

# 1

## Introdução

O fenômeno das colisões envolvendo átomos ou moléculas como alvos e partículas carregadas (elétrons, prótons ou íons pesados) como projéteis é de fundamental importância para muitas áreas da ciência, tais como, astronomia, química, física de plasma e física médica, dentre outras.

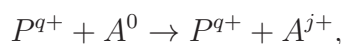
Durante a colisão podem existir diversos canais possíveis como resultado das interações entre os participantes. Em colisões elásticas, duas partículas A e B, ao colidirem, permanecem nos seus respectivos estados iniciais, enquanto que em uma colisão inelástica, o sistema em questão sofre transições que o levam de um estado inicial para um estado final diferente. Podemos dizer que um canal estará aberto se a colisão correspondente for permitida pelas leis de conservação; caso contrário dizemos que este canal estará fechado.

A escolha de um determinado regime de velocidades tornará mais provável ou não um canal. As probabilidades de ocorrência dos diferentes canais possíveis podem ser fortemente dependentes da velocidade da colisão. Podemos dividir aproximadamente os regimes de velocidades em três faixas:

- regime de baixas velocidades<sup>1</sup> onde  $(v/v_0) \leq 2$ ;
- regime de velocidades intermediárias onde  $2 \leq (v/v_0) \leq 10$ ;
- regime de altas velocidades onde  $(v/v_0) \geq 10$ .

Os canais de troca de carga disponíveis em uma colisão entre íons pesados como projéteis ( $P$ ) e de átomos neutros como alvos ( $A$ ) são:

- Ionização simples ou múltipla do alvo



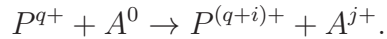
onde uma quantidade  $j$  de elétrons pertencentes ao átomo alvo são ionizados;

<sup>1</sup> Sendo  $v$  a velocidade por nucleon do projétil e  $v_0$  a velocidade de Bohr, tem-se  $(v/v_0) = 6,32 \cdot \sqrt{\frac{E}{M}} (MeV/amu)$ , onde  $E$  é a energia do projétil em MeV e  $M$  é a massa do projétil.

- Ionização com captura de um, ou mais elétrons do alvo pelo projétil.



- Ionização com perda de um ou mais elétrons do projétil, chamado de perda eletrônica



Ao escolhermos o tipo de projétil torna-se inerente a escolha de alguns canais disponíveis que vão competir com o canal da ionização. Podemos definir três tipos de projéteis:

- íons desnudos<sup>2</sup> (p. ex.  $p^+$ ,  $\text{He}^{2+}$ ,  $\text{C}^{6+}$ , ...);
- íons vestidos<sup>3</sup> (p. ex.  $\text{He}^+$ ,  $\text{C}^{3+}$ ,  $\text{O}^{5+}$  ...);
- íons moleculares (p. ex.  $\text{H}_2^+$ ,  $\text{CH}_4^+$ , ...).

Para os íons desnudos na região de baixas energias o canal principal é o de captura de elétrons do alvo pelo projétil. Entre as regiões de velocidades baixas a intermediárias, existe uma superposição dos canais de captura e ionização. Já na região intermediária a alta, dependendo do estado de carga do projétil, o canal principal é o de ionização [1, 2, 3].

Para os íons vestidos na região de velocidades baixas, os canais principais disponíveis dependentes do estado de carga do projétil são os de ionização simples e múltipla. A disposição dos canais dos íons moleculares nos regimes de velocidades é a mesma dos íons vestidos, porém com a adição dos canais dissociativo e não dissociativo do projétil.

Quando um íon atômico vestido ou um íon molecular interage com um átomo neutro, a perda eletrônica se deve a dois mecanismos distintos no que diz respeito à participação dos elétrons do alvo [4, 5, 6, 7, 8]:

1. um papel passivo, onde os elétrons do alvo agem como uma blindagem entre o campo nuclear do alvo e os elétrons do projétil, reduzindo assim o seu valor efetivo e diminuindo as seções de choque. Este efeito tem a participação coerente de todos os elétrons do alvo recebendo o nome de *screening*.
2. um papel ativo, onde os elétrons do alvo interajam diretamente e de uma forma incoerente com os elétrons do projétil podendo ionizá-lo. A soma

<sup>2</sup>Íons desnudos são partículas carregadas desprovidas de elétrons

<sup>3</sup>Íons vestidos são partículas carregadas providas de elétrons

das interações contribui para o aumento das seções de choque. Este efeito recebe o nome de *antiscreening* neste caso, ocorre, em geral, a ionização simultânea do projétil e do alvo.

Enquanto que o entendimento atual da ionização simples induzida por íons desnudos é razoavelmente bom [2], a situação não é a mesma para a ionização múltipla. Este processo pode ocorrer por meio de diferentes canais competitivos, tais como:

- ionização direta de elétrons das camadas mais externas;
- transferência de carga múltipla com ou sem ionização adicional; e
- ionização de camadas internas seguida de emissão de elétrons pós-colisionais, através de processos como Auger ou Coster–Kronig.

A seção de choque de ionização múltipla direta das camadas mais externas pode fornecer informações sobre o processo de interação responsável pela ionização múltipla do átomo. O processo de ionização múltipla pode ser pensado como ocorrendo por meio de dois caminhos distintos. O projétil incidente pode interagir com um único elétron do átomo e este elétron, por sua vez, pode interagir com os demais elétrons que, podem, assim ser ejetados. Este processo é de primeira ordem na interação do projétil com o alvo. Por outro lado, o projétil pode interagir diretamente com  $n$  elétrons do alvo e assim ionizá-los. Este processo é de ordem  $n$  na interação do projétil com o alvo.

Uma questão básica que aparece no estudo da ionização múltipla diz respeito a quais e quantos elétrons de um átomo ou uma molécula multieletrônica preferencialmente participam neste processo, isto é, se existe um mecanismo de seleção que favoreça uma certa fração dos elétrons do alvo, e qual é sua origem [9].

J. H. McGuire [10] apresentou um dos casos mais simples, a ionização dupla de um alvo por íons; o caso estudado foi o do átomo de He como alvo e prótons e elétrons como projéteis. Este processo, segundo McGuire, pode ser entendido através de dois mecanismos: (i) processo *shake-off*, ocorre quando um elétron é ionizado diretamente pelo projétil e um segundo elétron é ejetado por um rearranjo atômico para um determinado estado final; (ii) a ionização de dois elétrons pela interação direta com o projétil na mesma colisão.

Uma ferramenta importante para o entendimento da dinâmica de colisão em sistemas de muitos elétrons é o estudo das colisões entre íons desnudos e gases nobres. Os íons desnudos são escolhidos por reduzirem a quantidade de canais que ficariam disponíveis neste tipo de colisão, caso fossem usados íons vestidos, simplificando a análise da mesma, já que não há o canal de perda

eletrônica. A escolha dos gases nobres como principais alvos em colisões se dá pelo fato que na natureza eles são encontrados na forma elementar e não como moléculas, evitando assim as complicações que advêm do tratamento, tanto teórico quanto experimental, desses sistemas mais complexos.

O interesse pelo entendimento da dinâmica das colisões que envolvam íons e átomos multieletrônicos motivou esforços tanto teóricos como experimentais de diversos grupos. Além do já citado trabalho de McGuire [10], DuBois *et al* [2, 3] mediram seções de choque absolutas para colisões de  $H^+$  e  $He^+$  com gases nobres, obtendo seções de choque para vários processos individuais que contribuem para a seção de choque total de ionização múltipla. Cavalcanti *et al* [11, 12] apresentaram dados de seções de choque absolutas de ionização múltipla de gases nobres por prótons rápidos (0,75–3,5 MeV). Galassi *et al* [13] analisaram o papel dos diferentes mecanismos que se seguem à produção de vacâncias devidas à interação direta do projétil com os elétrons do alvo. Santos *et al* [15, 16] mediram seções de choque absoluta para a ionização múltipla de gases nobres por impacto de  $He^+$  e  $C^{3+}$ , respectivamente. Sigaud *et al* [17] apresentaram a produção de ionização múltipla para a colisão de  $H_2^+$  de 1,0 MeV/amu com He–Xe nos dois canais, dissociativo e não-dissociativo. Kirchner *et al* [18] obtiveram seções de choque de correlação do estado de carga para perda eletrônica do projétil, captura e ionização do alvo em colisões envolvendo  $C^{3+}$  com Ne.

## 1.1

### Objetivos

Nesta dissertação temos como objetivo apresentar cálculos detalhados e valores de seções de choque para colisões entre prótons e alvos de Ne ( $q = 1, 2$  e  $3$ ), Ar ( $q = 1, 2, 3$  e  $4$ ), Kr ( $q = 1, 2, 3$  e  $4$ ) e Xe ( $q = 1, 2, 3$  e  $4$ ), onde  $q$  é o estado de carga final do átomo alvo. Vamos levar em consideração os efeitos pós-colisionais e as interações que ocorrem nas camadas internas devido à interação nas camadas externas, e vice e versa. Será verificada a sensibilidade dos valores das probabilidades de emissões pós-colisionais inseridos na aproximação feita.

## 1.2

### Organização da dissertação

A dissertação está organizada da seguinte forma. No capítulo 2 serão apresentados os métodos que já foram utilizados para resolver o problema proposto. No capítulo 3 serão apresentadas as aproximações e considerações feitas. No quarto capítulo serão apresentados os valores obtidos e comparações

com resultados experimentais e teóricos disponíveis na literatura. Finalmente, as conclusões e perspectivas futuras se encontram no capítulo 5.