

HELIO SILVA CAMPOS

ESPALHAMENTO ELETRODINAMICO AUTO-CONSISTENTE  
NO CASO SIMETRICO DE BRAGG

T e s e  
de  
D O U T O R A D O

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FISICAS

Rio de Janeiro

- 1988 -

Para

ALICE (8),

GUILHERME (6)

e FELIPE (1 ano)

pelo tempo de pai não usufruído

durante a realização deste trabalho

## A G R A D E C I M E N T O S

Ao Prof. Włodzimierz Aleksander Keller pela orientação, pela proveitosa convivência científica e pela amizade.

Aos Profs. Anibal Omar Caride, Antonio Ferreira da Silva, Juan Alberto Mignaco e Vivian Stojanoff, membros da Banca Examinadora, pela análise deste trabalho e pelas valiosas sugestões.

Aos colegas do Departamento de Física Geral do Instituto de Física da UFBA pelo apoio.

Ao Geólogo José Augusto Fernandes Filho, então Superintendente do Distrito de Exploração da Bahia (PETROBRAS/DEXBA), pela autorização para utilizar o computador Fujitsu 360. Ao Paulo Roberto, Chefe do DEXBA/SESEP pela atenção recebida. Ao Zamil, pela inúmeras vezes que interrompeu suas tarefas no SESEP para auxiliar-me na obtenção dos resultados numéricos.

Aos Profs. Edson Starteri Sampaio e Antonio Expedito Gomes de Azevedo, Coordenador e Vice-Coordenador do Programa de Pós-Graduação e Pesquisa em Geofísica da UFBA que permitiram o meu acesso ao VAX-785. Aos colegas geofísicos Reynan, Sato e Alexandre pela ajuda na obtenção das figuras.

Ao Prof. Lisandro Pavie Cardoso pela criteriosa avaliação.

Ao Prof. Paulo Mascarello Bisch, pelo incentivo.

Aos amigos Adrião, Aurino, Cícero, Dioni, Judite, Marcos, Nice, Roberto e Sílvio pela ajuda sincera.

A Myriam Simões Coutinho pela atenção que sempre me dispensou no CBPF.

A CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

A Jane, minha mulher, por tudo.

## R E S U M O

Analisamos o caso simétrico de Bragg, introduzindo um modelo de espalhamento auto-consistente para o caso de dois feixes, elipticamente polarizados. O cristal é formado como um conjunto de  $N$  planos matemáticos, cada qual definido por uma densidade superficial de carga. O mesocampo e o epicampo são conceituados de uma forma diferente da teoria de Ewald. Definimos um plano de dipolos induzidos e os campos associados como a unidade de espalhamento auto-consistente. Desenvolvendo um rigoroso tratamento analítico encontramos uma forma auto-consistente para a equação de Bragg, em função das variações de amplitude e de fase. A solução generalizada para o conjunto de  $N$  planos, introduzindo-se um fator de absorção na radiação incidente, foi obtida de duas maneiras: (i) analítica, sendo uma com a regra da semelhança de campo pela qual ocorre incidência em ambas faces de todos os planos do cristal e outra, através de um desenvolvimento matricial em função dos polinômios de Chebyshev; (ii) com uma solução numérica calculamos, iterativamente, a refletividade, a fase de reflexão, a transmissividade, a fase de transmissão e a energia. Os resultados obtidos, mostrados através de curvas de reflexão e de transmissão, são característicos tanto da teoria cinemática como da teoria dinâmica. A conservação da energia resulta, neste tratamento, da adoção do princípio da auto consistência de Ewald. No caso da absorção, os resultados indicam que esta não é a única causa da assimetria nas curvas de reflexão. O modelo contém elementos básicos de uma formulação unificada, microscópica, auto-consistente, exata e vetorial para interpretar a difração de raios-X em cristais perfeitos.

## A B S T R A C T

We have analyzed the symmetric Bragg case, introducing a model of self consistent scattering for two elliptically polarized beams. The crystal is taken as a set of mathematical planes, each of them defined by a surface density of dipoles. We have considered the mesofield and the epifield differently from that of the Ewald's theory and, we assumed a plane of dipoles and the associated fields as a self consistent scattering unit. The exact analytical treatment when applied to any two neighbouring planes, results in a general and self consistent Bragg's equation, in terms of the amplitude and phase variations. The generalized solution for the set of  $N$  planes was obtained after introducing an absorption factor in the incident radiation, in two ways : (i) the analytical one, through a rule of field similarity, which says that the incidence occurs in both faces of the all crystal planes and also, through a matricial development with the Chebyshev polinomials; (ii) using the numerical solution we calculated, iteratively, the reflectivity, the reflection phase, the transmissivity, the transmission phase and the energy. The results are showed through reflection and transmission curves, which are characteristics as from kinematical as dynamical theories. The conservation of the energy results from the Ewald's self consistency principle usage. In the absorption case, the results show that it is not the only cause for the asymmetric form in the reflection curves. The model contains basic elements for a unified, microscope, self consistent, vectorial and exact formulation to interpretate the X ray diffraction in perfect crystals.

# S U M A R I O

Página

Agradecimentos . . . . .	iii
Resumo . . . . .	iv
Abstract . . . . .	v
Lista de Figuras . . . . .	viii

<u>CAPITULO 1</u> - AS TEORIAS DE DIFRACAO DE RAIOS-X . . . . .	1
1. 1 - Introduçõo Histõrica . . . . .	1
1. 2 - A Teoria de Darwin . . . . .	3
1. 3 - A Teoria de Ewald . . . . .	5
1. 4 - A Teoria de Laue . . . . .	9
1. 5 - Uma Breve Avaliaçõo das Teorias . . . . .	10
1. 6 - A Proposiçõo deste Trabalho . . . . .	13

<u>CAPITULO 2</u> - A UNIDADE DE ESPALHAMENTO AUTO-CONSISTENTE . . . . .	14
2. 1 - Introduçõo . . . . .	14
2. 2 - Os Campos das Ondas Incidentes . . . . .	15
2. 3 - Os Campos das Ondas de Dipolos . . . . .	19
2. 4 - Os Campos das Ondas Transmitidas . . . . .	30
2. 5 - A Unidade de Espalhamento . . . . .	34

<u>CAPITULO 3</u> - O ESPALHAMENTO AUTO-CONSISTENTE POR UM CRISTAL . . . . .	43
3. 1 - Introduçõo . . . . .	43
3. 2 - Duas Unidades de Espalhamento . . . . .	44
3. 3 - A Soluçõo Analõtica com a Regra da Semelhança de Campo	
3. 3. 1 - A Equaçõo de Bragg Auto-Consistente . . . . .	45
3. 3. 2 - A Soluçõo Generalizada com a Absorçõo . . . . .	46

3. 4 -	A Solução Analítica com os Polinômios de Chebyshev . . . . .	53
3. 5 -	A Solução Numérica . . . . .	59
<u>CAPITULO 4</u> -	ANALISE DOS RESULTADOS NUMERICOS . . . . .	63
4. 1 -	Introdução . . . . .	63
4. 2 -	Os Resultados Numéricos . . . . .	65
4. 2. 1 -	A Amplitude de Reflexão . . . . .	65
4. 2. 2 -	A Fase de Reflexão . . . . .	67
4. 2. 3 -	A Amplitude de Transmissão . . . . .	68
4. 2. 4 -	A Fase de Transmissão . . . . .	69
4. 2. 5 -	A Determinação da Energia . . . . .	69
4. 2. 6 -	O Incremento no Fator de Espalhamento do Plano . . . . .	70
4. 2. 7 -	Considerações Finais . . . . .	72
<u>CAPITULO 5</u> -	AVALIACAO FINAL E CONCLUSOES . . . . .	102
<u>APENDICE</u> -	Programa que Calcula a Refletividade, a Fase de Reflexão, A Transmissividade, a Fase de Transmissão e a Energia. . . . .	106
<u>BIBLIOGRAFIA</u> . . . . .		108

## LISTA DE FIGURAS

<u>Figura</u>	<u>Página</u>
2. 1 - Diagrama da interação do plano de espalhamento $J$ com as duas ondas A e B representadas pelas suas componentes nos dois estados de polarização $\pi$ e $\sigma$ . . . . .	16
2. 2 - A composição do mesocampo incidente $\mathbf{N}^i$ , no plano complexo de amplitude e fase, em função dos vetores de polarização das ondas A e B, no estado $\sigma$ . . . . .	21
2. 3 - A composição do mesocampo incidente $\mathbf{N}^i$ nas duas situações limites: (a) quando o ângulo entre as ondas, $\varphi = \pi$ e, (b) quando $\varphi = 0$ . Os vetores de polarização que indicam as ondas incidentes possuem a mesma magnitude em ambas figuras . . . . .	37
3. 1 - A composição dos vetores de polarização das ondas interagentes em um plano de dipolos, no estado $\sigma$ , quando a absorção é introduzida . . . . .	48
4. 1a - Refletividade $R$ versus $\Delta\Theta$ , o desvio do ângulo de Bragg ( $\Theta_B$ ). São comparados os resultados para 1024 (curva contínua) e 2048 (tracejada) planos. A letra S indica a polarização $\sigma$ do campo eletromagnético incidente. Os valores de $R(\max)$ e de $\Theta_B$ , escritos no mesmo nível na Figura, referem-se à curva contínua . . . . .	74
4. 1b - A mesma comparação que a Fig. 4.1a com $\rho$ versus $R$ . . .	75
4. 2a - $R$ versus $\Delta\Theta$ em situação análoga à Fig. 4.1a, para 4096 (curva contínua) e 8192 (tracejada) planos . . . . .	76



4. 2b	- A mesma comparação que a Fig. 4.2a com $\rho$ versus R	77
4. 3	- R versus $\Delta\theta$ para 16384 planos	78
4. 4a	- R versus $\Delta\theta$ para 8192 planos. São comparados os resultados para os estados de polarização $\sigma$ (S, curva contínua) e $\pi$ (P, tracejada) do campo eletromagnético incidente	79
4. 4b	- A mesma comparação que a Fig. 4.4a com $\rho$ versus R	80
4. 5a	- R versus $\Delta\theta$ para 8192 planos. São comparados os resultados para o caso sem absorção (curva contínua) e com absorção (tracejada), quando $h=0.0001$	81
4. 5b	- A mesma comparação que a Fig. 4.5a com $\rho$ versus R	82
4. 6a	- R versus $\Delta\theta$ para 8192 planos, em situação análoga à Fig. 4.5a, quando $h=0.0005$	83
4. 6b	- A mesma comparação que a Fig. 4.6a com $\rho$ versus R	84
4. 7a	- Transmissividade T versus $\Delta\theta$ comparando-se os resultados para 1024 (curva contínua) e 2048 (tracejada) planos. Os valores de T(min) e de $\theta_p$ , escritos no mesmo nível na Figura, referem-se à curva contínua	85
4. 7b	- A mesma comparação que a Fig. 4.7a com $\pi$ versus T	86
4. 8a	- T versus $\Delta\theta$ para 8192 planos. São comparados os resultados para o caso sem absorção (curva contínua) e com absorção (tracejada), quando $h = 0.0001$	87
4. 8b	- A mesma comparação que a Fig. 4.8a com $\pi$ versus T	88
4. 9a	- Energia E versus $\Delta\theta$ para 8192 planos. A reta contínua ao nível de $E=1$ , corresponde aos resultados para o caso sem absorção. A curva tracejada resulta quando a absorção é incluída, sendo $h=0.0001$	89

4. 9b	- A mesma comparação que a Fig. 4.9a quando $h=0.0005$ . . .	90
4. 10a	- R versus $\Delta\theta$ para 1024 planos (curva contínua) comparando-se com os resultados obtidos quando o fator de espalhamento do plano $f_p$ é multiplicado por 2 (tracejada) . . . . .	91
4. 10b	- A mesma comparação que a Fig. 4.10a com $\rho$ versus R . . .	92
4. 11a	- R versus $\Delta\theta$ para 1024 planos (curva contínua), em situação análoga à Fig. 4.10a, $f_p$ sendo multiplicado por 4 (tracejada) . . . . .	93
4. 11b	- A mesma comparação que a Fig. 4.11a com $\rho$ versus R . . .	94
4. 12a	- T versus $\Delta\theta$ para 1024 planos (curva contínua) comparando-se com os resultados obtidos quando $f_p$ é multiplicado por 2 (tracejada) . . . . .	95
4. 12b	- A mesma comparação que a Fig. 4.12a com $\tau$ versus T . . .	96
4. 13a	- T versus $\Delta\theta$ para 1024 planos (curva contínua), em situação análoga à Fig. 4.12a, com $f_p$ multiplicado por 4 (tracejada) . . . . .	97
4. 13b	- A mesma comparação que a Fig. 4.13a com $\tau$ versus T . . .	98
4. 14a	- R versus $\Delta\theta$ para 128 planos (curva contínua) comparando-se com os resultados obtidos quando $f_p$ é multiplicado por 16 (tracejada) . . . . .	99
4. 14b	- R versus $\Delta\theta$ para 128 planos quando $f_p$ é multiplicado por 256 . . . . .	100
4. 15	- Curva de reflexão experimental obtida por Renninger com Silício [333] (referência (31)). . . . .	101

## C A P Í T U L O 1

### AS TEORIAS DE DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

#### 1.1 - Introdução Histórica

A descoberta da difração de raios X em cristais por von Laue, Friedrich e Knipping em 1912, além de mostrar as propriedades ondulatórias dos raios X, revelou a existência de uma periodicidade na estrutura da matéria. Em consequência, tornou-se possível a comprovação de modelos de estruturas cristalinas imaginadas naquela época. A importância dessa descoberta pode ser medida pela atenção despertada em grande número de pesquisadores destacando-se W.H. Bragg e seu filho, W.L. Bragg. Estes e seus colaboradores, iniciaram um campo de pesquisas utilizando a difração de raios-X para determinar estruturas atômicas de cristais. Esta técnica, ainda hoje, se constitui no mais poderoso método experimental da Física da Matéria Condensada.

Na interpretação dos resultados seguiu-se, de início, uma forma elementar da teoria de difração por uma rede espacial constituída de idênticos pontos espalhadores. Essa forma, denominada teoria geométrica, leva em conta apenas os raios difratados nas direções onde há superposição das pequenas ondas ("wavelets"), de cada elemento do cristal. Durante algum tempo ficaram evidentes, entre os pesquisadores, duas tendências quanto ao procedimento analítico para tratar a difração: se baseada nas equações de Laue ou se, na equação de Bragg. Embora distintas, essas metodologias são equivalentes e, fundamentaram o desenvolvimento de outra

formulação mais abrangente.

A teoria cinemática caracteriza-se por levar em conta apenas a interação de cada átomo com a onda primária em um cristal ou seja, cada átomo espalha uma fração do feixe incidente. Isto significa que as amplitudes das "wavelets" são, sempre, menores que aquela da onda incidente. Nessa teoria, considera-se outras direções de difração além daquela de máxima intensidade, como ocorre na teoria geométrica. A teoria cinemática não trata a interação de um átomo com o campo induzido no cristal pelo espalhamento dos outros átomos. Em consequência, a energia do feixe primário que atravessa o cristal permanece inalterada ou seja, a energia nas direções dos feixes secundários não é considerada. A ampla utilização dessa teoria contudo, deve-se à satisfatória interpretação dos resultados experimentais obtidos com cristais reais (imperfeitos).

A partir das limitações da teoria cinemática, Darwin (1,2,3) elaborou um modelo de espalhamento dinâmico de raios X sendo incluídos os feixes difratados pelos planos de um cristal perfeito. Na mesma época, Ewald (4,5,6,7) apresentou sua teoria onde trata o cristal como uma rede infinita de elétrons oscilantes (dipolos). Por outro lado, em seu trabalho, Laue (8), assumiu cada cela do cristal preenchida por uma densidade eletrônica tal que, a distribuição contínua de cargas no plano é dada por uma constante dielétrica periódica.

Distintamente concebidas essas teorias constituem-se no que Kato (9) chamou de "os três edifícios" da teoria dinâmica. Entretanto, naquela época, as mesmas não despertaram interesse entre os pesquisadores diante da impossibilidade de comprovação experimental pela inexistência de cristais perfeitos, entre outros fatores. Este quadro começou a mudar quando surgiu o interesse em cristais Semicondutores no estado perfeito e conseqüentemente, na

teoria dinâmica.

A seguir apresentamos, brevemente, os princípios das teorias de difração dinâmica existentes.

## 1.2 - A Teoria de Darwin

A partir dos resultados obtidos por J.J. Thomson para o espalhamento da luz por um elétron, Darwin analisou a difração resultante da incidência de uma onda plana sobre um plano de átomos. As intensidades espalhadas em ambas faces do plano, foram determinadas através do método das zonas de Fresnel somando as reflexões correspondentes a cada cela unitária do plano.

Para tratar o espalhamento em um cristal, Darwin considerou sucessivos planos igualmente espaçados. Denominando os feixes refletido por  $S$  e o transmitido por  $T$ , o referido autor encontrou uma relação de recorrência envolvendo amplitudes e fases, expressando-a na forma:

$$S_r = -iq T_r + (1 - iq_0) S_{r+1} \exp(-i\varphi) \quad (1.2.1)$$

$$T_{r+1} = (1 - iq_0) T_r \exp(-i\varphi) - iq S_{r+1} \exp(-i2\varphi). \quad (1.2.2)$$

O índice  $r$  enumera os planos atômicos que são espaçados por  $d_{hkl}$ .  $T_r$  e  $T_{r+1}$  são as amplitudes das ondas transmitidas no plano  $r$  e no seu vizinho inferior,  $r+1$ .  $S_r$  e  $S_{r+1}$  são as amplitudes correspondentes para as ondas refletidas. As quantidades  $q_0$  e  $q$  indicam, respectivamente, os coeficientes de transmissão e de reflexão sendo  $g$  o coeficiente de reflexão para a face inferior do plano.  $\varphi(\theta, \lambda)$  é a diferença de fase de caminho.

No caso da absorção, Darwin admitiu seu efeito apenas

quando o feixe atravessa cada plano, independentemente do seu espalhamento pelos átomos. Esse efeito é observado introduzindo-se o fator de absorção  $(1-h)$  na amplitude do feixe transmitido, sendo  $h$  uma quantidade muito pequena. Prins (10) tratou, fenomenologicamente, a absorção na teoria de Darwin admitindo os coeficientes  $q_0$  e  $q$  como entes complexos. Isto significa levar em conta a absorção também no feixe refletido. Como resultado, o autor obteve uma forma assimétrica para a curva de reflexão dependente da ordem do espectro e da polarização do campo incidente.

Seguindo a metodologia introduzida por Bragg para tratar reflexões em planos paralelos, Darwin mostrou a necessidade de efetuar uma correção na lei de Bragg. Em vez de ocorrer difração apenas para o valor de  $\Theta_0$ , que satisfaz essa lei, ele encontrou uma região de difração cujo centro corresponde ao denominado ângulo de Bragg,  $\Theta_B$ . De acordo com Bragg, James e Bosanquet (11), este ângulo é igual a  $\Theta_0$ , acrescido de uma pequena correção angular  $\epsilon$ . Na faixa angular em torno de  $\Theta_B$ , o cristal age como um perfeito refletor. Fora dessa faixa, a intensidade de reflexão cai rapidamente a um valor quase zero.

A teoria dinâmica de Darwin é uma importante contribuição para explicar as características fundamentais da difração de raios X em cristais perfeitos. A mesma constitui um elemento significativo para o desenvolvimento de métodos refinados para a determinação de estruturas, permitindo medir com maior precisão e interpretar corretamente, intensidades refletidas. Apesar de formulada há mais de 70 anos, esta teoria ainda desperta interesse, conforme os trabalhos de Borie em 1967 (12), Batterman e Hildebrandt em 1968 (13), Perkins e Knight em 1984 (14), além de ser amplamente usada na difração de elétrons.

### 1.3 - A Teoria de Ewald

Na sua tese de doutorado em 1912, Ewald analisa a dispersão da luz em um meio anisotrópico no qual as propriedades óticas eram causadas por elétrons oscilantes (dipolos) distribuídos como uma rede infinita. O rigoroso e fisicamente elegante tratamento analítico desenvolvido foi aplicado pelo autor no caso da difração de raios-X, levando em conta as mútuas interações entre os dipolos ("resonators"). Slater (15), denominou esse trabalho de Ewald como "a very sophisticated theory of X rays".

Inicialmente, Ewald reavaliou o tratamento dado a onda incidente na determinação do índice de refração como um problema de auto-valor. O autor desenvolveu o cálculo de frequências próprias de vibração, em vez de vibrações forçadas como nas teorias de Drude, de Lorentz e de Planck (16). Na teoria de Ewald a onda incidente que age sobre cada "resonator" é originária das "wavelets" (pequenas ondas esféricas) irradiadas pelos outros "resonators". As soluções são obtidas através das equações de Maxwell, que são lineares, superpondo-se os campos individuais. O cristal é tido como infinitamente extenso em todas as direções tal que cada ponto da rede, supostamente ocupado por um dipolo, oscila sob a radiação de um campo eletromagnético propagando-se no meio. O estado de oscilação de um dipolo é então configurado por uma "onda-dipolo", estacionária. Ewald discute o ambiente de um dipolo, tratando-o como a unidade principal de espalhamento de seu modelo. Cada dipolo emite uma "wavelet" que se propaga com a velocidade da luz no vácuo. A superposição das "wavelets" oriundas de todos os outros "resonators" forma o campo atuante sobre cada dipolo, separadamente. Desta forma estabeleceu-se a condição de equilíbrio com o campo total de todas as ondas.

Na determinação do campo de um dipolo isolado, o autor usou as soluções de Hertz das equações de Maxwell e daí, para todos os outros dipolos oscilando em uma mesma direção. A soma de todas as "wavelets" em cada ponto da rede foi efetuada desenvolvendo uma técnica de integral que depois verificou ser a integral de Fourier. Para separar a contribuição de cada dipolo para o campo total Ewald adotou o método de Riemann, relacionando o campo de excitação de cada dipolo com a amplitude através de sua polarizabilidade  $\alpha$ ,

$$\mathbf{p} = \alpha \mathbf{E} \quad (1.3.1)$$

onde  $\mathbf{p}$  é o momento de dipolo e  $\mathbf{E}$  o campo elétrico. Como resultado, Ewald observou que " the optical field generated by the dipole oscillations had to be such that it just sustained these very oscillations" (17). Essa situação ele chamou de "equilíbrio dinâmico", sendo agora conhecida como o princípio da auto-consistência de Ewald.

O regime auto-consistente é estabelecido quando o estado de vibração no cristal representa uma compatibilização entre as oscilações dos "resonators" e o campo ótico de raios X. Para analisar a propagação deste campo no cristal, Ewald introduz o teorema da reciprocidade pelo qual, se  $n$  pontos da rede recíproca estão na esfera de reflexão então existem  $n$  ondas, que são as meso-ondas. Estas formam uma unidade inseparável tal que nenhuma delas pode existir sem gerar as outras. O campo ótico no cristal (18) é expresso como

$$E(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{H}} S_{\mathbf{H}\mathbf{p}} r_{\mathbf{H}} \exp(2\pi i \mathbf{K}_{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{x}) \quad (1.3.2)$$



onde  $K_H$  é o vetor de onda de origem, localizada pelo vetor  $x$ , no centro da esfera de reflexão e extremidade no ponto H da rede recíproca.  $S_{Hp}$  representa a componente da amplitude de estrutura da cela perpendicular a  $K_H$ . E ainda,

$$r_H \equiv k_0^2 / (K_H^2 - k_0^2) \quad (1.3.3)$$

é o denominado fator de ressonância. De acordo com Ewald, este fator dá a "eficiência" do cristal em converter uma amplitude de momento de dipolo em amplitude do campo da onda, representada por  $K_H$ .

Sob a condição de auto-consistência para conhecer o campo ótico no cristal, basta conhecer a magnitude  $K_H$  para uma das ondas componentes e então, todos os outros vetores, tipo  $K_H$ , serão determinados. Com isso, fixa-se a origem comum aos vetores de onda, chamando-a de ponto de onda ou "tie-point", garantindo que cada onda tem amplitude e fase ajustadas às outras ondas componentes do campos.

A relação campo de ondas versus "resonators", é a condição para determinar o índice de refração para raios-X que difere de 1 na ordem de  $10^{-6}$ . Esta diferença é a mesma existente entre as magnitudes do comprimento de onda de qualquer uma das ondas do campo ótico  $K$  e o correspondente valor para o vácuo,  $k_0$ . Isto significa que cada uma das  $n$  ondas terá seu próprio índice de refração.

Os modos próprios do campo auto-ajustado são visualizados pelas posições dos "tie-points" como centros das esferas de reflexão. A representação geométrica dessas posições, no espaço

recíproco, é conhecida como a superfície de dispersão. Esta superfície representa o campo das ondas, dando as direções e as magnitudes de seus vetores de onda, as direções de polarização e as razões de amplitude das ondas componentes.

Com o objetivo de obter resultados que pudessem ser verificados experimentalmente Ewald, admitiu um campo externo em seu modelo formado uma onda eletromagnética plana incidente na superfície de um cristal semi-infinito ou "half-crystal". O campo resultante é composto por ondas de um mesmo tipo como no cristal infinito ou seja, a meso-onda. Cada uma dessas é acompanhada por uma "boundary wave", criada na superfície do cristal, denominada de epi-onda interna. Essa onda tem a mesma amplitude que a meso-onda, velocidade de fase  $c$  mas, com fase oposta. Desta maneira, ocorrendo o cancelamento dessa epi-onda interna, o autor pôde aplicar a solução obtida para um meio ilimitado. A condição de contorno é introduzida admitindo-se uma mesma componente tangencial ao longo da superfície do cristal, para os vetores de ondas da meso e da epi-onda.

O regime auto-consistente é preservado com a superposição dos campos das epi-ondas tal que em cada direção propaga-se um feixe de ondas planas, com vetores de ondas ligeiramente diferentes. Como resultado, formam-se os chamados "beats" com troca de energia entre as direções de propagação das ondas, originando-se no que Ewald denominou de "Pendelloesung".

A avaliação de Ewald para o caso onde o plano de superfície é paralelo aos planos da rede, mostrou a necessidade de considerar um "crystal plate" em vez de "half-crystal". O autor introduziu uma segunda condição de contorno para a superfície inferior do cristal e, tomando um valor médio para a espessura do cristal, obteve a conhecida curva de reflexão "top hat".

#### 1.4 - A Teoria de Laue

O formalismo mais utilizado da teoria dinâmica de raios X foi apresentado por Laue em 1931, sendo considerado por Slater (15) uma extensão natural daquele devido a Ewald. A teoria de Laue admite que cada cela do cristal é preenchida por uma densidade eletrônica dada por  $\rho(\mathbf{r})$ . Para neutralizar essa configuração de cargas negativas, assume-se que as cargas positivas do núcleo estão contínua e igualmente distribuídas na rede cristalina. O estado de oscilação das cargas é determinado pelo campo externo incidente.

A rede é então representada pela expansão da série de Fourier da susceptibilidade elétrica  $\chi$ , visto que esta é proporcional a densidade eletrônica e triplamente periódica para o cristal perfeito. Então,

$$\chi = \sum_{\mathbf{H}} \chi_{\mathbf{H}} \exp(i2\pi \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.4.1)$$

onde o somatório é estendido a todos os pontos da rede recíproca e  $\mathbf{H}$  é um vetor da mesma, definido por  $\mathbf{K}_{\mathbf{H}} = \mathbf{K}_0 + \mathbf{H}$ . O vetor  $\mathbf{r}$  dá a posição no espaço real de um átomo relativo à origem da cela unitária.  $\chi_{\mathbf{H}}$  é a susceptibilidade elétrica relacionada com o fator de estrutura  $F_{\mathbf{H}}$ , que por sua vez, é associado as componentes da expansão da transformada de Fourier da densidade de carga  $\rho(\mathbf{r})$ .

Laue resolveu as equações de Maxwell calculando o campo de ondas no cristal através o vetor deslocamento elétrico  $\mathbf{D}$ . As soluções obtidas são ondas vetoriais de Bloch com mesma periodicidade que a susceptibilidade elétrica.

$$\mathbf{D} = \sum_{\mathbf{H}} \mathbf{D}_{\mathbf{H}} \exp(i2\pi \mathbf{K}_{\mathbf{H}} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.4.2)$$

onde  $D_H$  e  $K_H$  são o deslocamento elétrico e o vetor de onda na direção do ponto H da rede recíproca.

A equação de dispersão de Laue, conhecida como a equação fundamental da teoria dinâmica é dada por:

$$[(k_H^2 - k^2) / k_H^2] D_H = \sum_{H'} x_{H-H'} D_{H'CH} \quad (1.4.3)$$

sendo  $k = 2\pi/\lambda$ , o módulo do vetor de onda no vácuo  $k$ ,  $x_{H-H'}$  a componente da expansão de Fourier de  $x$  e  $D_{H'CH}$  é a projeção de  $D$  no plano normal a  $K_H$ .

A equação (1.4.3) representa um conjunto infinito de equações lineares homogêneas, associadas aos valores de  $D$  para diferentes ondas.

### 1.5 - Uma Breve Avaliação das Atuais Teorias

As três teorias de espalhamento dinâmico de raios X, embora objetivem interpretar uma mesma situação, apresentam diferenças não só em configurar o meio cristalino como na formulação analítica.

É interessante destacar que Darwin reformulou o seu modelo original, ainda no ano de sua publicação (2). Inicialmente, ele considerou que o plano de átomos era excitado por uma onda originária de uma fonte pontual. Cada átomo espalhava uma pequena onda esférica ("wavelet") assumindo-se ainda uma direção de polarização diferente para cada um deles. Verificando a complexidade na determinação do coeficiente de reflexão  $q$ , o autor julgou mais conveniente tratar a onda incidente como onda plana.

Darwin introduziu um coeficiente  $x$  para indicar uma modificação tanto a amplitude do feixe espalhado como a do feixe transmitido. Esta consideração não pode ser aplicada para um conjunto de planos de um cristal real, onde o campo em cada plano comporta-se de maneira diferente. Por outro lado, a conservação da energia não pode ser verificada em seu modelo, visto que o autor não levou em conta as mútuas interações entre os átomos no próprio plano. A absorção foi tratada introduzindo-se o fator de amortecimento  $(1-h)$  apenas para a amplitude do feixe transmitido, proporcionando uma solução incompleta para a radiação espalhada.

A teoria de Ewald não obteve significativa aceitação dos pesquisadores na época. Entre os motivos, a dificuldade em tratar, experimentalmente, a unidade de espalhamento do cristal assumida como eletrons oscilantes (dipolos) nos pontos da rede cristalina. A distribuição de dipolos formando uma rede infinita foi considerada por Ewald como plano de superfície no tratamento de um cristal semi-infinito. Essa superfície tem uma função singular no modelo: destruir a onda incidente, refletir uma onda e, criar uma onda que se propaga no interior do cristal. Este procedimento deu origem ao teorema da extinção.

Uma outra característica desse modelo é a não inclusão do fator de estrutura. Slater (15) considera este fato como uma séria inconveniência da teoria de Ewald, diante da importância do referido fator no espalhamento de raios-X.

No caso da absorção, Ewald demonstrou alguma hesitação em introduzi-la como um fator de freamento nas oscilações dos dipolos. Sabia ele que a absorção era causada principalmente pela ejeção de fotoeletrons ou seja, um efeito tipicamente quântico.

A equação fundamental da teoria dinâmica encontrada por Laue é baseada em soluções da equação de Maxwell para um meio

essencialmente periódico. Esta consideração, como questionada por Ewald (17), significa uma transferência do conceito da constante dielétrica, que representa uma quantidade macroscópica, para distâncias interatômicas. De acordo com a observação de Ewald, Laue assumiu um valor médio para o campo de uma distribuição de cargas negativas e positivas, como na teoria de Lorentz. Contudo, este tipo de valor médio não pode ser aplicado para os "rapidamente variáveis campos de raios-X".

As auto-soluções das equações de Maxwell foram obtidas por Laue, introduzindo o conceito de ondas de Bloch, podendo ser somadas como um campo de ondas planas. Entretanto, o tratamento de ondas de Bloch como constituintes de um campo de raios-X não pode ser generalizado, considerando que a periodicidade de tais ondas não necessariamente reflete a periodicidade de excitação do campo no interior do cristal.

As teorias de Ewald e de Laue diferem principalmente em dois aspectos:

(i) Ewald deriva uma equação da dispersão, microscopicamente, para campos de dipolos isolados usando o vetor de Hertz  $Z$ , enquanto Laue adota um procedimento fenomenológico e macroscópico para resolver as equações de Maxwell expandindo o vetor deslocamento elétrico  $D$ ;

(ii) Considerando um cristal semi-infinito, Ewald não estabeleceu condições de contorno e então a superfície do cristal é definida pelos dipolos mais exteriores oscilando sob o regime da auto-consistência. Na teoria de Laue a seção da superfície do cristal é representada por uma distribuição contínua de matéria e as condições de contornos para atender todos os pontos no plano de superfície seguem aquelas da teoria Maxwelliana.

Na avaliação de Wagenfeld (12), a teoria de Laue pode

apresentar os mesmos resultados da teoria microscópica de Ewald. Desde que esta situação implica em diferentes considerações e analogias, o espalhamento dinâmico de raios X pode ser interpretado de acordo com a preferência do pesquisador e o modelo de cristal assumido. Isto mostra a necessidade de uma formulação unificada e rigorosa que justifique plenamente os resultados experimentais.

## 1.6 - A Proposição deste Trabalho

O objetivo desta tese é apresentar um modelo unificado, microscópico, vetorial e exato para o espalhamento auto-consistente de raios-X no caso simétrico de Bragg. O cristal é tratado como um conjunto de planos de dipolos induzidos, paralelos e unidimensionalmente periódicos sobre os quais incidem, simetricamente, duas ondas eletromagnéticas planas. Definimos um plano qualquer do cristal, associado aos campos incidente e transmitido, como unidade de espalhamento e encontramos o campo resultante dessa interação. Essa solução é então estendida para o caso de um cristal ou seja, um conjunto de  $N$  planos paralelos e igualmente espaçados. Além da solução analítica, desenvolvemos uma solução numérica como um método eficaz de encontrar resultados comparáveis com aqueles publicados.

## A UNIDADE DE ESPALHAMENTO AUTO-CONSISTENTE

## 2.1 - Introdução

O espalhamento eletrodinâmico auto-consistente apresentado por Keller e Campos (20), trata o cristal como um conjunto de planos de dipolos sobre os quais incidem, perpendicularmente em sentidos opostos, duas ondas eletromagnéticas planas. A exemplo de Ewald para modelo idêntico (21), os autores tratam os planos do cristal como se possuíssem uma infinita densidade de cargas. Entretanto, os campos gerados no meio são interpretados de modo diferente. O epicampo é dado pelo campo estacionário das oscilações dos dipolos em cada plano e o mesocampo, é o campo de propagação entre os planos. Estes dois campos, por sua vez, interagem auto-consistentemente nos planos. A obtenção de uma solução exata evidencia, no referido trabalho, fundamentos para o desenvolvimento de um modelo completo de espalhamento auto-consistente de um cristal.

Keller e Urbanski (22) encontraram uma solução auto-consistente para o espalhamento de uma onda eletromagnética plana, harmônica, por um plano de dipolos. Para um ângulo qualquer de incidência  $\Theta$  e, definindo a distribuição de cargas no plano por um fator de espalhamento do plano  $f_p$ , os autores mostraram que a onda dos dipolos no plano tem o comportamento de onda eletromagnética plana. Introduzindo o princípio da auto-consistência de Ewald eles mostraram ainda a conservação da energia nessa



interação. Recentemente, Keller (23) estendeu a solução para o caso de dois feixes, definindo a unidade de espalhamento como um plano de dipolos e seus campos associados.

Com o nosso propósito de analisar o espalhamento auto-consistente no caso simétrico de Bragg, retomamos o modelo de cristal discutido em (20). A solução auto-consistente para um plano de dipolos, será generalizada para determinar os campos resultantes para todo o cristal admitindo-se inclusive, o efeito da absorção.

## 2.2 - Os Campos das Ondas Incidentes

O ponto de partida para tratar esse modelo de espalhamento consiste em re-definir a unidade de espalhamento implicitamente adotada (20), generalizando as condições de incidência. Designamos por  $j$  um plano de dipolos qualquer do cristal, referenciado à um sistema de coordenadas ortonormais. Sobre esse plano incidem, simetricamente com mesmo ângulo  $\Theta$ , duas ondas eletromagnéticas planas com polarização elíptica (Fig. 2.1).

As componentes elétricas dos campos incidentes, que são as utilizadas na análise da difração de raios-X são dadas, em função dos vetores de polarização  $A^i_E$  e  $B^i_E$ , na forma:

$$E^i_A(\mathbf{r}, t) = A^i_E \exp[i(\omega t - \mathbf{k}^i_A \cdot \mathbf{r})] \quad (2.2.1)$$

$$E^i_B(\mathbf{r}, t) = B^i_E \exp[i(\omega t - \mathbf{k}^i_B \cdot \mathbf{r})] \quad (2.2.2)$$

onde  $\omega = 2\pi\nu$ , é a frequência da radiação e  $\mathbf{r} = [x, y, z]$  o ponto que localiza o plano de espalhamento. Nesta formulação os vetores de ondas  $\mathbf{k}^i_A$  e  $\mathbf{k}^i_B$  são definidos, no plano de incidência, por:

$$\mathbf{k}_A^i = k [+sen\theta, \cos\theta, 0] \quad (2.2.3)$$

$$\mathbf{k}_B^i = k [-sen\theta, \cos\theta, 0] \quad (2.2.4)$$

tendo magnitude  $k = 2\pi/\lambda$ .

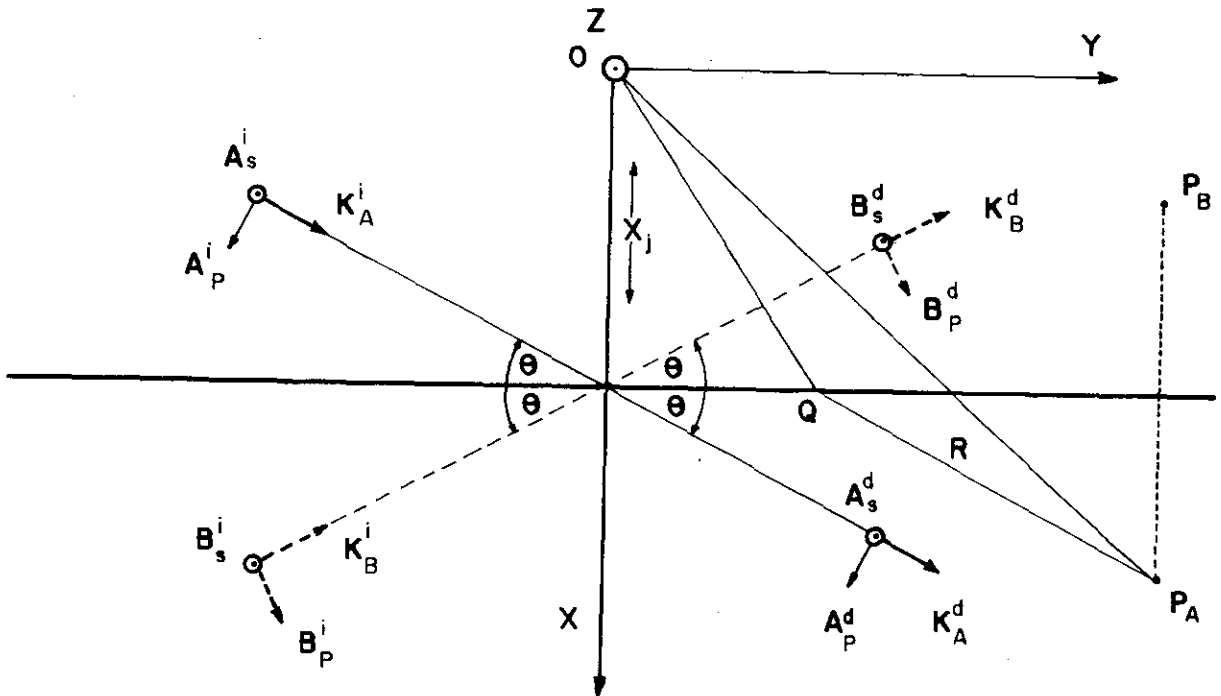


Fig. 2.1 - Diagrama da interação das ondas A e B, representadas nos estados de polarização  $\pi$  e  $\sigma$ , com o plano de espalhamento  $j$ .

Os vetores de polarização  $A_E^i$  e  $B_E^i$  são expressos através de suas componentes nos estados de polarização  $\pi$  e  $\sigma$  indicados, respectivamente, pelas letras p e s:

$$A_E^i = A_P^i + A_S^i \quad (2.2.5)$$

$$B_E^i = B_P^i + B_S^i \quad (2.2.6)$$

ou, representando-os em função de suas amplitudes,  $A_p^i$ ,  $A_s^i$ ,  $B_p^i$  e  $B_s^i$  e respectivos versores,  $e_{pA}$ ,  $e_{sA}$ ,  $e_{pB}$  e  $e_{sB}$ , temos:

$$A_E^i = A_p^i e_{pA} + A_s^i e_{sA} \quad (2.2.7)$$

$$B_E^i = B_p^i e_{pB} + B_s^i e_{sB} \quad (2.2.8)$$

onde

$$e_{pA} = [\cos\theta, -\sin\theta, 0] \quad (2.2.9)$$

$$e_{sA} = [0, 0, 1] \quad (2.2.10)$$

$$e_{pB} = [\cos\theta, \sin\theta, 0] \quad (2.2.11)$$

$$e_{sB} = [0, 0, 1] \quad (2.2.12)$$

As amplitudes são dadas pelas suas magnitudes  $|A_s^i|$ ,  $|A_p^i|$ ,  $|B_s^i|$ ,  $|B_p^i|$  e fases iniciais nos dois estados de polarização,  $\alpha_p^i$ ,  $\alpha_s^i$ ,  $\beta_p^i$ ,  $\beta_s^i$ , respectivamente para cada direção de incidência:

$$A_p^i = |A_p^i| \exp(i\alpha_p^i) \quad (2.2.13)$$

$$A_s^i = |A_s^i| \exp(i\alpha_s^i) \quad (2.2.14)$$

$$B_p^i = |B_p^i| \exp(i\beta_p^i) \quad (2.2.15)$$

$$B_s^i = |B_s^i| \exp(i\beta_s^i) \quad (2.2.16)$$

Os campos elétricos incidentes em cada direção, para o estado de polarização  $\pi$ , são:

$$E_{pA}^i(\mathbf{r}, t) = |A_p^i| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\alpha_p^i + \omega t - k \sin \theta x - k \cos \theta y)] \right\} (\cos \theta \mathbf{e}_x - \sin \theta \mathbf{e}_y) \quad (2.2.17)$$

$$E_{pB}^i(\mathbf{r}, t) = |B_p^i| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\beta_p^i + \omega t + k \sin \theta x - k \cos \theta y)] \right\} (\cos \theta \mathbf{e}_x + \sin \theta \mathbf{e}_y) \quad (2.2.18)$$

e para o estado- $\sigma$ ,

$$E_{sA}^i(\mathbf{r}, t) = |A_s^i| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\alpha_s^i + \omega t - k \sin \theta x - k \cos \theta y)] \right\} \mathbf{e}_z \quad (2.2.19)$$

$$E_{sB}^i(\mathbf{r}, t) = |B_s^i| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\beta_s^i + \omega t + k \sin \theta x - k \cos \theta y)] \right\} \mathbf{e}_z \quad (2.2.20)$$

onde  $E_{pA}^i$ ,  $E_{pB}^i$ ,  $E_{sA}^i$ ,  $E_{sB}^i$  representam as componentes de polarização do campo incidente, orientadas nas direções  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{e}_z$ .

Os campos interagentes são interpretados, de acordo com (20), da seguinte maneira:

(i) O mesocampo incidente  $\mathbf{M}^i$  é o campo eletromagnético de propagação das ondas no cristal, tendo velocidade  $c$  e vetor de onda  $\mathbf{k}$ , como no espaço livre; (ii) A interação desse campo com o plano de dipolos ocasiona um estado estacionário de oscilações dos dipolos. O campo resultante dessas oscilações é o epicampo  $\mathbf{E}_e$  que tem significado físico exclusivamente no plano de dipolos. A sua intensidade depende daquela do mesocampo  $\mathbf{M}^i$  e, do fator de espalhamento do plano,  $f_p$ .

### 2.3 - Os Campos das Ondas de Dipolos

Segundo Keller e Urbanski (22) a radiação espalhada pelos dipolos, em um ponto do plano, pode ser analisada sob duas condições: (i) quando os dipolos do plano são excitados apenas pelo mesocampo incidente  $H^i$  e, (ii) quando o campo total de excitação dos dipolos inclui também o campo de radiação de todos os outros dipolos no mesmo plano.

Na primeira condição, a solução encontrada através do vetor de Hertz, mostrou que os campos resultantes dos dipolos assumem, imediatamente, a forma de um campo de ondas eletromagnéticas planas. A onda transmitida possui vetor de onda idêntico ao da onda incidente, não havendo portanto, onda refratada em outra direção além daquela de incidência.

A segunda condição, que proporciona a solução auto-consistente, será aqui detalhadamente desenvolvida para o caso de dois feixes. O campo total de excitação inclui também os campos dos próprios dipolos, obtidos tomando-se o valor médio desses campos em dois pontos de observação,  $P_A$  e  $P_B$ , simétricos e fora do plano. O campo total de excitação, sendo agora auto-consistente  $F_e$ , é determinado retroagindo-se ao ponto  $Q=[0,y,z]$  no plano de espalhamento  $j$ . Para simplificar localizamos o mesmo na origem do sistema de coordenadas.  $F_e$  é então expresso em função das ondas incidentes  $A^i_u$  e  $B^i_u$  e das ondas de dipolos  $A^d_u$  e  $B^d_u$ :

$$F_e(Q,t) = (A^i_u + B^i_u) + (1/2)(A^d_u + B^d_u) \quad (2.3.1)$$

onde  $u=p,s$  indicam o estado de polarização ( $\pi$ ,  $\sigma$ ). Esta situação é

ilustrada na Fig. (2.2) para a polarização- $\sigma'$

Vamos então mostrar que as ondas de dipolos assumem comportamento de ondas planas. Seja o momento infinitesimal de dipolo no ponto  $Q$  definido por:

$$d\mathbf{M}(Q,t) = -r_e \sigma_0 k^{-2} \mathbf{F}_e \exp[i(\omega t - k \cos\theta y)] dy dz \quad (2.3.2)$$

Antes de aplicar o método do vetor de Hertz referenciamos ao sistema de coordenadas  $xyz$ , os campos das ondas incidentes e de dipolos. Os vetores de polarização no estado- $\pi'$  são representados no plano  $xy$  e aqueles no estado- $\sigma'$ , tem a direção do versor  $\mathbf{e}_z$ .

Para o campo incidente as componentes do momento,  $d\mathbf{M}_x$ ,  $d\mathbf{M}_y$ ,  $d\mathbf{M}_z$ , nas direções  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{e}_z$  são as seguintes:

$$d\mathbf{M}_x^i = (1/2) G [(A_P^i \Omega_A + B_P^i \Omega_B) \exp(-ik \cos\theta y) + (A_P^{*i} \Omega_A^* + B_P^{*i} \Omega_B^*) \exp(+ik \cos\theta y)] \cos\theta dy dz \mathbf{e}_x \quad (2.3.3)$$

$$d\mathbf{M}_y^i = (1/2) G [(-A_P^i \Omega_A + B_P^i \Omega_B) \exp(-ik \cos\theta y) + (-A_P^{*i} \Omega_A^* + B_P^{*i} \Omega_B^*) \exp(+ik \cos\theta y)] \sin\theta dy dz \mathbf{e}_y \quad (2.3.4)$$

$$d\mathbf{M}_z^i = (1/2) G [(A_S^i \Omega_A + B_S^i \Omega_B) \exp(-ik \cos\theta y) + (A_S^{*i} \Omega_A^* + B_S^{*i} \Omega_B^*) \exp(+ik \cos\theta y)] dy dz \mathbf{e}_z \quad (2.3.5)$$

onde definimos  $G = -r_e \sigma_0 k^{-2}$ ,  $r_e$  é o raio clássico do elétron e  $\sigma_0$  a densidade de cargas no plano. Para simplificar, denominamos:

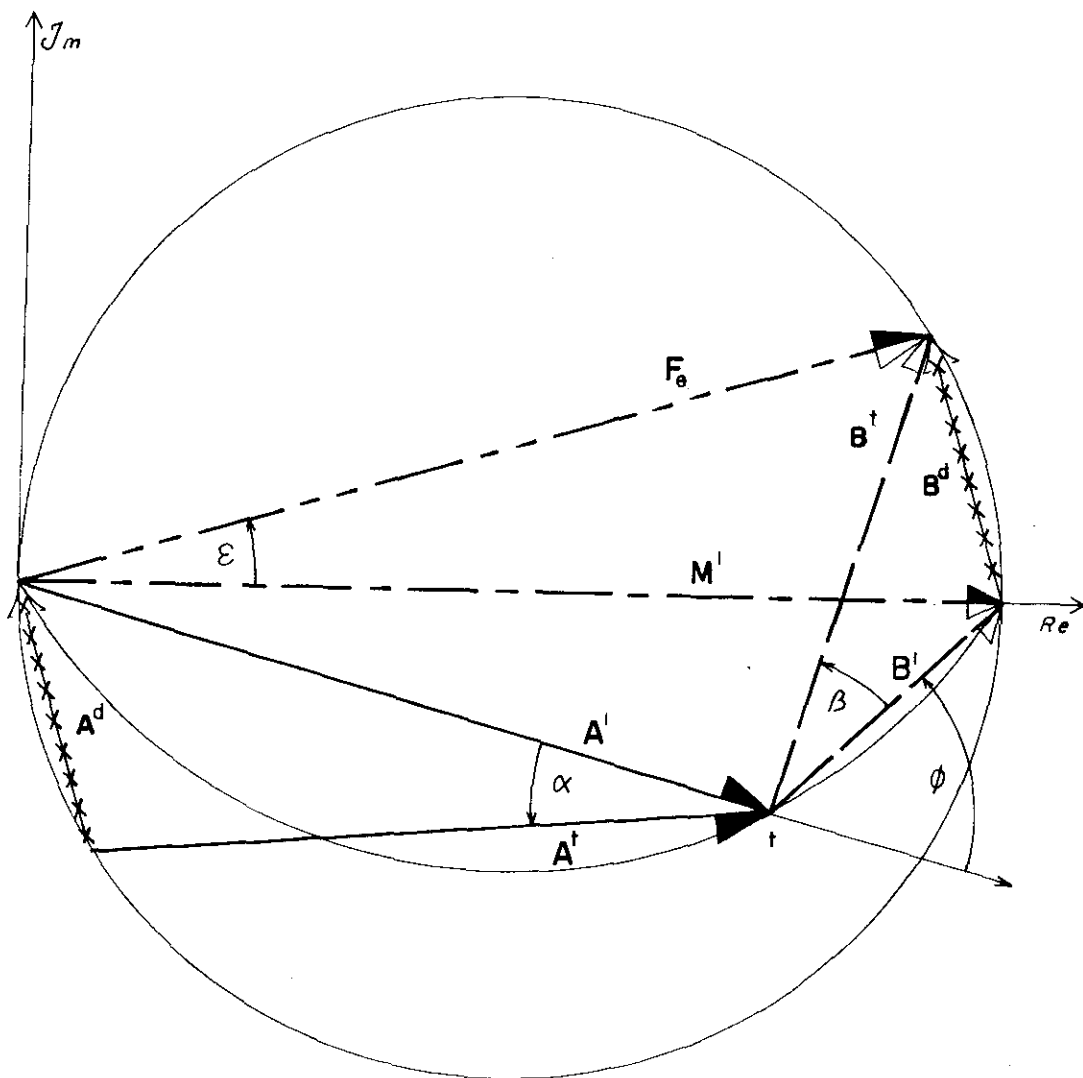


Fig. 2. 2 - A composição do mesocampo incidente  $M^i$ , no plano complexo de amplitude e fase, em função dos vetores de polarização das ondas A e B, no estado  $\alpha$ .

$$\Omega_A = \exp[i(\omega t - k \sin \Theta x)] \quad (2.3.6)$$

$$\Omega_B = \exp[i(\omega t + k \sin \Theta x)] \quad (2.3.7)$$

e seus respectivos conjugados,  $\Omega_A^*$  e  $\Omega_B^*$ .

No caso das ondas de dipolos, denominamos os seus respectivos campos, em cada direção, por  $E_A^d(r,t)$  e  $E_B^d(r,t)$ . As componentes ortonormais dos vetores de polarização  $A^d$  e  $B^d$  são:

$$A^d = A_x^d e_x + A_y^d e_y + A_z^d e_z \quad (2.3.8)$$

$$B^d = B_x^d e_x + B_y^d e_y + B_z^d e_z \quad (2.3.9)$$

onde as amplitudes  $A_x^d, A_y^d, A_z^d$  e  $B_x^d, B_y^d, B_z^d$  são dadas pelas suas magnitudes e seus respectivas fases,  $\alpha_x^d, \alpha_y^d, \alpha_z^d$  e  $\beta_x^d, \beta_y^d, \beta_z^d$  ou sejam:

$$A_x^d = |A_x^d| \exp(i\alpha_x^d) \quad (2.3.10)$$

$$A_y^d = |A_y^d| \exp(i\alpha_y^d) \quad (2.3.11)$$

$$A_z^d = |A_z^d| \exp(i\alpha_z^d) \quad (2.3.12)$$

$$B_x^d = |B_x^d| \exp(i\beta_x^d) \quad (2.3.13)$$

$$B_y^d = |B_y^d| \exp(i\beta_y^d) \quad (2.3.14)$$

$$B_z^d = |B_z^d| \exp(i\beta_z^d) \quad (2.3.15)$$

As componentes do campo de dipolos,  $E_{Ax}^d, E_{Ay}^d, E_{Az}^d$  e  $E_{Bx}^d,$



$E_{By}^d, E_{Bz}^d$ , são

$$E_{Ax}^d(\mathbf{r}, t) = |A_x^d| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\alpha_x^d + \omega t - k \sin \Theta x - k \cos \Theta y)] \right\} \mathbf{e}_x \quad (2.3.16)$$

$$E_{Ay}^d(\mathbf{r}, t) = |A_y^d| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\alpha_y^d + \omega t - k \sin \Theta x - k \cos \Theta y)] \right\} \mathbf{e}_y \quad (2.3.17)$$

$$E_{Az}^d(\mathbf{r}, t) = |A_z^d| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\alpha_z^d + \omega t - k \sin \Theta x - k \cos \Theta y)] \right\} \mathbf{e}_z \quad (2.3.18)$$

$$E_{Bx}^d(\mathbf{r}, t) = |B_x^d| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\beta_x^d + \omega t + k \sin \Theta x - k \cos \Theta y)] \right\} \mathbf{e}_x \quad (2.3.19)$$

$$E_{By}^d(\mathbf{r}, t) = |B_y^d| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\beta_y^d + \omega t + k \sin \Theta x - k \cos \Theta y)] \right\} \mathbf{e}_y \quad (2.3.20)$$

$$E_{Bz}^d(\mathbf{r}, t) = |B_z^d| \operatorname{Re} \left\{ \exp[i(\beta_z^d + \omega t + k \sin \Theta x - k \cos \Theta y)] \right\} \mathbf{e}_z \quad (2.3.21)$$

Análogas às eqs. (2.3.3) a (2.3.5), as componentes dos momentos infinitesimais para as ondas de dipolos são:

$$\begin{aligned} dM_x^d = & (1/2) G \left[ (1/2) (A_x^d \Omega_A + B_x^d \Omega_B) \exp(-ik \cos \Theta y) \right. \\ & \left. + (1/2) (A_x^{*d} \Omega_A^* + B_x^{*d} \Omega_B^*) \exp(+ik \cos \Theta y) \right] dy dz \mathbf{e}_x \quad (2.3.22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} dM_y^d = & (1/2) G \left[ (1/2) (A_y^d \Omega_A + B_y^d \Omega_B) \exp(-ik \cos \Theta y) \right. \\ & \left. + (1/2) (A_y^{*d} \Omega_A^* + B_y^{*d} \Omega_B^*) \exp(+ik \cos \Theta y) \right] dy dz \mathbf{e}_y \quad (2.3.23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} dM_z^d = & (1/2) G \left[ (1/2) (A_z^d \Omega_A + B_z^d \Omega_B) \exp(-ik \cos \Theta y) \right. \\ & \left. + (1/2) (A_z^{*d} \Omega_A^* + B_z^{*d} \Omega_B^*) \exp(+ik \cos \Theta y) \right] dy dz \mathbf{e}_z \quad (2.3.24) \end{aligned}$$

O vetor elétrico de Hertz  $Z_E$ , resultante das oscilações

auto-consistentes dos dipolos de todo o plano é calculado nos dois ponto simétricos,  $P_A$  e  $P_B$ , indicados por  $P = [x_p, y_p, z_p]$ , distante do ponto  $Q$  de  $R = P - Q$ , ou seja:

$$Z_E(P,t) = G F_e \exp(i\omega t) \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} R^{-1} \exp[ik(R + \cos\theta y)] dydz \quad (2.3.25)$$

Levando em conta a definição de  $F_e$

$$\begin{aligned} Z_E(P,t) = & (1/2) G \left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} R^{-1} \exp[-ik(R + \cos\theta y)] dydz \right. \\ & \left. [ (A_p^i \Omega_A + B_p^i \Omega_B) \cos\theta + (1/2) (A_x^d \Omega_A + B_x^d \Omega_B) ] e_x \right. \\ & + [ (-A_p^i \Omega_A + B_p^i \Omega_B) \sin\theta + (1/2) (A_y^d \Omega_A + B_y^d \Omega_B) ] e_y \\ & \left. + [ (A_s^i \Omega_A + B_s^i \Omega_B) + (1/2) (A_z^d \Omega_A + B_z^d \Omega_B) ] e_z \right\rangle \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} R^{-1} \exp[+ik(R + \cos\theta y)] dydz \\ & \left. [ (A_p^i \Omega_A^* + B_p^i \Omega_B^*) \cos\theta + (1/2) (A_x^d \Omega_A^* + B_x^d \Omega_B^*) ] e_x \right. \\ & + [ (-A_p^i \Omega_A^* + B_p^i \Omega_B^*) \sin\theta + (1/2) (A_y^d \Omega_A^* + B_y^d \Omega_B^*) ] e_y \\ & \left. + [ (A_s^i \Omega_A^* + B_s^i \Omega_B^*) + (1/2) (A_z^d \Omega_A^* + B_z^d \Omega_B^*) ] e_z \right\} \end{aligned} \quad (2.3.26)$$

Separando a integral dupla:

$$I_2 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} R^{-1} \exp[-ik(R + \cos\theta y)] dydz \quad (2.3.27)$$

Com as substituições abaixo:

$$x_j - x_p = u \quad y - y_p = v \quad z - z_p = w$$

$$w = (u^2 + v^2)^{1/2} \sinh t \quad dw = (u^2 + v^2) \cosh t \, dt = R dt \quad (2.3.28)$$

temos,

$$I_2 = \exp(-ik \cos \Theta y_p) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ik \cos \Theta v) \left\{ 2 \int_0^{+\infty} \exp[-ik (u^2 + v^2)^{1/2} \cosh t] dt \right\} dv \quad (2.3.29)$$

e usando a solução para  $\int_0^{+\infty} \dots dt$  conforme Watson (24),

$$I_2 = \exp(-ik \cos \Theta y_p) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ik \cos \Theta v) \left\{ -i\pi H_0^{(2)} [k(u^2 + v^2)^{1/2}] dv \right\} \quad (2.3.30)$$

De forma análoga, para a conjugada  $I_2^*$  :

$$I_2^* = \exp(ik \cos \Theta y_p) \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(ik \cos \Theta v) \left\{ i\pi H_0^{(1)} [k(u^2 + v^2)^{1/2}] \right\} dv \quad (2.3.31)$$

Separando as integrais das funções de Hankel que aparecem nestas equações:

$$I_1 \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} H_0^{(2)} [k(u^2 + v^2)^{1/2}] \exp(-ik \cos \Theta v) \, dv \quad (2.3.32)$$

De acordo McLachlan (25) estas integrais para  $0 < \Theta < \pi/2$  e  $u \neq 0$ , são dadas na forma:

$$I_1 = 2 \int_0^{+\infty} H_0^{(2)} [k(u^2 + v^2)^{1/2}] \cos(k \cos \theta v) dv \quad (2.3.33)$$

resulta, lembrando que o plano de espalhamento  $j$  é definido em  $x_j=0$  no sistema de coordenadas, ou seja  $|x_p|=u$ .

$$I_1 = \exp(-ik |x_p| \operatorname{sen} \theta)^2 / (k \operatorname{sen} \theta) \quad (2.3.34)$$

e para a sua conjugada,

$$I_1^* = 2 \exp(+ik |x_p| \operatorname{sen} \theta)^2 / (k \operatorname{sen} \theta) \quad (2.3.35)$$

As integrais duplas resultam como:

$$I_2 = -i(\lambda / \operatorname{sen} \theta) \exp(-ik (|x_p| \operatorname{sen} \theta + y_p \cos \theta)) \quad (2.3.36)$$

e a conjugada,

$$I_2^* = i(\lambda / \operatorname{sen} \theta) \exp(ik (|x_p| \operatorname{sen} \theta + y_p \cos \theta)) \quad (2.3.37)$$

Encontramos o vetor de Hertz, parte elétrica  $Z_E$ , que dá o campo das ondas de dipolos como campo de ondas planas calculado nos pontos  $P_A$  e  $P_B$ .

$$Z_E(P,t) = ik^{-2} f_p \exp(i[\omega t - k(\operatorname{sen} \theta |x_p| + \cos \theta y)]) F_e \quad (2.3.38)$$

onde o fator de espalhamento do plano,  $f_p$  é agora definido por:

$$f_p = r_e \lambda \sigma_0 / \operatorname{sen} \theta \quad (2.3.39)$$

Os campos, elétrico  $E$  e magnético  $B$ , são determinados a partir das relações vetoriais em função do vetor  $Z_E$ ,

$$E(P,t) = \nabla(\nabla \cdot Z_E) - (1/c^2) \partial^2 Z_E / \partial t^2 \quad (2.3.40)$$

$$B(P,t) = (1/c) \partial(\nabla \times Z_E) / \partial t \quad (2.3.41)$$

Utilizando apenas a primeira destas relações, desde que o vetor magnético também se comporta transversalmente (22), obtemos com a eq. (2.3.38), para o ponto de observação abaixo do plano,  $P_A$ , na direção da onda  $A^i$ :

$$\begin{aligned} E^d(P_A,t) = if_p \{ & \cos\theta [A^i_p + \cos 2\theta B^i_p + (1/2)(\cos\theta (A^d_x + B^d_x) \\ & - \sin\theta (A^d_y + B^d_y))] e_x \\ & - \sin\theta [A^i_p + \cos 2\theta B^i_p + (1/2)(\cos\theta (A^d_x + B^d_x) \\ & - \sin\theta (A^d_y + B^d_y))] e_y \\ & + [A^i_s + B^i_s + (1/2)(A^d_z + B^d_z)] e_z \} \\ & \exp[i(\omega t - k \sin\theta x_p - k \cos\theta y_p)] \end{aligned} \quad (2.3.42)$$

e de modo similar para o ponto acima,  $P_B$ , na direção da onda  $B^i$ , temos:

$$\begin{aligned} E^d(P_B,t) = if_p \{ & \cos\theta [\cos 2\theta A^i_p + B^i_p + (1/2)(\cos\theta (A^d_x + B^d_x) \\ & + \sin\theta (A^d_y + B^d_y))] e_x \\ & + \sin\theta [\cos 2\theta A^i_p + B^i_p + (1/2)(\cos\theta (A^d_x + B^d_x) \\ & + \sin\theta (A^d_y + B^d_y))] e_y \end{aligned}$$

$$+ [ A^i_s + B^i_s + (A^d_z + B^d_z)/2 ] e_z \} \\ \exp[i(\omega t + k \sin\theta x_p - k \cos\theta y_p)] \quad (2.3.43)$$

O termo " $k \sin\theta |x_p| - k \cos\theta y_p$ ", que aparece na exponencial como uma fase inicial, indica que as ondas de dipolos geradas no plano têm, correspondentemente, as mesmas direções daquelas incidentes. A primeira equação, para  $x > 0$ , refere-se ao campo da onda de dipolo  $A^d$  que se propaga na direção de  $A^i$  considerando que

$$k^d_A = k [ \sin\theta, \cos\theta, 0 ] = k^i_A = k_A \quad (2.3.44)$$

A outra, simetricamente para  $x < 0$ , descreve a onda de dipolo  $B^d$  na direção de  $B^i$ , para

$$k^d_B = k [ -\sin\theta, \cos\theta, 0 ] = k^i_B = k_B \quad (2.3.45)$$

Nas eqs. (2.3.42) e (2.3.43), para  $E^d(P_A, t)$  e  $E^d(P_B, t)$ , observamos que os termos destacados nos colchetes na direção dos vetores unitários  $e_x$  e  $e_y$ , são igualmente multiplicados por  $\cos\theta$  e por  $-\sin\theta$ . Esses termos correspondem as amplitudes das componentes de polarização  $A^d_s, A^d_p, B^d_s, B^d_p$  das ondas de dipolos  $A^d$  e  $B^d$ , em função daquelas incidentes nas direções dos eixos coordenados. Para o estado de polarização- $\pi$ , temos:

$$A^d_p = A^i_p + \cos 2\theta B^i_p + \cos\theta (A^d_x + B^d_x)/2 - \sin\theta (A^d_y + B^d_y)/2 \quad (2.3.46)$$

$$B_p^d = \cos 2\Theta A_p^i + B_p^i + \cos \Theta (A_x^d + B_x^d)/2 - \sin \Theta (A_y^d + B_y^d)/2 \quad (2.3.47)$$

e para o estado- $\sigma$ ,

$$A_s^d = A_s^i + B_s^i + (A_z^d + B_z^d)/2 = B_s^d \quad (2.3.48)$$

Re-escrevendo-as na forma vetorial, correspondentemente para cada estado de polarização encontramos, para o estado- $\pi$

$$A_p^d = A_p^d [\cos \Theta e_x - \sin \Theta e_y] = A_p^d e_{pA} \quad (2.3.49)$$

$$B_p^d = B_p^d [\cos \Theta e_x + \sin \Theta e_y] = B_p^d e_{pB} \quad (2.3.50)$$

e para o estado- $\sigma$ ,

$$A_s^d = A_s^d e_{sA} = A_s^d e_z \quad (2.3.51)$$

$$B_s^d = B_s^d e_{sB} = B_s^d e_z \quad (2.3.52)$$

levando nas eqs. (2.3.42) e (2.3.43),

$$E_A^d(\mathbf{r}, t) = i f_p (A_p^d + A_s^d) \exp[i(\omega t - \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r})] \quad \text{para } x > 0 \quad (2.3.53)$$

$$E_B^d(\mathbf{r}, t) = i f_p (B_p^d + B_s^d) \exp[i(\omega t - \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r})] \quad \text{para } x < 0 \quad (2.3.54)$$

onde

$$\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{A}_p^d = \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{A}_s^d = 0 = \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{B}_p^d = \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{B}_s^d \quad (2.3.55)$$

Este resultado mostra que os campos gerados pelas oscilações dos dipolos no plano de espalhamento assumem a forma de duas ondas eletromagnéticas planas, com vibrações elétricas transversais. São os campos das ondas de dipolos que só existem somados aos

correspondentes incidentes, resultando nos campos espalhados nas duas direções.

## 2.4 - Os Campos das Ondas Transmitidas

Os campos das ondas transmitidas são obtidos como uma soma dos campos incidentes e de dipolos, em cada direção de propagação. Primeiro, representamos os campos das ondas de dipolos em função dos parâmetros de incidência. Das eqs. (2.3.49) a (2.3.52) temos as amplitudes  $A_x^d$ ,  $A_y^d$ ,  $A_z^d$ ,  $B_x^d$ ,  $B_y^d$ ,  $B_z^d$  das componentes das ondas de dipolos, nas direções dos eixos coordenados, sendo escritas em função de suas correspondentes componentes de polarização  $A_p^d$ ,  $A_s^d$ ,  $B_p^d$  e  $B_s^d$ , ou sejam:

$$A_x^d = A_p^d \cos\Theta \quad (2.4.1)$$

$$A_y^d = -A_p^d \sin\Theta \quad (2.4.2)$$

$$A_z^d = A_s^d \quad (2.4.3)$$

$$B_x^d = B_p^d \cos\Theta \quad (2.4.4)$$

$$B_y^d = B_p^d \sin\Theta \quad (2.4.5)$$

$$B_z^d = B_s^d \quad (2.4.6)$$

Substituindo nas equações (2.3.42) e (2.3.43), as amplitudes de polarização ficam:

$$A_p^d = if_p [A_p^i + \cos 2\Theta B_p^i + (A_p^d + \cos 2\Theta B_p^d)/2] \quad (2.4.7)$$

$$B_p^d = if_p [\cos 2\Theta A_p^i + B_p^i + (\cos 2\Theta A_p^d + B_p^d)/2] \quad (2.4.8)$$



$$A^d_s = if_p [CA^i_s + B^i_s + (A^d_s + B^d_s)/2] \quad (2.4.9)$$

$$B^d_s = if_p [CA^i_s + B^i_s + (A^d_s + B^d_s)/2] \quad (2.4.10)$$

Estas equações comprovam a existência dos dois tipos de vibrações, inicialmente admitidos para as duas ondas, em cada estado de polarização. Para as vibrações no plano de incidência, estado de polarização- $\pi$ , temos o par de equações para as amplitudes  $A^d_p$  e  $B^d_p$  :

$$(1 - if_p/2) A^d_p - icos2\theta (f_p/2) B^d_p = if_p (A^i_p + \cos2\theta B^i_p) \quad (2.4.11)$$

$$-icos2\theta (f_p/2) A^d_p + (1 - if_p/2) B^d_p = if_p (\cos2\theta A^i_p + B^i_p) \quad (2.4.12)$$

e para as vibrações perpendiculares ao plano, estado- $\sigma$ , as amplitudes  $A^d_s$  e  $B^d_s$ , são:

$$(1 - if_p/2) A^d_s - i(f_p/2) B^d_s = if_p (A^i_s + B^i_s) \quad (2.4.13)$$

$$- i(f_p/2) A^d_s + (1 - if_p/2) B^d_s = if_p (A^i_s + B^i_s) \quad (2.4.14)$$

Resolvendo, para a polarização- $\pi$

$$A^d_p = \frac{[if_p + (\text{sen}2\theta f_p)^2 / 2] A^i_p + (if_p \cos2\theta) B^i_p}{[1 - if_p - (\text{sen}2\theta f_p/2)^2]} \quad (2.4.15)$$

$$B^d_p = \frac{((if_p \cos2\theta) A^i_p + [if_p + (\text{sen}2\theta f_p)^2 / 2] B^i_p)}{[1 - if_p - (\text{sen}2\theta f_p/2)^2]} \quad (2.4.16)$$

e para a polarização- $\sigma$

$$A^d_s = [if_p / (1 - if_p)] (A^i_s + B^i_s) = B^d_s \quad (2.4.17)$$

São as soluções para as ondas de dipolos como dois pares de ondas eletromagnéticas planas imediatamente formadas fora do plano de espalhamento, sob um mesmo ângulo  $\Theta$ . Nestas últimas equações (2.4.15 a 2.4.17) são definidos os coeficientes de reflexão  $f_r$  e de transmissão  $f_t$ . Então podemos escrever simplesmente, para o estado- $\pi$

$$A^d_p = f_t A^i_p + f_r B^i_p \quad (2.4.18)$$

$$B^d_p = f_t B^i_p + f_r A^i_p \quad (2.4.19)$$

e para o estado- $\sigma$ ,

$$A^d_s = f_s (A^i_s + B^i_s) = B^d_s \quad (2.4.20)$$

sendo

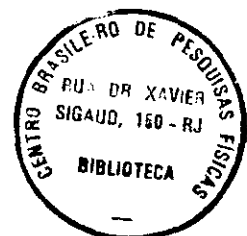
$$f_t = [if_p + (\text{sen}2\Theta f_p)^2/2] / [1 - if_p - (\text{sen}2\Theta f_p/2)^2] \quad (2.4.21)$$

$$f_r = (if_p \cos 2\Theta) / [1 - if_p - (\text{sen}2\Theta f_p/2)^2] \quad (2.4.22)$$

onde para o estado- $\sigma$ , quando  $f_t \rightarrow f_s \leftarrow f_r$

$$f_s = if_p / (1 - if_p) \quad (2.4.23)$$

Como mostrado as ondas  $A^d_p$  e  $A^d_s$  propagam-se nas direções



daquelas incidentes  $A_p^i$  e  $A_s^i$  enquanto, correspondentemente, o par  $B_p^d$  e  $B_s^d$  propaga-se nas direções de  $B_p^i$  e  $B_s^i$ . Os campos das ondas de dipolos [eqs. (2.3.53) e (2.3.54)], não existem independentemente e sim, somados àquêles incidentes de modo que os vetores de polarização das ondas transmitidas são:

$$A_p^t = (1 + f_t) A_p^i + f_r B_p^i \quad (2.4.24)$$

$$B_p^t = (1 + f_t) B_p^i + f_r A_p^i \quad (2.4.25)$$

$$A_s^t = (1 + f_s) A_s^i + f_s B_s^i \quad (2.4.26)$$

$$B_s^t = (1 + f_s) B_s^i + f_s A_s^i \quad (2.4.27)$$

Então,

$$E_A^t(\mathbf{r}, t) = (A_p^t + A_s^t) \exp[i(\omega t - \mathbf{k}_A \cdot \mathbf{r})] \quad \text{com} \quad A^t = A_s^t + A_p^t \quad (2.4.28)$$

$$E_B^t(\mathbf{r}, t) = (B_p^t + B_s^t) \exp[i(\omega t - \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r})] \quad \text{com} \quad B^t = B_s^t + B_p^t \quad (2.4.29)$$

São os campos eletromagnéticos das ondas planas transmitidas em cada direção de propagação, explicitadas em função de seus componentes de polarização.

Com este resultado, mostramos as soluções auto-consistentes encontradas para o espalhamento por um plano de dipolos no caso de dois feixes com uma polarização elíptica. Este tipo de polarização é tratada, independentemente, nos estados  $\pi$  e  $\sigma$  observando-se que, apenas as ondas vibrando no estado- $\pi$  mostram uma dependência do ângulo de incidência  $\Theta$ .

## 2.5 - A Unidade de Espalhamento

A solução para os campos interagentes em um plano de dipolos foi obtida sem estabelecer quaisquer condições de contorno. Estas são, neste caso, as condições naturais do plano. Isto significa que um plano pode ser considerado como elemento básico para analisar o espalhamento em um conjunto de planos como um cristal.

A unidade de espalhamento auto-consistente é definida como um plano de dipolos induzidos associado aos dois campos de propagação ou sejam: o mesocampo incidente formado pelas duas ondas incidentes e, o mesocampo transmitido semelhantemente composto pelas duas ondas transmitidas. O estado de oscilação dos dipolos no plano, que gera o epicampo  $E_e$ , depende do mesocampo  $H^i$  e do fator de espalhamento de plano  $f_p$ . Esta unidade, atua como um elemento transformador do mesocampo incidente, variando tanto as amplitudes como as fases de suas ondas. A função transformadora é convenientemente representada através de coeficientes complexos para a razão de amplitudes de diferentes pares de ondas. Cada um dos coeficientes apresenta um valor constante em todo o plano de espalhamento sendo definido, em ambos estados de polarização. Seja o mais importante deles, o coeficiente  $\mathcal{F}$  que dá a composição das ondas ativas do mesocampo  $H^i$ , através da razão entre as amplitudes incidentes  $B^i$  e  $A^i$ .

$$\mathcal{F}_u = B_u^i / A_u^i = F_u \exp(i\varphi_u) \quad (2.5.1)$$

sendo

$$F_u = |\mathcal{F}_u| \quad \text{e} \quad \varphi_u = \beta_u^i - \alpha_u^i \quad (2.5.2)$$

onde  $\alpha_u^i$  e  $\beta_u^i$  são as fases iniciais das ondas incidentes.  $\varphi_u$  é a diferença em fase entre as referidas ondas sendo que,  $u = p, s$  indica a polarização  $\pi, \sigma$ .

De modo similar, são definidos os coeficientes de transmissão  $A$  e  $B$  como razão entre as ondas transmitidas  $A^t$  e  $B^t$  respectivamente com as incidentes  $A^i$  e  $B^i$ :

$$A_u = A_u^t / A_u^i = a_u \exp(i\alpha_u) \quad (2.5.3)$$

sendo

$$a_u = |A_u| \quad e \quad \alpha_u = \alpha_u^t - \alpha_u^i \quad (2.5.4)$$

e para a onda  $B^i$ ,

$$B_u = B_u^t / B_u^i = b_u \exp(i\beta_u) \quad (2.5.5)$$

sendo

$$b_u = |B_u| \quad e \quad \beta_u = \beta_u^t - \beta_u^i \quad (2.5.6)$$

onde  $a_u$  e  $b_u$  dão as razões das magnitudes das amplitude para cada onda.  $\alpha_u$  e  $\beta_u$  são as variações em fase resultantes das diferenças entre as fases  $\alpha^t$  e  $\beta^t$  das ondas transmitidas e aquelas das ondas incidentes  $\alpha^i$  e  $\beta^i$ , respectivamente.

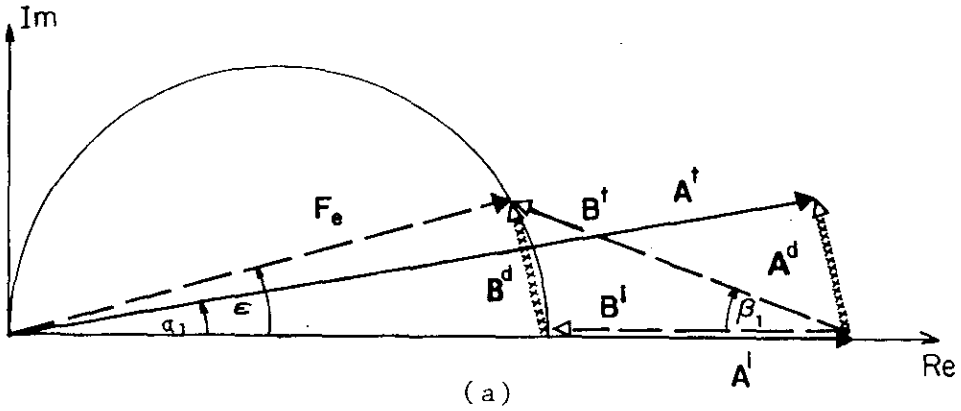
A Fig. (2.2) ilustra, no plano complexo, a composição das duas ondas, no estado de polarização- $\sigma$ , dadas pelos seus vetores de polarização  $A^i$  e  $B^i$  onde a diferença de fase entre elas é  $\varphi$ . O ângulo de fase  $\epsilon$ , entre o campo auto-consistente de excitação  $F_e$  e

o mesocampo incidente  $\mathbf{M}^i$ , caracteriza o regime auto-consistente na interação. As ondas de dipolos,  $\mathbf{A}^d$  e  $\mathbf{B}^d$ , possuem uma mesma intensidade e são, respectivamente, adicionadas às ondas  $\mathbf{A}^i$  e  $\mathbf{B}^i$  resultando nas ondas transmitidas  $\mathbf{A}^t$  e  $\mathbf{B}^t$ .

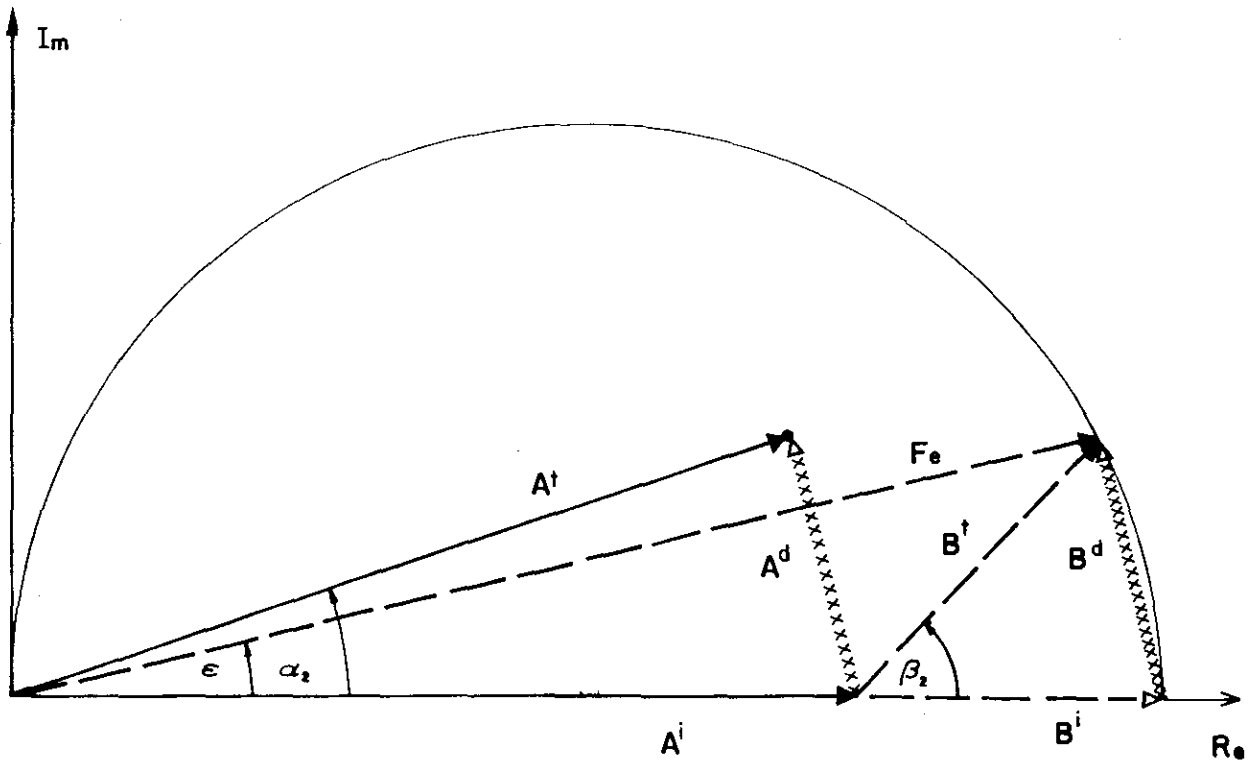
Em termos da fase, a composição das ondas incidentes no plano pode ocorrer sob duas situações distintas, denominadas de modos de excitação: No modo 1, a diferença em fase entre as ondas incidentes situa-se na faixa  $\pi > \varphi > \pi/2$  e, para o modo 2, os valores da fase são definidos em  $\pi/2 > \varphi > 0$ . Nas situações limites ou sejam: quando  $\varphi = \pi$ , a amplitude de  $\mathbf{M}^i$  corresponderá ao valor dado pela diferença em magnitude das ondas incidentes e, quando  $\varphi = 0$ , a amplitude de  $\mathbf{M}^i$  terá o máximo valor. Nas ilustrações nas Figs. (2.3a) e (2.3b) são exemplificados estas situações limites, observando-se que, uma mesma contribuição dos dipolos, em cada direção, modificam diferentemente as ondas incidentes. Os valores absolutos dos vetores representando as ondas incidentes em ambas Figuras são os mesmos para facilitar uma comparação imediata.

Um exemplo mostra a importância deste tratamento para o campo incidente. Analisemos o caso, para o estado de polarização- $\sigma$ , quando as duas ondas incidentes chegam ao plano de dipolos com mesma amplitude, mas opostas em fase. Isto significa que o mesocampo  $\mathbf{M}^i$  tem valor zero no plano conseqüentemente, os dipolos não são excitados e o epicampo não é gerado. O plano de dipolos torna-se "invisível" para as duas ondas incidentes, atravessando-o como no espaço livre.

Tratando separadamente para cada estado de polarização, os coeficientes  $\mathbf{A}$  e  $\mathbf{B}$  são dados em função dos parâmetros iniciais. Para o estado- $\pi$ , substituímos nas eqs. (2.5.3) e (2.5.5) as



(a)



(b)

Fig. 2. 3 - A composição do mesocampo incidente  $M^i$ , nas duas situações limites: (a) quando o ângulo, entre as ondas A e B,  $\varphi = \pi$  e (b) quando  $\varphi = 0$ . Os vetores de polarização que indicam as ondas incidentes possuem uma mesma magnitude, em ambas as Figuras.

amplitudes transmitidas  $A^t$  e  $B^t$  de acordo (2.4.24) e (2.4.25), levando em conta as eqs. (2.4.21) e (2.4.22) para  $f_t$  e  $f_r$ .

$$A_p = (1 + c_t + if_p \mathfrak{F}_p \cos 2\theta) / (1 - c_t - if_p) \quad (2.5.7)$$

$$B_p = (1 + c_t + if_p \mathfrak{F}_p^{-1} \cos 2\theta) / (1 - c_t - if_p) \quad (2.5.8)$$

onde

$$c_t = (f_p \sin 2\theta)^2 / 4 \quad (2.5.9)$$

E de modo similar, tomando as eqs. (2.4.26) e (2.4.27) após substituir as amplitudes  $A_s^d$  e  $B_s^d$  em (2.4.20), o coeficiente para o estado- $\sigma$  (2.4.23), têm a forma:

$$A_s = (1 + if_p \mathfrak{F}_s) / (1 - if_p) \quad (2.5.10)$$

$$B_s = (1 + if_p \mathfrak{F}_s^{-1}) / (1 - if_p) \quad (2.5.11)$$

Com as identidades tipo:

$$\begin{aligned} [v(1 + c_t) + if_p w \cos 2\theta] (1 - c_t + if_p) &\equiv v(1 + c_t) \\ &\cdot [1 - c_t + if_p + if_p w \cos 2\theta (1 - c_t + if_p)] \end{aligned} \quad (2.5.12)$$

e

$$\begin{aligned} (1 - c_t)^2 + (f_p)^2 &\equiv \\ &[(1 - c_t)^2 + (f_p)^2]^{1/2} [(1 + c_t)^2 + (f_p \cos 2\theta)^2]^{1/2} \end{aligned} \quad (2.5.13)$$

As eqs. (2.5.7) e (2.5.78) ficam, para a polarização- $\pi$ :



$$A_p = [\cos(\epsilon_q) + i \mathcal{F}_p \sin(\epsilon_q)] \exp(i\epsilon_p) \quad (2.5.14)$$

$$B_p = [\cos(\epsilon_p) + i \mathcal{F}_p^{-1} \sin(\epsilon_p)] \exp(i\epsilon_p) \quad (2.5.15)$$

e para a polarização- $\sigma$ , nas eqs. (2.5.10) e (2.5.11)

$$A_s = [\cos(\epsilon_s) + i \mathcal{F}_s \sin(\epsilon_s)] \exp(i\epsilon_s) \quad (2.5.16)$$

$$B_s = [\cos(\epsilon_s) + i \mathcal{F}_s^{-1} \sin(\epsilon_s)] \exp(i\epsilon_s) \quad (2.5.17)$$

Os parâmetros  $\epsilon_q$ ,  $\epsilon_p$  e  $\epsilon_s$  são definidos em função de  $f_p$  e de  $\Theta$  ou sejam:

$$\epsilon_q = \arctg \left( \frac{\langle f_p \cos 2\Theta \rangle}{\langle 1 + [(f_p \sin 2\Theta)/2]^2 \rangle} \right) \quad (2.5.18)$$

$$\epsilon_p = \arctg \left( \frac{\langle f_p \rangle}{\langle 1 - [(f_p \sin 2\Theta)/2]^2 \rangle} \right) \quad (2.5.19)$$

$$\epsilon_s = \arctg \langle f_p \rangle \quad (2.5.20)$$

Com estes parâmetros os coeficientes  $A$  e  $B$ , (eqs. 2.5.3 e 2.5.5) são expressos em função das respectivas razões de amplitudes,  $a_p$  e  $b_p$  e saltos em fase  $\alpha_p$  e  $\beta_p$ . Para o estado- $\pi$

$$A_p = a_p \exp[i(\epsilon_{pA} + \epsilon_p)] \quad \text{com} \quad \epsilon_{pA} = \alpha_p - \epsilon_p \quad (2.5.21)$$

$$B_p = b_p \exp[i(\epsilon_{pB} + \epsilon_p)] \quad \text{com} \quad \epsilon_{pB} = \beta_p - \epsilon_p \quad (2.5.22)$$

e para o estado- $\sigma$ , tomando os correspondentes parâmetros  $a_s$ ,  $b_s$  e  $\alpha_s$ ,  $\beta_s$

$$A_s = a_s \exp[i(\epsilon_{sA} + \epsilon_s)] \quad \text{com} \quad \epsilon_{sA} = \alpha_s - \epsilon_s \quad (2.5.23)$$

$$\mathcal{B}_S = b_S \exp[i(\epsilon_{SB} + \epsilon_S)] \quad \text{com} \quad \epsilon_{SB} = \beta_S - \epsilon_S \quad (2.5.24)$$

Relacionando estes dois últimos pares de equações com as eqs. (2.5.14) a (2.5.17), onde o coeficiente  $\mathcal{F}$  é dado pela eq. (2.5.1), obtemos

$$a_p = (\cos^2(\epsilon_q) - F_p \sin(\varphi_p) \sin(2\epsilon_q) + F_p^2 \sin^2(\epsilon_q))^{1/2} \quad (2.5.25)$$

$$b_p = (\cos^2(\epsilon_q) + F_p^{-1} \sin(\varphi_p) \sin(2\epsilon_q) + F_p^{-2} \sin^2(\epsilon_q))^{1/2} \quad (2.5.26)$$

$$a_s = (\cos^2(\epsilon_S) - F_S \sin(\varphi_S) \sin(2\epsilon_S) + F_S^2 \sin^2(\epsilon_S))^{1/2} \quad (2.5.27)$$

$$b_s = (\cos^2(\epsilon_S) + F_S^{-1} \sin(\varphi_S) \sin(2\epsilon_S) + F_S^{-2} \sin^2(\epsilon_S))^{1/2} \quad (2.5.28)$$

Encontramos as magnitudes  $a_p$ ,  $b_p$ ,  $a_s$  e  $b_s$  que dão as variações das amplitudes das ondas incidentes, indicadas em cada estado de polarização.

As variações em fase  $\epsilon_{pA}$ ,  $\epsilon_{pB}$ ,  $\epsilon_{sA}$  e  $\epsilon_{sB}$ , são obtidas igualando-se, correspondentemente, os coeficientes  $\mathcal{A}_p$  e  $\mathcal{B}_p$  dados nas eqs. (2.5.14) a (2.5.17) com suas expressões nas eqs. (2.5.21) a (2.5.24) resultando, para o estado- $\pi$

$$\epsilon_{pA} = \arcsen \{ [F_p \sin(\epsilon_q) \cos(\varphi_p)] / a_p \} \quad (2.5.29)$$

$$\epsilon_{pB} = \arcsen \{ [\sin(\epsilon_q) \cos(\varphi_p)] / (F_p b_p) \} \quad (2.5.30)$$

e para o estado- $\sigma$

$$\epsilon_{sA} = \arcsen \{ [F_S \sin(\epsilon_S) \cos(\varphi_S)] / a_s \} \quad (2.5.31)$$

$$\epsilon_{sB} = \arcsen \{ [\sin(\epsilon_S) \cos(\varphi_S)] / (F_S b_s) \} \quad (2.5.32)$$

Separando, nestes dois últimos pares de equações, os parâmetros de fase e de amplitude, em cada estado de polarização, temos

$$a_p \text{sen}(\epsilon_{pA}) \ b_p \text{sen}(\epsilon_{pB}) = \text{sen}^2(\epsilon_q) \ \text{cos}^2(\varphi_p) \quad (2.5.33)$$

$$a_s \text{sen}(\epsilon_{sA}) \ b_s \text{sen}(\epsilon_{sB}) = \text{sen}^2(\epsilon_s) \ \text{cos}^2(\varphi_s) \quad (2.5.34)$$

Estas equações representam uma forma conjunta das variações da amplitude e da fase como equação da hipérbole equilátera, tipo  $yx=c^2$  onde, por exemplo na eq. (2.5.34), temos:

$$y_s = b_s \text{sen}(\epsilon_{sB}), \quad x_s = a_s \text{sen}(\epsilon_{sA}), \quad c = \text{sen}(\epsilon_s) \ \text{cos}(\varphi_s) \quad (2.5.35)$$

Análogos aos coeficientes de transmissão são definidos os coeficientes de reflexão  $\mathcal{R}$  para a razão entre as amplitudes  $B^t$  e  $A^i$ , na face superior do plano e  $\mathcal{S}$  para a razão entre  $A^t$  e  $B^i$ , na face inferior, ou sejam:

$$\mathcal{R}_u = B^t_u / A^i_u = r_u \exp(i\rho_u) \quad (2.5.36)$$

e

$$\mathcal{S}_u = A^t_u / B^i_u = s_u \exp(i\sigma_u) \quad (2.5.37)$$

onde  $r_u$  e  $s_u$  dão as magnitudes das razões das amplitudes,  $\rho$  a diferença em fase entre as ondas  $B^t$  e  $A^i$  e  $\sigma$ , entre as ondas  $A^t$  e  $B^i$ .

Com as equações (2.4.24) a (2.4.27) introduzimos, adequadamente, o coeficiente  $\mathcal{F}$  para encontrar uma forma semelhante àquelas dos

coeficientes  $A$  e  $B$  nas eqs. (2.5.14) a (2.5.17). Com as identidades já definidas, [eqs. (2.5.12) e (2.5.13)] encontramos, para cada estado de polarização  $\pi$  e  $\sigma$ :

$$\mathcal{R}_p = [\mathcal{F}_p \cos(\epsilon_q) + i \operatorname{sen}(\epsilon_q)] \exp(i\epsilon_p) \quad (2.5.38)$$

$$\mathcal{S}_p = [\mathcal{F}_p^{-1} \cos(\epsilon_q) + i \operatorname{sen}(\epsilon_q)] \exp(i\epsilon_p) \quad (2.5.39)$$

e

$$\mathcal{R}_s = [\mathcal{F}_s \cos(\epsilon_s) + i \operatorname{sen}(\epsilon_s)] \exp(i\epsilon_s) \quad (2.5.40)$$

$$\mathcal{S}_s = [\mathcal{F}_s^{-1} \cos(\epsilon_s) + i \operatorname{sen}(\epsilon_s)] \exp(i\epsilon_s) \quad (2.5.41)$$

que são as expressões finais dos coeficientes de reflexão em ambas faces do plano de espalhamento, para cada estado de polarização das ondas interagentes. As amplitudes e as fases das ondas refletidas são, conseqüentemente, obtidas.

Com as definições para os ângulos envolvidos na interação ( $\epsilon_q$ ,  $\epsilon_p$ ,  $\epsilon_s$ ), simplificamos as equações (2.4.21) e (2.4.23) como se segue:

$$f_t = \cos(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p) - 1 \quad (2.5.42)$$

$$f_r = i \operatorname{sen}(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p) \quad (2.5.43)$$

$$f_s = i \operatorname{sen}(\epsilon_s) \exp(i\epsilon_s) \quad (2.5.44)$$

obtendo os fatores de transmissão  $f_t$  e de reflexão  $f_r$  em função dos ângulos  $\epsilon_q$  e  $\epsilon_p$ , para o estado de polarização- $\pi$  e o fator de espalhamento  $f_s$  em função do ângulo  $\epsilon_s$ , para o estado- $\sigma$ .

## C A P Í T U L O 3

### O ESPALHAMENTO AUTO-CONSISTENTE POR UM CRISTAL

#### 3. 1 - Introdução

No capítulo anterior, apresentamos a solução para o espalhamento auto-consistente em um plano de dipolos, sob a ação de duas ondas simetricamente incidentes. A solução foi obtida, sem estabelecer condições especiais para interpretar a difração. Desta forma, a mesma pode ser aplicada a qualquer um dos planos do modelo de cristal adotado (29). Com o nosso propósito de analisar a reflexão simétrica de Bragg, essa solução é generalizada para um conjunto de  $N$  planos iguais, admitindo para isto, a continuidade total dos campos entre eles.

Inicialmente, analisamos a difração resultante da associação de dois planos vizinhos. Após então, extendemos a solução encontrada para todo o cristal, em duas maneiras:

(i) analítica, generalizando o procedimento adotado no caso de dois planos onde, em cada um deles, existem quatro ondas: duas incidentes e duas transmitidas. Essa situação ocasiona um mesmo comportamento em todos os planos, representado através dos introduzidos coeficientes complexos (vide secção 2. 5). Dizemos então que existe uma regra da semelhança de campo. Uma outra solução analítica é desenvolvida através de uma formulação matricial usando polinômios de Chebyshev, semelhante ao trabalho efetuado por Perkins e Knight (14) aplicando a teoria de Darwin.

(ii) numérica, fazendo uma analogia ao método experimental admitimos

que ocorre incidência apenas em um dos planos de superfície do cristal. Em consequência cada plano atua de modo diferente na interação com o campo incidente e então, a regra da semelhança de campo não pode ser aplicada. A solução numérica é o recurso de ordem prática que permite obter resultados comparáveis com os publicados.

### 3. 2 - Duas Unidades de Espalhamento

Vamos analisar a condição de difração na associação de dois planos vizinhos. Esses planos, designados por  $j$  e  $j+1$  no sistema de coordenadas da Fig. (2.1), e seus campos são então acoplados como duas unidades de espalhamento. Para isso, basta admitir a continuidade total dos campos entre eles. A onda transmitida por um dos planos torna-se a onda incidente no outro plano e vice-versa. Esta condição de continuidade é representada da seguinte maneira:

$$A^i_{(j+1)} = A^t_{(j)} \exp(-i\delta) \quad (3.2.1)$$

$$B^i_{(j)} = B^t_{(j+1)} \exp(-i\delta) \quad (3.2.2)$$

onde  $\delta$  indica a diferença de fase de caminho de propagação entre os planos. Levando estas equações na definição do coeficiente de reflexão  $\mathcal{R}$  (eq. 2.5.36) temos, para o plano  $j+1$ :

$$\mathcal{R}_{u(j+1)} = [B^i_{u(j)} / A^t_{u(j)}] \exp(i2\delta) \quad (3.2.3)$$

ou com a definição de  $\mathcal{S}_{u(j)}$  em (2.5.37) resulta,

$$R_u^{(j+1)} S_u^{(j)} = \exp(i2\delta) \quad (3.2.4)$$

Esta equação envolve mudanças de fase e de amplitude nas ondas incidentes em dois planos vizinhos quaisquer do cristal. A mesma possibilita determinar as condições de reflexão na superfície do cristal (26).

### 3. 3 - A Solução Analítica com a Regra da Semelhança de Campo

#### 3. 3. 1 - A Equação de Bragg Auto-Consistente

Tratando o cristal como um conjunto de N planos, a solução analítica é obtida a partir daquela para o caso de dois planos (eq. 3.2.4). Isto é possível por que não há restrição quanto ao posicionamento desses planos. Essa generalização, contudo, requer a existência de quatro ondas em todos os N planos: duas incidentes e duas transmitidas. É necessário, então, que ocorra incidência externa em ambas as superfícies do cristal logo, as variações de fase e de amplitude das ondas interagentes serão as mesmas para todos os planos do cristal. Representamos esta situação como a regra de semelhança de campo, definida por qualquer um dos coeficientes complexos:  $A$ ,  $B$ ,  $T$ ,  $R$  e  $S$ . Para o mais importante deles, que descreve a razão entre as amplitudes das ondas ativas  $B^i$  e  $A^i$ , temos:

$$T_u^{(1)} = T_u^{(2)} = \dots = T_u^{(j)} = T_u^{(j+1)} = \dots = T_u^{(N)} \quad (3.3.1)$$

onde  $J$  (maiúsculo) refere-se ao último plano.

Com esta regra, a eq. (3.2.4) é re-escrita em função dos coeficientes de reflexão, desde que  $A_u(j) = A_u(j+1) = A_u$  e  $B_u(j) = B_u(j+1) = B_u$  resultando,

$$A_u B_u = \exp(i2\delta) \quad (3.3.2)$$

Levando em conta as definições destes coeficientes (eqs. 2.5.4 e 2.5.6), encontramos as relações:

$$\begin{aligned} a \cdot b &= 1 && \text{para as amplitudes} \\ e \quad \alpha + \beta &= 2\delta - 2\pi m && \text{para as fases} \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

O índice  $m$  indica a ordem de difração sendo a diferença de fase de caminho  $\delta$ , dada por:

$$\delta = k \sin\theta [x(j+1) - x(j)] \quad (3.3.4)$$

Chamando a distância entre os planos,  $d=x(j+1)-x(j)$ , temos:

$$2 d \sin\theta = m\lambda [1 + (\alpha+\beta)/2\pi m] \quad (3.3.5)$$

que é a equação de Bragg auto-consistente, em função das variações de fase  $\alpha$  e  $\beta$ , para cada onda, entre dois planos (22).

### 3. 3. 2 - A Solução Generalizada com a Absorção

Na época da formulação da teoria dinâmica de raios-X, já se sabia que a absorção era causada, principalmente, pela ejeção de



fotoeletrons ou seja, um efeito quântico. De início, Ewald procurou introduzir a absorção em seu modelo assumindo um valor complexo para a polarizabilidade dos dipolos. Entretanto, para abreviar o tratamento algébrico o referido autor, embora hesitasse, optou por representar a absorção através de um termo de amortecimento na equação de movimento de um dipolo (16). Darwin, mesmo reconhecendo o carácter estatístico para tratar a absorção (1), preferiu introduzi-la como um fator de atenuação  $(1-h)$  aplicado apenas na amplitude do feixe transmitido. Posteriormente, Prins (10) admitindo os coeficientes de transmissão e de reflexão, definidos na teoria de Darwin, como quantidades complexas encontrou uma forma assimétrica para a curva de reflexão. Na teoria de Laue, a absorção é representada pela parte imaginária da constante dielétrica periódica que define a distribuição de cargas no cristal. Esta consideração, justificada por Kohler em 1933 através de um tratamento quântico, aumentou o número de parâmetros dessa teoria (13).

Em nossa formulação, admitimos que o carácter estatístico para o efeito da absorção representa uma média na tempo da emissão de fotoeletrons. Desta maneira são desprezados aqueles eletrons que, vibrando com diferentes frequências, não contribuem para o quadro de difração auto-consistente. Para caracterizar esta situação, introduzimos o fator  $\exp(-h)$  como o equivalente a um redutor na intensidade do mesocampo incidente  $H^i$ , que existe em cada plano do cristal. O efeito da absorção aparece em ambas direções de espalhamento e o regime auto-consistente é preservado. A Fig. (3.1) ilustra a nova composição dos vetores de polarização,  $A^i_h$  e  $B^i_h$ , das ondas incidentes após extrair de  $H^i$  a parte relativa à absorção. Essa parte, corresponde à diferença entre  $H^i$  e o mesocampo

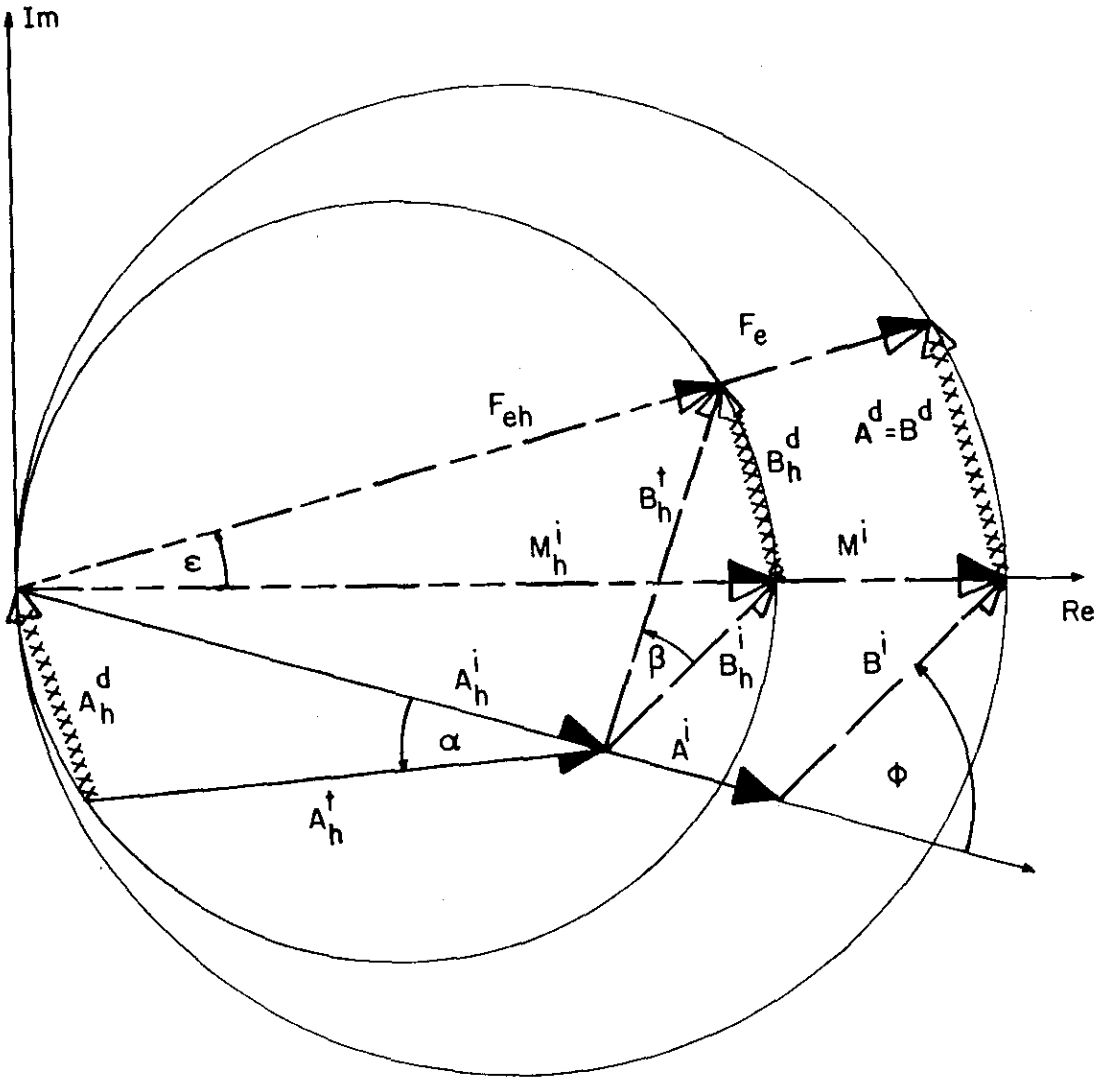


Fig. 3. 1 - A composição dos vetores de polarização das ondas interagentes em um plano de dipolos, no estado  $\sigma$ , quando a absorção é introduzida.

incidente resultante,  $\mathbf{H}_h^i$ .  $\mathbf{F}_{eh}$  é o novo campo total auto-consistente de excitação dos dipolos. Esta forma de introduzir a absorção, com um coeficiente único  $h$ , além de simplificar o tratamento tem um efeito local de mostrar diretamente a diminuição do epicampo gerado pelos dipolos, agora representado por  $\mathbf{A}_h^d = \mathbf{B}_h^d$ .

No caso da reflexão assumimos as definições dos coeficientes  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{S}$ , (eqs. 2.5.38 e 2.5.39) com o fator  $\exp(-h)$  ou seja,

$$\mathcal{R}_{ph} = \mathcal{R}_p \exp(-h) \quad \text{e} \quad \mathcal{S}_{ph} = \mathcal{S}_p \exp(-h).$$

Para o estado- $\pi$ ,

$$\mathcal{R}_{ph}^{(\pi)} = [\mathcal{F}_p^{(\pi)} \cos(\epsilon_q) + i \operatorname{sen}(\epsilon_q)] \exp(i\epsilon_p - h) \quad (3.3.6)$$

$$\mathcal{S}_{ph}^{(\pi)} = [\mathcal{F}_p^{-1}(\pi) \cos(\epsilon_q) + i \operatorname{sen}(\epsilon_q)] \exp(i\epsilon_p - h) \quad (3.3.7)$$

e analogamente, para o estado- $\sigma$ , das eqs. (2.5.40) e (2.5.41) temos,

$$\mathcal{R}_{sh}^{(\sigma)} = [\mathcal{F}_s^{(\sigma)} \cos(\epsilon_s) + i \operatorname{sen}(\epsilon_s)] \exp(i\epsilon_s - h) \quad (3.3.8)$$

$$\mathcal{S}_{sh}^{(\sigma)} = [\mathcal{F}_s^{-1}(\sigma) \cos(\epsilon_s) + i \operatorname{sen}(\epsilon_s)] \exp(i\epsilon_s - h) \quad (3.3.9)$$

lembrando que o índice  $h$  denota o tratamento com absorção

A reflexão na superfície do cristal, dado pelo coeficiente  $\mathcal{R}_{ph}^{(\pi)}$  (quando  $j=1$ , o primeiro plano), é desenvolvida para o estado de polarização- $\pi$ , que é matematicamente mais abrangente. Substituindo na eq. (3.3.6) o coeficiente  $\mathcal{F}_p^{(\pi)}$  dado em (3.3.7) fica:

$$\mathcal{R}_{ph}^{(j)} = \left[ \langle \cos^2(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h) / \langle \mathcal{S}_{ph}^{(j)} - i \sin(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_q - h) \rangle + i \sin(\epsilon_q) \right] \exp(i\epsilon_q - h) \quad (3.3.10)$$

ou, como uma forma generalizada da eq. (3.2.4),

$$\mathcal{R}_{ph}^{(j)} = \langle [U + V \mathcal{R}_{ph}^{(j+1)}] / [W + U^* \mathcal{R}_{ph}^{(j+1)}] \rangle \quad (3.3.11)$$

onde, à título de simplificação, definimos:

$$\begin{aligned} U &\equiv i \operatorname{tg}(\epsilon_q) \exp(i\delta) \\ U^* &\equiv -i \operatorname{tg}(\epsilon_q) \exp(-i\delta) \\ V &\equiv [1/\cos(\epsilon_q)] \exp[-i(\delta - \epsilon_q - ih)] \\ W &\equiv [1/\cos(\epsilon_q)] \exp[+i(\delta - \epsilon_q - ih)] \end{aligned} \quad (3.3.12)$$

A expressão equivalente para o coeficiente  $\mathcal{R}_{sh}^{(j)}$ , no estado de polarização- $\sigma$ , obtém-se quando  $\epsilon_q \rightarrow \epsilon_s \leftarrow \epsilon_p$ . Com a regra da semelhança de campo, dada pela eq. (3.3.1),

$$\mathcal{R}_{ph}^{(j+1)} = \mathcal{R}_{ph}^{(j)} = \mathcal{R}_{ph} = \mathcal{R} \quad (3.3.13)$$

e então, a equação (3.3.11) torna-se,

$$U^* \mathcal{R}^2 + (W - V) \mathcal{R} - U = 0 \quad (3.3.14)$$

resolvendo, encontramos as raízes:

$$\mathcal{R}_{1,2} = \exp\left[i(\delta \pm \arccos \langle \sin(\delta - \epsilon_p - ih) / \sin(\epsilon_q) \rangle)\right] \quad (3.3.15)$$

A eq. (3.3.15) é uma outra representação da equação de Bragg auto-consistente, em função dos parâmetros iniciais (vide eq. 3.2.4). Com ela, podemos analisar a reflexão do cristal. As raízes da eq. (3.3.15) dão as soluções analíticas possíveis neste caso, sob a regra da semelhança de campo. Entretanto tais soluções não proporcionam resultados de ordem prática devido a natureza da incidência, ou seja: nas duas superfícies do cristal.

Vamos agora discutir a eq. (3.3.15) abordando suas particularidades. Para o caso onde a absorção não é considerada ( $h=0$ ), a reflexão ocorre na faixa angular:

$$|\sin(\delta - \epsilon_p)| \leq |\sin(\epsilon_q)| \quad (3.3.16)$$

A condição de igualdade nesta equação define uma região de reflexão perfeita, quando  $\mathcal{R}\mathcal{R}^*=1$ , cujos limites dados por

$$(i) \quad \delta = \epsilon_p - \epsilon_q \quad \text{limite anterior} \quad (3.3.17)$$

correspondente ao menor valor de  $\Theta$  da citada região do platô, ou seja quando  $\Theta = \Theta_{Lp}$ , o ângulo de Laue para o campo incidente no estado de polarização  $\pi$ .

No caso da polarização- $\sigma$ , quando  $\epsilon_q \rightarrow \epsilon_s \leftarrow \epsilon_p$  então,

$$\delta = 0 \quad \text{limite anterior} \quad (3.3.18)$$

e a reflexão dá-se exatamente em  $\Theta = \Theta_{Ls} = \Theta_0$  satisfazendo

a conhecida equação de Bragg, como na teoria cinemática. A fase da reflexão  $\rho$  neste ponto, de acordo com a eq. (3.2.15) terá um valor de  $+\pi$ .

$$(ii) \quad \delta = \epsilon_p + \epsilon_q \quad \text{limite posterior} \quad (3.3.19)$$

temos o outro extremo dessa região, correspondendo ao que doravante será aqui chamado de ângulo de Ewald,  $\Theta = \Theta_{Ep}$ .

Para a polarização  $\sigma$ , obtemos

$$\delta = 2\epsilon_s = \rho \quad (3.3.20)$$

e a reflexão dá-se sob o ângulo  $\Theta = \Theta_{Es}$ .

É importante destacar que o valor intermediário de  $\Theta$  entre  $\Theta_L$  e  $\Theta_E$ , é o ângulo de Bragg,  $\Theta_B$ , que corresponde ao valor máximo da refletividade.

Para a polarização  $\pi$ ,  $\Theta = \Theta_{Bp}$ , temos

$$(iii) \quad \text{sen}(\delta - \epsilon_q) = 0 \quad \text{ou seja,} \quad \delta = \epsilon_p \quad (3.3.21)$$

Para polarização  $\sigma$ , sendo  $\Theta = \Theta_{Bs}$

$$\text{sen}(\delta - \epsilon_s) = 0 \quad \text{ou seja,} \quad \delta = \epsilon_s \quad (3.3.22)$$

logo,

$$\rho = \pi/2 + \epsilon_s \quad (3.3.23)$$

A fase de reflexão na superfície do cristal,  $\rho$ , é obtida diretamente nesta formulação auto-consistente.

### 3. 4 - A Solução Analítica com os Polinômios de Chebyshev

Utilizando um procedimento diferente, encontramos uma outra solução analítica para este caso simétrico de Bragg. Neste aspecto, adotamos um formalismo matricial para expressar as equações de nosso modelo auto-consistente, de maneira semelhante àquele usado por Perkins and Knight (14) com as equações da teoria de Darwin. Para adequar os dois desenvolvimentos analíticos, as equações auto-consistentes são re-escritas na forma das equações de Darwin fazendo uma analogia entre as notações utilizadas em cada um deles:

$$A^i(j) \equiv T_0 \quad \text{e} \quad B^t(1) \equiv S_0 \quad \text{no plano da superfície}$$

$$A^i(j) \equiv T_r \quad \text{e} \quad B^t(j) \equiv S_r \quad \text{plano qualquer do cristal}$$

Neste espírito, as amplitudes transmitidas para os dois planos vizinhos  $j$  e  $j+1$  são dadas, sem levar em conta a polarização das ondas, da seguinte maneira:

$$A^i(j+1) \exp(i\delta) = (1-iq_0) A^i(j) - iq B^t(j+1) \exp(-i\delta) \quad (3.4.1)$$

$$B^t(j) = -iq A^i(j) + (1-iq_0) B^t(j+1) \exp(-i\delta) \quad (3.4.2)$$

$$A^t(j+1) = (1-iq_0) A^i(j) - iq B^i(j+1) \quad (3.4.3)$$

$$B^i(j) \exp(i\delta) = -iq A^i(j+1) - (1-iq_0) B^i(j+1) \quad (3.4.4)$$

onde  $(-iq)$  e  $(1-iq_0)$  são, respectivamente, os coeficientes de reflexão e de transmissão usados por Darwin. O ângulo  $\delta$  é a fase de caminho definida na eq. (3.2.4).

Destacando as amplitudes  $B^t(j)$  e  $A^i(j)$  nas duas primeiras

equações:

$$B^t(j) = -iq A^i(j) + (1-iq_0) B^t(j+1) \exp(-i\delta) \quad (3.4.5)$$

$$A^i(j) = \langle 1/(1-iq_0) \rangle A^i(j+1) \exp(i\delta) - \langle iq/(1-iq_0) \rangle B^t(j+1) \exp(-i\delta) \quad (3.4.6)$$

tem-se as equações de Darwin. Deve ser observado que, embora tenhamos introduzido para as amplitudes e as fases a notação usada na solução auto-consistente, os coeficientes de cada termo são equivalentes aos parâmetros da teoria de Darwin.

Tomando agora das eqs. (2.4.24) e (2.4.25) as amplitudes das ondas transmitidas, no estado de polarização- $\pi$ , levando em conta a absorção, temos para o plano j :

$$A^t_{ph}(j) = \cos(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h) A^i_p(j) + i \operatorname{sen}(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h) B^i_p(j) \quad (3.4.7)$$

$$B^t_{ph}(j) = i \operatorname{sen}(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h) A^i_p(j) + \cos(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h) B^i_p(j) \quad (3.3.8)$$

onde os fatores de transmissão  $f_t$  e de reflexão  $f_r$  são, respectivamente, definidos nas eqs. (2.5.42) e (2.5.43). O acoplamento entre os dois planos j e j+1 é feito introduzindo-se a continuidade total dos campos [eqs. (3.2.1) e (3.2.2)]. Então:

$$A^i_{ph}(j) = \{ \exp(i\delta) / [\cos(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h)] \} A^i_{ph}(j+1) - i \operatorname{tg}(\epsilon_q) \exp(-i\delta) B^t_{ph}(j+1) \quad (3.4.9)$$

$$B^t_{ph}(j) = i \operatorname{tg}(\epsilon_q) \exp(i\delta) A^i_{ph}(j+1) + \cos(\epsilon_q) \langle 1 + \operatorname{tg}^2(\epsilon_q) \rangle \exp(i\epsilon_p - h) \exp(-i\delta) B^t_{ph}(j+1) \quad (3.4.10)$$



As soluções destas equações são encontradas através formulação matricial, relacionando as amplitudes das ondas incidentes e transmitidas nos dois planos:

$$\begin{bmatrix} A_{ph}^{i(j)} \\ B_{ph}^{t(j)} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} A_{ph}^{i(j+1)} \\ B_{ph}^{t(j+1)} \end{bmatrix} \quad (3.4.11)$$

sendo a matriz

$$M = \begin{bmatrix} \exp\{i(\delta - \epsilon_p - ih)\} / \cos(\epsilon_q) & -itg(\epsilon_q) \exp(-i\delta) \\ itg(\epsilon_q) \exp(i\delta) & \exp\{-i(\delta - \epsilon_q - ih)\} / \cos(\epsilon_q) \end{bmatrix} \quad (3.4.12)$$

Verificando que  $M$  é uma matriz unimodular, i.e.,  $\det M = 1$ , então podemos calcular os elementos de uma matriz de ordem  $N$ ,  $M^N$ , como equivalente à uma matriz unimodular (característica) de potência  $N$ , (28).

$$M^N = \begin{bmatrix} m_{11} U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x) & m_{12} U_{N-1}(x) \\ m_{21} U_{N-1}(x) & m_{22} U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x) \end{bmatrix} \quad (3.4.13)$$

onde  $U_N(x)$  são os polinômios de Chebyshev de segunda espécie, dado por

$$U_N(x) = \{ \text{sen} [(N+1) \text{arc sen}(1-x^2)^{1/2}] \} / (1-x^2)^{1/2} \quad (3.4.14)$$

$$e \quad x = (m_{11} + m_{22}) / 2 \quad (3.4.15)$$

com os elementos  $m_{11}$ ,  $m_{12}$ ,  $m_{21}$  e  $m_{22}$  são os elementos da matriz característica (eq. 3.4.12), e de acordo as eqs. (3.4.9) e (3.4.10), encontramos para  $x$ :

$$x = \cos(\delta - \epsilon_p - ih) / \cos(\epsilon_q) \quad (3.4.16)$$

A formulação matricial [eq. (3.4.11)] é então aplicada para um conjunto de  $N$  planos, identificados como os elementos da matriz  $M^N$ . Consideramos as amplitudes  $A_{ph}^i(1)$  e  $B_{ph}^t(1)$  na superfície de entrada (primeiro plano) e  $A_{ph}^i(J)$ , na superfície de saída (último plano) do cristal.

$$\begin{bmatrix} A_{ph}^i(1) \\ B_{ph}^t(1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11}U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x) & m_{12}U_{N-1}(x) \\ m_{21}U_{N-1}(x) & m_{22}U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{ph}^i(J) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.4.17)$$

Desde que não há incidência externa superfície inferior do cristal,

$B^i(J) = 0$  logo, a contribuição para a onda transmitida nesta direção

é zero. Embora ocorra reflexão da onda  $A^i(J)$ , a mesma não foi considerada por Perkins and Knight. Desta maneira,  $B^t(J) = 0$ . As amplitudes no plano de superfície do cristal (plano 1), onde ocorre a reflexão, são obtidas resolvendo a matriz (3.4.17), então:

$$A^i_{ph}(1) = [m_{11} U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x)] A^i_{ph}(J) \quad (3.4.18)$$

$$B^t_{ph}(1) = [m_{21} U_{N-1}(x)] A^i_{ph}(J) \quad (3.4.19)$$

O coeficiente de reflexão  $\mathcal{R}$  pela sua definição (eq. 2.5.36) é dado por:

$$\mathcal{R}_{uh}(J) = [m_{21} U_{N-1}(x)] / [m_{11} U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x)] \quad (3.4.20)$$

ou, substituindo os polinômios de Chebyshev de acordo a eq. (3.4.16) com o coeficiente  $x$  na eq. (3.4.15) temos finalmente,

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{uh}(1) = & \langle \text{tg}(\epsilon_q) \exp(i\delta) \rangle / \langle -\text{tg}(\epsilon_q) \exp(-i\delta) \\ & - \langle \text{sen}[(N-1)\arcsen(1-x^2)^{1/2}] / \text{sen}[N \arcsen(1-x^2)^{1/2}] \rangle \end{aligned} \quad (3.4.21)$$

onde generalizamos os estados de polarização indicando  $u=p$  (estado  $\pi$ ) e por  $u=s$  (estado  $\sigma$ , quando  $\epsilon_q \rightarrow \epsilon_s \leftarrow \epsilon_p$ ) e os coeficientes  $m_{11}$  e  $m_{21}$ , são dados na eq. (3.4.12).

A eq. (3.4.21) é a solução analítica para a reflexão de um cristal, através do coeficiente  $\mathcal{R}$ , em função dos polinômios de Chebyshev. A mesma representa uma aplicação da formulação auto-consistente aqui desenvolvida em uma situação analisada com a teoria de Darwin.

No caso da transmissão, definimos o coeficiente  $\mathcal{T}$  para o conjunto de N planos, como um cristal, por:

$$\mathcal{T}_{uh(N)} = A_{uh}^t(J) / A_{uh}^i(1) \quad (3.4.22)$$

Admitindo uma igualdade entre as amplitudes incidente e transmitida neste último plano, ou seja:  $|A^i(J)| = |A^t(J)|$ , encontramos da amplitude  $A_{ph}^i(1)$  na eq. (3.4.18)

$$\mathcal{T}_{uh(N)} = 1 / [m_{11} U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x)] \quad (3.4.23)$$

e com os parâmetros já definidos,

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{uh(N)} = (1-x^2) \operatorname{cose} q / \{ \exp[i(\delta - \epsilon_p - ih)] \\ \cdot \operatorname{sen}[N \operatorname{arcsen}(1-x^2)^{1/2}] - \operatorname{sen}[(N-1) \operatorname{arcsen}(1-x^2)^{1/2}] \} \end{aligned} \quad (3.4.24)$$

A transmissividade T, é dada por:

$$\begin{aligned} T = \mathcal{T} \mathcal{T}^* = |\mathcal{T}|^2 = 1 / \{ (m_{11})(m_{11})^* [U_{N-1}(x)]^2 \\ - [m_{11} + (m_{11})^*] U_{N-1}(x) U_{N-2}(x) + [U_{N-2}(x)]^2 \} \end{aligned} \quad (3.4.25)$$

e a refletividade R, a partir da eq. (3.4.20),

$$\begin{aligned} R = \mathcal{R} \mathcal{R}^* = |\mathcal{R}|^2 = (n_{21})(n_{21})^* [U_{N-1}(x)]^2 \\ / \{ [m_{11} U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x)] [m_{11})^* U_{N-1}(x) - U_{N-2}(x)] \} \end{aligned} \quad (3.4.26)$$

com os valores de  $m_{12}$  e  $m_{21}$  (eq. 3.4.12), encontramos:

$$|R|^2 + |T|^2 = (\operatorname{tg}^2(\epsilon_q) [U_{N-2}(x)]^2 + 1) / (\operatorname{tg}^2(\epsilon_q) [U_{N-1}(x)]^2 + [U_{N-1}(x)]^2 - 2x U_{N-1}(x) U_{N-2}(x) + [U_{N-2}(x)]^2) \quad (3.4.27)$$

ou para a identidade, quando  $|x| < 1$ ,

$$[U_{N-1}(x)]^2 - 2x U_{N-1}(x) U_{N-2}(x) + [U_{N-2}(x)]^2 = 1 \quad (3.4.28)$$

$$E = R + T = 1 \quad (3.4.29)$$

como uma verificação analítica da conservação da energia.

### 3.5 - A Solução Numérica

As duas soluções analíticas encontradas abordam, diferentemente, uma mesma condição de difração para o cristal:

(i) a primeira, desenvolvida sob a regra da semelhança de campo, admitindo-se incidência em ambas superfícies do cristal.

(ii) a segunda, embora permitindo uma generalização das condições de incidência com os polinômios de Chebyshev, proporciona soluções periódicas. Com esta limitações, desenvolvemos uma solução numérica a partir da primeira solução analítica, iterativamente, como uma relação de recorrência. Desta maneira, obtemos resultados exatos e tão precisos quanto às condições computacionais permitirem.

Experimentalmente, no caso Bragg, o feixe de raios-X incide em

uma das superfícies do cristal. Verifica-se então que a ausência de um feixe incidente na outra superfície do cristal inviabiliza a aplicação da regra da semelhança de campo. Como resultado, no último plano, a superfície inferior do cristal, a onda incidente é  $B^i(j) = 0$ . Então,

$$F(j) = B^i(j) / A^i(j) = 0 \quad (3.5.1)$$

Por outro lado, observamos que a eq. (3.2.4) é uma relação de recorrência que envolve os coeficientes de reflexão  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{S}$  no espaço entre os dois planos vizinhos. De modo equivalente, tomamos a eq. (3.4.9) e (3.4.10) como:

$$A^i_{ph}(j) = A^i_{ph}(j+1) [m_{11} + m_{12} \mathcal{R}_{ph}(j+1)] \quad (3.5.2)$$

$$B^t_{ph}(j) = A^i_{ph}(j+1) [m_{21} + m_{22} \mathcal{R}_{ph}(j+1)] \quad (3.5.3)$$

onde  $m_{11}$ ,  $m_{12}$ ,  $m_{21}$ ,  $m_{22}$  são dados na eq. (3.4.12). O coeficiente de reflexão fica:

$$\mathcal{R}_{ph}(j) = [m_{21} + m_{22} \mathcal{R}_{ph}(j+1)] / [m_{11} + m_{12} \mathcal{R}_{ph}(j+1)] \quad (3.5.4)$$

Esta relação de recorrência desempenha a mesma função que a eq. (3.2.4), para análise da reflexão do cristal. O coeficiente de reflexão no último plano, com a condição da eq. (3.4.1) torna-se

$$\mathcal{R}_{ph}(j) = i \operatorname{sen}(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h) \quad (3.5.5)$$

Sendo o valor de  $R_{ph}(J)$  conhecido, o coeficiente na superfície do cristal  $R(1)$ , é calculado a partir da eq. (3.2.4) (ou eq. 3.5.4), identificando o coeficiente  $R(J)$  como  $R(J+1)$ . Conseqüentemente obtemos a refletividade  $R$ , definida como a razão entre intensidades, e a fase de reflexão  $\rho$  em toda a faixa angular que ocorre difração.

A avaliação numérica no cálculo transmissão no cristal foi feita a partir da definição do coeficiente  $\Sigma(N)$ , [eq. (3.4.22)], que dá a razão entre a amplitude transmitida no último plano,  $A^t(J)$ , e aquela incidente no primeiro plano  $A_{ph}^i(1)$ . Seguindo o mesmo procedimento na obtenção da relação de recorrência para a reflexão, consideramos a transmissão no acoplamento dos planos  $j$  e  $j+1$ , dado por:

$$\Sigma_{ph} = A_{ph}^t(j+1) / A_{ph}^i(j) \quad (3.5.6)$$

A amplitude  $A_{ph}^i(j)$  é dada pela eq. (3.5.2) e  $A_{ph}^t(j+1)$  é obtida a partir da definição do coeficiente de transmissão, como:

$$A_{ph}(j+1) = A_{ph}^t(j+1) / A_{ph}^i(j+1) \quad (3.5.7)$$

Assumindo, de acordo (2.5.14), este coeficiente para o último plano, com a condição da eq. (3.5.1), temos:

$$A_{ph}(J) = \cos(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h) \quad (3.5.8)$$

Desta maneira, a amplitude  $A_{ph}^t(j+1)$  é avaliada como  $A_{ph}^t(j)$ , em um nível de referência baixo do último plano, ou seja:

$$A^t(j) = \cos(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h) \exp(-i\delta) A_{ph}^i(j) \quad (3.5.9)$$

Podemos então, obter a solução generalizada com a eq. (3.5.6), ou seja:

$$\overline{T}_{ph}(N) = [\cos(\epsilon_q) \exp(i\epsilon_p - h)] / A_{ph}^i(j+1) [m_{11} + m_{12} \mathcal{R}_{ph}(j+1)] \quad (3.5.10)$$

Esta equação representa o coeficiente de transmissão para um cristal constituído por N planos. A transmissividade T, como a razão entre as intensidades, e a fase de transmissão  $\gamma$  são determinadas com a relação de recorrência dada na eq. (3.5.4).



## C A P I T U L O 4

### ANALISE DOS RESULTADOS NUMERICOS

#### 4. 1 - Introdução

A solução analítica para um conjunto de  $N$  planos, como um cristal, foi encontrada assumindo um plano de dipolos, associado aos campos incidente e transmitido como unidade de espalhamento auto-consistente. No acoplamento dessas unidades, basta admitir a continuidade total dos campos entre elas. As condições de contorno são naturais aos próprios planos então, qualquer plano pode ser superfície do cristal. Isto significa que ocorre incidência em ambas faces de todos os  $N$  planos do cristal logo, com a regra da semelhança de campo, implicitamente estabelecida, leva à solução analítica generalizada.

A solução numérica, nesta análise do caso simétrico de Bragg, constitui a única maneira de obter resultados, que possam ser comparados com os publicados. É um procedimento usual da Física Computacional utilizada para situações não completamente atendidas através de fórmulas finitas. Esta solução representa uma analogia do método experimental para este caso de difração. Ou seja, o feixe incidente sobre um dos planos de superfície do cristal determina, nos planos desse cristal, um sistema de quatro ondas exceto no último plano, onde só há uma onda incidente vindo do meio cristalino. Desta maneira, os campos interagentes comportam-se, em princípio, diferentemente em cada plano e a regra da semelhança de campo não pode ser aplicada.

Como exemplo de cristal perfeito, para aplicar a solução auto-consistente, escolhemos o Germânio que possui uma capacidade de espalhamento maior que, por exemplo, o Silício. Para a direção [111], é possível obter resultados significativos com um menor número de planos  $N$  e conseqüentemente, um menor tempo de cálculo computacional. Os valores iniciais adotados foram: a constante de rede do Germanio  $a = 5,657700000 \times 10^{-10} \text{ m}$ ; o comprimento de onda da radiação  $\lambda[\text{CuK}\alpha_1] = 1,540562000 \times 10^{-10} \text{ m}$  o raio clássico do elétron  $r_e = 2,817940000 \times 10^{-15} \text{ m}$  e o ângulo de incidência que satisfaz a equação exata de Bragg foi calculado  $\Theta_0 = 13,63962014$  graus. Tratando-se de um modelo exato, esses valores foram utilizados como se possuíssem uma maior precisão, refletindo-se nos resultados obtidas.

O procedimento de cálculo para a reflexão, foi efetuado através de processo iterativo, com a eq. (3.5.4) generalizada para os estados de polarização  $\pi$  e  $\sigma$ . Esta equação relaciona os coeficientes de reflexão  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{S}$  entre dois planos vizinhos quaisquer do cristal. Como método numérico, assumimos o valor de  $\mathcal{R}$  dado pela eq. (3.5.5) e encontramos os resultados para a refletividade  $R$  e a fase de reflexão  $\rho$  na superfície do cristal. No caso da transmissão, foi utilizada a eq. (3.5.10) para determinar a transmissividade  $T$  e a fase de transmissão  $\tau$ . A fase, geralmente, não é tratada nas teorias de difração de raios-X. Neste modelo a mesma constitui no parâmetro mais sensível que a amplitude para interpretação dos resultados. A energia foi calculada, em todas as situações, como a soma  $E = R + T$ .

## 4. 2 - Os Resultados Numéricos

Os resultados numéricos foram obtidos atribuindo-se ao número de planos  $N$ , valores múltiplos de 2 entre 1024 e 16384. A utilização deste múltiplo possibilita direta comparação dos resultados obtidos para um cristal de  $N$  planos com aqueles resultantes admitindo-se sub-múltiplos ou múltiplos de  $N$ . Assim, podemos observar as coincidências dos pontos mínimos da refletividade e da transmissividade com a variação de  $N$  à medida que o quadro de difração cinemático evolui para um tipicamente dinâmico.

Os valores de  $R(\Theta)$  e de  $T(\Theta)$  são mostrados pelas respectivas curvas de reflexão ("rocking curve") e de transmissão. As fases de reflexão  $\rho$  e de transmissão  $\tau$ , são ilustradas em função do desvio do ângulo de Bragg e respectivamente, em função de  $R$  e de  $T$ . A energia é representada em cada figura nas duas situações: sem absorção ( $h=0$ ) e com absorção ( $h \neq 0$ ).

A notação usada nas figuras mostra no alto à esquerda o número de planos  $N$ , seguindo-se a letra S ou P indicando a polarização do campo eletromagnético incidente,  $\pi$  ou  $\sigma$ . Quando a absorção é considerada fazemos referência com a letra H. O valor de  $\Theta_B$  (teta de Bragg) destacado em cada figura, corresponde aos resultados representados pela curva contínua.

### 4. 2. 1 - A Amplitude de Reflexão

As curvas de reflexão indicam os valores da refletividade  $R$  versus  $\Delta\Theta$ , o desvio do ângulo de Bragg. As Figuras (4.1a), (4.2a) e (4.3) ilustram, comparativamente, os valores para 1024, 2048, 4096, 8192 e 16384 planos, assumindo o campo eletromagnético incidente no estado de polarização- $\sigma$ . As curvas da Fig. (4.1a), para 1024 e 2048

planos, possuem formas semelhantes àquelas características da teoria cinemática. A medida que  $N$  cresce, Fig. (4.2a) para 4096 e 8192 planos, delinea-se uma faixa angular onde ocorre, crescentemente, maior refletividade  $R$ . O valor máximo de  $R$  corresponde, nessa faixa, ao ângulo de Bragg  $\Theta_B$ . A mesma é limitada por outras duas, simétricas, onde  $R$  decresce rapidamente enquanto oscila entre máximos e mínimos. A frequência dessas oscilações é proporcional ao incremento de  $N$ , como se observa na teoria cinemática. Destacamos os resultados da Fig. (4.3) para 16384 planos, mostrando nitidamente o platô da curva de reflexão. O valor máximo de  $R$ , 0.999999999997, indica que a reflexão total só ocorre quando  $N \rightarrow \infty$  logo,  $R \rightarrow 1$ .

A comparação dos resultados em dois estados de polarização  $\sigma$  e  $\pi$ , é mostrada na Fig. (4.4a) para 8192 planos. Distante da faixa central de reflexão, as curvas aparecem superpostas observando-se os menores valores de  $R$  para o estado- $\pi$  (curva tracejada). O exemplo da Fig. (4.4a), mostra na faixa central, próxima do ângulo de Bragg  $\Theta_B$ , há uma diferença de 3 segundos de arco na largura do platô, ocasionada por um termo em função de  $2\Theta$  que aparece tanto no numerador como no denominador das expressões dos coeficientes complexos. Comparemos, por exemplo, a eq. (2.5.38) com a eq. (2.5.40) onde os ângulos  $\epsilon_q$ ,  $\epsilon_p$ ,  $\epsilon_s$  são dados pelas eqs. (2.5.18) a (2.5.20).

A Fig. (4.5a) mostra, para 8192 planos, os resultados obtidos quando introduzimos o fator da absorção  $\exp(-h)$ , com  $h=0.0001$ . Para medir o grau de influência da absorção, incrementamos o valor de  $h$  para 0.0005 resultando uma curva de forma quase-gaussiana, desaparecendo as flutuações de  $R$  (Fig. 4.6a). Observa-se que o efeito da absorção é menor quando a incidência ocorre na pequena faixa angular em torno de  $\Theta_B$ . Isto porque, nessa faixa, o feixe

incidente é fortemente refletido por um pequeno número de planos e, quantitativamente, a absorção será menor.

#### 4. 2. 2 - A Fase de Reflexão

A fase de reflexão,  $\rho$ , constitui-se no parâmetro mais sensível que a amplitude para analisar a difração. Os resultados para 1024 planos são mostrados na Fig. (4.1b), como  $\rho$  versus  $R$ . Observam-se oscilações entre máximos e mínimos de  $\rho$ , variando entre  $-\pi$  e  $+\pi$ . Com o aumento do número de planos do cristal, também aumenta a frequência de oscilação da refletividade diminuindo a faixa angular de difração. Esta situação é mostrada com os resultados para 4096 e 8192 planos na Fig. 4.2b.,  $\rho$  versus  $R$ . Na faixa central de reflexão, como mostra esta Figura para os resultados com 8192 planos (curva tracejada), nota-se o aparecimento um platô de fase, na região de máximos valores de  $R$ . O platô localiza-se na faixa positiva de  $\rho$  marcada pelos pontos 1 e 2, correspondentes aos valores de  $\rho$  respectivamente iguais a  $\pi$  e a  $0$ , para um mesmo valor de  $R$ . A faixa angular entre esses pontos é da ordem de 27,7 segundos de arco. A curva já indica a progressiva formação do platô com o incremento de  $N$ .

Na Fig. (4.4b) comparamos os resultados da fase  $\rho$  obtidos para os dois estados de polarização do campo eletromagnético incidente ou sejam:  $\sigma$  (curva contínua) e  $\pi$  (curva tracejada), quando  $N=8192$  planos. A curva  $\rho$  versus  $R$  permite acompanhar as diferenças entre os valores de  $R$  até tornarem-se praticamente o mesmo. O comportamento da fase  $\rho$ , como ocorre para amplitude, é completamente modificado com a absorção. Os resultados são ilustrados pela curva tracejada, (Fig. 4.5b,  $\rho$  versus  $R$ ), para 8192 planos, quando  $h=0.0001$ . O efeito da absorção é mostrado como uma

brusca alteração no comportamento da fase, reduzindo seu período de oscilação. Aumentando-se 5 vezes o coeficiente de absorção, ou seja  $h=0.0005$ , os resultados são completamente diferentes. Como mostra a Fig. (4.6b), desaparecem as flutuações da fase observando-se apenas, a refletividade correspondente a faixa angular central. Os pontos 1 e 2 são os mesmos indicados na Fig. (4.2b) e o ponto 3, refere-se ao valor de R para  $\rho=\pi/2$ .

#### 4. 2. 3 - A Amplitude de Transmissão

A amplitude da transmissão geralmente não é discutida no caso Bragg. Os resultados da transmissividade T, ilustrados como curvas de transmissão, mostram-se correspondentemente simétricos àquêles obtidos para a reflexão. Como exemplo, as curvas T versus  $\Delta\theta$  da Fig. (4.7a) para 1024 e 2048 planos, são as equivalentes inversas àquelas das Figs. (4.1a) para R versus  $\Delta\theta$ . Os valores mínimos de T ocorrem sob o ângulo  $\theta_B$  aproximam-se de zero com o aumento do número de planos.

Quando a absorção é considerada no cálculo de T, como exemplo, obtivemos os resultados para 8192 planos mostrados na Fig. (4.8a) quando  $h=0.0001$ . Semelhante à reflexão, comparando os resultados para o caso sem a absorção, podemos notar que na pequena faixa em torno de  $\theta_B$  a transmissividade não é sensível à absorção. Outrossim, também não aparecem os pontos extremos que correspondem aos máximos valores da transmissividade e simetricamente, aos da refletividade mínima.

#### 4. 2. 4 - A Fase de Transmissão

No caso da fase de transmissão  $\tau$ , mostramos na Fig. (4.7b) os resultados para 1024 e 2048 planos, com  $\tau$  versus  $T$ . Os valores de  $\tau$  abrangem o espectro de  $-\pi$  a  $+\pi$  em toda a região de difração. Observa-se ainda as simétricas e crescentes oscilações de  $T$  em torno do valor  $\tau=0$ , correspondente ao ângulo de Bragg  $\Theta_B$ .

Nos resultados com a absorção, a fase  $\tau$  tem a mesma faixa espectral que no caso sem a absorção. A curva tracejada da Fig. (4.8b),  $\tau$  versus  $T$  ilustra, claramente, como a absorção modifica a fase  $\tau$ . Esta situação indica uma tendência de redução nas oscilações da fase com o aumento de  $N$  e do valor de  $h$ .

#### 4. 2. 5 - A Determinação da Energia

Os resultados para a energia mostrados nas Figs. (4.9a) e (4.9b), para 8192 planos, foram obtidos diretamente somando-se a refletividade com a transmissividade. A linha contínua que aparece ao nível de energia  $E=1$ , corresponde ao valor calculado 0.999999999992, no caso sem absorção. A medida que o número de planos cresce,  $E$  aproxima-se de 1 como um indicativo numérico de que ocorre a conservação da energia. Quando o efeito da absorção é incluído, aparece uma diferença entre o patamar da curva tracejada e o nível de energia 0. Esta diferença corresponde a energia do feixe transmitido, na ordem de  $E = 0.20$ , observado na Fig. (4.9a). A título de ilustração, vale associar os resultados mostrados nas Figs (4.5a),  $R$  versus  $\Delta\Theta$ , e (4.8a),  $T$  versus  $\Delta\Theta$ , obtidos para um mesmo número de planos (8192) e coeficiente de absorção  $h$  (0.0001). Aumentando-se  $h$  para 0.0005, o valor da energia do feixe refletido reduz-se em 60% enquanto que a energia

do feixe transmitido tende exponencialmente a zero. Os resultados mostrados na curva tracejada da Fig. (4.9b) correspondem, praticamente, à energia do feixe refletido. Embora a influência da absorção nas oscilações dos dipolos sejam iguais, em ambas direções, esperava-se que o seu efeito fôsse mais pronunciado na direção do feixe refletido, de menor intensidade, que naquela do transmitido. No entanto, quando a incidência ocorre em uma faixa estreita em torno do ângulo de Bragg, o feixe é fortemente refletido por uma fina camada do cristal logo, um menor número de planos participará da absorção.

#### 4. 2. 6 - O Incremento no Fator de Espalhamento de Plano

Na teoria de Laue, são atribuídos pequenos valores para o parâmetro físico que define a distribuição de cargas no plano, como uma condição para obter a solução. Em nossa formulação, em concordância com o modelo físico, também assumimos pequenos valores para a densidade de dipolos em cada plano. Entretanto, podemos alterar livremente os parâmetros iniciais envolvidos no processo de interação, sem prejuízo da solução auto-consistente. Como exemplo, fixamos o número de planos em 1024 e admitimos um incremento para o fator de espalhamento de plano  $f_p$ , com valores 2 e 4. As respectivas curvas de reflexão são mostradas nas Figs. (4.10a) e (4.11a). As curvas contínuas referem-se à situação onde  $f_p$  não sofre modificação enquanto que as tracejadas correspondem aos casos com incremento de  $f_p$ . É interessante comparar a curva tracejada da Fig. (4.10a) com a correspondente da Fig. (4.1a), para 2048 planos, observando-se a mesma refletividade obtida para 1024 planos com o incremento de 2 em  $f_p$ . Situação



análoga ocorre entre os resultados para 4096 planos, (Fig. 4.2a, curva contínua), com aqueles para 1024 planos com  $4f_p$ , (Fig. 4.11a, curva tracejada).

Para a fase de reflexão  $\rho$ , também verifica-se a analogia referida para R. A curva tracejada,  $\rho$  versus R, da Fig. (4.10b) para 1024 planos com  $2f_p$  (curva tracejada) e é comparada com aquela da Fig. (4.1b) para 2048 planos (curva tracejada). Nota-se uma ligeira diferença no valor de R correspondente a  $\rho=0$ . Esta diferença torna-se menor para os resultados com  $N=1024$  planos e  $f_p$  multiplicado por 4 (Fig. 4.11b, curva tracejada) quando comparamos com aqueles para 4096 planos (Fig. 4.2b, curva contínua).

De forma análoga ao caso da reflexão, obtivemos resultados para a transmissão com os mesmos valores do incremento para  $f_p$ . A curva T versus  $\Theta$  para 1024 planos com  $2f_p$  é mostrada na Fig. 4.12a (curva tracejada) tendo a mesma forma que aquela para 2048 planos, sem alterar o valor de  $f_p$  (Fig. 4.7a). As curvas são simétricas àquelas para a reflexão, como mostram também os resultados para 1024 planos com  $4f_p$  (Fig. 4.13a, curva tracejada). Os resultados para a fase de transmissão  $\tau$  são comparados de mesma maneira, ou seja: com o incremento de 2 em  $f_p$  para 1024 planos, mostrado na Fig. (4.12b) reproduz a situação para 2048 planos com o valor normal de  $f_p$  (Fig. 4.7b).

Considerando apenas um conjunto de 128 planos, o valor de  $f_p$  é multiplicado por 16 e seguidamente, por 256. Na Fig. (4.14a), a curva contínua corresponde a situação onde não há incremento no fator  $f_p$  e a curva tracejada ilustra os resultados para  $16 f_p$ . Para o incremento de 256 em  $f_p$ , obtivemos a curva da Fig. (4.14b), reproduzindo uma situação típica do espalhamento dinâmico. Neste



entre elas além de comprovar os nossos resultados constitui um indicativo da potencialidade desta formulação auto-consistente.

A faixa angular central, onde ocorre maior refletividade, representa a faixa de transição próxima a  $\Theta_B$ , com  $\rho$  (mesmo que  $\varphi$ ) variando entre  $\pi$  e  $0$ . Os resultados numéricos mostram que estas situações limites correspondem ao ângulo de Laue  $\Theta_L$  ( $\varphi, \rho = \pi$ ) e aquele aqui denominado ângulo de Ewald  $\Theta_E$  ( $\varphi, \rho = 0$ ), respectivamente. No ponto de singularidade entre eles, quando  $\varphi, \rho = \pi/2$ , tem-se a máxima refletividade, sob o ângulo de Bragg,  $\Theta_B$ .

Os resultados para a transmissão indicam que o valor de  $T$  diminui com o aumento de  $N$ . Este fato parece indicar a existência de uma camada de extinção no cristal, considerando que a refletividade aproxima-se de 1 e a transmissividade de 0. Observando os resultados para a faixa angular central de difração, notamos que essa suposta camada não é significativamente afetada pela absorção.

No caso da energia os valores encontrados, quando não há absorção, são constantes e aproximam-se de 1 com a precisão numérica. Analisando efeito da absorção, o valor para a energia do feixe refletido torna-se múltiplo daquele para o feixe transmitido. Com o incremento do coeficiente de absorção  $h$ , os valores decrescem rapidamente. A menor influência da absorção no feixe refletido ocorre para os valores de  $\Theta$  incidente na vizinhança de  $\Theta_B$ . Nessa região, a energia ainda é significativa apesar do incremento em  $h$ . Isto porque, o feixe incidente penetrando uma pequena camada no cristal já sofre intensa reflexão, logo o efeito da absorção será menor. Fora dessa região, o feixe penetra um maior número de planos no cristal para então observar-se a reflexão, em consequência o efeito da absorção será maior.

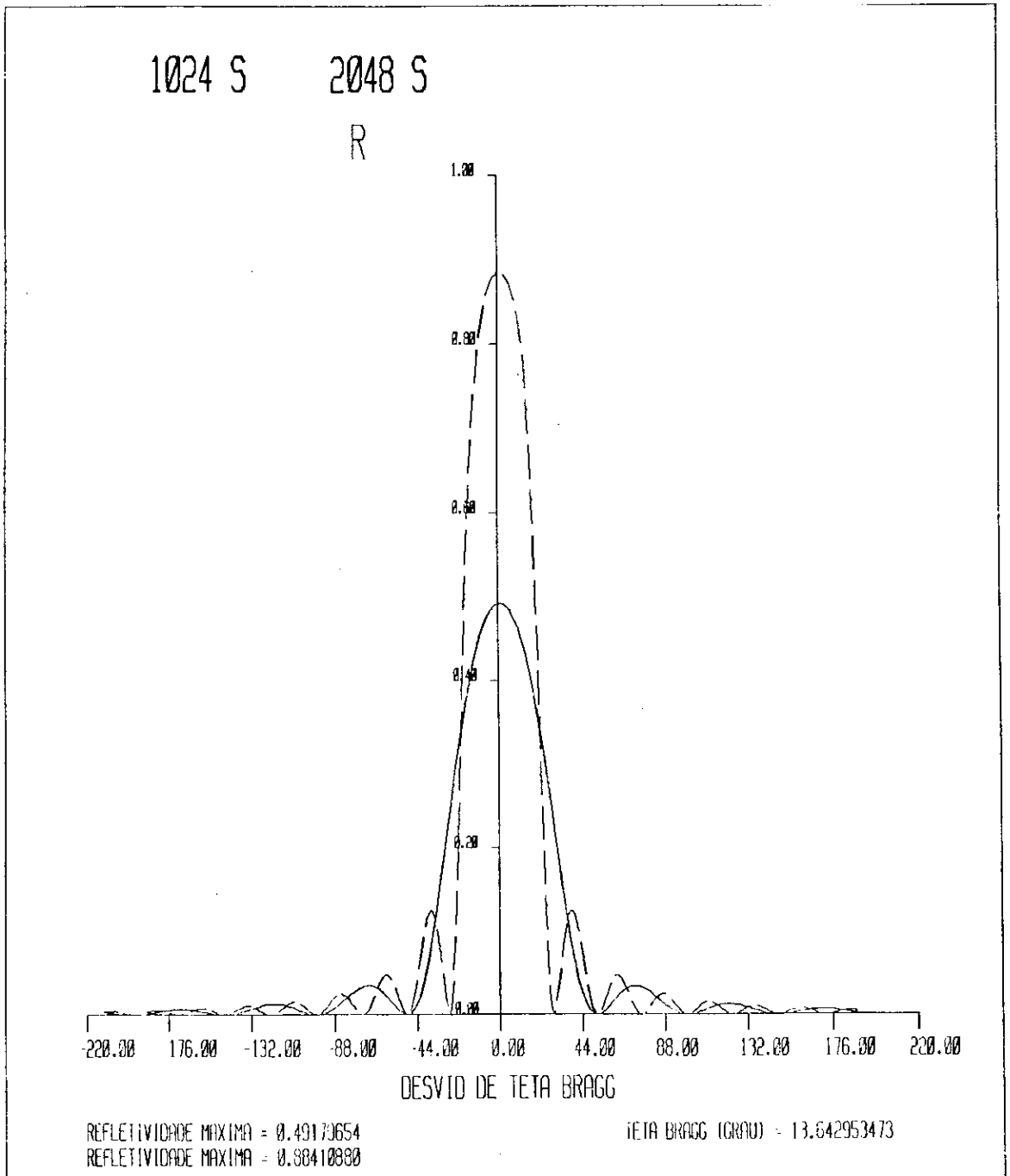


Fig. 4.1a - Refletividade  $R$  versus  $\Delta\theta$  o desvio do ângulo de Bragg ( $\Theta_B$ ). São comparados os resultados para 1024 (curva contínua) e 2048 (tracejada) planos. A letra S indica a polarização  $\sigma$  do campo eletromagnético incidente. Os valores de  $R(\max)$  e de  $\Theta_B$  escritos no mesmo nível da figura, referem-se à curva contínua.

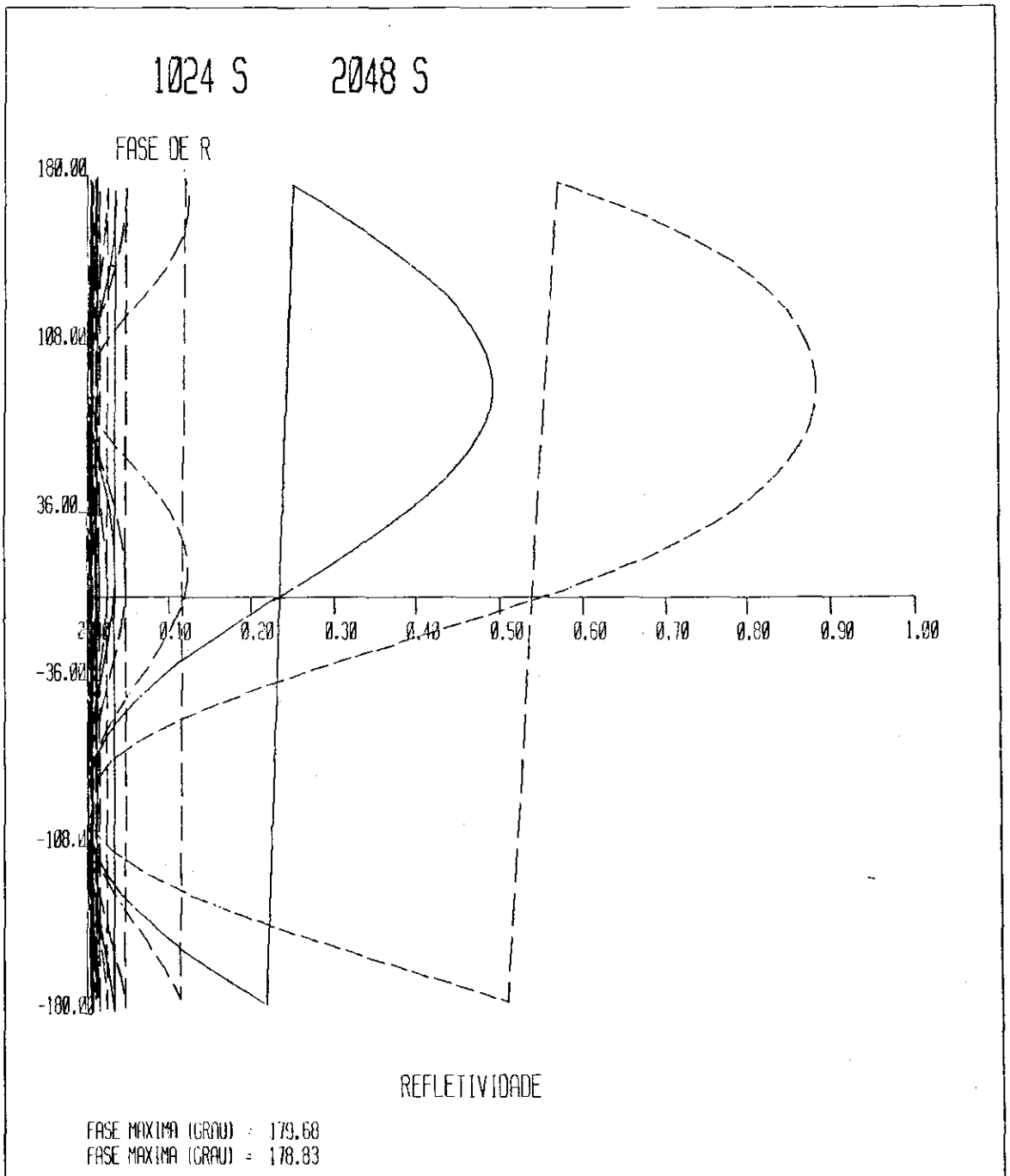


Fig. 4.1b - A mesma comparação que a Fig. 4.1a com  $\rho$  versus R.

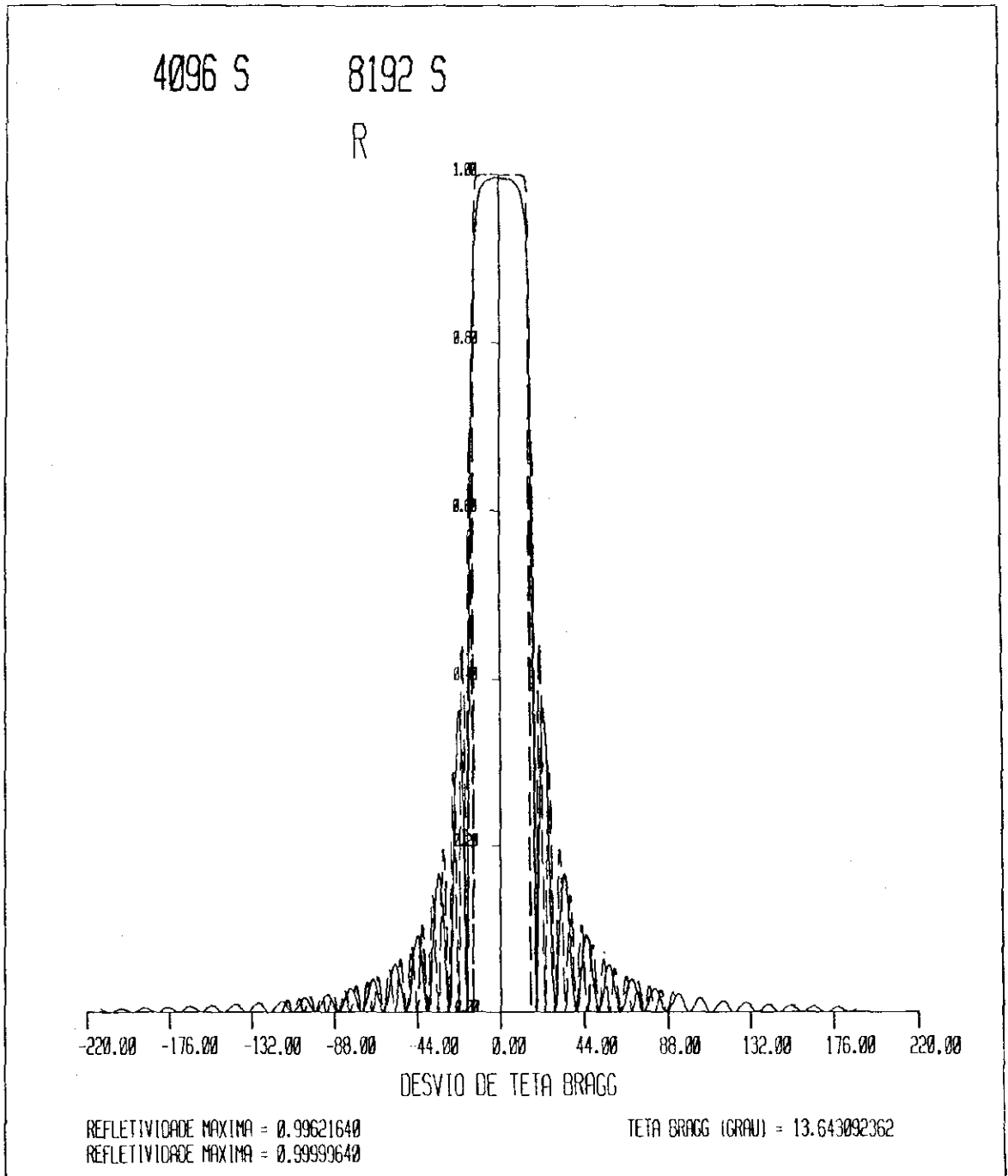


Fig. 4.2a - R versus  $\Delta\theta$  em situação análoga à Fig. 4.1a para 4096 (curva contínua) e 8192 (tracejada) planos.

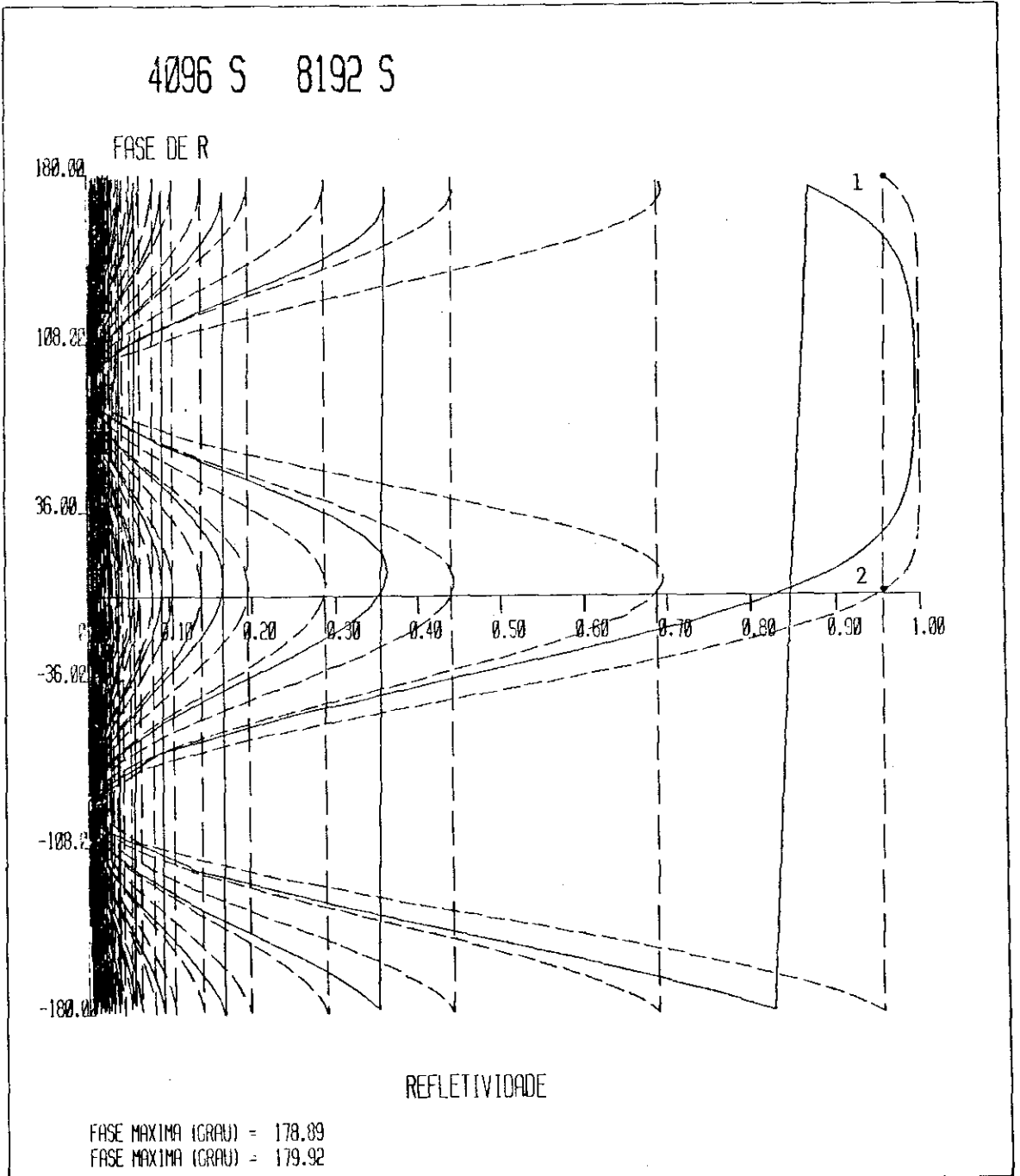


Fig. 4.2b - A mesma comparação que a Fig. 4.2a com  $\rho$  versus R.

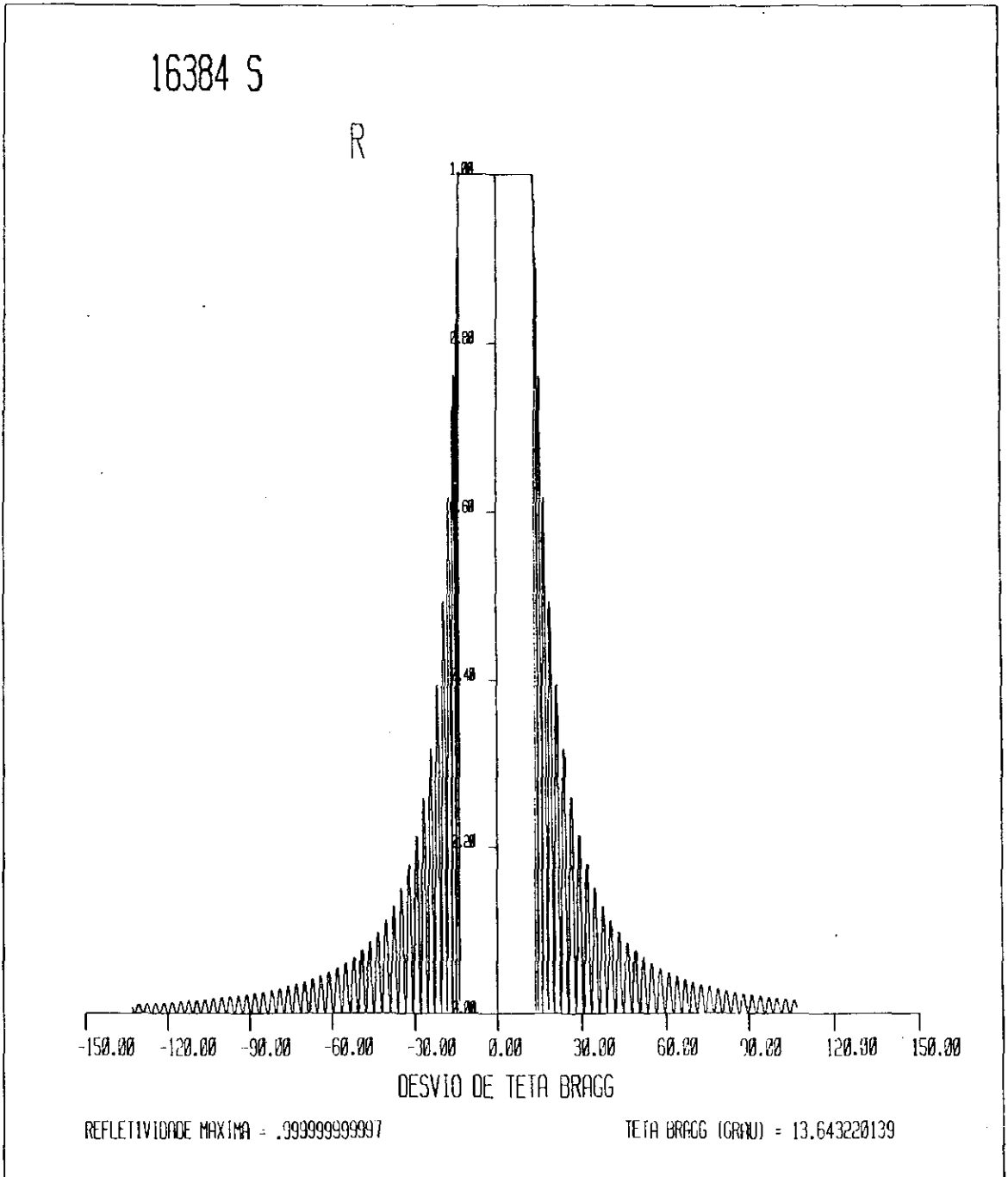


Fig. 4.3 - R versus  $\Delta\theta$  para 16384 planos.



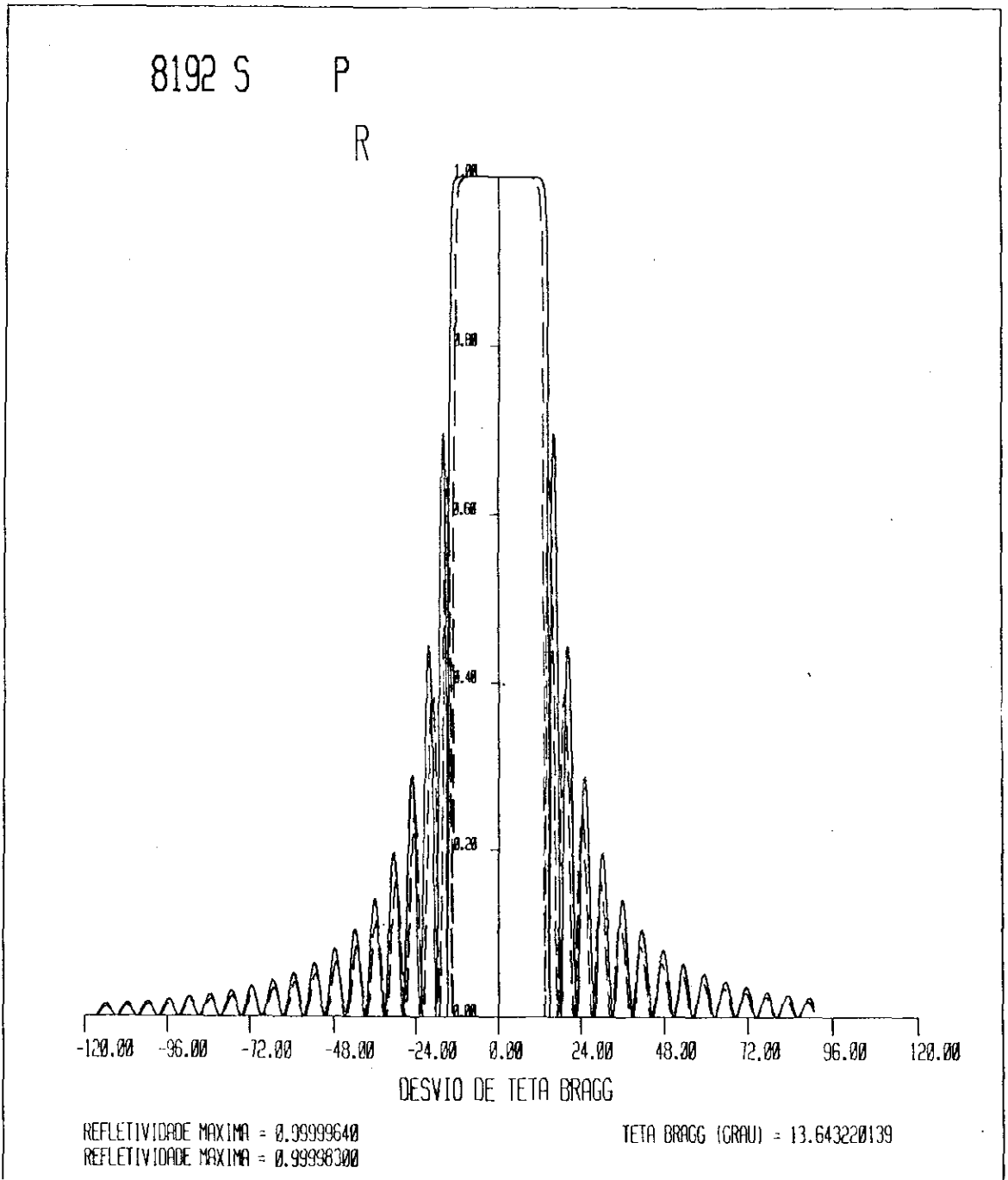


Fig. 4.4a - R versus  $\Delta\theta$  para 8192 planos. São comparados os resultados obtidos para os estados de polarização  $\sigma$  (S, curva contínua) e  $\pi$  (P, tracejada) do campo eletromagnético incidente.

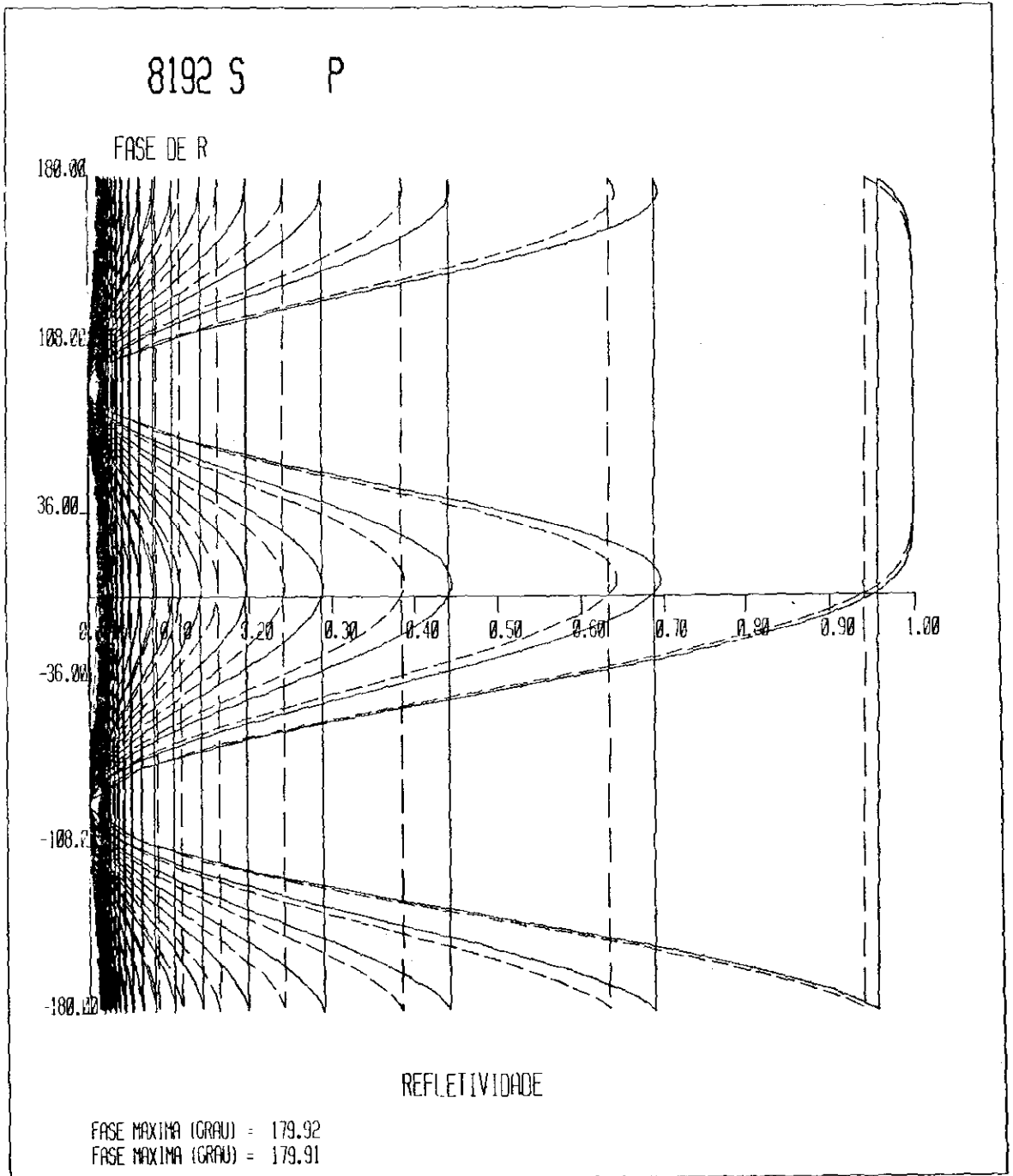


Fig. 4.4 b- A mesma comparação que a Fig. 4.4a com  $\rho$  versus R.

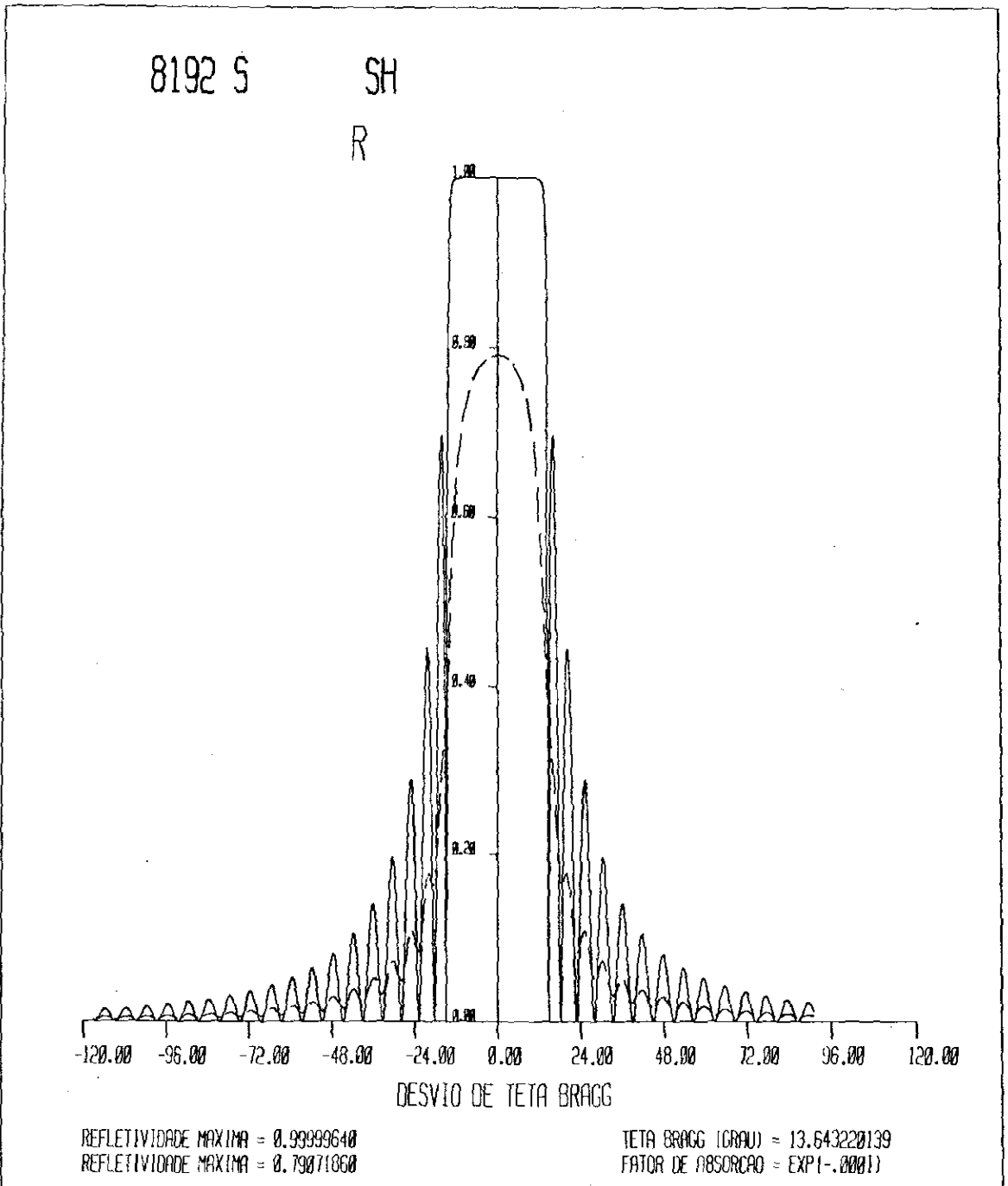


Fig. 4.5a - R versus  $\Delta\theta$  para 8192 planos. São comparados os resultados para o caso sem absorção (curva contínua) e com absorção (tracejada) quando  $h = 0.0001$ .

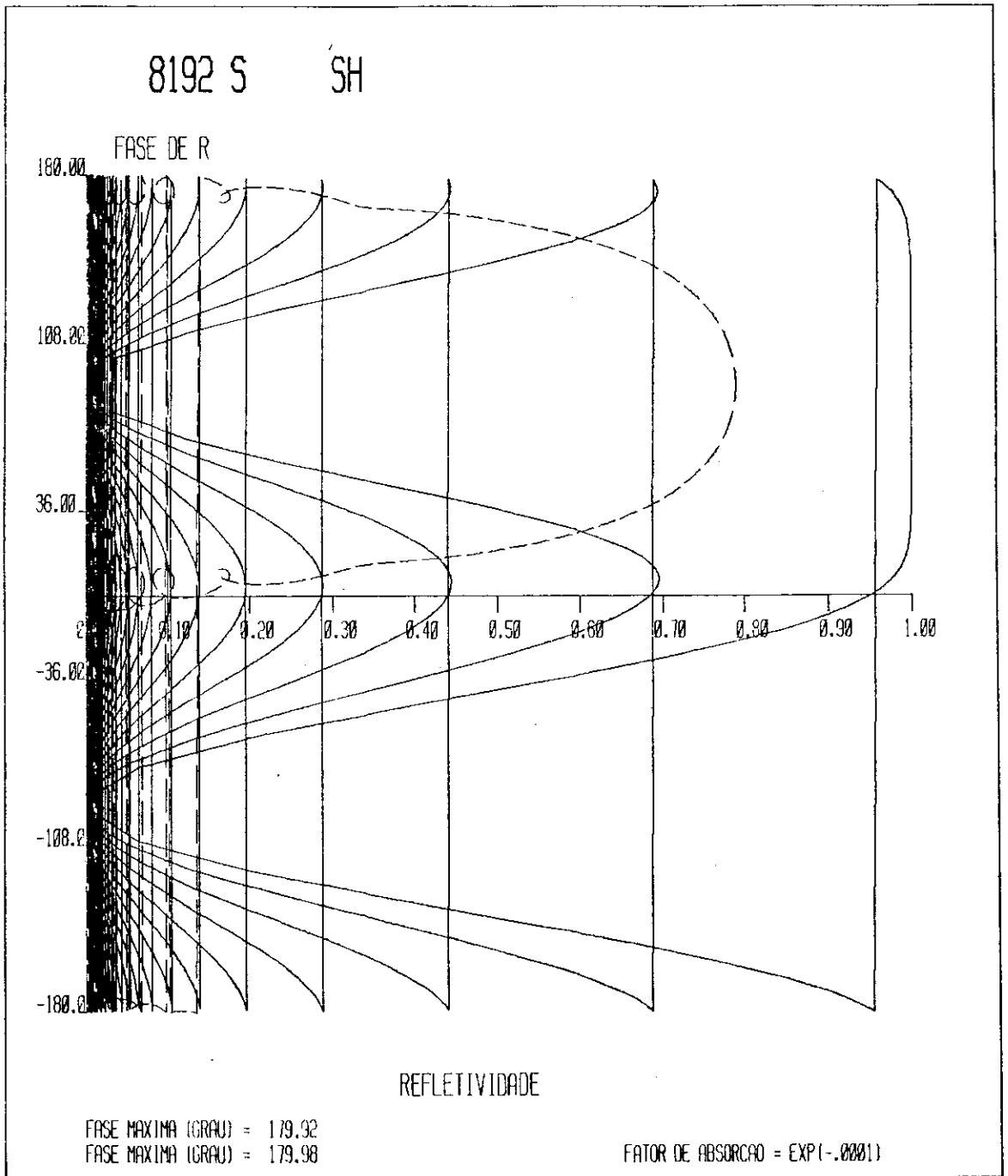


Fig. 4.5b - A mesma comparação que a Fig. 4.5a com  $\rho$  versus R.

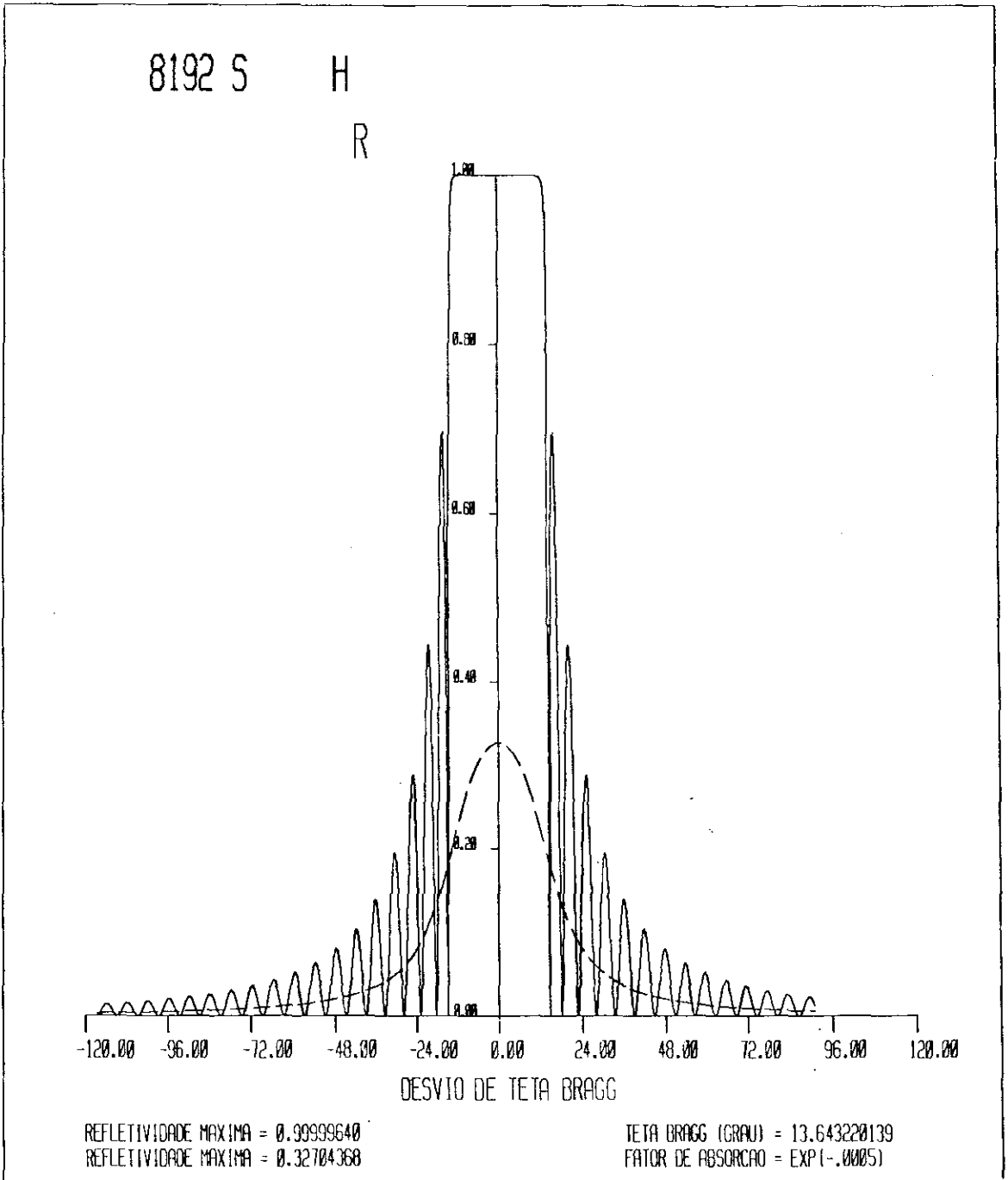


Fig. 4.6a - R versus  $\Delta\theta$  para 8192 planos em situação análoga à Fig. 4.5a, quando  $h = 0.0005$ .

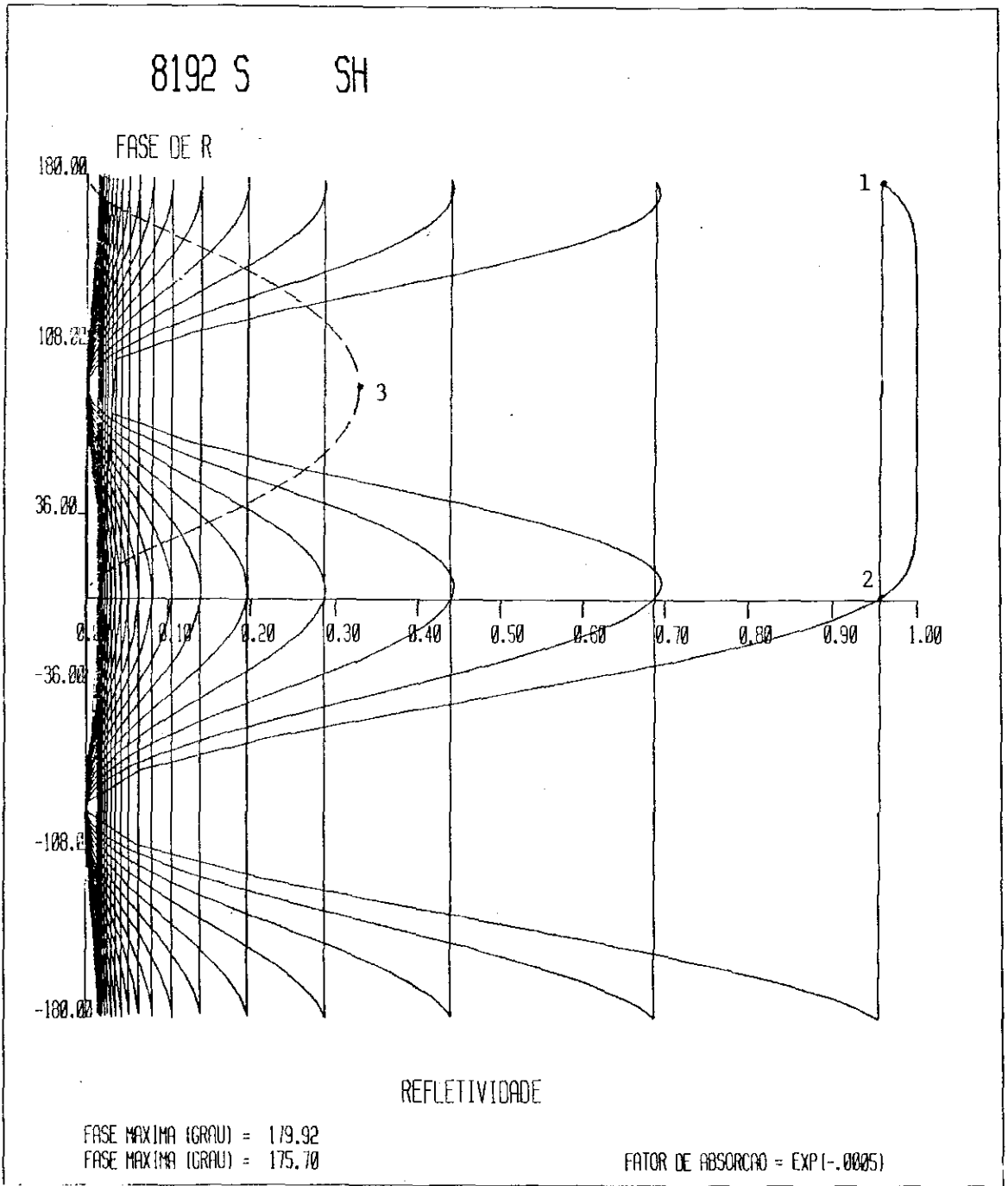


Fig. 4.6b - A mesma comparação que a Fig. 4.6a com  $\rho$  versus R.

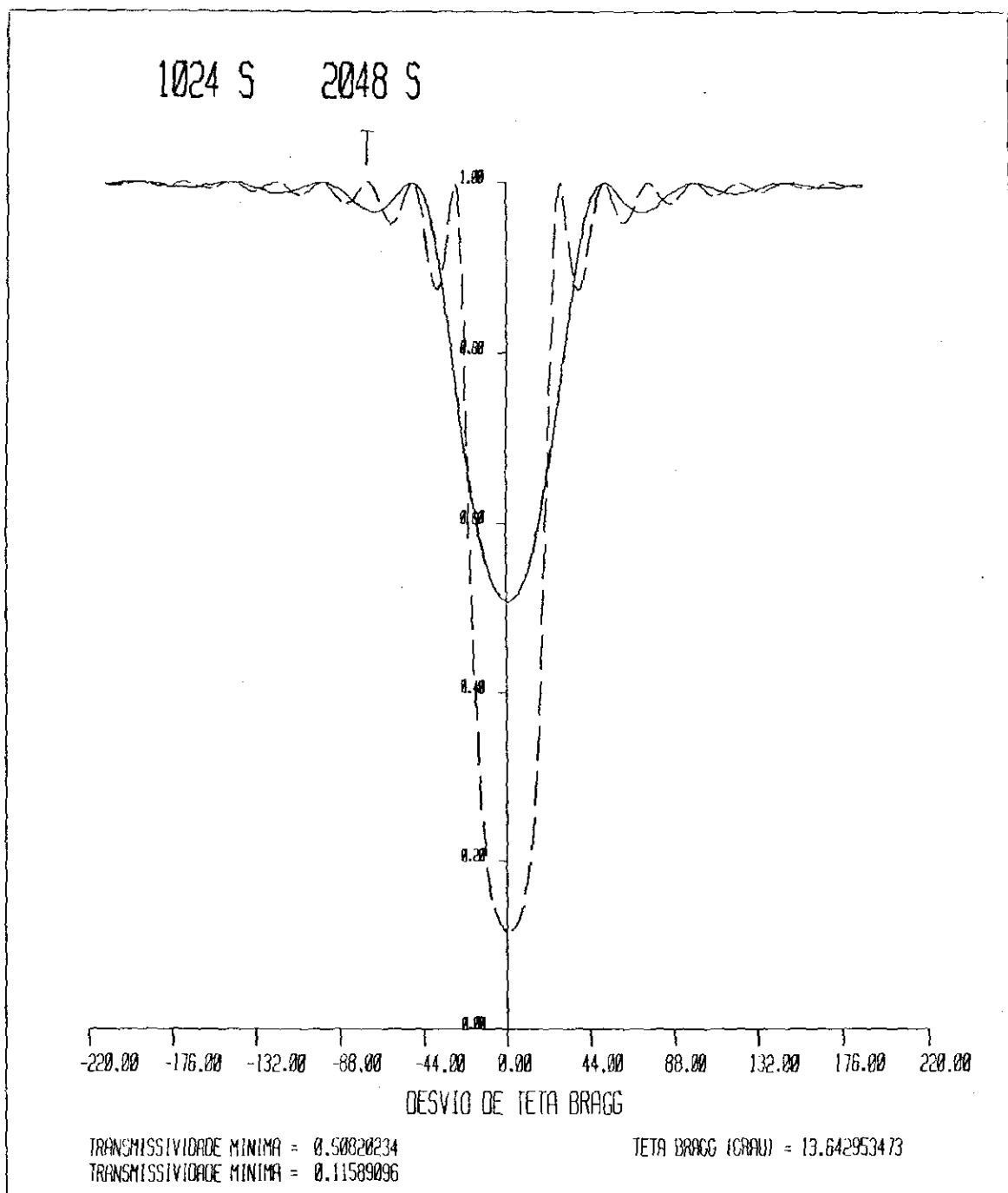


Fig. 4.7a - Transmissividade T versus  $\Delta\theta$ , comparando-se os resultados para 1024 (curva cont nua) e 2048 (tracejada) planos. Os valores de T (m n) e de  $\theta_B$  escritos no mesmo n vel na Figura, referem-se   curva cont nua.

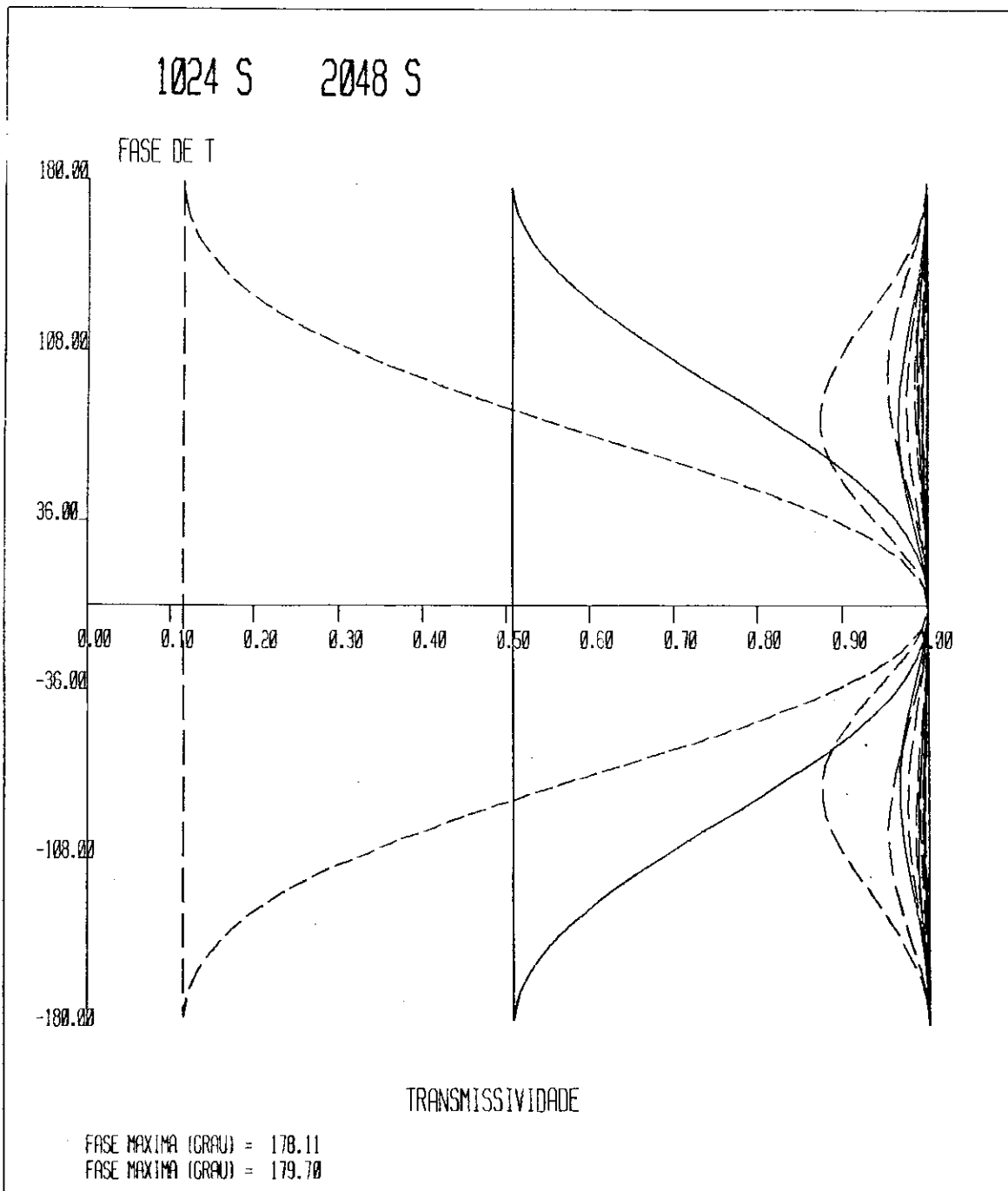


Fig. 4.7 b- A mesma comparação que a Fig. 4.7a com  $\tau$  versus T.



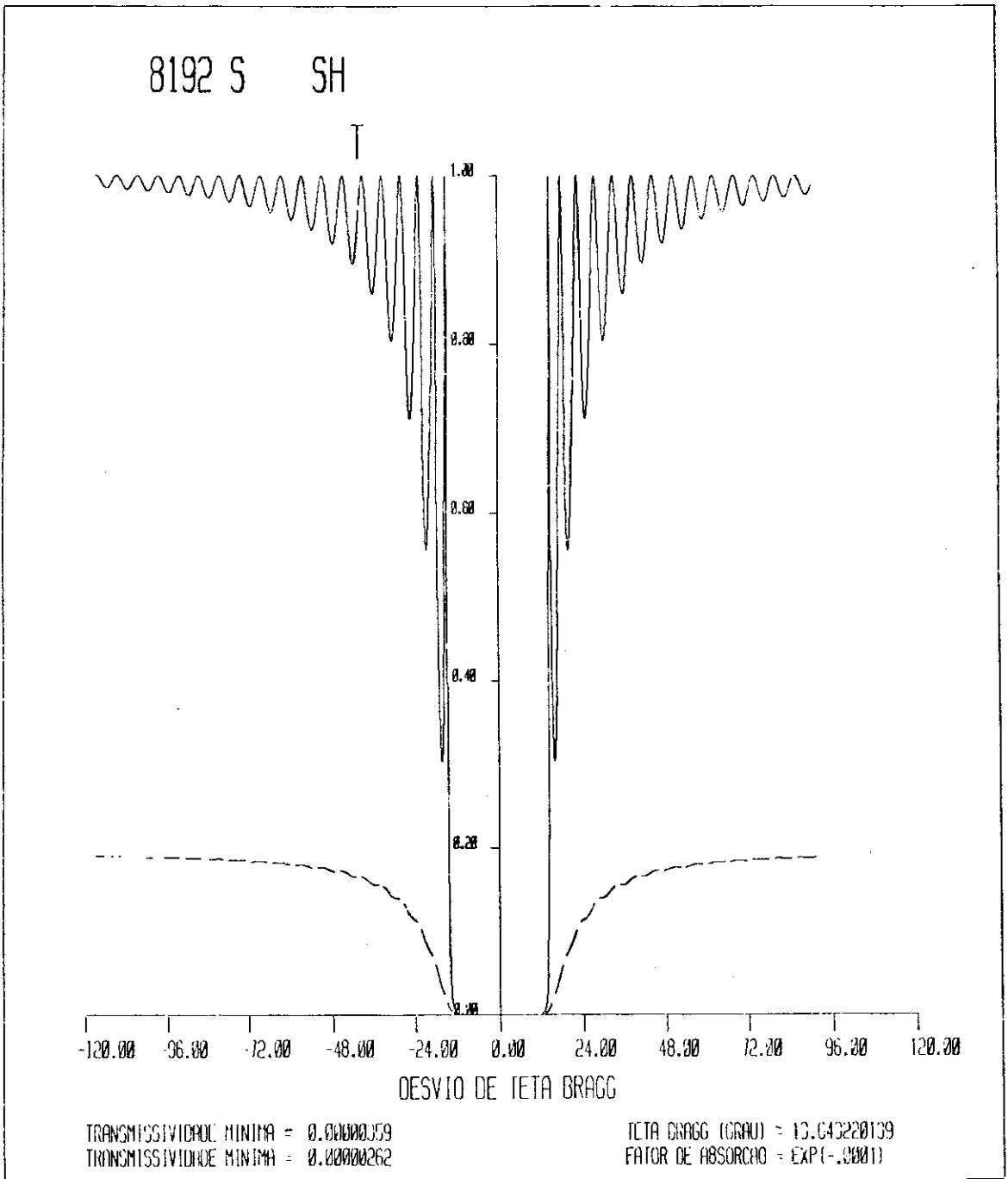


Fig. 4.8a - T versus  $\Delta\theta$  para 8192 planos. São comparados os resultados para o caso sem absorção (curva contínua) e com absorção (tracejada), quando  $h = 0.0001$ .

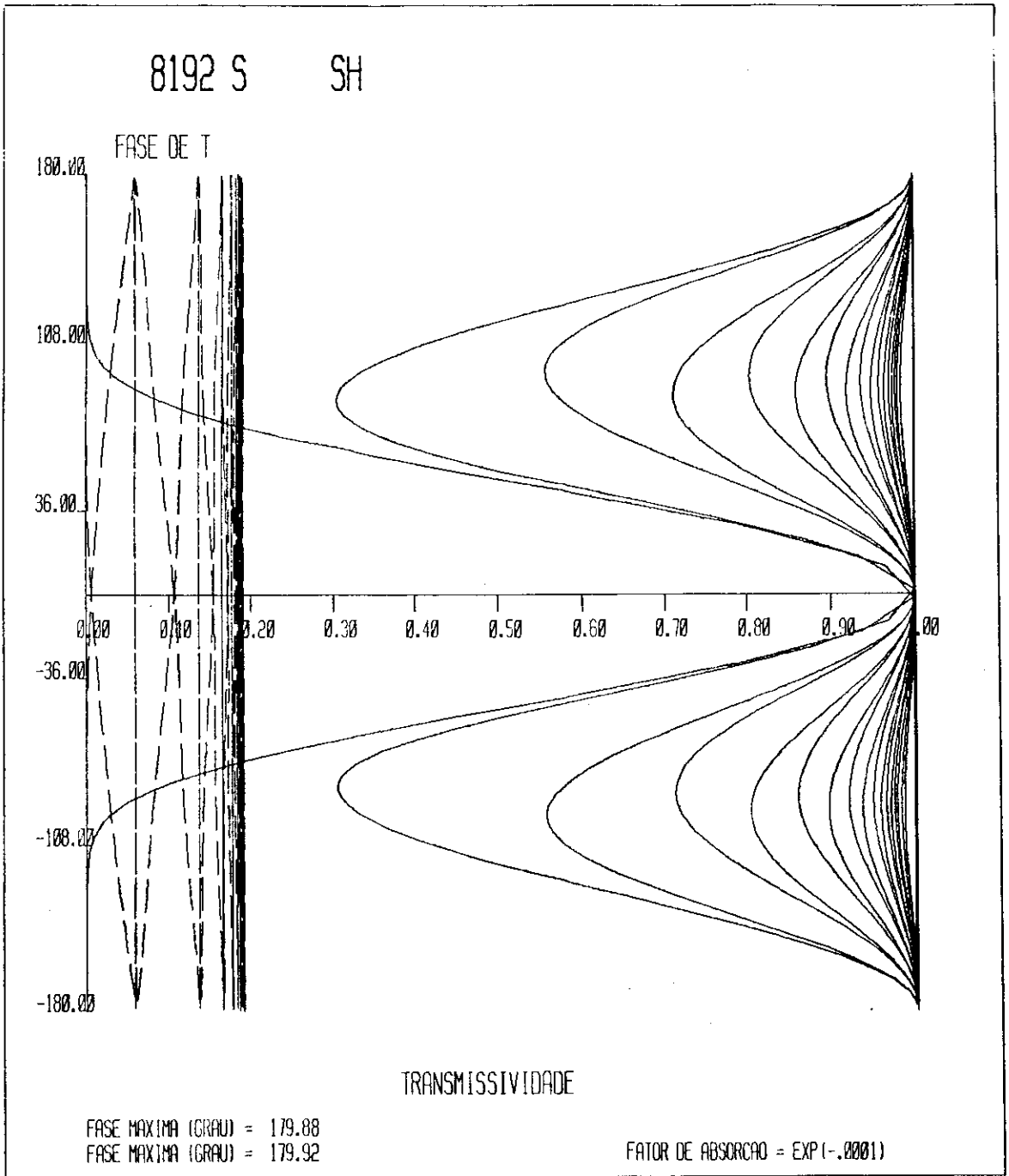


Fig. 4.8b - A mesma comparação que a Fig. 4.8a com  $\tau$  versus T.

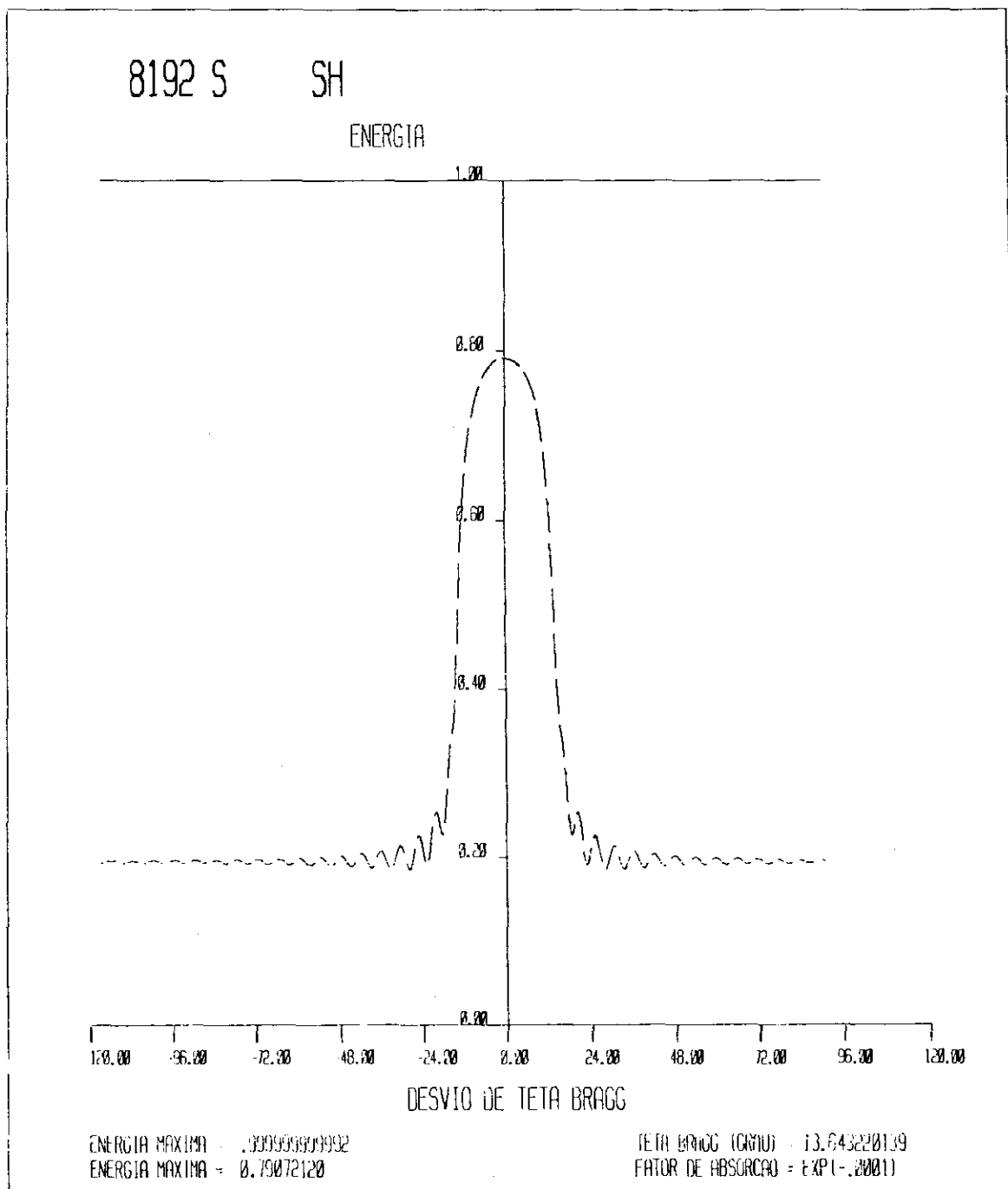


Fig. 4.9a - Energia  $E$  versus  $\Delta\theta$  para 8192 planos. A reta contínua ao nível de  $E = 1$  corresponde aos resultados obtidos para o caso sem absorção. A curva tracejada resulta quando o efeito da absorção é incluído, sendo  $h = 0.0001$ .

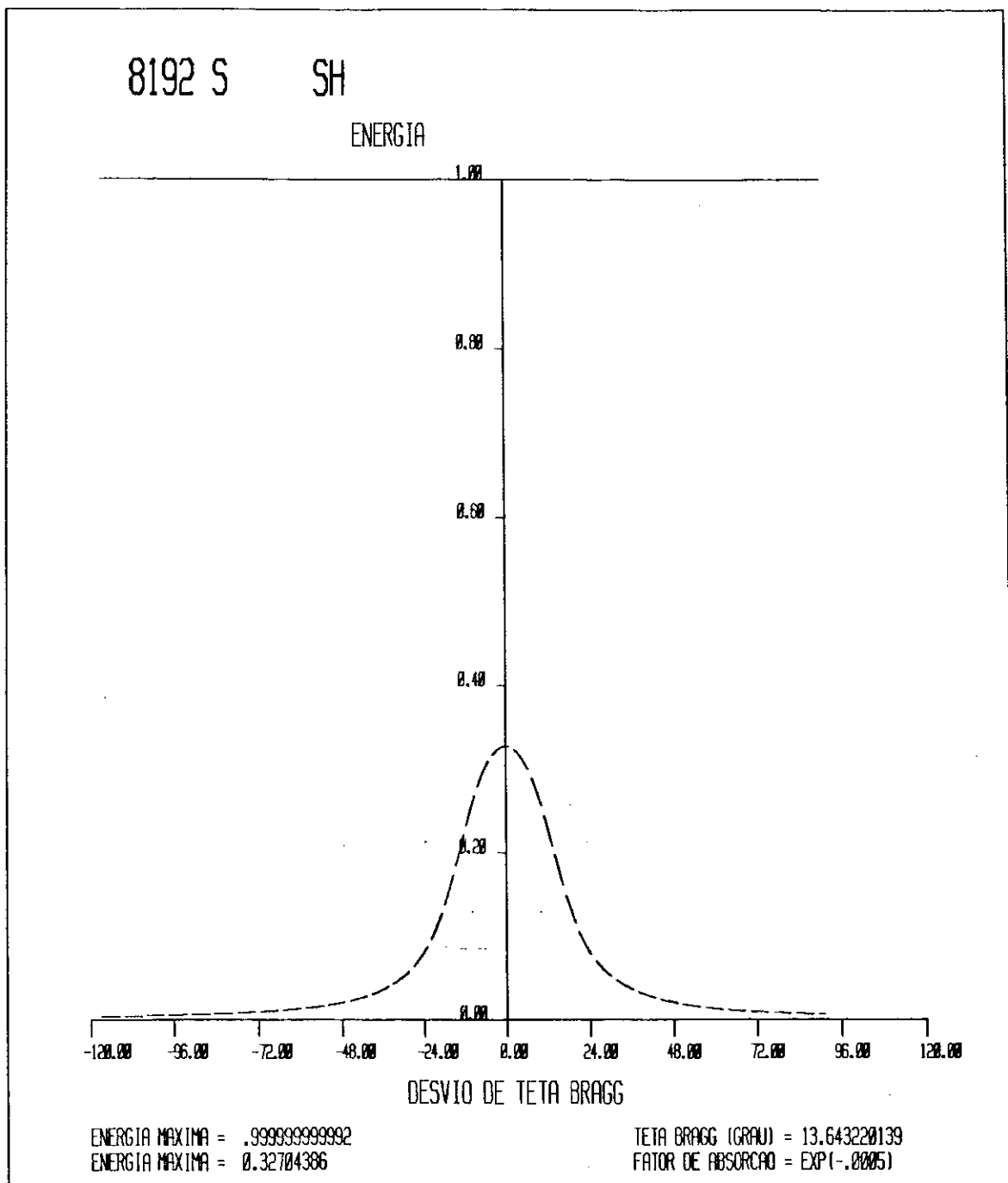


Fig. 4.9b - A mesma comparação que a Fig. 4.9a quando  $h = 0.0005$ .

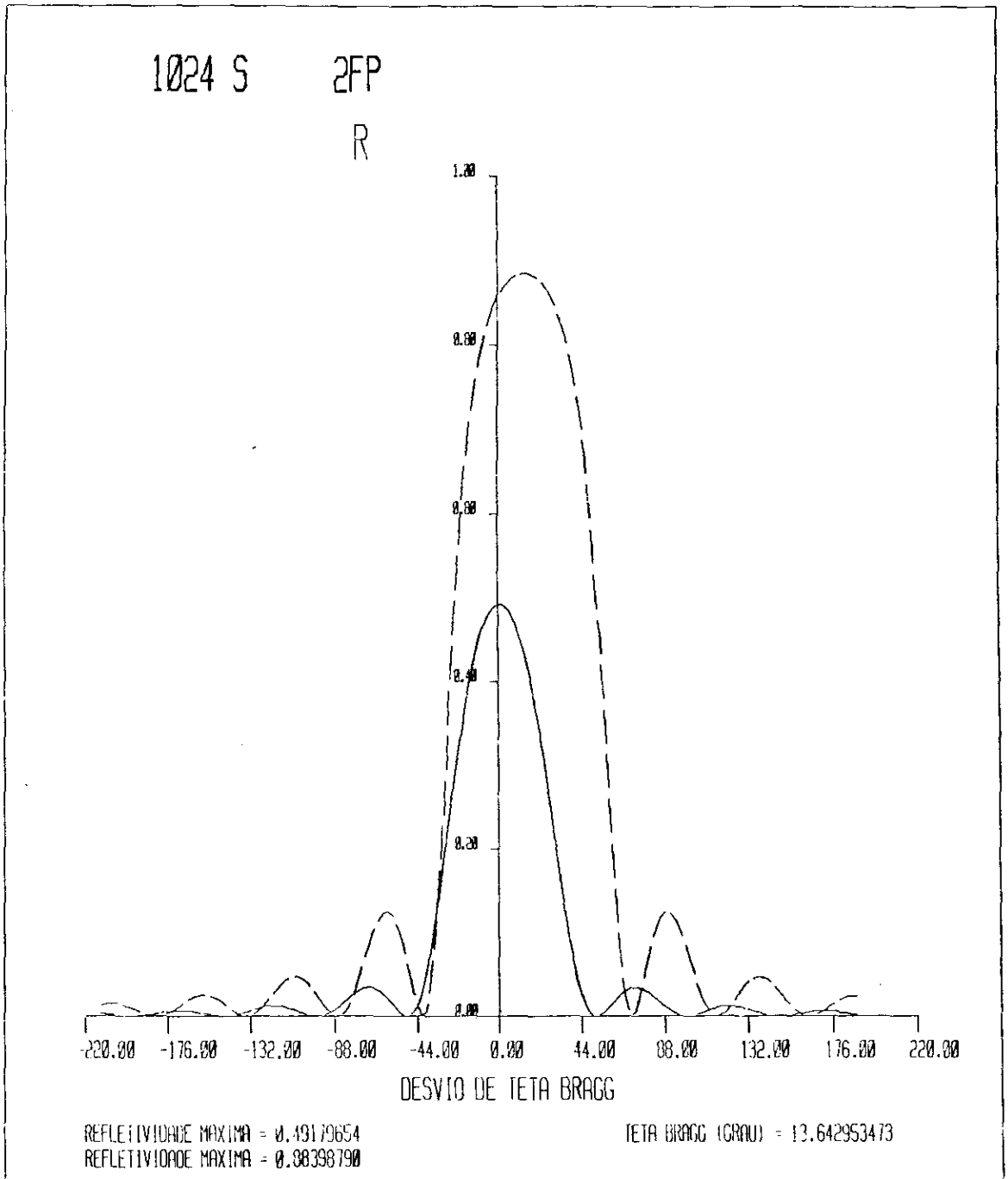


Fig. 4.10a - R versus  $\Delta\theta$  para 1024 planos (curva contínua) comparando-se com os resultados obtidos quando o fator de espalhamento do plano,  $f_p$ , é multiplicado por 2 (tracejada).

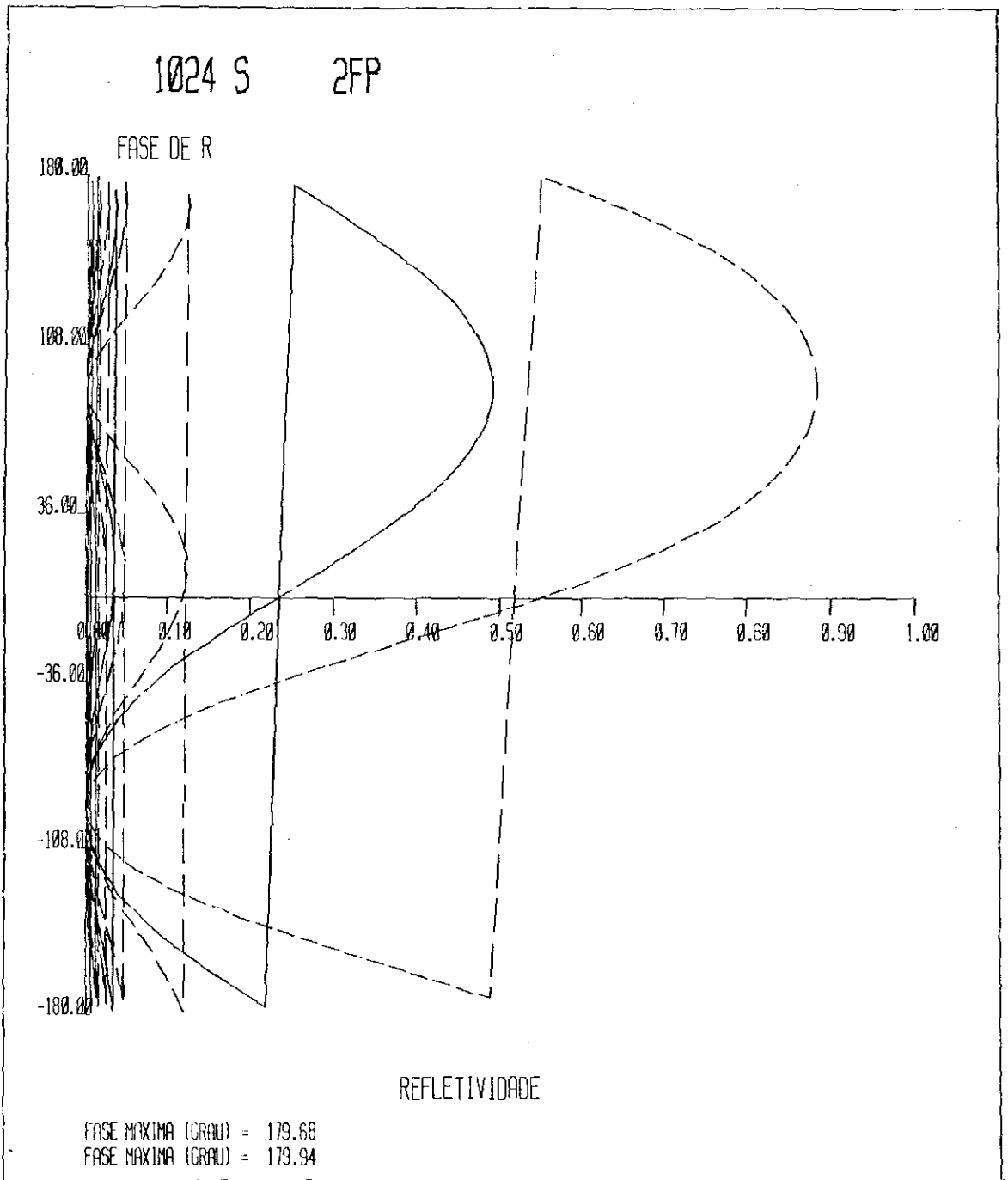


Fig. 4.10b - A mesma comparação que a Fig. 4.10a com  $\rho$  versus R.

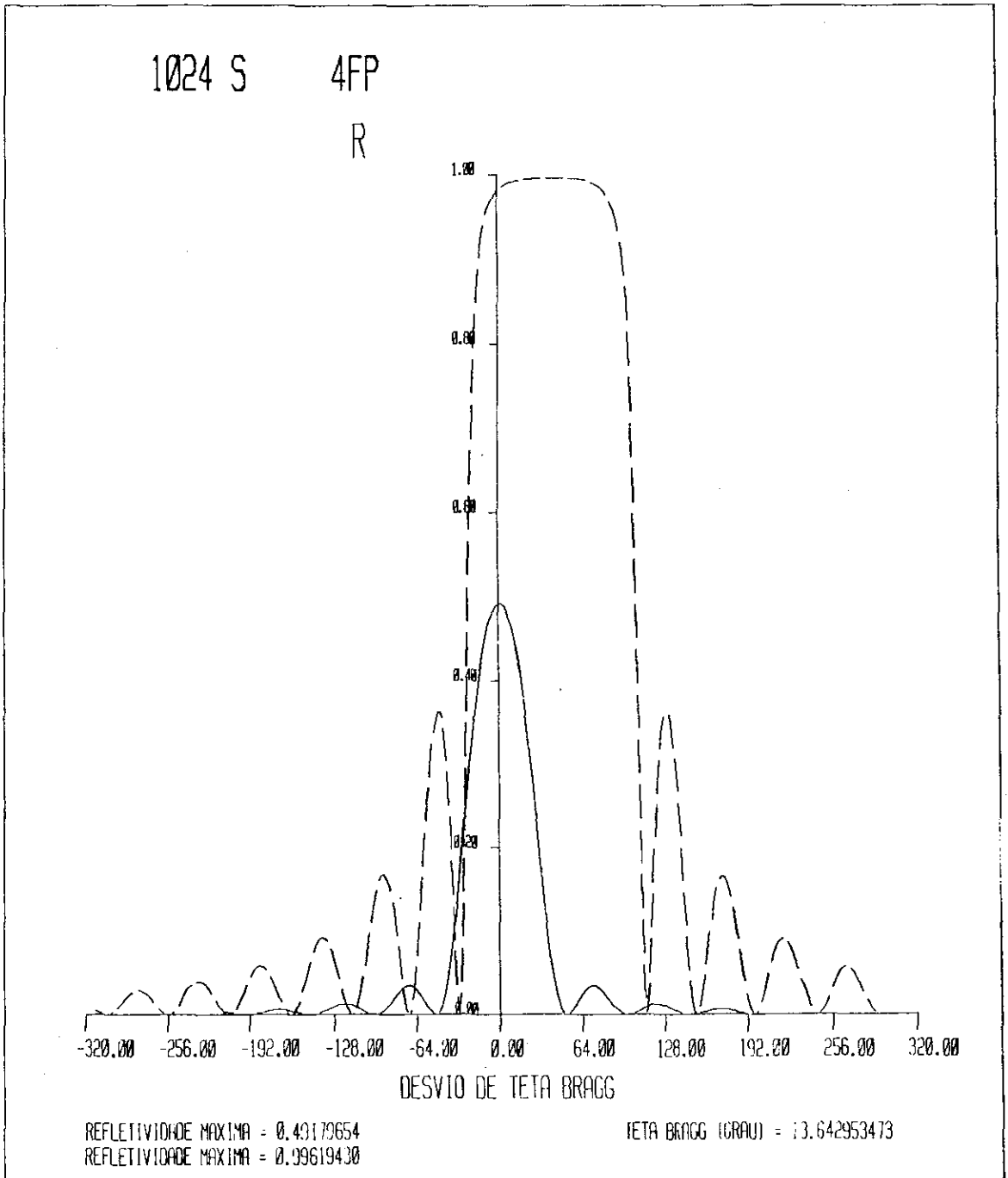


Fig. 4.11a - R versus  $\Delta\theta$  para 1024 planos (curva contínua), em situação análoga à Fig. 4.10a, no caso que  $f_p$  é multiplicado por 4 (tracejada).

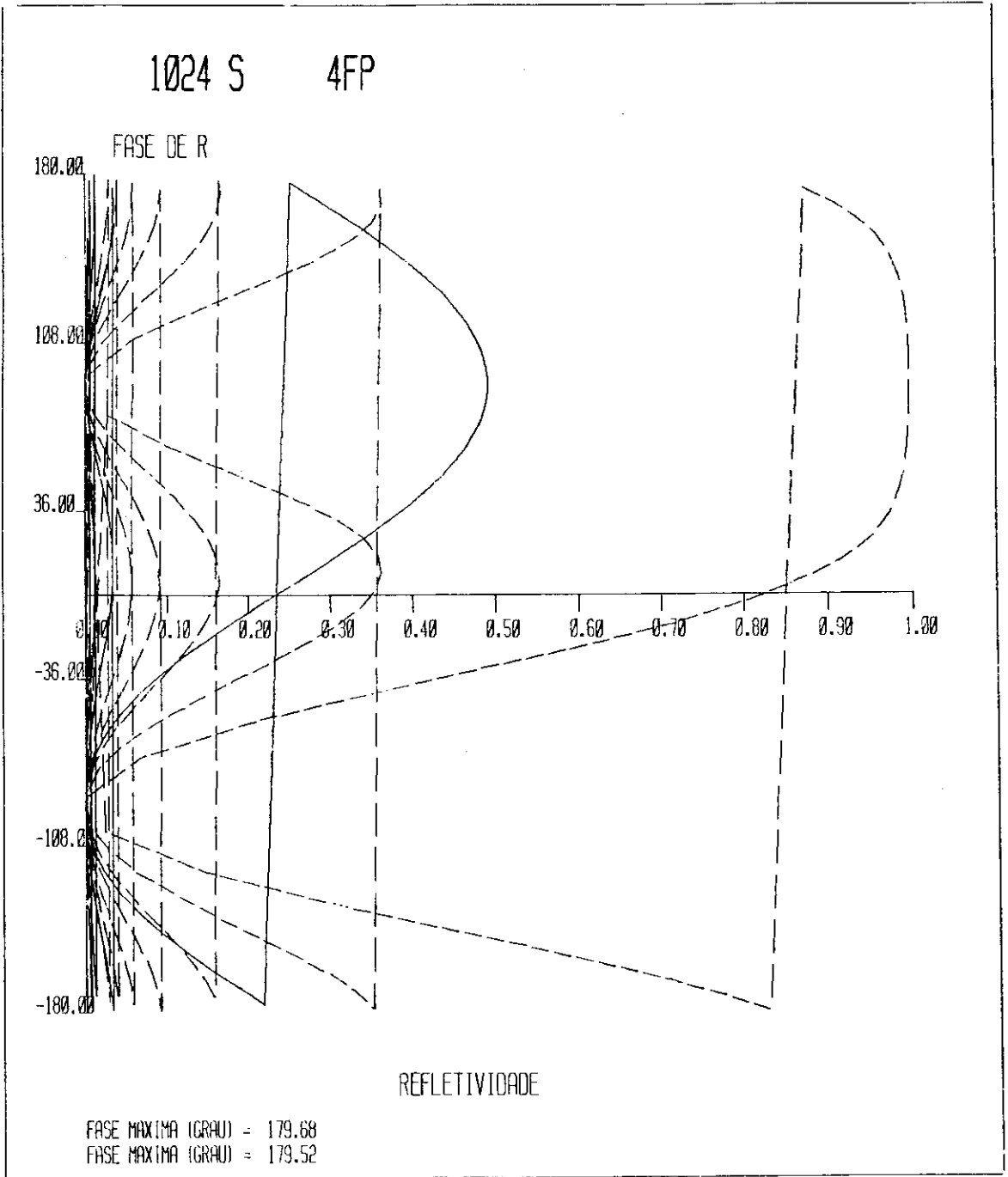


Fig. 4.11b - A mesma comparação que a Fig. 4.11a com  $\rho$  versus R.



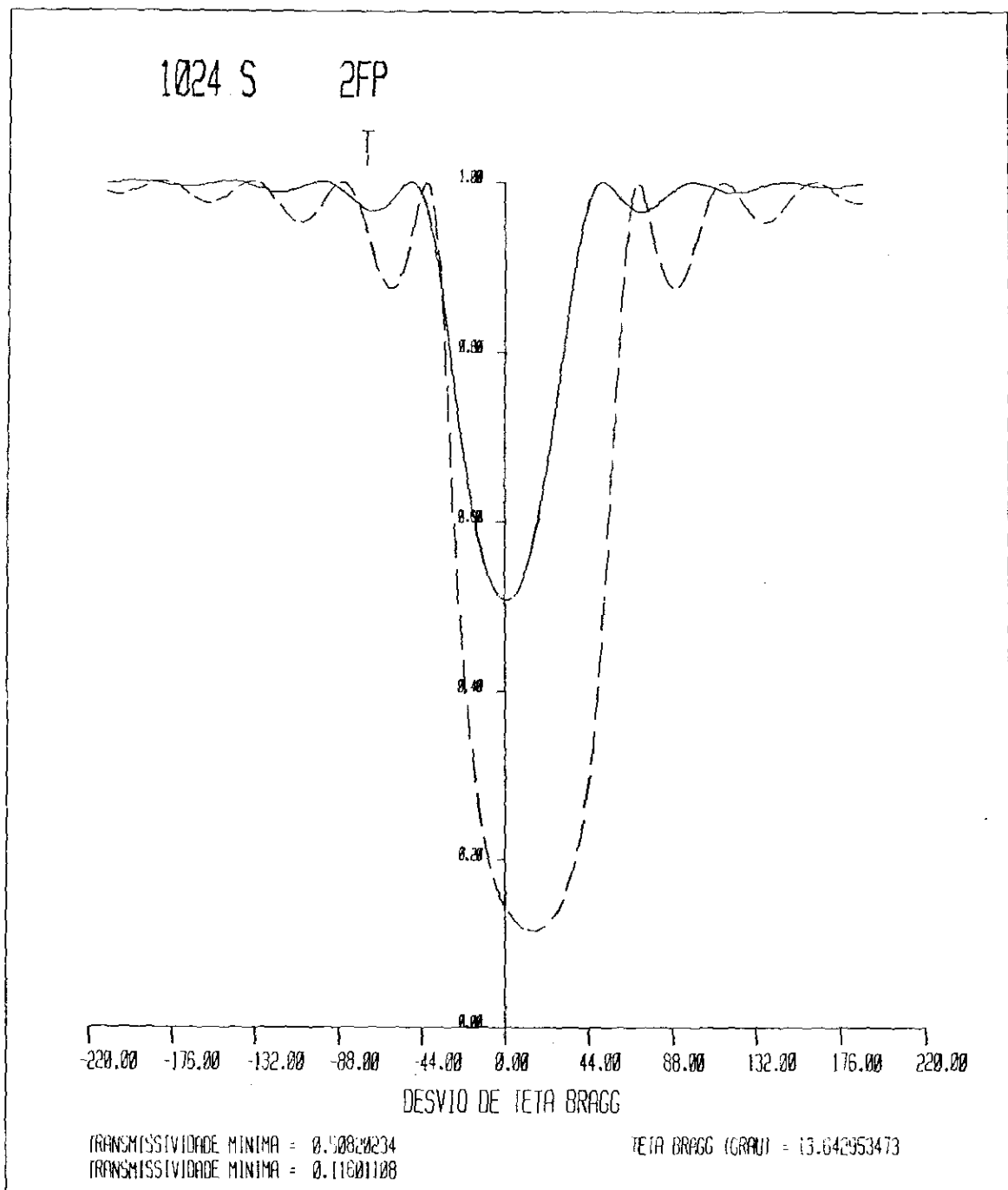


Fig. 4.12a - T versus  $\Delta\theta$  para 1024 planos (curva cont nua) comparando-se com os resultados obtidos quando  $f_p \bar{e}$  multiplicado por 2 (tracejada).

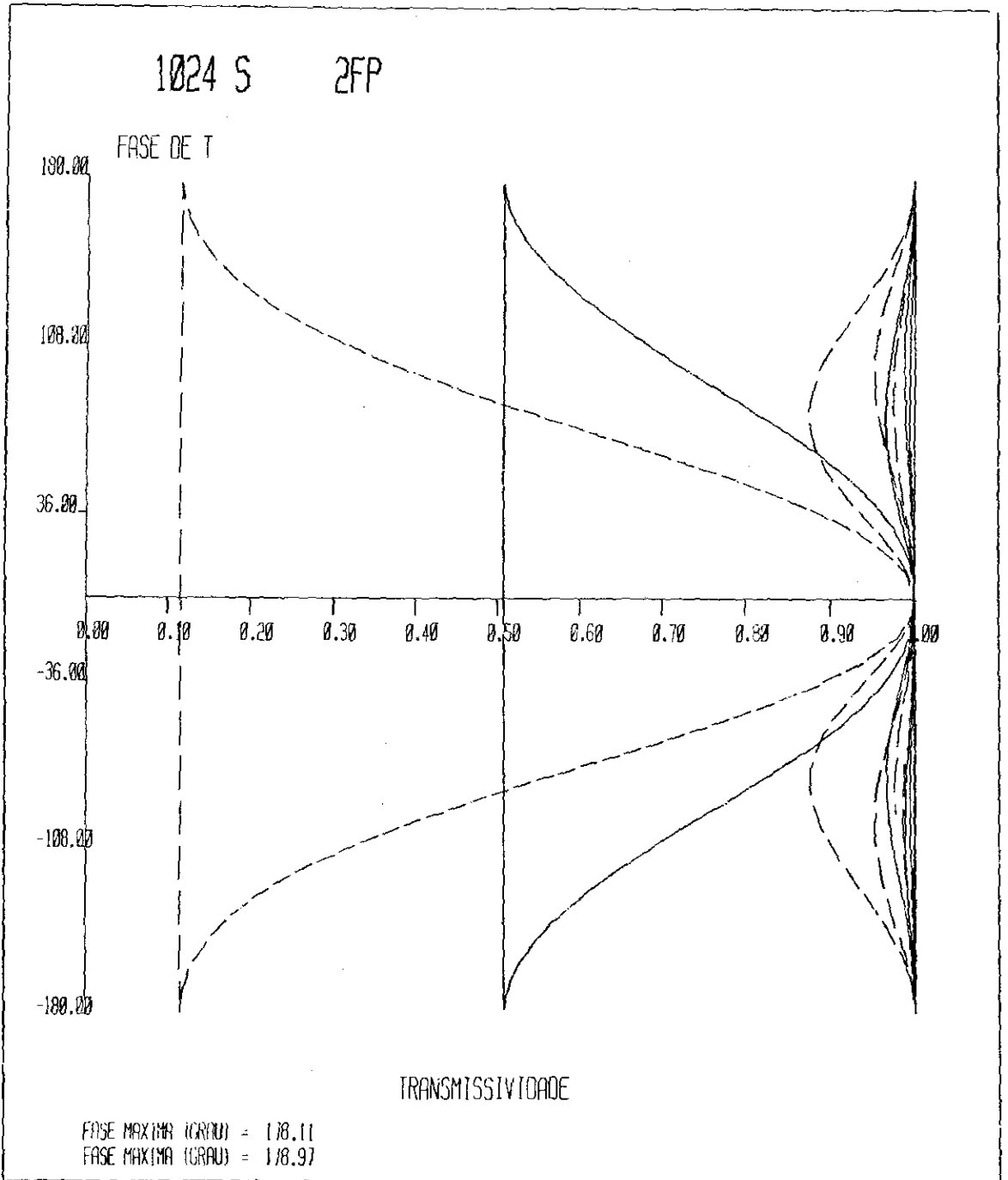


Fig. 4.12b - A mesma comparação que a Fig. 4.12a com  $\tau$  versus  $T$ .

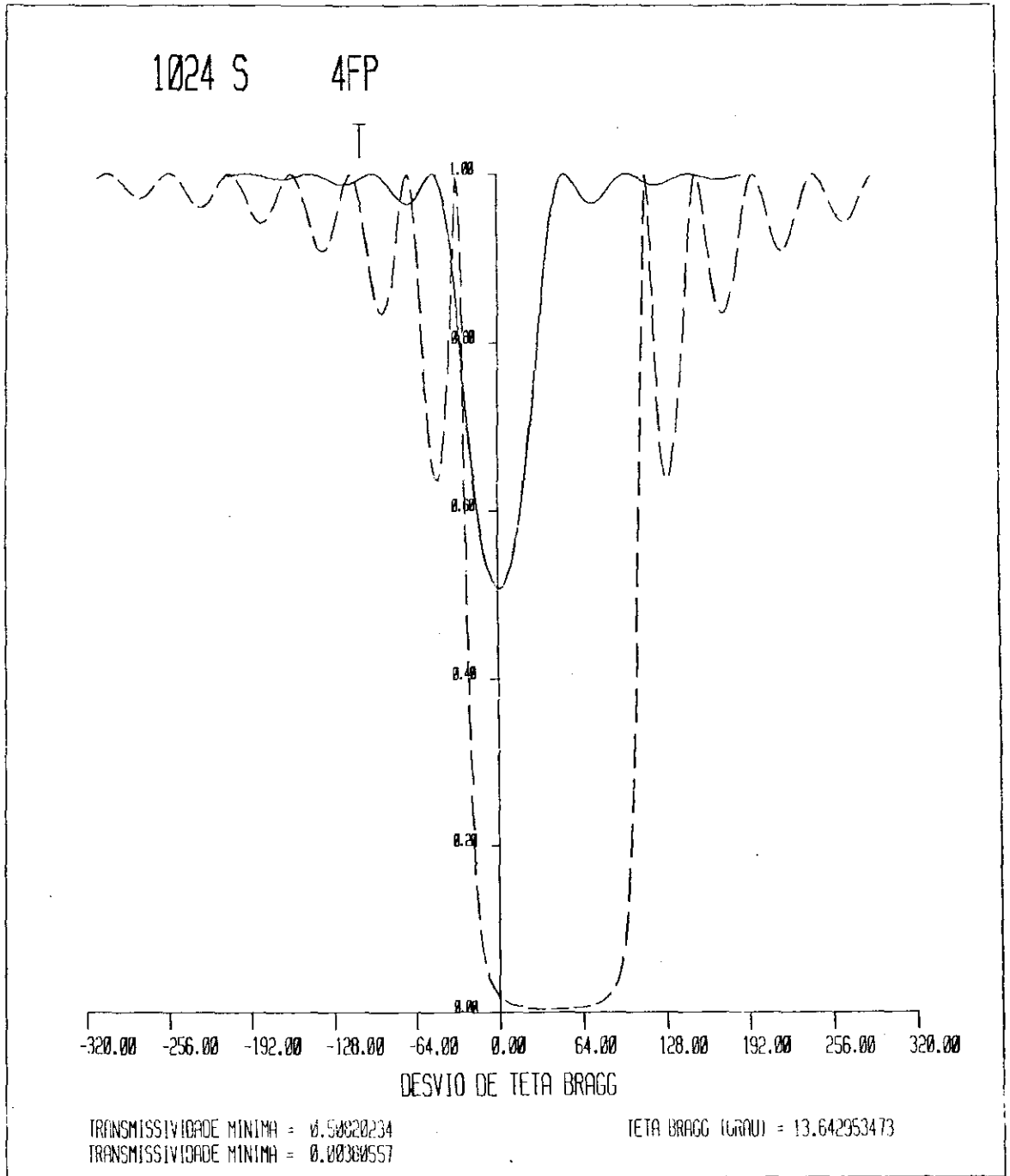


Fig. 4.13a - T versus  $\Delta\theta$  para 1024 planos (curva contínua), em situação análoga à Fig. 4.12a, no caso que  $f_p$  é multiplicado por 4 (tracejada).

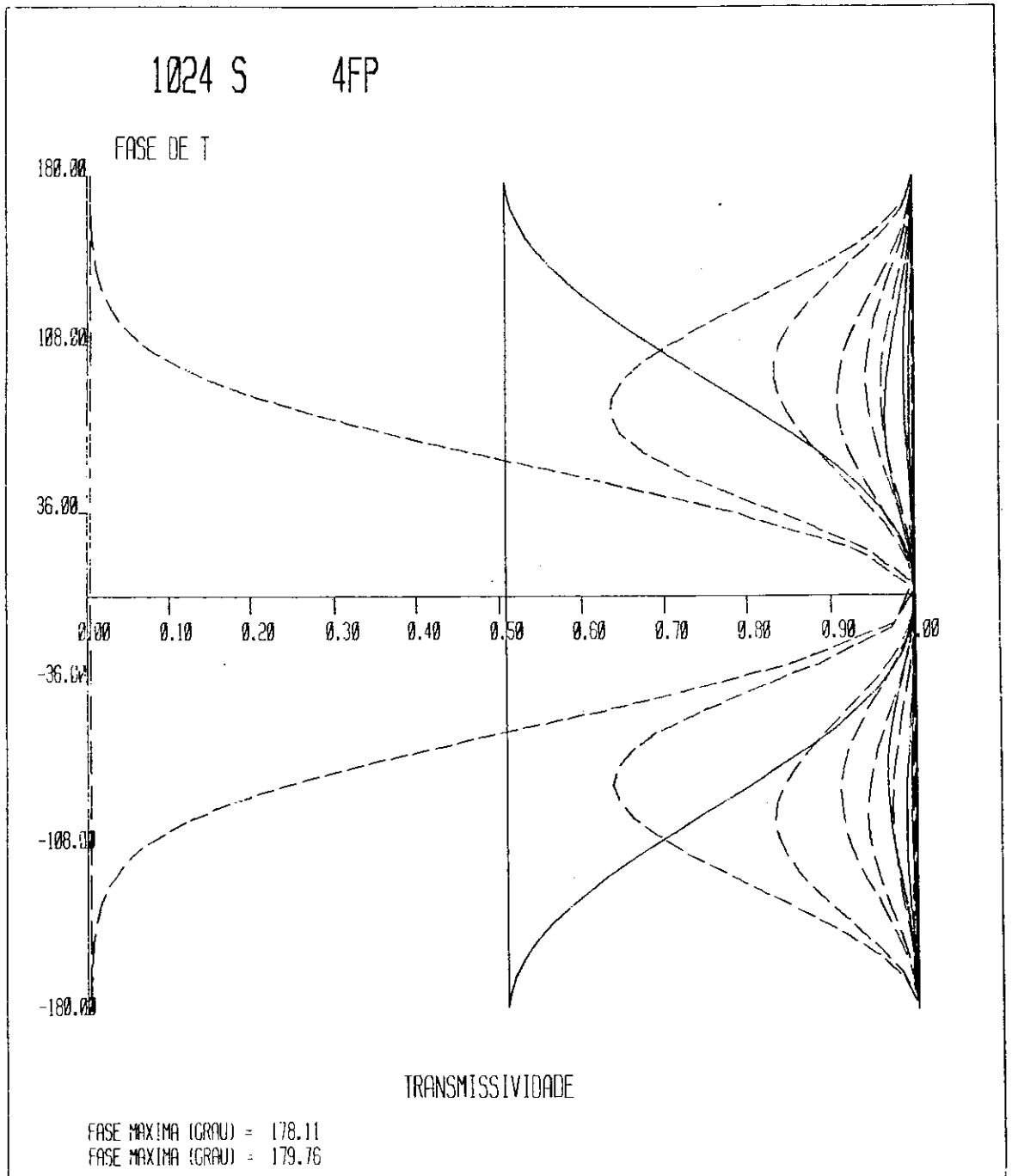


Fig. 4.13b - A mesma comparação que a Fig. 4.13a com  $\tau$  versus T.

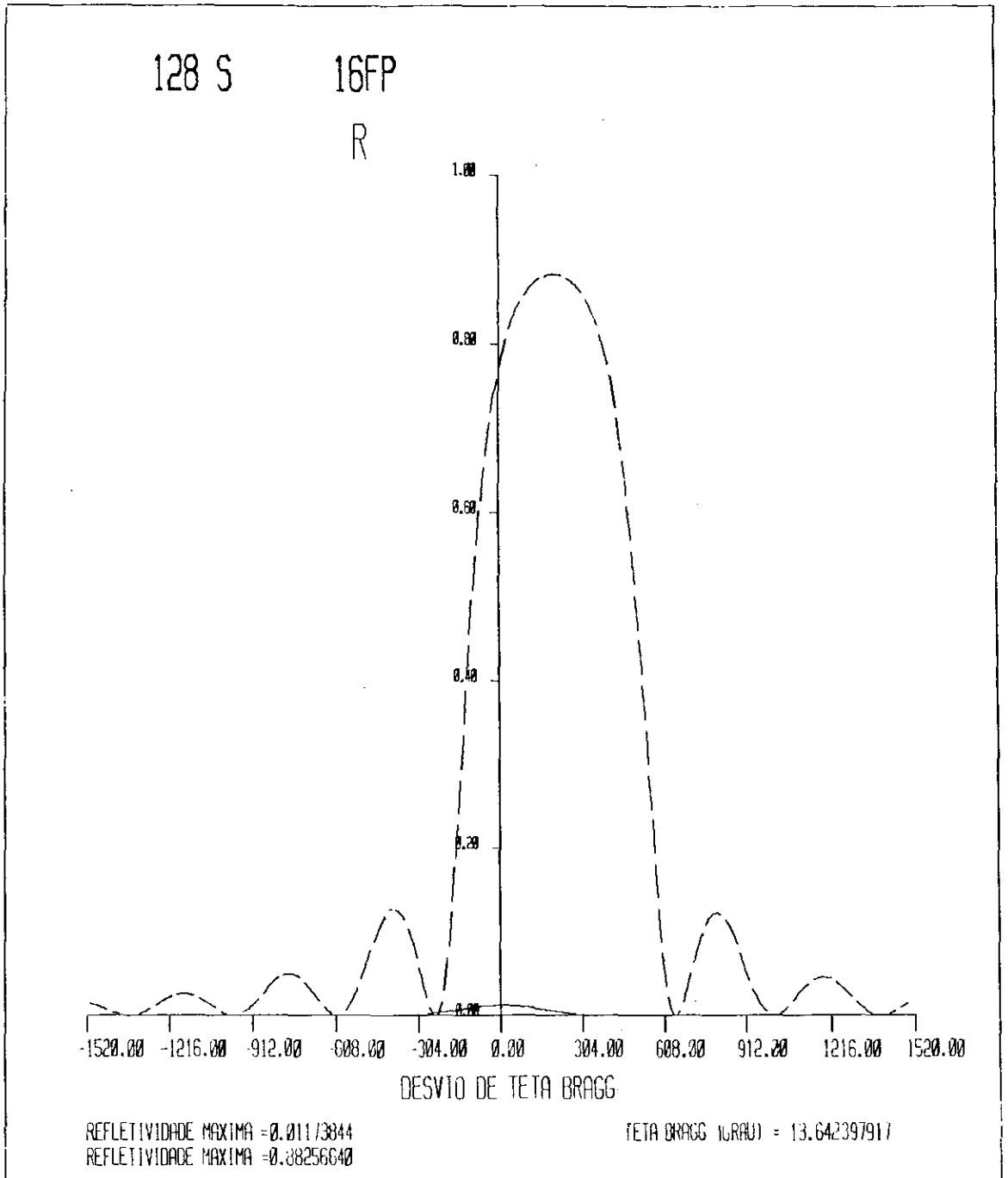


Fig. 4.14a - R versus  $\Delta\theta$  para 128 planos (curva contínua) comparando-se com os resultados obtidos quando  $f_p$  é multiplicado por 16 (tracejada).

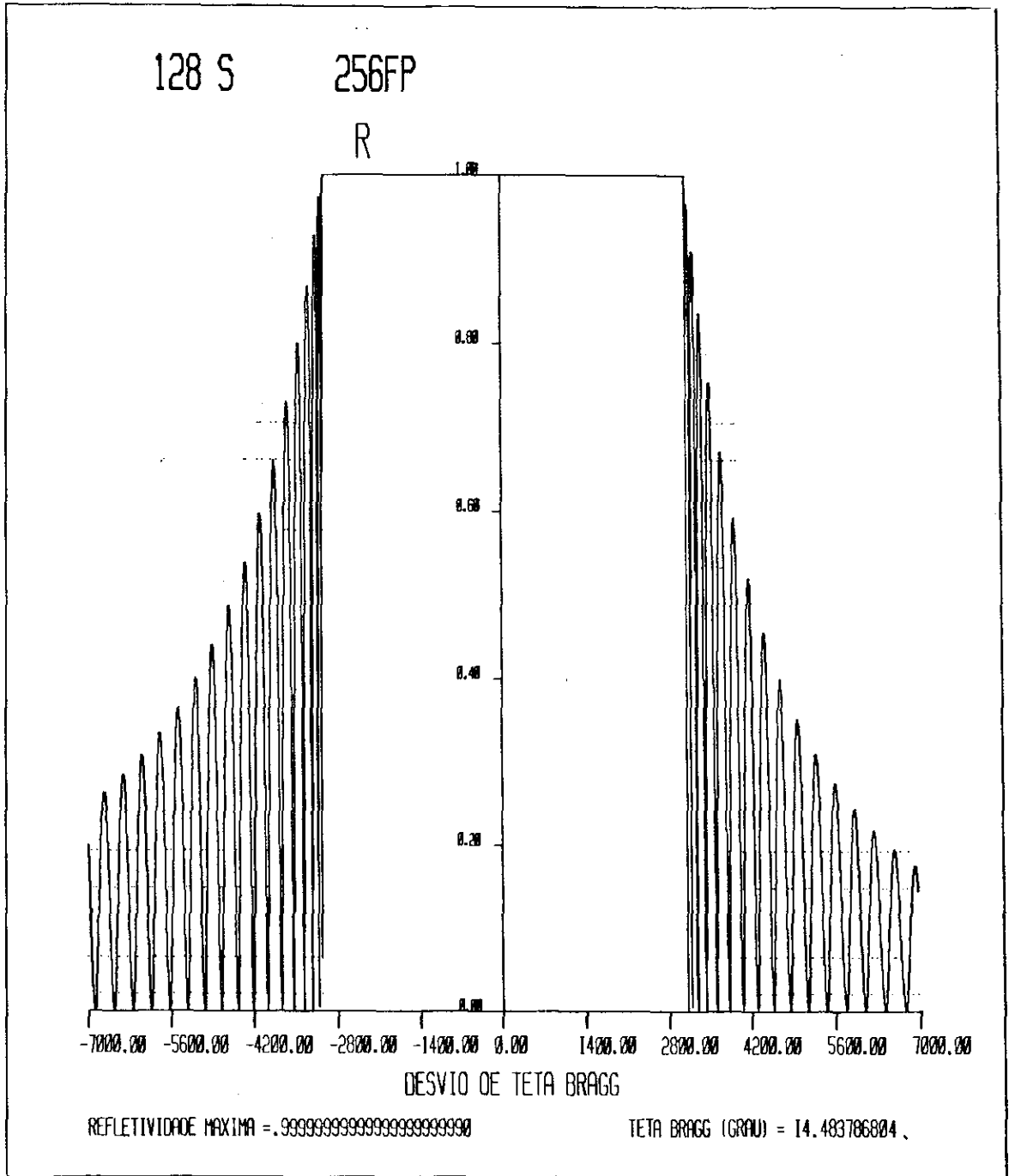
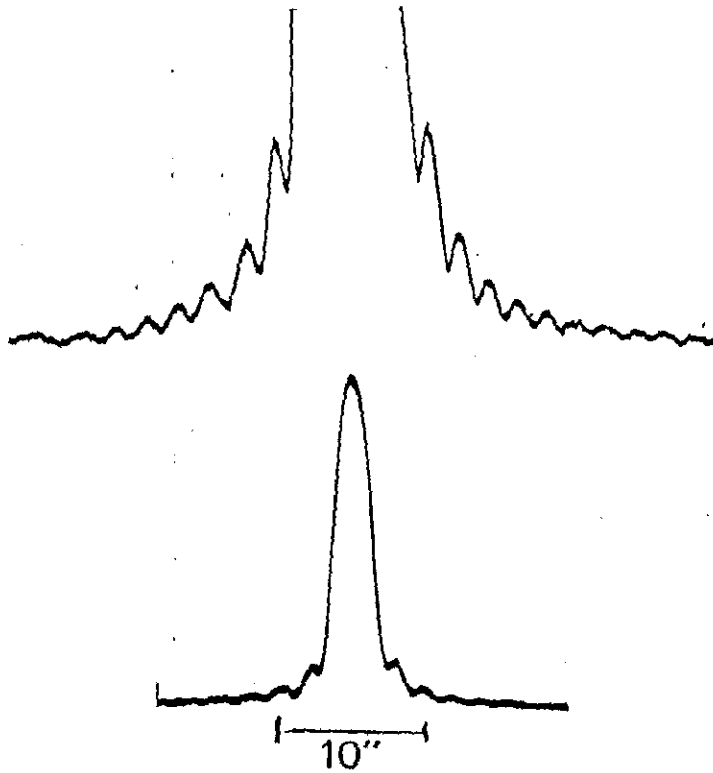


Fig. 4.14b - R versus  $\Delta\theta$  para 128 planos quando  $f_p$  é multiplicado por 256.



333 Bragg case,  $R_H$  only

$d_n \sim 0.5$

Two different ordinate scales 1:10

Fig. 4.15 - Curva de reflexão experimental obtida por Renninger com Silício [333] {referência (31)}.

## AVALIAÇÃO FINAL E CONCLUSÕES

O caso simétrico de Bragg é analisado através de um modelo unificado, microscópico e exato para o espalhamento auto-consistente em cristais perfeitos. Partimos da solução encontrada para o espalhamento de um plano de dipolos, no caso de duas ondas eletromagnéticas planas incidentes com polarização elíptica. O campo de excitação dos dipolos é formado pelo campo externo acrescido do campo gerado pelos dipolos do plano. As soluções próprias induzidas só existem com a presença do campo externo. É uma formulação diferente da tratada na teoria de Ewald, onde não é levada em conta a influência do campo externo no meio cristalino sendo mais próxima, das idéias originais de Drude e Lorentz e de Planck (16). Consideramos as mútuas interações entre os dipolos em um mesmo plano, o que não ocorre na teoria de Darwin.

No cristal, são definidos dois campos: o epicampo como sendo o campo estacionário representando as oscilações dos dipolos no plano e o mesocampo, que é o campo eletromagnético de propagação. Com a solução para um plano, verifica-se que não há onda refratada com ângulo diferente daquele incidente logo, assumimos que esta situação ocorre para todos os planos de um cristal. O acoplamento de dois planos e seus campos associados, como unidades de espalhamento, é efetuado admitindo a continuidade total do campo entre eles.

A solução analítica generalizada para um conjunto de  $N$  planos, é obtida introduzindo-se a regra da semelhança de campo ou



seja, cada plano comporta-se igualmente sob a ação dos campos interagentes. O tratamento desses campos é efetuado através de coeficientes complexos que definem razões de suas amplitudes. Com eles, são calculados as variações de amplitude e de fase no espalhamento do cristal.

A solução numérica é a única maneira de obter resultados comparáveis com os da literatura. O método desenvolvido também pode ser aplicado para um conjunto de planos não necessariamente iguais ou regularmente espaçados. As curvas de reflexão e de transmissão ilustram modelos de difração típicos da teoria cinemática, no caso de poucos planos, como também indicativos do espalhamento dinâmico, quando consideramos um maior número de planos no cristal. Em todas as situações a energia é conservada.

O tratamento com planos "matemáticos" não exige condições especiais de incidência na superfície do cristal. A propósito, Authier (32) destaca a observação do próprio Laue de que, o tratamento da superfície do cristal como um plano matemático constitui o ponto mais fraco de sua teoria. Em nosso modelo, as condições de contorno são as naturais do próprio plano. Qualquer um deles pode ser plano de superfície. Mesmo que este primeiro plano apresenta algum defeito, a solução para o cristal não seria prejudicada pois a contribuição de cada plano é muito pequena. Desta maneira, é possível determinar as variações em fase e em amplitude em cada plano entretanto, a solução geral é obtida no plano de superfície, com um processo iterativo.

A potencialidade deste modelo pode ser avaliada, por exemplo, através do número de dipolos envolvidos no processo iterativo: (i) Aumentando-se o número de planos do cristal um platô de amplitude é formado e a refletividade aproxima-se cada vez mais de 1; (ii) Com o incremento do fator de espalhamento de plano  $f_p$  no

caso de um conjunto com poucos planos, ocorre situação semelhante a anterior. Isto porque o modelo considera a distribuição de cargas em cada plano com uma densidade dipolos. Desta forma, aumentando essa densidade obtém-se o comportamento dinâmico para um pequeno número de planos, até mesmo tratando-se de dois planos. Ambas as situações indicam a existência de um efeito de saturação, onde a refletividade praticamente não muda, como um resultado que depende mais do número de dipolos participantes da interação do que da distribuição dos mesmos. Esta situação não se verifica, por exemplo, na teoria de Laue, a forma da teoria dinâmica mais utilizada, que só permite soluções periódicas. Nela, a distribuição de cargas é dada por uma constante dielétrica, muito pequena e conseqüentemente, não pode ser aumentada.

Em nosso modelo não é necessário distinguir uma situação onde existem poucos planos, como típica da teoria cinemática, daquela com muitos planos, com um tratamento da teoria dinâmica. Isto porque o quadro de difração resultante depende do número de dipolos envolvidos na interação.

É importante observar o que Ewald indica como o ideal (30), verifica-se exatamente nesta solução auto-consistente, ou seja: As curvas de reflexão e de transmissão são registradas com absoluta precisão dos ângulos de incidência  $\Theta$  (glancing angles), os quais servem como "zeros" das curvas.

Em suma, obtivemos curvas de reflexão e de transmissão calculando as variações em fase e em amplitude, para o caso simétrico de Bragg, introduzindo uma forma geral e auto-consistente da equação de Bragg como uma relação de recorrência. O modelo de espalhamento é rigoroso, vetorial e exato não utiliza qualquer argumento geométrico, como no tratamento analítico aproximado da teoria de Laue. O mesmo pode ainda ser aplicado para uma radiação

radiação com qualquer comprimento de onda, não necessariamente ligada à equação de Bragg. Admite ainda, as ondas interagentes com uma polarização elíptica tratando-a, independentemente, nos estados de polarização- $\pi$  e  $\sigma$ . A conservação da energia, geralmente não contemplada nas teorias de difração existentes, resulta da adoção do princípio da auto-consistência de Ewald. Essa verificação, para o caso sem absorção, serve com um indicador da exatidão dos cálculos. A absorção é introduzida na radiação incidente aparecendo, portanto, em toda a radiação espalhada e não apenas no feixe transmitido, como ocorre na teoria de Darwin. Conclusivamente, podemos dizer que estas características do modelo o credencia como base para uma formulação única e auto-consistente que interprete o espalhamento em cristais perfeitos.

Findo o nosso objetivo neste trabalho, as idéias estabelecidas fundamentam a sua extensão para a análise de modelos de difração de cristais reais. Para tanto, torna-se necessário: (i) introduzir um fator de espalhamento de plano que leve em conta a distribuição espacial de cargas, como um plano espesso; (ii) estabelecer os parâmetros que determinam a assimetria na curva de reflexão; (iii) analisar outros aspectos como efeito térmico e possíveis defeitos na estrutura cristalina. Seguidamente, o modelo pode ser aplicado para analisar a difração no caso Laue, procurando resolver a condição de incidência do feixe na superfície do cristal e também a propagação da energia no mesmo, como um indicativo para tratar o efeito Borrmann. Outro aspecto, é a sua aplicação para analisar o espalhamento em estruturas finas, considerando-se diferentes planos e distâncias interplanares.

# A P E N D I C E

Programa que Calcula a Refletividade, a Fase de Reflexão, a Transmissividade, a Fase de Transmissão e a Energia.

```

C      SELF-CONS OBTAINED TRANSM AND REFLECURV 05-05-83
C      FP VARIES WITH TETA
C      T(L) AND R(L)  RECURRENCE RELATION
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
      DIMENSION TBG(3001),RMQ(3001),ROD(3001),TMD(3001),TAUC(3001)
      DIMENSION FNC(3001)
      COMPLEX*16 CCP,CXM,CR,CXE,CXU,CM1,CM2,CM3,CM4,CA,CT,CPH
      READ(5,*)L,NI,IP,H,TB,DT,WL,SIG0,D
      WRITE(7,300)L,NI,IP,H,TB,DT,WL,SIG0,D
300    FORMAT(' ', 'L= ', I7, 2X, 'NI= ', I4, 2X, 'IP= ', I1, 2X, 'H= ', F7.5,
&2(2X, F13.9), 3(2X, D15.10)/)
      PI=DATAN(1.000)*4.000
      FAT=PI/180.
      TB=TB*FAT
      DT=DT*FAT
      RE=2.317940-15
      FT=TB+(DFLOAT(NI)*DT)
      TB=TB-(DFLOAT(NI)*DT)
C      WRITE(7,333)FT,TB
C33    FORMAT(' FT = ', D20.10, ' TB = ', D20.10)
      I=0
      7    I=I+1
          TBO=TB/FAT
          TBG(I)=TBO
          SET=DSIN(TB)
          FP=(RE*WL*SIG0)/SET
C      CET=DCOS(TB)
          SOT=DSIN(2*TB)
          COT=DCOS(2*TB)
          IF(IP.EQ.1)GO TO 3
          SOT=0.000
          COT=1.000
      8    EP=DATAN(FP/(1.000-(SOT*FP/2.000)**2))
          EQ=DATAN(FP*COT/(1.000+(SOT*FP/2.000)**2))
          SEQ=DSIN(EQ)
          CEQ=DCOS(EQ)
          TEQ=DTAN(EQ)
          CCP=DCMPLX(0.000,EP)
          XM=(PI/WL)*200*D*SET
          CXM=DCMPLX(0.000, XM)
          CPH=CCP-H
          CR=DCMPLX(0.000, SEQ)*CDEXP(CPH)
          XE=XM-EP
          CXE=DCMPLX(0.000, XE)
          CXU=CXE+H
          CM1=CDEXP(CXU)/CEQ
          CM2=-DCMPLX(0.000, TEQ)*CDEXP(-CXM)
          CM3=DCMPLX(0.000, TEQ)*CDEXP(CXM)
          CM4=CDEXP(-CXU)/CEQ
          CA=CM1+CR*CM2

```

```
DO 5 J=2,L
CT=(CEQ*COEXP(-CXE))/((CM1+CR*CM2)*CA)
CA=(CM1+CR*CM2)*CA
CR=(CR*CM4+CM3)/(CM1+CM2*CR)
C CR=(CF*CEQ+DCMPLX(0.000,SEQ))*COEXP(CPH)
C CA=(CEQ+CF*DCMPLX(0.000,SEQ))*COEXP(CPH)
5 CONTINUE
C WRITE(7,500)I
C500 FORMAT(' VALOR DE I ',I10)
RMQ(I)=CDABS(CR)*CDABS(CR)
RX=DREAL(CR)
RY=DIMAG(CR)
RO=DATAN2(RY,RX)
ROO(I)=RO/FAT
TMQ(I)=CDABS(CT)*CDABS(CT)
TX=DREAL(CT)
TY=DIMAG(CT)
TA=DATAN2(TY, TX)
TAU(I)=TA/FAT
EN(I)=RMQ(I)+TMQ(I)
TB=T3+DT
C WRITE(7,333)FT,TB
IF(TB.LE.FT)GO TO 7
ND=200*NI+100
WRITE(7,*)ND
DO 9 I=1,ND
9 WRITE(7,199)TBG(I),TMQ(I),TAU(I),RMQ(I),ROO(I),EN(I)
199 FORMAT(1X,F19.16,1X,F20.18,1X,F21.16,1X,F25.18,1X,F21.16,
*1X,F20.18)
STOP
END
```

B I B L I O G R A F I A

- (1) C.G. Darwin, Phil. Mag. 27 (1914a), 315-333
- (2) C.G. Darwin, Phil. Mag. 27 (1914b), 675-690
- (3) C.G. Darwin, Phil. Mag. 33 (1922), 800-829
- (4) P.P. Ewald, Ann. Phys. (Leipzig), 49 (1916a), 1-38
- (5) P.P. Ewald, Ann. Phys. (Leipzig), 49 (1916b), 117-143
- (6) P.P. Ewald, Ann. Phys. (Leipzig), 54 (1917), 519-597
- (7) P.P. Ewald, Z. Kristallogr. A97 (1937), 1-7
- (8) M. von Laue, Ergeb. d. Exakten Naturwiss., 10 (1931) 133-158.
- (9) N. Kato, em *X-Ray Diffraction*, by L.V. Azaroff, R. Kaplow, N. Kato, R.J. Weiss, A.J.C. Wilson and R.A. Young McGraw-Hill Book Company (1974) Cap. 4
- (10) J. N. Prins, Z. Phys. 63 (1930), 477-493
- (11) W.L. Bragg, R.W. James and C.H. Bosanquet, Phil. Mag. 41 (1921), 309-337.
- (12) B. Borie, Acta Cryst. 21 (1966) 470-472
- (13) B. Batterman and G. Hildebrandt, Acta Cryst. A24 (1968), 150-157.
- (14) R. Perkins and L. Knight, Acta Cryst. A40 (1984), 617-619.
- (15) J. C. Slater, *Quantum Theory of Molecules and Solids*, Vol. 3 - Insulators, Semiconductors and Metals (1974), Caps. 4,5 e 6
- (16) P.P. Ewald, Rev. of Modern Physics (1965), 46-56
- (17) P.P. Ewald, Acta Cryst. A35 (1979), 1-9
- (18) P.P. Ewald, Lecture Notes, Univ. of Sidney (1965), n<sup>o</sup> publicado.
- (19) H. Wagenfeld, Acta Cryst. A24 (1968), 170-174
- (20) W.A. Keller and H.S. Campos, Phys. Stat. Solid. (a) 96 (1986), 83-86

- (21) P.P. Ewald, Fortschritte Chemie, Physik & physikalische Chemie 18 (1925), 498-518.
- (22) W.A. Keller and Marek Urbanski, Phys. Letters A 116 (1986), 340-342.
- (23) W.A. Keller, em preparação
- (24) G.N. Watson, *A Treatise on the Theory of Bessel Functions*. Cambridge Univ. Press (1966).
- (25) H.W. McLachlan, *Bessel Functions for Engineers*, Clarendon, Oxford (1961)
- (26) H.S. Campos and W.A. Keller, em preparação
- (27) W.A. Keller, em preparação
- (28) M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics* (1980), Pergamon Press, London, 6th ed., Cap. 1.
- (29) W.H. Zachariasen, *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals*, New York, John Wiley (1945) Cap. 3
- (30) P.P. Ewald, Acta Cryst. A42 (1986), 411-413.
- (31) M. Renninger, Acta Cryst. A31 (1975), 42-49.
- (32) A. Authier, Acta Cryst. A42 (1986), 414-426.

"ESPALHAMENTO ELETRODINÂMICO AUTO-CONSISTENTE NO  
CASO SIMÉTRICO DE BRAGG"

HELIO SILVA CAMPOS

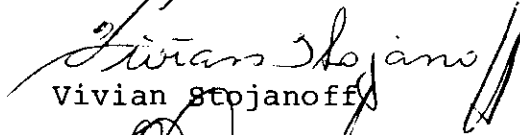
Tese de Doutorado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



Wlodek Keller - Presidente



Antonio Ferreira da Silva



Vivian Stojanoff



Anibal Omar Caride



Juan Alberto Mignaco



George Bemski - Suplente