

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

CONTRIBUIÇÕES AO FORMALISMO AUTO - CONSISTENTE  
DA DIFRAÇÃO DE RAIOS - X.  
APLICAÇÃO EM ESTRUTURAS PLANARES.

Dionício Carlos Soares de Vasconcelos

Tese de Doutorado

Rio de Janeiro, Julho de 1991

A Lina, Nalini,  
Larriri e Rajasi

## ÍNDICE DE CONTEÚDO

AGRADECIMENTOS	II
RESUMO	IV
ABSTRACT	V
ÍNDICE DE FIGURAS	VI
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
1.1 - Revisão Histórica	1
1.2 - Análise Crítica	4
1.3 - Objetivos	8
CAPÍTULO 2 - CONSIDERAÇÕES GERAIS	12
2.1 - Os Raios-X	12
2.2 - Espalhamento Thomson	14
2.3 - A Teoria Cinemática	17
2.4 - A Teoria Dinâmica	22
2.4.1 - Modelo de Darwin	22
2.4.2 - Modelo de Ewald	23
2.4.3 - Modelo de Laue	25
2.4.4 - Modelo Auto-consistente	26
CAPÍTULO 3 - O FORMALISMO AUTO-CONSISTENTE	28
3.1 - Introdução	28
3.2 - Espalhamento por um Plano de Dipolos	29
3.3 - Refletividade e Transmitividade	37
3.4 - Espalhamento por um conjunto de planos	42

CAPÍTULO 4 - GEOMETRIZAÇÃO DO FORMALISMO	50
4.1 - Introdução	50
4.2 - Interpretação Geométrica	50
4.3 - Conservação da Energia	57
4.4 - Semelhança Geométrica de Campo	59
4.5 - Lei de Bragg Auto-consistente	65
CAPÍTULO 5 - CONTRIBUIÇÕES AO FORMALISMO AUTO-CONSISTENTE	67
5.1 - Fator de Estrutura Auto-consistente	67
5.1.1 - Introdução	67
5.1.2 - Unidade Primitiva de Espalhamento	72
5.1.3 - Unidade Não Primitiva. A Matriz Estrutural	75
5.1.4 - Fator de Estrutura Auto-consistente	79
5.2 - Fator Atômico Auto-consistente	84
5.3 - Fator de Polarização	94
5.4 - Fator de Estrutura para Multicamadas	99
5.5 - Absorção	105
CAPÍTULO 6 - APLICAÇÕES DO FORMALISMO AUTO-CONSISTENTE	116
6.1 - Multicamadas e Super-redes	116
6.1.1 - Introdução	116
6.1.2 - O Modelo	118
6.1.3 - Redes Fibonacci	120
6.2 - Difração de Bragg Perto de $\pi/2$	124
6.3 - Mapeamento do Campo de Ondas	126

CAPÍTULO 7 - RESULTADOS NUMÉRICOS E DISCUSSÃO	129
7.1 - Introdução	129
7.2 - Metodologia do Cálculo	129
7.3 - Estrutura do Programa	131
7.4 - Resultados e Discussão	135
CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	198
8.1 - Conclusões	198
8.2 - Perspectivas	203
APÊNDICE A	205
APÊNDICE B	210
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	238

## AGRADECIMENTOS

Ao Dr. Wlodzimierz A. Keller, do Instituto de Física da UFBA., pela orientação e paciência durante esses anos de convivência amigável.

Aos colegas do Departamento de Física do Estado Sólido do Instituto de Física da UFBA que assumiram meus encargos didáticos durante o meu afastamento para realização deste trabalho.

Ao colega Kleber Carlos Mundim pelas discussões e ajuda na parte computacional.

Aos professores Dr. Aurino Ribeiro Filho pelo incentivo e discussões, Dr. Manuel Marcos Freire D'Aguiar Neto por ceder o Plot do Laboratório de Fotoacústica, Dra. Nice Maria Americano da Costa Costa Pinto, pelo constante incentivo e ajuda na realização de tarefas administrativas aumentando a minha disponibilidade de tempo para a execução deste trabalho, ao Dr. Helio Campos e ao PPPG. pela utilização do Plot e confecção de alguns gráficos.

As Secretárias Wanda do DME e Miriam Coutinho, da Secretaria de Ensino do CBPF pelas atividades dedicadas que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

Ao amigo Luis Reis, Técnico de Computação do CBPF pela ajuda constante durante a minha permanência no Rio.

Aos funcionários do CPD da UFBA, especialmente Luis Cláudio, Aloísio, Sônia Matos, Agnaldo e o diretor José Carlos pela ajuda na solução dos muitos problemas no uso do sistema.

À Universidade Federal da Bahia e especialmente ao Instituto de Física da UFBA pelo uso do computador IBM3090, das instalações e de outros equipamentos.

À CAPES pelo suporte financeiro.

## RESUMO

O formalismo auto-consistente da difração de raios-x foi desenvolvido, para o "caso simétrico de Bragg", através do espalhamento de raios-x por um plano de dipolos utilizando-se o potencial vetor de Hertz. O modelo usado considera um plano de dipolos de espessura desprezível com densidade contínua e constante, submetido a ação de duas ondas planas simétricas. Neste trabalho, como contribuição ao novo formalismo, introduzimos os conceitos de Fator de Estrutura, Fator Atômico e Fator de Polarização. Reconsideramos a Absorção no processo de espalhamento auto-consistente reproduzindo, desta vez, os resultados da literatura obtidos experimentalmente ou através das teorias usuais. Como aplicação do formalismo no estudo de estruturas planares construímos diversos modelos de multicamadas com estruturas comensuráveis e incomensuráveis e generalizamos o conceito de Fator de Estrutura Auto-consistente para Multicamadas. O objetivo é mostrar a aplicabilidade do formalismo no estudo de estruturas planares. Acompanhamos a formação do campo de onda no interior do cristal com o objetivo de enfatizar o caráter microscópico do formalismo aqui utilizado. E, finalmente estudamos o caso especial de incidência a  $\pi/2$ .



## ABSTRACT

A self-consistent approach to the X-ray crystal scattering was developed for the symmetrical Bragg case using a model of the single plane of scattering dipoles by means of the Hertz vector formalism. The model used considers a dipole plane of negligible thickness with a continuous and constant charge density submitted to the action of two symmetrically incident EM plane waves. As a contribution to the self-consistent approach we introduce modified concepts of the Structure, Atomic and Polarization Factors. We also reconsider the Absorption model in the self-consistent formalism which is able now to correctly predict the experimental results. As an application of this formalism in order to study the planar structures we propose several scattering models for the multilayers of commensurate and incommensurate structures generalizing, at the same time, the concept of the self-consistent structure factor for multilayers and superlattices. The aim is to show the applicability of our formalism for the case of planar structures. Taking advantage of the microscopical character of the self-consistent formalism we are able to follow exactly the wave field formation. Finally, we indicate the possibility of new formalism applications for a special case when the Bragg angle is  $\pi/2$ .

## INDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 - Radiação característica de um tubo de Raios-x.  
Extraída de X-Ray Crystal Structure, Dan McLachlan,  
McGraw-Hill, N. York, pg. 81 (1957)

13

Figura 2.2 - Raio-x não polarizado propagando-se na direção X  
incidindo sobre um eletrón. Espalhamento observado em P.  
Extraída de X-Ray Crystal Structure, Dan McLachlan,  
McGraw-Hill, N. York, pg. 173 (1957)

15

Figura 2.3 - Dois raios paralelos encontram-se em fase quando a  
Lei de Bragg é satisfeita.  $d_{hkl}$  é a distância interplanar,  $\theta$  o  
ângulo de Bragg e  $n$  a ordem de difração

21

Figura 3.1 - Espalhamento de um plano de dipolos sob a ação de  
duas ondas planas.

30

Figura 3.2 - Representação, no plano complexo, das amplitudes e  
fases das ondas envolvidas no espalhamento auto-consistente.

41

Figura 3.3 - Espalhamento por dois planos vizinhos.  
Representação das ondas envolvidas no processo.

43

Figura 4.1 - Representação dos ângulos auto-consistentes,  
das amplitudes das ondas incidentes e espalhadas, do "forcing  
field" e da contribuição dos dipolos.

56

Figura 4.2 - Uma das soluções da equação da Refletividade com aplicação da Regra de Semelhança Geométrica de Campo.

62

Figura 4.3 - Relação entre as escalas  $\gamma$  e  $\theta$ .

63

Figura 4.4 - Refletividade do Ge[111] em função do desvio do ângulo de Bragg (seg. arco) e de  $\gamma$ . Encarte com resultados apresentados por Zachariassen [74].

64

Figura 5.1 - Representação da Unidade Primitiva de espalhamento auto-consistente e os mesocampos associados.

71

Figura 5.2 - Representação da cela unitária tipo zinc blend com seus subplanos "físicos" ou planos estruturais.

73

Fig. 5.3 - Representação de uma Unidade Não Primitiva de Espalhamento Auto-consistente formada de duas Unidades Primitivas.

74

Figura 5.4 - Rocking curve para um cristal de Ge infinitamente espesso, direção [111] com radiação Cu- $\alpha_1$ , polarização  $\sigma$ , para os dois tipos de cela unitária, "matemática" e "física".

79

Figura 5.5 - Espalhamento por uma distribuição esférica de carga elétrica representando um átomo com volume finito.

84

Figura 5.6 - Representação planar discreta de uma distribuição esférica de cargas, modulada por gaussianas.

89

Figura 5.7 - Representação de uma cela unitária nas três situações "matemática", com estruturas "física" e "atômicas".

90

Figura 5.8 - Fator Atômico para o Silício calculado pelo formalismo auto-consistente com uma distribuição gaussiana tentativa comparado com os resultados publicados por L. Pauling & J. Sherman [81]

93

Figura 5.9 - Rocking curve para um cristal de Ge infinitamente espesso, direção [111] com radiação Cu -  $k\alpha$  com cela unitária "matemática", para os dois estados de polarização  $\pi$  e  $\sigma$ .

95

Figura 5.10 - Rocking curve para um cristal de Ge infinitamente espesso, na escala Y. Direção [111], radiação Cu -  $k\alpha$  com cela unitária "física", para os dois estados de polarização  $\pi$  e  $\sigma$ .

97

Figura 5.11 - Refletividade versus angulo de difração para uma multicamada infinitamente espessa formada de bi-camadas Ge e GaAs com, respectivamente 1024 e 512 planos moleculares cada. Polarização  $\sigma$ . Reflexão [111].

101

Figura 5.12 - Amplitudes e Fases das ondas envolvidas no processo de espalhamento Auto-consistente com absorção.

111

Figura 5.13 - Refletividade versus ângulo de difração para um cristal de Ge [111] com 16184 planos moleculares. Polarização  $\sigma$  Plano Matemático. Parâmetro de absorção  $\mu = 0.0001$ . Radiação Cu  $K\alpha_1$ .

113

Figura 5.14 - Refletividade versus Ângulo de Difração para um cristal de Ge[111] com coeficiente de absorção proporcional ao quadrado da intensidade. Polarização  $\sigma$ . Plano Matemático. Radiação Cu  $K\alpha_1$ . Parâmetro de absorção  $\mu = 0.00004$ .

115

Figura 6.1 - Representação de uma multicamada formada por duas substâncias (bi-camadas).

118

Figura 6.2 - Continuidade do campo de ondas entre duas Unidades Primitivas de espalhamento.

120

Figura 6.3 - Rocking curve de uma sequência Fibonacci do tipo [A,B] com A e B representando, respectivamente, 128 e 64 planos moleculares de Ge e de GaAs em 32 passos.

123

Figura 6.4 - Refletividade versus ângulo de incidência para um cristal de Ge[620] com 49.152 planos moleculares, sem absorção. Radiação de Co  $K\alpha_1$ .

124

Figura 6.5 - Refletividade versus ângulo de incidência para dois cristais de Ge [620] com, respectivamente, 49.152 e 24.576 planos moleculares cada, com parâmetro de absorção  $\mu = 0.00006$ . Radiação de Co  $K-\alpha_1$ .

125

Figura 6.6 - Formação do Campo de Onda no interior do cristal de Ge[620] com cela "matemática". Polarização  $\sigma$  e fator de plano artificialmente aumentado 96 vezes. Cristal com 256 planos dividido em 8 camadas de 32 planos cada. Rocking Curve das camadas 1, 4, 5, 7 e 8.

127

Figura 7.1 - Refletividade versus Desvio de  $\theta_B$  para um cristal de Ge com 512 planos moleculares. Plano Matemático, Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].  $\theta_B = 13.642963$ .

148

Figura 7.2 - Refletividade versus Desvio de  $\theta_B$  para cristais de Ge com, respectivamente, 128 e 256 planos moleculares cada. Plano Matemático, Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].  $\theta_B = 13.642953$ .

149

Figura 7.3 - Refletividade versus Desvio de  $\theta_B$  para um cristal de Ge com 16384 planos moleculares. Plano Matemático, Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

150

Figura 7.4 - Fase da Transmitividade e Refletividade versus desvio de  $\theta_B$  para um cristal de Ge com 2048 planos moleculares. Plano Matemático, Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

151

Figura 7.5 - Fase da Transmitividade e Refletividade versus desvio de  $\theta_B$  para um cristal de Ge com 2049 planos moleculares. Plano Matemático, Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

152

Figura 7.6 - Refletividade versus Angulo de Difração para dois cristais de Ge, um espesso e outro infinitamente espesso. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

153

Figura 7.7 - Refletividade versus Angulo de Difração para dois cristais de Ge com, respectivamente, 4.096 e 8.192 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Parâmetro de absorção  $\mu = 0.0006$ . Reflexão [111].

154

Figura 7.8 - Refletividade versus Angulo de Difração para três cristais de Ge com, respectivamente, 4.096, 16.384 e 32.768 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Parâmetro de absorção  $\mu = 0.0001$ . Reflexão [111].

155

Figura 7.9 - Refletividade versus Angulo de Difração para dois cristais de Ge com, respectivamente, 4.096, e 16.384 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Parâmetro de absorção  $\mu = 0.0003$ . Reflexão [111].

156

Figura 7.10 - Refletividade versus Angulo de Difração para dois cristais de Ge infinitamente espessos com parâmetros de absorção, respectivamente, iguais a  $\mu = 0.0006$  e  $\mu = 0.0003$ . Plano Matemático. Polarização sigma, Radiação Cu K $\alpha$ , Reflexão [111].

157

Figura 7.11 - Refletividade versus Ângulo de Difração para as Reflexões (422) e (333) do Si. Reprodução da figura 9.12 do livro: Z. G. Pinsk, Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals, Springer Series in Solid-State Sciences 3 (1978) pg. 316.

158

Figura 7.12 - Refletividade versus Ângulo de Difração para três cristais de Ge com, respectivamente, 6.144, 24.576 e 49.152 planos moleculares. Parâmetro de absorção  $\mu = 0.00001$ . Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Co K $\alpha$ . Reflexão (620).

159

Figura 7.13 - Refletividade versus Ângulo de Difração para três cristais de Ge com 49.152 planos moleculares, com parâmetros de absorção iguais a, respectivamente,  $\mu = 0.00006$  e  $\mu = 0.00001$ ,  $\mu = 0$ . Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Co K $\alpha$ . Reflexão (620).

160

Figura 7.14 - Salto em Fase sofrido pela onda A no interior do cristal, ao longo da direção de propagação, nos 20 primeiros planos apartir da superfície do cristal.

161

Figura 7.15 - Salto em Fase sofrido pela onda B no interior do cristal, nos 20 primeiros planos apartir da superfície do cristal.

162

Figura 7.16 - Refletividade versus desvio do Ângulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 8 Celas de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 64 planos



moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

163

Figura 7.17 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 8 Celas de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 128 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

164

Figura 7.18 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 8 Celas de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 256 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

165

Figura 7.19 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 16 Celas de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 128 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

166

Figura 7.20 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 32 Celas

de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 128 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

167

Figura 7.21 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 8 Celas de super-rede composta de camadas de AlAs e GaAs com 256 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de AlAs na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

168

Figura 7.22 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 16 Celas de super-rede composta de camadas de AlAs e GaAs com 64 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de AlAs na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

169

Figura 7.23 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura formada por 8 bi-camadas composta com, 64 e 32 planos moleculares de, respectivamente, GaAs e Ge sobre um substrato de Ge com 4500 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

170

Figura 7.24 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura formada por 128 bi-camadas composta com, 64 e

32 planos moleculares de, respectivamente, GaAs e AlAs sobre um substrato de Ge com 8192 planos moleculares. Plano Físico. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [004].

171

Figura 7.25 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 8 e 8 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de GaAs na superfície superior. Reflexão [111].

172

Figura 7.26 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 8 e 8 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

173

Figura 7.27 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 128 e 128 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

174

Figura 7.28 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 128 e 128 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de GaAs na superfície superior. Reflexão [111].

175

Figura 7.29 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 256 e 128 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superficie superior. Reflexão [111].

176

Figura 7.30 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 256 e 256 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superficie superior. Reflexão [111].

177

Figura 7.31 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 512 e 128 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superficie superior. Reflexão [111].

178

Figura 7.32 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 512 e 512 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superficie superior. Reflexão [111].

179

Figura 7.33 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 256 e 1024

planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma.  
Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

180

Figura 7.34 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 512 e 1024 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

181

Figura 7.35 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 512 e 1024 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de GaAs na superfície superior. Reflexão [111].

182

Figura 7.36 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 1024 e 256 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

183

Figura 7.37 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 1024 e 256 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de GaAs na superfície superior. Reflexão [111].

184

Figura 7.38 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 1024 e 256 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

185

Figura 7.39 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 1024 e 1024 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

186

Figura 7.40 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 2048 e 2048 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

187

Figura 7.41 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 8192 e 8192 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

188

Figura 7.42 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 16394 e 16394

planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma.  
Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

189

Figura 7.43 - Ângulo de Laue para hetero-estruturas infinitas formadas por bi-camadas de Ge (128 planos moleculares) e GaAs (variando de 4 a 1024 planos moleculares). Reflexão [111].

190

Figura 7.44 - Ângulo de Bragg para hetero-estruturas formadas por infinitas bi-camadas de Ge (ou GaAs) variando-se a espessura da camada de GaAs (ou Ge) de 4 a 1024 planos moleculares. Plano Físico. Reflexão [111].

191

Figura 7.45 - Ângulo de Laue para hetero-estruturas formadas por infinitas bi-camadas com 128 planos moleculares de Ge (ou GaAs) variando-se a espessura da camada de GaAs (ou Ge) de 4 a 1024 planos moleculares. Polarização  $\sigma$ . Reflexão [111].

192

Figura 7.46 - Posição da Região de Reflexão Total em termos dos ângulos característicos para hetero-estruturas infinitas formadas por bi-camadas de Ge (128 planos moleculares) e GaAs (variando de 4 a 1024 planos moleculares). Polarização  $\sigma$ . Reflexão [111].

193

Figura 7.47 - Largura da Região de Reflexão Total (segundos) para hetero-estruturas infinitas formadas por bi-camadas de Ge (128 planos moleculares) e GaAs (variando de 4 a 1024 planos moleculares). Reflexão [111].

194

Figura 7.48 - Rocking curve de uma sequência Fibonacci do tipo [A,B] com A e B representando, respectivamente, 1 plano molecular de Ge e de GaAs em 40 passos.

195

Figura 7.49 - Rocking curve de uma sequência Fibonacci do tipo [A,B] com A e B representando, respectivamente, 1 plano molecular de Ge e de GaAs em 100 passos.

196

Figura 7.50 - Rocking curve de uma sequência Fibonacci do tipo [A,B] com A e B representando, respectivamente, 1 plano molecular de Ge e de GaAs em 160 passos.

197



## CAPITULO 1 - INTRODUÇÃO

### 1.1 - REVISÃO HISTÓRICA

A proposta de Max von Laue em 1912 sobre a possibilidade da matéria fornecer uma rede natural, em três dimensões, para a difração de raio-x, teve a sua comprovação experimental ainda no mesmo ano, por Friedrich e Knipping, sob a supervisão do próprio von Laue [1]. Duas conclusões fundamentais foram obtidas como consequência: o caráter ondulatório dos raios-x e a organização periódica da matéria sólida. Este fato deu surgimento a uma importante técnica de investigação da matéria, principalmente no seu estado sólido, denominada Difração de Raios-x ou Cristalografia por Raios-x.

Desde os primórdios da descoberta da difração de raios-x duas teorias foram desenvolvidas com a finalidade de explicar os resultados experimentais: uma mais simplificada, a Teoria Cinemática, voltada durante muito tempo para a determinação de estruturas químicas, iniciada por e W.L.Bragg [2]; a outra chamada Teoria Dinâmica, buscava os fundamentos da interação da radiação com a matéria. Apesar de mais elaborada, a Teoria Dinâmica, em suas três versões: Darwin 1914a, b, 1922, [3], [4], Ewald 1916a,b, 1917,1937, [5], [6], [7], e Laue 1931 [8], encontrava dificuldades para a sua aceitação no meio científico, pois não conseguia explicar os resultados experimentais de então. A Teoria Cinemática, por outro lado, parecia ser suficiente para interpretar tais resultados, consolidando-se ao longo do tempo, como ferramenta eficaz na

determinação de estruturas cristalinas simples. Este fato, aparentemente intrigante para os cristalógrafos teve, posteriormente, uma explicação razoavelmente simples: Enquanto a Teoria Dinâmica, era elaborada através de um modelo de cristal perfeito e infinito, as amostras utilizadas nos experimentos eram naturalmente imperfeitas e constituídas de pequenos blocos, mais tarde denominados por Ewald de "blocos mosaicos". Por outro lado, a Teoria Cinemática, apesar de consideravelmente simplificada, estava apta a tratar pequenos cristais uma vez que os efeitos dinâmicos, podiam ser negligenciados para os micros-cristais, não necessitando da abordagem dinâmica. Como disse von Laue em momento de descontração, cristais imperfeitos "não merecem uma teoria melhor" (James, 1963 [9]).

Com o desenvolvimento da tecnologia de crescimento de cristais com alto grau de perfeição para atender às necessidades da engenharia eletrônica, a Teoria Dinâmica pode, finalmente, ver comprovada suas previsões e então o interesse pela mesma foi renovado. A Teoria Cinemática, entretanto, impossibilitada de explicar os resultados obtidos dos cristais sintéticos, tinha o seu campo de atuação direcionado, principalmente, para a determinação de estruturas químicas e somente com o advento da teoria das deslocações surgiu um novo campo de aplicação: o estudo de defeitos em cristais.

Ficava claro, portanto, que as duas teorias tinham espectros disjuntos de aplicação: enquanto a Dinâmica, se aplicava ao estudo de cristais grandes e perfeitos, a Cinemática, era apropriada para o estudo de cristais pequenos e

imperfeitos. O desenvolvimento paralelo dessas duas teorias e o uso intensivo das mesmas em diferentes campos de aplicação retardaram e dificultaram a compreensão do processo de interação da radiação com a matéria, além de contribuir para inibir o estudo da Física de difração.

Embora as teorias acima referidas se fundamentem no eletromagnetismo clássico com resultados em bom acordo com a experiência, foi desenvolvida uma proposta baseada nos princípios da Física Quântica por Molieré 1939 [10], seguindo-se por Born 1942 [11], Ohtsuki 1964 [12], Afanas'ev 1968 [13], e Kuriyama 1972 [14], até o presente ainda não completamente estabelecida. Considerando-se que o intervalo de comprimento de onda para os raios-x no espectro eletromagnético é tal que os aspectos ondulatório e corpuscular, para a radiação, são equivalentes, a formulação clássica tem espaço garantido no campo da difração de raios-x.

Sob a visão clássica, portanto, ainda hoje são desenvolvidos esforços no sentido de adaptar as versões existentes - notadamente a mais utilizadas delas, a Teoria de von Laue - para explicar os resultados atualmente observados. Resultados estes, consequência da utilização de técnicas experimentais, cada vez mais elaboradas e sofisticadas, capazes de externarem com grande acurácia, alguns novos fenômenos da óptica de raios-x, produzidos por mono-cristais sintéticos com alto grau de perfeição. Reciprocamente, alguns fenômenos previstos pelas teorias têm sido observados, com a obtenção de mono-cristais perfeitos e desenvolvimento de diversas técnicas experimentais de significativa importância. Neste contexto vale

citar a observação de Tanner 1976 [15] "A produção de monocristais altamente perfeitos tem permitido a observação de muitos novos fenômenos em óptica de raios-x e a verificação experimental detalhada das teorias de difração".

Historicamente podemos citar algumas datas importantes na Física de Difração:

- 1941- observação da transmissão anômala de Borrmann [16];
- 1949- explicação teórica do efeito Borrmann por von Laue, com argumentos extraídos de sua própria teoria [17];
- 1958- formulação matricial para a transmissão de n-feixes, por Kato [18];
- 1959- observação do efeito Pendellösung previsto na teoria de Ewald, por Kato e Lang [19];
- 1960- observação da birrefringência na transmissão dos raios-x, por Authier [20];
- 1961- estudo do efeito Pendelösung para três feixes, por Lang e Hart [21];
- 1965- descoberta da transmissão anômala múltipla, por Borrmann e Hartwig [22];
- 1974- início de trabalhos experimentais para investigação da fase, por Colella [23] e Post [24].

Desde 1981 a determinação de estruturas químicas conta com um método prático para a extração da fase em cristais com centro de simetria, desenvolvido, com base na difração múltipla, por S.L Chang [25].

## 1.3 - ANÁLISE CRÍTICA

Apesar do grande desenvolvimento teórico ocorrido no

estudo da difração dinâmica de raios-x, permanecem algumas questões conceituais e operacionais as quais têm recebido críticas de renomados pesquisadores. Ewald [26], por exemplo, considera inaceitável a utilização de grandezas macroscópicas, como a constante dielétrica, em dimensões microscópica, no interior da cela unitária e do próprio átomo. Mesmo com a utilização de valores médios, como proposto por H.A. Lorentz, não fica clara a sua aplicação para campos eletromagnéticos que variam tão rapidamente como os raios-x: "It seems strange to transfer the concept of dielectric constant, derived as it is from large-scale experiments, to the spaces between atoms.... But this kind of averaging is not applicable to the rapidly varying X-ray fields". Ewald discorda, também do fato do índice de refração como uma grandeza periódica. Um outro ponto da teoria de von Laue que tem recebido crítica diz respeito às condições de contorno que impõem a necessidade de um plano com perfeição matemática como plano de superfície. No entendimento do próprio von Laue, segundo citação de Authier [27], este fato constitui-se no ponto mais fraco de sua teoria: "...the approximation of a mathematical plane for the boundary limits is a better than nothing else one justified by the agreement between experimental and theoretical rocking curves in the Bragg case but that it remains the weakest point in the dynamical theory".

Na passagem do modelo de Ewald para o modelo de Laue foi introduzido o Fator de Estrutura, um conceito tipicamente cinemático, o qual é expresso através de uma série de Taylor e o número de termos considerados depende do número de ondas do

modelo (normalmente é tratado o caso de duas ondas). Este fato gerou dificuldades conceituais além de introduzir modificações, não claramente determinadas, na densidade eletrônica e, conseqüentemente, no próprio modelo de cristal. O fator de estrutura pode ser considerado o "elo" que falta na teoria de Ewald para levar em conta uma distribuição contínua de carga. Este fato foi considerado por Slater [28] como um sério inconveniente na teoria de Ewald, haja vista a demasiada importância deste fator para estabelecer a relação entre o quadro de difração observado e a estrutura da substância espalhadora. A tentativa de introduzir este conceito no formalismo da teoria dinâmica trouxe alguns prejuízos para o mesmo como por exemplo a perda do caráter microscópico bem como do princípio da auto-consistência responsáveis pelo rigor e elegância da teoria de Ewald. Segundo Wagenfeld [29] a auto-consistência é também quebrada na própria teoria de Ewald quando ele considera os campos mesofield e epifield para um cristal semi-infinito: "The existence of the epifield contradicts the self-consistence of the field within the crystal.... This leads to the same relations for the amplitudes and wave vectors as in von Laue's theory".

As considerações acima, por si só, justificam o desenvolvimento e utilização de novos modelos e formalismos no sentido de superar as atuais dificuldades e complexidades do tratamento dinâmico, criar novos elementos capazes de suscitar a abertura de canais de discussão sobre a Física de Difração, hoje tão pouco estudada, como bem observado informalmente em 1975 pelo (agora) prêmio Nobel, Jerome Karle, além de conduzir

a uma formulação unificada para o estudo da difração dinâmica de raios-x.

Seguindo este pensamento, Keller e colaboradores [30],[31], [32], [33] iniciaram a formulação de uma nova proposta para o espalhamento dinâmico de raio-x, no caso simétrico de Bragg, baseada no modelo de espalhamento de Darwin e no princípio de auto-consistência de Ewald, denominado "espalhamento auto-consistente". Como na maioria dos trabalhos em difração dinâmica de raio-x, este novo formalismo está sendo elaborado, por enquanto, para o caso de dois feixes, não existindo, entretanto, nas bases em que foi proposto, nenhuma restrição para o tratamento de três ou mais feixes. O formalismo auto-consistente é desenvolvido utilizando-se o método do Potencial Vetor de Hertz para o espalhamento eletromagnético e tem como unidade básica de espalhamento um plano de dipolos sem espessura com densidade contínua e constante, denominado 'plano matemático', ao invés de um elétron como no caso de Ewald ou uma nuvem eletrônica preenchendo toda a cela unitária como no caso de Laue. Esta proposta é facilmente assimilável se considerarmos cada elemento da densidade de carga como um dipolo oscilante, como proposto por Ewald [26]: "Schrödinger's wave mechanical perturbation theory also showed that each element of volume of electron density reacted to an optical field like a dipole". Considerando este modelo simples de espalhador todo cálculo matemático é feito de forma rigorosa apesar da observação de Max Born [34]: "Solutions which, in some sense, can be regarded as rigorous are very rare in diffraction theory". As sucessivas aproximações para a obtenção

de expressões simples, os artifícios de cálculo e a excessiva parametrização da teoria dinâmica tornam-na por demais complicada e deselegante. Este formalismo, entretanto, possui caráter microscópico, preserva o princípio de auto-consistência inicialmente proposto por Ewald e não faz aproximações algébricas. De certo modo segue-se, filosoficamente, a ideia de partir de um modelo simples e se manter fiel a ele até o fim, ao invés de formular um modelo, aparentemente bem geral, e fazer sucessivas aproximações o que significa, a todo instante, alterar o modelo originalmente proposto.

Inicialmente apresentado para o espalhamento por um único plano sob incidência normal [30] e em seguida sob uma incidência qualquer [31] foi posteriormente estendido [32] para um conjunto de planos paralelos. Os principais resultados até agora divulgados são : a) imediata formação de onda plana espalhada por um plano infinito de dipolos; b) conservação da energia ; c) o salto em fase da onda espalhada, superior a  $\pi/2$  em relação à onda incidente; e d) padrão de difração para um cristal perfeito [35].

### 1.3 - OBJETIVOS

Os objetivos deste trabalho são:

- 1) Introduzir novos elementos no formalismo auto-consistente e enfatizar o seu caráter microscópico.
- 2) Mostrar a sua aplicabilidade no estudo de substâncias de estruturas planares.

Para atender a esses objetivos,

- a) Consideramos um dos principais elementos do espalhamento de



raios-x que é o fator de estrutura introduzindo os conceitos de "Fator de Estrutura Auto-Consistente" [26], e "Fator Atômico Auto-Consistente". Com isto resgatamos a idéia de auto-consistência, mesmo para celas unitárias compostas de muitos espalhadores, perdida quando Laue estendeu a teoria de Ewald de um elétron puntual por cela unitária para uma distribuição contínua preenchendo toda a cela unitária.

b) Introduzimos o fator de absorção [37] reproduzindo os resultados experimentais e previstos nas demais teorias, e estendemos para o caso de absorção a dois fótons.

c) Definimos o Fator de Polarização Auto-consistente e mostramos que os diversos fatores envolvidos no espalhamento de raios-x, inclusive o fator de polarização contribuem para o estreitamento do pico de difração.

d) Estudamos o comportamento do campo de ondas no interior do cristal [38], [39].

e) Estudamos o caso "especial" de incidência perto de  $\pi/2$  [40], sem necessidade de qualquer consideração extra, como se acontece nas teorias usuais [41], [42], que realizam tal cálculo com extrema dificuldade e artificialismo.

f) Em face do contínuo avanço da indústria eletrônica e da importância dos semicondutores na referida indústria direcionamos o nosso trabalho para o estudo de substâncias com estruturas tipo "diamond" ou "zinc-blend", típicas de substâncias semicondutoras. Generalizamos a lei de Bragg modificada [43] para multicamadas [44], e preparamos o formalismo para o estudo de certas estruturas artificiais que têm despertado grande interesse prático como as super-redes.

multicamadas, filmes finos, redes incomensuráveis e sequência Fibonacci .hoje amplamente divulgada na literatura: Segmuller et al. 1977 [45] R. Fynn 1979 [46], Francis J. di Salvo et al. 1979 [47], R.L. Withers and A.L.Bursill 1981 [48], A.Janner et al. 1982 [49],[50], J. Kervarec, et al 1984 [51], Vardanyan et al.I,II 1985 [52],[53], Bartels et al. 1986 [54], H.Eduardo Roman 1987 [55], M. Kohmoto 1983 [56], M. Kohmoto et al., 1983, 1986, 1987 [57], [58], [59], [60], B. Sutherland and M. Kohmoto 1987 [61], Rolf Schilling and Serge Aubry 1987 [62] M. Block et al. 1988 [63], C. Janot et al. 1989 [64].

g) Realizamos diversas aplicações em multicamadas e redes fibonacci formadas de substâncias semicondutoras.

h) Generalizamos o conceito de Fator de Estrutura para Super-rede [65], [66].

i) Mostramos o caráter unificado deste formalismo, suficiente para estudar os pequenos e grandes cristais e assim contemplar os atuais aspectos cinemáticos e dinâmicos do espalhamento.

Finalmente,

j) Sugerimos a idéia de considerarmos os fatores de Estrutura e Atômico como defeitos em uma estrutura ideal e apresentamos a possibilidade de estudar defeitos cristalinos planares no espalhamento dinâmico, notadamente aqueles que resultam na quebra da periodicidade da rede cristalina, como difração de Bragg por ondas acústicas [67].

Os resultados obtidos neste trabalho apontam para a possibilidade de um tratamento geral para o problema da difração de raio-x. A simplicidade do formalismo e a sua característica microscópica, além de tratar de forma clara

aspectos teóricos como o mapeamento do campo de ondas no interior do cristal permite, facilmente, a elaboração de modelos para o estudo da difração dinâmica de raios-x, o que justifica, portanto, prosseguir na continuidade do seu desenvolvimento.

## CAPÍTULO 2 - CONSIDERAÇÕES GERAIS

São elementos fundamentais no fenômeno da difração de raios-x pela matéria: a emissão de radiação eletromagnética por uma carga elétrica acelerada, a ocorrência de interferência nessa radiação, a constituição e estrutura da matéria e a produção e detecção de raios-x.

### 2.1 - Os Raios-x

Os raios-x são ondas eletromagnéticas, descobertos em 1895 por Röntgen, com comprimento de onda situado no intervalo 0.1 a 100 Å. do espectro eletromagnético. A sua produção, em laboratório, é normalmente feita pelo choque de elétrons rápidos em um material "alvo" com emissão característica, descoberta em 1909 por Barkla [68].

A desaceleração dos elétrons incidentes contribuem para a parte contínua do espectro enquanto os picos de intensidade são produzidos pelos elétrons do material alvo. Monocromadores especiais se encarregam de selecionar o comprimento de onda conveniente para a execução do experimento, normalmente correspondendo a um dos picos de intensidade, denominada por Moseley [69] de radiação  $K\alpha$  ( $\alpha_1$  e  $\alpha_2$ ) ou  $K\beta$ , cujo comprimento de onda varia com o inverso do número atômico da substância alvo.

Atualmente os grandes aceleradores de partículas como os síncrotrons são fontes de raios-x que apresentam muitas vantagens sobre os geradores convencionais, como por exemplo,

forte intensidade do feixe e comprimento de onda qualquer, apesar da impossibilidade de deslocá-los até os pesquisadores em seus diversos centros de pesquisa!

A matéria composta por átomos arrumados periodicamente, com distâncias interatômicas da ordem do comprimento de onda dos raios-x fornece, como proposto por Laue, a rede de difração natural, em três dimensões, para a radiação x.

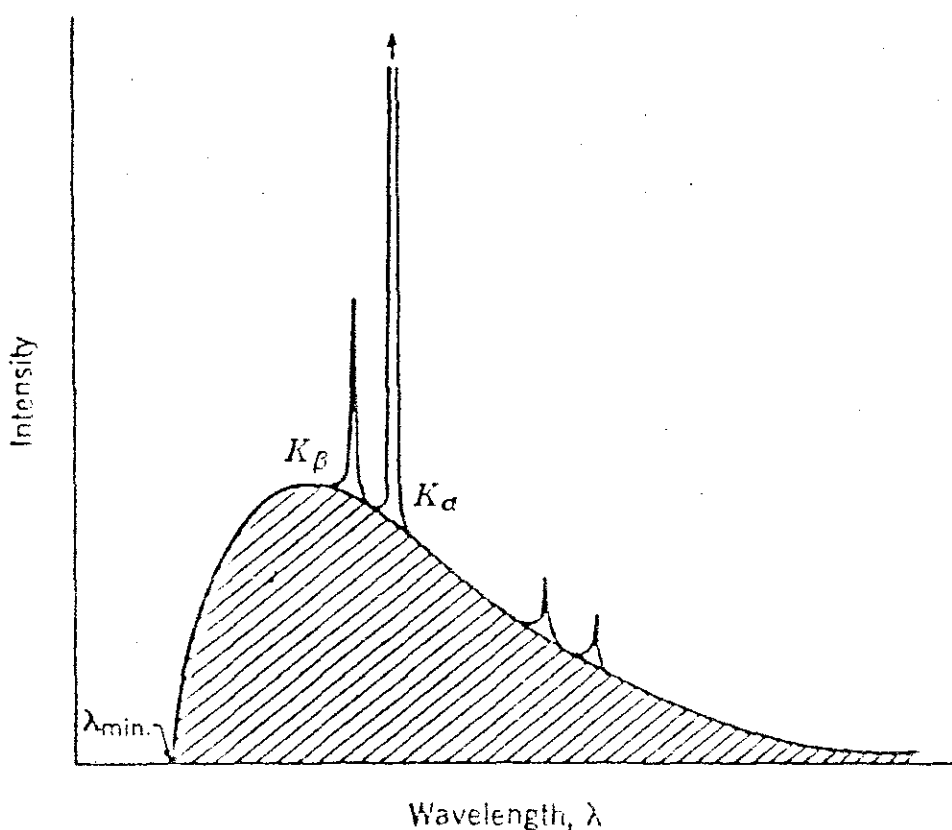


Figura 2.1 - Radiação característica de um tubo de Raios-x..  
 Extraída de X-Ray Crystal Structure, Dan, McLachlan,  
 McGraw-Hill, N. York, pg.81 (1957)

A detecção da radiação difratada pelos cristais é usualmente feita por dois processos: através da impressão em chapa fotográfica, como no experimento realizado por Friedrich e Knipping [1] que comprovou a difração de raios-x; ou através de uma câmara de ionização como nos experimentos realizados por Bragg [2] na determinação das primeiras estruturas químicas, como os atuais contadores Geiger, proporcional ou de cintilação.

## 2.2 - ESPALHAMENTO THOMSON

Quando sobre um elétron incide uma radiação eletromagnética, este oscila devido ao campo oscilante da onda incidente, emitindo uma radiação eletromagnética. Vamos supor que o elétron está situado na origem do sistema de coordenadas sob a ação de uma onda incidente do tipo:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp[i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})] \quad \vec{r} = [x_1, x_2, x_3] \quad (2.1)$$

O elétron, considerado quase livre, sofre uma aceleração dada por

$$\vec{a} = e \cdot \vec{E} / m \quad (2.2)$$

onde  $e$  e  $m$  são, respectivamente a carga e a massa do elétron. Então a onda espalhada pelo elétron no ponto  $P$  possui amplitude da forma:

$$\vec{E}_e = -\vec{E}_0 \left( \frac{e^2}{m c^2} \right) \frac{1}{r} \sin(\theta) \cdot \exp[i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})] \quad (2.3)$$

onde  $r = |\vec{r}|$ ,  $\theta$  é o ângulo entre o feixe espalhado e a direção de aceleração do elétron, e  $c$  a velocidade da luz no vácuo.

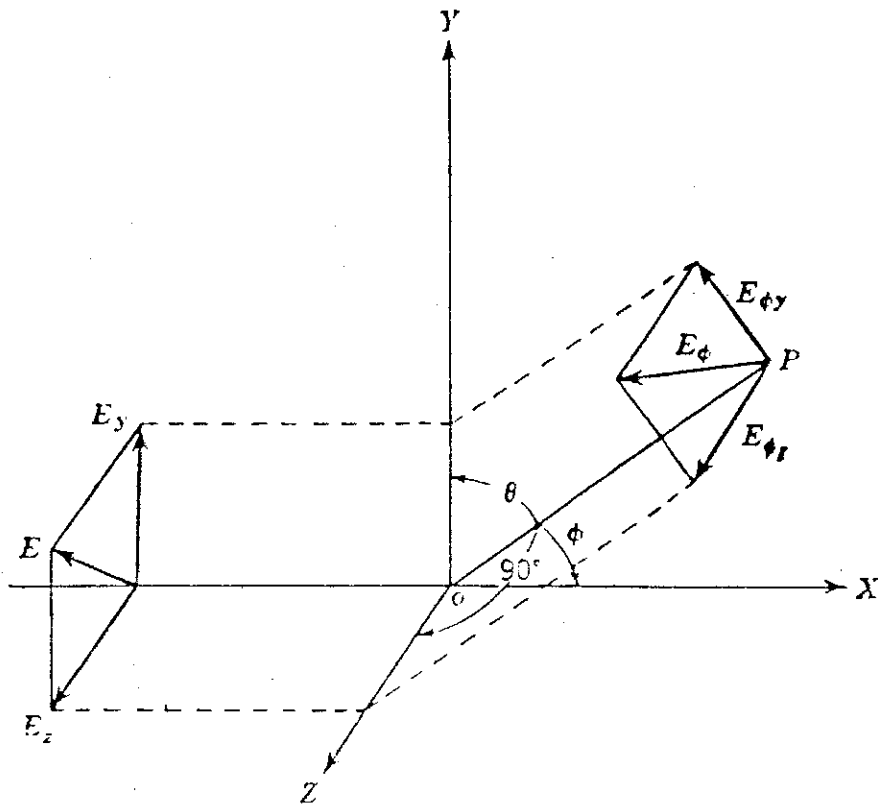


Figura 2.2 - Raio-x não polarizado propagando-se na direção X incidindo sobre um elétron. Espalhamento observado em P. Extraída de X-Ray Crystal Structure, Dan McLachlan, McGraw-Hill, N. York, pg. 173 (1957)

O módulo do vetor campo elétrico da onda espalhada é, então,

$$E_{\theta} = - E \left( \frac{\epsilon^2}{n^2 c^2} \right) \frac{1}{r} \sin(\theta) \quad (2.4)$$

A intensidade é dada por

$$I_{\theta} = | E_{\theta} |^2,$$

isto é

$$I_{\theta} = E^2 \frac{\epsilon^4}{n^2 c^4 r^2} \sin^2(\theta) \quad (2.5)$$

ou

$$I_{\theta} = I_0 \frac{\epsilon^4}{n^2 c^4 r^2} \sin^2(\theta) \quad (2.6)$$

onde  $I_0$  é a intensidade do feixe incidente. Se a radiação incidente não é polarizada, as componentes  $E_y$  e  $E_z$  do campo incidente possuem o mesmo valor médio, isto é

$$E_y^2 = E_z^2 = E^2/2 \quad (2.7)$$

logo

$$I_y = I_z = I_0/2 \quad (2.8)$$

a intensidade espalhada é



$$I_{\theta y} = I_y \frac{e^4 \sin^2(\theta y)}{r^2 n^2 c^4} \quad (2.9)$$

ou

$$I_{\phi y} = \frac{1}{2} I \frac{e^4}{r^2 n^2 c^4} \cos^2(\phi) \quad (2.10)$$

Analogamente

$$I_{\phi z} = I \frac{e^4 \sin^2(\theta z)}{r^2 n^2 c^4} \quad (2.11)$$

ou

$$I_{\phi z} = \frac{1}{2} I \frac{e^4}{r^2 n^2 c^4}, \quad \theta z = \pi/2 \quad (2.12)$$

logo

$$I_e = I_{\theta y} + I_{\theta z} \quad (2.13)$$

$$I_e = I \frac{e^4}{r^2 n^2 c^4} \left( \frac{1 + \cos^2(\phi)}{2} \right) \quad (2.14)$$

Isto significa que a intensidade espalhada é atenuada de um fator denominado Fator de Polarização dado por

$$FP = \frac{1 + \cos^2(\phi)}{2} \quad (2.15)$$

### 2.3 - TEORIA CINEMATICA DA DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

A Teoria Cinemática é uma proposta simplificada para o

espalhamento de raios-x por cristais. É adaptada especialmente para estabelecer a relação entre o quadro de difração observado e a substância espalhadora, com o objetivo de determinar a sua estrutura química: posição dos átomos na cela unitária, distância entre eles e os ângulos entre os planos cristalinos.

As principais simplificações da Teoria Cinemática são: o espalhamento é elástico; o índice de refração é igual à unidade, com velocidade de propagação dentro do cristal igual à velocidade da luz no vácuo; o reespalhamento do feixe dentro do cristal não é levado em consideração; os cristais devem ser pequenos; a distância entre a substância espalhadora e o ponto de observação é grande comparada com o tamanho da amostra, assumindo-se o modelo de difração de Fraunhofer.

A substância espalhadora é descrita, também, de forma simplificada por uma função densidade de cargas  $\rho$ , que integrada para pequenos volumes representa os centros espalhadores. As principais simplificações, normalmente devidas a James e Brindley (1931) [70] são: a contribuição de um elétron independe do estado de ionização do átomo; o espalhamento por um átomo independe do seu estado de ligação química; os átomos são considerados esféricos.

A função densidade eletrônica, é também chamada função densidade de cargas de Schrödinger e é dada por

$$\rho = e |\psi \psi^*| \quad (2.16)$$

onde  $e$  e  $\psi$  são, respectivamente, a carga e a função de onda do elétron que, segundo a interpretação de Max Born (1926) [71],

representa a probabilidade de encontrar o elétron em um ponto em torno do átomo.

A Amplitude da radiação espalhada por um elemento de volume  $d^3\vec{x}$  da substância espalhadora, na direção do vetor de onda  $\vec{k}$  é dada, no modelo de espalhamento de Fraunhofer, por:

$$d\vec{A} = \rho(\vec{x}) \exp[-i2\pi \vec{x} \cdot \vec{k}] \cdot \exp[i2\pi \vec{x} \cdot \vec{k}_0] d^3\vec{x} \quad (2.17)$$

onde  $\vec{k}_0$  é o vetor de onda da radiação incidente. Em cristalografia é comum expressar-se os vetores de onda em termos de vetores convenientes no espaço de Fourier ou espaço recíproco:

$$\vec{S} = \vec{k} / \lambda \quad \text{e} \quad \vec{S}_0 = \vec{k}_0 / \lambda \quad (2.18)$$

onde  $\lambda$  é o comprimento da radiação. A Amplitude pode, então ser expressa como

$$\vec{A}(\vec{S}) = \int_{-\alpha}^{+\alpha} \rho(\vec{x}) \exp[-i2\pi \vec{x} \cdot \vec{S}] d^3\vec{x} = |\vec{A}(\vec{S})| \exp(i\varphi) \quad (2.19)$$

onde  $\vec{s} = \vec{S} - \vec{S}_0$  é chamado vetor de difração. Formalmente a amplitude  $\vec{A}(\vec{s})$  representa a transformada de Fourier da função densidade de cargas  $\rho(\vec{x})$ .

Os resultados experimentais são dados por uma função chamada Função Intensidade  $I(\vec{s})$  definida por:

$$I(\vec{s}) = |\vec{A}(\vec{s})| \exp(i\varphi) \cdot |\vec{A}(\vec{s})| \exp(-i\varphi) \quad (2.20)$$

ou

$$I(\vec{s}) = |\vec{\lambda}(\vec{s})|^2 \quad (2.21)$$

Vale destacar que a fase  $\varphi$  da transformada de Fourier, a qual poderia fornecer importantes informações para a determinação da estrutura da substância, fica desconhecida. Recorre-se, normalmente a informações de outras fontes de pesquisa para a superação da perda de fase. Atualmente algumas técnicas experimentais e teorias bastante sofisticadas têm sido desenvolvidas com o objetivo de determinar a fase da transformada de Fourier e com isto recolher informações valiosas sobre as estruturas cristalinas.

Uma parte puramente geométrica que trata apenas das posições dos máximos de intensidade e de sua relação com os centros espalhadores situados nos nós da rede cristalina foi desenvolvida por von Laue. É denominada Teoria Geométrica e é resumida :

1) em três equações, chamadas de "Equações de Laue":

$$(\vec{S} - \vec{S}_0) \cdot \vec{a}_1 = h\lambda$$

$$(\vec{S} - \vec{S}_0) \cdot \vec{a}_2 = k\lambda \quad (2.22)$$

$$(\vec{S} - \vec{S}_0) \cdot \vec{a}_3 = l\lambda$$

onde  $h, k, l$  são números inteiros denominados índices de Miller e

os vetores  $\vec{a}_i$  representam os eixos cristalinos; ou,

ii) pela chamada "Lei de Bragg":

$$2 \cdot d_{hkl} \cdot \sin(\theta) = n\lambda \quad (2.23)$$

onde  $d_{hkl}$  é a distância interplanar,  $\theta$  o ângulo de Bragg e  $n$  a ordem de difração.

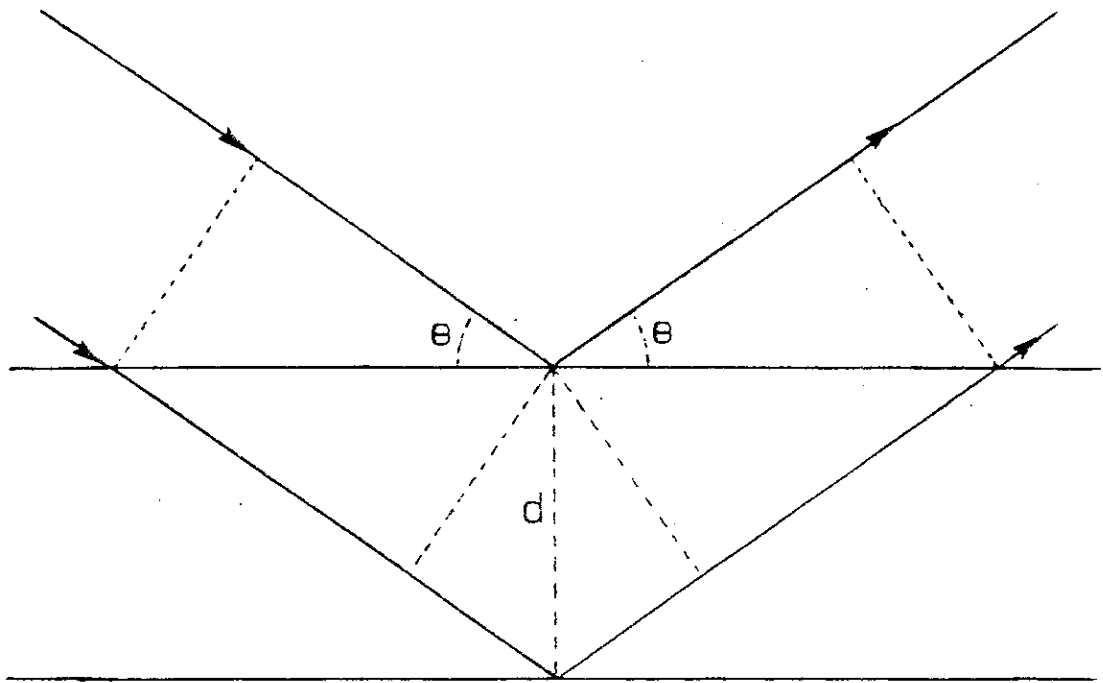


Figura 2.3 - Dois raios paralelos encontram-se em fase quando a Lei de Bragg é satisfeita.

## 2.4 - TEORIA DINAMICA DA DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

A Teoria Dinâmica caracteriza-se, fundamentalmente, por levar em conta o reespalhamento dentro do cristal. Assim um eletrón espalhador pode estar sujeito a um campo elétrico resultante chamado "forcing field" constituído da superposição da onda externa incidente e das diversas ondas provenientes dos demais eletróns.

Duas versões foram inicialmente propostas, Darwin (1914) [3] e Ewald (1916) [5]. Quinze anos mais tarde, von Laue (1931) [8] apresentou uma nova proposta que tornou-se, ao longo do tempo, a mais utilizada pelos pesquisadores, hoje considerada como uma extensão da teoria de Ewald e comumente chamada teoria de Ewald-von Laue. Recentemente Keller (1986) [32], [33], [34] iniciou o desenvolvimento de uma nova proposta buscando superar alguns pontos não claramente justificados nos formalismos atuais: i) conservação da energia; ii) unificação dos tratamentos cinemático e dinâmico; iii) explicação de alguns novos resultados experimentais de difícil interpretação nas teorias atuais, etc. As principais características dos modelos e formalismos utilizados são:

### 2.4.1 - MODELO DE DARWIN

O modelo para o espalhamento proposto por Darwin considera, a partir do espalhamento Thomson, para um eletrón, a incidência de uma onda plana sobre um arranjo periódico de planos cristalinos.

Utilizando o modelo de difração de Fresnel, Darwin determina a amplitude espalhada, refletida e transmitida, em cada face de um plano cristalino e estabelece os coeficientes, respectivamente de, reflexão e transmissão para cada plano. Desse tratamento constatou-se a existência de uma região angular de reflexão perfeita, ao invés de um ponto como dado pela teoria geométrica no limite para um cristal infinito.

Três pontos merecem destaque: o primeiro diz respeito à metodologia utilizada no cálculo, muito semelhante àquela da teoria cinemática, que usa o tratamento integral; o segundo, é a suposição de que as ondas espalhadas pelos dipolos oscilantes sofrem um retardo na fase de  $\pi/2$  em relação à onda incidente; e o terceiro, é que existe a possibilidade de adaptação do modelo para incluir pequenos desvios na periodicidade cristalina.

O tratamento de Darwin tem sido bastante utilizado pelos microscopistas eletrônicos e ainda hoje desperta grande interesse no meio cristalográfico.

#### 2.4.2 - MODELO DE EWALD

O modelo de Ewald consiste em uma rede tridimensional infinita de dipolos, onde cada um deles oscila sob a ação do campo eletromagnético formado pela superposição dos campos das pequenas ondas produzidas por todos os outros dipolos oscilantes, sem contar com campo externo. O campo óptico gerado por um dipolo seria equivalente ao campo total incidente devido a todos os outros dipolos, formando-se o chamado "balanço dinâmico" mais tarde denominado de "sistema auto-consistente".

Numa situação desse tipo dispensa-se a inclusão de uma onda externa para a excitação dos dipolos. Basicamente este procedimento é equivalente a determinar os modos de vibração de um sistema mecânico, independente de forças externas ( ! ).

Seguindo tratamento analítico rigoroso, Ewald formulou o modelo, inicialmente proposto por Sommerfeld para a luz em sua tese de doutorado, como um problema de auto-valores, determinando as frequências possíveis para os dipolos oscilantes. Ele assumiu que todos os dipolos oscilavam na mesma direção e, através das soluções de Hertz para as equações de Maxwell, determinou o campo de um dipolo e em seguida o campo devido a todos os outros dipolos por meio do tratamento integral.

A adaptação desse modelo a uma situação real implicou na necessidade de, tomando um cristal "semi-infinito", imaginar a existência de um campo superficial, denominado *epicampo*, capaz de anular a onda incidente e formar as ondas refletida e refratada para que a situação anterior de "cristal infinito" fosse mantida no restante do cristal. Alguns pontos merecem destaque no modelo de Ewald: o primeiro é a não presença do fator de estrutura, o qual desempenha papel importante na cristalografia; o segundo é o não estabelecimento de condições de contorno, sendo a superfície do cristal representada pelos dipolos das camadas mais externas; o terceiro é a necessidade de inclusão da camada de extinção para adaptar o modelo original a uma situação real.

Apesar de uma teoria microscópica elegante, sofisticada e rigorosa a teoria de Ewald não logrou de imediato o merecido



sucesso no meio cristalográfico. Somente após a formulação de Laue considerada como uma extensão natural da teoria de Ewald a mesma teve a sua importância devidamente reconhecida.

### 2.4.3 - MODELO DE LAUE

O modelo de Laue baseia-se na existência de uma função densidade eletrônica contínua e periódica preenchendo o interior das celas unitárias da estrutura cristalina. De igual forma considera-se também a densidade de cargas positivas distribuídas contínua e periodicamente no cristal. Assim as propriedades de espalhamento do cristal não se limitam aos nós da rede como no modelo de Ewald.

Assume-se a aplicabilidade das equações de Maxwell ao meio cristalino com a necessária extensão do conceito macroscópico de constante dielétrica, para o mundo microscópico dos átomos. A rede cristalina é representada pela expansão em séries de Fourier da susceptibilidade elétrica e as soluções das equações de Maxwell são ondas de Bloch com a mesma periodicidade da susceptibilidade elétrica, calculada através do vetor deslocamento elétrico  $\vec{D}$ .

Na superfície do cristal considera-se as condições de contorno usuais do eletromagnetismo, com a concordância dos campos de onda externo e interno ao cristal.

Um tratamento similar foi proposto anteriormente por Bethe (1928) [72] para a difração de elétrons o qual é comumente chamado de "Teoria Óptica". O conceito básico dessa teoria é o campo de ondas ou ondas de Ewald e explica,

fenomenologicamente, as propriedades de absorção e propagação dos raios-x para um cristal perfeito na posição de Bragg.

Dentre as formulações teóricas para a difração de raios-x por cristais perfeitos, a de Laue tem sido a mais utilizada pelos pesquisadores. Suas conclusões estão em boa concordância com os resultados experimentais embora existam, conceitualmente, alguns pontos obscuros.

O formalismo matemático do tratamento de Laue é quase idêntico ao de Ewal e pode apresentar os mesmos resultados. Atualmente é comum referir-se ao tratamento dinâmico com o nome de Teoria de Ewald-von Laue. No apêndice faremos um resumo da teoria de Laue pela sua importância atual.

#### 2.4.4 - MODELO AUTO-CONSISTENTE

Keller e colaboradores [32], [33], [34], vêm desenvolvendo um modelo para o espalhamento de raios-x por cristais que consiste na justaposição paralela de unidades de espalhamento definidas por um plano infinito de cargas eletrônicas ou dipolos com densidade contínua, e constante, associada a quatro ondas planas: duas incidentes e duas espalhadas, e a um fator de fase que leva em conta a distância entre duas unidades vizinhas. A definição desta unidade de espalhamento foi possível após cálculos rigorosos, analíticos e numéricos, que mostram a imediata formação de ondas planas na radiação espalhada pelos dipolos.

Ao campo de ondas espalhado pelos dipolos é adicionado o campo externo para formação do campo total de excitação dos

dipolos chamados "forcing field", num regime de auto consistência. Tal regime assegura a conservação da energia, inicialmente mostrado por Keller e Urbanski 1986 [33] para o caso de incidência de apenas uma onda externa. Posteriormente, Keller e Campos 1986 [32] apresentaram o espalhamento auto-consistente para o caso de duas ondas externas com incidência perpendicular ao plano de dipolos, e em sentidos contrários. A incidência para um ângulo qualquer foi apresentada por Keller e Campos 1988 [34].

O formalismo utiliza o vetor de Hertz para o cálculo dos campos elétricos e magnéticos das ondas espalhadas pelos dipolos oscilantes.

No próximo capítulo será apresentado um resumo do formalismo auto-consistente que servirá de suporte para o desenvolvimento deste trabalho.

## CAPÍTULO 3 - O FORMALISMO AUTO - CONSISTENTE

### 3.1 - INTRODUÇÃO

O "formalismo auto-consistente" está baseado no princípio de auto-consistência de Ewald, o qual considera como fazendo parte do "forcing field", isto é, do campo total que incide sobre um dipolo do plano, o campo espalhado pelos demais dipolos do plano além, é claro, do campo das ondas provenientes de fora do plano enfocado. Foi inicialmente desenvolvido para o caso amplamente conhecido na literatura como o "caso simétrico de Bragg para dois feixes", num modelo de espalhamento "tipo Darwin". Neste caso o cristal é construído por uma pilha de planos paralelos de dipolos, onde sobre cada um deles incidem, simetricamente sob um ângulo  $\theta$ , duas ondas eletromagnéticas planas, enquanto que a onda externa incide sobre a superfície do cristal paralela aos planos de dipolos, sob o mesmo ângulo.

O campo espalhado pelos dipolos de um plano é calculado utilizando-se o formalismo de Hertz para ondas eletromagnéticas harmônicas com polarização elíptica. Como resultado obtém-se ondas eletromagnéticas com o mesmo vetor de onda das ondas incidentes, o que implica na não presença de ondas refratadas. O princípio da conservação da energia é preservado e aparece como uma consequência direta da aplicação do princípio de auto-consistência. Vale salientar, portanto, que o princípio de auto-consistência além de fornecer mais informação tem ascendência hierárquica sobre o princípio da conservação da energia.

## 3.2 - ESPALHAMENTO POR UM PLANO DE DIPOLOS

Consideremos um plano de dipolos com densidade de cargas  $\sigma_0$  contínua e constante submetido a ação de duas ondas eletromagnéticas planas  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$  simetricamente incidentes com um ângulo qualquer  $\theta$ , representadas, respectivamente, pelos seus campos elétricos:

$$\vec{E}_A^i(\vec{r}, t) = \vec{A}_E^i e^{i(\omega t - \vec{k}_A^i \cdot \vec{r})} \quad (3.1)$$

$$\vec{E}_B^i(\vec{r}, t) = \vec{B}_E^i e^{i(\omega t - \vec{k}_B^i \cdot \vec{r})}$$

onde o índice "i" representa incidência,  $\omega = 2\pi\nu$  é a frequência angular da radiação.  $\vec{k}_A^i$ ,  $\vec{A}_E^i$  e  $\vec{k}_B^i$ ,  $\vec{B}_E^i$  são os vetores de onda e de polarização, respectivamente, das ondas  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$ .

Consideremos o plano de incidência I determinado pelas vetores de onda  $\vec{k}_A^i$  e  $\vec{k}_B^i$ , perpendicular ao plano D de dipolos, e o sistema de coordenadas Oxyz, onde o eixo Oy é a interseção dos planos I e D, Ox é normal a D e Oz é normal a I (fig.3.1).

Indiquemos por  $U_x$ ,  $U_y$  e  $U_z$  as componentes vetoriais de um vetor  $\vec{U}$  nas direções Ox, Oy e Oz, respectivamente e por  $U_x$ ,  $U_y$  e  $U_z$  suas componentes no referido sistema, ou seja,

$$\vec{U} = U_x \vec{u} + U_y \vec{v} + U_z \vec{w},$$

onde

$$\vec{u} = [1, 0, 0], \quad \vec{v} = [0, 1, 0] \quad \text{e} \quad \vec{w} = [0, 0, 1]$$

Assim,

$$\vec{k}_A^i = k(\text{sen}\theta u + \text{cos}\theta v)$$

$$\vec{k}_B^i = k(-\text{sen}\theta u + \text{cos}\theta v)$$

(3.2)

$$\vec{A}^i = A_x^i u + A_y^i v + A_z^i w$$

$$\vec{B}^i = B_x^i u + B_y^i v + B_z^i w$$

onde  $k = 2\pi/\lambda$ .

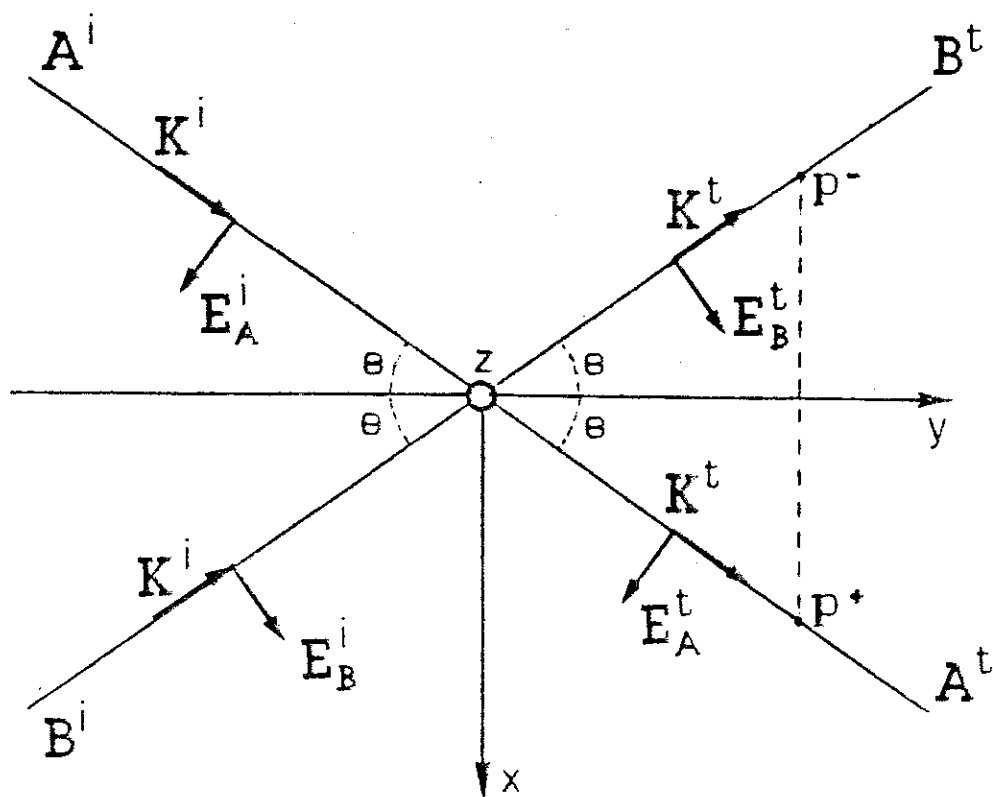


Figura 3.1 - Espalhamento de um plano de dipolos sob a ação de duas ondas planas.

$\vec{A}^i$  e  $\vec{B}^i$  representam, respectivamente, os vetores  $\vec{A}_E^i$  e  $\vec{B}_E^i$ , de onde suprimimos o índice E para simplificar a notação.

O campo auto-consistente gerado pelos dipolos é calculado em duas etapas, como proposto por KELLER e URBANSKI 1986 [33]. Na primeira etapa, é calculado o campo dos dipolos sem levar em consideração a interação entre eles. Obtém-se como resultado duas ondas planas com vetores de onda paralelos aos das ondas incidentes. Na segunda etapa, a interação entre os dipolos é assegurada considerando-se que os dipolos estão sujeitos aos campos das ondas externas adicionados ao campo das ondas produzidas pelos dipolos, isto é,

$$\vec{E} = \vec{E}_A^i + \vec{E}_B^i + (1/2) \cdot [ \vec{E}_A^d + \vec{E}_B^d ] \quad (3.3)$$

onde  $\vec{E}_A^d$  e  $\vec{E}_B^d$  são os campos de onda dos dipolos observados, respectivamente, nos pontos  $P^+(x_p, y_p, z_p)$  e  $P^-(x_p, y_p, z_p)$  e trazidos para sobre o plano de dipolos através da correspondente mudança de fase.

O campo total  $\vec{F}_s(Q, t)$ , ( "forcing field" ) que age sobre os dipolos é chamado campo auto-consistente e pode ser escrito como:

$$\vec{F}_s = \vec{A}^i + \vec{B}^i + (1/2) \cdot [ \vec{A}^d + \vec{B}^d ] \quad (3.4)$$

onde  $\vec{A}^d$  e  $\vec{B}^d$  são os vetores de polarização dos campos de dipolos e  $Q(0, y, z)$  representa um ponto sobre o plano de cargas.

O Momento de dipolo infinitesimal no ponto Q é dado por :

$$d \vec{A} (Q, t) = (- e^2 \sigma_0 / mc^2 k^2) e^{i(\omega t - ky \cos \theta)} dy \cdot dz \cdot \vec{F}_s (Q, t) \quad (3.5)$$

onde  $e$  - é a carga do eletrón

$m$  - é a massa do eletrón

$c$  - é a velocidade da luz no vácuo

$\sigma_0$  - é a densidade de dipolos no plano

e portanto suas componentes são dadas por

$$d M_j (Q, t) = (- e^2 \sigma_0 / mc^2 k^2) e^{i(\omega t - ky \cos \theta)} dy \cdot dz \cdot F_j (Q, t)$$

sendo  $F_j$  as componentes de  $\vec{F}_s$  e  $j = x, y, z$ .

O vetor de HERTZ no ponto de observação  $P$  devido às oscilações de todos os dipolos do plano é:

$$\vec{Z} (P, t) = -r_e \sigma_0 k^{-2} e^{i\omega t} \int_{-\alpha}^{+\alpha} R^{-1} e^{ik(R + y \cos \theta)} dy \cdot dz \cdot \vec{F}_s (Q, t)$$

onde  $r_e = (1/4\pi\epsilon_0)(e^2/mc^2)$  é o raio clássico do eletrón e

$$R = |\vec{r}| = |P - Q|.$$

Resolvendo a integral, para cada componente, temos

$$\vec{Z} (P, t) = i \cdot k^{-2} f_p e^{i[\omega t - k(\text{sen} \theta |x_p| + y_p \cos \theta)]} \cdot \vec{F}_s (Q, t) \quad (3.6)$$

onde  $f_p = r_e \lambda \sigma_0 / \text{sen} \theta$

é definido como "fator de espalhamento do plano".

O vetor campo elétrico é obtido do vetor de Hertz através



da expressão

$$\left[ \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{z}) - c^{-2}(\partial^2 \vec{z} / \partial t^2) \right] \quad (2)$$

isto é,

$$\vec{E} = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{z}) - c^{-2}(\partial^2 \vec{z} / \partial t^2).$$

No ponto de observação  $P^+$  abaixo do plano, obtemos

$$\vec{E}_A(P, t) = A^d \cdot e^{i[\omega t - k \cdot x_P \cdot \text{sen}\theta - k \cdot y_P \cdot \text{cos}\theta]} \quad (3.7)$$

e no ponto  $P^-$  acima do plano,

$$\vec{E}_B(P, t) = B^d \cdot e^{i[\omega t + k \cdot x_P \cdot \text{sen}\theta - k \cdot y_P \cdot \text{cos}\theta]} \quad (3.8)$$

onde os vetores de onda satisfazem as relações

$$\vec{k}_A = \vec{k}_A^i = \vec{k}_A^d \quad \vec{k}_B = \vec{k}_B^i = \vec{k}_B^d \quad (3.9)$$

sendo

$$A^d = i \cdot f_P \cdot \left\{ \begin{array}{l} \text{cos}\theta \cdot [ F_x \text{cos}\theta - F_y \text{sen}\theta ] u \\ + \text{sen}\theta \cdot [ F_y \text{sen}\theta - F_x \text{cos}\theta ] v \\ + [ F_z ] w \end{array} \right\} \quad (3.10)$$

$$B^d = i \cdot f_P \cdot \left\{ \begin{array}{l} \text{cos}\theta \cdot [ F_x \text{cos}\theta + F_y \text{sen}\theta ] u \\ + \text{sen}\theta \cdot [ F_y \text{sen}\theta + F_x \text{cos}\theta ] v \\ + [ F_z ] w \end{array} \right\}$$



É comum expressar-se as polarizações das ondas em termos de dois casos especiais de polarização, onde o vetor campo elétrico da onda vibra nas direções paralela ou perpendicular ao plano de incidência chamados, respectivamente, polarização  $\pi$  e  $\sigma$ . Assim, de acordo com o sistema de coordenadas utilizado, podemos escrever:

$$\mathbf{A}^j = A_{\pi}^j + A_{\sigma}^j, \quad A_{\pi}^j = A_{\pi}^j e_{\mathbf{A}}, \quad A_{\sigma}^j = A_{\sigma}^j \mathbf{w} \quad (3.11)$$

$$\mathbf{B}^j = B_{\pi}^j + B_{\sigma}^j, \quad B_{\pi}^j = B_{\pi}^j e_{\mathbf{A}}, \quad B_{\sigma}^j = B_{\sigma}^j \mathbf{w}$$

com

$$e_{\mathbf{A}} = [ \cos\theta, -\sin\theta, 0 ], \quad e_{\mathbf{B}} = [ \cos\theta, \sin\theta, 0 ],$$

$$\mathbf{w} = [ 0, 0, 1 ] \quad e \quad j = i, d$$

de onde obtemos as relações

$$A_x^j = A_{\pi}^j \cos\theta, \quad A_y^j = -A_{\pi}^j \sin\theta, \quad A_{\sigma}^j = A_z^j \quad (3.12)$$

$$B_x^j = B_{\pi}^j \cos\theta, \quad B_y^j = B_{\pi}^j \sin\theta, \quad B_{\sigma}^j = B_z^j$$

$$j = i, d$$

Como não existe restrição à posição de P, colocando Q na origem do sistema de coordenadas e utilizando as equações (3.4), (3.11) e (3.12) podemos reescrever (3.10) como:

$$\begin{aligned}
 \vec{A}^d &= if_p \left\{ [ F_x \cos\theta - F_y \sin\theta ] e_A + F_z w \right\} = \\
 &= if_p \left\{ \left[ A_\pi^i + \cos(2\theta) B_\pi^i + 1/2 [ A_\pi^d + \cos(2\theta) B_\pi^d ] \right] e_A + \right. \\
 &\quad \left. + \left[ A_\sigma^i + B_\sigma^i + 1/2 ( A_\sigma^d + B_\sigma^d ) \right] w \right\}
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

$$\begin{aligned}
 \vec{B}^d &= if_p \left\{ [ F_x \cos\theta + F_y \sin\theta ] e_B + F_z w \right\} = \\
 &= if_p \left\{ \left[ [ B_\pi^i + \cos(2\theta) \cdot A_\pi^i + 1/2 [ B_\pi^d + \cos(2\theta) A_\pi^d ] \right] e_B + \right. \\
 &\quad \left. + \left[ A_\sigma^i + B_\sigma^i + 1/2 ( A_\sigma^d + B_\sigma^d ) \right] w \right\}
 \end{aligned}$$

de onde obtemos o sistema

$$A_\pi^d = if_p [ A_\pi^i + \cos(2\theta) \cdot B_\pi^i + 1/2 ( A_\pi^d + \cos(2\theta) \cdot B_\pi^d ) ]$$

$$A_\sigma^d = if_p [ A_\sigma^i + B_\sigma^i + 1/2 ( A_\sigma^d + B_\sigma^d ) ]$$

(3.14)

$$B_\pi^d = if_p [ B_\pi^i + \cos(2\theta) \cdot A_\pi^i + 1/2 ( B_\pi^d + \cos(2\theta) \cdot A_\pi^d ) ]$$

$$B_\sigma^d = if_p [ A_\sigma^i + B_\sigma^i + 1/2 ( A_\sigma^d + B_\sigma^d ) ]$$

O sistema acima pode ser resolvido separadamente para as polarizações  $\sigma$  e  $\pi$ . Este é um ponto importante que vale a pena chamarmos a atenção pois possibilita tratarmos a polarização elíptica de forma simples considerando primeiro a

um estado de polarização e depois o outro. As soluções são :

$$A_{\pi}^d = \frac{i \cdot f_p [1 - (\sin^2(2\theta) \cdot i f_p / 2) A_{\pi}^i + \cos(2\theta) B_{\pi}^i]}{1 - i f_p - \sin^2(2\theta) f_p^2 / 4}$$

$$B_{\pi}^d = \frac{i \cdot f_p [1 - (\sin^2(2\theta) \cdot i f_p / 2) B_{\pi}^i + \cos(2\theta) A_{\pi}^i]}{1 - i f_p - \sin^2(2\theta) f_p^2 / 4} \quad (3.15)$$

$$A_{\sigma}^d = \frac{i \cdot f_p [A_{\sigma}^i + B_{\sigma}^i]}{1 - i f_p} = B_{\sigma}^d$$

Uma vez que a polarização  $\sigma$  é definida como sendo perpendicular ao plano de incidência, o que equivale dizer, paralela ao plano de dipolos, era de se esperar que a contribuição dos dipolos para esta polarização não dependesse do ângulo de incidência  $\theta$ . Entretanto, não é demais lembrar que o "fator de plano",  $f_p$ , que aparece nas equações acima, depende do ângulo de incidência  $\theta$ .

Um importante resultado obtido é a possibilidade de tratar o espalhamento de duas ondas eletromagnéticas simétricas com polarização elíptica como dois estados de polarização  $\pi$  e  $\sigma$ , separadamente, e a seguir fazer a composição de tais estados. Outros dois importantes resultados obtidos, são : 1) a incidência de duas ondas simétricas resulta em duas ondas espalhadas também simétricas, e ; 2) os resultados obtidos para a polarização  $\sigma$  podem ser conseguidos da polarização  $\pi$  apenas fazendo nas expressões (3.15),  $\cos(2\theta)=1$  e  $\sin(2\theta)=0$ . Em razão deste fato doravante trabalharemos, apenas, com a polarização  $\pi$  e para simplificar a notação retiraremos o índice  $n$ .

### 3.3 - REFLETIVIDADE E TRANSMITIVIDADE

É importante observar que as ondas geradas pelas vibrações dos dipolos emergem do plano de cargas juntamente com as ondas cujos campos provocam oscilações nos dipolos resultando em duas novas ondas entendidas como ondas espalhadas  $\vec{E}_A^l(\vec{r}, t)$  e  $\vec{E}_B^l(\vec{r}, t)$  nas direções das ondas incidentes  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$ , respectivamente, dadas por:

$$\begin{aligned}\vec{E}_A^l(\vec{r}, t) &= \vec{A}^l e^{i(\omega t - \vec{k}_A \cdot \vec{r})} \\ \vec{E}_B^l(\vec{r}, t) &= \vec{B}^l e^{i(\omega t - \vec{k}_B \cdot \vec{r})}\end{aligned}\tag{3.16}$$

onde

$$\begin{aligned}\vec{A}^l &= \vec{A}_\pi^l + \vec{A}_o^l, & \vec{A}_\pi^l &= \vec{A}_\pi^i + \vec{A}_\pi^d, & \vec{A}_o^l &= \vec{A}_o^i + \vec{A}_o^d \\ \vec{B}^l &= \vec{B}_\pi^l + \vec{B}_o^l, & \vec{B}_\pi^l &= \vec{B}_\pi^i + \vec{B}_\pi^d, & \vec{B}_o^l &= \vec{B}_o^i + \vec{B}_o^d\end{aligned}\tag{3.17}$$

As equações (3.15) podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\begin{aligned}A^d &= f_t \cdot A^i + f_r \cdot B^i \\ B^d &= f_r \cdot A^i + f_t \cdot B^i\end{aligned}\tag{3.18}$$

onde

$$f_l = \frac{if_p [ 1 - if_p \cdot \text{sen}^2(2\theta) / 2 ]}{1 - if_p - f_p^2 \text{sen}^2(2\theta) / 4}$$

(3.19)

$$f_r = \frac{if_p \cdot \cos(2\theta)}{1 - if_p - f_p^2 \text{sen}^2(2\theta) / 4}$$

Considerando-se as equações (3.17) e (3.18), obtemos

$$A^l = A^i + f_l \cdot A^i + f_r \cdot B^i = t \cdot A^i + r \cdot B^i$$

(3.20)

$$B^l = B^i + f_l \cdot B^i + f_r \cdot A^i = t \cdot B^i + r \cdot A^i$$

onde

$$t = 1 + f_l \quad \text{e} \quad r = f_r \quad (3.21)$$

são chamados, respectivamente, coeficientes de transmissão e reflexão, os quais podem ser escritos como

$$t = \frac{1 + Z}{1 - Z - if_p}$$

(3.22)

$$r = \frac{if_p \cdot \cos(2\theta)}{1 - Z - if_p}$$

com

$$Z = 1/4 \cdot f_p^2 \cdot \text{sen}^2(2\theta) \quad (\in \mathbb{R}) \quad (3.23)$$

Definimos o fator de transmissão e de reflexão, respectivamente, como:

$$\begin{aligned} \mathfrak{T}_A &= \frac{A^t}{A^i} & \mathfrak{R}_A &= \frac{B^r}{A^i} \\ \mathfrak{T}_B &= \frac{B^t}{B^i} & \mathfrak{R}_B &= \frac{A^r}{B^i} \end{aligned} \quad (3.24)$$

Quando apenas uma onda incide sobre o plano de dipolos, os fatores de transmissão e reflexão coincidem, respectivamente, com os coeficientes de transmissão e reflexão, isto é:

$$\mathfrak{T} = t \quad (3.25)$$

$$\mathfrak{R} = r$$

Para o caso mais geral de duas ondas, obtemos de (3.20) e de (3.24),

$$\mathfrak{T}_A = t + r \frac{B^i}{A^i} \quad \mathfrak{R}_A = r + t \frac{B^i}{A^i} \quad (3.26)$$

$$\mathfrak{T}_B = t + r \frac{A^i}{B^i} \quad \mathfrak{R}_B = r + t \frac{A^i}{B^i}$$

Definindo

$$\mathfrak{S} = B^i / A^i \quad (3.27)$$

as equações (3.26) podem ser escritas

$$\begin{aligned} \mathfrak{Z}_A &= t + r \cdot \mathfrak{Z} & \mathfrak{Z}_B &= t + r \cdot \mathfrak{Z}^{-1} \\ \mathfrak{R}_A &= r + t \cdot \mathfrak{Z} & \mathfrak{R}_B &= r + t \cdot \mathfrak{Z}^{-1} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Lembrando que  $A^l$ ,  $B^l$ ,  $A^t$  e  $B^t$  são grandezas complexas podemos escrevê-las em termos de módulo e fase como:

$$\begin{aligned} A^l &= |A^l| e^{i\alpha^j} & B^l &= |B^l| e^{i\beta^j} \\ j &= t, l \end{aligned} \quad (3.29)$$

Consequentemente, as grandezas  $\mathfrak{Z}_A$ ,  $\mathfrak{Z}_B$  e  $\mathfrak{Z}$  podem ser escritas, respectivamente, como:

$$\begin{aligned} \mathfrak{Z}_A &= a e^{i\alpha} \\ \mathfrak{Z}_B &= b e^{i\beta} \\ \mathfrak{Z} &= f e^{i\phi} \end{aligned} \quad (3.30)$$

onde

$$\begin{aligned} a &= |\mathfrak{Z}_A| & e & \alpha = \alpha^t - \alpha^l \\ b &= |\mathfrak{Z}_B| & e & \beta = \beta^t - \beta^l \\ f &= |\mathfrak{Z}| & e & \phi = \beta^l - \alpha^l \end{aligned} \quad (3.31)$$



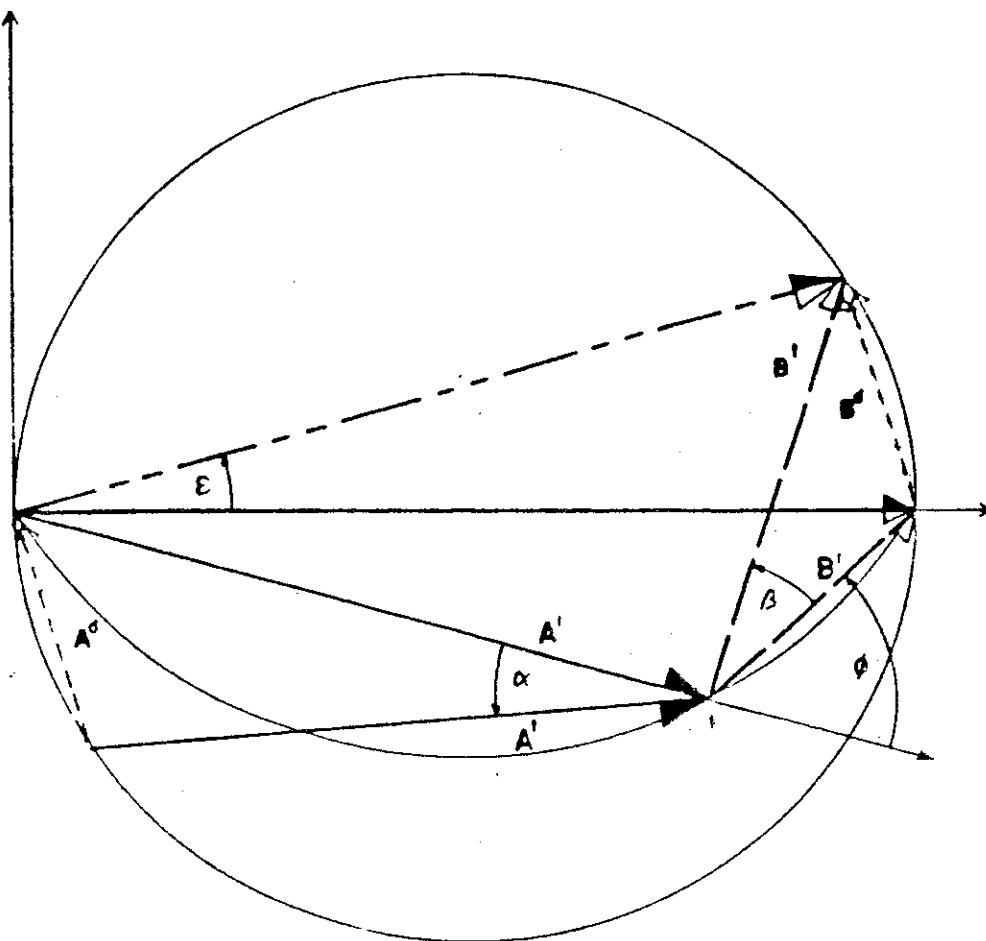


Figura 3.2 - Representação, no plano complexo, das amplitudes e fases das ondas envolvidas no espalhamento auto-consistente.

As grandezas  $\alpha$  e  $\beta$  são os "saltos" em amplitude sofridos pelas ondas  $A^i$  e  $B^i$  quando emergem do plano de dipolos como  $A^o$  e  $B^o$ , respectivamente, ao tempo em que sofrem um "salto"

em fase, dados por  $\alpha$  e  $\beta$ .

Substituindo (3.22) em (3.23), temos

$$Z_A = \frac{1 + Z + if_p \cos(2\theta) \cdot Z}{1 - Z - if_p}$$

(3.32)

$$Z_B = \frac{1 + Z + if_p \cos(2\theta) \cdot Z^{-1}}{1 - Z - if_p}$$

### 3.4 - ESPALHAMENTO POR UM CONJUNTO DE PLANOS

Neste formalismo utilizamos um modelo de difração tipo DARWIN onde o cristal é construído por um conjunto de planos paralelos de dipolos. Para cada plano do cristal valem todas as relações anteriormente definidas e desenvolvidas para um plano de dipolos.

Exigindo-se a continuidade do campo de ondas no espaço interplanar, as ondas transmitidas por um plano de dipolos incidirão no plano vizinho satisfazendo as relações:

$$A_j^t = A_k^t \cdot e^{-i\delta} \quad (3.33)$$

$$B_k^t = B_j^t \cdot e^{-i\delta} \quad (3.34)$$

onde  $\delta = K(x_k - x_j) \sin\theta$  é a diferença de fase para as ondas entre os planos posicionados em  $x_j$  e  $x_k$ ,  $K = 2\pi/\lambda$  é o módulo do vetor de onda.

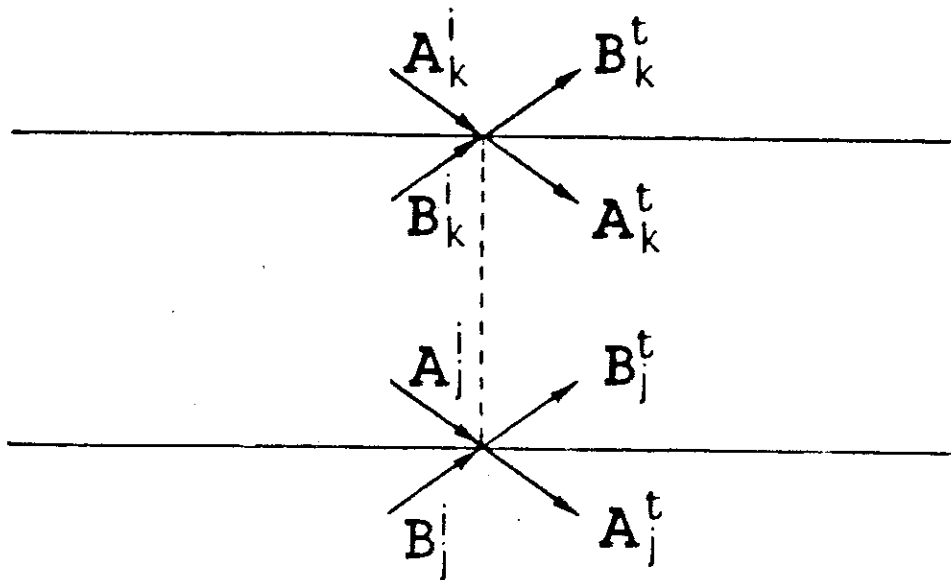


Figura 3.3 - Espalhamento por dois planos vizinhos. Representação das ondas envolvidas no processo.

Para obter uma lei de recorrência procederemos à maneira de Darwin. Desta forma estamos, inicialmente, interessados em encontrar, para planos vizinhos,  $A_k^t$  e  $B_k^t$  em função de  $A_j^i$  e  $B_j^i$ .

As equações (3.20) podem ser escritas como:

$$A_j^t = t_j \cdot A_j^i + r_j \cdot B_j^i \quad B_j^t = t_j \cdot B_j^i + r_j \cdot A_j^i \quad (3.35)$$

$$A_k^t = t_k \cdot A_k^i + r_k \cdot B_k^i \quad B_k^t = t_k \cdot B_k^i + r_k \cdot A_k^i \quad (3.36)$$

De (3.36), temos

$$A_k^t = (A_k^i - r_k \cdot B_k^i) / t_k$$

$$B_k^t = t_k B_j^t + r_k (A_k^i - r_k \cdot B_k^i) / t_k$$

de onde obtemos, utilizando (3.33) e (3.34)

$$A_k^t = [(1/t_k) e^{i\delta}] \cdot A_j^i - [(r_k/t_k) \cdot e^{-i\delta}] B_j^t \quad (3.37)$$

$$B_k^t = [(r_k/t_k) \cdot e^{i\delta}] \cdot A_j^i + [e^{-i\delta} (t_k^2 - r_k^2) / t_k] B_j^t$$

podemos escrever o sistema (3.37) na forma matricial

$$\begin{bmatrix} A_k^t \\ B_k^t \end{bmatrix} = M_k \cdot \begin{bmatrix} A_j^i \\ B_j^t \end{bmatrix}$$

onde

$$M_k = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1/t_k) e^{i\delta} & -(r_k/t_k) e^{-i\delta} \\ (r_k/t_k) \cdot e^{i\delta} & [(t_k^2 - r_k^2) / t_k] e^{-i\delta} \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

A matriz  $M_k$  é chamada matriz de acoplamento e pode ser composta de duas matrizes: uma associada às características

físicas dos planos espalhadores e a outra  $\lambda$  distância entre os planos, dada pela diferença de fase  $\delta$ , isto é.

$$M_k = \begin{bmatrix} (1/t_k) & -(r_k/t_k) \\ (r_k/t_k) & (t_k^2 - r_k^2)/t_k \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e^{i\delta k} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta k} \end{bmatrix} \quad (3.39)$$

Observamos que a matriz  $M_k$  acima é Unimodular ( $\det M_k = 1$ ).

Se o plano  $k$  não existe de fato, isto é descrito como  $t_k = 1$  e  $r_k = 0$ , a matriz  $M_k$  torna-se:

$$M_k = \begin{bmatrix} e^{i\delta} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta} \end{bmatrix}$$

que representa apenas uma defasagem das ondas  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$ , ao viajarem do plano  $j$  até o plano  $k$ .

Para um conjunto de  $N$  planos podemos encontrar a matriz associada  $M$  da seguinte forma.

De acordo (3.38), para  $k = j + 1$ ,  $l = j + 2$ ,

temos

$$\begin{bmatrix} A_l^t \\ B_l^t \end{bmatrix} = M_l \cdot \begin{bmatrix} A_k^t \\ B_k^t \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \begin{bmatrix} A_k^t \\ B_k^t \end{bmatrix} = M_k \cdot \begin{bmatrix} A_j^t \\ B_j^t \end{bmatrix}$$

Temos, então, para três planos

$$\begin{bmatrix} A_l^t \\ B_l^t \end{bmatrix} = M_l \cdot M_k \cdot \begin{bmatrix} A_j^t \\ B_j^t \end{bmatrix}$$

Portanto,

$$M = M_N \cdot M_{N-1} \cdots M_l \cdot M_k \cdot M_j \cdots M_2 \cdot M_1 = \prod_{l=0}^{N-1} M_{N-l}$$

Logo a relação entre os campos no primeiro e último plano é dada por

$$\begin{bmatrix} A_N^t \\ B_N^t \end{bmatrix} = M \cdot \begin{bmatrix} A_1^t \\ B_1^t \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

Considerando

$$M = \begin{bmatrix} M_1 & M_2 \\ M_3 & M_4 \end{bmatrix}$$

escrevemos (3.40) como

$$A_N^t = M_1 A_1^t + M_2 B_1^t \quad (3.41)$$

$$B_N^t = M_3 A_1^t + M_4 B_1^t \quad (3.42)$$

Se os planos são idênticos e igualmente espaçados, a

matriz  $M$  pode ser obtida por:

$$M = ( \bar{M} )^N$$

$$\text{onde } \bar{M} = M_1 = M_2 = M_3 = \dots = M_N$$

Neste caso podemos utilizar os polinômios de Chebyshev como proposto por Perkins e Knight 1984 [73] para o formalismo de Darwin. Os elementos da matriz  $M$  são, então, dados por:

$$M_1 = [U_{n-1}(x) - U_{n-2}(x)] a_1$$

$$M_2 = [U_{n-1}(x)] a_2$$

$$M_3 = [U_{n-1}(x)] a_3$$

$$M_4 = [U_{n-1}(x) - U_{n-2}(x)] a_4$$

$$\text{onde } U_n(x) = \frac{\text{sen} [(N+1) \arcsen \sqrt{1-x^2}]}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$x = \frac{1}{2} ( a_3 + a_2 )$$

Estamos, agora, interessados em encontrar as amplitudes das ondas espalhadas nas duas faces de o cristal em função das ondas incidentes em ambas as faces, isto é,  $A_1^t$  e  $B_N^t$  em função de  $A_N^i$  e  $B_1^i$ .

De (3.20), para o primeiro plano temos:

$$A_1^t = t_1 \cdot A_1^i + r_1 \cdot B_1^i \quad (3.43)$$

$$B_1^i = t_1 \cdot B_1^t + r_1 \cdot A_1^i \quad (3.44)$$

De (3.41) e (3.44) obtemos

$$A_1^t = \frac{1}{M_1 + r_1 M_2} A_N^t - \frac{M_2 t_1}{M_1 + r_1 M_2} B_1^i \quad (3.45)$$

$$B_1^t = \frac{r_1}{M_1 + r_1 M_2} A_N^t + \frac{M_2 t_1}{M_1 + r_1 M_2} B_1^i$$

Substituindo (3.45) em (3.43) e (3.42), temos, respectivamente,

$$A_1^t = \frac{t_1}{M_1 + r_1 M_2} A_N^t + \frac{r_1 M_1 - (t_1^2 - r_1^2) M_2}{M_1 + r_1 M_2} B_1^i \quad (3.46)$$

$$B_N^t = \frac{(M_3 + r_1 M_4)}{M_1 + r_1 M_2} A_N^t + \frac{t_1}{M_1 + r_1 M_2} B_1^i$$

Experimentalmente a incidência de raios-x é feita em, apenas, uma das faces. Neste caso as equações acima se reduzem a:

1) Para  $B_1^i = 0$

$$A_1^t = T_A \cdot A_N^t, \quad B_N^t = R_A \cdot A_N^t \quad (3.47)$$

onde



$$T_A = \frac{t_1}{M_1 + r_1 M_2}, \quad R_A = \frac{r_1 M_1 - (t_1^2 - r_1^2) M_2}{M_1 + r_1 M_2} \quad (3.48)$$

2) Para  $A_N^i = 0$

$$A_1^i = R_B \cdot B_1^i, \quad B_N^i = T_B \cdot B_1^i \quad (3.49)$$

onde

$$R_B = \frac{r_1 M_1 - (t_1^2 - r_1^2) M_2}{M_1 + r_1 M_2}, \quad T_B = \frac{t_1}{M_1 + r_1 M_2} \quad (3.50)$$

As grandezas  $T_A$ ,  $R_A$ ,  $T_B$  e  $R_B$ , de acordo com as definições dadas em (3.24) podem ser chamadas fatores de transmissão e reflexão do cristal, respectivamente, para as ondas  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$ . Assim,

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_A &= T_A, & \mathcal{T}_B &= T_B \\ \mathcal{R}_A &= R_A, & \mathcal{R}_B &= R_B \end{aligned} \quad (3.51)$$

## CAPÍTULO 4 - GEOMETRIZAÇÃO DO FORMALISMO AUTO-CONSISTENTE

### 4.1 - INTRODUÇÃO

A simplicidade do modelo utilizado, apesar do rigor matemático utilizado, onde não são feitas aproximações, tem possibilitado a apresentação do formalismo auto-consistente através de equações simples e de fácil interpretação. Neste capítulo vamos apresentar uma interpretação geométrica do formalismo auto-consistente construída a partir das amplitudes complexas e expressa em termos de fasores. Vale salientar que esta interpretação é utilizada para permitir uma melhor visualização do comportamento dos campos de onda envolvidos no processo de espalhamento e não para obter resultados para grandezas físicas a partir de construções geométricas.

### 4.2 - INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA

Vamos inicialmente reescrever os coeficientes de transmissão e reflexão em termos de ângulos auto-consistentes, para a polarização  $\pi$  lembrando que para se obter resultados para a polarização  $\sigma$  basta fazer  $\sin(2\theta) = 0$  ( $\rightarrow Z = 0$ ) e  $\cos(2\theta) = 1$ , como mostrado no capítulo anterior através das equações (3.15).

Dividindo e multiplicando as expressões (3.22) por

$$(1 - Z + i/p)$$

podemos escrever :

$$t = \frac{1 + Z}{G} \left[ \frac{1 - Z}{G} + i \frac{f_P}{G} \right]$$

$$r = \frac{i f_P \cos(2\theta)}{G} \left[ \frac{1 - Z}{G} + i \frac{f_P}{G} \right]$$
(4.1)

onde  $G = \sqrt{(1 - Z)^2 + f_P^2}$

De acordo com (3.23),

$$(1 + Z)^2 + (f_P \cos(2\theta))^2 = (1 - Z)^2 + f_P^2$$
(4.2)

o que nos permite reescrever (4.1) como:

$$t = \cos(\varepsilon_q) e^{i\varepsilon_P}$$
(4.3)

$$r = i \sin(\varepsilon_q) e^{i\varepsilon_P}$$

onde

$$\varepsilon_P = \text{arctg} \left( \frac{f_P}{1 - Z} \right)$$

$$\varepsilon_q = \text{arctg} \left( \frac{f_P \cos(2\theta)}{1 + Z} \right)$$
(4.4)

Vamos agora procurar os ângulos auto-consistentes com relação às componentes x e y das contribuições dos dipolos para ondas transmitidas.

De (3.10) podemos escrever

$$A_x^d = 1f_p \left\{ F_x \cos^2 \theta - F_y \cos \theta \operatorname{sen} \theta \right\}$$

$$B_x^d = 1f_p \left\{ F_x \cos^2 \theta - F_y \operatorname{sen} \theta \cos \theta \right\}$$

(4.5)

$$A_y^d = 1f_p \left\{ F_y \operatorname{sen}^2 \theta - F_x \cos \theta \operatorname{sen} \theta \right\}$$

$$B_y^d = 1f_p \left\{ F_x \cos \theta \operatorname{sen} \theta + F_y \operatorname{sen}^2 \theta \right\}$$

De onde obtemos

$$\begin{aligned} A_x^d + B_x^d &= 21f_p \cos^2 \theta F_x \\ &= 21f_p \cos^2 \theta \cdot [ A_x^l + B_x^l + 1/2( A_x^d + B_x^d ) ] \end{aligned}$$

(4.6)

$$\begin{aligned} A_y^d + B_y^d &= 21f_p \operatorname{sen}^2 \theta F_y \\ &= 21f_p \operatorname{sen}^2 \theta \cdot [ A_y^l + B_y^l + 1/2( A_y^d + B_y^d ) ] \end{aligned}$$

Obs. Estas equações podem ser obtidas, também, de (3.14), as quais foram obtidas de (3.10), com as correspondentes trocas do índice  $n$  por  $x$  e  $y$ , devido às relações (3.12). As equações (4.6) implicam em:

$$A_x^d + B_x^d = 2 \cdot f_x [ A_x^l + B_x^l ]$$

(4.7)

$$A_y^d + B_y^d = 2 \cdot f_y [ A_y^l + B_y^l ]$$

onde

$$f_x = \frac{if_p \cos^2 \theta}{1 - if_p \cos^2 \theta} \quad (4.8)$$

$$f_y = \frac{if_p \sin^2 \theta}{1 - if_p \sin^2 \theta}$$

Podemos rescrever  $f_x$  e  $f_y$  da seguinte forma

$$f_x = \frac{if_p \cos^2 \theta}{H} \left( \frac{1}{H} + i \frac{f_p \cos^2 \theta}{H} \right) \quad (4.9)$$

$$f_y = \frac{if_p \sin^2 \theta}{K} \left( \frac{1}{K} + i \frac{f_p \sin^2 \theta}{K} \right)$$

onde

$$H = \sqrt{1 + (f_p \cos^2 \theta)^2} \quad e \quad K = \sqrt{1 + (f_p \sin^2 \theta)^2}$$

Podemos, então, definir

$$\epsilon_x = \arctg (f_p \cos^2 \theta) \quad (4.10)$$

$$\epsilon_y = \arctg (f_p \sin^2 \theta)$$

e com isso podemos reescrever (4.9) como

$$f_x = i \operatorname{sen} \epsilon_x \cdot e^{i\epsilon_x} \quad (4.11)$$

$$f_y = i \operatorname{sen} \epsilon_y \cdot e^{i\epsilon_y}$$

Por outro lado, de (3.12) e (3.18)

$$A_x^d = f_l \cdot A_x^l + f_r \cdot B_x^l$$

$$B_x^d = f_r \cdot A_x^l + f_l \cdot B_x^l$$

(4.12)

$$A_y^d = f_l \cdot A_y^l + f_r \cdot B_y^l$$

$$B_y^d = f_r \cdot A_y^l + f_l \cdot B_y^l$$

e, conseqüentemente

$$A_x^d + B_x^d = (f_l + f_r) [A_x^l + B_x^l]$$

(4.13)

$$A_y^d + B_y^d = (f_l - f_r) [A_y^l + B_y^l]$$

Comparando (4.7) com (4.13) temos

$$f_x = (f_l + f_r)/2 \quad f_y = (f_l - f_r)/2 \quad (4.14)$$

ou

$$f_l = f_x + f_y \quad f_r = f_x - f_y \quad (4.15)$$

Estamos interessados, agora, em relacionar os ângulos auto-consistentes relativos à polarização  $\pi$  e às componentes nos planos  $x$  e  $y$ .

Utilizando as relações (3.21), (4.14), desenvolvendo e

comparando as equações (4.3) e (4.11) temos

$$\begin{aligned} e^{i(\varepsilon_p + \varepsilon_q)} &= 1 + r = f_t + f_r + 1 = 2f_x + 1 = \\ &= e^{i2\varepsilon_x} \end{aligned}$$

(4.16)

$$\begin{aligned} e^{i(\varepsilon_p - \varepsilon_q)} &= 1 - r = f_t - f_r + 1 = 2f_y + 1 = \\ &= e^{i2\varepsilon_y} \end{aligned}$$

de onde podemos relacionar  $\varepsilon_x$ ,  $\varepsilon_y$ ,  $\varepsilon_p$ ,  $\varepsilon_q$ :

$$\varepsilon_x = \frac{\varepsilon_p + \varepsilon_q}{2} \qquad \varepsilon_y = \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_q}{2} \qquad (4.17)$$

$$\varepsilon_p = \varepsilon_x + \varepsilon_y \qquad \varepsilon_q = \varepsilon_x - \varepsilon_y \qquad (4.18)$$

Obs. Uma outra forma alternativa para obter estas relações pode ser através da equação (4.10): Temos que

$$f_t = f_p \cos^2 \theta + f_p \sin^2 \theta = \operatorname{tg} \varepsilon_x + \operatorname{tg} \varepsilon_y \qquad (4.19)$$

$$f_r \cos 2\theta = f_p \cos^2 \theta - \sin^2 \theta = \operatorname{tg} \varepsilon_x - \operatorname{tg} \varepsilon_y$$

e utilizando (4.4) e a expressão de Z em (3.23)

$$\operatorname{tg} \varepsilon_p = \operatorname{tg} (\varepsilon_x + \varepsilon_y)$$

$$\operatorname{tg} \varepsilon_q = \operatorname{tg} (\varepsilon_x - \varepsilon_y)$$

de onde podemos determinar as relações (4.18).

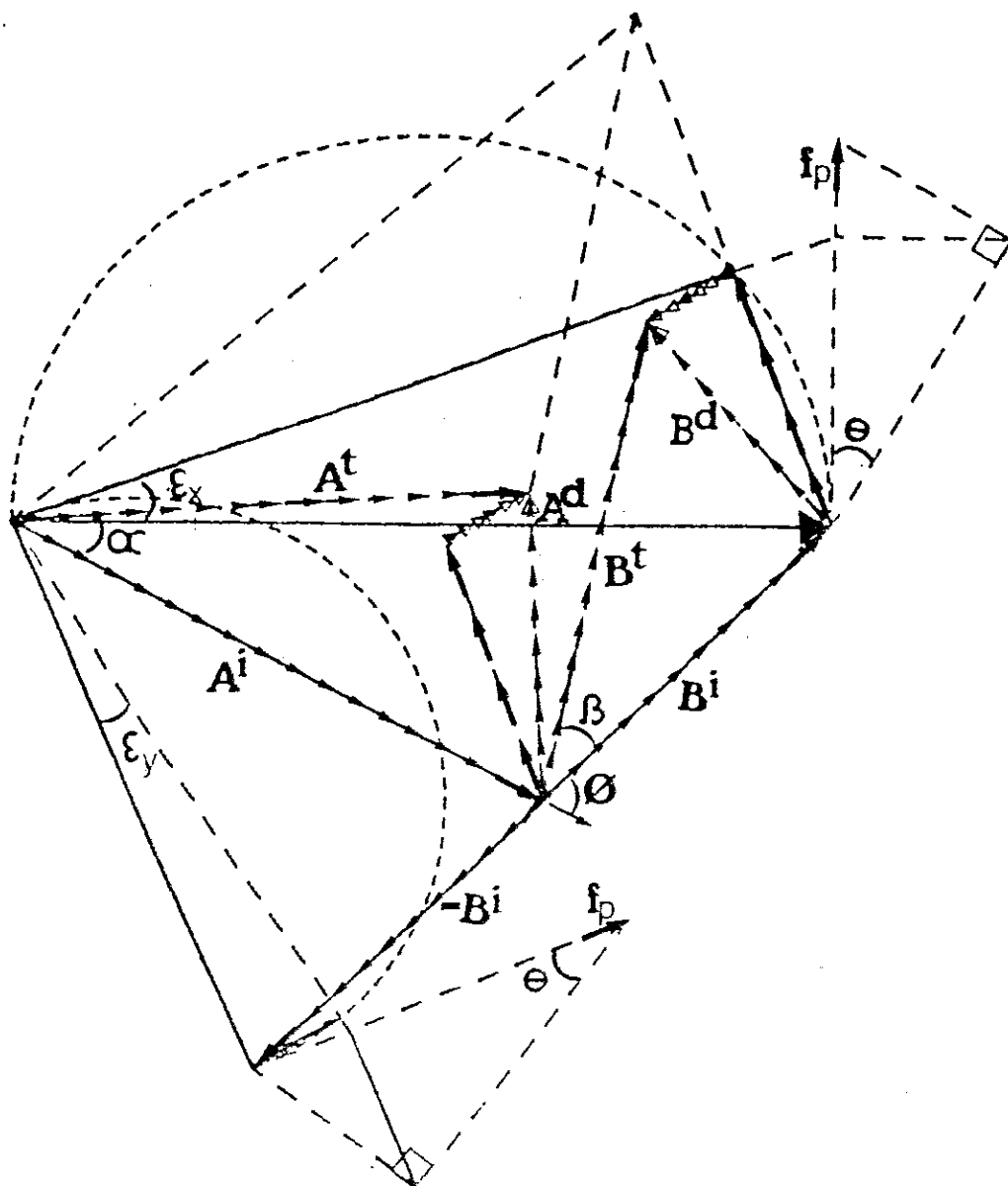


Figura 4.1 - Representação dos ângulos auto-consistentes, das amplitudes das ondas incidentes e espalhadas, do "forcing field" e da contribuição dos dipolos.



Enfatizando o caráter de simplicidade e rigor matemático do formalismo auto-consistente vamos mostrar, agora, através da representação geométrica que a energia é conservada no processo de interação da radiação com a matéria.

#### 4.3 - CONSERVAÇÃO DA ENERGIA

Nos cálculos acima desenvolvidos não foi feita nenhuma consideração sobre a absorção de energia no processo de interação da radiação com a matéria. Espera-se, portanto que seja assegurada a conservação de energia no processo de espalhamento. Com efeito, Keller e Urbanski [33] mostram que a auto-consistência é equivalente à conservação da energia. Isto quer dizer que deve ser válida a relação

$$|A^i|^2 + |B^i|^2 = |A^r|^2 + |B^r|^2 \quad (4.20)$$

Utilizando (3.20) e (4.3), obtemos

$$A^i = e^{i\epsilon_F} (\cos \epsilon_q A^r + i \sin \epsilon_q B^r)$$

e portanto

$$\begin{aligned} |A^i|^2 &= |\cos \epsilon_q A^r + i \sin \epsilon_q B^r|^2 \\ &= (\cos \epsilon_q A^r + i \sin \epsilon_q B^r) \overline{(\cos \epsilon_q A^r + i \sin \epsilon_q B^r)} \end{aligned}$$

onde a " — " significa complexo conjugado.

Consequentemente,

$$\begin{aligned}
 |A^t|^2 &= |A^i|^2 \cos^2 \epsilon_q + i \overline{A^i} B^i \sin \epsilon_q \cos \epsilon_q - \\
 &- i A^i \overline{B^i} \cos \epsilon_q \sin \epsilon_q + |B^i|^2 \sin^2 \epsilon_q
 \end{aligned}
 \tag{4.21}$$

Analogamente, para a onda  $\mathcal{B}$ , encontramos

$$\begin{aligned}
 |B^t|^2 &= |B^i|^2 \cos^2 \epsilon_q + i A^i \overline{B^i} \sin \epsilon_q \cos \epsilon_q - \\
 &- i \overline{A^i} B^i \cos \epsilon_q \sin \epsilon_q + |A^i|^2 \sin^2 \epsilon_q
 \end{aligned}
 \tag{4.22}$$

logo

$$\begin{aligned}
 |A^t|^2 + |B^t|^2 &= (|A^i|^2 + |B^i|^2) \cos^2 \epsilon_q + (|A^i|^2 + |B^i|^2) \sin^2 \epsilon_q \\
 &= (|A^i|^2 + |B^i|^2) (\cos^2 \epsilon_q + \sin^2 \epsilon_q) \\
 &= |A^i|^2 + |B^i|^2
 \end{aligned}$$

Este resultado é válido para qualquer tipo de polarização e para qualquer plano dentro ou na superfície do cristal, uma vez que utilizamos as expressões da polarização  $\pi$  que pode se reduzir à polarização  $\sigma$  pelas condições explicitadas no capítulo 3, isto é,  $\cos 2\theta = 1$  e  $\sin 2\theta = 0$  e não foi feita nenhuma consideração sobre a posição do plano. No capítulo 6 estudaremos o espalhamento auto-consistente com absorção.

#### 4.4 - SEMELHANÇA GEOMÉTRICA DE CAMPO

No processo de espalhamento a formação da onda refletida desde os planos mais interiores, a depender da espessura do cristal, poderá conduzir ao que chamamos de reflexão perfeita, quando a mesma atinge amplitude da ordem da amplitude da onda incidente. Duas considerações importantes podem ser feitas a partir deste fenômeno: a primeira trata-se da conhecida "camada de extinção", entendida aqui como a espessura necessária para que a amplitude da onda refletida atinja valores da ordem da amplitude da onda incidente. Neste caso dispensa-se a importância dada à condição de cristal infinito. A segunda consideração é feita a partir deste mesmo fenômeno no que concerne ao que chamamos processo de saturação da onda refletida quando o valor absoluto da sua amplitude permanece, praticamente, inalterada quando, no processo de espalhamento, são envolvidos mais planos cristalinos ou celas unitárias. Resultados numéricos com a precisão dos computadores permitem definir a regra de "Semelhança Geométrica de Campo", que estabelece que a refletividade para dois planos vizinhos de um cristal perfeito e suficientemente grande, são iguais, isto é,

$$\mathfrak{R}_k = \mathfrak{R}_j$$

Sejam dois planos vizinhos, designados pelos índices  $j$  e  $k=j+1$

De acordo com as equações (3.37) e (3.38), temos

$$A_k^i = a_1 \cdot A_j^i + a_2 \cdot B_j^t$$

(4.23)

$$B_k^t = a_3 \cdot A_j^i + a_4 \cdot B_j^t$$

Dividindo a segunda equação pela primeira e utilizando a definição para a refletividade dada em (3.24), para qualquer índice  $k, j$ , temos

$$\mathcal{R}_k = \frac{a_3 + a_4 \mathcal{R}_j}{a_1 + a_2 \mathcal{R}_j} \quad (4.24)$$

Utilizando a condição de semelhança geométrica de campo, isto é

$$\mathcal{R}_k = \mathcal{R}_j = \mathcal{R}$$

a equação (4.24) torna-se a equação quadrática

$$\mathcal{R}^2 - \frac{(a_1 - a_4)}{-a_2} \mathcal{R} + \frac{a_3}{-a_2} = 0 \quad (4.25)$$

cujas soluções são

$$\mathcal{R}_{\pm} = i \cdot \left( \sqrt{a_3/a_2} \right) \cdot \left\{ Y \pm \sqrt{Y^2 - 1} \right\}$$

ou

$$\mathcal{R}_{\pm} = e^{i\delta} \cdot \left[ Y \pm \sqrt{Y^2 - 1} \right] \quad (4.26)$$

onde

$$Y = \frac{[a_4 - a_1]}{2i \sqrt{a_3 \cdot a_2}} \quad (4.27)$$

De acordo com (3.38) e (4.3) podemos escrever (4.27) como

$$Y = \frac{\text{sen}(\delta - \epsilon_p)}{\cos(\epsilon_q) \cdot |\text{tg}(\epsilon_p)|}$$

portanto,  $Y \in \mathbb{R}$ .

Se  $Y^2 - 1 \leq 0$ ,  $\mathcal{R}$  pode ser dado como

$$\mathcal{R} = e^{i\delta} \cdot \left[ Y \pm i\sqrt{1 - Y^2} \right]$$

de onde obtemos

$$R = |\mathcal{R}| = \left| Y \pm i\sqrt{1 - Y^2} \right| = 1$$

Se  $Y^2 - 1 > 0$  consideramos, apenas, as soluções de significado físico, isto é:

$$\mathcal{R}_+ = e^{i\delta} \cdot \left[ Y + \sqrt{Y^2 - 1} \right] \quad \text{e} \quad Y < -1$$

$$\mathcal{R}_- = e^{i\delta} \cdot \left[ Y - \sqrt{Y^2 - 1} \right] \quad \text{e} \quad Y > 1$$

Nestes casos observamos que

$$|\mathcal{R}_+| = \left| Y + \sqrt{Y^2 - 1} \right| \quad \text{e} \quad Y < -1$$

$$|\mathcal{R}_-| = \left| Y - \sqrt{Y^2 - 1} \right| \quad \text{e} \quad Y > 1$$

são funções crescente e decrescente, respectivamente, e se aproximam de zero quando  $|Y|$  tende ao infinito.

A figura (4.2) mostra uma das soluções matemáticas da equação (4.26). A outra solução é simétrica com relação ao eixo vertical.

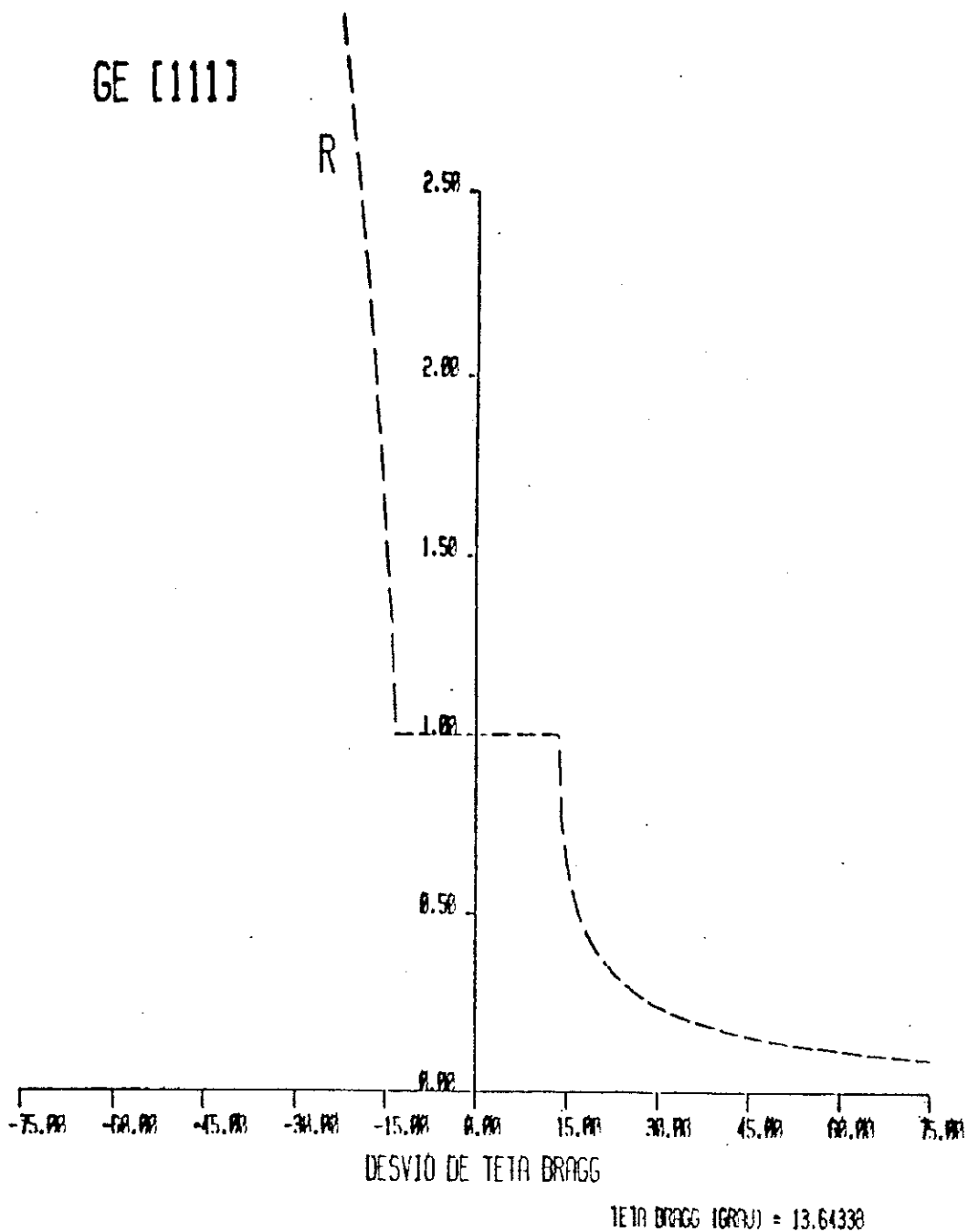


Figura 4.2 - Uma das soluções da equação da Refletividade com aplicação da Regra de Semelhança Geométrica de Campo.

Vamos denominar de Ângulos característicos aos Ângulos  $\theta$  que correspondem aos valores de  $\Upsilon$  que delimitam a largura do platô e, também, o Ângulo central, isto é

Theta Laue  $\theta_L$  para  $\Upsilon = -1$

Theta Bragg  $\theta_B$  para  $\Upsilon = 0$

Theta Ewald  $\theta_E$  para  $\Upsilon = 1$

Para substâncias cristalinas simples ( ex. Ge, GaAs, etc.)  $\Upsilon$  varia linearmente com o ângulo  $\theta$ , como mostrado na fig. 4.3.

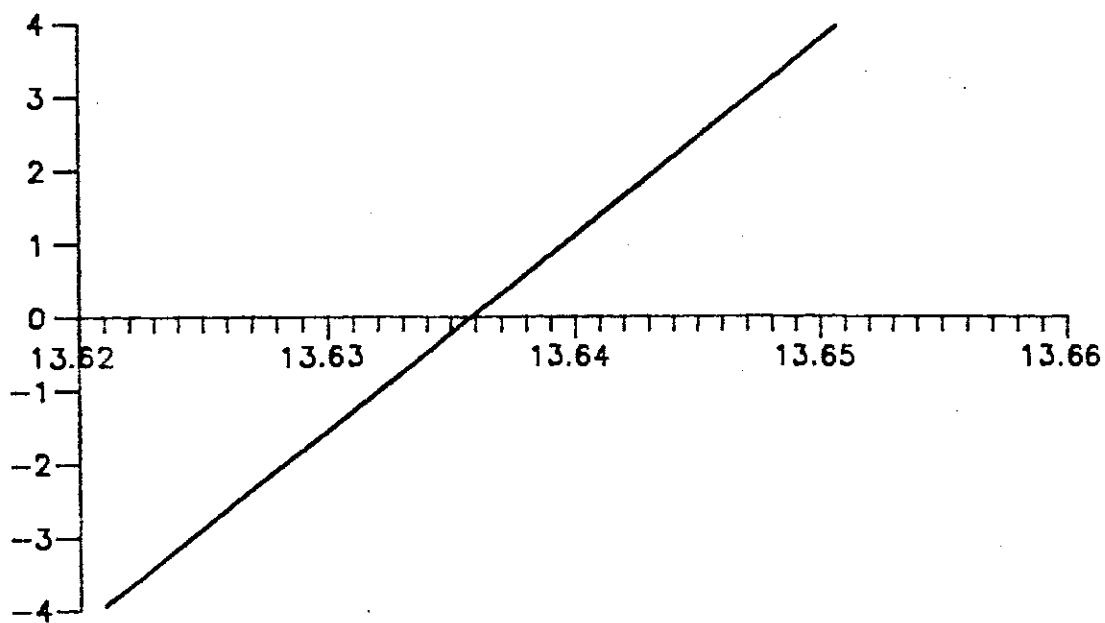


Figura 4.3 - Relação entre as escalas  $\Upsilon$  e  $\theta$ .

A representação da refletividade em função de  $\Upsilon$  (também

chamada na escala  $y$ ) para as teorias de Ewald e Darwin é mostrada por Zachariasen [74]. Vale a pena ressaltar que apesar da semelhança das equações os resultados aqui obtidos não contemplam nenhuma aproximação. O uso da condição de Semelhança Geométrica de Campo equivale, apenas, a utilização de um novo modelo obtido da convergência do modelo de cristal pequeno para cristal infinito. Neste caso o princípio de auto-consistência é preservado a conservação da energia continua satisfeita.

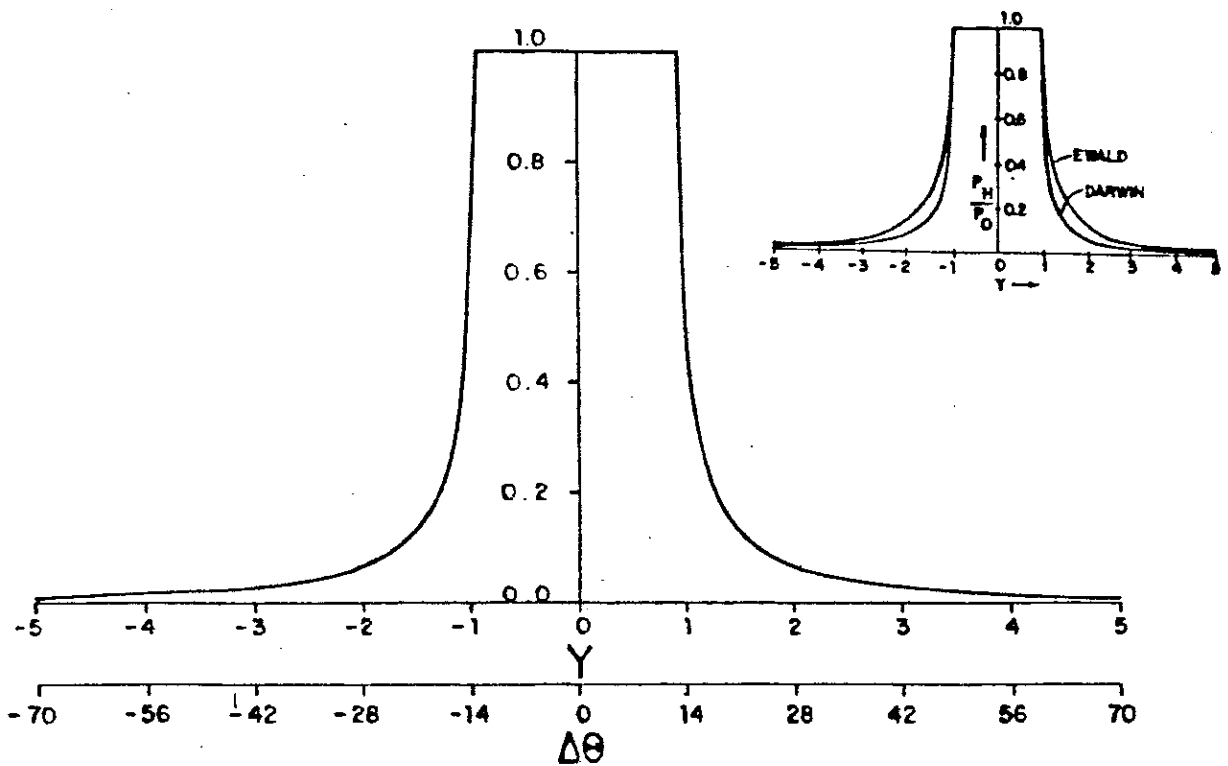


Figura 4.4 - Refletividade versus desvio do ângulo de Bragg (seg. arco) e de  $Y$ . Cristal de Ge [111] infinitamente espesso. Encarte com resultados apresentados por Zachariasen [74].



## 4.5 - LEI DE BRAGG AUTO-CONSISTENTE

Utilizando as definições em (3.24) e as equações (3.30) para o plano k obtemos

$$\mathfrak{Z}_{Ak} \cdot \mathfrak{Z}_{Bk} = a b e^{i(\alpha_k + \beta_k)} \quad (4.28)$$

Por outro lado, com (3.24) para os planos k e j e com as equações (3.33) e (3.34)

$$\mathfrak{Z}_{Ak} \cdot \mathfrak{Z}_{Bk} = \mathfrak{R}_{Aj}^{-1} \cdot \mathfrak{R}_{Ak} e^{i2\delta} \quad (4.29)$$

Pela regra da "Semelhança Geométrica de Campo"  $\mathfrak{R}_{Aj} = \mathfrak{R}_{Ak}$ , portanto (4.29) pode ser escrita como

$$\mathfrak{Z}_{Ak} \cdot \mathfrak{Z}_{Aj} = e^{i2\delta} \quad (4.30)$$

comparando (4.28) com (4.30) obtemos para o plano k

$$a b = 1 \quad (4.31)$$

$$2\delta = (\alpha + \beta) + 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z}, \quad (4.32)$$

de onde omitimos o índice k para simplificar a notação.

A partir de (4.32), considerando que

$$\delta = K d \sin \theta, \quad \text{com } K = 2\pi/\lambda,$$

obtemos

$$2d \sin \theta = n \lambda \left[ \frac{\alpha + \beta}{2\pi n} + 1 \right] \quad (4.33)$$

que é a "Lei de Bragg Auto-consistente". Onde  $n$  é a ordem de reflexão,  $d$  é a distância interplanar,  $\alpha$  e  $\beta$  são os saltos em fase sofridos pelas ondas incidentes em cada plano dipolo devido às contribuições auto-consistente dos dipolos.

## CAPITULO 5 - CONTRIBUIÇÕES AO FORMALISMO AUTO-CONSISTENTE

### 5.1 - FATOR DE ESTRUTURA AUTO-CONSISTENTE

#### 5.1.1 - INTRODUÇÃO

A determinação de estruturas cristalinas tem sido, desde a descoberta da difração de raios-x, a principal aplicação da Teoria Cinemática e o Fator de Estrutura traduz a relação entre a intensidade da radiação espalhada e a estrutura da substância espalhadora expressa através da função densidade de cargas.

A utilização da difração de raios-x para determinar estruturas químicas foi iniciada por Bragg [2] quando em 1912, apresentou a estrutura de quatro "alkali halides". Desde então milhares de substâncias tiveram suas estruturas determinadas por técnicas de difração de raios-x, desde substâncias de estruturas simples como os metais, até algumas de estruturas mais complexas como os compostos orgânicos, de DNA por exemplo.

Uma substância tem a sua estrutura determinada quando são conhecidos as dimensões e o conteúdo da cela unitária. É comum representá-la por uma rede cristalina de pontos periodicamente arranjados nas três direções associada a um conjunto de centros espalhadores como elétrons, átomos ou moléculas, chamado de motivo. As pesquisas sobre esses arranjos têm levado à conclusão sobre a existência de 7 sistemas cristalinos, 14 tipos de redes, chamadas redes de Bravais, 32 grupos pontuais ou simetrias e 230 grupos espaciais. Os conceitos de simetria e

periodicidade do cristal tem tido um papel central na Teoria Cinemática da Difração de Raios-X e a relação entre a estrutura cristalina e as propriedades físicas dos cristais constitui um dos principais objetos de estudo da Física do Estado Sólido. Um outro ponto correlacionado que adquiriu grande impulso foi o estudo de defeitos em cristais, uma vez que suas propriedades físicas são modificadas sensivelmente se de alguma forma a sua estrutura for perturbada.

Inicialmente a determinação de estruturas cristalinas encontrou dificuldades em função, principalmente, do desconhecimento da fase, conhecido na cristalografia como Lei de Friedel, a qual estabelece que duas substâncias centrosimétricas podem apresentar o mesmo quadro de difração. Desta maneira a determinação de estrutura exige, além de um aparato matemático especial, técnicas experimentais sofisticadas.

Métodos diretos para a determinação de estruturas químicas contribuíram para a outorga do Prêmio Nobel de 1985 a J. Karle e H. Hauptman. De um modo geral os métodos existentes são estatísticos e necessitam de muitas reflexões cristalográficas e do conhecimento dos seus correspondente fatores de estruturas para uma determinação apenas parcial da estrutura. Outras dificuldades, entretanto, ainda persistem em função, por exemplo, da sensibilidade que a intensidade do pico de difração apresenta com as naturais distorções da rede cristalina. Estas dificuldades, entretanto, podem ser atenuadas se considerarmos, ao invés da altura do pico, a sua intensidade integrada, por ser a mesma menos sensível à presença de tais distorções. Um

ponto importante que merece ser considerado diz respeito a obtenção de cristais sintéticos com alto grau de perfeição. Constatou-se que a intensidade observada, nestes casos, era proporcional à primeira potência do módulo do fator de estrutura ao contrário do até então conhecido para os cristais naturais onde a intensidade é proporcional à sua segunda potência. Este fato despertou a atenção de Zachariasen quando do estudo de alguns cristais perfeitos como por exemplo, quartzo, o que o levou a se interessar pela teoria Dinâmica de Ewald. Esta teoria apesar de bastante elegante foi inicialmente esquecida por dois motivos principais: o primeiro deles, por que não conseguia, àquela época, explicar os resultados experimentais observados e o segundo por que a Teoria Cinemática era suficientemente eficaz para interpretar os resultados obtidos nos experimentos de difração. Com a necessidade da indústria eletrônica em obter cristais de substâncias semicondutoras cada vez mais perfeitos foi, então, renovado o interesse pela Teoria Dinâmica, uma vez que a Teoria Cinemática não era suficiente para explicar os resultados obtidos nos experimentos com cristais perfeitos. A teoria Dinâmica, como inicialmente proposta por Ewald não era contemplada com o conceito de Fator de Estrutura e a determinação de estruturas químicas, em princípio, dificilmente poderia ser feita por intermédio dela. Apesar do rigor com que a teoria de Ewald foi desenvolvida este fato tem sido considerado um sério inconveniente para a sua utilização sistemática.

Na versão proposta por von Laue, o conceito de fator de estrutura é introduzido nas mesma bases cinemática, apesar das teorias cinemática e dinâmica utilizarem diferentes formalismos matemático: integral da transformada de Fourier e diferencial das equações de Maxwell. Este fato cria um problema, pelo menos, de ordem conceitual, uma vez que a transformada de Fourier é uma operação linear enquanto o espalhamento dinâmico é não linear. Além disso a idéia de auto-consistência, ponto forte da teoria de Ewald, não é preservada, trazendo assim prejuízo considerável para o formalismo.

Algumas tentativas para a determinação do fator de estrutura na teoria dinâmica têm sido feita usando-se a noção, proposta por Ewald, de "Pendellösung Fringes" [75], [76], [77].

Os avanços da tecnologia moderna de crescimento de cristais e as necessidades crescentes da indústria eletrônica têm exigido como lembrado por W.J. Bartels [54] uma nova teoria dinâmica para estudar o caso Bragg. Enquanto as teorias Cinemática e Dinâmica são disjuntas e se aplicam separadamente para cristais pequenos ou com defeitos e para cristais grandes e perfeitos, o formalismo auto-consistente, por outro lado, permite o estudo nas duas situações expostas, para cristais pequenos e grandes mostrando, inclusive, a passagem de forma contínua de uma situação para a outra. O formalismo auto-consistente desenvolvido, inicialmente para cristais perfeitos pode, sem grandes dificuldades se aplicar ao estudo de defeitos se, de alguma forma o conteúdo de defeitos puder ser representado por um parâmetro de defeitos como o fator de

Debye-Waller, defeitos estáticos, etc. Desta maneira podemos mostrar o comportamento do perfil de difração em função desses parâmetros de imperfeições. Sabe-se que o fator de estrutura, como determinado pelas teorias convencionais não se aplica a estruturas parcialmente periódicas ou periódica em uma direção apenas como, por exemplo, multicamadas, super-redes, etc. O conceito de fator de estrutura elaborado para substâncias de estruturas periódicas perfeitas precisa, portanto, ser generalizado para tomar em conta as estruturas sintéticas, como por exemplo as multicamadas, super-redes, redes Fibonacci, estruturas quasi-periódicas e redes incomensuráveis. Além dessas substâncias com modelos de estruturas estáticas outros tipos de distorções introduzidos na rede, como por exemplo, através de ondas elásticas, campos de pressão, campos eletromagnéticos variáveis, etc. exigem um conceito mais geral para o fator de estrutura. O formalismo auto-consistente tem se mostrado uma ferramenta apropriada para tratar estes tipos de estruturas planares. O Fator de Estrutura é representado, na teoria cinemática, por um número complexo, o qual relaciona duas ondas apenas, enquanto que, no espalhamento dinâmico, cada plano está relacionado a, no mínimo, quatro ondas, duas incidentes e duas espalhadas. Desta forma o mesmo não pode traduzir, claramente, a relação entre as quatro ondas citadas. Logo são necessário, pelo menos, dois números complexos para representá-la. Por outro lado, no formalismo auto-consistente para dois feixes podemos determinar o fator de estrutura para substâncias periódicas ou parcialmente periódicas de uma única

maneira através de uma matriz  $2 \times 2$ . Esta matriz nos dá, portanto, dois números complexos (os outros dois são complexos conjugados) e é suficiente para relacionar as quatro ondas envolvidas no processo de espalhamento. A partir dessa matriz podemos determinar as larguras dos picos de difração, para um determinado plano cristalográfico, para as duas situações onde o conteúdo da cela unitária está ou não distribuído sobre todo o seu volume. A razão entre estas larguras nos dá o fator de estrutura para o correspondente plano cristalográfico.

Uma contribuição importante deste trabalho é, portanto, a introdução, no formalismo auto-consistente do conceito de "Fator de Estrutura" para o espalhamento dinâmico. Para isso vamos redefinir a unidade de espalhamento auto-consistente, denominando-a de Unidade Primitiva e introduzir o conceito de Unidade Não Primitiva de espalhamento como uma generalização do conceito de Unidade Primitiva.

### 5.1.2 - UNIDADE PRIMITIVA DE ESPALHAMENTO AUTO-CONSISTENTE

No capítulo 3 estudamos o espalhamento de duas ondas eletromagnéticas planas incidindo simetricamente sobre um plano de dipolos. A formação de duas ondas planas simétricas, com os vetores de onda paralelos aos vetores de onda das ondas incidentes, permite associar ao plano de cargas um elemento quaternário formado pelas quatro ondas envolvidas no processo de espalhamento. As ondas incidentes e espalhadas são chamadas respectivamente, mesocampo incidente e mesocampo espalhado. A



onda produzida pelos dipolos é denominada de "epicampo".

Vamos, agora, reescrever a matriz  $M_k$  (3.29) de forma tal que possamos definir a Unidade Primitiva de espalhamento auto-consistente, como um plano de dipolos associado à vizinha região do espaço em ambos os lados representada através de uma conveniente mudança de fase dada, respectivamente, por  $\delta a$  e  $\delta d$  :

$$M_k = \begin{bmatrix} e^{i\delta a} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta a} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} (1/t_k) & -(r_k/t_k) \\ (r_k/t_k) & (t_k^2 - r_k^2)/t_k \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e^{i\delta d} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta d} \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

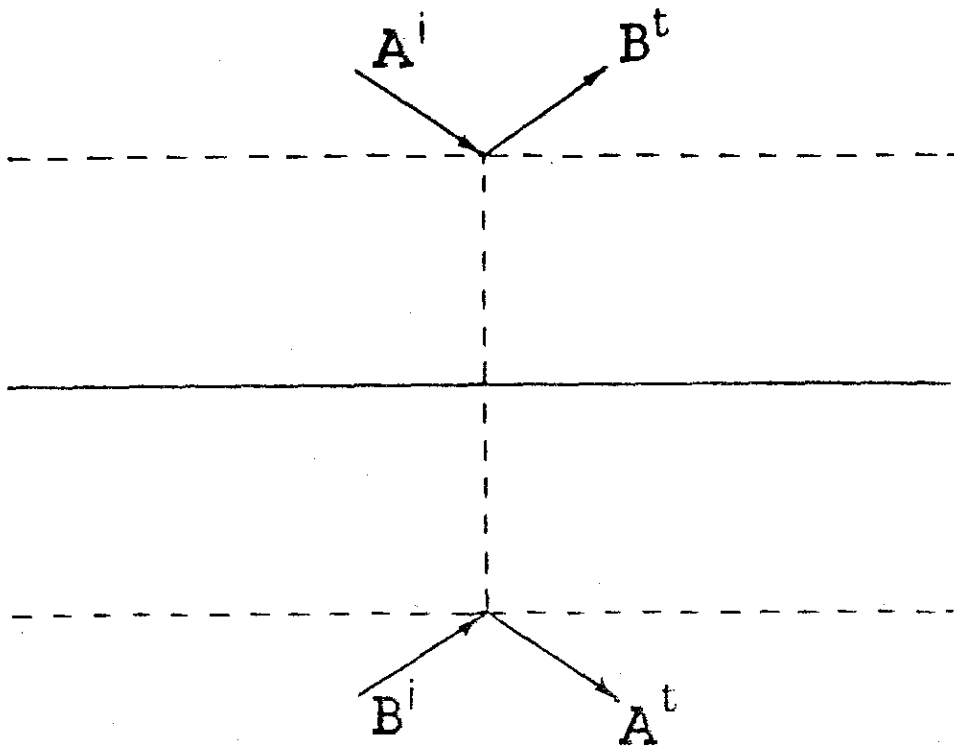


Figura 5.1 - Representação da Unidade Primitiva de espalhamento auto-consistente e os mesocampos associados.

Para uma determinada substância e suas faces não calculadas pela distância média entre dois planos vizinhos. Com a unidade de espalhamento assim definida podemos facilmente trabalhar com qualquer estrutura que possa ser imaginada ou formada pela superposição de planos de dipolos.

As equações (3.37) que relacionam dois planos vizinhos ou, neste caso, duas unidades primitivas serão reescritas, agora, como:

$$A_k^1 = (f_k^2 / f_k^1) e^{i(\delta d + \delta \alpha)} A_j^1 - (r_k / t_k) e^{-i(\delta d - \delta \alpha)} p_j^1 \quad (3.38)$$

$$B_k^1 = (r_k / t_k) e^{i(\delta d - \delta \alpha)} A_j^1 + i(f_k^2 - r_k^2) / f_k^1 e^{-i(\delta d + \delta \alpha)} p_j^1$$

Considerando-se a continuidade do campo na fronteira entre duas unidades primitivas, estabelece-se a seguinte relação entre os campos incidentes e refletidos:

$$A_k^1 = A_k^2 \quad E_k^1 = E_k^2 \quad (3.39)$$

de forma que se pode escrever as equações (3.38) de maneira mais compacta, a saber:

$$\begin{bmatrix} A_k^1 \\ E_k^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P_1 & P_2 \\ R_1 & R_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_j^1 \\ E_j^1 \end{bmatrix} \quad (3.40)$$

onde  $P_1, P_2, R_1, R_2$  são os elementos da matriz  $P$ . Esta matriz representa, matematicamente, a unidade primitiva de

espalhamento auto-consistente e relaciona as duas ondas espalhadas por um plano "matemático"  $A_k^l$  e  $B_k^l$  com as duas ondas incidentes  $A_k^i$  e  $B_k^i$ .

### 5.1.3 - UNIDADE NÃO PRIMITIVA. A MATRIZ ESTRUTURAL

Vamos considerar, agora, que as cargas elétricas no interior da cela unitária estão situadas em planos, com densidade constante, paralelos ao plano  $hkl$  e posicionados nos centros dos núcleos espalhadores que preenchem a cela unitária. Por exemplo, para uma substância de estrutura tipo "zinc blend" nas direções (620), (111) e (001) a cela unitária contém, respectivamente, um, dois e quatro planos atômicos estruturais denominaremos de "sub-planos físicos" os quais formam um plano "físico". A densidade de cargas, posição dos sub-planos espalhadores e distância interplanar são características de cada substância química.

Seja um plano físico com densidade de carga  $\sigma_0$  e seus sub-planos estruturais com densidades  $\sigma_j$ , sendo  $\sigma_0 = \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \dots + \sigma_n$  com  $n$  representando o número de subplanos estruturais do plano físico  $hkl$ .

Definimos como Unidade Não Primitiva de espalhamento auto-consistente ao conjunto de sub-planos estruturais que compõe uma cela unitária associado aos espaços vizinhos cujos limites correspondem aos limites já definidos anteriormente para uma cela sem estrutura.

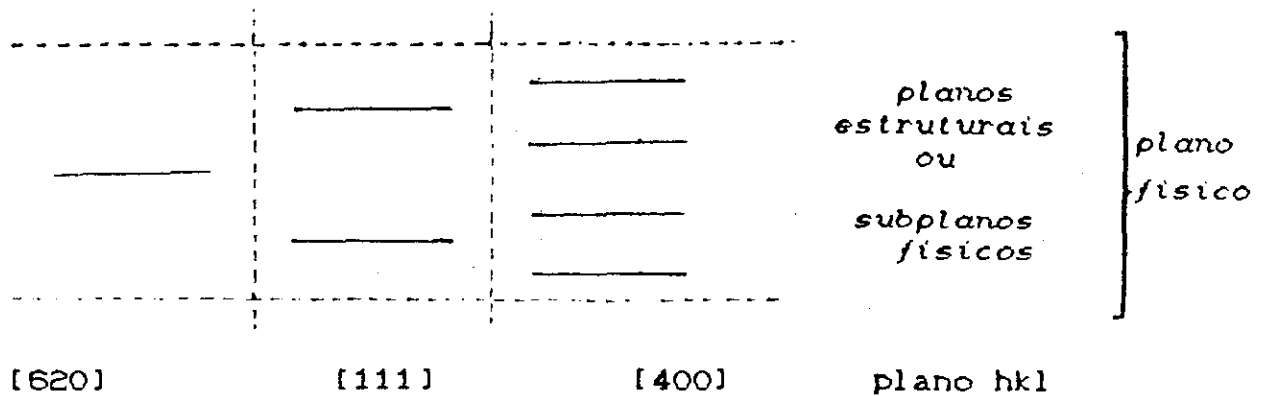


Figura 5.2 - Representação da cela unitária tipo zinc blend com seus subplanos "físicos" ou planos estruturais.

As Unidades Primitivas que compõe uma Unidade Não Primitiva são justapostas de tal forma que o limite superior de uma coincide com o limite inferior da outra. E a equação (5.2) representa, também, a continuidade do campo na superfície fronteira, onde o campo transmitido por uma é igual ao incidente na outra. A figura a seguir representa uma unidade não primitiva

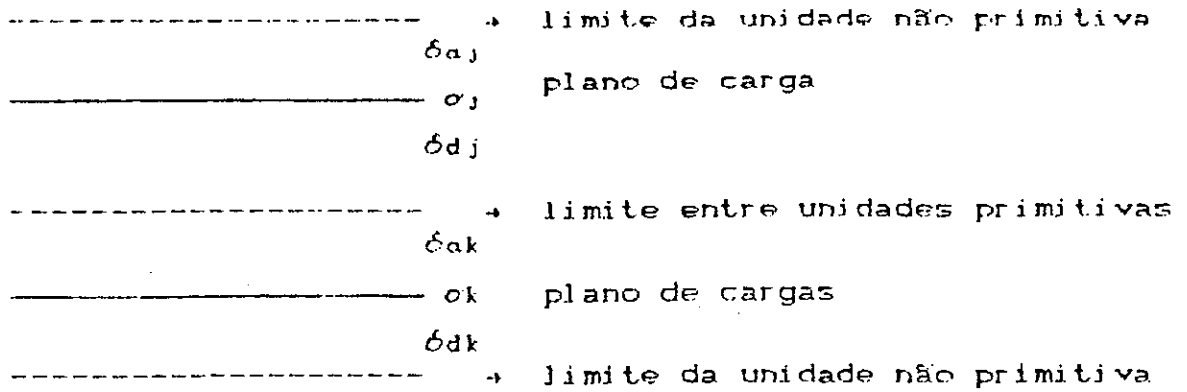


Fig. 5.3 - Representação de uma Unidade Não Primitiva de Espalhamento Auto-consistente formada de duas Unidades Primitivas.

Utilizando a formulação matricial empregada nos capítulos anteriores, podemos representar um sub-plano por um produto de três matrizes. Duas delas representam o espaço vizinho nas duas faces do plano dado pela respectiva variação de fase para os mesocampos e a terceira representa a interação dos espalhadores com as ondas eletromagnéticas.

$$m_j = \begin{bmatrix} e^{i\delta_{jd}} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta_{jd}} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/t_j & -r_j/t_j \\ r_j/t_j & (t_j^2 - r_j^2)/t_j \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} e^{i\delta_{ja}} & 0 \\ 0 & e^{-i\delta_{jd}} \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

A matriz associada aos subplanos estruturais, aqui denominada de "Matriz estrutural" é obtida pelo produto das matrizes dos sub-planos, chamados de "sub-planos físicos":

$$\mathfrak{M} = \prod_{j=1}^n m_j = \begin{bmatrix} f_1 & f_2 \\ f_3 & f_4 \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

onde  $n$  é o número de sub-planos  $hkl$ .

A Unidade não Primitiva de espalhamento auto-consistente é, então representada pela matriz estrutural  $\mathfrak{M}$  e sua função é semelhante àquela da unidade primitiva, a qual, como um elemento quaternário ativo, transforma dois pares de ondas interagentes por mudanças discretas em suas amplitudes e fases. A matriz que representa a unidade não primitiva de espalhamento torna possível determinar a contribuição, no processo de espalhamento, de uma estrutura complexa para os feixes transmitido e refletido, por uma cela unitária.

O espalhamento por um cristal perfeito formado de  $N$  planos físicos pode ser obtido através de uma matriz  $\mathfrak{G}$  determinada por:

$$\mathfrak{G} = (\mathfrak{M})^N \quad (5.7)$$

Vale ressaltar que o determinante das matrizes  $\mathfrak{G}$  e  $\mathfrak{M}$  é, também, unitário. Se o cristal não é perfeito, isto é, se as

matrizes associadas a cada plano é diferente, então a matriz que representa o cristal será obtida pelo produto das matrizes associadas a cada plano, isto é

$$\mathbb{C} = \prod_{i=1}^N \mathbb{M}_i \quad (5.8)$$

onde  $\mathbb{M}_i$  é a matriz de cada plano "físico" e  $N$  é o número de planos moleculares do cristal. Defeitos de não periodicidade na rede, que bem poderiam ser estudados por este formalismo não será, entretanto, tratado neste trabalho. Convém, lembrar, por outro lado, que este formalismo não exige periodicidade na rede como nas demais teorias de espalhamento dinâmico.

Uma cela unitária que não leva em conta a distribuição espacial dos átomos será chamada de "cela matemática", no caso contrário, será chamada de "cela física" em analogia aos planos "matemáticos" e "físicos", anteriormente definidos.

#### 5.1.4 - FATOR DE ESTRUTURA AUTO-CONSISTENTE

Todo o tratamento anteriormente desenvolvido para  $N$  planos pode ser interpretado como sendo para um cristal perfeito limitado onde cada plano representa um plano  $hkl$  do cristal. Inicialmente consideramos um cristal sem estrutura formado apenas por planos de dipolos com densidade de cargas  $\sigma_0$  correspondente a toda a carga da cela unitária de um cristal real. É interessante observar que, neste caso, temos uma situação completamente ideal onde a distribuição de carga

espaçial no interior da rede e em torno do núcleo atômico não é considerada. Os resultados obtidos por KELLER e CAMPOS [22], para esta situação, permitem tirar conclusões interessantes sobre a refletividade, transmitividade conservação de energia e lei de Bragg.

Vamos utilizar procedimento análogo ao aplicado na seção 4.4. Para isso vamos reescrever, para dois planos físicos vizinhos  $j, k$ , as equações dadas por (2.7) na forma matricial, desta vez usando a Matriz Estrutural  $\mathbb{M}$  :

$$\begin{bmatrix} A_k^i \\ B_k^t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 & f_2 \\ f_3 & f_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_j^i \\ B_j^t \end{bmatrix} \quad (5.9)$$

onde  $f_1, f_2, f_3, f_4$  são os elementos da matriz de acoplamento de duas unidades não primitivas (ou físicas). Podemos escrever o sistema

$$A_k^i = f_1 A_j^i + f_2 B_j^t \quad (5.10)$$

$$B_k^t = f_3 A_j^i + f_4 B_j^t$$

Dividindo a segunda equação pela primeira e em seguida o numerador e denominador por  $A_j^i$  obtemos

$$\mathfrak{R}_k = \frac{B_k^t}{A_k^i} = \frac{f_3 A_j^i + f_4 B_j^t}{f_1 A_j^i + f_2 B_j^t} \quad (5.11)$$



Utilizando a condição de Semelhança Geométrica de Campos, isto é,

$$\mathcal{R}_1 = \mathcal{R}_2 + \mathcal{R} \quad (5.12)$$

obtemos a equação quadrática

$$\mathcal{R}^2 - \frac{f_1 - f_2}{f_2} \mathcal{R} + \frac{f_2}{f_2} = 0 \quad (5.13)$$

cujas soluções são dadas por

$$\mathcal{R}_1 = \sqrt{\frac{f_2}{-f_2}} \left\{ Y_1 \pm \sqrt{Y_1 - 1} \right\} \quad (5.14)$$

onde

$$Y_1 = \frac{f_1 - f_2}{f_2} \pm \sqrt{\left(\frac{f_1 - f_2}{f_2}\right)^2 - 4} \quad (5.15)$$

então, os argumentos  $Y_1$  e  $Y_2$  são sempre reais e positivos.

A análise destes resultados é também válida, embora apenas para os casos em que se possa encontrar soluções reais para a Eq. (5.14). Nesta forma podemos também considerar os argumentos característicos, isto é, para alguns valores particulares de  $Y_1$  e  $Y_2$ .

Theta Laue	$\theta_{LF}$	para	$Y_f = -1$	
Theta Bragg	$\theta_{BF}$	para	$Y_f = 0$	(5.16)
Theta Ewald	$\theta_{EF}$	para	$Y_f = 1$	

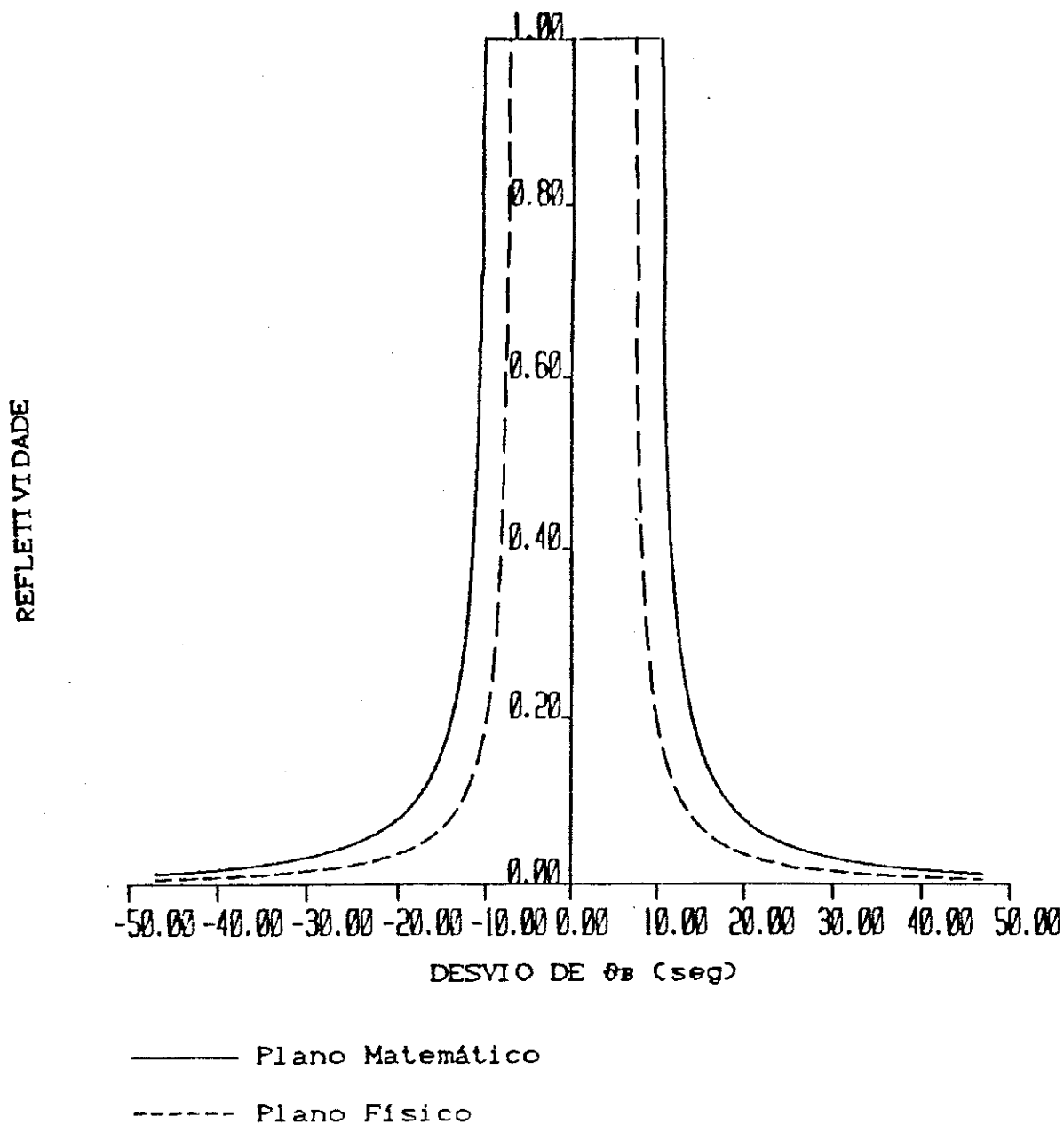


Figura 5.4 - Rocking curve para um cristal de Ge infinitamente espesso, direção [111] com radiação Cu-K $\alpha$ , polarização  $\sigma$ , para os dois tipos de cela unitária, "matemática" e "física".

Vamos definir o Fator de Estrutura Auto-consistente  $FAC(hkl)$ , como a razão entre a largura dos picos "Estrutural" (cela "física") e "Não Estrutural" (cela "matemática"), isto é

$$FAC(hkl) = \frac{\partial(Y_f=1) - \partial(Y_f=-1)}{\partial(Y_m=1) - \partial(Y_m=-1)} = \frac{\partial EF - \partial LF}{\partial EM - \partial LM} \quad (5.17)$$

onde  $Y_m = Y$  calculado na seção 4.4.

Os resultados obtidos para o fator de estrutura (normalizado) são da ordem daqueles obtidos na teoria cinemática para o caso de átomos pontuais que equivale no formalismo auto-consistente, a tomar os subplanos físicos com espessura zero. A distribuição da carga no interior da cela, representada pelo Fator de Estrutura, resulta no estreitamento do pico de uma estrutura ideal. Desta forma o Fator de Estrutura pode ser considerado como um defeito nesta estrutura ideal.

O Fator de Estrutura Auto-consistente, representado pela Matriz Estrutural é, conceitualmente diferente do fator de estrutura como determinado pela Teoria Cinemática. Enquanto naquela teoria o fator de estrutura é obtido pela razão entre as amplitudes complexas dos feixes refletido e incidente, ambos tomados do mesmo lado do plano cristalino, no formalismo auto-consistente ele pode ser definido através da matriz estrutural a qual envolve simultaneamente, todas as quatro ondas interagentes. Os termos da diagonal secundária da matriz estrutural representa, de certa forma, a razão entre as amplitudes acima referida.

A diferença mais importante entre os dois conceitos

resulta, entretanto, da própria definição convencional do fator de estrutura que implica na adição das contribuições de cada plano de dipolos expressa no formalismo linear da Transformada de Fourier. Por outro lado, no formalismo auto-consistente as contribuições não se comportam linearmente em face das múltiplas reflexões dentro da própria cela unitária e entre os planos cristalinos, não podendo, portanto, serem simplesmente adicionadas.

## 5.2 - FATOR ATÔMICO AUTO-CONSISTENTE

Uma outra contribuição importante deste trabalho é a introdução, no formalismo auto-consistente, do conceito de Fator Atômico.

Considerando-se que um átomo não é um centro espalhador puntual, como concebido na teoria geométrica da difração de raios-x, mas ocupa um volume finito, da ordem do comprimento de onda da radiação utilizada, podemos facilmente concluir da existência de interferência entre os raios espalhados por pontos distintos do volume atômico. Obviamente a diferença de fase entre dois desses raios espalhados varia com o ângulo de espalhamento  $\theta$ , conseqüentemente a eficiência de espalhamento para um átomo é uma função, também, do ângulo  $\theta$ . Essa eficiência no caso do espalhamento coerente de raio-x por um átomo com diversos elétrons como centros espalhadores, sem levar em consideração o movimento térmico dos átomos, é expressa, de acordo com a teoria convencional, através do fator

atômico  $f_0$ , definido como a razão entre as amplitudes das radiações espalhadas pelo átomo e por um elétron nas mesmas condições.

Usualmente o átomo, como centro espalhador, é descrito através de uma densidade eletrônica  $\rho(\vec{r})$  sobre a qual são feitas algumas aproximações, uma vez que apenas a densidade eletrônica do hidrogênio é conhecida exatamente. As principais aproximações são devidas a James e Brindley 1931 [70]. São elas:

- 1 - Os átomos são considerados esféricos
- 2 - O espalhamento por um átomo independe do seu estado de ligação química.
- 3 - A contribuição para  $f_0$  de um elétron em um átomo cuja densidade eletrônica não é conhecida pode ser estimada por um processo de interpolação das contribuições calculadas de elétrons similares em outros átomos.
- 4 - A contribuição do elétron independe do estado de ionização do átomo.

Sob essas aproximações o fator de espalhamento atômico é dado pela transformada de Fourier esférica

$$f_0 = \int_0^{\infty} \rho(\vec{r}) \frac{\sin(kr)}{kr} \cdot d(\vec{r}) \quad (5.18)$$

onde  $\rho(\vec{r}) \cdot d\vec{r}$  é o número médio de elétrons em uma casca esférica de raios  $r$  e  $r+dr$ ,  $\rho(\vec{r})$  é a distribuição eletrônica radial e  $k = 4\pi \sin(\theta) / \lambda$ .

A densidade eletrônica é dada por

$$\rho(\vec{r}) = 4\pi r^2 |\psi|^2 \quad (5.19)$$

onde  $\psi$  é a função de onda de Schrödinger que, uma vez conhecida possibilita o cálculo de  $f_0$ .

Os primeiros trabalhos realizados para calcular o fator atômico de alguns elementos remonta a década de trinta : Bragg & West 1928 [78], Debye 1930 [79], James & Brindley 1931 [70], Bewilogua 1931 [80], Pauling & Sherman 1932 [81]. Outros mais recentes introduz novos refinamentos como por ex: Viervoll & Ogrim 1949 [82], Brill 1950 [83], McWeeny 1951 [84], Freeman 1959 [85].

Diversos métodos teóricos têm sido utilizados, para a melhor determinação de  $\rho(\vec{r})$ . Dentre eles podemos citar:

- Uso da função de onda tipo hidrogênio
- Distribuição eletrônica de Thomas-Fermi
- Função de onda de Campo Auto-Consistente (SCF- self consistent field) de Hartree
- Cálculo variacional para orbitais atômicos tipo Slater (átomos leves).
- Funções de Hartree-Fock

Quando uma onda eletromagnética incide sobre um átomo e espalhada pelos diversos elétrons que o constitui. Se o comprimento de onda da radiação é da ordem do diâmetro da secção transversal efetiva do átomo as ondas espalhadas pelos

elétrons em direções diferentes da incidente estarão defasadas, produzindo assim uma diminuição na amplitude com o aumento do ângulo ( $2\theta$ ) de espalhamento.

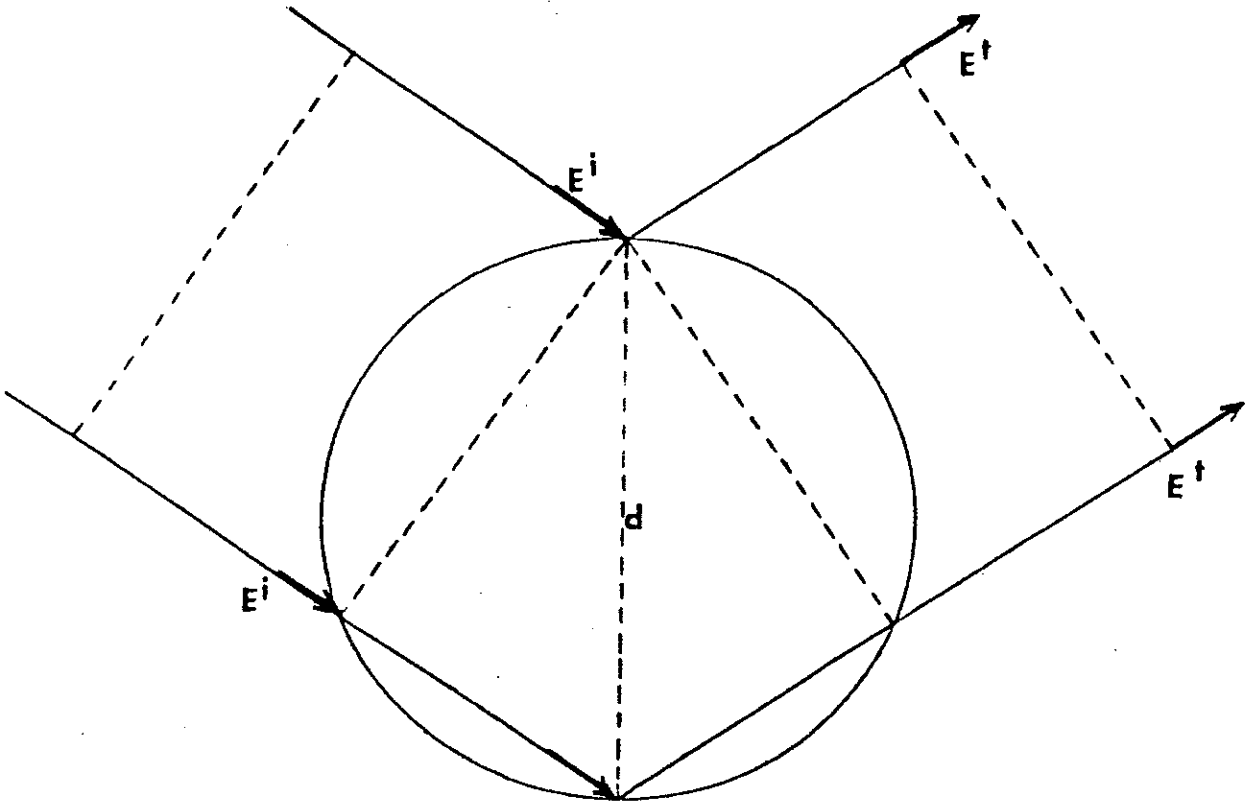


Figura 5.5 - Espalhamento por uma distribuição esférica de carga elétrica (representando um átomo com volume finito).

No tratamento cinemático costuma-se considerar o átomo como :i) sendo puntual (aproximação geométrica) ou; ii) finito com uma distribuição de carga esférica. O fator de espalhamento

atômico ou fator de forma corrige os resultados da aproximação geométrica. A distribuição de cargas, entretanto, nem sempre pode ser considerada esférica como no caso do diamante onde surge uma reflexão proibida não prevista no caso da esfericidade do átomo de carbono.

Considerando-se o formalismo auto-consistente que utiliza como unidade de espalhamento um plano de dipolos com densidade constante e contínua de espessura zero, denominado "plano matemático" nos é permitido imaginar o átomo como formado pela justaposição de planos de elementos infinitesimais de cargas, cada um deles também de espessura zero. Assim o volume ocupado por um plano atômico é preenchido por uma série de planos "matemáticos", chamados aqui de subplanos atômicos, cada um deles com sua correspondente densidade de carga, cuja carga total é igual à carga do plano atômico.

Vamos considerar o átomo como sendo esférico. Neste caso podemos utilizar uma distribuição gaussiana para a densidade de carga cujos parâmetros independam do ângulo de incidência.

A carga total do plano atômico (sub-plano físico com densidade  $\sigma_j$ ) é, então, distribuída pelos sub-planos atômicos, cada um deles com uma densidade de carga  $\sigma_{j1}$ , de forma que

$$\sigma_0 = \sum_j \sigma_j \quad \text{e} \quad \sigma_j = \sum_{j1} \sigma_{j1} \quad (5.20)$$

onde  $\sigma_0$  é a densidade superficial de cargas que corresponde à carga total da cela unitária, já referida no item anterior.



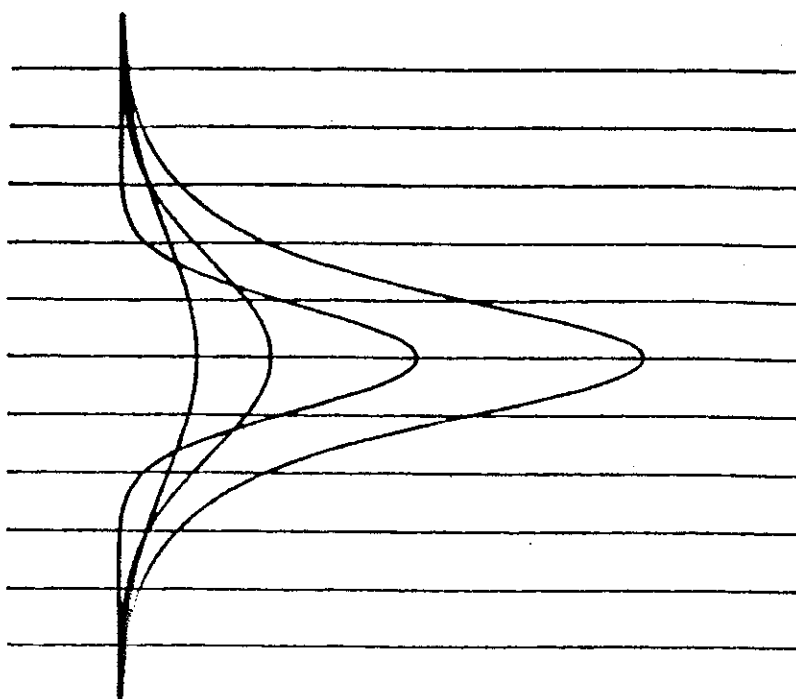


Figura 5.6 - Representação planar discreta de uma distribuição esférica de cargas, modulada por gaussianas.

A distância entre os subplanos atômicos depende, por um lado, do raio da seção de choque efetiva do átomo e, por outro, de quantos subplanos estejamos considerando no modelo.

Procederemos aqui de forma análoga ao caso anterior para a cela estrutural. O sub-plano "físico" que antes era um plano "matemático" de espessura zero representado pela matriz  $M$  sera, agora, considerado um plano estrutural atômico, formado por novos planos "matemáticos" aqui denominados de "subplanos atômicos". O produto das matrizes associadas a cada sub-plano atômico dará a matriz do sub-plano físico e o produto das

matrizes dos sub-planos físicos dará a nova matriz estrutural:

$$\mathfrak{M}_A = \prod_{k=1}^N \mathfrak{M}_k = \prod_{k=1}^N \left( \prod_{j=1}^M \mathfrak{M}_{k,j} \right) \quad (5.21)$$

onde N é o número de de sub-planos físicos da cela estrutural,  
e M é o numero de sub-planos atômicos de cada sub-plano físico.

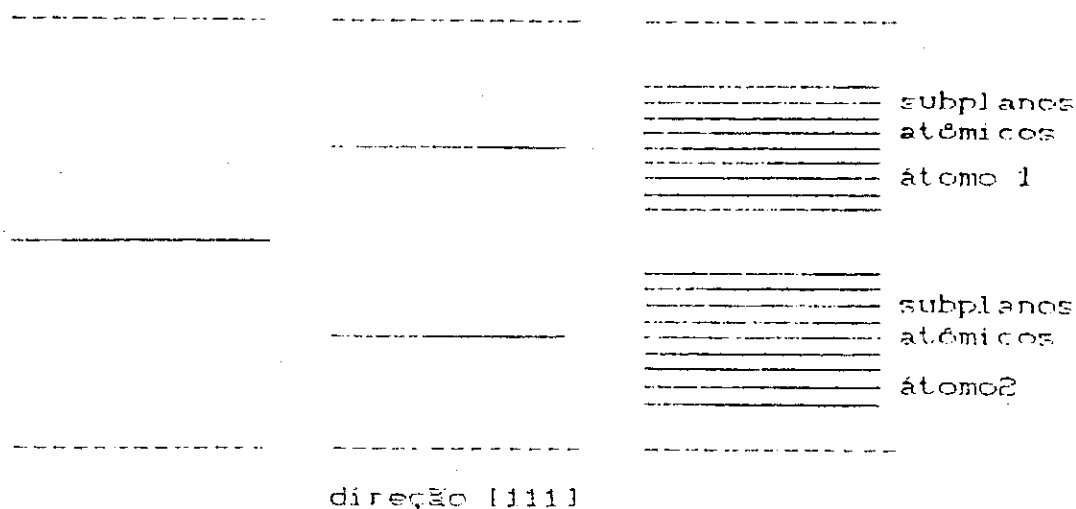


Figura 5.7 - Representação de uma cela unitária nas três situações "matemática", com estruturas "física" e "atômicas".

A cela estrutural atômica será, agora, representada pela matriz

$$\mathfrak{M}_A = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{bmatrix} \quad (5.22)$$

Podemos, então, escrever as equações para dois planos vizinhos dadas por (3.37) na forma matricial

$$\begin{bmatrix} A_k^l \\ B_k^l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \\ A_3 & A_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_J^l \\ B_J^l \end{bmatrix} \quad (5.23)$$

$$A_k^l = A_1 A_J^l + A_2 B_J^l \quad (5.24)$$

$$B_k^l = A_3 A_J^l + A_4 B_J^l$$

Dividindo a segunda equação pela primeira e em seguida o numerador e denominador por  $A_J^l$  obtemos

$$\mathfrak{R}_k = \frac{B_k^l}{A_k^l} = \frac{A_3 A_J^l + A_4 B_J^l}{A_1 A_J^l + A_2 B_J^l} \quad (5.25)$$

Utilizando a condição de Semelhança Geométrica de Campo, isto é

$\mathfrak{R}_j = \mathfrak{R}_{j+1} = \mathfrak{R}$  obtemos a equação quadrática

$$\mathfrak{R}^2 - \frac{A_1 - A_4}{-A_2} \mathfrak{R} + \frac{A_3}{-A_2} = 0 \quad (5.26)$$

cujas soluções são dadas por

$$\mathfrak{R}_{\pm} = \sqrt{\frac{A_3}{-A_2}} \left\{ Y_A \pm \sqrt{Y_A - 1} \right\} \quad (5.27)$$

onde

$$Y_A = \frac{A_4 - A_1}{21 \cdot \sqrt{A_2 A_3}} \quad (5.28)$$

corresponde ao parâmetro  $Y$  para a cela unitária com volume atômico finito indicada pelo índice  $A$ .

A análise é, também, análoga àquela feita para as soluções obtidas para as celas "matemática" e "física". Desta forma podemos também considerar os ângulos característicos, isto é, para alguns valores particulares de  $Y_A$ , como

Theta Laue	$\theta_{LA}$	para	$Y_A = -1$	
Theta Bragg	$\theta_{BA}$	para	$Y_A = 0$	(5.29)
Theta Ewald	$\theta_{EA}$	para	$Y_A = 1$	

Estamos interessados em calcular a contribuição da geometria do átomo, isto é, do volume e forma no processo de espalhamento. Devemos, portanto, isolar a contribuição da estrutura da cela unitária. Para isso vamos considerar uma direção  $hkl$  onde exista, apenas, um plano atômico por cela unitária, por exemplo o plano (620). Desta forma a única estrutura a ser considerada é a estrutura atômica e a matriz estrutural coincide com a matriz "matemática". Tomadas estas precauções vamos definir o Fator de Atômico Auto-consistente  $F_{AA}$ , como a razão entre a largura dos picos "Estrutural Atômico" e "Não Estrutural" (cela "matemática"), isto é

$$F_{AT} = \frac{\theta(Y_A=1) - \theta(Y_A=-1)}{\theta(Y_m=1) - \theta(Y_m=-1)} = \frac{\theta_{EA} - \theta_{LA}}{\theta_{EM} - \theta_{LM}} \quad (5.30)$$

O Fator atômico é apresentado, graficamente, em função de  $\text{sen}\theta/\lambda$ . Mantendo o comprimento de onda  $\lambda$  constante variamos o ângulo  $\theta$ , o que equivale dizer que estamos "olhando" o átomo por diversos ângulos e "observando" a sua forma.

Considerando uma distribuição discreta modulada por uma distribuição gaussiana normalizada com os parâmetros "variança" e altura arbitrários, calculamos as larguras dos platôs "estrutural atômico" e "matemático" em função de  $\text{sen}\theta/\lambda$ .

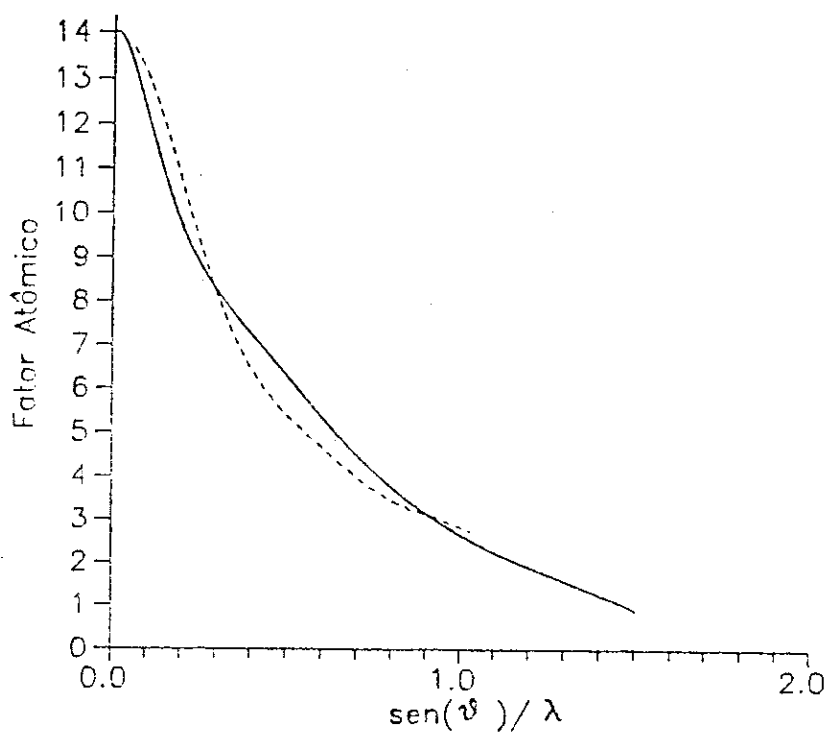


Figura 5.8 - Fator Atômico para o Silício calculado pelo formalismo auto-consistente com uma distribuição gaussiana tentativa comparado com os resultados publicados por L. Pauling & J. Sherman, *Kristallogr.* 81, 1 (1932).

Os resultados obtidos por nós apontam para uma possibilidade concreta da utilização do formalismo auto-consistente no estudo do fator atômico. A dificuldade reside, como em qualquer outro formalismo, na obtenção da função densidade de carga de cada sub-plano atômico.

### 5.3 - FATOR DE POLARIZAÇÃO

Em difração de raios-x são poucos os trabalhos sobre polarização apesar do recente interesse dos astrónomos na investigação sobre a polarização de fontes intensas raios-x [86].

Neste trabalho, definiremos o fator de polarização a partir do formalismo auto-consistente.

Uma vez que coeficientes de transmissão e de reflexão dados pelas equações (3.22) são diferentes para as polarizações  $\pi$  e  $\sigma$ , o produto último no processo de espalhamento por um cristal e, também, diferente. Vale a pena relembrar que a teoria de Ewald tem o eletrón como unidade de espalhamento e por isso a polarização é considerada a nível de eletrón. No formalismo auto-consistente, por outro lado, a unidade de espalhamento é um plano de dipolos de espessura zero e, portanto, a polarização é considerada a nível de plano de dipolos. Neste caso a contribuição das ondas de dipolos é, em geral, diferente para as ondas  $\mathcal{A}$  e  $\mathcal{B}$ , enquanto que na teoria de Ewald este resultado não pode ser previsto.

Vamos definir, agora, o Fator de Polarização utilizando

procedimento análogo aos anteriores para o cálculo da largura do platô, em termos dos ângulos característicos.

Vamos calcular a largura do platô para os dois casos de polarização, isto é, vamos calcular os ângulos característicos para os casos: no primeiro, as ondas incidem sobre o cristal com polarização  $\pi$ ; no segundo, com a polarização  $\sigma$ .

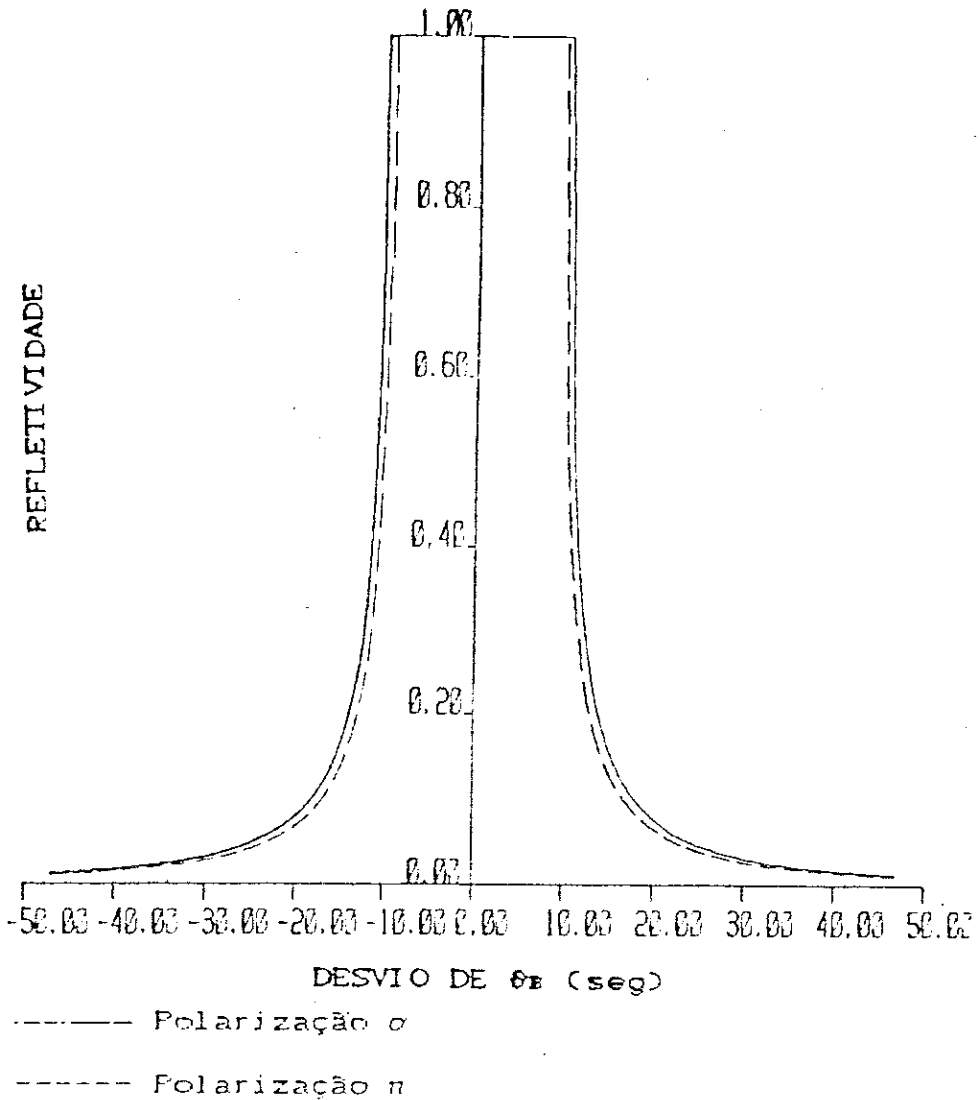


Figura 5.9 - Rocking curve para um cristal de Ge infinitamente espesso, direção [111] com radiação Cu -  $K\alpha_1$  com cela unitária "matemática", para os dois estados de polarização  $\pi$  e  $\sigma$ .

Definimos o Fator de Polarização no formalismo auto-consistente como a razão entre as larguras dos platôs obtidos nas duas situações acima:

$$F_{pol} = \frac{\partial(Y_{\pi}=1) - \partial(Y_{\pi}=-1)}{\partial(Y_{\sigma}=1) - \partial(Y_{\sigma}=-1)} = \frac{\partial R_{\pi} - \partial L_{\pi}}{\partial R_{\sigma} - \partial L_{\sigma}} \quad (5.31)$$

Os resultados obtidos por nós concordam com os obtidos pelo formalismo convencional, isto é, a razão entre as larguras dos platôs é igual a  $\cos(2\theta)$ , com a precisão de quatro casas decimais e concordam entre si até a sétima casa decimal. É importante ressaltar que obtivemos resultados semelhantes para todos os tipos de celas unitárias, "primitiva matemática", "estrutural física" ou "estrutural atômica".

É importante observar que o fato de não fazermos aproximações analíticas em nossos cálculos, e com a parte numérica realizada com a precisão dos computadores, nos permite obter resultados bastante confiáveis.

A título de ilustração vamos mostrar os resultados obtidos para o fator de polarização utilizando o cálculo da largura do platô na reflexão [111] do Ge, para os dois estados de

$$\cos(2\theta) = 0.88848921670$$

$$F_{pol}(M) = IRRM(\pi)/IRRM(\sigma) = 0.88842882270$$

$$F_{pol}(F) = IRRF(\pi)/IRRF(\sigma) = 0.88842881166$$

As tabelas a seguir apresentam os resultados obtidos para os diversos ângulos que possibilitaram os cálculos acima.



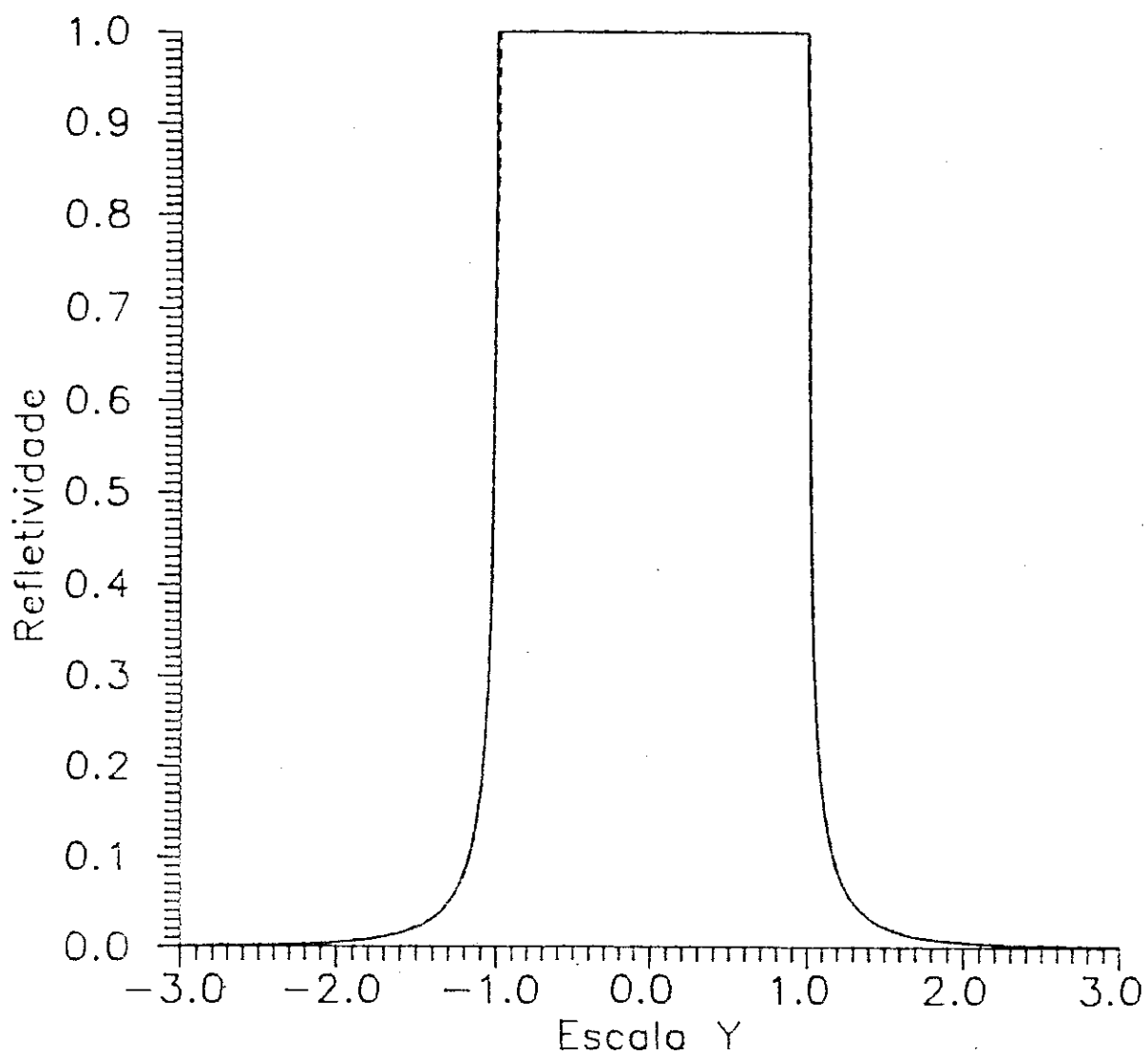


Figura 5.10 - Rocking curve para um cristal de Ge infinitamente espesso, na escala Y. Direção [111], radiação Cu -  $k\alpha$  com cela unitária "física", para os dois estados de polarização  $\pi$  e  $\sigma$ .

TABELA 5.1 - Ângulos característicos na polarização  $\sigma$ 

Polarização $\sigma$ Plano Matemático	Polarização $\sigma$ Plano Físico
$\theta_0 = 13.657993894060^\circ$	$\theta_0 = 13.657993894060^\circ$
$\theta_{LM} = 13.657993894060^\circ$	$\theta_{LF} = 13.659093533723^\circ$
$\theta_{BM} = 13.661762614951^\circ$	$\theta_{BF} = 13.661763354647^\circ$
$\theta_{EM} = 13.665533865391^\circ$	$\theta_{EF} = 13.664436012271^\circ$
$\theta_{LM} - \theta_0 = 0.0000000001'$	$\theta_{LF} - \theta_0 = 3.9587027853'$
$\theta_{BM} - \theta_{LM} = 13.5673952049'$	$\theta_{BF} - \theta_{LF} = 9.6113553259'$
$\theta_{EM} - \theta_{BM} = 13.5765015844'$	$\theta_{EF} - \theta_{BF} = 9.6215674484'$
$\theta_{EM} - \theta_{LM} = TRRM(\sigma)$	$\theta_{EF} - \theta_{LF} = TRRF(\sigma)$
$TRRM(\sigma) = 27.143896789'$	$TRRF(\sigma) = 19.232922774'$
$Fac(\sigma) = TRRF(\sigma)/TRRM(\sigma) = 0.708554226$	

TABELA 5.2 - Ângulos característicos na polarização  $\pi$ 

Polarização $\pi$ Plano Matemático	Polarização $\pi$ Plano Físico
$\theta_0 = 13.657993894060^\circ$	$\theta_0 = 13.657993894060^\circ$
$\theta_{LM} = 13.658414522305^\circ$	$\theta_{LF} = 13.659391486142^\circ$
$\theta_{BM} = 13.661763089919^\circ$	$\theta_{BF} = 13.661763674057^\circ$
$\theta_{EM} = 13.665113250157^\circ$	$\theta_{EF} = 13.664137896010^\circ$
$\theta_{LM} - \theta_0 = 1.5142616798'$	$\theta_{LF} - \theta_0 = 5.0313314931'$
$\theta_{BM} - \theta_{LM} = 12.0548434192'$	$\theta_{BF} - \theta_{LF} = 8.5398764949'$
$\theta_{EM} - \theta_{BM} = 12.0605768552'$	$\theta_{EF} - \theta_{BF} = 6.5472062302'$
$\theta_{EM} - \theta_{LM} = TRRM(\pi)$	$\theta_{EF} - \theta_{LF} = TRRF(\pi)$
$TRRM(\pi) = 24.115420268'$	$TRRF(\pi) = 17.087082725'$
$Fac(\pi) = TRRF(\pi)/TRRM(\pi) = 0.708554217$	

#### 5.4 - FATOR DE ESTRUTURA PARA MULTICAMADAS

Nesta secção nós estendemos o conceito de Fator de Estrutura para Hetero-estruturas, estudando o comportamento dos Perfis de difração para os dois casos de celas unitárias com e sem estrutura, isto é, caso Matemático e caso Físico. Definimos o Fator de Estrutura e Fator de Polarização para multicamadas de forma análoga a das secções 5.1 e 5.3, respectivamente:

$$FAC(hkl) = \frac{\partial(Y_f=1) - \partial(Y_f=-1)}{\partial(Y_m=1) - \partial(Y_m=-1)} = \frac{\partial EF - \partial LF}{\partial EM - \partial LM}$$

$$FPOL = \frac{\partial(Y_\pi=1) - \partial(Y_\pi=-1)}{\partial(Y_\sigma=1) - \partial(Y_\sigma=-1)} = \frac{\partial E\pi - \partial L\pi}{\partial E\sigma - \partial L\sigma}$$

A distribuição da carga elétrica no interior da cela unitária das substâncias componentes da multicamada fornece também, como no caso de substâncias puras, picos de reflexão total mais estreitos que no caso de celas matemáticas. A análise de tais picos é mais complicada e exige um estudo mais sistemático para cada pico. Vale salientar, entretanto, que utilizamos o mesmo formalismo, para estudar substâncias puras e multicamadas de qualquer espessura, o qual toma em conta tanto os aspectos cinemáticos como dinâmicos do espalhamento de raio-x. Isto é possível devido à "Unidade de Espalhamento Auto-consistente" definida na secção 5.1.2, a qual já contém as

condições de contorno associadas. Desta forma as considerações sobre as propriedades periódicas e homogêneas, tão necessárias nos formalismos costumeiramente utilizados, são irrelevantes no Formalismo Auto-consistente.

A figura 5.11 mostra o comportamento dos picos central e laterais para as duas situações com, cela unitária Matemática e Física.

Nas Tabelas 5.3 a 5.7 mostramos os fatores de Estrutura e de Polarização, e as larguras dos picos matemático e físico expressas em termos das diferenças angulares obtidas para os seguintes casos:

Theta Laue  $\theta_L$  para  $\gamma = -1$

Theta Bragg  $\theta_B$  para  $\gamma = 0$

Theta Ewald  $\theta_E$  para  $\gamma = 1$

isto é, a Largura do platô é dada pela diferença entre os ângulos Theta de Ewald e Theta de Laue para todos os casos de polarização e de tipos de celas unitárias matemática e física.

$$L = \theta_E - \theta_L \quad (5.33)$$

A lei de Bragg cinemática para multicamadas pode ser expressa por

$$2 \left( \frac{N_1 \cdot d_1 + N_2 \cdot d_2}{N_1 + N_2} \right) \sin \theta_0 = n \cdot \lambda \quad (5.34)$$

onde  $N_1$ ,  $d_1$ ,  $N_2$ , e  $d_2$  são, respectivamente o número de planos moleculares e distância interplanar das substâncias 1 e 2;

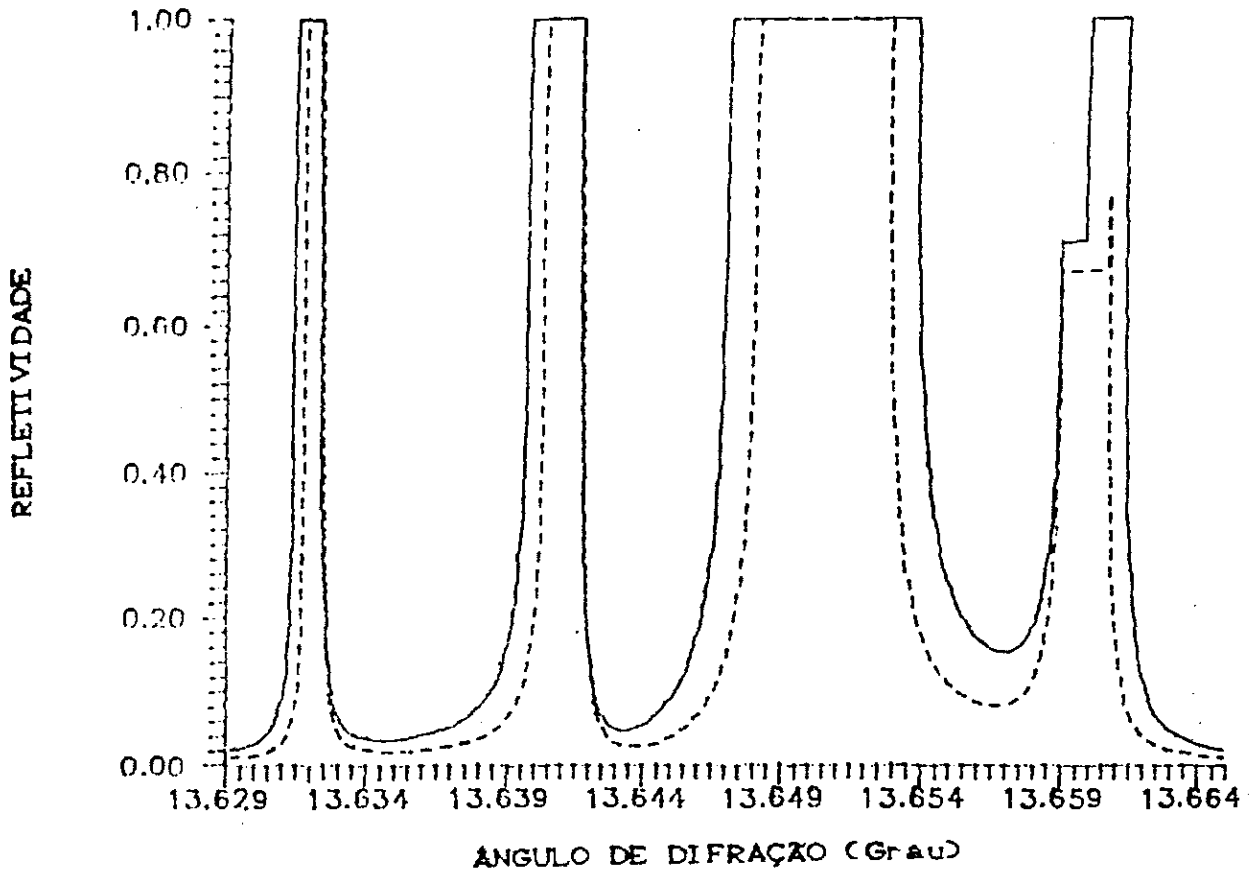


Figura 5.11 - Refletividade versus Ângulo de Difração para um multicamada infinitamente espessa formada de bi-camadas de Ge e GaAs com, respectivamente, 1024 e 512 planos moleculares cada. Polarização  $\alpha$ . Reflexão (111).

TABELA 5.3 - PICO CENTRAL

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs	
$F_{hkl}(111) = 0.7072183181$	$d_{hkl} = 3.2656470826 (\text{\AA})$
$\sigma = 4.6197636023 (\text{el}/\text{\AA}^2)$	$\theta_B = 13.64724095 (\text{grau})$
Polarização $\sigma$	Polarização $\pi$
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)	Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)
$\theta_B - \theta_0 = 0.0$	$\theta_B - \theta_0 = -0.22458071$
$\theta_B - \theta_L = 13.24466543$	$\theta_B - \theta_L = 11.68425463$
$\theta_E - \theta_B = 10.95137474$	$\theta_E - \theta_B = 9.8148111$
$\theta_E - \theta_L = 24.19604016$	$\theta_E - \theta_L = 21.49906574$
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)	Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)
$\theta_B - \theta_0 = -0.54500009$	$\theta_B - \theta_0 = -0.67555808$
$\theta_B - \theta_L = 9.18411335$	$\theta_B - \theta_L = 8.10725987$
$\theta_E - \theta_B = 7.92548303$	$\theta_E - \theta_B = 7.09634285$
$\theta_E - \theta_L = 17.10959637$	$\theta_E - \theta_L = 15.20360272$
Largura do Platô (L) (segundos)	
$L_{\sigma M} = 24.19604016$	$L_{\pi M} = 21.49906574$
$L_{\sigma F} = 17.10959637$	$L_{\pi F} = 15.20360272$
Fator de Estrutura (FE)	Fator de Polarização (FP)
$F_{\sigma} = 0.70712382$	$F_M = 0.88853654$
$F_{\pi} = 0.70717504$	$F_F = 0.8886009$
$F_{hkl} = 0.70721832$	$\text{Cos}(2\theta) = 0.8886614$

TABELA - 5.4 - Primeiro Pico à Esquerda

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs	
$\theta_{\text{Bx}} = 13,63776856$ (grau)	$\theta_{\text{By}} = 13,63706957$ (grau)
$\theta_0 = 13,6370695691$ (grau)	$\Delta\theta = -0,00069899$ (grau)
Polarização $\sigma$	Polarização $\pi$
Plano matematico ( $\text{OM}$ ) (seg.)	Plano matematico ( $\text{PM}$ ) (seg.)
$\theta_{\text{B}} - \theta_{\text{By}} = 0,0$	$\theta_{\text{B}} - \theta_{\text{By}} = 0,5648176$
$\theta_{\text{B}} - \theta_{\text{L}} = 3,65218736$	$\theta_{\text{B}} - \theta_{\text{L}} = 3,32387113$
$\theta_{\text{E}} - \theta_{\text{B}} = 4,66561400$	$\theta_{\text{E}} - \theta_{\text{B}} = 4,16567665$
$\theta_{\text{E}} - \theta_{\text{L}} = 8,31780137$	$\theta_{\text{E}} - \theta_{\text{L}} = 7,48954978$
Plano Fisico ( $\text{OF}$ ) (seg.)	Plano fisico ( $\text{PF}$ ) (seg)
$\theta_{\text{B}} - \theta_0 = 1,3643608$	$\theta_{\text{B}} - \theta_0 = 1,66327938$
$\theta_{\text{B}} - \theta_{\text{L}} = 2,7436538$	$\theta_{\text{B}} - \theta_{\text{L}} = 2,47971921$
$\theta_{\text{E}} - \theta_{\text{B}} = 3,3248214$	$\theta_{\text{E}} - \theta_{\text{B}} = 2,95099201$
$\theta_{\text{E}} - \theta_{\text{L}} = 6,0684752$	$\theta_{\text{E}} - \theta_{\text{L}} = 5,43071122$
Largura do Platô (L) (segundos)	
$L_{\text{OM}} = 8,31780137$	$L_{\text{PM}} = 7,48954978$
$L_{\text{OF}} = 6,0684752$	$L_{\text{PF}} = 5,43071122$
Fator de Estrutura (FE)	Fator de Polarização (FP)
$F_{\sigma} = 0,72957684$	$F_{\pi} = 0,90042422$
$F_{\pi} = 0,72510516$	$F_{\sigma} = 0,8949054$
$F_{\text{hkl}} = 0,70721832$	$\text{Cos}(2\theta) = 0,88882416$

TABELA - 5.5 - Primeiro Fico à Direita

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs	
$\theta_{DB} = 13,65587661$	$\theta_{BY} = 13,65640553$
$\theta_0 = 13,6564055275$	$\Delta\theta = 0,00052891$ (grau)
Polarização $\sigma$	Polarização $\pi$
Plano matematico ( $\sigma_M$ )	Plano matematico ( $\pi_M$ )
$\theta_B - \theta_{BY} = 0,0$	$\theta_B - \theta_{BY} = -0,34056011$
$\theta_B - \theta_L = 2,80344791$	$\theta_B - \theta_L = 2,59759501$
$\theta_E - \theta_B = 4,17998909$	$\theta_E - \theta_B = 3,70319397$
$\theta_E - \theta_L = 6,983437$	$\theta_E - \theta_L = 6,30078898$
Plano Fisico ( $\sigma_F$ )	Plano fisico ( $\pi_F$ )
$\theta_B - \theta_0 = -0,80655047$	$\theta_B - \theta_0 = -0,97632063$
$\theta_B - \theta_L = 2,20451452$	$\theta_B - \theta_L = 2,0102995$
$\theta_E - \theta_B = 2,9237137$	$\theta_E - \theta_B = 2,58296073$
$\theta_E - \theta_L = 5,12822822$	$\theta_E - \theta_L = 4,59326023$
Largura do Platô (L) (segundos)	
$L_{\sigma M} = 6,983437$	$L_{\pi M} = 6,30078898$
$L_{\sigma F} = 5,12822822$	$L_{\pi F} = 4,59326023$
Fator de Estrutura (FE)	Fator de Polarização (FP)
$F_{\sigma} = 0,73434159$	$F_M = 0,90224756$
$F_{\pi} = 0,72899763$	$F_F = 0,89568171$
$F_{hkl} = 0,70721832$	$\cos(2\theta) = 0,88851466$



No Apêndice B apresentaremos resultados para outros picos satélites para a mesma multicamada aqui estudada.

## 5.5 - ABSORÇÃO

### 5.5.1 - INTRODUÇÃO

A absorção da radiação no processo de interação com a matéria foi considerada, primeiramente, por Darwin [3] em seu trabalho pioneiro sobre o espalhamento de raios-x. Ele introduziu a absorção como um fator complexo, exclusivamente, sobre a amplitude do feixe transmitido. Posteriormente Prins [89] modificou o modelo proposto por Darwin introduzindo dois fatores complexos para os feixes refletidos nas duas faces do plano espalhador. Seus resultados estão em bom acordo com os resultados experimentais. Ewald [90], considerado o pai da cristalografia moderna e autor de um dos mais expressivos trabalhos no campo da difração de raios-x, hesitava em aceitar fatores complexos para a absorção, como os acima citados ou através da Polarizabilidade complexa. Esta última idéia foi incorporada por Laue [18] em sua extensão da teoria dinâmica de Ewald e justificada através de considerações quantum-mecânicas por Kohler [91]. Ele assumiu que a função densidade eletrônica é complexa, com as partes real e imaginária periódicas no espaço. Isto equivale a considerar a inclusão de um termo de fricção nas equações de movimento dos elétrons. Ewald [90] considera este fato como um "dubious procedure" para a absorção

causado pela ejeção de fotoeletrons, que se trata de um fenómeno quântico e estatístico. O mesmo ponto de vista estatístico foi expresso por Darwin e Moseley [3], [92]. O primeiro deles, o qual usou o fator complexo, para a absorção, como primeira aproximação considera, no entanto, "a less satisfactory assumption", pensando na possibilidade de "a more complete theory in a future paper".

Dois pontos de interesse emergem com respeito à forma de espalhamento auto-consistente para os raios-x proposta por Keller [31]:

i) O conceito de unidade de espalhamento é extremamente bem comportado para incorporar a absorção considerada como um evento estatístico de acordo com a idéia previamente proposta por Darwin e Ewald,

ii) Incluindo-se a absorção, o conceito de unidade de espalhamento mantém intacta a auto-consistência. Este último fato é ainda mais notável desde quando o próprio Ewald deixa aberto o problema da absorção pela simples razão de que sua teoria era "complicated enough even for the non-absorbing crystal".

Neste tratamento atentamos para conciliar em um quadro comum duas características aparentemente contrárias para a absorção: a origem, como definida pelas leis quânticas do espalhamento, e os efeitos da difração, usualmente tratados pelas leis clássicas da teoria eletromagnética.

É bem conhecido que para os raios-x a principal contribuição para a absorção é devido as oscilações dos

eletrons das camadas mais internas do átomo o qual dependendo do modelo de absorção aceito pode também produzir a emissão de eletrons de alta velocidade. A absorção é, portanto, altamente localizada e representa um evento esporádico afetando eletrons individuais de forma estatística, cujos resultados são definidos pelas leis quânticas do espalhamento. Para ser mais explícito, a absorção não acontece, simultaneamente e a todo instante, em todos os pontos do plano espalhador, como na versão da polarizabilidade complexa ou dos fatores complexos da absorção. Aqui nós admitimos que uma parte dos fótons incidentes na superfície do plano espalhador, numa média estatística sobre o tempo é, simplesmente, desprezada no evento de difração. O número de fótons que corresponde à parte absorvida é subtraído do número total de fótons de modo que eles não participam do processo de espalhamento auto-consistente. Este enunciado resume o efeito da absorção na difração. É comum considerar o campo elétrico como o principal responsável pela absorção. Em nosso caso temos um campo estacionário agindo sobre um conjunto de planos de dipolos. Este campo estacionário é formado por duas ondas incidentes as quais incluem, também em um modo auto-consistente de espalhamento, a contribuição dos dipolos dentro do mesmo plano sobre o qual consideramos a absorção e a difração. O efeito total da difração implica em três casos dependendo da intensidade do campo elétrico: 1) o padrão de ondas "standing" define uma intensidade zero o qual leva ao conhecido efeito chamado de absorção anômala, ou melhor dizendo, absorção

anomalamente baixa, ii) o caso típico definindo a absorção proporcional à primeira potência da intensidade do campo elétrico e iii) campo extremamente intenso o qual requer absorção proporcional à segunda ou potência superior da intensidade do campo elétrico.

Enquanto dentro do mesmo modelo de espalhamento nós podemos utilizar diferentes modelos de absorção nos restringiremos às consequências da absorção no fenômeno da difração. Neste caso temos somente que definir um único fator de redução apropriado para a intensidade do fluxo de fótons, o qual recai, de igual forma, sobre todas as componentes  $x$ ,  $y$  e  $z$  do campo eletromagnético incidente.

O modelo microscópico de absorção é, como esperado, independente do estado de polarização dos campos incidentes. Não existe, portanto, necessidade de usar coeficientes de absorção diferentes para os dois estados de polarização. Analogamente, não será necessário ter coeficientes, também, diferentes para cada uma das ondas interagentes.

Em suma, no formalismo auto-consistente reconsideramos o fenômeno da absorção assumindo como sendo um evento fotoelétrico estatístico de ocorrência microscópica localizada. A partir desta assunção surgem cinco pontos importantes que merecem ser explicitados:

- 1) A absorção toma lugar exclusivamente no sítio do elétron, arranjado como um conjunto de planos paralelos de dipolos;
- 2) Este é um evento localizado com probabilidade de ocorrer, o qual pode ser considerado como proporcional à primeira ou a

potências de ordem superior do campo elétrico estacionário resultante que incide sobre o plano de dipolos;

3) O campo elétrico estacionário é dinamicamente formado por duas ondas eletromagnéticas planas, simultânea e simetricamente incidentes sobre o plano de dipolos, com amplitudes ajustadas auto-consistentemente sobre todo o espaço do cristal sob inclusão da absorção;

4) o fluxo de fótons incidentes é dividido em duas partes distintas e disjuntas; uma, sobre a qual a absorção é levada em conta, permanece com a frequência desconhecida, e considerada irrelevante para o modelo de espalhamento, a outra que toma parte no modelo de espalhamento é determinada pela exata satisfação do princípio de auto-consistência de Ewald. Somente este último, para o caso de não absorção, está apto a garantir a conservação de energia.

5) O efeito da absorção é representado por um perfil de difração da radiação a qual pode incidir com polarização elíptica ou em ambos os estados, separadamente, de polarização  $\pi$  ou  $\alpha$ . Os resultados podem ser, também, obtidos para um modelo de cristal finito ou infinito, isto é, sob as considerações de Semelhança Geométrica de Campo.

### 5.6.2 - O MODELO

Vamos considerar, inicialmente, o modelo de cristal finito, representado por um conjunto de planos paralelos de dipolos, cada um deles submetido a ação de duas ondas

eletromagnéticas planas com polarização  $\alpha$  simetricamente incidentes nas duas faces. Consideramos que uma parte da energia incidente não participa da difração e, portanto, é subtraída da energia total incidente. Podemos escrever:

$$E^i = E^t + E^a \quad (5.34)$$

onde os índices  $i$ ,  $t$  e  $a$  significam, respectivamente, "incidente", "transmitida" e "absorvida".

O campo total auto-consistente que produz as oscilações nos dipolos é dado por

$$E^t = (1/2) [A^i + B^t + A^t + B^i] \quad (5.35)$$

A energia absorvida é proporcional a este campo e pode ser escrita como

$$E^a = |e^{-\mu}| (1/2) [A^i + B^t + A^t + B^i]^2 \quad (5.36)$$

O balanço de energia é, então

$$\begin{aligned} |A^i|^2 + |B^t|^2 &= \\ &= e^{-2\mu} \left[ |A^i|^2 + |B^t|^2 + \frac{p}{1-p} \left( \frac{1}{2} [A^i + B^t + A^t + B^i]^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (5.37)$$

onde  $0 \leq p \leq 1$  representa a probabilidade de absorção do fóton e  $\mu$  é o parâmetro de absorção dado por

$$\mu = \frac{1}{2} \ln \left[ 1 + \frac{p}{1-p} \frac{\left| \left( \frac{1}{2} \right) (A^i + B^i + A^i + B^i) \right|^2}{|A^i|^2 + |B^i|^2} \right] \quad (5.38)$$

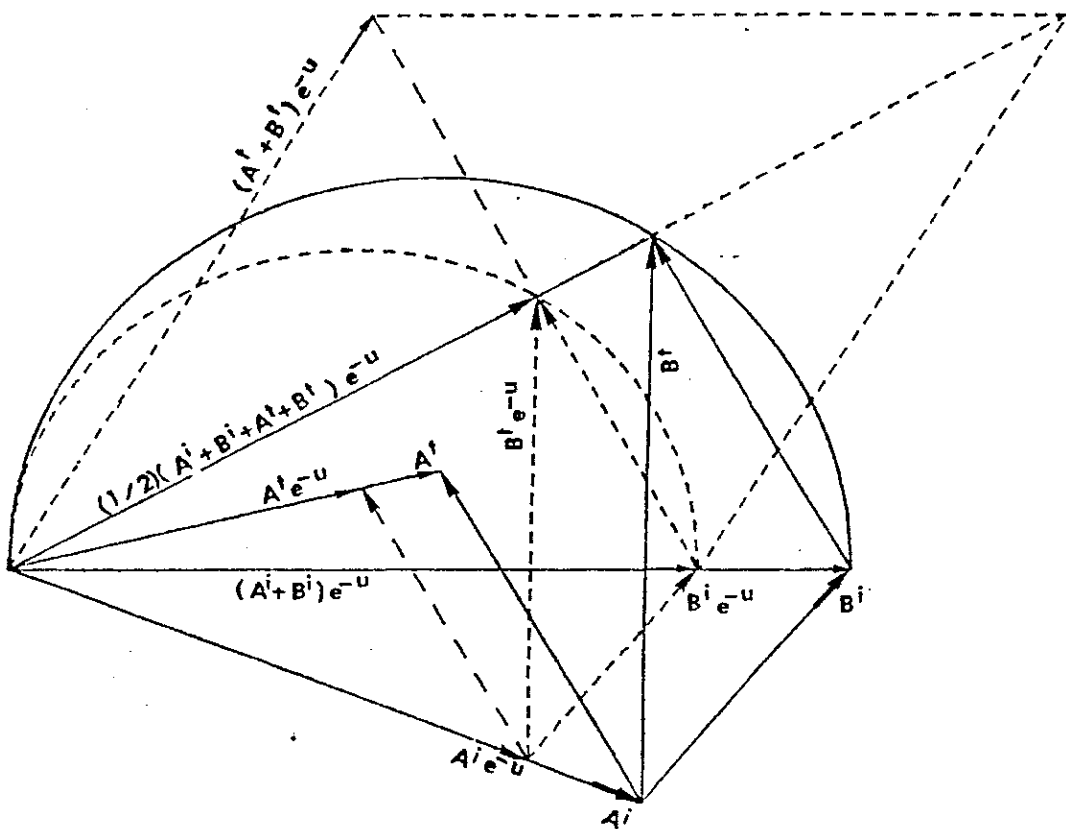


Figura 5.12 - Amplitudes e Fases das ondas envolvidas no processo de espalhamento auto-consistente com absorção.

Os ângulos  $\vartheta_L$  e  $\vartheta_E$ , limites do platô, correspondem a duas situações onde as ondas incidentes estão com seus vetores de polarização, respectivamente, em oposição de fase e em fase, o que equivale a dizer que o campo resultante possui,

respectivamente, amplitude mínima e máxima. Neste modelo fica claro, portanto, que a absorção introduz uma assimetria no pico de difração com absorção mais acentuada na direção de  $\theta x$ .

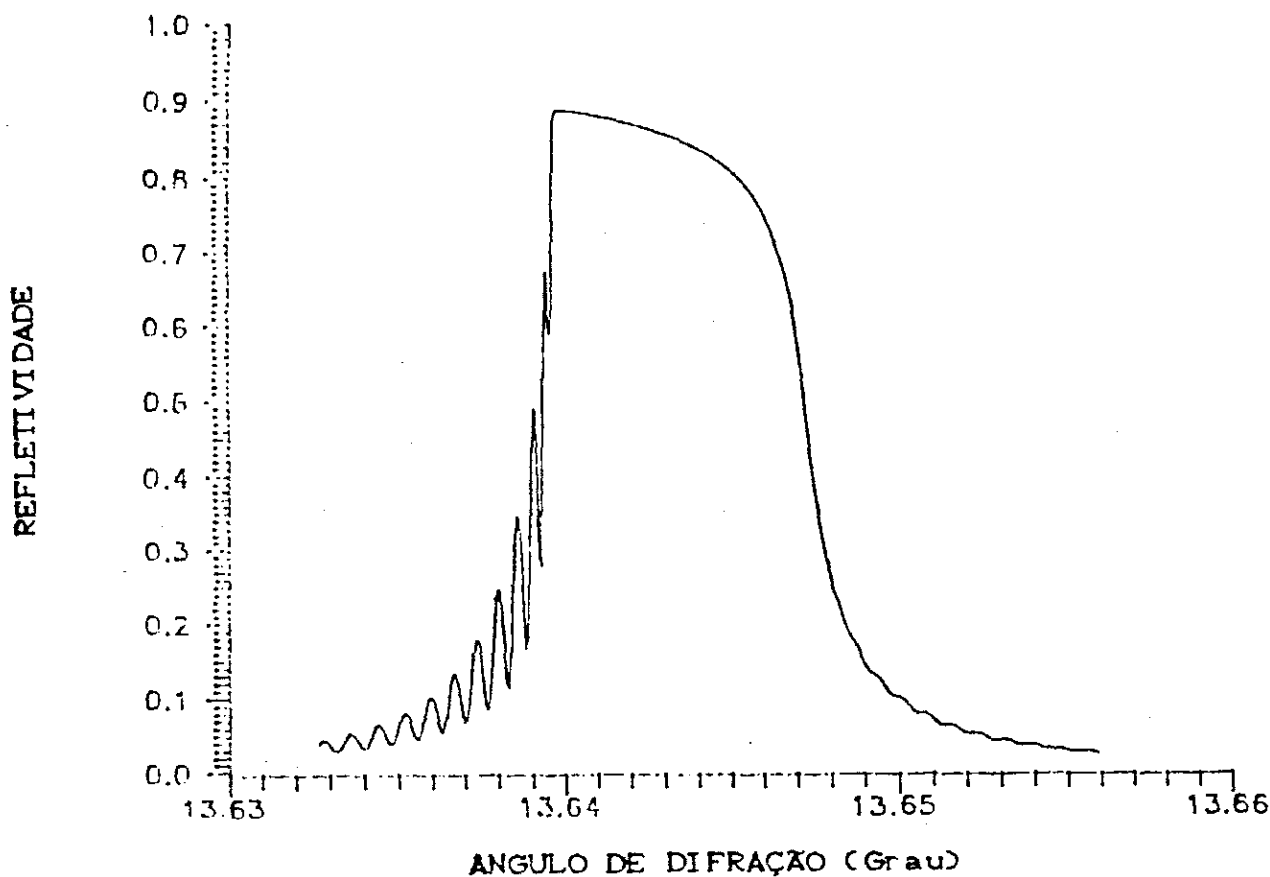


Figura 5.13 - Refletividade versus Ângulo de Difração para um cristal de Ge [111] com 16184 planos moleculares. Polarização  $\sigma$  Plano Matemático. Parâmetro de absorção  $\mu = 0.0001$ . Radiação Cu  $K\alpha_1$ .



Para outros modelos de absorção proporcional a potências superiores com respeito a intensidade do campo incidente podemos, de forma análoga a segunda potência, obter o balanço de energia

$$\begin{aligned}
 & |A^l|^2 + |B^l|^2 = \\
 & = e^{-2\mu} \left[ |A^l|^2 + |B^l|^2 + \frac{p_n}{1-p_n} \frac{\left(\frac{1}{2}\right) (|A^l| + |B^l| + |A^l| + |B^l|)^{2n}}{c (|A^l|^2 + |B^l|^2)^{n-1}} \right] \quad (5.39)
 \end{aligned}$$

onde  $p_n$  é a probabilidade para a absorção proporcional a potência  $n$ -ésima da intensidade do campo. Nestes casos o coeficiente de absorção é dado por

$$\mu = \frac{1}{2} \ln \left[ 1 + \frac{p_n}{1-p_n} \frac{\left(\frac{1}{2}\right) (|A^l| + |B^l| + |A^l| + |B^l|)^{2n}}{c (|A^l|^2 + |B^l|^2)^n} \right] \quad (5.40)$$

No formalismo auto-consistente vale, em qualquer situação, a relação

$$|A^l|^2 + |B^l|^2 = |A^l|^2 + |B^l|^2 \quad (5.41)$$

o que equivale a dizer que quando a absorção é considerada a energia transmitida é reduzida de um fator  $e^{-2\mu}$  sendo, portanto, adicionada de uma parcela equivalente à energia absorvida, preservando-se a idéia de auto-consistência e mantendo-se o balanço de energia. A título de ilustração

mostramos o pico de difração para um modelo de absorção proporcional à segunda potência da intensidade.

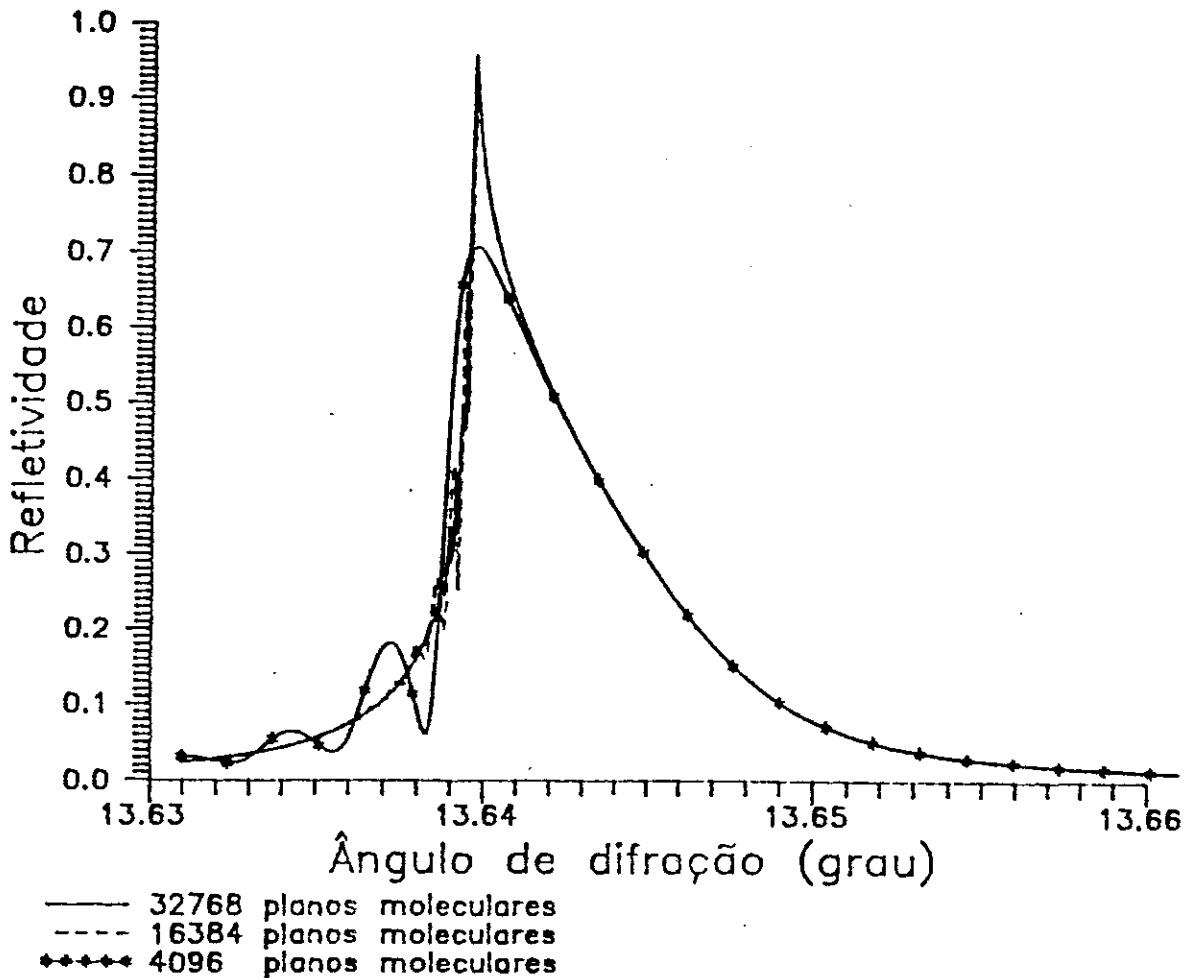


Figura 5.14 - Refletividade versus Ângulo de Difração para um cristal de Ge [111] com coeficiente de absorção proporcional ao quadrado da intensidade . Polarização  $\sigma$ . Plano Matemático, Radiação Cu  $K\alpha_1$ . Parâmetro de absorção  $\mu = 0.00004$ .

Neste trabalho nos preocupamos em mostrar a relativa simplicidade de tratar diferentes modelos de absorção através do formalismo auto-consistente, deixando para futuros trabalhos o estudo sistemático e considerações sobre as implicações físicas de tais modelos.

## CAPITULO 6 - APLICAÇÕES

### 6.1 - MULTICAMADAS E SUPER-REDES

#### 6.1.1 - INTRODUÇÃO

Multicamadas são estruturas cristalinas compostas de duas ou mais substâncias dispostas em camadas crescidas artificialmente. A primeira delas foi obtida em 1970 com substância semicondutora por Esaki & Tsu [93] através de uma técnica de crescimento epitaxial.

O ritmo acelerado da indústria eletrônica tem exigido a utilização de técnicas cada vez mais elaboradas no crescimento dessas estruturas semicondutoras artificiais. As técnicas mais comuns são implantação de íons, difusão, evaporação e deposição para multicamadas de metal/metal ou metal/isolante, feixe molecular epitaxial (molecular beam epitaxy, MBE) ou deposição de vapor químico metal-orgânico (metal-organic vapour deposition, MOCVD) e deposição de Langmuir-Blodgett (LB) para materiais orgânicos. O crescente interesse em multicamadas ou filmes finos vem do fato de que tais sistemas tem propriedades governadas, principalmente, por suas superfícies e interfaces.

A repetição de um conjunto ou "pacote" de camadas, que forma uma estrutura cristalina modulada é chamada de Super-rede. Do ponto de vista físico são detetadas propriedades interessantes particularmente em óptica e transportes elétricos com aplicações tecnológicas em laser, circuitos integrados e

hiperfrequências (Bartels & Nijman, 1978 [94]; Palmier, 1981 [95]; Bartels, 1983)[96]. principal característica do ponto de vista da difração de raios-x é o aparecimento de picos ou satélites em torno do pico de máxima intensidade, cuja localização esta relacionada com a média dos parâmetros de rede das substâncias componentes. O principal objetivo dos experimentos de difração de raios-x em multicamadas ou super-redes tem sido a determinação do período médio da estrutura; pouca atenção tem sido dada ao estudo de propriedades outras que não as de caráter puramente cristalográficos, em parte devido as dificuldades com o formalismo utilizado. Multicamadas e Super-redes têm sido largamente estudadas nos últimos anos por difração de raios-x utilizando, principalmente, as equações de Taupin 1964 [97] e Takagi 1969 [98]; Chang et al, 1973 [99]; Segmuller, Krishna & Esaki, 1977 [45]; Kervarec et al, 1984 [51]; Vardanyan & Manoukian, 1985 [52], [53]; Rieutord et al, 1989 [100]. Apesar de apresentarem uma solução geral para a reflexão dinâmica de uma camada epitaxial de espessura arbitrária W. J. Bartels et al (1986) [54] consideram que o entendimento para o fenômeno da difração de raios-x em multicamadas requer a elaboração de uma teoria dinâmica para o caso Bragg : " ...it is necessary to elaborate the Dynamical theory for the Bragg case of X-ray diffraction".

Neste trabalho investigamos a possibilidade de utilização do formalismo auto-consistente proposto por Keller et al (1986) [30], [31], [32] para estudar multicamadas, super-redes

ou qualquer outro tipo de estrutura planar.

### 6.1.2 - O MODELO

Vamos, inicialmente, apresentar um modelo de multicamada formada por duas substâncias semicondutoras tipo Ge e Si e em seguida para substâncias tipo Ge e GaAs ou GaAs e InP. Os dois tipos se caracterizam por apresentarem para um determinado plano atômico, átomo de um ou mais elementos diferentes.

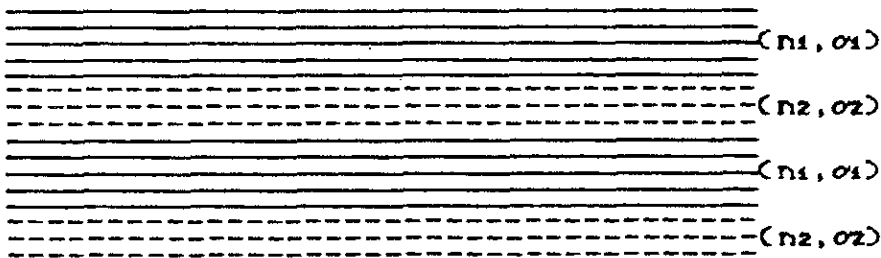


Figura 6.1 - Representação de uma multicamada formada por duas substâncias (bi-camadas).

onde  $n_1$  e  $n_2$  são o número de planos moleculares das substâncias de densidades planares  $\sigma_1$  e  $\sigma_2$ , respectivamente. As densidades planares correspondem, num primeiro modelo, a toda a carga da cela unitária, podendo, a depender da direção  $hkl$ , ser subdividida em outras densidades planares correspondentes aos planos de átomos no interior da cela unitária, como mostrado no capítulo 5.

Vamos utilizar aqui a definição de unidade de espalhamento auto-consistente apresentada no capítulo 5, generalizando-a para estruturas não periódicas. Com um plano de dipolos representado por uma matriz e relacionado ao espaço vizinho através de duas outras matrizes, isto é

$$M = \begin{bmatrix} f_a & 0 \\ 0 & 1/f_a \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} M_1 & M_2 \\ M_3 & M_4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} f_d & 0 \\ 0 & 1/f_d \end{bmatrix}$$

onde

$$M_1 = 1/t, \quad M_2 = -r/t, \quad M_3 = r/t, \quad M_4 = (t^2 - r^2)/t$$

$$f_a = e^{i\delta a} \quad \text{e} \quad f_d = e^{i\delta d}$$

Com a unidade de espalhamento acima definida podemos construir uma cela unitária, uma camada, uma multicamada e uma estrutura planar qualquer, simplesmente considerando a continuidade do campo nos limites de cada unidade, isto é:

$$A_j^i = A_k^i \quad \text{e} \quad B_k^i = B_j^i$$

A onda transmitida pelo plano de dipolos de densidade  $\alpha$  atinge o plano de dipolos de densidade  $\alpha$  com uma mudança de fase correspondente a  $f_{1d} + f_{2\alpha}$  dada por  $e^{i(\delta_{1d} + \delta_{2\alpha})}$ . Analogamente, a onda transmitida pelo plano de dipolos  $\alpha$  atinge o plano de dipolos  $\alpha$  com uma mudança de fase equivalente uma vez que ambas as ondas incidem sobre os planos de dipolos com o mesmo

Angulo  $\theta$ . Deve-se ficar claro que as ondas "transmitidas" por um plano de dipolos sofrem adequada mudança em fase para se transformar em "transmitidas" pela unidade de espalhamento.

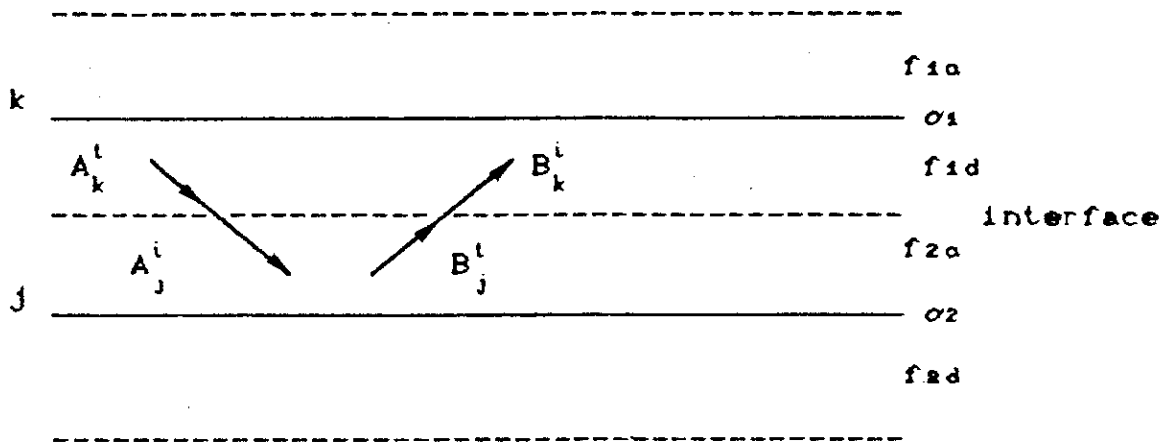


Figura 6.2 - Continuidade do campo de ondas entre duas Unidades Primitivas de espalhamento.

### 6.1.3 - REDES FIBONACCI

Alguns tipos especiais de multicamadas são as super-redes incomensuráveis, estruturas quasi-periódicas e as sequências Fibonacci, hoje largamente estudadas [46] a [50], [55] a [64], em função das importantes propriedades físicas e os surpreendentes resultados experimentais em difração de



elétrons, neutrons e raios-x. Foge, entretanto, ao escopo deste trabalho o estudo de tais propriedades.

Um sistema é incomensurável quando uma determinada propriedade local é modulada com um período que não corresponde a nenhum múltiplo do período da rede, ou seja a razão entre os dois períodos não é uma fração racional. Atualmente muita atenção tem sido dada ao estudo de estruturas cristalinas planares com perda de periodicidade. Os padrões de difração de tais estruturas têm sido bastante discutidos por diversos pesquisadores [49], [50] e originaram os grupos super-espaciais de simetria não contemplados nos 230 grupos espaciais de simetria catalogados para as estruturas cristalinas ordinárias. O objetivo do trabalho desenvolvido nesta seção é enfatizar a aplicabilidade do formalismo para estudar, através da difração de raios-x, as estruturas planares. Não constitui, portanto, nosso objetivo o estudo das importantes propriedades físicas, como por exemplo, as transições de fase, os transportes elétricos, etc. observadas em tais estruturas.

Considerando-se a sua atual importância teórica e tecnológica estendemos o desenvolvimento do formalismo auto-consistente de multicamadas comensuráveis para as incomensuráveis, tomando o caso particular de uma sequência Fibonacci.

As redes Fibonacci são constuídas a partir de uma "semente", de forma tal que não haja periodicidade ao longo de toda a rede. Em nosso caso tomamos uma sequência [A,B] formada por planos de Ge (representado por A) e GaAs (representado por



outra estrutura planar que não tenha periodicidade, necessitamos, apenas, da distância entre os planos de dipolos e suas respectivas densidades de cargas. Caso a distância entre os planos não sejam conhecidas podemos, através de simulação numérica, obter os perfis de difração que correspondam aos resultados experimentais e, conseqüentemente, determinar as referidas distâncias.

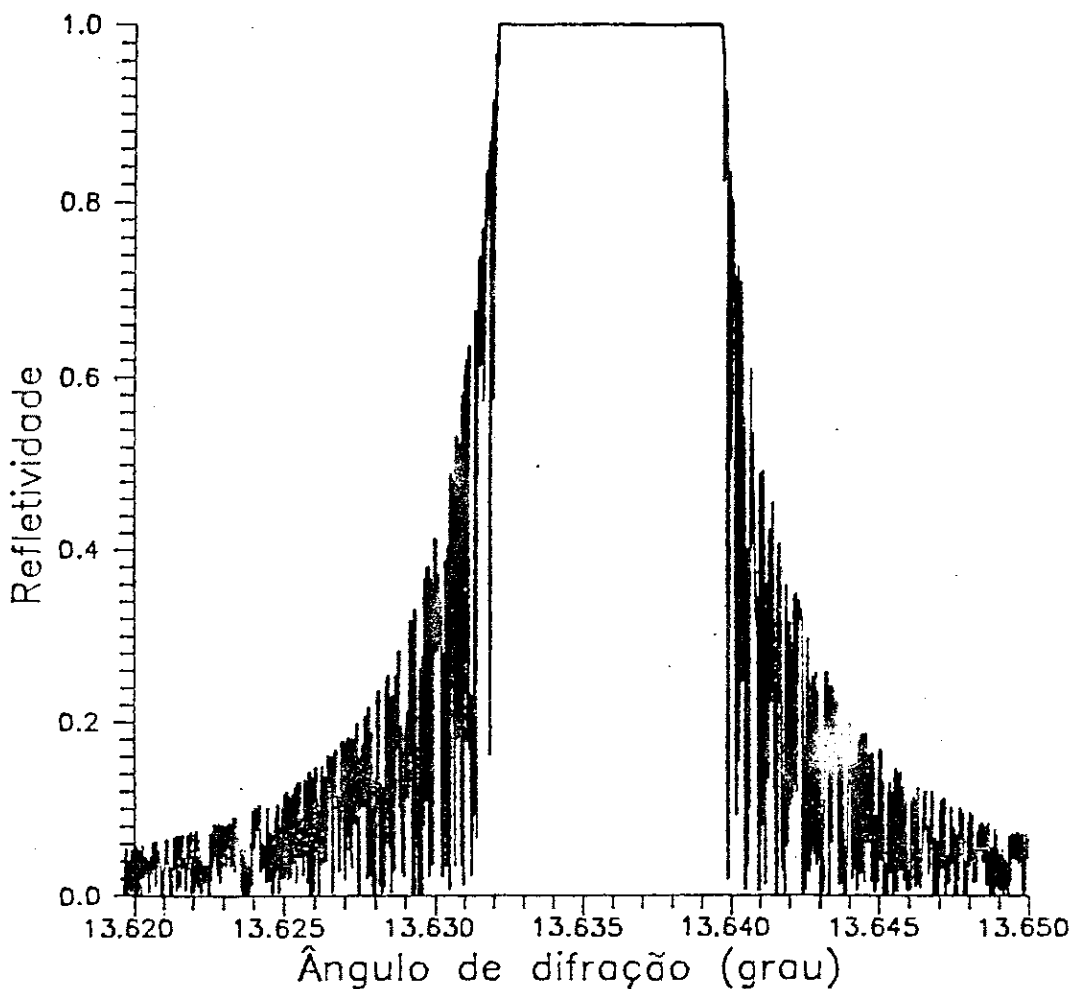


Figura 6.3 - Rocking curve de uma sequência Fibonacci do tipo [A,B] com A e B representando, respectivamente, 128 e 64 planos moleculares de Ge e de GaAs em 32 passos.

6.2 - DIFRAÇÃO A  $\pi/2$ 

Uma outra aplicação que fizemos foi estudar a difração de raios-x em torno de  $\pi/2$ . Este caso particular mereceu pouca atenção por parte dos investigadores [41], [42], acreditamos que em função da sua complexa resolução quando da utilização da teoria de Laue.

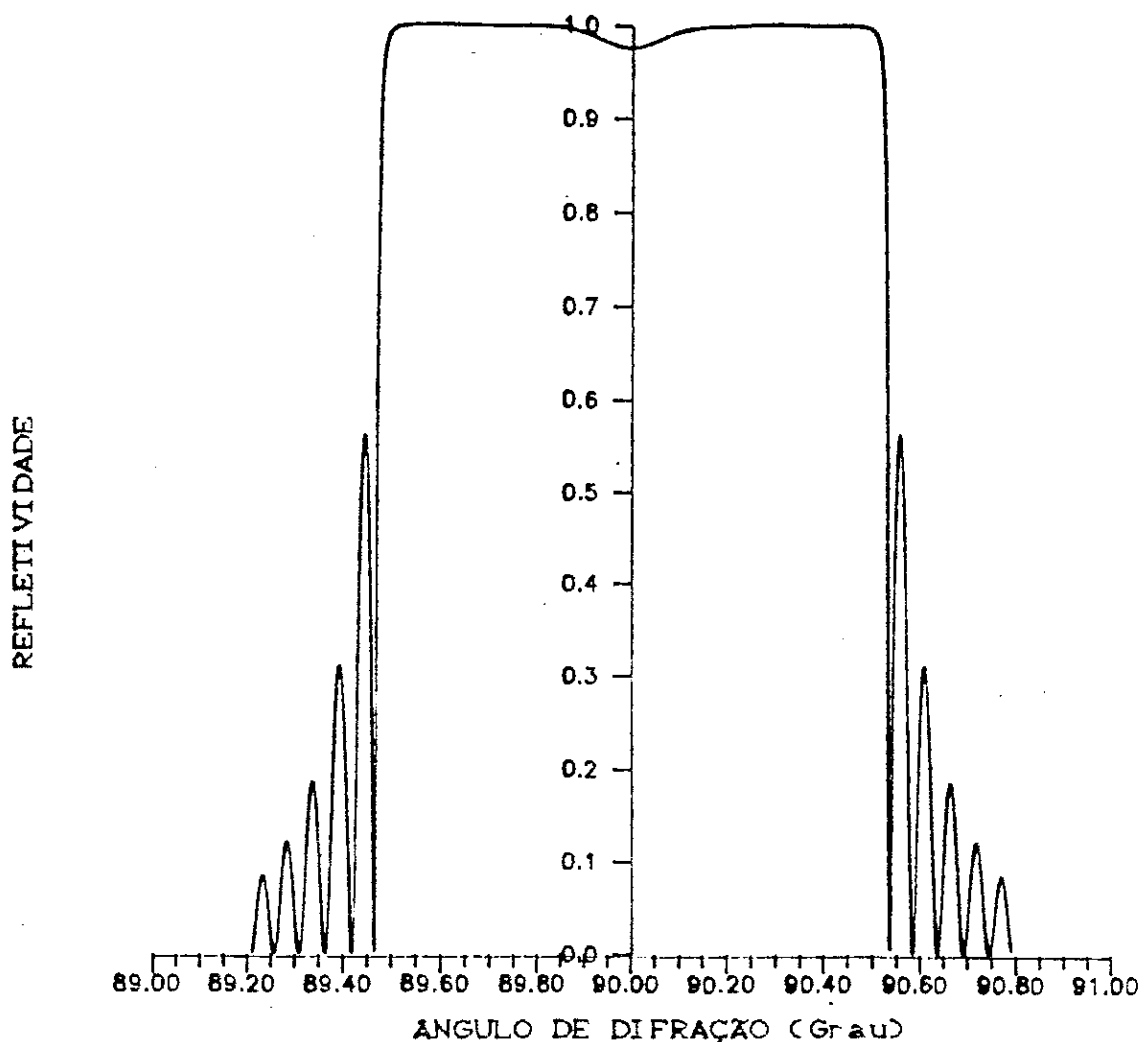
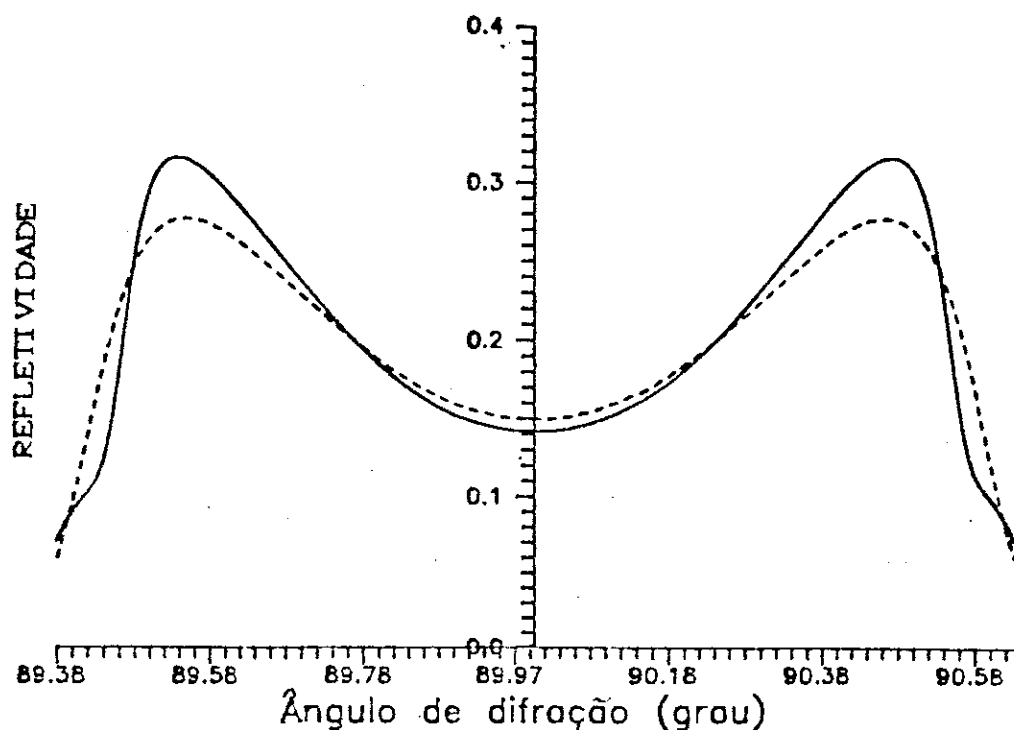


Figura 6.4 - Refletividade versus ângulo de incidência para um cristal de Ge[620] com 49.152 planos moleculares, sem absorção. Radiação de Co K- $\alpha$ .

As diversas aproximações utilizadas na teoria dinâmica usual não são válidas para ângulos próximos de  $\pi/2$ . Resultados obtidos com extrema dificuldade, para esta situação invocam ainda, a utilização de grandezas estranhas como, por exemplo, ângulo complexo.



— 49158 planos moleculares  
 - - - 24576 planos moleculares

Figura 6.5 - Refletividade versus ângulo de incidência para dois cristais de Ge [620] com, respectivamente, 49.152 e 24.576 planos moleculares cada, com parâmetro de absorção  $\mu = 0.00006$ . Radiação de Co K- $\alpha$ .

No formalismo auto-consistente, entretanto, este caso

particular de difração perto de  $\pi/2$  deixa de ser particular e é tratado como em qualquer outra situação. Nenhuma consideração extra foi necessário fazer para obtermos a Rocking Curve para uma incidência perto de  $\pi/2$ .

As diversas situações previstas neste formalismo como cristal finito ou infinitamente espesso, polarização  $\pi$  ou  $\sigma$  e com absorção ou sem absorção podem ser tratados da mesma forma que para qualquer outro ângulo de incidência. A seguir mostraremos outra rocking curve considerando a absorção no processo de espalhamento.

### 6.3 - MAPEAMENTO DO CAMPO DE ONDAS

O caráter microscópico do formalismo auto-consistente nos possibilita investigar o comportamento do campo de onda em qualquer ponto do interior do cristal. A partir dos coeficientes de reflexão e transmissão encontrados para cada plano de dipolos ou para cada unidade de espalhamento, quer seja ela Primitiva ou não Primitiva, podemos calcular os saltos em fase e em amplitude para cada uma das ondas  $A$  e  $B$  incidentes. Desta forma a contribuição de cada plano na construção da Refletividade total de uma amostra cristalina, isto é, a Refletividade observada fora do cristal, pode ser computada. Assim podemos seguir passo a passo a formação da Rocking Curve desde os planos mais interiores ou mais próximos da superfície inferior até a superfície superior do cristal onde se dá a refletividade correspondente a todos os planos do cristal.

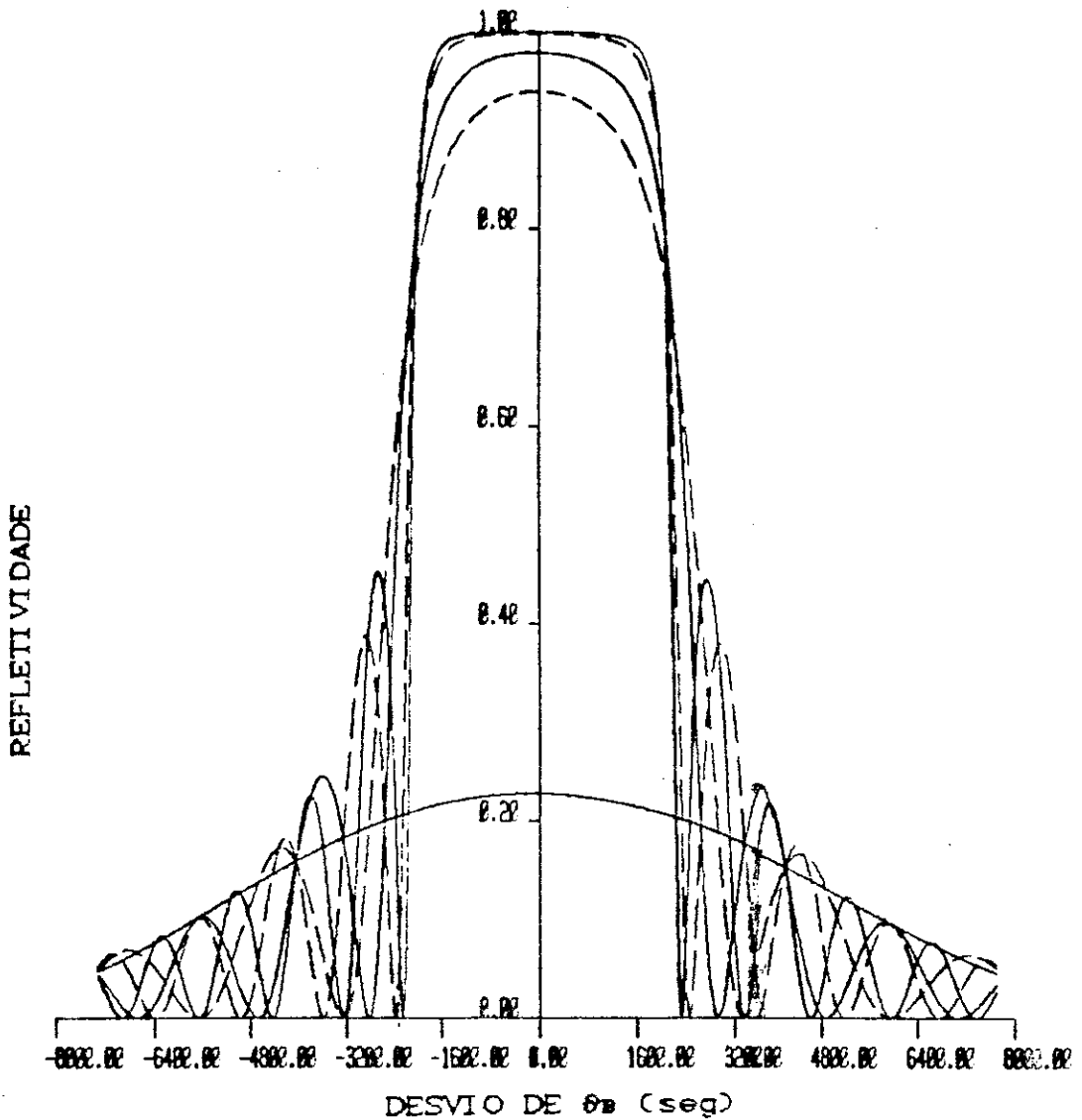


Figura 6.6 - Formação do Campo de Onda no interior do cristal de Ge[620] com cela "matemática". Polarização  $\sigma$  e fator de plano artificialmente aumentado 96 vezes. Cristal com 256 planos dividido em 8 camadas de 32 planos cada. Rocking Curve das camadas 1, 4, 5, 7 e 8.

O fator de plano  $f_p$ , aumentado artificialmente permite a obtenção de uma curva característica com um número bem menor de

planos envolvidos no processo de espalhamento, com redução considerável no tempo de CPU. No espalhamento dinâmico a largura do platô depende da densidade de cargas do plano, desta forma com o aumento do fator de plano, o que equivale a um aumento da densidade de dipolos do plano temos um aumento correspondente da largura do platô. A figura 6.6 mostra um platô com largura aumentada da ordem de 250 vezes a largura real.

Além de acompanhar a formação do Campo de Onda no interior do cristal podemos, eventualmente, calcular qualquer outra grandeza associada ao processo de espalhamento como por exemplo: os Saltos em Fase e em Amplitude sofridos pelas ondas *A* e *B* à medida que as mesmas se deslocam no interior do Cristal. Podemos observar se a Absorção no espalhamento Auto-consistente tem alguma influência sobre os citados saltos.

No capítulo seguinte mostraremos diversos resultados sobre as aplicações aqui apresentadas com algumas comentários e conclusões interessantes.



## CAPITULO 7 - CALCULOS NUMERICOS. DISCUSSAO DOS RESULTADOS

## 7.1 - INTRODUÇÃO

Neste capítulo faremos uma descrição do programa principal utilizado, de suas subrotinas e dados de entrada. Discutiremos sobre os resultados obtidos para os diversos cálculos efetuados com base no formalismo auto-consistente.

## 7.2 - METODOLOGIA DO CÁLCULO

Apartir das equações fundamentais do formalismo auto-consistente desenvolvemos um programa de computador em duas linhas distintas:

1ª LINHA - Trata do estudo de um cristal sem absorção. Aqui podemos desenvolver todo o cálculo utilizando o formalismo matricial tanto para o cristal finito como para o semi-infinito ou infinitamente espesso.

1.a) - No caso do cristal semi-infinito utilizamos o produto de matrizes apenas para encontrar a matriz associada à cela unitária estrutural, e a seguir as equações analíticas obtidas da aplicação da regra de Semelhança Geométrica de Campo, tomando como resultados físicos as soluções analíticas para  $|\mathbb{R}_{1,2}| \leq 1$ .

1.b) No caso do cristal finito utilizamos o cálculo numérico fazendo o produto de matrizes, tanto para o caso não estrutural como para o estrutural. Neste último achávamos

primeiro a matriz estrutural e a seguir a matriz total relacionada aos N planos moleculares que formam o cristal .

2ª LINHA - Considera o fator de absorção no formalismo. O procedimento utilizado para tomar em conta a absorção é radicalmente diferente do anterior. Aqui não é mais possível utilizar o cálculo matricial uma vez que a absorção em cada plano depende do campo eletromagnético resultante que age sobre os dipolos. Desta forma todo o cálculo é feito passo a passo sobre cada plano molecular e respectivos subplanos estruturais:

2.a) No caso do cristal finito iniciamos o cálculo considerando o empilhamento de planos de dipolos com uma onda transmitida normalizada de amplitude e fase respectivamente iguais a 1 e 0, isto é,  $A^t = [A^t, \phi_A] = [1, 0]$  e onda incidente na superfície inferior do cristal de amplitude e fase nulas, isto é,  $B^t = [B^t, \phi_B] = [0, 0]$

Apartir de então calculamos o valor de  $A^t$  sem absorção capaz de gerar uma onda  $A^t$ . Uma vez conhecido o campo resultante que age sobre o plano de dipolos, isto é, o "forcing field", calculamos o fator de absorção, que é proporcional ao campo total incidente. Com o fator de absorção conhecido calculamos, novamente, o Campo  $A^t$  e em seguida o fator de absorção, repetindo o procedimento até que o valor do coeficiente de absorção  $\mu$  não mais se altera. O processo de convergência é feito em três ou quatro passos apenas. Com a adequada mudança em fase  $A^t$  se transforma em  $A^t$  e  $B^t$  em  $B^t$  no plano seguinte, isto é,  $A^t = A^t \cdot e^{-i\delta}$  e  $B^t = B^t \cdot e^{i\delta}$ , onde  $\delta$  é

a mudança em fase devida ao deslocamento de um plano a outro. Todo o processo anteriormente descrito para o primeiro plano é novamente repetido com as novas amplitudes e fases e assim sucessivamente até atingir a superfície superior do cristal.

2.b) - No caso do cristal infinito é ainda possível utilizarmos a regra de Semelhança Geométrica de Campo. O processo de convergência é feito sobre cada plano estrutural de uma única cela unitária, de forma análoga ao caso anterior. Os resultados obtidos para as amplitudes e fases na superfície superior da cela unitária são levados para a superfície inferior da cela e recomeçado, novamente, todo o processo de convergência já descrito. Este procedimento é feito tantas vezes quantas sejam necessárias, até que as amplitudes obtidas na superfície superior da cela unitária não mais se altere. Com isso asseguramos que a regra de Semelhança Geométrica de Campo é satisfeita.

### 7.3 - ESTRUTURA DO PROGRAMA

O programa principal está estruturado de tal forma que pode atender a diversas opções, isoladas ou simultâneas. A escolha das opções é feita no arquivo de ENTRADA através de parâmetros "0" ou "1". As diversas opções são :

I - Opção de Modelo

a) cristal infinito ou finito

- b) pela "matemática" ou "física"(estrutural)
- c) polarização  $\sigma$  ou  $\pi$
- d) sem absorção ou com absorção
- e) sem substrato ou com substrato (no caso de multicamadas)

Além dessas opções deve-se, também através de parâmetros, escolher qual cálculo será efetuado para o arquivo de SAÍDA.

## II - Opções de Cálculo

- i) Achar o ângulo de Bragg.  
Subrotina YBRAGG
- ii) Calcular o Fator de Estrutura.  
Subrotina WIDTH
- iii) Calcular os "saltos" em fase e amplitude.  
Subrotina PHASE
- iv) Calcular Refletividade, Transmitividade, fases e Energia.  
Subrotinas REFLIM, RMAINF, FIELD e IFIELD
- v) Mapeia o Campo de ondas no interior do cristal  
Subrotina CAMAD
- vi) Traça a "Rocking Curve".  
Subrotina ROCKIN
- vii) Calcular o Fator Atômico

## Subrotina Fatom

Internamente o programa, através de algumas subrotinas executa cálculos auxiliares, como por exemplo:

## III - Cálculos Auxiliares

a) acha as posições absolutas dos átomos na cela unitária.

Subrotina FLAFI

b) acha a distância entre os planos e subplanos estruturais.

Subrotina DEFDIN

c) acha a densidade de carga dos planos e subplanos estruturais

Subrotina DSIGMA

d) procura os ângulos  $\theta$  para valores característicos de  $Y$ .

Subrotina YREFLE

e) calcula a mudança de fase de caminho para cada onda.

Subrotina GEFASE

f) calcula  $Y$  para determinado ângulo  $\theta$ .

Subrotina YCCALC

g) encontra os elementos das matrizes "matemática" e "física".

Subrotinas ELMAT e GEMAEI.

h) encontra a matriz resultante, para uma cela unitária, para um conjunto de planos, para uma bi- (ou tri-) camada, para o substrato e para todo o cristal ou multicamada.

Subrotinas PROMAT, GEMAFI MATINV

i) encontra a distância entre os subplanos atômicos

Subrotina Calcdis

j) encontra a densidade de carga de cada subplano atômico

Subrotina Gaussi

O arquivo de ENTRADA fornece, além dos parâmetros já referidos acima, os seguintes elementos ao Programa:

- 1) comprimento de onda da radiação utilizada
- 2) número atômico dos elementos da substância estudada
- 3) número de planos moleculares de cada substância
- 4) número de planos do substrato
- 5) número de camadas (ou "pacotes" de bi- ou tri-camada)
- 6) fator de absorção
- 7) posição relativas dos átomos na cela unitária
- 8) índices hkl
- 9) parâmetro de rede de cada substância
- 10) número de sub-planos atômicos

## 7.4 - DISCUSSÃO DOS RESULTADOS

Vamos apresentar e discutir os resultados em duas etapas: a primeira relativa aos monocristais de substâncias puras semicondutoras e a segunda relativa à aplicação do formalismo em multicamadas semicondutoras.

### 1ª ETAPA

Nesta etapa apresentaremos os resultados em três partes: Na primeira parte trataremos da obtenção de diversas "rocking Curve" para cristal pequeno, espesso e infinitamente espesso, com ou sem absorção, para os dois estados de polarização  $\pi$  e  $\alpha$ , além de considerar a incidência a  $\pi/2$ . Na segunda parte consideraremos os fatores de estrutura, polarização e atômico todos extraídos do caso de cristal infinitamente espesso. Na terceira parte falaremos do caráter microscópico do formalismo auto-consistente estudando o comportamento e formação do campo de ondas no interior do cristal, bem como estudando outros elementos auto-consistentes.

### 1ª PARTE - ROCKING CURVE

Para um cristal finito obtemos uma solução numérica única para a Refletividade com resultados comparáveis aos resultados cinemáticos( para cristal pequeno, da ordem de algumas dezenas de planos moleculares), atingindo a saturação como no caso

dinâmico (para cristais com alguns milhares de planos moleculares). Neste caso o platô é ladeado por oscilações cuja frequência aumenta com o número de planos moleculares do cristal. As figuras 7.1 e 7.2 mostram os resultados, para um cristal pequeno, tipicamente cinemáticos. A figura 7.3 mostra o resultado para um cristal espesso com a saturação do pico formando o platô, resultado este tipicamente dinâmico.

Investigamos, ainda neste caso, as Fases da Refletividade e Transmittividade na superfície do cristal para os casos quando o número de planos envolvidos é par ou ímpar. As figuras 7.4 e 7.5 mostram o comportamento das fases em função do desvio do ângulo de Bragg  $\theta_B$ . Observamos que a fase da Refletividade, em ambos os casos, é  $\pi/2$  para o ângulo de Bragg.

Para o cristal infinito, utilizamos a regra de "Semelhança Geométrica de Campo", obtendo uma "rocking curve" cujas laterais do platô são curvas suaves monotônicas. O Platô da mesma coincide com o obtido para um cristal finito com espessura suficiente para atingir a saturação. Necessário se faz, entretanto, explicar a considerável diferença existente nas laterais dos platôs nos dois casos. Esta diferença é facilmente justificada por duas hipóteses: a primeira diz respeito ao uso da Semelhança Geométrica de Campo que é equivalente a fazer incidir ondas de raio-x sobre as duas faces do cristal, o que necessariamente contribuiria para o alisamento da curva; a outra hipótese diz respeito ao rigor matemático com que é desenvolvido o formalismo autoconsistente onde nenhuma aproximação é feita e os resultados são obtidos



com a precisão dos modernos computadores, o que permite a visualização das oscilações laterais, não destruídas por qualquer aproximação numérica ou analítica. Vale a pena ressaltar que nas teorias existentes os resultados são comparáveis aos obtidos com a Semelhança Geométrica de Campo. A figura 4.4 mostra uma comparação entre tais resultados, onde aproveitamos para esclarecer que a rocking curve apresentada na escala Y para o formalismo auto-consistente coincide com aquele obtido pela teoria de Darwin. A explicação para este fato é simples: ambos são obtidos a partir de um modelo de estrutura planar, apesar de Darwin não utilizar nos cálculos o princípio de auto-consistência e, portanto, não ter a conservação da energia assegurada. Após analisar a introdução do fator de absorção voltaremos a comentar sobre o assunto. A figura 7.6 mostra uma comparação entre os resultados obtidos para um cristal espesso e um infinitamente espesso.

Vamos analisar, agora, os resultados obtidos quando introduzimos a absorção no formalismo auto-consistente. Vale a pena ressaltar que na literatura o fator de absorção é responsável pela assimetria no pico de intensidade. Tentativa anterior de tratar a absorção no formalismo em estudo não foi suficiente para reproduzir os resultados experimentais. Os resultados aqui apresentados além de reproduzir os resultados experimentais e obtidos nos formalismos existentes mostram a simplicidade e versatilidade desta proposta, onde necessitamos, apenas, considerar se queremos um fator de absorção proporcional à primeira ou segunda potência do campo incidente,

isto é, se estamos interessados em estudar a absorção de campos fracos ou intensos. Verificamos pelos resultados obtidos que o coeficiente de absorção introduzido como um parâmetro no arquivo de entrada do programa utilizado modifica a curva obtida sem absorção, suavizando as laterais do platô e fazendo a curva convergir para a uma situação limite, que corresponde a condição de cristal infinito com absorção. Neste caso podemos seguir qualquer uma das maneiras já explicitadas antes, isto é, utilizando o procedimento para cristal finito, com um número grande de planos ou utilizando a regra de Semelhança Geométrica de Campo. No primeiro caso temos um inconveniente operacional: o tempo de CPU é demasiadamente longo, por exemplo, para um cristal com 50.000 planos moleculares necessitamos da ordem de duas horas (2 h) de CPU num computador de grande porte como o IBM 3090, para obter uma rocking curve com 500 pontos (80" de arco, aproximadamente). A sequência de figuras 7.7 a 7.10 mostra o pico de difração para diversos valores do coeficiente de absorção e do número de planos do cristal. A figura 7.11 mostra resultados experimentais da literatura.

Um outro resultado que desperta interesse é o caso de incidência próximo de  $\pi/2$ , como mostra a literatura, uma vez que na teoria de Laue o seu estudo implica em algumas dificuldades, como por exemplo a necessidade de utilizar ângulos complexos. As figuras 7.12 e 7.13 mostram vários casos de incidência a  $\pi/2$  onde nenhuma consideração extra foi necessário fazer para obtê-las, nem sequer varrer o ângulo  $\theta$  nos dois sentidos se aproximando de  $\pi/2$ , isto é, podemos varrer

o Angulo  $\theta$  de um valor menor a outro maior que  $\pi/2$ . Os resultados são obtidos para qualquer caso, isto é, cristal finito ou infinito, usando ou não a absorção, com polarização  $\pi$ , ou  $\alpha$ .

## 2a PARTE - FATOR DE ESTRUTURA

O Fator de Estrutura calculado pela razão entre as larguras dos platôs estrutural e não estrutural, considerando-se os espalhadores como puntuais, está em bom acordo com os resultados normalizados obtidos pela Teoria Cinemática sob as mesmas considerações. A figura 5.4 mostra as rocking curves para o Ge (111) nos casos estrutural e não estrutural. O fator de estrutura para este caso é 0.708554226. As tabelas 5.1 e 5.2 mostram os resultados para o cálculo do Fator de estrutura nos dois casos de polarização  $\pi$  e  $\alpha$ . Os resultados concordam até a sétima casa decimal. Para o Ge(620) o Fator de Estrutura é igual à unidade, uma vez que na cela unitária só existe um plano de dipolos. Para qualquer direção hkl os resultados obtidos concordam com aqueles obtidos pela teoria Cinemática. Cálculos feitos considerando-se o átomo como possuindo volume mostram o pico ainda mais estreito, diminuindo, portanto, o fator de estrutura. O cálculo exato para o Fator de Estrutura, neste caso, vai depender de uma boa determinação do Fator Atômico.

O Fator Atômico foi calculado de forma análoga, pela razão entre as larguras dos picos para um átomo com volume e para um

Atomo puntual. Para desprezar a contribuição estrutural consideramos a direção (620) cujo fator de estrutura normalizado é igual à unidade. A varredura em  $\text{sen}\theta/\lambda$  foi feita artificialmente modificando-se a distância interplanar e com isso a necessária mudança em  $\theta$  para satisfazer a lei de Bragg. A figura 5.8 mostra o fator atômico do Si encontrado na literatura e o calculado por este formalismo para uma distribuição de carga tentativa, sem a preocupação com o rigor de um modelo apropriada para o cristal silício. Para a obtenção exata do fator atômico será necessário considerar a exata função densidade de carga planar para o átomo. Este trabalho não se propõe a isso, mas apenas fornecer uma maneira alternativa para o cálculo do fator atômico, dentro da proposta auto-consistente. Seguramente este procedimento é válido uma vez que, para a difração de raios-x e a implícita consideração do fenômeno da interferência, a diferença de caminho entre dois raios desempenha papel fundamental, sendo de menor importância o deslocamento do elemento espalhador sobre o plano de cargas.

Para finalizar esta parte consideraremos, agora, o Fator de Polarização. O procedimento para calculá-lo é, também, análogo ao utilizado para calcular os dois outros fatores anteriores, desta vez pela razão entre os picos com polarização  $\pi$  e  $\sigma$ . Os resultados obtidos concordam até a sétima casa decimal entre os casos "matemático" e "físico", e até a quarta casa decimal com o  $\cos(2\theta)$  do fator de polarização das teorias existentes. A figura 5.9 mostra o platô para os dois casos de polarização.

### 3a PARTE -- CARÁTER MICROSCÓPICO DO FORMALISMO

O caráter microscópico do formalismo auto-consistente é enfatizado aqui através de alguns pontos de tratamento simples: O primeiro deles diz respeito à possibilidade de calcularmos os saltos em fase e em amplitude das ondas  $A$  e  $B$  em cada ponto no interior do cristal. Percorrendo o cristal desde o seu primeiro plano na superfície inferior até o último plano na superfície superior observamos, como esperado, um aumento da amplitude da onda  $B$  transmitida e no sentido contrário, uma diminuição da amplitude da onda  $A$ . De igual forma podemos observar que, à medida que a amplitude das ondas aumenta, diminui o salto em fase sofrido por cada uma delas. As figuras 7.14 e 7.15 mostram os saltos em fase das ondas  $A$  e  $B$  no interior do cristal até os vinte (20) planos mais próximos da superfície de entrada do feixe de raios-x. Ainda como parte da ênfase que damos ao caráter microscópico do formalismo é possível mostrar a formação do campo de ondas no interior do cristal desde os seus planos mais inferiores até a superfície. Neste caso pudemos obter a rocking curve dentro do cristal através da simulação numérica. Para mostrar a formação do campo de onda dividimos o cristal em oito regiões de mesma espessura e construímos a rocking curve na fronteira de cada região, sendo que a última coincide com a superfície do cristal. Para um cristal espesso, os resultados mostram que à medida que se aproxima da superfície superior (superfície de entrada da onda) a

refletividade vai aumentando até atingir a saturação. A figura 6.6 mostra a formação do campo de onda no interior do cristal.

## 2ª ETAPA

Nesta etapa trataremos da aplicação do formalismo em multicamadas. Apresentaremos os resultados em três partes: Na primeira mostraremos a rocking curve para multicamadas finitas com e sem substrato, a seguir para estruturas infinitas (obviamente sem substrato) e finalmente resultados para uma sequência Fibonacci. Na segunda parte analisaremos o comportamento dos ângulos característicos de Laue, Bragg e Ewald. Na terceira parte analisaremos a extensão do conceito de fator de estrutura auto-consistente e de polarização para multicamadas.

### 1ª PARTE - ROCKING CURVE EM MULTICAMADAS

Esta parte tem como objetivo mostrar a aplicabilidade do formalismo auto-consistente em estruturas planares tais como multicamadas, super-redes, sequências Fibonacci, etc. Para isso construímos diversos modelos de multicamadas e obtivemos a rocking curve para cada um deles. Utilizamos várias substâncias semicondutoras como por exemplo Ge, GaAs, AlAs, InP, Sic, ZnSe, etc. As considerações de ordem prática como possibilidade de crescer tais estruturas ou sua aplicabilidade na indústria não foram levadas em conta. Nos concentramos, apenas, em mostrar a

versatilidade do formalismo, apesar de reproduzirmos alguns resultados da literatura. A sequência de figuras de 7.16 a 7.22 mostram resultados para multicamadas finitas sem substrato onde são observados o pico central e alguns laterais, e as oscilações características de estruturas com poucas celas. Algumas situações podem ser impostas: desde estruturas com poucas celas de super-rede entendidas aqui como "pacotes", formada pela junção de bi- ou tri- camadas, cada uma das quais formadas por um grande número de planos moleculares, até muitas celas de super-rede formadas de poucos planos moleculares cada uma delas. Os resultados mostrados nesta sequência são para celas de super-redes formadas por Ge e GaAs com diversas espessuras dadas em termos do número de planos moleculares. O aumento do número de planos moleculares conduz rapidamente à saturação do pico central enquanto o aumento do número de celas de super-rede aumenta a frequência das oscilações laterais e diminui o período dos picos laterais. Em seguida introduzimos no cálculo o substrato onde obtivemos como efeito o deslocamento do pico na direção do ângulo de Bragg do elemento do substrato, no caso estudado o Ge, e o aumento da altura nos mínimos laterais à sua direita. As figuras 7.23 e 7.24 mostram esses dois casos. A segunda delas reproduz os resultados obtidos por Segmüller et al [45] onde conseguimos "esplitar" o pico situado a  $33^{\circ}$ , uma vez que não é levada em conta, em nossos cálculos, a convolução do pico teórico com as condições experimentais (função erro, largura da fenda, etc.)

Para uma multicamada infinita construímos uma série

considerável de modelos, uma vez que, utilizando a Semelhança Geométrica de campo poupamos tempo de CPU. Os resultados comprovam a expressão encontrada para a obtenção do pico central, dada pela lei de Bragg (cinemática) para multicamadas de substâncias com parâmetros de rede próximos, e fornece uma gama de informações valiosas. Essas informações servirão para elucidar, acreditamos, de forma fácil, o comportamento da difração de raios-x em multicamadas, do ponto de vista prático e, inclusive, do ponto de vista acadêmico. Algumas conclusões já podem ser tiradas na sequência das figuras de 7.25 a 7.42, por exemplo: a relevância de qual substância se encontra na superfície da amostra, notadamente para os casos de camadas bastante espessas; com isso podemos investigar qual substância que compõe a multicamada tem papel preponderante em cada pico; a periodicidade dos picos satélites fornece informações sobre a espessura da cela unitária da super-rede; para cada pico o parâmetro  $\gamma$  passa pelos valores -1 a 1; um ponto interessante a ser explicado é o fato de haver saturação da Refletividade para valores menores do que a unidade; substâncias que possuem parâmetro de rede próximos apresentam um pico central que é a superposição dos picos das substâncias componentes; com o aumento do número de planos moleculares em cada camada ou com quantidades diferentes, os picos, principalmente o central, se subdividem mostrando uma possível fonte de informação para novas pesquisas.



## 2ª PARTE - ÂNGULOS CARACTERÍSTICOS

Ainda estudando multicamadas com o formalismo auto-consistente obtivemos interessantes resultados para o caso de estruturas infinitas. Analisamos o comportamento do pico central, em termos de largura e posição, através do cálculo do parâmetro  $\gamma$ , isto é, os ângulos  $\theta$  correspondentes a  $\gamma=-1$  (theta Laue)  $\gamma=0$  (theta Bragg) e  $\gamma=1$  (theta Ewald). Construímos uma série de modelos de multicamadas onde fixávamos, para uma camada, o número de planos moleculares de uma substância e variávamos o número de planos da outra substância, calculando para cada caso os ângulos característicos acima citados. As figuras 7. 3 a 7.47 mostram o comportamento de tais ângulos em função do número de planos ou da razão entre suas espessuras. Podemos constatar a relevância, já citada no item anterior, do papel desempenhado pela substância que se encontra na superfície da amostra. Verificamos, entretanto, que à medida que aumentamos a espessura da camada de uma das substâncias o pico ou melhor falando o ângulo  $\theta_{\gamma}$  da multicamada se desloca na direção do ângulo de Bragg da substância que tem maior espessura como dado pela expressão usual da literatura ou pela apresentada por nós, para o caso de substâncias com parâmetros de rede próximos, como no caso do Ge e GaAs. As figuras também mostram o comportamento dos ângulos característicos em função da polarização e da distribuição de carga no interior da cela unitária.

### 3ª PARTE - FATOR DE ESTRUTURA PARA MULTICAMADAS

Analisando os resultados obtidos para as rocking curve em multicamadas quando considerávamos ou não a cela não primitiva ou estrutural observamos um comportamento não muito regular para os diferentes picos, apesar do estreitamento de todos eles quando a cela estrutural era considerada. O comportamento não regular diz respeito a uma não simetria como observado no pico central ou no pico das respectivas substâncias puras. Este ponto, portanto, merece um estudo sistemático e poderá contribuir sobremaneira para uma possível generalização do Fator de Estrutura para multicamadas. A figura 5.11 mostra o perfil para uma multicamada formada por celas de super-rede (matemática e física) composta de Ge e GaAs com 1024 e 512 planos moleculares, respectivamente, com Ge na superfície superior da amostra.

As tabelas 5.3 a 5.5 e as apresentadas no Apêndice B mostram o comportamento do pico central e dos picos laterais, isto é, dos satélites dos lados direito e esquerdo.

### 4ª PARTE - APLICAÇÃO EM REDES FIBONACCI

Ainda com o intuito de mostrar a aplicabilidade do formalismo auto-consistente em estruturas planares fizemos mais uma aplicação, desta vez em redes *Fibonacci*. A figura 6.3 mostra a Rocking Curve de uma sequência [A, AB] com A e B representando, respectivamente, 128 e 64 planos moleculares no

primeiro passo em 32 passos. As figuras 7.48 a 7.50 mostram outras sequências Fibonacci com A e AB representando um (1D) plano molecular no primeiro passo, em diferentes números de gerações ou passos. Os resultados mostram a possibilidade de tratar estruturas desse tipo com relativa simplicidade. Nenhuma consideração a mais foi introduzida no programa além da sequência [A, AB]. Este fato mostra a versatilidade do formalismo e do programa por nós desenvolvido.

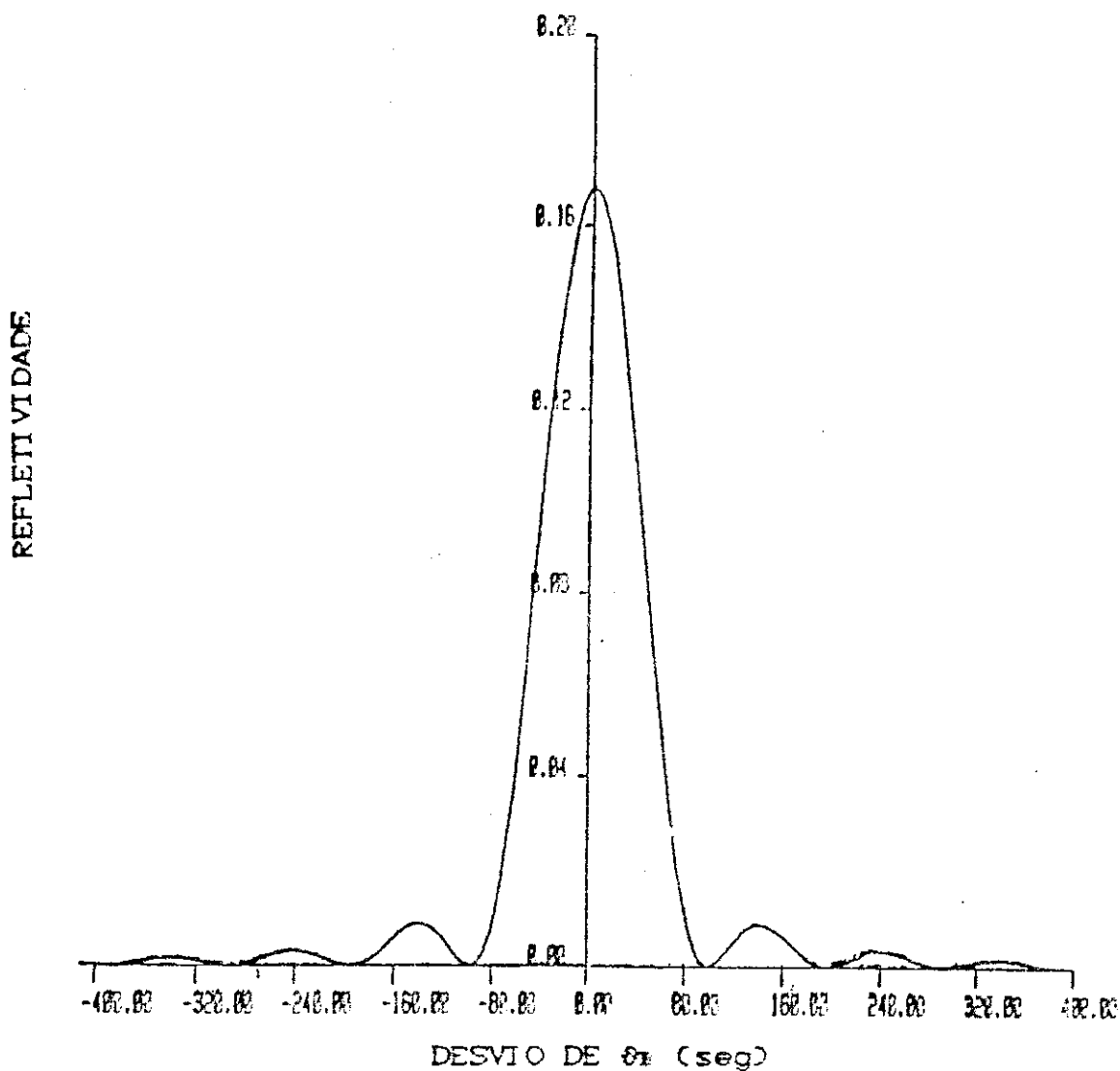


Figura 7.1 - Refletividade versus Desvio de  $\theta_B$  para um cristal de Ge com 512 planos moleculares. Plano Matemático, Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].  $\theta_B=13.642953$

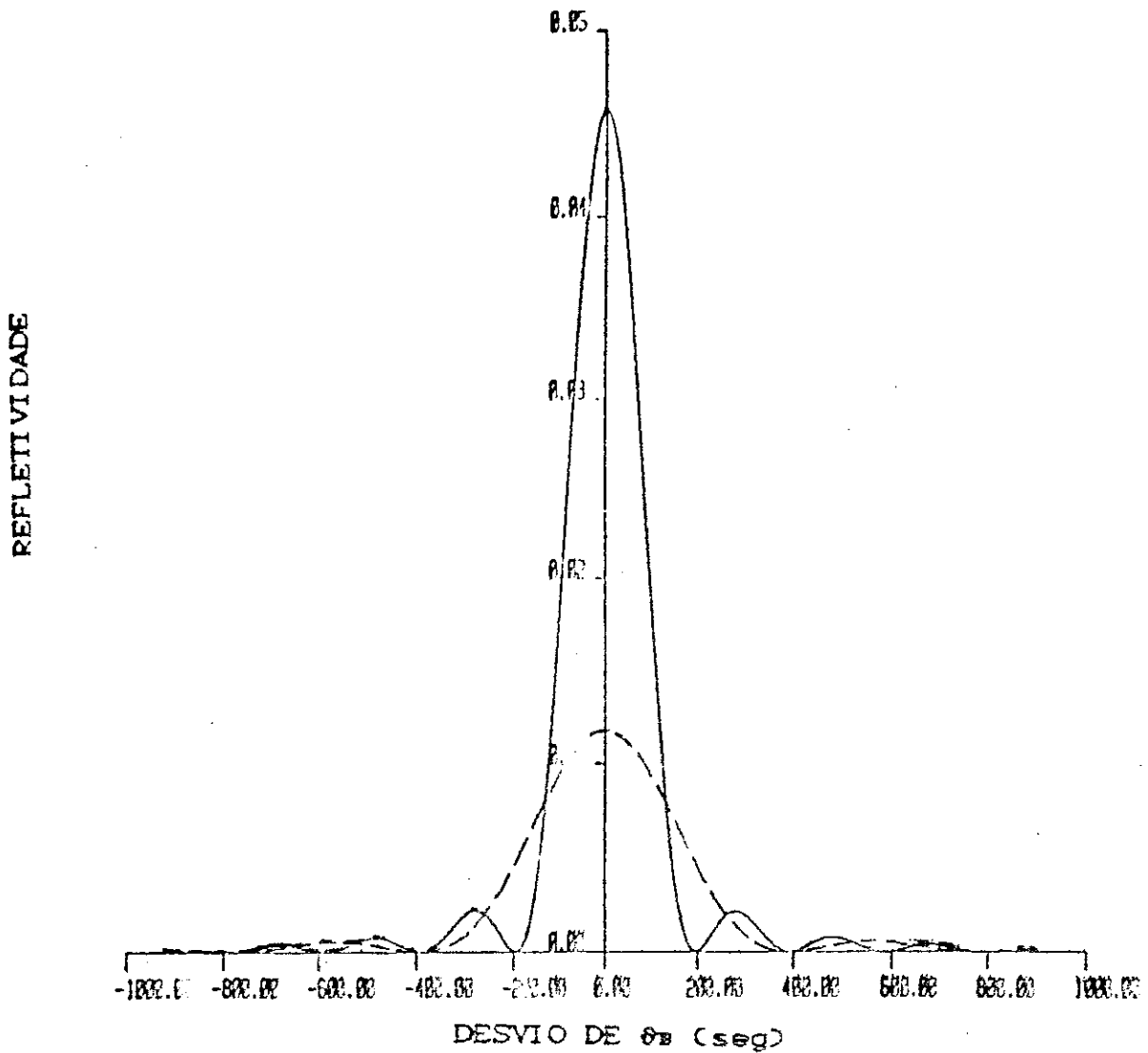


Figura 7.2 - Refletividade versus Desvio de  $\theta_B$  para cristais de Ge com, respectivamente, 128 e 256 planos moleculares cada. Plano Matemático, Polarização sigma. Radiação Cu  $K\alpha_1$ . Reflexão [111].  $\theta_B = 13.642953$ .

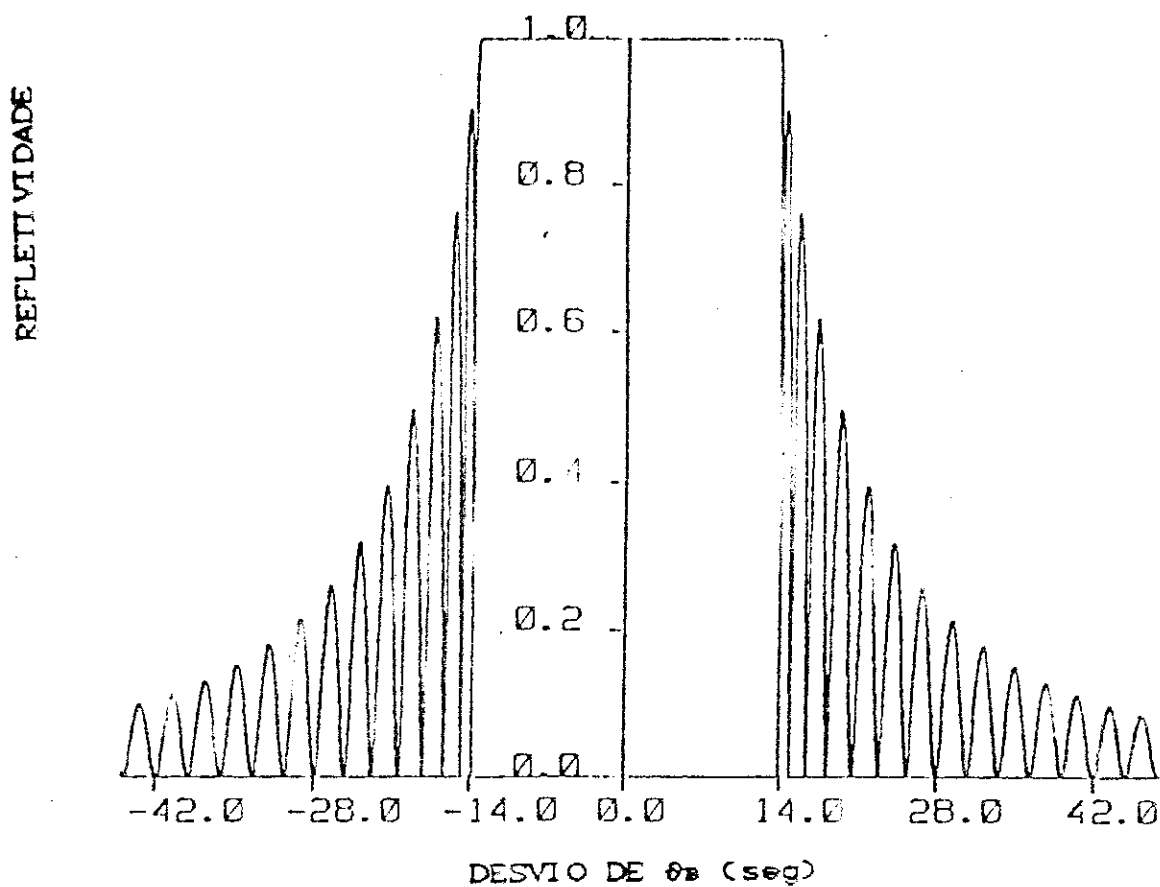
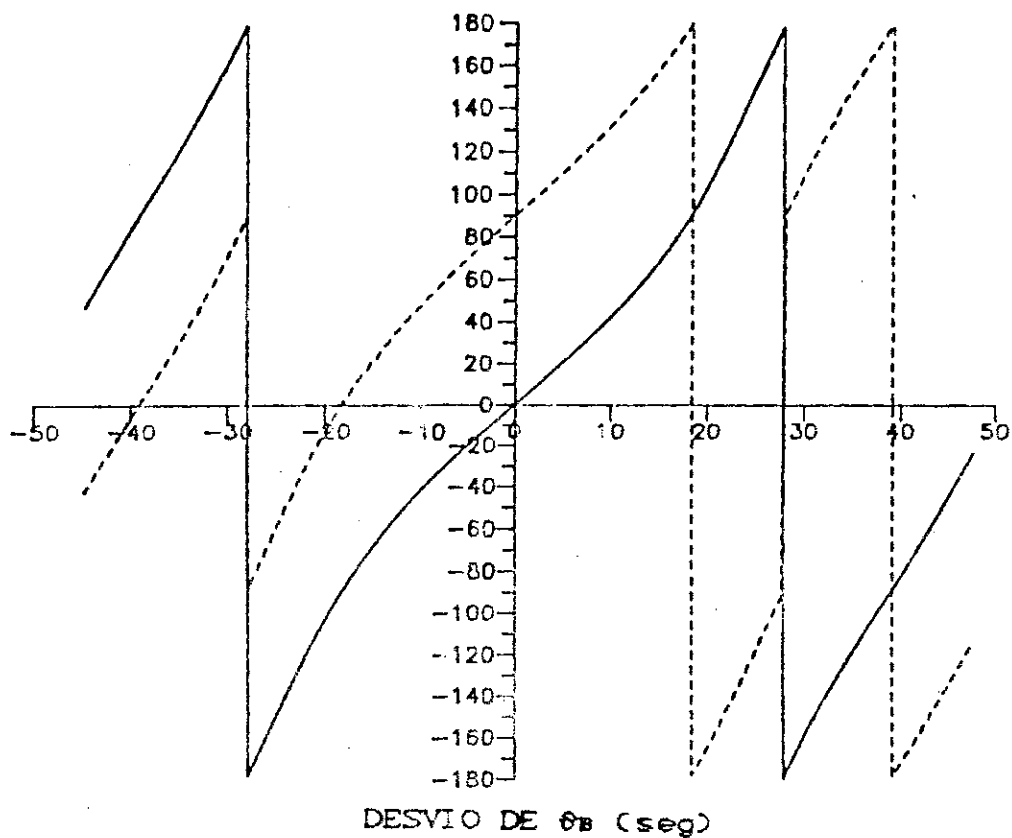


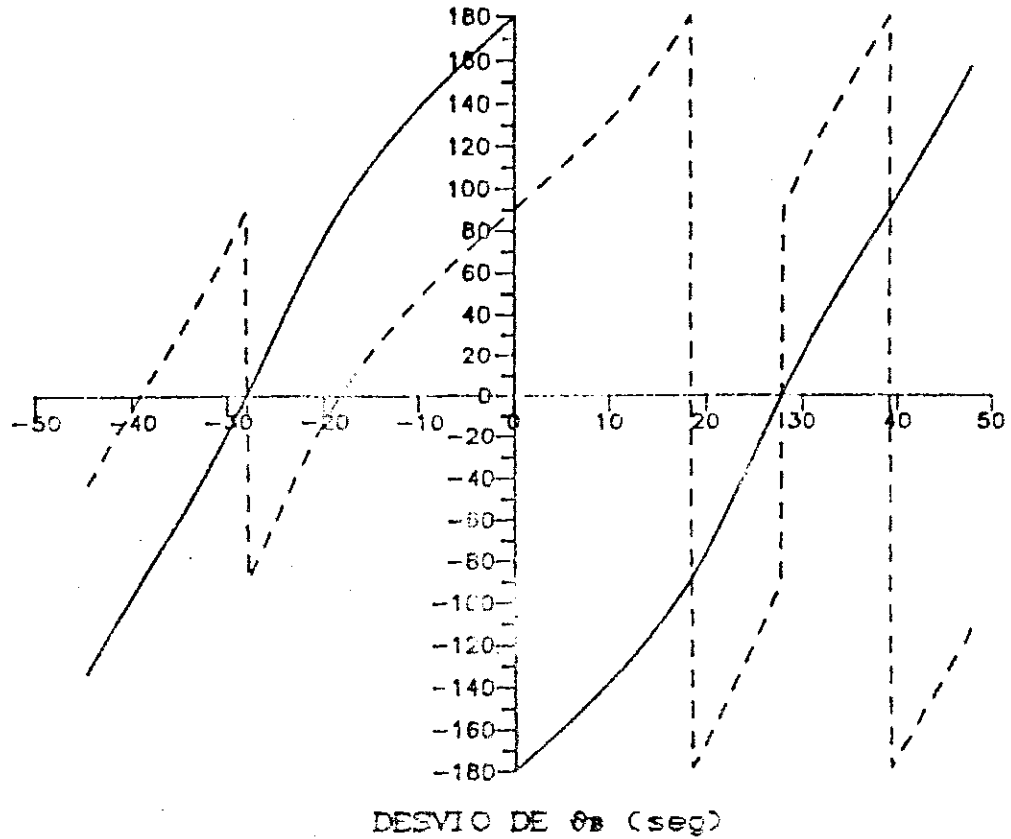
Figura 7.3 - Refletividade versus Desvio de  $\theta_B$  para um cristal de Ge com 16384 planos moleculares . Plano Matemático, Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].



—— Fase da Transmitividade

----- Fase da Refletividade

Figura 7.4 - Fase da Transmitividade e Refletividade versus desvio de  $\theta_B$  para um cristal de Ge com 2048 planos moleculares. Plano Matemático, Polarização sigma, Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

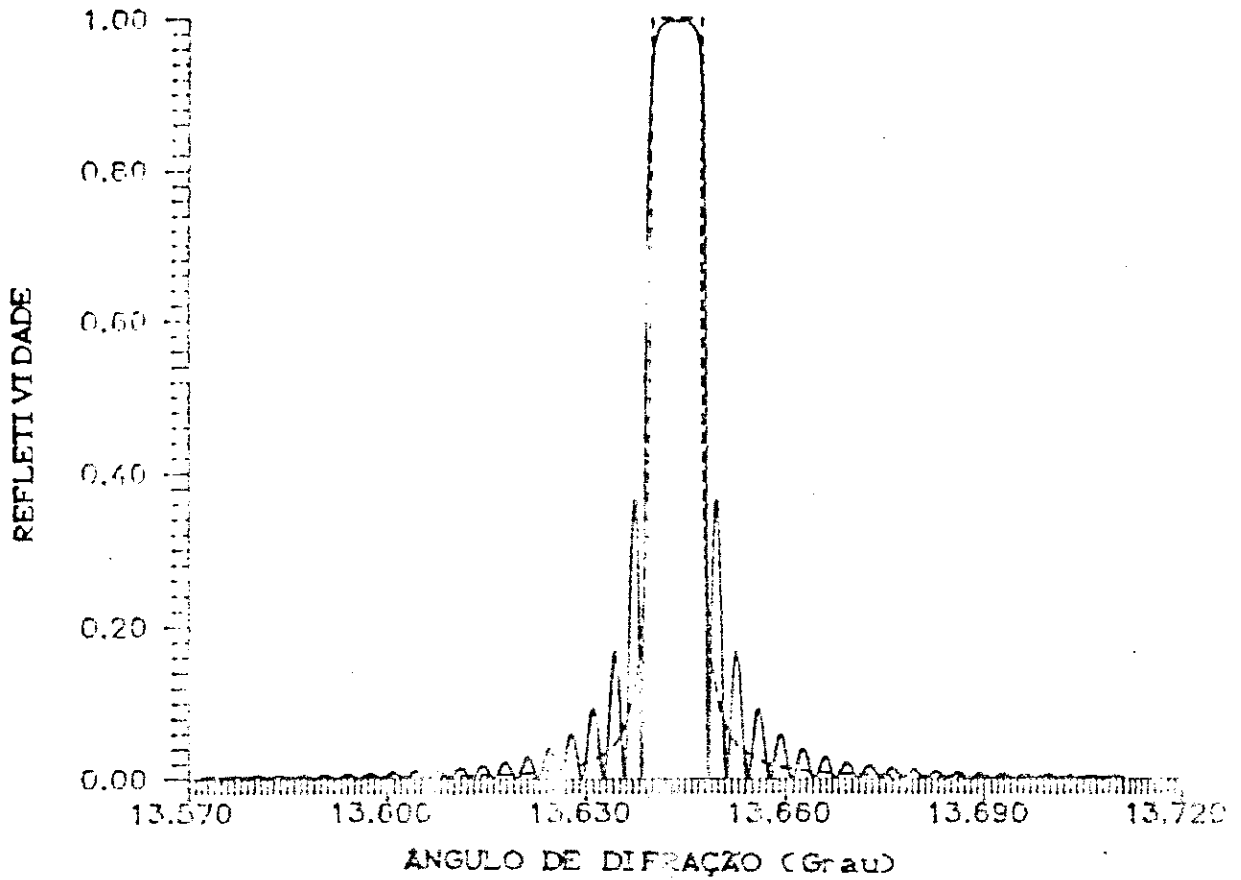


—— Fase da Transmitividade

----- Fase da Refletividade

Figura 7.5 - Fase da Transmitividade e Refletividade versus desvio de  $\theta_B$  para um cristal de Ge com 2049 planos moleculares. Plano Matemático, Polarização sigma, Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

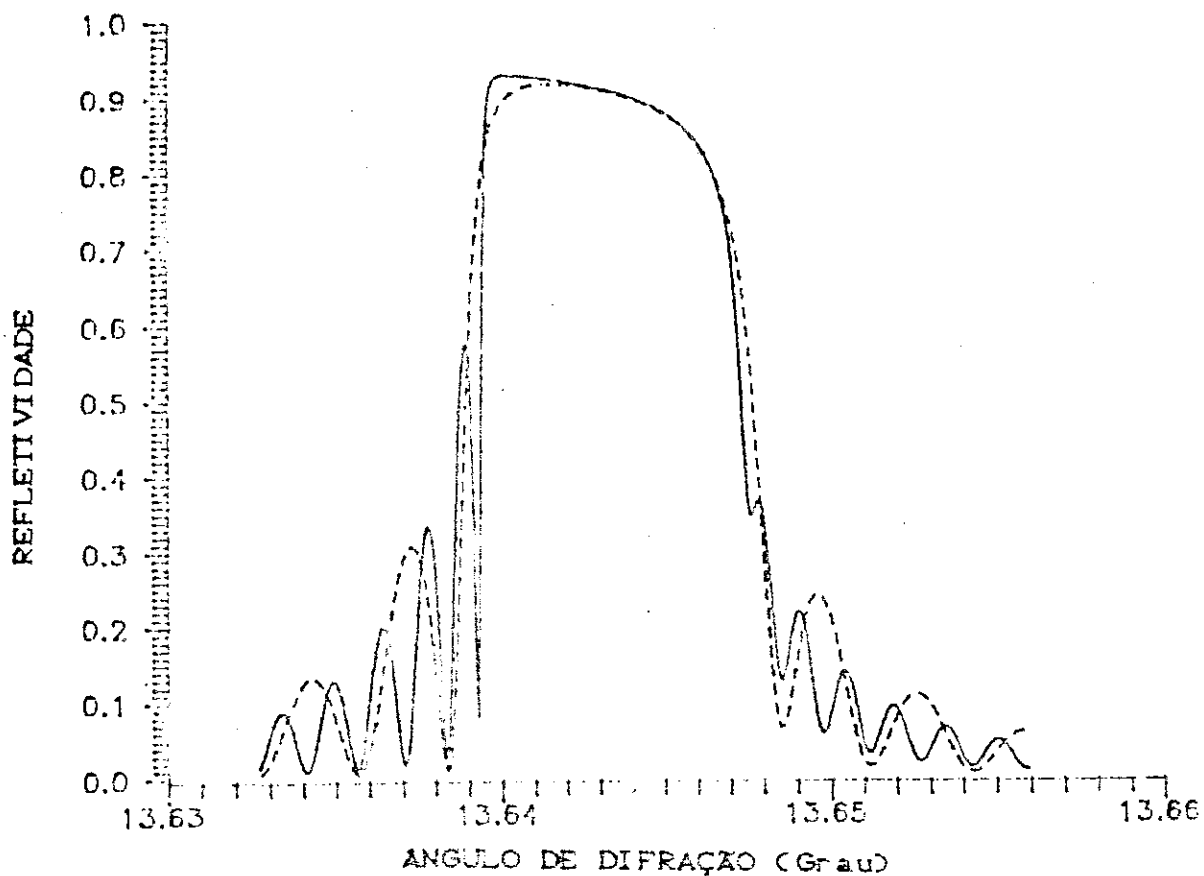




———— Cristal finito

----- Cristal infinitamente espesso

Figura 7.6 - Refletividade versus Angulo de Difração para dois cristais de Ge, um espesso e outro infinitamente espesso. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].



— 8192 planos moleculares

----- 4096 planos moleculares

Figura 7.7 - Refletividade versus Angulo de Difração para dois cristais de Ge com, respectivamente, 4.096 e 8.192 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Parâmetro de absorção  $\mu = 0.0006$ . Reflexão [111].

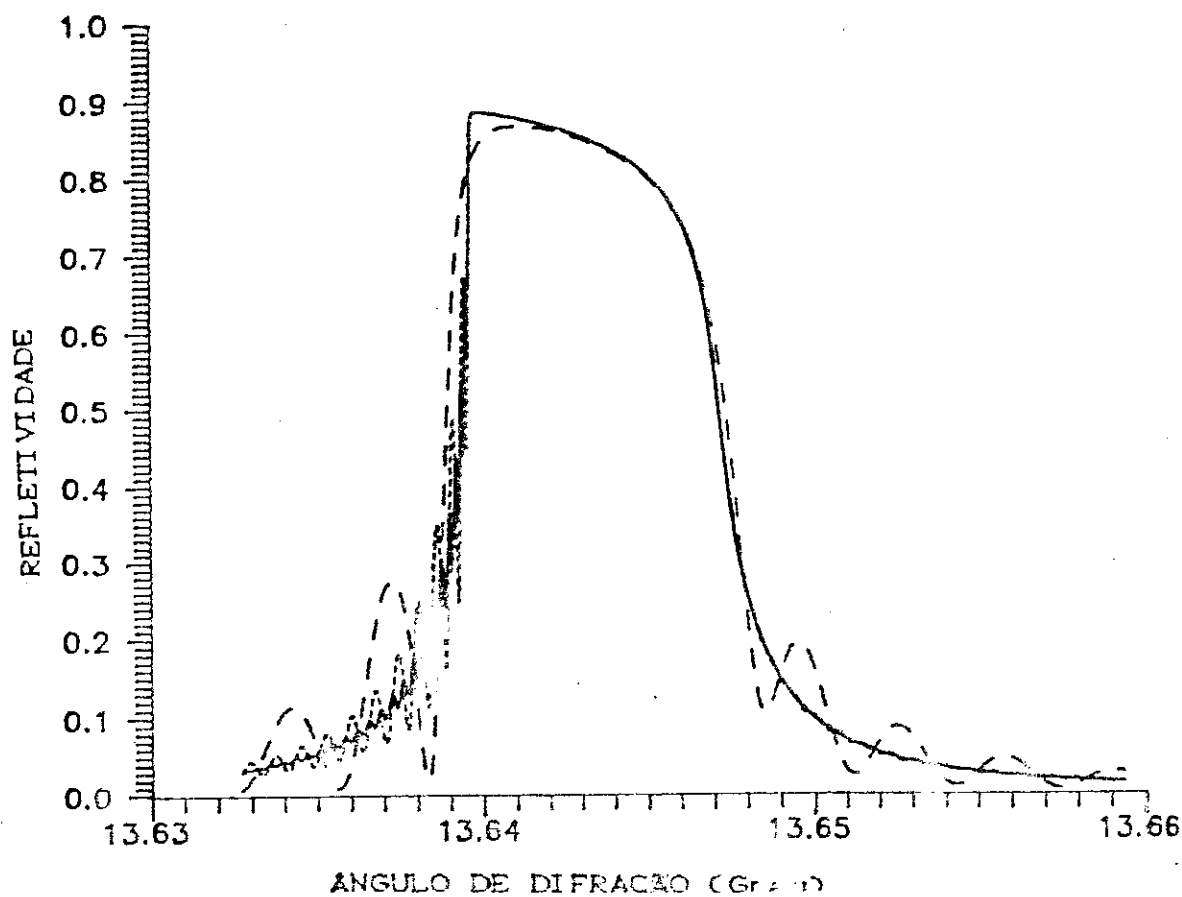
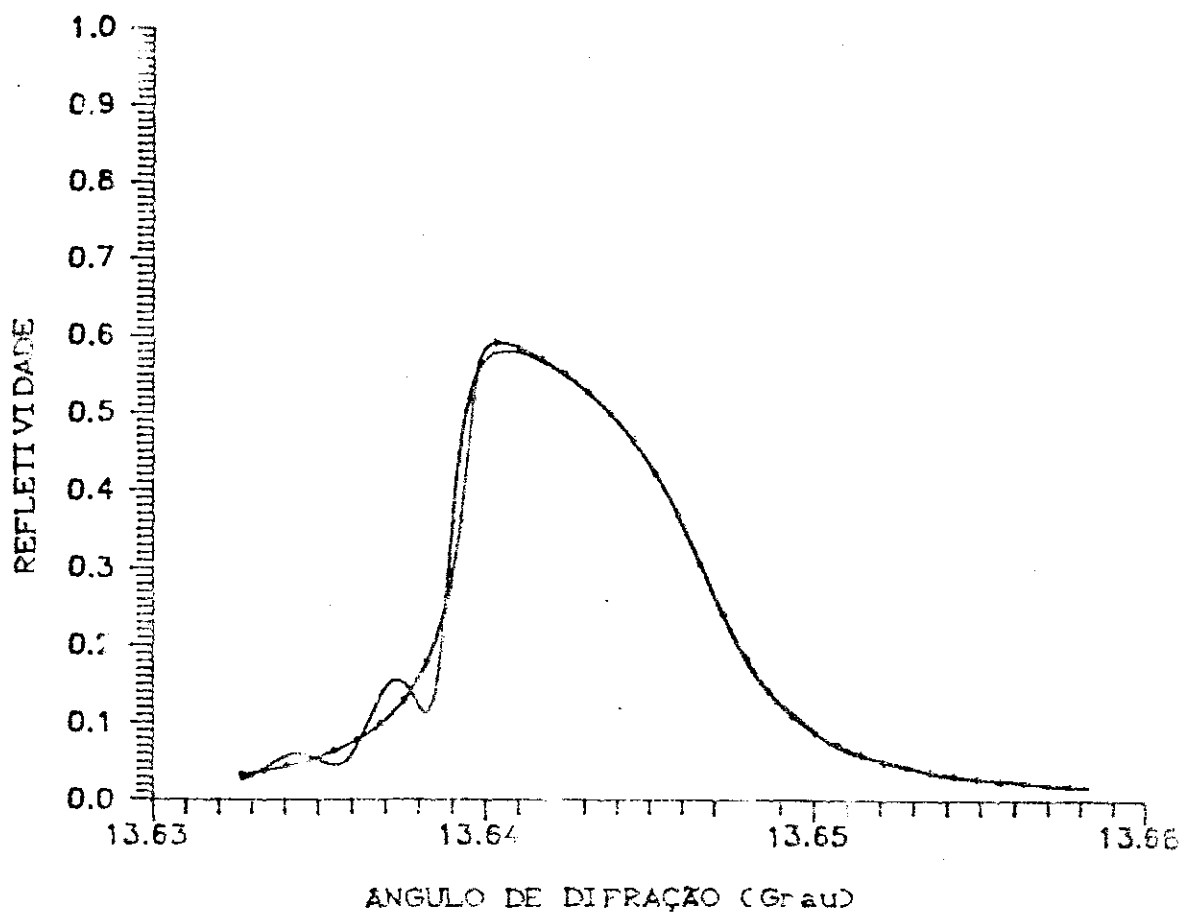
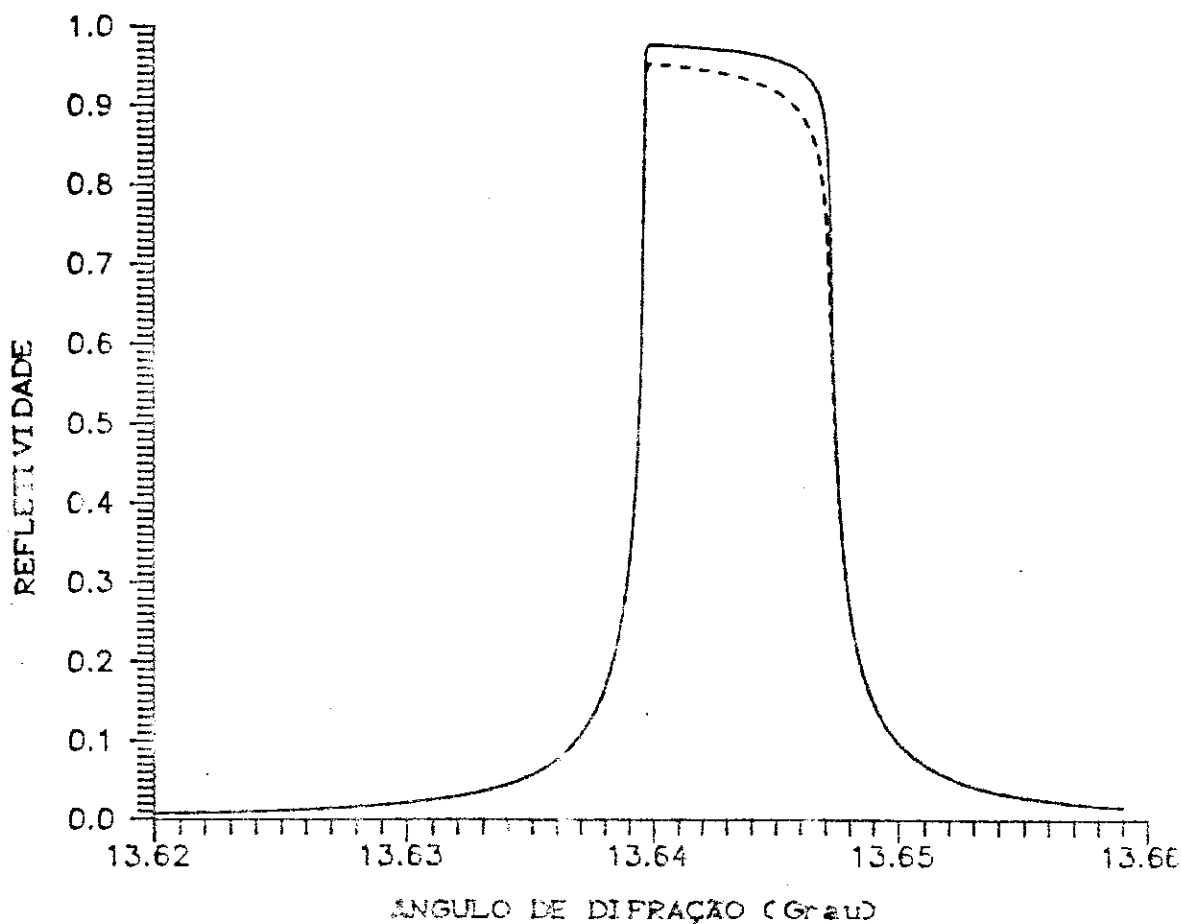


Figura 7.8 - Refletividade versus Angulo de Difracção para três cristais de Ge com, respectivamente, 4.096, 16.384 e 32.768 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Parâmetro de absorção  $\mu = 0.0001$ . Reflexão [111].



- 4096 planos moleculares
- - - 16384 planos moleculares
- · - 32768 planos moleculares

Figura 7.9 - Refletividade versus Angulo de Difração para dois cristais de Ge com, respectivamente, 4.096, e 16.384 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Parâmetro de absorção  $\mu = 0.0003$ . Reflexão [111].



—  $\mu = 0.0006$

- - -  $\mu = 0.0003$

Figura 7.10 - Refletividade versus Ângulo de Difração para dois cristais de Ge infinitamente espessos com parâmetros de absorção, respectivamente, iguais a  $\mu = 0.0006$  e  $\mu = 0.0003$ . Plano Matemático. Polarização sigma, Radiação Cu K $\alpha$ , Reflexão [111].

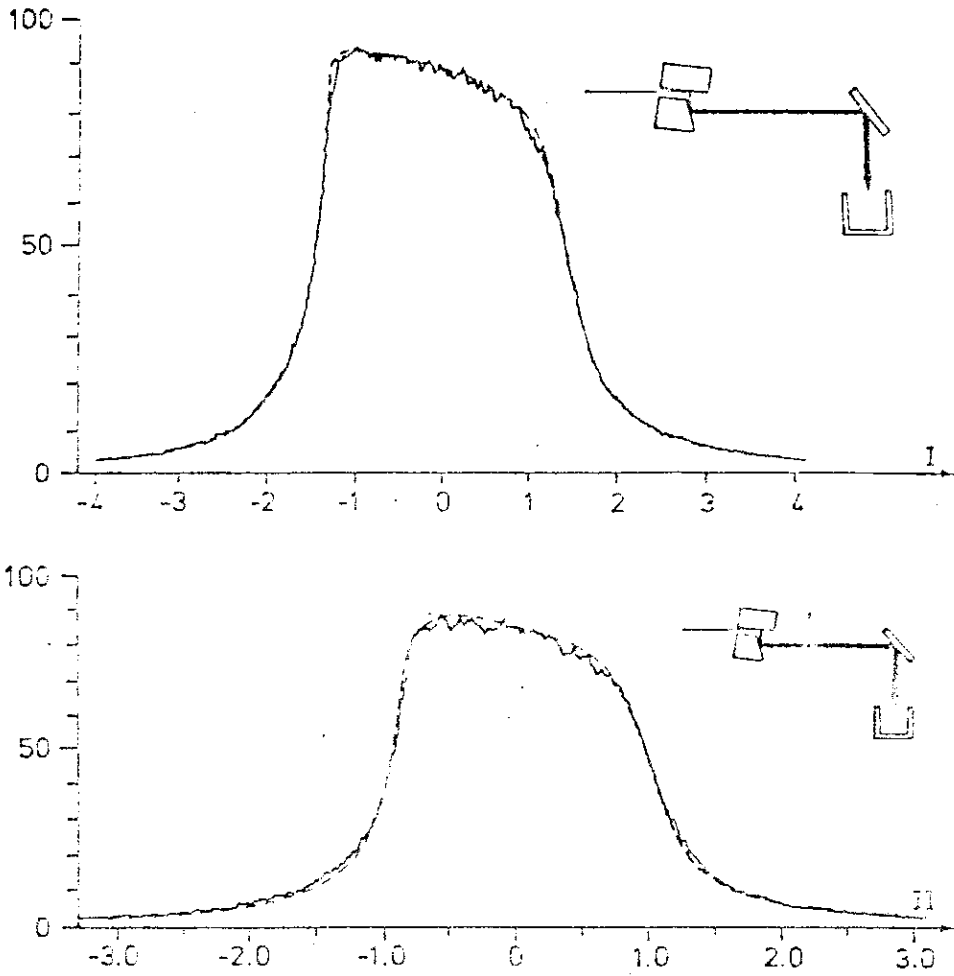


Figura 7.11 - Refletividade (Rocking Curve) para as Reflexões [422] e [333] do Si. Reprodução da figura 9.12 do livro: Z. G. Pinsker, *Dynamical Scattering of X-Rays in Crystals*, Springer Series in Solid-State Sciences 3 (1978) pg. 316.

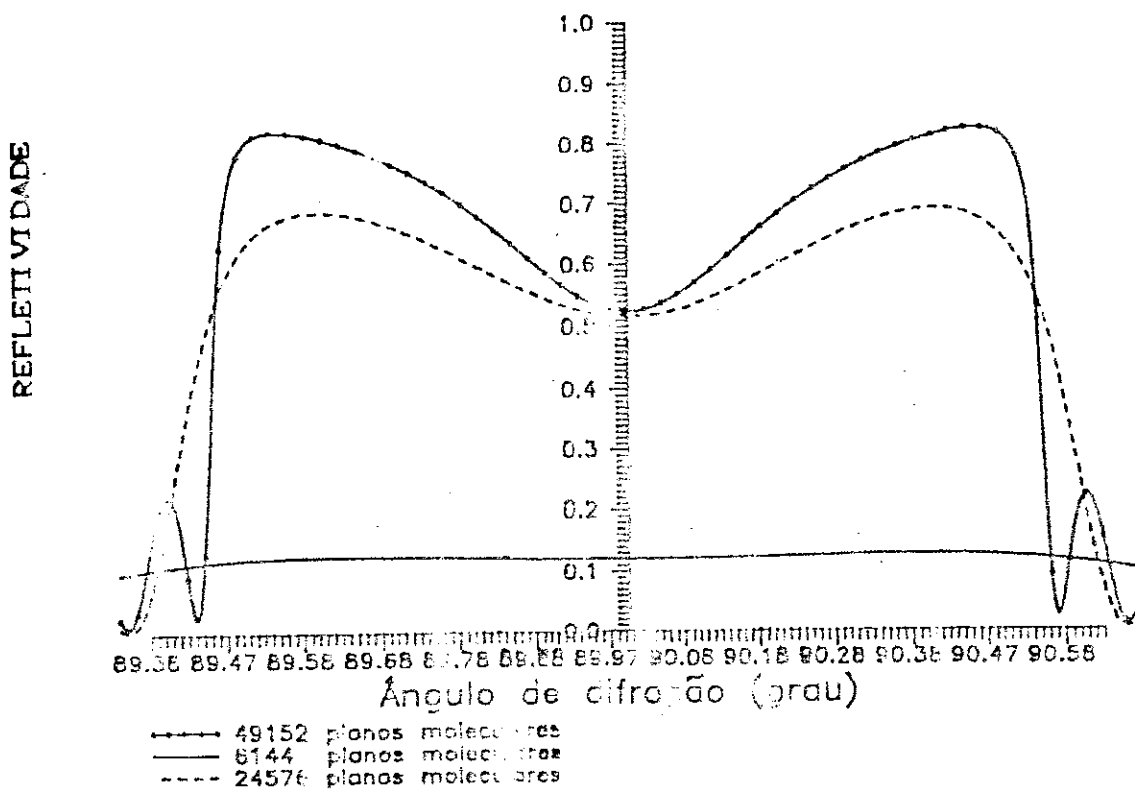


Figura 7.12 - Refletividade versus Ângulo de Difração para três cristais de Ge com, respectivamente, 6.144, 24.576 e 49.152 planos moleculares. Parâmetro de absorção  $\mu = 0.00001$ . Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Co K $\alpha$ . Reflexão {620}.

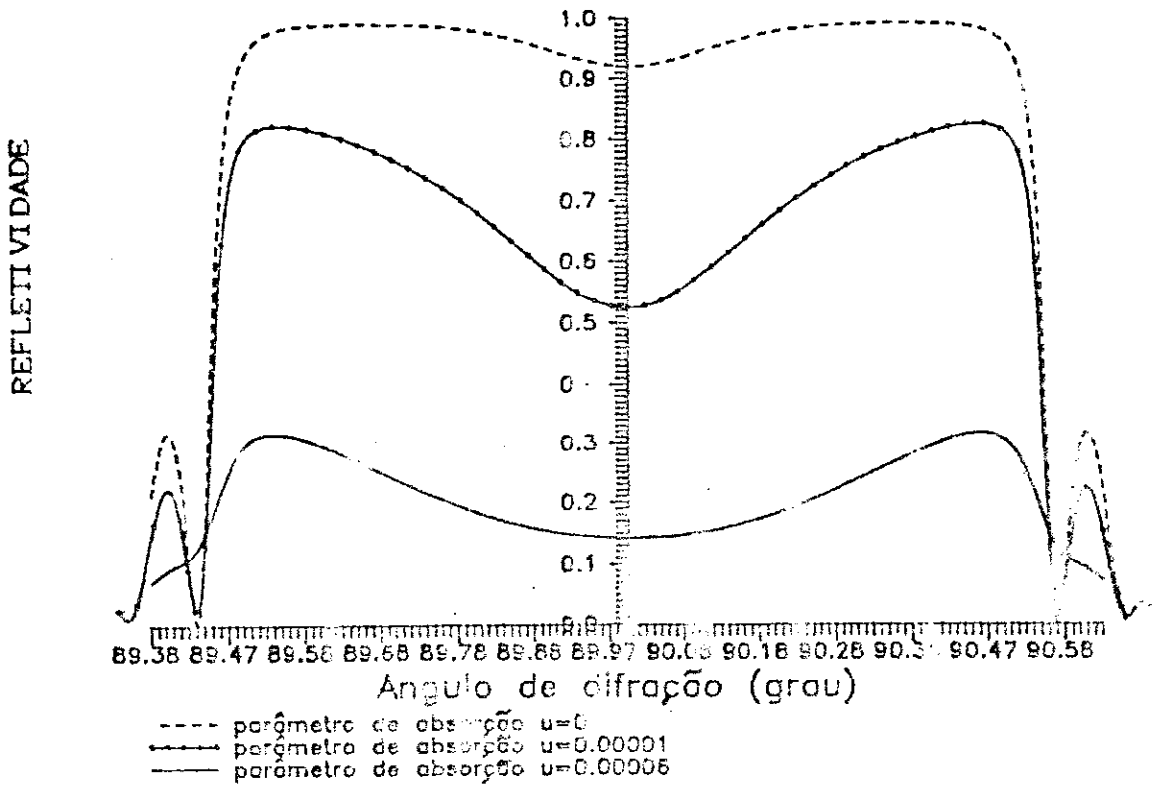


Figura 7.13 - Refletividade versus Angulo de Difração para três cristais de Ge com 49.152 planos moleculares, com parâmetros de absorção iguais a, respectivamente,  $\mu = 0.00006$  e  $\mu = 0.00001$ ,  $\mu = 0$ . Plano Matemático. Polarização sigma, Radiação Co K $\alpha$ . Reflexão {620}.



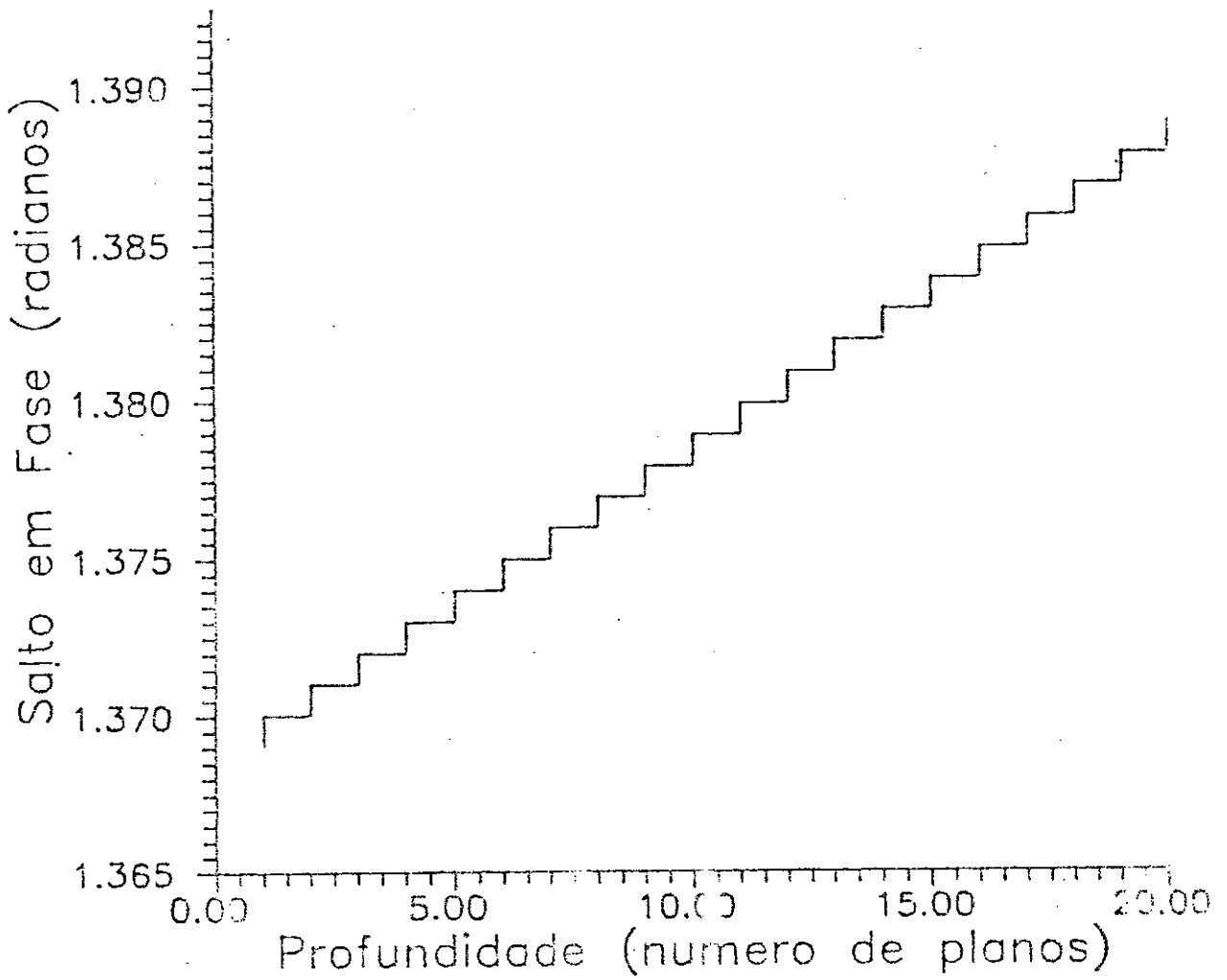


Figura 7.14 - Salto em Fase sofrido pela onda A no interior do cristal, ao longo da direção de propagação, nos 20 primeiros planos apartir da superfície do cristal.

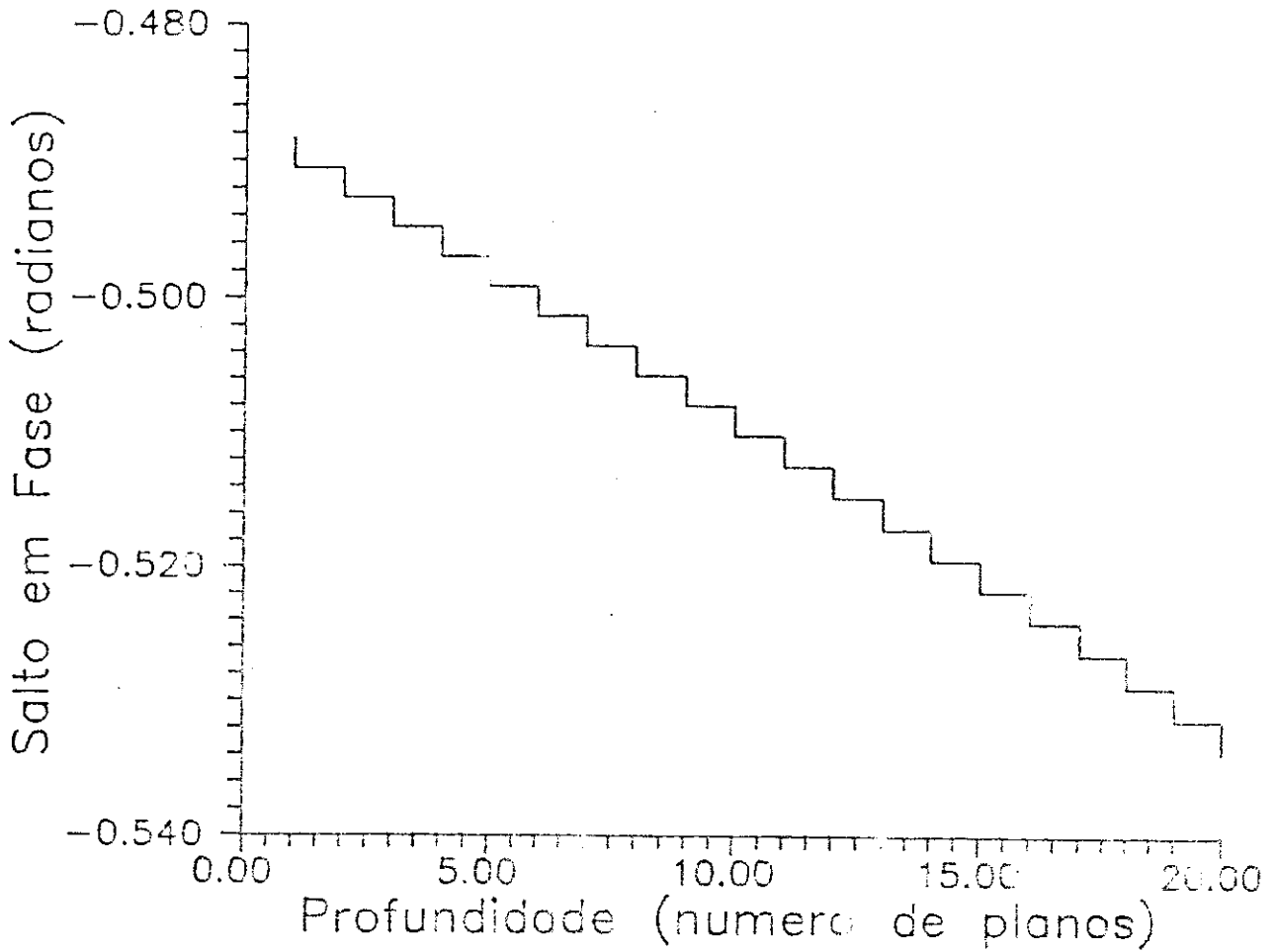


Figura 7.15 - Salto em Fase sofrido pela onda *B* no interior do cristal, nos 20 primeiros planos apartir da superfície do cristal.

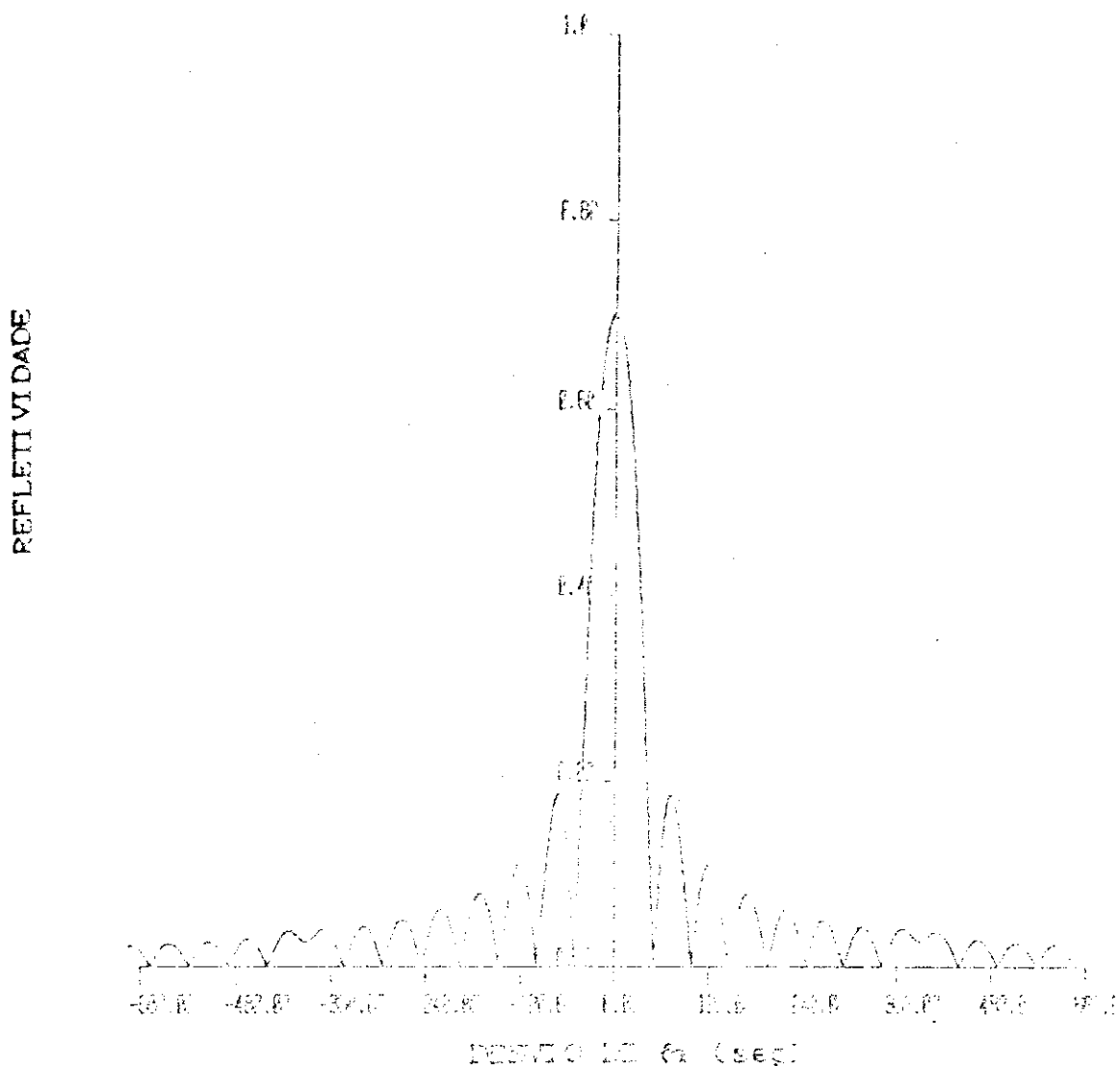


Figura 7.15 - Refletividades versus desvio de Ângulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 8 Camadas de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 64 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão (111).

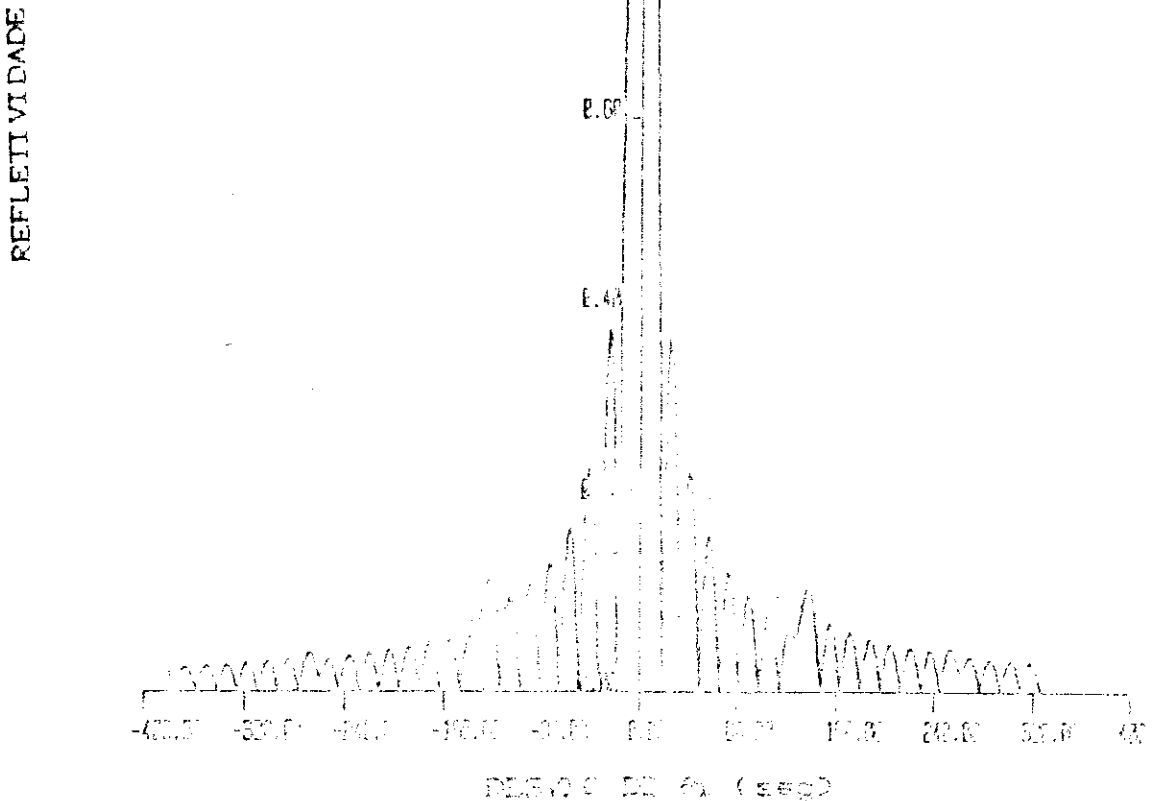


Figura 7.17 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg, para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 7 Camadas de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 128 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sgn. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

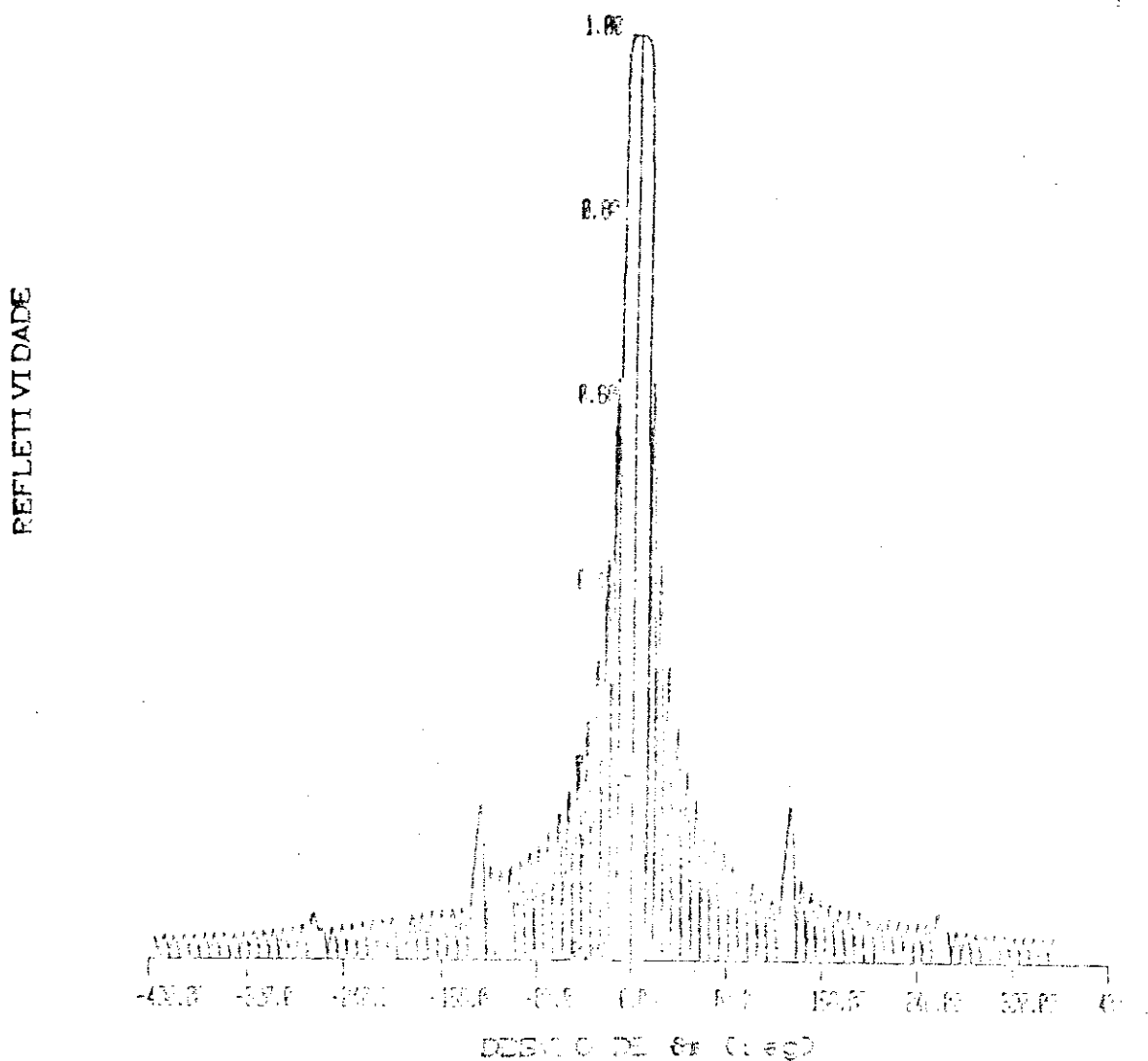


Figura 7.19 - Refletividade versus desvio do Ângulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 16 Celas de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 128 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

REFLETIVIDADE

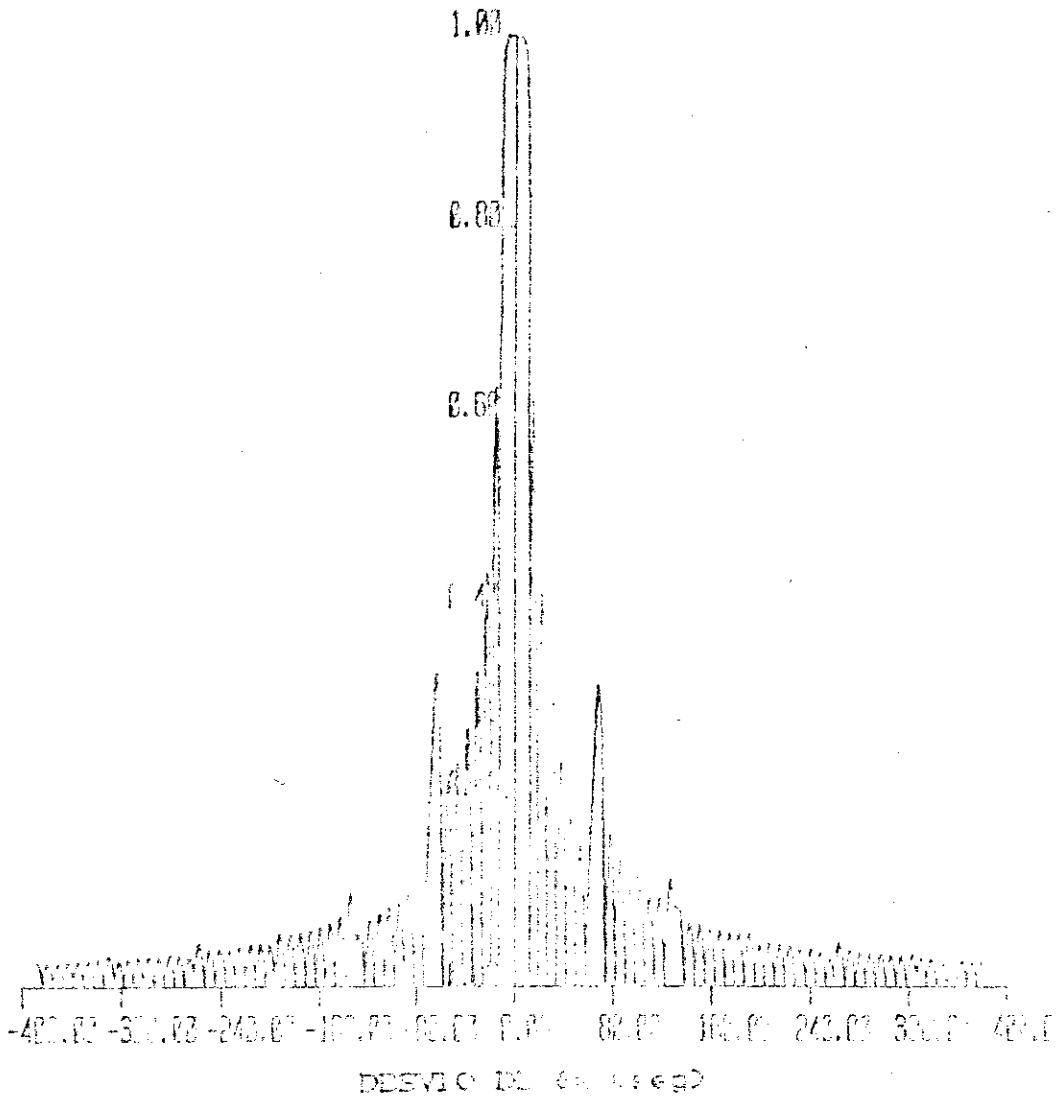


Figura 7.18 - Refletividade versus desvio do Ângulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 8 Camadas de super-rede composta de camadas Ge e GaAs com 255 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sígnal. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

REFLETIVIDADE

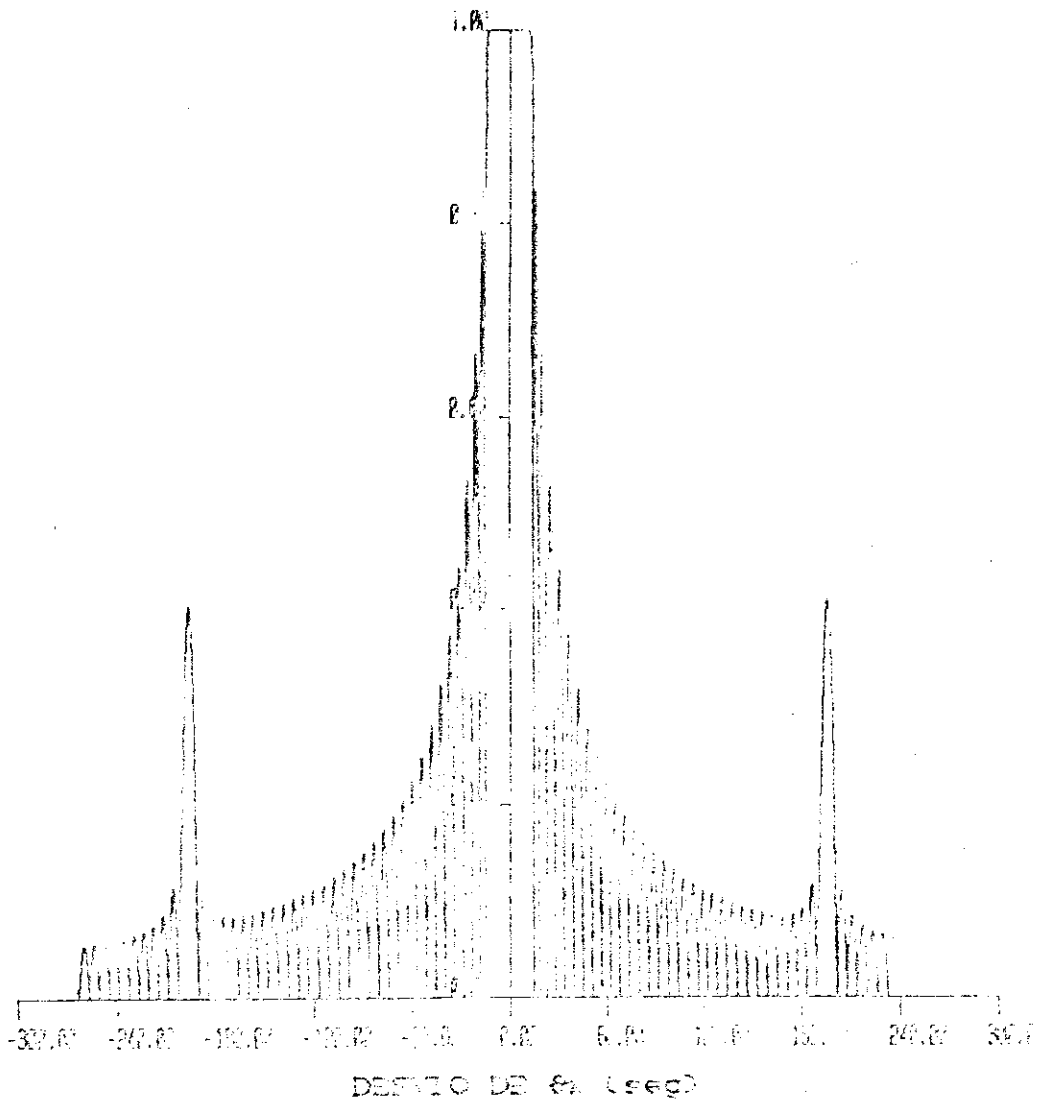


Figura 7.20 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 32 Celas de super-rede composta de camadas de Ge e GaAs com 128 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão (111).

REFLETIVIDADE

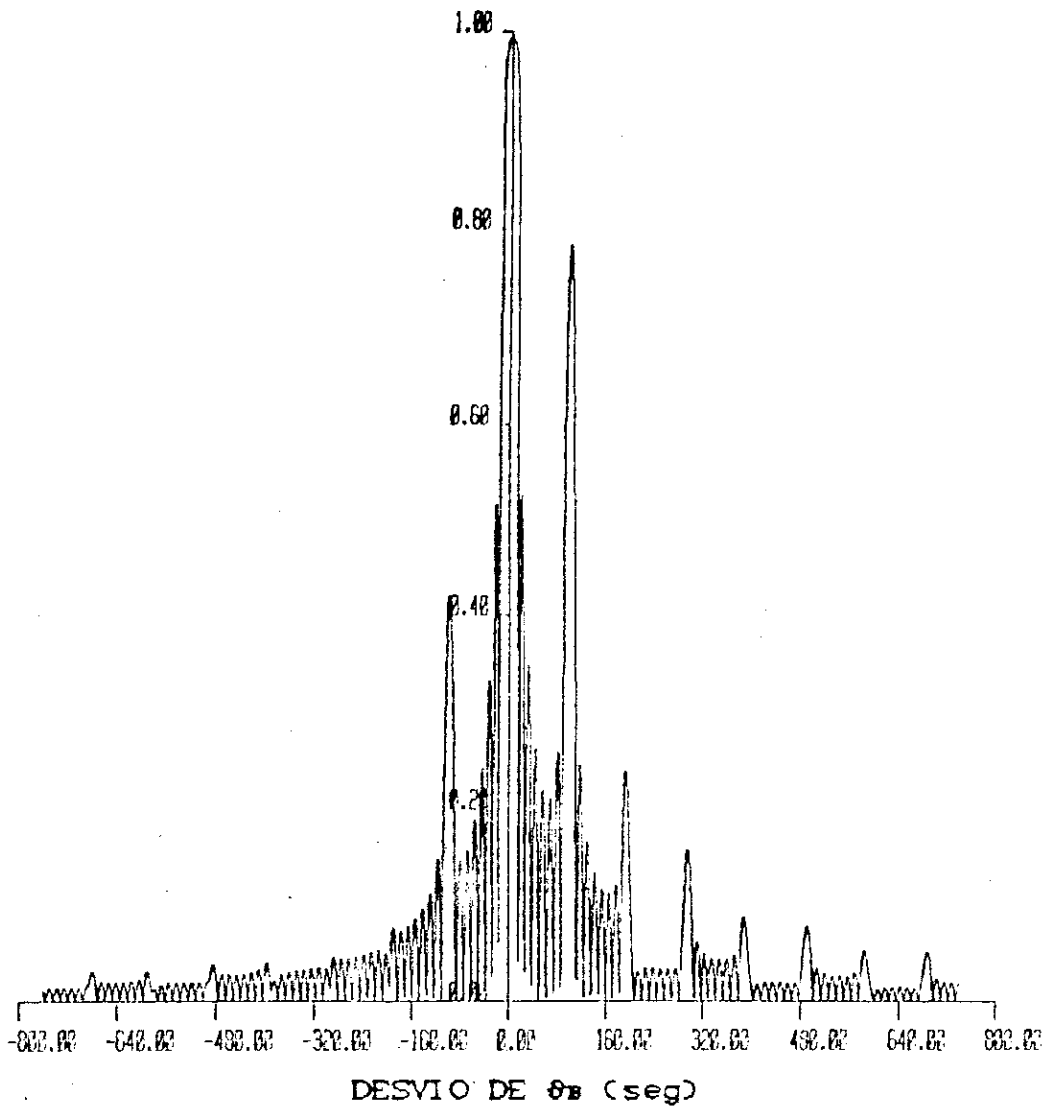


Figura 7.21 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 8 Celas de super-rede composta de camadas de AlAs e GaAs com 256 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de AlAs na superficie superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].



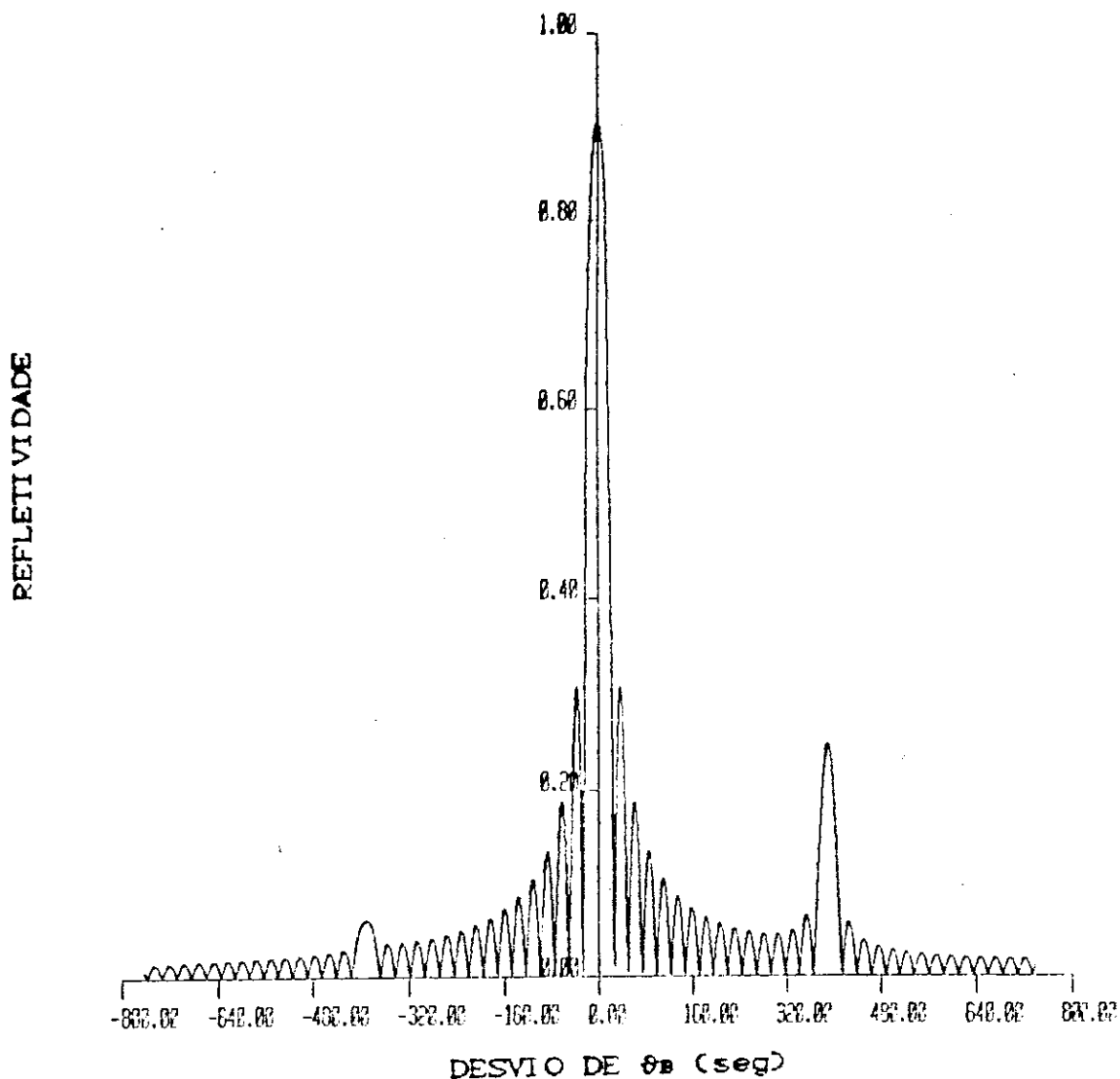


Figura 7.22 - Refletividade versus desvio do Angulo de Bragg para uma hetero-estrutura, sem substrato, formada por 16 Celas de super-rede composta de camadas de AlAs e GaAs com 64 planos moleculares cada. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de AlAs na superfície superior. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

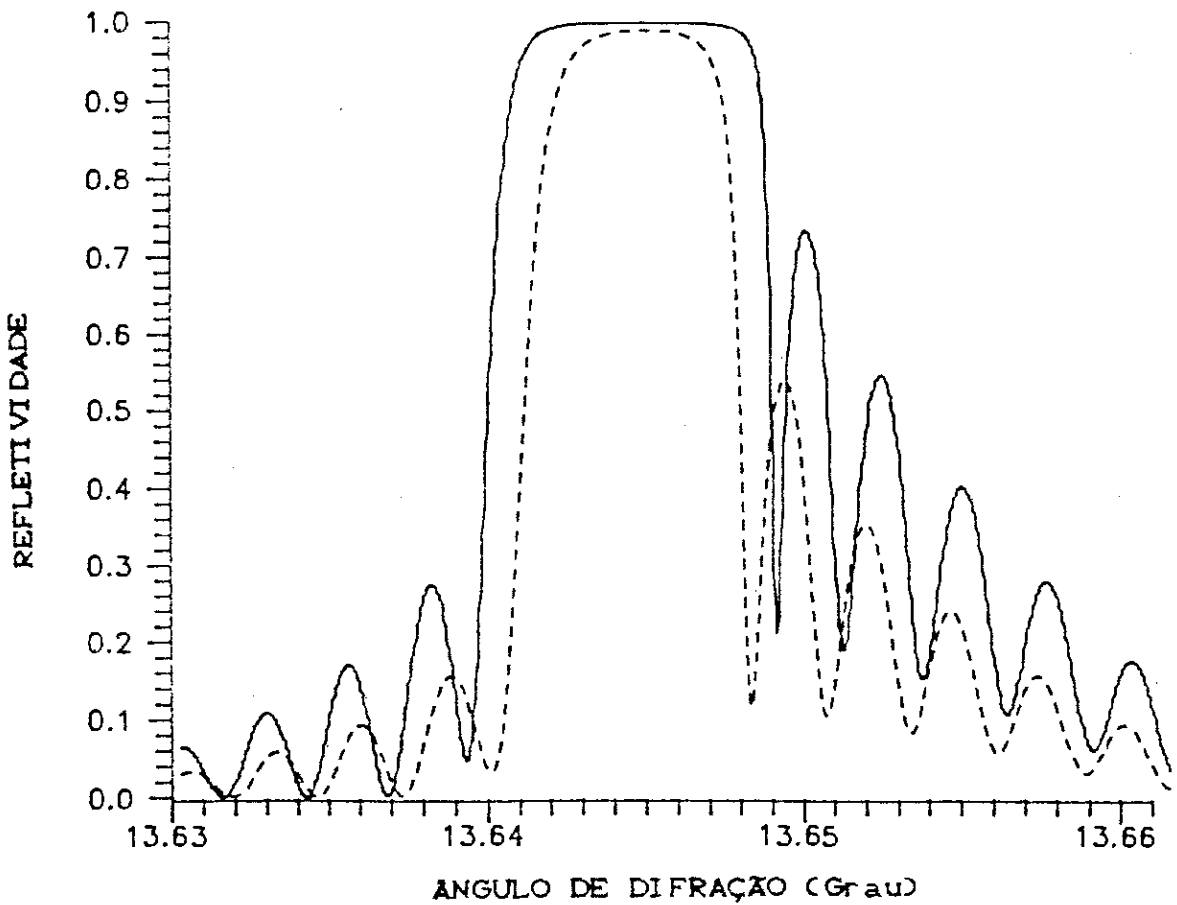


Figura 7.23 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura formada por 8 bi-camadas composta com, 64 e 32 planos moleculares de, respectivamente, GaAs e Ge sobre um substrato de Ge com 4500 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [111].

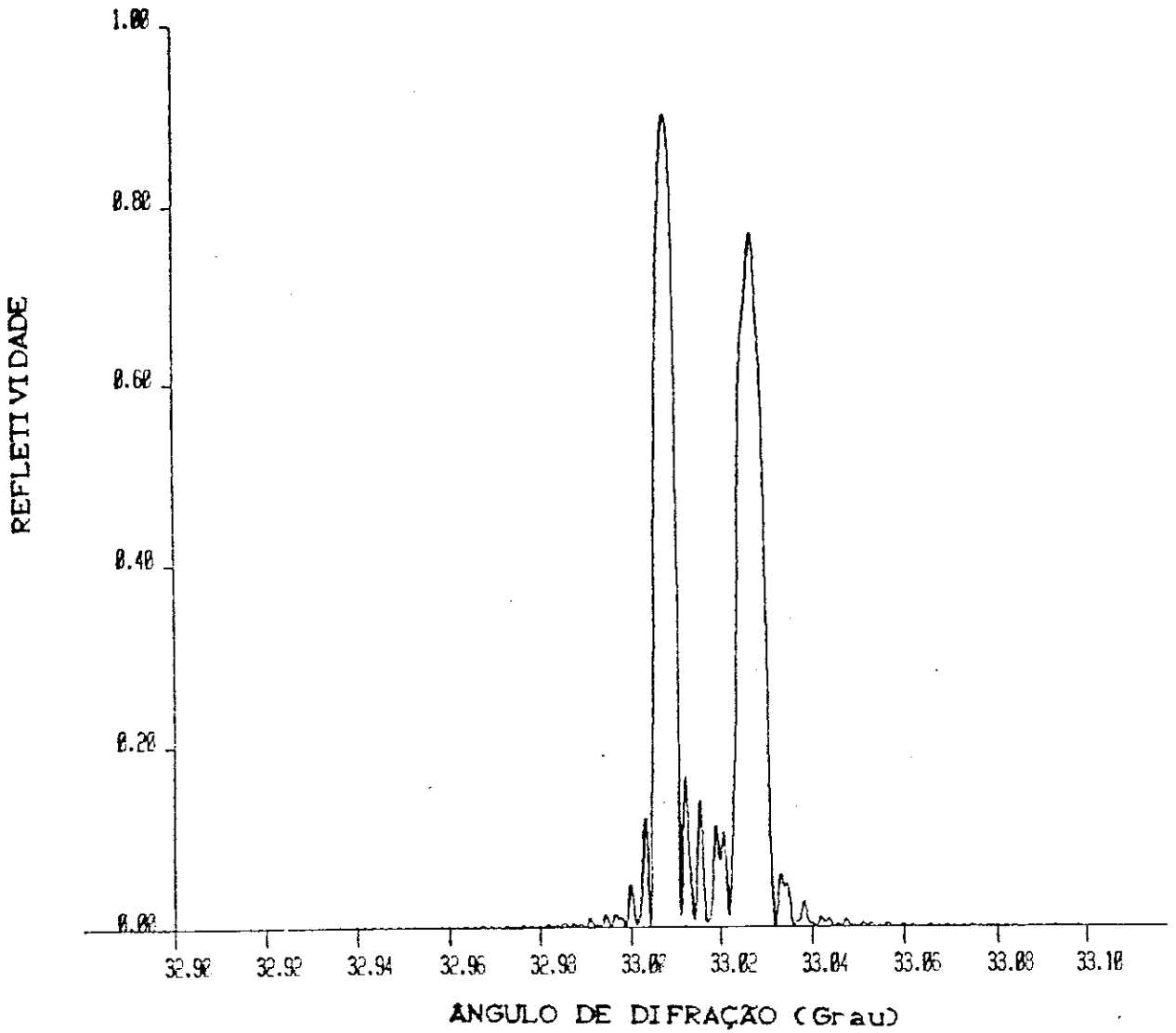


Figura 7.24 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura formada por 128 bi-camadas composta com, 64 e 32 planos moleculares de, respectivamente, GaAs e AlAs sobre um substrato de Ge com 8192 planos moleculares. Plano Físico. Polarização sigma. Radiação Cu K $\alpha$ . Reflexão [004].

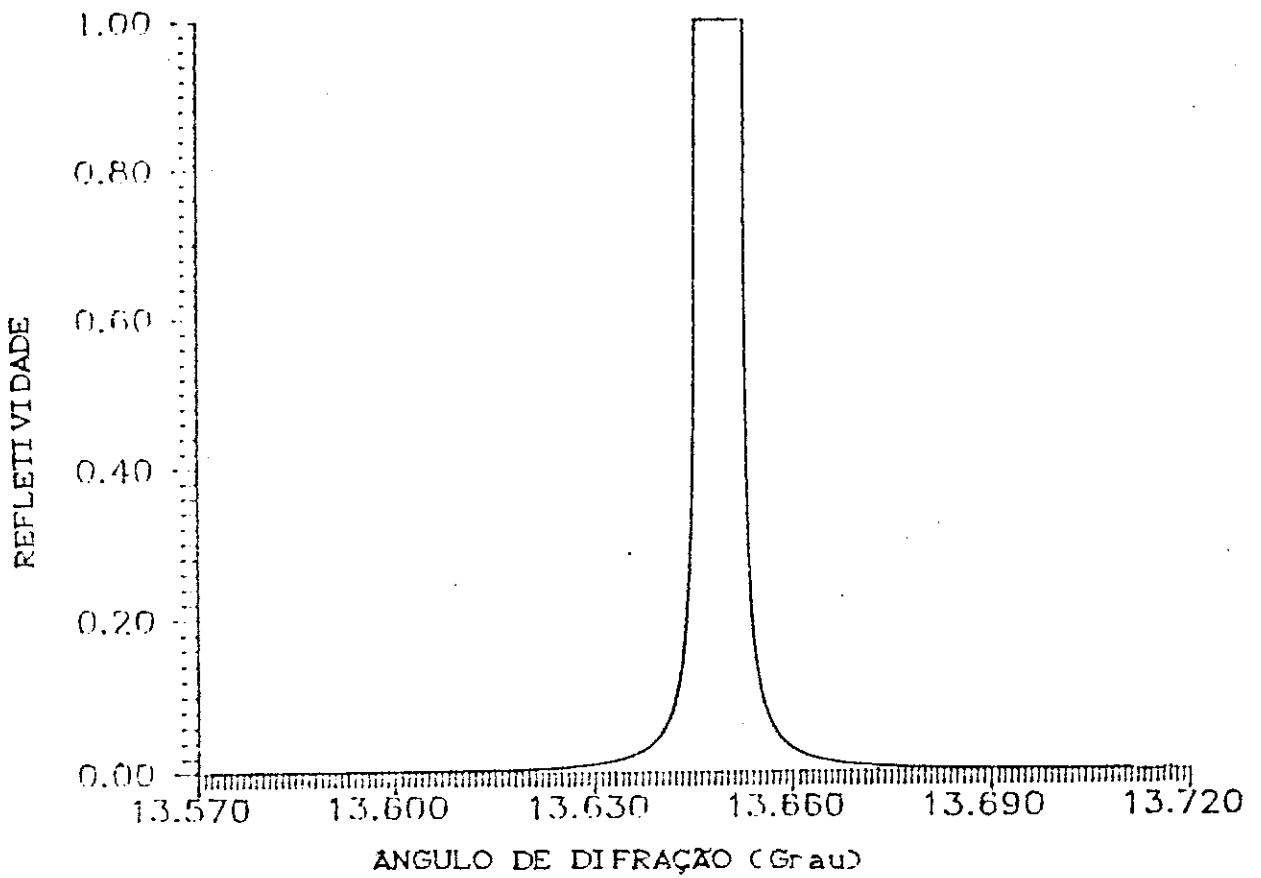


Figura 7.25 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa. Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 8 e 8 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de GaAs na superfície superior. Reflexão [111].

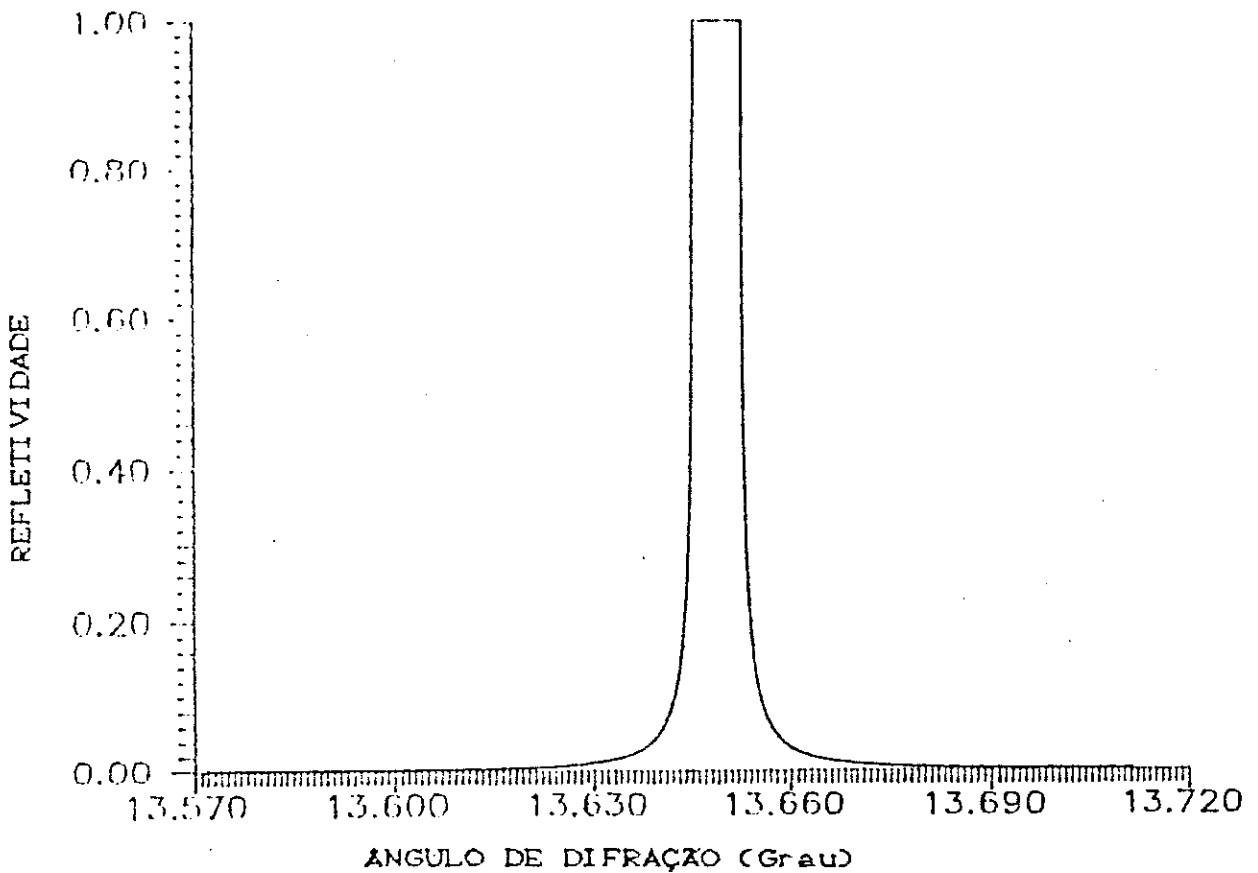


Figura 7.26 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 8 e 8 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão (111).

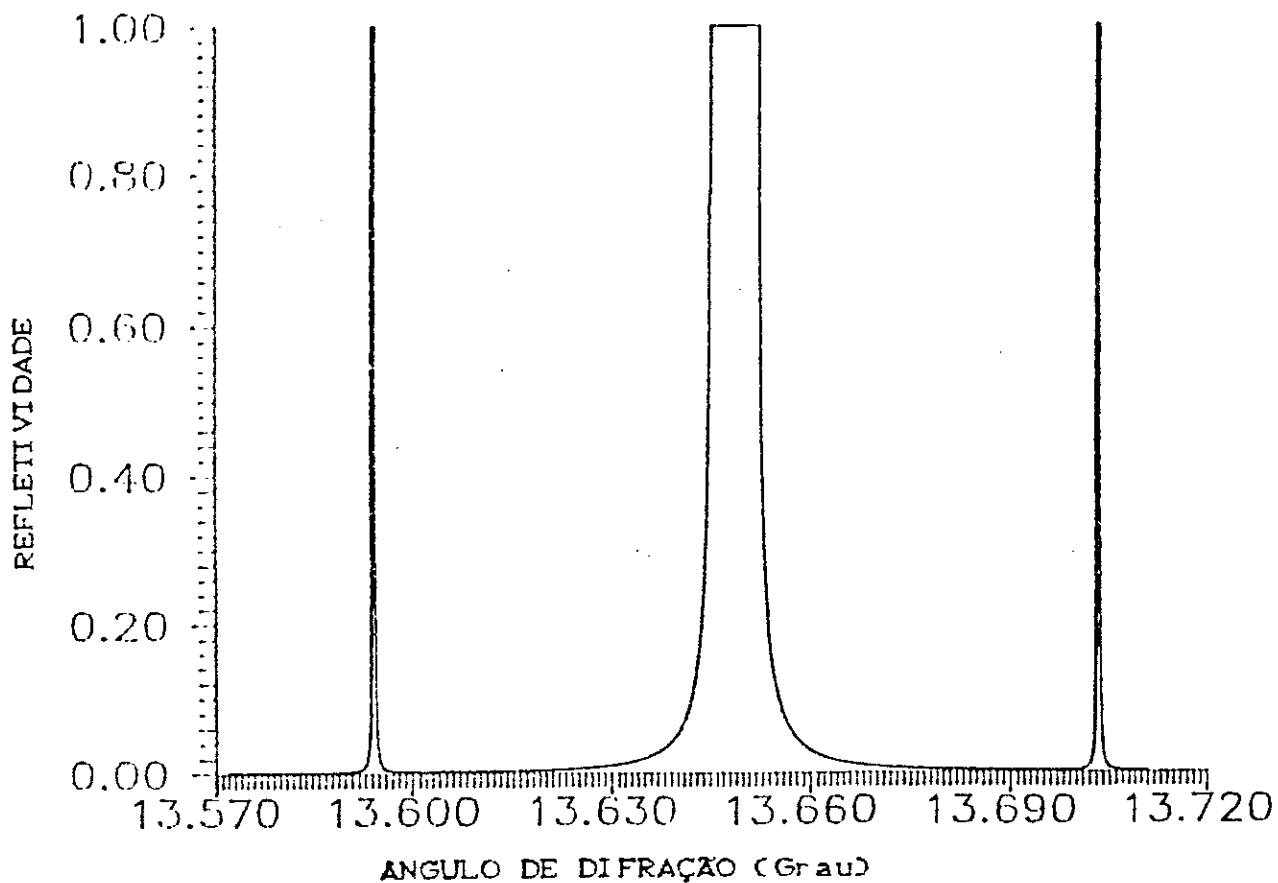


Figura 7.27 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 128 e 128 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

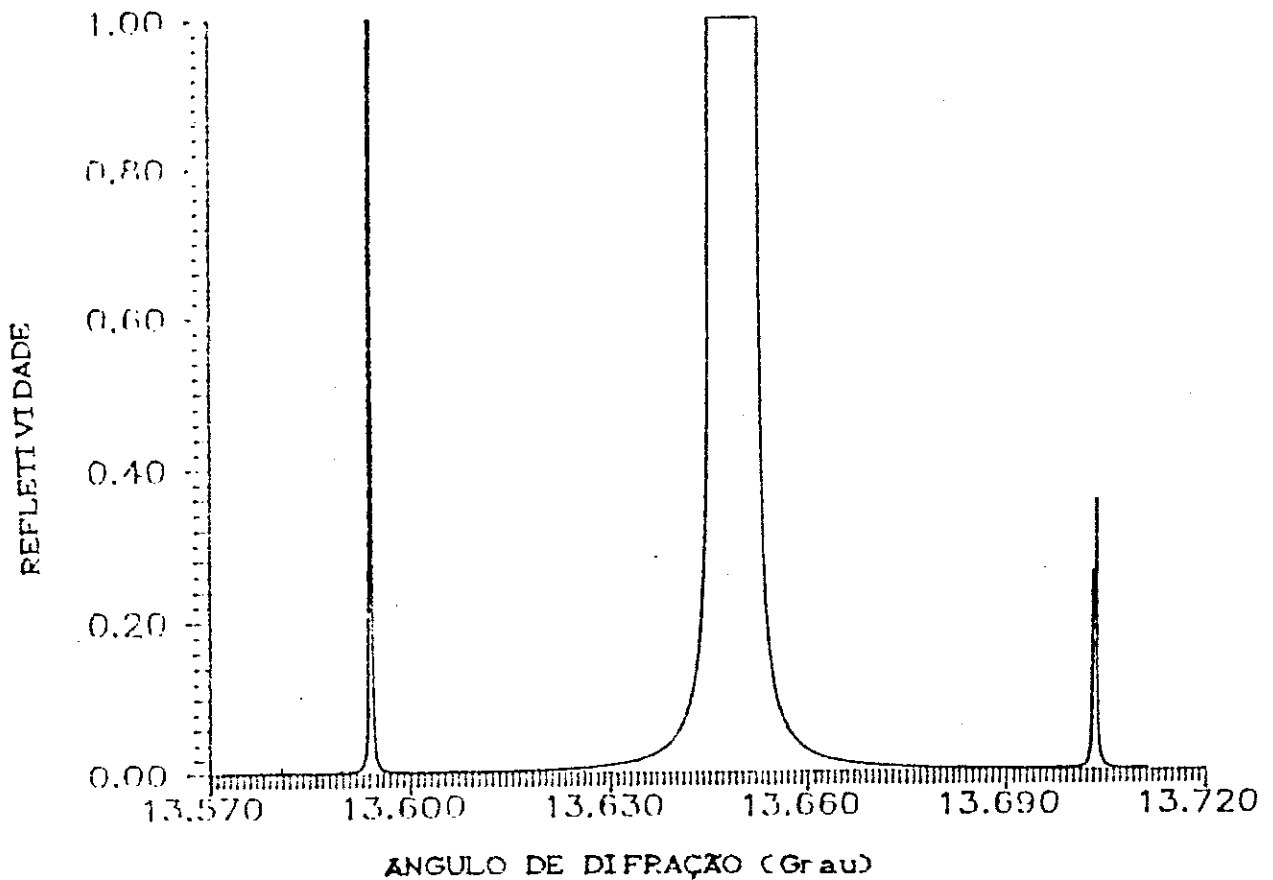


Figura 7.28 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 128 e 128 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de GaAs na superficie superior. Reflexão [111].

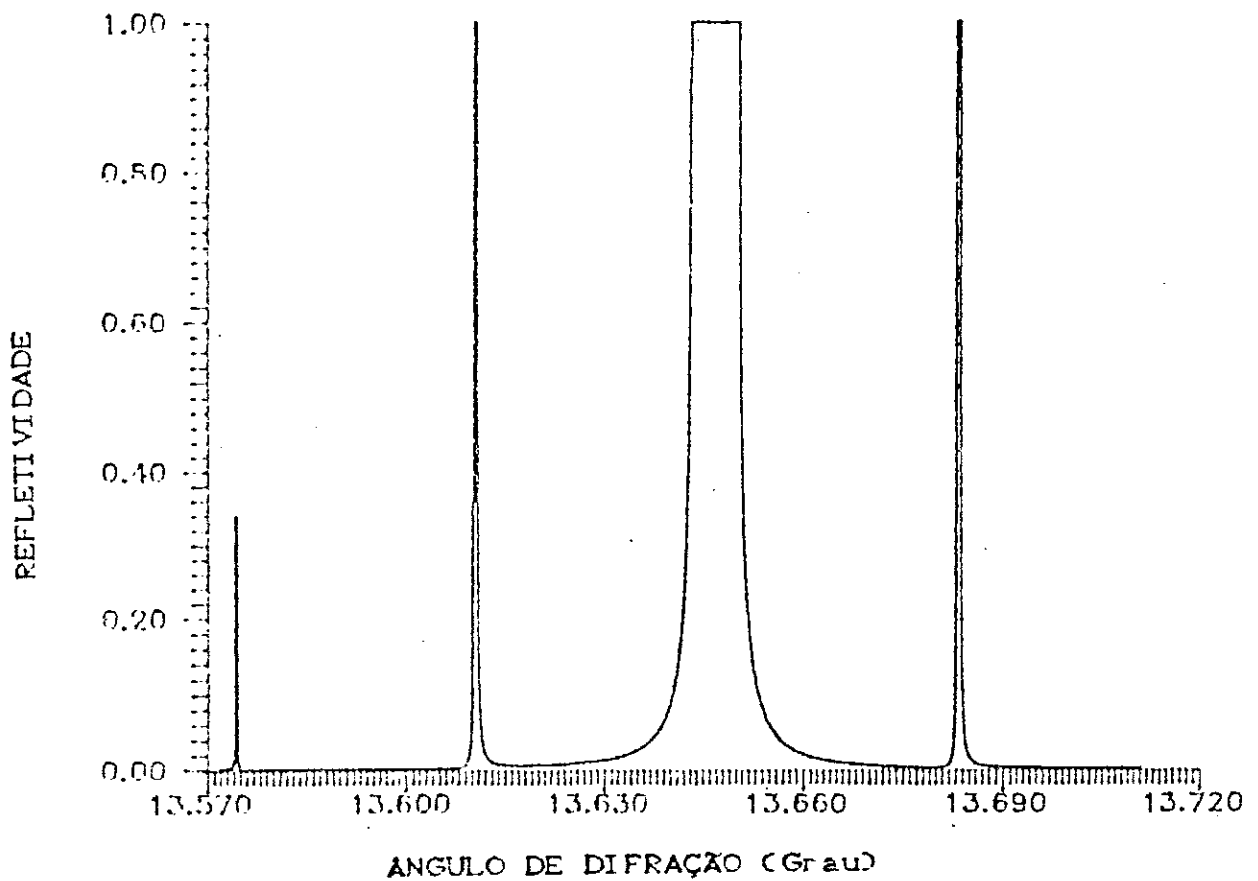


Figura 7.29 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 256 e 128 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superficie superior. Reflexão [111].



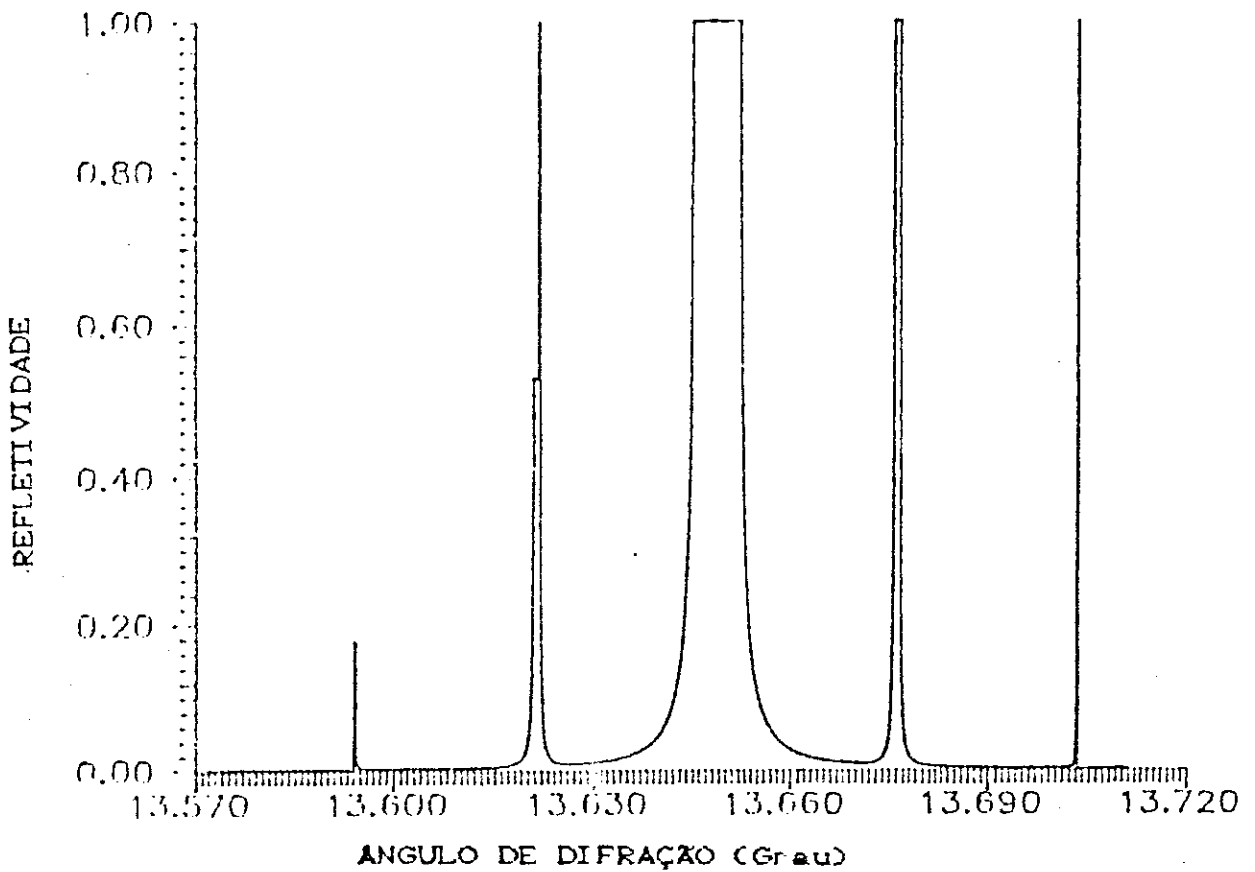


Figura 7.30 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 256 e 256 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

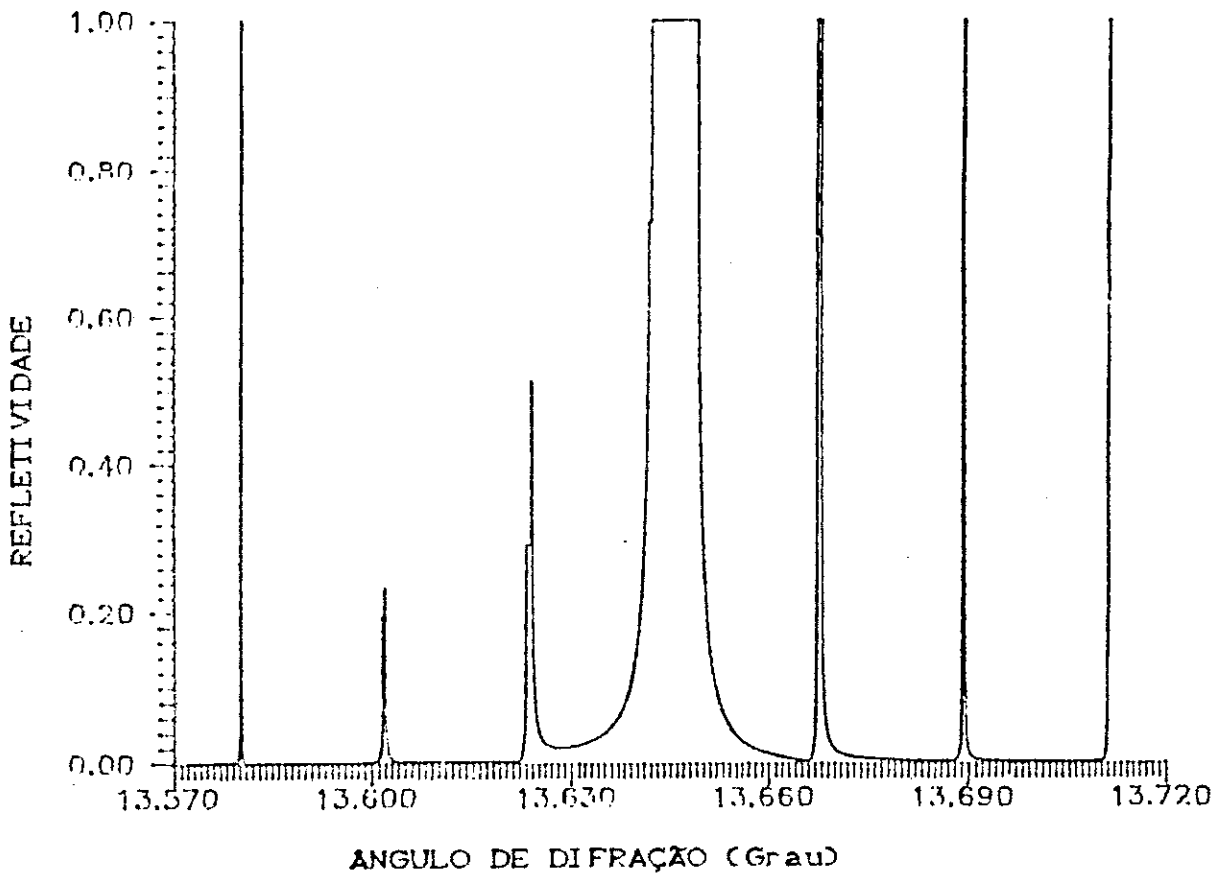


Figura 7.31 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 512 e 128 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

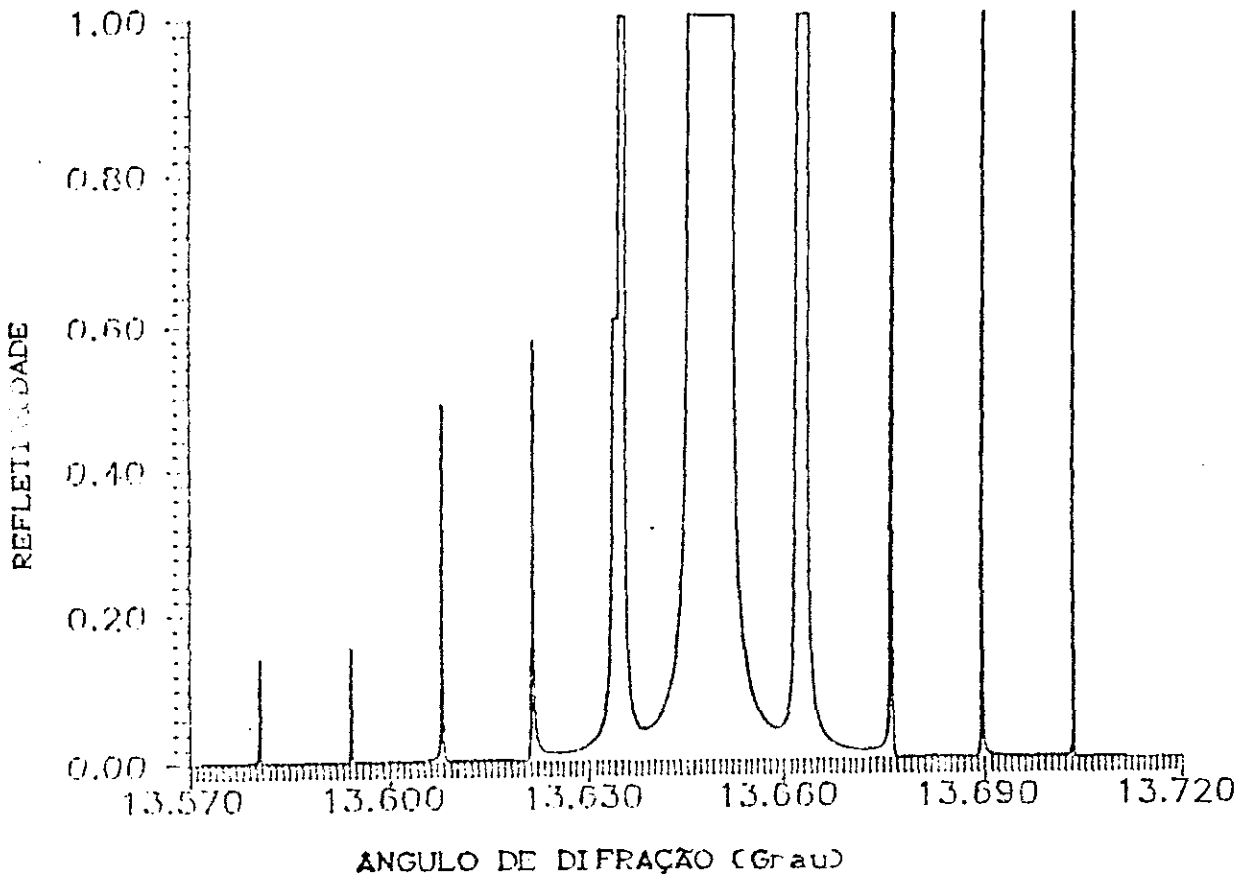


Figura 7.32 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 512 e 512 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

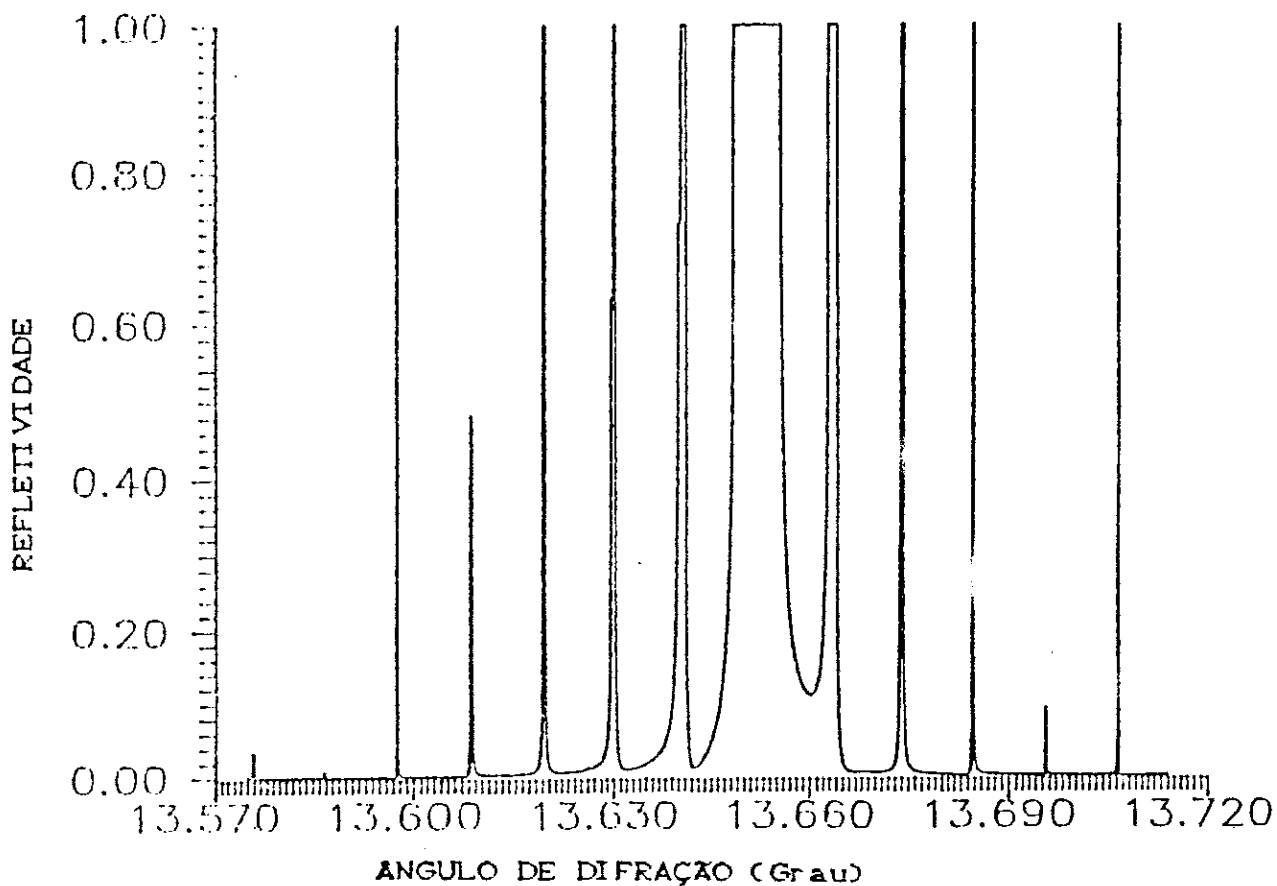


Figura 7.33 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 256 e 1024 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão {111}.

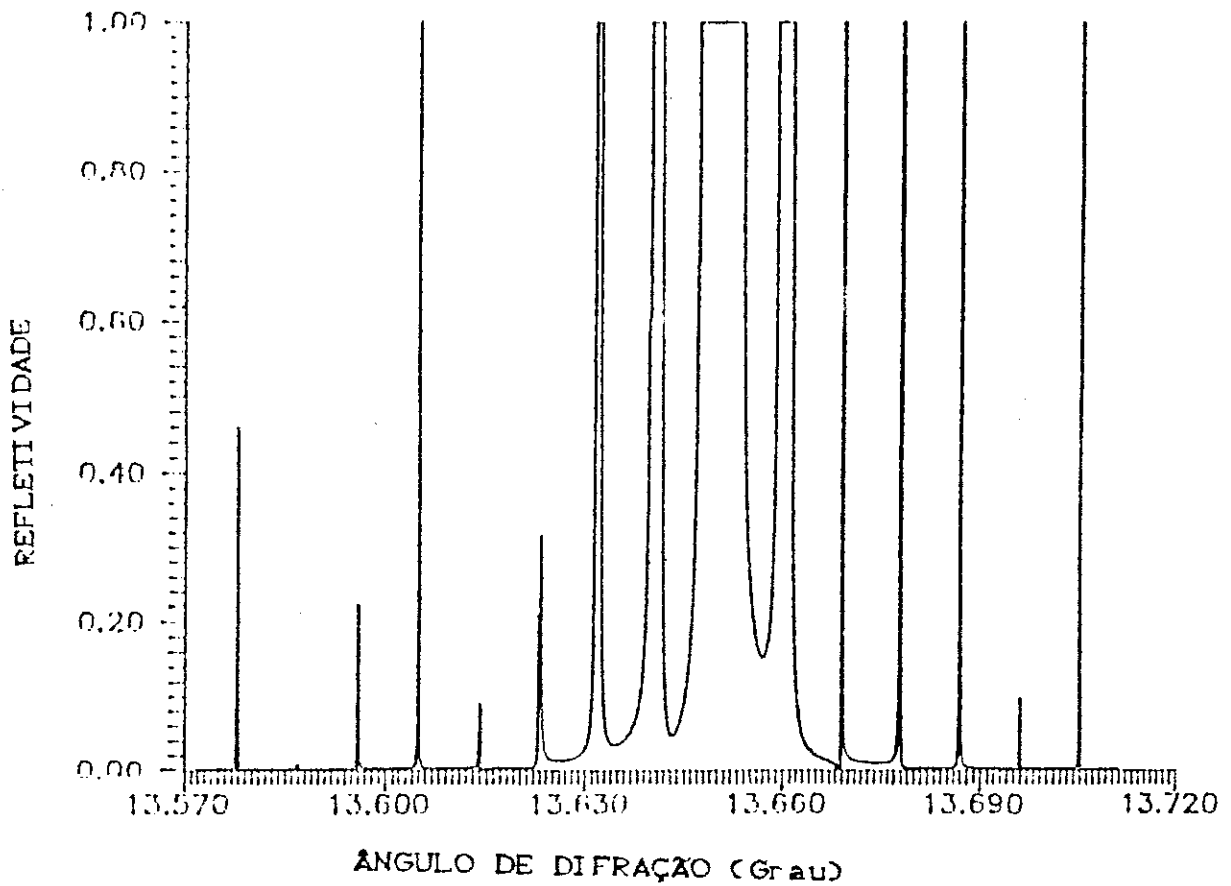


Figura 7.34 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 512 e 1024 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

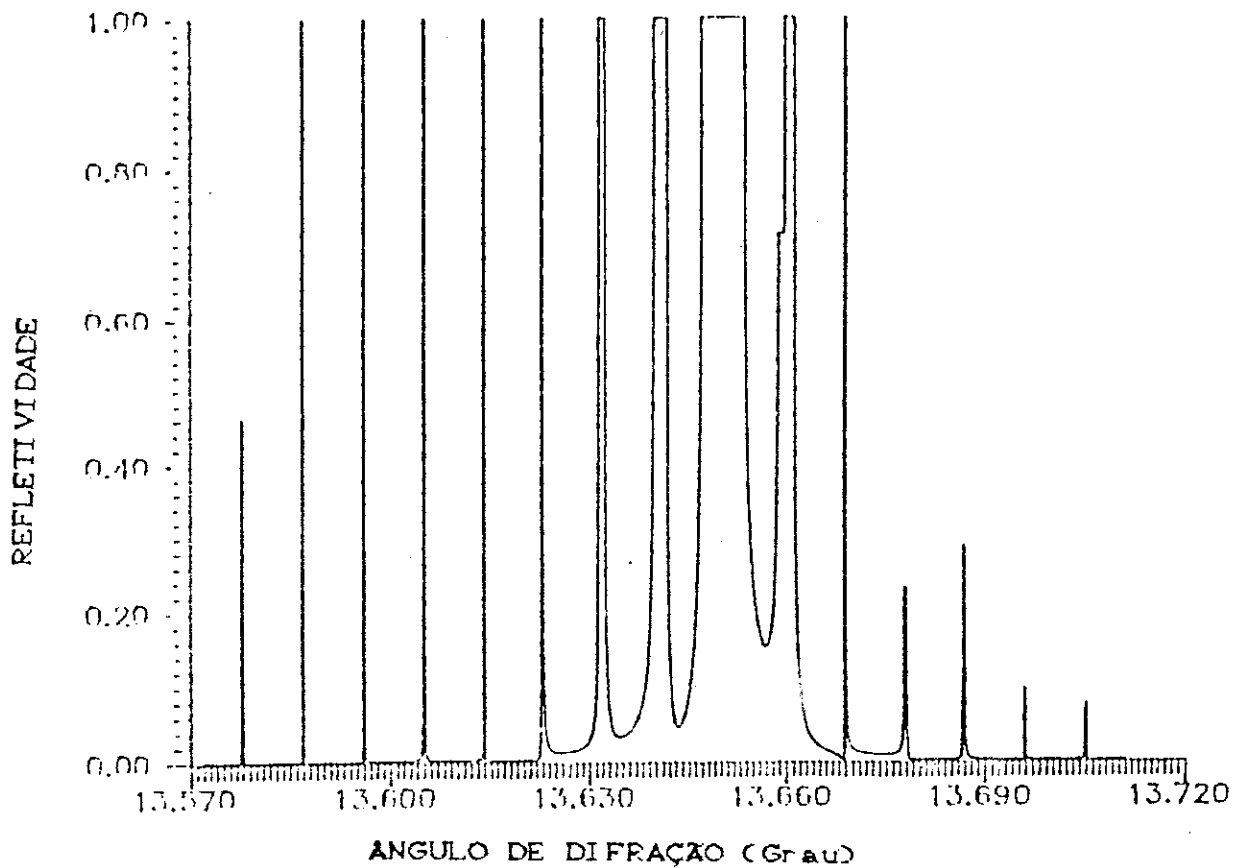


Figura 7.35 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 512 e 1024 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de GaAs na superfície superior. Reflexão [111].

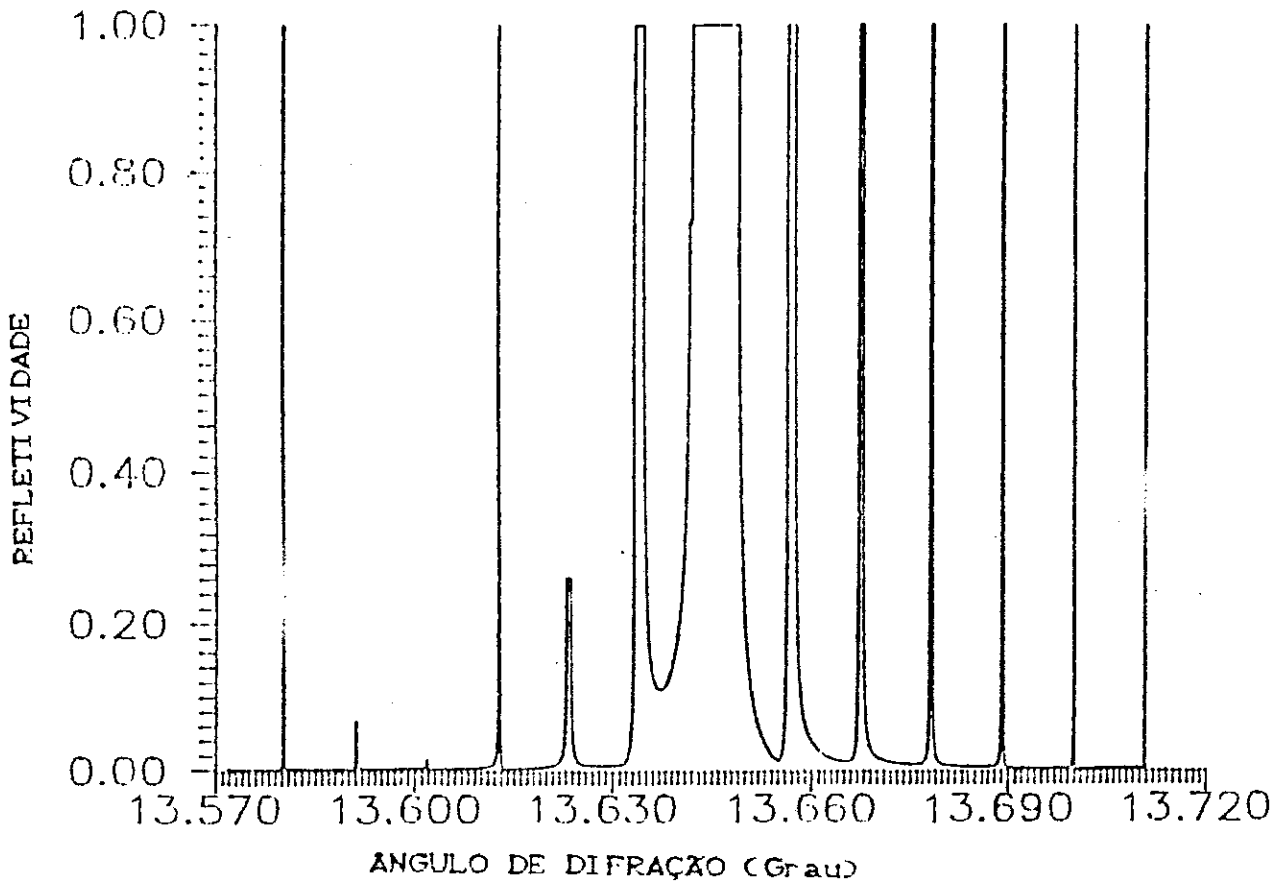


Figura 7.36 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 1024 e 256 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

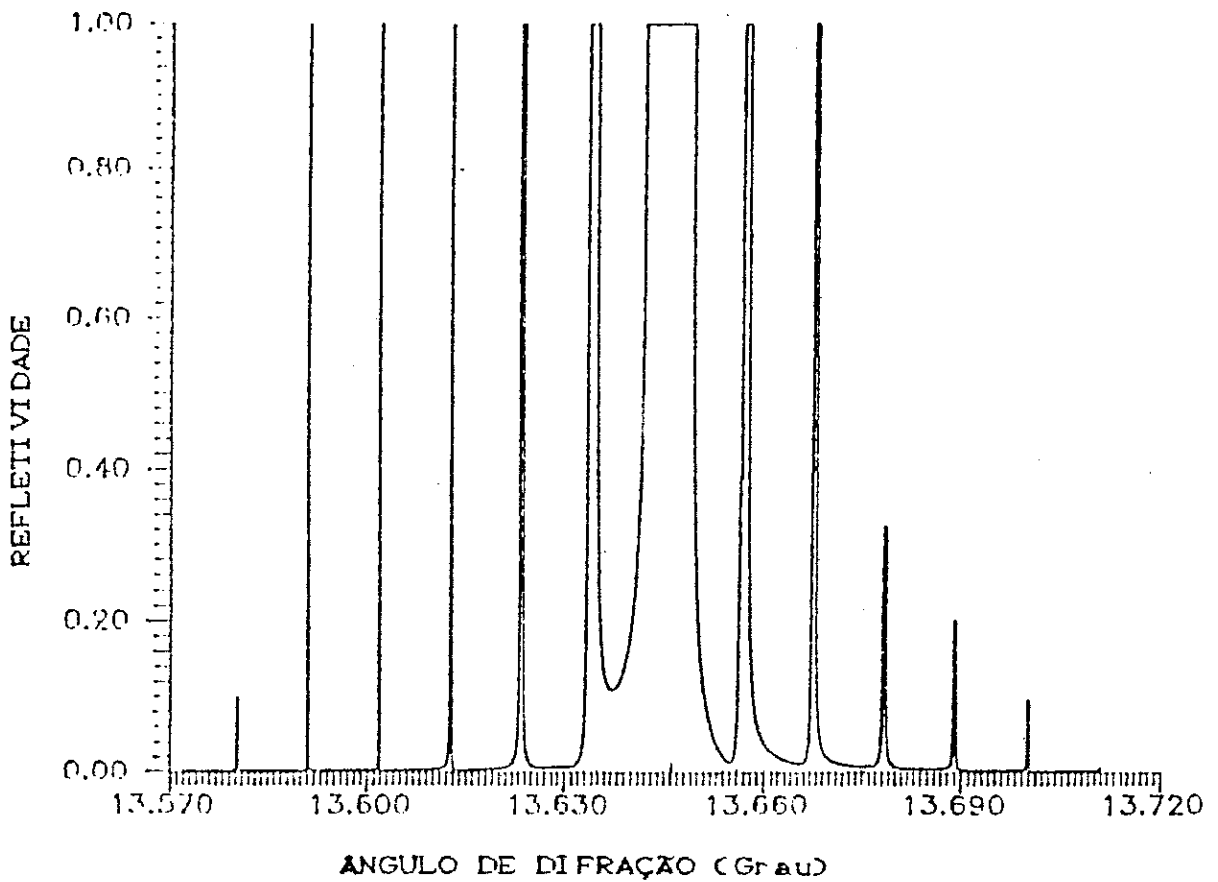


Figura 7.37 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa. Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 1024 e 256 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de GaAs na superfície superior. Reflexão [111].



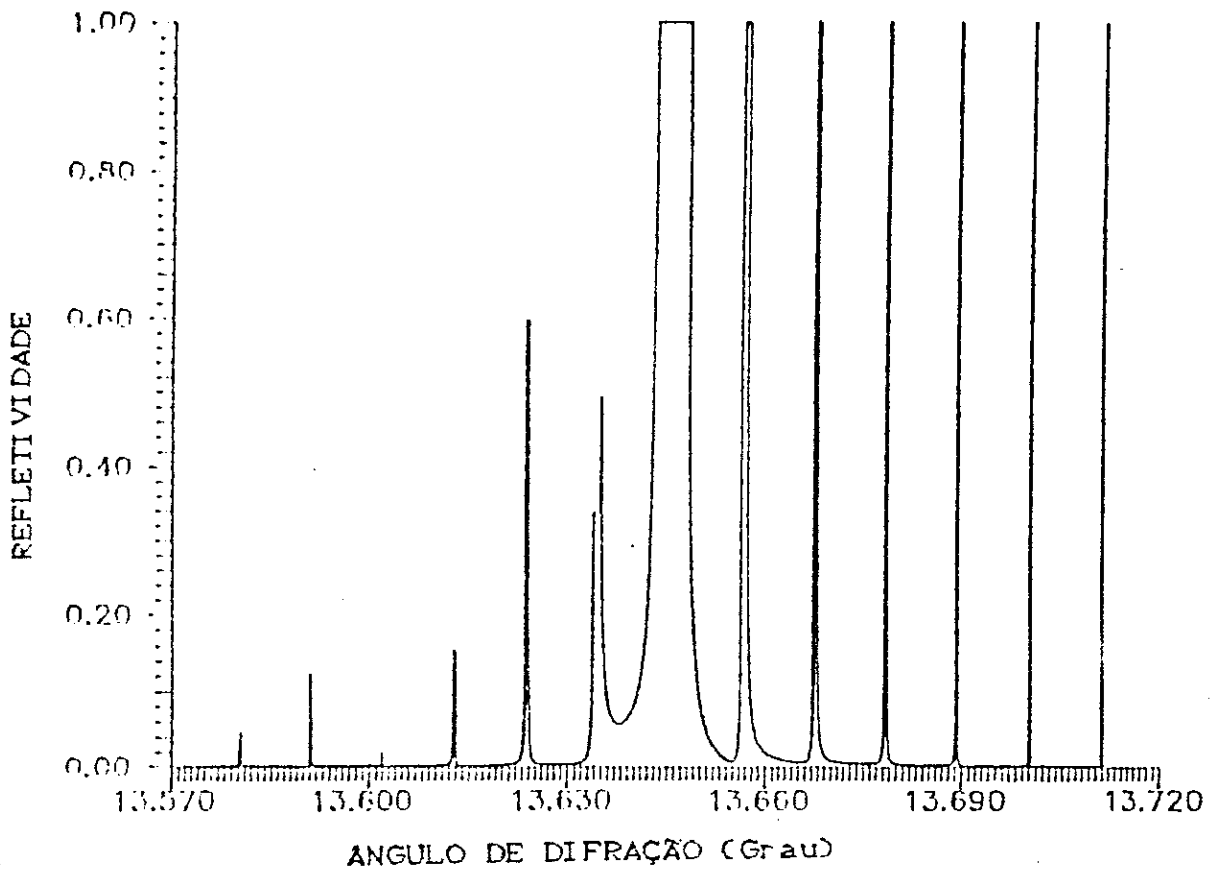


Figura 7.38 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 1024 e 256 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

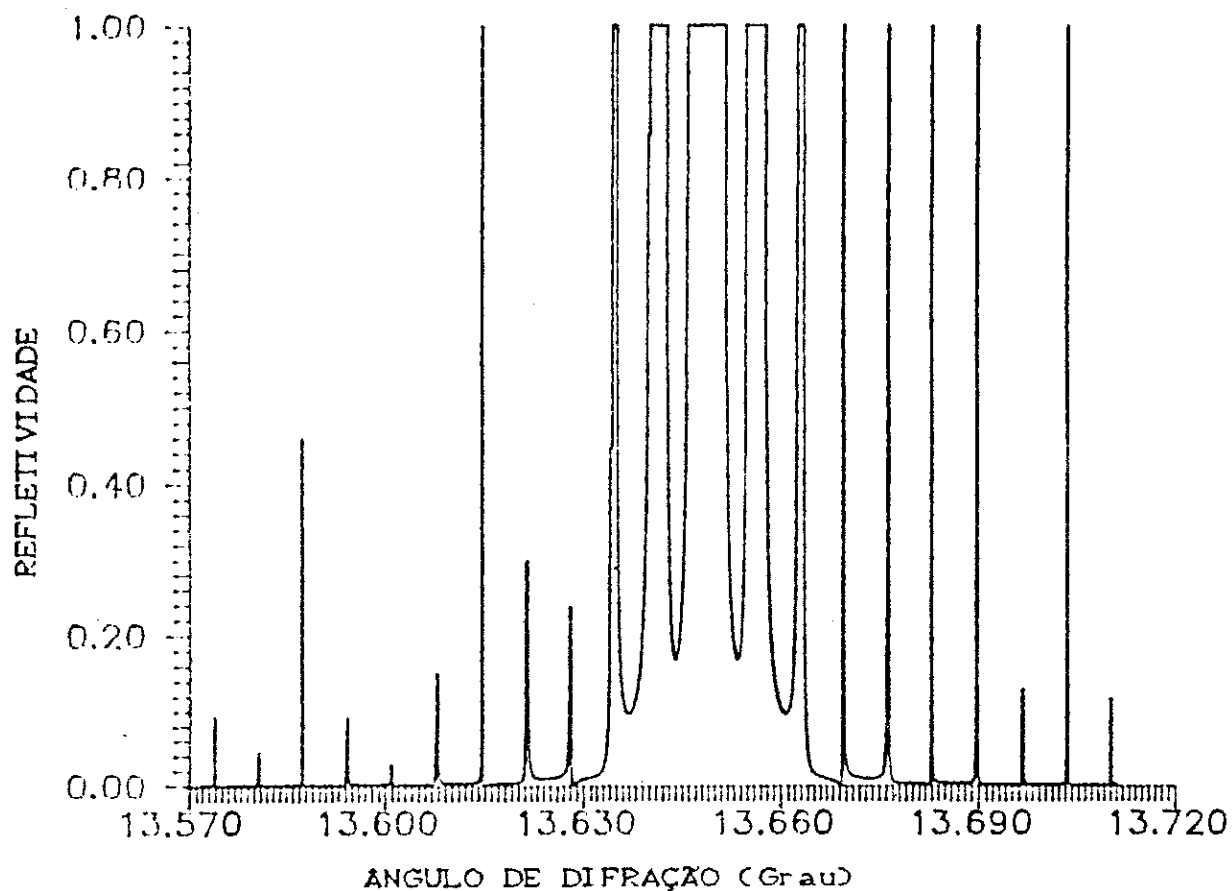


Figura 7.39 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 1024 e 1024 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

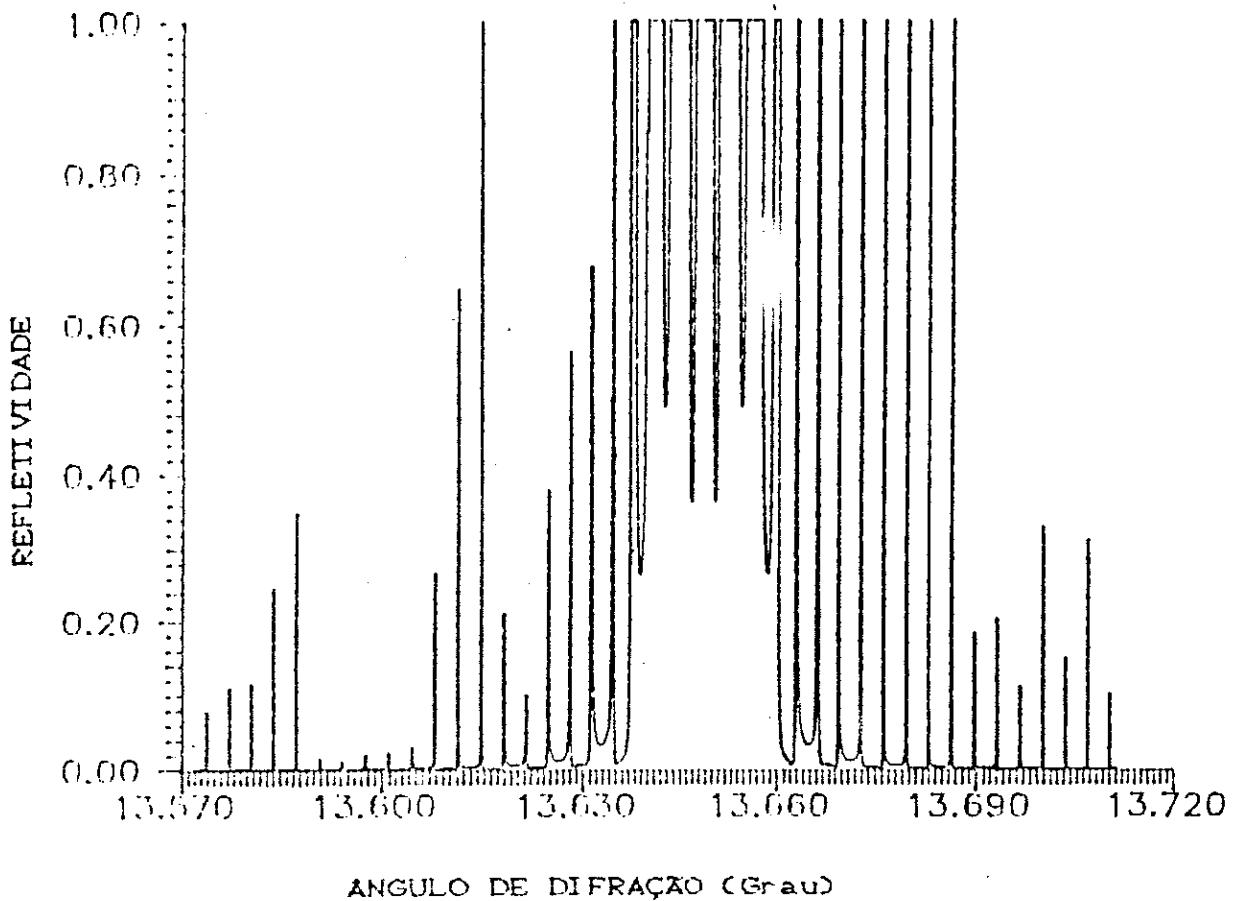


Figura 7.40 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 2048 e 2048 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão {111}.

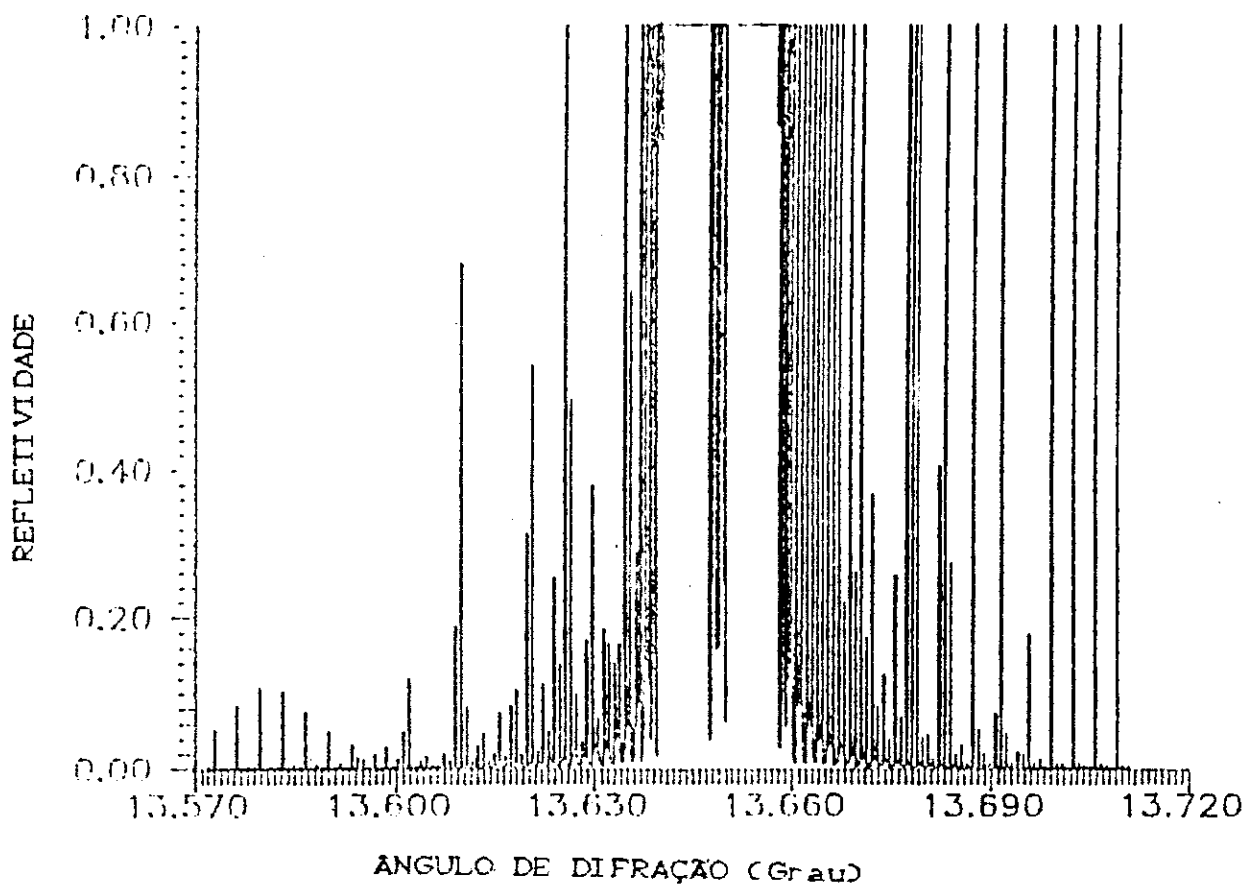


Figura 7.41 - Refletividade versus Angulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa . Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 8192 e 8192 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

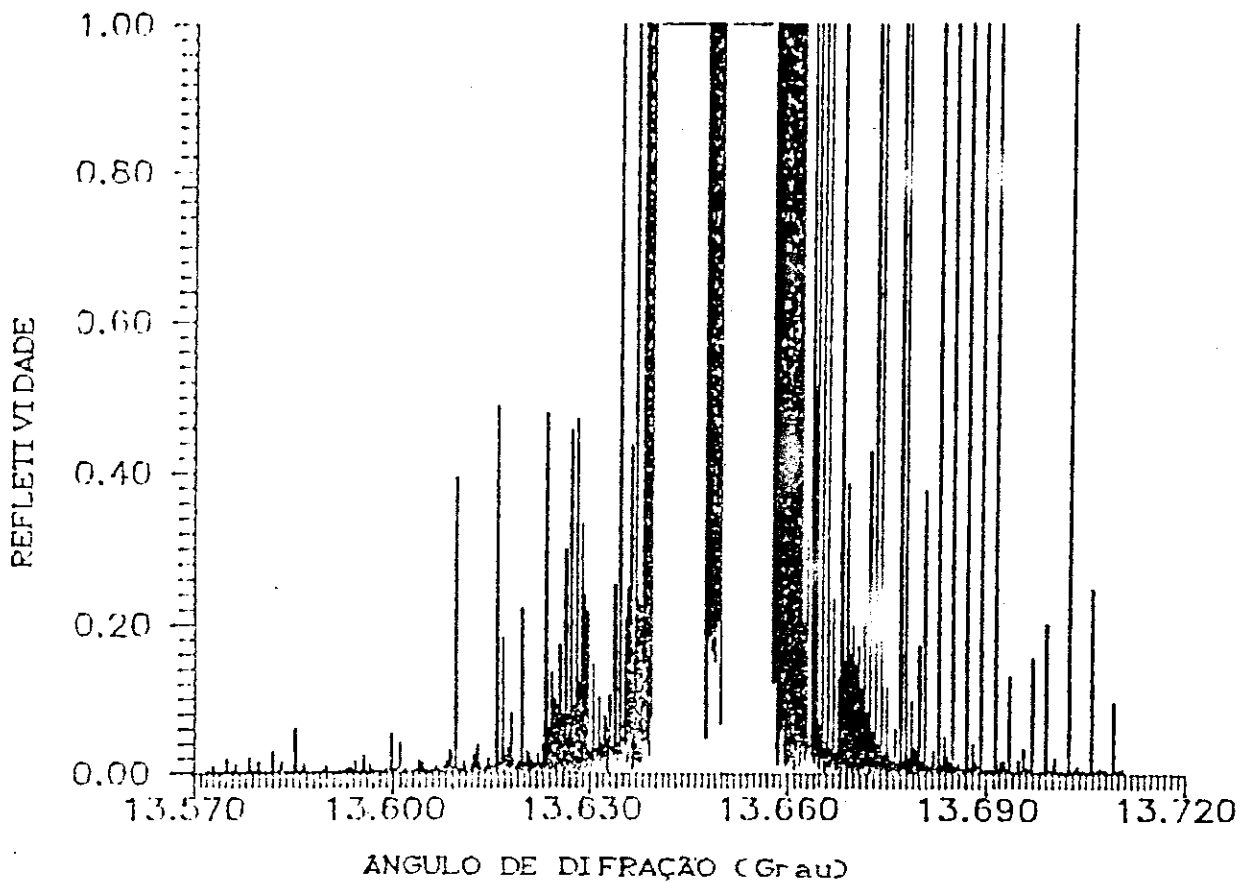


Figura 7.42 - Refletividade versus Ângulo de Difração para uma hetero-estrutura infinitamente espessa. Cella de super-rede formada de camadas Ge e GaAs com respectivamente, 16394 e 16394 planos moleculares. Plano Matemático. Polarização sigma. Camada de Ge na superfície superior. Reflexão [111].

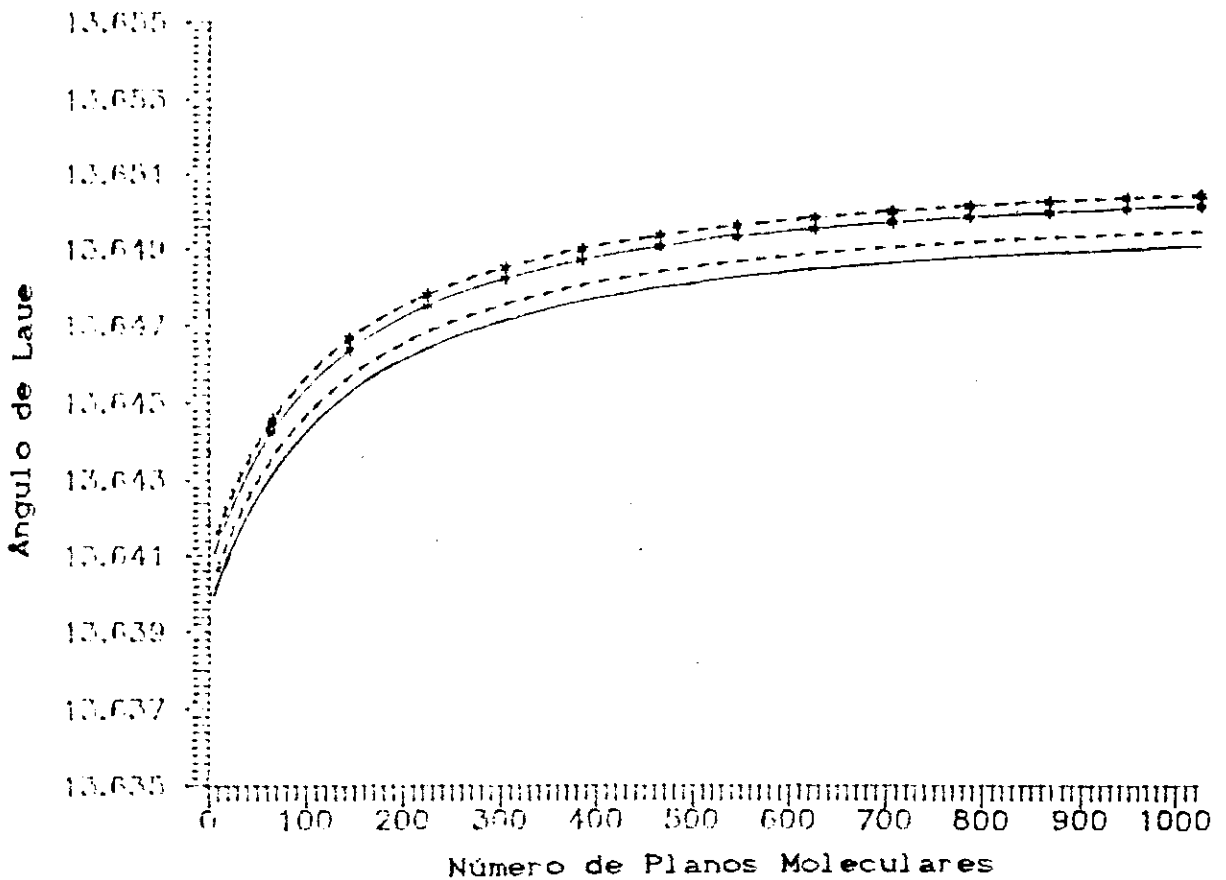
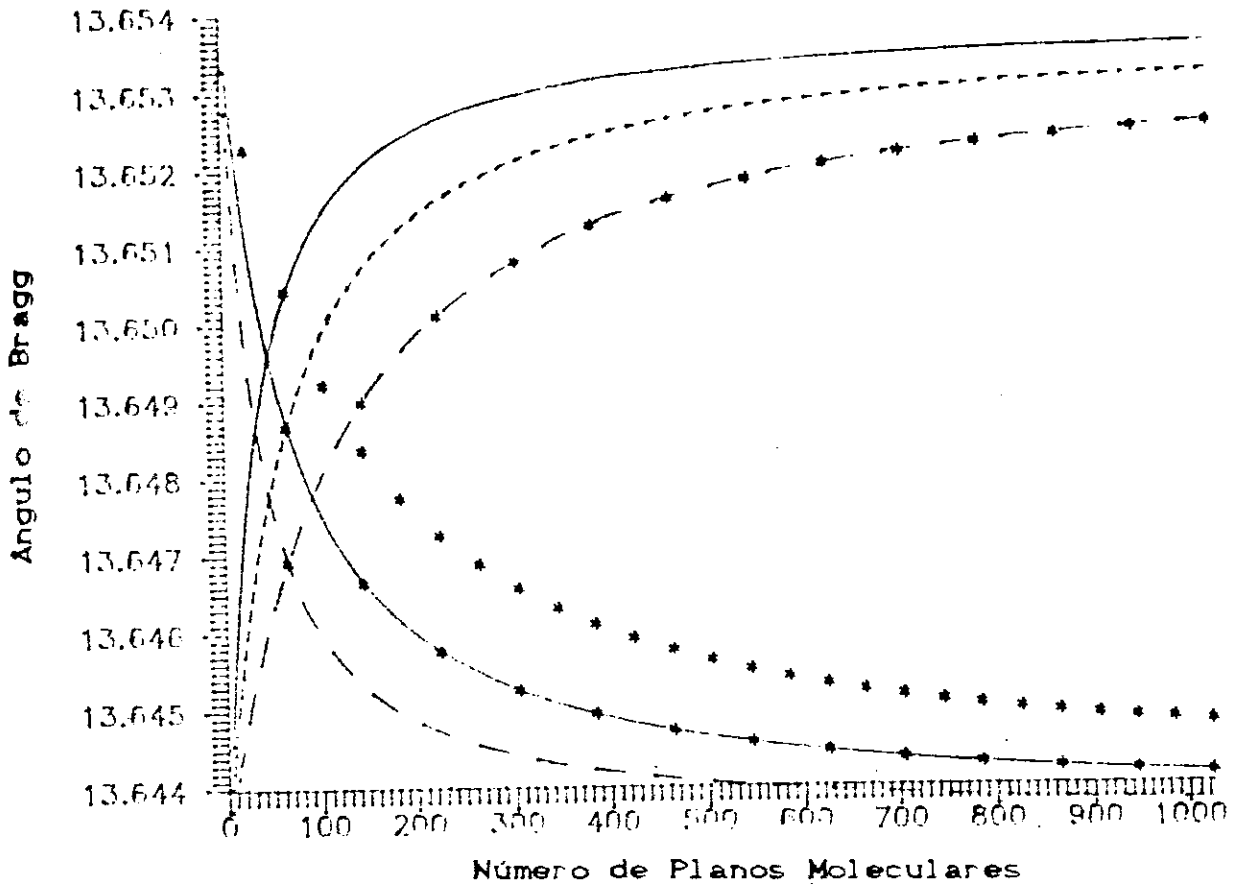
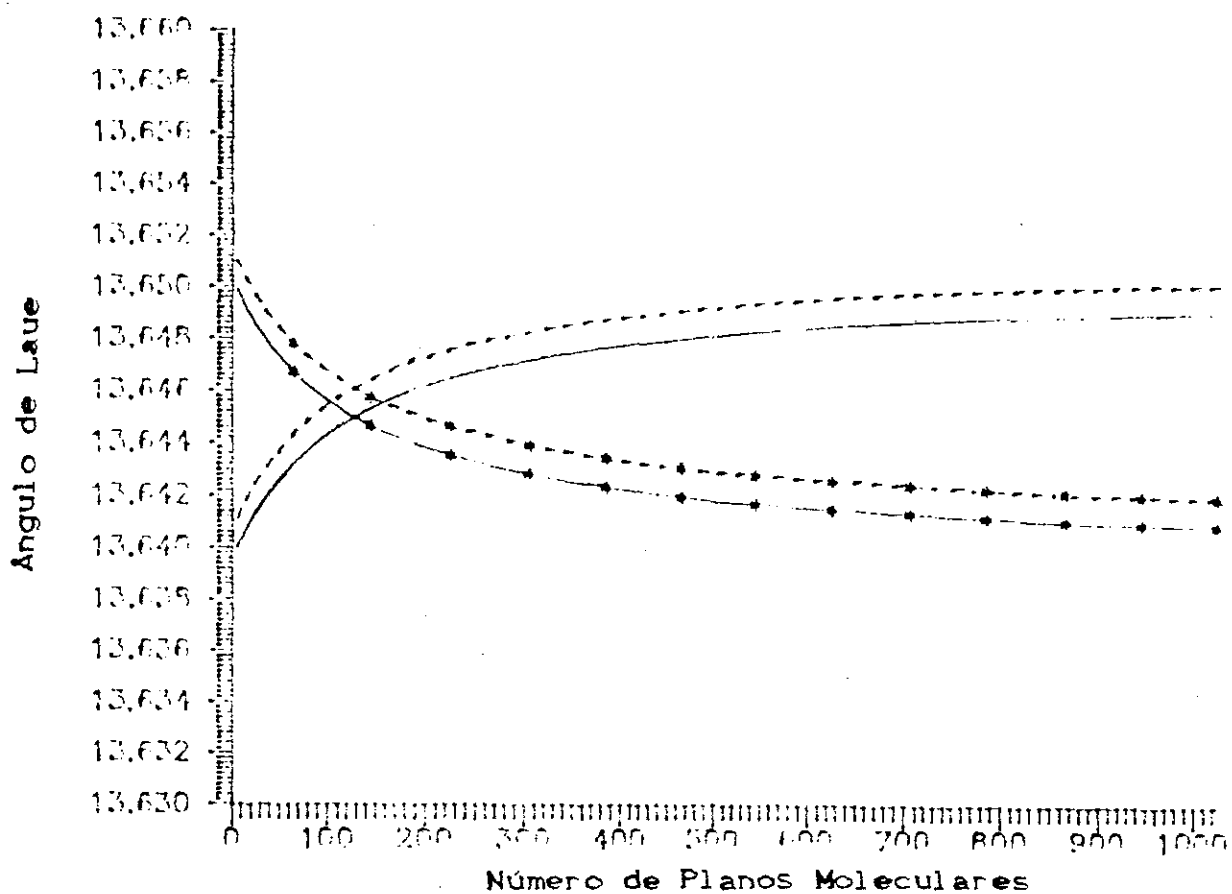


Figura 7.43 - Ângulo de Laue para hetero-estruturas infinitas formadas por bi-camadas de Ge (128 planos moleculares) e GaAs (variando de 4 a 1024 planos moleculares). Reflexão [111].



- 32 planos na camada de Ge
- - - 32 planos na camada de GaAs
- · - · 64 planos na camada de Ge
- ◆ ◆ ◆ ◆ 64 planos na camada de GaAs
- ■ ■ ■ 128 planos na camada de Ge
- \* \* \* \* \* 128 planos na camada de GaAs

Figura 7.44 - Angulo de Bragg para hetero-estruturas formadas por infinitas bi-camadas de Ge (ou GaAs) variando-se a espessura da camada de GaAs (ou Ge) de 4 a 1024 planos moleculares. Plano Físico. Reflexão [111].



- 128 Planos Matemáticos de Ge
- - - 128 Planos Físicos de Ge
- ◆◆◆◆ 128 Planos Matemáticos de GaAs
- ◆◆◆ 128 Planos Físicos de GaAs

Figura 7.45 - Angulo de Laue para hetero-estruturas formadas por infinitas bi-camadas com 128 planos moleculares de Ge (ou GaAs) variando-se a espessura da camada de GaAs (ou Ge) de 4 a 1024 planos moleculares. Polarização  $\sigma$ . Reflexão [111].



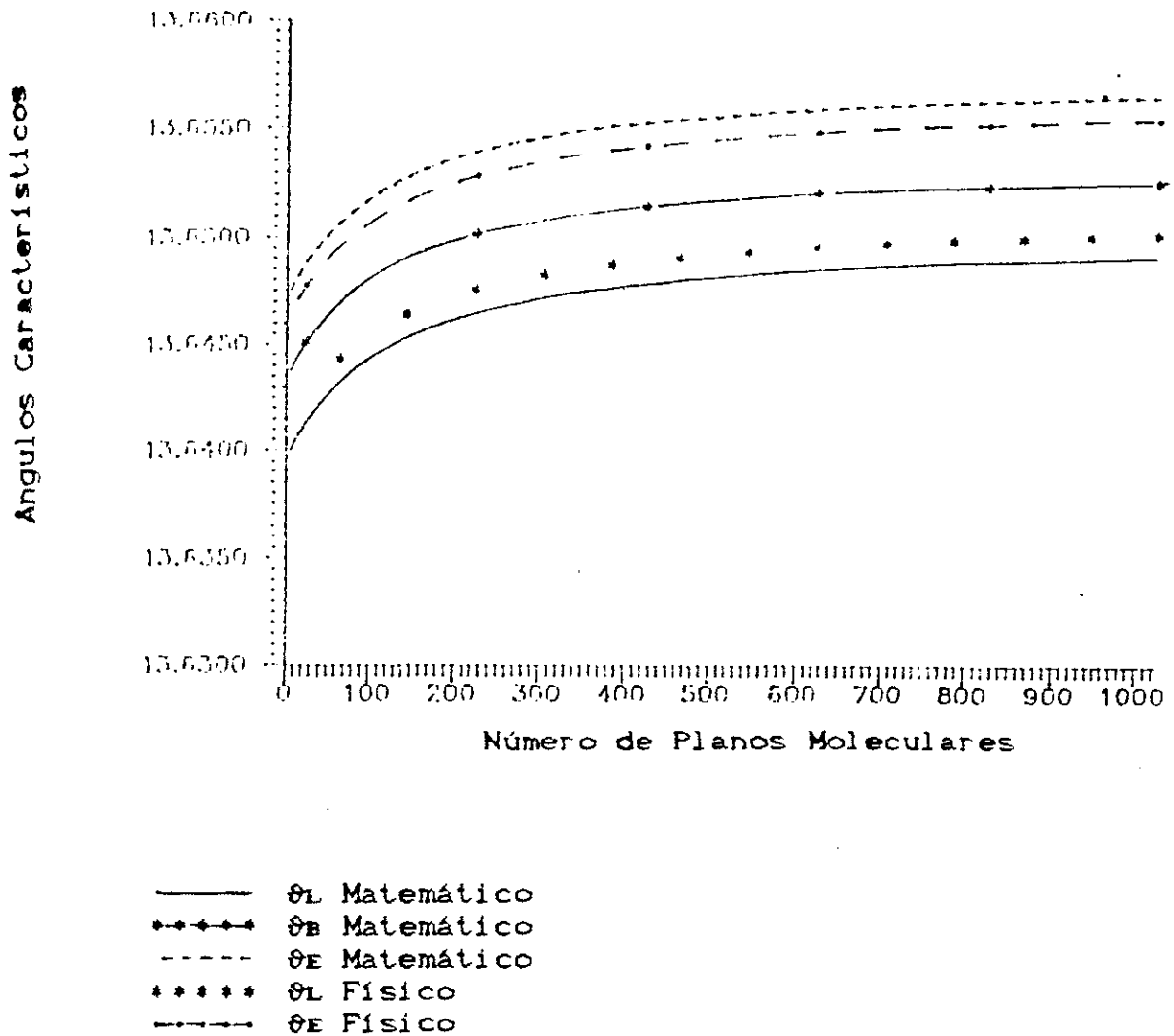
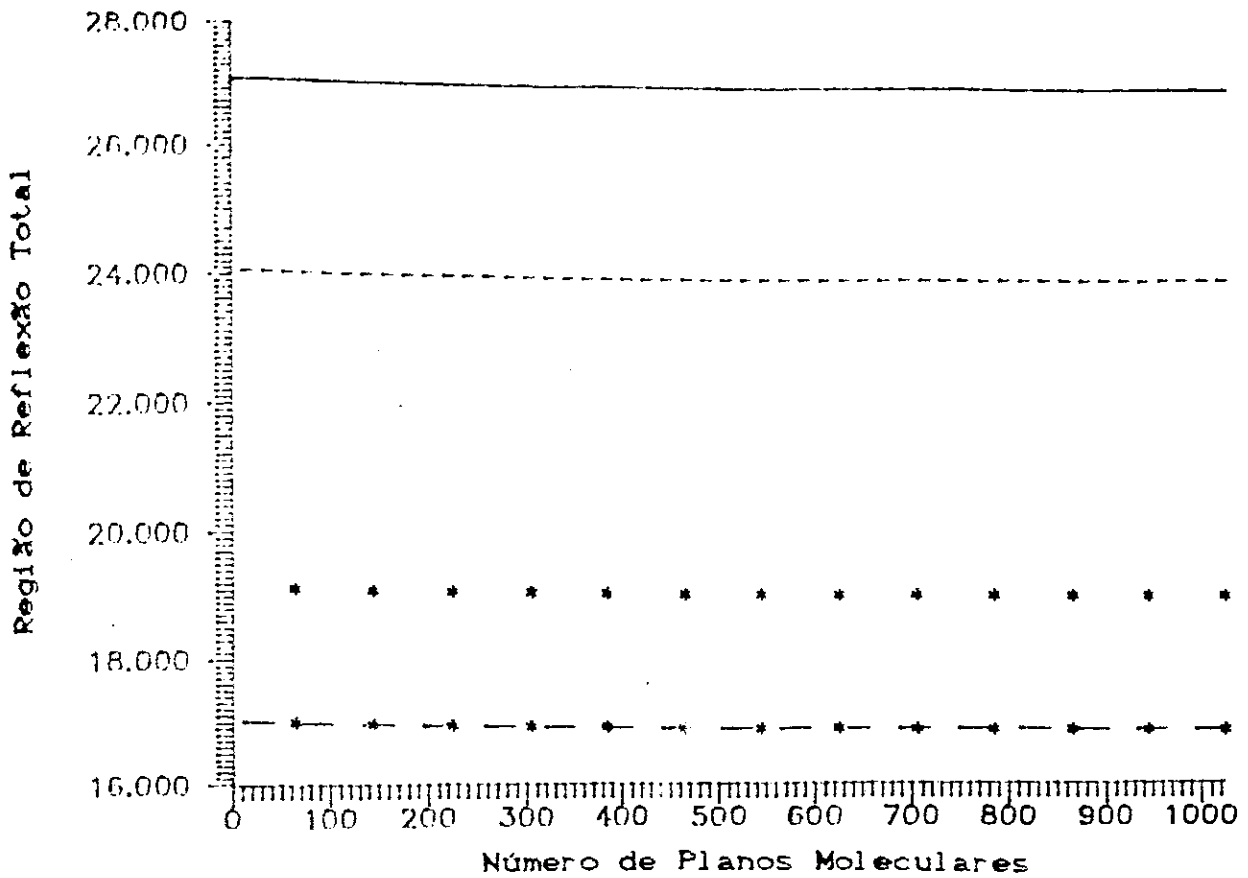


Figura 7.46 - Posição da Região de Reflexão Total em termos dos ângulos característicos para hetero-estruturas infinitas formadas por bi-camadas de Ge (128 planos moleculares) e GaAs (variando de 4 a 1024 planos moleculares). Polarização  $\sigma$ . Reflexão [111].



- Polarização  $\sigma$ , Plano Matemático
- - - Polarização  $\pi$ , Plano Matemático
- \* \* \* \* \* Polarização  $\sigma$ , Plano Físico
- \* \* \* \* \* Polarização  $\pi$ , Plano Físico

Figura 7.47 - Largura da Região de Reflexão Total (segundos) para hetero-estruturas infinitas formadas por bi-camadas de Ge (128 planos moleculares) e GaAs (variando de 4 a 1024 planos moleculares). Reflexão [111].

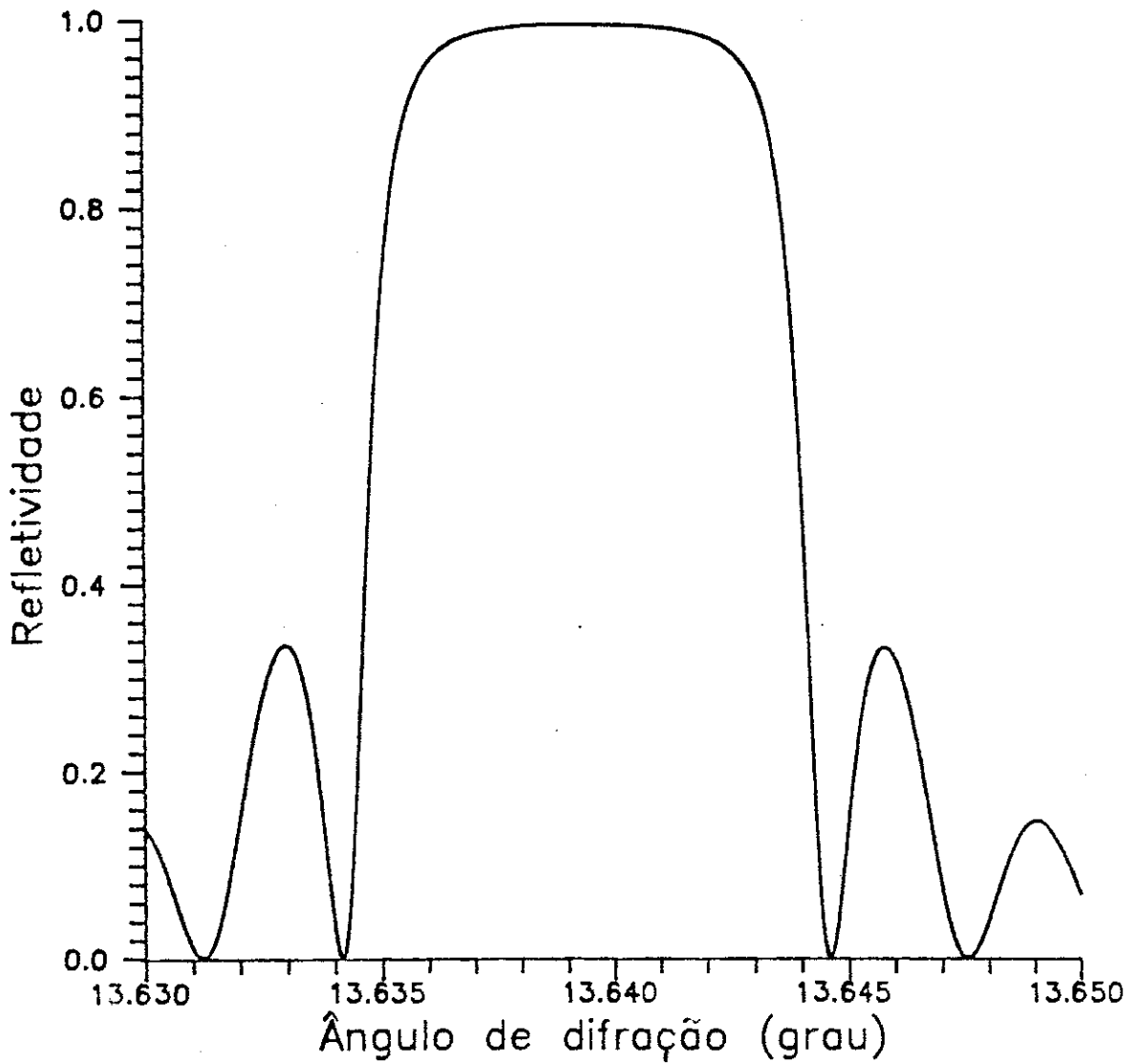


Figura 7.48 - Rocking curve de uma sequência Fibonacci do tipo [A,B] com A e B representando, respectivamente, 1 plano molecular de Ge e de GaAs em 40 passos.

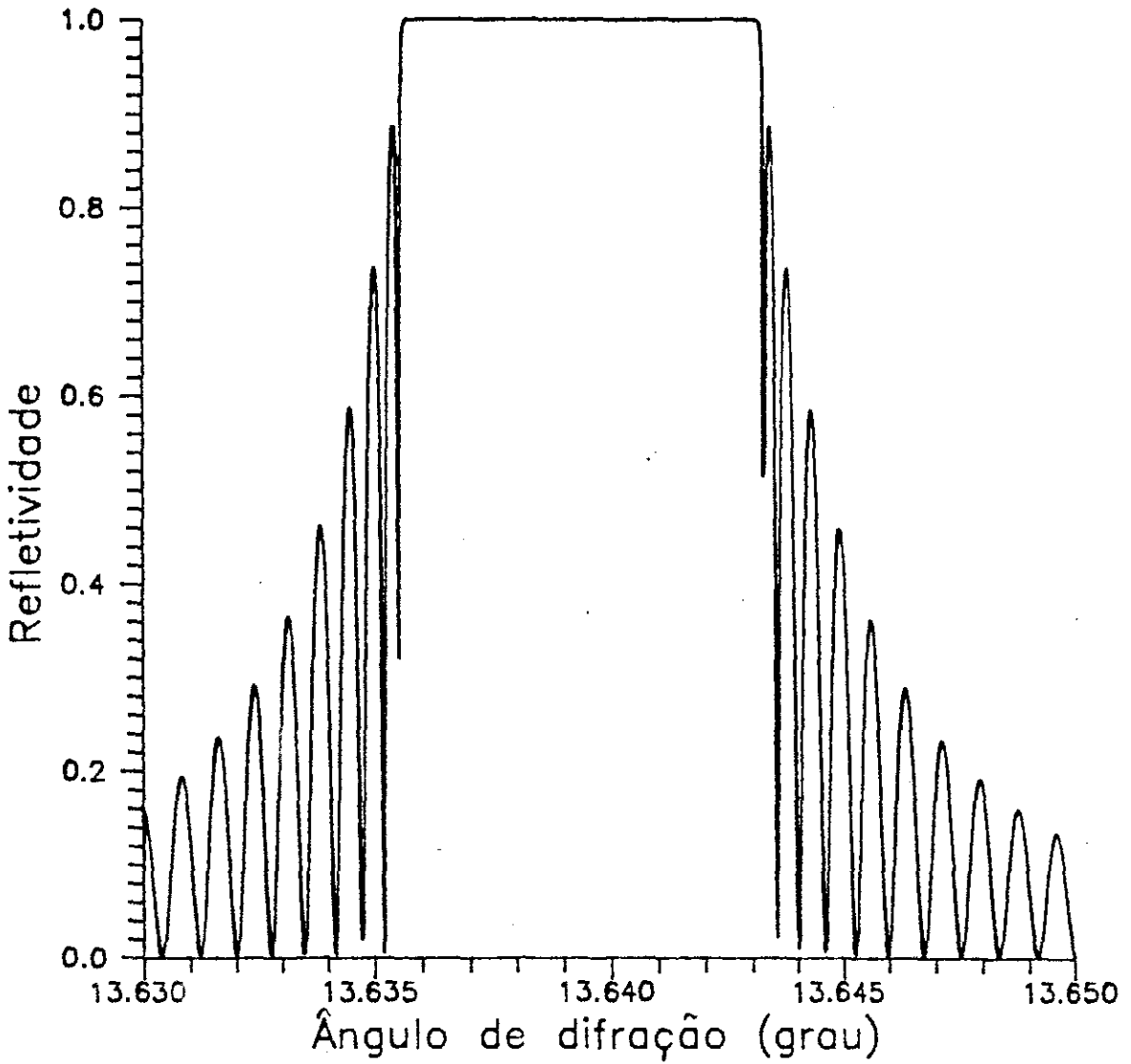


Figura 7.49 - Rocking curve de uma sequência Fibonacci do tipo [A,B] com A e B representando, respectivamente, 1 plano molecular de Ge e de GaAs em 100 passos.

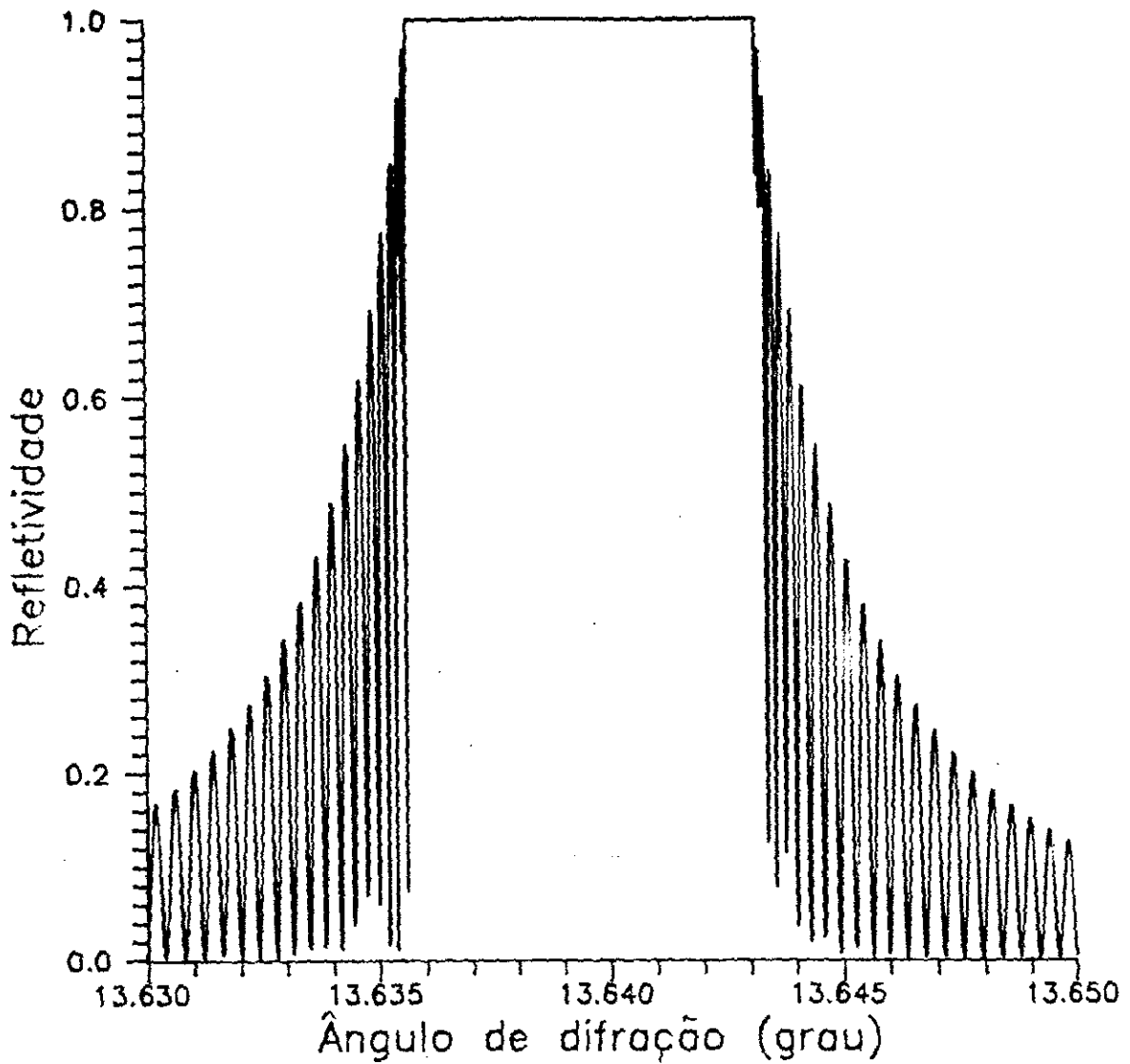


Figura 7.50 - Rocking curve de uma sequência Fibonacci do tipo [A,B] com A e B representando, respectivamente, 1 plano molecular de Ge e de GaAs em 160 passos.

## CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

### 8.1 - CONCLUSÕES

O formalismo auto-consistente está ainda em fase de desenvolvimento. Os primeiros resultados divulgados na literatura mostram que, para um plano de dipolos com densidade de carga constante submetido a ação de uma ou duas ondas eletromagnéticas planas, a conservação de energia é satisfeita quando a auto-consistência é considerada [30], [31], [32]. A Refletividade e Transmitividade para um cristal ideal finito, com planos "matemáticos", isto é, sem cela unitária estrutural foram calculadas por Keller e Campos [32].

Neste trabalho, atendendo aos objetivos propostos, continuamos o desenvolvimento do formalismo, introduzindo e definindo alguns novos elementos auto-consistentes, fazendo algumas aplicações de ordem prática e reproduzindo resultados da literatura calculados por outras teorias ou obtidos experimentalmente.

No Capítulo 3, apresentamos o formalismo auto-consistente e no Capítulo 4 mostramos uma interpretação geométrica do mesmo, a conservação da energia para um plano de dipolos, desenvolvemos a idéia de Semelhança Geométrica de Campo (SGC) e reapresentamos a Lei de Bragg Auto-consistente obtida da condição de SGC.

No Capítulo 5 introduzimos os conceitos de Unidade Primitiva e Unidade não Primitiva de espalhamento

auto-consistente, definimos o Fator de Estrutura, o Fator Atômico e o Fator de Polarização na abordagem auto-consistente. Introduzimos o conceito de Fator de Estrutura para Multicamadas, e reconsideramos a absorção no formalismo mantendo a idéia de auto-consistência e reproduzindo, desta vez, a assimetria dos picos observada experimentalmente.

No Capítulo 6 fizemos algumas aplicações do formalismo no estudo de multicamadas comensuráveis e incomensuráveis do tipo Fibonacci. Aplicamos o formalismo para o caso particular de incidência perto de  $\pi/2$ .

As conclusões obtidas neste trabalho podem ser enquadradas em dois níveis:

- 1) conclusões de caráter geral e teórico e,
- 2) conclusões de caráter prático.

Vamos apresentá-las em alguns pontos fundamentais.

#### A) PRESERVAÇÃO DA AUTO-CONSISTÊNCIA

Até o presente estágio o formalismo auto-consistente vem sendo desenvolvido e aplicado sem nenhuma aproximação, mantendo-se o rigor matemático que levaram às conclusões iniciais de conservação da energia e com as contribuições dos dipolos formando onda plana logo após emergirem do plano espalhador. Com a utilização da condição de Semelhança Geométrica de Campo dispomos, na verdade, de um outro modelo de espalhamento equivalente à incidência de duas ondas nas faces oposta de um cristal finito. Na região em torno do ângulo de Bragg a solução para o cristal finito converge para a solução de Bragg de um cristal sem-infinito, obtida através da

Semelhança Geométrica de Campo. Desta forma a Auto-consistência é preservada e a energia é conservada em ambos os casos de cristal semi-infinito e finito. Quando a absorção não é considerada a auto-consistência conduz, necessariamente, a conservação de energia. Tendo em vista que a auto-consistência fornece outras informações sobre o processo de espalhamento como, por exemplo, a fase do campo, não contempladas com as considerações de energia, concluímos que, hierarquicamente, o princípio de auto-consistência ocupa posição superior ao da conservação da energia.

Considerando-se a proposta apresentada neste trabalho para a absorção, isto é, desprezada a parte absorvida que produz o espalhamento difuso, a absorção estatística foto-elétrica mantém preservada a noção de espalhamento auto-consistente. Neste caso parte da energia incidente é retirada do processo de espalhamento auto-consistente a qual é considerada responsável pelo espalhamento difuso, efeito foto-elétrico, etc. O restante da energia que participa do processo de forma auto-consistente, e sem mudança do comprimento de onda, é conservada.

#### B) CARÁTER MICROSCÓPICO do FORMALISMO

A definição de uma unidade básica de espalhamento e associada a ela uma matriz envolvendo as características físicas do plano de dipolos e a região do espaço à sua volta permite calcular todos os parâmetros envolvidos no processo de espalhamento como, por exemplo, Refletividade, Transmitividade, Fase, Salto em Fase e em Amplitude, conservação da energia,



etc, em qualquer ponto do cristal. Desta forma podemos investigar e acompanhar a formação do campo de ondas no interior do cristal bem como construir "rocking curve" para qualquer um dos parâmetros acima citados em qualquer plano de dipolo. Neste sentido, onde através de um elemento básico, fundamental, podemos retirar qualquer informação sobre o espalhamento de raios-x em cristais, chamamos à atenção para o seu caráter microscópico, enfatizando a não necessidade de aproximações para cálculo de qualquer dos parâmetros referidos.

### C) CONDIÇÕES DE CONTORNO

Enquanto no formalismo auto-consistente as equações de Maxwell são resolvidas para um plano de dipolos com suas inerentes condições de contorno, nas teorias existentes o uso das equações de Maxwell para meios cristalinos ou amorfos implica em estabelecer, para cada situação, as condições de contorno necessárias para obtenção de suas soluções. Este fato tem exigido dos pesquisadores esforços consideráveis em cada situação estudada bem como a utilização de idéias um tanto quanto estranhas como lembradas por Ewald [28] ou por von Laue sobre sua própria teoria [27]. A definição da unidade de espalhamento auto-consistente já carrega em si mesma as condições de contorno necessárias, isto é, um plano de dipolos de espessura zero ladeado pelo espaço vazio. A condição de superfície matematicamente perfeita exigida na teoria de Laue é irrelevante neste modelo uma vez que a contribuição de um plano de dipolos é por demais insignificante para alterar o resultado

oriundo do restante do cristal. A utilização deste formalismo para o estudo de multicamadas formadas de duas ou mais substâncias mostra o quão simples é construir os modelos estudados.

#### DD PERIODICIDADE

As soluções de Maxwell para um meio periódico são requisitos, na teoria de Laue, para o estudo de cristais. No formalismo auto-consistente a periodicidade não é considerada como fator relevante. Com a unidade de espalhamento definida neste formalismo é possível estudarmos o espalhamento de qualquer substância que possa ser imaginada como formada de planos de átomos, ou mais precisamente, de planos de dipolos. Em cada caso necessitamos, apenas, da densidade planar de cargas e das distâncias entre os planos. Para substâncias simples com parâmetro de rede conhecido é trivial. Para multicamadas simples como super-rede, por exemplo, de Ge e GaAs com interface abrupta, a distância entre os planos da interface pode ser considerado, inicialmente, como a média das distâncias entre os planos de Ge e de GaAs. Pode-se recorrer a outras técnicas para a sua determinação ou através de tentativa e erro na análise numérica. Este não seria um problema do formalismo auto-consistente, mas de todos os formalismos. As diversas aplicações em estruturas comensuráveis e incomensuráveis feitas neste trabalho, não envolveu cálculos complicados, mas a simples utilização da unidade de espalhamento auto-consistente.

## E) TRATAMENTO UNIFICADO PARA A DIFRAÇÃO DE RAIOS-X

O formalismo auto-consistente pode ser aplicado ao estudo de cristais de qualquer tamanho ou espessura, englobando desta forma os aspectos cinemáticos e dinâmicos do espalhamento de raios-x.

### 8.2 - PERSPECTIVAS

Os resultados obtidos neste trabalho apontam em duas direções claras e complementares:

- a) A primeira sugere a possibilidade de um tratamento unificado para o espalhamento da radiação eletromagnética pela matéria, envolvendo desde os raios-x à luz visível;
- b) A segunda sugere o uso sistemático do formalismo no estudo de cristais simples e de heteroestruturas.

Os resultados obtidos, até agora, e as considerações feitas neste trabalho justificam, claramente, a necessidade de continuar o desenvolvimento do formalismo auto-consistente.

De imediato apontamos algumas perspectivas para trabalhos futuros dentro da formulação auto-consistente:

Estudo sobre o Índice de Refração a partir de considerações dinâmicas.

Aplicação sistemática no estudo de heteroestruturas de interesse prático.

Aplicação sistemática para determinação do coeficiente de absorção de diferentes substâncias.

Espalhamento de Bragg por ondas acústicas

Espalhamento térmico

Extensão para o espalhamento de luz

Extensão para o "Caso Assimétrico de Bragg".

Extensão para o "Caso Laue".

## APÊNDICE A

## A TEORIA DINÂMICA DE LAUE

A teoria dinâmica de Laue (macroscópica) é uma extensão da teoria microscópica de Ewald, e tem como ponto de partida as equações de Maxwell. Para o mesmo modelo físico ambas conduzem ao mesmo resultado. A teoria parte do princípio de que em cada ponto do cristal pode-se definir o Campo Elétrico, e o Deslocamento Elétrico, a Susceptibilidade Elétrica e outras grandezas elétricas ou magnéticas. Através das equações de Maxwell suas relações são:

$$\vec{\nabla} \times H(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} D(\vec{r}, t)$$

$$\vec{\nabla} \times E(\vec{r}, t) = - \frac{\partial}{\partial t} B(\vec{r}, t)$$

$$\vec{\nabla} \cdot B(\vec{r}, t) = 0$$

$$\vec{\nabla} \cdot D(\vec{r}, t) = 0$$

onde a carga e corrente local são nulas. Isto significa que a contribuição do núcleo é desprezada e sua carga pode, portanto, ser expandida sobre todo o volume ocupado pela nuvem eletrônica.

As condições de contorno são:

$$E_T^1 - E_T^2 = 0 \quad D_N^1 - D_N^2 = 0$$

$$H_T^1 - H_T^2 = 0 \quad B_N^1 - B_N^2 = 0$$

onde  $T$  e  $N$  indicam, respectivamente, as componentes tangencial e normal dos vetores elétricos e magnéticos. Para o caso de ondas planas, com frequência  $\nu$ , dadas pelos seus campos elétrico e magnético, temos

$$E e^{2\pi i \nu t} \quad e \quad H e^{2\pi i \nu t}$$

O vetor de Poynting é definido por

$$S = \text{Re} ( E \times H^* )$$

e a intensidade, fluxo de energia, é dada por

$$I = \bar{S} = \frac{1}{2} S = \frac{1}{2} c \epsilon_0 | E |^2$$

$c$  e  $\epsilon_0$  são, respectivamente, a velocidade da luz e a permissividade elétrica do vácuo. considerando-se  $\mu_0$  a permeabilidade magnética no vácuo,  $\epsilon$  a constante dielétrica e  $\chi$  a susceptibilidade elétrica do meio, podemos escrever as relações:

$$D = \epsilon E = \epsilon_0 ( 1 + \chi ) E \quad e \quad B = \mu_0 H$$

$$\epsilon_0 \mu_0 = 1/c^2$$

A equação de propagação é

$$\Delta E = \frac{1+\chi}{c^2} \frac{\partial E}{\partial t^2}$$

cuja solução é uma onda plana

$$E e^{2\pi i (\nu t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad \mathbf{k} = k \sqrt{1+\chi} = n k$$

onde  $n$  é o índice de refração do meio, e  $k = 1/\lambda = \nu/c$ . Para os raios-X o índice de refração pode, também, ser escrito como

$$n = 1 + \frac{\chi}{2}$$

Para um meio absorvente, considera-se a absorção fenomenológica introduzindo uma parte imaginária na susceptibilidade elétrica e nos vetores de onda, isto é,

$$\chi = \chi' + \chi''$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}' + \mathbf{K}''$$

As ondas são, então, representadas pelas expressões

$$E = E_0 e^{2\pi i \nu t} e^{2\pi i (\nu t - \mathbf{K}'' \cdot \mathbf{r})}$$

onde

$$\varepsilon = k \frac{\chi''}{2\cos(k', k'')} X$$

$X$  é o caminho percorrido pela onda no meio na direção de  $K''$

Com a presença do campo elétrico o meio é polarizado com o vetor de Polarização dado por

$$P = - \frac{e^2}{m} \frac{1}{4\pi^2 \nu^2} \rho E$$

A susceptibilidade elétrica é, então,

$$\chi = - \frac{e^2}{mc^2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\lambda^2}{\pi} \rho = - r_e \frac{\lambda^2}{\pi} \rho$$

onde  $r_e$  é o raio clássico do elétron.

Em um cristal a densidade  $\rho$  é periódica e a susceptibilidade é expandida em séries de Fourier.

$$\chi = \sum_h \chi_h e^{2\pi i h \cdot r} \quad \text{com} \quad \chi_h = - r_e \frac{\lambda^2}{\pi V} F_h$$

onde  $V$  é o volume da cela unitária,  $h$  é o vetor da rede recíproca e  $F_h$  é o Fator de Estrutura.

Obs.  $\chi_h$  é negativo da ordem de  $10^{-6}$ .

No caso com absorção a parte imaginária é triplamente periódica e é expandida em séries de Fourier

$$\chi'' = \sum_h \chi''_h e^{-2\pi i h \cdot r} \quad \text{com} \quad \chi''_0 = - \frac{\mu}{2\pi k}$$



$\mu$  é o coeficiente linear de absorção.

A equação de propagação para um meio cristalino é obtida das equações de Maxwell. Para uma onda monocromática temos

$$\Delta D + \nabla x (\nabla x \chi D) + 4\pi^2 K^2 D = 0$$

com  $K = \nu/c$

cuja solução será uma combinação linear das soluções parciais determinadas pelas condições de contorno.

Para um cristal infinito submetido a ação de ondas planas a solução é tentada como uma solução de ondas de Bloch

$$D_j = e^{2\pi i(\nu t - k_0 \cdot r)} \sum_R D_{hj} e^{2\pi i h \cdot r}$$

onde  $j$  denota uma solução particular. A solução acima também pode ser escrita como

$$D_j = e^{2\pi i \nu t} \sum_R D_{hj} e^{-2\pi i k_{hj} \cdot r}$$

com  $k_{hj} = k_{0j} - h$

Esta onda de Bloch é interpretada como um campo de onda constituído por um número infinito de ondas planas com vetores de onda  $k_{hj}$  e amplitudes  $D_{hj}$ . Normalmente em difração de raios-x costuma-se tomar o caso de duas ondas, como no trabalho desenvolvido aqui com o formalismo auto-consistente.

## APENDICE B

TABELA B.1 - Pico 2 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs	
$\theta_{BB} = 13,62871505$ (grau)	$\theta_{By} = 13,62840276$ (grau)
$\theta_0 = 13,6284027637$ (grau)	$\Delta\theta = -0,00031229$ (grau)
Polarização $\sigma$	Polarização $\pi$
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)	Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$	$\theta_B - \theta_{By} = 0,30065034$
$\theta_B - \theta_L = 0,28305802$	$\theta_B - \theta_L = 0,25205436$
$\theta_E - \theta_B = 0,18640212$	$\theta_E - \theta_B = 0,17389608$
$\theta_E - \theta_L = 0,46946014$	$\theta_E - \theta_L = 0,42595044$
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)	Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)
$\theta_B - \theta_0 = 0,71929014$	$\theta_B - \theta_0 = 0,87050823$
$\theta_B - \theta_L = 0,19964928$	$\theta_B - \theta_L = 0,17677141$
$\theta_E - \theta_B = 0,14869568$	$\theta_E - \theta_B = 0,13604484$
$\theta_E - \theta_L = 0,34834496$	$\theta_E - \theta_L = 0,31281625$
Largura do Platô (L) (segundos)	
$L_{\sigma M} = 0,46946014$	$L_{\pi M} = 0,42595044$
$L_{\sigma F} = 0,34834496$	$L_{\pi F} = 0,31281625$
Fator de Estrutura (FE)	Fator de Polarização (FP)
$F_{\sigma} = 0,74201178$	$F_M = 0,90731971$
$F_{\pi} = 0,7343959$	$F_F = 0,89800713$
$F_{hkl} = 0,70721832$	$\cos(2\theta) = 0,88896275$

TABELA - B.2 - Pico 2 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs	
$\theta_{BD} = 13,66493116$	$\theta_{By} = 13,66540131$
$\theta_0 = 13,6654013073$	$\Delta\theta = 0,00047015$ (grau)
Polarização $\sigma$	Polarização $\pi$
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)	Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$	$\theta_B - \theta_{By} = -0,2934154$
$\theta_B - \theta_L = 1,61635744$	$\theta_B - \theta_L = 1,44346112$
$\theta_E - \theta_B = 1,63569126$	$\theta_E - \theta_B = 1,45740524$
$\theta_E - \theta_L = 3,2520487$	$\theta_E - \theta_L = 2,90086636$
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)	Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)
$\theta_B - \theta_0 = -0,69851865$	$\theta_B - \theta_0 = -0,84711491$
$\theta_B - \theta_L = 1,15693394$	$\theta_B - \theta_L = 1,0306677$
$\theta_E - \theta_B = 1,16814257$	$\theta_E - \theta_B = 1,03917447$
$\theta_E - \theta_L = 2,32507651$	$\theta_E - \theta_L = 2,06984217$
Largura do Platô (L) (segundos)	
$L_{\sigma M} = 3,2520487$	$L_{\pi M} = 2,90086636$
$L_{\sigma F} = 2,32507651$	$L_{\pi F} = 2,06984217$
Fator de Estrutura (FE)	Fator de Polarização (FP)
$F_{\sigma} = 0,71495747$	$F_{\pi} = 0,89201197$
$F_{\pi} = 0,71352552$	$F_F = 0,8902254$
$F_{hkl} = 0,70721832$	$\cos(2\theta) = 0,88837053$

TABELA - B.3 - Pico 3 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,6196619$	(grau)	$\theta_{By} = 13,61947513$	(grau)
$\theta_0 = 13,6194751334$	(grau)	$\Delta\theta = -0,00018676$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,20836788$	
$\theta_B - \theta_L = 0,32995995$		$\theta_B - \theta_L = 0,29732886$	
$\theta_E - \theta_B = 0,40647327$		$\theta_E - \theta_B = 0,35807117$	
$\theta_E - \theta_L = 0,73643322$		$\theta_E - \theta_L = 0,65540003$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = 0,49888712$		$\theta_B - \theta_0 = 0,6034215$	
$\theta_B - \theta_L = 0,2411151$		$\theta_B - \theta_L = 0,21639509$	
$\theta_E - \theta_B = 0,28043371$		$\theta_E - \theta_B = 0,24754231$	
$\theta_E - \theta_L = 0,52154881$		$\theta_E - \theta_L = 0,4639374$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,73643322$		$L_{\pi M} = 0,6554440003$	
$L_{\sigma F} = 0,52154881$		$L_{\pi F} = 0,4639374$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70820924$		$F_{\pi} = 0,88996532$	
$F_{\pi} = 0,70786906$		$F_F = 0,88953784$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88910543$	

TABELA - B.4 - Pico 3 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,67398606$	(grau)	$\theta_{By} = 13,6743459$	(grau)
$\theta_o = 13,6743459026$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00035985$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,21399623$	
$\theta_B - \theta_L = 0,54290588$		$\theta_B - \theta_L = 0,47718455$	
$\theta_E - \theta_B = 0,43751302$		$\theta_E - \theta_B = 0,38368794$	
$\theta_E - \theta_L = 0,98041891$		$\theta_E - \theta_L = 0,87087249$	
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)	
$\theta_E - \theta_o = 0,50638134$		$\theta_B - \theta_o = -0,61423555$	
$\theta_B - \theta_L = 0,37348864$		$\theta_B - \theta_L = 0,32919079$	
$\theta_E - \theta_B = 0,32107427$		$\theta_E - \theta_B = 0,28775034$	
$\theta_E - \theta_L = 0,69456291$		$\theta_E - \theta_L = 0,61694113$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,98041891$		$L_{\pi M} = 0,87087249$	
$L_{\sigma F} = 0,69456291$		$L_{\pi F} = 0,61694113$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70843484$		$F_M = 0,88826571$	
$F_{\pi} = 0,70841729$		$F_F = 0,8882437$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88822714$	

TABELA - B.5 - Pico 4 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,61060908$	(grau)	$\theta_{By} = 13,6505051$	(grau)
$\theta_o = 13,6105050958$	(grau)	$\Delta\theta = -0,00010399$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,14808906$	
$\theta_B - \theta_L = 0,28357677$		$\theta_B - \theta_L = 0,25182251$	
$\theta_E - \theta_B = 0,26895817$		$\theta_E - \theta_B = 0,24027168$	
$\theta_E - \theta_L = 0,55253494$		$\theta_E - \theta_L = 0,4920942$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = 0,35504794$		$\theta_B - \theta_o = 0,42909123$	
$\theta_B - \theta_L = 0,19919962$		$\theta_B - \theta_L = 0,17694179$	
$\theta_E - \theta_B = 0,19252798$		$\theta_E - \theta_B = 0,17166904$	
$\theta_E - \theta_L = 0,3917276$		$\theta_E - \theta_L = 0,34861083$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,55253494$		$L_{\pi M} = 0,4920942$	
$L_{\sigma F} = 0,3917276$		$L_{\pi F} = 0,34861083$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70896439$		$F_M = 0,89061191$	
$F_{\pi} = 0,70842296$		$F_F = 0,88993175$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,8892487$	

TABELA - B.6 - Pico 4 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,6830413$	(grau)	$\theta_{By} = 13,68331166$	(grau)
$\theta_o = 13,6833116629$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00027036$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,14862947$	
$\theta_B - \theta_L = 0,07123396$		$\theta_B - \theta_L = 0,06442062$	
$\theta_E - \theta_B = 0,087309$		$\theta_E - \theta_B = 0,0771812$	
$\theta_E - \theta_L = 0,15854297$		$\theta_E - \theta_L = 0,14160182$	
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = 0,35023226$		$\theta_B - \theta_o = -0,042506474$	
$\theta_B - \theta_L = 0,05283452$		$\theta_B - \theta_L = 0,04746215$	
$\theta_E - \theta_B = 0,06104139$		$\theta_E - \theta_B = 0,05395619$	
$\theta_E - \theta_L = 0,11387591$		$\theta_E - \theta_L = 0,10141834$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,15854297$		$L_{\pi M} = 0,14160182$	
$L_{\sigma F} = 0,11387591$		$L_{\pi F} = 0,1014834$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,7182653$		$F_M = 0,89314476$	
$F_{\pi} = 0,71622202$		$F_F = 0,890604$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88808332$	

TABELA - B.7 - Pico 5 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,60155662$	(grau)	$\theta_{By} = 13,6014941$	(grau)
$\theta_0 = 13,6014941047$	(grau)	$\Delta\theta = -0,00006251$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,11861938$	
$\theta_B - \theta_L = 0,04639803$		$\theta_B - \theta_L = 0,04105144$	
$\theta_E - \theta_B = 0,03942112$		$\theta_E - \theta_B = 0,03551241$	
$\theta_E - \theta_L = 0,08581915$		$\theta_E - \theta_L = 0,07656385$	
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = 0,28517595$		$\theta_B - \theta_0 = 0,34431433$	
$\theta_B - \theta_L = 0,03227797$		$\theta_B - \theta_L = 0,02857985$	
$\theta_E - \theta_B = 0,02877827$		$\theta_E - \theta_B = 0,02580682$	
$\theta_E - \theta_L = 0,06105624$		$\theta_E - \theta_L = 0,05438667$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,08581915$		$L_{\pi M} = 0,07656385$	
$L_{\sigma F} = 0,06105624$		$L_{\pi F} = 0,05438667$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71145235$		$F_{\pi} = 0,89215335$	
$F_{\pi} = 0,71034397$		$F_F = 0,89076346$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88939253$	



TABELA - B.8 - Pico 5 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,69209689$	(grau)	$\theta_{By} = 13,69232489$	(grau)
$\theta_0 = 136923248933$	(grau)	$\Delta\theta = 0,000228$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,11840487$	
$\theta_B - \theta_L = 0,20785944$		$\theta_B - \theta_L = 0,18519589$	
$\theta_E - \theta_B = 0,21712877$		$\theta_E - \theta_B = 0,19249869$	
$\theta_E - \theta_L = 0,42498821$		$\theta_E - \theta_L = 0,37769458$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = -0,2785598$		$\theta_B - \theta_0 = -0,33815609$	
$\theta_B - \theta_L = 0,14844012$		$\theta_B - \theta_L = 0,13211962$	
$\theta_E - \theta_B = 0,15354703$		$\theta_E - \theta_B = 0,13614467$	
$\theta_E - \theta_L = 0,30198715$		$\theta_E - \theta_L = 0,26826429$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,42498821$		$L_{\pi M} = 0,37769458$	
$L_{\sigma F} = 0,30198715$		$L_{\pi F} = 0,26826429$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71057777$		$F_M = 0,88871778$	
$F_{\pi} = 0,71026779$		$F_F = 0,88833017$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88793865$	

TABELA - B.9 - Pico 6 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,5925045$	(grau)	$\theta_{By} = 13,59246881$	(grau)
$\theta_0 = 13,5924688078$	(grau)	$\Delta\theta = -0,00003569$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,10011805$	
$\theta_B - \theta_L = 0,09066968$		$\theta_B - \theta_L = 0,08112415$	
$\theta_E - \theta_B = 0,10000192$		$\theta_E - \theta_B = 0,08851669$	
$\theta_E - \theta_L = 0,1906716$		$\theta_E - \theta_L = 0,16964084$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = 0,24111366$		$\theta_B - \theta_0 = 0,29097921$	
$\theta_B - \theta_L = 0,0649136$		$\theta_B - \theta_L = 0,05798599$	
$\theta_E - \theta_B = 0,06976288$		$\theta_E - \theta_B = 0,06182499$	
$\theta_E - \theta_L = 0,13467648$		$\theta_E - \theta_L = 0,11981098$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma_M} = 0,1906716$		$L_{\pi_M} = 16964084$	
$L_{\sigma_F} = 0,13467648$		$L_{\pi_F} = 0,11981098$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,7063269$		$F_{\pi} = 0,88970167$	
$F_{\pi} = 0,70626257$		$F_F = 0,88962063$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88953651$	

TABELA - B.10 - Pico 6 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,70115283$	(grau)	$\theta_{By} = 13,70135472$	(grau)
$\theta_o = 13,701354722$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00020189$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,10044991$	
$\theta_B - \theta_L = 0,11660149$		$\theta_B - \theta_L = 0,10299049$	
$\theta_E - \theta_B = 0,10581323$		$\theta_E - \theta_B = 0,09447815$	
$\theta_E - \theta_L = 0,22241472$		$\theta_E - \theta_L = 0,19746864$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = -0,2356728$		$\theta_B - \theta_o = -0,28627534$	
$\theta_B - \theta_L = 0,08152266$		$\theta_B - \theta_L = 0,07211843$	
$\theta_E - \theta_B = 0,07630498$		$\theta_E - \theta_B = 0,06800365$	
$\theta_E - \theta_L = 0,15782764$		$\theta_E - \theta_L = 0,14012208$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma_M} = 0,22241472$		$L_{\pi_M} = 0,19746864$	
$L_{\sigma_F} = 0,15782764$		$L_{\pi_F} = 0,14012208$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70960969$		$F_M = 0,88783981$	
$F_{\pi} = 0,70959153$		$F_F = 0,88781709$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88779362$	

TABELA - B.11 - Pico 7 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,58345272$	(grau)	$\theta_{By} = 13,58343995$	(grau)
$\theta_o = 13,5834399494$	(grau)	$\Delta\theta = -0,00001277$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,08458012$	
$\theta_B - \theta_L = 0,0943482$		$\theta_B - \theta_L = 0,08383076$	
$\theta_E - \theta_B = 0,09131838$		$\theta_E - \theta_B = 0,08143273$	
$\theta_E - \theta_L = 0,18566658$		$\theta_E - \theta_L = 0,16526349$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = 0,20411223$		$\theta_B - \theta_o = 0,24618571$	
$\theta_B - \theta_L = 0,06625556$		$\theta_B - \theta_L = 0,05889603$	
$\theta_E - \theta_B = 0,06495217$		$\theta_E - \theta_B = 0,05786491$	
$\theta_E - \theta_L = 0,13120772$		$\theta_E - \theta_L = 0,11676094$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,18566658$		$L_{\pi M} = 0,16526349$	
$L_{\sigma F} = 0,13120772$		$L_{\pi F} = 0,11676094$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70668465$		$F_M = 0,89010895$	
$F_{\pi} = 0,70651382$		$F_F = 0,88989376$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 88968045$	

TABELA - B.12 - Pico 7 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,71020912$	(grau)	$\theta_{By} = 13,7103878$	(grau)
$\theta_o = 13,7103877973$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00017868$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,08463437$	
$\theta_B - \theta_L = 0,02333123$		$\theta_B - \theta_L = 0,02088906$	
$\theta_E - \theta_B = 0,02618614$		$\theta_E - \theta_B = 0,02314353$	
$\theta_E - \theta_L = 0,04951737$		$\theta_E - \theta_L = 0,04403259$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = -0,19800493$		$\theta_B - \theta_o = -0,24068675$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01692753$		$\theta_B - \theta_L = 0,01511117$	
$\theta_E - \theta_B = 0,0183751$		$\theta_E - \theta_B = 0,01625305$	
$\theta_E - \theta_L = 0,03530263$		$\theta_E - \theta_L = 0,03136421$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,04951737$		$L_{\pi M} = 0,04403259$	
$L_{\sigma F} = 0,03530263$		$L_{\pi F} = 0,03136421$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71293431$		$F_{\pi} = 0,88923509$	
$F_{\pi} = 0,71229553$		$F_F = 0,88843835$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88764846$	

TABELA - B.13 - Pico B (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,57440129$	(grau)	$\theta_{By} = 13,5744048$	(grau)
$\theta_0 = 13,5744047959$	(grau)	$\Delta\theta = 0,0000035$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,07404164$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01819173$		$\theta_B - \theta_L = 0,01612104$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01643229$		$\theta_E - \theta_B = 0,01472524$	
$\theta_E - \theta_L = 0,03462402$		$\theta_E - \theta_L = 0,03084628$	
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = 0,17915749$		$\theta_B - \theta_0 = 0,21592522$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01269044$		$\theta_B - \theta_L = 0,01125628$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01181609$		$\theta_E - \theta_B = 0,01056323$	
$\theta_E - \theta_L = 0,02450653$		$\theta_E - \theta_L = 0,02181952$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,03462402$		$L_{\pi M} = 0,03084628$	
$L_{\sigma F} = 0,02450653$		$L_{\pi F} = 0,02181952$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70778973$		$F_{\pi} = 0,89089252$	
$F_{\pi} = 0,7073629$		$F_F = 0,89035527$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88982441$	

TABELA - B.14 - Pico B (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,71926576$	(grau)	$\theta_{By} = 13,71942804$	(grau)
$\theta_o = 13,7194280392$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00016228$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,07396419$	
$\theta_B - \theta_L = 0,0790863$		$\theta_B - \theta_L = 0,07034187$	
$\theta_E - \theta_B = 0,08143974$		$\theta_E - \theta_B = 0,07218567$	
$\theta_E - \theta_L = 0,16053837$		$\theta_E - \theta_L = 0,14252754$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = -0,17272904$		$\theta_B - \theta_o = -0,21004605$	
$\theta_B - \theta_L = 0,05639507$		$\theta_B - \theta_L = 0,05012668$	
$\theta_E - \theta_B = 0,05774528$		$\theta_E - \theta_B = 0,05119059$	
$\theta_E - \theta_L = 0,11414034$		$\theta_E - \theta_L = 0,10131727$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,16053837$		$L_{\pi M} = 0,14252754$	
$L_{\sigma F} = 0,11414034$		$L_{\pi F} = 0,10131727$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,7109848$		$F_{\pi} = 0,88780977$	
$F_{\pi} = 0,71086104$		$F_F = 0,88765523$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88750309$	

TABELA - B.15 - Pico 9 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs	
$\theta_{B\sigma} = 13,56535021$	$\theta_{B\pi} = 13,5653664$
$\theta_0 = 13,5653663959$	$\Delta\theta = 0,00001619$ (grau)
Polarização $\sigma$	Polarização $\pi$
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)	Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$	$\theta_B - \theta_{By} = 0,06620935$
$\theta_B - \theta_L = 0,04145902$	$\theta_B - \theta_L = 0,03703485$
$\theta_E - \theta_B = 0,04422936$	$\theta_E - \theta_B = 0,03923053$
$\theta_E - \theta_L = 0,08568838$	$\theta_E - \theta_L = 0,076265538$
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)	Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)
$\theta_B - \theta_0 = 0,16051816$	$\theta_B - \theta_0 = 0,019336831$
$\theta_B - \theta_L = 0,02950639$	$\theta_B - \theta_L = 0,02633218$
$\theta_E - \theta_B = 0,03096984$	$\theta_E - \theta_B = 0,02749159$
$\theta_E - \theta_L = 0,06047622$	$\theta_E - \theta_L = 0,05382377$
Largura do Platô (L) (segundos)	
$L_{\sigma M} = 0,08568838$	$L_{\pi M} = 0,07626538$
$L_{\sigma F} = 0,06047622$	$L_{\pi F} = 0,05382377$
Fator de Estrutura (FE)	Fator de Polarização (FP)
$F_{\sigma} = 0,70576922$	$F_{\pi} = 0,89003175$
$F_{\pi} = 0,70574315$	$F_F = 0,88999887$
$F_{hkl} = 0,70721832$	$\cos(2\theta) = 0,88996833$



TABELA - B.16 - Pico 9 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,72832275$	(grau)	$\theta_{By} = 13,72847254$	(grau)
$\theta_o = 13,7284725401$	(grau)	$\Delta\theta = 0,000149796$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,06625226$	
$\theta_B - \theta_L = 0,04985606$		$\theta_B - \theta_L = 0,0440889$	
$\theta_E - \theta_B = 0,04679282$		$\theta_E - \theta_B = 0,0416758$	
$\theta_E - \theta_L = 0,09664888$		$\theta_E - \theta_L = 0,0857647$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = -0,15433909$		$\theta_B - \theta_o = -0,18780038$	
$\theta_B - \theta_L = 0,03508049$		$\theta_B - \theta_L = 0,03105729$	
$\theta_E - \theta_B = 0,03363045$		$\theta_E - \theta_B = 0,02991479$	
$\theta_E - \theta_L = 0,06871093$		$\theta_E - \theta_L = 0,06097208$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,09664888$		$L_{\pi M} = 0,0857647$	
$L_{\sigma F} = 0,06871093$		$L_{\pi F} = 0,06097208$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71093355$		$F_M = 0,8873843$	
$F_{\pi} = 0,71092283$		$F_F = 0,88737092$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,86735756$	

TABELA - B.17 - Pico 10 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_B = 13,55629917$	(grau)	$\theta_{By} = 13,55632727$	(grau)
$\theta_o = 13,5563272689$	(grau)	$\Delta\theta = 0,0000278$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,05919821$	
$\theta_B - \theta_L = 0,04650302$		$\theta_B - \theta_L = 0,04135011$	
$\theta_E - \theta_B = 0,04543519$		$\theta_E - \theta_B = 0,04050422$	
$\theta_E - \theta_L = 0,09193821$		$\theta_E - \theta_L = 0,08185433$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = 0,14382762$		$\theta_B - \theta_o = 0,17316817$	
$\theta_B - \theta_L = 0,03266657$		$\theta_B - \theta_L = 0,02905941$	
$\theta_E - \theta_B = 0,03223836$		$\theta_E - \theta_B = 0,0287199$	
$\theta_E - \theta_L = 0,06490493$		$\theta_E - \theta_L = 0,05777931$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,09193821$		$L_{\pi M} = 0,08185433$	
$L_{\sigma F} = 0,06490493$		$L_{\pi F} = 0,05777931$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70596259$		$F_{\pi} = 0,89031901$	
$F_{\pi} = 0,70587969$		$F_F = 0,89021445$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,89011217$	

TABELA - B.18 - Pico 10 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,73738009$	(grau)	$\theta_{By} = 13,73751827$	(grau)
$\theta_o = 13,7375182675$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00013818$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,0591881$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01141696$		$\theta_B - \theta_L = 0,01018556$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01237486$		$\theta_E - \theta_B = 0,0109409$	
$\theta_E - \theta_L = 0,2379182$		$\theta_E - \theta_L = 0,02112647$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = -0,13752438$		$\theta_B - \theta_o = -0,16745443$	
$\theta_B - \theta_L = 0,00823636$		$\theta_B - \theta_L = 0,00733498$	
$\theta_E - \theta_B = 0,00872294$		$\theta_E - \theta_B = 0,00771822$	
$\theta_E - \theta_L = 0,0169593$		$\theta_E - \theta_L = 0,01505321$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,02379182$		$L_{\pi M} = 0,02112647$	
$L_{\sigma F} = 0,0169593$		$L_{\pi F} = 0,01505321$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71282056$		$F_{\pi} = 0,88797184$	
$F_{\pi} = 0,71252631$		$F_F = 0,88760779$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\text{Cos}(2\theta) = 0,88721193$	

TABELA - B.19 - Pico 11 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{DB} = 13,54724907$	(grau)	$\theta_{By} = 13,54728631$	(grau)
$\theta_0 = 13,54728631$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00003724$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,053829137$	
$\theta_B - \theta_L = 0,00964721$		$\theta_B - \theta_L = 0,0085602$	
$\theta_E - \theta_B = 0,0089587$		$\theta_E - \theta_B = 0,00801401$	
$\theta_E - \theta_L = 0,01860591$		$\theta_E - \theta_L = 0,0165742$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = 0,13111924$		$\theta_B - \theta_0 = 0,16775999$	
$\theta_B - \theta_L = 0,00674321$		$\theta_B - \theta_L = 0,00598869$	
$\theta_E - \theta_B = 0,00640328$		$\theta_E - \theta_B = 0,00571869$	
$\theta_E - \theta_L = 0,01314649$		$\theta_E - \theta_L = 0,01170738$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,01860591$		$L_{\pi M} = 0,0165742$	
$L_{\sigma F} = 0,01314649$		$L_{\pi F} = 0,01170738$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70657621$		$F_{\pi} = 0,89053282$	
$F_{\pi} = 0,70636185$		$F_F = 0,89053282$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,89025595$	

TABELA - B.20 - Pico 11 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{Bx} = 13,74643777$	(grau)	$\theta_{By} = 13,74656653$	(grau)
$\theta_0 = 13,7465665261$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00012875$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,05377344$	
$\theta_B - \theta_L = 0,0414914$		$\theta_B - \theta_L = 0,03685808$	
$\theta_E - \theta_B = 0,04239959$		$\theta_E - \theta_B = 0,03757237$	
$\theta_E - \theta_L = 0,08389099$		$\theta_E - \theta_L = 0,07443045$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = -0,1247044$		$\theta_B - \theta_0 = -0,15191341$	
$\theta_B - \theta_L = 0,02960024$		$\theta_B - \theta_L = 0,02628701$	
$\theta_E - \theta_B = 0,03014766$		$\theta_E - \theta_B = 0,02671831$	
$\theta_E - \theta_L = 0,0597479$		$\theta_E - \theta_L = 0,05300531$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,08389099$		$L_{\pi M} = 0,07443045$	
$L_{\sigma F} = 0,0597479$		$L_{\pi F} = 0,05300531$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71220879$		$F_{\pi} = 0,88722816$	
$F_{\pi} = 0,71214552$		$F_F = 0,88714934$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88706617$	

TABELA - B.21 - Pico 12 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,53819902$	(grau)	$\theta_{By} = 13,5382443$	(grau)
$\theta_o = 13,5342443012$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00004528$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,04951345$	
$\theta_B - \theta_L = 0,02359504$		$\theta_B - \theta_L = 0,02106706$	
$\theta_E - \theta_B = 0,02476663$		$\theta_E - \theta_B = 0,02199608$	
$\theta_E - \theta_L = 0,04836167$		$\theta_E - \theta_L = 0,04306314$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = -0,12085179$		$\theta_B - \theta_o = -0,14533501$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01674581$		$\theta_B - \theta_L = 0,01494162$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01737554$		$\theta_E - \theta_B = 0,01544078$	
$\theta_E - \theta_L = 0,03412136$		$\theta_E - \theta_L = 0,03038239$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,04836167$		$L_{\pi M} = 0,04306314$	
$L_{\sigma F} = 0,03412136$		$L_{\pi F} = 0,03038239$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70721832$		$F_M = 0,89043947$	
$F_{\pi} = 0,70553129$		$F_F = 0,89042164$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,89039966$	

TABELA - B.22 - Pico 12 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,75549581$	(grau)	$\theta_{By} = 13,75561664$	(grau)
$\theta_0 = 13,7556166446$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00012083$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,0495019$	
$\theta_B - \theta_L = 0,02761226$		$\theta_B - \theta_L = 0,0244267$	
$\theta_E - \theta_B = 0,02634146$		$\theta_E - \theta_B = 0,02342653$	
$\theta_E - \theta_L = 0,05395372$		$\theta_E - \theta_L = 0,04785323$	
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = -0,11452544$		$\theta_B - \theta_0 = -0,13959981$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01951513$		$\theta_B - \theta_L = 0,0172786$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01892583$		$\theta_E - \theta_B = 0,01681553$	
$\theta_E - \theta_L = 0,03844095$		$\theta_E - \theta_L = 0,03409413$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,05395372$		$L_{\pi M} = 0,04785323$	
$L_{\sigma F} = 0,03844095$		$L_{\pi F} = 0,03409413$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71248017$		$F_M = 0,88693109$	
$F_{\pi} = 0,7124729$		$F_F = 0,88692204$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88692029$	

TABELA - B.23 - Pico 13 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,52914932$	(grau)	$\theta_{By} = 13,5292022$	(grau)
$\theta_o = 13,5292022005$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00005288$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,04553481$	
$\theta_B - \theta_L = 0,02756172$		$\theta_B - \theta_L = 0,02452447$	
$\theta_E - \theta_B = 0,02707164$		$\theta_E - \theta_B = 0,02413566$	
$\theta_E - \theta_L = 0,05463336$		$\theta_E - \theta_L = 0,04866014$	
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = 0,11139268$		$\theta_B - \theta_o = 0,13387676$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01936827$		$\theta_B - \theta_L = 0,01724064$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01918613$		$\theta_E - \theta_B = 0,01709626$	
$\theta_E - \theta_L = 0,0385544$		$\theta_E - \theta_L = 0,0343369$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,05463336$		$L_{\pi M} = 0,04866014$	
$L_{\sigma F} = 0,0385544$		$L_{\pi F} = 0,0343369$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70569336$		$F_M = 0,89066712$	
$F_{\pi} = 0,70564747$		$F_F = 0,8906092$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,89054328$	



TABELA - B.24 - Pico 13 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,7645542$	(grau)	$\theta_{By} = 13,76466749$	(grau)
$\theta_0 = 13,7646674895$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00011329$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,04550614$	
$\theta_B - \theta_L = 0,0067395$		$\theta_B - \theta_L = 0,00600107$	
$\theta_E - \theta_B = 0,00716956$		$\theta_E - \theta_B = 0,00633955$	
$\theta_E - \theta_L = 0,01390905$		$\theta_E - \theta_L = 0,01234062$	
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = -0,10501766$		$\theta_B - \theta_0 = -0,1280954$	
$\theta_B - \theta_L = 0,00485527$		$\theta_B - \theta_L = 0,00431753$	
$\theta_E - \theta_B = 0,00507432$		$\theta_E - \theta_B = 0,00448997$	
$\theta_E - \theta_L = 0,00992959$		$\theta_E - \theta_L = 0,00880751$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,01390905$		$L_{\pi M} = 0,01234062$	
$L_{\sigma F} = 0,00992959$		$L_{\pi F} = 0,00880751$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71389379$		$F_M = 0,88723622$	
$F_{\pi} = 0,71370071$		$F_F = 0,88699226$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 88677431$	

TABELA - B. 25 - Pico 14 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{B\sigma} = 13,5200009995$	(grau)	$\theta_{B\pi} = 13,52015948$	(grau)
$\theta_0 = 13,5201594754$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00005952$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{B\sigma} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{B\pi} = 0,042288$	
$\theta_B - \theta_L = 0,00596961$		$\theta_B - \theta_L = 0,00530266$	
$\theta_E - \theta_B = 0,00563185$		$\theta_E - \theta_B = 0,00503451$	
$\theta_E - \theta_L = 0,01160136$		$\theta_E - \theta_L = 0,01033717$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = 0,10369963$		$\theta_B - \theta_0 = 0,12456084$	
$\theta_B - \theta_L = 0,00417913$		$\theta_B - \theta_L = 0,00371504$	
$\theta_E - \theta_B = 0,00401288$		$\theta_E - \theta_B = 0,00358303$	
$\theta_E - \theta_L = 0,00819201$		$\theta_E - \theta_L = 0,00729806$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma_M} = 0,01160136$		$L_{\pi_M} = 0,01033717$	
$L_{\sigma_F} = 0,00819201$		$L_{\pi_F} = 0,00729806$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70612499$		$F_{\pi} = 0,89103031$	
$F_{\pi} = 0,70600206$		$F_F = 0,89087521$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,89068683$	

TABELA - B.26 - Pico 14 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,77361294$	(grau)	$\theta_{By} = 13,77371965$	(grau)
$\theta_o = 13,773719648$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00010671$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,04223849$	
$\theta_B - \theta_L = 0,02554012$		$\theta_B - \theta_L = 0,02266933$	
$\theta_E - \theta_B = 0,02598277$		$\theta_E - \theta_B = 0,0230175$	
$\theta_E - \theta_L = 0,05152289$		$\theta_E - \theta_L = 0,04568683$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_o = -0,09728315$		$\theta_B - \theta_o = -0,11871901$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01824887$		$\theta_B - \theta_L = 0,01619488$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01852753$		$\theta_E - \theta_B = 0,01641393$	
$\theta_E - \theta_L = 0,0367764$		$\theta_E - \theta_L = 0,03260882$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,05152289$		$L_{\pi M} = 0,04568683$	
$L_{\sigma F} = 0,0367764$		$L_{\pi F} = 0,03260882$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71378758$		$F_{\pi} = 0,88672885$	
$F_{\pi} = 0,71374652$		$F_F = 0,88667785$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88662821$	

TABELA - B.27 - Pico 15 (Esquerda)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,51105094$	(grau)	$\theta_{By} = 13,51111641$	(grau)
$\theta_0 = 13,5111164133$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00006548$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma_M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi_M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = 0,03955664$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01517387$		$\theta_B - \theta_L = 0,01354727$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01577513$		$\theta_E - \theta_B = 0,01402394$	
$\theta_E - \theta_L = 0,030949$		$\theta_E - \theta_L = 0,02757121$	
Plano Fisico ( $\sigma_F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi_F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = 0,09720332$		$\theta_B - \theta_0 = 0,11669947$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01075403$		$\theta_B - \theta_L = 0,00959585$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01108199$		$\theta_E - \theta_B = 0,00985636$	
$\theta_E - \theta_L = 0,02183602$		$\theta_E - \theta_L = 0,01945222$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,030949$		$L_{\pi M} = 0,02757121$	
$L_{\sigma F} = 0,02183602$		$L_{\pi F} = 0,01945222$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,70554834$		$F_{\pi} = 0,89085941$	
$F_{\pi} = 0,70552634$		$F_F = 0,89083163$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,89083029$	

TABELA - B.28 - Pico 15 (Direita)

Cela de Super-rede com 1024 planos de Ge e 512 Planos de GaAs			
$\theta_{BB} = 13,78267203$	(grau)	$\theta_{By} = 13,78277289$	(grau)
$\theta_0 = 13,7827728945$	(grau)	$\Delta\theta = 0,00010087$	(grau)
Polarização $\sigma$		Polarização $\pi$	
Plano matematico ( $\sigma M$ ) (seg.)		Plano matematico ( $\pi M$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_{By} = 0,0$		$\theta_B - \theta_{By} = -0,03952797$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01755045$		$\theta_B - \theta_L = 0,01552617$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01690546$		$\theta_E - \theta_B = 0,01501897$	
$\theta_E - \theta_L = 0,03445592$		$\theta_E - \theta_L = 0,03054514$	
Plano Fisico ( $\sigma F$ ) (seg.)		Plano fisico ( $\pi F$ ) (seg.)	
$\theta_B - \theta_0 = -0,09082757$		$\theta_B - \theta_0 = -0,11090921$	
$\theta_B - \theta_L = 0,01245097$		$\theta_B - \theta_L = 0,0110232$	
$\theta_E - \theta_B = 0,01215828$		$\theta_E - \theta_B = 0,01079301$	
$\theta_E - \theta_L = 0,02460925$		$\theta_E - \theta_L = 0,02181622$	
Largura do Platô (L) (segundos)			
$L_{\sigma M} = 0,03445592$		$L_{\pi M} = 0,03054514$	
$L_{\sigma F} = 0,02460925$		$L_{\pi F} = 0,02181622$	
Fator de Estrutura (FE)		Fator de Polarização (FP)	
$F_{\sigma} = 0,71422414$		$F_{\pi} = 0,88649901$	
$F_{\pi} = 0,7142288$		$F_F = 0,88650479$	
$F_{hkl} = 0,70721832$		$\cos(2\theta) = 0,88648202$	

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. W. Friedrich, P. Knipping, and M. von Laue, Interferenz-Erscheinungen bei Röntgenstrahlen, Sitzungsber. math.-phys. Klasse der Königlich Bayer., Akad. Wiss. München (1912), 303-322 ( Reprinted in Naturwiss. 39 (1952), 361).
2. W. L. Bragg, The structure of some crystal as indicated by their diffraction of x-rays, Proc. R. Soc. A89 (1913), 248-277.
3. C. G. Darwin, The Theory of X-Ray Reflexion, Phil. Mag. 27 (1914a,b), 315-333, 675-690.
4. C. G. Darwin, Note on the Theory of Radiation, Phil. Mag. 43 (1922), 641-649.
5. P. P. Ewald, Zur Begründung der Kristalloptik. I. Theorie der Dispersion Ann. Phys. 49 (1916), 1-38. II. Theorie der Reflexion und Brechung, Ann. Phys. 49 (1916), 117-143.
6. P. P. Ewald, Die Kristalloptic der Röntgenstrahlen, Ann. Phys. 54 (1917), 519-597
7. P. P. Ewald, Aufstellung einer allgemeinen dispersionsbedingung, insbesondere für Röntgenfelder, Z. Kristallgr. A97 (1937), 1-27.
8. M. von Laue, Die Dynamische Theorie der Röntgenstrahlinterferenzen in neuer Form, Ergeb. d. Exakten Naturwiss, 10 (1931), 133-158.
9. R. W. James, The Dynamical Theory of X-Ray Diffraction, Solid State Phys. 15 (1963), 53, New York Academic Press.
10. von G. Molière, Quantenmechanische Theorie der Röntgenstrahlinterferenzen in Kristallen, Ann. der Phys. 5.

Folge., Band 35 (1939), 272-297.

11. M. Born, Effect of thermal vibrations on the scattering of x-rays.III. Proc. Roy. Soc. A180 (1942), 397-413.
12. Y. H. Ohtsuki, Temperature Dependence of X-Ray Absorption by Crystal 1. Photo-Electric Absorption, J. Phys. Soc. Japan 19 (1964), 2285-2292.
13. A. M. Afanas'ev and Y. Kagan, The Role of Lattice Vibrations in Dynamical Theory of X-Ray, Acta Cryst. A24, (1968), 163-170.
14. M. Kuriyama, The Dynamical Scattering Amplitude of an Imperfect Crystal. II. A Relation Between Takagi's Dynamical Equation and a More Exact Dynamical Equation, Acta Cryst. A28 (1972), 588-593.
15. B. K. Tanner, X-ray Diffraction Topography, Pergamon Press Oxford (1976), vii.
16. G. Borrmann, Über Extinktionsdiagramme von Quarz, Phys. Zeit. 42 (1941), 157-162.
17. M. von Laue, Die Absorption der Röntgenstrahlen in Kristallen im Interferenzfall, Acta Cryst. 2 (1949), 106-113.
18. N. Kato, The Flow of X-rays and Material Waves in Ideally Perfect Single Crystals, Acta Cryst. 11, (1958), 885-887.
19. N. Kato and A. R. Lang, A Study of Pendelösung Fringes in X-ray Diffraction, Acta Cryst. 12, (1959), 787-793.
20. A. Authier, Mise en Evidence Experimentale de la Double Réfraction des Rayons X, Cont. Rend. Acad. Sci. Paris 251, (1960), 2003.

21. A. R. Lang and M. Hart, Direct Determination of X-Ray Reflection Phase Relationships Through Simultaneous Reflection, Phys. Rev. Lett. 7 (1961), 120-121.
22. G. Borrmann and W. Hartwig, Z. Krist. 121, 26(1965)
23. R. Colela, Acta Cryst. A30, 413(1974)
24. B. Post, A Solution of the X-Ray 'Phase Problem', Acta Cryst. A35 (1979), 17 .
25. S. L. Chang, Direct Determination of X-Ray Reflection Phases, Phys. Rev. Lett. 48 (1982), 163-166.
26. P. P. Ewald, A Review of my Papers on Crystal Optics 1912 to 1968, Acta Cryst. A35 (1979), 1-9.
27. A. Authier, Angular Dependence of the Absorption-Induced Nodal Plane shifts of X-ray Stationary Waves, Acta Cryst. A42 (1986), 414-426.
28. J. C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solid, McGraw Hill, N.York (1974), cap. 4.
29. H. Wagenfeld, Ewald's and von Laue's Dynamical Theories of X-Ray Diffraction, Acta Cryst. A24, (1968), 170-174.
30. W. A. Keller and H.S. Campos, Self-Consistent Model of Electromagnetic Dynamical Scattering, Phys. Stat. Solid.(a) 96 (1986), 83-86.
31. W. A. Keller and M. Urbanski, Equivalence of Self-Consistency and Conservation of Energy in the Scattering of an Electromagnetic Wave By a Plane of Dipoles, Phys. Letters A. 116, (1986), 340-342.
32. H. S. Campos, Espalhamento Eletrodinâmico Auto-consistente no Caso Simétrico de Bragg, tese de doutorado, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - Rio de Janeiro (1988).



33. H. S. Campos and W. A. Keller, Self-Consistent X-Ray Diffraction Patterns of Perfect Crystal, Modern Phys. Lett. B 3, 16 (1986), 1221-1224.
34. M. Born and E. Wolf, Principles of Optics, Pergamon Press Sixth Ed. (1980), 370.
35. D. S. de Vasconcelos, H. S. Campos and W. A. Keller, Phys. Stat. Solidi A , Reflections curve Pattern in the Bragg case from Thick and Infinitely Thick Crystal, submetido.
36. D. S. de Vasconcelos and W. A. Keller, Self - consistent Structure Factor for  $\sigma$  and  $\pi$  Polarization, Acta Cryst. A46 Supplement (1990), C427.
37. W. A. Keller, E. Ratajczyk and D. S. de Vasconcelos, Absorption in the Self-consistent X-Ray Crystal Scattering, em preparação.
38. D. S. de Vasconcelos, E. Ratajczyk and W. A. Keller, Self-consistent Microscopic Refractive Index, em preparação.
39. D. S. de Vasconcelos, H. S. Campos and W. A. Keller, Microscopic Images of the Self-consistent X-Ray Wavefield in the Symmetric Bragg case, em preparação.
40. D. S. de Vasconcelos, and W. A. Keller, Peculiarities of the Self-consistent X-Ray Scattering for a Region Near  $\pi/2$ , em preparação.
41. A. Caticha and S. Caticha-Ellis, Dynamical theory of X-ray diffraction at Bragg angles near  $\pi/2$ , Phys. Rev. B25, 2 (1982), 971-983 .
42. K. Kora and T. Matsushita, Some Characteristic of Dynamical Diffraction at a Bragg Angle of about  $\pi/2$ , Z. Naturforsch

27a (1972), 484-487.

43. W. A. Keller, Proc. do XVth Congress and General Assembly -International Union of Crystallography - Bordeaux - France, Bragg Law and Darwin Model of Scattering Upon Inclusion of The Ewald Self-consistency Principle, pg C428 (1990).
44. W. A. Keller and D. S. de Vasconcelos, The Modified Bragg Law for Heterolayers Structure, Proc. da 5th Brazilian School on Semiconductor Physics - São Paulo, Brazil, (1991), pg. wed 13.
45. A. Segmüller, P. Krishna and L. Esaki, X-Ray Diffraction Study of a One-Dimensional GaAs-AlAs Superlattice, J. Appl. Cryst. 10 (1977), 1-6.
46. R. Pynn, Incommensurable Structures, Nature 281 (1979), 433-437.
47. F. J. Di Salvo, Jr. and T. M. Rice, Charge - density Waves in Transition - Metal Compounds, Phys. Today ,April 1979, 32-38.
48. R. L. Withers and L.A. Bursill, The structure of the incommensurate superlattices of  $2H-TaSe_2$ , Phil. Mag. B, 43, 4 (1980), 635-672 .
49. A. Janner, T.Janssen and zp. P. M. de Wolff, Bravais Classes for Incommensurate Crystal Phases, Acta Cryst. A39, (1983), 658-666 .
50. A. Janner, T.Janssen and zp. P. M. de Wolff, Determination of the Bravais Class for a Number of Incommensurate Crystal Acta Cryst. A39 (1983), 671-678.
51. J. Kervaroc, M. Baudet, J. Caulet, P. Auvray, J.Y. Emfry and Regreny, Some Aspects of X-ray Structural

- Characterization of  $(\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As})_n(\text{GaAs})_n/\text{GaAs}(001)$  Superlattices, *J. Appl. Cryst.* 17 (1984), 196-205.
52. D. M. Vardanyan, H. M. Manoukyan and H. M. Petrosyan, The Dynamic Theory of X-ray Diffraction by the One-Dimensional Ideal Superlattice. I. Diffraction by the Arbitrary Superlattice, *Acta Cryst.* A41 (1985), 212-217.
53. D. M. Vardanyan, H. M. Manoukyan and H. M. Petrosyan, The Dynamic Theory of X-ray Diffraction by the One-Dimensional for Some Superlattice Models, *Acta Cryst.* A41 (1985), 218-222.
54. W. J. Bartels, J. Hornstra and D. J. W. Lobeck, X-Ray Diffraction of Multilayers and Superlattices, *Acta Cryst.* A42 (1986), 539-545.
55. H. E. Roman, Electronic Properties of a one-dimensional hierarchical system, *Phys. Rev. B* 36, 13 (1987), 7173-7176.
56. M. Kohmoto, L. P. Kadanoff and C. Tang, Localization Problem in One Dimensional: Mapping and Escape, *Phys. Rev. Lett.* 50, 23 (1983), 1870-1872.
57. M. Kohmoto, Metal-Insulator Transition and Scaling for Incommensurate Systems, *Phys. Rev. Lett.* 51, 13 (1983), 1198-1201.
58. M. Kohmoto, B. Sutherland and K. Iguchi, Localization in Optics: Quasiperiodic Media, *Phys. Rev. Lett.* 58, 23 (1987), 2436-2438
59. M. Kohmoto and J. R. Banavar, Quasiperiodic lattice: Electronic properties, phonon properties and diffusion *Phys. Rev. B* 34, 2 (1986), 563-566.
60. M. Kohmoto, B. Sutherland and C. Tang, Critical wave

- functions and aantor-set spectrum of a one-dimensional quasicrystal model, *Phys. Rev. B*, 35, 3 (1987), 1020-1033.
61. B. Sutherland and M. Kohmoto, Resistance of a one-dimensional quasicrystal: Power-law growth, *Phys. Rev. B* 36, 11 (1987), 5877-5886.
62. R. Schilling and S. Aubry, The static structure factor of one-dimensional non-analytic incommensurate structures, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 20, (1987), 4881-4889
63. M. Block, F. Gleisberg and W. Wonneberg, Structure factor of weakly pinned charge-density waves in sub-threshold electric field, *Phil. Mag. B* 58, 4 (1988), 433-443.
64. C. Janot, J. Dubois and M. de Boissieu, Quasiperiodic structures: Another type of long-range order for condensed matter *Am. J. Phys.* 57, 11 (1989), 972-986.
65. D. S. de Vasconcelos and W. A. Keller, The Self-consistent Structure Factor for Heterolayers, *Proc. da 5th Brazilian School on Semiconductor Physics - São Paulo, Brazil*, (1991), pg. thu 33.
66. H. S. Campos, D. S. de Vasconcelos and W. A. Keller, The Self-consistent Rocking Curve for Hetero-layers, *Proc. da 5th Brazilian School on Semiconductor Physics - São Paulo, Brazil*, (1991), pg. tue 15.
67. A. Yariv, *Quantum Electronics*, 3rd Ed. John Wiley & Sons, pg 327 (1989)
68. C. G. Barkla, Phenomena of x-ray transmission, *Proc. Camb. Phil. Soc.* 15 (1909), 287-268.
69. H. G. J. Moseley, The high-frequency spectra of the elements, *Phil. Mag.* 26 (1913) 1024-1034

70. R. W. James and G.W. Brindley, Some Numerical Calculations of Atomic Scattering Factors, *Phil. Mag.* 12 (1931), 81-112.
71. M. Born, *Z. Physik* 37, 863 (1926)
72. H.A. Bethe, Theorie der Beugung von Elektronen an Kristallen, *Ann. Physik* 87 (1928) 55.
73. R. T. Perkins and L. V. Knight, An Exact Analytic Solution of Darwin's Difference Equations, *Acta Cryst.* A40, (1984), 617-619.
74. W. H. Zachariasen, *Theory of X-Ray Diffraction in Crystal*, Dover Publications, Inc. N.York (1967).
75. H. Hattori, H. Kuriyama, T. Katagawa and N. Kato, Absolute Measurement of Structure Factors of Si Single Crystal by Means of X-Ray Pendelösung Fringes, *J. Phys. Soc.* 20 (1965), 988-996.
76. N. Kato, The Determination of Structure Factors by Means of Pendellösung Fringes, *Acta Cryst.* A25 (1969), 119-138.
77. M. Renninger, Diffraction Patterns of Thin perfect Crystal and Their Applicability to the Determination of Structure Factors, *Acta Cryst.* A31 (1975), 42-49.
78. W. L. Bragg & J. West, A technique for the x-ray examination of crystal structures with many parameters *Z. Krist. A*, 60 (1929), 118.
79. P. Debye, Röntgeninterferenzen und Atomgrosse, *Phys. Z.* 31, (1930), 419-428.
80. L. Bewilogua, Über die inkohärente Streuung der Röntgenstrahlen, *Phys. Z.* 32 (1931), 740.
81. L. Paulin & J. Sherman, *Z. Kristallogr. A* 81, 1 (1932)
82. H. Viervold & O. Ogrin, An Extended Table of Atomic

- Scattering Factors, *Acta Cryst.* 2 (1949), 277-279.
83. R. Brill, The Covalent Bond in Diamond and the X-Ray Scattering Factor of Covalent-Bonded Carbon, *Acta Cryst.* 3, (1950), 333-337.
84. R. McWeeny, X-Ray Scattering by Aggregates of Bonded Atoms. I. Analytical Approximations in Single-Atom Scattering, *Acta Cryst.* 4, (1951), 513-519.
85. A. J. Freeman, Atomic Scattering Factors for Spherical and Aspherical Charge Distributions, *Acta Cryst.* 12 (1959), 261-271.
86. M. Hart, X-ray polarization phenomena, *Phil. Mag.* B38, (1978), 41-56.
87. P. P. Ewald, The So-Called Correction of Bragg's Law, *Acta Cryst.* A42 (1986), 411-413.
88. M. Hart, W. Parrish, M. Bellotto and G. S. Lim. The Refractive-Index Correction in Powder Diffraction, *Acta Cryst.* A44, (1988), 193-197.
89. J. N. Prins, Die Reflexion von Röntgenstrahlen an absorbierenden idealen Kristallen, *Z. Phys.* 63 (1930), 477-493.
90. P. P. Ewald, Scattering Phenomena in Electron Diffraction, The Origin of the Dynamical Theory of X-Ray Diffraction, *J. Phys. Soc. Japan*, 17 Sup B II, (1961), 48-52.
91. M. Kohler, Dynamische Reflexion von Röntgenstrahlen an idealen, insbesondere absorbierenden Kristallen, *Ann. der Phys.* 18, (1933), 265-.
92. H. G. J. Moseley, J. H. Fellow and G. Darwin, The Reflexion of X-rays, *Phil. Mag.* 26 (1913), 210-232.

93. L. Esaki & R. Tsu, IBM J. Res. Dep., 14 1970, 61-65
94. W. J. Bartels & W. Nijman, J. Cryst. Growth, 44, 518, 1978
95. J. F. Palmier, *L'Echo des Recherches*, 105, CNET, Paris, (1981), 41-48.
96. W. J. Bartels, J. Vac. Sci. Technol. B1, 338, 1983
97. D. Taupin, Théorie dynamique de la diffraction des rayons X par les cristaux déformés, Bull. Soc. Fr. Mineral. Crystallogr. 87 (1964), 469.
98. S. Takagi, A Dynamical Theory of Diffraction for a Distorted Crystal, J. Phys. Soc. Jpn., 26 (1969), 1239 .
99. L. L. Chang, L. Esaki, W. E. Howard & R. Ludeke, J. Vac. Sci. Technol. 10, 11, 1973
100. F. Rieutord, J. J. Benattar et al., X-ray Phase Determination in Multilayers, Acta Cryst. A45 (1989), 445-453.

"CONTRIBUIÇÃO AO FORMALISMO AUTO-CONSISTENTE DA DIFRAÇÃO DE RAIOS-X,  
APLICAÇÃO EM ESTRUTURAS PLANARES"

DIONICARLOS SOARES DE VASCONCELOS

Tese de Doutorado apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da banca examinadora os seguintes professores:



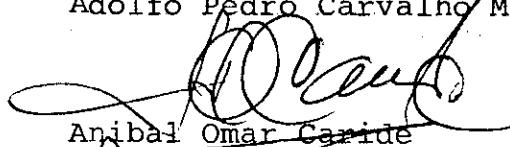
Włodzimierz Aleksander Keller - Presidente



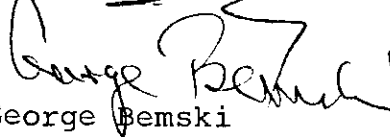
Marcia de Abreu Fanti



Adolfo Pedro Carvalho Malbouisson



Anibal Omar Caride



George Bemski