

André Carlos Tavares

**Ionização múltipla de gases nobres por prótons:
probabilidades de ionização e efeitos
pós-colisionais**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Geraldo Monteiro Sigaud

Rio de Janeiro
Abril de 2011



André Carlos Tavares

**Ionização múltipla de gases nobres por prótons:
probabilidades de ionização e efeitos pós-colisionais**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro Técnico Científico da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Prof. Geraldo Monteiro Sigaud

Orientador

Departamento de Física – PUC-Rio

Prof. Marcelo Martins Sant’Anna

UFRJ

Prof. Vitor Luiz Bastos de Jesus

IFRJ–Nilópolis

Prof. José Eugenio Leal

Coordenador Setorial do Centro
Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 8 de abril de 2011.

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

André Carlos Tavares

Graduou-se em Física com habilitação em Física Médica na Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Ficha Catalográfica

Tavares, André Carlos

Ionização múltipla de gases nobres por prótons: probabilidades de ionização e efeitos pós-colisionais / André Carlos Tavares; orientador: Geraldo Monteiro Sigaud. — Rio de Janeiro : PUC-Rio, Departamento de Física, 2011.

v., 98 f: il. ; 29,7 cm

1. Dissertação (mestrado) - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Física.

Inclui referências bibliográficas.

1. Física – Tese. 2. Colisões atômicas. 3. Ionização múltipla. 4. Probabilidade. 5. Pós-colisional. 6. Próton. I. Sigaud, Geraldo Monteiro. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Física. III. Título.

CDD: 510

Agradecimentos

Ao Deus todo poderoso no qual acredito, ao qual sirvo e adoro com toda a minha mente, força e vida, respectivamente.

Aos meus pais por tudo o que me ensinaram. Pai, é uma pena o senhor ter partido no meio do mestrado. Mãe, muito obrigado pelo sangue e pela perseverança.

Às minhas irmãs e aos meus cunhados/irmãos por terem me acolhido e finaciado em alguns momentos.

À Igreja Evangélica Shalom em Cachoeiro de Itapemirim no ES pelas orações. Agradeço também a Igreja Batista no Moneró na pessoa do Pr. Fábio Zambaldi, o qual cedeu inúmeras vezes suas dependências para o desenvolvimento dessa dissertação.

Aos meus bons amigos de longa jornada Miguel, Sarah, Miatã, Humberto e Kristoffer pela amizade e pelas grandes partidas de *Poker* que aliviaram as tensões causadas pela presente dissertação. Aos bons amigos Diogo e Ulrich (o nome é assim mesmo !!), obrigado por me suportarem durante todos esses anos debaixo do mesmo teto. Aos alunos da pós-graduação da PUC. Aos excelentes físicos Rafael Santos e Rafael Coutinho pelos almoços e pelos debates. Ao grande amigo Fábio Lins por ter acreditado em mim em um momento muito crítico na minha vida. Agradeço aos amigos da UFRJ, Lucas Sigaud e a Natália pelas excelentes dicas e direcionamentos. A um dos caras que mais admiro e tenho orgulho de conhecer, Marco Vieira. A Mary, Thiago e Alex que me socorreram no momento LaTeX de desespero.

Aos pesquisadores argentinos Dra. Cláudia Montanari e Dr. Jorge Mirágli por terem cedido gentilmente tempo e dados.

Muito obrigado professor Sigaud.

Em momentos de tribulação, Deus sempre envia um refrigerio que nos motiva a caminhar e olhar pra frente. O meu refrigerio tem nome, Quézia.

À CAPES e ao CNPq pelas bolsas de estudo concedidas.

Agradeço a TIM pela promoção que me permitiu falar com a minha família e namorada por, às vezes, mais de duas horas por dia e assim aliviar a saudade e tensão.

Resumo

Tavares, André Carlos; Sigaud, Geraldo Monteiro. **Ionização múltipla de gases nobres por prótons: probabilidades de ionização e efeitos pós-colisionais**. Rio de Janeiro, 2011. 98p. Dissertação de Mestrado — Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Nesta dissertação são apresentados cálculos detalhados de seções de choque de ionização múltipla de gases nobres por prótons de velocidades intermediárias. Foi realizado um estudo detalhado sobre a importância das probabilidades tanto de ionização direta de elétrons de cada subcamada como das probabilidades de emissão pós-colisional. Uma comparação com resultados teóricos e experimentais disponíveis na literatura também foi realizada. Com o intuito de investigar a influência dos valores adotados para as probabilidades de ionização em cada subcamada, foram realizadas versões que deixavam de levar em conta, gradativamente, a participação das diversas subcamadas do alvo. Foi analisada também a utilização de diferentes fontes de probabilidades de emissão pós-colisional. Observou-se que, para os estados de carga finais mais elevados, as seções de choque de ionização múltipla se tornam cada vez mais sensíveis tanto às probabilidades de ionização direta quanto às probabilidades de emissão pós-colisional.

Palavras-chave

Colisões atômicas; Ionização Múltipla; Probabilidade; Pós-colisional; Próton.

Abstract

Tavares, André Carlos; Sigaud, Geraldo Monteiro (Advisor). **Multiple ionization of noble gases by protons: ionization probabilities and post-collisional effects**. Rio de Janeiro, 2011. 98p. MSc. Dissertation — Departamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In this dissertation, detailed calculations of multiple ionization cross sections of noble gases by intermediate-velocity protons are presented. A detailed study on the relative importance of the probabilities for both the direct ionization of electrons from a given sub-shell and the postcollisional emission has been performed. The cross sections obtained in this work have also been compared to the experimental data and theoretical results available in the literature. In order to investigate the influence of the adopted values for the probabilities of direct ionization of each target sub-shell, different versions of the general equations have been used, in which the participation of each sub-shell has been gradually neglected. The use of probabilities for postcollisional emission from different authors has also been analyzed. It was observed that, for higher final charge states, the multiple ionization cross sections become more and more sensitive to both the direct ionization and the post-collisions emission probabilities.

Keywords

Atomic Collision; Multiple Ionization; Probability; Post-collision; Proton.

Sumário

1	Introdução	14
1.1	Objetivos	17
1.2	Organização da dissertação	17
2	Revisão Bibliográfica	19
2.1	Modelo de partículas independentes	19
2.2	Ionização múltipla provocada por íons desnudos em gases nobres	21
2.3	Ionização múltipla provocada por H^+ e He^+ em gases nobres	23
2.4	Ionização múltipla provocada por H^+ e H_2^+ em gases nobres	23
3	Metodologia utilizada	25
3.1	Probabilidades pós-colisionais.	25
3.2	Cálculo das probabilidades de emissão pós-colisional	26
3.3	O átomo de Ne	30
3.4	O átomo de Ar	33
3.5	O átomo de Kr	37
3.6	O átomo de Xe	40
4	Apresentação e discussão dos resultados	44
4.1	Resultados para o átomo de Ne	45
4.2	Resultados para o átomo de Ar	49
4.3	Resultados para o átomo de Kr	53
4.4	Resultados para o átomo de Xe	57
5	Conclusão	63
A	Appêndice	70
A.1	O átomo de Ne	70
A.2	O átomo de Ar	73
A.3	O átomo de Kr	81
A.4	O átomo de Xe	90

Lista de figuras

3.1	Probabilidades p_{nlm} de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Ne para prótons a 1 MeV. Na figura (a) cálculos realizados por Montanari <i>et al</i> na PWBA [25]. Na figura (b) cálculos realizados por Kirchner <i>et al</i> pelo método BGM [23].	31
3.2	Probabilidades p_{nlm} de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Ne por prótons a 1 MeV, figura (a), e a 5 MeV, figura (b), calculados por Montanari <i>et al</i> na PWBA [25].	32
3.3	Probabilidades $p_{nlm}(b)$ de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Ar para prótons a 1 MeV. Na figura (a) cálculos realizados por Montanari <i>et al</i> na PWBA [25]. Na figura (b) cálculos realizados por Kirchner <i>et al</i> pelo método BGM [23].	34
3.4	Probabilidades $p_{nlm}(b)$ de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Ar por prótons a 1 MeV, figura (a), e a 7 MeV, figura (b), calculados por Montanari <i>et al</i> na PWBA [25].	35
3.5	Probabilidades $p_{nlm}(b)$ de ionização para um elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Kr por prótons a 300 keV, figura (a), e a 1 MeV, figura (b), calculados por Montanari <i>et al</i> na PWBA [25].	38
3.6	Probabilidades $p_{nlm}(b)$ de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Xe por prótons a 400 keV, figura (a), e a 1 MeV, figura (b), calculados por Montanari <i>et al</i> na PWBA [25].	41
4.1	Seções de choque de ionização simples do Ne. Dados experimentais: triângulos vazios, Cavalcanti <i>et al</i> [12]; estrelas cheias, DuBois <i>et al</i> [3]. Resultados teóricos: linha tracejada, PWBA Montanari <i>et al</i> [14]. Resultados deste trabalho: círculo metade azul/branco e triângulo metade azul/branco, versões 1 e 4, respectivamente, com $p_i(b)$ do método BGM [23]; linhas cheia e tracejada em azul, versões 1 e 4, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais em negrito na Tab. 3.1 sugeridas por Montanari <i>et al</i> [14]; linhas cheia e tracejada em vermelho, versões 1 e 4, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais na Tab. 3.1 distintos dos sugeridos por Montanari <i>et al</i> [14].	45
4.2	Seções de choque de ionização dupla do Ne. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.1.	46
4.3	Seções de choque de ionização tripla do Ne. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.1.	46

- 4.4 Seções de choque de ionização tripla do Ne onde são apresentadas as versões de 1 a 4. Linhas cheia, tracejada, ponto e traço-ponto, todas em azul, versões 1, 2, 3 e 4, respectivamente, com as probabilidades pós-colisionais que estão em negrito na Tab. 3.1 sugeridos por Montanari *et al* [14]; Linhas cheia, tracejada, ponto e traço-ponto todas em vermelho, versões 1, 2, 3 e 4, respectivamente, com os pós-colisionais que estão na Tab. 3.1 distintas das sugeridas por Montanari *et al* [14]. 47
- 4.5 Seções de choque de ionização simples do Ar. Dados experimentais: triângulos vazios, Cavalcanti *et al* [12]; estrelas cheias, DuBois *et al* [3]. Resultados teóricos: linha cheia em preto, PWBA Montanari *et al* [14]. Resultados deste trabalho: círculo azul/branco e triângulo azul/branco, versões 1 e 5, respectivamente, com $p_i(b)$ do método BGM [23]; linhas cheia e tracejada em azul, versões 1 e 5, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais em negrito na Tab. 3.1 sugeridas por Montanari *et al* [14]; linhas cheia e tracejada em vermelho, versões 1 e 5, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais na Tab. 3.1 distintas das sugeridas por Montanari *et al* [14]. 49
- 4.6 Seções de choque de ionização dupla do Ar. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.5. 50
- 4.7 Seções de choque de ionização tripla do Ar. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.5. 50
- 4.8 Seções de choque de ionização quádrupla do Ar. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.5. 51
- 4.9 Seções de choque de ionização do Ar onde são apresentadas as versões de 1 a 5. Linhas cheia, tracejada, ponto, traço-ponto e traço-ponto-ponto todas em azul, versões 1, 2, 3, 4 e 5, respectivamente, com as probabilidades pós-colisionais que estão em negrito na Tab. 3.1 sugeridas por Montanari *et al* [14]. Linhas cheia, tracejada, ponto, traço-ponto e traço-ponto-ponto todas em vermelho, versões 1, 2, 3, 4 e 5, respectivamente, com os pós-colisionais que estão na Tab. 3.1 distintas das sugeridas por Montanari *et al* [14]. 51
- 4.10 Seções de choque de ionização simples do Kr. Dados experimentais: triângulos vazios, Cavalcanti *et al* [12]; estrelas cheias, DuBois *et al* [3]. Resultados teóricos: linha cheia em preto, PWBA Montanari *et al* [14]. Resultados deste trabalho: linhas cheia e tracejado em azul, versões 1 e 6, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais em negrito na Tab. 3.1 sugeridas por Montanari *et al* [14]; linhas cheia e tracejada vermelho, versões 1 e 6, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais na Tab. 3.1 distintas das sugeridos por Montanari *et al* [14]. 54
- 4.11 Seções de choque de ionização dupla do Kr. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.10. 54
- 4.12 Seções de choque de ionização tripla do Kr. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.10. 55

4.13	Seções de choque de ionização quádrupla do Kr. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig.4.10.	55
4.14	Seções de choque de ionização quádrupla do Kr onde são apresentadas as versões de 1 a 6. Linhas cheia, tracejada, ponto, traço-ponto, traço-ponto-ponto e traço curto todas em azul, versões 1, 2, 3, 4, 5 e 6, respectivamente, com as probabilidades pós-colisionais que estão em negrito na Tab. 3.1 sugeridas por Montanari <i>et al</i> [14]; Linhas cheia, tracejada, ponto, traço-ponto, traço-ponto-ponto e traço curto todos na cor vermelha, versões 1, 2, 3, 4, 5 e 6 respectivamente, as probabilidades com pós-colisionais que estão na Tab. 3.1 distintos dos sugeridos por Montanari <i>et al</i> [14].	56
4.15	Seções de choque de ionização simples do Xe. Dados experimentais: triângulos vazios, Cavalcanti <i>et al</i> [12]. Resultados teóricos: linha cheia em preto, PWBA, Montanari <i>et al</i> [14]. Resultados deste trabalho: linhas cheia e tracejada em azul, versões 1 e 6, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais em negrito na Tab. 3.1 sugeridas por Montanari <i>et al</i> [14]; linhas cheia e tracejada em vermelho, versões 1 e 6, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais na Tab. 3.1 distintas das sugeridas por Montanari <i>et al</i> [14].	58
4.16	Seções de choque de ionização dupla do Xe. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.15.	59
4.17	Seções de choque de ionização tripla do Xe. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.15.	59
4.18	Seções de choque de ionização quádrupla do Xe. As curvas estão representadas da mesma forma como na Fig. 4.15.	60
4.19	Seções de choque de ionização quádrupla do Xe onde são apresentadas as versões de 1 a 6. Linhas cheia, tracejada, ponto, tracejado-ponto, tracejado-ponto-ponto e traço curto todas em azul, versões 1, 2, 3, 4, 5 e 6, respectivamente, com probabilidades pós-colisionais que estão em negrito na Tab. 3.1 sugeridas por Montanari <i>et al</i> [14]; Linhas cheia, tracejado, ponto, tracejado-ponto, tracejado-ponto-ponto e tracejado curto todas em vermelha, versões 1, 2, 3, 4, 5 e 6 respectivamente, com probabilidades pós-colisionais que estão na Tab. 3.1 distintos dos sugeridos por Montanari <i>et al</i> [14].	60

Lista de tabelas

3.1	Compilação de dados experimentais e calculados de razão de fotoionização. $F_{\mu,i}$ é a probabilidade de emissão de i elétrons de camadas mais internas após a fotoionização de um elétron de subcamada μ , com o estado de carga final sendo $i+1$.	27
4.1	Razões percentuais entre os valores das seções de choque para a ionização múltipla em cada estado final de carga do átomo de Ne para as probabilidades de ionização calculadas na PWBA e no BGM na energia de 1 MeV.	47
4.2	Razões percentuais entre os valores das seções de choque para a ionização múltipla em cada estado final de carga do átomo de Ar para as probabilidades de ionização calculadas na PWBA e no BGM na energia de 1 MeV.	52
4.3	Razões percentuais entre os valores das seções de choque para a ionização múltipla em cada estado final de carga do átomo de Kr para as probabilidades de ionização oriundas da PWBA na energia de 300 keV.	56
4.4	Razões percentuais entre os valores das seções de choque para a ionização múltipla em cada estado final de carga do átomo de Xe para as probabilidades de ionização oriundas da PWBA na energia de 400 keV.	61
A.1	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 1$, ionização simples, com $n_{\text{pos}} = 0$ para o Ne.	70
A.2	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 2$, ionização dupla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1$ para o Ne.	71
A.3	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 3$, ionização tripla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1, 2$ para o Ne.	71
A.4	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 1$, ionização simples, com $n_{\text{pos}} = 0$ para o Ar.	73
A.5	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 2$, ionização dupla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1$ para o Ar.	74
A.6	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 3$, ionização tripla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1, 2$ para o Ar.	75
A.7	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 4$, ionização quádrupla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1, 2, 3$ para o Ar.	76

A.8	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 1$, ionização simples, com $n_{\text{pos}} = 0$ para o Kr.	81
A.9	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 2$, ionização dupla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1$ para o Kr.	82
A.10	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 3$, ionização tripla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1, 2$ para o Kr.	83
A.11	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 4$, ionização quádrupla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1, 2, 3$ para o Kr.	84
A.12	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 1$, ionização simples, com $n_{\text{pos}} = 0$ para o Xe.	90
A.13	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 2$, ionização dupla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1$ para o Xe.	91
A.14	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 3$, ionização tripla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1, 2$ para o Xe.	92
A.15	Combinações possíveis do número de elétrons ionizados por subcamada e respectiva emissão pós-colisional para $n = 4$, ionização quádrupla, com $n_{\text{pos}} = 0, 1, 2e3$ para o Xe.	93

Ora, a fé é o firme fundamento das coisas que se esperam e a prova das coisas que não se vêem. Porque por ela os antigos alcançaram bom testemunho. Pela fé entendemos que os mundos foram criados pela palavra de Deus; de modo que o visível não foi feito daquilo que se vê.

Carta aos Hebreus 11:1–3, A Bíblia Sagrada.