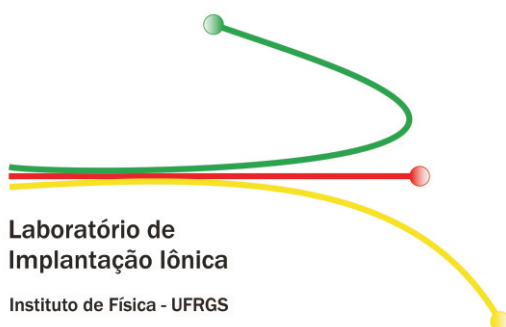




VII Encontro Sul- Americano de Colisões Inelásticas na Matéria

Gramado, RS, Brasil
27 a 30 de outubro de 2014

Livro de Resumos



Laboratório de
Implantação Iônica
Instituto de Física - UFRGS





Livro de Resumos
VII Encontro Sul- Americano de Colisões
Inelásticas na Matéria

Organizadores
Raul Carlos Fadanelli Filho
Pedro Luis Grande

Porto Alegre
2014

UFRGS – Instituto de Física

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Professora Ruth de Souza Schneider

E562 Encontro Sul-Americano de Colisões Inelásticas na Matéria
(7. : 2014 : Gramado, RS).

Livro de Resumos VII Encontro Sul-Americano de
Colisões Inelásticas na Matéria [recurso eletrônico] /
Organizadores: Raul Carlos Fadanelli Filho, Pedro Luis
Grande. – Porto Alegre : UFRGS - Instituto de Física, 2014.

Modo de acesso:

<<http://www.if.ufrgs.br/~grande/VIIESCIM.pdf>>

ISBN 978-85-64948-12-9

1. Implantação de íons. 2. Feixes de íons. I. Fadanelli
Filho, Raul Carlos. II. Grande, Pedro Luis. III. Título

VII Encontro Sul-Americano de Colisões Inelásticas na Matéria

27 a 30 de outubro de 2014

Gramado, RS, Brasil

O VII Encontro Sul-Americano de Colisões Inelásticas na Matéria é uma continuação dos encontros realizados no Brasil, Argentina e Chile (Gramado, Brasil em 2002, Viña del Mar, Chile em 2004, Buenos Aires, Argentina em 2006, Rio de Janeiro, Brasil em 2008, Valparaíso, Chile, em 2010 e Rosário, Argentina em 2012) e envolve pesquisadores de diferentes áreas que utilizam feixes de íons como técnica ou como estudo de processos básicos da interação íon matéria.

Esta série de encontros cobre diferentes áreas relacionadas ao estudo básico das interações das partículas atômicas e radiação em sólidos, superfícies, líquidos e gases. Além disso serão discutidos diversos tópicos abordando:

- aplicações utilizando técnicas espectroscópicas (TOF, PIXE, RBS, ERDA, NRA, FEEL);
- caracterização de materiais implantados;
- tópicos de química e física de superfície de um ponto de vista fundamental;
- estudos experimentais utilizando técnicas como STM, AFM, LEED, fotoemissão, AES, EELS, ISS, FTIR, entre outras;
- estudos teóricos utilizando a teoria do funcional da densidade, simulações Monte Carlo e dinâmica molecular.

O principal objetivo é fomentar o intercâmbio científico dos pesquisadores do Cone Sul, buscando agregar esforços em atividades conjuntas para incrementar a cooperação científica. A organização desta série de encontros tem contribuído para a consolidação e o desenvolvimento de atividades relacionadas com feixes de íons entre os países da América do Sul. Além do mais, estes encontros têm tido uma grande participação de estudantes de pós-graduação, criando oportunidades de intercâmbio com os pesquisadores mais renomados do Cone Sul na área de interações inelásticas.

O ESCIM 2014, na sua sétima versão, retorna a Gramado, 12 anos após a realização do primeiro encontro. Estamos ansiosos para receber uma grande participação de colegas e estudantes, de diferentes partes da América do Sul, como tem acontecido nas edições anteriores do encontro.

Comitês

Comitê científico e internacional

- Moni Behar. Instituto de Física, UFRGS, Brasil.
- Pedro L. Grande. Instituto de Física, UFRGS, Brasil.
- Nestor Arista. Centro Atómico Bariloche, CNEA, Argentina.
- Jorge Miraglia. IAFE CONICET, Argentina.
- Roberto Rivarola. IFIR, CONICETUNR, Argentina.
- Nelson V. Castro Faría. Instituto de Física, UFRJ, Brasil.
- Eduardo Montenegro. Instituto de Física, UFRJ, Brasil.
- Enio F. da Silveira. PUC Ríó de Janeiro, Brasil.
- Jorge E. Valdés. UTFSM, Chile.

Comitê organizador local

- Pedro L. Grande.
- Moni Behar.
- Johnny F. Dias.
- Agenor Hentz.
- Leandro Araújo.
- Raul C. Fadanelli.
- Ricardo Papaléo .
- Carla lochims dos Santos.

Índice

Programa	04
Contribuições orais	07
Pôsteres	45
Índice de autores	85

Programa

Segunda-feira (Lunes), dia 27 de outubro

14:00 a 17:00: Chegada

17:00 a 19:00: Inscrição

19:00: Recepção / coquetel

Terça-feira (Martes), dia 28 de outubro

08:30: Abertura

Chairperson: R. Rivarola

09:00: (C1) Canales de disipación de energía en procesos de reflexión y adsorción de átomos y moléculas en superficies metálicas (Diez Muiño, Espanha)

09:30: (C2) Interacción de protones y deuterones con metales de transición en el rango de bajas energías: el efecto de los electrones d (N. R. Arista, Argentina)

10:00: (O1) Ionización, stopping y straggling de CH₄, NH₃ y H₂O mediante un método de neonización (C. Montanari, Argentina)

10:20: (O2) Estudo da dinâmica da fragmentação da água por impacto de elétrons (N. Ferreira, Brasil)

10:40: Coffee Break

Chairperson: M. Behar

11:00: (C3) Radiocarbon measurements with the AMS technique at LAC-UFF: status report and future perspectives (R. Linares, Brasil)

11:30: (O3) Perfilometria em quantum dots CdSe/ZnS por espalhamento de íons de energia média (M. A. Sortica, Brasil)

11:50: (O4) Aplicações de PIXE à alimentação (Carla E. I. dos Santos, Brasil)

12:10: (O5) Nueva Representación de Funciones de Onda Del Continuo em Ondas Parciales (M. Fiori, Argentina)

12:30: Almoço

Chairperson: E. F. da Silveira

14:00: (C4) Energetic processing of the icy surfaces of the Jovian moons (G. Strazzulla, Itália)

14:30: (C5) Interferencia en ionización atómica por pulsos láser diseñados (Diego G. Arbó, Argentina)

15:00: (O6) Effects on nitrogen-acetone ice produced by energetic heavy ion collisions (K. F. Alcantara, Brasil)

15:20: (O7) Degradação de filmes de PMMA submetidos à radiação ionizante (M. G. Schappo, Brasil)

15:40: Coffee Break

Chairperson:

16:00 a 17:00: Pôster

Chairperson: C. Montanari

17:20: Homenagem Prof. G. Sigaud

17:30: (C6) Usos alternativos do acelerador Tandem para investigar, sintetizar e caracterizar materiais nanoestruturados (M. M. Sant'Anna, Brasil)

19:00: Reunião do comitê internacional

Quarta-feira (Miércoles), dia 29 de outubro

08:30

Chairperson: N. R. Arista

09:00: (C7) Electronic stopping of slow protons and He ions in solids (P. Bauer, Áustria)

09:30: (C8) Frenado de proyectiles cargados cerca de superficies en el formalismo dieléctrico semiclásico (F. Salvat-Pujol, Alemanha)

10:00: (O8) Excitación de plasmones en grafito pirolítico altamente orientado (S. Segui, Argentina)

10:20: (O9) Dynamic screening of an ion in a degenerate electron gas within the second-order Born approximation (José M. Fernández-Varea, Espanha)

10:40: Coffee Break

Chairperson: G. Jalbert

11:00: (C9) Cálculos de dinámica Electrón-Núcleo de H^+ colisionando com LiF en fase gaseosa: Sección de poder de frenamiento electrónico y nuclear (R. Cabrera Trujillo, México)

11:30: (O10) Accurate Stopping Power measurements for protons in the energy range of Ion Beam Analysis (M. V. Moro, Brasil)

11:50: (O11) Interacción de vórtices y cúspides en colisiones de ionización (F. Navarrete, Argentina)

12:10: (O12) Seções de choque absolutas não dissociativas e dissociativas de compostos aromáticos por impacto de elétrons e prótons a velocidades intermediárias (W. Wolff, Brasil)

12:30: Almoço

Chairperson: M. S. Graviele

14:00: (C10) Depósito energético a nivel nanométrico en sistemas biológicos irradiados con haces de iones (R. D. Rivarola, Argentina)

14:30: (C11) A técnica de PIXE aplicada ao estudo dos objetos do patrimônio artístico cultural (M. A. Rizzutto, Brasil)

15:00: (O13) Perda de energia de H e He em filmes de hidroxiapatita: implicações para terapia de câncer por feixes de íons (R. C. Fadanelli, Brasil)

15:20: (O14) Fotoionización de moléculas diatómicas mediante attopulsos asistida por láseres de diferentes intensidades (D. I. R. Boll, Argentina)

15:40: Coffee Break

Chairperson: N. V. Castro Faria

16:00: (C12) Resultados recientes de colisiones atómicas obtenidos en el laboratorio de

Bariloche con proyectiles vestidos en el rango de energias intermedias (S. Suárez, Argentina)

16:30: (C13) Perfis de composição e espectrometria de retroespalhamento Rutherford (O. de Melo, Cuba)

17:00: (O15) New trends in Ion Beam Analysis at LAMFI – USP (M. H. Tabacniks, Brasil)

17:20: (C14) Correlación inter-electrónica em doble ionización de He por imacto de protones y antiprotones (S. D. López, Argentina)

19:00: Banquete

Quinta-feira (Jueves), dia 30 de outubro

08:30

Chairperson: J. F. Dias

09:00: (C15) Simulation of swift ion bombardment effects (Eduardo M. Bringa, Argentina)

09:30: (C16) Efeitos da radiação iônica sob confinamento espacial em uma dimensão: o caso de filmes ultrafinos poliméricos (R. M. Papaléo, Brasil)

10:00: (O16) (G. García Bermúdez, Argentina)

10:20: (O17) Caminhos de Formação do CH_2^+ na Fragmentação de CH_4 por Impacto de Elétrons (L. Sigaud, Brasil)

10:40: Coffee Break

Chairperson: G. Bermudez

11:00: (C17) Biomonitoring and Toxicology Studies with PIXE (J. F. Dias, Brasil)

11:30: (O18) Coeficiente de fluorescência de Al e Si através da determinação experimental de seção de choque de produção de raios X induzida por prótons (A. P. L. Bertol)

11:50: (O19) Interacción de iones livianos con capas de grafeno (J. D. Uribe, Chile)

12:10: Encerramento

Contribuições orais

Canales de disipación de energía en procesos de reflexión y adsorción de átomos y moléculas en superficies metálicas

I. Goikoetxea^(a,b), L. Martin-Gondre^(c), G. A. Bocan^(d), M. Blanco-Rey^(e,f), J. I. Juaristi^(b,e,f), M. Alducin^(b,f) y R. Díez Muiño^(b,f)

(a) Humboldt Universität, Berlín, Alemania

(b) Centro de Física de Materiales (CSIC-UPV/EHU), San Sebastián, España

(c) Université de Franche-Comté, Besançon, Francia

(d) Centro Atómico de Bariloche CNEA, San Carlos De Bariloche, Argentina

(e) Departamento de Física de Materiales UPV/EHU, San Sebastián, España

(f) Donostia International Physics Center DIPC, San Sebastián, España

La descripción teórica de los procesos de reflexión y adsorción de átomos y moléculas diatómicas de energías térmicas en superficies metálicas se basa habitualmente en la aproximación adiabática. Gracias a formalismos teóricos capaces de alcanzar niveles muy altos de precisión (la teoría del funcional de la densidad, DFT, por ejemplo), la dinámica de estos procesos y las probabilidades con que pueden ocurrir en función de distintos parámetros presentes en el sistema, se pueden describir de forma cualitativa y, en muchos casos, cuantitativa. A pesar del éxito demostrado por la aproximación adiabática en este contexto, es cierto que este tipo de procesos puede y, en ocasiones, tiene que venir acompañado de distintos canales de disipación de energía. Los más importantes entre ellos son la excitación de pares electrón-hueco y la excitación de fonones en la superficie.

En esta contribución describimos distintas aproximaciones teóricas que pueden servir para describir estos procesos disipativos, estudiamos distintos casos en los que tienen relevancia y discutimos la importancia relativa de cada uno de los canales de disipación con ejemplos concretos. En particular, nos centraremos, entre otros sistemas, en la pérdida de energía de átomos de nitrógeno en superficies de plata [1] y en la pérdida de energía sufrida por átomos calientes de hidrógeno que se difunden en superficies de Paladio [2]. Utilizaremos, por último, este mismo modelo teórico para estudiar la diferencia en la reactividad de la superficie de tungsteno cuando la constante de red se expande al crecer epitaxialmente encima de hierro [3].

[1] L. Martin-Gondre, G. A. Bocan, M. Blanco-Rey, M. Alducin, J. I. Juaristi y R. Díez Muiño, *Journal of Physical Chemistry C* 117 (2013) 9779.

[2] M. Blanco-Rey, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño, H. F. Busnengo, G.-J. Kroes y M. Alducin, *Physical Review Letters* 112 (2014) 103203.

[3] I. Goikoetxea, J. I. Juaristi, R. Díez Muiño y M. Alducin, *Physical Review Letters* 113 (2014) 066103.

Interacción de protones y deuterones con metales de transición en el rango de bajas energías: el efecto de los electrones d

C. E. Celedón, E. A. Sánchez y N.R. Arista

Instituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche, S. C. Bariloche, Argentina
Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile.

Es bien conocido que el principal mecanismo de pérdida de energía de iones livianos en sólidos es la excitación de electrones de valencia o conducción. En el caso de los metales, los desarrollos teóricos basados en modelos de gas de electrones libres predicen, para bajas energías, un comportamiento del coeficiente de frenamiento (stopping power) proporcional a la velocidad del ion. Las primeras evidencias experimentales indicaban un comportamiento aproximadamente similar [1].

Estudios experimentales más recientes mostraron desviaciones de dicho comportamiento para ciertos metales [2]. Estos efectos se hallaron para el caso de protones en Cu, Ag y Au, tanto en el caso de channeling como en policristales [3]. Efectos similares se observaron posteriormente en aisladores de alto gap (LiF y AlF₃).

La explicación teórica propuesta para explicar este comportamiento -inesperado en el caso de los metales- se basa en las propiedades de la estructura de bandas de los metales de transición, más específicamente en las propiedades de los electrones d existentes en dichos metales.

A fin de obtener mayores evidencias y entender mejor la influencia de los electrones d en el proceso de frenamiento de iones en metales de transición se realizaron nuevas mediciones de coeficientes de frenamiento en los metales de la columna X de la Tabla Periódica (Ni, Pd y Pt), vecina inmediata a la de Cu, Ag y Au.

Los resultados muestran un comportamiento inesperado y no unívoco en lo que respecta a la dependencia con la velocidad [4]. Dichos resultados plantean la necesidad de estudios teóricos que tengan en cuenta de manera realista la estructura de bandas de los metales de transición.

En particular, un modelo teórico basado en teoría cuántica de scattering y en propiedades de la densidad de estados de los metales mencionados permite analizar físicamente los resultados de una manera consistente.

[1] A. Mann and W. Brandt, *Physical Review B* 24 (1981) 4999.

[2] R. Blume, W. Eckstein and H. Verbeek, *NIM B* 168 (1980) 57; *ibid.* 194 (1982) 67.

[3] J. E. Valdés et al, *NIM B* 73 (1993) 313; *Phys. Rev. A* 49 (1994) 1083; E. A. Figueroa et al, *Phys. Rev. A* 75 (2007) 010901.

[4] C. E. Celedón et al, *Phys. Rev. A* 88 (2013) 012903; C. E. Celedón et al (to be published).

Ionización, stopping y straggling de CH_4 , NH_3 y H_2O mediante un método de neoinización

Claudia C Montanari, Jorge E. Miraglia

Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET y UBA, Buenos Aires, Argentina

Mediante un método de neoinización describimos las moléculas compuestas por hidridos del segundo período de la tabla periódica (CH_4 , NH_3 , OH_2 , FH , todos con 10 electrones ligados) como átomos vestidos en un pseudopotencial esférico [1]. Pusimos a prueba este método calculando varias de las magnitudes colisionales de interés experimental: secciones eficaces de ionización (totales, single y doble diferenciales), pérdida de energía (*stopping power*), valor cuadrado medio en la pérdida de energía (*energy-loss straggling*) y energía media de excitación. Para esto combinamos la descripción del blanco neoinizado con distintos modelos colisionales tales como continuum-distorted-wave–eikonal-initial-state (CDW-EIS), primera aproximación de Born, y shell-wise local plasma approximation (SLPA).

Los resultados muestran que el modelo propuesto reproduce bastante bien los valores experimentales de los distintos parámetros colisionales en el rango de energías intermedias y altas. A modo de ejemplo mostramos en la figura las secciones eficaces totales de ionización y el stopping number (adimensionalización del stopping power). También pudimos calcular la energía media de excitación de estas moléculas, siendo $I(\text{H}_2\text{O})=73.5$ eV (cercano al recomendado en las tablas ICRU49 de 75 eV); $I(\text{CH}_4)=43.0$ eV; $I(\text{NH}_3)=57.0$ eV.

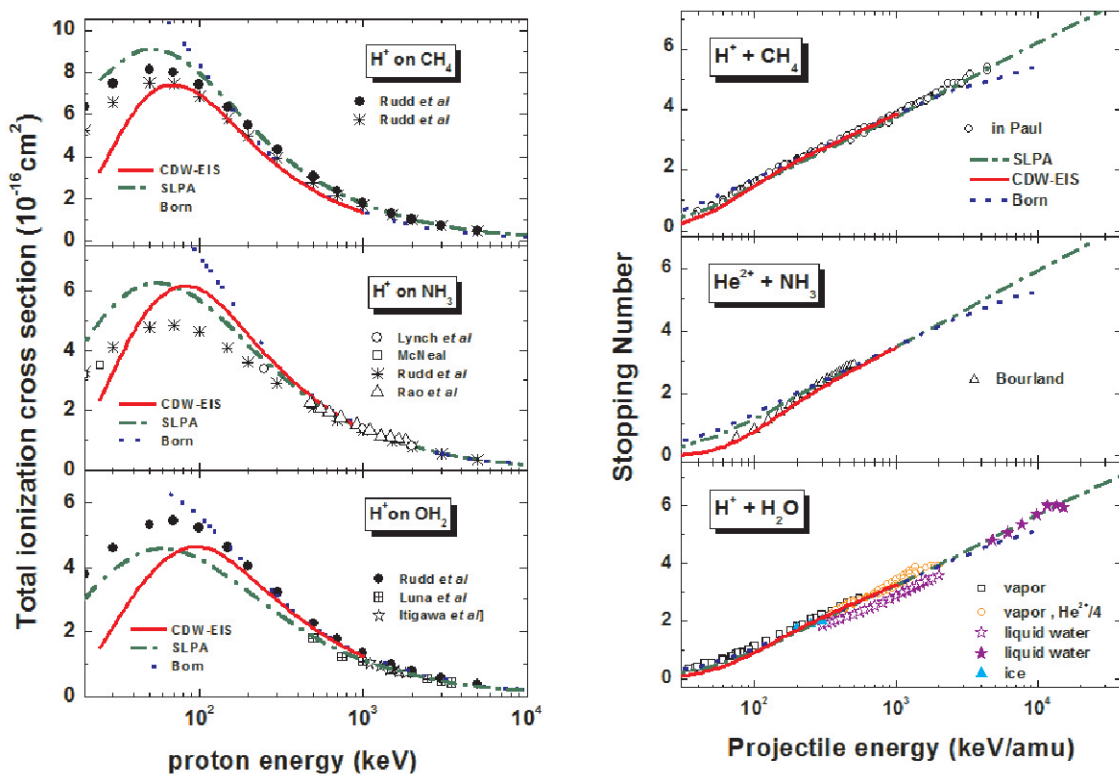


Figura: sección eficaz total de ionización y stopping number de H^+ y He^{2+} en las distintas moléculas consideradas. Las curvas representan nuestros resultados con el método de neoinización y distintos modelos colisionales (CDW-EIS línea sólida, SLPA línea cortada y punto, 1ra Born línea de puntos). Los datos experimentales son incluidos con distintos símbolos como se detalla en la figura. Las referencias se encuentran citadas en [1]. En el caso de stopping en agua puede notarse los datos correspondientes a distintos estados (vapor, líquido, hielo).

[1] C. C. Montanari, J. E. Miraglia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47** (2014) 015201.

Estudo da dinâmica da fragmentação da água por impacto de elétrons.

Natalia Ferreira^(a), L. Sigaud^(b), e E.C. Montenegro^(c)

(a) Departamento de Física, CEFET/RJ, Unidade Maracanã, Rio de Janeiro, - CEP: 20271-110, Brasil.

(b) Instituto de Física, UFF, Niterói, - CEP: 24210-346, Brasil.

(c) Instituto de Física, UFRJ, Rio de Janeiro, CP: 68528 - CEP: 21941-972, Brasil.

A fragmentação da água por impacto de elétrons tem sido estudada por diferentes ângulos e abordagens e por diversos autores há mais de 50 anos [1]. O tema desperta grande interesse por ser um processo chave em diversas aplicações como em biologia, nas consequências para o corpo humano interagindo com radiação ionizante, ou em astrofísica, como o estudo de atmosferas planetárias ou cometárias irradiadas por elétrons do vento solar e/ou elétrons secundários de radiações.

O estudo da dinâmica da fragmentação e da distribuição de energia dos fragmentos da água é feito por diversos métodos, que em sua maioria, medem os fragmentos mais energéticos que se dissociam via explosão Coulombiana após múltipla ionização [2]. Na literatura disponível não é possível encontrar dados sobre os fragmentos mais lentos vindos principalmente da ionização simples. Utilizando a metodologia DETOF (Delayed Extraction TOF Spectroscopy), desenvolvida na Universidade Federal do Rio de Janeiro [3], é possível determinar não somente a distribuição de energia dos fragmentos lentos produzidos pela interação de elétrons com água, mas também pode-se determinar a quantidade de íons produzidos com uma determinada energia média. Esta técnica tem maior sensibilidade para íons de baixa energia, faixa onde a maioria das técnicas não tem grande precisão. Podemos medir energias de fragmentos tão pequenas quanto a energia térmica.

Os resultados a serem apresentados foram obtidos para os fragmentos OH^+ e O^+ , onde variamos a energia do feixe de elétrons entre 28 eV e 700 eV, e medimos a distribuição de energia destes. Na figura abaixo podemos ver alguns resultados para o fragmento O^+ , em a) temos a distribuição de energia obtida para impacto de elétrons de 100 eV. A distribuição de energia total é a soma de 3 distribuições distintas, uma exponencial, devido aos fragmentos supra térmicos, uma gaussiana centrada em 0,2 eV, e uma outra gaussiana centrada em 1,2 eV. A contribuição relativa de cada distribuição varia com a energia do elétron incidente, como pode ser visto na figura b). Obtivemos as seções de choque de cada uma destas distribuições, cujo comportamento com a energia do elétron permite explorar detalhes da dinâmica da fragmentação. Estes resultados serão discutidos, assim como os demais resultados para fragmento OH^+ .

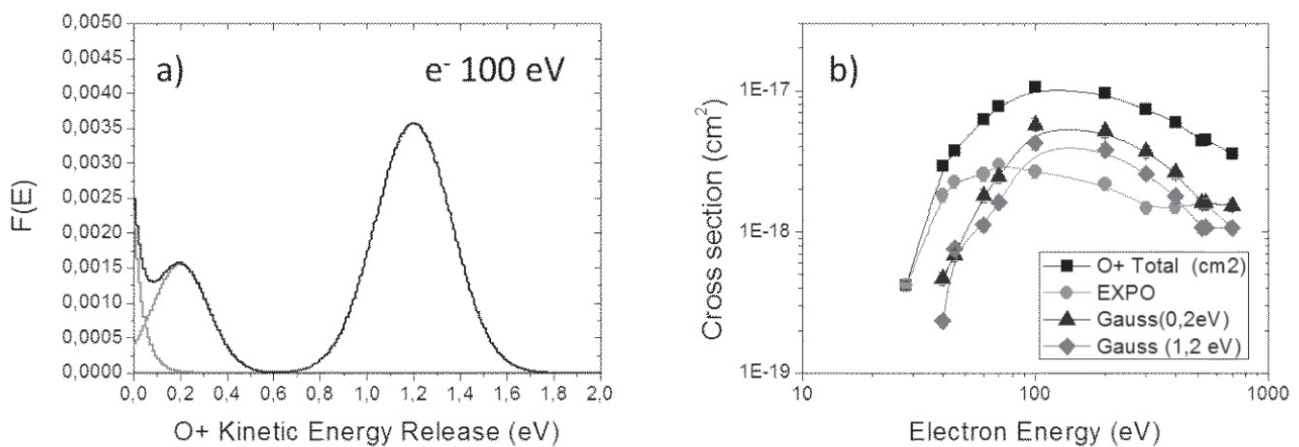


Figura: a) Distribuição de energia do fragmento O^+ no impacto com elétrons de 100 eV. a) Seção de choque de cada uma das 3 distribuições de energia do fragmento O^+ , para várias energias de elétron incidente.

[1] J.W. McConkey, C.P. Malone, P.V. Johnson, C. Winstead, V. McKoy, I. Kanik, *Physics Reports*, 466, 1–103. (2008)

[2] Simon J. King, Stephen D. Price, *International Journal of Mass Spectrometry*, 277, 84–90. (2008)

[3] Natalia Ferreira, L. Sigaud and E. C. Montenegro, *Journal of Physics: Conference Series*, 488, 012042. (2014)

Radiocarbon measurements with the AMS technique at LAC-UFF: status report and future perspectives

R. Linares^(a), K.D. Macario^(a), P.R.S. Gomes^(a), C. Carvalho^(b), H.C. Santos^(a), F.M. Oliveira^(a), M.D. Castro^(a) e E.Q. Alves^(a)

(a) Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, 24210-340, Niterói, RJ, Brazil

(b) Departamento de Geoquímica, Universidade Federal Fluminense, 24020-150, Niterói, RJ, Brazil

Accelerator Mass Spectrometry (AMS) is a very powerful technique to a direct measurement of isotopic concentration as small as $1:10^{15}$ atoms with good accuracy and precision. Compared to the scintillation counting method, the AMS technique requires less acquisition time (minutes) and small amount of sample (few mg). These characteristic open up a wide possibilities of research using isotopes such as ^{10}Be , ^{14}C , ^{26}Al , ^{36}Cl , ^{129}I . Among them, the ^{14}C isotope is the most applied one for studies in geosciences, oceanography and archaeology.

In the 2009 the first brazilian radiocarbon sample preparation laboratory (LAC-UFF) for AMS technique was implemented at the IF-UFF. It provides a complete infraestructure to pre-treatment of organic (soil, sediments, wood, charcoal) and inorganic (corals, shells) samples, conversion to CO_2 and its reduction into graphite. In March 2012 it was installed an open-air 250KV Single Stage Accelerator Mass Spectrometry (SSAMS, *National Electrostatic Corp.*) system dedicated to radiocarbon. Molecular isobars of ^{14}C ($^{12}\text{CH}_2$, ^{13}CH) are dissociated with an Argon stripper and the ^{14}C is detected with a Si detector. Offline Faraday Cups measure the $^{12}\text{C}^+$ and $^{13}\text{C}^+$ in the high energy section as well. Thus, $^{14}\text{C}/^{12}\text{C}$ ratio is corrected by the measured ^{13}C on-line. Typical beam current is $50\ \mu\text{A}$ $^{12}\text{C}^+$, with a beam transmission of 32 – 34% measured after the Ar stripper. Machine background, measured with an unprocessed ^{14}C -dead graphite is about 1.5×10^{-15} $^{14}\text{C}/^{12}\text{C}$ (~50kyr BP). At LAC-UFF we use HOx-II (SRM 4990c) as standard modern and IAEA reference materials (C2, C5 e C6) for quality control. Day-by-day precision is of 0.8%. The number of request for radiocarbon measurements at LAC-UFF and some reseach undergoing will be outlined.

Perfilometria em *quantum dots* CdSe/ZnS por espalhamento de íons de energia média

M. A. Sortica^(a), L. G. Almeida^(a), P. L. Grande^(a), C. Radtke^(b), R. Debastiani^(a,c), J. F. Dias^(a) e A. Hentz^(a)

(a) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil

(b) Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil

(c) Karlsruhe Institute of Technology, Institute for Photon Science and Synchrotron Radiation (IPS), Hermann-von-Helmholtz-Platz 1, D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany.

Nanocristais compostos são materiais promissores, usados em muitos campos do desenvolvimento tecnológico. Entretanto, o conhecimento preciso do perfil de distribuição elementar dentro deles ainda é um desafio. Espalhamento de íons de média energia (MEIS) é uma técnica de análise por feixe de íons, capaz de obter perfis de profundidade com resolução subnanométrica. Recentemente, a técnica MEIS foi otimizada para análise de materiais nanoestruturados [1], passando a ser uma ferramenta promissora para a caracterização estrutural dentro de *quantum dots* QDs [2].

Neste trabalho, utilizamos a técnica MEIS, combinada com microscopia eletrônica de transmissão, espectrometria de retroespalhamento Rutherford (RBS) e emissão de raios-X induzidos por partículas (PIXE), para caracterizar nanoestruturas núcleo-casca comerciais de CdSe/ZnS [3].

Para obter a informação estrutural dos nanocristais, utilizamos o software de simulação de espectros *PowerMeis*, desenvolvido em nosso laboratório, para simular espectros de MEIS para diferentes modelos estruturais de *quantum dots*. A caracterização foi obtida pelo melhor ajuste do espectro simulado, com o espectro experimental.

Observamos que, apesar da amostra possuir uma razão Cd:Se de 0,69:0,31, o núcleo é um cristal estequiométrico de CdSe e o cádmio excedente está distribuído na casca, formando uma estrutura CdSe/CdZnS. O tamanho obtido para o núcleo, de 5,2 nm, está de acordo com as imagens de TEM e com o espectro de fotoluminescência dos nanocristais.

Este estudo mostra que a técnica MEIS, combinada com outras técnicas analíticas, é um método poderoso para determinar perfis de distribuição elementar, dentro de nanopartículas com diâmetro de cerca de 5 nm, o que dificilmente pode ser obtido por outras técnicas. Isto possibilita estudos da formação e estabilidade da estrutura interna dos QDs quando expostos a vários tipos de processos, como aquecimento e irradiação de íons.

[1] M. A. Sortica, P. L. Grande, G. Machado and L. Miotti, *Journal of Applied Physics* 106 (2009) 1.

[2] H. Matsumoto, K. Mitsuhashi, A. Visikovskiy, T. Akita, N. Toshima, and Y. Kido, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 268 (2010) 2281.

[3] M. A. Sortica, P. L. Grande, C. Radtke, L. Almeida, R. Debastiani, J. F. Dias, A. Hentz, *Applied Physics Letters* 101 (2012) 023110.

Aplicações de PIXE à alimentação

Carla Eliete Iochims dos Santos^(a), Patrícia Molz^(b), Daniela Leffa^(c), Vanessa Moraes de Andrade^(c), Sílvia Isabel Rech Franke^(b) and Johnny Ferraz Dias^(d)

^(a) Instituto de Matemática, Estatística e Física, FURG, Brasil

^(b) Programa de Pós-Graduação em Promoção da Saúde, UNISC, Brasil

^(c) Programa de Pós-Graduação em Ciências da Saúde, UNESC, Brasil

^(d) Instituto de Física, UFRGS, Brasil

A dieta humana inclui vários compostos orgânicos e inorgânicos que aumentam os riscos de desenvolvimento de obesidade, desnutrição, doenças cardiovasculares e câncer, dentre outros. Entretanto, uma alimentação balanceada e saudável pode fornecer nutrientes essenciais para o metabolismo, garantindo o adequado balanço químico do organismo. Além disso, o conhecimento da composição elementar dos alimentos é necessário para garantir produtos livres de contaminação química. O principal objetivo deste trabalho é apresentar e discutir competências e limitações de técnicas de feixes de íons aplicadas à alimentação. Em um trabalho recente, por exemplo, foi realizado um experimento com animais desnutridos para avaliar possíveis mudanças metabólicas e a influência da suplementação com *shiitake* na composição elementar sanguínea de ratos através de PIXE. Resultados mostraram diferença estatística entre os grupos controle (animais desnutridos) e tratamento (animais desnutridos tratados com *shiitake*) para o Cl, K, Zn e Br [1]. Resultados complementares, obtidos por FT-IR sobre o metabolismo dos animais, mostraram correlação com os de composição elementar, indicando o envolvimento de proteínas do plasma no transporte de alguns elementos. A suplementação com *shiitake* alterou a composição elementar e de proteínas do sangue. Outro estudo realizado com PIXE mostrou alterações na concentração de elementos do rim e do fígado de camundongos obesos, alimentados com uma dieta rica em carboidratos e açúcares, em comparação com animais não obesos, tratados apenas com a dieta padrão (ração e água) [2]. Além dos estudos da composição elementar de tecidos, motivados por alguma dieta ou suplementação alimentar específica, resultados da composição elementar de alimentos e bebidas obtidos com PIXE revelam a potencialidade do método analítico para pesquisas na área de alimentação e produção de alimentos [3].

[1] P. Molz, J. H. Ellwanger, C. E. I. dos Santos, J. F. Dias, D. Campos, V. A. Corbellini, D. Prá, M. T. L. Putzke, S. I. R. Franke, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 318, 2014, 194.

[2] D. D. Leffa, C. E. I. dos Santos, R. Debastiani, L. Amaral, M. L. Yoneama, J. F. Dias, V. M. Andrade, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 318, 2014, 198.

[3] L. A. Bouffleur, C. E. I. dos Santos, R. Debastiani, M. L. Yoneama, L. Amaral, J. F. Dias, Journal of Food Composition and Analysis 30, 2013, 19.

Nueva Representación de Funciones de Onda Del Continuo em Ondas Parciales

Marcelo Fiori^(a), Silvana Puca^(b)

(a) Depto de Física, Fac. De Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta

(b) Depto de Matemática, Fac. De Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Salta

El tratamiento habitual para tratar funciones de onda del continuo en potenciales centrales es desarrollar las funciones en la forma:

$$H \psi_{l,m}(S, d) = \sum_{l,m} C_{l,m} F_l \psi_{l,m}(S, d) \quad (a)$$

A partir de aquí y mediante las propiedades asintóticas de las funciones radiales se pueden extraer características del proceso de colisión, por ejemplo desfases, etc [1].

Este tipo de desarrollos ofrece una buena gama de ventajas. Las funciones radiales son reales, la descripción del proceso de colisión a partir de los desfases es muy clara; pero también presenta inconvenientes, a medida que aumentamos el momento de la partícula la convergencia de la serie se vuelve muy lenta por lo que es un método usado principalmente para colisiones a bajas energías.

En este trabajo proponemos un desarrollo de la forma

$$H \psi_{l,m}(S, d) = e^{ik \cdot r} \sum_{l,m} C_{l,m} G_l \psi_{l,m}(S, d) \quad (b)$$

Habíamos usado este tipo de desarrollo para el potencial de Coulomb aproximando las funciones radiales mediante funciones gaussianas [2]. En este caso las ventajas encontradas fueron la rápida convergencia de la serie y la suavidad de las funciones radiales que permite una muy eficiente aproximación de estas funciones por gaussianas.

Ahora extendemos el método a potenciales radiales en general. Analizamos las propiedades analíticas de las soluciones obtenidas, sus formas asintóticas, y cómo extraer información relevante del proceso de colisión a partir de estas funciones y su vínculo con el desarrollo convencional (a).

Mostraremos mediante algunos ejemplos las ventajas y desventajas de este método con respecto al habitual.

[1] Charles J. Joachaim, "Quantum Collision Theory" North Holland Publishing Company, 1975.

[2] Marcelo Fiori, J.E. Miraglia, Comp. Phys. Comm. **183**, 2528 (2012).

Energetic processing of the icy surfaces of the Jovian moons

G. Strazzulla

INAF-Osservatorio Astrofisico, Via S. Sofia 78, 95123 Catania, Italy

gianni@oact.inaf.it

The surfaces of the icy moons of Jupiter are continuously modified by bombardment of energetic ions and electrons from the magnetosphere. The study of the induced effects is based on laboratory simulations aimed e.g. at investigating the induced non-thermal chemical reactions. Pure ices (e.g. H₂O, NH₃, CO₂, SO₂ and many others) or mixtures are deposited at low temperature (10-150 K) and irradiated with energetic ions or electrons. When the thickness of the target is greater than the ion penetration depth, ions are implanted in the target and if they are reactive (e.g., H⁺, Cⁿ⁺, Nⁿ⁺, Oⁿ⁺, Sⁿ⁺) induce all of the effects of any other ion, but in addition have a chance, being stopped in the target, to form new species containing the projectile. These experiments are of fundamental relevance to clarify the formation history of the molecular species in particular to reveal their endogenic or exogenic origin.

Some of the results obtained so far will be presented, in particular: (1) H₂O₂ is formed by ion bombardment of pure water ice and such a process is believed to be responsible for its presence in the ices of Europa and other satellites. (2) The experimental results relative to implantation of reactive ions indicate that some molecular species observed on icy planetary surfaces (e.g. CO₂ and hydrated sulfuric acid) could have been formed by implantation of reactive ions that populate the jovian (and others) magnetosphere and continuously bombard the surfaces of the embedded satellites. In some instances implantation of magnetospheric ions is the main mechanism to initiate the so called sulfur and carbon cycles on the icy surfaces. (3) Electron bombardment of water-carbon dioxide mixtures produces carbonic acid that is stable at higher temperature. In turns the bombardment of carbonic acid re-produces carbon dioxide that exhibits a peculiar IR band shape at about 4.25 μm that well mimic the one observed on Ganymede and Callisto.

The results are of the greatest relevance to understand existing data from space missions and to program the future observations by the programmed space missions, particularly JUICE (ESA).

Interferencia en ionización atómica por pulsos láser diseñados

Diego G. Arbó^(a)

(a) Instituto de Astronomía y Física del Espacio – IAFE- (Conicet-UBA), CC67 Suc. 28 (1428) Buenos Aires, Argentina

En los procesos de fotoionización atómica se usan pulsos de dos colores con frecuencias conmensurables para diseñar la forma del campo eléctrico y controlar las franjas de interferencia en el espectro de momentos del electrón [1,2]. El control de fase coherente permite investigar los procesos físicos involucrados en la ionización atómica en función de la fase relativa φ de las dos componentes de frecuencia del campo [3]. Aunque se han logrado muchos avances en la teoría despreciando el potencial del núcleo iónico en la aproximación de campo fuerte (SFA), para que los resultados sean precisos se debe incluir el efecto del potencial atómico sobre la emisión del electrón emitido, como en la aproximación Coulomb-Volkov (CVA), o en forma *ab initio* resolviendo la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (TDSE).

En esta charla se presenta un estudio sobre efectos de interferencia que resultan de la interacción de un átomo aislado con un pulso láser intenso de dos colores. Con la ayuda de un modelo semiclásico (SMM), se identifica la interrelación entre interferencias *intra-* e *interciclo* de trayectorias de electrones directos en la fotoionización por láser multiciclos de dos colores. Se explora el efecto del potencial Coulombiano del *core* remanente sobre la emisión de electrones, especialmente sobre el patrón de interferencia resultante. La teoría facilita la comprensión de experimentos de interferometría de paquetes de onda electrónicos con precisión por debajo de las decenas de attosegundos [1]. La dependencia de las modulaciones *intraciclo* con el potencial de Coulomb de largo alcance abre la posibilidad de obtener la imagen del potencial del *core* en la emisión de electrones directos obtenidos fácilmente en los experimentos. Precisamente, en la charla se mostrarán resultados experimentales por pulsos de dos colores [1,4]

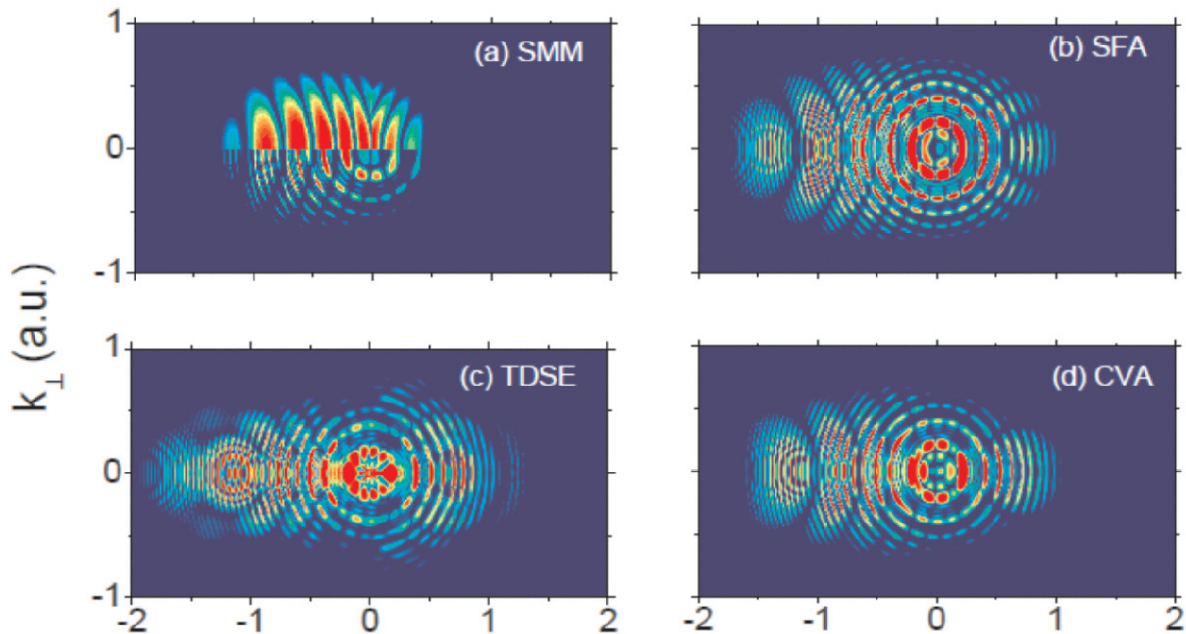


Figura: Distribución de momento doblemente diferencial en ionización de hidrogeno atómico por un pulso de 10^{14} W/cm², longitud de onda de 800 nm y fase relativa $\varphi = \pi/2$.

La figura muestra cálculos teóricos de las distribuciones para un láser de dos colores. La mitad inferior de la Fig. a corresponde a resultados semiclásicos (SMM) para un pulso de cuatro ciclos, mientras que el patrón en la mitad superior exhibe el patrón *intraciclo*, el que claramente modula los anillos *interciclo* mostrados en el panel inferior. Los cálculos cuánticos (SFA, CVA, y TDSE) resultan en distribuciones de momento más elongadas más allá de los límites clásicos. Cuando comparamos las distribuciones CVA y SFA, se observa que las franjas *intraciclo* CVA en la Fig. d están ligeramente corridas hacia el origen con respecto a las SFA en Fig. b debido al efecto del campo Coulombiano del *core*. La distribución TDSE en Fig. c muestra interferencias similares a las CVA, SFA y SMM.

- [1] X. Xie *et al.*, Phys. Rev. Lett. **108**, 193004 (2012).
- [2] D. G. Arbó *et al.*, Phys. Rev. A **89**, 043414 (2014).
- [3] F. Ehlotzky, Phys. Rep. **345**, 175 (2001).
- [4] R. Moshhammer *et al.*, comunicación privada (2014).

Effects on nitrogen-acetone ice produced by energetic heavy ion collisions

K. F. Alcantara^a, A. L. F. de Barros^b, E. F. da Silveira^a, H. Rothard^c, P. Boduch^c

^a Departamento de Física, PUC- Rio, Rua Marquês de São Vicente 225, 22451-900, RJ, Brazil.

^b Departamento de Física, CEFET-RJ, Av. Maracanã, 229, 20271-110 Rio de Janeiro, RJ, Brazil

^c CIMAP-CIRIL-Ganil, Boulevard Henri Becquerel, BP 5133, F-14070 Caen Cedex 05, France

The N₂ molecule, formed by one of the most abundant elements in the Universe, is the most common constituent of Earth's modern atmosphere. It is also a major component of the atmosphere of Saturn's moon Titan and has been detected in trace amounts in the atmospheres of Venus and Mars. Acetone (CH₃COCH₃) has the C=O link, which is present in several molecules of biological interest. The mixture of these two molecular species, N₂:CH₃COCH₃, causes asymmetries in the nitrogen molecule, which enhances the IR absorption and allows its study by FTIR spectroscopy. Moreover, irradiating the N₂:CH₃COCH₃ ice in laboratory, the cosmic ray-ice interaction can be simulated and analyzed [1].

This ice mixture has been irradiated with 40 MeV ⁵⁸Ni¹¹⁺ ions, while FTIR spectra were obtained at certain fluences. Figure 1 shows spectra of N₂:CH₃COCH₃ before and after irradiation. Daughter molecules resulting from the induced chemical reactions were identified; from the dependence of the molecular abundance, the evolution with fluence of destruction and compaction cross sections of the ice were determined. The average value of $2.2 \pm 0.4 \times 10^{-13}$ cm² was obtained for the average destruction cross-section using seven different bands. As a conclusion, this result, compared to that for the pure acetone ice [2], shows that acetone in the presence of N₂ becomes more difficult to be destroyed by radiolysis.

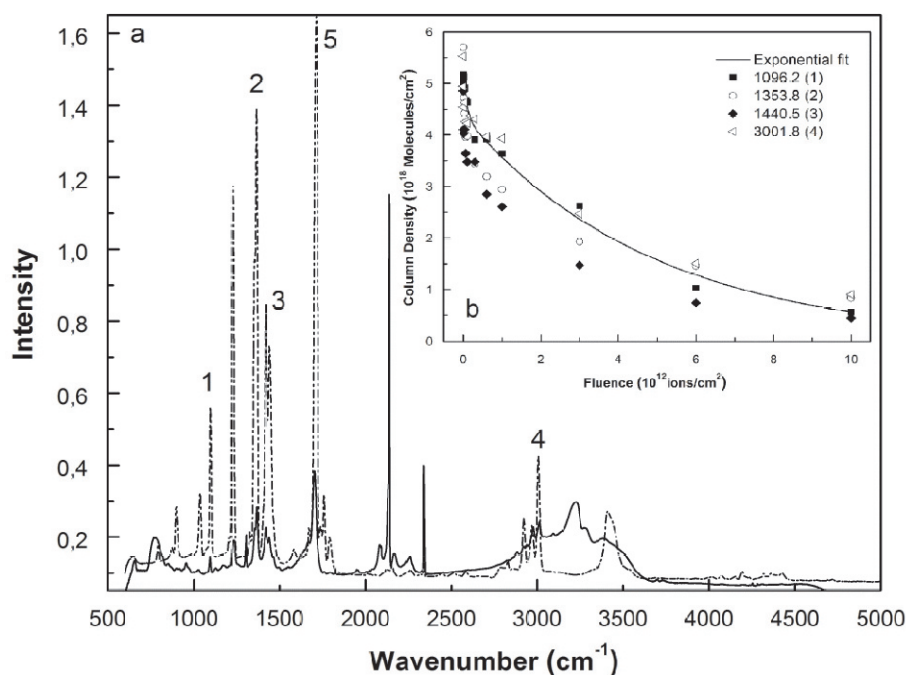


Figure1:

a- FTIR spectra of N₂:CH₃COCH₃ ice at 13 K before (dotted line) and after (solid line) irradiation at fluence of 1×10^{13} ions/cm² with 40 MeV ⁵⁸Ni¹¹⁺ ions. Vibration modes are labelled with integer numbers in both graphics:

1- CH₃ rocking mode;

2/ 3 - CH₃ symmetrical deformation;

4 - CH₃ asymmetrical stretch;

5 (1713.2 cm⁻¹) -CO stretch.

b- Inset - Evolution of the acetone molecular column density as a function of the fluence, considering four vibration modes observed in the IR spectra; the used A-values are those proposed in the reference [2]. The line represents the best fitting of the decrease of the CH₃COCH₃ column density.

[1] de Barros A. L. F., da Silveira E. F., Pilling, S., Domaracka A, Boduch P., Rothard H., MNRAS, 2014, **438**, 2026–2035

[2] Diana P. P. Andrade, Ana L. F. de Barros, Jingjie Ding, Hermann Rothard, Philippe Boduch and Enio F. da Silveira, MNRAS 2014 444, 3792–3801

The authors acknowledge the agencies CAPES/COFECUB, FAPERJ and CNPq for partial support.

Degradação de filmes de PMMA submetidos à radiação ionizante

M.G. Schappo^(a,b), R.S. Tiedt^(a,b), L.G. da Silva^(a), E.F. da Silveira^(c) e L.S. Farenzena^(a)

(a) Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) – Campus Reitor João David Ferreira Lima Trindade – Florianópolis, SC – Brasil – CEP 88040-900

(b) Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Santa Catarina (IFSC) – Campus São José Rua José Lino Kretzer, 608 – Praia Comprida – São José, SC – Brasil – CEP 88103-310

(c) Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-RJ)

Rua Marquês de São Vicente, 225 – Gávea – Rio de Janeiro, RJ – Brasil – CEP 22451-900

Materiais poliméricos submetidos à radiações ionizantes tem sido estudados de modo a quantificar e controlar as modificações induzidas nas cadeias macromoleculares. As características medidas neste processo de degradação são as mais diversas sendo que as mudanças induzidas no arranjo molecular são quantificadas através de uma variada gama de técnicas experimentais. O poli(metacrilato de metila) – PMMA em especial tem sido bastante estudado à diversas décadas devido a seu amplo uso em ambientes sujeitos à radiações ionizantes, como por exemplo na construção de concentradores fotovoltaicos ou como protótipo para fotoresistências usados na microeletrônica [1-3].

Neste trabalho, submetemos amostras de PMMA a feixes de íons energéticos (H^+ de 600KeV e 1,5MeV, He^+ de 1,0MeV e N^{2+} de 1,5MeV) para estudar sua degradação em função a dose de radiação recebida. A degradação foi quantificada através de espectros de infravermelho por transformada de Fourier (FTIR), onde se comparou a intensidade de IR absorvido em cada ligação química após o processo de irradiação com a intensidade original da absorção para o polímero virgem.

Um dos resultados encontrados mostra que PMMA irradiado com feixe de nitrogênio (N^{2+}) à energia de 1,5MeV faz com que a ligação C=O presente no polímero chegue a ter seu sinal diminuído em 70% quando a dose incidente vale 10^{16} íons/cm². A figura abaixo ilustra a diminuição da absorbância de diferentes grupamentos químicos para diferentes doses de íons (até um máximo de $1.1E16$ cm⁻²). Apresentaremos também dados da degradação do PMMA induzida por fótons na região do ultravioleta de vácuo analisados através de FTIR e espectrometria de massas.

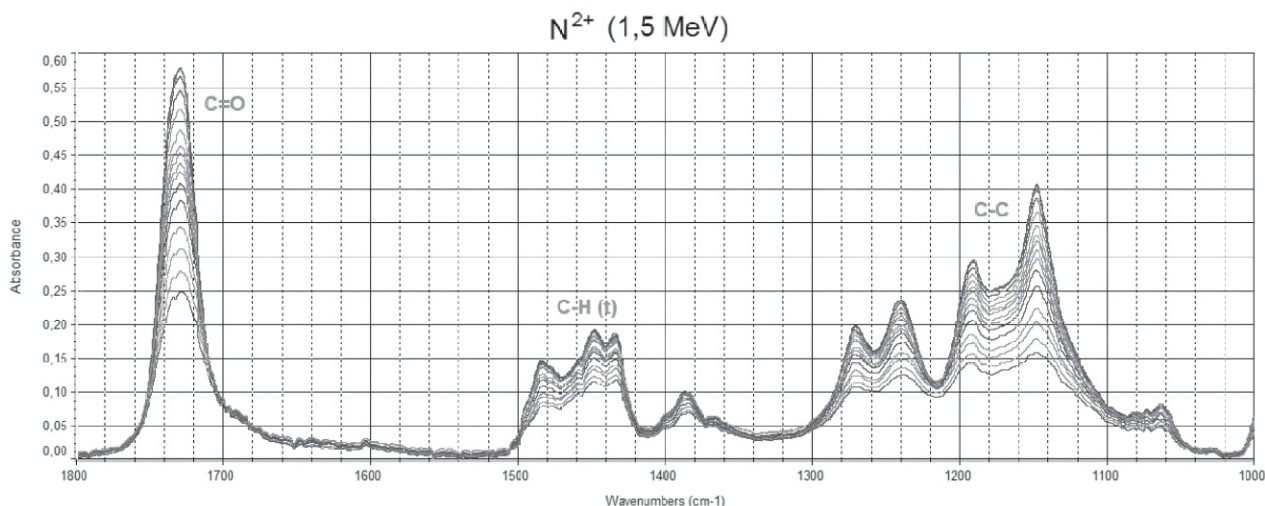


Figura: Mudanças no espectro de PMMA para doses diferentes de N^{2+} (1,5MeV).

[1] MILLER, D.C. et al. *An investigation of the changes in poly(methyl metacrylate) specimens after exposure to ultra-violet light, heat and humidity*. Solar Energy Materials & Solar Cells, **111**, p. 165-180, 2013;

[2] MILLER, K.J. et al. *Conformations of poly(methyl metacrylate) and its degraded forms upon radiation*. Macromolecules, **26**, p. 4945-4952, 1993;

[3] Nagai, N et al. *Infrared analysis of depth profiles in UV-photochemical degradation of polymers*, Polymer Degradation and Stability, **88**, p. 224-233, 2005.

Homenagem a Geraldo M. Sigaud

E. C. Montenegro^(a)

(a) Instituto de Física, UFRJ, Rio de Janeiro, CP: 68528 - CEP: 21941-972, Brasil.

O Prof. Sigaud foi um participante ativo e destacado nas várias edições do simpósio de Colisões Inelásticas na Matéria. Amigo de praticamente todos da nossa comunidade, colaborou cientificamente com muitos dos seus membros, contribuindo para consolidar, enriquecer e dar visibilidade à área de Colisões Atômicas com Íons Pesados na América do Sul. Nesta homenagem serão lembradas algumas de suas inúmeras contribuições para a área.



Prof. Geraldo Monteiro Sigaud

Usos alternativos do acelerador Tandem para investigar, sintetizar e caracterizar materiais nanoestruturados

M.M. Sant'Anna, C. F. S. Codeço, S.L.A. Mello, e B. F. Magnani

Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro 21941-972, RJ, Brasil

Feixes de íons são amplamente usados tanto para síntese quanto para caracterização de materiais [1]. Uma estratégia usual é produzir íons em uma fonte, injetar estes íons em um sistema acelerador, e transportar o feixe até uma câmara de vácuo na qual uma amostra sólida é modificada e/ou analisada. No modo padrão de operação de aceleradores eletrostáticos do tipo Tandem, ânions são acelerados, convertidos em íons positivos e novamente acelerados. Assim, com máquinas relativamente pequenas, é possível obter feixes de íons com vários MeV (e.g. [2]).

Nesta palestra serão discutidos dois modos alternativos para operação de aceleradores eletrostáticos do tipo Tandem que permitem ampliar a versatilidade destas máquinas e sua gama de aplicações.

O primeiro envolve modificações, que permitem o uso na saída do acelerador de feixes de íons negativos de alguns keV até poucas dezenas de keV. A voltagem central do tubo acelerador é usada neste caso com duas funções: (i) para controle de uma lente eletrostática similar a uma lente Einzel que aqui é o próprio acelerador e (ii) para aumentar a energia de partículas neutras produzidas na célula gasosa central do acelerador e detectadas na saída de zero graus de seu ímã analisador. Esta última função permite aumentar a eficiência de detecção destas partículas neutras pela emissão de elétrons secundários e uma rápida otimização do feixe desejado. Resultados para a produção de feixes de Rh^- de alguns keV e síntese, por implantação, de aglomerados de Rh com poucos nanômetros serão mostrados como exemplo [3].

O segundo modo de operação, ainda menos ortodoxo, usa a fonte de íons como câmara de irradiação da amostra e o acelerador como espectrômetro de massa para controle da amostra durante a irradiação iônica. Uma amostra sólida a ser estudada é colocada no catodo da fonte de íons e bombardeada por íons de Cs^+ de poucos keV internos à fonte. Correntes altas de Cs^+ são assim facilmente obtidas e a amostra é radicalmente modificada.

Para mostrar o potencial deste segundo modo de operação serão mostrados resultados de um estudo da modificação de amostras de Silício recobertas com filmes finos de Titânio e Ouro. As amostras são irradiadas por íons de Césio de 2 keV com fluências que variam espacialmente ao longo de sua superfície. O posterior uso de microscopias de varredura e de força atômica permite estudar a síntese, evolução e destruição de nanoestruturas auto-organizadas na amostra, em função da fluência de íons de Cs^+ incidentes.

[1] B. Schmidt e K. Wetzig, "Ion beams in materials processing and analysis", Springer, London, 2013.

[2] M. M. Sant'Anna, A. C. F. Santos, L. F. S. Coelho, Ginette Jalbert, N. V. de Castro Faria, F. Zappa, P. Focke, e Dž. Belkić, Phys. Rev. A 80 (2009) 042707.

[3] V.M.T.S. Barthem, A. Rogalev, F. Wilhelm, M. M. Sant'Anna, S. L. A. Mello, Y. Zhang, P. Bayle-Guillemaud e D. Givord. Phys. Rev. Lett. 109, (2012) 197204.

Electronic stopping of slow protons and He ions in solids.

D. Goebel, D. Roth, e P. Bauer

Institut für Experimentalphysik, Johannes Kepler University Linz, Altenberger Straße 69, 4040 Linz

Ions are slowed down when moving in matter. Nuclear stopping is attributed to interaction with the nuclear charge and electronic stopping to energy transfer to the electronic system. The resulting deceleration is described by the stopping power $S = -dE/dx$. While for sufficiently high ion velocities electronic stopping is well understood [1,2,3], in the regime of slow ions the prevailing mechanisms are still unresolved and the interplay of electronic and nuclear stopping is the more important the higher the probability is for electron promotion in atomic collisions.

When slow ions interact with a free electron gas (FEG) at projectile velocities $v \ll v_F$ (v_F denotes the Fermi velocity of the electron gas) electronic stopping is only due to excitations in binary Coulomb collisions. For metals, this concept is adopted for excitation of conduction and valence electrons. For a FEG, $dE/dx = Q(Z_1, r_s)v$, where $Q(Z_1, r_s)$ denotes the friction coefficient which depends on the atomic charge of the projectile Z_1 and the Wigner-Seitz radius r_s .

Arista and coworkers were the first to reveal deviations from the velocity proportionality of electronic stopping in metals [4] and have shown how precisely one can model electronic stopping of protons in metals even if the conduction band exhibits a density of states significantly different from that of a FEG, due to the contribution of the d-bands [5]. Experimental results on such band structure effects have been observed for a variety of metals [5,6,7,8, 9] and insulators (influence of the band gaps, [10,11,12], both leading to significant deviations from velocity proportionality.

For slow He ions in many cases different velocity dependences are observed compared to protons. This rises the question, which of those deviations are due to band structure effects, and which ones should be taken as indications of processes different from binary Coulomb collisions, like electron promotion in atomic collisions.

Another point of interest refers to electronic stopping of H and He ions in semiconductors. Atomic semiconductors (Si, Ge) are strictly speaking covalently bound insulators, while for binary semiconductors like ZnO, ZnS the chemical bonds exhibit ionic character to significant extent. Therefore, one should expect that their stopping powers behave differently compared to ionic insulators. Recent results are discussed [13].

[1] P.M. Echenique, F. Flores, and R.H. Ritchie, Sol. State Phys. 43, 229 (1990).

[2] P. Sigmund, Particle Penetration and Radiation Effects: General Aspects and Stopping of Swift Point Charges (Springer, Berlin, New York, 2008).

[3] C. P. Race et al., Rep. Prog. Phys. 73, 116501 (2010).

[4] J.E. Valdes, G. Martinez-Tamayo, G.H.J. Lantschner, J.C. Eckart, and N.R. Arista, Nucl. Instr. Meth. B73, 313 (1993).

[5] C. Celedon, E.A. Sanchez, M.S. Moreno, N. Arista, J.D. Uribe, M. Mery, J.E. Valdes, and P. Vargas, Phys. Rev. A88, 012903 (2013).

[6] E. Cantero, G. Lantschner, J. Eckardt, and N. Arista, Phys. Rev. A 80, 032904 (2009).

[7] S. N. Markin, D. Primetzhofer, M. Spitz, and P. Bauer, Phys. Rev. B 80, 205105 (2009).

[8] D. Goebel, D. Roth and P. Bauer, Phys. Rev. A 87, 062903 (2012)

[9] L. Serkovic, E. Sánchez, O. Grizzi, J. Eckardt, G. Lantschner, and N. Arista, Phys. Rev. A 76, 040901(R) (2007).

[10] S. N. Markin, D. Primetzhofer, and P. Bauer, Phys. Rev. Lett. 103, 11, 113201 (2009).

[11] D. Primetzhofer, S.N. Markin, and P. Bauer, Nucl. Instr. Meth. B 269, 19, 2063-2066 (2011).

[12] D. Goebel, W. Roessler, D. Roth, and P. Bauer, Phys. Rev. A90, in press.

[13] D. Roth, D. Goebel, and P. Bauer, ICACS26, July 2014, Debrecen, Hungary, and to be published.

Frenado de proyectiles cargados cerca de superficies en el formalismo dieléctrico semiclásico

F. Salvat-Pujol^(a), W.S.M. Werner^(b)

(a) Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt, Max-von-Laue-Straße 1, 60438 Frankfurt (Alemania)

(b) Institut für Angewandte Physik, Technische Universität Wien, Wiedner Hauptstraße 8-10/134, 1040 Wien (Austria)

En esta contribución se presenta un resumen del formalismo dieléctrico semiclásico para el frenado electrónico de proyectiles cargados en medios infinitos. El modelo se completa discutiendo el frenado cerca de una superficie plana entre dos medios. El modelo es estrictamente válido sólo para proyectiles no relativistas; la extensión a proyectiles relativistas se discutirá. Como aplicaciones del modelo se consideran la simulación Monte Carlo de espectros de pérdidas de energía de electrones [1,3] y la emisión de electrones secundarios [2]. La aplicabilidad del modelo se valida en última instancia a través de la comparación con medidas experimentales.

[1] F. Salvat-Pujol et al., *Surface and Interface Analysis*, 45 (2013) 873-894.

[2] W.S.M. Werner et al., *Physical Review B*, 88 (2013) 201407R.

[3] F. Salvat-Pujol et al., *Physical Review B*, 89 (2014) 205435.

Excitación de plasmones en grafito pirolítico altamente orientado

S. Seguí^(a), W. Werner^(b), A. Bellissimo^(b), y Z. L. Miskovic^(c)

(a) Centro Atómico Bariloche. Av Bustillo 9500, S. C. De Bariloche, 8400 Río Negro, Argentina

(b) Institut fuer Angewandte Physik, TU Vienna, Austria

(c) Department of Applied Mathematics, University of Waterloo, Waterloo, Ontario Canada N2L 3G1

La excitación de plasmones es una de los procesos más relevantes en la interacción de partículas cargadas con sólidos y superficies. Espectros de pérdida de energía de electrones por reflexión (REELS, [1]) obtenidos en grafito pirolítico altamente orientado (HOPG) muestran características distintivas que pueden identificarse como plasmones de volumen y de superficie. En este trabajo usamos un modelo hidrodinámico de dos fluidos combinado con una descripción de gas de electrones laminado (LEG) [2,3] para estudiar la interacción de electrones energéticos incidiendo sobre HOPG en distintas configuraciones. Este marco teórico nos permite calcular, entre otras cantidades, la densidad de probabilidad de pérdida de energía de los electrones incidentes, y compararla con los espectros experimentales y cálculos correspondientes a grafeno mono- y multicapa. Identificamos picos de plasmones y discutimos los límites de aplicabilidad del modelo teórico al sistema estudiado.

[1] W. Werner, F. Salvat-Pujol, A. Bellissimo, R. Khalid, W. Smekal, M. Novák, A. Ruocco, G. Stefani. Phys. Rev. B 88 (2013) 201407(R).

[2] D. J. Mowbray, S. Seguí, J. L. Gervasoni, Z. L. Miskovic, N. R. Arista. Phys. Rev. B 82 (2010) 035405.

[3] V. B. Jovanović, I. Radović, D. Borka, Z. L. Mišković. Phys. Rev. B 84 (2011) 155416.

Dynamic screening of an ion in a degenerate electron gas within the second-order Born approximation

Hrachya B. Nersisyan ^(a), José M. Fernández-Varea ^(b), Néstor R. Arista ^(c)

* Deceased

(a) Plasma Theory Group, Institute of Radiophysics & Electronics, 0203 Ashtarak, Armenia

(b) Facultat de Física (ECM & ICC), Universitat de Barcelona, Diagonal 645, E-08028 Barcelona, Spain

(c) División de Colisiones Atómicas, Centro Atómico Bariloche & Instituto Balseiro, 8400 Bariloche, Argentina

The screening of ions in condensed media plays a crucial role in many important phenomena such as the stopping of ions in solids. Here we report on the perturbative treatment of screening effects for an ion that moves with speed v in a degenerate electron gas (Fermi wave number k_F , one-electron radius r_s). To this end, we formulate the dynamic Friedel sum rule (FSR), proposed in [1,2], within the second-order Born (B2) approximation. The main results of our study [3] are summarized as follows for the relevant case of screened potentials $V(r) = -(Z_1 e^2/r) \chi(r)$, where Z_1 is the atomic number of the ion and χ is the screening function. The general solution for the dynamic screening parameter in the B2 approximation can be written as an implicit equation $\alpha =_{\text{RPA}} [F(s) + Z_1 H(s, r_s)]^{1/2}$, where $_{\text{RPA}} = (4k_F/a_0)^{1/2}$, a_0 is the Bohr radius and α is a numerical constant [2,3]. The functions $F(s)$ and $H(s, r_s)$ depend on v through $s = v/v_F$ ($v_F = k_F/m_e$). The B2 correction to α is embodied in the term that contains $H(s, r_s)$, which also depends on r_s and the Fourier transform of χ . Neglecting this term we retrieve the well-known expression $\alpha_{\text{B1}} =_{\text{RPA}} [F(s)]^{1/2}$ derived within the B1 approximation [1,2]. In contrast to α_{B1} , the B2 approximation correctly predicts that α depends on the sign of Z_1 . Furthermore, for a static ion ($v = 0$) one recovers the results for the static B2 FSR. The figure shows the dynamic B1, B2 and exact (obtained using the exact FSR [2]) screening parameters for $r_s = 1.6$ and $Z_1 = 1$ as a function of v , calculated with the Yukawa and hydrogenic potentials. It is seen that, even in the unfavourable case of low velocities, the B2 results deviate from the exact ones but improve upon the $\alpha_{\text{B1}}(v)$ curves.

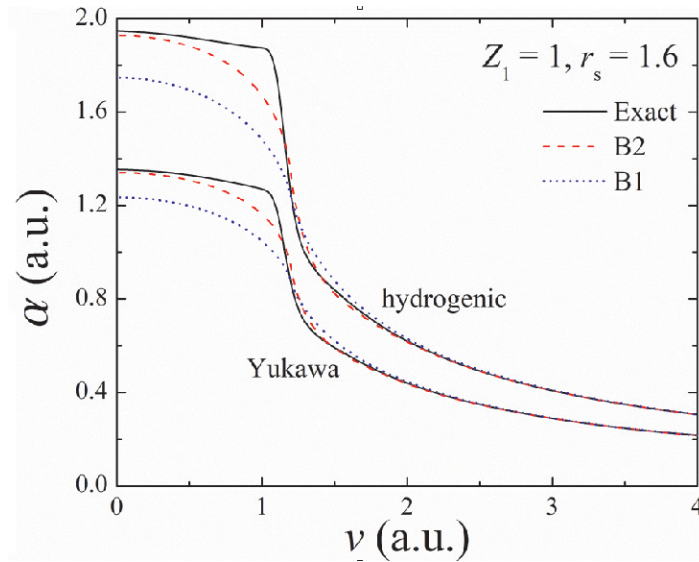


Figure: B1, B2 and exact dynamic screening parameters for $r_s = 1.6$ and $Z_1 = 1$ as a function of v .

[1] I. Nagy, A. Bergara, Nucl. Instrum. Meth. B 115 (1996) 58-61.

[2] A. F. Lifschitz, N. R. Arista, Phys. Rev. A 57 (1998) 200-207.

[3] H. B. Nersisyan, J. M. Fernández-Varea, N. R. Arista, Nucl. Instrum. Meth. B (submitted).

Cálculos de dinámica Electrón-Núcleo de H^+ colisionando con LiF en fase gaseosa: Sección de poder de frenamiento electrónico y nuclear

R. Cabrera-Trujillo

Instituto de Ciencias Física,
Universidad Nacional Autónoma de México, Ap. Postal 43-8, Cuernavaca, 62251 Morelos, México

En esta plática presentaré los avances en el cálculo de la sección eficaz de frenamiento electrónico y nuclear para protones incidentes en una molécula de Fluoruro de Litio (LiF) mediante la implementación del método de *Electron-Nuclear Dynamics* (END). El método END consiste en acoplar la dinámica del electrón al núcleo mediante una descripción macromolecular del sistema basada en estado coherentes y así resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Al final de la dinámica se obtiene la función de onda y la proyección sobre estado determina la probabilidad de captura electrónica, pérdida de energía del proyectil, excitación, vibración y fragmentación del blanco.

Así, determinamos la sección eficaz de captura electrónica, de frenamiento electrónico y nuclear, como función de la velocidad o energía del proyectil. En particular reportamos que para velocidades del proyectil entre 0.2 y 1.5 u.a. La sección de frenamiento electrónico muestra un comportamiento lineal. Sin embargo, a bajas velocidades, debido a la captura electrónica, la sección de frenamiento no muestra un efecto de umbral ni una dependencia lineal con la velocidad de los protones. Nuestros resultados se comparan con trabajos experimentales y teóricos disponibles en la literatura.

Finalmente discutimos posibles escenarios para estudiar el mismo problema en fase sólida.

Se agradece el apoyo del proyecto PAPIIT IN-110-714, al comité del VII-ESCIM y al ICF-UNAM.

Accurate Stopping Power measurements for protons in the energy range of Ion Beam Analysis

M. V. Moro^(a), T. F. Silva^(a), N. Added^(a) and M. H. Tabacniks^(a)
^(a) Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil

Nowadays, there is an increasing interest in the Ion Beam Analysis community for accurate stopping power data, mainly for soft charged particles (like protons and alphas) in any kind of materials. Accurate stopping power data is necessary to achieve precise quantification of the elemental composition and profile in samples and specially for self-consistent Ion Beam Analysis [1]. In other hand, to verify the agreement of current theoretical or semi-empirical models with experimental data, lowest possible uncertainties are valuable. To contribute with the improvement of the international database of stopping powers and to evaluate the confidence of theoretical models, we are developing an accurate and traceable protocol for stopping power measurements with relative uncertainty less than 2%. This protocol was applied to the measurements of stopping power of protons in Aluminum and Molybdenum using the transmission method in the energy range of 0.7-3.2 MeV. The main contributions for the stopping power uncertainty are: 0.1% for the beam energy, 0.7% for the foil thickness including elemental purity checked by PIXE analysis and 1.6% for the energy loss measurements, resulting in an average overall uncertainty of 1.7% for H⁺ in Al and ~1.9% for H⁺ in Mo data in the quoted energy range. The experimental data were compared to SRIM-2003, CASP, PSTAR, Geant4 and modern Bethe-Bloch formulation [2]. SRIM-2003 and a Bethe-Bloch fit, living the mean excitation energy as a free parameter, showed the best agreement with the experimental data. (FAPESP)

References:

- [1] C. Jeyenes, N. P. Barradas and E. Szilágyi, *Analytical Chemistry* **84**, (2012) 6061-6069.
- [2] H. Paul and D. Sánchez-Parcerisa, *NIMB* **312**, (2013) 110-117.

Interacción de vórtices y cúspides en colisiones de ionización

F. Navarrete^(a), M. Feole^(a), R. O. Barrachina^(a), y A. Kövér^(b)

(a) Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo, Av. Bustillo 9500, 8400 Bariloche, Argentina

(b) Institute for Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences, P.O. Box 51, Debrecen H-4001, Hungría

Es largamente conocida y documentada la existencia del denominado pico de captura al continuo (ECC por su sigla en inglés), que fue primeramente observado hacen ya cuatro décadas en colisiones ion-átomo [1], y más recientemente en colisiones por impacto de positrones [2]. Por otra parte, los vórtices cuánticos constituyen una estructura también presente en los procesos de colisión cuyo estudio, en cambio, fue abordado esporádica y parcialmente durante décadas, y su presencia fue recientemente probada, siendo observados experimentalmente en la ionización de átomos por impactos de electrones [3] e iones [4], y teóricamente analizados para positrones [5] y pulsos eléctricos [6].

Las condiciones para su ocurrencia, y la anatomía de ambas estructuras es de diferente naturaleza. Los vórtices, que se generan en la función de onda en etapas tempranas de la colisión, pueden disiparse en algún momento de su evolución, mientras que otros pueden sobrevivir hasta el régimen asintótico, donde se manifiestan como cerros de co-dimensión 2 en el espacio de configuraciones multidimensional del elemento de matriz T . Por otro lado, los picos ECC aparecen como divergencias en el umbral del proceso de transferencia de carga. En este trabajo analizamos las condiciones en que estas dos estructuras se aproximan una a la otra en el espacio de configuraciones de T , y los efectos que este encuentro puede producir en la sección eficaz múltiple diferencial.

[1] G. B. Crooks and M. E. Rudd, Phys. Rev. Lett. 25, 1599 (1970)

[2] A Kövér and G. Laricchia, Phys. Rev. Lett. 80, 5309 (1998)

[3] J. H. Macek et al., Phys. Rev. Lett. 112, 083201 (2014)

[4] L. Ph. H. Schmidt et al., Phys. Rev. Lett. 112, 083201 (2014)

[5] F. Navarrete et al., J. Phys. B 46, 115203 (2013)

[6] S. Yu Ovchinnikov et al., Phys. Rev. Lett. 105, 203005 (2010)

Seções de choque absolutas não dissociativas e dissociativas de compostos aromáticos por impacto de elétrons e prótons a velocidades intermediárias

W. Wolff^a, H. Luna^a, Lucas Sigaud^b, Natália Ferreira^c, André C. Tavares^d, E.C. Montenegro^a

(a) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Av. Athos da Silveira Ramos, 149, Centro de Tecnologia, bloco A, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 21941-972

(b) Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense, Av. Gal. Milton Tavares de Souza s/nº, Gragoatá, Niterói, 24210-346, RJ, Brasil, 24210-346

(c) Instituto Federal do Rio de Janeiro, IFRJ, Rua Senador Furtado, 121-125, Maracanã, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 20270-021

(d) Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rua Marquês de São Vicente 225, Gávea, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 22453-900

Moléculas aromáticas apresentam uma estabilidade química elevada em comparação a moléculas não-aromáticas, e em azabenzenos mono e di-substituídos a ação de agentes ionizantes induz a perturbações na sua estrutura resultando em clivagens de suas ligações e pre e pós-rearranjos. O foco do presente trabalho foi verificar a diferenciação e o grau de alteração da dissociação molecular em relação à substituição de um ou dois grupos CH na molécula de benzeno por um ou dois átomos de nitrogênio por impacto de partículas leves (elétrons) e pesadas (prótons).

As seções de choque não dissociativas e dissociativas de benzeno, da piridina e da pirimidina foram medidas através da técnica de espectrometria de massa por tempo de voo, e obtida em valores absolutos. As medições foram efetuadas na faixa de energias de 70-800eV por impacto de elétrons e 250-2500 keV por colisões com prótons. Os rendimentos das distribuição dos fragmentos iônicos são apresentadas em relação ao íon molecular de origem ou à soma de todos os íons como função da energia do projétil para verificar o grau de estabilidade molecular e no padrão de fragmentação, a independência da natureza da interação coulombiana no processo de colisão. É apresentada uma comparação com os resultados existentes na literatura.

O trabalho anterior focando unicamente a molécula pirimidina [1] mostrou como as seções de choque absolutas podem ser descritas com sucesso utilizando-se um modelo semi-empírico simples com base na aproximação Born incluindo informações relativas aos orbitais moleculares (MOs), como configuração eletrônica, energia de ionização dos orbitais e ocupação dos mesmos. As seções de choque (SCs) absolutas dissociativas e não dissociativas medidas em função da energia incidente do projétil quando comparadas aos valores das SCs obtidos pelo modelo teórico para a ionização de cada MO permitem inferir a população de vacância dos MOs de valência e sua contribuição percentual na formação de fragmentos iônicos, como mostrado na Figura. A proposta é verificar a possível existência de uma regularidade na determinação e contribuição dos orbitais envolvidos na fragmentação de compostos moleculares de massa maiores.(benzeno apresenta $m=78$). A determinação destes valores podem ser úteis em cálculos mais complexos.

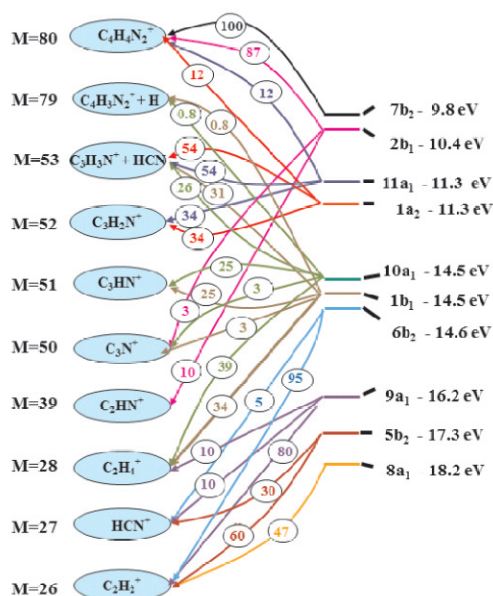


Figura: Esquema sugerido da contribuição (centro - porcentagem) da ionização dos orbital moleculares (direita) na formação de fragmentos de massa M (esquerda) para a molécula pirimidina

[1] Wania Wolff, Hugo Luna, Lucas Sigaud, Andre C. Tavares, and Eduardo C. Montenegro, The Journal of Chemical Physics **140**, (2014) 064309.

Depósito energético a nivel nanométrico en sistemas biológicos irradiados con haces de iones

R. D. Rivarola^(a), C. Champion^(b), O. A. Fojón^(a), M. E. Galassi^(a), J. Hanssen^(a), J. M. Monti^(a), M. Quinto^(b), C. A. Tachino^(a) y Ph. Weck^(c)

(a) Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR) y Laboratorio de Colisiones Atómicas (FCEIA, UNR), Rosario, Argentina

(b) Université Bordeaux I, CNRS/IN2P3, Centre d'Etudes Nucléaires de Bordeaux-Gradignan, CENBG, Gradignan, France

(c) Department of Chemistry and Harry Reid Center for Environmental Studies, University of Nevada, Las Vegas, USA

La comprensión de los mecanismos físicos que producen deposición energética en la materia biológica sometida a irradiación con haces de iones, constituye un tema de interés fundamental en radioterapia y en particular en hadronterapia. Diferentes procesos electrónicos como ionización e intercambio de carga son candidatos principales para obtener una descripción adecuada del fenómeno estudiado. Con el empleo de modelos de onda distorsionada y la aproximación de primer orden de Born con correctas condiciones asintóticas, se investigan distintos blancos moleculares en interacción con iones simple y múltiplemente cargados a velocidades de colisión intermedias y altas. Entre las mencionadas moléculas se consideran las cuatro nucleobases y el esqueleto azúcar-fosfato del ADN como así también la base uracil del ARN. Las secciones eficaces simple y doblemente diferenciales y las secciones eficaces totales muestran un muy buen acuerdo con los resultados experimentales para emisión electrónica. Para captura electrónica, solo existen muy pocas mediciones de secciones eficaces totales para ser contrastadas con las predicciones teóricas.

Si bien a energías suficientemente altas las secciones eficaces totales de ionización son dominadas por emisión desde los orbitales externos, siendo éstas también más importantes que las correspondientes a captura electrónica, los cálculos que realizamos muestran que la energía depositada en el blanco es gobernada por el intercambio de carga desde orbitales internos. Se observa en todo caso que el depósito energético se produce preferencialmente sobre el azúcar-fosfato.

Focalizamos también el interés en el caso de moléculas de agua, teniendo en cuenta que constituyen el componente principal del tejido biológico. Se analizan diferentes efectos físicos para una mejor interpretación de las mediciones existentes, como por ejemplo la influencia sobre el electrón emitido del apantallamiento dinámico producido por los electrones que permanecen ligados al blanco residual. Finalmente, con el objetivo de comparar los patrones de depósito energético a escala nanométrica en agua líquida y en ADN, se investigan los resultados obtenidos usando un modelo simplificado del núcleo celular.

A TÉCNICA PIXE APLICADA AO ESTUDO DOS OBJETOS DO PATRIMÔNIO ARTÍSTICO CULTURAL

M.A.Rizzutto^(a), J.F. Curado^(a), P. R. Allegro^(a), S. Bernardes^(a), M. Moro^(a), P.H.O.V. Campos^(a), E.A.M. Kajjiya^(a), T. F. Silva^(a), M. H. Tabacniks^(a) e N. Added^(a).

(a) Instituto de Física, Universidade de São Paulo

As investigações científicas em objetos de arte e do patrimônio histórico cultural são rotineiramente realizadas na Europa e Estados Unidos há algumas décadas, no Brasil estamos atualmente cada vez mais utilizando metodologias físico-químicas para este fim. Desde 2003 o Grupo de Física Aplicada com aceleradores do Instituto de Física da USP tem trabalhado com várias metodologias para caracterização e análises de bens culturais [1]. Os métodos de análise abrangem processos de imageamento e técnicas de caracterização elementar e composicionais, que acopladas permitem ajudar no entendimento dos materiais e técnicas utilizadas no processo criativo e da manufatura dos objetos. Nos processos de análises utilizam-se técnicas de imageamento como: Fotografias com luz visível, Reflectografia de Infravermelho (IR), Fluorescência Visível com Radiação de Ultravioleta (UV), Imagens com Luz Rasante e Radiografia Digitalizada; que são utilizadas para examinar e documentar objetos artísticos e do patrimônio histórico cultural. Nas determinações dos materiais característicos dos objetos presentes nos acervos, temos utilizados análises que permitam determinar os elementos e compostos químicos existentes nas camadas superficiais destes. As técnicas com feixes iônicos envolvem análises de "Particle Induced X Ray Emission" (PIXE), "Rutherford Backscattering" (RBS) e atualmente "IonLuminescence" (IOL), amplamente utilizadas no Laboratório de Análises de Materiais por Feixes Iônicos (LAMFI-USP) [2]. Ampliando ainda mais as possibilidades de análise tem-se utilizado as técnicas de Fluorescência de Raios X por dispersão de energia e Raman com equipamentos portáteis que podem ser utilizadas nos próprios museus. Os resultados destas análises estão fornecendo informações valiosas sobre o processo de manufatura e tem permitido fornecer novas informações aos colaboradores dos diferentes museus paulistanos como a Pinacoteca, Museu de Arte Contemporânea (MAC-USP), Museu Paulista, Museu de Arqueologia e Etnologia (MAE-USP) e Instituto de Estudos Brasileiros (IEB-USP). Os trabalhos e estudos estão sendo realizados de forma sistemática com o objetivo de produzir informações que sejam úteis aos historiadores, curadores, conservadores e restauradores para a ampliação do conhecimento em História da Arte, como também na determinação e definição das técnicas e condições de preservação do patrimônio material. Neste trabalho serão apresentados alguns exemplos de análises que estão sendo realizadas no acelerador do LAMFI do Instituto de Física da USP no estudo de pinturas de cavalete conforme figura 1. Serão também discutidos as inovações que estão sendo realizadas no arranjo de feixe externo para análise de objetos do patrimônio histórico cultural utilizando o acoplamento de várias metodologias de análises.



Figura 1: Medida PIXE de pigmentos da obra "Paisagem" de Mario Sironi, 53,9x74,2cm, 1946, acervo do Museu de Arte Contemporânea, USP - SP.

[1] M. A. Rizzutto, M. H. Tabacniks, N. Added, M. D. L. Barbosa, J. F. Curado, W. A. Santos Jr., S. C. Lima, H. G. Melo, A. C. Neiva* "The External Beam Facility used to characterize Corrosion Products in Metallic Statuettes" Nuclear Instruments and Methods B240 (2005) 549-553.

[2] Laboratório LAMFI, <http://www2.if.usp.br/~lamfi/>, acesso setembro, 2014.

Perda de energia de H e He em filmes de hidroxiapatita: implicações para terapia de câncer por feixes de íons

R. C. Fadaneli^(a), S. Limandri^(b), P. de Vera^(c), Luiz C. C. M. Nagamine^(d), A. Mello^(e), R. Garcia-Molina^(f), M. Behar^(a), e I. Abril^(c).

(a) Laboratório de Implantação de Íons, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 91501-970, Brasil

(b) Centro Atômico Bariloche, RA-8400 San Carlos de Bariloche, Argentina

(c) Departament de Física Aplicada, Universitat d'Alacant, E-03080 Alacant, Espanha

(d) Instituto de Física, Universidade de São Paulo, 05508-090, São Paulo, Brasil

(e) Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, Rio de Janeiro, 22290-180, RJ, Brasil

(f) Departamento de Física, Centro de Investigación en Óptica y Nanofísica, Regional Campus of International Excellence "Campus Mare Nostrum," Universidad de Murcia, E-30100 Murcia, Espanha

A terapia de câncer por feixes de íons é uma técnica promissora para o tratamento de tumores profundos. No entanto, para o preparo adequado ao tratamento, a deposição de energia dos íons deve ser muito bem conhecida tanto em tecidos *moles* quanto em tecidos *duros*. Embora a perda de energia em água e em outros materiais biológicos seja bem conhecida, muito menos informações estão disponíveis para os tecidos duros (como o tecido ósseo). Atualmente, usam-se regras simples de aditividade (Bragg) a dados de perda de energia em alvos atômicos simples. Em particular, necessita-se saber a perda de energia no principal componente do osso humano, a hidroxiapatita de cálcio (HAp) (58% da massa óssea).

Nosso trabalho consiste na medida da perda de energia de H e He em HAp via espectrometria de retroespalhamento Rutherford (RBS) e na descrição dos resultados experimentais através de cálculos teóricos baseados no formalismo dielétrico pelo uso de funções de perda de energia de Mermin e forças de oscilador generalizadas (MELF-GOS). Tal estudo teórico-experimental permite obter a energia média de excitação da HAp, uma grandeza fundamental para a descrição de perda de energia de projéteis em altas energias, como as utilizadas clinicamente.

Uma vez obtida a energia média de excitação, mostra-se seu efeito nos perfis de distribuição de energia como função da profundidade através do uso de simulações detalhadas. Finalmente, implicações do presente trabalho na perda de energia no tecido cortical ósseo humano serão comentadas.

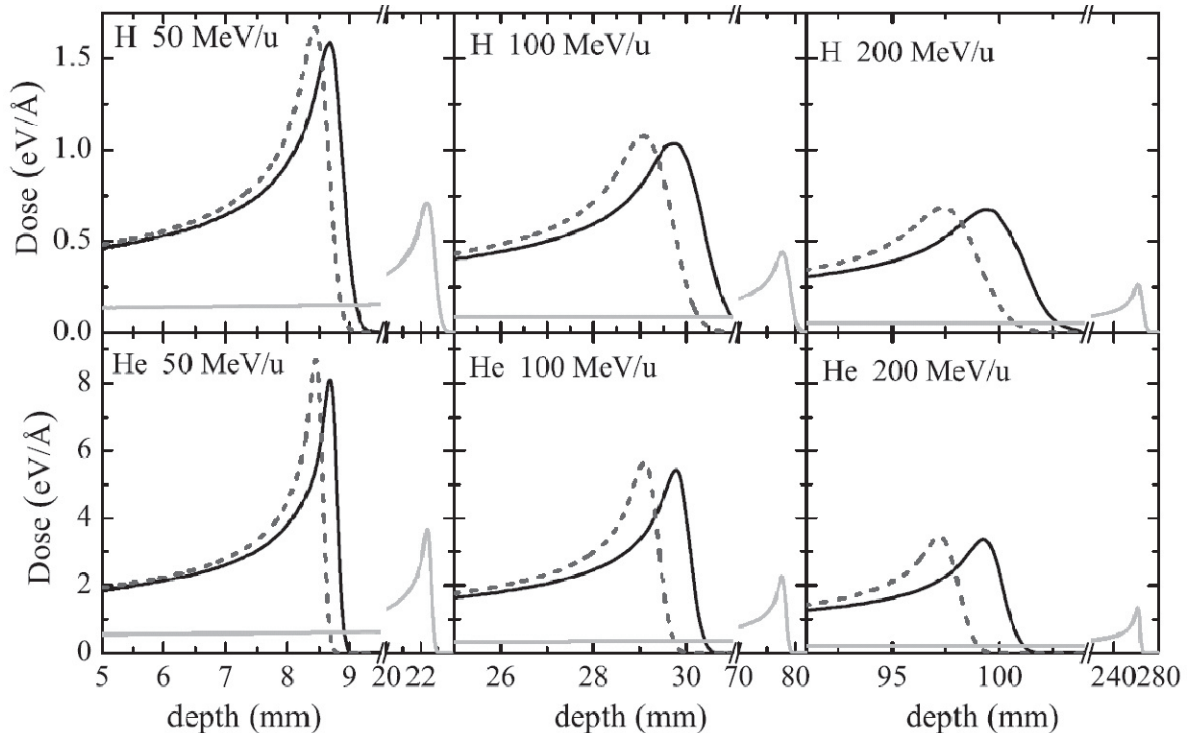


Figura: Distribuições de energia depositada (dose) como função da profundidade de H e He em HAp, obtidas por simulação SEICS. As linhas cheias pretas correspondem a resultados usando a energia média de excitação obtidas no presente trabalho, as linhas tracejadas correspondem aos resultados obtidos via regra de Bragg e, para comparações, as distribuições de H e He em água são mostradas nas linhas cheias de cor cinza.

Coeficiente de fluorescência de Al e Si através da determinação experimental de seção de choque de produção de raios X induzida por prótons

A. P. L. Bertol[ⓐ], R. Hinrichs[ⓑ], e M. A. Z. Vasconcelos[ⓐ]

(a) Programa de Pós Graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, c.p. 15051, 91501-970 Porto Alegre, RS, Brasil

(b) Instituto de Geociências, UFRGS, c.p. 15001, 91501-970 Porto Alegre, RS, Brasil

A precisão na análise quantitativa pela técnica de emissão de raios X induzida por partículas (PIXE) exige o conhecimento de uma série de parâmetros físicos, tais como a seção de choque de ionização e o coeficiente de fluorescência dos elementos a serem analisados. O primeiro parâmetro determina a probabilidade de que um dado projétil com determinada energia ionize uma camada eletrônica específica do átomo. O segundo descreve a probabilidade de que a desexcitação da eletrosfera ocorra por emissão de raios X característicos. Para elementos que são analisados utilizando as linhas K excitadas por prótons, esses parâmetros podem ser obtidos a partir de modelos teóricos, compilações de dados experimentais e ajustes semi-empíricos. Contudo, o comportamento da seção de choque de ionização para elementos leves ou para baixas energias de prótons apresenta consideráveis desvios entre experimentos e teoria [1]. Para alguns elementos, mesmo os dados experimentais apresentam grandes desvios entre si, assim como os ajustes semi-empíricos. Para Al e Si os dados experimentais podem ser até 36% menores que as previsões semi-empíricas usadas como referência de valores de seção de choque [2].

No que diz respeito aos valores de coeficientes de fluorescência para esses elementos, observa-se grande desvio entre valores experimentais, teóricos e semi-empíricos, dificultando a escolha de uma base de dados [3]. Uma vez que a comparação entre seção de choque de ionização teórica e a medida experimental da seção de choque de produção de raios é feita através do coeficiente de fluorescência, a correta determinação deste último parâmetro é fundamental para estabelecer a correlação do experimento com a teoria.

Neste trabalho são apresentados resultados experimentais de seção de choque de produção de raios X induzida por prótons na faixa de energia 0,7-2,0 MeV para os elementos Al, Si, Ti, Fe e Ni. Os dados obtidos para Ti, Fe e Ni concordam com a teoria ECPSSR [1] e com ajustes semi-empíricos, endossando o método experimental. Já os dados de Al e Si, quando transformados em valores de seção de choque de ionização usando os coeficientes de fluorescência adotados pela maioria dos autores [3], não concordam com a compilação semi-empírica de referência [2], embora sejam consistentes com valores experimentais de outros autores e compilações mais recentes. Considerando que a teoria é aplicável nesta faixa de energias e de número atômico, o desvio dos dados em relação à teoria foi estudado através dos diferentes valores de coeficientes de fluorescência da literatura [3], e se propõe valores novos para os coeficientes de fluorescência de Al e Si. Dentro da incerteza experimental, os valores compatíveis com a teoria e os dados experimentais para o Al ficam entre 0,0322 e 0,0341, sendo a média ponderada de 0,0333. Para o Si, o intervalo de valores compatíveis é de 0,0428 a 0,0463, com média ponderada de 0,0444.

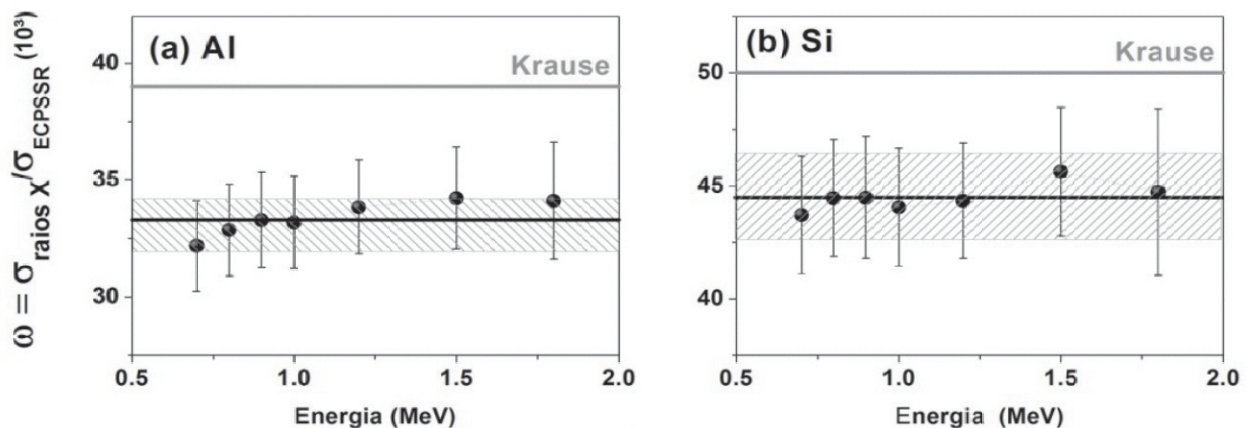


Figura: Coeficientes de fluorescência propostos a partir da divisão dos valores experimentais pelos valores da teoria ECPSSR (símbolos), para Al (a) e Si (b). A área hachurada indica os valores compatíveis, a linha preta indica a média ponderada e a linha cinza os valores comumente usados.

[1] G. Lapicki, X-Ray Spectrometry 34 (2005) 269–278

[2] H. Paul, J. Sacher, Atomic Data and Nuclear Data Tables 42 (1989) 105-156

[3] A. Kahoul, V. Aylikci, N. Kup Aylikci, E. Cengiz, G. Apaydin, Radiation Physics and Chemistry 81 (2012) 713-727

Resultados recientes de colisiones atómicas obtenidos en el laboratorio de Bariloche con proyectiles vestidos en el rango de energías intermedias

S. Suárez^(a,b,c) (*)

(a) Centro Atómico Bariloche (CNEA), Av. Bustillo 9500 (8400) S. C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.

(b) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).

(c) Instituto Balseiro, Universidad nacional de Cuyo, S. C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.

Después de muchos años de investigaciones en física de emisión de electrones por impacto de proyectiles livianos sobre blancos gaseosos con un acelerador electrostático Cockcroft-Walton de hasta 300 keV, el grupo de Bariloche instaló un nuevo acelerador Tandem de 1.7 MV, con fuentes de iones que permiten el empleo de iones más pesados y con cargas múltiples.

En esta exposición se presentarán algunos nuevos resultados obtenidos en el estudio de distribuciones doblemente diferenciales de electrones en colisiones de diversos proyectiles neutros y cargados (Li^{q+} , B^{q+} , C^{q+} , Na^{q+} , Al^{q+} , Si^{q+}) sobre blancos gaseosos (H_2 , He, Ar). Se observan y se discuten estructuras en la región de velocidades cercanas a la del proyectil, así como en la región de emisión binaria. Se presenta para algunos casos la comparación con teorías cuánticas (CDW y CDW-EIS) y clásicas (CTMC).

(*) Los resultados que se presentarán han sido obtenidos y discutidos en colaboración con un grupo amplio de colegas, los cuales serán mencionados y reconocidos al momento de la exposición.

Perfis de composição e espectrometria de retroespalhamento Rutherford

O. de Melo^(a), J. C. González^(b), J. Ferraz Dias^(c), M. Behar^(c)

(a) Facultad de Física, Universidad de La Habana, 10 400 La Habana, Cuba

(b) Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG 30123-970, Brazil

(c) Ion Implantation Laboratory, Physics Institute, Federal University of Rio Grande do Sul, CP 15051, CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brazil

A espectrometria de retroespalhamento Rutherford (RBS), baseada na interação com a substância de íons ligeiros e de alta energia, é uma poderosa técnica para a caracterização de materiais. Consiste em bombardear com íons a amostra a ser analisada e estudar o espectro de energia dos íons retroespalhados. Esse espectro contém informação da composição química, mas também da distancia á superfície, do átomo com o qual aconteceu a colisão. É por isso que se pode medir com RBS a espessura de filmes finos e também as variações da composição em profundidade.

Emquanto existem várias tecnicas simples e não destrutivas para medir as espessuras de camadas finas, o mesmo não acontece para a determinação da forma dos perfis de composição. Em geral, as técnicas que combinam erosão e análise de superfície como a Espectroscopia Augier (AES) ou a espectroscopia de fotoelétrons (XPS) para a determinação destes perfis ou ainda as que se baseiam em medições em secção transversal utilizando a emissão de raios-X característicos (EDS) são geralmente destrutivas e requerem calibração previa. O RBS não precisa de complicadas calibrações previas e existem códigos que permitem, da simulação do espectro, determinar como depende a composição com a profundidade com relativa facilidade.

Nesta palestra iremos apresentar a utilização do RBS para a caracterização dos perfis de composição em dois tipos de materiais: semicondutores infiltrados em silício poroso e filmes finos de $Cd_xZn_{1-x}Te$ com composição gradual. Ambos os materiais foram preparados utilizando a sublimação isotérmica em espaço fechado (ICSS, por sua sigla em inglês).

As amostras de silício poroso foram infiltradas com semicondutores do tipo II-VI, para produzir modificações nas propriedades ópticas do material. Os perfis de composição foram avaliados a partir da simulação dos espectros de RBS. Esses perfis foram comparados com medições de EDS em secção transversal e também com simulação dos espectros de refletância. Um acordo razoável entre as diferentes medidas foi verificado. A influência dos parâmetros de crescimento no processo de infiltração é discutida.

As amostras de $Cd_xZn_{1-x}Te$ com composição variável foram crescidas por meio de uma sequência de ciclos de deposição de camadas finas de CdTe e ZnTe alternadamente. A partir de medidas de RBS foi verificado que a interdifusão Zn/Cd suaviza as interfaces e conduz a um perfil de composição gradual e suave. Tais estruturas são interessantes para diferentes aplicações, em particular, como camada absorvedora com largura de banda proibida variável em células solares. O perfil obtido dependerá de uma forma mais ou menos complexa das espessuras das camadas de ZnTe e CdTe, a temperatura, o tempo de exposição e do coeficiente de interdifusão. Para simular a forma do perfil a partir de uma estrutura dada de camadas, foi desenvolvido um modelo difusivo e os perfis foram calculados usando o método de diferenças finitas. Estes perfis simulados foram comparados com os obtidos por RBS.

New trends in Ion Beam Analysis at LAMFI – USP

M. H. Tabacniks¹, Nemitala Added¹, Márcia A Rizzutto¹, Tiago F. da Silva¹,
Cleber Rodrigues¹, Marcos V. Moro¹.

¹ Institute of Physics, University of São Paulo, São Paulo, Brazil

For over two decades the LAMFI (Laboratory for the Analysis of Materials using Ion Beams) was doing regular PIXE and RBS analysis at a rate of about 3500 samples/year. Since its beginning, in 1992, the LAMFI aimed improving the quality and reliability of experimental data keeping the accelerator down time to a minimum. The paradigm was to offer prompt and quality Ion Beam Analysis to most users, without the need of any calibration or detailed knowledge of experimental details. In the last years however, a decrease of PIXE analysis was observed. Handheld and desktop XRF-EDS spectrometers are becoming increasingly cheaper, better and competitive, while PIXE analysis at LAMFI was still relying on vacuum compatible samples, rigid sample geometry, and spectrum analysis was still using an old software with intense human intervention. To comply with the new trends in Ion Beam Analysis several changes were recently implemented at LAMFI: a new external beam IBA setup based on a 60cm range and high precision ($<5\ \mu\text{m}$) XYZ stage, with multi parameter simultaneous data collection (IBIL, PIXE, RBS, PIGE, and color analysis) and imaging capability enhanced by an automated autofocus procedure for rough samples, is taking over most of the "in vacuum" analysis. Better control of the accelerator yielded better energy resolution of the beam (1:10000, instead of the nominal 1:1000) while accurate integrated charge measurements and new protocols for energy calibration, with a comprehensive uncertainty budget, are now enabling self consistent multi-spectra ion beam analysis. These new capabilities associated with increased computational power are leading Ion Beam Analysis to a new era of easy-to-use, high precision and highly accurate self-consistent material analysis technique.

Correlación inter-electrónica en doble ionización de He por impacto de protones y antiprotones

S. D. López^(a), C. R. Garibotti^(b) y S. Otranto^(c)

(a) Instituto de Astronomía y Física del Espacio- IAFE (CONICET-UBA), CC67 Suc. 28 (1428), Buenos Aires, Argentina

(b) CONICET y Centro Atómico Bariloche

(c) IFISUR y Dpto. de Física UNS

En este trabajo presentamos un estudio de la influencia de la correlación inter-electrónica en el proceso de doble ionización de He por impacto de iones. En particular, nos concentraremos en las características que presentan las secciones eficaces de doble ionización por impacto de protones y antiprotones en He. Para realizar una exploración más íntima del proceso, estudiamos sistemáticamente secciones eficaces plenamente diferenciales (SEPD) mediante diferentes aproximaciones que surgen de la Ecuación de Schrödinger [1,2]. En primer lugar presentamos un análisis basado en la Primera Aproximación de Born (PAB) que considera al proyectil como una onda plana tanto en el estado inicial como el final [1]. Mediante la PAB se identifican las estructuras en las SEPD concernientes a la dinámica del subsistema atómico y las diferencias que surgen de los modelos empleados para describir los estados atómicos ligados y del continuo [1,2], asociados a los mecanismos TS-1 y de "shake-off" [3]. En ambos casos contrastamos modelos con y sin correlación angular para el sistema de dos electrones en un centro, encontrando discrepancias de hasta dos órdenes de magnitud entre los más simples y los más complejos. Luego, para estudiar el influjo del proyectil en las distribuciones electrónicas, y cómo afecta la correlación inter-electrónica a la emisión según sea un proyectil de carga positiva o negativa, realizamos diferentes aproximaciones sobre la PAB planteando modelos de cuatro cuerpos para describir al continuo de las cuatro partículas. Finalmente analizamos el segundo orden de la serie de Born en una aproximación sobre la capa de energía [4], incluyendo de este modo el mecanismo TS-2 [3].

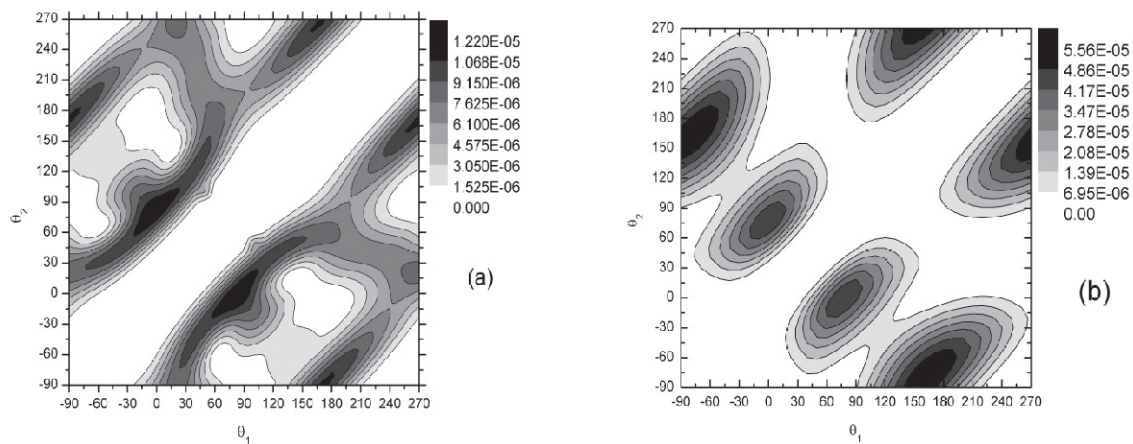


Figura: SEPD (a.u.) para doble ionización de He por impacto de protones en función de los ángulos polares de emisión electrónica, calculadas mediante los modelos (a) PAB con cargas efectivas y (b) PAB con Momentos Efectivos. La energía de impacto es de 700 keV, el momento transferido es $Q=0.9$ u.a. Las energías electrónicas son $E_1 = E_2 = 10$ eV. La emisión es coplanar con todos los fragmentos emitidos en el plano de colisión.

En la figura mostramos las distribuciones angulares de la SEPD calculadas mediante dos de los modelos considerados en este trabajo. Pueden observarse las estructuras "Binaria" y de "Retocesos", ambas para electrones emergiendo casi perpendicularmente. Mientras el modelo GS2-DSC3 [1] favorece una emisión "Binaria" ($-15^\circ, 75^\circ$) sobre una de "Retocesos" ($-80^\circ, 170^\circ$), el modelo de Momentos Efectivos [5] predice lo contrario. Ambos tipos de modelos predicen SEPD dentro del mismo orden de magnitud.

[1] S. D. López, C. R. Garibotti and S. Otranto. Phys. Rev. A, **83**, 062702, 2011,

[2] S. D. López, C. R. Garibotti, and S. Otranto, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B **283**, 63, 2012.

[3] J. McGuire, Electron Correlation Dynamics in Atomic Collisions, Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics (Cambridge University Press, 2005).

[4] S. D. López, S. Otranto and C. R. Garibotti, Phys. Rev. A **89**, 062709, 2014.

[5] S. D. López, S. Otranto and C. R. Garibotti, Phys. Rev. A **87**, 022705, 2013.

Simulation of swift ion bombardment effects

Eduardo M. Bringa (ebringa@yahoo.com)

CONICET & Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza, Argentina

Swift ions deposit most of their energy into electronic excitations of target electrons, which might couple to atomic motion and lead to defect formation, tracking, sputtering, etc. Relatively simple thermal spike models are able to provide insights into the dynamics of the target after this coupling, and might also provide quantitative comparison to experiments.

We will discuss several recent molecular dynamics (MD) simulations of ion bombardment of solid targets.

(a) tracking in nanocrystalline diamond: there is no tracking in single crystal diamond, but confinement effects by grain boundaries, which decrease heat conductivity, produce tracks.

(b) tracking in silica including impurities: tracks in silica depend strongly on ion velocity and stopping power and the presence of metal nanoparticles can change track dynamics.

(c) cratering in a solid mimicking a polymer thin film, in order to compare with experimental results and investigate possible confinement effects for electronic excitations within the thin film.

These examples will display how experiments can help in planning of future experiments to help unveil excitation dynamics and electron-phonon coupling under complex, far-from equilibrium conditions.

Efeitos da radiação iônica sob confinamento espacial em uma dimensão: o caso de filmes ultrafinos poliméricos

R. M. Papaléo^(a,b), R. Thomaz^(a), P.L. Grande^(b), C. Trautmann^(c)

(a) Faculdade de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto alegre, RS, Brasil

(b) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio grande do Sul, Porto alegre, RS, Brasil

(c) GSI Helmholtz Centre for Heavy Ion Research, Darmstadt, Alemanha

Nos últimos 30 anos, os efeitos básicos da radiação iônica em polímeros foram exaustivamente estudados, com particular ênfase nos processos de quebra/recombinação de ligações químicas e nas mudanças decorrentes nas propriedades físicas e químicas desses materiais. Contudo, muito pouco foi investigado até o momento sobre os efeitos da radiação em sistemas poliméricos em nanoescala, em particular almejando uma comparação direta da magnitude dos efeitos da radiação em condições bulk e de confinamento espacial. Nessa apresentação, mostramos resultados recentes de efeitos da radiação iônica em sistemas poliméricos 2D com especial ênfase aos estudos de formação de crateras e deformações induzidos por íons individuais. Utilizamos o polímero poli(metacrilato de metila, PMMA) como sistema modelo para investigar efeitos de confinamento das trilhas iônicas em uma dimensão (para íons num intervalo de energia de 20 MeV a 2 GeV) à medida que a espessura das camadas é reduzida até valores próximos a 2nm. Apresentamos evidências experimentais de que os efeitos da radiação (associados ao transporte de massa e emissão de partículas induzidos pelos íons) ficam reduzidos quando o comprimento das trilhas iônicas é confinado espacialmente. Desvios do comportamento bulk são observados a partir de espessuras críticas tão grandes quanto 40 nm, associados provavelmente a supressão de efeitos cooperativa do material excitado ao longo do caminho dos íons no material. Espessuras críticas similares foram encontradas quando diferentes substratos foram utilizados (Si, SiO₂ e Cr), indicando que a excitação eletrônica não difunde significativamente e se acopla rapidamente a rede, mesmo para os filmes de PMMA mais finos.

Irradiación de polímeros con haces de iones y sus aplicaciones biomédicas

G. García Bermúdez^(a), C. Arbeitman^(b), M. F. del Grosso^(a,b), e M. Behar^(c).

(a) Gerencia de Investigación y Aplicaciones, Laboratorio Tandem, CNEA.

(b) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina.

(c) Instituto de Física, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.

Los iones pesados depositan una alta densidad de energía en un rango de solo unos pocos micrones e inducen cambios físico-químicos muy complejos a lo largo de su camino. En particular, el estudio de la irradiación de polímeros con iones pesados muestra que los efectos producidos en los mismos varían con el ión utilizado, su energía y la fluencia.

Uno de estos efectos es la formación, en el seno de un polímero determinado, de centros o semillas de crecimiento de otros polímeros, proceso denominado polimerización por injerto (Grafting). El Grafting como función de la fluencia presenta un máximo que puede ser interpretado como debido a la interferencia producida por dos zonas distintas. Una central o núcleo que presenta una gran cantidad de defectos de alrededor de 3-5 nm de radio y otra mayor de hasta 100 nm de radio denominada penumbra producida por los electrones emitidos. Las dimensiones de ambas zonas dependen fuertemente del tipo y energía del ión incidente.

Estudios posteriores en polietileno irradiado mostraron, utilizando espectroscopia de infrarrojo, que estructuras del tipo C=C (doble enlace de carbono) y entrecruzamiento de cadenas (crosslinking) también muestran una intensidad máxima en función de la fluencia. Analizando estas fluencias en las que se maximiza un efecto físico-químico dado en función de la energía depositada (Stopping Power), se ve que estos parámetros están altamente correlacionados.

Con el objeto de modelar este efecto se realizó un programa de simulación Monte Carlo y además se obtuvo, del tratamiento de los datos experimentales, una expresión analítica que relaciona ambos parámetros[1]. Esta correlación energía-fluencia constituye una herramienta de gran utilidad para el investigador ya que predice el rango de fluencias a explorar, óptimas para producir un cierto efecto.

Basándonos en estas relaciones encontradas, se irradió con distintos iones y energías polietileno de alto peso molecular (UHMWPE), utilizado en prótesis médicas, para provocar el endurecimiento de su superficie. También se irradiaron polímeros biodegradables para favorecer el crecimiento celular. Este trabajo interdisciplinario involucra la medición de la adhesión, proliferación y morfología de células endoteliales sobre poliláctico (PLLA). El estudio mostró que la proliferación celular es máxima para determinadas fluencias y que además depende de la densidad de energía depositada. De esta forma se logra el crecimiento de una monocapa de células endoteliales sobre un soporte o estructura que se degrada en contacto con medios biológicos [3].

[1] G. García Bermúdez, V. C. Chappa, M. del Grosso and R. Mazzei. Nucl. Instr. Meth. **B** 266 (2008) 3063.

[2] M. del Grosso, V. C. Chappa, G. García Bermúdez, E. Forlerer, M. Behar, Surface and Coatings Technology 202 (2008) 4227-4232.

[3] C. Arbeitman, M. F. del Grosso, M. Behar, G. García Bermúdez, Nucl. Instr. Meth. **B** 314 (2013) 86-89.

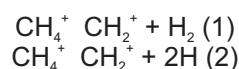
Caminhos de Formação do CH_2^+ na Fragmentação de CH_4 por Impacto de Elétrons

L. Sigaud^(a) e E.C. Montenegro^(b)

(a) Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense (UFF), Niterói, RJ, Brasil.

(b) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Hidrocarbonetos, de modo geral, e em particular o metano (CH_4), o mais simples entre eles, são constituintes abundantes em atmosferas planetárias e nuvens moleculares interestelares, bem como sistemas biológicos, e tem aplicações diretas em física de plasmas, e por estes motivos sua fragmentação é estudada há décadas. Em um trabalho recente [1], Wei *et al.* utilizaram a técnica COLTRIMS para estudar os possíveis caminhos de fragmentação do metano por impacto de elétrons entre 20 e 200 eV. Diferentemente do que ocorre com os demais fragmentos, os resultados experimentais apontam para dois processos possíveis diferentes para a produção do fragmento molecular CH_2^+ a partir da ionização simples da molécula-mãe, a saber:



Para investigar mais a fundo os mecanismos envolvidos nos dois processos de fragmentação indicados acima, a técnica DETOF foi utilizada para observar o mesmo processo colisional. Esta técnica permite tanto a medida das distribuições de energia de cada fragmento produzido na colisão, o que possibilita a identificação de diferentes caminhos para a fragmentação molecular, quanto a obtenção da seção de choque absoluta para cada um destes processos [2].

Serão apresentados os resultados obtidos com a técnica DETOF para a formação do CH_2^+ a partir da colisão por impacto de elétrons. Duas diferentes distribuições de energia foram identificadas, corroborando os dados de Wei *et al.*, e as seções de choque absolutas de produção de CH_2^+ para cada uma delas foi obtida. A atribuição das distribuições de energia encontradas aos canais indicados acima também será discutida.

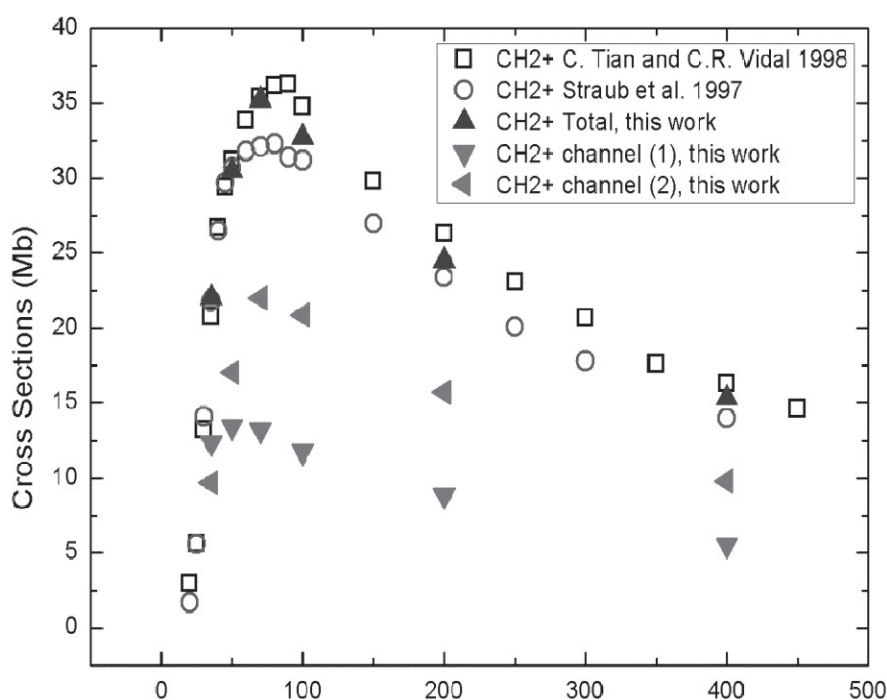


Figura: seções de choque absolutas obtidas tanto para cada um dos dois canais de fragmentação descritos acima quanto para o fragmento CH_2^+ total, em comparação com dados da literatura.

[1] B. Wei, Z. Chen, X. Wang, D. Lu, S. Lin, R. Hutton, Y. Zou, J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys., 46 (2013) 215205.

[2] Natalia Ferreira, L. Sigaud, E.C. Montenegro, Journal of Physics: Conference Series 488 (2014) 012042 e suas referências.

Biomonitoring and Toxicology Studies with PIXE

C. E. I. dos Santos ^(a), J. Silva ^(b), V. M. Andrade ^(c), J. J. Zocche ^(c), L. Amaral ^(d), J. F. Dias ^(d)

(a) IMEF, Universidade Federal do Rio Grande, RS, Brasil

(b) Laboratório de Genética Toxicológica, ULBRA, RS, Brasil

(c) Laboratório de Imunologia e Mutagênese, UNESC, SC, Brasil

(d) Laboratório de Implantação Iônica, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, CP 15051, CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil

As the infrastructure of transport and telecommunications improved in the last 20 years, the use of the term "Globalization" transcended its original meaning of international integration and brought awareness of several important issues to our present society. Since then, environmental pollution has become a major concern worldwide as it affects ecosystems with direct impact on the food chain and on the quality of life. Pollution can lead to higher accumulation of some elements present in living organisms, causing toxicological effects at the cellular level with possible implications for complex organic structures. A reliable way to monitor changes in the ecosystems due to anthropogenic activities is to study the fauna and/or flora from that ecosystem and compare it with the same species from unaffected or pristine areas.

The PIXE (Particle-Induced X-ray Emission) technique is characterized by several attractive features including multi-elemental capability, good sensitivity and relative simple sample preparation protocols. PIXE plays a major role in several fields of knowledge, and when combined with other techniques can provide support for a more consistent evaluation of the problems under study.

In this talk it will be shown how PIXE can contribute to the fields of toxicology and biomonitoring in an easy and straightforward manner. In particular, several examples representing different ecosystems and situations will be discussed.

Fotoionización de moléculas diatómicas mediante attopulsos asistida por láseres de diferentes intensidades

D.I.R Boll^(a), O.A. Fojón^(a,b)

(a) Laboratorio de Colisiones Atómicas, IFIR, UNR-CONICET, Bv. 27 de Febrero 210 bis, Rosario, Argentina

(b) Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, FCEIA-UNR, Av. Pellegrini 250, Rosario, Argentina.

El desarrollo de pulsos en el extremo ultravioleta (XUV) con duraciones de cientos de attosegundos (ATP), ha abierto la posibilidad de estudiar la dinámica de la fotoionización con una resolución temporal cercana al tiempo característico del movimiento de los electrones en átomos y moléculas. En los experimentos tipo pump-probe ([1] y las referencias ahí incluidas) donde la reacción es asistida mediante un campo láser en el infrarrojo cercano (NIR), es posible extraer información sobre el ATP, así como determinar o modificar la dinámica electrónica en moléculas. Desde este punto de vista, tanto los pulsos únicos (SATP) como los trenes de attopulsos (ATPT) prometen ser una herramienta para controlar las propiedades electrónicas en las moléculas.

La resolución numérica de la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo, para los procesos tipo pump-probe en blancos moleculares representa un desafío computacional. En este contexto, el uso de modelos simplificados que den lugar a resultados en acuerdo cualitativo con cálculos ab-initio puede ser útil para comprender los fenómenos físicos subyacentes. Entre ellos podemos mencionar la Strong Field Approximation, en donde se supone que el fotoelectrón evoluciona en el canal final sin interactuar con el blanco residual. Una mejora de esta aproximación, está dada por el Separable de Coulomb-Volkov (SCV) [2]. En este modelo se tiene en cuenta la interacción entre el fotoelectrón y el blanco residual. El empleo de funciones de onda aproximadas tanto en el canal inicial como final de la reacción, permite obtener expresiones analíticas para los observables de interés, como ser, el espectro o las distribuciones angulares.

En este trabajo mostramos que el modelo SCV permite obtener un acuerdo cualitativo con resultados ab-initio [3] para las secciones eficaces de fotoionización monocromática. Luego analizamos el caso donde la reacción es asistida por un NIR con diferentes intensidades, desde bajas hasta intermedias, estudiando los tipos de interferencias presentes en los espectros.

[1] F. Krausz, M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.*, 81 (2009) 163-234.

[2] G. Yudin, S. Patchkovskii, A.D. Bandrauk, *J. Phys. B: At., Mol. and Opt. Phys.*, 41 (2008) 045602.

[3] X. Guan, R.C. DuToit, K. Bartschat, *Phys. Rev. A.* (87) 053410.

Interacción de iones livianos con capas de grafeno

J. D. Uribe, M. Mery, P. Vargas, J. E. Valdés

Depto. de Física, Laboratorio de colisiones Atómicas, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso 2390123, Chile

En los últimos años se han estudiado ampliamente las aplicaciones del grafeno [1] y más recientemente de otros materiales bidimensionales que han sido redescubiertos. Las numerosas aplicaciones potenciales del grafeno dictan una variedad de procesos de preparación de materiales, desde películas monocapa hasta mayores áreas superficiales. La nanoelectrónica se apoyará de todos los estudios que se realicen con el fin de comprender la estructura electrónica y la alta conductividad eléctrica del grafeno.

La pérdida de energía de partículas energéticas en materiales se debe principalmente a procesos de excitación electrónica, tanto individuales como colectivos, y a las colisiones elásticas con el núcleo apantallado. En general, estos fenómenos de transferencia de energía dependen del tipo de partícula y de su energía cinética.

Hemos realizado medidas de pérdida de energía electrónica para protones transmitidos a través de películas de grafeno y multicapas de grafeno. La figura muestra la energía transferida a las capas de grafeno como función de la velocidad del ion.

Para ambos tipos de películas de grafeno, la sección transversal de frenamiento para protones como función de la energía incidente presenta dos características sobresalientes: los datos de pérdida de energía aumentan dramáticamente con la energía de la partícula, comparado con los valores encontrados en películas amorfas de carbón y grafito; los datos exhiben una energía de corte, lo que significa que ciertas excitaciones electrónicas o procesos de scattering no son permitidos en esta interacción.

Este comportamiento tan particular es muy diferente de otros materiales y es posible que se generen por las características extraordinarias de la estructura electrónica del grafeno. Adicionalmente los datos obtenidos están cualitativamente de acuerdo con recientes simulaciones ab initio TD-DFT, las cuales predicen altas pérdidas de energía para partículas que interactúan con grafeno[2].

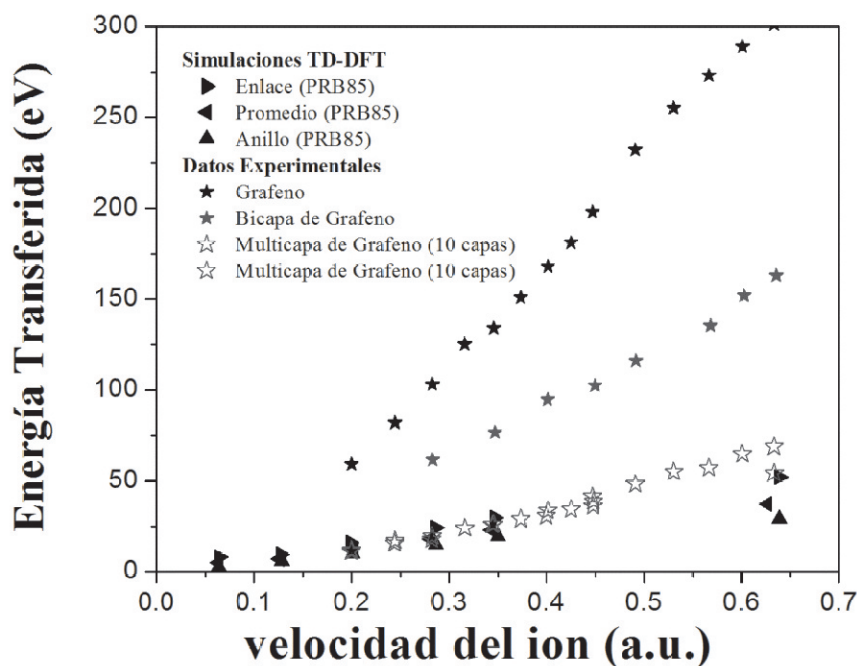


Figura: Energía transferida a las capas de grafeno.

[1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubono, I. V. Grigorieva, and, A. A. Firsov, Science 306 (2004) 666.

[2] S. Bubin, B. Wang, S. Pantelides, and K. Varga, Phys. Rev. B 85 (2012) 235435

Pôsteres

Pérdida de energía de protones en grafeno y en multicapas de grafeno, en rango de baja energía.

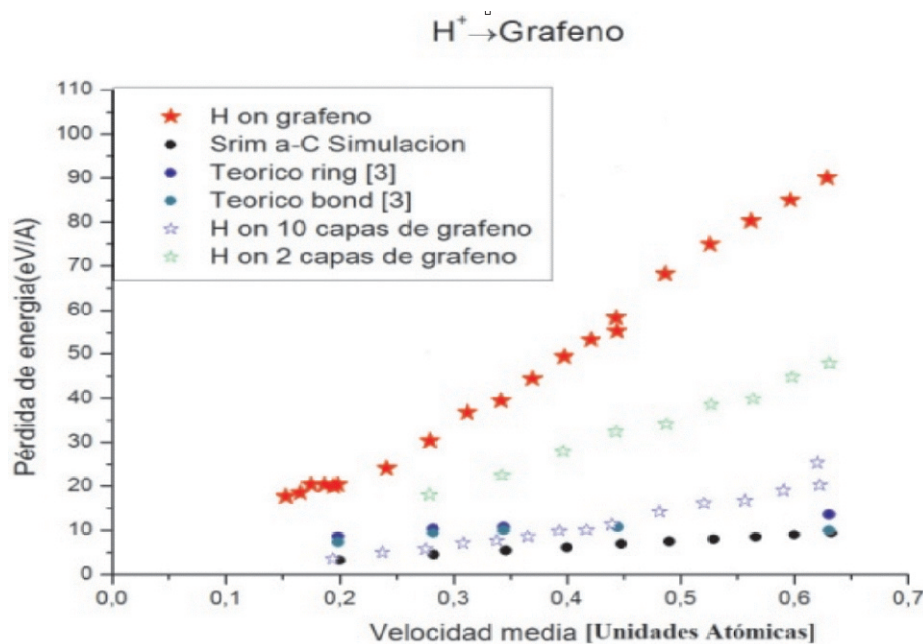
Mario Mery, J.D. Uribe, Jorge Valdés.

Departamento de física, laboratorio de Colisiones Atómicas, Universidad técnica Federico Santa María, Valparaíso 2390123, Chile.

El Grafeno es considerado un material prometedor para variadas aplicaciones tecnológicas [1,2] debido a sus excelentes propiedades electrónicas mecánicas y térmicas. Por medio de técnicas de grabado se pueden crear nanocintas y puntos cuánticos de grafeno. Haces de iones enfocados es una de las técnicas más prometedoras para realizar ataque químico y grabado de patrones. Si bien la interacción de partículas y sólidos ha sido ampliamente estudiada experimental y teóricamente, los efectos en un material de una capa atómica de espesor se esperan que sean muy diferentes con respecto al material volumétrico. El estudio de la radiación de partículas además es valioso para dispositivos electrónicos basados en grafeno que se usan en el espacio exterior y orbitas bajas de la tierra, donde la radiación de iones es considerable y puede ocasionar daños.

En este trabajo presentamos mediciones preliminares de la pérdida de energía de protones en grafeno y multicapas de grafeno autosoportadas. La energía incidente de las partículas usadas cubre el rango de 600 [eV] a 10 [keV] y el método utilizado es la técnica de transmisión del haz que luego son analizadas en energía mediante un analizador electrostático.

Los novedosos resultados obtenidos en este trabajo muestran una inmensa pérdida de energía o poder de frenado de protones incidentes en muestras autosoportadas de grafeno, mucho mayor que la pérdida de energía que produce el carbono como material volumétrico, ya sea con estructura cristalina grafitica o amorfo, esto ha sido predicho en artículos teóricos anteriores [3], pero subestimaron el valor de pérdida de energía. Además la pérdida de energía sobre multicapas de grafeno muestra una tendencia: a medida que aumentamos el número de capas de grafeno en la muestra (2, 3, 4, 5, 10) se recupera el valor de pérdida de energía para carbono como material volumétrico. En la figura se observan los resultados obtenidos junto con comparaciones teóricas.



Referencias

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
- [3] Sergiy Bubin, Bin Wang, Sokrates Pantelides, and K'alm'an Varga. *PHYSICAL REVIEW B* **85**, 235435 (2012).

Efectos debidos a la preparación del proyectil en colisiones atómicas; un análisis en el marco de la teoría de De Broglie-Bohm

M. Feole^(a), F. Navarrete^(a), L. Sarkadi^(b) y R. Barrachina^(a)

(a) Centro Atómico Bariloche e Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica y Universidad Nacional de Cuyo, Av. Bustillo 9500, 8400 Bariloche, Argentina

(b) Institute for Nuclear Research of the Hungarian Academy of Sciences, P.O. Box 51, Debrecen H-4001, Hungary

Usualmente se demuestra que, bajo condiciones muy generales, el resultado de un experimento de colisiones atómicas no depende de las propiedades del haz incidente [1]. Sin embargo, la evidencia aportada recientemente por una serie de experimentos de ionización [2] y captura electrónica [3] apunta a una ruptura de estas condiciones, con resultados que parecen depender del estado de coherencia del haz incidente. Estos hechos dejan abierta la pregunta de cómo afecta la preparación del haz de proyectiles al resultado de una colisión.

En este trabajo presentamos un estudio de este problema analizando las inconsistencias de la formulación estacionaria estándar de la teoría de colisiones [1], y como éstas pueden afectar la interpretación de los efectos de la preparación del proyectil en experimentos de colisión por impacto de iones. Para realizar esto, hemos utilizado la formulación cuántica de De Broglie-Bohm [4, 5] que ha recobrado recientemente notoriedad, principalmente gracias a su capacidad para tratar resultados innovadores en experimentos de mediciones débiles [6, 7].

[1] J. R. Taylor, *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*, 1st ed, John Wiley & Sons, Inc., 1972.

[2] K. N. Egodapitiya et al., *Phys. Rev. Lett.*, 106 (2011) 153202.

[3] S. Sharma et al., *Phys. Rev. A*, 86 (2012) 022706.

[4] D. Bohm, *Phys. Rev.*, 85 (1952) 166, 180.

[5] P. R. Holland, *The Quantum Theory of Motion*, Cambridge University Press, 1993.

[6] J. S. Lundeen et al., *Nature*, 474 (2011) 188.

[7] S. Kocsis et al., *Science*, 332 (2011) 1170.

The role of micro-NRA and micro-PIXE in carbon mapping of organic tissues

L.A.B. Niekraszewicz^(a,b), C. T de Souza^(a), E. M. Stori^(a), A. Duarte^(a,b), L. Amaral^(a,b), J.F. Dias^(a,b)

(a) Ion Implantation Laboratory, Institute of Physics, Federal University of Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, P.O. Box 15051, CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brazil

(b) Graduate Program on Materials Science, Federal University of Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, CEP 91540-000, Porto Alegre, RS, Brazil

This study reports the work developed in order to implement the micro-NRA technique in the microprobe line of the Ion Implantation Laboratory, thus allowing to obtain elemental maps of light elements in organic tissues. In particular, the work was focused on nuclear reactions employing protons with carbon. The results obtained with the micro-NRA technique are compared with those obtained with micro-PIXE employing a SDD detector equipped with an ultra-thin window. The results show that although the use of NRA for carbon at 1.75 MeV resonance is feasible, it does not compete with the direct measurement of carbon X-rays. A comparison of elemental maps obtained by PIXE and by NRA in different samples indicates that PIXE provides better statistics and elemental maps of higher quality.

The density of valence electrons in solids and its implication on the stopping power of slow ions

José M. Fernández-Varea^(a,b), Michel Lacerda^(c,b), Lucy V.C. Assali^(b)

(a) Facultat de Física (ECM and ICC), Universitat de Barcelona, Barcelona, Spain

(b) Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil

(c) Chemical Engineering and Materials Science, University of Minnesota, Minneapolis, USA

Swift heavy charged particles (protons, alpha particles, etc.) that move in condensed matter lose energy in inelastic collisions with the electrons of the traversed medium, and the ensuing energy loss per unit path length is quantified by the (electronic) stopping power. Various perturbative and non-perturbative formalisms have been devised over the years to predict the stopping power of ions in solids [1]. Most of these formalisms, especially the non-perturbative ones, regard the stopping medium as a homogeneous degenerate electron gas (DEG). In a real solid the electron density obviously varies rapidly close to the atomic cores, but it is almost always assumed that valence electrons do constitute a DEG of constant density. Since at low and intermediate energies the largest contribution to the stopping power is due to the valence electrons, this simplification deserves further analysis. In this context, the purpose of the present work was to calculate state-of-the-art 3D valence electron densities for some representative monoatomic solids (free-electron-like and transition metals, semiconductors) in order to investigate their variation within the unit cell and compare them to the commonly-adopted constant r_s values. Furthermore, the 3D densities were combined within the local-plasma approximation (LPA) to estimate the stopping power of slow antiprotons in these materials and compare them to the values obtained for a homogeneous DEG as well as to the existing measurements.

The 3D electron densities of Al, Si, Ni, Cu, Ag, Ta, Pt and Au were calculated by means of the Quantum ESPRESSO package [2], with the electronic wave functions described by a projector augmented wave (PAW) method [3]. The electronic exchange-correlation potential was described within the spin-polarized density functional theory and the generalized-gradient approximation (DFT-GGA) [4]. Stopping powers of slow (1 - 70 keV) antiprotons in homogeneous DEGs were computed using the non-perturbative transport-cross section formalism [1] with phase shifts for the Mensing potential forced to satisfy the Friedel sum rule. The stopping powers of antiprotons in the considered materials were then computed having recourse to the constrained LPA with the corresponding 3D electron densities.

As expected, the 3D valence electron density of Al (a free-electron-like metal) is rather constant, so that the stopping power resulting from the LPA coincides with that pertaining to a homogeneous DEG with $r_s = 2.12$. In turn, the valence electrons of the transition metals (Cu, Ag, etc) display a marked density variation, which leads to LPA stopping powers that can differ by around 20% from those evaluated for a fixed r_s . The agreement between the calculated antiproton stopping powers and the available experimental data is satisfactory.

[1] P.M. Echenique, F. Flores, R.H. Ritchie, *Solid State Phys.* **43** (1990) 229–308.

[2] P. Giannozzi *et al.*, *J. Phys.: Condens. Matter* **21** (2009) 395502 (19 pp); www.quantum-espresso.org

[3] G. Kresse, D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59** (1999) 1758–1775.

[4] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865–3868.

Pérdida de energía de iones H y He en TiO₂

S.P. Limandri ^(a), R.C. Fadanelli ^(b), M. Behar ^(b), L.C.C.M. Nagamine ^(c), J.M. Fernández-Varea ^(d,c), I. Abril ^(e), R. Garcia-Molina ^(f), C.C. Montanari ^(g), J.C. Aguiar ^(h), D. Mitnik ^(g), J.E. Miraglia ^(g), N.R. Arista ^(a)

- (a) Centro Atómico Bariloche, San Carlos de Bariloche, Argentina
(b) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil
(c) Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil
(d) Facultat de Física, Universitat de Barcelona, Barcelona, España
(e) Departament de Física Aplicada, Universitat d'Alacant, Alacant, España
(f) Departamento de Física, CIOyN, Universidad de Murcia, Murcia, España
(g) Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET y UBA, Buenos Aires, Argentina
(h) Autoridad Regulatoria Nuclear, Buenos Aires, Argentina

Presentamos un trabajo teórico–experimental sobre la pérdida de energía de iones H y He en dióxido de titanio (rutilo) [1], material de gran interés tecnológico. Las muestras de TiO₂ con grosores entre 30 y 260 nm fueron preparadas por *sputtering* reactivo sobre sustratos de C o Si y caracterizadas por reflectometría de rayos x. Las irradiaciones se llevaron a cabo con el implantador de iones de 500 kV y el Tandatron de 3 MV del Instituto de Física de la UFRGS para energías 200-1500 keV (H) y 250-3000 keV (He). A partir de los espectros de retrodispersión Rutherford adquiridos se determinaron las secciones eficaces de frenado de ambos iones. Por otro lado se trabajó en la descripción teórica empleando tres modelos diferentes:

1) *Mermin Energy-Loss Function – Generalized Oscillator Strength* (MELF-GOS) [2], modelo perturbativo basado en el formalismo dieléctrico y en una descripción realista de las funciones de pérdida de energía del blanco con funciones tipo Mermin para los electrones de valencia e intensidades de oscilador generalizadas para las capas atómicas más internas.

2) *Shellwise Local Plasma Approximation* (SLPA) [3], también perturbativo y dentro del formalismo dieléctrico, describe al blanco como un gas de electrones inhomogéneo a partir de la densidad electrónica de las diversas capas teniendo en cuenta sus respectivos umbrales de ionización. Para el TiO₂ estas densidades se calcularon mediante el formalismo DFT-GGA [1].

3) *Transport Cross Section - Extended Friedel Sum Rule* (TCS-EFSR) [2], método no perturbativo adecuado para describir el frenado de iones con velocidades arbitrarias en un gas de electrones degenerado.

Los datos experimentales obtenidos cubren un intervalo amplio de energías. Como se muestra en la figura los valores medidos concuerdan con los modelos semiempíricos SRIM y Barradas *et al* (referencias en [1]). La descripción teórica con MELF-GOS y SLPA es muy buena a energías intermedias y altas (mayores que la del máximo de la curva), pero alrededor del máximo y a energías menores TCS-EFSR está más cerca de los puntos experimentales. Más detalles sobre estos resultados se encuentran en la ref. [1] y serán presentados en la conferencia.

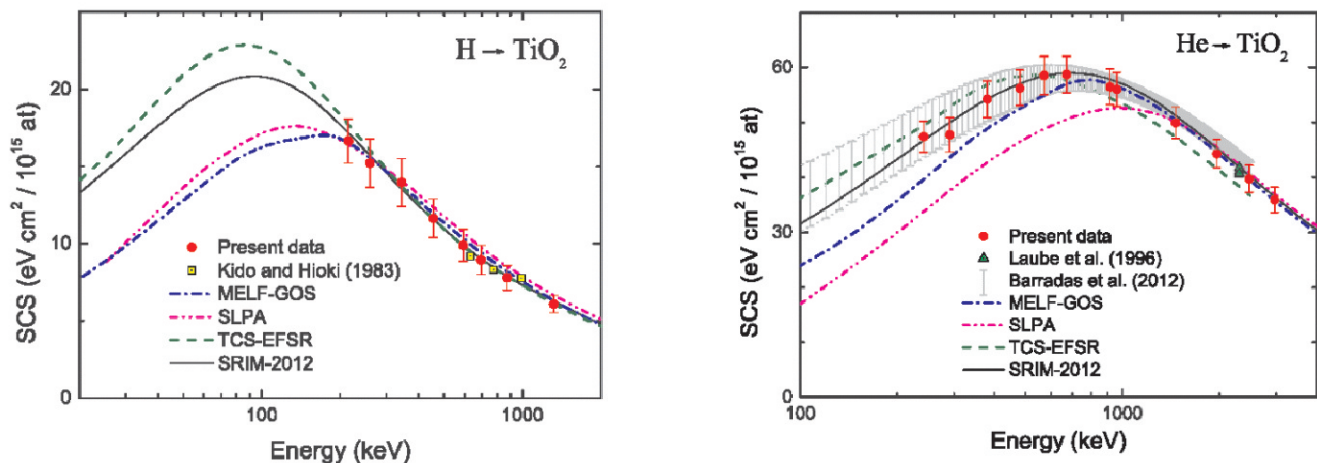


Figura: Secciones eficaces de frenado, en función de la energía incidente, para H y He en TiO₂. Los círculos sólidos representan las medidas obtenidas en este trabajo; el significado de los otros símbolos se indica en cada figura. Las curvas a trazos corresponden a los cálculos teóricos presentes (detalles en las figuras) y a las predicciones de SRIM (curva continua) y Barradas *et al*. Para más detalles pueden consultarse las referencias citadas en [1].

[1] S.P. Limandri, R.C. Fadanelli, M. Behar, L.C.C.M. Nagamine, J.M. Fernández-Varea, I. Abril, R. Garcia-Molina, C.C. Montanari, J.C. Aguiar, D. Mitnik, J.E. Miraglia, N.R. Arista, *Eur. Phys. J. D* **68** (2014) 194.

[2] S. Heredia-Avalos, R. Garcia-Molina, J.M. Fernández-Varea, I. Abril, *Phys. Rev. A* **72** (2005) 052902.

[3] E.D. Cantero, R.C. Fadanelli, C.C. Montanari, M. Behar, J.C. Eckardt, G.H. Lantschner, J.E. Miraglia, N.R. Arista, *Phys. Rev. A* **79** (2009) 042904.

Influencia del estado de carga del proyectil en el espectro de emisión electrónica desde superficies metálicas.

C. D. Archubi^(a), M. S. Gravielle^(a), and V. M. Silkin^(b,c)

(a) Instituto de Astronomía y Física del Espacio (CONICET-UBA), casilla de correo 67, sucursal 28, C1428EGA, Buenos Aires, Argentina

(b) Donostia International Physics Center (DIPC), 20018 San Sebastián, Spain

(c) Depto. de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad del País Vasco, Apdo. 1072, 20080 San Sebastián, Spain

El impacto de iones multicargados sobre superficies se ha convertido en un tema de interés en las últimas dos décadas. El grado de ionización del proyectil depende de su velocidad y ejerce una marcada influencia en las transiciones electrónicas originadas por impacto rasante sobre diferentes superficies metálicas, lo que afecta tanto la pérdida de energía del ión como la emisión electrónica [1,2].

Por otro lado, en trabajos previos [3,4] hallamos que los espectros de emisión electrónica producidos por incidencia rasante de protones sobre superficies de Be(0001), Cu(111), Ag(111), Au(111) y Mg(0001) presentan señales evidentes de la estructura de banda de la superficie, con “hombros” pronunciados debidos a la contribución de estados electrónicos superficiales parcialmente ocupados. El objetivo de este trabajo es, por lo tanto, investigar en qué grado tales estructuras son afectadas por el estado de carga del proyectil. Nuestras investigaciones previas para protones son extendidas aquí para estudiar la probabilidad de emisión electrónica producida por incidencia rasante sobre una superficie de Cu(111) de diferentes proyectiles - C, Be, Li y He - con distintos estados de carga. El proceso es descrito con la aproximación Band-Structured-Based (BSB) [3], el cual es un método perturbativo que incluye una precisa representación de la interacción del electrón con la superficie, incorporando información de la estructura de bandas del sólido.

La figura muestra la probabilidad de emisión electrónica para un ángulo de emisión $\theta = 0^\circ$ considerando distintos proyectiles que impactan sobre una superficie de Cu(111). Cuando la carga asintótica del proyectil disminuye se observa un incremento de las probabilidades de emisión y la atenuación de la estructura generada por la presencia de estados electrónicos superficiales. Este comportamiento es consecuencia de la influencia combinada de la trayectoria y del estado de carga del proyectil.

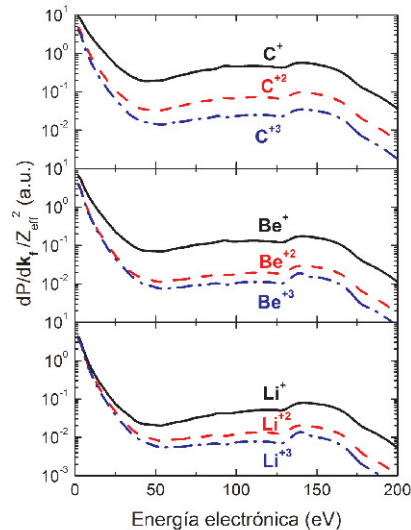


Figura: Probabilidad diferencial de emisión electrónica desde la banda de valencia, normalizada por la carga asintótica Z_{eff} , como función de la energía de emisión para diferentes proyectiles impactando con velocidad $v=2$ a.u. y con un ángulo de incidencia $\theta = 0^\circ$ sobre una superficie de Cu(111).

[1] X. Luo, B. Hu, Ch. Zhang, J. Wang, Ch. Chen, Phys Rev. A, 81 (2010) 052902.

[2] N. Nieuwjaer, C. Bénazeth, P. Benoit-Cattin, P. Cafarelli, M. Richard-Viard, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B, 230 (2005) 317.

[3] C. D. Archubi, M. S. Gravielle, V. M. Silkin, Phys. Rev. A, 84 (2011) 012901.

[4] C. D. Archubi, M. Faraggi, M. S. Gravielle, V. M. Silkin, Phys. Rev. B, 89 (2014) 155421.

Evaluación de daño por irradiación sobre películas de C_{60} depositados sobre Cu(111) en experimentos de dispersión de iones lentos (LEIS).

F. Bonetto ^(a,b), R. Vidal ^(a,c), C. Bonin ^(a,c) y J. Ferrón ^(a,b)

(a) Instituto de Física del Litoral – CONICET, Guemes 3450, Santa Fe, Argentina.

(b) Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, Santa Fé, Argentina.

(c) Departamento de Física, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, Santa Fé, Argentina.

Las técnicas basadas en la dispersión de iones lentos (Low Energy Ion Scattering, LEIS) son ampliamente utilizadas para la caracterización química y estructural de superficies. La técnica tiene una alta sensibilidad superficial, siendo posible detectar fracciones de monocapa utilizando bajas dosis, con un daño mínimo por irradiación. En particular, esto es importante para superficies nanoestructuradas, en donde el daño por irradiación puede ser importante y debe ser cuantificado. Una variante de la técnica, Direct Recoil Spectroscopy (DRS) ha sido recientemente utilizada para estudiar el autoensamblado de moléculas orgánicas sobre superficies metálicas [1].

En este trabajo nos proponemos encontrar las condiciones óptimas de irradiación (ion, dosis, energía) para minimizar los daños por irradiación durante la adquisición de espectros de LEIS en películas de C_{60} depositadas sobre Cu(111).

Las películas de C_{60} fueron depositadas sobre una superficie de Cu(111) por sublimación de C_{60} desde una celda de Knudsen. Se utilizó espectroscopia de electrones Auger (AES) para estimar el espesor de la película, y la presencia del plasmón característico de los enlaces π en el espectro de EELS, como una medida de su calidad. En el caso de películas ultradelgadas se utilizó la técnica de difracción de electrones de baja energía (LEED) para obtener información de la estructura cristalina de la superficie.

Para analizar el daño por irradiación se estudió la evolución temporal de los espectros de LEIS al bombardear con H^+ y Ar^+ en el rango de 1 a 5 keV. La evolución del plasmón característico de los enlaces π en el espectro de EELS con la dosis nos da una idea de la integridad de las moléculas de C_{60} .

En forma complementaria se contrastan tanto espectros de AES como imágenes LEED tomadas antes y después del bombardeo para caracterizar la integridad de la muestra.

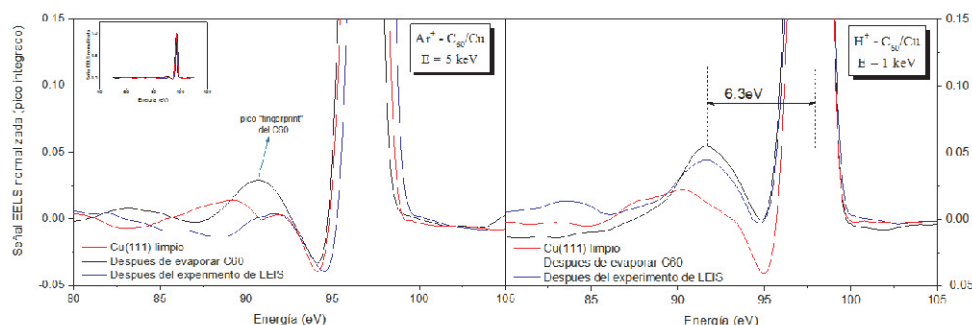


Figura: Espectros EELS de Cu(111) limpio; inmediatamente después de evaporar C_{60} e inmediatamente después del experimento de LEIS donde se utilizó Ar^+ de $E=5$ keV (izquierda) y H^+ de $E=1$ keV (derecha)

[1] L. Salazar Alarcón, J. Jia, A. Carrera, V.A. Esaulov, H. Ascolani, J.E. Gayone, E.A. Sánchez, O. Grizzi. Direct recoil spectroscopy of adsorbed atoms and self-assembled monolayers on Cu(001), Vacuum 105 (2014) 80.

Retrodispersión de iones lentos de H^+ por HOPG: formación de iones negativos.

F. Bonetto^(a,b), M. Romero^(a), A. Iglesias-García^(a), R. Vidal^(a,c), J. Ferrón^(a,b) y E. C. Goldberg^(a,b)

(a) Instituto de Física del Litoral – CONICET, Guemes 3450, Santa Fe, Argentina.

(b) Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, Santa Fé, Argentina.

(c) Departamento de Física, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santiago del Estero 2829, Santa Fé, Argentina.

La formación de iones negativos en la dispersión de protones por una superficie de grafito pirolítico altamente orientado (HOPG) se analizó teórica y experimentalmente para un gran rango de energías cinéticas de los protones incidentes. Las preguntas abiertas relacionadas con los efectos de correlación electrónica y la influencia de la estructura de bandas de superficie detallada trataron de ser respondidas por propuestas teóricas adecuadas. Se analiza la importancia de considerar la matriz de densidad del sólido en nuestra descripción de la superficie. La comparación con el experimento de las diferentes aproximaciones límite de la repulsión electrónica en el estado atómico, muestra que la validez esperada varía de acuerdo a la velocidad de los iones. Sin embargo, la primera y más notable conclusión obtenida a partir de esta comparación es la no validez de un enfoque adiabático del nivel de energía desplazado por las interacciones con los átomos de la superficie, cuando la incertidumbre en energía introducida por la velocidad del ion se vuelve del orden de la repulsión electrónica en el estado fundamental de hidrógeno.

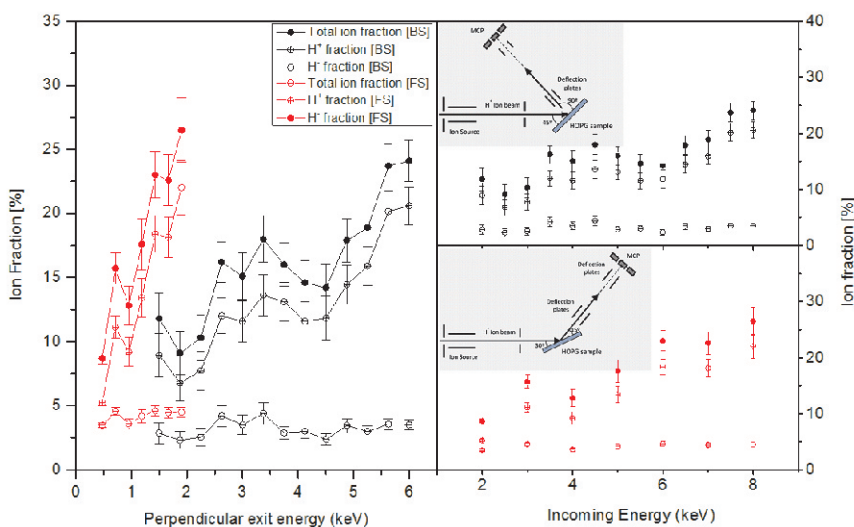


Figura: Izquierda: Mediciones en forward y backscattering graficados en función de la componente perpendicular de la energía. Derecha: Ambas mediciones graficadas en término de la energía de entrada.

En resumen, el análisis realizado en cada configuración experimental muestra que a pesar de las fracciones de iones similares obtenidas en ambas configuraciones, forward y backscattering, la física es muy diferente. En la configuración de forwardscattering la energía de salida perpendicular mucho más baja conduce a una pérdida de la memoria de la trayectoria de entrada y a un estado de carga determinado por el proyectil lejos de la superficie, donde el límite de correlación infinita proporciona un escenario apropiado. En la configuración de backscattering, el ancho de nivel introducido por el rápido movimiento del protón comienza a jugar un papel importante al disminuir la repulsión de Coulomb efectiva U . El límite de U pequeño es el adecuado para describir los experimentos en este caso, y la suposición de niveles de energía constantes para el átomo permite un buen acuerdo con las mediciones a las mayores energías entrantes.

Ionización por pulsos láser cortos: Dependencia del espectro de emisión con la forma del pulso

A. A. Gramajo ^(a), S. D. López ^(b), D. G. Arbó ^(b), R. Della Picca ^(a), y C. R. Garibotti ^(a)

(a) Centro Atómico Bariloche - CONICET, Bariloche

(b) Instituto de Astronomía y Física del Espacio, IAFE (CONICET-UBA)

Cuando pulsos láseres cortos e intensos interactúan con la materia pueden ocurrir procesos de orden superior que la simple absorción y emisión de un único fotón. Estos procesos denominados multifotónicos se producen en condiciones extremas del campo de radiación. Por ejemplo, la ionización por encima del umbral (ATI, above threshold ionization) ocurre cuando el blanco se ioniza absorbiendo un número de fotones mayor que el mínimo requerido por el umbral de ionización [1,2]. En el espectro electrónico se observan picos en valores de energías dados por la relación de Einstein generalizada [3]:

$$E_n = n\omega - (I_p + U_p),$$

donde I_p es el potencial de ionización y U_p la energía ponderomotriz. Aunque esta propiedad del espectro de emisión electrónica fue históricamente deducida en forma analítica para un láser de duración infinita (onda sinusoidal) [4], su interpretación es cuestionable para el caso de pulsos ultracortos [5, 6] donde existe una gran variación de este valor con su valor máximo $U_p = (F_0/2\omega)^2$. La pregunta que se desprende es, entonces, qué valor de U_p es el que determina los picos de energía del espectro.

En el presente trabajo consideramos la ionización del átomo H(1s) con pulsos de la forma $E'(t) = E'_0 f(t) \cos(\omega t + \varphi)$ para $0 < t < \tau$ y que se anulan fuera de este intervalo; τ es la duración del pulso de unos pocos femtosegundos. Bajo las aproximaciones semiclásica y Coulomb-Volkov, investigamos la relación entre los distintos tipos de envolvente $f(t)$ y el espectro electrónico. A modo de ejemplo, en la figura de la izquierda comparamos los mismos en los casos constante: $f(t)=1$ y suave: $f(t) = \sin^2(\pi t/\tau)$. En la figura de la derecha se observa distintos picos secundarios los cuales se deben a distintos valores de la energía ponderomotriz durante la duración del pulso. Además estudiamos el efecto del potencial Coulombiano en el espectro fotoelectrónico.

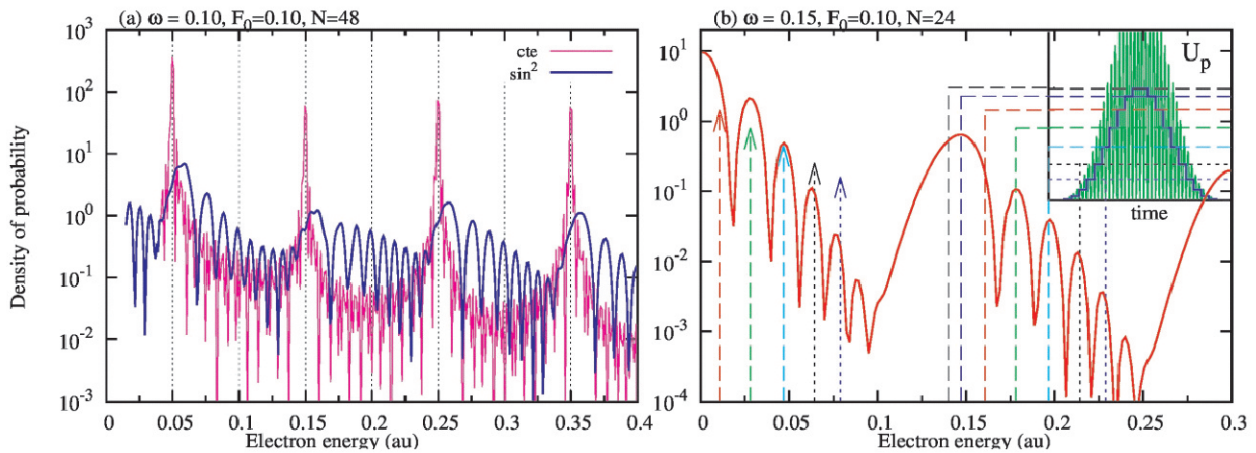


Figura: Espectro de energía en ionización de H(1s) por un pulso láser corto. (a) Para varias funciones envolventes. (b) Visualización del corrimiento de los picos secundarios debido a diferentes valores de U_p dentro del pulso.

[1] Agostini P., et al, Phys. Rev. Lett. **42**, 1127 (1979).
 [2] Bashkansky M., et al, Phys. Rev. Lett. **60**, 2458 (1988).
 [3] Parker J., et al, J. Opt. Soc. Am. B **13**, 371 (1996).
 [4] A. Becker and F. H. M. Faisal, J. Phys. B **38**, R1 (2005).
 [5] F. Linder et al, Phys. Rev. Lett. **95**, 040401 (2005).
 [6] M. Wickenhauser, et al, Phys. Rev. **73**, 011401 (2006).

Ionización de Argón por láser bicromático: Dependencia de la emisión electrónica con la fase relativa

S. López ^(a), A. A. Gramajo ^(b), S. Nagele ^(c), C. Lemell ^(c), J. Burgdörfer ^(c), N. Camus ^(d), L. Fechner ^(d), y R. Moshhammer ^(d), D. G. Arbó ^(a)

(a) Instituto de Astronomía y Física del Espacio – IAFE- (Conicet-UBA), CC67 Suc. 28 (1428) Buenos Aires, Argentina

(b) Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo – CNEA, S. C. de Bariloche, Argentina

(c) Institute for Theoretical Physics, Vienna University of Technology, (A-1040) Viena, Austria

(d) Max Plack Institute for Nuclear Physics, Heidelberg, Alemania

La emisión electrónica en procesos de fotoionización atómica por pulsos láser de dos colores ha sido de interés en los últimos tiempos [1,2]. En experimentos previos [1], se ha demostrado la recuperación de la función de onda auto-referenciada durante su creación por ionización de campo fuerte con precisión por debajo de los 10 attosegundos, lo cual se basa en la separación de interferencias distintas provenientes de diferentes escalas temporales [2].

En este trabajo teórico-experimental, observamos cómo la emisión electrónica por ionización de átomos de argón debida a pulsos láser de dos colores (ω - 2ω) linealmente polarizados depende de la fase relativa entre las dos componentes. En la figura mostramos la distribución de momentos doblemente diferencial en función del momento longitudinal k_z (a lo largo de la dirección de polarización) y el momento transversal k_p (perpendicular a la dirección de polarización). A la izquierda para fase relativa $\varphi = 0.6\pi$ y a la derecha $\varphi = 1.6\pi$. Arriba los datos experimentales y abajo los cálculos ab initio que resuelven numéricamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. La longitud de onda fundamental es 800nm con una intensidad de 10^{14} W/cm², mientras que el primer armónico (400nm) tiene una intensidad de un orden de magnitud inferior (10^{13} W/cm²). La duración del pulso se estima en 20fs FWHM. En los cálculos teóricos se ha utilizado este mismo valor pero para la duración total.

En las figuras se observa una clara asimetría en función de la fase relativa. Los cálculos teóricos replican las mediciones de manera muy satisfactoria. También se presentarán cálculos semiclásicos y cuánticos aproximados mediante la aproximación Coulomb-Volkov.

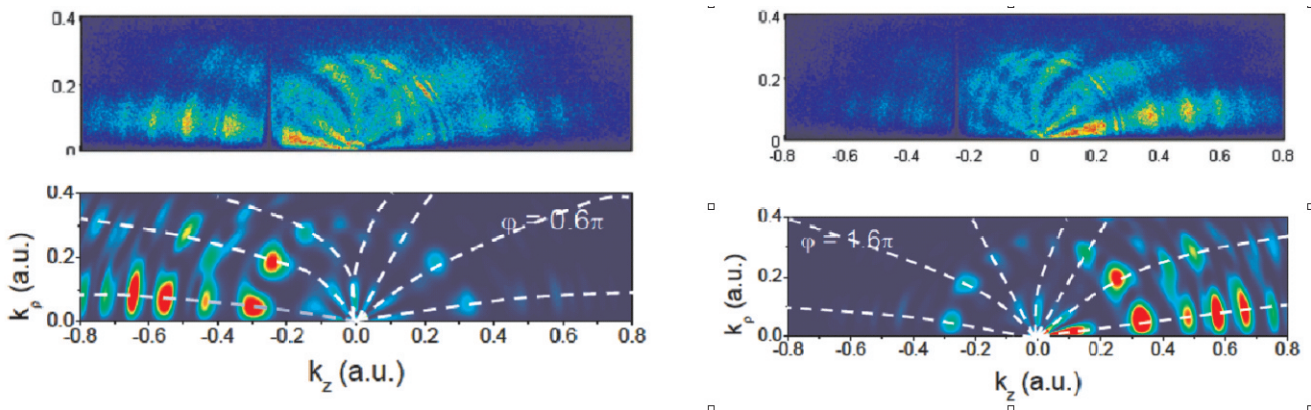


Figura: Distribución de momentos doble diferencial para $\varphi = 0.6\pi$ y $\varphi = 1.6\pi$.

[1] Xi. Xie, S. Roither, D. Kartashov, E. Persson, D. G. Arbó, L. Zhang, S. Gräfe, M. Schöffler, J. Burgdörfer, A. Baltuska, y M. Kitzler, Phys. Rev. Lett. **108**, 193004 (2012).

[2] D. G. Arbó, S. Nagele, X-M. Tong, X. Xie, M. Kitzler, y J. Burgdörfer, Phys. Rev. A **89**, 043414 (2014)

Ionización múltiple por impacto de electrones, positrones, protones y antiprotones

Claudia C Montanari, Jorge E. Miraglia

Instituto de Astronomía y Física del Espacio, CONICET y UBA, Buenos Aires, Argentina

Presentamos cálculos de ionización múltiple de Ne, Ar, Kr y Xe por impacto de proyectiles con $|Z|=1$. Trabajamos en la aproximación de electrones independientes para la cual las probabilidades de ionización múltiples son una combinación multinomial de probabilidades en función del parámetro de impacto. El estado de carga final del blanco está dado por la contribución de la ionización directa pero también de la emisión post-colisional de electrones (procesos tipo Auger luego de ionización de capas internas) [1]. Nuestros cálculos describen la producción de iones con cargas +1 a +6 incluyendo las contribuciones de ionización directa y post-colisional, y tomando en cuenta hasta las capas L y M de Kr y Xe, respectivamente [2].

Para el caso de proyectiles livianos, electrones y positrones, se tomaron en cuenta las correcciones en la trayectoria, el máximo momento transferido y la energía mínima de ionización [3]. Esta última tanto en las probabilidades de ionización como dentro de la combinación multinomial. En particular describimos el umbral de energía para los distintos estados de ionización considerando la energía media transferida a los electrones ionizados [4]. Obtuvimos umbrales de ionización múltiple muy cercanos a los valores experimentales, como puede observarse en las figuras a continuación, y una buena descripción de los valores experimentales a altas energías, donde la contribución postcolisional es dominante.

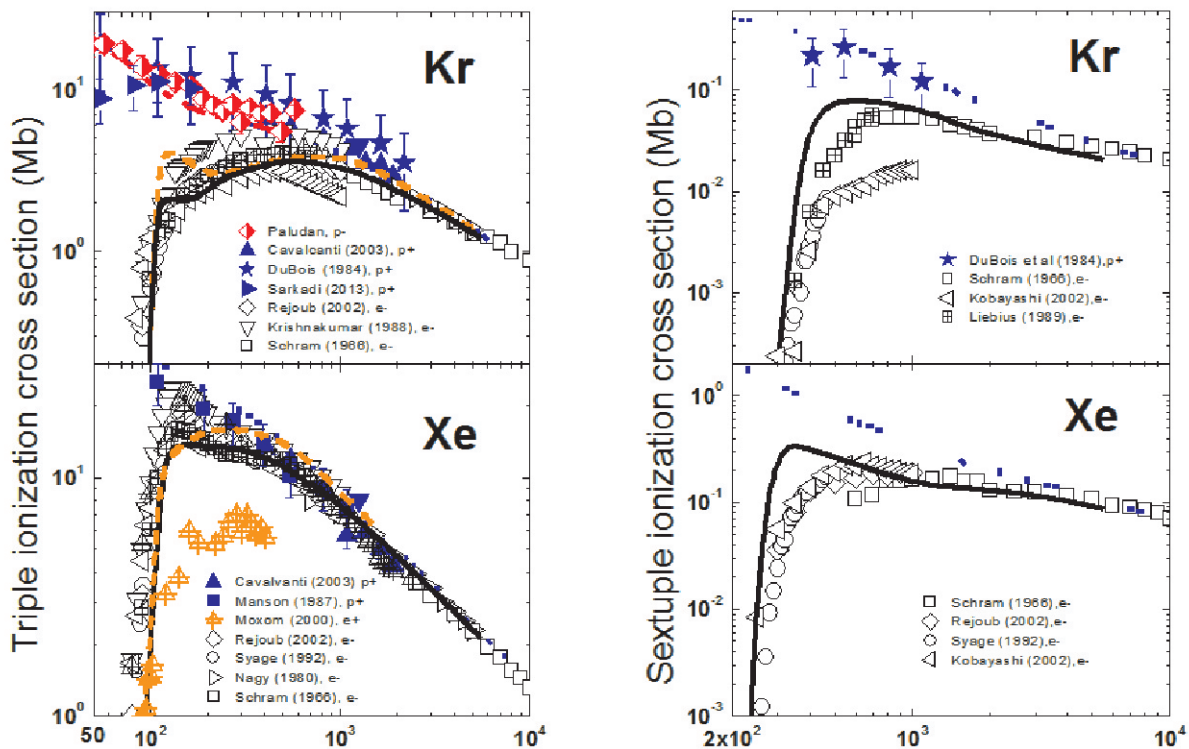


Figura: Secciones eficaces de ionización triple y sextuple de Kr y Xe en función de la energía de impacto. Las curvas representan nuestros cálculos CDW-EIS para electrones (línea sólida), positrones (línea cortada), protones (línea de puntos) y antiprotones (rayas y puntos). Los símbolos son los valores experimentales según se detalla dentro de las figuras y en [3].

[1] E.G. Cavalcanti, G.M. Sigaud, E.C. Montenegro, M.M. Sant 'Anna, H. Schmidt-Bocking, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **35** (2002) 3937

[2] A. C. Tavares, C C Montanari, J E Miraglia and G M Sigaud, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47** (2014) 04520.

[3] C.C. Montanari, J. E. Miraglia, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **47** (2014) 105203

[4] C.C. Montanari, J. E. Miraglia, *Energy threshold in multiple ionization by electron or positron impact*, presentado en la 17th Highly Charged Ions Conference, Bariloche, Argentina (2014), proceedings en J. Phys. Conf. Series. (2015).

Neutralization and wake effects on the Coulomb explosion depth profiling

L. F. S. Rosa[†], P. L. Grande[†], R. C. Fadanelli[†], J. F. Dias[†]

[†] Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul , Brazil

Corresponding author: lucio_efe@hotmail.com

Depth profiling of heavy elements in thin films is a requirement in the modern materials science. One of the most used techniques is the Rutherford backscattering spectrometry (RBS) due to its simplicity and reliability. The RBS gives depth in units of length assuming the knowledge of the density of the target, otherwise “depth” stands as an abbreviation for the number of atoms per unit area. But in the case of thin films the atomic density can be quite different from its bulk or nominal value.

In [1] we proposed the use of Coulomb explosion (CE) as an alternative way to determinate the absolute value of thickness of thin films (from 0.1 to 20 nm). The depth information is obtained from the broadening of the energy-loss distribution of the H⁺ fragments under quasi-Coulomb explosion after the molecular break-up. For H₂⁺ ions with a few hundreds keV, the complete dissociation takes place at the first atomic layers and the energy-loss straggling can be disentangled from other energy-loss fluctuations and converted to time or penetrated depth. This conversion is straightforward as long as neutralization, multiple scattering and wake potential effects are of minor importance, which is the case for energies larger than 150 keV/u.

In this work we exploited this technique at much lower energies and determined the effects of neutralization, screening under non-central wake forces and multiple scattering. For this sake, we measured the energy loss spectrum of H₂⁺ and H⁺ at 50 keV/u to 150 keV/u in thin TiO₂ films using MEIS (Medium Energy Ion Scattering) as a function of the incidence angle. The results at 150 keV/u yield thicknesses different from the nominal one obtained by the standard MEIS analysis using the bulk density of TiO₂ but are in good agreement with thicknesses obtained by TEM measurements. This is a consequence of the actual density of the film being smaller than the bulk one by 20%. The same results can be obtained at much smaller energies only if neutralization effects are correctly taken into account. In addition, the effect of the screening due to non-central wake potential is very important and is discussed using the dielectric formalism with a linear combination of Mermin dielectric functions [2] to describe the electronic structure of TiO₂.

References

[1] Shubeita S.M. ; Fadanelli, R. C. ; DIAS, J. F. ; Grande, P. L. . Determination of film thicknesses through the breakup of H₂⁺ ions. *Surface Science*, v. 608, p. 292-296, 2013.

[2] Isabel Abril, Rafael Garcia-Molina, Cristian D. Denton, F. Javier Pérez-Pérez, Néstor R. Arista. *Phys. Rev. A*, 58, 1, (1998)

Controle da dispersão de tamanhos de nanopartículas Utilizando feixes de íons de alta energia

R. C. Pazim^(a), G. M. Azevedo^(a), e P. F. P. Fichtner^(b)

(a) Instituto de Física-UFRGS, Caixa Postal 15051, 91501-970 Porto Alegre, Brasil.

(b) Departamento de Metalurgia, Escola de Engenharia-UFRGS, Porto Alegre, Brasil

Nanopartículas (NPs) são aglomerados atômicos contendo 10^2 a 10^7 átomos com dimensões entre 1 e 20nm. Frequentemente, demonstram um comportamento que é intermediário entre o de um sólido macroscópico, bulk, e aquele de um sistema atômico ou molecular, entretanto também há fenômenos novos, contra-intuitivos, que não podem ser compreendidos com um raciocínio simples, sendo necessário o uso da mecânica quântica. Estes aspectos permitem que materiais em nanoescala sejam classificados em uma nova categoria.

Dispositivos comerciais baseados em nanopartículas devem contê-las num tamanho específico e sua distribuição espacial e de tamanhos deve ser estreita. A implantação iônica seguida de tratamentos térmicos é o método baseado em feixe de íons mais conveniente e versátil, pois podem produzir uma mistura sólida supersaturada de praticamente qualquer composição e com ótimo controle de concentração, entretanto, a dificuldade em manter a distribuição de tamanho estreita impede aplicações práticas deste método[1].

Portanto, o desenvolvimento de uma metodologia que permita controlar o tamanho e a dispersão espacial de tamanhos de nanopartículas é especialmente interessante do ponto de vista de física básica, por ser necessário compreender os mecanismos envolvidos na obtenção das NPs e do ponto de vista industrial por inserir a técnica de feixe de íons como ferramenta de fabricação de dispositivos comerciais.

Neste trabalho, estuda-se a formação de nanopartículas de germânio obtidas por irradiação e tratamento térmico, visando o controle da dispersão de tamanhos das nanopartículas. O sistema inicial, depositado por sputtering, é composto por um filme de germânio entre camadas de sílica sobre substrato de silício cristalino. Este sistema foi irradiado com Au e tratado termicamente a 600, 800 e 1100.

As propriedades, formação, estrutura e distribuição de tamanhos das partículas obtidas foram obtidas por microscopia eletrônica de transmissão (TEM), retroespalhamento Rutherford (RBS) e fotoluminescência (PL).

Por fim, obteve-se uma distribuição de tamanhos mais estreita que a esperada somente por processos termodinâmicos, conforme descrito pela teoria LSW[2]. Mostrando que é possível utilizar técnicas de feixes de íons para controlar a dispersão de tamanhos de nanopartículas.

[1] D L. Zhou et al. Narrow size distribution of Au nanocrystals formed in sapphire by utilizing Ar ion irradiation and thermal annealing. Nuclear Instruments and Methods B, 278:42–45, 2012.

[2] A I. M. Lifshitz e V. V. Slyozov. The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 19:35–50, 1961.

MEIS INVESTIGATION OF PT-PD NANOPARTICLES

V. Z. C. Paes⁽¹⁾, P. L. Grande⁽¹⁾, and J. Morais⁽¹⁾

(1) Federal University of Rio Grande do Sul (UFRGS), Institute of Physics, Av. Bento Goncalves 9500, Porto Alegre, Brazil

MEIS (Medium Energy Ion Scattering) is an ion-beam technique with high resolution that is suitable to study the outermost layers of nanoparticles [1]. In previous studies, it was shown that MEIS can reveal the core-shell structure of CdSe/ZnS nanoparticles [1,2]. Pt-Pd nanoparticles are of extreme importance in nanocatalysis studies nowadays.

By using the surface sensitivity of MEIS, we studied different Pt-Pd nanoparticles prepared via chemical methods. To do that, we used MEIS spectra simulation software POWERMEIS [1] and we compared different models of Pt-Pd arrangement in the nanoparticle. For example, we performed spectra simulations considering a Pt-Pd alloy, Pt-core/Pd shell, Pd-core/Pt-shell, interpenetrate Pt-Pd spheres or isolated Pt and Pd spheres. Through minimization of the difference between theoretical simulation and experimental results, we determined the arrangement of Pt and Pd in the nanoparticle. Our results show that depending on the chemical preparation method, a Pt-Pd alloy or a Pd-core/Pt-shell is formed.

[1] M. A. Sortica, P. L. Grande, G. Machado and L. Miotti, *J. Appl. Phys.*, 114320 (2009) 106.

[2] M. A. Sortica, P. L. Grande, C. Radtke, L. G. Almeida, R. Debastiani, J. F. Dias, and A. Hentz, *Appl. Phys. Lett.*, 023110 (2012) 101.

Estudo da formação de quantum dots de InAs em silício por implantação iônica

M.A. Sortica^(a,b), B. Canut^(a), M. Hatori^(b), P. L. Grande^(b), J.F. Dias^(b), N. Chauvin^(a), O. Marty^(c)

(a) Université de Lyon; Institut des Nanotechnologies de Lyon INL-IMR5270, CNRS, INSA de Lyon, Villeurbanne, F-69621 Villeurbanne, France

(b) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (IF-UFRGS), Av. Bento Gonçalves 9500, 91501-970, Porto Alegre (RS), Brazil

(c) Université de Lyon; Institut des Nanotechnologies de Lyon INL-IMR5270, CNRS, Université Lyon 1, Villeurbanne, F-69621 Villeurbanne, France

Nanocristais de compostos III-V, imersos em uma matriz semicondutora de maior largura de banda, são de grande interesse para dispositivos optoeletrônicos, já que o intenso efeito de confinamento quântico desses materiais possibilita ajustar sua emissão de luz através do controle dos tamanhos dos nanocristais. A técnica mais utilizada para produzir tais nanoestruturas é epitaxia por feixe molecular (MBE), mas outra técnica bastante utilizada é a combinação de implantação iônica com tratamento térmico.

Nesse trabalho, estudamos a formação de quantum dots pela implantação sequencial de As e In em Si (1 0 0) seguido por tratamento térmico rápido (RTA) das amostras implantadas. Dois conjuntos de amostras foram produzidas com fluências de $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ e $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. As espécies foram implantadas a uma temperatura de 500 °C com energias de 250 keV para o As e 350 keV para o In. As amostras foram tratadas termicamente com diferentes temperaturas e por diferentes tempos a fim de otimizar a emissão de luz dos nanocristais em silício. A caracterização óptica foi feita por espectroscopia de fotoluminescência e a caracterização estrutural das amostras foi feita por espectrometria de retroespalhamento Rutherford canalizada (RBS-C), microscopia eletrônica de varredura (SEM) e microscopia eletrônica de transmissão (TEM).

Após o tratamento RTA, foi observada a formação de precipitados e um forte aumento na intensidade da fotoluminescência. Pela análise de RBS, podemos observar a remoção dos defeitos causados na matriz de silício em função da temperatura de RTA, bem como a perda das espécies implantadas por difusão durante o RTA. Observamos que para as amostras implantadas com uma fluência de $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, obtivemos a melhor remoção de defeitos, maior intensidade de fotoluminescência e nenhuma perda por difusão foi observada para as espécies implantadas.

Efeito da radiação ultravioleta na formação de núcleos de condensação de nuvens em misturas de água e dimetilsulfeto

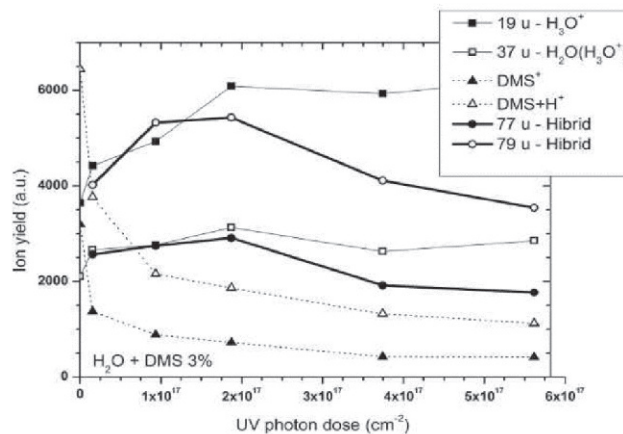
R.S. Tiedt^(a,b), M.G. Schappo^(a,b), L.G. da Silva^(a), R. Haas^(a), M.G.P Homem^(c) e L.S. Farenzena^(a)

(a) Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) – Campus Reitor João David Ferreira Lima, Trindade – Florianópolis, SC – Brasil – CEP 88040-900

(b) Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Santa Catarina (IFSC) – Campus São José Rua José Lino Kretzer, 608 – Praia Comprida – São José, SC – Brasil – CEP 88103-310

(c) Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) – Rodovia Washington Luís (SP-310), km 235 – São Carlos, SP – Brasil – CEP 13565-905

O litoral sul do Brasil - em especial o litoral do Estado de Santa Catarina- tem registrado repetidos eventos de chuva não explicadas pelos modelos existentes e não detectadas pelos radares meteorológicos pois são geradas por nuvens baixas e quentes [1]. Estas chuvas se aproximam pelo quadrante leste, tendo origem oceânica. No ano de 2011 foi investigada no projeto CLOUD [2] – *Cosmic Leaving OUtdoors Droplets* – associado ao CERN, o papel dos raios cósmicos na formação de núcleos de condensação de nuvens (NCN) a partir de água e H_2SO_4 , demonstrando sua importância na formação de nuvens na baixa atmosfera. Há um entendimento que a maior fonte de compostos de enxofre presentes na atmosfera se devem à atividade de algas que geram dimetilsulfeto (DMS, CH_3-S-CH_3). Análises químicas de águas de chuva do litoral catarinense mostram alta concentração de compostos de enxofre em algumas amostras relacionadas a nuvens quentes. Neste trabalho, amostras com diferentes concentrações de água e DMS são introduzidas em uma câmara de ultra-alto-vácuo e condensadas em um substrato metálico mantido à temperatura de 25 K. Utilizando a técnica PDMS [3] analisamos a desorção iônica das amostras através da espectrometria de massas por tempo-de-vo. A amostra pode ser modificada in-situ por uma lâmpada de Hidrogênio não monocromatizada que irradia a amostra através de uma janela de CaF_2 , tendo como principal emissão a linha Lyman-alpha (10,2 eV). A análise de massas é então feita para a amostra como depositada e para diferentes doses de fótons UV. A figura abaixo mostra o rendimento de alguns íons desorvidos para três grupos de moléculas: I) água :picos 19 u (H_3O^+) e 37u ($H_2O(H_3O^+)$); II) DMS: picos 62 u (DMS^+) e 63 u ($DMS+H^+$); III) híbridos água+DMS: picos 77 u e 79 u. O rendimento total dos agregados de água tem um pequeno aumento e uma maior contribuição do primeiro agregado (19u). Observamos uma queda acentuada no rendimento de moléculas de DMS com o aumento da dose de fótons e para as moléculas híbridas (compostas por moléculas de água e DMS) observamos primeiramente um aumento e então um decréscimo em função da dose de fótons. Através destes dados extraímos uma dose ótima para formação de moléculas híbridas. Além das amostras de água e DMS puros iremos também mostrar dados para misturas com 3% e 10% de DMS.



Rendimento iônico de grupamentos moleculares para mistura de $H_2O+DMS(3\%)$ com irradiação de fótons UV.

[1] Haas, R. *Simulações da chuva orográfica associada a um ciclone extratropical, no Litoral Sul do Brasil*, Tese de Doutorado do DCA-IAG-USP, São Paulo-SP, dezembro de 2002.

[2] Kirkby, J. et al. *Role of sulphuric acid, ammonia and galactic cosmic rays in atmospheric aerosol nucleation*. Nature, v. 476, n. 7361, p. 429-433, 2011.

[3] Farenzena, L. S. et al. *Secondary Ion Emission from CO₂-H₂O Ice Irradiated by Energetic Heavy Ions. Part I: Measurement of the Mass Spectra*. International Journal of Mass Spectrometry, v. 243, p. 85-93, 2005.

Caracterização e análise do estresse no parâmetro de rede em sistemas Cristal/Amorfo através da técnica de MEIS

T. S. Ávila^(a), P.L. Grande^(a), e P.F.P. Fichtner^(a)

(a) Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Av. Bento Gonçalves 9500 - Campus Vale, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil.

Nanoestruturas na interface de matrizes sólidas cristal/amorfo do tipo Si/SiO₂ têm sido investigadas, por apresentarem grande interesse tecnológico nas áreas de nanociência e nanotecnologia, devido as suas propriedades físicas propícias para o desenvolvimento de dispositivos óticos e eletrônicos, tais como: memórias voláteis (*flash memory*) e diversos tipos de transistores de efeito de campo (*FET technology*)[1,2].

Amostras do tipo SOI (*Silicon on Insulator*) com camadas cristalinas ultrafinas na superfície, têm sido utilizados para o crescimento de nanopartículas semicondutoras de germânio (SGOI - *Silicon-Germanium on Insulator*)[1]. Recentes estudos têm mostrado que heteroestruturas crescidas na superfície desses SGOI's apresentam um aumento efetivo na mobilidade de portadores quando comparados com SOI puro. Isto possibilita grandes vantagens tecnológicas nas características da corrente de *gate* no dreno de transistores.

A técnica de MEIS é utilizada para análise de superfícies cristalinas, capaz de determinar as composições elementares e o perfil de concentração em filmes ultrafinos com resolução de profundidade menor que 1nm. O MEIS ainda serve como técnica adicional para a caracterização da forma, distribuição de tamanhos e estequiometria de sistemas de nanopartículas na superfície bem como em camadas mais profundas[4]. Sendo possível ainda, efetuar uma análise sobre a tensão da rede de filmes cristalinos. Através do software de simulação de Monte Carlo, PowerMeis[5], desenvolvido pelo grupo de Implantação Iônica da UFRGS são obtidos resultados sobre a caracterização da forma, distribuição de tamanhos e de estequiometria de sistemas de nanopartículas e filmes.

O objetivo deste trabalho é utilizarmos a grande capacidade da técnica de MEIS, combinada com outras técnicas experimentais (RBS e TEM), para caracterizar amostras SGOI e SOI, de forma a obtermos informações sobre as suas características de estrutura interna e composição elementar, além de aspectos de tensão na rede e suas implicações na mobilidade eletrônica destes materiais.

Mostramos que através da análise via MEIS das regiões de bloqueio, observadas nos mapas bidimensionais, que o estresse na camada cristalina superficial nas amostras SGOI, devido a presença de Germânio, torna a mobilidade eletrônica destes materiais maior do que nas amostras SOI, fazendo com que esse tipo de material apresente melhores características para aplicações tecnológicas em dispositivos eletrônicos.

[1] C. Lee, J.H. Kwon, J.S. Lee et al. Appl. Phys. Letters 91:153506,2007.

[2] G.M. Xia, J.L. Hoyt and M.J. Canonico. Appl. Phys. 101:044901, 2007.

[3] I.E. Tyschenko, M. Voelskow, A.G. Cherkov, V.P. Popov, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 267 (2009) 1277–1280.

[4] D.F. Sanchez, F.P. Luce, Z.E. Fabrim, M.A. Sortica, P.F.P. Fichtner, P.L. Grande, Surface Science 605 (2011) 654–658.

[5] M. A. Sortica, P. L. Grande, G. Machado, and L. Miotti, Journal of Applied Physics, 106 1 (2009).

Infrared spectroscopy of valine irradiated by MeV ions

C.A.P. Costa^(a), C.F.G. Mejía^(a), C.R. Ponciano^(a), E.S. Duarte^(b) and E.F da Silveira^(a)

^(a) Departamento de Física, PUC-Rio, Rua Marques de São Vicente 225, Rio de Janeiro, 22451-900, Brazil.

^(b) Instituto Federal do Rio de Janeiro, 26530-060, Nilópolis, RJ, Brazil.

Amino acids are one of the keys in the Chemistry of life on Earth. Researchers have been spending decades to identify a whole miscellany of amino acids on meteorites (some of them involving life). [2] The isomers L and D valine are typical examples of complex organic molecules found in outer space. Both samples were irradiated by 330 and 650 keV H^+ and by 330, 650 and 1000 keV He^+ beams produced by the Van de Graaff accelerator at PUC-Rio. These projectiles were selected because they are the main components of solar cosmic rays. The radiolysis of valine was monitored by infrared spectroscopy. Fig. 1a presents a typical IR spectrum; the area, S , of the peak between arrows was determined for different fluences, F . The exponential decrease of this area is shown in Fig. 1b, which allows the destruction cross-section (σ_d) determination.

Preliminary cross section results, as a function of the electronic stopping powers, S_e , relative to the used beams, are displayed in Fig. 1c. Conclusions: a) the dependence of σ_d on S_e appears to be linear; b) within the experimental accuracy of the current data, it is not possible to know whether L and D valines have different destruction cross sections.

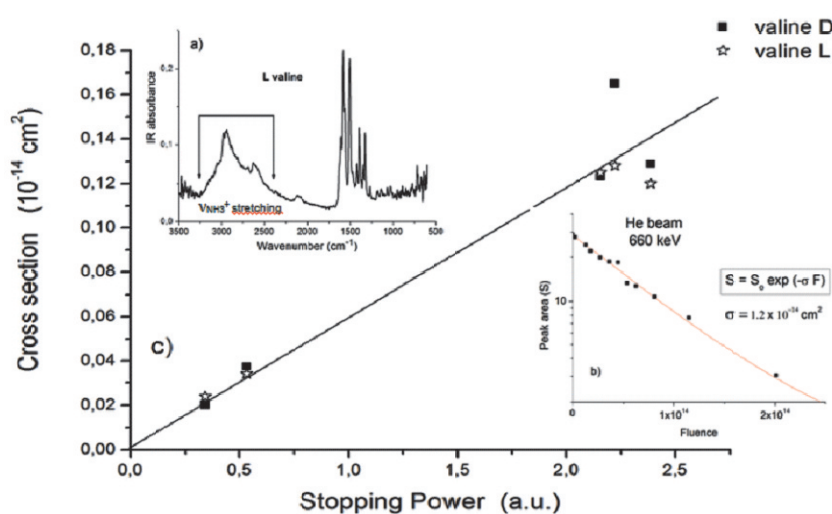


Figure 1:

- L valine spectrum before irradiation.
- Band area decrease in function of ions fluence for L valine under 1,0 MeV He^+ .
- Cross-section versus the electronic stopping power for H^+ and He^+ ions bombarding valine.

[1] E.F. Silveira. American Institute of Physics Conf. Proc. 1529, 10-21 (2013). **Coments on cosmic Ray research in Brazil.**

[2] S. Pilling et. Al. Astrobiology 13 n° 1 (2013). **The influence of crystallinity degree on the Glycine decomposition induced by 1 MeV próton bombardment in space analog conditions.**

The authors acknowledge the agencies FAPERJ, CNPq and CAPES.

Variación de la composición química de un ionómero dental en distintos medios acuosos

M. G. Verón ^(a), B. Quiroga ^(b), M. O. Prado ^(a,b,c), S. Suárez ^(a,b,c)

(a) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).

(b) Centro Atómico Bariloche (CNEA), Av. Bustillo 9500 (8400) S. C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.

(c) Instituto Balseiro, Universidad nacional de Cuyo, S. C. de Bariloche, Río Negro, Argentina.

Los materiales para aplicaciones médicas representan un desafío para la ciencia de materiales, ya que los mismos deben tener buen desempeño mecánico y resistencia química en un ambiente biológico dinámico y muchas veces agresivo. Dentro del área odontológica, es de gran interés poder desarrollar un material que permita realizar restauraciones libres de metales y excelentes resultados estéticos. En este sentido han adquirido una gran importancia los ionómeros vítreos (IV) para restauraciones de lesiones pequeñas o caries [1-3]. Estos compuestos están formados por una fase vítrea de fluoraluminosilicato y por un polímero polimetacrilato. Poseen propiedades únicas que los hacen sumamente atractivos como materiales restauradores, presentan gran adherencia a la estructura dental húmeda y metales base, tienen propiedades anticariogénicas debido a la liberación de fluoruro, son compatibles térmicamente con el esmalte de los dientes debido a los bajos coeficientes de expansión térmica, similares a las de la estructura dental, presentan biocompatibilidad y baja citotoxicidad.

En el presente trabajo se estudia la variación en el tiempo de la composición del ionómero comercial Ketac Molar Easymix (3M) almacenado en diferentes bebidas de consumo habitual. Las muestras se prepararon según las indicaciones del fabricante; se colocaron en los medios y se estacionaron en estufa de cultivo a 36 °C durante 14 días. La composición superficial inicial de las muestras y la evolución de la misma se estudió mediante las técnicas PIXE.y RBS. Los resultados preliminares mostraron una disminución apreciable en la concentración de ciertos elementos: C, O, F, Ca, manteniéndose prácticamente inalterada en el resto de componentes, independientemente del medio.

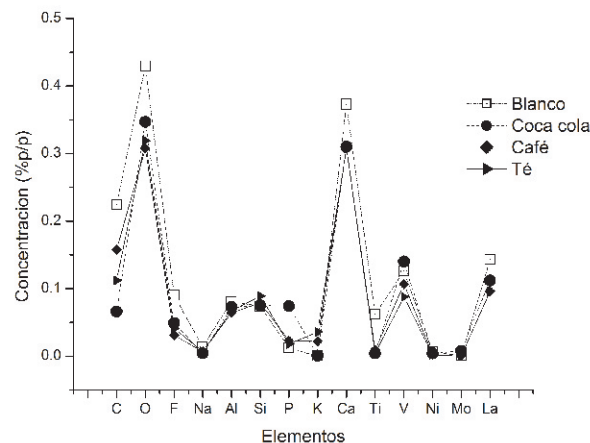


Figura: Variación de la concentración de los elementos de las muestras almacenadas durante 14 días en diferentes bebidas.

Referencias

- [1] Phillips Ciencia de los materiales dentales, Kenneth J. Anusavice DMD PhD, 11ma Edición, Elsevier, 2004.
- [2] Glass Ceramic Technology, Wolfram Holand, George H. Beall, American Ceramic Society, 2002.
- [3] TR. Mahesh Singh, P .Suresh, J .Sandhyarani, J .Srvanthi, Glass ionomer cements (GIC) in dentistry: a review. Int. J. Plant, Animals and Environmental Sci. 1 (2011) 26-30.

Interferencias cuánticas en el rango de energías intermedias

A. Riascos Ochoa^(a), J. M. Monti^(b), J. Fiol^(a), R.D. Rivarola^(b), B. Quiroga^(a), C. Olivares^(a), D. Fregenal^(a), G. Bernardi^(a), S. Suárez^(a)

(a) Centro Atómico Bariloche, Av. Bustillo 9500, 8400 Bariloche, Argentina

(b) Instituto de Física de Rosario, Bv. 27 de febrero 210 bis, 2000 Rosario, Argentina

Muchos resultados experimentales han sido publicados hasta el presente en relación con la emisión de electrones rápidos en colisiones ion-átomo [1]. Además de los mecanismos bien conocidos de emisión, tales como captura/pérdida de electrones al continuo del proyectil, emisión de electrones blandos, electrones producidos por colisiones binarias y autoionización desde el blanco o del proyectil, en las últimas décadas, efectos de interferencia han sido incluidos en la discusión y análisis de los espectros de emisión. Los denominados “efectos de interferencia cuántica” fueron investigados desde fines de los años '80 por diferentes grupos [2]. Varios años más tarde de las primeras evidencias experimentales, Monti y colaboradores [3] presentaron un cálculo cuántico del efecto dando una explicación simple e intuitiva. Estos resultados mostraron la presencia de dos estructuras en las proximidades del pico de emisión binaria debidas a la interferencia entre las interacciones de Corto y Largo alcance del potencial del proyectil en la emisión de electrones desde el blanco atómico. Estos cálculos fueron capaces de reproducir cualitativamente los espectros de emisión de electrones emitidos en la colisión de U^{21+} sobre blancos de He, también en otros sistemas con proyectiles múltiplemente cargados (I^{7+} , I^{23+} , Au^{11+} , etc.) con diferentes blancos gaseosos.

En este trabajo tomamos la misma idea con el propósito de investigar interferencias cuánticas con proyectiles más livianos con menores energías. Mostramos espectros de emisión en colisiones de Al^{9+} y Si^{9+} sobre H_2 y He para energías entre 3 – 7 MeV y para varios ángulos de emisión. Nuestros resultados son interpretados con la ayuda de conocidas aproximaciones cuánticas, CDW y CDW-EIS.

[1] N. Stolterfoht, R. D. DuBois, R. D. Rivarola, “Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions”, (Springer Series on Atoms + Plasmas, 20) 1997. Editors: G. Ecker, P. Lambropoulos, I. Sobel'man, H. Walther, H. Lotsch.

[2] C.O.Reinhold et al, Phys.Rev.Lett.**66**, 1842(1991); W. Wolff et al, J.Phys:B: Mol.Opt.Phys.**25**, 3683(1992) and references therein.

[3] J. M. Monti et al, J.Phys.B:Mol.Opt.Phys.**41**, 201001(2008).

Determinación experimental de secciones eficaces de producción de rayos X en oxígeno por impacto de protones

S. Limandri ^(a,b), M.B. Quiroga ^(c), C. Olivares ^(c), G. Bernardi ^(c), S. Suárez ^(a,d)

(a) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas de la República Argentina

(b) Facultad de Matemática, Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba. Medina Allende s/n. CP:X5000HUA Córdoba, Argentina.

(c) Comisión Nacional de Energía Atómica - Centro Atómico Bariloche. Av. E. Bustillo km 9500, San Carlos de Bariloche CP:8400, Río Negro, Argentina.

(d) Instituto Balseiro - Universidad Nacional de Cuyo. Av. E. Bustillo km 9500, San Carlos de Bariloche CP:8400, Río Negro, Argentina.

Contar con datos experimentales de secciones eficaces de producción de rayos x es muy importante tanto para la física básica como aplicada. Por ejemplo, se necesitan datos experimentales para evaluar los modelos teóricos que describen procesos atómicos que involucran capas internas y para realizar análisis precisos de elementos traza.

El método más utilizado para la determinación de secciones eficaces consiste en medir la intensidad de rayos x característicos de ese elemento emitidos por una muestra delgada; de esta manera, la intensidad característica será directamente proporcional a la sección eficaz que se pretende determinar. Esto es válido para cualquier haz incidente. No obstante la mayoría de los detectores de rayos X utilizados en equipamientos que permiten bombardear una muestra con haces de iones no poseen capacidad para la detección de rayos X de bajas energías. Por este motivo, los datos experimentales relacionados a elementos de bajo número atómico son muy escasos.

En este trabajo presentamos los resultados experimentales obtenidos de secciones eficaces de ionización por impacto de protones de la capa K en O a partir del análisis de espectros de emisión de rayos x de películas correspondientes a Al_2O_3 y SiO_2 para energías de incidencia entre 1 y 3 MeV. La detección de rayos X característicos fue realizada con un detector de Si(Li) de ventana ultradelgada. Los espesores másicos de los films fueron caracterizados por RBS. Los resultados obtenidos son comparados con otras determinaciones experimentales [1], cálculos basados en las teorías EPCSSR y PWBA [2] y modelos semiempíricos disponibles en la literatura [3].

[1] G. Lapicki, J. Phys. Chem. Ref. Data, 18 (1989) 111-202.

[2] G. Lapicki, X-Ray Spectrom. 34, (2005) 269-278.

[3] M. Nekkab, B. Deghfel, A. Kahoul. Proceedings 6th Conference on Nuclear and Particle Physics (2007) 557-567. Luxor, Egypt.

Determinación de poderes de frenamiento de películas delgadas de óxidos de Uranio con iones de He, Li y O.

M. Mayo^(a), S. Limandri^(b), B. Quiroga, J. Guimpel^(a,b), G. Bernardi y S. Suárez^(a,b)

Centro Atómico Bariloche, A. E. Bustillo 9500, Bariloche, Argentina

(a) Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, Bariloche, Argentina

(b) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

Se estudió experimentalmente el poder de frenamiento de partículas He, Li y O en films de UO_3 y UO_4 en el rango de energías comprendido entre 0.3 y 6.0 MeV. Los iones fueron producidos y acelerados en el nuevo acelerador Tandem del Centro Atómico Bariloche y los poderes de frenamiento fueron obtenidos empleando la técnica conocida como Rutherford Back Scattering (RBS). Los films fueron crecidos en un sustrato de Silicio mediante sputtering con Ar sobre una pastilla de U_3O_8 . Una atmósfera de presión variable de Oxígeno permitió obtener las estequiometrías de UO_3 y UO_4 , las que fueron determinadas utilizando las técnicas RBS y XPS. El poder de frenado fue determinado por dos métodos: la aproximación de superficie y la aproximación de energía media. Se discuten las condiciones de validez y los resultados de tales métodos. Los resultados obtenidos fueron comparados con simulaciones realizadas por el programa SRIM.

Ionização múltipla da molécula de H₂O por H⁺ e Li³⁺

André C. Tavares^a, W. Wolff^b, H. Luna^b, E.C. Montenegro^b

(a) Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, CP. 38071, Rio de Janeiro, RJ, 22452-970, Brasil.

(b) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CP. 6852, Rio de Janeiro, RJ, 21945-970, Brasil.

Um estudo experimental da ionização e fragmentação da molécula H₂O por colisões dos íons H⁺ e Li³⁺ foi realizado na faixa de energias entre 300-2000 keV e 750-5800 keV, respectivamente. Um modelo teórico foi desenvolvido para descrever as seções de choque por impacto de prótons. O enfoque do trabalho está em determinar de forma quantitativa, em valores absolutos, a formação dos fragmentos iônicos e identificar a contribuição da ionização dos orbitais moleculares e de processos tipo Auger nos canais de dissociação. Tais informações são de considerável importância para sugerir uma modelação mais acurada da fragmentação da água por íons pesados e permitir o entendimento dos processos presentes nos padrões de fragmentação para ionizações simples, duplas e triplas. As Seções de Choque Absolutas (SCAs) para produção de fragmentos iônicos foram obtidas resultantes da combinação da técnica de espectroscopia de massa por tempo de voo, aliada a um sistema de coincidência de fragmentos "multihit" baseado em um conversor tempo-digital (TDC). As SCAs para impacto de prótons foram obtidos por normalização à dados disponíveis na literatura, enquanto que os valores das SCAs para o projétil Li³⁺ foram extraídos em combinação à técnica de taxa de crescimento. Estas medidas permitiram também quantificar as seções de choque dos canais de fragmentação em função da troca ou não de carga pelo projétil (ionização pura, captura simples e dupla). Os dados experimentais por impacto de H⁺ evidenciaram que para modelar corretamente a secção de choque de produção de pares de íons principalmente no regime de alta velocidade há a necessidade da inclusão da contribuição do efeito Auger. O modelo desenvolvido por Montenegro [1] aplicando resultados baseados na aproximação BGM [2], descreve com sucesso os dados experimentais Figura 1.

Para o projétil Li³⁺, são apresentados resultados obtidos para a produção de íons e pares de íons produzidos pela interação deste projétil com a molécula da água. Foi aplicado um procedimento para levar em consideração a eficiência de detecção dependente do detetor e do espectrômetro, do desempenho do espectrômetro aplicado ao estudo da fragmentação molecular e da distribuição energética dos fragmentos não térmicos.

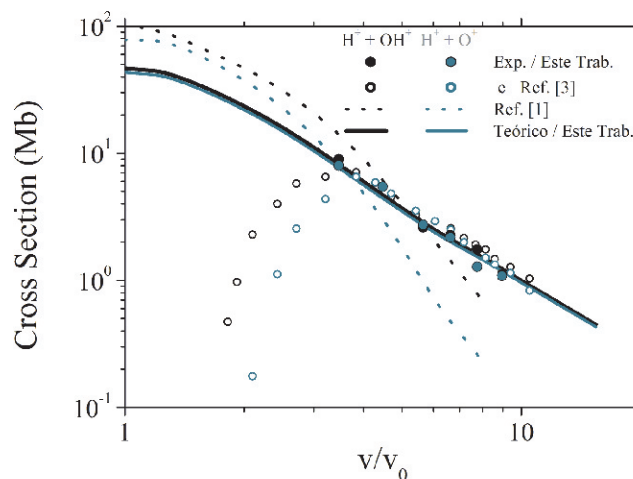


Figura 1 - Comparação entre as seções de choque para impacto com H⁺, experimentais e teóricas, obtidas neste trabalho com cálculos apresentados por T. Kirchner [2] e seções de choque para produção de duplas por impacto de elétrons [3].

[1] E. C. Montenegro *J. Phys: Conf. Ser.* **194**, 012049, (2009)

[2] M. Murakami, T Kirchner *et al.*, *Phys. Rev. A* **85**, 052713 (2012).

[3] E. C. Montenegro *J. of Elec. Spec. and Relat. Phen.* **155**, 81 (2007).

²⁵²Cf-PDMS-TOF and Raman spectrometry studies on meteorites.

J. M. da S. Pereira^a, C. R. Ponciano^a, E. F. da Silveira^a

^a Departamento de Física, PUC-Rio, Rua Marquês de São Vicente 225, 22451-900, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

The study of meteorites is relevant because their chemical and crystallographic transformations give hints on the solar system evolution. With this aim, we analyzed three different samples of meteorites: a) Isna meteorite, felt in Egypt in 1970; b) Allende meteorite, felt in Mexico in 1969; and c) Zagami meteorite, a Martian meteorite, felt down in Nigeria in 1962.

The analysis of the samples has been done with two different techniques: ²⁵²Cf-PDMS-TOF (Plasma Desorption Mass Spectrometry) and Raman spectrometry. The first shows secondary emission of large variety of masses, including species with masses around 500 u, for the positive ion spectra; for the negative ion spectra, species with mass around 320 u were observed. The Raman spectrometry gives results on the presence of carbon atoms and their structure; for instance, the G peak indicates the existence of carbon-carbon vibration bonds and the D peak shows the occurrence of amorphous carbons. The two small peaks around 2600-3000 cm⁻¹ are attributed to non-crystalline carbon material.

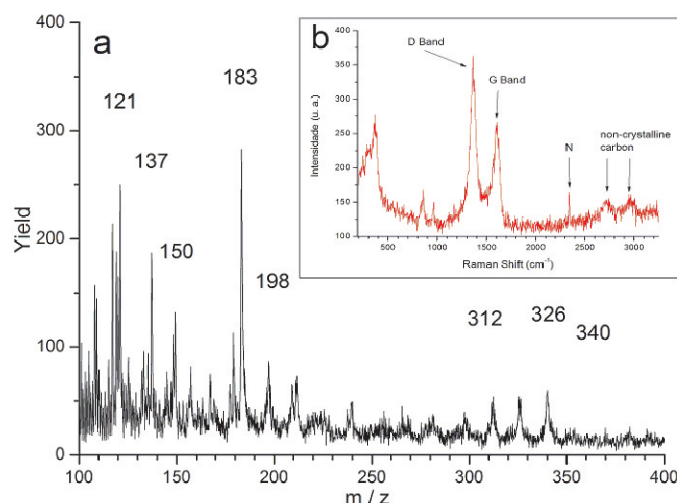


Figure 1:

a- Partial mass spectrum of negative ions obtained from the Allende meteorite. Note that 14 u (CH₂) is the mass difference between the three last peaks.

b- Raman spectrum of the same meteorite. The presence of the G and D bands proves that carbon links exist in the sample. This agrees with the classification *carbonaceous chondrite* for this meteorite[1]. The two small bands around 2700 cm⁻¹ indicate that a fraction of carbon atoms exhibits some degree of crystallinity.

[1] JAROSEWICH. E. **Chemical analyses of meteorites: A compilation of stony and iron meteorites analyses.** Meteoritics.1990. 25. 323-337.

The authors acknowledge the agencies FAPERJ and CNPq for partial support.

Caracterização Elementar da Erva Mate

F. F. Fernandes ^(a), L. A. B Nieklaszewicz ^(a), D. Bauer ^(a), T. Ferrari ^(a), C. T. de Souza ^(a) e J. F. Dias ^(a)

(a) Laboratório de Implantação Iônica, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, CP 15051, CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil.

A erva mate é utilizada para o preparo de uma bebida muito apreciada na Argentina, Uruguai e sul brasileiro, a qual é conhecida como mate ou chimarrão pelos apreciadores desta tradição. Com intuito de verificar a existência dos elementos cádmio e chumbo identificados por autoridades uruguaias em ervas exportadas a partir do Brasil, foram avaliadas duas ervas produzidas no Rio Grande do Sul pela mesma ervateira, sendo que uma é comercializada nesse estado, enquanto que a outra é comercializada no Uruguai. Usando a técnica PIXE (Particle Induced X-Ray Emission) existente no laboratório de Implantação Iônica do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), observou-se a presença de Mg, Al, Si, P, S, Cl, K, Ca, Ti, Mn, Fe, Cu, Zn, Rb, Sr e Ba em diferentes concentrações nas duas marcas de erva mate. Além disso, foi feita uma avaliação do percentual de cada elemento presente na erva mate antes e após a infusão, e consecutivamente, ingeridos pelo apreciador desta bebida. Tal balanço mostra que alguns elementos como Cl e K são altamente solúveis em água, sendo portanto transferidos da erva mate para o consumidor da bebida.

[1] R. Giulian et al., Elemental Characterization of Commercial Mate Tea Leaves (*Ilex paraguariensis* A. St. – Hil.) before and after Hot Water Infusion Using Ion Beam Techniques. *J. Agric. Food Chem.* 2006, 55, 741-746.

A Influência da Metodologia de Preparo de Amostras na Análise de Creme de Leite por PIXE.

D.Bauer^(a), T.Ferrari^(a), A.Cunha^(a), J.Feijó^(a) J.FDias^(a)

(a) Laboratório de Implantação de Íons, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves, CP 15051, CEP 91501-970, Porto Alegre, RS, Brasil.

Para a conservação de produtos alimentícios, a indústria utiliza diversos materiais em suas embalagens a fim de manter a qualidade do produto até o consumidor final e aumentar a vida de prateleira do mesmo. Nos últimos anos, utilização de aceleradores de íons na análise de alimentos e embalagens vem ganhando importância devido às suas características intrínsecas como rapidez e boa sensibilidade. Baseada em feixes de íons, a técnica *PIXE (Particle Induced X-Ray Emission)* existente no Laboratório de Implantação Iônica do Instituto de Física da UFRGS, consiste em incidir um feixe de prótons em alimentos e embalagens com a finalidade de obter a composição elementar das amostras em estudo. O objetivo do presente trabalho consiste em comparar duas metodologias de preparo de creme de leite para posterior análise por PIXE. Neste contexto, vale lembrar que as amostras possuem alto teor lipídico, o que dificulta sua preparação. Para atingir tal fim, um lote de creme de leite armazenado em embalagem do tipo Tetra Pack foi selecionado e preparado por duas maneiras distintas. A primeira consiste em incinerar a amostra por meio de uma chapa aquecida, a fim de obter, como produto final, cinzas. O outro método de preparo consiste em dissolver a amostra em acetona a fim de separar a gordura presente até obter uma amostra sólida. Resultados preliminares indicam a presença de Rb, Ca, Fe, Na, S, Ni, Sr, K, Zn, Cl, P tanto para amostras incineradas quanto para amostras dissolvidas em Acetona. Porém, as diferenças entre os processos para alguns elementos sugerem que o método de incineração é a melhor maneira de preparar amostras com alto teor de gordura.

Referências:

- [1] Publicação interna do Laboratório de Implantação Iônica do Instituto de Física (LII UFRGS) - UFRGS
- [2] Yoneama, M. L.; Dias, J. F., Estudos Ambientais em Candiota, carvão e seus impactos. FEPAM (2004)

Caracterização estrutural por MEIS de *quantum dots* CdSe/ZnS modificados termicamente

M. A. Sortica¹, L. G. Almeida¹, P. L. Grande¹, C. Radtke², A. Hentz¹

¹Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil

²Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil
lais.almeidag@gmail.com

Nanocristais compostos são materiais usados em muitos campos do desenvolvimento tecnológico. Entretanto, o conhecimento preciso do perfil de distribuição elementar dentro deles é um grande desafio. O espalhamento de íons de média energia (MEIS) é uma técnica de análise por feixe de íons, capaz de obter perfis de profundidade com resolução subnanométrica. Esta técnica foi otimizada para análise de materiais nanoestruturados [1], passando a ser uma ferramenta para a caracterização estrutural dentro de *quantum dots* QDs [2]. O nosso grupo de pesquisa realizou um estudo com QDs núcleo-casca comerciais de CdSe/ZnS e foi possível obter o perfil de distribuição elementar e a caracterização da nanoestrutura que as formam [3]. Neste trabalho, utilizamos a técnica MEIS, combinada com microscopia eletrônica de transmissão, espectrometria de retroespalhamento Rutherford (RBS) e fotoluminescência, para caracterizar os mesmos QDs, porém, modificados termicamente a uma temperatura de 400°C durante 5 minutos. Para obter a informação estrutural dos nanocristais, utilizamos o software de simulação de espectros *PowerMeis*, desenvolvido em nosso laboratório, para simular espectros de MEIS para diferentes modelos estruturais. A caracterização foi obtida pelo melhor ajuste do espectro simulado, com o espectro experimental.

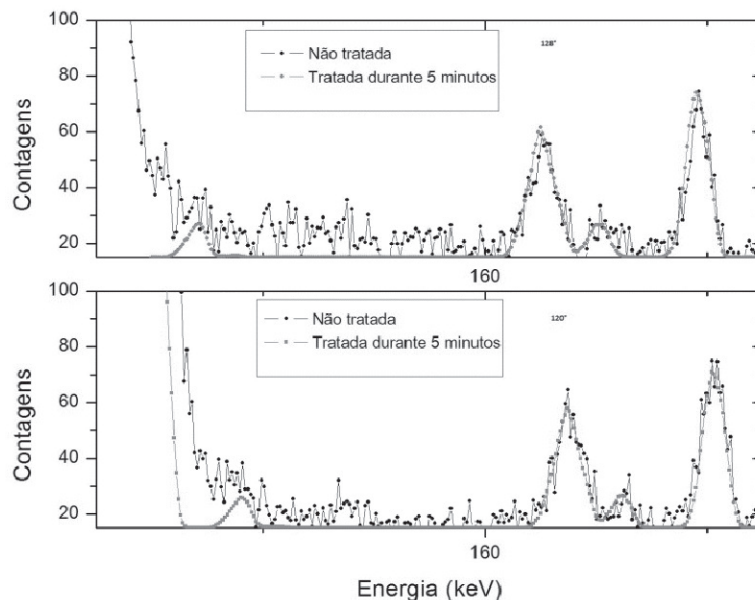


Figura. Melhor ajuste do espectro simulado de MEIS com o experimental, levando em conta dois ângulos diferentes de espalhamento.

O núcleo ainda permanece com um cristal estequiométrico de CdSe, com um núcleo em torno de 4,2 nm, estando de acordo com as imagens de TEM e com o espectro de fotoluminescência dos nanocristais.. O cádmio excedente está distribuído na casca formando uma estrutura CdSe/CdZnS, apesar do ZnS estar se redistribuindo. Este estudo mostra que a técnica MEIS, combinada com outras técnicas analíticas, é um método poderoso para determinar perfis de distribuição elementar, dentro de nanopartículas com diâmetro de cerca de 5 nm.

[1] M. A. Sortica, P. L. Grande, G. Machado and L. Miotti, *Journal of Applied Physics* **106**, 1 (2009).

[2] H. Matsumoto, K. Mitsuahara, A. Visikovskiy, T. Akita, N. Toshima, and Y. Kido, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **268**, 2281 (2010).

[3] M. A. Sortica, P. L. Grande, C. Radtke, L. Almeida, R. Debastiani, J. F. Dias, A. Hentz, *Applied Physics Letters* **101**, 023110, (2012).

SIMS de MeV no Laboratório de Implantação Iônica - UFRGS

E. M. Stori^(a), L. F. S. Rosa^(a), P. L. Grande^(a), J. F. Dias, R. M. Papaléo^(b)

(a) Ion Implantation Laboratory – Physics Institute – Federal University of Rio Grande do Sul – Av. Bento Gonçalves, 9500, Postal Code University of Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Postal Code 91501-970, P.O. Box 15051

(b) Faculty of Physics, PUCRS, Av. Ipiranga 6681, Porto Alegre, RS, Brasil

Em várias áreas de pesquisa em materiais orgânicos e biológicos a capacidade de analisar compostos orgânicos em duas ou três dimensões com resolução micro e sub-micrométrica tem grande potencialidade, especialmente em se tratando de compostos orgânicos complexos sem a necessidade de marcadores ou adição de matrizes que podem comprometer sua química.

Dentre as técnicas de caracterização molecular, encontra-se o SIMS (*Secondary Ion Mass Spectrometry*), uma técnica muito bem estabelecida, que consiste em excitar íons moleculares secundários através da incidência de um feixe de clusters iônicos com energia na ordem de até algumas dezenas de keV, que são coletados por um espectrômetro de massa, usualmente do tipo tempo de voo.

Na última década foi desenvolvida a técnica conhecida como SIMS de MeV que substitui um feixe iônico de keV por um feixe de MeV. O feixe primário de maior energia permite a detecção de espécies moleculares maiores. Há também um aumento na produção de íons secundários, o que possibilitaria análises em atmosfera ambiente, importante para diversas amostras, como as biológicas, arqueológicas, obras de arte, entre outras. O SIMS de MeV é uma técnica emergente cujos aspectos experimentais e teóricos ainda requerem muitos estudos e aperfeiçoamentos.

Recentemente o Laboratório de Implantação Iônica da UFRGS (LII-UFRGS) adquiriu um espectrômetro de massa por tempo de voo e vem sendo realizado um projeto para implementação da técnica de SIMS de MeV no referido laboratório, desde a confecção da câmara de análises, passando pela montagem da linha experimental até o seu futuro aperfeiçoamento. Este trabalho tem como propósito elucidar as potenciais aplicações da técnica de SIMS de MeV no LII-UFRGS, bem como mostrar o atual andamento do projeto de montagem do equipamento.

Comparative Study of Microstructured Polymer Foils using STIM with H, He and Li ions

E. M. Stori^(a), C. T. de Souza^(a), R. M. Papaléo^(b), L. Amaral^(a), J. F. Dias^(a)

(a) Ion Implantation Laboratory – Physics Institute – Federal University of Rio Grande do Sul – Av. Bento Gonçalves, 9500, Postal Code University of Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Postal Code 91501-970, P.O. Box 15051

(b) Faculty of Physics, PUCRS, Av. Ipiranga 6681, Porto Alegre, RS, Brasil

Scanning Transmission Ion Microscopy (STIM) provides structural images based on the energy loss of swift ions passing through the sample and therefore it depends on local mass density. That quality makes the technique useful for morphological analysis of microstructures fabricated on homogeneous substrates such as polymer foils.

Proton Beam Writing (PBW) is an important technique for fabrication of various devices with applications on different areas such as microfluidics, tissue engineering substrates and microphotonics, among others. Microstructures obtained by PBW can be an interesting object of study by STIM when fabricated on homogeneous substrates. In this case, STIM can be an important tool for morphological characterization.

In this work we present a study of two different structures obtained by PWB and subsequently submitted to STIM measurements using three different ions, namely protons, alpha particles and Li³⁺ ions, in order to evaluate the differences between the analysis by each particle beam considering the energy resolution achieved by them and the effects on the resulting images. The results indicate that ions heavier than protons may provide distinct information about the microstructures under study.

Produção de microfios de íons de MeV com o uso de microcapilares de vidro

D. G. Sotelo^(a) e R. M. Papaléo^(a,b)

(a) Faculdade de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul (PUCRS), Porto Alegre – RS, Brasil

(b) Laboratório de Implantação Iônica, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre – RS, Brasil.

O emprego de um conjunto de lentes eletrostáticas ou magnéticas é uma maneira eficiente de se obter microfios iônicos altamente energéticos, mas sua construção é bastante dispendiosa. O confinamento mecânico de feixes de íons através de estruturas lineares se apresenta como segunda via em relação a essa técnica tradicional. Foram fabricados microcapilares cônicos de vidro com pontas entre 2 m e 118 m através de aquecimento e estiramento controlado, como mostra o exemplo da Figura. Experimentos de produção dos microfios com os microcapilares foram realizados no acelerador de íons 3 MV, do Laboratório de Implantação Iônica do IF-UFRGS. Utilizou-se feixes de H^+ com energia entre 1 e 1,5 MeV e um goniômetro para testes de alinhamento e transmissão do feixe através dos microcapilares. Para cada capilar foi obtida uma posição bem definida de alinhamento. Em alguns casos observaram-se quedas bruscas do sinal ao variar o ângulo em $0,1^\circ$ e em outros o alinhamento é perdido de forma gradativa. Os espectros de energia apresentaram FWHM entre 18 e 158 keV na condição de transmissão máxima. A dispersão angular variou entre $0,2^\circ$ e $1,6^\circ$. A melhor colimação do feixe foi obtida com capilares de pontas com diâmetros intermediárias, entre $3\ \mu\text{m}$ e $17\ \mu\text{m}$. Amostras de policarbonato foram irradiadas com microfios de H^+ de 1 MeV e Au^{7+} de 18 MeV, produzidos através dos capilares de vidro. A fluência variou entre 10^{14} e 10^{16} íons/cm². Diferentes padrões na forma das marcas feitas nos polímeros foram revelados: foram encontradas marcas circulares, marcações em forma de “c” e em formato alongado. O aumento da fluência de íons incidentes na amostra resulta no acréscimo do diâmetro da marcação produzida. Os perfis das marcações apresentaram FWHM ficou entre 38 e 90 μm e o grau de divergência do feixe está entre $0,15^\circ$ e $0,20^\circ$. Estudos preliminares de visualização do microfio com uma câmera CCD também foram implementados.

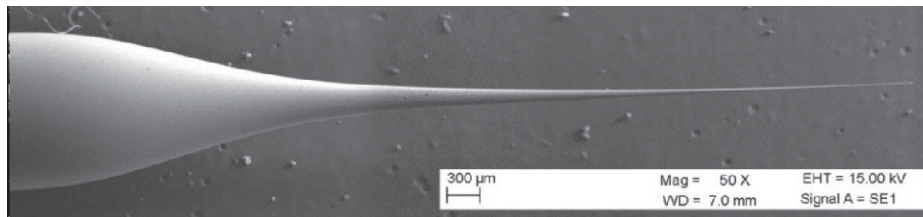


Figura: capilar fabricado por aquecimento e estiramento controlado

- [1] SIMON, M. J.; DÖBELI, M.; MÜLLER, A.M.; SYNAL, H. In-air STIM with a capillary microprobe. **Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B**, v. 273, p. 237-240, 2012.
- [2] ZHOU, C.L.; SIMON, M.; IKEDA, T. et al. Transmission of slow highly charged ions through glass capillaries: Role of the capillary shape. **Physical Review A**, v. 88, 2013.
- [3] NEBIKI, T.; YAMAMOTO, T.; NARUSAWA, T. et al. Focusing of MeV ion beams by means of tapered glass capillary optics. **Sci. Tech. A: Vacuum, Surfaces, and Films**, v. 21, 2003.

Cálculo da Perda de Energia de Íons Moleculares de Baixas Energias na Matéria

F. M. Silva, P. L. Grande, e R. C. Fadanelli

Instituto de Física da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Avenida Bento Gonçalves 9500, 91501-970 Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brasil

Neste trabalho apresentaremos a motivação baseada nos resultados obtidos no laboratório de Implantação Iônica do IF-UFRGS, onde feixes moleculares de H_2^+ e H_3^+ foram utilizados para a determinação de suas perdas de energia e *straggling* na interação com camadas ultrafinas de SiO_2 , numa extensa faixa de energias [1]. Nos resultados obtidos para o fator de perda de energia dos íons moleculares com relação a prótons, observou-se a importância de efeitos não-lineares nos mecanismos de perda de energia na região de baixas energias e, para as energias mais altas, de excitação de *plasmons*. Em particular foi observada uma transição abrupta do efeito de vizinhança (ilustrada na figura abaixo [1]).

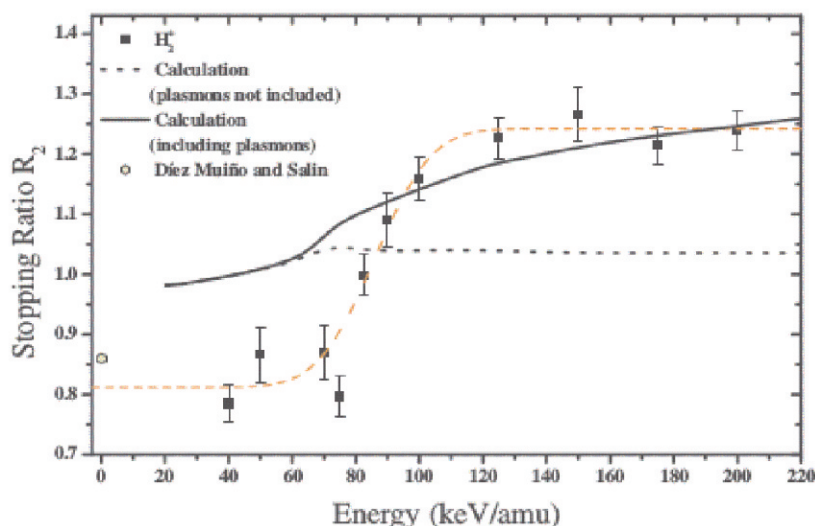


Fig. 1: Resultados experimentais e cálculos teóricos do fator de perda de energia para os íons H_2^+ com relação a prótons. Em altas energias nota-se a importância do efeito de excitação de *plasmons*. Por outro lado, em mais baixas energias os efeitos não lineares tornam-se relevantes.

Até o presente momento nenhum cálculo teórico conseguiu descrever este efeito. Tal efeito está associado à transição do regime não linear (baixas energias) para o linear (altas energias), tendo em vista que poucos cálculos teóricos existem fora do regime linear para íons moleculares [2]. Nosso principal objetivo é o cálculo não perturbativo (não linear) do poder de freamento molecular em materiais amorfos. Mais especificamente, pretendemos investigar os efeitos observados para os filmes de SiO_2 (efeitos não-lineares e presença da transição abrupta). Para isso, estamos desenvolvendo uma nova metodologia de cálculo da perda de energia, utilizando, pela primeira vez, potenciais de interação não centrais para descrever as interações de íons moleculares com os elétrons do meio. Além da forte motivação, apresentaremos os primeiros cálculos para a determinação da perda de energia de íons moleculares em filmes ultrafinos. De forma geral, o cálculo da perda de energia é dado por uma equação escrita em termos da seção de choque de transporte [3]. Esta por sua vez, é dada em termos da seção de choque diferencial, a qual será determinada em termos de ondas parciais e deslocamentos de fases.

[1] S. M. Shubeita, M. A. Sortica, P. L. Grande, J. F. Dias, and N. R. Arista, Phys. Rev. B **77**, 115327 (2008).

[2] P. Sigmund and A. Schinner, Eur. Phys. J. D **61**, 39 (2011).

[3] A.F. Lifschitz, N.R. Arista, Phys. Rev. A **57** (1998) 200.

Irradiação de filmes finos e ultrafinos de polimetilmetacrilato: Efeitos químicos sob condições de confinamento espacial

R. S. Thomaz^(a), B. Q. Friedrich^(a), L. I. Gutierrez^(a), J. Morais^(b), P. Louette^(c), J. J. Pireaux^(c), R. M. Papaléo^(a)

(a) Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Av. Ipiranga 6681, CEP: 90619-900, Porto Alegre - RS, Brasil

(b) Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Goncalves 9500, CEP 91501-970, Porto Alegre - RS - Brasil

(c) Université de Namur, Rue de Bruxelles, 61, 5000, Namur, Belgium

Neste trabalho, a influência do confinamento espacial em uma dimensão nos efeitos químicos induzidos pela irradiação com íons de H^+ de 300 keV e Au^{7+} 18 MeV foram investigados sistematicamente, seguindo as taxas de quebra de ligações em função da espessura h de filmes finos de PMMA ($2 < h < 100$ nm).

As modificações químicas dos filmes foram analisadas por XPS e FTIR, e as mudanças morfológicas foram investigadas por AFM e elipsometria. Resultados preliminares indicam que seções de choque de danos para modificações químicas, estimadas por XPS, mudam muito pouco com filmes de espessura $h \sim 5$ nm. Filmes com $h \sim 2$ nm apresentam resultados menos conclusivos, devido à forte influência de contaminantes de carbono, combinada a mudanças causadas pelo feixe. Diversos desafios tem sido enfrentados na quantificação das taxas de quebra de ligações, somados à redução de sensibilidade na análise dos filmes mais finos. As mudanças morfológicas nos filmes devido ao bombardeamento com íon (rugosidade, cobertura, densidade), além do decréscimo de espessura devido ao *sputtering* podem contribuir na quantificação, e serão discutidos. Nossos resultados preliminares indicam que as taxas de quebra de ligações induzidas por íons pesados com energia de MeV mudam pouco em filmes de PMMA confinados a poucos nanômetros em uma dimensão.

Efeito da espessura de filmes finos de PMMA na taxa de *thinning* induzido por irradiação iônica

R. S. Thomaz^(a), B. Q. Friedrich^(a), L. I. Gutierrez^(a), R. M. Papaléo^(a,b)

(a) Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Av. Ipiranga 6681, CEP: 90619-900, Porto Alegre - RS, Brasil

(b) Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Goncalves 9500, CEP 91501-970, Porto Alegre - RS - Brasil

Foi observada uma redução na espessura de filmes finos e ultrafinos de polimetilmetacrilato após bombardeamento com íons de H^+ de 300 keV, H^+ de 2 MeV e Au^{7+} de 18 MeV. Os filmes finos com espessura inicial h_0 de 2 até 100 nm foram depositados sobre substrato de silício com uma camada de óxido nativo. A espessura do filme após a irradiação com diferentes fluências $h(\Phi)$, foi medida por AFM e por elipsometria. Como esperado, o efeito qualitativo da irradiação com todos os diferentes feixes foi a redução da espessura com o aumento da fluência (*thinning*). No entanto, observou-se uma clara dependência da espessura inicial h_0 na taxa de *thinning*, que se torna progressivamente mais lenta quanto menor a espessura. Para irradiações com H^+ de 300 keV e filmes com $h_0 \sim 50$ nm, a taxa (ou *cross-section*) foi de $\sim 2 \times 10^{-14}$ cm², enquanto para o filme de $h_0 \sim 25$ nm a taxa reduziu para $\sim 6 \times 10^{-15}$ cm². Além disso, para o feixe de H^+ de 300 keV a espessura $h(\Phi)$ tende a saturar, fenômeno que não é observado para o feixe de Au^{7+} de 18 MeV, pelo menos não nas fluências investigadas. Tal diferença é atribuída às diferentes contribuições de compactação e *sputtering* na taxa de *thinning* dos filmes finos para os diferentes tipos de feixes.

Asimetría en la excitación de plasmones por partículas cargadas rápidas en trayectorias oblicuas entrantes y salientes

J. L. Gervasoni^(a,b), S. Seguí^(a), y R. Barrachina^(a,b)

(a) Centro Atómico Bariloche (CNEA) Av. Bustillo 9500, S. C. De Bariloche, 8400 Río Negro, Argentina.

(b) Instituto Balseiro (UNCuyo y CNEA). Av. Bustillo 9500, S. C. De Bariloche, 8400 Río Negro, Argentina.

En este trabajo analizamos la producción de plasmones de volumen y superficie por partículas cargadas rápidas que inciden sobre la superficie de un material semi-infinito (aluminio) en trayectorias oblicuas entrantes y salientes, a diferentes velocidades y ángulos de incidencia. Dentro del marco que da la formulación dieléctrica semiclásica [1,2], estudiamos las diferentes contribuciones al potencial inducido, principalmente en la vecindad de la superficie, analizando las similitudes y diferencias que aparecen cuando la partícula entra o sale del material. En particular, encontramos estructuras oscilatorias novedosas tanto para trayectorias perpendiculares como oblicuas.

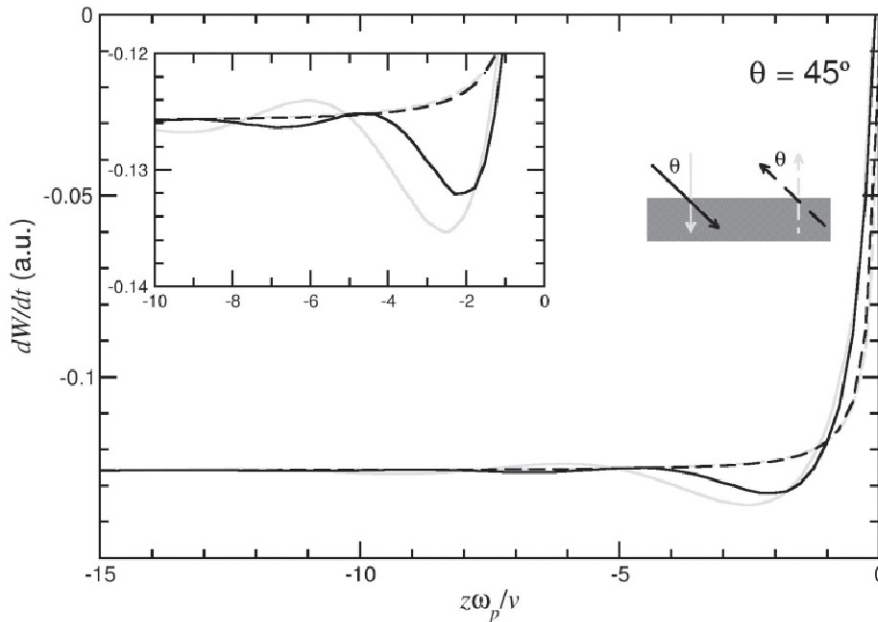


Figura: Pérdida de energía por unidad de tiempo en función de la penetración normalizada $z\omega_p/v$ de una partícula entrando (línea continua) y saliendo (línea a trazos) a través de la superficie plana de una muestra semiinfinita de Aluminio. Velocidad $v=4$ a.u.; ángulo de incidencia $\theta=45$ grados; frecuencia de plasma $\omega_p=15,8$ eV. En gris se muestran los cálculos correspondientes a incidencia perpendicular.

[1] J. L. Gervasoni, N. R. Arista. Surface Science 260 (1992) 329.

[2] J. L. Gervasoni, R. O. Barrachina, S. Seguí, W. Werner. Surf. Interface Anal. 45 (2013) 1849.

Simulação por dinâmica molecular dos defeitos induzidos por íons acelerados em filmes finos orgânicos de espessuras variadas

L. I. Gutierrez^(a), V. M. Menezes^(a), Diego Tramontina^(b), Raquel S. Thomaz^(a), Ricardo M. Papaléo^(a,c) e Eduardo M. Bringa^(b,d)

(a) Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil

(b) Instituto de Ciencias Basicas, Universidad Nacional de Cuyo, Mendoza, Argentina

(c) Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil

(d) CONICET, Mendoza, Argentina

A irradiação de polímeros com íons de alta energia pode produzir defeitos de superfície complexos: crateras cercadas ou não por protuberância. O estudo dos mecanismos de formação dos defeitos e sua dependência com a espessura do filme irradiado quando confinado em uma dimensão podem trazer informações importantes sobre a dissipação da energia em materiais de escala nanométrica. Contudo, uma vez que as interações de interesse ocorrem muito rapidamente e em escala atômica, atualmente não existe aparato experimental disponível para analisar a evolução do sistema a partir da passagem de íons de alta energia por filmes finos orgânicos. Nesse contexto, simulações por dinâmica molecular, usando um modelo simples de pulso térmico (*thermal spike*), foram realizadas a fim de simular camadas ultra finas de um sólido molecular com potencial de Lennard-Jones (LJ) governando as energias de ligação entre as partículas do sólido, que tiveram valores escolhidos similares a de compostos poliméricos. Duas séries diferentes de simulações do sólido molecular foram modeladas: uma com as partículas dispostas em uma rede cristalina e outra para um sólido de LJ amorfo. Para modelar a passagem do feixe iônico por toda extensão do filme, um cilindro simulando um íon com poder de freamento efetivo, inicialmente, de 300 eV/Å foi usado. Diferentes espessuras de filmes foram simuladas para acompanhar a evolução dos defeitos em função do confinamento espacialmente do material. Os resultados das simulações foram analisados e comparados com resultados experimentais obtidos com filmes finos de polimetilmetacrilato (PMMA) irradiados com íons de Pb com energia de 1 GeV. As simulações com base no sólido de LJ cristalino apresentaram boa concordância qualitativa para valores de diâmetro da cratera, porém vazios (*voids*) foram visualizados abaixo das crateras, o que afetou as medidas de profundidade da cratera para algumas espessuras de filmes. As simulações com a estrutura amorfa mostraram também boa concordância qualitativa para o diâmetro da cratera não apresentando, porém, *voids*, tendo a profundidade da cratera aumentado se comparado ao caso cristalino. Os resultados alcançados nas simulações são qualitativamente similares aos encontrados experimentalmente. A partir dos dados de simulação, serão discutidas a contribuição do fluxo de material derretido e do impulso coerente (pulso de pressão) na formação dos defeitos de superfície decorrentes da irradiação iônica e sua dependência com a espessura da camada.

Simulation of ERDA measurements for nanostructured materials

G. Marmitt¹, P. L. Grande¹, A. Hentz¹, W. J. Min², D. Moon³

¹ Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul

² Korea Materials & Analysis Corporation (K-MAC)

³ Daegu Gyeongbuk Institute of Science and Technology (DGIST)

Different ion scattering techniques with high-energy resolution have a great potentiality to investigate nanostructured systems since the energy loss of scattered ions depends on the set path lengths probed by the ions at different incident and detection angles. In the case of MEIS (Medium Energy Ion Scattering) this is accomplished by simulations through the use of PowerMeis software [1], that considers any geometry, size distribution, composition and density of the nanostructures [2]. Recently not only the scattering of the incident ions has been measured but also the energy loss of the recoil atoms using electrostatic analysers [3] and time-of-flight (TOF) detectors [4,5]. These high-resolution ERDA (Elastic Recoil Detection Analysis) measurements performed at low energies in MEIS apparatus, are accomplished by using heavier than He incident ions with grazing angles. They complement the backscattering analysis by allowing for the detection of lighter atoms. However, in order to better understand the ERDA spectra, especially in the case of nanostructures, computational simulations that include multiple and plural scattering effects are of major importance. In this work, we include elastic recoil effects in the PowerMeis software, allowing for the simulation of both MEIS and ERDA spectra simultaneously. Spectra acquired by a TOF system [5] using 100 keV Ne⁺ beams are discussed for uniform and nanostructured films. In particular the importance of multiple and plural scattering effects are analyzed and set a limit for the use of the ERDA technique at low energies.

[1] **M.A. Sortica, P.L. Grande, G. Machado, L. Miotti. *J. Appl. Phys.* 106 (2009) 114320.**

[2] **D. F. Sanchez, G. Marmitt, C. Marin, D. L. Baptista, G. de M. Azevedo, P. L. Grande, P. F. P. Fichtner, *Scientific Reports* 3 (2013) 3414.**

[3] **T. Nishimura, A. Ikeda, T. Koshikawa, T. Yasue, Y. Kido. *Surface Science*, 409 (1998) 183-188.**

[4] **M.K. Linnarsson, A. Hallen, J. Astrom, D. Primetzhofer, S. Legendre, G. Possnert. *Review of Scientific Instruments*, 83 (2012) 095107.**

[5] **K. W. Jung, H. Yu, W. J. Min, K. S. Yu, M. A. Sortica, P. L. Grande, D. Moon. *Analytical Chemistry* 86 (2014) 1091-1097**

Ionización de agua líquida por impacto electrónico: influencia de los electrones pasivos sobre las distribuciones angulares

M. L. de Sanctis^(a), M.-F. Politis^(b), R. Vuilleumier^(c), C. R. Stia^(a), y O.A. Fojón^(a)

(a) Instituto de Física de Rosario (CONICET-UNR), Bv. 27 de febrero 210 bis, 2000 Rosario, Argentina

(b) Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement, CNRS UMR 8587, Université d'Evry Val d'Essonne, Bv. Mitterrand, 91025 Evry, France

(c) Ecole Normale Supérieure, Dépt. de Chimie, UMR 8640 CNRS-ENS-UPMC, 24, rue Lhomond, 75005 Paris, France

Estudiamos teóricamente la ionización simple de moléculas de agua en fase líquida por impacto de electrones rápidos. Dicha reacción es de relevancia en diversas áreas como radiobiología y física médica dado que la materia biológica está compuesta mayoritariamente por agua líquida. Los procesos biofísicos que inducen lesiones complejas en las células están estrechamente relacionados con la exposición a las radiaciones ionizantes. En particular, los electrones lentos emitidos desde las moléculas de agua por acción de esta radiaciones pueden provocar daños considerables en el ADN que a su vez pueden ocasionar mutaciones. Por lo tanto, resulta de interés contar con distribuciones electrónicas angulares y energéticas precisas con el objeto de conocer en detalle los mecanismos potencialmente oncogénicos. Sin embargo, la mayoría de los estudios realizados consideran el agua en fase vapor siendo necesaria una descripción más adecuada de la misma.

Para analizar las distribuciones angulares de los electrones eyectados, utilizamos un modelo de un electrón activo en primer orden que nos permite obtener secciones eficaces múltiplemente diferenciales (MDCS) [1] para los diversos orbitales del agua líquida. Nos focalizamos en el caso de colisiones asimétricas coplanares. Los orbitales iniciales para el agua en fase líquida se representan de forma realista mediante un formalismo de orbitales de Wannier [2]. Analizamos la influencia de los electrones pasivos del blanco sobre la reacción mediante el uso de adecuados potenciales modelo. Comparamos nuestros resultados con las escasas predicciones disponibles para distribuciones angulares de agua en fase líquida [3] y, dado que no existen MDCS para dicha fase, comparamos con MDCS para vapor de agua. Observamos un buen acuerdo cualitativo con nuestras MDCS, las cuales exhiben picos binarios y de retroceso de forma similar a las mediciones correspondientes a agua gaseosa. Además, notamos que la influencia de los electrones pasivos resulta especialmente importante en la zona del pico de retroceso.

[1] M. L. de Sanctis *et al*, J. Phys. B: At. Mol. Opt., **45** 045206 (2012).

[2] P. Hunt *et al*, Chem. Phys. Lett., **376** 68 (2003).

[3] C. Champion, C. Phys. Med. Biol., **55** (2010) 11.

Ionización de agua líquida por impacto electrónico: influencia de los electrones pasivos

M. L. de Sanctis^(a), M.-F. Politis^(b), R. Vuilleumier^(c), C. R. Stia^(a), y O.A. Fojón^(a)

(a) Instituto de Física de Rosario (CONICET-UNR), Bv. 27 de febrero 210 bis, 2000 Rosario, Argentina

(b) Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement, CNRS UMR 8587, Université d'Evry Val d'Essonne, Bv. Mitterand, 91025 Evry, France

(c) Ecole Normale Supérieure, Dépt. de Chimie, UMR 8640 CNRS-ENS-UPMC, 24, rue Lhomond, 75005 Paris, France

Estudiamos teóricamente la ionización simple de moléculas de agua en fase líquida por impacto de electrones rápidos. Dicha reacción es de relevancia en diversas áreas como radiobiología y física médica dado que la materia biológica está compuesta mayoritariamente por agua líquida. Los procesos biofísicos que inducen lesiones complejas en las células están estrechamente relacionados con la exposición a las radiaciones ionizantes. En particular, los electrones lentos emitidos desde las moléculas de agua por acción de esta radiaciones pueden provocar daños considerables en el ADN que a su vez pueden ocasionar mutaciones. Por lo tanto, resulta de interés contar con distribuciones electrónicas angulares y energéticas precisas con el objeto de conocer en detalle los mecanismos potencialmente oncogénicos. Sin embargo, la mayoría de los estudios realizados consideran el agua en fase vapor siendo necesaria una descripción más adecuada de la misma.

Para analizar las distribuciones de los electrones eyectados, utilizamos un modelo de un electrón activo en primer orden que nos permite obtener secciones eficaces múltiplemente diferenciales (MDCS) [1] para los diversos orbitales del agua líquida. Nos focalizamos en el caso de colisiones asimétricas coplanares. Los orbitales iniciales para el agua en fase líquida se representan de forma realista mediante un formalismo de orbitales de Wannier [2]. Analizamos la influencia de los electrones pasivos del blanco sobre la reacción mediante el uso de adecuados potenciales modelo. Comparamos nuestros resultados con las escasas predicciones disponibles para agua en fase líquida [3] y, dado que no existen MDCS para dicha fase, comparamos con MDCS para vapor de agua. Observamos un buen acuerdo cualitativo con nuestras MDCS, las cuales exhiben picos binarios y de retroceso de forma similar a las mediciones correspondientes a agua gaseosa. Además, notamos que la influencia de los electrones pasivos resulta especialmente importante en la zona del pico de retroceso.

[1] M. L. de Sanctis *et al*, J. Phys. B: At. Mol. Opt., **45** 045206 (2012).

[2] P. Hunt *et al*, Chem. Phys. Lett., **376** 68 (2003).

[3] C. Champion, C. Phys. Med. Biol., **55** (2010) 11.

Seção de choque de duplaexcitação por impacto de elétrons

L.O.Santos^(a), A. B. Rocha^(b), N.V. de Castro Faria^(a), e Ginette Jalbert^(a)

(a) Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Cidade Universitária, CT Bloco A, CaixaPostal 68528, Rio de Janeiro, 21945-970, Rio de Janeiro, Brasil

(b) Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Cidade Universitária, CT Bloco A, Rio de Janeiro, 21949-900, Rio de Janeiro, Brasil

Um sistema possível para os chamados átomos gêmeos consistiria de dois átomos emaranhados vindos da dissociação de uma molécula. Um tal sistema, seria análogo ao experimento de pensamento de David Bohm [1] como apresentado em sua famosa discussão sobre o paradoxo de Einstein, Podolsky e Rosen [2].

Para que tal experimento seja possível, é fundamental que os fragmentos sejam excitados e tenham um tempo de vida suficiente para que sejam manipulados. Tais fragmentos metaestáveis, poderiam ser um par de H(2s) cujo tempo de vida é de aproximadamente 0,7s. Este par pode ser produzido via dissociação da molécula de hidrogenio para estados ditos “duplamente excitados” via impacto de elétrons, visto que não são permitidos por fotoexcitação devido a regras de seleção.

Nós desenvolvemos uma metodologia para o cálculo da seção de choque de excitação dentro da primeira aproximação de Born válida para colisões com energia de impacto entre 100-1000eV.

Neste trabalho, nós apresentamos nossos resultados para o curvas de energia potencial dos estados duplamente excitados da molécula de hidrogênio, bem como cálculos da força de oscilador generalizada [3] para alguns sistemas atômicos e moleculares.

[1]D. Bohm, *Quantum theory*, Eglewood Cliffs, Nj: Prentice-Hall(1951).

[2]Einstein A., B. Podolsky, N. Rosen, *Phys. Rev.* **47** (1935) 777-780.

[3]M. Inokuti, *Inelastic Collisions of Fast Charged Particles with Atoms and Molecules-The Bethe Theory Revised*, *Rev. Mod.Phys.***43** (1971) 297-347.

Índice de Autores

Autor	Página(s)
A. Hentz	13, 72, 81
A. A. Gramajo	54, 55
A. Bellissimo	24
A. Cunha	71
A. Duarte	48
A. Iglesias-García	53
A. Kövér	28
A. L. F. de Barros	18
A. Mello	32
A. P. L. Bertol	33
A. Riascos Ochoa	65
André C. Tavares	29, 68
B. Canut	60
B. F. Magnani	21
B. Q. Friedrich	77, 78
B. Quiroga	64, 65, 67
C. A. Tachino	30
C. Arbeitman	40
C. Bonin	52

C. Carvalho	12
C. Champion	30
C. D. Archubi	51
C. E. Celedón	9
C. E. I. dos Santos	14, 42
C. F. S. Codeço	21
C. Lemell	55
C. Olivares	65, 66
C. R. Garibotti	37, 54
C. R. Ponciano	69
C. R. Stia	82, 83
C. Radtke	13, 72
C. T. de Souza	48, 70, 74
C. Trautmann	39
C.A.P. Costa	63
C.C. Montanari	10, 50, 56
C.F.G. Mejía	63
C.R. Ponciano	63
D. Bauer	70, 71
D. Fregenal	65

D. G. Arbó	17, 54, 55
D. G. Sotelo	75
D. Goebel	22
D. Mitnik	50
D. Moon	81
D. Roth	22
D.I.R Boll	43
Daniela Leffa	14
Diego Tramontina	80
E. A. Sánchez	9
E. C. Goldberg	53
E. C. Montenegro	11, 20, 29, 41, 68
E. F. da Silveira	18, 19, 63, 69
E. M. Stori	48, 73, 74
E.A.M. Kajiya	31
E.Q. Alves	12
E.S. Duarte	63
Eduardo M. Bringa	38, 80
F. Bonetto	52, 53
F. F. Fernandes	70
F. M. Oliveira	12

F. M. Silva	76
F. Navarrete	28, 47
F. Salvat-Pujol	23
G. A. Bocan	8
G. Bernardi	65, 66, 67
G. García Bermúdez	40
G. M. Azevedo	58
G. Marmitt	81
G. Strazzulla	16
H. Luna	29, 68
H. Rothard	18
H.C. Santos	12
Hrachya B. Nersisyan	49
I. Abril	32, 50
I. Goikoetxea	8
J. Burgdörfer	55
J. C. González	35
J. D. Uribe	44
J. E. Valdés	44
J. F. Dias	13, 14, 35, 42, 48, 57, 60, 70, 71, 73, 74

J. Ferrón	52, 53
J. Fiol	65
J. Guimpel	67
J. Hanssen	30
J. I. Juaristi	8
J. J. Pireaux	77
J. J. Zocche	42
J. L. Gervasoni	79
J. M. da S. Pereira	69
J. M. Monti	30, 65
J. Morais	59, 77
J. Silva	42
J.C. Aguiar	50
J.D. Uribe	46
J.E. Miraglia	10, 36, 50, 56
J.F. Curado	31
J. Feijó	71
J.M. Fernández-Varea	25, 49, 50
Jorge Valdés	46
K. F. Alcantara	18
K.D. Macario	12

L. A. B Niekłaszewicz	70
L. Amaral	42, 48, 74
L. F. S. Rosa	57, 73
L. Fechner	55
L. G. Almeida	13, 72
L. I. Gutierrez	77, 78, 80
L. Martin-Gondre	8
L. Sarkadi	47
L. Sigaud	11, 29, 41
L.A.B. Niekraszewicz	48
L.C.C.M. Nagamine	50
L.G. da Silva	19, 61
L.S. Farenzena	19, 61
Lucy V.C. Assali	25
Luiz C. C. M. Nagamine	32
M M. Sant'Anna	21
M. A. Sortica	13, 60, 72
M. A. Z. Vasconcellos	33
M. Alducin	8
M. Behar	32, 35, 40, 50

M. Blanco-Rey	8
M. E. Galassi	30
M. F. del Grosso	40
M. Feole	28, 47
M. G. Verón	64
M. H. Tabacniks	27, 31, 36
M. Hatori	60
M. L. de Sanctis	82, 83
M. Mayo	67
M. Mery	44, 46
M. O. Prado	64
M. Quinto	30
M. Romero	53
M. S. Gravielle	51
M. V. Moro	27, 31
M.A.Rizzutto	31
M.B. Quiroga	66
M.D. Castro	12
M.-F. Politis	82, 83
M.G. Schappo	19, 61
M.G.P Homem	61

Marcelo Fiori	15
Michel Lacerda	25
N. Added	27, 31
N. Camus	55
N. Chauvin	60
N.R. Arista	9, 49, 50
Natália Ferreira	11, 29
O. A. Fojón	30, 43, 82, 83
O. de Melo	35
O. Marty	60
P. Bauer	22
P. Boduch	18
P. de Vera	32
P. F. P. Fichtner	58, 62
P. L. Grande	13, 39, 57, 59, 60, 62, 72, 73, 76
P. Louette	77
P. R. Allegro	31
P. Vargas	44
P.H.O.V. Campos	31

P.R.S. Gomes	12
Patrícia Molz	14
Ph. Weck	30
R. Barrachina	47, 79
R. C. Fadanelli	32, 50, 57, 76
R. C. Pazim	58
R. Cabrera-Trujillo	26
R. D. Rivarola	30
R. Debastiani	13
R. Della Picca	54
R. Díez Muiño	8
R. Garcia-Molina	32, 50
R. Haas	61
R. Hinrichs	33
R. Linares	12
R. M. Papaléo	39, 73, 74, 75, 77, 78, 80
R. Moshammer	55
R. O. Barrachina	28
R. S. Thomaz	77, 78
R. Thomaz	39
R. Vidal	52, 53

R. Vuilleumier	82, 83
R.D. Rivarola	65
R.S. Tiedt	19, 61
Raquel S. Thomaz	80
S. Bernardes	31
S. D. López	37, 54
S. Limandri	32, 66, 67
S. López	55
S. Nagele	55
S. Otranto	37
S. Segui	24, 79
S. Suárez	34, 64, 65, 66, 67
S.L.A. Mello	21
S.P. Limandri	50
Silvana Puca	15
Sílvia Isabel Rech Franke	14
T. F. Silva	27, 31
T. Ferrari	70
T. S. Ávila	62
T.Ferrari	71

V. M. Andrade	14, 42
V. M. Menezes	80
V. M. Silkin	51
V. Z. C .Paes	59
W. J. Min	81
W. Werner	24
W. Wolff	29, 68
W.S.M. Werner	23
Z. L. Miskovic	24

	Segunda-feira 27/10	Terça-feira 28/10	Quarta-feira 29/10	Quinta-feira 30/10
08:00	Chegada	Inscrição		
08:30		Abertura		
Chairperson		R. Rivarola	N.R. Arista	J.F. Dias
09:00		C1-Diez Muiño	C7-Bauer	C15-Bringa
09:30		C2-Arista	C8-Salvat-Pujol	C16-Papaléo
10:00		O1-Montanari	O8-Segui	O16 - Bermudez
10:20		O2 - Ferreira	O9-Fernández-Varea	O17 – L. Sigaud
10:40		Coffee Break	Coffee Break	Coffee Break
Chairperson		M. Behar	G. Jalbert	G. Bermudez
11:00		C3-Linares	C9-Trujillo	C17- Dias
11:30		O3-Sortica	O10-Moro	O18-Bertol
11:50		O4 I. dos Santos	O11-Navarrete	O19-Uribe
12:10		O5-Fiori	O12-Wolff	Encerramento
		ALMOÇO		
Chairperson		E.F. da Silveira	E.C. Montenegro	
14:00		C4-Strazzulla	C10-Rivarola	
14:30		C5-Arbó	C11-Rizzuto	
15:00		O6 -Alcantara	O13-Fadanelli	
15:20		O7-Schappo	O14-Boll	
15:40		Coffee Break	Coffee Break	
Chairperson			N. V. Castro Faria	
16:00		Poster	C12-Suarez	
16:30		Poster	C13-Melo	
17:00	Inscrição		O15 - Tabacniks	
Chairperson		C. Montanari		
17:20		Homenagem G. Sigaud	C14-López	
17:30		C6- Sant'Anna		
18:00				
19:00	Recepção COQUETEL	Reunião do comitê internacional	Banquete	