

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**MEDIDAS DO PODER DE FREAMENTO DE ÍONS
DE He E Li EM FILMES DE Zn^{*}**

Patricia Fernanda Duarte

Dissertação realizada sob a orientação dos Profs. Moni Behar e José Henrique dos Santos e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS, em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Porto Alegre

Maio, 2003

* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

Agradecimentos

Aos Profs. Moni Behar e José H. R. dos Santos, pela orientação, paciência e atenção.

Ao Prof. Johnny F. Dias, pelo seu incentivo e apoio na realização deste trabalho.

Aos funcionários do Laboratório de Implantação Iônica, Eng. Agostinho Bulla e Técnicos Clodomiro F. Castelo, Paulo Roberto Borba e Manoel R. Pinheiro da Silva pela constante disposição em ajudar e competência no controle do feixe de íons.

À secretária da Física Experimental, Wanda Knebel, pela presteza.

Aos funcionários da biblioteca do Instituto de Física; em especial à Silvia Catarina Rossi, pela competência, dedicação e paciência.

À minha colega e amiga Olinda pelo incentivo, apoio e amizade.

Ao meu namorado Luciano por todo o companheirismo, auxílio e carinho na finalização deste trabalho.

SUMÁRIO

1	INTERAÇÃO DE ÍONS ENERGÉTICOS COM A MATÉRIA	6
1.1	Introdução	6
1.2	Poder de Freamento Nuclear	8
1.3	Poder de Freamento Eletrônico	
1.3.1	Cálculo do Poder de Freamento Eletrônico para altas energias do Projétil: Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA)	16
1.3.2	Teoria de Bethe	18
1.3.3	Teoria de Bohr	20
1.3.4	Teoria da Resposta Linear	23
1.3.4 a)	Poder de Freamento em um Gás de Elétrons	23
1.3.4 b)	Poder de freamento eletrônico em sólidos	26
2	ANÁLISE POR ESPECTROMETRIA DE RETROESPALHAMENTO RUTHERFORD	30
2.1	Introdução	30
2.2	Processo Físico Básico	33
2.2.1	Fator Cinemático	33
2.2.1 a)	Seção de Choque de Espalhamento Diferencial	35
2.3	Análise de Dados	38
2.3.1	Escala de Profundidade para uma amostra Elementar	
3	PROCEDIMENTO E RESULTADOS EXPERIMENTAIS	41
3.1	Procedimento Experimental e Análise de Dados	41
3.1.1	Resultados	49
4	DISCUSSÃO DOS RESULTADOS E CONCLUSÕES	51
4.1	Medidas da perda de energia de He em Zn em direção não- alinhada	52
4.2	Medidas da perda de energia de Li em Zn em direção não-alinhada	54
4.3	Conclusões	56
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	59

RESUMO

Neste trabalho, medimos a perda de energia de íons de He e Li em Zn, com energias que vão de 400 keV a 7 MeV, no primeiro caso, e de 300 keV a 5 MeV, no segundo. Usamos a técnica de retroespalhamento de Rutherford com amostras do tipo $\text{Au}(100\text{Å})\backslash\text{Zn}\backslash\text{Au}(100\text{Å})\backslash\text{Si}$, com camadas de Zn de espessuras de 460 Å, 750 Å e 1500 Å.

Sendo o Zn o metal de transição com o maior deslocamento de energia entre as camadas 4s e 3d, ele é o alvo ideal para estudar a relação entre o poder de freamento e a velocidade do íon a baixas energias. Para ambos os tipos de projétil consegue-se observar a relação de proporcionalidade entre a perda de energia e a velocidade do íon incidente, como previstos pelas teorias existentes.

Por outro lado, encontrou-se que, para íons de He incidindo a baixas energias ($E < 800\text{keV}$) em Zn, a curva do poder de freamento está em perfeito acordo com os resultados obtidos utilizando o método de transmissão por N. Arista et al. Para altas energias ($E > 800\text{keV}$), os resultados estão em bom acordo com o cálculo feito pela subrotina RSTOP do programa Transport of Ions in Matter (TRIM).

No caso dos íons de Li, as medições de perda de energia foram realizadas num alvo de Zn pela primeira vez. Esses resultados se mostraram em bom acordo com a previsão da subrotina RSTOP de Ziegler et al e com a fórmula universal de Kalbitzer. Esse acordo ocorre para todo o intervalo de energia estudado.

ABSTRACT

In this work, we present results on the stopping power of He and Li in Zn in the 0.4-7 MeV energy range He and in the 0.3-5 MeV for Li. We have used the Rutherford backscattering technique (RBS) with Au (100 Å)/Zn/Au (100 Å) films with Zn slabs of 460, 750, 1500 Å width.

Since Zn is the transition metal with the larger energy gap between the 4s and 3d sub shells, it is the ideal candidate for studying the relationship between the stopping power and the ion velocity (at lower energies). In both cases it was possible to observe the direct proportionality between both quantities as anticipated by current theories.

On the other hand, we found that, for lower energies ($E < 800$ keV), the stopping power measured in our laboratory is in perfect agreement with similar measurements performed using the transmission technique by N. Arista et al. For higher energies ($E > 800$ keV) the He results are in fair agreement with the RSTOP predictions.

For the Li case, the stopping power measurements were the first ones done on a Zn target. The results are in good agreement with the RSTOP predictions as well as with the universal function by Kalbitzer et al. This is valid for all the measured energy range.

INTRODUÇÃO

Os processos de perda de energia de íons que penetram em sólidos têm sido muito estudados durante as últimas décadas. Como consequência desse estudo, têm-se obtido dados sobre o freamento de diversos íons em diversos elementos. Entretanto, dados sobre a perda de energia específica em alvos de Zn na fase sólida são muito escassos. Essa lacuna deve-se basicamente à dificuldade experimental de preparar alvos de Zn auto-sustentáveis de boa qualidade. Por outro lado, encontrou-se que, a baixas energias, o poder de freamento de prótons não segue uma dependência linear, ao contrário do que seria esperado a partir de cálculos baseados no modelo de gás de elétrons-livres^[1].

No caso dos metais de transição, o desvio da relação de proporcionalidade pode ser explicado pela existência de elétrons d, cujas bandas de energia são deslocadas de somente alguns eV em relação ao nível de Fermi, o que introduz uma energia mínima necessária para o processo de excitação (efeito limiar). Sendo o Zn um metal de transição, com o maior deslocamento de energia entre as camadas 4s e 3d (8 eV), ele é o alvo ideal para se estudar a relação entre a perda de energia e a velocidade do íon, a baixas energias.

Essa medida de perda de energia de He em filmes de Zn foi feita, então, utilizando a Espectrometria de Retroespalhamento de Rutherford (RBS).

CAPÍTULO 1

INTERAÇÃO DE ÍONS ENERGÉTICOS COM A MATÉRIA

1.1 Introdução

Os processos responsáveis pelo freamento de íons energéticos que se movem na matéria são de dois tipos: a) a transferência de energia para os elétrons do meio e b) colisões com os átomos do alvo como um todo, as quais são regidas pela energia potencial de interação entre os íons incidentes e os átomos do alvo. A energia média perdida por unidade de caminho percorrido pelo íon é chamada poder de freamento, ou ainda, força de freamento e é dada por:

$$S \equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta E}{\Delta x}, \quad (1.1.1)$$

ou seja,

$$S = \frac{dE}{dx} \quad (1.1.2)$$

O poder de freamento eletrônico ou inelástico $\left. \frac{dE}{dx} \right|_e$ (item a) refere-se à parcela decorrente das excitações e ionizações do alvo ou do próprio íon. Já o poder de freamento nuclear ou elástico $\left. \frac{dE}{dx} \right|_n$ (item b), àquela transferida na

forma de energia cinética para os átomos do alvo. Esses dois processos de perda de energia têm sido considerados independentes. Embora, nos últimos anos, têm surgido evidências experimentais da correlação entre ambos¹. Entretanto, nesta dissertação, consideraremos sempre as contribuições para o poder de freamento independentemente, ou seja:

$$\left. \frac{dE}{dx} \right|_t = \left. \frac{dE}{dx} \right|_n + \left. \frac{dE}{dx} \right|_e \quad (1.1.3)$$

O poder de freamento nuclear e eletrônico dependem da energia do íon e de suas características como mostrado esquematicamente na figura 1.1.1.

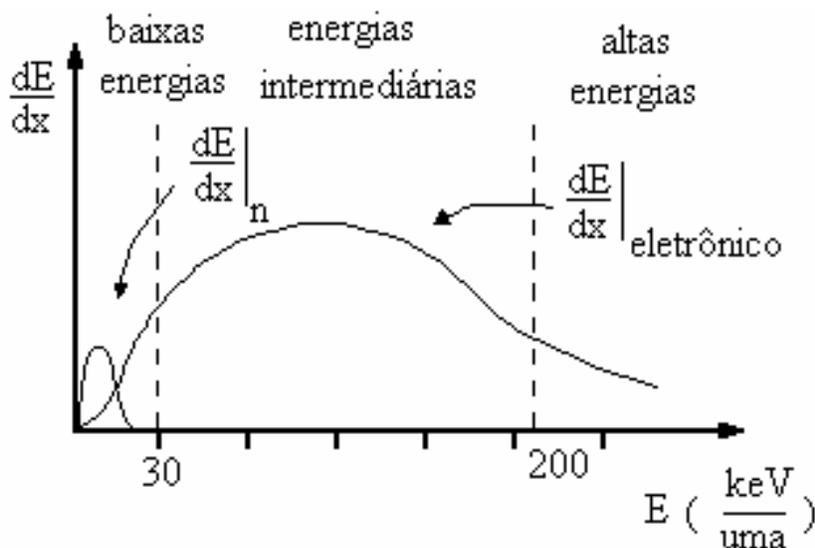


Fig. 1.1.1: Representação qualitativa dos poderes de freamento nuclear e eletrônico.

No intervalo de energia abrangido na parte experimental desta dissertação, basicamente só o poder de freamento eletrônico contribui para a perda de energia do feixe de íons incidentes.

1.2 Poder de Freamento Nuclear

No poder de freamento elástico, o íon e o átomo-alvo devem mudar suas energias internas depois da colisão. Uma abordagem usual no estudo do poder de freamento nuclear consiste em tratá-lo como um problema de força central, com interação de potencial binária, isto é, o projétil interage com um único átomo-alvo de cada vez.

A energia transferida (T) elasticamente por um projétil de massa M_1 , no sistema de coordenadas do laboratório, para um átomo-alvo de massa M_2 em repouso é dada por²:

$$T = \gamma E \operatorname{sen}^2\left(\frac{\Theta}{2}\right), \quad (1.2.1)$$

onde

$$\gamma = \frac{4M_1 M_2}{(M_1 + M_2)^2} \quad (1.2.2)$$

e Θ é o ângulo de espalhamento do projétil no sistema de coordenadas do centro de massa. Classicamente, esse pode ser determinado em termos do parâmetro de impacto (p) e da energia do projétil (E):

$$\Theta(p, E) = \pi - 2 \int_{r_0}^{\infty} \frac{p dr}{r^2 \sqrt{1 - U(r)/E_{CM} - p^2/r^2}}, \quad (1.2.3)$$

sendo a energia do projétil no sistema de coordenadas do centro de massa E_{CM} relacionada com a energia E através da relação:

$$E_{CM} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E, \quad (1.2.4)$$

U é a energia potencial de interação entre os dois átomos e r_0 , a distância mínima de aproximação entre o projétil e o átomo-alvo.

Consideremos um arranjo de átomos aleatoriamente distribuídos com uma densidade uniforme de átomos por unidade de volume (N). Um íon incidindo sobre o mesmo, ao atravessar uma distância Δx , sofre, em média, um número de colisões $\bar{n}(p)dp$ com átomos-alvo situados a parâmetros de impacto entre p e $p + dp$. Esse número é igual ao produto do número de átomos do alvo por unidade de área em Δx pela área do anel entre p e $p + dp$:

$$\bar{n}(p)dp = 2\pi N \Delta x p dp \quad (1.2.5)$$

Assim, a energia média transferida nessas colisões é

$$d\bar{\Delta E} = N \Delta x T(p) 2\pi p dp \quad (1.2.6)$$

Somando sobre todos os parâmetros de impacto, obtemos

$$\bar{\Delta E} = N \Delta x \int_0^{\infty} T(p) 2\pi p dp \quad (1.2.7)$$

Acrescentando o sub índice n nos parâmetros ΔE e $T(p)$ e considerando o lim $\Delta x \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{dE}{dx}\right)_n &\equiv \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left(\frac{\overline{\Delta E}}{\Delta x}\right) \\
&\equiv N \int_0^{\infty} T_n(p) 2\pi p dp \\
&\equiv 2\pi N \int_0^{2\pi} T_n(p) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) (\Theta) \sin\Theta d\Theta \\
&\equiv N \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n (\Theta) d\Omega \\
&\equiv N \int T_n(p) d\sigma_n
\end{aligned} \tag{1.2.8}$$

onde $(d\sigma/d\Omega)_n(\Theta)$ é a seção de choque diferencial para espalhamentos elásticos. Para chegar à expressão 1.2.8, utilizamos as identidades

$$d\sigma_n \equiv \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n (\Theta) d\Omega \equiv 2\pi \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n (\Theta) \sin\Theta d\Theta \equiv 2\pi p dp \tag{1.2.9}$$

e a simetria cilíndrica do problema.

Como vemos, $(dE/dx)_n$ é proporcional ao número de átomos por unidade de volume (N). Para uma grandeza relacionada a $(dE/dx)_n$, mas independente de N , a seção transversal de freamento (“stopping cross-section”) é definida por :

$$\varepsilon_n \equiv \frac{1}{N} \left(\frac{dE}{dx}\right)_n \tag{1.2.10}$$

Introduzindo na eq. 1.2.8 o valor da energia transferida numa colisão binária dada por 1.2.1 e adaptando a eq. 1.2.8 para ε_n , obtemos

$$\varepsilon_n = 2\pi\gamma E \int_0^\infty \text{sen}^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) p dp \quad (1.2.11)$$

ou

$$\varepsilon_n = 2\pi\gamma E \int_0^\infty \text{sen}^2\left(\frac{\Theta}{2}\right) \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n (\Theta) \text{sen}(\Theta) d\Theta \quad (1.2.12)$$

A seção de choque diferencial, que figura na equação acima, é calculada através de

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_n (\Theta) = \frac{p}{\text{sen } \Theta} \frac{1}{\left|\frac{d\Theta(p, E)}{dp}\right|} \quad (1.2.13)$$

e, como vemos da eq. 1.2.3, ela é um funcional da função energia potencial de interação entre o projétil e o átomo-alvo.

O potencial interatômico que descreve a interação na colisão entre um íon e um átomo isolado pode, geralmente, ser descrito por uma função complicada de vários parâmetros, tais como a distância interatômica, a velocidade do projétil, o parâmetro de impacto e os números atômicos dos pares envolvidos na colisão. Para reduzir essa complexidade costuma-se fazer aproximações a fim de minimizar o número de parâmetros de que o potencial depende. Por exemplo, é usual assumir que qualquer dependência na velocidade do projétil seja desprezível, muito embora a blindagem proporcionada pelas nuvens eletrônicas em torno do íon e do alvo contenham características dinâmicas. Entretanto, a validade dessas hipóteses é questionável, uma vez que,

mesmo para baixas velocidades do projétil, onde se espera que as nuvens eletrônicas se ajustem adiabaticamente ao movimento dos núcleos, efeitos não adiabáticos devido ao cruzamento de níveis eletrônicos podem resultar num rearranjo significativo do sistema eletrônico³ tanto do projétil como do alvo. Em geral, assume-se que a influência desses efeitos é desprezível na determinação dos mecanismos de espalhamento íon-elétron.

Além disso, por causa da sua aplicabilidade universal, modelos estatísticos de interação interatômica têm sido largamente usados no cálculo do poder de freamento nuclear, dentre eles cabe citar os potenciais de Bohr⁴, Thomas-Fermi⁵, Molière⁶, Ziegler-Biersack-Littmark⁷ (ZBL). Cada um desses potenciais deve ser considerado como um termo coulombiano $\left(\frac{1}{r}\right)$ multiplicado por uma função de “blindagem”. O termo coulombiano surge dos núcleos pontuais positivos e a blindagem devida à nuvem eletrônica em torno do núcleo reduz seu valor para todos os raios. Essa função de blindagem deve ser definida como a razão entre o potencial atômico real em alguns raios e o potencial causado pela não blindagem do núcleo:

$$\varphi = \frac{V(r)}{\left(\frac{Ze}{r}\right)} \quad (1.2.14)$$

A função de blindagem para o átomo de Bohr é:

$$\varphi_B(x) = \exp(-x) \quad , \quad \text{com } x = \frac{r}{a} \quad (1.2.15)$$

onde o comprimento de blindagem de Bohr é dado por:

$$a_B = a_o (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}, \quad \text{sendo } a_o = 0,59 \text{ \AA} \quad (1.2.16)$$

Pelo modelo de Thomas-Fermi o potencial coulombiano blindado, $V(r)$ entre os átomos é:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \exp(-r/a) \quad (1.2.17)$$

O parâmetro de blindagem de Thomas-Fermi é dado por:

$$a_{TF} = \frac{0,8853 a_o}{Z^{1/3}} \quad (1.2.18)$$

Outra função de blindagem vem da aproximação de Molière para o átomo de Thomas-Fermi:

$$\varphi_{Molière}(x) = [0,35 \exp(-0,3x)] + [5,5 \exp(-1,2x)] + [0,1 \exp(-6x)] \quad (1.2.19)$$

com $x = r/a$.

No potencial de Molière a função de blindagem foi obtida minimizando-se o funcional de Thomas-Fermi sob a restrição de que o potencial tenha decaimento exponencial.

Para o potencial de Molière, o comprimento de blindagem utilizado é o comprimento de blindagem de Firsov⁸:

$$a_F = \frac{0,8854 a_o}{\left(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2} \right)^{2/3}} \quad (1.2.20)$$

Por sua vez, Ziegler, Biersack e Littmark⁹ procuraram uma expressão “universal” para o potencial interatômico que descrevesse a colisão binária entre

todos os pares íon-alvo possíveis, conhecido como Potencial ZBL. Dos cerca de 10^4 pares possíveis eles selecionaram aleatoriamente 261 pares.

Um valor para o comprimento de blindagem para o qual as funções de blindagem tivessem uma aglutinação máxima em torno de um valor médio precisava ser encontrado e para tanto, eles descobriram que isso seria possível com uma nova definição do comprimento de blindagem:

$$a_U = \frac{0,8854a_o}{(Z_1^{0,23} + Z_2^{0,23})} \quad (1.2.21)$$

A função blindagem média foi então ajustada pela seguinte função

$$\varphi_{ZBL}(x) = \sum_{i=1}^4 a_i \exp(-b_i x) \quad (1.2.22)$$

onde $a_i = \{0,028171; 0,28022; 0,50986; 0,18175\}$ e $b_i = \{0,20162; 0,40290; 0,94229; 3,1998\}$.

O potencial universal modela bastante bem o cálculo do potencial interatômico como pode-se observar na figura 1.2.2.

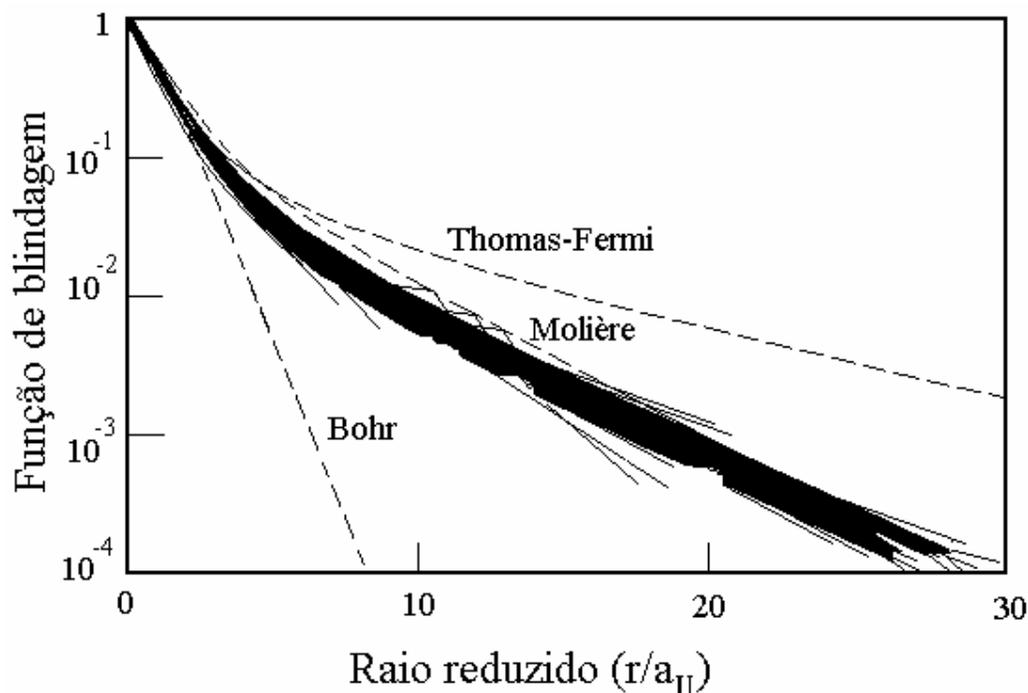


Fig 1.2.2: Os potenciais são mostrados em termos exponenciais e as curvas escuras se juntam para formar a curva do Potencial Universal.

1.3 Poder de Freamento Eletrônico

A transferência de energia entre o íon incidente e um átomo-alvo pode causar excitação ou ionização dos elétrons, tanto do íon quanto do átomo-alvo. Para íons incidentes com alta energia, a excitação dos elétrons das camadas internas do alvo é responsável pelo poder de freamento eletrônico. Nessa região, o comportamento funcional da perda de energia é descrito pela teoria de Bethe^{10,11}, a qual é baseada na Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA)¹². Na região de baixa energia, por sua vez, o projétil e o alvo são praticamente

neutros e o processo de freamento é de caráter friccional. Nessa condição, o poder de freamento deve-se à interação com os elétrons de valência. As teorias que descrevem esse poder de freamento eletrônico nesse regime são baseadas no modelo de gás de elétrons-livres¹³. Para íons de energias intermediárias, os cálculos perturbativos de baixa ordem são insuficientes, sendo necessários cálculos mais sofisticados para descrever os diferentes tipos de interação que tomam lugar nessa faixa de energia.

1.3.1 Cálculo do Poder de Freamento Eletrônico para altas energias do Projétil: Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA)

Consideremos uma partícula energética de carga Z_1e , massa M_1 e momentum inicial $\hbar\vec{k}_i$ (energia cinética inicial não-relativística $T_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2M_1}$) incidindo sobre um átomo estacionário de número atômico Z_2 . Seja $\hbar\vec{k}_f$ o momentum da partícula espalhada. Essa situação é esquematizada na figura 1.3.1.1. Os índices p , t e e referem-se, respectivamente, ao projétil, ao “caroço iônico” do alvo e ao elétron ativo. Aqui, $e = \hbar = m = 1$.

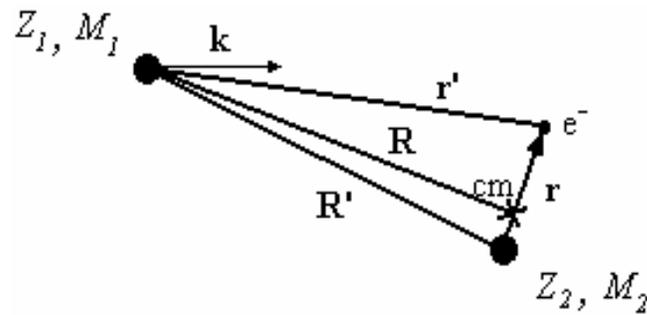


Fig. 1.3.1.1: Diagrama vetorial para um íon energético de massa M_1 e carga Z_1 incidindo sobre um átomo-alvo estacionário de massa M_2 e carga Z_2 . cm é o centro de massa do sistema constituído pelo elétron e pelo “caroço iônico” do átomo-alvo.

A seção de choque diferencial de espalhamento é dada por¹⁴

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{i \rightarrow f} = \frac{\mu^2}{4\pi^2} \frac{k_f}{k_i} |T_{i \rightarrow f}|^2, \quad (1.3.1.1)$$

onde μ é a massa reduzida do sistema formado pelo alvo e pelo elétron ativo. T é a matriz de transição do estado inicial i para o estado final f . Na Aproximação de Born de Onda Plana, a matriz de transição T é dada por

$$T_{i \rightarrow f} = \left\langle e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{R}} \varphi_f(\vec{r}) \left| V_{\text{int}}(\vec{r}, \vec{R}) \right| e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{R}} \varphi_i(\vec{r}) \right\rangle \quad (1.3.1.2)$$

onde as funções φ_a são autofunções do hamiltoniano:

$$\left[-\frac{1}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 + V_{te}(\vec{r}) \right] \varphi_a = \varepsilon_a \varphi_a \quad (1.3.1.3)$$

Se V_t é o potencial eletrostático gerado pelo “caroço iônico” do alvo, a energia potencial $V_{te}(\vec{r}) = V_t(\vec{r})$ onde $e = 1$. Nesse caso, estamos considerando o modelo de elétrons independentes. Para se obter o potencial V_t , pode-se utilizar, por exemplo, o método Hartree-Fock-Slater^{15,16}.

O valor do termo perturbativo V_{in} é dado por

$$V_{int}(\vec{r}', \vec{R}') = V_{pe}(\vec{r}') + V_{pt}(\vec{R}') \quad (1.3.1.4)$$

Da fig. 1.3.1.1, vemos que $\vec{r}' \cong \vec{R} - \vec{r}$ e $\vec{R}' \cong \vec{R}$. Dessa forma

$$V_{in}(\vec{r}', \vec{R}') \cong V_{pe}(\vec{R} - \vec{r}) + V_{pt}(\vec{R}) \quad (1.3.1.5)$$

com

$$V_{pe}(\vec{R} - \vec{r}) = \frac{-Z_1}{|\vec{R} - \vec{r}|} \quad (1.3.1.6)$$

e

$$V_{pt}(R) = -Z_1 V_t(R) \quad (1.3.1.7)$$

Uma vez determinada a seção de choque diferencial de espalhamento, a seção transversal de freamento pode ser calculada através da equação

$$\mathcal{E}_e = \sum_{i,f} (\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i) \sigma_{i \rightarrow f} \quad (1.3.1.8)$$

com

$$\sigma_{i \rightarrow f} \equiv \int d\Omega \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{i \rightarrow f} \quad (1.3.1.9)$$

1.3.2 Teoria de Bethe

Bethe formulou o primeiro modelo quântico completo do problema de freamento eletrônico. Nesse modelo, ele utilizou a Aproximação de Born de Onda Plana (PWBA).

A fórmula de Bethe^{17,18} é expressa por

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_e^{Bethe} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} NZ_2 \ln \frac{2mv^2}{I}, \quad (1.3.2.10)$$

onde v é a velocidade da partícula incidente e I é a energia de excitação média de um átomo-alvo (ou molécula), sendo determinada através da relação

$$\ln I \equiv \frac{1}{Z_2} \sum_i \sum_f f_{i \rightarrow f} \ln(\varepsilon_f - \varepsilon_i), \quad (1.3.2.11)$$

com ε_f (ε_i) sendo a energia do estado final (inicial) do elétron do átomo-alvo e $f_{i \rightarrow f}$, sua força de oscilador de dipolo, dada por

$$f_{i \rightarrow f} \equiv (\varepsilon_f - \varepsilon_i) \left| \langle \phi_f | z | \phi_i \rangle \right|^2, \quad (1.3.2.12)$$

onde ϕ_j é a função de onda que descreve o estado quântico de um elétron no nível atômico j .

Esse resultado está baseado em duas aproximações essenciais:

(a) o potencial de interação entre o projétil e o átomo-alvo deve ser suficientemente fraco para poder ser considerado (dentro do espírito da Aproximação de Born) como um termo perturbativo e

(b) a velocidade do projétil deve ser muito maior do que a velocidade orbital de qualquer elétron do alvo.

Embora a fórmula de Bethe descreva qualitativamente a estrutura Z_2 do poder de freamento eletrônico de uma forma bastante boa, ela não fornece valores acurados de ε_e , quando comparados com resultados experimentais.

Quando $\frac{Z_1 e^2}{\hbar v} \gg 1$, modelos não-perturbativos devem ser usados. Nesse

limite, Bohr demonstrou a aplicabilidade da mecânica clássica à descrição do processo de colisão.

1.3.3 Teoria de Bohr

Segundo Bohr, contanto que o tempo de interação seja muito menor do que o período do movimento orbital dos elétrons do alvo, o freamento eletrônico pode ser considerado como um processo em que a energia é transferida do íon para elétrons praticamente livres.

A fim de levar em conta o efeito da ligação do elétron ao átomo-alvo, Bohr considerou o átomo como um conjunto de osciladores harmônicos carregados sujeitos à força externa da interação eletrostática coulombiana entre o íon e o elétron.

O tempo de interação é da ordem de $\frac{p}{v}$, onde v é a velocidade da partícula incidente e p é o parâmetro de impacto. Logo, mesmo estando o projétil com velocidades muito altas, o tempo de interação será grande para parâmetros de impacto grandes. Dessa forma, utiliza-se o parâmetro de impacto em relação à condição de que o tempo de interação seja curto. Portanto, p deve

satisfazer $p \ll v/\omega \equiv p_0$, onde ω é a frequência do oscilador, a qual é determinada pela energia de ligação do elétron num átomo-alvo.

Quando os parâmetros de impacto são muito menores que p_0 , o efeito da ligação do elétron pode ser desprezado, e a energia transferida Q , nesse caso, é calculada através da transferência de energia numa colisão binária entre o íon-projétil e o elétron-livre^{18,19}.

$$Q_{p \ll p_0} = \frac{2(Z_1 e^2)^2}{mv^2} \frac{1}{p^2 + \left(\frac{Z_1 e^2}{mv^2}\right)^2} \quad (1.3.3.1)$$

Quando, $p \geq p_0$, o efeito da ligação tem de ser levado em conta, e se tem que a energia transferida para o elétron é dada por

$$Q = \frac{\pi}{m} |\hat{F}(\omega)|^2, \quad (1.3.3.2)$$

onde \hat{F} é a transformada de Fourier da força \vec{F} de interação entre o íon e o elétron.

Colocando, agora, a força de Coulomb na equação 1.3.3.2 e supondo a trajetória do projétil como uma linha reta, que não sofre alteração na colisão com o elétron, temos

$$Q = \frac{2(Z_1 e^2)^2}{mv^4} \left[K_0^2\left(\frac{\omega p}{v}\right) + K_1^2\left(\frac{\omega p}{v}\right) \right], \quad (1.3.3.3)$$

onde K_0 e K_1 são as funções de Bessel modificadas de ordens zero e um, respectivamente.

A seção transversal de freamento eletrônico é dada pela seguinte expressão:

$$\varepsilon_e \equiv \frac{1}{NZ^2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_e = \int_0^{\infty} Q(p) 2\pi p dp, \quad (1.3.3.4)$$

onde N é a densidade de átomos por unidade de volume e a equação, em princípio, é válida para todos os valores de p .

Contudo, quando a mesma é substituída na equação 1.3.3.4, a integral diverge. Para contornar essa dificuldade, pode-se adotar um certo valor $p_{min} \neq 0$ como limite inferior da integral definida. Para determinar esse valor do parâmetro de impacto, exige-se, então, que o integrando 1.3.3.3, quando avaliado em p_{min} , forneça o valor da energia transferida no encontro binário frontal entre o projétil e o elétron. O valor de p_{min} que satisfaz essa condição é

$$p_{min} = \frac{|Z_1|e^2}{mv^2}.$$

Substituindo-se a equação 1.3.3.3 na equação 1.3.3.4 e adotando o limite de integração inferior p_{min} adequado, resulta:

$$\varepsilon_e^{Bohr} = 4\pi \frac{(Z_1 e^2)^2}{mv^2} \ln \left(\frac{1,123mv^2}{|Z_1| \omega e^2} \right) \quad (1.3.3.5)$$

O uso dos conceitos clássicos de órbita bem definida e de parâmetro de impacto, no caso do modelo de Bohr, e a noção quântica de amplitude de espalhamento no caso do modelo de Bethe, indicam a diferença de abordagem dos dois modelos.

A teoria de Bohr do poder de freamento eletrônico descreve acuradamente os resultados experimentais, desde que:

- (i) $v \gg v_o$, sendo $v_o = c/137$, a velocidade de Bohr, e
- (ii) $Z_1/(v/v_o) \gg 1$, condição que corresponde ao limite de aplicabilidade da Mecânica Clássica.

1.3.4 Teoria da Resposta Linear

No estudo do freamento eletrônico de íons energéticos em qualquer intervalo de energia, utiliza-se, comumente, a Teoria da Resposta Linear de Sistemas Homogêneos^{20,21}.

Começaremos, primeiramente, estudando o poder de freamento em um gás de elétrons.

1.3.4 a) Poder de Freamento em um Gás de Elétrons

Nesse caso, o que acontece com o íon é que ele gera um campo elétrico externo E_{ext} que representa uma perturbação no gás de elétrons, gerando um campo elétrico induzido:

$$\vec{E}^{ind} = \left[\frac{1}{\epsilon(\vec{k}, \omega)} - 1 \right] \vec{E}^{ext}, \quad (1.3.4.1)$$

onde \vec{E}^{ext} e \vec{E}^{ind} são as transformadas de Fourier dos campos elétricos externo e induzido, respectivamente, e $\varepsilon(k, \omega)$ é a constante dielétrica longitudinal do plasma eletrônico. A energia dissipada por unidade de tempo pelo íon $\frac{dW}{dt}$ é dada por

$$\frac{dW}{dt} = \vec{F} \cdot \vec{v}_1 = \vec{v}_1 \cdot \int \rho_{ion}(\vec{r}, t) \vec{E}^{ind}(\vec{r}, t) d^3 r \quad (1.3.4.2)$$

A distribuição de carga de um projétil de carga nuclear Z_1 movendo-se a uma velocidade v_1 com N elétrons ligados a ele em um meio é dada por

$$\rho_{ion}(\vec{r}, t) = Z_1 \delta(\vec{r} - \vec{v}_1 t) - \rho_{ion}^e(\vec{r} - \vec{v}_1 t), \quad (1.3.4.3)$$

com o vínculo

$$\int \rho_{ion}^e(\vec{r}) d^3 r = N,$$

onde N é o número total de elétrons.

Substituindo ρ_{ion} da eq. 1.3.4.3 na eq. 1.3.4.2, obtemos²²:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dE}{dx} \right)_e &= \frac{1}{v_1} \frac{dW}{dt} \\ &= \frac{2Z_1^2 e^2}{\pi v_1^2} \int \frac{dk}{k} |\rho_{ion}^e(k)|^2 \int_0^{kv_1} d\omega \omega \text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(\vec{k}, \omega)} \right], \end{aligned} \quad (1.3.4.4)$$

onde $\rho_{ion}^e(k)$ é a transformada de Fourier de $\rho_{ion}^e(\vec{r})$ no sistema de coordenadas do íon incidente.

A eq. 1.3.4.4 não considera efeitos da excitação ou ionização dos elétrons do íon incidente e supõe que a densidade eletrônica do íon (eq. 1.3.4.3) é rígida quando o íon se aproxima do átomo-alvo. O efeito de excitação do gás de elétrons está todo contido na constante dielétrica $\epsilon(k, \omega)$.

Restringindo-nos ao caso de um íon nu, o poder de freamento eletrônico em um meio pode ser escrito na forma:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv_1^2} nL(n, v_1), \quad (1.3.4.5)$$

onde L depende somente da densidade eletrônica do meio n e da velocidade do projétil (v_1).

Por exemplo, para $v_1 \leq v_f$ ²³,

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \sim f(n) \frac{v_1}{v_F(n)} \quad (1.3.4.6)$$

Essa relação implica a dependência linear entre o poder de freamento eletrônico e a velocidade da partícula incidente.

Para $v_1 \gg v_f$ ²⁰,

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \sim Z_1^2 \frac{n}{v_1^2} \ln \left[\frac{2v_1^2}{\omega_p(n)} \right], \quad (1.3.4.7)$$

sendo $\sqrt{4\pi e^2 n/m}$ a frequência de excitação de plásmons.

As formas funcionais de L e f dependem do tipo de aproximação usada para calcular $\epsilon(k, \omega)$ ^{21,23}.

1.3.4 b) Poder de freamento eletrônico em sólidos

Em um sólido, contrariamente ao que acontece em um gás, não há densidade eletrônica uniforme. Lindhard e Scharff^{24,25} e Lindhard e Winther²⁶ adaptaram a equação 1.3.4.5 para um sólido usando a Aproximação de Densidade Local:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} n(\vec{r}) L[n(\vec{r}), v] \quad (1.3.4.8)$$

sendo $L(n, v)$, chamada função de interação de freamento.

A seção transversal de freamento é, dessa forma, calculada através de

$$\varepsilon_e = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} \int d^3 r n_a(\vec{r}) L[n(\vec{r}), v], \quad (1.3.4.9)$$

onde $n_a(\vec{r})$ é a densidade de elétrons por átomo do alvo:

$$\int d^3 r n_a(\vec{r}) = Z_2 \quad (1.3.4.10)$$

Para baixas velocidades do íon incidente ($v_1 \ll v_0 Z_1^{2/3}$), Lindhard e Scharff²⁷ chegaram à seguinte aproximação:

$$\varepsilon_e = 8\pi e^2 a_0 \xi \frac{Z_1 Z_2}{Z} \frac{v_1}{v_0}, \quad (1.3.4.11)$$

onde a_0 e v_0 , são o raio e a velocidade de Bohr, respectivamente, $\xi \approx Z^{1/6}$ e

$$Z = \left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/2} \quad (1.3.4.12)$$

A mesma dependência com a velocidade também foi encontrada por Firsov em 1950²⁸.

Para altas velocidades do projétil ($v_1 \gg v_0 Z_1^{2/3}$), temos que

$$\varepsilon_e = \frac{Z_1^2}{v_1^2} f(\text{alvo}, v_1), \text{ onde } f, \text{ é uma função que depende só do alvo e da}$$

velocidade do projétil.

Como uma consequência da equação acima, para um mesmo alvo e uma mesma velocidade de íon incidente, temos:

$$\frac{\varepsilon_e(Z_1, v_1)}{\varepsilon_e(Z_1 = 1, v_1)} = Z_1^2, \quad v_1 \gg v_0 Z_1^{2/3} \quad (1.3.4.13)$$

A altas velocidades do íon incidente, vemos que o poder de freamento de qualquer íon em qualquer alvo escala com o poder de freamento do próton nesse mesmo alvo na mesma velocidade, sendo a constante de proporcionalidade o quadrado do número atômico do íon incidente.

Até aqui consideramos o íon nu. Para velocidades intermediárias, podemos adaptar a equação acima, substituindo a carga Z_1 do núcleo por uma carga efetiva Z_1^* ²²:

$$\frac{\varepsilon_e(Z_1, v_1)}{\varepsilon_e(Z_1 = 1, v_1)} = Z_1^{*2} \quad (1.3.4.14)$$

Esse é o tipo de aproximação utilizada para o cálculo da perda de energia de íons realizada pelo programa TRIM.

Brandt e Kitagawa²² encontraram uma expressão para a carga efetiva, utilizando uma densidade eletrônica do tipo

$$\rho_{ion}^e(r) = \frac{N_1}{4\pi \Lambda^3} \frac{\Lambda}{r} \exp(-r/\Lambda), \quad (1.3.4.15)$$

onde Λ é um parâmetro variacional. Minimizando a energia interna do íon (que depende de $\rho_{ion}^e(\vec{r})$) em relação a Λ , temos

$$\Lambda(q) = \frac{0,48a_0(1-q)^{2/3}}{Z_1^{1/3} \left[1 - \frac{1}{7}(1-q) \right]}, \quad (1.3.4.16)$$

com $q \equiv 1 - N_1/Z_1$.

Para altas velocidades, a constante dielétrica do meio pode ser calculada através da “plasmon-pole approximation”²⁹:

$$\varepsilon(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_g^2 + \beta^2 k^2 + k^4/4 - \omega(\omega + i\gamma)}, \quad (1.3.4.17)$$

onde ω_p representa a energia de plasmon e ω_g , o gap de energia efetivo para semicondutores e isolantes, sendo a frequência de ressonância coletiva

$\Omega_o = (\omega_p^2 + \omega_g^2)^{1/2}$, com $\beta^2 = 3/5 k_F^2$, onde $k_F = 1,919 r_s^{-1}$ é o momentum de

Fermi dos elétrons do meio e γ está relacionada com os processos de “damping”.

Quando $\gamma \rightarrow 0$,

$$\text{Im} \left[\frac{-1}{\varepsilon(k, \omega)} \right] = \frac{\pi \omega_p^2}{2A} \delta(\omega - A), \quad (1.3.4.18)$$

com

$$A^2 = \Omega_o^2 + \beta^2 k^2 + k^4/4. \quad (1.3.4.19)$$

Ao substituírmos as eqs. 1.3.4.15, 1.3.4.16, 1.3.4.18 e 1.3.4.19 em 1.3.4.4 e considerarmos $v_1 < v_f$ e $k_F \Lambda \ll 1$, obtemos

$$\frac{Z_1^*}{Z_1} \equiv \xi = q + C(v_F/v_o)(1-q) \ln \left[1 + \left(\frac{2v_F \Lambda}{a_o v_o} \right)^2 \right], \quad (1.3.4.20)$$

onde ξ é chamada carga efetiva fracional, v_F é a velocidade de Fermi, $C(v_F/v_o) \approx 1/2$, e a fração de ionização $q \equiv 1 - N_1/Z_1$ é calculada através de³⁰:

$$q = 1 - \exp(-0,92y_r), \quad (1.3.4.21)$$

sendo

$$y_r = \frac{v_r}{v_o Z_1^{2/3}} \quad (1.3.4.22)$$

A velocidade do projétil em relação aos elétrons de condução em um sólido é dada por:

$$v_r = \begin{cases} v_1 \left[1 + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F}{v_1} \right)^2 \right], & v > v_F \\ \frac{3}{4} v_F \left[1 + \frac{2}{3} \left(\frac{v_1}{v_F} \right)^4 - \frac{1}{15} \left(\frac{v_1}{v_F} \right)^4 \right], & v_1 \leq v_F \end{cases} \quad (1.3.4.23)$$

CAPÍTULO 2

ANÁLISE POR ESPECTROMETRIA DE RETROESPALHAMENTO RUTHERFORD

2.1 Introdução

A Espectrometria de Retroespalhamento Rutherford (RBS) é uma técnica baseada na colisão entre núcleos atômicos, e seu nome deriva de Lord Ernest Rutherford, que em 1911 foi o primeiro a apresentar a idéia de que átomos contém núcleos. RBS envolve medidas do número e da energia dos íons do feixe incidente que são retroespalhados depois de colidirem com átomos na região próxima à superfície da amostra.

Além disso, é uma técnica não-destrutiva que permite determinar a composição atômica de materiais em função da profundidade nas regiões próximas à superfície dos mesmos (espessuras tipicamente menores do que 1 μ m). RBS permite também determinar a presença, a massa atômica e o perfil de concentração de impurezas. A medida da espessura de filmes finos é uma outra aplicação simples da técnica. RBS é, ainda, utilizada para a determinação da concentração do traço de elementos pesados, mas é pouco sensível a massas leves.

A idéia da técnica é bastante simples. Suponhamos que um feixe colimado e monoenergéticas de partículas incide sobre um alvo. As partículas do feixe podem colidir frontalmente com os átomos da amostra. Contudo, esses eventos são de baixa probabilidade, devido à reduzida dimensão dos núcleos atômicos. Quando o alvo é suficiente fino, quase todas as partículas incidentes o atravessam, acarretando apenas uma pequena perda de energia. Aquelas que colidem quase frontalmente com átomos do alvo sofrem grandes mudanças na direção e na energia. Por sua vez, para qualquer alvo, somente as partículas retroespalhadas a ângulos maiores do que 90° da direção incidente podem ser detectadas.

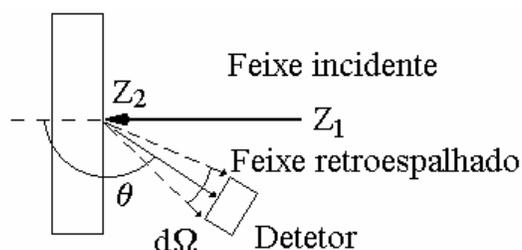


Fig. 2.1.1: Esquema do arranjo experimental numa análise por RBS.

Conseqüentemente, apenas uma pequena fração das partículas retroespalhadas incide sobre a área definida pelo ângulo sólido de um detector e pode ser analisada em energia (fig.2.1.1). Tipicamente, são utilizados detectores de estado sólido, que produzem um sinal de tensão analógico proporcional à energia da partícula detectada (fig. 2.1.2). Esse sinal alimenta um pré-amplificador e, depois de amplificado, serve de entrada para um analisador

multicanal, que tem a função de processar e armazenar a informação gerada pelo detector. Dessa forma, é feita a discretização dos eventos de detecção de partículas retroespalhadas em intervalos de energias denominados canais. Para um evento de retroespalhamento cuja energia da partícula detectada corresponde à faixa de dado canal, há o acréscimo de uma contagem a esse canal. Então, cada canal tem registrado certo número de contagens (número de partículas detectadas), o que, quando traçado em um gráfico de contagens versus canais constitui o espectro de RBS.

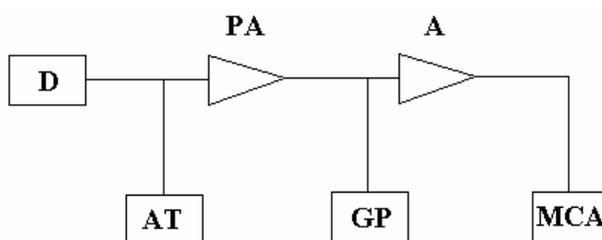


Fig. 2.1.2: Diagrama em blocos do sistema analisador de um experimento de RBS: D = detector, AT = fonte de alta tensão, PA = pré-amplificador, A = amplificador, GP = gerador de pulsos e MCA = analisador multicanal.

O número de eventos de retroespalhamento que ocorrem para um dado elemento numa amostra depende de vários fatores, tais como: a concentração dos elementos, o tamanho efetivo (número atômico) dos seus núcleos e a energia das partículas incidentes.

2.2 Processo Físico Básico

A conversão de sinais de um espectro de RBS para distribuições em profundidade de concentrações atômicas reside sobre princípios simples. Esses baseiam-se na Mecânica Clássica e na hipótese de que as colisões entre as partículas sejam elásticas.

2.2.1 Fator Cinemático

Para espalhamento na superfície da amostra o mecanismo de perda de energia é simplesmente a transferência de momentum de um feixe de partículas de uma dada energia para o átomo alvo. A razão entre a energia do projétil depois de uma colisão, E_1 , e a energia do projétil antes da colisão, E_0 , é definida como o fator cinemático (ver figura 2.2.1):

$$K \equiv \frac{E_1}{E_0}. \quad (2.2.1)$$

O fator cinemático determina o canal no espectro onde se tem a contagem de uma partícula detectada, após ser retroespalhada por um determinado átomo. A energia $K_x E_0$ corresponde ao maior canal do sinal do elemento x.

Supondo colisões elásticas (a condição necessária é que o valor de energia o feixe seja muito maior que a energia de ligação dos átomos no alvo,

porém não tão alto que reações nucleares possam ocorrer) entre duas partículas isoladas e considerando a conservação de energia e de momentum, podemos mostrar que³¹

$$K(M_1, M_2, \theta) = \left[\frac{\left(1 - \left(\frac{M_1}{M_2} \right)^2 \sin^2 \theta \right)^{1/2} + \left(\frac{M_1}{M_2} \right) \cos \theta}{1 + \left(\frac{M_1}{M_2} \right)} \right]^2, \quad (2.2.2)$$

onde M_1 e M_2 são as massas atômicas do projétil e do átomo alvo respectivamente, e θ é o ângulo de espalhamento, isto é, o ângulo entre as direções final e inicial do projétil.

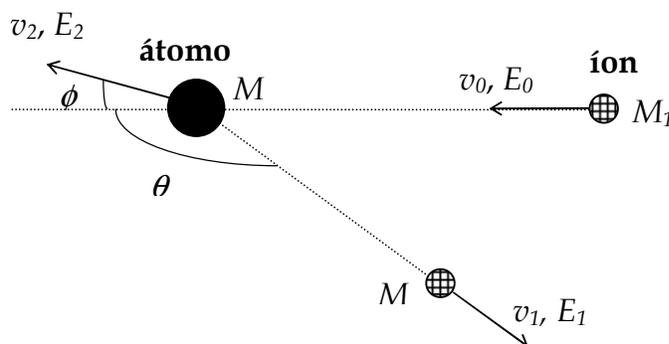


Fig.2.2.1: Representação esquemática de uma colisão entre um projétil de massa M_1 , velocidade v_0 e energia E_0 e um átomo-alvo de massa M_2 que está inicialmente em repouso. Após a colisão, o projétil e o átomo-alvo têm velocidades e energias v_1, E_1 e v_2, E_2 , respectivamente.

Há diferença entre as energias das partículas retroespalhadas por elementos leves e elementos pesados, porque uma quantidade maior de momentum é transferida da partícula incidente para um átomo-alvo leve. Quando a massa do átomo aumenta, menos momento é transferido para o

átomo-alvo, e a energia das partículas retroespalhadas aproxima-se assintoticamente da energia incidente.

O espalhamento por um átomo na superfície frontal de um alvo é detectado a uma energia $K_{M2} E_0$. Os eventos que ocorrem dentro do material são registrados a energias mais baixas, que decrescem à medida que a profundidade do átomo espalhador aumenta. Considerando que a intensidade do feixe praticamente não é atenuada, a probabilidade de espalhamento por dado tipo de átomo a dada profundidade é proporcional ao número de átomos desse tipo particular presente nessa região. Dessa forma, no sinal de RBS de um elemento, a altura é diretamente proporcional à concentração e pode ser demonstrado que o número do canal decresce linearmente com a profundidade.

2.2.1.a) Seção de Choque de Espalhamento Diferencial

O número relativo de partículas retroespalhadas por um átomo alvo dentro de um dado ângulo sólido para um dado número de partículas incidentes é denominado seção de choque diferencial de espalhamento. Ela está relacionada à probabilidade de ocorrência de um evento de espalhamento. Rutherford calculou-a supondo um potencial coulombiano, ($V(r) = Z_1 Z_2 e^2 / r$), onde Z_1 e Z_2 são os números atômicos do projétil e do alvo, respectivamente. Nessas condições, a seção de choque diferencial, no sistema de referência do centro de massa, é dada por^{32,33}:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_{cm} \sin^2\left(\frac{\theta_{cm}}{2}\right)} \right]^2, \quad (2.2.3)$$

onde E_{cm} é a energia cinética no sistema de referência do centro de massa.

Vemos, portanto, que a seção de choque de espalhamento é basicamente proporcional ao quadrado do número atômico do átomo alvo e inversamente proporcional ao quadrado da energia do íon. Ou seja, quanto mais pesado o átomo-alvo e menor a energia do projétil, maior a probabilidade de espalhamento.

Já no sistema de referência do laboratório, é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E \sin^2\left(\frac{\theta_{cm}}{2}\right)} \right]^2 \frac{\left[(1 - x^2 \sin^2 \theta)^{1/2} + x \cos \theta \right]^2}{(1 - x^2 \sin^2 \theta)^{1/2}}, \quad (2.2.4)$$

onde E é a energia no sistema de referência de laboratório, $x \equiv M_1/M_2 \leq 1$ e

$$\operatorname{tg} \theta_{cm} = \frac{\operatorname{sen} \theta}{\operatorname{cos} \theta + x} \quad (2.2.5)$$

Somente uma pequena fração das partículas chegam bastante perto de um núcleo atômico e são retroespalhadas para fora da amostra. Quando as partículas penetram no material, a energia do projétil dissipada é consequência da interação com os elétrons (freamento eletrônico), das colisões não-frontais com os núcleos dos átomos do alvo (freamento nuclear). Isso significa que, no

interior do material, uma partícula do feixe terá menor energia que na superfície. A quantidade de energia que um projétil perde por distância atravessada no alvo depende do projétil, de sua velocidade, dos elementos do alvo e da densidade do mesmo.

A profundidade x alcançada por uma partícula que incidiu com uma energia E_0 é dada por

$$x = \int_E^{E_0} \left(\frac{dE}{dx} \right)^{-1} dE \quad (2.2.6)$$

Os valores para a perda de energia específica dE/dx podem ser calculados com acurácia (melhor do que 10%) a partir do programa TRIM.

2.3 Análise de Dados

2.3.1 Escala de Profundidade para uma amostra Elementar

A figura 2.3.1.1 ilustra a entrada e a saída de um feixe que incide sobre a amostra. Algumas partículas do feixe são retroespalhadas na superfície e outras à profundidade x .

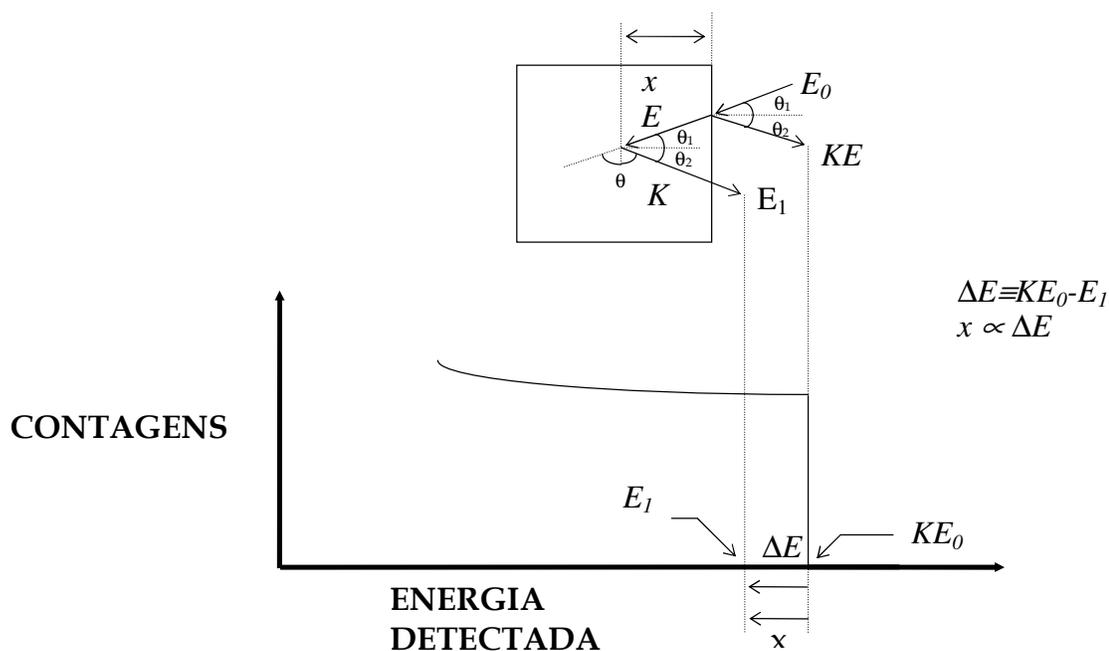


Fig. 2.3.1.1: Diagrama esquemático mostrando o espalhamento à superfície da amostra e a uma profundidade x de partículas de um feixe incidente em uma direção oblíqua com relação à normal.

A projeção da trajetória de entrada da partícula na direção x é dada por:

$$x/\cos\theta_1 = \int_E^{E_0} dE(dE/dx)^{-1}, \quad (2.3.1)$$

e, para a trajetória de saída:

$$x/\cos\theta_2 = \int_{E_1}^{KE} dE(dE/dx)^{-1} \quad (2.3.2)$$

Tomando-se a perda de energia dE/dx como constante, temos, para o caminho de entrada:

$$E = E_0 - \frac{x}{\cos\theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{entrada}, \quad (2.3.3)$$

onde dE/dx deve ser avaliada em algum valor de energia que o íon assume ao longo do percurso de entrada. E, para o caminho de saída, temos:

$$E_1 = KE - \frac{x}{\cos\theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{saída}, \quad (2.3.4)$$

onde dE/dx deve ser avaliada em algum valor de energia que o íon assume ao longo do percurso de saída.

Eliminando E , a energia que a partícula tem imediatamente antes do espalhamento, entre as eqs. 2.3.3 e eq. 2.3.4, vem

$$\Delta E = [S]x = N[\varepsilon]x, \quad (2.3.5)$$

onde $\Delta E \equiv KE_0 - E_1$,

$$[S] \equiv \frac{K}{\cos\theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{entrada} + \frac{1}{\cos\theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{saída} \quad (2.3.6)$$

é chamado o *fator de perda de energia* ou *fator S* e

$$[\varepsilon] \equiv \frac{K}{\cos\theta_1} \varepsilon_{entrada} + \frac{1}{\cos\theta_2} \varepsilon_{saída} \quad (2.3.7)$$

é chamado o *fator de seção transversal de freamento* ou *fator ε* , que foi definido no capítulo 1 (equação 1.2.13).

Para regiões próximas à superfície, a variação relativa de energia ao longo da trajetória de entrada é pequena e, portanto, $(dE/dx)_{\text{entrada}}$ pode ser avaliada em E_0 e $(dE/dx)_{\text{saída}}$, em KE_0 (Aproximação pela Energia de Superfície):

$$[S_0] \equiv \frac{K}{\cos \theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{E_0} + \frac{1}{\cos \theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{KE_0} \quad (2.3.8)$$

ou

$$[\varepsilon_0] \equiv \frac{K}{\cos \theta_1} (E_0) + \frac{1}{\cos \theta_2} (KE_0) \quad (2.3.9)$$

CAPÍTULO 3

PROCEDIMENTO E RESULTADOS EXPERIMENTAIS

3.1 Procedimento Experimental e Análise de Dados

A perda de energia de íons de He e Li em Zn foi medida utilizando filmes de multicamadas do tipo Au(100Å)/Zn/Au(100Å)/Si com o auxílio da Espectrometria de Retroespalhamento de Rutherford (RBS).

Os filmes foram depositados por evaporação. A camada interna de Au é necessária pois os átomos de Zn não aderem ao substrato de Si. A camada externa foi depositada para termos um marcador a mais que nos permitirá determinar independentemente a espessura do filme ou o poder de freamento de He ou Li (em alguns valores). Um desenho esquemático dessa estrutura é mostrado na figura 3.1.

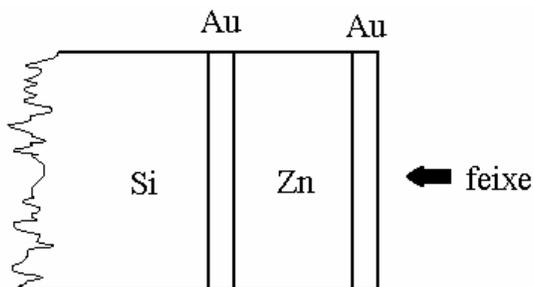


Fig 3.1: Representação esquemática das amostras utilizadas nesse experimento.

Para a medida da espessura das amostras, utilizamos feixes de íons de H, visto que o poder de freamento de H em Zn foi muito bem estudado e hoje em dia está bem estabelecido³⁵. O feixe colimado de H incidiu sobre as amostras segundo diversas geometrias e a diferentes energias (400-1000 keV). As partículas retroespalhadas foram detectadas por um detector de estado sólido (Si) de barreira de superfície. Como resultado das medidas obteve-se, para os diferentes filmes de Zn fornecidos pelo Centro Atômico de Bariloche (CAB), os seguintes valores de espessura: 460 ± 20 ; 750 ± 30 e 1500 ± 50 Å. Os erros estimados provêm fundamentalmente do poder de freamento do H em Zn.

Um espectro típico desse experimento é mostrado na fig 3.2:

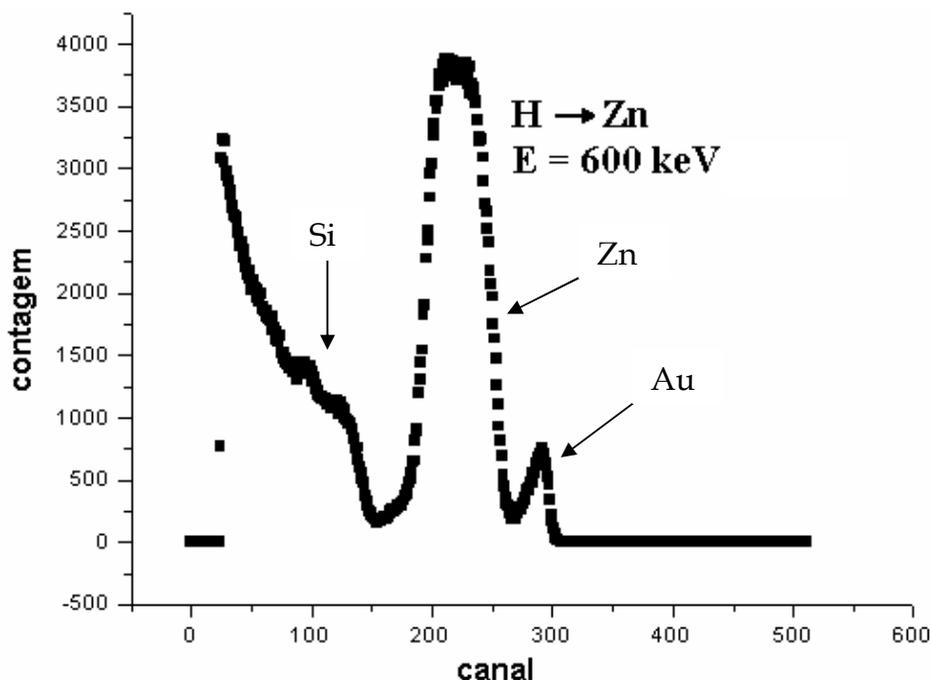


Fig 3.2: Espectro de RBS típico de alvo do tipo da fig 3.1 medidos com íons de H de 600 keV.

Posteriormente, para as medidas específicas de poder de freamento de He em Zn, utilizamos, o acelerador Tandetron de 3 MeV.

As partículas retroespalhadas foram detectadas por um detector de Si, colocado a um ângulo de 60° em relação ao feixe incidente.

Da mesma forma que para as medidas da espessura as amostras foram colocadas sobre um goniômetro de três eixos com precisão de $0,01^\circ$.

As energias utilizadas variam de 400 keV a 7 MeV. Para cada energia, realizaram-se várias medidas utilizando geometrias diferentes. Essas geometrias foram obtidas mantendo a posição do detector fixo e mudando o ângulo entre a direção do feixe e a normal da amostra. Especificamente, as energias de incidência usadas foram: 400 keV, 500 keV, 600 keV, 800 keV, 1000 keV, 1500 keV, 2000 keV, 2500 keV, 3000 keV, 4000 keV, 5000 keV (máxima energia para Li), 7000 keV (máxima energia para He).

A corrente utilizada variou tipicamente entre 5 e 10 nA, a fim de evitar o efeito de empilhamento dos sinais, na detecção das partículas retroespalhadas.

Alguns espectros típicos são mostrados na fig 3.3.

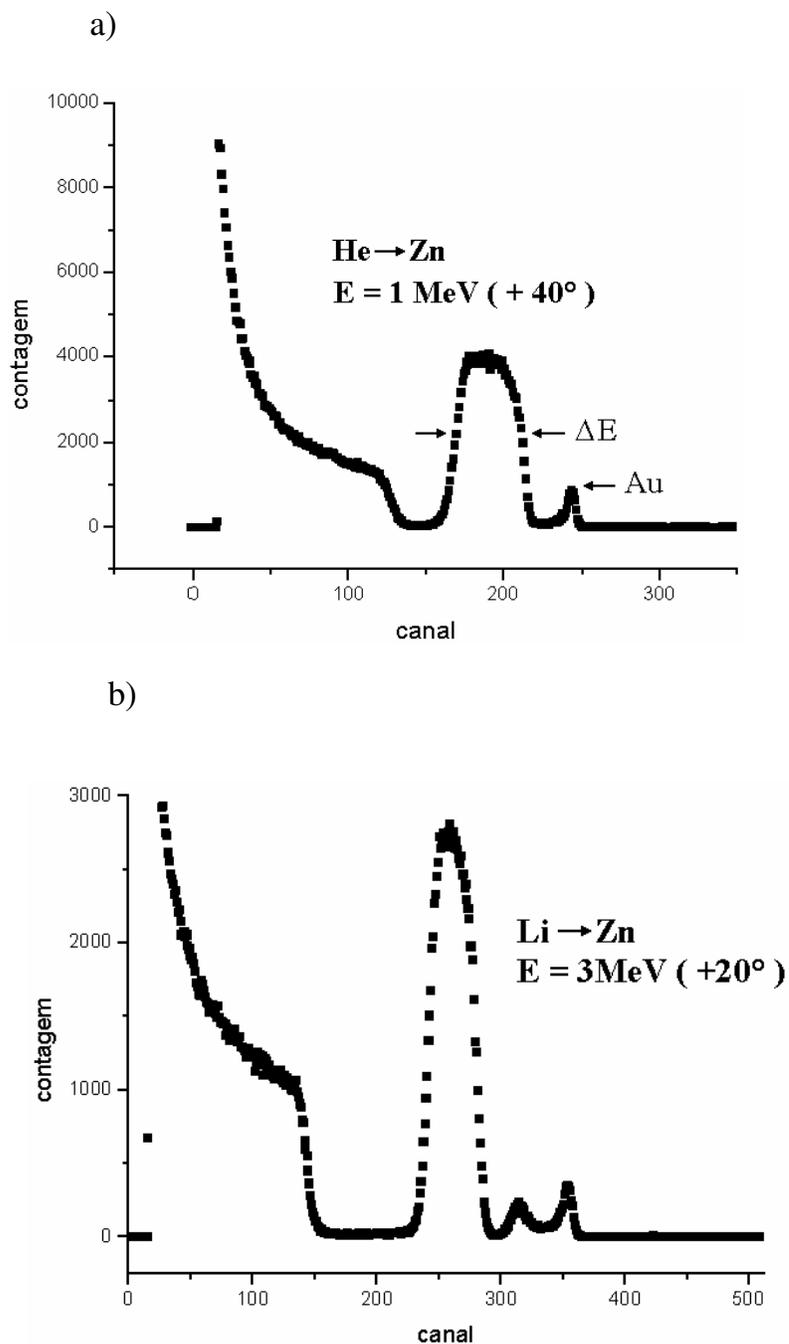


Fig. 3.3: Espectros típicos de RBS para alvos do tipo mostrado na fig 3.1 medidos com: a) íons de He de energia 1MeV com $\theta_1 = 40^\circ$, ΔE indica o intervalo de energia correspondente ao filme de Zn, Au identifica um marcador constituído pelo sinal do pico do Au; b) íons de Li de energia 3 MeV com $\theta_1 = 20^\circ$, ΔE e Au idem à a).

Para determinarmos a posição da borda posterior do sinal do espectro correspondente ao Zn (indicado na figura 3.3) usamos funções de ajuste envolvendo a chamada função-erro (erf):

$$y = y_o + \frac{h}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_c}{\sqrt{2}\sigma} \right) \right), \quad (3.1)$$

Os parâmetros livres são y_o , h , x_c e σ , sendo y_o o fundo, h a altura do espectro, x_c a posição da borda do sinal e σ o desvio padrão. Essa equação é usada, também, para a parte dianteira do sinal de Zn quando, como na figura 3.3 b, os picos de Au estão completamente separados do sinal de Zn, o que ocorre para energias maiores que 2 MeV.

Contudo, para baixas energias o segundo pico de Au tende a migrar para a esquerda penetrando no sinal de Zn, como pode ser visto na fig. 3.4(ii). Nesse caso, devemos levar em consideração esse fato na análise dos dados, usando a eq. 3.2.

$$\begin{aligned} y = & a_1 \left(0,5(1 - 2b_1(x - x_c)) \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_c}{w} \right) \right) - \frac{b_1 w}{\sqrt{\pi}} \exp \left(-\frac{(x - x_c)^2}{w^2} \right) \right) + \\ & a_2 \left(0,5(1 - 2b_2(x - x_c)) \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{x - x_c}{w} \right) \right) + \frac{b_2 w}{\sqrt{\pi}} \exp \left(-\frac{(x - x_c)^2}{w^2} \right) \right) + \\ & a_3 \exp \left(-0,5 \frac{(x - x_{c2})^2}{w^2} \right) \end{aligned} \quad (3.2)$$

A função da eq. 3.2 ajusta o sinal dianteiro referente à uma erf proveniente do sinal de Zn sobreposta à uma gaussiana referente ao pico de Au.

Entretanto, para energias muito baixas, o pico de superfície se aproxima da borda do sinal de Zn e o segundo pico de Au penetra neste, como pode ser visto na fig. 3.4 (iii). Podemos ver que nesta situação, o segundo pico não influencia na obtenção do xc, mas o primeiro influencia e podemos ainda utilizar a eq. 3.2.

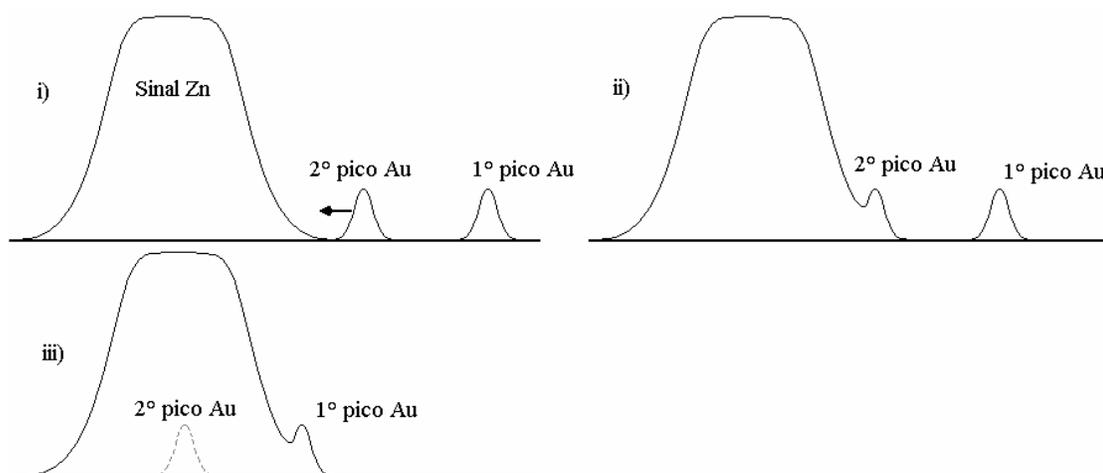


Fig. 3.4: Representação esquemática da penetração dos picos de Au no sinal de Zn.

A partir dessas informações, após multiplicarmos a largura do sinal em canais pelo coeficiente angular da reta de calibração, temos o que chamamos na figura 3.3 de ΔE .

Para determinar a perda de energia por unidade de comprimento utilizamos a seguinte equação³¹:

$$[S]_{Zn}^{Zn} = \frac{\Delta E}{t_{Zn}}, \quad (3.3)$$

onde t_{Zn} é a espessura da amostra determinada previamente.

O valor de $[S]_{Zn}^{Zn}$ é dado pela fórmula:

$$[S]_{Zn}^{Zn} = \frac{K_{Zn}}{\cos \theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{E_o}^{Zn} + \frac{1}{\cos \theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{K_{Zn}E_o}^{Zn}, \quad (3.4)$$

onde θ_1 é o ângulo entre a normal da amostra e o feixe incidente, θ_2 é o ângulo

entre a normal da amostra e o detector. Os valores de $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{E_o}^{Zn}$ (“perda de energia

de entrada”) e, os valores de $\left. \frac{dE}{dx} \right|_{K_{Si}E_o}^{Zn}$ (“perda de energia de saída”) são os

valores a determinar.

Usando as equações 3.3 e 3.4 obtemos

$$\frac{\Delta E}{t_{Zn}} = \frac{K_{Zn}}{\cos \theta_1} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{E_o}^{Zn} + \frac{1}{\cos \theta_2} \left(\frac{dE}{dx} \right)_{K_{Zn}E_o}^{Zn}, \quad (3.5)$$

que se transforma em :

$$y = \cos \theta_2 \left(\frac{\Delta E}{t_{Zn}} \right) - K_{Zn} \frac{\cos \theta_2}{\cos \theta_1} x, \quad (3.6)$$

onde

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_{E_o}^{Zn} \equiv x \quad \text{e}$$

$$\left(\frac{dE}{dx} \right)_{K_{Zn}E_o}^{Zn} \equiv y.$$

Definidas, então, as variáveis x e y , encontramos um sistema de equações

onde cada equação corresponde a uma geometria (θ_1, θ_2) distinta.

Resolvemos cada sistema graficamente, como sugerido na fig3.5.

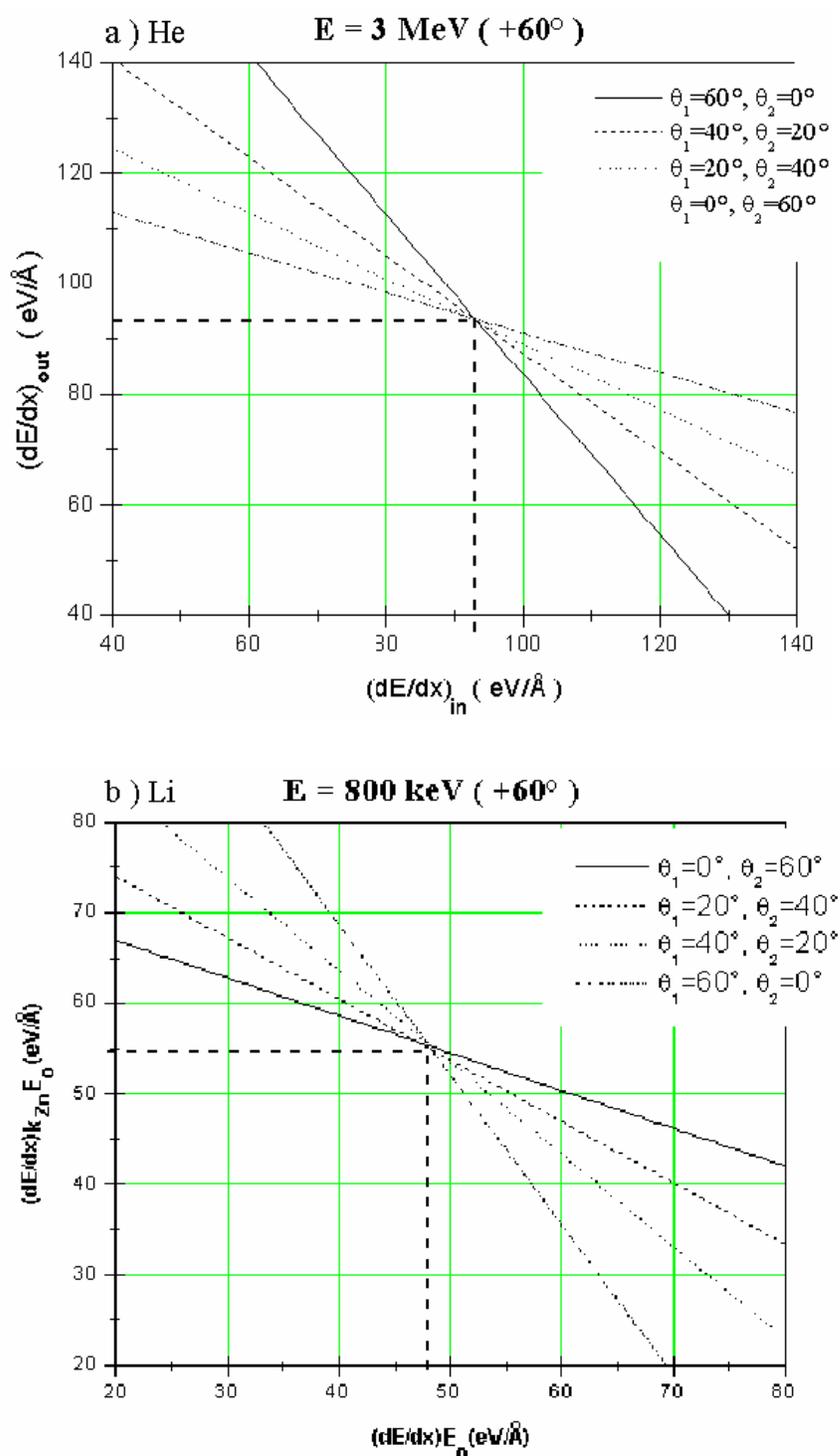


Fig 3.5: $(dE/dx)E_0$ versus $(dE/dx)K_{Zn}E_0$ para íons de: a) He a 3 MeV com detector a $+60^\circ$; b) Li a 800 keV com detector a $+60^\circ$. As linhas retas correspondem, nos dois casos, às geometrias especificadas. O ponto de intersecção das retas fornece os valores de perda de energia medidos no caminho de entrada e no caminho de saída.

É necessário, no mínimo, usar dois ângulos θ_1 e θ_2 diferentes. Porém, em nosso trabalho usamos quatro geometrias diferentes para cada valor de energia, com as quais sobredeterminamos os valores de $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{E_o}^{Zn}$ e $\left(\frac{dE}{dx}\right)_{K_{Zn}E_o}^{Zn}$.

O ponto de interseção das retas provenientes da eq. 3.5 em várias geometrias mostrado na fig 3.5 nos fornece os valores de x e y correspondentes, respectivamente, à perda de energia de entrada e de saída dos íons incidentes. Na verdade, esse método das retas nada mais é do que a resolução gráfica de um sistema de equações.

3.1.1 Resultados

Na fig. 3.6 são mostrados o poder de freamento de íons de He obtidos no intervalo de energia de 400 keV a 7 MeV.

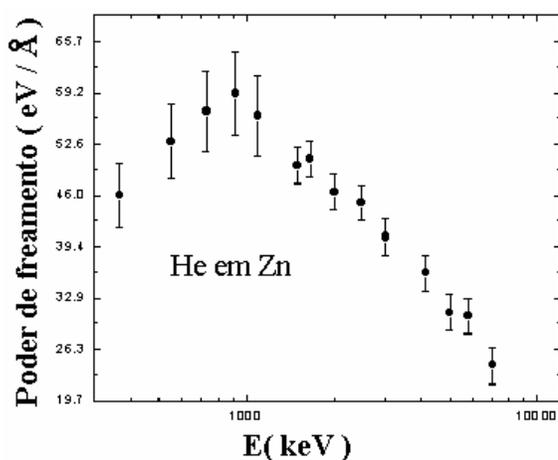


Fig 3.6: Poder de freamento eletrônico de He em Zn.

A resolução do detector mais a do sistema eletrônico foi menor que 13 keV. Cada ponto da figura 3.6 foi obtido como uma média de pelo, menos cinco, medições independentes. O erro típico foi estimado em 5%.

Utilizando a mesma sistemática descrita até aqui, obtivemos os poderes de freamento para íons de Li em Zn mostrados na figura 3.7.

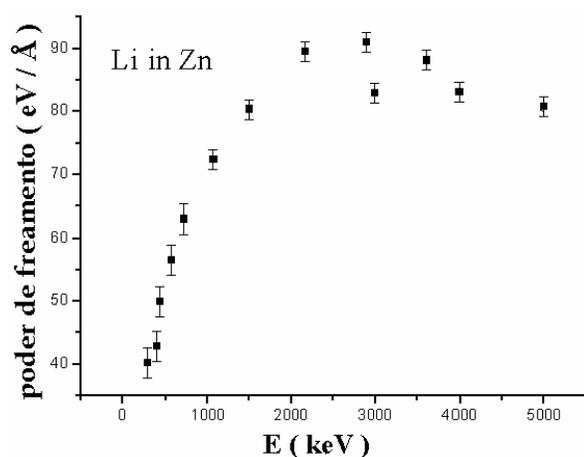


Fig 3.7: Poder de freamento eletrônico de Li em Zn.

Para o caso do Li, a resolução do detector e do sistema eletrônico foi de 15 keV. Como no caso do He, cada ponto da figura 3.7 foi obtido com uma média de cinco medições independentes e o erro típico é também da ordem de 5%.

CAPÍTULO 4

DISCUSSÃO DOS RESULTADOS E CONCLUSÕES

A partir da técnica de retroespalhamento de Rutherford pudemos obter resultados para o poder de freamento de íons de He e Li, para os quais, até onde sabemos, não existem dados experimentais na faixa de energia estudada.

Tivemos a vantagem da disponibilidade de alvos com espessuras da camada de Zn variáveis e de se ter marcadores de Au muito bem definidos, que eventualmente foram utilizadas de uma forma independente na determinação da espessura dos filmes de Zn ou do poder de freamento do He ou Li em Zn.

Nós dividiremos as discussões e conclusões em duas partes: uma correspondente às medições de He em Zn e outra referente a Li em Zn.

4.1 Medidas da perda de energia de He em Zn em direção não-alinhada

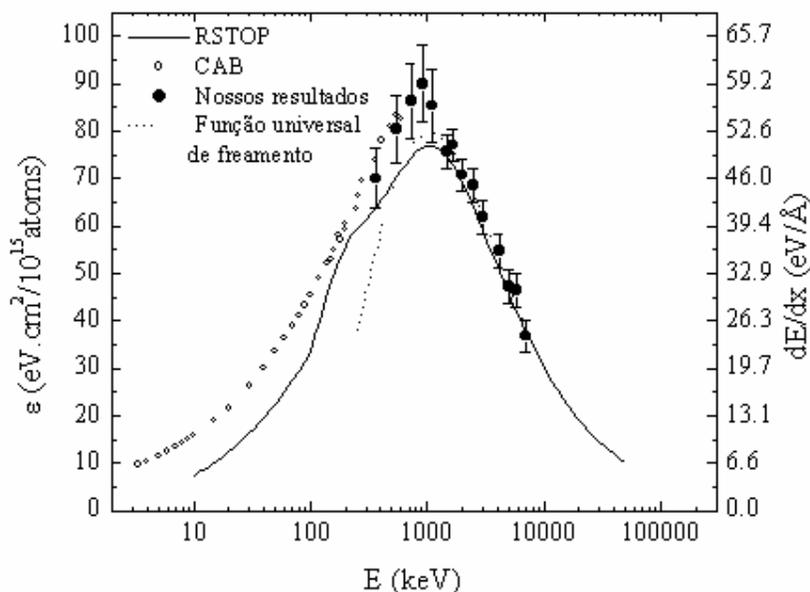


Fig. 4.1: Poder de freamento eletrônico de He em Zn.

Na figura 4.1, mostramos os resultados experimentais para a perda de energia de He em Zn. Na mesma figura, mostramos uma comparação com os resultados experimentais do CAB obtidos através da técnica de transmissão em uma faixa de energia de 10-600 keV³⁶. São mostradas, ainda, as previsões do programa TRIM e o cálculo do poder de freamento que surge da fórmula universal de Kalbitzer³⁷. Como pode ser observado, os valores encontrados pelo método de transmissão mostram uma curva com a mesma tendência que as medidas feitas no presente trabalho. As técnicas são complementares e fornecem valores compatíveis.

Nossos valores experimentais reproduzem razoavelmente bem as previsões do programa TRIM para energias maiores que 800 keV. A baixas energias, os valores teóricos são sistematicamente menores que os valores experimentais, sendo que a diferença pode ser de até 10%. Finalmente, destaca-se que a fórmula universal de Kalbitzer³⁷ ajusta bem os resultados obtidos no presente experimento.

Vemos, então, que os nossos resultados revelam um poder de freamento que varia de 46 eV/Å (a 366 keV), passando pelo máximo de 59,12 eV/Å (a 916 keV) e decrescendo a 25 eV/Å (a 7 MeV).

Outra questão de considerável interesse é o estudo da dependência da velocidade em relação à perda de energia em alvos metálicos³⁸. Como é bem conhecido, o mecanismo dominante na perda de energia de He, abaixo da energia correspondente ao poder de freamento máximo, é a transferência de energia para elétrons das camadas externas dos átomos do alvo. No caso de alvos metálicos, isso inclui os elétrons da banda de condução e possivelmente bandas eletrônicas adjacentes. Modelos teóricos^{39,40} predizem uma relação de proporcionalidade entre a velocidade e o poder de freamento a baixas energias. Ainda, no caso de metais de transição há existência de elétrons d cujas bandas de energia são deslocadas de somente alguns eV com relação à energia de Fermi, o que introduz uma energia mínima de transferência para o processo de excitação. Podemos ver essa relação de proporcionalidade confirmada a partir dos nossos dados, na figura 4.2:

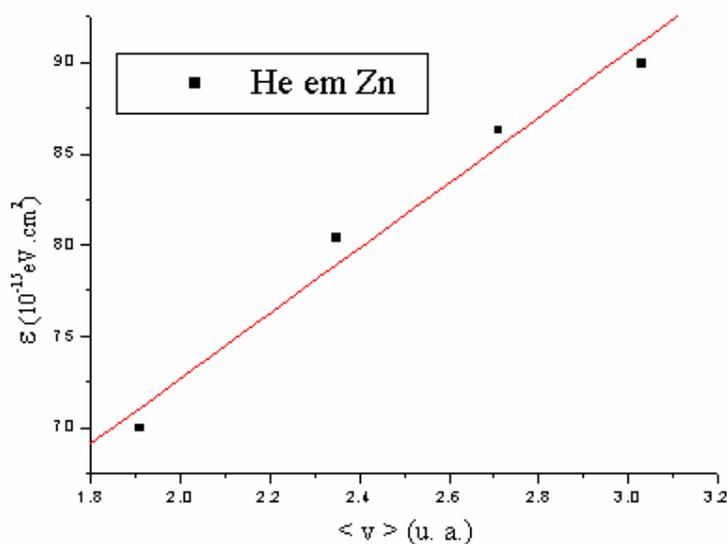


Fig. 4.2: Valores de perda de energia (em unidade de seção de choque de freamento) de Zn para íons de He vs a velocidade média $\langle v \rangle$ na amostra.

4.2 Medidas da perda de energia de Li em Zn em direção não-alinhada

Como foi dito anteriormente, estas são as primeiras medições do poder de freamento em direção não-alinhada de Li em Zn. Os únicos dados disponíveis na literatura são os da subrotina RSTOP do programa TRIM, os quais provém de um procedimento numérico de escalonamento e não do ajuste de resultados experimentais.

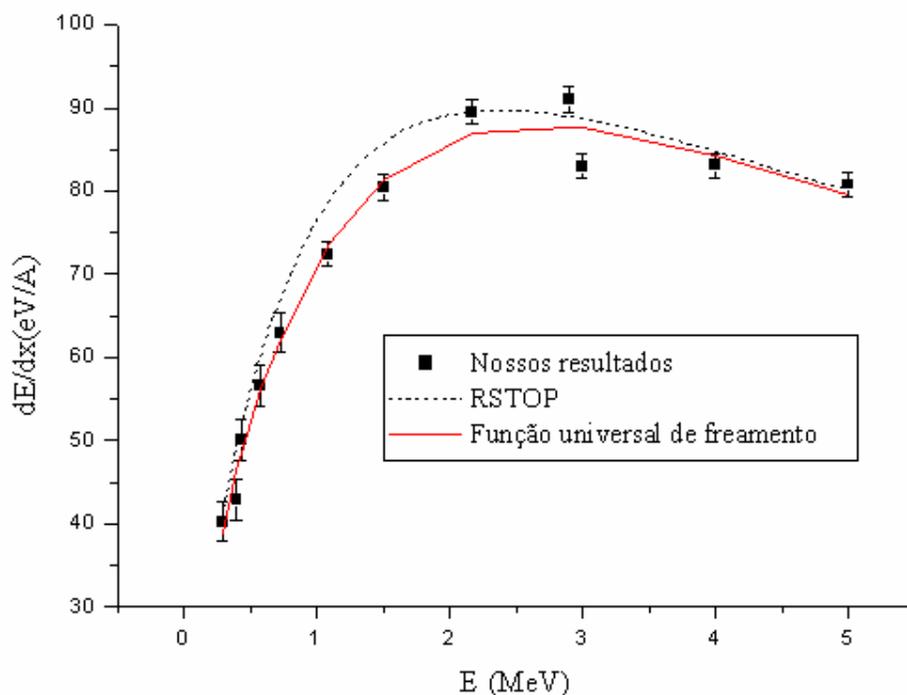


Fig. 4.3: Poder de freamento eletrônico de Li em Zn

Na figura 4.3 são mostrados os poderes de freamento de Li obtidos no presente experimento, no intervalo de energia de 300 keV a 5 MeV, junto com os valores da subrotina RSTOP. Observamos, a partir desses resultados, que os valores da perda de energia para Li em Zn vão de um valor de 40 eV/Å (para a energia de 300 keV), passando por um máximo de 90 eV/Å (em 2 MeV) e chegando até 82 eV/Å (para a energia de 5 MeV). Vemos que há uma boa concordância entre nossos resultados experimentais e a subrotina RSTOP, sendo que a diferença máxima é de menos de 5%. Na mesma figura mostramos as previsões da fórmula universal de Kalbitzer^{41,42}. Como pode ser observado, o

acordo teórico-experimental é tão bom quanto aquele encontrado com o programa TRIM.

Além disso, a relação de proporcionalidade entre a velocidade e poder de freamento do íon incidente também se cumpre, como pode ser visto na figura 4.4.

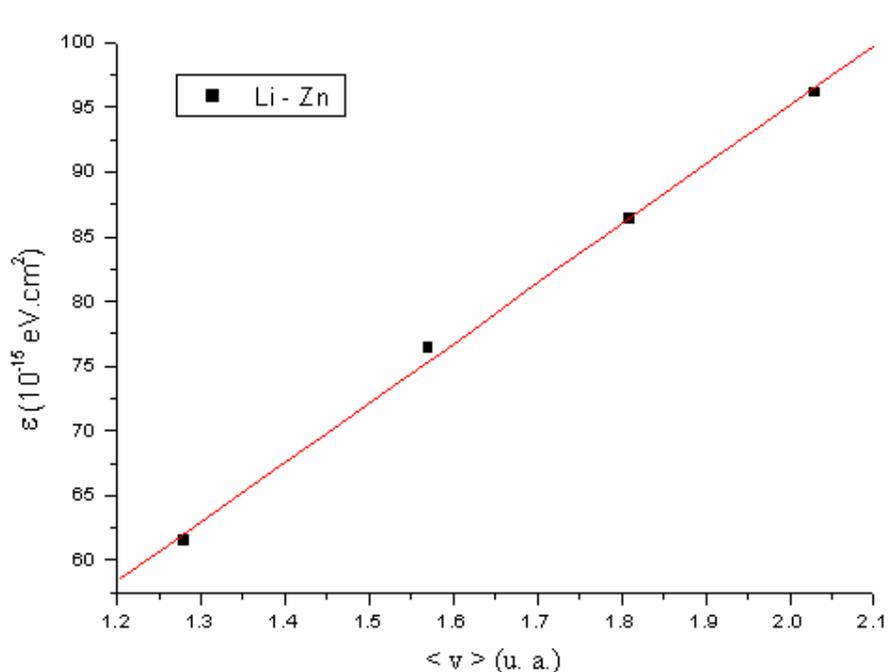


Fig. 4.4: Valores de perda de energia (em unidade de seção de choque de freamento) de Zn para íons de Li vs a velocidade média $\langle v \rangle$ na amostra.

4.3 Conclusões

Nas últimas três décadas muitos resultados sobre a perda de energia de diversos íons em diferentes materiais sólidos têm sido publicados na literatura. Paradoxalmente, a despeito do largo uso de íons de He na análise de materiais, há uma escassez surpreendente de dados voltados para o freamento desses íons

em materiais com alto valor de Z . No caso do Li, a carência de dados relacionados à perda de energia desses íons em alvos com $Z > 15$ é ainda maior.

Neste trabalho, realizamos um estudo experimental da perda de energia de íons de He e Li em filmes de Zn. Para esse fim, usamos a técnica de RBS combinada com alvos previamente caracterizados. No método experimental empregado, a execução das medições é simples, feita a partir da incidência do feixe de íons sob várias geometrias e várias energias.

a) Para íons de He em Zn: a perda de energia medida varre uma faixa de energia que vai de 400 keV a 7 MeV resultando num poder de freamento que vai de 46 eV/Å (a 366 keV), passando pelo máximo de 59,12 eV/Å (a 916 keV) e decrescendo a 25 eV/Å (a 7 MeV).

b) Para íons de Li em Zn: a perda de energia medida neste caso varre uma faixa de energia que vai de 300 keV a 5 MeV resultando num poder de freamento que vai de um valor de 40 eV/Å (para a energia de 300 keV), passando por um máximo de 90 eV/Å (em 2 MeV) chegando até 82 eV/Å (para a energia de 5 MeV).

Simultaneamente determinamos que o poder de freamento $\frac{dE}{dx}$ é proporcional a v , tanto para o He como para o Li. Pela primeira vez, foi realizado um estudo sistemático do poder de freamento de Li em Zn. Os resultados obtidos estão em razoável acordo com as previsões teóricas publicadas (subrotina RSTOP do programa TRIM), que provém de um

procedimento de escalonamento de dados de poder de freamento eletrônico.

Além disso, ajustam-se a uma relação de linearidade entre a velocidade e o poder de freamento do íon incidente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] GRANDE, P. L. **Estudo do alcance de íons pesados ($29 \leq Z_1 \leq 83$) em alvos de berílio, carbono e dióxidos de silício. 1989. 166 f.** Tese (Doutorado em Ciências) - Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1989.
- [2] GOLDSTEIN, H. **Classical mechanics.** 2.ed. Reading: Addison-Wesley, 1980.
- [3] BARAT, M.; LICHTEN, W. Extension of electron-promotion model to asymmetric atomic collisions. **Physical Review A**, New York, v. 6, n. 1, p. 211-229, July 1972.
- [4] BOHR, N. **Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk** v. 24, n. 19, 1948.
- [5] SOMMERFELD, A. **Z. f. Physik**, v. 76, p. 293, 1932.
- [6] MOLIÈRE, G. Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. **Z. Naturforschung A** v. 2, p. 133, 1947.
- [7] ZIEGLER, J. F.; BIRSACK, J. P.; LITTMARK, U. **The stopping and range in solids.** New York: Pergamon Oxford, 1985. STOP Program version 1995.
- [8] FIRSOV, O. B. Calculation of the interaction potential of atoms. **Soviet Physics JETP**, New York, v. 6, n. 3, p. 534-537, Mar. 1958.
- [9] ZIEGLER, J. F.; BIRSACK, J. P.; LITTMARK, U. **The stopping and ranges of ions in solids.** New York: Pergamon Press, 1985.
- [10] BETHE, H. Theory of passage of swift corpuscular rays through matter. **Ann. Phys. (Liepzig)** v. 5, p. 325, 1930.
- [11] AHLEN, S.P. Theoretical and experimental aspects of the energy loss of relativistic heavy ionizing particles. **Reviews of Modern Physics**, New York, v. 52, n. 1, p. 121-173, Jan. 1980.
- [12] BETHE, H.A. **Intermediate Quantum Mechanics.** New York: W. A. Benjamin, 1964.
- [13] KITTEL, C. **Introdução à física de estado sólido.** 5.ed. Rio de Janeiro: Guanabara dois, 1978.

[14] MCDOWELL, M.R.C.; COLEMAN, J.P. **Introduction to the theory of ion – atom collisions**. Amsterdam: North-Holland, 1970.

[15] ROUSSEAU, C.C.; CHU, W.K.; POWERS, D. Calculation of stopping cross sections for 0.8-2.0MeV alpha particles. **Phys. Rev. A**, Texas, v. 4, p. 1066, November 1970.

[16] WILSON, W.D.; HAGGMARK, L.G.; BIERSACK, J.P. Calculations of nuclear stopping, ranges and straggling in the low-energy region. **Phys. Rev B.**, v. 15, n. 5, p. 2458-2468, March 1977.

[17] BETHE, H. A.; JACKIW, R. W. **Intermediate quantum mechanics**. 2.ed. London: W. A. Benjamin, 1968.

[18] CRUZ, S.A. On the energy of loss of heavy ions in amorphous materials. **Radiat. Eff.**, London, v. 88, n 3/4, p. 159-215, Jun 1986.

[19] JACKSON, J.D., 1983. **Eletrodinâmica clássica**. 2 ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois. von JAN, R., 1967. **Phys. Ver. Lett.**, v. 18, p. 303.

[20] RITCHIE, R.H. Interaction of charged particles with a degenerate Fermi-Dirac electron gas. **Phys. Rev.**, Tennessee, v. 114, n. 3, p. 644-654, May 1959.

[21] CALKIN, M.G., NICHOLSON, P.J. Electrodynamics of a semiclassical free-electron gas. **Rev. Mod. Phys.**, Canada, v. 39, n. 2, p. 361-372, April 1967.

[22] BRANDT, W., KITAGAWA, M. Effective stopping-power charges of swift ions in condensed matter. **Phys. Rev. B**, New Iork, v. 25, n. 9, p. 5631-5637, May 1982.

[23] MANN, A., BRANDT, W. Material dependence of low velocity stopping powers. **Phys. Rev. B**, New Iork, v. 24, n. 9, p. 4999-5003, November 1981.

[24] LINDHART, J., SCHARFF, M. Energy loss in matter by fast particles. **K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.**, v. 27, n. 15, p. 1-31, 1953.

[25] LINDHART, J., SCHARFF, M. On the properties of a gas of charged particles. **K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.**, v. 28, n. 8, p. 1-57, 1954.

[26] LINDHART, J., WINTER, A., **K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd.**, v. 34, n. 4, 1964.

- [27] LINDHART, J.; SCHARFF, M.; Energy dissipation by ions in the keV region. **Physical Review**, New York, v. 124, n.1, p. 128-130, Oct. 1961.
- [28] FIRSOV, O.B., **Soviet Physics JETP**, New York, v. 36, p. 1076, Mar. 1958.
- [29] ECHENIQUE, P.M., RITCHIE, R.H., BRANDT, W. Spatial excitation patterns induced by swift ions in condensed matter. **Phys. Rev. B**, v. 20, n. 7, p 2567-2580, October 1979.
- [30] ZIEGLER, J. F., BIRSACK, J. P. LITTMARK, U., The stopping and range in solids. In: ZIEGLER, J.F. ed. **The stopping and range of ions in matter**. New York: Pergamon. v. 1.
- [31] CHU, W-K.; MAYER, J. W.; NICOLET, M. A., **Backscattering spectroscopy**. New York: Academic Press, 1978.
- [32] MARION, J. B., 1970. **Classical dynamics of particles and systems**. New York: Academic.
- [33] GOLDSTEIN, H., **Classical Mechanics**. 2.ed. Reading: Assison-Wesley, 1981.
- [34] BIRSACK, J. P, HAGGEMARK, L. G. A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions amorphous target. **Nucl. Instrum. and Methods**, v. 174, p. 257, February 1980.
- [35] ANDERSEN, H. H., ZIEGLER, J.F., 1977. Hidrogen stopping powers and ranges in all elements. In: ZIEGLER, J. F. **Stopping and ranges of ions in matter**. New York: Pergamon. v. 3.
- [36] MARTÍNEZ-TAMAYO, G., ECKARDT, J.C., LANTSCHNER, G.H., and ARISTA, N.R. Energy loss of H^+ in Al, Zn and Au in the very low – to intermediate- energy range. **Phys. Rev. A**, Bariloche, v. 54, n. 4, p. 3131-3138, October 1996.
- [37] KONAC ,G., KLATT, Ch., KALBITZER, S. Universal fit formula for electronic stopping of all ions in carbon and silicon. **Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B**, Heidelberg, v. 146, n. 1, p. 106-113, December 1998.
- [38] MARTÍNEZ-TAMAYO, G., ECKARDT, J.C., LANTSCHNER, G.H., and ARISTA, N.R. Energy loss of protons in Zn: Measurements between 2 and 200kev. **Phys. Rev. A**, Bariloche, v. 51, n. 3, p. 2285-2288, March 1995.

[39] CAMPILLO, I., PITARKE, J. M. and EGUILUZ, A.G. Electronic stopping power of aluminum crystal. **Phys. Rev. B**, v. 58, n. 16, p. 10307-10314, October 1998.

[40] ARNAU, A. Charge states and energy loss of ions in solids. Nucl. Instr. Meth. Res. B, v. 93, n. 2, p. 195-202, July 1994.

[41] NIEMANN, D., OBERSCHACHTSIEK, P., KALBITZER, S. and ZEINDL, H.P., **Energy loss and straggling of MeV ^4He ions in a Si/Sb multilayer target**, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B80/81, North-Holland, p. 37-40, September 1993.

[42] AZEVEDO, G. de M., BEHAR, M., DIAS, J.F., GRANDE, P.L. and da SILVA, D.L. Random and channeling stopping powers of He and Li ions in Si, Phys. Rev. B, v. 65, n. 7, p. 752031-752039, February 2002.