1

Introdução

Colisões atômicas é uma área da física muito estudada por dois motivos básicos: primeiro, o desafio de uma descrição teórica da natureza da matéria e seu comportamento, atrelada a um campo instigante e desafiador como aplicação da mecânica quântica no estudo das interações de longo alcance; segundo, a demanda de outras áreas por dados, para alimentar modelos que tentarão reproduzir e prever o comportamento da natureza, como a astrofísica, a física de plasmas, a física de atmosferas e a biofísica, entre outros.

O problema mais comum em colisões atômicas envolve um átomo neutro como alvo e um fóton, elétron ou próton como projétil. Nos dois últimos casos, temos três ou mais corpos envolvidos, ou seja, um sistema de muitos corpos, interagentes, evoluindo no tempo, o que torna o problema sem solução exata por abordagem analítica.

Os processos inelásticos de primeira ordem que podem acontecer nesse cenário são a ionização do alvo pelo projétil e a captura de um elétron do alvo pelo projétil, no caso da colisão íon-átomo. Quando o projétil possui estrutura eletrônica, o problema fica ainda mais complexo, pois a perda eletrônica por parte do projétil e a interação elétron-elétron entre centros passam a ser possíveis. Quando o projétil se aproxima do alvo, a interação entre os seus elétrons e os do alvo se manifesta de duas formas distintas. Primeiro, “blindando” o potencial nuclear, reduzindo o seu valor efetivo e diminuindo as seções de choque. Esse efeito é causado pela ação do conjunto dos elétrons do alvo como um todo, e ganha o nome de *screening*. Segundo, cada elétron do alvo atua como agente ionizante “independente” e a soma dessas interações contribui aumentando as seções de choque. Em oposição ao *screening*, esse efeito recebe o nome de *antiscreening*.

Além disso, processos de segunda ordem também podem ocorrer, como a ionização mútua decorrente da interação núcleo-elétrons cruzada ou entre centros; a ionização dupla com captura (*transfer-ionization*), ou ainda, a ionização múltipla, causada por ionização e excitação do alvo, seguida de desexcitação e emissão de outros elétrons (efeito Auger).

Quando um dos parceiros da colisão é uma molécula, o problema se

torna mais complexo ainda, pois ela, em si, já é um problema de mais de dois corpos e com mais de um centro. Além disso, a energia do sistema encontra novas formas de se distribuir, com novos graus de liberdade como o vibracional e o rotacional. Se considerarmos ainda as possibilidades para os estados finais das moléculas, veremos, mais uma vez, que este caso se torna mais complexo do que o caso atômico, pois aquelas podem ainda se fragmentar. A fragmentação das moléculas pode se dar por dois caminhos básicos: excitação de estados vibracionais e a ionização de mais de um elétron. O primeiro caso é mais facilmente obtido com fótons de frequências bem determinadas, enquanto a ionização múltipla será mais provável em colisões com íons, onde a transferência de energia se dá de forma mais distribuída e menos precisa.

Tendo em vista a variedade e complexidade da área, este trabalho focalizará a atenção num aspecto mais específico, a saber, o estudo de um único alvo, de grande interesse principalmente em duas áreas, a astronomia e a biologia: a molécula de água, que pode estar relacionada a dois campos tão distintos em suas complexidades, por causa de sua importância para a vida e as condições básicas para seu surgimento e manutenção.

Aplicações desse estudo específico são ainda possíveis além das citadas para os casos gerais no início do capítulo, como os efeitos dos íons provenientes da fragmentação da água causada pelos produtos da fissão do ^{235}U em reatores, como a corrosão das barras de combustível [1, 2].

No entanto, recentemente, com a chegada da sonda Galileo Orbiter a Júpiter, novas aplicações astrofísicas se apresentaram, como o estudo da evolução química, induzida por radiação, das superfícies geladas das luas do planeta, cuja magnetosfera lança íons de S, O e H, além de elétrons de várias energias [3]. Esses estudos são fundamentais para um entendimento da origem desses satélites, de suas atmosferas exteriores e suas interações com a magnetosfera de Júpiter.

Recentemente, também, foi levantada a discussão sobre as emissões na faixa de ultra-violeta extremos (EUV) e raios-x “moles” por parte de cometas [4]: essas faixas de energias são geralmente observadas no plasma quente (10^6 K) da coroa solar, onde as colisões entre íons altamente carregados de H (92%), He (8%) e de outros elementos pesados como O^{+7} e O^{+6} (0.1%), geram estados excitados que emitem radiação ao decair; nas auroras, a interação do vento solar com as atmosferas da Terra e de Júpiter; e até mesmo refletidos pela superfície lunar. Porém, a emissão dessas radiações por parte dos cometas não era esperada devido às baixas temperaturas em que eles se apresentam. O estudo da interação desses íons pesados com a água, um dos constituintes principais dos cometas, deve ajudar a esclarecer melhor esses fenômenos.

Mais restrito ainda do que o estudo da molécula de água em colisões atômicas, este trabalho tratará apenas de um projétil: o átomo de hélio sem um de seus dois elétrons. O motivo da escolha desse projétil está relacionado com a interação entre radiações e material biológico. Isótopos radioativos encontrados na natureza são emissores de partículas alfa, na faixa de energia de MeV. Quando esses elementos são acidentalmente ingeridos, ou entram em contato com o corpo, as partículas alfa emitidas, ao penetrar no tecido biológico, trocam carga à medida que colidem e perdem energia, necessariamente atingindo uma velocidade para a qual o seu estado de carga de equilíbrio é +1. Isso ocorre quando a partícula atinge a velocidade em que a taxa de transferência de energia para o meio (dE/dx) torna-se máxima. Quando isso acontece, o potencial para danificar o meio é máximo, porém a radiação já não é alfa, e sim He^+ .

Além disso, já é fato conhecido [5] que a radioterapia com íons “pesados” apresenta vantagens em relação à feita com fótons, elétrons e prótons, como uma maior precisão na deposição de energia por parte dos íons no tecido biológico: enquanto elétrons depositam energia quase que monotonamente ao perder velocidade, o mesmo não se pode dizer dos íons, onde a dependência com a velocidade dessa taxa de deposição de energia possui regiões claramente diferentes, governada por processos distintos, como ionização e captura, por exemplo. Depositando menos energia no tecido sadio anterior ao tumor e mais energia no tumor, consegue-se maior eficiência no tratamento e, ao mesmo tempo, minimizam-se os efeitos colaterais em tecido sadio, diminuindo também o número de sessões e, conseqüentemente, o custo do tratamento.

A faixa de energia em que o acelerador de partículas utilizado neste trabalho pode produzir tais projéteis (400 keV a 4 MeV), além de incluir a energia em que o potencial de dano é máximo (50 a 1000 keV), abrange também a região em que se inicia a inversão da predominância entre os mecanismos que competem nesse tipo de colisão, onde projéteis e alvos possuem estrutura eletrônica. Acima de 1 MeV, a alta velocidade dos projéteis conduz a uma predominância dos processos de ionização e perda eletrônica. Abaixo dessa energia, a velocidade dos projéteis começa a se aproximar da velocidade de Bohr dos elétrons mais externos do alvo, o que aumenta a probabilidade de captura eletrônica.

Outros estudos já foram feitos tendo a molécula de água como alvo. Muitos apresentam informações sobre a emissão de elétrons e fótons por parte dos fragmentos excitados resultantes de colisões com elétrons [6, 7], fótons [8] e íons [9], ou ainda, apresentam seções de choque de produção total de íons positivos ou negativos [10], e alguns poucos apresentam seções de choque para

produção de fragmentos específicos [11]. Em 1995, Werner e colaboradores [12] investigaram pela primeira vez a ionização e fragmentação múltiplas após impacto por prótons de 100 a 400 keV, usando um detector multi-partículas, sensível à posição e ao tempo. Esse trabalho oferecia também informações sobre a energia cinética liberada e a correlação angular para cada evento de impacto individual. No entanto, a montagem experimental utilizada não visava a detectar projéteis, ou mesmo fragmentos neutros e, portanto, não pôde fornecer informações sobre seções de choque absolutas ou diferenciais pelo estado final do projétil. O trabalho de Gobet e colaboradores [11] foi o primeiro com dados de seções de choque parciais de captura e já indicava a relação entre esse processo e a maior produção de fragmentos H^+ , em contraste com a ionização simples. Seções de choque absolutas são raras e, às vezes, obtidas através de normalizações por dados alheios [11, 13].

Neste trabalho serão apresentadas seções de choque absolutas, totais e parciais, diferenciais tanto no estado final do projétil (ionização, captura e perda eletrônicas) quanto no estado final do alvo (parciais: H_2O^+ , OH^+ , O^+ e H^+), em colisões com He^+ . O único trabalho, que apresenta resultados semelhantes (mesmo projétil e alvo) aos que serão apresentados aqui, foi feito em 1985 por Rudd e colaboradores [14]. Apesar de também apresentar seções de choque de produção total de íons positivos, negativos, perda e captura eletrônica totais, para colisões de He^+ em vapor d'água, a faixa de energia era mais baixa e não havia coincidência, nem distinção entre os possíveis estados finais do alvo e os projéteis, informação muito mais detalhada da colisão. A montagem utilizada no presente trabalho foi a mesma utilizada em um trabalho pioneiro [15] sobre a fragmentação da molécula da água por impacto de íons de carbono e oxigênio, que permitiu obter seções de choque absolutas e independentes, do mesmo tipo das apresentadas aqui.

Seções de choque diferenciais nos estados finais dos projéteis e alvos são importantes porque indicam as características de cada processo (ionização, captura e perda eletrônicas), além das proporções da produção de cada fragmento, informação de extrema relevância para o estudo dos efeitos das radiações sobre materiais biológicos. Um exemplo é a produção de radicais altamente reativos na fragmentação da molécula de H_2O no núcleo das células. No trabalho de Luna e Montenegro [15], foi observada uma inversão nas proporções dos produtos da colisão, com relação ao impacto por prótons: enquanto as seções de choque por prótons apresentam uma hierarquia da forma $\sigma_{H_2O^+} > \sigma_{OH^+} > \sigma_{H^+} > \sigma_{O^+}$, indicativa de uma fragmentação seqüencial, o padrão para as seções de choque por carbono mostra uma maior probabilidade para a formação de íons de hidrogênio e oxigênio separados, indicando um

mecanismo de fragmentação explosivo. Em um trabalho seguinte [16], foram apresentados resultados indicando um aumento de mais de uma ordem de grandeza na razão entre a produção de fragmentos O^{2+} e a produção total de íons positivos, ou seja, o percentual de fragmentos O^{2+} relativo à produção de todos os fragmentos positivos possíveis. Esses radicais são conhecidos por atacar as cadeias de DNA causando danos significativos, e o efeito, muito provavelmente, está relacionado com os benefícios conseguidos no tratamento de tumores com íons de carbono.

Por outro lado, os resultados absolutos e independentes são necessários para confrontar quantitativamente os resultados dos modelos teóricos e permitir a confirmação, por comparação, de outros trabalhos. Deve-se ressaltar aqui a importância desse fato e salientar a dificuldade experimental envolvida na obtenção de dados absolutos e em coincidência, que se reflete no número reduzido de trabalhos com essas características.

No capítulo 2, será apresentada a montagem experimental, com descrição, figuras e fotografias dos elementos principais da linha de colisões atômicas do laboratório Van De Graaff da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro e descrição dos procedimentos utilizados na aquisição de dados e obtenção das seções de choque.

No capítulo 3, serão apresentados os resultados deste trabalho comparados a outros, na medida do possível, uma vez que não existe na literatura material equivalente.

No capítulo 4, serão discutidos os resultados apresentados no capítulo anterior, apresentadas algumas conclusões e as perspectivas para a continuidade do trabalho.

O apêndice A tratará da técnica empregada na recuperação do detectores; o apêndice B, do uso do *software* de aquisição de dados utilizado; o apêndice C, dos detalhes da eletrônica utilizada na aquisição de dados; o apêndice D, do modelo empírico para obtenção das seções de choque e o apêndice E apresentará as tabelas de dados obtidos.