

# PMT3540 - Aula 2 - O deslocamento dos átomos

Cláudio Geraldo Schön

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais  
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

21 de agosto de 2019

## Colisão primária

Primeiro evento de colisão de uma partícula e um átomo em repouso no material (em ordem cronológica):

- Interação da partícula incidente com o átomo-alvo
- Transferência de energia cinética para o átomo, gerando o primeiro átomo deslocado (PKA, *primary knock-on atom*)
- Deslocamento do PKA no reticulado
- Trajeto do PKA no reticulado, gerando átomos adicionais deslocados
- Criação da cascata de dano (coleção de defeitos puntiformes criados pelo PKA)
- Repouso do PKA criando um auto-intersticial (SIA, *self-interstitial atom*)

# Equação de taxa de dano

$$R_d = N \int_{E_{min}}^{E_{max}} \phi(E_i) \Sigma_D(E_i) dE_i \quad (1)$$

- $\phi(E_i)$ : fluxo de partículas com energia  $E_i$
- $\Sigma_D(E_i)$ : seção de choque de deslocamento para a energia  $E_i$

## Seção de choque de deslocamento

$$\Sigma_D(E_i) = \int_{T_{min}}^{T_{max}} \bar{\sigma}(E_i, T) \nu(T) dT \quad (2)$$

- $\bar{\sigma}(E_i, T)$ : probabilidade de que o átomo, atingido por uma partícula de energia  $E_i$ , irá adquirir energia cinética  $T$  (deduzida na aula 1)
- $\nu(T)$ : número de átomos deslocados (objeto dessa aula)

# Probabilidade de deslocamento

Primeira aproximação

$$P_D = \begin{cases} 0 & T < E_D \\ 1 & T \geq E_D \end{cases}$$

- $E_D$ : energia necessária para deslocar o átomo no reticulado

# Probabilidade de deslocamento

De forma mais realista (reticulado, agitação térmica):

$$P_D = \begin{cases} 0 & T < E_{D,min} \\ f(T) & E_{D,min} \leq T < E_{D,max} \\ 1 & T \geq E_{D,max} \end{cases}$$

- $E_{D,min}, E_{D,max}$ : intervalo de energias em que o deslocamento pode ocorrer
- $f(T)$ : função monotônica crescente da energia cinética

# Modelo de Kinchin – Pease (KP)

## Hipóteses:

- 1 A cascata é resultado de colisão de dois corpos, evento por evento
- 2 A probabilidade de deslocamento é 1 para  $T \geq E_D$  (modelo simplificado)
- 3 O efeito do poder de frenagem elástico é ignorado (toda energia é compartilhada entre o átomo incidente e o deslocado)
- 4 Existe uma energia  $E_c$  que não pode ser ultrapassada (ligada ao poder de frenagem eletrônico)
- 5 Seção de choque usada é a do modelo de esferas rígidas
- 6 O arranjo dos átomos é assumidamente aleatório (sólido amorfo)

# Modelo de KP

## Dedução

O PKA de energia  $T$  colide com um átomo, transferindo energia  $\varepsilon - E_D$  para o segundo átomo e permanecendo com energia residual  $T - \varepsilon$ . Assumindo que  $\varepsilon \gg E_D$ :

$$\nu(T) = \nu(T - \varepsilon) + \nu(\varepsilon)$$

# Modelo de KP

## Dedução

Usando o modelo de esferas rígidas:

$$\bar{\sigma}(T, \varepsilon) = \frac{\Sigma(T)}{\gamma T}$$

Como estamos tratando de um átomo colidindo com um átomo do mesmo tipo (em geral), temos  $\gamma = 1$ .

# Modelo de KP

## Dedução

A probabilidade de transferência de energia do PKA no intervalo  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon + d\varepsilon$  é:

$$\frac{\bar{\sigma}(T, \varepsilon) d\varepsilon}{\Sigma(T)} = \frac{d\varepsilon}{T}$$

# Modelo de KP

## Dedução

Multiplicando e integrando sobre os valores permitidos de  $\varepsilon$  teremos o número médio de átomos deslocados.

$$\bar{\nu}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T [\nu(T - \varepsilon) + \nu(\varepsilon)] d\varepsilon$$

# Modelo de KP

## Dedução

O integrando, entretanto é positivo, assim, definindo a mudança de variáveis  $\varepsilon' = T - \varepsilon$ , com  $d\varepsilon' = -d\varepsilon$ :

$$\bar{\nu}(T) = \frac{1}{T} \left[ \int_T^0 \nu(\varepsilon') d\varepsilon' + \int_0^T \nu(\varepsilon) d\varepsilon \right] = \frac{2}{T} \int_0^T \nu(\varepsilon) d\varepsilon$$

# Modelo de KP

## Solução

$$\bar{\nu}(T) = \frac{2}{T} \left[ \int_0^{E_D} 0 d\varepsilon + \int_{E_D}^{2E_D} 1 d\varepsilon + \int_{2E_D}^T \nu(\varepsilon) d\varepsilon \right]$$

ou seja

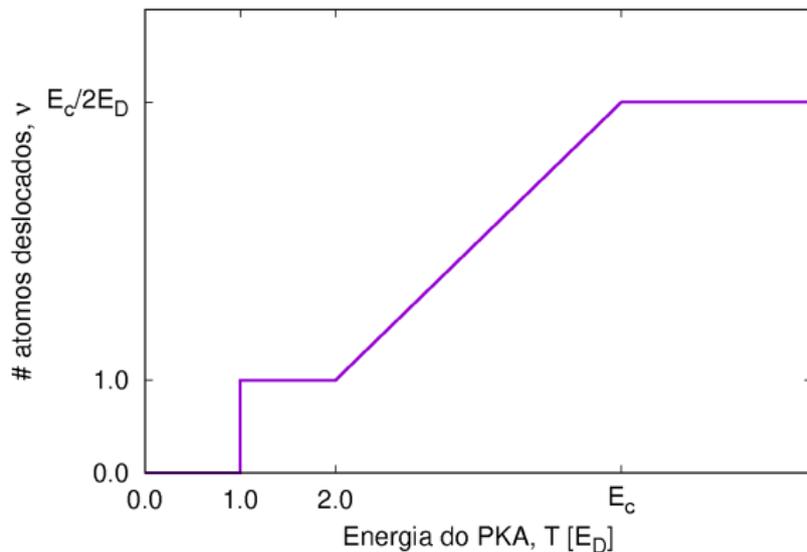
$$\bar{\nu}(T) = \frac{2E_D}{T} + \frac{2}{T} \int_{2E_D}^T \nu(\varepsilon) d\varepsilon$$

Was mostra que a solução definitiva para o intervalo  $2E_D - E_c$  é:

$$\bar{\nu}(T) = \frac{T}{2E_D}$$

# Modelo de KP

## Solução



# Estimativa da energia crítica de deslocamento

- Energias típicas de sublimação:  $\approx 5$  a  $6$  eV
- Na sublimação o átomo está na superfície, no interior do cristal há o dobro de ligações a romper:  $\approx 10$  -  $12$  eV
- Considerando que o processo acontece sem relaxação e não na direção mais ideal:  $E_D \approx 20$  a  $25$  eV

# Estimativa da energia crítica de deslocamento

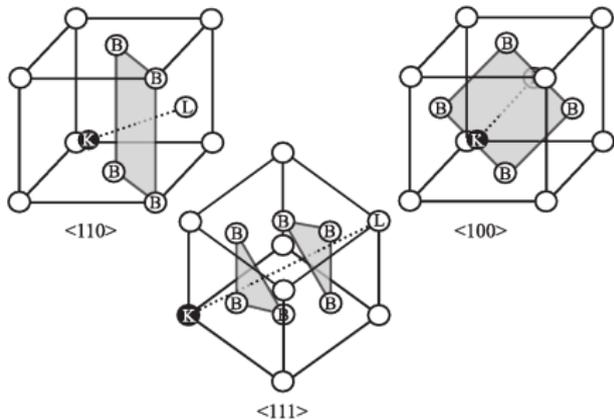
## Estimativa mais precisa

- 1 Considere uma determinada direção  $[hkl]$  no reticulado.
- 2 Mova um átomo ao longo dessa direção, registrando a energia do cristal (por exemplo, usando o potencial de Born - Meyer ou outro).
- 3 Quando essa energia atinge um valor máximo, temos um ponto de sela, a energia correspondente é a energia do estado ativado ( $E^*$ ).
- 4 A energia de deslocamento nessa direção particular é  $E_D^{[hkl]} = E^* - E_0$ , onde  $E_0$  é a energia interna do cristal perfeito.
- 5 O procedimento pode ser repetido para diversar direções e se calcula um valor médio para  $E_D$ .

# Barreiras de potencial para o deslocamento

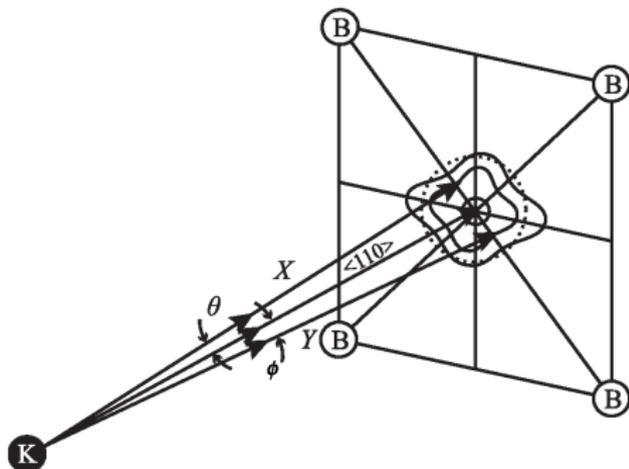
## Exemplos

### Reticulado CFC



O átomo K é deslocado em direção ao átomo L ao longo da linha tracejada indicada.

### Anisotropia da energia de deslocamento.





## O limite superior para o número de deslocamentos

- O deslocamento de átomos na rede é acompanhado de dissipação de energia (poderes de frenagem elástico e eletrônico, Aula 1).
- Para baixas energias cinéticas ( $T \leq 1000$  eV) domina o poder de frenagem elástico que é aproximadamente constante.
- Para altas energias cinéticas, o poder de frenagem eletrônico começa a dominar e ele é, dentro de um certo regime, linear na energia cinética.
- Devido à natureza das colisões, a maioria dos eventos gera ricochetes (*recoils*) com energia muito baixa, o que significa que o poder de frenagem eletrônico pode ser inicialmente ignorado  $\rightarrow E_c$ .

## Estimativa de $E_c$

Kinchin e Pease assumem que  $E_c = E_x$  ( $E_x$  é a energia cinética em que os poderes de frenagem elástico e eletrônico tem o mesmo valor), abaixo de  $E_c$  os deslocamentos respondem pela dissipação de energia, acima de  $E_c$  as contribuições eletrônicas dominam.

A máxima energia que um átomo em deslocamento pode transferir a uma elétron é

$$T = \frac{4m_e}{M} E$$

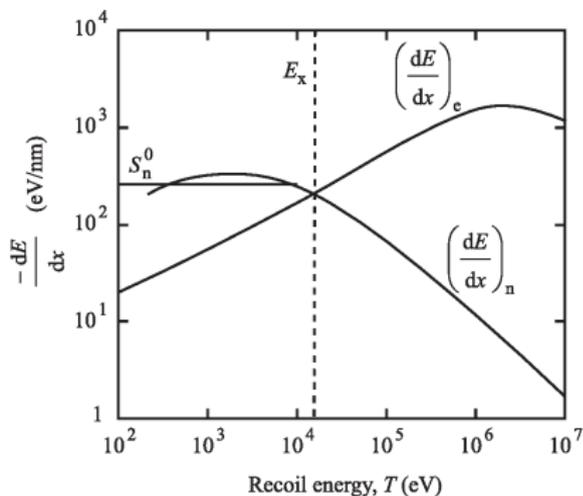
Igualando à energia média de ionização ( $I$ ):

$$E_c = \frac{M}{4m_e} I$$

# Limite superior ( $E_c$ )

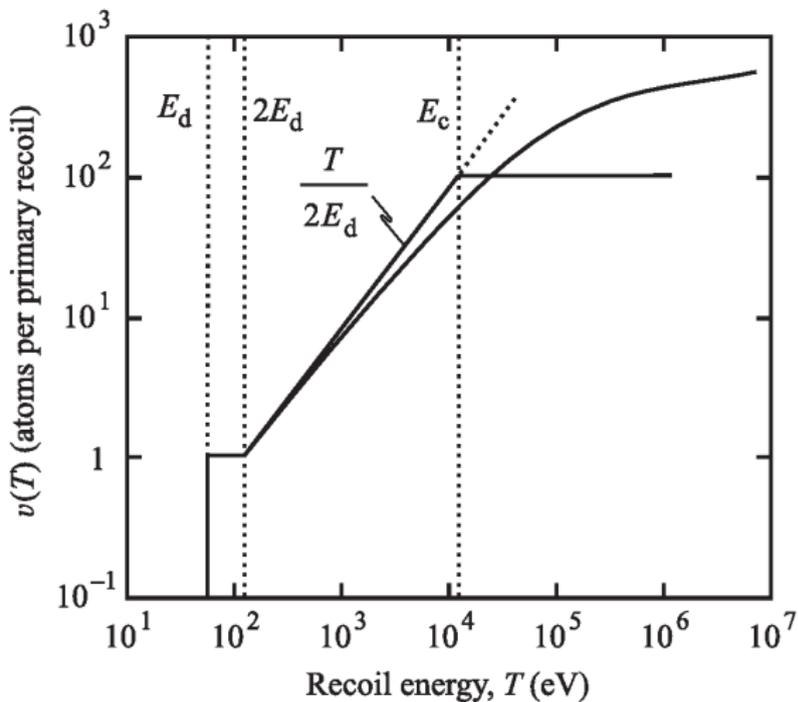
Exemplo: Grafite

$$E_c = \int_0^{T_{min}} \frac{\left(\frac{dE}{dx}\right)_e}{\left(\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(\frac{dE}{dx}\right)_n} dE$$



# Limite superior ( $E_c$ )

Exemplo: Grafite



# O tratamento de Snyder e Neufeld

Snyder e Neufeld iniciam sua análise distinguindo o que chamam de “colisões elásticas” e “colisões inelásticas”, correspondentes aos regimes em que frenagem elástica e frenagem eletrônica são predominantes. A diferenciação dos dois processos é dada pela energia da partícula incidente, colisões inelásticas ocorrem quando:

$$E_i \geq E_\gamma = \frac{Me^4}{2\hbar^2} = \frac{M(v_{0,H})^2}{2}$$

onde  $v_{0,H} = 2,18 \times 10^6 \text{ m s}^{-1}$  é a velocidade do elétron no orbital 1s do hidrogênio (modelo de Bohr).

W. S. Snyder, J. Neufeld “Disordering in solids by neutron radiation” *Phys. Rev.* **97**(6) pp. 1636 – 1646.

# A equação integral de Snyder e Neufeld

Snyder e Neufeld, então definem a probabilidade  $K(E_i, E') dE'$  de que o átomo incidente de energia  $E_i$  perca  $dE'$  de energia em torno da energia  $E'$ , como:

$$K(E_i, E') = \frac{\bar{\sigma}(E_i, E')}{\Sigma(E_i)}$$

onde  $\bar{\sigma}(E_i, E')$  é a seção de choque diferencial de espalhamento de um projétil com energia inicial  $E_i$  para uma energia  $E'$  e  $\Sigma(E_i)$  é a seção de choque de espalhamento total. Eles então escrevem a equação integral do número de deslocamentos:

$$\nu(E_i) = \int_0^{E_i} \nu(E_i - E') K(E_i, E') dE' + \int_{E_D}^{E_i} \nu(E' - E_D) K(E_i, E') dE'$$

A solução dessa equação é estritamente válida para  $E_i \geq E_D$ , mas os autores sugerem impor  $\nu(x) = 0$  para  $x \leq 0$ , então a solução será válida em qualquer circunstância.

W. S. Snyder, J. Neufeld "Disordering in solids by neutron radiation" *Phys. Rev.* **97**(6) pp. 1636 – 1646.

# Análise do espalhamento

A seguir os autores procedem a uma análise laboriosa do espalhamento, usando o potencial blindado. Eles concluem entretanto que, na região de energia entre  $E_D \leq E_i \leq E_\gamma$  o número de deslocamentos é aproximadamente dado por:

$$\nu(E_i) = \frac{E_i}{2E_D}$$

Que é o resultado de Kinchin - Pease.

Os autores ainda analisam os deslocamentos produzidos no regime acima de  $E_\gamma$ , obtendo:

$$\nu(E_i) \approx \frac{R_1 + R_2}{4E_D} (E_i - E_\gamma) + \frac{E_\gamma}{2E_D}$$

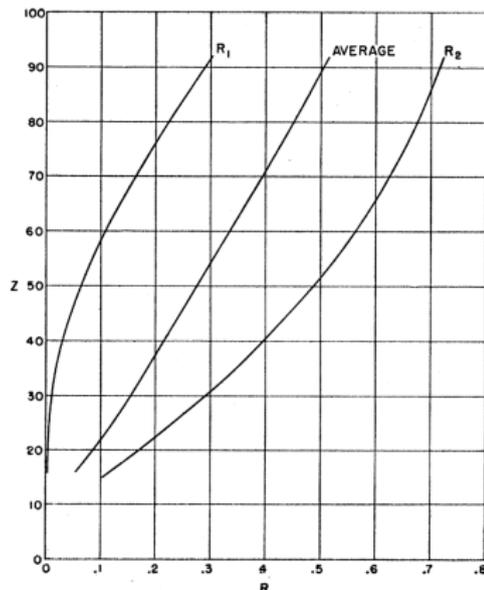
Para  $Z$  baixo, o coeficiente angular de  $\nu(E_i)$  para

$E_i \geq E_\gamma$  será quase nulo  $\rightarrow$  como  $E_\gamma \equiv E_c \rightarrow$  resultado

de Kinchin - Pease.

W. S. Snyder, J. Neufeld "Disordering in solids by neutron radiation" *Phys. Rev.* **97** (1955) pp. 1636 – 1646.

$R_1$  e  $R_2$  como funções de  $Z$



# Usando uma seção de choque realista

Sanders relaxa a restrição à seção de choque da esfera rígida ao escrever a equação integral:

$$\nu(E_i) = \frac{2}{\Sigma(E_i)} \int_{E_D}^{2E_D} \bar{\sigma}(E_i, E') dE' + \\ + \frac{1}{\Sigma(E_i)} \int_{2E_D}^{E_i} \bar{\sigma}(E_i, E') [\nu(E_i - E') + \nu(E')] dE'$$

Resolvendo para o potencial

$$U \propto r^{-s} \Rightarrow \bar{\sigma}(E_i, E') \propto \frac{1}{E_i^{\frac{1}{s}}} \frac{1}{(E')^{1+\frac{1}{s}}} \quad (3)$$

obtendo

$$\nu(E_i) = s \left( 2^{\frac{1}{s+1}} - 1 \right) \frac{E_i}{2E_D} \quad (E_D \leq E_i \leq E_C)$$

Baseado na descrição por D. R. Olander ("Fundamental aspects of nuclear fuel elements", United States Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information: Oak Ridge-TN, 1985) da tese de J. B. Sanders, defendida em 1967 na Universidade de Leiden.

## Densidade de ricochete

Sigmund, em 1969, fornece uma visão alternativa para o problema de determinar o número de deslocamentos causados por um PKA.

Esse autor define a **densidade de ricochetes**,  $F(E_i, E_0) dE_0$ , definida como o número médio de átomos de ricochete espalhados com energia  $(E_0, dE_0)$  dado que um átomo primário desacelerou da energia  $E_i$  para zero. Essa função obedece a seguinte equação integral:

$$0 = \int_0^{E_i} dE' K(E_i, E') [F(E_i, E_0) - F(E_i - E', E_0) - F(E' - U, E_0) - \delta(E' - E_0)]$$

onde  $U < E_D$  é a energia de ligação envolvida na remoção de um átomo de sua posição no reticulado e  $\delta(x)$  é um termo de fonte não especificado.

O autor fornece a solução assintótica para  $F$ , válida para a seção de choque da Equação 3:

$$F(E_i, E_0) = \frac{s}{\psi(1) - \psi(1-s)} \frac{E_i}{(E_0 + U)^{1-s} (E_0)^{1+s}} \quad E_i \gg E_0 \gg U$$

onde  $\psi(x)$  é a função digama, definida como a derivada logarítmica da função  $\Gamma(x)$ :

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x)$$

P. Sigmund "On the number of atoms displaced by implanted ions or energetic recoil atoms" *Appl. Phys. Lett.* **14** (1969) pp. 114 – 117.

# Solução

Aplicando ao problema de determinar o número de deslocamentos:

$$\nu(E_i) = \int_{E_D}^{E_i} dE_0 F(E_i, E_0) = \frac{\left(1 + \frac{U}{E_D}\right)^s - 1}{\psi(1) - \psi(1-s)} \frac{E_i}{U} \quad E_i \gg E_D \gg U$$

o autor argumenta que o valor de  $s$  deve ser limitado a  $s \lesssim 0,25$  para reproduzir a condição de colisão de baixa energia (pouca penetração dos orbitais). Nota-se que a dependência em  $E_i$  é linear.

O autor ainda fornece o resultado para o caso especial em que  $s \rightarrow 0$ :

$$\nu(E_i) = \frac{6}{\pi^2} \frac{E_i}{U} \ln \left(1 + \frac{U}{E_D}\right)$$

lembrando que se trata de um limite superior para o número de colisões, pois colisões com reposição não são consideradas.

P. Sigmund "On the number of atoms displaced by implanted ions or energetic recoil atoms" *Appl. Phys. Lett.* **14** (1969) pp. 114 –

# Solução

Aplicando ao problema de determinar o número de deslocamentos:

$$\nu(E_i) = \int_{E_D}^{E_i} dE_0 F(E_i, E_0) = \frac{\left(1 + \frac{U}{E_D}\right)^s - 1}{\psi(1) - \psi(1-s)} \frac{E_i}{U} \quad E_i \gg E_D \gg U$$

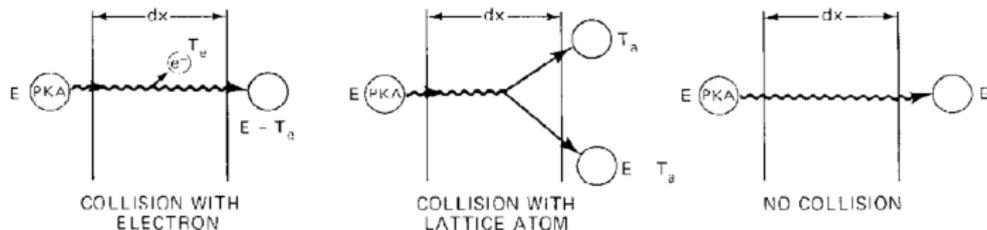
Assumindo alguns valores típicos dos parâmetros:  $E_D = 25$  eV,  $U = 4$  eV e  $s = 0,25; 0,20$  e  $0,15$  temos que o fator de proporcionalidade é, respectivamente, 0,01858; 0,019423 e 0,020241. Isso compara com o fator de Kinchin - Pease, que é  $(2E_D)^{-1} = 0,02$ . Caso substituíssemos para valores típicos do Si (a saber,  $E_D = 14$  eV e  $U = 2$  eV), esses fatores de proporcionalidade se alterariam, respectivamente, para 0,033369; 0,0348976 e 0,03638066, o que é superior ao valor de Kinchin - Pease. Esse era o resultado experimental que Sigmund buscava explicar.

P. Sigmund "On the number of atoms displaced by implanted ions or energetic recoil atoms" *Appl. Phys. Lett.* **14** (1969) pp. 114 –

# Competição entre deslocamento e espalhamento de elétrons

Definindo:

- $p_e dT_e = N\bar{\sigma}_e(E_i, T_e) dT_e dx$  : probabilidade de transferência de energia cinética em  $T_e, dT_e$  para um elétron quando o PKA atravessa uma distância  $dx$  do material.
- $p_a dT_a = N\bar{\sigma}_a(E_i, T_a) dT_a dx$  : probabilidade de transferência de energia cinética em  $T_a, dT_a$  por deslocamento quando o PKA atravessa uma distância  $dx$  do material.
- $p_0 = 1 - \int_0^{T_{e,max}} \bar{\sigma}_e(E_i, T_e) dT_e - \int_0^{E_i} \bar{\sigma}_a(E_i, T_a) dT_a$  : probabilidade de nada acontecer quando o PKA atravessa uma distância  $dx$  do material.

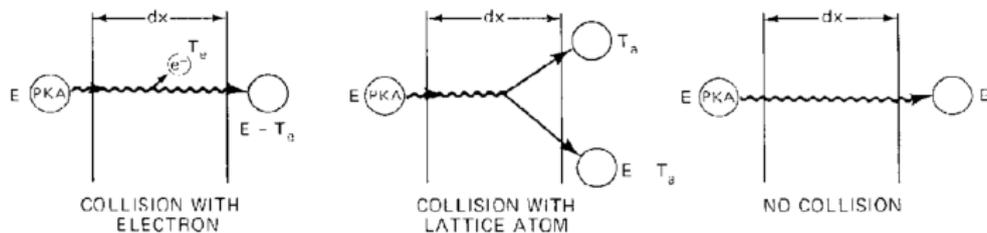


Baseado em D. R. Olander "Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements" United States Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information: Oak Ridge-TN, 1985.

# Competição entre deslocamento e espalhamento de elétrons

Definindo:

- $p_e dT_e = N\bar{\sigma}_e(E_i, T_e) dT_e dx$  : probabilidade de transferência de energia cinética em  $T_e$ ,  $dT_e$  para um elétron quando o PKA atravessa uma distância  $dx$  do material.
- $p_a dT_a = N\bar{\sigma}_a(E_i, T_a) dT_a dx$  : probabilidade de transferência de energia cinética em  $T_a$ ,  $dT_a$  por deslocamento quando o PKA atravessa uma distância  $dx$  do material.
- $p_0 = 1 - \Sigma_e(E_i) - \Sigma_a(E_i)$  : probabilidade de nada acontecer quando o PKA atravessa uma distância  $dx$  do material.



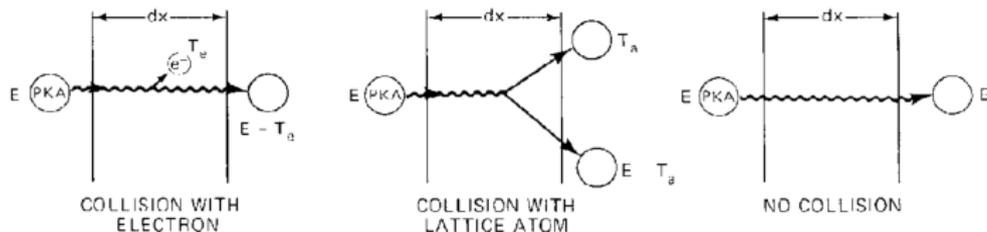
Baseado em D. R. Olander "Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements" United States Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information: Oak Ridge-TN, 1985.

# Competição entre deslocamento e espalhamento de elétrons

Equação integral geral:

$$\nu(E_i) = \int_0^{E_i} [\nu(E_i - T_a) + \nu(T_a)] p_a dT_a + \int_0^{T_{e,max}} \nu(E_i - T_e) p_e dT_e + p_0 \nu(E_i)$$

com  $T_{e,max}$  máxima energia cinética transferível a elétrons.



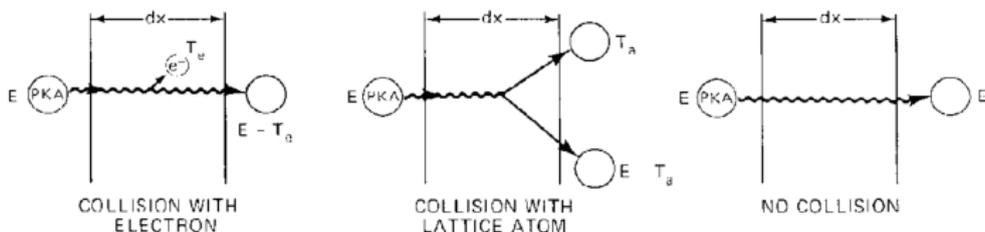
Baseado em D. R. Olander "Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements" United States Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information: Oak Ridge-TN, 1985.

# Competição entre deslocamento e espalhamento de elétrons

Equação integral geral:

$$[\Sigma_a(E_i) + \Sigma_e(E_i)] \nu(E_i) = \int_0^{E_i} [\nu(E_i - T_a) + \nu(T_a)] \bar{\sigma}_a(E_i, T_a) dT_a + \int_0^{T_{e,max}} \nu(E_i - T_e) \bar{\sigma}_e(E_i, T_e) dT_e + \rho_0 \nu(E_i)$$

com  $T_{e,max}$  máxima energia cinética transferível a elétrons.

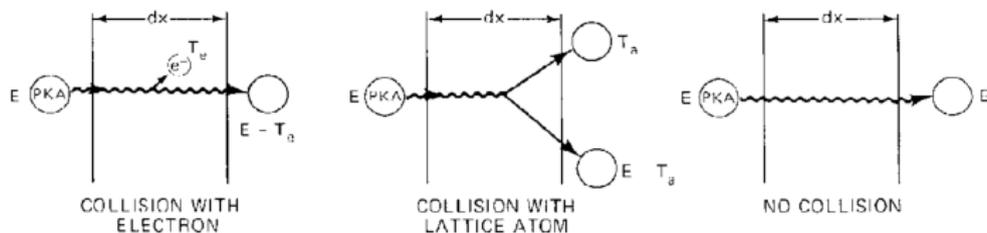


Baseado em D. R. Olander "Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements" United States Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information: Oak Ridge-TN, 1985.

# Competição entre deslocamento e espalhamento de elétrons

Como  $T_e \ll E_i$ :

$$\nu(E_i - T_e) \approx \nu(E_i) + \frac{d\nu}{dE_i}(E_i - T_e)$$

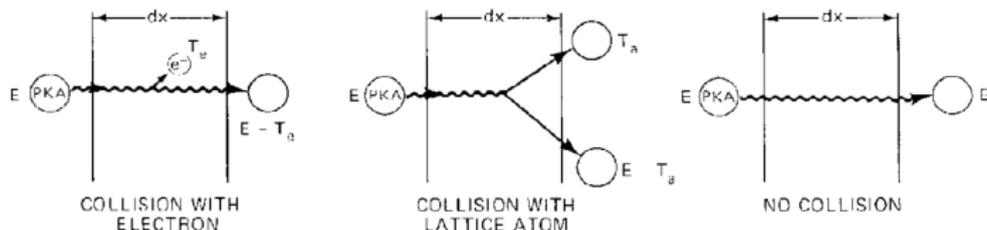


Baseado em D. R. Olander "Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements" United States Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information: Oak Ridge-TN, 1985.

# Competição entre deslocamento e espalhamento de elétrons

Equação integral geral:

$$\nu(E_i) + \left[ \frac{\left( \frac{dE_i}{dx} \right)_e}{N \Sigma_e(E_i)} \right] \frac{d\nu}{dE} = \int_0^{E_i} [\nu(E_i - T_a) + \nu(T_a)] \frac{\bar{\sigma}_a(E_i, T_a)}{\Sigma_a(E_i)} dT_a$$



Baseado em D. R. Olander "Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements" United States Department of Energy, Office of Scientific and Technical Information: Oak Ridge-TN, 1985.

## Solução de Lindgard

Lindgard fornece uma solução da equação integral geral assumindo a seção de choque da esfera rígida e:

$$\left(\frac{dE_j}{dx}\right)_e = k\sqrt{E_j} \quad (4)$$

onde  $k = 0,3NZ^{\frac{2}{3}}$ .

$$\nu(E_j) = \left[1 - \frac{4k}{\Sigma_e(E_j)N\sqrt{2E_D}}\right] \left(\frac{E_j}{2E_D}\right)$$

Nesse formalismo não há uma transição nítida entre os regimes de dissipação por deslocamento ou por frenagem eletrônica, como em Kinchin - Pease, assim torna-se desnecessário postular a energia  $E_C$ .

# Teoria da equipartição de energia de Lindgard

A teoria desenvolvida por Lindgard não é exclusivamente uma teoria para os deslocamentos e Lindgard nota que  $\nu(E_i)$  pode se referir a qualquer processo de dano produzido pela radiação. A sua teoria é então conhecida como **teoria da equipartição de energia**. Lindgard define:

$$\xi(E_i) \equiv \frac{\nu(E_i)}{E_i}$$

Esse parâmetro é usado para estimar o número de deslocamentos com uma expressão válida para energias altas:

$$\nu(E_i) = \xi(E_i) \frac{E_i}{2E_D}$$

# Teoria da equipartição de energia de Lindgard

## Solução

Lindgard resolve a equação integral para o potencial da lei de potência (Equação 3) e o poder de frenagem da Equação 4:

$$\xi(E_i) = \frac{1}{1 + 0,13 \left[ 3,4 (\epsilon_T)^{\frac{1}{6}} + 0,4 (\epsilon_T)^{\frac{3}{4}} + (\epsilon_T) \right]}$$

com

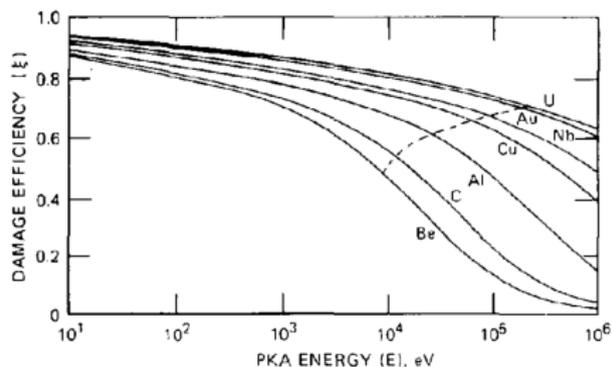
$$\epsilon_T = \frac{E_i a}{2Z^2} \epsilon_e^2$$

e

$$a = \frac{0,8853 \times a_0}{Z^{\frac{1}{3}}}$$

sendo  $a_0$  é o raio de Bohr.

Parâmetro de dano de Lindgard, a linha tracejada indica o valor de  $E_c$  em K-P.



Fim da primeira parte.

# Efeitos da cristalografia

Análise de Kinchin - Pease ou mesmo outras mais precisas → distribuição aleatória de átomos (sólido amorfo). Para sólidos cristalinos:

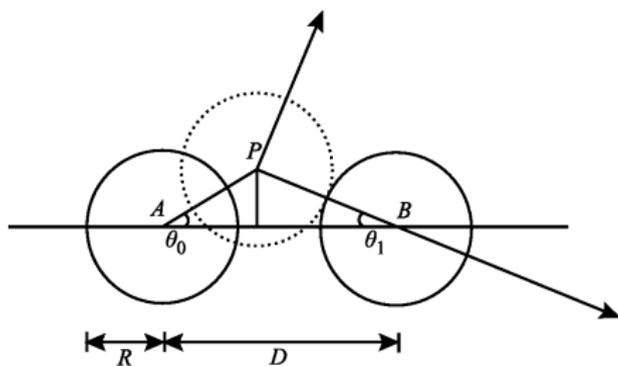
- Focalização (*Focusing*)
- Canalização (*Channeling*)

Possibilitam o transporte a longas distâncias do átomo deslocado e reduzem  $\bar{\nu}(T)$  em comparação com o modelo KP.

# Focalização

## Modelo de colisão de esferas rígidas

Anisotropia de  $E_D \rightarrow$  Concentração de energia por colisões quase de frente envolvendo uma fileira de átomos para direções em que  $E_D$  é reduzida.

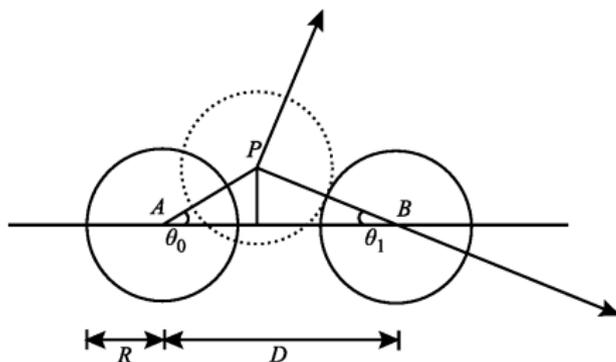


$$\overline{AP} \sin \theta_0 = \overline{PB} \sin \theta_1$$

# Focalização

## Modelo de colisão de esferas rígidas

Anisotropia de  $E_D \rightarrow$  Concentração de energia por colisões quase de frente envolvendo uma fileira de átomos para direções em que  $E_D$  é reduzida.



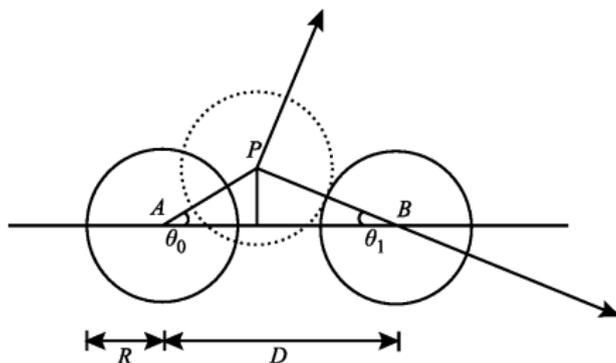
$$\overline{AP}\theta_0 \approx \overline{PB}\theta_1$$

para  $\theta_0, \theta_1 \approx 0$ .

# Focalização

## Modelo de colisão de esferas rígidas

Anisotropia de  $E_D \rightarrow$  Concentração de energia por colisões quase de frente envolvendo uma fileira de átomos para direções em que  $E_D$  é reduzida.



Ainda:

$$\overline{AP} \approx \overline{AB} - \overline{PB} = D - 2R$$

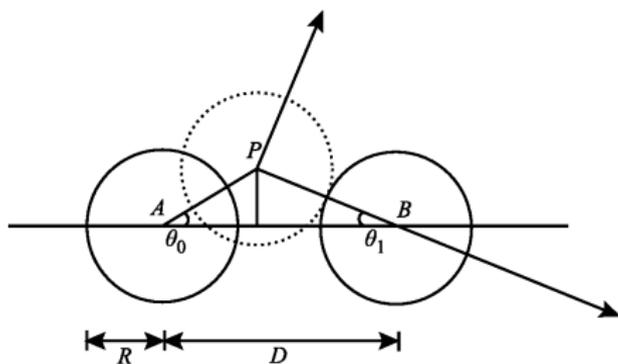
e

$$\overline{PB} = 2R$$

# Focalização

## Modelo de colisão de esferas rígidas

Anisotropia de  $E_D \rightarrow$  Concentração de energia por colisões quase de frente envolvendo uma fileira de átomos para direções em que  $E_D$  é reduzida.



Resultando em

$$\theta_0 (D - 2R) = \theta_1 (2R)$$

# Focalização

## Modelo de colisão de esferas rígidas

Definindo:

$$f \equiv \frac{\theta_1}{\theta_0} = \frac{D}{2R} - 1$$

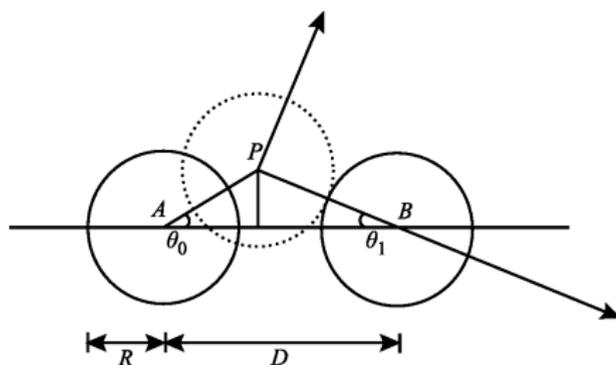
Para:

$$f < 1 \Rightarrow D < 4R \Rightarrow \theta_0 > \theta_1$$

Para  $n$  colisões:

$$\theta_n = f^n \theta_0 = \left( \frac{D}{2R} - 1 \right)^n \theta_0$$

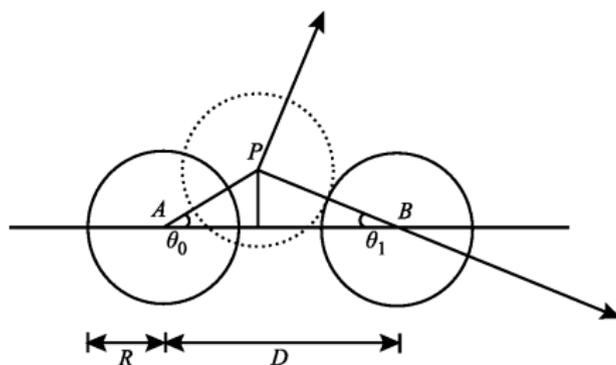
# Focalização crítica



Procuramos  $\theta_c \Rightarrow \theta_0 = \theta_1 = \dots$

$$\frac{\sin(\pi - \theta_0 - \theta_1)}{\sin(\theta_0)} = \frac{D}{2R}$$

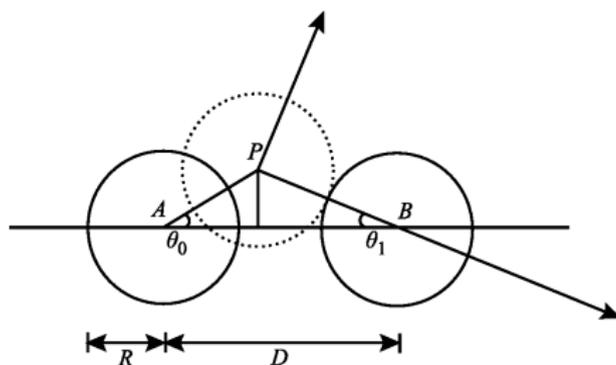
# Focalização crítica



Procuramos  $\theta_c \Rightarrow \theta_0 = \theta_1 = \dots$

$$\frac{\sin(\theta_0 + \theta_1)}{\sin(\theta_0)} = \frac{D}{2R}$$

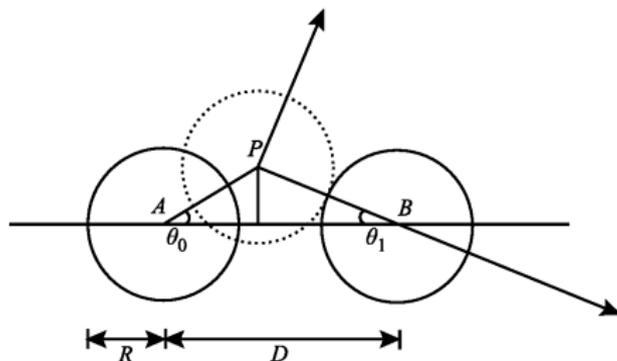
# Focalização crítica



Procuramos  $\theta_c \Rightarrow \theta_0 = \theta_1 = \dots$

$$\frac{\sin(2\theta_0)}{\sin(\theta_0)} = \frac{D}{2R}$$

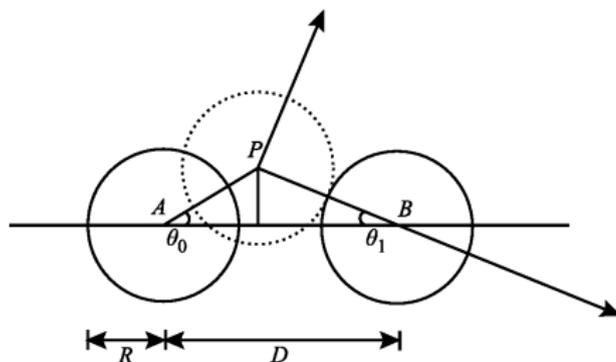
# Focalização crítica



Procuramos  $\theta_c \Rightarrow \theta_0 = \theta_1 = \dots$

$$2 \cos \theta_0 = \frac{D}{2R}$$

# Focalização crítica



Procuramos  $\theta_c \Rightarrow \theta_0 = \theta_1 = \dots$

$$\cos \theta_c = \frac{D}{4R}$$

# Probabilidade de focalização

Focalização só é possível se o átomo for espalhado dentro de um cone definido por  $\theta_c$  na direção cristalina correspondente, a probabilidade disso ocorrer, para um espalhamento aleatório, é:

$$P_f = \frac{(\theta_c)^2}{4}$$

mas, como vimos

$$\cos \theta_c = \frac{D}{4R}$$

Como  $\theta_c$  em geral é pequeno, podemos expandir em série de potências, retendo somente o termo quadrático:

$$1 - \frac{1}{2} (\theta_c)^2 \approx \frac{D}{4R}$$

resultando em:

$$P_f = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{D}{4R} \right)$$

# Focalização

## A dependência da energia

É possível mostrar que há uma energia máxima em que a focalização é possível. Para tanto consideramos que o potencial de interação entre os átomos é dada pelo potencial de Born-Meyer:

$$V(r) = A \exp\left(-\frac{r}{B}\right)$$

A energia de interação entre átomos para uma colisão direta é:

$$\frac{1}{2}E = V(2R) \Rightarrow E = 2A \exp\left(-\frac{2R}{B}\right)$$

Para uma colisão direta temos  $\theta_c = 0 \Rightarrow \cos(\theta_c) = 1 = \frac{D}{4R}$ , portanto:

$$E_{fc} = 2A \exp\left(-\frac{D}{2B}\right)$$

$E_{fc}$  marca a energia em que apenas colisões diretas podem ser focalizadas, portanto para energias cinéticas maiores que essas, focalização não ocorre.

# Ângulo crítico de focalização

## Dependência da energia

Podemos inverter o resultado anterior, levando a:

$$D = 2B \ln \left( \frac{2A}{E_{fc}} \right)$$

Da mesma forma podemos resolver a separação interatômica que corresponde a uma dada energia cinética:

$$4R = 2B \ln \left( \frac{2A}{T} \right)$$

obtendo:

$$\cos(\theta_c) = \frac{D}{4R} = \frac{\ln \left( \frac{2A}{E_{fc}} \right)}{\ln \left( \frac{2A}{T} \right)}$$

Válido para  $T \leq E_{fc}$ .

# Probabilidade de focalização

## Dependência da energia

Usando o resultado anterior temos:

$$P_f = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\ln\left(\frac{2A}{E_{fc}}\right)}{\ln\left(\frac{2A}{T}\right)} \right] = \frac{1}{2} \left[ \frac{\ln\left(\frac{2T}{E_{fc}}\right)}{\ln\left(\frac{E_{fc}}{2A}\right) + \ln\left(\frac{T}{E_{fc}}\right)} \right]$$

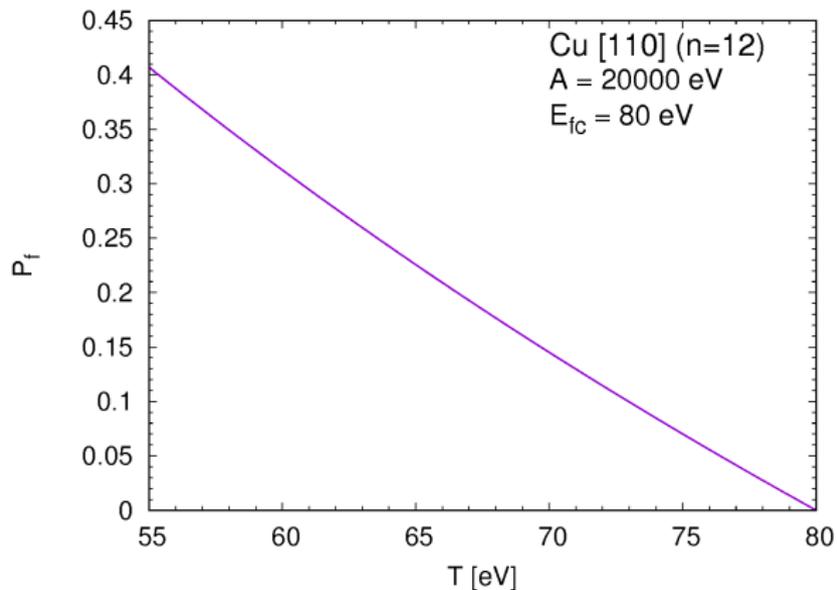
Considerando que  $E_{fc} \ll A$  e  $\frac{T}{E_{fc}} \approx 1$ :

$$P_f = \begin{cases} \frac{n}{2} \left[ \frac{\ln\left(\frac{T}{E_{fc}}\right)}{\ln\left(\frac{E_{fc}}{A}\right)} \right] & T \leq E_{fc} \\ 0 & T > 0 \end{cases}$$

onde  $n$  é o número de direções equivalentes no cristal.

# Probabilidade de focalização

## Dependência da energia



# Deslocamentos de reposição

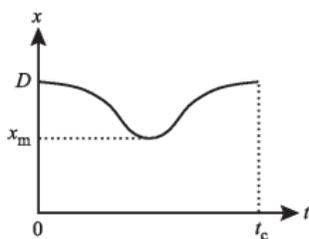
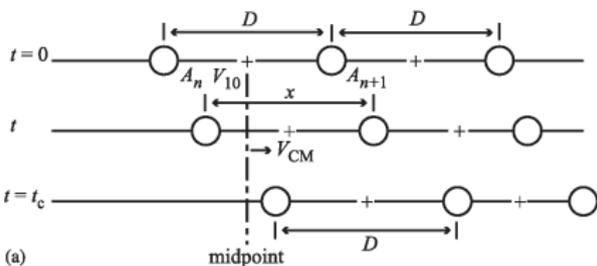
## *Dynamic crowdions*

Focalização, estritamente falando, envolve a transmissão da energia do impacto do PKA a longas distâncias da origem, mas quando a energia é suficientemente alta, o PKA pode deslocar o átomo em que incide inicialmente, tomando seu lugar. A esse processo se dá o nome de deslocamento de reposição (*replacement collision*).

(Pêndulo de Newton)

# Deslocamentos de reposição

## Cinemática



$$V_{CM} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} v_1 + \frac{m_2}{m_1 + m_2} v_2$$

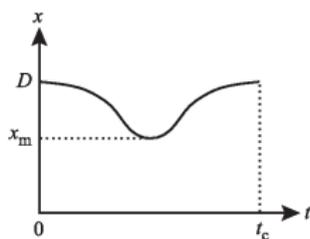
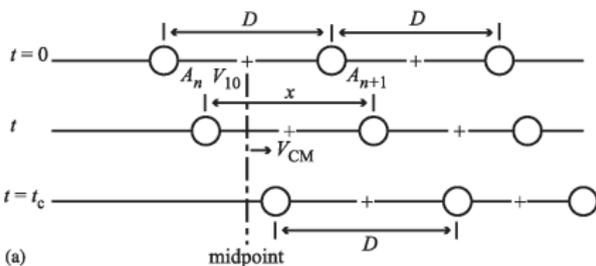
Definindo  $g = v_2 - v_1$

$$v_1 = V_{CM} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} g$$

$$v_2 = V_{CM} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} g$$

# Deslocamentos de reposição

## Cinemática



Energia cinética:

$$K = \frac{m_1 (v_1)^2}{2} + \frac{m_2 (v_2)^2}{2}$$

Definindo a massa reduzida  $\mu$ :

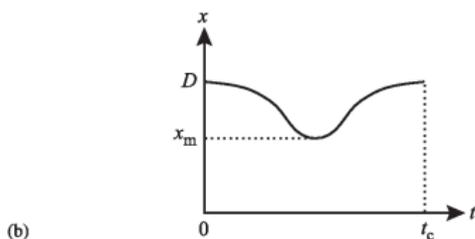
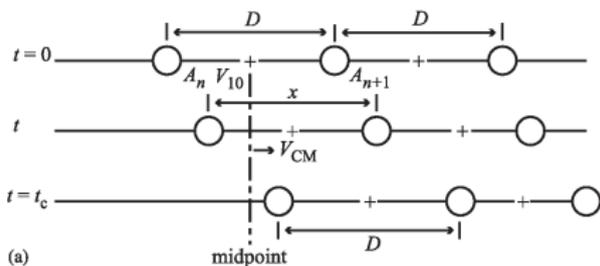
$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

temos

$$K = \frac{1}{2} (m_1 + m_2) V_{CM}^2 + \frac{1}{2} \mu g^2$$

# Deslocamentos de reposição

## Cinemática



Conservação da energia:

$$E_r + V(x) = E_{r0}$$

e

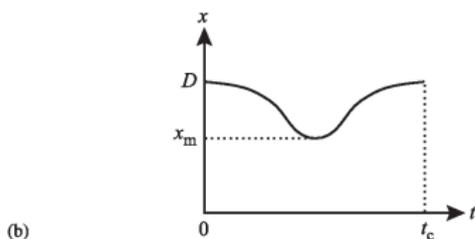
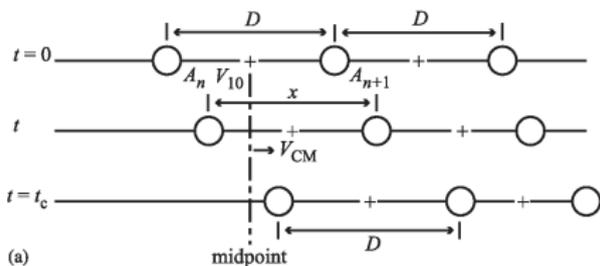
$$\frac{1}{2}\mu g^2 + V(x) = \frac{1}{2}\mu g_0^2$$

O tempo transcorrido no processo é dado por:

$$t_c = -2 \int_D^{x_m} \frac{dx}{g} = -2 \int_{V(D)}^{V(x_m)} \frac{dV}{g \frac{dV}{dx}}$$

# Deslocamentos de reposição

## Cinemática



Derivando o potencial de Born - Meyer, temos:

$$\frac{dV}{dx} = \frac{d}{dx} A \exp\left(-\frac{x}{B}\right) = -\frac{A}{B} \exp\left(-\frac{x}{B}\right) = -\frac{V}{B}$$

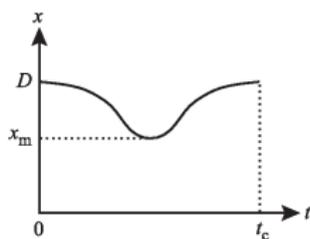
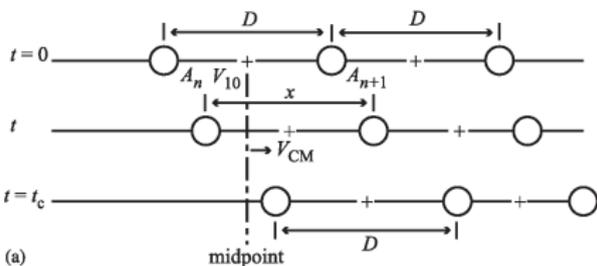
além disso, invertendo  $g$ :

$$\begin{aligned} g &= \sqrt{\left[\frac{1}{2}\mu g_0^2 - V(x)\right] \frac{4}{m}} \\ &= \sqrt{\left[\frac{E}{2} - V(x)\right] \frac{4}{m}} \\ &= 2\sqrt{\left[\frac{E}{2m} - \frac{V(x)}{m}\right]} \end{aligned}$$

onde usamos  $m_1 = m_2 = m \Rightarrow \mu = \frac{m}{2} \Rightarrow \frac{1}{2}\mu g_0^2 = \frac{E}{2}$ .

# Deslocamentos de reposição

## Cinemática



Substituindo:

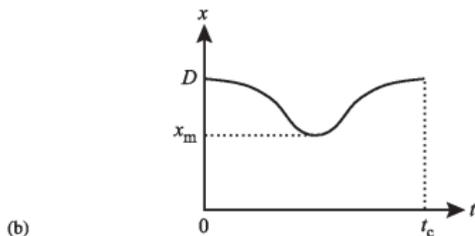
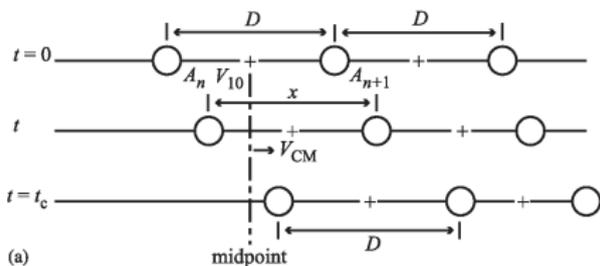
$$\begin{aligned}
 t_c &= B \sqrt{\frac{2m}{E}} \int_{V(D)}^{\frac{E}{2}} \frac{dV}{V \sqrt{1 - \frac{2V}{E}}} \\
 &= B \sqrt{\frac{2m}{E}} \tanh^{-1} \left[ \sqrt{1 - \frac{2V(D)}{E}} \right]
 \end{aligned}$$

para  $\frac{V}{E} \ll 1$ :

$$t_c = B \sqrt{\frac{2m}{E}} \ln \frac{2E}{V(D)}$$

# Deslocamentos de reposição

## Cinemática



Como  $V_{CM} = \frac{g_0}{2} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$ , a distância trancorrida pelo átomo incidente durante a colisão será dada por:

$$x = t_c \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

quando  $x \geq \frac{D}{2}$  o átomo incidente irá substituir o átomo atingido em sua posição, relacionando com a energia:

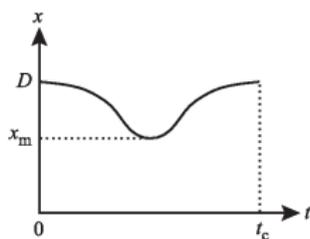
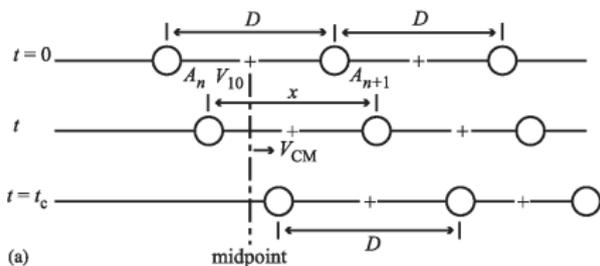
$$\frac{x}{B} = \ln \left( \frac{2E_r}{V(D)} \right)$$

e para  $x = \frac{D}{2}$

$$\exp \left( \frac{D}{2B} \right) = \frac{2E_r}{A \exp \left( -\frac{D}{B} \right)} \Rightarrow E_r = \frac{A}{2} \exp \left( \frac{-D}{2B} \right)$$

# Deslocamentos de reposição

## Cinemática

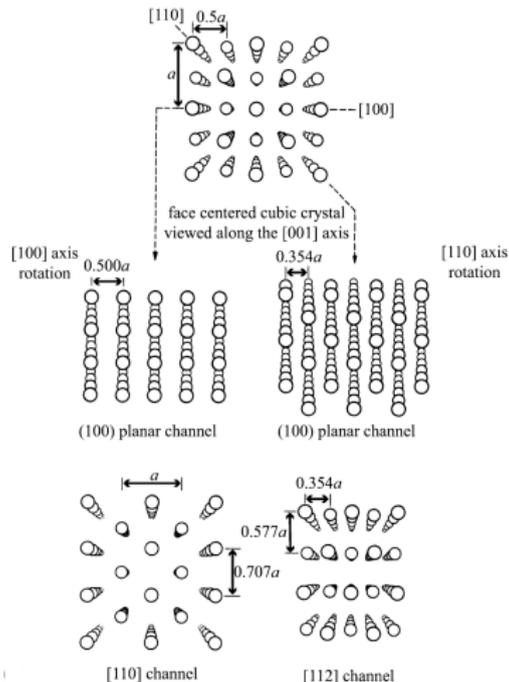


Assim, reposição será possível para energias  $E$ :

$$E \geq E_r = \frac{A}{2} \exp\left(\frac{-D}{2B}\right) = \frac{E_{fc}}{4}$$

# Canalização

## Canais na estrutura CFC



Canalização se refere ao evento em que o átomo incidente viaja por longas distâncias no reticulado em direções menos densas (canais).

# Canalização

## Modelo

O potencial das paredes do canal é aproximadamente parabólico:

$$V_{ch} = kr$$

Usando o potencial de Born - Meyer:

$$k = \frac{A}{DB} \left( \frac{2\pi r_{ch}}{B} \right) \exp \left( \frac{r_{ch}}{B} \right)$$

$r_{ch}$  é o raio da seção lateral do canal.

# Canalização

## Modelo

O átomo penetra no canal com a velocidade:

$$v_{z0} = v_0 \cos \theta_0 = \sqrt{\frac{2E}{m}} \cos \theta_0$$

O átomo percorre uma trajetória dada pelo potencial harmônico, com período:

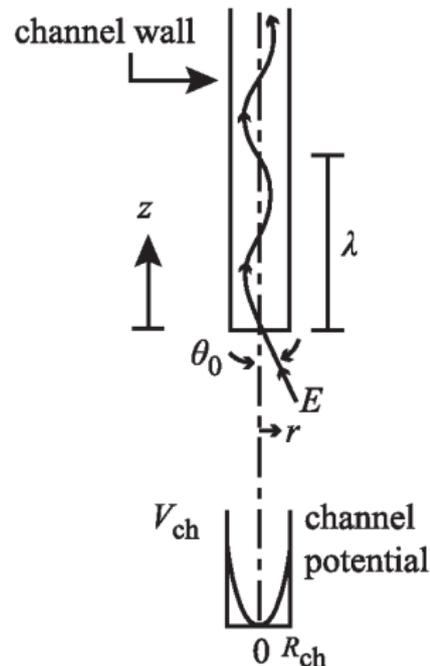
$$\tau = 2\pi \sqrt{\frac{m}{2k}}$$

O comprimento de onda ( $\lambda$ ) dessas oscilações é dado por:

$$\lambda = 2\pi \sqrt{\frac{E}{k}}$$

A componente radial da velocidade do átomo no interior do canal é dada por:

$$v_{r0} = \sqrt{\frac{2E}{m}} \sin \theta_0 \approx \sqrt{\frac{2E}{m}} \theta_0$$



# Canalização

## Modelo

A amplitude máxima das oscilações do átomo no interior do canal é dada por:

$$r_{max} = \sqrt{\frac{E}{k}} \theta_0$$

e a trajetória é

$$r = \theta_0 \sqrt{\frac{E}{k}} \sin \left[ \left( \frac{E}{k} \right)^{\frac{1}{2}} z \right]$$

O ângulo crítico  $\theta_0$  além do qual canalização não pode ocorrer é dado por:

$$\theta_0 = r_{ch} \sqrt{\frac{k}{E}}$$

Não há uma energia máxima para canalização, mas o ângulo crítico fica cada vez menor, quanto maior a energia, uma energia mínima pode ser estimada a partir da condição de que  $\lambda \gtrsim 2D$ , Was mostra que  $E_{ch} \approx 0.1kD^2$  que resulta em um valor de cerca de 300 eV para o Cu.

# Efeitos da focalização e da canalização

Assumindo que  $P$  representa a probabilidade do PKA ser focalizado/canalizado após a primeira colisão, temos:

$$\bar{\nu}(T) = P(T) + [1 - P(T)] \left[ \frac{2E_D}{T} + \frac{2}{T} \int_{2E_D}^T \nu(\varepsilon) d\varepsilon \right]$$

A equação diferencial a ser resolvida agora é:

$$T \frac{d\nu}{dT} = (1 - 2P) + P$$

Cuja solução é:

$$\bar{\nu}(T) = \frac{CT^{(1-2P)} - P}{1 - 2P}$$

com

$$C = \frac{1 - P}{(2E_D)^{(1-2P)}}$$

para  $P \ll 1$ :

$$\nu(T) = \left( \frac{T}{2E_D} \right)^{(1-2P)}$$

# Taxa de dano

Retornamos às equações 1 e 2 para escrever:

$$\begin{aligned} R_d &= N \int_{\frac{E_D}{\Lambda}}^{\infty} dE_i \phi(E_i) \int_{E_D}^{\Lambda E_i} \bar{\sigma}(E_i, E') \nu(E') dE' = \\ &= N \int_{\frac{E_D}{\Lambda}}^{\infty} dE_i \phi(E_i) \Sigma_d(E_i) \end{aligned}$$

onde  $\Lambda$  é o parâmetro de transferência de energia, que, para nêutrons é:

$$\Lambda = \frac{4A}{(1+A)^2}$$

sendo  $A$  a massa atômica do PKA.

# Espalhamento de nêutrons rápidos por núcleos

O espalhamento de nêutrons pode ser:

- Elástico: o núcleo não é excitado para um estado energético maior, a energia cinética é conservada, isotrópico no referencial do CM para  $E_i \lesssim 0,1$  MeV, após, concentrado à frente
- Inelástico: o núcleo é excitado para um estado energético mais alto ( $E_i \gtrsim 1$  MeV), isotrópico no referencial do CM

$$\Sigma(E_i) = \int_{E_D}^{E_i} \bar{\sigma}_{el}(E_i, E') \nu(E') dE' + \int_{E_{min}}^{E_{max}} \bar{\sigma}_{in}(E_i, E') \nu(E') dE'$$

## Seção de choque de espalhamento

Considerando que o espalhamento é axisimétrico no referencial do CM (Aula 1), temos:

$$d\Omega = 2\pi [d \cos(\theta)] \Rightarrow 2\pi \bar{\sigma}(E_i, \theta) d \cos \theta = \bar{\sigma}(E_i, T) dT$$

onde  $\theta$  é o ângulo de espalhamento medido no referencial do laboratório (vide transparência 6 da Aula 1). Com isso:

$$\begin{aligned} \Sigma(E_i) = & 2\pi \int_{E_D}^{\wedge E_i} \bar{\sigma}_{el}(E_i, \theta) \left| \frac{d \cos \theta}{dE'} \right|_{el} \nu(E') dE' + \\ & + 2\pi \int_{E_{min}}^{E_{max}} \bar{\sigma}_{in}(E_i, \theta) \left| \frac{d \cos \theta}{dE'} \right|_{in} \nu(E') dE' \end{aligned}$$

## Tratamento da dependência angular de $\bar{\sigma}_{el}$

A dependência angular pode ser tratada com polinômios de Legendre:

$$\bar{\sigma}_{el}(E_i, \theta) = \frac{\Sigma_{el}(E_i)}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} a_l(E_i) P_l(\cos \theta)$$

O Jacobiano da transformação de coordenadas é dado por:

$$\left| \frac{d \cos \theta}{d E_i} \right|_{el} = \frac{2}{\Lambda E_i}$$

## Tratamento da dependência angular de $\bar{\sigma}_{el}$

A dependência angular pode ser tratada com polinômios de Legendre: Retendo apenas os termos com  $l = 0$  e  $1$ .

$$\bar{\sigma}_{el}(E_i, \theta) = \frac{\Sigma_{el}(E_i)}{4\pi} [1 + a_1(E_i) \cos \theta]$$

O Jacobiano da transformação de coordenadas é dado por:

$$\left| \frac{d \cos \theta}{dE_i} \right|_{el} = \frac{2}{\Lambda E_i}$$

Como o espalhamento inelástico é isotrópico no referencial do CM, apenas o termo com  $l = 0$  é necessário.

## Seção de choque inelástica, $\bar{\sigma}_{in}$

Seja  $Q$  o nível energético excitado do núcleo, o balanço de energia é dado por:

$$E = \frac{\Lambda E_i}{2} \left[ 1 - \frac{1+A}{2A} \frac{Q}{E_i} - \left( 1 - \frac{1+A}{A} \frac{Q}{E_i} \right)^{\frac{1}{2}} \cos \theta \right]$$

os limites de integração são determinados impondo  $\theta = \pm \frac{\pi}{2}$ :

$$E_{max,min} = \frac{\Lambda E_i}{2} \left[ 1 - \frac{1+A}{2A} \frac{Q}{E_i} \pm \left( 1 - \frac{1+A}{A} \frac{Q}{E_i} \right)^{\frac{1}{2}} \right]$$

A menor energia capaz que excitar o núcleo é calculada impondo que o termo sob o radical seja positivo:

$$(E_i)_{min} = \frac{1+A}{A} Q$$

com  $E_i \leq (E_i)_{min} \Rightarrow \bar{\sigma}_{in} = 0$ .

O Jacobiano da transformação de variáveis será:

$$\left| \frac{d \cos \theta}{dE_i} \right|_{in} = \frac{2}{\Lambda E_i} \left[ 1 - \frac{1+A}{A} \frac{Q}{E_i} \right]^{\frac{1}{2}}$$

# Seção de choque de espalhamento total

Desenvolvendo a expressão:

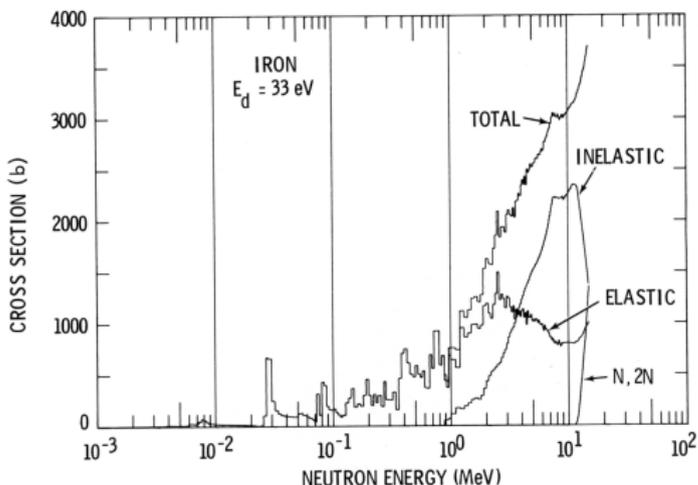
$$\Sigma_d(E_i) = \frac{\Sigma_{el}(E_i)}{\Lambda E_i} \int_{E_D}^{\Lambda E_i} \left[ 1 + a_1(E_i) \times \left( 1 - \frac{2E'}{E_i} \right) \right] \nu(E') dE' +$$

$$+ \frac{\Sigma_{in}(E_i)}{\Lambda E_i \left( 1 - \frac{1+A}{A} \frac{Q}{E_i} \right)^{\frac{1}{2}}} \int_{E_{min}}^{E_{max}} \nu(E') dE'$$

# Seção de choque de espalhamento

## Exemplo

Doran (1972): Seção de choque em barns (b), aço inoxidável e tântalo, modelo de Lindgard.

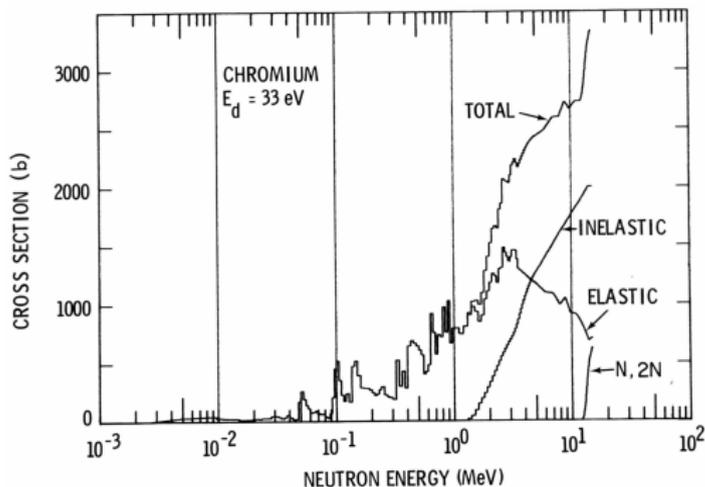


D. G. Doran "Nuclear displacement cross sections for stainless steel and tantalum based on Lindgard model" *Nucl. Sci. Eng.* **49**, 1972, pp. 130 – 144.

# Seção de choque de espalhamento

## Exemplo

Doran (1972): Seção de choque em barns (b), aço inoxidável e tântalo, modelo de Lindgard.

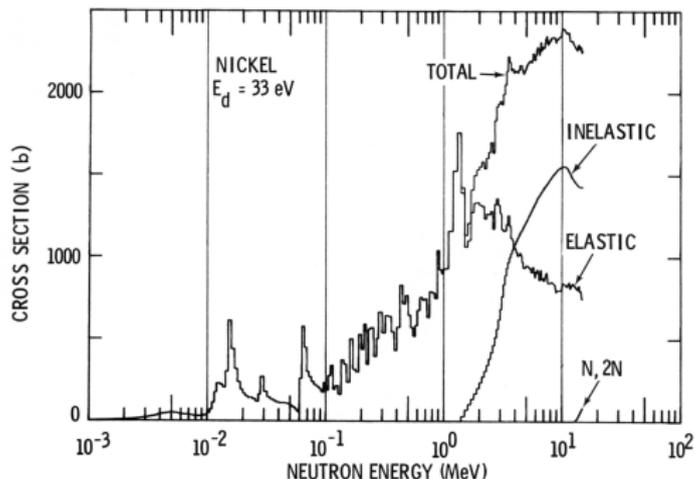


D. G. Doran "Nuclear displacement cross sections for stainless steel and tantalum based on Lindgard model" *Nucl. Sci. Eng.* **49**, 1972, pp. 130 – 144.

# Seção de choque de espalhamento

## Exemplo

Doran (1972): Seção de choque em barns (b), aço inoxidável e tântalo, modelo de Lindgard.

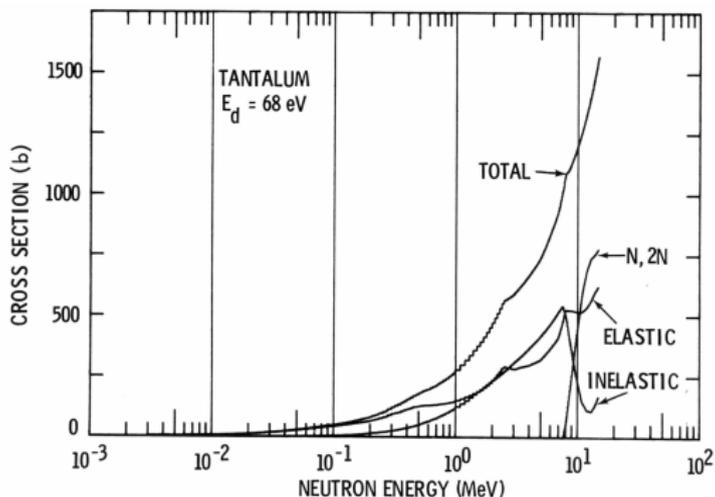


D. G. Doran "Nuclear displacement cross sections for stainless steel and tantalum based on Lindgard model" *Nucl. Sci. Eng.* **49**, 1972, pp. 130 – 144.

# Seção de choque de espalhamento

## Exemplo

Doran (1972): Seção de choque em barns (b), aço inoxidável e tântalo, modelo de Lindgard.



D. G. Doran "Nuclear displacement cross sections for stainless steel and tantalum based on Lindgard model" *Nucl. Sci. Eng.* **49**, 1972, pp. 130 – 144.