UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO Instituto de Física

# Estudo do Freamento de Íons de Cu natural em Au em Baixas Velocidades.

Roberto Linares

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Orientador: prof. Dr. Roberto Vicençotto Ribas

#### Comissão Examinadora:

prof. Dr. Roberto Vicençotto Ribas IFUSP prof. Dr. Jun Takahashi (UNICAMP) prof. Dr. Manfredo Harri Tabacniks (IFUSP)

> SÃO PAULO 2005

## Agradecimentos

Por mais uma etapa profissional concluída gostaria de expressar meus agradecimentos aos que contribuíram de forma direta ou indireta no desenvolvimento deste trabalho. Antes de todos, devo agradecer à Deus pela saúde e auxílio ao longo desses 2 anos de dedicação. Em especial, agradeço:

Ao prof. Ribas, que me orientou durante a realização deste trabalho, pelo incentivo, pelo profissionalismo e confiança em mim depositada.

Aos profs. do Grupo Gama: Medina, Zero, Wayne e Ewa, que me acolheram bem e colaboração durante as tomadas de dados.

Aos alunos do grupo (em ordem hierárquica): Shila, Kenia, Joel, Dennis, Paula, Pedretti, Radamés e Tiago pela amizade.

Ao prof. Nemitala pelo auxílio dado na montagem experimental na canalização 30B e passagem do feixe pelo tubo de aceleração.

À todos os funcionários pelo suporte indispensável para a realização desta dissertação.

Ao Fábio, Gabriel, Luciano, Moacir, Altivex e Jandira pela amizade.

À toda minha família que, apesar da distância, sempre me apoiaram e incentivaram ao longo desses anos.

À FAPESP pela bolsa concedida para a realização deste trabalho.

iv

## Resumo

A perda de energia de íons na matéria é um tópico de grande interesse não apenas por suas aplicações diretas em técnicas de análises de materiais bem como nos estudos teóricos das interações íon-átomo. No entanto, o poder de freamento de sólidos para íons pesados é ainda pouco compreendido especialmente para baixas velocidades devido principalmente a complicada dependência nos números atômicos do meio freador e do íon incidente.

Neste trabalho são apresentados os dados experimentais para o freamento de Cu em Au na região de velocidades de 2 - 4% da velocidade da luz. Os dados experimentais foram obtidos com uso da técnica de espalhamento elástico, onde um feixe primário de <sup>16</sup>O e <sup>28</sup>Si, com energias entre 35 - 52 MeV e 49 - 79 MeV respectivamente, foram utilizados para produzir íons de Cu em recuo a partir de um alvo fino (~ 160  $\mu$ g/cm<sup>2</sup>). O feixe primário espalhado é detectado a 60° por um detector de Si, produzindo átomos de Cu do alvo recuando em um ângulo definido pela cinemática da colisão elástica. Os íons em recuo medidos em coincidência temporal com o feixe primário espalhado compõe o feixe secundário de interesse. A perda de energia, em uma folha de Au com espessura em torno de 530  $\mu$ g/cm<sup>2</sup>, foi obtida medindo-se a energia do feixe secundário com um detector de Si, com e sem a folha de Au interceptando os íons em recuo. Os dados experimentais foram comparados com teorias e modelos semi-empíricos aplicáveis a esse caso. Bom acordo entre a previsão da Aproximação de Convolução Unitária e nossos dados experimentais é observado. vi

## Abstract

The energy loss of ions in materials is an important issue not only because of its direct applications in analytic techniques of materials but also for studying the basics of ion-atom interactions. Nevertheless, the Stopping Power of heavy ions in solids is still poorly understood which is especially true at low velocities mainly due to the complicated dependence on the atomic numbers of the stopper medium and of the stopping ion.

In this work we present new experimental data for Copper ions slowing down in Gold foil in the velocity range of 2 to 4% of the velocity of light. Experimental data were obtained using the elastic scattering technique, where primary beams of <sup>16</sup>O and <sup>28</sup>Si, with energies from 35 to 52 MeV and 49 to 79 MeV respectively, were used to scatter Cu fons from a thin target (~  $160 \,\mu\text{g/cm}^2$ ). The scattered primary beam is detected at 60° with a Si detector, producing recoiling atoms of the target in an angle given by the elastic scattering kinematics. The recoiling ions in temporal coincidence with the scattered primary beam will compose the secondary beam. The energy loss, in a gold foil with thickness about  $530 \,\mu g/cm^2$ , was obtained by measuring the energy of the secondary beam with a Si detector, with and without the Au foil intercepting the recoiling ions. Experimental results were compared with theories and semi-empirical models applied to this case. Good agreement between Unitary Convolution Approximation (UCA) prediction and our data is observed. viii

# Sumário

1	$\mathbf{Intr}$	rodução	13		
	1.1	Conceitos Iniciais	13		
	1.2	Histórico	17		
	1.3	Aplicações	18		
	1.4	Unidades do Poder de Freamento	20		
<b>2</b>	Teorias do Freamento Eletrônico				
	2.1	Freamento em Altas Velocidades	21		
		2.1.1 Teoria de Bohr	22		
		2.1.2 Teoria de Bethe	25		
		2.1.3 Extensões da Teoria de Bethe	27		
	2.2	Freamento em Velocidades Intermediárias e Baixas	29		
		2.2.1 Teoria LSS	29		
	2.3	Modelos Semi-empíricos	33		
		2.3.1 Northcliffe e Schilling (NS)	33		
		2.3.2 Ziegler, Biersack e Littmark (ZBL)	34		
	2.4	Teorias Recentes	37		
3	Teo	rias do Freamento Nuclear	39		
	3.1	Equações Básicas do Freamento Nuclear	40		
		3.1.1 Espalhamento por um Potencial Central	42		
		3.1.2 Potenciais Interatômicos	43		
	3.2	Descrição de Lindhard, Scharff e Schiott (LSS)	45		
	3.3	Descrição de Ziegler, Biersack e Littmark (ZBL)	48		
4	Téc	nicas e Equipamentos	51		
	4.1	Métodos Experimentais	51		

## SUMÁRIO

		4.1.1	Algumas Técnicas	2
		4.1.2	A Técnica de Espalhamento Elástico	3
	4.2	Equipa	amento Experimental	7
		4.2.1	Acelerador e Fonte de Íons	7
		4.2.2	Confecção dos Alvos	)
		4.2.3	Câmara de Espalhamento	L
		4.2.4	Eletrônica e Aquisição de Dados	2
<b>5</b>	Anź	alise do	os Dados e Resultados Experimentais 67	7
	5.1	Medid	as de Espessura do Alvo e Freador	7
	5.2	Medid	as de Perda de Energia	3
	5.3	Anális	e de Dados	2
		5.3.1	Calibração do detector	5
		5.3.2	Correções em $\Delta E$	3
	5.4 Resultados Experimentais		ados Experimentais	7
	5.5	Discus	são	3
		5.5.1	Comparação com as previsões de LSS	)
		5.5.2	Comparação com os modelos semi-empíricos NS e ZBL	)
		5.5.3	Comparação com as previsões de TB e UCA	3

### 6 Conclusões

85

## Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Conceitos Iniciais

Uma partícula carregada, ao penetrar um meio material, gradualmente transfere a ele sua energia cinética em sucessivas colisões com os átomos do meio. A taxa de energia perdida por unidade de comprimento é denominada de *poder de freamento* do meio. De fato, o poder de freamento de um meio freador é uma função do próprio meio, do tipo de partícula incidente e da velocidade de incidência desta partícula e portanto não deve ser encarada como uma propriedade intrínseca do meio.

O processo de freamento de íons na matéria pode ser dividido em duas componentes de acordo com a sugestão dada por Bohr [1]: i) o freamento nuclear<sup>1</sup>, correspondendo às perdas de energias devido a colisões elásticas do íon com os átomos do meio e ii) freamento eletrônico, devido a colisões inelásticas entre o íon e os átomos do meio levando-os a excitação e/ou ionização. Devido a pequena massa do elétron, o freamento eletrônico não muda significantemente a direção do projétil, enquanto o freamento nuclear está associado a grandes desvios na direção do momento do íon. Por outro lado, o freamento nuclear é também responsável por defeitos no arranjo atômico do meio.

Esta classificação não considera as possíveis correlações entre os dois processos de perda

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>O termo nuclear faz com que surja uma ambiguidade, já que o nome sugere que o freamento ocorre em colisões elásticas entre os núcleos das partículas. Não deve ser confundido o freamento nuclear com a reação de espalhamento elástico na física nuclear. O segundo ocorre em energia bem maiores que o primeiro, na qual os elétrons praticamente não exercem nenhuma blindagem. Devido a fatores históricos, será mantida o termo freamento nuclear.



Figura 1.1: Curva característica do freamento de íons na matéria. A curva cheia corresponde ao freamento eletrônico e a pontilhada ao freamento nuclear. A mudança brusca de inclinação da curva correspondente ao freamento eletrônico em baixas velocidades foi introduzida empiricamente em [2].

de energia. Também, não impõe a ocorrência de apenas uma das componentes durante uma colisão. Os dois processos de transferência de energia coexistem sendo que, para certas regiões de velocidade de recuo do íon, uma das componentes predomina sobre a outra. Existem também outros processos de perda de energia, como os que envolvem emissão de radiação do tipo *Bremsstralhung* e *Cerenkov*. Estes não serão considerados pelos seguintes motivos: o primeiro é significativo apenas para feixe de elétrons; o segundo só ocorre quando a velocidade do projétil é próximo a velocidade da luz no meio, e os casos estudados neste trabalho não envolvem nem um nem outro.

O freamento eletrônico é o processo dominante numa ampla faixa de energias. A Fig. 1.1 ilustra a curva característica do freamento em função da energia de recuo do íon em um meio freador. Nesta figura, a região III corresponde a região de altas velocidades do íon, na qual o íon encontra-se praticamente nú, i.e., sem seus elétrons atômicos. Nesta região, a dinâmica de excitação/ionização dos átomos do meio devido as colisões inelásticas é bem caracterizada por uma única constante, a saber, energia de ionização média  $\langle I \rangle$  dos átomos do meio. Aproximações teóricas sugerem uma dependência do tipo  $v^{-2}$  para o freamento



Figura 1.2: Exemplo da oscilação presente no poder de freamento em função do número atômico do freador para partículas  $\alpha$ . Para energias do íon cada vez menores as oscilações tornam-se mais evidente, caracterizando os efeitos quânticos peculiar ao freamento nas regiões I e II. O mesmo efeito é observado em função do número atômico do íon incidente. Extraído de [5].

eletrônico nessa região. A medida que a velocidade do projétil diminui, o íon começa a ser capaz de capturar elétrons do meio no sentindo de se neutralizar eletricamente, assumindo uma carga média (carga efetiva) que depende de sua velocidade instantânea. Esse fenômeno ocorre nas regiões I e II, sendo esta última caracterizada pela presença de um máximo na curva de freamento, conhecido como *pico de Bragg*. A região I corresponde ao regime de baixas energias em que  $v \leq v_0 Z_1^{2/3}$ , onde  $v_0$  é a velocidade de Bohr ( $v_0 \approx c/137$ ) e  $Z_1$  é o número atômico do íon, e o processo de freamento passa a depender dos detalhes das estruturas eletrônicas tanto do íon como do átomo. Em particular, nesta região em energia, o poder de freamento apresenta uma dependência oscilatória em função do número atômico do íon e do meio, como visto na Fig. 1.2. Modelos teóricos [3, 4] predizem que o freamento eletrônico nesta região é proporcional a velocidade do íon.

O freamento nuclear torna-se importante apenas para velocidade do íon  $\lesssim v_0$  (Fig. 1.1), quando excede a contribuição eletrônica. Nessas velocidades de recuo, o estado de ionização do íon é praticamente nulo. Enquanto o freamento eletrônico diminui com a velocidade do projétil, o freamento nuclear começa a aumentar rapidamente, chegando a

um máximo e então decaindo a zero. O efeito cumulativo das colisões nucleares produz uma grande dispersão na direção de recuo do feixe incidente, bem como em sua energia. Efeitos dessa natureza são denominados de *straggling*.

A região de altas energias é bem descrita teoricamente. Nela, a existência de diferentes formulações para o poder de freamento eletrônico para um dado íon faz com que seja conveniente reunir as características em comum em um termo geral, definido por  $Z_1^2/m_e v^2$ , onde  $m_e$  é a massa do elétron, e confinar as diferenças num termo multiplicativo adimensional (B) conhecido como stopping number. O termo geral descreve a forma como o freamento de partículas carregadas na matéria depende da carga e da velocidade do íon incidente: i) íons mais velozes perdem menos energia em relação aos íons mais lentos; ii) íons pesados sofrem uma força freadora mais intensa que íons leves. Para energias intermediárias e baixas deve-se considerar a carga efetiva  $Z_1^*e$  do íon no lugar de  $Z_1e$ . Essa carga efetiva, correspondendo aos processos de perda e captura de elétrons no decorrer do processo de freamento é um dos fatores responsáveis pelo máximo no poder de freamento (ver Fig. 1.1).

O tratamento teórico do freamento nuclear consiste basicamente em considerar os detalhes das colisões elásticas íon-átomo, nos quais as próprias distribuições eletrônicas exercem uma blindagem ao potencial Coulombiano dos núcleos atômicos. Experimentalmente, o potencial de interação entre o íon e o átomo do meio pode ser determinado através de medidas da seção de choque do espalhamento elástico dos íons. Dessa forma o freamento nuclear é bem conhecido, tendo um grau de confiabilidade tal que técnicas experimentais, que dependem principalmente do conhecimento deste tipo de freamento, como por exemplo análises de materiais, sejam possíveis.

De forma geral, as descrições teóricas para o poder de freamento conseguem reproduzir os aspectos essenciais. Sem dúvida, a região de altas energias é a melhor descrita e conhecida experimentalmente, principalmente para íons leves e intermediários. O freamento eletrônico nas regiões de energias baixas e intermediárias tem sido de difícil previsão. Mesmo para íons leves não se obtém previsões teóricas confiáveis para todos os meios. A situação agrava-se para o caso de íons pesados por dois principais motivos: i) complicada variação do estado de carga do projétil no meio, principalmente para baixas energias; ii) pequena quantidade de dados experimentais para íons pesados. A impossibilidade de se obter previsões teóricas precisas tem acarretado um grande esforço no sentido de se desenvolver parametrizações semi-empíricas para o poder de freamento no amplo espaço  $(Z_1, Z_2, E)$ , em que  $Z_2$  é o número atômico do meio e E é a energia do íon. No caso de

#### 1.2. HISTÓRICO

prótons e alfas, em razão da grande quantidade de dados experimentais disponíveis, as previsões dadas por essas formulações semi-empíricas são em geral confiáveis. Já para íons pesados, sendo maior a complexidade dos mecanismos de interação e escassas as medidas experimentais, os cálculos podem apresentar grandes discrepâncias em comparação com dados experimentais. Dos vários métodos semi-empíricos desenvolvidos, destacam-se os de Northcliffe e Schilling (NS) [6] e o de Ziegler, Biersack e Littmark (ZBL) [2, 7]

No presente trabalho, foi estudado o poder de freamento de Au para íons de Cu no regime de baixas velocidades de recuo, na qual nenhuma medida experimental havia sido anteriormente realizada. Para a produção de íons em baixas energias foi empregada uma técnica experimental recentemente desenvolvido por nosso grupo [8], na qual um feixe primário energético incidindo num alvo fino de Cu, por espalhamento elástico, produz íons do alvo recuando com velocidades muito menores que a do feixe primário. No total, foram realizados 16 medidas experimentais com energias de recuo entre 8 - 28 MeV com incertezas em torno de 5%. Nossas medidas foram comparadas com cálculos teóricos e semi-empíricos aplicavéis a esta região.

### 1.2 Histórico

A interação de partículas carregadas com a matéria tem sido um assunto de interesse desde o início do século passado, com a descoberta dos materiais radioativos. Nessa época, foram identificados elementos que emitem espontâneamente partículas energéticas carregadas ( $\alpha \in \beta$ ). Como essas partículas são capazes de atravessar um material suficientemente delgado, pesquisadores criaram a espectativa de que experimentos desta natureza poderiam fornecer informações quanto à estrutura do átomo, o que impulsionou os primeiros estudos teóricos sobre o freamento de partículas carregadas na matéria.

Em 1913, N. Bohr [9] desenvolveu a primeira teoria para o freamento eletrônico, utilizando o modelo do átomo de Rutherford e calculando o poder de freamento da matéria por meio da mecânica clássica não relativística. A primeira formulação quântica foi desenvolvida por H. A. Bethe [10, 11] em 1930. Em 1933, também com base na mecânica quântica, F. Bloch [12] obteve uma expressão para o freamento eletrônico que se reduz as expressões de Bohr e de Bethe nos limites apropriados. Anos mais tarde, Bohr sugeriu que o processo de perda de energia de partículas atravessando a matéria poderia ser divida em duas componentes: freamento nuclear e eletrônico [1].

Novo fôlego foi dado ao tema após a descoberta da fissão nuclear e das partículas

pesadas resultantes desse processo, em meados da década de 30. Com isso, ampliou-se o número de combinações íon-meio-energia possíveis. O problema adicional apresentado na teoria para partículas com  $Z_1 > 2$  está relacionado com o tratamento da interação de íons parcialmente nús, i.e., com alguns elétrons atômicos (estado de carga diferente de zero). Com isso, a teoria até então desenvolvida poderia ser generalizada para íons pesados se fosse estimado uma carga efetiva apropriada para o íon.

As teorias até então desenvolvidas não eram capazes de prever, nem mesmo para o próton, o freamento em regiões intermediárias e baixas energias. Tornou-se comum a implementação de correções à teoria de Bethe no sentido de descrever a forma do freamento nestas regiões. Dentre estes trabalhos, destaca-se o realizado por Northcliffe em 1963 [13].

Ao longo das décadas de 50 e 60, Lindhard e colaboradores desenvolveram uma teoria unificada para o freamento nuclear e eletrônico na região de baixas velocidades conhecida como teoria-LSS (Lindhard, Scharff and Schiott) [3, 14]. A descrição de LSS é baseada no modelo estatístico de Thomas-Fermi do átomo, sendo mais precisa para átomos com muitos elétrons. Para o freamento eletrônicos, a teoria considera o íon em movimento interagindo com um gás de elétrons livres uniforme, que recorrendo a aproximação de densidade local, aplica-se ao átomo. Para o freamento nuclear, os autores estudaram a interação de dois átomos de Thomas-Fermi colidindo elasticamente. Durante muitos anos, a teoria LSS foi amplamente utilizada como meio para a previsão de dados experimentais. No entanto, medidas sistemáticas para o freamento de íons pesados em baixas velocidades, desenvolvidos principalmente a partir da década de 70, evidenciaram o comportamento oscilatório do poder de freamento como função de  $Z_1$  e  $Z_2$ , que não é previsto por esta teoria.

### 1.3 Aplicações

A perda de energia de partículas carregadas ao penetrar a matéria é um tópico de vasto interesse atual, não somente no sentido de compreender os detalhes da interação íon-átomo como também por suas inúmeras aplicações. Técnicas experimentais de análises de materiais tais como Rutherford Backscattering Spectrometry (RBS) [15], Elastic Recoil Detection Analysis (ERDA) [16], bem como outras aplicações como Protonterapia e Implantação Iônica [17] necessitam cada vez mais valores precisos do poder de freamento para um número crescentes de combinações íon-meio-energia.

Em particular, na Física Nuclear, medidas experimentais do tempo de vida de estados nucleares da ordem de  $10^{-11} - 10^{-14}$  segundos são geralmente realizadas utilizando-se a

#### 1.3. APLICAÇÕES



Figura 1.3: Alargamento Doppler do raio gama de 1014 keV do núcleo <sup>27</sup>Al em recuo em 6 diferentes substratos. O tempo de vida do estado nuclear deduzido para os distintos substratos é indicado em cada gráfico, onde percebe-se a variação em função do substrato. Extraído de [18].

técnica de atenuação do efeito Doppler (DSAM) [18]. Neste método, reações nucleares entre um feixe de partículas incidindo sobre um alvo produzem núcleos excitados em recuo. O alvo é depositado sobre um substrato, geralmente de Au ou Pb, de modo que os núcleo produzidos recuam nesse meio. A dependência temporal da velocidade do núcleo excitado em recuo é uma função do poder de freamento do material do substrato, que é utilizado como escala temporal na determinação da vida média. Se o tempo de vida do estado nuclear é da ordem do tempo de freamento do núcleo no backing, então alguns núcleos emitirão raios gama ainda em movimento e outros já estarão parados quando decairem. No espectro de raios gama é observado uma componente, correspondendo ao decaimento em repouso, e um alargamento Doppler devido ao decaimento com o núcleo em movimento em vários instantes (velocidades diferentes) - ver Fig. 1.3. A análise da forma dessa linha junto com o conhecimento do poder de freamento do freador para o correspondente núcleo em recuo permite reproduzir a sua forma a partir de um tempo de vida conveniente para o estado nuclear. Este valor é aferido como o tempo de vida do estado nuclear. Ainda na figura, é apresentado o efeito de atenuação do efeito Doppler para o raio  $\gamma$  de 1014 keV do núcleo de <sup>27</sup>Al recuando em vários substratos distintos. Pode-se perceber a variação do tempo de vida

do mesmo estado nuclear em função do substrato. Essa variação deve-se principalmente à incerteza do poder de freamento deste núcleo para os substratos utilizados.

### 1.4 Unidades do Poder de Freamento

O poder de freamento é definido como a taxa de energia perdida pelo íon para o meio por unidade de comprimento atravessado, e portanto possui unidade de força<sup>2</sup>. Existem várias unidades adotadas para o poder de freamento de um meio. Uma dessas unidades é eV/Å.

Na física nuclear, é comum expressar a espessura de um alvo em função de sua densidade superficial (em g/cm<sup>2</sup>), diretamente relacionado com a espessura em unidades de comprimento  $\Delta x$  (cm) através de sua densidade  $\rho$  (em g/cm<sup>3</sup>)

$$\left(g/cm^2\right) = \rho \times \Delta x \tag{1.1}$$

Como, em geral, as energias de incidência dos íons são medidos em MeV, o poder de freamento fica expresso em  $MeV/mg/cm^2$ . Uma terceira unidade é obtida expressando-se a densidade superficial do freador como o número de átomos por unidade de superfície (em átomos/cm<sup>2</sup>).

$$\left(\operatorname{\acute{a}tomos}/cm^{2}\right) = \left(g/cm^{2}\right) \times \frac{N_{0}}{A_{2}} \tag{1.2}$$

em que  $N_0$  é o número de Avogadro. Nessa forma, o poder de freamento é geralmente expresso como  $eV/10^{15}$ átomos/cm<sup>2</sup>. Uma outra unidade utilizada é a *unidade reduzida* LSS que será definida na seção 2.4.

Fator de Conversão	Poder de Freamento em
$\rho \times 10^1$	${ m eV}/{ m \AA}$
$ ho  imes 10^2$	${ m keV}/{ m \mu m}$
$ ho  imes 10^2$	${ m MeV}/{ m mm}$
1	${ m keV}/{ m \mu/cm^2}$
$10^{3}$	${ m keV/mg/cm^2}$
$A_2 \times 1,6606$	${ m eV}/10^{15}~{ m \acute{a}tomos}/{ m cm}^2$

Tabela 1.1: Tabela de conversão das unidades de poder de freamento a partir da unidade  $MeV/mg/cm^2$ .  $\rho em g/cm^3$ .

 $<sup>^{2}</sup>$ A essa força freadora (média) associa-se um vetor no sentido contrário ao momento do íon.

## Capítulo 2

## Teorias do Freamento Eletrônico

- "Science..., never solves a problem without creating ten more" George Bernard Shaw.
- "If you thought that science was certain well, this is just an error on your part." Richard P. Feynman.

Para uma vasta região em energia do projétil, o freamento eletrônico é o processo de perda de energia dominante. A interação do íon com os elétrons do meio possui uma natureza complexa que fica clara quando levamos em conta como possíveis causas: i) transferência de energia cinética dos elétrons do próprio íon para os elétrons do meio; ii) excitação e ionização dos átomos que compõem o freador; iii) processos de perda e captura de elétrons por parte do íon a medida que perde energia para o meio.

Neste capítulo, os principais trabalhos desenvolvidos nesta área serão abordados.

### 2.1 Freamento em Altas Velocidades

Vários modelos foram desenvolvidos no sentindo de compreender os mecanismos básicos do freamento eletrônico. N. Bohr [9], utilizando a mecânica clássica, e H. Bethe [10, 11], com base na mecânica quântica, estudaram o processo de perda de energia através da colisão íon-elétron, descrevendo razoavelmente bem o freamento de protons e alfas na região de altas velocidades.



Figura 2.1: Descrição clássica do freamento eletrônico de uma partícula carregada.

#### 2.1.1 Teoria de Bohr

A teoria de Bohr [9] é uma visão clássica do processo de colisões do íon incidente com os elétrons do meio. Apesar de estarmos lidando com partículas no domínio microscópico, na qual uma descrição quântica torna-se necessária, veremos que a descrição clássica, por meio de trajetórias e parâmetros de impacto bem definidos, pode ser satisfatoriamente utilizada dentro de certos limites.

Bohr considerou um projétil de massa  $m_1 \gg m_e$  e carga  $Z_1 e$  colidindo com o elétron atômico do meio, onde  $m_e$  é a massa do elétron. O projétil se desloca com velocidade  $\vec{v}$ com parâmetro de impacto b, conforme ilustrado na Fig. 2.1.

A perda de energia do íon corresponde à quantidade de energia absorvida pelo elétron devido a sua interação com o campo eletromagnético do íon em movimento. A teoria considera separadamente interações próximas e distantes, interpretado-as a partir de um parâmetro de impacto crítico  $b_0$ . Para valores de  $b < b_0$  (colisão próxima) o elétron pode ser tratado como livre. A ligação do elétron ao seu átomo é levada em conta para  $b > b_0$ (colisões distantes). Além disso, Bohr considerou apenas casos em que a velocidade do íon é muito maior que a velocidade orbital do elétron de modo que, para o projétil, o elétron está praticamente parado durante o tempo de duração da interação. Os detalhes matemáticos da teoria podem ser encontrados na referência [19].

Sendo  $NZ_2$  a densidade de elétrons do meio, com N o número de átomos por volume<sup>1</sup>, a perda de energia do íon pode ser escrita como

$$\frac{dE}{dx} = NZ_2 S = NZ_2 \int 2\pi b\Delta E(b)db$$
(2.1)

 $<sup>^1</sup>N=N_0.\rho/A_2,$ onde $N_0$ é o número de Avogadro. $\rho$  e  $A_2$ são a densidade e a massa atômica do meio freador.

onde S é a seção de shoque de freamento eletrônico por elétron do meio e  $\Delta E(b)$  é a energia transferida em função do parâmetro de impacto. Para colisões próximas, a expressão obtida é

$$\Delta E_p = \frac{2Z_1^2 e^4}{m_e v^2 b^2} \frac{1}{1 + (d/2b)^2}$$
(2.2)

em que  $d = 2Z_1 e^2/m_e v^2$  é a distância de máxima aproximação<sup>2</sup>. Ao integrarmos em db na eq.(2.1), os limites de integração serão  $0 < b < b_0$ , de modo a obter, para colisões próximas  $(b < b_0)$ , a seguinte expressão para o poder de freamento

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_p = \frac{4\pi Z_2 Z_1^2 e^4}{m_e v^2} ln\left(\frac{b_0 m_e v^2}{Z_1 e^2}\right) \tag{2.3}$$

Para colisões distantes  $(b > b_0)$ , a força de ligação do elétron não é mais desprezível. Bohr modelou a força de ligação do elétron ao seu núcleo por uma força harmônica de frequência natural  $w_0$ . Assim, a expressão obtida para a perda de energia em colisões distantes é dada por

$$\Delta E_d = \frac{2Z_1^2 e^4}{m_e v^2 b^2} \left[ \xi^2 K_1^2(\xi) + \frac{1}{\gamma^2} \xi^2 K_0^2(\xi) \right]$$
(2.4)

onde

$$\xi = \frac{w_0 b}{v}$$

e  $K_n(\xi)$  sendo a função de Bessel modificada de ordem n<sup>3</sup>. O poder de freamento em colisões distantes (dE/dx<sub>d</sub>) é calculado substituindo a eq.(2.4) em (2.1), com a integração de *b* nos limites de  $b_0$  até  $b \to \infty$ . A teoria pressupõe a consideração de íons rápidos de modo que, em geral,  $b_0 \ll v/w_0$ , de modo que a função de Bessel pode ser aproximada pela sua expansão para pequenos argumentos. O poder de freamento para colisões distantes é então dada por:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_d = \frac{4\pi N Z_2 Z_1^2 e^4}{m_e v^2} ln\left(\frac{2v e^{-\epsilon}}{w_0 b_0}\right) \tag{2.5}$$

Somando as contribuições do freamento eletrônico para colisões próximas (eq.(2.3)) e colisões distantes (eq.(2.5)), chega-se a expressão final derivada por Bohr:

$$\frac{dE}{dx}_{Bohr} = \frac{4\pi N Z_2 Z_1^2 e^4}{m_e v^2} ln\left(\frac{1, 123m_e v^3}{Z_1 e^2 w_0}\right)$$
(2.6)

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Corresponde a um limite superior ( $\approx 2v^2m_e$ ) para transferência de energia numa colisão.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>a função de Bessel modificada é definida a partir das funções de Bessel  $J_n(x)$  e Neumann  $N_n(x)$  como  $K_n(\xi) = -\frac{\pi}{2} \left[ J_n(i\xi) + i N_n(i\xi) \right]$ 



Figura 2.2: Poder de freamento de íons de He em Si. A curva pontilhada é um ajuste empírico dos dados experimentais (referência [2]). A linha cheia é a previsão dada pela eq.(2.6) com  $\langle I \rangle =$  190 eV para o átomo de Si [20].

com 1,123 =  $2\exp(-\epsilon)$ . Para íons pesados ( $Z_1 \ge 2$ ), a carga do íon deve ser convenientemente substítuido pela sua carga efetiva  $Z_1^*$ e. Em trabalhos posteriores, a frequência de oscilação característica do átomo foi corretamente relacionada com a energia média de excitação  $\langle I \rangle$  através da relação  $\langle I \rangle = \hbar w_0$ . Os valores de  $\langle I \rangle$  para vários átomos podem ser encontrados na referência [20].

As considerações realizadas ao longo da teoria restringem sua aplicabilidade na previsão de dados experimentais. Além disso, a representação dos estados de ligação dos elétrons do meio através de uma única constante de oscilação característica constitui-se numa simplificação fora da realidade. Mesmo assim, a teoria consegue descrever o processo para a região de altas energias. Deste fato podemos compreender que as complexas excitações e ionizações dos átomos do meio tendem (estatisticamente) para um valor médio da energia de excitação ( $\langle I \rangle$ ). Porém, ainda existe uma forte razão matemática para negligenciar a equação de Bohr: só faz sentido enquanto o logaritmo for positivo, isto é,

$$\frac{1,123m_e v^3}{Z_1 e^2 w_0} > 1 \tag{2.7}$$

Na Fig. 2.2, o efeito de "corte" devido a quebra na condição do logaritmo (eq. 2.7)

fica evidenciada. A teoria foi originalmente desenvolvida para descrever a interação de partículas  $\alpha$  rápidas, para o qual a restrição imposta pela eq. (2.7) não representa uma séria limitação. Mesmo em não apresentando valores próximos ao ajuste dos dados experimentais, a equação de Bohr se mostra capaz de descrever a forma do poder de freamento em altas energias.

#### 2.1.2 Teoria de Bethe

Em 1930, H. A. Bethe [10] estudou o freamento de partículas na matéria descrevendo o processo numa abordagem quântica. Inicialmente, Bethe considerou a partícula incidente com velocidade alta o suficiente se comparada com a velocidade orbital do elétron atômico e ao mesmo tempo não-relativística. Nesta situação, o problema pode ser tratado em primeira aproximação de Born na teoria de espalhamento quântico. A teoria de Bethe se basea na quantidade de momento transferido  $\overrightarrow{q}$  durante a colisão, que é um observável e mais diretamente relacionado com a energia transferida aos elétrons.

A seção de choque de freamento (S), definida em (2.1), explicitamente é a soma para todas as excitações/ionizações do átomo freador possíveis durante a colisão

$$S = \sum_{n} E_n \sigma_n \tag{2.8}$$

onde  $\sigma_n$  é a seção de choque para colisões inelásticas do íon com o átomo do meio de modo a excitar este último a um estado de energia  $E_n$ , medido a partir de seu estado fundamental. Determinar o poder de freamento corresponde, indiretamente, em obter uma expressão para a seção de choque  $\sigma_n$ . Assim, devemos resolver a equação de Schöedringer dependente do tempo para a Hamiltoniana do sistema íon-átomo dada por:

$$H = H_p + H_a + H_{int.} \tag{2.9}$$

onde  $H_p$  é a hamiltoniana de partícula livre, representando o íon incidente,  $H_a$  do átomo e  $H_{int.}$  da interação Coulombiana entre o íon incidente e os elétrons e núcleo do átomo do meio, dada por

$$H_{int.} = -Z_1 e^2 \left( \sum_{j=1}^{Z_2} \frac{1}{|\vec{r_{0j}}|} - \frac{Z_2}{|\vec{r_0}|} \right)$$
(2.10)

onde  $\overrightarrow{r_{0j}}$  é a distância entre o íon incidente e o elétron j do átomo. A partir desta notação fica claro que o núcleo do átomo freador encontra-se fixo à origem do eixo de coordenadas.

A equação de Schöedringer para hamiltoniana (2.9) pode ser tratada pelo método da teoria de pertubação dependente do tempo, em que (2.10) é o termo pertubativo. A função de onda solução  $\psi$  será a soma dos produtos entre a função de onda atômica  $\psi_n(\overrightarrow{r_1}, ..., \overrightarrow{r_{Z_2}})$ , descrevendo o estado n do átomo, e a função de onda da partícula livre,  $e^{i \vec{k} \cdot \overrightarrow{r_0}}$  onde  $\vec{k} = \vec{p}/\hbar$  é o vetor de propagação da partícula incidente,

$$\psi = \sum_{n} c_n \left(\overrightarrow{k}, t\right) \psi_n \left(\overrightarrow{r_1}, ..., \overrightarrow{r_{Z_2}}\right) e^{i \overrightarrow{k} \cdot \overrightarrow{r_0}} e^{-i(E_n + E)t/\hbar}$$
(2.11)

em que E é a energia da partícula incidente e os coeficientes  $c_n\left(\overrightarrow{k},t\right)$  são as amplitudes de probabilidade de transição do estado fundamental ao estado n.

Utilizando a aproximação de Born, a seção de choque  $\sigma_n$  derivada por Bethe é dada por (detalhes na referência [21]):

$$\sigma_n(\theta,\phi) = \left(\frac{2Z_1 e^2 E}{\hbar^2 c^2 q^2}\right)^2 \frac{v_f}{v} \times \left|\int \sum_{j=1}^{Z_2} \psi_n^* \psi_0 e^{i\overrightarrow{q}\cdot\overrightarrow{r_j}} d^3 r_1 \cdots d^3 r_{Z_2}\right|^2$$
(2.12)

 $v_f$  e v são as velocidades final e inicial do íon respectivamente e c a velocidade da luz no vácuo. A variável q corresponde ao módulo da quantidade de momento transferido ao elétron, definido como  $\overrightarrow{q} = \overrightarrow{k_f} - \overrightarrow{k}$ . É interessante observar que a seção de choque é  $\sim 1/q^4$ , indicando a tendência para colisões de baixas transferências de momento.

Dentro destas considerações, o poder de freamento derivado por Bethe é dado

$$\frac{dE}{dx}_{Bethe} = \frac{4\pi N Z_2 Z_1^{*^2} e^4}{m_e v^2} ln\left(\frac{2m_e v^2}{\langle I \rangle}\right)$$
(2.13)

em que $\langle I \rangle$ , a energia de excitação média por elétron, é definida como

$$\ln\left\langle I\right\rangle = \sum f_n \ln E_n \tag{2.14}$$

e  $f_n$  é a constante do oscilador harmônico associado ao nível de energia n do átomo. Na expressão (2.13) foi tomado o cuidado de utilizar a carga efetiva  $Z_1^*$  ao invés do número atômico do íon, encontrado na expressão original. Devido a aproximação de Born, utilizada por Bethe na dedução da expressão acima, a validade do tratamento quântico impõe a condição  $Z_1^* \ll 137v/c$ . Na Fig. 2.3 o poder de freamento de  $\alpha$  em Si determinado pela expressão de Bethe é comparado com um ajuste semi-empírico dos dados experimentais



Figura 2.3: Perda de energia de íons de He em alvo de <sup>14</sup>Si sólido. A linha cheia e pontilhada correspondem a previsão teórica devido a teoria de Bethe (eq. 2.13) e ao ajuste semiempírico dos dados experimentais [2].

[2]. Uma boa concordância entre as curvas é observado. Similarmente a teoria de Bohr, o efeito de corte do freamento é observado devido ao logaritmo na expressão do freamento de Bethe.

#### 2.1.3 Extensões da Teoria de Bethe

A conexão entre os resultados dados pelas descrições clássicas e quânticas, para íons com velocidades maiores que a velocidade orbital dos elétrons, foi deduzido por Bloch [12]. Bloch levou em conta a pertubação na função de onda dos elétrons atômicos causado pela presença do íon. O resultado por ele obtido, para íons não relativísticos, é usualmente conhecido como equação de Bethe-Bloch

$$\frac{dE}{dx}_{Bloch} = \frac{4\pi N Z_2 Z_1^{*^2} e^4}{m_e v^2} \left[ ln \left( \frac{2m_e v^2}{\langle I \rangle} \right) + \psi \left\{ 1 \right\} - Re\psi \left\{ 1 + i \left( \frac{Z_1 c}{137 v} \right) \right\} \right]$$
(2.15)

onde  $\psi$  é a derivada logarítmica da função gama e  $Re\psi$  é a parte real de  $\psi$ . A equação acima se reduz ao limite clássico (Bohr) para  $Z_1c/137v \gg 1$  e ao limite quântico (Bethe) para  $Z_1c/137v \ll 1$ .

Vários trabalhos surgiram posteriormente implementando correções à expressão de Bethe-Bloch. O excelente artigo de U. Fano [22] sumariza os trabalhos teóricos desenvolvidos nestas extensões. Em sua abordagem, Fano considera o momento transferido a um elétron ligado, analisando-o em 3 regiões distintas da energia transferida. Fano obteve uma versão relativística da expressão de Bethe-Bloch onde dois termos adicionais foram incluidos.

$$\frac{dE}{dx}_{Fano} = \frac{4\pi N Z_2 Z_1^{*^2} e^4}{m_e v^2} \left[ ln \left( \frac{2m_e v^2}{\langle I \rangle} \right) + \frac{C(v)}{Z_2} + \frac{v^2}{c^2} - ln \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right) - \delta \right]$$
(2.16)

O primeiro termo entre colchetes é simplesmente a expressão originalmente obtida por Bethe. O segundo termo é denominado *correção de camadas* e corrige a hipótese de que a velocidade do íon é muito maior que a velocidade orbital do elétron atômico. O último termo corresponde a uma correção devido a densidade do meio, em que efeitos de polarização dos átomos reduzem o poder de freamento. Os demais termos são meramente correções relativísticas.

Existem várias correções propostas para aprimorar a expressão obtida por Fano. Tradicionalmente, isto é realizado expandindo-se o *stopping number*<sup>4</sup> (*B*), termo entre colchetes em (2.16), em potências de  $Z_1$ , que pode ser feita para incrementar correções adicionais. Assim, o stopping number na expressão de Bethe-Bloch é expandida como

$$B = \left[L_0(\beta) + Z_1 L_1(\beta) + Z_1^2 L_2(\beta) + \dots\right]$$
(2.17)

onde o termo  $L_0$  contém todos os fatores de correção da expressão (2.16) obtida por Fano. O segundo termo na expansão,  $L_1$ , é denominado de correção Barkas ou correção  $Z_1^3$ . Por conter um termo de potência ímpar do número atômico do íon, e portanto sensível ao sinal da carga (+, -), essa correção é, por exemplo, responsável pelo reduzido poder de freamento para o antiproton em relação ao freamento do próton num mesmo meio. O termo  $L_2$  é conhecido como correção de Bloch e corresponde a uma pequena correção na força de ligação atômica do elétron. Maiores detalhes podem ser encontrados no artigo de revisão de Ziegler sobre o tema [23].

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Ver introdução.

#### 2.2 Freamento em Velocidades Intermediárias e Baixas

A dificuldade imposta pela complexidade do freamento em velocidades intermediárias e baixas, e principalmente para íons pesados, fez com que fossem acrescentadas correções às teorias existentes. Cada vez mais tornou-se necessário o conhecimento de novas variáveis físicas para aplicação destas correções, tirando a simplicidade das expressões originais. Nestas regiões de energia, a única teoria que encontrou relativo sucesso foi a desenvolvida por Lindhard et. al. [24, 25].

#### 2.2.1 Teoria LSS

A descrição detalhada de sistemas com inúmeros graus de liberdade, como no caso do freamento de partículas por um meio sólido, é em geral muito difícil. No freamento eletrônico, a própria interação existente entre os elétrons do meio torna-se um agravante. As teorias anteriores - Bohr e Bethe-Bloch - ignoraram essa interação intrínseca. Porém, ambas as teorias conseguem reproduzir, para casos envolvendo íons leves, a forma do freamento na região de altas energias. Em energias intermediárias e baixas, as previsões fornecidas por essas teorias contradizem enormemente os dados experimentais.

Uma nova abordagem para o processo de perda de energia eletrônica foi a análise do freamento de partículas por um gás de elétrons livres, que oferece uma ilustração das propriedades dinâmicas gerais de sistemas atômicos. O freamento, baseado nas propriedades dielétricas do gás de elétrons, foi abordado pela primeira vez por Fermi [26], considerando a perda de energia em razão de efeitos coletivos (polarização) do gás. Fermi partiu das equações clássicas de Maxwell para estabelecer estimativas sobre a polarização do meio.

Uma análise mais geral foi apresentada por J. Lindhard e colaboradores considerando a partícula incidente como uma pertubação ao gás de elétrons livres [24, 25]. Quanto as características do gás de elétrons livres, Lindhard fez as seguintes considerações: i) o gás consiste de elétrons a temperatura zero (descrição por ondas planas); ii) a densidade inicial do gás é constante; iii) todas as partículas são não-relativísticas. No entanto, a hipótese básica na teoria é a consideração do efeito da partícula (íon) como uma pertubação ao estado do gás, de modo que a perda de energia é proporcional a  $Z_1^2$ . Neste caso, a teoria se reduz ao tratamento das propriedades do meio, onde uma descrição linear pode ser aplicada.

Dentro destas considerações, Lindhard et. al. calcularam o poder de freamento de um íon em gás de elétrons livres. Para um gás de densidade uniforme  $\rho_0$ , o poder de freamento pôde ser escrito como

$$\frac{dE}{dx} = \frac{Z_1^{*2} e^4}{m_e v^2} \rho_0 L(\rho_0, v)$$
(2.18)

onde  $L(\rho_0, v)$ , função de interação, é dado por

$$L(\rho_0, v) = \frac{i}{\pi\omega_0^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_{-kv}^{kv} \omega d\omega \left[\frac{1}{\epsilon^l(k,\omega)} - 1\right]$$
(2.19)

sendo  $\omega_0^2 = 4\pi e^2 \rho_0/m_e$  a frequência do plasma e  $\epsilon^l(k,\omega)$  a constante dielétrica longitudinal do gás eletrônico. A constante dielétrica é obtida por Lindhard partindo das equações de Maxwell, considerando um gás de elétrons degenerados e levando em conta considerações quânticas. Na referência [27], os autores desenvolveram uma expressão analítica para o cálculo da função de interação  $L(\rho_0, v)$ . A Fig. 2.4 apresenta o gráfico de  $L(\rho_0, v)$  em função da densidade do gás para três energias do íon incidente. Verifica-se que a função permanece praticamente constante para densidades do gás cuja velocidade de Fermi  $(v_F)$ é menor que a velocidade do íon incidente. Lembrando, a velocidade de Fermi é definido como

$$E_F = \frac{1}{2}m_e v_F^2 = \frac{h^2}{2m_e} \left(3\pi^2 \rho_0\right)^{2/3}$$
(2.20)

O modelo do gás de elétrons pode ser aplicado, por meio da aproximação de densidade local, para descrever o freamento de partículas na matéria. Em essência, a aproximação de densidade local supõe, em cada elemento de volume do sólido, um plasma independente com densidade igual a densidade eletrônica local. O freamento eletrônico é calculado somando-se a contribuição sobre todo volume do átomo do meio freador:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi N Z_1^{*2} Z_2 e^4}{m_e v^2} \int_0^\infty \rho(r) L(\rho, v) \, 4\pi r^2 dr \tag{2.21}$$

Para a densidade eletrônica do átomo  $(\rho(r))$ , Lindhard e colaboradores utilizaram o modelo de Thomas-Fermi. Verifica-se que a integral acima se reduz ao termo correspondente da expressão de Bethe para o freamento em altas velocidades, incluindo as correções de camadas. Na região de baixas velocidades, conclui-se que o poder de freamento é proporcional a velocidade do íon (v). A mesma conclusão foi obtida por Firsov [4] considerando um modelo geométrico para as colisões, tendo em conta a transferência de momento dos elétrons do íon que passam para o átomo freador e vice-versa. No entanto, para íons pesados, a proporcionalidade em v não permanece válida devido a determinação da carga



Figura 2.4: Cálculos da função de interação de Lindhard  $L(\rho_0, v)$  em função da densidade do plasmas para diferentes energias de recuo. A função é praticamente constante até o ponto em que a velocidade de Fermi do gás de elétrons se aproxima da velocidade do íon. Extraído de [28].

efetiva em função da velocidade de recuo.

Posteriormente, densidades eletrônicas do átomo baseado em Hartree-Fock (HF) foram aplicados a teoria de Lindhard. A Fig. 2.5 apresenta um comparativo entre a distribuição de carga no átomo de <sup>29</sup>Cu e o valor do integrando em (2.21) em função da variação espacial. No caso, observa-se que devido a consideração de uma estrutura cristalina, a densidade de carga não tende a zero para distâncias maiores. Sendo assim, a integração em (2.21) deve ser truncada em uma distância conveniente.

Uma comparação entre a previsão do modelo de Lindhard, aplicado a distribuições eletrônicas obtidas por HFS (Hartree-Fock-Slater), e as medidas experimentais é apresentado em [28]. Utilizando uma expressão empírica para a carga efetiva do íon, concluíram que para energias acima de 4 MeV/u.m.a. o erro máximo obtido entre teoria e experimento é em torno de 4%. Para energias menores, o erro máximo aumenta suavemente chegando a 30% para energias de recuo em torno de 100 keV/u.m.a.

Posteriormente, num cálculo semelhante e considerando o projétil também descrito pelo modelo de Thomas-Fermi, Lindhard [3] obteve uma expressão para o freamento em baixas velocidades que não depende da carga efetiva do íon. Neste caso, em sua expressão final, os autores utilizaram unidades reduzidas para a energia e distância ( $\epsilon \in \rho$  respectivamente),



Figura 2.5: Comparação da variação espacial entre a densidade de carga radial, calculado por HFS (Hartree-Fock-Slater) numa estrutura cristalina, a função de interação L e o integrando na eq. (2.21). Verifica-se que em baixas energias de recuo do íon (na figura, 100 KeV/u.m.a.) os elétrons mais externos do freador contribuem significativamente para o freamento.

conhecidos como unidades LSS e dados por

$$\epsilon = \frac{a_I A_2}{Z_1 Z_2 (A_1 + A_2)} E \tag{2.22}$$

$$\rho = 4\pi a_I^2 \frac{A_1 A_2}{(A_1 + A_2)^2} Nx \tag{2.23}$$

em que  $a_I = 0.885a_0(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$  é a distância de blindagem ( $a_0$  é o raio de Bohr) derivada por Lindhard com base no potencial de Thomas-Fermi. N é o número de átomos por unidade de volume e x a espessura do freador. Nestas unidades, a expressão para o freamento em baixas energias torna-se extremamente simples:

$$\frac{d\epsilon}{d\rho} = k_e \epsilon^{1/2} \tag{2.24}$$

 $\operatorname{com}$ 

$$k_e = 0,0793 \frac{Z_1^{2/3} Z_2^{1/2} (A_1 + A_2)^{3/2}}{A_1^{3/2} A_2^{1/2} \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{3/4}}$$
(2.25)

A expressão acima deixa de ser válida para  $v > Z_1^{2/3} v_0$ . A dependência teórica do freamento à baixas velocidades com a velocidade de recuo do íon torna-se clara nesta expressão. Experimentalmente, em determinadas combinações íon-átomo, a linearidade em v do poder de freamento não é observada [32]. Nestas regiões, o freamento depende dos detalhes da estrutura eletrônica tanto do íon incidente como dos átomos do meio.

### 2.3 Modelos Semi-empíricos

A previsão do freamento de um íon em um dado meio, com base nas teorias existentes, pode apresentar grandes incertezas em determinados casos. Por outro lado, cada vez mais são necessárias informações sobre o freamento de vários íons pesados em diversos meios, de forma que o número de combinações íon-meio possíveis é extremamente enorme para ser determinado experimentalmente.

Desde o início da década de 60 têm sido desenvolvidos métodos de correlação, guiados por expectativas teóricas, entre os dados experimentais existentes. Assim, métodos de interpolação e extrapolação para a previsão do freamento de diversos íons tornaram-se práticas comuns. Dos diversos métodos existentes destacam-se a compilação de dados desenvolvidos por Northcliffe e Schilling (NS) e Ziegler, Biersack e Littmark (ZBL).

#### 2.3.1 Northcliffe e Schilling (NS)

Northcliffe e Schilling, em 1970 [6], desenvolveram um método semi-empírico de interpolação e extrapolação dos dados experimentais disponíveis para regiões onde, até então, não havia nenhuma medida. A partir deste método, os autores publicaram tabelas para o freamento de vários íons ( $1 \le Z_1 \le 103$ ) em 24 meios distintos, inclusos meios sólidos e gasosos, para energias de recuo na região  $0,0125 \le E/A_1 \le 12 \text{MeV/u.m.a.}$ , distribuidas logaritmicamente.

A hipótese base para estes cálculos é que o poder de freamento relativo entre dois materiais, em uma dada velocidade, independe do íon incidente. Explicitamente, sejam os subscriptos  $a \in b$  denotando dois meios distintos e os subscriptos  $p \in q$  denotando diferentes íons. Supõe-se que, para mesma velocidade de recuo dos íons, temos

$$\left[\frac{(dE/dx)_{p,a}}{(dE/dx)_{p,b}}\right] = \left[\frac{(dE/dx)_{q,a}}{(dE/dx)_{q,b}}\right]$$
(2.26)

em que  $(dE/dx)_{p,a}$  denota o poder de freamento do meio *a* para o íon *p*, e assim correspondentemente.

Em acréscimo, considera-se que o poder de freamento relativo varia suavemente com  $Z_2$  e com a velocidade do íon, e que o poder de freamento de qualquer material varia suavemente com  $Z_1$  e com a velocidade do íon. A forma dessa variação é determinada a partir de medidas experimentais amparado pela teoria em regiões onde acredita-se ser válida.

Levando em conta as hipóteses do modelo, os autores construíram um conjunto de curvas do poder de freamento de vários íons em alumínio (Al), frequentemente considerado como meio freador padrão [29]. Assim, o freamento de qualquer íon em Al é determinado por interpolação do conjunto de curvas. Em seguida, desenvolveram o problema complementar com respeito a construção de um conjunto de curvas do poder de freamento de vários meios relativo ao do Al.

Pelas hipóteses, o modelo não apresenta os efeitos de oscilação do poder de freamento em função de  $Z_1$  e  $Z_2$ . Na referência [30], são comparadas as previsões das tabelas de NS com um amplo banco de dados de medidas do freamento. Para íons com 18  $< Z_1 <$ 36, na região de energias entre 0,01 - 0,1 MeV/u.m.a., a diferença média entre o modelo e os dados experimentais é de  $+4\%^5$  (com desvio padrão de 16%). Uma implementação de correções de camadas ao modelo de NS foi desenvolvido por D. Ward [31].

#### 2.3.2 Ziegler, Biersack e Littmark (ZBL)

No início da década de 80, Ziegler, Biersack e Littmark desenvolveram um modelo semiempírico para a previsão do freamento de íons com  $Z_1 \leq 92$  em qualquer meio (sólido ou gasoso) e em uma ampla região de energia do projétil (de 1 keV/u.m.a. a 2 GeV/u.m.a.) [2]. A base do modelo se concentra em determinar o freamento de um determinado íon em relação ao freamento do próton.

Para o freamento de próton (hidrogênio) os autores elaboraram curvas empíricas de ajuste dos dados experimentais disponíveis. Esses ajustes foram interpolados e extrapolados para cobrir meios e/ou energia onde não se despunham de medidas experimentais. O freamento de íons de He é determinado com base nas curvas de ajuste do freamento de protons com a aplicação de uma carga efetiva conveniente. Em ambos os casos, para baixa energias o modelo leva em conta a linearidade do freamento em função da velocidade de recuo do projétil.

 $<sup>^{5}</sup>$ O sinal positivo indica que em média o modelo sobrestima os dados experimentais.

Para o freamento de íons pesados, os autores consideraram 3 regiões de análise distintas da velocidade do íon (v): i) v > 200 kev/u.m.a.; ii) v < 25 keV/u.m.a. e iii) 25 < v < 200 keV/u.m.a.

Na primeira região (v > 200 keV/u.m.a.) o poder de freamento de íons pesado  $(dE/dx_{HI})$  é relacionado com o equivalente poder de freamento do próton  $(dE/dx_H)$  através do quadrado da carga efetiva do íon pesado  $(Z_1^*)$ :

$$dE/dx_{HI} = dE/dx_H Z_{HI}^{*^2} = dE/dx_H Z_{HI}^2 \gamma^2$$
(2.27)

onde  $\gamma = Z_{HI}^*/Z_{HI}$  é a carga efetiva fracional que possue valores entre 0 e 1. Os valores de  $dE/dx_{HI}$  e  $dE/dx_H$  são tomados para o mesmo meio e velocidade do íon.

Na região de muito baixas velocidades (v < 25 keV/u.m.a.) a velocidade dos elétrons do meio são, em geral, maiores que a velocidade de deslocamento do íon, assim a maioria das colisões são adiabáticas. Diversos trabalhos voltados para o freamento em baixas velocidades, por exemplo a teoria LSS, têem demonstrado que o freamento apresenta uma depedência linear com a velocidade do íon. Essa dependência tem sido confirmada experimentalmente para várias combinações íon-meio. No entanto, existem casos em que essa proporcionalidade não é válida. Em particular, para meios semicondutores com Si e Ge, o extensivo conjunto de dados experimentais tem verificado que nestes meios o freamento é proporcional a  $v^{0,7}$ . Desta observação entende-se que o gap entre as bandas de valência e condução do semicondutor reduz o número de estados possíveis de serem excitados, diminuindo o freamento de íons nesses meios. Comportamento similar é observado em alvos de Carbono, com  $dE/dx \propto v^{0,7}$ . Mas neste último caso, as impurezas provenientes do processo de confecção desse alvos não deixa clara a confiabilidade dessa análise. De fato, outras medidas também mostram desvios da linearidade [32]. Levando em conta as peculariedades, o modelo ZBL supõe a dependência linear do freamento com a velocidade para  $v < v_0$ , exceto para combinações envolvendo íons com  $Z_1 \leq 19$  em meios de C, Si e Ge, onde a dependência  $v^{0,75}$  é empregada

Uma análise cuidadosa do freamento na região intermediária (25 < v < 200 keV/u.m.a.) foi desenvolvida pelos autores no sentido de interligar as duas regiões anteriores. Para o freamento nesta região, basearam-se na teoria de Brandt e Kitagawa (BK) [33]. A hipótese básica diz respeito ao estado de carga do íon. Ao contrário da descrição de Bohr, a teoria BK supõe que os elétrons a serem arrancados do íon são aqueles cujas velocidades orbitais são menores que a velocidade relativa do íon com os elétrons do meio. Utilizando o modelo



Figura 2.6: Comparativa da previsão da oscilação no poder de freamento eletrônico de Au em função do número atômico do íon  $(Z_1)$  para velocidade equivalente a 0,0125 KeV/u.m.a.. Conforme discutido, o modelo NS não apresenta nenhuma oscilação.

de Thomas-Fermi, a velocidade relativa do íon  $(v_r)$  é

$$v_r = v \left(1 + 0, 2v_F^2/v^2\right) \qquad \text{para} \quad v > v_F v_r = 0,75v_F \left(1 + 2v^2/3v_F^2 - v^4/15v_F^4\right) \qquad \text{para} \quad v < v_F$$
(2.28)

Ziegler et. al. relacionaram o grau de ionização (q) do íon incidente em função de sua velocidade relativa. A expressão semi-empírica obtida foi

$$q = 1 - exp\left(0,803v_r^{*^{0,3}} - 1,317v_r^{*^{0,6}} - 0,382v_r^* - 0,009v_r^{*^2}\right)$$
(2.29)

sendo  $vv_r^* = v_r/v_0 Z_1^{2/3}$ . Uma vez determinado o estado de carga do íon, a teoria de BK estabelece a distribuição eletrônica do íon em função do grau de ionização. Essa distribuição é relacionada com o comprimento de blindagem do projétil ( $\Lambda$ ), expresso em função do número atômico do íon e de seu grau de ionização,

$$\Lambda = \frac{2a_0 \left(1-q\right)^{2/3}}{Z_1^{1/3} \left(1-\frac{1-q}{7}\right)}$$
(2.30)

em que  $a_0$  é o raio de Bohr. Por final, considerando colisões próximas e distantes, a teoria

BK fornece uma expressão simples para a carga efetiva do íon na matéria.

$$\gamma = q + C(1 - q) ln \left[ 1 + (2\Lambda v_F / a_0 v)^2 \right]$$
(2.31)

onde C é uma quantidade próxima a 1/2. Ziegler, Biersack e Littmark analisaram expressão com base nos dados experimentais verificando que o melhor ajuste obtido correspondia a  $C \approx (v/v_F)^2/2$ . A partir da carga efetiva, o poder de freamento de ZBL é dado por (2.27).

Para o cálculo do poder de freamento no modelo ZBL, os autores disponibilizam o programa SRIM [7]. O banco de dados do programa é continuamente atualizado de modo que distintas versões do programa podem fornecer valores diferentes do freamento. O modelo ZBL consegue reproduzir razoavelmente as oscilações do poder de freamento em função de  $Z_1$  e  $Z_2$ .

#### 2.4 Teorias Recentes

Nos últimos anos, novas teorias, visando cobrir o amplo espaço íon-átomo-energias, têem sido desenvolvidas. Dessas, destacam-se a *Teoria Binária* [35, 34] e a *Aproximação de Con-volução Unitária* (UCA - Unitary Convolution Approximation) [36, 37]. No entanto, até o momento, essas teorias carecem de uma ampla comparação com os dados experimentais existentes, principalmente para íons pesado à baixas energias, de forma que nesta seção somente serão delineadas as principais características dessas duas teorias.

A Teoria Binária se basea na teoria de Bohr, utilizando uma abordagem clássica do processo e evitando o uso da teoria de pertubações. Enquanto Bohr considerou o potencial Coulombiano para a interação íon-elétron do meio, a teoria considera colisões binária entre o projétil e elétrons livres governada por um potencial efetivo, composto por um termo Coulombiano adicionado termo exponencial, simulando o efeito de ligação dos elétrons aos átomos e sendo aplicado igualmente à íons nús e blindados. A forma do potencial efetivo depende das frequências de ligação características dos elétrons atômicos em cada camada. Os valores dessas frequências são obtidos a partir de propriedades ópticas tabeladas. Nesse formalismo não há necessidade em fazer distinção entre colisões próximas e distantes e o uso da teoria de pertubação é evitado. Os autores apresentam uma extensão da teoria em que correções de camadas, correções quânticas e a excitação e ionização do projétil são incluídos.

A Aproximação de Convolução Unitária (UCA) é uma extensão da Aproximação de Convolução Pertubativa (PCA - Pertubative Convolution Approximation). Em ambas,

para o cálculo da perda de energia devido a ionização e excitação dos átomos do meio considera-se as amplitudes para cada transição eletrônica atômica desde seu estado fundamental. Na descrição da colisão íon-elétron, são considerados 3 regiões de parâmetros de impacto. Em geral, a solução numérica do problema requer um enorme esforço computacional sendo, portanto, necessário o uso tratamento pertubativo para a redução nos cálculos (PCA), sendo válida para altas energias do íon. No entanto, na teoria de perturbação de  $1^a$  ordem, as probabilidades de ionização para um certo parâmero de impacto podem exceder a unidade. A Aproximação de Convolução Unitária foi desenvolvida com base no tratamento de Bloch para o freamento [12], em que cada componente de momento do estado inicial leva a uma distribuição de momento do estado final cuja soma é sempre igual à unidade no referencial do projétil.

Para cálculos do freamento eletrônico da UCA, os autores disponibilizam o programa CASP (Convolution Approximation for Swift Particles) [38]. Para a teoria Binária o autor está desenvolvendo o programa para uso público.
## Capítulo 3

## Teorias do Freamento Nuclear

"Você não pode provar uma definição. O que você pode fazer é mostrar que ela faz sentido." traduzido de Albert Einstein

Para íons a baixas energias, i.e. velocidades menores que  $v_0 Z_1^{2/3}$ , o freamento nuclear torna-se relevante e excede o freamento eletrônico para velocidades menores que  $v_0$ . O freamento nuclear é compreendido como a perda de energia através de colisões elásticas íon-átomo. Sua descrição, em essência, consiste em tratar o problema de colisões devido a um potencial repulsivo entre as partículas participantes. Diferentemente do caso de colisões entre núcleos atômicos (espalhamento Rutherford), para o íon, seus elétrons atuam como blindagem, reduzindo a ação do campo Coulombiano do núcleo, produzindo um potencial efetivo. Similarmente deve-se considerar esse efeito para os átomos do meio, e a colisão a ser analisada é o de dois núcleos blindados pelos seus respectivos elétrons atômicos.

A interação íon-átomo é descrita por *potenciais interatômicos*. De modo geral, devido a sua aplicabilidade universal, i.e., que permite sua aplicação a qualquer combinação íonátomo, são vastamente explorados os potenciais estatísticos como os de Thomas-Fermi, de Moliére e o de Lenz-Jensen. Em geral, esses potenciais podem ser descritos como um termo coulombiano multiplicado por uma função de blindagem  $\Psi(r)$ .

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Psi(r)$$
(3.1)

A energia transferida  $T(\theta,p)$  do íon para átomo é calculada classicamente em função

do ângulo de espalhamento  $\theta$  do íon e do parâmetro de impacto p da colisão. O potencial interatômico é levado em conta para calcular as equações de trajetória da colisão. A partir destas informações, a seção de choque de freamento nuclear  $S_n$ , que é a energia média transferida quando somado para todos os paramêtros de impacto, é dada por:

$$S_n = \int_0^\infty T(\theta, p) 2\pi p dp \tag{3.2}$$

A energia transferida deve possuir as seguintes propriedades para manter a convergência da seção de choque: i) para altos parâmetros de impacto, deve tender a zero e ii) em colisões frontais, deve possuir um valor máximo de energia transferida, correspondendo a uma distância de máxima aproximação.

### 3.1 Equações Básicas do Freamento Nuclear

Torna-se conveniente relembrar algumas das equações assintóticas de colisões elásticas envolvendo sistemas binários. Em particular, o interesse se concentra em explicitar a energia cinética transferida do íon para o átomo em função do ângulo de espalhamento. Desde que a conservação de energia e momento sejam válidos, independente do tipo de potencial que rege a interação entre dois átomos, para um íon de massa  $m_1$  incidindo com velocidade v em um átomo de  $m_2$  em repouso (ver Fig. 3.1a), temos

$$\frac{1}{2}m_1v^2 = \frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2 \tag{3.3}$$

$$m_1 v = m_1 v_1 cos\theta + m_2 v_2 cos\phi \tag{3.4}$$

$$m_1 v_1 sen\theta = m_2 v_2 sen\phi \tag{3.5}$$

As equações acima correspondem ao sistema no referencial do laboratório. Entretanto, tornar-se mais vantajoso descrever a colisão no referencial do centro de massa, em que o momento total é nulo e o movimento de duas partículas pode ser reduzido ao movimento de uma única partícula sob ação de um potencial central. A Fig. 3.1b ilustra a mesma colisão no referencial do centro de massa. A velocidade do centro de massa é dada por

$$v_{cm} = \frac{m_1 v}{m_1 + m_2} \tag{3.6}$$



Figura 3.1: Esquema da colisão elástica entre duas partículas no referencial do centro de massa (a); e no referencial do centro de massa (b). Reprodução de [2]

Os ângulos  $\phi_{cm}$ ,  $\theta_{cm} \in \phi$  satisfazem a seguinte relação:

$$\phi_{cm} = (\pi - \theta_{cm}) = 2\phi \tag{3.7}$$

A energia transferida T pelo íon é igual a energia do átomo em recuo após a colisão. É possível deduzir a quantidade de energia perdida como função do ângulo de recuo do átomo no referencial do laboratório,

$$T \equiv \frac{1}{2}m_2v_2^2 = \frac{2}{m_2} \left(\frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}v\cos\phi\right)^2$$
(3.8)

Será útil reescrever a expressão acima em função do ângulo de espalhamento do íon no centro de massa. Com o uso de (3.7)

$$T = \frac{2}{m_2} \left( \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} vsen \frac{\theta_{cm}}{2} \right)^2 = T_m sen^2 \frac{\theta_{cm}}{2}$$
(3.9)

onde  $T_m$  é a máxima energia transferida numa colisão. A equação (3.9) é aplicável para o cálculo do poder de freamento, determinando a perda de energia do íon em função do ângulo de espalhamento durante a colisão com o átomo.

#### 3.1.1 Espalhamento por um Potencial Central

Para obter a seção de choque de freamento nuclear é necessário conhecer a probabilidade de espalhamento do íon para cada ângulo em função do parâmetro de impacto. Esta probabilidade é obtida calculando os detalhes da colisão, com o uso de um potencial interatômico. O problema fica simples se supormos que o potencial de interação íon-átomo é radial. Com essa hipótese podemos reduzir o problema de dois corpos para o de um se considerarmos o referencial do centro de massa.

O cálculo das trajetórias de espalhamento do íon é facilitada com o uso de coordenadas polares. Então, por conservação de energia, temos para o sistema

$$E_{cm} = \frac{1}{2} \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \left( \dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}_{cm}^2 \right) + V(r)$$
(3.10)

em que  $E_{cm}$  é a energia do centro de massa. Apelando para as equações de Lagrange, verifica-se que o momento angular  $J_c = [m_1 m_2/(m_1 + m_2)] r^2 \dot{\theta}_{cm}$  é uma constante de movimento do sistema. A partir da Fig. 3.1, o momento angular pode ser escrito como  $J_c = \left[m_1 m_2 / \left(m_1 + m_2\right)\right] v p,$  combinando ambas as expressões para o momento angular do sistema

$$\dot{\theta} = \frac{vp}{r^2} \tag{3.11}$$

Substituindo (3.11) em (3.10) e colocando a coordenada radial em evidência, escrevemos a seguinte equação radial

$$\dot{r} = v \left[ 1 - \frac{V(r)}{E_{cm}} - \left(\frac{p}{r}\right)^2 \right]^{1/2}$$
(3.12)

Utilizando a regra da cadeia e combinando (3.12) e (3.11)

$$\frac{d\theta_{cm}}{dr} = \frac{d\theta_{cm}}{dt}\frac{dt}{dr} = \frac{\dot{\theta_{cm}}}{\dot{r}} = \frac{p}{r^2 \left[1 - \frac{V(r)}{E_{cm}} - \frac{p^2}{r^2}\right]^{1/2}}$$
(3.13)

e integrando sobre r ao longo de toda a trajetória do íon, temos

$$\theta_{cm} = \pi - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{p}{r^2} \left[ 1 - \frac{V(r)}{E_{cm}} - \frac{p^2}{r^2} \right]^{-1/2} dr$$
(3.14)

A equação acima permite-nos calcular a direção final de espalhamento em função da energia do centro de massa, do potencial interatômico e do parâmetro de impacto da colisão. O valor de  $\theta_{cm}$  obtido por (3.14) deve ser levado em conta em (3.9) e implicitamente na integral em p da eq. (3.2).

#### 3.1.2 Potenciais Interatômicos

O potencial da interação ion-átomo é a resultante de um soma de contribuições. Seguindo a sugestão em [2], o potencial de interação V(r) pode ser descrito como

$$V(r) = V_{nn} + V_{en} + V_{ee} + V_k + V_a$$
(3.15)

onde  $V_{nn}$  é o potencial eletrostático entre os dois núcleos,  $V_{en}$  é o potencial de interação de cada núcleo com o elétron do outro átomo e  $V_{ee}$  é o potencial devido a interação do elétron de um átomo com o elétron do outro. Quando uma nuvem eletrônica sobrepõe-se a outra, aumentando a densidade eletrônica local, o princípio de Pauli impõe a excitação de parte desses elétrons a outros níveis. O termo  $V_k$  representa o aumento na energia cinética destes elétrons excitados e  $V_a$  corresponde a uma energia de troca na região de sobreposição.

Para o cálculo de cada um dos termos da expressão (3.15) é necessário conhecer a

distribuição de carga em ambos os átomos. Felizmente, o cálculo do potencial (3.15) já foi realizado para vários tipos distintos de distribuição. Destes, os potenciais interatômicos mais utilizados são os de Thomas-Fermi, Lenz-Jensen e Moliére. Antes, é interessante definir o parâmetro adimensional raio reduzido ( $\chi$ ) como:

$$\chi = \frac{r}{a_I} \tag{3.16}$$

em que  $a_I$  é o raio de blindagem interatômica. Utilizando o modelo atômico de Thomas-Fermi, Lindhard [14] sugeriu a seguinte forma para o raio de blindagem interatômica:

$$a_I = \frac{0.8853 a_0}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3}\right)^{1/2}}$$
(3.17)

com  $a_0$  sendo o raio de Bohr. Com a utilização do parâmetro  $\chi$ , o potencial interatômico de Thomas-Fermi (com dispersão em torno de 5%) praticamente independe dos números atômicos do íon e do átomo em consideração. Na Fig. 3.2 são apresentados a forma das funções de blindagem para os 3 potenciais interatômicos acima considerados em função do raio de blindagem.

Até aqui foram apresentadas as equações básicas para o cálculo da seção de choque do freamento nuclear. Toda a física do processo de colisão íon-átomo concentra-se no potencial interatômico, a partir do qual calcula-se as integrais (3.14) e (3.2). No entanto, o simples cálculo dessas integrais para um evento não produz um resultado mensurável. Numa situação real, o íon colide com mais de um átomo ao atravessar um freador. Assim, o freamento é um processo estatístico, em que a grandeza de interesse é a quantidade média de energia transferida ao longo de várias colisões. Apesar desses potenciais interatômicos possuírem um simples parâmetro de escala para outros átomos, é interessante obter alguma expressão simples que forneça diretamente o freamento nuclear para diferentes pares íonátomo.

Um potencial interatômico mais refinado pode ser obtido com base no método de Hartree-Fock. Neste método, o potencial é derivado de forma auto-consistente, levando-se em conta as interações entre os elétrons dos átomos. Para problemas de muitos elétrons, o potencial é derivado numericamente e, sem dúvida, uma expressão que forneça diretamente o freamento nuclear com base neste tipo de potencial é bastante útil.



Figura 3.2: Função de Blindagem em função do raio reduzido para os 3 potenciais considerados. As funções diferem pouco para os elétrons mais internos. A forma da blindagem, quando expressa em função do raio reduzido, difere pouco para os distintos pares íonátomo. As expressões analíticas para as distintas funções de blindagem são apresentadas em [2].

## 3.2 Descrição de Lindhard, Scharff e Schiott (LSS)

Para o cálculo das trajetórias da colisão elástica íon-átomo é necessário conhecer o potencial interatômico. Uma vez conhecido o potencial, o ângulo de espalhamento do íon no referencial do centro de massa - eq. 3.14 - torna-se uma função de 5 variáveis,  $\theta_{cm} = \theta_{cm}(Z_1, Z_2, v, \mu, p)$ , onde  $\mu$  é a massa reduzida do sistema. Sendo o potencial interatômico estático, que dependa apenas de  $Z_1$ ,  $Z_2$  e da distância r entre as partículas, a dependência de  $\theta_{cm}$  se reduz a 4 variáveis, em que  $v \in \mu$  são combinados em uma única variável,  $\mu v^2$ . Uma redução a mais na equação em  $\theta_{cm}$  é obtida aplicando um tratamento ao potencial de Thomas-Fermi, em que é introduzida uma constante apropriada (distância de blindagem  $a_I$  - ver eq. 3.17).

Lindhard e colaboradores [14] procuraram descrever as colisões entre íons e átomos em termos das similaridades no freamento de diversos pares íon-átomo. Tais similaridades fazem com que o ângulo de espalhamento seja função apenas de duas variáveis,  $\theta_{cm} = \theta_{cm}(\epsilon, p/a_I)$ . Na tentativa de obter uma expressão com o menor número possível de varíaveis independentes, Lindhard et. al. analisaram o problema com base num tratamento perturbativo através do qual, o ângulo de espalhamento do íon é função de um único parâmetro, denominada pelos autores de parâmetro "t", suficiente para descrever o processo de colisão para qualquer caso de íon-átomo. Esse parâmetro t é dado por

$$t = \epsilon^2 sen^2 \left(\frac{\theta_{cm}}{2}\right) \tag{3.18}$$

em que  $\epsilon$  é denominado de energia reduzida de LSS - definido na eq. 2.22. De forma concisa, a eq. 3.18 reproduz as propriedades gerais de colisões íon-átomo: valores pequenos de t ocorrem ou quando a energia do íon é baixa ou o ângulo de espalhamento é pequeno, implicando em colisões periféricas. Alternativamente, colisões próximas ocorrem para energias ou ângulos elevados.

Na aproximação de Lindhard, a seção de choque diferencial do freamento nuclear, i.e. equivalente a  $d\sigma = 2\pi p dp$  na expressão (3.2), é

$$d\sigma = \frac{\pi a_I^2 f(t^{1/2})}{2t^{3/2}} dt \tag{3.19}$$

A função  $f(t^{1/2})$  é determinada, por meio de métodos numéricos, a partir do potencial interatômicos a ser aplicado. Lindhard utilizou a teoria aplicada ao potencial de Thomas-Fermi, obtendo a  $f(t^{1/2})$  correspondente. Para interesses computacionais, esta função pode ser aproximada pela seguinte função analítica [39] (vide Fig. 3.3):

$$f(t^{1/2}) \equiv f(x) = \frac{1,309x^{1/3}}{\left[1 + (2,618x^{4/3})^{2/3}\right]^{3/2}}$$
(3.20)

A partir da seção de choque diferencial (eq. 3.19), a seção de choque do freamento nuclear é dado por

$$S_n = \int T d\sigma = T_m \int sen^2\left(\frac{\theta}{2}\right) d\sigma \tag{3.21}$$

onde  $T_m$  é a energia máxima transferida (ver eq. 3.9). Utilizando as unidades reduzidas de LSS, definidas pelas eqs. (2.22) e (2.23), Lindhard introduziu a seção de choque reduzida do freamento nuclear  $s_n(\epsilon)$ , que se relaciona com a seção de choque  $S_n$  através de

$$s_n(\epsilon) = S_n(E) \frac{\epsilon}{E} \frac{x}{\rho}$$
(3.22)

Combinando (3.18) e (3.19) em (3.21), a seção de choque reduzida é, então, dada por



Figura 3.3: Gráfico  $f(t^{1/2})$  vs.  $t^{1/2}$  para o potencial de Thomas-Fermi. Nestas coordenadas a função é universal, i.e. não dependem dos íon e/ou átomos envolvidos na colisão. Os pontos correspondem ao cálculo númerico obtido em [14]. A curva representa a função analítica (3.20).

$$s_n(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon} \int_0^{\epsilon^2} \frac{dt}{2t^{1/2}} f(t^{1/2})$$
(3.23)

Na referência [40] o autor desenvolveu uma expressão analítica para o cálculo do poder de freamento nuclear nas unidades LSS. A expressão obtida segue abaixo:

$$\frac{d\epsilon}{d\rho} = Ns_n(\epsilon) = \begin{cases} 0,611e^{\left(-\epsilon^{-1/2}/1,919\right)} \left[1 - e^{\left(-\epsilon^{-1/2}/0,2406\right)}\right] & \epsilon \le 2,4\\ 0,5\epsilon \left[0,3 + \ln\left(\frac{0,6+\epsilon^2}{\epsilon}\right)\right] & \epsilon > 2,4 \end{cases}$$
(3.24)

Nas unidades reduzidas de LSS, o poder de freamento independe do íon e do átomo que compõe o meio freador. Essa universalidade permite rapidamente, através das conversões das variáveis de LSS, o cálculo de freamento nuclear de qualquer íon para qualquer meio. No entanto, a universalidade do freamento nuclear nestas unidades, não tem sido comprovada experimentalmente, conforme demonstra a Fig. 3.4.



Figura 3.4: Poder de freamento nuclear em unidades reduzidas LSS. Nestas unidades, a curva do freamento na descrição LSS (linha cheia) é tida como universal e dada pela equação (3.24). No entanto, os dados experimentais não comprovam esta universalidade. Extraído de [5].

## 3.3 Descrição de Ziegler, Biersack e Littmark (ZBL)

Uma descrição mais realística para o potencial interatômico é obtido em termos de potenciais do tipo Hartree-Fock. Contudo, assim como na teoria LSS, é conveniente desenvolver, baseado no potencial Hartree-Fock, uma expressão geral para o freamento nuclear, permitindo rápida aplicação aos cálculos de freamentos nucleares. Essa expressão foi desenvolvida por Ziegler, Biersack e Littmark [2] ao longo da década de 80. O modelo (semi-empírico) é comumente denominado de ZBL.

Inicialmente, dentre as amplas possíveis combinações, os autores aleatoriamente escolheram um grupo de potencial interatômicos representativos do amplo conjunto de possíveis combinações ( $\approx 80 \times 80$ ). Ao todo, foram selecionados 261 pares íon-átomo, em que pela simetria das colisões, representam 516 combinações. A função de blindagem de cada um desses potenciais interatômicos individuais foram ajustados através da seguinte expressão:

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^{3} a_i \exp(-b_i x)$$
(3.25)



Figura 3.5: Gráficos das funções de blindagem de diferentes combinações íons-átomos calculados potenciais interatômicos derivados de Hartree-Fock, situando-se entre as curvas de Lenz-Jensen e Thomas-Fermi. Observa-se claramente que, com a utilização de parâmetro de blindagem apropriado, a dispersão nas funções reduzem-se para  $\chi < 20$ .

novamente com  $x = r/a_I$  e impondo a seguinte condição:

$$\sum_{i=1}^{3} a_i = 1 \tag{3.26}$$

A utilização do parâmetro de blindagem  $a_I$  faz com que as diferentes funções de blindagens se ajustem próximas uma das outras. Ziegler et. al. obtiveram empiricamente um parâmetro de blindagem  $a_u$  que produz um efeito mais eficiente (Fig. 3.5). A partir deste último, as curvas se concentram de modo mais agrupado, com dispersão em torno de 5%. O fator de escala  $a_u$ , que foi denominado pelos autores de comprimento de blindagem universal, é

$$a_u = \frac{0,8854.a_0}{(Z_1^{0.23} + Z_2^{0.23})} \tag{3.27}$$

As distintas funções, através da utilização do parâmetro acima, foram ajustadas obtendo um função de blindagem média ou *Potencial Universal* de acordo com os autores:

$$\Phi_u(x) = 0,1818e^{-3,20x} + 0,5099e^{-0,94x} + 0,2802e^{-0,40x} + 0,0282e^{-0,20x}$$
(3.28)

Similarmente a descrição LSS, pode-se derivar a função  $f(t^{1/2})$  para o potencial univer-

sal de ZBL, dado por:

$$f(t^{1/2}) \equiv f(x) = \frac{\ln A}{2B} + \frac{1,138x}{2AB} - \frac{x \ln A \left[1+0,003 \, x^{-0,788}+0,196/2 \, x^{1/2}\right]}{2B^2} \tag{3.29}$$

com A = (1 + 1, 138 x) e  $B = [x + 0, 013 x^{0,212} + 0, 196 x^{1/2}].$ 

A partir do potencial universal, (3.2), (3.9) e (3.14) calcula-se o freamento nuclear da colisão íon-átomo descrito por potencial interatômico de Hartree-Fock. Para cálculos práticos, o freamento nuclear de Ziegler é dado por

$$S_n(E) = \frac{8.462 \times 10^{-15} Z_1 Z_2 m_1 s_n(\epsilon)}{(m_1 + m_2)(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})}$$
(3.30)

em unidades de eV/átomo/cm² e com  $\epsilon$ sendo a energia reduzida calculada como

$$\epsilon = \frac{32,53m_2E}{Z_1Z_2(m_1 + m_2)(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})}$$
(3.31)

e  $s_n(\epsilon)$  a seção de choque de freamento reduzida, calculada por

$$s_n(\epsilon) = \begin{cases} \frac{ln(1+1,1383\epsilon)}{2(\epsilon+0,013\epsilon^{0,212}+0,196\epsilon^{0,5})} & para \ \epsilon \le 30\\ \frac{ln(\epsilon)}{2\epsilon} & para \ \epsilon > 30 \end{cases}$$
(3.32)

## Capítulo 4

## Técnicas e Equipamentos

"São fúteis e cheias de erros as ciências que não nasceram da experimentação, mãe de todo do conhecimento." traduzido de Leonardo da Vinci.

"The best way to get a good idea is to get a lot of ideas" Linus Pauling.

Neste capítulo será apresentado a técnica e o arranjo experimental utilizado para as medidas do poder de freamento obtidas nesta dissertação.

## 4.1 Métodos Experimentais

Existem vários métodos distintos para se medir o poder de freamento de um meio. Em geral, se a espessura do freador for suficientemente fina, a seguinte aproximação diferencial para o poder de freamento é válida:

$$\frac{dE(\overline{E})}{dx} \approx \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{E_{sem} - E_{com}}{\Delta x}$$
(4.1)

onde  $E_{sem}$  e  $E_{com}$  são as energias do feixe de íons medidas sem e com o freador e  $\Delta x$  a espessura do freador. A razão é tomada como o poder de freamento no valor médio das energias.

Quanto à determinação da perda de energia, essencialmente os métodos se dividem em duas categorias. Na primeira, conhecido como método direto ou de transmissão de feixe,



Figura 4.1: Arranjo experimental para medidas de freamento utilizando o feixe espalhado elasticamente por um alvo fino de Ouro. detectores em ângulos distintos medem energias distintas. A medida com e sem o freador é realizada simultaneamente devido ao suporte parcialmente coberto pelo freador e posicionado a frente do detector. Extraído de [41].

prepara-se um filme fino do freador. A partir da medida da perda de energia do feixe de íons ao atravessar um alvo, determina-se o poder de freamento. A segunda classe é composta por métodos em que faz-se a medida de uma quantidade física relacionada de forma previsível com a perda de energia no freador de interesse, como por exemplo as técnicas de Deslocamento Doppler e Atenuação do Deslocamento Doppler de raios  $\gamma$ . De modo geral, as medidas de perda de energia são obtidos com incertezas entre 2-5%.

Em relação à medida da espessura de alvos freadores, são utilizados dois métodos. No primeiro, a espessura do alvo é determinada pela razão de sua massa, medido em uma balança de precisão, e a área do alvo. O segundo método, baseado na eq. (4.1), corresponde à determinar a espessura medindo-se a perda de energia de um íon leve (em geral partículas alfas) com energia de recuo tal que o poder de freamento seja bem conhecido para o freador em particular. Em ambos os métodos a incerteza na espessura média do freador é em torno de 4%.

#### 4.1.1 Algumas Técnicas

Uma técnica bastante utilizada em medidas do poder de freamento é a ilustrada na Fig. 4.1. Nesse arranjo, um feixe de íons energético é espalhado por um alvo fino de Au. Um conjunto de detectores é posicionado após o espalhador de Au em ângulos bem conhecidos de modo que a energia do feixe espalhado na direção de cada um dos detectores pode ser calculada em função do ângulo de espalhamento. O arranjo de cada detector é apresentado em detalhe na figura, onde o filme fino do material freador de interesse é posicionado cobrindo metade do seu suporte (configuração de "meia-lua"). A vantagem desta técnica é a medida da perda de energia do feixe espalhado em vários meios e energias simultaneamente utilizando-se de vários detectores em diversos ângulos. Num espectro típico de um desses detectores são observados dois picos de energia, correspondendo ao feixe que atravessou a região sem e com freador respectivamente. Em geral, o método é utilizado para medidas em energias acima de 1 MeV/u.m.a.. Dados obtidos com essa técnica tem em geral incertezas da ordem de 4% em  $\Delta E$ .

Técnicas baseadas em RBS também podem ser aplicadas para medidas do freamento de íons em alvos sólidos [42, 43]. Em geral, a técnica consiste em detectar o retro-espalhamento elástico de íons incidindo num substrato sobre o qual um filme fino do material freador é posteriormente depositado. A perda de energia é determinada a partir da energia do íon incidente retro-espalhado na superfície do substrato sem e com o filme freador.

Recentemente, tem sido desenvolvido técnicas que permitem a medida da perda de energia numa ampla região de energias simultaneamente [44, 45]. À parte das diferentes configurações, essas técnicas utilizam um feixe incidindo num substrato, a partir do qual íons do feixe retro-espalhados no substrato (RBS) ou átomos do substrato em recuo (ERDA) são utilizados como fonte de íons secundários com larga distribuição em energia. Em medidas numa ampla faixa de energias, uma das principais precauções é quanto a não-linearidade de detectores de Barreira de Superfície. Os distintos arranjos baseados nessas técnicas fornecem incertezas entre 2-5% em  $\Delta E$ .

Por final, como ilustração de métodos indiretos podemos citar a técnica de Atenuação do Deslocamento Doppler Inverso (IDSA) [46, 47] que é frequentemente utilizado para medidas do poder de freamento em baixas energias devido às velocidades características de recuo do núcleo excitado. O método é basicamente a situação inversa da técnica DSAM<sup>1</sup>, utilizado para medidas de vidas médias de estados nucleares. Assim, conhecendo-se a vidamédia de um dado estado nuclear, através da atenuação do efeito Doppler observado no espectro de raios  $\gamma$  determina-se o dE/dx. Diferentemente das demais técnicas abordadas anteriormente, não é necessário conhecer a espessura do freador desde que seja espesso o suficiente para frear completamente o íon em recuo. As incertezas no poder de freamento

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Ver seção 1.3.

obtidos por esse método são ~ 5%. Os resultados obtidos com essa técnica para algumas combinações íon-freador tem se apresentado incompatíveis com resultados obtidos por meio de outras técnicas, conforme discutido em [48], possivelmente devido a incerteza na determinação da meia-vidas de estados nucleares em particular.

#### Técnicas para Baixas Velocidades

A escassez de dados experimentais para certos tipos íons pesados deve-se principalmente a dificuldade na produção direta do feixe desses íons em condições para serem injetados num acelerador de partículas. Para estas situações torna-se necessário o desenvolvimento de métodos alternativos de produção indireta desses feixes. Em acréscimo, especial atenção deve ser dada quanto ao uso de detectores de Barreira de Superfície para medidas envolvendo íons pesados em baixas velocidades. No processo de confecção de detectores de Si uma fina camada de Au é depositado sobre a superfície do cristal de Si. Essa camada de Au é referida como zona morta do detector, em que a produção de carga devido a passagem de uma partícula não é coletada pelo detector, perdendo parte da informação com respeito a energia da partícula incidente. Em particular, no caso de um íon pesado à baixas velocidades, a partícula perderá uma quantidade relevante de sua energia na zona morta e o pulso gerado pelo detector corresponderá a energia de recuo menos a energia perdida fora da região de detecção. Em acréscimo, o processo de perda de energia por colisões elásticas entre o íon pesado incidente e os átomos que compõem o cristal de Si (freamento nuclear) geram danos estruturais que a longo prazo podem danificar o detector.

Além da técnica de IDSA, uma outra técnica utilizada para medidas envolvendo íons pesados em baixas velocidades é a do Deslocamento Doppler (DD) [49, 32]. A técnica consiste na determinação da velocidade de recuo de um íon, cujo núcleo encontra-se num estado excitado, pela observação do efeito Doppler na energia do raio  $\gamma$  emitido no decaimento nuclear. Nessa técnica, núcleos excitados com velocidade média v em recuo são produzidos por excitação Coulombiana bombardeando-se o alvo com feixe de íons, como visto na Fig. 4.2. Um sistema de coincidências  $\gamma$ -partículas espalhados próximo a 180° permite selecionar íons provenientes do alvo recuando em torno da direção 0°. Após o alvo é posicionado o freador de modo que os núcleos excitados em recuo nessa direção podem decair antes ou depois de atravessar o freador. Escolhendo-se a distância d convenientemente (que depende do tempo de vida do estado nuclear excitado), pode-se conseguir com que aproximadamente metade dos núcleos decaiam antes e o restante após atravessar o freador. No espectro de energia dos raios  $\gamma$  em coincidência com as partículas do feixe



Figura 4.2: Arranjo experimental para a técnica do Deslocamento Doppler. Em [8], o ângulo do detector de Germânio é  $0^{o}$  e o alvo de Ag é evaporado no substrato de Au. As energias dos raios  $\gamma$  são determinados com e sem o freador de ouro. Extraído de [49].

retro-espalhados são observados dois picos correspondendo a mesma transição nuclear. Um desses picos de energia está relacionado ao raio  $\gamma$  emitido pelo núcleo com velocidade de recuo v e o outro relacionado ao que foi emitido com velocidade v' devido a perda de energia do íons após atravessar o freador. Essa diferença de energia nos picos é proporcional à velocidade dos íons em recuo, e portanto relacionado com a perda de energia.

Na técnica de DD, a espessura do freador deve ser relativamente grande, em torno de  $2 \text{ mg/cm}^2$ , para reduzir a incerteza final na determinação do poder de freamento. Assim, a aproximação da eq. (4.1) não é mais válida e a análise dos dados pode ser realizada com base numa parametrização dos freamentos eletrônico e nuclear relacionando-os com a espessura do freador ( $\Delta x$ ):

$$\Delta x = \int_{E_i}^{E_f} \frac{dE}{\frac{dE}{dx}\Big|_{elet.} + \frac{dE}{dx}\Big|_{nuc.}}$$
(4.2)

em que  $E_f$  e  $E_i$  são as energias final e inicial de recuo dos íons respectivamente. As incertezas no freamento obtido com a técnica são em torno de 5%.



Figura 4.3: Arranjo experimental para as medidas do poder de freamento de Ouro para íons de Cobre em baixas velocidades.

#### 4.1.2 A Técnica de Espalhamento Elástico

Recentemente, nosso grupo de pesquisa desenvolveu uma técnica para medidas do freamento de íons pesados em baixas velocidades [8], ao qual chamaremos de Espalhamento Elástico. Nesta dissertação, essa técnica foi utilizada para as medidas do freamento de íons de Cu em Au.

O arranjo experimental utilizado nessa técnica é apresentada na Fig. 4.3. No centro da câmara, perpendicular à direção de incidência do feixe primário (tipicamente <sup>16</sup>O ou <sup>28</sup>Si), é posicionado um alvo fino (alvo primário) composto por átomos do elemento do qual deseja-se produzir o seu feixe em baixas velocidades. Por espalhamento elástico, íons do feixe primário produzem átomos do alvo primário em recuo (feixe secundário) numa direção  $\theta_{recuo}$ , com os correspondentes íons primários espalhados na direção  $\theta_{esp}$ . Para detecção das partículas são utilizados dois detectores de Barreira de Superfície. Um sistema de coincidências temporal permite selecionar os átomos do alvo primário em recuo na direção  $\theta_{recuo}$ . Para as medidas de perda de energia, na direção do feixe secundário é posicionado uma folha fina do material freador.

A calibração em energia do detector 1 é calculada com um programa de Monte Carlo

(SCATU) que simula toda a geometria do arranjo experimental. No algoritmo do programa, o alvo primário é dividido em várias fatias. Aleatoriamente, o programa sorteia a fatia do alvo em que a colisão do íon (do feixe primário) com os átomos do alvo ocorre. A perda de energia do feixe primário, desde a superfície até o ponto da colisão, é calculada. Da mesma forma, o ângulo de espalhamento do íon (do feixe primário) é sorteado dentro do ângulo sólido de observação do detector 2. Os correspondentes ângulo de recuo e velocidade iniciais do átomo do alvo são determinados pela cinemática da colisão elástica. A perda de energia eletrônica e nuclear devido as colisões do átomo no próprio alvo são obtidas seguindo o formalismo apresentado em [40]. Nestes cálculos, o poder de freamento eletrônico utilizado é o da referência [31] e o freamento nuclear é descrito pelo potencial universal. Note que o átomo do alvo primário (e que compõe o feixe secundário) recua no seu próprio alvo em baixa velocidade e conforme apresentado ao longo desta dissertação, a previsão do poder de freamento nesta situação apresenta grandes incertezas. No entanto, se o alvo primário for suficientemente fino, a incerteza na energia média de recuo final dos átomos emergindo do alvo devido a incerteza na previsão do freamento átomo-átomo torna-se apenas uma pequena correção.

Na referência [8], o freamento de Ag em Au medidos com a técnica de Espalhamento Elástico são comparados com os realizados pela técnica de Deslocamento Doppler. A comparação dos valores obtidos é apresentado na tabela (4.1). Os dados da técnica de Espalhamento Elástico se mostraram compatíveis com a função ajustada a partir dos dados obtidos na técnica Deslocamento Doppler, demonstrando a consistência da técnica. Em acréscimo, o tempo de aquisição de dados com a técnica de espalhamento elástico chega a ser 70% menor em relação a técnica de Deslocamento Doppler<sup>2</sup>.

### 4.2 Equipamento Experimental

#### 4.2.1 Acelerador e Fonte de Íons

A tomada de dados foi realizada no *Laboratório Aberto de Física Nuclear* (LAFN) utilizando o acelerador eletrostático Tandem 8-UD Pelletron de 8 MV (Fig. 4.4).

A fonte de íons utilizada no Pelletron é a MC-SNICS (*Multi-Cathode Source of Negative Ions by Cesium Sputtering*) da NEC [50]. A extração do feixe pela fonte se baseia na técnica de "sputtering". Uma pequena fonte emite vapor de Césio (Cs) ocupando todo o

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>O elevado tempo de aquisição da técnica de Deslocamento Doppler deve-se à estatística necessária nos picos de energia dos raios  $\gamma$ .



Figura 4.4: Diagrama esquemático do acelerador vertical 8-UD Pelletron Tandem localizado no departamento de Física Nuclear. A fonte de íons do acelerador localiza-se acima do tubo de aceleração e o arranjo experimental para as medidas do poder de freamento é montado na saída do feixe, após o Switching Magnético. Ao longo da aceleração, bombas mantêm o vácuo nas canalizações em torno de  $10^{-7}$  torr.

$\overline{E}$ (MeV)	$dE/dx_{exp}$	$dE/dx_{fit}^{DD}$
7,20	3,10(12)	2,95(14)
$9,\!14$	$3,\!67\ (15)$	$3,\!54\ (17)$
10,3	4,05(16)	$3,\!92~(18)$
$10,\! 6$	4,07(16)	4,01~(20)
$11,\!9$	4,40(18)	4,45~(22)
12,2	4,52(18)	$4,54\ (23)$
$14,\! 0$	5,11(20)	$5,\!12\ (25)$

Tabela 4.1: Comparativo entre o poder de freamento de Ag em Au medido com as técnicas de espalhamento elástico e Deslocamento Doppler (DD). O poder de freamento é expresso em MeV/mg/cm<sup>2</sup>.  $dE/dx_{fit}^{DD}$  corresponde aos valores obtidos com o ajuste dos dados medidos com a técnica DD. Extraído da referência [8].

volume da fonte. Parte do vapor se condensa na superfície fria do catodo formando uma película mono-atômica. Parte é ionizada positivamente pelo contato com uma superfície de tungstênio (ionizador) aquecido por passagem de corrente. O Cs ionizado é acelerado por um potencial de  $\sim 5$  kV na direção do catodo, arrancando, por sputtering, partículas do catodo. As partículas arrancadas, em geral, possuem carga neutra ou positiva. Devido a alta eletronegativadade do átomo de Cs, a película ( $\sim$  mono-atômica) condensada na superfície do catodo terá a importante função de doador de elétrons para as partículas arrancadas do catodo, obtendo desta forma um feixe negativo extraído por um potencial de 20 kV. O conjunto está montado numa estrutura isolada eletricamente à qual é aplicada uma tensão de 70 kV como pré-aceleração para em seguida ser injetado no acelerador. Desta forma, os íons saem com energia de típicamente 90 keV.

Os íons extraídos da fonte de íons passam primeiramente por um eletroímã  $(ME-20)^3$ que deflete em 90° a direção do feixe sem alterar a velocidade das partículas. O ME-20 possui também a função de selecionar a massa do íon a ser acelerada.

A aceleração do feixe se dá em dois estágios sendo que no primeiro os íons, com carga negativa, são atraídos pelo potencial positivo aplicado ao terminal instalado no meio do tubo de aceleração da máquina. No terminal, os íons atravessam uma fina folha de carbono, com espessura em torno de  $10\mu g/cm^2$ , denominado de *stripper*. A finalidade do stripper é a de arrancar elétrons dos íons, consequentemente saindo com uma carga positiva e sendo repelido pelo potencial positivo do terminal, correspondendo ao segundo estágio da

 $<sup>^{3}</sup>$ A sigla do eletroímã indica a maior relação entre a massa (em u.m.a.) e a energia (MeV) que um íon pode ter para que possa ser defletido a 90°.

aceleração. O processo de ionização dos íons pelo stripper é um efeito predominantemente de superfície e a quantidade de elétrons arrancados depende do tipo e da energia do íon acelerado. Os estados de carga do íon (após o stripper) e suas probabilidades podem ser estimadas através do programa CHARGE [51, 52]. Assim, por exemplo, para um feixe de íons <sup>16</sup>O de 8 MeV, após o stripper obtém-se uma distribuição de carga aproximada de 12% de <sup>16</sup>O<sup>4+</sup>, 45% de <sup>16</sup>O<sup>5+</sup>, 36% de <sup>16</sup>O<sup>6+</sup> e 7% de <sup>16</sup>O<sup>7+</sup>. A aceleração do feixe no segundo estágio de aceleração depende do estado de carga (Q) do íon após o stripper. A energia (E) final de um íon acelerado é dado pela expressão abaixo.

$$E = (1+Q)V_t + V_{pre} (4.3)$$

onde  $V_t$  é a tensão aplicada no terminal e  $V_{pre}$  a tensão de pré-aceleração.

A seleção da energia do feixe é realizada pelo eletroímã ME-200 (ver Fig. 4.4). No eletroímã, a energia do feixe defletido é uma função da carga e massa do íon e do campo magnético aplicado. Em [53], a calibração do ME-200 foi realizada medindo-se a seção de choque de reações nucleares conhecidas, como por exemplo a reação  ${}^{19}F(p,n){}^{19}Ne$ , que ocorre em energia bem conhecida.

Ainda existe um terceiro eletroímã, o Seletor Magnético, que possui a função exclusiva de desviar o feixe para uma das linhas de experimentos. Ao longo da trajetória do feixe, desde a fonte de íons até a canalização do experimento, estão posicionados equipamentos que controlam a direção e forma do feixe através de campos eletromagnéticos. Para maiores detalhes, ver referência [54].

#### 4.2.2 Confecção dos Alvos

As espessuras dos alvos de Cu e Au devem ser criteriosamente escolhidas de modo a otimizar as medidas, minimizando as incertezas. No caso dos alvos de Cu, devido a metodologia de calibração do detector 1, deve-se preparar alvos finos o suficiente de modo que a incerteza na predição do freamento Cu-Cu seja uma pequena correção na energia final de recuo do feixe secundário. Por outro lado, um alvo que seja extremamente fino reduziria a taxa de íons de cobre em recuo e proporcionalmente aumentaria o tempo necessário para cada medida. Quantitativamente, para os alvos primários de Cu devem ter espessuras entre 50 - 150  $\mu g/cm^2$ .

Para o freador de Au, a espessura deve ser fina o suficiente para permitir que a eq. 4.1 seja uma boa aproximação. Também neste caso, se o freador for demasiadamente fino, os picos de energias das partículas de cobre sem e com o freador estarão muito próximos, aumentando a incerteza relativa na determinação de  $\Delta E$ . Em acréscimo, torna-se interessante destacar que para alvos muito finos ( $\leq 40 \ \mu g/cm^2$  para alvos de Carbono) o poder de freamento para velocidades de recuo próximas à  $v_0$  depende da espessura do freador. O fenômeno deve-se a falha na natureza estatística para o processo de freamento de íons por alvos muito finos [2].

Os alvos de Cobre e de Ouro foram confeccionados no LAFN, utilizando uma evaporadora Edwards [55]. Os alvos foram produzidos através do processo de evaporação em vácuo, em que o material do qual deseja-se produzir o seu alvo é depositado num barquinho de tungstênio e aquecido por meio de passagem de corrente. O material é evaporado e recolhido sob lâminas posicionadas acima do cadinho. Antes da evaporação do material, passa-se uma finíssima camada de substrato sóluvel sobre a superfície da lâmina aonde o material evaporado será depositado. Após a evaporação do material, a camada solúvel é dissolvida em água e a folha do material evaporado se solta. Sobre cada lâmina é possível produzir de 2 a 4 alvos de  $\approx 1,5 \ge 2$  cm. Os alvos de Cu e os freadores foram montados em suportes de 2 x 4 cm, com furo de 10 mm de diâmetro. Posteriormente o suporte de um dos freadores de Au foi adaptado a outro suporte especial para acomodação no arranjo experimental. Os alvos de cobre confeccionados foram armazenados dentro de uma câmara com atmosfera de Argônio para evitar efeitos de oxidação da superfície. O alvo de ouro foi acomodado numa caixinha com humidade controlada. Ambos os alvos são auto-portantes, sem a necessidade de um substrato de apoio.

#### 4.2.3 Câmara de Espalhamento

A câmara de espalhamento utilizada para as medidas é ilustrada na Fig. 4.5. No centro da câmara, o alvo primário de Cu é fixado numa das posições do porta-alvos (01). O porta-alvos pode ser movimentado verticalmente (para posicionamento do alvo na direção do feixe primário) e angularmente pelo lado externo da tampa. Tomou-se cuidado para ajustar a posição angular, mantendo o alvo primário o mais perpendicular possível da direção de incidência do feixe primário. No lado interno da tampa é instalado um suporte cilíndrico, de diâmetro externo 70 mm e espessura 5 mm, concêntrico com o porta-alvos da câmara, como é ilustrado na Fig. 4.6. Nesse cilindro há um suporte de nylon para o posicionamento do freador de Au (a uma distância  $\approx 35$  mm do porta-alvos). O suporte de nylon pode ser deslocado angularmente durante a aquisição de dados com auxílio do porta-alvos da câmara para medidas da energia do feixe secundário sem e com o freador.

Um pequeno batente para referência é fixado próximo a posição angular de recuo do feixe secundário obtido com o programa de cinemática de reações KINEQ [56]. Em razão das diferenças de massas entre os feixes primários de <sup>28</sup>Si e <sup>16</sup>O, átomos de Cu do alvo primário recuam em ângulos diferentes. Assim, ao trocar o feixe primário utilizado há a necessidade de quebra do vácuo na câmara para reajuste da posição deste batente.

Para a detecção das partículas foram utilizados dois detectores de Barreira de Superfície ambos fabricados pela ORTEC, de 100 mm<sup>2</sup> de área ativa e 100  $\mu$ m de espessura. Um deles (detector 2) é mantido fixo a 60° em relação a direção de incidência do feixe primário após o alvo primário (no plano horizontal) e o outro é montado sobre a plataforma circular da câmara de espalhamento. A plataforma pode se deslocar angularmente com auxílio de um motor e sistema de redução instalado em seu eixo e controlado externamente. Toda a superfície da plataforma é demarcada com precisão de um centésimo do grau, e a sua leitura pode ser feita através de uma luneta posicionada na tampa da câmara. No detector 1 foi fixado um colimador de 3 mm para limitar o cone de observação do feixe secundário, enquanto nenhum colimador foi fixado ao detector 2. Os detectores 1 e 2 distam 120 e 330 mm respectivamente do alvo primário.

Toda a câmara foi mantida a uma pressão da ordem de  $10^{-6}$  torr com uso de uma bomba turbo-molecular em conjunto com uma bomba mecânica para pré-vácuo.

#### 4.2.4 Eletrônica e Aquisição de Dados

Para tratamento dos dados experimentais foi montado um sistema eletrônico de coincidência temporal entre os dois detectores utilizando módulos do sistema NIM [57]. A Fig. 4.7 ilustra o sistema utilizado nas medidas desta dissertação. Cada detector é conectado a um pré-amplificador e este a um amplificador espectroscópico. A saída bipolar de cada amplificador é conectada a um *Timing Single Channel Analyser* (Timing-SCA) que gera um pulso lógico no instante que o sinal bipolar cruza o zero, determinando o momento em que o pulso foi produzido. O pulso lógico do Timing SCA é conectado a um *Gate and Delay Generator* (GDG) que permite ajustar o atraso e gerar pulsos rápidos negativos ao final do tempo de atraso. Cada pulso rápido de cada detector é conectado em um *Time to Amplitude Converter* (TAC). O atraso nos GDGs são ajustados de modo que o pulso do detector fixo dê o sinal de "Start" e o do detector 1 dê o sinal de "Stop" no TAC. O TAC gera um pulso analógico lento com amplitude proporcional à diferença de tempo entre o sinal de "Start" e de "Stop". Fazendo-se com que o pulso que aciona a parada chegue com um atraso maior que aquele que aciona a partida, produz-se um conjunto de pulsos em



Figura 4.5: Corte vertical da câmara de espalhamento utilizada para aquisição dos dados desta dissertação. Legenda: 01 - porta-alvos; 02 - detector fixo; 03 - detector móvel; 04 - canalização do acelerador (feixe primário); 05 - plataforma móvel; 06 - luneta. Na figura abaixo, ilustração do arranjo experimental vista de cima.



Figura 4.6: Fotografia do cilindro em aço inox confeccionado para o posicionamento do freador de Au. Em detalhe, vista do suporte de nylon possibilitando deslocá-lo angularmente.



Figura 4.7: Esquema da eletrônica de aquisição de dados em coincidência utilizados para as medidas de poder de freamento.

que eventos simultâneos produzem a mesma amplitude na saída do TAC, enquanto eventos aleatórios produzem pulso de quaisquer amplitude, com igual probabilidade. Maiores detalhes quanto aos módulos utilizados podem ser encontrados em [58, 57].

Na aquisição de dados, previamente tratados pela eletrônica associada aos detectores, foi utilizado o sistema de aquisição de dados do Laboratório Pelletron, que utiliza a norma de interface CAMAC (*Computer Automated Measurement and Control*). O sinal de cada amplificador e o do TAC são conectados a um módulo ADC *Silena* modelo 4418 (que possui 8 entradas). Um módulo, o CAMAC FERA (*Fast Encoding and Readout ADC*) fabricado pela Lecroy modelo 4301, executa as funções de controle do ADC tais como emissão do sinal de *trigger* e reinicialização (clear). No nosso caso, o sinal de *trigger* é dado pelo detector fixo e o sinal de reinicialização é enviado por um computador. Após um sinal de reinicialização, o ADC permanece no estado de "espera", pronto para receber o sinal de trigger, indicando um novo evento. Assim que o FERA sinaliza um novo evento para o ADC, esse entre em estado de "ocupado". O tempo de conversão do ADC é de 4  $\mu$ s e qualquer outro evento que ocorra durante esse tempo é inibido. O ADC é habilitado a enviar um sinal de LAM (Look at me) ao módulo controlador do CAMAC, o *Crate Controller* - modelo CAEN C111A, logo após a conversão dos pulsos de entrada, retornando ao estado de espera. A aquisição e histogramação de eventos é controlada em um computador pelo sistema SPM-Linux que utiliza o Crate Controller e uma interface A151 turbo que emula um controlador CAMAC auxiliar [59]. O sistema possui um protocolo de aquisição programável, utilizando-se do compilador ADAC [56] para implementar as instruções em um nível superior à linguagem de máquina, que é executado cada vez que o sinal de LAM é enviado para o Crate Controller. No algorítimo de aquisição, o seguinte roteiro é realizado: i) lê as entradas do ADC, referentes aos detector 1 e 2 e ao sinal do TAC, e armazena os dados em sua memória; ii) as entradas do ADC são zerados, retornando ao modo de espera. A histogramação dos eventos, em histogramas 1D para os 3 parâmetros do ADC, nos quais as propriedades de cada histograma são programadas seguindo a linguagem CHIL [56]. Para visualização e análise dos histogramas foi utilizado o programa DAMM [56].

## Capítulo 5

# Análise dos Dados e Resultados Experimentais

"To know that we know what we know, and to know that we do not know what we do not know, that is the true knowledge" Nicolau Copérnico.

Neste capítulo serão apresentados os dados experimentais, a análise e discussão do resultado obtido para o freamento de íons de Cu em Au.

### 5.1 Medidas de Espessura do Alvo e Freador

As medidas de espessura dos alvos foram realizadas no LAFN (Laboratório Aberto de Física Nuclear) através da determinação da perda de energia de partículas  $\alpha$  emitidas por uma fonte de <sup>241</sup>Am, cujo pico de energia está definido em 5,483 MeV. Nessa região de energia, o freamento de partículas  $\alpha$  é bem conhecido, permitindo a utilização dos valores fornecidos pela referência [2], onde a incerteza é estimada em 4%.

Para as medidas de energia das partículas  $\alpha$  foi utilizado um dos detectores de Barreira de Superfície do arranjo experimental descrito no capítulo anterior. A eletrônica associada ao detector consiste de um pré-amplificador e amplificador espectroscópico. A aquisição de dados é obtida através de uma placa ADC Trump de 8K canais, instalada num computador com plataforma Linux, e controlada pelo programa DAMM [56]. A calibração em energia

Alvo	Espessura	$dE/dx_{alvo}$ para	
	$(\mu g/cm^2)$	$\alpha$	
Cu	156(6)	0,409	
Au	538(21)	0,226	

Tabela 5.1: Espessuras dos alvos utilizados para as medidas desta dissertação. As incertezas devem-se a incerteza no valor de dE/dx fornecido pela referência [2].

do detector de Si é realizada com o pico de energia das partículas  $\alpha$  medido sem o alvo e com auxílio de um pulsador de precisão.

As espessuras foram calculadas com o emprego da eq. 4.1, medindo-se a energia das partículas  $\alpha$  sem e com o alvo à frente do detector. As espessuras médias dos alvos de cobre e ouro selecionados para as tomadas de dados são apresentados na tabela (5.1). As incertezas relativas entre os picos  $E_{sem}$  e  $E_{com}$  são próximas de 2%, de modo que as incertezas finais nas espessuras dos alvos devem-se majoritariamente à incerteza estimada em 4% para os valores do poder de freamento para as partículas alfas.

A uniformidade do freador de Au foi medida acoplando-se um colimador de 2,0 mm à fonte alfa e medindo-se a espessura ao longo de uma direção na folha. A varredura foi feita em passos de 2 mm na extensão do diâmetro horizontal, ao longo da região central do freador (a mesma utilizada durante as tomadas de dados). A variação máxima de espessura observada foi em torno de 3%, em uma extensão de 8 mm. Após a utilização do freador para as medidas do freamento de Cu, mediu-se novamente a espessura média. A espessura obtida concorda com a medida anterior dentro de 2%.

### 5.2 Medidas de Perda de Energia

Com a técnica de espalhamento elástico (Fig. 4.3) foram realizadas 16 medidas experimentais da perda de energia de íons de Cu em Au dentro de uma faixa de energia onde até então nenhuma medida experimental tinha sido realizada anteriormente. Como feixes primários, foram utilizados íons de <sup>28</sup>Si, com energias iniciais entre 49,0 MeV e 79,0 MeV, e <sup>16</sup>O, com energiais entre 35,0 MeV e 52,0 MeV. A utilização de energias acima de 79,0 MeV, para feixe de <sup>28</sup>Si, e 52,0 MeV, para feixe de <sup>16</sup>O, é limitada pelo crescimento da seção de choque de fusão nuclear destes com os núcleos de Cu do alvo primário. A corrente do feixe primário no alvo de cobre foi, na média, em torno de 300 nA e com diâmetro do feixe em torno de 3 mm.



Figura 5.1: Metodologia para determinação experimental da posição angular do detector móvel. Para cada posição angular, a área do pico de Cu (no detector móvel) é normalizada pela área do pico de <sup>28</sup>Si (no detector fixo). Note que a área do pico de Si é maior que a área do pico de Cu em razão de eventos não coincidentes.



Figura 5.2: Espectros dos perfis de distribuição angular do feixe secundário de Cu. Os respectivos ângulos de recuo do feixe secundário são:  $49,2^{\circ}$  para o feixe primário de <sup>28</sup>Si e  $54,2^{\circ}$  para feixe primário de <sup>16</sup>O. A curva pontilhada corresponde a simulação realizada com o programa SCATU. No KINEQ, os correspondentes ângulos de recuo são  $48,7^{\circ}$  e  $53,6^{\circ}$ .

Inicialmente foi realizada medidas de distribuição angular do feixe secundário para determinar experimentalmente a posição angular correta do detector móvel<sup>1</sup>. A medida é realizada variando-se o ângulo de observação do detector sem o freador de Au na direção de recuo do feixe secundário para uma dada energia de incidência do feixe primário. Note que para um dado feixe primário, o ângulo de recuo do feixe secundário independe da energia inicial daquele feixe (apenas da massa atômica dos íons que o compõe). Em cada posição angular do detector foi calculado a razão entre o número de partículas de Cu no detector móvel e o número de partículas do feixe primário no detector fixo (incluindo os eventos não coincidentes), conforme ilustrado na Fig. 5.1. O procedimento foi realizado para os feixes primários de <sup>28</sup>Si e <sup>16</sup>O separadamente. Os perfis das distribuições angulares do feixe secundário são apresentados na Fig. 5.2. Para os feixes primários de Si e O, o valor de  $\sigma$  das distribuições são 0,75(2) e 1,5(1) graus respectivamente. Também na figura é apresentado o cálculo da distribuição angular do feixe primário obtido com o programa SCATU (curva pontilhada). Os valores de  $\sigma$  obtidos nessa simulação são 0,8 e 1,4 respectivamente. A

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Essa medida visa posicionar o detector no ângulo correspondente ao máximo da distribuição visando otimizar o tempo de aquisição.



Figura 5.3: Espectros típicos observados no detector móvel. A curva pontilhada corresponde as medidas de energia do Cu em recuo (feixe secundário) sem o freador de ouro e a curva contínua à medida com o freador.  $\Delta E$  dos íons de cobre é proporcional a diferença entre os centróides dos picos. No espectro inferior (b), o pico à direita corresponde ao espalhamento elástico de <sup>16</sup>O. Ver texto.

diferença no valor médio do ângulo de recuo entre a simulação e os dados experimentais é reflexo da incerteza no posicionamento do detector fixo à  $60^{\circ}$ . Se considerarmos o detector fixo à  $59^{\circ}$  na simulação, os ângulos de recuo experimentais são bem reproduzidos indicando que o programa de Monte Carlo é confiável. No freador, estima-se que o diâmetro do feixe secundário seja próximo de 2 mm. Mesmo que experimentalmente o ângulo de recuo seja ligeiramente diferente que o calculado pelo KINEQ (ver legenda da figura), as diferenças são bem menores que o ângulo de aceitação do suporte do freador, definido pela distância do freador ao alvo primário (35 mm) e pelo diâmetro do suporte de nylon do freador (~ 8 mm), e sendo aproximadamente de  $10^{\circ}$ . Deste modo, não há necessidade de reposicionar o batente para o freador.

Uma vez o detector móvel posicionado na posição de máximo da distribuição angular do feixe primário, sua posição não foi mais alterada (para as medidas envolvendo o mesmo feixe primário). Cada par de medidas com sem freador tomou cerca de 1,5 - 2 horas. Para as energias mais baixas dos feixes primários de <sup>28</sup>Si e <sup>16</sup>O, 49,0 MeV e 35,0 MeV respectivamente, a corrente no alvo primário foi extremamente baixa devido a pequena probabilidade de produção dos estados de carga (Si<sup>6+</sup> e O<sup>5+</sup> respectivamente) após o stripper do aceler-



Figura 5.4: Detalhe do pico de energia de Cu em recuo com o freador de Au para o feixe primário de <sup>28</sup>Si com 71,0 MeV. Pode-se observar a assimetria da distribuição para canais abaixo do centróide.

ador, sendo um dos fatores que prolongam o tempo de aquisição. Particularmente, para o feixe de <sup>16</sup>O com 35,0 MeV, em virtude do straggling angular do Cu recuando em Au, o tempo de medida subiu para 2,5 - 3 horas.

Dois espectros típicos obtidos no detector móvel são apresentados na Fig. 5.3. Devido a proximidade entre os ângulos de espalhamento do feixe primário de <sup>16</sup>O ( $\theta = 60^{\circ}$ ) e de recuo dos átomo de Cu ( $\theta = 54, 2^{\circ}$ ), o pico do feixe primário espalhado é também observado no detector móvel, conforme o espectro da Fig. 5.3b).

### 5.3 Análise de Dados

Na análise dos dados foi utilizado o programa DAMM [56]. Em medidas do poder de freamento à baixas energias, uma atenção especial deve ser dada à análise dos picos de energia. A determinação precisa dos centróides e suas respectivas incertezas é de fundamental importância, tendo em mente que, para uma dada estatística, a incerteza relativa aumenta com o inverso da diferença de energia entre os picos com e sem freador.

A forma dos picos de energia do feixe secundário de Cu, de modo geral, se aproxima a

de uma curva do tipo gaussiana acima do centróide e por uma pequena região gaussiana seguida por uma cauda exponencial abaixo deste (ver Fig. 5.4). A cauda exponencial nos picos se deve a uma série de fatores: espalhamento no colimador do detector, colisões elásticas Cu-Au, processo intrínseco de coleta de cargas no detector, etc. Em particular, colisões elásticas do íon ao penetrar o meio freador (freamento nuclear) aumentam a distância efetiva percorrida pelo íon. É interessante citar que, para íons pesados à velocidades de recuo menores que  $v_0$  (~ 25 keV/u.m.a.), a análise minuciosa da largura dos picos de energia com e sem freador pode ser utilizada como uma estimativa para a perda de energia por freamento nuclear em métodos experimentais de transmissão de feixe [60].

Inicialmente os picos de energia foram ajustados por uma curva gaussiana seguida por uma cauda exponencial para canais abaixo do centróide. Nenhum desvio perceptível da forma gaussiana foi observada na região acima do canal de máximo dos picos. Deixou-se os parâmetros da cauda exponencial, o de largura e o da posição de máximo dos picos variáveis de modo a minimizar o  $\chi^2$  do ajuste em cada pico. Na aplicação do método foi observado que, devido à baixa estatística nos picos, existe uma correlação entre os valores da assimetria, largura e centróide ajustados. Essa correlação faz com que conjuntos distintos dessas grandezas produzam valores do  $\chi^2$  do ajuste muito próximos um do outro dependendo das condições iniciais do ajuste.

Para eliminar um dos graus de liberdade no  $\chi^2$ , um outro procedimento de análise foi utilizado. Tendo em conta a forma geral dos picos descrito anteriormente, empiricamente foi observado que, na média, os picos de energia do Cu são bem ajustados por uma cauda exponencial abaixo do centróide com o parâmetro da cauda mantida fixa em 0,4 (método A). Para as energias mais baixas, nos quais a expectativa é de se observar picos com larga assimetria abaixo do centróide devido a crescente contribuição do freamento nuclear, não foi verificado nenhum padrão quanto ao parâmetro da cauda exponencial em razão da baixa estatística de nossos dados experimentais. Usando o programa SCATU (descrito na seção 4.1.2) para simulação do processo experimental, verificou-se nenhuma assimetria nos picos de recuo do Cu devido ao seu freamento nuclear no Au. Portanto, a assimetria observada experimentalmente deve-se basicamente à espalhamentos do feixe secundário no colimador do detector ou do processo de coleção de carga dos detectores. De nossos dados não podemos obter conclusões quanto ao freamento nuclear de Cu em Au. Fixando o parâmetro da cauda em 0,4, a variação no valor do centróide em função da região incluída ou das condições iniciais do ajuste é pequena e portanto encorporada pela incerteza estatística. Comparado com o método anterior, este apresenta-se mais estável.

Feixe Primário		Diferença (em canais)		
Tipo	Energia (MeV)	Método A	Método B	
	79,0	32,97(27)	33,11(22)	
<sup>28</sup> Si	71,0	34,55~(55)	34,28(24)	
	69,0	31,01 (42)	31,73(34)	
	67,1	$30,\!68\ (35)$	$30,\!63\ (22)$	
	65,0	31,18(33)	$30,\!84\ (23)$	
	63,1	29,67(48)	29,91(21)	
	60,0	29,36(31)	29,39(21)	
	58,0	$28,\!65(28)$	28,59(18)	
	56,0	26,33 $(33)$	26,42(17)	
	52,0	24,33 (34)	24,55(17)	
	49,0	24,86(48)	24,96(17)	
	52,0	15,50(28)	$15,\!66$ $(19)$	
	49,0	15,99(27)	$15,\!69\ (15)$	
$^{16}\mathrm{O}$	45,0	$13,46\ (21)$	13,75(16)	
	42,0	$13,26\ (24)$	$13,14\ (15)$	
	35,0	10,04(34)	10,42(27)	

Tabela 5.2: Tabela com a diferença entre os centróides sem e com freador para a mesma energia do feixe primário utilizando 2 métodos de ajuste dos picos. Método A - média da distribuição; Método B - ajuste com parâmetro da cauda fixo.

Ainda um outro método de análise do pico foi avaliado, para confirmação dos valores obtidos para a posição de pico (método B). Nesse, apenas o centróide do pico é determinado após a subtração de um fundo linear, e portanto nenhuma informação sobre a forma do pico é considerada. O fundo linear é determinada pelos números de contagem nos limites da região considerada, i. e., para o exemplo acima o fundo é determinado interpolando uma reta entre número de contagens nos canais 130 (ou 150 posteriormente) e 200. Na aplicação do método, o valor do centróide obtido depende da região escolhida, haja visto que a determinação do fundo linear varia concomitantemente com a região de analise. Visando obter os valores mais representativos possíveis, para cada pico foram calculados os centróides considerando distintas regiões nas proximidades do pico. A média dos valores obtidos e o desvio padrão médio servem, respectivamente, como o centróide são reproduzidos (com desvios < 1%) com um método similar no qual a determinação do fundo linear a ser subtraído é definido por ajuste de mínimos quadrados, incluindo-se vários pontos em duas regiões, acima e abaixo do pico separadamente, que não englobam a região o pico.


Figura 5.5: Reta de calibração em energia do detector móvel. O eixo das abcissas correspondem aos centróides dos picos de energia sem o freador de Au. O eixo das ordenadas correspondem ao valores das energias de recuo de Cu emergindo de seu alvo, calculadas pelo simulação de Monte Carlo.

As diferenças entre os centróides sem e com freador obtidos com os 2 métodos de análise são apresentados na tabela 5.2. Apesar dos centróides calculados variarem de acordo com o método de análise utilizado, verifica-se que as diferenças entre os picos com e sem freador (para a mesma energia de recuo do Cu) obtidas pelos métodos A e B produzem resultados consistentes entre si. Da compatibilidade entre os métodos A e B podemos interpretar que, se há uma variação no parâmetro da cauda exponencial a medida que a energia de recuo diminui, esta não é sensível em nossas análises devido a pouca estatística.

Para os cálculos do poder de freamento de Au para íons de Cu foi considerado os valores obtidos com o método A.

#### 5.3.1 Calibração do detector

Para calibração do detector móvel, foi utilizado o programa SCATU (descrito na seção 4.1.2). Assim, a energia média dos átomos de Cu que atingem o detector na ausência do freador pode ser calculada. Observou-se que a incerteza na espessura do alvo de Cu (ver tabela 5.1) gera uma incerteza média menor que 0,5% nos cálculos das energias de recuo de seus íons. Considerando ainda uma incerteza média estimada em 20% na previsão

do freamento de Cu em Cu, a incerteza na energia de recuo é menor que 2%. Na Fig. 5.5, as retas de calibração para os centróides (sem freador) são apresentadas. Os dados obtidos com uso dos feixes primário de <sup>28</sup>Si e <sup>16</sup>O foram ajustados separadamente, onde os  $\chi^2_{red}$  obtidos são 0,7 e 1,3 respectivamente. Dentro da faixa de energia de estudo desta dissertação não foi observado nenhum desvio significativo da linearidade da calibração em razão de perdas de energia na zona morta e defeitos produzidos no detector.

#### 5.3.2 Correções em $\Delta E$

Conforme apresentado no capítulo anterior, no arranjo experimental o detector móvel é montado a 85 mm de distância do freador de Au e com um colimador de 3 mm. Nas energias de recuo do feixe secundário, colisões elásticas entre os átomos de Cu e Au (freamento nuclear) começam a ser consideráveis. Assim, devido ao ângulo de observação finito do detector, átomos de Cu, que na ausência do freador são observados pelo detector, ao atravessarem o freador de Au podem ser espalhados fora do ângulo de detecção, de sorte que apenas os átomos que não sofreram espalhamentos consideráveis são observados. Aqueles átomos que sofrem grandes espalhamentos correspondem ao conjunto de partículas que mais perdem energia por duas razões: i) em função do freamento nuclear e ii) do freamento eletrônico, devido a uma distância maior a ser percorrida dentro do freador. Consequentemente, o  $\Delta E$  observado experimentalmente é ligeiramente menor que o que seria observado se o detector estivesse mais próximo do freador e portanto é necessário estimarmos uma correção para essa perda.

Para correção nos dados experimentais, foi realizada a simulação deste efeito com a utilização do programa SCATU calculando-se o poder de freamento efetivo de Cu em Au em várias energias de incidência do feixe primário considerando-se dois valores para o ângulo de abertura do detector: i) de 2°, correspondendo ao arranjo experimental utilizado e ii) de 70°, correspondendo a um arranjo ideal, na qual o detector está próximo o suficiente para observar as partículas espalhadas em grandes ângulos. As razões entre os valores obtidos correspondem ao fator de correção a ser aplicado em nossos dados experimentais. O gráfico dessa correção em função da energia de recuo de Cu é apresentado na Fig. 5.6. Conforme esperado, a correção nos dados é maior em baixas energias em razão da crescente importância do freamento nuclear a medida que a energia de recuo diminui.



Figura 5.6: Gráfico da curva de correção aos dados experimentais em função da energia de recuo do Cu.

### 5.4 Resultados Experimentais

O poder de freamento total (eletrônico + nuclear) é determinado utilizando-se a eq. 4.1, com o valor da espessura do freador dado na tabela 5.1. Os resultados obtidos são apresentados na tabela 5.3. O valor médio é calculado da seguinte expressão:

$$\overline{E} = E_{sem} - \frac{1}{2}\Delta E \tag{5.1}$$

As incertezas nas energias médias do feixe de Cu são obtidas propagando-se as incertezas nas retas de calibração. No valor do poder de freamento, a incerteza obtida corresponde as incertezas devido as retas de calibração (< 2%) e à espessura do freador de Au (4%). A incerteza média é aproximadamente 5%.

Em alguns casos, principalmente nas medidas de mais baixas energia de recuo, a perda de energia do feixe secundário de Cu ao atravessar o freador de Au chega a ser 15% de sua energia inicial. Para verificar a validade da aproximação diferencial para o poder de freamento, a perda de energia de Cu em Au, calculando a integral (4.2) para a espessura do freador, foi obtida com o programa STOPX [56]. O desvio relativo entre o poder de freamento médio ( $\Delta E/\Delta x$ ) e o correspondente valor de  $dE/dx(\overline{E})$  obtido com o mesmo

Feixe Prim.		Feixe Sec.	Poder de Freamento		
Tipo	Energia	Energia rec.	$\overline{E}$	$dE/dx_{exp}$	${ m dE}/{ m dx}^{teorico}_{nuclear}$
<sup>28</sup> Si	79,0	26,73	24,8(4)	6,9(4)	0,1
	71,0	$23,\!90$	22,4~(4)	7,2~(4)	0,1
	69,0	23,20	21,2(4)	$^{6,6}(3)$	0,1
	67,1	22,53	$20,\!6(3)$	6,5~(3)	0,1
	65,0	21,79	20,0(3)	$^{6,6}(3)$	0,1
	63,1	$21,\!12$	19,5(3)	$_{6,3}(3)$	0,1
	60,0	20,03	18,3(3)	$^{6,2}(3)$	0,1
	58,0	$19,\!33$	17,8(3)	$_{6,0}(3)$	0,1
	56,0	$18,\!63$	17,3(3)	5,5~(3)	0,1
	52,0	17,23	15,8(3)	5,1~(3)	0,2
	49,0	16, 18	14,8(3)	5,2~(3)	0,2
<sup>16</sup> O	52,0	10,32	9,42 (11)	3,31(18)	0,22
	49,0	9,70	8,83(11)	$3,\!45\ (18)$	0,23
	45,0	8,88	8,05(11)	2,87(15)	0,24
	42,0	$^{8,25}$	7,52(11)	$2,\!87\ (15)$	0,25
	35,0	$6,\!83$	6,26(10)	$2,19\ (13)$	0,28

Tabela 5.3: Resultados experimentais do poder de freamento de Cu em Au obtidos nesta dissertação. Na terceira coluna são apresentados as energias de recuo iniciais dos átomos de Cu calculados pelo programa SCATU. Na última coluna são apresentados os correspondentes valores do freamento nuclear obtido pelo programa SRIM. As energias são dadas em MeV e o poder de freamento é em MeV/mg/cm<sup>2</sup>.

programa foi  $\leq 2\%$ . Portanto, de acordo com expectativas teóricas do freamento em baixas velocidades, a aproximação diferencial permanece válida na região de energias medidas.

### 5.5 Discussão

78

Os dados do poder de freamento de Au para íons de Cu foram comparados com as previsões da teoria de LSS e dos modelos semi-empíricos de Northcliffe e Schilling e Ziegler, Biersack e Littmark. Também são comparados com as previsões obtidas com a Teoria Binária (TB) e a Aproximação de Convolução Unitária (UCA). Nessas comparações, foi subtraído o freamento nuclear previsto pelo potencial universal de ZBL [2] dos dados experimentais, (ver tabela 5.3) para a determinação da componente eletrônica do freamento. Em [61], Abdesselam et. al. realizaram medidas do freamento de vários íons, incluso íons de Cu, em Au em energias próximas ao pico de Bragg. Os dados de Cu em Au relevantes também serão utilizados para a presente análise.

#### 5.5.1 Comparação com as previsões de LSS

Na Fig. 5.7 são apresentados os resultados experimentais para o freamento eletrônico obtidos nessa dissertação em função de v/v<sub>0</sub>. A teoria de LSS prevê, para o freamento de Cu em Au, uma dependência linear para v/v<sub>0</sub> $\lesssim$  9. Do gráfico verifica-se o desacordo entre a previsão de LSS e os dados experimentais. Se considerarmos a linearidade do freamento eletrônico em função da velocidade de recuo, os dados experimentais sugerem um coeficiente angular muito diferente da prevista por LSS. Sob os dados dessa dissertação foi ajustado uma curva do tipo  $a(v/v_0)^p$ . O melhor ajuste obtido foi com os seguintes valores:

$$\left.\frac{dE}{dx}\right)_{elet.} = 0,75(5) \times \left(\frac{v}{v_0}\right)^{1,7(1)}$$

a partir do qual verifica-se uma dependência aproximadamente quadrática do freamento com a velocidade de recuo. A expressão acima é válida para  $v/v_0 < 4$ . Ao tentar incluir os dados de Abdesselam nesse ajuste, a curva ajustada torna-se incompatível com os dados experimentais para energias menores que 10 MeV ( $v/v_0 < 2.5$ ).

Também, na Fig. 5.7, uma reta é ajustada ao dados experimentais incluindo os de Abdesselam. Observa-se da figura que o ajuste linear fornece um termo constante positivo e sua extrapolação para energias menores sinaliza uma região que o opder de freamento do freador seria nulo! A existência de um termo constante não nulo no ajuste linear é observada em outras medidas experimentais com energias menores que  $Z_1^{2/3}v_0$  como por exemplo para íons de Urânio em vários meios [62], bem como para íons intermediários freando em Au (ver Fig. 5.8). De fato essa constante corresponderia a uma situação não realística. De fato, Ziegler et. al., em seu modelo semi-empírico [2], sugerem a muito baixas velocidades uma descontinuidade no freamento eletrônico, através do qual o freamento eletrônico converge para a origem (ver legenda Fig. 1.1).

#### 5.5.2 Comparação com os modelos semi-empíricos NS e ZBL

A comparação do poder de freamento total (eletrônico + nuclear) entre os dados dessa dissertação com os modelos semi-empíricos de Northcliffe-Schilling e Ziegler et. al. é apresentada na Fig. 5.9. Na figura também está incluída o modelo NS com correção de camadas [31] e parte dos dados medidos por Abdesselam et. al. Pode ser observada



Figura 5.7: Medidas experimentais do freamento de Cu em Au em função de  $v/v_0$ . A componente nuclear, obtida pelo programa SRIM, foi subtraída dos dados experimentais (círculos). Ajuste do tipo  $a.(v/v_0)^b$  excluíndo os dados de Abdesselam. Ajuste linear incluindo os dados de Abdesselam.



Figura 5.8: Poder de freamento de vários íons intermediários  $(2 < Z_1 < 20)$  em Au, em função de v/v<sub>0</sub>. O diversos ajustes lineares apresentam o termo constante diferente de zero. Para alguns íons o coeficiente linear do ajuste é positivo. Dados experimentais extraídos de [63].



Figura 5.9: Comparação de dados experimentais com o poder de freamento total calculado pelos modelos semi-empíricos NS e ZBL. O freamento nuclear é tomado da previsão ZBL.



Figura 5.10: Comparação dos dados obtidos nesta dissertação com os dados em [61] para uma ampla faixa de energias. Observa-se a consistência entre as medidas experimentais.

que a flutuação nos dados obtidos para esta dissertação é consistente com as incertezas estimadas. O mesmo gráfico é apresentado numa ampla região (incluindo o pico de Bragg) na Fig. 5.10 de onde verifica-se a consistência de nossos dados com as medidas realizadas por Abdesselam.

Das Figs. 5.9 e 5.10 observa-se que a previsão do modelo de NS subestima o freamento para energias maiores que ~ 30 MeV e sobrestima-o para energias menores que ~ 10 MeV. O desvio médio da curva obtida pelo modelo de NS em relação aos dados desta dissertação<sup>2</sup> é aproximadamente de 13%, em que para energias menores que 10 MeV chega a ser em torno de -28% (o sinal negativo indica que a previsão de NS está acima dos dados experimentais). A curva do modelo de NS com correção de camadas situa-se sistematicamente acima de nossos dados experimentais. Apesar deste conseguir descrever os dados de mais baixas energias medidos por Abdesselam (Fig. 5.9), para energias acima de ~ 80 MeV o modelo também substima o freamento.

Para a previsão do modelo de ZBL foi utilizado o programa SRIM (versão 2003.26) [7]. Como os dados de Abdesselam são anteriores a esta versão do programa utilizado, certamente o banco de dados do programa leva em conta estes dados experimentais. Por-

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Calculado como (modelo -  $\exp$ .)/exp.

tanto, não é surpreendente o bom acordo do modelo para o freamento de Cu em Au nas energias próximas ao pico de Bragg, apesar de que nossos dados experimentais situam-se sistematicamente abaixo da previsão do modelo. Na média o modelo sobrestima em cerca 12% os dados experimentais, sendo que abaixo de 10 MeV o desvio chega a ser de 25%.

#### 5.5.3 Comparação com as previsões de TB e UCA

Uma comparação entre os resultados da Teoria Binária (TB) e da Aproximação de Convolução Unitária (UCA) e os dados experimentais para o freamento de Cu em Au é apresentada na Fig. 5.11.

O cálculo teórico da TB para o freamento de Cu em Au foi gentilmente cedido por P. Sigmund<sup>3</sup>. Do gráfico verifica-se que os resultados experimentais situam-se sistematicamente abaixo da previsão obtida pela teoria. Porém, a curva teórica consegue reproduzir a forma do freamento em baixas energias. Curiosamente, para energias menores que 50 MeV, se substraírmos ~ 1,25 MeV/mg/cm<sup>2</sup> da previsão da TB, a curva se ajustaria bem com os dados experimentais. Desacordos da teoria Binária com medidas experimentais em baixas energias tem sido reportadas, como por exemplo em [64], onde os autores mediram o freamento de antiproton em vários meios, inclusive Au. Para esses dados experimentais, a teoria consegue prever satisfatoriamente o freamento em energias próximas e acima do pico de Bragg. Para baixas energias, a teoria sobrestima o freamento de antiprotons em Ni e em Au devido, segundo os autores, à escolha das constantes ópticos empregado para caracterização do freador para o cálculo teórico.

Para o cálculo teórico da UCA foi utilizado o programa CASP [38]. O programa oferece várias opção como escolha da forma de blindagem do íon bem como a opção entre o cálculo na aproximação unitária (UCA) ou perturbativa (PCA). Para o cálculo do freamento de Cu em Au utilizamos a configuração default do programa (utilizando a blindagem do íon dada pela sua carga média). Surpreendentemente, a previsão teórica concorda satisfatoriamente com os dados experimentais dessa dissertação. Para energias próximas ao pico de Bragg, os dados experimentais de Abdesselam et. al. situam-se sistematicamente acima da curva teórica. No entanto, para baixas energias a teoria ainda não é confiável para qualquer íon em qualquer meio. Por exemplo, num comparativo entre os dados de Ag em Au [8] e a previsão do programa é apresentada na tabela 5.4 a partir do qual verifica-se que a teoria é, em média, 30% menor.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>Em breve o autor estará disponibilizando o programa para acesso público.



Figura 5.11: Comparação dos dados experimentais dessa dissertação com as previsões da Teoria Binária e da Aproximação de Convolução Unitária.

Energia (MeV)	$dE/dx_{exp}$	$dE/dx_{UCA}$
7,20	2,20(12)	1,42
9,14	2,89(15)	$1,\!99$
$10,\!30$	3,32(16)	$2,\!31$
$10,\!60$	3,36(16)	$2,\!39$
$11,\!90$	3,74(18)	2,77
12,20	3,86(18)	2,86

Tabela 5.4: Comparação entre as medidas experimentais e a previsão teórica da UCA para o freamento de Ag em Au. Dos dados experimentais foram subtrídos a contribuição nuclear do freamento dado por [7].

# Capítulo 6

## Conclusões

Os dados experimentais obtidos nessa dissertação indicam que o freamento eletrônico de Cu em Au não é bem descrito por uma função proporcional a v como previsto pela teoria LSS, sendo bem ajustados por uma curva do tipo  $kv^p$ , com  $p \sim 1,7(1)$ . No entanto, ajuste do tipo  $kv^p$  não se aplica para as energias maiores que os dados obtidos nesta dissertação. Ao tentar incluir alguns dados experimentais de Abdesselam, o ajuste não consegue descrever os dados experimentais à baixas velocidades, i. e., com energias menores que 10 MeV. Estudos do freamento nesse regime de velocidades tem mostrado que por enquanto ainda não é possível estabelecer nenhuma relação do coeficiente p com o íon ou freador. Por exemplo, nos ajustes dos dados para o freamento de íons de Ag com energias entre 5 e 20 MeV em vários meios [32], o coeficiente p apresenta valores entre 0,8 e 1,8. Em particular, para o freamento de Ag em Au |8|, o valor do expoente  $p \in \sim 1, 5$ . Em |63|, é possível obter um amplo banco de dados dos valores experimentais do freamento de vários íons em diversos meios. No caso do freamento de Cu em baixas energias existem poucos dados disponíveis (especificamente Cu em C, Al e Cu). Para esses dados os melhores ajustes fornecem valores do expoente p próximos de 1. Com isso, qualquer generalização dos resultados obtidos para outros meios e íons torna-se impraticável.

Quanto ao modelo semi-empírico de Ziegler, Biersack e Littmark, observou-se que mesmo utilizando uma versão, no qual certamente os dados do freamento de Cu em Au obtidos por Abdesselam estão inclusos em seu banco de dados, a previsão do modelo sobrestima os dados experimentais dessa dissertação, indicando que o método de extrapolação do modelo à baixas energias não é totalmente confiável. Mesmo assim, a previsão não está fora das espectativa do modelo que, para íons pesados em baixas velocidades é de  $\pm 20\%$ .

A teoria denominada Aproximação de Convolução Unitária fornece dados em excelente

acordo com os dados experimentais dessa dissertação mas isso não pode ser tomado como um resultado geral. Por exemplo, para o freamento de Ag em Au, a teoria subestima o freamento em 30 %. Já no caso de C em C, as diferenças entre as previsões teóricas e resultados experimentais não são tão grandes [30]. Na região de 10-100 keV/u.m.a., a diferença média obtida é de 16%, caindo para 3% na região próxima ao pico de Bragg. Fica claro que os mecanismos de perda de energia de íons pesados à baixas velocidades não são totalmente bem compreendidos e avanços teóricos nessa área, no sentido de ampliar espaço íon-meio-energia de aplicabilidade das teorias recentes, ainda são necessários. Em paralelo, devido a carência de dados experimentais para a região de baixas velocidades, medidas de outros íons pesados são altamente desejados para amparo das teorias a serem desenvolvidas.

Quanto à técnica experimental utilizada, é possível empregá-la para estudos do freamento de praticamente qualquer íon em qualquer meio à baixas energias. A principal limitação é quanto a produção dos alvos finos auto-portantes para a produção de feixe composto por átomos do alvo em recuo. Os resultados obtidos fornecem uma incerteza em  $\Delta E$  próxima de 2%, da ordem das demais técnicas geralmente utilizadas para essas medidas. Em acréscimo, devido a mobilidade angular de um dos detectores (o detector 1) e possível utilizar o mesmo arranjo experimental para estudo da distribuição angular de íons pesados em baixas velocidades após multíplas colisões no freador. A partir da medida dessa distribuição, pode-se analisar a forma do potencial interatômico médio responsável pela distribuição.

Em [65], a distribuição angular de próton em baixas velocidades (~ 9 keV) após multíplas colisões em freadores de Al e Au foram estudadas. Em particular, a distribuição obtida experimentalmente para o freador de Au possui um valor de  $\sigma$  aproximadamente 50% menor que a prevista em simulações utilizando os potenciais de Thomas-Fermi e Lenz-Jensen. Em medidas preliminares da distribuição do multíplo espalhamento elástico de Ag em Au realizadas pelo grupo de pesquisa, a distribuição obtida era 70% da distribuição teórica.

## **Referências Bibliográficas**

- BOHR, N. The penetration of atomic particles through matter. Matematisk-fysiske Meddelelser Det K. Danske Videnskabernes Selskab., vol.18, n. 8, 1948.
- [2] ZIEGLER, J.F.; BIERSACK, J.P.; LITTMARK, U. The Stopping and Ranges of Ions in Matter, vol. 1, 1a. ed., Pergamon Press, 1985.
- [3] LINDHARD, J.; SCHARFF, M. Energy dissipation by ions in the keV region. *Physical Review*, vol. 124, p. 128-130, 1961.; LINDHARD, J.; SCHARFF, M.; SCHIOTT, H. E. Range concepts and heavy ions ranges. *Matematisk-fysiske Meddelelser Det K. Danske Videnskabernes Selskab.*, vol. 33, n. 14, 1963.
- [4] FIRSOV, O. B. Zh. Eksp. Teor. Fiz., vol. 9, pag. 1076, 1959.
- [5] CHU, W. K. Energy loss of High-velocity ion in matter. Methods of Experimental Physics, vol 17, pag. 25-72, 1980.
- [6] NORTHCLIFFE, L. C.; SCHILLING, R. F. Range and stopping power tables for heavy ions, *Nuclear Data Tables*, vol. A7, pag. 233-463, 1970.
- [7] Programa SRIM 2003, versão 2003.26, disponível para download em <http://www.srim.org>.
- [8] RIBAS, R. V.; et. al. Stopping power of Au for silver ions at low velocities. Nuclear Instruments and Methods B, vol. 211, p. 453-459, 2003.
- [9] BOHR, N. On the theory of decrease of velocity of moving electrified particles on passing through matter. *Philos. Mag.*, v. 25, p. 10-31, 1913.
- [10] BETHE, H. A. Annalen der Physik, vol. 5, p. 325, 1930.
- [11] BETHE, H.A. *Handbook Physik*, 24/1, 491 ff. (Springer, Berlin, 1933).

- [12] BLOCH, F. Annalen der Physik (Leipzig), vol. 16, p. 285, 1933.
- [13] NORTHCLIFFE, L.C. Passage of Heavy Ions Through Matter. Annual Reviews of Nuclei Science, vol. 13, pag. 67, 1963.
- [14] LINDHARD, J.; NIELSEN, V.; SCHARFF, M. Approximation method in classical scattering by screened Coulomb fields, *Matematisk-fysiske Meddelelser Det K. Danske* Videnskabernes Selskab., vol. 36, n. 10, 1968.
- [15] CHU, W.K.; MAYER, J. W.; NICOLET, M. A. Backscattering spectrometry. 1a. ed., Academic Press, New York, 1978.
- [16] BIRD. J. R.; WILLIAMS, J.S. Ion Beams for Materials Analysis. 1a. ed. Academic Press, 1989.
- [17] ZIEGLER, J. F. Ion Implantation: Science and Technology. 2a. ed. Academic Press, 1988.
- [18] ALEXANDER, T. K.; FORSTER, J. S. Advances Nuclear Physics. vol. 10, pag. 197, 1978.
- [19] JACKSON, J. D. Classical Electrodynamics, 2nd. ed., Wiley, New York, 1975.
- [20] ICRU, Stopping Powers and Ranges for Proton and Alpha Particles (ICRU, International Commission of Radiation Units and Measurements, 1994), vol. 49.
- [21] BETHE, H. A. Intermediate Quantum Mechanics, 1a. ed., W. A. Benjamin, New York, 1964.
- [22] FANO, U. Penetrations of protons, alpha particles and mesons. Annual Reviews of Nuclei Science, vol. 13, pag. 1-66, 1963.
- [23] ZIEGLER, J. F. Stopping of energetic Light ions in elemental matter, Applied Physics Reviews, vol. 85, n. 3, pag. 1249-1272, 1999.
- [24] LINDHARD, J. On the properties of a gas of charged particles. Matematisk-fysiske Meddelelser Det K. Danske Videnskabernes Selskab., vol. 28, n. 8, 1954.
- [25] LINDHARD, J.; WINTER, A. Stopping power of electron gas and equipartition rule. Matematisk-fysiske Meddelelser Det K. Danske Videnskabernes Selskab., vol. 34, n. 4, 1964.

- [26] FERMI, E. The ionization loss of energy in gases and in condensed materials. *Physical Review*, vol. 57, pag. 485-493, 1940.
- [27] IAFRATE, G. J.; ZIEGLER, J. F. Numerical evaluation of Lindhard's theory of stopping power for charged particle in a free electron gas. *Journal of Applied Physics*, vol. 5, pag. 5579-5581, 1979.
- [28] IAFRATE, G. J.;ZIEGLER, J. F.; NASS, M. J. Application of Lindhard's dieletric theory to the stopping of ions in solids. *Journal of Applied Physics*, vol. 51, p. 984-987, 1980.
- [29] NORTHCLIFFE, N. C. Energy loss and effective charge of heavy ions in Aluminum. *Physical Reviews*, vol. 120, pag. 1744-1757, 1961.
- [30] PAUL, H.; SCHINNER, A. Judging the reliability of stopping power tables and programs for heavy ions. *Nuclear Instruments and Methods B*, vol. 209, pag. 252-258, 2003.
- [31] WARD. D; et. al. Stopping for Heavy Ions, AECL-5313, Chalk River, 1973.
- [32] RIBAS, R. V.; SEALE, W. A.; RAO, M. N. Stopping of silver ions in solids. *Physical Review A*, vol. 28, núm. 6, pag. 3234-3237, 1983.
- [33] BRANDT, W.; KITAGAWA, M. Effective stopping-power charges of swift ions in condensed matter. *Physical Review B*, vol. 25, pag. 5631-5637, 1982.
- [34] SIGMUND, P.; SCHINNER, A. Binary Theory of electronic stopping. Nuclear Instruments and Methods B, vol. 195, pag. 64-90, 2002.
- [35] SIGMUND, P.; SCHINNER, A. Binary stopping theory for swift heavy ions. European Physics Journal D, vol. 12, pag. 425-434, 2000.
- [36] GRANDE, P. L.; SCHIWIETZ, G. Impact-parameter dependence of the electronic energy loss of fast ions, *Physical Review A*, vol. 58, pag. 3796-3801, 1998.
- [37] SCHIWIETZ, G.; GRANDE, P. L. A Unitary Convolution Approximation for impactparameter dependent electronic energy loss. *Nuclear Instruments and Methods B*, vol. 153, pag. 1-9, 1999.

- [38] Program CASP, versão 3.1, disponível para download em <a href="http://www.hmi.de/people/schiwietz/casp.html">http://www.hmi.de/people/schiwietz/casp.html</a>.
- [39] GLAZOV. L. G.; SIGMUND, P. Nuclear stopping in transmission experiments. Nuclear Instruments and Methos B, vol. 207, p. 240-256, 2003.
- [40] CURIE, W. M. A Monte Carlo programme for Doppler shift analysis. Nuclear Instruments and Methods, vol. 73, pag. 173-185, 1969.
- [41] WARD, D.; GRAHAM, R. L.; GEIGER, J. S. Measurement of stopping powers for <sup>4</sup>He, <sup>16</sup>O, and <sup>35</sup>Cl ions at ~ 1 to ~ 3 MeV per nucleon in Ni, Ge, Ag and Au. *Canadian Journal of Physics*, vol. 50, pag. 2302-2312, 1972.
- [42] LIN, W. K.; OLSON, H. G.; POWERS, D. Alpha-particle stopping cross section of solids from 0.3 to 2.0 MeV. *Physical Review B*, vol. 8, pag. 1881-1888, 1973.
- [43] CHU, W. K.; POWERS, D. Alpha-particle stopping cross-section in solids from 400 keV to 2 MeV. *Physical Review*, vol. 187, pag. 479-490, 1969.
- [44] LIGUORI NETO, R.; ADDED, N.; COUTINHO, F. A. S. A new experimental method for precise energy loss measurements. *Nuclear Instruments and Methods B*, vols. 161-163, pag. 159-163, 2000.
- [45] ZHANG, Y.; WEBER, W. J.; WHITLOW, H. J. Electronic stopping powers for heavy ions in silicon. Nuclear Instruments and Methods B, vol. 215, pag. 48-56, 2004.
- [46] BRANDOLINI, F.; MEDINA, N. H.; et. al. Stopping power of Nd ions in Pb determined from γ-ray lineshape analysis in Coulomb excitations. *Nuclear Instruments and Methods B*, vol. 132, pag. 11-17, 1997.
- [47] ARSTILA, K.; KEINONEN, K.; TIKKANEN, P. Stopping power for low-velocity heavy ions: (0.01 - 0.9) MeV/nucleon Si ions in 18 (Z = 13 - 79) metals. Nuclear Instruments and Methods B, vol. 101, pag. 321-326, 1995.
- [48] PAUL, H.; SCHINNER, A. Does the result of stopping power measurements depends on the method used?, *Physica Scripta*, vol. 69, C41, 2004.
- [49] RIBAS, R. V.; SEALE, W. A.; RONEY, W. M.; SZANTO, E. M. Energy loss of <sup>107</sup>Ag, <sup>109</sup>Ag and <sup>150</sup>Sm in Ni and Au. *Physical Review A*, vol. 21, pag. 1173-1176, 1980.

#### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [50] Site da NEC, http://www.pelletron.com (acesso em 10/02/2005.)
- [51] SAYER, R. O., Revue de Physique Appliquee, vol. 12, pag. 1543, 1977.
- [52] SAYER, R. O.; MADDOX, L. B. Prediction of equilibrium charge state distributions: charge state handbook, *Internal Lab. Memo*, 1978.
- [53] ROTBERG, V.; PEREIRA, D.; RAO, M. N.; UETA, N.; SALA, O. Revista Brasileira de Física, vol. 6, n. 3, 1976.
- [54] ADDED, N. Laboratório Pelletron-Linac. Comunicação Interna.
- [55] UETA, N.; ENGEL, W. G. P.; LEANDRO, J. J. G. Confecção de Alvos Nucleares. Comunicação interna, 2002.
- [56] MILNER, W. T. Upak documentation, Oak Ridge National Laboratory.
- [57] RIBAS, R. V. Curso de Instrumentação Nuclear. Apostila, 2002.
- [58] Site da EGG-Ortec, http://www.ortec-online.com/ (acesso em 03/03/2005.)
- [59] RIBAS, R. V. A camac data acquisition system based on PC-Linux, Nuclear Instruments and Methods A, vol. 483, pag. 830-832, 2002.
- [60] HVELPLUND, H. Energy loss and straggling of 100-500 KeV <sup>90</sup>Th, <sup>82</sup>Pb, <sup>80</sup>Hg e <sup>64</sup>Gd in H<sub>2</sub>. *Physical Review A*, vol. 11, pag. 1921-1927, 1975.
- [61] ABDESSELAM, M.; et. al. Cu, I and Au stopping powers in solid targets. Nuclear Instruments and Methods B, vol. 72, pag. 7-15, 1992.
- [62] BROWN, M. D.; MOAK, C. D. Stopping powers of some solids for 30 90 MeV <sup>238</sup>U ions. *Physical Review B*, vol. 6, pag. 90-94, 1972.
- [63] PAUL, H., <a href="http://www.exphys.uni-linz.ac.at/Stopping/">http://www.exphys.uni-linz.ac.at/Stopping/</a> (acesso em 26/01/2005.)
- [64] MOLLER, S. P.; CSETE, A.; et. al. Antiproton stopping at low energies: Confirmation of velocity-proportional stopping power. *Physical Review Letters*, vol. 88, n. 19,
- [65] FAMA, F.; LANSTSCHNER, G. H.; et. al. Energy-angle distribution fo low-energy hidrogen ions in thin aluminium and gold films. *Nuclear Instruments and Methods B*, vol. 164-165, pag. 241-249, 2000.