

Fragmentação de H₂O por impacto de íons leves nus e vestidos à energias intermediárias

W Wolff^{c1}, H Luna^{c2}, R Schuch^d, D Cariatore^b, S Otranto^b, F Turco^a, D Fregenal^a
G Bernardi^a and S Suárez^a

^aCentro Atômico Bariloche, Bustillo 9500, San Carlos de Bariloche, Río Negro, Argentina

^bIFISUR, Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina

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

^dDepartment of Physics, Stockholm University, Alba Nova University Center, SE-106 91 Stockholm, Sweden

Sinopse. Distribuições de energia e de tempo-de-vôo de fragmentos iônicos de H₂O produzidos pelo impacto de íons leves nus e vestidos, H⁺, Li⁰⁻³⁺ e C^{1,2+} com energias de poucos MeV são apresentadas. Dois arranjos experimentais baseados ambos em um espectrômetro electrostático foram aplicados para investigar os canais de fragmentação da água. Na primeira configuração as distribuições de energia dos fragmentos iônicos foram coletadas, enquanto que no segundo arranjo, o acelerador Pelletron foi operado no modo pulsado e o espectrômetro foi utilizado como um espectrômetro de massa por tempo de voo. Os resultados experimentais foram comparados com cálculos CMTC acoplados a um modelo de explosão coulombiana.

A maior parte da energia dos íons depositada ao longo de sua trajetória ionizante em um meio celular é absorvida por moléculas de água, que induz a ejeção de elétrons, e formação de fragmentos neutros e carregados. Essas espécies secundárias contribuem para os danos biológicos, na vizinhança do DNA, competindo em importância com as quebras diretas, simples e duplas, de DNAs.

A ionização das moléculas da água, com a remoção de dois ou mais elétrons é sempre seguida pelo processo de fragmentação. Na remoção de dois elétrons, três principais canais de fragmentação competem em importância: H⁺ + H⁺ + O, H⁺ + OH⁺ e H⁺ + H + O⁺, enquanto que para a ionização múltipla de grau mais elevado, os canais de fragmentação induzem a atomização da molécula em 3 corpos: H⁺ + H⁺ + O⁺, H⁺ + H⁺ + O^{q+}, e H⁺ + H + O^{q+} com q > 2.

O estudo experimental e teórico revela a produção isotrópica de íons carregados e, além dos íons H⁺ mais abundantes, fragmentos altamente carregados de oxigênio, O^{q+}, com cargas de até 5 são observados. A partir das distribuições de energia dos fragmentos-iônicos e dos espectros de massa por tempo de vôo foram extraídas as abundâncias relativas de formação de fragmentos resultante da múltipla-ionização em função da carga dos projéteis em diversas energias de impacto e, em função das energias dos fragmentos iônicos sondando as características distintas da fragmentação da água. Os cálculos indicam que as colisões estreitas entre projétil e os

átomos da água levam à múltipla-ionização e pode ser associada à população O^{q+}.

Apesar de existirem estudos sobre a influência da velocidade e carga do estado do projétil sobre a dissociação da água [1], um conhecimento detalhado dos padrões de dissociação que conduzem à formação de íon de cargas múltiplas no intervalo de energia intermediária é escasso.

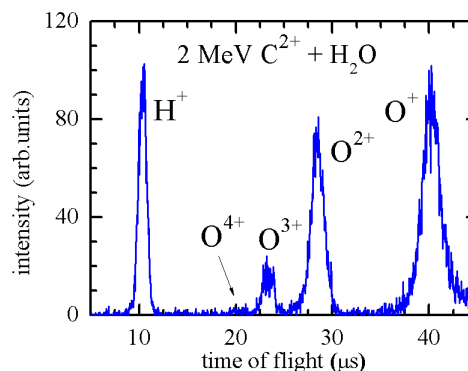


Figure 1. Espectro de tempo de vôo registrado para 2 MeV C²⁺ sob ângulo de detecção de 10 graus. Fragmentos iônicos com uma energia de 2eV/q de O^q, q⁺ de 1 até 4, e H⁺, foram medidos.

Referência

- [1] Z. D. Pešić, J.-Y. Chesnel R. Hellhammer, B. Sulik and N. Stolterfoht, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **37** 1405-1417 (2004)