

BR7801649



**SOBRE A INFLUÊNCIA DA ESPESSURA FINITA DAS FONTES NAS LINHAS  
DE CONVERSÃO INTERNA OBSERVADAS EM ESPECTROMETRIA BETA**

**Brigitte R. S. Pecequillo**

**DISSERTAÇÃO E TESE - IEA 005**

**FEVEREIRO/1976**

**SOBRE A INFLUÊNCIA DA ESPESSURA FINITA DAS FONTES NAS LINHAS  
DE CONVERSÃO INTERNA OBSERVADAS EM ESPECTROMETRIA BETA**

Brigitte R. S. Pecequilo

Dissertação para obtenção do Título de "Mestre em Ciências" – Orientador Dr. Achilles Alfonso Suarez. Apresentada e defendida em 19 de maio de 1971, na Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.

APROVADA PARA PUBLICAÇÃO EM JANEIRO/1976.

## **CONSELHO DELIBERATIVO**

### **MEMBROS**

Klaus Reinach – Presidente  
Roberto D'Utra Vaz  
Helcio Modesto da Costa  
Ivano Humbert Marchesi  
Admar Cervellini

### **PARTICIPANTES**

Regina Elisabete Azevedo Beretta  
Flávio Luiz

### **SUPERINTENDENTE**

Ricardo Libério Pieroni

**INSTITUTO DE ENERGIA ATÔMICA**  
Caixa Postal 11.049 (Pinheiros)  
Cidade Universitária "Armando de Salles Oliveira"  
SÃO PAULO – BRASIL

---

NOTA: Este trabalho foi conferido pelo autor depois de composto e sua redação está conforme o original, sem qualquer correção ou mudança.

## ÍNDICE

	Pág.
<b>CAPÍTULO I</b>	
INTRODUÇÃO GERAL .....	1
<b>CAPÍTULO II</b>	
O MÉTODO MONTE CARLO NO ESTUDO DE TRAJETÓRIAS DE ELÉTRONS .....	3
II.1 – Princípios de cálculo (Programa Principal) .....	6
II.2 – Sub-Programas para o programa principal .....	8
II.2a – Secção de choque de espalhamento elétron-núcleo .....	8
II.2b – Secção de choque de espalhamento elétron-elétron .....	15
II.2c – Ângulo de espalhamento elétron-núcleo .....	17
II.2d – Ângulo de espalhamento elétron-elétron .....	19
II.2e – Perda de energia dos elétrons .....	21
II.2f – Geração de números ao acaso .....	25
II.2g – Seleção de ângulo azimutal uniformemente distribuído .....	25
II.2h – Determinação dos cossenos diretores da nova direção de espalhamento .....	25
II.3 – Entrada de dados .....	28
II.3a – Coordenadas iniciais da partícula .....	28
II.3b – Ângulo de saída dos elétrons do depósito .....	29
II.3c – Ângulo sólido de geração de partículas .....	29
II.4 – Saída de dados .....	29
II.5 – Energia mínima do elétron emergente .....	31
<b>CAPÍTULO III</b>	
AJUSTE DAS LINHAS SIMULADAS PARA COMPARAÇÃO COM A EXPERIÊNCIA .....	32
A – Correções a distribuição das perdas de energia em espessuras finitas de fontes (função de Blüncck e Leisegang) .....	32
B – Fatores responsáveis pelo alargamento das linhas de conversão interna .....	34
B1 – Resolução intrínseca do espectrômetro .....	34
B2 – Largura natural da linha .....	35
<b>CAPÍTULO IV</b>	
COMPARAÇÃO COM A EXPERIÊNCIA .....	35

	<b>Pág.</b>
<b>CAPÍTULO V</b>	
<b>VARIAÇÃO DA RESOLUÇÃO E DESLOCAMENTO DO MÁXIMO DAS LINHAS DE CONVERSÃO EM FUNÇÃO DA ESPESSURA DAS FONTES .....</b>	<b>36</b>
<b>CAPÍTULO VI</b>	
<b>CONCLUSÃO GERAL .....</b>	<b>38</b>
<b>APÊNDICE A</b>	
<b>LISTAGENS DOS PROGRAMAS PARA COMPUTADOR .....</b>	<b>41</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>55</b>

# SOBRE A INFLUÊNCIA DA ESPESSURA FINITA DAS FONTES NAS LINHAS DE CONVERSÃO INTERNA OBSERVADAS EM ESPECTROMETRIA BETA

Brigitte R. S. Pecaquilo

## RESUMO

Estudando a possibilidade de deduzir uma fórmula analítica para calcular automaticamente a energia e a intensidade relativa das linhas de conversão dos elétrons observadas em espectrometria beta efetuamos neste trabalho uma simulação das linhas de elétrons por um processo Monte-Carlo num computador digital, sendo os elétrons gerados na própria espessura da fonte. Depois de gerados os elétrons é simulada a forma da linha obtida experimentalmente num espectrômetro beta usando hipóteses apropriadas sobre as interações dos elétrons. São apresentados o programa fonte e os programas auxiliares que simulam as linhas de conversão dos elétrons, escritos em linguagem FORTRAN e que podem ser usados num computador IBM/1620 ou IBM/360. Para testar o processo é feita uma comparação direta da linha K de conversão do Hg-198 medida experimentalmente com a mesma linha simulada no computador. Apresentamos ainda neste trabalho o comportamento sistemático da posição da linha e da resolução como funções da energia do elétron e da espessura da fonte.

## CAPÍTULO I

### INTRODUÇÃO GERAL

Nos estudos de estrutura nuclear o processo de captura radioativa de nêutrons térmicos é uma técnica excelente para a determinação das energias, razões de desvios (branching ratios), "spins" e paridades de níveis de baixa excitação dos núcleos.

Entre os vários métodos existentes para a análise do decaimento do núcleo produto, a análise dos elétrons de conversão interna emitidos durante o processo da captura radioativa apresenta certas vantagens, já que, além das energias e intensidades das transições, podem ser determinadas também as multipolaridades.

Com os espectrômetros beta modernos podem-se medir os momentos relativos dos elétrons de conversão com uma precisão aproximadamente de uma parte em  $10^5$  (costumam-se medir os momentos relativos por ser menor neste caso a incerteza na medida). Apesar das técnicas de alta resolução usadas na espectrometria beta existem vários fatores que, na prática, limitam a precisão com a qual as linhas de conversão interna (correspondentes aos diferentes níveis de energia no núcleo) podem ser observadas experimentalmente. Alguns destes fatores são:

- espessura finita das fontes;
- largura natural da linha, que é uma propriedade fundamental do núcleo.

Para o estudo das linhas é necessário preparar a fonte de um material que se deseja analisar. Mas é impossível a preparação de uma fonte "ideal", isto é, uma camada monoatômica de átomos. As fontes

preparadas na prática têm uma espessura finita, ainda que pequena, mas que afeta a largura das linhas de conversão, particularmente em baixas energias. Então, o conhecimento da maneira pela qual a largura da linha é afetada pela espessura da fonte é de grande auxílio para deduzir as intensidades e a energia verdadeira dos elétrons emergentes da fonte.

O presente trabalho propõe-se estudar os efeitos da espessura finita das fontes na forma das linhas de conversão interna observadas em espectrometria beta, levando em consideração o fato de que o elétron, ao atravessar esta espessura, devido às interações com os núcleos e com os elétrons atômicos está sujeito a desvios de direção e perdas de energia.

Ao mesmo tempo pretende-se estudar também a variação da largura à meia altura da distribuição de perdas de energia dos elétrons e a variação do máximo desta distribuição como funções da espessura da fonte e da energia inicial dos elétrons.

Interessa-nos sobremaneira a influência da espessura das fontes porque estamos usando fontes de vários alvos para estudos de conversão interna com o auxílio do espectrômetro tipo setor magnético do I.E.A. As fontes que nos interessam são conseguidas depositando o material alvo a ser estudado em cima de um suporte fino de alumínio. A espessura deste depósito é de alguns miligramas por centímetro quadrado, mas mesmo assim causa um alargamento nas linhas de conversão interna observadas.

Como não existe uma maneira analítica simples de tratar o problema da influência da espessura dos alvos, optamos por um estudo simulado através do processo Monte-Carlo, num computador digital IBM/1620 – modelo II. Este estudo simulado é feito considerando uma dada espessura de fonte e gerando no seu interior elétrons, cujas perdas de energia ao sair da fonte procuramos estudar por meio das interações às quais estes elétrons estão sujeitos. Deste modo estamos seguindo a estória de um elétron, desde a sua formação até o momento em que ele sai do depósito ou é abandonado por ter perdido uma fração muito grande da sua energia cinética inicial antes de sair do alvo.

Visto ser o estudo da trajetória do elétron no interior da fonte muito demorado, devido ao grande número de interações que ocorrem, usou-se o artifício<sup>(1)</sup> das "estórias condensadas" (agrupamento de vários processos físicos num caminho "condensado") a fim de diminuir o tempo de computação. Este tempo é um fator importante no processo Monte-Carlo, pois sendo o processo normalmente demorado, é sempre interessante qualquer artifício que reduza o tempo de computação.

Com o auxílio das "estórias condensadas" é possível analisar num tempo relativamente curto, um número suficiente de estórias dos elétrons. No Capítulo II encontra-se a explicação do método das estórias condensadas, além do programa principal para computador que dá a distribuição das perdas de energia e dos subprogramas para as interações dos elétrons com os núcleos e com os elétrons atômicos (seções de choque, ângulo de espalhamento).

No mesmo capítulo incluímos a escolha dos dados de entrada (ângulo sólido no qual as partículas são geradas, coordenadas iniciais do elétron) e a saída de dados (distribuição das perdas de energia).

No Capítulo II calculamos ainda a perda de energia do elétron correspondente a um certo caminho. Mas esta perda, para uma dada espessura, não é constante e deve-se considerar a probabilidade de flutuações. A função da perda de energia de uma partícula carregada ao atravessar uma espessura fina de material foi calculada por Landau<sup>(2)</sup> e mais tarde por Blunck e Leisegang<sup>(3)</sup> que melhoraram a teoria desenvolvida por Luntlau. Esta correção à distribuição das perdas de energia é feita no Capítulo III, quando são feitas ainda as correções levando em consideração a resolução intrínseca do espectrômetro e a largura natural da linha, correções necessárias quando deseja-se comparar com resultados experimentais.

A concordância com os resultados experimentais verificada por meio de simulação de linhas obtidas em espectrometria beta é discutida no Capítulo IV.

No Capítulo V é analisada a variação da meia largura e do máximo da distribuição como funções da espessura e da energia inicial do elétron, sendo as conclusões incluídas no Capítulo VI.

As listagens dos programas para o computador são apresentadas nos Apêndices.

Neste trabalho estudamos a distribuição das perdas de energia para os elétrons porque, estando a trabalhar com espectrômetro tipo setor magnético do I.E.A., é de nosso particular interesse conhecer a influência da espessura nas linhas de conversão interna.

Este método de estudo oferece contudo possibilidades de aplicação a outros campos da pesquisa, além da espectrometria beta.

Assim por exemplo, em aceleradores de partículas carregadas o conhecimento da maneira pela qual as partículas incidentes perdem energia no alvo permitiria o cálculo preciso do "yield" de reações nucleares. Ou então, poder-se-iam testar as teorias utilizadas no programa, como por exemplo, verificar se realmente a teoria de Blunck e Leisegang apresenta vantagens e melhoras frente à teoria de Landau, ou ainda saber avaliar com maior precisão as perdas características de energia dos elétrons associadas com a excitação do plasma.

Como outra aplicação importante poder-se-ia tentar conhecer a influência da espessura na deformação do espectro beta contínuo. Pelas curvas de Fermi-Kurie deste espectro observa-se que há uma deformação na região de baixas energias causadas pela espessura finita das fontes utilizadas. Esta deformação pode ser eliminada com o uso de fontes extremamente finas<sup>(4)</sup> em detrimento da estatística das contagens. O conhecimento então da influência da espessura da deformação, através do programa apresentado neste trabalho permitiria o uso de fontes mais espessas, o que significaria melhor estatística das contagens.

Como podemos ver o presente trabalho oferece um campo amplo de aplicações que esperamos serem aproveitadas com o decorrer do tempo.

## CAPÍTULO II

### O MÉTODO MONTE-CARLO NO ESTUDO DE TRAJETÓRIAS DE ELÉTRONS

O problema que estamos tentando estudar, ou seja, a influência da espessura finita dos alvos nas linhas de conversão interna observadas em espectrometria beta não pode ser resolvido (pelo menos, por enquanto) de uma maneira analítica simples. Assim, usamos o processo Monte-Carlo, por meio do qual simulamos a experiência, visando obter a distribuição das perdas de energia devidas à espessura do depósito. Neste Capítulo exporemos as hipóteses formuladas para este estudo, bem como o funcionamento do programa de computador que nos dá a distribuição desejada.

Neste estudo as seguintes suposições são feitas:

- (a) – os centros de espalhamento (núcleos e elétrons) com os quais a partícula carregada interage são distribuídos ao acaso;
- (b) – não estamos considerando correlações entre as posições dos vários elétrons e núcleos;
- (c) – ao atravessar o depósito, a partícula carregada interage somente com um centro de espalhamento de cada vez; deste modo não é necessário considerar o espalhamento coerente por vários centros espalhadores ao mesmo tempo.



Assim, imaginamos a trajetória descrita pela partícula como um caminho tortuoso composto de trajetórias retas (durante as quais não calculamos perdas de energia do elétron), interrompidas por colisões fortes, quando então ocorrem mudanças na direção da partícula e é considerada a perda de energia desta.

Podemos descrever a trajetória do elétron por meio de um conjunto de variáveis do seguinte modo:

$$E_0, E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$$

$$\vec{u}_0, \vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n, \dots$$

$$\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \dots$$

sendo  $E_0$  a energia,  $\vec{u}_0$  a direção e  $\vec{r}_0$  a posição da partícula no seu estado inicial.  $E_n$ ,  $\vec{u}_n$  e  $\vec{r}_n$  indicam, respectivamente, a energia, direção e posição do elétron imediatamente após a  $n$ -ésima colisão. Para simularmos a trajetória de um elétron dentro de um material bastará então que haja uma geração aleatória do conjunto de variáveis que caracteriza o seu caminho e que consideremos todas as interações do elétron, por meio das quais o mesmo sofre perdas de energia ou mudança de direção.

Em princípio, esta simulação permite resolver qualquer problema de partículas carregadas atravessando um depósito. Mas vamos imaginar o caso de um elétron passando por uma espessura finita- $z_d$  de um depósito.

O processo Monte Carlo consiste em simular várias trajetórias de elétrons formados no interior do depósito. Fundamentalmente, são três os tipos de trajetórias possíveis (Figura 1):

- (a) – reflexão: o elétron saiu do depósito por retro-espalhamento ( $z < 0$ ).
- (b) – absorção: o elétron perde toda sua energia e é absorvido pelo depósito.
- (c) – o elétron saiu do depósito ( $z > z_d$ ).

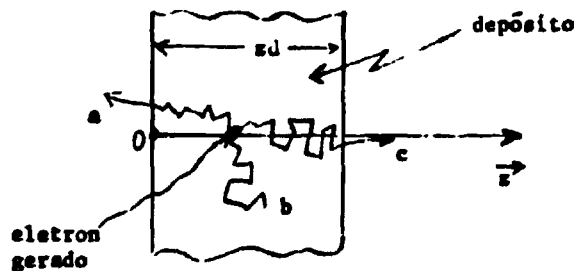


Figura 1 – Trajetórias típicas de um elétron num depósito de espessura finita- $z_d$ .

Devido ao grande número de interações de um elétron numa trajetória típica, o número de colisões que este sofre é enorme. Berger<sup>(1)</sup>, usando a secção de choque de espalhamento de Rutherford com a correção de "screening" (blindagem do núcleo pelos elétrons orbitais) da carga nuclear estimou algumas ordens de grandeza deste número para os elétrons, como pode ser visto na Tabela I.

Tabela I

Intervalo de Energia (keV)	Alumínio	Ouro
500 – 250	$2,9 \times 10^5$	$1,7 \times 10^5$
250 – 125	$3,4 \times 10^4$	$1,7 \times 10^4$
125 – 62,5	$4,2 \times 10^4$	$1,5 \times 10^5$

Número estimado de colisões sofridas pelos elétrons num alvo, para perderem a energia  $\Delta E$  (o intervalo de energia  $\Delta E$  significa: um elétron de 500 keV reduziu sua energia para 250 keV, etc.)

No caso dos raios gama são suficientes apenas cerca de 20 a 30 espalhamentos Compton para reduzir a energia de um fóton de vários MeV para 50 MeV. Do mesmo modo, para reduzir a energia de um nêutron de 2 MeV até a energia térmica (0,025 eV) são necessárias 18 colisões no hidrogênio.

Como podemos observar da Tabela I, para que os elétrons percam uma fração apreciável da sua energia cinética inicial, o número médio das colisões pode chegar a dezenas e mesmo centenas de milhares, fato este que contrasta bastante do comportamento dos raios gama ou dos nêutrons. Comparando o número das colisões no caso dos elétrons e dos raios gama ou nêutrons conclui-se que a simulação de estórias de elétrons pelo método Monte Carlo é comparativamente mais demorada, devendo-se então recorrer a algum artifício que nos permita estudar mais estórias em menos tempo.

A fim de reduzirmos o tempo de computação gasto pelo processo Monte Carlo no caso dos elétrons, adotamos o artifício das "estórias condensadas" que consiste em agruparmos vários processos físicos e calcular a perda de energia somente ao final de cada trajetória reta percorrida pelo elétron. Introduzimos as "estórias condensadas" através do conjunto.

$$0, s_1, s_2, \dots, s_n, \dots$$

$$E_0, E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$$

$$\vec{u}_0, \vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n, \dots$$

$$\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n, \dots$$

onde  $E_n$  é a energia,  $\vec{u}_n$  a direção e  $\vec{r}_n$  a posição da partícula depois de ter percorrido um comprimento de caminho  $s_n$  desde o seu ponto de partida.

O comprimento de caminho (trajetória reta) entre dois estados quaisquer consecutivos é obtido considerando-se as probabilidades de interação elétron-núcleo e elétron-elétron. Durante este caminho o

elétron perde energia somente através de ionização ou excitação dos átomos do depósito. A simulação então tem seqüência calculando-se esta perda de energia e selecionando probabilisticamente o processo pelo qual o elétron é espalhado. A esta colisão com um elétron ou um núcleo dá-se o nome de colisão "catastrófica".

O espalhamento elétron-núcleo é considerado espalhamento elástico no sistema de laboratório, pois a massa  $m$  do elétron é desprezível frente à massa  $M$  do núcleo e a perda de energia do elétron é menor que a razão  $m/M$ , enquanto que no espalhamento elétron-elétron o espalhamento é inelástico e o elétron perde uma fração da sua energia inicial.

### II.1 - Princípios de Cálculo (Programa Principal)

Entre duas colisões "catastróficas" consecutivas o elétron perde quase continuamente sua energia cinética mas, como já havíamos afirmado, estamos considerando que ele percorre uma trajetória reta sem nenhuma perda de energia ou mudança de direção até a próxima colisão "catastrófica". Deste modo, a probabilidade de que o elétron permaneça ao longo de uma distância  $x$  sem sofrer nenhuma colisão decresce exponencialmente à medida que  $x$  aumenta e o caminho livre médio dos elétrons para colisões "catastróficas" é dado por

$$\lambda(E) = [N_s \sigma_t(E)]^{-1} \quad (\text{PP-1})$$

onde  $\sigma_t(E)$  é a soma das duas secções de choque totais,  $\sigma_{e-n}(E)$  e  $\sigma_{e-e}(E)$  e  $N_s$  é o número de átomos por unidade de volume dado por

$$N_s = \frac{N_A \rho}{A} \quad (\text{PP-2})$$

com

$$N_A = \text{número de Avogadro} = 6.023 \times 10^{24} \text{ mol}^{-1}$$

$$A = \text{peso atômico do material}$$

$$\rho = \text{densidade do material em g/cm}^3$$

Como é mais comum considerarmos a espessura do depósito em miligramas por centímetro quadrado, para obtermos o caminho livre médio na mesma unidade devemos ter

$$L(E) = \lambda(E) \times \rho = [ (6.023 / (1000 \times A)) \times \sigma_t(E) ]^{-1} \quad (\text{mg/cm}^2) \quad (\text{PP-3})$$

Para um dado caminho livre médio  $L(E)$ , o comprimento de caminho  $l(E)$  percorrido pelo elétron dentro do material sem sofrer nenhuma colisão "catastrófica" é obtido de forma aleatória obedecendo à distribuição exponencial dos comprimentos de caminho dos elétrons. Assim,

$$l(E) = -L(E) \times \ln \xi \quad (\text{PP-4})$$

onde  $\xi$  é um número aleatório distribuído uniformemente no intervalo 0-1.

Após a colisão é escolhido o processo pelo qual o elétron foi espalhado. As razões da secção de choque nuclear e da secção de choque elétron-elétron para a secção de choque total dão a probabilidade de ocorrer uma outra interação e são usadas para determinar o processo de espalhamento. Assim a probabilidade de espalhamento elétron-núcleo é dada por  $\sigma_{e-n}(E)/\sigma_t(E)$  e para o caso elétron-elétron por  $\sigma_{e-e}(E)/\sigma_t(E)$ , como é mostrado na Figura 2. A ordem dos intervalos é arbitrária, devendo ser fixada previamente.

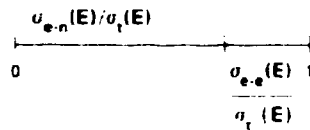


Figura 2

Para determinarmos o tipo do intervalo, isto é, o processo de espalhamento sofrido pelo elétron, obtemos um número aleatório  $\xi$  e verificamos em que intervalo ele se encontra. Para o processo elétron-núcleo devemos ter  $\xi < \sigma_{e-n}(E)/\sigma_t(E)$ , enquanto que para o processo elétron-elétron  $\xi > \sigma_{e-n}(E)/\sigma_t(E)$ .

Uma vez determinado o tipo de espalhamento sofrido pelo elétron na colisão, é calculado o ângulo de espalhamento de acordo com o processo ocorrido.

Sempre que calculamos a perda de energia sofrida pelo elétron verificamos se a sua energia cinética não tornou-se menor do que um limite inferior de análise estabelecido previamente. Ao fazermos esta rejeição, estamos desconsiderando as estórias excessivamente longas e portanto diminuindo o tempo total de computação sem contudo perder informações, pois abaixo de um certo valor de energia é extremamente pequena a ocorrência de elétrons correspondentes a longos trajetos.

No caso do espalhamento elétron-elétron, após a colisão existem dois elétrons livres, indistinguíveis. Mas o elétron incidente cuja estória acompanhamos será sempre o de maior energia, pois sua máxima perda fracional de energia ao colidir com outro elétron é sempre igual à metade da energia cinética inicial.

O elétron incidente, após o espalhamento, continuará sua trajetória reta até a próxima colisão.

Os elétrons que sofreram retroespalhamento ( $Z < 0$ ) são abandonados, pois são em número muito pequeno frente aos elétrons que conseguem sair do depósito. Além disto, o trajeto percorrido pelo elétron retroespalhado para voltar ao depósito e sair dele torna-se muito longo e por conseguinte a perda de energia ultrapassa o valor limite pré-fixado.

Após o elétron sair do depósito determinamos os ângulos de saída (formados pela direção do elétron com relação ao eixo Z segundo os planos XY e YZ), as coordenadas da intersecção da partícula com a face de saída do depósito e a sua energia cinética final.

Ao analisarmos um certo número de estórias obtemos a distribuição das perdas de energia sob a forma de um histograma cujos intervalos de energia tem uma largura dada por

$$\frac{E_0 - E_{lim}}{n}$$

onde

$E_0$  = é a energia inicial dos elétrons

$E_{lim}$  = é a mínima energia com a qual o elétron pode sair do depósito

$n$  = é o número de intervalos considerados

Na Figura 3 apresentamos um diagrama explicativo do programa principal ao qual demos o nome de LISHA (line shape of eletrons).

## II.2 – Sub-programas para o Programa Principal

### II.2a – Secção de Choque de Espalhamento Elétron-Núcleo

Para elétrons de energias na faixa  $10^4$  --  $10^7$  eV o espalhamento elástico dos elétrons pelos núcleos é inteiramente responsável pela mudança de direção do elétron.

Os depósitos de material por nós utilizados têm espessuras  $d$  da ordem de poucos miligramas por centímetro quadrado. Assim,  $d < 1/\sigma N$  onde  $\sigma$  é a secção de choque e  $N$  o número de átomos por centímetro cúbico. Então o elétron praticamente verá um só núcleo de cada vez e assim o espalhamento elétron-núcleo pode ser considerado como um espalhamento simples.

O primeiro tratamento teórico do espalhamento de uma partícula carregada por um núcleo de carga  $Ze$  foi dado por Rutherford<sup>(5)</sup>.

Sendo  $\theta$  o ângulo de deflexão, a secção de choque diferencial de Rutherford é dada por

$$\sigma_R(\theta) = \frac{d\sigma_c}{d\Omega} = \frac{z^2 e^4}{\rho^2 v^2 (1-\cos\theta)^2} \quad (\text{EN-1})$$

onde

$\rho$  = momento de partícula

$v$  = velocidade inicial da partícula

A expressão acima não leva em consideração o screening da carga nuclear por elétrons orbitais. Molière<sup>(6)</sup>, usando o screening de Fermi-Thomas deu um outro tratamento teórico ao espalhamento simples.

Para considerarmos o screening<sup>(1)</sup> substituímos o termo  $(1-\cos\theta)^2$  da expressão (EN-1) por  $(1-\cos\theta + 2\eta)^2$ , sendo  $\eta$  o parâmetro de correção obtido da teoria de Molière<sup>(6,7)</sup>.

$$\eta = \frac{1}{4} X_a^2 \quad (\text{EN-2})$$

onde  $X_a^2$  é um parâmetro dado pela expressão

$$X_a^2 = aZ^{2/3} [ 1.13 + 3.76 (Z/137\beta)^2 ] \quad (\text{EN-3})$$

com

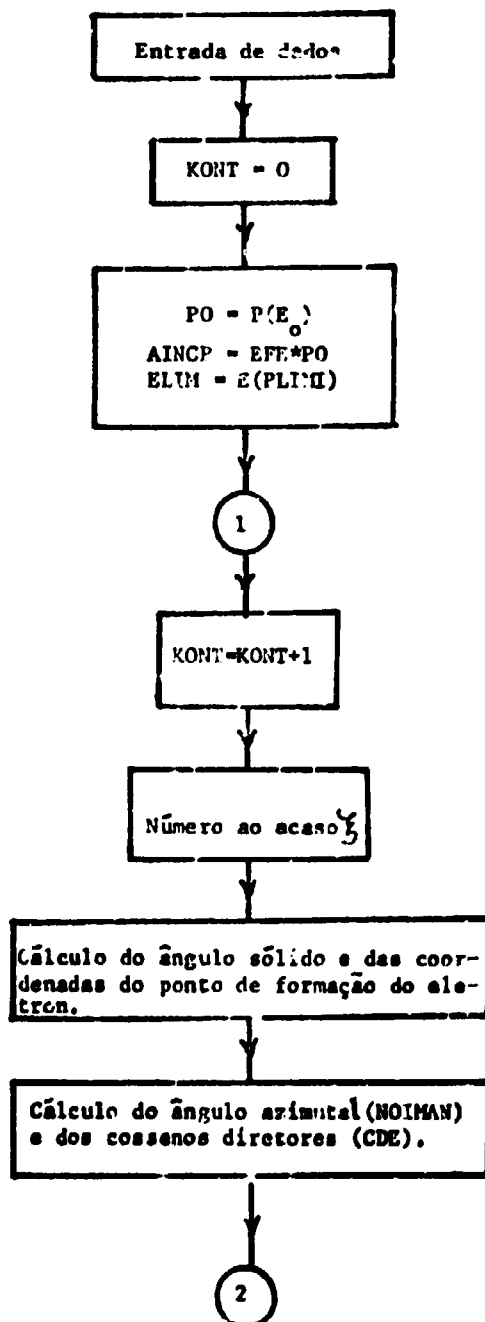
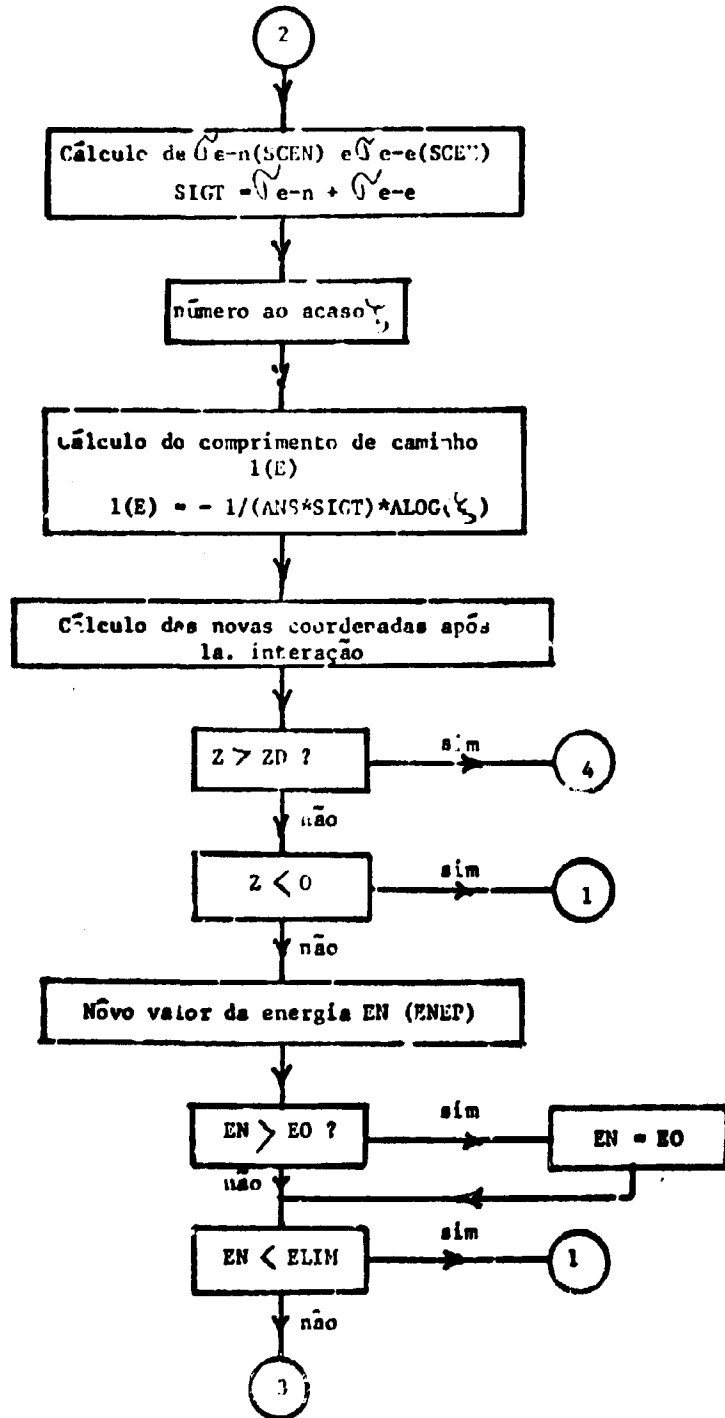
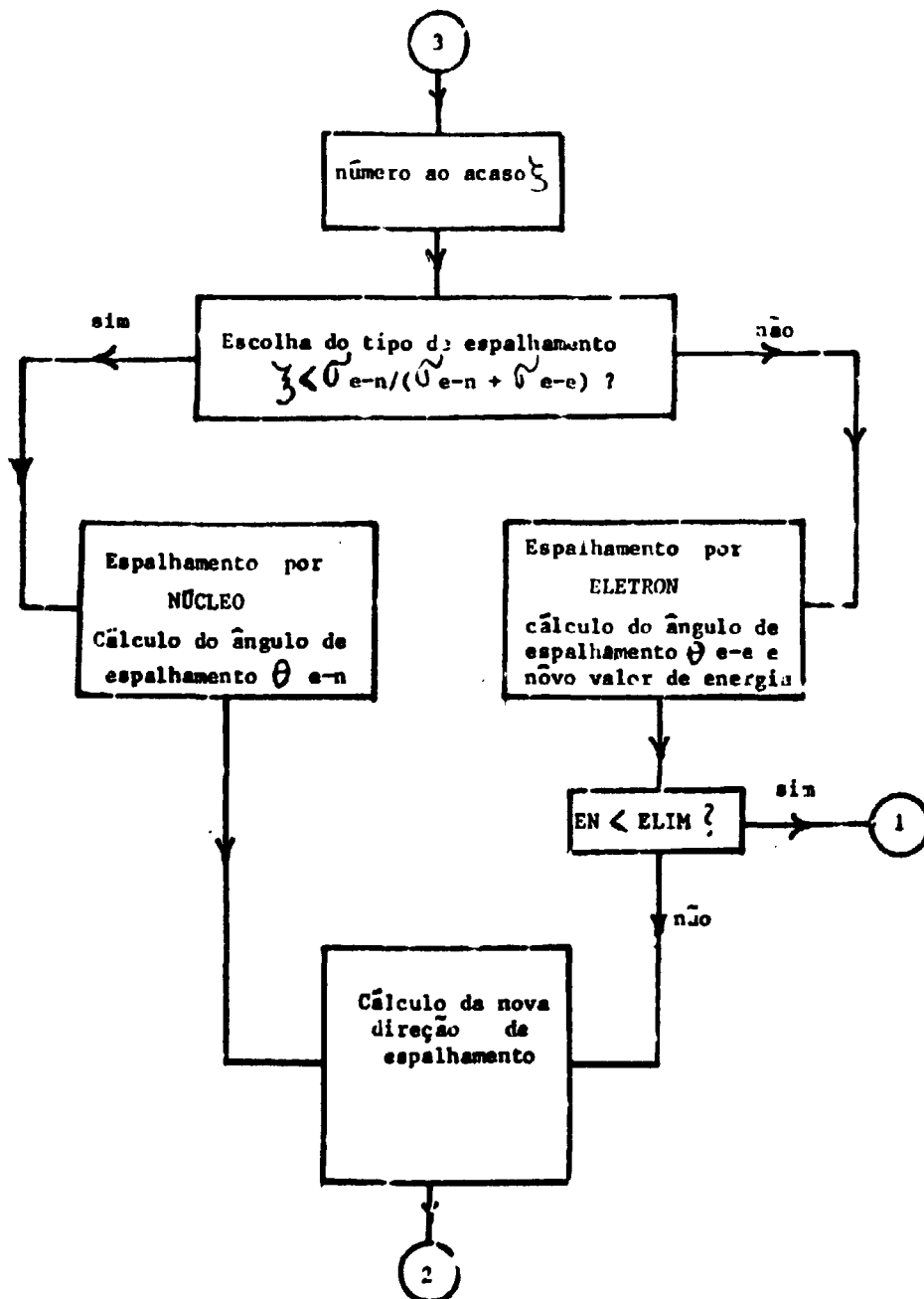
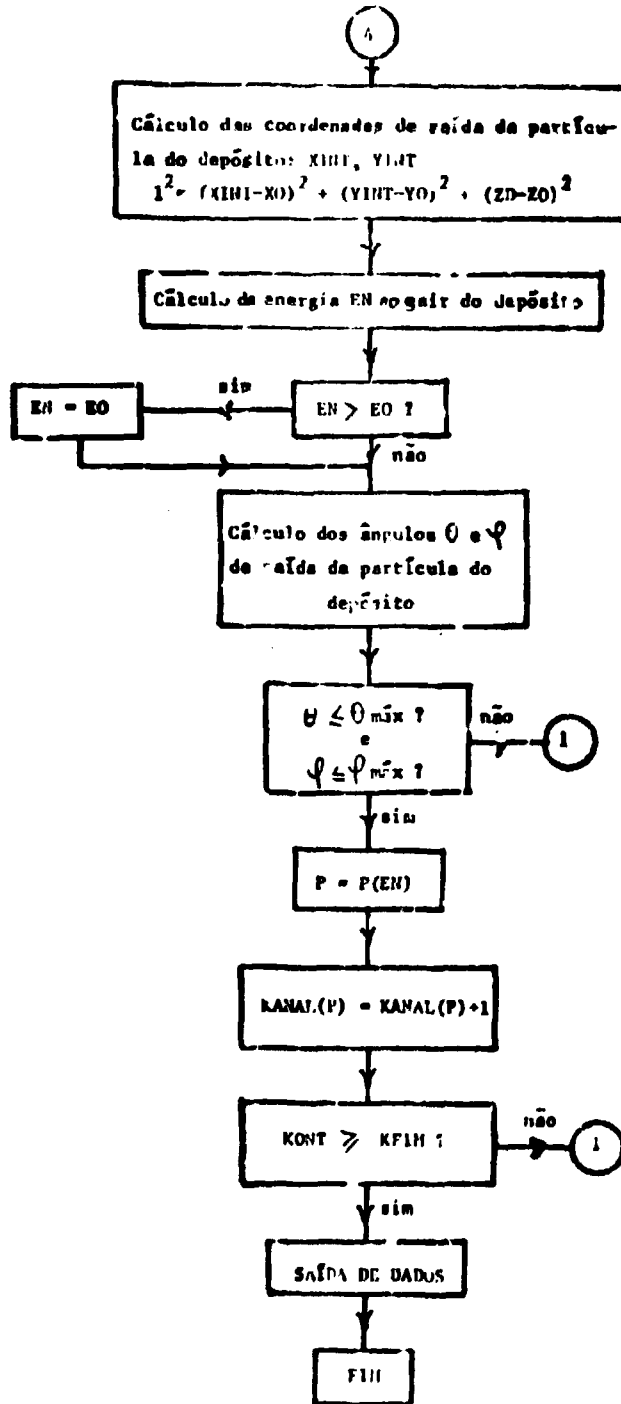


Figura 3 — Diagrama explicativo do programa principal LISHA.









$a = 1.77 \times 10^{-5}$  (para elétrons)

$Z$  = número atômico do núcleo alvo

$\beta$  = velocidade dos elétrons incidentes em unidades da velocidade da luz

Pela equação (EN-2) observamos que  $\eta$  é uma quantidade muito pequena.

Com a correção do parâmetro  $\eta$  em (EN-1) obtemos então a seção de choque diferencial de Rutherford-Molière

$$\sigma_{R-M}(\theta) = \frac{d\sigma_{R-M}}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{p^2 v^2 (1 - \cos\theta + 2\eta)^2} \quad (\text{EN-4})$$

Uma melhora da seção de choque de Rutherford é obtida usando a seção de choque diferencial de Mott<sup>(8)</sup>,  $\sigma_M$ , que relaciona-se com o espalhamento por uma carga nuclear sem elétrons orbitais. A seção de choque  $\sigma_M$  é obtida com uma série de Legendre lentamente convergente no ângulo de deflexão e tem de ser calculada numericamente.

Para pequenas deflexões<sup>(1)</sup> é mais vantajoso usar a expressão analítica:

$$\frac{\sigma_M}{\sigma_R} \sim 1 + \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{Z\beta}{137} \cos\gamma (1 - \cos\theta)^{1/2} \quad (\text{EN-5})$$

onde

$$\cos\gamma = \text{Re} \left\{ \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - i\frac{Z}{137\beta}\right) \Gamma\left(1 + i\frac{Z}{137\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + i\frac{Z}{137\beta}\right) \Gamma\left(1 - i\frac{Z}{137\beta}\right)} \right\} \quad (\text{EN-6})$$

Combinando as expressões (EN-1) e (EN-5) com a correção de Molière tem-se a expressão abaixo para a seção de choque diferencial do espalhamento elétron-núcleo:

$$\sigma_n(\theta) = \frac{d\sigma_n}{d\eta} = \frac{Z^2 e^4}{p^2 v^2 (1 - \cos\theta + 2\eta)^2} \left\{ 1 + \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{Z\beta}{137} \cos\gamma (1 - \cos\theta)^{1/2} \right\} \quad (\text{EN-7})$$

ou, lembrando a equação (EN-4),

$$\sigma_n(\theta) = \sigma_{R-M}(\theta) \left\{ 1 + \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{Z\beta}{137} \cos\gamma (1 - \cos\theta)^{1/2} \right\} \quad (\text{EN-8})$$

As equações (EN-4) e (EN-8) representam duas expressões para o cálculo da seção de choque diferencial do espalhamento de uma partícula incidente carregada por um núcleo. Para uma dada energia  $E$  de um elétron, a seção de choque total de espalhamento por um núcleo,  $\sigma_n(E)$ , pode ser calculada integrando sobre o ângulo sólido  $d\eta$  a seção de choque diferencial. Assim, se  $\theta_{in}$  é o ângulo mínimo da deflexão, teremos, da equação (EN-4)

$$\sigma_{R-M} = \int_{\theta_{in}}^{180^\circ} \frac{d\sigma_{R-M}}{d\Omega} d\Omega = \int_{\theta_{in}}^{180^\circ} \frac{Z^2 e^4}{p^2 v^2 (1 - \cos\theta + 2\eta)^2} 2\pi \sin\theta d\theta \quad (EN-9)$$

e da equação (EN-8)

$$\sigma_n = \int_{\theta_{in}}^{180^\circ} \frac{d\sigma_n}{d\Omega} d\Omega = \int_{\theta_{in}}^{180^\circ} \sigma_{R-M}(\theta) \left\{ 1 + \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{Z\beta}{137} \cos\gamma (1 - \cos\theta)^{1/2} \right\} 2\pi \sin\theta d\theta \quad (EN-10)$$

integrando, vem

$$\sigma_{R-M} = \frac{2\pi Z^2 e^4}{p^2 v^2} \left( \frac{1}{1 - \cos\theta_{in} + 2\eta} - \frac{1}{2 + 2\eta} \right) \quad (EN-11)$$

e

$$\begin{aligned} \sigma_n = \sigma_{R-M} + \frac{2\pi^2 Z^3 e^4 \cos\gamma}{137\sqrt{2} p^2 v^2} \left\{ \frac{\sqrt{2}}{2 + 2\eta} + \frac{(1 - \cos\theta_{in})^{1/2}}{1 - \cos\theta + 2\eta} \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{2\eta}} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{\eta}} - \frac{1}{\sqrt{2\eta}} \operatorname{arctg} \frac{(1 - \cos\theta_{in})^{1/2}}{\sqrt{2\eta}} \right\} \quad (EN-12) \end{aligned}$$

com  $\beta = v/c$

Se  $\tau$  é a energia inicial dos elétrons em unidades da energia cinética do elétron em repouso ( $\tau = E_0/m_0c^2$ ) então

$$\beta^2 = \frac{\tau(\tau + 2)}{(\tau + 1)^2} \quad (EN-13)$$

As partículas são defletidas num plano com o ângulo  $\theta$  variando de 0 a  $\pi$ . Se fossemos usar no cálculo da secção de choque nuclear a expressão sem a correção para o screening teríamos uma integral infinita. Por isto, outros pesquisadores<sup>(9)</sup> viram-se forçados a impor um limite inferior para o ângulo  $\theta$  mínimo, escolhendo assim  $\theta = 6^\circ$ . Mas no nosso caso, considerando o parâmetro  $\eta$ , estamos eliminando o problema da integral infinita. Substituindo então o valor de  $\theta_{in} = 0^\circ$  nas equações (EN-11) e (EN-12) e mais os valores de  $e$ ,  $p$ ,  $v$  e  $\beta$  ficaremos com

$$\sigma_{R-M} = \frac{2\pi r_0^2 Z^2 (1 + \tau)^2}{v^2 (\tau + 2)} \frac{1}{\eta (2 + 2\eta)} \quad (EN-14)$$

e

$$\sigma_n = \sigma_{R-M} - \frac{2\pi^2 r_0^2 Z^3 (\tau + 1) \cos\gamma}{137 2\tau^{3/2} (\tau + 2)^{3/2}} \left( \frac{\sqrt{2}}{2 + 2\eta} - \frac{1}{\sqrt{2\eta}} \operatorname{arctg} \frac{1}{\sqrt{\eta}} \right) \quad (EN-15)$$

onde

$r_o$  = raio clássico do elétron

$Z$  = número atômico do núcleo alvo

$\tau$  = energia inicial em unidades de  $m_o c^2$

O termo corretivo de Mott na expressão (EN-15) não modifica muito o valor da secção de choque. Como sempre procuramos diminuir o tempo gasto em computação, optamos pelo uso da secção de choque  $\sigma_{R-M}$  sem as correções de Mott, pois estas correções aumentariam o tempo sem influir sensivelmente no valor da secção de choque calculada.

A teoria de Molière, apesar da correção para o screening leva em consideração somente as colisões elásticas contra o campo-coulombiano dos núcleos atômicos, desconsiderando as colisões inelásticas com os elétrons atômicos. No caso das partículas espalhadas serem elétrons, para considerar espalhamentos inelásticos devemos substituir  $Z^2$  por  $Z(Z+1)$  na equação (EN-16).

Chegamos assim à expressão final que usamos para o cálculo da secção de choque elétron-núcleo:

$$\sigma_n(E) = \frac{2 \pi r_o^2 Z(Z+1) (\tau + 1)^2}{\tau^2 (\tau + 2)^2} \frac{1}{\eta (2 + 2\eta)} \quad (EN-16)$$

Para o cálculo da constante  $2 \pi r_o^2$  usamos

$$r_o = 2.818 \times 10^{-13} \text{ cm}$$

$$\text{onde } 2 \pi r_o^2 = .4989552 \times 10^{-24} \text{ cm}^2$$

ou, para obtermos a secção de choque diretamente em barns

$$2 \pi r_o^2 = .4989552$$

$\eta$  é calculado pela teoria de Molière como sendo

$$\eta = .4425 \times 10^{-5} Z^{2/3} \left[ 1.13 + 3.76 \frac{Z^2 (\tau + 1)^2}{18769 \times \tau (\tau + 2)} \right] \quad (EN-17)$$

O subprograma que calcula a secção de choque de espalhamento elétron-núcleo é a FUNCTION SCEN(E,TETA).

## 11.2b – Secção de Choque de Espalhamento Elétron-Elétron

Os elétrons além de sofrerem colisões elásticas com os núcleos são também espalhados através de colisões inelásticas com os elétrons atômicos. Desde que a energia do elétron incidente é consideravelmente maior que a energia de ligação do elétron atômico, podemos considerar a colisão elétron-elétron como uma colisão entre duas partículas livres.

A expressão que permite obter resultados próximos dos dados experimentais é a secção de choque de Møller<sup>(10)</sup> para o espalhamento elétron-elétron:

$$\frac{d\tau}{d\varepsilon} = \frac{C}{E_0} \left\{ \frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(1-\varepsilon)^2} + \left(\frac{\tau}{\tau+1}\right)^2 - \frac{2\tau+1}{(\tau+1)^2} \frac{1}{\varepsilon(\varepsilon-1)} \right\} \quad (\text{EE-1})$$

onde

$E_0$  = energia cinética do elétron incidente

$\varepsilon$  = energia transferida em unidades de E

$$C = \frac{2\pi e^4}{m_0 v^2} \left\{ \begin{array}{l} m_0 = \text{massa} \\ e = \text{carga} \\ v = \text{velocidade} \end{array} \right\} \quad \text{do elétron}$$

Transformando  $\frac{C}{E_0}$  em termos de  $\tau$  e  $r_0$ , a equação (EE-1) fica

$$\frac{d\sigma_e}{d\varepsilon} = \frac{2\pi r_0^2 \tau^2 (\tau+2)}{(\tau+1)^2} \left\{ \frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(1-\varepsilon)^2} + \left(\frac{\tau}{\tau+1}\right)^2 - \frac{2\tau+1}{(\tau+1)^2} \frac{1}{\varepsilon(\varepsilon-1)} \right\} \quad (\text{EE-2})$$

Para obtermos a secção de choque total de espalhamento por elétrons  $\sigma_e(E)$  para uma dada energia cinética E de um elétron, integramos a equação (EE-2) e obtivemos

$$\sigma_e(E) = \int_{\varepsilon_{\min}}^{\varepsilon_{\max}} \frac{d\sigma_e}{d\varepsilon} d\varepsilon, \quad \varepsilon > \varepsilon_{\min} \quad (\text{EE-3})$$

$\varepsilon_{\min}$  é a mínima transferência possível de energia

e

$\varepsilon_{\max}$  é a máxima transferência de energia possível, correspondente ao valor 1/2.

Temos então a secção de choque integral elétron-elétron:

$$\sigma_e(E) = .4989552 \frac{\sigma^2 (\tau+2)}{(\tau+1)^2} \left[ -H(\varepsilon) \right]_{\varepsilon_{\min}}^{1/2} \quad (\text{EE-4})$$

com

$$H(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{1-\varepsilon} + \left(\frac{\tau}{\tau+1}\right)^2 \left( \frac{1}{2} - \varepsilon \right) - \frac{2\tau+1}{(\tau+1)^2} \ln \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \quad (\text{EE-5})$$

Podemos observar que para  $\epsilon = \frac{1}{2}$  temos  $H\left(\frac{1}{2}\right) = 0$

Então ficamos somente com  $H(\epsilon_{\min})$  e a secção de choque dada por:

$$\sigma_{\theta}(E) = .4989552 \frac{\tau^2 (\tau + 2)}{(\tau + 1)^2} \cdot H(\epsilon_{\min}) \quad (\text{EE-6})$$

A mínima transferência de energia  $\epsilon_{\min}$  deve ter um valor definido que escolhemos da seguinte maneira: quando há uma grande transferência de energia, tal que o elétron que sofreu a colisão pode ser considerado livre. Dizemos que a colisão é do tipo forte<sup>(11)</sup>. Neste caso, a energia transferida vai de  $Q = Q_{\max}$  até um valor  $Q = W$  arbitrário, onde a única restrição é que  $W$  seja grande quando comparado à energia de ligação do elétron atômico.

Nas colisões fracas, a transferência de energia estende-se do valor arbitrário  $Q = W$  até a mínima transferência de energia possível  $Q = Q_{\min}$  que é da ordem da energia de excitação ou ionização de um elétron atômico.

O nosso caso é típico de colisões fortes e portanto, tomamos para  $W$  o valor de  $10^4$  eV, desde que o potencial de ionização é da ordem de  $10^3$  eV.

O valor de  $W$  em unidades de energia inicial do elétron toma então o seguinte valor

$$\epsilon_{\min} = \frac{10}{E_0} \quad (\text{EE-7})$$

que é substituído em (EE-5) e (EE-6) obtendo-se assim a expressão para o cálculo da secção de choque de espalhamento elétron-elétron (subprograma FUNCTION SC(E)).

## II.2c – Ângulo de Espalhamento Elétron-Núcleo

No cálculo do ângulo  $\theta$  de espalhamento elétron-núcleo devemos considerar a seguinte distribuição angular dos elétrons quando espalhados pelo núcleo entre 0 e  $\theta$  máximo graus.

$$f(\theta)d\theta = \frac{d\tau / d\Omega}{\int_0^{\pi} \frac{d\tau}{d\Omega} d\tau} d\Omega \quad (\text{AEN-1})$$

$\frac{d\tau}{d\Omega}$  é a secção de choque diferencial de Rutherford-Molière para o espalhamento elétron-núcleo (II.2a)

$$\frac{d\tau}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{p^2 v^2 (1 - \cos\theta + 2\eta)^2} \quad (\text{AEN-2})$$

$$\int_0^{\pi} \left( \frac{d\tau}{d\Omega} \right) d\Omega = \frac{2\pi Z^2 e^4}{p^2 v^2} \frac{1}{2\eta(1+\eta)} \quad (\text{AEN-3})$$

Substituindo as expressões (AEN-2) e (AEN-3) em (AEN-1) ficamos com

$$f(\theta) d\theta = \frac{2\eta(1+\eta)\sin\theta}{(1-\cos\theta+2\eta)^2} d\theta \quad (\text{AEN-4})$$

Para acharmos o ângulo de espalhamento pelo método Monte-Carlo fizemos uso de uma função  $g(\theta)$  dada por

$$g(\theta) = \frac{f(\theta)}{f(\theta)_{\text{máx}}}$$

que é uma função limitada no intervalo 0 a 1.

De (AEN-4) podemos tirar  $f(\theta)$ ,

$$f(\theta) = \frac{2\eta(1+\eta)\sin\theta}{(1-\cos\theta+2\eta)^2} \quad (\text{AEN-5})$$

A partir da equação (AEN-5) obtemos  $f(\theta)_{\text{máx}}$ , usando da hipótese que  $\eta^2$  pode ser desprezado frente a  $2\eta$ .

$$f(\theta)_{\text{máx}} \simeq \frac{\sqrt{2}\eta^{-3/2}}{9} 2\eta(1+\eta) \quad (\text{AEN-6})$$

Assim a função  $g(\theta)$  toma a forma

$$g(\theta) = \frac{2.25(2\eta)^{3/2}\sin\theta}{(1-\cos\theta+2\eta)^2} \quad (\text{AEN-7})$$

que é a função distribuição de  $\theta$  para o cálculo do ângulo de espalhamento elétron-núcleo.

Utilizando agora a expressão (AEN-2) podemos calcular a fração de elétrons que são espalhados num ângulo maior do que  $\theta$ .

$$\alpha = \frac{\int_{\theta}^{\pi} \frac{d\tau}{d\Omega} d\Omega}{\int_{\theta}^{\pi} \frac{d\tau}{d\Omega} d\Omega} \quad (\text{AEN-8})$$

ou

$$\alpha = \frac{2\eta(1+\eta)}{(1-\cos\theta+2\eta)} - \eta \quad (\text{AEN-9})$$

Desta expressão podemos verificar que cerca de 95% dos elétrons espalhados o são num ângulo menor do que 0,1 radianos ( $\approx 5.7^\circ$ ). Eliminando-se então ângulos de espalhamento maiores do que 0,1 radianos fazemos com que o processo de simulação Monte-Carlo seja acelerado sem contudo nos afastarmos apreciavelmente da realidade.

A maneira pela qual este ângulo de espalhamento é avaliado está demonstrado na Figura 4 e o sub-programa correspondente é FUNCTION ESPEN (EZERO, ANGMIN).

### 11.2d – Ângulo de Espalhamento Elétron-Elétron

A deflexão angular  $\theta$  no caso dos elétrons serem espalhados por outro elétron está associada a  $\epsilon$  (transferência de energia em unidades de E) pela expressão

$$\sin^2 \theta = \frac{4\epsilon}{\tau(1-2\epsilon) + \tau + 4} \quad (\text{AEE-1})$$

O método de cálculo segue o mesmo raciocínio do caso de espalhamento elétron-núcleo, com uma única diferença: a distribuição dos elétrons espalhados por outros elétrons será em função da transferência de energia  $\epsilon < \epsilon_c$ , onde  $\epsilon_c$  é a mínima transferência de energia.

A função de distribuição das probabilidades de transferências de energia  $f(\epsilon, \epsilon_c)$  é dada por

$$f(\epsilon, \epsilon_c) d\epsilon = \frac{d\tau/d\epsilon}{\int_{\epsilon_c}^{\epsilon_{\text{máx}}} \frac{d\tau}{d\epsilon}} d\epsilon \quad (\text{AEE-2})$$

onde  $\epsilon_{\text{máx}} = 1/2$

lembrando a secção 11.2b, teremos

$$f(\epsilon, \epsilon_c) d\epsilon = \frac{d\tau/d\epsilon}{\frac{C}{E} H(\epsilon_c)} d\epsilon \quad (\text{AEE-3})$$

onde

$$\frac{d\tau}{d\epsilon} = \frac{C}{E} \left\{ \frac{1}{\epsilon^2} + \frac{1}{(1-\epsilon)^2} + \left( \frac{\tau}{\tau+1} \right)^2 - \frac{2\tau+1}{(\tau+1)^2} \frac{1}{\epsilon(1-\epsilon)} \right\} \quad (\text{AEE-4})$$

Como no caso do espalhamento elétron-núcleo, para efeito do cálculo Monte-Carlo devemos usar uma função  $g(\epsilon, \epsilon_c)$ , limitada no intervalo 0 – 1 e dada por

$$g(\epsilon, \epsilon_c) = \frac{f(\epsilon, \epsilon_c)}{f(\epsilon, \epsilon_c)_{\text{máx}}} \quad (\text{AEE-5})$$

Analisando as expressões (AEE-3) e (AEE-4) observamos que o máximo da função  $f(\epsilon, \epsilon_c)$  se dá quando  $d\tau/d\epsilon$  for máximo, o que ocorre para o valor mínimo da transferência de energia,  $\epsilon_c$ .



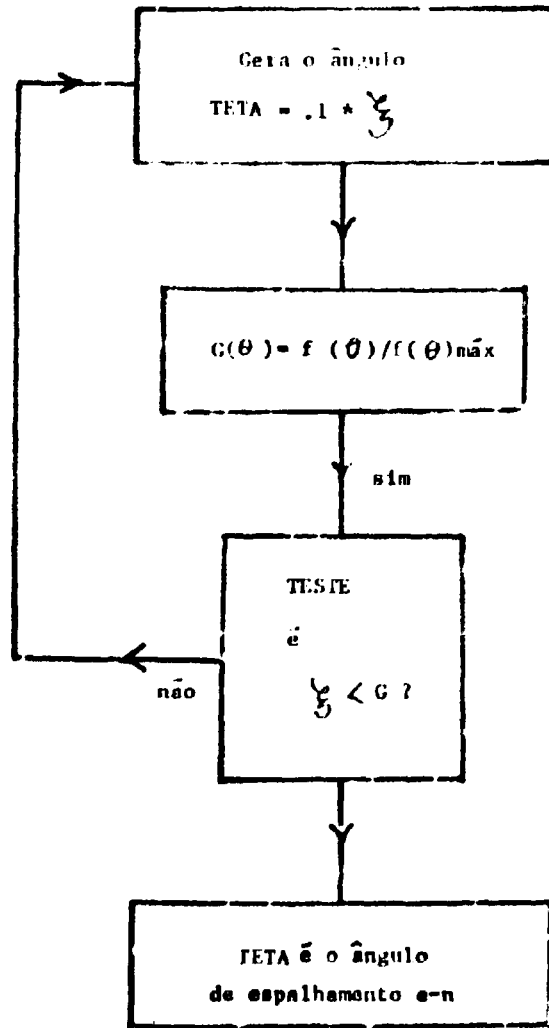


Figura 4 -- Cálculo do ângulo de espalhamento e-n.

$$f(\varepsilon, \varepsilon_c)_{\text{máx}} = \frac{d\tau / d\varepsilon_c}{\frac{c}{E} H(\varepsilon_c)} \quad (\text{AEE-6})$$

Se (AEE-3), (AEE-4) e (AEE-6) achamos para  $g(\varepsilon, \varepsilon_c)$  a expressão abaixo

$$g(\varepsilon, \varepsilon_c) = \frac{\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(1-\varepsilon)^2} + \left(\frac{\tau}{\tau+1}\right)^2 - \frac{2\tau+1}{(\tau+1)^2} \frac{1}{\varepsilon(1-\varepsilon)}}{\frac{1}{\varepsilon_c^2} + \frac{1}{(1-\varepsilon_c)^2} + \left(\frac{\tau}{\tau+1}\right)^2 - \frac{2\tau+1}{(\tau+1)^2} \frac{1}{\varepsilon_c(1-\varepsilon_c)}} \quad (\text{AEE-7})$$

O comportamento da função  $g(\varepsilon, \varepsilon_c)$  para uma energia  $E=500$  KeV pode ser visto na figura 5.

Para obtermos o valor de  $\varepsilon$  necessário na expressão (AEE-1) que nos dá o ângulo de espalhamento no choque elétron-elétron geramos de uma forma aleatória um valor de  $\varepsilon$  no intervalo  $\varepsilon_c$  a  $\varepsilon_{\text{lim}}$  conforme a função  $g(\varepsilon, \varepsilon_c)$ .

A figura 6 apresenta o diagrama resumido deste processo. ELIM é a energia limite, isto é, a mínima energia com a qual o elétron pode sair do depósito.

O sub-programa que calcula o ângulo de espalhamento elétron-elétron é FUNCTION ESPEE (EZERO, EIEN).

No espalhamento inelástico elétron-elétron, há uma perda de energia que é calculada neste mesmo sub-programa em função da transferência  $\varepsilon$  de energia.

## 11.2e – Perda de Energia dos Elétrons

Num trajeto entre dois pontos consecutivos a perda de energia que o elétron sofre não é constante, devendo-se considerar a probabilidade de flutuações desta perda. Deste modo a energia perdida não é bem definida e o que se calcula então é somente o valor mais provável da energia perdida pelos elétrons.

O problema das perdas de energia de uma partícula carregada dentro de uma camada de material foi investigado por Williams<sup>(12)</sup>, Landau<sup>(2)</sup> e mais recentemente por Blurick e Leisegang<sup>(3)</sup> e por Vavilov<sup>(13)</sup>.

Landau, considerando camadas de material não muito espessas, de tal forma que a perda média de energia é pequena quando comparada com a energia inicial do elétron calculou a função de distribuição das perdas de energia por ionização para partículas rápidas. Esta função  $f(x, \Delta)$  representa a probabilidade de uma partícula com uma dada energia inicial  $E_0$ , ao percorrer uma trajetória  $\cdot x \cdot$ , vir a perder uma quantidade de energia entre  $\Delta$  e  $\Delta + d\Delta$  (a função é normalizada, então  $\int f d\Delta = 1$ ) e é igual a

$$f(x, \Delta) = \frac{1}{a} \varphi(\lambda) \quad (\text{PE-1})$$

onde

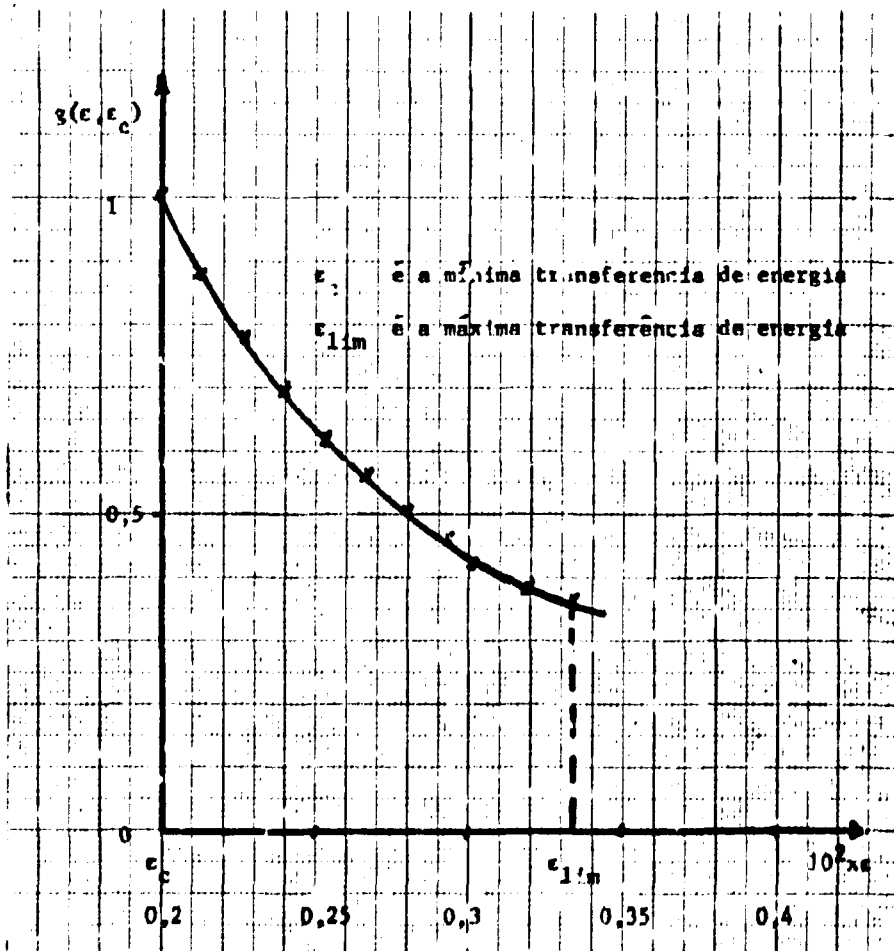


Figura 5

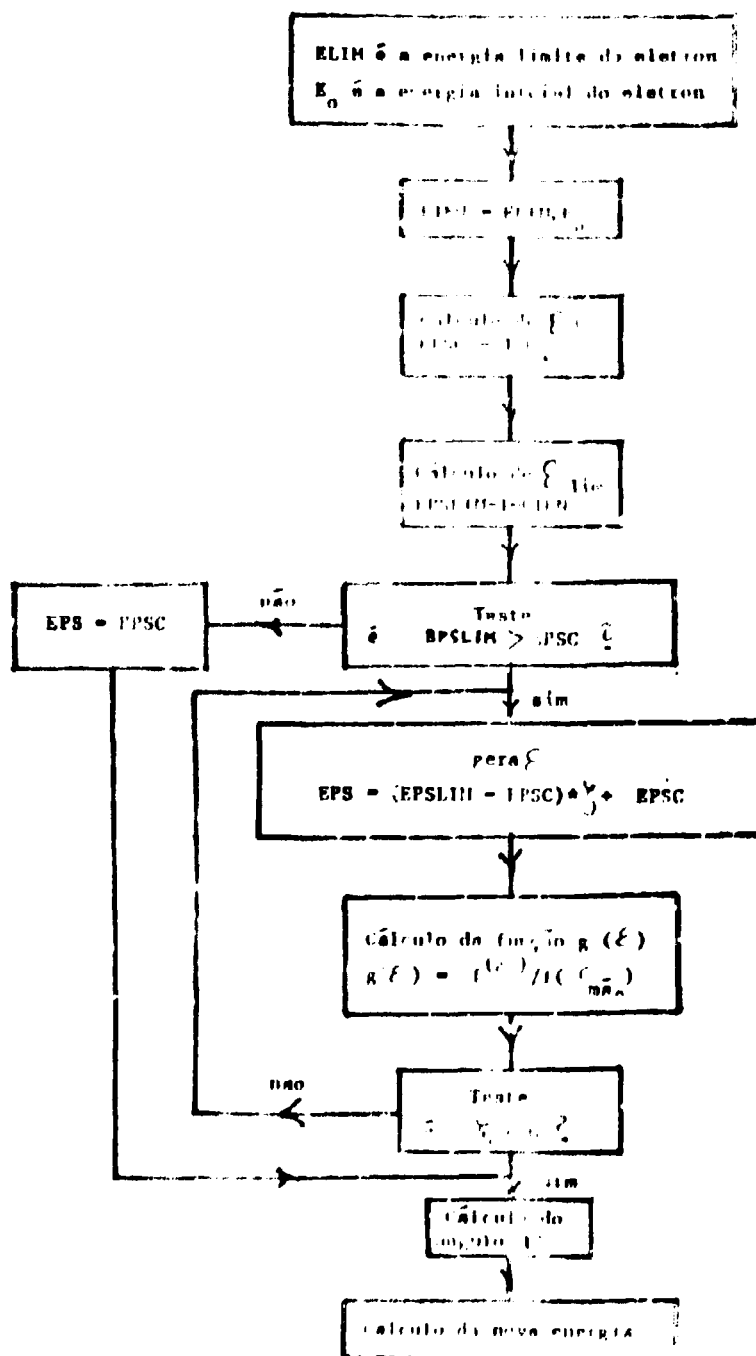


Figura 6 — Cálculo do ângulo de espalhamento eletrón- eletrón

$$a = x \frac{2\pi N_A e^4 \rho Z}{m_0 v^2 A} \quad (\text{PE-2})$$

$$\varphi(\lambda) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-j\infty}^{+j\infty} e^{u \ln u + \lambda u} du \quad (\text{PE-3})$$

é uma função universal de uma variável  $\lambda$  adimensional

$$\lambda = \frac{\Delta - a \left( \ln \frac{a}{\epsilon} + 1 - c' \right)}{a} \quad (\text{PE-4})$$

com

$$\ln \epsilon' = \ln \frac{(1 - \beta^2) I^2}{2 m_0 v^2} + \beta^2 \quad (\text{PE-5})$$

onde

$I$  = potencial de ionização do material alvo

$c'$  = constante de Euler = 0.577216

O máximo da função  $\varphi(\lambda)$  foi achado por Landau para  $\lambda = 0.05$ . Borsch-Supan<sup>(14)</sup> calculou e tabelou esta função, achando o seu máximo em  $\lambda = 0.225$ . A fim de verificarmos estes resultados, calculamos  $\varphi(\lambda)$  e achamos  $\lambda = 0.225$ . Com este valor então de  $\lambda$  para o máximo da função  $\varphi(\lambda)$  e usando (PE-4), achamos a expressão para o valor mais provável de perda de energia.

$$\Delta_0 E = a \left( \ln \frac{a}{\epsilon'} + 0.197784 \right) \quad (\text{PE-6})$$

Substituindo os valores das constantes nas expressões (PE-2) e (PE-5) e efetuando algumas simplificações, obtemos finalmente, para o valor mais provável da perda de energia

$$\Delta_0 E = \frac{0.153500482 Z I (\tau + 1)^2}{\tau(\tau + 2) A} \left[ \ln \frac{6.00812884 \times 10^{-4} Z I (\tau + 1)^2}{A (I/m_0 c^2)} - \frac{\tau(\tau + 2)}{(\tau + 1)^2} + 0.197784 \right] \quad (\text{PE-7})$$

onde  $I$  é o caminho percorrido pelo elétron, em  $\text{mg}/\text{cm}^2$ .

A expressão (PE-7) é usada para o cálculo da perda de energia do elétron no sub-programa FUNCTION ENEP (EO,PT,ESP), sendo EO a energia inicial do elétron, PT o potencial de ionização do material alvo e ESP o caminho percorrido, em  $\text{mg}/\text{cm}^2$ .

A nova energia EN do elétron será então dada por

$$EN = EO - \Delta_0 E \quad (\text{PE-8})$$

### 11.2f – Geração de Números ao Acaso

A grande vantagem do computador digital é a de permitir efetuar várias operações aritméticas dentro de um período de tempo razoavelmente curto. O método Monte-Carlo, baseado na velocidade do computador, permite estudar uma série de problemas complicados quando fórmulas analíticas não são possíveis. Ele é freqüentemente usado para simular o resultado de uma série de acontecimentos que ocorrem com uma certa probabilidade, tal como é o nosso caso.

A utilização deste método requer a possibilidade de se escolher um número aleatório de uma distribuição uniforme no intervalo 0 – 1. Um gerador de números ao acaso deve poder assegurar uma seqüência grande não repetitiva destes números. O método empregado para esta geração aleatória é o método da potência residual (15,16).

Para computador digital IBM-1620 modelo 11, o número acaso  $\mu_{n+1}$  é gerado pela relação

$$u_{n+1} = xu_n \pmod{10^d} \quad (\text{GNA-1})$$

onde  $u_n$  é o número ao acaso anterior,  $d$  representa o número de dígitos significativos na palavra do computador (para nós,  $d=10$ ) e  $x$  é uma constante multiplicativa escolhida de tal forma a obter a seqüência mais longa de números sem repetição. Para  $x=100003$  e  $d=10$ , tem-se uma seqüência não repetitiva de 0.5 bilhão de números.

Quando é usado o computador binário IBM/360 a relação abaixo permite gerar números ao acaso, numa seqüência não repetitiva de 8.5 bilhões de números:

$$u_n = u_{n-1} (2^{18} + 3) \pmod{2^{35}} \quad (\text{GNA-2})$$

onde  $u_0$  é um número ímpar qualquer.

Nas duas expressões (GNA-1) e (GNA-2) o número gerado é convertido num número no intervalo 0 a 1.

O sub-programa utilizado por nós é apresentado no Apêndice A sob o nome FUNCTION ACC (Iu) e gera o número aleatório, sendo o argumento inicial Iu um número inteiro, ímpar, com nove algarismos.

### 11.2g – Seleção de um Ângulo Azimutal Uniformemente Distribuído

O ângulo azimutal  $\phi$  é selecionado ao acaso de uma distribuição uniforme no intervalo  $[0, 2\pi]$  pelo método de von Neumann<sup>(15)</sup>. Este método consiste em gerar as funções  $\sin \varphi$  e  $\cos \varphi$  de um ângulo uniformemente distribuído. A eficiência deste método é  $\pi/4$ . Na figura 7 apresentamos o esquema do sub-programa SUBROUTINE NOIMAN (CFI,SFI) que calcula o ângulo azimutal  $\phi$  uniformemente distribuído.

### 11.2h – Determinação dos Cossenos Diretores da Nova Direção de Espalhamento

Toda vez que o elétron sofre uma colisão e é espalhado, a sua nova direção é determinada pelo ângulo polar e pelo ângulo azimutal. Se  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  são os cossenos diretores da direção inicial, os cossenos diretores  $\alpha'$ ,  $\beta'$  e  $\gamma'$  do elétron espalhado (nova direção) são calculados<sup>(18)</sup> conforme a figura 8. A

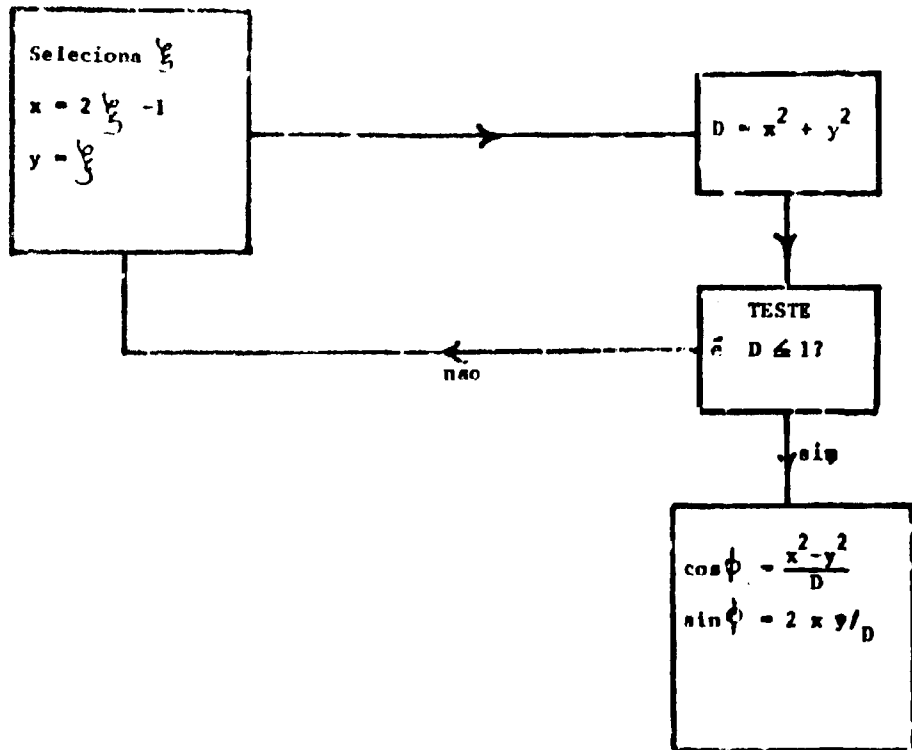


Figura 7 - Cálculo do ângulo azimutal  $\phi$  (Método de Neumann)

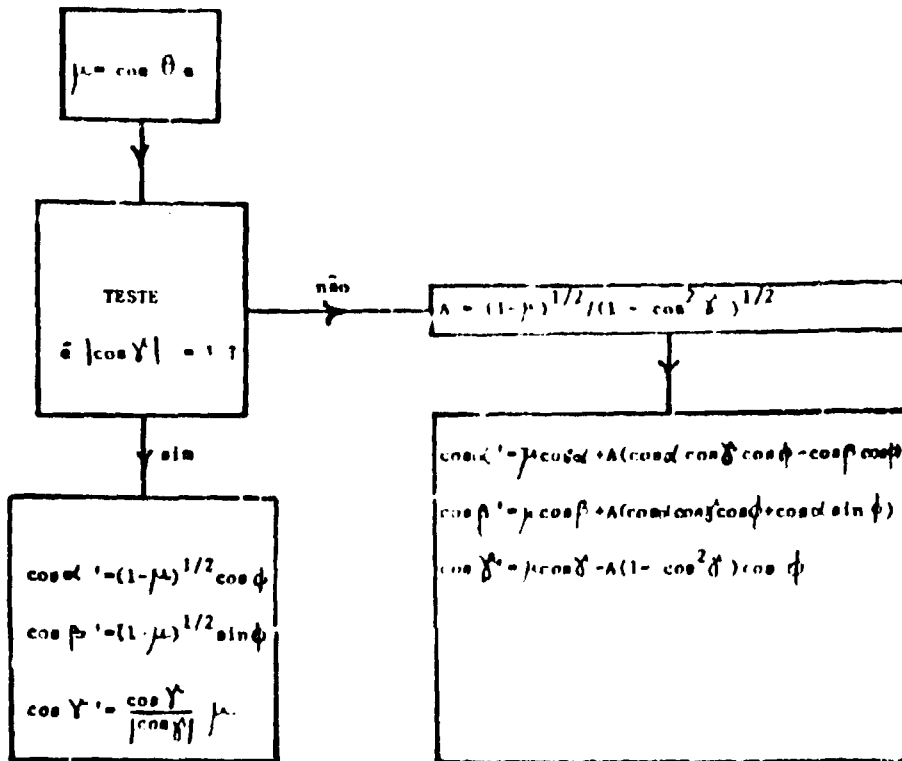


Figura 8 - Cálculo dos cossenos diretores da nova direção de espalhamento.



rotação das coordenadas para obter os cossenos diretores da nova direção do elétron após o espalhamento é feita no sub-programa SUBROUTINE CDE (CALFA, CBETA, CGAMA, EMU, CFI, SFI, CALFAL, CBETAL, CGAMAL) onde EMU é o cosseno do ângulo polar de espalhamento  $\theta$  e CFI e SFI determinados pelo método de Neumann (II.2g).

### II.3 – Entrada de Dados

Certas decisões se fazem necessárias quanto à preparação dos dados para a simulação pelo método Monte-Carlo, pois devem ser escolhidas as coordenadas iniciais da partícula, o ângulo sólido no qual elas podem ser geradas e o ângulo de saída das partículas do depósito. Também merece atenção especial a escolha da perda máxima de energia que a partícula pode sofrer ao atravessar o depósito.

#### II.3a – Coordenadas Iniciais da Partícula

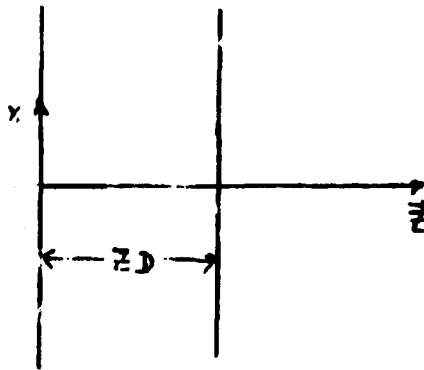


Figura 9 – Origem dos eixos no depósito.

Considerando o depósito de espessura igual a ZD (figura 9) a origem dos eixos foi escolhida no meio da face à esquerda do depósito. No começo dos estudos dávamos como dados de entrada as dimensões XD, YD e ZD do depósito. Mas no decorrer dos cálculos, quando procurávamos conhecer a distribuição das partículas em x e y, verificamos que os elétrons saiam do depósito quase que somente ao longo do eixo Z. Em vista destes resultados abandonamos as dimensões do depósito em x e y, passando a considerar somente a sua espessura ZD.

As coordenadas iniciais são

$$x_0 = 0 \quad (CI-1)$$

$$y_0 = 0 \quad (CI-2)$$

O elétron então é gerado ao longo do eixo Z através de um número ao acaso associado à espessura ZD, ou seja

$$Z_0 = \zeta \cdot ZD \quad (CI-3)$$

### 11.3b – Ângulo de Saída dos Elétrons do Depósito

O feixe de elétrons emergente do depósito é analisado num espectrômetro tipo setor magnético. Este espectrômetro tem um ângulo sólido dentro do qual as partículas são aceitas. Assim, não faz sentido considerarmos partículas emergentes do depósito num ângulo maior que este ângulo sólido, uma vez que elas não chegarão a serem analisadas. Devemos pois fixar um valor máximo para os ângulos de saída dos elétrons do depósito. Como para o estudo das linhas de conversão interna estamos utilizando o espectrômetro beta tipo setor magnético construído no IEA de São Paulo<sup>(19)</sup> temos os seguintes limites para os ângulos  $\theta$  e  $\varphi$ :

$$|\theta \text{ máx}| = 0.4^\circ \quad (\text{AS-1})$$

$$|\varphi \text{ máx}| = 0.4^\circ \quad (\text{AS-2})$$

$\theta$  e  $\varphi$  sendo os ângulos formados pela direção do elétron como o eixo Z sendo o plano XZ ou o plano YZ, respectivamente.

As partículas emergentes num ângulo sólido maior que os valores acima são abandonadas.

### 11.3c – Ângulo Sólido de Geração das Partículas

As partículas são geradas de uma forma aleatória dentro de um ângulo  $\gamma$ , no intervalo  $0 - \pi/2$ . Mas nem todos os elétrons gerados saem do depósito dentro dos limites dos ângulos  $\theta$  e  $\varphi$  (11.3b) e portanto será aproveitada só uma fração das partículas formadas no intervalo  $0 - \pi/2$ . Como o tempo de computação gasto para conseguir uma boa estatística da contagem de elétrons emergentes é muito grande, devemos procurar uma solução a fim de melhorarmos a estatística das contagens sem aumentar o tempo de computação. Para tanto, verificamos para vários valores do ângulo  $\gamma$ , o número de elétrons que conseguem sair do depósito dentro dos limites

$$|\theta \text{ máx}| = |\varphi \text{ máx}| = 0.4^\circ$$

Os resultados são mostrados na Figura 10. Para cada valor de  $\gamma$  foram geradas 1000 partículas. Podemos observar da Figura 10 que a probabilidade de que o maior número dos elétrons gerados consiga sair do depósito dentro dos limites de  $\theta \text{ máx}$  e  $\varphi \text{ máx}$  decresce à medida que o valor de  $\gamma$  aumenta. Escolhemos então o valor  $0.5^\circ$  para o ângulo  $\gamma$ , isto é,  $\gamma$  variando de 0 a  $0.5^\circ$  porque abaixo deste valor temos o maior número de partículas saindo dentro dos ângulos  $\theta \text{ máx}$  e  $\varphi \text{ máx}$  pré-fixados.

Os ângulos serão então gerados ao acaso através da expressão

$$\theta_e = 2\gamma\xi - \gamma \quad (\text{AG-1})$$

onde

$$\gamma = 0.5^\circ$$

### 11.4 – Saída de Dados

Para posterior comparação das linhas simuladas com a experiência (no espectrômetro são analisados os momentos relativos dos elétrons de conversão) passamos da distribuição das perdas de energia para a distribuição das perdas de momento, na saída do programa LISHA.

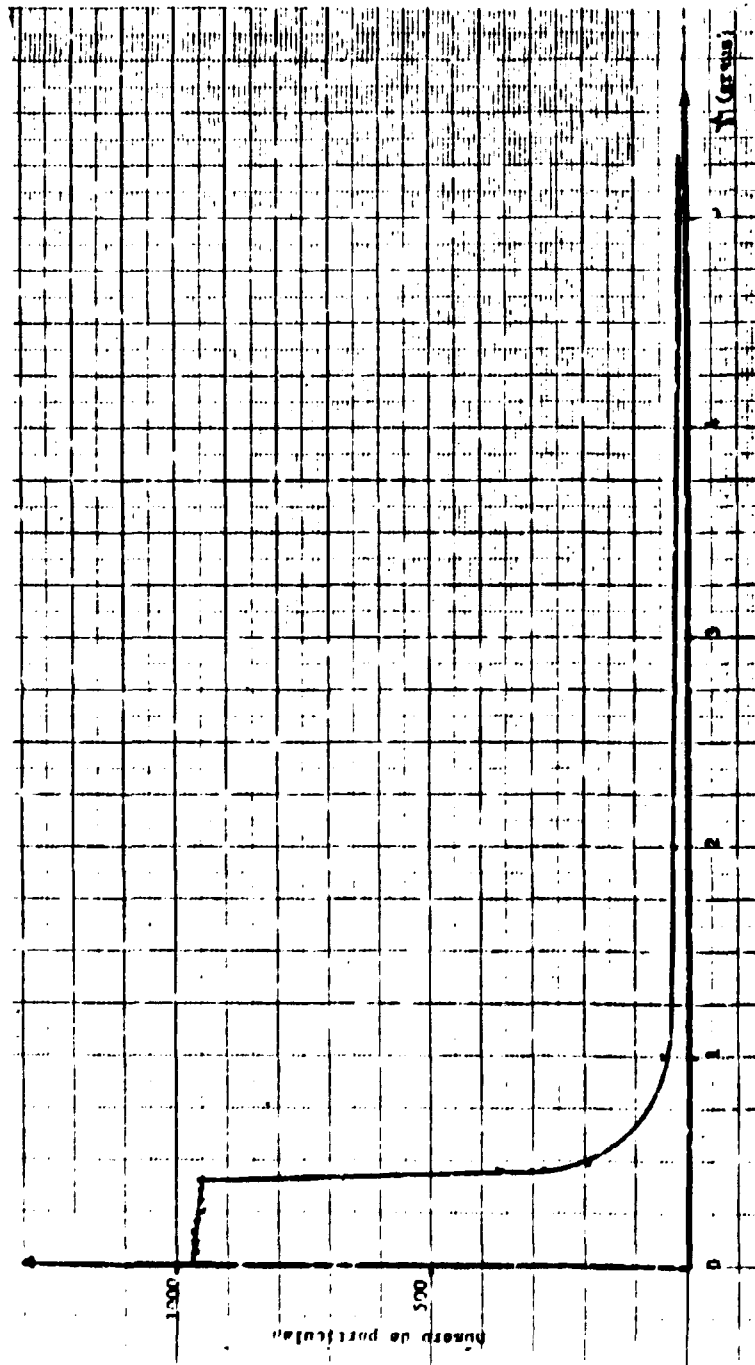


Figure 10

Devido a facilidade de cálculo no computador, a distribuição das perdas é feita sob a forma de um histograma, em canais cuja largura é proporcional ao momento.

A largura de cada canal deve ser escolhida com cuidado pois se fôsse muito grande, teríamos poucos pontos para traçarmos o perfil da linha simulada e se fôsse muito pequena, gastar-se-ia muito tempo nos cálculos a fim de obter uma boa estatística.

Assim sendo, escolhemos uma largura de canal AINCP da ordem de 0.005% do momento inicial PO da partícula

$$\text{AINCP} = 5 \times 10^{-5} \text{ PO} \quad (\text{SD-1})$$

No programa LISHA o valor  $5 \times 10^{-5}$  aparece como EFE.

O momento calculado em cada canal representa o centro deste, conforme a Figura 11.



Figura 11

PO é o momento correspondente à energia inicial do elétron; PLIMI é o extremo inferior do momento.

### 11.5 – Energia Mínima do Elétron Emergente

Ao acompanharmos a estória de um elétron, cada vez que é calculada uma nova energia é feita também uma comparação a fim de verificarmos se este valor não é menor do que o limite inferior de análise. Impomos este limite inferior a fim de diminuirmos o tempo de computação (estamos desconsiderando as estórias muito longas). Podemos proceder desta maneira sem prejudicar as informações obtidas, já que abaixo deste valor limite de energia, elétrons correspondentes a longos trajetos são bastante raros.

O valor da energia limite ELIM é calculado através de PLIMI e AINCP. Se NP é o número de canais, então

$$\text{PLIMI} = \text{PO} - (\text{AINCO} \cdot \text{ANP}) \quad (\text{EM-1})$$

e

$$\text{ELIM} = E(\text{PLIMI} - \text{AINCP}/2) \quad (\text{EM-2})$$

ELIM é o extremo inferior do intervalo de energia.

## CAPÍTULO III

## AJUSTE DAS LINHAS SIMULADAS PARA COMPARAÇÃO COM A EXPERIÊNCIA

## A – CORREÇÕES À DISTRIBUIÇÃO DAS PERDAS DE ENERGIA EM ESPESSURAS FINITAS DE FONTES (FUNÇÃO DE BLÜNCK E LEISEGANG)

Para termos uma descrição completa da passagem dos elétrons por uma dada espessura, além do valor mais provável da perda de energia, devemos considerar também a probabilidade de flutuações da perda de energia.

Para uma dada espessura fina de fonte tal que  $\Delta E \ll E_0$ , onde  $\Delta E$  é a perda de energia e  $E_0$  a energia inicial do elétron, Landau calculou uma função de distribuição para a perda  $\Delta E$  de energia, levando em consideração as flutuações desta perda. Esta função é dada pela expressão

$$\varphi(\Delta E) d(\Delta E) = \varphi(\lambda) d\lambda \quad (\text{BL-1})$$

onde  $\varphi(\Delta E) d(\Delta E)$  representa a probabilidade de que o elétron perca uma quantidade de energia entre  $\Delta E$  e  $\Delta E + d\Delta E$ , ao percorrer um caminho entre  $x$  e  $x + dx$ .

$\varphi(\lambda)$  é uma função universal calculada por Landau (II.2e) e  $\lambda$  é uma variável adimensional, podendo ser calculada através da expressão (PE-4) do Capítulo II.2 e ou por uma expressão equivalente

$$\lambda = \frac{\Delta E - \overline{\Delta E}}{NZCx} + \lambda_0 \quad (\text{BL-2})$$

com

$\Delta E$  = incremento da energia

$\overline{\Delta E}$  = incremento da perda de energia

$x$  = caminho percorrido pelos elétrons (em centímetros)

$\lambda_0$  = é o ponto de máximo da função  $\varphi_L(\lambda)$ ,  $\lambda_0 = -0.225$

$$C = 2 \pi e^4 / m_0 v^2$$

Então

$$\lambda = \frac{\Delta E - \overline{\Delta E}}{NZCx} - 0.225 \quad (\text{BL-3})$$

como

$$NZCx = \frac{2 \pi N_A \lambda_0^2}{m_0 c^2} \frac{(\tau + 1)^2}{\tau(\tau + 2)} \frac{Z}{A} \rho x \quad (\text{BL-4})$$

e lembrando que  $\tau = E/m_0c^2$  e  $l$  é o comprimento de caminho em miligramas por centímetro quadrado, a equação (BL-3) fica

$$\lambda = \frac{\overline{\Delta\tau} - \Delta\tau}{.30040644 \times 10^{-3}} \frac{A}{Zl} \frac{\tau(\tau+2)}{(\tau+1)^2} - 0.225 \quad (\text{BL-5})$$

Mas a teoria de Landau leva em consideração transferências pequenas de energia somente em primeira ordem. Blünck e Leisegang introduziram uma melhora na teoria de Landau, considerando também as perdas devidas aos elétrons ligados para os quais o elétron transfere a sua energia. Esta modificação causa um alargamento maior nas linhas de conversão. Blünck e Leisegang estenderam o cálculo até o termo de segunda ordem na transferência de energia de ressonância. Estes autores expandiram a função  $\varphi(\lambda)$  de Landau em uma série de funções de Gauss, obtendo a função normalizada  $f_{B-L}(\lambda)$  de Blünck e Leisegang.

$$f_{B-L}(\lambda)d\lambda = \sum_{\nu=1}^4 \frac{c_{\nu} \gamma_{\nu}}{(\gamma^2 + b^2)^{1/2}} \exp\left[-\frac{(\lambda - \lambda_{\nu})^2}{\gamma_{\nu}^2 + b^2}\right] d\lambda \quad (\text{BL-6})$$

onde  $\lambda$  é o mesmo parâmetro adimensional da teoria de Landau sendo dado pela expressão (BL-5),  $c_{\nu}$ ,  $\gamma_{\nu}$  e  $\lambda_{\nu}$  constantes dadas na tabela II<sup>(13)</sup> e  $b^2$  é um parâmetro adimensional igual a

$$b^2 = \frac{\overline{2K_r^2}}{a^2 x} \quad (\text{BL-7})$$

onde

$$a = \frac{2\pi N_A e^4 \rho Z}{m_0 v^2 A} \quad (\text{BL-8})$$

e  $\overline{K_r^2}$  é o segundo momento da transferência de energia devida às colisões de ressonância.

A largura à meia altura da distribuição de Blünck e Leisegang é aumentada de um valor dependente do parâmetro  $b^2$ .

Blünck e Westphal<sup>(20)</sup> acharam uma expressão para o parâmetro  $b^2$ , baseados no modelo de Fermi-Thomas para o átomo:

$$b^2 = q \frac{\overline{\Delta E} Z^{4/3}}{(ax)^2} \quad (\text{BL-9})$$

onde  $\overline{\Delta E}$  é a perda média de energia do elétron no caminho percorrido e  $q$  é uma energia da ordem de 20 eV.

Considerando o comprimento de caminho em miligramas por centímetro quadrado,  $\overline{\Delta\tau} = \overline{\Delta E}/m_0c^2$  e substituindo os valores das constantes na expressão (BL-8), obtemos para  $b^2$

$$b^2 = \frac{.433691 \times 10^3 \overline{\Delta\tau} A^2 \tau^2 (\tau+2)^2}{Z^{2/3} (\tau+1)^4 l^2} \quad (\text{BL-10})$$

Então para corrigir a distribuição calculada pelo programa LISHA, usamos a função de Blünck e Leisegang da expressão (BL-6), com o parâmetro  $b^2$  dado por (BL-10) e as constantes da Tabela II.

Tabela II

Constantes da distribuição de Blünck e Leisegang

$\nu$	1	2	3	4
$C_\nu$	0.174	0.058	0.019	0.007
$\lambda_\nu$	0.0	3.0	6.5	11.0
$\gamma_\nu$	1.8	2.0	3.0	5.0

A correção da distribuição das perdas de energia devidas à espessura da fonte pela função de Blünck e Leisegang é feita no programa RLBL com a seguinte filosofia: a contagem de cada canal obtido do LISHA é distribuída ao longo dos outros canais, levando-se em consideração para cada canal a função corretiva de Blünck e Leisegang através da expressão

$$f(E) = \int_{E_{\text{LIM}}}^{E_0} g(E') W(E'-E, E', l) d(E'-E)$$

onde

$f(E)$  = é a função corrigida.

$f(E')$  = é a distribuição das energias dada pelo programa LISHA.

$W(E'-E, E', l)$  = é a probabilidade de um elétron, com energia inicial  $E_0$  sofrer uma perda de  $E$  e  $E'$

$l$  = corresponde ao caminho percorrido entre  $E$  e  $E'$ .

## B – FATORES RESPONSÁVEIS PELO ALARGAMENTO DAS LINHAS DE CONVERSÃO INTERNA

### B1 – Resolução Intrínseca do Espectrômetro

O espectrômetro é idealizado de forma a analisar os elétrons de conversão interna que saem da fonte com um momento  $P_0$  correspondente à órbita central do espectrômetro. Mas devido a aberrações ópticas um feixe monoenergético de elétrons focalizado pelo espectrômetro vai aparecer como uma linha com uma certa largura finita  $\Delta P$  ( $\Delta P$  é a largura à meia altura).

Ao comparar as linhas simuladas com as experimentais é então necessário levar em consideração este alargamento da linha causado pela resolução intrínseca do espectrômetro.

Para aplicarmos esta correção à função de distribuição das perdas de energia dos elétrons devidas à espessura finita das fontes, usamos o mesmo método empregado na correção pela função

de Blünc e Leisegang, ou seja, cada contagem da distribuição das perdas é distribuída ao longo dos canais segundo a distribuição de momentos obtida com o programa RESOL<sup>(21)</sup>.

Esta correção é feita no programa -RLBL-

## B2 – Largura Natural da Linha

A largura natural da linha é uma propriedade fundamental do átomo e deve ser considerada sempre pois, mesmo que não existissem outros fatores influenciando no alargamento da linha, sempre existiria a largura natural

A intensidade da linha natural como função da energia é dada pela expressão de Lorentz

$$I_{\Gamma}(E) \sim [(E - E_0)^2 + (\frac{1}{2} \Gamma)^2]^{-1} \quad (\text{LN-1})$$

onde  $E_0$  é a energia central,  $\Gamma$  é a largura à meia altura e  $E$  é a energia que estamos observando.

O fator de normalização para a expressão (LN.1), tal que  $\int_0^{\infty} I_{\Gamma}(E) dE = 1$ , é  $\Gamma/\pi$ . Então

$$I_{\Gamma}(E) = \frac{\Gamma/\pi}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (\text{LN-2})$$

Para aplicarmos esta correção usamos a filosofia dos casos anteriores (III – A, B1), moldando a curva da distribuição das perdas de energia pela linha natural, no programa -RLBLN-

## CAPÍTULO IV

### COMPARAÇÃO COM A EXPERIÊNCIA

A fim de testar a validade das hipóteses por nós formuladas no estudo pelo método Monte Carlo da influência da espessura dos alvos nas linhas de conversão interna, foi simulada a linha K de conversão do Hg-198. A energia dos elétrons desta linha é

$$E_{e_k} = 328.669 \pm 0.010 \text{ KeV}$$

correspondente a uma energia de transição

$$E_{trans} = 411.776 \pm 0.010 \text{ keV}$$

O momento  $P_0$  correspondente à energia dos elétrons é



$$P_0 = 2222.42 \text{ gauss-cm}$$

A comparação foi feita com a linha K do Hg-198 obtida no espectrômetro tipo setor magnético do I.E.A. Foi usada uma fonte de ouro de espessura  $0.99 \text{ mg/cm}^2$ , com a área de  $1 \times 8 \text{ cm}^2$ .

Como pode ser visto da figura 12, o ajuste das duas curvas, experimental e simulada, é bom. Observa-se porém uma discrepância somente na região das baixas energias. Esta discrepância poderia ser devida à excitação dos elétrons do plasma que absorvem parte da energia inicial dos elétrons em quantidades discretas. Este fato não foi levado em consideração no cálculo da perda de energia dos elétrons devido à escassez das informações existentes sobre a seção de choque de excitação do plasma pelos elétrons.

Talvez a inclusão destas perdas de energia no cálculo levaria a um ajuste melhor da linha simulada com a experimental.

## CAPÍTULO V

### VARIAÇÃO DA RESOLUÇÃO E DESLOCAMENTO DO MÁXIMO DAS LINHAS DE CONVERSÃO EM FUNÇÃO DA ESPESSURA DAS FONTES

Vimos anteriormente que a espessura das fontes é responsável pelo alargamento das linhas de conversão interna dos elétrons. Porém é natural supor que espessuras diferentes causam alargamentos distintos para uma mesma energia.

Neste Capítulo vamos estudar esta variação da largura como função da espessura das fontes.

Chamamos de resolução à razão percentual da largura à meia altura pelo momento  $P_0$  correspondente à energia inicial dos elétrons.

Para o estudo em questão simulamos uma linha do Au-198, com energia  $E_0$  dos elétrons

$$E_0 = 2000 \text{ keV}$$

que corresponde a um momento  $P_0$

$$P_0 = 8200.5312 \text{ gauss-cm}$$

As espessuras estudadas foram

$$1.0 \text{ mg/cm}^2$$

$$2.0 \text{ mg/cm}^2$$

$$3.0 \text{ mg/cm}^2$$

$$5.0 \text{ mg/cm}^2$$

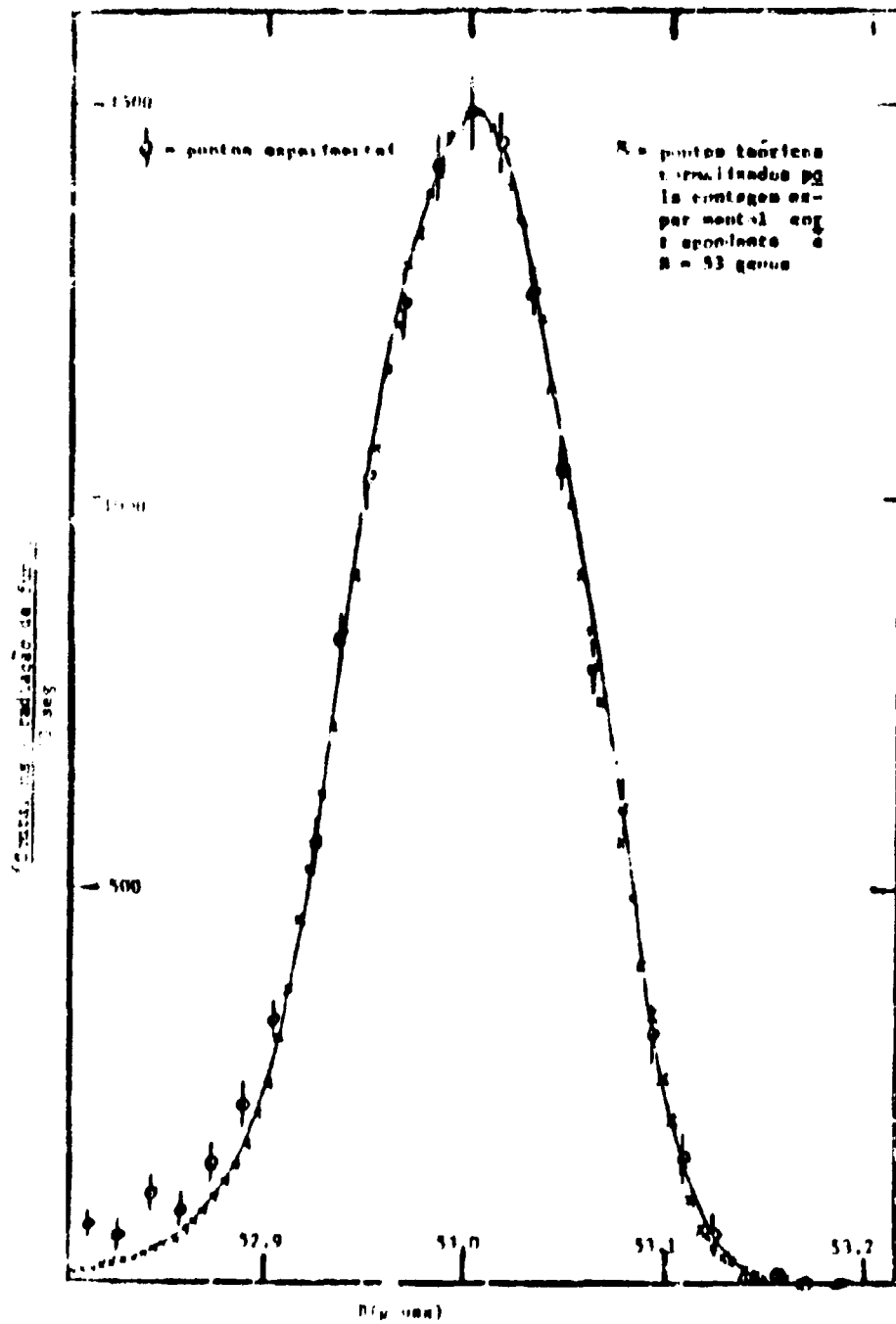


Figura 12

Pelos resultados apresentados na Figura 13, apesar de não podermos afirmar uma variação linear da resolução com a espessura, observamos que à medida que aumenta a espessura, aumenta também a largura da linha (resolução maior) o que é razoável, pois os elétrons, tendo que percorrer um trajeto maior para saírem do depósito, sofrerão mais interações, perdendo desta forma uma fração maior de sua energia inicial.

Nesta mesma simulação observamos que há também um deslocamento do máximo das linhas de conversão. Considerando o máximo em  $P_0$ , calculamos o seu desvio pela razão

$$\frac{\Delta P}{P_0} \%$$

onde

$$\Delta P = P_0 - P$$

com  $P$  = máximo da linha numa dada espessura

Da Figura 14 observamos que o deslocamento aumenta à medida que a espessura da fonte aumenta.

## CAPÍTULO VI

### CONCLUSÃO GERAL

O ajuste da linha simulada com a experimental veio comprovar a validade das hipóteses consideradas neste trabalho (cálculo das seções de choque e dos ângulos de espalhamento dos elétrons, perdas de energia, teoria de Blünck e Leisegang).

Como primeiro passo a seguir, pretendemos estudar as perdas de energia devidas à frequência de oscilação do plasma, a fim de verificar se este fator permitirá melhor ajuste dos pontos teóricos com a experiência.

Além disto tentaremos obter uma expressão analítica que reproduza a forma da linha, o que permitirá análises de espectros mais complexos. Uma idéia ainda "crua" neste setor é a de se tentar ajustar a forma das linhas através de uma soma de gaussianas.

E finalmente, este estudo simulado permite-nos partir para aplicações em outros campos de pesquisa, esperando obter resultados dos mais satisfatórios.

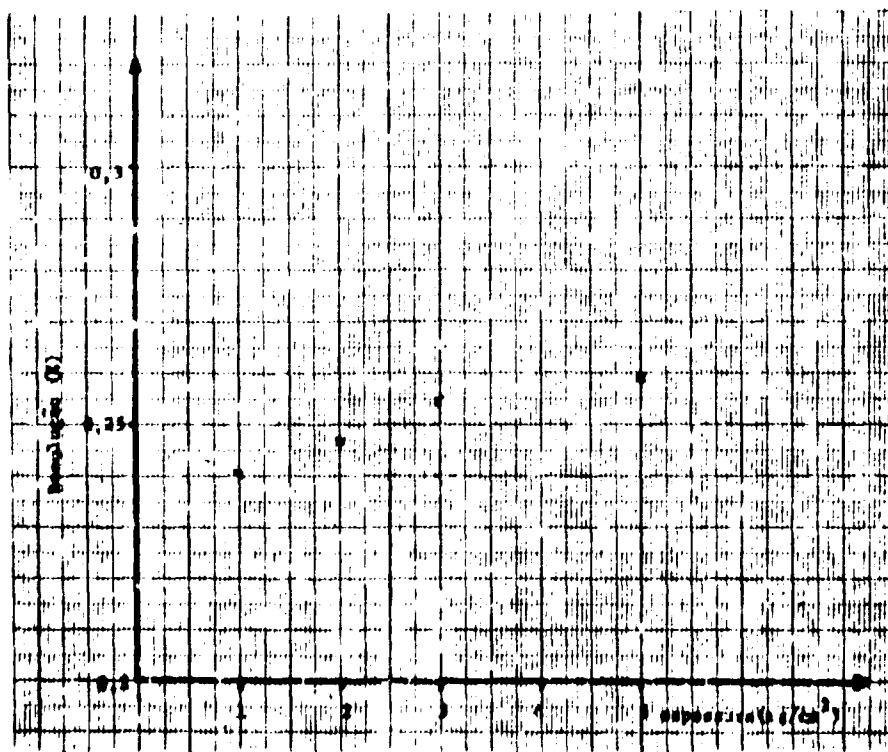


Figura 13 - Resolução vs. espessura da fonte

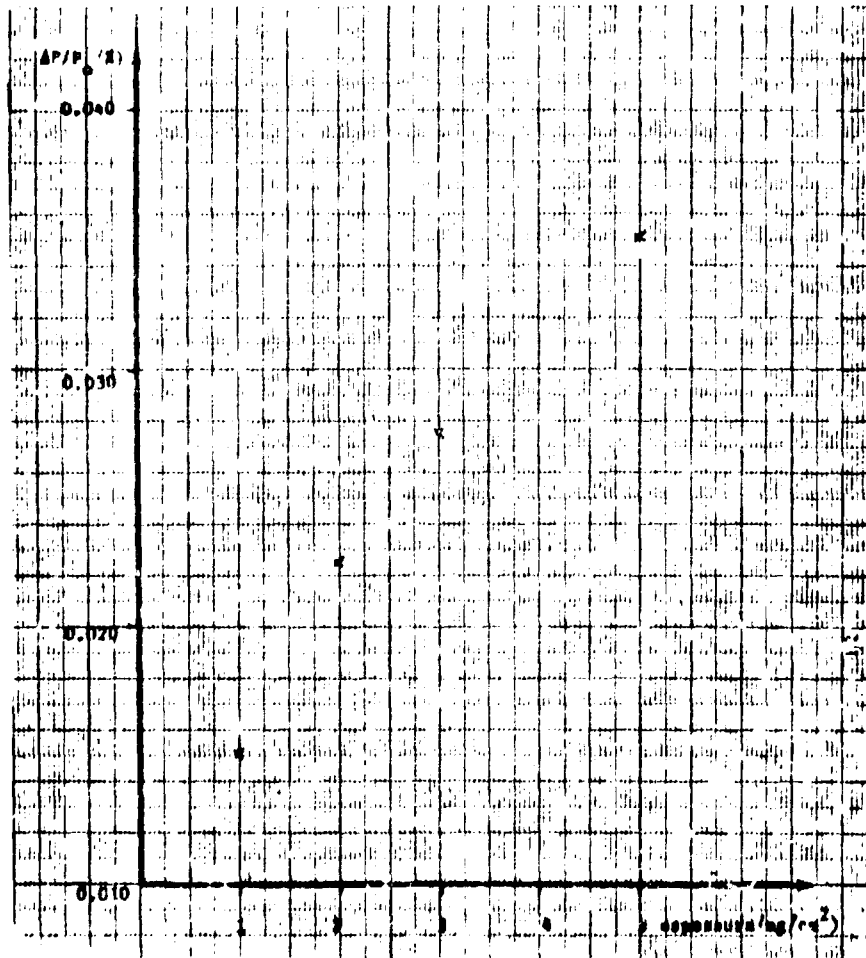


Figura 14 - Decaimento do máximo velocidade de fonte.

## APÊNDICE A

## LISTAGENS DOS PROGRAMAS PARA COMPUTADOR

```

*FANDK1010
C          ***LISHA***

C***INFLUENCIA D. ESPESSURA FINITA DAS FONTES NAS LINHAS DE
C  CONVERSÃO INTERNA

C***ORIGEM DOS ETXOS-MEIO DA FACE A ESQUERDA DO DEPOSITO
C**EOI...ENERGIA INICIAL DO FLETRON
C**EN...ENERGIA NUM DETERMINADO PONTO
C**EIF...EXTREMU INFERIOR DA ENERGIA.CALCULADO EM UNIDADE
C  DE EOI
C**PO...MOMENTO CORRESPONDENTE A EOI
C**PLIMI...EXTREMO INFERIOR DO MOMENTO
C**ENER(P)...ENERGIA EM FUNCAO DO MOMENTO
C**P(ENERG)...MOMENTO EM FUNCAO DA ENERGI
C**CINTIC1,C2)...INTERSECCAO-COORDENADAS Y,Y DE SAIDA
C**KANALP...CANAL PARA DISTRIBUICAO DAS PENDAS DE MOMENTO
C**NP...NUMERO DE CANAIS EM QUE E FEITA A DISTRIBUICAO
C**TETANG,FIMAXG...ANGULO MAXIMO DE SAIDA EM GRAUS
C**ZD...ESPESSURA DO DEPOSITO
C**ZEMA...NUMERO ATOMICO DO MATERIAL-ALVO
C**AMA...PESO ATOMICO DO MATERIA-ALVO
C**PT...POTENCIAL DE IONIZACAO DO MATERIAL-ALVO
C**AINCP...LARGURA DE CADA CANAL,CALCULADA COM FRACAO E F
C  DE PO
C**IU...ARGUMENTO INICIAL PARA GERACAO DE NUMEROS AO ACASO
C**GAMALG...ANGULO SOLIDO DE GERACAO DOS ELETRONS EM GRAUS
C**KPRINT...CONTADOR INTERMEUJARIO DE ESTORIAS
C**KFIN...CONTADOR PARA NUMERO FINAL DE ESTORIA
C**KONT...NUMERO TOTAL DE ESTORIAS SIMULADAS
C**ANGG...ANGULO TETA MINIMO EM GRAUS
COMMON ZEMA,AMA,PI,IU,C2M
DIMENSION NOME(40)
DIMENSION KANALP(100)
CINT(C1,C2)=C1+(C1-C2)*(ZD-Z0)/(Z0-Z1)
ENER(P)=C2M*( SORT(2441.834 E-10**2+1.)-1.,
P(ENERG)=SQRT(1./3441.834E-10*((ENERG/C2M+1.)**2-1.))
FI=3.141593
OPI=2.*PI
954 READ 440,NOME
READ 3130,NP,KPRINT,KFIN,KONT
PRINT3930,NP,KPRINT,KFIN,KONT
ANP=NP-1
READ 10,TETANG,FIMAXG
PRINT10,TETANG,FIMAXG
TETAM=TETANG*PI/180.
FIMAX=FIMAXG*PI/180.
READ 130,(KANALP(I)),I=1,NP)
PRINT930,(KANALP(I)),I=1,NP)
READ 90,IU
PRINT 990,IU
READ10,EOI,ANGG,ZD,ZEMA,AMA,PT,EFE,C2M
PRINT910,EOI,ANGG,ZD,ZEMA,AMA,PT,EFE,C2M
READ 10,GAMALG
PRINT 910,GAMALG
GAMAL=GAMALG*PI/180.
PO=P(EOI)
INCP=EFE*PO
IMJ=PO-AINCP*ANP

```

```

ELIM=ENER(PLIMI - AINCP/2.)
EIEN=ELIH/EOI
PINF=PLIMI-AINCP/2.
PRINT 20,PO,PLIMI,AINCP
ANS=.6023/(1000.*AMA)
ANGMIN=ANGG*PI/180.
PRINT 1440,NOME
GO TO 2
C*** ZO... ORDENADA DE SAIDA NO FIXO Z
1 IF(KONT/KPRINT*KPRINT-KONT)2,29,2
2 IU=IU
ZO=ACC(IU)*ZD
XO=C.
YO=0.
EO=EOI
KONT=KONT+1
C*** ANGULOS TETA E FI DE SAIDA - COSENO DIRETORES
TETA=2.*GAMAL*ACC(IU)-GAMAL
CALL NGIMAN(CFIE,SFIE)
EMU=COS(TETA)
CALL CDE(0.,0.,1.,EMU,SFIE,CFIE,CALFA,CBETA,CGAMA)
11 SIGN=SCEN(EO,ANGMIN)
SIGE=SCFE(EO)
SIGT=SIGN+SIGE
ELE=-1./((ANS*SIGT)*ALOG(ACC(IU)))
C*** NOVAS COORDENADAS APOS 1 INTERACAO
X=ELE*CALFA +XO
Y=ELE*CBETA +YO
Z=ELE*CGAMA+ZO
C*** VER SE SATU DO DEPOSITO
IF(Z-ZD)6,6,53
6 IF(Z) 1,36,36
C*** NOVO VALOR DA ENERZIA
26 EN=EJEP(EO,PT,ELE)
IF(EN-EO)200,200,201
201 EN=EO
200 IF(EN-ELIM)1,69,69
69 XO=X
YO=Y
ZO=Z
C*** LSCOLHA DO TIPO DE ESPALHAMENTO
SIGN=SCEN(EN,ANGMIN)
SIGE=SCFE(EN)
IF(ACC(IU)-SIGN/(SIGE+SIGN))32,32,31
C*** ESPALHAMENTO ELETRON-ELETRON
C** O SUBPROGRAMA ESPEE CALCULA UM NOVO VALOR DA ENERZIA
31 TETA=ESPEE(EN,EIEN)
13 IF(EN-ELIM)1,16,16
C***** ESPALHAMENTO ELETRON - NUCLEO
32 TETA=ESPEE(EN,ANGMIN)
16 CALL NGIMAN(CFIE,SFIE)
19 EMU=COS(TETA)
CALL CDFICALFA,CBETA,CGAMA,EMU,SFIE,CFIE,CALFAL,CBETAL,CGAMAL)
EO=EN
CALFA=CALFAL
CBETA=CBETAL
CGAMA=CGAMAL
GO TO 11

```

```

C***CALCULO DAS COORDENADAS DE SAIDA DA PARTICULA
  53 XINT=CIN.(XO,X)
    YINT=CINT(YO,Y)
    ELE=SQRT((XINT-XO)**2+(YINT-YO)**2+(ZD-ZU)**2)
    EN= ENEP(EO,PT,ELE)
    IF(EN=EO)203,203,204
  204 EN=EO
C*** ANGULOS DE SAIDA
  203 SINT=-CALFA/SQRT(CALFA**2+CGAMA**2)
    TETA=ATAN(SINT/SQRT(1.-SINT**2))
    IF(ABS(TETA)-TETAM)28,88,1
  88 SINFI=-CBETA/SQRT(CBETA**2+CGAMA**2)
    FI=ATAN(SINFI/SQRT(1.-SINFI**2))
    IF(ABS(FI)-FIMAX)46,46,1
  46 PE=P(EN)
    KP=(PE-PINF)/AINCP+1.
    KANALP(KP)=KANALP(KP)+1
    GO TO 1
  29 PRINT 190,KONT,IJU
    PRINT 150,(KANALP(I),I=1,NF)
    IF(KONT-KFIM)2,954,2
  190 FORMAT(9H0HISTORIA16,2X,3H1U=110)
  10 FORMAT(5E14.8)
  20 FORMAT(4H0P0=E14.8,2X,6HPL1M1=E14.8,8H AINCP=F14.8)
  90 FORMAT(110)
  130 FORMAT(20I4)
  150 FORMAT(1H ,20I6)
  440 FORMAT(40A2)
  1440 FORMAT(1H ,40A2)
  910 FORMAT(1H ,5E14.8)
  930 FORMAT(1H ,20I4)
  990 FORMAT(1H ,110)
  3130 FORMAT(10I6)
  3930 FORMAT(1H ,10I10)
    CALL EXIT
    END

```

```

08472 CORES USED
39941 NEXT COMMON
END OF COMPIATION

```



```

*FANDK1010
C***ACC PARA 1620
C** ARGUMENTO INICIAL .. 9 DIGITOS, TERM. COM IMPAR=IU

      FUNCTION ACC(IU)
      IU=IU*100003
      RU=IU
      ACC=RU*.1E-9
      RETURN
      END

```

```

00294 CORES USED
39999 NEXT COMMON
END OF COMPILEATION

```

\*\*\*\* \*

```

C***ACC PARA /360
C** ARGUMENTO INICIAL .. 9 DIGITOS, TERM. COM IMPAR=IU

      FUNCTION ACC(IU)
      IU=IU*65539
      IF(IU)5,6,6
5      IU=IU+2147483647+1
6      YFL=IU
      ACC=YFL*.4656613E-9
      RETURN
      END

```

```

*FANDK1010
C***NOIMAN
C***CALCULO DO ANGULO AZIMUTAL

      SUBROUTINE NOIMAN(CFI,SFI)
      COMMON Z,A,PI,IU
25  XIS=2.*ACC(IU)-1.
      YPS=ACC(IU)
      D=XIS**2+YPS**2
      IF(D-1.)27,27,25
27  CFI=(XIS**2-YPS**2)/D
      SFI=2.*XIS*YPS/D
      RETURN
      END

```

```

00676 CORES USED
39953 NEXT COMMON
END OF COMPILATION

```

\*\*\*\* \*\*

```

*FANDK1010
C** CDE
C*** DET. DOS COSENOS DIRETORES DA DIRECAO DE ESP.

      SUBROUTINE CDE(CALFA,CBETA,CGAMA,EMU,SFI,CFI,CALFAL,
1CBETAL,CGAMAL)
      RUMU2=SQRT(1.-EMU**2)
      IF(ABS(CGAMA)-1.)21,2,21
2  CALFAL=RUMU2*CFI
      CBETAL=RUMU2*SFI
      CGAMAL=CGAMA/ABS(CGAMA)*EMU
      GO TO 3
21 A=RUMU2/SQRT(1.-CGAMA**2)
      CALFAL=EMU*CALFA+A*(CALFA*CGAMA*CFI-CBETA*SFI)
      CBETAL=EMU*CBETA+A*(CBETA*CGAMA*CFI+CALFA*SFI)
      CGAMAL=EMU*CGAMA-A*(1.-CGAMA**2)*CFI
3  RETURN
      END

```

```

01070 CORES USED
39999 NEXT COMMON
END OF COMPILATION

```

```

010001010
**** SCEN - SECCAU DE CHOQUE E-N (MOLLIERE)

```

```

      FUNCTION SCEN(E,TETA)
      COMMON Z,A,PI,IU,C2M
      COST=COS(TETA)
      TAU=E/C2M
      FTA=.4425E-5*Z**.5666667*(1.13+3.76*(Z*(TAU+1.))**.5
+18769.*TAU*(TAU+2.))
      DELTA=2.*FTA
      SCEN=.4989552*Z*(Z+1.)*((1.-TAU)/(TAU*(TAU+2.)))**.5*(
+1./(1.-COST+DELTA)-1./(2.+DELTA))
      RETURN
      END

```

```

01000200010
39941 NEXT COMMON
END OF COMPILATION

```

\*\*\*\* \*\*

```

010003010
**** SCEN - SECCAU DE CHOQUE E-E (MOLLER)

```

```

      FUNCTION SCEN(E)
      COMMON Z,A,PI,IU,C2M
      TAU=E/C2M
      EPC=10./E
      SCEN=.4989552*(1.+TAU*TAU*(1.+2./TAU))**.5*(1./EPC-1./
+1.-(EPC)+(.5-EPC)*(TAU/(1.+TAU))*(TAU/(1.+TAU))-2.*TA
+2*(1.)*ALOG((1.-EPC)/EPC)/(1.+TAU)**2)/(TAU*TAU*TAU*(1
+2./TAU))
      SCEN=SCEN*Z
      RETURN
      END

```

```

01000400010
39941 NEXT COMMON
END OF COMPILATION

```

```
*FANDK1010
C** A T A F
C** TABULADO DE ESPALHAMENTO FLETRON-ELETRON
C** ENFONTE TRANSFERIDA
```

```
FUNCTION ESPE(EZERO,EIEN)
COMMON Z,A,PI,IU,C2M
EPSLIM=1.-EIEN
TAU=EZERO/C2M
EPSC=1./EZERO
IF(EPSC-EPSC)3,3,2
3 EPS=EPSC
GO TO 1
2 EPS=(EPSLIM-EPSC)*ACC(IU)+EPSC
G=(1./EPS**2+1./(1.-EPS)**2+(TAU/(TAU+1.))**2-((2.*TAU
IU+1.)/(TAU+1.))**2)*1./EPS*(1.-EPS)/(1./EPSC**2+1./
2(1.-EPSC)**2+(TAU/(TAU+1.))**2-((2.*TAU+1.)/(TAU+1.))
3**2)*1./EPSC*(1.-EPS))
IF(ACC(IU)-G)1,1,2
1 SINTE2=4.*EPS/(TAU*(1.-2.*EPS)+TAU*G.)
SINT=SQRT(SINTE2)
ESPE=ATAN(SINT/SQRT(1.-SINTE2))
EZERO=(1.-EPS)*EZERO
RETURN
END
```

```
0102 CORES USED
39941 NEXT COMMON
END OF COMPILATION
```

\*\*\*

```
*FANDK1010
C*** ENEP - PERDA DE ENERGIA POR IONIZACAO (DELTA TOTAL)
C** A SAIDA E A ENERGIA RESTANTE
C*** ESP E A ESPESSURA DA AMOSTRA
C*** PT E O POTENCIAL DE IONIZACAO
```

```
FUNCTION ENEP (EZERO,PT,ESP)
COMMON Z,A,PI,IU,C2M
PIE=(PT/C2M)**2
TAU=EZERO/C2M
TAU1=(TAU+1.)**2
TAU2=TAU*(TAU+2.)
ZET1=Z*ESP*TAU1
DELTE=.1535095*ZET1/(A*TAU2)*(ALOG(6.008129E-4*/E11*(
1A*PIE))-TAU2/TAU1+.197764)
ENEP =EZERO-DELTE
RETURN
END
```

```
0103 CORES USED
39941 NEXT COMMON
END OF COMPILATION
```

```
*FANDK1010
*** ESPFN
*** ANGULO DE ESPALHAMENTO ELETRON-NUCLEO
```

```
FUNCTION ESPFN (EZERO,ANGMIN)
COMMONZ,A,PI,IU,C2M
TAU=EZERO/C2M
ETA2=.885E-5*(1.13+3.76*Z**2*(TAU+1.)*.6277110769.*TAU*
1(TAU+2.)))*Z**2*.6666667
2 TET=.1*ACC(IU)
G=2.25*SIN(TET)*ETA2**2*(3./2.)/(1.-COS(TET)+ETA2)**2
IF(ACC(IU)-G)1,1,2
1 ESPFN=TET
RETURN
END
```

```
01070 CORES USED
39941 NEXT COMMON
END OF COMPILATION
```

```

C**BLUNCK-LEISEGANG
C**COLECAO DAS CONTIAGENS UTILIS DO LISHA

C**EO...ENERGIA INICIAL DO ELETRON
C**P...MOMENTO DO ELETRON
C**CM2...ENERGIA CINETICA DO ELETRON EM REPOUSO
C**TAU...ENERGIA CINETICA DO ELETRON EM UNIDADES DE CM2
C**TAU(P)...ENERGIA CINETICA EM UNIDADES DE CM2 EM
C   FUNCAO EM MOMENTO
C**DTAU...INCREMENTO DA PERDA DE ENERGIA EM UNIDADES DE CM2
C**DTAUB...INCREMENTO DA PERDA DE ENERGIA MEDIA EM UNIDADES
C   DE CM2
C**KANAL...CANAIS DO PROGRAMA LISHA
C**NK...NUMERO DOS CANAIS
C**CANAL...CANAIS DA DISTRIBUICAO CORRIGIDA
C**DP...LARGURA DE CADA CANAL
C**PLIMI...CENTRO DO PRIMEIRO CANAL
C**ELE...COMPRIMENTO DE CAMINHO PARA CADA CANAL
C**F(X)...FUNCAO PARA CALCULO DE ELE
C**FL(X)...DERIVADA DE F(X)
C**EPS...PRECISAO PARA O CALCULO DOS -ELE-
C**ALAMB...VARIAVEL DA FUNCAO DE LANDAU
C**DLAMB...INCREMENTO DE ALAMB
C**FR2...PARAMETRO B2 DA TEORIA DE BLUNCK E LEISEGANG
C**BL(AL)...FUNCAO DE BLUNCK E LEISEGANG PARA DISTRIBUICAO
C   DAS PERDAS DE ENERGIA
C**Z...NUMERO ATOMICO DO MATERIAL ALVO
C**A...PESO ATOMICO DO MATERIAL ALVO
C**PT...POTENCIAL DE IONIZACAO DO MATERIAL ALVO
C**ZD...ESPESSURA DO MATERIAL ALVO
      DIMENSION(FKANAL(100),DTAUB(100),TAU(100),CANAL(100)
      1,P(100),KANAL(100),ELE(100)
C**FUNCOES P/ CALC. DE *L* EM CADA CANAL
      F(X)=C1*X*(ALOG(C2*X)+C3)-DEM
      FL(X)=C1*(ALOG(X)+C4)
      TAU(PE)=SQRT(3441.8338E-10*PE**2+1.)-1.
      ALAMB(EL,DTAU,DTAUB)=(DTAU-DTAUB)*TT2*A/(.30040644E-
      13*Z*EL*TAU12)
      DLAMB(EL,TP1,TP2)=(TP1-TP2)/(.30040644E-3*Z*TAU12*EL.
      1/(A*TT2))
      FB2(EL,TB)=.4336961E+3*TB*(TT2*A)**2/(EL**2*Z**(2./3.
      1)*TAU12**2)
      BL(AL)=.3132*EXP(-AL**2/(3.24+B2))/SQRT(3.24+B2)+.116
      1*EXP(-(AL-3.)**2/(4.+B2))/SQRT(4.+B2)+.057*EXP(-(AL-6
      2.5)**2/(9.+B2))/SQRT(9.+B2)+.035*EXP(-(AL-11.)**2/(25
      3.+B2))/SQRT(25.+B2)
      1 READ 10,NK,( KANAL(I),I=1,NK)
      PRINT 30,NK
      DO 1003 I=1,NK
1003 FKANAL(I)=KANAL(I)
      PRINT 50,(FKANAL(I),I=1,NK)
      READ 20,EO,PLIMI,DP,Z,ZD,A,PT,CM2
      PRINT 50,EO,PLIMI,DP,Z,ZD,A,PT,CM2
      READ 20,EPS
      PRINT 50,EPS
      TAUO=EO/CM2
      PIE2=(PT/CM2)**2

```

```

      TAU12=(TAU0+1.)**2
      TT2=TAU0*(TAU0+2.)
      TOTF2=TAU0*TT2
      C1=.30040644E-3*7*TAU12/(A*TT2)
      C2=6.0081288E-4*2*(TAU12/(A*PTI2))
      C3=-TT2/TAU12+.197784
      C4=ALOG(C2)+C3+1.
      PRINT 120,C1,C2,C3,C4
      DO 215 I=1,NK
215  CANAL(I)=0.
      ELE0=2.*ZD
      DO 5 J=1,NK
      AJ=J
      P(J)=PLIMI+(AJ-1.)*DP
      TAU(J)=TAUF(P(J))
      DTAUB(J)=TAU0-TAU(J)
C.** DET. DOS L P/ CADA CANAL
      BEM=DTAUB(J)
      13 ELE1=ELE0-F(ELE0)/FL(FLE0)
      IF(ABS((ELE1-ELE0)/ELE1)-FPS)4,4,3
      3 ELE0=ELE1
      GO TO 13
      4 ELE(J)=ELE1
      ELE0=ELE1
      5 CONTINUE
      DO 15 I=1,NK
      IF(FKANAL(I))15,15,16
16  B2=FB2(FLE(I),DTAUB(I))
C.** CONTRIBUICAO DO CANAL(I) AUS CANAIS 'JI
      DO 15 J=1,NK
      ALAMB=ALAMB*(ELE(I),DTAUB(J),DTAUB(I))
      DLAMB=DLAMB*(ELE(I),TAUF(P(J)+DP/2.),TAU(P(J)-DP/2.))
      1'
      AA=ALAMB**2/(3.24+B2)
      IF(AA-227.)11,12,12
11  CANAL(J)=CANAL(J)+FKANAL(I)*BL(ALAMB)+DLAMB*(P(J)/P(I))**2
      GO TO 15
17  CANAL(J)=CANAL(I)
15  CONTINUE
      PRINT 200,(CANAL(I),I=1,NK)
      PUNCH 20 ,(CANAL(I),I=1,NK)
      SOMA=0.
      DO 25 I=1,NK
25  SOMA=SOMA+CANAL(I)
      PRINT 300, SOMA
      GO TO 1
10  FORMAT(15/(20I4))
20  FORMAT(5E14.8)
30  FORMAT(1H ,I3)
120  FORMAT(1H0,5E14.8)
200  FORMAT(9I2X,5E14.8)
300  FORMAT(4H SOMA=1E14.8)
50  FORMAT(1H ,5(14.8))
      END

```

0004 - CUBES - 0010  
 0009 - NEXT - 00000  
 0010 - 0001 - 0010

```

C
      ***KLBL
C***CORRECAO PELA RESOLUCAO INTRINSECA DO ESPECTROMETRO

C***CANALR...CANAIS DA FUNCAO DE RESOLUCAO DO ESPECTROMETRO
C (RESOL)
C***CANALL...CANAIS DO PROGRAMA LISHA
C***CANAL...CANAIS DA DISTRIBUICAO CORRIGIDA
C***NR...NUMERO DE CANAIS-RESOL
C***NLL...NUMERO DE CANAIS-LISHA
C***NPLL...NUMERO DE CANAIS-DISTRIBUICAO CORRIGIDA
C***DP...LARGURA DE CADA CANAL
C***ZDM...INTERVALO DE VARIACAO DO MOMENTO NO PROGRAMA RESOL
C***PLIMI...EXTREMO INFERIOR DO MOMENTO
      DIMENSION CANALR(100),CANALL(100),CANAL(100)
      READ 90,NR,NLL,NPLL
      PKINI 190,NR,NLL,NRLL
      ANR=NR
      READ 20,(CANALR(I),I=1,NR)
      PRINT 100,(CANALR(I),I=1,NR)
1  READ 10,DP,DM,PLIMI
   PRINT100,DP,DM,PLIMI
   READ 10,(CANALL(I),I=1,NLL)
   PRINT 100,(CANALL(I),I=1,NLL)
   DR=2.*DM/ANR
   DO 5 I=1,NR!!
     CANAL(I)=0.
5  CONTINUE
   DO 35 I=1,NLL
     IF(CANALL(I))35,35,36
36  AI=I
     PI=PLIMI+(AI-1.)*DP
     SOMAR=0.
     DO 25 K=1,NR
       IF(CANALR(K))25,25,26
26  AK=K
     PK=PI*(1.+DR*(AK-1.))-DM)
     SOMAR=SOMAR+CANALR(K)/PK
25  CONTINUE
     DO 35 J=1,NRLL
       AJ=J
       PJ=PLIMI+(AJ-1.)*DP
       DELTA=(PJ-PI)/PI
       IF(ABS(DELTA)-DM)2,2,35
2  KR=(DELTA+DM)/DR+1.
     CANAL(J)=CANAL(J)+CANALL(I)*CANALR(KR)*DP/(SOMAR*PI*P
1J*DR)
35  CONTINUE
     PRINT 200,(CANAL(J),J=1,NRLL)
     PUNCH 10 ,(CANAL(J),J=1,NRLL)

```



```
SOMA=0.  
DO 125 I=1,NRLL  
125 SOMA=SOMA+CANAL(I)  
PRINT 300, SOMA  
GO TO 1  
10 FORMAT(5E14.8)  
20 FORMAT(13F6.0)  
90 FORMAT(20I3)  
100 FORMAT(1H ,5E14.8)  
190 FORMAT(1H ,20I3)  
300 FORMAT(6H SOMA=E14.8)  
200 FORMAT(9I20,F14.8)  
END
```

```
06224 CORES USED  
39999 NEXT COMMON  
END OF COMPILATION
```

```

(      ***PLRLN***
C***CORRECAO PELA LARGURA NATURAL DA LINHA

C***CANAL...CANAL DA DISTRIBUICAO FINAL CORRIGIDA DAS PERDAS
C DE MOMENTO
C***CRLL...CANAL DA DISTRIBUICAO CORRIGIDA PELA RESOLUCAO
C DO ESPECTROMETRO
C***CANALN...CANAL DA DISTRIBUICAO PELA LARGURA NATURAL DA
C LINHA
C***NC...NUMERO DE CANAIS EM QUE E FEITA A DISTRIBUICAO
C***EO...ENERGIA INICIAL
C***PO...MOMENTO CORRESPONDENTE A EO
C**KB...CANAL CORRESPONDENTE A PO
C***GAMA...LARGURA NATURAL DA LINHA
C***PLIMI...EXTREMO INFERIOR DO MOMENTO
C***DELT...LARGURA DE CADA CANAL
C***C2M...ENERGIA CINETICA DO ELETRON EM REPOUSO
C***ENERG(X)...ENERGIA EM FUNCAO DO MOMENTO
      DIMENSION CRLL(140),CANAL(140),CANALN(140),P(140)
      ENER(X)=C2M*(SQRT(3441.8336E-10*X**2+1.)-1.)
      1 READ 90,NC,KB
      PRINT 100,NC,KB.
      READ 10,GAMA,PO,PLIMI,DELT,C2M
      PRINT20,GAMA,PO,PLIMI,DELT,C2M
      READ 10,(CRLL(I),I=1,NC)
      PRINT200,(CRLL(I),I=1,NC)
      ANC=NC
      PIN=3.1415926
      SOMA=0.
      DO 5 I=1,NC
      CANAL(I)=0.
      SOMA=SOMA+CRLL(I)
      5 CONTINUE
      SOMAN=0.
      GAMA2=GAMA/2.
      EO=ENER(PO)
      DO 15 I=1,NC
      AI=I
      P(I)=PLIMI+(AI-1.)*DELT
      E=ENER(P(I))
      CANALN(I)=2.*E*GAMA/(PIN*((E-EO)**2+GAMA2**2))
      SOMAN=SOMAN+CANALN(I)
      15 CONTINUE
      DO 35 I=1,NC
      DO 35 J=1,NC
      IE=KB-I+J
      IF(IE-NC)11,11,35
      11 IF(IF)35,35,12
      12 CANAL(J)=CANAL(J)+CANALN(I)*CRLL(IF)/SOMA
      35 CONTINUE
      PRINT 200,(CANAL(I),I=1,NC)
      PUNCH 10,(CANAL(I),I=1,NC)

```

```
SOMA=0.  
DO 25 I=1,NC  
25  SOMA=SOMA+CANAL(I)  
    PRINT 300, SOMA,SOMAN  
    GO TO 1  
10  FORMAT(5E14.8)  
20  FORMAT(1H ,5E14.8)  
90  FORMAT(20I3)  
100 FORMAT(1H ,20I3)  
200 FORMAT(1H ,8E16.8)  
300 FORMAT(6H SOMA=E14.8/7H SOMAN=E14.8)  
    END
```

```
08814 CORES LEFT  
39999 NEXT COMMON  
END OF COMPILATION
```

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. – Berger, M. J. – “Methods in Computational Physics” – ed. B. Alder, I, (1963), 135
2. – Landau, L. D. – J. Phys. U.S.S.R 8, (1944), 201
3. – Blünck, O., Leisegang, S. – Z. Physik 128, (1950), 500
4. – Wu, C. S. – “ $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\gamma$  ray spectroscopy” Ch. XXIVA ed. K. Siegbahn, 1965
5. – Rutherford, E. – Phil. Mag. 21, (1911), 669
6. – Molière, G. – Z. Naturforsch. 2a, (1947), 133
7. – Molière, G. – Z. Naturforsch. 10a., (1955), 177-211
8. – Mott, N. F. – Proc. Roy. Soc. A124, (1929), 475
9. – Hara, E. – Nucl. Instr. Meth. 65, (1968), 85
10. – Møller, C. – Ann. der Physik 14, (1932), 531
11. – Evans, R. – “The Atomic Nucleus” int. Series in Pure and Appl. Phys., 1955 – ed. L. Shiff
12. – Williams, E. M. – Proc. Roy. Soc. A125, (1929), 420
13. – Vavilov, P. V. – J.E.P.T. 5, (1957), 749
14. – Borsch – Supan, W. – J. Res. Natl. Bur. Standards 65B, (1961) 245
15. – Kuo, S. S. – “Numerical Methods and Computers”. Addison-Wesley Publ. Co. 1965
16. – “IBM Random Number Generation and Testing” Reference Manual C20-8011, New York, 1959
17. – von Neumann, J. – “Monte Carlo Method”. Natl. Bur. Standards Appl. Math. Ser. 12, (1951), 36
18. – Zerby, C. D. – “Methods in Computational Physics” ed. B. Alder I, (1963), 89
19. – Suarez, A. A. – “Sobre uma nova versão de espectrômetro magnético setorial para o estudo de elétrons de conversão interna em reações de captura” – Tese de doutoramento apresentada à Universidade de Campinas – agosto, 1970
20. – Blünck, O., Westphal, K. – Z. Physik 130, (1951) 641
21. – Suarez, A. A., Mazzili, E., Coutinho, F. A. B. – “Beam Optics Studies Using the Monte Carlo Methods” – Anais da Acad. Bras. de Ciências, 1970.

