

5 Conclusão

Nesta dissertação foram apresentados cálculos detalhados de seções de choque de ionização múltipla de gases nobres por prótons de velocidades intermediárias. Neste regime de velocidades, o processo de captura eletrônica pode ser desprezado, de modo que foi possível restringir a análise apenas aos processos de ionização direta e de ionização pós-colisional. No âmbito do Modelo de Partículas Independentes, foram combinadas as probabilidades de ionização direta, calculadas segundo a aproximação de Born de ondas planas (PWBA) [14], com as probabilidades de emissão pós-colisional de elétrons devida à ionização de um elétron de uma dada subcamada do alvo, obtidas a partir de resultados experimentais de fotoionização, para a ionização múltipla dos gases nobres, do Ne ao Xe, por prótons com energias variando entre algumas centenas de keV até alguns MeV. No caso dos alvos de Ne e Ar, também foram calculadas as seções de choque usando o método gerador de bases (BGM) para as probabilidades de ionização direta por prótons de 1,0 MeV [23]. Os estados de carga finais dos alvos variaram de 1 a 3 para o Ne, e de 1 a 4 para os demais gases.

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. Com o objetivo 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. A comparação entre os diversos resultados obtidos foi feita de forma mais quantitativa através de razões percentuais entre as diferentes seções de choque, para cada alvo e estado de carga final.

De um modo geral, 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.

Entretanto, algumas características particulares podem ser destacadas.

No caso dos alvos de Ne e Xe, as razões percentuais entre a primeira versão (versão 1) – que considera as probabilidades de ionização direta do maior número de subcamadas – e a última versão – que leva em conta somente as subcamadas mais externas – crescem apreciavelmente à medida que o estado de carga final do alvo aumenta, independentemente do conjunto de probabilidades de emissão pós-colisional considerado. Já no caso do alvo de Ar, tais razões também crescem com o estado de carga final, tendendo, porém, a saturar para os estados de carga mais elevados. O mesmo ocorre para o Kr quando se usam as probabilidades de emissão pós-colisional sugeridas por Montanari *et al* [14]. No caso do outro conjunto de probabilidades de emissão pós-colisional utilizado aqui para o Kr, a tendência de aumento das razões percentuais entre as duas versões extremas também se manifesta.

É importante notar que, para o Ar e Kr, as seções de choque de ionização quádrupla (o grau máximo de ionização aqui considerado para estes alvos), são extremamente sensíveis ao conjunto de probabilidades de emissão pós-colisional escolhido, independentemente da versão utilizada. O mesmo não se dá para o Ne, onde a dependência de todas as seções de choque de ionização múltipla com a escolha das probabilidades de emissão pós-colisional é pequena, para todas as versões aqui consideradas.

Já para o Xe, ocorre algo inesperado pois a maior dependência com a escolha das probabilidades de emissão pós-colisional se dá para a ionização tripla e não para a quádrupla, que é muito pouco sensível a essa escolha.

Para os alvos de Kr e Xe, a utilização da versão mais completa para o cálculo das seções de choque de ionização múltipla se torna mais importante a partir da ionização dupla, independentemente do conjunto de probabilidades de emissão pós-colisional escolhido. Como mencionado acima, as comparações realizadas entre os dois modelos de cálculo das probabilidades de ionização direta ficaram restritas aos alvos de Ne e Ar e à energia de 1,0 MeV.

No caso Ne, observou-se que, no caso da versão 1, as seções de choque calculadas a partir da PWBA são maiores do que aquelas obtidas a partir da BGM para a ionização simples, mas menores do que as do BGM para as ionizações dupla e tripla. Isto já não acontece com a última versão (versão 4 para o Ne), onde as seções de choque obtidas na PWBA são sempre um pouco maiores do que as calculadas com o BGM. Isto também acontece, em geral, com o alvo de Ar; entretanto, para a seção de choque de ionização quádrupla do Ar, calculada na versão 1, o valor obtido na PWBA é novamente maior do que aquele obtido com o BGM. Uma explicação possível para essa aparente flutuação entre as seções de choque calculadas pelos dois modelos na versão mais completa aqui apresentada, é que, apesar das probabilidades,

em função do parâmetro de impacto da colisão, calculadas no BGM serem sempre maiores – por fatores da ordem de 2 para pequenos parâmetros de impacto – do que as obtidas com a PWBA, estas últimas caem a zero mais lentamente do que aquelas, de modo que, quando integradas no parâmetro de impacto, tais diferenças como que se cancelam em escalas distintas, produzindo resultados ora maiores ora menores. O fato de isto não ocorrer para as versões mais simples indica que a versão mais completa é mais sensível aos valores das probabilidades de ionização direta do que a mais simples, o que já era de se esperar. Vale lembrar que as seções de choque obtidas com os dois modelos foram calculadas usando o mesmo conjunto de probabilidades de emissão pós-colisional.

Cabe aqui uma observação sobre o porquê de não termos feito uma comparação explícita entre as seções de choque calculadas e os resultados experimentais existentes na literatura. Em primeiro lugar, as medidas exclusivas de seções de choque absolutas para a ionização múltipla por prótons se resumem a dois conjuntos de dados apenas: os de DuBois *et al* [3] e os de Cavalcanti *et al* [12]. Entretanto, como se pode ver das figuras apresentados no capítulo 4, estes conjuntos de dados apresentam, nas regiões de energia onde eles se superpõem, discrepâncias apreciáveis entre si, que são, muitas vezes, bem maiores do que as diferenças entre os diversos cálculos aqui apresentados. Como não há outros dados absolutos desta natureza na literatura, não foi possível selecionar com segurança qual conjunto de dados poderia ser considerado mais confiável, o que impossibilitou qualquer comparação sistemática entre nossos resultados e a experiência. Só nos é possível afirmar que as seções de choque calculadas apresentam, em geral, os mesmos comportamentos com a energia do que os resultados dos dois grupos, sendo da mesma ordem de grandeza deles. As seções de choque aqui obtidas, quando comparadas com aquelas apresentadas por Montanari *et al* [14] calculadas usando a PWBA, apresentam uma concordância muito boa para todos os alvos e graus de ionização.

Com relação às perspectivas futuras a partir desta dissertação, podemos destacar dois possíveis desdobramentos. O primeiro seria a realização do mesmo tipo de cálculo para o íon molecular H_2^+ como projétil incidindo sobre gases nobres, para o qual já foram calculadas as razões entre ionizações múltiplas e simples para os canais dissociativo e não-dissociativo, utilizando, entretanto as probabilidades de ionização direta para prótons. A ideia é calcular as seções de choque de ionização múltipla usando probabilidades de ionização direta específicas para o H_2^+ , de modo a verificar quão importantes são os fatores de forma moleculares na produção destes canais. O segundo seria estender a comparação entre as seções de choque calculadas na PWBA e com o BGM

para outras energias e para os alvos de Kr e Xe. Entretanto, este projeto é de realização mais difícil – pelo menos, no momento - tendo em vista a necessidade de um esforço computacional considerável para sua consecução.