

CRI/10:50/5ªf. SIMULAÇÃO DE DIFRAÇÃO MÚLTIPLA DE RAIOS-X. Conceição A.B.Salles da Costa, Lisandro P. Cardoso (Instituto de Física/UNICAMP), Vera L. Mazzochi e Carlos B.R. Parente (Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN/CNEN)

Neste trabalho é apresentado o programa MULTI, que realiza simulação da difração múltipla de raios-X. Este programa foi originariamente desenvolvido para a utilização com difração múltipla de neutrons, e foram implementadas as modificações necessárias para os raios-X. O programa pode fazer a simulação do feixe incidente ou do primário (Laue ou Bragg). O cálculo das intensidades é baseado no termo geral da série de Taylor (C.B.R. Parente e S. Catcha-Ellis, Japan J.Appl. Phys. 13, 1501 (1974)), podendo então ser considerada a interação simultânea de muitos feixes.

Foram obtidos diagramas simulados para o Si(222) e o GaAs(002) que reproduzem muito bem os diagramas experimentais. O program MULTI, possibilita a análise da influência de fatores como a polarização e a perfeição cristalina (analisada através da largura mosaico e dimensão do nó da rede recíproca em condição de difração) nas intensidades multiplamente difratadas.

(CNPq)

CRI/11:10/5ªf. SIMULAÇÃO DE DIFRAÇÃO MÚLTIPLA DE RAIOS-X NO ESTUDO DE CAMADAS EPITAXIAIS Conceição A.B. Salles da Costa e Lisandro P. Cardoso (Instituto de Física / UNICAMP)

Uma primeira aplicação prática da simulação de difração múltipla de raios-X no estudo de camadas epitaxiais semicondutoras é apresentada neste trabalho.

O programa MULTI, que é objeto de outro trabalho neste Encontro (C. Salles da Costa, Cardoso, Mazzochi e Parente), foi utilizado com o intuito de simular diagramas de difração múltipla de raios-X para camadas epitaxiais finas. Como primeiro exemplo, diagramas experimentais foram obtidos para amostras de GaAs/Si crescidas por epitaxia química em vácuo (VCE) usando radiação  $\text{CuK}\alpha_1$ . A reflexão primária escolhida foi a (002) para camada e substrato. Observou-se que no diagrama para a camada as reflexões secundárias praticamente desapareciam e apenas as secundárias de superfície são claramente observadas, devido ao efeito da espessura da camada ( $\approx 1\mu\text{m}$ ). Realizando-se as modificações necessárias no cálculo do comprimento médio dos feixes, podemos reproduzir por simulação este efeito. O diagrama para o substrato não mostra grandes modificações devido a sua espessura razoável (350  $\mu\text{m}$ ). Outras aplicações da simulação já estão sendo consideradas.

(CNPq)

CRI/11:30/5ªf. REFINAMENTO DAS FASES FERRI E PARAMAGNÉTICA DA MAGNETITA MEDIDAS COM DIFRAÇÃO MÚLTIPLA DE NÊUTRONS. V.L.Mazzocchi e C.B.R.Parente - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CNEN/SP.

Utilizando diagramas experimentais de difração múltipla, foi realizado o refinamento dos parâmetros estruturais das fases ferri e paramagnética da magnetita. Os diagramas experimentais foram obtidos com a reflexão primária 111 de um cristal natural desse composto, na temperatura ambiente para a fase ferrimagnética e em 730°C para a fase paramagnética. O refinamento foi realizado com o auxílio de um programa de computador (MULTI), de cálculo de diagramas teóricos de difração múltipla, o qual emprega o método iterativo, de cálculo de intensidades por aproximação em série de Taylor. O refinamento foi feito passo a passo, onde cada parâmetro foi refinado isoladamente, buscando-se o valor mínimo do fator de discorância R, para esse parâmetro. Os valores finais encontrados foram  $R = 3,96\%$ , para a fase ferrimagnética, e  $R = 3,46\%$  para a fase paramagnética.