



**Pedro Mariano Yunes Garcia**

**Fragmentação da molécula de água por  
impacto de íons de  $\text{He}^+$**

**Dissertação de Mestrado**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Colisões Atômicas do Departamento de Física da PUC-Rio

Orientador: Prof. Geraldo Monteiro Sigaud

Rio de Janeiro  
Abril de 2006



**Pedro Mariano Yunes Garcia**

**Fragmentação da molécula de água por  
impacto de íons de He<sup>+</sup>**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre pelo Programa de Pós-graduação em Colisões Atômicas 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. Nelson Velho de Castro Faria**

UFRJ

**Prof. Paulo Roberto Silveira Gomes**

UFF

**Prof. José Eugênio Leal**

Coordenador Setorial do Centro Técnico Científico — PUC-Rio

Rio de Janeiro, 10 de Abril de 2006

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

### **Pedro Mariano Yunes Garcia**

Graduou-se em Física na Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - PUC-Rio em 2003.

#### Ficha Catalográfica

Garcia, Pedro Mariano Yunes

Fragmentação da molécula de água por impacto de íons de He<sup>+</sup> / Pedro Mariano Yunes Garcia; orientador: Geraldo Monteiro Sigaud. — Rio de Janeiro : PUC-Rio, Departamento de Física, 2006.

v., 70 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 íon-molécula. 3. Água. 4. Fragmentação molecular. 5. Fragmentação explosiva. 6. Fragmentação seqüencial. 7. Seções de choque absolutas. I. Sigaud, Geraldo Monteiro. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Física. III. Título.

CDD: 530

Aos meus pais, Sergio e Eliana, por tudo.

## Agradecimentos

Não poderia deixar de agradecer às pessoas que de alguma forma contribuíram para a produção desse documento ou me ajudaram a chegar até aqui.

Ao meu orientador, Geraldo Sigaud, pelo excelente professor, orientador e amigo.

Ao professor Eduardo Montenegro, cujas conversas, mais do que esclarecedoras, foram verdadeiras aulas e injeções de incentivo, que contribuíram imensamente para este trabalho.

Aos professores Hugo Luna e Vitor de Jesus, de quem aprendi muito, e ao professor Eric Cavalcanti, por me apresentar ao laboratório. Pela boa vontade dessas duas pessoas que, até à distância, contribuíram para essa dissertação.

Ao professor Mansuhk Shah, por sua paciência e boa vontade. Seu apoio foi determinante para a conclusão deste trabalho.

Aos meus colegas de curso e amigos, Clara Muniz, Flávia Cavalcanti, Lucas Sigaud e Samantha Fonseca, sem os quais, com certeza, não teria conseguido forças para chegar até aqui.

À todos os técnicos do laboratório VDG, em especial ao Sergio, Nélio, Edson e Cássia, pela competência, solicitude e contribuições, fundamentais para a produção desse trabalho; às secretárias Tânia, Giza, Nélia e Majô, pela atenção; aos auxiliares Júlio e Jorge, pela simpatia e solicitude. À todos esses, meu sincero muito obrigado.

Ao professores Renato Barbosa e Thomas Lewiner, pelas aulas de LateX, que em muito facilitaram minha vida.

Aos meus amigos, Fernanda Medeiros e Lucas Costa, por me ouvirem durante longas e empolgadas explicações sobre física atômica.

À minha namorada, Ana Tavares Sampaio, pelo apoio, incentivo, paciência, carinho e atenção.

À minha irmã, Antonia Christina que além de sempre ouvir minhas histórias, contribuiu com as figuras desse trabalho.

Aos meus Pais, Sergio Garcia e Eliana Yunes, que me apoiaram e incentivaram em todos os momentos para que eu pudesse perseguir meus sonhos.

Não poderia deixar de agradecer também ao CNPq e à FAPERJ, pelos auxílios concedidos, sem os quais este trabalho não teria sido realizado.

Finalmente, pelos membros da banca examinadora, professor Paulo Roberto Silveira Gomes e professor Nelson Velho de Castro Faria, pela disponibilidade para ler e contribuir com o trabalho.

## Resumo

Garcia, Pedro Mariano Yunes; Sigaud, Geraldo Monteiro. **Frag-  
mentação da molécula de água por impacto de íons de  
He<sup>+</sup>**. Rio de Janeiro, 2006. 70p. Dissertação de Mestrado — De-  
partamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de  
Janeiro.

Neste trabalho são apresentadas, pela primeira vez, seções de choque absolutas para a ionização e a fragmentação da molécula de vapor d'água em colisões com He<sup>+</sup>, para as energias de 1,0, 1,5 e 2,0 MeV, totais e parciais nos processos de ionização pura, perda eletrônica (ionização do projétil) e captura eletrônica pelo projétil. Essas seções de choque foram obtidas por meio de medidas de coincidência entre os estados de carga do projétil após a colisão e os estados de carga dos íons de recuo, estes últimos determinados por espectrometria de tempo de voo.

São descritas, detalhadamente, tanto a montagem experimental como a metodologia para a obtenção dos dados, além de uma série de providências que se fizeram necessárias para a realização do trabalho.

Os resultados são, na medida do possível, comparados com dados experimentais obtidos não só no Laboratório do Acelerador Van de Graaff da PUC-Rio, como em outros laboratórios, para a ionização e a fragmentação da molécula de água por He<sup>+</sup> e outros projéteis, e analisados na tentativa de compreender melhor a importância relativa dos diferentes processos para os mecanismos de fragmentação da molécula de vapor d'água na sua transição entre o caráter dipolar e o explosivo.

## Palavras-chave

Colisões íon-molécula. Água. Fragmentação molecular. Frag-  
mentação explosiva. Fragmentação sequencial. Seções de choque absolutas.

## Abstract

Garcia, Pedro Mariano Yunes; Sigaud, Geraldo Monteiro. **Water molecule fragmentation by impact of He<sup>+</sup> ions**. Rio de Janeiro, 2006. 70p. MsC Thesis — Department of Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

In this work, absolute cross sections for the ionization and fragmentation of water vapor molecules are presented, for the first time, for collisions with He<sup>+</sup> with energies of 1.0, 1.5 and 2.0 MeV, total and partial in the pure ionization, electron loss (projectile ionization) and electron capture by the projectile processes. These cross sections were obtained by means of coincidence measurements between the post-collision projectile charge states and the recoil ion charge states, the latter determined by time-of-flight spectrometry.

Both the experimental setup and the methodology for data acquisition are described in detail, together with several procedures that were needed to the completion of this work.

The results are, whenever possible, compared with experimental data obtained not only in the Van de Graaff Accelerator Laboratory of PUC-Rio, but also from other groups, for the ionization and fragmentation of the water molecule by He<sup>+</sup> and other projectiles, and analyzed in order to better understand the relative importance of the different processes leading to water molecule fragmentation in its transition from the sequential to the explosive regime.

## Keywords

Ion-molecule colisions. Water. Molecular fragmentation. Explosive fragmentation. Sequential fragmentation. Absolute cross sections.

# Sumário

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 1   | Introdução  | 11 |
| 2   | Montagem Experimental   | 16 |
| 2.1 | A linha de colisões atômicas: uma visão geral                           | 16 |
| 2.2 | A câmara de colisões  | 18 |
| 2.3 | O sistema de detecção de íons de recuo: espectrômetro de tempo de vôleo | 22 |
| 2.4 | Os detectores MCP   | 24 |
| 2.5 | A eletrônica de coincidência  | 28 |
| 2.6 | A obtenção das seções de choque   | 29 |
| 3   | Apresentação dos resultados   | 31 |
| 3.1 | Espectros TOF   | 31 |
| 3.2 | Seções de choque  | 31 |
| 4   | Conclusões  | 42 |
| A   | Técnica para recuperação de detectores do tipo MCP                      | 48 |
| B   | Uso do <i>software</i> COBOLD   | 50 |
| C   | Eletrônica detalhada  | 64 |
| D   | Obtendo a lei empírica para a fragmentação                              | 67 |
| E   | Tabelas de dados  | 70 |



## Lista de figuras

|      |   |    |
|------|---|----|
| 2.1  | Ímã 90°, ímã seletor e esquema da linha   | 17 |
| 2.2  | Fendas  | 18 |
| 2.3  | Camara de colisões: vista superior  | 19 |
| 2.4  | Sistema de gás  | 20 |
| 2.5  | Baratron  | 22 |
| 2.6  | Espectrômetro   | 23 |
| 2.7  | MCP-P e Multi-fios  | 25 |
| 2.8  | Coincidência  | 26 |
| 2.9  | Esquema MCP-R   | 27 |
| 2.10 | Esquema simplificado da eletrônica  | 28 |
| 3.1  | Espectro de tempo de vôo. 1 MeV, ionização  | 32 |
| 3.2  | Espectro de tempo de vôo. 1 MeV, perda eletrônica                                   | 32 |
| 3.3  | Espectro de tempo de vôo. 1 MeV, captura eletrônica                                 | 33 |
| 3.4  | Espectro de tempo de vôo. 1,5 MeV, ionização  | 33 |
| 3.5  | Espectro de tempo de vôo. 1,5 MeV, perda eletrônica                                 | 34 |
| 3.6  | Espectro de tempo de vôo: 2 MeV, ionização  | 34 |
| 3.7  | Espectro de tempo de vôo. 2 MeV, perda eletrônica                                   | 35 |
| 3.8  | Seções de choque totais: comparação prótons e He <sup>+</sup>                       | 35 |
| 3.9  | Seções de choque (captura eletrônica e $\sigma^+$ ) para He <sup>+</sup> comparadas | 38 |
| 3.10 | Gráficos ternários: proporções relativas dos fragmentos                             | 39 |
| 3.11 | Gráficos ternários: tendência do padrão com a velocidade                            | 40 |
| 3.12 | Resultados do modelo empírico   | 41 |
| 4.1  | Pico de Bragg   | 44 |
| A.1  | Limpeza e suporte   | 48 |
| B.1  | Passo-a-passo: arquivo “.ccf”   | 58 |
| B.2  | Passo-a-passo: aquisição ou análise   | 59 |
| B.3  | Passo-a-passo: arquivo “.lmf” para leitura  | 59 |
| B.4  | Passo-a-passo: arquivo “.lmf” para gravação   | 60 |
| B.5  | Passo-a-passo: aguardando   | 60 |
| B.6  | Passo-a-passo: lendo o arquivo  | 61 |
| B.7  | Passo-a-passo: exemplo 1  | 62 |
| B.8  | Passo-a-passo: exemplo 2  | 62 |
| B.9  | Passo-a-passo: exemplo 3  | 63 |
| C.1  | Eletrônica detalhada  | 66 |

## Lista de tabelas

|     |   |    |
|-----|---|----|
| E.1 | Seções de choque de ionização para formação de fragmentos positivamente carregados da molécula de vapor d'água por impacto de $\text{He}^+$ . Os valores estão em Mb ( $1 \text{ Mb} = 10^{-22} \text{m}^2$ ) | 70 |
| E.2 | O mesmo do que a tabela D.1, porém para perda eletrônica.   | 70 |
| E.3 | O mesmo do que a tabela D.1, porém para captura eletrônica.   | 70 |