



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

sid.inpe.br/mtc-m21b/2014/11.11.17.19-MAN

CÁLCULO DO TAMANHO DOS CRISTALITOS ATRAVÉS DO MODELO DE CONFINAMENTO DE FÔNOS

Miguel Angelo do Amaral Junior

URL do documento original:

<<http://urlib.net/8JMKD3MGP5W34M/3HCUGSS>>

INPE
São José dos Campos
2014

PUBLICADO POR:

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais - INPE

Gabinete do Diretor (GB)

Serviço de Informação e Documentação (SID)

Caixa Postal 515 - CEP 12.245-970

São José dos Campos - SP - Brasil

Tel.:(012) 3208-6923/6921

Fax: (012) 3208-6919

E-mail: pubtc@sid.inpe.br

CONSELHO DE EDITORAÇÃO E PRESERVAÇÃO DA PRODUÇÃO INTELLECTUAL DO INPE (RE/DIR-204):**Presidente:**

Marciana Leite Ribeiro - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Membros:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação Observação da Terra (OBT)

Dr. Amauri Silva Montes - Coordenação Engenharia e Tecnologia Espaciais (ETE)

Dr. André de Castro Milone - Coordenação Ciências Espaciais e Atmosféricas (CEA)

Dr. Joaquim José Barroso de Castro - Centro de Tecnologias Espaciais (CTE)

Dr. Manoel Alonso Gan - Centro de Previsão de Tempo e Estudos Climáticos (CPT)

Dr^a Maria do Carmo de Andrade Nono - Conselho de Pós-Graduação

Dr. Plínio Carlos Alvalá - Centro de Ciência do Sistema Terrestre (CST)

BIBLIOTECA DIGITAL:

Dr. Gerald Jean Francis Banon - Coordenação de Observação da Terra (OBT)

REVISÃO E NORMALIZAÇÃO DOCUMENTÁRIA:

Maria Tereza Smith de Brito - Serviço de Informação e Documentação (SID)

Yolanda Ribeiro da Silva Souza - Serviço de Informação e Documentação (SID)

EDITORAÇÃO ELETRÔNICA:

Maria Tereza Smith de Brito - Serviço de Informação e Documentação (SID)

André Luis Dias Fernandes - Serviço de Informação e Documentação (SID)



MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO
INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS

sid.inpe.br/mtc-m21b/2014/11.11.17.19-MAN

CÁLCULO DO TAMANHO DOS CRISTALITOS ATRAVÉS DO MODELO DE CONFINAMENTO DE FÔNOS

Miguel Angelo do Amaral Junior

URL do documento original:

<<http://urlib.net/8JMKD3MGP5W34M/3HCUGSS>>

INPE
São José dos Campos
2014



Esta obra foi licenciada sob uma Licença Creative Commons Atribuição-NãoComercial 3.0 Não Adaptada.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 3.0 Unported License.



Manual do Programa

“Cálculo do Tamanho dos Cristalitos através do Modelo de Confinamento de Fônons.”

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

O programa consiste em simular o espectro Raman de primeira ordem do silício poroso através do modelo de confinamento de fônons (Richter, 1981). O programa armazena o deslocamento Raman, a intensidade em vetores x e y , e realiza a integral do modelo com os valores experimentais assim obtidos.

Este programa já foi utilizado anteriormente por ex-alunos do grupo Laboratório de Eletroquímica e Materiais Carbonosos (LABEMAC). Iniciou-se com Patrícia Abramof (Abramof, 2006) para estimar o tamanho dos cristalitos sob o silício poroso produzido por ataque químico. Depois foi utilizado por Sandra Ramos (Ramos, 2004) para estimar o tamanho dos cristalitos sob amostras de diamante. Este programa foi aprimorado, de tal modo que, introduziu-se uma interface gráfica e melhorou-se a rotina de cálculo. Para mais informações sobre o cálculo realizado, acesse a dissertação de mestrado: "Produção de silício poroso por processo eletroquímico e estudos da evolução morfológica e do tamanho dos cristalitos" (Amaral, 2014).

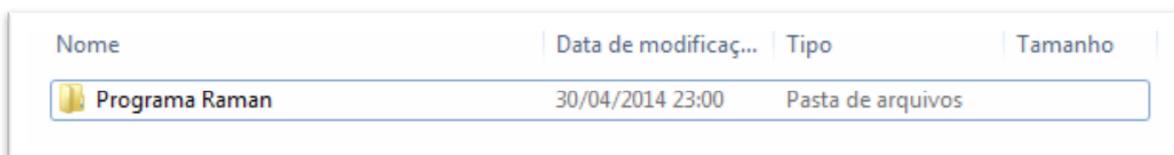
Abril de 2014

COMO UTILIZAR O PROGRAMA

O programa deve ser instalado em máquinas que contenham o sistema operacional Windows (Versões: XP, Vista, 7 ou 8). Deve-se também instalar a Linguagem de programação Python em seu computador (Python versão 2.7 link: www.python.org). Para realizar os cálculos e utilizar a interface gráfica é necessário instalar algumas bibliotecas que complementam o Python:

- Numpy (<http://www.numpy.org/>)
- Scipy (<http://www.scipy.org/>)
- Matplotlib (<http://www.matplotlib.org/>)

Para organizar os resultados, crie uma pasta qualquer com nome, por exemplo, “Programa Raman” (Figura 1).



Nome	Data de modificaç...	Tipo	Tamanho
 Programa Raman	30/04/2014 23:00	Pasta de arquivos	

Figura 1: Pasta com nome Programa Raman.

Faça o “download” do programa na biblioteca online do INPE (link: 8JMKD3MGP5W34M/3H5F662). Em seguida, abra a pasta “Programa Raman” e copie o programa em formato python (com extensão “.py”) para dentro da pasta (Figura 2). Então, crie uma pasta com o nome “Dados”. Dentro da pasta “Dados”, coloque os “arquivos.ASC” do espectro Raman.

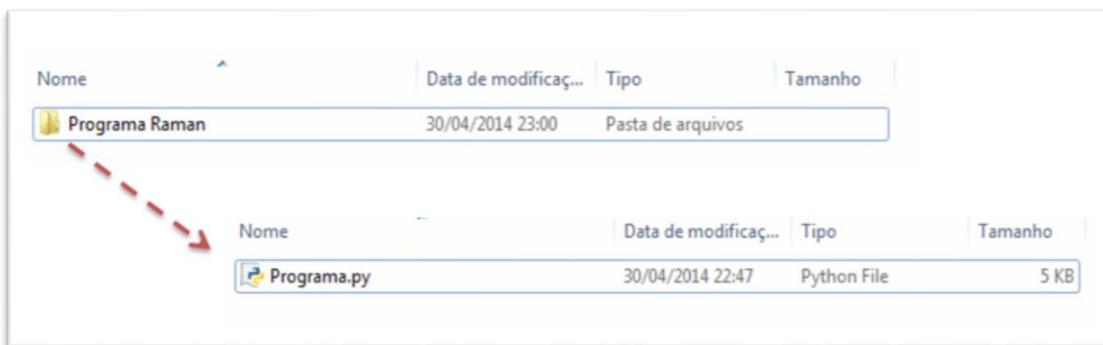


Figura 2: Copiar o programa para pasta “Programa Raman”.

Para facilitar o usuário, não será necessário manipular os dados dos espectros Raman extraídos do aparelho (MicroRaman Sistema 2000 da Renishaw – LAS), sendo assim, basta apenas copiar os dados para a pasta “Dados”. A Figura 3 mostra como estão organizados os dados do “arquivo.ASC”, que são extraídos do aparelho situado no LAS. Desta forma o programa já pode ser executado.

The image shows a Notepad window titled 'FCA2_1.ASC - Bloco de notas'. The window has a menu bar with 'Arquivo', 'Editar', 'Formatar', 'Exibir', and 'Ajuda'. The main text area contains a list of numerical data points, each consisting of a wavelength value followed by a comma and a corresponding intensity value.

Arquivo	Editar	Formatar	Exibir	Ajuda
950.503900,			69.000000	
952.033100,			77.000000	
953.562400,			72.000000	
955.091600,			68.000000	
956.620800,			67.000000	
958.150000,			71.000000	
959.679300,			72.000000	
961.208500,			72.000000	
962.737700,			73.000000	
964.267000,			68.000000	
965.796200,			69.000000	
967.325400,			74.000000	
968.854700,			73.000000	
970.383900,			72.000000	
971.913100,			73.000000	
973.442300,			74.000000	
974.971600,			69.000000	
976.500800,			70.000000	
978.030000,			69.000000	
979.559300,			66.000000	
981.088500,			71.000000	
982.617700,			77.000000	
984.146900,			73.000000	
985.676100,			77.000000	
987.205400,			76.000000	
988.734600,			76.000000	
990.263900,			76.000000	
991.793100,			78.000000	
993.322300,			81.000000	
994.851600,			77.000000	

Figura 3: Exemplo de um “arquivo.ASC” obtido do equipamento Raman.

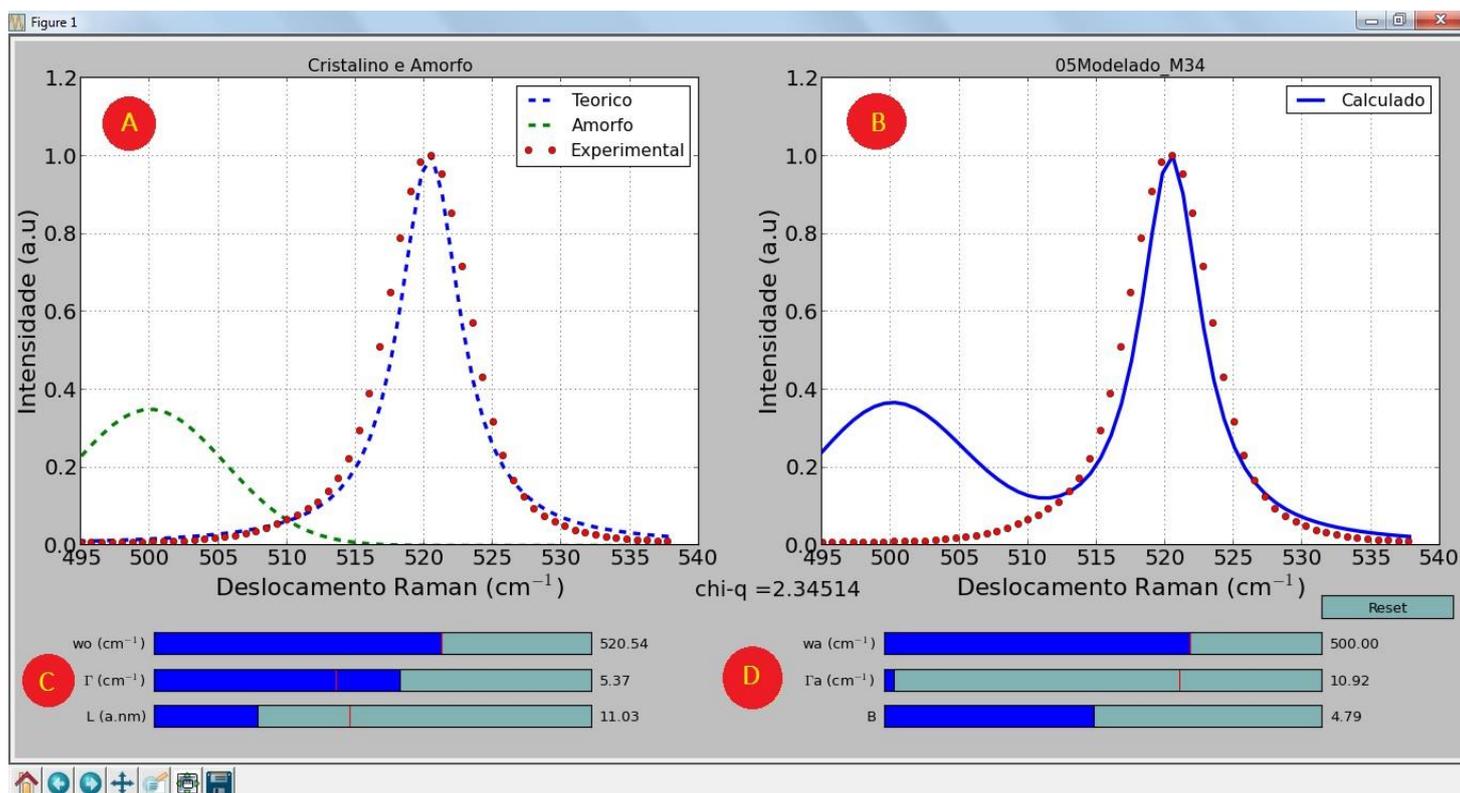


Figura 4: Ilustração do programa desenvolvido para cálculo do tamanho dos cristalitos. A-) Os pontos experimentais estão em vermelho, a linha tracejada azul representa o modelo de confinamento de fônons e a linha tracejada verde representa a gaussiana para região amorfa. B-) Soma das intensidades do modelo de Richter e o Espectro amorfo(Gaussiana).C-) Variáveis do modelo de Richter. D-) Variáveis da Gaussiana.

Após realizar todos os processos descrito anteriormente, basta executar o programa “Programa.py” (dois clicks), e a Figura 4 será exibida. Na região A-) foi utilizado o cálculo do modelo de confinamento de fônons e da Gaussiana separadamente, afim de melhorar o ajuste manual. Após o melhor ajuste, a região B-) do programa exhibe a soma das duas equações. Na região C-) foram utilizadas barras, que servem para alterar os valores das variáveis da equação do modelo de confinamento de fônons: r (largura a meia altura), w_0 (posição do pico) e L (tamanho do cristalito). Na região D-) as barras alteram apenas os valores das variáveis da gaussiana: w_a (posição do pico) , (largura a meia altura) e B (constante de proporcionalidade). Para salvar algum ajuste desejado, basta clicar na figura com formato de disquete, situada no canto inferior esquerdo (Figura 4).

A Figura 4 tem como objetivo principal facilitar a compreensão da equação do modelo de confinamento de fônons (Richter, 1981). Assim, o usuário pode variar cada parâmetro através da barra e observar as variações que ocorrem no gráfico.

$$I(w) \cong A \int \frac{4\pi \cdot q^2 \cdot (e^{-q^2 L/4}) dq}{\left(w - \left(w_0 - 120 \left(\frac{qa_0}{2\pi} \right)^2 \right) \right)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2} \right)^2} + \frac{B}{\Gamma_a \left(\sqrt{\frac{\pi}{2}} \right)} e^{-\frac{2(w-w_a)}{\Gamma_a^2}} \quad (1.1)$$

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA.

- ABRAMOF, P. G. **Silício poroso obtido por ataque eletroquímico**. 2006. 165f. (INPE-14496-TDI/1176) Tese (Doutorado em Engenharia e Tecnologia Espaciais/ Ciência e Tecnologia de Materiais e Sensores) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), São José dos Campos, 2006. Disponível em: <<http://urlib.net/sid.inpe.br/MTC-m13@80/2006/05.30.17.15>>. Acesso em: 21 fev. 2014.
- ABRAMOF, P. G.; FERREIRA N. G.; BELOTO, A. F.; UETA A. Y. Investigation of nanostructured porous silicon by Raman spectroscopy and atomic force microscopy. **Journal of Non-Crystalline Solids**, v. 338-340, p.139-142, 2004.
- AMARAL JUNIOR, M. A. **Produção de silício poroso por processo eletroquímico e estudos da evolução morfológica e do tamanho dos cristalitos**. 2014. 105 p. (sid.inpe.br/mtc-m19/2014/02.06.16.18-TDI). Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais e Sensores) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE), São José dos Campos, 2014. Disponível em: <<http://urlib.net/8JMKD3MGP7W/3FMP3NB>>. Acesso em: 05 set. 2014.
- RAMOS, S. C. **Filme de diamante nanocristalino: efeito de confinamento e cálculo da tensão residual a partir de espectroscopia de espalhamento Raman**. 2007. 92 p. (INPE-15189-TDI/1298). Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia de Materiais e Sensores) - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2007. Disponível em: <<http://urlib.net/sid.inpe.br/mtc-m17@80/2007/11.20.17.39>>. Acesso em: 26 fev. 2014.
- RICHTER, H.; WANG, Z. P.; LEY, L. The one phonon Raman spectrum in microcrystalline silicon. **Solid State Communications**, v.39, p. 625-629, 1981.