

ANCULO: Um programa Monte Carlo para transporte de feixes de íons em alvos sólidos*

L. F. S. Coelho e D. P. Almeida - IF/UFRJ

Várias variáveis descrevem o comportamento de íons em alvos: perda de energia, deflexão angular e desvio lateral. O método Monte Carlo evita as suposições irreais - deflexões pequenas, perdas de energias desprezíveis e seções de choque constantes - que permitem e/ou facilitam os cálculos analíticos, estes baseados nas equações de Bethe e de Landau - Vavilov. Ele permite o uso de diversos potenciais interatômicos e poderes de freiamento e para projéteis moleculares é o único possível. A grande deficiência está na maior lentidão do tempo de computação a qual, por exemplo no programa TRIM, é minorada por aproximações grosseiras se a deflexão angular for menor que 10 graus. Como apontado na literatura recente (Lantschner et al⁽¹⁾) testes das dependências de dE/dx em ângulo e na espessura necessitam de cálculos mais precisos que NKW⁽²⁾ e TRIM⁽³⁾.

O programa ANCULO usa micros IBM-PC e AT, exigindo 120 K para a versão executável. Fornece vários tipos de histograma e outros podem ser facilmente implementáveis (alguns exemplos são dados nas figuras). Foi usada a parametrização de Lindhard

$$\frac{d\sigma}{d\eta} = \pi a^2 f(\eta) / \eta^2$$

os potenciais Kr - C⁽⁴⁾ e TF/SW⁽⁵⁾ e os parametros de blindagem de TF e de BZL⁽³⁾. A perda de energia eletrônica é obtida da expressão de Montenegro et al⁽⁶⁾.

O ajuste aos dados experimentais é muito bom. Melhorias adicionais a serem introduzidas são o uso de uma expressão analítica para a dependência angular do freiamento eletrônico e do tratamento da região de pré-equilíbrio da distribuição de cargas.

* trabalho apoiado parcialmente pela FINEP.

- 1) G. H. Lantschner, J. C. Eckardt, M. M. Jakas, N. E. Capuj e H. Ascolani, Phys. Rev. A 36 (1987) 4667
- 2) L. Meyer, M. Klein e R. Wedell, Phys. Stat. Sol. (b) 83 (1977) 451
- 3) J. F. Ziegler, J. P. Biersack e U. Littmark, The Stopping and Range of Ions in Solids, Pergamon (1985)
- 4) W. D. Wilson, L. G. Haggmark e J. P. Biersack, Phys. Rev. A 15 (1977) 2458
- 5) P. Sigmund e K. B. Winterbon, Nucl. Instr. Meth. 119 (1974) 541

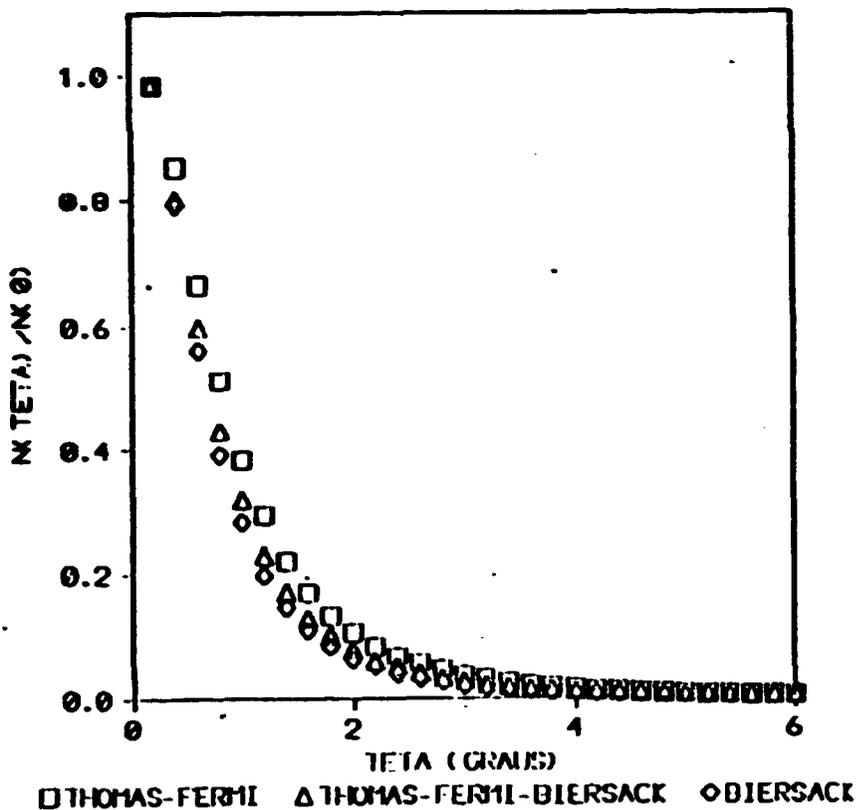


Fig. 1

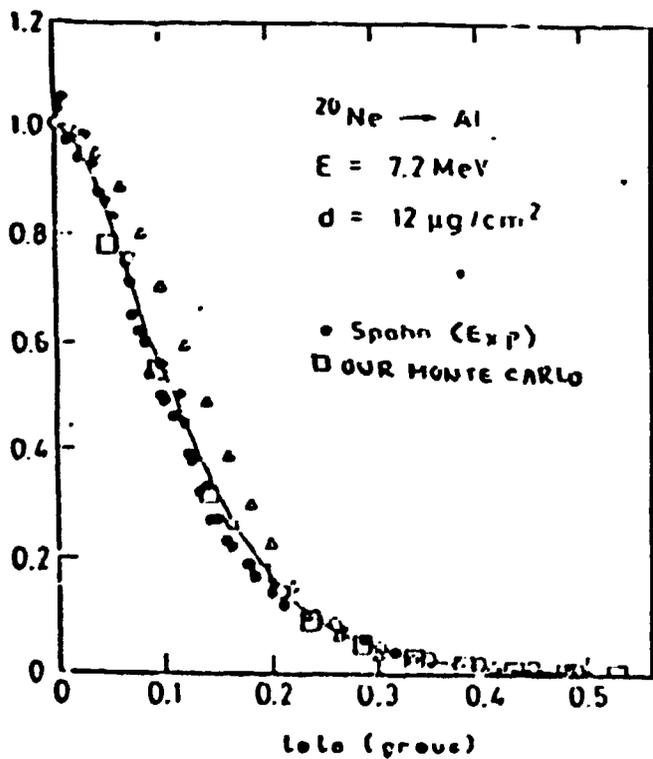


Fig. 2

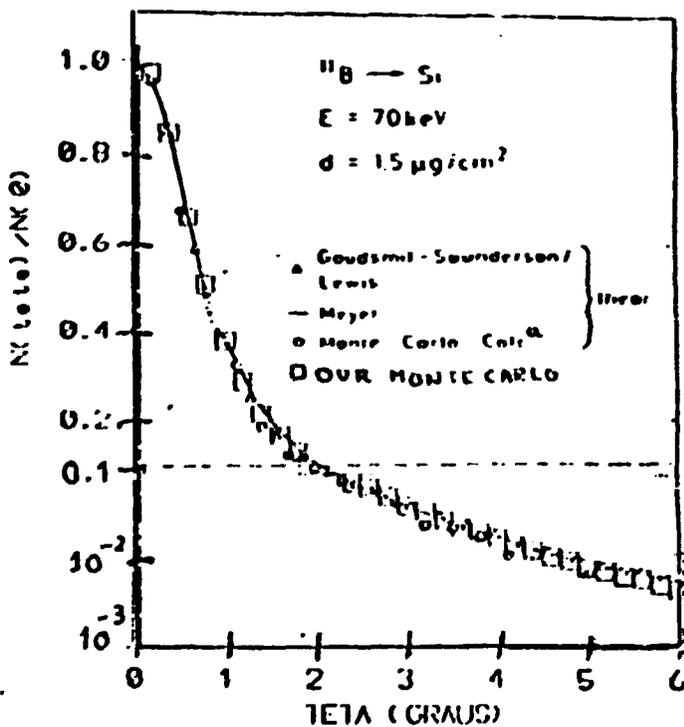


Fig. 3

a. calculations by Moller & Pospisich, Nucl. Instr. Meth. (1977)

Fig. 2 } data from above reference
 Fig. 3 }