

2

Revisão Bibliográfica

Nesta parte da dissertação serão apresentados alguns estudos teóricos e experimentais que tratam da ionização múltipla de gases nobres por íons desnudos, vestidos e moleculares. Vamos, aqui, nos restringir àqueles trabalhos onde são apresentados cálculos que incluem os efeitos da emissão pós-colisional de elétrons. Na primeira seção apresentaremos os trabalhos referentes a colisões com prótons. Na segunda seção os trabalhos referentes a colisões com He^+ . Na terceira seção os trabalhos referentes a colisões com H_2^+ .

2.1

Modelo de partículas independentes

Do ponto de vista teórico, os métodos mais usados para o tratamento matemático da ionização múltipla se baseiam no modelo de partículas independentes (*Independent Particle Model*–IPM)[19]. Neste modelo considera-se que cada elétron do alvo interage com o projétil independentemente dos demais, e as diferentes probabilidades de ionização são combinadas para fornecer as seções de choque totais com base na distribuição binomial ou multinomial, dependendo de quantos processos são levados em consideração.

A equação

$$P_n^N(b) = \sum_{n_1+n_2+\dots+n_N=n} \prod_{i=1}^N \binom{N_i}{n_i} p_i^{n_i}(b) [1 - p_i(b)]^{N_i-n_i}, \quad (2-1)$$

define a probabilidade correspondente à transição de n de um total de N elétrons, em função do parâmetro de impacto b , devido às transições de n_i dentre os N_i elétrons de cada subcamada i do alvo. Cada um dos n_i elétrons possui uma probabilidade p_i de transição. Portanto, sendo p_i a probabilidade de ocorrer um determinado evento e q_i a probabilidade de não ocorrer este mesmo evento, temos que $p_i + q_i = 1$, então dizemos que $[1 - p_i(b)]$ é a probabilidade de não ocorrer o evento p_i . Destacamos que na Eq. (2-1) as informações sobre a dinâmica do colisão estão embutidas nas probabilidades

$p_i(b)$, enquanto que a estatística dos elétrons equivalentes é dada pela escolha da distribuição (binomial ou multinomial). O coeficiente binomial

$$\binom{N_i}{n_i} = \frac{N_i!}{n_i!(N_i - n_i)!}$$

determina o número de combinações possíveis dos n_i dentre N_i elétrons. A seção de choque total para a ionização de ordem n para um átomo pode ser obtida através de

$$\sigma_n = 2\pi \int_0^\infty b P_n^N(b) db. \quad (2-2)$$

2.1.1

Probabilidades pós-colisionais no IPM

Quando uma vacância é criada nas camadas internas de um átomo ela pode ser preenchida por uma transição radiativa ou por um processo tipo Auger.

Em 1966 Carlson *et al* [20] apresentaram um estudo sistemático sobre o rearranjo atômico das camadas internas devido a vacâncias geradas por raios-X incidentes em alvos de He, Ne, Ar, Kr, Xe e Hg. Os autores tiveram como motivação um entendimento melhor dos processos básicos que levam à ionização múltipla. Este trabalho forneceu probabilidades, por exemplo, $\mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, n_N, n_{\text{pos}})$ de emissão pós-colisional de n_{pos} elétrons após a criação de n_1 , n_2 e/ou n_N vacâncias, onde n_N é o número de elétrons ionizados em cada subcamada do átomo em questão. Os valores de $\mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, n_N, n_{\text{pos}})$ mostram a probabilidade existente quando um ou mais elétrons do átomo são ionizados pelo projétil com a participação ou não de elétrons que foram ejetados pelo rearranjo atômico após a ionização.

Na região de velocidades intermediárias, a produção de vacâncias em camadas internas de átomos com muitos elétrons se torna um processo relevante [21]. Entretanto, só recentemente foi feita a inclusão da emissão pós-colisional de elétrons no cálculo das seções de choque de ionização múltipla. Sant'Anna *et al* [22] incluíram valores de probabilidades de emissão pós-colisional de elétrons, obtidos a partir de experimentos de fotoionização, na Eq.2-1, obtendo um bom acordo com os resultados experimentais em colisão de H_2^+ com Ne. Com a inclusão destes efeitos, a Eq. (2-1) fica

$$P_n^N(b) = \sum_{n_1+n_2+\dots+n_N+n_{\text{pos}}=n} \prod_{i=1}^N \binom{N_i}{n_i} p_i^{n_i}(b) [1 - p_i(b)]^{N_i-n_i} \times \mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, n_N, n_{\text{pos}}), \quad (2-3)$$

As Eqs. (2-2 e 2-3) serão utilizadas como base nessa dissertação. É importante ressaltar que $\mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, n_N, n_{\text{pos}})$ é a única probabilidade na Eq.(2-3) que não é função do parâmetro de impacto b .

A ionização múltipla e a utilização das probabilidades de emissão pós-colisional nos levam a algumas questões, tais como:

- qual a influência da ionização de uma camada interna ou externa na reorganização do átomo e na emissão de elétrons pós-colisionais?
- quão significativa é a variação dos valores das probabilidades de emissão pós-colisional para a seção de choque de ionização múltipla?

2.2

Ionização múltipla provocada por íons desnudos em gases nobres

Kirchner *et al* [1] examinaram a contribuição dos canais de captura e ionização na colisão entre p^\pm e Ne, cobrindo uma região de energia entre 5 keV e 5 MeV. Estes autores calcularam as seções de choque onde os estados de carga finais do projétil e do alvo são determinados. Foi utilizado o método gerador de bases (*Basis Generator Method* – BGM) o qual expande as soluções para partículas em termos de bases que, dinamicamente, se adaptam ao processo de colisão em estudo. Esta característica permite uma representação adequada para os orbitais de propagação, incluindo suas superposições no contínuo, com um conjunto finito de funções. A representação via BGM da solução para uma partícula também permite a separação entre ionização e captura e entre o estado fundamental e o estado excitado do projétil em uma faixa grande de energias de colisão. Neste trabalho os autores argumentaram que a inclusão das contribuições pós-colisionais poderia melhorar a concordância entre os resultados teóricos e os dados experimentais. Foi adicionada, porém, somente a contribuição devida ao efeito Auger KLL nos cálculos realizados por eles.

Cavalcanti *et al* [11] mediram seções de choque absolutas para ionização simples e múltipla do Ne por prótons rápidos (0,75–3,50 MeV). Eles compararam os valores de seções de choque obtidos com os dados publicados por DuBois e colaboradores [3] e os resultados dos cálculos feitos por Kirchner *et al* [1]. Os autores levaram em conta a contribuição para a ionização múltipla do canal pós-colisional devido às transições Auger e Coster–Kronig $L_1L_2L_2$. As probabilidades de ionização pós-colisionais foram incluídas dentro do IPM descrito

na Sec. 2.1, apresentados na Eq.2-3, com $i = 1, 2, 3$. Neste trabalho, as probabilidades de ionização de n elétrons de um total de N elétrons distribuídos em três subcamadas N_1 , N_2 e N_3 são dados, então por:

$$P_n^{(N_1, N_2, N_3)}(b) = \sum_{n_1+n_2+n_3+n_{\text{pos}}=n} \prod_{i=1}^3 \binom{N_i}{n_i} p_i^{n_i} (1-p_i)^{N_i-n_i} \times \mathcal{P}(n_1, n_2, n_3, n_{\text{pos}}). \quad (2-4)$$

Na Eq. (2-4) n_i é o número de vacâncias produzidas pelo projétil através da ionização direta da subcamada i do Ne com probabilidade p_i . $\mathcal{P}(n_1, n_2, n_3, n_{\text{pos}})$ é a probabilidade de emissão de n_{pos} elétrons por um processo pós-colisional depois da criação de n_1 , n_2 e n_3 vacâncias nas subcamadas 1s, 2s e 2p do Ne, respectivamente. Devido à dependência similar com o parâmetro de impacto b entre $p_{2s}(b)$ e $p_{2p}(b)$ fornecidos por Kirchner *et al* [23], os autores consideraram $p_{2s}(b) \cong p_{2p}(b) \cong p_{2l}(b)$. Ao compararem os valores de $p_{1s}(b)$ com $p_{2l}(b)$, eles fizeram a aproximação $p_{1s}(b) \ll p_{2l}(b) \ll 1$ e isso implica que $(1-p)^k \cong 1$. A simples estimativa das contribuições dos processos de decaimento pós-colisionais Auger e Coster-Kronig feita por estes autores mostra que a inclusão destas contribuições nos cálculos resulta em uma descrição melhor da dependência com a energia das seções de choque experimentais na região de altas velocidades.

Galassi *et al* [13] estudaram o processo de ionização múltipla por prótons dos átomos de Ne e Ar tendo como base o modelo de partículas independentes [19]. Os autores analisaram os diferentes mecanismos da produção de vacâncias criadas pela interação direta do projétil com os elétrons do alvo, dentre os quais podemos destacar os efeitos Auger e Coster-Kronig de emissão de elétrons. O cálculo das probabilidades de ionização direta foram feitas usando a aproximação onda distorcida do contínuo-estado inicial eikonal (*Continuum Distorted Wave-Eikonal Initial State* – CDW-EIS). No modelo CDW-EIS, a função de onda inicial do elétron orbital é distorcida por uma fase associada à interação coulombiana do elétron do projétil. No canal de saída, o elétron emitido é descrito por um duplo produto de ondas planas e dois fatores contínuos associados a suas interações com o alvo residual e com o projétil. Portanto, neste modelo considera-se que o elétron emitido se move em um campo combinado criado pelo alvo e pelo projétil.

2.3

Ionização múltipla provocada por H^+ e He^+ em gases nobres

Montanari *et al* [14] apresentaram seções de choque teóricas pela aproximação CDW–EIS, para a ionização múltipla dos gases Ne, Ar, Kr e Xe, tendo como projéteis H^+ e He^+ . Vale ressaltar que, pela primeira vez, foram apresentados dados referentes a seções de choque de ionização múltipla para os átomos de Kr e Xe. Os autores mostraram, também, resultados com a primeira aproximação de Born (*Plane Wave Born Approximation* – PWBA) utilizando os mesmos potenciais utilizados na aproximação CDW–EIS. Foram calculadas as probabilidades de ionização $p_{nlm}(b)$, onde nlm são os números quânticos principal, orbital e magnético, respectivamente, para H^+ e He^+ . Neste trabalho, é também apresentada uma compilação extensa de resultados experimentais e teóricos de $\mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, n_N, n_{\text{post}})$, que serviu para a escolha das probabilidades pós-colisionais que foram utilizadas nos cálculos realizados por esses autores. Os resultados tabulados também fornecem as probabilidades pós-colisionais que foram utilizadas nesta dissertação. Os resultados dos cálculos feitos para a obtenção das probabilidades $p_{nlm}(b)$ foram gentilmente cedidos pelos autores para esta dissertação.

2.4

Ionização múltipla provocada por H^+ e H_2^+ em gases nobres

Sant’Anna *et al* [9] mediram a distribuição dos estados de carga Ne^{q+} da ionização dos átomos de Ne por íons moleculares de H_2^+ a 1 MeV/amu e íons desnudos de H^+ a 1 MeV, para os canais dissociativo e não dissociativo. Para o canal não dissociativo o comportamento, à mesma velocidade, do íon H_2^+ produz resultados semelhantes aos de prótons e elétrons. Os autores utilizaram a estrutura do IPM e os valores experimentais das probabilidades de decaimento que se seguem à criação de vacâncias nas subcamadas $1s$ e $2s$ retirados de Carlson *et al* [20]. As probabilidades de ionização em função do parâmetro de impacto foram feitas através da aproximação semi-clássica [24]. Foi desprezada a probabilidade de ionização em função do parâmetro de impacto da camada interna $1s$. Foram feitas também as seguintes aproximações: (i) para altas velocidades $p_{2s}(b) \approx p_{2p}(b) \ll 1$ e $(1-p)^k \approx 1$; (ii) se nenhum dos elétrons internos for ionizado, não haverá emissão pós-colisional; (iii) a produção inicial de duas vacâncias na mesma camada interna é menos provável do que a produção de uma vacância.

Sigaud *et al* [17] mediram a produção da ionização múltipla dos alvos He–Xe pelo íon molecular H_2^+ a 1,0 MeV/amu para os canais dissociativo e não dissociativo. Os autores compararam as medidas obtidas com cálculos estimados das seções de choque de ionização múltipla para os alvos Ne e

Ar. O método utilizado seguiu a estrutura do IPM com a inclusão das contribuições pós-colisionais. Foram utilizadas as probabilidades de ionização $p_{nlm}(b)$ calculados por Kirchner *et al* [1]. Os autores realizaram as seguintes aproximações: $p_{2p_0}(b) \approx p_{2p_{\pm 1}}(b) \approx p_{2p}(b)$ e $(1 - p_i) \approx 1$ para os átomos Ne e Ar e $p_{3p_0}(b) \approx p_{3p_{\pm 1}}(b) \approx p_{3p}(b)$ para o átomo de Ar. Com relação às probabilidades de emissão pós-colisionais $\mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, n_N, n_{\text{pos}})$, os autores consideraram que a emissão pós-colisional devida à ionização das camadas mais externas poderia ser desprezada, significando que $\mathcal{P}(0, 0, n_{2p}, n_{\text{post}})$ (para o Ne) $\approx \mathcal{P}(0, 0, 0, 0, n_{3p}, n_{\text{post}})$ (para o Ar) ≈ 0 , desde que $n_{2p}, n_{3p}, n_{\text{post}} \neq 0$. Para o canal, não dissociativo os autores consideraram as probabilidades¹ $P_n^{N_i}(b)_{\text{ND}}$ do íon molecular H_2^+ como as probabilidades $P_n^{N_i}(b)$ do íon H^+ . Para o canal dissociativo os autores levaram em conta o *antiscreening* (ver capítulo 1). As equações para este canal ficaram assim:

para o Ne

$$\begin{aligned} (P_n^{(N_{1s}, N_{2s}, N_{2p})})_{\text{D}}(b) &= \sum_{\sum_i n_i + n_{\text{post}} = n} N_i (P_{\text{anti}})_i \binom{N_i - 1}{n_i - 1} p_i^{n_i - 1} \\ &\times (1 - p_i)^{N_i - n_i} \prod_{j \neq i} \binom{N_j}{n_j} p_j^{n_j} (1 - p_j)^{N_j - n_j} \\ &\times \mathcal{P}(n_{1s}, n_{2s}, n_{2p}, n_{\text{post}}), \end{aligned} \quad (2-5)$$

e para o Ar

$$\begin{aligned} (P_n^{(N_{1s}, N_{2s}, N_{2p}, N_{3s}, N_{3p})})_{\text{D}}(b) &= \sum_{\sum_i n_i + n_{\text{post}} = n} N_i (P_{\text{anti}})_i \binom{N_i - 1}{n_i - 1} p_i^{n_i - 1} \\ &\times (1 - p_i)^{N_i - n_i} \prod_{j \neq i} \binom{N_j}{n_j} p_j^{n_j} (1 - p_j)^{N_j - n_j} \\ &\times \mathcal{P}(n_{1s}, n_{2s}, n_{2p}, n_{3s}, n_{3p}, n_{\text{post}}). \end{aligned} \quad (2-6)$$

Nas equações acima foi introduzida a probabilidade de ionização simultânea do elétron do projétil e algum elétron da subcamada i do alvo devido ao *antiscreening* $(P_{\text{anti}})_i$. As notações destas equações são as mesmas das Eqs. (2-1) e (2-3).

¹Os índices ND e D representam, respectivamente, os canais não dissociativo e dissociativo.