

## 4

### Previsões do modelo proposto

Com as expressões desenvolvidas no capítulo 3, foi escrito um código em linguagem FORTRAN para simular a dinâmica dos íons desorvidos de um sólido sob bombardeio de projéteis rápidos. O diagrama de blocos do código desenvolvido é apresentado no apêndice A.

Este capítulo é dedicado basicamente ao estudo do efeito dos parâmetros relevantes nas expressões empregadas pelo modelo eletrostático de desorção iônica proposto. O objetivo das simulações efetuadas é compreender a influência desses parâmetros no cálculo final da velocidade.

As previsões do modelo foram obtidas para o seguinte sistema projétil-alvo: feixe de íons de nitrogênio com carga  $+2$ , com energia cinética de  $1,7 \text{ MeV}$  e com ângulo de incidência  $\theta_p = 45^\circ$ ; o alvo é gelo formado pela condensação de vapor de água.

Os cálculos preliminares feitos num microcomputador Pentium 4 indicaram que o tempo de execução era longo demais para o nosso propósito. A solução foi utilizar o equipamento SUN FIRE 6800 do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) para realizar os cálculos.

O programa **FileZilla** gerencia a transferência de dados entre um PC e o computador do LNCC: o arquivo com código a ser compilado é enviado e os arquivos com os cálculos feitos são repatriados. O programa **PUTTY** facilita a compilação e execução dos arquivos no computador do LNCC que interage com o PC. Detalhes deste programas estão no apêndice B.

## 4.1

## Dependência do traço com o estado de carga do projétil

O modelo é descreve o processo de interação entre o projétil e o material considerando que a carga de projétil varia durante a sua travessia pelo alvo.

Os valores obtidos com o programa CasP, apresentados nas figuras 3.6 e 3.8, permitem obter a perda de energia e o raio  $b_{max}$  em função do valor da carga média do projétil para uma dada profundidade (ver eq. (3-2)).

Três valores de carga inicial do projétil,  $q = 0, 2$  e  $5$ , foram escolhidos para ilustrar os comportamentos da taxa de perda de energia eletrônica do projétil, do valor do raio positivo do traço e da densidade de carga linear em função da profundidade  $s$  da interação projétil-sólido.

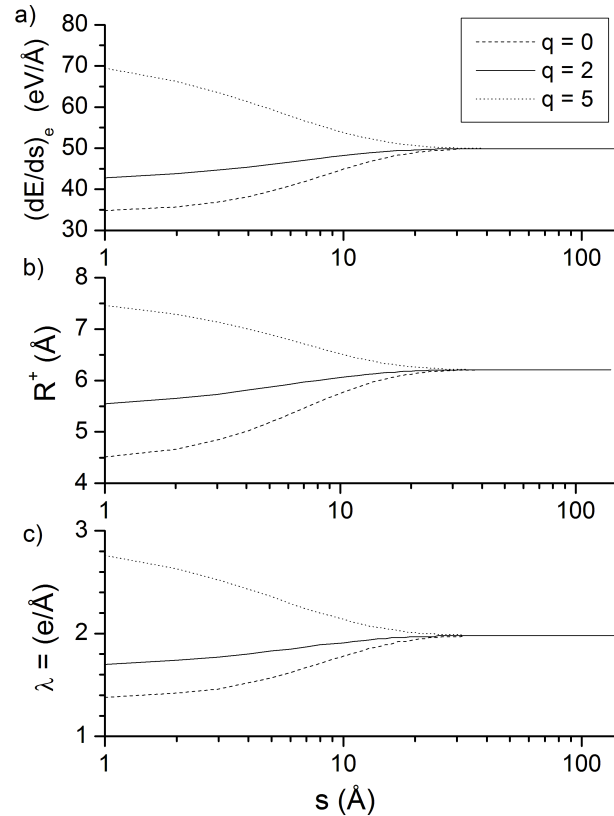


Figura 4.1: a) Taxa de perda de energia eletrônica, b) raio do traço e c) densidade de carga linear em função da profundidade, para um projétil de nitrogênio de  $1,7 \text{ MeV}$  e com três valores de carga inicial  $q = 0, 2, 5$  incidindo sobre gelo. Utilizou-se  $\lambda_q = 6 \text{ \AA}$ .

Uma vez obtida a eq. (3-15), a taxa de perda de energia eletrônica

$(dE/ds)_e$  pode ser determinada em função de  $s$ . Utilizando a eq. (3-2) com  $\lambda_q = 6 \text{ \AA}$ , os resultados são apresentados na figura 4.1a. Pode-se ver que, dependendo do estado de carga inicial  $q$  do projétil, o valor da taxa de perda de energia  $(dE/ds)_e$  tem comportamentos distintos durante os primeiros  $100 \text{ \AA}$  do traço, uma vez que a carga efetiva do projétil ainda não alcançou seu valor de equilíbrio  $q_{eq} = 2,95$ . Após percorrer a distância de alguns  $\lambda_q$ , a taxa de perda de energia é a mesma para os três casos.

O raio positivo do traço formado pela passagem do projétil eq. (3-19), proporcional a  $b_{max}$ , também adquire um valor constante depois de  $s \sim 100 \text{ \AA}$  de profundidade (ver figura 4.1b). Note que, quanto maior for o valor da carga inicial do projétil, maior será  $R^+$ .

Outra variável é a densidade de carga linear gerada ao longo do traço  $\lambda_i$ , figura 4.1c. Considerando na eq. (3-23) um valor de ionização da água igual a  $12,6 \text{ eV}$  e  $C_i = 0,5$ , observa-se comportamento em função de  $s$  similar ao das variáveis anteriores. Uma vez determinada a densidade de carga linear, calcula-se o valor das densidades de carga volumétrica ao longo dos traços positivo e negativo. A etapa seguinte é calcular o campo elétrico gerado pelos traços, em particular o da sua componente normal à superfície do alvo que é crucial no processo da dessorção.

## 4.2 Campo elétrico

Como o campo elétrico gerado pelos traços depende do tempo, eq. (3-35), o modelo SEID considera que a densidade de carga de cada traço decresce exponencialmente com o tempo o que simula uma neutralização dos traços com as constantes de tempo  $\tau^+$  e  $\tau^-$ .

Sejam dois pontos localizados na superfície do alvo, com coordenadas  $(x_0, y_0)$  iguais a  $(0,0)$  e  $(-50 \text{ \AA}, 0)$ , e dois instantes de tempo: o primeiro logo após a formação do traço,  $t = 0$ , e um segundo tempo,  $t = 5 \text{ ps}$ . A figura 4.2 apresenta como o módulo da componente  $z$  do campo elétrico gerado pelos traços positivo ( $E_z^+$ ) e negativo ( $E_z^-$ ) varia com a espessura do alvo. As simulações foram feitas para as vidas médias  $\tau^+ = 4 \text{ ps}$  e  $\tau^- = 10 \text{ ps}$ .

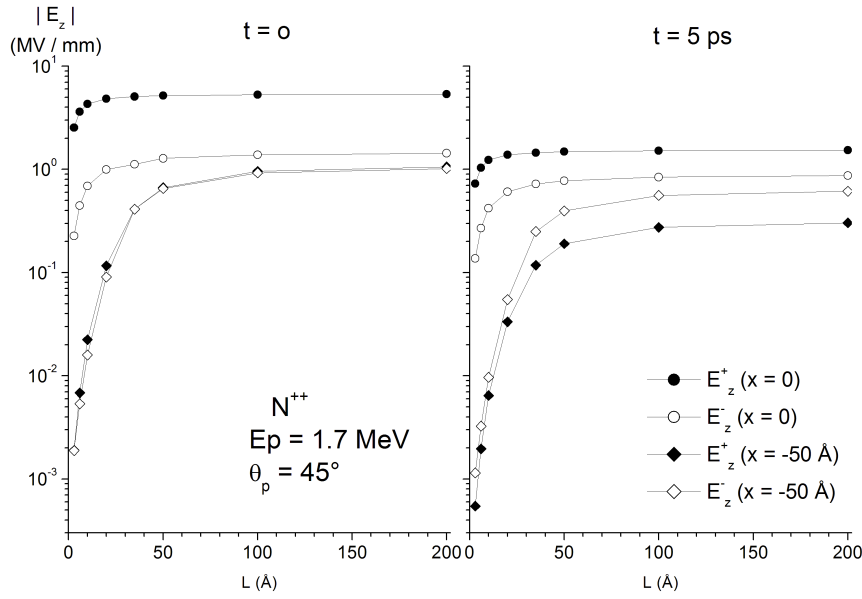


Figura 4.2: Contribuição dos traços positivo e negativo na determinação da componente  $z$  do campo elétrico em função da espessura do alvo, para dois instantes de tempo  $t = 0$  e  $t = 5$  ps. Considera-se  $\tau^+ = 4$  ps e  $\tau^- = 10$  ps. Para alvos mais espessos que  $\sim 50$  Å, o valor do campo na sua superfície satura.

No instante inicial ( $t = 0$ ) e na coordenada  $(0,0)$ , o valor do módulo de  $E_z^+$  sempre é maior que do módulo de  $E_z^-$  (por uma ordem de grandeza), enquanto que na coordenada  $(-50,0)$  a contribuição do traço positivo é ligeiramente maior do que a do traço negativo, para diferentes espessura do alvo.

Depois de  $5$  ps a situação é bem diferente para os dois pontos da superfície: para  $(0,0)$ ,  $|E_z^+|$  continua a ser maior do que  $|E_z^-|$  mas a diferença entre eles é pequena; no caso do sítio  $(-50,0)$ ,  $|E_z^-|$  torna-se maior. Interpreta-se que o traço positivo foi em grande parte neutralizado em um intervalo de tempo  $\tau^+ = 4$  ps.

Para espessuras superiores a  $\sim 150$  Å, o valor do campo não mais depende de sua variação.

Outro parâmetro importante no processo da dessorção é o ângulo de incidência do projétil  $\theta_p$ . O comprimento do traço é  $L_T = L / \cos \theta_p$ , o que mostra que a carga total gerada ao longo do traço aumenta com o ângulo de incidência. Na figura 4.3, o valor da componente  $z$  do campo elétrico gerado pelo traço é apresentado em função de  $\theta_p$ . Dois pontos da superfície do alvo,  $x = 0$  e  $x = -50$  Å, e dois tempos,  $t = 0$  e  $t = 5$  ps são considerados novamente.

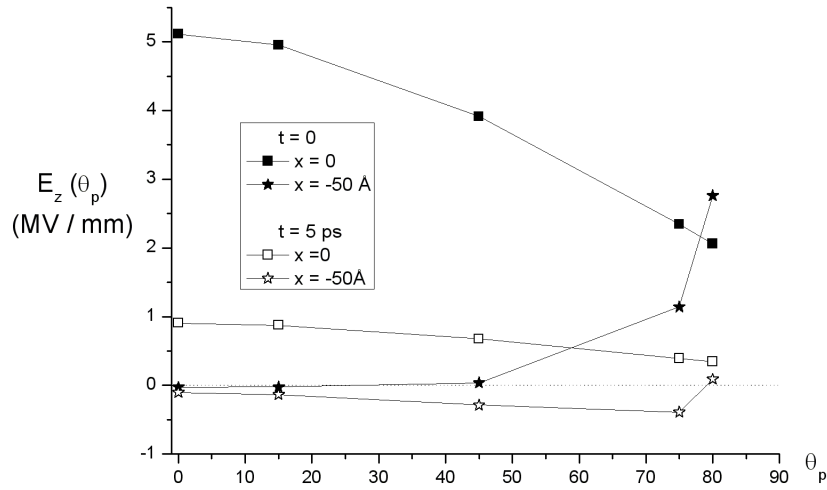


Figura 4.3: Componente  $z$  do campo elétrico como função do ângulo de incidência do projétil, calculada para o ponto de impacto e para um ponto “longe” dele. Símbolos cheios correspondem ao instante do impacto; símbolos vazados a  $t = 5 \text{ ps}$ .

Na posição  $(0,0)$ , o valor de  $E_z$  é maior para a incidência normal. Aumentando o ângulo de incidência, o valor do campo  $E_z$  diminui para ambos os instantes estudados. Ao contrário da coordenada  $(-50,0)$ , o valor do campo  $E_z$  aumenta a medida que aumenta o valor de  $\theta_p$ . Estes dois efeitos são compreensíveis já que: i)  $E_z = E(L) \cos \theta_p$  e a direção do campo  $\vec{E}$  no ponto de impacto é praticamente a mesma do traço; ii) ao aumentar  $\theta_p$ , o traço aproxima-se da superfície (logo  $E$  deve aumentar para  $x < 0$ ).

Para a análise do comportamento da componente  $z$  do campo elétrico em função do tempo, foram considerados três pontos na superfície do alvo  $x = 0$ ,  $-20 \text{ \AA}$  e  $-50 \text{ \AA}$ , espessura  $L = 100 \text{ \AA}$ , ângulo de incidência do projétil de  $45^\circ$  e os tempos de neutralização dos traços  $\tau^+ = 4 \text{ ps}$  e  $\tau^- = 10 \text{ ps}$ . Observa-se na figura 4.4 que para  $t = 0$  nas três posições o valor do campo elétrico é positivo e a medida que o tempo aumenta, o valor do campo torna-se negativo. Com relação ao ponto  $x = 0$ , o campo torna-se negativo em um intervalo tempo de  $\sim 8 \text{ ps}$ , instante em que um íon positivo estará suficientemente longe do alvo para ser neutralizado.

Íons positivos localizados em posições menores que  $-50 \text{ \AA}$  têm grande probabilidade de serem neutralizados rapidamente se retornarem à superfície. Já os íons negativos podem ser emitidos com maior facilidade nessa região.

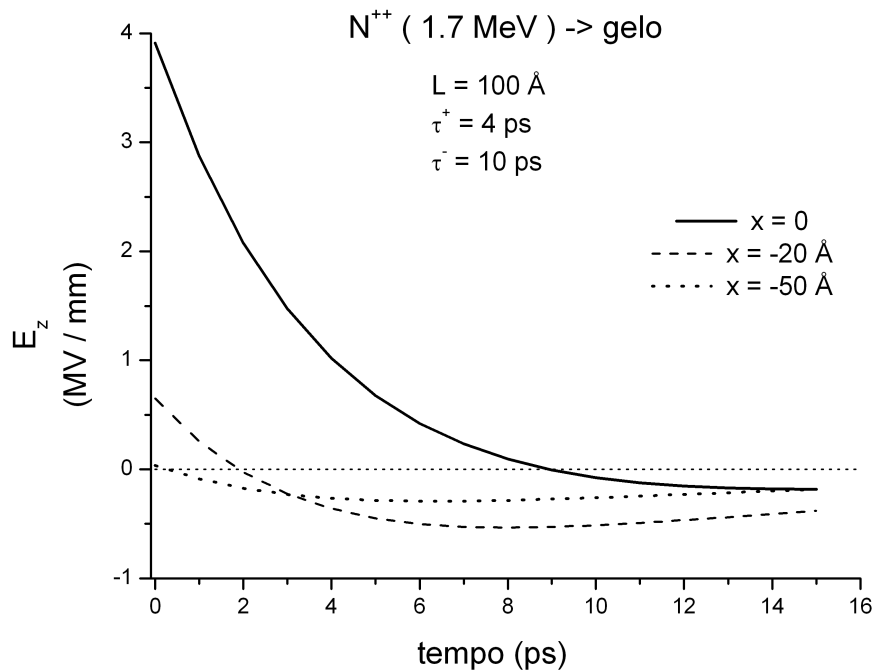


Figura 4.4: Componente  $z$  do campo elétrico em função do tempo para três pontos da superfície  $x = 0, -20, -50 \text{ \AA}$ .

### 4.3

#### Trajetória de íons secundários

Conhecido o comportamento do campo elétrico médio em função de certas variáveis chave, o estudo da dinâmica da dessorção de íons secundários fica facilitado. Sejam vários íons positivos de massa  $181 u$  em repouso distribuídos ao longo do eixo  $X$ , entre  $-10 \text{ \AA}$  e  $10 \text{ \AA}$ . Considerando a vida média de neutralização do traço negativo constante  $\tau^- = 10 \text{ ps}$  e valores para  $\tau^+$  de  $1, 4$  e  $7 \text{ ps}$ , as trajetórias dos íons foram determinadas para os primeiros  $100 \text{ ps}$  de dessorção. Na figura 4.5 observa-se que, quando  $\tau^+ = 1 \text{ ps}$ , todos os íons voltaram para a superfície do alvo devido ao fato de que o campo elétrico gerado pelo traço tornou-se negativo muito depressa na escala da dinâmica de emissão iônica. Para os outros valores de  $\tau^+ = 4$  e  $7 \text{ ps}$ , o tempo de neutralização mais lento do traço positivo permite que os íons positivos consigam se afastar do alvo.

Fixando os valores de  $\tau^+ = 4 \text{ ps}$  e  $\tau^- = 10 \text{ ps}$ , as trajetórias foram determinadas para íons de massa  $19, 235$  e  $343 u$ , localizados entre  $-40 \text{ \AA}$  e  $0$ , a cada  $5 \text{ \AA}$ . Elas são apresentadas na figura 4.6. Observa-se que os íons de massa  $235$  e  $343 u$ , localizados entre  $-10 \text{ \AA}$  e  $0$ , são dessorvidos sem serem

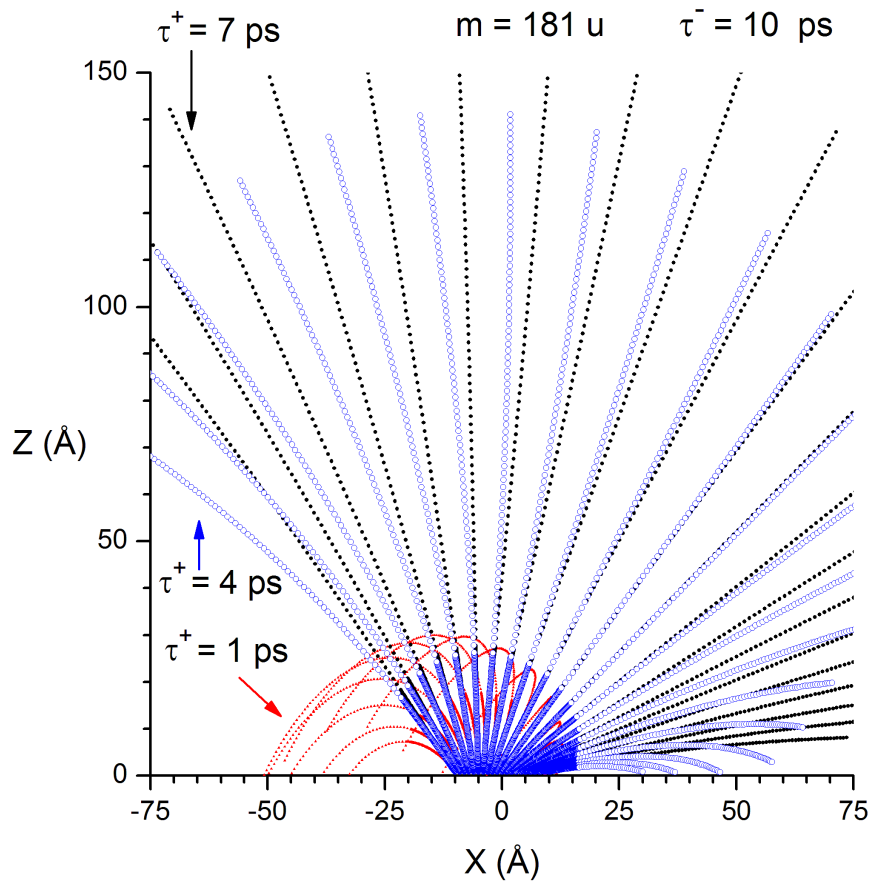


Figura 4.5: Trajetórias de íons positivos de massa  $181 u$  no plano  $XZ$  em função de várias vidas médias de neutralização de  $\tau^+$ , mantendo  $\tau^-$  fixo. Os íons partem de sítios localizados entre  $-10$  e  $10 \text{ \AA}$ , espaçados de  $1 \text{ \AA}$ . As trajetórias foram calculadas para os primeiros  $100 ps$ .

neutralizados; ao contrário, os íons de massa  $19 u$  conseguem sair de uma região maior. Note que íons de massa diferente e que saem da mesma posição têm trajetórias bem diferentes.

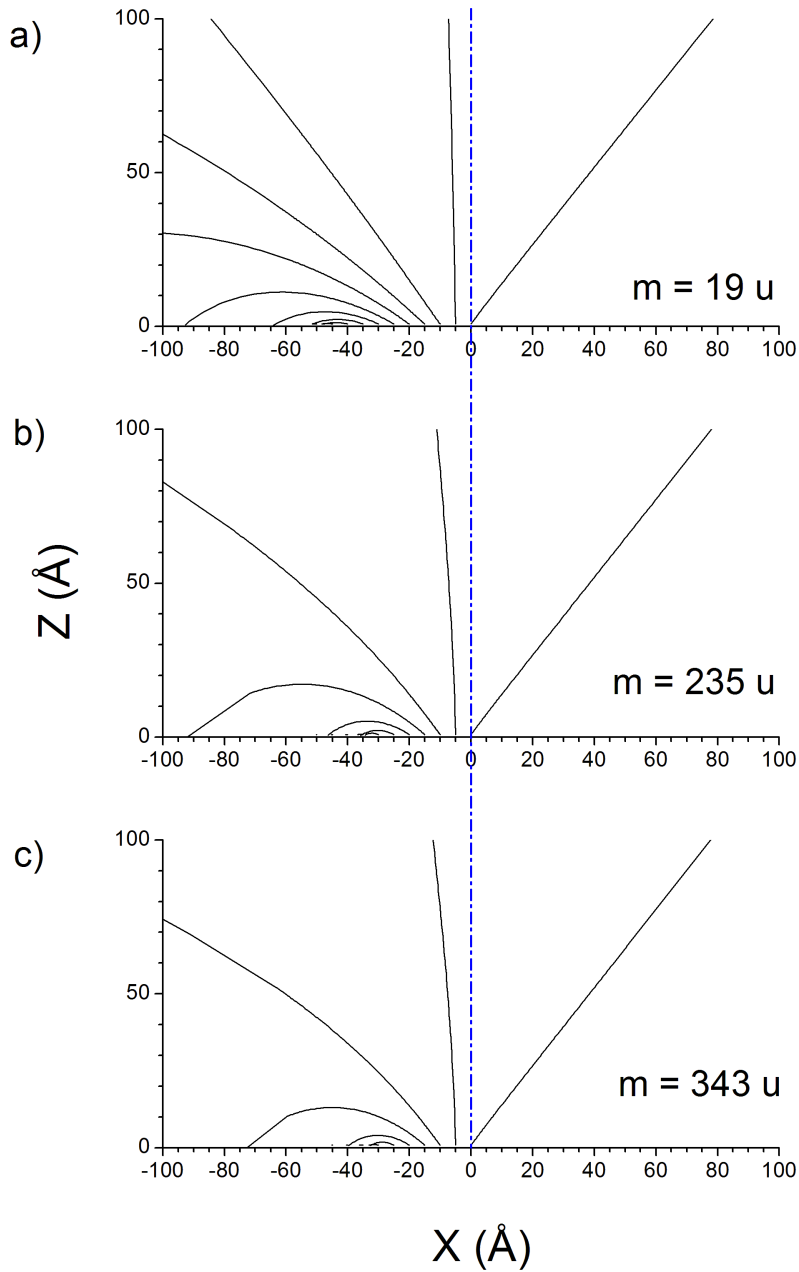


Figura 4.6: Trajetórias para íons de massa 19, 217 e 343 u, com  $\tau^+ = 4 \text{ ps}$  e  $\tau^- = 10 \text{ ps}$ . A linha tracejada vertical é usada como referência para a verificação de que íons de massa diferente não têm a mesma trajetória.



#### 4.4 Velocidade dos íons

As velocidades dos íons desorvidos são medidas experimentalmente e constituem um teste fino de mecanismos. Elas são usadas para a determinação dos valores adequados dos parâmetros envolvidos nas expressões matemáticas.

Na figura 4.7 é apresentada como varia no tempo a componente da velocidade normal ao plano de incidência do projétil, em unidades de  $km/s$  e calculada durante os primeiros  $10 ps$ . O valor de  $\tau^- = 100 ps$  foi mantido constante e foram considerados diferentes valores de  $\tau^+$  para um íon de massa  $343 u$ . A posição inicial do íon tem coordenadas  $x_0 = -5 \text{ \AA}$  e  $y = 0$ ; o íon partiu do repouso.

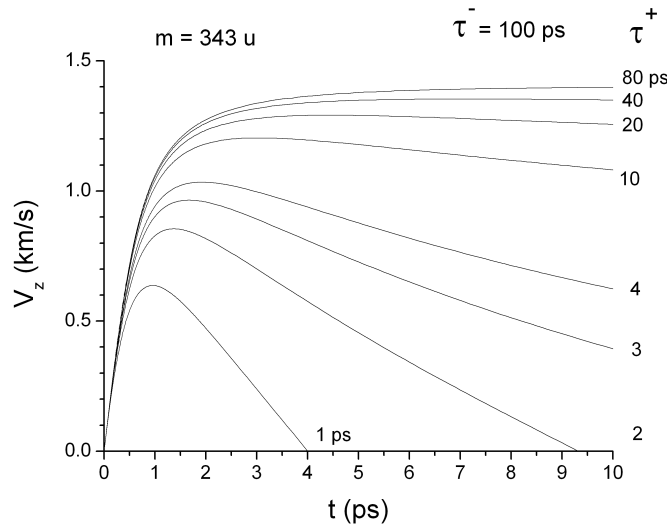


Figura 4.7: Comportamento da velocidade axial no plano de incidência, para diferentes valores de  $\tau^+$  e para  $\tau^- = 100 ps$  fixo. O íon tem massa  $343 u$ ,  $v_0 = 0$  e  $x_0 = -5 \text{ \AA}$ .

No caso de grande diferença entre os valores de  $\tau^+$  e  $\tau^-$ , observa-se que o valor da velocidade axial evolui até um valor máximo, indicando forte desaceleração. Para valores de  $\tau^+$  superiores a  $\sim \tau^-/2$ , a velocidade máxima desloca-se para  $t \rightarrow \infty$ , coincidindo com a velocidade final.

Na figura 4.8 é mostrado o comportamento da componente axial da velocidade em função da posição inicial, da carga do projétil e para: a)  $\lambda_q = 10 \text{ \AA}$  e b)  $\lambda_q = 3 \text{ \AA}$ . Ao longo do eixo  $X$ , simula-se a desorção de íons de massa  $19 u$ , com emissões entre  $-15$  e  $15 \text{ \AA}$  com passo de  $1 \text{ \AA}$ . No cálculo

considera-se  $\tau^+ = 6 \text{ ps}$  e  $\tau^- = 15 \text{ ps}$  para três valores de carga do projétil de nitrogênio de  $1,7 \text{ MeV}$ ,  $q = 0, 3, 7$ .

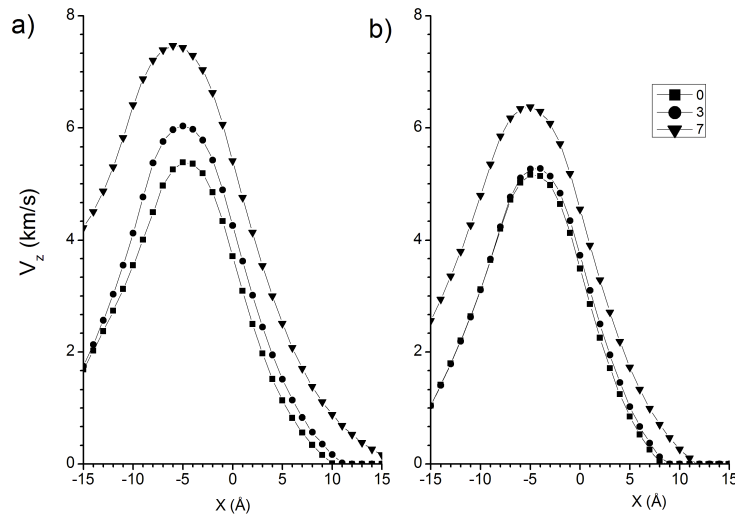


Figura 4.8: Velocidade axial de íons de massa  $19 u$  para diferentes valores da carga inicial do projétil  $q = 0, 3, 7$ ; para a)  $\lambda_q = 10 \text{ \AA}$  e b)  $\lambda_q = 3 \text{ \AA}$ .

Na figura 4.8 observa-se, que se a carga do projétil aumenta, as velocidades dos íons desorvidos também aumentam. Isto se deve ao fato de que as densidades de carga volumétrica nos infra e ultra traços aumentam com  $q$ , intensificando o campo elétrico e a aceleração exercida sobre o íon. Na figura 4.8 a), considerando a distância de relaxação ao equilíbrio no interior do sólido igual a  $\lambda_q = 10 \text{ \AA}$ , os valores da velocidade são maiores do que os correspondentes a  $\lambda_q = 3 \text{ \AA}$  mostrados na figura b) quando  $q > q_{eq}$ . Para  $q < q_{eq}$ , são pouco dependentes de  $\lambda_q$ .

Na expressão (3-19) definiu-se uma constante  $\eta_1$  para descrever a evolução efetiva do raio  $R^+$  do infratraço. Seus efeitos sobre  $v_z$  serão investigados a seguir. Na figura 4.9, os valores da velocidade axial inicial dos íons de massa  $1, 19$  e  $343 u$  são mostrados para três valores de  $\eta_1$ . A medida que o valor do parâmetro  $\eta_1$  aumenta, aumentam também os valores da velocidade axial. O efeito do parâmetro é mudar o volume dos traços distribuindo a carga numa região maior e aumentando a velocidade dos íons emitidos mais distantes do ponto de impacto. Para íons desorvidos de  $-5 \text{ \AA} < x < 0$ , o efeito de  $\eta_1$  é desprezível em consequência, tanto a forma da distribuição angular quanto da distribuição de velocidade são sensíveis a  $\eta_1$ .

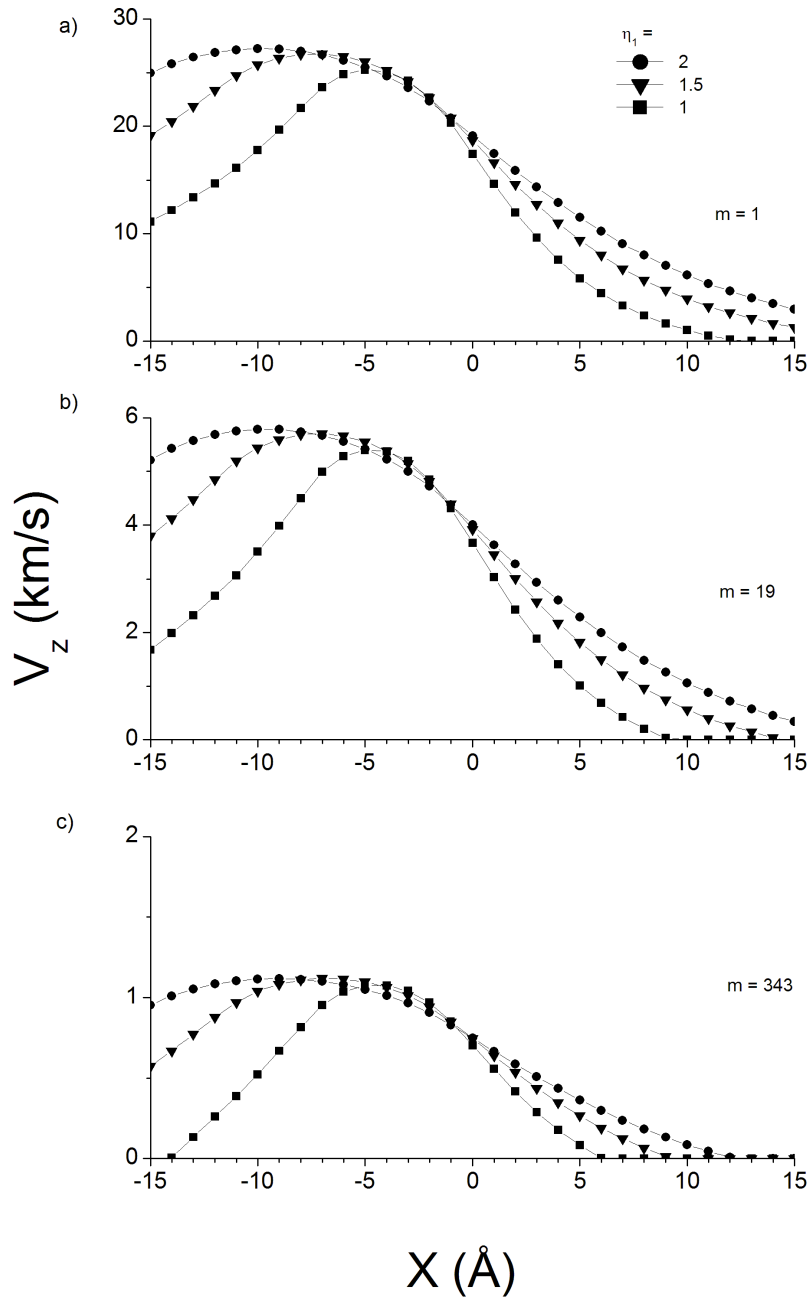


Figura 4.9: Velocidade axial dos íons de massa: 1, 19 e 343  $u$  em função do parâmetro  $\eta_1$  e da posição inicial de dessorção.

O efeito do parâmetro  $C_i$ , a fração da taxa de perda de energia do projétil utilizada na ionização do traço (eq. 3-23), sobre a velocidade axial é analisado na figura 4.10. A conclusão é que  $C_i$  tem efeito proporcional sobre todos os íons e posições de dessorção. Ele pode ser usado para ajustar o rendimento de dessorção e os valores absolutos das energias finais dos íons secundários. Ele não modifica a distribuição angular.

A velocidade axial dos íons dessorvidos é particularmente sensível às vidas médias de neutralização dos traços. Elas são características do material estudado, conforme mostrado por Wien et al. [44], que obteve os valores característicos entre 0.2 e 5 ps usando a equ. (3-20). A partir destes resultados procurou-se os valores de tempos de neutralização para o gelo.

A figura 4.11 mostra como a velocidade axial do íon hidrogênio varia no tempo, em função de diferentes pares de valores de tempos de neutralização  $\tau^+$  e  $\tau^-$ . Observa-se que, quando o valor de  $\tau^-$  é 10 vezes maior do que o valor de  $\tau^+ = 0,2$ , o íon pode ter velocidades negativas, voltando para a superfície. Nos demais casos analisados, a velocidade atinge um valor máximo, diminui e torna-se constante: o traço não mais atua sobre a dinâmica do íon.

A análise apresentada permite identificar como atuam os parâmetros do modelo SEID. Estas informações serão empregadas no capítulo 6, quando os cálculos serão confrontados com os resultados experimentais apresentados no capítulo seguinte.

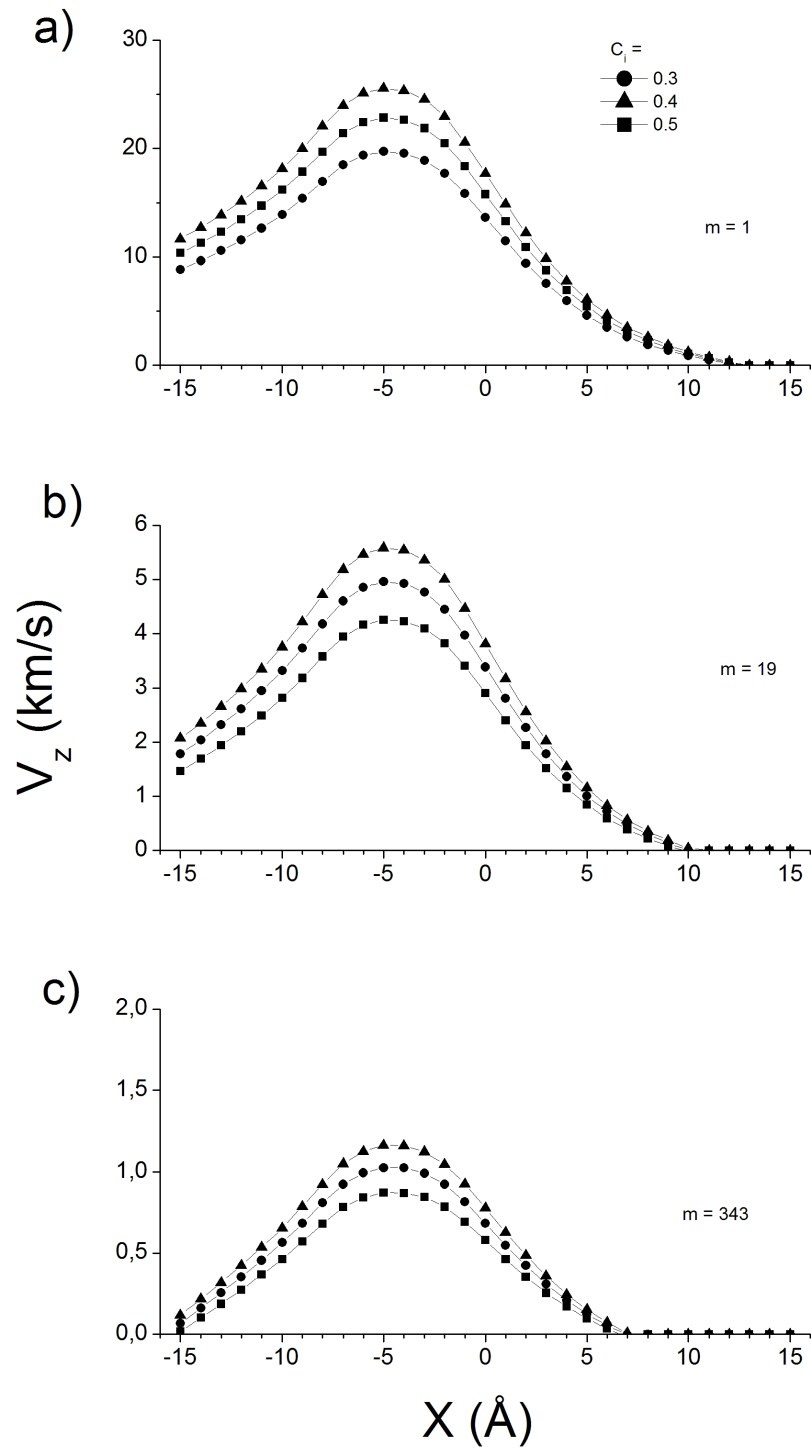


Figura 4.10: Influência do parâmetro  $C_i$  na velocidade axial dos íons de massa 1, 19 e 343  $u$ .

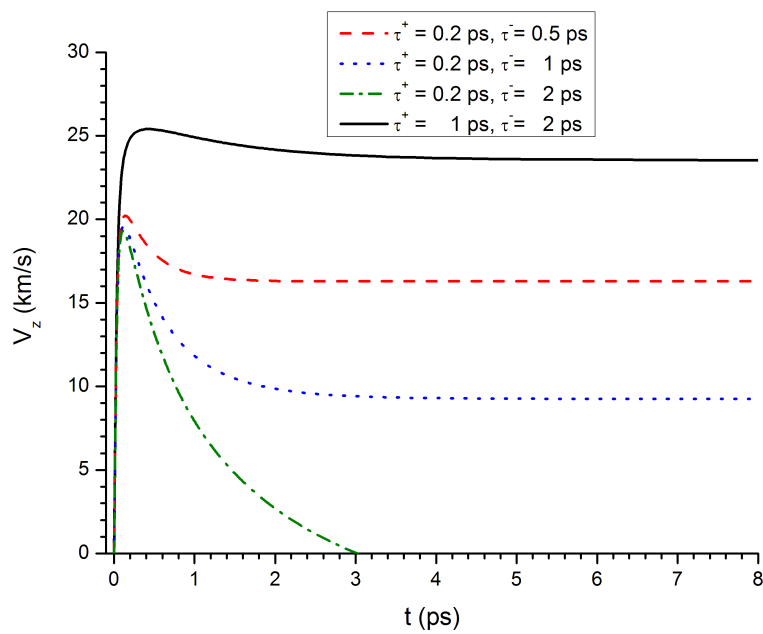


Figura 4.11: Dependência da velocidade axial com o tempo para diferentes pares de tempos de neutralização do traço. O íon tem massa  $1 u$  e foi lançado de  $-10 \text{ \AA}$ .