

DETERMINAÇÃO DAS SEÇÕES DE CHOQUE ELÁSTICAS PARA COLISÃO DE PÓSITRON COM N_2 E A CORREÇÃO PARA O ESPALHAMENTO EM BAIXO ÂNGULO

SARAH ESTHER DA SILVA SAAB¹; WAGNER TENFEN²

¹Sarah Esther da Silva Saab – sarahesthersaab@outlook.com

²Wagner Tenfen – wtenfen@ufpel.edu.br

1. INTRODUÇÃO

O estudo da natureza da interação entre pósitrons e diferentes moléculas, tanto teórico quanto experimental, é relativamente recente. Até 2011, os dados que se tinham para a molécula de N_2 apresentavam uma teoria condizente com os dados experimentais disponíveis, mas o trabalho de ZECCA et al. (2011) apresentou à comunidade seções de choque experimentais significativamente maiores do que as existentes até então. E assim se iniciou a busca por uma teoria que explicasse tal discrepância.

Por bastante tempo, pensou-se que a causa desse problema estava na descrição da correlação eletrônica, que acontece quando o pósitron está dentro da nuvem eletrônica da molécula. No entanto, com o trabalho de TENFEN; BARP; ARRETCHÉ (2019) se observou que é fundamental que se tenha uma descrição do potencial de polarização, que ocorre nas proximidades da molécula, refinada para que se obtivesse seções de choque teóricas comparáveis com as experimentais.

No entanto, a discrepância se manteve expressiva na região de baixas energias. Ela é, geralmente, atribuída à falta de resolução angular dos aparatos experimentais, pois isso faz com que os pósitrons que são espalhados em baixo ângulo sejam contabilizados como não espalhados. Isso implica, em uma seção de choque aparentemente menor do que a esperada pela literatura e ainda explica a razão dos trabalhos anteriores ao de 2011 serem tão convergentes, pois tanto a teoria estava sendo implementada de forma incompleta quanto o experimento era carente de uma boa resolução angular.

A molécula de N_2 foi escolhida por apresentar uma riqueza de dados experimentais que são essenciais para que possa ser feita a comparação das seções de choque elásticas integrais (SCI), diferenciais (SCD) e totais (SCT) de espalhamento no regime de baixas energias e possa se observar a necessidade de ser realizada a correção para o espalhamento em baixo ângulo.

2. METODOLOGIA

As seções de choque de espalhamento são determinadas com o uso do Método das Frações Continuadas (RIBEIRO et al.; 2001), o qual necessita do potencial de interação para determinar os observáveis da dinâmica de espalhamento. Para isso empregamos o modelo de potencial espalhador na aproximação estático-correlação-polarização (SCP). Nessa aproximação, é preciso determinar o potencial eletrostático a partir dos orbitais moleculares de N_2 em seu estado fundamental. Uma boa descrição desses orbitais é necessária para que os momentos multipolares da molécula sejam bem representados, dentro dos limites

da aproximação da estrutura eletrônica empregada. Com esses orbitais também definimos a densidade eletrônica da molécula em cada ponto do espaço, uma quantidade necessária para a determinação do potencial de correlação tal como proposto por JAIN; GIANTURCO (1991), esse potencial descreve os efeitos da distorção da nuvem eletrônica da molécula alvo em termos da presença do pósitron, enquanto estiver dentro dela.

A energia produzida na distorção da molécula quando o pósitron estiver suficientemente distante da molécula é dada em termos do potencial de polarização, que é determinado a partir de uma função analítica que depende de parâmetros da molécula, as polarizabilidades. O potencial espalhador na aproximação SCP, então, é dado pela soma do potencial eletrostático com o potencial de correlação-polarização, onde este último é definido como o potencial de correlação desde a origem do sistema de coordenadas até a posição radial em que este cruza o potencial de polarização pela primeira vez, e como o potencial de polarização desde esta coordenada radial até o infinito.

O potencial de polarização veio da teoria de perturbação. Para calculá-lo é fundamental considerar os termos de polarizabilidades e hiperpolarizabilidades na determinação das seções de choque para baixas energias, os efeitos disso foram reportados em TENFEN; BARP; ARRETICHE (2019). Os detalhes dos procedimentos computacionais adotados para a obtenção das seções de choque teóricas foram apresentados anteriormente em SAAB; TENFEN (2021).

A correção implementada nesse trabalho exige levar em consideração o efeito do espalhamento em baixo ângulo, como discutido anteriormente. Ela foi proposta primeiramente por KAUPPILA et al. (1981) e retomada por SULLIVAN et al. (2011) e BRUNGER; BUCKMAN; RATNAVELU (2017) e recentemente verificada em TENFEN et al. (2022). Essa correção pode ser realizada ou incrementando na SCT a SCD teórica integrada desde o ângulo de espalhamento $\theta=0$ até o ângulo crítico $\theta=\theta_c$ para assim obter uma SCT corrigida como na equação [1]

$$\sigma_{corrigida} = \sigma_{medida} + 2\pi \int_0^{\theta_c} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta, \quad [1]$$

ou a correção pode ser feita na SCI teórica, bastando degradar ela no mesmo intervalo conforme observamos na equação [2]

$$\sigma_{degradada} = \sigma_{calculada} - 2\pi \int_0^{\theta_c} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta. \quad [2]$$

Assim, idealmente, quanto menor o ângulo crítico, mais próxima estarão as seções de choque medidas experimentalmente e obtidas teoricamente.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Usando o ângulo crítico associado à cada valor de energia do pósitron incidente, fornecidos por ZECCA et al. (2011), pudemos calcular as correções. Como pode ser observado na Fig. 1, os dados experimentais (SCT+Corr), após serem corrigidos conforme a Eq. 1, apresentam uma ótima convergência com a curva teórica (SCI). Por outro lado, quando usamos a Eq. 2 para obter a curva teórica degradada (SCI-Corr) e a comparamos com a SCT também pode ser observado que a convergência é equivalente. Como o esperado, os resultados

convergem bem até alcançar a energia necessária para a formação de positrônio em 8,78 eV.

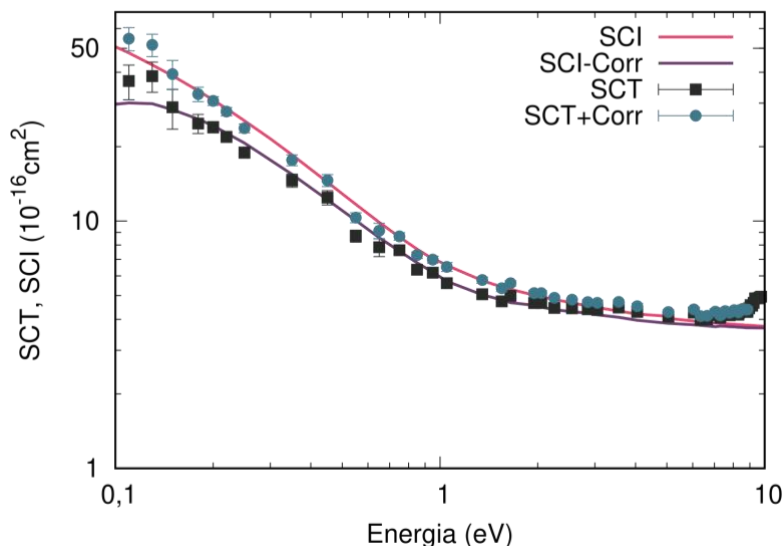


Figura 1: SCI (linha rosa), SCI degradada (linha roxa), SCT (quadrados pretos) e SCT corrigida (bolazinhas azuis).

Com essa figura, observamos que o valor da correção dos dados experimentais decaem conforme o aumento da energia, visto que, para baixas energias, o ângulo crítico fica cada vez maior, chegando à $71,6^\circ$ para 0,1 eV implicando em uma correção de 33,5%. Enquanto para 10,0 eV o θ_c é de $5,4^\circ$ então a correção cai para apenas 0,99%.

A Fig. 2 mostra a SCD para as energias de 0,1 eV e 1,0 eV dos pósitrons incidentes. Na área sob a curva pintada, observa-se a proporção de pósitrons espalhados que o equipamento deixa de detectar. E como esperado, a porção vai se tornando cada vez mais significativa conforme a energia diminui. É com ela que se observa a importância de ser realizada a correção para o espalhamento de pósitrons em baixas energias.

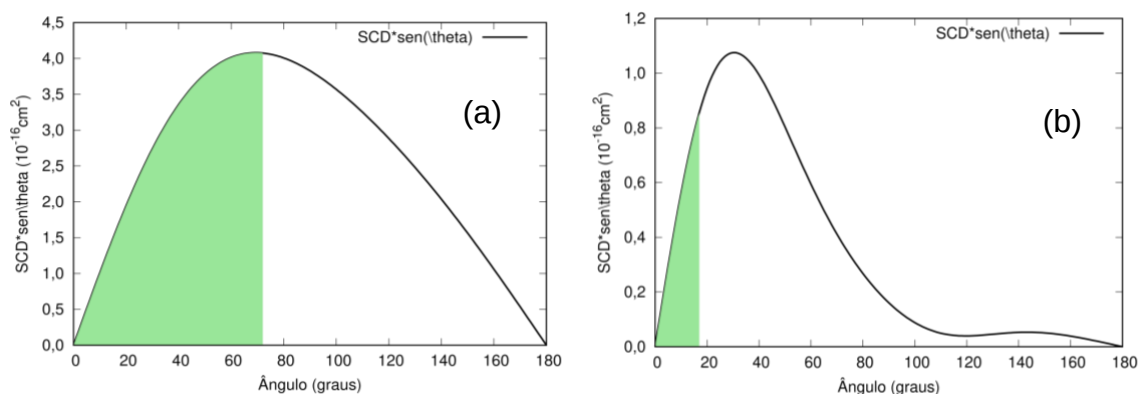


Figura 2: $SCD \cdot \sin \theta$ em (a) 0,1 eV (b) 1,0 eV com a porção em verde representando o percentual de pósitrons espalhados desconsiderado na TCS.

4. CONCLUSÕES

Com esse trabalho, nota-se a necessidade de realizar a correção para o espalhamento em baixo ângulo em baixas energias pois a SCT corrigida apresentar um bom resultado implica que a nossa SCD não está supervalorizada visto que ao degradar a SCI, também obtivemos um resultado positivo.

Apesar da correção ser facilmente calculada, uma vez que tenhamos as SCD, SCI e o ângulo crítico correspondente de cada energia de pósitron incidente, não é comum em trabalhos da área experimental fornecer os ângulos críticos do equipamento, assim, parte desse trabalho será calcular eles para que sejam feitas comparações com outros dados experimentais e possa ser verificado se a concordância melhora para todos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BRUNGER, M. J.; BUCKMAN, S. J.; RATNAVELU, K. Positron scattering from molecules: An experimental cross section compilation for positron transport studies and benchmarking theory. **Journal of Physical and Chemical Reference Data**, v. 46, n. 2, 2017.

JAIN, A.; GIANTURCO, F. A. Low-energy positron collisions with CH₄ and SiH₄ molecules by using new positron polarization potentials. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, v. 24, n. 9, p. 2387, 1991.

KAUPPILA, W. E. et al. Measurements of total scattering cross sections for intermediate-energy positrons and electrons colliding with helium, neon, and argon. **Physical Review A**, v. 24, n. 2, p. 725, 1981.

RIBEIRO, E. M. S. et al. Application of the method of continued fractions to electron scattering by polyatomic molecules. **Computer physics communications**, v. 136, n. 1-2, p. 117-125, 2001.

SAAB, S. E. S.; TENFEN, W. ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE PÓSITRON POR N₂. In: **7ª Semana Integrada de Inovação, Ensino, Pesquisa e Extensão - UFPel**, Pelotas, 2021. XXX Congresso de Iniciação Científica.

SULLIVAN, James P. et al. Forward angle scattering effects in the measurement of total cross sections for positron scattering. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, v. 44, n. 3, p. 035201, 2011.

TENFEN, Wagner et al. Higher order polarizabilities and the positron forward scattering problem: Convergence between calculated and measured cross sections in the very low energy regime. **Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena**, v. 255, p. 147160, 2022.

TENFEN, Wagner; BARP, Marcos V.; ARRETCHE, Felipe. Low-energy elastic scattering of positrons by O₂. **Physical Review A**, v. 99, n. 2, p. 022703, 2019.

ZECCA, A. et al. Positron scattering from the isoelectronic molecules N₂, CO and C₂H₂. **New Journal of Physics**, v. 13, 2011.