

CBPF

**Centro Brasileiro de
Pesquisas Físicas**

Dissertação de Mestrado

**Seção de choque de íons de Carbono em Argônio
para aplicações em Carbono-terapia**

Adrian Lozano Sánchez Orientador:

Sérgio J. Barbosa Duarte

Rio de Janeiro, 2017

À minha família

Agradecimentos

À minha mãe e avós por todo o amor, apoio e confiança, permitindo que a distância seja curta.

Ao meu pai por ser meu despertar no estudo da física.

Ao meu orientador Sérgio Duarte por sua dedicação e força durante todo o trabalho.

À família Fagundes pela acolhida e carinho, em especial à Rosely.

Aos meus colegas e amigos do CBPF e os que estão na querida Cubita.

Ao CBPF por dar a chance de continuar crescendo e aos seus funcionários a Bethe e o Ricardo.

À CAPES pelo suporte financeiro.

Resumo

No presente trabalho de mestrado estudamos o espalhamento de átomos através de uma abordagem clássica. Introduzimos os principais conceitos e equações da teoria do espalhamento por potencial. Usamos o potencial de Lennard-Jones para descrever a interação atômica e propusemos como seria modificada a interação quando consideramos a ionização entre os átomos. Resultados numéricos de funções de deflexão e seções de choque são apresentados, os quais serão úteis na elaboração de trabalhos que darão continuidade aos nossos estudos. Uma proposta tentativa para o mecanismo de ionização é formulada meramente para estabelecer a metodologia de cálculo de seções de choque para diferentes estados de carga. Esta proposta permite incorporar características atômicas, como energias de ionização e polarizabilidade para a determinação dos valores limites do parâmetro de impacto em diferentes graus de ionização do carbono. A seção de choque íon-átomo em diferentes estados de carga é imprescindível para o estudo da difusão do feixe em diversos meios gasosos da câmara de “striping” de um acelerador linear. Nosso estudo não é conclusivo, entretanto deixamos indicadas as várias etapas a serem seguidas na continuidade do presente trabalho.

Palavras-chave: Seção de choque, ionização atômica, carbono-terapia.

Abstract

In the present master's work we study the scattering of atoms using a classical approach. We introduce the main concepts and equations of scattering theory by potential. The Lennard-Jones's potential is used to describe atomic interaction and we have proposed how the interaction could be modified when ionization between atoms are considered. Numerical results for the deflection functions and cross sections are presented, which will be useful in the elaboration of works that will give continuity to our studies. A tentative proposal for the ionization mechanism is formulated merely to establish the numerical methodology for calculating cross sections for different states of charge. This proposal allows incorporating atomic characteristics, such as ionization energies and polarizability, to determine the limit values of the impact parameter in different degrees of carbon ionization. The ion-atom cross section in different states of charge is essential for the study of the diffusion of the beam in various gaseous media of the striping chamber of a linear accelerator. Our study is not conclusive; however we indicate the several steps to be followed in the continuity of present work.

Keywords: Cross section, atomic ionization, carbon-therapy.

Sumário

Dedicatória.....	i
Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Abstract.....	iv
Lista de Tabelas	vi
Lista de Figuras	vii
1 Introdução	1
2 Espalhamento de átomos e íons	8
2.1 Redução de sistema de duas partículas: coordenadas relativas e do centro de massa	10
2.2 A função de deflexão para o espalhamento por potencial	12
2.2.1 Método numérico para a determinação da função de deflexão	15
2.3 Da função de deflexão à seção de choque diferencial	16
2.3.1 Método numérico para a determinação da seção de choque diferencial	18
2.4 Potencial interatômico Lennard-Jones	19
3 Trajetórias colisionais e o mecanismo de ionização	24

3.1	Cálculo da trajetória das partículas.....	25
3.2	Troca de carga e critério de ionização.....	27
3.2.1	O detalhamento do mecanismo de ionização ao longo das trajetórias	30
3.2.2	Formação de dipolos elétricos atômicos na ionização	32
4	Resultados e Discussões	36
4.1	Resultados para as funções de deflexão	36
4.2	Resultados para as seções de choque.....	40
4.3	Distâncias e limiares de energia para a ionização	43
4.4	Trajетórias com ionização.....	45
5	Conclusões e Planos de Continuidade do Trabalho	48
A	Código computacional	51
A.1	Cálculo da função de deflexão e da seção de choque diferencial.....	51
A.2	Cálculo das trajetórias com mudança nos estados de carga	60
	Referências Bibliográficas	73

Lista de Tabelas

2.1	Parâmetros de interação átomo-átomo.....	22
3.1	Polarizabilidade atômica e iônica ($\alpha/4\pi\epsilon_0$ em $10^{-30} m^3$).....	33
3.2	Valores de energias de ionização em eV para o Carbono.	34
4.1	Distâncias de máxima aproximação entre os átomos onde surgem os efeitos da ionização em diferentes energias iniciais do projétil.....	43
4.2	Limiares de energia do átomo de Carbono que vão produzir ionização.	44
4.3	Dependência do ângulo de espalhamento com a energia.	47

Lista de Figuras

1.1	Comparação dos feixes de Hadronterapia e radioterapia convencional. A figura mostra que os feixes de fótons atravessam o corpo inteiro do paciente e provocam danos nas células saudáveis, enquanto os feixes de prótons e íons de Carbono têm sua energia máxima liberada dentro do tumor e minimizam a dose nos tecidos saudáveis.	2
1.2	Esquema do acelerador SSAMS da UFF.	5
2.1	Esboço de um arranjo experimental típico de colisão entre partículas.	9
2.2	Coordenadas para o problema de duas partículas.	11
2.3	Espalhamento em um potencial central.	14
2.4	Ilustração da função de deflexão para potencial: (a)repulsivo e (b)atrativo.	15
2.5	Ilustração esquemática de como três trajetórias diferentes correspondem ao mesmo ângulo de espalhamento.	17
2.6	Esquema de espalhamento de um feixe de partículas.	17
2.7	Potencial de Lennard-Jones.	21
3.1	Trajетórias seguidas pelo Carbono fixando o Argônio. As distâncias estão dadas em unidades de $r_0 = 2^{1/6}\sigma$ e as energias em unidades de ϵ , lembre-se que σ e ϵ são parâmetros dos que depende o potencial de Lennard-Jones (Eq. 2.27).	27

3.2	Representação geométrica dos raios de ionização.....	29
3.3	Representação da ionização do átomo de Carbono.....	31
3.4	Indução de dipolo elétrico no átomo de Argônio.....	32
4.1	Função de deflexão para colisões de diferentes energias entre dois átomos de Neônio.....	37
4.2	Função de deflexão para a colisão de 100 keV entre dois átomos de Neônio.....	38
4.3	Função de deflexão para a colisão entre dois átomos de Neônio, segundo a literatura.....	39
4.4	Seção de choque diferencial para a colisão de dois átomos de Neônio.....	40
4.5	Seção de choque diferencial em intervalos de ângulos de espalhamento.....	41
4.6	Seção de choque diferencial em função do ângulo de espalhamento para a colisão de dois átomos de neônio, segundo a literatura.....	42
4.7	Trajetórias seguidas pelos átomos de Carbono e Argônio para energia de 100 keV. A legenda ilustra a mudança dos estados de carga do Carbono. O movimento do Argônio está representado na cor preta.....	45
4.8	Trajetórias seguidas pelos átomos de Carbono e Argônio para energia de 200 keV. A legenda ilustra a mudança dos estados de carga do Carbono. O movimento do Argônio está representado na cor preta.....	46
4.9	Trajetórias seguidas pelos átomos de Carbono e Argônio para energia de 300 keV. A legenda ilustra a mudança dos estados de carga do Carbono. O movimento do Argônio está representado na cor preta.....	46

Capítulo 1

Introdução

Atualmente uma das doenças responsáveis por milhares de mortes no mundo é o câncer, representando cerca de 12% da causa mortis no planeta, ou seja, uma a cada seis mortes é causada pelo câncer [1]. Mais de 14 milhões de pessoas desenvolvem a doença a cada ano e a projeção indica que esse número irá atingir 22 milhões em 2030 [2]. Segundo dados da OMS (Organização Mundial da Saúde), o número de mortes no Brasil causadas pelo câncer aumentou 31% desde o ano 2000 e alcançou a marca de 223 mil pessoas ao final de 2015 [2, 3]. O Inca (Instituto Nacional do Câncer) estima que para o biênio 2016-2017 surgirão mais 600 mil novos casos [4, 5, 6].

Através de estudos e pesquisas estimuladas pelo desafio em desenvolver melhores mecanismos de tratamento desta doença, a física se destaca em descobrir e aprimorar teorias, técnicas e equipamentos, contribuindo com a comunidade médica na melhoria da qualidade de vida de pacientes acometidos pelo câncer. Diante desses desafios a física se coloca como adjunto a evolução das formas de diagnósticos e tratamento, tornando-os mais imediatos e precisos, o que é fundamental em se tratando de uma doença muitas vezes agressiva e letal.

Graças às pesquisas na física de partículas conseguimos avançar no tratamento do câncer. Um exemplo desses avanços é a Hadronterapia [7, 8], na qual se utilizam prótons (chamada protonterapia) e íons de Carbono (chamada Carbono-terapia), cuja principal

vantagem é a redução da dose de radiação aplicada ao tecido saudável e é capaz de atingir de maneira precisa a região tumoral, onde se observam índices de cura mais elevadas do que a radioterapia convencional (utiliza fótons e elétrons).

A Hadronterapia já foi empregada em aproximadamente 112 mil pessoas nos últimos 20 anos. Cerca de 90% dos pacientes receberam a irradiação de prótons, mais poderosa do que a oferecida pela radioterapia convencional, e foi três vezes menos energética do que a de íons de Carbono, considerada a mais eficiente para os casos mais complicados da doença [9]. Os feixes de íons de Carbono são eficazes em concentrar na região de interesse, a atuação da radiação na destruição das células cancerosas, devido à amplitude e largura do respectivo pico de Bragg, o que significa que têm uma menor dispersão lateral do que os prótons [10]. Entende-se como pico de Bragg [11] a grande deposição de energia próxima ao alcance final da partícula incidente (Fig. 1.1).

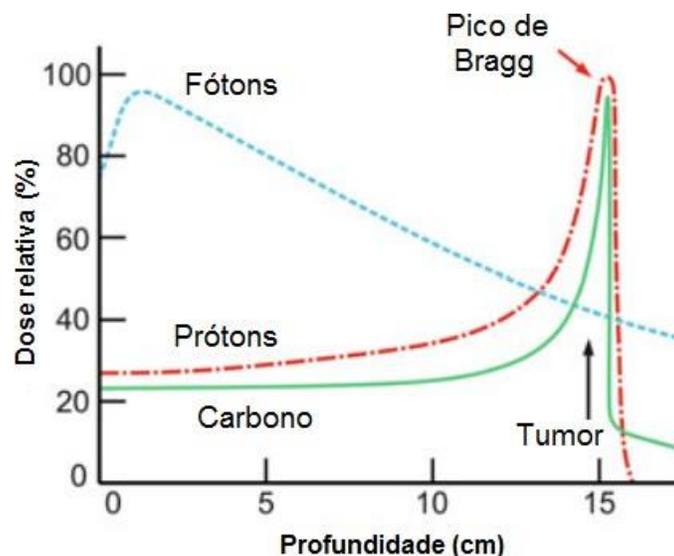


Figura 1.1: Comparação dos feixes de Hadronterapia e radioterapia convencional. A figura mostra que os feixes de fótons atravessam o corpo inteiro do paciente e provocam danos nas células saudáveis, enquanto os feixes de prótons e íons de Carbono têm sua energia máxima liberada dentro do tumor e minimizam a dose nos tecidos saudáveis. Figura extraída de [8].

A profundidade de ocorrência do pico de Bragg é dependente da energia inicial e da partícula incidente [10], e dessa forma, a posição de deposição máxima de energia do

ção é controlada pela velocidade inicial da partícula incidente e também da composição do meio. Como consequência, pode-se preservar os tecidos sadios em região anterior e posterior ao pico de Bragg, ampliar a dose na região alvo e obter maior taxa de controle tumoral, através da variação de parâmetros físicos aplicados na terapia, no que consiste o planejamento do tratamento [12, 13]. Modulando a energia das partículas incidentes, é possível estender a região do pico de Bragg para localizar a dose num volume mais extenso. Também se pode sobrepor vários feixes para formar o pico de Bragg estendido e assim cobrir toda a extensão do tumor [14].

As partículas carregadas ao passarem pela matéria, interagem (via interação coulombiana) com um ou mais elétrons orbitais (provocando a excitação e ionização dos átomos no material) ou também com os núcleos (levando à emissão de radiação eletromagnética) do material praticamente todo átomo por onde passa. Muitas destas interações transferem apenas uma pequena fração da energia cinética da partícula incidente, de modo que é conveniente pensar que a perda de energia cinética por parte da partícula incidente é gradual [15, 16]. Uma grandeza que descreve as propriedades ionizantes de qualquer meio é o poder de frenagem (*stopping power* ou dE/dx), que é definido como a quantidade de energia cinética que perde uma partícula por unidade de comprimento atravessando um meio, e resulta ser a soma dos poderes de frenagens devido às interações eletrônicas e nucleares:

$$\frac{dE}{dx}_{total} = \frac{dE}{dx}_{eletro\grave{n}ico} + \frac{dE}{dx}_{nuclear} \quad (1.1)$$

A expressão que descreve a perda de energia eletrônica, $\frac{dE}{dx}_{eletro\grave{n}ico}$, é conhecida como fórmula de Bethe-Bloch [17, 18]:

$$-\frac{dE}{dx}_{eletro\grave{n}ico} = 4\pi NZ \frac{z^2 e^4}{mv^2} \ln \frac{2m\beta^2 c^2}{\bar{I}} \cdot \gamma^2 - \beta^2, \quad (1.2)$$

onde N é o número de átomos por unidade de volume, Z é o número atômico do meio, z é a carga da partícula incidente, m é a massa de repouso do elétron, $\beta = v/c$ é a velocidade da partícula dividida pela velocidade da luz, $\gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}$ é o fator de Lorentz da partícula e \bar{I} é a energia média de excitação.

Um aspecto importante da terapia com hádrons é a simulação precisa do *stopping*

power e das reações induzidas pelo feixe ao longo de seu percurso, para prever com precisão a dose a ser depositada. Desta forma, estaremos trabalhando para obter dados importantíssimos para a Hadronterapia, em colisões de baixas energias, próximas ao pico de Bragg, quando a maior parte da energia é transferida do feixe de Carbono para o tecido tumoral [19].

Trabalhos recentes indicam que feixes de íons de Carbono com energias menores de 100 keV tem predominantemente estados de carga 0 e 1 ao passar pela água¹. Para esta situação a ionização da molécula de água por Carbono neutro é mais do que o dobro da originada por íons de Carbono C⁻ [19]. Muito pouco foi feito, até o momento, no que diz respeito à pesquisa com feixes de Carbono neutro [20], pela dificuldade em conseguir feixes de alta intensidade.

No Brasil se tem aceleradores lineares (conhecidos como LINACs) para o desempenho da radioterapia, os quais geram feixes de elétrons e fótons. Ainda não se conta com aceleradores para o tratamento com hádrons devido ao alto custo de aquisição destes equipamentos. Existem outros acelerados em universidades dedicados à pesquisa nas áreas de Física Ambiental, Arqueologia, Biologia Nuclear e Marinha, Geologia Marinha e Geoquímica. O IF-UFF (Instituto de Física da Universidade Federal Fluminense) possui um acelerador SSAMS (Single Stage Accelerator Mass Spectrometry) integrado a vários desses projetos [21, 22]. Embora este acelerador não trabalhe na faixa de energia da Carbono-terapia, pode ser adaptado para o estudo dos processos colisionais entre Carbono neutro e material representativo do tecido humano, para a análise da entrega de energia na região do pico de Bragg, que acontece em níveis de energias baixas [13, 23].

Existe um projeto INCT-FNA (Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia-Física Nuclear e Aplicações) aprovado pela agência CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) para o desenvolvimento de atividades de pesquisas em áreas da Física Nuclear. Nosso trabalho se insere nesse projeto como estudo de simulação dentro da linha Carbono-terapia.

O feixe de Carbono passa por diferentes estágios antes de sair do acelerador. Uma

¹Testes são feitos em fantasmas e a água é utilizada para representar boa parte do tecido humano.

fonte de íons positivos de Césio, Cs^+ , é utilizada para gerar íons negativos C^- de uma amostra de Carbono e eliminar a interferência dos elementos que não formam íons negativos (Estágio 01 na Fig. 1.2). O Césio é mantido em um reservatório em seu estado sólido. Ao aquecer o reservatório o Césio se sublima e incide no ionizador, onde são produzidos íons Cs^+ . O Césio ionizado é acelerado até o cátodo, colidindo com o Carbono da amostra, pulverizando-o (processo conhecido como *sputtering*) e extraíndo íons C^- e outros elementos presentes no cátodo. Deste modo está formado um feixe contínuo negativo de Carbono. Estes íons negativos ao sair da fonte encontram um defletor magnético que seleciona uma massa próxima que se deseja medir [24, 25, 26, 27, 28].

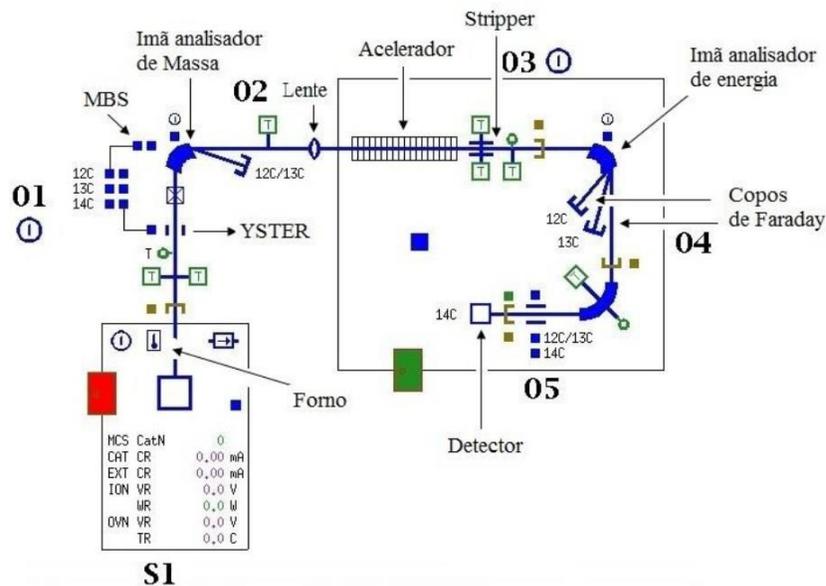


Figura 1.2: Esquema do acelerador SSAMS da UFF.

Em continuação, o feixe de partículas é injetado no tubo de aceleração, sendo acelerado por um potencial elétrico (tensão máxima de 240 kV, equivalente a 280 keV) em vários estágios em sua parte central, ganhando, portanto energia suficiente para as aplicações desejadas. Na zona do terminal destes estágios está aplicado um potencial elétrico, onde as partículas sofrem um processo muito importante, chamado *stripping*. As partículas do feixe passam por um tubo de gás (por exemplo argônio, nitrogênio, hélio), a câmara de *stripping*. Ao colidir contra as partículas do gás perdem um ou mais elétrons, passando de um estado de carga negativo a diferentes estados de cargas positivos. Este processo

de *stripping* também dissocia os íons moleculares e elimina assim as interferências moleculares, que são causadas por moléculas da mesma massa que o íon que se deseja medir, por exemplo ${}^7\text{Li}_2$, ${}^{12}\text{CH}_2$ e ${}^{13}\text{CH}$. Portanto, as moléculas que tiveram em seu conjunto uma massa igual à das partículas que procuramos se rompem em fragmentos de massa menor. A saída do *stripper* com um estado de carga particular depende da energia da partícula, da massa e número atômico do íon, e da espessura efetiva do gás [29, 30].

Na saída do canal de *stripper* há outro ímã, e em seguida um defletor eletrostático, no que se aplica um campo elétrico muito intenso ($\sim 17\text{-}18\text{ kV}/\sim 3\text{ cm}$). O defletor elétrico seleciona energia/carga, e junto ao ímã nesta zona, seleciona um dos possíveis estados de cargas após o acelerador com uma massa e energia especificadas.

Assim, em teoria, temos filtros de componentes do feixe para que só fiquem íons de Carbono com estados de carga positivo.

Por último, é usado um sistema de detecção sequencial formado por copos de Faraday e um detector.

Para o estudo da Carbono-terapia, neste acelerador vai se implementar um esquema experimental que permita saber qual é o componente de Carbono neutro existente no feixe e construir uma linha deste feixe para as pesquisas.

O foco de nosso trabalho é o processo de *stripping* do feixe de Carbono pelo gás contido na câmara. Quando o feixe atravessa a câmara, vários processos de colisão atômica acontecem ao longo de seu trajeto. O importante para o estudo da entrega de dose com os aceleradores SSAMS é o conhecimento da fração de Carbono neutro remanescente no feixe.

Em tempo, o trabalho desenvolvido nessa dissertação é a primeira etapa para estudos teóricos e simulações que analisem o comportamento de um íon de Carbono atravessando um gás de Argônio. Aqui apenas analisamos o processo colisional de um íon e sua variação de estado de carga no processo. O objetivo é estudar o espalhamento de íons/átomos de Carbono por Argônio em diferentes energias incidentes e para diferentes estados finais de carga.

Esta dissertação se compõe por capítulos escritos afim de esclarecer de forma detalhada o processo de interação entre Carbono e Argônio. No capítulo dois apresentamos uma descrição da teoria do espalhamento por potencial clássico para obter as características do estado final que serão utilizadas a partir do capítulo três. No capítulo três se descreve a metodologia e procedimentos de cálculo que permitirão o desenvolvimento do trabalho, além de propor um mecanismo de ionização que caracteriza os estados de carga finais do projétil. No capítulo quatro se apresentam os resultados dos cálculos numéricos e se comparam com outros da literatura. No capítulo cinco, abordamos as conclusões do trabalho e perspectivas que irão permitir a simulação em estudos futuros.

Neste trabalho todos os cálculos numéricos serão elaborados na linguagem de programação Pascal.

Capítulo 2

Espalhamento de átomos e íons

Como anunciamos no capítulo anterior neste trabalho analisaremos processos colisionais de átomos e íons visando a determinação de seções de choque e descrição do processo de ionização. Apresentamos aqui, de forma resumida, os principais conceitos estabelecidos sobre a teoria de colisão atômica que serão utilizados ao longo do trabalho.

Consideremos um esboço de um experimento típico de colisão atômica através do esquema da Fig. 2.1. Um feixe homogêneo de partículas monoenergéticas (*a*) é colimado e dirigido sobre um alvo (*b*) que contém centros espalhadores. O feixe incidente não deve ser muito intenso para que a interação entre as partículas incidentes possa ser desprezada, e não muito fraco para que se possa observar um número razoável de situações de espalhamentos durante o experimento [31]. Assumimos que as condições experimentais foram escolhidas de tal forma que cada alvo espalhador age como se estivesse isolado. As partículas incidentes interagem com o alvo e são espalhadas. Parte ou todas as partículas emergentes da região de interação são coletadas por um detector situado num ângulo θ , fora da trajetória do feixe incidente, medido com respeito à direção de incidência do feixe, de modo que as partículas não defletidas não são registradas [20, 32, 33].

A velocidade da partícula incidente v constitui um parâmetro importante para classificar as colisões [34]. Para colisões não relativísticas temos que v é muito menor que a velocidade da luz c , enquanto para colisões relativísticas essa velocidade é comparável

a c . No nosso caso estaremos lidando com a situação nitidamente não relativística, com energias do feixe da ordem de keV e massas dos projéteis da ordem de dezenas de GeV/c^2 .

Mesmo com esta simplificação, o sistema em colisão possui muitos graus de liberdade internos. Trata-se de um sistema de muitos corpos e com múltiplas possibilidades de rearranjos internos, tanto de suas partículas constituintes como de manifestações coletivas das mesmas. Assim, devemos fazer aproximações adicionais para que o processo colisional seja tratável e tenhamos resultados teóricos que possam ser comparáveis aos resultados dos experimentos.

Portanto, consideraremos que em energias tão baixas, o processo colisional é lento em relação a dinâmica dos graus de liberdade internos. Estes se acomodam rapidamente (quase instantaneamente) quando comparado a escala de tempo τ da colisão [34].

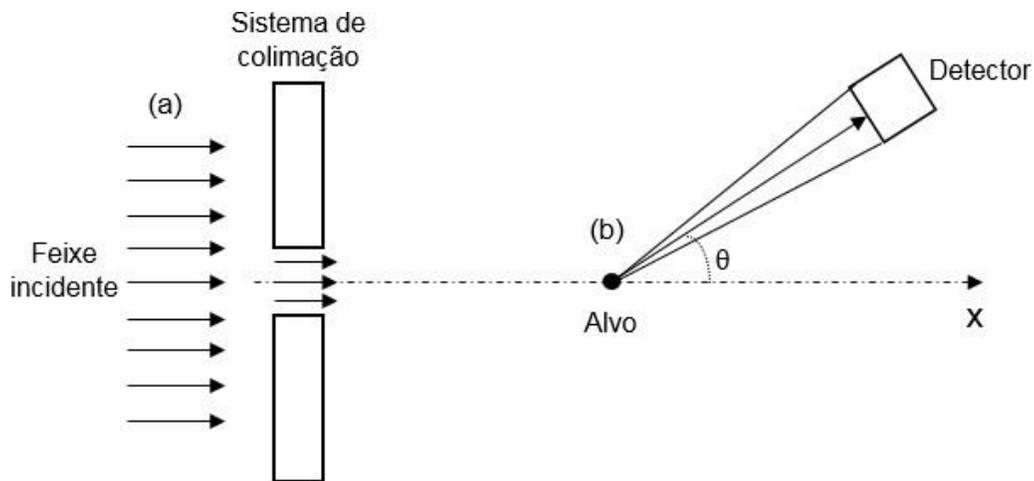


Figura 2.1: Esboço de um arranjo experimental típico de colisão entre partículas.

Pelo exposto acima, diferentes tipos de processos podem ocorrer na colisão entre átomos (ou íons) [32, 35, 36], de acordo com os produtos finais da reação:

1. Espalhamento elástico

As duas partículas A e B são espalhadas sem sofrer mudança em suas energias internas, mas a partícula incidente é defletida através de um certo ângulo:

$$A + B \rightarrow A + B. \quad (2.1)$$

2. Espalhamento inelástico

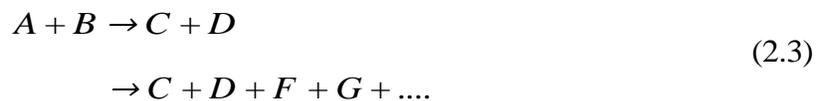
Uma ou as duas das partículas sofrem uma mudança em sua energia interna ou estrutura durante a colisão:



onde A^* e B^* correspondem a um estado excitado das partículas.

3. Reações

O sistema composto $A + B$ se divide em duas ou mais partículas diferentes de A e B :



No nosso caso, isto acontece quando um ou mais elétrons são ejetados dos átomos. Além disso podemos ter transferências de elétrons entre os átomos. Em ambos casos os átomos ficam ionizados.

4. Captura

O sistema inicial projétil-alvo fica temporariamente ou permanentemente reduzido a uma partícula:



2.1 Redução de sistema de duas partículas: coordenadas relativas e do centro de massa

Vamos considerar duas partículas, projétil e alvo, com massas m_1 e m_2 respectivamente, que interagem mediante um potencial dependente da distância que as separa

$r = |\vec{r}_{\rightarrow 2} - \vec{r}_{\rightarrow 1}|$. A posição de cada partícula é descrita por um vetor \vec{r} de três componentes espaciais (Fig. 2.2).

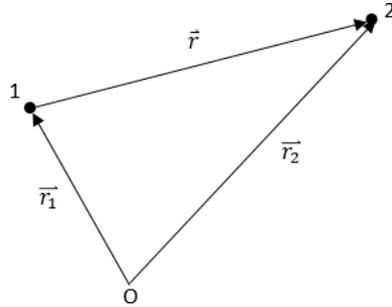


Figura 2.2: Coordenadas para o problema de duas partículas.

A lagrangiana que descreve este sistema de interação pode ser escrita como:

$$L = \frac{1}{2} m_1 \dot{\vec{r}}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{\vec{r}}_2^2 - V(r_{12}), \quad (2.5)$$

Podemos fazer uma transformação de coordenadas $\vec{r}_{\rightarrow 1}$ e $\vec{r}_{\rightarrow 2}$ a coordenadas relativas \vec{r} e do centro de massa

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_{\rightarrow 1} + m_2 \vec{r}_{\rightarrow 2}}{m_1 + m_2}, \quad (2.6)$$

desta maneira as equações de transformação serão

$$\vec{r}_{\rightarrow 1} = \vec{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2} \vec{r} \quad \text{e} \quad \vec{r}_{\rightarrow 2} = \vec{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2} \vec{r}, \quad (2.7)$$

com $\vec{r}(x, y, z)$ sendo a separação relativa entre as partículas.

Agora escrevemos a lagrangiana em função dessas novas coordenadas

$$L = \frac{1}{2} M \dot{\vec{R}}^2 + \frac{1}{2} \mu \dot{\vec{r}}^2 - V(r), \quad (2.8)$$

onde $M = m_1 + m_2$ é a massa do sistema e $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ é a massa reduzida das duas partículas.

Podemos escrever as equações do movimento para o movimento do centro de massa do sistema $\vec{R} = \vec{R}(X, Y, Z)$. As derivadas da lagrangiana com respeito às coordenadas X , Y e Z e velocidades \dot{X} , \dot{Y} e \dot{Z} são

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = M \dot{q}_i \quad \text{e} \quad \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad (2.9)$$

com $q_i = X, Y$ e Z . Logo a equação do movimento para cada coordenada generalizada tem a forma $\frac{d}{dt}(M \dot{q}_i) = 0$ [37]. Portanto a lagrangiana não depende explicitamente das coordenadas do centro de massa, estas coordenadas são cíclicas e se conserva o momento linear do sistema, em outras palavras, o movimento do centro de massa fica inalterado.

Como o movimento translacional do centro de massa não é interessante do ponto de vista das órbitas das partículas em relação umas às outras, podemos escolher a origem para que o sistema de coordenadas seja o próprio centro de massa das partículas $\mathbf{R} = 0$. Isto significa que a lagrangiana corresponde à de uma partícula de massa μ que se move em um campo de forças centrais com seu centro na origem de coordenadas. De modo que reduzimos o problema do movimento de duas partículas a um problema equivalente de uma partícula [38, 39], em que devemos determinar apenas o movimento de uma partícula de massa μ no campo central descrito pela função potencial $V(r)$,

$$L = \frac{1}{2} \mu \dot{\mathbf{r}}^2 - V(r). \quad (2.10)$$

2.2 A função de deflexão para o espalhamento por potencial

O potencial $V(r)$ depende da distância da partícula ao centro de força e não da orientação, então o sistema tem simetria esférica. Como consequência, o momento angular L do sistema em torno de qualquer eixo que passe pelo centro de força é constante. Logo \mathbf{r} e $\dot{\mathbf{r}}$ sempre permanecerão em um plano fixo perpendicular a L .

Agora expressaremos a lagrangiana em coordenadas polares:

$$L = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) - V(r). \quad (2.11)$$

A variável θ não aparece explicitamente na lagrangiana, portanto é uma coordenada cíclica e o momento conjugado a ela p_θ é uma constante do movimento. A equação do movimento para a coordenada θ é dada por

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = \mu r^2 \dot{\theta} = L = \text{constante}, \quad (2.12)$$

onde $\mu r^2 \dot{\theta}$ é o momento angular L .

Como as equações de transformação não dependem explicitamente do tempo e o potencial é conservativo então se conserva a energia mecânica. Para obter a solução completa do problema do movimento da partícula de massa μ em um campo de força central é mais simples partir dos teoremas de conservação da energia e do momento angular [40, 41], sem escrever as equações do movimento

$$T + V = E = \text{constante.} \quad (2.13)$$

Substituindo o termo de energia cinética de (2.11) na anterior equação, tem-se

$$E = \frac{1}{2} \mu (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2) + V(r), \quad (2.14)$$

mas de (2.12) $\dot{\theta} = \frac{L}{\mu r^2}$, finalmente

$$E = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + \frac{1}{2} \frac{L^2}{\mu r^2} + V(r). \quad (2.15)$$

Observando que o segundo termo resulta uma energia potencial associada a uma força centrífuga [42], por conseguinte a partícula se moverá em um potencial efetivo $V_{ef}(r) = V(r) + \frac{1}{2} \frac{L^2}{\mu r^2}$.

Quando $V(r)$ é especificado, a equação 2.15 descreve a energia total do sistema. A integração dessa equação nos dá a distância r da partícula ao centro de força como uma função implícita do tempo e em termos dos parâmetros E e L . Resolvendo a equação para r ,

$$\dot{r} = \frac{dr}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2}{\mu} \left(E - V(r) - \frac{L^2}{2\mu r^2} \right)}. \quad (2.16)$$

Resulta mais factível obter a trajetória da partícula combinando a equação anterior com a 2.12

$$\frac{d\theta}{dr} = \frac{\dot{\theta}}{\dot{r}} = \pm \frac{L}{r^2 \mu \sqrt{E - V(r) - \frac{L^2}{2\mu r^2}}}. \quad (2.17)$$

Lembrando que L e E são grandezas conservadas, inicialmente temos

$$L = \mu b v \quad \text{e} \quad E = \frac{1}{2} \mu v^2, \quad (2.18)$$

onde b é o parâmetro de impacto (vide Fig. 2.3) e v_0 a velocidade inicial do projétil. O parâmetro de impacto está relacionado com o momento angular e a energia através de

$L = b\sqrt{2\mu E}$. Substituindo L na equação para $d\theta/dr$, obtemos:

$$\frac{d\theta}{dr} = \pm \frac{b}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}}. \quad (2.19)$$

O sinal desta expressão estará dado segundo a trajetória da partícula (Fig. 2.3). Quando a partícula esteja se aproximando ao centro espalhador o sinal será positivo (r diminui à medida que θ diminui) e o sinal negativo corresponderá quando se afaste desse centro espalhador (r aumenta à medida que θ diminui). A distância mais próxima ao centro espalhador acontecerá quando a velocidade de aproximação relativa da partícula seja nula, $r\dot{r} = 0$ e $E = V(r) + b^2/r^2$, esse ponto é conhecido como ponto de retorno clássico $r = r_m$.

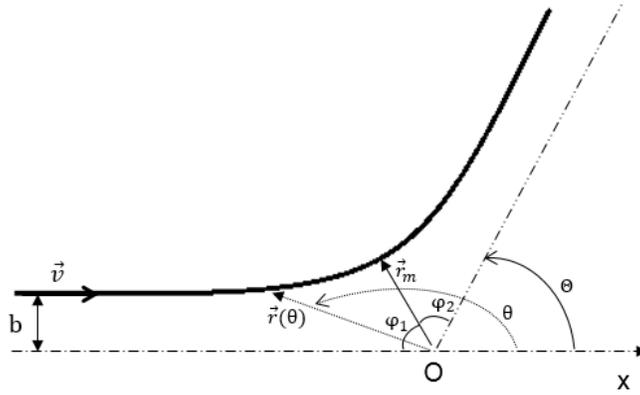


Figura 2.3: Espalhamento em um potencial central.

A trajetória completa pode ser determinada integrando a equação (2.19) desde $r = -\infty$ ao ponto de retorno clássico e deste ao infinito,

$$\Theta = \theta(r = r_m) + \int_{r_m}^{\infty} \frac{d\theta}{dr} dr, \quad \text{mas} \quad \theta(r = r_m) = \pi + \int_{-\infty}^{r_m} \frac{d\theta}{dr} dr, \quad (2.20)$$

e colocando o correspondente sinal para $d\theta/dr$,

$$\Theta(b, E) = \pi - 2b \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{b^2}{r^2}}}. \quad (2.21)$$

Esta relação entre o ângulo de deflexão e parâmetro de impacto para uma energia constante é chamada função de deflexão. Expressões analíticas para a função de deflexão são achadas para poucos potenciais, razão pela qual é necessário usar métodos numéricos.

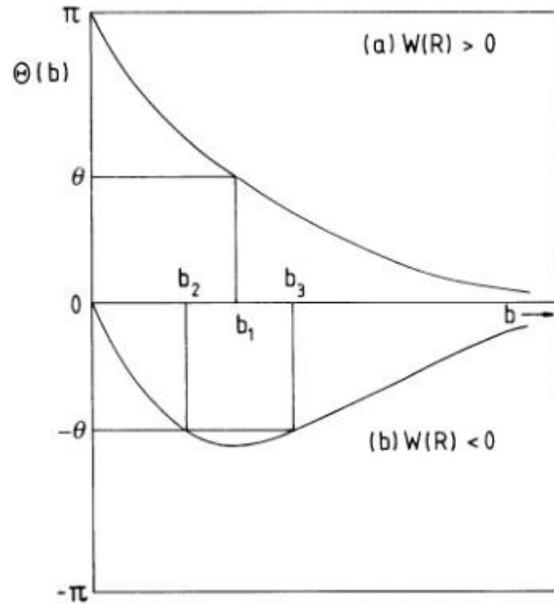


Figura 2.4: Ilustração da função de deflexão para potencial: (a)repulsivo e (b)atrativo. Figura extraída de [43].

2.2.1 Método numérico para a determinação da função de deflexão

A forma da função de deflexão está dada pela equação (2.21). Para sua determinação é preciso seguir uma série de passos.

Primeiramente se determina o ponto de retorno clássico, o qual é solução da equação

$$1 - \frac{b^2}{r_m^2} - \frac{V(r_m)}{E} = 0. \quad (2.22)$$

A raiz da equação se calcula pelo método de Newton-Raphson [44, 45], fixando o parâmetro de impacto e a energia. Assim teremos achado o limite inferior da integral.

Agora procedemos a calcular a integral. Dando-se uma olhada na integral, percebemos que diverge no ponto $r = r_m$, pelo que não podemos empregar os métodos numéricos tradicionais: Trapézio, Simpson nem Newton-Cotes [46], pois são baseados na continuidade do integrando em um intervalo. Existem vários métodos que permitem resolver esse problema de singularidade. Um candidato de simples implementação é o método de Ponto Médio, a expensas de muito tempo computacional para obter boa precisão nos resultados.

Como o limite superior da integração é infinito, precisamos para a avaliação da integral tomar um valor o suficientemente maior que r_m , por exemplo $r_{max} = 10000 r_m$.

Uma vez feito os cálculos teremos um só valor do ângulo de deflexão correspondente a um dado parâmetro de impacto. A função de deflexão se construirá variando o parâmetro de impacto desde um valor inicial $b_0 = 0$ a um valor final b_f (que garante que não mude mais o ângulo de deflexão) com um passo Δb .

2.3 Da função de deflexão à seção de choque diferencial

O ângulo de deflexão é uma quantidade associada às trajetórias clássicas e não é observado diretamente em um experimento de laboratório. Isto porque os experimentos não mostram o resultado de uma única colisão com um valor específico para o parâmetro de impacto, mas sim o resultado de muitas colisões superpostas com todos os possíveis parâmetros de impacto [47]. As medições feitas em um experimentos estão dadas em termos do ângulo de espalhamento, ϑ , definido como o ângulo entre a direção espalhada e incidente, o qual toma valores no intervalo 0 a π . Entre as partículas observadas sob o ângulo de espalhamento, existem diferentes trajetórias que contribuem ao mesmo ângulo, portanto não se pode distinguir entre os ângulos $\Theta(b_1) = \vartheta$ e $\Theta(b_2) = -\vartheta$ (Fig. 2.5). Além disso, não é possível detectar as trajetórias orbitais (rotações em torno do centro espalhador) $\Theta(b_3) = \vartheta - 2\pi$, de modo que a observação sob o ângulo de espalhamento ϑ registra as partículas com parâmetro de impacto para $\pm(\Theta(b) + 2n\pi) = \vartheta$ ($n = 0, 1, 2, \dots$).

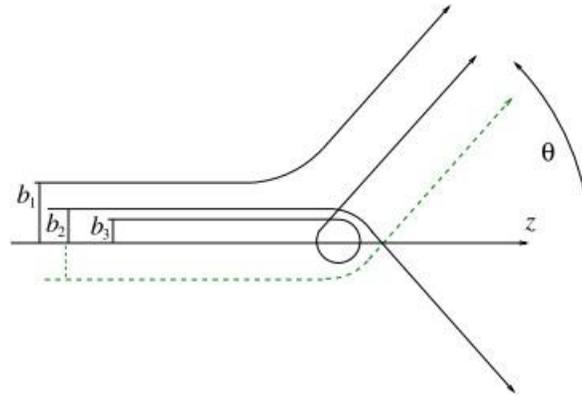


Figura 2.5: Ilustração esquemática de como três trajetórias diferentes correspondem ao mesmo ângulo de espalhamento. Figura extraída de [48].

Usualmente os resultados dos experimentos de espalhamento de partículas é caracterizado pela seção de choque diferencial (Fig. 2.6), $d\sigma/d\Omega$, relacionada com a probabilidade do átomo ser espalhado em um determinado ângulo ϑ por unidade de ângulo sólido Ω .

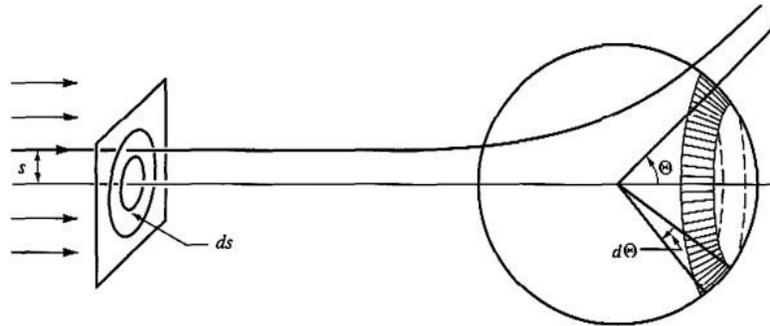


Figura 2.6: Esquema de espalhamento de um feixe de partículas. Figura extraída de [49].

Consideremos que as partículas então entrando com um fluxo I (número de partículas incidentes por unidade de tempo e de área) em uma área compreendida entre b e $b + db$. Então o número de partículas que serão espalhadas em um ângulo sólido $d\Omega = 2\pi \sin \theta d\vartheta$ com probabilidade $d\sigma$ entre ϑ e $\vartheta + d\vartheta$ será:

$$2\pi I b |db| = 2\pi I \sigma \sin \theta |d\vartheta|. \quad (2.23)$$

O módulo na expressão anterior se deve ao fato que o número de partículas observadas tem que ser sempre positivo, independentemente de $d\theta/db$ ser positivo ou negativo [50].

O sinal de $d\theta/db$ está dado pela forma do potencial e do parâmetro de impacto. Daí, a seção de choque diferencial resulta:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \vartheta} \frac{db}{d\vartheta}. \quad (2.24)$$

Mas, precisamos modificar a expressão para levar em conta as múltiplas contribuições de parâmetros de impactos para uma mesma direção de espalhamento [51], especificadas pelo parâmetro b_i :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_i \frac{b_i}{\sin \vartheta} \frac{db}{d\vartheta} = \sum_i \frac{b_i}{\sin \vartheta} \frac{d\Theta}{db} \Big|_{b=b_i}. \quad (2.25)$$

2.3.1 Método numérico para a determinação da seção de choque diferencial

A partir dos valores do ângulo de deflexão se pode calcular a seção de choque diferencial dada por (2.25). É importante atentar ao somatório na expressão de cálculo, no caso do potencial de Lennard-Jones existem três valores de parâmetro de impacto diferentes que correspondem ao mesmo ângulo de espalhamento.

Para fazer a derivada numérica podemos usar a fórmula de três pontos [52]:

$$\frac{d\Theta}{db} \approx \frac{f(b+h) - f(b-h)}{2h}, \quad (2.26)$$

com h o suficientemente pequeno (não muito pequeno para evitar o cancelamento catastrófico) que garanta uma mínima mudança em b .

Quando se calcula a função de deflexão se varia o parâmetro de impacto de forma constante, o que é uma dificuldade, já que não corresponderá um mesmo valor do ângulo de espalhamento para dois ou três parâmetros de impacto. Uma maneira de solucionar este problema é a seguinte:

1. Dividimos a função de deflexão em duas regiões, ou seja, determinamos o mínimo valor negativo dos ângulos de deflexão, onde uma região será desde o parâmetro de

impacto inicial, b_0 , até o parâmetro de impacto que corresponde ao mínimo valor negativo dos ângulos de deflexão, b_m , e a outra a partir desse último em diante.

2. As regiões formam um vetor bidimensional $[b, \Theta(b)]$. Trocando as colunas teremos o par $[\Theta(b), b]$ e procedemos a ordenar por ordem crescente da variável Θ , assim no final se tem $\Theta_1 < \Theta_2 < \dots < \Theta_i$ com seus pertences b .
3. Variamos o ângulo em intervalos iguais, por exemplo de 5 em 5, desde o mínimo valor de Θ até seu máximo. Nos faltaria determinar qual é o parâmetro de impacto que corresponde a cada ângulo. Mediante uma interpolação de Lagrange de quatro nós, dois valores maiores e dois valores menores, obtém-se o b desejado.
4. Calculamos as derivadas da função de deflexão com os novos b mais as seções de choques diferenciais para cada região.
5. Finalmente, a seção de choque diferencial total será o resultado da soma entre os valores de seções de choques de cada região.

2.4 Potencial interatômico Lennard-Jones

A forma exata do potencial interpartícula $V(r)$ para moléculas e átomos eletricamente neutros tem que ser determinada por primeiros princípios de cálculos quânticos. Tais cálculos são muito complexos, e para muitos propósitos é suficiente escolher uma forma fenomenológica simples para $V(r)$. As características mais importantes de $V(r)$ são uma repulsão forte para r pequeno e uma atração fraca em r grande. A forma fenomenológica mais comum de $V(r)$ é o potencial de Lennard-Jones (L-J) ou 6-12 proposto por Sir John Edward Lennard-Jones em 1924 [53, 54, 55]:

$$V(r) = 4\varepsilon \left[\frac{\sigma}{r}^{12} - \frac{\sigma}{r}^6 \right], \quad (2.27)$$

onde σ é a distância na qual o potencial interatômico é igual a zero e ε é a profundidade do poço de potencial e uma medida de quão fortemente é a atração, a qual é atingida quando a separação entre os átomos ou moléculas é $r = 2^{1/6}\sigma$.

O potencial de Lennard-Jones é uma aproximação. O primeiro termo do potencial descreve a repulsão e o segundo a atração.

A forma do termo que descreve a repulsão não tem nenhuma justificção teórica, a força repulsiva deve depender exponencialmente da distância, mas é mais conveniente devido à facilidade e eficiência de calcular r^{12} como o quadrado de r^6 . Sua origem física está relacionada com a repulsão eletrostática devido à proximidade de cargas elétricas de mesmo sinal e ao princípio de exclusão de Pauli (quando duas nuvens eletrônicas circulando os átomos iniciam a se sobrepôr, a energia do sistema aumenta abruptamente, dando uma contribuição repulsiva para a interação). O expoente 12 foi eleito exclusivamente por sua facilidade de cálculo. A solução computacional deste problema faz uso de conceitos básicos em análise numérica (como derivadas e integrais), permitindo a ligação entre o uso de ferramentas computacionais e a solução de problemas físicos [55, 56].

A segunda parte do potencial é originado pela forças de dispersão de Van der Waals [57], ou interação dipolo-dipolo induzido. A mesma pode ser obtida por considerações da interação de dois átomos neutros com seus centros separados por uma distância r , muito maior que o raio nuclear de cada um deles [58]. A neutralidade implica um número igual de cargas positivas e negativas e se a distribuição destas cargas for sempre esfericamente simétrica, nunca haverá interação (atrativa ou repulsiva) entre estes átomos. Porém, sabemos que os elétrons estão em constante movimento ao redor dos núcleos mesmo no mais baixo estado eletrônico do átomo, e em um dado instante t pode-se ter um momento dipolar não nulo (a média temporal do momento dipolar, por outro lado, é nula). No instante t_1 , o movimento eletrônico no átomo 1 dá origem a um momento dipolar $p \rightarrow_1$ que produz um campo \vec{E} em todo o espaço. Em geral, um campo \vec{E} produzido por duas distribuições de carga separadas por uma distância como em nosso caso, pode ser escrito em termos dos momentos dipolares das distribuições como (considerando que o dipolo está na origem de coordenadas):

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{3\vec{n}(\vec{p}_1 \cdot \vec{n}) - p \rightarrow_1}{r^3}, \quad (2.28)$$

e seu módulo

$$E = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{p_1}{r^3} \sqrt{1 + 3\cos^2\phi}, \quad (2.29)$$

onde \hat{n} é um vetor unitário na direção radial e ϕ é o ângulo entre os vetores \hat{r} e $p \rightarrow 1$. O átomo 2 sujeito a este campo torna-se polarizado com um momento dipolar $p \rightarrow 2$, que surge como resposta da polarizabilidade α da distribuição de carga deste átomo ao campo externo aplicado. O momento induzido pode ser escrito como:

$$p \rightarrow 2 = \alpha \cdot \vec{E}. \quad (2.30)$$

A energia potencial adquirida por um dipolo elétrico sujeito a um campo \vec{E} é dado por:

$$V = -p \rightarrow \cdot \vec{E} = -\alpha \cdot \vec{E} \cdot \vec{E}. \quad (2.31)$$

Substituindo as equações 2.28, 2.29 e 2.30 na equação 2.31, obtemos uma expressão para a energia potencial de interação dos dois átomos separados pela distância r :

$$V(r) = -\alpha \frac{p_1}{4\pi\epsilon_0}^2 \frac{(1 + 3\cos^2\phi)}{r^6} = -\frac{cte}{r^6}. \quad (2.32)$$

A figura 2.7 mostra uma representação do potencial de Lennard-Jones em função da distância de separação entre os centros dos átomos.

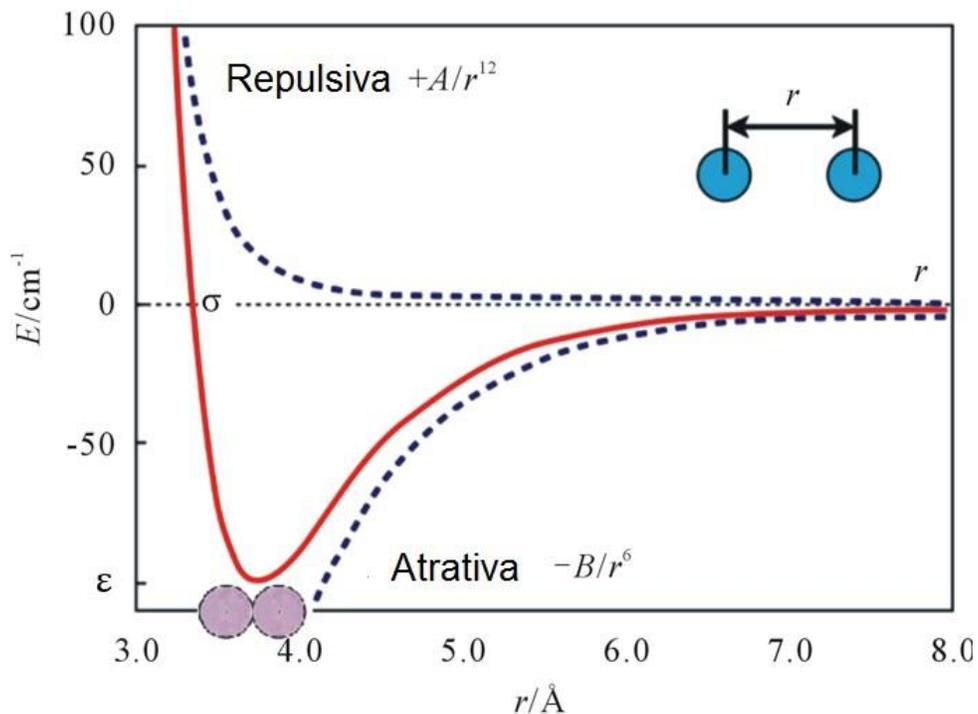


Figura 2.7: Potencial de Lennard-Jones.

Para distâncias $r \leq \sigma$ o potencial interatômico aumenta rapidamente, indicando que aparecem forças repulsivas muito intensas. Assim, σ nos informa a distância que podem se aproximar dois átomos sem que as repulsões sejam muito fortes. Muitas vezes σ é identificado com o diâmetro atômico.

Os coeficientes do potencial de Lennard-Jones de espécies neutras são obtidos a partir de medições de viscosidade ou de cálculo do segundo coeficiente virial. No caso que exista uma mistura de duas espécies diferentes, é comum considerar as seguintes relações de combinação de Lorentz-Berthelot [59, 60, 61]:

$$\sigma = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \quad \text{e} \quad \epsilon = \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{1 \cdot 2}}, \quad (2.33)$$

onde $\sigma_1, \sigma_2, \epsilon_1$ e ϵ_2 são os parâmetros correspondentes de cada uma das espécies, enquanto σ e ϵ são os parâmetros que descrevem a mistura das duas espécies.

A tabela a seguir apresenta os valores de σ e ϵ correspondente à interação entre pares de átomos idênticos [56, 61, 62]:

Tabela 2.1: Parâmetros de interação átomo-átomo.

Átomo	$\epsilon/k_B(K)$	$\sigma(nm)$
Ne	47	0.272
Xe	213.96	0.426
N	91.85	0.3919
Ar	119.8	0.341
Kr	154.87	0.3895
O	113.27	0.3654
C	51.2	0.335
He	10.2	0.228
F	52.8	0.283

No entanto, independentemente de quão bem o potencial de Lennard-Jones é capaz de modelar fenômenos reais, constitui hoje em dia um sistema modelo extremamente importante. Existe um vasto conjunto de artigos que investigam o comportamento de átomos

interagindo via potencial de Lennard-Jones em uma variedade de geometrias diferentes (sólidos, líquidos, gases, superfícies, clusters, sistemas bidimensionais). Poderia-se dizer que o potencial de Lennard-Jones é o potencial padrão para todas as investigações onde o foco é sobre questões fundamentais, ao invés de estudar as propriedades de um fenômeno específico. O trabalho de simulação feito sobre os sistemas de Lennard-Jones nos ajuda a compreender os pontos básicos em muitas áreas da física como a matéria condensada, a física atômica e a física molecular, e por isso a importância do potencial de Lennard-Jones não pode ser subestimada.

Capítulo 3

Trajетórias colisionais e o mecanismo de ionização

No capítulo anterior mostramos como fazer a determinação das funções de deflexão e seções de choque para a situação de colisões onde a interação projétil-alvo é descrita por um potencial, mesmo quando a forma do mesmo não permita obter expressões por funções analíticas explícitas para estas grandezas. Neste caso, tivemos que recorrer a métodos numéricos de determinação de raízes de equações, derivação e integração para o caso de nosso interesse, lidando com o potencial de Lennard-Jones. Aqui nos defrontamos com uma situação mais delicada do processo colisional dos íons quando pretendemos obter informações sobre seções de choque do processo levando em conta a transferência de carga elétrica durante a colisão. Neste caso, a ionização não pode ser incorporada a uma descrição lagrangeana, e não existe procedimento simples estabelecido para traduzir este mecanismo. Diante deste impasse, nossa opção foi o acompanhamento da trajetória dos íons estabelecendo passo à passo os estados de carga e polarização dentro de suposições simplificadoras como veremos a seguir. O objetivo aqui é simular as trajetórias colisionais analisando a evolução do estado de carga ponto a ponto para que quando alcançarmos o estado final da colisão tenhamos não apenas a energia, momento e ângulo de espalhamento conhecidos, mas também a carga do íon. Assim, estamos preparando o ferramental

necessário para a determinação da seção de choque para diferentes estados de carga dos íons no estado final. Nas perspectivas futuras deste trabalho, na seção 4.4 e no capítulo 5, retomaremos este ponto.

3.1 Cálculo da trajetória das partículas

Estamos interessados em obter a trajetória que seguem os íons/átomos interagentes por intermédio de um potencial de Lennard-Jones. Acompanhando as trajetórias dos íons na região de grande proximidade, focamos nossa atenção em determinar uma possível transferência de carga entre eles e como esta se processa. No capítulo anterior discutimos o processo colisional utilizando coordenadas relativas e do centro de massa, a partir da lagrangiana, $L = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 - V(r)$, que descreve o movimento de uma partícula de massa reduzida movendo-se em um potencial central com origem no centro de massa do sistema. Neste capítulo, de maneira diferente, utilizamos diretamente as equações de movimento das partículas no sistema de laboratório, descrito pelos vetores posição $r_1(t)$ e $r_2(t)$ do centro de cada um dos íons em interação. Estas essencialmente nos conduzem aos resultados, bem conhecidos, das equações de movimento newtonianas dada pelas forças de interação:

$$\begin{aligned} m_1 \ddot{\vec{r}}_1 &= \vec{F}_{12} = -\nabla V, \\ m_2 \ddot{\vec{r}}_2 &= \vec{F}_{21} = +\nabla V. \end{aligned} \quad (3.1)$$

Como sabemos, as forças F_{12} e F_{21} expressam a terceira lei de Newton, $F_{12} = -F_{21}$ e as trajetórias de dois íons de massas idênticas seriam simétricas em relação a origem e contidas em um dado plano. No nosso caso estamos tratando do espalhamento de íons de Carbono sobre Argônio, de massas bem distintas, o que quebra esta simetria.

O procedimento de cálculo utilizado para a determinação das trajetórias consiste em estabelecer a solução numérica do um sistema de equações diferenciais acopladas representadas pelas quatro equações de movimento de segunda ordem no tempo explicitadas nas Eqs. 3.2 para as acelerações dos íons. Estas por sua vez são transformadas em oito

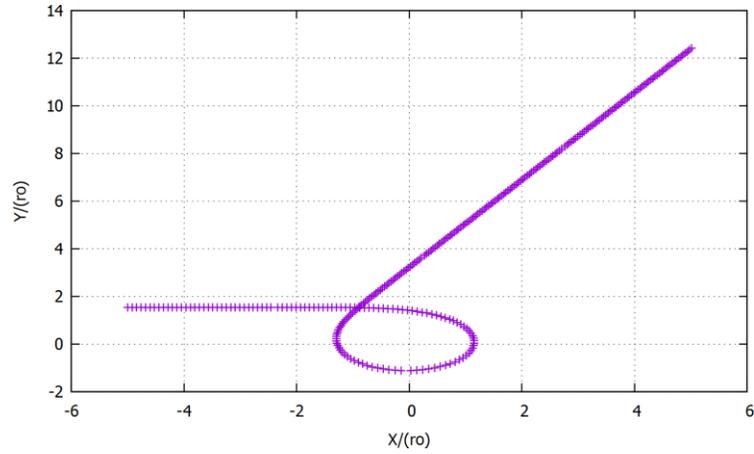
equações de primeira ordem acopladas para as componentes de velocidade e posição dos íons (Eqs. 3.3). O sistema é integrado por intermédio do algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4) [63, 64], onde a precisão e adequação do passo temporal são controladas pela conservação de momento e energia total do sistema.

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2x_c}{dt^2} &= \frac{F_x}{m_c} = \frac{F \cos \theta}{m_c} = \frac{F}{m_c} \frac{(x_c - x_a)}{r} \\
 \frac{d^2y_c}{dt^2} &= \frac{F_y}{m_c} = \frac{F \sin \theta}{m_c} = \frac{F}{m_c} \frac{(y_c - y_a)}{r} \\
 \frac{d^2x_a}{dt^2} &= -\frac{F_x}{m_a} = -\frac{F \cos \theta}{m_a} = -\frac{F}{m_a} \frac{(x_c - x_a)}{r} \\
 \frac{d^2y_a}{dt^2} &= -\frac{F_y}{m_a} = -\frac{F \sin \theta}{m_a} = -\frac{F}{m_a} \frac{(y_c - y_a)}{r},
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

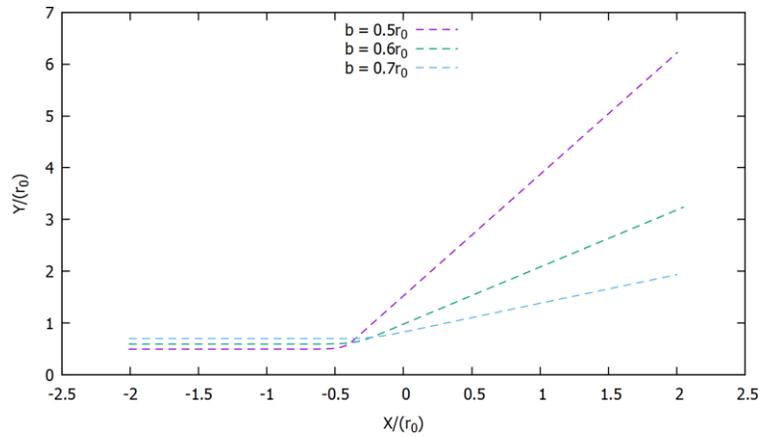
e

$$\begin{aligned}
 \frac{dv_{x_c}}{dt} &= \frac{F}{m_c} \frac{(x_c - x_a)}{r} \\
 \frac{dv_{y_c}}{dt} &= \frac{F}{m_c} \frac{(y_c - y_a)}{r} \\
 \frac{dv_{x_a}}{dt} &= -\frac{F}{m_a} \frac{(x_c - x_a)}{r} \\
 \frac{dv_{y_a}}{dt} &= -\frac{F}{m_a} \frac{(y_c - y_a)}{r} \\
 \frac{dx_c}{dt} &= v_{x_c} \\
 \frac{dy_c}{dt} &= v_{y_c} \\
 \frac{dx_a}{dt} &= v_{x_a} \\
 \frac{dy_a}{dt} &= v_{y_a}.
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Na figura 3.1, a título ilustrativo, mostramos duas trajetórias de colisões em energias bem distintas, extraídas do nosso cálculo para o potencial de Lennard-Jones, sendo o alvo fixado ($v_{x_a} = v_{y_a} = 0$). Os resultados são obtidos apenas como validação do código de trajetórias. Na parte (a) energias bem baixas mostrando inclusive a situação de aprisionamento do projétil na região de grande proximidade. Na parte (b) mostramos uma energia de nosso interesse com trajetórias em diferentes parâmetros de impacto. Nota-se que estamos apenas validando o código elaborado para utilizá-lo, incorporando o mecanismo de ionização discutido na próxima seção.



(a) Trajetória circular para $E = 0.84\varepsilon$ e $b = 1.54r_0$.



(b) Trajetórias para $E = 100\varepsilon$ e $b = 0.5r_0, 0.6r_0, 0.7r_0$.

Figura 3.1: Trajetórias seguidas pelo Carbono fixando o Argônio. As distâncias estão dadas em unidades de $r_0 = 2^{1/6}\sigma$ e as energias em unidades de ε , lembre-se que σ e ε são parâmetros dos que depende o potencial de Lennard-Jones (Eq. 2.27).

3.2 Troca de carga e critério de ionização

A troca de carga em processos de colisão de íons com átomos e moléculas foi descoberta desde 1923 quando Henderson durante o curso de experimentos nos quais partículas α (íon He^{++}) passavam através de telas absorventes de mica [43]. Observou-se que um grande número de átomos de He neutro emergiam do lado mais distante das telas, e

isto foi atribuído à captura de elétrons da estrutura da mica pelas partículas α . Esta interpretação dos experimentos foi confirmada e as medições estenderam-se à captura de elétrons por partículas α em ar e hidrogênio, por Rutherford em 1924 [65], Henderson em 1925 [66] e Jacobsen em 1926 [67].

Pouco tempo depois da descoberta da troca de carga em colisões íon/átomo, começaram a surgir modelos teóricos para descrever essas reações.

Em 1927 Thomas [68] elaborou um modelo teórico baseado na mecânica clássica, no qual supôs que os elétrons do alvo estavam em repouso e uniformemente distribuídos sobre a superfície de uma esfera ¹. O modelo requeria que ocorressem duas etapas sucessivas, na primeira o íon incidente com uma velocidade v_0 captura um elétron da superfície, e na segunda faz uma colisão com o núcleo alvo de tal maneira que é defletido com o elétron que foi junto. Este mecanismo produz uma seção de choque de captura, que diminui com a velocidade como v_0^{-11} . Esta dependência com o inverso da velocidade pode ser encontrada a partir da teoria quântica, sendo a variação de velocidade assintótica da seção de choque não-relativística [43].

Os primeiros modelos de troca de carga baseados na mecânica quântica, utilizaram os tratamentos de perturbação e foram introduzidos por Oppenheimer em 1928 e por Brinkman e Kramers em 1930 [34]. Esses últimos autores foram os primeiros a usar o fato de que, exceto nas energias mais baixas, o comprimento de onda associado ao movimento relativo da partícula pesada é muito pequeno em comparação com a distância em que a interação ocorre, como consequência o movimento das partículas pesadas segue uma trajetória newtoniana clássica, apenas o movimento eletrônico precisa ser tratado pela mecânica quântica. Em baixas energias a seção de choque de troca de carga é grande e um tratamento perturbativo não seria adequado. Quando a velocidade relativa das partículas pesadas é pequena, o tempo de interação é longo comparado com os tempos característicos de elétrons em órbitas de estados ligados. Nestas circunstâncias, o elétron a ser capturado é compartilhado entre os dois íons durante a colisão, formando uma quase-

¹Observe-se que nesta época o modelo do átomo nuclear e a própria mecânica quântica estavam em seus primeiros passos.

molécula. À medida que os íons se separam, as probabilidades de captura pelo projétil ou de permanecer associadas ao alvo são comparáveis.

As ideias apresentadas nos parágrafos anteriores constituem uma referência histórica do problema de troca de carga. Várias situações são possíveis na colisão entre átomos e íons como foram abordadas no capítulo anterior. Os problemas de troca de carga, ionização e excitação em geral são complexos. Muitas teorias tem sido desenvolvidas e se baseiam usando a mecânica quântica, a partir da solução da equação de Schrödinger para muitos corpos e a função de onda eletrônica pode ser expandida em uma série de orbitais atômicos ou moleculares, segundo a energia do projétil [34, 43].

Neste trabalho estamos fazendo uma mera tentativa para resolver as trajetórias incluindo a ionização. Nossa proposta no trabalho é aprender a determinar as seções de choque e as distribuições angulares com a questão da ionização incluída. Nesta tentativa vamos ver que nossa proposta de mecanismo vai se reduzir a um critério de ionização com base puramente geométrica.

O critério estabelece diferentes regiões de ionização em esferas concêntricas de raios r_i (Fig. 3.2), sendo r_i a distância de máxima aproximação em $b = 0$. Identificaremos a r_i como o raio de ionização para obter a i -ésima ionização. Assim para um determinado grau de ionização i a separação entre as trajetórias dos átomos tem que ser entre r_i e r_{i+1} .

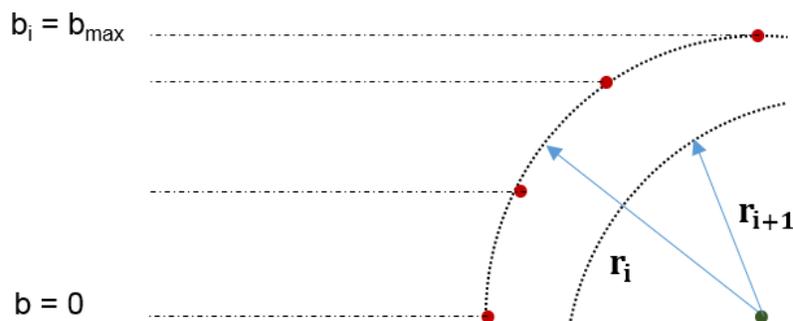


Figura 3.2: Representação geométrica dos raios de ionização.

Uma forma de inferir o critério geométrico acima é imaginar que a ionização acontece pela ação de forças elétricas que permitem arrancar um elétron de um dos átomos. O

elétron arrancado de um íon/átomo está sob a ação do campo elétrico do outro átomo, um campo monopolar e dipolar, e também está submetido à ligação do átomo a que pertence. As forças são dependentes de distância e são calculadas a cada ponto das trajetórias. No ponto onde a força elétrica monopolar e dipolar for maior que a força que mantém o elétron preso ao átomo, ocorrerá a ionização. As distâncias críticas onde acontece o processo de ionização são vinculadas aos raios de ionização.

Observamos que neste critério geométrico pode-se chegar a um nível de completa ionização em uma única colisão Carbono-Argônio. Consideraremos sempre a situação hipotética limite em que somente os elétrons do Carbono serão arrancados e transferidos para o Argônio ou escapam completamente.

3.2.1 O detalhamento do mecanismo de ionização ao longo das trajetórias

Em primeiro lugar, chamamos a atenção para o fato de que o potencial de Lennard-Jones apenas contempla, de forma aproximada, a repulsão de camadas eletrônicas quando os íons se aproximam além do regime atrativo e alcançam a vizinhança da região do *hard-core* (vide figura 2.7). Entretanto, na formulação deste potencial é assumido que os átomos estão eletricamente neutros, não são íons, nem acontece transferência de carga. No máximo estes podem estar polarizados com a mudança no centro de carga dos elétrons devido à proximidade das nuvens eletrônicas. Nós extrapolaremos este limite de aplicabilidade, considerando a utilização deste potencial mesmo quando os átomos estão ionizados. Obviamente incorporando o termo de monopolo na interação entre os íons e no caso de transferência de carga temos que relaxar o critério de estrita conservação de energia, do espalhamento por potencial. O mecanismo de ionização que se incorporou ao processo de espalhamento não é lagrangiano, introduziu uma mudança de configuração de carga, que claramente altera a energia eletromagnética do sistema.

Para dar continuidade a ideia do critério geométrico exibiremos as principais colocações envolvidas na formulação do critério.

Vamos considerar que o elétron que vai ser liberado está localizado na linha que une os centros [Fig. 3.3, ponto (1)], a uma distância r_C ($r_C = 0.705 \text{ \AA}$) do centro do Carbono.

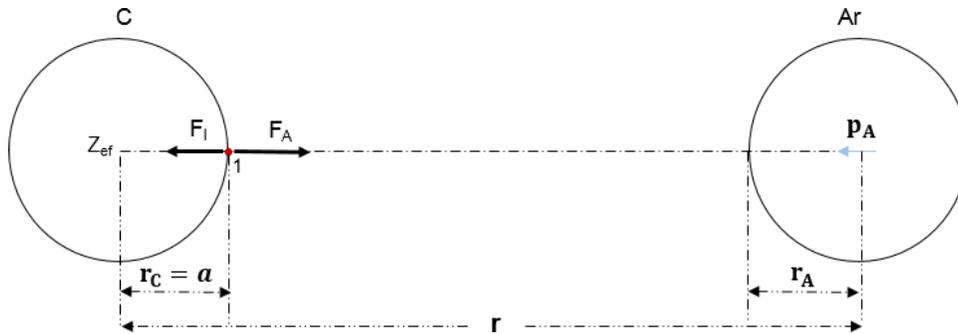


Figura 3.3: Representação da ionização do átomo de Carbono.

Consideramos que a liberação do elétron será resultante da interação entre ele e um monopolo-dipolo do argônio. Se os átomos estiverem bem próximos de forma tal que a força que age sobre o elétron devido ao argônio, F_A , é maior que a força que mantém este ligado no átomo, F_l , então o elétron vai ser liberado do átomo de Carbono, explicitamente:

$$\vec{F}_l < \vec{F}_A. \quad (3.4)$$

A força de ligação \vec{F} pode ser encontrada considerando que a atração do elétron ao núcleo depende da magnitude de uma carga nuclear efetiva Z_{ef} atuando sobre o elétron a uma distância média $r_C = a$. Cada elétron de um átomo é blindado do efeito de atração da carga nuclear pelos elétrons restantes e, principalmente, pelos elétrons dos níveis mais internos [69, 70]. Essa carga efetiva é quem assegurará ao elétron uma determinada energia de ligação no átomo.

Então temos uma força que mantém esse elétron no átomo como uma carga efetiva por causa da blindagem, que é dada por

$$F_l = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_{ef} \cdot e^2}{a^2}, \quad (3.5)$$

onde a é o raio médio do Carbono.

Podemos definir uma carga efetiva Z_{ef} a partir do valor da energia de ionização do

átomo/íon no estado de cara em que se encontra,

$$V_{ion} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_{ef} \cdot e^2}{a}. \quad (3.6)$$

Logo a força de ligação ficará descrita como

$$F_l = \frac{V_{ion}}{a}. \quad (3.7)$$

Foi assumido no critério de ionização que é o Carbono que perde elétrons e o Argônio vai adquirindo carga e se polarizando. O elétron arrancado do Carbono só vai ser capturado pelo Argônio quando os átomos estiverem muito próximos, ou o que é o mesmo que assumir uma distância de separação mínima entre seus centros, λ . Esta transferência eletrônica é uma simplificação extrema quando não queremos nos envolver com um cálculo microscópico baseado em uma abordagem quântica da transferência eletrônica.

3.2.2 Formação de dipolos elétricos atômicos na ionização

Inicialmente temos o íon de Carbono com carga -1 e o Argônio com carga nula. O íon de Carbono gera um campo elétrico ao redor (similar ao de uma carga) que produz uma distorção na densidade eletrônica atômica do Argônio, atraindo as cargas elétricas positivas em um sentido e repelindo as cargas negativas (Fig. 3.4).

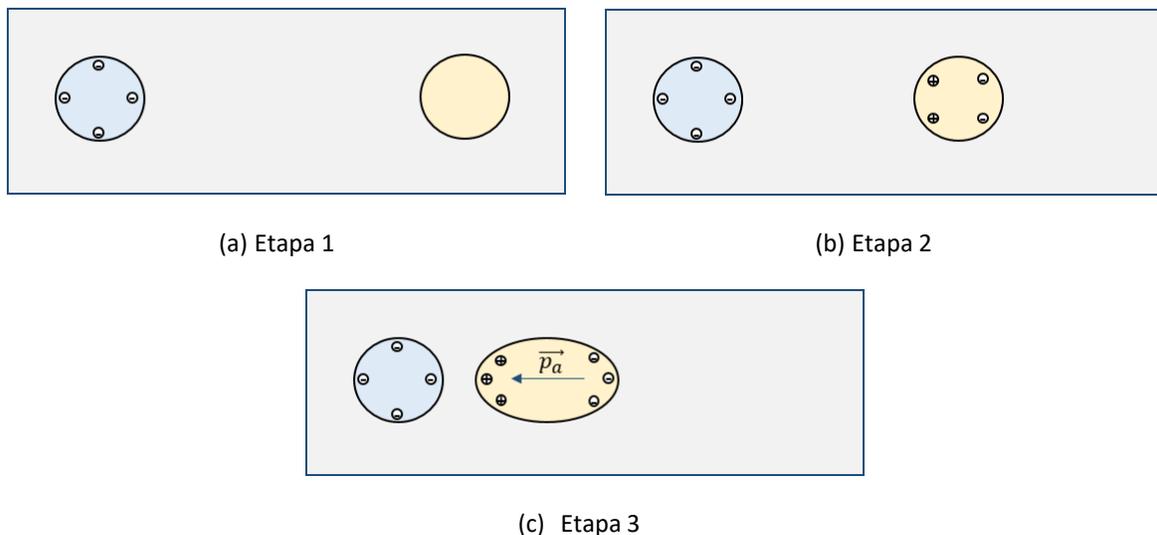


Figura 3.4: Indução de dipolo elétrico no átomo de Argônio.

O campo elétrico do íon de Carbono produz um deslocamento das cargas positivas do Argônio em um dado sentido e as cargas negativas no sentido oposto, como resultado o centro de cargas positivas e negativas não coincidem e surge um momento dipolar elétrico induzido no Argônio (dipolo induzido), proporcional à intensidade do campo elétrico do íon de Carbono,

$$p_A = \alpha_A \cdot E_C, \quad (3.8)$$

onde α_A é a polarizabilidade do Argônio e E_C é o campo elétrico do íon de Carbono, $E_C = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_C}{r^2}$ com a distância entre os centros dos átomos sendo r (Fig. 3.3).

A polarizabilidade depende da estrutura atômica e iônica. Consideramos que a polarizabilidade não muda para o Argônio, o que não é real porque ela muda com a ionização. A tabela 3.1 mostra as polarizabilidades para alguns átomos e íons [71].

Tabela 3.1: Polarizabilidade atômica e iônica ($\alpha/4\pi\epsilon_0$ em $10^{-30} m^3$).

Átomo	H	He	Li	C	O	Ne	Na	Al	Ar	K
α	0.67	0.20	24.30	1.67	0.80	0.40	24.08	6.80	1.64	43.40
Íon			Li⁺	C⁴⁺	O²⁻		Na⁺	Al³⁺		K⁺
α			0.03	0.001	3.88		0.80	0.29		0.83

Vamos considerar só a geração de um dipolo no Argônio induzida pelo Carbono. Aqui desprezamos o fato que o dipolo de Argônio induzido tem também uma ação indutora sobre o Carbono. Nota-se que o dipolo induzido no Argônio é proporcional a r^{-2} com uma pequena contribuição à configuração dipolar de Argônio. Continuando o processo iterativo, a contribuição deste último dipolo na configuração dipolar do Carbono é proporcional a r^{-5} , completamente desprezível.

O dipolo induzido no Argônio irá gerar um campo elétrico ao seu entorno.

O campo elétrico que sente o elétron de Carbono, localizado no ponto (1) da figura 3.3, é dado por:

$$E_A = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2p_A}{(r-a)^3}, \quad (3.9)$$

onde usamos a equação 2.29 do capítulo 2. Nessa situação o fator 2 se deve ao ângulo entre o vetor unitário \hat{n} (situado na direção radial que liga o dipolo ao ponto (1)) e o vetor momento dipolar elétrico $p \rightarrow A$ (situado na direção da reta que une os centros de ambas partículas) é 0° ou 180° .

A força F_A na figura 3.3 que atua entre um elétron do Carbono e um dipolo do Argônio pode ser escrita como:

$$F_A = -e \cdot E_A, \quad (3.10)$$

e para que aconteça a ionização ela tem que ser maior que a força de ligação do elétron.

Agora estamos em condições de escrever as forças resultantes no ponto (1), substituindo as equações 3.7 e 3.10 na condição de ionização 3.4:

$$\frac{V_{ion}^i}{a} < \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2\alpha_A e q_C}{r^2 (r-a)^3}, \quad (3.11)$$

nota-se que a carga q_C que aparece aqui é a própria do Carbono que induz um dipolo no Argônio, não é a carga efetiva do núcleo porque os átomos estão longe e não estamos discutindo a ligação dos elétrons.

As energias de ionização reportadas na literatura estão dadas para átomos eletricamente neutros. Na condição inicial temos íons C^- , obtidos pela ionização com a fonte de Cs^+ . Para resolver esta questão estabelecemos que a energia de ionização do sétimo elétron é menor que a primeira energia de ionização quando o átomo está neutro, em nosso caso o valor escolhido foi $5 eV$.

Na tabela 3.2 são apresentados os valores de energia de ionização para o Carbono neutro. Os números em negritos correspondem aos níveis de ionização, enquanto os outros valores são relacionados com as energias de ionização.

Tabela 3.2: Valores de energias de ionização em eV para o Carbono.

1	2	3	4	5	6
11.26	24.38	47.89	64.49	392.09	489.99

Quando o Argônio está carregado temos que incluir o termo de interação desse monopolo com o elétron do Carbono. Consequentemente a força que atuará sobre o elétron terá uma contribuição monopolar e dipolar

$$F_A = F_m + F_d, \quad (3.12)$$

com

$$F_m = -e \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_A}{(r-a)^2} \quad \text{e} \quad F_d = -e \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2p_A}{(r-a)^3}, \quad (3.13)$$

sendo os termos entre colchetes o campo elétrico de um monopolo e de um dipolo.

Logo podemos prosseguir como na equação 3.11 e obtemos que

$$\frac{V_{ion}^i}{a} < -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_A}{(r-a)^2} + \frac{2\alpha_A q_C}{4\pi\epsilon_0 r^2 (r-a)^3}. \quad (3.14)$$

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Neste capítulo apresentaremos os resultados referentes ao conteúdo dos capítulos dois e três. Mostraremos as funções de deflexão e seções de choque com o objetivo de explorar um cálculo de seção de choque semianalítico, sem a inclusão das trajetórias dos íons e sem mecanismo de ionização. Estes resultados serão úteis para checar o código de Monte Carlo a ser elaborado quando reduzido a esta situação mais simples. Nas seções 4.3 y 4.4 apresentamos e discutimos resultados obtidos com a introdução do mecanismo de ionização estabelecido no capítulo 3. Resultados para diferentes energias e parâmetros de impacto são mostrados para os níveis de ionização ao longo de trajetória. Chamamos a atenção para a aproximação feita ao considerar que o potencial de interação não seria modificado. Na seção 4.4 e Capítulo 5 deixaremos descrito como será encaminhada a modificação desta aproximação na continuação futura deste trabalho.

4.1 Resultados para as funções de deflexão

Nesta dissertação os resultados foram obtidos numericamente, elaboramos códigos computacionais usando a linguagem de programação Pascal e compilados nos sistemas operacionais Windows e Linux com o Free Pascal 3.0.0. Os gráficos foram feitos com os programas Gnuplot 5.0 e OriginPro 2016.

Seguindo a metodologia proposta no capítulo dois para a determinação numérica da função de deflexão escrevemos um código para calculá-la. Aqui utilizamos energias de colisão, eb , iguais a 0.5ε , 1ε e 2ε , onde ε é a energia correspondente à profundidade do poço de potencial de Lennard-Jones do sistema neônio-neônio (vide Tab. 2.1). O parâmetro de impacto muda de 0 a 9\AA com variação constante de 0.1σ (σ é o parâmetro linear do potencial mostrado na figura 2.7). A integral da equação 2.21 foi resolvida dividindo o intervalo de integração $[x_0, x_f]$ em subdivisões iguais de largura h , ou ainda,

$$h = \frac{x_f - x_0}{n}, \quad (4.1)$$

com n sendo o número de subdivisões do intervalo $[x_0, x_f]$, adotado como 10^9 ; x_0 sendo o limite inferior da integral, igual à distância de máxima aproximação entre os átomos e calculado com um erro menor que 10^{-15} . Sendo x_f o limite superior da integral, escolhido como $10^4 x_0$ representando infinito.

A figura a seguir 4.1 apresenta os nossos resultados numéricos para as funções de deflexão. Podemos verificar que na medida que aumentamos a energia cinética inicial da partícula incidente, o valor mínimo da curva função deflexão sofre um deslocamento para a esquerda e se torna menos negativo.

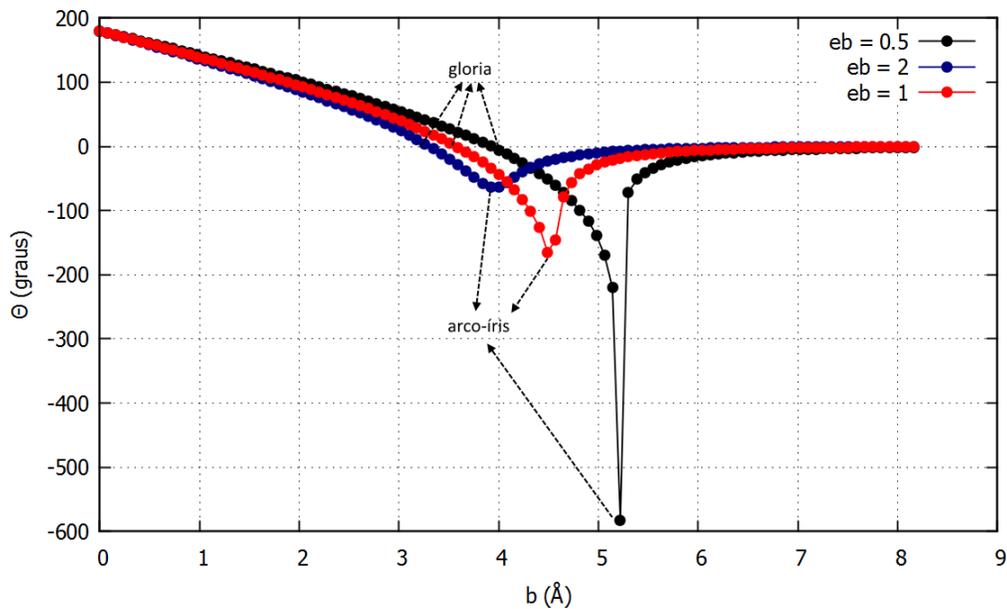


Figura 4.1: Função de deflexão para colisões de diferentes energias entre dois átomos de Neônio.

Analisando o gráfico anterior constatamos que o ângulo de deflexão adquire valores positivos e negativos na medida que muda o parâmetro de impacto. Quando o parâmetro de impacto for zero o ângulo de deflexão é 180° , que corresponde à situação de colisão frontal e o espalhamento da partícula incidente será na direção oposta do seu movimento inicial. Com o aumento do parâmetro de impacto o ângulo de deflexão diminui, isso se deve ao fato que para pequenos valores de parâmetros de impacto o efeito das forças de atração prevalecem sobre as repulsivas. Seguindo essa condição do aumento do parâmetro de impacto, o ângulo de deflexão atingirá o valor nulo, conhecido como efeito *gloria*, onde o efeito das forças de atração e repulsão serão iguais. Para parâmetros de impacto maiores que o correspondente ao ângulo de deflexão nulo, encontramos valores de ângulos negativos que alcançam um valor mínimo, nesse trajeto o efeito da força atrativa é maior que a repulsiva, essa condição onde o ângulo de deflexão tem o valor mínimo é conhecida como efeito *arco-íris*. Na sequência, o efeito das forças atrativas e repulsivas no movimento dos átomos diminui, até que o ângulo de deflexão tenda a zero e não haverá mais deflexão, devido a limitações do alcance do potencial.

Também notamos que para energias muito baixas a função deflexão apresenta ângulos negativos que podem ser menores que 360° , no qual o projétil orbita em torno do alvo até sair da região de colisão. Se a energia (veja figura 3.1(a)) cinética inicial for suficientemente grande a curva função de deflexão terá um comportamento semelhante à curva que se obtém no espalhamento de átomos por um potencial de esferas rígidas, só existirão ângulos de deflexão maiores que zero, como mostramos na figura 4.2.

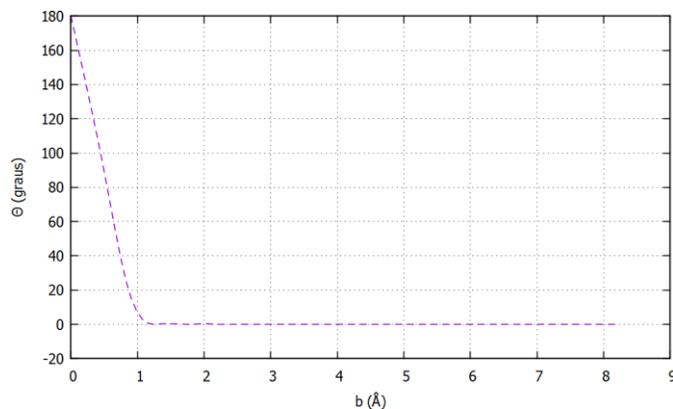


Figura 4.2: Função de deflexão para a colisão de 100 keV entre dois átomos de Neônio.

Os resultados obtidos numericamente (Fig. 4.1) das funções de deflexão para diferentes energias reproduzem aqueles reportados na referência [37]. Existe uma boa concordância entre os resultados calculados e os da literatura (Fig. 4.3), de maneira qualitativa as curvas apresentam o mesmo comportamento. No caso quantitativo, tomando como exemplo o espalhamento com energia 2ε , percebemos que o ângulo de deflexão é nulo (efeito *gloria*) quando o parâmetro de impacto é aproximadamente 3.2 \AA , enquanto o ângulo de deflexão é mínimo (efeito *arco-íris*) em torno de -60° com um parâmetro de impacto de 3.9 \AA

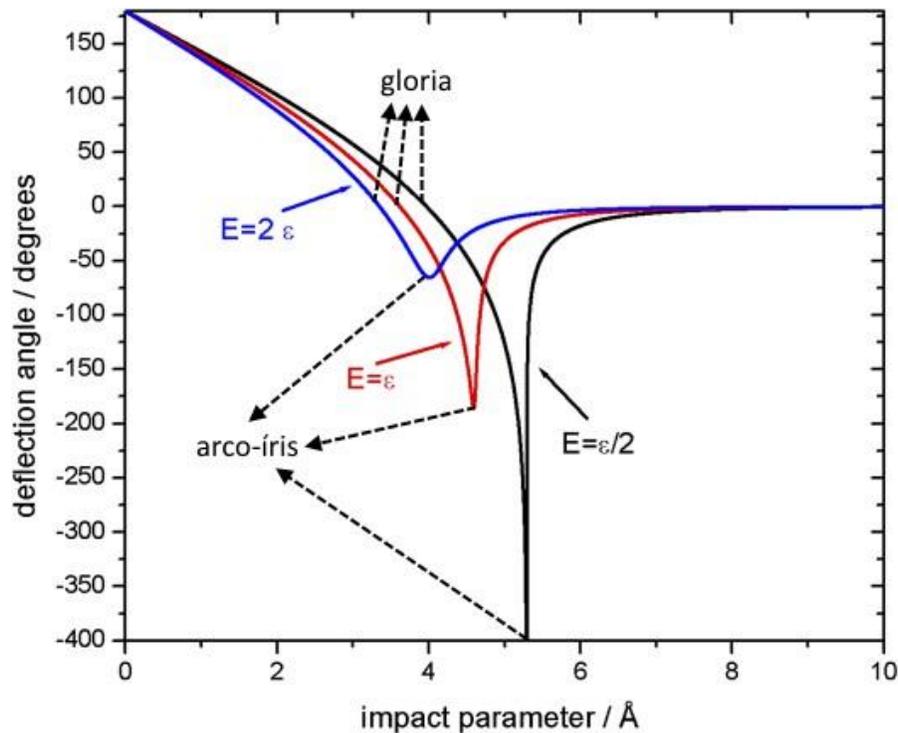


Figura 4.3: Função de deflexão para a colisão entre dois átomos de Neônio, segundo a literatura. Figura extraída de [37].

Pelos resultados apresentados anteriormente, concluímos que o código está habilitado para ser usado em próximas etapas do trabalho.

4.2 Resultados para as seções de choque

Mediante o método proposto no capítulo dois referente à determinação da seção de choque diferencial, calculamos numericamente essa grandeza de interesse. Para isso usamos como ponto de partida o algoritmo da função de deflexão elaborado na seção anterior. Nestes cálculos também utilizamos as energias de colisão 0.5ε , 1ε e 2ε . Na figura 4.4 mostramos os resultados das seções de choque diferencial para o espalhamento de dois átomos de neônio.

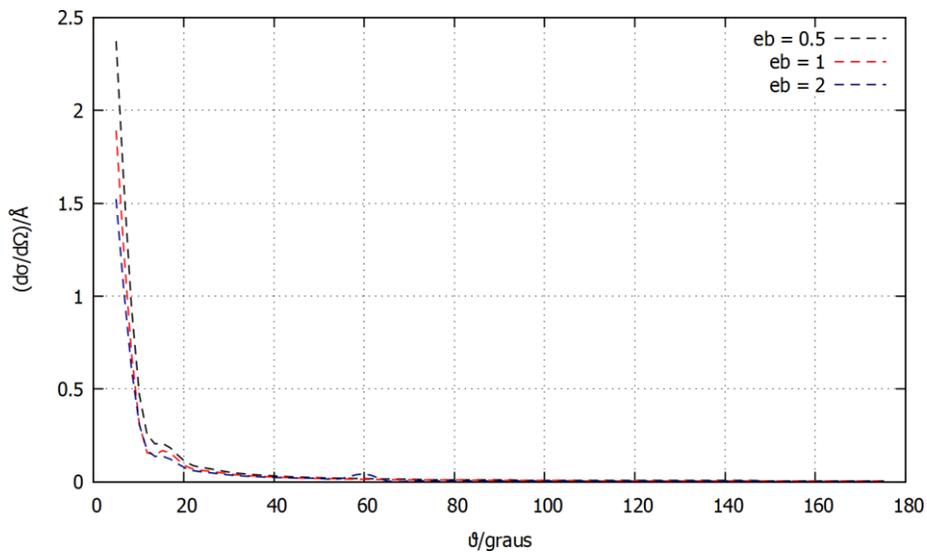
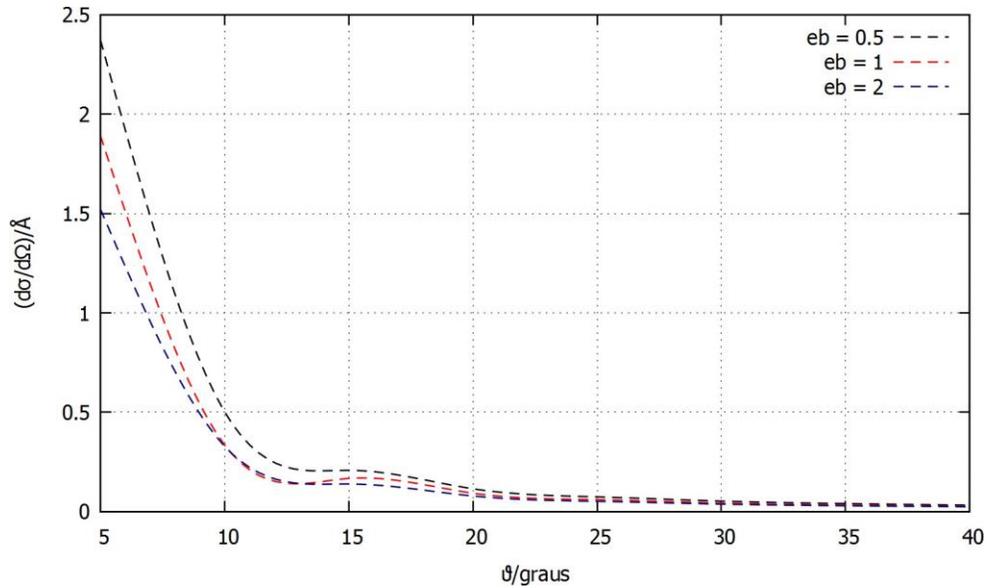


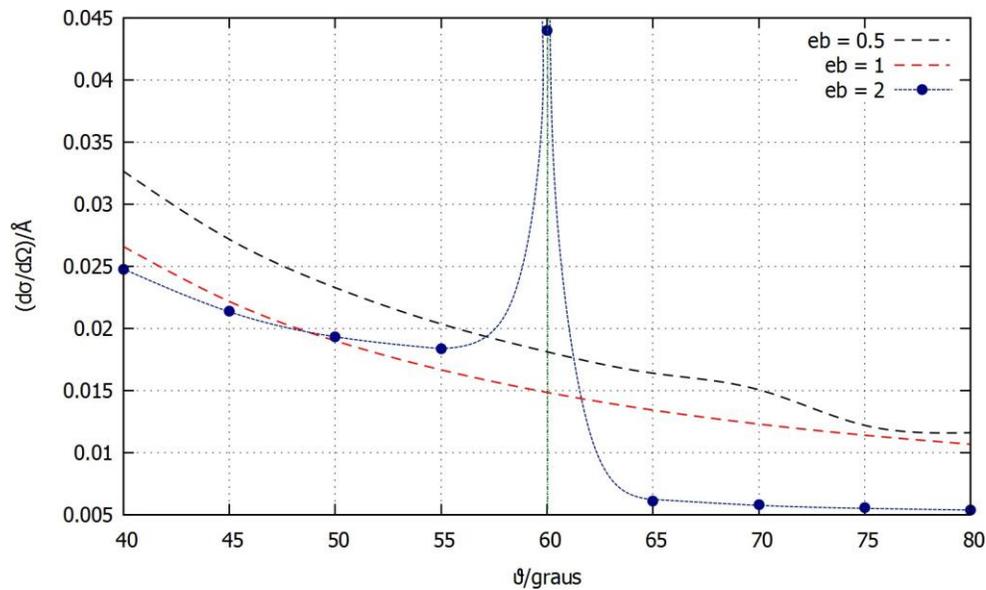
Figura 4.4: Seção de choque diferencial para a colisão de dois átomos de Neônio.

Nessa escala de ângulos de espalhamento notamos a dificuldade em diferenciar as curvas, devido ao fato de se sobreporem, sendo assim, para uma melhor análise, podemos dividi-las em intervalos de ângulos. Primeiramente, escolhemos o intervalo de 5° a 40° (Veja 4.5(a)) e em seguida o intervalo de 40° a 80° (Veja 4.5(b)).

Concluindo o procedimento anterior poderemos perceber as formas das curvas seções de choque. Observamos que a seção de choque diminui com o aumento da energia e o aumento do ângulo de espalhamento, portanto a probabilidade de espalhar o átomo com uma energia cada vez maior será reduzida, o que é o mesmo dizer que a trajetória do átomo será alterada levemente.



(a) Ângulos de espalhamento entre 5° e 40°.



(b) Ângulos de espalhamento entre 40° e 80°.

Figura 4.5: Seção de choque diferencial em intervalos de ângulos de espalhamento.

Na figura 4.5(b) existe um crescimento assintótico da seção de choque para a energia 2ε quando o ângulo de espalhamento é aproximadamente 60° , o que corresponde a uma descontinuidade da seção de choque diferencial porque $db/d\vartheta = 0$, e isto é referente ao efeito *arco-íris*, como vimos ao determinar a função de deflexão, a qual apresentava um

valor mínimo. Nos cálculos numéricos não foram incluídos os ângulos 0° e 180° porque a seção de choque fica indeterminada, $\sin \vartheta = 0$, e esta singularidade é característica do efeito *gloria*.

Estes resultados de seção de choque diferencial podem ser comparados aos obtidos na referência [37]. Vemos que as seções de choque têm comportamento semelhantes, porém seus valores diferem e está dado pela exatidão do cálculo numérico. O número de pontos de análise se têm que aumentar para obter resultados satisfatórios, em especial os pontos que rodeiam a singularidade da seção de choque.

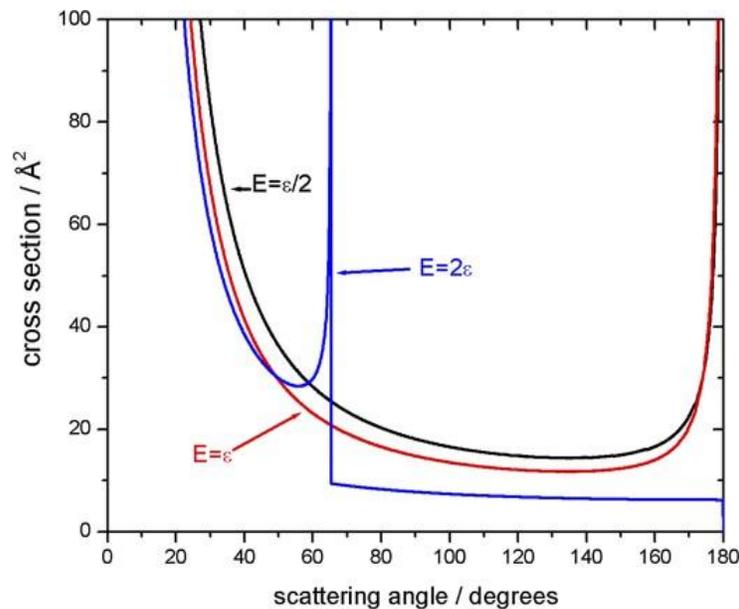


Figura 4.6: Seção de choque diferencial em função do ângulo de espalhamento para a colisão de dois átomos de neônio, segundo a literatura. Figura extraída de [37].

Até aqui mostramos como determinar as funções de deflexão e seções de choque quando o resultado é a ausência de ionização. Isto nos permite ter noção do problema da ionização e como enfrentá-lo. Os resultados servem para validar o que foi feito no capítulo dois em termos de derivada e integração numérica, cuidando para não haver singularidades.

4.3 Distâncias e limiares de energia para a ionização

No capítulo 3 as trajetórias sem ionização do Carbono foram apresentadas de maneira ilustrativa. Nesta seção incorporaremos o critério de ionização dentro das equações do movimento dos átomos, considerando que o potencial de interação não será modificado.

A partir dos arquivos de saída do código que calcula as trajetórias das partículas, podemos encontrar as distâncias de separação mínima entre os átomos (raio de ionização), nas quais começa a ionizar o átomo de Carbono. As energias iniciais utilizadas foram 50, 100, 150, 200, 250 e 300 keV respectivamente com um parâmetro de impacto zero. Nessas faixas de energia se produzem a ionização total do átomo de Carbono, ficando completamente sem elétrons.

Tabela 4.1: Distâncias de máxima aproximação entre os átomos onde surgem os efeitos da ionização em diferentes energias iniciais do projétil.

<i>Ionização</i>	1	2	3	4	5	6	7	<i>Energia (keV)</i>
<i>Distância (Å)</i>	1.923	1.654	1.332	1.331	1.330	1.238	1.237	100
	1.921	1.654	1.332	1.332	1.329	1.239	1.237	150
	1.921	1.654	1.332	1.330	1.328	1.238	1.236	200
	1.922	1.653	1.331	1.329	1.327	1.238	1.236	250
	1.921	1.653	1.331	1.329	1.327	1.237	1.235	300
<i>Médias</i>	1.922	1.654	1.332	1.330	1.328	1.238	1.236	

Para as diferentes distâncias apresentadas com o mesmo grau de ionização calculamos uma média aritmética e assim dispomos de um valor referencial aproximado. Mediante os resultados demonstrados na tabela 4.1 percebemos que a ionização só será possível se a separação entre os centros dos átomos for menor que $r_1 = 1.922 \text{ \AA}$. De modo geral, a ionização ocorrerá quando o projétil tenha energia suficiente para alcançar a distância $r_1 = 1.922 \text{ \AA}$.

Com os resultados das distâncias médias podemos calcular as energias iniciais que o projétil necessita para alcançar determinado grau de ionização. Para isso usamos a equação 2.22 do capítulo 2 e isolamos a variável E ,

$$E = \frac{V(r)}{1 - \frac{b^2}{r^2}}. \quad (4.2)$$

Neste caso estamos tratando o choque frontal, parâmetro de impacto zero, as energias iniciais são determinadas atribuído as distâncias médias na função potencial de Lennard-Jones.

Tabela 4.2: Limiares de energia do átomo de Carbono que vão produzir ionização.

<i>Ionização</i>	<i>Distâncias</i> (Å)	<i>Energias</i> (eV)
1	1.922	22.852
2	1.654	141.262
3	1.332	1919.577
4	1.330	1944.756
5	1.328	1981.300
6	1.238	4619.037
7	1.236	4697.470

Como podemos observar na tabela 4.2, a energia inicial para ionizar o átomo de Carbono é de 22.852 eV, em caso de incidência frontal. Para outros parâmetros de impacto a energia para que ionize o átomo será diferente que a calculada anteriormente, só poderíamos dizer que o átomo ionizará se com a nova energia alcançar alguns dos raios de ionização.

Outro ponto importante a analisar seria conhecer quais são os parâmetros de impacto que produzem algum grau de ionização. Pelas condições geométricas da figura 3.2 a ionização i ocorrerá quando o parâmetro de impacto for menor que o raio de ionização r_i correspondente. Quando o parâmetro de impacto for maior que $r_1 = 1.922 \text{ \AA}$ não teremos ionização.

4.4 Trajetórias com ionização

Nesta seção daremos continuidade aos resultados apresentados na seção anterior, ilustrando as trajetórias dos átomos/íons e acompanhando a mudança no tempo do grau de ionização do Carbono. As trajetórias foram calculadas resolvendo o sistema de equações diferenciais acopladas (Eq. 3.3). A cada passo temporal se verificou a conservação da energia e momento com um erro de 10^{-6} . As energias iniciais do Carbono foram escolhidas como 100, 200 e 300 *keV* respectivamente, enquanto o Argônio consideramos que inicialmente está em repouso e situado na origem do sistema de coordenadas. Para cada energia de Carbono utilizamos os parâmetros de impacto 1 Å, 1.5 Å a 2 Å.

A seguir, mostraremos as trajetórias do Carbono e Argônio com a inclusão da ionização.

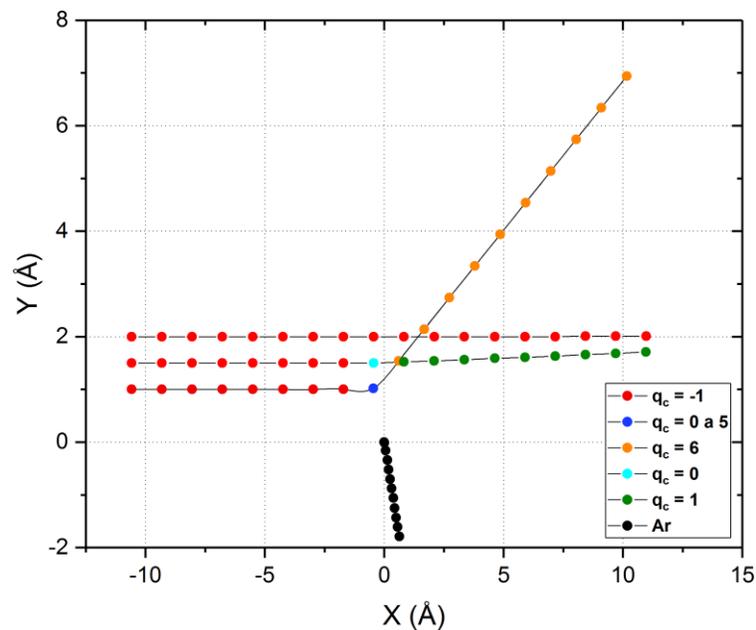


Figura 4.7: Trajetórias seguidas pelos átomos de Carbono e Argônio para energia de 100 *keV*. A legenda ilustra a mudança dos estados de carga do Carbono. O movimento do Argônio está representado na cor preta.

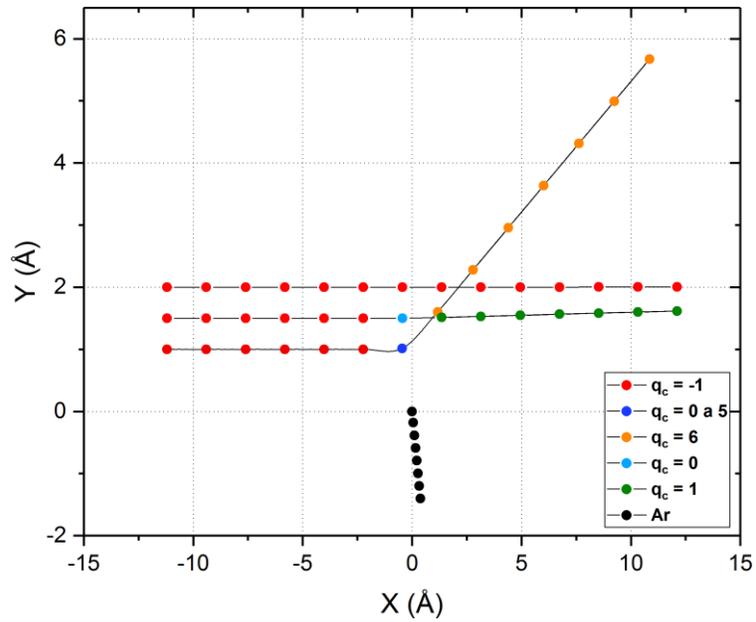


Figura 4.8: Trajetórias seguidas pelos átomos de Carbono e Argônio para energia de 200 keV . A legenda ilustra a mudança dos estados de carga do Carbono. O movimento do Argônio está representado na cor preta.

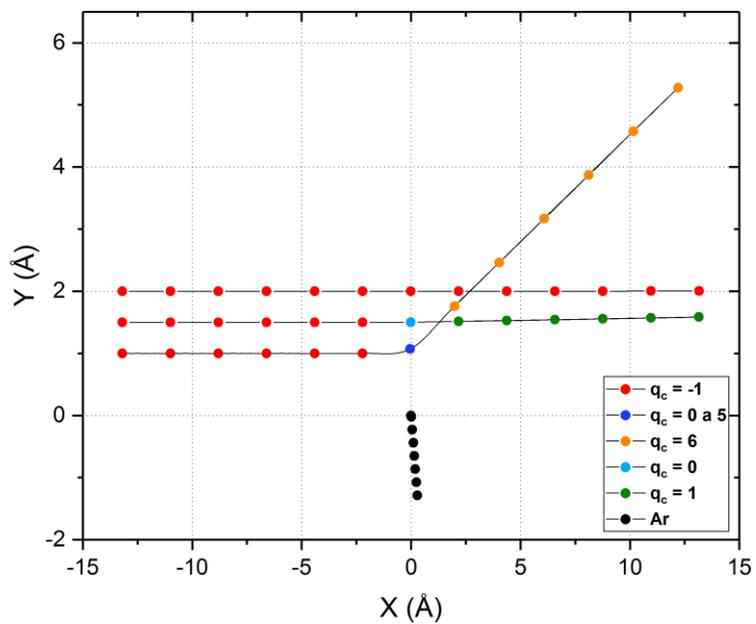


Figura 4.9: Trajetórias seguidas pelos átomos de Carbono e Argônio para energia de 300 keV . A legenda ilustra a mudança dos estados de carga do Carbono. O movimento do Argônio está representado na cor preta.

Nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9 notamos a mudança da ionização para diferentes parâmetros de impacto e energias. A ionização ocorre na região de máxima aproximação entre os átomos. Para o parâmetro de impacto igual a 1 \AA o átomo de Carbono é totalmente ionizado. Ao aumentar o parâmetro de impacto até 1.5 \AA o grau de ionização diminui, o Carbono terá estado de carga final +1. Se continuamos aumentando o parâmetro de impacto até 2 \AA , não acontece nenhuma ionização, o qual está de acordo com o concluído na seção anterior, onde não haveria ionização para parâmetros de impacto maiores que $r_1 = 1.922 \text{ \AA}$. Se fixamos o parâmetro de impacto e aumentamos a energia inicial do Carbono, veremos como o ângulo de espalhamento diminui. Para uma melhor visualização veja a tabela a seguir 4.3.

Tabela 4.3: Dependência do ângulo de espalhamento com a energia.

<i>Parâmetro de impacto (Å)</i>	1	1.5	2	<i>Energia (keV)</i>
<i>Ângulo de espalhamento (grau)</i>	29.5	1.1	$3.5 \cdot 10^{-2}$	100
	22.8	0.6	$1.7 \cdot 10^{-2}$	200
	19.0	0.4	$1.1 \cdot 10^{-2}$	300

Durante o desenvolvimento deste trabalho, consideramos o caso mais simples onde o potencial de interação não seria modificado, o que não é razoável, pois quando acontece a ionização a redistribuição de cargas muda o potencial, portanto temos que incluir as interações monopolo-monopolo e dipolo-monopolo, como é demonstrado abaixo

$$V_{int} = 4\epsilon \frac{\sigma^{12}}{r} - \frac{\sigma^6}{r} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qcq_A}{r^2} - \frac{qc^2\alpha_A}{(4\pi\epsilon_0)^2 r^4}, \quad (4.3)$$

sendo o primeiro termo o potencial de Lennard-Jones, o segundo o potencial de interação entre duas cargas e o terceiro o potencial de interação entre uma carga e um dipolo induzido [56, 72].

Os resultados apresentados neste capítulo constituem a ferramenta para passar a outra etapa do trabalho, onde determinaremos as seções de choque de ionização a partir da utilização do método de Monte Carlo.

Capítulo 5

Conclusões e Planos de Continuidade do Trabalho

Nesta dissertação desenvolvemos um modelo para descrever o processo de ionização entre íon de Carbono e átomo de Argônio, que interagem mediante um potencial de Lennard-Jones. Discutimos a questão da ionização, usando uma aproximação ainda grosseira baseada apenas numa abordagem clássica para a ligação eletrônica. Este aspecto exige um aprofundamento sobre o tema, pois se trata de um assunto muito complexo e que necessita ser aprimorado, no que se refere ao critério de ionização. Devemos buscar uma proposta que tenha mais conteúdo físico da teoria atômica.

Sem a questão da ionização desenvolvemos um cálculo clássico de seção de choque. Estes resultados foram calculados numericamente, as funções de deflexão e seções de choque para átomos de neônio, permitindo a comparação com cálculos na literatura. Estabelecemos os raios de ionização através de um critério de forças, que vincula as forças elétricas e de ligações atômicas. Encontramos os limites de energia que produzem a ionização quando estamos tratando o choque frontal. Vimos as trajetórias dos átomos de Carbono e Argônio para diferentes energias de colisão e parâmetros de impacto, incluindo um critério de ionização tentativa. Deixamos descrito como deve o potencial de interação ser modificado levando em conta outras interações.

Os resultados obtidos permitem criar as bases para determinar as seções de choque do Carbono-Argônio com ionização. Para a determinação da seção de choque pretendemos em um futuro próximo usar o método de Monte Carlo, o qual consiste em sortear os valores de parâmetros de impacto fixada a energia, simulando as trajetórias do Carbono até a região assintótica com uma precisão adequada. Assim fixaremos um determinado ângulo ϑ de saída na região assintótica e contaremos quantas vezes um átomo do feixe sai com um estado de carga q_i neste ângulo. As seções de choque diferenciais em um intervalo de energia e ângulo serão definidas a partir de uma probabilidade, assim como o número de vezes que sairá um estado de carga q_i sob um ângulo ϑ e $\vartheta + d\vartheta$ dividido pelo número total de trajetórias simuladas e multiplicado pela área efetiva que compreende a distribuição dos parâmetros de impacto sorteados,

$$\frac{d\sigma}{dE d\Omega}_{q_i} = \frac{N(q_i, \Delta E, \Delta\Omega) A(b_{min}, b_{max})}{N_T} \quad (5.1)$$

O grau de ionização i que alcançará o Carbono será a probabilidade de obter um r entre r_i e r_{i+1} , se r ficar dentro de alguns raios de ionização contaremos como um evento positivo (acontecerá a ionização) com carga correspondente à região onde ioniza, em caso contrário será um evento nulo e sem ionização. Ao final alcançaremos a seção de choque de ionização para uma dada energia varrendo o parâmetro de impacto por todos os valores da distribuição inicial.

Embora o critério de ionização tenha sido introduzido como problema que enfrentaremos em termos da determinação da seção de choque, podemos ainda continuar a utilizá-lo num estudo exploratório dos efeitos sobre a trajetória quando as cargas dos íons são alteradas. Isto pode ser feito incorporando as interações monopolo-monopolo e monopolo-dipolo nas equações de movimento dos íons.

Se eliminamos o critério de ionização de um futuro cálculo de Monte Carlo, os resultados das seções de choque diferenciais poderão ser comparadas aos calculados na seção 4.2. Este procedimento nos permitirá validar a metodologia do cálculo de seção de choque mediante o método de Monte Carlo.

Além das seções de choque poderemos obter a distribuição angular do Carbono pois

contaremos com a função deflexão para cada parâmetro de impacto em uma determinada energia.

Este trabalho de dissertação terá continuidade no nosso programa de doutorado, pois aqui apenas ferramentas básicas foram criadas para o estudo em questão. Em próximos trabalhos iremos melhorar o critério de ionização e usaremos o método de Monte Carlo para determinar as seções de choque diferenciais em energias e ângulos. Estes resultados servirão como dados na difusão de íons de carbono em diferentes condições de concentração, temperatura e pressão do gás contido na câmara de “stripping” do acelerador. Os resultados finais serão comparados com medições feitas no acelerador SSAMS da UFF, quando esta linha estiver ativada. Portanto, a proposta de continuidade do trabalho é determinar as seções de choque pois não temos dados experimentais das mesmas, para o uso de um código de simulação que faça a difusão de átomos/íons, por exemplo, o MCNP ou o GEANT.

Apêndice A

Código computacional

A.1 Cálculo da função de deflexão e da seção de cho-que diferencial

```
1
2 program test;
3
4 uses
5     math;
6
7 type
8     uno = array [1..1000] of extended;
9
10 var
11     b,theta,theta1,theta2,dtheta_db,scd1,scd2: uno;
12     xo1,yo1,xo2,yo2: uno;
13     a1,c1,a2,c2: uno;
14     i,p,l,j,m,u1,u2: integer;
15     eb,dbb,n,vmin: extended;
```

```

16         rmin,rmax,int: extended;
17         rmin1,rmax1,int1: extended;
18         rmin2,rmax2,int2: extended;
19         v1,vi1,v2,vi2: uno;
20     m1,m2,m3: text;
21
22     //Raiz da equação por método de Newton-Raphson//
23     {Função}
24     function f(x,b,eb: extended): extended;
25     begin
26         f := eb*power(x,12) - eb*b*b*power(x,10) + 4*power(x,6) - 4;
27     end;
28
29     {1era Derivada}
30     function g(x,b,eb: extended): extended;
31     begin
32         g := 12*eb*power(x,11) - 10*eb*b*b*power(x,9) + 24*power(x,5)
33             ;
34     end;
35
36     {2da Derivada}
37     function k(x,b,eb: extended): extended;
38     begin
39         k := 132*eb*power(x,10) - 90*eb*b*b*power(x,8) + 120*power(x
40             ,4);
41     end;
42
43     {Método de Newton-Raphson}
44     function raiz(b,eb: extended): extended;
45     var
46         xa,xb: boolean;
47         xo,xf,xant,x,Error: extended;

```

```

46  begin
47      xo := 1E-15;
48      xf := 1 + b;
49      xant := 0;
50      x := 0;
51      xa := false;
52      xb := false;
53      if (abs(f(xo,b,eb)*k(xo,b,eb))/sqr(g(xo,b,eb)) < 1) then xa
        := true;
54      if (abs(f(xf,b,eb)*k(xf,b,eb))/sqr(g(xf,b,eb)) < 1) then xb
        := true;
55      if (xa = xb) and (xa = true) then xant := xo;
56      if (xa = true) then xant := xo;
57      if (xb = true) and (xa = false) then xant := xf;
58      if (xa = true) or (xb = true) then
59          begin
60              repeat
61                  x := xant - f(xant,b,eb)/g(xant,b,eb);
62                  Error := abs(x-xant);
63                  xant := x;
64                  until Error <= 1E-15;
65              end;
66          raiz := x;
67      end;
68
69      //Integração por método de Midpoint//
70      function z(r,b,eb: extended): extended;
71      begin
72          z := 1/(r*r*sqr(1 - b*b/(r*r) - 4/eb*(1/power(r,12) - 1/power(r,6))));
73      end;
74

```

```

75 {Método de Midpoint}
76 function integral(xo,xf,n,b,eb: extended): extended;
77     var
78         h,i,r,suma: extended;
79     begin
80         h := (xf - xo)/n;
81         i := 0;
82         suma := 0;
83         while i <= n-1 do
84             begin
85                 r := xo + (i + 1/2)*h;
86                 suma := suma + z(r,b,eb);
87                 i := i + 1;
88             end;
89         integral := h*suma;
90     end;
91
92 //Interpolação por método de Lagrange//
93 {Método de Lagrange segmentado}
94 function interpolar(x,y: uno; v: extended): extended;
95     var
96         i,j: integer;
97         r,L: extended;
98     begin
99         r := 0;
100         for i := 1 to 4 do
101             begin
102                 L := 1;
103                 for j := 1 to 4 do
104                     begin
105                         if j <> i then
106                             begin
107                                 L := L*(v - x[j])/(x[i] - x[j]);

```

```

108                                     end;
109                                     end;
110                                     r := r + y[i]*L
111                                 end;
112                                interpolat := r;
113    end;
114
115    //Ordenar por método Bolha//
116    procedure ordenar(x,y: uno; n,nn:          integer; var xo,yo: uno);
117        var
118            i,j: integer;
119            f,g: extended;
120    begin
121        for i := n to nn-1 do
122            begin
123                for j := n to nn-1 do
124                    begin
125                        if x[j] > x[j + 1] then
126                            begin
127                                f := x[j];
128                                g := y[j];
129                                x[j] := x[j + 1];
130                                y[j] := y[j + 1];
131                                x[j + 1] := f;
132                                y[j + 1] := g;
133                            end;
134                        end;
135                    end;
136                for i := n to nn do
137                    begin
138                        xo[i] := x[i];

```

```

139             yo[i] := y[i];
140         end;
141     end;
142
143 begin
144     Assign(m1,'Resultados1.txt');
145     Rewrite(m1);
146     Writeln(m1,'           b           '' ''           theta
           '' ''           seção choque ');
147
148     Assign(m2,'Resultados11.txt');
149     Rewrite(m2);
150
151     Assign(m3,'Resultados111.txt');
152     Rewrite(m3);
153
154     eb := 1;
155     n := 1E9;
156     vmin := 180;
157     dbb := 1E-5;
158     b[1] := 0;
159     i := 1;
160
161     while b[i] <= 3 do
162         begin
163             rmin := raiz(b[i],eb);
164             rmax := 10000*rmin;
165             int := integral(rmin,rmax,n,b[i],eb);
166             theta[i] := (Pi - 2*b[i]*int)*180/Pi;
167
168             if theta[i] <= vmin then
169                 begin

```

```

170             vmin := theta[i];
171             p := i;
172         end;
173
174     Writeln(m1,b[i]:21,'           ',theta[i]:21,'           ',vmin:21,'           ',p)
175         ;
176
177         b[i + 1] := b[i] + 0.03;
178         l := i;
179         i := i + 1;
180     end;
181
182     ordenar(theta,b,1,p,xo1,yo1);
183     ordenar(theta,b,p,l,xo2,yo2);
184
185     v1[1] := round(theta[p - 2]/5)*5 - 5;
186     j := 1;
187     while v1[j] <= 176 do
188         begin
189             u1 := 1;
190             while xo1[u1] <= v1[j] do
191                 begin
192                     u1 := u1 + 1;
193                 end;
194             a1[1] := xo1[u1 - 2];
195             c1[1] := yo1[u1 - 2];
196             a1[2] := xo1[u1 - 1];
197             c1[2] := yo1[u1 - 1];
198             a1[3] := xo1[u1];
199             c1[3] := yo1[u1];
200             a1[4] := xo1[u1 + 1];
201             c1[4] := yo1[u1 + 1];

```

```

201
202         vi1[j] := interpol(a1,c1,v1[j]);
203
204         rmin1 := raiz(vi1[j] + dbb,eb);
205         rmax1 := 10000*rmin1;
206         int1 := integral(rmin1,rmax1,n,vi1[j] + dbb,eb);
207         theta1[j] := (Pi - 2*(vi1[j] + dbb)*int1)*180/Pi;
208
209         rmin2 := raiz(vi1[j] - dbb,eb);
210         rmax2 := 10000*rmin2;
211         int2 := integral(rmin2,rmax2,n,vi1[j] - dbb,eb);
212         theta2[j] := (Pi - 2*(vi1[j] - dbb)*int2)*180/Pi;
213
214         dtheta_db[j] := (theta1[j] - theta2[j])/(2*dbb);
215
216         if v1[j] <> 0 then
217             begin
218                 scd1[j] := abs(vi1[j]/sin(v1[j]*Pi/180)/ dtheta_db[j]);
219                 Writeln(m2,v1[j]:21,'          ',vi1[j]:21,'          ',scd1[j]);
220             end;
221
222         v1[j + 1] := v1[j] + 5;
223         j := j + 1;
224     end;
225
226 v2[1] := round(theta[p + 2]/5)*5 - 5;
227 m := 1;
228 while v2[m] <= theta[l] do
229     begin
230         u2 := p;
231         while xo2[u2] <= v2[m] do

```

```

232         begin
233             u2 := u2 + 1;
234         end;
235         a2[1] := xo2[u2 - 2];
236         c2[1] := yo2[u2 - 2];
237         a2[2] := xo2[u2 - 1];
238         c2[2] := yo2[u2 - 1];
239         a2[3] := xo2[u2];
240         c2[3] := yo2[u2];
241         a2[4] := xo2[u2 + 1];
242         c2[4] := yo2[u2 + 1];
243
244         vi2[m] := interpol(a2,c2,v2[m]);
245
246         rmin1 := raiz(vi2[m] + dbb,eb);
247         rmax1 := 10000*rmin1;
248         int1 := integral(rmin1,rmax1,n,vi2[m] + dbb,eb);
249         theta1[m] := (Pi - 2*(vi2[m] + dbb)*int1)*180/Pi;
250
251         rmin2 := raiz(vi2[m] - dbb,eb);
252         rmax2 := 10000*rmin2;
253         int2 := integral(rmin2,rmax2,n,vi2[m] - dbb,eb);
254         theta2[m] := (Pi - 2*(vi2[m] - dbb)*int2)*180/Pi;
255
256         dtheta_db[m] := (theta1[m] - theta2[m])/(2*dbb);
257
258         if v2[m] <> 0 then
259             begin
260                 scd2[m] := abs(vi2[m]/sin(v2[m]*Pi/180)/dtheta_db[m
                ]);
261                 Writeln(m3,v2[m]:21,'          ',vi2[m]:21,'          ', scd2[m])
                ;

```

```

262         end;
263
264         v2[m + 1] := v2[m] + 5;
265         m := m + 1;
266     end;
267
268     Close(m1);
269     Close(m2);
270     Close(m3);
271
272 end.

```

A.2 Cálculo das trajetórias com mudança nos estados de carga

```

1
2 program trajetorias;
3
4 uses
5     math;
6
7 type
8     uno = array [1..100] of extended;
9
10 const
11     alc = 1.95826E-40 {C·m2/V}; ala = 1.82597E-40 {C·m2/V}; e
12         = 1.602E-19 {C};
13     k = 8.98755E9 {N·m2/C2}; mc = 19.93685E-27 {kg}; ma =
14         66.31368E-27 {kg};

```

```

13         ep = 1.081E-21 {J}; si = 3.38E-10 {m}; rat = 0.705E-10 {m
           };
14
15 var
16     resul, posc, posa, estc: text;
17     cont, m, v, z: integer;
18     xco, yco, xao, yao, vxco, vyco, vco, vxao, vyao, t0, ro, Eio, Eko, Eto, sigo: extended;
19     xc, yc, xa, ya, vxc, vyc, vxa, vya: extended;
20     xc1, yc1, xa1, ya1, vxc1, vyc1, vc1, vxa1, vya1, va1, r1, Ei1, Ek1, Et1, sig1: extended;
21     qc, qa, h, t, tf,      Ebeam: extended;
22     k1, k2, k3, k4:      extended;
23     l1, l2, l3, l4:      extended;
24     m1, m2, m3, m4:      extended;
25     n1, n2, n3, n4:      extended;
26     p1, p2, p3, p4:      extended;
27     q1, q2, q3, q4:      extended;
28     s1, s2, s3, s4:      extended;
29     t1, t2, t3, t4:      extended;
30     axco, ayco, axao, ayao: extended;
31     axc, ayc, axa, aya: extended;
32     delta: extended;
33     Eionc, Eiona: uno;
34     pc, pa, Fc, Fa: extended;
35
36 //Para o C//
37 {EDO f1 = dxc/dt}
38 function f1(vxc: extended): extended;
39 begin
40     f1 := vxc;
41 end;

```

```

42
43 {EDO f2 = dyc/dt}
44 function f2(vyc: extended): extended;
45 begin
46     f2 := vyc;
47 end;
48
49 {EDO f3 = dvxc/dt}
50 function f3(xc,yc,xa,ya: extended): extended;
51     var
52         r: extended;
53 begin
54     r := sqrt(sqrt(xc - xa) + sqrt(yc - ya));
55     f3 := 1/mc*(xc - xa)/r*24*ep/si*(2*power(si/r,13) r,7));           - power(si/
end;
56
57
58 {EDO f4 = dvyc/dt}
59 function f4(xc,yc,xa,ya: extended): extended;
60     var
61         r: extended;
62 begin
63     r := sqrt(sqrt(xc - xa) + sqrt(yc - ya));
64     f4 := 1/mc*(yc - ya)/r*24*ep/si*(2*power(si/r,13) r,7));           - power(si/
end;
65
66
67 //Para o Ar//
68 {EDO f5 = dxa/dt}
69 function f5(vxa: extended): extended;
70 begin
71     f5 := vxa;

```

```

72  end;
73
74  {EDO f6 = dy/dt}
75  function f6(vya: extended): extended;
76  begin
77      f6 := vya;
78  end;
79
80  {EDO f7 = dvxa/dt}
81  function f7(xc,yc,xa,ya: extended): extended;
82      var
83          r: extended;
84  begin
85      r := sqrt(sqrt(xc - xa) + sqrt(yc - ya));
86      f7 := -1/ma*(xc - xa)/r*24*ep/si*(2*power(si/r,13)           - power(si
87          /r,7));
88
89  end;
90
91  {EDO f8 = dvya/dt}
92  function f8(xc,yc,xa,ya: extended): extended;
93      var
94          r: extended;
95  begin
96      r := sqrt(sqrt(xc - xa) + sqrt(yc - ya));
97      f8 := -1/ma*(yc - ya)/r*24*ep/si*(2*power(si/r,13)           - power(si
98          /r,7));
99
100  end;
101
102  //Ordenar por método Bolha//
103  procedure ordenar(x: uno; n: integer; var xo: uno);
104      var
105          i,j: integer;

```

```

102         f: extended;
103 begin
104     for i := 1 to n-1 do
105         begin
106             for j := 1 to n-1 do
107                 begin
108                     if x[j] > x[j + 1] then
109                         begin
110                             f := x[j];
111                             x[j] := x[j + 1];
112                             x[j + 1] := f;
113                         end;
114                     end;
115                 end;
116             for i := 1 to n do
117                 begin
118                     xo[i] := x[i];
119                 end;
120             end;
121
122     //Resolução das equações diferenciais pelo método RK4//
123 begin
124     Assign(resul,'Todos.txt');
125     Assign(posc,'Carbono.txt');
126     Assign(posa,'Argonio.txt');
127     Assign(estc,'Estados de carga.txt');
128     Rewrite(resul);
129     Rewrite(posc);
130     Rewrite(posa);
131     Rewrite(estc);
132     Writeln(resul,'          xc          '' ''
          yc          '' ''          vyc          '' ''

```

```

        xa          '' ''          ya
        '' ''          vxa          '' ''
        vya          '' ''          axc
        '' ''          ayc          '' ''
        axa          '' ''          aya
        '' ''          Ek          '' ''
        Ei          '' ''          Energia tot al
        '' ''          Ângulo ');
133  Writeln(posc,'          xc          '' ''          yc
        '' ''          qc');
134  Writeln(posa,'          xa          '' ''          ya
        '' ''          qa');
135  Writeln(estc,'          qc          '' ''          qa
        '' ''          r1          '' ''          Fc
        '' ''          Ec          '' ''          Fa
        '' ''          Ea          '' ''          Uc
        '' ''          Eionc1          '' ''          Ua
        '' ''          Eiona1          '' ''          xc
        '' ''          xa          '' ''          yc
        '' ''          ya          ');
136
137  //Inicialização de variáveis//
138  t0 := 0;
139  t := t0;
140  tf := 1E-14;
141  h := 1E-19;
142  Ebeam := 300E3*e;
143
144  qc := -e;
145  qa := 0;
146

```

```
147 delta := 2E-10;
148
149 Eionc[1] := 5*e;
150 Eionc[2] := 11.26030*e;
151 Eionc[3] := 24.38332*e;
152 Eionc[4] := 47.8878*e;
153 Eionc[5] := 64.4939*e;
154 Eionc[6] := 392.087*e;
155 Eionc[7] := 489.99334*e;
156
157 Eiona[1] := 15.75962*e;
158 Eiona[2] := 27.62967*e;
159 Eiona[3] := 40.74*e;
160 Eiona[4] := 59.81*e;
161 Eiona[5] := 75.02*e;
162 Eiona[6] := 91.009*e;
163 Eiona[7] := 124.323*e;
164 Eiona[8] := 143.460*e;
165 Eiona[9] := 422.45*e;
166 Eiona[10] := 478.69*e;
167 Eiona[11] := 538.96*e;
168 Eiona[12] := 618.26*e;
169 Eiona[13] := 686.10*e;
170 Eiona[14] := 755.74*e;
171 Eiona[15] := 854.77*e;
172 Eiona[16] := 918.03*e;
173 Eiona[17] := 4120.8857*e;
174 Eiona[18] := 4426.2296*e;
175
176 xco := -100E-10;
177 yco := 0;
178 xao := 0;
```

```

179   yao := 0;
180
181   ro := sqrt(sqrt(xco - xao) + sqrt(yco - yao));
182
183   vxco := sqrt(2*(Ebeam)/mc);
184   vyco := 0;
185   vco := sqrt(sqrt(vxco) + sqrt(vyco));
186   vxao := 0;
187   vyao := 0;
188
189   sigo := 0;
190
191   xc := xco;
192   yc := yco;
193   vxc := vxco;
194   vyc := vyco;
195
196   xa := xao;
197   ya := yao;
198   vxa := vxao;
199   vya := vyao;
200
201   Eko := 1/2*mc*sqrt(vco);
202   Eio := 4*ep*(power(si/ro,12) - power(si/ro,6));
203   Eto := Eko + Eio;
204
205   cont := 0;
206
207   axco := f3(xco,yco,xao,yao);
208   ayco := f4(xco,yco,xao,yao);
209   axao := 0;
210   ayao := 0;

```

```

211
212 Writeln(resul,xco/1E-10,'          ',yco/1E-10,'          ',vxco,'          ',vyco,'
          ',xao/1E-10,'          ',yao/1E-10,'          ',vxao,'          ',vyao,'          ',
axco,'          ',ayco,'          ',axao,'          ',ayao,'          ',Eko/(e*1E3),'          ',
,Eio/(e*1E3),'          ',Eto/(e*1E3),'          ',180*sigo/Pi);
213 Writeln(posc,xco/1E-10:21,'          ',yco/1E-10:21,'          ',qc/e:21);
214 Writeln(posa,xao/1E-10:21,'          ',yao/1E-10:21,'          ',qa/e:21);
215
216 while t <= tf do
217     begin
218         k1 := h*f1(vxc);
219         l1 := h*f2(vyc);
220         m1 := h*f3(xc,yc,xa,ya);
221         n1 := h*f4(xc,yc,xa,ya);
222         p1 := h*f5(vxa);
223         q1 := h*f6(vya);
224         s1 := h*f7(xc,yc,xa,ya);
225         t1 := h*f8(xc,yc,xa,ya);
226
227         k2 := h*f1(vxc + 1/2*m1);
228         l2 := h*f2(vyc + 1/2*n1);
229         m2 := h*f3(xc + 1/2*k1,yc          + 1/2*l1,xa          + 1/2*p1,ya          + 1/2*q1)
          ;
230         n2 := h*f4(xc + 1/2*k1,yc          + 1/2*l1,xa          + 1/2*p1,ya          + 1/2*q1)
          ;
231         p2 := h*f5(vxa + 1/2*s1);
232         q2 := h*f6(vya + 1/2*t1);
233         s2 := h*f7(xc + 1/2*k1,yc          + 1/2*l1,xa          + 1/2*p1,ya          + 1/2*q1)
          ;
234         t2 := h*f8(xc + 1/2*k1,yc          + 1/2*l1,xa          + 1/2*p1,ya          + 1/2*q1)
          ;
235

```

```

236     k3 := h*f1(vxc + 1/2*m2);
237         l3 := h*f2(vyc + 1/2*n2);
238     m3 := h*f3(xc + 1/2*k2,yc + 1/2*l2,xa + 1/2*p2,ya + 1/2*q2)
        ;
239     n3 := h*f4(xc + 1/2*k2,yc + 1/2*l2,xa + 1/2*p2,ya + 1/2*q2)
        ;
240     p3 := h*f5(vxa + 1/2*s2);
241         q3 := h*f6(vya + 1/2*t2);
242     s3 := h*f7(xc + 1/2*k2,yc + 1/2*l2,xa + 1/2*p2,ya + 1/2*q2);
        := h*f8(xc + 1/2*k2,yc + 1/2*l2,xa + 1/2*p2,ya +
243     t3
        1/2*q2);
244
245     k4 := h*f1(vxc + m3);
246     l4 := h*f2(vyc + n3);
247     m4 := h*f3(xc + k3,yc + l3,xa          + p3,ya          + q3);
248     n4 := h*f4(xc + k3,yc + l3,xa          + p3,ya          + q3);
249     p4 := h*f5 (vxa + s3);
250     q4 := h*f6 (vya + t3);
251     s4 := h*f7(xc + k3,yc + l3,xa          + p3,ya          + q3);
252     t4 := h*f8(xc + k3,yc + l3,xa          + p3,ya          + q3);
253
254     xc1 := xc + 1/6*(k1 + 2*k2 + 2*k3          + k4);
255     yc1 := yc + 1/6*(l1 + 2*l2 + 2*l3 + l4);
256     vxc1 := vxc + 1/6*(m1 + 2*m2 + 2*m3 + m4);
257     vyc1 := vyc + 1/6*(n1 + 2*n2 + 2*n3 + n4);
258     xa1 := xa + 1/6*(p1 + 2*p2 + 2*p3 + p4);
259     ya1 := ya + 1/6*(q1 + 2*q2 + 2*q3 + q4);
260     vxa1 := vxa + 1/6*(s1 + 2*s2 + 2*s3 + s4);
261     vya1 := vya + 1/6*(t1 + 2*t2 + 2*t3 + t4);
262
263     axc := f3(xc1,yc1,xa1,ya1);

```

```

264     ayc := f4(xc1,yc1,xa1,ya1);
265     axa := f7(xc1,yc1,xa1,ya1);
266     aya := f8(xc1,yc1,xa1,ya1);
267
268     vc1 := sqrt(sqr(vxc1) + sqr(vyc1));
269     va1 := sqrt(sqr(vxa1) + sqr(vya1));
270
271     sig1 := arctan(vyc1/vxc1);
272
273     r1 := sqrt(sqr(xc1 - xa1) + sqr(yc1 - ya1));
274
275     pc := ala*k*qa/sqr(r1);
276     pa := ala*k*qc/sqr(r1);
277
278     Fc := -e*k*(qa/sqr(r1 - rat) + 2*pa/power(r1 - rat,3));
279     Fa := -e*k*(qc/sqr(r1 - rat) + 2*pc/power(r1 - rat,3));
280
281     if Eionc[1]/rat <= abs(Fc) then
282         begin
283             if r1 <= delta then
284                 begin
285                     qa := qa - e;
286                     v := round(18 - qa/e);
287                     Eiona[v] := Eionc[1];
288                     ordenar(Eiona,v,Eiona);
289                     end;
290                 qc := qc + e;
291                 z := round(6 - qc/e);
292                 for m := 1 to z do
293                     begin
294                         Eionc[m] := Eionc[m + 1];
295                     end;

```

```

296         end;
297
298         if qc > 6*e then qc := 6*e;
299         if qa < -7*e then qa := -7*e;
300     if qc < -19*e then qc := -19*e;
301     if qa > 18*e then qa := 18*e;
302
303         Ek1 := 1/2*mc*sqr(vc1) + 1/2*ma*sqr(va1);
304         Ei1 := 4*ep*(power(si/r1,12) - power(si/r1,6));
305         Et1 := Ek1 + Ei1;
306
307     t := t + h ;
308
309         xc := xc1;
310         yc := yc1;
311     vxc := vxc 1;
312     vyc := vyc 1;
313     xa := xa1;
314     ya := ya1;
315     vxa := vxa1;
316     vya := vya1;
317
318     cont := cont + 1;
319
320     if (cont mod 1000 = 0) then
321         begin
322             Writeln(resul,xc1/1E-10,'          ',yc1/1E-10,'          ',vxc1,' ',
                 vyc1,'          ',xa1/1E-10,'          ',ya1/1E-10,'          ',vxa1,'
                 ',vya1,'          ',axc,'          ',ayc,'          ',axa,'          ',aya,'
                 ',Ek1/(e*1E3),'          ',Ei1/(e*1E3),'          ',Et1/(e*1E3),'
                 ',180*sig1/Pi);

```

```

323         Writeln(posc,xc1/1E-10:21,'          ',yc1/1E-10:21,'          ',qc/e
           :21);
324         Writeln(posita,xa1/1E-10:21,'          ',ya1/1E-10:21,'          ',qa/e
           :21);
325     end;
326
327     Writeln(estc,qc/e:21,'          ',qa/e:21,'          ',r1/1E-10:21,'          ',
           Fc:21,'          ',Eionc[1]/rat:21,'          ',Fa:21,'          ',Eiona[1]/
           rat:21,'          ',abs(rat*Fc/e):21,'          ',Eionc[1]/e:21,'          ',
           abs(rat*Fa/e):21,'          ',Eiona[1]/e:21,'          ',xc1/1E-10:21,'
           ',xa1/1E-10:21,'          ',yc1/1E-10:21,'          ',ya1/1E-10:21);
328
329     end;
330
331     Close(resul);
332     Close(posc);
333     Close(posita);
334     Close(estc);
335
336     end.

```

Referências Bibliográficas

- [1] Maximiliano Ribeiro Guerra, Cândia Vitória de Moura Gallo, Gulnar Azevedo, e Silva Mendonça. Risco de cancer no Brasil: tendências e estudos epidemiológicos mais recentes. *Revista Brasileira de Cancerologia*, 51(3):227–34, 2005.
- [2] UOL Notícias Ciência e Saúde. Mortes por câncer aumentaram 31% no Brasil em 15 anos, afirma OMS. Disponível em: <https://noticias.uol.com.br/saude/ultimas-noticias/estado/2017/02/03/mortes-por-cancer-aumentaram-31-no-brasil-em-15-anos-afirma-oms.htm>, 2017. Acessado 6/06/2017.
- [3] Portal Brasil. Dia mundial do câncer, alerta para prevenção da doença. Disponível em: <http://www.brasil.gov.br/saude/2017/02/dia-mundial-do-cancer-4-alerta-para-prevencao-da-doenca>, 2017. Acessado 13/06/2017.
- [4] Instituto Nacional de Câncer. Números de câncer do Brasil. Disponível em: <http://www.inca.gov.br/wcm/dmdc/2016/numeros-cancer-brasil.asp>, 2015. Acessado 5/06/2017.
- [5] Arthur Orlando Corrêa Schilithz e Fernanda Cristina da Silva de Lima. Estimativa 2016: Incidência de câncer no Brasil, 2015.
- [6] Vinícius Lisboa. Inca: Brasil deve ter quase 1.2 milhão de novos casos de câncer em dois anos. Disponível em: <http://agenciabrasil.ebc.com.br/geral/noticia/2015-11/>

- inca-brasil-deve-ter-quase-12-milhao-de-novos-casos-de-cancer-em-dois-anos, 2015. Acessado 7/06/2017.
- [7] Marcos d'Ávila Nunes. *Protontherapy Versus Carbon Ion Therapy: Advantages, Disadvantages and Similarities*. Springer, 2015.
- [8] Marcos d'Ávila Nunes. *Hadron therapy physics and simulations*. Springer, 2014.
- [9] Marcos Pivetta. *Prótons e íons na medida certa*, 2014.
- [10] Ugo Amaldi e Gerhard Kraft. Radiotherapy with beams of carbon ions. *Reports on progress in physics*, 2005.
- [11] Ana Maia. Terapia com minifeixes poupa os tecidos saudios. Disponível em: <http://www.saense.com.br/2016/03/terapia-com-minifeixes-poupa-os-tecidos-sa-dios>, 2016. Acessado 15/06/2017.
- [12] Marília Tavares Christóvão, Tarcisio Passos Ribeiro de Campos, e Bruno Machado Trindade. Simulation and dosimetric analysis of proton and carbon ion therapy in the treatment of uveal melanoma. *Radiologia Brasileira*, 44(6):367–373, 2011.
- [13] João Basso Marques. *Medida de uma curva contínua do poder de freamento de partículas alfa em Al na região do pico de Bragg*. Dissertação de Mestrado, Instituto de Física USP, 2008.
- [14] E. Herranz, J. L. Herraiz, E. Vicente, et al. Hadronterapia. I Encuentro Complutense para la Divulgación en Física Nuclear y de Partículas, 2008.
- [15] William R. Leo. *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments: A How-To Approach*. Springer, 1994.
- [16] Glenn F. Knoll. *Radiation Detection and Measurement, 4th Edition*. Wiley India, 2010.
- [17] Hans Bethe. Bethe formula explained. Disponível em: http://everything.explained.today/Bethe_formula, 2015. Acessado 17/09/2016.

- [18] Antônio Carlos Fontes dos Santos. Interação de partículas carregadas com a matéria. Disponível em: http://www.if.ufrj.br/~toni/capitulo_10.pdf, 2008. Acessado 8/01/2017.
- [19] Paulo Gomes e Takeshi Kodama. Programa INCT-FNA, 2014.
- [20] Bo Nyström. Formation of excited states in collision between carbon ions and argon atoms at intermediate velocity. *Lund Reports in Atomic Physics*, 1990.
- [21] Laboratory of Radioecology e Environmental Change. The nuclear physics applied to the environment. Disponível em: <http://lara.if.uff.br/doku.php?id=home>, 2014. Acessado 10/12/2016.
- [22] Kita Chaves Damasio Macario. Laboratório de radiocarbono (LAC-UFF). Disponível em: <https://sites.google.com/a/mail.if.uff.br/lac/home/apresentacao>, 2014. Acessado 4/01/2017.
- [23] Wei-Kan Chu, J. W. Mayer, e Marc-A Nicolet. *Backscattering Spectrometry*. Academic Press, New York, 1978.
- [24] R. Middleton. A versatile high intensity negative ion source. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 214(2):139–150, 1983.
- [25] Maikel D'íaz Castro. *Espectrometria de massa com aceleradores. Software para análise de dados e Efeito Reservatório em Cuba*. Tese de Doutorado, Universidade Federal Fluminense, 2015.
- [26] Fabiana Monteiro de Oliveira. *Implementação de novas técnicas no LAC-UFF e mapeamento da distribuição de ^{14}C no estado do Rio de Janeiro nos anos de 2014- 2015*. Tese de Doutorado, Universidade Federal Fluminense, 2016.
- [27] Vitor Jesus de Oliveira. *Seções de choque de perda e captura eletrônica para feixes de O^+ em vapor de água em uma faixa de energia entre 0.2 e 1.2 MeV*. Dissertação de Mestrado, Instituto de Radioproteção e Dosimetria, 2015.

- [28] Vinícius Nunes Moreira. *A influência do catalisador na produção de grafite para análise por espectrometria de massa com aceleradores*. Trabalho de Conclusão de Curso, Universidade Federal Fluminense, 2016.
- [29] Universidad de Sevilla. Acelerador AMS: Espectrómetro de masas. Disponível em: <https://institucional.us.es/divulgacioncna/02-aceleradores/index.html>, 2013. Acessado 16/09/2015.
- [30] Jun Wang, XiMeng Chen, BaoWei Ding, et al. Investigation of transfer ionization processes in the collision of partially stripped carbon ions on argon. *Science in China Series G: Physics, Mechanics and Astronomy*, 51(7):750–754, 2008.
- [31] C. J. Joachain. *Quantum collision theory*. American Elsevier Pub. Co, 1975.
- [32] B. H. Bransden e C. J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. Longman Pub Group, 1982.
- [33] Elisangela Aparecida y Castro. *Cálculo das Seções de Choque Diferenciais e Integrais para a Excitação Eletrônica de Camadas Internas da Molécula C_2N_2* . Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 2003.
- [34] Jörg Eichler. *Lectures on Ion-Atom Collisions: From Nonrelativistic to Relativistic Velocities (North-Holland Personal Library)*. Elsevier Science, 2005.
- [35] Gordon W. F. Drake. *Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [36] Dževad Belkić. *Quantum Theory of High-Energy Ion-Atom Collisions*. Taylor and Francis, London, 2008.
- [37] Gabriel G. Balint-Kurti e Alexander P. Palov. *Theory of Molecular Collisions (Theoretical and Computational Chemistry Series)*. Royal Society of Chemistry, 2015.
- [38] R. Douglas Gregory. *Classical Mechanics*. Cambridge University Press, 2006.
- [39] Keith R. Symon. *Mechanics (3rd Edition)*. Addison-Wesley, 1971.

- [40] L. D. Landau e L. M. Lifchitz. *Mecânica (Volume 1) (Spanish Edition)*. Reverté, 2005.
- [41] John N. Murrell e S. D. Bosanac. *Introduction to the Theory of Atomic and Molecular Collisions*. Wiley, 1989.
- [42] Stephen T. Thornton e Jerry B. Marion. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. Brooks Cole, 2003.
- [43] B. H. Bransden e M. R. C. McDowell. *Charge Exchange and the Theory of Ion-Atom Collisions (International Series of Monographs on Physics)*. Clarendon Press, 1992.
- [44] Joe D. Hoffman e Steven Frankel. *Numerical methods for engineers and scientists*. CRC press, 2001.
- [45] Richard L. Burden e J. Douglas Faires. *Numerical Analysis*. Brooks Cole, 2000.
- [46] Tao Pang. *An Introduction to Computational Physics*. Cambridge University Press, 2006.
- [47] M. S. Child. *Molecular Collision Theory (Theoretical Chemistry Monographs)*. Academic Press Inc, 1974.
- [48] Harald Friedrich. *Scattering Theory*. Springer, 2015.
- [49] Herbert Goldstein, Charles P. Poole Jr., e John L. Safko. *Classical Mechanics (3rd Edition)*. Pearson, 2001.
- [50] Sebastião J. Formosinho e Luís G. Arnaut. *Cinética química: estrutura molecular e reactividade química: estrutura molecular e reactividade química*. Imprensa da Universidade de Coimbra/Coimbra University Press, 2003.
- [51] N. H. T. Lemes, J. C. Belchior, e J. P. Braga. Aplicação do modelo geométrico no estudo dos efeitos glory e rainbow em colisões atômicas. *Química Nova*, 21(6):714–718, 1998.

- [52] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, et al. Numerical recipes in fortran 77: the art of scientific computing, 1992.
- [53] Kipton Barros. Lennard-Jones system of particles. Disponível em: <http://stp.clarku.edu/simulations/lj>, 2009. Acessado 30/01/2017.
- [54] John Edward Jones. On the determination of molecular fields. From the equation of state of a gas. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 106, pages 463–477. The Royal Society, 1924.
- [55] Ana Claudia Pinheiro da Silva Cruz. *Desenvolvimento de superfície de energia potencial para sistemas $H_2...X_2$ e $H_2...HX$, com $X = H, F, Cl, Br$* . Dissertação de Mestrado, Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, 2014.
- [56] Raphael D. Levine. *Molecular Reaction Dynamics*. Cambridge University Press, 2005.
- [57] Márcio Oliveira Alves. *Estudo clássico, quântico e semi-clássico em colisões elásticas para o sistema He_2* . Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Minas Gerais, 2012.
- [58] Adenilson J. Chiquito e Norton G. de Almeida. O potencial de Lennard-Jones: Aplicação a moléculas diatômicas. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 21(2), 1999.
- [59] Carolina Cerezo Bueno. *Procesos colisionales de moléculas excitadas electrónicamente*. Tese de Doutorado, Universidad Complutense de Madrid, 2004.
- [60] Seung-Kyo Oh. Modified Lennard-Jones potentials with a reduced temperature-correction parameter for calculating thermodynamic and transport properties: Noble gases and their mixtures (He, Ne, Ar, Kr, and Xe). *Journal of Thermodynamics*, 2013.
- [61] M. P. Allen e D. J. Tildesley. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford University Press, 1988.

- [62] Peter Atkins, Julio de Paula, e Ron Friedman. *Quanta, Matter and Change: A Molecular Approach to Physical Chemistry*. W. H. Freeman, 2008.
- [63] Paul L. DeVries e Patrick Hamill. *A first course in computational physics*. AAPT, 1995.
- [64] Steven E. Koonin. *Computational Physics*. Benjamin-Cummings Publishing Co., Subs. of Addison Wesley Longman, US, 1985.
- [65] Ernest Rutherford. The capture and loss of electrons by α particles. *Philosophical Magazine Series 6*, 47(278):277–303, 1924.
- [66] G. H. Henderson. The capture and loss of electrons by α particles. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 109(749):157–165, 1925.
- [67] J. C. Jacobsen. Capture of electrons by α particles in hydrogen. *Nature*, 117:858, 1926.
- [68] L. H. Thomas. On the capture of electrons by swiftly moving electrified particles. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 114(768):561–576, 1927.
- [69] Departamento de Química UFMG. Aulas de Química Geral: carga nuclear efetiva. Disponível em: <http://zeus.qui.ufmg.br/~qgeral/downloads/aulas/aula%2010%20-%20carga%20nuclear%20efetiva.pdf>, 2013. Acessado 8/12/2016.
- [70] Química Universitária. Carga nuclear efetiva. Disponível em: http://quimicauniversitaria.blogspot.com.br/2011/11/carga-nuclear-efetiva_07.html, 2011. Acessado 8/12/2016.
- [71] William M. Haynes, David R. Lide, e Thomas J. Bruno. *CRC Handbook of Chemistry and Physics, 97th Edition*. CRC Press, 2016.
- [72] Jacob N. Israelachvili. *Intermolecular and Surface Forces*. Academic Press, 2011.