

REVISÃO DOS FUNDAMENTOS DA DIFRAÇÃO DE RAIOS - X UTILIZANDO O SOFTWARE VESTA EM COMPOSTOS DO TIPO PEROVSKITA

João Vitor de Araujo Silva ⁽¹⁾ (joaovitorsilvaz@alu.ufc.br), João Victor Barroso Xavier ⁽¹⁾ (victor.jvbx@alu.ufc.br), José Arlison de Sousa Ribeiro ⁽¹⁾ (arlisson.r@alu.ufc.br), Pedro Queiros Santiago ⁽¹⁾ (pedroqueirossantiago@gmail.com), Laryssa Coutinho da Silva ⁽¹⁾ (laryssacoutinho@alu.ufc.br)

⁽¹⁾ Universidade Federal do Ceará (UFC); Departamento de Engenharia Metalúrgica

RESUMO:

A difração de raios X corresponde a uma técnica amplamente utilizada no campo da ciência e engenharia de materiais por acadêmicos e profissionais da indústria, sendo responsável pelo processo de caracterização da estrutura cristalina e parâmetros metalográficos dos materiais. Diante da aplicação desta técnica, este trabalho busca abordar os conceitos básicos dessa área do conhecimento por meio de um estudo de caso com compostos do tipo perovskita: BaTiO₃ e CaTiO₃, materiais importantes para o estudo e aplicações em semicondutores. Com isso, o objetivo deste trabalho consiste em comparar os resultados utilizando a metodologia de construção de perfis de difração descrita por Cullity com os resultados apresentados pelo software gratuito VESTA, a fim de validar a precisão e estabelecer um comparativo entre ambos os métodos. Com esse estudo foi possível extrair informações fundamentais dos compostos analisados, adquirindo com precisão dados como a posição dos picos do perfil de difração e noções sobre o ajuste da forma dos picos.

PALAVRAS-CHAVE: RAIOS X, REVISÃO, FUNDAMENTOS, VESTA, DIFRAÇÃO.

REVIEW OF FUNDAMENTALS OF X - RAY DIFFRACTION USING VESTA SOFTWARE IN PEROVSKITE COMPOUNDS

ABSTRACT:

X-ray diffraction is a widely used technique in the field of materials science and engineering by academics and industry professionals, responsible for characterizing the crystalline structure and metallographic parameters of materials. Given the application of this technique, this work aims to address the basic concepts of this area of knowledge through a case study with perovskite-type compounds: BaTiO₃ and CaTiO₃, materials important for study and applications in semiconductors. Thus, the objective of this work is to compare the results using the diffraction profile construction methodology described by Cullity with the results presented by the free software VESTA, in order to validate the accuracy and establish a comparison between both methods. With this study, it was possible to extract fundamental information from the analyzed compounds, accurately acquiring data such as the position of the diffraction profile peaks and notions about the adjustment of the peak shapes.

KEYWORDS: X RAY, REVIEW, FUNDAMENTALS, VESTA, DIFFRACTION.

1. INTRODUÇÃO

A descoberta dos Raios X em 1895 pelos estudos de Wilhelm Conrad Roentgen (1845-1923) permitiu, mesmo sem a compreensão completa de sua natureza, sua imediata aplicação no estudo da estrutura interna de objetos opacos por meio da radiografia. (FRANCISCO, 2005).

No entanto, foi apenas em 1912 que a aplicação dos raios X foi expandida e mais bem descrita no contexto dos cristais. Isso ocorreu quando Max von Laue começou a explorar a difração de Raios X em cristais. (NELSON E PADILHA, 2022)

Em discussões com P. P. Ewald, que estava desenvolvendo sua tese de doutorado sobre a propagação da luz em cristais, Laue se interessou pelo modelo teórico de Ewald. Este modelo descreve cristais como pequenos osciladores espaçados periodicamente em três dimensões, com distâncias da ordem de 10^{-8} cm. (THOMAS, 2012).

Baseando-se nos experimentos de Roentgen, Laue sabia que o comprimento de onda dos raios X era compatível com essas dimensões. Portanto, um cristal poderia servir como uma grade ideal para a difração de raios X. Laue previu teoricamente e demonstrou experimentalmente que os raios X podiam ser difratados pelos cristais, utilizando a teoria eletromagnética da luz. (BLEICHER E SASAKI, 2000).

Essa descoberta possibilitou o estudo detalhado do reticulado cristalino, que tem dimensões da ordem de Ångström, oferecendo uma poderosa técnica para pesquisadores e engenheiros de materiais. (MARTINS, 1998).

Com base na aplicação prática da difração de raios X para a caracterização de estruturas, este trabalho tem como objetivo apresentar uma metodologia de estimativa e interpretação numérica e gráfica dos resultados de difratogramas. Para isso, serão utilizados os difratogramas calculados dos compostos BaTiO₃ e CaTiO₃ (ambas de arranjo cúbica simples), comparando esses resultados com os obtidos pelo software Vesta.

Esse software é uma ferramenta computacional para geração de difratogramas de compostos, utilizando uma série de bases de dados experimentais de difração de raios X já existentes.

1.1 Produção dos Raios - X

A produção de Raios X ocorre quando uma partícula com alta energia cinética é subitamente desacelerada. O método mais comum para gerar raios X envolve a colisão de um elétron de alta energia, produzido no cátodo de um tubo de raios X, com um alvo metálico, ou ânodo. (NELSON E PADILHA, 2022; MOREIRA, 2003).

Durante os primeiros estudos sobre a geração de raios X, foi observado que o aumento da diferença de potencial entre os terminais do tubo aumentava tanto a intensidade quanto a faixa de comprimentos de onda produzidos. Quando a diferença de potencial V atinge um valor crítico V_c , conhecido como potencial de excitação e específico do material do alvo, os elétrons incidentes possuem energia cinética suficiente para repelir os elétrons das camadas mais internas do alvo, criando vacâncias.

No nível atômico, ao atingir o alvo, o elétron de alta energia é ejetado do cátodo colide com um elétron da camada K de um átomo do material alvo, liberando-o como fotoelétron e criando uma vacância na camada K.

Para preencher essa vacância, um elétron de uma camada mais externa move-se para a camada K, liberando a diferença de energia na forma de um fóton de raio X. A energia desse fóton corresponde à diferença de energia entre as duas camadas envolvidas. Esses espaços vazios são então preenchidos por elétrons das camadas mais externas, resultando na emissão de raios X.

Nesse sentido, uma radiação muito importante para o estudo de raios-X é a radiação $K\alpha$, que ocorre quando um elétron da camada L preenche uma vacância na camada K. (BLEICHER E SASAKI, 2000).

1.2 Difração e intensidade dos Raios - x

Quando um feixe de raios X monocromáticos incide sobre um material cristalino, ocorre o fenômeno da difração. Esse processo pode ser compreendido em três pontos importantes:

Difração em um átomo isolado: Quando a incidência de raios X ocorre em um único átomo isolado, os elétrons desse átomo ficam excitados e vibram com a mesma frequência do feixe incidente. Esses elétrons emitem raios X em todas as direções com a mesma frequência do feixe incidente, fazendo com que o átomo se comporte como uma fonte de emissão esférica de radiação, conforme o princípio de Huygens. (NELSON E PADILHA, 2022).

Difração em cristais: Quando o feixe de raios X incide sobre um cristal em uma determinada orientação, no qual os átomos estão regularmente espaçados devido à periodicidade do arranjo cristalino, cada átomo age como uma fonte de emissão esférica de radiação. Essa organização regular dos átomos em um cristal (representada pela orientação dos planos cristalográficos) permite condições para que as ondas eletromagnéticas emitidas possam interferir entre si.

Tendo o processo de difração ocasionado pela periodicidade e dimensão da rede cristalina, podem ocorrer interferências construtivas ou destrutivas entre as ondas eletromagnéticas, dependendo de estarem em fase ou fora de fase, respectivamente. (CULLITY, 2001).

Para que a difração ocorra de forma efetiva, o comprimento de onda da radiação incidente deve ser da mesma ordem de grandeza do espaçamento entre os átomos do cristal. Isso garante que as ondas espalhadas pelos átomos individuais possam se somar de maneira coerente, resultando em padrões de difração que são observáveis e analisáveis.

Observa-se que para que haja uma interferência construtiva das ondas espalhadas, é necessário que seja obedecida a condição informada pela Equação 1 a seguir:

$$n \cdot \lambda = 2 \cdot d \cdot \sin(\theta_h) \quad (1)$$

Onde:

n = ordem dos picos de difração, que para esse trabalho foi considerado apenas as difrações de primeira ordem;

λ = comprimento de onda dos Raios X em Angstrom (Å);

$\sin(\theta_h)$ = o ângulo de incidência ou reflexão do feixe incidente.

d = corresponde ao espaçamento interplanar de planos, que para uma estrutura de sistema cristalino cúbica, esse termo é obtido por meio da Equação 2:

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2)$$

Onde os coeficientes h , k e l representam os índices de orientação de um plano, e o termo “ a ” equivale ao parâmetro de rede da estrutura.

Embora a Equação de Bragg permita quantificar as localizações dos picos de difração, a expressão geral utilizada para estimar a amplitude de espalhamento em ordem de grandeza apresentada em um perfil de difração é informada por uma função que considera a influência de diversos fatores, conforme apresentado na Equação 3 a seguir:

$$I_{hkl} = |F_{hkl}|^2 p_{hkl} \left(\frac{1 + \cos^2 2\theta_{hkl}}{\sin^2 2\theta_{hkl} \cdot \cos \theta_{hkl}} \right) \quad (3)$$

Onde:

F_{hkl} = amplitude de espalhamento de raios-x para um conjunto de planos hkl ;

p_{hkl} = fator de multiplicidade;

O termo em parentes representa o Fator de Polarização de Lorentz (LP), que leva em conta fatores geométricos relacionados com a orientação dos planos que difratam, que afetam a intensidade do feixe difratado.

O desenvolvimento das equações de Laue e Bragg estabelece o Fator de Espalhamento de Raios X como um parâmetro essencial para identificar as condições de difração em um conjunto de planos contendo j átomos nas posições $(x_j, y_j \text{ e } z_j)$ conforme informado na Equação 4 abaixo:

$$F_{hkl} = \sum_j f_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)} \quad (4)$$

Onde:

x_j, y_j e z_j = posições dos átomos dentro da estrutura analisada;

f_j = o fator de forma atômico

Em relação ao fator de forma, esse equivale a eficiência com que um átomo espalha ondas eletromagnéticas em uma determinada direção, seu valor é aproximado como uma função associada ao ângulo de orientação (θ_h) e o comprimento de onda de raio x incidente (λ). Sendo essa relação dada por meio da Equação 5:

$$f\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right) = \sum_{i=1}^N a_i \cdot \exp \exp \left(- b_i \cdot \frac{\sin^2\theta}{\lambda^2} \right) + c \quad (5)$$

Os termos (a_i ; b_i e c) são constantes ajustáveis à função e podem ser obtidos por meio de dados informados pela literatura. Levando em conta os dois compostos químicos analisados neste trabalho, torna-se pertinente o cálculo dos fatores de forma atômica para o Bário, Cálcio, Titânio e Oxigênio.

O fator de multiplicidade (p_{hkl}) representa o número de planos da mesma família que possuem o mesmo espaçamento interplanar.

Os valores para esse fator podem ser consultados na literatura vigente, todavia como neste trabalho ambos os compostos apresentam mesma estrutura cristalina, os valores do fator de multiplicidade dependendo de cada índice de plano (hkl) para o caso de uma cúbica simples são apresentados na Tabela 1 abaixo:

TABELA 1. Valores para o Fator de Multiplicidade (p_{hkl}).

Índices	hkl	hhl	hk0	hh0	hhh	h00
p_{hkl}	48	24	24	12	8	6

Fonte: Autor (2024).

Tendo em vista que o tamanho do grão (t) do material cristalino exerce forte influência na forma do pico de difração, por exemplo para grãos muito pequenos ($< 1\text{nm}$) começa a ocorrer alargamento dos picos de difração, torna-se importante levar em consideração a mudança do formato e distância do pico de intensidade numa simulação.

Para isso, é possível utilizar dois ajustes: a Largura de Linha (B_h), representando esse alargamento do pico em função do tamanho de cristal (t), e uma função gaussiana utilizada para ajustar o formato do pico em relação a esse alargamento.

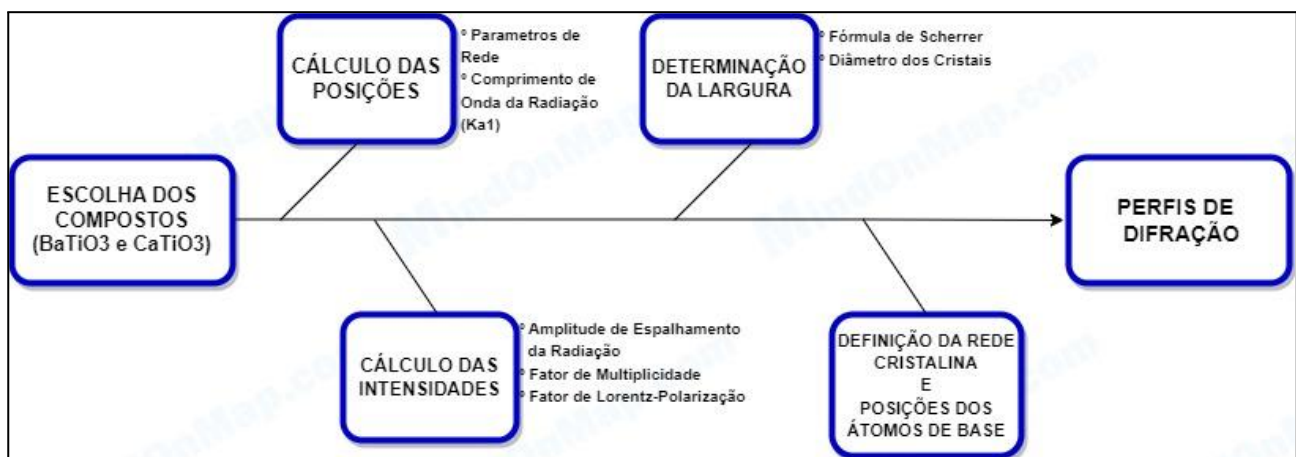
Ambos os parâmetros são calculados por meios das Equações 6 e 7 a seguir:

$$t = \frac{0,9\lambda}{B_h \cos \theta_B} \quad (6)$$

$$I = I_h \cdot e^{-\left(\frac{2\theta - 2\theta_h}{B_h}\right)^2} \quad (7)$$

2. MATERIAIS E MÉTODOS

FIGURA 1. Fluxograma do Desenvolvimento do Trabalho.



Fonte: Autor (2024).

O Fluxograma da Figura 1 elaborado pelos autores ilustra os pontos chaves que auxiliaram na organização e realização das etapas de desenvolvimento deste trabalho, a fim de que cumprir da melhor forma possível com os objetivos inicialmente pensados.

Em relação ao fluxograma, as entradas iniciais correspondem à escolha dos compostos BaTiO₃ e CaTiO₃ como objetos de estudo. A motivação dessa escolha deve-se ao fato de que ambos os materiais possuem uma estrutura cristalina do tipo perovskita (estrutura cristalina cúbica simples). Eles foram selecionados pela ampla quantidade de informações disponíveis na literatura e por suas aplicações e estudos na fabricação de materiais semicondutores.

Em seguida, no processo de desenvolvimento desse trabalho, tem-se que para a análise dos perfis de difração, o foco deste trabalho se manteve na investigação dos 5 primeiros picos, correspondentes às famílias de planos {100}, {110}, {111}, {200} e {110}.

Para a construção dos perfis de difração, foram realizados cálculos amplamente conhecidos na literatura para determinar a posição, intensidade e largura dos picos de cada um dos compostos. Os autores levaram em consideração que a radiação K α 1 emitida por uma fonte de cobre possui um comprimento de onda (λ) igual a 1,541 nm. Os parâmetros de rede assumiram os valores de 4,01 e 3,89 nm para BaTiO₃ e CaTiO₃, respectivamente, para determinação da posição dos picos.

O cálculo da intensidade dos picos levou em consideração apenas a amplitude de espalhamento da radiação, o fator de multiplicidade e o fator de Lorentz-Polarização, ou seja, o efeito da temperatura não foi considerado. O fator de forma de cada um dos elementos presentes na perovskita foi ajustado por um polinômio.

A largura dos picos foi determinada por meio da fórmula de Scherrer para materiais nanocristalinos. Os autores utilizaram 3 diâmetros de cristais diferentes (100, 50 e 10 nm) e as linhas de difração foram aproximadas por uma gaussiana visto que essa é frequentemente aplicada em cálculos de ordem de grandeza.

Com o desenvolvimento realizado, é possível gerar os perfis de difração de cada composto analisado, por meio dos resultados obtidos. Todavia, tendo em vista o objetivo delimitado deste trabalho, foi realizado também um estudo comparativo dos resultados obtidos. Para fins de comparação e comprovação dos cálculos realizados, foi utilizado o software gratuito VESTA. Antes de gerar os perfis de difração, foi necessário informar ao programa a rede cristalina e a posição dos átomos da base para a construção da célula unitária.

Foi utilizada uma rede cúbica simples e as posições dos átomos foram configuradas como (0, 0, 0), ($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$), (0, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$), ($\frac{1}{2}$, 0, $\frac{1}{2}$) e ($\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, 0) para o Ba (ou Ca), Ti e os 3 átomos de oxigênio, respectivamente.

Uma vez que o tamanho de cristal utilizado pelo software não era conhecido, os autores utilizaram um método de busca numérico iterativo a fim de encontrar o tamanho de cristal mais próximo dos resultados produzidos pelo VESTA.

Cabe esclarecer que, tendo em vista o referencial teórico descrito anteriormente, os resultados e metodologias aplicadas ao longo deste trabalho, assim como eventuais análises desenvolvidas, considera-se que os difratômetros de raios X estão configurados, nesse caso, em uma geometria parafocal Bragg-Brentano (LUZIA, 2013).

Portanto, os resultados e análises desenvolvidas neste trabalho não são aplicáveis a configurações com ângulos rasantes, ou seja, para ângulos de incidência muito baixos, que correspondem a situações onde a espessura do material é muito fina.

3. RESULTADOS

As Tabelas 2 e 3 abaixo sintetizam todos os principais resultados obtidos ao realizar a metodologia de cálculo descrita anteriormente, tais valores são importantes para construção dos difratogramas dos seus respectivos compostos.

TABELA 2. Cálculos para construção do difratograma do composto BaTiO₃.

hkl	d (Å)	2θh	Bh 100nm	Bh 50nm	Bh 10nm	Bh 120,7nm	L-P	p	f (Ti 4+)	f (Ba 2+)	f (O ₂ -)	F	Intensidade	Relativa (%)
100	4,01	22,15	0,0810	0,1619	0,8079	0,0671	51,275	6	16,867	49,587	7,334	25,386	1,98E+05	21,8
110	2,835	31,53	0,0826	0,1651	0,8257	0,0684	24,295	12	15,864	46,237	6,230	55,871	9,10E+05	100,0
111	2,315	38,87	0,0843	0,1685	0,8427	0,0698	15,377	8	14,975	43,612	5,443	44,965	2,49E+05	27,3
200	2,005	45,19	0,0861	0,1722	0,8607	0,0713	10,977	6	14,185	41,498	4,848	70,227	3,25E+05	35,7
210	1,793	50,89	0,0880	0,1760	0,8800	0,0729	8,386	24	13,481	39,754	4,380	21,893	9,65E+04	10,6

Fonte: Autor (2024).

TABELA 3. Cálculos para construção do difratograma do composto CaTiO₃.

hkl	d (Å)	2θh	Bh 100nm	Bh 50nm	Bh 10nm	Bh 120,7nm	L-P	p	f (Ti 4+)	f (Ca 2+)	f (O ₂ -)	F	Intensidade	Relativa (%)
100	3,890	22,848	0,0811	0,1621	0,8107	0,0672	48,088	6	16,800	16,305	7,252	-7,748	1,73E+04	10,5
110	2,751	32,534	0,0828	0,1656	0,8278	0,0686	22,712	12	15,747	14,920	6,118	24,549	1,64E+05	100,0
111	2,246	40,128	0,0846	0,1692	0,8460	0,0701	14,333	8	14,819	13,777	5,319	14,914	2,55E+04	15,5
200	1,945	46,675	0,0865	0,1731	0,8654	0,0717	10,207	6	14,001	12,827	4,721	40,990	1,02E+05	62,0
210	1,740	52,578	0,0886	0,1773	0,8863	0,0734	7,786	24	13,276	12,031	4,253	-5,499	5,65E+03	3,4

Fonte: Autor (2024).

Como forma de interpretar os resultados informados acima, tem-se que em relação ao composto BaTiO₃:

- Os planos {110} e {200} apresentam a maior combinação possível entre os fatores de forma atômico, como consequência, suas respectivas amplitudes de espalhamento são consideravelmente maiores em relação aos demais planos;
- Mesmo o plano {200} apresentando o maior fator de espalhamento, o mesmo não se torna o maior pico de intensidade justamente por esse plano apresentar também os menores valores tanto do fator de multiplicidade ($h00$) como também do Fator de Polarização de Lorentz;
- Os planos {100} e {210} apresentam os menores picos principalmente pelos seus valores baixos de fatores de espalhamento, cabendo destacar que o plano {210} torna-se o menor pico em intensidade mesmo apresentando o maior fator de multiplicidade, pois esse último não consegue mesmo assim compensar a influência dos demais parâmetros;
- Percebe-se também a influência do tamanho de grão para o formato e constituição do pico em um difratograma, onde para valores menores que 100nm os efeitos da largura de linha tornam-se consideráveis.

Todas essas considerações e explicações anteriores também podem ser utilizadas para explicar o comportamento das curvas referentes aos difratogramas do CaTiO₃. Com base nisso, cabe destacar por exemplo que:

- Existe uma pequena diferença em relação aos ângulos de difração para ambos os materiais, tal fato deve-se a proximidade dos parâmetros de rede, que por sua vez corresponde a valores de espaçamento interplanar bastante próximos e pela Lei de Bragg, a valores de ângulos de difração também semelhantes;
- Por apresentar essa semelhança em relação a orientação, tem-se que os efeitos da largura dos picos de difração quando se altera o valor do tamanho do grão também tornam-se bastante próximos em cada caso;
- Comparando os valores informados pelas tabelas 2 e 3 percebe-se que o BaTiO₃ apresenta picos de intensidade consideravelmente maiores, tal fato pode ser explicado pela diferença dos valores de fator de espalhamento atômico do Bário e Cálcio, onde este último apresenta menores valores;
- Uma possível explicação para essa diferença de valores deve-se ao número atômico dos dois elementos e por consequência dos tamanhos dos seus raios atômicos, visto que o

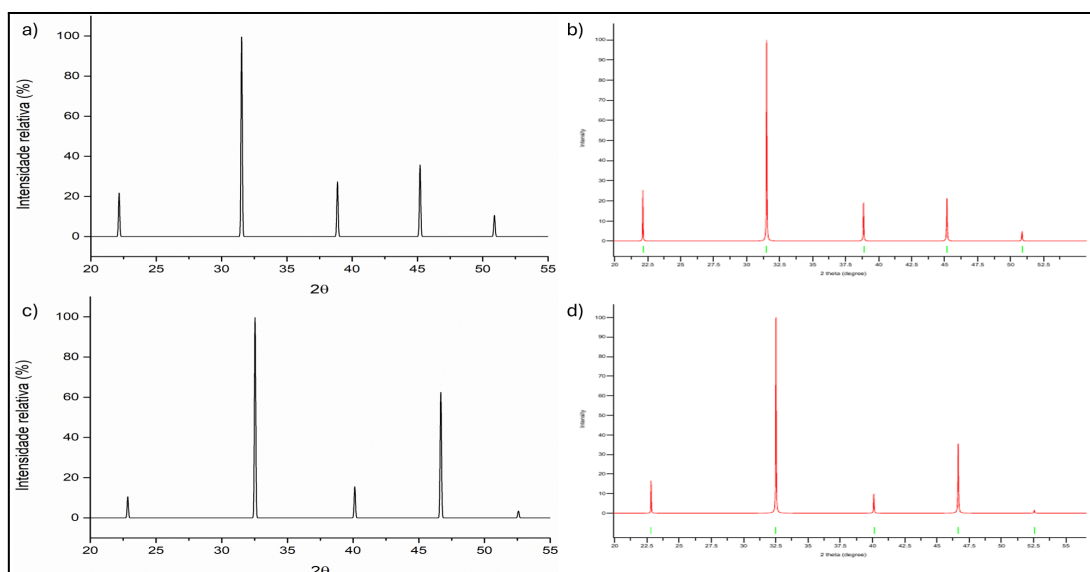
Bário apresenta raio atômico maior que o Cálcio e por consequência interfere de forma maior no espalhamento de ondas em contato com sua eletrosfera.

Em relação a este último, pode-se estabelecer uma relação entre o peso atômico dos materiais e seus perfis de difração. Nesse sentido, a literatura informa que o peso atômico exerce forte influência no espaçamento interplanar, especialmente pelo seu parâmetro de rede. Isso pode ser observado neste trabalho, onde os compostos BaTiO₃ e CaTiO₃, com massas atômicas respectivas de 233,1922 g/mol e 135,9432 g/mol informadas pelo software Vesta, apresentam resultados que indicam que o composto BaTiO₃ apresenta maior distância entre planos em sua estrutura, como mostrado nas Tabelas 2 e 3.

Levando em conta a Equação de Bragg apresentada neste trabalho, pode-se entender que, quanto maior o espaçamento interplanar, menor o ângulo de difração. Isso está em conformidade com os resultados apresentados, que mostram uma pequena diferença de ângulos de difração, com o titanato de bário apresentando sempre picos de difração à frente do titanato de cálcio.

A Figura 2 abaixo mostra a diferença entre o perfil de difração calculado pelos autores e o gerado pelo VESTA. A princípio, os perfis de difração não possuem semelhanças significativas, visto que as posições dos picos são iguais e os picos do CaTiO₃ estão mais à direita do que os picos do BaTiO₃, o que é esperado, devido ao menor parâmetro de rede do primeiro, o que também serve para confirmar os resultados obtidos.

FIGURA 2. Comparativo entre os difratogramas gerados pelos autores com um tamanho de cristal à 120,7 nm (à esquerda) e pelo software VESTA (à direita) dos compostos BaTiO₃ (a,b) e CaTiO₃ (c,d).

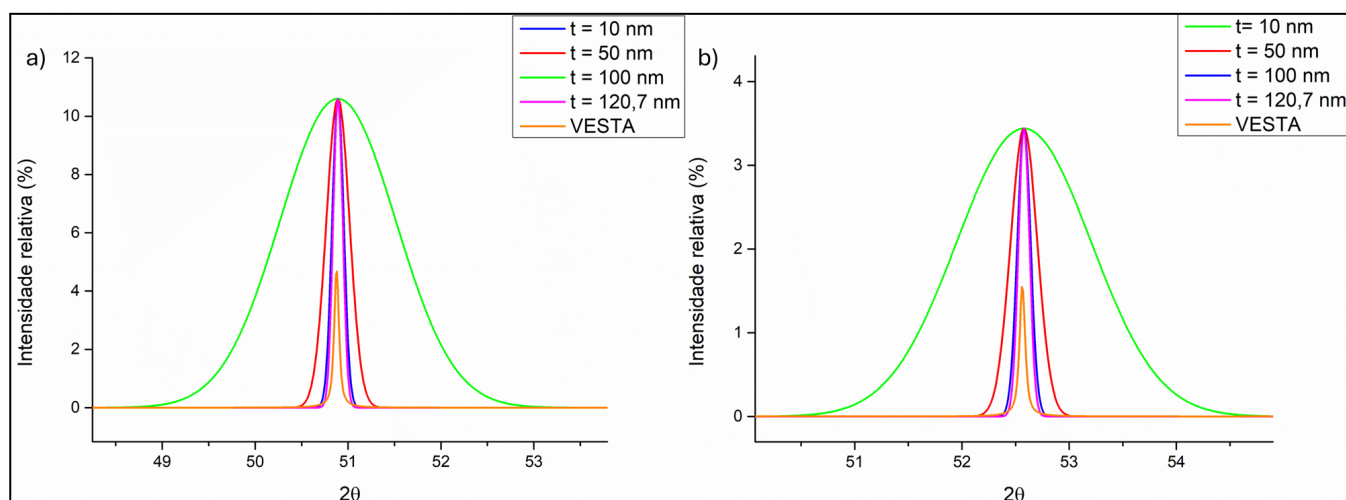


Fonte: Autor (2024).

Tomando como base os resultados dos difratogramas obtidos, tanto a largura como a intensidade dos picos calculados pelos autores diferiram daqueles gerados pelo VESTA. Uma possível explicação para essa diferenciação, deve-se ao fato que os autores aproximam o perfil de difração por uma curva gaussiana e não levaram em consideração o fator de temperatura durante os cálculos, culminando em larguras e intensidades distintas para alguns picos, como pode ser observado na Figura 3 abaixo.

Além disso, no que diz respeito ao efeito do tamanho do cristal do difratograma, a Figura 3 também demonstra que cristais menores produzem picos mais largos. Esse resultado está de acordo com a fórmula de Scherrer para materiais nanocristalinos, o que também confirma os valores calculados.

FIGURA 3. Efeito de diferentes tamanhos de cristais nos difratogramas de a) BaTiO₃ e b) CaTiO₃ referentes à família de planos {210}.



Fonte: Autor (2024).

4. CONCLUSÕES

O presente trabalho procurou revisar os conceitos fundamentais de difração de Raios-X que são necessários para qualquer profissional que atue no ramo de ciência e engenharia de materiais. Dessa forma, os autores puderam concluir que:

- O método utilizado, partindo de conceitos básicos, é eficaz para a previsão das posições dos picos no perfil de difração;

- Não é possível alcançar os valores obtidos pelo software VESTA para as intensidades e larguras dos picos, uma vez que ele leva em conta fatores que não foram considerados para os cálculos dos perfis de difração dos compostos estudados.

Para continuar os desenvolvimentos e análises apresentados, é importante mencionar a possibilidade de, em trabalhos futuros, realizar uma revisão mais aprofundada da literatura, focando em análises detalhadas de como alguns parâmetros influenciam os resultados e métodos de difração. É necessário citar um maior aprofundamento sobre como a densidade eletrônica e o peso atômico influenciam esses aspectos.

Embora a literatura forneça uma relação intuitiva que consegue explicar de forma satisfatória os resultados encontrados, essa explicação não é suficiente para esclarecer todo o processo. Isso se deve, em parte, à falta de um estudo comparativo que melhor evidencie a influência desses parâmetros. Por exemplo, um estudo sobre como se dá o cálculo dos parâmetros de rede dos materiais em relação ao peso atômico seria útil, pois esses parâmetros ajudam a explicar o espaçamento interplanar.

Além disso, recomenda-se que futuros trabalhos apliquem uma maior variedade de métodos, considerando que, conforme citado nos materiais e métodos, este trabalho se limita às configurações do tipo Bragg-Brentano.

DECLARAÇÃO DE RESPONSABILIDADE

Os autores são os únicos responsáveis por este trabalho.

REFERÊNCIAS

BLEICHER, L.; SASAKI, J. M. Introdução à difração de raios X em cristais. Fortaleza. Universidade Federal do Ceará, 2000. 20 p. Apostila de curso.

CULLITY, B. D.; STOCK, S. R. Elements of X-Ray Diffraction, 3 ed, Upper Saddle River: Prentice Hall, 2001. 678 p.

F. C. **FRANCISCO:** Radiologia: 110 anos de história. Revista Imagem, Vol. 27, nº 4, pp. 281-286, 2005.

LUZIA, A.; SILVA, D. (2013). CARACTERIZAÇÃO MINERALÓGICA POR DIFRAÇÃO DE RAIOS X E DETERMINAÇÃO DE TERRAS RARAS POR ICP-MS DE ROCHAS DA REGIÃO SUL DA BAHIA. [s.l: s.n.].

MARTINS, R. A. A Descoberta dos Raios X: O primeiro comunicado de Röntgen. Revista Brasileira de Ensino de Física. 20, 373-391 (1998).

MOMMA, K. VESTA - Visualization for Electronic and Structural Analysis. Disponível em: <<https://jp-minerals.org/vesta/en/>>. Acesso em: 1 jul. 2024.

I. **MOREIRA**: Henrique Morize, os raios-X e os raios catódicos. Física na Escola, Vol. 4, n. 1, pp. 33-34, 2003.

Lima, **NELSON & PADILHA**, Angelo. (2022). Difração de raios X: uma introdução para iniciantes X-Ray diffraction: an introduction for beginners.

J. M. **THOMAS**: The birth of X-ray crystallography. Nature, Vol. 491, pp. 186–187, 2012.