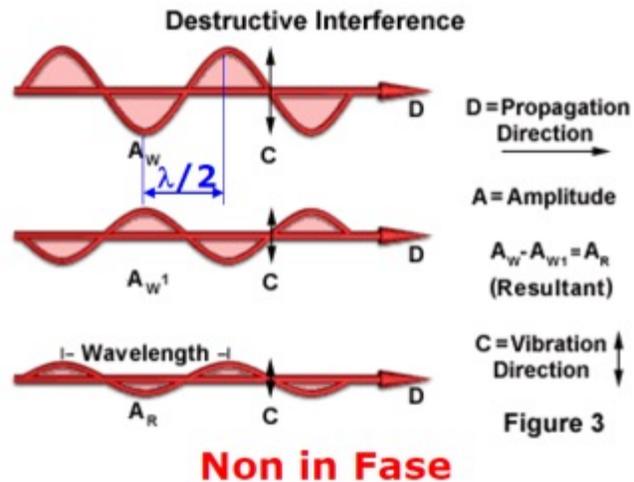
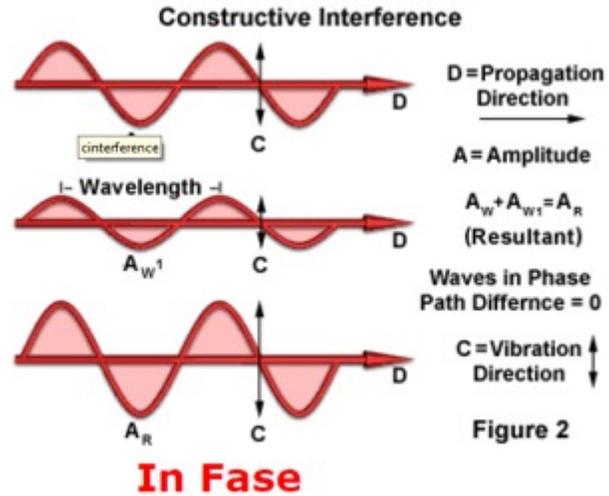
Una singola particella diffonde il fascio incidente uniformemente in tutte le direzioni



In un materiale cristallino i fasci diffusi si combinano costruttivamente in certe direzioni

SCATTERING DA UN RETICOLO CRISTALLINO

Quando la radiazione incide su un reticolo di atomi, le radiazioni emesse dai diversi atomi interagiscono tra loro dando luogo a fenomeni di **interferenza costruttiva e distruttiva**



L'**interferenza costruttiva** tra due onde in fase porta ad un **raddoppiamento dell'ampiezza dell'onda risultante**, mentre l'**interferenza distruttiva** tra due onde completamente non in fase determina un'**ampiezza finale nulla**, ovvero le due onde si estinguono

INTERPRETAZIONE QUANTITATIVA DEL FENOMENO DELLA DIFFRAZIONE: EQUAZIONE DI BRAGG

Nel metodo proposto da Bragg nel 1912 la diffrazione viene considerata semplicemente come un riflessione di raggi X da parte di una famiglia di piani reticolari.

In altri termini Bragg mise in evidenza che anche se i raggi X sono diffratti, si comportano come raggi riflessi da piani presenti nel cristallo.

Diversamente dalla riflessione della luce, i raggi X non sono riflessi continuamente" da un piano del cristallo, ma solo se si verificano particolari condizioni. Usando una certa lunghezza d'onda λ , Bragg mostrò come si ha una riflessione da una famiglia di piani paralleli solo quando sono soddisfatte determinate condizioni.

INTERPRETAZIONE QUANTITATIVA DEL FENOMENO DELLA DIFFRAZIONE: EQUAZIONE DI BRAGG

Consideriamo una famiglia di piani del reticolo; d è la **distanza interplanare**, λ la **lunghezza d'onda della radiazione incidente** e θ l'**angolo di incidenza**.

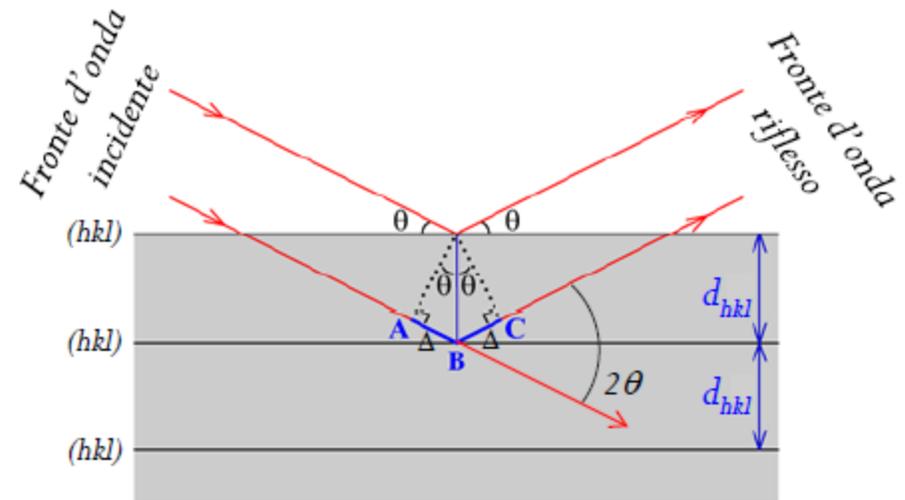
la differenza di cammino ottico deve essere uguale ad un numero intero di lunghezze d'onda.

Per piani atomici paralleli (di indici hkl) separati da spaziatura d_{hkl} :

$$(AB+BC) = (d_{hkl} \sin \theta + d_{hkl} \sin \theta) =$$

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda$$

LEGGE DI BRAGG



$\theta, 2\theta$ – Angoli di Bragg

2Δ = differenza di cammino ottico

$2\Delta = n\lambda$ – Interferenza costruttiva

Poiché la distanza tra piani d corrisponde a qualche \AA il fenomeno non si osserva con luce visibile ($\sim 5000 \text{\AA}$). E' necessario usare fotoni X.

Perché è utile la Legge di Bragg?

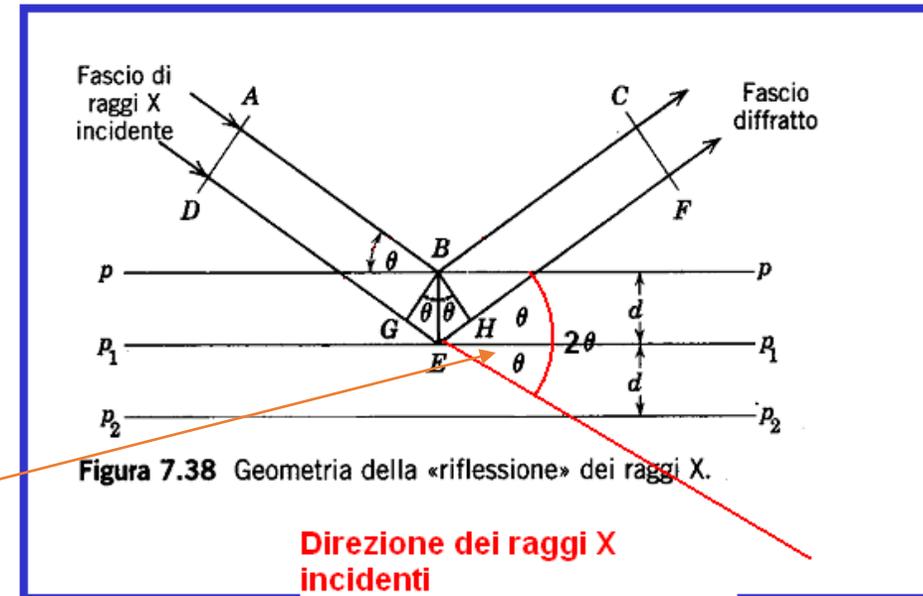
Bragg ci dice COSA

MISURARE

SPERIMENTALMENTE e
che cosa calcolare in base
alla misura sperimentale per
“saperne di più” sull’intima
struttura del cristallo:

1. Misurare l’angolo 2θ
2. Utilizzarlo per calcolare tante distanze interplanari d_1, d_2, d_3 (una per ogni effetto di diffrazione) applicando la sua legge

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



E' semplice misurare 2θ : è l'angolo tra la direzione del raggio incidente e la direzione di quello diffratto....

Da 2θ si ricava θ e lo si introduce nella eq. di Bragg per calcolare d !!! INFATTI..... →

I piani si indicano con delle “coordinate” (dette “*indici*”) intere $h\ k\ l$, in analogia con gli indici delle facce di un cristallo: di fatto sono gli indici DI MILLER dei piani di riflessione di Bragg.

Si potrebbe dimostrare che –conoscendo qualche valore di distanze interplanari d ricavate misurando alcuni 2θ relativi a qualche effetto di diffrazione, si può risalire alla misura di $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$:

I PARAMETRI DELLA CELLA ELEMENTARE!!!

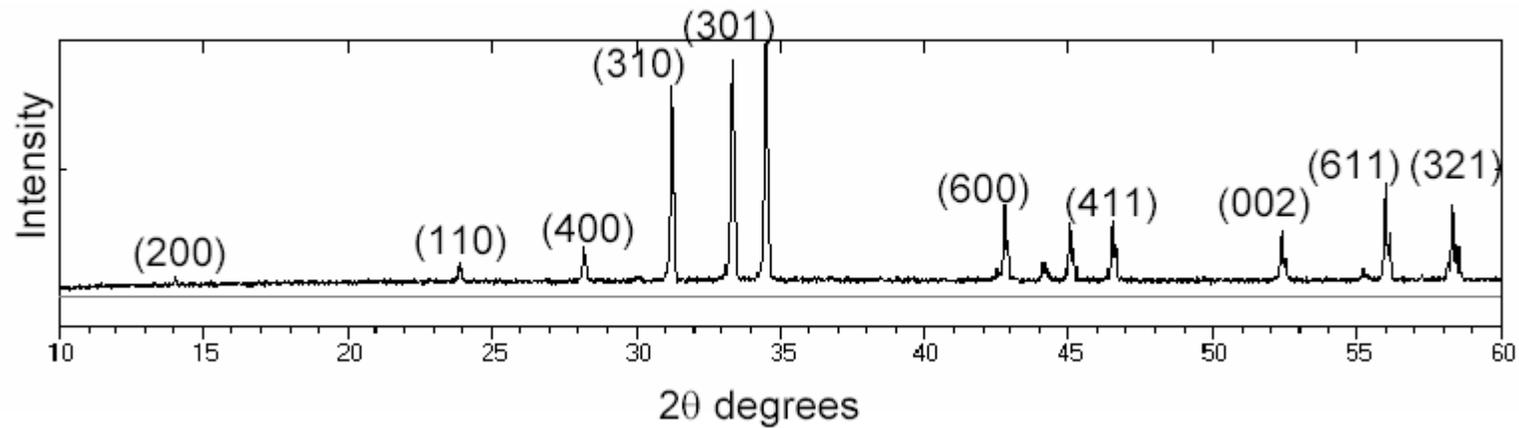
(con essi sono in grado di identificare la fase: ne sono le impronte digitali)

Per es., ecco la relazione tra (a, h, k, l) e d nel sistema cubico.....


$$d_{(hkl)}^2 = a^2 / (h^2 + k^2 + l^2)$$

Tipico diffrattogramma :

Ad ogni picco è possibile assegnare la terna di indici (di Miller) riferiti ai piani di Bragg che l'hanno prodotto.



Posizione dei picchi

La posizione del picco è determinata dall'angolo di Bragg, che a sua volta è funzione della distanza interplanare tra i piani che hanno dato origine al riflesso.

La distanza interplanare è funzione dei parametri di cella e degli indici di Miller hkl in accordo con le seguenti equazioni:

$$\text{Sistema Cubico: } \frac{1}{d^2} = \frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}$$

$$\text{Sistema Tetragonale: } \frac{1}{d^2} = \frac{h^2+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$\text{Sistema Esagonale: } \frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \frac{h^2+hk+k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$\text{Sistema Ortorombico: } \frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}$$

$$\text{Sistema Monoclino: } \frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \alpha} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2 \sin^2 \beta} + \frac{2hl \cos \beta}{ac \sin^2 \beta}$$

$$\text{Sistema Triclino: } \frac{1}{d^2} = \left[\frac{h^2}{a^2 \sin^2 \alpha} + \frac{2kl}{bc} (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha) + \frac{k^2}{b^2 \sin^2 \beta} + \frac{2hl}{ac} (\cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta) + \frac{h^2}{a^2 \sin^2 \gamma} + \frac{2hk}{ac} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) + (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma) \right]$$

TECNICHE SPERIMENTALI DI DIFFRAZIONE DI RAGGI X

POLVERI



Analisi delle posizioni dei picchi.
Determinazione del gruppo spaziale e
delle dimensioni e forma della cella.
Riconoscimento della fase cristallina

CRISTALLO SINGOLO

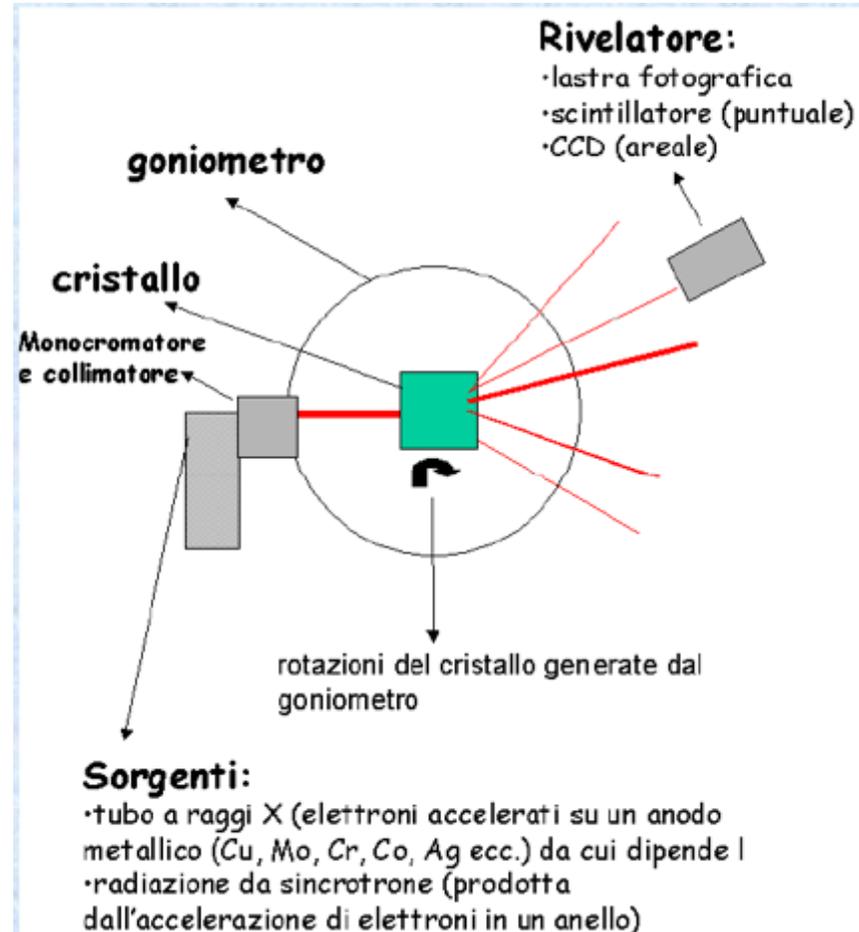


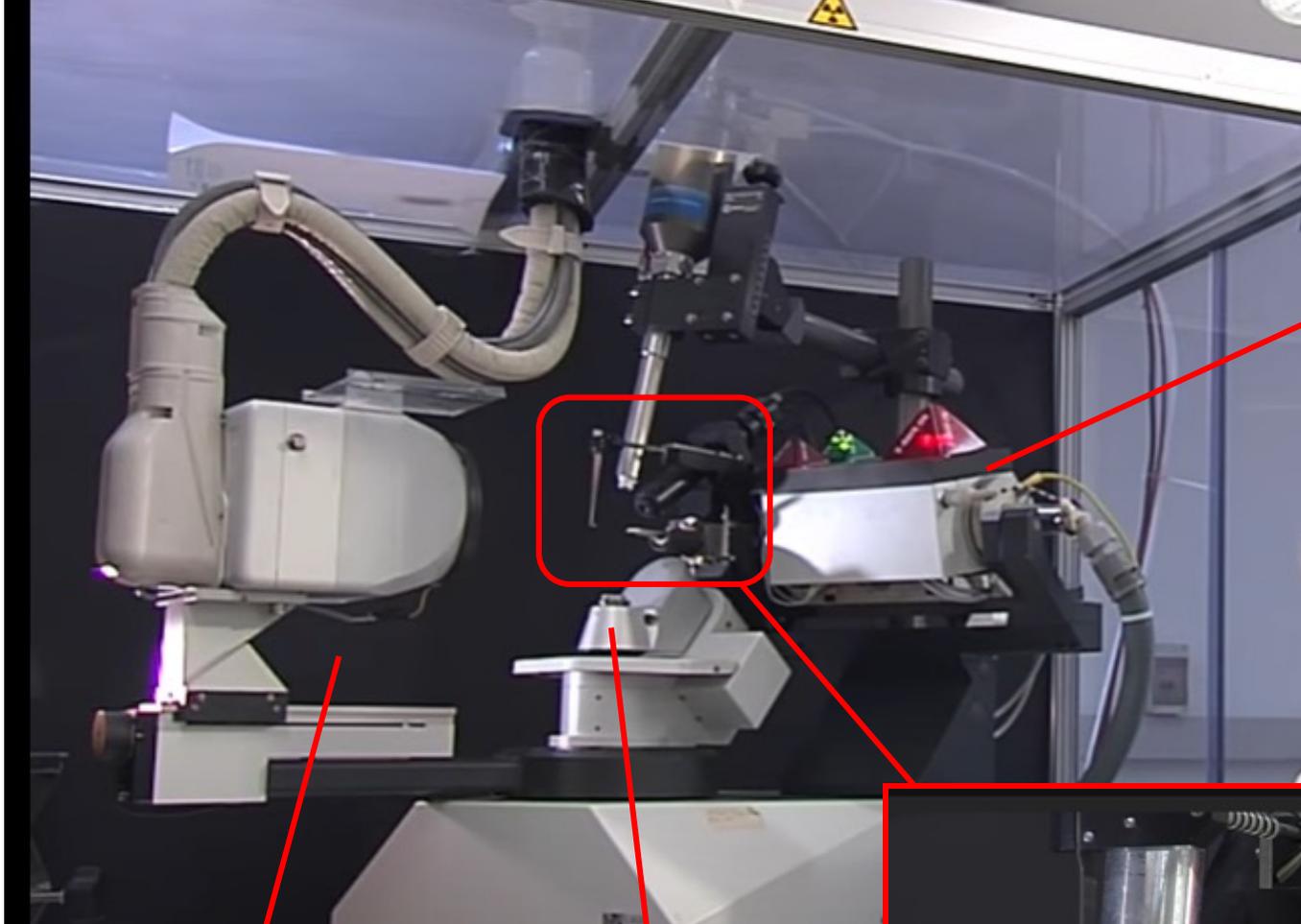
Riconoscimento della fase cristallina
(posizione dei picchi)
Analisi delle intensità dei picchi.
Risoluzione della struttura e
raffinamento strutturale :
determinazione della struttura dei
cristalli (posizione degli atomi)

DIFFRATTOMETRO A RAGGI X A CRISTALLO SINGOLO

Il diffrattometro è composto da

- Una sorgente di raggi X che fornisce la radiazione, la quale viene monocromatizzata e collimata attraverso una fenditura
- un goniometro atto a posizionare cristallo e rivelatore in condizioni particolari che consentano la diffrazione
- un rivelatore di radiazione X che consente la misurazione delle intensità diffratte.





SORGENTE

COLLIMATORE

RIVELATORE

GONIOMETRO



SORGENTI DI RADIAZIONE X

Generazione di raggi X :quando elettroni ad alta velocità, quindi con elevata energia cinetica E_{cin} subiscono un'improvvisa decelerazione per urto contro un bersaglio materiale, una parte dell'energia cinetica viene convertita in radiazione elettromagnetica, con lunghezza d'onda distribuita in un certo intervallo (radiazione bianca o di frenamento) , il cui limite inferiore corrisponde alla conversione completa dell'energia cinetica degli elettroni :

$$hc/\lambda_{\text{min}} = E_{\text{cin}}$$

SORGENTI DI RADIAZIONE X

I raggi X sono generalmente prodotti usando due metodi:

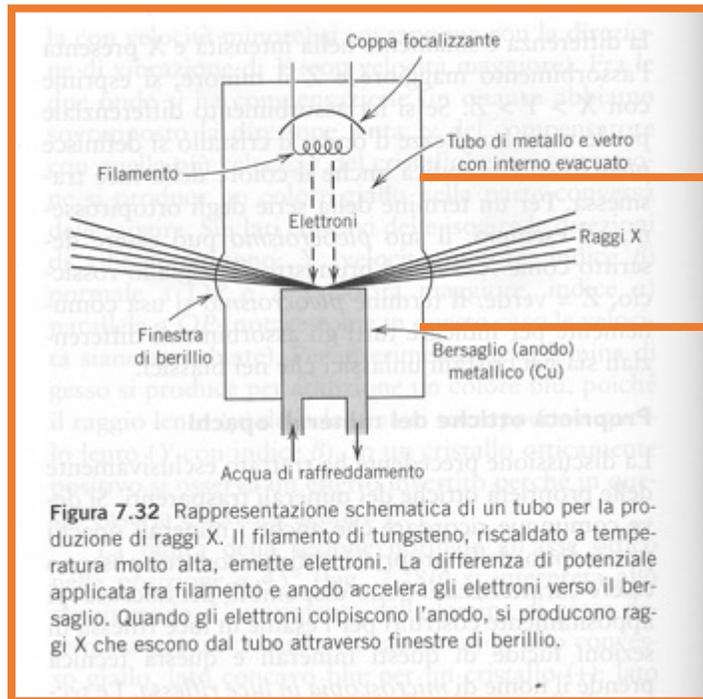
Tubo a raggi X (*tubo di Coolidge*)

Rappresenta la più diffusa e semplice sorgente di raggi X per laboratori e per questa ragione sono definiti anche sorgenti convenzionali

Luce di sincrotrone

Sorgenti estremamente brillanti (alto flussi di fotoni X) hanno costi elevati sia di costruzione che di mantenimento, pertanto non è possibile avere una sorgente di questo tipo in ogni laboratorio. Questo tipo di sorgente è anche chiamata sorgente non-convenzionale.

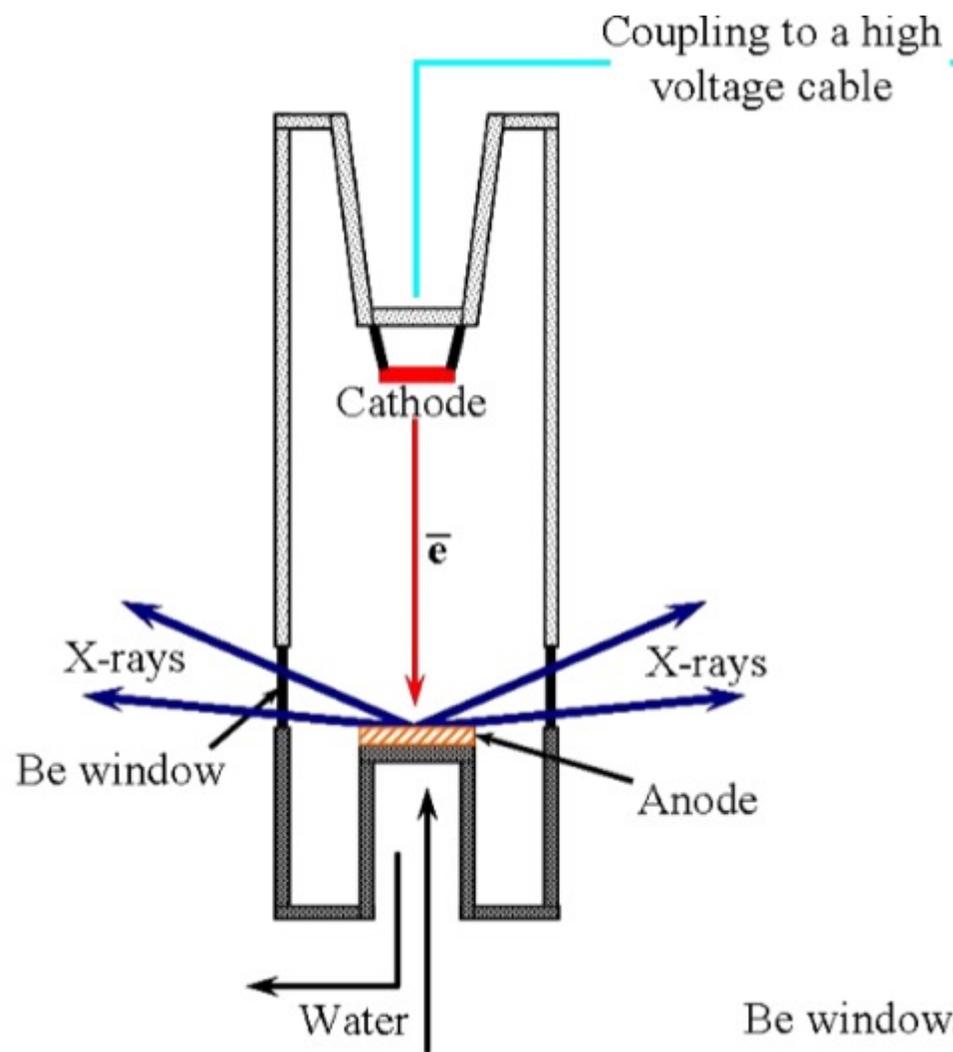
Il tubo di Coolidge accelera (grazie un elevato campo elettrico) gli elettroni prodotti per riscaldamento di un filamento di tungsteno (catodo) facendoli cozzare ad alta velocità su un disco di metallo detto “*anticatodo*” (o “*anodo*”).



Forte
differenza
di
potenziale
($V = 60\text{kV}$)

Il tubo di Coolidge è sostanzialmente una valvola di vetro e metallo ad alto vuoto (10^{-6} mmHg) in cui l'emissione degli elettroni avviene per effetto termoionico ed è regolata dall'intensità di corrente i che percorre il filamento di tungsteno.

Il rendimento in elettroni prodotti per effetto termoionico è tanto maggiore quanto maggiore è la temperatura, per cui si utilizza il tungsteno che ha un punto di fusione elevato.

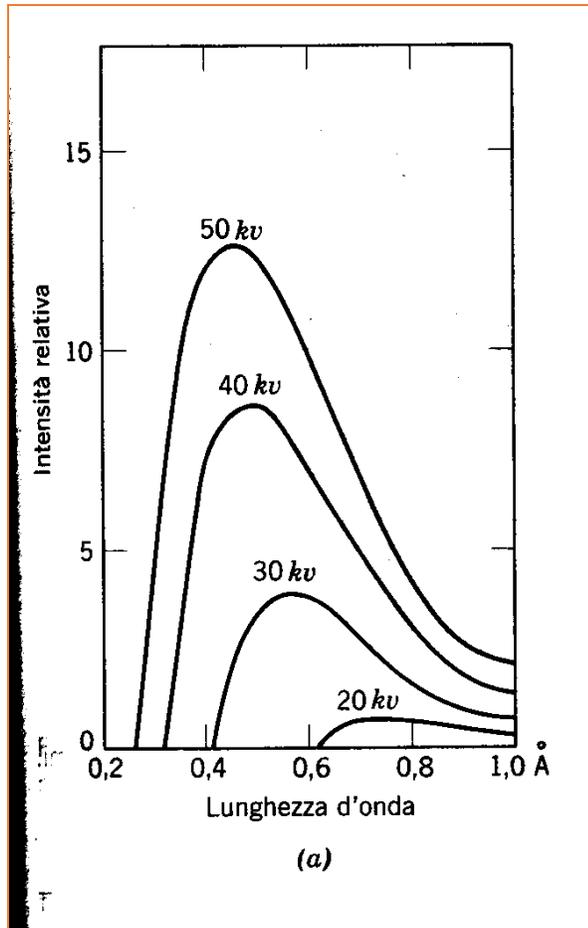


La maggior parte dell'energia degli Elettroni viene dissipata in calore (il rendimento in radiazione è inferiore all'1%) che viene sottratto all'anticatodo mediante un circuito di raffreddamento ad acqua.

Senza questo accorgimento il tubo andrebbe incontro rapidamente a danneggiamenti irreversibili.

In ogni caso un tubo di Coolidge ha una vita limitata a qualche migliaio di ore nelle migliori condizioni di impiego.

DISTRIBUZIONE DELL'INTENSITA' DELLA RADIAZIONE BIANCA PRODOTTA DAL TUBO DI COOLIDGE



- ❑ All'aumentare della tensione applicata al tubo aumenta l'energia totale della radiazione (gli elettroni diventano più energetici)
- ❑ Non esiste un limite superiore per le lunghezze d'onda (un elettrone può perdere energia attraverso infiniti urti, anche se si tratta di un evento poco probabile)
- ❑ Il massimo della distribuzione (corrispondente al meccanismo di frenamento degli elettroni più probabile) si sposta verso lunghezze d'onda più basse all'aumentare di V

L'energia cinetica degli elettroni può essere più elevata dell'energia di legame degli elettroni dei livelli più interni degli atomi costituenti l'anticatodo. Se ciò avviene, uno o più elettroni possono essere espulsi da uno strato interno. L'espulsione è seguita da un processo di riassetamento che comporta l'emissione di radiazione secondaria (**fluorescenza**) consistente in uno spettro a righe caratteristico dell'anticatodo che si sovrappone allo spettro continuo.

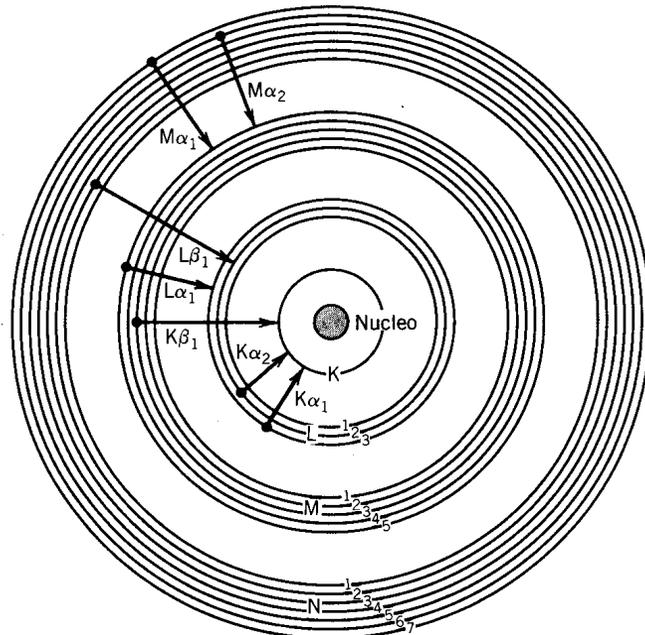
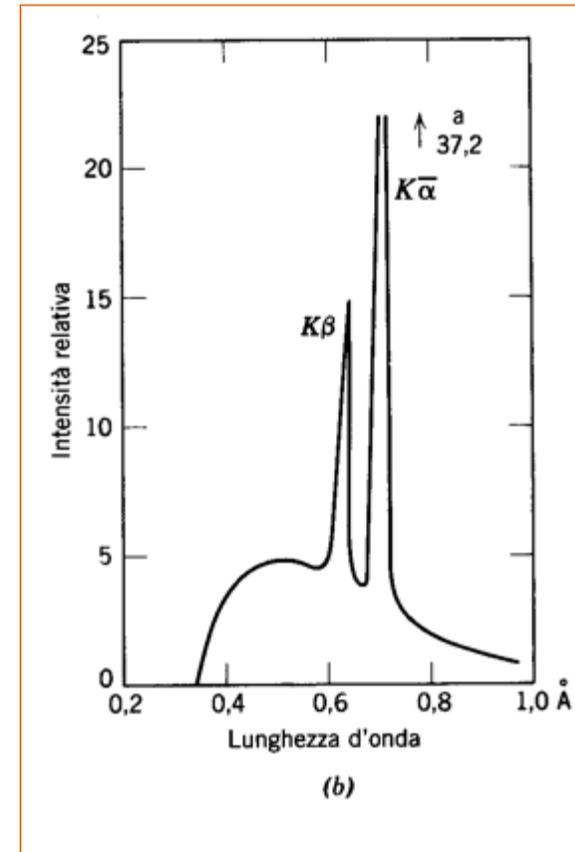
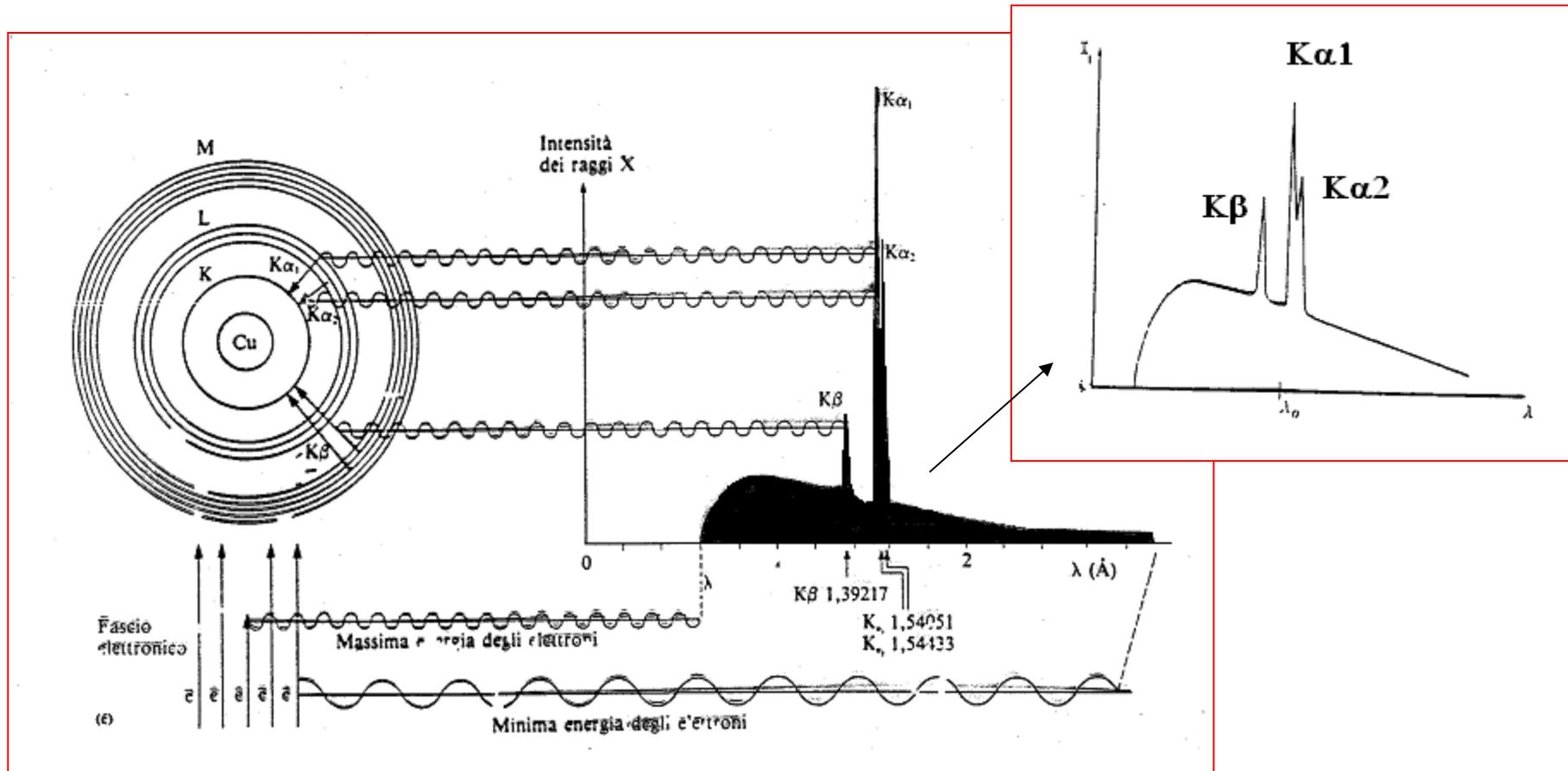


Figura 7.54 Schema della produzione degli spettri caratteristici K e L come risultato della ricaduta di elettroni da livelli energetici superiori a livelli inferiori nella struttura di un atomo. Le linee di emissione X sono indicate con una lettera maiuscola che rappresenta il livello in cui viene riempita una vacanza. La lettera greca è α se l'elettrone che riempie la vacanza si origina nel livello superiore successivo, β se l'elettrone proviene da due livelli più in alto e così via. I numeri indicano sottolivelli specifici (1 per s, 2 per p) per l'origine degli elettroni che riempiono la vacanza.



Lo spettro dei RX prodotti dal tubo di Coolidge:



La finestra che viene utilizzata in diffrazione comprende i picchi $K\alpha_1$ e $K\alpha_2$.

FILTRAGGIO DEI RX

Mediante opportune tecniche di filtraggio, riusciremo ad isolare la K_{α} dello spettro ed avere quindi una lunghezza d'onda "monocromatica"

Ci sono 2 metodi di filtraggio:

- 1) mediante una lamina
- 2) mediante un cristallo monocromatore

In entrambi i casi, il filtraggio permette di eliminare soltanto la K_{α} , mentre $K_{\alpha 1}$ e $K_{\alpha 2}$ rimarranno. Si farà allora una media tra le lunghezze d'onda λ corrispondenti.

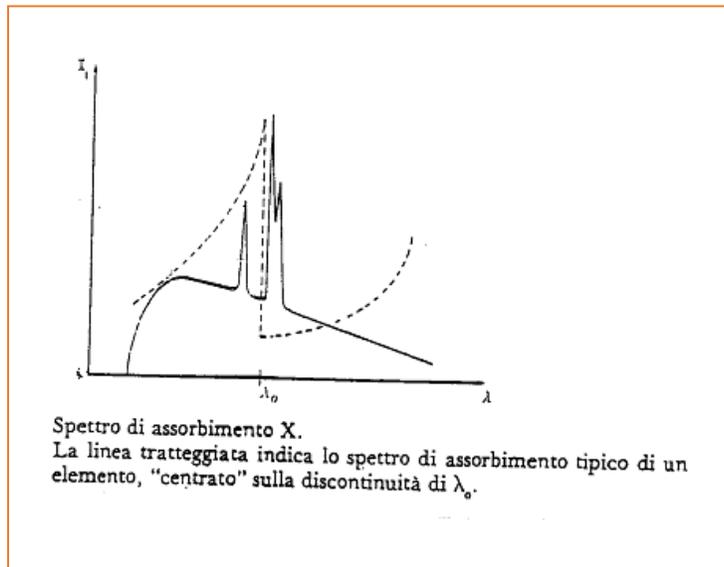
FILTRAGGIO DEI RX

1) Lamina

La scelta del materiale della lamina si fonda su questo principio:

“ogni elemento - che colpito dai RX emette una radiazione caratteristica $K\alpha$, se usato come anticatodo- ha un forte potere di assorbimento per le radiazioni di lunghezza d'onda appena inferiore a $K\alpha_1$ (comprese tra $K\alpha_1$ e $K\beta$). Tale ‘spigolo di assorbimento’ per un elemento cade circa sulla $K\beta$ dell’ elemento successivo del sistema periodico”.

Ad es: il Ni (numero atomico =28) assorbe il 98% della $K\beta$ del Cu (numero atomico = 29).



FILTRAGGIO DEI RX

2) Monocromatori a cristallo

Si usa in questi casi un cristallo che assorba poco (quindi con numero atomico basso; es: il C, quindi un cristallo di grafite) che, opportunamente orientato, sfruttando la legge di Bragg, diffrange una radiazione avente una sola lunghezza d'onda.

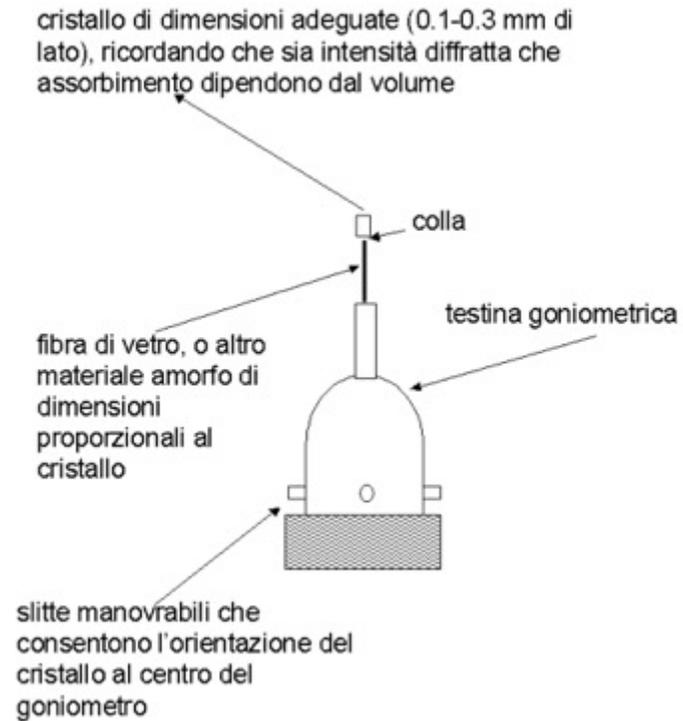
Essendo $2d\sin(\theta) = \lambda$

sapendo il d del cristallo, orientando secondo un θ opportuno il cristallo rispetto ai raggi che escono dal tubo, si otterrà un effetto di diffrazione in corrispondenza di una sola λ , che si sceglie opportunamente a seconda dell'anticatodo usato.

Per es. se mi interessa $\lambda=0.7107$ (K α del molibdeno), e $d = 2.4 \text{ \AA}$, dovrò orientare il cristallo secondo un angolo $2\theta \approx 16^\circ$ rispetto alla direzione dei raggi che escono dal tubo

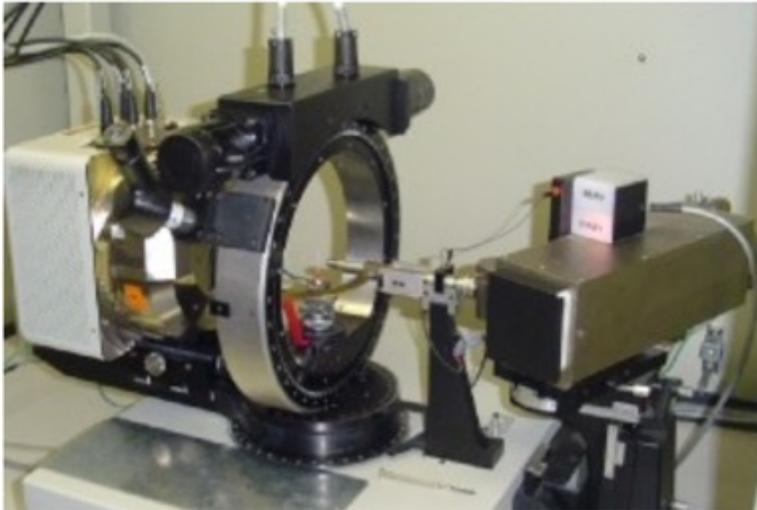
PREPARAZIONE DEL CAMPIONE

La radiazione X, opportunamente filtrata e collimata, raggiunge il campione che viene fissato su una testina goniometrica, che ha lo scopo di orientare il cristallo in modo da portare ogni famiglia di piani di diffrazione in posizione di Bragg.

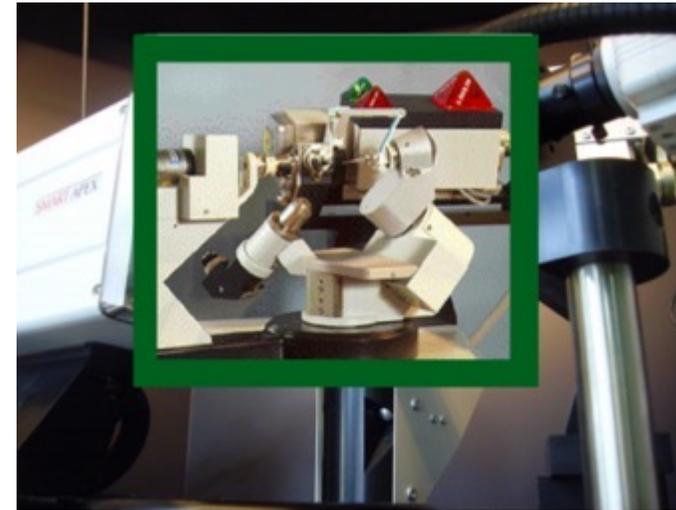


GONIOMETRO

Il goniometro è lo strumento atto ad orientare il cristallo in modo da portare ogni famiglia di piani di diffrazione in posizione di Bragg. Lo scopo è quello di ottenere l'intensità di un numero elevato di riflessi per potere effettuare il raffinamento della struttura.

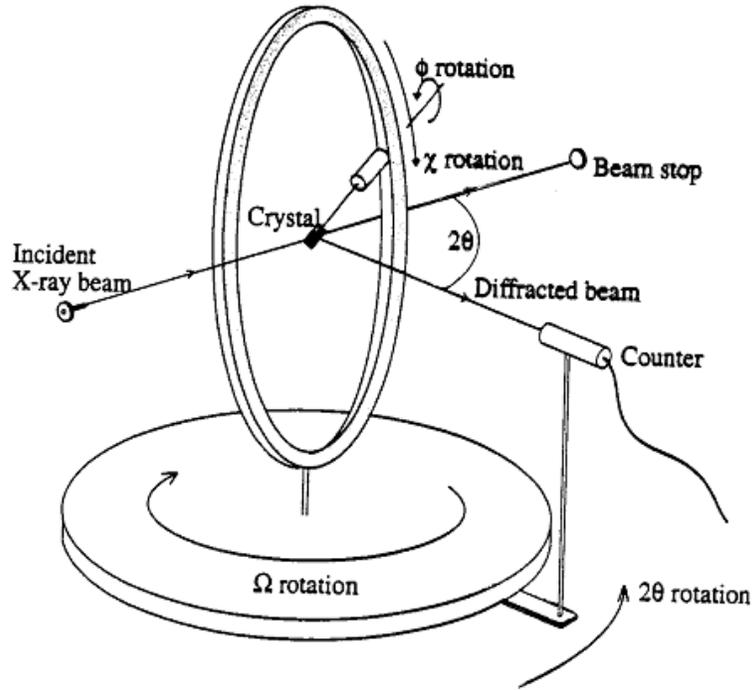


GEOMETRIA EULERIANA



GEOMETRIA K

IL DIFFRATTOMETRO a GEOMETRIA EULERIANA



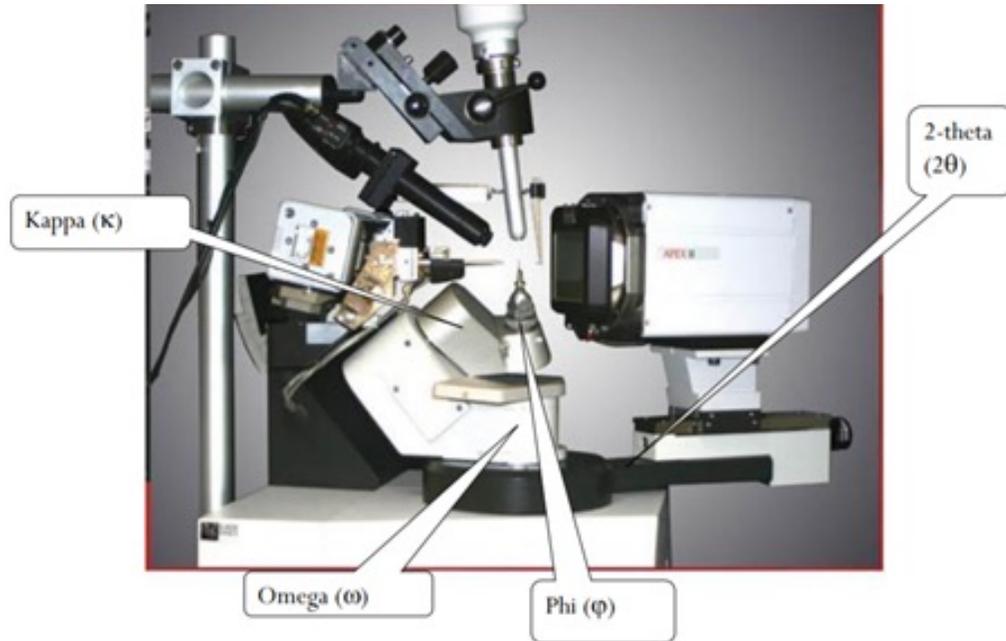
ω - Rotazione attorno all'asse verticale del supporto

2θ – rotazione del braccio del detector

ϕ – rotazione attorno all'asse della testina

χ - rotazione del supporto

IL DIFFRATTOMETRO a GEOMETRIA K



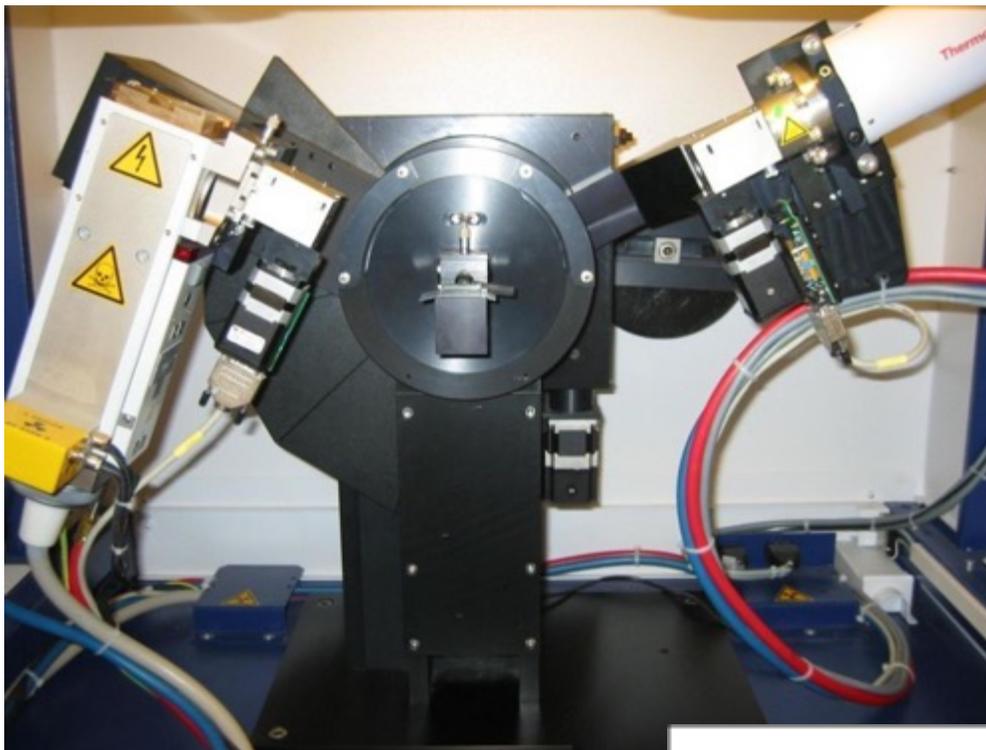
φ – rotazione attorno all'asse della testina

ω - Rotazione perpendicolare al raggio incidente

κ - rotazione lungo un asse inclinato di 50° rispetto a ω

2θ – rotazione del braccio del detector

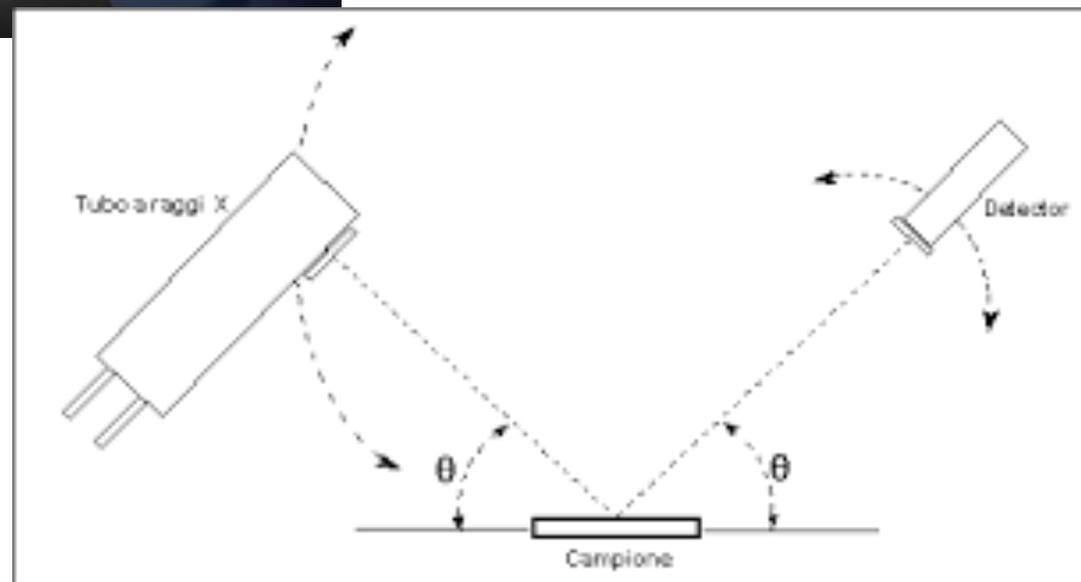
DIFFRATTOMETRO A RAGGI X PER POLVERI



I costituenti di un diffrattometro per polveri sono sostanzialmente quelli di un diffrattometro a cristallo singolo :

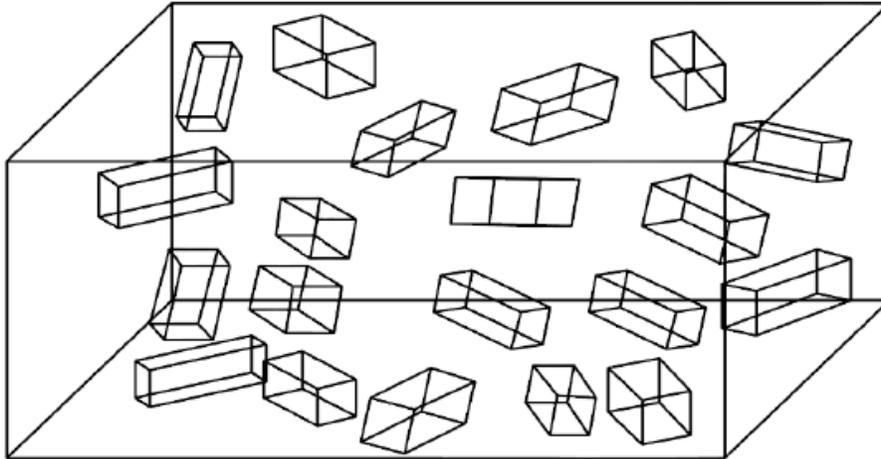
diffattometro è composto da

- Sorgente di raggi X (tubo di Coolidge)
- Goniometro portacampione
- Rivelatore X



CAMPIONE : POLVERI

ORIGINE DI UN PATTERN DI DIFFRAZIONE DA POLVERI



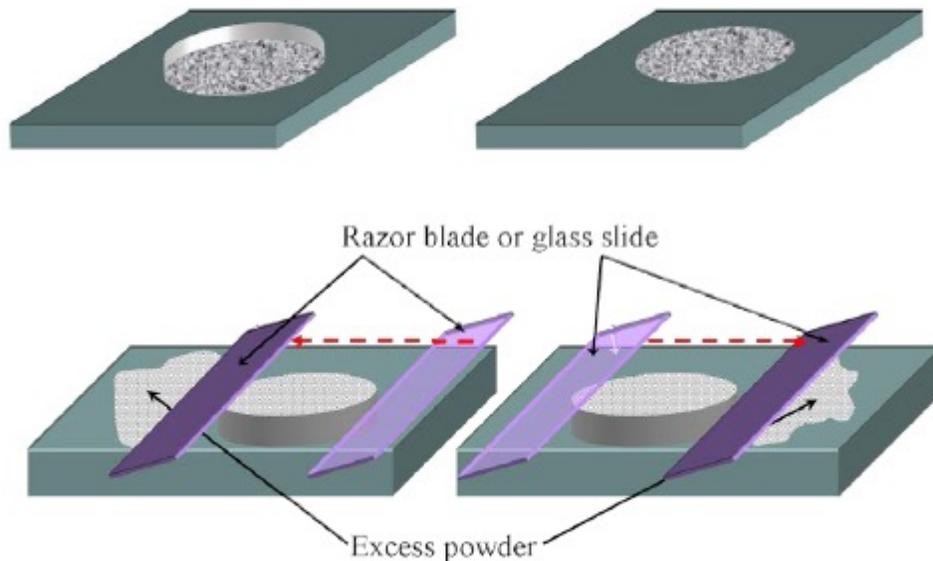
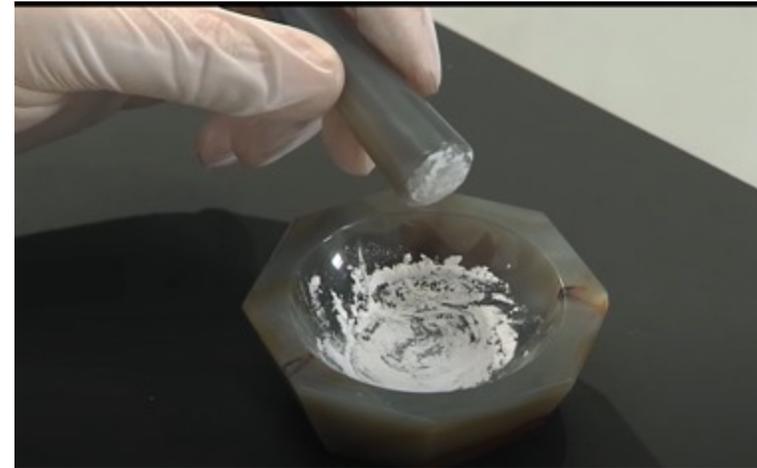
Una polvere può essere considerata un materiale policristallino, costituito da cristalliti (piccoli cristalli di dimensioni di pochi μm), che sono disposti in modo uniforme secondo tutte le possibili orientazioni

Associato ad una polvere cristallina vi è quindi un gran numero di reticoli reciproci, tutti identici (essendo la radiazione monocromatica e i cristalliti della stessa natura) ma STATISTICAMENTE ORIENTATI come i granuli della polvere cristallina.

CAMPIONE : POLVERI

PREPARAZIONE DEL CAMPIONE

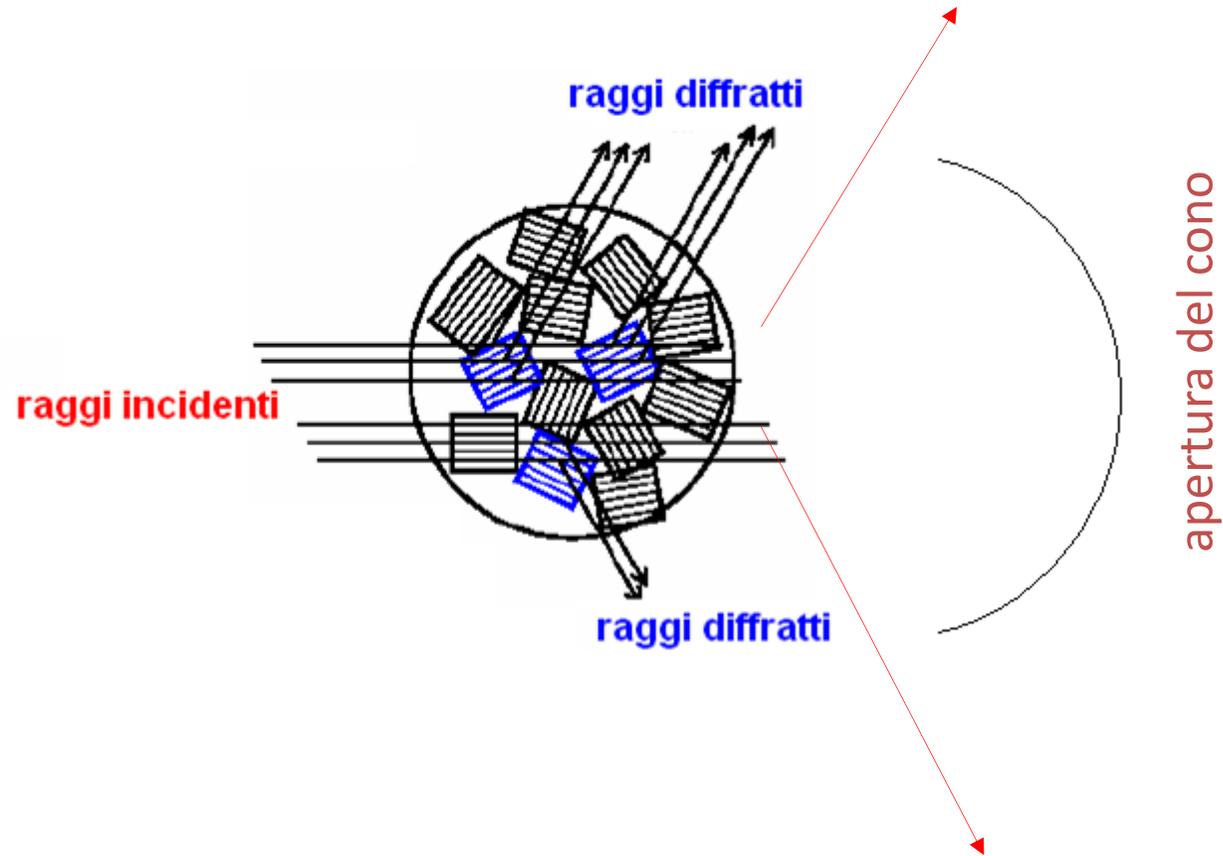
Molti fattori influenzano la qualità di uno spettro in diffrazione e la qualità del campione utilizzato è uno di questi. Il “vero” pattern di diffrazione di una sostanza può essere solo ottenuto da un campione che contenga un numero infinito di cristalliti equiorientati



L'approccio più utilizzato per aumentare il numero dei cristalliti di un campione è macinarlo meccanicamente con l'ausilio di un pestello e un mortaio. Il campione da esaminare viene macinato il più finemente possibile per garantire un orientamento casuale dei granuli cristallini rispetto al fascio dei raggi X.

CAMPIONE : POLVERI

ORIGINE DI UN PATTERN DI DIFFRAZIONE DA POLVERI



Nel caso di cristalliti con gli stessi piani in posizione di Bragg (blu in figura), i piani formano lo stesso angolo rispetto ai raggi diffratti

CAMPIONE : POLVERI

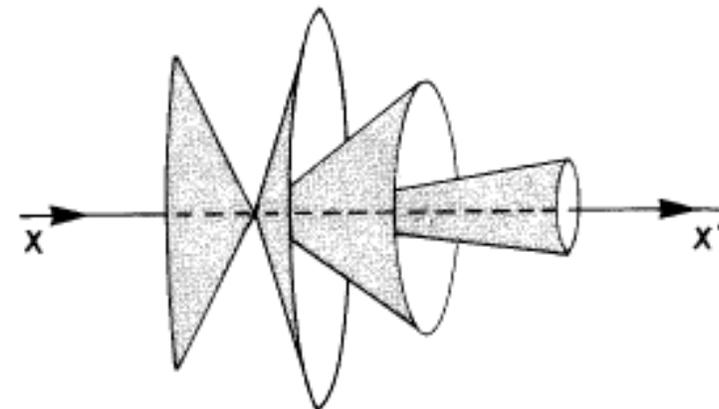
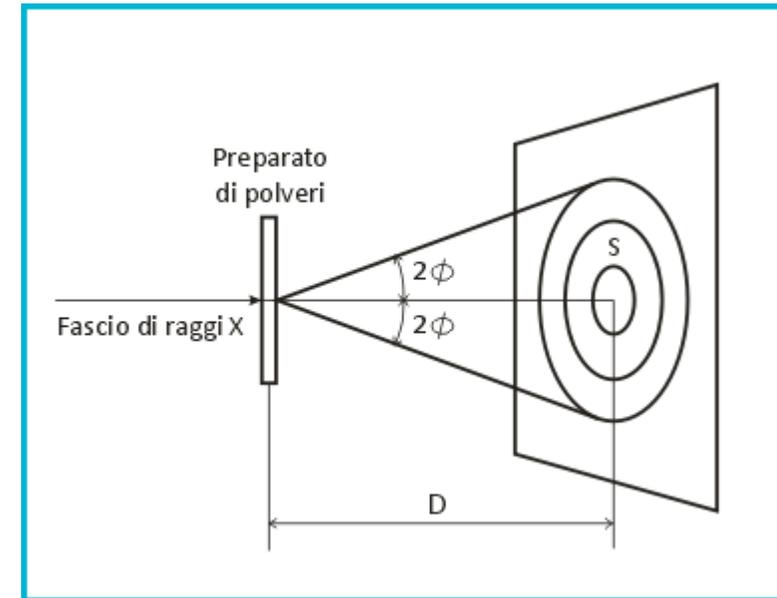
ORIGINE DI UN PATTERN DI DIFFRAZIONE DA POLVERI

La disposizione casuale dei granuli permette di avere molti cristalliti la cui orientazione è tale da possedere l'angolo θ appropriato rispetto al fascio incidente tale da soddisfare la legge di Bragg:

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

Questo si verifica, nelle tre dimensioni, per ciascuna famiglia di piani che soddisfi l'equazione di Bragg .

Unendo ciascun punto di queste circonferenze col centro della sfera di riflessione si determinano serie di CONI coassiali con la direzione dei raggi incidente e aventi angoli al vertice 4θ compresi tra 0 e 360° .



CAMPIONE : POLVERI

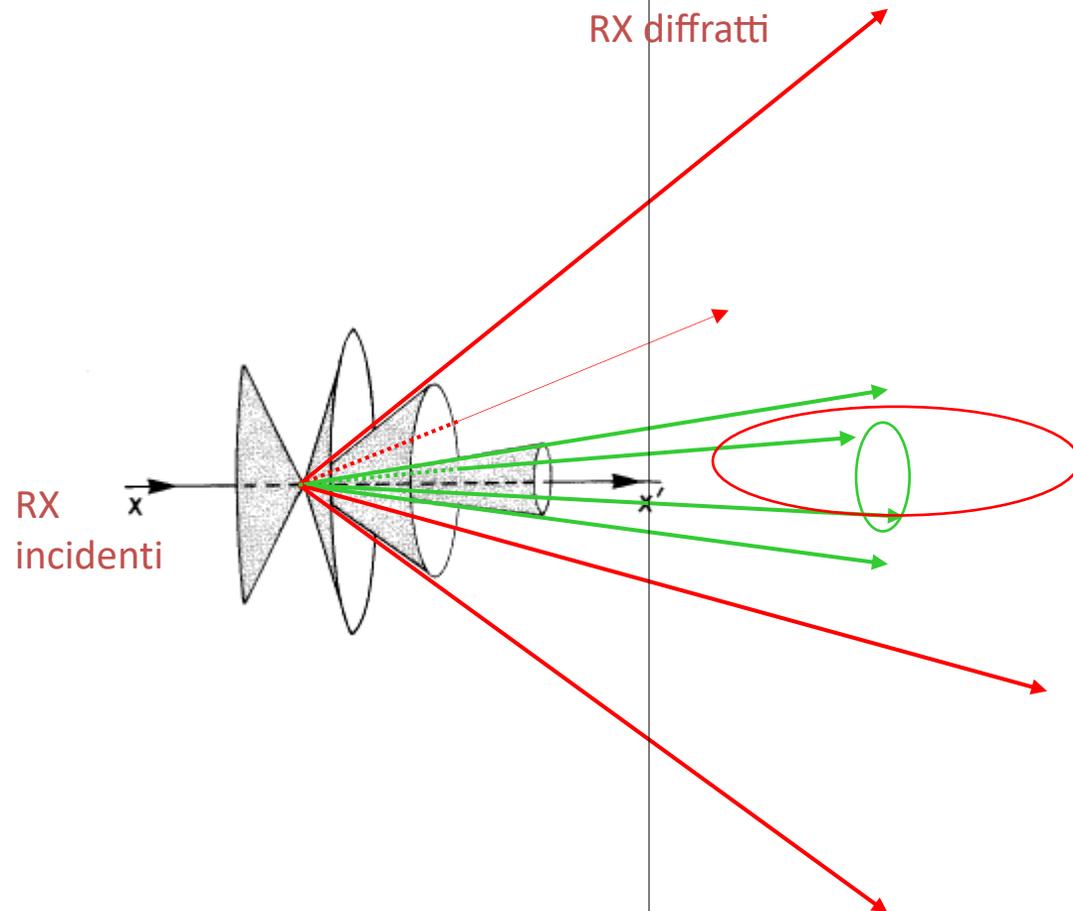
ORIGINE DI UN PATTERN DI DIFFRAZIONE DA POLVERI

In verde: raggi diffratti che rappresentano una famiglia di piani $h_1k_1l_1$ che soddisfa la legge di Bragg:

$$2d_1 \sin \theta_1 = n\lambda$$

In rosso: raggi diffratti che rappresentano una famiglia di piani $h_2k_2l_2$ che soddisfa la legge di Bragg:

$$2d_2 \sin \theta_2 = n\lambda$$

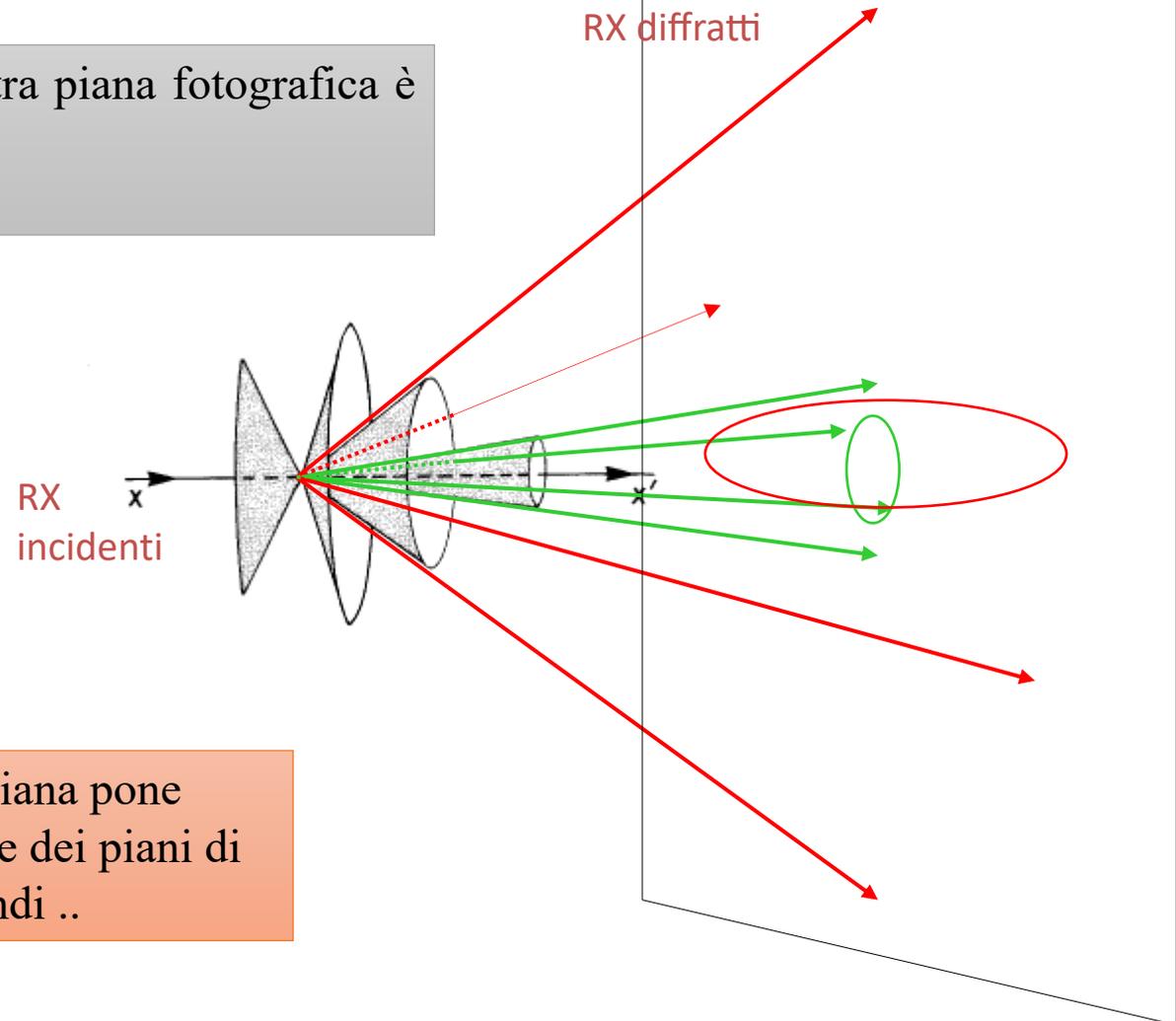


Immaginando in 3D la figura, si intuisce perché la figura di diffrazione risulta essere un cono

CAMPIONE : POLVERI

ORIGINE DI UN PATTERN DI DIFFRAZIONE DA POLVERI

... la proiezione dei coni su una lastra piana fotografica è una serie di cerchi concentrici...

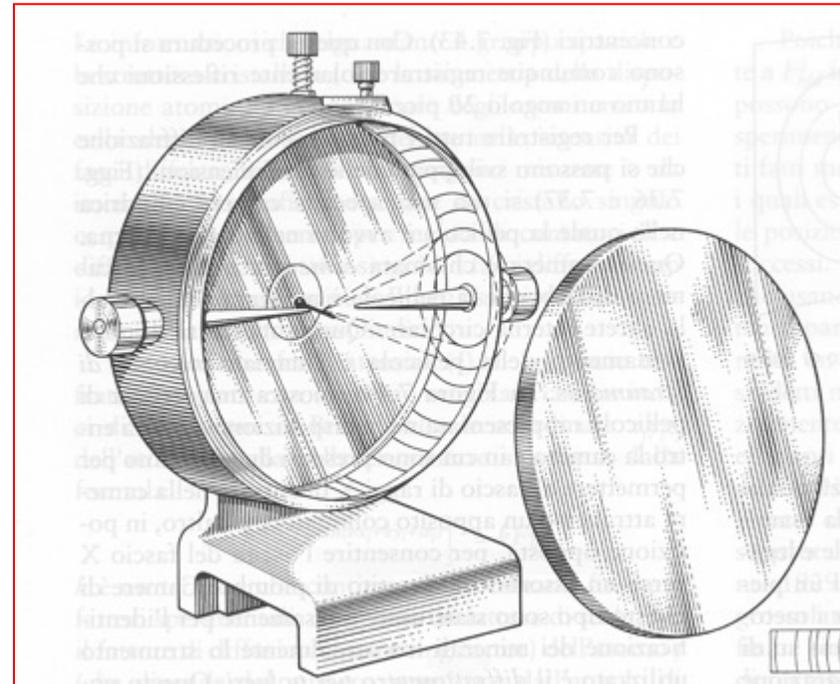
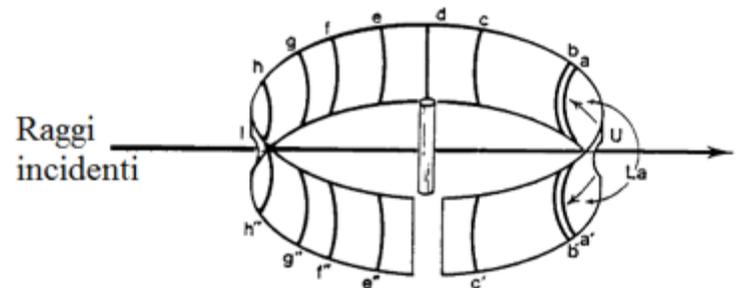
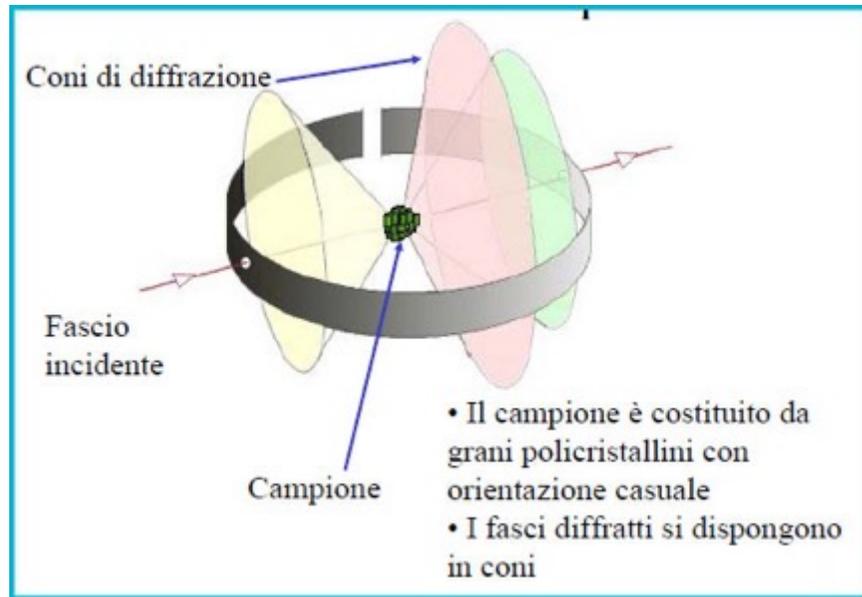


L'utilizzo della lastra fotografica piana pone delle difficoltà nella identificazione dei piani di Bragg che generano i coni più grandi ..

CAMPIONE : POLVERI

CAMERA DI DEBYE

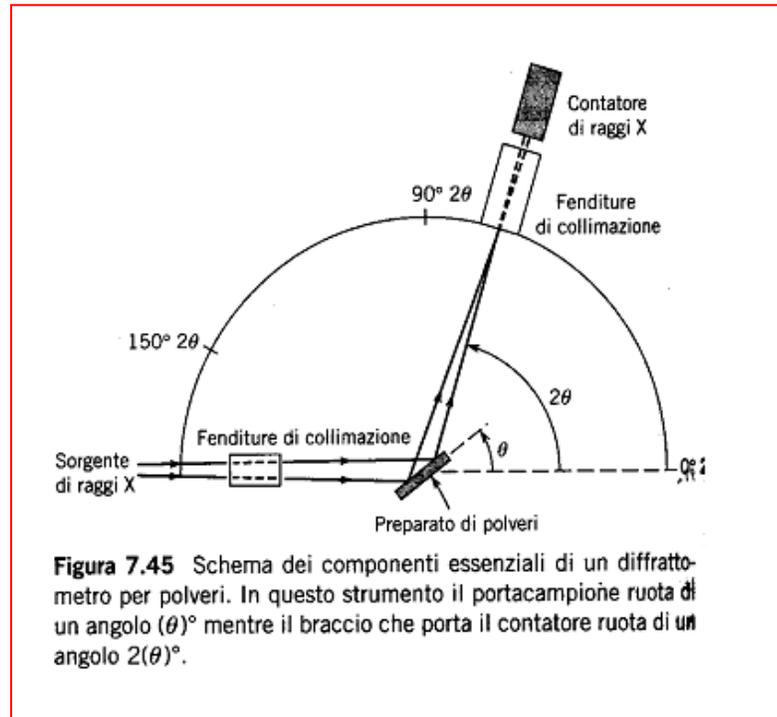
Per ovviare a questo problema si usa la cosiddetta camera di Debye in cui la pellicola viene avvolta parallelamente alla direzione del fascio incidente. L'intersezione dei coni in figura impressionerà la pellicola come nella figura di sotto:



CAMPIONE : POLVERI

DIFFRATTOMETRO AUTOMATICO

Principio: in pratica si tratta di irraggiare una lastra porta-campioni su cui e' disposta una polvere e di raccogliere gli effetti di diffrazione (i "coni" visti prima) attraverso un rivelatore solidale ad un cerchio goniometrico.



Ed ecco quello che ha registrato il contatore passando da $2\theta=0^\circ$ a $2\theta=80^\circ$

Ogni "picco" è l'equivalente di una linea nella lastra fotografica....

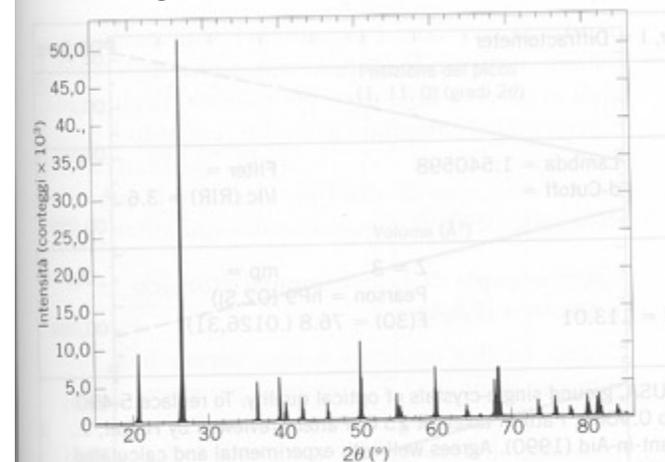
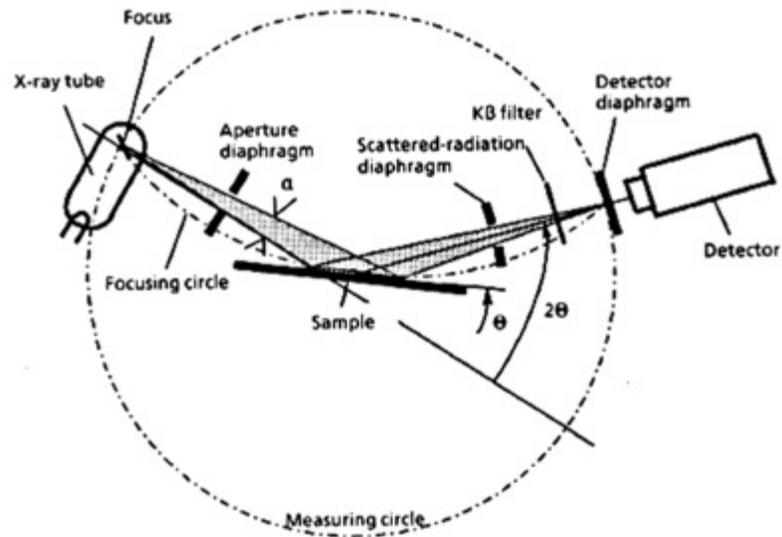


Figura 7.46 Diffrattogramma di un campione finemente polverizzato di quarzo- α .

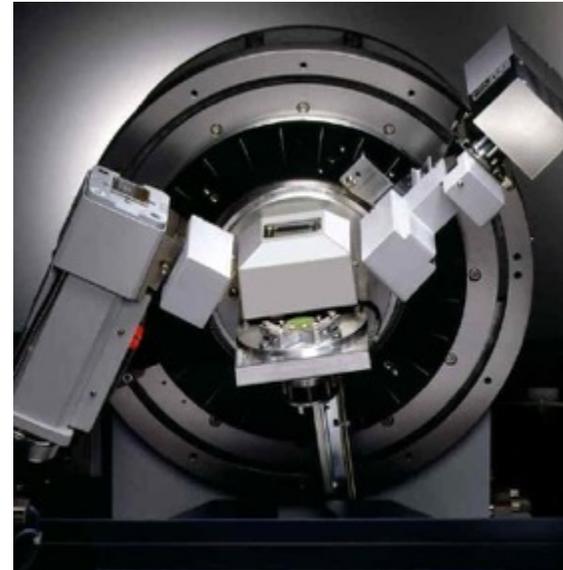
GEOMETRIA DI BRAGG-BRENTANO

Affinché sia rispettata la legge di Bragg, il movimento del rivelatore deve essere accoppiato al movimento del campione o della sorgente. Nella cosiddetta geometria Bragg-Brentano questo può realizzarsi in due modi
Geometria (θ - 2θ) oppure Geometria (θ - θ)



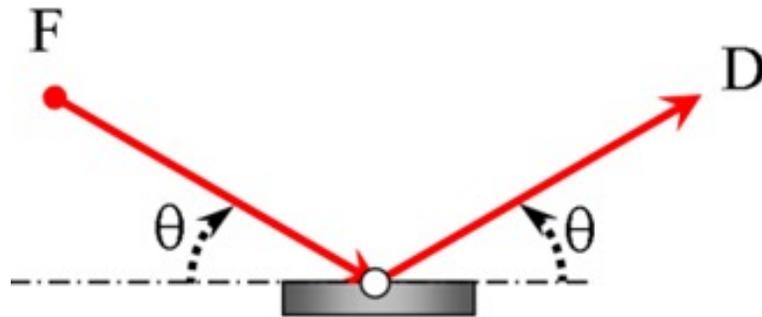
θ Glancing angle
 2θ Diffraction angle
 α Aperture angle

Diffractometer beam path in $\theta/2\theta$ mode



GEOMETRIA DI BRAGG-BRENTANO θ - θ

La focalizzazione può essere preservata anche muovendo simultaneamente la sorgente e il detector e mantenendo fisso il campione (θ - θ).



Il campione è fermo, mentre la sorgente (F) e il detector (D) ruotano attorno ad un asse comune. Per mantenere la focalizzazione, la sorgente e il detector si muovono con la stessa velocità ma in direzioni opposte.

GEOMETRIA DI BRAGG-BRENTANO

Con questa geometria, il campione è sempre in una precisa posizione "focalizzata", che viene preservata cambiando simultaneamente l'orientazione del campione e l'angolo di rivelazione ($\theta-2\theta$).

La sorgente (F) è ferma, mentre il campione e il detector (D) ruotano attorno ad un asse comune. Per mantenere la focalizzazione, il detector si muove a velocità doppia rispetto al campione.

