

Universidade Federal de Juiz de Fora
Instituto de Ciências Exatas
Departamento de Física

**Seção de choque parcial e total
absoluta nas colisões de Li^+ e Li^{2+} em
Argônio, na faixa de energia de 0,2 a
3,5 MeV.**

Alberto Luiz Costa Losqui

Orientador: Prof. Dr. Wilson de Souza Melo

Juiz de Fora
Julho de 2014

Universidade Federal de Juiz de Fora
Instituto de Ciências Exatas
Departamento de Física

**Seção de choque parcial e total
absoluta nas colisões de Li^+ e Li^{2+} em
Argônio, na faixa de energia de 0,2 a
3,5 MeV.**

Tese de Doutorado apresentada ao
Departamento de Física da Universidade
Federal de Juiz de Fora como parte dos
requisitos necessários para obtenção do
Título de Doutor em Física.

Alberto Luiz Costa Losqui

Orientador: Prof. Dr. Wilson de Souza Melo

Juiz de Fora, MG – Brasil
30 de Julho de 2014

Seção de choque parcial e total absoluta nas colisões de Li^+ e Li^{2+} em Argônio, na faixa de energia de 0,2 a 3,5 MeV.

Alberto Luiz Costa Losqui

Prof. Dr. Wilson de Souza Melo

Tese de doutorado submetida ao programa de Pós-Graduação em Física, Departamento de Física da Universidade Federal de Juiz de Fora – UFJF, como parte dos requisitos necessários a obtenção do título de Doutor em Física.

Aprovada por:

Prof. Dr. Wilson de Souza Melo

Prof. Dra. Maria Cristina Andreolli Lopes

Prof. Dr. Eduardo Chaves Montenegro

Prof. Dr. José Rachid Mohallem

Prof. Dr. Nelson Velho de Castro Faria

Juiz de Fora, MG – Brasil
30 de Julho de 2014

Para minha Família

"Quem compreender o atomismo ficará tranquilo e sem medo, pois tudo ocorre pela reunião ou separação de átomos."

Os Atomistas: Leucipo e Demócrito

AGRADECIMENTOS

À Deus.

Ao meu orientador, Prof. Wilson de Souza Melo da Universidade Federal de Juiz de Fora, que sempre se demonstrou paciente e disposto a me ensinar. Obrigado pela oportunidade de aprender tanto.

Aos Profs. da Graduação e Pós Graduação em Física da UFJF.

Ao Prof. Fábio Zappa da UFJF, que ajudou muito na construção deste trabalho, sempre sanando minhas dúvidas.

Ao Prof. Sigaud da PUC-Rio, por sua grande ajuda durante a realização deste trabalho.

Aos Profs. da UFRJ e toda equipe do LaCAM: Marcelo, Wania, Felipe, Ihani e especialmente ao Tony, por estar sempre disponível para tirar minhas dúvidas. Ao Professor E. C. Montenegro, que gentilmente fez as contas da PWBA. Obrigado pela boa vontade de todos e oportunidade de aprender tanto.

Ao Domingos da secretaria da Pós Graduação, pela boa vontade e interesse em ajudar.

A Universidade Federal de Juiz de Fora e a Universidade Federal do Rio de Janeiro, pelo apoio material.

A CAPES, CNPq e Fapemig pelo apoio financeiro.

Aos meus pais, Alberto e Terezinha, pelo apoio e o amor incondicional. Por serem meu ponto de referência e o exemplo que eu sigo. Amo vocês!

Ao meu irmão e melhor amigo Angelito, pelas nossas conversas e nossas partidinhas de futebol.

A toda minha família, em especial as pessoas ligadas diretamente ao meu sucesso, minha Vó Leny, aos meus tios Julim, Carlim, e tias Elza, Ellem, minha priminha Ailana e minha afilhadinha Elena.

A Liliane, por ser minha amiga e companheira em todos os momentos, por me ajudar a enfrentar e vencer os obstáculos e, por tudo que ela representa pra mim.

Ao meu amigo Rochedo (Tiago) que sempre me ajudou nas minhas traduções.

A todos os meus amigos feitos até aqui, todos são especiais e igualmente importantes, sejam, da Graduação, Pós Graduação ou da “peladinha” de sexta... Enfim, a todos que contribuíram direta ou indiretamente para este trabalho.

RESUMO

Para compreender o comportamento dos canais de perda eletrônica, captura eletrônica e ionização direta do alvo (para um alvo fixo) é necessário compreender como esses canais são afetados pela faixa de energia do projétil, pelo estado de carga do projétil e se eles estão, de alguma forma, conectados.

Na faixa de energia estudada neste trabalho, a perda eletrônica do projétil pode ocorrer basicamente devido aos modos de blindagem, antiblindagem e o processo de segunda ordem (“Loss Ionization – LI”). Em baixas energias, o canal de captura é dominante em relação ao canal de perda e, a combinação baixa energia e estado de carga do projétil pode favorecer o acoplamento desses canais (perda – captura) num mesmo evento de colisão, mantendo fixo o estado de carga do projétil, antes e depois da colisão. Além disso, para um alvo com muitos elétrons, um acoplamento entre o canal de captura e ionização também deve ser considerado.

Com o intuito de estudar como os canais de perda eletrônica, captura eletrônica e ionização estão conectados e competindo durante a colisão, foram feitos dois tipos de medidas para o alvo de Argônio: o primeiro, a medida da seção de choque total absoluta para a perda e captura eletrônica de Li^+ e Li^{2+} na faixa de energia de 0,2 – 3,5 MeV. O segundo, a medida da seção de choque parcial absoluta para os canais de perda e captura (para o projétil Li^{2+} , levando a ionização múltipla do alvo) e, a ionização direta do alvo entre 0,75 – 3,5 MeV. Dados experimentais para a perda eletrônica são comparados com cálculos teóricos baseados na Aproximação de Born de Ondas Planas (PWBA) e no Modelo de Colisões Livres (MCL).

A comparação experimento-teoria (PWBA-antiblindagem + MCL-blindagem) para o canal de perda eletrônica total (perda simples + perda dupla) em relação ao projétil Li^+ apresenta um bom acordo. Em relação ao projétil Li^{2+} , para o mesmo canal, é observada uma discrepância experimento-teoria, que pode ser atribuída ao acoplamento entre os canais de perda e captura num mesmo evento de colisão (perda com transferência) e ao processo de segunda ordem (LI).

Palavras-chave: acoplamento, canais competitivos, lítio, perda com transferência.

ABSTRACT

In order to understand the behavior of channels of electron loss, electron capture and direct ionization of the target (for a fixed one) it is necessary to understand how these channels are affected by the energy range of the projectile, by the charge state of it and if they are connected somehow.

In the energy range studied in this work, the electron loss of the projectile may occur basically due to ways, namely the screening, antiscreening and the second-order process (“Loss Ionization – LI”). At low energies, the capture channel is dominant to the loss channel, and combination of low energy and charge state of the projectile may favor the coupling of these channels (loss - capture) in the same collision event, keeping fixed the charge state of the projectile before and after the collision. Furthermore, for many electrons target, the coupling between the capture and ionization channel must also be considered.

To study how the channels of electron loss, electron capture and ionization are connected and competing during the collision, two types of measurements to Argon target were made: first, the measurement of the absolute total cross section for the loss and electron capture of Li^+ and Li^{2+} in the energy range from 0.2 to 3.5 MeV. Second, the measure of the absolute partial cross sections for capture and loss channels (for the Li^{2+} projectile, leading to target multiple ionization) and the direct ionization of the target from 0.75 to 3.5 MeV. Experimental data for electron loss are compared with theoretical calculations based on the Plane Wave Born Approximation (PWBA) and the Free Collision Model (FCM).

The theory-experiment comparison (PWBA-antiscreening + MCL-screening) for total electron loss channel (single + double loss) for the Li^+ projectile shows a good agreement. In relation to the Li^{2+} projectile, on the same channel, it is observed a theory-experiment discrepancy, which can be attributed to the coupling between loss and capture channel in a single collision event (transfer-loss) and the second-order process (LI).

Keywords: coupling, competitive-channels, lithium, transfer-loss.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS.....	xi
LISTA DE TABELAS.....	xvii
LISTA DE SÍMBOLOS.....	xviii
CAPÍTULO 1.....	1
1. INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO 2.....	6
2. DESCRIÇÃO TEÓRICA.....	6
2.1. CONCEITOS ENVOLVENDO PERDA, CAPTURA E IONIZAÇÃO.....	6
2.2. BLINDAGEM E ANTIBLINDAGEM.....	8
2.3. DESCRIÇÃO TEÓRICA DOS MODOS DE BLINDAGEM E ANTIBLINDAGEM.....	12
2.3.1. APROXIMAÇÃO DE BORN DE ONDAS PLANAS.....	12
2.3.2. MODELO DE COLISÕES LIVRES.....	15
2.4. MODOS DE BLINDAGEM, ANTIBLINDAGEM E PROCESSOS ASSOCIADOS.....	18
2.5. PERDA E CAPTURA SIMULTÂNEAS, DEPENDÊNCIA COM O ESTADO DE CARGA DO PROJÉTILO.....	21
2.6. DEPENDÊNCIA DOS MODOS DE BLINDAGEM E ANTIBLINDAGEM COM O NÚMERO ATÔMICO DO ALVO (Z_2).....	26
CAPÍTULO 3.....	32
3. DESCRIÇÃO EXPERIMENTAL.....	32
3.1. DESCRIÇÃO GERAL DA LINHA EXPERIMENTAL.....	32
3.2. A FONTE DE ÍONS.....	35
3.3. FILTRO DE WIEN.....	38
3.4. PRODUÇÃO DE CATODOS.....	40
3.5. O ACELERADOR PELLETRON-TANDEM 5SDH.....	40
3.6. O MAGNETO.....	44
3.7. OS FEIXES ESPÚRIOS.....	47
3.8. A CÂMARA DE COLISÃO.....	49

3.8.1. CÂMARA DE COLISÃO PARA MEDIDA DA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL ABSOLUTA.....	49
3.8.2. CÂMARA DE COLISÃO PARA MEDIDA DA SEÇÃO DE CHOQUE PARCIAL ABSOLUTA.....	51
3.9. A CÂMARA DE DETECÇÃO	55
3.9.1 CÂMARA DE DETECÇÃO – MEDIDAS TOTAIS ABSOLUTAS DE PERDA E CAPTURA	55
3.9.2 CÂMARA DE DETECÇÃO – MEDIDAS PARCIAIS ABSOLUTAS.....	58
3.10. MEDIDA DENOMINADA “TOTAL ABSOLUTA”	67
3.11. MEDIDA DENOMINADA “PARCIAL ABSOLUTA”	71
CAPÍTULO 4.....	81
4. RESULTADOS.....	81
4.1. SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL	81
4.2. SEÇÃO DE CHOQUE PARCIAL ABSOLUTA	88
4.2.1. CAPTURA SIMPLES ACOMPANHADA DA IONIZAÇÃO MULTIPLA DO ALVO.....	88
4.2.2. PERDA SIMPLES ACOMPANHADA DA IONIZAÇÃO MULTIPLA DO ALVO.....	92
4.2.3. IONIZAÇÃO MULTIPLA DIRETA DO ALVO.....	96
CAPÍTULO 5.....	107
5. CONCLUSÃO	107
APÊNDICE	109
A. TABELAS.....	109
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	115

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1: Representação esquemática para ilustrar o processo de perda eletrônica pelo projétil, cuja reação está na equação (2.2). A seta vermelha indica a possível localização do elétron que foi perdido.	7
Figura 2.2: Representação esquemática para ilustrar o processo de captura eletrônica pelo projétil, cuja reação está na equação (2.3). A seta vermelha indica a possível localização do elétron que foi capturado.....	7
Figura 2.3: Representação esquemática para ilustrar o processo de ionização direta do alvo, cuja reação está na equação (2.4). A seta vermelha indica a possível localização do elétron que foi removido do alvo.	8
Figura 2.4: Ilustração do parâmetro de impacto, \bar{b} , que é a distância internuclear de separação projétil-alvo. A unidade do parâmetro de impacto é dada em u.a. (unidade atômica).....	9
Figura 2.5: Parte (a), representação da perda eletrônica do projétil, no referencial do projétil, como o resultado de uma interação do núcleo blindado do alvo com o elétron ativo do projétil. O elétron ativo do projétil faz uma transição de um estado inicial s para o contínuo, enquanto os elétrons do alvo permanecem no estado fundamental, este processo é chamado de blindagem. Na parte (b), a mesma consideração de referencial é feita, mas agora para uma interação elétron-elétron. O elétron ativo do projétil vai de um estado s para o contínuo e o elétron ativo do alvo, simultaneamente, vai de um estado 0 para o estado n , este processo é chamado de antiblindagem.	11
Figura 2.6: Representação das velocidades e ângulos do modelo de colisões livres, onde: \vec{v}_N representa a velocidade do centro de massa do projétil no referencial do laboratório; \vec{u}_{rms} é a velocidade do elétron ativo do íon incidente no referencial do projétil; \vec{v}_i é a velocidade inicial do elétron ativo no referencial do laboratório; \vec{v}_f é a velocidade final do elétron espalhado no referencial do laboratório; β é o ângulo entre \vec{v}_N e \vec{u}_{rms} ; θ é o ângulo entre \vec{v}_i e \vec{v}_f ; e ϕ é o ângulo entre os planos formados pelas velocidades \vec{v}_N e \vec{v}_i , e \vec{v}_N e \vec{v}_f	17
Figura 2.7: Representação dos mecanismos envolvidos num processo de interação íon – átomo. (a) representa o mecanismo de blindagem; (b) representa o mecanismo de antiblindagem; (c) representa a ionização simultânea e independente do projétil e do alvo; (d) representa a ionização direta do alvo pelo núcleo do projétil, onde o projétil não perde elétrons. Os três processos (a), (b) e (c) resultam na perda total de elétrons do projétil.	19
Figura 2.8: Ilustração dos processos eletrônicos possíveis ocorrendo simultaneamente com a perda eletrônica do projétil devido aos modos de blindagem (a) e antiblindagem (b).	24

Figura 3.1: Vista lateral dos equipamentos constituídos da fonte de íons, acelerador e magneto.	33
Figura 3.2: Vista superior da canalização do feixe. Os símbolos tem o seguinte significado: M, “switching magnet” – magneto; C, colimadores; E ₁ , placas de deflexão eletrostática (feixe defletido horizontalmente); G ₁ , célula gasosa para medidas totais; E ₂ , placas de deflexão eletrostática (feixe defletido na vertical); G ₂ , célula gasosa para medidas em coincidência; E ₃ , placas de deflexão eletrostática (feixe defletido na horizontal); D, câmara de detecção com detector sensível a posição.	34
Figura 3.3: Representação esquemática do funcionamento da fonte de íons negativos.	35
Figura 3.4: Uma foto ilustrativa da fonte SNICS.	37
Figura 3.5: Exemplo de produção de íons ao atravessar a parede de céso. Neste caso, a amostra para o catodo é TiO ₂ – dióxido de titânio.	37
Figura 3.6: Representação esquemática do campo elétrico (E) e magnético (B) no filtro de wien, para obtenção da relação entre a massa da partícula e o potencial aplicado nas placas. Note que no esquema a notação vetorial adotada é representada por letras em negrito e sem o uso de setas.	38
Figura 3.7: Foto ilustrativa do filtro de Wien que faz parte do acelerador.	40
Figura 3.8: Esquema ilustrativo dos dois estágios de aceleração do tandem. O 1º estágio é de baixa energia (LE) e o 2º estágio é de alta energia (HE). Ambas as extremidades estão aterradas e, o potencial V no esquema ilustrativo é o mesmo potencial representado por V _t no texto.	41
Figura 3.9: Esquema ilustrativo dos processos que podem ocorrer no interior do tanque do acelerador.	41
Figura 3.10: Foto ilustrativa com vista do interior do acelerador. No centro, temos o terminal de alta tensão.	42
Figura 3.11: Esquema ilustrativo do gerador de tensão no pelletron 5SDH.	43
Figura 3.12: Foto ilustrativa da corrente de cilindros, mostrando os chamados “pellets”.	44
Figura 3.13: Parte (a), superior, esquema ilustrativo com vista superior do magneto e das linhas de feixes. Na parte (b), uma foto ilustrativa com vista superior do acelerador, magneto e linhas de feixe. Na parte (c), o console do acelerador, onde é possível controlar a voltagem no seletor de velocidades, o valor do campo magnético e a energia do feixe de projéteis.	44
Figura 3.14: Representação ilustrando a trajetória circular devido ao campo magnético.	46
Figura 3.15: Representação esquemática com vista superior, da deflexão horizontal do feixe espúrio mais principal ao passar pela placa de deflexão horizontal E ₁ . Separação do feixe principal dos feixes espúrios. A placa de deflexão E ₃ funciona de forma similar e por isso não será representada.	48
Figura 3.16: Representação esquemática com vista superior, da deflexão vertical dos feixes após passarem pela câmara de colisão, pelas placas de deflexão vertical E ₂ e E ₃ . Os três feixes incidentes estão no mesmo plano. Cada feixe da origem a outros estados de	

	carga após passar pela câmara de colisão. As placas de deflexão vertical E_2 e E_3 , separam as famílias.....	48
Figura 3.17:	Imagem típica obtida no detector x-y, que mostra a separação dos feixes pelas placas de deflexão eletrostática E_1 , E_2 e E_3 . Em destaque temos: 1 – captura simples (Li^+); 2 – feixe principal (Li^{2+}); 3 – perda simples (Li^{3+}); 4 – espúrio captura simples (Li^+); 5 – espúrio perda simples (Li^{3+}).....	49
Figura 3.18:	Esquema ilustrativo da célula gasosa G_1 – câmara de colisão. A célula gasosa tem comprimento de 120,0 mm, diâmetro de entrada de 2,5 mm e diâmetro de saída de 3,0 mm. A válvula agulha é o mecanismo de injeção do gás alvo.	50
Figura 3.19:	Esquema ilustrativo da interseção de um feixe e a dispersão do jato de gás alvo liberado pela agulha.	51
Figura 3.20:	Sistema de coordenadas do feixe. O eixo y positivo é definido ao longo da direção do feixe, o eixo negativo de z é definido na direção do jato de gás e o eixo positivo x é definido perpendicular e no mesmo plano do feixe.	52
Figura 3.21:	Ilustração do alinhamento do jato gasoso e o feixe de projéteis no eixo x, com a posição da agulha centrada no feixe.....	53
Figura 3.22:	Ilustração do posicionamento do feixe e da agulha no eixo z. Contagens feitas num intervalo de 10 segundos são feitas em função da posição z, identificando a região onde a agulha começa a bloquear o feixe.	54
Figura 3.23:	Imagem ilustrativa do funcionamento do programa VDG na tela do computador.	57
Figura 3.24:	Esquema de montagem dos equipamentos eletrônicos usados para aquisição e leitura dos feixes.	57
Figura 3.25:	Ilustração esquemática (retirada da Ref, [25]) dos componentes usados na aquisição da seção de choque absoluta. Os eixos são definidos da seguinte forma: eixo x positivo na direção axial do espectrômetro, o eixo y positivo na direção ao longo do feixe de projéteis e o eixo z negativo na direção do jato gasoso. Os detectores internos a célula G_2 são: detector de elétrons (elétron detector) e detector de íon de recuo (recoil ion detector); os detectores externos a G_2 são: detector sensível à posição (projectile ion detector – position sensitive detector – PS); um detector barreira de superfície, indicado como SB (surface barrier) e um copo de faraday (faraday cup – FC). O espectrômetro é constituído de dois lados: um lado para o tempo de voo dos elétrons (TOF e-side) e um lado para tempo de voo dos íons de recuo (TOF r-side). Note que, o detector barreira de superfície e o copo de faraday podem se mover no eixo x.....	59
Figura 3.26:	Foto ilustrativa da célula de colisão G_2 (para medidas parciais absolutas).	60
Figura 3.27:	Foto ilustrativa do detector sensível a posição (PS ou detector D), localizado no final da linha. Nesta seção, também conhecida como câmara D (ver Figura 3.2), também está localizado o detector barreira de superfície (SB).	60
Figura 3.28:	Ilustração esquemática do espectrômetro por tempo de voo localizado dentro da câmara de colisão G_2 . Na parte direita	

temos o tempo de voo para os íons de recuo e na parte esquerda o tempo de voo para os elétrons. A ilustração não contém detalhes de montagem do espectrômetro, tampouco representa corretamente as dimensões.	61
Figura 3.29: Esquema ilustrativo da montagem dos equipamentos eletrônicos usados na obtenção dos dados referentes as medidas das seções de choque absolutas.	63
Figura 3.30: Esquema ilustrativo com vista superior da célula gasosa G ₂ , da placa de deflexão eletrostática E ₃ e o do detector barreira de superfície, mostrando as coincidências entre elétron ejetado – íon de recuo e, íon de recuo – estado de carga do projétil.	64
Figura 3.31: Espectro de massa por tempo de voo de ar, onde temos: (a) representa a coincidência entre o elétron ejetado e o íon de recuo (elétron – recuo); (b) representa a coincidência entre íon de recuo e o estado de carga selecionado do projétil (recuo – projétil), produzidos na colisão de projéteis de Li ²⁺ com energia de 1,5 MeV. O canal analisado é de ionização.	66
Figura 3.32: Fração de estados de carga (número de Li ³⁺ detectados/número total de íons incidentes – Li ⁰ + Li ⁺ + Li ²⁺ + Li ³⁺) para Li ²⁺ em Ar a 2,0 MeV em função da pressão na célula gasosa.	71
Figura 3.33: Representação do canal de ionização direta de argônio por próton com energia de 2,0 MeV. Onde: (a) é o espectro referente à coincidência íon recuo – projétil para ionização direta; (b) é a reta de calibração obtida a partir da relação linear entre a razão (m/q) ^{1/2} e o canal.	74
Figura 4.1: Seção de choque total (em Mb ou 10 ⁻¹⁸ cm ²) de Li ⁺ em Ar como função da energia do projétil (0,20 – 2,50 MeV). A seção de choque total de captura eletrônica, σ^{10} , são representados por: triângulo vermelho, este trabalho; triângulo vazio invertido magenta, Dmitriev e colaboradores [73]. A seção de choque total de perda simples, σ^{12} , são: quadrado sólido preto, este trabalho; estrela sólida azul, Dmitriev e colaboradores [73]. A seção de choque total de perda dupla, σ^{13} , são: quadrado vazio preto, este trabalho; estrela vazia azul, Dmitriev e colaboradores [73].	82
Figura 4.2: Seção de choque total (em Mb ou 10 ⁻¹⁸ cm ²) de Li ²⁺ em Ar como função da energia do projétil (0,50 – 3,50 MeV). A seção de choque de captura eletrônica, σ^{21} , são: quadrado preto, este trabalho; triângulo vazio azul, Dmitriev e colaboradores [73]. A seção de choque de perda eletrônica, σ^{23} , são: círculo preto, este trabalho; triângulo vazio invertido magenta, Dmitriev e colaboradores [73]; estrela vazia vermelha, Pivovar e colaboradores [74]; círculo vazio verde, Knudsen e colaboradores [75]. A seção de choque de captura dupla, σ^{20} , são: diamante vazio oliva, Dmitriev e colaboradores [73].	83
Figura 4.3: Seção de choque total de perda eletrônica simples como função da velocidade do projétil, em alvo de Ar. Os projeteis são: círculo vazio púrpuro, He ⁺ da Ref. [19]; quadrado vazio preto, C ³⁺ da Ref. [14]; triângulo vazio invertido azul, C ³⁺ da Ref. [22]; estrela sólida preta, Li ²⁺ este trabalho; estrela vazia verde, Li ²⁺	

- da Ref. [75]; triângulo vazio vermelho, O^{5+} da Ref. [22]; diamante vazio preto, B^{2+} da Ref. [14], e estrela sólida laranja, Li^+ este trabalho.....84
- Figura 4.4: Seção de choque total de captura eletrônica simples como função da velocidade do projétil em unidades atômicas, para diferentes projeteis interagindo com Ar. Os símbolos são: quadrado vazio preto, C^{3+} da Ref. [14]; triângulo vazio invertido azul, C^{3+} da Ref. [22]; estrela sólida preta, Li^{2+} este trabalho; triângulo vazio vermelho, O^{5+} da Ref. [22]; diamante vazio magenta, B^{2+} da Ref. [14]; estrela sólida laranja, Li^+ este trabalho; e asterisco oliva, He^+ da Ref. [34]. Teoria: linha sólida preta, para os dados de Li^{2+} , modelo Bohr-Lindhard [76].85
- Figura 4.5: Seção de choque de perda total (soma da perda simples + perda dupla) como função da energia do projétil. Experimento: quadrado sólido preto, Li^+ , este trabalho. Teoria: linha pontilhada azul, antibrindagem baseada na PWBA [17]; linha tracejada vermelha, blindagem baseada no MCL [18]; e linha sólida preta, seção de choque de perda total (blindagem + antibrindagem).87
- Figura 4.6: Parte (a) Canal de captura simples (CS). Parte (b) canal de transferência e ionização (TI) e, na parte (c) razão TI/CS somente para os projéteis Li^{2+} e He^{2+} , para o alvo de Ar como função da velocidade do projétil em unidades atômicas. Os símbolos são: quadrado sólido preto, Li^{2+} , este trabalho; círculo vazio vermelho, He^+ , da Ref. [34]; triângulo vazio azul, He^{2+} , da Ref. [78]; e diamante vazio laranja, C^{3+} , da Ref. [15].90
- Figura 4.7: Razão entre a seção de choque de transferência e ionização (σ_{TI}) e a seção de choque de captura simples (σ_{CS}), como função do estado de carga, q , do projétil. Alvos são: He, quadrado vazio verde; Ne, círculo vazio laranja; Ar, triângulo azul; Kr, estrela vazio vermelho; e Xe diamante vazio preto. Projéteis são: C^{3+} , das Refs. [15] e [80]; H^+ , He^{2+} e Li^{3+} , da Ref. [61]; He^+ , das Refs. [34] e [79]; He^{2+} , da Ref. [78]; e Li^{2+} , este trabalho. Linha sólida preta, ajuste q^2 das razões para o alvo de He; linha tracejada vermelha, guia para os olhos, delimitando o limite inferior e superior das razões para os alvos de Ne, Ar, Kr, e Xe.....91
- Figura 4.8: Seção de choque parcial absoluta de simples perda eletrônica (em 10^{-18} cm^2) de Li^{2+} em Ar como função da velocidade do projétil em unidades atômicas. Dados experimentais: quadrado vazio preto, soma de todas as seções de choque de ionização – perda, este trabalho; quadrado azul, seção de choque total de perda, este trabalho; triângulo vazio magenta, diferença entre a seção de choque total e a seção de choque de ionização – perda, este trabalho; seção de choque total de perda, estrela sólida vermelha, da Ref. [75]. Teoria: linha sólida preta, soma da blindagem (MCL da Ref. [18]) e antibrindagem (PWBA da Ref. [17]); linha sólida densa verde, soma da blindagem e antibrindagem (PWBA da Ref. [17]); linha pontilhada preta, blindagem (PWBA da Ref. [17]); linha tracejada azul,

	blindagem (MCL da Ref. [18]); linha traço ponto vermelha, antibrindagem da Ref. [17].	95
Figura 4.9:	Seção de choque de ionização simples e dupla de Ar como função do estado de carga, q , do projétil, para a velocidade de colisão $v/v_0 = 3.16$ a.u.. Os símbolos são: H^+ , quadrado vazio preto, Ref. [32]; He^+ , círculo vazio laranja, Ref. [34]; He^+ , triângulo vazio azul, Ref. [35]; He^{2+} , estrela vazia magenta, Ref. [78]; Li^{2+} , quadrado sólido verde, este trabalho; C^{3+} , quadrado vazio vermelho, Ref. [15].	97
Figura 4.10:	Seção de choque de ionização simples de Ar por projéteis duplamente carregados como função da velocidade do projétil (em unidades atômicas). Projéteis são: quadrado vazio verde, He^{2+} , Ref. [78] e triângulo sólido preto, Li^{2+} , este trabalho.	98
Figura 4.11:	Seção de choque de ionização dupla de Ar por projéteis duplamente carregados como função da velocidade do projétil (em unidades atômicas). Projéteis são: quadrado vazio verde, He^{2+} , Ref. [78] e triângulo sólido preto, Li^{2+} , este trabalho.	99
Figura 4.12:	Razão σ_{01}^{qq}/q^2 para alvo de Ar como função da velocidade do projétil (em unidades atômicas). Símbolos são: estrela vazia oliva, H^+ da Ref. [32]; triângulo vazio pra cima azul, He^+ da Ref. [34]; círculo vazio preto, He^+ da Ref. [35]; diamante vazio magenta, H^+ da Ref. [36]; triângulo vazio pra baixo vermelho, H^+ da Ref. [72]; asterisco verde, He^{2+} da Ref. [78]; quadrado cheio vermelho, Li^{2+} este trabalho; quadrado vazio preto, C^{3+} da Ref. [15].	100
Figura 4.13:	Razão s_{ion}/q^2 para Ar como função da velocidade do projétil (em unidades atômicas), com s_{ion} calculado de acordo com a Eq. (4.12). Símbolos são: estrela vazia oliva, H^+ da Ref. [32]; triângulo vazio pra cima azul, He^+ , da Ref. [34]; círculo vazio preto, He^+ da Ref. [35]; diamante vazio magenta, H^+ da Ref. [36]; triângulo vazio pra baixo vermelho, H^+ da Ref. [72]; asterisco verde, He^{2+} da Ref. [78]; quadrado sólido vermelho, Li^{2+} este trabalho; quadrado vazio preto, C^{3+} da Ref. [15].	104
Figura 4.14:	Parte (a) razão entre a seção de choque de captura total (captura simples + dupla) e a seção de choque de perda total (simples + dupla) em Ar como função da velocidade do projétil. Símbolos são: estrela sólida preto, Li^{2+} , este trabalho; estrela sólida vermelho, Li^+ , este trabalho; diamante vazio magenta, C^{3+} , da Ref. [22]; triângulo vazio azul, B^{2+} , da Ref. [14]; quadrado vazio preto, He^+ , com a captura tirada da Ref. [34] e a perda tirada da Ref. [19]. Parte (b), razão entre a seção de choque de captura total (captura simples + dupla) e a seção de choque de perda total (simples + dupla) em ar para uma velocidade $v/v_0 = 1,7$ u.a.. As cores são as mesmas da parte (a).	106

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Distribuição de energia dos íons dentro do tubo do acelerador.....	42
Tabela A.1: Dados experimentais deste trabalho para a seção de choque total de perda eletrônica (σ^{12}), dupla perda (σ^{13}) e captura eletrônica (σ^{10}) (em Mb ou 10^{-18} cm ²) do projétil Li ⁺ em Ar na faixa de energia (E) de 0,20 a 2,50 MeV. Números entre parênteses representam potências de 10.....	109
Tabela A.2: Dados experimentais deste trabalho para a seção de choque total de perda eletrônica (σ^{23}) e captura eletrônica (σ^{21}) (em Mb ou 10^{-18} cm ²) do projétil Li ²⁺ em Ar na faixa de energia (E) de 0,50 a 3,50 MeV. Números entre parênteses representam potências de 10.....	110
Tabela A.3: Seção de choque de múltipla ionização absoluta (em 10^{-18} cm ²) de Ar acompanhado de uma captura simples de um elétron pelo projétil (Li ²⁺), como função da energia E (em MeV). Números entre parênteses representam potências de 10.....	110
Tabela A.4: Seção de choque de múltipla ionização absoluta (em 10^{-18} cm ²) de Ar acompanhado de uma perda simples de um elétron do projétil (Li ²⁺), como função da energia E (em MeV). Números entre parênteses representam potências de 10.....	111
Tabela A.5: Seção de choque de ionização múltipla direta do alvo (em 10^{-18} cm ²) de Ar por projéteis de Li ²⁺ , como função da energia do projétil (em MeV). Número entre parêntese representa potências de 10.....	111
Tabela A.6: Cálculo da seção de choque de captura eletrônica de Li ²⁺ em Argônio, baseado no modelo de Bohr-Lindhard, como função da energia (E) do projétil. Número entre parêntese representa potências de 10.....	112
Tabela A.7: Cálculo da seção de choque total de perda eletrônica de Li ²⁺ em Argônio e, das contribuições da blindagem e antiblindagem, baseado na aproximação de born de ondas planas (PWBA), como função da energia (E) do projétil. Número entre parêntese representa potências de 10.....	113
Tabela A.8: Cálculo da seção de choque total de perda eletrônica de Li ²⁺ em Argônio e, das contribuições da blindagem (baseado no modelo de colisões livres – MCL) e antiblindagem (baseado na aproximação de born de ondas planas – PWBA), como função da energia (E) do projétil. Número entre parêntese representa potências de 10.....	113
Tabela A.9: Cálculo da seção de choque total de perda eletrônica de Li ⁺ em Argônio e, das contribuições da blindagem (baseado no modelo de colisões livres – MCL) e antiblindagem (baseado na aproximação de born de ondas planas – PWBA), como função da energia (E) do projétil. Número entre parêntese representa potências de 10.....	114

LISTA DE SÍMBOLOS

P	Projétil.
A	Alvo.
q	Carga inicial do projétil.
i	Carga final do projétil.
j	Carga inicial do alvo.
k	Carga final do alvo.
Z	Número atômico do projétil.
Z_2	Número atômico do alvo.
σ	Seção de choque.
σ^{qi}	Seção de choque para medida “single”.
σ_{jk}^{qi}	Seção de choque para medida em coincidência.
m	Massa do elétron.
M	Massa do projétil.
I	Energia de ionização do elétron ativo.
v	Velocidade do projétil.
v_0	Velocidade de Bohr.
\vec{Q}	Momento transferido na colisão.
n	Estados do alvo.
s	Estado inicial do projétil.
f	Estado final do projétil.
$F(Q)$	Fator de forma.
Ψ	Função de onda do estado do projétil.
Φ	Função de onda do estado do alvo.
P_{blin}	Probabilidade de ionização de um elétron do projétil pelo núcleo do alvo blindado.
P_{anti}	Probabilidade de ionização de um elétron do projétil pelo elétron do alvo.
P_c	Probabilidade de captura de um elétron do alvo.
b	Parâmetro de impacto.
u_{rms}	Média quadrática da distribuição de velocidades iniciais do elétron do íon incidente.
θ	Ângulo de espalhamento do elétron livre.

β Ângulo entre as velocidades do centro de massa do projétil no referencial do laboratório e do elétron ativo no referencial do projétil.

v_N Velocidade do centro de massa no referencial do laboratório.

ϕ Ângulo entre o plano formado por \vec{v}_N e a velocidade inicial do elétron, e o plano formado por \vec{v}_N e a velocidade final do elétron, todas as velocidades no referencial do laboratório.

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

A compreensão de processos básicos, tais como, perda eletrônica, captura eletrônica e ionização, são a chave para o entendimento do estudo de colisões atômicas envolvendo íons positivos e/ou negativos, ou ainda átomos. Além disso, pode contribuir no desenvolvimento de diversas áreas, como por exemplo, a física de plasmas [1], tecnologia de aceleradores [2], física das atmosferas planetárias [3], radioterapia e dosimetria da radiação [4] e fusão nuclear [5,6].

As condições envolvidas na dinâmica de colisão projétil-alvo, como por exemplo, faixa de energia, estado de carga do projétil e número atômico do alvo, podem afetar os processos ou canais de perda eletrônica, captura eletrônica, ionização direta do alvo e como estes canais estão associados.

A perda eletrônica (na faixa de energia deste trabalho, 0,2 – 3,5 MeV) pode ocorrer basicamente devido aos modos de blindagem (“screening”), antiblindagem (“antiscreening”) [7-12], e o processo de segunda ordem (“Loss Ionization – LI) [11,12] (os quais serão explicados com mais detalhes no Capítulo 2). No modo de blindagem a perda de um elétron do projétil é devido à interação entre o núcleo blindado do alvo e o elétron ativo do projétil, no modo de antiblindagem a perda é devido à interação entre o elétron ativo do alvo e o elétron ativo do projétil e, no processo de segunda ordem, cada um dos núcleos ioniza simultaneamente e independentemente o elétron do parceiro na colisão. Embora esses três modos citados acima possuam origens físicas diferentes, são modos competitivos que podem levar a perda eletrônica do projétil.

Para baixas energias, o canal de captura é dominante em relação ao canal de perda e, a combinação baixa energia e estado de carga do projétil pode favorecer o acoplamento desses canais (perda – captura) num mesmo evento de colisão, mantendo fixo o estado de carga do projétil, antes e depois da colisão. Além disso, para um alvo com muitos elétrons, um acoplamento entre o canal de captura e ionização também deve ser considerado.

Para estudar os canais de perda eletrônica, captura eletrônica e ionização, bem como, os modos de blindagem, antiblindagem e processo de segunda ordem (LI),

podemos usar dois tipos diferentes de medidas (ou duas formas diferentes de medidas): o primeiro tipo de medida, conhecida como seção de choque total absoluta, que consiste na medida do estado de carga inicial e final do projétil, mas sem nenhuma informação do alvo após a colisão. Neste tipo de medida não temos uma medida simultânea do projétil e do alvo após a colisão [13-17], o que dificulta a análise da perda simultânea de elétrons do projétil e do alvo. O segundo tipo de medida, conhecida como seção de choque parcial absoluta, possibilita detectar simultaneamente os produtos da colisão (alvo e projétil, conhecendo o estado de carga do projétil e do alvo antes e depois da colisão), chamada também de medida em coincidência [11,18-22]. Embora as medidas experimentais “totais absolutas” não forneçam informação simultânea do estado de carga do projétil e do alvo, a comparação dessas medidas com descrições teóricas para a blindagem e antiblindagem serviram como base no estudo destes mecanismos, conduzindo os pesquisadores a encontrarem evidências da importância dos mesmos no processo de perda eletrônica.

No processo de perda eletrônica, os elétrons do projétil, além do seu núcleo, podem ionizar o alvo, mas os elétrons do alvo, além do seu núcleo, também podem ionizar o projétil (interação elétron – elétron). O primeiro tratamento quântico feito para determinar a seção de choque inelástica (antiblindagem – contribuição dos elétrons do alvo na ionização do projétil) envolvendo dois átomos, foi feito por Bates e Griffing [23-25]. Outros trabalhos teóricos e experimentais (que serão citados a seguir) foram desenvolvidos ao longo dos anos para entender melhor o mecanismo envolvendo a interação elétron-elétron e elétron-núcleo.

Hülskötter e colaboradores [7,8], estudando a interação elétron-elétron na perda eletrônica do projétil, mediram as seções de choque de perda eletrônica para projéteis de C^{3+} e O^{7+} sobre H_2 e He para energias de 0,75 – 3,5 MeV/nucleon; Li^{2+} , C^{5+} , e O^{7+} sobre H_2 e He; Au^{52+} sobre H_2 , He, C e N_2 ; Au^{75+} sobre H_2 e He; e U^{86+} e U^{90+} colidindo com alvos de H_2 e He para energias de 0,75 – 405 MeV/nucleon, onde foram feitas comparações entre essas medidas experimentais e cálculos teóricos utilizando a PWBA (“Plane Wave Born Approximation” - Aproximação de Born de ondas planas). A comparação (experimento-teoria) usando cálculos baseados somente na contribuição da blindagem forneceu uma curva teórica que, para uma região de energia acima do limiar da antiblindagem, se situa, abaixo dos dados experimentais. Essa diferença na comparação experimento-teoria foi atribuída à contribuição da antiblindagem (interação elétron – elétron). Para os cálculos considerando as interações elétron-elétron

(antiblindagem) e elétron-núcleo (blindagem), os resultados foram bem mais próximos dos dados experimentais. Efeitos similares foram observados por Shah e Gilbody [26] em colisões de Li^+ e Li^{2+} sobre alvos de H, H_2 e He. Estes comportamentos são indícios de que as contribuições da blindagem e antiblindagem devem ser consideradas para representar corretamente a magnitude da seção de choque total de perda eletrônica nos diferentes sistemas de colisão.

Montenegro e colaboradores [11] separaram experimentalmente as contribuições da blindagem e antiblindagem para a perda eletrônica, através das medidas de íons de recuo e o estado de carga emergente nas colisões de He^+ em H_2 e He, onde é possível identificar os estados de carga do projétil (feixe emergente) e do alvo (íons de recuo) simultaneamente após a colisão. Este experimento foi o primeiro a separar sem ambiguidade os modos de blindagem e antiblindagem, onde um bom acordo entre teoria (baseada na PWBA) e experimento foi observado. Além disso, este trabalho também apontou para a existência de outros processos (onde cada um dos núcleos ioniza simultaneamente e independentemente o elétron do parceiro na colisão – ionização dupla), conhecidos como processos associados [12] e que serão estudados no tópico 2.4.

Sant'Anna e colaboradores [27] realizaram estudos da perda eletrônica de He^+ e C^{3+} em H e H_2 na faixa de energia de 0,5 a 3,5 MeV. Os resultados foram analisados com base na aproximação dos elétrons independentes e, para o canal de perda eletrônica é levado em conta às contribuições dos modos de blindagem e antiblindagem. Uma das propostas de estudo deste trabalho é investigar a conexão entre o modo de antiblindagem e a ionização de íons multi-carregados por impacto de elétrons, observando que é possível usar medidas íon-elétron para avaliar a contribuição da antiblindagem na medida da seção de choque total de perda e que, para a perda eletrônica total, um bom acordo experimento-teoria é obtido quando a contribuição elétron-elétron (antiblindagem) é levado em conta.

Wolff e colaboradores [17] em seu estudo de B^{2+} e C^{3+} colidindo com alvo de Ne e Ar, mostrou que um melhor acordo entre experimento-teoria é obtido quando os modos de blindagem e antiblindagem são levados em conta no cálculo da seção de choque total de perda.

Santos e colaboradores [20,21] em trabalhos recentes fizeram medidas da seção de choque parcial absoluta para a perda eletrônica, captura eletrônica e múltipla ionização do alvo em colisões de He^+ e C^{3+} em gases nobres, onde as contribuições da

blindagem e antiblindagem foram comparadas com teoria baseada na PWBA [28] e MCL (Modelo de colisões livres) [29], mostrando um bom acordo experimento-teoria.

Para alvos leves (número atômico baixo), a teoria perturbativa de 1ª ordem (PWBA) descreve satisfatoriamente os modos de blindagem e antiblindagem, bem como a seção de choque total de perda eletrônica. À medida que aumentamos o número atômico do alvo (Z_2), torna-se necessário empregar teorias ou modelos não perturbativos para descrever a contribuição da blindagem, como mostrado no trabalho de Sant'Anna e colaboradores [14]. Tratamentos não perturbativos para a contribuição da blindagem foram feitos por outros autores como, por exemplo, Grande e colaboradores [30], Voitkiv e colaboradores [31], Melo e colaboradores [16], Wolff e colaboradores [17], Santos e colaboradores [20,21], que mostraram uma melhor descrição do modo de blindagem e, conseqüentemente da seção de choque total de perda eletrônica.

Além do número atômico do alvo, fatores como a faixa de velocidades (energia) e o estado de carga do projétil podem influenciar tanto nos mecanismos que podem levar a perda eletrônica do projétil, quanto na medida da seção de choque e conseqüentemente na comparação experimento-teoria. Montenegro e colaboradores [32], mostraram que para altas energias o modo de antiblindagem é dominante para ambos os alvos (leves ou pesados) e a interação elétron-elétron tem um papel importante no processo de perda do projétil seguida de ionização do alvo. Para baixas energias, além dos modos de blindagem e antiblindagem, o processo de perda com ionização ("Loss Ionization – LI"), também pode contribuir para a perda eletrônica do projétil [11,12]. Além disso, em baixas energias, o processo de perda com transferência ("Transfer Loss – TL"), que é a perda seguida da captura eletrônica no mesmo evento de colisão [33] e é um processo que pode ser influenciado pelo estado de carga do projétil, pode interferir na medida da seção de choque total de perda eletrônica.

À medida que o número de elétrons do alvo aumenta e/ou dependendo da faixa de energia do projétil, novas possibilidades no processo de interação projétil-alvo podem aparecer, necessitando de teorias cada vez mais complexas e que englobam o maior número de processos físicos envolvidos. Trabalhos experimentais como este, contribuem para o entendimento de processos que podem ocorrer na interação projétil-alvo, auxiliando os trabalhos teóricos para a correta descrição do problema.

A escolha de um projétil com estado de carga, +1 e +2, Li^+ e Li^{2+} , respectivamente, está relacionada a diversas razões, como por exemplo, ao fato de

existir na literatura estudos conhecidos de diferentes projéteis, H^+ , He^+ , He^{2+} , C^{3+} e O^{5+} , interagindo com o mesmo alvo de Argônio [20,21,34-38]. Também, pela análise separada dos canais de perda, captura e ionização para um alvo fixo é possível identificar como esses canais são afetados por diferentes projéteis com diferentes estados de carga. Além disso, é possível observar como o estado de carga do projétil pode contribuir para o acoplamento dos canais competitivos (perda e captura eletrônica), num mesmo evento de colisão, para uma dada faixa de velocidades.

As medidas feitas neste trabalho permitem analisar e compreender os mecanismos competitivos (blindagem, antiblindagem e o processo de segunda ordem - LI) que podem levar a perda eletrônica do projétil, a faixa de energia em que cada mecanismo é dominante e como essa dinâmica de colisão, mecanismo competitivo – faixa de energia, pode influenciar no acoplamento de canais competitivos (perda, captura e ionização), interferindo na medida do estado de carga final do projétil e alvo após a interação. É possível observar como o estado de carga do projétil pode favorecer o acoplamento entre os canais de perda e captura eletrônica num mesmo evento de colisão e, que este acoplamento é mais provável para baixas energias, onde a captura é o canal dominante em relação à perda. Os resultados experimentais para a perda eletrônica são comparados com modelos teóricos baseados na PWBA (“Plane Wave Born Approximation” - Aproximação de Born de Ondas Planas) [28] e no MCL (Modelo de Colisões Livres) [29], publicados recentemente no trabalho de Losqui e colaboradores [39], para o projétil Li^{2+} .

A apresentação deste trabalho é dividida da seguinte maneira: No Capítulo 2 será apresentado um breve histórico do estudo da perda eletrônica do projétil em colisões com alvos leves e pesados e, algumas definições pertinentes para compreensão dos termos usados neste trabalho. No Capítulo 3 serão descritos detalhes da experiência realizada no Laboratório de Colisões Atômicas e Moleculares (LaCAM) da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ). No Capítulo 4 serão apresentados os resultados experimentais e comparações com previsões teóricas. No Capítulo 5 serão apresentadas as conclusões e, algumas perspectivas de trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

2. DESCRIÇÃO TEÓRICA

2.1. CONCEITOS ENVOLVENDO PERDA, CAPTURA E IONIZAÇÃO

O aprofundamento no estudo de colisões atômicas torna necessário o uso de novos conceitos, novos termos e também uma notação. Esta seção é destinada à apresentação dos termos utilizados no decorrer deste trabalho.

Os projéteis usados neste trabalho são íons de lítio, ${}^7\text{Li}^+$ e ${}^7\text{Li}^{2+}$, com massa ≈ 7 u.m.a. (unidade de massa atômica) e estado de carga $q = +1$ e $q = +2$, respectivamente. Para simplificar a notação, daqui em diante, os íons serão simplesmente denotados como Li^+ e Li^{2+} .

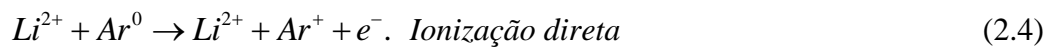
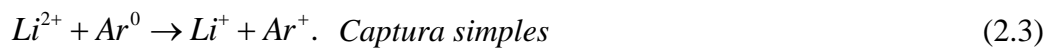
A análise de uma interação atômica entre íons e átomos pode resultar em processos ou reações tais como: perda eletrônica do projétil, captura eletrônica do projétil ou simplesmente ionização direta do alvo. Podemos interpretar a reação de perda eletrônica como sendo um processo no qual um íon interage com um alvo atômico ou molecular e pelo menos um elétron é ejetado do projétil como resultado desta interação. A reação de captura eletrônica pode ser interpretada como sendo um processo no qual um íon interage com um alvo atômico ou molecular e pelo menos um elétron do alvo é arrancado (capturado) pelo projétil. E por ultimo, a ionização direta do alvo pode ser interpretada como sendo um processo no qual um íon interage com um alvo atômico ou molecular e pelo menos um elétron do alvo é liberado.

Se um projétil P , de carga inicial q , colide com um alvo neutro A , podemos em geral representar esses processos de mudança de carga como,

$$P^q + A^0 \rightarrow P^i + A^k + (i+k-q)e^-, \quad (2.1)$$

onde q e i podem assumir valores de -1 a Z (número atômico do projétil), k pode assumir valores de 0 a Z_2 (número atômico do alvo) e por ultimo, $(i+k-q)$ é o número de elétrons liberados no processo.

As reações a seguir ilustram os processos de perda simples, captura simples e ionização direta simples, respectivamente, para o íon Li^{2+} . Como inicialmente o alvo está neutro, o estado de carga inicial será representado por zero (0).



Estas reações (Eqs. 2.2 – 2.4) estão ilustradas respectivamente, na Figura 2.1, Figura 2.2 e Figura 2.3 a seguir.

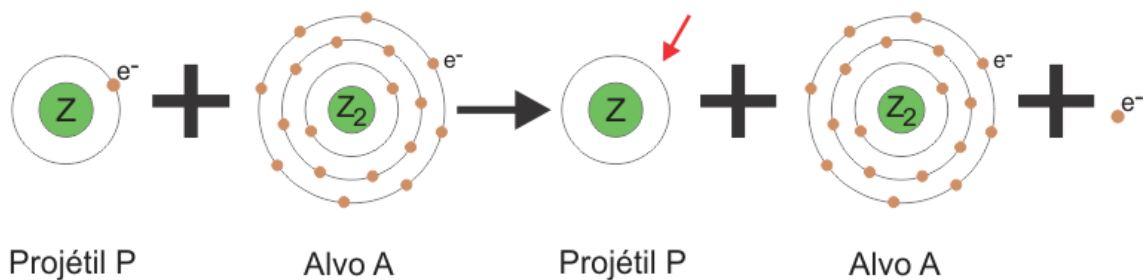


Figura 2.1: Representação esquemática para ilustrar o processo de perda eletrônica pelo projétil, cuja reação está na Equação (2.2). A seta vermelha indica a possível localização do elétron que foi perdido.

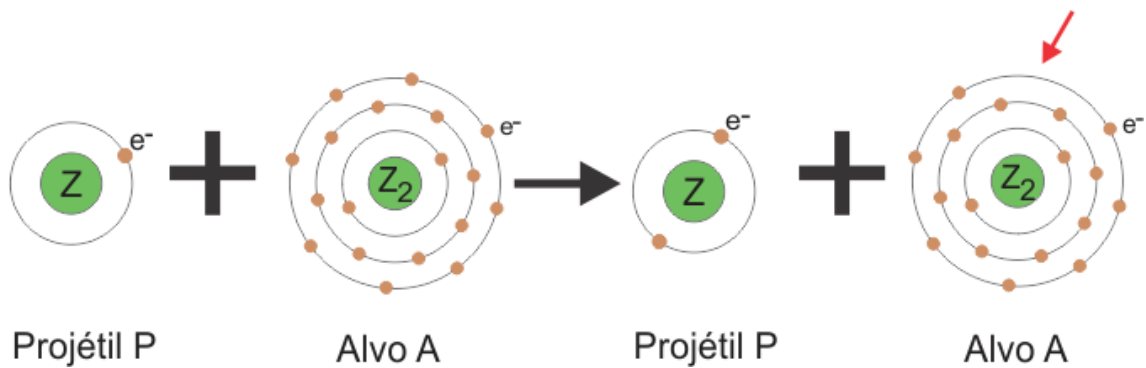


Figura 2.2: Representação esquemática para ilustrar o processo de captura eletrônica pelo projétil, cuja reação está na Equação (2.3). A seta vermelha indica a possível localização do elétron que foi capturado.

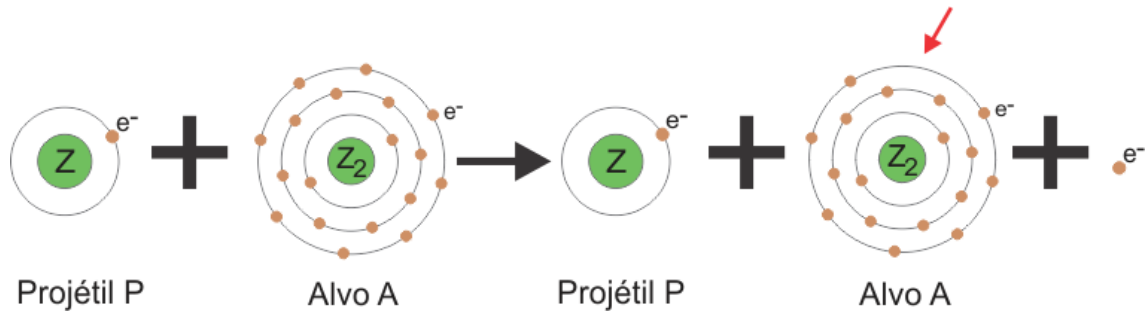


Figura 2.3: Representação esquemática para ilustrar o processo de ionização direta do alvo, cuja reação está na Equação (2.4). A seta vermelha indica a possível localização do elétron que foi removido do alvo.

Em geral, para processos apresentados como na Equação (2.1) temos uma seção de choque correspondente dada por σ_k^{qi} , que tem uma dependência da observação dos estados de carga inicial e final do projétil, além da observação do estado de carga final do alvo (uma vez que o estado inicial do alvo é neutro).

Quando conseguimos identificar somente o estado inicial e final do projétil, a seção de choque medida leva em conta todos os possíveis estados finais do alvo, sendo conhecida como seção de choque total e dada por:

$$\sigma^{qi} = \sum_k \sigma_k^{qi}. \quad (2.5)$$

onde, q e i , representa o estado de carga inicial e final do projétil, respectivamente e, k representa o estado de carga final do alvo.

Mais detalhes das medidas das seções de choque serão fornecidos no Capítulo 3; por agora, essas informações são suficientes para introduzir a notação utilizada no texto.

2.2. BLINDAGEM E ANTIBLINDAGEM

No estudo de colisões atômicas, projétil e alvo podem interagir de diversas formas e, o tipo de interação depende fortemente da estrutura atômica do projétil e da região de velocidade estudada. Os projéteis completamente despidos de elétrons (“nus”, como por exemplo, H^+ , He^{2+} , Li^{3+}) podem: excitar, ionizar ou capturar elétrons do alvo e a interação preponderante é a coulombiana entre o núcleo do projétil e os elétrons do

alvo [40]. Porém, na natureza existem projéteis com estrutura (projéteis vestidos, como por exemplo, He^+ , Li^+ , Li^{2+} , C^{3+}), que tornam o problema mais complicado, pois passamos a ter interação dos elétrons do projétil com os elétrons do alvo, fornecendo novas possibilidades.

Levando em conta a interação projétil-alvo (ambos carregados), podemos ter, em primeira ordem, dois modos dominantes para que o processo de perda eletrônica ocorra. O primeiro é considerar uma interação coulombiana entre o núcleo do alvo (com número atômico Z_2) e um elétron do projétil, sendo que o campo nuclear do alvo é atenuado pela blindagem causada por seus elétrons, assim, os elétrons do alvo permanecem em seu estado inicial. Uma consideração sobre esse modo (chamado blindagem) é que sua eficiência não é a mesma para todos os parâmetros de impacto (ver Figura 2.4) para o qual a perda eletrônica pode ocorrer [41]. Para colisões mais próximas (parâmetro de impacto menor) a probabilidade de perda (com o alvo blindado) é dominante e diminui à medida que aumentamos o parâmetro de impacto [31].

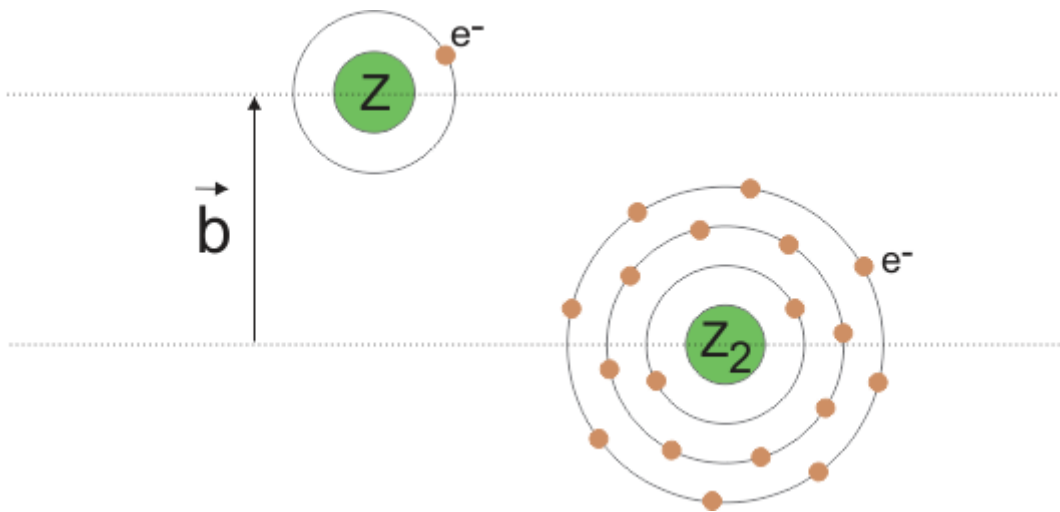


Figura 2.4: Ilustração do parâmetro de impacto, \vec{b} , que é a distância internuclear de separação projétil-alvo. A unidade do parâmetro de impacto é dada em u.a. (unidade atômica).

O segundo modo considera que um dos elétrons do alvo também atua como agente ionizante. Este modo contém uma diferença importante entre a ionização causada por uma partícula sem estrutura (sem elétrons) e por um átomo neutro, pois nesse modo (chamado antiblindagem), a perda eletrônica do projétil é devida somente à interação elétron-elétron, com os núcleos do projétil e do alvo agindo apenas como observadores e não participando diretamente da interação. Como a interação é somente elétron-

elétron, a energia necessária para ionizar os dois elétrons tem que vir da energia de translação relativa dos elétrons do alvo e do projétil,

$$\frac{mv^2}{2} \geq I_P + I_A, \quad (2.6)$$

onde m é a massa do elétron, v a velocidade relativa de translação, I_P e I_A são as energias de ionização dos elétrons ativos do projétil e do alvo, respectivamente. Esta desigualdade mostra que a contribuição elétron-elétron para a perda eletrônica tem um limiar com respeito à energia do projétil dado por [42]

$$E \cong \left(\frac{M}{m} \right) (I_P + I_A), \quad (2.7)$$

onde M é a massa do projétil. Este limiar é importante para o processo, pois a seção de choque total de perda passa a ter uma contribuição adicional para energias acima do limiar, devido à adição desta seção de choque a aquela da interação núcleo-elétron. Para baixas velocidades, a contribuição da interação elétron-elétron para a perda eletrônica deve ser reduzida, pois o elétron do alvo não tem energia cinética suficiente para ionizar o elétron do projétil. Outro fato a se destacar é que para colisões distantes (parâmetro de impacto maior) a probabilidade de perda devido à interação elétron-elétron é dominante [31].

Esses dois modos ou processos descritos acima são denominados, respectivamente, de blindagem e antiblindagem (“screening” e “antiscreeing”) [9,28,42,43]. Uma representação esquemática desses dois modos é apresentada na Figura 2.5, ilustrando a interação de um íon (projétil com um elétron) com um alvo neutro. Nesta Figura é adotado o referencial do projétil durante a interação, mostrando na parte (a) a blindagem, onde o núcleo do alvo é totalmente blindado por seus elétrons externos e, a interação é entre o elétron ativo do projétil e o alvo com carga nuclear efetiva Z_{ef} . Na parte (b) a antiblindagem, onde a interação é entre o elétron ativo do projétil e o elétron ativo do alvo.

Diversas formas possíveis de interação elétron-elétron foram discutidas por Stolterfoht [44] em uma colisão, onde foi classificado que a antiblindagem é uma

correlação de espalhamento de dois centros, enquanto que a blindagem foi classificada como uma interação de um elétron. Terminologia também usada por outros autores [28,45].

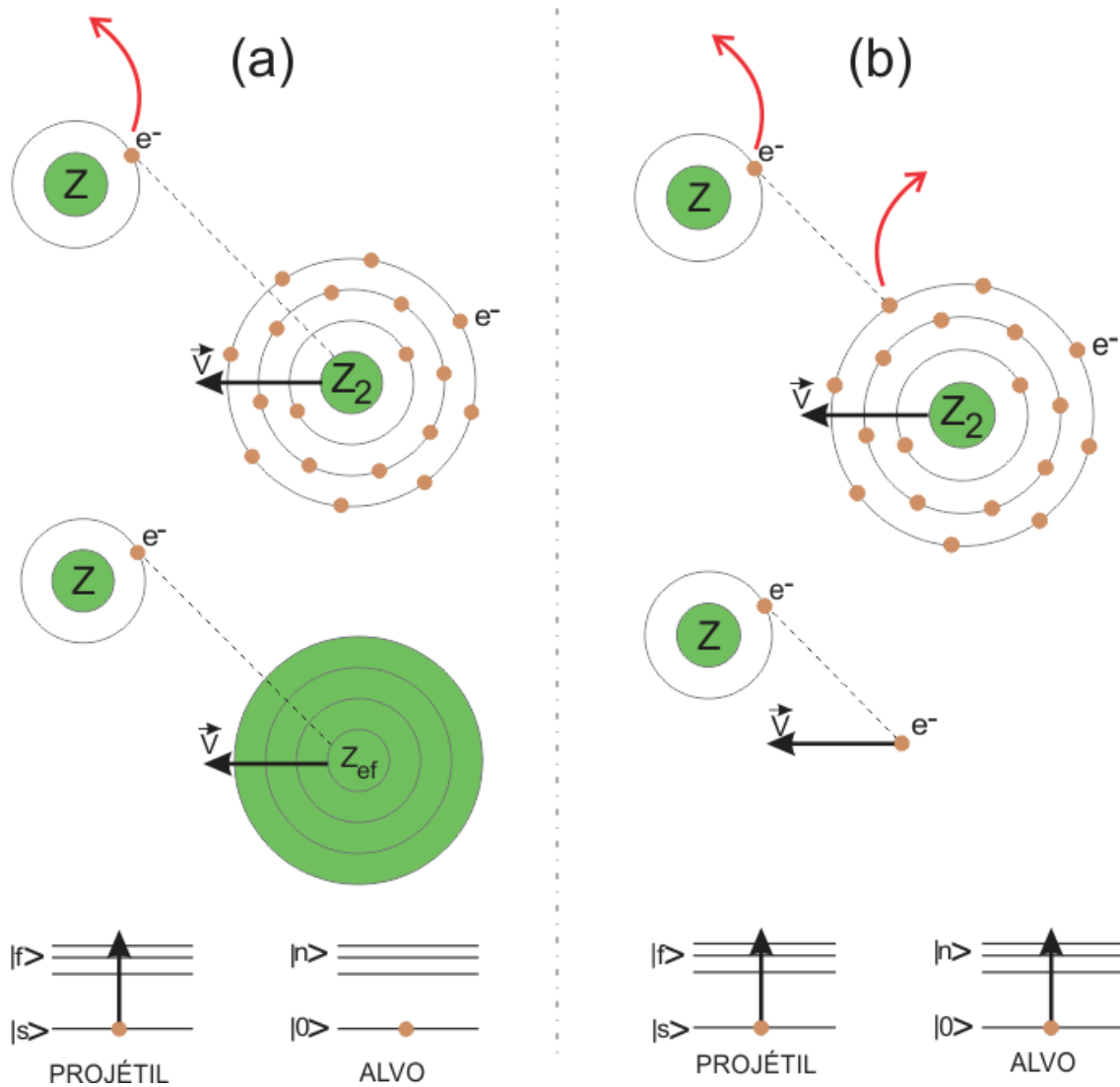


Figura 2.5: Parte (a), representação da perda eletrônica do projétil, no referencial do projétil, como o resultado de uma interação do núcleo blindado do alvo com o elétron ativo do projétil. O elétron ativo do projétil faz uma transição de um estado inicial s para o contínuo, enquanto os elétrons do alvo permanecem no estado fundamental, este processo é chamado de blindagem. Na parte (b), a mesma consideração de referencial é feita, mas agora para uma interação elétron-elétron. O elétron ativo do projétil vai de um estado s para o contínuo e o elétron ativo do alvo, simultaneamente, vai de um estado 0 para o estado n , este processo é chamado de antiblindagem.

2.3. DESCRIÇÃO TEÓRICA DOS MODOS DE BLINDAGEM E ANTIBLINDAGEM

O objetivo principal deste trabalho não é se aprofundar nos cálculos dos tratamentos teóricos, mas sim entender o processo físico envolvido nas aproximações, para poder compreender a comparação experimento-teoria. Sendo assim, a descrição teórica que vem a seguir será feita de uma maneira mais direta e sucinta, abordando o foco de interesse.

Os dois tópicos a seguir, 2.3.1 e 2.3.2, serão destinados à apresentação de forma sucinta das aproximações teóricas usadas no cálculo das seções de choque total de perda eletrônica.

2.3.1. APROXIMAÇÃO DE BORN DE ONDAS PLANAS

Bates e Griffing [23-25], introduziram o tratamento quântico das interações elétron-elétron, estudando colisões H + H. A teoria desenvolvida por eles é baseada na aproximação de Born de ondas planas (“Plane Wave Born Approximation” – PWBA), em que a seção de choque pode ser expressa como dois fatores de forma, onde um, relaciona o estado inicial e final do projétil e o outro, relaciona o estado inicial e final do alvo. Com a inclusão da interação elétron-elétron, a ionização (ou excitação) do projétil e do alvo tem um papel importante na teoria, tornando necessária a consideração de todos os possíveis estados excitados do alvo para determinar a seção de choque total de perda (ionização do projétil).

Para simplificar, vamos supor um projétil carregado com apenas um elétron (a extensão para projeteis com mais elétrons pode ser feita se os efeitos de coerência entre os elétrons do projétil são desprezados [8]), sua seção de choque, σ_{sf} , para ionização ou excitação deste elétron na PWBA não relativística é dada por [28]

$$\sigma_{sf} = \frac{8\pi}{(v/v_0)^2} \sum_n \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} dQ \frac{1}{Q^3} |F_{sf}(Q)|^2 |F_{0n}(Q)|^2, \quad (2.8)$$

onde v é a velocidade do projétil, $v_0 = e^2 / \hbar$ é a velocidade de Bohr, n representa os estados (fundamental e excitados, incluindo o contínuo) do alvo, s e f representam os estados iniciais e finais do projétil, 0 e n representam os estados inicial e finais do alvo, Q é o momento transferido para o elétron do projétil, $F_{sf}(Q)$ e $F_{0n}(Q)$ são os fatores de forma do projétil e do alvo, representados respectivamente, por [28]

$$F_{sf}(Q) = \langle \psi_f | e^{iQr} | \psi_s \rangle, \quad (2.9)$$

$$F_{0n}(Q) = \langle \phi_n | Z_2 - \sum_i e^{iQr_i} | \phi_0 \rangle, \quad (2.10)$$

onde $\psi_f(r)$ e $\psi_s(r)$ representam os estados final e inicial do projétil, ϕ_n e ϕ_0 o estado final e inicial do alvo, r_i é a coordenada do i -ésimo elétron do alvo. O momento mínimo e máximo transferido pode ser dado por [28]

$$Q_{\min} = \frac{E_f - E_s + E_n - E_0}{\hbar v}, \quad (2.11)$$

$$Q_{\max} = \infty, \quad (2.12)$$

onde E_f , E_s , E_n e E_0 são, respectivamente, as correspondentes energias para estes estados (finais e iniciais) para projétil e alvo.

Uma consideração importante neste caso, assim como feito por Montenegro e Meyerhof [28], é que, o estado final do alvo não é observado (seção de choque total) e, conseqüentemente, a soma na Equação (2.8) que é sobre todos os possíveis estados n do alvo, vai influenciar o fator de forma $F_{0n}(Q)$ dado pela Equação (2.10), que envolve funções de onda dos estados fundamental, excitados ou do contínuo para os elétrons do alvo. E, para que a seção de choque na Equação (2.8) seja calculada, todas estas funções de onda devem ser conhecidas. Bates e Griffing [23-25] em seu tratamento de H + H, conheciam analiticamente todos os possíveis estados excitados e o resultado pôde ser obtido. Entretanto para alvos mais complexos, como átomos multieletrônicos ou moléculas, a solução se torna mais complexa.

Para resolver o problema quando o alvo tem dois ou mais elétrons (alvos mais complexos) é necessário fazer uma aproximação com relação à energia envolvida no momento transferido, considerando uma energia de excitação média para o cálculo de Q_{\min} que aparece na integral da Equação (2.8) e é dado pela Equação (2.11). Com o uso dessa aproximação e da relação de fechamento (“closure”), mostrado em detalhes nos trabalhos de McGuire [9] e Anholt [10], onde as energias referentes ao alvo (E_n e E_0) são desprezadas e, podemos inverter a ordem entre o somatório e a integral. Aplicando a relação de fechamento (“closure”) [6], podemos escrever o somatório do fator de forma como,

$$\sum_n \left| \langle \phi_n | Z_2 - \sum_i^N e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} | \phi_0 \rangle \right|^2 = [Z_2 - F_{00}(Q)]^2 + [N - |F_{00}(Q)|^2] \quad (2.13)$$

com

$$F_{00}(Q) = \langle \phi_0 | \sum_i^N e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} | \phi_0 \rangle, \quad (2.14)$$

onde N é o número total de elétrons do alvo.

O procedimento na determinação da média do momento mínimo transferido ao alvo é considerado com mais detalhes por Montenegro e Meyerhof [28] e, depende da energia de excitação dos elétrons do alvo, de modo que se obtenha uma aproximação mais consistente para a seção de choque de ionização do projétil. Denomina-se este procedimento de “método da regra de soma estendida” e, tem a mesma filosofia do método de fechamento, que pretende evitar que se levem em conta todos os estados excitados possíveis do alvo individualmente.

A aproximação com relação à energia envolvida no momento transferido feita para alvos com dois ou mais elétrons simplifica o cálculo da seção de choque total de perda, pois agora precisamos saber apenas o fator de forma do alvo que envolve as funções de onda do estado fundamental (ver Eqs. (2.13) e (2.14)) e não precisamos das funções de onda que envolvem os estados excitados, ou contínuo do alvo. Porém, esta aproximação é mais fiel apenas onde à energia do projétil é suficientemente alta [10]. Isto ocorre porque a aproximação despreza as diferenças de energia entre várias

transições possíveis no alvo quando se têm interação elétron-elétron e é definido um valor médio para a energia transferida. Dessa forma, podemos concluir que o uso desta aproximação simplifica os cálculos e, superestima a contribuição elétron-elétron para a perda em velocidades intermediárias e baixas; e em altas velocidades a aproximação tende a um bom acordo com os resultados experimentais.

Analisando fisicamente a Equação (2.13), os dois termos da direita podem ser interpretados respectivamente, da esquerda para direita, como a ionização pelo núcleo blindado do alvo (blindagem) e a ionização de um dos N elétrons do alvo (antibindagem). Uma análise mais apurada desses termos, levando em conta um alvo pesado, por exemplo, indica que, com o aumento do número atômico, o primeiro termo da direita cresce com $(Z_2)^2$, aumentando muito a intensidade do campo e, como consequência a intensidade da perturbação aumenta e os métodos perturbativos começam a apresentar limitações para descrever esse termo que representa a blindagem. Por outro lado, o segundo termo cresce com o número de elétrons, mas não com o quadrado, de forma que os métodos perturbativos continuam eficientes e sendo usados no cálculo deste termo que representa a antibindagem à medida que aumentamos o número atômico do alvo. A seção de choque total de perda será calculada como a soma de duas parcelas, a parcela da blindagem mais a parcela da antibindagem.

Outra interpretação para os modos de blindagem e antibindagem pode ser fornecida com base na análise do parâmetro de impacto [46-49]. Mostrando que as probabilidades de perda por blindagem e antibindagem são dependentes do parâmetro de impacto (distância internuclear) e, para o caso onde foi usada uma aproximação semiclássica baseada em teoria de perturbação dependente do tempo [46-48], os resultados obtidos para a seção de choque total são similares aos resultados obtidos pela PWBA.

Os cálculos referentes à seção de choque total de perda baseada na PWBA para os modos de blindagem e antibindagem, neste trabalho, foram publicados recentemente no trabalho de Losqui e colaboradores [39].

2.3.2. MODELO DE COLISÕES LIVRES

Uma aproximação teórica também utilizada para descrever a perda eletrônica, conhecida como o modelo de colisões livres – MCL (“free collision model”), ou aproximação clássica de impulso (“classical impulse approximation”) [29,50-55], consiste de um modelo semi-clássico para o cálculo da seção de choque de perda eletrônica [29].

Esta aproximação (modelo de colisão livres) executa os cálculos teóricos com base na extensão que foi desenvolvida e aplicada por Melo e colaboradores [16], da aproximação de impulso clássico de colisões livres (free-collision classical-impulse approximation), desenvolvida por Riesselmann e colaboradores [55], que também é uma extensão do modelo semi-clássico de colisões livres [50,53,56]. A ideia básica é tratar o elétron ativo do projétil como um elétron livre com uma velocidade que é a soma das velocidades do centro de massa do projétil e aquela do elétron ligado ao projétil. Basicamente, temos que o elétron do projétil é espalhado elasticamente por um átomo-alvo com a mesma seção de choque de espalhamento de um elétron livre. Durante a colisão, temos um momento transferido ao elétron ativo do projétil, tal que, o elétron adquira energia suficiente para ser ionizado. Isto implica numa restrição na configuração cinemática, exigindo um ângulo de espalhamento do elétron livre maior do que um ângulo crítico θ_c . Quanto à velocidade do elétron ativo do projétil, ela é considerada como sendo a média quadrática da distribuição de velocidades iniciais do elétron do íon incidente (projétil), u_{rms} .

Este modelo foi aplicado por Riesselmann e colaboradores [55] para avaliar a contribuição da blindagem para a perda eletrônica, obtendo seções de choque de perda de H(1s), perda simples e dupla de projétil H colidindo com alvos gasosos. Outros pesquisadores como, Melo e colaboradores [16], Santos e colaboradores [20,21], aplicaram este modelo pra projéteis mais pesados como He⁺, C³⁺ e O⁵⁺ colidindo com gases nobres.

A expressão para a seção de choque total de perda eletrônica como uma função da velocidade do centro de massa no referencial do laboratório, v_N , no modelo de colisões livres é dada por [29]

$$Q(v_N) = \frac{1}{2} \sum_j \int_0^\pi (\sin\beta) d\beta \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\theta_c}^\pi \sigma_j(v_N, \theta) \sin\theta d\theta, \quad (2.15)$$

onde θ é o ângulo de espalhamento do elétron livre, θ_c é o ângulo crítico que surge da condição cinemática mencionada anteriormente, β é o ângulo entre as velocidades do centro de massa do projétil no referencial do laboratório e do elétron ativo no referencial do projétil, ϕ é o ângulo entre o plano formado por \vec{v}_N e a velocidade inicial do elétron e o plano formado por \vec{v}_N e a velocidade final do elétron, com todas as velocidades no referencial do laboratório. Na Figura 2.6 temos uma representação destas velocidades tirada da Ref. [29]. E, por último, temos $\sigma_j(v_N, \theta)$ que é a seção de choque diferencial de espalhamento do elétron para o processo j em um ângulo θ para um elétron com velocidade incidente v_N em um alvo qualquer. Neste modelo, os elétrons do alvo permanecem no estado fundamental e a aplicação é restrita a considerar somente o espalhamento elástico do elétron livre, assim o modo de blindagem é o mecanismo dominante.

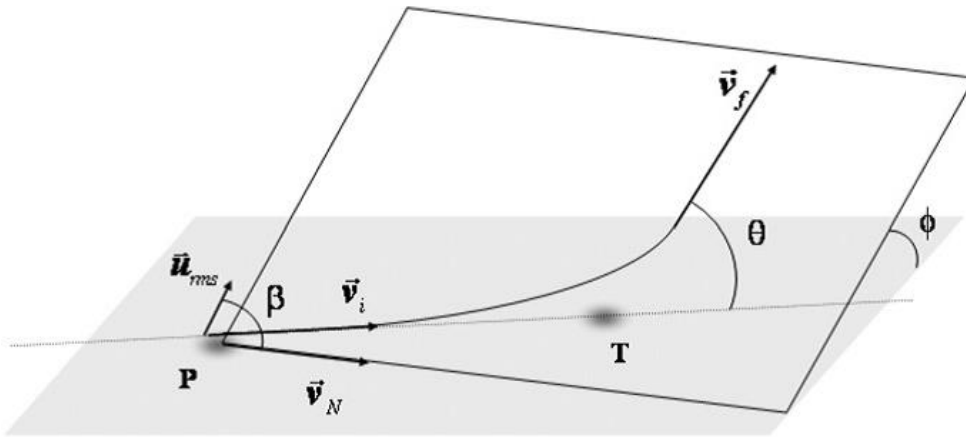


Figura 2.6: Representação das velocidades e ângulos do modelo de colisões livres, onde: \vec{v}_N representa a velocidade do centro de massa do projétil no referencial do laboratório; \vec{u}_{rms} é a velocidade do elétron ativo do íon incidente no referencial do projétil; \vec{v}_i é a velocidade inicial do elétron ativo no referencial do laboratório; \vec{v}_f é a velocidade final do elétron espalhado no referencial do laboratório; β é o ângulo entre \vec{v}_N e \vec{u}_{rms} ; θ é o ângulo entre \vec{v}_i e \vec{v}_f ; e ϕ é o ângulo entre os planos formados pelas velocidades \vec{v}_N e \vec{v}_i , e \vec{v}_N e \vec{v}_f .

O ângulo crítico e a seção de choque de perda eletrônica com a contribuição do modo da blindagem podem ser expressos, respectivamente, por [29]

$$\theta_c(x) = \frac{u_{rms}}{v_N} [(1+x^2)^{1/2} - x], \quad (2.16)$$

onde $x = \text{sen}\beta \cos \phi$.

$$\sigma_{\text{blin}}(v_N) = \pi \int_{-1}^1 dx \int_{\theta_c(x)}^{\pi} \sigma_{\text{el}}(v_N, \theta) \text{sen} \theta d\theta, \quad (2.17)$$

onde $\sigma_{\text{el}}(v_N, \theta)$ é a seção de choque diferencial para espalhamento elástico de um elétron livre com velocidade v_N . As funções $\sigma_{\text{el}}(v_N, \theta)$ da equação acima são interpolações das seções de choque diferenciais elásticas de espalhamento eletrônico por gases nobres calculadas por Adibzadeh e Theodosiou [57].

Os cálculos referentes à seção de choque total de perda eletrônica, neste trabalho, baseada no MCL, para o modo de blindagem foram publicados recentemente no trabalho de Losqui e colaboradores [39].

2.4. MODOS DE BLINDAGEM, ANTIBLINDAGEM E PROCESSOS ASSOCIADOS

Além dos mecanismos de blindagem e antiblindagem que contribuem para a seção de choque total de perda eletrônica, é possível que se tenha uma combinação de interações que também levem a perda eletrônica do projétil e a ionização do alvo (podendo ser uma ionização mútua projétil-alvo, ou não) [11,12]. Na Figura 2.7 tem-se uma representação da interação entre um projétil com apenas um elétron (He^+) e um alvo com dois elétrons (He), por exemplo. A velocidade do projétil é representada simbolicamente pela letra \mathbf{V} .

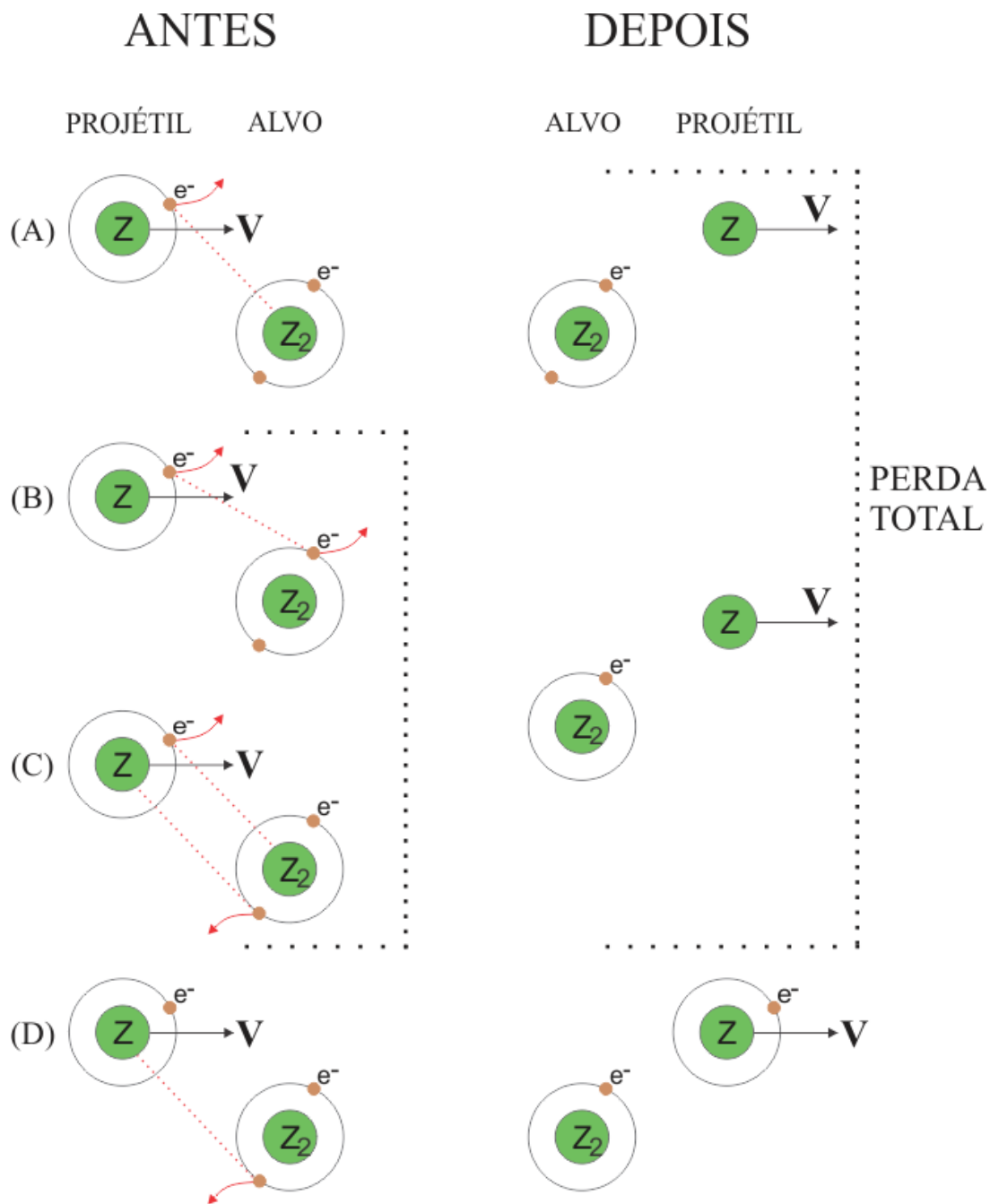


Figura 2.7: Representação dos mecanismos envolvidos num processo de interação íon – átomo. (A) representa o mecanismo de blindagem; (B) representa o mecanismo de antiblindagem; (C) representa a ionização simultânea e independente do projétil e do alvo; (D) representa a ionização direta do alvo pelo núcleo do projétil, onde o projétil não perde elétrons. Os três processos (A), (B) e (C) resultam na perda total de elétrons do projétil.

Com base na Figura 2.7, pode-se observar que:

(A) representa o mecanismo de blindagem no processo de interação, onde ocorre à ionização do projétil pelo núcleo blindado do alvo.

(B) representa o mecanismo de antiblindagem no processo de interação, onde ocorre à ionização do elétron do projétil e do elétron do alvo via interação elétron-elétron.

(C) representa um processo que ocorre em duas etapas ou um processo de segunda ordem, onde cada um dos núcleos ioniza simultaneamente e independentemente o elétron do vizinho ou parceiro na colisão. De modo que o processo (B) e (C) são indistinguíveis, pois ambos geram estados de carga finais idênticos.

(D) representa a ionização simples direta do alvo pelo núcleo do projétil.

De forma resumida, os processos (A), (B) e (C) representam a perda total do projétil e, o processo (D) representa a ionização do alvo.

Da observação desses processos associados à perda eletrônica, tem-se que a ionização mútua projétil-alvo no mesmo evento de colisão, pode ser devido ao mecanismo de antiblindagem (interação elétron-elétron) ou pela interação de segunda ordem núcleo-elétron como mostrado no processo (C), na Figura 2.7. Essa interação de segunda ordem pode levar a uma perda do projétil com a ionização simultânea do alvo (LI – “Loss Ionization”), que também pode ser chamada de uma ionização dupla (DI – “Double Ionization”) [12]. Embora esses processos não possam ser separados neste trabalho, eles contribuem para a seção de choque total de perda eletrônica e tem que ser levados em conta nos cálculos teóricos, a fim de gerar um melhor acordo experimento-teoria.

O processo (C) na Figura 2.7, que leva a uma perda e ionização simultânea (LI) pode ser visto também como um mecanismo de blindagem de segunda ordem. No processo LI, a perda do projétil e a ionização do alvo se deve a ação simultânea dos potenciais nucleares blindados do alvo e do projétil.

Abaixo do limiar da antiblindagem, o mecanismo dominante para perda do projétil seguida de ionização do alvo é o processo de segunda ordem (LI), conforme mostrado nas referências [11,12]. A interação elétron-elétron compete com o modo de blindagem para a perda eletrônica do projétil, tornando-se o mecanismo dominante para a ionização simultânea projétil-alvo para altas energias [11,12].

2.5. PERDA E CAPTURA SIMULTÂNEAS, DEPENDÊNCIA COM O ESTADO DE CARGA DO PROJÉTIL

Inicialmente, em relação ao processo de captura, vamos considerar um regime de baixas velocidades com o projétil bem próximo do alvo (parâmetro de impacto pequeno). Neste caso, a captura eletrônica acontece de forma que o elétron do alvo seja mais atraído pelo projétil do que pelo núcleo do alvo, induzindo uma transição deste elétron de um núcleo a outro. Outro fator como o tempo de interação também pode influenciar no processo de captura, ou seja, um tempo de interação razoavelmente longo (o suficiente para ocorrer à reação), implica que a captura irá acontecer (fica dependente somente das energias envolvidas) se a energia cinética do elétron do alvo, em relação ao projétil, for menor do que sua energia potencial no campo do projétil. Logo, se a energia do projétil decresce (seu tempo de interação aumenta), ou se o estado de carga do projétil cresce (energia potencial coulombiana cresce), a probabilidade de captura de um elétron pelo projétil também crescerá.

Para um regime de velocidades intermediárias, o projétil apresenta um máximo na probabilidade de perda, mas é nessa faixa de velocidade que a probabilidade de captura começa a decrescer. Sendo assim, é prudente considerar a possibilidade de que a perda e a captura ocorram num mesmo evento de colisão neste regime de velocidade baixa-intermediária. Tal processo é denominado de perda com transferência (“Transfer Loss” – TL) e não muda o estado de carga do projétil. A perda eletrônica é determinada experimentalmente pela detecção da mudança deste estado de carga, porém, dependendo da probabilidade de captura, pode haver uma variação nesta medida, de forma que, a fração detectada dos projéteis que perderam elétrons seja menor do que efetivamente ocorre. Logo no regime de velocidades baixa-intermediárias, a perda e a captura eletrônica devem ser consideradas simultaneamente para levar em conta o processo de TL [33].

Alguns processos envolvendo o projétil (P) carregado com estado de carga inicial (q) e o alvo neutro (A) podem ser ilustrados por [58]:

Ionização simples do alvo:



Ionização dupla do alvo,

ou Perda simples mais captura simples mais ionização do alvo,

ou “Transfer Loss” – TL:



Perda simples mais captura simples,

ou “Transfer Loss” – TL:



Captura simples:



Captura mais ionização,

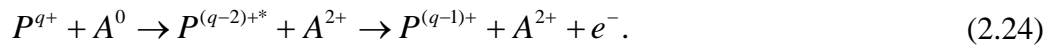
ou Perda simples mais captura dupla:



Captura dupla:



Captura dupla com contribuição de auto – ionização:



Perda simples:



Perda mais ionização simples,

ou “Loss Ionization” – LI:



Perda mais ionização dupla:



Para algumas combinações particulares de projéteis, alvos e velocidade de colisão, a captura eletrônica tem maior probabilidade de ocorrer do que a perda. Como consequência, a perda eletrônica é frequentemente acompanhada pela captura no mesmo evento de colisão, resultando em um estado de carga final para o projétil igual ao inicial [15]. Porém, este tipo de processo se confunde com o processo de ionização simples e, não pode ser identificado na montagem experimental utilizada neste trabalho.

Se considerarmos um alvo com pelo menos dois elétrons e que haja a possibilidade de ocorrer os modos de blindagem e antiblindagem [15], pode-se observar que, se a perda ocorrer no modo de blindagem, existirá dois elétrons do alvo disponíveis para captura, ao passo que, no modo de antiblindagem, só um elétron do alvo estará disponível para ser capturado pelo projétil. A distribuição de probabilidades do modo de blindagem em função do parâmetro de impacto (\vec{b}) favorece as colisões de baixo parâmetro de impacto (colisões próximas) [31], além disso, nesta região de baixo parâmetro de impacto e considerando um regime de velocidades baixa-intermediárias a captura também é mais provável.

A Figura 2.8 ilustra o processo de captura ocorrendo simultaneamente ao processo de perda do projétil, para alvos com dois elétrons como He, por exemplo. No modo de blindagem, parte (a), o projétil tem disponíveis dois elétrons do alvo para captura, ao passo que no modo de antiblindagem, parte (b), o projétil terá somente um elétron do alvo disponível para captura. Mas em ambos os casos, se a captura simples ocorrer, o estado de carga final do projétil será igual ao inicial.

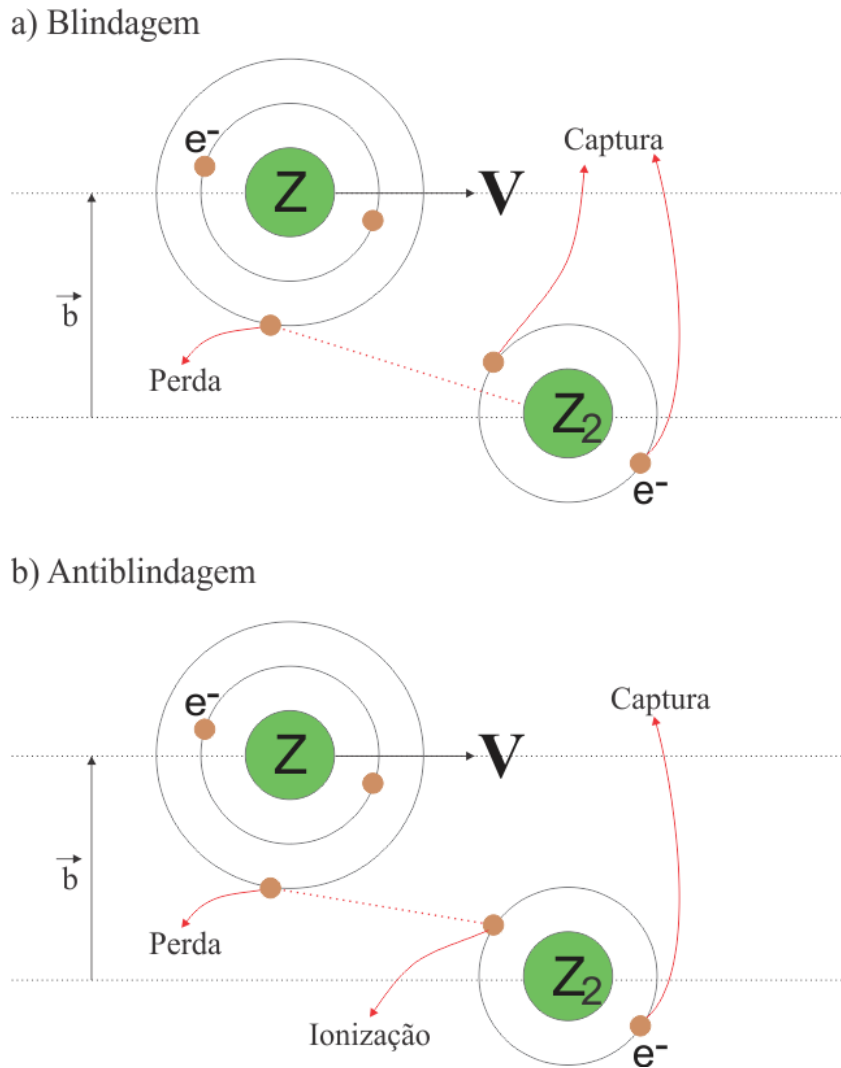


Figura 2.8: Ilustração dos processos eletrônicos possíveis ocorrendo simultaneamente com a perda eletrônica do projétil devido aos modos de: (a) blindagem e, (b) antiblindagem.

Depois dessa discussão dos possíveis processos eletrônicos que podem ocorrer simultaneamente com a perda eletrônica do alvo e, que os mecanismos (blindagem e antiblindagem) que podem levar a perda têm probabilidades diferentes, para parâmetros de impacto diferentes, podemos escrever a seção de choque total de perda eletrônica em função do parâmetro de impacto, b , como [15]

$$\sigma_{\text{perda}} = 2\pi \int_0^{\infty} db b [1 - P_c(b)]^2 P_{\text{blin}}(b) + 2\pi \int_0^{\infty} db b [1 - P_c(b)] P_{\text{anti}}(b), \quad (2.28)$$

onde $P_{\text{blin}}(b)$ e $P_{\text{anti}}(b)$, são respectivamente, as probabilidades de perda por blindagem e antiblindagem em função do parâmetro de impacto, b ; $P_c(b)$ é a probabilidade de captura de um elétron do alvo e $[1 - P_c(b)]$ é a probabilidade de que um elétron do alvo não seja capturado. Podemos considerar uma colisão muito próxima (a nuvem eletrônica do projétil interage diretamente com a nuvem eletrônica do alvo), tal que $P_c(b) \cong P_c(0)$, onde $P_c(0)$ é definido como a probabilidade de captura com parâmetro de impacto zero (0) e as probabilidades, $P_{\text{blin}}(b)$ e $P_{\text{anti}}(b)$, serão associadas às seções de choque de perda por blindagem e antiblindagem, σ_{blin} e σ_{anti} , respectivamente. O que nos permite aproximar a Equação (2.28), assim como feito na Ref. [15], para:

$$\sigma_{\text{perda}} \cong [1 - P_c(0)]^2 \sigma_{\text{blin}} + [1 - P_c(0)] \sigma_{\text{anti}}, \quad (2.29)$$

onde σ_{perda} é associada a seção de choque total de perda experimental, σ_{blin} e σ_{anti} são as contribuições dos modos de blindagem e antiblindagem calculadas (usando um modelo teórico) para seção de choque de perda eletrônica.

A partir da Equação (2.29) acima, podemos fazer algumas análises com respeito ao comportamento da seção de choque de perda à medida que consideramos intervalos diferentes para a energia do projétil. Por exemplo, para um regime de altas energias a probabilidade de captura é pequena, assim temos $P_c(0) \ll 1$ e temos uma nova aproximação para a Equação (2.29), que pode ser escrita como [15]

$$\sigma_{\text{perda}} = \sigma_{\text{blin}} + \sigma_{\text{anti}}. \quad (2.30)$$

Para um regime de energia baixa – intermediária, não podemos desprezar $P_c(0)$, pois a captura tem uma contribuição importante nesta faixa de velocidade e a Equação (2.30) assume a forma [15]

$$\sigma_{\text{perda}} < \sigma_{\text{blin}} + \sigma_{\text{anti}}. \quad (2.31)$$

Note que na Eq. (2.31) a perda experimental assume um valor menor do que o descrito pela teoria, já que agora a captura não pode ser desprezada e contribui para a redução da seção de choque total de perda experimental, devendo ser incluída nos cálculos teóricos mais realistas para uma descrição correta do problema.

Experimentos sobre os processos descritos acima, foram realizados por Montenegro e colaboradores [15] em medidas da captura e perda eletrônica na colisão de C^{3+} e O^{5+} em alvos de H_2 e He. Os resultados mostraram que para baixas energias, as seções de choque experimentais medidas são bem menores do que as seções de choque de PWBA previstas pelo método da soma estendida [28], onde não é levada em conta a captura. Com o aumento da energia do projétil, as seções de choque tendem a previsão do método da soma estendida. Além disso, Montenegro e colaboradores [15], concluíram que a análise de um único canal não é suficiente para explicar os resultados, sendo que, a perda eletrônica do projétil, a captura eletrônica pelo projétil e a ionização do alvo devem ser considerados juntos para interpretar os dados.

2.6. DEPENDÊNCIA DOS MODOS DE BLINDAGEM E ANTIBLINDAGEM COM O NÚMERO ATÔMICO DO ALVO (Z_2)

A determinação do equilíbrio entre os modos de blindagem e antiblindagem no processo de interação eletrônica tem sido controversa desde o início da tentativa de descrever a perda de íons rápidos e leves por alvos pesados. De um lado, podemos analisar a contribuição desses dois modos simplesmente mantendo um projétil fixo e variando o número atômico do alvo; e, por outro lado, podemos variar o estado de carga do projétil e o número atômico do alvo. Dessa maneira podemos compreender melhor como o estado de carga do projétil e o número atômico do alvo influenciam na contribuição dos modos de blindagem e antiblindagem.

Analisando inicialmente o problema envolvendo alvos leves, como H_2 e He, podemos citar trabalhos feitos por Hülskötter e colaboradores [7,8] (já citados anteriormente), onde uma comparação entre seção de choque total de perda eletrônica e teoria de 1ª ordem (PWBA) para descrever a perda total apresentaram um bom acordo.

Em um trabalho posterior, Montenegro e colaboradores [11] separaram experimentalmente os modos de blindagem e antiblindagem nas colisões de He^+ em H_2 e He, onde os resultados experimentais foram comparados com cálculos de 1ª ordem baseados na PWBA para a contribuição de cada modo (blindagem e antiblindagem), observando um bom acordo entre experimento e teoria.

Estes trabalhos servem como parâmetro para evidenciar que quando analisamos colisões envolvendo alvos leves, a aproximação de 1ª ordem (PWBA) descreve satisfatoriamente a seção de choque total de perda eletrônica e as contribuições dos modos de blindagem e antiblindagem. O sucesso dessa aproximação para alvos leves abre a possibilidade de usar esses conceitos para descrever casos mais complexos, como por exemplo, alvos com mais elétrons.

Em aproximações de 1ª ordem (PWBA), quando a perda eletrônica é devido à interação do elétron ativo do projétil com o núcleo do átomo – alvo, se espera que a dependência dessa contribuição à perda eletrônica com o número atômico do alvo (Z_2) seja proporcional a $(Z_2)^2$ [14] (ver Eq. (2.13)), mas isso não levando em conta a blindagem causada pelos elétrons do alvo sobre o núcleo – alvo, ou seja, se não existe a contribuição da blindagem causada pelos elétrons do alvo. Mas, se o projétil interage com um alvo parcialmente blindado pelo campo nuclear coulombiano, a dependência com o número atômico do alvo (Z_2) deve ser menor que $(Z_2)^2$ [14] (ver Eq. (2.13)). Por outro lado, podemos ter a interação direta dos elétrons do alvo com o elétron ativo do projétil, resultando na ionização simultânea de ambos os parceiros de colisão, caracterizando um modo de antiblindagem. No modo de antiblindagem, o núcleo não participa diretamente da interação e assim é esperada uma dependência linear da contribuição desse modo com (Z_2) , devido à soma das probabilidades de transição elétron – elétron sobre todos os elétrons do alvo [14]. Se levarmos em conta a contribuição de ambos os modos (blindagem e antiblindagem) é esperado que a dependência da perda eletrônica com o número atômico do alvo deve ser dominada pela contribuição da blindagem, à medida que o número atômico do alvo aumente [14].

Estendendo a análise feita para alvos leves com relação à teoria de 1ª ordem (PWBA), mas considerando agora alvos diversos (leves e pesados), podemos citar o trabalho de Sant'Anna e colaboradores [14], que apresentaram medidas da seção de choque total de perda em colisões de He^+ com alvos de He, Ne, Ar, Kr e Xe na faixa de energia de 1,0 a 4,0 MeV. Essas medidas apresentaram um efeito de saturação com o crescimento de Z_2 , sugerindo uma contribuição bem menor do modo de blindagem do

que a prevista pela teoria de 1ª ordem e mostrando a necessidade de tratamentos não perturbativos para descrever a contribuição da blindagem, indicando uma limitação nos cálculos de 1ª ordem referentes a este modo à medida que aumentamos o número atômico do alvo.

Posteriormente, Grande e colaboradores [30] fizeram um tratamento não perturbativo para a contribuição da blindagem coulombiana no processo de perda eletrônica do projétil de He^+ colidindo com alvos de He, Ne, Ar, Kr e Xe na faixa de energia entre 250 e 1000 keV/u. A seção de choque de perda (parcela da blindagem) é calculada usando o método dos canais acoplados, onde são levadas em conta as transições eletrônicas do alvo. A parcela da antiblindagem é calculada com base na PWBA [28] e a seção de choque total de perda é a soma das duas parcelas (blindagem + antiblindagem). Neste tratamento, para obter a probabilidade total de perda eletrônica os processos não – correlacionados (associados com a blindagem) e os processos correlacionados (associados com a antiblindagem) são considerados de maneira *ad hoc*, de modo a manter a unitariedade do processo, ou seja, a probabilidade total deve ser 1. À medida que Z_2 aumenta, foi observado que os cálculos teóricos superestimaram os dados experimentais principalmente para baixas energias, o que pode ser devido a diferentes razões, que podem ir desde problemas teóricos (como cálculo das probabilidades para transições correlacionadas e problemas intrínsecos da aproximação) até a medida experimental da perda eletrônica, onde a perda eletrônica é acompanhada da captura eletrônica num mesmo evento, resultando no estado final do projétil igual ao estado inicial e contribuindo para redução da seção de choque total de perda.

Outro tratamento não perturbativo foi feito por Voitkiv e colaboradores [31], estudando a perda eletrônica do projétil de He^+ em gases nobres na faixa de energia de 1,0 a 4,0 MeV usando a “Sudden Approximation – SA”, uma teoria unitarizada não perturbativa que descreve a dinâmica dos elétrons do projétil e do alvo. Isto significa que o estado final do projétil e do alvo induzidos na colisão são unitarizados dentro da aproximação de maneira natural e os canais de blindagem (elástico), antiblindagem e ionização do alvo aparecem naturalmente da teoria, já satisfazendo a unitariedade das probabilidades, sem a necessidade de uma suposição *ad hoc*. Um excelente acordo foi observado entre o cálculo da seção de choque referente ao modo de blindagem e as medidas experimentais, além disso, um bom acordo também foi observado no caso da seção de choque total de perda, onde a parcela da antiblindagem foi calculada baseada na PWBA [28]. Também foi observada uma saturação do modo de blindagem

(comparando dados experimentais e cálculos teóricos da blindagem) à medida que aumentamos o número atômico do alvo Z_2 , o que contraria as previsões feitas pelas teorias de 1ª ordem.

Montenegro e colaboradores [32] observaram que para alvos leves, o modo de antiblindagem desempenha um papel importante no processo da perda de elétrons, contribuindo em pé de igualdade com o modo de blindagem. E para alvos pesados, o simples cenário perturbativo baseado em razões na qual a contribuição da blindagem domina (pois aumenta com Z_2^2), enquanto a contribuição da antiblindagem aumenta mais lentamente (com Z_2), não está correta devido a forte saturação do modo de blindagem, o qual também reflete na saturação da seção de choque total de perda eletrônica [14,16,30,31,52,59]. O equilíbrio entre os modos de blindagem e antiblindagem para alvos pesados (à medida que Z_2 aumenta) assenta numa complexa mistura de mecanismos, onde alguns deles trabalham fora do regime perturbativo [32]. Além disso, foi mostrado na Ref. [32], que para altas energias (acima de 10 MeV) o modo de antiblindagem domina e para ambos os alvos, leves ou pesados, a interação elétron – elétron tem um papel importante no processo de perda do projétil com ionização simultânea do alvo.

É importante destacar que nos artigos citados acima, basicamente na interação com ambos os alvos, leves e pesados, foi usado o projétil, He^+ , onde o canal de captura eletrônica foi considerado desprezível (não apareceu nos dados experimentais ou apresenta valor muito pequeno) e o canal de perda eletrônica é dominante na colisão. Nos artigos citados a seguir, um projétil com estado de carga maior será usado e ambos os canais passam a ser importantes, podendo competir num mesmo evento de colisão.

Montenegro e colaboradores [15], estudando colisões de C^{3+} e O^{5+} sobre H_2 e He na faixa de energia de 1,5 – 4,0 MeV, observaram que o acordo experimento – teoria (PWBA) não era bom para baixas energias, mas tinha um bom acordo para altas energias. Essa diferença em baixas energias foi atribuída ao acoplamento do canal de perda e captura numa mesma colisão, o que modifica a seção de choque experimental e, que dependendo do modo como ocorre à perda eletrônica, modo de blindagem ou antiblindagem, o projétil terá mais ou menos elétrons disponíveis para capturar, respectivamente. Foi observado também que a probabilidade de captura de um elétron pelo projétil está acoplada a probabilidade de ionização de um elétron do alvo, implicando que os três canais estão interligados, ou seja, a perda depende da captura, a qual depende da ionização do alvo.

Em um estudo posterior, Melo e colaboradores [16], estudando colisões de C^{3+} e O^{5+} sobre He, Ne, Ar, Kr e Xe na faixa de energia de 1,0 – 3,5 MeV, analisaram combinações teóricas diferentes para a descrição da perda eletrônica, onde o modo de blindagem foi calculado usando o modelo de colisões livres – MCL, a sudden approximation e o método dos canais acoplados; nos três casos o modo de antiblindagem foi calculado usando a PWBA e essas três combinações (blindagem + antiblindagem) com teorias diferentes para o cálculo da blindagem forneceram a seção de choque total de perda, onde a melhor descrição foi obtida com o uso do MCL. Também foi observada uma saturação da seção de choque total de perda à medida que o número atômico do alvo aumenta, implicando numa saturação dos modos de blindagem e antiblindagem, tanto experimental quanto teoricamente. Para baixas energias, os dados experimentais apresentam uma diferença em relação aos dados teóricos e essa diferença foi atribuída à existência de um canal competitivo ocorrendo junto com a perda.

Em trabalhos mais recentes, Wolff e colaboradores [17] estudando colisões de B^{2+} e C^{3+} em Ne e Ar, mostraram um bom acordo entre a seção de choque total de perda experimental e a seção de choque total de perda teórica, com a blindagem calculada no MCL [29] e antiblindagem calculada usando PWBA [28] para ambos os alvos e projéteis. É importante destacar que os cálculos teóricos neste trabalho foram limitados a velocidades acima de 2,0 u.a. e não varrem os dados experimentais para baixas velocidades, onde a captura tem uma influência maior sobre a perda.

Santos e colaboradores [20,21] estudando colisões de C^{3+} e He^+ , respectivamente, em gases nobres, mostraram que na colisão C^{3+} em Ar, existe um bom acordo entre a seção de choque total de perda experimental-teórica e, uma pequena discrepância na comparação entre a blindagem/antiblindagem experimental e a blindagem/antiblindagem teórica. Na colisão He^+ em Ar, também ocorre um bom acordo entre teoria e experimento no caso da seção de choque total de perda, embora também apresente uma discrepância entre a blindagem/antiblindagem experimental e a blindagem/antiblindagem teórica, especialmente para baixas velocidades. Em ambos os casos a seção de choque total de perda foi calculada como a soma das contribuições da blindagem usando MCL [29] e antiblindagem usando PWBA [28]. Os cálculos teóricos nestes trabalhos são para velocidades acima de 2,0 u.a. e não cobrem os dados experimentais com velocidades mais baixas.

Em resumo, o estado de carga do projétil, o número atômico do alvo e a faixa de velocidade (energia) do projétil podem contribuir, ou não, para os processos de captura,

perda e ionização, influenciando na seção de choque experimental quando comparada a seção de choque teórica.

Os projéteis Li^+ e Li^{2+} colidindo em Ar deste trabalho se enquadram numa faixa intermediária dos estudos citados anteriormente, podendo apresentar uma combinação de fatores que afetam a seção de choque experimental. Onde processos associados, além dos modos de blindagem e antiblindagem podem contribuir para a perda eletrônica em baixas energias e, onde o estado de carga pode favorecer o acoplamento dos canais de perda e captura eletrônica numa mesma colisão para baixas energias, reduzindo a seção de choque total de perda experimental, comparada aos cálculos teóricos. O tratamento teórico feito neste trabalho usando o MCL [29] e a PWBA [28], são também uma escolha natural, uma vez que foram constatados nos estudos anteriores, que esses modelos foram os que melhores descreveram os dados experimentais.

CAPÍTULO 3

3. DESCRIÇÃO EXPERIMENTAL

Neste capítulo será feita uma breve descrição do uso dos equipamentos experimentais, como por exemplo, a fonte de íons, o acelerador, o magneto, entre outros e uma discussão do método experimental usado na medida das seções de choque totais e parciais absolutas.

3.1. DESCRIÇÃO GERAL DA LINHA EXPERIMENTAL

A parte experimental deste trabalho foi desenvolvida no Laboratório de Colisões Atômicas e Moleculares (LaCAM) do Instituto de Física da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ). Este laboratório contribui constantemente com artigos científicos, dissertações de mestrado e teses de doutorado. Alguns trabalhos produzidos neste laboratório por outros autores, como por exemplo, [17-19,60-62], podem ser usados como referência com relação à disposição dos equipamentos e/ou arranjo experimental.

Para entender o procedimento experimental e os equipamentos usados neste trabalho, vamos partir da idéia básica, que é produzir um feixe de projéteis (íons com carga negativa ou positiva), selecionar o íon de interesse (por exemplo, lítio, hélio, etc.), acelerar esse íon até a energia desejada, selecionar o estado de carga de interesse e, após isso, colocar o feixe na linha. Na linha de feixes, pode ser colocado um alvo gasoso para estudar a interação projétil-alvo. No laboratório (LaCAM) é usada uma fonte de íons negativos SNICS II, para produzir os feixes; um filtro de Wien, para selecionar a massa do íon desejado (por exemplo, lítio); um acelerador tipo Pelletron-tandem, modelo 5SDH-NEC, para colocar o feixe com a energia desejada e o magneto, que seleciona o estado de carga e deflete o feixe para estudo. Uma ilustração desses equipamentos (fonte de íons, filtro de Wien, acelerador e “switching magnet” – magneto) é apresentada na Figura 3.1.

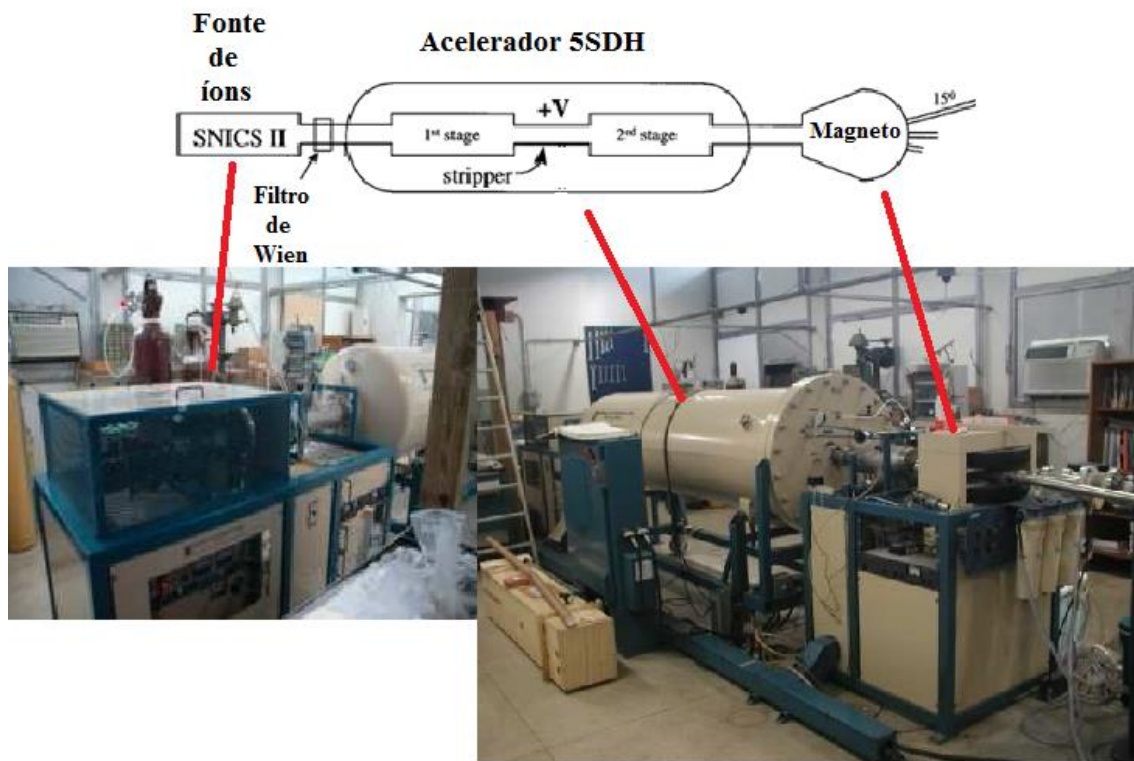


Figura 3.1: Ilustração dos equipamentos (fonte de íons, filtro de Wien, acelerador e “switching magnet” – magneto).

Uma ilustração para a linha de feixe pode ser observada na Figura 3.2, onde temos uma vista superior da trajetória de um feixe qualquer, com estado de carga qualquer (mas diferente de zero), que após sair do segundo estágio do acelerador e ser selecionado pelo magneto, entra na linha de colisão. Note que, na ilustração da Figura 3.2 vamos considerar que as placas de deflexão estão desligadas e não tem gás na câmara de colisão, de modo que teremos somente o feixe principal (de carga q escolhida no magneto) descrevendo uma trajetória retilínea e sem deflexão. Na Figura 3.2, os símbolos têm os seguintes significados: M, “switching magnet” – magneto; C, colimadores; E_1 , placas de deflexão eletrostática (feixe defletido horizontalmente); G_1 , célula gasosa para medidas totais absolutas; E_2 , placas de deflexão eletrostática (feixe defletido na vertical); G_2 , célula gasosa para medidas em coincidência (parciais absolutas); E_3 , placas de deflexão eletrostática (feixe defletido na horizontal); D, câmara de detecção com detector sensível a posição.

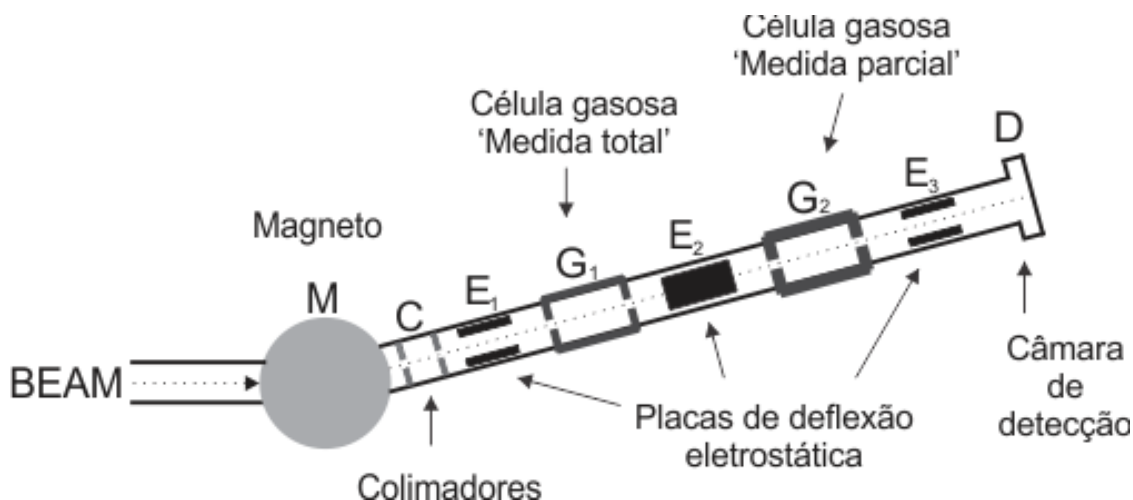


Figura 3.2: Vista superior da canalização do feixe. Os símbolos tem o seguinte significado: M, “switching magnet” – magneto; C, colimadores; E₁, placas de deflexão eletrostática (feixe defletido horizontalmente); G₁, célula gasosa para medidas totais; E₂, placas de deflexão eletrostática (feixe defletido na vertical); G₂, célula gasosa para medidas em coincidência; E₃, placas de deflexão eletrostática (feixe defletido na horizontal); D, câmara de detecção com detector sensível a posição.

Os feixes de íons negativos são extraídos da fonte de íons SNICS-II a uma energia de 5,0 keV. Esses feixes de íons negativos são acelerados a uma energia, E_0 , de aproximadamente 17,6 keV, passam por um seletor de massa (seleciona o elemento químico de interesse, no caso ${}^7\text{Li}$) conhecido como filtro de Wien e são injetados no acelerador eletrostático de dois estágios. No primeiro estágio, o feixe de íon negativo é acelerado no sentido do terminal de alta tensão localizado no centro do acelerador, onde atravessa um “stripper” gasoso. Devido à colisão no “stripper” gasoso, elétrons podem ser removidos produzindo feixes com diferentes estados de carga $q+$. Os íons positivos seguem pro segundo estágio de aceleração no sentido da abertura do acelerador e atingindo uma energia final de $E_f = [17,6 + (1 + q)V_T]$ keV, onde V_T é a voltagem no terminal em kV, que pode ser regulada no console do aparelho. O feixe de íons é selecionado em massa, energia e, em seguida a carga pelo “switching magnet” – Magneto (Ímã) e, por ultimo, colocado na linha para estudo. Na linha o feixe passa por fendas de colimação com uma abertura da ordem de $1,0 \text{ mm}^2$ e separadas por uma distância de aproximadamente 2,0 m. Em seguida as placas paralelas de deflexão E₁ separam as componentes espúrias do feixe principal (separação horizontal), resultantes de colisões com o gás residual na linha ou colisões na borda dos colimadores. Na câmara de colisão (para medidas totais absolutas – G₁), o feixe passa por dois colimadores, um de 2,5 mm de diâmetro na entrada e um de 3,0 mm de diâmetro na

saída, podendo colidir ou não com o gás alvo. Ao deixar a câmara de colisão, os feixes emergentes com diferentes estados de carga são separados pelas placas paralelas de deflexão E_2 (separação vertical), passam pela 2ª câmara de colisão (para medidas coincidentes/ parciais absolutas – G_2) e, são novamente separados horizontalmente nas placas paralelas de deflexão E_3 , sendo finalmente detectados em uma câmara de detecção (D), sensível à posição (x-y). A representação esquemática das placas paralelas de deflexão será feita com mais detalhes nas Figura 3.15 e Figura 3.16 à frente. Note que as placas E_1 e E_3 são idênticas quanto à função de separação, por isso a ilustração apresentada na Figura 3.15 é equivalente para as duas. Uma discussão mais detalhada sobre as câmaras de colisão será feita no tópico 3.8. A pressão na linha de feixe e câmaras é tipicamente da ordem de $3,0 \times 10^{-8}$ Torr.

Para um melhor entendimento dos equipamentos, do processo de obtenção e detecção dos feixes, será feita uma breve descrição de alguns componentes fundamentais para essa experiência.

3.2. A FONTE DE ÍONS

A fonte de íons negativos, conhecida como “Source of Negative Ions by Cesium Sputtering - (SNICS)” pode ter seu funcionamento esquematizado na Figura 3.3 [63].

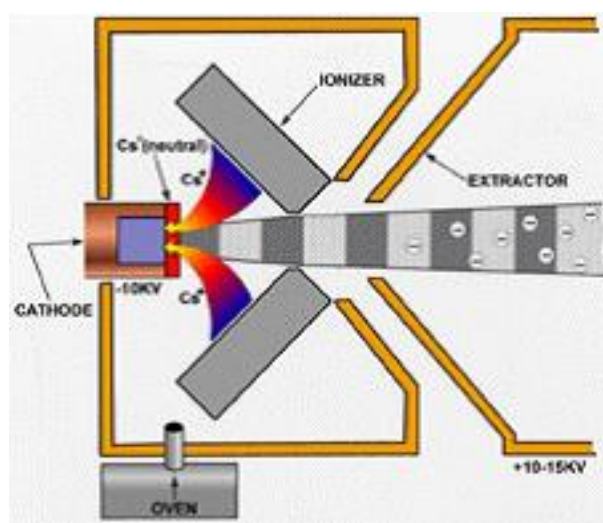


Figura 3.3: Representação esquemática do funcionamento da Fonte de Íons negativos.

Basicamente temos um catodo cilíndrico de cobre resfriado, onde é depositado o material do qual se obterão os ânions, uma resistência de formato helicoidal encapsulada por uma superfície cônica metálica, chamado ionizador (mantido aquecido por um filamento de tungstênio), um recipiente com césio (também mantido aquecido e chamado de forno). A fonte trabalha em um ambiente com vapor de césio (originário do forno), onde uma parcela dos átomos é ionizada pelos elétrons emitidos pelo ionizador. Além disso, como o catodo é resfriado, uma fina camada de césio se condensa na superfície aumentando significativamente a produção do feixe negativo.

Entre o catodo e o ionizador há uma diferença de potencial de até -10kV, fazendo com que os íons de césio gerados pelo ionizador sejam acelerados em direção ao catodo e arrancam partículas deste por “sputtering”¹. No processo de sputtering, alguns materiais são arrancados neutros ou positivos, que por sua vez capturam elétrons quando atravessam a camada de césio produzindo íons negativos. A corrente de íons extraídos é dada por [63]:

$$I^- = I^+ S \eta^-, \quad (3.1)$$

onde I^+ é a corrente de íons positivos de césio que incide sobre o catodo, S é a razão de íons que são emitidos por sputtering, dada em função do íon positivo utilizado e η^- a probabilidade de produção de íons negativos que está ligada a função trabalho W do material do catodo. Esta probabilidade atinge o valor máximo quando a função trabalho é mínima, o que ocorre quando a superfície é coberta por uma camada de césio da ordem de uma camada atômica [63].

A Figura 3.4 é a fonte de íons (SNICS) propriamente dita. Na Figura 3.5, temos um exemplo do processo de produção de íons negativos ao atravessarem a camada de césio [63].

¹ O sputtering é o fenômeno no qual átomos de uma superfície são ejetados pelo impacto de íons rápidos (chamados de íons primários) e, tem aplicações importantes como na fonte de íons.



Figura 3.4: Uma foto ilustrativa da Fonte SNICS.

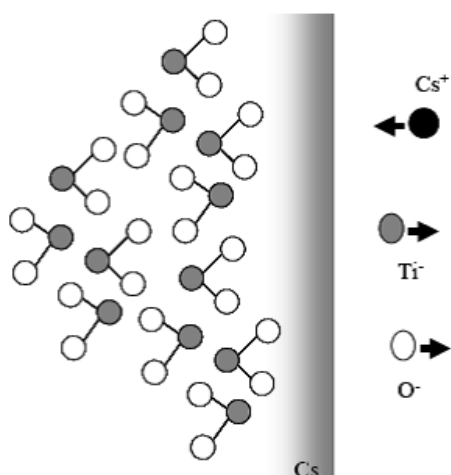


Figura 3.5: Exemplo de produção de íons ao atravessar a parede de césio. Neste caso, a amostra para o catodo é TiO_2 – Dióxido de Titânio.

É importante destacar que a fonte fica em um potencial negativo em relação à terra, sendo V_{fonte} de até 30 kV e, dessa forma, após a câmara de ionização os ânions sofrem nova aceleração e saem da fonte com energia de até 40 keV.

Na realização do experimento apresentado neste trabalho as seguintes condições de trabalho foram adotadas: $V_{\text{catodo}} = 5,0$ keV; $V_{\text{fonte}} = 12,6$ keV (42% de 30 kV) e o vácuo no caminho percorrido pelos íons é cerca de 10^{-7} Torr.

3.3. FILTRO DE WIEN

O Filtro de Wien é um seletor de velocidades instalado logo depois da fonte e consiste de um campo elétrico (\mathbf{E}) e um campo magnético (\mathbf{B}), perpendiculares entre si e à trajetória da partícula carregada. Basicamente, um conjunto de placas paralelas geram os campos (elétricos e magnéticos) na vertical e na horizontal; e ambos perpendiculares a velocidade inicial da partícula incidente, de forma que possamos ter um campo ajustável por um controle, no console do acelerador. Para entender melhor a situação, vamos considerar duas placas paralelas, separadas por uma distância d com a interação de um campo magnético (\mathbf{B}) e um campo elétrico (\mathbf{E}), constantes e perpendiculares entre si. Uma partícula com energia E_0 e velocidade \mathbf{v} , com carga q e massa m que entra na região entre as placas sofrerá a ação de uma força elétrica (\mathbf{F}_e) e magnética (\mathbf{F}_b). A representação dessa situação pode ser observada na Figura 3.6 abaixo. Considerando que a partícula não seja defletida, ou seja, as forças elétrica e magnética estão em equilíbrio, podemos achar uma relação para a massa da partícula selecionada e o potencial aplicado nas placas.

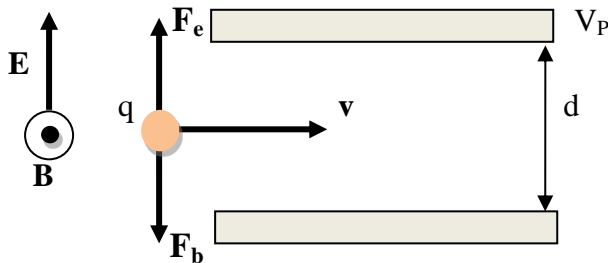


Figura 3.6: Representação esquemática do campo elétrico (\mathbf{E}) e magnético (\mathbf{B}) no filtro de Wien, para obtenção da relação entre a massa da partícula e o potencial aplicado nas placas. Note que no esquema a notação vetorial adotada é representada por letras em negrito e sem o uso de setas.

Para a partícula não defletir, temos que ter:

$$\mathbf{F}_e + \mathbf{F}_b = 0. \quad (3.2)$$

Daqui em diante será adotada uma notação não vetorial. Partindo da Equação (3.2) tiramos uma relação para a velocidade:

$$v = \frac{E}{B}. \quad (3.3)$$

Lembrando que a energia cinética (E_0) e o campo elétrico (E) são dados, respectivamente, por:

$$E_0 = \frac{1}{2}mv^2. \quad (3.4)$$

$$E = \frac{V_p}{d}. \quad (3.5)$$

Se combinarmos as Equações (3.3 – 3.5), chegamos à seguinte relação entre a massa m e o potencial aplicado nas placas:

$$\sqrt{m} = Bd\sqrt{2E_0} \frac{1}{V_p}. \quad (3.6)$$

Com base na Equação (3.6) podemos concluir que o filtro de Wien funciona como um espectrômetro de massa, cuja função é separar íons de acordo com sua massa (ou o mais comum, a razão carga-massa). Considerando que a tensão nas placas, V_p , é igual à tensão no seletor de velocidade, V_{sel} (que é controlado no console do acelerador, ver Figura 3.13, parte (c)), a calibração do seletor de velocidades pode ser dada pela Equação (3.7) [61]. Com V_{sel} em kV e m em unidades atômicas (u.a.). No dia da realização da experiência o filtro de Wien estava devidamente calibrado [61].

$$\frac{1}{V_{sel}} = \left[-0,07 + 0,34 \times (m)^{\frac{1}{2}} \right] [\text{kV}^{-1}]. \quad (3.7)$$

Com esse ajuste, garantimos que o feixe desejado (selecionado por sua massa) estará na linha de colisão. Abaixo temos uma foto ilustrativa do filtro de Wien.



Figura 3.7: Foto ilustrativa do Filtro de Wien que faz parte do acelerador.

3.4. PRODUÇÃO DE CATODOS

Os ânions liberados neste experimento são provenientes da pastilha (ou pó) de hidreto de lítio (LiH), que é um material com boa condutividade elétrica e se apresenta no estado sólido até altas temperaturas (aproximadamente 690 °C). O hidreto de lítio é depositado no catodo cilíndrico de cobre, onde será ionizado pelo ionizador, liberando os íons negativos, que serão pré-acelerados até a entrada do acelerador.

Maiores informações sobre o funcionamento da fonte e fabricação dos catodos podem ser obtidas no trabalho de Middleton [64,65].

3.5. O ACELERADOR PELLETRON-TANDEM 5SDH

Este tipo de acelerador trabalha em dois estágios, um estágio de baixa energia (LOW ENERGY) e um estágio de alta energia (HIGH ENERGY) [60,61,63]. Uma ilustração destes estágios é apresentada na Figura 3.8 e Figura 3.9 abaixo.

O feixe de íons negativos produzidos pela fonte é acelerado com uma energia E_0 entre 10,0 - 40,0 keV antes de serem injetados no acelerador. No acelerador, o feixe entra no primeiro estágio de aceleração, uma região de baixa energia (LE), cuja entrada está aterrada. Os íons negativos (X^- , com $q = -1$) são em seguida pós-acelerados para o centro do acelerador (terminal) que está à alta tensão V_T de até 1,7 MV, ganhando energia $E_0 + eV_T$. No terminal, temos um trocador de cargas chamado de

“stripper”, que consiste de um alvo gasoso (neste caso o gás é N_2), que ao entrar em contato com as partículas do feixe, faz com que estas partículas possam perder um ou mais elétrons. Perdendo um elétron, o projétil torna-se neutro (X , com $q=0$) e perdendo mais de um elétron, torna-se positivamente multicarregado (X^{q+} , com $q=1,2,3,\text{etc.}$). O feixe entra no segundo estágio, uma região de alta energia (HE), onde a extremidade também está aterrada, de forma que os íons positivos serão novamente acelerados saindo do acelerador com energia final $E_0 + (1 + q)eV_T$. Os íons neutros percorrem o segundo estágio com velocidade constante, deixando o acelerador com energia final $E_0 + eV_T$. Os íons negativos que não trocaram de carga no “stripper”, são desacelerados e saem do acelerador com a energia que entraram E_0 . O vácuo residual no acelerador medido nas extremidades é mantido abaixo de 10^{-8} Torr, pelo bombeamento de duas bombas turbo molecular, situadas nas extremidades [63]. A Figura 3.9 é uma representação dos processos que podem acontecer no interior do tanque do acelerador.

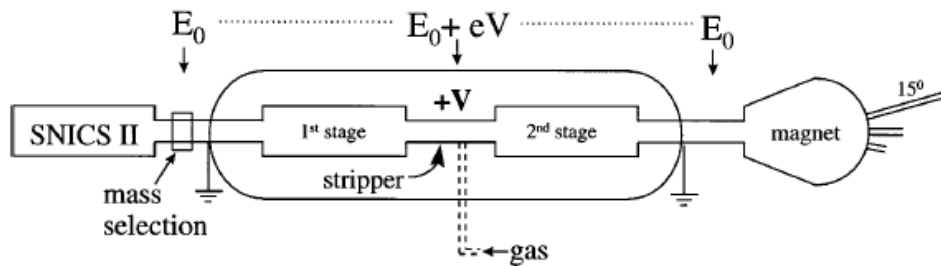


Figura 3.8: Esquema ilustrativo dos dois estágios de aceleração do Tandem. O 1º estágio é de baixa energia (LE) e o 2º estágio é de alta energia (HE). Ambas as extremidades estão aterradas e, o potencial V no esquema ilustrativo é o mesmo potencial representado por V_T no texto.

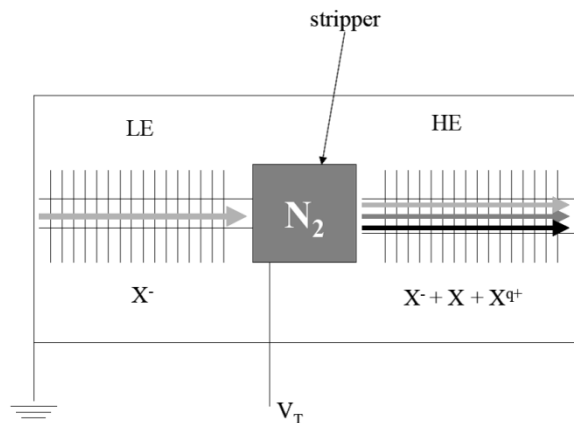


Figura 3.9: Esquema ilustrativo dos processos que podem ocorrer no interior do tanque do acelerador.

A Tabela 3.1 representa a distribuição da energia final dos íons (que depende do estado de carga q), após passar pelos dois estágios do acelerador, ou seja, para cada estado de carga tem-se a energia final que o íon deixa o acelerador e entra na linha para estudo.

Tabela 3.1: Distribuição de energia dos íons dentro do tubo do acelerador. A unidade da energia final é dada em elétron-Volts (eV).

Estado de carga	Energia Final
-1	E_0
0	$E_0 + eV_T$
+q	$E_0 + (1+q) eV_T$

Para garantir que não ocorram descargas da alta tensão do terminal, em forma de faíscas no ambiente próximo do tubo acelerador, é necessário envolver todo o tubo com um material dielétrico com alto poder de isolamento. O gás indicado neste caso é o gás hexafluoreto de enxofre (SF_6), pressurizado em 80 psi. A Figura 3.10 mostra uma foto ilustrativa do interior do acelerador, do terminal de alta tensão e o tanque que envolve o tubo acelerador.



Figura 3.10: Foto ilustrativa com vista do interior do acelerador. No centro, temos o terminal de alta tensão.

O processo de obtenção de alta tensão no terminal baseia-se no princípio de indução eletrostática. Onde basicamente temos uma correia (corrente) de cilindros metálicos, denominados de “pellets”, ligados entre si através de elos isolantes (nylon),

que são carregados por um processo de indução eletrostática. A Figura 3.11 ilustra o processo de indução.

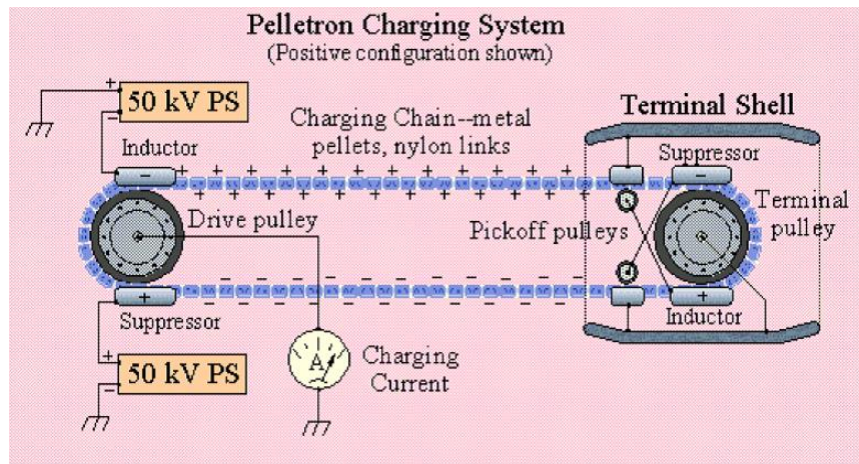


Figura 3.11: Esquema ilustrativo do gerador de tensão no Pelletron 5SDH.

Um eletrodo indutor negativo de até -50 kV carrega positivamente os cilindros metálicos, (ver Figura 3.11) e após passarem pelo indutor, os “pellets” (um tipo de corrente metálica) perdem o contato com a roldana guia que está aterrada e adquirem carga positiva. Estas cargas positivas são transportadas pela correia até o terminal de alta voltagem, onde o processo reverso ocorre. Em seguida os “pellets” retornam ao potencial terra para serem novamente carregados.

A utilização deste sistema pelo acelerador Pelletron da NEC para obtenção de alta voltagem através da indução de esferas metálicas isoladas produz uma alta estabilidade do terminal de alta voltagem. Para ilustrar melhor a idéia física de “pellets”, uma foto é apresentada na Figura 3.12.

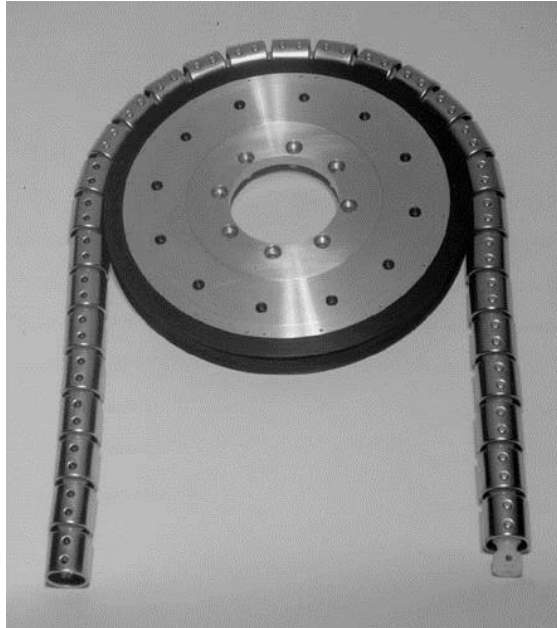


Figura 3.12: Foto ilustrativa da corrente de cilindros, mostrando os chamados “pellets”.

3.6. O MAGNETO

Após sair do acelerador, o feixe de projétil passa pelo ímã seletor de momento (“Switching magnetic”) que vai defletir o feixe no plano horizontal. O direcionamento do feixe pode ser feito para três linhas; uma linear com o acelerador, formando um ângulo de zero grau (0°) com o eixo do acelerador e as outras duas formando um ângulo de menos e mais 15 graus (-15° e $+15^\circ$); linha 2, 1 e 3, respectivamente, [61]. Ver Figura 3.13.

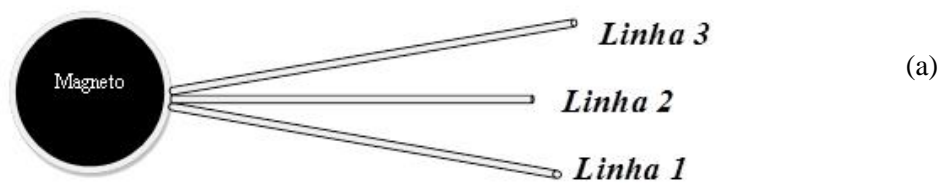


Figura 3.13: Parte (a), superior, esquema ilustrativo com vista superior do Magneto e das linhas de feixe. Na parte (b), uma foto ilustrativa com vista superior do acelerador, magneto e linhas de feixe. Na parte (c), o console do acelerador, onde é possível controlar a voltagem no seletor de velocidades, o valor do campo magnético e a energia do feixe de projéteis.

Este experimento foi realizado usando a linha 3, que formava um ângulo de $+15^\circ$ em relação ao eixo do acelerador.

O projétil de massa m e carga q , entra no magneto com uma energia cinética T e submetido a um campo magnético estático de magnitude B . Como o campo magnético estático não realiza trabalho, a energia do feixe será a mesma. Assim, podemos relacionar a magnitude do campo magnético, massa, carga e energia do projétil pela força que o feixe sentirá ao passar pelo ímã como sendo:

$$F = qvB = \frac{mv^2}{R} = mv \times \frac{v}{R}, \quad (3.8)$$

onde R é o raio da trajetória circular devido ao campo magnético. Na Figura 3.14, está ilustrado o desvio na trajetória devido ao campo magnético.

Para o campo magnético, temos a seguinte expressão em função da energia cinética, $T = \frac{1}{2}mv^2$, dada por:

$$B = \frac{2mT}{R} \times \frac{1}{qmv}. \quad (3.9)$$

Por manipulação algébrica e usando o fato que, $mv = qBR$, eliminamos a dependência da velocidade e chegamos à seguinte expressão:

$$B^2 = \frac{2mT}{q^2} \times \frac{1}{R^2}. \quad (3.10)$$

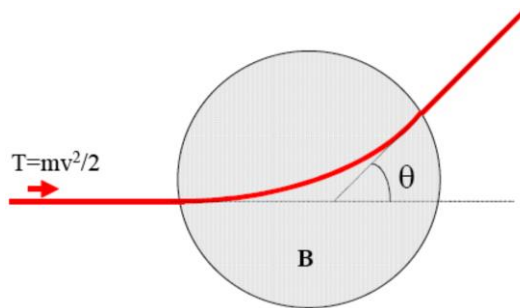


Figura 3.14: Representação ilustrando a trajetória circular devido ao campo magnético.

A calibração do campo magnético em função de mT/q^2 é dada pela Equação (3.11), onde m e q são dados em unidades atômicas, T em MeV e B em kilo Gauss. No dia da experiência o magneto estava devidamente calibrado e funcionando perfeitamente [61], podendo assim selecionar o feixe com o estado de carga desejado.

$$B = \left[0,02 + 1,84 \times \left(\frac{mT}{q^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] [\text{kGauss}] \quad (3.11)$$

Esse arranjo, magneto (que além da separação de estado de carga) e filtro de Wien, garante a separação correta da massa do projétil estudado, mesmo no caso de valores de massa próximos. E, o maior produto mT/q^2 que o conjunto magneto/fonte de corrente pode selecionar é de 15 MeV x (a.m.u.) / $q^2(e)$ [61].

3.7. OS FEIXES ESPÚRIOS

Para realizar a experiência devemos escolher o feixe com o estado de carga de nosso interesse (denominado de feixe principal) selecionando este feixe por intermédio do “switching magnetic” (magneto – M). Porém, após o magneto uma parcela do feixe principal pode eventualmente trocar de carga com o gás residual na linha e com as bordas das fendas de colimação, dando origem a feixes secundários (denominados de feixes espúrios). Para garantir que esses feixes espúrios não atrapalhem na experiência, separamos os feixes espúrios do feixe principal usando as placas de deflexão E_1 , que ficam localizadas anteriormente a câmara de colisão G_1 , responsáveis por uma deflexão horizontal. Depois da câmara de colisão G_1 , temos as placas de deflexão E_2 , responsáveis por uma deflexão vertical, que separa os estados de carga. Um terceiro conjunto de placas paralelas E_3 colocado após a câmara de colisão é responsável por uma deflexão horizontal (ver Figura 3.2). Assim o conjunto: placas de deflexão E_1 , E_2 , E_3 e o detector (D) sensível à posição (x-y), permitem a separação e identificação dos feixes.

Depois da separação dos feixes espúrios do feixe principal pelas placas de deflexão E_1 , estes feixes (principal + espúrios) entram na câmara de colisão G_1 (que contém o gás alvo) podendo colidir ou não. Cada feixe, ao cruzar a câmara de colisão gasosa G_1 e trocar (ou não) de carga com o gás alvo dá origem a uma “família” que é separada pelas placas de deflexão E_2 . Depois de se identificar as “famílias” podem-se fazer alguns ajustes, modificando a tensão nas placas de deflexão, de tal forma que os feixes fiquem separados por uma distância segura para fazer medidas. Nas Figura 3.15 e

Figura 3.16, tem-se a representação da separação dos feixes espúrios e das famílias, respectivamente, pelas placas de deflexão E_1 e E_2 . Como a placa E_3 é equivalente em funcionamento a E_1 , a ilustração é idêntica para as duas placas.

Na Figura 3.17 temos uma imagem típica que representa a identificação das famílias e, do feixe principal, Li^{2+} .

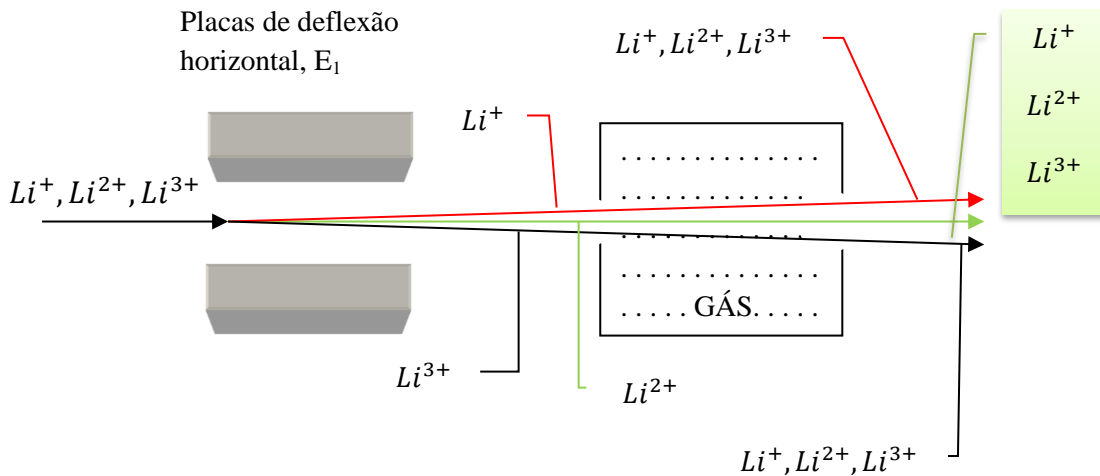


Figura 3.15: Representação esquemática com vista superior, da deflexão horizontal do feixe espúrio mais principal ao passar pela placa de deflexão horizontal E_1 . Separação do feixe principal dos feixes espúrios. A placa de deflexão E_3 funciona de forma similar e por isso não será representada.

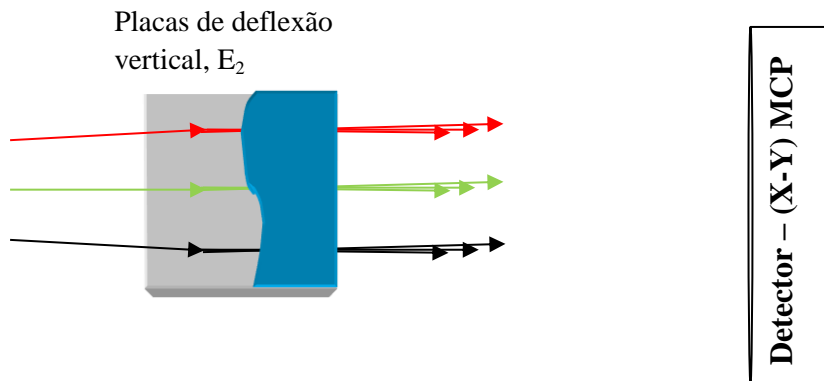


Figura 3.16: Representação esquemática com vista superior, da deflexão vertical dos feixes após passarem pela câmara de colisão, pelas placas de deflexão vertical E_2 e E_3 . Os três feixes incidentes estão no mesmo plano. Cada feixe da origem a outros estados de carga após passar pela câmara de colisão. As placas de deflexão vertical E_2 e E_3 , separam as famílias.

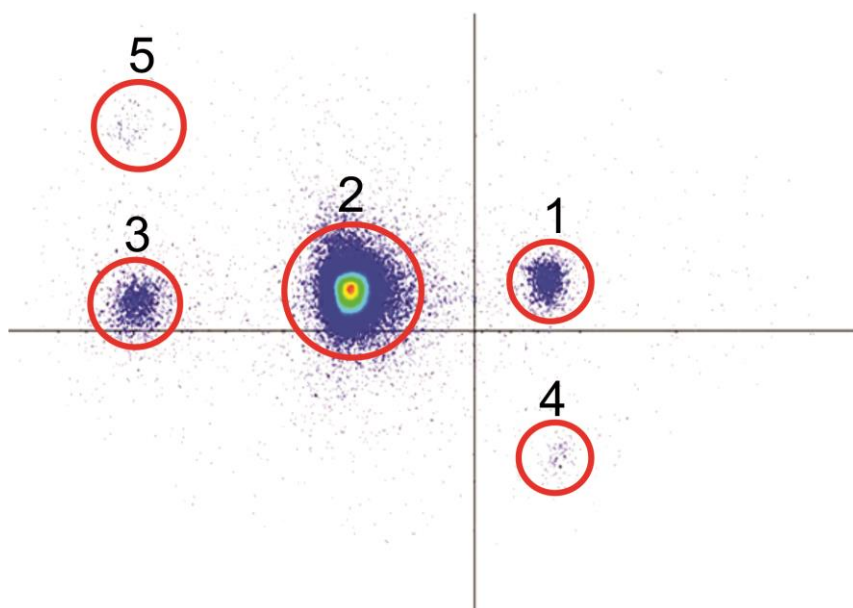


Figura 3.17: Imagem típica obtida no detector X-Y, que mostra a separação dos feixes pelas placas de deflexão eletrostática E_1 , E_2 e E_3 . Em destaque temos: 1 – Captura simples (Li^+); 2 – Feixe Principal (Li^{2+}); 3 – Perda simples (Li^{3+}); 4 – Espúrio Captura Simples (Li^+); 5 – Espúrio perda simples (Li^{3+}).

3.8. A CÂMARA DE COLISÃO

A montagem experimental usada neste trabalho consiste de duas câmaras de colisão distintas e independentes, para que se possam fazer tanto medidas da seção de choque total absoluta, quanto medidas da seção de choque parcial absoluta. As medidas não são simultâneas, ou seja, cada medida é feita por vez e de forma independente. Sem mudanças físicas na linha é possível fazer uma medida da seção de choque total absoluta ou fazer uma medida da seção de choque parcial absoluta, sendo que uma medida não afeta a outra. Os tópicos seguintes, 3.8.1 e 3.8.2, tratarão separadamente de aspectos gerais referentes às duas câmaras (G_1 e G_2).

3.8.1. CÂMARA DE COLISÃO PARA MEDIDA DA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL ABSOLUTA

As medidas das seções de choque total absoluta de perda e captura eletrônica são realizadas com a interação do projétil com o gás alvo proveniente desta célula gasosa, conhecida também como câmara de colisão que será denotada por G_1 (ver Figura 3.2).

A câmara possui um comprimento de 120,0 mm, o orifício de entrada tem 2,5 mm de diâmetro e o de saída 3,0 mm de diâmetro, cuja função é diminuir a passagem de gás alvo para a linha de vácuo, mantendo nessas regiões a pressão constante, independente da pressão do alvo. O gás alvo é injetado por meio de uma válvula “agulha” manual, onde é possível controlar a entrada do gás, de modo que, toda a câmara fique preenchida.

O vácuo na região da câmara é mantido por duas bombas turbo molecular, localizadas um pouco antes e um pouco depois da câmara, proporcionando um bombeamento diferencial na região e impedindo que o gás alvo se espalhe pela linha. A pressão no interior da câmara é medida por meio de um manômetro capacitivo absoluto e a pressão fora da câmara é monitorada por um medidor tipo penning. A pressão típica de trabalho na câmara gasosa G_1 (sem o gás alvo) é da ordem de 10^{-8} Torr.

Caso seja necessário realizar algum reparo na linha, tanto a entrada, quanto a saída da câmara, podem ser isoladas do acelerador por meio de uma válvula tipo “gaveta” manual.

Uma representação esquemática da câmara de colisão G_1 pode ser mostrada na Figura 3.18. Note que a válvula agulha não é um “alvo extra”, ou seja, em nenhum momento o feixe de projéteis interage ou bate nela.

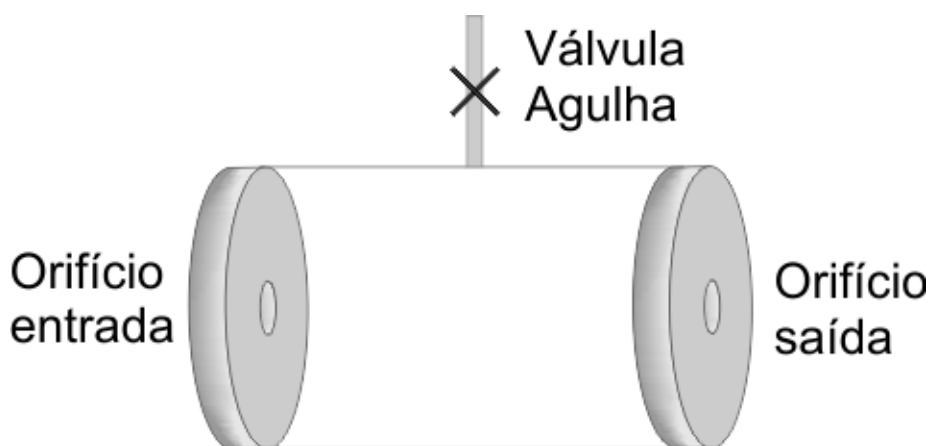


Figura 3.18: Esquema ilustrativo da célula gasosa G_1 – câmara de colisão. A célula gasosa tem comprimento de 120,0 mm, diâmetro de entrada de 2,5 mm e diâmetro de saída de 3,0 mm. A válvula agulha é o mecanismo de injeção do gás alvo.

Nesta experiência o feixe principal é o isótopo de Lítio, ${}^7\text{Li}^{2+}$ e ${}^7\text{Li}^+$, denominados como projéteis (simplesmente denotados como Li^{2+} e Li^+) e o gás alvo que preenche a câmara de colisão é o Argônio, Ar.

3.8.2.CÂMARA DE COLISÃO PARA MEDIDA DA SEÇÃO DE CHOQUE PARCIAL ABSOLUTA

As medidas das seções de choque parcial absoluta de perda e captura (levando a ionização múltipla do alvo); e, ionização múltipla direta do alvo; são realizados com as interações do projétil e do gás alvo proveniente desta câmara, conhecida como célula gasosa de medidas coincidentes e que será denotada por G_2 (ver Figura 3.2).

Nesta configuração de alvo, um jato gasoso é obtido da expansão de alto vácuo de gás proveniente de uma região de mais alta pressão através de um capilar ou agulha [18,62,66-68]. A maior dificuldade em se trabalhar com esse tipo de alvo está na medida direta da pressão do alvo e a interseção deste com o feixe incidente (feixe de projéteis), de forma que não conhecemos e não podemos medir diretamente a espessura (densidade) do alvo, denotada por π .

A dispersão do jato de gás liberado através da agulha é dada por uma distribuição do tipo [67]:

$$f(\theta) \propto (\cos \theta)^{5/2}, \quad (3.12)$$

onde uma certa quantidade de partículas de gás liberadas através da agulha por unidade de tempo é relacionado com uma lei de distribuição angular. Uma ilustração esquemática dessa dispersão pode ser vista na Figura 3.19 a seguir.

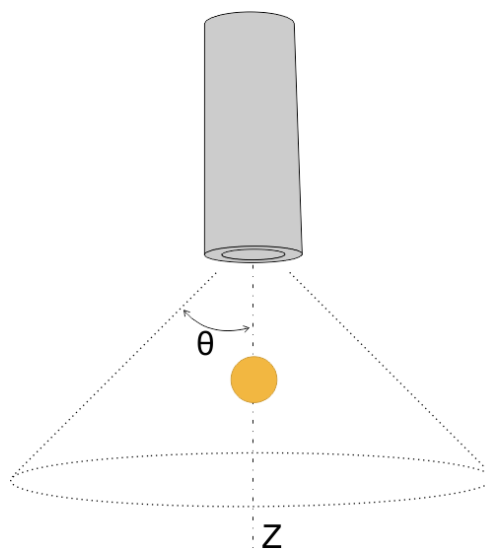


Figura 3.19: Ilustração da interseção do feixe e a dispersão do jato de gás alvo, liberado pela agulha.

O diâmetro do feixe de projéteis na região de interação é da ordem de 1,5 – 2,0 mm e o diâmetro da agulha jato de gás usado têm 1,5 mm de diâmetro externo e da ordem de 0,8 mm de diâmetro interno e um comprimento $L= 40,0$ mm [18]. O posicionamento do jato de gás com respeito ao feixe pode ser alinhado com um manipulador de movimento XYZ.

Algumas medidas alternativas devem ser tomadas para contornar o fato de não ser possível medir diretamente a densidade do alvo: A primeira é garantir que os feixes tenham a mesma área de interseção com o alvo (jato gasoso) e atravessem sempre na mesma posição. A área de interseção é controlada com a colimação do feixe e com base nos diâmetros de interseção dados acima, temos uma área da ordem de $1,77 - 3,14$ mm². Um cuidado especial teve que ser tomado para o posicionamento do jato de gás ficar exatamente no centro do feixe de projéteis e para manter a distância, z , entre o orifício de saída da agulha jato de gás e o feixe. Dessa forma conseguimos minimizar os jatos espalhados (nas bordas) e mantemos a densidade do gás alvo na região de interseção com o feixe.

Antes de prosseguir nos detalhes do posicionamento da agulha do jato de gás é necessário introduzir um sistema de coordenadas que é mostrado na Figura 3.20. O eixo Y positivo é definido ao longo da direção e no sentido do feixe, o eixo positivo de Z é definido na direção e no sentido contrário do jato de gás e o eixo positivo X é definido perpendicular (para direita) e no mesmo plano do feixe. O feixe de projéteis se propagando na direção Y, pode ser interrompido ou obstruído se movimentamos a agulha no eixo X ou Z, onde o deslocamento em X fornece o alinhamento entre o feixe e a agulha; e o deslocamento em Z fornece a distancia entre a saída da agulha e o feixe.

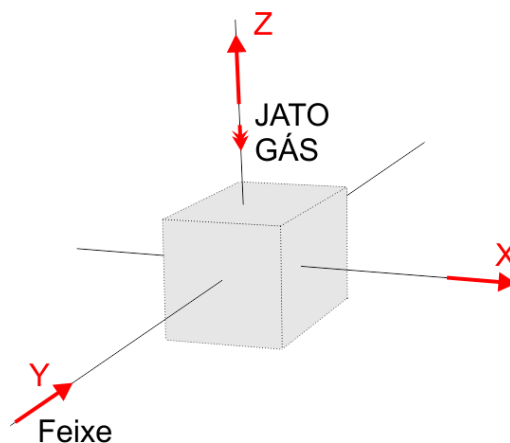


Figura 3.20: Sistema de coordenadas do feixe. O eixo Y positivo é definido ao longo da direção do feixe, o eixo negativo de Z é definido na direção do jato de gás e o eixo positivo X é definido perpendicular e no mesmo plano do feixe.

O posicionamento do feixe para definir a região de interseção com o jato gasoso é feito varrendo e obstruindo o feixe pela agulha e monitorando a intensidade do feixe. Iniciando uma varredura no eixo X, ou seja, variando a posição da agulha somente no eixo X é possível dividir o feixe ao meio e dessa forma concluir que o feixe e a agulha estão realmente centrados e alinhados no mesmo ponto em X. Uma representação esquemática, relacionando a intensidade do feixe com a região da agulha que impede (está bloqueando) a passagem do feixe é mostrado na Figura 3.21, onde a região com intensidade mínima indica que a agulha está centrada no feixe. Note que a área do feixe pode assumir uma área maior do que a habitual de trabalho para facilitar o posicionamento e a visualização do feixe após ser dividido.

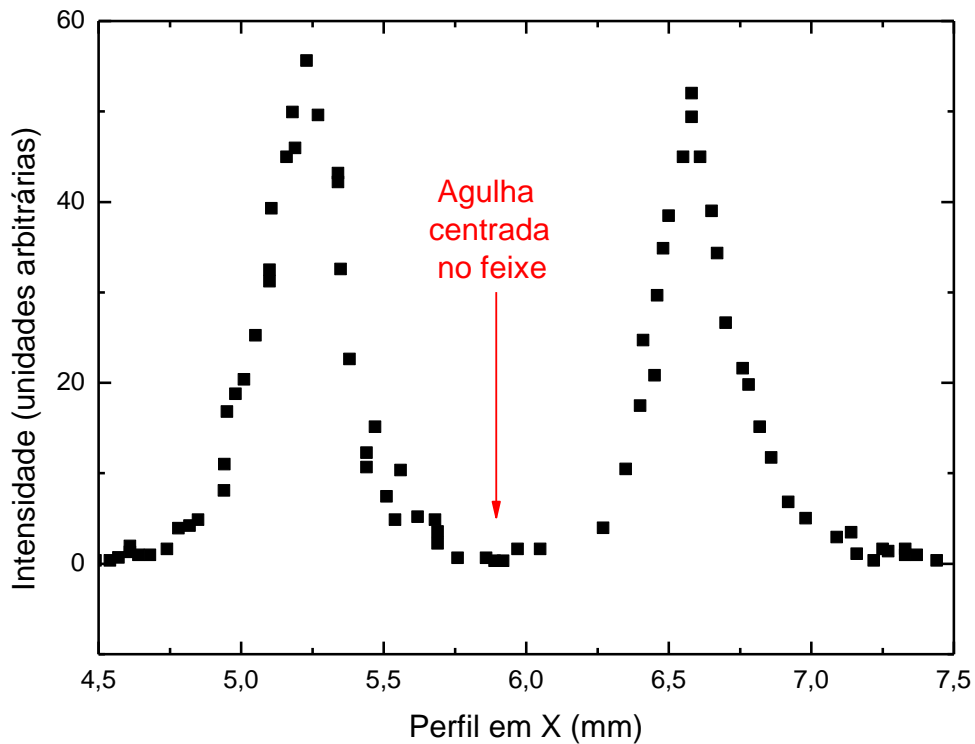


Figura 3.21: Ilustração do alinhamento do jato gasoso e o feixe de projéteis no eixo X, com a posição da agulha centrada no feixe.

No eixo Z, direção vertical, o posicionamento foi feito inserindo (de aproximadamente 0,5 mm) a agulha no feixe e obstruindo o feixe. Dessa forma é possível observar a contagem sem a agulha bloqueando o feixe e a posição onde a agulha começa a bloquear o feixe, fazendo a contagem diminuir. Uma representação

para a relação da contagem em função da posição, z , no eixo Z da agulha é apresentada na Figura 3.22.

Buckman e colaboradores [68] em seu estudo de perfis espaciais de feixes moleculares efusivos e suas dependências com espécies de gases, mostraram que para valores da distância, z , (que é a distância entre o orifício de saída da agulha e o feixe, na região de interseção) próximos do valor do diâmetro interno da agulha, a largura do feixe sofre menos espalhamento, do que para distâncias maiores (mantendo a mesma pressão de trabalho e independente do tipo de gás), ou seja, mantendo a distância de separação, z , bem pequena (próximo do diâmetro interno da agulha) é possível obter a mesma largura do feixe independente do gás alvo e assim mantemos a densidade do feixe. Essas informações ajudam a definir a distância para o posicionamento entre a saída da agulha e o feixe, sendo $z \approx 0,8$ mm, como ilustra a Figura 3.22.

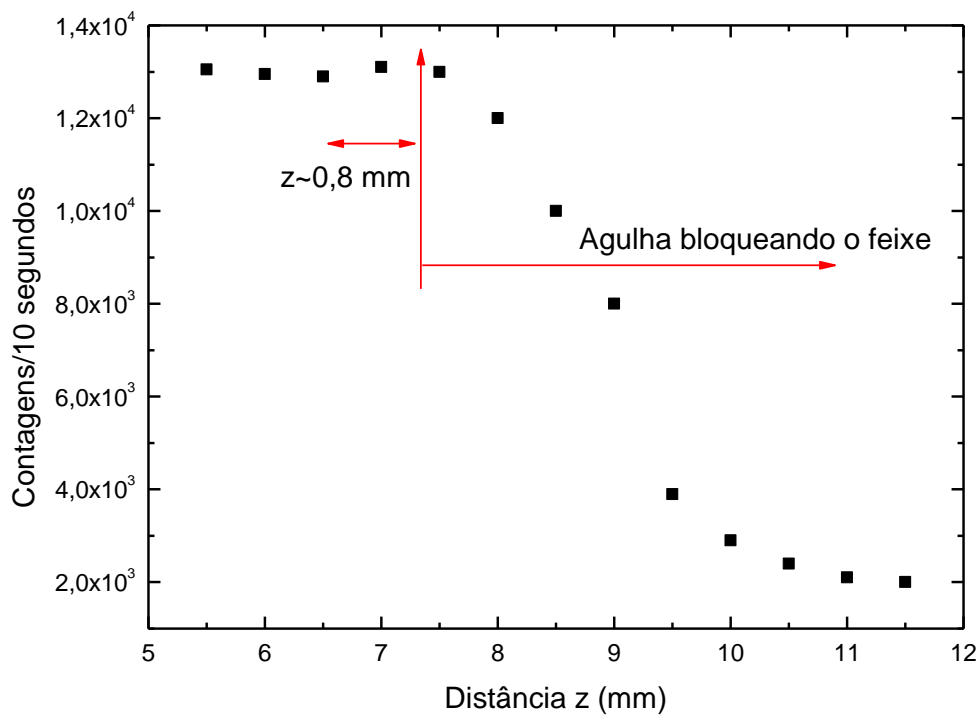


Figura 3.22: Ilustração do posicionamento do feixe e da agulha no eixo Z. Contagens feitas num intervalo de 10 segundos são feitas em função da posição z , identificando a região onde a agulha começa a bloquear o feixe.

A área do feixe neste caso, também pode assumir um valor menor que o habitual do experimento, pois estamos interessados que a seção da agulha seja maior que a área do feixe e assim possa obstruí-lo sem espalhar.

Para garantir condições de única colisão na passagem do feixe pelo jato gasoso e que não tenha colisões entre os átomos de gás alvo, temos que considerar que o jato de gás efusivo esteja no regime de fluxo molecular. Isso pode ser obtido controlando a entrada do gás alvo através da agulha (monitorando a pressão de entrada) e observando se obtemos alguma leitura resultante da interação entre átomos do gás alvo. Uma densidade ideal para jato gasoso implica numa pressão em torno de 0,07 mTorr, o que corresponde a uma pressão na câmara (G_2) de interação do feixe com o jato de $1,0 \times 10^{-6}$ Torr, medido por um medidor por ionização Bayard-Alpert [18]. Durante todo experimento essa pressão foi mantida constante, a fim de garantir o regime de colisão única.

3.9. A CÂMARA DE DETECÇÃO

Estamos tratando de dois experimentos diferentes (medida da seção de choque total e medida da seção de choque parcial) compartilhando o mesmo aparato experimental (mesma linha de feixe), sendo que para a medida da seção de choque total absoluta usaremos um detector e para a seção de choque parcial absoluta usaremos outro detector. Além disso, o posicionamento físico do detector será diferente, possibilitando a detecção, separadamente, de cada experimento. Os tópicos a seguir, tratam separadamente da câmara para detecção da seção de choque total e da câmara para detecção da seção de choque parcial.

3.9.1 CÂMARA DE DETECÇÃO – MEDIDAS TOTAIS ABSOLUTAS DE CAPTURA E PERDA

A câmara de detecção, D, destinada a medidas da seção de choque total absoluta é o último setor da linha de canalização (ver Figura 3.2 e Figura 3.27), onde os feixes,

com diferentes estados de carga, que foram defletidos ao longo da linha pelas placas E_1 , E_2 e E_3 , serão detectados. A câmara fica acoplada a um dispositivo que permite movimentos tanto na vertical quanto na horizontal e, é mantida numa pressão da ordem de 10^{-8} Torr.

No centro da tampa da câmara é fixo um detector sensível à posição X-Y, composto por duas placas de micro-canais - MCPs (microchannel plates), com uma área ativa de diâmetro igual a 38,0 mm, onde conseguimos detectar o feixe principal e os demais estados de carga resultantes da interação com o gás alvo. A MCP é um arranjo de canais multiplicadores de elétrons paralelos uns aos outros, com cerca de $10^4 - 10^7$ canais por placa. É importante destacar que os resultados experimentais são independentes da posição onde os íons batem na MCP e para usos prolongados da mesma região de interação do feixe com a MCP, pode ocorrer uma saturação dessa região (influenciando na contagem do feixe incidente), tornando necessário varrer regiões diferentes de interação do feixe com a MCP. Neste experimento, a taxa da contagem foi mantida abaixo de 500 contagens/segundo para minimizar as perdas de contagem. Mais informações da MCP são fornecidas na Ref. [69].

Um aparato eletrônico teve que ser montado para controlar e medir a posição e contagem dos íons que chegam ao detector. Para isso foi necessário um computador que continha um programa chamado VDG, que mostra a contagem e posição dos íons na tela do computador; um divisor de tensão (“BIAS VOLTAGE DIVIDER”); um pré-amplificador (“DETECTOR PRE AMP”) e um “POSITION COMPUTER”.

Os equipamentos estão ligados da seguinte forma: No fim da linha, 4 saídas se ligam ao “BIAS VOLTAGE DIVIDER” (o divisor de tensão da MCP) e, este por sua vez está ligado a uma fonte de alimentação. Outras 4 saídas, no fim da linha, levam o sinal da MCP que deve ser amplificado para o “DETECTOR PRE AMP”. Os cabos deixam o detector e se ligam na parte “PRE AMP IN” do “POSITION COMPUTER”, que faz a contagem dos feixes. Do “POSITION COMPUTER” duas saídas X e Y se conectam ao computador por meio de um cabo (“LONG CABLE”). No computador são feitas as leituras de posição e contagem dos feixes, com o uso do programa VDG, que já foi testado e funciona perfeitamente. A conexão com o fim da linha está devidamente aterrada para evitar descargas elétricas acidentais. Na Figura 3.23, temos uma imagem ilustrativa do funcionamento do programa VDG na tela do computador e na Figura 3.24 temos a representação da distribuição dos aparatos eletrônicos.

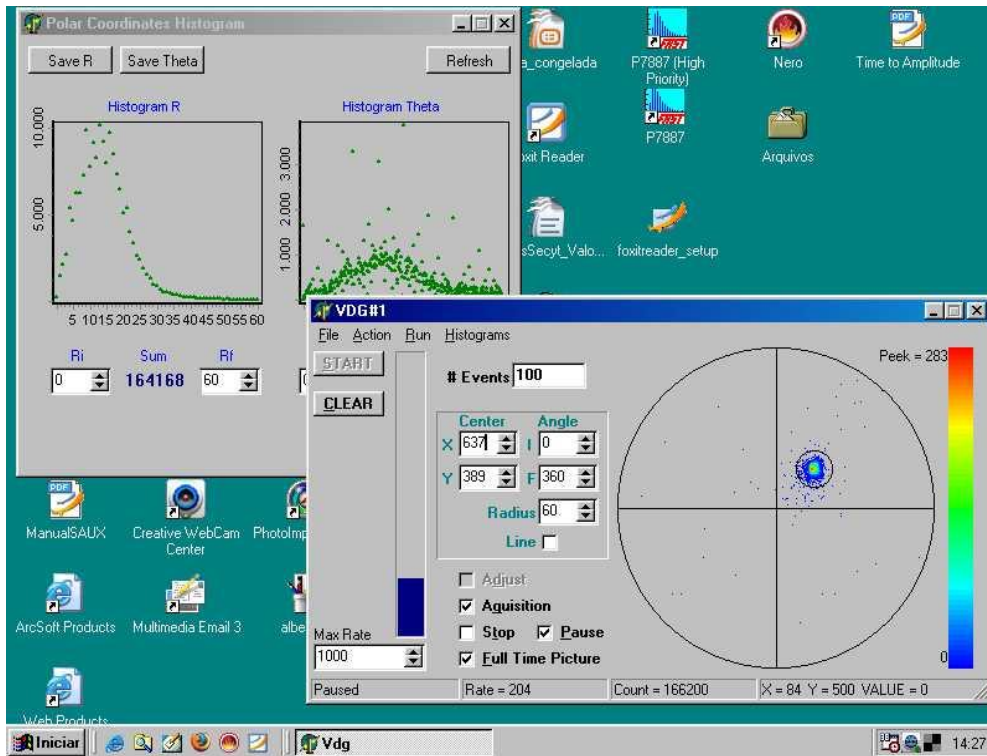


Figura 3.23: Imagem ilustrativa do funcionamento do programa VDG na tela do computador.

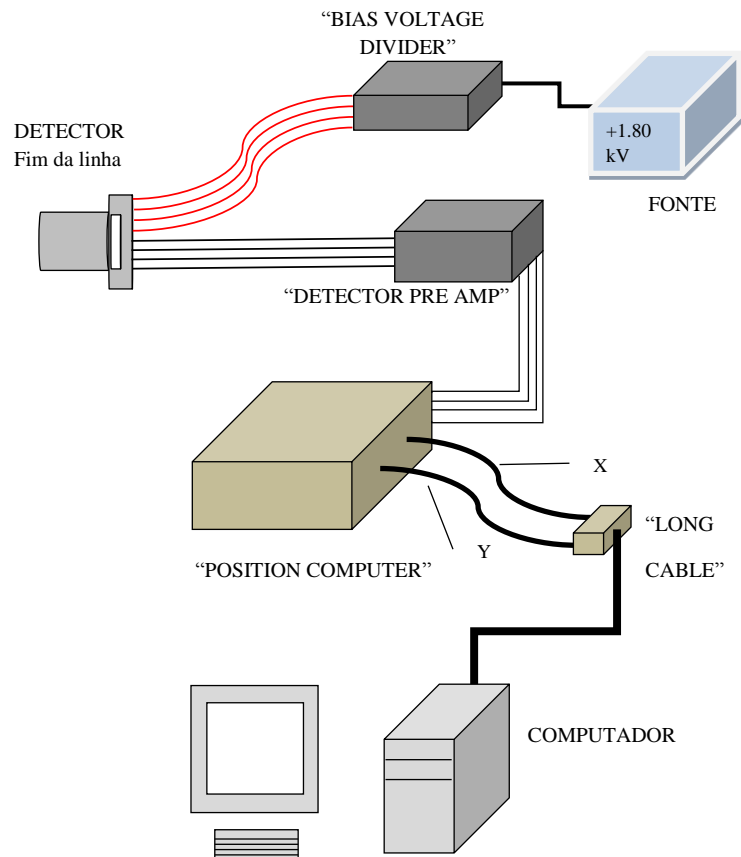


Figura 3.24: Esquema de montagem dos equipamentos eletrônicos usados para aquisição e leitura dos feixes, da seção de choque total.

3.9.2 CÂMARA DE DETECÇÃO – MEDIDAS PARCIAIS ABSOLUTAS

Um arranjo especial é usado para coletar os dados obtidos nas medidas das seções de choque parciais absolutas. A câmara de jato gasosa G_2 (ver Figura 3.2) está a uma distância de 1,5 m da célula gasosa G_1 e no seu interior está um espectrômetro de massa por tempo de voo (“time-of-flight mass spectrometer – TOFMS”) acoplado ao jato gasoso. O espectrômetro está acoplado a um manipulador de movimento linear e a agulha do jato gasoso está acoplada a um manipulador de movimento XYZ. Uma ilustração esquemática da distribuição física em 3D dos componentes internos e externos a célula G_2 pode ser vista na Figura 3.25, que foi retirada da Ref. [18], onde os eixos são definidos da seguinte forma: eixo X positivo (sentido para direita) na direção axial do espectrômetro, o eixo Y positivo (sentido do feixe) na direção ao longo do feixe de projéteis e o eixo Z negativo (sentido do jato gasoso) na direção do jato gasoso. Os detectores internos a célula G_2 são: detector de elétrons (“electron detector”), que detecta os elétrons provenientes da interação e o detector de íon de recuo (“recoil ion detector”), que detecta os íons de Ar provenientes da interação; os detectores externos a G_2 são: detector sensível à posição (“projectile ion detector – Position Sensitive detector – PS”), que é o mesmo detector D (ver Figura 3.2) usado na obtenção das medidas da seção de choque total absoluta, onde é possível observar todos os estados de carga do projétil simultaneamente; um detector barreira de superfície, indicado como SB (“surface barrier”) que detecta íons do projétil, Li^{2+} , proveniente da interação com o jato gasoso, onde, somente um estado de carga do projétil é detectado por vez e um copo de Faraday (“Faraday cup – FC”) usado para eventual monitoramento da alta intensidade do feixe. O espectrômetro é constituído de dois lados: um lado para o tempo de voo dos elétrons (“TOF e-side”) e um lado para tempo de voo dos íons de recuo (“TOF R-Side”). Note que, o detector barreira de superfície e o copo de Faraday podem se mover no eixo X, esse movimento está indicado na Figura 3.25 por duas setas consecutivas.

O detector sensível à posição (PS) tem uma área ativa com 38,0 mm de diâmetro e o detector barreira de superfície (SB) tem uma área ativa com 12,0 mm de diâmetro. O ajuste fino para seleção do estado de carga que será colhido no detector barreira de superfície é feito pelas placas de deflexão eletrostática E_3 (ver Figura 3.2).

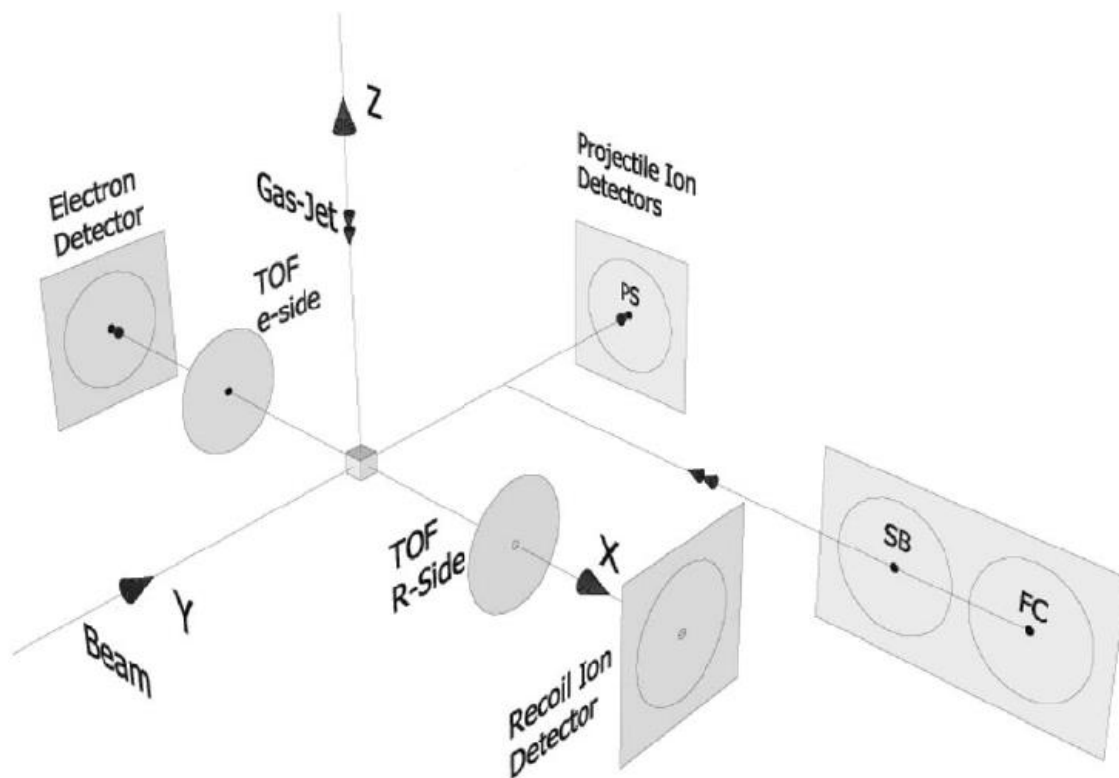


Figura 3.25: Ilustração esquemática (retirada da Ref, [18]) dos componentes usados na aquisição da seção de choque absoluta. Os eixos são definidos da seguinte forma: eixo X positivo na direção axial do espectrômetro, o eixo Y positivo na direção ao longo do feixe de projéteis e o eixo Z negativo na direção do jato gasoso. Os detectores internos a célula G_2 são: detector de elétrons (“electron detector”) e detector de íon de recuo (“recoil ion detector”); os detectores externos a G_2 são: detector sensível à posição (“projectile ion detector – Position Sensitive detector – OS”); um detector barreira de superfície, indicado como SB (“surface barrier”) e um copo de Faraday (“Faraday cup – FC”). O espectrômetro é constituído de dois lados: um lado para o tempo de voo dos elétrons (“TOF e-side”) e um lado para tempo de voo dos íons de recuo (“TOF R-Side”). Note que, o detector barreira de superfície e o copo de Faraday podem se mover no eixo X.

Uma foto ilustrativa da célula de colisão G_2 (para medidas parciais absolutas) e da câmara, onde fica o detector sensível à posição (PS, ou detector D) e o detector barreira de superfície (SB) é apresentado a seguir na Figura 3.26 e Figura 3.27, respectivamente.

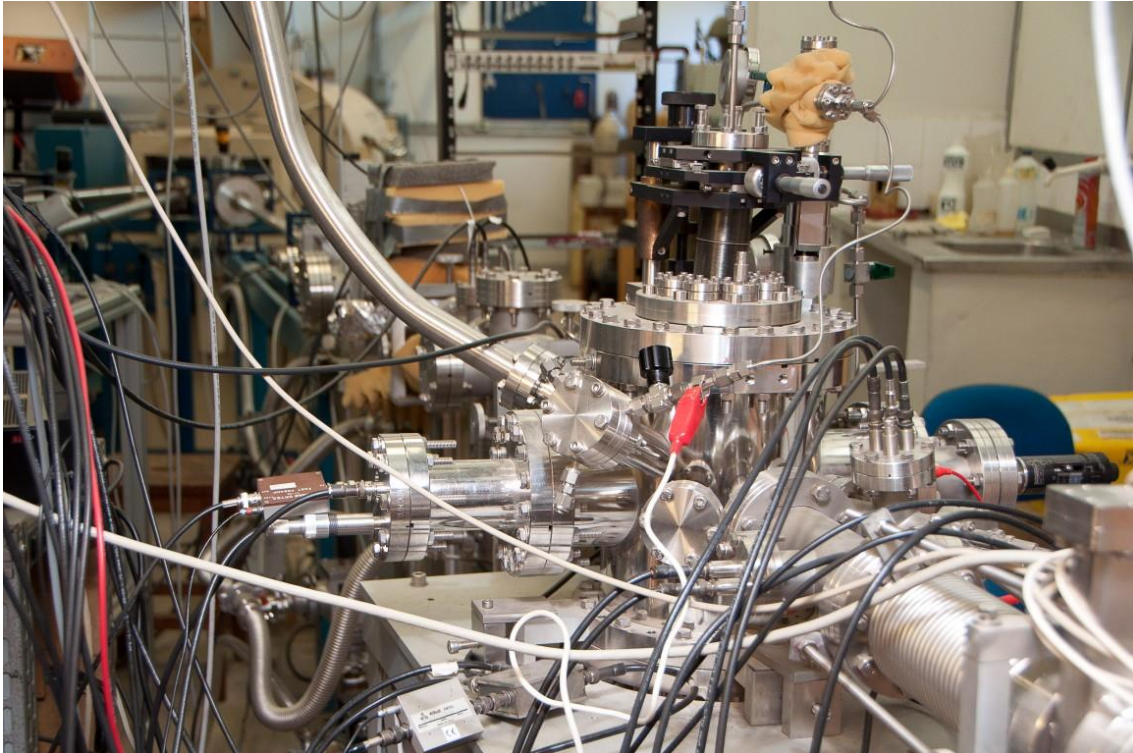


Figura 3.26: Foto ilustrativa da célula de colisão G_2 (para medidas parciais absolutas).

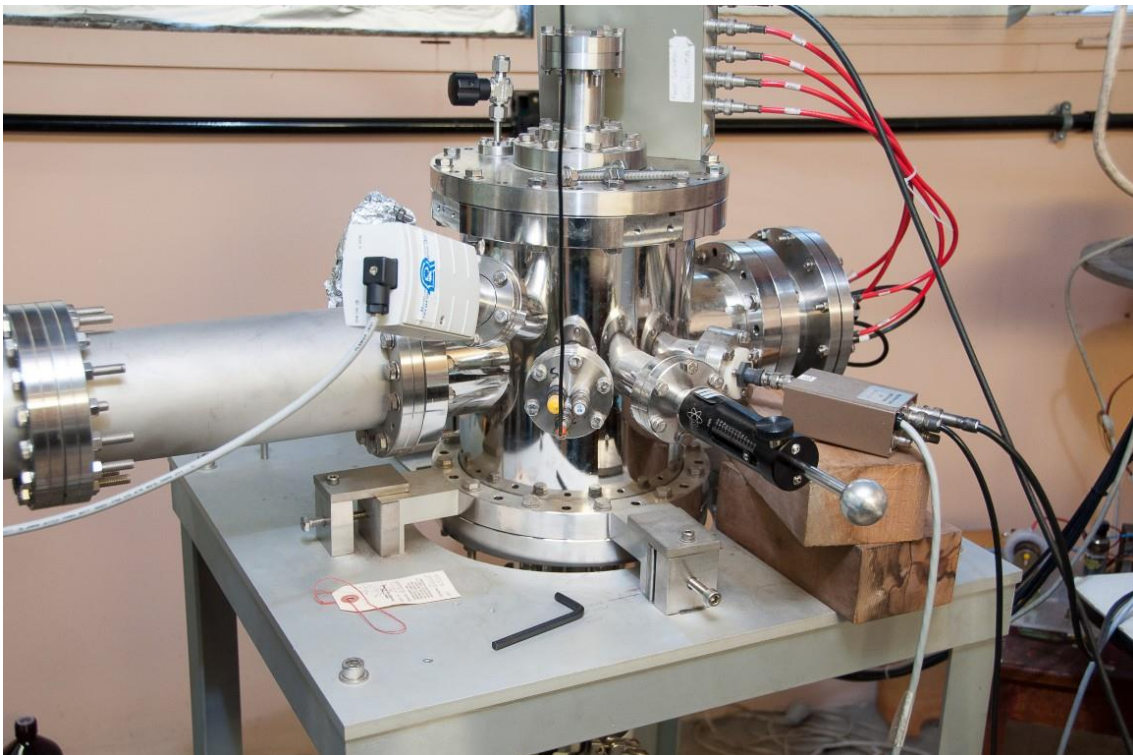


Figura 3.27: Foto ilustrativa da câmara onde fica localizado o detector sensível a posição (PS ou detector D), localizado no final da linha. Nesta câmara, está localizado também o detector barreira de superfície (SB), que pode se mover no eixo X (ver Figura 3.25).

O espectrômetro de massa por tempo de voo no interior da célula gasosa G_2 pode ser esquematizado na Figura 3.28, onde o objetivo não é especificar a montagem ou as dimensões, mas enfatizar que existem duas regiões de aceleração distintas e divididas pela região de interação projétil – jato gasoso. Na região de interação/extração existem anéis com potencial simétrico de $\pm 350\text{ V}$ mantendo um campo elétrico uniforme de 70 V/mm , atraindo os íons de recuo ou fragmentos iônicos positivos para direita e atraindo os elétrons emitidos para esquerda, percorrendo direções opostas. O diâmetro interno dos anéis é de 26 mm , o diâmetro do detector de íon de recuo é de 24 mm , o diâmetro do detector de elétron é um detector cônico (multiplicador de elétron) de 12 mm de diâmetro e os elementos do tempo de voo estão separados por aproximadamente 10 mm [18].

É importante destacar que, após definir a região de interação (jato gasoso – feixe de projeteis, ver tópico 3.8.2), a região de interseção é colocada exatamente no meio entre os anéis de extração com o auxílio de um manipulador linear horizontal. E, o potencial da agulha do jato gasoso é definido como sendo terra, deixando o potencial nos anéis (região de extração) simétricos e homogêneos, com potencial terra no centro.

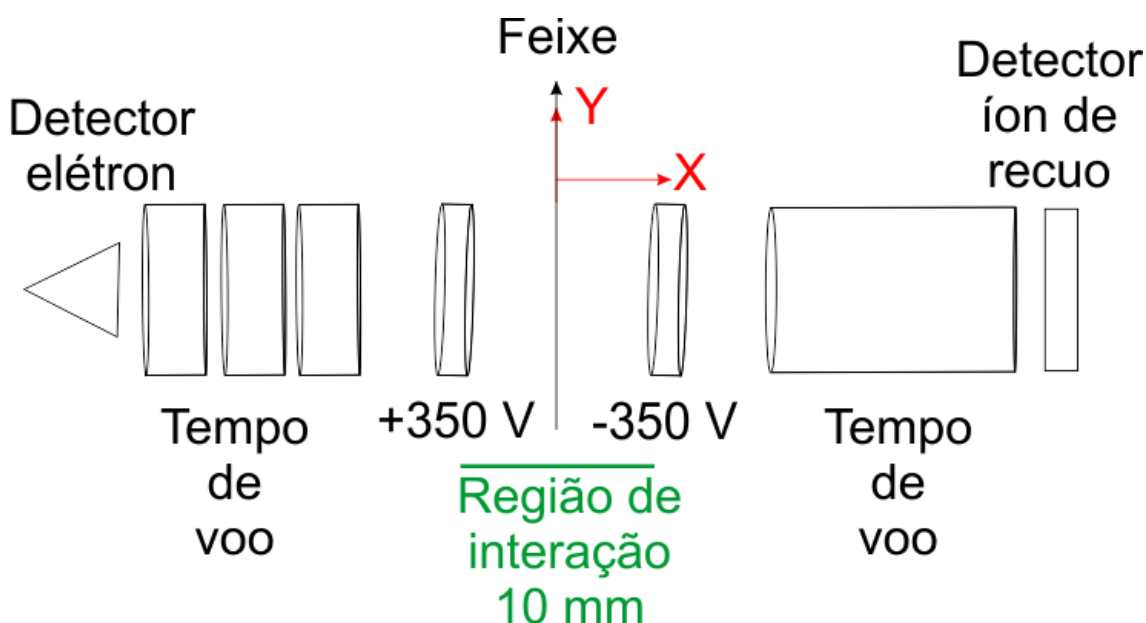


Figura 3.28: Ilustração esquemática do espectrômetro por tempo de voo localizado dentro da câmara de colisão G_2 . Na parte direita temos o tempo de voo para os íons de recuo e na parte esquerda o tempo de voo para os elétrons. A ilustração não contém detalhes de montagem do espectrômetro, tampouco representa corretamente as dimensões.

Para determinar a seção de choque parcial absoluta de Li^{2+} em Ar é necessário detectar [18]:

- 1 – os íons de recuo de Ar produzidos durante a colisão.
- 2 – os elétrons ejetados do alvo de Ar durante a colisão.
- 3 – o feixe principal e seus subprodutos (estado de cargas diferentes provenientes da colisão).

Como os elétrons ejetados e os íons de recuo têm estados de carga diferentes, negativo e positivo, respectivamente, eles são acelerados para regiões diferentes do espectrômetro de massa por tempo de voo, como mostrado na Figura 3.25 e Figura 3.28. Simultaneamente, são colhidas informações do feixe principal ou seus subprodutos no detector barreira de superfície (somente um canal pode ser estudado por vez, captura, perda ou ionização), os íons de recuo e os elétrons ejetados. Para que os dados sejam devidamente correlacionados, ou seja, a detecção do projétil no detector barreira de superfície, os elétrons ejetados no detector de elétrons e os íons de recuo no detector de íons de recuo, um arranjo de eletrônica deve ser feito.

Uma ilustração para a montagem da eletrônica usada na obtenção dos dados da seção de choque absoluta é apresentada em forma de diagrama de blocos na Figura 3.29.

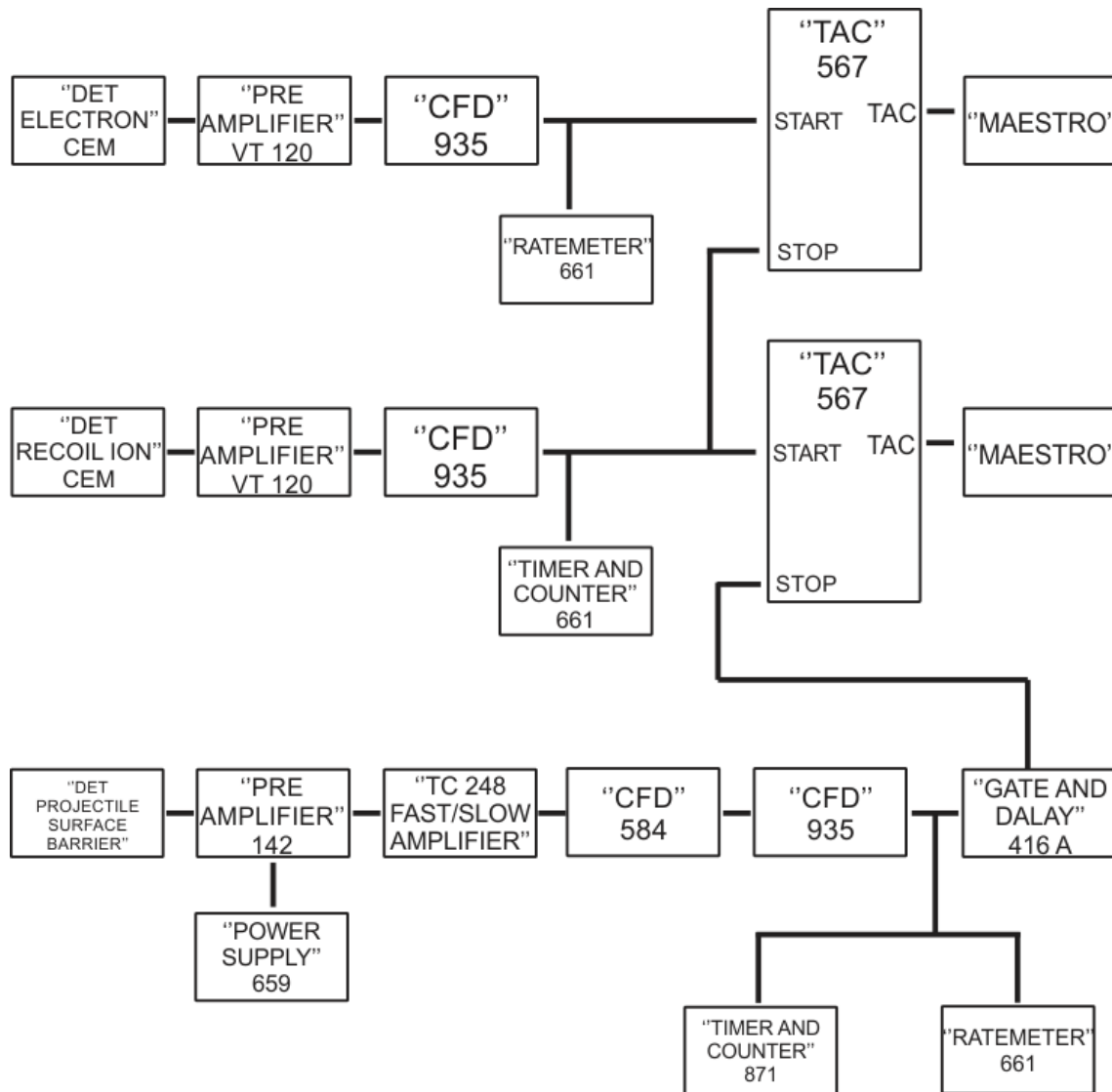


Figura 3.29: Esquema ilustrativo da montagem dos equipamentos eletrônicos usados na obtenção dos dados referentes as medidas das seções de choque parciais absolutas.

O espectro por tempo de voo é determinado pela coincidência simultânea de dois experimentos: a coincidência entre o elétron ejetado e o íon de recuo; e a coincidência entre íon de recuo e o estado de carga selecionado do projétil [18], uma ilustração para estas coincidências é mostrada na Figura 3.30. O sinal dos detectores de íons de recuo e elétrons alimenta um pré-amplificador (“VT 120 Fast-Preamp”) cujos pulsos são enviados a um discriminador de fração constante (“935 Quad CFD”), enquanto o sinal pre-amplificado (“142 Preamplifier”) do detector de projéteis é adicionalmente inserido em um “FAST/SLOW” amplificador (“Tennelec TC 248 fast/slow amplifier”). A saída dos pulsos do “CFD” vão acionar o sinal “START” e “STOP” para os conversores tempo-amplitude (“567 TAC/SCA”). Para a coincidência elétron – íon de recuo, o sinal

de start para medidas do tempo de voo é gerado pelos elétrons ejetados e o sinal de stop é dado pelos íons de recuo. O tempo de atraso entre a chegada dos elétrons ejetados e o dos íons (íons de recuo) produzidos simultaneamente dão informação sobre o estado de carga dos diferentes íons. Um intervalo de tempo de voo típico para os íons de recuo é da ordem de μs [18]. A diferença de tempo é processada por um conversor tempo-analógico “TAC” e a análise da altura do pulso da saída do “TAC” são processados por um “TRUMP-PCI-2k” analisador multicanal num cartão “PCI-plug-in” e num software emulador “Maestro-32 MCA” e, então armazenados no computador. Para a coincidência íon de recuo – projétil, o sinal de fração constante do projétil é atrasado por um gerador “gate and delay” (“416A GDG”) e neste caso, o sinal de start é dado pelo íon de recuo e o sinal de stop é dado pelo sinal atrasado ($\approx 15 \mu\text{s}$) do projétil. De maneira análoga, o tempo de atraso entre a chegada dos íons de recuo e o dos projéteis espalhados simultaneamente, dão informação sobre o estado de carga dos diferentes íons.

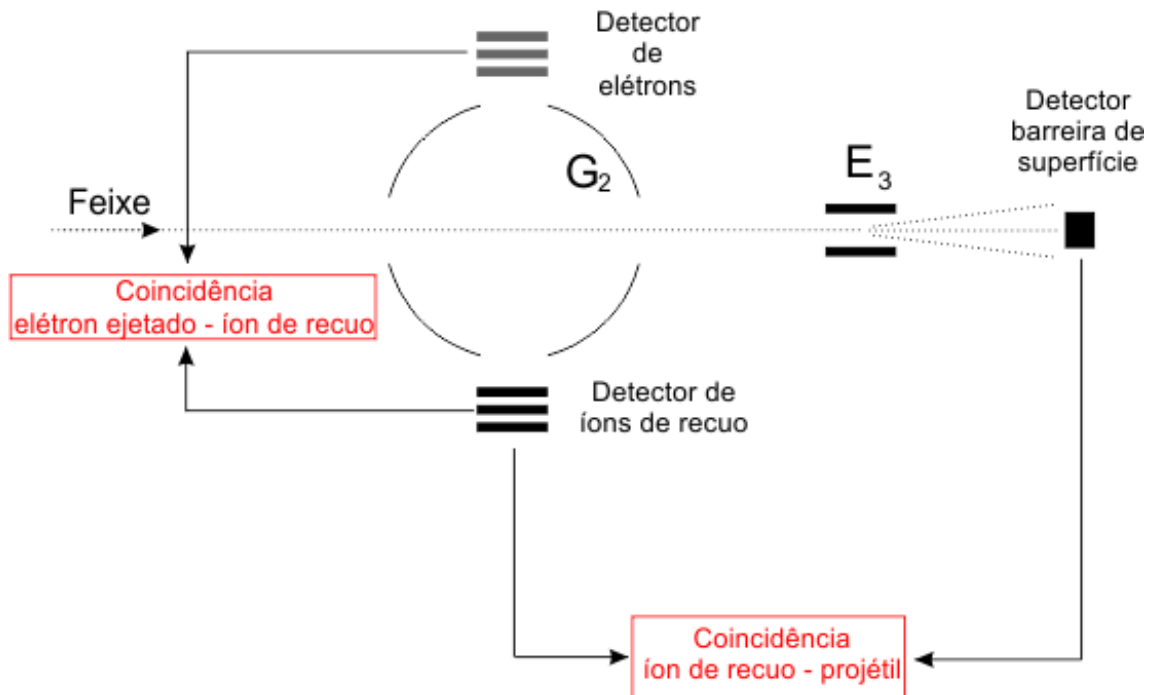


Figura 3.30: Esquema ilustrativo com vista superior da célula gasosa G_2 , da placa de deflexão eletrostática E_3 e o do detector barreira de superfície, mostrando as coincidências entre elétron ejetado – íon de recuo e, íon de recuo – estado de carga do projétil.

Para cada canal estudado, perda, captura ou ionização; dois espectros em coincidência são registrados: a coincidência entre o elétron ejetado e o íon de recuo (elétron – íon recuo); e a coincidência entre íon de recuo e o estado de carga selecionado do projétil (íon recuo – projétil). Uma ilustração desse espectro é apresentada na Figura 3.31, para o canal de ionização de Li^{2+} com energia de 1,5 MeV colidindo em Ar. Note que na figura abaixo, na parte (a), coincidência elétron – íon de recuo, o pico de maior estado de carga está à esquerda do pico de menor estado de carga, isso porque os elétrons estão dando o start e o maior estado de carga sofre maior aceleração e chega primeiro, fazendo com que a diferença de tempo entre o start e o stop seja menor e, assim, os eventos são acumulados nas posições ou canais menores. Na parte (b), coincidência íon de recuo – projétil, o íon de recuo aciona o start e, como o sinal do projétil já sofre um atraso (“gate and delay – 416A” para dar o stop), o maior estado de carga sofre a maior aceleração (fazendo com que ele faça o percurso em menos tempo), porém, isso aumenta o intervalo de tempo entre o start e o stop, pois ele chega primeiro e tem que esperar o tempo de “delay” terminar para que ocorra o stop, fazendo com que o maior estado de carga fique à direita do menor estado de carga e o espectro fica invertido em relação à parte (a).

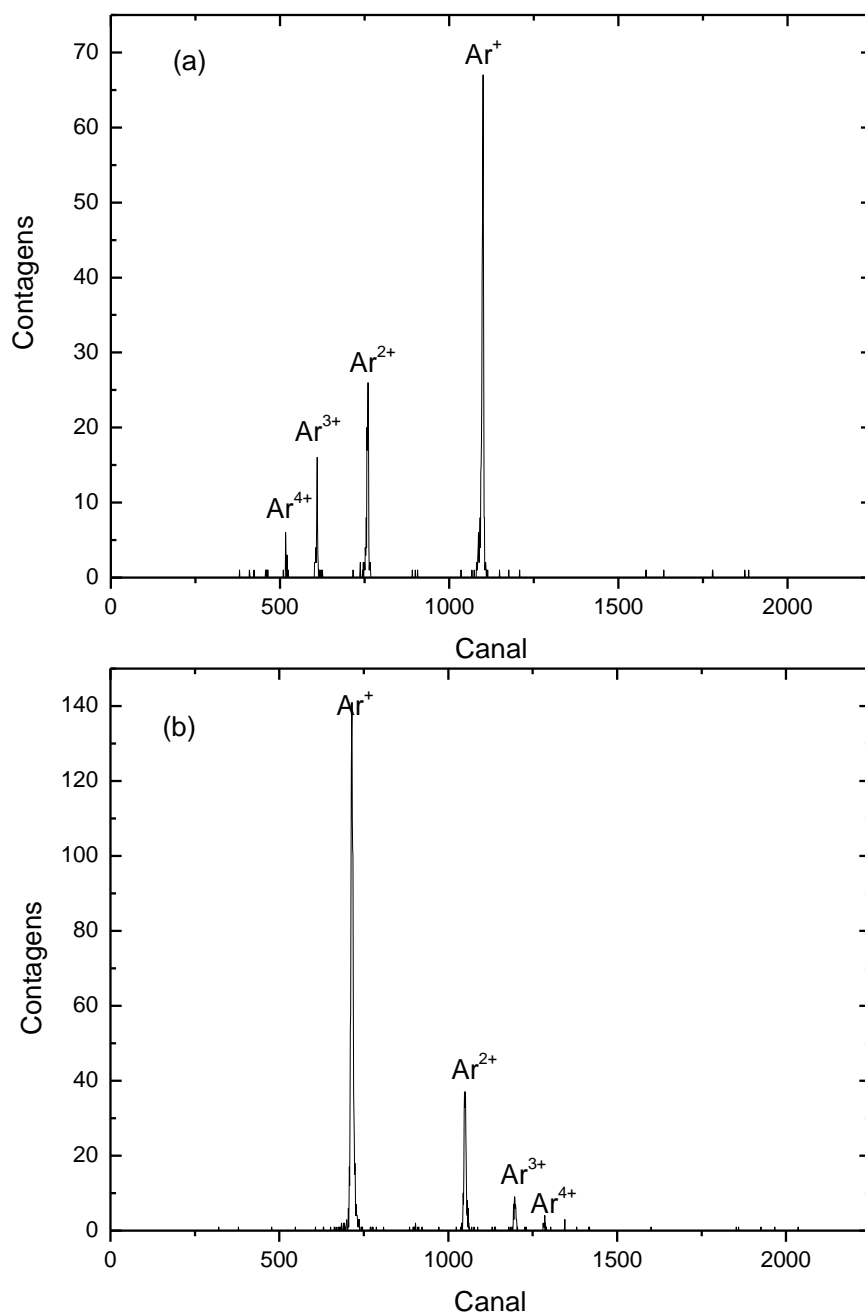


Figura 3.31: Espectro de massa por tempo de voo de Ar, onde temos: (a) representa a coincidência entre o elétron ejetado e o íon de recuo (elétron – recuo); (b) representa a coincidência entre íon de recuo e o estado de carga selecionado do projétil (recuo – projétil), produzidos na colisão de projéteis de Li^{2+} com energia de 1,5 MeV. O canal analisado é de ionização.

3.10. MEDIDA DENOMINADA “TOTAL ABSOLUTA”

Este tipo de medida é conhecido como seção de choque total absoluta, ou seção de choque total, ou simplesmente “medida single”. Neste tipo de medida, são detectados somente o feixe incidente e seus subprodutos atômicos e/ou iônicos, independentemente do estado de carga k do alvo ionizado produzido na colisão, ou seja, não é feita uma medida direta para conhecer o estado de carga final do alvo. Depois de passar pela câmara de colisão, os estados de carga do feixe emergente são separados pelas placas de deflexão, E_2 , E_3 ; e são detectados individualmente na câmara de detecção D . Assim, medimos o número de partículas em cada um dos estados de carga possíveis. Como o feixe de partículas pode sofrer ou não uma transição de carga; vamos considerar, N_{qi} , como o número de partículas que sofrem transição de um estado de carga inicial q para um estado da carga final i , em um dado intervalo de tempo. Neste mesmo intervalo de tempo, o número total de partículas no feixe definido como N_t tem que ser conservado e será igual à soma do número de partículas que trocaram de carga (N_{qi}) e os que não trocaram de carga (N_{qq}), ou seja, uma soma sobre todos os estados de carga:

$$N_t = \sum_i N_{qi} . \quad (3.13)$$

Para cada estado de carga, podemos associar uma fração que é dada por:

$$Y_i = \frac{N_{qi}}{N_t} . \quad (3.14)$$

A variação da composição da carga do feixe durante a passagem através da matéria (gás alvo) é descrita pela equação diferencial abaixo [13],

$$\frac{dY_i}{d\pi} = \sum_{q \neq i} (\sigma^{qi} Y_q - \sigma^{iq} Y_i), \quad (3.15)$$

onde π é uma grandeza proporcional à densidade atômica do alvo, também chamada de “espessura do alvo”; Y é a fração de íons num dado estado de carga (i ou q); σ^{qi} é a

seção de choque do processo dentro do qual o íon com carga q é transformado em um com carga i ; σ^{iq} é a seção de choque do processo dentro do qual o íon com carga i é transformado em um com carga q . Na Equação (3.15), o primeiro termo da direita representa o aumento na fração de íons no estado de carga i através da transformação do estado de carga i proveniente de todos os possíveis estados de carga q ; enquanto o segundo termo representa o decréscimo na fração de íons com estado de carga i através da transformação de todos os possíveis estados de carga q , vindos do estado de carga i . Para achar a solução da equação diferencial acima, vamos considerar a “espessura do alvo” π sendo pequena (para que possamos desprezar os termos de ordem π^2 e superiores) e também assumir que a pressão do gás é muito baixa; de modo que as transformações de volta ao estado de carga i de todos os outros possíveis estados de carga q são insignificantes, ou seja, os termos de colisões múltiplas podem ser desprezados. Com essas considerações, chegamos à solução dada por [13]

$$Y_i(\pi) = Y_i(0) + \sigma^{qi} \left(\pi - \frac{1}{2} \sum_{j=-1}^Z \sigma^{jq} \pi^2 \right) + \text{termos de ordem } \pi^3 \text{ ou maiores}$$

$$Y_i = Y_{i0} + \sigma^{qi} \pi, \quad (3.16)$$

onde o termo Y_{i0} representa a fração no estado de carga i proveniente da interação do projétil com o gás residual na linha ou do espalhamento nas bordas dos colimadores, ou ainda, representa a fração no estado de carga quando a espessura do alvo (π) é zero (conhecido como “background”).

Para que a Equação (3.16) seja válida, temos que considerar a aproximação feita anteriormente, tal que π deve ser pequeno e proporcional à densidade atômica do alvo. Para isso, devemos considerar a temperatura do gás como sendo a temperatura ambiente e a pressão na câmara gasosa sendo bem pequena (menor que 1,0 mTorr) [13]. Assim, temos uma situação onde o gás rarefeito se comporta aproximadamente como um gás ideal ($PV = NkT$; onde P é a pressão da amostra do gás, V é o volume da amostra de gás, N é o número de moléculas do gás, k é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do gás) e podemos assumir uma condição de fluxo molecular, onde a colisão entre o gás alvo é desprezível e a colisão dupla por parte do projétil também é desprezível. De forma que esta aproximação nos leva a equação dada por [70]:

$$\pi(P) = nl_{\text{ef}} = \frac{Pl_{\text{ef}}}{kT}, \quad (3.17)$$

onde n é a densidade atômica do alvo, l_{ef} é o comprimento efetivo do alvo, P é a pressão na câmara gasosa, T é temperatura na câmara e k é a constante de Boltzmann ($k = 1,034 \times 10^{-16}$ mTorr cm³ K⁻¹).

Substituindo a Equação (3.17) na Equação (3.16) e fazendo algumas manipulações algébricas é possível chegar à expressão para a seção de choque (σ^{qi}) em Mega barn – Mb (onde 1Mb = 10⁻¹⁸ cm²),

$$\sigma^{qi}(\text{Mb ou } 10^{-18} \text{ cm}^2) = \frac{\left[2,823 \times 10^4 \left(1 + \frac{T(^{\circ}\text{C})}{273} \right) \right]}{l_{\text{ef}}(\text{cm})} \left[\frac{Y_i - Y_{i0}}{P(\text{mTorr})} \right]. \quad (3.18)$$

Para determinar a seção de choque na equação (3.18), ainda falta determinar com precisão o comprimento efetivo (l_{ef}) do alvo. A realização desta tarefa apresenta dificuldades devido ao fato do gás alvo se difundir para regiões de alto vácuo ao longo do caminho do feixe, através dos colimadores de entrada e saída da câmara. Uma estimativa para difusão do gás é feita [13] considerando que a pressão cai isotropicamente a partir dos colimadores de entrada e saída (condição de propagação isotrópica) e, que a pressão a uma distância igual ao raio da abertura do colimador é a mesma do que dentro da câmara gasosa (condição de escoamento molecular). Com base nestas considerações, temos que a pressão efetiva e o comprimento efetivo não afetam a seção de choque independentemente, mas sim, de forma dependente. O valor efetivo total deste produto (usado na Equação 3.18) é dado por [13]

$$Pl_{\text{ef}} = P_0 l_0 + P_0(r_1 + r_2) + P_0 r_1^2 \int_{r_1}^{\infty} \frac{dr}{r^2} + P_0 r_2^2 \int_{r_2}^{\infty} \frac{dr}{r^2}, \quad (3.19)$$

$$Pl_{\text{ef}} = P_0 [l_0 + 2(r_1 + r_2)], \quad (3.20)$$

onde P é a pressão efetiva, l_{ef} é o comprimento efetivo, P_0 é a pressão medida na câmara gasosa (com auxílio de um manômetro capacitivo – baratron), l_0 é o comprimento geométrico da câmara gasosa ($l_0 = 120,0 \text{ mm}$), r_1 é o raio do colimador de entrada ($r_1 = 1,25 \text{ mm}$), r_2 é o raio do colimador de saída ($r_2 = 1,50 \text{ mm}$) e $l_{\text{ef}} = 125,5 \text{ mm}$ ou $l_{\text{ef}} = 12,55 \text{ cm}$.

Substituindo a Equação (3.20) na Equação (3.18), podemos reescrever:

$$\sigma^{qi} (\text{Mb ou } 10^{-18} \text{ cm}^2) = \frac{\left[2,823 \times 10^4 \left(1 + \frac{T(^{\circ}\text{C})}{273} \right) \right]}{[l_0 + 2(r_1 + r_2)](\text{cm})} \left[\frac{Y_i - Y_{i0}}{P_0 (\text{mTorr})} \right]. \quad (3.21)$$

Observe que a Equação (3.21) fornece uma relação linear entre as grandezas seção de choque (σ), pressão medida na câmara (P_0) e fração de estado de carga (Y). Para calcular a seção de choque experimental é usado um método conhecido como método do crescimento (“growth-rate method”) [13], onde é feito um ajuste linear de mínimos quadrados da fração de estado de carga medida em função da pressão na câmara gasosa. Assim, para cada energia estudada, além de Y_{i0} , também são feitas medidas de Y_i em várias pressões. A Figura 3.32 mostra a fração do estado de carga Li^{3+} em função da pressão na câmara gasosa, para a reação $\text{Li}^{2+} + \text{Ar} \rightarrow \text{Li}^{3+}$ com energia do feixe de 2,0 MeV.

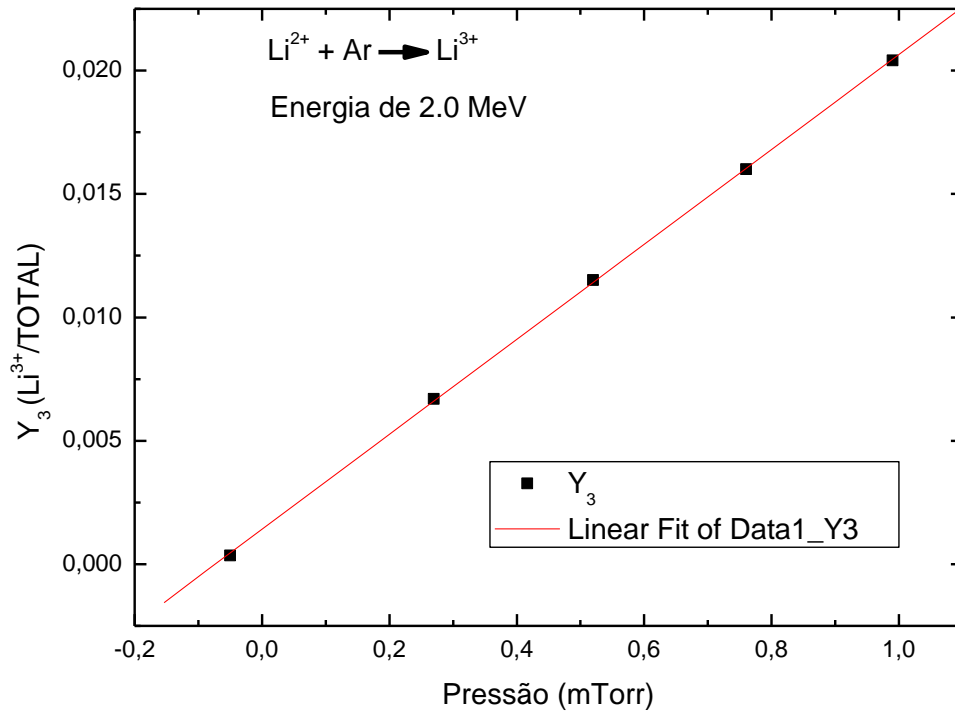


Figura 3.32: Fração de estados de carga (número de Li³⁺ detectados/número total de íons incidentes – Li⁰ + Li⁺ + Li²⁺ + Li³⁺) para Li²⁺ em Ar a 2.0 MeV em função da pressão na célula gasosa.

Para cada fração de estado de carga e para cada energia do feixe é feito um gráfico em função da pressão na célula gasosa, em seguida é feito um ajuste linear e o resultado deste ajuste (o coeficiente angular) é usado para determinar a seção de choque na Equação (3.21).

As principais fontes de erro nas medidas das seções de choque estão associadas aos erros na medida da pressão ($\approx 3\%$), do comprimento efetivo da câmara ($\approx 5\%$) e erros associados ao ajuste linear entre 2% – 20%.

3.11. MEDIDA DENOMINADA “PARCIAL ABSOLUTA”

Este tipo de medida é conhecido como seção de choque parcial absoluta, seção de choque parcial ou simplesmente como “medida coincidente”. Nestas medidas é possível identificar o estado de carga final do projétil e alvo simultaneamente. Porém

um único canal da colisão pode ser medido por vez, pois um único estado de carga do projétil é coletado no detector de barreira de superfície, enquanto todos os estados de carga do alvo podem ser detectados simultaneamente. Sendo assim, são necessários procedimentos iguais para medir separadamente cada canal da colisão, ou seja, é necessária uma medida do canal de perda, ionização e captura eletrônica do projétil. A cada medida de um dado canal, com uma dada energia do projétil, coletamos simultaneamente dois espectros, um da coincidência entre o íon de recuo e o projétil; e outro da coincidência entre o íon de recuo e os elétrons emitidos [18]. É importante destacar que nesta medida da seção de choque parcial absoluta feita na câmara G_2 , a câmara G_1 fica em alto vácuo como o restante da linha.

Neste trabalho, o canal de perda eletrônica, captura eletrônica e ionização direta são medidos separadamente para cada energia do projétil. Estes processos podem ser ilustrados a seguir, onde o estado de carga do alvo é denotado por k .

i – Captura eletrônica:



ii – Perda eletrônica:



iii – Ionização direta:



O processo de obtenção experimental da seção de choque em coincidência será descrito a seguir e segue o mesmo procedimento usado por Wolff e colaboradores [18].

Analisando inicialmente o espectro da coincidência entre os elétrons emitidos e os íons de recuo (elétron – íon recuo), quanto à distribuição do estado de carga dos íons de recuo resultante da emissão de pelo menos um elétron do alvo, podemos associar um número de átomos alvo (neste trabalho Ar) ionizados N_k^e que é proporcional a: número de projéteis incidentes I_0 ; o produto da densidade do alvo e o comprimento efetivo (

$n \times I_{ef}$); a eficiência de detecção de pelo menos um elétron ε_k^e ; a eficiência de detecção do íon de recuo Ar^{k+} , ε_k^r ; e a seção de choque da produção de íon de recuo associada à emissão de pelo menos um elétron σ_k^e . Portanto, o número de átomos ionizados pode ser escrito como [18],

$$N_k^e = (n \times I_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon_k^e \times \varepsilon_k^r \times \sigma_k^e. \quad (3.25)$$

A partir do espectro íon de recuo – projétil, a Equação (3.25) pode ser escrita como:

$$N_k^{canal} = (n \times I_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon_k^r \times \sigma_k^{canal}, \quad (3.26)$$

onde N_k^{canal} é o número de coincidências para cada estado de carga k do alvo, o índice sobrescrito “canal” é referente ao canal de captura eletrônica, perda eletrônica e ionização direta. É importante destacar na Equação (3.26) que a eficiência de detecção do detector barreira de superfície é assumida como 1, isso é verdade se as condições de trabalho não excedem a taxa de 2000 contagens/segundo [18].

Os próximos passos exigem que uma aproximação seja feita com relação à eficiência de detecção para cada íon de recuo. Vamos assumir que ε_k^r é independente do estado de carga do íon de recuo, ou seja, $\varepsilon_k^r = \varepsilon^r$. Com o intuito de checar essa eficiência de detecção, nós comparamos a razão Ar^{2+}/Ar^+ para próton com energia de 2,0 MeV no canal de ionização, com dados existentes e bem conhecidos na literatura de Melo e colaboradores [71], onde obtivemos um bom acordo, uma eficiência da ordem de 82%. Um espectro do tempo de voo referente à coincidência íon recuo – projétil para o canal de ionização de $H^+ + Ar \rightarrow H^+ + Ar^{k+} + ke^-$, com energia do feixe de 2,0 MeV é mostrado na Figura 3.33 a seguir (parte (a)). Na parte (b), temos uma reta de calibração obtida a partir da relação linear entre $(m/q)^{1/2}$ e o canal, separando e identificando satisfatoriamente cada elemento.

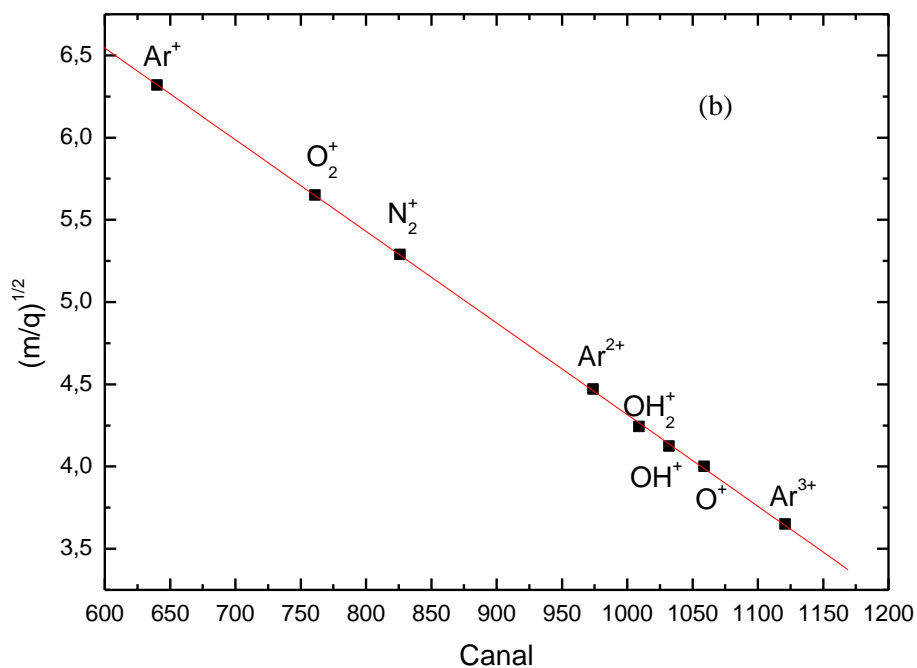
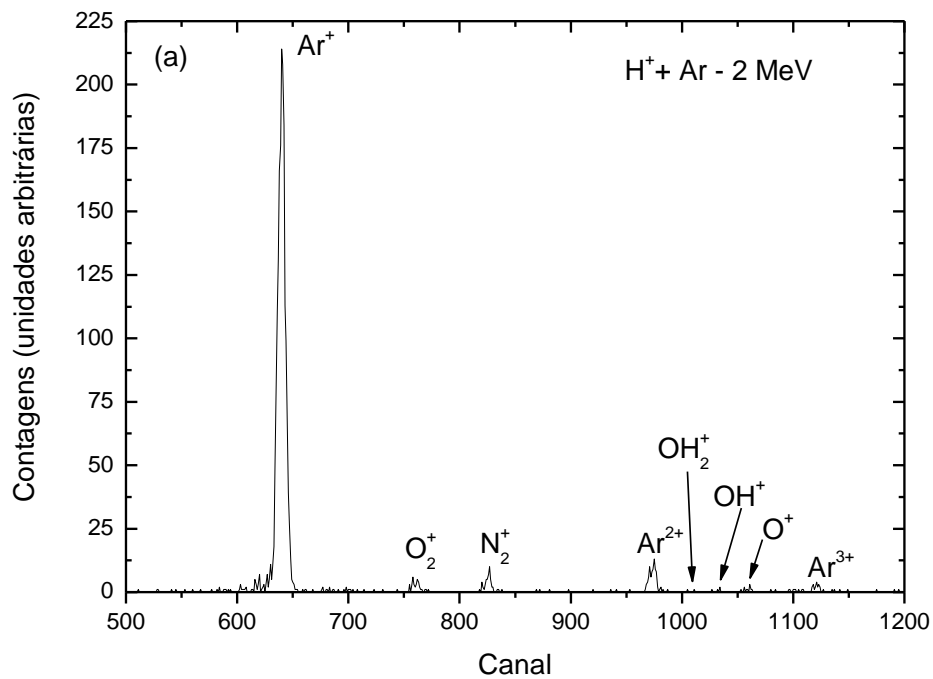


Figura 3.33: Representação do canal de ionização direta de Argônio por próton com energia de 2,0 MeV. Onde: (a) é o espectro referente à coincidência íon recuo – projétil para ionização direta; (b) é a reta de calibração obtida a partir da relação linear entre a razão $(m/q)^{1/2}$ e o canal.

Para os 3 canais, perda, captura e ionização, nós temos 2 espectros associados a cada canal e com os dados desses espectros é que tiramos as equações que fornecem informações das seções de choque parciais absolutas. Essas equações são mostradas separadamente para cada canal a seguir:

i – Captura eletrônica: partindo da Equação (3.25), o espectro elétron – íon recuo fornece:

$$(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon^r = \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k \varepsilon_k^e \sigma_k^e} \right), \quad (3.27)$$

onde consideramos todos os possíveis estados de carga k .

Partindo da Equação (3.26), o espectro íon recuo – projétil fornece:

$$(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon^r = \left(\frac{\sum_k N_k^{captura}}{\sum_k \sigma_k^{captura}} \right). \quad (3.28)$$

ii – Perda eletrônica: partindo da Equação (3.25), o espectro elétron – íon recuo fornece:

$$(n \times l_{ef})' \times I_0' \times \varepsilon^r = \left(\frac{\sum_k O_k^e}{\sum_k \varepsilon_k^e \sigma_k^e} \right). \quad (3.29)$$

Partindo da Equação (3.26), o espectro íon recuo – projétil fornece:

$$(n \times l_{ef})' \times I_0' \times \varepsilon^r = \left(\frac{\sum_k O_k^{perda}}{\sum_k \sigma_k^{perda}} \right). \quad (3.30)$$

iii – Ionização direta: partindo da Equação (3.25), o espectro elétron – íon recuo fornece:

$$(n \times l_{ef})'' \times I_0'' \times \varepsilon^r = \left(\frac{\sum_k M_k^e}{\sum_k \varepsilon_k^e \sigma_k^e} \right). \quad (3.31)$$

Partindo da Equação (3.26), o espectro íon recuo – projétil fornece:

$$(n \times l_{ef})'' \times I_0'' \times \varepsilon^r = \left(\frac{\sum_k M_k^{ionização}}{\sum_k \sigma_k^{ionização}} \right). \quad (3.32)$$

É importante ressaltar que nas Equações (3.27 – 3.32), não é necessário manter as mesmas condições do feixe e do alvo para as medidas de captura eletrônica, perda eletrônica e ionização direta, por exemplo, quando a captura eletrônica é pequena comparada à ionização direta, pode-se aumentar o número de projéteis incidentes I_0 sem prejudicar o método. As condições do feixe e do alvo devem ser mantidas durante a medida de um mesmo canal, mas podem variar de um canal pra outro sem invalidar o método [18].

Outra observação importante é que a soma do pico da coincidência para captura é denotada por N_k , para a perda é O_k e para a ionização direta é M_k .

Voltando a Equação (3.26), para o caso onde o canal de captura é analisado, podemos escrever:

$$N_k^{captura} = (n \times l_{ef})'' \times I_0'' \times \varepsilon^r \times \sigma_k^{captura}. \quad (3.33)$$

Substituindo a Equação (3.28) na Equação (3.33),

$$N_k^{captura} = \left(\frac{\sum_k N_k^{captura}}{\sum_k \sigma_k^{captura}} \right) \times \sigma_k^{captura}. \quad (3.34)$$

Lembrando que $\sum_k \sigma_k^{captura} = \sigma^{cap.Total}$, ver Equação (2.5), onde $\sigma^{cap.Total}$ é a seção de choque total de captura eletrônica obtida via método do crescimento (medidas singles).

Fazendo manipulação algébrica, obtemos a seção de choque parcial absoluta de captura eletrônica:

$$\sigma_k^{captura} = \left(\frac{N_k^{captura}}{\sum_k N_k^{captura}} \right) \times \sigma^{cap.Total}. \quad (3.35)$$

Neste procedimento de obtenção da seção de choque parcial absoluta, a seção de choque total de captura será usada para obter os canais de perda e ionização. Para isso é necessário estabelecer uma conexão entre as equações do canal de captura e o canal de perda ou ionização, por exemplo.

Para a perda eletrônica, a informação na Equação (3.27) e Equação (3.29) será usada para estabelecer uma conexão com a seção de choque total de captura eletrônica. Dessa forma, vamos dividir a Eq. (3.27) pela Eq. (3.29),

$$\left(\frac{(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \mathcal{E}^r}{(n \times l_{ef})' \times I_0' \times \mathcal{E}^r} \right) = \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k \mathcal{E}_k^e \sigma_k^e} \right) \times \left(\frac{\sum_k \mathcal{E}_k^e \sigma_k^e}{\sum_k O_k^e} \right). \quad (3.36)$$

$$\left(\frac{(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \mathcal{E}^r}{(n \times l_{ef})' \times I_0' \times \mathcal{E}^r} \right) = \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k O_k^e} \right). \quad (3.37)$$

E também dividindo a Eq. (3.28) pela Eq.(3.30),

$$\left(\frac{(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \mathcal{E}^r}{(n \times l_{ef})' \times I_0' \times \mathcal{E}^r} \right) = \left(\frac{\sum_k N_k^{captura}}{\sum_k \sigma_k^{captura}} \right) \times \left(\frac{\sum_k \sigma_k^{perda}}{\sum_k O_k^{perda}} \right). \quad (3.38)$$

Lembrado que $\sum_k \sigma_k^{captura} = \sigma^{cap.Total}$,

$$\left(\frac{(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon^r}{(n \times l_{ef})' \times I_0' \times \varepsilon^r} \right) = \left(\frac{\sum_k \sigma_k^{perda}}{\sigma^{cap.Total}} \right) \times \left(\frac{\sum_k N_k^{captura}}{\sum_k O_k^{perda}} \right). \quad (3.39)$$

Substituindo a Eq. (3.37) na Eq. (3.39) temos,

$$\left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k O_k^e} \right) = \left(\frac{\sum_k \sigma_k^{perda}}{\sigma^{cap.Total}} \right) \times \left(\frac{\sum_k N_k^{captura}}{\sum_k O_k^{perda}} \right). \quad (3.40)$$

Manipulando algebricamente a Eq. (3.40), obtemos uma equação para a seção de choque total de perda eletrônica dada por,

$$\sum_k \sigma_k^{perda} = \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k O_k^e} \right) \times \left(\frac{\sum_k O_k^{perda}}{\sum_k N_k^{captura}} \right) \times \sigma^{cap.Total}, \quad (3.41)$$

Tomando como base a Eq. (3.34), mas agora considerando o canal de perda eletrônica, a equação assume a forma:

$$O_k^{perda} = \left(\frac{\sum_k O_k^{perda}}{\sum_k \sigma_k^{perda}} \right) \times \sigma_k^{perda}, \quad (3.42)$$

que pode ser manipulada para obter:

$$\sum_k \sigma_k^{perda} = \left(\frac{\sum_k O_k^{perda}}{O_k^{perda}} \right) \times \sigma_k^{perda}. \quad (3.43)$$

Substituindo a Eq. (3.43) na Eq. (3.41) e fazendo manipulação algébrica, podemos escrever a seção de choque parcial absoluta de perda eletrônica na forma,

$$\sigma_k^{perda} = \left(\frac{O_k^{perda}}{\sum_k O_k^e} \right) \times \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k N_k^{captura}} \right) \times \sigma^{cap.Total}. \quad (3.44)$$

Um processo similar é usado para a ionização direta, vamos estabelecer uma conexão entre a Eq. (3.27) e Eq. (3.31). Dividindo a Eq. (3.27) pela Eq. (3.31),

$$\left(\frac{(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon^r}{(n \times l_{ef})'' \times I_0'' \times \varepsilon^r} \right) = \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k \varepsilon_k^e \sigma_k^e} \right) \times \left(\frac{\sum_k \varepsilon_k^e \sigma_k^e}{\sum_k M_k^e} \right). \quad (3.45)$$

$$\left(\frac{(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon^r}{(n \times l_{ef})'' \times I_0'' \times \varepsilon^r} \right) = \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k M_k^e} \right). \quad (3.46)$$

Dividindo a Eq. (3.28) pela Eq. (3.32),

$$\left(\frac{(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon^r}{(n \times l_{ef})'' \times I_0'' \times \varepsilon^r} \right) = \left(\frac{\sum_k N_k^{captura}}{\sum_k \sigma_k^{captura}} \right) \times \left(\frac{\sum_k \sigma_k^{ionização}}{\sum_k M_k^{ionização}} \right). \quad (3.47)$$

Lembrado que $\sum_k \sigma_k^{captura} = \sigma^{cap.Total}$, a Eq. (3.47) pode ser escrita na forma,

$$\left(\frac{(n \times l_{ef}) \times I_0 \times \varepsilon^r}{(n \times l_{ef})'' \times I_0'' \times \varepsilon^r} \right) = \left(\frac{\sum_k N_k^{captura}}{\sigma^{cap.Total}} \right) \times \left(\frac{\sum_k \sigma_k^{ionização}}{\sum_k M_k^{ionização}} \right). \quad (3.48)$$

Substituindo a Eq. (3.46) na Eq. (3.48),

$$\left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k M_k^e} \right) = \left(\frac{\sum_k \sigma_k^{ionização}}{\sigma^{cap.Total}} \right) \times \left(\frac{\sum_k N_k^{captura}}{\sum_k M_k^{ionização}} \right). \quad (3.49)$$

Manipulando algebricamente a Eq. (3.49) obtemos a seguinte equação para a seção de choque,

$$\sum_k \sigma_k^{ionização} = \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k M_k^e} \right) \times \left(\frac{\sum_k M_k^{ionização}}{\sum_k N_k^{captura}} \right) \times \sigma^{cap.Total}. \quad (3.50)$$

Usando a mesma relação das Eqs. (3.34), (3.42) e (3.43), agora para o canal de ionização, podemos escrever:

$$\sum_k \sigma_k^{ionização} = \left(\frac{\sum_k M_k^{ionização}}{M_k^{ionização}} \right) \times \sigma_k^{ionização}. \quad (3.51)$$

Substituindo a Eq. (3.51) na Eq. (3.50) e fazendo manipulação algébrica, podemos escrever a seção de choque parcial absoluta de ionização direta na forma,

$$\sigma_k^{ionização} = \left(\frac{M_k^{ionização}}{\sum_k M_k^{ionização}} \right) \times \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k M_k^e} \right) \times \left(\frac{\sum_k M_k^{ionização}}{\sum_k N_k^{captura}} \right) \times \sigma^{cap.Total}. \quad (3.52)$$

$$\sigma_k^{ionização} = \left(\frac{M_k^{ionização}}{\sum_k M_k^e} \right) \times \left(\frac{\sum_k N_k^e}{\sum_k N_k^{captura}} \right) \times \sigma^{cap.Total}. \quad (3.53)$$

Com o auxílio das Eq. (3.35), Eq. (3.44) e Eq. (3.53), podemos achar a seção de choque parcial absoluta de captura eletrônica, perda eletrônica e ionização direta, respectivamente.

Uma combinação total dos erros associados às medidas da seção de choque parcial para a captura eletrônica, perda eletrônica e ionização direta, na maioria dos casos estão entre 20 – 30 %.

CAPÍTULO 4

4. RESULTADOS

Neste capítulo serão mostrados os resultados experimentais obtidos utilizando os métodos experimentais descritos anteriormente e, a comparação com os modelos teóricos descritos no Capítulo 2.

4.1. SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL

As medidas das seções de choque total absoluta foram feitas para projéteis de Li^+ e Li^{2+} colidindo com Argônio (Ar). A seção de choque total de perda e captura eletrônica, para os projéteis de Li^+ e Li^{2+} , são listadas na Tabela A.1 e Tabela A.2, respectivamente, em função da energia (E em MeV) do projétil, no Apêndice A – TABELAS.

Os pontos experimentais de Li^+ em Ar são apresentados na Figura 4.1, como função da energia do projétil e comparado com dados de outros autores. Os dados experimentais estão separados em captura simples, perda simples e perda dupla. A seção de choque total de captura eletrônica, σ^{10} , são representados por: triângulo sólido vermelho, este trabalho; triângulo vazio magenta invertido, Dmitriev e colaboradores [72]. A seção de choque de perda simples, σ^{12} , são: quadrado sólido preto, este trabalho; estrela sólida azul, Dmitriev e colaboradores [72]. A seção de choque de perda dupla, σ^{13} , são: quadrado vazio preto, este trabalho; estrela vazia azul, Dmitriev e colaboradores [72].

A Figura 4.2 ilustra o comportamento da seção de choque total de Li^{2+} em Ar, comparado com dados de outros autores, como função da energia do projétil. A seção de choque de captura eletrônica, σ^{21} , são: quadrado preto, este trabalho; triângulo vazio azul, Dmitriev e colaboradores [72]. A seção de choque de perda eletrônica, σ^{23} , são: círculo preto, este trabalho; triângulo vazio invertido magenta, Dmitriev e colaboradores

[72]; estrela vazia vermelha, Pivovarov e colaboradores [73]; círculo vazio verde, Knudsen e colaboradores [74]. A seção de choque de captura dupla, σ^{20} , são: diamante vazio oliva, Dmitriev e colaboradores [72].

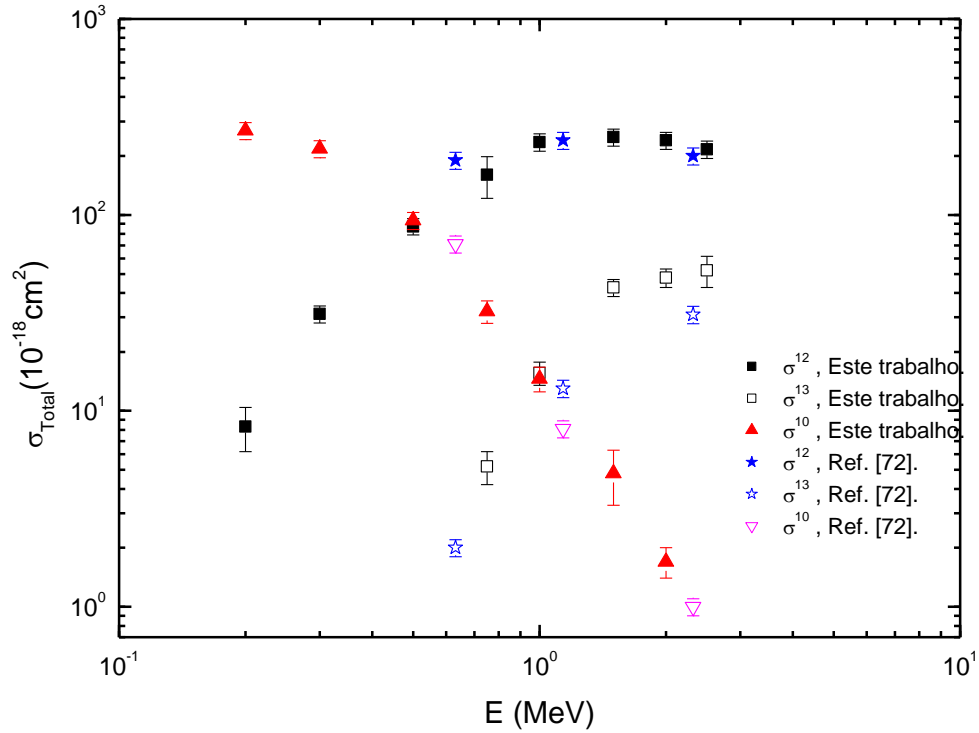


Figura 4.1: Seção de choque total (em Mb ou 10^{-18} cm^2) de Li^+ em Ar como função da energia do projétil (0,20 – 2,50 MeV). A seção de choque total de captura eletrônica, σ^{10} , são representados por: triângulo vermelho, este trabalho; triângulo vazio invertido magenta, Dmitriev e colaboradores [72]. A seção de choque total de perda simples, σ^{12} , são: quadrado sólido preto, este trabalho; estrela sólida azul, Dmitriev e colaboradores [72]. A seção de choque total de perda dupla, σ^{13} , são: quadrado vazio preto, este trabalho; estrela vazia azul, Dmitriev e colaboradores [72].

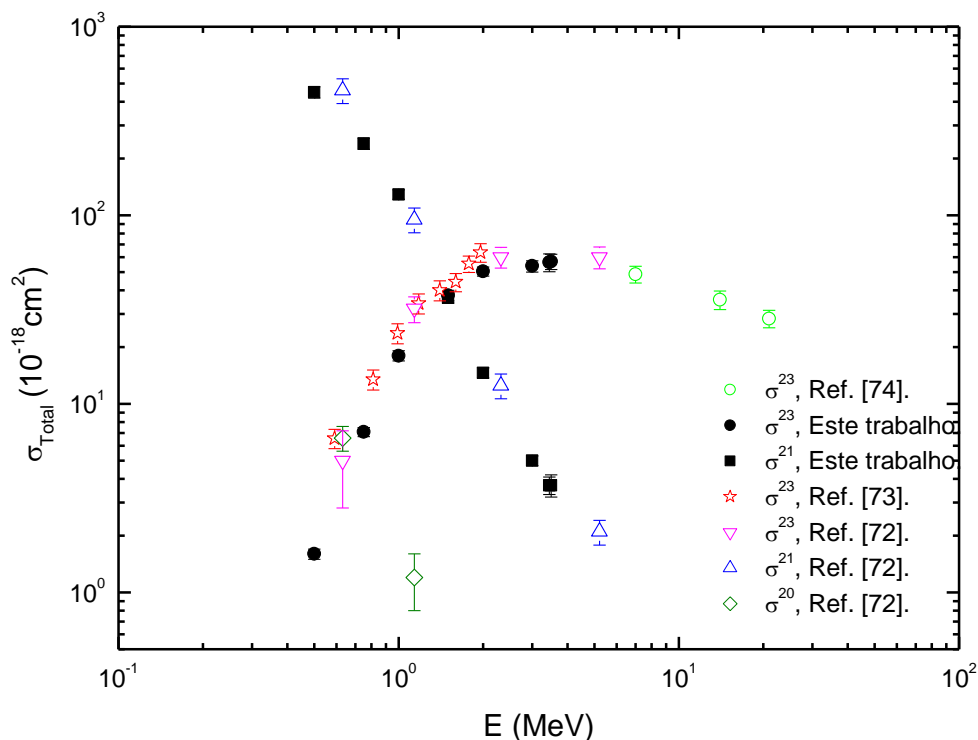


Figura 4.2: Seção de choque total (em Mb ou 10^{-18} cm^2) de Li^{2+} em Ar como função da energia do projétil (0,50 – 3,50 MeV). A seção de choque de captura eletrônica, σ^{21} , são: quadrado preto, este trabalho; triângulo vazio azul, Dmitriev e colaboradores [72]. A seção de choque de perda eletrônica, σ^{23} , são: círculo preto, este trabalho; triângulo vazio invertido magenta, Dmitriev e colaboradores [72]; estrela vazia vermelha, Pivovar e colaboradores [73]; círculo vazio verde, Knudsen e colaboradores [74]. A seção de choque de captura dupla, σ^{20} , são: diamante vazio oliva, Dmitriev e colaboradores [72].

Podemos observar um excelente acordo entre os dados experimentais deste trabalho e de outros autores, para ambos os projéteis (Ver Figura 4.1 e Figura 4.2). Além disso, para baixas energias, a captura eletrônica é o canal dominante em relação ao canal de perda, mas à medida que a energia aumenta, a velocidade do projétil aumenta e a perda eletrônica passa a ser o canal dominante.

O estudo da seção de choque total de perda e captura pode ser estendido, comparando diferentes projéteis, com diferentes estados de carga interagindo com o mesmo alvo, como função da velocidade do projétil e observando como o estado de carga pode influenciar na perda e/ou na captura eletrônica. As Figura 4.3 e Figura 4.4 ilustram esse comportamento para diferentes projéteis, com diferentes estados de carga, de diferentes autores, tais como, C^{3+} e O^{5+} de Melo e colaboradores [16]; He^+ de

Sant'Anna e colaboradores [14]; B^{2+} e C^{3+} de Wolff e colaboradores [17]; He^+ de DuBois [36]; e Li^{2+} de Knudsen e colaboradores [74], como função da velocidade do projétil. É comum nestes casos, expressar a velocidade como uma razão v/v_0 , onde v_0 é a velocidade de Bohr ($v_0 = c/137$). A unidade da velocidade é comumente dada em unidades atômicas – u.a..

O comportamento da seção de choque total de perda eletrônica simples para diferentes projéteis, com diferentes estados de carga, como função da velocidade do projétil, pode ser observado na Figura 4.3 e, o comportamento da seção de choque total de captura eletrônica simples é mostrado na Figura 4.4.

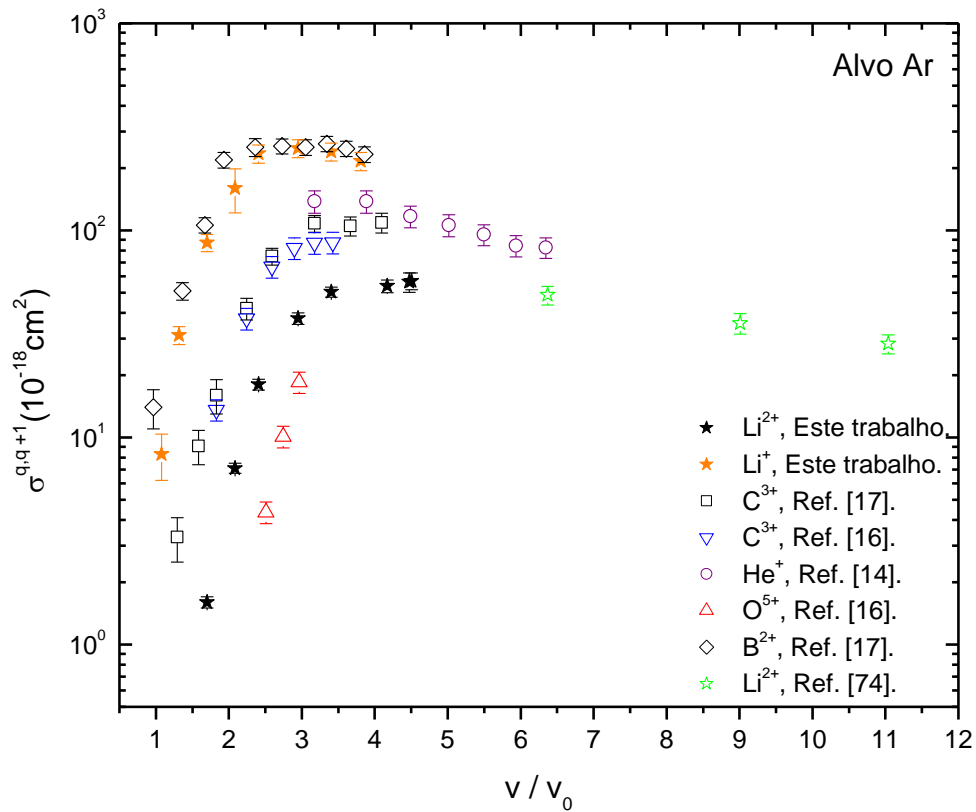


Figura 4.3: Seção de choque total de perda eletrônica simples como função da velocidade do projétil, em alvo de Ar. Os projéteis são: círculo vazio púrpuro, He^+ da Ref. [14]; quadrado vazio preto, C^{3+} da Ref. [17]; triângulo vazio invertido azul, C^{3+} da Ref. [16]; estrela sólida preta, Li^{2+} este trabalho; estrela vazia verde, Li^{2+} da Ref. [74]; triângulo vazio vermelho, O^{5+} da Ref. [16]; diamante vazio preto, B^{2+} da Ref. [17], e estrela sólida laranja, Li^+ este trabalho.

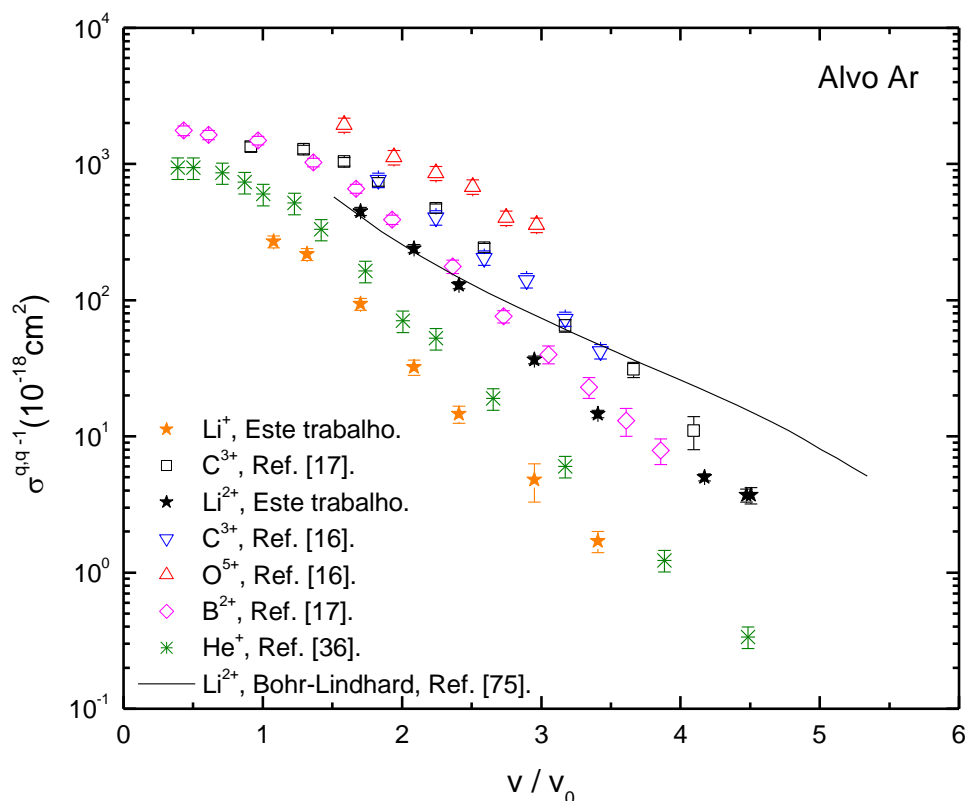


Figura 4.4: Seção de choque total de captura eletrônica simples como função da velocidade do projétil em unidades atômicas, para diferentes projéteis interagindo com Ar. Os símbolos são: quadrado vazio preto, C^{3+} da Ref. [17]; triângulo vazio invertido azul, C^{3+} da Ref. [16]; estrela sólida preta, Li^{2+} este trabalho; triângulo vazio vermelho, O^{5+} da Ref.[16]; diamante vazio magenta, B^{2+} da Ref. [17]; estrela sólida laranja, Li^+ este trabalho; e asterisco oliva, He^+ da Ref. [36]. Teoria: linha sólida preta, para os dados de Li^{2+} , modelo Bohr-Lindhard [75].

A seção de choque total de perda eletrônica simples analisada na Figura 4.3 tem o mesmo comportamento com o aumento da velocidade para todos os projéteis e estados de carga, dependendo fortemente da energia de ionização do elétron ativo do projétil (o qual faz a transição para o contínuo durante a colisão) para baixas velocidades, como esperado. A sequência do aumento da seção de choque de perda, para baixas velocidades, segue as energias de ionização dos vários projéteis iônicos mostrados na Figura 4.3: 138,1 eV para O^{5+} ; 122,4 eV para Li^{2+} ; 75,6 eV para Li^+ ; 64,5 eV para C^{3+} ; 54,4 eV para He^+ e 37,9 eV para B^{2+} [76]. Para altas velocidades, os dados de todos os projéteis coalescem.

Na Figura 4.4, nós podemos observar uma forte dependência entre o estado de carga do projétil e a seção de choque total de captura eletrônica simples para todas as velocidades. O projétil com menor estado de carga tem uma probabilidade menor de capturar um elétron do alvo durante a colisão e quanto maior o estado de carga, maior a probabilidade de captura. Por exemplo, o projétil Li^{2+} tem uma probabilidade de captura menor do que os projéteis C^{3+} e O^{5+} , porém, maior do que o projétil Li^+ . Para altas velocidades, todos os projéteis parecem coalescer para uma mesma curva onde a captura é bem pequena, exceto para o projétil Li^+ e He^+ , cuja captura está bem abaixo dos demais em toda faixa de velocidades.

Uma curva teórica para a seção de choque de captura de Li^{2+} é plotada na Figura 4.4 e serve para “guiar os olhos”. Esses cálculos são baseados no modelo clássico de captura de Bohr-Lindhard [75]. A seção de choque neste modelo é obtida para a captura de um elétron do átomo alvo. O elétron a ser capturado deve ser despreendido do alvo quando o projétil está perto o suficiente para que a força exercida pelo projétil (íon com carga q) sobre o elétron seja maior do que a força de ligação do elétron no átomo alvo. O elétron pode ser capturado se, no referencial do projétil, sua energia potencial for maior que sua energia cinética, isto é, a condição limite para a captura é dada por,

$$\frac{qe^2}{R_c} = \frac{1}{2}mV^2, \quad (4.1)$$

onde m é a massa do elétron, V é a velocidade do íon e R_c é a distância íon-átomo, conhecida como a distância de captura [75].

Da análise das Figura 4.3 e Figura 4.4, podemos concluir que para baixas velocidades, a captura eletrônica é um evento mais provável de ocorrer do que a perda eletrônica, o que favorece o acoplamento dos canais de perda e captura eletrônica num mesmo evento de colisão, nesta faixa de velocidades. O acoplamento desses canais é chamado de perda com transferência – “transfer loss – TL”. O processo TL, em baixas velocidades, foi notado por Montenegro e colaboradores [15] nas colisões de C^{3+} e O^{5+} com alvos de H_2 e He , resultando no estado de carga final do projétil igual ao estado inicial, o que contribui para reduzir a medida experimental da seção de choque total de perda eletrônica.

Com base nas observações feitas acima é esperado um comportamento diferente entre teoria e experimento para os projéteis Li^+ e Li^{2+} . Como em ambos os projéteis serão usados à mesma teoria é esperado que no projétil com estado de carga menor, o acordo entre teoria e experimento seja melhor, pois o acoplamento da perda com a captura no mesmo evento de colisão será minimizado. Na Figura 4.5 a seguir é feita uma comparação entre a seção de choque de perda total (perda simples + perda dupla) experimental de Li^+ em Ar e o cálculo da seção de choque de perda total, combinando o modo de antiblindagem baseado na PWBA [28] e o modo de blindagem baseado no MCL [29].

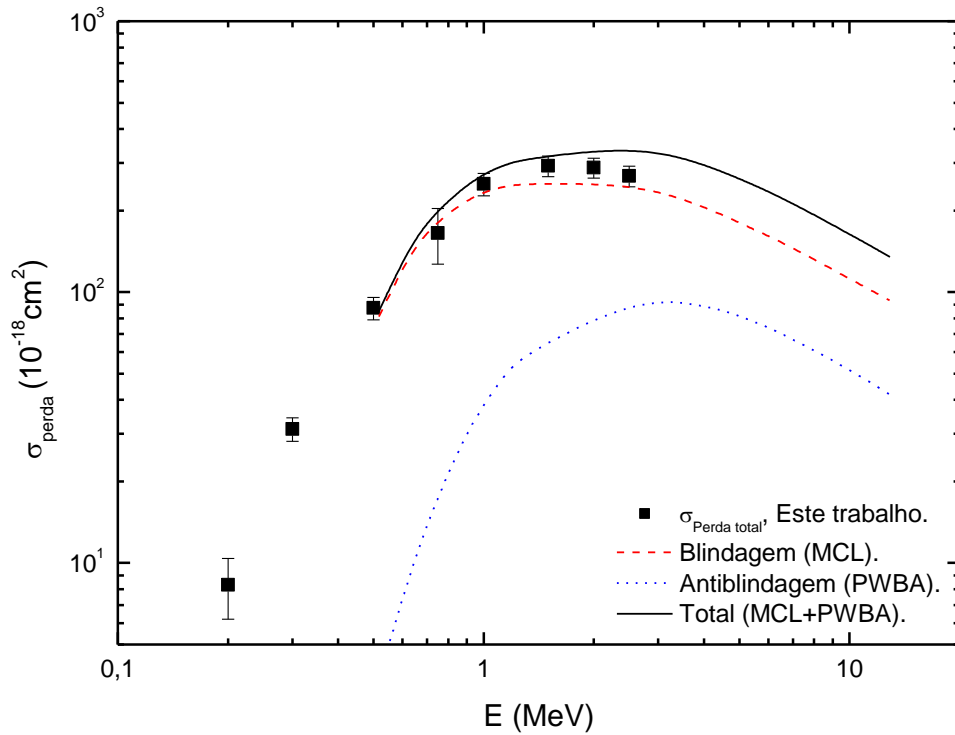


Figura 4.5: Seção de choque de perda total (soma da perda simples + perda dupla) como função da energia do projétil. Experimento: quadrado sólido preto, Li^+ , este trabalho. Teoria: linha pontilhada azul, antiblindagem baseada na PWBA [28]; linha tracejada vermelha, blindagem baseada no MCL [29]; e linha sólida preta, seção de choque de perda total (blindagem + antiblindagem).

Como esperado, neste caso, mesmo em baixa energia, a captura não contribui significativamente para reduzir a seção de choque de perda experimental, uma vez que a probabilidade de perda e a captura num mesmo evento de colisão (TL) foram

drasticamente reduzidas. Dessa forma, teoria e experimento apresentaram um excelente acordo para a seção de choque de perda total.

Note que os cálculos teóricos não cobrem todo intervalo de energia dos dados experimentais. Isso ocorre, pois os cálculos baseados no MCL são restritos para velocidades do projétil maiores do que a velocidade orbital do elétron ativo do projétil [29].

Em relação ao projétil Li^{2+} , a comparação teórica será apresentada na Figura 4.8, onde os modos de blindagem, antiblindagem e processos de 2ª ordem serão discutidos.

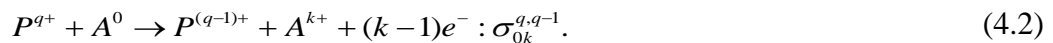
4.2. SEÇÃO DE CHOQUE PARCIAL ABSOLUTA

As seções de choque parciais absolutas serão analisadas separadamente para cada canal: captura eletrônica simples acompanhada da ionização múltipla do alvo, perda eletrônica simples acompanhada da ionização múltipla do alvo e ionização múltipla direta, respectivamente, nas subseções seguintes. A análise separada destes canais foi publicada recentemente por Losqui e colaboradores [39].

A seção de choque parcial absoluta, cuja notação usada será, σ_{jk}^{qi} , onde j e k representam, respectivamente, os estados iniciais e finais do alvo; q e i representam, respectivamente, os estados iniciais e finais do projétil.

4.2.1. CAPTURA SIMPLES ACOMPANHADA DA IONIZAÇÃO MÚLTIPLA DO ALVO

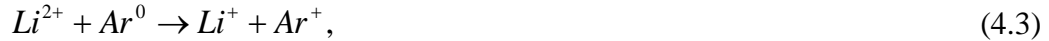
O processo de captura simples acompanhada da ionização múltipla do alvo e a seção de choque correspondente são representados por [20,39],



A seção de choque para a múltipla ionização do alvo, Ar, seguida de uma captura simples de um elétron pelo projétil, Li^{2+} , pode ser representada por σ_{ok}^{21} , com

$k \neq 0$, sendo apresentada na Tabela A.3 (no Apêndice A – TABELAS) como função da energia do projétil.

As maiores contribuições para a seção de choque podem ser atribuídas, ou divididas em dois canais [20,39], um canal é a genuína captura simples de um elétron – CS (“single electron capture – SC”), que é a captura simples com um único elétron removido do alvo – ER (“electron removal – ER”), σ_{01}^{21} , representado pela reação,



e o outro canal é a transferência e ionização – TI (“transfer ionization – TI”), que é captura simples de um elétron com dois elétrons removidos do alvo – ER, σ_{02}^{21} , representado pela reação,



Interessado em verificar o comportamento da captura simples acompanhada do canal de ionização múltipla do alvo com o estado de carga do projétil, dados deste trabalho e de outros autores, como Santos e colaboradores [20] e DuBois [36,77] para CS, $\sigma_{01}^{q,q-1}$, e para TI, $\sigma_{02}^{q,q-1}$, são comparados na Figura 4.6 para o alvo de Ar, com diferentes projéteis e diferentes estados de carga como função da velocidade do projétil em unidades atômicas, v/v_0 (onde v_0 é a velocidade de Bohr). A parte (a) do gráfico representa o canal de captura simples (CS), a parte (b) representa o canal de transferência e ionização (TI) e, a parte (c) representa a razão entre TI e CS, para projéteis diferentes (He^{2+} e Li^{2+}) com o mesmo estado de carga ($q = 2$).

Analisando o canal CS, para velocidades acima de 1 u.a., os dados para os projéteis de He^{2+} (triângulo vazio azul), C^{3+} (diamante vazio laranja) e Li^{2+} (quadrado sólido preto) estão bem próximos e um pouco distante dos dados de He^+ (círculo vazio vermelho). Nesta mesma faixa de energia, para o canal TI, a separação dos projéteis com diferentes estados de carga torna-se ainda maior, embora C^{3+} , He^{2+} e Li^{2+} ainda estejam relativamente próximos um dos outros, eles estão mais distantes do He^+ .

Na parte (c) da Figura 4.6, podemos observar que embora as seções de choque CS e TI para os projéteis Li^{2+} e He^{2+} sejam diferentes, as razões TI/CS são bem

similares na região de velocidades estudadas e dentro da incerteza experimental. Essa similaridade é uma indicação de que a possível diferença na dinâmica desses processos devido à estrutura do projétil é de alguma forma cancelada.

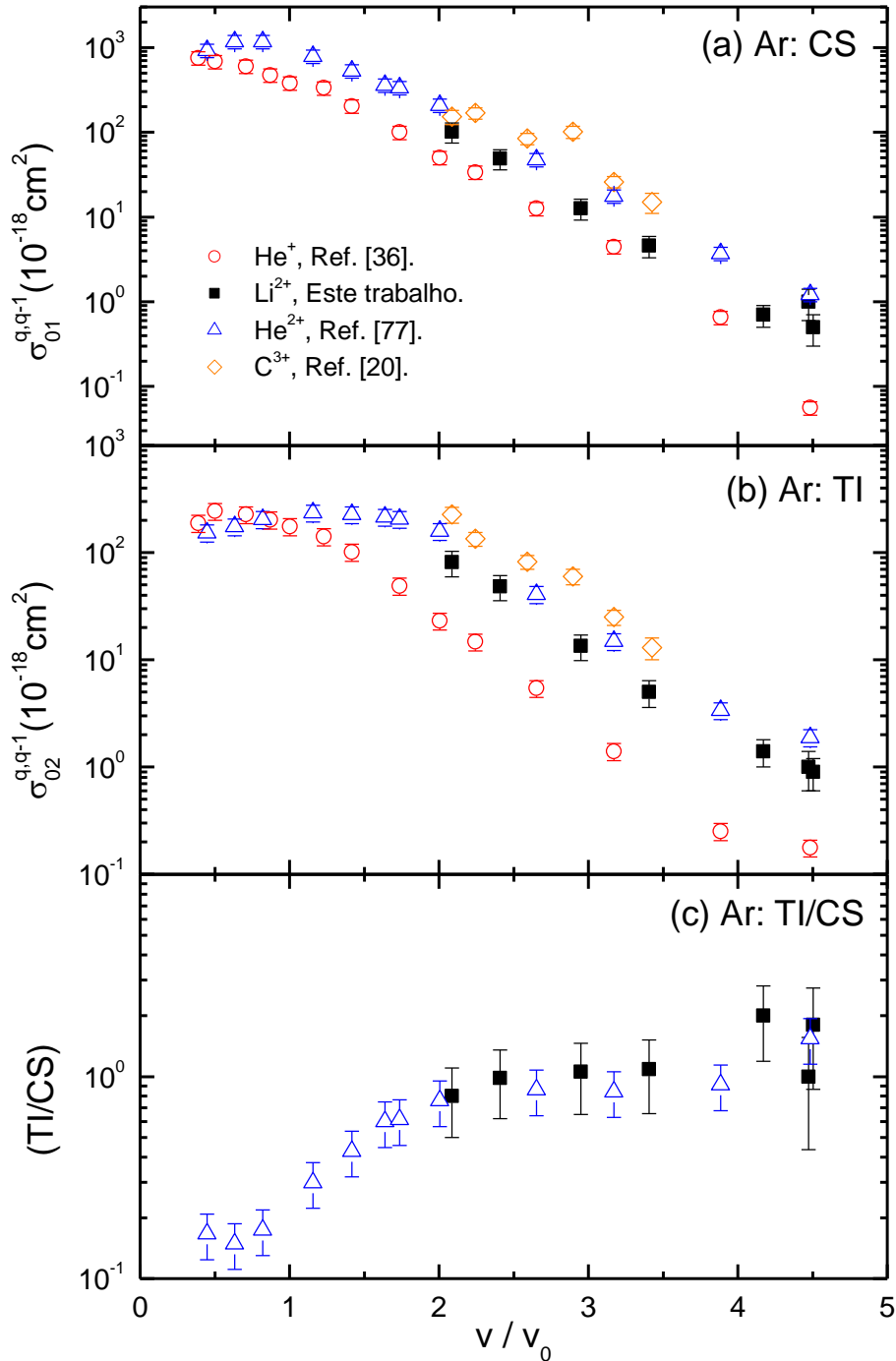


Figura 4.6: (a) Canal de captura simples (CS), (b) Canal de transferência e ionização (TI) e (c) Razão TI/CS somente para os projéteis Li^{2+} e He^{2+} , para o alvo de Ar como função da velocidade do projétil em unidades atômicas. Os símbolos são: quadrado sólido preto, Li^{2+} , este trabalho; círculo vazio vermelho, He^+ , da Ref. [36]; triângulo vazio azul, He^{2+} , da Ref. [77]; e diamante vazio laranja, C^{3+} , da Ref. [20].

Para entender melhor a dependência dos canais CS e TI com o estado de carga do projétil, nós vamos analisar a razão entre as seções de choque TI e CS, $\sigma_{\text{TI}}/\sigma_{\text{CS}}$, como função do estado de carga do projétil, q , para diferentes alvos. Para esta análise, vamos fixar uma velocidade do projétil para vários sistemas de colisão como sendo aproximadamente de 3,16 u.a., que é uma região de velocidade intermediária. Os diversos projéteis e alvos são dados experimentais de vários autores: projéteis de H^+ , He^{2+} e Li^{3+} colidindo com alvo de He, de Shah and Gilbody [58]; He^+ sobre He, de Forest e colaboradores [78]; He^+ e He^{2+} sobre He, Ne, Ar e Kr, de DuBois [36,77]; C^{3+} sobre He, Ar, Kr e Xe, de Santos e colaboradores [20]; C^{3+} sobre Ne, de Kirchner e colaboradores [79]; e Li^{2+} sobre Ar, este trabalho. Estes dados são apresentados na Figura 4.7 abaixo. Além dos dados experimentais, duas linhas tracejadas em vermelho servem para guiar os olhos, dando um limite inferior e superior das razões; a linha sólida preta indica um ajuste quadrático feito para as razões.

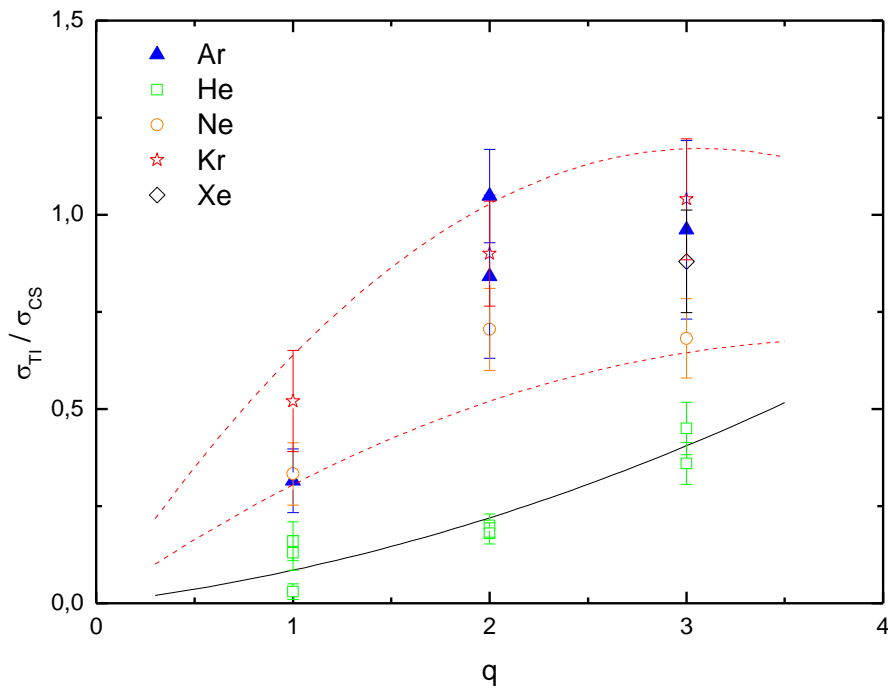


Figura 4.7: Razão entre a seção de choque de transferência e ionização (σ_{TI}) e a seção de choque de captura simples (σ_{CS}), como função do estado de carga, q , do projétil. Alvos são: He, quadrado vazio verde; Ne, círculo vazio laranja; Ar, triângulo azul; Kr, estrela vazio vermelho; e Xe diamante vazio preto. Projéteis são: C^{3+} , das Refs. [20] e [79]; H^+ , He^{2+} e Li^{3+} , da Ref. [58]; He^+ , das Refs. [36] e [78]; He^{2+} , da Ref. [77]; e Li^{2+} , este trabalho. Linha sólida preta, ajuste q^2 das razões para o alvo de He; linha tracejada vermelho, guia para os olhos, delimitando o limite inferior e superior das razões para os alvos de Ne, Ar, Kr, e Xe.

A razão da medida $\sigma_{\text{T}}/\sigma_{\text{SC}}$ mostra uma forte dependência com o estado de carga do projétil e para o alvo de He (quadrado vazio verde) segue aproximadamente uma regra de escalonamento q^2 para pequenos valores de q ($q \leq 3$), como foi analisado por Montenegro e colaboradores [80] para projéteis iônicos com energia de 2 MeV/u incidentes sobre He (com velocidade do projétil de ≈ 9 u.a.). O comportamento para alvos pesados (Ne, Ar, Kr e Xe) é completamente diferente do que para o alvo de He. Além da diferença aparente nos números atômicos, os quais estão espalhados numa região entre e/ou em torno de duas linhas vermelhas tracejadas, existe também uma dependência de $\sigma_{\text{T}}/\sigma_{\text{SC}}$ com o estado de carga do projétil que tende a saturar à medida que q aumenta. Combinando este fato, com a análise da Figura 4.6, nós podemos assumir que a falha na lei q^2 é provavelmente devido ao aumento no processo de ionização múltipla do alvo à medida que aumentamos o número atômico do alvo.

4.2.2.PERDA SIMPLES ACOMPANHADA DA IONIZAÇÃO MULTIPLA DO ALVO

O processo de perda simples acompanhado da ionização múltipla do alvo e a seção de choque correspondente são representados por [20,39],

$$P^{q+} + A^0 \rightarrow P^{(q+1)+} + A^{k+} + (k+1)e^- : \sigma_{0k}^{q,q+1}. \quad (4.5)$$

A seção de choque para a múltipla ionização do alvo, Ar, seguida de uma perda simples de um elétron pelo projétil, Li^{2+} , pode ser representada por σ_{0k}^{23} , com $k \neq 0$, sendo apresentada na Tabela A.4 (no Apêndice A – TABELAS) como função da energia do projétil.

Como mencionado na Introdução, os mecanismos competitivos que podem levar a perda eletrônica de projéteis vestidos são conhecidos como, blindagem e antiblindagem [9,43] e, tem origens físicas bem diferentes. No modo de blindagem, a interação é entre o elétron ativo do projétil (o qual faz uma transição para o contínuo durante a colisão) e o núcleo do alvo blindado (o qual permanece no estado inicial –

modo elástico, pois os elétrons do alvo blindam o campo nuclear coulombiano do alvo). No modo de antiblindagem, a interação é direta entre o elétron ativo do projétil com o elétron do alvo e, ambos os elétrons são ejetados, ionizando projétil e alvo (modo inelástico). Essas diferentes origens físicas nos permitem entender o comportamento desses dois modos na dinâmica da colisão.

A soma de todas as seções de choque de perda simples acompanhada da múltipla ionização do alvo medidas aqui, chamada de seção de choque total de ionização – perda, $\sigma_{\text{inelástico}}$, e definido por [20,21],

$$\sigma_{\text{inelástico}} = \sum_k \sigma_{0k}^{23}, \quad (4.6)$$

é devido somente a interação elétron – elétron, sem a contribuição vinda da ionização direta entre os elétrons do projétil e o núcleo blindado do alvo, ou seja, a perda eletrônica devido ao modo de blindagem não é medido no arranjo experimental da seção de choque parcial absoluta, pois não existe coincidência entre elétron ejetado do projétil e íon de recuo, ou ainda coincidência entre íon de recuo e projétil, uma vez que o alvo permanece no estado fundamental.

A ionização mútua projétil – alvo pode ocorrer pelo modo de antiblindagem (interação elétron – elétron), ou por interação de segunda ordem núcleo – elétron (ionização dupla de dois centros, “two-center double-ionization – DI”, também conhecida como “Loss Ionization – LI”) e pode ser visto como uma colisão no modo de blindagem de segunda ordem [12]. O processo de dupla ionização – DI para projéteis com energias abaixo do limiar da antiblindagem é essencialmente o mecanismo responsável pela ionização mútua projétil – alvo [12]. Como visto nas Referências [20,21], a contribuição devido a mecanismos de segunda ordem para a perda eletrônica, torna-se desprezível quando comparado aos mecanismos de primeira ordem, para velocidades acima do limiar da antiblindagem. A Eq. (4.6) engloba tanto a perda por antiblindagem como a perda por interação de segunda ordem e, o que ajuda a interpretar esses processos é levar em conta o limiar da antiblindagem; abaixo do limiar, a perda na Eq. (4.6) é dominada pelo processo de segunda ordem e acima do limiar, a antiblindagem é o mecanismo dominante.

A diferença entre, a seção de choque total de perda eletrônica e a seção de choque total de ionização – perda, pode ser chamada de “blindagem experimental” e representada por [20,21],

$$\sigma_{\text{blindagem}} = \sigma_{\text{perda total}} - \sigma_{\text{inelástico}}. \quad (4.7)$$

Nos artigos [17,20,21], os autores apresentaram uma comparação entre seus resultados experimentais e cálculos teóricos da seção de choque total de perda eletrônica contendo a soma de dois mecanismos (blindagem e antiblindagem), os quais podem contribuir para a perda eletrônica simples. Uma comparação similar é feita neste trabalho e apresentada na Figura 4.8. Nesta Figura, quadrado vazio preto, representa $\sigma_{\text{inelástico}}$, este trabalho; quadrado sólido azul representa a seção de choque total de perda, $\sigma_{\text{perda total}}$ (ou simplesmente denotado por σ_{perda}), este trabalho; triângulo vazio magenta, representa $\sigma_{\text{blindagem}}$, este trabalho; estrela sólida vermelha, σ_{perda} , Knudsen e colaboradores [74]; linha sólida preta representa a soma da contribuição da blindagem usando o modelo de colisões livres (MCL) [29] e a contribuição da antiblindagem usando a aproximação de Born de ondas planas (PWBA) [28]; a linha sólida densa verde representa a soma das contribuições da blindagem e antiblindagem usando a PWBA [28]; a linha pontilhada preta representa a contribuição da blindagem calculada usando a PWBA [28]; a linha tracejada azul representa a contribuição da blindagem usando MCL [29]; e a linha traço ponto vermelha representa a contribuição da antiblindagem usando a PWBA [28].

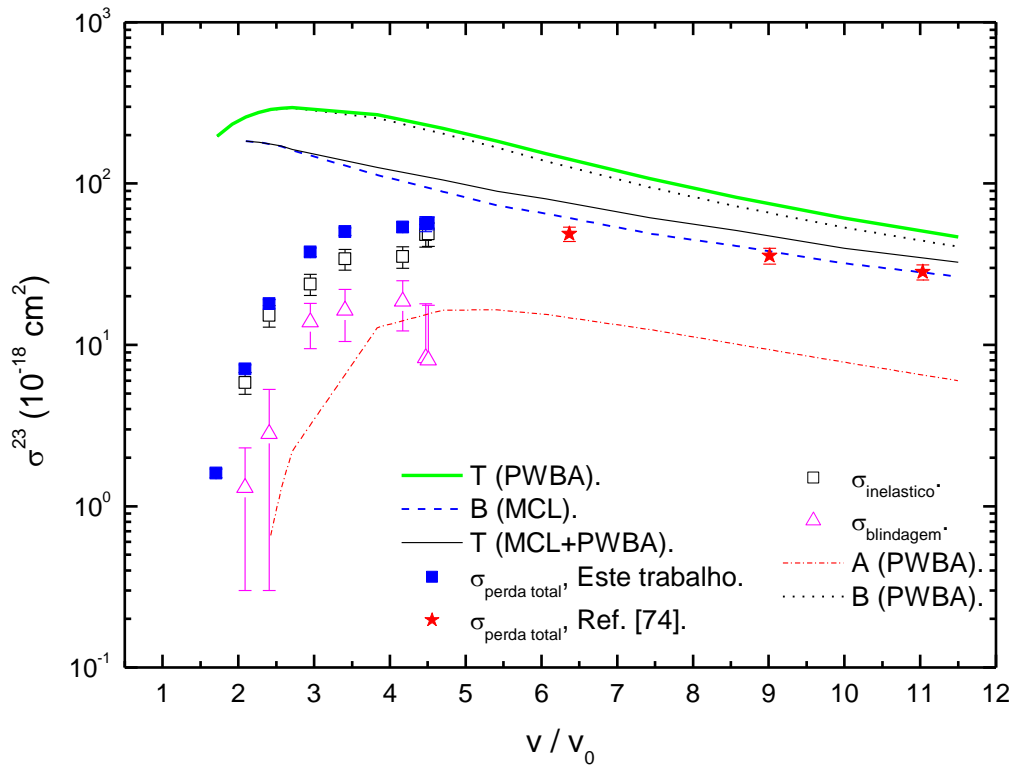


Figura 4.8: Seção de choque parcial absoluta de simples perda eletrônica (em 10^{-18} cm^2) de Li^{2+} em Ar como função da velocidade do projétil em unidades atômicas. Dados experimentais: quadrado vazio preto, soma de todas as seções de choque de ionização – perda, este trabalho; quadrado azul, seção de choque total de perda, este trabalho; triângulo vazio magenta, diferença entre a seção de choque total e a seção de choque de ionização – perda, este trabalho; seção de choque total de perda, estrela sólida vermelha, da Ref. [74]. Teoria: linha sólida preta, soma da blindagem (MCL da Ref. [29]) e antiblindagem (PWBA da Ref. [28]); linha sólida densa verde, soma da blindagem e antiblindagem (PWBA da Ref. [28]); linha pontilhada preta, blindagem (PWBA da Ref. [28]); linha tracejada azul, blindagem (MCL da Ref. [29]); linha traço ponto vermelha, antiblindagem da Ref. [28].

Podemos notar que existe uma diferença entre teoria e experimento, mas esta diferença diminui à medida que aumentamos a energia (velocidade) do projétil, melhorando o acordo experimento – teoria. Um resultado melhor é obtido quando o cálculo da seção de choque total de perda contém o termo da blindagem baseado no MCL. Um comportamento similar para um melhor acordo entre a seção de choque total de perda eletrônica calculada pelo MCL e os dados experimentais também foi observado por Santos e colaboradores [20], nas colisões de C^{3+} sobre gases nobres. E, a comparação do MCL (para o termo da blindagem) com a seção de choque de “blindagem experimental” também não mostrou um bom acordo. Como o “screening

experimental” foi obtido da diferença entre a seção de choque total de perda e seção de choque total de ionização – perda, algumas flutuações na seção de choque experimental de múltipla ionização com perda, podem ser amplificadas pelo processo de subtração, como notado por Santos e colaboradores [20].

Outro fato importante, observado por Montenegro e colaboradores [15] nas colisões de C^{3+} e O^{5+} sobre H_2 e He na faixa de velocidades de 2,24 – 3,66 u.a., é que a perda eletrônica é frequentemente acompanhada de uma captura eletrônica num mesmo evento de colisão, resultando num estado de carga final do projétil igual ao estado inicial e este processo pode ser chamado de perda com transferência – “Transfer Loss – TL”, o qual contribui para reduzir a seção de choque total de perda. Além disso, como o processo de DI (ou LI) é dominante para a perda eletrônica abaixo do limiar da antibrindagem, a contribuição do modo de blindagem pode estar superestimada no tratamento teórico nesta faixa de velocidades.

4.2.3. IONIZAÇÃO MÚLTIPLA DIRETA DO ALVO

O processo de ionização múltipla do alvo com o projétil permanecendo no estado inicial e a seção de choque correspondente são representados por [20,39],

$$P^{q+} + A^0 \rightarrow P^{q+} + A^{k+} + ke^- : \sigma_{0k}^{q,q}. \quad (4.8)$$

A seção de choque para a múltipla ionização direta do alvo, Ar, com o projétil, Li^{2+} , não sofrendo alteração no estado de carga, pode ser representada por σ_{0k}^{22} , com $k \neq 0$, sendo apresentada na Tabela A.5 (no Apêndice A – TABELAS) como função da energia do projétil.

Vamos começar a análise do canal de ionização múltipla direta do alvo analisando a dependência desse canal com o estado de carga do projétil. Nesta análise, vamos considerar a seção de choque de ionização simples (σ_{01}^{qq}) e ionização dupla (σ_{02}^{qq}) de Ar para projéteis com velocidade aproximadamente igual ($v/v_0 = 3,16$ a.u.) e com diferentes estados de carga. Os projéteis são: H^+ [34], He^+ [36,37], He^{2+} [77], Li^{2+} este trabalho e C^{3+} [20]. Essa comparação é apresentada na Figura 4.9.

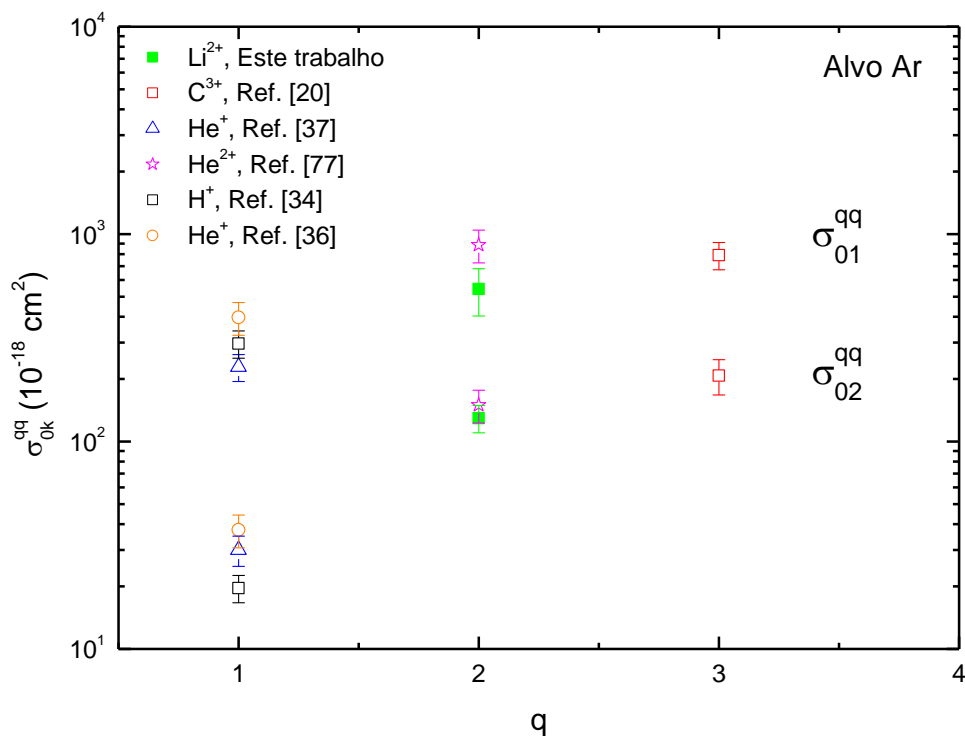


Figura 4.9: Seção de choque de ionização simples e dupla de Ar como função do estado de carga, q , do projétil, para a velocidade de colisão $v/v_0 = 3.16$ a.u.. Os símbolos são: H^+ , quadrado vazio preto, Ref. [34]; He^+ , círculo vazio laranja, Ref. [36]; He^+ , triângulo vazio azul, Ref. [37]; He^{2+} , estrela vazia magenta, Ref. [77]; Li^{2+} , quadrado cheio verde, este trabalho; C^{3+} , quadrado vazio vermelho, Ref. [20].

Podemos observar que, tanto na seção de choque para ionização simples quanto na dupla, para diferentes projéteis com o mesmo estado de carga, os valores da seção de choque estão muito próximos entre si. Embora mais dados sejam necessários para compreender melhor esta análise e poder estender para maiores estados de carga do projétil, nós podemos especular que, a seção de choque segue aproximadamente uma dependência sobre o estado de carga (q) do projétil (dentro da incerteza experimental), como foi observado por Santos e colaboradores [20], na ionização de He.

Uma análise mais aprofundada para a seção de choque de ionização simples e dupla de Ar como função da velocidade do projétil são plotados na Figura 4.10 e Figura 4.11, respectivamente, para diferentes projéteis com o mesmo estado de carga. Os projéteis são: Li^{2+} (triângulo preto), este trabalho e He^{2+} (quadrado vazio verde), de DuBois [77].

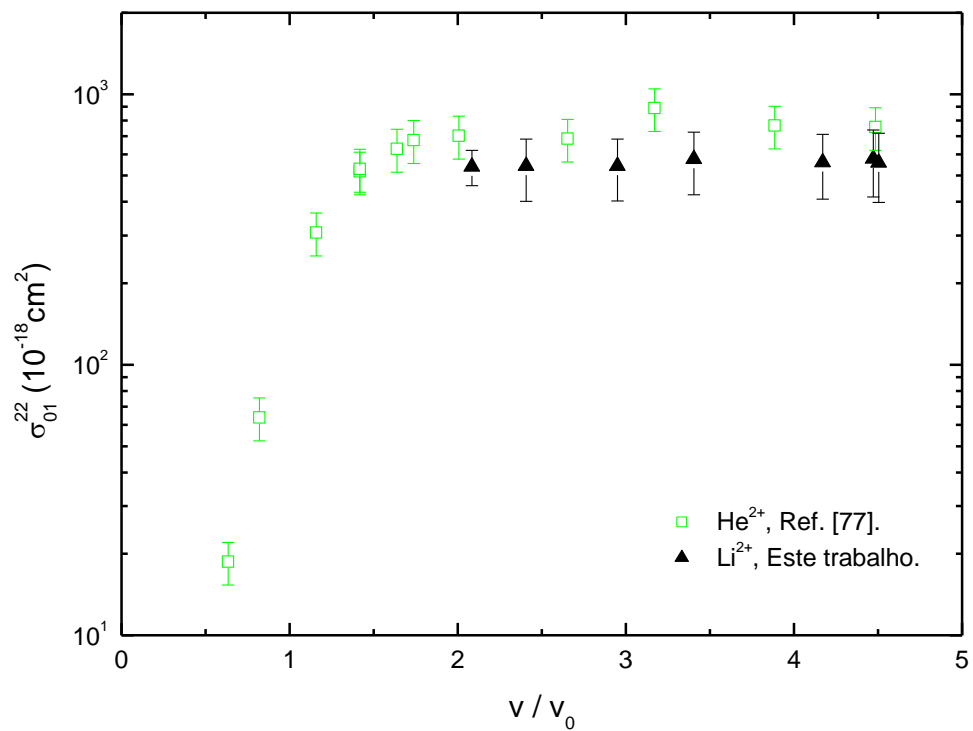


Figura 4.10: Seção de choque de ionização simples de Ar por projéteis duplamente carregados como função da velocidade do projétil (em unidades atômicas). Projéteis são: quadrado vazio verde, He^{2+} , Ref. [77] e triângulo cheio preto, Li^{2+} , este trabalho.

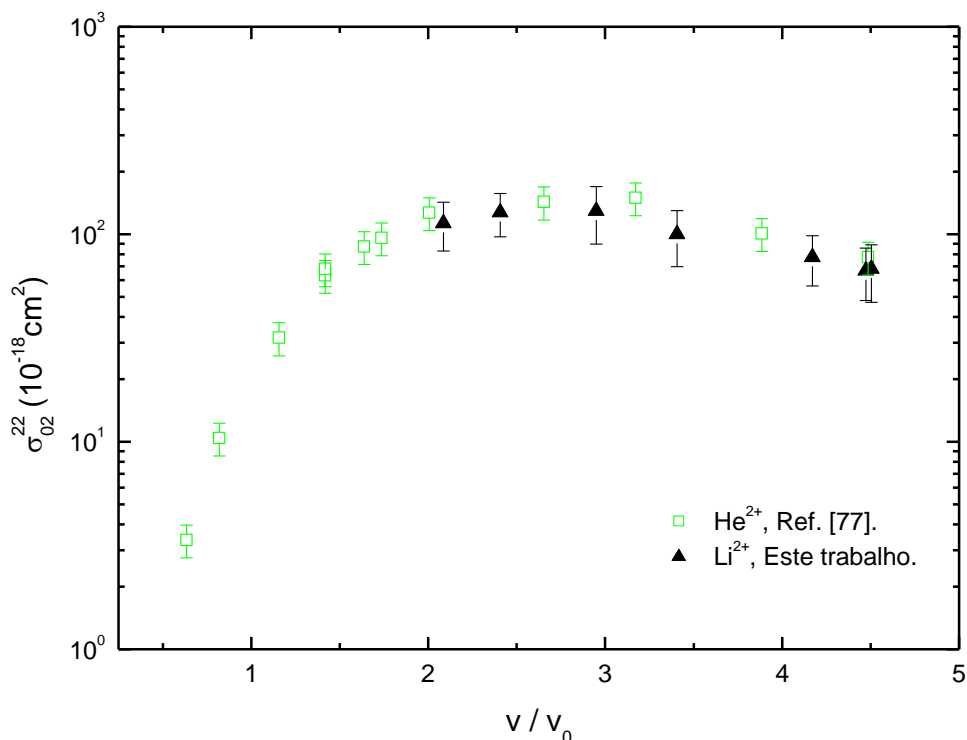


Figura 4.11: Seção de choque de ionização dupla de Ar por projéteis duplamente carregados como função da velocidade do projétil (em unidades atômicas). Projéteis são: quadrado vazio verde, He^{2+} , Ref. [77] e triângulo cheio preto, Li^{2+} , este trabalho.

Devido à falta de dados experimentais não foi possível estender a comparação dos resultados deste trabalho. Mas, nós podemos observar que a seção de choque de ionização simples para ambos os projéteis são muito próximas e exibem o mesmo comportamento à medida que a velocidade do projétil aumenta. Para a seção de choque de ionização dupla, ambos os projéteis coalescem ao longo da mesma curva, caminhando na direção da diminuição deste canal à medida que a velocidade do projétil aumenta. Em ambos os casos as seções de choque para os projéteis são aproximadamente a mesma, dentro da incerteza experimental.

A Figura 4.12 apresenta a razão σ_{01}^{qq}/q^2 para Ar como função da velocidade do projétil. A razão σ_{01}^{qq}/q^2 coalesce para altas velocidades (maior que 4 u.a.), apresentando um comportamento similar, independente do estado de carga do projétil. Para baixas velocidades, a razão para os vários estados de carga é bem diferente e segue uma sequência com o estado de carga, onde o maior valor de q apresenta o menor

valor da razão σ_{01}^{qq}/q^2 . O mesmo comportamento foi observado por Santos e colaboradores [20] e por Tonuma e colaboradores [81] para colisões de projéteis Ar^{q+} , com $q = 4-14$, em alvo de Ar.

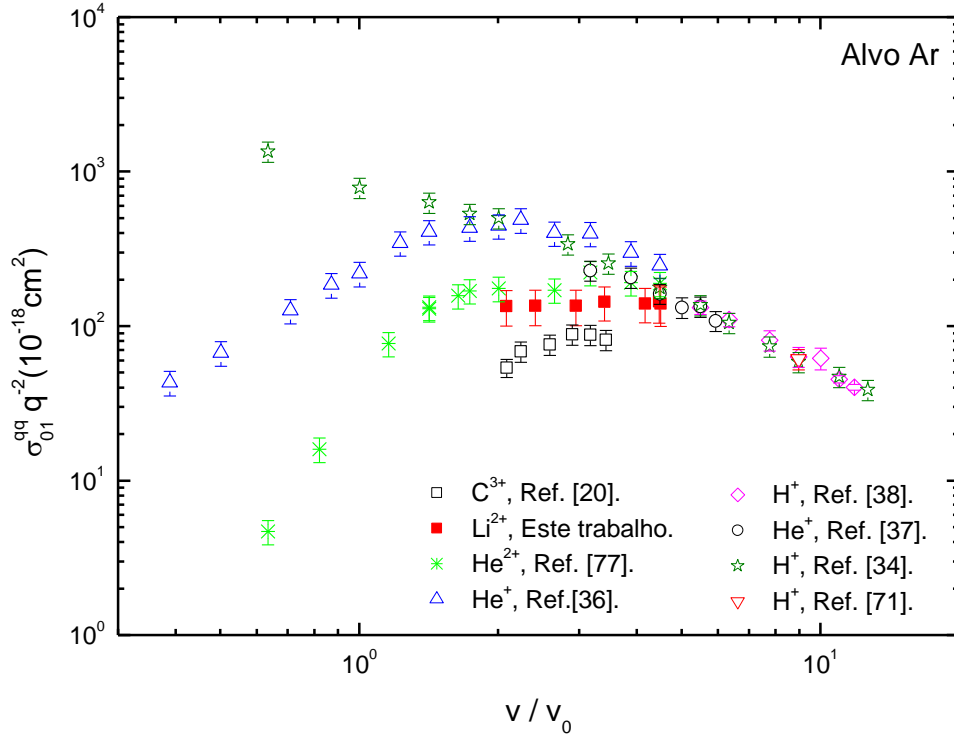


Figura 4.12: Razão σ_{01}^{qq}/q^2 para alvo de Ar como função da velocidade do projétil (em unidades atômicas). Símbolos são: estrela vazia oliva, H^+ da Ref. [34]; triângulo vazia pra cima azul, He^+ da Ref. [36]; círculo vazia preto, He^+ da Ref. [37]; diamante vazia magenta, H^+ da Ref. [38]; triângulo vazia pra baixo vermelho, H^+ da Ref. [71]; asterisco verde, He^{2+} da Ref. [77]; quadrado cheio vermelho, Li^{2+} este trabalho; quadrado vazia preto, C^{3+} da Ref. [20].

Uma análise similar, a que foi feita na Figura 4.12 é considerar a dependência q^2 da seção de choque inclusiva direta de ionização, empregando as relações de inversão derivadas por Sant’Anna e colaboradores [82] para seção de choque exclusiva e inclusiva (que serão explicadas a frente), dentro da aproximação do elétron independente (ou modelo de partícula independente), usando a distribuição multinomial – AEIM (“independent electron approximation, using the multinomial distribution – MIEA”). Uma breve consideração do modelo de partícula independente e uma breve

descrição da análise feita por Sant'Anna e colaboradores [82], será feita nos parágrafos seguintes.

Se as colisões envolvem íons vestidos altamente carregados, teremos os processos multieletrônicos ocorrendo com probabilidade suficientemente alta, podendo mudar a interpretação dos resultados experimentais obtidos a partir de uma análise de um único canal (necessário considerar o acoplamento dos canais). O modelo de partícula independente pode ser usado como ponto de partida para a análise da seção de choque total envolvendo transições multieletrônicas [82]. No modelo da partícula independente (“independent particle model” – IPM) [43,83], podemos destacar os seguintes aspectos:

- i) o projétil é considerado como uma carga pontual.
- ii) o movimento relativo dos núcleos é separado do movimento eletrônico.
- iii) o espalhamento entre os núcleos é tratado classicamente.
- iv) a correlação entre os elétrons do mesmo centro é desprezada.

De forma resumida, no IPM, a colisão é vista como o produto de interações independentes entre os elétrons do projétil e do alvo. Com uma análise simples de teorias em primeira ordem, pode-se obter o comportamento geral de vários sistemas colisionais e a dependência da seção de choque ou da probabilidade com vários parâmetros de colisão.

Nas colisões de projéteis carregados, com átomos de muitos elétrons na região de velocidades intermediárias, a seção de choque de captura e ionização são frequentemente canais de colisão que devem ser ambos considerados (uma vez que eles são muito maiores do que a seção de choque de perda). Assim, seção de choque exclusiva para pura ionização simples (desprezando excitação e sem considerar a captura de qualquer elétron do alvo), dentro do MIEA é dada por [82]

$$\sigma_{\text{ion}} = N \int P_I(b) [1 - P_I(b) - P_C(b)]^{N-1} 2\pi b db, \quad (4.9)$$

onde N é o número total de elétrons do alvo, $P_I(b)$ e $P_C(b)$ são, a probabilidade de ionização e captura como função do parâmetro de impacto, b , respectivamente. Podemos observar na equação acima que a integral acopla $P_I(b)$ e $P_C(b)$; e essas probabilidades dependem diferentemente do estado de carga do projétil, por isso não é

esperado que σ_{ion} apresente uma simples dependência em q , a menos que a velocidade de colisão seja alta o suficiente para que possamos considerar $[1 - P_I(b) - P_C(b)] \cong 1$, regime no qual as probabilidades de captura e ionização podem ser desprezadas.

A correspondente seção de choque inclusiva para ionização simples é dada por [82],

$$s_{\text{ion}} = N \int P_I(b) 2\pi b db, \quad (4.10)$$

a qual é independente de $P_C(b)$. Esta equação não é uma aproximação para altas velocidades e é sempre válida para baixas velocidades e pequenos parâmetros de impacto, para o qual $P_I(b) + P_C(b) \cong 1$. Levando em conta que a Eq. (4.10) é mais apropriada para uma análise no regime de velocidade baixa – intermediária do que a Eq. (4.9); e como procuramos uma dependência de q com a seção de choque na mudança de estado de carga, um gráfico de s_{ion} é mais apropriado do que um gráfico de σ_{ion} , para essa faixa de velocidade.

Para compreender melhor como obter a seção de choque mencionada acima, nós podemos associar a seção de choque exclusiva com medidas da seção de choque em experimentos em coincidência, enquanto a seção de choque inclusiva, como mostrado por Sant'Anna e colaboradores [82] é possível obter valores experimentais a partir das medidas da seção de choque exclusiva de um estado de carga do experimento em coincidência (e não somente ionização simples) através de uma soma ponderada apropriada.

A relação de transformação para obter a seção de choque inclusiva para o canal de ionização de pelo menos um elétron do alvo a partir das medidas da seção de choque exclusiva de ionização direta e captura eletrônica, mantendo a mesma notação usada por [20], pode ser escrita como [20,82]

$$s_{\text{ion}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=0}^{N-i} (i-j) \sigma_{0i}^{q,q-j}, \quad (4.11)$$

onde j é o número de elétrons capturados, i é o número de elétrons removidos do alvo e $(i-j)$ é o número de elétrons ionizados do alvo, os quais não são capturados pelo

projétil. Neste trabalho, somente a captura simples foi medida, por isso, para obter valores numéricos é necessário truncar a série desprezando captura múltipla (dupla, tripla e por diante), o que pode ser escrito como [20]

$$s_{\text{ion}} = \sum_i [i\sigma_{0i}^{qq} + (i-1)\sigma_{0i}^{q,q-1}]. \quad (4.12)$$

Em resumo, vamos usar uma soma ponderada entre a seção de choque parcial absoluta de captura e ionização para obter a seção de choque inclusiva de ionização de pelo menos um elétron do alvo.

A Figura 4.13, representa os resultados para s_{ion} , obtidos de acordo com a Eq. (4.12), divididos por q^2 , para o mesmo sistema de colisão como foi feito na Figura 4.12, como função da velocidade do projétil. Essa razão (Figura 4.13) apresenta um comportamento similar ao apresentado para ionização simples direta mostrada na Figura 4.12, mas para baixas velocidades, os valores da razão estão mais próximos do que na Figura 4.12. Para entender melhor esse comportamento, vamos pegar como exemplo, um ponto com velocidade de 2,0 u.a., a razão s_{ion}/q^2 para H^+ é aproximadamente 48% maior do que para He^{2+} , enquanto a mesma razão para H^+ na ionização simples direta é aproximadamente 65% maior do que para He^{2+} (ver Figura 4.12).

Nós podemos observar também que a razão σ_{0i}^{qq}/q^2 para o mesmo estado de carga, q , são muito similares e independentes do projétil. O mesmo comportamento foi observado por Santos e colaboradores [20] para diferentes alvos, He, Ar, Kr e Xe. Para exemplificar, vamos considerar diferentes projéteis com o mesmo estado de carga, $q=1$ (estrela vazia oliva, triângulo vazio pra cima azul, círculo vazio preto, diamante vazio magenta, triângulo vazio pra baixo vermelho), o mesmo comportamento é observado à medida que aumentamos a velocidade do projétil. Para $q=2$ (asterisco verde, quadrado cheio vermelho), o mesmo comportamento é observado. Baseado nessas informações, nós podemos concluir que a seção de choque de ionização simples direta depende somente do estado de carga do projétil, seja vestido ou nu (com ou sem elétrons, respectivamente), indicando que para este processo (canal de ionização), a estrutura eletrônica do projétil é irrelevante, assim como a blindagem nuclear do projétil devido a seus elétrons. Dessa maneira, o projétil age como uma carga pontual.

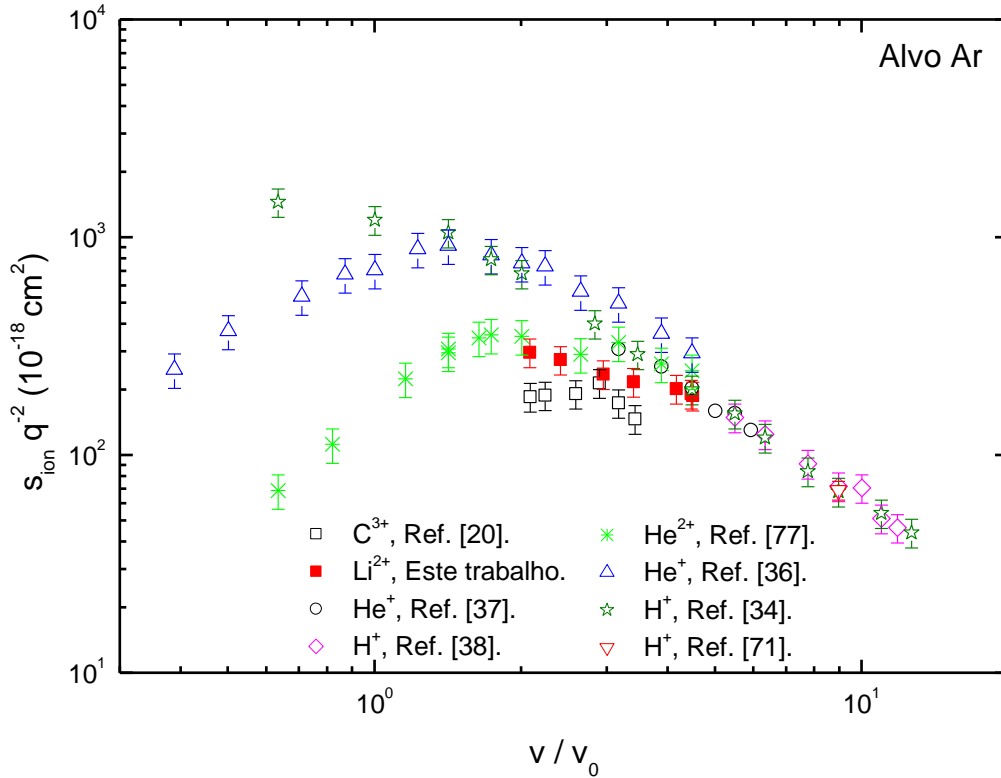


Figura 4.13: Razão s_{ion} / q^2 para Ar como função da velocidade do projétil (em unidades atômicas), com s_{ion} calculado de acordo com a Eq. (4.12). Símbolos são: estrela vazia oliva, H^+ da Ref. [34]; triângulo vazio pra cima azul, He^+ , da Ref. [36]; círculo vazio preto, He^+ da Ref. [37]; diamante vazio magenta, H^+ da Ref. [38]; triângulo vazio pra baixo vermelho, H^+ da Ref. [71]; asterisco verde, He^{2+} da Ref. [77]; quadrado cheio vermelho, Li^{2+} este trabalho; quadrado vazio preto, C^{3+} da Ref. [20].

Embora tenha sido feito uma análise separada para cada canal, perda, captura e ionização, a correta análise dos processos envolvidos durante a colisão, de acordo com os dados apresentados, implica que os três canais estão acoplados e devem ser analisados juntos nas descrições teóricas mais realistas.

Para finalizar a discussão e mostrar que a perda e a captura simultânea no mesmo evento de colisão é um processo dominante para alguns parceiros de colisão, que depende diretamente do estado de carga do projétil e da energia de ionização associada ao elétron ativo do projétil, principalmente em baixas energias, vamos considerar cinco projéteis, com estados de carga e energias de ionização diferentes, interagindo no mesmo alvo, Ar.

Para cada projétil é feita uma razão entre a seção de choque de captura total (simples + dupla, quando for o caso) e a seção de choque de perda total (simples + dupla, quando for o caso) como função da velocidade do projétil, mostrado na Figura 4.14 (a). Essa razão nos fornece a informação da proporção em que a captura é maior do que a perda numa dada velocidade e, o quão maior for a captura em relação à perda, maior será o efeito da captura sobre a perda num mesmo evento de colisão, ou seja, quando a captura for tão grande comparada a perda, a perda eletrônica será frequentemente acompanhada da captura eletrônica e, dessa forma, a captura suprime a perda, que assume um valor experimental bem menor do que deveria ser em relação a descrição teórica. Este efeito diminui à medida que aumentamos a velocidade do projétil, já que a probabilidade de captura diminui.

Na Figura 4.14 (b), um valor aproximado para a velocidade é levado em conta para que seja possível fazer uma comparação com os demais projéteis, principalmente em baixa velocidade onde a discrepância teoria-experimento é maior (aproximadamente $v/v_0 = 1,7$ u. a.). Podemos observar que a maior razão é no caso do projétil Li^{2+} (cor preta), onde a captura é quase 300 vezes maior do que a perda e, neste caso, ocorre uma maior discrepância entre teoria-experimento. Nos demais projéteis, Li^+ , cor vermelho, este trabalho; B^{2+} , cor azul, da Ref. [17] e C^{3+} , cor magenta da Ref. [16], a razão é bem pequena e fornece um melhor resultado teoria-experimento, como mostrado em cada trabalho, respectivamente.

Esta argumentação é condizente com toda a análise apresentada neste trabalho, consolidando que a discrepância experimento-teoria para baixas energias para o projétil Li^{2+} está fortemente associada dentre outros fatores citados no texto, ao acoplamento da perda e captura num mesmo evento de colisão, uma vez que, a razão captura/perda é muito maior neste projétil do que nos demais.

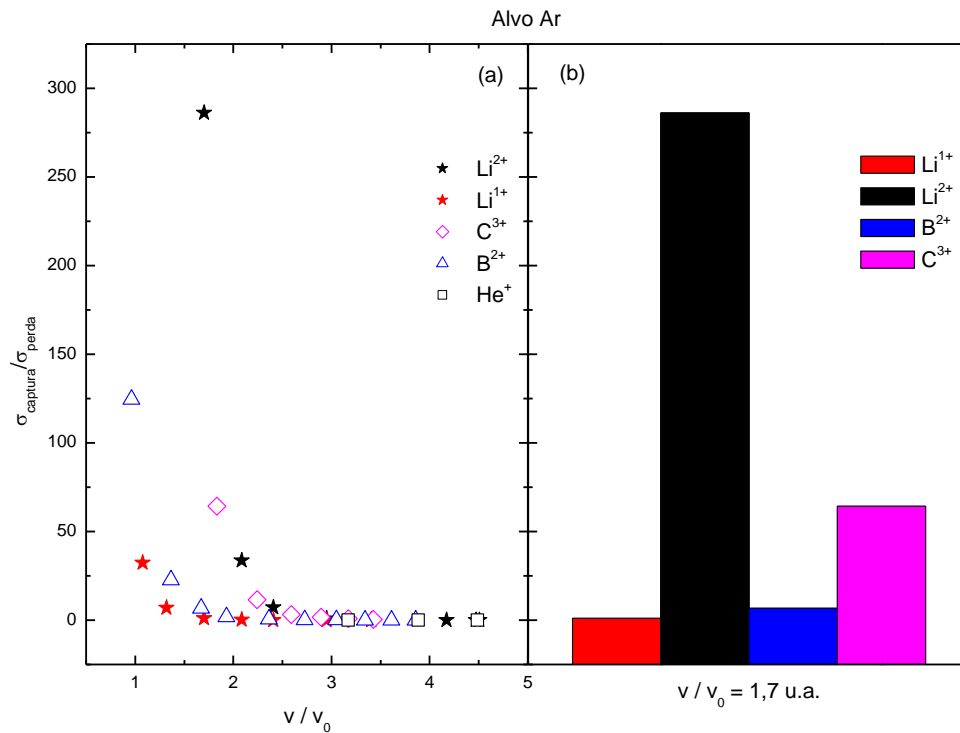


Figura 4.14: Parte (a) Razão entre a seção de choque de captura total (captura simples + dupla) e a seção de choque de perda total (simples + dupla) em Ar como função da velocidade do projétil. Símbolos são: estrela sólida preto, Li^{2+} , este trabalho; estrela sólida vermelho, Li^{1+} , este trabalho; diamante vazio magenta, C^{3+} , da Ref. [16]; triângulo vazio azul, B^{2+} , da Ref. [17]; quadrado vazio preto, He^{+} , com a captura tirada da Ref. [36] e a perda tirada da Ref. [14]. Parte (b), razão entre a seção de choque de captura total (captura simples + dupla) e a seção de choque de perda total (simples + dupla) em Ar para uma velocidade $v/v_0 = 1,7$ u.a.. As cores são as mesmas da parte (a).

CAPÍTULO 5

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho foram apresentadas as seções de choque total absoluta de perda e captura eletrônica dos projéteis de Li^+ e Li^{2+} em Ar e a seção de choque parcial absoluta para os processos de ionização múltipla direta do alvo, perda e captura simples (ambos acompanhados da ionização múltipla do alvo Ar por projétil Li^{2+}). Os dados apresentados para a seção de choque total absoluta para ambos projéteis estão em bom acordo com os dados experimentais de outros autores [72-74]. No caso da seção de choque parcial absoluta não foi possível nenhuma comparação experimental, pois “não existe” (ou não é de conhecimento do autor) na literatura nenhum dado para este sistema de colisão.

Cálculos teóricos para a seção de choque total absoluta de perda eletrônica usando uma combinação do MCL (blindagem) [29] e PWBA (antiblindagem) [28] fornecem um resultado melhor do que aquele obtido usando somente PWBA para a contribuição da blindagem e antiblindagem. O projétil Li^+ apresenta um excelente acordo entre teoria-experimento ao passo que o projétil Li^{2+} apresenta uma discrepância significativa para baixas energias do projétil. Essa discrepância pode ser atribuída a duas possíveis razões: primeiro, o acoplamento dos canais de perda e captura eletrônica num mesmo evento de colisão (processo “Transfer-Loss”) [15,33], onde o estado de carga inicial do projétil é igual ao estado de carga final e este processo não é separado neste experimento e, que teve sua importância bastante evidenciada em relação ao processo de perda, quando observamos o quão maior é a captura em relação à perda para o projétil Li^{2+} , em especial. Segunda possível razão, a contribuição do processo de dupla ionização (DI) ou blindagem de segunda ordem (LI), onde o elétron do projétil e do alvo é ionizado simultaneamente [11,12]. O processo DI é o mecanismo dominante para a perda eletrônica em baixas energias e se torna desprezível para altas energias, onde a antiblindagem é o mecanismo dominante para perda do projétil com ionização do alvo. E nos cálculos da contribuição da blindagem (tanto na PWBA quanto no MCL) não é levado em conta o acoplamento entre esta contribuição e o mecanismo DI.

Os cálculos para a contribuição do modo de blindagem sugerem uma superestimativa em relação aos dados experimentais, ao passo que os cálculos para a contribuição do modo de antiblindagem sugerem uma contribuição pequena deste modo para a perda do projétil seguida de ionização do alvo, para baixas velocidades.

A seção de choque parcial absoluta para o canal de captura eletrônica mostra uma dependência com o estado de carga do projétil e, com o aumento da velocidade do projétil, o canal, transferência de ionização (TI) domina em relação ao canal de captura simples (CS).

A análise da seção de choque de ionização simples do alvo sugere uma dependência com estado de carga do projétil (para altas velocidades), seja vestido ou nu (com ou sem elétrons, respectivamente), indicando que para este processo, a estrutura eletrônica do projétil é irrelevante, assim como a blindagem nuclear do projétil devido a seus elétrons. E, dessa forma, o projétil age como uma carga pontual.

As perspectivas de trabalho futuro incluem medidas da seção de choque parcial absoluta para o projétil Li^+ , medidas da seção de choque total e parcial absoluta para os projéteis, Li^0 e Li^{3+} , permitindo entender melhor a contribuição dos mecanismos de blindagem, antiblindagem e processo de segunda ordem, bem como a influencia do estado de carga na perda e captura simultânea do projétil. Com essas medidas será possível estudar o comportamento dos canais de captura, perda e ionização do alvo para o mesmo projétil com quatro estados de carga diferentes ($q = 0, +1, +2$ e $+3$) incidindo sobre o mesmo alvo de Argônio, ajudando a compreender como esses canais estão acoplados.

Gostaria de contribuir também com medidas de ionização múltipla do alvo (Argônio) para projéteis diferentes, com estado de carga ($q = +2$), uma vez que na literatura faltam dados para esses parceiros de colisão.

APÊNDICE

A. TABELAS

Todas as seções de choque usadas neste trabalho são listadas aqui e expressas em Mb (10^{-18} cm²).

A.1. Medidas da seção de choque total absoluta

A.1.1. Seção de choque total de perda, dupla perda e captura eletrônica para Li⁺ em Argônio

Tabela A.1: Dados experimentais deste trabalho para a seção de choque total de perda eletrônica (σ^{12}), dupla perda (σ^{13}) e captura eletrônica (σ^{10}) (em Mb ou 10^{-18} cm²) do projétil Li⁺ em Ar na faixa de energia (E) de 0,20 a 2,50 MeV. Números entre parênteses representam potências de 10.

E (MeV)	σ^{12} (10^{-18} cm ²)	σ^{13} (10^{-18} cm ²)	σ^{10} (10^{-18} cm ²)
0,20	8,3(0) \pm 2.1(0)		2,7(2) \pm 0,3(2)
0,30	3,1(1) \pm 0,3(1)		2,2(2) \pm 0,2(2)
0,50	8,7(1) \pm 0,8(1)		9,4(1) \pm 0,9(1)
0,75	1,6(2) \pm 0,4(2)	5.2(0) \pm 1.0(0)	3,2(1) \pm 0,4(1)
1,00	2,4(2) \pm 0,2(2)	1,6(1) \pm 0,2(1)	1,5(1) \pm 0,2(1)
1,50	2,5(2) \pm 0,3(2)	4,3(1) \pm 0,4(1)	4,8(0) \pm 1,5(0)
2,00	2,4(2) \pm 0,2(2)	4,8(1) \pm 0,5(1)	1,7(0) \pm 0,3(0)
2,50	2,2(2) \pm 0,2(2)	5,2(1) \pm 0,9(1)	

A.1.2. Seção de choque total de perda e captura eletrônica para Li^{2+} em Argônio

Tabela A.2: Dados experimentais deste trabalho para a seção de choque total de perda eletrônica (σ^{23}) e captura eletrônica (σ^{21}) (em Mb ou 10^{-18} cm^2) do projétil Li^{2+} em Ar na faixa de energia (E) de 0,50 a 3,50 MeV. Números entre parênteses representam potências de 10.

E (MeV)	$\sigma^{23} (10^{-18} \text{ cm}^2)$	$\sigma^{21} (10^{-18} \text{ cm}^2)$
0,50	$1,6(0) \pm 0,1(0)$	$4,5(2) \pm 0,3(2)$
0,75	$7,1(0) \pm 0,4(0)$	$2,4(2) \pm 0,2(2)$
1,00	$1,8(1) \pm 0,1(1)$	$1,3(2) \pm 0,1(2)$
1,50	$3,8(1) \pm 0,2(1)$	$3,7(1) \pm 0,2(1)$
2,00	$5,0(1) \pm 0,3(1)$	$1,5(1) \pm 0,1(1)$
3,00	$5,4(1) \pm 0,4(1)$	$5,0(0) \pm 0,3(0)$
3,45	$5,6(1) \pm 0,6(1)$	$3,7(0) \pm 0,4(0)$
3,50	$5,7(1) \pm 0,5(1)$	$3,7(0) \pm 0,5(0)$

A.2. Medidas da seção de choque parcial absoluta

A.2.1. Seção de choque de múltipla ionização absoluta de Argônio acompanhado de captura simples pelo projétil Li^{2+}

Tabela A.3: Seção de choque de múltipla ionização absoluta (em 10^{-18} cm^2) de Ar acompanhado de uma captura simples de um elétron pelo projétil (Li^{2+}), como função da energia E (em MeV). Números entre parênteses representam potências de 10.

E (MEV)	Ar^+	Ar^{2+}	Ar^{3+}	Ar^{4+}	Ar^{5+}
0,75	$1,0(2) \pm 0,3(2)$	$8,1(1) \pm 2,2(1)$	$4,6(1) \pm 1,2(1)$	$9,0(0) \pm 2,5(0)$	$3,1(0) \pm 1,0(0)$
1,00	$4,9(1) \pm 1,3(1)$	$4,8(1) \pm 1,3(1)$	$2,5(1) \pm 0,7(1)$	$5,4(0) \pm 1,5(0)$	$1,9(0) \pm 0,6(0)$
1,50	$1,3(1) \pm 0,4(1)$	$1,3(1) \pm 0,4(1)$	$6,8(0) \pm 1,9(0)$	$2,2(0) \pm 0,7(0)$	$1,5(0) \pm 0,5(0)$
2,00	$4,6(0) \pm 1,3(0)$	$5,0(0) \pm 1,4(0)$	$3,0(0) \pm 0,8(0)$	$1,3(0) \pm 0,4(0)$	$0,7(0) \pm 0,2(0)$
3,00	$0,7(0) \pm 0,2(0)$	$1,4(0) \pm 0,4(0)$	$1,4(0) \pm 0,4(0)$	$0,8(0) \pm 0,3(0)$	$0,7(0) \pm 0,2(0)$
3,45	$1,0(0) \pm 0,4(0)$	$1,0(0) \pm 0,4(0)$	$1,2(0) \pm 0,4(0)$	$0,5(0) \pm 0,2(0)$	
3,50	$0,5(0) \pm 0,2(0)$	$0,9(0) \pm 0,3(0)$	$1,0(0) \pm 0,3(0)$	$0,8(0) \pm 0,2(0)$	$0,6(0) \pm 0,2(0)$

A.2.2. Seção de choque de múltipla ionização absoluta de Argônio acompanhado de perda simples pelo projétil Li^{2+}

Tabela A.4: Seção de choque de múltipla ionização absoluta (em 10^{-18} cm^2) de Ar acompanhado de uma perda simples de um elétron do projétil (Li^{2+}), como função da energia E (em MeV). Números entre parênteses representam potências de 10.

E (MEV)	Ar^+	Ar^{2+}	Ar^{3+}	Ar^{4+}	Ar^{5+}
0,75	$1,1(0) \pm 0,3(0)$	$2,0(0) \pm 0,6(0)$	$2,2(0) \pm 0,6(0)$	$0,5(0) \pm 0,2(0)$	
1,00	$2,7(0) \pm 0,7(0)$	$6,2(0) \pm 1,7(0)$	$4,9(0) \pm 1,3(0)$	$1,1(0) \pm 0,3(0)$	$0,3(0) \pm 0,1(0)$
1,50	$5,4(0) \pm 1,5(0)$	$9,0(0) \pm 2,4(0)$	$7,6(0) \pm 2,1(0)$	$1,4(0) \pm 0,4(0)$	$0,4(0) \pm 0,2(0)$
2,00	$9,4(0) \pm 2,5(0)$	$1,4(1) \pm 0,4(1)$	$8,6(0) \pm 2,3(0)$	$1,9(0) \pm 0,5(0)$	$0,6(0) \pm 0,2(0)$
3,00	$1,2(1) \pm 0,3(1)$	$1,3(1) \pm 0,4(1)$	$6,4(0) \pm 1,8(0)$	$2,3(0) \pm 0,7(0)$	$1,1(0) \pm 0,4(0)$
3,45	$1,8(1) \pm 0,5(1)$	$1,8(1) \pm 0,5(1)$	$6,7(0) \pm 2,0(0)$	$3,6(0) \pm 1,2(0)$	$1,7(0) \pm 0,6(0)$
3,50	$2,0(1) \pm 0,6(1)$	$1,7(1) \pm 0,5(1)$	$7,7(0) \pm 2,3(0)$	$2,6(0) \pm 0,8(0)$	$1,6(0) \pm 0,5(0)$

A.2.3. Seção de choque de ionização múltipla direta do alvo (Argônio) por projétil Li^{2+}

Tabela A.5: Seção de choque de ionização múltipla direta do alvo (em 10^{-18} cm^2) de Ar por projéteis de Li^{2+} , como função da energia do projétil (em MeV). Número entre parêntese representa potências de 10.

E (MEV)	Ar^+	Ar^{2+}	Ar^{3+}	Ar^{4+}	Ar^{5+}
0,75	$5,4(2) \pm 1,4(2)$	$1,1(2) \pm 0,3(2)$	$5,7(1) \pm 1,6(1)$	$9,2(0) \pm 2,9(0)$	
1,00	$5,4(2) \pm 1,4(2)$	$1,3(2) \pm 0,3(2)$	$4,7(1) \pm 1,3(1)$	$8,1(0) \pm 2,5(0)$	$0,7(0) \pm 0,4(0)$
1,50	$5,4(2) \pm 1,4(2)$	$1,3(2) \pm 0,4(2)$	$2,6(1) \pm 0,8(1)$	$4,7(0) \pm 1,8(0)$	
2,00	$5,7(2) \pm 1,5(2)$	$1,0(2) \pm 0,3(2)$	$2,1(1) \pm 0,7(1)$	$2,9(0) \pm 1,4(0)$	
3,00	$5,6(2) \pm 1,5(2)$	$7,7(1) \pm 2,1(1)$	$1,7(1) \pm 0,5(1)$	$5,2(0) \pm 1,9(0)$	$2,0(0) \pm 0,9(0)$
3,45	$5,8(2) \pm 1,6(2)$	$6,7(1) \pm 1,9(1)$	$1,7(1) \pm 0,5(1)$		
3,50	$5,6(2) \pm 1,6(2)$	$6,8(1) \pm 2,1(1)$	$1,3(1) \pm 0,5(1)$	$2,5(0) \pm 1,6(0)$	

A.3. Cálculos da Seção de choque total de captura e perda eletrônica dos projéteis Li^{2+} e Li^+ em Argônio.

A.3.1. Cálculo da Seção de choque total de captura eletrônica do projétil Li^{2+} em Argônio.

Tabela A.6: Cálculo da seção de choque de captura eletrônica de Li^{2+} em Argônio, baseado no modelo de Bohr-Lindhard, como função da energia (E) do projétil. Número entre parêntese representa potências de 10.

E (MeV)	$\sigma^{21}(10^{-18} \text{ cm}^2)$
0,40	5,7(2)
0,60	3,2(2)
0,80	2,1(2)
1,00	1,5(2)
1,20	1,1(2)
1,40	8,9(1)
1,60	7,2(1)
1,80	5,9(1)
2,00	4,9(1)
2,20	4,2(1)
2,40	3,5(1)
2,60	3,0(1)
2,80	2,6(1)
3,00	2,3(1)
3,20	2,0(1)
3,40	1,7(1)
3,60	1,5(1)
3,80	1,3(1)
4,00	1,1(1)
4,20	9,4(0)
4,40	8,0(0)
4,60	6,9(0)
4,80	5,9(0)

A.3.2. Cálculo da Seção de choque total de perda eletrônica do projétil Li^{2+} em Argônio.

Tabela A.7: Cálculo da seção de choque total de perda eletrônica de Li^{2+} em Argônio e, das contribuições da blindagem e antiblindagem, baseado na Aproximação de Born de Ondas Planas (PWBA), como função da energia (E) do projétil. Número entre parêntese representa potências de 10.

E (MeV)	Blindagem (PWBA)	Antiblindagem (PWBA)	Total ($B_{\text{PWBA}} + A_{\text{PWBA}}$)
0,52	2,0(2)	0,0	2,0(2)
0,65	2,3(2)	0,0	2,3(2)
0,77	2,6(2)	0,0	2,6(2)
0,90	2,8(2)	0,0	2,8(2)
1,03	2,9(2)	0,7(0)	2,9(2)
1,16	2,9(2)	1,3(0)	2,9(2)
1,29	2,9(2)	2,2(0)	2,9(2)
2,58	2,5(2)	1,3(1)	2,6(2)
3,87	2,0(2)	1,6(1)	2,2(2)
5,14	1,7(2)	1,7(1)	1,9(2)
6,43	1,4(2)	1,6(1)	1,6(2)
9,66	9,5(1)	1,3(1)	1,1(2)
12,88	7,2(1)	1,0(1)	8,0(1)
17,39	5,4(1)	7,8(0)	6,2(1)
23,00	4,1(1)	6,0(0)	4,7(1)

Tabela A.8: Cálculo da seção de choque total de perda eletrônica de Li^{2+} em Argônio e, das contribuições da blindagem (baseado no modelo de colisões livres – MCL) e antiblindagem (baseado na Aproximação de Born de Ondas Planas – PWBA), como função da energia (E) do projétil. Número entre parêntese representa potências de 10.

E (MeV)	Blindagem (MCL)	Antiblindagem (PWBA)	Total ($B_{\text{MCL}} + A_{\text{PWBA}}$)
0,77	1,8(2)	0,0	1,8(2)
0,90	1,8(2)	0,0	1,8(2)
1,03	1,8(2)	0,7(0)	1,8(2)
1,16	1,7(2)	1,3(0)	1,7(2)
1,29	1,6(2)	2,2(0)	1,6(2)
2,58	1,1 (2)	1,3(1)	1,2(2)
3,87	8,9(1)	1,6(1)	1,1(2)
5,14	7,3(1)	1,7(1)	9,0(1)
6,43	6,5(1)	1,6(1)	8,1(1)
9,66	4,9(1)	1,3(1)	6,2(1)
12,88	4,1(1)	1,0(1)	5,1(1)
17,39	3,2(1)	7,8(0)	4,0(1)
23,00	2,7(1)	6,0(0)	3,3(1)

A.3.3. Cálculo da Seção de choque total de perda eletrônica do projétil Li^+ em Argônio.

Tabela A.9: Cálculo da seção de choque total de perda eletrônica de Li^+ em Argônio e, das contribuições da blindagem (baseado no modelo de colisões livres – MCL) e antiblindagem (baseado na Aproximação de Born de Ondas Planas – PWBA), como função da energia (E) do projétil. Número entre parêntese representa potências de 10.

E (MeV)	Blindagem (MCL)	Antiblindagem (PWBA)	Total ($B_{\text{MCL}} + A_{\text{PWBA}}$)
0,52	8,1(1)	3,8(0)	8,5(1)
0,65	1,5(2)	1,0(1)	1,6(2)
0,77	1,9(2)	2,0(1)	2,1(2)
0,90	2,2(2)	3,0(1)	2,5(2)
1,03	2,4(2)	4,1(1)	2,8(2)
1,16	2,5(2)	5,0(1)	3,0(2)
1,29	2,5(2)	6,0(1)	3,1(2)
2,58	2,5(2)	9,5(1)	3,5(2)
3,87	2,1(2)	9,1(1)	3,0(2)
5,14	1,8(2)	8,1(1)	2,6(2)
6,43	1,6(2)	7,1(1)	2,3(2)
9,66	1,2(2)	5,3(1)	1,7(2)
12,88	9,3(1)	4,2(1)	1,4(2)

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] J.-S. Yoon and Y.-D. Jung, *Physics of Plasmas* **6**, 3391 (1999).
- [2] A. K. Kaminskii and A. A. Vasil'ev, *Physics of Particles and Nuclei* **29**, 201 (1998).
- [3] W. H. Liu and D. R. Schultz, *Astrophysical Journal* **530**, 500 (2000).
- [4] P. Wu, K. L. Heng, S. W. Yang, Y. F. Chen, R. S. Mohan, and P. H. C. Lim, in *Artificial Intelligence in Medicine*, edited by W. Horn *et al.* (Springer-Verlag Berlin, Berlin, 1999), pp. 372.
- [5] R. D. DuBois *et al.*, *Physical Review A* **68**, 042701 (2003).
- [6] R. D. DuBois *et al.*, *Physical Review A* **70**, 032712 (2004).
- [7] H. P. Hülskötter, W. E. Meyerhof, E. Dillard, and N. Guardala, *Physical Review Letters* **63**, 1938 (1989).
- [8] H. P. Hulskotter *et al.*, *Physical Review A* **44**, 1712 (1991).
- [9] J. H. McGuire, N. Stolterfoht, and P. R. Simony, *Physical Review A* **24**, 97 (1981).
- [10] R. Anholt, *Physics Letters A* **114**, 126 (1986).
- [11] E. C. Montenegro, W. S. Melo, W. E. Meyerhof, and A. G. de Pinho, *Physical Review Letters* **69**, 3033 (1992).
- [12] E. C. Montenegro, W. S. Melo, W. E. Meyerhof, and A. G. de Pinho, *Physical Review A* **48**, 4259 (1993).
- [13] H. Tawara and A. Russek, *Reviews of Modern Physics* **45**, 178 (1973).
- [14] M. M. Sant'Anna, W. S. Melo, A. C. F. Santos, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **99**, 46 (1995).
- [15] E. C. Montenegro, G. M. Sigaud, and W. E. Meyerhof, *Physical Review A* **45**, 1575 (1992).
- [16] W. S. Melo, M. M. Sant'Anna, A. C. F. Santos, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Physical Review A* **60**, 1124 (1999).
- [17] W. Wolff, H. Luna, A. C. F. Santos, E. C. Montenegro, and G. M. Sigaud, *Physical Review A* **80**, 032703 (2009).
- [18] W. Wolff, I. J. de Souza, A. C. Tavares, G. F. S. de Oliveira, and H. Luna, *Review of Scientific Instruments* **83**, 8, 123107 (2012).

- [19] J. S. Ihani, H. Luna, W. Wolff, and E. C. Montenegro, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **46**, 9, 115208 (2013).
- [20] A. C. F. Santos, G. M. Sigaud, W. S. Melo, M. M. Sant'Anna, and E. C. Montenegro, *Physical Review A* **82**, 012704 (2010).
- [21] A. C. F. Santos, G. M. Sigaud, W. S. Melo, M. M. Sant'Anna, and E. C. Montenegro, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **44**, 12, 045202 (2011).
- [22] A. C. F. Santos, W. S. Melo, M. M. Sant'Anna, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Review of Scientific Instruments* **73**, 2369 (2002).
- [23] D. R. Bates and G. Griffing, *Proceedings of the Physical Society. Section A* **66**, 961 (1953).
- [24] D. R. Bates and G. Griffing, *Proceedings of the Physical Society. Section A* **67**, 663 (1954).
- [25] D. R. Bates and G. Griffing, *Proceedings of the Physical Society. Section A* **68**, 90 (1955).
- [26] M. B. Shah and H. B. Gilbody, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **24**, 977 (1991).
- [27] M. M. Sant'Anna, W. S. Melo, A. C. F. Santos, G. M. Sigaud, E. C. Montenegro, M. B. Shah, and W. E. Meyerhof, *Physical Review A* **58**, 1204 (1998).
- [28] E. C. Montenegro and W. E. Meyerhof, *Physical Review A* **43**, 2289 (1991).
- [29] G. M. Sigaud, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **41** (2008).
- [30] P. L. Grande, G. Schiwietz, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Physical Review A* **54**, 2983 (1996).
- [31] A. B. Voitkiv, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Physical Review A* **59**, 2794 (1999).
- [32] E. C. Montenegro, A. C. F. Santos, W. S. Melo, M. M. Sant'Anna, and G. M. Sigaud, *Physical Review Letters* **88** (2002).
- [33] E. C. Montenegro, X. Y. Xu, W. E. Meyerhof, and R. Anholt, *Physical Review A* **38**, 3357 (1988).
- [34] R. D. DuBois, L. H. Toburen, and M. E. Rudd, *Physical Review A* **29**, 70 (1984).
- [35] M. Saito, Y. Haruyama, N. Hamamoto, K. Yoshida, A. Itoh and N. Imanishi, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **28** 5117 (1995).

- [36] R. D. DuBois, *Physical Review A* **39**, 4440 (1989).
- [37] A. C. F. Santos, W. S. Melo, M. M. Sant'Anna, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Physical Review A* **63**, 062717 (2001).
- [38] E. Cavalcanti, G. Sigaud, E. Montenegro, and H. Schmidt-Bocking, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **36**, 3087, PII S0953-4075(03)62321-7 (2003).
- [39] A. L. C. Losqui, F. Zappa, G. M. Sigaud, W. Wolff, M. M. Sant'Anna, A. C. F. Santos, H. Luna, and W. S. Melo, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **47**, 045202 (2014).
- [40] N. F. Mott and H. S. W. Massey, *The Theory of Atomic Collisions* (Oxford University Press, USA., 1987), Vol. I e II, International Series of Monographs on Physics.
- [41] L. H. Toburen, N. Stolterfoht, P. Ziem, and D. Schneider, *Physical Review A* **24**, 1741 (1981).
- [42] R. Anholt, *Physics Letters A* **114**, 126 (1986).
- [43] E. C. Montenegro, W. E. Meyerhof, and J. H. McGuire, *Advances in Atomic Molecular and Optical Physics D* **34**, 249 (1994).
- [44] N. Stolterfoht, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **53**, 477 (1991).
- [45] G. M. Sigaud and E. C. Montenegro, *Brazilian Journal of Physics* **33**, 382 (2003).
- [46] E. C. Montenegro and W. E. Meyerhof, *Physical Review A* **44**, 7229 (1991).
- [47] E. C. Montenegro and W. E. Meyerhof, *Physical Review A* **46**, 5506 (1992).
- [48] S. Ricz, B. Sulik, N. Stolterfoht, and I. Kádár, *Physical Review A* **47**, 1930 (1993).
- [49] D. H. Jakubaša-Amundsen, *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters* **22**, 701 (1992).
- [50] I. S. Dmitriev and V. S. Nikolaev, *Soviet Physics JETP-USSR* **17**, 447 (1963).
- [51] D. R. Bates and J. C. G. Walker, *Proceedings of the Physical Society* **90**, 333 (1967).
- [52] H. R. J. Walters, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **8**, L54 (1975).
- [53] D. P. Dewangan and H. R. J. Walters, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **11**, 3983 (1978).

- [54] M. Meron and B. M. Johnson, *Physical Review A* **41**, 1365 (1990).
- [55] K. Riesselmann, L. W. Anderson, L. Durand, and C. J. Anderson, *Physical Review A* **43**, 5934 (1991).
- [56] D. R. Bates, V. Dose, and N. A. Young, *Journal of Physics Part B: Atomic and Molecular Physics* **2**, 930 (1969).
- [57] M. Adibzadeh and C. E. Theodosiou, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **91**, 8 (2005).
- [58] M. B. Shah and H. B. Gilbody, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **18**, 899 (1985).
- [59] A. B. Voitkiv, N. Grun, and W. Scheid, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **33**, 3431 (2000).
- [60] J. C. Acquadro, H. Luna, S. D. Magalhães, F. Zappa, G. Jalbert, E. Bessa Filho, L. F. S. Coelho, and N. V. de Castro Faria, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **171**, 373 (2000).
- [61] F. Zappa. *Tese de doutorado* (2003).
- [62] W. Wolff, H. Luna, A. C. F. Santos, E. C. Montenegro, R. D. DuBois, C. C. Montanari, and J. E. Miraglia, *Physical Review A* **84**, 042704 (2011).
- [63] Universidade Federal do Rio de Janeiro, *Física de aceleradores, capítulo 8, terceira versão*, (2007), pp. 109.
- [64] R. Middleton, *Nuclear Instruments and Methods* **144**, 373 (1977).
- [65] R. Middleton, *Nuclear Instruments and Methods* **122**, 35 (1974).
- [66] K. Wong, W. Wu, E. Montenegro, I. Benitzhak, C. Cocke, J. Giese, and P. Richard, *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms* **99**, 72 (1995).
- [67] B. Farizon, M. Farizon, M. Gaillard, E. Gerlic, And S. Ouaskit, *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions With Materials and Atoms* **101**, 287 (1995).
- [68] S. J. Buckman, R. J. Gulley, M. Moghbelhossein and S. J. Bennett, *Measurement Science and Technology* **4**, 1143 (1993).
- [69] M. Hellsing, L. Karlsson, H. O. Andren and H. Norden, *Journal of Physics E: Scientific Instruments* **18**, 920 (1985).
- [70] E. Horsdal Pedersen and P Hvelplund, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **6**, 1277 (1973).

- [71] W. S. Melo, A. C. F. Santos, M. M. Sant'Anna, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **35**, L187, PII S0953-4075(02)34793-X (2002).
- [72] I. S. Dmitriev, Y. A. Teplova, Y. A. Belkova, N. V. Novikov, and Y. A. Fainberg, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **96** (2010).
- [73] L. I. Pivovarov, Levchenko, Yz, and Krivonos, Ga, *Soviet Physics JETP-USSR* **32**, 11 (1971).
- [74] H. Knudsen, L. H. Andersen, H. K. Haugen, and P. Hvelplund, *Physica Scripta* **26**, 132 (1982).
- [75] H. Knudsen, H. K. Haugen, and P. Hvelplund, *Physical Review A* **23**, 597 (1981).
- [76] M. Mattioli, G. Mazzitelli, M. Finkenthal, P. Mazzotta, K. Fournier, J. Kaastra, and M. Puiatti, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **40**, 3569 (2007).
- [77] R. D. DuBois, *Physical Review A* **36**, 2585 (1987).
- [78] J. L. Forest, J. A. Tanis, S. M. Ferguson, R. R. Haar, K. Lifrieri, and V. L. Plano, *Physical Review A* **52**, 350 (1995).
- [79] T. Kirchner, A. C. F. Santos, H. Luna, M. M. Sant'Anna, W. S. Melo, G. M. Sigaud, and E. C. Montenegro, *Physical Review A* **72**, 012707 (2005).
- [80] E. C. Montenegro *et al.*, *Physical Review A* **55**, 2009 (1997).
- [81] T. Tonuma, H. Kumagai, T. Matsuo, and H. Tawara, *Physical Review A* **40**, 6238 (1989).
- [82] M. M. Sant'Anna, E. C. Montenegro, and J. H. McGuire, *Physical Review A* **58**, 2148 (1998).
- [83] J. H. McGuire, in *Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics*, edited by B. Sir David Bates and Benjamin (Academic Press, 1991), pp. 217.