

# PMT3540 - Aula 1 - O processo primário de colisão

Cláudio Geraldo Schön

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

23 de agosto de 2020

- 1 O evento primário de colisão
- 2 Colisão elástica nêutron - núcleo
- 3 Colisão inelástica nêutron - núcleo
- 4 Colisões entre átomos
- 5 Dissipação de energia
- 6 Poder de frenagem elástico
- 7 Poder de frenagem eletrônico

# 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*)

# Escala de tempo

Tempo (s)	Evento	Resultado
$10^{-18}$	Transferência de energia	PKA
$10^{-13}$	Deslocamento do PKA	Cascata de dano
$10^{-11}$	Dissipação de energia	Pares de Frenkel estáveis (lacunas - SIA) e <i>clusters</i> de defeitos
$> 10^{-8}$	Difusão	Recombinação, <i>clustering</i> etc...

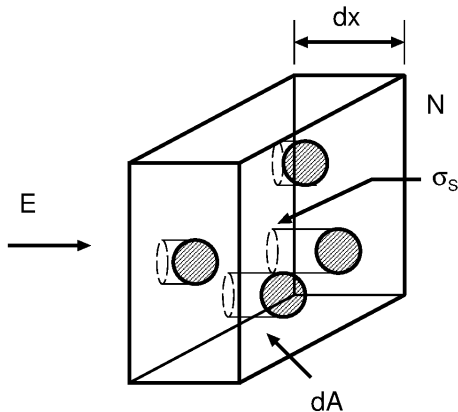
- 1 O evento primário de colisão
- 2 Colisão elástica nêutron - núcleo**
- 3 Colisão inelástica nêutron - núcleo
- 4 Colisões entre átomos
- 5 Dissipação de energia
- 6 Poder de frenagem elástico
- 7 Poder de frenagem eletrônico

# Seção de choque diferencial dupla

## Probabilidade de colisão

$$\sigma_S(E_i, E_f, \Omega) \quad (1)$$

- $E_i$ : energia do átomo incidente
- $E_f$ : energia transferida ao átomo
- $\Omega$ : ângulo sólido de espalhamento



# Definições

- Seção de choque simples

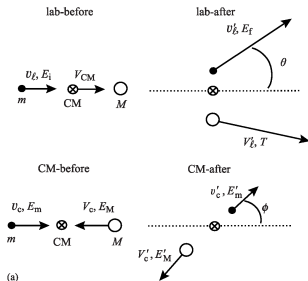
$$\bar{\sigma}_S(E_i, \Omega) = \int \sigma_S(E_i, E_f, \Omega) dE_f$$

- Seção de choque total

$$\Sigma_S(E_i) = \int \bar{\sigma}_S(E_i, \Omega) d\Omega = \int \int \sigma_S(E_i, E_f, \Omega) dE_f d\Omega$$

# Colisão binária

## Referenciais



No referencial do centro de massa (CM).  
Conservação do momento linear:

$$v_c m - V_c M = 0$$

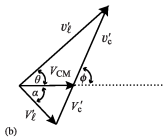
$$v'_c m - V'_c M = 0$$

Conservação da energia cinética:

$$\frac{1}{2} m v_c^2 + \frac{1}{2} M V_c^2 = \frac{1}{2} m (v'_c)^2 + \frac{1}{2} M (V'_c)^2$$

Implica:

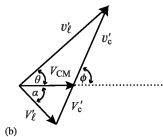
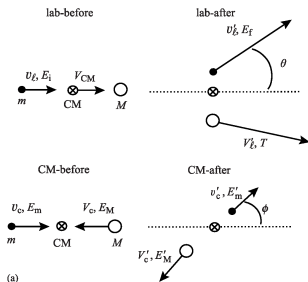
$$\begin{cases} V_c = V'_c \\ v_c = v'_c \end{cases}$$





# Colisão binária

## Referenciais



donde

$$v_c = v_\ell - V_{CM} = v_\ell - V_c$$

e

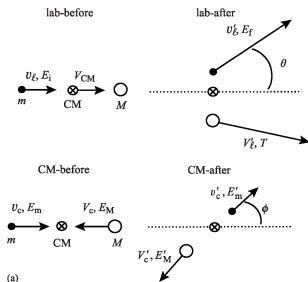
$$V_{CM} = \left( \frac{m}{M+m} \right) v_\ell$$

Pela adição vetorial (Fig. b):

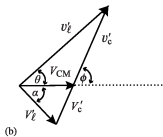
$$(V'_\ell)^2 = (V_{CM})^2 + (V'_c)^2 - 2V_{CM}V'_c \cos \phi$$

# Colisão binária

## Referenciais



(a)



(b)

Expressando em termos de energia:

$$\left\{ \begin{array}{l} (V'_\ell)^2 = \frac{2T}{M} \\ (V_{CM})^2 = \frac{2E_i}{m} \left( \frac{m}{M+m} \right)^2 \\ (V'_c)^2 = \frac{2mE'_m}{M^2} \end{array} \right.$$

resultando em:

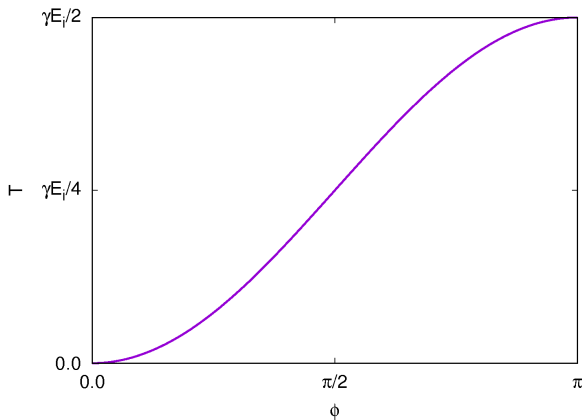
$$T = \eta_1 \eta_2 E_i + \frac{\eta_1}{\eta_2} E'_m - 2\eta_1 \sqrt{E_i E'_m} \cos \phi$$

com

$$\eta_1 = \frac{m}{M+m}$$

$$\eta_2 = \frac{M}{M+m}$$

# Energia cinética transferida ao PKA



Substituindo  $E'_m$  por  $E_i$ :

$$T = \frac{\gamma}{2} E_i (1 - \cos \phi) \quad (2)$$

com

$$\gamma = \frac{4mM}{(M+m)^2}$$

para nêutrons

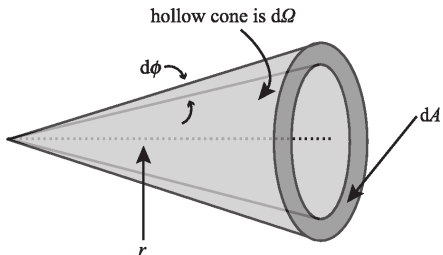
$$\gamma = \frac{4A}{(1+A)^2}$$

# Seção de choque da interação nêutron - núcleo

Definimos a probabilidade de espalhamento do átomo **incidente** em um ângulo  $\phi + d\Omega$  no referencial do centro de massa ( $d\Omega$  é um elemento de ângulo sólido centrado na direção  $\phi$ ):

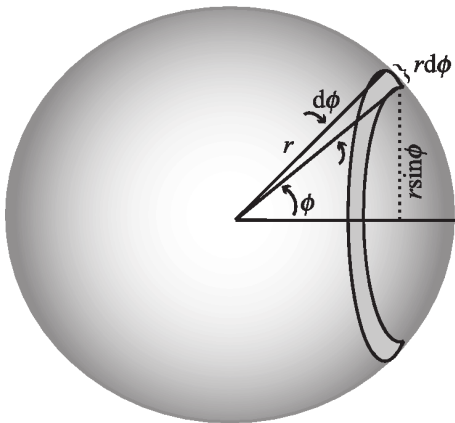
$$\bar{\sigma}_S(E_i, \phi) d\Omega$$

# Relações geométricas



$$d\Omega = \frac{dA}{r^2}$$

# Relações geométricas



$$d\Omega = \frac{dA}{r^2}$$

$$d\Omega = r d\phi \frac{(2\pi r \sin \phi)}{r^2} = 2\pi \sin \phi d\phi$$

# Seção de choque em função da energia transferida

$$\bar{\sigma}_S(E_i, T) = \bar{\sigma}_S(E_i, \phi) d\Omega = 2\pi\bar{\sigma}_S(E_i, \phi) d\phi$$

como

$$T = \frac{\gamma}{2}E_i(1 - \cos\phi) \Rightarrow dT = \frac{\gamma}{2}E_i \sin\phi d\phi$$

temos

$$\bar{\sigma}_S(E_i, T) = \frac{4\pi}{\gamma E_i} \bar{\sigma}_S(E_i, \phi)$$

# Seção de choque total

Assumindo espalhamento isotrópico:

$$\Sigma_S(E_i) = \int \bar{\sigma}_S(E_i, T) d\Omega = 2\pi \bar{\sigma}_S(E_i, \phi) \int_0^\pi \sin \phi d\phi = 4\pi \bar{\sigma}_S(E_i, \phi)$$

e

$$\bar{\sigma}_S(E_i, T) = \frac{\Sigma_S(E_i)}{\gamma E_i}$$



# Energia média transferida

$$\langle T \rangle = \frac{\int_{T_{min}}^{T_{max}} T \bar{\sigma}_S(E_i, T) dT}{\int_{T_{min}}^{T_{max}} \bar{\sigma}_S(E_i, T) dT} = \frac{T_{max} + T_{min}}{2} \quad (3)$$

assumindo que  $T_{min} \approx 0$  e que  $T_{max} = \gamma E_i$ :

$$\langle T \rangle = \frac{\gamma E_i}{2} \quad (4)$$

- 1 O evento primário de colisão
- 2 Colisão elástica nêutron - núcleo
- 3 Colisão inelástica nêutron - núcleo**
- 4 Colisões entre átomos
- 5 Dissipação de energia
- 6 Poder de frenagem elástico
- 7 Poder de frenagem eletrônico

# Colisão inelástica

- As partículas incidentes mantêm sua identidade, mas parte da energia é consumida no processo de colisão (por excitação do núcleo ou emissão de radiação)
- A energia cinética não é conservada ( $Q_j < 0$  é a energia dos estados excitados)

## Seção de choque a colisão inelástica

$$\bar{\sigma}_{Sj}(E_i, Q_j, T) = \bar{\sigma}_{Sj}(E_i, Q_j, \phi) \sin \phi \frac{d\phi}{dT}$$

Conservação da energia (total):

$$\frac{M}{M+m} E_i + Q_j = E'_m + E'_M$$

Conservação do momento resulta em:

$$ME'_M = mE'_m$$

Resolvendo:

$$E'_m = \frac{M}{M+m} \left( Q_j + \frac{M}{M+m} E_i \right) = \eta_2 (Q_j + \eta_2 E_i) \quad (5)$$

# Energia cinética

$$T = \eta_1 \eta_2 E_i + \frac{\eta_1}{\eta_2} E'_m - 2\eta_1 \sqrt{E_i E'_m} \cos \phi$$

Substituindo:

$$T(E_i, Q_j, \phi) = \frac{\gamma}{2} E_i - \frac{\gamma}{2} \left[ E_i \left( E_i + Q_j \frac{A+1}{A} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \cos \phi + \frac{Q_j}{A+1}$$

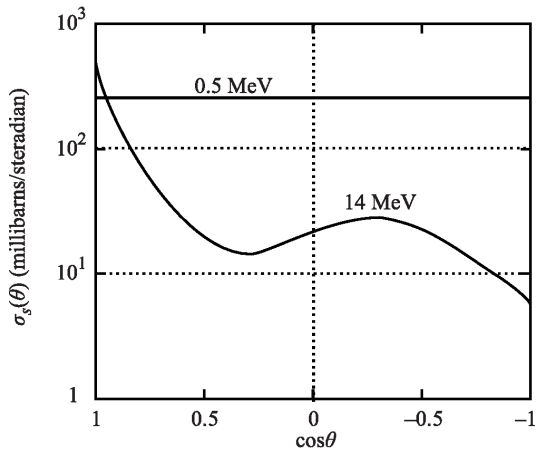
$$\Rightarrow \frac{dT}{d\phi} = \frac{\gamma}{2} E_i \left( 1 + \frac{Q_j}{E_i} \frac{A+1}{A} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \phi$$

# Seção de coque da colisão inelástica

$$\bar{\sigma}_{Sj}(E_i, Q_j, T) = \frac{\Sigma(E_i, Q_j)}{\gamma E_i} \left( 1 + \frac{Q_j A + 1}{E_i A} \right)^{\frac{1}{2}}$$

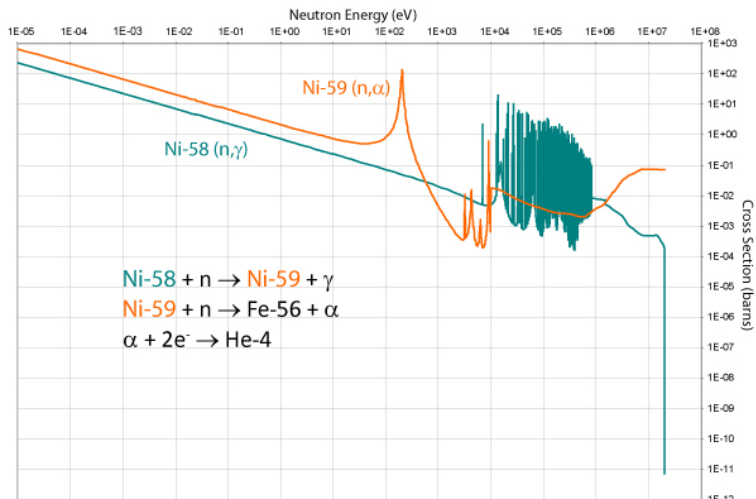
# Exemplo

nêutrons e  $C^{12}$



# Exemplo

## nêutrons e níquel





# Limite de altas energias

Quando a energia cinética é alta, os níveis de energia do núcleo se superpõem:

$$\sigma_S(E_i, E'_m, T) = \Sigma_{is}(E_i) \frac{f(E_i, E'_m)}{4 \frac{1}{A+1} \sqrt{E_i E'_m}}$$

e

$$\bar{\sigma}_S(E_i, T) = \Sigma_{is}(E_i) \int_0^{E'_m, \max} \frac{f(E_i, E'_m)}{4 \frac{1}{A+1} \sqrt{E_i E'_m}} dE'_m$$

com

$$f(E_i, E'_m) = \frac{E'_m}{I(E_i)} \exp\left(-\frac{E_i}{E_D}\right)$$

- $E_D$ : energia necessária para deslocar o átomo
- $I(E_i)$ : fator de normalização  $\Rightarrow \int_0^{E'_m, \max} f(E_i, E'_m) dE'_m = 1$
- $E'_m, \max$  é dada pela equação 5 com  $Q_j = Q_j^{\min}$  (o menor nível de energia)

- 1 O evento primário de colisão
- 2 Colisão elástica nêutron - núcleo
- 3 Colisão inelástica nêutron - núcleo
- 4 Colisões entre átomos**
- 5 Dissipação de energia
- 6 Poder de frenagem elástico
- 7 Poder de frenagem eletrônico

# Potenciais interatômicos

Após a formação do PKA (ou mesmo antes, se o átomo projétil for um íon, por exemplo), o mesmo passa a se mover pela rede, interagindo com outros átomos  $\Rightarrow$  potenciais interatômicos.

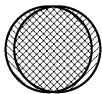
# Potencial da esfera rígida

O potencial da esfera rígida é formalmente definido por:

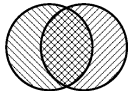
$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } r > r_0 \\ \infty & \text{para } r \leq r_0 \end{cases}$$

# Potenciais

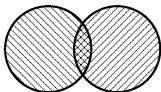
## Perspectiva geral



$r < r_N$  (Coulomb)



$r_N < r < a_0$  (Coulomb blindado)



$r \sim a_0$  (Born - Meyer)

# Potencial de Coulomb

Para distâncias pequenas, os núcleos dos dois átomos se comportam como cargas puntiformes:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \varepsilon_e^2}{r}$$

onde  $\varepsilon_e = 1,602 \times 10^{-19}$  C é a carga elemental do elétron, e  $Z_1$  e  $Z_2$  são os números atômicos dos átomos incidente e espalhado.

# Potencial de Born - Meyer

Para distâncias comparáveis à distância interatômica, o potencial se comporta como:

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

onde  $A$  e  $B$  são parâmetros.

# Potencial de Coulomb blindado

Para distâncias intermediárias a carga do núcleo passa a ser blindada pelos elétrons do caroço, levando ao potencial de Coulomb blindado:

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \epsilon_e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

onde

$$a = \frac{Ca_0}{\left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{1}{2}}}$$

com  $a_0 = 5,29 \times 10^{-11} \text{ m} = 5,28 \times 10^{-2} \text{ nm}$  (raio de Bohr) e  $C = 0,8853$ .



# Potencial inverso quadrático

Um potencial válido para a região de penetração  $\frac{a}{5} < r_{min} < 5a$  é o potencial inverso quadrático, que é obtido ajustando-se a expressão do potencial de Coulomb blindado:

$$V(r) = \frac{2E_R}{e} (Z_1 Z_2)^{\frac{5}{6}} \left(\frac{a_0}{r}\right)^2$$

# Potencial completo

Aproximação zero

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \epsilon_e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) + A \exp\left(-\frac{r}{B}\right)$$

com

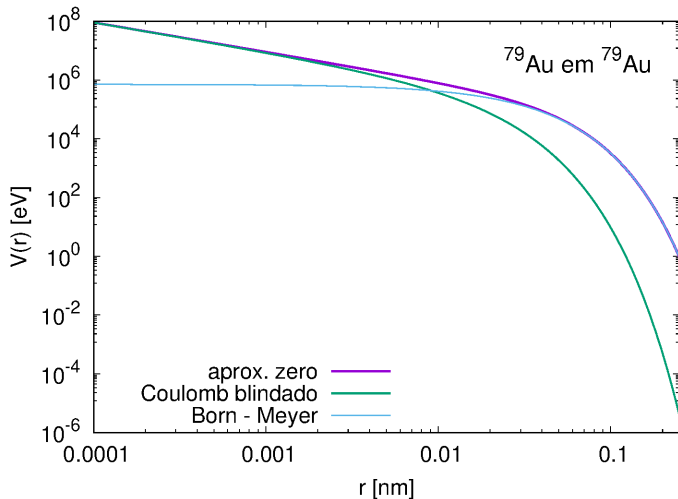
$$A = 2,58 \times 10^{-5} (Z_1 Z_2)^{\frac{11}{4}}$$

e

$$B = \frac{1,5a_0}{(Z_1 Z_2)^{\frac{1}{6}}}$$

# Potencial completo

## Aproximação zero



# Aproximação de Brinkman I

Átomo incidente e espalhado são os mesmos

Atração muito intensa a longas distâncias.

$$V(r) = \frac{Z^2 \epsilon_e^2}{r} \exp\left(-\frac{r}{a}\right) \times \left(1 - \frac{r}{2a}\right)$$

## Aproximação de Brinkman II

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \epsilon_e^2 \exp(-Br)}{1 - \exp(-Ar)}$$

Coulomb para distâncias pequenas, Born - Meyer para distâncias intermediárias. Confiável para  $Z > 25$  até distâncias  $\approx 0.7r_e$ , onde  $r_e$  é a distância interatômica.

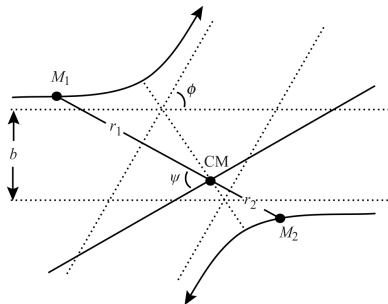
## Aproximação de Brinkman II

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 \epsilon_e^2 \exp(-Br)}{1 - \exp(-Ar)}$$

Coulomb para distâncias pequenas, Born - Meyer para distâncias intermediárias. Confiável para  $Z > 25$  até distâncias  $\approx 0.7r_e$ , onde  $r_e$  é a distância interatômica.

Outros potenciais: Firsov, Thomas- Fermi, não serão discutidos aqui. Conferir o livro texto.

# Geometria da colisão e variáveis



Coordenadas polares com relação ao centro de massa (CM):  $r_1$ ,  $r_2$ ,  $\phi$ ,  $\psi$ .

Parâmetro de impacto:  $b$ .

Velocidades radiais e transversais:  
 $\dot{r}_1$ ,  $\dot{r}_2$ ,  $r_1\dot{\psi}$ ,  $r_2\dot{\psi}$ .

Velocidade resultante:

$$v_e = \left( \dot{r}_1^2 + r_1^2 \dot{\psi}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

# Energia cinética

No referencial do laboratório:

$$E_T = \frac{M_1 (v_\ell)^2}{2}$$

No referencial do centro de massa:

$$E_{CM} = \frac{M_1}{M_1 + M_2} E_1$$

Energia disponível para transformações:

$$E = E_T - E_{CM} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_1$$

Na colisão elástica:

$$\frac{M_2}{M_1 + M_2} E_1 = \frac{M_1 (i_1^2 + r_1^2 \psi^2)}{2} + \frac{M_2 (i_2^2 + r_2^2 \psi^2)}{2} + V(r_1, r_2)$$



# Energia cinética

No referencial do laboratório:

$$E_T = \frac{M_1 (v_\ell)^2}{2}$$

No referencial do centro de massa:

$$E_{CM} = \frac{M_1}{M_1 + M_2} E_1$$

Energia disponível para transformações:

$$E = E_T - E_{CM} = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_1$$

Na colisão elástica: Definindo a distância total  $r = r_1 + r_2$

$$\eta E_1 = \frac{\mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\psi}^2)}{2} + V(r)$$

com  $\eta = \frac{M_2}{M_1 + M_2}$  e  $\mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$ .

# Conservação do momento

Momento linear:

$$M_1 v_1 b_1 + M_2 v_2 b_2 = \mu b v_\ell$$

Momento angular:

$$M_1 r_1^2 \dot{\psi} + M_2 r_2^2 \dot{\psi} = \mu r^2 \dot{\psi}$$

Conservação do momento total:

$$\mu b v_\ell = \mu r^2 \dot{\psi}$$

Substituindo na equação da energia cinética, eliminando  $\dot{\psi}$  e resolvendo para  $\dot{r}$ :

$$\dot{r} = \left(\frac{2}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) \eta E_1 - V(r) \right]^{\frac{1}{2}}$$

# Cálculo da seção de choque

## Distância de máxima aproximação

O ponto de máxima aproximação ocorre quando  $\dot{r} = 0$ :

$$V(r) = \left(1 - \frac{b^2}{r^2}\right) \eta E_1$$

Was faz um malabarismo algébrico/analítico para deduzir a equação que produz a órbita das partículas:

$$\frac{dx}{d\psi} = \left\{ \frac{1}{b^2} \left[ 1 - \frac{V(x)}{\eta E_i} \right] - x^2 \right\}^{\frac{1}{2}}$$

onde  $x = r^{-1}$ .

Para calcular a seção de choque é necessário expressar a órbita em termos do ângulo  $\phi$ .

Notamos que o ponto de máxima aproximação corresponde a  $\psi = \frac{\pi}{2}$  e escrevemos a distância correspondente à máxima aproximação como  $r_{min}$ .

Notamos que, pela definição,  $\psi$ ,  $\phi$  e  $x$  se relacionam tal que:

$$\begin{cases} x = 0 \Rightarrow \psi = \frac{\phi}{2} \\ x = \frac{1}{r_{min}} \Rightarrow \psi = \frac{\pi}{2} \end{cases}$$

# Cálculo da seção de choque

Integrando a equação da trajetória:

$$\int_{\frac{\phi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\psi = \int_0^{r_{min}} \left\{ \frac{1}{b^2} \left[ 1 - \frac{V(x)}{\eta E_i} \right] - x^2 \right\}^{\frac{1}{2}} dx \quad (6)$$

O segundo ingrediente é o valor de  $r_{min}$ , que pode ser obtido por:

$$\eta E_i = \frac{V(r_{min})}{\left(1 - \frac{b^2}{r_{min}^2}\right)} \quad (7)$$

# Cálculo da seção de choque

Integrando a equação da trajetória:

$$\phi = \pi - 2 \int_0^{\frac{1}{r_{min}}} \left\{ \frac{1}{b^2} \left[ 1 - \frac{V(x)}{\eta E_i} \right] - x^2 \right\}^{\frac{1}{2}} dx \quad (6)$$

O segundo ingrediente é o valor de  $r_{min}$ , que pode ser obtido por:

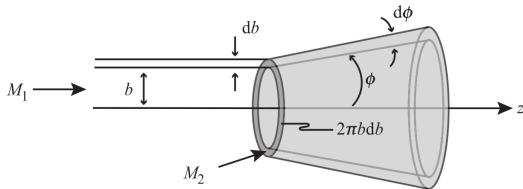
$$\eta E_i = \frac{V(r_{min})}{\left( 1 - \frac{b^2}{r_{min}^2} \right)} \quad (7)$$

# Cálculo da seção de choque

$$\bar{\sigma}(E_i, T) = 2\pi b db = 2\pi b \frac{db}{d\phi} \frac{d\phi}{dT} \quad (8)$$

e

$$\Sigma(E_i) = \int_{T_{min}}^{\gamma E_i} \bar{\sigma}(E_i, T) dT \quad (9)$$



# Cálculo da seção de choque

## Receita

Was fornece uma receita aparentemente simples para calcular as seções de choque relevantes para o processo de colisão:

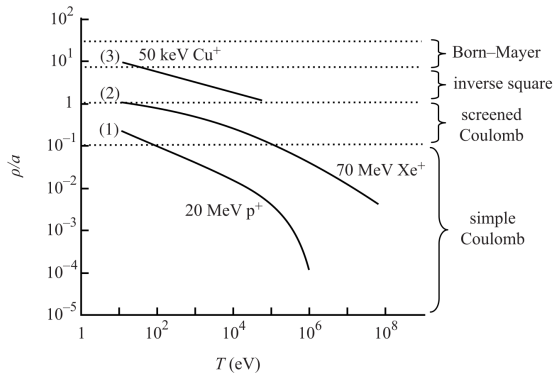
- 1 Escolha um potencial
- 2 Resolva as equações 6 e 7 para obter a trajetória em função de  $E_i$  e  $\phi$ .
- 3 Resolva a equação 2 para obter  $T$  em função de  $E_i$  e  $\phi$ .
- 4 Resolva as equações 8 e 9.

Ele enfatiza, entretanto, a importância do passo 1 (escolha do potencial), e lembra que a solução da integral no passo 2 de forma analítica só é possível para potenciais razoavelmente simples.

# Cálculo da seção de choque

## Escolha do potencial

A escolha do potencial depende da distância com que o íon se aproxima do núcleo alvo.



$$\rho = r_{min}$$

- 1 Íons leves energéticos ( $E_i > 1 \text{ MeV}$ )
- 2 Íons pesados muito energéticos ( $E_1 > 10^2 \text{ MeV}$ ,  $M_1 \approx 100$ ), por exemplo, produtos de fissão
- 3 Íons pesados pouco energéticos ( $E_i < 1 \text{ MeV}$ ), produzidos em acelerador ou como resultados de colisões anteriores



Fim da primeira parte

- 1 O evento primário de colisão
- 2 Colisão elástica nêutron - núcleo
- 3 Colisão inelástica nêutron - núcleo
- 4 Colisões entre átomos
- 5 Dissipação de energia**
- 6 Poder de frenagem elástico
- 7 Poder de frenagem eletrônico

# Dissipação de energia

## Definições

Procuramos determinar como quantificar a perda de energia que um íon sofre ao viajar pelo reticulado, definimos:

- Perda de energia por unidade de comprimento:  $-\frac{dE}{dx}$ .

$$-\frac{dE}{dx} = \left(-\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_e + \left(-\frac{dE}{dx}\right)_r$$

onde os subscritos  $n$ ,  $e$  e  $r$  se referem a componentes elásticas, eletrônicas e radiativas, respectivamente.

- Poder de frenagem (*stopping power*),  $S$ , em unidades de energia  $\times$  distância<sup>2</sup>.

$$-\frac{dE}{dx} = NS(E)$$

## Questões de escala

Was relata que esses processos ocorrem em uma ampla gama de energias, entre  $T_{min} \approx 10$  eV e  $T_{max} \approx 1$  MeV (discussão sobre o potencial)  $\rightarrow$  problemas de multi-escala.

Ele argumenta, entretanto, que essas contribuições normalmente se referem a diferentes faixas de energia, podendo ser computadas separadamente.

- Para altas energias  $r_{min} \ll a \Rightarrow S_e \gg S_n \rightarrow$  colisões coulombianas
- Para baixas energias  $r_{min} \approx a \Rightarrow S_n > S_e$

## Cálculo do poder de frenagem

Dada a seção de choque para o processo em questão, calculamos a energia cinética média transferida,  $\bar{T}$ :

$$\bar{T} = \frac{\int T \bar{\sigma} dT}{\int \bar{\sigma} dT}$$

Dado o caminho livre médio dessas colisões,  $\lambda = \frac{\bar{\sigma}}{N}$ , temos:

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\bar{T}}{\lambda} = N \int_{T_{min}}^{T_{max}} T \bar{\sigma}(E_i, T) dT$$

onde  $N$  é a densidade de alvos na linha da trajetória.

- 1 O evento primário de colisão
- 2 Colisão elástica nêutron - núcleo
- 3 Colisão inelástica nêutron - núcleo
- 4 Colisões entre átomos
- 5 Dissipação de energia
- 6 Poder de frenagem elástico**
- 7 Poder de frenagem eletrônico

# Colisões elásticas de alta energia

$$r_{min} \ll a$$

Seção de choque para colisões coulombianas:

$$\bar{\sigma}(E_i, T) = \frac{\pi b_0^2}{4} \frac{\gamma E_i}{T^2}$$

onde

$$b_0 = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\gamma E_i}$$

A dissipação de energia é

$$\left( \frac{dE}{dx} \right)_n = NS_n(E_i) = N \int_{T_{min}}^{\gamma E_i} T \frac{\pi b_0^2}{4} \frac{\gamma E_i}{T^2} dT = N \frac{\pi b_0^2}{4} \gamma E_i \ln \frac{\gamma E_i}{T_{min}}$$

# Estimativa de $T_{min}$

O contexto das colisões de baixa energia,  $T_{min} = T_b$ , que é a energia cinética que produz  $b = a$ :

$$T_b = \frac{\epsilon_e^2 \gamma E_a^2}{4E_i}$$

onde  $E_a$  é a energia que produz  $r_{min} = a$ :

$$E_a = 2E_R (Z_1 Z_2)^{\frac{7}{6}} \frac{M_1 + M_2}{M_2 e}$$

sendo  $E_R = 13,6$  eV, a energia de Rydberg.

Substituindo:

$$T_b = \frac{4E_R^2 (Z_1 Z_2)^2 (Z_1 Z_2)^{\frac{2}{6}}}{a^2 E_i}$$

Usando a relação  $a = \frac{a_0}{(Z_1 Z_2)^{\frac{1}{6}}}$ :

$$T_b = \frac{4E_R^2 a_0^2 (Z_1 Z_2)^2}{a^2 E_i}$$

onde  $a_0 = 5,29 \times 10^{-2}$  nm é o raio de Bohr



# Poder de frenagem elástico

## Limite de altas energias

Por simplicidade trataremos o caso em que o átomo incidente é idêntico ao átomo alvo ( $Z_1 = Z_2 = Z$  e  $M_1 = M_2$ ). Consideramos a relação fundamental do átomo de Bohr:

$$\epsilon_{\theta}^2 = 2a_0 E_R$$

e substituindo, temos:

$$NS_n(E_i) = \frac{4N\pi Z^4 a_0^2 E_R^2}{E_i} \ln \frac{a^2 E_i^2}{4a_0^2 E_R^2 Z^4} \quad (10)$$

Expressão válida para colisões energéticas.

## Limite de energias baixas

$$r_{min} \approx a$$

Para energias intermediárias e baixas o potencial de Coulomb blindado deve ser preferido.

Lindhard, Nielsen, Scharff (seção de choque universal):

$$\bar{\sigma} = \frac{\pi a^2}{2} \frac{f(\tau)^{\frac{1}{2}}}{\tau^{\frac{3}{2}}}$$

onde  $\tau$  é um parâmetro de colisão adimensional, definido como:

$$\tau = \mathcal{E} \frac{T}{T_{min}}$$

com  $\zeta$  definida como a energia adimensional:

$$\mathcal{E} = \frac{aM_2}{Z_1 Z_2 \epsilon_e^2 (M_1 + M_2)} E_i$$

# Função de escala

 $f(\tau)$ 

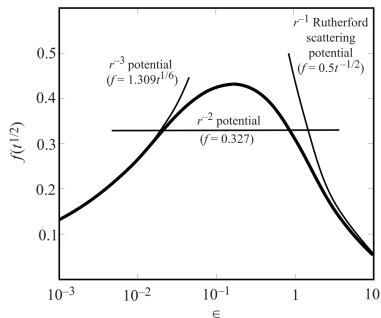
Relação analítica (Winterbon):

$$f\left(t^{\frac{1}{2}}\right) = \lambda' t^{\frac{1}{6}} \left[ 1 + \left( 2\lambda' t^{\frac{2}{3}} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^{-\frac{3}{2}}$$

onde  $\lambda' = 1,309$ , ou ainda

$$f\left(t^{\frac{1}{2}}\right) = \lambda_m t^{\frac{1}{2}-m}$$

com  $\lambda_{\frac{1}{3}} = 1,309$ ,  $\lambda_{\frac{1}{2}} = 0,327$  e  $\lambda_1 = 0,5$ .



# Poder de frenagem elástico

## Potencial de Coulomb blindado

Para o potencial de Coulomb blindado:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = -\frac{N\pi a^2 T_{max}}{\mathcal{E}^2} \int_0^{T_{max}} f\left(t^{\frac{1}{2}}\right) dt^{\frac{1}{2}} \quad (11)$$

Definindo o comprimento universal:

$$\rho_R = \frac{N4\pi a^2 M_1 M_2}{M_1 + M_2} R$$

onde  $R$  é uma medida característica do referencial de laboratório.

Escrevendo a relação entre  $S_n(E)$  e  $S_n(\mathcal{E})$  como:

$$S_n(\mathcal{E}) = \frac{\mathcal{E}}{\pi a^2 \gamma E_i} S_n(E)$$

Pode-se escrever a equação 11 em forma universal:

$$\frac{d\mathcal{E}}{d\rho} \equiv S_n(\mathcal{E}) = \frac{1}{\mathcal{E}} \int_0^{\mathcal{E}} f\left(t^{\frac{1}{2}}\right) dt^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

Essa equação deve ser resolvida numericamente.

- 1 O evento primário de colisão
- 2 Colisão elástica nêutron - núcleo
- 3 Colisão inelástica nêutron - núcleo
- 4 Colisões entre átomos
- 5 Dissipação de energia
- 6 Poder de frenagem elástico
- 7 Poder de frenagem eletrônico**

# Colisão entre íons e elétrons

## Regime de íons rápidos

Quando a velocidade dos íons,  $v_i$ , é maior que a do elétron mais ligado (ou seja, o mais rápido),  $v_e$ , vale a teoria clássica. Neste caso:

$$T_{max} \approx \gamma_e E_i$$

onde

$$\gamma_e = \frac{4m_e M}{(m_e + M)^2}$$

Para estimar o limite inferior consideramos o valor médio dos níveis de excitação do átomo (em primeira aproximação,  $\bar{I} = 11,5Z_2$ ), e a densidade eletrônica do alvo, que é dada por  $N_e = NZ_2$ . Obtemos então uma primeira aproximação para o poder de frenagem eletrônico:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = -\frac{N_e}{Z_2} \int_0^{\gamma_e E_i} T \bar{\sigma}_S(E_i, T) dT = -N\pi \frac{Z_1^2 Z_2 \epsilon_e^4}{E_i} \frac{M_1}{m_e} \ln \frac{\gamma_e E_i}{\bar{I}} \quad (13)$$

# Colisão entre elétrons e íons rápidos

## Correções quânticas e relativísticas

Numa segunda aproximação usa-se a aproximação de Born (o íon incidente não perturba significativamente o movimento dos elétrons) resultando em um fator 2:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = -2N\pi \frac{Z_1^2 \epsilon_e^4}{E_i} \frac{M_1}{m_e} B \quad (14)$$

onde  $B$  é o número de frenagem, definido como:

$$B = Z_2 \ln \frac{\gamma_e E_i}{I}$$

No caso de velocidades relativísticas (definindo  $\beta = \frac{v}{c}$ ) temos:

$$B = B_{rel} = Z_2 \left[ \ln \left( \frac{\gamma_e E_i}{I} \right) - \ln (1 - \beta^2) - \beta^2 \right]$$

Was estima que para prótons com energias na faixa dos MeVs,  $S_e \approx 2000 S_n$ .

## Limite de velocidades mais baixas

Para velocidades do projétil próximas a velocidade dos elétrons com energia próxima à de Fermi, os elétrons de caroço passam a não influir e efeitos de neutralização dominam  $\rightarrow S_e \propto v_j$ .

Nesse regime (aproximação de Lindhard-Scharff):

$$S_e(\mathcal{E}) = k\mathcal{E}^{\frac{1}{2}}$$

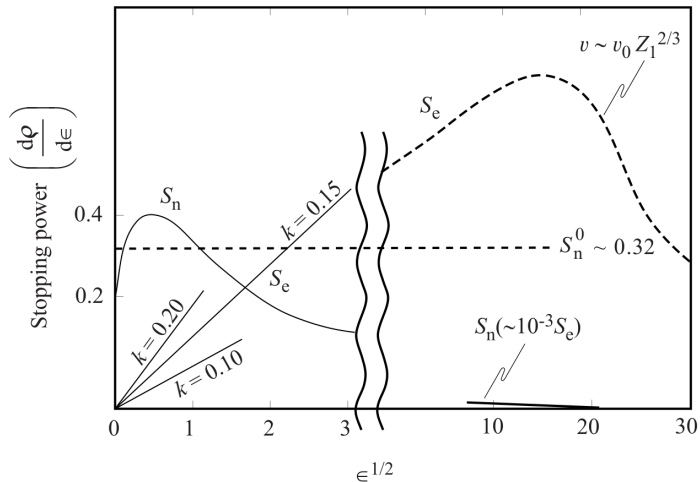
com

$$k = \frac{0,07937 Z_1^{\frac{2}{3}} Z_2^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{M_2}{M_1}\right)^{\frac{3}{2}}}{\left(Z_1^{\frac{2}{3}} + Z_2^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{3}{4}} M_2^{\frac{1}{2}}}$$



# Poder de frenagem

## Comparação



# Extensão percorrida

## Range

Assumindo que os processos de frenagem são independentes, podemos calcular o poder de frenagem total como:

$$S_T = N(S_n + S_e)$$

Com auxílio dessa quantidade podemos calcular a distância média percorrida por um projétil de energia  $E_i$  antes de entrar em repouso no sólido:

$$R = \int_0^{E_i} \frac{dE}{S_T(E_i)}$$

# Exemplo

## Potencial inverso quadrático

Para o potencial inverso quadrático temos:

$$\bar{\sigma}_S(E_i, T) = \frac{\pi^2 a^2 E_a \gamma^{\frac{1}{2}}}{8 (E_i)^{\frac{1}{2}} T^{\frac{3}{2}}}$$

donde se calcula (Was):

$$S_T(E_i) = \frac{N\pi^2 a^2}{4} E_a \gamma$$

A extensão média percorrida então é:

$$R = \frac{4E_i}{\pi^2 a^2 \gamma E_a} \quad (E_i \leq E_a)$$

# Detalhamento da distribuição de extensão

Extensão média projetada ( $\overline{R_p}$ )

Para  $T \ll E$  (Lindhard):

$$\overline{R_p} = \int_0^{E_i} \frac{dE'}{\beta_1(E')} \exp \left[ \int_{E_i}^{E'} \frac{\alpha_1(x) dx}{\beta_1(x)} \right]$$

onde:

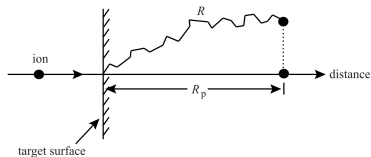
$$\alpha_1(E) = \frac{\mu N S_n(E)}{2E}$$

e

$$\beta_1(E) = N \left[ S_n(E) + S_e(E) - \frac{\mu \Omega_n^2(E)}{2E} \right]$$

com

$$\Omega_n^2(E) = \int_0^\infty T_n^2 2\pi b db$$



# Detalhamento da distribuição de extensão

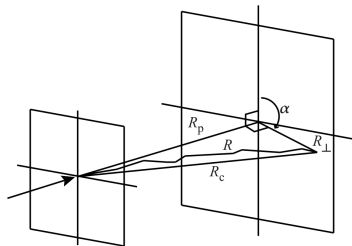
Desvio padrão da extensão projetada ( $\overline{\Delta R_p}$ )

Definindo:

$$(\overline{R_c})^2 = (\overline{R_p})^2 + (\overline{R_{\perp}})^2$$

e

$$(\overline{R_r})^2 = (\overline{R_p})^2 - \frac{(\overline{R_{\perp}})^2}{2}$$



# Detalhamento da distribuição de extensão

Desvio padrão da extensão projetada ( $\overline{\Delta R_p}$ )

Para  $T \ll E_i$

$$(\overline{R_c})^2 = \int_0^E \frac{2\overline{R_p}(E') dE'}{N[S_n(E') + S_e(E')]}$$

e

$$(\overline{R_r})^2 = \int_0^E \frac{2\overline{R_p}(E') dE'}{\beta_2(E')} \exp \left[ \int_E^{E'} \frac{3\alpha_2(x)}{\beta_2(x)} dx \right]$$

dado

$$(\overline{\Delta R_p})^2 = \frac{2[\overline{R_r}(E)]^2 + [\overline{R_c}(E)]^2}{3} - [\overline{R_p}(E)]^2$$

com

$$\alpha_2(E) = \frac{\alpha_1(E)}{2}$$

$$\beta_2(E) = \beta_1(E) - \frac{N\mu\Omega_n^2(E)}{E}$$

e

$$\Omega_n^2(E) = \frac{4M_1M_2}{3(M_1 + M_2)} S_n^0 E$$

