

## Referências Bibliográficas

- [1] BOHR, N.. **The penetration of atomic particles through matter**. In: MATHEMATISK-FYSISKE MEDDELELSER, volumen 18. Det Kgl. Danske Videnskabernes Selskab, 1948.
- [2] BROWN, W. L.; AUGUSTINIAK, W. M.; BRADY, E.; COOPER, B.; LANZEROTTI, L. J.; RAMIREZ, A.; EVATT, B. ; JOHNSON, R. E.. **Energy-dependence of the erosion of H<sub>2</sub>O ice films by H and He ions**. Nucl. Instr. and Meth., 170:321–325, 1980.
- [3] BROWN, W. L.; AUGUSTINIAK, W. M.; LANZEROTTI, L. J.; JOHNSON, R. E. ; EVATT, B.. **Linear and nonlinear processes in the erosion of H<sub>2</sub>O ice by fast light ions**. Phys. Rev. Lett., 45(29):1632, 1980.
- [4] JOHNSON, R. E.. **Stimulated desorption of atoms and molecules from bodies in the outer solar system**. Braz. J. Phys., 29(3):444, 1999.
- [5] OHRING, M.. **The Materials Science of Thin Films**. Academic Press, 1992.
- [6] SPOHR, R.. **Ion tracks and Microtechnology. Principles and Applications**. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft, 1990.
- [7] PETRENKO, V. F.; WHITWORTH, R. W.. **Physics of ice**. Oxford University Press, 1999.
- [8] ZIEGLER, J.. **SRIM-2003**. Nucl. Instr. and Meth. B, 219-220:1027–1036, 2004.
- [9] FLEISCHER, R. L.; PRICE, P. B. ; WALKER, R. M.. **Ion explosion spike mechanism for formation of charged-particle tracks in solids**. J. Appl. Phys., 36(11):3645, 1965.
- [10] HAFF, P. K.. **Possible new sputtering mechanism in track registering materials**. Appl. Phys. Lett., 29(8):473, 1976.

- [11] JOHNSON, R. E.; BROWN, W. L.. **Electronic mechanisms for sputtering of condensed-gas solids by energetic ions.** Nucl. Instr. and Meth., 198:103–118, 1982.
- [12] SEIBERLING, L. E.; GRIFFITH, J. E. ; TOMBRELLO, T. A.. **A thermalized ion explosion model for high energy sputtering and track registration.** Radiat. Eff., 52:201, 1980.
- [13] RITCHIE, R. H.; CLAUSSEN, C.. **A core plasma model of charged particle track formation in insulators.** Nucl. Instr. and Meth., 198:133–138, 1982.
- [14] WATSON, C. C.; TOMBRELLO, T. A.. **A modified lattice potential model of electronically mediated sputtering.** Radiat. Eff., 89:263, 1985.
- [15] VINEYARD, G. H.. **Thermal spikes and activated processes.** Radiat. Eff., 29:245, 1976.
- [16] LUCCHESI, R. R.. **Thermal spike model for heavy ion induced desorption from surfaces.** J. Chem. Phys., 86(1):443, 1987.
- [17] NIESCHLER, E.; NEES, B.; VOIT, H.; BEINING, P. ; SCHEER, J.. **Macroscopic description of fast heavy-ion-induced desorption yields.** Phys. Rev. B, 37:9197, 1988.
- [18] REIMANN, C. T.; BROWN, W. L. ; JOHNSON, R. E.. **Electronically stimulated sputtering and luminescence from solid argon.** Phys. Rev. B, 37(4):1455, 1988.
- [19] WILLIAMS, P.; SUNDQVIST, B.. **Mechanism of sputtering of large biomolecules by impact of highly ionizing particles.** Phys. Rev. Lett., 58(10):1031, 1987.
- [20] BITENSKY, I. S.; PARILIS, E. S.. **Shock wave mechanism for cluster emission and organic molecule desorption under ion bombardment.** Nucl. Instr. and Meth. B, 21:26, 1987.
- [21] BROWN, W. L.; JOHNSON, R. E.. **Sputtering of ices: a review.** Nucl. Instr. and Meth. B, 13:295–303, 1986.
- [22] SCHOU, J.. **Transport theory for kinetic emission of secondary electrons from solids by electron and ion bombardment.** Nucl. Instr. and Meth., 170:317–320, 1980.

- [23] JOHNSON, R. E.; SUNDQVIST, B.. **An electronic mechanism for molecular desorption.** Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys., 53:337–339, 1983.
- [24] HEDIN, A.; HÅKANSSON, P. ; SUNDQVIST, B.. **Ion-track model for fast-ion-induced desorption of molecules.** Phys. Rev. B, 31(4):1780, 1985.
- [25] SUNDQVIST, B.; HEDIN, A.; HÅKANSSON, P.; SALEHPOUR, M.; SÄVE, G. ; JOHNSON, R. E.. **Sputtering of biomolecules by fast heavy ions.** Nucl. Instr. and Meth. B, 14:429–435, 1986.
- [26] WIEN, K.. **Fast heavy ion induced desorption.** Radiat. Eff. and Def. in Solids, 109:137–167, 1989.
- [27] SUNDQVIST, B.. **Desorption of organic molecules from solid and liquid surface induced by particle impact.** In: SPUTTERING BY PARTICLE BOMBARDMENT III, volumen 64, p. 257–303. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1991.
- [28] HÅKANSSON, P.. **Desorption experiments on organic insulators with high energy particle beams.** In: FUNDAMENTAL PROCESSES IN SPUTTERING OF ATOMS AND MOLECULES, número 43, p. 593. K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd., 1992.
- [29] REIMANN, C. T.. **Theoretical models for sputtering and desorption of bio-organic molecules under collisional and electronic excitation by ion impact.** In: FUNDAMENTAL PROCESSES IN SPUTTERING OF ATOMS AND MOLECULES, volumen 43, p. 351. K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat. Fys. Medd., 1992.
- [30] BETZ, G.; WIEN, K.. **Energy and angular distributions of sputtered particles.** Int. J. Mass Spec. Ion Proc., 140:1, 1994.
- [31] PAPALÉO, R. M.. **Fast-Ion-Induced sputtering and modifications of molecular solids.** Tese de Doutorado, Division of ion Physics, Department of Radiation Sciences, Uppsala University, Sweden, 1996.
- [32] DE CASTRO, C. S. C.. **Estudo dos mecanismos de dessorção de íons  $H^+$  e  $H^-$  emitidos por superfícies metálicas sob impacto de íons rápidos.** Tese de doutorado, Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 1997.

- [33] SCHWARTZ, K.; TRAUTMANN, C. ; NEUMANN, R.. **Electronic excitation and heavy-ion-induced processes in ionic crystals**. Nucl. Instrum. Methods B, 209:73–84, 2003.
- [34] SCHIWIETZ, G.; CZERSKI, K.; ROTH, M.; STAUFENBIEL, F. ; GRANDE, P. L.. **Femtosecond dynamics -snapshots of early ion-track evolution**. Nucl. Instrum. Methods B, 226:683–704, 2004.
- [35] SCHIWIETZ, G.; GRANDE, P. L.; SKOGVALL, B.; BIRSACK, J. P.; KÖHRBRÜCK, R.; SOMMER, K.; SCHMOLDT, A.; GOPPELT, P.; KÁDÁR, I.; RICZ, S. ; STETTNER, U.. **Influence of nuclear track potentials in insulators on the emission of target auger electrons**. Phys. Rev. Lett., 69(4):628, 1992.
- [36] BETZ, H. D.. **Charge state and charge-changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media**. Rev. Modern Phys., 44(3):465, 1972.
- [37] NASTASI, M.. **Ion-Solid Interactions: Fundamentals and applications**. Solid State Science. Cambridge, 1996.
- [38] HECKMAN, H. H.; HUBBARD, E. L. ; SIMON, W. G.. **Electronic charge distributions for heavy ions at high velocities**. Phys. Rev., 129(3):1240, 1963.
- [39] MONTENEGRO, E. C.; CRUZ, S. A. ; VARGAS-ABURTO, C.. **A universal equation for the electronic stopping of ions in solids**. Phys. Lett., 92A(4):195–202, 1982.
- [40] BOHR, N.. **Velocity-range relation for fission fragments**. Phys. Rev., 59:270, 1941.
- [41] RITCHIE, R. H.. **Energy losses by swift charged particles in the bulk and at the surface of condensed matter**. Nucl. Instr. and Meth., 198:81–91, 1982.
- [42] REIMANN, C. T.. **Some comments on pressure-pulse/shock-wave desorption in a real material**. Nucl. Instr. and Meth. B, 95:181–191, 1995.
- [43] JOHNSON, R. E.. **Sputtering of ices in the outer solar system**. Rev. Mod. Phys., 68(1):305, 1996.

- [44] WIEN, K.; KOCH, C. ; VAN TAN, N.. **Line shifts in mass spectra of secondary ions ejected from solids by MeV-ion impact.** Nucl. Instr. and Meth. B, 100:322–330, 1995.
- [45] KOBETICH, E. J.; KATZ, R.. **Energy deposition by electron beam and  $\delta$  rays.** Phys. Rev., 170(2):391, 1968.
- [46] IZA, P.; SIGAUD, R.; FARENZENA, L. S.; PONCIANO, C. R. ; DA SILVEIRA, E. F.. **Track electrostatic model for describing ion emission of insulators.** Braz. J. Physics, 35(4A):921–926, 2005.
- [47] STERNGLASS, E. J.. **Theory of secondary electron by high-speed ions.** Phys. Rev., 108(1):1, 1957.
- [48] SCHOU, J.. **Secondary electron emission from solids by electron and proton bombardment.** Scanning Microscopy, 2(2):607–632, 1988.
- [49] DREXLER, C. G.; DUBOIS, R. D.. **Energy-and angle- differential yields of electron emission from thin carbon foils after fast proton impact.** Phys. Rev. A, 1996.
- [50] ROTHARD, H.. **Electron ejection by heavy particles as precursor of track formation in condensed matter.** Nucl. Instrum. Methods B, 225:27–39, 2004.
- [51] VERLET, L.. **Computer experiments on classical fluids. I. thermodynamical properties of Lennard–Jones molecules.** Phys. Rev., 159(1):98, 1967.
- [52] PONCIANO, C. R.. **Desenvolvimento de espectrômetros de massa por tempo de voo para PDMS e MALDI. Aplicações de PDMS em compostos não voláteis.** Tese de doutorado, Departamento de Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 1996.
- [53] TORGERSON, D. F.; SKOWRONSKI, R. P. ; MACFARLENE, R. D.. **New approach to mass-spectroscopy of non volatile compounds.** Biochem. Biophys. Res. Commun., 60:616–621, 1974.
- [54] COLLADO, V. M.; FARENZENA, L. S.; PONCIANO, C. R.; DA SILVEIRA, E. F. ; WIEN, K.. **Ion desorption from frozen H<sub>2</sub>O irradiated by MeV heavy ions.** Surf. Sci., 569:149–162, 2004.
- [55] FARENZENA, L. S.; COLLADO, V. M.; PONCIANO, C. R.; DA SILVEIRA, E. F. ; WIEN, K.. **Secondary ion emission from CO<sub>2</sub> – H<sub>2</sub>O ice**

- irradiated by energetic heavy ions Part I. measurement of the mass spectra. *Int. J. Mass Spectrom.*, 243:85–93, 2005.
- [56] PINHO, R. R.. **Estudo da dessorção iônica induzida pelo impacto de íons rápidos sobre fenilalanina.** Tese de doutorado, Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 1993.
- [57] [www.roentdek.com](http://www.roentdek.com), User Manual version 6.0.1.8 B77.
- [58] FENYÖ, D.; HÅKANSSON, P. ; SUNQVIST, B. U. R.. **On the ejection of hydrogen ions from organic solids impacted by MeV ions.** *Nucl. Instrum. Methods. B.*, 84:31–36, 1994.
- [59] HÅKANSSON, P.; KAMENSKY, I. ; SUNDQVIST, B.. **Biomolecule desorption yields as a function of the angle of incidence of fast heavy ions.** *Surf. Sci.*, 116:302–312, 1982.
- [60] <http://physics.nist.gov/physrefdata/ionization/>.
- [61] STRAUB, H. C.; RENAULT, P.; LINDSAY, B. G.; SMITH, K. A. ; STEBBINGS, R. F.. **Absolute partial cross sections for electron-impact ionization of H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> from threshold to 1000 eV.** *Phys. Rev. A*, 54(3):2146, 1996.
- [62] STRAUB, H. C.; LINDSAY, B. G.; SMITH, K. A. ; STEBBINGS, R. F.. **Absolute partial cross sections for electron-impact ionization of H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O from threshold to 1000 eV.** *J. Chem. Phys.*, 108(1):109, 1998.
- [63] SCHULZ, G. J.. **Formation of H<sup>-</sup> ions by electron impact on H<sub>2</sub>.** *Phys. Rev.*, 113(3):816, 1959.
- [64] COMPTON, R. N.; CHRISTOPHOROU, L. G.. **Hegative-ion formation in H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O.** *Phys. Rev.*, 154(1):110, 1967.
- [65] PEREIRA, J. A. M.; DA SILVEIRA, E. F.. **Cluster and velocity effects on yields and kinetic energy distributions of Li<sup>+</sup> desorbed from LiF.** *Phys. Rev. Lett.*, 84(25):5904, 2000.
- [66] PEREIRA, J. A. M.; BITENSKY, I. S. ; DA SILVEIRA, E. F.. **Nonlinear effects in ion emission from lif induced by N<sup>+</sup> and N<sub>2</sub><sup>+</sup> MeV ion impact.** *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes*, 174:179–191, 1998.
- [67] GRANDE, P. L.; SCHWIETZ, G.. **Impact-parameter dependence of the electronic energy loss of fast ions.** *Phys. Rev. A*, 58:3796, 1998.

- [68] SCHIWIEZ, G.; GRANDE, P. L.. **A unitary convolution approximation for the impact-parameter dependent electronic energy.** Nucl. Instr. and Meth. B, 153:1–9, 1999.
- [69] DE AZEVEDO, G. M.; GRANDE, P. L. ; SCHIWIEZ, G.. **Impact-parameter dependent energy loss of screened ions.** Nucl. Instrum. Methods B, 164:203–211, 2000.
- [70] SCHIWIEZ, G.; GRANDE, P. L.. **Casp version 3.1.** [www.hmi.de/people/schiwietz/casp.html](http://www.hmi.de/people/schiwietz/casp.html), 2004.
- [71] JOHNSTON, R. L.. **Atomic and molecular clusters.** Taylor & Francis, 2002.
- [72] GARRISON, B. J.. **Molecular desorption induced by heavy particle bombardment of solids.** Int. J. Mass Spectrom. Ion Phys., 53:243, 1983.

## A Códigos

### A.1

#### Solução da equação de movimento pelo algoritmo de Verlet

A evolução de um sistema de partículas clássico fica determinada se a equação de movimento, as posições e as velocidades iniciais são conhecidas.

O algoritmo de Verlet é um método prático para resolver numericamente a equação de movimento calculando as novas posições e velocidades passo a passo a partir da posição e velocidade no momento inicial [51].

A equação de movimento clássica é uma equação diferencial de segunda ordem  $\ddot{r}(t) = F(r)/m$  que pode ser reduzida a duas equações de primeira ordem. Elas são:

$$\dot{r}(t) = v(t) \quad (\text{A-1})$$

e

$$\dot{v}(t) = \frac{F(r(t))}{m} \quad (\text{A-2})$$

Um algoritmo de diferenças finitas pode ser montado utilizando a expansão de Taylor da função posição  $r(t+h)$ :

$$r(t+h) = r(t) + h\dot{r}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{r}(t) + O(h^3) \quad (\text{A-3})$$

Utilizando  $v(t)$  no lugar de  $\dot{r}$  e a 2ª Lei de Newton  $\ddot{r} = F/m$ , tem-se:

$$r(t+h) = r(t) + hv(t) + \frac{h^2}{2} \frac{F(r(t))}{m} + O(h^3) \quad (\text{A-4})$$

A expansão de  $v(t+h)$  nos conduz a:

$$v(t+h) = v(t) + h\dot{v}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{v}(t) + O(h^3) \quad (\text{A-5})$$

Podemos usar  $F/m$  para eliminar  $\dot{v}$ , mas ainda assim necessitamos desen-



volver uma expressão para  $\ddot{v}$  em termos de quantidades conhecidas. Isto pode ser feito através de  $\dot{v}(t+h)$ :

$$\dot{v}(t+h) = \dot{v}(t) + h\ddot{v}(t) + O(h^2) \quad (\text{A-6})$$

re-ordenando e multiplicando por  $h/2$  obtém-se:

$$\frac{h^2}{2}\ddot{v}(t) = \frac{h}{2}[\dot{v}(t+h) - \dot{v}(t)] + O(h^3) \quad (\text{A-7})$$

A expressão para  $v(t+h)$  transforma-se então em:

$$v(t+h) = v(t) + h\dot{v}(t) + \frac{h}{2}(\dot{v}(t+h) - \dot{v}(t)) + O(h^3) \quad (\text{A-8})$$

Usando a equação de movimento, esta pode ser escrita como:

$$v(t+h) = v(t) + \frac{h}{2m}[F(x(t+h)) + F(x(t))] + O(h^3) \quad (\text{A-9})$$

Esquemáticamente, o algoritmo de Verlet para as velocidades é: dado um valor conhecido da posição  $r_i$ , velocidade  $v_i$  e uma expressão para a força  $F(r(t))$ ,

**Passo 1:** Determinar

$$r_{i+1} = r_i + hv_i + h^2F(r_i)/2m \quad (\text{A-10})$$

**Passo 2:** Calcular

$$F(r_{i+1}) \quad (\text{A-11})$$

**Passo 3:** Determinar

$$v_{i+1} = v_i + \frac{h}{2m}[F(r_i) + F(r_{i+1})] \quad (\text{A-12})$$

Após os parâmetros para uma nova posição terem sido calculados, volta-se ao passo 1.

O diagrama de blocos do programa principal é apresentado na figura A.1.

Três subrotinas adicionais foram desenvolvidas. Uma primeira subrotina permite determinar o valor da força originada pelo campo elétrico formado pelo traço usando um referencial localizado ao longo do traço (Fig.A.2); como o traço é formado pelo infratraço (traço positivo) e ultratraço (negativo), duas subrotinas independentes foram escritas para cada um destes e são apresentadas nas figuras A.3 e A.4 respectivamente.

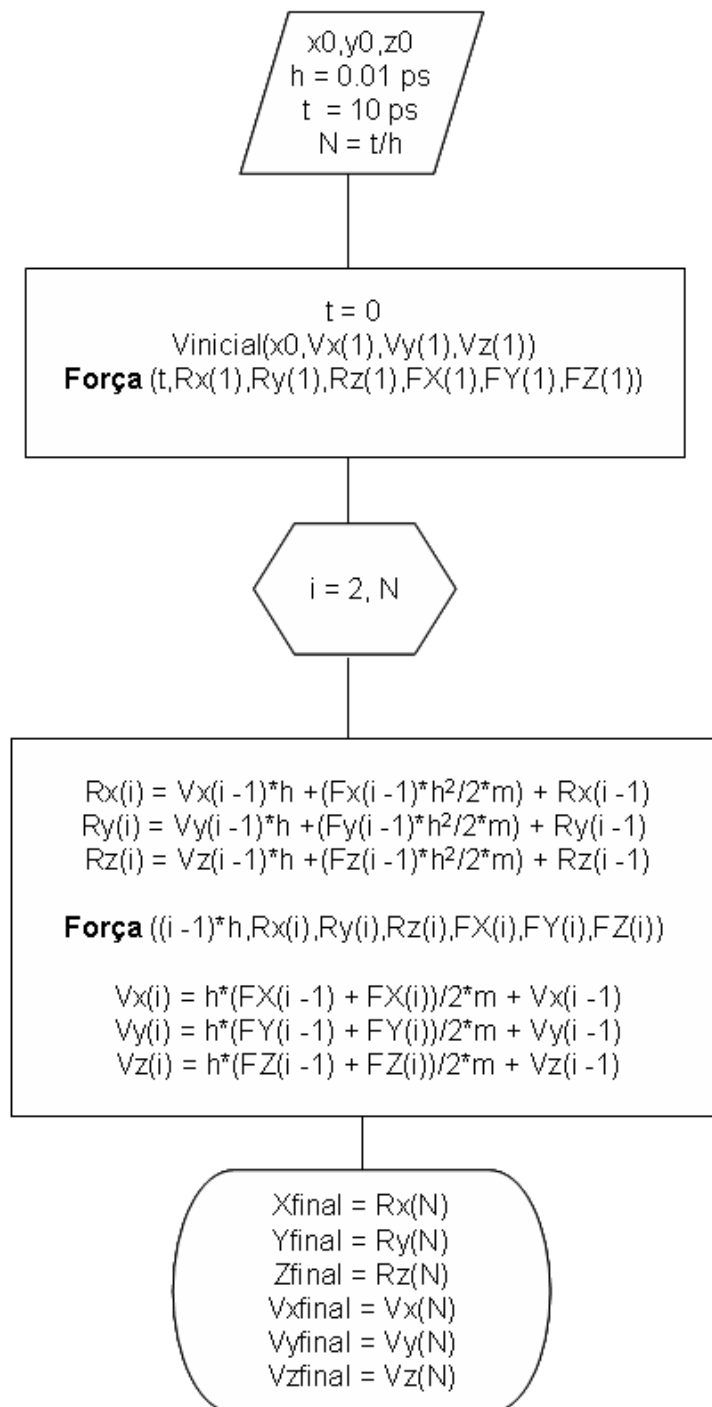


Figura A.1: Diagrama de blocos do programa principal

### Força

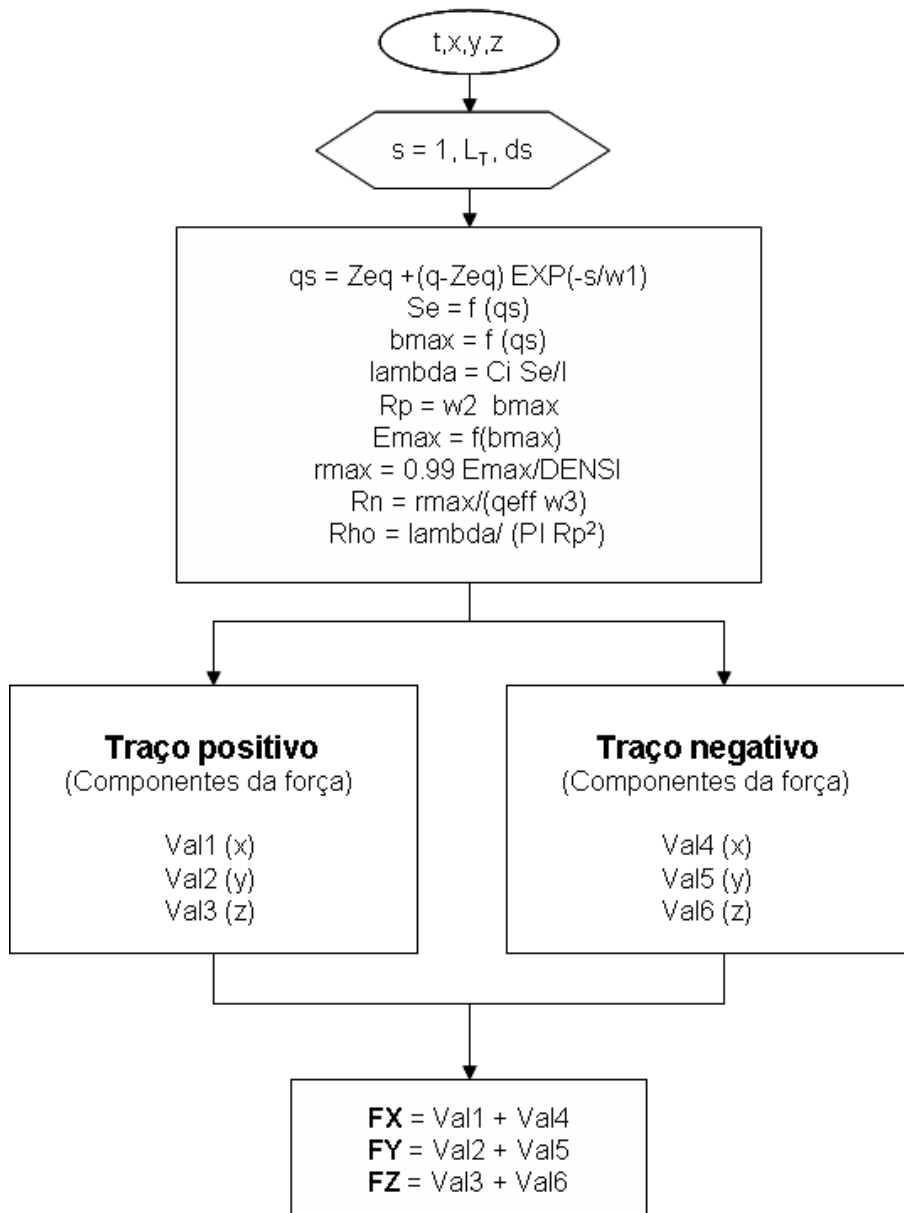


Figura A.2: Subrotina Força.

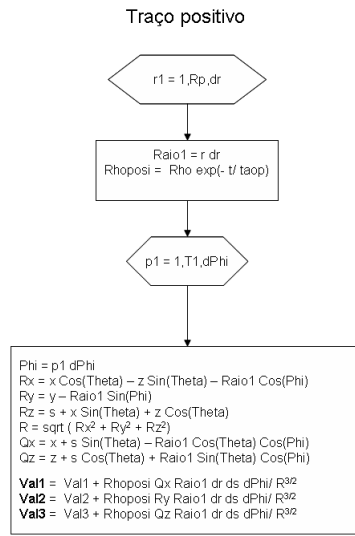


Figura A.3: Subrotina traço positivo.

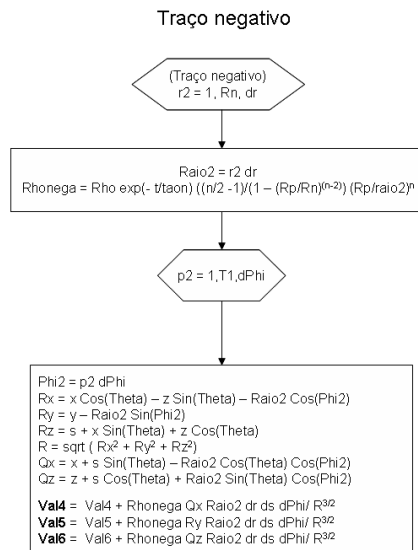


Figura A.4: Subrotina traço negativo.

## A.2 Estrutura do programa CoboldPC

Na figura A.5 pode-se ver o diagrama do programa utilizado pelo CoboldPC para a aquisição e análise de dados.

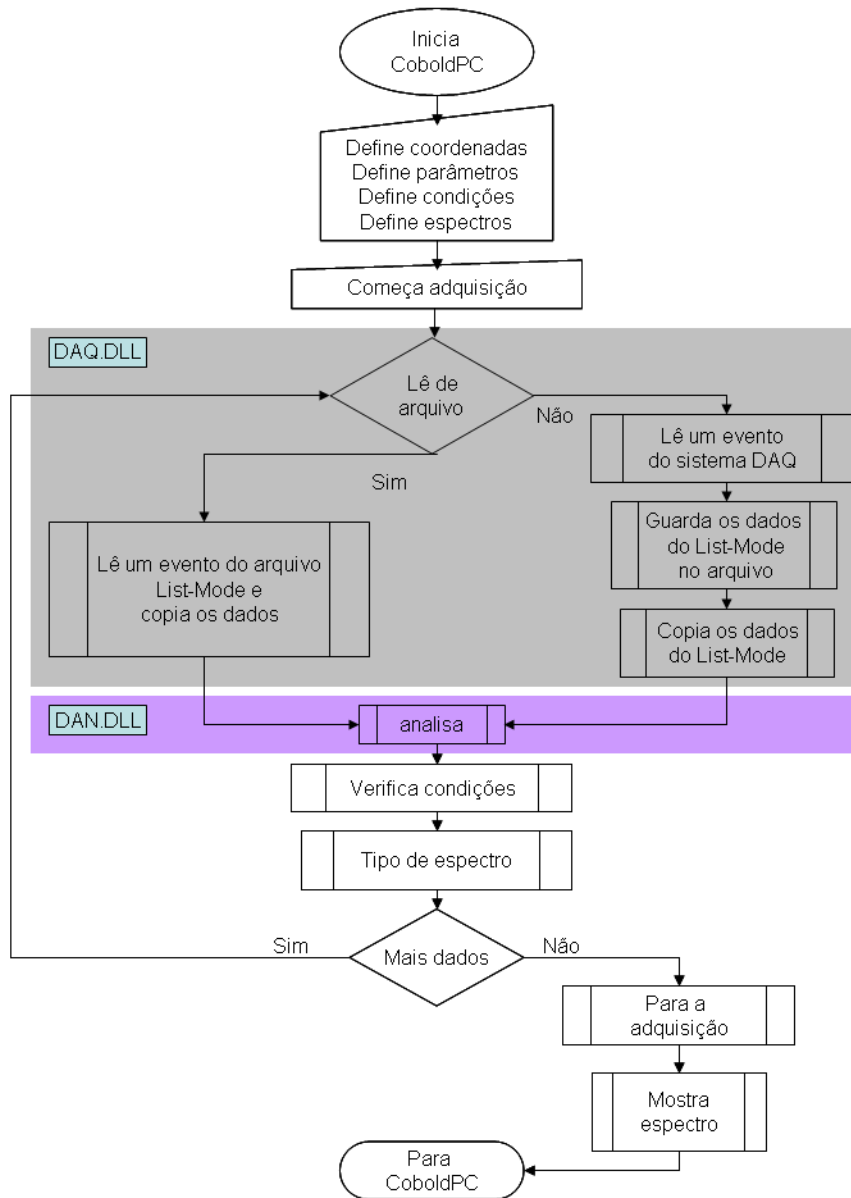


Figura A.5: Diagrama de blocos que o CoboldPC utiliza.

## **B**

### **Programas utilizados**

#### **B.1**

##### **SRIM**

O programa SRIM é formado por dois sub-programas: o "Stopping Power" e o TRIM ("Transport and Range of Ions in Matter"). O programa foi elaborado por J.P. Ziegler, J.P. Biersack e U. Littmark e tornou-se uma ferramenta muito útil no estudo das interações projétil-sólido.

Este código pode, para energias incidentes de 10 eV a 10 GeV, simular o alcance do íon e a perda de energia por unidade de comprimento. As distribuições angulares e de energia dos íons espalhados e transmitidos também podem ser calculadas.

Os parâmetros iniciais do alvo são: a densidade, a espessura e a composição química. Para um alvo composto de vários elementos a regra de Bragg é usada para determinar a perda de energia. Os resultados variam na ordem de 15% com relação aos resultados experimentais.

O projétil perde energia em quantidades discretas durante as colisões binárias e continuamente entre as colisões binárias, até que sua energia esteja abaixo de um valor pré-estabelecido ou que saia do material. As perdas de energia discretas nas colisões binárias contribuem para a perda de energia nuclear enquanto que as perdas contínuas entre as colisões binárias contribuem para a perda de energia eletrônica.

O programa utiliza o método de Monte Carlo para simular as trajetórias de um grande número de projéteis no alvo.

## B.2 CasP

O programa **CasP** (**C**onvolution approximation for swift **P**articles) versão 3.1, desenvolvido por P.L. Grande e G. Schiwietz [67–70], calcula apenas a perda de energia eletrônica através de cálculos de transferência de energia eletrônica  $Q_e$  (devido à excitação e a ionização dos átomos do alvo) para cada um dos diferentes valores de parâmetro de impacto  $b$  na colisão. A seção de choque total devido a perda de energia eletrônica  $S_e$  é determinada a partir de  $Q_e(b)$ .

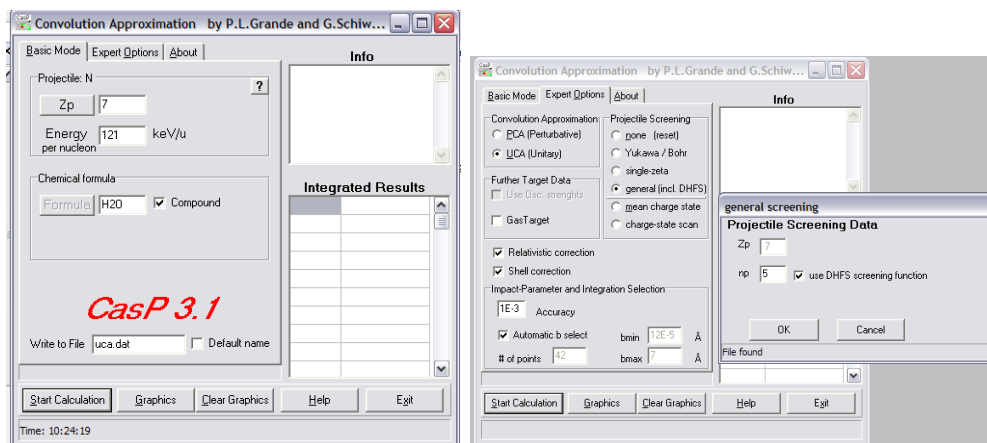


Figura B.1: CasP

A computação de  $Q_e$  e de  $S_e$  leva em conta uma função de blindagem do projétil que pode ser pré-definida na opção “projectile–screening function”, ou seja, CasP calcula o poder de freamento para cada estado de carga do projétil. Feito o cálculo, pode-se optar pelo valor de taxa de perda de energia correspondente ao estado de carga médio.

O programa CasP faz uso de aproximações para realizar os cálculos; a aproximação de convolução unitária **UCA** é uma teoria não linear já que inclui os termos de Bloch na perda de energia. Conseqüentemente, para projéteis totalmente ionizados, os resultados não escalam com o quadrado da carga do projétil (como acontece para a maioria das teorias quânticas de primeira ordem).

A captura eletrônica e ciclos de perda podem ser importantes para energias perto ou abaixo da velocidade na qual a velocidade do projétil é igual à velocidade orbital dos elétrons (aproximadamente 25 keV/u para as bandas de valência). Para velocidades do projétil mais elevadas, a transferência de energia para os elétrons do alvo se torna o processo dominante no mecanismo de redução de velocidade

dos íons.

A opção da aproximação UCA inclui uma aproximação para o formalismo de pacote de onda de Bloch. Cada elétron é contado só uma vez em uma colisão e são restringidas as probabilidades de ionização a um máximo de 100%.

A opção **PCA** é uma aproximação que depende do parâmetro de impacto na primeira aproximação de Bohr (teoria da perturbação da 1ª ordem, freqüentemente denominada aproximação semi-clássica). Esta aproximação é baseada na suposição de um movimento retilíneo do projétil, contanto que o projétil tenha alguns  $keV/u$ .

Na janela principal do programa, figura B.1, o projétil é definido pelo seu número atômico  $Z$  e a sua relação energia/massa dada em unidades  $keV/u$ . O alvo é especificado pelo símbolo do elemento químico ou, se for molecular, pela sua fórmula.

Na janela “Expert\_Options” pode-se escolher uma das duas aproximações mencionadas anteriormente. Nos nossos cálculos usou-se a **UCA**. Na região de “Projectile screening”, se for marcado “general”, surge uma janela na qual o estado de carga inicial do projétil deve ser definido.

### B.3 CoboldPC

No início da execução do programa surge uma janela similar a da figura B.2. Existem duas maneiras de interação: através dos botões da barra de ferramentas ou por uma ordem na linha de comandos localizada na parte inferior da tela. Para dar início à aquisição, executa-se um arquivo de extensão *ccf* (nome.ccf) da seguinte forma:

1. na linha de comandos escreve-se a ordem *execute nome.ccf (enter)*; pode-se alternativamente usar a barra com o comando *execute*.
2. na caixa de diálogo que surge, seleciona-se o diretório e o nome.ccf.

Em outra janela de diálogo, figura B.2, o usuário deve definir o tipo de sessão:

- leitura de um arquivo previamente adquirido **ListModeFile**, ou



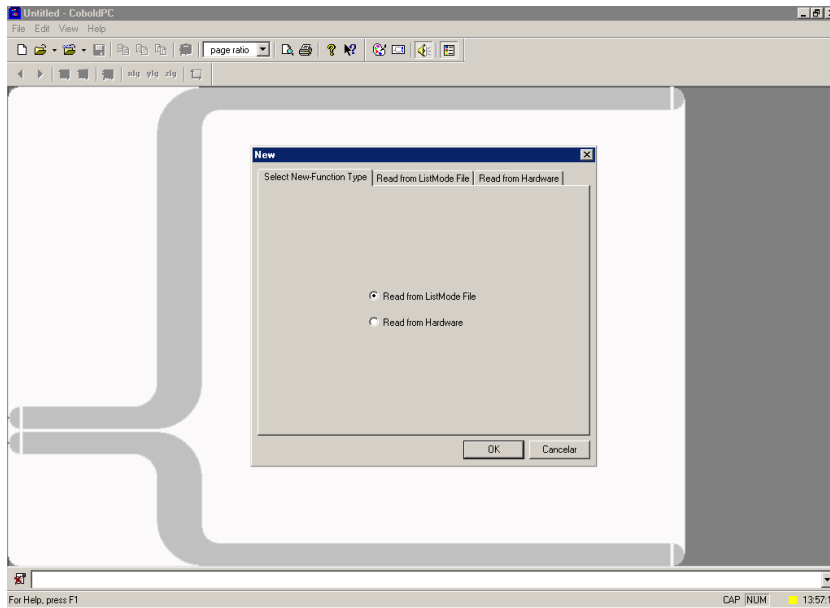


Figura B.2: Janela do CoboldPC

- leitura a partir do **Hardware**, neste caso o usuário pode adquirir os dados em formato ListModeFile (nome.lmf).

O programa automaticamente adquire e gera os espectros que previamente foram definidos no nome.ccf; estes ficam visíveis durante toda a aquisição. Para observar os diferentes espectros use as opções da barra, os botões (+/-) do bloco numérico, ou a linha de comandos (*view*).

A seguir alguns comandos freqüentes:

start	inicia a aquisição
pause	pára a aquisição
stop	encerra a aquisição
view 2	mostra o espectro 2
cur	mostra um marcador para observar as coordenadas no espectro
exp	expande o espectro usando o cursor para determinar a área
fit	ajusta uma função ao espectro
int	fornece o valor de uma área definida no espectro
update	atualiza o espectro que está sendo mostrado
clear all	apaga os espectros

O tratamento de dados é feito de acordo com as necessidades específicas e, para isso, deve-se modificar o arquivo DAN.d11 escrito em linguagem FORTRAN.

## B.4 FileZilla

O software FileZilla permite transferir os arquivos tipo “Modelo.f90” para o diretório do “usuário” no LNCC. Depois de executar o programa, as caixas de diálogo devem ser preenchidas assim:

Address: sftp://itaipava.lncc.br  
 User: “usuário”  
 Password: \*\*\*\*\*  
 Port: 22

Uma vez feito isso, pode-se realizar o intercâmbio dos arquivos com um simples arraste dos arquivos entre a pasta do LNCC e a pasta do PC.

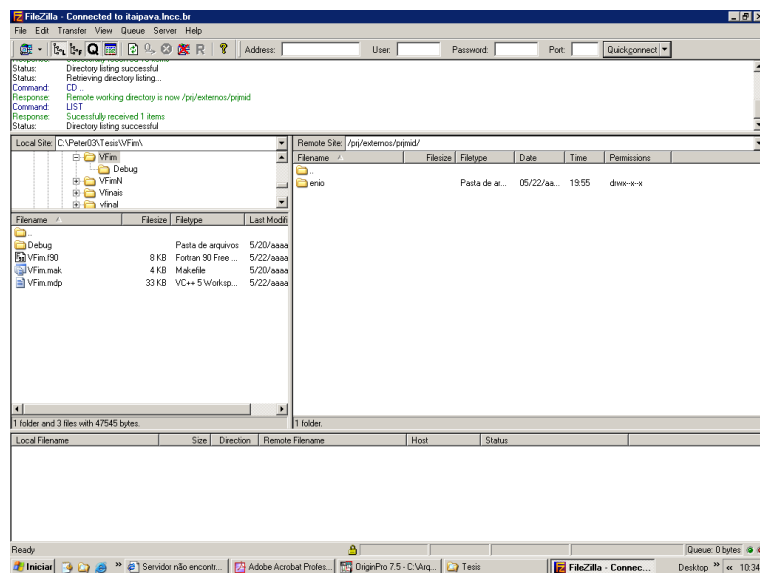


Figura B.3: FileZilla

## B.5 Putty

Este programa permite administrar o computador no LNCC, definido em um ambiente Unix. Uma vez na janela do Putty, no espaço correspondente a Host Name, digite “itaipava.lncc.br” e depois clique em Open, logo aparece uma janela preta com a seguinte mensagem: Login as:, digite “usuário”; a seguir forneça a senha.

A seguir os principais comandos usados:

logout	para sair
man	ajuda
cd	permite trocar de diretório
ls -l	lista os arquivos
rm "nome"	apaga arquivo
rmdir "nome"	cria um diretório
ps -u	lista os processos do usuário
dos2unix modelo.f90 > n1.f90	permite adicionar um fim de linha ao arquivo "modelo.f90" e o renomea para "n1.f90"
f90 n1.f90 -o modelo	cria o arquivo executável
./modelo	executa o arquivo "modelo"
./modelo &	executa o arquivo e permite continuar executando outros comandos
kill PID	anula o trabalho com numeração PID
gzip dado.dat	comprime o arquivo

## C Agregados Iônicos

### C.1 Agregados iônicos

Define-se um agregado como um conjunto de partículas (átomos ou moléculas). Os agregados se subdividem de acordo com os tipos de átomos que os compõem e pela natureza da ligação destes [71]; por exemplo: agregados metálicos, iônicos, moleculares, de semicondutores, de gases raros.

A formação de agregados iônicos é outra questão que ainda não tem uma resposta bem definida. Existem três mecanismos de formação de agregados [30,72]:

1. O primeiro é chamado de emissão simples. Supõe-se que exista agregados de moléculas pré-formadas na superfície do alvo e que a energia de dissociação da molécula é grande em comparação com a energia de ligação à superfície. É esta diferença de energias que permite a ejeção das moléculas intactas.
2. Para sistemas como metais e semicondutores, a energia de dissociação de uma molécula é menor que a energia de ligação superficial. Assim, as moléculas ejetadas podem interagir entre elas em uma região acima da superfície do sólido e formar agregados por um processo de recombinação. Neste mecanismo, os átomos não precisam ser emitidos de sítios contíguos na superfície.
3. O último mecanismo é essencialmente um mecanismo híbrido dos dois anteriores (ejeção intacta e recombinação).

#### C.1.1 Propriedades dos agregados iônicos

Um dos aspectos fascinantes dos agregados é a evolução das propriedades em função de seus tamanhos. Existe uma teoria que descreve esta evolução. A

teoria de aproximação de agregados esféricos (Spherical Clusters Approximation SCA) considera um agregado formado por  $N$  átomos ou moléculas como sendo uma esfera.

O volume de um agregado é considerado como sendo o produto entre o volume de um átomo e o número de átomos que formam o agregado:

$$V_c = NV_a \quad (\text{C-1})$$

introduzindo o raio atômico, tem-se:

$$\frac{4}{3}\pi R_c^3 = \frac{4}{3}\pi R_a^3 N \quad (\text{C-2})$$

após reordenar os termos, determina-se o raio de um agregado:

$$R_c = N^{1/3}R_a \quad (\text{C-3})$$

A área superficial de um agregado é portanto:

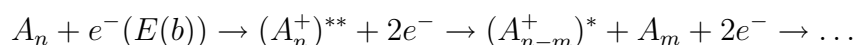
$$S_c = 4\pi R_c^2 = 4\pi (N^{1/3}R_a)^2 = N^{2/3}S_a \quad (\text{C-4})$$

### C.1.2

#### Formação de agregados iônicos de água

Dependendo do tipo de material e do tipo de experimento, agregados iônicos positivos e negativos podem ser formados a partir de clusters neutros seja por impacto de elétrons ou por fotoionização.

A ionização de agregados neutros por impacto de elétrons vem acompanhada de uma fragmentação do agregado devido a uma mudança na geometria e ao excesso de energia envolvida na ionização. Para um agregado de tipo  $A_N$ , temos que:



O estudo dos agregados de água iniciou-se em 1950, utilizando técnicas como espectroscopia IR ou espectrometria de massa. As espécies iônicas medidas num espectrômetro de massa são agregados protonados  $(H_2O)_nH^+$ , estes agregados são constituídos por um íon hidrônio  $(H_3O^+)$ . Assim, o agregado  $(H_2O)_nH^+$  pode-se considerar como  $(H_3O^+)(H_2O)_{n-1}$ .

Segundo Johnston [71] as seções de choque de ionização dos agregados são aproximadamente constantes, este foi o critério adotado para os nossos cálculos.

## D

### Lista de Artigos Publicados no Doutorado

#### D.1

##### Artigos Relacionados a esta Tese

1. Iza, P.; Farenzena, L.S.; da Silveira, E.F.  
Effects of projectile track charging on the  $H^-$  secondary ion velocity distribution  
Nucl. Instrum. Methods B, 2006, submetido.
2. Iza, P.; Farenzena, L.S.; Jalowy, T.; Groneveld, K.O. e da Silveira, E.F.  
Secondary ion emission dynamics model: A tool for nuclear track analysis  
Nucl. Instrum. Methods B, 2006, 245, 61-66
3. Iza, P.; Sigaud, R.; Farenzena, L.S.; Ponciano, C.R. e da Silveira E.F.  
Track electrostatic model for describing ion emission of insulators  
Braz. J. Physics, 2005, 35(4A), 921-926

#### D.2

##### Outros Artigos publicados

Nestes trabalhos a minha contribuição foi na análise parcial dos dados (em particular a água) e durante a etapa experimental desenvolvida no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron.

1. Farenzena, L.S.; Iza, P.; Martinez, R.; Fernandez-Lima, F.A.; Seperuelo, Eduardo D.; Faraudo, G.S.; Homem, M.G.P.; Naves de Brito, A.; Wien, K. e da Silveira, E.F.  
Electronic analysis of astrophysical ices  
Earth, Moon and Planets, 2006, 11, 1946-1951

2. Farenzena, L.S.; Martinez, R.; Iza, P.; Ponciano, C.R.; Homem, M.G.P.; Naves de Brito, A.; da Silveira, E.F. e Wien, K.  
Secondary ion emission from condensed *CO* bombarded by fission fragments.  
Int. J. Mass spec., 2006, 251, 1-9
3. Martinez, R.; Ponciano, C.R.; Farenzena, L.S.; Iza, P.; Homem, M.G.P.; Naves de Brito, A.; Wien, K. e da Silveira, E.F.  
Ion cluster desorption from frozen *NH<sub>3</sub>* induced by impact of fast multi-charged ions.  
Int. J. Mass Spec., 2006 , 253 , 112-121
4. Ponciano, C.R.; Martinez, R.; Farenzena, L.S.; Iza, P.; Homem, M.G.P.; Naves de Brito, A.; da Silveira, E.F. e Wien, K.  
Electronic sputtering produced by fission fragments on condensed *CO* and *CO<sub>2</sub>*.  
J. Am. Soc. Mass Spectrom., 2006, 17, 1120-1128