

Este exemplar corresponde à
redação final da tese defendida
pelo aluno ^{em 31/X/91} e aprovada pela
Comissão Julgadora.
05/XI/91 H. Turtelli J.

A Formação de Traços Nucleares em Polímeros—
Subsídios à Identificação de Primários Pesados.

Reinaldo Camargo Rigitano

outubro de 1991

Tese de Doutorado

a ser apresentada junto ao
Departamento de Raios Cósmicos e Cronologia,
Instituto de Física *Gleb Wataghin*,
UNICAMP

Orientador: Prof. Dr. Armando Turtelli Junior.

Dedico este trabalho
aos meus pais,
à minha esposa
e ao meu filho.

Agradecimentos

- ao Prof. Dr. Armando Turtelli Junior
pela orientação,
pela receptividade, paciência e compreensão,
pelas oportunidades repetidas,
pela dedicação ao trabalho,
- ao Prof. Dr. Julio Cesar Hadler Neto,
do DRCC-UNICAMP,
pelo apoio contínuo,
- ao Prof. Dr. Juan Carlos Acquadro Quacchia,
do Departamento de Física Nuclear do IFUSP,
pela exposição de materiais no acelerador Pelletron,
- ao Óptico Darci Jacob Silva,
da *Multivis Indústria Óptica Ltda.*,
pela polimerização de material detector.

Abstract

A model of track formation in polymeric solid state nuclear track detectors is proposed, where the contribution of the secondary energy deposition plays a fundamental role. In the model, the threshold impact parameter for a restricted energy loss rate is connected with the energy density deposited at the periphery of the latent track. A general algorithm is presented. The theoretical results are then compared to observations of the heavy fraction of the primary cosmic radiation, from an experiment accomplished by the *Departamento de Raios C3smicos e Cronologia-UNICAMP*, in 1986.

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Composição da radiação primária	2
1.2	Detectores sólidos e o estudo da radiação cósmica	7
1.3	O presente trabalho	9
2	Formação de traços em polímeros	11
2.1	Modelos adotados para a formação do traço	11
2.2	A alteração local	14
2.3	Uma interpretação para a formação de traços em polímeros	15
2.4	Independência com respeito ao número atômico da partícula incidente	16
3	Transferência de energia a elétrons do meio	18
3.1	Transferência de energia; a aproximação do elétron livre	18
3.2	Ângulos de espalhamento e recuo	22
3.3	A correção quântica	24
3.4	A ligação dos elétrons ao meio; o modelo harmônico	26
3.5	Taxa de perda de energia	30
3.6	Materiais compostos	32
3.7	O efeito de polarização	32
4	Densidade do depósito de energia—formulação	34
4.1	Expressão geral	35
4.2	Perda de energia dos elétrons secundários	36
4.3	O parâmetro de impacto limiar para a perda de energia restrita (I) .	37
5	Potenciais de transição nos materiais de interesse	39
5.1	Potenciais de ionização	40
5.2	Materiais estudados	42
6	Raios admitidos de traços	44
6.1	Dados disponíveis sobre diâmetros de traços	45
6.2	A escolha de valores para o raio (I)	49

7	Densidade do depósito de energia—cálculos	52
7.1	Densidade como função do parâmetro de impacto	52
7.2	Densidade total	56
7.3	A escolha de valores para o raio (II)	57
7.4	Contribuições relativas	57
7.5	O parâmetro limiar para a perda de energia restrita (II)	60
8	Generalização de curvas ‘velocidade de corrosão×alcance’	66
8.1	Calibração	67
	Nitrito de celulose	67
	CR39	68
8.2	Generalização das curvas ‘ v_{TM} ×alcance residual’	72
8.3	Relações ‘alcance-energia’	74
8.4	‘Velocidade×alcance’	78
8.5	A função resposta do material	78
8.6	Comportamento com respeito ao número atômico	78
8.7	Curvas ‘velocidade de corrosão×alcance’	80
9	Dados experimentais de primários pesados	82
10	Discussão dos Resultados	91
	Resultados teóricos	91
	Resultados experimentais	92
	Resumo	95
	Continuidade e Perspectivas	96
A	O modelo do elétron ligado elasticamente	98
B	Energia transferida a um oscilador	105
C	Programas de cálculo	107
D	Gráficos ‘energia×velocidade’	133
E	Polimerização do CR39	134
	Bibliografia	140

Capítulo 1

Introdução

Entende-se por radiação cósmica *primária* aquela que atinge a parte superior da atmosfera terrestre, proveniente do espaço exterior. A radiação cósmica tem atingido o nosso planeta durante milhões de anos e ela nos traz informações diretas de regiões distantes do universo. Provém de todas as direções do espaço; suas eventuais anisotropias acham-se hoje em discussão. A radiação primária é constituída por prótons e elementos de diferentes números atômicos; o conhecimento de sua composição química é importante para a melhor compreensão da evolução do universo, em particular do processo de produção dos vários elementos na natureza. O seu espectro é extremamente amplo, desde a ordem de 10 MeV, até a existência de alguns eventos com energia estimada em torno de 10^{19} ou 10^{20} eV.

Grupos de pesquisa do Departamento de Raios Cósmicos e Cronologia do IFGW-UNICAMP têm se dedicado ao estudo da radiação cósmica, teórica e experimentalmente. Do ponto de vista experimental, o Departamento acumula hoje uma extensa experiência com a utilização de 1º) *cintiladores* (e sua eletrônica associada), para o estudo de chuueiros extensos na atmosfera, 2º) *emulsões nucleares*, associadas a *filmes sensíveis aos raios-X*, para o estudo de interações nucleares induzidas pela radiação cósmica, através do registro de cascatas hadrônicas e eletromagnéticas, 3º) *detectores sólidos de traços*, tanto *poliméricos*, que têm sido utilizados em medições de radiação ambiental, como *naturais*, estudados com objetivo de datação e, mais recentemente, 4º) *contadores proporcionais* ou *tubos 'streamer'*, aplicados também no estudo de chuueiros extensos.

O presente trabalho aborda aspectos teóricos e experimentais relacionados ao uso de detectores sólidos poliméricos no estudo da radiação cósmica, especialmente na identificação de elementos pesados. A próxima seção (Seção 1.1) trata da composição da radiação primária, a Seção 1.2 apresenta algumas características dos detectores sólidos, situando-os no conjunto dos detectores de partículas e a Seção 1.3 explica a idéia geral do trabalho. O próximo capítulo discute algumas interpretações para a formação do traço, bem como uma proposta para o caso de detectores poliméricos, a qual é então desenvolvida algebricamente nos capítulos seguintes. As atividades experimentais do trabalho encontram-se relatadas na Seção 8.1 e no capítulo 9.

1.1 Composição da radiação primária

Os raios cósmicos são constituídos fundamentalmente de átomos dos diferentes elementos, ionizados ou não, em um amplo espectro de energia, com marcante predominância de prótons. Durante a década de 1930, estudos relativos à influência do campo magnético terrestre sobre a direção de chegada demonstraram que a maioria das partículas da radiação são positivamente carregadas¹. A presença de núcleos pesados na radiação primária foi descoberta por Freier, Lofgren, Ney, Oppenheimer, Bradt e Peters em 1948 [42], a partir de registros em emulsões nucleares colocadas em balão, antes mesmo da identificação dos prótons (que não foram registrados naquela oportunidade devido à sensibilidade insuficiente das emulsões utilizadas). Posteriormente, o uso de detectores mais sensíveis mostrou a abundante fração de prótons [108,75]. Fótons de radiação gama também estão presentes [64,110]; os raios gama, embora pouco intensos, são hoje bastante estudados [79,110] porque se propagam em linha reta no espaço interestelar, possibilitando em princípio a identificação das fontes emissoras. Uma componente eletrônica da radiação primária tem sido relatada [29,74]; elétrons contribuem com uma fração pequena de baixa energia (da ordem de 10 % do número de prótons, mas muito variável devido à influência solar).

Os núcleos presentes na radiação cósmica são habitualmente classificados nos seguintes grupos: prótons (a fração dominante), núcleos de hélio, núcleos leves ($3 \leq z \leq 5$; z é o número atômico), médios ($6 \leq z \leq 9$), pesados ($10 \leq z \leq 19$) e ultrapesados ($z > 20$). Prótons constituem 90 % da radiação; cerca de 10 % é composta pelo elemento hélio, e apenas 1 % é constituída pelos outros núcleos [92,82]. A Figura 1.1 mostra as abundâncias aceitas para os vários elementos, nos raios cósmicos e na matéria condensada do sistema solar, com relação à abundância do elemento silício ($z = 14$). Os núcleos médios mais abundantes na radiação são o carbono ($z = 6$) e o oxigênio ($z = 8$), e entre os elementos mais pesados destaca-se o ferro ($z = 26$). As informações mais recentes sobre a composição da radiação galáctica (ou seja, fora da blindagem do campo geomagnético) estão em geral em boa concordância com relatos anteriores, ao menos na região de energias não relativísticas, conforme medidas efetuadas com os satélites ISEE-3 [67], HEAO-3 [45]. Concordância também tem sido relatada pelo experimento ALICE [52] (vôo de balão em grandes latitudes). Por sua vez, no intervalo de 10 até centenas de GeV, Vylet et al. [109] reafirmam a concordância e sugerem algumas atualizações a partir de resultados do satélite HEAO-3.

Os núcleos de ferro que chegam até nós são entendidos como sendo primordiais das fontes de radiação [79]. Também são primordiais os núcleos mais pesados que o ferro, que são pouco abundantes. Por outro lado, como se pode depreender da Figura 1.1, existe uma superabundância dos elementos mais leves que o ferro, em especial do lítio, berílio e boro, os quais são quase ausentes na matéria condensada. Esses elementos são entendidos como secundários provenientes do despedaçamento

¹Conforme nos relata B.Rossi [89] houveram, do ponto de vista teórico, os trabalhos de C.Störmer, G.E.Lemaître e M.S.Vallarta, entre outros, e do ponto de vista experimental, principalmente os trabalhos de A.H.Compton, R.A.Millikan e do próprio B.Rossi.

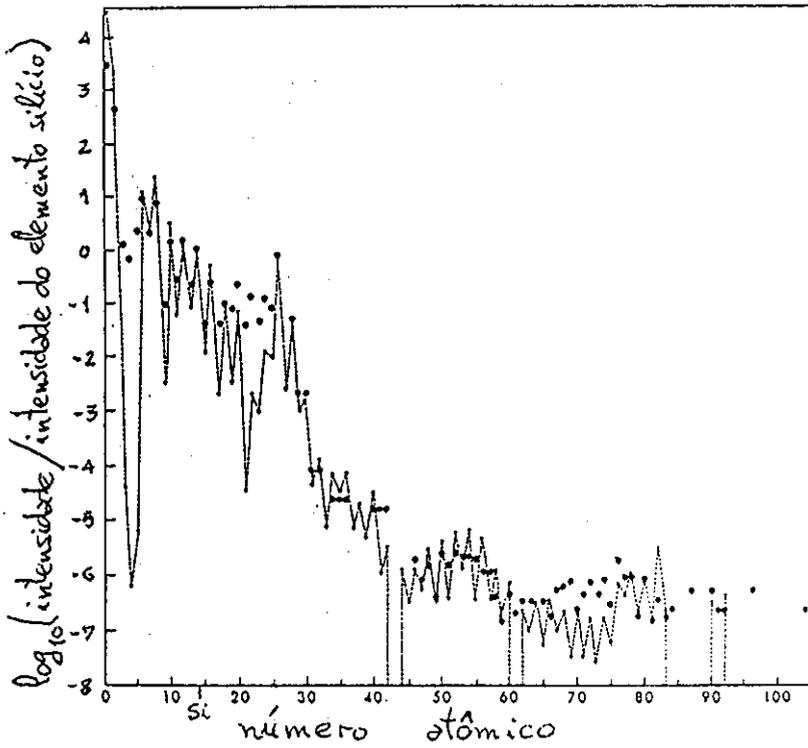


Figura 1.1: Abundâncias dos vários elementos, com relação à abundância do elemento silício (a partir de [82]; vide também [92] e [40]). •: abundância nos raios cósmicos; ···: abundância no sistema solar.

de elementos mais pesados em interações nucleares da radiação com o gás interestelar.

A proporção dos núcleos de Li, Be, B e N em relação aos outros elementos diminui progressivamente à medida que a energia se torna maior que 5 GeV/u.m.a. [102,95]. O processo de despedaçamento produz núcleos secundários com menores números atômicos e menores energias do que os núcleos originais. Sugere-se também que partículas de maior energia têm menor probabilidade de interação no meio interestelar, com caminho livre médio maior [79]. Desse modo, uma fração significativa dos núcleos de energias abaixo de 5 GeV/u.m.a. é constituída de núcleos secundários.

A propagação da radiação no espaço interestelar tem sido descrita como um fluxo estacionário [25], sendo produzida em um conjunto de fontes na galáxia e dissipada por mecanismos de interação nuclear (colisões com o gás interestelar), fuga da galáxia, decaimento radioativo (no caso de isótopos instáveis) e perda de energia por ionização do gás interestelar. Para núcleos pesados a forma de dissipação dominante é a da interação nuclear, cuja seção de choque aumenta com o aumento do número atômico [92], favorecendo o despedaçamento de núcleos pesados em núcleos mais leves e menos energéticos. Esse mecanismo coloca um limite de distância para a produção de núcleos pesados. Tem sido sugerido que o caminho livre médio para

a fuga da galáxia é uma função decrescente com a energia [26,72], de modo que em energias a partir de 100 GeV/u.m.a. o despedaçamento por interação nuclear torna-se progressivamente menos importante, o que também contribui para que a proporção de núcleos pesados com relação aos mais leves seja maior em altas energias. A composição primordial (nas fontes) prevista a partir desse modelo de propagação é rica em elementos pesados, sugerindo que os raios cósmicos foram acelerados em regiões onde ocorreu nucleossíntese até os mais elevados números atômicos; daí pensar-se em um processo estelar para a aceleração, em especial a explosão de supernovas.

Tem sido relatada uma abundância especialmente alta de Cr ($z = 24$) e Mn ($z = 25$) [85], elementos que fazem parte do chamado *grupo do ferro*. Ademais, conforme mostra a Figura 1.1, os núcleos com $z > 30$ são bastante mais raros na radiação primária, e sua proporção em relação à intensidade do grupo do ferro é da ordem de 10^{-4} [73, página 7]. Entre esses há dois picos de maior frequência, com $z \sim 54$ (Xe) e $z \sim 76$ (Os), ausência dos nuclídeos radioativos de vida curta ($84 \leq z \leq 89$), mas há relato de observação de urânio ($z = 92$) [39]. Estrôncio ($z = 38$) tem se mostrado ausente [16]. Ainda, os núcleos de números atômicos pares são em geral mais abundantes que os vizinhos de números ímpares, ao menos em baixas energias (caráter par-ímpar) [22,44,84].

Com respeito à dependência da composição com a energia, a intensidade dos diferentes elementos diminui monotonicamente com a energia ao longo de várias ordens de grandeza. O espectro diferencial total da radiação primária (que reflete predominantemente o espectro de prótons) é descrito pela forma analítica

$$\frac{dn}{d\xi} = \text{constante} \cdot \xi^{-\gamma} \quad , \quad (1.1)$$

onde n é o número de partículas por unidade de área por unidade de tempo, ξ é a energia e $\gamma \simeq 2.7$. O espectro dos núcleos pesados acompanha a grosso modo o espectro dos prótons, ao menos em energias não muito elevadas, como mostram as Figuras 1.2, 1.3 e 1.4. Observações em detectores subterrâneos da componente muônica em altas energias são coerentes com uma composição no intervalo de 10^{13} a 10^{15} eV semelhante à composição em baixas energias [19,9]. Há também relato de que os índices admitidos do espectro de energia de diferentes grupos de íons não devem ser alterados significativamente na região acima de 1 TeV/u.m.a. [58]. No entanto tem sido relatada uma maior proporção de elementos pesados em altas energias; o espectro do ferro seria desse modo descrito pela mesma expressão (1.1) mas com $\gamma \simeq 2.5$ (e uma diferente constante multiplicativa) [94]. Em contraste com essa descrição, o grupo de Kolar Gold Fields, utilizando detectores subterrâneos acoplados a arranjos de cintiladores para chuveiros atmosféricos extensos, sugere um aumento da predominância de prótons em altas energias [2].

Na região de altas energias, a partir de 10^{14} eV, a composição da radiação primária tem sido pesquisada por intermédio da técnica de chuveiros extensos, enquanto que medidas diretas são mais eficientes em energias menores, para as quais a intensidade é maior. Com respeito a chuveiros extensos, conjuntos de detectores são

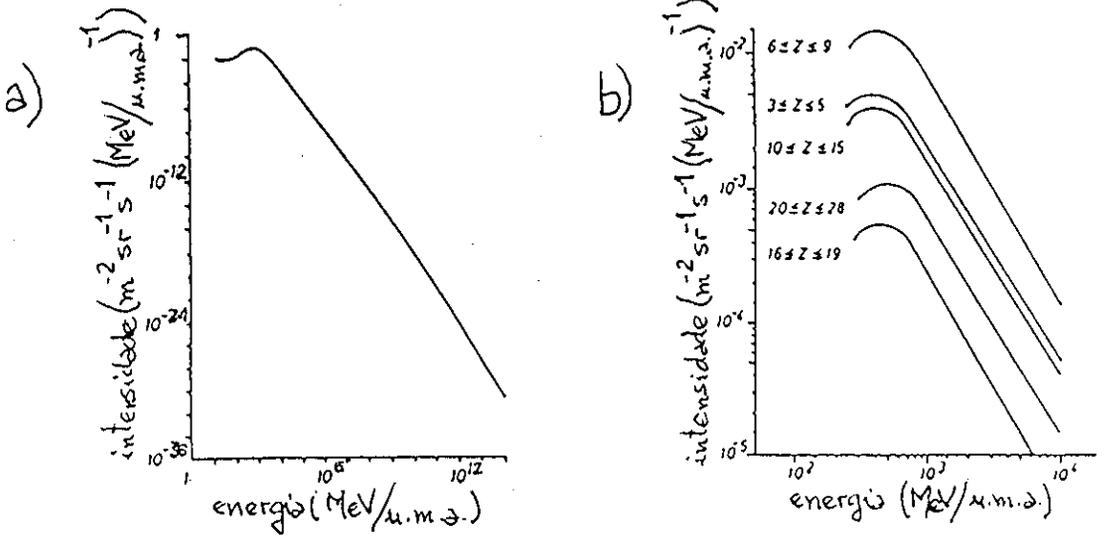


Figura 1.2: a) Espectro diferencial de energia da radiação primária total; b) espectro diferencial de diferentes grupos de elementos (a partir de [5]).

distribuídos em áreas da ordem de $10^5 m^2$, usualmente cintiladores trabalhando em regime de coincidência, e que registram a passagem de chuviros atmosféricos ('Extensive Air Shower Arrays'). Tais dispositivos têm sido até o momento bastante utilizados no estudo da direção de chegada e de eventuais anisotropias da radiação [78,18,3,49,7,103,38,107]. Para a identificação de primários essa técnica, embora indireta, é apropriada à análise em altas energias, em vista de que nessa região as intensidades são pequenas, e detectores comuns haveriam de necessitar áreas demasiadamente grandes para acumular estatística razoável². Sobre o assunto vide a revisão de Hillas [55].

Para efetuar cálculo do desenvolvimento de chuviros inicia-se habitualmente com uma hipótese simplificadora, a saber, a de que a partícula incidente é um próton. A partir da colisão com um átomo da atmosfera é produzida uma cascata hadrônica, que passa a constituir o núcleo ('core') do chuviro. Dessa cascata são emitidos fótons gama, que por sua vez dão lugar a cascatas eletromagnéticas (por mecanismos de produção de pares e Bremsstrahlung). A cascata hadrônica central se desenvolve com abundante produção de píons, os quais podem interagir com átomos do ar ou decair em múons. Os múons têm caminho livre médio longo e normalmente atingem o nível do mar sem interagir, constituindo a fração penetrante da radiação cósmica na superfície da Terra.

No caso da partícula incidente ser um núcleo de massa atômica M , supõe-se, em primeira aproximação, que M cascatas nucleônicas ('subcores') se desenvolvem no

²É preciso no entanto fazer notar que medidas diretas na região de 10^{12} até 10^{15} eV têm sido realizadas, embora com estatística pequena para núcleos pesados. Vide Burnett et al. [21,20], que por sua vez citam medições diretas em altas energias efetuadas com os satélites Proton, HEAO-3 e Spacelab 2.

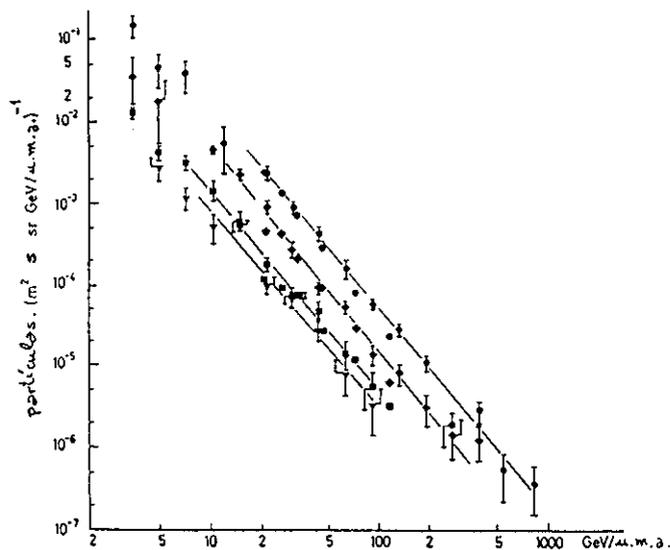


Figura 1.3: O espectro diferencial de alguns grupos de núcleos da radiação primária, conforme a citação [90]; ●: $6 \leq z \leq 9$; ◆: $10 \leq z \leq 16$; ▼: $17 \leq z \leq 23$; ■: $z > 23$.

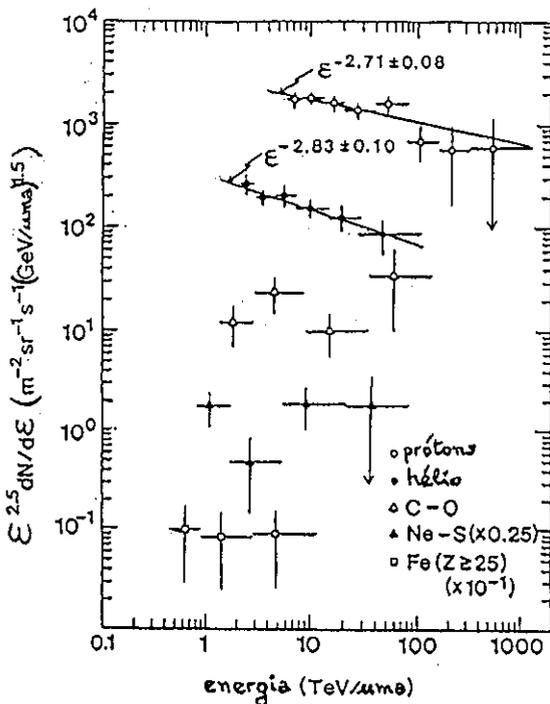


Figura 1.4: O espectro diferencial de prótons, hélio e elementos pesados da radiação primária em energias acima de 1 TeV, conforme a citação [21].

centro do chuveiro, cada qual com uma energia inicial ξ_0/M , onde ξ_0 é a energia da partícula incidente. Como a energia inicial de cada cascata é menor do que no caso de um próton incidente de mesma energia, os píons produzidos também são de menor energia e decaem em múons em altitudes maiores. Assim os píons caminham em média menos na atmosfera e os decaimentos são favorecidos com respeito à interação com núcleos do ar, de tal modo que, por esse mecanismo, *chuveiros produzidos por núcleos pesados possuem maior quantidade de múons que os iniciados por prótons de mesma energia* [4]. Tais múons produzidos em altitudes mais elevadas apresentam uma distribuição lateral mais espalhada. A componente muônica de chuueiros de altas energias, a partir de 10^{15} eV, é mais sensível ao número atômico do núcleo primário que as componentes eletromagnética ou hadrônica [79,80]. Gaisser e Stanev apresentam um estudo da relação de fluxos muônicos subterrâneos com a composição do primário [43]. Por outro lado, Fenyves et al. [33] apresentam simulações comparativas do desenvolvimento da componente eletromagnética de chuueiros iniciados por prótons e por núcleos de ferro. Em vista de que os chuueiros produzidos por núcleos pesados iniciam o desenvolvimento em maiores altitudes na atmosfera, o número de elétrons ao nível do mar ou em altitudes de montanha é menor do que no caso de chuueiros produzidos por prótons³. Deste modo, a proporção da quantidade de múons com relação ao número de elétrons é um parâmetro indicativo da natureza do primário, sendo tanto maior quanto maior seu número atômico⁴.

Com respeito à composição nas fontes, Dwyer e Meyer [28], com base em dados de balões e a aplicação de modelos de propagação, obtiveram resultados consistentes com uma proporção de elementos nas fontes independente da energia. Tem havido interesse em relacionar medidas realizadas com as abundâncias nas fontes por intermédio dos modelos atualmente aceitos [28,77,57]. Ainda, esforços têm sido recentemente dirigidos à obtenção de abundâncias de isótopos na radiação primária, especialmente do ferro e manganês [67,46], nitrogênio [65] e de elementos leves e hélio [111].

1.2 Detectores sólidos e o estudo da radiação cósmica

Situemos os detectores sólidos no conjunto dos detectores de partículas, a fim de termos uma visão geral do assunto⁵. Todos os detectores de partículas registram primordialmente partículas eletricamente carregadas. As detecções de partículas neutras, tais como neutrons, fótons ou neutrinos, são efetuadas pelo recuo de elétrons do meio detector em colisões que têm como projétil a própria partícula (como no

³Ao nível do solo a maioria dos chuueiros possui *idade* maior que 1, o que significa que o número de elétrons diminui com o desenvolvimento do chuueiro (vide o conceito de idade em [5, página 101]).

⁴Com respeito à distribuição lateral de elétrons, não se tem previsão de variação significativa com o número atômico do primário [33]. Citemos também que, para o caso de chuueiros iniciados por *fótons*, a relação do número de múons para o número de elétrons ao nível do solo é $\sim 3 \cdot 10^{-4}$, enquanto que é da ordem de 10^{-2} em chuueiros ordinários iniciados por prótons ou núcleos [79]. Chuueiros extremamente pobres em múons são, pois, provenientes de gamas primários.

⁵Para um tratamento mais completo vide o livro de Wolfendale [112, capítulo 5].

caso do efeito Compton) ou um produto de reação da partícula (como na detecção de múons provenientes da interação de neutrinos). Há detectores *elétricos*, que emitem descargas elétricas conforme a passagem de partículas carregadas, e *detectores de traços*, que registram a trajetória de cada partícula.

- Detectores elétricos são as *câmaras de ionização*, os *contadores proporcionais*, os *contadores Geiger* e os *cintiladores associados a células fotossensíveis*. Tais detectores, por serem acoplados a circuitos eletrônicos, permitem a utilização de condições de *coincidência* (registro de pulsos simultâneos) e *anticoincidência* (registro de pulsos não simultâneos), cruciais para a verificação experimental de várias hipóteses fundamentais na Física das Partículas Elementares.
- Como detectores de traços tem-se a *câmara de nuvens* (o registro é feito por condensação de um vapor supersaturado), as *emulsões nucleares* (com a sensibilização de grãos de cloreto de prata) e os *detectores sólidos*, nos quais a partícula incidente carregada destrói a estrutura molecular do material na região circunvizinha a sua trajetória. Nos diferentes detectores de traços acontece o fenômeno notável, qual seja, o de uma partícula microscópica que cria um distúrbio *macroscópico* ao longo de sua trajetória no meio material. Esse distúrbio é imediatamente visível a olho nu nas câmaras de nuvens, ou é tornado visível mediante revelação nos detectores sólidos e nas emulsões.

Os detectores sólidos têm ampla aplicação na identificação de íons com $z/\beta \geq 10$ (dependendo do material detector [86,41]; z é o número atômico, $\beta = v/c$; v é a velocidade da partícula; $c = 3 \cdot 10^8$ m/s.) e são, ao lado das emulsões nucleares, úteis no estudo da composição química da radiação⁶. Ao contrário das emulsões, não registram partículas rápidas e de pequena carga, como é o caso da abundante fração de prótons e núcleos de hélio relativísticos da radiação primária. Os prótons e o He^{++} constituem um fundo de ruído no estudo da fração pesada e os detectores sólidos funcionam como um filtro que seleciona os núcleos mais pesados (que são 100 vezes menos abundantes).

Os detectores de traços em geral são apropriados para a determinação de espectros de energia na região não relativística, até $\sim 1\text{GeV/u.m.a.}$. A energia da partícula incidente é determinada a partir do alcance e de seu número atômico⁷. Seriam necessárias pilhas de detectores sólidos demasiadamente espessas para frear

⁶A radiação primária apresenta especial interesse. Na radiação secundária, existente no interior da atmosfera, os núcleos pesados estão presentes apenas nos estágios iniciais do desenvolvimento de chuviscos, como resultado do despedaçamento de núcleos primários, mas prontamente dão origem a partículas mais elementares. Os núcleos pesados têm existência efêmera na radiação secundária, com caminho médio pequeno até a próxima colisão. Eles existem como remanescentes do núcleo primário, constituindo a chamada 'partícula líder' das cascatas hadrônicas. A composição de núcleos na radiação secundária é um resultado complexo dependente da composição primária e da natureza das interações núcleo-núcleo que acontecem na alta atmosfera.

⁷Medidas de energia da radiação são efetuadas com associações de detectores—os *calorímetros*—que absorvem integralmente a radiação incidente.

partículas relativísticas. Um núcleo de urânio por exemplo—que é o que sofre maior desaceleração—com energia inicial de 1 GeV/u.m.a., tem alcance de aproximadamente 10 g/cm², ou seja, ~9 cm em plásticos. Assim, a observação de partículas relativísticas com detectores sólidos limita-se freqüentemente à determinação do número atômico.

1.3 O presente trabalho

O Departamento de Raios Cósmicos e Cronologia do IFGW-UNICAMP, em colaboração com outras instituições⁸, expôs um conjunto de detectores CR39 à radiação cósmica primária, durante um vôo de balão realizado em 1986 [68]. Um conjunto de traços foi registrado pela pilha de detectores e se nos apresentou o problema da *identificação dos núcleos* responsáveis pelos registros efetuados. Tal identificação exige uma compreensão do *processo de formação do traço* no detector. Embora esse assunto tenha sido abordado por diferentes autores (o assunto será objeto do Capítulo 2), julgou-se oportuno reconsiderar as diferentes propostas de mecanismo para a formação do traço, com o objetivo de aprimorar a identificação de núcleos com o uso desse tipo de detector.

A grandeza medida experimentalmente nos detectores sólidos é a *velocidade de corrosão química ao longo do traço*, e uma interpretação consistente para a formação de traços em detectores deve conduzir a uma grandeza microscópica *primária* capaz de descrever diferentes observações. Como grandeza primária entende-se aquela que é função da energia e do número atômico da partícula incidente, bem como das características do meio detector. Fleischer, Price, Walker e Hubbard [37] foram os introdutores da idéia, hoje bastante difundida, de que a grandeza microscópica determinante da formação do traço latente seria a *ionização primária*. A ionização primária é o número de íons por unidade de comprimento do traço criados *diretamente* pela partícula primária. Contudo, em seu famoso livro de 1975, Fleischer, Price e Walker salientam, para o caso dos detectores orgânicos, a importância do mecanismo das *quebras secundárias de cadeias poliméricas* (ou seja, quebras de cadeia causadas por elétrons secundários) na formação do traço [36, páginas 27, 31 e 39]. É também sugestivo o fato de que ainda se tenha continuado a utilizar outras grandezas para a descrição do traço, como o fizeram por exemplo Tripier e Debeauvais, que basearam sua interpretação na grandeza *perda de energia total* [105].

O ponto de partida deste trabalho é o reconhecimento de que nos detectores *poliméricos* (orgânicos) a contribuição à formação do traço das *quebras de cadeia polimérica por mecanismo secundário* é fundamental. Por outro lado, a ionização primária seria o mecanismo predominante nos detectores inorgânicos, nos quais os elétrons delta não teriam a possibilidade de causar desestruturação do material. Um modelo de formação do traço em polímeros foi desenvolvido, que associa a velocidade de corrosão química à *taza de perda de uma energia restrita* por parte da partícula incidente, na qual o *parâmetro de impacto mínimo para a produção de*

⁸Vide início do Capítulo 9.

elétrons secundários é escolhido com base na *densidade limiar do depósito de energia* (característica do material). A densidade limiar é aquela depositada na periferia do traço latente. A taxa de perda de energia restrita assim determinada é uma grandeza primária, mas que para cuja determinação é considerado o mecanismo secundário das quebras de cadeia⁹.

Em seguida, a interpretação proposta deve passar por um teste de consistência. A relação entre uma grandeza primária teórica e a velocidade de corrosão química ao longo do traço, medida experimentalmente, deve ser independente do número atômico da partícula incidente (vide início da Seção 2.3 e as Seções 2.4 e 8.2). A esse respeito o comportamento da grandeza proposta foi testado e resultou bastante satisfatório (Seção 8.6).

Um conjunto de eventos registrados no experimento de 1986, citado no início desta seção, foi então detalhadamente analisado nos laboratórios do Departamento. Experimentos de calibração do material detector foram efetuados no acelerador *Pelletron*, da USP; utilizou-se também dados relatados de calibração [83]. Resultados satisfatórios foram obtidos para os eventos relativísticos (Figura 9.4, Capítulo 9, e Figura 10.1, Capítulo 10); com menos sucesso o algoritmo foi aplicado na identificação de núcleos de menor energia, que pararam no interior da pilha de detectores.

Para completar o trabalho, dirigiu-se parte do esforço à obtenção de material detector, na *Multivis Indústria Óptica Ltda.*, Campinas-SP. Várias placas foram polimerizadas a partir do monômero CR39. Obteve-se um material de boa qualidade para o registro de traços, embora ainda menos sensível que o similar estrangeiro, e que tem sido utilizado em calibrações e testes (vide o Apêndice E).

O capítulo seguinte é dedicado a explicar as motivações que conduziram à proposta de um modelo para a formação de traços em polímeros, e a esclarecer suas idéias fundamentais. Em seguida, o Capítulo 3 trata da mecânica da colisão entre a partícula incidente e os elétrons atômicos, e o Capítulo 4 apresenta o algoritmo para o cálculo da densidade do depósito de energia.

O Capítulo 5 trata dos potenciais atômicos e o Capítulo 6 dos raios dos traços em polímeros. Nesse ponto, a conceituação acha-se completa e seguem capítulos de aplicação: o Capítulo 7 calcula valores da grandeza introduzida no Capítulo 4. O relacionamento da grandeza teórica com a experimental, bem como o teste da independência dessa relação com respeito ao número atômico, compõem o Capítulo 8. O Capítulo 9 apresenta os dados experimentais de primários obtidos em 1986 e o Capítulo 10 contém a discussão dos resultados.

São ainda incluídos cinco apêndices, que tratam de aspectos específicos do texto.

⁹O algoritmo de cálculo de tal grandeza foi objeto de recente publicação por parte do autor [88].

Capítulo 2

Formação de traços em polímeros

A elucidação do processo de formação do traço em sólidos tem sido objeto de extensos estudos. Já em 1975, Fleischer, Price e Walker dedicaram uma seção de seu livro ao assunto [36, Seção 1.4] e artigos anteriores já haviam considerado o problema com respeito aos polímeros [11,76]. Recentemente Spoehr [96, capítulo 2] retomou o assunto em detalhes. O mecanismo é certamente diferente em detectores inorgânicos e em polímeros orgânicos, já que nestes os raios delta secundários também contribuem à desorganização molecular do material. Nos sólidos inorgânicos, a desestruturação é devida basicamente à *ionização primária* seguida de um processo de explosão de íons, já que a estrutura do material é em geral pouco vulnerável a uma desestruturação por parte dos elétrons delta. Nos polímeros orgânicos, por outro lado, as cadeias poliméricas são destruídas não só pelo processo primário, mas também pelos elétrons que recuam a partir da colisão com a partícula incidente. A grande sensibilidade dos detectores orgânicos ao registro de traços provém desse mecanismo secundário de desestruturação das cadeias poliméricas.

2.1 Modelos adotados para a formação do traço

A formação do traço quimicamente reativo em diferentes sólidos tem sido atribuída principalmente aos seguintes mecanismos, baseados cada um numa grandeza física: 1º) a *perda de uma energia restrita* [11], 2º) a *ionização primária* com explosão de íons [37,35] e 3º) a proposta de Kobetich e Katz [62,61], que postulam a *densidade do depósito de energia em uma distância crítica a partir do centro do traço* como a grandeza determinante da sua formação. Discutamos as diferentes propostas:

- O critério da perda de uma energia restrita considera como formadora do traço apenas a energia dissipada em raios delta de energia abaixo de determinado limiar. Foi aplicado empiricamente, com um limiar fixo de energia que melhor ajustasse dados experimentais [11], sem considerar os mecanismos pelos quais os raios delta contribuiriam à formação do traço;

- O modelo de explosão de íons interpreta a formação a partir de um processo de repulsão eletrostática de íons primários, e não leva em conta as quebras de cadeia poliméricas, ou eventualmente ionizações e excitações secundárias;
- Kobetich e Katz sugerem que se considere um raio crítico para o traço, no qual a densidade de energia aí depositada seria responsável pela sua formação. Contudo, esses autores não desenvolvem a determinação desse raio crítico, e o fixam também de modo a ajustar dados experimentais.

A primeira e a terceira propostas têm em comum o mecanismo secundário, enquanto que a segunda se atém a um mecanismo primário. Dada a importância dos processos secundários nos polímeros, procurar-se-á desenvolver uma interpretação da formação do traço que contenha, de um modo consistente, aspectos positivos das duas propostas que envolvem mecanismos secundários.

Tem-se uma concepção estabelecida de que o distúrbio que caracteriza a presença do traço latente é de natureza molecular (química) ou cristalina [36, seção 1.3.3]. Tal alteração se estende por dezenas de angstroms a partir do centro do traço, conforme têm evidenciado análises de microscopia eletrônica [93,87,24] e o desenvolvimento de poros em membranas (que permite estudar a distribuição radial da alteração no traço) [10,27,63,91,47,104,6,54]¹.

Com respeito à ionização dos átomos do meio, o parâmetro de impacto de um projétil eletricamente carregado com o elétron-alvo do material deve ser da ordem das dimensões atômicas ($\sim 1\text{Å}$). Tal valor pequeno é compreendido se se tem em mente que o campo do íon incidente é o campo elétrico de um núcleo atômico, e apenas a distâncias dessa ordem é capaz de transferir energia suficiente para a ionização de um átomo. Com isso, a seqüência de íons primários que a partícula incidente produz (se considerada no momento de sua formação antes de acontecer a repulsão eletrostática) é bastante estreita, sendo constituída de uma fileira única de íons, raramente apresentando-os emparelhados lado a lado. A repulsão eletrostática é bastante grande devido à proximidade com que os íons originalmente se encontram. Sobrevém então o processo de explosão, e é mesmo notável que uma fileira constituída de íons isolados possa criar uma zona de alteração molecular de raio igual a dezenas de angstroms. Cada íon tem um alcance considerável dentro do material, o que permite entender, no caso de materiais inorgânicos, a existência de traços latentes com raios bastante maiores que as dimensões atômicas.

Mas em polímeros orgânicos, por outro lado, as quebras de cadeia constituem um fenômeno ímpar, sem paralelo nos sólidos inorgânicos. Naqueles (os inorgânicos), os fenômenos secundários podem eventualmente ser desconsiderados, por serem elevados os potenciais de ionização atômicos e os elétrons delta não serem capazes de criar uma desorganização de caráter molecular. Mas em polímeros a formação do traço está estreitamente relacionada a quebras de cadeias poliméricas, que possuem energias limiares de rompimento menores do que os potenciais atômicos. Nos polímeros, apenas numa região central do traço, com raio da ordem de dezenas de angstroms,

¹O Capítulo 6 será dedicado ao estudo da extensão da desorganização molecular no material, ou seja, o raio do traço latente.

são as quebras de cadeia causadas diretamente pela passagem da partícula primária. Por outro lado, esses rompimentos absorvem parte da energia que seria utilizada em ionizações, tendendo a diminuir o número de íons primários por unidade de comprimento. O processo de explosão acontece nos polímeros do mesmo modo que em materiais inorgânicos, mas *há uma região periférica de maior dimensão*, e que envolve a região central, *onde ocorrem quebras de cadeia por mecanismos secundários*, as quais alteram a reatividade química local e *determinam, nos polímeros, o raio do traço latente*.

As regiões onde acontecem diferentes fenômenos no processo de formação de traços em polímeros são as seguintes (vide Figura 2.1):

1º) uma região com raio da ordem de angstroms, na qual os átomos do meio são ionizados pela partícula incidente; forma-se uma fileira estreita de íons; a partir de tais parâmetros de impacto são emitidos raios delta que percorrem até centenas de angstroms no interior do material; essa região, ou fileira, desaparece imediatamente pelo processo de explosão de íons;

2º) uma região com raio da ordem de dezenas de angstroms, onde ocorrem quebras de cadeia causadas diretamente pela partícula primária incidente; essa é também a região atingida pelos íons lançados no processo de explosão (corresponde à *região I* da Figura 6.1, página 45), e

3º) uma região com raio da ordem de centenas de angstroms (corresponde à *região II* da Figura 6.1), onde acontecem quebras de cadeia causadas pelos elétrons delta; o raio desta região pode ser considerado o próprio raio do traço².

Procuremos avaliar o raio da 2ª região, onde predomina o mecanismo primário, a partir da transferência de energia a ser utilizada em quebras de cadeia. O parâmetro de impacto máximo para transferência de energia a modos de oscilação conectados às ligações poliméricas³, $b_{max} = \hbar\gamma v/\Delta I$ é da ordem de centenas de angstroms (vide expressão (3.26); $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ J.s, $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2}$, ΔI é a energia potencial para a quebra de cadeia). Contudo, uma densidade apreciável de quebras dessas ligações acontecerá numa região delimitada por um parâmetro bastante menor, já que para parâmetros grandes, comparáveis ao parâmetro máximo, acontecem mais freqüentemente excitações eletrônicas sem quebras de cadeia⁴. Assim, o raio da região onde acontecem quebras de cadeia diretamente por mecanismo primário (2ª região, ou região I da Figura 6.1) não deve ultrapassar algumas dezenas de angstroms. Por outro lado, estudos que consideraram a questão da medida do

²Existe ainda uma quarta região, denominada *halo*, bastante ampla, na qual a reatividade química é quase igual à reatividade do polímero bruto. O Capítulo 6 retomará, do ponto de vista experimental, a questão da estrutura do traço, e apresentará também informações sobre diâmetros.

³A Seção 3.4 apresentará o conceito de parâmetro máximo.

⁴Este aspecto estará sendo novamente considerado na nota de rodapé 1 da página 39.

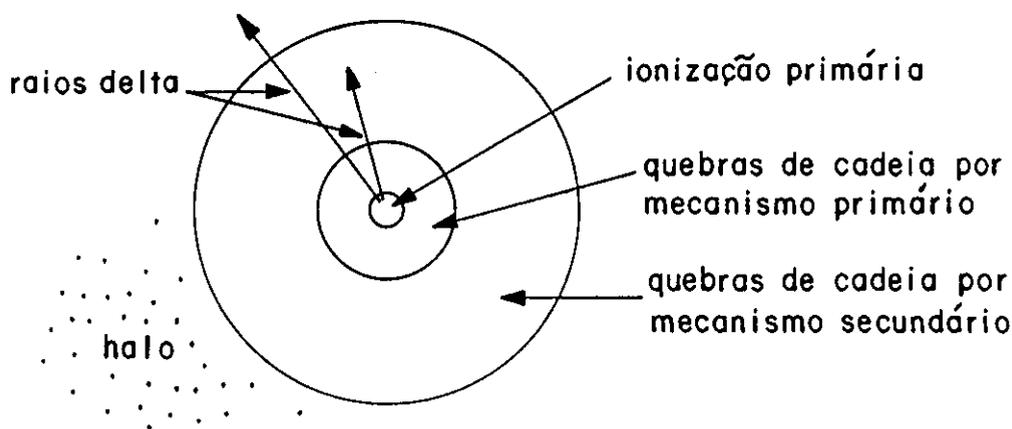


Figura 2.1: Regiões onde acontecem diferentes fenômenos no processo de formação de traços em polímeros. Vide também a Figura 6.1, à página 45. A região onde acontecem predominantemente quebras de cadeia por mecanismo primário corresponde à região I da Figura 6.1, e a região onde acontecem quebras de cadeia por mecanismo secundário corresponde à região II daquela figura.

diâmetro de traços [27,63,91,47,104,6,54], relatam valores de raios de traços latentes em polímeros como sendo da ordem de algumas centenas de angstroms. Então, os elétrons secundários causam, nos polímeros, a desorganização das cadeias num volume (3ª região) dez a cem vezes maior do que faz a partícula primária, determinando o diâmetro de traço.

O mecanismo secundário de produção do traço é preponderante nos polímeros enquanto o modelo de explosão de íons descreve com mais coerência a formação de traços em sólidos inorgânicos. A produção dos elétrons secundários é abundante e eles são lançados preferencialmente em direções próximas às perpendiculares à trajetória do íon primário⁵. As ligações poliméricas possuem caráter acentuadamente covalente, que dá lugar a rompimentos estáveis sem a produção concomitante de íons. Por outro lado, enquanto um deslocamento atômico em cristal constitui uma alteração estrutural que envolve considerável transferência de energia, uma quebra de cadeia polimérica absorve energia menor, que pode ser criada por um elétron secundário. Os polímeros são mais sensíveis e apropriados à identificação de partículas ou dosimetria; os detectores inorgânicos mantêm sua importância na geologia e na cronologia.

Assim, em face de não ter sido ainda considerado devidamente o mecanismo de quebras de cadeia em polímeros, procurar-se-á desenvolver uma descrição mais completa do processo de formação de traços nesses materiais, que leve em conta a desorganização da estrutura polimérica.

⁵ Ângulos de recuo serão tratados na Seção 3.2.

2.2 A alteração local

A reatividade química em um *local* do polímero é função da densidade de quebras de cadeia naquele local. Quebras de cadeia são eventos moleculares e a determinação de sua densidade depende de técnicas especiais de medição (tal como o método espectroscópico de análise de radicais [104]) e também está relacionada com a interpretação teórica que se adota para a estrutura do traço, e do próprio polímero⁶. Alternativamente, considera-se alguma grandeza física, também local, calculável a partir da carga e velocidade do projétil, das características do meio e da distância ao centro do traço, a qual determinaria a densidade de quebras de cadeia⁷. Tal grandeza deve conduzir a um único valor limiar característico do material, abaixo do qual não acontece *no local* aumento da reatividade química⁸. Ela se presta, por isso, à previsão da sensibilidade de materiais detectores a diferentes partículas incidentes. Supõe-se para as análises que seguem, e acompanhando Kobetich e Katz [62,61], que a grandeza determinante da alteração local da reatividade química no material é a *densidade do depósito secundário de energia*. Os elétrons secundários transferem energia ao meio ao longo de suas trajetórias, e a desorganização local da estrutura molecular deve estar univocamente relacionada à energia por eles depositada por unidade de volume.

2.3 Uma interpretação para a formação de traços em polímeros

A grandeza macroscópica observável experimentalmente, como já foi introduzido na Seção 1.3, é a *velocidade de corrosão química ao longo do traço*— v_T . A observação experimental deve ser relacionada a uma grandeza microscópica característica da partícula primária, essa relação deve ser *monotônica* (quanto maior o distúrbio maior será a velocidade de corrosão) e independente da carga da partícula incidente, ou seja, para um mesmo distúrbio no material deve haver um mesmo efeito observável (relação *unívoca*; a seção seguinte tratará do assunto).

Procurando verificar tais condições propõe-se então uma relação entre a velocidade de corrosão ao longo do traço e a *perda*, por parte da partícula primária, *de uma energia restrita à produção dos raios delta que depositam uma densidade de energia significativa no interior do traço*. Repitamos, para clareza, a frase da Seção 1.3: trata-se da *taxa de perda de uma energia restrita* na qual o *parâmetro de impacto*

⁶A respeito da estrutura do polímero CR39 vide o Apêndice E.

⁷Não confundir com a grandeza *primária* que deve determinar a formação do traço como um todo, e que foi assunto da seção anterior e voltará a ser tratada na próxima seção.

⁸Nos diversos materiais admite-se que um número mínimo de eventos moleculares é necessário para a formação de uma imagem latente. Em registros fotográficos há um limiar para a formação de um 'grão', o qual tem a potencialidade de ser transformado em imagem (vide por exemplo [48]). Do mesmo modo, nos polímeros há, dependendo do material, uma densidade mínima de quebras de cadeia, abaixo da qual não se observa alteração da reatividade química no local. R. Spohr [96, seção 3.2.3] apresenta uma descrição detalhada da formação de grãos sensitivos em sólidos.

mínimo para a produção de elétrons secundários é escolhido com base na *densidade limiar do depósito de energia que acontece na periferia do traço*. Na periferia é depositada uma densidade de energia limiar, abaixo da qual (ou seja, numa região ainda mais distante do centro) não acontece alteração significativa da reatividade química local. Elétrons que passam pela periferia do traço com grande velocidade, depositando aí pouca energia, também pouco contribuem para sua formação, e a fração da taxa de perda de energia que é utilizada na produção desses elétrons de alta velocidade deve ser desprezada. A densidade limiar do depósito de energia é uma característica do material. Prevê-se, pois, que traços produzidos por diferentes partículas primárias em um mesmo material apresentam, consistentemente, o mesmo valor da densidade do depósito de energia na periferia do traço.

Cada elétron que constitui um raio delta, como qualquer partícula carregada que perde energia em um material, aumenta sua taxa de perda de energia à medida que se aproxima do final da trajetória, até um valor máximo, que em seguida diminui. Assim, os elétrons delta que param numa região circunvizinha a periferia do traço são os que produzem uma densidade de quebras de cadeia secundárias significativa na região periférica. Conhecendo-se os perfis—em função da distância ao centro do traço—das densidades de energia depositada por raios delta produzidos com diferentes parâmetros de impacto (Seção 7.1), e considerando-se as diferentes contribuições que acontecem na periferia (Seção 7.4), é possível escolher um valor limiar mínimo de parâmetro de impacto para a produção de elétrons formadores de traço (o qual é também função da carga e energia da partícula primária)⁹, o que será efetuado na Seção 7.5.

2.4 Independência com respeito ao número atômico da partícula incidente

A taxa de perda de energia restrita desse modo obtida é então submetida ao critério da independência da relação 'velocidade de corrosão química \times taxa de perda de energia restrita' com respeito à carga da partícula incidente (conforme foi já introduzido na Seção 1.3, vide página 10). Essa relação entre a grandeza medida experimentalmente e a grandeza teórica é chamada *função resposta* do material. A grandeza primária admitida como responsável pela formação do traço, por força da própria suposição de ser a grandeza que determina o fenômeno, deve guardar relação unívoca com o efeito mensurável no meio detector, independentemente de qual tenha sido a partícula primária que criou o distúrbio.

Tal exigência básica é aplicada para estabelecer o valor de um parâmetro aditivo

⁹Não existe aqui a fixação de um único parâmetro de impacto mínimo ou de um único valor limiar para a perda de energia restrita, independente do número atômico e da energia da partícula incidente. O que se propõe é a utilização do valor limiar para a densidade do depósito de energia, que é único e característico do material e é o valor da densidade do depósito que acontece na periferia do traço. Assim, embora a grandeza primária calculada seja função apenas das características da partícula primária (e do detector), leva-se em conta os diâmetros dos traços produzidos. Esses diâmetros constituem um novo conjunto de dados experimentais que passa a ser considerado.

ajustável na expressão da grandeza microscópica (parcela K , vide Seção 8.2), parcela essa que tem uma função de ajuste final às aproximações realizadas. Pretende-se que o parâmetro aditivo seja próximo de zero ou mesmo nulo, ou seja, que não haja necessidade de ajustes significativos. Valores do parâmetro aditivo bastante diferentes de zero, eventualmente comparáveis em módulo a outras parcelas da expressão da taxa de perda de energia restrita (expressões (4.7) ou (8.2)), denotariam uma inadequação da teoria às observações.

Preenchidas as condições dessa comprovação as curvas 'velocidade de corrosão \times alcance' são, como usualmente, generalizadas para todos os números atômicos (Capítulo 8, Figura 8.9). As observações experimentais de 1986 (Capítulo 9) serão com elas confrontadas (Capítulo 10) a fim de identificar núcleos pesados da radiação primária.

Capítulo 3

Transferência de energia a elétrons do meio

Íons ou elétrons incidentes, ao atravessarem um meio material, transferem quantidade de movimento e energia aos elétrons do meio e aos núcleos atômicos. Os núcleos, por estarem blindados por elétrons, interagem com menor probabilidade com a partícula, de tal modo que a maior parte da perda de energia é realizada elasticamente aos elétrons do meio.

Quando o parâmetro de impacto entre a partícula incidente e o elétron atômico é suficientemente pequeno a transferência de energia é bastante maior do que a energia de ionização do elétron, e é possível, dentro de determinados limites, adotar-se a *aproximação do elétron livre*. Por outro lado, se o parâmetro for maior que determinado limiar, que depende da energia de ionização do elétron atômico, será necessário levar em consideração a ligação do elétron com o átomo, para o que se adota o *modelo de ligação harmônica*. O problema foi originalmente tratado por Bohr [17] e por Bethe [14]. Iniciaremos com a aproximação do elétron livre. Vide também o final da Seção 3.4, que volta a considerar as regiões de validade de cada aproximação.

3.1 Transferência de energia; a aproximação do elétron livre

A energia transferida em cada colisão é a energia cinética de recuo do elétron-alvo. As quantidades de movimento e as energias finais, em função do parâmetro de impacto, são obtidas das leis de conservação. Tais leis são mais imediatamente escritas no sistema do centro de momentos (SCM), em função do ângulo de espalhamento. Em seguida é aplicada a relação entre o ângulo e o parâmetro de impacto *b*—*relação de Rutherford*.

Consideremos uma partícula com quadrimomento inicial $p \equiv (\vec{p}, ie_1/c)$ e massa M , que atinge um elétron, com massa m , inicialmente em repouso; a colisão é elástica, os quadrimomentos finais são $p_{\text{espalhamento}}$ e p_{recuo} (vide Figura 3.1). No

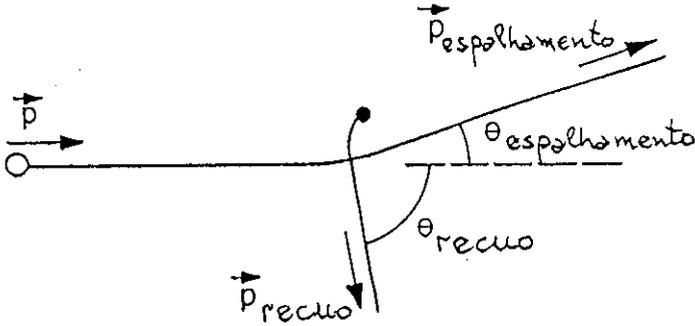


Figura 3.1: A colisão no sistema do laboratório.

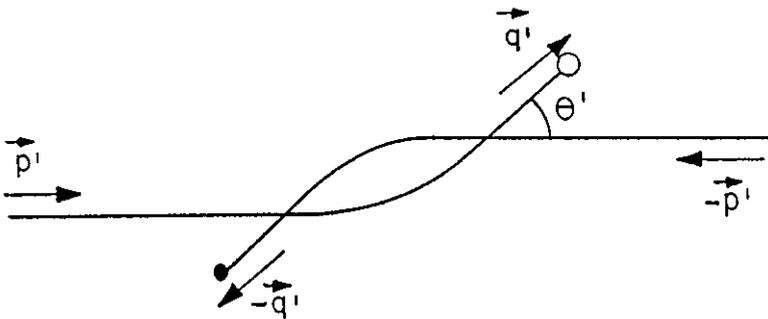


Figura 3.2: A colisão no SCM.

SCM, cujas variáveis serão denotadas com o superescrito *linha*, as quantidades de movimento finais são os vetores \vec{q}' e $-\vec{q}'$. Os vetores \vec{p}'_1 e $-\vec{p}'_1$ são os momentos iniciais e θ' é o ângulo entre as direções final e inicial (vide Figura 3.2). Desejamos a energia de recuo no sistema do laboratório. Calculemos a energia de recuo no SCM (e'_{recuo}), para em seguida transformá-la ao sistema do laboratório (expressão (3.4) a seguir):

$$e'_{recuo} = e'_2 \quad , \quad (3.1)$$

por se tratar de colisão elástica (e'_2 é a energia inicial do elétron no SCM). Para obter a grandeza em função dos dados iniciais do problema consideremos inicialmente a invariância do módulo do quadrivetor momento total:

$$|\vec{p}'_1 + \vec{p}'_2| = |\vec{p}_1 + \vec{p}_2|$$

e como $\vec{p}'_2 = -\vec{p}'_1$ e $\vec{p}_2 = \vec{0}$ tem-se:

$$\begin{aligned} i \frac{e'_1 + e'_2}{c} &= \sqrt{|\vec{p}'|^2 - \left(\frac{e'_1}{c} + mc\right)^2} \\ e'_1 + e'_2 &= c\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2} \quad . \end{aligned} \quad (3.2)$$

E agora consideremos a seguinte invariância de produto escalar:

$$\begin{aligned} p'_2 \cdot (p'_1 + p'_2) &= p_2 \cdot (p_1 + p_2) \\ \frac{e'_2(e'_1 + e'_2)}{c^2} &= mc \left(\frac{e_1}{c} + mc \right) \end{aligned}$$

donde, e das expressões (3.1) e (3.2), se escreve:

$$e'_{recuo} = e'_2 = \frac{mc(e_1 + mc^2)}{\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2}} \quad (3.3)$$

A energia transferida é obtida por intermédio de uma transformação de Lorentz ao sistema do laboratório:

$$\begin{aligned} \Delta e &= e_{recuo} - mc^2 \\ &= \gamma_{CM}(e'_{recuo} + \beta_{CM}c|\vec{q}'|) - mc^2 \quad , \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde $|\vec{q}'|$ é o módulo da quantidade de movimento de cada uma das partículas no SCM e γ_{CM} e β_{CM} se referem também ao SCM.

$$\begin{aligned} |\vec{q}'| &= |\vec{p}'| \quad (\text{porque a colisão é elástica}) \\ &= \sqrt{\frac{e'^2_2}{c^2} - m^2c^2} \\ &= \frac{m|\vec{p}'|c}{\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2}} \quad . \end{aligned} \quad (3.5)$$

Ademais:

$$\gamma_{CM} = \frac{e'_2}{mc^2} = \frac{e_1 + mc^2}{c\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2}} \quad (3.6)$$

$$\beta_{CM} = \frac{|\vec{p}'|}{\gamma_{CM}mc} = \frac{|\vec{p}'|c}{e_1 + mc^2} \quad (3.7)$$

e então:

$$\begin{aligned} \Delta e &= \frac{1}{c} \frac{e_1 + mc^2}{\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2}} \cdot \\ &\quad \left(\frac{mc(e_1 + mc^2)}{\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2}} + \right. \\ &\quad \left. \frac{|\vec{p}'|c}{e_1 + mc^2} \cdot c \cdot \frac{m|\vec{p}'|c}{\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2}} \cos \theta' \right) - mc^2 \\ &= \frac{m\vec{p}^2c^2(1 - \cos \theta')}{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2} \quad , \end{aligned} \quad (3.8)$$

ou seja, é a energia transferida, em função do ângulo de espalhamento no SCM.

A relação não relativística entre o ângulo θ' e o parâmetro de impacto b , numa colisão com força proporcional ao inverso do quadrado da distância a um ponto fixo (*relação de Rutherford*) é:

$$\operatorname{tg} \frac{\theta'}{2} = \frac{z' z q_e^2}{m v^2 b}$$

(z' e z são as quantidades de carga elementar respectivamente do centro espalhador e do projétil, q_e é a carga do elétron em módulo— q_e será doravante considerado positivo—e m e v são respectivamente a massa e a velocidade do projétil¹).

Para velocidades relativísticas os ângulos de espalhamento são menores do que os previstos pela fórmula acima, devido ao aumento de massa; no caso a massa transversal γm . Utilizar-se-á como relação $\theta'(b)$ a mesma expressão anterior, mas que considera a massa relativística transversal $\gamma_{CM} m$ do elétron do material, no SCM²:

$$\operatorname{tg} \frac{\theta'}{2} = \frac{z' z q_e^2}{\gamma_{CM} m \beta_{CM}^2 c^2 b} \quad (3.9)$$

Daí (com $z' = 1$):

$$\sqrt{\frac{1 - \cos \theta'}{1 + \cos \theta'}} = \frac{b_{lim}}{b}$$

onde

$$b_{lim} = \frac{z q_e^2}{\gamma_{CM} m \beta_{CM}^2 c^2} \quad (3.10)$$

Prosseguindo:

$$1 - \cos \theta' = \frac{2b_{lim}^2}{b^2 + b_{lim}^2} \quad (3.11)$$

e substituindo:

$$\begin{aligned} \Delta e &= \frac{2m\bar{p}^2 c^2}{M^2 c^2 + 2e_1 m + m^2 c^2} \frac{b_{lim}^2}{b^2 + b_{lim}^2} \\ &= \frac{2z^2 q_e^4}{m \beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b^2 + b_{lim}^2} \quad (3.12) \end{aligned}$$

A função $1/(b^2 + b_{lim}^2)$ está representada graficamente na Figura 3.3. Para valores de b bastante maiores do que b_{lim} a transferência de energia é inversamente proporcional ao quadrado do parâmetro de impacto b . O parâmetro b_{lim} é, pois, um *parâmetro de impacto limite*, em torno e abaixo do qual a transferência de energia já não obedece à relação inversa ao quadrado do parâmetro de impacto.

¹No SCM o elétron do material funciona como um projétil que é espalhado por um centro fixo de forças.

²No SCM, notadamente para pequenos parâmetros de impacto, ocorre uma diminuição da massa do projétil quando ele se aproxima demasiadamente do centro espalhador, momento em que a massa é transferida ao campo das duas partículas. Nessa situação, na qual ocorre a maior transferência de quantidade de movimento, a massa é menor do que γm , o que age no sentido de que o ângulo de espalhamento seja maior (menos diminuído com relação ao cálculo não relativístico). Ademais, a perda de energia eletromagnética age também no mesmo sentido. Contudo o efeito é notável apenas para grandes ângulos de espalhamento, para os quais a variação do módulo da velocidade é grande durante a colisão, de modo que a expressão (3.9) constitui uma boa aproximação.

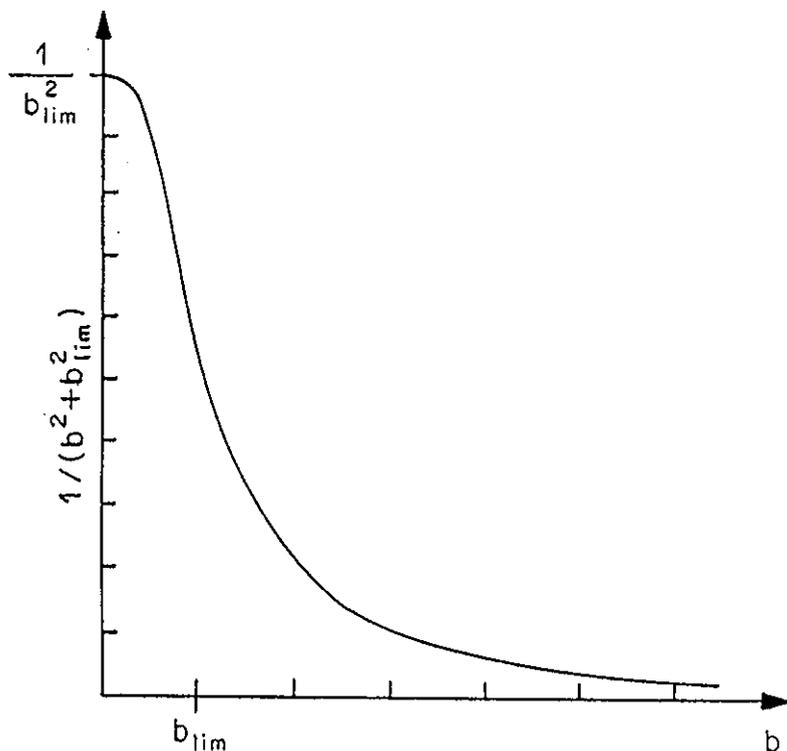


Figura 3.3: Gráfico da função $1/(b^2 + b_{lim}^2)$, que descreve a dependência da transferência clássica de energia em colisões elásticas, em função do parâmetro de impacto.

3.2 Ângulos de espalhamento e recuo

Escrevamos os ângulos de espalhamento e recuo, em função do parâmetro de impacto, na aproximação do elétron livre. Tem-se:

$$\operatorname{tg} \theta_{\text{espalhamento}} = \frac{p_{\text{espalhamento} \perp}}{p_{\text{espalhamento} \parallel}},$$

onde $p_{\text{espalhamento} \parallel}$ ($p_{\text{espalhamento} \perp}$) é a quantidade de movimento final, no sistema do laboratório, na direção paralela (perpendicular) à direção da trajetória inicial do projétil. A componente $p_{\text{espalhamento} \parallel}$ do quadrimomento inicial é transformada conforme a seguinte relação de Lorentz:

$$p_{\text{espalhamento} \parallel} = \gamma_{CM} \left(p'_{\text{espalhamento} \parallel} + \frac{\beta_{CM}}{c} e'_{\text{espalhamento}} \right),$$

donde (vide Figura 3.2):

$$\operatorname{tg} \theta_{\text{espalhamento}} = \frac{|\vec{q}'| \operatorname{sen} \theta'}{\gamma_{CM} \left(|\vec{q}'| \cos \theta' + \frac{\beta_{CM}}{c} e'_{\text{espalhamento}} \right)},$$

Lembremo-nos que

$$e'_{\text{espalhamento}} = e'_1$$

porque a colisão é elástica. Prosseguindo:

$$\begin{aligned} e'_{\text{espalhamento}} &= (e'_1 + e'_2) - e'_2 \\ &= \frac{c(M^2c^2 + e_1m)}{\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2}}, \end{aligned}$$

com o uso das expressões (3.2) e (3.3). Utilizando também as expressões (3.5) a (3.7) para $|\vec{q}'|$, γ_{CM} e β_{CM} tem-se:

$$\begin{aligned} \text{tg } \theta_{\text{espalhamento}} &= \frac{c\sqrt{M^2c^2 + 2e_1m + m^2c^2} \text{ sen } \theta'}{(e_1 + mc^2) \cos \theta' + e_1 + \frac{M^2}{m}c^2} \\ &= \frac{\sqrt{M^2 + 2\gamma Mm + m^2} \text{ sen } \theta'}{(\gamma M + m) \cos \theta' + \frac{M(M + \gamma m)}{m}}. \end{aligned}$$

O ângulo de espalhamento máximo (para o qual $d \text{tg } \theta_{\text{espalhamento}}/d\theta' = 0$) é dado por:

$$\text{tg } \theta_{\text{espalhamento máx}} = \frac{m\sqrt{M^2 + 2\gamma Mm + m^2}\sqrt{M^4 + 2(M^2 - m^2)\gamma Mm - m^4}}{M^2(M^2 + 2M\gamma m) - m^2(2M\gamma m + m^2)}$$

No caso da partícula incidente ser um núcleo, tem-se $M \gg m$ e pode-se desprezar as parcelas em m^2 . Neste caso

$$\text{tg } \theta_{\text{espalhamento máx}} \cong \frac{m}{M} \ll 1 \quad (\text{para } M \gg m),$$

um resultado que é independente de γ . Assim, com $M \gg m$, o espalhamento será pequeno em qualquer situação.

Quando a partícula incidente é um elétron, tem-se $M = m$ e então:

$$\text{tg } \theta_{\text{espalhamento}} = \sqrt{\frac{2}{\gamma + 1}} \text{tg } \frac{\theta'}{2}. \quad (3.13)$$

Neste caso são possíveis ângulos de espalhamento até $\pi/2$. Contudo, é interessante verificar que em colisões elétron-elétron não relativísticas tem-se

$$\theta_{\text{espalhamento}} \simeq \text{arctg}(b_{lim}/b) \quad (\text{para } \gamma \sim 1) \quad (3.14)$$

(vide expressões (3.9) e (3.10)) e menor no caso de colisões relativísticas, que se torna pequeno quando b aumenta. Por outro lado, a probabilidade de colisão com parâmetros menores ou igual a um determinado parâmetro de referência é proporcional ao quadrado deste valor de referência (quatro vezes mais elétrons tem colisões com $b \leq 2b_{lim}$ que com $b \leq b_{lim}$, nove vezes mais com $b \leq 3b_{lim}$, e assim por diante) de tal

modo que, a maior parte dos elétrons incidentes é espalhada com pequenos ângulos³ (apesar da pequena massa do projétil). Esse fato será utilizado como hipótese para cálculos de depósito secundário de energia (Capítulos 4 e 7).

Com respeito aos ângulos de recuo tem-se:

$$\operatorname{tg} \theta_{\text{recuo}} = \frac{p_{\text{recuo}\perp}}{p_{\text{recuo}\parallel}} = \frac{|\vec{q}'| \operatorname{sen} \theta'}{\gamma_{CM} \left(-|\vec{q}'| \cos \theta' + \frac{\beta_{CM} M}{c} e'_{\text{recuo}} \right)}$$

Substituindo as expressões (3.3) e (3.5) a (3.7) para e'_{recuo} , $|\vec{q}'|$, γ_{CM} e β_{CM} tem-se:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \theta_{\text{recuo}} &= \frac{c\sqrt{M^2 c^2 + 2e_1 m + m^2 c^2}}{e_1 + mc^2} \cotg \frac{\theta'}{2} \\ &= C \frac{b}{b_{lim}}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

com $C = \frac{\sqrt{\left(\frac{M}{m}\right)^2 + 2\gamma_{\frac{M}{m}} + 1}}{\gamma_{\frac{M}{m}} + 1}$. Tal fator é aproximadamente igual a 1 e independente de M/m , no caso não relativístico, e é menor que 1 no caso relativístico. Os elétrons-alvo são lançados em direções próximas às perpendiculares à trajetória da partícula incidente, com exceção daqueles lançados a partir de parâmetros de impacto com valor próximo a b_{lim} . Tal hipótese, a saber, a de que os elétrons são lançados perpendicularmente à direção do traço, também será admitida nos cálculos que seguem (vide início do Capítulo 4).

3.3 A correção quântica

Consideremos agora um efeito quântico de diminuição da energia transferida em média aos elétrons do meio no caso de parâmetros de impacto pequenos, devido ao princípio da incerteza.

A localização de uma partícula é definida com uma incerteza da ordem de $\hbar/\Delta p$, onde $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ J.s e Δp é a incerteza no conhecimento do valor da quantidade de movimento. Em um feixe de partículas com quantidade de movimento média (em módulo) igual a p , a maior incerteza possível no conhecimento da quantidade de movimento, a fim de minimizar a incerteza da posição, é da ordem da própria quantidade p , donde a incerteza mínima da posição se torna da ordem de \hbar/p .

Numa colisão entre duas partículas considerada no SCM, o ângulo de espalhamento θ' vale $\pi/2$ para $b = b_{lim}$ (expressão (3.11)). Então, para parâmetros de impacto pequenos existe uma incerteza quântica da ordem de $\hbar/|\vec{p}'|$ no conhecimento do valor do parâmetro de impacto. Com isso, a média quântica da energia transferida $\Delta e_q(b)$ é uma média, dentro do intervalo $b - \hbar/2|\vec{p}'|$ a $b + \hbar/2|\vec{p}'|$, do valor

³Vale a pena notar aqui que o parâmetro b possui valores possíveis (de modo a transferir energia aos elétrons do meio) num intervalo de várias ordens de grandeza maiores que b_{lim} . Vide a avaliação do parâmetro máximo na Seção 3.4, expressão (3.26), e comparei com valores típicos do parâmetro b_{lim} dados na expressão (7.3), página 63.

calculado classicamente (dado pela expressão (3.12)). Podemos supor por exemplo, como uma aproximação, que todos os valores dentro do intervalo são igualmente prováveis, em vista do que escrevemos⁴:

$$\begin{aligned} \Delta e_q(b) &= \frac{\int_{b - \frac{\hbar}{2|\bar{p}'|}}^{b + \frac{\hbar}{2|\bar{p}'|}} \frac{2z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b^2 + b_{lim}^2} db}{\frac{\hbar}{|\bar{p}'|}} \\ &= \frac{2z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b_{lim} \frac{\hbar}{|\bar{p}'|}} \left(\arctg \frac{b + \frac{\hbar}{2|\bar{p}'|}}{b_{lim}} - \arctg \frac{b - \frac{\hbar}{2|\bar{p}'|}}{b_{lim}} \right) \\ &= \frac{2z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b_{lim} \frac{\hbar}{|\bar{p}'|}} \left(\arctg \frac{b_{lim}}{b - \frac{\hbar}{2|\bar{p}'|}} - \arctg \frac{b_{lim}}{b + \frac{\hbar}{2|\bar{p}'|}} \right). \quad (3.16) \end{aligned}$$

A incerteza quântica diminui a altura do pico da transferência de energia que existe em torno de $b = 0$ (vide Figura 3.3), e o alarga. No caso de $\hbar/|\bar{p}'|$ ser menor que b_{lim} , a expressão (3.16) aproxima-se de sua derivada, em relação a b/b_{lim} (dividida por b_{lim}^2) e retorna-se à expressão clássica (3.12). Por outro lado, no caso em que $\frac{\hbar}{|\bar{p}'|} > b_{lim}$ a expressão (3.16) pode ser substituída por

$$\Delta e_q(b) = \frac{2z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b^2 + b_{lim}^2} \quad (\text{para } \frac{\hbar}{|\bar{p}'|} > b_{lim}), \quad (3.17)$$

onde

$$b_q = \frac{\hbar}{|\bar{p}'|}; \quad (3.18)$$

b_q é um *parâmetro limite quântico*⁵. Tal substituição simplifica a integração das

⁴Outras distribuições de probabilidade podem ser consideradas. Por exemplo, uma distribuição gaussiana com uma largura $\frac{\hbar}{|\bar{p}'|}$ pode ser admitida, a partir do que se terá [1]:

$$\begin{aligned} \Delta e_q(b) &= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} e^{-\frac{(b-b_q)^2}{2\left(\frac{\hbar}{2|\bar{p}'|}\right)^2}} \frac{1}{b^2 + b_{lim}^2} db}{\sqrt{2\pi} \frac{\hbar}{2|\bar{p}'|}} \\ &= \frac{2z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{\pi}{b_{lim}} e^{-(a^2 x_0^2 - a^2)} \mathcal{R}(1 - \text{erf}(a + ia x_0)), \end{aligned}$$

onde $a = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{|\bar{p}'|}$ e \mathcal{R} significa a parte real.

⁵Consideremos inicialmente o caso em que $b \gg \frac{\hbar}{|\bar{p}'|} \sim b_{lim}$. Neste caso a expressão 3.16 poderá ter suas funções arcotangentes aproximadas por seus argumentos, donde:

$$\Delta e_q(b \gg \frac{\hbar}{|\bar{p}'|}) \simeq \frac{2z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b^2} \quad (\text{para } b \gg \frac{\hbar}{|\bar{p}'|} \sim b_{lim}).$$

A fim de estudar o comportamento da função quando o parâmetro b é da ordem de $\frac{\hbar}{|\bar{p}'|}$, calculemos seu valor no ponto $b = \frac{\hbar}{|\bar{p}'|}$:

$$\Delta e_q\left(\frac{\hbar}{|\bar{p}'|}\right) = \frac{2z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b_{lim} \frac{\hbar}{|\bar{p}'|}} \left(\arctan 2 \frac{b_{lim}}{\frac{\hbar}{|\bar{p}'|}} - \arctan \frac{2}{3} \frac{b_{lim}}{\frac{\hbar}{|\bar{p}'|}} \right)$$

perdas de energia aos elétrons que se situam em torno da trajetória da partícula (a ser efetuada adiante, Seção 3.5).

Vejam os quais são as situações em que se tem $b_q > b_{lim}$, de modo a que o efeito quântico seja notável. Consideremos, em primeiro lugar, uma partícula incidente de massa $M \gg m$; nesse caso $|\vec{p}'| \simeq \gamma m v$ e $\beta_{CM} \simeq \beta$:

$$\begin{aligned} b_q &= \frac{\hbar}{\gamma m v} & (\text{para } M \gg m) \\ b_{lim} &= \frac{z q_e^2}{\gamma m v^2} & (\text{para } M \gg m). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Teremos $b_q > b_{lim}$ quando

$$\frac{v}{z} > \frac{q_e^2}{\hbar} = \frac{c}{137},$$

ou seja, no caso de partículas de baixo número atômico e grande velocidade. No caso da partícula incidente ser um elétron tem-se

$$b_q = \frac{\hbar}{\gamma_{CM} m \beta_{CM} c} \quad (\text{para elétrons}) \quad (3.20)$$

ou, com o uso das expressões (3.6) e (3.7), pode-se também escrever

$$b_q = \frac{\hbar}{m c} \sqrt{\frac{2}{\gamma - 1}} \quad (\text{para elétrons}), \quad (3.21)$$

que é maior que b_{lim} (expressão (3.10)) quando $v \gtrsim \frac{2c}{137}$, ou seja, elétrons com velocidades a partir de $4 \cdot 10^6$ m/s—com energia cinética de apenas alguns elétron-volts—devem já ter sua transferência de energia calculada com o parâmetro b_q .

3.4 A ligação dos elétrons ao meio; o modelo harmônico

Os elétrons-alvo do detector encontram-se vinculados aos átomos do material e devem receber uma energia de ionização para que sejam ejetados. Uma expressão

que, para $\frac{\hbar}{|\vec{p}'|}$ suficientemente maior que b_{lim} torna-se aproximadamente

$$\frac{2z^2 q_e^4}{m \beta_{CM}^2 c^2} \frac{4}{3} \frac{1}{\left(\frac{\hbar}{|\vec{p}'|}\right)^2}.$$

Note-se que é um valor determinado apenas por $\frac{\hbar}{|\vec{p}'|}$, e não mais por b_{lim} . Então, como uma simplificação da expressão (3.16), escreveremos a transferência de energia $\Delta e_q(b)$, quando $\frac{\hbar}{|\vec{p}'|} > b_{lim}$, com a mesma expressão clássica expressão (3.12), mas substituindo o parâmetro b_{lim} por $\frac{\hbar}{|\vec{p}'|}$ (o qual passamos a denotar por b_q). Teremos assim

$$\Delta e_q(b) = \frac{2z^2 q_e^4}{m \beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b^2 + b_q^2} \quad (\text{para } \frac{\hbar}{|\vec{p}'|} > b_{lim}),$$

que é a expressão expressão (3.17) do texto.

completa da transferência de energia deve levar em conta essa energia de ionização, o que não foi feito enquanto trabalhamos com a aproximação do elétron livre (Seções 3.1 e 3.3). Tal consideração é objeto do *modelo clássico de ligação harmônica*.

O modelo de ligação harmônica é baseado na demonstração de que os elétrons atômicos se comportam, quando sob a ação de uma influência externa, como um conjunto de osciladores clássicos forçados; tal demonstração está apresentada no Apêndice A. Trata-se de um capítulo da Mecânica Quântica, que inclui algumas aproximações. Supõe-se, em primeiro lugar, que o campo externo sobre o elétron pode ser tratado como uma perturbação ao campo próprio do átomo e, em segundo lugar, que esse campo é uniforme na região de interação (dependendo apenas do tempo), o que é conhecido como *aproximação de dipolo*. A aproximação de dipolo é equivalente a supor que o elétron atômico não se move durante a interação, o que não é válido para velocidades pequenas da partícula incidente, da ordem das velocidades no átomo de Bohr ($v = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Zq^2}{n\hbar} = 9.0 \cdot 10^9 \frac{Nm^2}{C^2} \frac{Z(1.6 \cdot 10^{-11}C)^2}{n(1.05 \cdot 10^{-34}Js)} \cong \frac{Z}{n} 2 \cdot 10^6 m/s$; Z é o número atômico do átomo-alvo, $n = 1, 2, 3, \dots$), ou para parâmetros de impacto pequenos, tais que o ângulo de recuo torna-se significativamente diferente de 90° . Contudo, o conjunto de partículas incidentes que consideraremos (que penetram e criam traços em sólidos) possuem velocidades superiores às velocidades no átomo de Bohr e, ademais, a presente aproximação visa tratar os casos de parâmetros de impacto maiores, enquanto os parâmetros de impacto pequenos são tratados com a aproximação do elétron livre.

A transferência de energia (Δe) a um elétron do meio material, considerado como um oscilador harmônico clássico, é (trata-se de expressão fundamental, que se encontra deduzida no Apêndice B):

$$\frac{2\pi q_e^2}{m} |\vec{E}(\omega_j)|^2, \quad (3.22)$$

onde $\vec{E}(\omega_j)$ é o componente de Fourier do campo elétrico externo $\vec{E}(t)$ sobre o elétron, na frequência ω_j característica do oscilador ($-q_e$ é a carga do elétron; m é sua massa, j é um índice que identifica o oscilador). As relações entre as frequências ω_j e os potenciais atômicos serão consideradas no Capítulo 5. Consideremos uma partícula de massa M , carga zq_e e velocidade βc , que passa ao lado de um elétron, com parâmetro de impacto b , no instante $t = 0$. Consideremos parâmetros de impacto suficientemente grandes a fim de que se possa considerar a trajetória da partícula incidente como retilínea. Consideremos um sistema ortogonal de eixos, tal que o eixo x esteja alinhado com a trajetória e o eixo z esteja contido no plano que contém as partículas (vide Figura 3.4). Os componentes do campo elétrico são:

$$E_x = -\frac{\gamma z q_e \beta c t}{(b^2 + \gamma^2 \beta^2 c^2 t^2)^{3/2}}$$

⁶Um ângulo de recuo menor do que 90° significa que a projeção do campo paralela à trajetória inicial do projétil realizou trabalho, e denota que, durante a interação, o alvo se afastou da trajetória do projétil, para onde o campo é menor. O ângulo de recuo dá, assim, uma indicação do grau de validade da aproximação de dipolo.

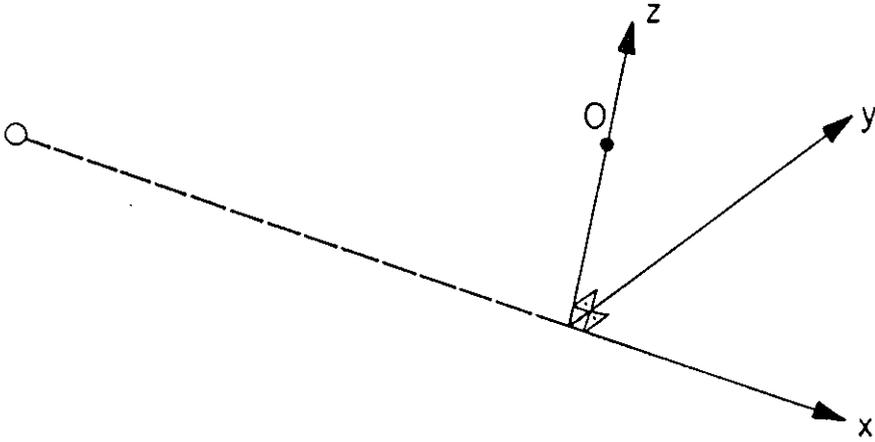


Figura 3.4: Sistema ortogonal de eixos utilizado na descrição do vetor campo elétrico que atua sobre o elétron-alvo.

$$E_y = 0$$

$$E_z = \frac{\gamma^2 q_e b}{(b^2 + \gamma^2 \beta^2 c^2 t^2)^{3/2}}$$

A transformada de Fourier de E_z é:

$$E_z(\omega) = \frac{\gamma z q_e \beta c}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{t e^{-i\omega t}}{(b^2 + \gamma^2 \beta^2 c^2 t^2)^{3/2}} dt$$

$$= \frac{izq_e\omega}{\pi\gamma^2\beta^2c^2} K_0\left(\frac{\omega b}{\gamma\beta c}\right) ;$$

K_0 é a chamada *função de Bessel modificada de ordem zero*. A transformada de Fourier de E_z é:

$$E_z(\omega) = \frac{\gamma z q_e b}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{(b^2 + \gamma^2 \beta^2 c^2 t^2)^{3/2}} dt$$

$$= \frac{zq_e\omega}{\pi\gamma\beta^2c^2} K_1\left(\frac{\omega b}{\gamma\beta c}\right) ,$$

onde K_1 é a *função de Bessel modificada de ordem um*.

Então, a partir da expressão (3.22) escreve-se:

$$\Delta e(b) = \frac{2\pi^2 q_e^2}{m} \left[\frac{z^2 q_e^2 \omega_j^2}{\pi^2 \gamma^4 \beta^4 c^4} K_0^2\left(\frac{\omega_j b}{\gamma\beta c}\right) + \frac{z^2 q_e^2 \omega_j^2}{\pi^2 \gamma^2 \beta^4 c^4} K_1^2\left(\frac{\omega_j b}{\gamma\beta c}\right) \right]$$

$$= \frac{2z^2 q_e^4 \omega_j^2}{\gamma^2 m \beta^4 c^4} \left[\frac{1}{\gamma^2} K_0^2\left(\frac{\omega_j b}{\gamma\beta c}\right) + K_1^2\left(\frac{\omega_j b}{\gamma\beta c}\right) \right] .$$

Devemos estudar o comportamento das funções K_0 e K_1 , as quais possuem as seguintes expressões limites:

$$\begin{aligned} K_0(z \ll 1) &\simeq -\ln z - 0,1159 \\ K_1(z \ll 1) &\simeq \frac{1}{z} \\ K_0(z \gg 1) = K_1(z \gg 1) &\simeq \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} [1 + O(z^{-1})] \end{aligned}$$

(onde $O(z^{-1})$ é uma parcela em x de ordem -1). Com isto temos:

1º) para $b \ll \frac{\gamma\beta c}{\omega_j}$:

$$\Delta e(b) \simeq \frac{2z^2 q_e^4 \omega_j^2}{\gamma^2 m \beta^4 c^4} \left[\frac{(\ln \frac{\omega_j b}{\gamma\beta c} + 0,1159)^2}{\gamma^2} + \frac{\gamma^2 \beta^2 c^2}{\omega_j^2 b^2} \right].$$

A segunda parcela torna-se muito maior que 1 e a primeira parcela fica desprezível com relação à segunda. Assim, neste caso:

$$\Delta e(b) \simeq \frac{2z^2 q_e^4}{m \beta^2 c^2} \frac{1}{b^2}; \quad (3.23)$$

2º) para $b \gg \frac{\gamma\beta c}{\omega_j}$:

$$\Delta e(b) \simeq \frac{2z^2 q_e^4}{m \beta^2 c^2} \frac{1}{b^2} \left[\left(\frac{1}{\gamma^2} + 1 \right) \frac{\pi}{2} \frac{\omega_j b}{\gamma\beta c} e^{-2\frac{\omega_j b}{\gamma\beta c}} \right], \quad (3.24)$$

que é uma função que diminui exponencialmente para zero quando o parâmetro b aumenta.

Portanto, a quantidade $\gamma\beta c/\omega_j$ é um *parâmetro de impacto máximo* (b_{maxj}), acima do qual a transferência de energia cai exponencialmente e o átomo tende a reagir adiabaticamente à força externa;

$$b_{maxj} = \frac{\gamma\beta c}{\omega_j}. \quad (3.25)$$

Devido a estarem os elétrons vinculados aos átomos, somente para parâmetros de impacto menores que um determinado valor máximo será a colisão suficientemente brusca de modo a haver transferência de energia.

Por outro lado, se o parâmetro de impacto b é suficientemente menor que b_{maxj} , a transferência de energia calculada por intermédio do modelo de ligação harmônica, expressão (3.23), se aproxima do valor calculado com a aproximação do elétron livre, expressão (3.12), a menos da parcela b_{im}^2 no denominador; ou com a expressão (3.17) a menos da parcela b_q^2 no denominador⁷.

⁷ A ausência dessa parcela na expressão (3.23) é uma conseqüência da aproximação de dipolo, que considera como que agindo sobre o elétron-alvo o mesmo campo que agiria caso ele não recuasse, e faz resultar uma expressão para a transferência de energia que aumenta indefinidamente de valor quando o parâmetro de impacto tende a zero.

Assim, e conforme já vimos anteriormente, a aproximação do elétron livre é a mais apropriada para o caso de parâmetros de impacto pequenos, enquanto a ligação dos elétrons ao meio limita a transferência de energia no caso de parâmetros de impacto grandes. Para calcular em seguida a perda de energia da partícula primária por unidade de comprimento integraremos a expressão (3.16), obtida com a aproximação do elétron livre (ou mesmo a expressão simplificada (3.17)), até o limite superior b_{maxj} .

A fim de se ter uma idéia da ordem de grandeza dos parâmetros máximos (expressão (3.25)), calculemos um valor típico (para $\gamma \sim 1$; $\omega_j = \frac{I_j}{\hbar}$, vide início do Capítulo 5; o potencial I é da ordem de 10^{-18} J):

$$\frac{\hbar\gamma\beta c}{I_j} \simeq \frac{1.05 \cdot 10^{-34} \text{ J.s} \cdot \beta \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{10^{-18} \text{ J}} \simeq 100 \text{ \AA} \quad (3.26)$$

3.5 Taxa de perda de energia

Consideremos uma partícula de carga zq_e e velocidade βc que atravessa um determinado material, o qual possui $f_j N Z$ elétrons de cada tipo j por unidade de volume, ligados harmonicamente aos átomos com freqüências características ω_j (f_j são as *intensidades de oscilador*⁸, N é o número de átomos por unidade de volume e Z é o número atômico do elemento que constitui o material⁹).

O número de elétrons com freqüência ω_j e parâmetro de impacto entre b e $b + db$ em uma espessura de material dx é:

$$f_j N Z 2\pi b db dx$$

e a energia transferida por unidade de comprimento ($\frac{de}{dx}$) é:

$$\sum_j \int_0^\infty \Delta e(b) f_j N Z 2\pi b db \quad ,$$

onde $\Delta e(b)$ é dado pela expressão (3.16) para $b \leq b_{maxj}$ e pode ser considerado nulo para $b > b_{maxj}$. Portanto:

$$\begin{aligned} \frac{de}{dx} &= 2\pi N Z \sum_j \int_0^{b_{maxj}} \Delta e(b) f_j b db \quad (3.27) \\ &= 4\pi N Z \frac{z^2 q_e^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b_{lim} b_q} \cdot \sum_j f_j \int_0^{b_{maxj}} \left(\arctg \frac{b + b_q/2}{b_{lim}} - \arctg \frac{b - b_q/2}{b_{lim}} \right) b db \\ &= 4\pi N Z \frac{z^2 q_e^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \frac{1}{b_{lim} b_q} \cdot \end{aligned}$$

⁸O conceito de intensidade de oscilador, elementar em Mecânica Quântica, encontra-se no Apêndice A, Seção A.3.

⁹Materiais compostos serão considerados na próxima seção.

$$\begin{aligned}
& \sum_j f_j \left[\frac{b_{maxj}^2 + (b_q/2)^2}{2b_{lim}b_q} \left(\arctg \frac{b_{maxj} + b_q/2}{b_{lim}} - \arctg \frac{b_{maxj} - b_q/2}{b_{lim}} \right) \right. \\
& + \frac{b_{lim}}{2b_q} \left(\operatorname{arcsec} \left| \frac{\sqrt{b_{lim}^2 + (b_{maxj} + b_q/2)^2}}{b_{lim}} \right| \right. \\
& \qquad \qquad \qquad \left. \left. - \operatorname{arcsec} \left| \frac{\sqrt{b_{lim}^2 + (b_{maxj} - b_q/2)^2}}{b_{lim}} \right| \right) \right] \\
& + \frac{b_q}{2b_{lim}} \arctg \frac{b_q}{2b_{lim}} \\
& + \frac{1}{4} \left(\ln \frac{b_{lim}^2 + (b_{maxj} + b_q/2)^2}{b_{lim}^2 + (b_q/2)^2} + \ln \frac{b_{lim}^2 + (b_{maxj} - b_q/2)^2}{b_{lim}^2 + (b_q/2)^2} \right) \quad (3.28)
\end{aligned}$$

(b_{lim} , b_q e b_{maxj} são dados pelas expressões (3.10), (3.18) e (3.25) respectivamente, e (3.19) e (3.21) para os casos de $M \gg m$ e de elétron incidente, respectivamente).

Se se faz uso da aproximação em $1/(b^2 + b_q^2)$, expressão (3.17), adequada em uma ampla região do intervalo de integração, tem-se:

$$\begin{aligned}
\frac{de}{dx} &= 4\pi N Z \frac{z^2 q^4}{m\beta_{CM}^2 c^3} \sum_j f_j \int_0^{b_{maxj}} \frac{1}{b^2 + b_q^2} b db \\
&= 4\pi N Z \frac{z^2 q^4}{m\beta_{CM}^2 c^3} \sum_j f_j \ln \frac{\sqrt{b_{maxj}^2 - b_q^2}}{b_q}
\end{aligned}$$

Os parâmetros máximos b_{maxj} são algumas ordens de grandeza maiores que b_q^{10} , o que permite simplificar a expressão anterior para:

$$\frac{de}{dx} = 4\pi N Z \frac{z^2 q^4}{m\beta_{CM}^2 c^3} \sum_j f_j \ln \frac{b_{maxj}}{b_q} \quad (3.29)$$

A dependência em j do parâmetro b_{maxj} é dada pelo denominador da expressão (3.25), em vista do que é possível definir uma frequência ω dada por

$$\ln \omega = \sum_j f_j \ln \omega_j, \quad (3.30)$$

ou seja, ω é uma frequência média dos modos de oscilação do átomo, aplicável a cálculos de perda de energia.

A expressão (3.29) é basicamente a *fórmula de Bethe* para a taxa de perda de energia em um material [14]. O trabalho original de Bethe desenvolve um tratamento quântico detalhado da interação do projétil com os elétrons do material.

¹⁰A taxa de perda de energia atinge um máximo para energias da partícula incidente da ordem de 1 MeV/u.m.a. [36], abaixo da qual ela diminui (elétrons com parâmetros de impacto progressivamente menores passam a reagir adiabaticamente sem absorver energia—diminuição dos parâmetros b_{maxj} —e a incerteza quântica da posição aumenta—aumento de b_q).

3.6 Materiais compostos

Materiais compostos são tratados, com respeito à participação de seus elementos na taxa de perda de energia, como misturas. Tal hipótese não leva em conta o efeito que as ligações moleculares têm sobre as frequências ω_j dos modos de oscilação e sobre as intensidades de oscilador. Contudo, as energias das ligações moleculares são menores que as energias de ionização atômicas (às quais as frequências ω_j são estreitamente relacionadas; vide expressão (A.2)) e a alteração é pequena. Conforme Barkas e Berger, o desvio cometido é de algumas unidades por cento [8, página 105].

Por essa aproximação, a taxa de perda de energia de um composto é dada pela soma das taxas de perda de energia devidas aos diferentes elementos que o compõem (conhecida como *regra de Bragg*):

$$\begin{aligned} \frac{de}{dx} &= \sum_i \frac{de_i}{dx} \\ &= \sum_i 2\pi N_i Z_i \sum_j \int_0^{b_{max j}} \Delta e(b) f_{ji} b db \\ &= 2\pi N \sum_i \frac{\mu_i Z_i}{\sum_k \mu_k} \sum_j \int_0^{b_{max j}} \Delta e(b) f_{ji} b db \quad , \end{aligned}$$

onde μ_i é o número de fórmula do elemento identificado com o índice i , e Z_i é seu número atômico; a somatória $\sum_k \mu_k$ inclui todos os elementos da molécula¹¹. Ainda, é possível escrever:

$$\frac{de}{dx} = 2\pi N Z_{\text{médio}} \sum_i a_i \sum_j \int_0^{b_{max j}} \Delta e(b) f_{ji} b db \quad , \quad (3.31)$$

onde os coeficientes

$$a_i = \frac{\mu_i Z_i}{\sum_k \mu_k Z_k} \quad (3.32)$$

são as frações da população de elétrons pertencentes a cada elemento. A expressão (3.31) é análoga à expressão (3.27) da seção anterior.

3.7 O efeito de polarização

O campo elétrico da partícula que atravessa um meio é diminuído pela polarização dielétrica desse meio. A diminuição da taxa de perda de energia devida à polarização se torna importante no caso de velocidades relativísticas da partícula incidente, porque nessa condição os parâmetros $b_{max j}$ são grandes (o que é consequência da contração de Lorentz), e o campo transfere energia a distâncias maiores do que no caso de velocidades não relativísticas. O efeito foi inicialmente estudado por

¹¹ A quantidade $\frac{\sum_k \mu_k Z_k}{\sum_k \mu_k}$ seria um número atômico médio ($Z_{\text{médio}}$) do composto.

Fermi [34] que o calculou diretamente a partir da susceptibilidade elétrica do meio, e posteriormente por Sternheimer [99,100,101], que o deduziu levando em conta potenciais de ionização e intensidades de oscilador existentes em diferentes materiais, com comparação a observações experimentais. A diferença entre os valores calculados sem levar em conta a polarização e os valores que a incluem, tradicionalmente escrita como [99]

$$2\pi N Z \frac{z^2 q_v^4}{m\beta_{v,M}^2 c^2} \delta \quad , \quad (3.33)$$

foi resumida pelas seguintes expressões analíticas [99,101]:

$$\begin{aligned} \delta(x) &= 0 && \text{para } x < x_0 \\ \delta(x) &= 4.606x - C + a(x_1 - x)^m && \text{para } x_0 < x < x_1 \\ \delta(x) &= 4.606x - C && \text{para } x > x_1 \quad , \end{aligned}$$

onde $x = \log_{10}(\beta\gamma)$ e os parâmetros C , a , m , x_0 e x_1 têm, para vários compostos orgânicos, os valores constantes da Tabela 3.1¹². Subtrai-se, pois, a expressão (3.33)

material	C	a	m	x_0	x_1
Antraceno	3.11	.420	2.86	.11	2
Estilbeno	3.12	.423	2.86	.12	2
Poliestireno	3.15	.429	2.85	.13	2
Polietileno	2.94	.393	2.86	.12	2
Lucite	3.21	.456	2.78	.14	2
Tolueno	3.30	.454	2.83	.17	2
Xileno	3.27	.444	2.84	.16	2

Tabela 3.1: Parâmetros da expressão analítica do efeito de polarização para alguns compostos orgânicos.

da expressão (3.28), ou (3.29), a fim de levar em conta o efeito de polarização no cálculo da taxa de perda de energia. Tem-se, pois:

$$\frac{de}{dx} = 4\pi N Z \frac{z^2 q_v^4}{m\beta_{v,M}^2 c^2} \left(\sum_j f_j \ln \frac{b_{maxj}}{b_q} - \frac{\delta}{2} \right) \quad . \quad (3.34)$$

¹²Note-se, a partir da tabela, que os vários compostos orgânicos apresentam valores semelhantes para o efeito de polarização. Os materiais orgânicos possuem moléculas constituídas fundamentalmente pelos mesmos elementos hidrogênio, carbono e oxigênio, daí apresentarem eles susceptibilidades elétricas semelhantes, bem como o efeito de polarização.

Capítulo 4

Densidade do depósito de energia—formulação

Os raios delta, ao serem produzidos, recebem energia do íon incidente e a transportam na forma de energia cinética. Calcularemos, neste capítulo, a *densidade do depósito secundário de energia*, ou seja, a quantidade de energia depositada pelos raios delta, por unidade de volume, em função da distância à trajetória da partícula primária.

Suporemos que os elétrons delta se movem em trajetórias retilíneas, porque os ângulos de espalhamento de suas colisões com os elétrons do meio são em geral pequenos (vide expressão (3.14)). Assim, calcularemos as taxas de perda de energia dos elétrons delta por intermédio da expressão (3.34), do mesmo modo que é calculada para projéteis de massas maiores. Ademais, admitir-se-á que as trajetórias dos elétrons são perpendiculares à trajetória da partícula incidente. Tal aproximação não é adequada para parâmetros de impacto pequenos, notadamente em colisões relativísticas; contudo, o número de tais elétrons é pequeno (vide a explicação que se segue às expressões (3.13) e (3.14))¹.

Parte da energia perdida pelos elétrons delta não permanece, por sua vez, no local em que foi transferida ao meio, mas é transportada a outros locais, por elétrons de ordem superior. Contudo, como os elétrons-alvo recuam perpendicularmente à trajetória do projétil (que no caso é um elétron delta), eles são lançados para o interior de uma região plana perpendicular à trajetória do raio delta (e paralela à trajetória da partícula primária). Tais elétrons de ordem superior possuem alcance limitado, em vista do que suporemos também, como uma aproximação, que a energia perdida pelos raios delta numa determinada distância do centro do traço permanece naquela mesma distância do centro (ao contrário do que ocorre com a energia perdida pela partícula primária). Um cálculo mais completo levaria em conta a distribuição, ou o espalhamento, da energia que é realizada pelos elétrons de ordem superior.

¹A aproximação deve, a rigor, ser verificada posteriormente. A citação [88] contém uma formulação do cálculo da densidade do depósito de energia que inclui os ângulos de recuo dos elétrons delta.

4.1 Expressão geral

Consideremos um elemento de volume cilíndrico de raio b' e espessura db' , que envolve a trajetória da partícula primária (vide Figura 4.1). Consideremos também,

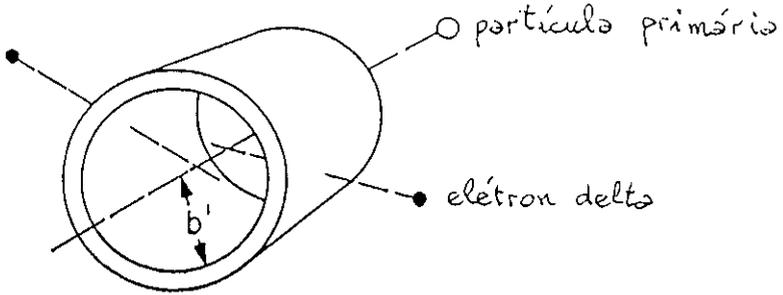


Figura 4.1: O elemento de volume cilíndrico considerado, com raio b' .

entre todos os elétrons secundários que atravessam esse cilindro, apenas aqueles lançados a partir de parâmetros de impacto compreendidos no intervalo entre b e $b + db$. Essa amostra inclui elétrons originários de diferentes camadas eletrônicas atômicas e moleculares; aqueles mais ligados à cadeia molecular passarão pela posição b' com menores velocidades que outros originalmente menos ligados (ou poderão mesmo, eventualmente, não atingir a posição b').

O número de um determinado modo de oscilação j , pertencente ao átomo de um elemento identificado pelo índice i , é

$$\frac{d^2 n_{ji}}{dx} = \nu_{ji} 2\pi b db \quad ,$$

onde ν_{ji} é a densidade daquele tipo de elétron (ji) no material. A energia depositada em uma região cilíndrica de raio b' e espessura db' , por unidade de comprimento x , devida a esses elétrons é

$$\frac{d^2 n_{ji}}{dx} \frac{de}{db'}(b, b', j, i) db' \quad ,$$

donde a densidade da energia depositada por eles nessa região é:

$$\frac{\frac{d^2 n_{ji}}{dx} \frac{de}{db'}(b, b', j, i)}{2\pi b'} \quad (4.1)$$

ou

$$\nu_{ji} \frac{b}{b'} \frac{de}{db'}(b, b', j, i) db \quad .$$

A densidade ν_{ji} é dada por

$$\nu_{ji} = N \frac{\mu_i}{\sum_k \mu_k} f_{ji} \quad ,$$

onde μ_i é o número de fórmula do elemento de índice i ao qual pertence o elétron (de tipo j) considerado, f_{ji} é a intensidade de oscilador desse elétron, N (conforme já definido) é o número de átomos por unidade de volume. A contribuição dos diferentes tipos ji de elétrons, lançados a partir de parâmetros de impacto entre b e $b + db$ à densidade do depósito na posição b' é a soma

$$\frac{N}{\sum_k \mu_k} \frac{1}{b'} \sum_i \mu_i \sum_j f_{ji} \frac{de}{db'}(b, b', j, i) b db \quad (4.2)$$

e a densidade total é a integral

$$\xi(b') = \frac{N}{\sum_k \mu_k} \frac{1}{b'} \int_0^\infty \sum_i \mu_i \sum_j f_{ji} \frac{de}{db'}(b, b', j, i) b db \quad . \quad (4.3)$$

(Lembre-mos que, devido ao caráter atrativo da colisão, os raios delta produzidos com parâmetro de impacto b (em módulo) maiores ou iguais a b' também contribuem para o depósito de energia no ponto b' .)

4.2 Perda de energia dos elétrons secundários

A expressão (3.34) deve ser escrita para os elétrons secundários em função das variáveis b , b' , j e i para ser então integrada numericamente conforme a expressão (4.3). Os parâmetros b , j e i determinam a energia cinética inicial do raio delta; $b' = X - b$, onde a variável X é a distância percorrida pelo raio delta desde sua origem (vide Figura 4.2). A energia cinética inicial do elétron $e_{el}(0)$ é obtida com o intermédio da expressão (3.17). A expressão (3.34), em conexão com a relação entre velocidade e energia,

$$\beta = \frac{\sqrt{(.51\text{MeV} + e_{el})^2 - (.51\text{MeV})^2}}{.51\text{MeV} + e_{el}} \quad ,$$

fornece a taxa de perda de energia do elétron em sua posição inicial — $\frac{de_{el}}{dX}(b, X=0, j, i)$. Em seguida, a expressão

$$e_{el}(X) = e_{el}(X=0) - \int_0^X \frac{de_{el}}{db'}(b, X, j, i) dX \quad (4.4)$$

fornece iterativamente seu próprio integrando $\frac{de_{el}}{db'}(b, X, j, i)$, ou seja, a taxa de perda de energia do elétron para qualquer valor de b' . Este é o fator necessário para o integrando da expressão (4.3), com o que a densidade total de energia depositada é então calculada.

Gráficos da densidade total do depósito de energia (em função do parâmetro b') serão obtidos na Seção 7.2.

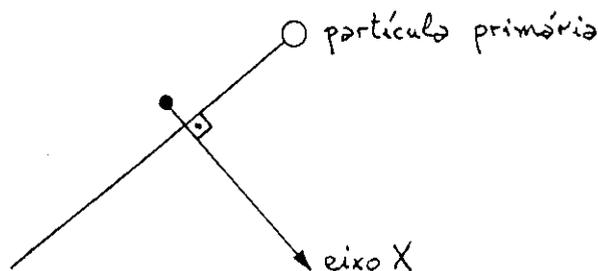


Figura 4.2: Considera-se que a trajetória de cada elétron delta é retilínea, conforme foi discutido no início do capítulo, e que os elétrons delta são lançados em direções perpendiculares à trajetória da partícula primária. O eixo X é definido como tendo a direção dessa trajetória e origem na posição inicial do elétron.

4.3 O parâmetro de impacto limiar para a perda de energia restrita (I)²

Conforme foi explicado na Seção 2.3, consideraremos como responsáveis pela formação do traço apenas aqueles elétrons delta que, ao atingir a periferia do traço, contribuem significativamente para o depósito de energia nessa região.

De especial interesse é a função

$$\xi(b, b') = \frac{N}{\sum_k \mu_k} \frac{1}{b'} \int_0^b \sum_i \mu_i \sum_j f_{ji} \frac{de}{db'}(b, b', j, i) b' db \quad (4.5)$$

(é a expressão (4.3) com o limite superior da integral igual a b), que é a densidade do depósito de energia na posição b' , devida apenas aos elétrons delta lançados com parâmetro de impacto menor ou igual a b . O seu integrando,

$$\frac{\partial \xi}{\partial b} \Big|_{b'}(b, b') = \frac{N}{\sum_k \mu_k} \frac{b}{b'} \sum_i \mu_i \sum_j f_{ji} \frac{de}{db'}(b, b', j, i) \quad , \quad (4.6)$$

fornece a contribuição relativa dos elétrons com parâmetro b à densidade em b' , e o parâmetro de impacto limiar a ser utilizado no cálculo da taxa de perda da energia restrita à produção de elétrons formadores do traço (que será doravante denotado por $b_{e,r}$) é aquele abaixo do qual a contribuição relativa ao depósito de energia na periferia do traço é desprezível.

Valores para o raio da região quimicamente ativa em traços produzidos em polímeros por diferentes partículas serão considerados no Capítulo 6, as contribuições relativas dos elétrons emitidos com diferentes parâmetros serão calculadas na Seção 7.4 e a escolha do parâmetro limiar $b_{e,r}$ será feita na Seção 7.5.

²A Seção 7.5 virá a ter o mesmo título.

A taxa de perda de energia *restrita* responsável pela formação do traço é dada pela expressão (3.34) com a substituição de b_q por $b_{e.r.}$ ³:

$$\frac{de_r}{dx} = 4\pi N Z \frac{z^2 q_i^4}{m\beta_{GM}^2 c^2} \left(\sum_j f_j \ln \frac{b_{max j}}{b_{e.r.}} - \frac{\delta}{2} \right) \quad (4.7)$$

³Mantém-se aqui, em primeira aproximação, a mesma parcela $2\pi N Z \frac{z^2 q_i^4}{m\beta_{GM}^2 c^2} \delta$ da expressão (3.34) para a perda da energia total. No entanto, a rigor, tal parcela deve mudar quando se considera a taxa de perda de uma energia restrita. Considerou-se que o estudo dessa alteração fugiria ao escopo do presente trabalho.

Capítulo 5

Potenciais de transição nos materiais de interesse

As frequências próprias ω_j associadas às transições possíveis dos elétrons do material são as diferenças de potencial entre os estados final e inicial das transições, divididas por $\hbar = 1.05 \cdot 10^{-34}$ J.s (expressão (A.2)). Os potenciais atômicos tornam-se importantes para parâmetros de impacto grandes, da ordem dos parâmetros máximos $b_{maxj} = \gamma\beta c/\omega_j$ (expressão (3.25)). Nessas situações as transferências de energia são da ordem dos próprios potenciais atômicos, ocorrendo *ionizações* e também *transições a estados ligados*, ou seja, excitações de átomos e moléculas do material.

A maior parte da energia retirada da partícula incidente é absorvida por ionizações de átomos do meio, ou seja, por transições a estados finais não ligados, com conseqüente produção de raios delta. Um oscilador de baixa frequência funciona, com respeito à transferência de energia de um impulso brusco, semelhantemente a uma partícula livre. Assim, muito embora para um estado final não ligado, cujas energias possíveis são positivas, sejam nulos os componentes quânticos de estados de energia zero, e muito embora um impulso forte e brusco não possa ser tratado por teoria de perturbação, os osciladores de frequências $\omega_j = I_j/\hbar$ —onde I_j são as energias de ionização para um estado final de energia nula—*são suficientes* para descrever a absorção de energia, não só, juntamente com as excitações, nos casos de parâmetro de impacto grande, como também nos casos de parâmetro moderadamente pequeno (que não seja contudo tão pequeno como da ordem de b_{lim} ou b_q , quando a aproximação do elétron livre se torna necessária). No cálculo da taxa de perda de energia inclui-se, pois, *apenas as transições a estados finais de energia nula*, porque os osciladores associados a essas transições *já incluem* as transições a estados finais de ionização, com energias positivas. Ademais, as transições a estados finais de energia nula levam em conta todos os estados finais de ionização. Restam as excitações, com absorções de energia menores que a energia de ionização. Tais excitações, que acontecem nas regiões mais periféricas do traço, ficam a ser consideradas como um aperfeiçoamento do cálculo¹.

¹ As transições a estados ligados podem eventualmente ter uma contribuição significativa à taxa

5.1 Potenciais de ionização

Em princípio as várias camadas dos átomos que constituem o material freador contribuem para a perda de energia, cada elétron com sua intensidade de oscilador². Pode-se definir uma *energia de ionização atômica média* I a qual, em analogia com a expressão (3.30), é dada por:

$$\ln I = \sum_j f_j \ln I_j \quad , \quad (5.1)$$

onde a somatória inclui todos os elétrons do átomo (o caso poliatômico será considerado em seguida, ao final desta seção).

As intensidades de oscilador (expressões (A.5), página 103) são contudo, e notadamente para as camadas mais internas, de difícil cálculo e, mesmo que calculadas a partir de princípios, os valores obtidos haveriam de ter precisão insuficiente, por não se poder levar em conta os vários fatores que interferem em cada transição. Os próprios potenciais de ionização das camadas mais internas são, como é sabido da Física Atômica, de avaliação difícil, pois as transições acontecem na presença de um potencial atômico alterado pelos elétrons mais externos. O efeito de blindagem é notável e diminui a contribuição das camadas mais internas à absorção de energia (ao exercerem a blindagem, os elétrons mais externos reagem ao campo externo e diminuem a perturbação a ser percebida pelos elétrons mais internos, num efeito equivalente ao da polarização). Em vista de tais dificuldades, os valores das ionizações atômicas médias têm sido determinados a partir das próprias taxas de perda de energia e dos alcances [8, página 104].

Os elétrons mais internos, em face de suas maiores energias de ionização, são os primeiros a reagir adiabaticamente ao campo externo (vide Seção 3.4), o que reduz sua participação na absorção de energia à medida que a velocidade do projétil diminui. Para dar conta desse efeito uma parcela de correção, denominada *tight-binding correction* ou *inner shell correction* [32, página 15] é subtraída da taxa de perda de energia (expressão (3.29)). Tal parcela é inversamente proporcional ao número atômico do átomo-alvo, o que denota uma blindagem tanto maior quanto maior for o número de camadas eletrônicas. Ademais, por ser uma correção em baixas velocidades, ela deveria em princípio tornar-se nula em velocidades relativísticas; no entanto Fano [32] aponta que tal não ocorre e sugere um 'ajuste' aos valores dos

de perda de energia da partícula, pois embora cada excitação individual absorva em geral pouca energia, é grande o número de átomos e ligações moleculares envolvidos no processo, em face de serem grandes os valores dos parâmetros de impacto relativos a tais transições.

Cabe aqui lembrar que, embora quanticamente não seja possível transferir a um modo de oscilação uma energia menor do que sua energia de excitação, existe essa possibilidade em um sentido estatístico para um grande número de elétrons [59, página 428]. Quando é pequeno o estímulo externo ao sistema, muitas transições não são efetuadas; contudo algumas acontecem conforme uma possibilidade quântica, de modo que em média é transferida por átomo uma energia menor do que sua energia de excitação.

²Os vários estados finais possíveis de energia nula são tratados conjuntamente, bem como os vários estados iniciais degenerados, de modo que resulta uma intensidade de oscilador para cada elétron com energia definida.

potenciais de ionização atômicos (que passam a ser denotados por I_{adj}) de modo a que a parcela *shell correction* tenda a zero em altas velocidades. Não incluiremos em nossos cálculos a referida parcela, por nos interessarmos por velocidades do projétil comparáveis à da luz ou francamente relativísticas; limitar-nos-emos a utilizar os valores ajustados dos potenciais de ionização, conforme prescreveu Fano.

Barkas e Berger [8] apresentam valores de potenciais médios ajustados de ionização para os vários elementos (I_{adj}), aplicáveis a cálculos de perda de energia, resumidos analiticamente pelas expressões:

$$\begin{cases} I_{adj} = (12Z + 7) \text{ eV} & \text{para } I_{adj} < 163 \text{ eV ou } Z < 13, \\ I_{adj} = (9.76Z + 58.8/Z^{0.19}) \text{ eV} & \text{para } I_{adj} > 163 \text{ eV ou } Z > 13. \end{cases} \quad (5.2)$$

Benton e Henke [12], por sua vez, sugerem ainda que, para os íons constantes da Tabela 5.1, os valores de I_{adj} ali apresentados são mais corretos e sejam utilizados no lugar dos fornecidos pelas expressões (5.2).

Tabela 5.1: Valores de I_{adj} que diferem dos computados pelas expressões (5.2) (a partir de [12]).

Íon	Z	I_{adj} (eV)
H	1	16.5*
He	2	42
Li	3	38
Be	4	60
N	7	85
O	8	96*
Ne	10	131
Mg	12	156

* Em compostos.

Materiais compostos são tratados como misturas, conforme foi explicado na Seção 3.6, com a limitação lá apontada³. Supõe-se, como o fazem Barkas e Berger [8] ou Benton e Henke [12], em analogia às expressões (3.30) e (5.1), que uma mistura de elementos com energias de ionização médias I_{adj1} , I_{adj2} , ... tem uma energia de ionização efetiva dada por

$$\ln I_{adj} = \sum_i a_i \ln I_{adj_i}, \quad (5.3)$$

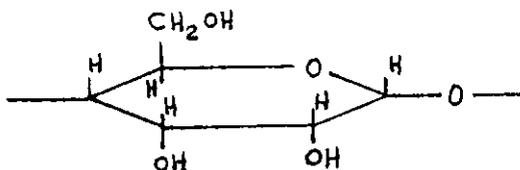
com os coeficientes a_i definidos pela expressão (3.32).

³O hidrogênio, por exemplo, apresenta $I_{adj} = 16.5$ eV a ser utilizado para o cálculo em compostos; o potencial de ionização de seu elétron é, contudo, 13.6 eV, como é sabido da Física Atômica.

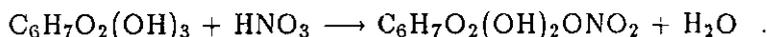
5.2 Materiais estudados

Dois polímeros orgânicos foram tratados no presente trabalho: o nitrato de celulose e o CR39.

• O nitrato de celulose é um éster inorgânico da celulose, produzido comercialmente. A celulose é um álcool trihídrico de fórmula empírica $(C_6H_7O_2(OH)_3)_n$, composto de uma cadeia de unidades de anidroglicose [70]. A fórmula estrutural admitida para cada unidade é



e o tratamento com ácido nítrico permite a substituição de um ou mais radicais OH^- por radicais NO_3^- , com produção de água (esterificação):



O grau de substituição (DS) dos radicais hidroxila é variável de 1 a 3 por unidade de anidroglicose (os materiais com $DS > 2.5$ são utilizados no fabrico de explosivos e propelentes). Os plásticos produzidos a partir do nitrato de celulose, por tratamento com cânfora, constituem os celulóides. O grau de substituição tem influência no limiar de registro de partículas nucleares, ao que seria atribuída a menor sensibilidade do nitrato de celulose *Nixon-Baldwin* com relação ao *Daicell*, que possui $DS=2$ [31] e fórmula molecular $(C_6H_7O_2OH(ONO_2)_2)_n$. Nos cálculos que seguem, dirigidos à análise de eventos relatados em nitrato de celulose *Nixon-Baldwin* [83] supôs-se um grau de substituição igual a 1, o qual, na ausência de uma informação direta, pode dar conta da menor sensibilidade deste detector.

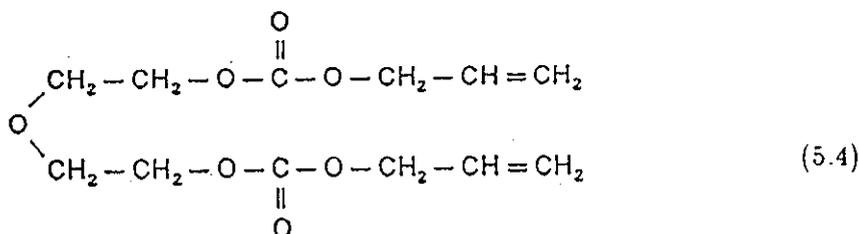
Com tais dados a massa molecular do monômero do nitrato de celulose é 207.10, o número de elétrons é 108 e, conforme as expressões (5.2) e (5.3) e a Tabela 5.1,

$$\begin{aligned} \ln I_{adj} &= \frac{36}{108} \ln 79 + \frac{9}{108} \ln 16.5 + \frac{36}{108} \ln 96 + \frac{7}{108} \ln 85 \\ I_{adj} &= 77.07 \quad (\text{nitrato de celulose}). \end{aligned}$$

Os dados de calibração referentes ao nitrato de celulose, a serem generalizados para números atômicos quaisquer, foram reproduzidos da citação [83] (vide Seção 8.1).

• O CR39 é marca da *Pittsburg Plate Glass Industries, Inc.-PPG* para o di-etileno glicol bis(alil carbonato). O mesmo produto é fornecido pela *Akzo Chemicals, Inc.* sob o nome comercial de *Nouryset 200*. É um monômero dialílico— $O(CH_2CH_2OCOOCH_2CH=CH_2)_2$ (contém o grupo alílico $CH_2=CHCH_2-$), trata-se de um líquido incolor com ponto de fusão variando entre $-4^\circ C$ e $0^\circ C$, ponto de

ebulição 160°C, índice de refração 1.45 e densidade 1.143 g/cm³ a 20°C [71]. Sua fórmula estrutural é



com massa molecular 274.14, número de elétrons 146 e fórmula molecular C₁₂H₁₈O₇. Para o material tem-se (expressões (5.2) e (5.3) e Tabela 5.1):

$$\begin{aligned}
 \ln I_{adj} &= \frac{72}{146} \ln 79 + \frac{16}{146} \ln 16.5 + \frac{56}{146} \ln 96 & (5.5) \\
 I_{adj} &= 70.18 & (\text{CR39}).
 \end{aligned}$$

O CR39 foi o material detector utilizado pelo Departamento de Raios Cósmicos e Cronologia-UNICAMP para o registro de núcleos da radiação primária em 1986 (vide Capítulo 9). Trata-se de material regularmente utilizado pela indústria. O autor recebeu a colaboração do Óptico Darci Jacob Silva, da *Multivis Indústria Óptica Ltda.*, avenida Anton von Zuben, nº 3193, Campinas, que polimerizou placas de CR39 em diferentes condições (vide Apêndice E).

Devido a sua alta sensibilidade à detecção de traços de partículas nucleares, o CR39 tem sido amplamente utilizado nesta finalidade desde 1978 a partir de um trabalho devido a Cartwright, Shirk e Price [23]. Aspectos teóricos relativos à sensibilidade e polimerização desse material estão também sendo apresentados no Apêndice E. Amostras de CR39, de procedência japonesa ou polimerizados na *Multivis Indústria Óptica*, foram expostas no acelerador *Pelletron* da Universidade de São Paulo a feixes de oxigênio com alguns valores de energia, com vistas à calibração dos detectores utilizados em 1986; vide Seção 8.1.

Capítulo 6

Raios admitidos de traços

As medidas de diâmetros da região de desorganização molecular criada pelo íon que atravessa o material é feita por intermédio de técnicas especiais, que passaremos a tratar no presente capítulo. Os trabalhos que consideram especificamente a questão dos diâmetros de traços são pouco numerosos, dada a dificuldade do assunto, muito embora já no trabalho pioneiro de Silk e Barnes [93] tenha sido obtida, por intermédio de uma técnica de microscopia eletrônica de transmissão, um diâmetro compreendido no intervalo 60 Å—150 Å para os traços de fragmentos de fissão de ^{235}U em mica.

O estabelecimento de um valor para o diâmetro de um traço está diretamente relacionado com a caracterização da região afetada, ou seja, a interpretação que se adota para a estrutura do traço, em conexão com uma hipótese a respeito de qual região de desorganização molecular é mais adequada para ser considerada como limite da região de corrosão química preferencial. O nosso interesse se restringe aos detectores poliméricos orgânicos, para os quais, seguindo a proposta apresentada por Guillot e Rondelez [47], o traço latente seria constituído de três regiões (vide Figura 6.1):

1º) um núcleo central, doravante denominado *região I*, onde a estrutura polimérica é completamente destruída, com raio da ordem de algumas dezenas de angstroms e altíssima velocidade de corrosão, evidenciada pelo curto tempo de formação de poros em membranas de material submetidas a gradiente eletrostático; DeSorbo [27], por exemplo, do mesmo modo que Guillot e Rondelez [47], citam a observação experimental de um núcleo central de traço, com raio de 50 Å para traços em policarbonato, onde a velocidade de corrosão assume valores desde 400 até 10^5 vezes a velocidade de corrosão do material íntegro,

2º) uma região anelar cilíndrica que envolve o núcleo, a qual será denominada *região II*, onde existe um aumento da reatividade química relativamente ao material bruto, com raio da ordem de centenas de angstroms, e

3º) um halo periférico, com raio da ordem de milhares de angstroms,

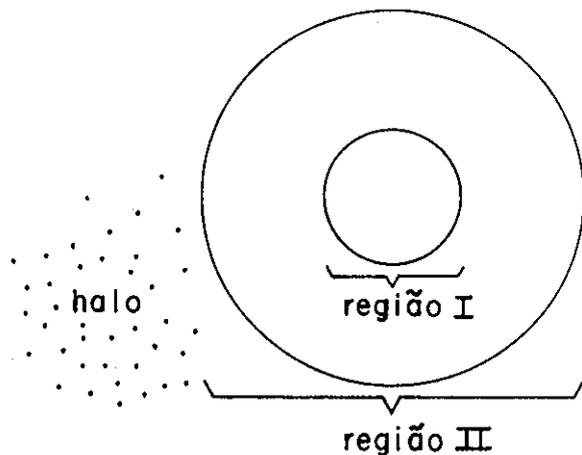


Figura 6.1: Regiões de desestruturação molecular que compõem um traço em polímero, conforme proposta de Guillot e Rondelez [47]. Vide também a Figura 2.1.

que é uma região de pequena desorganização molecular e velocidade de corrosão química praticamente igual ao do material bruto¹.

Os valores de raio de cada região dependem do material detector e do íon primário causador do traço. Vejamos alguns resultados experimentais para tais valores.

6.1 Dados disponíveis sobre diâmetros de traços

Um conjunto significativo de trabalhos que consideram diâmetros de traços em materiais orgânicos é contituído pelas citações [27,63,91,47,104,6,54]. O processo eletroquímico de corrosão constitui uma técnica fundamental para a obtenção de diâmetros, na qual é feita a medida da condutividade elétrica através de poros recém-formados em filmes finos de material sensível. A técnica foi introduzida por Bean [10], em micas, e em policarbonatos por DeSorbo em um trabalho desenvolvido em 1968 [27].

• DeSorbo expôs filmes de policarbonato *Makrofol* de espessura $10\ \mu\text{m}$ à radioatividade do ^{252}Cf em incidência normal à superfície [27]. O ^{252}Cf decai segundo um canal de produção de partículas alfa de 6.1 MeV, com probabilidade de 97 %, e segundo um canal de fissão espontânea com probabilidade de 3 % [66], os quais devem ser constituídos de íons com números atômicos da região central da tabela periódica

¹ As regiões I e II correspondem respectivamente às segunda e terceira regiões de desestruturação polimérica mencionadas na Seção 2.1 (à página 13). Ilić [56], por sua vez, sugere uma estrutura com apenas duas regiões, incorporando o núcleo do traço à região cilíndrica apresentada na proposta de Guillot e Rondelez.

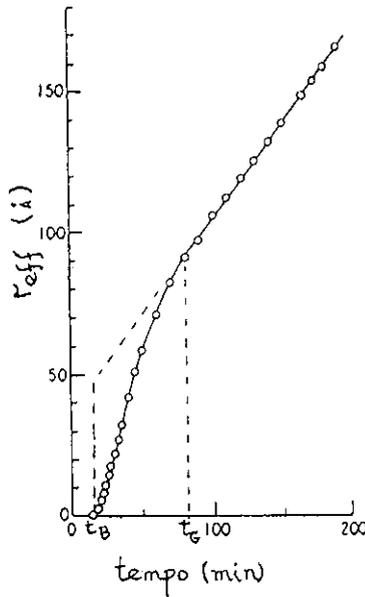


Figura 6.2: Gráfico do raio de poros obtidos por irradiação de ^{252}Cf em policarbonato, calculado a partir da condutância medida, em função do tempo (a partir de DeSorbo [27]).

e possuem energias entre 0.6 MeV e 1 MeV [47]. Os traços no policarbonato são produzidos pelas partículas alfa. DeSorbo coloca em evidência o favorecimento que a exposição à radiação UV na presença de oxigênio tem com respeito à reatividade química, aumentando grandemente a velocidade de corrosão ao longo do traço. Por outro lado, o trabalho é rico em informações sobre diâmetros. A obtenção de valores de raios da região quimicamente ativa—raio efetivo r_{eff} —é feita por intermédio da medida da condutância elétrica através de uma membrana, em uma célula eletroquímica constituída de duas câmaras (separadas pela própria membrana). O raio efetivo do poro é calculado a partir da relação

$$r_{eff} = \sqrt{\frac{l}{\pi N A \sigma_{sol.} (R - R_0)}}$$

onde l é a espessura da membrana de polímero, N é o número de traços por unidade de área, A é a área irradiada da membrana, $\sigma_{sol.}$ é a condutividade elétrica da solução eletroquímica e R e R_0 são as resistências entre os dois eletrodos com e sem a membrana, respectivamente.

Na Figura 6.2 temos o gráfico do desenvolvimento do raio assim calculado a partir da condutância, em uma das amostras estudadas. O número total de poros é obtido após o tratamento eletroquímico (e deve estar em coincidência com o previsto a partir da dose de irradiação a que o material foi exposto). Não há medida do número de poros concomitante à experiência. Em vista disso, o crescimento progressivo que existe entre o instante t_B , quando ocorre a abertura do primeiro poro, e o instante

t_G , quando todos os poros se encontram abertos, é artificial e é devido ao uso do valor de N constante igual ao seu valor máximo também no intervalo $t_B < t < t_G$ quando os poros abertos constituem ainda uma fração do total. Desse modo, o raio da região de alta reatividade química é obtido a partir do valor dado pelo prolongamento da reta de crescimento constante do raio (com velocidade de corrosão do material v_B) no instante t_B , sendo que o processo eletroquímico com produção de poros fornece desse modo raios para o núcleo do traço (região I; vide Figura 6.2)². O valor obtido é 50 Å.

- Schnoor, Schütt, Beaujean e Enge [91] retomam o trabalho de DeSorbo, estudando a dependência temporal da condutância elétrica em poros isolados. Atribuem um valor de raio entre 50 Å e 75 Å para a região de maior reatividade química dos traços de ^{252}Cf em policarbonato, confirmando portanto o resultado previamente obtido.

- Guillot e Rondelez [47] trabalham novamente com membranas de policarbonato, mediante irradiação com íons Kr^{25+} de energia 6 MeV/u.m.a. e submetidas ao processo eletroquímico em células de câmaras duplas. Um gráfico típico de evolução do raio do traço por eles obtido encontra-se na Figura 6.3. A interpretação para os resultados experimentais apresentados por Guillot e Rondelez é a de que a parte 1 indicada no gráfico é aquela em que há ainda aparecimento de novos poros, a parte 2 corresponde à de velocidade de corrosão aumentada em uma região de desestruturação molecular (região II do traço) e a parte 3 corresponde à região com velocidade de corrosão normal do material. A reta tangente à curva na parte 2 do gráfico deve ser prolongada até próximo ao eixo vertical e indica, para o instante em que se inicia a abertura dos poros, um raio de aproximadamente 50 Å para a região I, enquanto que a alteração da inclinação entre as partes 2 e 3 indica um raio de 500 Å para a região II do traço³.

Tanto Guillot e Rondelez como DeSorbo citam um crescimento uniforme dos poros, sem a formação de cones junto à superfície da membrana. Isso indica uma perfeita difusão do reagente e dos produtos ao longo do traço, o que é explicado pela migração altamente facilitada pelo campo eletrostático. Por outro lado, na corrosão normal de traços longos e não submetidos a diferença de potencial, o processo de difusão do reagente e dos produtos desempenha um papel fundamental; então a velocidade de corrosão ao longo do traço será muito menor do que a velocidade de corrosão local no núcleo do traço (embora seja maior que a velocidade de corrosão do material íntegro).

- Teyssier, Decossas e Vareille [104] apresentam um trabalho específico a respeito

²Uma técnica original de análise de poros em membranas foi desenvolvida por Komaki [63], que pesquisou o crescimento de poros em fluoropolivinilideno a partir da exposição a fragmentos de fissão do urânio, utilizando a medida do fluxo de um gás através da membrana. Esse método, contudo, forneceu resultados confiáveis somente para maiores valores do raio, em estágios mais avançados da formação do poro.

³O menor tempo de formação de poros obtido por Guillot e Rondelez com relação aos experimentos de DeSorbo pode ser atribuído à maior temperatura do ataque.

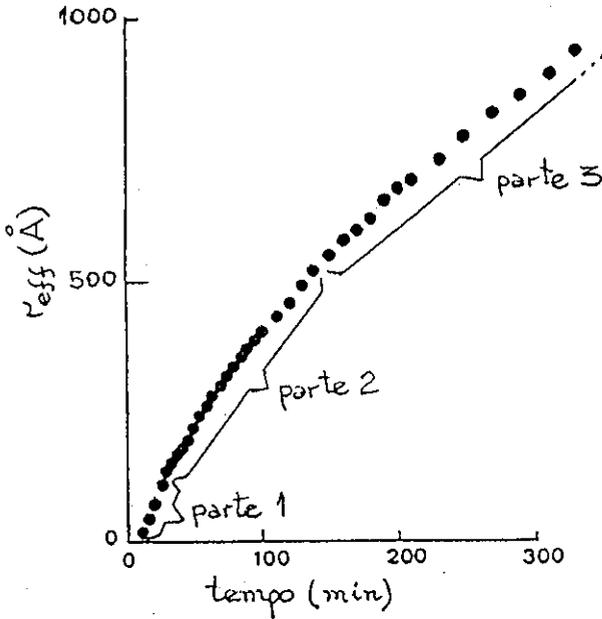


Figura 6.3: Gráfico da evolução do raio do traço em polycarbonato, obtido por Guillot e Rondelez [47]. No período indicado como *parte 1* acontece a formação de novos poros; na *parte 2* o desenvolvimento dos poros apresenta uma velocidade de corrosão aumentada, e na *parte 3* o aumento do diâmetro dos poros se dá com uma velocidade de corrosão praticamente igual à do material bruto.

de dimensões de traços em polímeros orgânicos, com irradiação de íons criptônio de energia 1 MeV/u.m.a. sobre triacetato de celulose, no qual utilizam uma técnica de *espectroscopia de análises de radicais*. Uma substância com espectro característico reage quimicamente com radicais livres ao longo do traço, fixando-se nesses locais. A análise espectroscópica, em conexão com um modelo para a estrutura do traço latente permitiu a obtenção de valores para o raio. Do mesmo modo que Guillot e Rondelez, os autores identificaram três regiões de desorganização polimérica, e sugeriram raios para as regiões I e II com valores de 30 Å e 175 Å, respectivamente.

- Apel e Pretzsch [6], utilizando íons xenônio com energias próximas a 1 MeV/u.m.a., obtiveram, em membranas de polietileno-éter-ftalato, um valor de raio de 15 Å para a região I (núcleo do traço) e indicam um raio superior a 60 Å para a região II. Por se tratar de íons de maior número atômico (xenônio, com relação ao criptônio) mas com a mesma energia por núcleon utilizada por Teyssier, Decossas e Vareille, seria de se esperar, se se desconsidera aqui a dificuldade de comparação em face da diferença dos materiais, valores maiores para os raios.

- Por sua vez, o relato a partir de Heyna, Enge, Sermund e Beaujean [54] de irradiação de íons ^{238}U a 410 MeV/u.m.a. sobre polímero CR39, utilizando ainda o

processo eletroquímico, atribui um raio de 150 Å à região II.

6.2 A escolha de valores para o raio (I)⁴

Os valores propostos por diferentes autores para o raio de traços latentes têm sido, na maior parte das vezes, obtidos a partir do comportamento geral da velocidade radial de corrosão durante a formação de poros em membranas, a qual apresenta transições suaves de uma região para outra. Sendo assim, torna-se difícil estabelecer um critério preciso. Basearemos pois, a escolha de um valor típico e característico para o raio de um traço, a ser utilizado nos cálculos que descrevem a formação desse traço, em três exigências básicas:

- Em primeiro lugar, pretender-se-á que os valores admitidos apresentem aumento da taxa de perda de energia restrita à medida que a velocidade diminui (em vista do maior momento transferido em cada colisão elementar), ou seja, espera-se que um mesmo íon, ao diminuir sua velocidade (na região não relativística), aumente o raio do traço produzido. Os trabalhos de Guillot e Rondelez, por um lado, e de Teyssier, Decossas e Vareille por outro, ambos tendo sido realizados com íons do elemento criptônio, apresentam resultados que, embora não se tratar do mesmo detector, parecem estar em discordância com essa idéia geral, ou seja, os íons com menor carga média (Kr^{25+}) e maior energia utilizados por Guillot e Rondelez são citados como produtores de traços de maior diâmetro (a energia de 1 MeV/u.m.a. utilizada por Teyssier, Decossas e Vareille encontra-se próxima à região de valor máximo da taxa de perda de energia). Neste caso, dada a imprecisão dos valores obtidos para os raios das várias regiões, é mais correto interpretar a discordância dos raios fornecidos por Guillot e Rondelez e por Teyssier, Decossas e Vareille dentro dessa imprecisão, ou às diferentes sensibilidades dos materiais utilizados (ao invés de atribuir a inversão a uma real diminuição da taxa de perda de energia).

Por outro lado, os valores apresentados por Heyna, Enge, Sermund e Beaujean [54] estariam, do ponto de vista da relação com a taxa da perda de energia restrita, em coerência com o valor de 500 Å para o raio da região II atribuído por Guillot e Rondelez aos traços de Kr^{25+} , 6 MeV/u.m.a., em policarbonato. Esses íons de urânio têm maior carga, mas possuem velocidade sensivelmente maior, o que explicaria o menor raio do traço. Ajunte-se ainda o fato de que o valor sugerido se refere ao próprio CR39, material que utilizaremos na presente análise.

- Em segundo lugar, o raio admitido de traço deve ser adequado para permitir a difusão do reagente e dos produtos no ápice do cone, necessária ao avanço da corrosão. A velocidade de corrosão ao longo do traço é determinada não só pela reatividade local, mas também pelo raio necessário para acontecer a difusão do reagente e dos produtos. A impossibilidade de difusão instantânea se constitui num mecanismo que causa uma unificação das várias velocidades de corrosão: a parte central, mais reativa, tem sua velocidade diminuída

⁴A Seção 7.3 virá a ter o mesmo título.

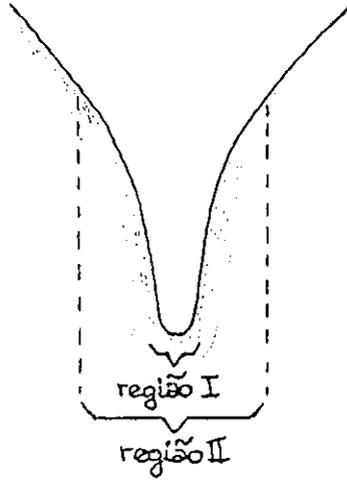


Figura 6.4: Perfil de uma fossa de corrosão junto ao ápice; o valor do ângulo de cone é dependente da distância ao centro do traço (raio).

por ser uma região estreita que dificulta a difusão; por outro lado, a parte mais externa passa a ser corroída conforme a superfície de um cone, o que aumenta a velocidade de corrosão dessa região ao longo da direção da trajetória da partícula primária. Observa-se assim uma única velocidade de corrosão ao longo do traço.

A difusão é deprimida não só pela diminuição do raio do traço latente como também pelo aumento de sua profundidade. Em um processo estacionário de corrosão, no qual todas as partes do traço são corroídas com a mesma velocidade ao longo do traço, tem-se que, no perfil de uma fossa de corrosão (vide Figura 6.4), uma diminuição local do ângulo de cone a medida que se se aproxima do centro do traço, com conseqüente aumento da profundidade do orifício, significa existir ali uma maior reatividade química local (a qual é compensada pela dificuldade de difusão que o formato da fossa oferece). Um raio típico característico do traço é aquele acima do qual não há aumento significativo e localizado do ângulo de cone (até a borda da fossa de corrosão)—no caso o raio da região II; abaixo deste raio a velocidade de corrosão ao longo do traço é freada pela falta de difusão e acima deste raio ela é determinada por $v_B / \sin \theta_{cone}$ (v_B , lembremo-nos, é a velocidade de corrosão do material bruto). Será, pois, considerado basicamente o raio da região cilíndrica II—com alterações de modo a verificar a primeira linha de argumentação apresentada—como um raio característico do traço.

- Em terceiro lugar, as densidades de depósito de energia na periferia dos traços (ou seja, numa distância igual a seu raio) devem ser coerentes com as sensibilidades dos detectores; um detector mais sensível deve apresentar densidade limiar do depósito de energia menor. Com respeito a este terceiro critério, deveremos em primeiro lugar efetuar cálculos de densidade de depósito de energia, o que será feito nas Seções 7.1

e 7.2, do próximo capítulo.

Tomemos assim, como ponto de partida, os valores de 500 \AA para o Kr^{25+} a 6 MeV/u.m.a. em policarbonato [47] e de 150 \AA para o U a 410 MeV/u.m.a. em CR39 [54], conforme sugerido pelo primeiro critério. A estes valores introduziremos as modificações exigidas pelo terceiro critério, o que será feito na Seção 7.3.

Capítulo 7

Densidade do depósito de energia—cálculos

A integração constante da expressão (4.3), tendo como base a hipótese de trajetória retilínea dos elétrons delta, já discutida na Seção 3.2 e início do Capítulo 4, e cujo integrando é a taxa de perda de energia eletrônica—fornecida basicamente pela expressão (3.34) (ou alternativamente a expressão (3.28), subtraída a (3.33)) aplicada aos elétrons delta—é complexa o bastante para justificar um tratamento numérico. A taxa de perda de energia dos elétrons delta deve ser calculada iterativamente por intermédio de um passo reduzido, subtraindo-se a cada ciclo de cálculo a energia cinética do elétron transferida ao meio. Trata-se da aplicação repetida da expressão (4.4), da Seção 4.2, com o uso da expressão (3.34) para a taxa de perda de energia dos elétrons delta. Tal cálculo iterativo se faz necessário, porque a taxa de perda de energia, bem como a própria energia cinética, em um determinado ponto da trajetória, dependem da história anterior de perda de energia por parte da partícula. Desse modo é também calculada a velocidade em cada ponto da trajetória, bem como seu alcance.

Escolheremos dois materiais para efetuar os cálculos: o nitrato de celulose, para o qual dispomos de informações de calibração (citação [83]), e o CR39, que foi o material utilizado no experimento sobre radiação primária em 1986 pelo DRCC (Capítulo 9). Mais adiante constataremos contudo (início da Seção 7.2) que as densidades de depósito de energia são aproximadamente iguais para diferentes materiais orgânicos.

7.1 Densidade como função do parâmetro de impacto

A primeira etapa de cálculo—levada a cabo no computador VAX do Instituto de Física-UNICAMP por intermédio do programa denominado DENSI.FOR apresentado no Apêndice C, à página 107 (em linguagem FORTRAN)—produz as densidades de energia à determinada distância b' do centro do traço devidas apenas aos elétrons originários de elementos cilíndricos de raio b e espessura db , tendo como

eixo a trajetória da partícula primária (trata-se do integrando da expressão (4.3)). Tem-se utilizado unidades do sistema MKS, com as densidades de energia obtidas em joules por metro cúbico; em seguida elas são reescritas com a unidade elétron-volt por angstrom cúbico ($1 \text{ J/m}^3 = 6.242 \cdot 10^{-12} \text{ eV/\AA}^3$), que é mais natural para a análise de fenômenos microscópicos.

O programa DENSI.FOR, após a introdução dos vários parâmetros pertinentes ao problema e a chamada de rotinas gráficas¹, calcula a velocidade (β) da partícula incidente. Inicia-se então um ciclo (ciclo do parâmetro b) de cálculo das densidades de depósito de energia devidas a elementos de volume $2\pi b db dx$ (b é o parâmetro de impacto; dx é um elemento de comprimento na direção da trajetória da partícula primária). As Figuras 7.1 a 7.4 mostram resultados de densidades de energia depositadas a diferentes distâncias do centro do traço por raios delta provenientes de vários elementos de volume cilíndricos de espessura 0.01 \AA , cujos raios—que são os parâmetros de impacto—possuem valores compreendidos entre 0.05 \AA e 0.4 \AA . Tais contribuições foram obtidas desde um parâmetro em que, pela alta velocidade dos elétrons e pelo pequeno elemento de volume associado a esse parâmetro, os elétrons aí produzidos depositam uma densidade de energia na região periférica do traço desprezível com relação à densidade total aí depositada² até um parâmetro que, por ser grande, os elétrons aí produzidos são de baixa energia, com alcances menores que os valores de raio admissíveis para o traço, e não contribuem portanto para o depósito na região periférica. As Figuras 7.1 e 7.2 mostram resultados para o íon Kr^{25+} (elemento criptônio), em nitrato de celulose e CR39 respectivamente; as Figuras 7.3 e 7.4 se referem do mesmo modo ao elemento urânio.

O parâmetro b' é a distância de observação, a partir do centro do traço (vide Figura 4.1). A fim de limitar-se a valores de b' maiores que o parâmetro de impacto³, há um ciclo de comparação entre os dois parâmetros.

Os quatro elementos constituintes do nitrato de celulose (C,H,O,N) e os três elementos químicos constituintes do CR39 (C,H,O) tiveram as contribuições devidas aos raios delta originários de cada um desses átomos constituintes consideradas por intermédio de cálculos independentes, conforme se pode constatar, por exemplo, no programa DENSI.FOR, às páginas 109 e 110. Trata-se da somatória sobre o índice i na expressão (4.3).

Para cada átomo constituinte que emite um raio delta, a energia recebida pelo elétron é determinada basicamente pela expressão (3.17), multiplicada pelo fator

¹Utilizou-se em todo o trabalho o sistema gráfico VPLLOT implementado no computador VAX do IFGW-UNICAMP.

²Isso ficará aparente nos gráficos das Figuras 7.7 e 7.8.

³É bem verdade que o caráter atrativo da colisão 'íon primário-elétron' determina que o elétron delta produzido também deposite energia a distâncias menores (a partir do centro do traço) do que o próprio parâmetro de impacto b . Contudo esta é uma região central do traço, e o nosso interesse se concentra na densidade de energia depositada na região periférica, em vista do que detalhes de cálculo necessários para que se considere o aspecto atrativo da colisão foram, por simplicidade, omitidos.

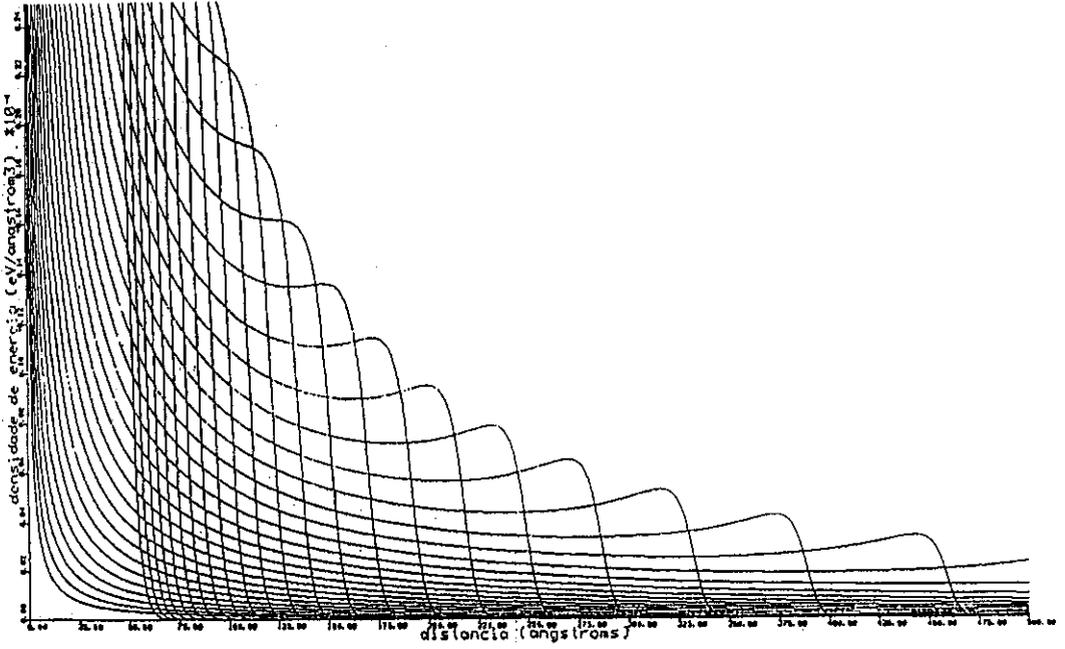


Figura 7.1: Densidades de depósito de energia devidas a elétrons delta lançados a partir de elementos de volume cilíndricos de espessura 0.01 Å, com raios compreendidos entre 0.05 Å e 0.4 Å. Íon incidente: Kr^{25+} , a 6 MeV/u.m.a.; material: nitrato de celulose. Intervalo da abscissa 25 Å; intervalo da ordenada: $0.02 \cdot 10^{-4} \text{ eV}/\text{Å}^3$.

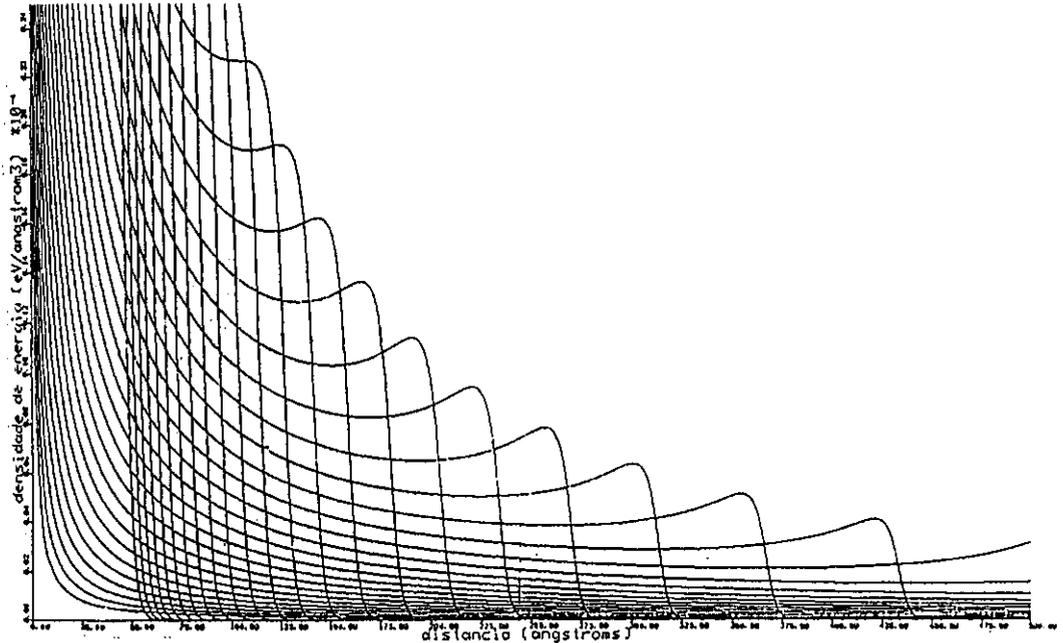


Figura 7.2: Idem à Figura 7.1, com íon incidente: Kr^{25+} , a 6 MeV/u.m.a.; material: CR39.

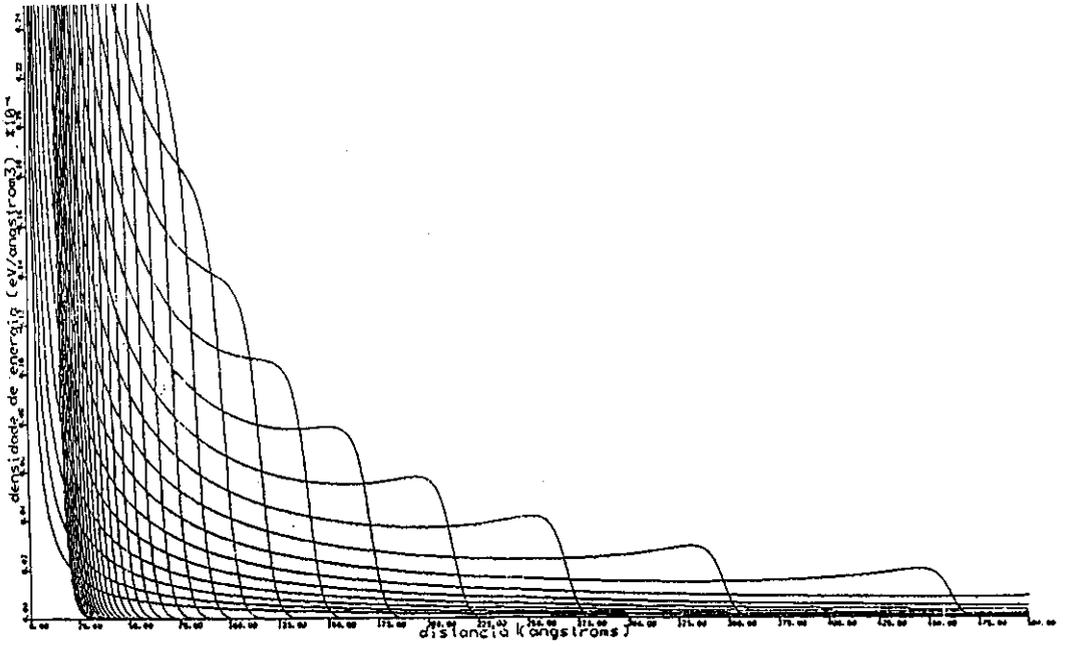


Figura 7.3: Idem à Figura 7.1, com íon incidente: U, a 410 MeV/u.m.a.; material: nitrato de celulose.

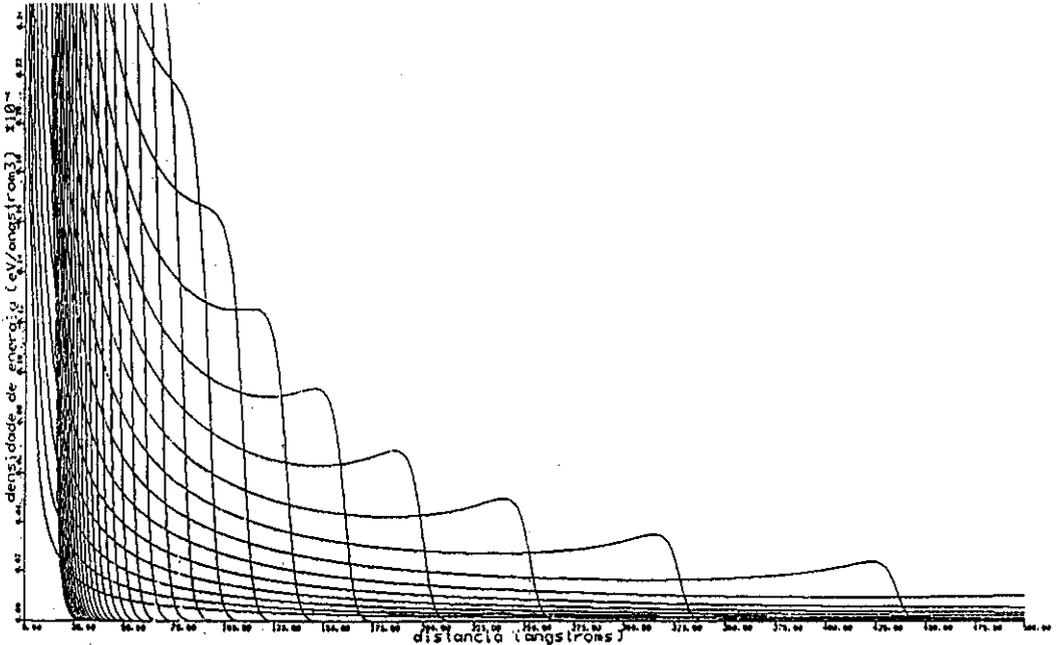


Figura 7.4: Idem à Figura 7.1, com íon incidente: U, a 410 MeV/u.m.a.; material: CR39.

(vide expressão (3.24)):

$$\left(\frac{1}{\gamma^2} + 1\right) \frac{\pi}{2} \xi_j e^{-2\xi_j}$$

com $\xi_j = I_j b / \hbar \gamma \beta c$, para o caso $\xi_j \gtrsim 1$; caso contrário o fator 1 é considerado⁴, a fim de se ter em conta o efeito adiabático proveniente da ligação ao átomo do meio. Em seguida, do calculado, é subtraído o potencial de ionização correspondente a cada caso, obtendo-se a energia cinética inicial do elétron. Considerou-se que apenas os elétrons menos ligados são passíveis de serem ejetados na forma de raios delta, sendo que os outros são blindados pela(s) camada(s) mais externa(s). Valores para as energias de ionização em questão são conhecidas da Física Atômica (vide por exemplo Mahan [69]):

$$\begin{array}{ll} I_{\text{C}} = 1.8 \cdot 10^{-18} \text{ J} ; & I_{\text{N}} = 2.3 \cdot 10^{-18} \text{ J} ; \\ I_{\text{H}} = 2.2 \cdot 10^{-18} \text{ J} ; & I_{\text{O}} = 2.2 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \end{array}$$

De acordo com o mencionado na Seção 4.1, os diferentes potenciais de ionização fazem com que, a partir do mesmo parâmetro de impacto, os raios delta originários de diferentes átomos sejam lançados com diferentes energias iniciais.

A taxa de perda de energia de cada elétron delta, produzido com um determinado parâmetro de impacto b , é calculada iterativamente—conforme mencionado no início do capítulo—por intermédio de um ciclo do parâmetro de observação b' . O valor obtido é multiplicado pelo número de elétrons delta emitidos a partir do elemento de volume considerado e em seguida dividido por $2\pi b'$, conforme a expressão (4.1) (somada sobre todos os tipos j de todos os elementos de índice i) o que fornece o depósito realizado pelos elétrons delta produzidos com parâmetros de impacto entre b e $b + db$ —Figuras 7.1 a 7.4.

7.2 Densidade total

Notemos, antes de prosseguir, que os gráficos das Figuras 7.1 e 7.2 e os das Figuras 7.3 e 7.4 não apresentam diferenças significativas nas taxas de perda de energia do mesmo íon em compostos distintos. De fato, essa semelhança é comum à maioria dos materiais orgânicos, porque são constituídos dos mesmos elementos básicos C, H e O⁶. Em vista dessa semelhança, os cálculos de densidade de energia (ou sua

⁴Na prática o fator calculado para um determinado parâmetro b foi comparado com o calculado com um parâmetro b um pouco menor. No caso do fator diminuir com o aumento de b ele é utilizado; caso contrário é utilizado o fator 1. As distorções que surgem da aplicação deste critério, devidas a que o fator não tem, em vista das aproximações realizadas, exatamente o valor 1 quando ele começa a diminuir (à medida que se aumenta o parâmetro b), foram corrigidas por uma normalização com base naquele valor (que o fator tem quando começa a diminuir).

⁶Pela mesma razão, o efeito de polarização é semelhante na maioria dos compostos orgânicos; vide nota de rodapé 12, à página 33. A sensibilidade, por sua vez, está relacionada à estrutura molecular específica do material, ao invés de ser determinada apenas por sua fórmula molecular.

derivada) passarão doravante a ser efetuadas com um único material para cada íon.

As várias contribuições são somadas—por intermédio do programa DENSITFOR, apresentado à página 112—completando-se a integração constante da expressão (4.3). Os resultados encontram-se nas Figuras 7.5 e 7.6 para Kr^{25+} , a 6 MeV/u.m.a. em nitrato de celulose e U, a 410 MeV/u.m.a. em CR39, respectivamente⁷.

7.3 A escolha de valores para o raio (II)

Podemos agora completar a tarefa interrompida ao final do Capítulo 6 (vide página 50), qual seja a de escolher valores de raio que apresentem densidades de depósito de energia em coerência com as sensibilidades dos detectores utilizados. Para tanto possuímos agora os perfis das densidades do depósito de energia calculados na Seção 7.2, para os íons e materiais estudados. Conforme as Figura 7.5, o valor de 500 Å para Kr^{25+} a 6 MeV/u.m.a. em nitrato de celulose aponta uma densidade de energia limiar de $8 \cdot 10^{-6} \text{ eV}/\text{Å}^3$. Por outro lado, a partir da Figura 7.6, o raio de 150 Å para U a 410 MeV/u.m.a. em CR39 mostra uma densidade limiar de $26 \cdot 10^{-6} \text{ eV}/\text{Å}^3$.

Contudo, não é aceitável que o limiar para o CR39 seja maior do que o do nitrato de celulose, já que o CR39 é sabidamente mais sensível [23]. Em face disso, sugere-se o conjunto de valores

$$\begin{array}{ll} 400 \text{ Å} & \text{para } \text{Kr}^{25+}, \text{ a } 6 \text{ MeV/u.m.a. em nitrato de celulose e} \\ 250 \text{ Å} & \text{para U, a } 410 \text{ MeV/u.m.a. em CR39,} \end{array} \quad (7.1)$$

que verifica a 1ª e 3ª exigências da Seção 6.2, porque atribui um raio menor ao urânio que ao criptônio e aponta um limiar de $12 \cdot 10^{-6} \text{ eV}/\text{Å}^3$ no nitrato de celulose e $10 \cdot 10^{-6} \text{ eV}/\text{Å}^3$ no CR39, ou seja, maior no nitrato de celulose. Há que se notar que variações em torno desses valores propostos de raio também verificam as condições apresentadas; adotaremos, para os cálculos que seguem, os raios sugeridos pelas expressões (7.1).

É oportuno observar que tais valores para a densidade do depósito de energia concordam em ordem de grandeza com aqueles obtidos por Kobetich e Katz [60,61,62] seguindo um raciocínio diferente, baseado na transmissão de elétrons através de películas.

7.4 Contribuições relativas

Conforme foi apontado no Capítulo 4, equação (4.5), desenhemos as densidades

⁷Em vista de que o material tem pouca influência sobre o resultado, escolheu-se arbitrariamente o material original CR39 do trabalho que relata os resultados dos experimentos com o íon urânio [54], e o nitrato de celulose, em lugar do policarbonato utilizado na irradiação por Kr^{25+} [47]. Ademais, o passo $\Delta b = 0.01 \text{ Å}$ utilizado na seção anterior (especificado na legenda da Figura 7.1) foi diminuído de modo a evitar oscilações do valor da integral (à medida que se varia o parâmetro b').

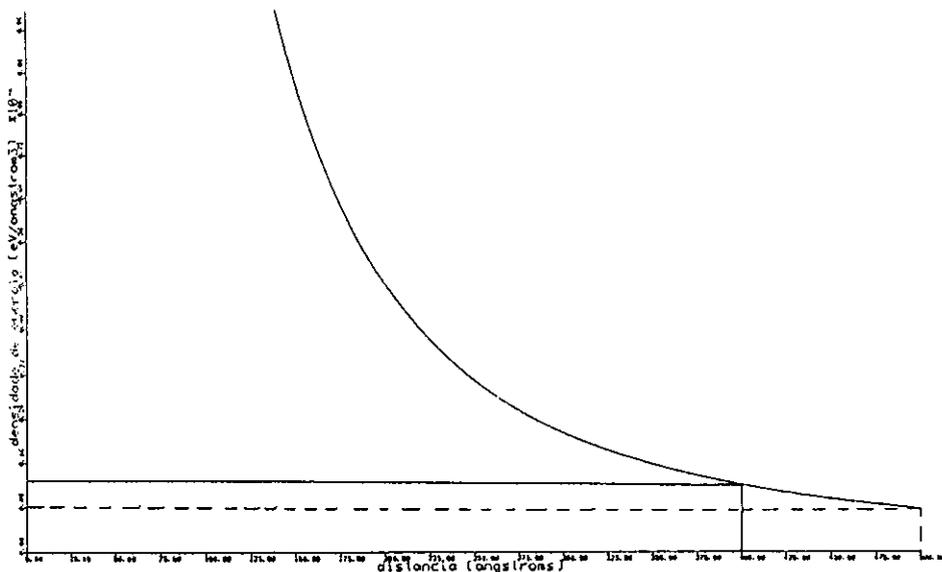


Figura 7.5: Densidade de energia depositada, em função da distância ao centro do traço; Kr^{25+} , a 6 MeV/u.m.a. em nitrato de celulose. O valor de 500 Å para o raio foi escolhido na Seção 6.2. A Seção 7.3 apresentará argumento no sentido de que seja considerado o valor de 400 Å, como mais adequado. Intervalo da abcissa 25 Å; intervalo da ordenada: $0.08 \cdot 10^{-4} \text{ eV}/\text{Å}^3$.

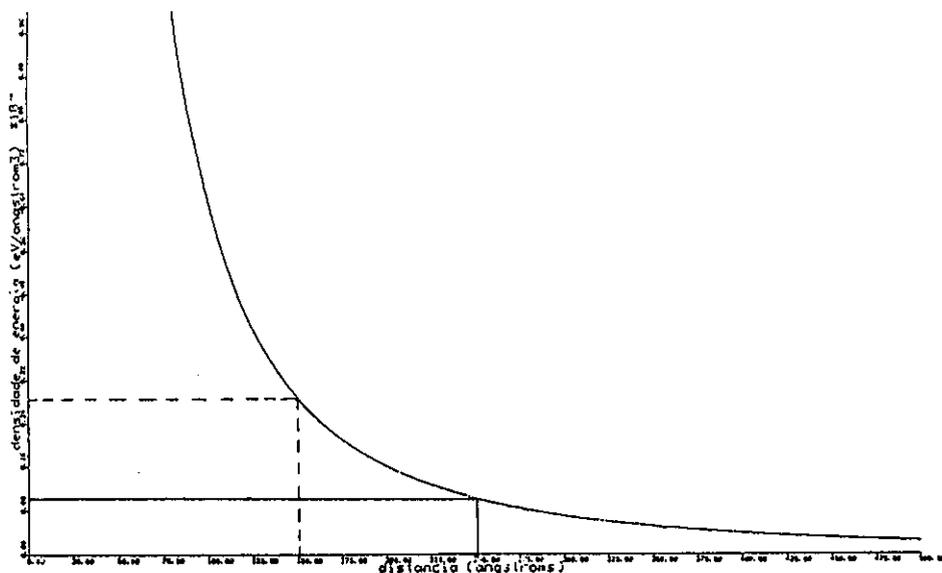


Figura 7.6: Idem à Figura 7.5, com U, a 410 MeV/u.m.a. em CR39. O valor escolhido de 150 Å para o raio será reconsiderado conforme argumento constante da Seção 7.3.

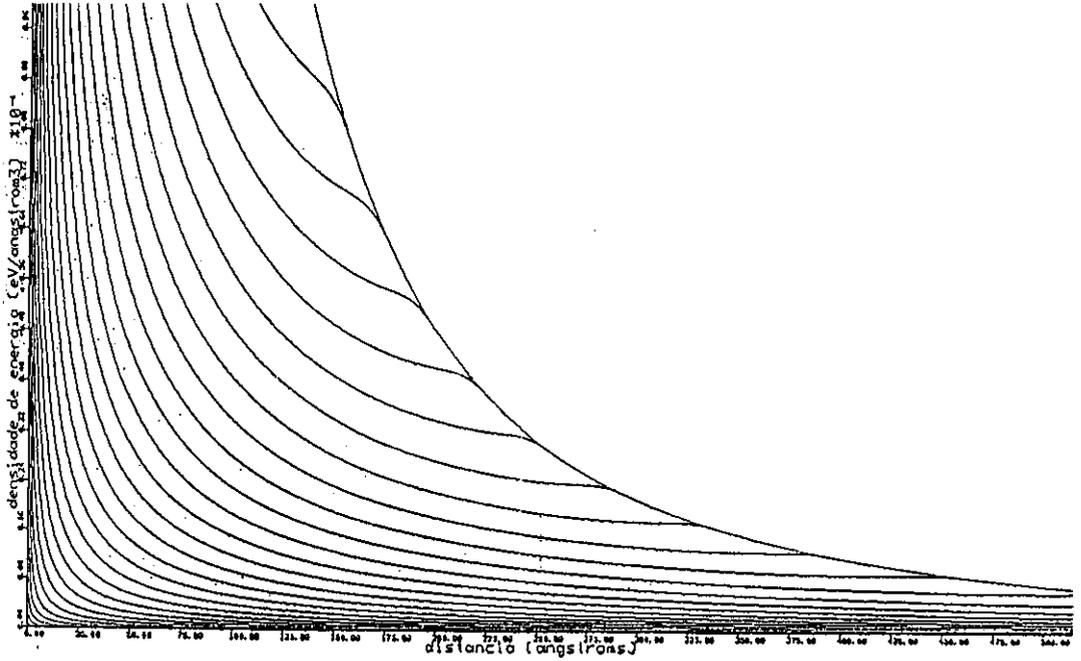


Figura 7.7: Densidades de energia $\xi(b, b')$ a partir de Kr^{25+} , a 6 MeV/u.m.a., devidas a elétrons delta produzidos com parâmetros de impacto menores ou igual a b . Intervalo da abcissa 25 Å; intervalo da ordenada: $0.08 \cdot 10^{-4} \text{ eV}/\text{Å}^3$.

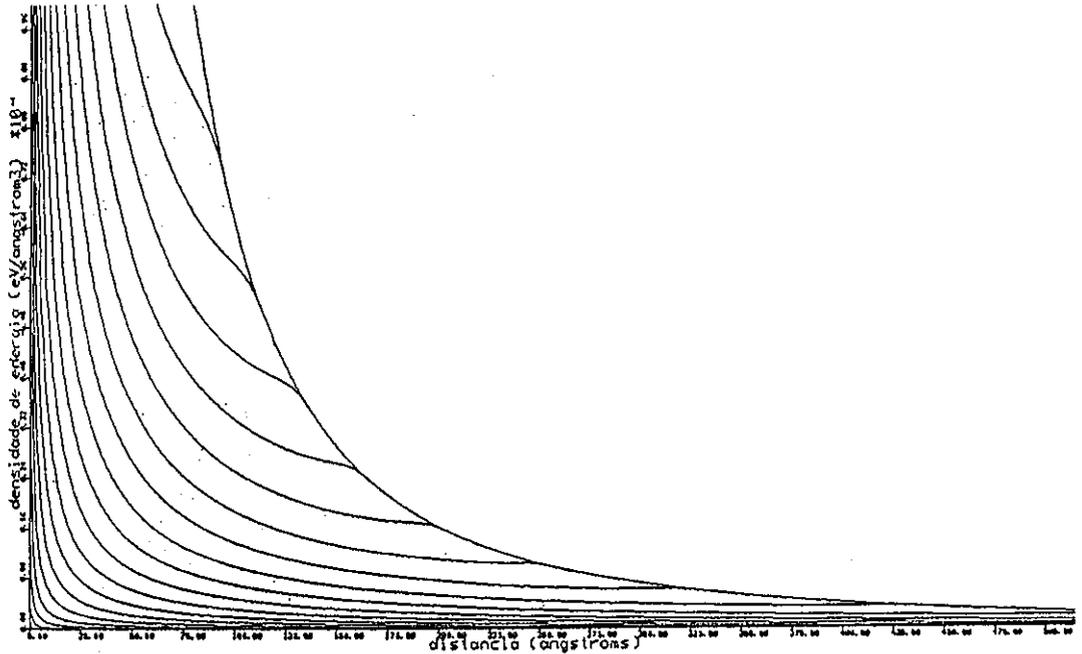


Figura 7.8: Idem à Figura 7.7, com o íon incidente U a 410 MeV/u.m.a..

de energia $\xi(b, b')$ devidas a elétrons delta produzidos com parâmetros de impacto menores ou igual a b . Vide as Figuras 7.7 e 7.8 (produzidas por uma modificação do programa DENSIT.FOR, denominada DENSITT.FOR, apresentado na página 114).

A função será em seguida derivada mantendo-se b' constante, mas já se observa no conjunto de curvas apresentadas nas Figuras 7.7 e 7.8 a pequena contribuição ao depósito de energia na periferia feita pelos elétrons lançados com parâmetros de impacto pequenos (dado o grande ajuntamento de curvas na parte inferior de cada figura). A maior fração do depósito de energia em um local é devida a elétrons que passam pelo local com baixa energia, e param logo depois.

As derivadas com relação a b conforme a equação (4.6), no ponto $b' = 400 \text{ \AA}$ para o Kr^{25+} , a 6 MeV/u.m.a. em nitrato de celulose, e no ponto $b' = 250 \text{ \AA}$ para o U, a 410 MeV/u.m.a. em CR39 (vide expressão (7.1)), são calculadas numericamente pelo programa DERI.FOR (vide página 117) e os resultados encontram-se apresentados nas Figuras 7.9 e 7.10, respectivamente. Conforme foi apontado em conexão com a equação (4.6), trata-se das contribuições relativas dos elétrons-delta produzidos com diferentes parâmetros de impacto à densidade do depósito de energia no ponto b' . Juntamente com as curvas derivadas foram desenhadas as curvas integrais, em porcentagem da contribuição total, a fim de se avaliar a contribuição relativa de elétrons delta de alta energia, lançados com parâmetros de impacto menores ou igual a um valor de referência, com relação à densidade total de energia.

7.5 O parâmetro limiar para a perda de energia restrita (II)

Na seção anterior foi efetuado o cálculo das funções (4.5) e (4.6) da Seção 4.3. As funções de contribuição relativa apresentadas nas Figuras 7.9 e 7.10 não fornecem uma indicação nítida de parâmetro de impacto limiar mínimo, abaixo do qual a contribuição ao depósito de energia na periferia do traço viesse, em cada caso, a ser desprezível. No entanto, ela apresenta uma ascensão progressivamente maior à medida que se considera parâmetros de impacto cada vez maiores⁸, de tal modo que é possível estabelecer algum limite inferior, abaixo do qual a contribuição torna-se desprezível. Por exemplo, os valores

$$\begin{aligned} 0.06 \text{ \AA} & \text{ para } \text{Kr}^{25+}, \text{ a } 6 \text{ MeV/u.m.a. e} \\ 0.04 \text{ \AA} & \text{ para U, a } 410 \text{ MeV/u.m.a.} \end{aligned} \quad (7.2)$$

delimitam uma região tal que a contribuição relativa dos elétrons delta aí produzidos (elétrons de alta velocidade) é menor que 1% da densidade total depositada (na periferia).

⁸Se todos os elétrons passassem pela periferia apresentando a mesma taxa de perda de energia (o que não acontece), a ascensão da contribuição relativa seria linear com o parâmetro de impacto, devida somente ao aumento dos elementos de volume considerados. Então, o crescimento progressivamente maior observado é devido à cada vez maior taxa de perda de energia dos elétrons mais lentos, lançados a partir de maiores parâmetros.

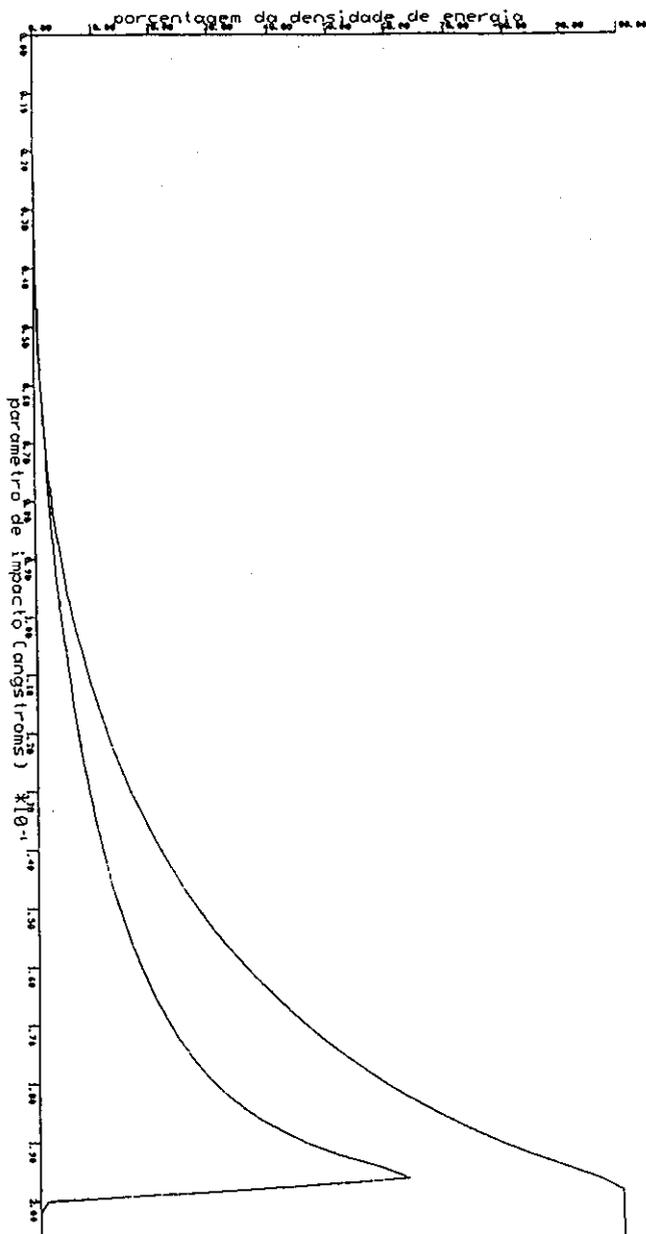


Figura 7.9: Derivada da densidade do depósito de energia com relação a b' , no ponto $b' = 400 \text{\AA}$; íon Kr^{25+} , a 6 MeV/u.m.a. em nitrato de celulose. Juntamente encontra-se desenhada a curva integral, ou seja, a probabilidade acumulada de contribuição por parte de todos os elétrons lançados com parâmetros de impacto menores ou igual àquele considerado (a escala de 0 a 100 desenhada no eixo das probabilidades refere-se a esta curva integral). Intervalo da abscissa: $0,01 \text{\AA}$.

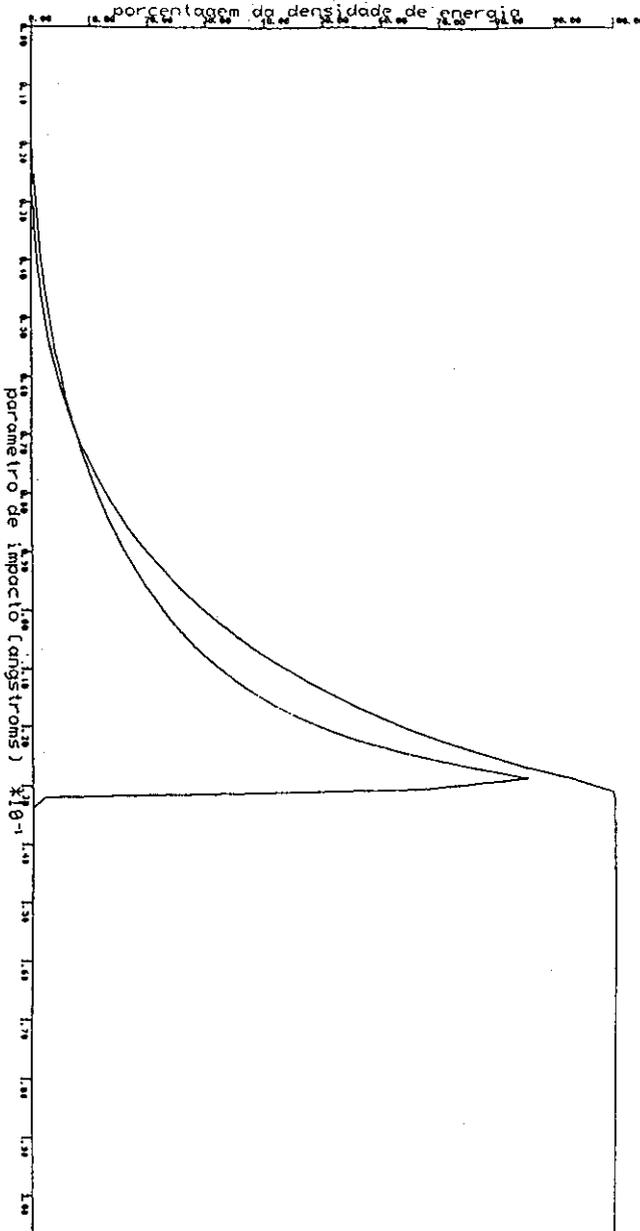


Figura 7.10: Derivada da densidade do depósito de energia com relação a b , no ponto $b' = 250$ Å; fon U, a 410 MeV/u.m.a. em CR39. Juntamente encontra-se a curva integral (vide legenda da Figura 7.9). Intervalo da abcissa: 0.01 Å.

Comparemos os valores constantes das expressões (7.2) com os parâmetros $b_q = \hbar/\gamma m v$ e $b_{lim} = zq_e^2/\gamma m v^2$ (expressões (3.19)) para os mesmos íons⁹:

$$\begin{aligned} \text{Kr}^{25+}, \text{ a } 6 \text{ MeV/u.m.a. : } \quad b_q &= \frac{1.05 \cdot 10^{-34}}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8} \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{\beta} \simeq 0.002 \text{ \AA} \\ b_{lim} &= \frac{25 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19})^2}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot (3 \cdot 10^8)^2} \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{\beta^2} \simeq 0.001 \text{ \AA} \end{aligned} \quad (7.3)$$

$$\begin{aligned} \text{U, a } 410 \text{ MeV/u.m.a. : } \quad b_q &\simeq 0.002 \text{ \AA} \\ b_{lim} &\simeq 0.002 \text{ \AA} \end{aligned}$$

O novo parâmetro, já denotado na Seção 4.3 por $b_{e.r.}$ (*e.r.* são as iniciais de 'energia restrita'), é uma ou duas ordens de grandeza maior que os parâmetros b_q ou b_{lim} . Essa elevação do parâmetro inferior nos expressa a conveniência de se descrever a formação do traço com uma taxa de perda de energia restrita, em lugar de uma perda de energia total (pois com a elevação do parâmetro em duas ordens de grandeza retira-se do cômputo um conjunto de elétrons que contribui com apenas 1% do depósito de energia da periferia do traço).

A fim de se estudar a dependência do parâmetro $b_{e.r.}$ com a carga e energia da partícula incidente, realizou-se novamente o cálculo da densidade total depositada em função da distância ao centro do traço para três valores do número atômico, $z = 15$, $z = 25$ e $z = 92$, com três valores da energia cinética, 6 MeV/u.m.a., 50 MeV/u.m.a. e 410 MeV/u.m.a., o que constitui uma amostra significativa de diferentes núcleos, em diferentes velocidades não relativísticas. Os cálculos se referem ao CR39. A Figura 7.11 mostra os gráficos obtidos. Consideraremos que o valor de $b_{e.r.}$ é proporcional ao raio do traço, ou seja, traços de maior raio devem ser produzidos por partículas que transferem maior quantidade de movimento a elétrons do meio, produzindo maior quantidade de raios delta, a partir de maiores parâmetros de impacto, o que eleva o valor de $b_{e.r.}$. Observa-se, ao menos em primeira aproximação, uma proporcionalidade com o número atômico z e uma relação inversa com a energia cinética da partícula incidente (vide Figura 7.11). Em vista disso, propõe-se a seguinte sumarização para os valores mínimos $b_{e.r.}$:

$$\begin{aligned} b_{e.r.} &= C \cdot b_{lim} \\ &= C \frac{z q_e^2}{\gamma_{CM} m v^2}, \end{aligned} \quad (7.4)$$

onde C é uma constante da ordem de 100, ou seja, $b_{e.r.}$ é duas ordens de grandeza maior que b_{lim} (generaliza-se assim, para todos os números atômicos e energias, a relação já sugerida a partir da comparação entre as expressões (7.2) e (7.3)).

⁹As velocidades dos íons são dadas por

$$\beta_{lim} = \frac{\sqrt{e^2 - (931.5 \text{ MeV})^2}}{e},$$

onde e é a energia total do íon, por unidade de massa atômica. Tem-se $\beta = 0.11$ para o Kr^{25+} , a 6 MeV/u.m.a. e $\beta = 0.72$ para o U, a 410 MeV/u.m.a..

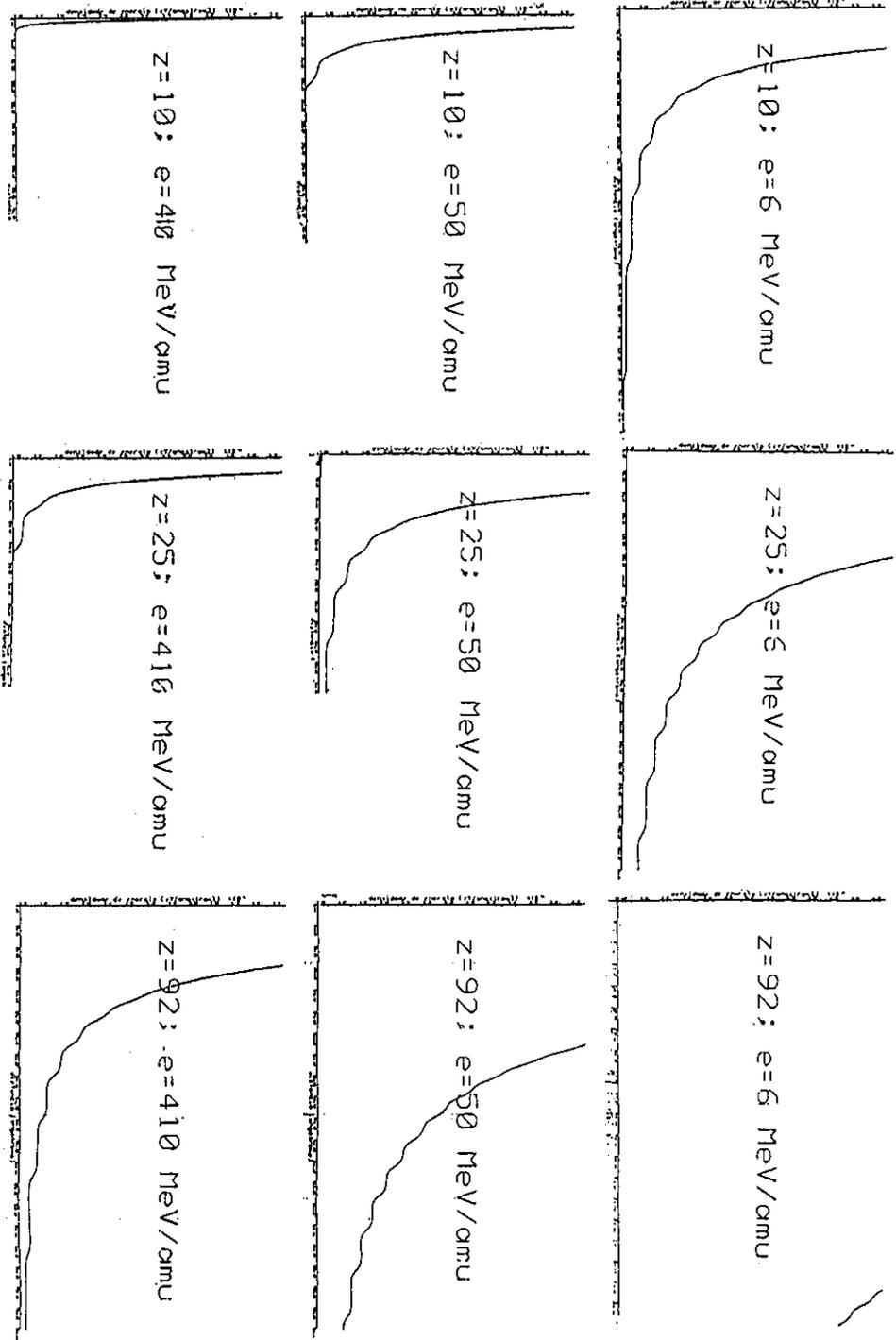


Figura 7.11: Gráficos da densidade de energia depositada, em função da distância ao centro do traço, para diferentes números atômicos z e diferentes energias da partícula incidente, em CR39. Intervalo da abcissa 25 \AA ; intervalo da ordenada: $0.08 \cdot 10^{-4} \text{ eV/\AA}^3$.

Chega-se então ao ponto de colocar em uso, dentro da estrutura da teoria, com a observância do critério de independência com relação ao número atômico, explicado na Seção 2.4, os valores e expressões propostos, em especial a expressão (4.7), página 38, com o parâmetro $b_{e.r.}$ dado pela expressão (7.4).

O capítulo seguinte trata desses cálculos, com vistas à interpolação dos resultados experimentais obtidos a partir do vôo de exposição realizado em novembro de 1986 pelo Departamento de Raios Cósmicos e Cronologia do IFGW-UNICAMP.

Capítulo 8

Generalização de curvas 'velocidade de corrosão × alcance'

A calibração dos detectores sólidos é efetuada por intermédio de sua exposição em aceleradores a feixes bem caracterizados quanto ao número atômico da partícula incidente e sua energia. A maioria dos atuais aceleradores de partículas oferece feixes de íons de baixo número atômico e com energias bastante inferiores àquelas normalmente observadas nos raios cósmicos. A Tabela 8.1 nos dá uma idéia a respeito de feixes comumente disponíveis.

Ajunte-se às informações da tabela as características do acelerador *Pelletron* da Universidade de São Paulo, Brasil, que oferece feixes de prótons, C, N, O, F, Br, Cl, Si, Cu e Ni. Com respeito ao oxigênio, a energia máxima disponível do feixe

acelerador	energia (MeV/u.m.a.)	íons
Cyclotron (Berkeley)	3	quase todos até o Fe
Cyclotron (Dubna)	6	Xe, Zn, Ca e íons mais leves
Cyclotron (Orsay)	7	Kr e íons mais leves
Unilac (Darmstadt)	8	quase todos os íons
Superhilac (Berkeley)	8	quase todos os íons
Hilac (Yale)	10	^{10}B , ^{11}B , C, N, O, Ne, Fe, S
Linac (Manchester)	10	Cu, Fe, Ca e íons mais leves
Bevatron (Berkeley)	~2000	C, N, O, Ne
Bevalac (Berkeley)	~2000	Fe e íons mais leves

Tabela 8.1: Composição e energia de feixes disponíveis em alguns aceleradores (a partir de [36]).

é 4.5 MeV/u.m.a.. Por outro lado, entrou recentemente em operação, em 1989, o potente acelerador *Sincroton SIS* de Íons Pesados da *Gesellschaft für Schwerionenforschung-Darmstadt*, Alemanha, com o qual urânio é acelerado a 1 GeV/u.m.a.. A disponibilidade de íons pesados de tão grande energia torna viável a calibração direta em toda a região não relativística, e na região relativística de mais baixa energia. O advento de novos aceleradores traz informações diretas num intervalo de números atômicos e energias mais amplo, o que vem tornar o estudo da descrição do traço particularmente atrativo, justamente porque permite organizar e compreender os novos resultados.

A calibração ideal para um detector de partículas, seja sólido, cintilador ou eletrônico, é, obviamente, a verificação direta de sua resposta, ou seja, um conjunto de curvas 'velocidade de corrosão v_T em função do alcance', para feixes compostos dos mesmos íons que se deseja identificar, e com as mesmas energias. Contudo, no caso de dados de calibração limitados a baixos números atômicos e energias, torna-se necessária uma *generalização de curvas para íons de maior número atômico e energias*. É o que acontece com os dados de que dispomos, e a referida generalização passará a ser desenvolvida a partir da Seção 8.2. Vejamos as informações de calibração disponíveis.

8.1 Calibração

Os dados que possuímos provém de duas origens: informações de literatura para o nitrato de celulose [83] e resultados de exposição de amostras de CR39 a feixes de íons oxigênio com energias conhecidas, no acelerador Pelletron do Instituto de Física da USP.

Nitrato de celulose

Com respeito ao nitrato de celulose, a citação [83] apresenta os resultados de exposição à incidência normal de feixes de ^{10}B , ^{11}B , C, N e O, com energias até 10.3 MeV/u.m.a., tempo de corrosão de 9 horas, os quais encontram-se reproduzidos na Figura 8.1¹. O trabalho relata medidas de comprimentos de cone, que fornecem as velocidades de corrosão ao longo do traço (v_T) por intermédio da relação

$$\text{comprimento do cone} = v_T \cdot \Delta t \quad .$$

onde Δt é o tempo de corrosão.

Para uso no algoritmo ora proposto, representou-se analiticamente os dados relatados por intermédio das seguinte relação linear:

$$v_T = A - B \cdot x \quad . \quad (8.1)$$

¹Comprimentos de cone maiores que o alcance parecem ter sido extrapolados a partir de tempos de corrosão menores que 9 horas. O texto não entra em detalhes com respeito à técnica utilizada nesses casos.

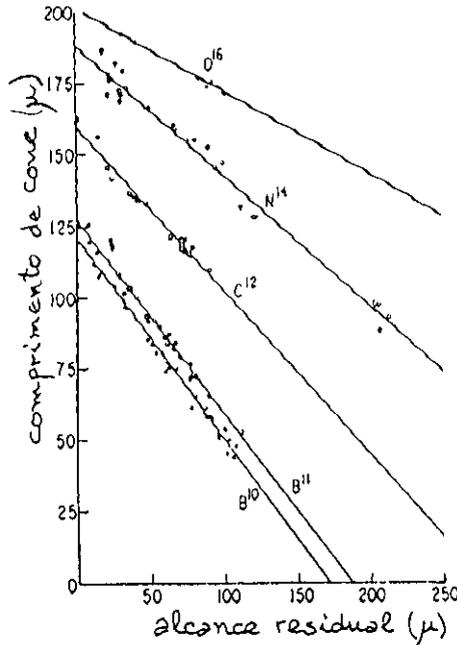


Figura 8.1: Resultados da exposição de nitrato de celulose a feixes de ^{10}B , ^{11}B , C, N e O, reproduzidos da citação [83].

onde x é o alcance residual, em micra. Para os vários íons os valores de A e B são os seguintes:

íon	A (μ/hora)	B (hora^{-1})
C	17.8	0.065
O	22.8	0.033
N	20.8	0.051
^{11}B	14.4	0.078
^{10}B	13.3	0.078

Desenvolveu-se um pequeno programa, denominado VVPR.FOR (vide página 119), que escreve a grandeza $v_T(x)$ para alguns valores do alcance dos íons relatados num arquivo de dados VVPR.DAT (página 120), o qual será utilizado pelo programa aplicativo do algoritmo (Seção 8.5).

CR39

Realizou-se no acelerador Pelletron da Universidade de São Paulo um experimento de calibração de CR39, com feixes de oxigênio totalmente ionizado ($z_0 = 8$). Foram irradiadas amostras virgens do detector CR39 de origem japonesa utilizado no experimento de 1986 (Capítulo 9), juntamente com amostras nacionais de CR39, polimerizadas na *Multivis Indústria Óptica*². O esquema de montagem da câmara de exposição encontra-se na Figura 8.2. A irradiação foi efetuada por intermédio de um espalhamento elástico em folha de ouro; as amostras estiveram colocadas a 24 cm do centro espalhador. A massa atômica do ouro é bastante superior à do

²Detalhes da polimerização que efetuamos encontram-se apresentados no Apêndice E.

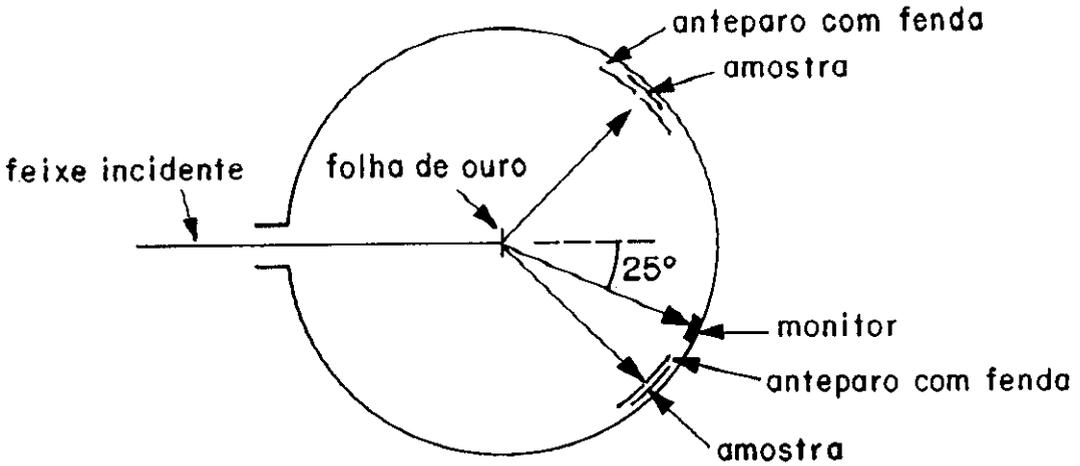


Figura 8.2: Esquema da câmara de exposição montada no acelerador Pelletron, da USP.

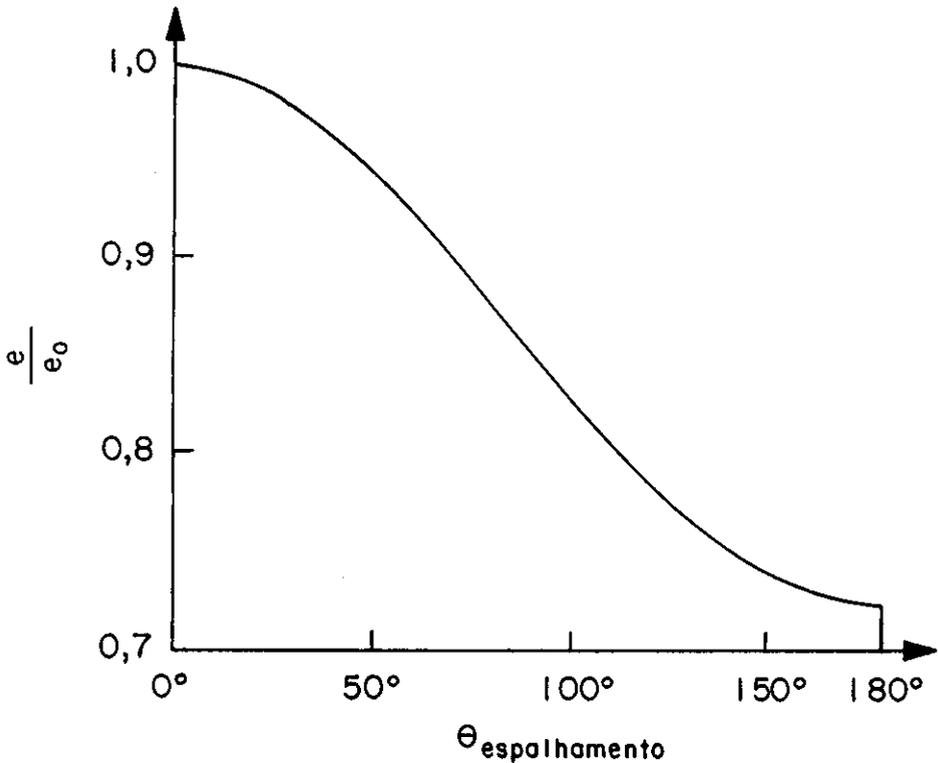


Figura 8.3: A razão entre a energia (e) do íon oxigênio, espalhado elasticamente por uma folha de ouro, e a energia do feixe incidente (e_0), em função do ângulo de espalhamento.

CR39 estrangeiro

energia (MeV/u.m.a.)	ângulo	intensidade calculada (partículas/mm ²)	intensidade observada (partículas/mm ²)	profundidade (μ)	diâmetro (μ)	alcance (μ)
2.86	44°	70	65	340	210	54
3.33	46°	49	47	310	200	63
3.79	48°	39	40	270	180	72
4.24	50°	25	27	180	100	80

CR39 nacional

2.85	46°	60	64
3.34	44°	59	57
3.84	42°	62	57
4.33	40°	56	51

Tabela 8.2: Resultados do experimento de calibração, realizado no acelerador *Pelletron* da Universidade de São Paulo, com o material CR39 original utilizado em 1986 e com CR39 nacional. Os valores de profundidade e os diâmetro foram obtidos ao microscópio; os alcances são os fornecidos pelas relações de Barkas e Berger (Seção 8.3).

projétil utilizado, de modo que a energia do íon espalhado varia pouco com o ângulo e é sempre maior que 72% da energia do feixe incidente; o gráfico da Figura 8.3 mostra essa dependência. Por outro lado, a intensidade do feixe espalhado varia inversamente com $\text{sen}^4(\theta_{\text{espalhamento}}/2)$, conforme a expressão de Rutherford para a seção de choque do espalhamento elástico. Na direção $\theta_{\text{espalhamento}} = 25^\circ$ dispôs-se um contador eletrônico de partículas (monitor), colocado a 26 cm do centro espalhador, que mediu a intensidade do feixe. Os ângulos utilizados no espalhamento foram de 46°, 44°, 42° e 40° para a amostra nacional e 44°, 46°, 48° e 50° para a amostra estrangeira. Para tais ângulos as energias do feixe incidente foram respectivamente 3, 3.5, 4 e 4.5 MeV/u.m.a., valores esses que devem ser corrigidos conforme a dependência com o ângulo de espalhamento—Figura 8.3; os valores resultantes constam da Tabela 8.2. Os valores de intensidade previstos a partir das contagens do monitor, e da aplicação da expressão de Rutherford para a dependência angular (bem como a consideração da dependência com a distância), estão também apresentadas na Tabela 8.2, ao lado dos valores obtidos experimentalmente. Observa-se uma excelente concordância, tanto para o material estrangeiro como para o nacional, que põe em evidência a elevada eficiência dos detectores para os íons e energias utilizados, ou seja, a relação entre a densidade de registros e a densidade de partículas incidentes é próxima da unidade.

O tratamento químico das amostras foi efetuado com equipamento do Grupo de Cronologia do DRCC-UNICAMP, com solução aquosa 6.25 N de hidróxido de sódio

a 70° em dois tempos diferentes: 6 horas e 40 minutos, e 21 horas. As observações ao microscópio foram realizadas com uso do microscópio Tiyoda 60234, do Grupo de Emulsões do DRCC. O experimento de calibração do CR39 apresentou até o momento resultados limitados, conforme passamos a relatar.

Após o primeiro intervalo de tempo de ataque o CR39 estrangeiro apresentou apenas cones em início de formação, com desenvolvimento ainda insuficiente para o discernimento do tamanho em função da energia. Nosso CR39 nacional, por sua vez, apresentava cones num estágio ainda mais inicial de formação.

Após um tempo de ataque de 21 horas, a corrosão atingiu, no CR39 japonês, o percurso integral dos íons incidentes no material, sugerindo pois que o tempo ideal de ataque seria intermediário entre os dois tempos utilizados (no estágio atual do trabalho ainda não se pôde acompanhar com maior detalhe o desenvolvimento do processo de corrosão). O ataque químico deu lugar a fossas arredondadas, que curiosamente se apresentam com a parte superior estreitada; vide Figura 8.4. Esse perfil

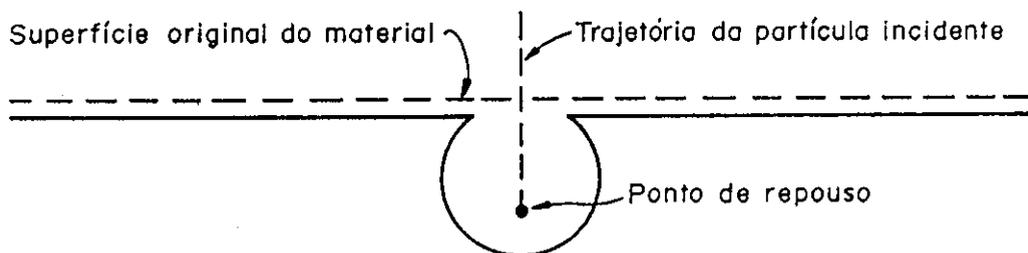


Figura 8.4: Perfil observado das fossas de corrosão em CR39 após a exposição a feixes de oxigênio.

pode ser explicado pela existência de uma velocidade de ataque químico ao longo do material dependente da profundidade, de tal modo que o material seria mais resistente na região próxima a sua superfície³. Os alcances de íons oxigênio com as energias estudadas, conforme as relações 'alcance-energia' fornecidas por Barkas e Berger (tais relações serão apresentadas na Seção 8.3, vide expressão (8.8) e Figura 8.6) também estão incluídas na Tabela 8.2, ao lado das profundidades medidas, bem como os diâmetros das fossas. Há uma nítida dependência das profundidades e dos diâmetros com a energia da partícula incidente. As fossas maiores, que correspondem a menores energias, foram devidas a traços que possuíam maior velocidade v_T , o que permitiu que o reagente chegasse mais rapidamente a sua extremidade, iniciando aí mais cedo o processo de corrosão do material bruto (e vice-versa).

Torna-se difícil deduzir velocidades de corrosão ao longo do traço v_T em traços tão completamente desenvolvidos quimicamente. O tempo de corrosão mostrou ser neste caso uma grandeza crucial e um acompanhamento progressivo do desenvolvi-

³Por outro lado, na revelação efetuada na Aoyama University-Japão dos traços dos eventos primários, tal camada resistente teria sido completamente removida, já que o tempo de ataque foi maior—72 horas.

mento dos traços deve ser efetuado.

Com respeito ao material CR39 que polimerizamos (vide Apêndice E), ele tem apresentado sensibilidade menor do que o estrangeiro (embora livre de figuras espúrias de ataque). Num tempo de ataque de 21 horas, como o realizado, os cones de corrosão no CR39 nacional encontram-se em estágio inicial de formação.

Nosso experimento de calibração não permitiu, pois, relacionar os dados relativos ao CR39 contidos na Tabela 8.2 com aqueles relativos ao nitrato de celulose da Figura 8.1. Contudo, no experimento de detecção de primários de 1986 não foram observadas no CR39 velocidades de corrosão maiores que as relatadas para o nitrato de celulose [83]⁴, muito embora o CR39 seja considerado mais sensível. Tal fato será levado em consideração quando se confrontar os dados experimentais de 1986 da radiação primária em CR39 com as curvas teóricas generalizadas a partir dos dados de calibração em nitrato de celulose (Capítulos 9 e 10).

8.2 Generalização das curvas 'v_T × alcance residual'

Conforme foi explicado no início do capítulo, as calibrações de que dispomos foram efetuadas com feixes de baixo número atômico e baixas energias, e devem então ser acompanhadas de uma generalização de curvas 'velocidade de corrosão × alcance'. Essa generalização é baseada essencialmente na grandeza microscópica primária que determina a formação do traço. O livro de Fleischer, Price e Walker discute detalhadamente esse processo [36, Capítulo 3] e sua idéia geral encontra-se esquematizada na Figura 8.5. Trabalharemos a seguir com os dados conhecidos para o nitrato de celulose.

Em vista de serem complexas as teorias de formação de traços, com os cálculos envolvidos sujeitos freqüentemente a diferentes aproximações, introduz-se na expressão da perda de energia $\frac{de_r}{dz}(z, \beta)$ uma parcela de correção (parcela K), que deve ser ajustada de modo a que a função preencha a condição de unicidade da resposta experimental (vide Seção 2.4).

A grandeza microscópica proposta, ou seja, a taxa de perda de energia restrita aos elétrons formadores do traço, é dada pela expressão (4.7). A essa expressão é pois adicionada a parcela $4\pi NZ \frac{z^2 q_e^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} K$, donde:

$$\frac{de_r}{dx}(z, \beta, K) = 4\pi NZ \frac{z^2 q_e^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \left(\sum_j f_j \ln \frac{b_{maxj}}{b_{e.r.}} - \frac{\delta}{2} + K \right) \quad (8.2)$$

Para reescrever esta grandeza como função do alcance— $\frac{de_r}{dx}(z, R, K)$ —são necessá-

⁴Os núcleos que pararam na pilha de detectores foram de elevado número atômico e não relativísticos, com capacidade de desestruturar o material e produzir traço certamente comparável à dos íons relatados por [83] para o nitrato de celulose. Compare-se os dados da Figura 9.6 com os da Figura 8.1.

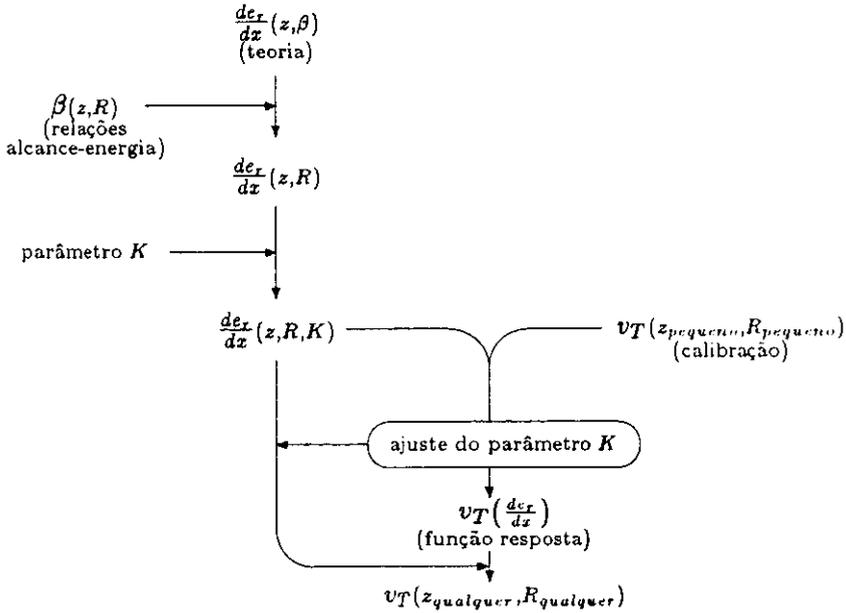


Figura 8.5: Esquema geral do processo de generalização de curvas 'velocidade de corrosão × alcance' para valores de número atômico e energia quaisquer.

rias as relações 'alcance-energia'— $R(z, e)$ —e a expressão relativística

$$\beta = \frac{\sqrt{e^2 - e_0^2}}{e}, \quad (8.3)$$

que relaciona a velocidade com a energia (total) por unidade de massa atômica da partícula (e ; $e_0 = 931.5 \text{ MeV/u.m.a.}$), conforme o seguinte esquema:

$$\beta = \frac{\sqrt{e^2 - e_0^2}}{e} \quad (8.4)$$

$R(z, e) \longrightarrow \beta(z, R)$

(e a função $\beta(z, R)$ é utilizada conforme indicado na parte superior da Figura 8.5).

Vejamos em seguida as relações 'alcance-energia' adotadas (Seção 8.3) e depois voltaremos aos cálculos ora sugeridos, apresentando os programas FORTRAN para sua execução (Seções 8.4 e 8.5), bem como os resultados dos cálculos (Seções 8.6 e 8.7).

8.3 Relações 'alcance-energia'

Os alcances de partículas carregadas (com massas superiores à do elétron) para cada energia e para cada número atômico, foram estudados por Barkas e Berger [8] (entre outros [81,113]), os quais sugeriram a relação de *scaling*

$$x(\beta) = \frac{M}{z^2} [\lambda(\beta) + B_z(\beta)] \quad , \quad (8.5)$$

onde x é o alcance de uma partícula de massa atômica M , número atômico z e velocidade βc , e λ é o alcance de um próton de mesma velocidade que o íon, o qual não captura elétrons ao longo de seu percurso—tal próton é chamado *próton ideal*. Barkas e Berger [8] resumizam os alcances de prótons ideais na faixa de energia de 7 MeV até 1200 MeV com a expressão:

$$\ln \lambda = \ln \frac{A}{Z} + \sum_{n=0}^3 \sum_{m=0}^3 \alpha_{mn} (\ln I_{adj})^m (\ln \tau)^n \quad , \quad (8.6)$$

sendo λ fornecido em gramas/cm², A e Z são respectivamente a massa atômica e o número de elétrons da molécula que constitui o meio (considerou-se a fórmula química do monômero do material; $A = \sum_i \mu_i A_i$; $Z = \sum_i \mu_i Z_i$, μ_i é o número de fórmula do elemento (vide Seção 3.6), A_i e Z_i são sua massa e número atômico, respectivamente), $\ln I_{adj} = \frac{1}{Z} \sum_i \mu_i Z_i \ln (I_{adj})_i$, onde $(I_{adj})_i$ é o potencial de ionização 'ajustado' (devido à correção proveniente do efeito de camadas) do elemento i , dado pelas expressões 5.2 com as alterações da Tabela 5.1 (vide Seção 5.1); $\tau = (\gamma - 1) \times 938,59$ MeV é a energia cinética do próton; e os valores dos coeficientes α_{mn} estão apresentados na Tabela 8.3.

Tabela 8.3: Coeficientes α_{mn} da equação (8.6).

		n			
		0	1	2	3
m	0	-8.0155	1.8371	$4.5233 \cdot 10^{-2}$	$-5.9898 \cdot 10^{-3}$
	1	$3.6916 \cdot 10^{-1}$	$-1.4520 \cdot 10^{-2}$	$-9.5873 \cdot 10^{-4}$	$-5.2315 \cdot 10^{-4}$
	2	$-1.4307 \cdot 10^{-2}$	$-3.0142 \cdot 10^{-2}$	$7.1303 \cdot 10^{-3}$	$-3.3802 \cdot 10^{-4}$
	3	$3.4718 \cdot 10^{-3}$	$2.3603 \cdot 10^{-3}$	$-6.8538 \cdot 10^{-4}$	$3.9405 \cdot 10^{-5}$

A parcela $B_z(\beta)$, chamada *extensão do alcance*, é devida à captura de elétrons ao longo do percurso, e é descrita por Benton e Henke [13] como sendo:

$$B_z(\beta) = (31.8 + 3.86 I^{5/8}) \frac{A_{material}}{Z_{material}} 10^6 Z^{8/3} \sum_{n=0}^3 b_n \chi^n \quad (8.7)$$

onde $\chi = \left(\frac{137\beta}{Z} \right)$ e os coeficientes b_n constam da Tabela 8.4.

Por outro lado, Barkas e Berger [8] ainda descrevem os alcances de prótons ideais na faixa de energia de 1 a 9 MeV com a seguinte expressão (compare-se-a com a expressão (8.6)):

$$\ln \lambda = \ln \frac{A}{Z} + \sum_{n=0}^2 \sum_{m=0}^2 a_{mn} (\ln I_{adj})^m (\ln \tau)^n \quad (8.8)$$

com os coeficientes a_{mn} fornecidos pela Tabela 8.5 (as descrições algébricas 8.8 e 8.6 coincidem na superposição dos intervalos de validade).

Os alcances descritos pelo *scaling* da expressão (8.5)—com o uso das expressões 8.6, 8.7 e 8.8—encontram-se apresentados nas Figuras 8.6 e 8.7, produzidos pelo programa R.FOR (vide Apêndice C, página 120)⁵. Os alcances de partículas em compostos orgânicos são em larga escala independentes do material, porque tais compostos são constituídos fundamentalmente pelos mesmos elementos⁶. Os gráficos foram produzidos a partir de parâmetros próprios para o nitrato de celulose; contudo eles podem em geral ser aplicados a outros materiais orgânicos sem alterações notáveis.

É oportuno ter também à mão o gráfico 'energia×velocidade' para unidades de

⁵A baixas energias aparece nítido o efeito da extensão do alcance, conforme mostra a Figura 8.6. Íons de grande número atômico têm a possibilidade de capturar vários elétrons do meio à medida que perdem velocidade. Devido a esse efeito, tais íons podem eventualmente ter alcance maior que íons de menor número atômico com a mesma energia.

⁶Lembremo-nos que nas Seções 3.7 e 7.2 já observamos semelhança de propriedades dos compostos orgânicos com respeito à polarização e à taxa de energia.

Tabela 8.4: Coeficientes b_{mn} da equação (8.7).

		n				
		0	1	2	3	
m	0	-0.00006	0.05252	0.1285	0	para $0 \leq \chi < 0.2$
	1	-0.00185	0.07355	0.07171	-0.02723	para $0.2 \leq \chi < 2.0$
	2	-0.0793	0.3323	-0.1234	0.0153	para $2.0 \leq \chi < 3.0$
	3	0.220	0	0	0	para $3.0 \leq \chi < \infty$

Tabela 8.5: Coeficientes a_{mn} da equação (8.8).

		n		
		0	1	2
m	0	$-7.5265 \cdot 10^{-1}$	2.5398	$-2.4598 \cdot 10^{-1}$
	1	$7.3736 \cdot 10^{-2}$	$-3.1200 \cdot 10^{-1}$	$1.1548 \cdot 10^{-1}$
	2	$4.0556 \cdot 10^{-2}$	$1.8664 \cdot 10^{-2}$	$-9.9661 \cdot 10^{-3}$

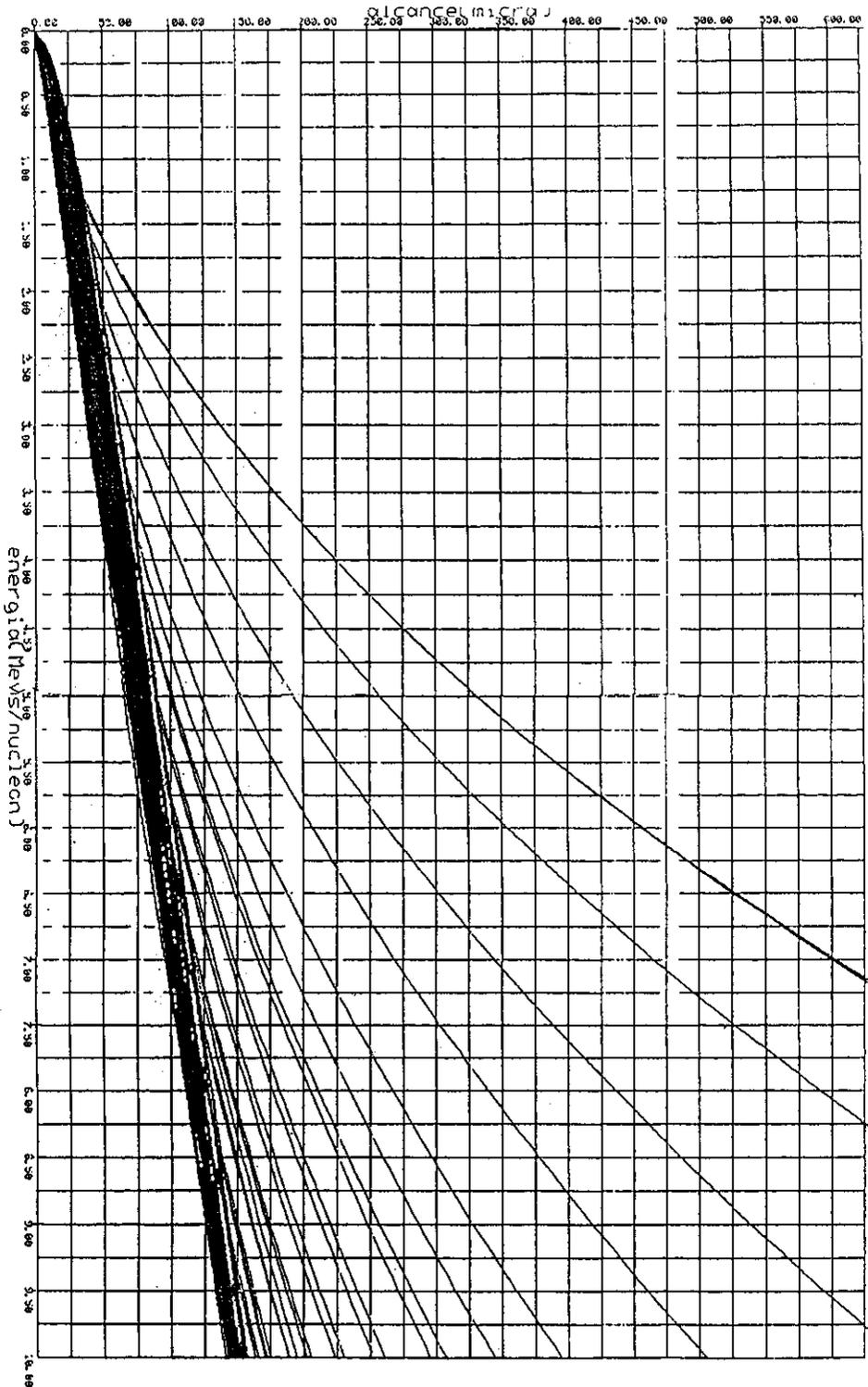


Figura 8.6: Alcance em função da energia no intervalo 0 até 10 MeV/u.m.a.. Note-se o efeito da extensão do alcance (comentado na nota de rodapé 5 da página 75).

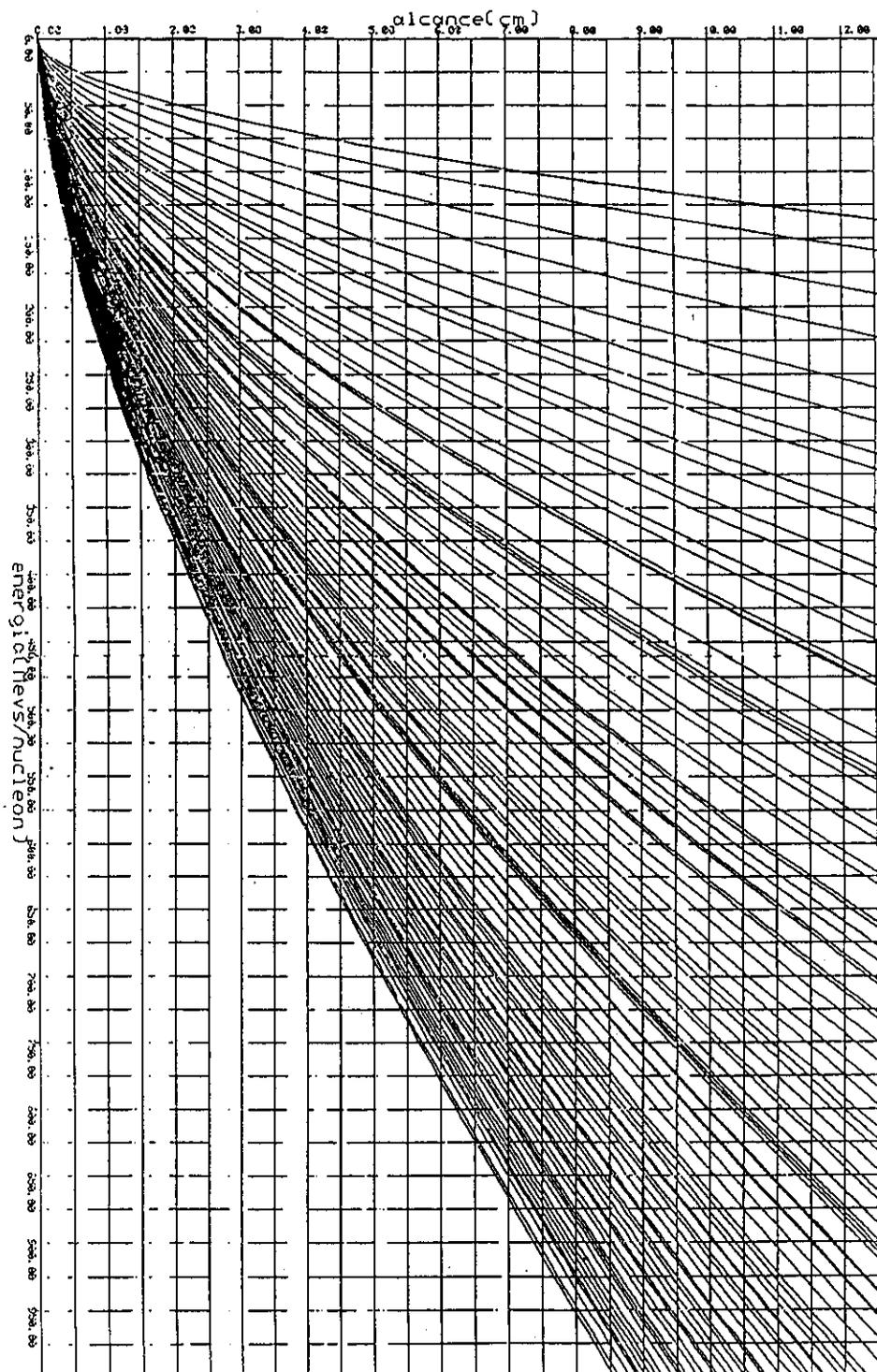


Figura 8.7: Alcance em função da energia no intervalo 0 até 1000 MeV/u.m.a..

massa atômica, representação da expressão (8.3); ele pode ser encontrado, (juntamente com o gráfico correspondente para elétrons), no Apêndice D.

8.4 'Velocidade \times alcance'

Descrevemos nesta seção as etapas esquematizadas na expressão (8.4) que permitem relacionar a velocidade da partícula primária com o seu alcance residual. O programa E.FOR (página 123), por intermédio da subrotina que busca os zeros de uma função (denominada DRTMI.FOR⁷), inverte algebricamente a relação 'alcance-energia' $x(z, \epsilon)$ para $\epsilon(z, x)$, com x assumindo valores escolhidos⁸. Os resultados são escritos no arquivo EPR.DAT (página 124).

Em seguida o programa B.FOR (página 124) lê o arquivo EPR.DAT e calcula $\beta(z, x)$; os resultados são escritos no arquivo BPR.DAT (página 125).

8.5 A função resposta do material

O programa VVERES.FOR (vide página 126) desenha vários gráficos da *função resposta do material*— $v_T \times \frac{d\epsilon_T}{dx}$ —com a finalidade de escolher o valor ótimo da constante K (reporte-se à Figura 8.5 para acompanhar o desenvolvimento do algoritmo). Por um lado, o programa lê o arquivo VVPR.DAT (página 120) a fim de obter os valores de v_T , experimentais, a serem colocados nas ordenadas dos gráficos. Por outro lado, este é o programa que efetua o cálculo da grandeza microscópica $\frac{d\epsilon_T}{dx}$ (conforme a expressão (8.2)), para o que lê os valores da velocidade β no arquivo BPR.DAT (página 125); os resultados são colocados nas abscissas dos gráficos. A Figura 8.8 mostra os gráficos obtidos.

8.6 Comportamento com respeito ao número atômico

Os gráficos $v_T \times \frac{d\epsilon_T}{dx}$ obtidos para diferentes valores da constante K , apresentados na Figura 8.8, mostram que a relação entre as grandezas se torna independente de z para $K \simeq 0.2$ (em nitrato de celulose). A constante de correção K é o logaritmo de outra constante K' , multiplicativa, que altera os valores admitidos para b_{maxj} , ou $b_{e,r}$. Um parâmetro $K \simeq 0.2$ representa uma correção pequena com relação aos resultados obtidos com os parâmetros adotados até o momento (o valor da parcela em $\ln \frac{b_{maxj}}{b_{e,r}}$ é aproximadamente 6)⁹ e evidencia a consistência do modelo de perda

⁷Trata-se de uma rotina padrão para a busca de zeros de uma função.

⁸Escolheu-se os seguintes valores de alcance, que constituem uma amostra significativa do intervalo medido: 25, 50, 75, 100, 125 e 150 angstroms.

⁹O programa VVERES.FOR foi também aplicado tentativamente para o cálculo da perda de energia total, expressão (3.34) (acrescida de uma constante de correção), caso em que indicou um valor -4.5 para a constante K . Tal fator corresponde a uma constante multiplicativa $K' \simeq \frac{1}{100}$. Ocorre que na expressão (3.34) para a perda de energia total não é possível alterar o valor de b_q , porque esse parâmetro mínimo é definido a partir do princípio da incerteza. A alternativa seria dividir o parâmetro máximo por 100, mas isso o torna da ordem das dimensões atômicas (vide expressão (3.26)), o que destruiria a idéia da integração em um cilindro ao redor da trajetória da

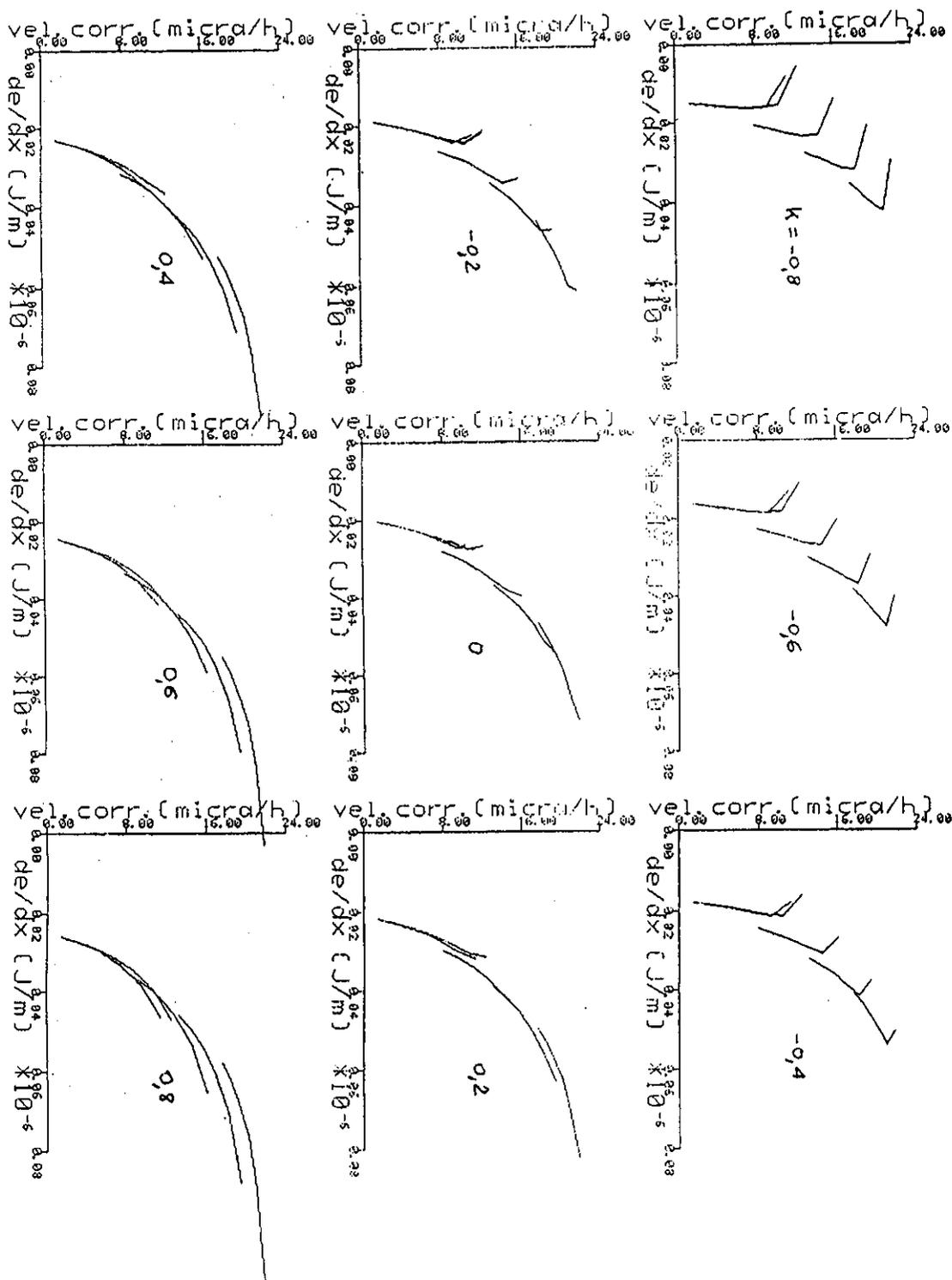


Figura 8.8: Gráficos $v_T \times \frac{dv_T}{dz}$ para diferentes valores da constante K (em nitrato de celulose).

de energia restrita aos elétrons que contribuem à formação do traço. Podemos, pois, escrever:

$$\frac{de_r}{dx} = 4\pi N Z \frac{z^2 q_c^4}{m\beta_{CM}^2 c^2} \left(\sum_j f_j \ln \frac{b_{maxj}}{b_{e.r.}} - \frac{\delta}{2} + 0.2 \right), \quad (8.9)$$

função essa que descreve a formação do traço em obediência ao princípio da independência do número atômico da partícula incidente.

8.7 Curvas 'velocidade de corrosão × alcance'

Obtido o valor da constante de correção K procede-se à generalização das curvas de calibração do nitrato de celulose, constantes da Figura 8.1. A função $v_T(\frac{dx}{dz})$ foi, por intermédio de um programa aplicativo de mínimos quadrados¹⁰, reproduzida analiticamente como um polinômio de 3º grau¹¹. Obeve-se a seguinte expansão:

$$129.502 \cdot 10^{21} \left(\frac{dx}{dz}\right)^3 - 261.397 \cdot 10^{14} \left(\frac{dx}{dz}\right)^2 + 187.294 \cdot 10^7 \left(\frac{dx}{dz}\right) - 26.875 \quad (\text{em nitrato de celulose}) \quad (8.10)$$

O programa VVR.FOR (vide página 129) recalcula, com a expressão (8.9), a taxa de perda de energia restrita para íons em toda a gama de números atômicos, e com alcances residuais no intervalo 0 a 40 cm ($\frac{dx}{dz}(z, x)$). Os alcances são colocados nos eixos das abscissas. Em seguida, com o uso da expressão (8.10) o programa calcula valores da função generalizada $v_T(z, x)$. Os resultados estão apresentados na Figura 8.9.

partícula primária e os próprios fundamentos do modelo. Mas por outro lado, com a utilização de $b_{e.r.}$, acontece uma elevação natural do parâmetro mínimo (vide Seção 7.5).

Em verdade, uma das motivações originais do presente estudo foi a constatação da impossibilidade de se elevar o parâmetro b_{lim} , ou o parâmetro b_q (porque são parâmetros definidos a partir de princípios fundamentais), enquanto que o valor absoluto da constante K se mantinha elevado. A adoção de uma taxa de perda de energia restrita para a descrição do processo soluciona o impasse.

¹⁰Utilizamos o programa denominado LSQF.FOR, baseado no formalismo de Marquardt, que ajusta um polinômio a um conjunto de dados (vide o livro de Bevington [15, Capítulo 11]).

¹¹Considerou-se que tal grau seria suficiente para a reprodução desejada.

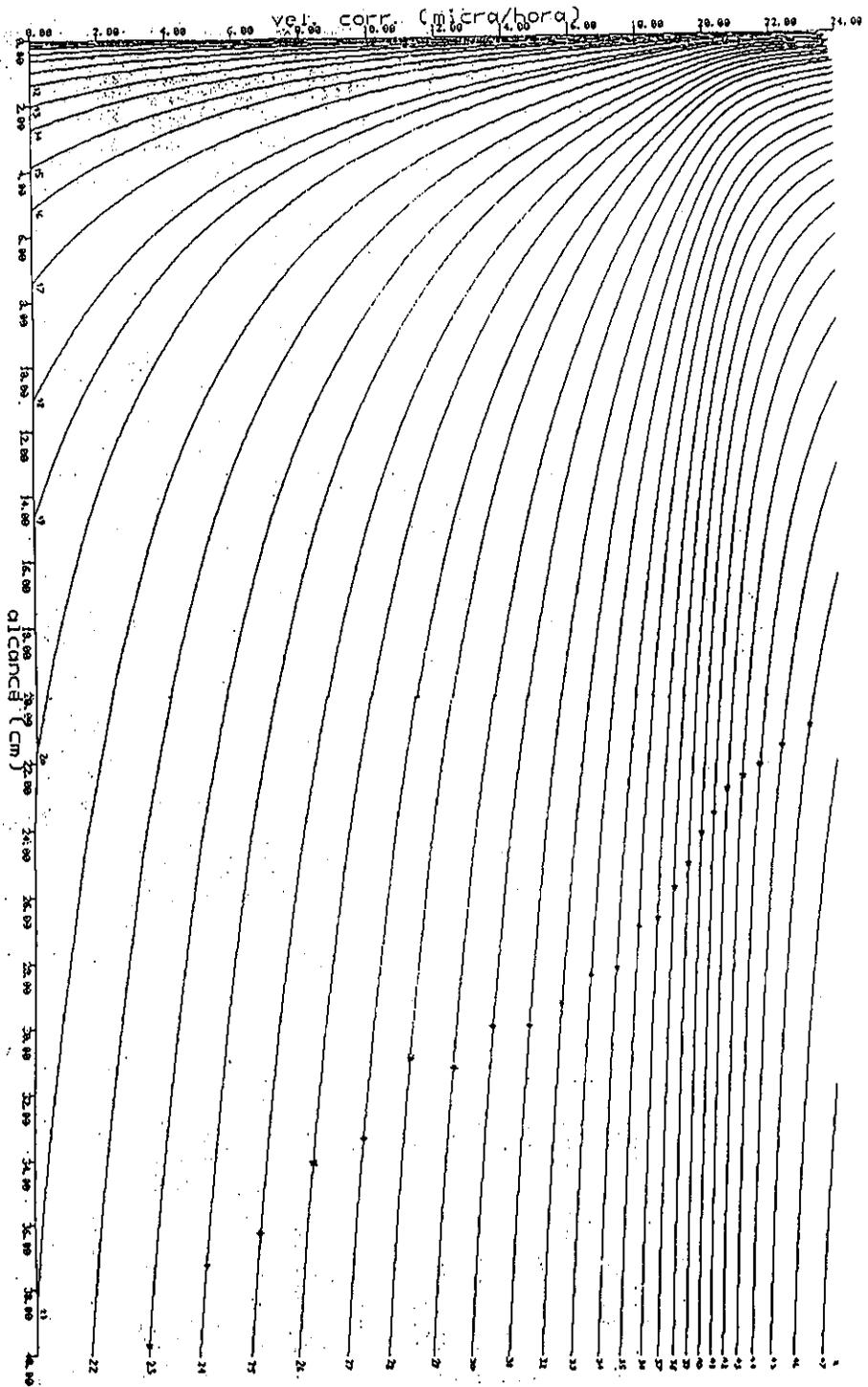


Figura 8.9: Gráficos $v_T \times z$ para vários valores do número atômico z da partícula incidente. Trata-se da generalização, para qualquer número atômico, das curvas de calibração apresentadas na Figura 8.1 para o nitrato de celulose, com base no critério da unicidade da função resposta do material. As estrelas desenhadas sobre as curvas indicam a energia de 1 GeV/u.m.a. para cada núcleo.

Capítulo 9

Dados experimentais de primários pesados

No dia 1º de novembro de 1986 uma colaboração entre o Departamento de Raios Cósmicos e Cronologia do IFGW-UNICAMP, o *Departamento de Lançamento de Balões do INPE-Instituto de Pesquisas Espaciais* e pesquisadores do *Department of Physics, College of Science and Engineering da Aoyama Gakuin University-Tokio*, Japão, fez voar um balão estratosférico de 47 000 m³ de hidrogênio e peso total de 550 kg, transportando, além de outros detectores, uma pilha de detectores sólidos CR39 para a identificação de núcleos primários da radiação cósmica [68].

O lançamento foi realizado a partir do Centro de Lançamento de Balões do INPE, em Cachoeira Paulista, SP. Os ventos estratosféricos sopram na região em direção ao continente durante o verão¹. O perfil de altitude do vôo, com valor máximo de 30700 m (10 milibars), encontra-se apresentado na Figura 9.1.

A parte superior da câmara utilizada no experimento foi composta por uma pilha contendo 17 camadas de detector e material freador, sendo cada camada composta de uma placa de material CR39 (com espessura 1.5 mm), papel oleado (0.1 mm), emulsão fotográfica (1 mm) e uma placa de lucite (com 1.5 mm de espessura); a estrutura da pilha está mostrada na Figura 9.2; sua espessura total foi de 69.7 mm. A câmara possuiu área de 2000 cm², dividida em quatro partes iguais. O tratamento químico foi efetuado na *Aoyama Gakuin University*; as placas de CR39 foram atacadas durante 72 horas com solução de hidróxido de sódio 7.5 N a 80 °C. A análise ao microscópio da parte nº 4 (com área de 500 cm²) foi realizada nos laboratórios do DRCC-UNICAMP, sendo que as outras partes estiveram sendo analisadas na Aoyama University. O mapa dos eventos, realizado a olho nu, encontra-se na Figura 9.3 (apresentado na escala 3:4) e contém 71 eventos que pararam na câmara e

¹O autor, em colaboração com colegas do DRCC-IFGW, efetuou na oportunidade uma exaustiva pesquisa de direções e velocidades de ventos estratosféricos, com o objetivo de caracterizar as condições de vôo, para o que se teve importante contribuição do Departamento de Meteorologia da *TASA-Telecomunicações Aeronáuticas S.A.*, Ponta do Galeão, C.P.3112, Rio de Janeiro. Especiais agradecimentos são devidos ao Sr. Everaldo Cavalcanti Bechara, então chefe daquele Departamento, pela gentilíssima receptividade e valiosas informações prestadas.

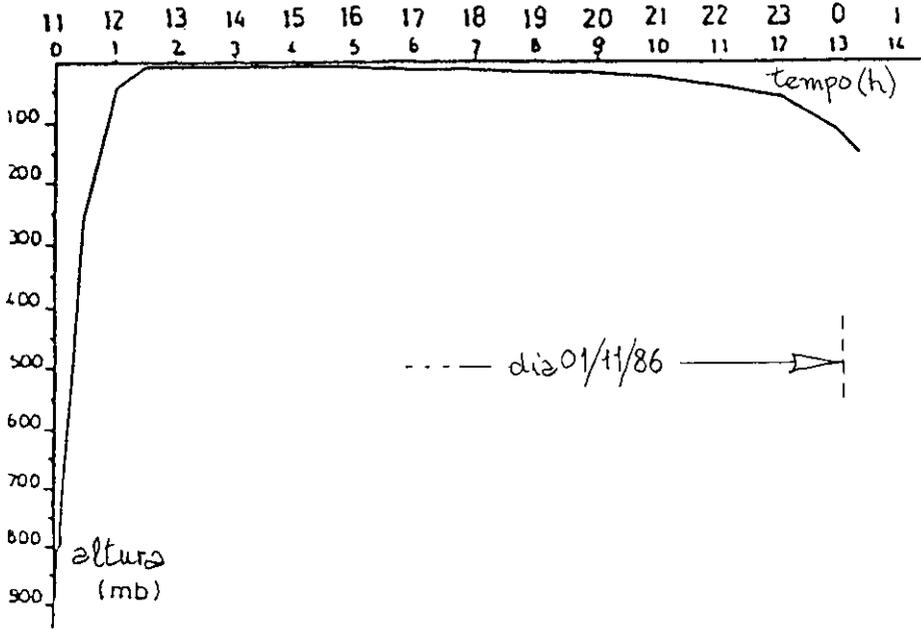


Figura 9.1: Perfil de altitude do voo efetuado em 01 de novembro de 1986 [68].

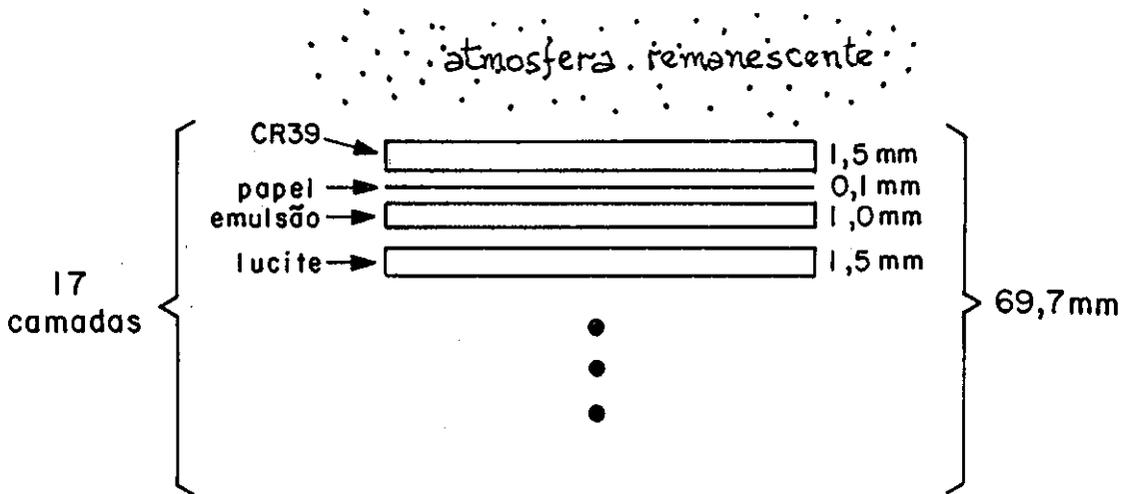


Figura 9.2: Composição da pilha de detectores plásticos exposta à radiação cósmica em 1º de novembro de 1986.

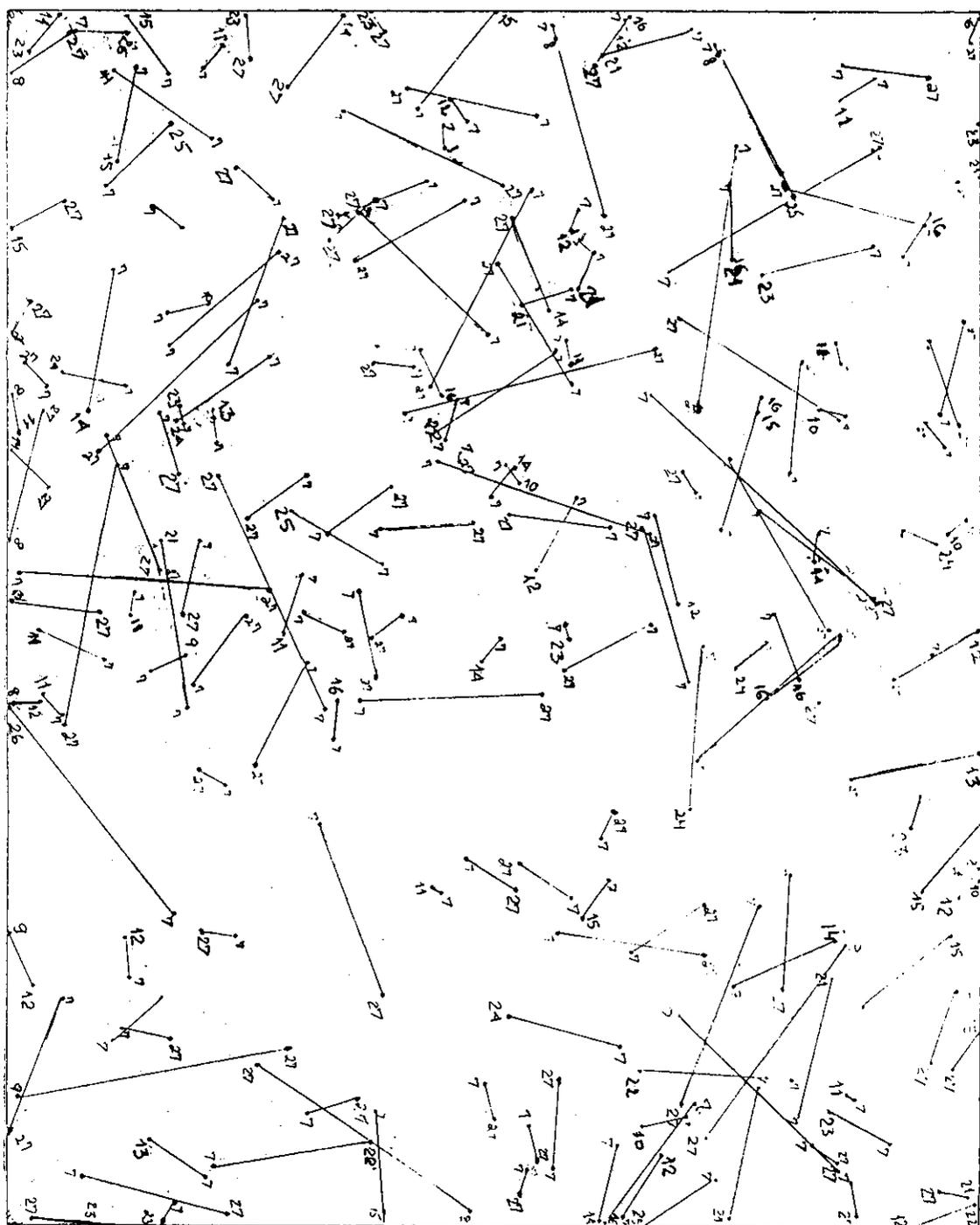


Figura 9.3: Mapa dos eventos registrados na pilha de detectores CR39 durante o voo de novembro de 1986; escala 3:4. (Nota: A numeração das placas, por razões técnicas, inicia-se em 7, vai até 16, recomeça em 21 e acaba em 27, totalizando 17 placas.)

107 eventos que a atravessam completamente, totalizando 178 eventos registrados.

Façamos uma avaliação do número esperado de eventos a serem registrados num experimento com as características dadas, a partir de valores conhecidos da intensidade da radiação e da proporção de núcleos pesados. A intensidade da radiação primária na latitude em que se realizou o experimento ($\sim 22^\circ$, com limiar de rigidez magnética ~ 10 GV [5, página 161]) é da ordem de 10^{-2} partículas/($\text{cm}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{sr}$) [112, página 88]; nossa área de registro foi de 500 cm^2 ; eventos com ângulos de incidência acima do ângulo crítico para o detector sólido não são registrados²—consideremos então, de maneira simplificada, um ângulo sólido algo menor que um hemisfério; nossa exposição durou aproximadamente 10 horas; o detector registra apenas partículas pesadas, que compõem 1% do total; daí se teria:

$$10^{-2} \frac{\text{partículas}}{\text{cm}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{sr}} \cdot 500 \text{ cm}^2 \cdot 36000 \text{ s} \cdot \pi \text{ sr} \cdot \frac{1}{100} \simeq 5000 \text{ partículas.} \quad (9.1)$$

Há ainda dois fatores a serem considerados. Em primeiro lugar, e conforme foi possível verificar posteriormente (vide página 93), a sensibilidade do detector não permitiu o registro de núcleos de oxigênio e carbono com velocidades relativísticas, que constituem contribuições importantes para a intensidade total dos núcleos pesados, de modo que os eventos registrados pertencem ao *grupo do ferro* (ferro, manganês, cromo, titânio e cálcio, elementos relativamente abundantes na radiação primária). Tal limitação deve diminuir o número de eventos até aproximadamente a vigésima parte daquele calculado na expressão 9.1, já que o carbono e o oxigênio encontram-se presentes na radiação cada um com intensidade uma ordem de grandeza maior que a do ferro (vide Figura 1.1); daí se esperaria portanto $5000/20=250$ eventos.

Ademais, uma diminuição ainda maior do número de eventos pode ser atribuída à atenuação na camada remanescente de atmosfera acima do detector. Um valor típico para a seção de choque de uma interação inelástica núcleo-núcleo é $\sigma = 600$ milibarns; consideremos uma massa atômica média para o ar de 14.5; consideremos uma espessura característica da camada de ar $x = 30 \text{ g/cm}^2$ (há que se lembrar a inclinação de um evento aumenta a camada de atmosfera atravessada); seja n_0 o número de eventos que atinge uma área igual à do detector em um mesmo tempo no topo da atmosfera; então o número esperado de eventos (n) será (vide [30]):

$$\begin{aligned} n &= n_0 \cdot e^{-\sigma \frac{6.02 \cdot 10^{23}}{14.5} x} \\ &= 250 \cdot e^{-600 \cdot 10^{-3} \cdot 10^{-24} \frac{6.02 \cdot 10^{23}}{14.5} 30} \\ &\simeq 120 \text{ eventos,} \end{aligned}$$

que é aproximadamente o número observado de eventos que atravessaram a pilha. Esses eventos devem assim pertencer, todos ou quase todos, ao grupo do ferro.

² Detectores sólidos não registram eventos com ângulo de incidência superior a $\arcsen(v_M/v_T)$ (v_M é a velocidade de corrosão ao longo do material; v_T é a velocidade de corrosão ao longo do traço); vide [36, Seção 2.2].

As medições, realizadas com o microscópio Tiyoda 60234 do Grupo de Emulsões do DRCC-UNICAMP, forneceram o valor de v_T para cada cone, obtido a partir da relação

$$v_T = \frac{z + B}{\Delta t \operatorname{sen} \delta} ,$$

onde z é a profundidade do vértice do cone na placa, B é a distância corroída ao longo do material, δ é o ângulo de incidência e Δt é o tempo de ataque químico³. O parâmetro B (corrosão ao longo do material) apresentou diferentes valores, variando de uma placa para outra⁴. O alcance residual é dado pela profundidade na pilha dividida por $\operatorname{sen} \delta$.

As 107 partículas que atravessaram a pilha, o fizeram com velocidades relativísticas. De fato, um íon do elemento ferro por exemplo, que é o elemento pesado mais abundante da radiação cósmica, necessita de uma energia de 430 MeV/u.m.a., ou $\beta = .73$, para atravessar 8.0 g/cm² de material, e um núcleo de urânio necessita de ~900 MeV/u.m.a. para alcançar a mesma distância. Como o limiar geomagnético é de ~10 GeV/u.m.a., as partículas primárias de qualquer número atômico têm energia suficiente para atravessar, com velocidade relativística, a camada remanescente de atmosfera e o próprio detector (a menos que sofram uma interação nuclear durante o percurso).

Partículas relativísticas possuem taxa de perda de energia restrita constante, praticamente independente do alcance⁵. Desenhou-se, pois, um diagrama unidimensional das velocidades de corrosão v_T dos 107 eventos que atravessaram a pilha; vide Figura 9.4. No próximo capítulo discutiremos sua interpretação.

Com respeito a partículas relativísticas, existe uma proposta interessante e simples para a análise dos eventos, devida a Hayashi e Doke [50], os quais sugeriram que a atribuição de números atômicos poderia ser feita a partir de um histograma de velocidades de corrosão, com a observação dos grupos de elementos já conhecidos como mais abundantes na radiação primária, quais sejam, o ferro, o oxigênio e o carbono. Os autores sugeriram ainda que o histograma seria melhor desenhado como função do ângulo de incidência δ ⁶. Seguindo essa sugestão, desenhou-se também o gráfico

³Seguimos a notação de Henke e Benton [51]. Foram também medidos os diâmetros maior e menor da elipse superficial do cone, cujos valores estiveram em boa concordância com valores calculados a partir das expressões (vide citação [51])

$$a = \frac{B \cos \theta}{\operatorname{sen} \delta + \operatorname{sen} \theta} , \quad b = B \sqrt{\frac{\operatorname{sen} \delta - \operatorname{sen} \theta}{\operatorname{sen} \delta + \operatorname{sen} \theta}} ,$$

onde $\operatorname{sen} \theta = \frac{B}{z+B} \operatorname{sen} \delta$ (θ é o ângulo de cone).

⁴A apresentação detalhada de todos os parâmetros envolvidos foi, neste caso, considerada desnecessária para o presente texto.

⁵O gráfico da Figura 8.9 mostra a tendência das velocidades v_T (que são univocamente relacionadas à taxa de perda de energia restrita) dos vários íons a serem independentes do alcance em altas energias.

⁶A argumentação é a de que existe freqüentemente uma variação da sensibilidade do detector com a profundidade, que causaria uma dependência da velocidade de corrosão com o ângulo de incidência (para um mesmo número atômico e velocidade da partícula incidente).

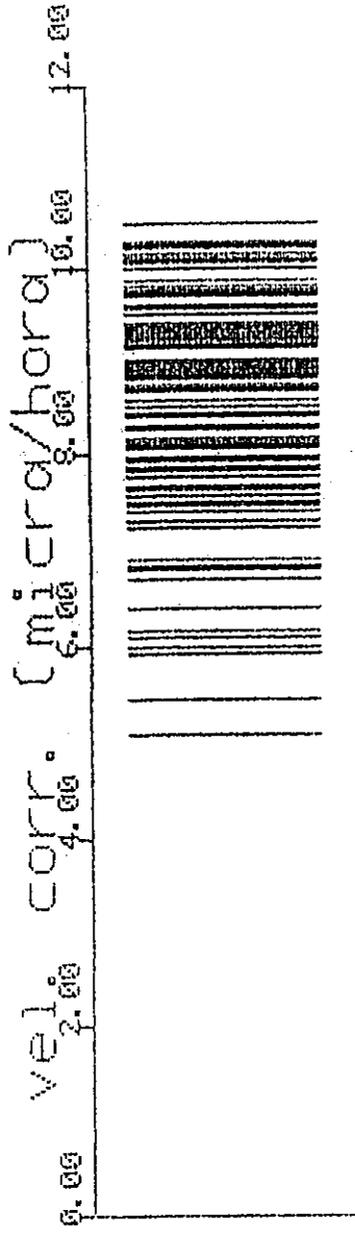


Figura 9.4: Diagrama unidimensional das velocidades de corrosão medidas ao microscópio para os 107 eventos que atravessaram a pilha.

' $v_T \times \sin \delta$ ' que contém nossos eventos que atravessaram a pilha; vide Figura 9.5, página 89 (com interpretação no próximo capítulo).

Os resultados foram mais satisfatórios para os traços que atravessaram a pilha. Com respeito aos núcleos que pararam no interior da pilha, eles foram não relativísticos ao adentrarem os detectores. Os resultados experimentais para esses núcleos encontram-se apresentados no gráfico ' $v_T \times$ alcance residual' da Figura 9.6, à página 90.

O capítulo seguinte será dedicado à discussão dos resultados ora apresentados, em confronto com a interpretação proposta nos capítulos anteriores para a formação do traço. Nele também serão discutidos possíveis motivos para as discrepâncias observadas.

Agradecimentos

O autor agradece especialmente às técnicas do laboratório do Grupo de Emulsões do DRCC-IFGW-UNICAMP, Analzira Oliva de Carvalho e Rosângela de Oliveira, pelo extenso trabalho de medição dos parâmetros dos cones ao microscópio.

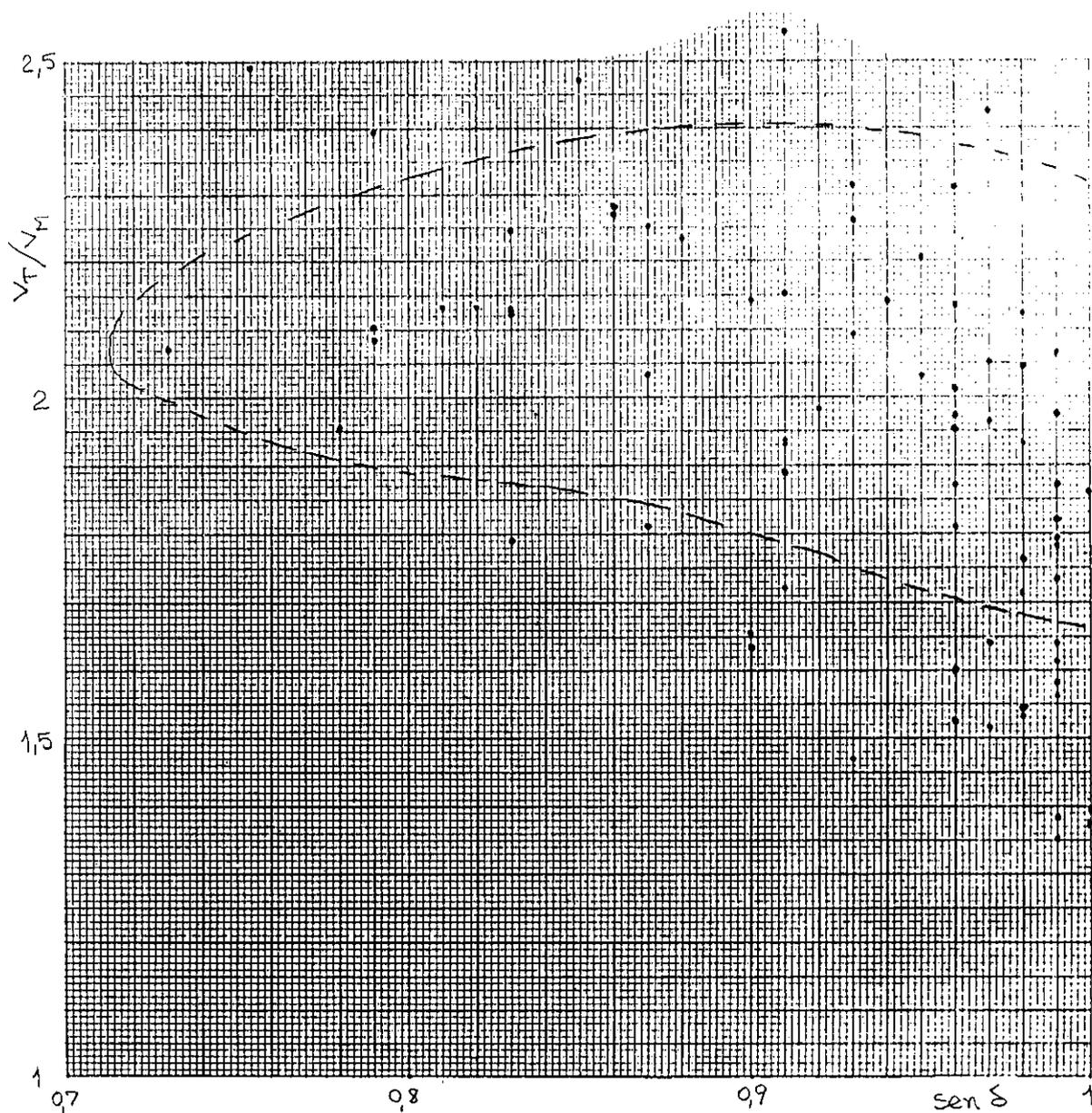


Figura 9.1: Gráfico $v_T \times \text{sen } \delta$ dos eventos que atravessaram a pilha. O conjunto de pontos circundados pela linha pontilhada será entendido como representativo de núcleos do ferro (segundo uma sugestão por Hayashi e Doke [50] de se atribuir números atômicos com base nos elementos mais abundantes da radiação primária).

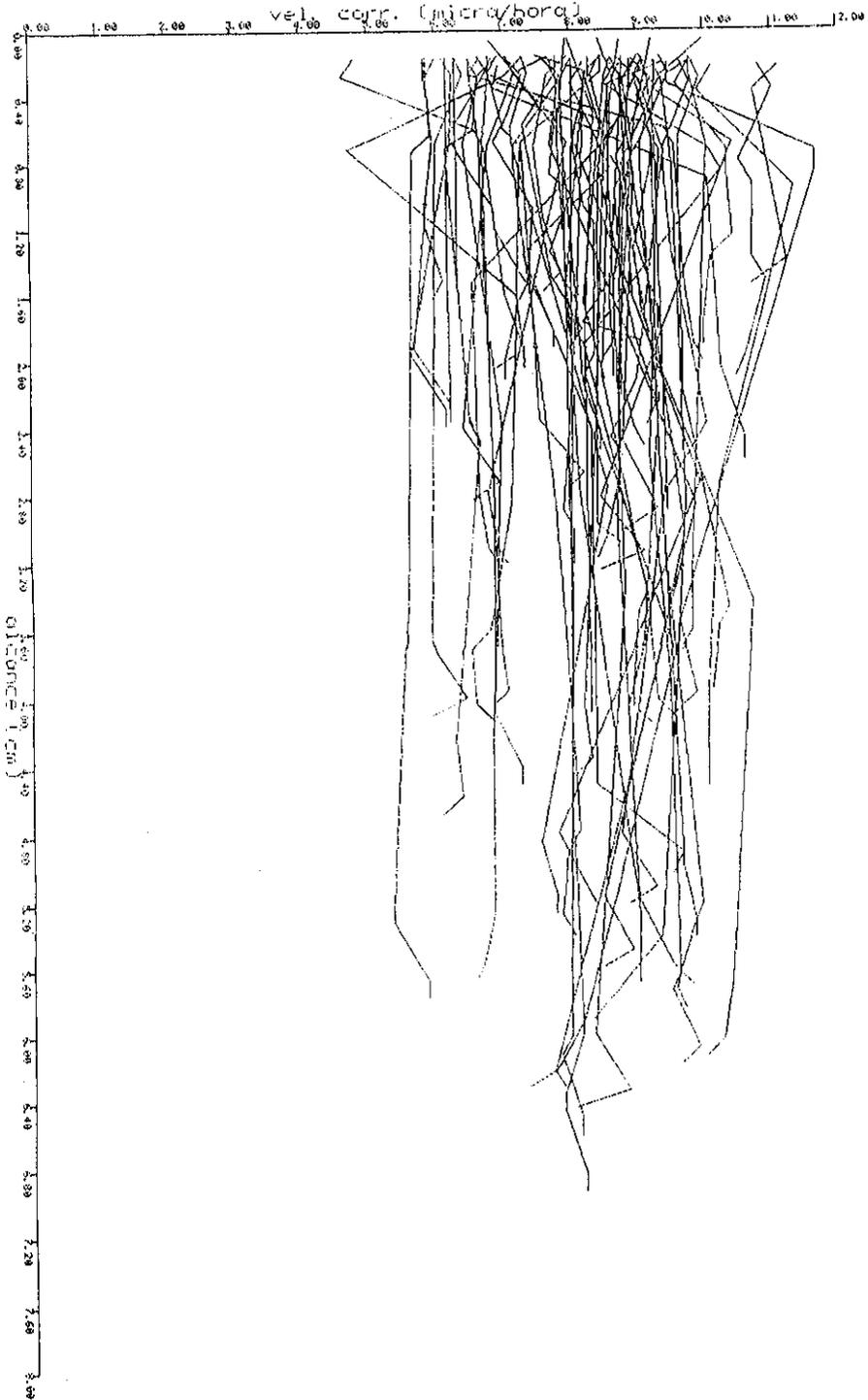


Figura 9.6: Resultados experimentais para as partículas que pararam na pilha. Intervalo da abscissa: 0.4 cm; intervalo da ordenada: 1 μ /hora.

Capítulo 10

Discussão dos Resultados

Discutamos em separado resultados teóricos e experimentais, apresentando em seguida uma seção de resumo das principais conclusões, e outra com as perspectivas futuras do trabalho.

10.1 Resultados teóricos

A proposta de se utilizar a taxa de perda de uma energia restrita para a descrição da formação dos traços de partículas nucleares em sólidos, e em especial nos polímeros, é devida a Benton [11] (a grandeza já havia sido utilizada regularmente em emulsões—vide por exemplo [59, página 431]). No entanto, embora diferentes valores limiares de transferência de energia a elétrons do meio tenham sido sugeridos [13] (citado em [36, página 38]), não se tem desenvolvido uma argumentação que relacionasse esse valor limiar com alguma característica do traço produzido. Propôs-se aqui um modelo de formação de traço em polímeros, baseado no depósito secundário de energia, que permite estabelecer o valor limiar de energia dos elétrons delta para cada partícula e cada material.

A idéia geral do modelo proposto foi explicada no Capítulo 2. Houve necessidade de que as expressões valessem para altas energias do projétil, em vista do que a teoria para as colisões com os elétrons do meio foi desenvolvida relativisticamente (Capítulo 3). As expressões obtidas são todas válidas para velocidades relativísticas, em particular as expressões (3.12), (3.15), (3.17), (3.25)¹, (3.34) e (8.9).

Ao considerar o efeito do princípio da incerteza sobre o parâmetro de impacto limite obteve-se uma expressão analítica generalizada para a fórmula de Bethe da perda de energia (expressão (3.28)), a partir da hipótese de uma distribuição uniforme de probabilidades no intervalo de incerteza (expressão (3.16)). Tal expressão generalizada considera tanto o parâmetro limite clássico (b_{lim}) como o quântico (b_q), evitando a aproximação em $\frac{1}{b^2 + b_q^2}$ (expressão (3.17)), e é adequada para os casos em que o efeito quântico é pouco pronunciado (conforme tratado na Seção 3.3).

¹A expressão 3.25 se encontra desenvolvida na citação [59].

O modelo sugerido unifica duas propostas anteriores, quais sejam a da perda de energia restrita [11] e a da alteração local causada pelo depósito de energia [62,61]². Uma característica do modelo é o tratamento detalhado da produção de raios delta. Trabalha-se com uma hipótese simples para a taxa de energia desses elétrons (expressão (3.34)), com base na qual se calcula a densidade do depósito de energia em torno do traço. Tal simplicidade pode por outro lado incluir desvios, em especial devido à hipótese de que as trajetórias são retilíneas. É interessante que se venha a comparar os resultados deste modelo com o desenvolvido por Monnin [76], que aplica a mesma idéia de energia restrita, mas calcula o efeito devido aos elétrons delta por intermédio de um modelo estatístico.

Iniciou-se um estudo sistemático de medidas de raios de traços³. A interpretação proposta permitiu uma melhor caracterização da estrutura do traço latente.

Outra característica do método é a introdução de uma dependência direta da grandeza primária utilizada para descrever o traço com o diâmetro do próprio traço. Um efeito relacionado com uma difusão não imediata do reagente e dos produtos junto ao vértice do cone de corrosão pode ser considerado. Por exemplo, um raio maior permite uma melhor difusão, aumentando a velocidade de corrosão ao longo do traço. Possivelmente a introdução de uma correção no valor da velocidade de corrosão, dependente do diâmetro do traço latente, permitiria uma relação mais perfeita e coerente entre a quantidade teórica e a observada experimentalmente.

O comportamento da grandeza primária proposta para a descrição do traço foi bastante satisfatório, produzindo uma função resposta do material independente do número atômico da partícula incidente (Seção 8.6). Esse é um teste crucial para uma interpretação da formação do traço. Foi necessário incluir apenas uma parcela aditiva pequena (com relação à própria expressão teórica) para que se obtivesse a requerida independência, o que evidencia um caráter de coerência da interpretação.

O modelo encontra-se em estágio de formulação básica e necessita ser testado em novas situações. Contudo, ele abre desde já perspectivas para a elucidação do mecanismo de formação de traços em polímeros. Retornaremos ainda a este ponto na Seção 10.4.

10.2 Resultados experimentais

A confrontação dos dados experimentais dos eventos registrados de radiação primária (Figuras 9.4 e 9.6) com as atribuições de números atômicos desenvolvidas a partir do modelo proposto (Figura 8.9) não deve em princípio ser feita imediatamente, já que os dados experimentais são relativos ao CR39 enquanto que as generalizações do Capítulo 8 se referiram ao nitrato de celulose. Contudo, não dispusemos até o momento de uma calibração mais completa do CR39, que incluísse um conjunto

²Tentarei aqui resumir a idéia ao máximo: 'a energia é restrita aos elétrons que depositam densidade de energia suficiente para alterar a reatividade química do material'.

³Façamos notar que apenas um dos trabalhos estudados sobre raios de traços [104] foi orientado especificamente para a medida do valor do raio em polímeros, sendo que os outros trataram primordialmente de outros aspectos da formação de traços.

de íons, com diferentes tempos de ataque químico, e que permitisse calcular para esse detector curvas generalizadas do mesmo modo como foi feito para o nitrato de celulose.

Por outro lado, as curvas propostas para o nitrato de celulose (Figura 8.9) podem ser utilizadas numa análise preliminar, com a introdução de um fator de proporcionalidade adequado. O CR39, como material mais sensível, deve apresentar velocidades de corrosão v_T maiores. Nossa observação não apontou contudo nesse sentido, como se pode deduzir ao comparar por exemplo os dados da Figura 9.4 (que correspondem mais provavelmente a núcleos do grupo do ferro, que são sabidamente abundantes na radiação) com as velocidades calculadas em nitrato de celulose da Figura 8.9: as figuras mostram velocidades em CR39 menores que as relatadas [83] e generalizadas em nitrato. Em vista disso, e por ser o CR39 considerado mais sensível, adotar-se-á um fator de proporcionalidade igual a um, ou em outras palavras, os dados experimentais em CR39 serão comparados diretamente com as curvas generalizadas que tomaram por base o nitrato de celulose (Figura 8.9).

Conforme já mencionado (nota de rodapé 5, página 86) as curvas generalizadas tornam-se independentes do alcance (velocidades de corrosão v_T constantes) na região relativística, dependendo apenas do número atômico. Desenhou-se pois, na Figura 10.1 os dados experimentais de velocidades de corrosão das partículas que atravessaram a pilha (Figura 9.4) ao lado das velocidades previstas teoricamente para partículas francamente relativísticas (valores assintóticos das curvas da Figura 8.9). Como se pode então depreender da Figura 10.1, ao conjunto de dados experimentais são pois atribuídos os números atômicos 24 (cromo), 25 (manganês) e 26 (ferro).

As abundâncias na radiação primária relatadas para esses elementos são bastante maiores que as dos elementos vizinhos na tabela periódica (vide Figura 1.1). Por exemplo, a abundância aceita do ferro com relação ao escândio ($z = 21$) é da ordem de 10^2 , e a do cromo ou do manganês são cada uma da ordem de 10 vezes maior que a do escândio. Contudo tal predominância não é suficiente para explicar, em nossos resultados, a ausência de eventos com números atômicos menores que 24, ou maiores que 26, pois as abundâncias aceitas para o elemento cálcio ($z = 20$) ou para o elemento níquel ($z = 28$) são também da ordem de 10 vezes maiores que a do escândio, e esperar-se-ia, numa estatística de 107 eventos, obter pelo menos alguns eventos devidos a esses elementos.

Com respeito ao oxigênio ($z = 8$) e ao carbono ($z = 6$), que se sabe serem especialmente abundantes na radiação, a ausência de tais eventos nos indica que a sensibilidade do detector não foi suficiente para seu registro (este dado foi utilizado consistentemente na avaliação do número esperado de eventos (página 85). Ademais, magnésio ($z = 12$) e silício ($z = 14$) (os números atômicos pares são mais abundantes), com abundâncias comparáveis à do ferro, não foram registrados. O caráter par-ímpar da distribuição também não pôde ser observado; a capacidade de discriminação de número atômico do detector não se apresenta suficiente para resolver diferenças de uma unidade, evidenciada pela observação de um espectro contínuo de números atômicos.

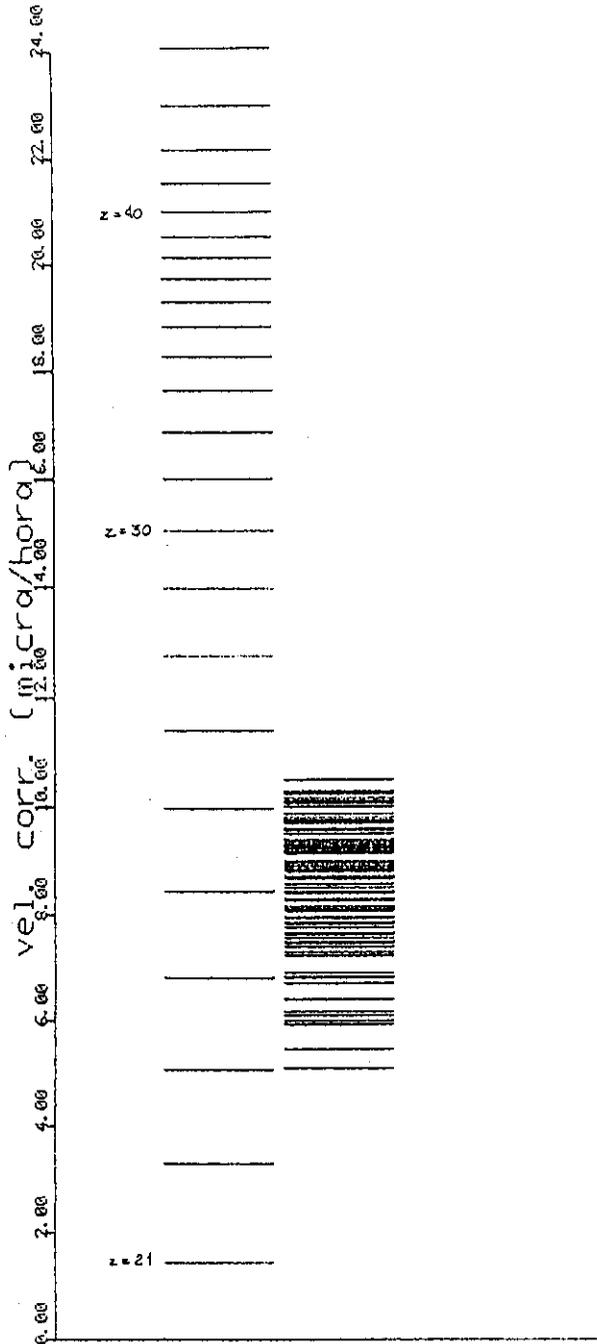


Figura 10.1: Diagrama unidimensional das velocidades de corrosão experimentais (conforme a Figura 9.4) ao lado das velocidades previstas teoricamente para partículas relativísticas (conforme os valores assintóticos das curvas da Figura 8.9).

Mas a ausência dos elementos cálcio ($z = 20$) e níquel ($z = 28$), conforme já mencionado, não pode ser explicada por uma eventual falta de sensibilidade dos detectores, porque têm números atômicos muito próximos do número atômico do ferro. Então os resultados obtidos estariam apontando para uma abundância de elementos do grupo do ferro *maior* que a tradicionalmente admitida⁴, eventualmente da ordem de 10^3 , ou mais, vezes a do elemento escândio. Desse modo, a predominância maciça do elemento ferro, associada a uma sensibilidade e a um poder de resolução limitados, explicaria os resultados experimentais obtidos, centrados no ferro, com alguma largura em números atômicos, e com ausência de eventos de outros números atômicos.

Seguindo a idéia de Hayashi e Doke [50] de atribuição de números atômicos pelos grupos já comprovadamente abundantes (vide página 86), o conjunto de pontos da Figura 9.5, página 89, circundados pela linha pontilhada seria representativo de núcleos do elemento ferro. Tal atribuição indica que a dependência da velocidade de corrosão v_T com a profundidade é pouco pronunciada.

Com respeito aos traços que terminam na pilha, tais partículas são não-relativísticas e devem ser entendidas como núcleos secundários produzidos em interações na camada remanescente de ar acima dos detectores (o limiar geomagnético exclui primários de baixas energias). Curiosamente, esses traços apresentaram velocidades de corrosão v_T com pouca variação ao longo do trajeto (vide Figura 9.6); ao contrário, esperava-se para partículas não relativísticas uma nítida variação de tamanhos de cone, variação essa diretamente relacionada à velocidade que diminui. Uma possível causa é o tempo de ataque químico, de 72 horas, que teria sido excessivo para a formação de cones característicos de cada partícula incidente. O desenvolvimento de cones além de determinado tamanho deve dificultar a difusão do reagente e dos produtos, de modo a prejudicar o prosseguimento da corrosão.

Finalizando, a indicação de uma superabundância de elementos do grupo do ferro, com relações Fe/Ni e Fe/Ca maiores que as aceitas até o momento, seria um resultado positivo do experimento de detecção efetuado pelo DRCC em 1986.

10.3 Resumo dos resultados

Como resultados teóricos houveram os seguintes itens:

- Desenvolveu-se um modelo para a formação do traço em polímeros, com base na taxa de perda de uma energia restrita, cujo limiar é determinado pelas características da partícula incidente e do material;

⁴Existe ainda a possibilidade de interpretar os dados como uma escassez de cálcio e níquel, ao lado de uma abundância regular de ferro, já que não tivemos o registro de outros núcleos para comparação. Contudo, esses dois elementos são separados na tabela periódica por várias unidades de número atômico, enquanto que os elementos do grupo do ferro (cromo, manganês e ferro) são próximos e têm propriedades químicas em comum (metais). Assim, os elementos do grupo do ferro devem ter mecanismos de formação nas fontes de radiação que são relacionados entre si. Torna-se assim mais plausível interpretar os dados obtidos como um acréscimo dos elementos do grupo do ferro, ao invés de uma atenuação de dois elementos pouco relacionados um com o outro (cálcio e níquel).

- O modelo é válido para velocidades relativísticas da partícula incidente;
- Obteve-se uma expressão generalizada à fórmula de Bethe para a taxa de perda de energia, válidas em um intervalo mais amplo de números atômicos e velocidades;
- Desenvolveu-se um estudo sistemático de diâmetros de traços latentes em polímeros;
- O modelo apresentou um comportamento altamente satisfatório para a descrição de traços em nitrato de celulose.

Como resultados experimentais pode-se citar:

- Há indicação de uma abundância de elementos do grupo do ferro, com velocidades relativísticas, acima daquela aceita até a presente data;
- Uma abundância elevada de cromo e manganês foi observada, em concordância com as abundâncias conhecidas;
- O detector utilizado não registrou partículas relativísticas com $z = 14$ (silício) ou menores;
- Sugere-se tempos de ataque químico menores, suficientes para a observação nítida dos cones ao microscópio, a fim de que se evite o efeito de unificação e retardamento das velocidades de corrosão, ocasionado pela diminuição da difusão junto ao vértice do cone.

10.4 Continuidade e Perspectivas

Durante o trabalho, e na literatura consultada, várias opções surgiram que ainda não puderam ser desenvolvidas. Este trabalho constitui uma retomada da problemática do processo de formação de traços em detectores sólidos, assunto que tem importância na identificação de núcleos. Essa identificação depende crucialmente da qualidade das calibrações efetuadas, que devem ser repetidas a fim de acompanhar a evolução dos detectores. A exposição regular de amostras de detector CR39 a diferentes íons permitiria que novos experimentos de registro da radiação primária fossem realizados em condições controladas.

Por outro lado, é importante a verificação, no material CR39 ou em outros materiais, do comportamento da função proposta—*a perda de energia restrita aos raios delta que depositam uma densidade significativa de energia no interior do traço*—com relação ao número atômico da partícula incidente; a verificação feita se restringiu ao nitrato de celulose. Mesmo no caso estudado, uma pesquisa mais exaustiva da dependência do parâmetro limiar $b_{e,r}$ com o número atômico e a velocidade da partícula incidente (vide Seção 7.5) poderá fornecer resultados mais perfeitos. Tal dependência pode mesmo ser diferente, conforme o material, ao invés de existir uma

proporcionalidade como a que foi admitida. Também, o critério adotado de desprezar os elétrons que contribuem com 1 % ou menos do depósito de energia na periferia foi arbitrário e poderia ser revisto.

Introduziu-se aqui uma preocupação especial com os diâmetros dos traços. Um eventual sucesso da aplicação do algoritmo poderá estimular a melhoria de técnicas para medidas de diâmetros, tais como a difração de raios-X ou a resistividade de poros. E, se por um lado o modelo é consistente com dados de baixa energia e número atômico, deve-se também procurar aplicá-lo nas condições mais abrangentes dos novos aceleradores (vide página 67).

Melhoramentos nos cálculos advirão da inclusão dos ângulos de recuo dos elétrons delta, da consideração da alteração da parcela de polarização quando se calcula uma taxa de energia restrita (expressão (4.7))⁵, e pelo uso da expressão generalizada deduzida para a taxa de perda de energia (expressão (3.28)) em lugar da aproximação usual (expressão (3.29)).

Uma teoria da relação entre a velocidade de difusão de solutos e o diâmetro do traço teria também aplicação no algoritmo proposto.

Há que se lembrar que não foi considerado o efeito de *ionização primária*, que continua a ser admitida como a grandeza determinante da formação de traços em sólidos inorgânicos, enquanto que a interpretação aqui proposta pretendeu dar conta dos traços em polímeros. Do mesmo modo que não se tem considerado em sólidos inorgânicos a contribuição dos elétrons secundários à formação de traços, cometeu-se aqui o exagero oposto, qual seja, o de considerar apenas o fenômeno secundário na descrição de traços em polímeros⁶. Pode-se dizer que não se realizou ainda a tarefa, apontada por Fleischer, Price e Walker [36, página 39], de ponderar as contribuições relativas dos mecanismos primário e secundário de modo a atingir a concepção mais abrangente e completa possível do processo de formação de traços nos diferentes sólidos.

Com respeito ao estudo da radiação cósmica primária, objetivo central de toda a pesquisa, a sugestão de superabundância de elementos do grupo do ferro deve ser averiguada. E a utilização de detectores sólidos em condições controladas é crucial para esse esclarecimento.

⁵Considerou-se sem restrições a mesma parcela de polarização (expressão (3.33)) que foi aplicada para a taxa de perda de energia total (expressão (3.34)), aproximação possível em baixas energias; em energias mais elevadas deve-se considerar a alteração.

⁶A menos da própria produção dos elétrons delta, que é um fenômeno primário.

Apêndice A

O modelo do elétron ligado elasticamente

A.1 Teoria de perturbações dependente do tempo

Trataremos do comportamento de um elétron ligado a um átomo conforme um potencial eletrostático $V(r)$ —onde r é o módulo do vetor posição \vec{r} —e sujeito a um campo eletromagnético externo dependente do tempo (t). Tal sistema é, de maneira bastante geral, descrito pelo seguinte hamiltoniano $\hat{H}(t)$:

$$\frac{1}{2m} [\hat{\vec{p}} + q_e \vec{A}(\vec{r}, t)]^2 - q_e V(r) \quad ,$$

onde:

$\hat{\vec{p}}$ é o operador quantidade de movimento;

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ é o potencial vetor que descreve o campo externo, $\vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{r}, t)$,

$\vec{B}(\vec{r}, t) = \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t)$, onde \vec{E} é o campo elétrico e \vec{B} é o campo magnético;

$V(r)$ é o potencial atômico;

$-q_e$ é a carga do elétron (q_e é positivo).

Desenvolvendo o quadrado tem-se:

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + \frac{q_e}{m} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) + \frac{q_e^2}{2m} \vec{A}^2(\vec{r}, t) - q_e V(r) \quad .$$

Faremos agora a aproximação que considera campos externos de baixa intensidade. Tal aproximação é, certamente, discutível no caso de uma partícula que passa junto a um átomo com parâmetro de impacto da ordem da distância interatômica, pois momentaneamente o campo iguala ou supera o campo atômico, o que tem, eventualmente, como resultado a ejeção do elétron. Contudo, o tratamento algébrico completo do hamiltoniano é complexo, em vista do que se adota a aproximação de baixa intensidade, e a presente abordagem não deve ter aplicação no

caso de pequenos parâmetros de impacto, situação em que a aproximação do elétron livre é mais adequada. Sendo assim, a parcela em $\vec{A}^2(\vec{r}, t)$ é, para efeito do presente cálculo, desconsiderada.

As duas parcelas $\hat{p}^2/2m - q_e V(\mathbf{r})$ constituem o hamiltoniano atômico (\hat{H}_o) e a parcela $(q_e/m)\vec{p}\vec{A}(\vec{r}, t)$ é o hamiltoniano de uma influência externa dependente do tempo—chamemo-la de $\hat{W}(t)$ —e que será tratada como uma perturbação. A equação de movimento para o elétron atômico é:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = [\hat{H}_o + \hat{W}(t)] |\Psi(t)\rangle .$$

Escrevendo o estado $|\Psi(t)\rangle$ como uma combinação linear de auto-estados $|\varphi_k\rangle$ do hamiltoniano atômico \hat{H}_o ,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k b_k(t) e^{-ie_k t/\hbar} |\varphi_k\rangle ,$$

onde¹ $b_k(t) = \langle \varphi_k | \Psi(t) \rangle e^{ie_k t/\hbar}$, pode-se reescrever, de um modo equivalente, essa equação de movimento como o seguinte conjunto de equações diferenciais para os parâmetros $b_n(t)$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk} t} W_{nk}(t) b_k(t) , \tag{A.1}$$

onde

$$\omega_{nk} = \frac{e_n - e_k}{\hbar} \tag{A.2}$$

e

$$W_{nk} = \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_k \rangle .$$

Conforme é usual em teoria de perturbações dependentes do tempo, consideremos o operador de perturbação $\hat{W}(t)$ como sendo um operador $\hat{W}'(t)$ multiplicado por um número real λ , que pode variar de zero até um valor máximo, e tal que $\lambda \ll 1$:

$$\hat{W}(t) = \lambda \hat{W}'(t) \quad (\lambda \ll 1).$$

Então os parâmetros $b_n(t)$ podem ser escritos como séries:

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots$$

que substituídas no conjunto de equações diferenciais (A.1), e igualando-se parcelas com a mesma potência de λ (e supondo, para simplicidade, que $|\Psi(t=0)\rangle = |\varphi_i\rangle$), fornece:

$$\begin{aligned} b_n^{(0)}(t) &= \delta_{ni} , \\ \lambda b_n^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni} t'} W_{ni}(t') dt' \end{aligned}$$

¹O raciocínio está apresentado com a notação própria para um sistema que tem um espectro discreto de energias. No entanto, o caso geral inclui uma parte contínua do espectro. A generalização a partir do caso discreto é imediata, embora um pouco trabalhosa, e está omitida para favorecer a clareza das idéias fundamentais.

e outras igualdades para parcelas de ordem superior. Num instante qualquer o estado $|\Psi(t)\rangle$ do sistema é, pois, em primeira ordem igual a

$$e^{-ie_i t/\hbar}|\varphi_i\rangle + \sum_n \lambda b_n^{(1)}(t) e^{-ie_n t/\hbar}|\varphi_n\rangle .$$

Em nosso caso $\hat{W}(t) = \frac{q_e}{m} \hat{\vec{p}} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t)$ de modo que:

$$\lambda b_n^{(1)}(t) = \frac{q_e}{i\hbar m} \vec{p}_{ni} \int_0^t e^{i\omega_{ni} t'} \vec{A}(\vec{r}, t') dt' ,$$

com $\vec{p}_{ni} = \langle \varphi_n | \hat{\vec{p}} | \varphi_i \rangle$.

A perturbação que se pretende tratar é aquela causada por uma partícula que passa próximo ao átomo. Como a integral é tratável quando a perturbação é harmônica, escreveremos $\vec{A}(\vec{r}, t)$ em termos de sua transformada de Fourier $\vec{A}(\vec{r}, \omega)$:

$$\vec{A}(\vec{r}, r) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\vec{r}, \omega) e^{i\omega t} d\omega .$$

Substituindo tem-se:

$$\begin{aligned} \lambda b_n^{(1)}(t) &= \frac{q_e}{i\hbar m} \vec{p}_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\vec{r}, \omega) \int_0^t e^{i(\omega_{ni} + \omega)t'} dt' d\omega \\ &= \frac{q_e}{i\hbar m} \vec{p}_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\vec{r}, \omega) \frac{e^{i(\omega_{ni} + \omega)t} - 1}{i(\omega_{ni} + \omega)} d\omega , \end{aligned}$$

e o estado do sistema num instante qualquer será:

$$e^{-ie_i t/\hbar}|\varphi_i\rangle - \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \vec{p}_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\vec{r}, \omega) \frac{e^{i(\omega_{ni} + \omega)t} - 1}{\omega_{ni} + \omega} e^{-ie_n t/\hbar}|\varphi_n\rangle ,$$

ou ainda, multiplicando-se pelo número $e^{ie_i t/\hbar}$ (de módulo 1, sem significação física), tem-se:

$$|\Psi(t)\rangle = |\varphi_i\rangle - \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \vec{p}_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\vec{r}, \omega) \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega_{ni} t}}{\omega_{ni} + \omega} d\omega |\varphi_n\rangle .$$

A.2 Cálculo do valor médio da posição do elétron

A grandeza física de interesse para a descrição do movimento do elétron é o valor médio de sua posição $\langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle$, dependente do tempo, porque, quando a partícula incidente atravessa uma região que contém muitos átomos, a sua interação pode ser descrita por intermédio dos comportamentos médios dos elétrons, sem necessidade da descrição quântica completa de cada elétron em particular. Segue o cálculo do valor médio da posição:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle = & \left(\langle \varphi_i | - \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \vec{p}_{in} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\vec{r}, \omega) \frac{e^{-i\omega t} - e^{i\omega_{ni} t}}{\omega_{ni} + \omega} d\omega \langle \varphi_n | \right) \vec{r} \\ & \left(| \varphi_i \rangle - \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \vec{p}_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\vec{r}, \omega) \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega_{ni} t}}{\omega_{ni} + \omega} d\omega | \varphi_n \rangle \right) . \end{aligned}$$

A integração na variável r é simplificada quando o campo eletromagnético tem variação pequena na região do átomo. Como, em nossas aplicações, estaremos considerando parâmetros de impacto da ordem ou maiores do que as dimensões do átomo, suporemos que o campo é constante na região de interação, com valor igual a seu valor na origem $\vec{A}(\vec{r}=\vec{0},t)$. Tal aproximação é usualmente conhecida como *aproximação de dipolo*.

Então:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle &= \langle \varphi_i | \vec{r} | \varphi_i \rangle \\ &- \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \left(\vec{p}_{in} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}^*(\vec{r}=\vec{0},\omega) \frac{e^{-i\omega t} - e^{i\omega_{ni}t}}{\omega_{ni} + \omega} d\omega \right) \vec{r}_{ni} \\ &- \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \left(\vec{p}_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\vec{r}=\vec{0},\omega) \frac{e^{i\omega t} - e^{-i\omega_{ni}t}}{\omega_{ni} + \omega} d\omega \right) \vec{r}_{ni} \\ &+ \text{parcelas que contém o fator } |\vec{A}(\vec{r}=\vec{0},\omega)|^2, \end{aligned}$$

onde $\vec{r}_{ni} = \langle \varphi_n | \vec{r} | \varphi_i \rangle$.

A primeira parcela é nula; o valor médio da posição é nulo em qualquer estado estacionário (a coordenada da origem é considerada como sendo igual a $(0,0,0)$). Algebricamente, o operador \vec{r} é ímpar, o que torna nula a integral do valor médio.

As parcelas que contém o fator $|\vec{A}(\vec{r}=\vec{0},\omega)|^2$, por outro lado, serão desprezadas com o argumento de se estar tratando de campos de baixa intensidade (vide página 98). Ademais, as parcelas em ω_{ni} correspondem a movimento transiente. (Observação: Denotaremos doravante o campo $\vec{A}(\vec{r}=\vec{0},\omega)$ apenas por $\vec{A}(\omega)$.) Assim:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle &\simeq \\ &- \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \left(\vec{p}_{in} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}^*(\omega) \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{ni} + \omega} d\omega \right) \vec{r}_{ni} \\ &- \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \left(\vec{p}_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\omega) \frac{e^{i\omega t}}{\omega_{ni} + \omega} d\omega \right) \vec{r}_{ni} \\ &+ \text{duas parcelas correspondentes a movimento transiente.} \end{aligned}$$

Será feita adiante uma comparação com o movimento de um oscilador harmônico clássico, e para efeito dessa comparação analisaremos apenas a parte permanente de $\langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle$, sendo que a comparação para o movimento transiente é análoga.

Tem-se, por outro lado, que $\vec{p}_{ni} = im\omega_{ni}\vec{r}_{ni}$, de modo que, na segunda parcela, ao trocarmos \vec{p}_{ni} por \vec{p}_{in} e \vec{r}_{in} e \vec{r}_{ni} , muda o sinal da parcela². Ademais, se utilizarmos a igualdade $\vec{A}^*(\omega) = \vec{A}(-\omega)$, porque $\vec{A}(t)$ é real, teremos:

$$\langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle_{\text{parte permanente}} =$$

²A partir de princípios da Mecânica Quântica tem-se que

$$[\vec{r}, \hat{H}_0] = i\hbar\{\vec{r}, H_0\},$$

onde $\{\vec{r}, H_0\}$ é o parênteses de Poisson para as grandezas clássicas \vec{r} e H_0 , sendo que nessa igualdade, após calculado o parênteses, as variáveis devem ser substituídas por operadores. Aplicando a defini-

$$\begin{aligned}
 & -\frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \left(\bar{p}_{ni} \int_{-\infty}^0 \left[\bar{A}(-\omega) \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{ni} + \omega} + \bar{A}(\omega) \frac{e^{i\omega t}}{\omega_{ni} - \omega} \right] d\omega \right) \bar{r}_{ni} \\
 & + \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \left(\bar{p}_{in} \int_{-\infty}^0 \left[\bar{A}(\omega) \frac{e^{i\omega t}}{\omega_{ni} + \omega} + \bar{A}(-\omega) \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_{ni} - \omega} \right] d\omega \right) \bar{r}_{ni} \\
 = & \frac{q_e}{\hbar m} \sum_n \left(\bar{p}_{in} \int_{-\infty}^0 \left[\bar{A}(-\omega) \frac{2\omega e^{-i\omega t}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2} - \bar{A}(\omega) \frac{2\omega e^{i\omega t}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2} \right] d\omega \right) \bar{r}_{ni} \\
 = & -\frac{2q_e}{\hbar m} \sum_n \left(\bar{p}_{in} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{A}(\omega) \frac{\omega e^{i\omega t}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2} d\omega \right) \bar{r}_{ni} \\
 = & -\frac{2q_e}{\hbar m} \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} [p_{xin} A_x(\omega) + p_{yin} A_y(\omega) + p_{zin} A_z(\omega)] \cdot \\
 & \cdot (x_{ni} \hat{x} + y_{ni} \hat{y} + z_{ni} \hat{z}) \frac{\omega e^{i\omega t}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2} d\omega \\
 = & -\frac{2q_e}{\hbar m} \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} [(p_{xin} x_{ni} \hat{x} + p_{xin} y_{ni} \hat{y} + p_{xin} z_{ni} \hat{z}) A_x(\omega) + \\
 & (p_{yin} x_{ni} \hat{x} + p_{yin} y_{ni} \hat{y} + p_{yin} z_{ni} \hat{z}) A_y(\omega) + \\
 & (p_{zin} x_{ni} \hat{x} + p_{zin} y_{ni} \hat{y} + p_{zin} z_{ni} \hat{z}) A_z(\omega)] \cdot \\
 & \cdot \frac{\omega e^{i\omega t}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2} d\omega .
 \end{aligned}$$

As somatórias sobre todos os estados (e, em especial, as somatórias sobre os estados com mesmo número quântico principal) das parcelas que contém $p_{xin} y_{ni}$, $p_{xin} z_{ni}$, $p_{yin} x_{ni}$, $p_{yin} z_{ni}$, $p_{zin} x_{ni}$ e $p_{zin} y_{ni}$ são nulas, por argumentos provenientes de teoria de grupos (considerou-se aqui que tal demonstração foge ao escopo do presente trabalho). Assim:

$$\begin{aligned}
 \langle \Psi(t) | \bar{r} | \Psi(t) \rangle_{\text{parte permanente}} = \\
 -\frac{2q_e}{\hbar m} \sum_n p_{xin} x_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} A_x(\omega) \frac{\omega e^{i\omega t}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2} d\omega \cdot \hat{x}
 \end{aligned}$$

ção do parênteses de Poisson tem-se:

$$\{\bar{r}, H_0\} = \frac{\partial H_0}{\partial p_x} \hat{i} + \frac{\partial H_0}{\partial p_y} \hat{j} + \frac{\partial H_0}{\partial p_z} \hat{k} = \dot{\bar{r}} = \frac{\bar{p}}{m} ,$$

donde:

$$[\bar{r}, \hat{H}_0] = i\hbar \frac{\bar{p}}{m} .$$

Então:

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_n | [\bar{r}, H_0] | \varphi_i \rangle &= i\hbar \frac{\bar{p}_{ni}}{m} \\
 \bar{r}_{ni} e_i - e_n \bar{r}_{ni} &= i\hbar \frac{\bar{p}_{ni}}{m} \\
 \bar{p}_{ni} &= im\omega_{ni} \bar{r}_{ni} .
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{2q_e}{\hbar m} \sum_n p_{y_{in}} y_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} A_y(\omega) \frac{\omega e^{i\omega t}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2} d\omega \cdot \hat{y} \\
 & -\frac{2q_e}{\hbar m} \sum_n p_{z_{in}} z_{ni} \int_{-\infty}^{+\infty} A_z(\omega) \frac{\omega e^{i\omega t}}{\omega_{ni}^2 - \omega^2} d\omega \cdot \hat{z} .
 \end{aligned} \tag{A.3}$$

A.3 Comparação com a equação horária de um oscilador harmônico forçado

Seja um corpo de massa m que obedece à seguinte equação de movimento (unidimensional):

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -m\omega_0^2 x + qE_x(t) ,$$

onde q é a carga elétrica do corpo e E_x é o campo elétrico externo aplicado. O movimento do corpo será (vide apêndice B, expressão (B.2)):

$$A_x \cos(\omega_0 t + \phi_{0x}) + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{qE_x(\omega) e^{i\omega t}}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} d\omega , \tag{A.4}$$

onde A_x é uma amplitude, ϕ_{0x} é uma fase inicial e $E_x(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} E_x(t) e^{-i\omega t} dt$.

Observa-se então, a partir da expressão (A.3) deduzida na Seção A.2, que aquele valor esperado para a posição do elétron é análogo a uma somatória de posições clássicas, multiplicadas por intensidades. De fato, introduzindo, em cada direção do espaço, o conceito de *intensidade de oscilador* (f_{ni}),

$$f_{x_{ni}} = \frac{2i}{\hbar} p_{x_{in}} x_{ni}; \quad f_{y_{ni}} = \frac{2i}{\hbar} p_{y_{in}} y_{ni}; \quad f_{z_{ni}} = \frac{2i}{\hbar} p_{z_{in}} z_{ni}; \tag{A.5}$$

tem-se:

$$\begin{aligned}
 & \langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle_{\text{parte permanente}} = \\
 & = \sum_n f_{x_{ni}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q_e i \omega A_x(\omega) e^{i\omega t}}{m(\omega_{ni}^2 - \omega^2)} d\omega \\
 & + \sum_n f_{y_{ni}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q_e i \omega A_y(\omega) e^{i\omega t}}{m(\omega_{ni}^2 - \omega^2)} d\omega \\
 & + \sum_n f_{z_{ni}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q_e i \omega A_z(\omega) e^{i\omega t}}{m(\omega_{ni}^2 - \omega^2)} d\omega .
 \end{aligned}$$

Utilizando a relação $\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}$ como

$$\vec{A}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{A}(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

tem-se que

$$\vec{E}(t) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \omega \vec{E}(\omega) e^{i\omega t} d\omega ,$$

donde

$$-i\omega\vec{A}(\omega) = \vec{E}(\omega) .$$

Então:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle_{\text{parte permanente}} &= \\ &= \sum_n f_{xni} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-q_e E_x(\omega) e^{i\omega t}}{m(\omega_{ni}^2 - \omega^2)} d\omega \\ &+ \sum_n f_{yni} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-q_e E_y(\omega) e^{i\omega t}}{m(\omega_{ni}^2 - \omega^2)} d\omega \\ &+ \sum_n f_{zni} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-q_e E_z(\omega) e^{i\omega t}}{m(\omega_{ni}^2 - \omega^2)} d\omega . \end{aligned} \quad (A.6)$$

As intensidades de oscilador são números reais e possuem a seguinte importante propriedade:

$$\begin{aligned} \sum_n f_{xni} &= \frac{2i}{\hbar} \sum_n p_{xin} x_{ni} \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_n (p_{xin} x_{ni} - p_{xni} x_{in}) \quad (\text{vide página 101}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle \varphi_i | [x, p_x] | \varphi_i \rangle \\ &= 1 . \end{aligned}$$

Assim, ao se comparar essa última expressão (A.6) para $\langle \Psi(t) | \vec{r} | \Psi(t) \rangle_{\text{p. perm.}}$ com a equação horária clássica (A.4) tem-se que o valor médio quântico é uma média ponderada de posições de osciladores clássicos forçados.

Deste modo, *um conjunto de elétrons atômicos se comporta, relativamente a um estímulo externo, como um conjunto de osciladores clássicos*. Se tivermos um conjunto de N átomos em idênticas condições, com Z elétrons cada um, podemos dividir os NZ elétrons em grupos de osciladores, cada grupo oscilando com frequência própria ω_{ni} e possuindo $NZ f_{ni}$ elétrons.

Apêndice B

Energia transferida a um oscilador

A equação de movimento de um elétron atômico, no modelo clássico de ligação harmônica, e desprezando-se qualquer dissipação, é:

$$m\ddot{\vec{r}} = -m\omega_0^2\vec{r} - q_e\vec{E}(t) \quad (q_e \text{ é positivo}). \quad (\text{B.1})$$

Supõe-se aqui a aproximação de dipolo— $\vec{E}(\vec{r},t) \simeq \vec{E}(\vec{r}=\vec{0},t)$, vide página 101—e desprezou-se a influência do campo magnético¹.

Escrevendo $\vec{r}(t)$ e $\vec{E}(t)$ em termos de suas transformadas de Fourier,

$$\vec{r}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{r}(\omega)e^{i\omega t} d\omega \quad \vec{E}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{E}(\omega)e^{i\omega t} d\omega \quad ,$$

e substituindo na expressão (B.1) tem-se:

$$-m\omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{r}(\omega)e^{i\omega t} d\omega = -m\omega_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{r}(\omega)e^{i\omega t} d\omega - q_e \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{E}(\omega)e^{i\omega t} d\omega$$

que, por ser uma igualdade válida em qualquer instante t , significa que os integrandos se igualam:

$$\begin{aligned} -m\omega^2 \vec{r}(\omega) &= -m\omega_0^2 \vec{r}(\omega) - q_e \vec{E}(\omega) \\ \vec{r}(\omega) &= \frac{-q_e \vec{E}(\omega)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

e a partir de $\vec{r}(\omega)$ calcula-se $\vec{r}(t)$, desde que $\vec{E}(\omega_0) = \vec{0}$. No caso em que $\vec{E}(\omega_0) \neq \vec{0}$, o problema tem solução somente quando há dissipação. Adiante introduziremos na

¹Mesmo nos casos em que o elétron adquire velocidade considerável durante a interação, de modo a que a força magnética se torne significativa, trata-se de força que não transfere energia, alterando apenas a direção do elétron ejetado. Ademais, o elétron adquire maior velocidade no final da interação, numa região em que o campo magnético está diminuído, permitindo que, em primeira aproximação, esse campo seja desconsiderado.

equação de movimento uma parcela de dissipação (que será em seguida reduzida a zero) como etapa de cálculo da energia transferida.

Interessa-nos a energia transferida ao elétron (Δe), ao invés dos detalhes do seu movimento. Assim então temos:

$$\Delta e = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot (-q_e) \vec{E} dt .$$

Deduziremos, a partir desta definição, uma expressão simples em função da componente de Fourier do campo na frequência própria do oscilador ($\vec{E}(\omega_0)$).

$$\begin{aligned} \Delta e &= -q_e \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} i\omega \vec{r}(\omega) e^{i\omega t} d\omega \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \vec{E}(\omega') e^{i\omega' t} d\omega' dt \\ &= -q_e \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} i\omega \vec{r}(\omega) \cdot \vec{E}(\omega') \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(\omega+\omega')t} dt}_{2\pi \delta(\omega+\omega')} d\omega d\omega' \\ &= -q_e \int_{-\infty}^{+\infty} i\omega \vec{r}(\omega) \cdot \vec{E}(-\omega) 2\pi d\omega . \end{aligned}$$

Como $\vec{E}(t)$ é real, tem-se que $\vec{E}(-\omega) = \vec{E}^*(\omega)$.

$$\begin{aligned} \Delta e &= 2\pi i (-q_e) \int_{-\infty}^{+\infty} \omega \vec{r}(\omega) \cdot \vec{E}^*(\omega) d\omega \\ &= \frac{2\pi i q_e^2}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{E}(\omega)|^2 \frac{\omega}{\omega_0^2 - \omega^2} d\omega . \end{aligned}$$

Para proceder ao cálculo desta integral, considera-se uma parcela pequena de dissipação na equação de movimento do elétron, que deverá em seguida tender a zero. Consideremos pois

$$m\ddot{\vec{r}} = -m\omega_0^2 \vec{r} - \Gamma \dot{\vec{r}} - q_e \vec{E}(t)$$

que tem solução:

$$\vec{r}(\omega) = \frac{-q_e \vec{E}(\omega)}{m(\omega_0^2 + i\Gamma\omega - \omega^2)}$$

Reescrevamos a transferência de energia. Teremos:

$$\begin{aligned} \Delta e &= \frac{2\pi i q_e^2}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{E}(\omega)|^2 \cdot \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \frac{\omega}{\omega_0^2 + i\Gamma\omega - \omega^2} d\omega \\ &= \frac{2\pi i q_e^2}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} |\vec{E}(\omega)|^2 \cdot \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (\omega + \frac{\omega_0}{\omega})^2} d\omega . \end{aligned}$$

A integral $\int_{-\infty}^{+\infty} f(|ax-b/x|^2) dx$ é igual a $\frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y^2) dy$, para $b/a > 0$, e $\frac{\Gamma}{\pi(\Gamma^2+y^2)}$ é uma seqüência delta². Daí temos:

$$\Delta e = \frac{2\pi^2 q_e^2}{m} |\vec{E}(\omega_0)|^2 .$$

² $\int_{-\infty}^{+\infty} f(y^2) dy = \int_{\sqrt{b/a}}^{\infty} f(|ax-b/x|^2) a dx + \int_{-\infty}^{\sqrt{b/a}} f(|ax-b/x|^2) \frac{b}{x^2} dx = \int_{\sqrt{b/a}}^{\infty} f(|u_x-b/x|^2) a dx - \int_{\sqrt{b/a}}^0 f(|b/x-u_x|^2) a dz = a \int_0^{\infty} f(|u_x-b/x|^2) dx$.

Apêndice C

Programas de cálculo

Programa DENSI.FOR

```
c Este programa calcula a energia depositada por um raio delta
c em funcao de blinha. Ademais, multiplica esta energia depo-
c sitada pelo numero de eletrons que existe num elemento ci-
c lindrico 2pibdb. Depois, divide isso por 2piblinha, o que
c resulta na densidade depositada devida somente aos eletrons
c daquele elemento cilindrico. O programa DENSI.FOR integra
c sobre todos esses elementos e obtem a densidade de energia
c depositada (em funcao de blinha).
```

```
dimension x(2003),y(2003),u(2003)
```

```
common Zmol,Mmol,mc2,f,hcortc,c1,beta,gama,b,deltab,blinha,delblin,
1 deltae,indin,i0c,i0h,i0o,i0n,ib,indblin,iadj,raio
integer Z
real*8 mc2,i0c,i0h,i0o,i0n,deltae,deltaein,betaeletr,gamaeletr,
1 etaeletr,I,ein,iadj
```

```
iinc=2
isubs=2
```

```
c Criptonio:
if(iinc.ne.1) go to 46
Z = 25 ! Z da particula incidente.
ein=6.d0 ! energia da particula (MeV/u.m.a.).
raio=4.e-8 ! raio admitido do traco.
go to 47
c Uranio:
46 Z = 92
ein=410.d0
raio=2.5e-8
```

```
C Nitrato de celuloze:
47 if(isubs.ne.1) go to 48
Zmol = 108
Mmol = 207.10
iadj = 77.07*1.602d-19
go to 49
C CR-39:
48 Zmol = 146
Mmol = 274.14
```

```

iadj = 70.18*1.602d-19

49 F = 2.306576E-28      ! 1.602E-19*8.98758E9*1.602E-19
MC2 = 8.186853d-14      ! 9.1091E-31*2.997925E8**2
hcortc=3.12795e-26 ! 1.05e-34*2.9979e8
C1 = 2*3.14159*Zmol*6.02E23*1.15*F*F/(Mmol*MC2)*1.e6
c   Com o fator 1.e6 resulta um dedblin em joules/metro.

C   IOS DO CARBONO, HIDROGENIO, OXIGENIO E NITROGENIO:
C
IOC = 259.6d0*4184d0/6.02d23
IOH = 313.5d0*4184d0/6.02d23 ! da ordem de 2d-18 joules.
IOO = 314.d0*4184d0/6.02d23
ION = 335.1d0*4184d0/6.02d23

c ib=2
if(ib.eq.2) go to 777
write(5,*) 'Escreva o valor de IB.'
write(5,*) ('(IB=1 -> VT; IB=2 -> FOR003; IB=3 -> NUMEROS.)')
READ(5,*) IB
777 continue

x(2002) = 0.
x(2003) = 40.
Y(2002) = 0.
Y(2003) = 1.e-6
u(2002) = 0.
u(2003) = .5

if(IB.eq.1) CALL VIPLOTS(21.,13.,2)
IF(IB.EQ.1) CALL FACTOR(.3)
IF(IB.EQ.1) CALL VIPLLOT(.5,.5,-3)
c if(ib.eq.1) CALL VTAXIS(0.,0.,'distancia (angstroms)',-1,20.,0.,0.,40.)
c if(ib.eq.1) CALL VTAXIS(0.,0.,'densidade de energia (eV/angstrom3)',
1 1,13.,90.,0.,1.e-6)

IF(IB.EQ.2) CALL PLOTS(21.,13.,3)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOT(.5,.5,-3)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'distancia (angstroms)'
1 ,-1,20.,0.,0.,40.)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'densidade de energia (eV/angstrom3)',
1 1,13.,90.,0.,1.e-6)

deltab = 1.e-12 ! 1.e-10 metros = 1 angstrom.
delblin = 4.e-11

beta=dsqrt((ein+931.5)**2-931.5**2) ! Calculo da velocidade
beta=beta/(ein+931.5)             ! da partícula incidente.
gama = 1/sqrt(1-beta**2)

bq=1.05e-34*3.e8/(2*gama*mc2*beta)

c Ciclo do parametro B:
do 1111 indb=5,40

do i=1,2001 !Para zerar as variaveis.
x(i)=0
y(i)=0
u(i)=0
end do

```

```

b=indb*deltab ! b e' o parametro de impacto da particula
! incidente, em metros.

i=1
blinha=.5*delblin
110 if (blinha.ge.b) go to 111 !Para se limitar a valores de
i=i+1 !blinha maiores que b.
blinha=blinha+delblin
go to 110
111 indin=i !indin e' indice inicial.
blinin=blinha

deltaein=2*z**2*f/(mc2*beta**2*(b**2+bq**2)) ! Energia inicial
deltaein=deltaein*f ! do raio delta.

c RAIOS DELTA ORIGINARIOS DOS ATOMOS DE CARBONO:
qsi=i0C*b/(hcortc*gama*beta)
fator=(1+1/gama**2)*3.14159*.5*qsi*exp(-2*qsi)
qsia=qsi*(b-deltab)/b
fa=(1+1/gama**2)*3.14159*.5*qsia*exp(-2*qsia) ! fa e'
! fator anterior.
if(fator.ge.fa) go to 300 !Normalizacao do fator.
if(ifatorC.ne.7) ffatorC=fator
ifatorC=7
fator=fator/ffatorC
go to 301
300 fator=1
301 deltaein=deltaein*fator
deltae=deltaein-i0c
if(deltae.le.0) go to 1201
if(isubs.eq.1)neletr=12 !12 e' 6*2.
if(isubs.eq.2)neletr=24 !24 e' 12*2.

call cicloblin(z,blinin,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)
indfinalc=indfinal
xfinalc=xfinal

c RAIOS DELTA ORIGINARIOS DOS ATOMOS DE HIDROGENIO:

1201 qsi=i0H*b/(hcortc*gama*beta)
fator=(1+1/gama**2)*3.14159*.5*qsi*exp(-2*qsi)
qsia=qsi*(b-deltab)/b
fa=(1+1/gama**2)*3.14159*.5*qsia*exp(-2*qsia)

if(fator.ge.fa) go to 302
if(ifatorH.ne.7) ffatorH=fator
ifatorH=7
fator=fator/ffatorH
go to 303
302 fator=1
303 deltaein=deltaein*fator
deltae=deltaein-i0h
if(deltae.le.0) go to 1202
if(isubs.eq.1)neletr=9 ! 9 e' 9*1.
if(isubs.eq.2)neletr=18 !18 e' 18*1.
call cicloblin(z,blinin,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)

c RAIOS DELTA ORIGINARIOS DOS ATOMOS DE OXIGENIO:

```

```

1202 qsi=i00*b/(hcortc*gama*beta)
fator=(1+1/gama**2)*3.14159*.5*qsi*exp(-2*qsi)
qsia=qsi*(b-delta)/b
fa=(1+1/gama**2)*3.14159*.5*qsia*exp(-2*qsia)

if(fator.ge.fa) go to 304
if(ifator0.ne.7) ffator0=fator
ifator0=7
fator=fator/ffator0
go to 305
304 fator=1
305 deltaein=deltaein*fator
deltae=deltaein-i0o
if(deltae.le.0) go to 1203
if(isubs.eq.1)neletr=28 !28 e' 7*4.
if(isubs.eq.2)neletr=28 !28 e' 7*4.
call cicloblin(z,blinin,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)
if(isubs.eq.2) go to 1204

c RAIDS DELTA ORIGINARIOS DOS ATOMOS DE NITROGENIO:
1203 qsi=i0N*b/(hcortc*gama*beta)
fator=(1+1/gama**2)*3.14159*.5*qsi*exp(-2*qsi)
qsia=qsi*(b-delta)/b
fa=(1+1/gama**2)*3.14159*.5*qsia*exp(-2*qsia)

if(fator.ge.fa) go to 307
if(ifatorN.ne.7) ffatorN=fator
ifatorN=7
fator=fator/ffatorN
go to 308
307 fator=1
308 deltaein=deltaein*fator
deltae=deltaein-i0n

if(deltae.le.0) go to 1204
neletr=3 ! 3 e' 1*3.
call cicloblin(z,blinin,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)

1204 do i=1,indin
x(i)=x(indin)
y(i)=y(indin)
u(i)=u(indin)
end do

do i=1,2001
x(i)=x(i)*1.e10
if(y(i).ge.13.e-6) y(i)=13.e-6
u(i)=u(i)*.5e10/52
end do
xfinalc=xfinalc*1.e10

do i=indfinalc,2001
x(i)=xfinalc
y(i)=y(indfinalc)
u(i)=u(indfinalc)
end do

if(ib.ne.3) go to 30
write(5,17)
do i=1,2001,100

```

```

write(6,*) x(i),y(i),u(i)
end do
17 format(/)

30 if(ib.eq.1) CALL VTLINE(x,y,2001,1,0,0)
c if(ib.eq.1) call vtline(x,u,2001,1,0,0)
IF(IB.EQ.2) CALL LINE(x,y,2001,1,0,0)
c if(ib.eq.2) call line(x,u,2001,1,0,0)
1111 continue
c Fim do ciclo do parametro b.

C IF(IB.EQ.1) CALL VTGRID(0.,0.,.5,.5,40,25)
IF(IB.EQ.1) CALL VPLOT(0.,0.,999)
c IF(IB.EQ.2) CALL GRID(0.,0.,.5,.5,40,25)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOT(0.,0.,999)

CALL EXIT
END

c////////////////////////////////////
subroutine cicloblin(z,blinin,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)

dimension x(2003),y(2003),u(2003)
common Zmol,Mmol,mc2,f,hcortc,c1,beta,gama,b,deltab,blinha,delblin,
1 deltae,indin,i0c,i0h,i0o,i0n,IB,INDBLIN,iadj,raio
real*8 mc2,i0c,i0h,i0o,i0n,deltae,deltaein,betaeetr,gamaeetr,
1 etaeetr,T,ein,iadj

indblin=indin
blinha=blinin

c Ciclo do parametro BLINHA:
112 betaeetr=dsqrt((deltae+.511*1.602d-13)**2-(.511*1.602d-13)**2)
betaeetr=betaeetr/(deltae+.511*1.602d-13)
gamaeetr = 1.DO/DSQRT(1.d0-betaeetr**2)
etaeetr = betaeetr*gamaeetr
T = gamaeetr*mc2+betaeetr*DSQRT(2*(gamaeetr-1.d0))

Calculo de DELTA (utilizou-se os parametros do material lucite):
xis=-.1
if(etaeetr.le.1) go to 212
xis = .43429*DLOG(etaeetr)
212 continue

DELO = 3.21
DEL1 = .456
DEL2 = 2.78
X0 = .14
X1 = 2

IF(xis.LT.X0) GO TO 71
IF(xis.LT.X1) GO TO 72
DELTA = 2*DLOG(etaeetr) - DELO
GO TO 80
71 DELTA = 0
GO TO 80
72 DELTA = 2*DLOG(etaeetr) - DELO + DEL1*(X1 - xis)**DEL2

```

```

C   Calculo da perda de energia:
80 dedblin = DLOG(T/iadj) - DELTA
dedblin = dedblin/betaeletr**2
c dedblin = dedblin*1.**2      ! z do eletron e' igual a um.
dedblin = dedblin*C1

dtx=dedblin*2*3.14159*(b+.5*deltab)*
1 (neletr*6.02e23*1.15/Nmol*1.e6)*deltab
c   dtx e' dedblintotaldevidoabpordx; 52 e' 6*2+9*1+7*4+1*3 ;dx e'
c   um elemento de comprimento na direcao da trajetoria da
c   particula primaria.

densib=dtx/(2*3.14159*blinha)
densib=densib*6.242e-12 ! Para transformar J/m3 em eV/angstrom3.
c   densib e densidade devida a funcao de blinha

if (dedblin.le.1.e-22.or.indblin.gt.2001)go to 1108
x(indblin)=blinha
y(indblin)=y(indblin)+densib
u(indblin)=(u(indblin)+neletr*dedblin)
indblin=indblin+1
deltae=deltae-dedblin*delblin
blinha=blinha+delblin      ! em metros.
go to 112
c   Fim do ciclo do parametro blinha.

1108 xfinal=blinha
indfinal=indblin
return
end

```

Programa DENSIT.FOR

```

c   Este programa integra as contribuicoes 'a densidade do depo-
c   sito de energia devidas a elementos cilindricos (ja calcula-
c   da anteriormente pelo programa DENSI.FOR) e obtem a densida-
c   de total de energia depositada (em funcao de blinha).

```

```

:
:
:   Esta parte omitida e' identica a parte correspondente do programa DENSI.FOR (inicia-se a pagina 107 e termina a
:   pagina 108).
:
:

```

```

x(2002) = 0.
x(2003) = 40.
Y(2002) = 0.
Y(2003) = 4.e-6

deltab = 1.e-13 ! 1.e-10 metros = 1 angstrom.
delblin = 4.e-11

beta=dsqrt((ein+931.5)**2-931.5**2)
beta=beta/(ein+931.5)
gama = 1/sqrt(1-beta**2)

bq = 1.05e-34*3e8/(2*gama*mc2*beta)

```

```

i=1
blinha=.5*delblin
410 if (blinha.ge.deltab) go to 411
i=i+1
blinha=blinha+delblin
go to 410
411 indinmin=i !indinmin e' indice inicial minimo.
blininmin=blinha

do 230 i=1,2001
230 x(i)=(float(i)-.5)*delblin

c Ciclo do parametro B:
indbmin=50
indbmax=400
do 1111 indb=indbmin,indbmax

b=indb*deltab

i=1
:
:
Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa DENSIT.FOR (inicia-se à página 109 e termina à
página 110).
:
:

if(deltae.le.0) go to 1204
neletr=3 ! 3 e' 1*3.
call cicloblin(z,blinin,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)

1204 continue
1111 continue
c FIM DO CICLO DE B.

do i=1,indinmin
x(i)=x(indinmin)
y(i)=y(indinmin)
end do

do i=1,2001
x(i)=x(i)*1.e10
if(y(i).ge.52.e-6) y(i)=52.e-6
end do
xfinalc=xfinalc*1.e10

do i=indfinalc,2001
x(i)=xfinalc
y(i)=y(indfinalc)
end do

if(ib.ne.3) go to 30
write(5,17)
do i=1,2001,100
write(5,*) x(i),y(i)
end do
17 format(/)

30 if(1B.eq.1) CALL VTPLOTS(21.,13.,2)
IF(1B.EQ.1) CALL FACTOR(.3)
IF(1B.EQ.1) CALL VTPLOT(.5,.5,-3)
c if(1B.eq.1) CALL VTAXIS(0.,0.,'distancia (angstroms)',-1,20.,0.,0.,40.)

```

```

c if(ib.eq.1) CALL VTAXIS(0.,0.,'densidade de energia (eV/angstrom3)',
1 1,13.,90.,0.,4.e-6)

IF(IB.EQ.2) CALL PLOTS(21.,13.,3)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOT(.5.,.5,-3)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'distancia (angstroms)'
1 ,-.1,20.,0.,0.,40.)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'densidade de energia (eV/angstrom3)',
1 1,13.,90.,0.,4.e-6)

if(IB.EQ.1) CALL VTLINE(x,y,2001,1,0,0)
IF(IB.EQ.2) CALL LINE(x,y,2001,1,0,0)

c IF(IB.EQ.1) CALL VTGRID(0.,0.,.5.,.5,40,25)
IF(IB.EQ.1) CALL VIPLLOT(0.,0.,999)
c IF(IB.EQ.2) CALL GRID(0.,0.,.5.,.5,40,25)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOT(0.,0.,999)

CALL EXIT
END

```

```

c////////////////////////////////////
subroutine cicloblin(z,blinin,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)

```

Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa DENS1.FOR (inicia-se à página 111 e termina à página 111).

```

if (dedblin.le.1.e-22.or.indblin.gt.2001)go to 1108
y(indblin)=y(indblin)+densib
indblin=indblin+1
deltae=deltae-dedblin*delblin
blinha=blinha+delblin ! em metros.
go to 112 !
c Fim do ciclo do parametro BLINHA.

```

```

1108 xfinal=blinha
indfinal=indblin
return
end

```

Programa DENSITT.FOR

c Este programa é igual ao DENSIT.FOR, mas desenha va'rias curvas
c de densidade do depo'sito de energia devidas aos ele'trons lanca-
c dos a partir de parametros de impacto menores ou igual a b.

```

dimension x(2003),y(2003),xx(2003)

```

Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa DENS1.FOR (inicia-se à página 107 e termina à página 108).

```

\bvb xx(2002) = 0.
xx(2003) = 40.
Y(2002) = 0.
Y(2003) = 4.e-6

deltab = 1.e-13 ! 1.e-10 metros = 1 angstrom.
delblin = 4.e-11

beta=dsqrt((ein+931.5)**2-931.5**2)
beta=beta/(ein+931.5)
gama = 1/sqrt(1-beta**2)

bq = 1.05e-34*3e8/(2*gama*mc2*beta)

i=1
blinha= 5*delblin
410 if (blinha.ge.deltab) go to 411
i=i+1
blinha=blinha+delblin
go to 410
411 indinmin=i !indinmin e' indice inicial minimo.
blininmin=blinha

do 230 i=1,2001
230 x(i)=(float(i)-.5)*delblin

if(IB.eq.1) CALL VTPLOTS(21.,13.,2)
IF(IB.EQ.1) CALL FACTOR(.3)
IF(IB.EQ.1) CALL VTIPLOT(.5,.5,-3)
c if(ib.eq.1) CALL VTAXIS(0.,0.,'distancia (angstroms)',-1,20.,0.,0.,40.)
c if(ib.eq.1) CALL VTAXIS(0.,0.,'densidade de energia (eV/angstrom3)',
1 1,13.,90.,0.,4.e-6)

IF(IB.EQ.2) CALL PLOTS(21.,13.,3)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOT(.5,.5,-3)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'distancia (angstroms)'
1 , -1,20.,0.,0.,40.)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'densidade de energia (eV/angstrom3)',
1 1,13.,90.,0.,4.e-6)

c Ciclo do parametro B:
indbmin=2
indbmax=320
do 1109 indb=indbmin,indbmax

b=indb*deltab

i=1
.
.
.
Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa DENSIT.FOR (inicia-se à página 109 e termina à
página 109).
.
.
.
call cicloblin(z,blinin,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)
if(indb.ne.indbmin)go to 270
indfinalc=indfinal
xfinalc=xfinal
270 continue

c RAIOS DELTA ORIGINARIOS DOS ATOMOS DE HIDROGENIO:

```

```

:
:
Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa DENS1.FOR (inicia-se à página 109 e termina à
página 110).
:
:

```

```

1204 continue
if (mod(indb,10).ne.0) go to 31
do i=1,indinmin
x(i)=x(indinmin)
y(i)=y(indinmin)
end do

```

```

do i=1,2001
xx(i)=x(i)*1.e10
if(y(i).ge.52.e-6) y(i)=52.e-6
end do
xxfinalc=xfinalc*1.e10

```

```

do i=indfinalc,2001
xx(i)=xxfinalc
y(i)=y(indfinalc)
end do

```

```

if(ib.ne.3) go to 30
write(5,17)
do i=1,2001,100
write(5,*) x(i),y(i)
end do
17 format(/)

```

```

30 if(1B.EQ.1) CALL VTLINExx,y,2001,1,0,0)
IF(1B.EQ.2) CALL LINE(xx,y,2001,1,0,0)

```

```

31 continue

```

```

1109 continue
c Fim do ciclo do parametro b.

```

```

C IF(1B.EQ.1) CALL VTGRID(0.,0.,.5,.5,40,25)
IF(1B.EQ.1) CALL VTPL0T(0.,0.,999)
c IF(1B.EQ.2) CALL GRID(0.,0.,.5,.5,40,25)
IF(1B.EQ.2) CALL PLOT(0.,0.,999)

```

```

CALL EXIT
END

```

```

c////////////////////////////////////
subroutine cicloblin(z,blinln,neletr,x,y,u,xfinal,indfinal)
:
:

```

```

Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa DENS1.FOR (inicia-se à página 111 e termina à
página 112).
:
:

```

```

if (dedblin.le.1.e-22.or.indblin.gt.2001)go to 1108
y(indblin)=y(indblin)+densib
indblin=indblin+1

```

```

deltae=deltae-dedblin*delblin
blinha=blinha+delblin  ! em metros.
go to 112  !
c Fim do ciclo do parametro BLINHA.

```

```

1108 xfinal=blinha
indfinal=indblin
return
end

```

Programa DERI.FOR

c Este programa desenha o grafico da derivada da densidade do deposito
c de energia em relacao a b, com b' constante.

c Nota: a dimensao do vetores xb e yb deve ser maior que o numero de
c pontos obtidos para o grafico da derivada.

```

dimension x(2003),y(2003),xb(203),yb(203),zb(203)

```

Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa DENSIFOR (inicia-se à página 107 e termina à página 108).

```

xb(202) = 0.
xb(203) = .02
yb(202) = 0.
yb(203) = .1
zb(202) = 0.
zb(203) = .1

```

```

deltab = 2.e-13 ! 1.e-10 metros = 1 angstrom.
delblin = 4.e-11

```

```

beta=dsqrt((sin+931.5)**2-931.5**2)
beta=beta/(sin+931.5)
gama = 1/sqrt(1-beta**2)

```

```

bq = 1.05e-34*3e8/(2*gama*mc2*beta)

```

```

i=1
blinha=.5*delblin
410 if (blinha.ge.deltab) go to 411
i=i+1
blinha=blinha+delblin
go to 410
411 indinmin=i !indinmin e' indice inicial minimo.
blininmin=blinha

```

```

do 230 i=1,2001
230 x(i)=(float(i)-.5)*delblin

```

```

y2=0

```

```

c Ciclo do parametro b:
indbmin=1
indbmax=201

```


!Ágima 112).

```

if (dedblin.le.1.e-22.or.indblin.gt.2001)go to 1108
y(indblin)=y(indblin)+densib
if (blinha.ge.raio)go to 1108
indblin=indblin+1
deltae=deltae-dedblin+delblin
blinha=blinha+delblin ! em metros.
go to 112 !
c Fim do ciclo do parametro BLINHA.

```

```

1108 xfinal=blinha
indfinal=indblin
return
end

```

Programa VVPR.FOR

C PROGRAMA PARA CALCULAR VT DADO O ALCANCE
C PARA OS CINCO IONS DE PRICE ET AL..

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Y)
DIMENSION R(6),VI(5,6)
INTEGER Z,ZZ
NPT = 6
OPEN(UNIT=1,FILE='ALC.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=2,FILE='VVPR.DAT',STATUS='NEW')
READ(1,101)
101 FORMAT(//)
DO I=1,NPT
READ(1,*) R(I)
WRITE(5,*) R(I)
END DO

C R(I) ESTAO ESCRITOS EM MICRA.

WRITE(2,104)
104 FORMAT(2X,'VT DOS IONS DE PRICE ET AL. EM FUNCAO
1 DO ALCANCE. '/')
C
DO 3341 ZZ=1,5
Z = 9 - ZZ
IF(Z.EQ.4) Z = 5
IF(ZZ.GE.4) N = ZZ + 6
C
C VT PARA CADA ALCANCE:
C
IF(Z.EQ.5.AND.N.EQ.11) A=130.DO
IF(Z.EQ.5.AND.N.EQ.11) B=185.DO
IF(Z.EQ.5.AND.N.EQ.10) A=120.DO
IF(Z.EQ.5.AND.N.EQ.10) B=170.DO
IF(Z.EQ.6) A=160.DO
IF(Z.EQ.6) B=275.DO
IF(Z.EQ.7) A=187.5DO
IF(Z.EQ.7) B=410.DO
IF(Z.EQ.8) A=206.DO
IF(Z.EQ.8) B=450.DO

```

```

DO 105 I=1,NPT
VT(ZZ,I) = A/9 - (A*R(I)/9)/B
105 IF(Z.EQ.8) VI(ZZ,I) = VI(ZZ,I) + (70.DO*R(I)/9)/B
IF(ZZ.LT.4) WRITE(2,51) Z
IF(ZZ.GE.4) WRITE(2,52) Z,M
3341 WRITE(2,*) (VI(ZZ,J),J=1,NPT)
51 FORMAT(X,'Z = ',I2)
52 FORMAT(X,'Z = ',I2,',','M = ',I2)
CALL EXIT
END
    
```

Arquivo VVPR.DAT

VT DOS IONS DE PRICE ET AL. EM FUNCAO DO ALCANCE.

```

Z = 8
  21.944444444444444      21.1111111111111      20.277777777777778
  19.444444444444444      18.6111111111111      17.777777777777778
Z = 7
  19.56300813008130      18.29268292682927      17.02235772357724
  15.75203252032520      14.48170731707317      13.21138211382114
Z = 6
  16.16161616161616      14.54545454545455      12.92929292929293
  11.31313131313131      9.696969696969697      8.080808080808081
Z = 5;M = 10
  11.37254901960784      9.411764705882353      7.450980392156863
  5.490196078431372      3.529411764705882      1.568627450980392
Z = 5;M = 11
  12.49249249249249      10.54054054054054      8.588588588588589
  6.636636636636636      4.684684684684685      2.732732732732733
    
```

Programa R.FOR

C PROGRAMA PARA CALCULAR O ALCANCE, DADA A ENERGIA.

```

INPLICIT REAL*8(A-H,O-Y)
REAL*4 X,Y
INTEGER Z,ZMOL
REAL*8 LOGI,LOGTAU,LL,LLL,LAMBDA,I1,I11,M,IADJ,MNOL
DIMENSION I(59),Y(59),M(92)
    
```

```

data (M(i),i=1,92)/1.008D0,4.003D0,6.939D0,9.012D0,10.81D0,12.011D0,
 1 14.007D0,15.9994D0,19.D0,20.183D0,22.9898D0,24.312D0,26.98D0,
 2 28.09D0,30.974D0,32.064D0,35.453D0,39.948D0,39.102D0,40.08D0,
 3 44.96D0,47.9D0,50.94D0,52.D0,54.94D0,55.85D0,58.93D0,58.71D0,
 4 63.54D0,65.37D0,69.72D0,72.59D0,74.92D0,78.96D0,79.909D0,83.8D0,
 6 85.47D0,87.62D0,88.91D0,91.22D0,92.91D0,95.94D0,99.D0,101.D0,
 7 102.91D0,106.4D0,107.87D0,112.4D0,114.82D0,118.69D0,121.75D0,
 8 127.6D0,126.9D0,131.3D0,132.91D0,137.34D0,138.91D0,140.12D0,
 9 140.91D0,144.24D0,147.D0,150.35D0,151.96D0,157.25D0,158.92D0,
10 162.6D0,164.93D0,167.26D0,168.93D0,173.04D0,174.97D0,178.49D0,
11 180.95D0,183.85D0,186.23D0,190.2D0,192.2D0,195.09D0,196.97D0,
12 200.59D0,204.37D0,207.19D0,208.98D0,210.D0,210.D0,222.D0,223.D0,
13 226.D0,227.D0,232.04D0,231.D0,238.03D0/
    
```

```

MNOL = 207.0748D0
ZMOL = 108
    
```

```

c MMOL = 434.1336
c ZNOL = 226

WRITE(5,*) ('Escreva o valor de IB.')
```

WRITE(5,*) ('(IB=1 -> VI; IB=1 -> FOR003; IB=3 -> NUMERDS.))')

```

READ(5,*) IB
IF(IB.EQ.1) CALL VTPLOTS(21.,13.,1)
IF(IB.EQ.1) CALL FACTOR(.4)
IF(IB.EQ.1) CALL VTPLOT(.5.,5.,-3)

C CALL VIAXIS(0.,0.,'energia(NeVs/nucleon)')
C 1.,-1,20.,0.,0.,50.)
C CALL VTAXIS(0.,0.,'alcance(cm)',1,13.,90.,0.,1.)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOTS(21.,13.,3)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOT(.5.,5.,-3)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'energia(NeVs/nucleon)')
1.,-1,20.,0.,7.,10.)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'alcance(cm)',1,13.,90.,0.,1.)
332 DO Z=92,1,-91
IF(I.EQ.2) WRITE(5,*) Z
II = I
C DO 1000 I=57,57
I1 = DFLOAT(I)
I11 = (I1+155)/40

C ALCANCE DO PROTON IDEAL:

C IBARKAS=1 -> 1<TAU<9 MEV; IBARKAS=2 -> 7<TAU<1200 MEV.
IBARKAS = 2
IF(IBARKAS.EQ.2) GO TO 121

TAU = 10**I11

C TAU E' A ENERGIA DA PARTICULA EM NEVS PDR NUCLEON.
C WRITE(5,*) ('TAU = '),TAU
IADJ = 77.0723555D0
LOGI = DLOG(IADJ)
LOGTAU = DLOG(TAU)
LL=DLOG(MMOL/ZNOL) - .75265D0 + .073736D0*LOGI + .040556D0*LOGI**2
LL = LL + (2.5398D0 - .312D0*LOGI + .018664D0*LOGI**2)* LOGTAU
LL = LL + (-.24598D0 + .11548D0*LOGI - .0099661D0*LOGI**2)* LOGTAU**2
LAMBDA = DEXP(LL)
C ASSIM, LAMBDA ESTA EM MILIGRAMAS POR CENTIMETRO QUADRADO.
LAMBDA = LAMBDA/.115
C AGORA, LAMBDA ESTA EM MICRA.
GO TO 122

121 LL = DLOG(MMOL/ZNOL)
LL=LL-8.0155D0+.36916D0*LOGI-.014307D0*LOGI**2+.0034718D0*LOGI**3
LLL=1.8371D0-.014520D0*LOGI-.030142D0*LOGI**2+.0023603D0*LOGI**3
LL=LL+LLL*LOGTAU
LLL=.045233D0-.00095873D0*LOGI+.0071303D0*LOGI**2-.00068538D0*LOGI**3
LL=LL+LLL*LOGTAU**2
LLL=-.0059898D0-.00052315D0*LOGI-.00033802D0*LOGI**2+.000039405*LOGI**3
LL=LL+LLL*LOGTAU**3
LAMBDA = DEXP(LL)
C ASSIM, LAMBDA ESTA EM GRAMAS POR CENTIMETRO QUADRADO.
LAMBDA = LAMBDA/.115
C DO JEITO QUE ESTA, LAMBDA ESTA EM MILIMETROS.
C LAMBDA = LAMBDA*1.D3
C AGORA, LAMBDA ESTA EM MICRA.
```

```
LAMBDA = LAMBDA/10
```

```
122 CONTINUE
```

```
IF(1B.EQ.3) WRITE(5,*) ('LAMBDA = '),LAMBDA
```

```
C EXTENSAO DO ALCANCE:
```

```
TAUO = 931.5D0
```

```
BETA = DSQRT((TAU+TAUO)**2 - TAUO**2)/(TAU+TAUO)
```

```
QUI = 137*BETA/Z
```

```
IF(QUI.LT..2) GO TO 10
```

```
IF(QUI.GE..2.AND.QUI.LT.2) GO TO 20
```

```
IF(QUI.GE.2.AND.QUI.LT.3) GO TO 30
```

```
IF(QUI.GE.3) GO TO 40
```

```
10 BO = 0.D0
```

```
B1 = .05262D0
```

```
B2 = .1285D0
```

```
B3 = 0.D0
```

```
GO TO 50
```

```
20 BO = -.00185D0
```

```
B1 = .07355D0
```

```
B2 = .07171D0
```

```
B3 = -.02723D0
```

```
GO TO 50
```

```
30 BO = -.0793D0
```

```
B1 = .3323D0
```

```
B2 = -.1234D0
```

```
B3 = .0153D0
```

```
GO TO 50
```

```
40 BO = .22D0
```

```
B1 = 0.D0
```

```
B2 = 0.D0
```

```
B3 = 0.D0
```

```
50 C = BO + B1*QUI + B2*QUI**2 + B3*QUI**3
```

```
B = (31.8D0 + 3.86D0*78.41D0**(5.D0/8))*(MNGL/ZMGL)
```

```
B = (1.D-1/.115)*B*Z**(8.D0/3)*C/10**6
```

```
C WRITE(5,*) ('B = '),B
```

```
C ALCANCE:
```

```
R = M(Z)*(LAMBDA + B)/Z**2
```

```
IF(1B.EQ.3) WRITE(5,*) ('R = '),R
```

```
IF(R.GT.13.) GO TO 370
```

```
II = I
```

```
Y(II)=R
```

```
X(II)=TAU
```

```
1000 CONTINUE
```

```
370 DO J=II,57
```

```
Y(J) = 13.
```

```
X(J) = X(II)
```

```
END DO
```

```
371 X(58) = 7.
```

```
X(59) = 10.
```

```
Y(58) = 0.
```

```
Y(59) = 1.
```

```
IF(1B.EQ.1) CALL VTLIN(X,Y,57,1,0,0)
```

```
333 IF(1B.EQ.2) CALL LINE(X,Y,57,1,0,0)
```

```
334 END DO
```

```
C IF(1B.EQ.1) CALL VTGRID(0.,0.,.5,.5,40,25)
```

```

IF(IB.EQ.1) CALL VTPLOT(0.,0.,999)
335 IF(IB.EQ.2) CALL GRID(0.,0.,.5.,.5,40,25)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOT(0.,0.,999)
336 CALL EXIT
END

```

Programa E.FOR

```

C ESTE PROGRAMA LE ALGUNS ALCANCES NUM ARQUIVO ALC.DAT,
C CALCULA A ENERGIA PARA CADA ALCANCE RESIDUAL
C PARA OS CINCO IONS DE PRICE ET AL.
C E AS ESCREVE NUM ARQUIVO EPR.DAT.
C
C
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Y)
INTEGER Z
DIMENSION R(6),BB(5,6)
EXTERNAL FCT
C
C AR E O ALCANCE RESIDUAL.
C
COMMON Z,NBORO,AR
NPT = 6
OPEN(UNIT=1,FILE='ALC.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=2,FILE='EPR.DAT',STATUS='NEW')
READ(1,101)
101 FORMAT(//)
DO I=1,NPT
READ(1,*) R(I)
WRITE(5,*) R(I)
END DO
DO 3341 Z=8,5,-1
DO 334 NBORO=10,11

C R(I) ESTAO ESCRITOS EM MICRA.

WRITE(2,104) Z
WRITE(5,104) Z
104 FORMAT(2X,'ENERGIAS CALCULADAS DOS IONS DE PRICE ET AL. EM FUNCAO
1 DO ALCANCE. Z = ',I2,'.')
C
C CALCULO DE E(Z) PARA CADA ALCANCE (B E A ENERGIA, EM MEVS):
C
DO 105 I=1,NPT
A = .1
B = 10.
AR = R(I)
CALL DRTMI(C,F,FCT,A,B,1.D-5,30,IER)
105 BB(Z-4,I) = C
WRITE(5,*) (BB(Z-4,J),J=1,NPT)
WRITE(2,*) (BB(Z-4,J),J=1,NPT)
IF(Z.NE.5) GO TO 3341
334 CONTINUE
3341 CONTINUE
CALL EXIT
END

C A FUNCAO F, SOMADA COM "AR", FORNECE O ALCANCE EM FUNCAO DA ENERGIA.

FUNCTION FCT(X)

```

```

IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Y)
REAL*4 X,Y
INTEGER Z
COMMON Z,MBORD,AR
DIMENSION M(4)
REAL*8 LOGI,LOGTAU,LL,LAMBDA,M,IADJ
M(1) = DFLOAT(MBORD) ! MASSA ATOMICA DO BORO.
M(2) = 12.011DO ! MASSA ATONICA DO CARBONO.
M(3) = 14.007DO ! MASSA ATONICA DO NITROGENIO.
M(4) = 15.9994DO ! MASSA ATOMICA DO OXIGENIO.

```

```

C ALCANCE DO PROTON IDEAL:

```

```

TAU = X
C TAU E' A ENERGIA DA PARTICULA EM MEVS POR NUCLEON.

```

```

:
```

Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa R.FOR (inicia-se à página 121 e termina à página 122)

```

:
```

```

:
```

```

C ALCANCE:

```

```

R = M(Z-4)*(LAMBDA + B)/Z**2
C WRITE(5,1) R

```

```

C FUNCAO FCT:

```

```

FCT=R-AR
C WRITE(5,11) FCT
11 FORMAT(F16.8/)
RETURN
END

```

Arquivo EPR.DAT

ENERGIAS CALCULADAS DOS IONS DE PRICE ET AL. EM FUNCAO DO ALCANCE. Z = 8.		
1.696748267613065	3.002088835857395	4.048064671886815
4.942890118121812	5.736248934507684	6.455558212821255
ENERGIAS CALCULADAS DOS IONS DE PRICE ET AL. EM FUNCAO DO ALCANCE. Z = 7.		
1.634528218603836	2.858135996825909	3.836881359350178
4.674060165765545	5.417839001294234	6.088261168132930
ENERGIAS CALCULADAS DOS IONS DE PRICE ET AL. EM FUNCAO DO ALCANCE. Z = 6.		
1.559151872873732	2.694574555227014	3.601422132829577
4.376562457176170	5.056217694836637	5.668284690228931
ENERGIAS CALCULADAS DOS IONS DE PRICE ET AL. EM FUNCAO DO ALCANCE. Z = 5.		
1.468792258242988	2.508910513199028	3.334361975384299
4.028039855390403	4.637516685961041	5.187283433827680
ENERGIAS CALCULADAS DOS IONS DE PRICE ET AL. EM FUNCAO DO ALCANCE. Z = 5.		
1.357076225120637	2.339652787227447	3.125293479860553
3.787316398852591	4.369039564481003	4.893781952121777

Programa B.FOR

(Nota: Uma característica particular do programa B.FOR é o uso do sistema de arquivos de *organização relativa*, implementado no computador VAX, o qual per-

mite a leitura seletiva de registros individuais dentro do arquivo. Cada registro é designado pelo seu número de ordem.)

```

C ESTE PROGRAMA LE, NO ARQUIVO E.DAT, AS ENERGIAS
C EM FUNCAO DO ALCANCE, CALCULA OS BETAS E OS
C ESCREVE NO ARQUIVO B.DAT, ARQUIVO ESTE QUE TEM
C ORGANIZACAO RELATIVA.
C
C
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Y)
INTEGER Z,ZZ
DIMENSION E(6,6),B(6,6)
CHARACTER NUL
DATA NUL/'00'X/
NPT = 6
EZERO=938.5400
OPEN (UNIT=2,FILE='EPR.DAT',STATUS='OLD')
OPEN (UNIT=3,FILE='BPR.DAT',STATUS='NEW',
1 FORM='FORMATTED',ACCESS='DIRECT',
2 ORGANIZATION='RELATIVE',RECL=25)
WRITE(UNIT=3,REC=1,FMT=20)
WRITE(UNIT=3,REC=2,FMT=21) NUL
WRITE(UNIT=3,REC=3,FMT=22)
WRITE(UNIT=3,REC=4,FMT=23)
WRITE(UNIT=3,REC=5,FMT=24)
20 FORMAT('$','ESTE ARQUIVO CONTEM OS B')
21 FORMAT(A1,'ETAS PARA ALGUNS ALCANCE')
22 FORMAT('+','S')
23 FORMAT('$','PARA OS CINCO IONS DE PR')
24 FORMAT('+','ICE ET AL..')
6 FORMAT()
DO 3341 ZZ=1,5
Z = 9 - ZZ
IF(Z.EQ.4) Z = 5
IF(ZZ.GE.4) M = ZZ + 6
READ (2,6)
READ (2,*) (E(ZZ,J), J=1,NPT)
C WRITE (6,*) (E(ZZ,J), J=1,NPT)
DO J=1,6
B(ZZ,J) = DSQRT((E(ZZ,J)+EZERO)**2 - EZERO**2) / (E(ZZ,J)+EZERO)
END DO
WRITE(3,REC=6+(ZZ-1)*(NPT+1),FMT=30) Z
IF(ZZ.GE.4) WRITE(3,REC=6+(ZZ-1)*(NPT+1),FMT=31) Z,M
WRITE(3,REC=6+(ZZ-1)*(NPT+1)+1,FMT=40) B(ZZ,1)
DO K=1,NPT-2
WRITE(3,REC=6+(ZZ-1)*(NPT+1)+1+K,FMT=50) NUL,B(ZZ,1+K)
END DO
3341 WRITE(3,REC=6+(ZZ-1)*(NPT+1)+NPT,FMT=60) B(ZZ,NPT)
30 FORMAT('$','Z = ',I2,':')
31 FORMAT('$','Z = ',I2,':','X','M = ',I2,':')
40 FORMAT('$',D24.16)
50 FORMAT(A1,D24.16)
60 FORMAT('+',D24.16)
CLOSE(3)
CALL EXIT
END

```

Arquivo BPR.DAT

ESTE ARQUIVO CONTEM OS BETAS PARA ALGUNS ALCANCES
PARA OS CINCO IONS DE PRICE ET AL..

```

Z = 8:
0.6004945558678930D-01 0.7979219957047074D-01
0.9257867614313867D-01 0.1022277730003231D+00
0.1100573110210328D+00 0.1166874221052370D+00
Z = 7:
0.5894108516654266D-01 0.7786457002071378D-01
0.9014660263577962D-01 0.9943020025419855D-01
0.1069861830365345D+00 0.1133522814114040D+00
Z = 6:
0.5756947036608672D-01 0.7561363489733898D-01
0.8735314255874726D-01 0.9623662835521258D-01
0.1033837346456606D+00 0.1094092776974485D+00
Z = 5; N = 10:
0.5588040067806244D-01 0.7297293707706659D-01
0.8406983143503899D-01 0.9235088028834288D-01
0.9904362266270174D-01 0.1047042053984612D+00
Z = 5; N = 11:
0.5371803876079809D-01 0.7047799019834241D-01
0.8140507379909692D-01 0.8956598230813967D-01
0.9615445691545161D-01 0.1017226507554829D+00

```

Programa VVERES.FOR

C PROGRAMA PARA DESENHAR VARIOS GRAFICOS velocidade de corrosao X dedx(K).

```

REAL Mmol,XX,YY,mc2,k,iadj
INTEGER Z,ZZ,ZMOL
DIMENSION X(5,8,9),Y(5,8),XX(8),YY(8),BETA(5,6)
COMMON IGRAF,IOUT,ipar,z,Zmol,Mmol,f,mc2,c1,iadj
NPT = 6
OPEN(UNIT=1,FILE='VVPR.DAT',STATUS='OLD')
OPEN(UNIT=3,FILE='BPR.DAT',STATUS='OLD',FORM='FORMATTED',
1 ACCESS='DIRECT')
OPEN(UNIT=9,FILE='VVeres.pro',STATUS='new')
Zmol = 108
Mmol = 207.10
iadj = 77.07*1.602e-19

F = 2.306576E-28 ! 1.602E-19*8.98758E9*1.602E-19
NC2 = 8.186853e-14 ! 9.1091E-31*2.997925E8**2
C1 = 4*3.14159*Zmol*6.02E23*1.15*F*(Mmol*NC2)*1.e6
c Com o fator 1.e6 resulta um dedx em joules/metro.

WRITE(5,*) ('Escreva o valor de IGRAF.')
READ(5,*) IGRAF
C 0 programa desenha graficos no video se IGRAF.EQ.1.
C 0 programa desenha graficos na plotter se IGRAF.EQ.2.
C 0 programa mostra parametros no video se IGRAF.GT.2.
C
IOUT = 9
ifator = 1
if(ifator.eq.1) go to 66
WRITE(5,*) 'Escreva o valor do fator de multiplicacao para a
1 constante K.'
READ(5,*) Ifator

66 continue
c ipar=2
if(ipar.gt.0) go to 67
WRITE(5,*) 'Escreva o parametro de escolha do limite inferior'

```

```

write(5,*) '(ipar.eq.1---> bq;      ipar.ne.1---> constante.blim.)'
READ(5,*) ipar

67 XX(NPT+1) = 0.
XX(NPT+2) = .5e-8
YY(NPT+1) = 0.
YY(NPT+2) = 2.
READ(1,1)
1 FORMAT(/)
2 FORMAT()
DO 7 ZZ=1,5
READ(1,2)
READ(1,*) (Y(ZZ,I),I=1,NPT)
DO I=1,NPT
IF(IGRAF.EQ.5) WRITE(5,*) Y(ZZ,I)
READ(3,REC=6+(ZZ-1)*(NPT+1)+I,FMT=18) BETA(ZZ,I)
END DO
7 CONTINUE
18 format(x,d24.16)

IF(IGRAF.NE.1) GO TO 330
CALL VTPLOTS(9.,13.,1)
CALL VTPLOT(.5,8.5,-3)
DO 10 KKK=1,3
DO 100 KK=1,3
kkkk = KK + 3*(KKK - 1)
fator = FLOAT(Ifator)
if(ipar.eq.1)K = .2*fator*FLOAT(KKKK) - 3.8
if(ipar.ne.1)K = .2*fator*FLOAT(KKKK) - 1
C CALL VTAXIS(0.,0.,'de/dx (J/m)',-1,2.,0.,0.,2.e-8)
C CALL VTAXIS(0.,0.,'vel.corr.(micra/h)',1,3.,90.,0.,8.)
CALL FACTOR(.25)
CALL VTGRID(0.,0.,1.,1.,1,1)
DO 334 ZZ=1,5
Z = 9 - ZZ
IF(Z.EQ.4) Z = 5
DO 1000 I=1,NPT
CALL eres(BETA(ZZ,I),X(ZZ,I,KKKK),K)
XX(I) = X(ZZ,I,KKKK)
YY(I) = Y(ZZ,I)
1000 CONTINUE
CALL VTLINe(XX,YY,6,1,0,0)
334 CONTINUE
CALL FACTOR(1.)
CALL VTPLOT(3.,0.,-3)
100 CONTINUE
CALL VTPLOT(-9.,-4.,-3)
10 CONTINUE
CALL VTPLOT(0.,0.,999)
GO TO 332

330 IF(IGRAF.NE.2) GO TO 331
CALL PLOTS(21.,13.,4)
CALL PLOT(1.5,8.5,-3)
DO 11 KKK=1,3
DO 101 KK=1,3
KKKK = KK + 3*(KKK - 1)
fator = FLOAT(Ifator)
if(ipar.eq.1)K = .2*fator*FLOAT(KKKK) - 3.8

```

```

if(ipar.ne.1)K = .2*fator*FLOAT(KKKK) - 1
CALL AXIS(0.,0.,'de/dx (J/m)',-1,4.,0.,0.,2.e-8)
CALL AXIS(0.,0.,'vel.corr.(micra/h)',1,3.,90.,0.,8.)
C CALL GRID(0.,0.,1.,1.,4,3)
CALL FACTOR(.25)
DO 335 ZZ=1,5
Z = 9 - ZZ
IF(Z.EQ.4) Z = 5
DO 1001 I=1,NPT
CALL eres(BETA(ZZ,I),X(ZZ,I,KKKK),K,KFLC,KFLH,KFLO,KFLN)
XX(I) = X(ZZ,I,KKKK)
YY(I) = Y(ZZ,I)
1001 CONTINUE
CALL LINE(XX,YY,6,1,0,0)
335 CONTINUE
CALL FACTOR(1.)
CALL PLOT(5.,0.,-3)
101 CONTINUE
CALL PLOT(-15.,-4.,-3)
11 CONTINUE
CALL PLOT(0.,0.,999)
GO TO 332

331 DO 12 KKK=1,3
DO 102 KK=1,3
KKKK = KK + 3*(KKK - 1)
fator = FLOAT(Ifator)
if(ipar.eq.1)K = 2*fator*FLOAT(KKKK) - 3.8
if(ipar.ne.1)K = 2*fator*FLOAT(KKKK) - 1
IF(IGRAF.EQ.3) WRITE(IOUT,20) KKKK
DO 336 ZZ=1,5
Z = 9 - ZZ
IF(Z.EQ.4) Z = 5
DO 1002 I=1,NPT
CALL eres(BETA(ZZ,I),X(ZZ,I,KKKK),K)
XX(I) = X(ZZ,I,KKKK)
YY(I) = Y(ZZ,I)
IF(IGRAF.EQ.3) WRITE(IOUT,21) XX(I),yy(i),BETA(ZZ,I),Z
1002 CONTINUE
336 CONTINUE
102 CONTINUE
12 CONTINUE
20 FORMAT(/X,'LOOP ',I2)
21 FORMAT(X,'dedx=',E12.3,';   vel. corr.=',E12.3,';   beta=',e12.3,
1';   Z=',I2)

332 CALL EXIT
END

```

```

SUBROUTINE eres(BETA,dedx,K)
REAL K,iadj,mc2
integer z
COMMON IGRAF,IOUT,ipar,z,Zmol,Mmol,f,mc2,c1,iadj

```

```

gama = 1/sqrt(1-beta**2)
eta = beta*gama
bmax=1.05e-34*3.e8*eta/iadj
bq=1.05e-34*3.e8/(2*mc2*eta)
blim=f/(eta*beta*mc2)

Calculo de DELTA (utilizou-se os parametros do material lucite):
xis=-.1
if(eta.le..1) go to 212
xis = .43429*log(eta)
212 continue

DELO = 3.21
DEL1 = .456
DEL2 = 2.78
X0 = .14
X1 = 2

IF(xis.LT.X0) GO TO 71
IF(xis.LT.X1) GO TO 72
DELTA = 2*DLOG(etae/etr) - DELO
GO TO 80
71 DELTA = 0
GO TO 80
72 DELTA = 2*DLOG(etae/etr) - DELO + DEL1*(X1 - xis)**DEL2

C Calculo da taxa de perda de energia:
80 if(ipar.ne.1) go to 81
dedx = log(bmax/bq) - DELTA/2 + k
go to 82
81 dedx = log(bmax/(50*blim)) - DELTA/2 + k
82 dedx = dedx*z**2*c1/beta**2
ff=log(bmax/bq)
fff=log(bmax/(50*blim))
c if(igraf.eq.3)write(5,*)'ff=',ff,';   fff=',fff,';   delta=',
c 1 delta,';   k=',k

return
end

```

Programa VVR.FOR

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Y)
DIMENSION XX(10002),YY(10002),N(92)
REAL*4 K,iadj,mc2,f,c1,dedx,IX,YY,U1,U2,beta
INTEGER Z,ZMOL
REAL*8 LOGI,LOGTAU,LL,LLL,LAMBDA,M,IADJev,Mmol
COMMON ib,IOUT,z,Zmol,f,mc2,c1,iadj

IOUT = 5
WRITE(5,*) ('Escreva o valor de IB.')
READ(5,*) IB
c 0 programa desenha graficos no video se IB.EQ.1.
c 0 programa desenha graficos na plotter se IB.EQ.2.
c 0 programa mostra parametros no video se IB.GT.2.

WRITE(5,*) ('Escreva o valor de IZ.')
READ(5,*) IZ
c IZ e' o numero atomico maximo, com que o programa inicia um ciclo.

```

```

data (M(i),i=1,92)/1.008D0,4.003D0,6.939D0,9.012D0,10.81D0,12.011D0,
1 14.007D0,15.9994D0,19.D0,20.183D0,22.9898D0,24.312D0,26.98D0,
2 28.09D0,30.974D0,32.064D0,35.453D0,39.948D0,39.102D0,40.08D0,
3 44.96D0,47.9D0,50.94D0,52.D0,54.94D0,55.85D0,58.93D0,58.71D0,
4 63.54D0,65.37D0,69.72D0,72.59D0,74.92D0,78.96D0,79.909D0,83.8D0,
6 85.47D0,87.62D0,88.91D0,91.22D0,92.91D0,95.94D0,99.D0,101.1D0,
7 102.91D0,106.4D0,107.87D0,112.4D0,114.82D0,118.69D0,121.75D0,
8 127.6D0,126.9D0,131.3D0,132.91D0,137.34D0,138.91D0,140.12D0,
9 140.91D0,144.24D0,147.D0,150.35D0,151.96D0,157.25D0,158.92D0,
10 162.5D0,164.93D0,167.26D0,168.93D0,173.04D0,174.97D0,178.49D0,
11 180.95D0,183.85D0,186.23D0,190.2D0,192.2D0,195.09D0,196.97D0,
12 200.59D0,204.37D0,207.19D0,208.98D0,210.D0,210.D0,222.D0,223.D0,
13 226.D0,227.D0,232.04D0,231.D0,238.03D0/

```

```

Zmol = 108
Mmol = 207.10D0
IADJev = 77.0723555D0
iadj = 77.07*1.602e-19

```

```

F = 2.306576E-28      ! 1.602E-19*8.98758E9*1.602E-19
MC2 = 8.186853e-14   ! 9.1091E-31*2.997925E8**2
C1 = 4*3.14159*Zmol*6.02E23*1.15*F/(Mmol*MC2)*1.e6
c Com o fator 1.e6 resulta um dedx em joules/metro.

```

```

XX(10001) = 0.
XX(10002) = 20000.
YY(10001) = 0.
YY(10002) = 2.

```

```

IF(IB.EQ.1) CALL VIPLOTS(21.,13.,2)
IF(IB.EQ.1) CALL FACTOR(.2)
IF(IB.EQ.1) CALL VIPLLOT(.5,.5,-3)
c IF(IB.EQ.1) CALL VTAXIS(0.,0.,'alcance (cm)',-1,20.,0.,0.,2.)
c IF(IB.EQ.1) CALL VTAXIS(0.,0.,'vel. corr. (micra/hora)',1,12.,90.,0.,2.)

```

```

IF(IB.EQ.2) CALL PLOTS(21.,13.,1)
IF(IB.EQ.2) CALL PLBT(.5,.5,-3)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'alcance (cm)',-1,20.,0.,0.,2.)
IF(IB.EQ.2) CALL AXIS(0.,0.,'vel. corr. (micra/hora)',1,12.,90.,0.,2.)

```

```

con0=-26.875d0
con1=187.294d7
con2=-261.397d14
con3=129.502d21

```

```

DO 1000 Z=IZ,1,-1
IF(IB.EQ.2) WRITE(5,*) Z
II = 1
IFLAG = 0
DO 1001 I=1,100000

```

```

C ALCANCE DO PROTON IDEAL:

```

```

C IBARKAS=1 -> 1<TAU<9 MEV; IBARKAS=2 -> 7<TAU<1200 MEV.
IBARKAS = 2
IF(IBARKAS.EQ.2) GO TO 121

```

```

TAU = FLOAT(I)
C TAU E' A ENERGIA DA PARTICULA EM MEVS POR NUCLEON.
C WRITE(5,37) TAU
37 FORMAT(X,F9.2)
LOGI = DLOG(IADJev)

```

```
LOGTAU = DLOG(TAU)
LL=DLOG(MNOL/ZMOL) - .75265D0 + .073736D0*LOGI + .040556D0*LOGI**2
LL = LL + (2.5398D0 - .312D0*LOGI + .018664D0*LOGI**2)* LOGTAU
LL = LL + (-.24598D0 + .11548D0*LOGI - .0099661D0*LOGI**2)* LOGTAU**2
GO TO 122
```

```
121 LL = DLOG(MNOL/ZMOL)
LL=LL-.80155D0+.36916D0*LOGI-.014307D0*LOGI**2+.0034718D0*LOGI**3
LLL=1.8371D0-.01452D0*LOGI-.030142D0*LOGI**2+.0023603D0*LOGI**3
LL=LL+LLL*LOGTAU
LLL=.045233D0-.00095873D0*LOGI+.0071303D0*LOGI**2-.00068538D0*LOGI**3
LL=LL+LLL*LOGTAU**2
LLL=-.0059898D0-.00052315D0*LOGI-.00033802D0*LOGI**2+.000039405*LOGI**3
LL=LL+LLL*LOGTAU**3
```

```
122 LAMBDA = DEXP(LL)/.115
1 FORMAT(F15.8)
```

C EXTENSÃO DO ALCANCE:

Esta parte omitida é idêntica à parte correspondente do programa R.FOR (inicia-se à página 121 e termina à página 122).

C ALCANCE:

R = M(Z)*(LAMBDA + B)/Z**2

```
bbeta=dsqrt((tau+931.5)**2-931.5**2)/(tau+931.5)
beta=angl(bbeta)
k = .2
CALL eres(beta,dedx,K)
```

```
YYY = con3*dedx**3 + con2*dedx**2 + con1*dedx + con0
IF(YYY.GT.24.) GO TO 1001
```

XX(II) = R

YY(II) = YYY

IF(VYY.LT.0.) YY(II) = 0.

U1 = XX(II)/20000

U2 = YY(II)/2

IF(IB.EQ.1.AND.I.EQ.1001.AND.U2.NE.0.) CALL VTSYMBOL(U1,U2,.2,'*',0.,1)

IF(IB.EQ.2.AND.I.EQ.1001.AND.U2.NE.0.) CALL SYMBOL(U1,U2,.1,'*',0.,1)

IF(II.EQ.10000) GO TO 1003

II = II + 1

IFLAG = 1

1001 if(r.gt.400000.or.yyy.le.0) go to 1004

1004 IF(IFLAG.NE.1) GO TO 1000

DO K=II,10000

XX(K) = XX(II-1)

YY(K) = YY(II-1)

END DO

1003 IF(IB.EQ.1) CALL VLINE(XX,YY,10000,1,0,0)

IF(IB.EQ.2) CALL LINE(XX,YY,10000,1,0,0)

c if(ib.ne.3) go to 1005

c do iu=1,10002,1000

c write(5,*)z,xx(iu),yy(iu)

c end do

c1005 continue

1000 continue

```
IF(IB.EQ.1) CALL VIPL0T(0.,0.,999)
IF(IB.EQ.2) CALL PLOT(0.,0.,999)
```

```
CALL EXIT
END
```

```
SUBROUTINE eres(BETA,dedx,K)
REAL*4 K,iadj,mc2,f,c1,dedx,XX,YY,U1,U2,beta
INTEGER Z,ZMOL
COMMON ib,IOUf,z,Zmol,f,mc2,c1,iadj
```

```
gama = 1/sqrt(1-beta**2)
eta = beta*gama
bmax=1.05e-34*3.e8*eta/iadj
bq=1.05e-34*3.e8/(2*mc2*eta)
blim=f/(eta*beta*mc2)
```

Calculo de DELTA (utilizou-se os parametros do material lucite):

```
xis=-.1
if(eta.le..1) go to 212
xis = .43429*log(eta)
212 continue
```

```
DELO = 3.21
DEL1 = .456
DEL2 = 2.78
X0 = .14
X1 = 2
```

```
IF(xis.LT.X0) GO TO 71
IF(xis.LT.X1) GO TO 72
DELTA = 2*DLOG(etae1etr) - DELO
GO TO 80
71 DELTA = 0
GO TO 80
72 DELTA = 2*DLOG(etae1etr) - DELO + DEL1*(X1 - xis)**DEL2
```

C Calculo da taxa de perda de energia:

```
80 dedx = log(bmax/(50*blim)) - DELTA/2 + k
dedx = dedx*z**2*c1/beta**2
```

```
return
end
```

Apêndice D

Gráficos 'energia×velocidade'

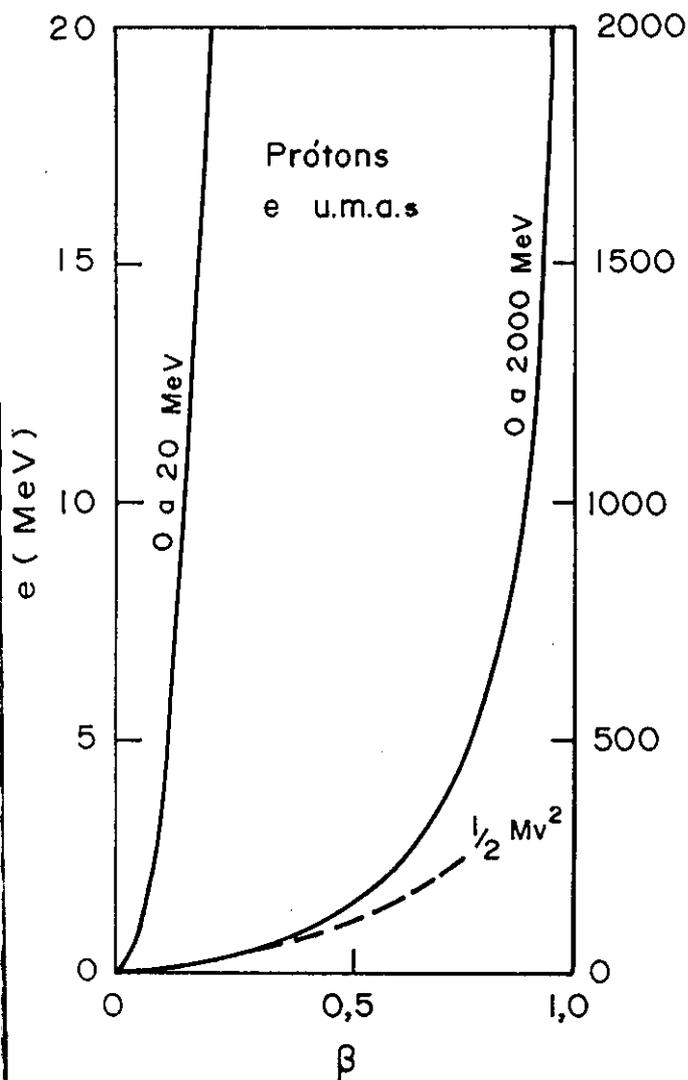


Gráfico 'energia×velocidade' para unidades de massa atômica.

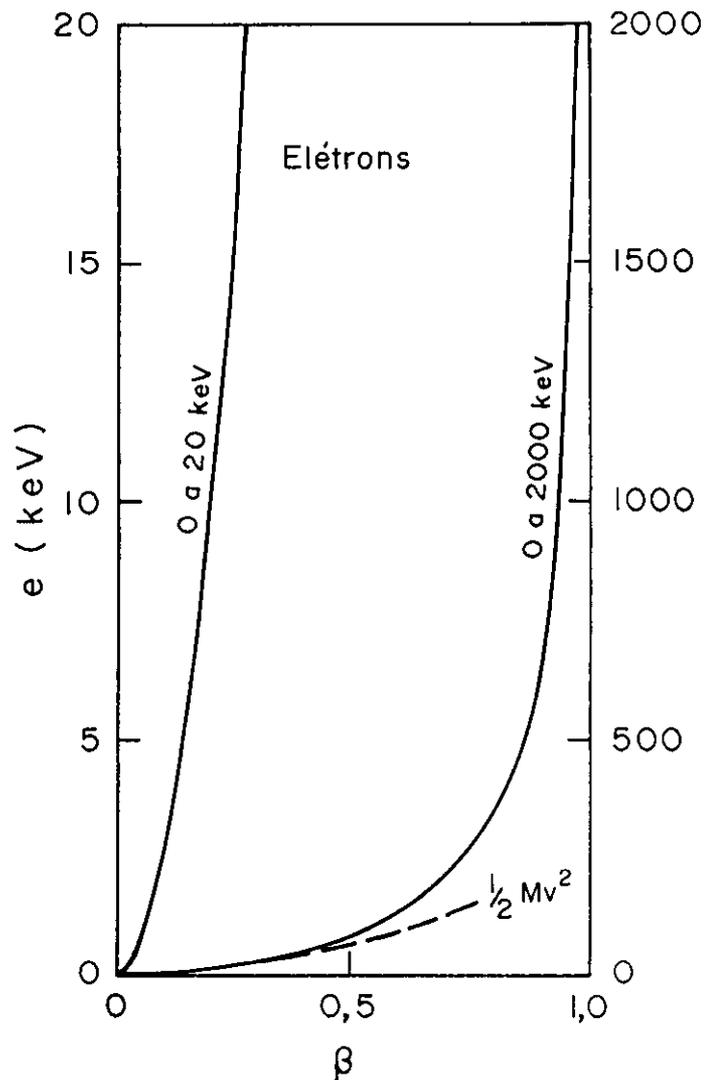


Gráfico 'energia×velocidade' para elétrons.

Apêndice E

Polimerização do CR39

Complementarmente às análises desenvolvidas sobre a formação de traços e sobre a composição da radiação primária, procurou-se, junto à indústria nacional, produzir material detector a partir do monômero CR39. As primeiras tentativas de produção de uma placa detectora foram feitas junto à *Acriresinas Indústria de Resina Acrílica Ltda.*, rua Amaro Luz, nº 180, São Paulo-SP. Nessas tentativas preliminares o CR39 foi copolimerizado com o metilmetacrilato; o material então produzido mostrou capacidade de detecção de partículas, embora tenha apresentado a formação de figuras espúrias de ataque químico¹.

A procura por um material que apresentasse boas qualidades de detecção teve prosseguimento na *Multivis Indústria Óptica Ltda.*, avenida Anton von Zuben, nº 3193, Campinas-SP. Várias amostras foram produzidas. A polimerização na forma de placas de pequena espessura traz novos problemas técnicos, notadamente na desmoldagem. Um parâmetro de controle é a *dureza*, medida por aparelho próprio, e que tem os resultados expressos na chamada *escala Barcol* (devida a Barber Collman, *Barbeton Institute, Pittsburg, PA, USA*). Outro parâmetro considerado é a *amarilidade* (yellowness), que está relacionada com o tipo e a quantidade de catalisador utilizado.

Utilizou-se como catalisadores o *Perkadox*, da *Akzo Chemicals, Inc.*, e o *IPP*, da *PPG Industries, Inc.*. O uso do *Perkadox* resulta em polimerizados de maior grau de amarilidade que o *IPP*. Ambos são nomes comerciais para o *diisopropil peroxidicarbonato*. Produziu-se progressivamente placas de maior dureza, por uso de maiores proporções de catalisador. A dificuldade de desmoldagem da peça íntegra aumenta com o aumento da dureza, a ponto de não ter sido possível desmoldar sem trincas as placas mais duras. Para comparação tinha-se à mão uma placa de origem japonesa (idêntica à utilizada no experimento de 1986), a qual possui dureza 40 (na escala Barcol) e alta amarilidade.

A dureza elevada favorece a ausência de figuras de ataque após o tratamento químico, qualidade essencial à utilização do material como detector de partículas.

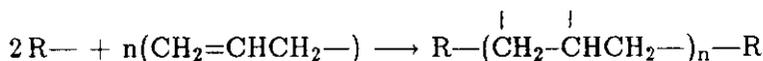
¹A Figura E.4, página 138, mostra o resultado obtido com esse material após irradiação com partículas alfa.

A fim de produzir um material livre de figuras espúrias é crucial homogeneizar ao máximo a mistura monômero-catalisador. O tempo de mistura (efetuado com misturador pneumático próprio) foi aumentado de alguns minutos para várias horas. As dificuldades de desmoldagem têm sido contornadas com a inclusão de um ciclo de pós-cura (em água quente), após a própria desmoldagem, que é assim efetuada enquanto o material ainda não atingiu sua maior dureza. Obteve-se ao final um material com certa amarelidade, dureza 35 na escala Barcol, que registrou partículas alfa de energia ~ 5 MeV provenientes de uma fonte de ^{226}Ra , e com ausência completa de figuras de ataque.

O ataque químico é o padrão, efetuado com solução de hidróxido de sódio 6.25 N a 70°C durante 400 minutos, em equipamento do Grupo de Cronologia do DRCC.

Estrutura molecular

O monômero do CR39 é o dietileno glicol bis(alil carbonato) (vide fórmula estrutural na expressão 5.4, página 43), que contém dois grupos alílicos ($\text{CH}_2=\text{CHCH}_2-$) passíveis de serem polimerizados em cadeias. Cada grupo rompe sua ligação insaturada e dá lugar a duas ligações carbono-carbono. A polimerização acontece devido à reatividade dos radicais alílicos, catalisada por um radical livre ($\text{R}\cdot$), conforme o processo



O polímero CR39 é constituído de uma estrutura molecular tridimensional formada por cadeias alílicas, conectadas entre si por pontes de dietileno glicol dicarbonato² (vide Figura E.1), pontes essas que já se encontram constituídas na molécula do monômero. Um objeto polimerizado é, pois, constituído de uma única macromolécula, daí suas excelentes qualidades ópticas e químicas, bem como sua infusibilidade (polímero termoresistente) e insolubilidade.

O processo de corrosão química libera as pontes de dicarbonato, dando lugar à formação de moléculas solúveis de álcool polialílico, remanescentes das cadeias polialílicas do polímero. A solubilidade diminui com o aumento do tamanho da cadeia, daí a conveniência da utilização de maiores quantidades de catalisador, que favorece a formação de cadeias mais curtas [98]. Ademais, uma maior quantidade de catalisador favorece a formação de uma maior densidade de pontes de dicarbonato (evidenciada pela maior dureza do polímero, diretamente relacionada à quantidade de catalisador utilizado), as quais são desestruturadas nas regiões circunvizinhas à trajetória de uma partícula carregada, e resulta uma maior diferença entre v_T (velocidade de corrosão ao longo do traço) e v_M (velocidade de corrosão ao longo do material).

²O glicol é um diálcool que, por perda de água, forma um éster. Este por sua vez, por nova perda de água, se liga ao radical carbonato.

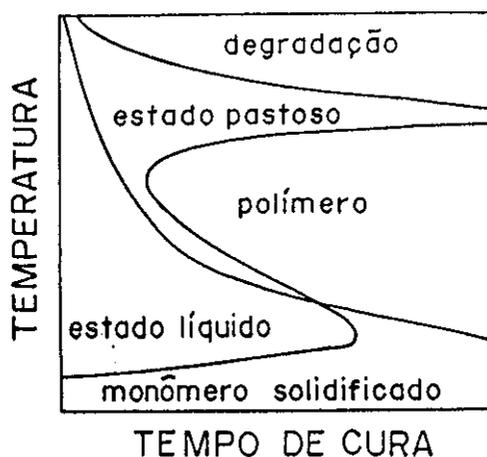


Figura E.2: Diagrama geral de fases, com transições físicas e químicas sofridas pelo monômero CR39 durante sua polimerização (a partir de [97]). A escala de tempo é da ordem de horas; as temperaturas encontram-se entre 0°C e 100°C.

Ltda. com o objetivo de minimizar os gradientes de temperatura.

A Figura E.2 mostra, em linhas gerais, o conjunto de transições físicas e químicas sofridas pelo monômero durante curas com diferentes temperaturas (constantes). A unidade de tempo é da ordem de horas (pode durar dias, em temperaturas menores); as temperaturas encontram-se entre 0°C e 100°C. Os processos em temperaturas mais baixas correspondem às polimerizações naturais. Ocorrem variações de valores na repetição de um mesmo processo. Para uma leitura mais completa leia-se, entre outros, um artigo por J. Stejni [97].

Com respeito a prescrições para o ciclo de cura existem diferentes experiências a respeito. Henshaw et al. [53], por exemplo, relata funções 'temperatura x tempo' adequadas para promover taxas constantes de formação de cadeias poliméricas (vide Figura E.3), a partir de diferentes temperaturas iniciais.

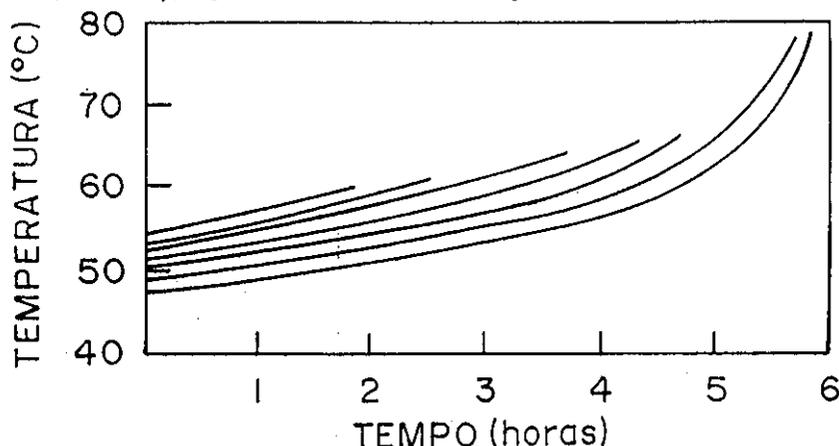


Figura E.3: Curvas 'temperatura x tempo' para cura do CR39, que permitem a formação de cadeias poliméricas a velocidades constantes (a partir de [53]).

Exposição à radioatividade

Testes de exposição foram realizados com uma fonte de ^{226}Ra de atividade $3\ \mu\text{Ci}$. Tal atividade corresponde a $3 \cdot 10^{-6} \cdot 3.7 \cdot 10^{10} \cdot (4\pi)^{-1} = 8.8 \cdot 10^3$ desintegrações/s.sr. Cada exposição durou 10 segundos. A fonte esteve colocada no fundo de um recipiente (blindagem de chumbo) de profundidade 2 cm, que foi justaposto à amostra. O número de partículas por unidade de área que deve, com essa disposição, atingir a amostra é

$$8.8 \cdot 10^3 \cdot 10 \cdot 2^{-2} = 2.2 \cdot 10^4 \text{ partículas/cm}^2$$

Na verdade o número deve ser menor, pelo menos de um fator de 2, devido à absorção de partículas que atravessam camadas da própria fonte.

Uma densidade conveniente de cones para a observação ao microscópio é de 500 cones/mm². A partir de 2000 cones/mm² acontece superposição freqüente de cones. Utilizou-se aumento de 500 vezes, e o campo de visão nesse aumento é um círculo de área $8 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2$. Ao fotografar, a área registrada é um pouco menor— $6 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2$ —ou seja, é um quadrado de lado aproximadamente igual a $250\ \mu$. Nas fotografias das Figuras E.4 e E.5 observa-se 13 cones de partículas em cada campo, o que corresponde a uma densidade de $\sim 2 \cdot 10^4$ partículas/cm². Aqui deve-se considerar que, para fotografar, procura-se uma região especialmente rica em cones, de modo que a densidade média é também menor, da ordem de um fator 2. Assim, a densidade observada na fotografia concorda com a densidade prevista a partir da atividade da fonte.

O CR39 que polimerizamos ainda não atingiu a sensibilidade do CR39 estrangeiro, levando à formação de cones menores nas mesmas condições. Diferentes fato-

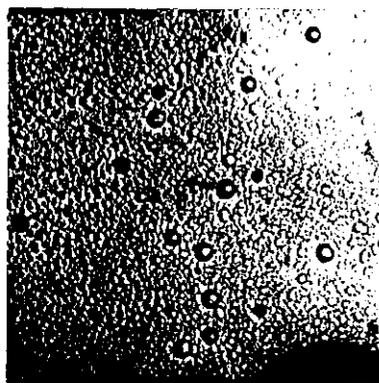


Figura E.4: Um dos materiais polimerizados inicialmente; observe-se a presença de figuras de ataque.

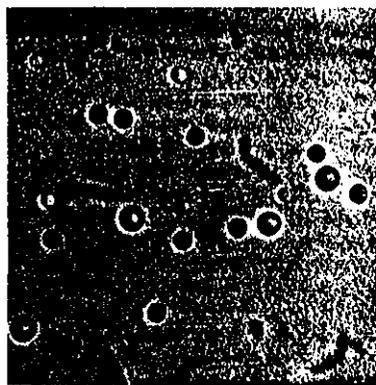


Figura E.5: Material japonês.

res, em especial a quantidade de catalisador, deverão ser considerados a fim de se elevar a sensibilidade.

Agradecimentos

O autor agradece ao Óptico Darci Jacob Silva, da *Multivis Indústria Óptica Ltda.*, pelo especialíssimo interesse e receptividade com que acolheu este trabalho e as sugestões de polimerização de CR39, com vistas à detecção de partículas. De fato, ele realizou pessoalmente a maior parte do trabalho de fabricação das placas.

Agradece também a Bruno Ianelli, da *Acriresinas Indústria de Resina Acrílica*, que me abriu portas para a realização do mesmo propósito.

Bibliografia

- [1] M. Abramowitz e I. A. Stegun, editori. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, Inc., New York, 1965. Item 7.4.13.
- [2] B. S. Acharya et al. *Proc. 18th Intern. Cosmic Ray Conf., Bangalore*, 9:191, 1985.
- [3] M. Aglietta et al. *Nuo. Cim.*, 9C:262, 1986.
- [4] H. R. Allan. *Prog. in Elem. Part. and Cosmic Ray Physics*, X:169, 1971.
- [5] O. C. Allkofer. *Introduction to Cosmic Radiation*. Verlag Karl Thiernig, München, 1975.
- [6] Y. P. Apel e G. Pretzsch. *Nuc. Tracks Rad. Meas.*, 12(1-6):45, 1986.
- [7] R. M. Baltrusaitis et al. *Proc. 20th Intern. Cosmic Ray Conf., Moscow*, 1:394, 1987.
- [8] W. H. Barkas e M. J. Berger. *National Academy of Sciences, 2101 Constitution Avenue, Washington, DC 20418—National Research Council Publication*, 1133:103, Nuclear Science Series, Report n.39, 1964.
- [9] G. Battistoni et al. *Nuo. Cim.*, 8C:76, 1985.
- [10] C. P. Bean, M. V. Doyle e G. Entine. *J. Appl. Phys.*, 41:1454, 1970.
- [11] E. V. Benton. *Rad. Effects*, 2:273, 1970.
- [12] E. V. Benton e R. P. Henke. *Nuc. Inst. and Methods*, 67:87, 1969.
- [13] E. V. Benton e R. P. Henke. Technical Report 19, Department of Physics, University of San Francisco, July 1972.
- [14] H. A. Bethe. *Ann. Physik*, 5:325, 1930.
- [15] P. R. Bevington. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill Book Company, 1969.
- [16] W. R. Binns, J. I. Fernandez, M. H. Israel, J. Klarmann, R. C. Maehl e R. A. Mewaldt. *Proc. 18th Intern. Cosmic Ray Conf., Denver*, 1:260, 1973.

- [17] N. Bohr. *Phil. Mag.*, 30:581, 1915.
- [18] A. D. Bray et al. *Proc. 17th Intern. Cosmic Ray Conf., Paris*, 2:168, 1981.
- [19] E. V. Budko et al. *Proc. 19st Intern. Cosmic Ray Conf., La Jolla*, 8:24, 1985.
- [20] T. H. Burnett et al. *Nuc. Inst. and Methods*, A251:583, 1986.
- [21] T. H. Burnett et al. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:101, 1990.
- [22] B. G. Cartwright, M. Garcia-Munoz e J. A. Simpson. *Proc. 12th Intern. Cosmic Ray Conf., Hobart*, 1:215, 1971.
- [23] B. G. Cartwright, E. K. Shirk e P. B. Price. *Nuc. Inst. and Methods*, 153:457, 1978.
- [24] L. T. Chadderton. *Nuc. Tracks Rad. Meas.*, 15:11, 1988.
- [25] R. Cowsik, Y. Pal, S. N. Tandon e R. P. Verga. *Phys. Rev.*, 158:1238, 1967.
- [26] R. Cowsik e L. W. Wilson. *Proc. 19th Intern. Cosmic Ray Conf., Denver*, 1:500, 1973.
- [27] W. DeSorbo. *Nuc. Tracks*, 3:13, 1979.
- [28] R. Dwyer e P. Meyer. *Proc. 20th Intern. Cosmic Ray Conf., Moscow*, 1:321, 1987.
- [29] J. A. Earl. *Phys. Rev. Lett.*, 6:125, 1961.
- [30] R. Eisberg e R. Resnick *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles* John Wiley & Sons, Inc., New York, 1974.
- [31] K. Endo e T. Doke. *Nuc. Inst. and Methods*, 111:29, 1973.
- [32] U. Fano. *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, 13:1, 1963.
- [33] E. J. Fenyves, S. N. Balog, N. R. Davis, D. J. Suson e T. Stanev. *Phys. Rev. D*, 37:649, 1988.
- [34] E. Fermi. *Phys. Rev.*, 57:485, 1940.
- [35] R. L. Fleisher, P. B. Price e R. M. Walker. *Sci. Amer.*, 220:30, 1969.
- [36] R. L. Fleisher, P. B. Price e R. M. Walker. *Nuclear Tracks in Solids, Principles and Applications*. University of California Press, Berkeley, 1975.
- [37] R. L. Fleisher, P. B. Price, R. M. Walker e E. L. Hubbard. *Phys. Rev.*, 156:353, 1967.

- [38] Yu. A. Fomin et al. *Proc. 20th Intern. Cosmic Ray Conf., Moscow*, 1:397, 1987.
- [39] P. H. Fowler. *Proc. 19th Intern. Cosmic Ray Conf., Denver*, 5:3627, 1973.
- [40] P. H. Fowler, R. A. Adams, V. G. Cowen e T. J. Kidd. *Proc. Roy. Soc. A*, 301:39, 1967.
- [41] P. H. Fowler, V. M. Clapham, D. L. Henshaw e S. Amin. *Proc. 16th Intern. Cosmic Ray Conf., Kyoto*, 11:97, 1979.
- [42] P. S. Freier, E. J. Lofgren, E. P. Ney, F. Oppenheimer, H. L. Bradt e B. Peters. *Phys. Rev.*, 74:213, 1948.
- [43] T. K. Gaisser e T. Stanev. *Nuc. Inst. and Methods*, A235:183, 1985.
- [44] M. Garcia-Munoz e J. A. Simpson. *Acta Phys. Acad. Sci. Hung., Suppl. 1*, 29:317, 1970.
- [45] T.L. Garrard, M.H. Israel, J. Klarmann, E.C. Stone, C.J. Waddington e W.R. Binns. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:61, 1990.
- [46] J.E. Grove et al. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:53, 1990.
- [47] G. Guillot e F. Rondelez *J. Appl. Phys.*, 52(12):7155, 1986.
- [48] J. F. Hamilton e B. E. Bayer. *J. Opt. Soc. Am.*, 55:528, 1965.
- [49] T. Hara et al. *Proc. 17th Intern. Cosmic Ray Conf., Paris*, 9:179, 1981.
- [50] T. Hayashi e T. Doke. *Nuc. Inst. and Methods*, 174:349, 1980.
- [51] R. P. Henke e E. V. Benton. *Nuc. Inst. and Methods*, 97:483, 1971.
- [52] M. Henkel et al. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:15, 1990.
- [53] D. L. Henshaw, N. Griffiths, O. A. L. Landen, S. P. Austin e A. A. Hopgood. *Proc. 11th Intern. Conf. on SSNTDs, Bristol, Nuc. Tracks Suppl.3*, 1982.
- [54] U. Heyna, W. Enge, G. Sermund e R. Beaujean. *Nuc. Tracks Rad. Meas.*, 12(1-6):33, 1986.
- [55] A. M. Hillas. *Phys. Rep.*, 20C:59, 1975.
- [56] R. Ilić. Technical Report, Workshop on Radon Monitoring, ICTP, Trieste, 1989.
- [57] M. H. Israel et al. *Proc. 20th Intern. Cosmic Ray Conf., Moscow*, 1:330, 1987.
- [58] I.P. Ivanenko et al. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:77, 1990.
- [59] J. D. Jackson. *Classical Eletrodynamics*. John Wiley & Sons, New York, 1962.
- [60] R. Katz e E. J. Kobetich. *Phys. Rev.*, 170:397, 1968.

- [61] R. Katz e E. J. Kobetich. *Phys. Rev.*, 170:401, 1968.
- [62] E. J. Kobetich e R. Katz. *Phys. Rev.*, 170:391, 1968.
- [63] Y. Komaki. *Nuc. Tracks*, 3:33, 1979.
- [64] W. L. Kraushaar e G. W. Clark. *Phys. Rev. Lett.*, 8:106, 1962.
- [65] K. E. Krombel e M. E. Wiedenbeck. *Proc. 20th Intern. Cosmic Ray Conf., Moscow*, 1:360, 1987.
- [66] C. M. Lederer e V. S. Shirley. *Table of Isotopes*. John Wiley & Sons, Inc., 7^a edição, 1978.
- [67] R.A. Leske e M.E. Wiedenbeck *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:57, 1990.
- [68] M. Luksys, J. A. Chinellato, I. M. Martin, R. C. Rigitano, E. H. Shibuya, M. C. Souza Jr., A. Turtelli Jr., H. Nanjo, H. Matsutani, T. Fujinaga, T. Kobayashi, M. Ichimira, K. Ikeda, T. Shibata, Y. Funayama e H. Semba. *Proc. 20th Intern. Cosmic Ray Conf., Moscow*, 5:206, 1987.
- [69] B. H. Mahan. *University Chemistry*. Addison-Wesley Publishing Company, 1965.
- [70] H. Mark, N. G. Gaylord e N. Bikales, editores. *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*, página 307. Volume 3, Interscience Publishers—John Wiley & Sons, Inc., 1964.
- [71] H. Mark, N. G. Gaylord e N. Bikales, editores. *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*, página 799. Volume 1, Interscience Publishers—John Wiley & Sons, Inc., 1964.
- [72] M. Meneguzzi. *Proc. 18th Intern. Cosmic Ray Conf., Denver*, 1:378, 1973.
- [73] P. Meyer. *Ann. Rev. Astron. Astroph.*, 7:1, 1969.
- [74] P. Meyer e R. Vogt. *Phys. Rev. Lett.*, 6:193, 1961.
- [75] P. Meyer e R. Vogt. *Phys. Rev.*, 129:2275, 1963.
- [76] M. Monnin. *Rad. Effects*, 5:69, 1970.
- [77] D. Müller, J. Grunsfeld, J. L'Heureux. P. Meyer e S. Swordy. *Proc. 20th Intern. Cosmic Ray Conf., Moscow*, 1:334, 1987.
- [78] K. Nagashima et al. *Proc. 15th Intern. Cosmic Ray Conf., Plovdiv*, 2:154, 1977.
- [79] G. Navarra. *Proc. G. Wataghin School on High E. Phen., Campinas*. R.C. Rigitano e A. Turtelli Jr., editores. Editora da Unicamp, DRCC-IFGW-UNICAMP, 13081-Campinas, Brasil, página 203, 1991.

- [80] L. K. Ng, J. Wdowczyk e A. W. Wolfendale. *Proc. 13th Intern. Cosmic Ray Conf., Denver*, 3:1781, 1973.
- [81] L.C. Northcliffe e R.F. Schilling.. *Nuclear Data Tables.*, A7:233, 1970.
- [82] P. B. Price. *Space Sci. Rev.*, 15:69, 1973.
- [83] P. B. Price, R. L. Fleischer, D. D. Peterson, C. O'Ceallaigh, D. O'Sullivan e A. Thompson. *Phys. Rev.*, 164:1618, 1967.
- [84] P. B. Price, R. L. Fleischer, D. D. Peterson, C. O'Ceallaigh, D. O'Sullivan e A. Thompson. *Phys. Rev. Lett.*, 21:630, 1968.
- [85] P. B. Price, D. D. Peterson, R. L. Fleischer, C. O'Ceallaigh, D. O'Sullivan e A. Thompson. *Acta Phys. Acad. Sci. Hung., Suppl. 1*, 29:417, 1970.
- [86] P. B. Price, E. K. Shirk, K. Kinoshita e G. Tarlé. *Proc. 16th Intern. Cosmic Ray Conf., Kyoto*, 11:80, 1979.
- [87] P. B. Price e R. M. Walker. *J. Appl. Phys.*, 33:3400, 1962.
- [88] R. C. Rigitano. *Nuc. Inst. and Methods*, B61:315, 1991.
- [89] B. Rossi. *Cosmic Rays*. McGraw-Hill Book Company, 1964.
- [90] W. K. H. Schmidt, K. Atallah, T. F. Cleghorn, W. V. Jones, A. Modlinger e M. Simon *Astron. and Astroph.*, 46:49, 1976.
- [91] G. Schnoor, H. Schütt, R. Beaujean e W. Enge. *Proc. 11th Intern. Conf. on SSNTDs, Bristol, Nuc. Tracks Suppl.3*, 1982.
- [92] M. M. Shapiro e R. Silberberg. *Ann. Rev. Nuc. Sci.*, 20:323, 1970.
- [93] E. C. H. Silk e R. S. Barnes. *Phil. Mag.*, 4:970, 1959.
- [94] M. Simon et al. *Astroph. J.*, 239:712, 1980.
- [95] L. H. Smith, A. Buffington, G. F. Smoot, L. W. Alvarez e M. A. Wahlig. *Astrophys. J.*, 180:987, 1973.
- [96] R. Spohr. *Ion Tracks and Microtechnology, Principles and Applications*. Vieweg, Braunschweig, Germany, 1990.
- [97] J. Stejni. *Rad. Prot. Dos.*, 20 No. 1/2:31, 1987.
- [98] J. Stejni e T. Portwood. *Nuc. Tracks*, 12, Nos 1-6:121, 1986.
- [99] R. M. Sternheimer. *Phys. Rev.*, 88:851, 1952.
- [100] R. M. Sternheimer. *Phys. Rev.*, 91:256, 1953.

- [101] R. M. Sternheimer. *Phys. Rev.*, 103:511, 1956.
- [102] S. P. Swordy, D. Müller, P. Meyer, J. L'Heureux e J. M. Grunsfeld. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:93, 1990.
- [103] M. Teshima et al. *Proc. 20th Intern. Cosmic Ray Conf., Moscow*, 1:404, 1987.
- [104] J. L. Teyssier, J. L. Decossas e J. C. Vareille. *Nuc. Tracks Rad. Meas.*, 12(1-6):25, 1986.
- [105] J. Tripier e M. Debeauvais. *Nuc. Inst. and Methods*, 147:221, 1977.
- [106] T. W. Turner, V. M. Clapham, A. P. Fews e D. L. Henshaw. *Proc. 11th Intern. Conf. on SSNTDs, Bristol, Nuc. Tracks Suppl.3*, 1982.
- [107] A. Turtelli Jr. et al. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:184, 1990.
- [108] R. Vogt. *Phys. Rev.*, 125:366, 1962.
- [109] V. Vylet et al. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:19, 1990.
- [110] T. C. Weekes. *Phys. Rep.*, 160:1, 1988.
- [111] M.E. Wiedenbeck. *Proc. 21st Intern. Cosmic Ray Conf., Adelaide*, 3:31, 1990.
- [112] A. W. Wolfendale. *Cosmic Rays*. George Newnes Limited, London, 1963.
- [113] J.F. Ziegler, editor. *The Stopping and Ranges of Ions in Matter*. Pergamon Press, Inc., New York, 1980.