



**INSTITUTO LATINO-AMERICANO DE CIÊNCIAS
DA VIDA E DA NATUREZA (ILACVN)**

ENGENHARIA FÍSICA

**Cálculo por elementos finitos de monocristais de silício sob forças de tração e
sua influência nas medidas de perfis de difração**

ÉGON PIRAGIBE BARROS SILVA BORGES

Foz do Iguaçu
2020

**Cálculo por elementos finitos de monocristais de silício sob forças de tração e sua
influência nas medidas de perfis de difração**

ÉGON PIRAGIBE BARROS SILVA BORGES

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Gonçalves Hönnicke

ÉGON PIRAGIBE BARROS SILVA BORGES

Cálculo por elementos finitos de monocristais de silício sob forças de tração e sua influência nas medidas de perfis de difração

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza da Universidade Federal da Integração Latino-Americana, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Física.

BANCA EXAMINADORA

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Gonçalves Hönnicke
UNILA

Prof. Yunier Garcia Basabe
UNILA

Renan Ramalho Geraldes
CNPEM

Foz do Iguaçu, _____ de _____ de _____.

*Soy lo que dejaron
Soy toda la sobra de lo que se robaron
Un pueblo escondido en la cima
...
Soy América Latina
Un pueblo sin piernas, pero que camina, ¡oye!
(Calle 13)*

Agradecimentos

Agradeço ao meu professor Dr. Marcelo Honnicke pela orientação no trabalho com dedicação e desvelo no compartilhamento dos ensinamentos e pelas horas que extrapolam o contexto da própria orientação, denotando o seu esmero e seu auxílio imprescindível na confecção deste trabalho em curto período de tempo.

Agradeço ao engenheiro físico Renan Geraldês por ser meu orientador de estágio, no qual a teoria se fez presente na prática por meio da análise de elementos finitos em problemas reais, contribuindo sobremaneira para o desenvolvimento desta tese.

Agradeço à Universidade Federal da Integração Latino-Americana (UNILA) pela oportunidade de cursar Engenharia Física.

Agradeço a todos os professores que me auxiliaram nesta jornada de cinco anos, sempre dispostos a ajudar e ministrar o conhecimento da melhor forma.

E agradeço a minha amiga Paula por auxiliar numa revisão ortográfica do trabalho.

BORGES, Égon Piragibe Barros Silva. **Cálculo por elementos finitos de monocristais de silício sob forças de tração e sua influência nas medidas de perfis de difração**. 60 páginas. 2020. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Física) – Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, 2020.

Resumo

O conceito mais básico do método dos elementos finitos (FEM) é a discretização da geometria do problema em vários elementos menores, cada elemento sendo chamado de elemento finito e possuindo seu conjunto de equações acoplado aos elementos vizinhos. O FEM, com o avanço do poder computacional, torna-se uma ferramenta essencial para projeção dos resultados de modelos por meio de simulações. A teoria para análise estrutural consiste basicamente da construção de uma matriz de rigidez global, que é construída a partir da rigidez de cada elemento finito que na aplicação de uma força arbitrária gera deslocamentos (deformações) ou vice-versa. Já a difração dinâmica de raios X é uma teoria microscópica da interação de feixes raios X que, ao serem refletidos em um monocristal perfeito, criam um perfil de difração. Como este depende do parâmetro de rede, sob a influência de uma força externa (macro) o parâmetro de rede altera. A alteração do parâmetro de rede sob uma força serve como principal elo entre o macroscópico e o microscópico. Este trabalho compara os resultados experimentais preliminares de monocristal de silício tracionado e suas respectivas curvas experimentais de difração com resultados do modelo que é simulado por meio da FEM e de programas que calculam a curva de difração. Os resultados iniciais indicam que há consistência nas simulações de FEM, porém isso não é o suficiente para dizer se estão coerentes com os dados experimentais preliminares, sendo necessária a coleta de mais dados.

Palavras chave: FEM, Monocristais, Silício, Tensão, Difração.

BORGES, Égon Piragibe Barros Silva. **Finite element calculation of silicon single crystals under tensile forces and their influence on diffraction profile measurements.** 60 páginas. 2020. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Física) – Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, 2020.

Abstract

The most basic concept of the finite element method (FEM) is the discretization of the problem geometry into several smaller elements, each element being called a finite element and having its set of equations coupled to neighboring elements. With the advancement of computational power, FEM becomes an essential tool for projecting model results through simulations. The theory for structural analysis basically consists of the construction of a global stiffness matrix, which is built from the stiffness of each finite element that in the application of an arbitrary force generates displacements (deformations) or vice versa. Dynamic X-ray diffraction is a microscopic theory of the interaction of X-ray beams, which, when reflected in a perfect single crystal, create a diffraction profile. As this depends on the network parameter, under the influence of an external force (macro) the network parameter changes. Changing the network parameter under force serves as the main link between the macroscopic and the microscopic. This work compares the preliminary experimental results of tractioned silicon monocrystal and their respective diffraction experimental curves with results from the model that is simulated by means of FEM and programs that calculate the diffraction curve. The initial results indicate that there is consistency in the FEM simulations, but this is not enough to say whether they are consistent with the preliminary experimental data, requiring the collection of more data.

Keywords: FEM, Monocrystals, Silicon, Tension, Diffraction.

Lista de Figuras

1.1	Esquema de análise em elementos finitos.	13
2.1	Difração de Bragg.	16
2.2	Difração, caso geral.	16
2.3	Malha elétrica com resistências.	19
2.4	Sistema massa-mola.	20
2.5	Problema de análise estrutural com nós.	21
2.6	Deslocamento da barra.	22
2.7	Barra com carga distribuída.	27
2.8	Elemento infinitesimal.	28
2.9	Representação do deslocamento virtual de um corpo arbitrário.	29
2.10	Elemento infinitesimal cúbico.	30
2.11	Comparação de qualidade de elemento finitos cúbicos.	34
2.12	Módulo de Young do silício para direções de 0 a $\pi/2$	36
3.1	Configuração com o monocromador, feixe de raios X e a mostra tracionada.	38
3.2	Esquema de análise em elementos finitos.	39
3.3	Fotos do experimento com tensionador e difratômetro.	40
4.1	Esquemático da lâmina de silício no textitSpaceClaim.	42
4.2	Condições de contorno para o bloco no Ansys	43
4.3	Condições de contorno para a casca no <i>Ansys</i>	43
4.4	Malha da casca.	44
4.5	Malha do bloco no Ansys	45
5.1	Representação do deslocamento do parâmetro de rede para cada camada	49
6.1	Gradiente de deslocamento nodal da casca e do bloco com força de 30 N	51
6.2	Tensão de cisalhamento para condição de suporte fixo e “remote displacement”	52
6.3	Figura do contorno da diferença no tensão de cisalhamento na casca com força de 30 N	52
6.4	Gráficos em relação à um eixo do deslocamento dos nós para o bloco e para a casca	53
6.5	Deslocamento dos nós em Y	54
6.6	Curvas de difração obtidas experimentalmente	55
6.7	Curvas de difração obtidas por simulações	56
6.8	Esquema de análise em elementos finitos	56
6.9	Gráfico das curvas de difração experimental e simulada	58

Lista de Abreviações e Siglas

FEA.	Análise de elementos finitos
FEM.	Método de elementos finitos
XOP.	Utilidades ópticas de raios X (X-ray Optics utilities)
PDE.	Equações diferenciais parciais
CAE.	Engenharia assistida por computador
Si.	Silício

Conteúdo

1	Introdução	12
2	Revisão teórica	15
2.1	Difração de raios X em monocristais perfeitos	15
2.1.1	Atenuação	18
2.2	Análise de elementos finitos	19
2.2.1	Os nós na Física	19
2.3	Teoria da elasticidade dos materiais	23
2.4	Formulações matemáticas	26
2.5	Análise estrutural de elementos finitos	29
2.5.1	Malhas	33
2.5.2	Erro e razão de aspecto	35
2.6	Anisotropia e o comportamento de monocristais de silício	35
3	Configuração experimental	38
4	Modelo de elementos finitos	41
4.1	Criação gráfica para estudo da lâmina de silício	41
4.2	Condições de contorno	43
4.3	Criação da malha	44
4.4	Verificação dos primeiros resultados	45
5	Simulação por teoria dinâmica de difração	47
5.1	Introdução ao XOP	47
5.2	Modelagem para as curvas de difração	48
6	Resultados e Análise	51
6.1	Resultados iniciais	51
6.2	Deslocamento dos nós	54
6.3	Curvas de difração	55
	Conclusões	59
	Referências bibliográficas	60

Capítulo 1

Introdução

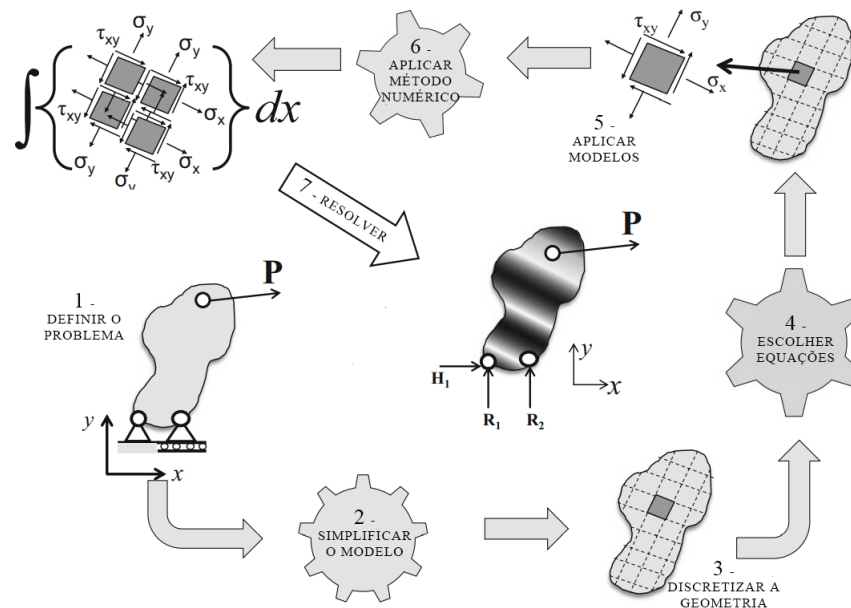
Métodos computacionais atualmente são amplamente utilizados na engenharia assistida por computador (CAE). Um dos métodos mais utilizados é o método de elementos finitos (FEM). Ele é feito por meio da discretização de uma geometria dividida em vários elementos menores em que cada elemento é chamado de elemento finito. Estes possuem uma equação diferencial própria acoplada aos elementos vizinhos, que juntos formam uma equação global do problema.

Diferentes problemas de dinâmica de fluidos, eletromagnetismo, análises financeiras, economia e ciências dos materiais, para citar apenas alguns exemplos, podem ser abordados usando métodos numéricos baseados em equações diferenciais parciais (PDE) porém, muitas vezes as PDEs não possuem solução analítica (OKEREKE; KEATES, 2018). Nesses casos, a abordagem numérica viabiliza seu cálculo por vários métodos matemáticos, como uma FEM consiste no cálculo de várias PDEs seus cálculos são feitos através de métodos numéricos.

No desenvolvimento de análises de métodos aproximados para solução de problemas de equações diferenciais parciais foram desenvolvidas na matemática em termos de soluções de equações por diferenças finitas, métodos variacionais e função de testes contínuos por partes (ZIENKIEWICZ; TAYLOR; ZHU, 2005). Por outro lado a engenharia muitas vezes aborda o problema de forma mais intuitiva (MCHENRY, 1943), por exemplo, criando uma analogia entre elementos discretos reais e porções finitas de um domínio contínuo. Ambas as abordagens se convergiram e atualmente podem se combinar em um único modelo, o FEM (ZIENKIEWICZ; TAYLOR; ZHU, 2005).

Os algoritmos da análise FEM em geral são estáveis e mais insensíveis às singularidades ou distorções da malha quando comparados aos métodos numéricos clássicos como o método da diferença (CIARLET; LIONS, 1991). Um esquema dos passos para FEA pode ser visto na Figura 1.1.

Figura 1.1: Esquema de análise em elementos finitos.



Fonte: Adaptado (OKEREKE; KEATES, 2018).

Neste trabalho aplicar-se-á de uma FEA em uma lâmina de silício sobre tração para obter curvas de difração e por isso é importante uma breve introdução sobre os cristais.

Para entender melhor o conceito de cristal, considere que na transição de fase de um líquido para sólido, as moléculas podem assumir uma disposição aleatória, mas um padrão ordenado é mais provável porque corresponde a um estado de menor energia. Esta disposição ordenada de moléculas é chamada de estado cristalino (GIACOVAZZO et al., 2002). A ciência que se preocupa com o estudo de cristais é a cristalografia. Seu desenvolvimento cresceu muito após a descoberta dos raios X e sua difração por cristais. A cristalografia é muito importante para a ciência moderna por causa de sua natureza interdisciplinar como, Química, Física, Ciências da Terra, Biologia, Matemática e Ciência dos Materiais, em que se procura desenvolver novas técnicas para atender às demandas experimentais aprofundando-se no estudo de cristais (GIACOVAZZO et al., 2002).

A análise na escala atômica se deve aos monocristais. Monocristais de Silício (Si) são amplamente utilizados em difração de raios X. Com a alta demanda dos monocristais de Si na indústria de semicondutores, o conhecimento técnico para o crescimento de cristais perfeitos de Si sem impurezas e livres de defeitos (monocristais perfeitos) foi construído por muitos anos (SHIMURA, 2012). Essa é uma das razões de se utilizar monocristais de Si como monocromadores de raios X.

O trabalho aborda métodos de análise de elementos finitos (FEA) para obter deslocamentos no macro de acordo com as condições de contorno do experimento e modelando os deslocamentos das células unitárias comparando com os resultados de simulação de difração dinâmica com os dados obtidos experimentalmente. Elementos finitos serão usados para fazer uma ponte entre a teoria que compõe o macro (FEA do Si) e a escala mínima de micrômetros (difração de raios X) a fim de extrair informações sobre o deslocamento relativo de átomos na escala atômica (angstrom).

Capítulo 2

Revisão teórica

Neste capítulo é realizada uma revisão teórica de base para as partes mais importantes da teoria de difração de raios X em monocristais perfeitos, teoria de elasticidade dos materiais e o conceito e a teoria da FEM. Por meio da análise de base, é possível entender quais métodos são utilizados e quais os possíveis problemas que podem surgir ou se podem ser aplicáveis quanto ao problema em questão.

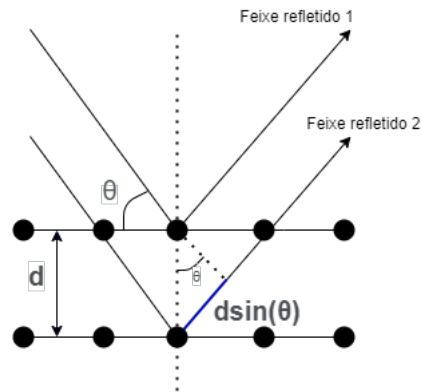
2.1 Difração de raios X em monocristais perfeitos

Os raios X são adequados para medir a estrutura em nível atômico porque seus comprimentos de onda são da mesma ordem do parâmetro de rede (a distância entre átomos) de uma célula cristalina. Os raios X podem ser produzidos pelo envio de elétrons de alta energia (da ordem de alguns quilo-eletronvolts - keV) de um cátodo para um ânodo, em que se ionizam elétrons dos níveis de maior energia de ligação de um átomo.

No modelo geométrico mais simples, os raios X “refletem” uma vez ao colidirem com um elemento do cristal, produzindo padrões de interferência devido à diferença de caminho entre os diferentes raios que compõem o feixe de raios X. Essa análise é válida para feixes que passam muito próximos à superfície, em que os efeitos de distribuição de carga são negligenciados. Nesta análise utiliza-se da lei de Bragg que compõe de uma simplificação geométrica da diferença de caminho entre dois feixes de raios X. Para mostrar a lei de Bragg, considere o modelo geométrico da Figura 2.1, com a estrutura cristalina representada, por questões de simplicidade, bidimensionalmente, a diferença de

caminho entre o raio refletido 1 e o raio refletido 2 é obtida geometricamente, e seu valor para interferência construtiva será um múltiplo inteiro do comprimento de onda.

Figura 2.1: Representação esquemática da difração de Bragg. Em azul, a distância $d\sin(\theta)$ representa a diferença de caminho entre o raio refletido 1 e o raio refletido 2.



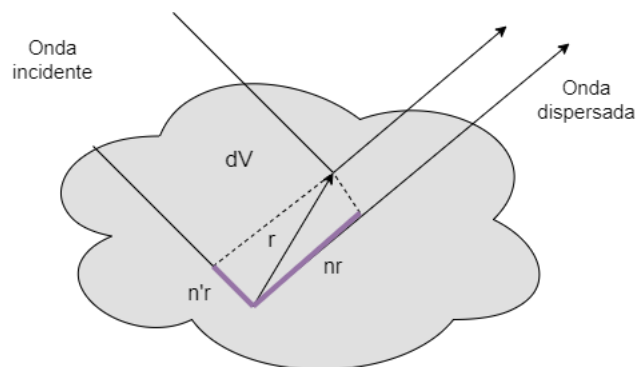
Fonte: O autor.

A figura 2.1 obtemos a equação

$$2d\sin(\theta) = m\lambda \quad , m = 0, 1, 2, 3... \quad (2.1)$$

Entretanto, nem todos os casos podem ser simplificados para o caso geométrico. Considerando dois pontos arbitrários no espaço interior do cristal, o caso geral é representado pela figura 2.2.

Figura 2.2: Difração, caso geral.



Fonte: O autor.

Sendo k e k' são vetores que coincidem com a direção de propagação da onda incidente e dispersada respectivamente, de módulo $k = 2\pi/\lambda$, em que λ é o comprimento de onda. Uma onda eletromagnética polarizada em uma direção é periódica e pode ser descrita para o campo elétrico como $\vec{E} = E_0 e^{-ikr + \omega t}$, sendo ω a frequência angular.

No caso da Figura 2.2 o valor de k' depende da direção da medida devido ao efeito de polarização do campo elétrico. Da Figura 2.2, a diferença de caminho é de $(\vec{n} - \vec{n}') \cdot \vec{r} = m\lambda$, em que \vec{n} e \vec{n}' representam vetores unitários coincidentes com a direção do feixe de entrada e saída, respectivamente. A diferença de caminho multiplicada por $\frac{2\pi}{\lambda}$ fornece $\Delta \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = 2\pi m$. Na condição de difração, os vetores satisfazendo a condição $G = k' - k$ são chamados de vetores de rede recíprocos.

A condição acima pode se reescrita para os vetores de rede recíproco e os índices de Miller como: $\mathbf{G} \cdot \mathbf{H} = 2\pi m$. Sendo \mathbf{H} o vetor da rede recíproca, dependente dos vetores recíprocos da rede, $\mathbf{H} = h\mathbf{b}_1 + h\mathbf{b}_2k + \mathbf{b}_3l$ e (h,k,l) são os índices de Miller.

Nestas condições descreve-se planos em cristais, derivados de onde o plano intercepta cada eixo de coordenadas. Em um material específico com uma constante de rede e estrutura cristalina conhecidas, isso permite o cálculo de ângulos e distâncias entre planos e direções de interesse.

Para descrever o efeito das cargas, é necessário definir a densidade de elétrons em uma estrutura cristalina suficientemente grande, considerando esferas rígidas, pode ser descrito como uma soma de Fourier (BATTERMAN; COLE, 1964)

$$\rho(r) = (1/V) \sum_H F_H e^{-2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2.2)$$

F_H é definido como o fator estrutural do vetor recíproco de rede. Assumindo que o efeito térmico é desprezível, este é escrito como uma soma de Fourier dependente de cada cristal e da direção de incidência do feixe de raios X.

$$F_H = \sum_n f_n e^{2\pi i \mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_n}. \quad (2.3)$$

O modelo geométrico da equação 2.1 não obedece à lei de conservação de energia, por isso não é o modelo mais correto para descrever o fenômeno. A teoria dinâmica da difração de raios X ((BATTERMAN; COLE, 1964) e (AUTHIER, 2001)) considera o campo de onda no potencial periódico do cristal e leva em consideração todos os múltiplos

efeitos de espalhamento. Ao contrário da teoria cinemática de difração, que descreve a posição aproximada dos picos de difração de Bragg ou Laue no espaço recíproco, a teoria dinâmica corrige a refração, forma e largura dos picos, extinção e efeitos de interferência. As representações gráficas são descritas em superfícies de dispersão em torno de pontos de rede recíprocos que cumprem as condições de contorno na interface do cristal.

Nos cristais finos, há também o efeito de reflexão na superfície abaixo do plano incidente do feixe. A onda eletromagnética é refletida na superfície abaixo do plano incidente no cristal no feixe refletido. A interferência causa ondulações de baixa intensidade próximas ao pico chamadas de *pendellösung*.

Quando o cristal é deformado, pela teoria de deformação do cristal, a equação 2.3 pode ser reescrita com um fator adicional que surge devido ao deslocamento $u(\mathbf{r})$ (AUTHIER, 2006)

$$F_H = \sum_n f_n e^{2\pi i(\mathbf{H} \cdot \mathbf{r}_n - u(\mathbf{r}))}. \quad (2.4)$$

O fator adicional $u(\mathbf{r})$ causa um deslocamento do pico da curva de difração (mudança do ângulo de reflexão) e um alargamento ou achatamento da curva.

2.1.1 Atenuação

A atenuação de um feixe de raios X é caracterizada por diversos processos de interação da radiação com a matéria, a maior contribuição é a absorção fotoelétrica, processo em que a onda eletromagnética fornece uma energia maior a uma energia mínima suficiente para que o elétron salte do estado discretizado de energia ligado ao núcleo atômico para um elétron livre com energia contínua.

Para determinar a atenuação considere uma camada de espessura infinitesimal dy a atenuação é linear e depende de uma constante, $-\mu dy$, assim a função da intensidade é descrita como:

$$I(y + dy) - I(y) = dI = -I(y)\mu dy. \quad (2.5)$$

Logo, a solução da equação diferencial é uma exponencial como mostrado na equação 2.6.

$$I(y) = I_0 e^{-\mu y}. \quad (2.6)$$

O valor do coeficiente de atenuação μ pode ser obtido experimentalmente ou por meio de cálculos que envolvem a teoria de perturbação da mecânica quântica e a teoria de propagação de ondas do eletromagnetismo. O valor de I_0 é a intensidade incidente do raios X.

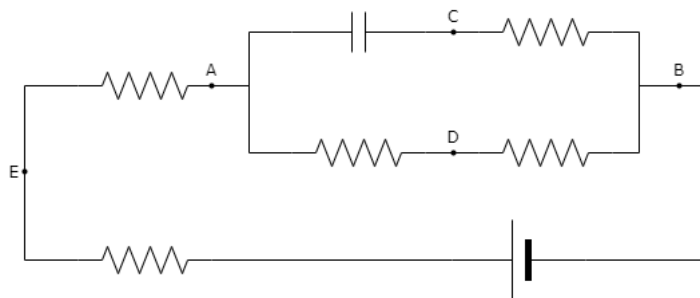
2.2 Análise de elementos finitos

Esta subseção inicia-se com a análise de análogos da engenharia com elementos finitos para entender como a FEA é realizada em programas de simulações, por meio dos conceitos de nós e elementos e como ambos são tratados de forma conjunta e apresentados.

2.2.1 Os nós na Física

Considere a malha elétrica da Figura 2.3, a soma das correntes elétricas em um nó é nula (Lei de Kirchoff).

Figura 2.3: Malha elétrica com resistências fonte e capacitor.



Fonte: O autor.

Sendo $I_{E \rightarrow A}$ corrente elétrica do nó E para A, $I_{A \rightarrow E}$ corrente elétrica do nó A para o E, V_a tensão no nó A, V_e tensão no nó E, então, podemos escrever: $I_{E \rightarrow A} =$

$\frac{1}{R_{ae}}(V_a - V_e)$ como também $I_{A \rightarrow E} = \frac{1}{R_{ae}}(V_e - V_a)$, em que R_{ae} é a resistência entre os nós A e E. Na forma matricial, a equação é:

$$\begin{bmatrix} I_{A \rightarrow E} \\ I_{E \rightarrow A} \end{bmatrix} = \frac{1}{R_{ae}} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_a \\ V_e \end{bmatrix}. \quad (2.7)$$

Definindo a matriz \mathbf{J} como a matriz das correntes, \mathbf{K} a matriz associada às resistências e \mathbf{V} a matriz de tensões, a equação 2.8 é então obtida. O sobrescrito E indica que é do nó E.

$$\mathbf{J}^E = \mathbf{K}^E \mathbf{V}^E. \quad (2.8)$$

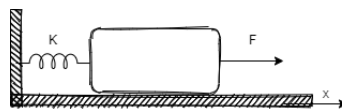
Em que, pela condição de nó não acumular carga, obtemos a equação matricial:

$$\mathbf{K}\mathbf{V} = \mathbf{0}, \quad (2.9)$$

em que $\mathbf{K}\mathbf{V}$ é a soma de todos os elementos da matriz K na equação 2.8 multiplicados pela respectiva tensão.

De forma análoga, na mecânica estrutural em equilíbrio, a aplicação das leis de Newton com resultante zero é similar à aplicação anterior. Considere um sistema simples de massa e mola em equilíbrio como o da Figura 2.4. Pela lei de Hooke, $Ku_x - F = 0$, simular a equação 2.9 com o implemento de um termo de carga (força).

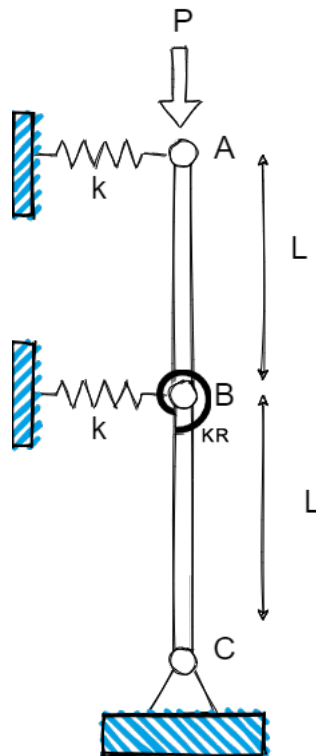
Figura 2.4: Sistema massa-mola.



Fonte: O autor.

Para ilustrar com outro exemplo, considere o sistema de barras pivotadas com molas da Figura 2.5.

Figura 2.5: Sistema de barras pivotadas com molas. Os pontos A, B e C são nós. P representa uma força constante.



Fonte: O autor.

Onde L é o comprimento AB e BC , k a constante da mola, Kr a constante linear de torção e P uma força. Para a barra superior, podemos escrever:

$$q = \begin{bmatrix} q_A \\ q_B \end{bmatrix} \quad q_A = \begin{bmatrix} q_{horizontal}^A \\ q_{vertical}^A \end{bmatrix}. \quad (2.10)$$

q^A é o vetor força atuando no nó "A". Para o nó "B" é análogo.

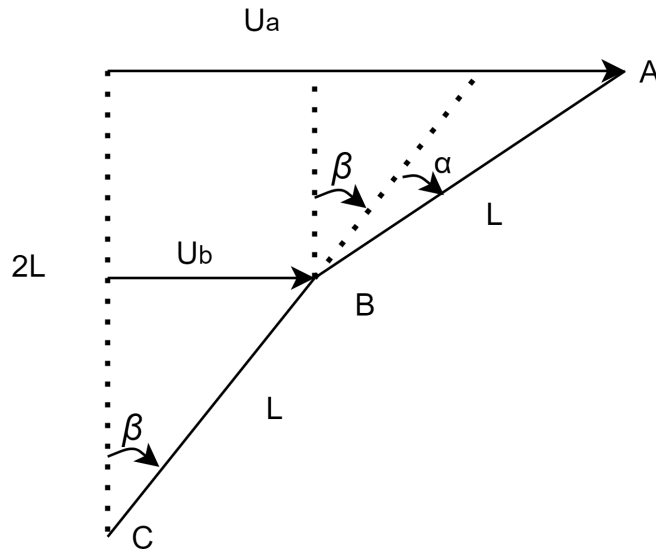
$$u = \begin{bmatrix} u_A \\ u_B \end{bmatrix} \quad u_A = \begin{bmatrix} u_{horizontal}^A \\ u_{vertical}^A \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

u_A é o vetor da localização do nó "A". Para o nó "B" é análogo. Para pequenos deslocamentos $u \approx u_{horizontal}$ e $q \approx q_{horizontal}$.

Na condição de contorno desse sistema, o ponto C está fixo, o ponto B não sofre fricção, além disso está com uma mola de ângulo, que funciona como $M = kr\theta$,

sendo kr a constante angular, θ o ângulo e M o momento angular. A mola de ângulo é um modelo simplificado de um elemento rígido sobre torção para ângulos pequenos.

Figura 2.6: Deslocamento da barra.



Fonte: O autor.

Na barra com B fixo para rotação, A e B deslocam o mesmo ângulo. Tendo em conta o B livre para rotação, quando B desloca um ângulo no sentido horário (visão da Figura 2.5) A irá deslocar o ângulo de B com a adição de um ângulo como mostrado na Figura 2.6. Por isso, se o ponto B desloca um ângulo de α , o ponto A desloca em um ângulo $\alpha + \beta$. Por conservação de momento angular, escreve-se para o nó A e B respectivamente:

$$PL \sin(\alpha + \beta) = ku_A L \cos(\alpha + \beta) + kr\alpha. \quad (2.12)$$

$$PL [\sin(\alpha + \beta) + \sin(\beta)] = ku_A L \cos(\alpha + \beta) + ku_B L \cos(\beta). \quad (2.13)$$

Temos que $\sin(\alpha + \beta) = (u_A - u_B)/L$ e $u_B = \sin(\beta)/L$. Para pequenos deslocamentos, $\cos(\alpha + \beta) \approx 1$, $\cos(\beta) \approx 1$ e $\alpha \approx (u_A - u_B)/L$

Com isso por 2.13 e 2.12, obtemos a equação matricial:

$$\begin{bmatrix} kL + k_r/L & -2k_r/L \\ 2kL & kL \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_A \\ u_B \end{bmatrix} = P \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_A \\ u_B \end{bmatrix}. \quad (2.14)$$

Para generalizar, pode-se se escrever a equação inicialmente válida para um nó arbitrário E:

$$\mathbf{q}^E = \mathbf{K}^E \mathbf{u}^E. \quad (2.15)$$

O número de linhas em q^E e de u^E é igual ao número de nós total, enquanto K^E será uma matriz quadrada do número de nós total. Como generalização na forma matricial com $f = \sum_E q^E$, U a matriz vetorial dos nós e com K a rigidez do sistema temos a equação geral:

$$\mathbf{KU} - \mathbf{f} = \mathbf{0}. \quad (2.16)$$

Para esclarecimento, considere que o elemento “A” vai ocupar a primeira linha da matriz U , a matriz q^A terá na primeira linha forças aplicadas diretamente ao nó, nas demais linhas forças de ação e reação de outros nós e K^A a relação de rigidez entre essas forças, é escrito desta maneira pois computacionalmente se calcula-se a matriz de cada nó para depois agrupá-las e resolver o sistema.

Comparando a equação 2.16 com a equação 2.16 a matriz de rigidez K é a matriz com os coeficientes de elasticidade da mola correspondente ao primeiro matriz do lado esquerdo da equação e a matriz da força é o resultado do lado direito.

2.3 Teoria da elasticidade dos materiais

Nesta seção iremos explorar a base dos conceitos que dão origem aos tensores de tensão e de deformação da teoria da elasticidade dos materiais (LANDAU; LIFSHITS, 1964). Essa teoria é base para qualquer problema envolvendo deformação de corpos, inclusive utilizada nos cálculos de FEA.

É importante entender os possíveis limites de aplicações da teoria de elasticidade, uma vez que vamos utilizar esta teoria (macroscópica) para entender o comporta-

mento microscópico de monocristais de Si sob tração investigados por difração de raios X.

O tensor de deformação

Novamente considere u como vetor de deslocamento. Podemos escrever na forma: $u_i = x'_i - x_i$ em que x_i denomina cada coordenada no espaço ($x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$).

Na deformação de um corpo, a distância entre cada ponto muda. Considere dois pontos muito próximos. O vetor que os une é dx_i . Após uma deformação, o vetor modifica para $dx'_i = dx_i + du_i$. Assim, o módulo do vetor fornece o comprimento ao quadrado $\sum_{i=0}^3 dx_i^2 = dl^2$ para uma deformação $dl'^2 = (dx_i + du_i)^2$, omite-se o somatório para a notação ficar mais limpa. A forma diferencial de pequeno deslocamento pode ser escrito na forma: $du_i = \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k$. Ao expandir o quadrado de dl'^2 , obtemos:

$$dl'^2 = dl^2 + 2dx_i \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_k + \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \frac{\partial u_i}{\partial x_l} dx_k dx_l. \quad (2.17)$$

Os índices i, k e l quando repetidos no mesmo termo indicam soma e são considerados variáveis muda. Podemos trocar as variáveis muda para isolar os termos iguais e obter a equação:

$$dl'^2 = dl^2 + 2u_{ik} dx_i dx_k, \text{ onde } u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \right). \quad (2.18)$$

A equação 2.18 é a mudança do comprimento de um elemento quando o corpo é deformado. Como qualquer tensor, este pode ser colocado em uma base na qual a matriz é diagonal, ou seja, $u_{ik} = 0$ para $i \neq k$.

Em geral, o terceiro termo de u_{ik} (com duas derivadas) é desconsiderado, devido a pequenos deslocamentos gerados pelas deformações. Uma maneira de escrever o tensor u_{ik} é por meio do volume, dado um elemento de volume $dV = dx_1 dx_2 dx_3$ na

deformação. Para isso, é necessário fazer $dx'_1 dx'_2 dx'_3 = dV(1 + u_{11})(1 + u_{22})(1 + u_{33})$, desconsiderando termos de segunda ordem, escreve-se:

$$dV' = dV(1 + u_{11} + u_{22} + u_{33}) \quad \rightarrow \quad u_i = (dV' - dV)/dV. \quad (2.19)$$

O tensor de tensão

Um corpo em equilíbrio sem deformação possui a soma das forças internas nula. Do ponto de vista microscópico, ao realizar uma força, que causa deformação, os átomos são retirados da posição de equilíbrio e exercem forças de interações (de curta distância) nos átomos vizinhos, gerando no conjunto uma força resultante que induz o retorno do átomo à posição inicial. Essa força gera tensão no corpo.

Considerando uma força por elemento de volume \mathbf{F} , pela terceira lei de Newton, as forças de uma porção de volume e que agem entre si são anuladas e, portanto restam as forças de borda na superfície que não contêm correspondentes dentro do corpo. Essa relação motiva a criação da força na forma de um elemento divergente que assim, ao integrar-se pelo volume, pode ser substituído por uma integral de superfície do volume do corpo.

$$\int F_i dv = \int \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} dV = \oint \sigma_{ik} ds_k, \quad (2.20)$$

o tensor σ_{ik} é o tensor de tensão. Para um força hidrostática, de pressão constante p , temos que a força que age nele é $-p ds_i = -p \delta_{ki} ds_k$, assim da equação 2.20 o nosso tensor é escrito na forma:

$$\sigma_{ik} = -p \delta_{ik}. \quad (2.21)$$

A matriz de δ_{ik} é uma matriz diagonal unitária. Quando os demais elementos não são nulos, significa que os termos associados ao problema possuem uma tensão de cisalhamento.

Por meio das variáveis termodinâmicas, investigando a energia livre de Helmholtz, é possível definir o módulo de young “E”. Este representa a constante de proporção entre a tensão de cisalhamento e o estresse induzido. Já o módulo de Poisson

“ ν ” representa o negativo da razão do cisalhamento transversal com axial, ou seja, define como ele deforma na transversal dada uma força axial. Em geral, para corpos isotrópicos:

$$\begin{aligned}
 u_{xx} &= \frac{1}{E}[\sigma_{xx} - \nu(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})] \\
 u_{yy} &= \frac{1}{E}[\sigma_{yy} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})] \\
 u_{zz} &= \frac{1}{E}[\sigma_{zz} - \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})] \\
 u_{xy} &= \frac{1+\nu}{E}\sigma_{xy} \\
 u_{xz} &= \frac{1+\nu}{E}\sigma_{xz} \\
 u_{yz} &= \frac{1+\nu}{E}\sigma_{yz}
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

2.4 Formulações matemáticas

O princípio variacional é um campo da análise matemática que usa variações, que são pequenas mudanças em funções e funcionais, para encontrar máximos e mínimos de funcionais e é utilizado nas equações de FEA.

Muitos problemas importantes envolvem funções de várias variáveis em que o mínimo ou máximo é encontrado por meio do princípio variacional como na mecânica Lagrangiana que utiliza do princípio variacional para encontrar as equações do movimento por coordenadas generalizadas. Por exemplo, sem saber previamente a possível trajetória em um problema de lançamento oblíquo, existem diversas curvas possíveis para ela, a trajetória que possui a menor ação, isto é, a diferença total entre energia potencial e cinética é única e é uma parábola. Demais curvas não minimizam a ação.

A formulação variacional consiste similar a formulação da mecânica clássica na forma Lagrangiana, porém para descrever deslocamentos em um corpo que não é mais infinitamente rígido. As equações de equilíbrio que regem as variáveis de estado também podem ser obtidas em muitas análises usando um extremo, ou formulação variacional. Um problema extremo consiste em localizar o conjunto de valores (variáveis de estado) $\Pi(U_1, U_2, \dots, U_n)$, para o qual um determinado U funcional (U_i, \dots, U_n) é um máximo, um mínimo ou tem um ponto de sela. A condição para obter as equações para as variáveis de estado é:

$$\delta\Pi = 0, \tag{2.23}$$

$$\delta\Pi = \frac{\partial\Pi}{\partial U_1} + \dots + \frac{\partial\Pi}{\partial U_n}, \quad (2.24)$$

$$\frac{\partial\Pi}{\partial U_i} = 0 \text{ para } i = 1, 2, 3.. \quad (2.25)$$

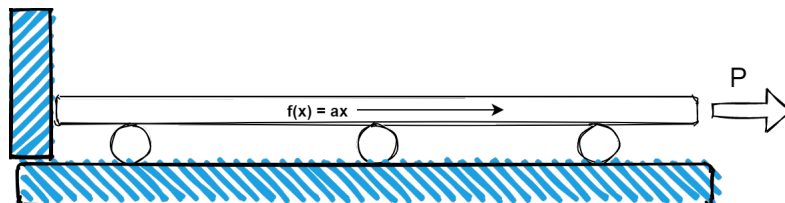
Na análise linear estrutural, com deslocamentos sendo variáveis de estado, a energia potencial total é formulada como a função de estado:

$$\Pi = U - W, \quad (2.26)$$

em que U é a energia de cisalhamento e W é a energia potencial total das cargas.

Para ilustrar os diferentes métodos matemáticos aplicados na resolução de problemas, considere uma barra horizontal na Figura 2.7, em que só uma direção é relevante para o problema. P é uma força constante, e $f(x)$ é uma carga distribuída na barra. A seção de área é considerada constante.

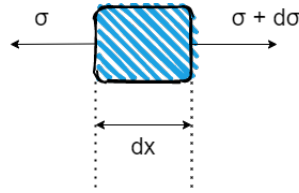
Figura 2.7: Barra com carga distribuída $f(x) = ax$ e de comprimento L sobre suportes sem fricção.



Fonte: O autor.

$$\text{Formulação diferencial} \begin{cases} EA \frac{d^2u}{dx^2} + f = 0 \\ u(x=0) = 0 \\ EA \frac{du}{dx}(x=L) = R \end{cases} \quad (2.27)$$

Na formulação diferencial, um elemento infinitesimal do sistema é analisado. Note que é uma formulação similar à discreta porém, agora o elemento é um elemento diferencial que compõe um sistema contínuo.

Figura 2.8: Elemento infinitesimal.

Da figura 2.8 como $d\sigma = \frac{d\sigma}{dx}dx$, por equilíbrio das forças, também escrevemos $f(x + dx) - f(x) = \frac{df}{dx}dx$:

$$\sigma A - \left(\frac{d\sigma}{dx}dx A + \sigma A \right) - \frac{df}{dx}dx = 0. \quad (2.28)$$

Da relação 2.21 e 2.22 para sistemas unidimensionais isotrópicos, é válido $\sigma = E \frac{du}{dx}$. Cancelando os termos de σA dado que as áreas são constantes, a equação restante é com as condições de contorno, a equação 2.29.

$$\text{Formulação variacional} \left\{ \begin{array}{l} \Pi = \int_0^L \left[\frac{1}{2}EA \left(\frac{du}{dx} \right)^2 - uf \right] dx - Pu(x=L) \\ u(x=0) \text{ e } \delta u(x=0) = 0 \\ \delta \Pi = 0 \end{array} \right. \quad (2.29)$$

A formulação variacional é matematicamente equivalente à forma diferencial em 2.28. Considere que ela é válida em todo seu domínio contínuo escrevemos:

$$\left(EA \frac{d^2u}{dx^2} + f \right) \delta u = 0. \quad (2.30)$$

Pode-se integrar o termo $\delta u(x)$, de 0 até L em x. Desta integral, realizando integração por partes, obtém-se:

$$\text{Princípio do trabalho virtual} \left\{ \begin{array}{l} \int_0^L \frac{d\delta u}{dx} EA \frac{du}{dx} dx = \int_0^L f \delta U dx + R \delta u(x=L) \\ u(x=0) \text{ e } \delta u(x=0) = 0 \end{array} \right. \quad (2.31)$$

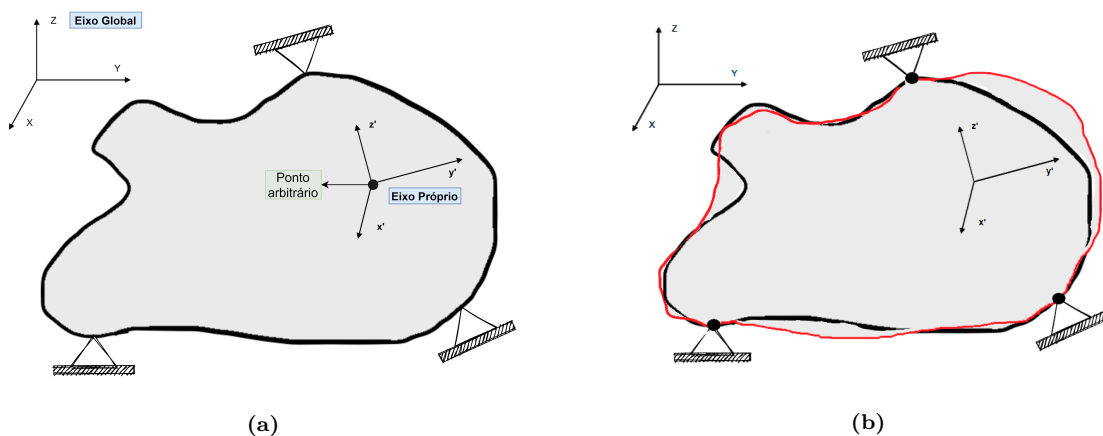
As três formas de descrever o problema matematicamente fornecem a mesma solução única, e por isso são equivalentes. A formulação variacional e os princípio de deslocamento virtuais possuem termo de derivada em x na ordem 1 enquanto a formulação diferencial é mais direta e possui o termo em segunda ordem. A vantagem de utilizar os

métodos variacionais e de trabalho virtual está nas descontinuidades das propriedades do material ou área de seção, em que se pode calcular diretamente, sem separar as descontinuidades como seria pela formulação diferencial. Sendo assim, estes métodos são mais poderosos.

2.5 Análise estrutural de elementos finitos

Com a formulação matemática pronta, é possível por meio dela formular e construir a base de elementos finitos em regime permanente em uma análise estrutural (BATHE, 2006). Para a formulação da análise estrutural de elementos finitos, imagine um corpo arbitrário como o da Figura 2.9:

Figura 2.9: Representação do deslocamento virtual de um corpo arbitrário: (a) Corpo sem deformação, (b) corpo com deslocamento virtual em relação ao anterior pela linha vermelha.



Fonte: O autor.

O eixo global é um eixo fixo fora do corpo que está sofrendo a deformação e cada ponto do corpo está sobre certa coordenada inicial do eixo de coordenadas global, ao ocorrer um deslocamento virtual (chamado de virtual, pois é uma deformação), o eixo próprio desloca-se junto com a deformação, de tal modo que a subtração das coordenadas do eixo próprio e do eixo global fornece o deslocamento total do ponto. Os deslocamentos do corpo são indicados pelo vetor transposto de U :

$$U^T = [U \quad V \quad W], \quad (2.32)$$

em que U, V e W estão em direções perpendiculares, coincidentes com o eixo global do sistema. A tensão de cisalhamento pode ser descrita pelo seu vetor:

$$u_{ij}^T = \varepsilon^T = \begin{bmatrix} u_{xx} & u_{yy} & u_{zz} & u_{xy} & u_{yz} & u_{zx} \end{bmatrix}. \quad (2.33)$$

E suas tensões correspondentes são denotadas pela matriz coluna:

$$\sigma^T = \tau^T = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{yy} & \sigma_{zz} & \sigma_{xy} & \sigma_{yz} & \sigma_{zx} \end{bmatrix}. \quad (2.34)$$

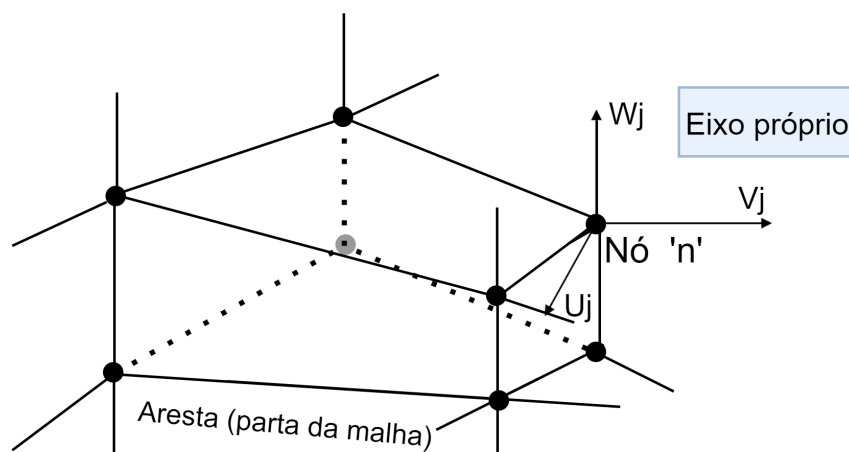
Considere uma força por unidade superficial denotada por f^s , uma força por unidade de volume denotada por f^V e uma força concentrada denotada F^i , assim escrevemos o princípio de deslocamento virtual para o nosso sistema:

$$\int_V \varepsilon^T \tau dV = \int_V U^T f^V dV + \int_S (U^S)^T f^s ds + \sum_i (U^i)^T F^i. \quad (2.35)$$

O valor de τ é gerado pelas forças volumétricas, superficiais e concentradas aplicadas no corpo em um ponto i . Se o corpo é sujeito a qualquer deslocamento virtual arbitrário, então o trabalho externo realizado pelas cargas (lado direito) é igual ao trabalho virtual realizado pelo corpo (lado esquerdo).

O corpo é dividido em elementos finitos, como os da Figura 2.10:

Figura 2.10: Elemento infinitesimal cúbico.



Fonte: O autor.

O nó “n” da figura possui as coordenadas U_j, V_j, W_j , ou apenas U_1, U_2, U_3 e este possuirá sua equação própria:

$$\begin{bmatrix} K_1 \\ K_2 \\ K_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ R_3 \end{bmatrix}. \quad (2.36)$$

Cada nó está acoplado a outro nó de outro elemento ao lado e isso ocorre em todo o interior do corpo. Já os nós da superfície são uma condição de contorno. Faz-se uma **suposição** de que se pode colocar o deslocamento do nó “n” como função de todos os deslocamentos de nós. Com o elemento m-ésimo, teremos:

$$u^{(m)}(x, y, z) = H^{(m)}(x, y, z)\hat{U}, \quad (2.37)$$

\hat{U} relaciona as coordenadas de cada nó do sistema com uma matriz de interpolação de deslocamento, $H^{(m)}$ que fornecerá o deslocamento do m-ésimo elemento, boa parte dos cálculos em FEM são nas matrizes de interpolação de deslocamento. Por consequência, é possível também escrever:

$$\varepsilon^{(m)}(x, y, z) = B^{(m)}(x, y, z)\hat{U}, \quad (2.38)$$

onde $B^{(m)}$ matriz de deslocamento de tensão do elemento m, seus valores são obtidas diferenciando e combinando a matriz $H^{(m)}$, escreve-se também:

$$\tau^{(m)}(x, y, z) = C^{(m)}\varepsilon^{(m)}, \quad (2.39)$$

$C^{(m)}$ é a matriz de elasticidade do elemento m, escrevendo a equação 2.39 para todos os elementos e depois somando por cada elemento:

$$\sum_m \int_V \varepsilon^T \tau dV = \sum_m \int_V U^T f^V dV + \sum_m \int_S (U^S)^T f^s ds + \sum_i (U^i)^T F^i. \quad (2.40)$$

E substituindo a equação 2.36, equação 2.37 e 2.38 na equação 2.35, é possível obter:

$$U^T \left[\sum_m \int_{V^m} (H^m)^T f^{V^m} dV^m + \sum_m \int_S (H^{S(m)})^T f^{s(m)} dS^m + Rc \right], \quad (2.41)$$

Rc é a resultante de todas as forças concentradas para o m -ésimo nó. O vetor de $(\hat{U})^T$ é independente e pode ser retirado da integral. Definindo a matriz de rigidez global dada por:

$$K = \int_{V^m} (B^m)^T (C^m) (B^m)^T dV^m, \quad (2.42)$$

a resultante em todo o corpo da força de superfície

$$R_s = \sum_m \int_{\Omega} (H^{S(m)})^T f^{s(m)} dS^m, \quad (2.43)$$

a resultante em todo o corpo da força de volume

$$R_v = \sum_m \int_{V^m} (H^m)^T f^{V^m} dV^m, \quad (2.44)$$

finalmente, obtendo a equação na forma já conhecida

$$\mathbf{KU} = \mathbf{R}, \quad (2.45)$$

\mathbf{R} é o vetor soma de todos os componentes da força, volumétrica, superficial e concentrada.

Cada elemento finito possui sua própria matriz \mathbf{K}^m , de tal modo que a soma resulta na equação na matriz \mathbf{K} da equação 2.42. O mesmo para os demais componentes R , R_s , R_v . Computacionalmente, primeiro calcula-se a rigidez respectiva para cada elemento para depois calcular a equação 2.42 com a matriz de rigidez global. É importante ressaltar que a rigidez em FEM é diferente da rigidez mecânica, apesar do termo da rigidez mecânica influenciar na matriz de rigidez em FEM a matriz de rigidez está relacionada à seleção do caminho do deslocamento do nó que tem o menor trabalho virtual e depende dos graus de liberdade, da geometria do problema e das condições de contorno.

2.5.1 Malhas

Os elementos finitos bidimensionais são compostos por polígonos, enquanto os tridimensionais podem ser de qualquer forma geométrica poliédrica convexa, para que o poliedro permaneça no mesmo semiespaço para qualquer plano na face do poliedro (CHENG; DEY; SHEWCHUK, 2012).

Cada nó é coincidente com o vértice do poliedro ou polígono. As malhas são compostas das arestas do poliedro ou dos lados do polígono. É comum denominar a malha tridimensional pela base poligonal do elemento poliédrico, por exemplo, uma malha cúbica como malha quadrática e uma malha tetraédrica como triangular.

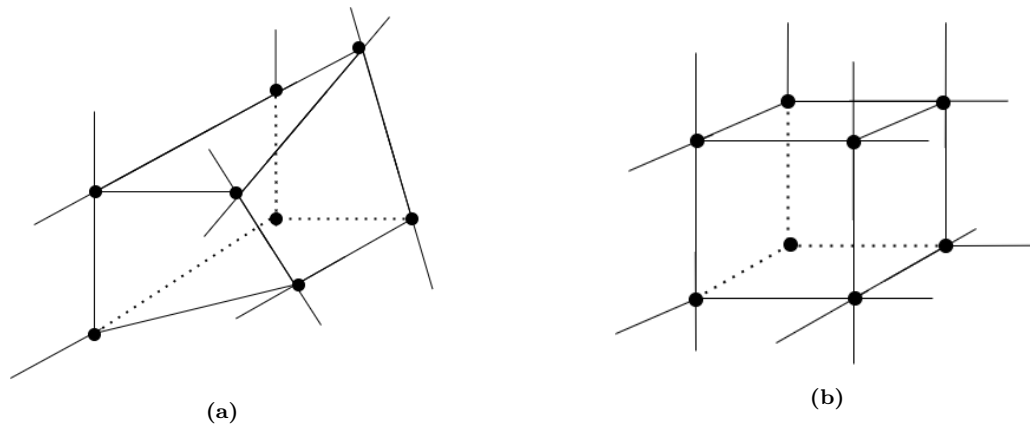
Seria como montar um quebra-cabeça, cada peça é um “elemento finito” que se conecta para montar e moldar uma geometria arbitrária. Em particular, a forma triangular é, em muitos casos, a que melhor se adapta em superfícies irregulares.

Para gerar malhas existe toda uma teoria, mas não existe um método definitivo para geração de malha para uma geometria arbitrária. O artigo *Mesh generation: Art or science?* (BAKER, 2005) não conclui se a geração de malhas é uma ciência ou uma arte. É comum programas de FEA terem na sua interface gráfica de usuário a opção para ajustar localmente o tamanho da malha, o tipo, se ela é linear ou não, entre outros, auxiliando o usuário a buscar a melhor malha para o seu problema.

Qualidade da malha

Numa análise de elementos finitos, para obter um resultado correto, é necessário, além de usar o modelo apropriado e delimitar as condições de contorno coerentes com o problema, assegurar a qualidade da malha.

Figura 2.11: Elemento finito cúbico: (a) Elemento cúbico imperfeito e (b) Elemento cúbico perfeito.



Fonte: O autor.

No caso da análise estrutural, comparando a geometria destes dois elementos da Figura 2.11 que compõem o todo de uma geometria qualquer, no caso do cubo perfeito, pode-se esperar que o erro seja menor, relacionado a erros de métodos numéricos. Intuitivamente, espera-se que o trabalho virtual para mover um nó em cada vértice de um ponto ao outro no cubo perfeito é o que possua menos erros, enquanto a outra geometria tenha uma rigidez superestimada que pode gerar erros ao entrar na matriz de rigidez global.

Matematicamente, definem-se alguns parâmetros para avaliar a qualidade de cada elemento e, por consequência, a malha. Existem diversas definições, as mais comuns sendo a razão de aspecto, a qualidade ortogonal e a distorção (*skewness*).

A razão de aspecto é a razão do maior comprimento do elemento finito sobre o menor comprimento, um elemento perfeito possui razão de aspecto unitário, porém na maioria dos casos os elementos possuirão uma razão de aspecto maior que um. O critério de razão de aspecto máxima para um elemento depende da análise da FEA, a análise do erro para o problema deste trabalho está na próxima subseção.

A qualidade ortogonal está relacionada ao produto vetorial normalizado da direção ótima da aresta de um elemento com a direção normalizada real, fornecendo um valor em função do cosseno do ângulo entre eles, os valores são entre 0 (pior) e 1 (perfeito). Distorção está relacionada ao desvio relativo de um volume de um poliedro ou polígono regular, normalmente calculado em relação ao desvio máximo e mínimo do ângulo, com valores entre 0 (perfeito) e 1 (pior).

2.5.2 Erro e razão de aspecto

Devido à lâmina do cristal de silício na aplicação em questão ter espessura pequena, a malha tende a ter uma razão de aspecto alta, considerando elementos maiores que a ordem da espessura, por isso a teoria do erro associado a razão de aspecto é analisada.

Para construir uma visão intuitiva e numa análise estrutural ter uma razão de aspecto muito alta pode superestimar tensões de cisalhamento na direção do maior lado, já que existe um viés de maior facilidade de cisalhamento o elemento em uma direção do que na outra.

Matematicamente, o erro da razão de aspecto é por erro de interpolação. Considere o nó em um plano XY, com coordenadas $u(x,y)$, definindo h como o menor comprimento e k como o maior comprimento, a expansão de Taylor é (AKIN, 2005):

$$u(x+h, y+k) = u(x, y) + \left[h \frac{\partial u}{\partial x} + k \frac{\partial u}{\partial y} \right] + \left[h^2 \frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + k^2 \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} + 2hk \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial x} \right]. \quad (2.46)$$

O segundo termo é igual para os nós adjacentes do elemento finito, portanto quando comparados se anulam.

O erro então depende da forma:

$$E \sim h^2 \left[\frac{\partial^2 u}{\partial^2 x} + AR^2 \frac{\partial^2 u}{\partial^2 y} + 2AR \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial u}{\partial x} \right]. \quad (2.47)$$

Sendo AR a razão de aspecto $AR = k/h$. Quanto maior o valor da razão de aspecto, maior o erro gerado. É importante notar que o valor de $\partial u / \partial x$ é a tensão de cisalhamento em x (ou y trocando as letras), e se eles são constantes o erro tende a zero. Como regra de boa prática o AR é tal que $AR < 5$ (AKIN, 2005).

2.6 Anisotropia e o comportamento de monocristais de silício

O comportamento dos cristais é caracterizado tipicamente por anisotropia, em que as propriedades elásticas mudam de acordo com a orientação. Um papel central

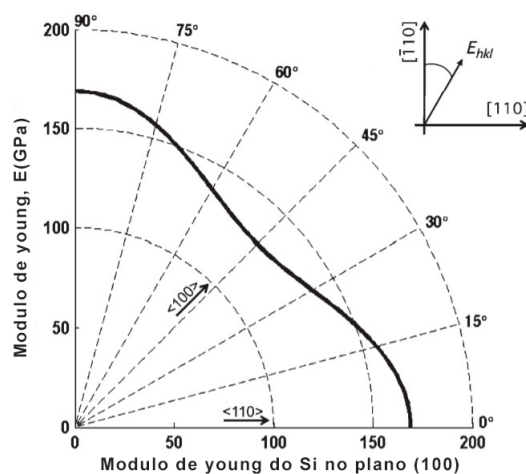
é, portanto, desempenhado pelo aspecto geométrico do problema, particularmente em relação à escolha das transformações de quadros de referência e levando em consideração a necessidade de cumprir as restrições de simetria do cristal. O artigo (HOPCROFT; NIX; KENNY, 2010) é utilizado como principal auxílio no desenvolvimento.

A equação 2.24 é válida para uma classe especial de materiais anisotrópicos: os materiais ortotrópicos, materiais com propriedades mecânicas direcionalmente bem definidas. O monocristal de Si é anisotrópico, contudo não necessariamente é ortotrópico. Mediante a anisotropia variar com a direção do plano do cristal, é importante saber qual a direção relevante para o trabalho para descrever as propriedades mecânicas do monocristal de silício.

Em um material anisotrópico, a descrição dos tensores de tensão e cisalhamento é dada por tensores de quarta ordem, $\sigma_{ij} = c_{ijkl}\varepsilon_{kl}$ ou $\varepsilon_{ij} = s_{ijkl}\sigma_{kl}$ (HOPCROFT; NIX; KENNY, 2010).

O total de variáveis permitido em três dimensões para um tensor de quarta ordem com simetria em kl é 21. No entanto, o cristal de silício, por possuir simetria cúbica, reduz para 6 variáveis independentes, e, com adicional da simetria dos termos de cisalhamento, o total de variáveis independentes é três. O valor do módulo de Young variando com o plano do Si pode ser visto na Figura 2.6, mostrando a sua anisotropia.

Figura 2.12: Módulo de Young do silício para direções de 0 a $\pi/2$.



Fonte: Adaptado (HOPCROFT; NIX; KENNY, 2010).

Descrevendo um material com dois planos de simetria (dado o padrão cúbico do silício), tem-se a equação:

$$\begin{bmatrix} u_{xx} \\ u_{yy} \\ u_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_x} & \frac{-\nu_{yx}}{E_y} & \frac{-\nu_{zx}}{E_z} \\ \frac{-\nu_{xy}}{E_x} & \frac{1}{E_y} & \frac{-\nu_{zy}}{E_z} \\ \frac{-\nu_{xz}}{E_x} & \frac{-\nu_{yz}}{E_y} & \frac{1}{E_z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \end{bmatrix}. \quad (2.48)$$

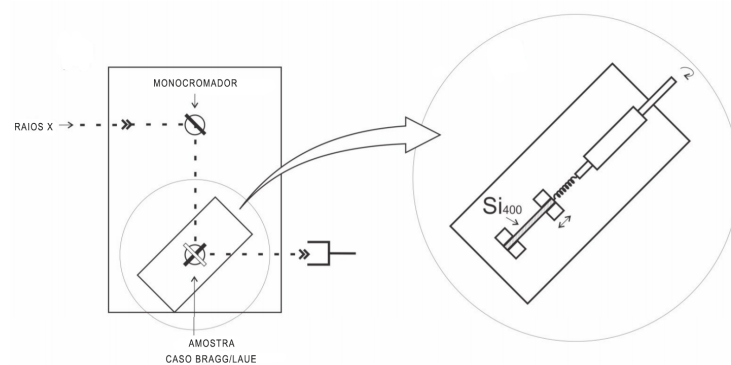
Para o silício com os eixos de orientação sendo os eixos perpendiculares [100], [010], [001], temos, para a equação 2.24 $E_x = E_y = E_z = 130GPa$ e $\nu_{yz} = \nu_{zx} = \nu_{xy} = 0.28$, comportando-se como um material isotrópico.

Capítulo 3

Configuração experimental

O arranjo experimental da Figura 3.1 foi elaborado e montado pelo Prof. Cesar Cusatis [Laboratório de Óptica de raios X e Instrumentação -(LORXI) no Departamento de Física (DFIS) da Universidade Federal do Paraná (UFPR)]. Vamos descrever, brevemente, o arranjo experimental aqui. Um feixe de raios X policromático saindo do tubo de raios X passa por um cristal monocromador de silício (Si) 400. O feixe, agora monocromático, passa para o segundo cristal, que é o cristal de estudo que está sendo tracionado. A área do cristal em que os raios X incidem é uma seção retangular de aproximadamente 5 mm de altura por 3 mm de largura.

Figura 3.1: Configuração com o monocromador, feixe de raios X e a mostra tracionada.

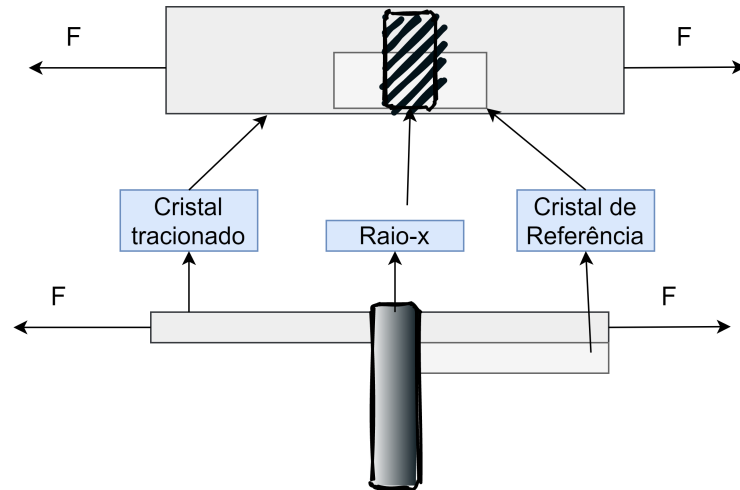


Fonte: Adaptado (CUSATIS, 2019)

Um cristal de referência (também Si 400), que não é tracionado, é colado em conjunto com a lâmina de silício de modo a não criar tensão. Com ele, os perfis de difração de referência são obtidos e é possível estimar o deslocamento angular do feixe difratado do

crystal tracionado em relação ao cristal perfeito (lâmina de referência), uma representação esquemática é mostrada na Figura 4.2

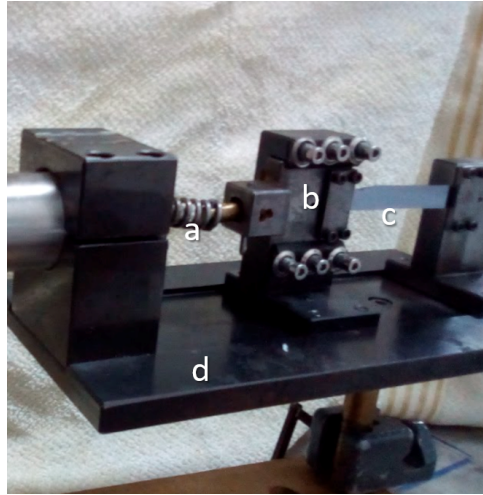
Figura 3.2: Representação esquemática da lâmina a ser tracionada, indicando os principais componentes. Acima, vista frontal. Abaixo, vista superior.



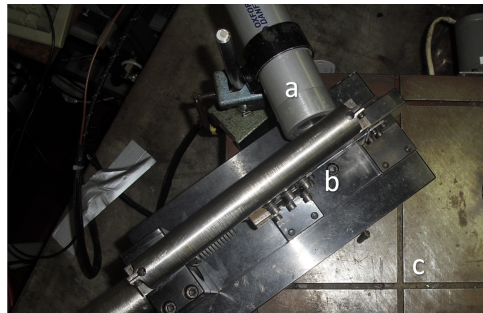
Fonte: O autor.

O tracionador mostrado na Figura 4.2 cria uma força de tração por uma mola e por meio da quantidade de giros é possível estimar a força total na lâmina de silício. Esta está colada em contato com um ferro com a cola Araldite 24h sem criar tensão por aperto com o suporte de ferro (garras). A montagem foi feita cuidadosamente, com o intuito de minimizar as tensões por contato, devido ao aperto da lâmina.

Figura 3.3: Fotos do experimento com tensionador e difratômetro (a) Tensionador com a Lâmina de Silício, (b) arranjo experimental montado sobre o difratômetro duplo eixo, no arranjo não dispersivo. No primeiro eixo, encontra-se montado o monocromador de Si 400 e, no segundo eixo, o dispositivo tracionador com a lâmina de Si 400.



(a) Mola do tensionador “a”, suporte de ferro colado com a lâmina “b”, lâmina de silício “c”, mesa de suporte “d”.



(b) Difratômetro “a”, tensionador “b” e mesa de suporte “d”.

Fonte: O autor, fotos cedidas pelo Prof. Cesar Cusatis (LORXI, DFIS, UFPR).

Capítulo 4

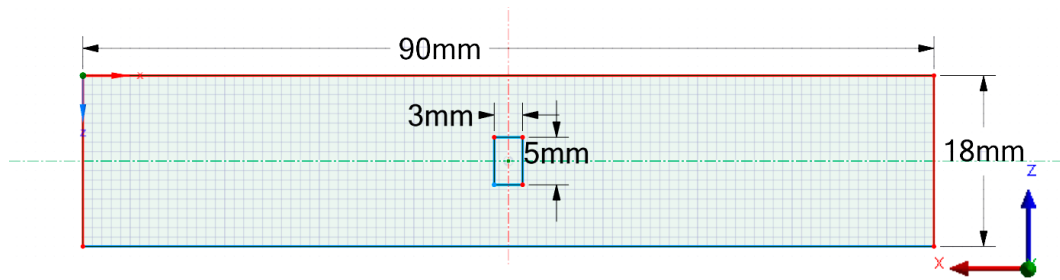
Modelo de elementos finitos

O software *Ansys* é um dos mais utilizados em CAE para simulações em diversas aplicações na engenharia. Estas envolvem simulações fluidodinâmicas, estruturais, eletromagnéticas, térmicas, entre outras, todas por FEM. O módulo para análise estática estrutural do *Ansys* é criado com base na teoria explicada no Capítulo dois, porém o usuário aplica tudo por meio de uma interface gráfica desenvolvida por *Ansys Inc.* Neste capítulo são discutidos os procedimentos utilizados para obter a malha e as condições de contorno no programa do *Ansys*. Além disso, é discutido como pode-se verificar se a resposta que o programa fornece está consistente com análises mais simples.

4.1 Criação gráfica para estudo da lâmina de silício

A área de interesse é a porção retangular em que incidem os raios X, assim o deslocamento analisado será respectivo a ela. No *SpaceClaim*, software de desenho geométrico do *Ansys*, é feita a lâmina de silício com as medidas tomadas da lâmina do experimento.

Figura 4.1: Rascunho da lâmina de silício no *SpaceClaim*.



Fonte: O autor.

Por convenção, a Figura 4.1 está no plano XZ. A espessura da lâmina no eixo Y é de $400\ \mu\text{m}$. Pelo desenho da figura 4.1, a geometria é dividida em dois sólidos, o sólido externo que compõe a maior parte da lâmina e tem o centro vazio; e o sólido central com a área de interesse de $3\text{mm} \times 5\text{mm}$ no qual incidem os raios X.

A opção de *share topology* é aplicada, garantindo uma geração de malha contínua e conforme para a região de contato dos corpos, além de não ter que modelar contatos entre os corpos que podem desviar do valor real. A divisão geométrica facilita a extração dos dados nodais na área na qual incidem os raios X, apenas selecionando a geometria e exportando pelo programa do *Ansys*.

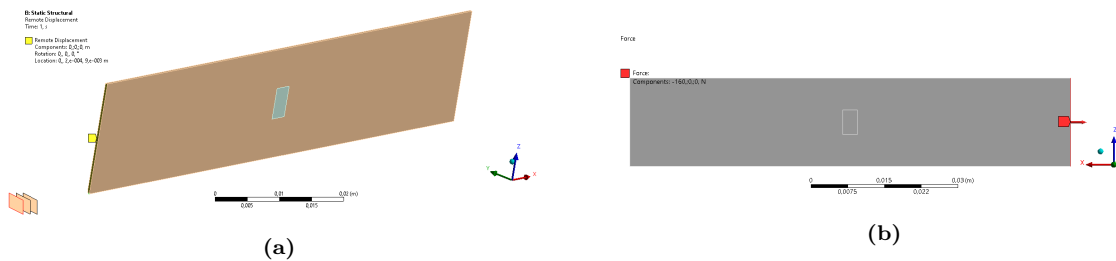
Devido à razão entre o maior lado do cristal e a espessura ser de $225\ \mu\text{m}$, o modelo de casca também é simulado para comparação de modo a evitar problemas devido à razão de aspecto alta, mas não é utilizado para formulação do problema, pois o interesse principal é o deslocamento perpendicular à superfície modelada, o qual o modelo de casca não prevê. Neste não se desenha a geometria em três dimensões, apenas como superfície na qual a espessura é um parâmetro colocado para ser calculado em um modelo matemático desenvolvido para cascas, o plano normal é modelado matematicamente.

Após a criação do volume/área a ser analisado, é importante selecionar o material. Para isso, o *Ansys* por padrão fornece o silício como material ortotrópico, podendo ser modelado como na equação 2.24 e simplificado para condição dos planos de interesse, $[100]$, $[010]$ e $[001]$.

4.2 Condições de contorno

A primeira condição de contorno imposta é de suporte fixa na lateral do cristal, para o caso volumétrico na face lateral e para o caso da casca na linha lateral. A condição impõe que todos os nós da região selecionada tenham um deslocamento zero, a condição é análoga a um suporte de uma parede infinitamente rígida na região selecionada e a segunda condição utilizada para comparação é de “remote displacement” nas condições de que a face selecionada não move nem rotaciona porém, diferente da condição anterior, pode sofrer deformação, esta condição pode ser vista na Figura 4.2:

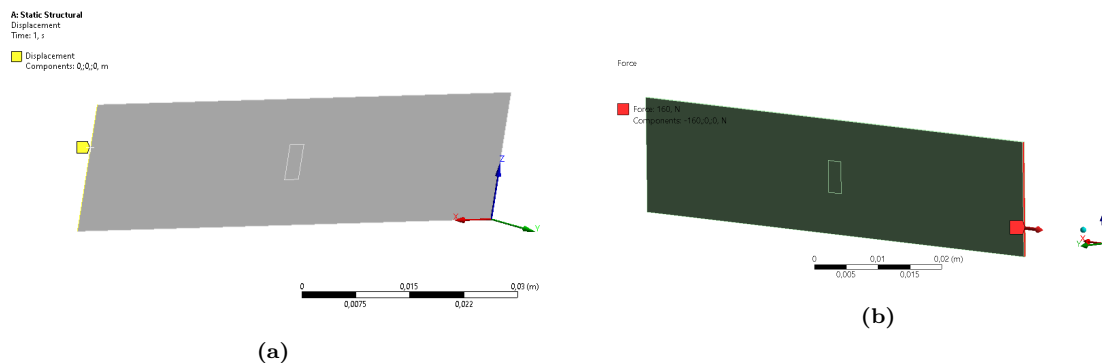
Figura 4.2: Condições de contorno para o bloco no *Ansys*, (a) “Remote displacement” para o modelo volumétrico na face lateral (em amarelo) e (b) Condição de força na face lateral (em vermelho).



Fonte: O autor.

A segunda condição de contorno é a da força, imposta no lado simetricamente oposto ao suporte fixo. A direção é no eixo x, na mesma direção da normal da superfície, essa força seria o terceiro termo do lado direito da equação 2.42.

Figura 4.3: Condições de contorno para a casca no *Ansys*, (a) Força na linha lateral (em vermelho) e (b) Força para o modelo volumétrico na face lateral (em vermelho).



Fonte: O autor.

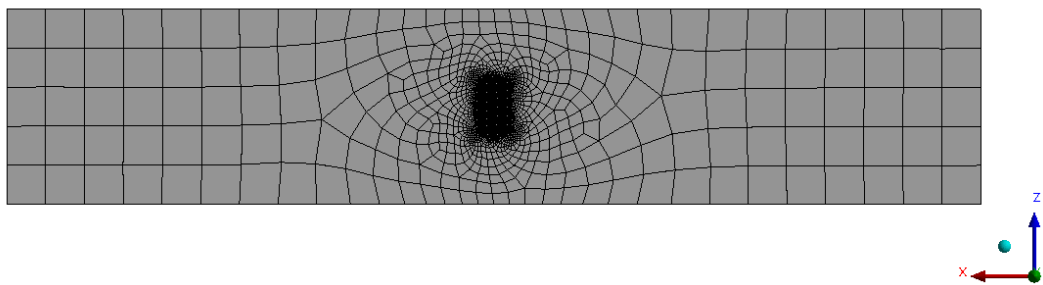
4.3 Criação da malha

Por ser uma geometria simples de modelar, os elementos finitos gerados também são simples e de quatro vértices que se adaptam melhor a geometria do bloco retangular ou superfície retangular. Em especial, são feitas duas condições para colocar um número maior de nós na região que é de interesse da análise. Como o limite é 32.000 nós para a versão estudantil do *Ansys*, a divisão dos elementos finitos é feita abaixo dele.

Os domínios representados pela especificação de limite são uma prática bastante comum para malha de objetos de engenharia, muitas vezes sendo referentes a um limite físico real.

Primeiramente, para a malha da casca, o tamanho máximo de um vértice ao outro vértice é controlado pelo *Ansys* e definido como $3,5576mm$ definido como o valor máximo global, tal que nenhum elemento da malha tem um comprimento maior que o máximo global. Para a área de $3 \times 5mm$, é selecionada a opção de colocar a face com o tamanho do elemento em $0,1mm$, com uma taxa de crescimento de $1,2$. Isso significa que o próximo elemento adjacente à face vai ter um tamanho de $0,1 \cdot 1,2$ mm, até o valor global, ou seja $0,1 \cdot 1,2^n$, com ajuste no termo $1,2$ nos últimos valores para atingir o valor de máximo global. Aumentando os nós na face de interesse, aumenta-se a resolução nessa face. A malha da casca da Figura 4.4 conta com um total de 2851 nós e 2820 elementos.

Figura 4.4: Malha da casca.

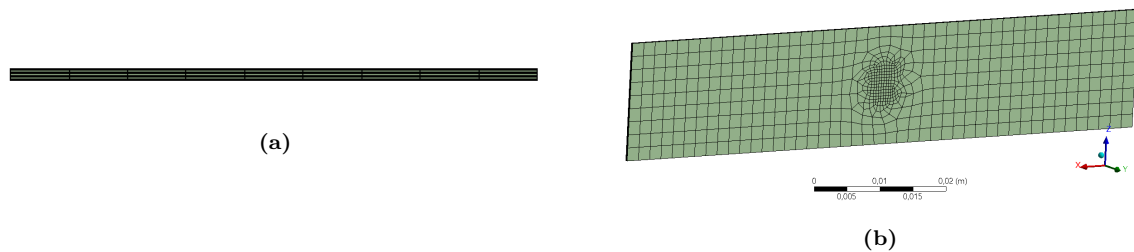


Fonte: O autor.

No segundo caso, para o bloco, é selecionado o volume da mesma porção de área. E o método *sweep* para subdividir a porção mais fina do bloco em 7 partes, apesar de aumentar a razão entre o menor comprimento de um elemento finito com seu maior comprimento (razão de aspecto) isso é feito para aumentar a resolução nesta porção. O

tamanho da malha global é $2mm$ e na mesma face que a casca, a malha tem o tamanho de $0,4mm$. É importante notar que quando se passa de um sistema de duas dimensões para três dimensões os números de nós para a mesma subdivisão em todos os lados, sobem com uma razão de um quadrado para cubo em $N_{3D} = (N_{2D})^{3/2}$, em que N é o número de elementos do nó. No caso estudado, o sistema é subdividido em menores partes na lateral, assim são 7 camadas. Adicionando os nós de superfície para cada camada, seriam quase 20 mil nós para a configuração anterior. Neste caso, para a malha da Figura 4.5 o número de nós é de 20462, com apenas 4347 elementos finitos.

Figura 4.5: Malha do bloco no *Ansys*, (a) vista lateral da malha e (b) vista frontal da malha.



Fonte: O autor.

4.4 Verificação dos primeiros resultados

Para verificar a credibilidade de uma simulação, é recomendável verificar analiticamente se os resultados estão coerentes. Para isso, escrevemos uma equação para ser utilizada no sistema, baseadas nas equações 2.22 e 2.23. Considerando que há tensão em apenas uma direção, substituindo as equações, podemos escrever:

$$u_{xx} = \frac{1}{E} \sigma_{xx} \rightarrow \frac{F}{EA}, \quad (4.1)$$

em que “A” é a área transversal (com vetor de área no mesmo sentido da força) e é aproximadamente constante. Lembrando que u_x remete ao deslocamento em x e como este permanece constante, a equação para deformações pode ser escrita como:

$$u_{xx} = \frac{u_x}{L}. \quad (4.2)$$

Substituindo a equação 4.2 na equação 4.1, é possível obter o deslocamento em função de comprimento, quando a taxa de variação da tensão de cisalhamento tende a zero.

$$u_x = L \frac{F}{EA}. \quad (4.3)$$

Como a força aplicada e o módulo de Young não mudam, é possível traçar uma reta com dependência do fator de comprimento L e coeficiente angular F/EA . Já o deslocamento em relação ao eixo Y , no centro da lâmina, só pode ser zero. Devido à relação linear, a média dos deslocamentos fornece o deslocamento no centro e o deslocamento nas pontas, simétrico e oposto, logo é zero no centro.

Capítulo 5

Simulação por teoria dinâmica de difração

A simulação da teoria dinâmica de difração é auxiliada por um programa apresentado na seção 4.1 que constrói as curvas de difração. Para calcular o parâmetro de rede modificado do Si, é preciso realizar uma análise analítica, criando o vínculo entre o mundo macroscópico simulado por FEM e o mundo microscópico que gera as curvas de difração.

5.1 Introdução ao XOP

X-ray oriented programs XOP (RIO; DEJUS, 2004) é um programa para simulações de diferentes efeitos de raios X, o qual possui uma interface gráfica que contém os parâmetros para as simulações. É usado mundialmente pela maioria das instalações de radiação síncrotron e tem sido crucial para projetistas e usuários de linhas de luz nos últimos 10 anos (ARGONNE, s.d.).

O programa pode ser dividido em três aplicações principais:

1. Fontes de raios X
2. Ótica de raios X
3. Base de dados e ferramentas

O X_TUBES estima os valores de emissão de tubos de raios X e o XWIGGLER calcula a emissão de um Raios x que passa por um *wiggler* por uma trajetória senoidal. O

grupo de interesse é o grupo de ótica de raios X em que as aplicações típicas são espelhos, cristais e multicamadas. O coeficiente de atenuação e índice de refração é retirado do DABAX, *Database for X-ray applications*, que possui os dados tabelados.

A aplicação do XOPOWER calcula, a partir de um espectro de raios X prévio, o efeito de elementos óticos. O programa XCRYSTAL é utilizado para calcular a difração de cristais planos e perfeitos em silício, germânio, diamante, entre outros. Para cristais com curvatura, o módulo XCRYSTALS_BENT é utilizado.

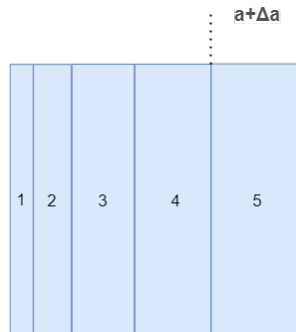
Através do XCRYSTAL, é possível modificar os parâmetros de rede do parâmetro de cristal e simular a diferença nos perfis de difração, o foco do estudo.

Os parâmetros padrões do XCRYSTAL, são: selecionar o cristal, o índice de Miller, a espessura do cristal, a energia do feixe de raios X, a absorção por efeito fotoelétrico, a difração do tipo Bragg e o número de pontos a serem calculados.

5.2 Modelagem para as curvas de difração

Para a modelagem do problema, devido à tração, há uma modificação no parâmetro de rede do Si, para cada força de tração aplicada. Porém, como mostramos no Capítulo 3, é zero no centro e máximo na superfície com comportamento linear. Baseados nisso, elaboramos um modelo simplificado de cristal tracionado, para simular medidas de difração de raios X em monocristais em caso Bragg. Nele o monocristal é dividido em camadas. Estas são consideradas como monocristais independentes cada um com um parâmetro de rede distinto. Como a penetração dos raios X, na condição de difração, é muito pequena (da ordem de $10\mu m$, para Si 400 em $\approx 8keV$), mas o comportamento dos deslocamentos é linear, dividimos a profundidade de $10,5\mu m$ em cinco camadas iguais (monocritais independentes) de $2,1\mu m$. Para cada camada, o parâmetro de rede vai ser único e a simulação pelo XCRYSTAL é realizada em cada monocristal independente (camada de $2,1\mu m$). Cinco curvas são obtidas e as curvas são convolucionadas com vistas a simular os perfis de difração da lâmina tracionada, obtidos experimentalmente, para as diferentes forças de tração aplicadas.

Figura 5.1: Representação do deslocamento do parâmetro de rede para cada camada.



Fonte: O autor.

A Figura 5.1 representa a variação do parâmetro de rede a com a profundidade (indo de 1 para 5), à medida que a profundidade é maior, menor é o valor da variação do parâmetro Δa , com $\Delta a < 0$.

Para estimar o deslocamento do parâmetro de rede deslocado, a proporção é calculada. Dado ΔY como o deslocamento na posição de $2,1\mu m$ de profundidade, a_0 o parâmetro de rede inicial, o novo parâmetro é:

$$a_{novo} = \frac{\Delta Y}{2,1\mu m} a_0. \quad (5.1)$$

O parâmetro de rede vai mudar em relação ao eixo y (direção de menor tamanho do cristal). Porém, o deslocamento em y também pode variar na progressão de cada eixo perpendicular ao y . Por isso é feita uma regressão linear, para calcular o coeficiente angular de cada eixo. Ela devolve uma equação linear no espaço quadridimensional.

$$\Psi(x, y, z) = \alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 z + \beta, \quad (5.2)$$

os coeficientes α_i multiplicam as coordenadas de cada eixo e β é uma constante linear no qual assume o valor máximo de Ψ ou seja a deformação máxima.

No caso do deslocamento em y , ao retirar o tamanho do cristal $\beta - 2,1\mu m$, o total ΔY que esta camada deslocou em relação à linha central é obtido. Assim, para as demais camadas, o fator ΔY se reduz a $2,1\mu m$, de modo que $\Delta Y_{total} = \Delta Y - (i-1)2,1\mu m$, sendo i o índice do subcristal iniciando pelo subcristal da superfície.

Mudando os parâmetros do Si por meio do XCRYSTAL e elaboradas as células para cada camada representada, cada uma, por um cristal de Si com parâmetro de rede diferente, calculamos as curvas de difração para cada camada com espessura de $2,1\mu m$. Em seguida, fizemos o cálculo da curva de difração para um cristal espesso de $10,5\mu m$. Com isso, foi possível determinar o coeficiente de atenuação na condição de difração (coeficiente de extinção, $\mu=0,9924$) a partir da intensidade transmitida pelo cristal $I/I_0 = 0,07$, quando esse se encontra no máximo do perfil de difração. A esta intensidade foi atribuída a espessura de 5 camadas ($i = 5$), de tal forma que a atenuação do feixe por cada uma das 5 camadas de $2,1\mu m$ pode ser determinada, conforme será mostrado na equação 5.3. Os valores de atenuação em cada camada são ponderados quanto a suas refletividades e construídas as figuras para cada parte dos cristal. Devido ao efeito da atenuação descrito pela equação 2.6, para cada cristal, é então calculado o efeito da atenuação. Para o cristal de Si no Índice de Miller, os índices 100, 200 e 300 são proibidos, com o primeiro satisfazendo a condição de difração, sendo 400 o valor do coeficiente da exponencial na atenuação de $\mu = 0.9924$ para cada camada. A equação pode ser reescrita para cada camada **i**:

$$I = I_0 e^{-\mu(i-1)}. \quad (5.3)$$

Após implementar a atenuação em cada camada, também é necessário normalizar de acordo com o valor total para uma camada única do caso Bragg da Figura 5.1. Considerando que I_i seja a intensidade da camada **i** e que I_{zero} seja a intensidade da camada total de $10,5\mu m$ e I_{norm} a intensidade normalizada, a equação 5.4 é construída:

$$I_{norm}(\theta) = I(\theta) e^{-\mu i} \frac{\int I_{zero} d\theta}{\int I_i d\theta}, \quad (5.4)$$

θ é o ângulo de incidência, como utilizado na demonstração do caso Bragg.

O método trapezoide para integração numérica é utilizado para calcular as integrais da equação 5.4. A partir delas, é possível construir a equação de cada camada e somar para obter o perfil de difração com deslocamento.

Capítulo 6

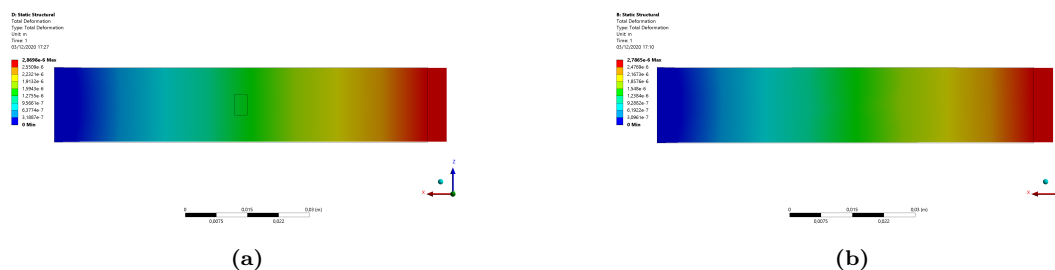
Resultados e Análise

Neste capítulo os principais resultados obtidos são destacados. Inicialmente é feita a verificação dos resultados pela FEA para saber se estão coerentes com o modelo esperado. Depois são analisados os dados obtidos experimentalmente das curvas de difração e os dados simulados que utilizaram os dados da FEA obtidos por meio do *Ansys* e do programa *XOP* para simular as curvas. Para a análise no *Ansys*, as forças simuladas são de 9, 30, 100, 103, 106, 110, 113, 116, 119, 122, 126, 129 e 130 N.

6.1 Resultados iniciais

Para uma força aplicada de 30 N, os resultados são analisados e comparados na Figura 6.1

Figura 6.1: Gradiente de deslocamento nodal da casca e do bloco com força de 30 N, (a) Deformação (em m) da casca, (b) Deformação (em m) do bloco.

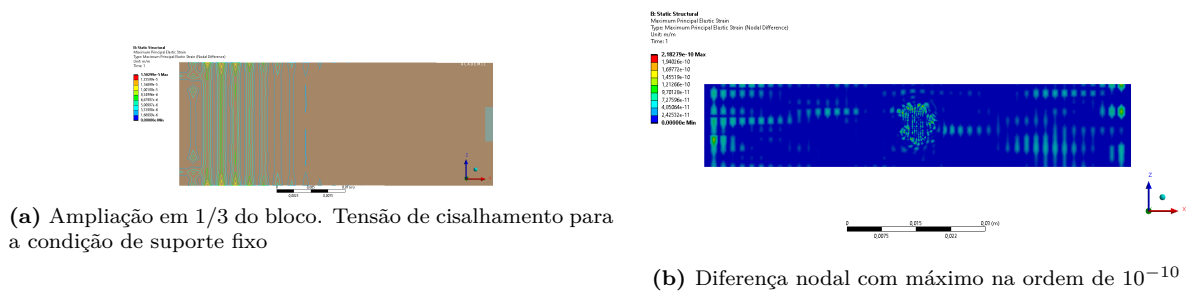


Fonte: O autor.

Apesar da diferença, os valores máximos e mínimos dos deslocamentos são valores muito próximos. O valor máximo do bloco é de $2,8698\mu\text{m}$ e da simulação de

casca é $2,7865\mu m$, uma diferença percentual de 3%. O deslocamento é calculado como a magnitude do vetor deslocamento do nó, $|\vec{u}(x, y, z)|$ para o caso do bloco e $|\vec{u}(x, y)|$ para o caso da casca. Outro ponto relevante é o da diferença de nodal de estresse.

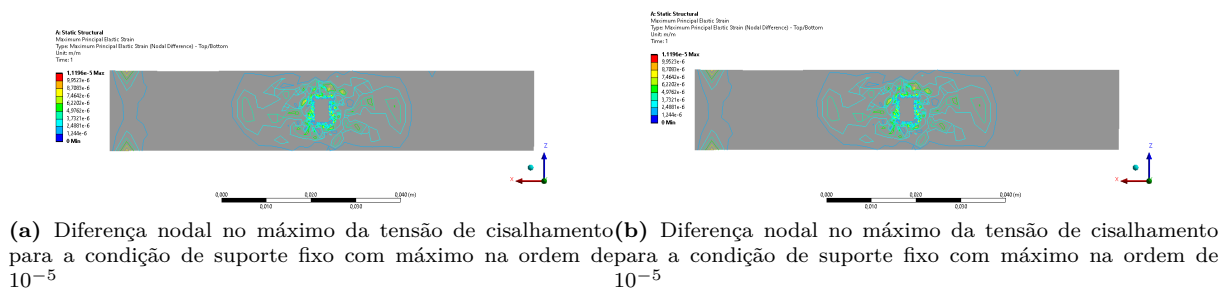
Figura 6.2: Diferença nodal do máximo da tensão de cisalhamento para condição de (a) Suporte fixo e (b) “remote displacement” para 30 N de força aplicada



Fonte: O autor.

A diferença nodal do máximo da tensão de cisalhamento é uma variação pequena de uma derivada e assim se relaciona com o erro da razão de aspecto da equação 2.1. Na Figura 6.2 o máximo nas pontas na ordem de 10^{-5} ocorre para a condição de contorno de suporte fixo, havendo uma tensão indesejada. Porém, não propaga ao resto do corpo, sendo constante no restante do corpo e assim não há erros induzidos pela razão de aspecto. Diferentemente da tensão de cisalhamento na casca como veremos na Figura 6.3. Para garantir que de fato não haja erros induzidos pela razão de aspecto, a condição de contorno utilizada é a de “remote displacement” que possui uma diferença nodal do máximo da tensão de cisalhamento na ordem de 10^{-10} . Uma análise do cisalhamento na casca também é feito na figura à seguir.

Figura 6.3: Figura do contorno da diferença no tensão de cisalhamento na casca com força de 30 N, (a) suporte fixo, (b) “remote displacement”.

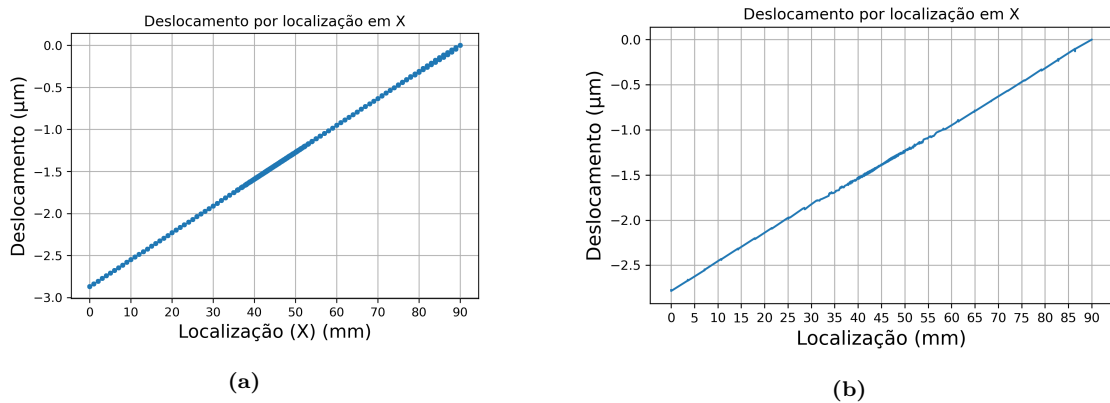


Fonte: O autor.

Comparando com a Figura 6.2 o valor da diferença nodal do máximo da tensão de cisalhamento muda com a densidade de nós. Por isso, teria que ser realizada uma análise dos efeitos da malha com a discretização para inferir sobre a confiabilidade dos resultados do tipo casca, além disso, para a casca o tipo de condição de contorno para os dois diferentes contornos o deslocamento resulta figuras semelhantes.

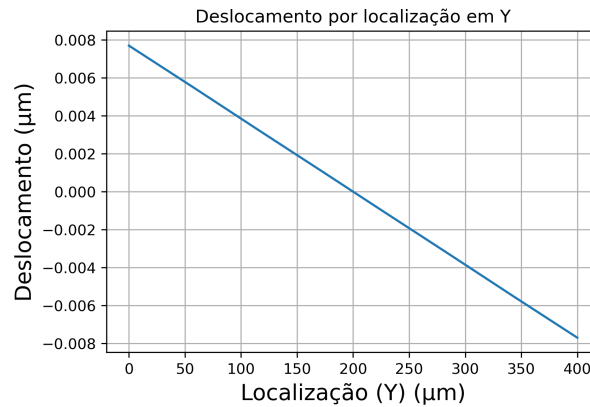
Retirando os dados dos nós do *Ansys*, e traçando uma reta em x para o caso da casca e para o caso do boco, as curvas são:

Figura 6.4: (a) Deslocamento por localização x para o bloco e (b) Deslocamento por localização em x para a casca



Fonte: O autor.

Na figura 6.4 os coeficientes angulares (da reta) obtidos são : (a) e (b) $30,5\mu$ (adimensional) e $31,9\mu$ respectivamente. O cálculo por meio da relação 4.3 fornece o coeficiente de 32μ . Há uma diferença percentual respectiva de 4,9% e 3%, a casca fornece os valores mais próximos do esperado, porém a diferença é pequena para dizer qual método é mais preciso.

Figura 6.5: Deslocamento dos nós em Y.

Fonte: O autor.

Da figura 6.5 para o eixo y, que é a principal direção de interesse para o problema, o valor do deslocamento no centro é de $u_y = 5,17 \cdot 10^{-17}$, valor muito próximo de zero, que é o esperado dada a simetria do problema. Não é zero provavelmente devido a erros numéricos.

6.2 Deslocamento dos nós

Como discutido anteriormente, para cada força simulada, são coletados os dados na seção da geometria onde incide-se o feixe de raios X. Desses dados, os parâmetros de redes são estimados de acordo com a variação do deslocamento dos nós em relação à sua posição inicial. Para isso, é preciso inicialmente verificar a influência de cada eixo no deslocamento dos nós.

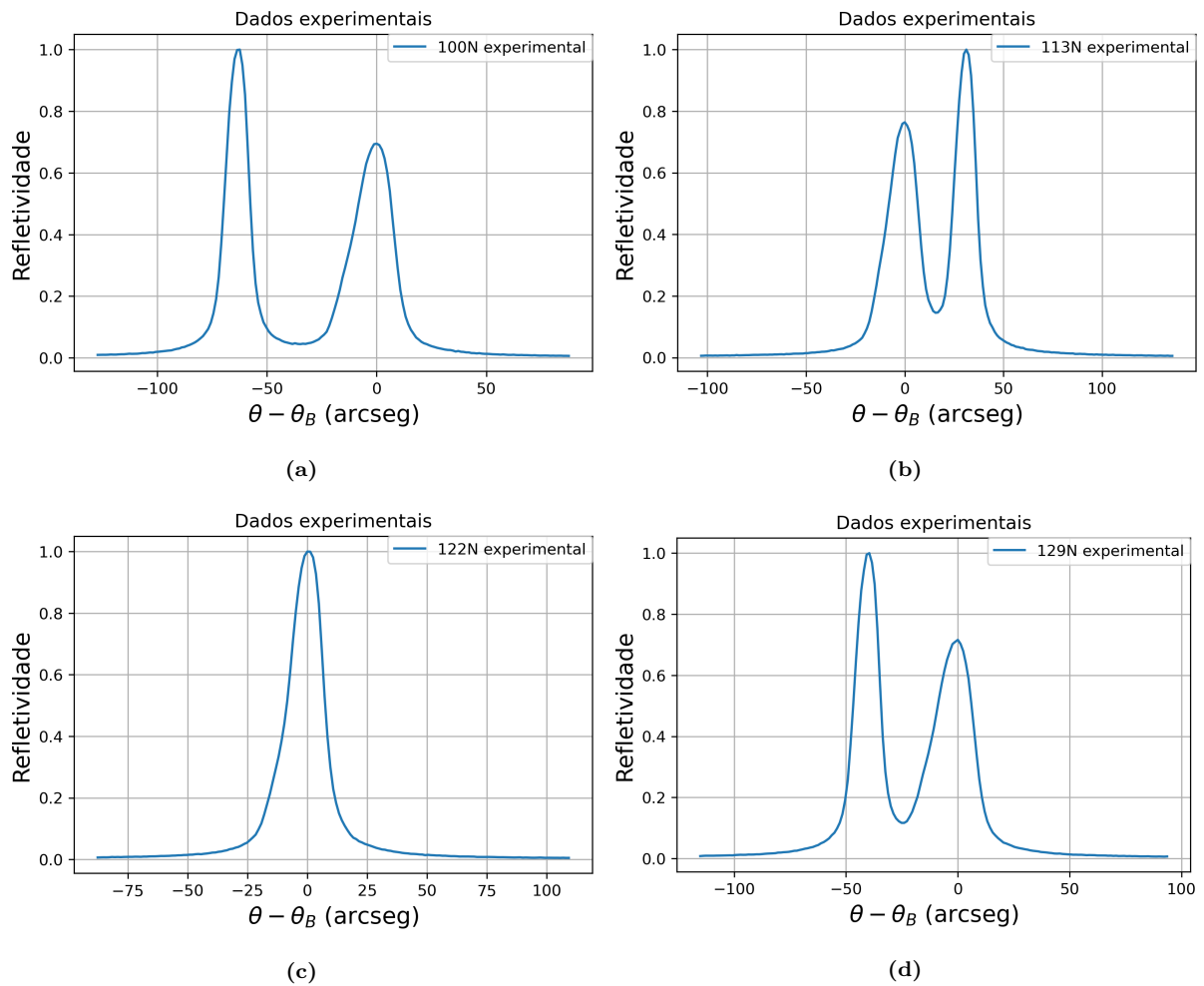
Para valores de $u_y(x, y, z)$ em que os valores de x e z para um y fixo variam é possível calcular o desvio padrão do valor de $u_y(x, z)$, como em todos os casos o desvio padrão é cerca de mil vezes menor que o média de cada valor de $u_y(x, z)$ correspondente a um Y conclui-se que o fator relevante para análise é apenas a divisão de cristais para as coordenadas Y.

6.3 Curvas de difração

Na figura 6.6 o menor pico é o cristal de referência e o maior pico da amostra de Si (400). O deslocamento relativo entre os picos aumenta quanto maior a força da mola. A largura da curva não parece ser afetada para diferentes forças de tração. O pico de menor intensidade é o pico de difração do cristal tracionado. O pico de maior intensidade é o pico do cristal de referência.

A distância entre os picos para 100 N é de -62,4 segundos de arco (arcseg), para 113 N são 31,2 segundos de arco, para 122 N as curvas são indistinguíveis e para 129 N são 39,6 segundos de arco.

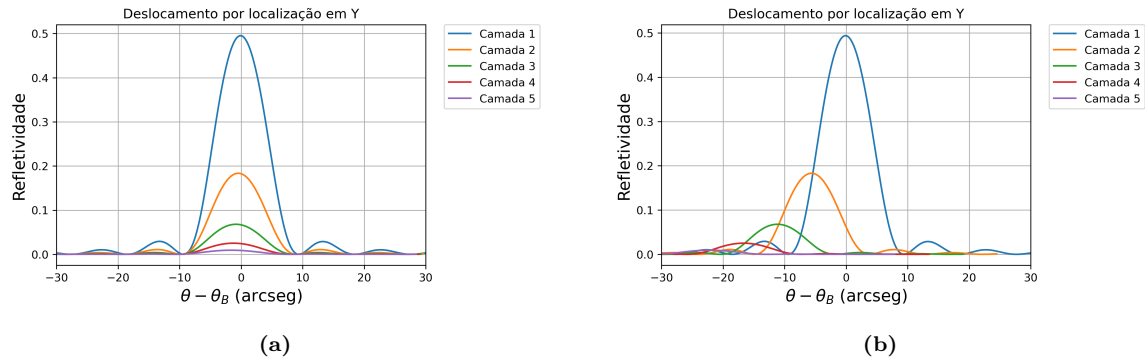
Figura 6.6: Gráfico das curvas de refletividade por variação em segundos de arco obtidas experimentalmente para (a) 97 N, (b) 113 N, (c) 126 N, (d) 139 N.



Fonte: O autor.

Nota-se da Figura 6.7 que os perfis de difração são indicados sempre relativos à primeira camada para as diferentes forças de tração aplicadas. Se formos comparar todas as primeiras camadas com diferentes forças aplicadas, elas aparecerão com seus máximos em diferentes posições angulares, pois quanto maior a força tração, menor é o d superficial.

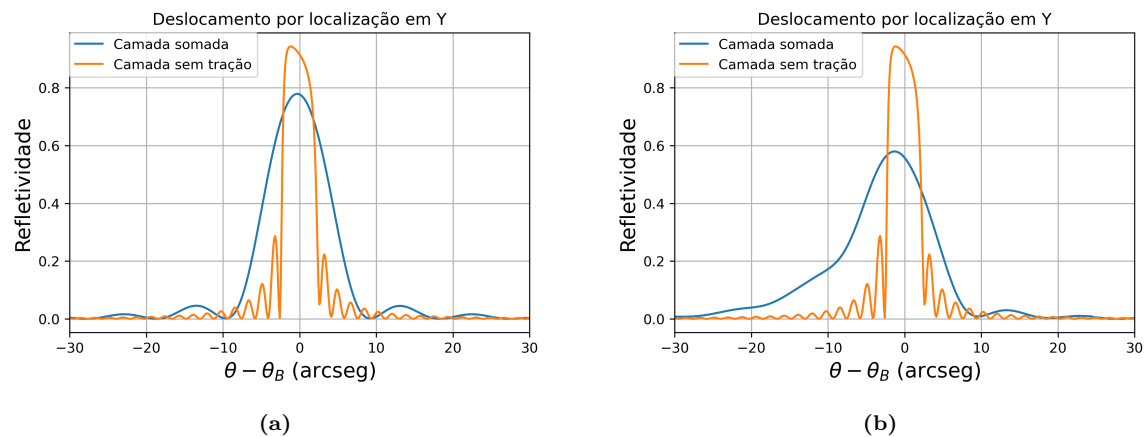
Figura 6.7: Curvas de difração para cada camada, (a) 9 N e (b) 130 N.



Fonte: O autor.

Adicionando cada curva com o seu valor de θ correspondente, obtém-se o modelo equivalente à curva total o resultado do modelo para um feixe de raios X plano monocromático. Contudo, os experimentos foram realizados em um arranjo duplo cristal não dispersivo (Figuras 3.1 e Figura 3.2). Logo para determinarmos a curva que esperamos obter experimentalmente precisamos realizar a correlação entre o perfil de difração que calculamos para o cristal tracionado com onda plana e monocromática com o perfil de difração do monocromador (cristal espesso de Si perfeito).

Figura 6.8: Comparação das curvas entre o conjunto modelado com tração e a curva sem tração, (a) 9 N, (b) 130 N.

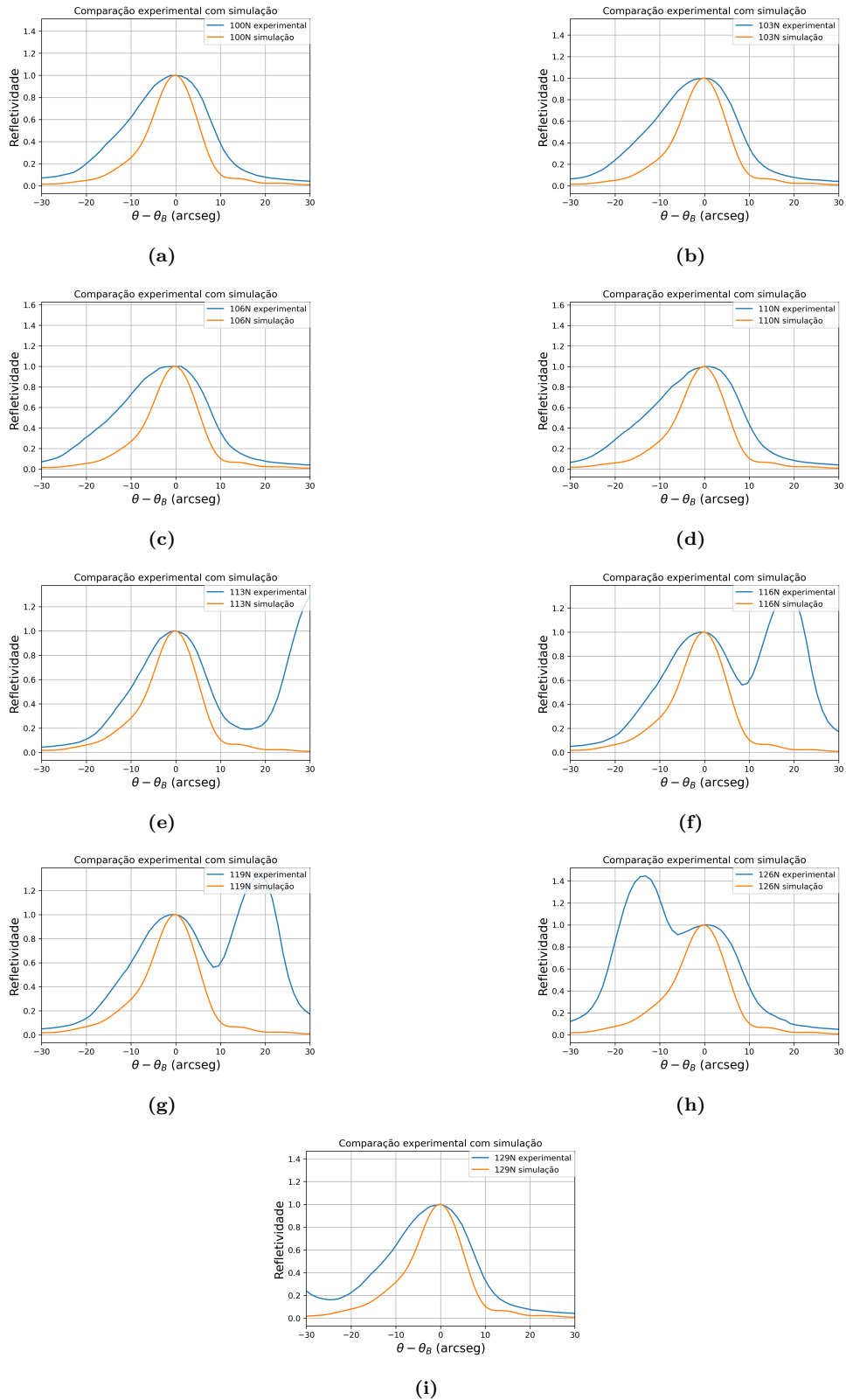


Fonte: O autor.

Os perfis de difração do monocromador e do Si tracionado são mostrados na Figura 6.8 para duas forças de tração distintas. A correlação das duas curvas é mostrada em conjunto com os resultados experimentais na Figura 6.9 para nove forças de tração distintas. Os perfis de difração medidos têm a mesma assimetria que os calculados, contudo estão com larguras maiores por até 2 vezes, a hipótese é que tenha ocorrido um erro experimental.

O ajuste do ângulo perpendicular ao plano de difração do cristal tracionado estava sendo realizado por máxima intensidade e não por menor largura do perfil. Além disso pode ocorrer uma leve inclinação na lâmina que produz um perfil diferente do esperado.

Figura 6.9: Curvas experimental e simulada com força de (a) 100 N, (b) 103 N, (c) 106 N, (d) 110 N, (e) 113 N, (f) 116 N, (g) 119 N, (h) 126 N, (i) 129 N.



Fonte: O autor.

Considerações finais

Apesar de toda a teoria complexa para FEM e de difração dinâmica por meio do CAE, é possível implementar e obter resultados simulados de maneira eficiente. A FEA é um processo robusto, porém vários fatores podem gerar erros. Isso mostra, que os resultados entre diferentes abordagens de FEM não são idênticos entre si, porém são consistentes com diferença relativa percentual menor que 5%. Como estamos lidando com deslocamentos no micro, estas variações podem impactar o resultado final e sua aplicação ,a princípio, serve inicialmente como uma primeira abordagem do problema.

Há deslocamento angular previsto pela teoria de difração dinâmica para as curvas experimentais, porém são mais largas que as demais curvas simuladas e, como discutido anteriormente na seção 5.3, é necessário coletar novos dados experimentais para uma melhor análise.

Referências bibliográficas

AKIN, J. E. **Finite element analysis with error estimators: An introduction to the FEM and adaptive error analysis for engineering students**. [S.l.]: Elsevier, 2005.

ARGONNE, N. L. **XOP v2.4 | Advanced Photon Source**. [S.l.: s.n.]. <https://www.aps.anl.gov/Science/Scientific-Software/XOP>. Acessado em 29/03/2021.

AUTHIER, A. **Dynamical Theory of X-Ray Diffraction**. [S.l.]: University Press, 2001.

— Dynamical theory of X-ray diffraction. **International Tables for Crystallography**, Wiley Online Library, p. 626–646, 2006.

BAKER, T. J. Mesh generation: Art or science? **Progress in Aerospace Sciences**, Elsevier, v. 41, n. 1, p. 29–63, 2005.

BATHE, K.-J. **Finite element procedures**. [S.l.]: Klaus-Jurgen Bathe, 2006.

BATTERMAN, B. W.; COLE, H. Dynamical diffraction of X rays by perfect crystals. **Reviews of modern physics**, APS, v. 36, n. 3, p. 681, 1964.

CHENG, S.-W.; DEY, T. K.; SHEWCHUK, J. **Delaunay mesh generation**. [S.l.]: CRC Press, 2012.

CIARLET, P. G.; LIONS, J.-L. **Handbook of Numerical Analysis: VOL II: Finite Element Methods.(Part 1)**. [S.l.]: North-Holland, 1991.

CUSATIS, C. Nanoscale tensile strain in perfect silicon crystals studied by high-resolution X-ray diffraction. **Review of Scientific Instruments**, AIP Publishing LLC, v. 90, n. 10, p. 100901, 2019.

GIACOVAZZO, C.; MONACO, H. L.; VITERBO, D.; SCORDARI, F.; GILLI, G.; ZANOTTI, G.; CATTI, M. **Fundamentals of crystallography**. [S.l.]: Oxford University Press Oxford, 2002. v. 7.

HOPCROFT, M. A.; NIX, W. D.; KENNY, T. W. What is the Young's Modulus of Silicon? **Journal of microelectromechanical systems**, IEEE, v. 19, n. 2, p. 229–238, 2010.

LANDAU, L. D.; LIFSHITS, E. M. **Theory of Elasticity: By LD Landau and EM Lifshitz. Translated from the Russian by JB Sykes and WH Reid**. [S.l.]: Pergamon Press, 1964.

MCHENRY, D. A LATTICE ANALOGY FOR THE SOLUTION OF STRESS PROBLEMS. **Journal of the Institution of Civil Engineers**, Thomas Telford-ICE Virtual Library, v. 21, n. 2, p. 59–82, 1943.

OKEREKE, M.; KEATES, S. Finite element applications. **Cham: Springer International Publishing AG**, Springer, 2018.

RIO, M. S. del; DEJUS, R. J. Status of XOP: an x-ray optics software toolkit. In: INTERNATIONAL SOCIETY FOR OPTICS e PHOTONICS. **ADVANCES in Computational Methods for X-Ray and Neutron Optics**. [S.l.: s.n.], 2004. v. 5536, p. 171–174.

SHIMURA, F. **Semiconductor silicon crystal technology**. [S.l.]: Elsevier, 2012.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. Z. **The finite element method: its basis and fundamentals**. [S.l.]: Elsevier, 2005.