

Gabriel G. Marmitt

*Determinação das frações de carga de não equilíbrio
para íons pesados*

Porto Alegre - RS, Brasil

20 de Junho, 2011

Gabriel G. Marmitt

***Determinação das frações de carga de não equilíbrio
para íons pesados***

Monografia apresentada para obtenção do Grau
de Bacharel em Física pela Universidade Fede-
ral do Rio Grande do Sul.

Orientador:
Pedro Luis Grande

INSTITUTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Porto Alegre - RS, Brasil

20 de Junho, 2011

Resumo

Um procedimento simples foi desenvolvido para a determinação da evolução dos estados de carga para íons pesados fora do equilíbrio. As secções de choque de perda eletrônica para cada estado de carga foram obtidas através do programa CasP, e baseado no modelo de Bohr-Lindhard, estimou-se as secções de choque de captura. Uma comparação com resultados experimentais do bombardeamento de íons de 600MeV de Au^{30+} sobre C foi realizada, e simulações das dinâmicas das trocas de carga para íons de Pb , I e Au irradiados sobre LiF são reportadas.

Abstract

A simple procedure was developed for determining the evolution of charge states for heavy ions out of equilibrium. The electronic loss cross sections for each charge-state were obtained through the CasP code, and based in the Bohr-Lindhard model, the capture cross sections were estimated. A comparison with experimental results of ion bombardment of 600MeV Au^{30+} on C was performed, and simulations for ions of Pb, I and Au irradiated on LiF are reported.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente aos meus pais, José e Edith, que tanto apoio e amor me deram. Certamente eu não teria chegado até aqui sem vocês. À minha irmã Daiana pelo carinho e compreensão.

Ao meu orientador, Prof. Pedro Luis Grande pela enorme paciência e dedicação que depositou nesse projeto, e por todo o aprendizado que consegui adquirir nessa convivência.

Aos demais familiares e amigos, que me apoiaram e auxiliaram durante todo o período da realização deste trabalho.

Sumário

1	Introdução	p. 6
1.1	Motivação e Objetivo	p. 7
2	Revisão Teórica	p. 8
2.1	Modelo estatístico	p. 8
2.1.1	Estado de carga de equilíbrio	p. 9
2.2	Teoria de Bohr-Lindhard	p. 10
3	Simulação computacional	p. 13
3.1	Secção de choque de perda eletrônica	p. 13
3.2	Secção de choque de captura eletrônica	p. 15
4	Resultados	p. 17
4.1	Comparação com dados experimentais	p. 17
4.2	Simulação para o LiF	p. 19
5	Conclusão	p. 21
	Referências Bibliográficas	p. 22
	Anexo A – Programa CasP	p. 24

1 *Introdução*

Feixes de íons são aplicados em muitos campos científicos há muitos anos. No entanto ainda falta uma melhor compreensão dos processos envolvendo as interações dos íons com a matéria, e a subsequente formação de uma intensa zona de excitações eletrônicas nos materiais bombardeados. Projéteis com energias de $MeV's$ a $GeV's$ depositam vários $keV's$ por nanômetro percorrido, induzindo em muitos materiais modificações dramáticas na superfície e no volume[1].

Por exemplo, um dos fenômenos que precisa ser melhor compreendido é o *sputtering* (pulverização ou desbastamento em português). Esse processo pode ser descrito como uma ejeção de material do alvo devido à colisão de íons energéticos[2]. Os processos de *sputtering* estão envolvidos em campos importantes, incluindo a fabricação de dispositivos e física de altas energias. Um exemplo de aplicação importante consiste em realizar microscopia/espectrometria, onde um componente da superfície pode ser arrancado e as massas das partículas resultantes podem ser identificadas, em técnicas conhecidas por SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry) e PDMS (Plasma Desorption Mass Spectrometry)[3][4].

Podem ser identificados três tipos de *sputtering*: o de tipo nuclear, que consiste na transferência de momento do núcleo do íon incidente para os átomos do material, tendo sido explicado satisfatoriamente através dos modelos de cascatas lineares e *spike* térmico[5]; o *sputtering* eletrônico, que ocorre quando o íon incidente passa através do material sem colidir diretamente com átomos do alvo, ocasionando uma excitação dos átomos próximos a sua trajetória; e o potencial, presente nas interações de íons muito carregados, onde a energia potencial armazenada de vários íons é liberada quando estes recombina-se durante o impacto na superfície.

O entendimento da dinâmica de troca de estados de carga é de extrema importância para a análise de experimentos envolvendo fenômenos próximo à superfície de materiais, pois a perda de energia ao longo da trajetória é proporcional ao quadrado da carga do íon incidente. Fator importante em técnicas de caracterização, como RBS, PIXE e ERDA entre outras. Em particular, através da modelagem dos processos de troca de carga, podemos inferir qual é a espessura

da superfície sensível ao *sputtering* eletrônico. Uma vez que o projétil tenha alcançado o seu estado de carga de equilíbrio, haverá apenas pequenas flutuações no seu estado interno. A determinação dos processos de perda de energia fora do equilíbrio de carga é um assunto atual, e importante para o entendimento de diversos fenômenos próximos de superfície, e que até o momento, não tem um método prático e simples de estimá-los.

1.1 Motivação e Objetivo

Medidas recentes do *sputtering* de átomos de *Li* e *F* arrancados de cristais de *LiF*, por íons de *Au*, *I* e *Pb* apresentam uma influência da carga inicial dos íons nos resultados[6][7]. Também foram reportadas evidências de uma forte dependência da formação de crateras com os estados de carga dos íons rápidos incidentes[1].

Dentro deste cenário, este trabalho tem o objetivo de estudar o comportamento dos mecanismos físicos que alteram as frações de estado de carga, encontrando uma maneira prática de obter as distâncias de penetração que levam os íons projéteis aos seus estados de equilíbrio dinâmico, onde há um equilíbrio entre a taxa de perda e de captura eletrônica pelos íons.

2 *Revisão Teórica*

Neste capítulo serão rapidamente apresentados, um modelo estatístico que descreve a dinâmica da troca de cargas a partir das interações de frações de carga, e o modelo de Bohr-Lindhard que descreve de maneira simplificada a captura eletrônica.

2.1 Modelo estatístico

Ao se considerar uma sequência de espalhamentos, onde um íon de carga q colide com átomos ou moléculas de um gás ou sólido, o íon pode capturar ou perder elétrons no processo e deve-se atribuir um caráter estatístico a esse fenômeno[8]. As probabilidades de troca de carga $P(q, q')$ estão relacionadas com as secções de choque de perda e captura $\sigma(q, q')$, conforme a equação (2.1), onde N é o número de átomos por volume do alvo e dx é o diferencial da trajetória do íon.

$$P(q, q') = N\sigma(q, q')dx \quad (2.1)$$

A variação do estado de carga de íons penetrando em sólidos ou gases pode ser então descrita por um sistema de equações diferenciais acopladas, que relaciona as frações dos íons em um dado estado Y_q com as secções de choque $\sigma(q, q')$, referentes a interações com troca de carga de q para q' . Além disso, são levadas em conta apenas aquelas interações nas quais houve troca efetiva de carga, não incluindo colisões elásticas e encontros que levam apenas à excitação dos íons. Também estão excluídos processos em que, por exemplo, um elétron é capturado e rapidamente perdido, talvez como resultado de um processo Auger, antes do íon sofrer outra colisão ou entrar no sistema de análise. É considerado que a densidade volumétrica de átomos N seja pequena, de tal forma que os íons, possivelmente excitados por uma colisão anterior, tenham tempo de voltar ao seu estado não excitado, antes que uma colisão subsequente ocorra. Então todas as secções de choque $\sigma(q, q')$ estão associadas com o estado não excitado dos íons com carga q . Além disso, é necessário que o alvo seja fino o suficiente para que a perda de energia média por íon no alvo ΔE seja desprezível ($\Delta E \ll E_{ion}$), onde E_{ion} é a energia inicial

do íon. Assim, tem-se um conjunto de equações acopladas para as frações de carga:

$$\frac{dY_q(x)}{dx} = \sum_{q'} [\sigma(q', q)Y_{q'}(x) - \sigma(q, q')Y_q(x)]N \quad (2.2)$$

Dado que as restrições acima são respeitadas, todas as probabilidades $P(q, q')$ são constantes para um dado conjunto de parâmetros e formam um grupo consistente que permite a integração de (2.2) e, para uma dada condição inicial, prever a variação das frações de carga na trajetória tomada pelo íon dentro do alvo.

2.1.1 Estado de carga de equilíbrio

Cada fração de carga Y_q , sujeita a todas as condições impostas pelo modelo, chegará a um valor de equilíbrio após percorrer uma distância d_{eq} , a partir da qual não mudará caso haja um aumento na espessura do alvo. As frações de equilíbrio serão independentes da distribuição inicial das frações dos estados de carga do feixe de íons incidente. As frações de carga no equilíbrio são chamadas F_q .

$$\sum_{q' \neq q} [F_{q'}\sigma(q, q') - F_q\sigma(q', q)] = 0 \quad (2.3)$$

E a carga média de equilíbrio é:

$$q_{eq} = \sum_q qF(q) \quad (2.4)$$

Para o caso particular em que se considera apenas secções de choque de perda e captura de um único elétron, obtém-se a Equação (2.5).

$$F(q)\sigma(q, q+1) = F(q+1)\sigma(q+1, q) \quad (2.5)$$

Essa expressão juntamente com o valor da carga média de equilíbrio, leva a um vínculo entre as secções de choque de perda e captura, e pode ser utilizado como artifício para uma estimativa das $\sigma(q, q')$, dado que se tenha um conhecimento prévio do comportamento das secções de choque em função da carga.

2.2 Teoria de Bohr-Lindhard

Modelos semiclássicos do processo de captura eletrônica são uma alternativa a cálculos por primeiros princípios, que apresentam alta complexidade e só são utilizados em casos muito simples. No caso de íons pesados em altas velocidades a validade do procedimento semiclássico é devido a alta densidade dos estados finais encontrados para íons altamente carregados, e também porque o comprimento de onda de de Broglie do projétil é muito menor que o diâmetro de colisão para a interação íon-elétron-alvo. Dentre vários modelos, o modelo de Bohr-Lindhard destaca-se pela sua simplicidade e acordo com os resultados experimentais.

O modelo para as secções de choque de captura obtido por Bohr e Lindhard, introduz duas importantes distâncias de interação íon-átomo. Primeiramente, eles supuseram que o elétron a ser capturado, deve ser solto do núcleo, por uma força que contrabalance a força de ligação do elétron com o átomo, devido ao íon com carga q .

$$\frac{qe^2}{R_r^2} = \frac{mv^2}{a} \quad (2.6)$$

A Equação (2.6) mostra o caso limite onde a força elétrica exercida pelo íon se iguala a força da ligação do elétron com o átomo, onde m, v e a são a massa, a velocidade e a órbita radial do elétron. A chamada distância de *release* (despreendimento, em português) R_r é então dada pela Equação (2.7).

$$R_r = (qaa_0)^{1/2} \left(\frac{v_0}{v} \right) \quad (2.7)$$

onde $v_0 = e^2/\hbar$ é a primeira velocidade orbital do átomo de Bohr, e $a_0 = \hbar^2/me^2$ é o raio da primeira órbita, o raio de Bohr.

Após o despreendimento do elétron, Bohr e Lindhard consideraram que a órbita do elétron estaria polarizada, devido ao forte campo elétrico durante a aproximação do íon, de maneira que no momento da captura, a velocidade do elétron estaria muito reduzida com respeito ao átomo. Consequentemente, a captura poderá acontecer se a energia potencial do elétron no campo iônico for em valores absolutos maior que sua energia cinética no referencial do íon. A condição para captura está mostrada na Equação (2.8), onde V é a velocidade do íon.

$$\frac{qe^2}{R_c} = \frac{1}{2}mV^2 \quad (2.8)$$

$$R_c = 2qa_0 \left(\frac{v_0}{V} \right)^2 \quad (2.9)$$

A captura se torna possível quando a distância entre o íon e o átomo é menor que R_c , que é

a chamada distância de captura. A partir destas distâncias Bohr e Lindhard consideraram dois casos, e chegaram a duas secções de choque de captura para os casos limites.

Se $R_r < R_c$ e o íon está perto o bastante para arrancar o elétron do átomo, a condição de captura já está satisfeita, pois na distância onde ocorre o despreendimento do elétron R_c já é menor que o valor apresentado na Equação (2.9). Chega-se, então, para essa faixa de valores desta interação a uma secção de choque σ_1 .

$$\sigma_1 = \pi R_r^2 = \pi a_0^2 q \left(\frac{a}{a_0}\right) \left(\frac{v}{v_0}\right)^{-2} \quad (2.10)$$

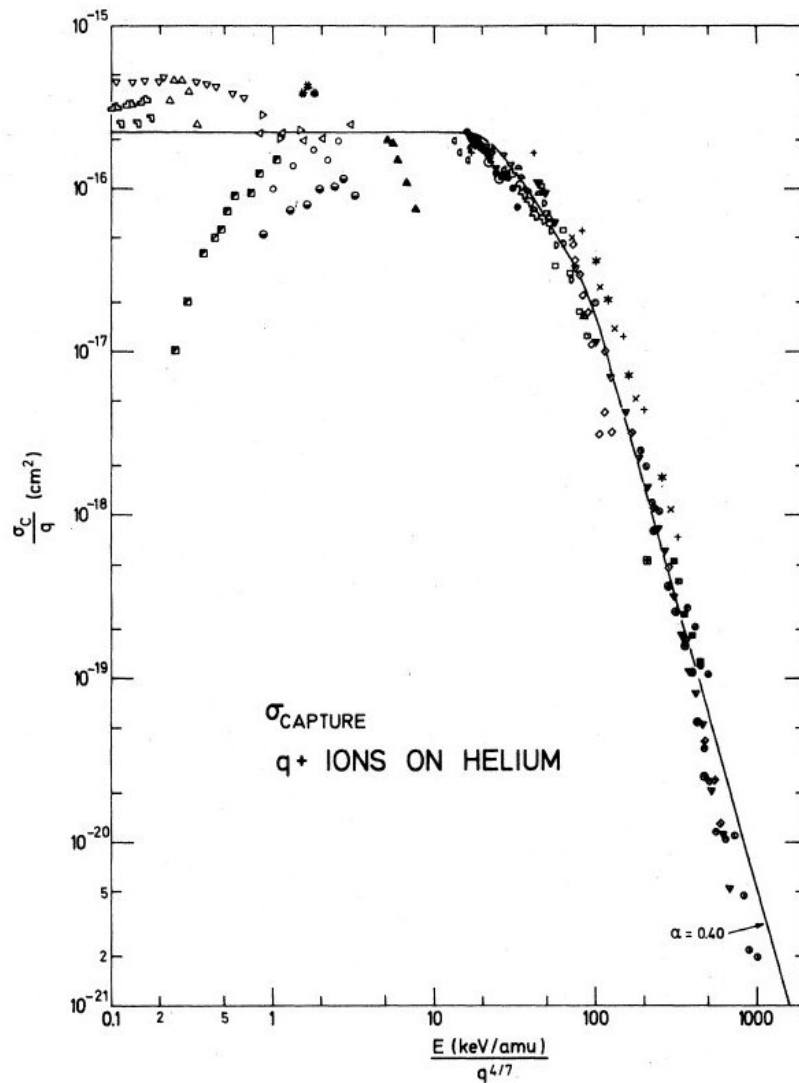


Figura 1. Comparação entre dados experimentais para secções de choque de captura de um único elétron para íons com carga $q > 4$ colidindo com átomos de He e a estimativa teórica, dada pelo modelo de Bohr-Lindhard.[9]

Por outro lado, quando $R_r > R_c$, o *release* se torna possível antes que a captura possa ocorrer, e se esse despreendimento fosse instantâneo, a secção de choque de captura seria zero, pois um íon não pode capturar um elétron livre (o que ocasionaria a violação da conservação de energia e momentum). Porém, o despreendimento é um processo gradual, de maneira que a captura possa ocorrer com uma probabilidade da ordem de v/a , e durante um tempo de aproximadamente R_c/V , como pode ser visto no diagrama mostrado na Figura 2. A probabilidade que um elétron despreendido pelo íon possa ser capturado nessa faixa de valores é $(v/a)(R_c/v)$, e conseqüentemente chega-se a uma secção de choque de captura eletrônica σ_2 .

$$\sigma_2 = \pi R_c^2 \left(\frac{v R_c}{a V} \right) = 8\pi a_0^2 q^3 \left(\frac{a}{a_0} \right)^{-1} \left(\frac{v}{v_0} \right) \left(\frac{V}{v_0} \right)^{-7} \quad (2.11)$$

Destes resultados, percebemos que para íons com baixas velocidades e altamente carregados, a secção de choque de captura para um único elétron é proporcional a q e independente da velocidade do íon V . Porém, para íons rápidos, as secções de choque de captura são proporcionais à q^3 e decrescem com V^{-7} , como pode ser visto na Figura 1.

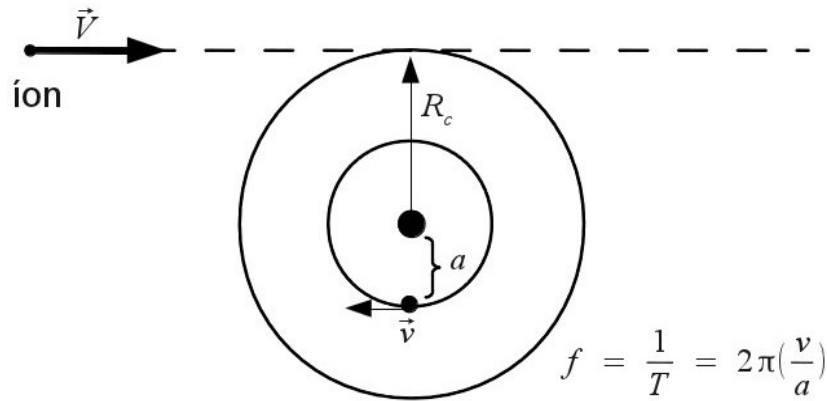


Figura 2. Diagrama da interação íon-alvo para o caso $R_r > R_c$ no modelo de Bohr-Lindhard.

Observamos que a frequência de rotação do elétron é $f \propto \frac{v}{a}$.

3 *Simulação computacional*

O modelo estatístico descrito no Capítulo 2.1, resumido pela Equação (2.2), juntamente com as secções de choque de perda e captura podem ser usados para o cálculo da dinâmica da troca de cargas devido à interação do feixe de íons com o alvo. Nas duas seções seguintes é relatada a obtenção das secções de choque, o que envolve a utilização de um *software* e de um modelo que descreve o comportamento das secções de choque, além da comparação com resultados experimentais.

3.1 **Secção de choque de perda eletrônica**

As secções de choque de perda podem ser calculadas através do programa CasP (Convolution approximation for swift Particles), desenvolvido por P.L. Grande e G. Schiwietz [10][11], detalhes no Anexo A. O método PCA (Perturbative Convolution Approximation), um dos utilizados pelo CasP, é uma aproximação que fornece resultados próximos aos calculados por teoria de perturbação em 1ª ordem para íons com energias médias e altas.

Analogamente ao cálculo da perda de energia de um projétil, onde quer-se obter a influência de cada camada eletrônica dos átomos do alvo na perda de energia do íon, calculamos a contribuição de cada camada eletrônica do íon para a secção de choque de perda. É necessário então considerar o íon incidente como sendo o alvo na entrada de dados do CasP. Por exemplo, no caso estudado de íons de Au^{30+} sobre C , deve-se considerar o referencial do íon, portanto o *input* no CasP será de C^0 incidindo sobre alvos de Au^{30+} , na mesma velocidade ($\approx 3000KeV/nucleon$).

Neste método, o programa possibilita o cálculo das secções de choque de perda totais $\sigma_{loss,total}$ para trocas únicas de elétrons em cada um dos estados de carga do íon incidente. Estas secções de choque representam a probabilidade de uma interação na qual há troca de energia do alvo para um dos elétrons do íon, resultando em uma excitação ou ionização.

$$\sigma_{loss,total} = \sigma_{ion} + \sigma_{exc} \quad (3.1)$$

Já que o CasP considera as interações nas quais o elétron ligado sai do seu estado fundamental, somente a parte referente à secção de choque de ionização, deve ser utilizada. Define-se então um valor de correção α , para a secção de choque de perda total calculada através do CasP, dada por:

$$\alpha = \frac{\sigma_{ion}}{\sigma_{loss,total}} \quad (3.2)$$

A correção α foi calculada à luz da Aproximação de Born de Onda Plana (Plane Wave Born Approximation - PWBA). Nesta aproximação se considera o projétil como sendo uma onda plana, que se aproxima de um centro espalhador (átomo alvo). Após a colisão, a onda muda de direção, enquanto o átomo alvo é ionizado ou excitado.[12]

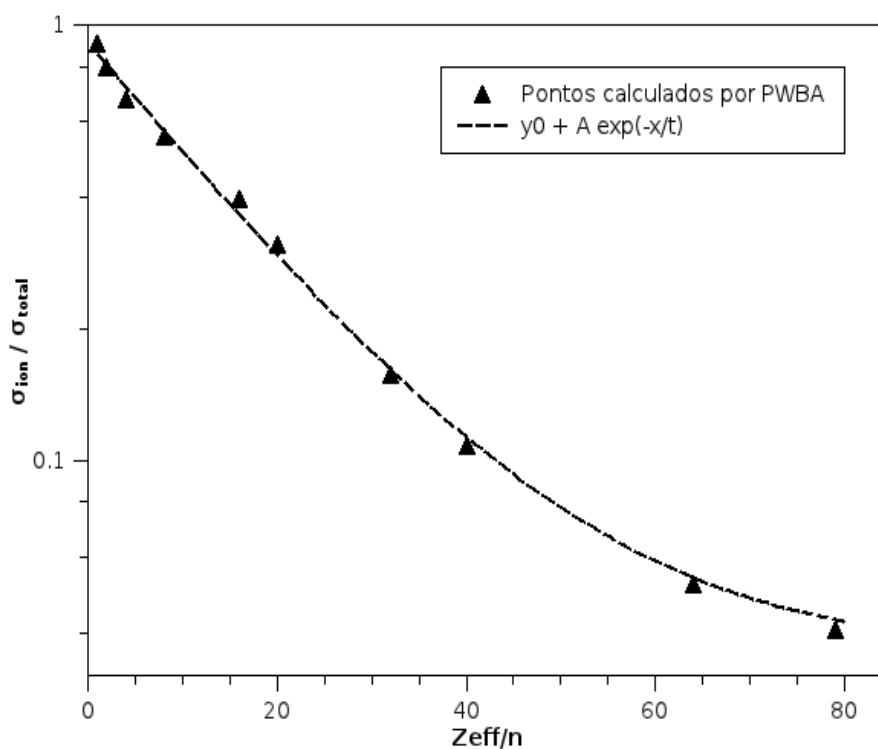


Figura 3. Valores para a correção α para íons de Au^{30+} sobre C calculados por PWBA, e ajuste exponencial dos pontos.

Neste trabalho usamos PWBA para átomos hidrogenóides. Assim deve-se utilizar o conceito do Z_{eff} . Trata-se de uma correção no número atômico devido a blindagem eletrônica atuante sobre os elétrons mais externos do átomo. Esta correção causa grande diferença no cálculo das secções de choque para íons pesados, dado o maior número de níveis eletrônicos internos. Calculamos o Z_{eff} através da relação entre o número atômico e a energia de ligação I_b , calculadas pelo CasP, na aproximação de átomos hidrogenóides, segundo a fórmula:

$$Z_{eff} = n \sqrt{\frac{I_b}{13.6}} \quad (3.3)$$

A correção é aplicada em cada camada eletrônica do íon, considerando a relação exponencial entre α e $Zeff/n$, exposta na Figura 3, onde n é o número quântico principal da camada em questão. Ao final soma-se as secções de choque de perda eletrônica de todas as camadas e obtém-se a σ_{ion} .

No caso de alvos sólidos, é necessário fazer uma modificação adicional, pois a correção por α , calculada por PWBA, não considera processos nos quais uma sequência de excitações leva a ionização. Este efeito pode ser desconsiderado no caso de gases rarefeitos, onde o livre caminho médio é grande o suficiente para que o íon possa sempre se desexcitar antes de uma nova colisão, mas como estamos interessados na modelagem de sistemas envolvendo alvos sólidos, devemos atribuir um número médio de colisões u que podem levar o íon a perder mais elétrons.

$$\sigma_{loss} = \sigma_{ion} + \frac{\sigma_{exc}}{u} = \sigma_{ion} + \frac{(1 - \sigma_{ion})}{u} \quad (3.4)$$

3.2 Secção de choque de captura eletrônica

Os cálculos por primeiros princípios das σ_{cap} são complexos, o que exigiria o uso de muito poder computacional além de modelos sofisticados. Alternativamente há a possibilidade de descrever o comportamento da σ_{cap} com uma função dependente da carga, e através de uma comparação com resultados experimentais de fácil obtenção, estimar os valores dos parâmetros desta função.

Esta alternativa é interessante pois resultados experimentais da carga média de equilíbrio, atingida pelo feixe de íons após penetrar uma certa distância d_{eq} , e da dispersão da distribuição de frações de carga $F(q)$ em torno dessa média, são vastos e portanto formam uma boa fonte de dados para a obtenção das σ_{cap} para as mais diversas configurações.

Como brevemente abordado na Seção 2.2, o modelo de Bohr-Lindhard revela dois comportamentos distintos em seus intervalos de validade, para íons pouco energéticos e com alto estado de carga as secções de choque de captura para um único elétron são proporcionais a q , porém em altas energias as secções de choque são proporcionais a q^3 . Como o objetivo é a simulação da interação de feixes muito energéticos, utiliza-se apenas a segunda solução.

$$\sigma_{cap} \cong Bq^3 \quad (3.5)$$

Uma primeira estimativa dos valores das σ_{cap} é obtido através do método descrito na Seção 2.1.1, interseccionando as curvas de σ_{loss} e σ_{cap} na carga média de equilíbrio e assim obtendo-se

o parâmetro B da Equação (3.5). No equilíbrio tem-se:

$$B \cong \frac{\sigma_{ion}(q_{eq})}{q_{eq}^3} \quad (3.6)$$

As secções de choque de perda e captura são assimétricas, o que acaba por deslocar as distribuições de carga de equilíbrio, isso faz com que a carga média de equilíbrio esteja deslocada da intersecção de σ_{loss} e σ_{cap} , como mostrado na Figura 4, e portanto é necessário procurar o valor de B que melhor reproduz o valor de q_{eq} .

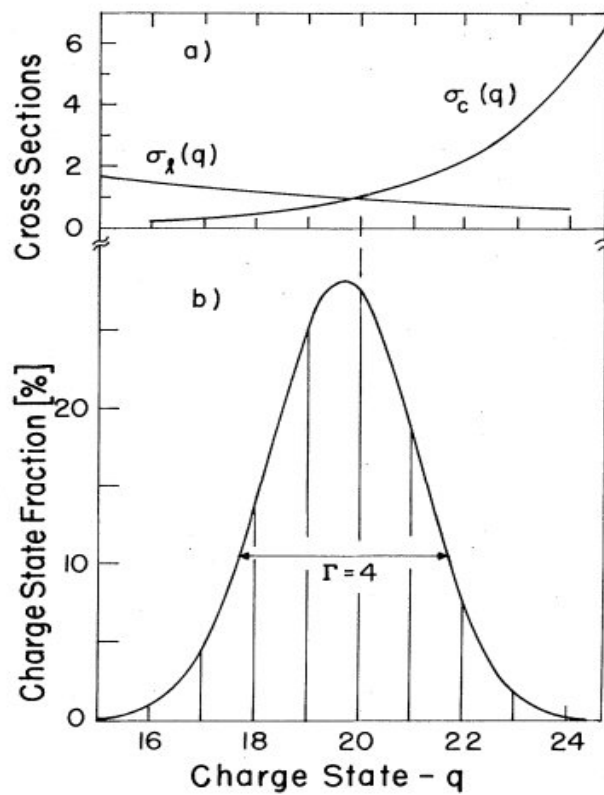


Figura 4. a)Secções de choque de captura e perda hipotéticas aproximadas por exponenciais;
b)Distribuição das frações de carga $F(q)$ correspondentes.[8]

Para obter o valor de B correto, e portanto das σ_{cap} , que ao final da integração espacial resulte em uma distribuição de frações $F(q)$ que apresente uma média q_{eq} com um valor próximo ao experimental, pode-se utilizar um método de integrações e aproximações sucessivas corrigindo o valor de B em cada integração com base na diferença apresentada em q_{eq} com o valor experimental. Esse método apresenta uma convergência rápida, não tomando mais do que dez integrações para se obter um erro na q_{eq} menor que 1% em todos os casos estudados.

4 Resultados

O procedimento desenvolvido nos capítulos anteriores é aplicado em alguns casos específicos. Primeiramente é feita uma comparação dos resultados da simulação com resultados experimentais, e então são estimados valores das distâncias de equilíbrio d_{eq} para algumas configurações de interesse.

4.1 Comparação com dados experimentais

Resultados experimentais da dinâmica do estado de carga médio em função da profundidade são escassos, para verificar os resultados obtidos pelo método acima exposto, utilizamos uma

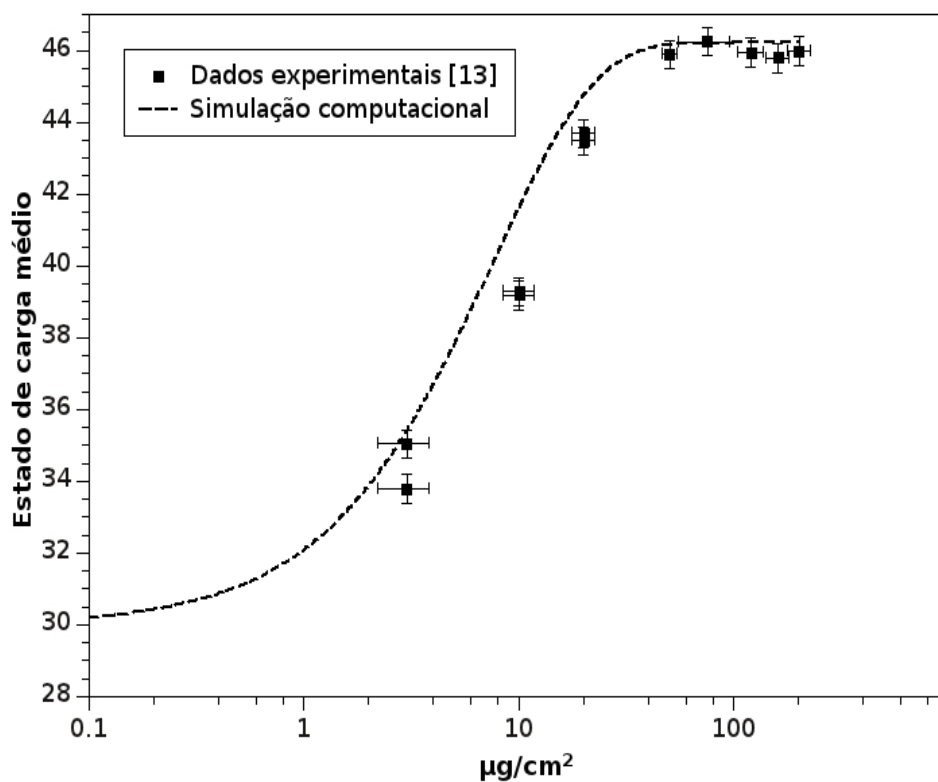


Figura 5. Comparação entre a simulação computacional e resultados experimentais da dinâmica da troca de cargas de um feixe de íons de Au^{30+} de 600MeV sobre um alvo de C.

medida da interação de íons de Au^{30+} de 600MeV sobre um alvo de C[13].

O feixe de íons de Au^{30+} estabiliza seu estado de carga médio em torno de $q_{eq} \cong 46.2$, portanto a dinâmica se dá em uma zona onde a secção de choque de perda eletrônica é dominante, e portanto os resultados da simulação computacional dependem fortemente das σ_{loss} e possuem muito pouca sensibilidade à variações das σ_{cap} .

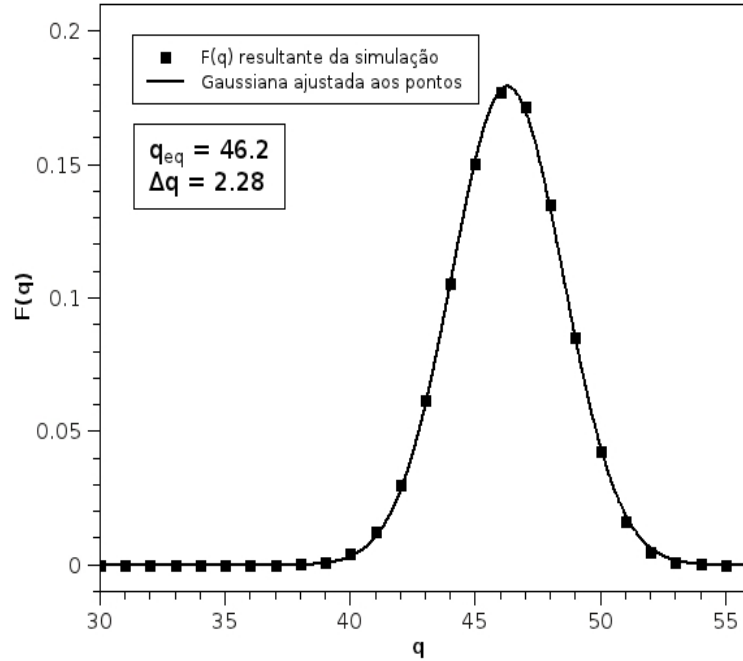


Figura 6. A distribuição das frações de carga no equilíbrio possui uma forma gaussiana; resultado da simulação para um feixe de íons de Au^{30+} de 600MeV sobre um alvo de C.

Observamos um desvio de aproximadamente 25% em comparação ao resultado experimental para a d_{eq} onde a simulação subestima os valores medidos, como pode ser visto no gráfico apresentado na Figura 5. Este erro é esperado pois as secções de choque de perda foram calculadas através do método PCA do CasP, o qual realiza um cálculo em teoria de perturbação de 1ª ordem, que tipicamente apresenta erros de 20% por efeitos de mais alta ordem desprezados, nesta faixa de energia e carga.

A dispersão da distribuição de frações de carga obtidas por fórmulas semi-empíricas para íons de Au sobre C é $\Delta q \cong 2.191$ (Nikolaev, Dmitriev), $\Delta q \cong 2.400$ (Betz, incl. gases) e $\Delta q \cong 2.070$ (Schiwietz, Grande). Esses valores ficam próximos ao resultado da simulação, calculado em $\Delta q \cong 2.28$, valor atingido em uma profundidade de $d_{eq} \cong 86\mu g/cm^2$.

4.2 Simulação para o LiF

Motivados pelos resultados observados em medidas de *sputtering* de cristais de LiF irradiados por íons pesados[6][7], utilizamos o procedimento aqui discutido para determinar a distância na qual ocorre o equilíbrio das trocas de carga íon-alvo. Como o alvo trata-se de um composto, as correções discutidas na seção 3.1 foram aplicadas às σ_{loss} para o Li e F separadamente, e após as correções uma média simples foi efetuada uma vez que as abundâncias dos elementos neste composto são as mesmas. A simulação foi executada para vários projéteis: íons de *Pb* de 735MeV, com estados de carga iniciais de 39+, 47+ e 55+, cujas dinâmicas estão mostradas na Figura 7; *Pb*²³⁺ com 936MeV's; *I*¹²⁺ com 150MeV's; e íons de *Au*¹⁵⁺ com 200MeV's.

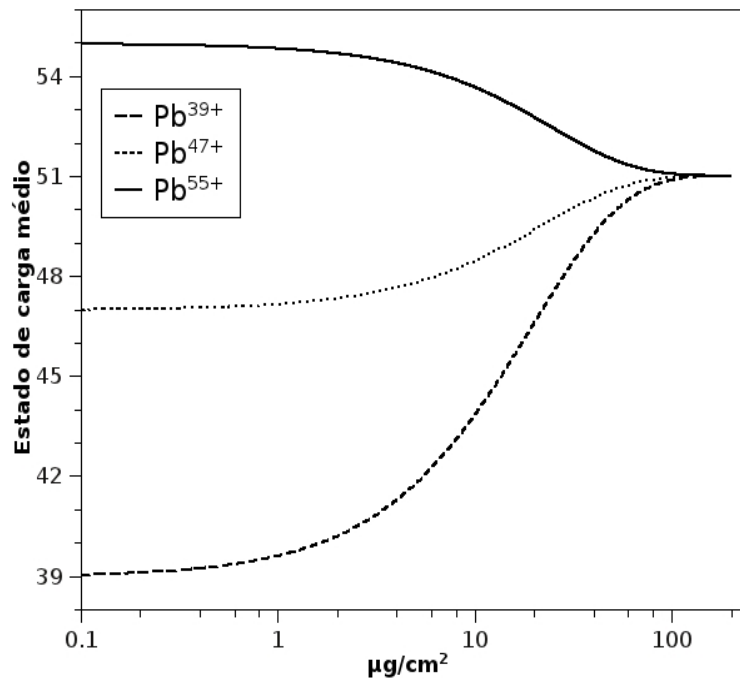


Figura 7. Simulação para íons de Pb de cargas iniciais 39+, 47+ e 55+ penetrando em um alvo de LiF.

Projétil	Energia (MeV's)	$q_{inicial}$	q_{eq}	Δq	d_{eq} ($\mu g/cm^2$)
Pb	735	39	51	2.23	95.39
Pb	735	47	51	2.23	91.66
Pb	735	55	51	2.23	139.45
Pb	936	23	56	2.40	194.49
I	150	12	25	2.01	10.68
Au	200	15	31	2.39	11.72

Tabela 1. Resultados da simulação da interação de íons carregados com cristais de LiF.

Os resultados das simulações estão apresentados na Tabela 1, analisando os dados para os íons de Pb com $735MeV/s$ percebe-se uma influência da carga inicial do íon com a distância percorrida até o equilíbrio. Deve-se lembrar que a dinâmica do Pb^{55+} se dá na região onde a σ_{cap} é dominante, e portanto possui uma maior incerteza em relação a dinâmica dos íons Pb^{39+} e Pb^{47+} , já que as secções de choque de captura foram estimadas a partir de um modelo simplificado.

5 *Conclusão*

O procedimento para o cálculo da profundidade onde ocorre o equilíbrio dinâmico de cargas, em uma interação de íons rápidos e pesados em alvos sólidos, foi desenvolvido. A comparação com o resultado experimental do bombardeamento de Au^{30+} sobre C revelou um erro na determinação desta distância de equilíbrio de aproximadamente 25%, condizente com a precisão dos modelos utilizados na determinação das secções de choque de perda e captura eletrônica.

Trabalhos futuros poderão se concentrar na comparação com outros resultados experimentais da dinâmica de troca de cargas, e em modelos mais sofisticados para o cálculo das secções de choque, adicionando outros efeitos aqui desconsiderados, como a troca de mais de um elétron em cada colisão e as contribuições de mais alta ordem em teoria de perturbação das interações íon-alvo. O resultado final será então incorporado em uma futura versão do programa CasP.

Referências Bibliográficas

- [1] Papaléo, R.M.; Silva, M.R.; Leal, R.; Grande, P.L.; Roth, M.; Schattat, B. e Schiwietz, G. *Direct evidence for projectile charge-State dependent crater formation due to fast ions*. Phys. Rev. Lett. 101, 167601, 2008.
- [2] *Sputtering by Particle Bombardment: Experiments and Computer Calculation from Threshold to MeV Energies*. (Springer Topics in Applied Physics), Rainer Behrisch e Wolfgang Eckstein (Editors), Springer Verlag (Berlin, New York, Heidelberg), 2007.
- [3] Fernandez-Lima, F.A.; Vilela Neto, O.P.; Pmimentel, A.S.; Ponciano, C.R.; Nascimento, M.A.C. e da Silveira, E.F. J. Phys. Chem. A113, 1813, 2009.
- [4] Ponciano, C.R.; Ávalos, F.E.; Rentería, A. e da Silveira, E.F. Int. J. Mass Spectrom. 209, 197, 2001.
- [5] Schiwietz, G.; Czernski, K.; Roth, M.; Staufenbiel, F. e Grande, P.L. *Femtosecond dynamics - snapshots of the early ion-track evolution*. Nucl. Instrum. Meth. B 225, 4-26, 2004.
- [6] Toulemonde, M.; Assmann, W.; Trautmann, C. e Grüner, F. *Jetlike Component in Sputtering of LiF Induced by Swift Heavy Ions*. Phys. Rev. Lett. 88, Num. 5, 2002.
- [7] Toulemonde, M. Comunicação privada.
- [8] Betz, H.D. *Charge States and Charge-Changing Cross Sections of Fast Heavy Ions Penetrating Through Gaseous and Solid Media*. Rev. Mod. Phys., Vol. 44, Num. 3, Pg. 465-539, 1972.
- [9] Knudsen, H.; Haugen, H.K. e Hvelplund, P. *Single-electron-capture cross section for medium- and high-velocity, highly charged ions colliding with atoms*. Phys. Rev. A, Vol. 23, Num. 2, Pg. 597-610, 1981.
- [10] Grande, P.L. e Schiwietz, G. *Impact-Parameter Dependence of the Electronic Energy Loss of Fast Ions*. Phys.Rev. A58, 3796, 1998.
- [11] Schiwietz, G., e Grande, P.L. *A Unitary Convolution Approximation for the Impact-Parameter Dependent Electronic Energy Loss*. Nucl. Instr. and Meth. B 153, 1, 1999.

[12] Bethe, H.A.; Jackiw, R. *Intermediate Quantum Mechanics*, Third Edition, 1997.

[13] Grande, P.L.; Nagamine, L.C.C.M.; Morais, J.; Alves, M.C.M.; Schiwietz, G.; Roth, M.; Schattat, B. e Baggio-Saitovitch, E. *High-energy ion beam irradiation of Co/NiFe/Co/Cu multilayers: Effects on the structural, transport and magnetic properties*. Thin Solid Films 516, 2087-2093, 2008.

ANEXO A – Programa CasP

O programa CasP (Convolution approximation for swift Particles) versão 5.0, desenvolvido por P.L. Grande e G. Schiwietz (mais informações em www.casp-program.org), tem por objetivo o cálculo da perda de energia eletrônica Q pelo íon (devido à excitação e a ionização dos átomos do alvo) para cada um dos diferentes valores de parâmetro de impacto b na colisão. A secção de choque de perda de energia eletrônica S_e (Stopping Cross-Section) é determinada a partir de $Q(b)$.

O método PCA (Perturbative Convolution Approximation), utilizado pelo CasP, parte da teoria de perturbação de primeira ordem e chega até uma fórmula simples para calcular a dependência com o parâmetro de impacto da perda de energia eletrônica. Até o surgimento desse modelo não havia uma teoria que desse conta de toda a região de parâmetros de impacto.

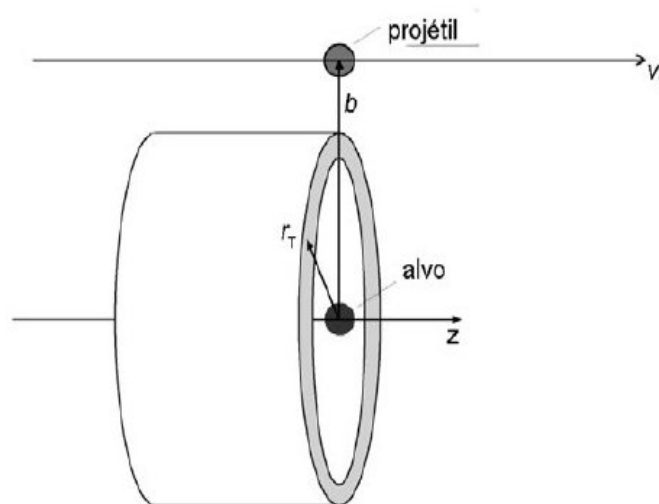


Figura A.1. Representação esquemática da geometria de colisão na Aproximação de Convolução Perturbativa, mostrando os núcleos do alvo e do projétil, o parâmetro de impacto b e a velocidade do projétil v_1 . O cilindro representa a densidade eletrônica integrada ao longo da direção de penetração do projétil.

A perda de energia eletrônica é então calculada a partir da seguinte expressão:

$$Q(b) = \sum_f |a_f(\vec{b})|^2 (\varepsilon_f - \varepsilon_0), \quad (\text{A.1})$$

Essa integração envolve uma soma sobre todos estados finais do alvo e o cálculo correspondente de todas as amplitudes de transição. Geralmente, isso demanda um esforço computacional grande demais para viabilizar um programa de simulação baseado nas equações acima. Uma das motivações para o desenvolvimento da PCA foi justamente essa inviabilidade. A fim de

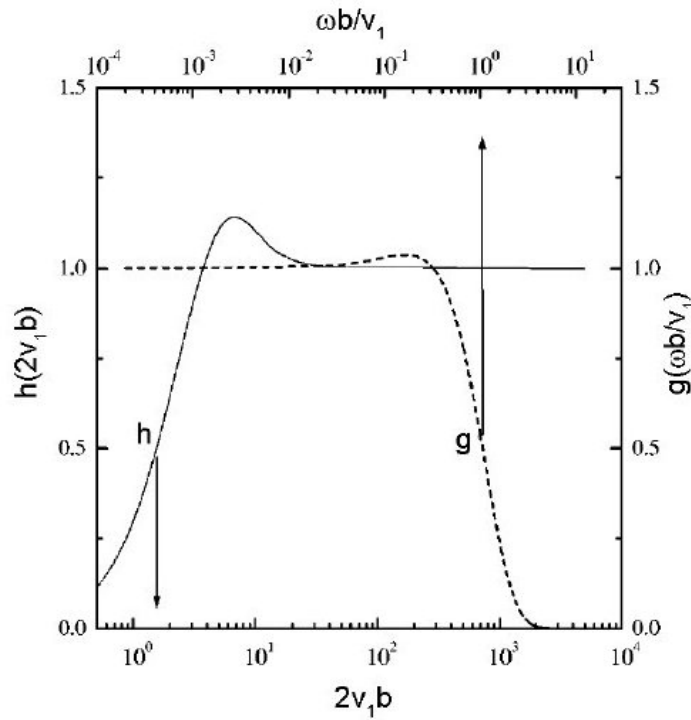


Figura A.2 As funções $g(x)$ e $h(x)$ presentes na Equação A.3 descrevem os termos de dipolo e as colisões quasi-livres, respectivamente.

superá-la, Grande e Schiwietz buscaram uma solução aproximada que não necessitasse de um cálculo em tão larga escala, e chegaram a seguinte equação de interpolação:

$$Q(b) = \int d^2r_T K(\vec{b} - \vec{r}_T) \int dz \rho(\vec{r}_T, z), \quad (\text{A.2})$$

onde vetor \vec{r}_T é perpendicular à direção z de penetração do projétil, como mostrado na Figura A.1, e $\int dz \rho(\vec{r}_T, z)$ é a densidade eletrônica integrada ao longo do caminho do íon. E com $K(b)$ dado pela fórmula abaixo:

$$K(b) = \frac{2Z_1^2}{v_1^2 b^2} \times h(2v_1 b) \times \sum_i f_i g\left(\frac{\omega_i b}{v_1}\right) \quad (\text{A.3})$$

onde b é o parâmetro de impacto, e Z_1, v_1 são o número atômico e a velocidade do projétil, respectivamente. Com as funções $g(\omega_i b/v_1)$ e $h(2v_1 b)$ dados por:

$$g\left(\frac{\omega_i b}{v_1}\right) = \left(\frac{\omega_i b}{v_1}\right)^2 \left(K_0^2\left(\frac{\omega_i b}{v_1}\right) + K_1^2\left(\frac{\omega_i b}{v_1}\right)\right) \quad (\text{A.4})$$

$$h(2v_1 b) = \frac{(2v_1 b)^2}{2} \int_0^1 y dy K_0(2v_1 b y^2) J_0(2v_1 b y \sqrt{1-y^2}) \quad (\text{A.5})$$

Onde J_0 é a função de Bessel e K_0, K_1 são as funções de Bessel modificadas, ω_i são as energias de transição ($\omega_i = \varepsilon_i - \varepsilon_0$) e f_i as forças de oscilador de dipolo [$f_i = 2|\langle i|z|0\rangle|^2(\varepsilon_i - \varepsilon_0)$], as quais satisfazem a regra da soma $\sum_i f_i = 1$. A forma da função $g(\omega b/v_1)$ é mostrada na Figura A.2.

A equação (A.3) une de forma suave três regiões de parâmetros de impacto, os dois primeiros termos da equação descrevem colisões binárias violentas, enquanto o último termo dá conta das transições de dipolo de longo alcance. A primeira integral de (A.2) descreve uma convolução com a densidade eletrônica inicial também fora do caminho do projétil e fornece contribuições não-locais para a perda de energia. Portanto, a PCA é válida para altas energias do projétil em todas as regiões de parâmetros de impacto.