

3 Metodologia utilizada

Neste capítulo apresentaremos a metodologia aplicada para o cálculo das seções de choque de ionização múltipla com a inclusão das probabilidades de emissão pós-colisional de elétrons. O capítulo está dividido da seguinte forma: na Sec. 3.1 trataremos das probabilidades pós-colisionais apresentadas por Montanari e colaboradores e que são utilizadas nos cálculos realizados nesta dissertação. Na Sec. 3.2 apresentaremos as considerações e aproximações realizadas. Nas Secs. 3.2, 3.4, 3.5 e 3.6 trataremos das suposições feitas para a colisão de prótons com os átomos de Ne, Ar, Kr e Xe respectivamente. Algumas tabelas e equações, referentes a cada átomo, que são mencionadas neste capítulo estão apresentadas no apêndice ao final desta dissertação.

3.1 Probabilidades pós-colisionais.

Montanari *et al* [14] organizaram em uma tabela diferentes valores de frações $F_{\mu,i}$ para as probabilidades de emissão pós-colisional devido a fotoionização de elétrons apresentados por diversos grupos, onde μ é a subcamada de onde um elétron foi ionizado e i é o número de elétrons ejetados de outras camadas por efeitos pós-colisionais. A soma $i + 1$ dará o valor do estado final de carga do alvo. Esta tabela é reproduzida aqui como Tab.3.1 na qual a soma dos valores em cada coluna é igual a 1, isto é:

$$\sum_{i=0}^{i_{max}} F_{\mu,i} = 1. \quad (3-1)$$

O número máximo de elétrons emitidos por efeitos pós-colisionais, i_{max} , depende do estado de carga inicial de ionização [14]. Na Tab.3.1 os valores em negrito representam a escolha feita por Montanari e colaboradores em [14], enquanto que os valores em itálico representam os valores distintos dos sugeridos por Montanari *et al* escolhidos nesta dissertação para efeitos comparativos.

Os valores de probabilidades pós-colisionais escolhidos por Montanari e colaboradores foram os de experimentos e cálculos mais recentes, enquanto

que os escolhidos nessa dissertação para comparação com estes foram os de valores mais distintos daqueles utilizados em [14]. Os nossos cálculos foram feitos para verificar a importância dos valores de probabilidades pós-colisionais e sua influência no resultado final do cálculo de seção de choque de ionização múltipla.

As diversas referências que serviram de fonte das probabilidades pós-colisionais apresentadas na Tab.3.1 são frutos de estudos sobre a redistribuição dos elétrons pelas subcamadas dos átomos em questão, após a fotoionização de um elétron da subcamada μ .

3.2

Cálculo das probabilidades de emissão pós-colisional

Esta seção será dedicada a apresentar as hipóteses feitas nas ionizações simples, dupla, tripla e quádrupla aplicadas a todos os átomos que foram estudados nessa dissertação.

Uma hipótese aplicada em todos os íons foi a de que, se a colisão produzir somente a ionização de um elétron da camada mais externa do alvo, então, não haverá emissão pós-colisional.

A notação que vamos estabelecer aqui é que $n_1 = 1s$, $n_2 = 2s$, $n_3 = 2p$, $n_4 = 3s$, $n_5 = 3p$, $n_6 = 3d$, $n_7 = 4s$, $n_8 = 4p$, $n_9 = 4d$, $n_{10} = 5s$ e $n_{11} = 5p$, para representar o número de elétrons ionizados de cada subcamada dos átomos que vão do Ne ao Xe.

3.2.1

Ionização simples

Na ionização simples não há emissão póscolisional, e portanto, o número total de elétrons ejetados será $n = n_1 + n_2 + \dots + n_N = 1$. Sendo assim, as únicas probabilidades pós-colisionais $\mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, n_N, n_{\text{pos}})$ utilizadas na ionização simples são as $\mathcal{P}(0, \dots, 1, \dots, 0)$ para as diversas subcamadas do alvo. Como exemplo, tendo como base [26] na Tab.3.1, podemos dizer que para uma ionização simples da camada 1s do átomo de Ne, sem emissão póscolisional, temos que $\mathcal{P}(1, 0, 0, 0) = 0,0193$.

3.2.2

Ionização dupla

Na ionização dupla consideramos que, além da ionização direta de dois elétrons, pode existir, a partir da ionização de um elétron, a emissão de outro elétron por efeitos pós-colisionais. Porém, como explicado anteriormente no início da seção, se algum elétron da última camada for ionizado não haverá

Tabela 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 $i+1$.

Ne

	$1s^{[26]}$	$1s^{[27]}$	$1s^{[28]}$	$1s^{[29]}$	$1s^{[30]}$	$2s^{[29]}$
$F_{\mu,0}$	0,0193	0,015	0,000	0,013	<i>0,000</i>	1,00
$F_{\mu,1}$	0,921	0,935	0,939	0,980	<i>0,921</i>	0,00
$F_{\mu,2}$	0,0571	0,048	0,058	0,007	<i>0,075</i>	0,00
$F_{\mu,3}$	0,0028	0,003	0,003	0,000	<i>0,004</i>	0,00
$F_{\mu,4}$	0,000	0,000	0,000	0,000	<i>0,000</i>	0,00

Ar

	$2s^{[31]}$	$2s^{[32]}$	$2s^{[20]}$	$2p^{[33]}$	$2p^{[32]}$	$2p^{[20]}$	$3s^{[31]}$
$F_{\mu,0}$	0,000	0,000	<i>0,00</i>	0,005	0,00	<i>0,00</i>	1,00
$F_{\mu,1}$	0,010	0,023	<i>0,02</i>	0,863	0,87	<i>0,74</i>	0,00
$F_{\mu,2}$	0,890	0,860	<i>0,72</i>	0,128	0,12	<i>0,24</i>	0,00
$F_{\mu,3}$	0,100	0,110	<i>0,24</i>	0,003	0,01	<i>0,02</i>	0,00
$F_{\mu,4}$	0,000	0,000	<i>0,02</i>	0,001	0,00	<i>0,00</i>	0,00

Kr

	$3s^{[34]}$	$3s^{[35]}$	$3p^{[34]}$	$3p^{[36]}$	$3p^{[31]}$	$3p^{[35]}$	$3d^{[34]}$	$3d^{[31]}$	$3d^{[35]}$	$4s^{[34]}$
$F_{\mu,0}$	0,00	<i>0,000</i>	0,00	0,000	0,000	<i>0,00</i>	0,005	<i>0,01</i>	0,00	1,00
$F_{\mu,1}$	0,01	<i>0,152</i>	0,02	0,035	0,030	<i>0,10</i>	0,670	<i>0,70</i>	0,69	0,00
$F_{\mu,2}$	0,12	<i>0,465</i>	0,60	0,586	0,635	<i>0,45</i>	0,320	<i>0,30</i>	0,31	0,00
$F_{\mu,3}$	0,66	<i>0,273</i>	0,36	0,326	0,335	<i>0,45</i>	0,005	<i>0,00</i>	0,00	0,00
$F_{\mu,4}$	0,21	<i>0,110</i>	0,02	0,052	0,000	<i>0,00</i>	0,000	<i>0,00</i>	0,00	0,00

Xe

	$4s^{[37]}$	$4p^{[38]}$	$4p^{[37]}$	$4d^{[39]}$	$4d^{[40]}$	$4d^{[37]}$	$5s^{[41]}$
$F_{\mu,0}$	0,000	0,00	<i>0,000</i>	0,00	0,01	0,000	1,00
$F_{\mu,1}$	0,010	0,05	<i>0,036</i>	0,80	0,80	0,997	0,00
$F_{\mu,2}$	0,165	0,89	<i>0,913</i>	0,20	0,19	0,003	0,00
$F_{\mu,3}$	0,774	0,06	<i>0,051</i>	0,00	0,00	0,000	0,00
$F_{\mu,4}$	0,051	0,00	<i>0,000</i>	0,00	0,00	0,000	0,00

emissão pós-colisional. As expressões utilizadas para cada combinação da ionização dupla serão apresentados a seguir.

- Probabilidades pós-colisionais na ionização dupla para uma determinada subcamada n_1 , por exemplo:

$$\mathcal{P}(2, 0, 0, 0, \dots, 0) = [\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 0)]^2 \quad (3-2)$$

- Probabilidades pós-colisionais na ionização dupla quando os dois elétrons retirados pertencem à mesma camada. n é o número de elétrons ionizados da subcamada mais externa da camada em questão e N o número total de elétrons dessa subcamada:

$$\mathcal{P}(0, \dots, 1, 1, \dots, 0) = 1 - \frac{N-n}{N} [1 - \mathcal{P}(0, \dots, 1, 0, \dots, 0)] \quad (3-3)$$

- Probabilidades pós-colisionais na ionização dupla quando n_1 e n_2 , por exemplo, pertencem a camadas diferentes:

$$\mathcal{P}(1, 1, 0, \dots, 0) = \mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 0) \mathcal{P}(0, 1, 0, \dots, 0) \quad (3-4)$$

3.2.3

Ionização tripla

A partir desta ionização começamos a mesclar os artifícios usados nos cálculos das ionizações simples e dupla. Na ionização tripla o número de elétrons ejetados por efeitos pós-colisionais estão entre 0 e 2; portanto dizemos que $n = 3$ e $n_{pos} = 0, 1, 2$. Os métodos utilizados para cada combinação da ionização tripla serão apresentados a seguir:

- Probabilidades pós-colisionais na ionização tripla quando os elétrons ionizados pertencem a camadas diferentes:

$$\mathcal{P}(0, \dots, 1, 1, 1, \dots, 0) = \mathcal{P}(0, \dots, 1, 0, 0, \dots, 0) \quad (3-5)$$

$$\times \left\{ 1 - \frac{N-n}{N} [1 - \mathcal{P}(0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)] \right\} \quad (3-6)$$

- Probabilidades na ionização tripla quando, em uma mesma camada, n_1 , por exemplo, são ionizados 2 elétrons juntamente com a emissão de 1 elétron por efeitos pós-colisionais, sendo que o denominador 2 aparece

em razão da média aritmética do número de possibilidades que surgem:

$$\mathcal{P}(2, 0, 0, \dots, 1) = [2(\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 1))(\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 0))] \frac{1}{2} \quad (3-7)$$

- Probabilidades na ionização tripla quando são ionizados 2 elétrons de subcamadas diferentes porém na mesma camada, n_2 e n_3 por exemplo, juntamente com a emissão de 1 elétron por efeitos pós-colisionais:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(0, 1, 1, \dots, 1) &= \{[\mathcal{P}(0, 1, 0, \dots, 1)][\mathcal{P}(0, 0, 1, \dots, 0)] \quad (3-8) \\ &+ [\mathcal{P}(0, 0, 1, \dots, 1)][\mathcal{P}(0, 1, 0, \dots, 0)] \frac{1}{2} \end{aligned}$$

(3 – 10)

3.2.4

Ionização quádrupla

Para a ionização quádrupla aplicamos os procedimentos realizados nos cálculos para as ionizações simples, dupla e tripla. Apresentaremos somente alguns casos que podem trazer dúvidas:

- Probabilidades pós-colisionais na ionização quádrupla onde 2 elétrons de n_1 , por exemplo, e 2 elétrons por efeitos pós-colisionais são ejetados:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(2, 0, 0, \dots, 2) &= [\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 1)\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 1) \quad (3-11) \\ &+ 2\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 2)\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 0)] \frac{1}{3} \end{aligned}$$

- Probabilidades pós-colisionais na ionização quádrupla onde 2 elétrons de n_1 , 1 elétron na subcamada n_2 , por exemplo, e mais 1 elétron por efeitos pós-colisionais são ejetados:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(2, 1, 0, \dots, 1) &= [2\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 1)\mathcal{P}(1, 0, 0, \dots, 0) \quad (3-12) \\ &\times \mathcal{P}(0, 1, 0, \dots, 0) + \mathcal{P}(2, 0, 0, \dots, 0)\mathcal{P}(0, 1, 0, \dots, 1)] \frac{1}{3} \end{aligned}$$

3.3

O átomo de Ne

Vamos apresentar nesta seção as probabilidades de ionização para cada elétron e a metodologia aplicada ao átomo de Ne, cuja configuração eletrônica é $1s^2, 2s^2, 2p^6$. Estas probabilidades foram calculadas para prótons com energias de 1, 2, 3 e 5 MeV.

3.3.1

Probabilidades utilizadas

As probabilidades p_{nlm} de ionização por prótons de um único elétron por subcamada, caracterizada pelos números quânticos n, l, m para o átomo de Ne, utilizadas nesta dissertação foram calculadas por dois modelos: PWBA [25] e BGM [23]. Apresentaremos p_{nlm} nas energias de 1 e 5 MeV no caso da PWBA, e 1 MeV no caso do BGM. A Fig. (3.1) representa as probabilidades p_{nlm} de ionização por prótons, para cada elétron nas subcamadas do átomo de Ne a 1 MeV calculados por Montanari *et al* [25] (a) e Kirchner *et al* [23] (b). A Fig. (3.2) apresenta as probabilidades p_{nlm} para prótons de 1 e 5 MeV para o Ne calculados por Montanari *et al* na PWBA.

Na Fig. (3.1) é observada uma discrepância entre os valores de p_{nlm} calculados pelos diferentes modelos: os valores obtidos pelo método BGM são cerca de duas vezes maiores do que os obtidos na PWBA para pequenos parâmetros de impacto, mas caem mais rapidamente a zero, à medida que b aumenta.

Na Fig.(3.2) é observado que, para prótons com energia de incidência de 1 MeV, as probabilidades de ionização $p_{1s}(b)$, a princípio, poderiam ser desprezadas em comparação com as probabilidades de ionização $p_{2l}(b)$. Porém com o aumento da energia de incidência dos prótons, as probabilidades $p_{1s}(b)$ aumentam e não podem ser desprezadas se comparadas com as probabilidades $p_{2l}(b)$, como pode ser observado na parte (b) da Fig. (3.2). Apesar de $p_{1s}(b) \ll p_{2l}(b)$ para a energia de 1 MeV, sua influência no resultado final será verificada nos cálculos aqui apresentados. Para $p_{2p_0(b)}$ e $p_{2p_{\pm}(b)}$ foi utilizado o valor da média aritmética entre eles, p_{2p} .

3.3.2

Metodologia aplicada ao Ne

Na Eq. (2-3) observamos a existência do fator $[1 - p_i(b)]^{N_i - n_i}$ o qual é aproximadamente igual a 1 quando a probabilidade $p_i \ll 1$. Nesta dissertação cada probabilidade p_i será levado em conta, mesmo que o valor correspondente a ela venha a ser muito menor do que a unidade. Para o átomo de Ne

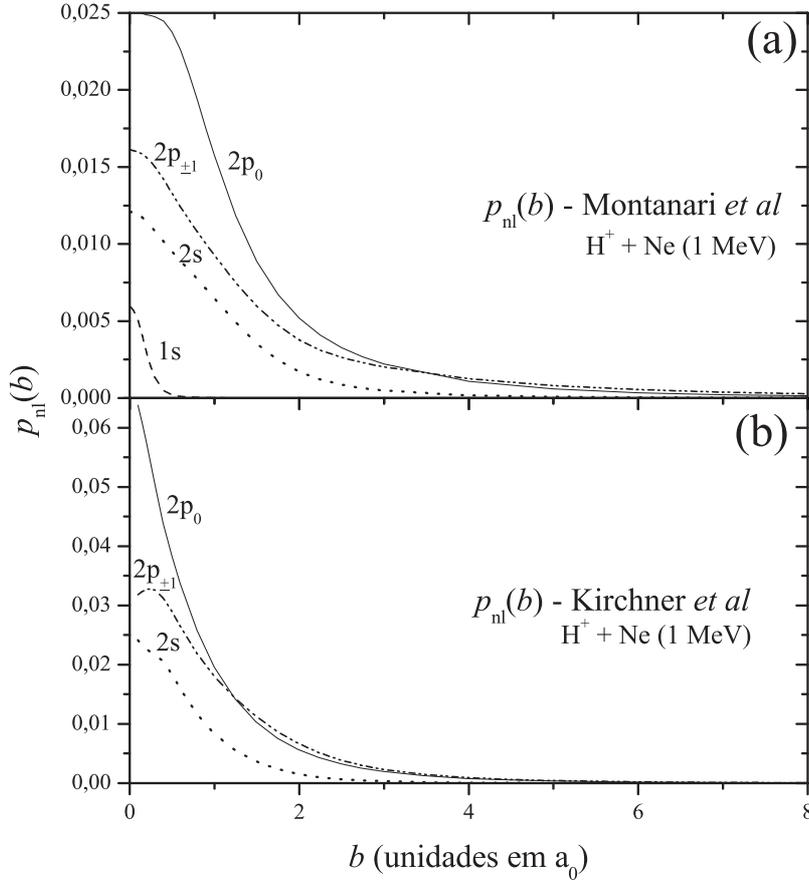


Figura 3.1: Probabilidades p_{nlm} de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Ne para prótons a 1 MeV. Na figura (a) cálculos realizados por Montanari *et al* na PWBA [25]. Na figura (b) cálculos realizados por Kirchner *et al* pelo método BGM [23].

foram construídas quatro versões da Eq. (2-3) para cada energia e grau de ionização. Em cada uma das versões será levada em conta a participação de cada subcamada para o resultado final.

Portanto, para a versão 1 teremos

$$[1 - p_{nl}(b)]^k \neq 1 \quad \forall nl; \tag{3-13}$$

para a versão 2 teremos

$$[1 - p_{2l}(b)]^k \neq 1; \tag{3-14}$$

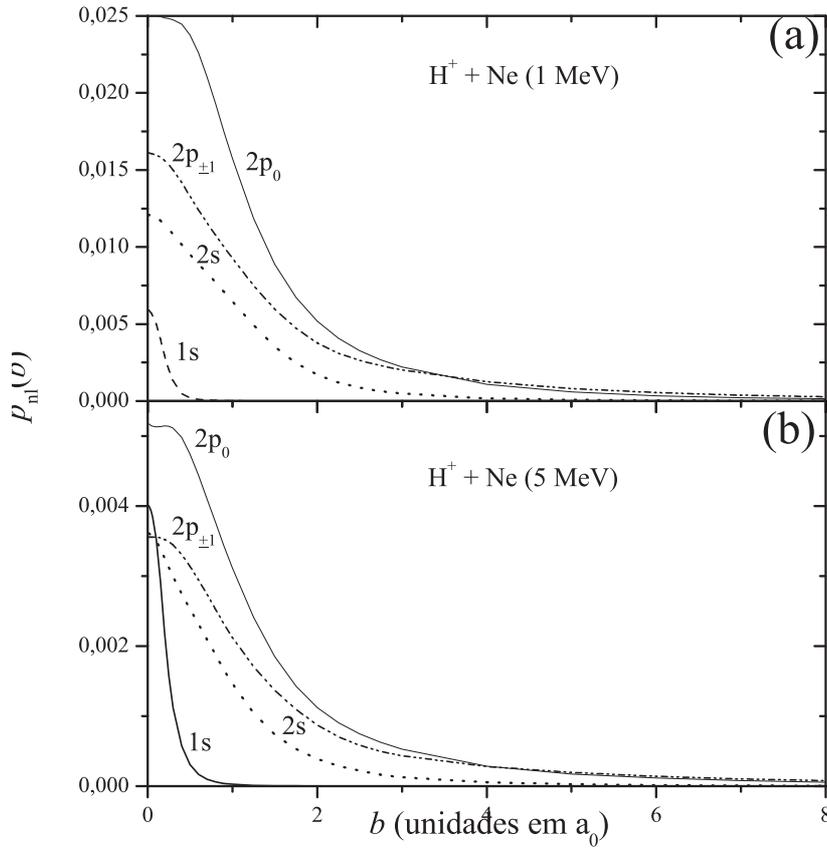


Figura 3.2: Probabilidades p_{nlm} de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Ne por prótons a 1 MeV, figura (a), e a 5 MeV, figura (b), calculados por Montanari *et al* na PWBA [25].

$$[1 - p_{1s}(b)]^k = 1;$$

para a versão 3 teremos

$$[1 - p_{2p}(b)]^k \neq 1; \tag{3-15}$$

$$[1 - p_{1s}(b)]^k = 1;$$

$$[1 - p_{2s}(b)]^k = 1;$$

para a versão 4 teremos

$$[1 - p_{1s}(b)]^k = 1; \tag{3-16}$$

$$[1 - p_{2s}(b)]^k = 1;$$

$$[1 - p_{2p}(b)]^k = 1,$$

onde $k = (N_i - n_i)$.

Para conhecermos as possibilidades de combinações existentes para cada grau de ionização em cada subcamada, construímos tabelas (Appêndice) que facilitaram a visualização das mesmas. Essas tabelas foram úteis para retirar as configurações possíveis e com elas obter valores das probabilidades de ionização pós-colisionais, como explicado na seção anterior. As tabelas estão divididas por grau de ionização. Em cada uma delas estão discriminadas as subcamadas e o número de elétrons ionizados em cada uma delas. A última coluna é referente aos elétrons ejetados por efeitos pós-colisionais. As Tabs. A.1, A.2, A.3 (Appêndice) são referentes a ionizações simples, dupla e tripla do Ne. É importante notar que, tanto nestas como nas tabelas similares construídas para os demais alvos aqui considerados, não foram incluídas combinações em que elétrons de última camada do alvo ionizados diretamente na colisão produzindo emissão pós-colisional, já que, por hipótese, as probabilidades são nulas nestes casos (ver Sec. 3.2).

Com base nas Tabs. A.1, A.2, A.3 foram calculados os valores para $\mathcal{P}(n_1, n_2, \dots, n_N, n_{\text{pos}})$, e juntamente com as versões 1, 2, 3 e 4 obtemos os valores de $(P_f)_{V_d}$, onde f e d são o grau de ionização e a versão desejada (Appêndice), respectivamente. Por questão de espaço, apresentaremos no apêndice somente as equações de $(P_f)_{V_d}$ para as versões 1 e 4 em todos os graus de ionização; as equações para as outras versões serão mostrados somente os resultados obtidos em gráficos no capítulo seguinte a esse.

3.4

O átomo de Ar

Vamos apresentar nesta seção as probabilidades de ionização para cada elétron e a metodologia aplicada ao átomo de Ar, cuja configuração eletrônica é $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$. Estas probabilidades foram calculadas para prótons com energias de 1, 2, 3 e 7 MeV.

3.4.1

Probabilidades utilizadas

Da mesma forma do que no caso do átomo de Ne as probabilidades p_{nlm} de ionização por prótons de um único elétron por subcamada, caracterizados pelos números quânticos n, l, m para o átomo de Ar, utilizadas nesta dissertação

foram calculadas por na PWBA [25] e no BGM [23]. Apresentaremos p_{nlm} nas energias de 1 e 7 MeV no caso da PWBA, e 1 MeV no caso do BGM. A Fig. (3.3) representa as probabilidades p_{nlm} de ionização por prótons, para cada elétron nas subcamadas do átomo de Ar a 1 MeV calculados por Montanari *et al* [25] (a) e Kirchner *et al* [23]. A Fig. (3.4) apresenta as probabilidades p_{nlm} para prótons de 1 e 7 MeV para o Ne calculados por Montanari *et al* através do método PWBA. Para o Ar, a probabilidade $p_{1s}(b)$ é muito menor do que $p_{2l}(b)$ e $p_{3l}(b)$, em ambos os cálculos para 1 MeV e também para 7 MeV na PWBA (diferentemente do caso do Ne). Sendo assim, as $p_{1s}(b)$ serão desprezados nos cálculos. Para $p_{2p_0}(b)$, $p_{2p_{\pm 1}}(b)$ e $p_{3p_0}(b)$, $p_{3p_{\pm 1}}(b)$ foram utilizados os valores da médias aritméticas entre eles referentes a cada subcamada, respectivamente, $p_{2p}(b)$ e $p_{3p}(b)$.

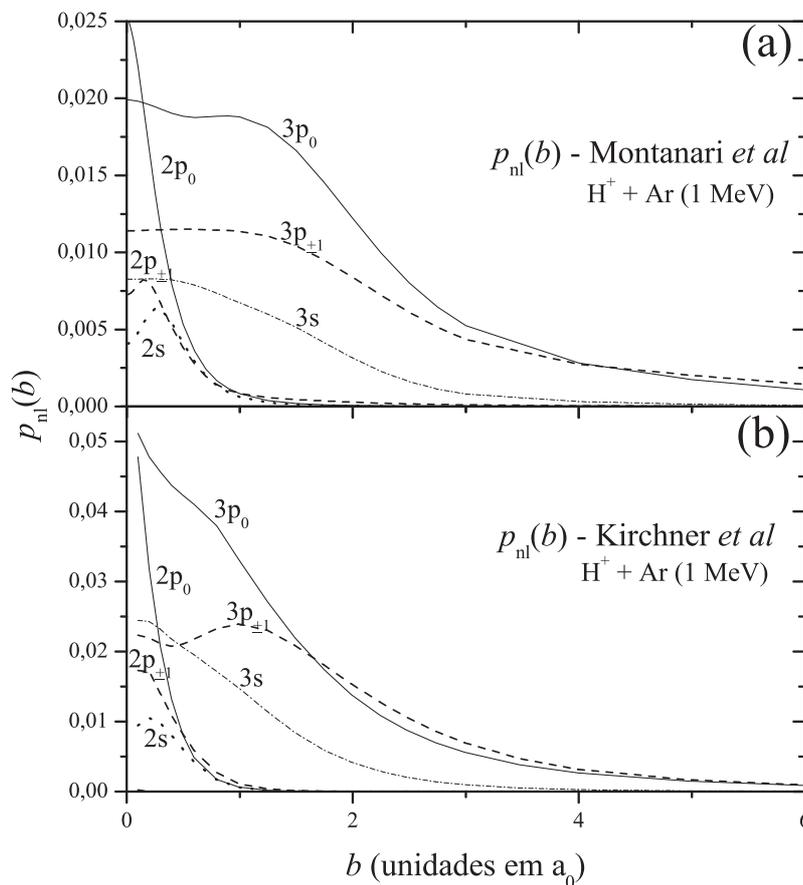


Figura 3.3: Probabilidades $p_{nlm}(b)$ de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Ar para prótons a 1 MeV. Na figura (a) cálculos realizados por Montanari *et al* na PWBA [25]. Na figura (b) cálculos realizados por Kirchner *et al* pelo método BGM [23].

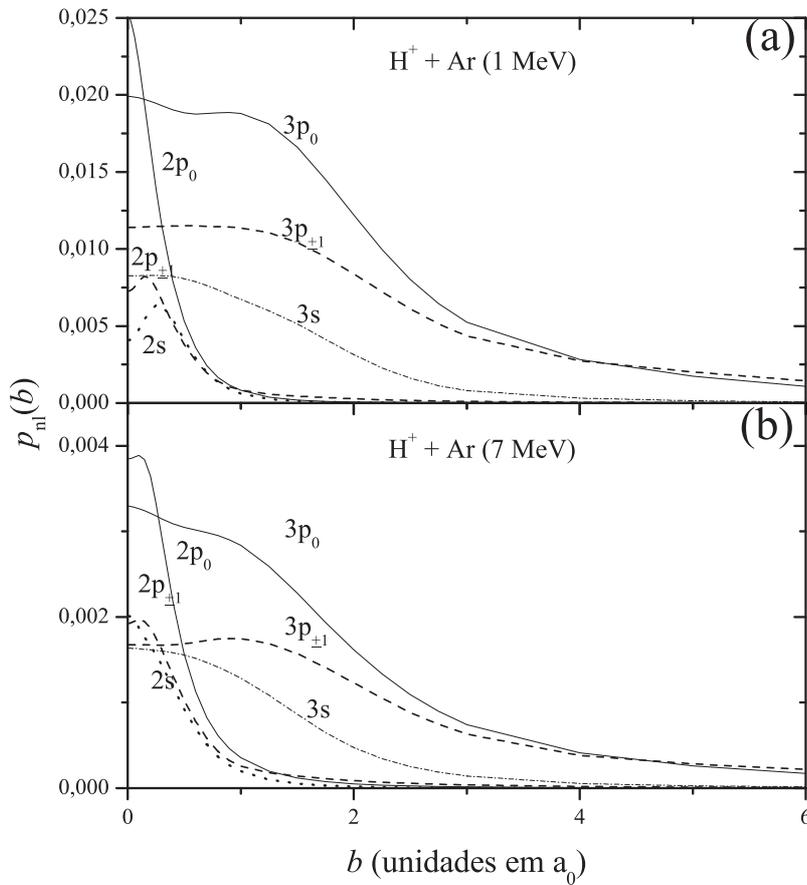


Figura 3.4: Probabilidades $p_{nlm}(b)$ de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Ar por prótons a 1 MeV, figura (a), e a 7 MeV, figura (b), calculados por Montanari *et al* na PWBA [25].

Na Fig. (3.3) é observada uma discrepância nos valores de $p_{nlm}(b)$ calculados pelos dois métodos. Essa diferença chega a ter um fator 2 para as probabilidades $p_{2p_0}(b)$, $p_{3p_0}(b)$ e $p_{3p_{\pm 1}}(b)$ para pequenos parâmetros de impacto. Entretanto, diferentemente do caso do Ne, as probabilidades calculadas pelo método BGM têm comportamento semelhante às aquelas calculadas na PWBA à medida que b aumenta; uma exceção é para p_{3p_0} , que cai mais rapidamente no BGM do que na PWBA.

3.4.2

Metodologia aplicada ao Ar

Será utilizada a mesma metodologia aplicada para o Ne ao tratarmos o átomo de Ar. No caso do Ar foram feitas cinco versões.

Portanto para a versão 1 teremos

$$[1 - p_{nl}(b)]^k \neq 1 \quad \forall nl \quad (3-17)$$

para a versão 2 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{3l}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{2p}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{2s}(b)]^k &= 1; \end{aligned} \quad (3-18)$$

para a versão 3 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{3l}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{2s}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{2p}(b)]^k &= 1; \end{aligned} \quad (3-19)$$

para a versão 4 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{2s}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{2p}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{3s}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{3p}(b)]^k &\neq 1e \end{aligned} \quad (3-20)$$

para a versão 5 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{2s}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{2p}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{3s}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{3p}(b)]^k &= 1, \end{aligned} \quad (3-21)$$

onde $k = (N_i - n_i)$.

As tabelas que servem para retirar as configurações possíveis e, com elas, obter valores das probabilidades de ionização pós-colisionais para o átomo de Ar foram construídas da mesma forma do que para o Ne, com a modificação de que só apresentaremos às combinações referentes as subcamadas 2s, 2p, 3s e 3p. As Tabs. (A.4, A.5, A.6, A.7) (Apêndice) são referentes a ionizações simples, dupla, tripla e quádrupla do Ar.

A mesma metodologia aplicada ao átomo de Ne foi utilizada com o átomo de Ar. Com base nas Tabs. (A.4, A.5, A.6, A.7) foram calculados os valores para $\mathcal{P}(n_2, n_3, n_4, n_5, n_{\text{pos}})$, e juntamente com as versões 1, 2, 3, 4 e 5, obtemos os valores de $(P_f)_{V_d}$, onde f e d são o grau de ionização e a versão desejada (Apêndice), respectivamente. Por questão de espaço apresentaremos somente as equações de $(P_f)_{V_d}$ para as versões 1 e 5 em todos os graus de ionização; para as outras versões serão mostrados somente os resultados obtidos em forma de gráficos no capítulo seguinte a esse.

3.5

O átomo de Kr

Vamos apresentar nesta seção as probabilidades de ionização para cada elétron e a metodologia aplicada ao átomo de Kr, cuja configuração eletrônica é $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6$. Estas probabilidades foram calculadas para prótons com energias de 300, 500, 700 e 1000 keV.

3.5.1

Probabilidades utilizadas

As probabilidades p_{nlm} de ionização por prótons de um único elétron por subcamada, caracterizados pelos números quânticos n, l, m para o átomo de Kr, utilizadas nesta dissertação, foram calculadas somente a PWBA. A Fig. (3.5) apresenta as probabilidades p_{nlm} para prótons de 300 keV e 1 MeV para o Kr calculados por Montanari *et al.* Para o Kr, as probabilidades $p_{1s}(b)$ e $p_{2l}(b)$ são muito menores do que $p_{3l}(b)$ e $p_{4l}(b)$, para todas as energias consideradas, sendo assim, elas foram desprezadas no cálculo das seções de choque. Para $p_{3p_0}(b)$, $p_{3p_{\pm 1}}(b)$, $p_{3d_0}(b)$, $p_{3d_{\pm 1}}(b)$, $p_{3d_{\pm 2}}(b)$ e $p_{4p_0}(b)$, $p_{4p_{\pm 1}}(b)$ foram utilizados os valores da média aritmética entre eles referentes a cada subcamada, isto é, $p_{3p}(b)$, $p_{3d}(b)$ e $p_{4p}(b)$, respectivamente.

3.5.2

Metodologia aplicada ao Kr

Será utilizada a mesma metodologia aplicada para o Ne ao tratarmos o átomo de Kr. No caso do Kr foram feitas seis versões.

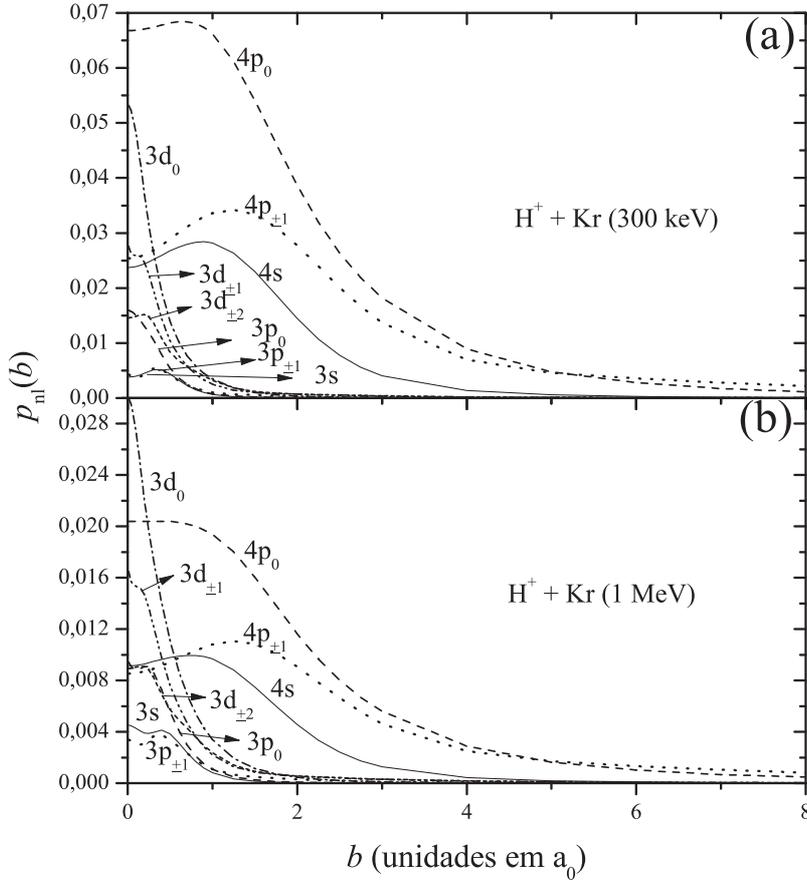


Figura 3.5: Probabilidades $p_{nlm}(b)$ de ionização para um elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Kr por prótons a 300 keV, figura (a), e a 1 MeV, figura (b), calculados por Montanari *et al* na PWBA [25].

Portanto para a versão 1 teremos

$$[1 - p_{nl}(b)]^k \neq 1 \quad \forall nl; \tag{3-22}$$

para a versão 2 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{4l}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{3d}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{3p}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{3s}(b)]^k &= 1 \end{aligned} \tag{3-23}$$

para a versão 3 teremos

$$\begin{aligned}
 [1 - p_{4l}(b)]^k &\neq 1; \\
 [1 - p_{3d}(b)]^k &\neq 1; \\
 [1 - p_{3p}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3s}(b)]^k &= 1;
 \end{aligned}
 \tag{3-24}$$

para a versão 4 teremos

$$\begin{aligned}
 [1 - p_{4p}(b)]^k &\neq 1; \\
 [1 - p_{3d}(b)]^k &\neq 1; \\
 [1 - p_{4s}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3p}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3s}(b)]^k &= 1;
 \end{aligned}
 \tag{3-25}$$

para a versão 5 teremos

$$\begin{aligned}
 [1 - p_{4p}(b)]^k &\neq 1; \\
 [1 - p_{3d}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{4s}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3d}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3p}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3s}(b)]^k &= 1;
 \end{aligned}
 \tag{3-26}$$

para a versão 6 teremos

$$\begin{aligned}
 [1 - p_{4p}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{4s}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3d}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3p}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{3s}(b)]^k &= 1;
 \end{aligned}
 \tag{3-27}$$

onde $k = (N_i - n_i)$. É importante lembrar que na Eq. 3-26 igualamos à unidade primeiramente a subcamada 4s ao invés de 3d, levando em conta a ordem dos níveis de energia das subcamadas deste átomo.

As tabelas que servem para retirar as configurações possíveis e com elas obter valores das probabilidades de ionização pós-colisionais para o átomo de Kr foram construídas da mesma forma do que para o Ne, com a modificação de que só apresentaremos as combinações referentes às subcamadas 3s, 3p, 3d, 4s e 4p. As Tabs. (A.8, A.9, A.10, A.11) são referentes a ionizações simples, dupla, tripla e quádrupla do Kr.

A mesma metodologia aplicada aos átomos de Ne e Ar foi utilizada com o átomo de Kr. Com base nas Tabs. (A.8, A.9, A.10, A.11) foram calculados os valores para $\mathcal{P}(n_4, n_5, n_6, n_7, n_8, n_{\text{pos}})$, e juntamente com as versões 1, 2, 3, 4, 5 e 6 obtemos os valores de $(P_f)_{V_d}$, onde f e d são o grau de ionização e a versão desejada, respectivamente. Por questão de espaço apresentaremos somente as equações de $(P_f)_{V_d}$ para as versões 1 e 6 em todos os graus de ionização, as equações para as outras versões serão mostrados somente os resultados obtidos em forma de gráficos no capítulo seguinte a esse. As equações abaixo levam em conta somente os valores de $p_{3s}, p_{3p}, p_{3d}, p_{4s}$ e p_{4p} . Por causa da quantidade de equações que podem surgir, vamos nos limitar a apresentar somente as equações nas quais $\mathcal{P}(n_4, n_5, n_6, n_7, n_8, n_{\text{pos}}) \neq 0$.

3.6

O átomo de Xe

Vamos apresentar nesta seção as probabilidades de ionização para cada elétron e a metodologia aplicada ao átomo de Xe, cuja configuração eletrônica é $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6, 3d^{10}, 4s^2, 4p^6, 5s^2, 5p^6$. Estas probabilidades foram calculadas para prótons com energias de incidência de 400, 500, 700 e 1000 keV.

3.6.1

Probabilidades utilizadas

As probabilidades p_{nlm} de ionização por prótons de um único elétron por subcamada, caracterizados pelos números quânticos n, l, m para o átomo de Xe, utilizadas nesta dissertação, foram calculadas somente usando PWBA. A Fig.(3.6) apresenta as probabilidades p_{nlm} para prótons de 400 keV e 1 MeV para o Xe calculados por Montanari *et al* Para o Xe, as probabilidades de ionização direta das camadas 1s, 2s e 3l são muito menores do que aquelas

para as subcamadas 4l e 5l, para todas as energias consideradas. Sendo assim, eles foram desprezados. Para $p_{4p_0(b)}$, $p_{4p_{\pm 1}(b)}$, $p_{4d_0(b)}$, $p_{4d_{\pm 1}(b)}$, $p_{4d_{\pm 2}(b)}$ e $p_{5p_0(b)}$, $p_{5p_{\pm 1}(b)}$ foram utilizados os valores das médias aritméticas entre eles, referentes a cada subcamada, isto é, p_{4p} , p_{4d} e p_{5p} , respectivamente.

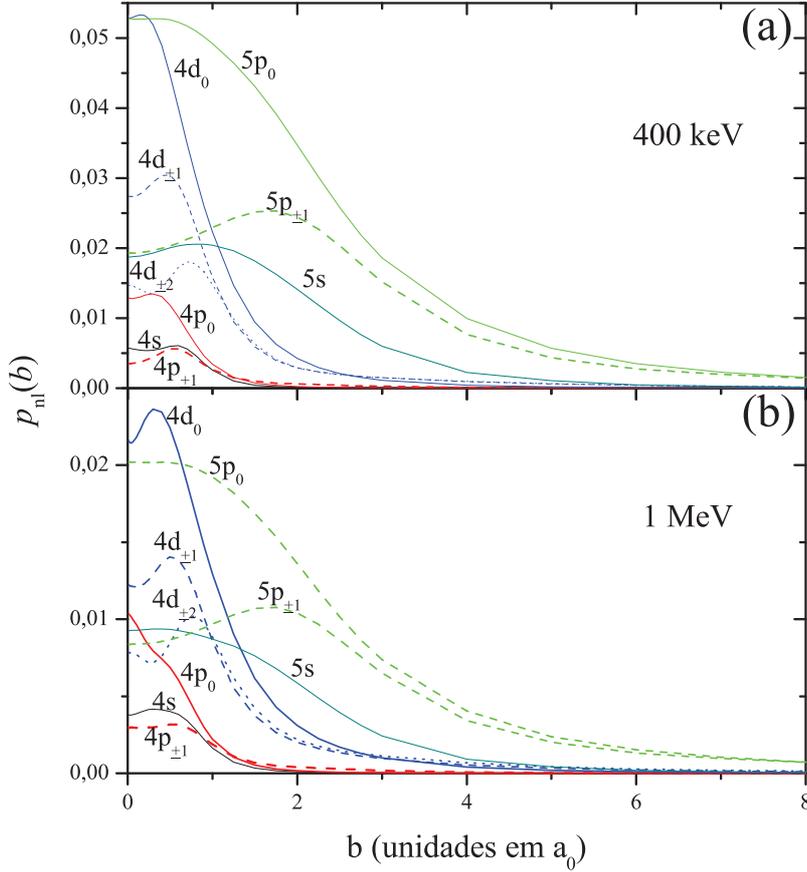


Figura 3.6: Probabilidades $p_{nlm}(b)$ de ionização para cada elétron em sua respectiva subcamada do átomo de Xe por prótons a 400 keV, figura (a), e a 1 MeV, figura (b), calculados por Montanari *et al* na PWBA [25].

3.6.2 Metodologia aplicada ao Xe

Será utilizada a mesma metodologia aplicada para o Ne ao tratarmos o átomo de Xe. No caso do Xe foram feitas seis versões.

Portanto para a versão 1 teremos

$$[1 - p_{nl}(b)]^k \neq 1 \quad \forall nl; \quad (3-28)$$

para a versão 2 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{5l}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{4d}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{4p}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{4s}(b)]^k &= 1; \end{aligned} \tag{3-29}$$

para a versão 3 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{5l}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{4d}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{4p}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{4s}(b)]^k &= 1; \end{aligned} \tag{3-30}$$

para a versão 4 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{5p}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{5s}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{4d}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{4p}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{4s}(b)]^k &= 1 \end{aligned} \tag{3-31}$$

para a versão 5 teremos

$$\begin{aligned} [1 - p_{5p}(b)]^k &\neq 1; \\ [1 - p_{5s}(b)]^k &= 1 \\ [1 - p_{4d}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{4p}(b)]^k &= 1; \\ [1 - p_{4s}(b)]^k &= 1 \end{aligned} \tag{3-32}$$

para a versão 6 teremos

$$\begin{aligned}
 [1 - p_{5p}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{5s}(b)]^k &= 1 \\
 [1 - p_{4d}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{4p}(b)]^k &= 1; \\
 [1 - p_{4s}(b)]^k &= 1,
 \end{aligned} \tag{3-33}$$

onde $k = (N_i - n_i)$. É importante lembrar que na Eq. 3-32 igualamos à unidade primeiramente a subcamada 5s ao invés de 4d, levando em conta a ordem dos níveis de energia das subcamadas deste átomo.

As tabelas que servem para retirar as configurações possíveis e com elas obter valores das probabilidades de inização pós-colisionais para o átomo de Xe foram construídas da mesma forma do que para o Ne, com a modificação de que só apresentaremos as combinações referentes as subcamadas 4s, 4p, 4d, 5s e 5p. As Tabs. (A.12, A.13, A.14, A.15) são referentes a ionização simples, dupla, tripla e quádrupla do Xe.

A mesma metodologia aplicada aos átomos de Ne, Ar e Kr foi utilizada com o átomo de Xe. Com base nas Tabs.(A.12, A.13, A.14, A.15) foram calculados os valores para $\mathcal{P}(n_7, n_8, n_9, n_{10}, n_{11}, n_{\text{pos}})$, e juntamente com as versões 1, 2, 3, 4, 5 e 6, obtemos os valores de $(P_f)_{V_d}$, onde f e d são o grau de ionização e a versão desejada, respectivamente. Por questão de espaço apresentaremos somente as equações de $(P_f)_{V_d}$ para as versões 1 e 6 em todos os graus de ionização; para as outras versões, serão mostrados somente os resultados obtidos em forma de gráficos no capítulo seguinte. As equações abaixo levam em conta somente os valores de $p_{4s}, p_{4p}, p_{4d}, p_{5s}$ e p_{5p} . Por causa da quantidade de equações que podem surgir, vamos nos limitar a apresentar somente as equações nas quais $\mathcal{P}(n_7, n_8, n_9, n_{10}, n_{11}, n_{\text{pos}}) \neq 0$.