

Capítulo 7

Conclusões

No presente trabalho foram analisados os principais efeitos físico-químicos causados pelo impacto e passagem de íons pesados (O, Fe, Zn e FF- ^{252}Cf) rápidos (\sim MeV/u) em um filme de metano sólido (15 K) de alguns microns de espessura. As técnicas analíticas empregadas foram FTIR e TOF-MS. Os principais resultados são:

- quanto à estrutura do gelo CH_4

1. A banda 4200 cm^{-1} do CH_4 revelou-se a mais propícia para descrever a evolução da densidade colunar do metano, porque ela não é afetada pelas bandas dos hidrocarbonetos criados pela irradiação (Figura 4.16).
2. A análise da superposição das absorvâncias de espécies moleculares diferentes (Figuras 4.26, 4.31, 4.32 4.33) obriga o uso de procedimentos de deconvolução matemática. As bandas que têm pouca superposição são listadas nas Tabelas 4.6 e 4.7.
3. A ação do feixe é similar àquela produzida por recozimento, Figuras 4.9 e 4.19.
4. Após uma dose ($D=F \times S_e$) de 0,1 íons·eV/molec, a forma da banda da fase cristalina altera-se para a de uma banda de fase amorfa, sem estruturas finas (Figura 4.18 e 4.20).
5. O efeito de amorfização é observado no incremento da absorvância do CH_4 para as primeiras irradiações ($F < 10^{12}$ íons/cm 2), *efeito subidinha*. Ele é descrito pela Eq. 4.5 e se relaciona com a variação entre 1 e 4 % do *A-value* (Tab 4.3).
6. A Eq 4.5 permite obter tanto: a seção de choque de amorfização, observada no efeito subidinha, e quanto o desvio do pico das bandas ν_3 e $\nu_1 + \nu_4$ (Fig. 4.19). As seções de choque exibem comportamento linear em função do poder de freamento eletrônico e nuclear $\sigma_j = a_{nj}S_n + a_{ej}S_e$.

- quanto à síntese das novas espécies químicas

7. Com íons pesados foram detectadas 12 espécies químicas, com fótons e elétrons 7 e com íons leves apenas 6 moléculas, Tabela 7.1.

Tabela 7.1. Irradiação com fótons, elétrons e íons no gelo CH₄ a 15 K.

Projéteis	Íon / Energia	Produtos C _n H _m	Referências
Fótons	6 e 10 eV	CH ₃ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₆ , C ₃ H ₄ , C ₃ H ₆ , C ₃ H ₈	[28], [70]
Elétrons	5 keV	CH ₃ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₃ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₅ , C ₂ H ₆ , C ₃ H ₈	[31]
Íons leves	H ⁺ 7.3 e He ⁺ 9 MeV	CH ₃ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₃ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₅ , C ₂ H ₆ ,	[33], [40], [69]
Íons pesados (implantação)	¹⁶ O ⁺ 5 keV	C ₂ H ₆	[105]
Íons pesados	¹⁶ O ⁷⁺ 220 MeV	CH ₃ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₆ , C ₃ H ₈	[32]
Íons pesados	¹⁶ O ⁷⁺ 220, ¹⁶ O ²⁺ 6, ⁵⁶ Fe ²²⁺ 267 e ⁷⁰ Zn ²⁶⁺ 606 MeV	CH ₃ , C ₂ H ₂ , C ₂ H ₃ , C ₂ H ₄ , C ₂ H ₅ , C ₂ H ₆ , C ₃ H ₄ , C ₃ H ₆ , C ₃ H ₈ , C ₄ H ₆ , C ₄ H ₈ , C ₄ H ₁₀	Esta tese

8. Em ordem decrescente de abundância, observou-se: C₂H₆, C₂H₂, C₂H₄, e C₃H₈. Em função da fluência (Fig. 4.28) a densidade colunar delas apresentam um comportamento crescente, passam por um máximo, e – para o feixe de Fe – observa-se um decréscimo nas duas últimas fluências. Atribui-se este efeito à dessorção do gelo.
9. Os radicais CH₃, C₂H₃, e C₂H₅ aparecem rapidamente nas primeiras irradiações mas são rapidamente destruídas pelo feixe de íons. Acredita-se que eles sejam os geradores das moléculas com 3 e 4 carbonos. Estes compostos são muito sensíveis aos elétrons delta gerados por projéteis posteriores com trajetórias vizinhas ao primeiro traço nuclear.
10. As moléculas com três e quatro carbonos C₃H₄, C₃H₆, C₃H₈, C₄H₆, C₄H₈ e C₄H₁₀ são de difícil identificação porque as bandas de cada espécie são muito próximas. O método de deconvolução separa a contribuição de cada uma (Fig. 4.31, 4.32 e 4.33).

11. A quantidade de H_2 liberado na síntese de hidrocarbonetos varia com a fluência. Inicialmente a razão hidrogênio / carbono é 4, isto é, $H/C = 4$ para o CH_4 virgem. No final da irradiação com o feixe de Fe, a razão evolui para 3 (Fig. 4.34.b).
12. As probabilidades $P_k = \sum n_k \sigma_{f,k} / \sigma_d$ de síntese das espécies k permanecem constantes com relação ao tipo de feixe ionizante e à sua energia. (Figs. 5.7 e 5.8).

- quanto à radiólise e síntese em função do Poder de Freamento

13. As seções de choque de destruição do CH_4 apresentam uma dependência do tipo $\sigma_d \propto S_e^{3/2}$ (Fig. 5.2). Este resultado permite prever a seção de choque de destruição para qualquer tipo de projétil e energia. Verificou-se um comportamento peculiar, talvez acidental, das seções de choque de destruição do CH_4 e de formação dos C_nH_m na faixa de energia estuda: uma dependência linear com o poder de freamento (S_e ou S_n) multiplicado pela carga de equilíbrio q_e .
14. O mesmo resultado foi visto para os produtos principais C_2H_2 , C_2H_4 e C_2H_6 na Fig. 5.4 ($\sigma_f \propto S_e^{3/2}$ ou $\sigma_f \propto q_e S_n$).

- quanto à dessorção total (neutros e íons)

15. Verificou-se que o rendimento de dessorção em função do poder de freamento é de $Y_0 = c_n q_e S_n + c_e S_e^2$, em concordância com [15 e 16]. O fator que mais prejudica esta determinação é a condensação de gases residuais na superfície da amostra.

- quanto à dessorção iônica

16. A Tabela 4.9 lista as espécies iônicas dessorvidas da superfície do gelo CH_4 quando impactada por fragmentos de fissão. O rendimento de dessorção total dos íons positivos é 2,7 maior do que o dos negativos. A grande quantidade de íons $H^{+/-}$ evidencia que os íons $C_nH_m^{+/-}$ contêm átomos na abundância $H/C < 4$.

17. Os rendimentos dos íons positivos têm comportamento exponencial decrescente para $n > 2$ (Fig. 4.34). Os íons mais abundantes contêm número ímpar de H e os menos abundantes número par de H (Fig. 4.39).
18. Nas Figs. 4.40 e 4.41 observa-se que a distribuição dos rendimentos é dependente do número de H da molécula. Em particular, os íons CH_3^+ são os mais abundantes entre os agregados CH_m^+ ; os rendimentos dos íons C_2H_3^+ e C_2H_5^+ são maiores dos agregados C_2H_m^+ .
19. Os rendimentos de dessorção dos íons negativos em função do número de átomos de carbono são mostrados na Fig 4.42. Os mais abundantes são as espécies C_nH_m^- que possuem $m = 1$ ou 2. Isso se deve à estrutura dos agregados C_nH^- e C_nH_2^- que podem ter uma seqüência de ligações triplas, aumentando sua estabilidade.
20. A Fig. 4.43.a ilustra a correlação entre rendimento de dessorção (*yield*) e a energia de ligação definida pela Eq. 4.14. Quanto maior é a energia de ligação maior é o *yield* para n par do cluster C_nH^- . O *cluster* C_3H_m^+ apresenta maior *yield* e energia de ligação para m ímpar.
21. Os rendimentos iônicos positivo e negativo $Y_0^{+,-}$ são determinados dividindo o número de sinais *stops* pelo número de sinais *starts*. Os rendimento de dessorção são descritos em função do poder de freamento por $Y_0^{+,-} = c_n^{+,-} q_e S_n + c_e^{+,-} S_e^2$. Ela permite estimar *yield* para qualquer feixe de íons.

- quanto às implicações astrofísicas

22. A relação empírica $\sigma_d = a S_e^{3/2}$ permitiu estimar o tempo de vida média de uma molécula de metano exposta ao raios cósmicos. No ISM obteve-se 600×10^6 anos; no sistema solar, a 1 AU do Sol, é de 600 anos.
23. A taxa de destruição no sistema solar é governada pelo fluxo dos íons leves H e He, enquanto que, nas nuvens densas do ISM, o fluxo de íons pesados predomina (Fig. 6.4).
24. Na Fig. 6.6 foi mostrada a penetração dos íons leves e pesados. Observou-se que, a baixas energias por nucleon (< 1 MeV/nucleon) o H penetra menos do que o Fe, e que a altas energias (> 1 MeV/nucleon), ocorre o contrário.

25. Para o sistema solar, todas as espécies iônicas em incidência normal são implantadas no sólido entre 0,1 e 1 μm de penetração (Fig. 6.7).
26. A taxa de dessorção no sistema solar é dominada pelos íons mais leves em até duas ordens de grandeza. Já no ISM, íons pesados como o Fe são 50 vezes mais eficientes do que H^+ (Tab. 6.7). Neste cálculo, só se considerou o ângulo de incidência perpendicular à superfície; variando o ângulo de incidência, prevê-se que o rendimento de dessorção dos íons pesados seja ainda maior.
27. A análise da dessorção iônica contribui para o entendimento da evolução química dos ambientes astrofísicos. As espécies dessorvidas podem ser re-adsorvidas na superfície de grãos, alterar sua composição química e dar origem a moléculas cada vez mais complexas.