

Seções de Choque de Ionização e Captura Eletrônica na Ionização Múltipla de H₂O por impacto de Li³⁺

H. Luna^{a1}, W. Wolff^{a2}, and E.C. Montenegro^a, André C. Tavares^b,
H.J. Lüdde^c, G. Schenk^c, M. Horbatsch^c, and T. Kirchner^d

^aDepartamento de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro Caixa Postal 68528, Rio de Janeiro, 21945-970, RJ, Brazil

^bDepartamento de Física, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Caixa Postal 38071, 22452-970, RJ, Brazil

^cInstitut für Theoretische Physik, Goethe-Universität, D-60438 Frankfurt, Germany

^dDepartment of Physics and Astronomy, York University, Toronto, Ontario M3J 1P3, Canada[†] Instituto de Química,

Sinopse. Seções de choque de ionização e de captura eletrônica experimentais e teóricas com a remoção simples, dupla e tripla de elétrons de H₂O por impacto de Li³⁺ são apresentadas para energias que variam de 0,75 a 5,8 MeV. O experimento foi realizado selecionando-se em coincidência o estado de carga final do projétil e dos fragmentos ejetados para obtenção de seções de choque associadas aos canais de ionização e de captura eletrônica. Os resultados experimentais são comparados com cálculos baseados no método de gerador de base para a propagação do orbital. A emissão de elétrons Auger após a produção da vacância no orbital 2a1 de H₂O demonstra determinar um efeito substancial sobre as distribuições dos estados de carga finais.

O estudo apresenta dados experimentais e cálculos teóricos sobre a ionização e a fragmentação da molécula de H₂O induzida por impacto de Li³⁺ na faixa de energia de 0,75 a 5,8 MeV. Os fragmentos iônicos foram medidos discriminando-se os eventos que produziram um, dois ou mais íons e incluiu a diferenciação no estado de carga projétil final, permitindo uma comparação rigorosa com a teoria. O experimento foi realizado selecionando-se em coincidência o estado de carga final do projétil e dos fragmentos ejetados para a obtenção de seções de choque associadas com os canais de ionização e de captura eletrônica. Os fragmentos iônicos e os elétrons emitidos produzidos no regime de colisões únicas foram coletados por um espectrômetro de massa por tempo de voo sendo que os eventos com "single-hit" (por exemplo, OH⁺ + H⁰) e "double-hit" (por exemplo OH⁺ + H⁺) foram devidamente discriminados [1].

Para os casos de remoção de um e dois elétrons os cálculos baseados no método gerador de base para a propagação do orbital apresentam uma boa concordância com os resultados experimentais para a maioria dos canais de colisão estudados. A emissão de elétrons Auger após a produção da vacância no orbital interno 2a1 de H₂O demonstra um efeito substancial nas distribuições dos estados de carga final ao longo de todo o intervalo de energias de impacto.

Os resultados mostram uma boa concordância entre a teoria e a experiência para o canal de captura simples total (figura 1) e para ionização simples e dupla pura, mas superestima para maiores graus de ionização.

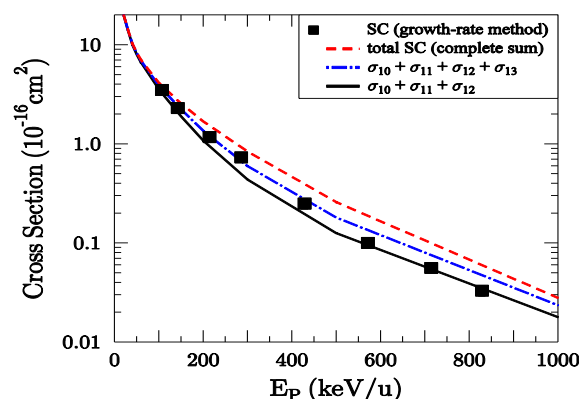


Figure 1. Seções de choque total de captura eletrônica simples em função da energia de impacto de Li³⁺ em H₂O. Dados experimentais (quadrados cheios) obtidos a partir do método de crescimento. Teoria: linha tracejada corresponde a soma total $\sum_i \sigma_{1i}$, linha tracejada - pontilhada está restrita a soma $\sigma_{10} + \sigma_{11} + \sigma_{12} + \sigma_{13}$ e linha sólida corresponde a $\sigma_{10} + \sigma_{11} + \sigma_{12}$. Os subscritos indicam os estados de carga finais do projétil e do alvo.

Referência

[1] A. C. Tavares, H. Luna, W. Wolff and E. C. Montenegro, Phys. Rev. A **92**, 032715 (2015).