

Espalhamento elástico de elétrons pela molécula de C₂H₂

Fábio Luiz Schmidt Rodrigues, Jorge L. S. Lino

Núcleo de Pesquisas em Matemática e Matemática Aplicada,
Universidade Braz Cubas, Campus I, 08773-380, Mogi das Cruzes, SP
falusch@yahoo.com.br

1. Resumo

Apresentamos seções de choque elásticas do C₂H₂ por impacto de elétrons usando o primeiro termo Born adaptado com correção do tipo “troca + polarização”. Também adaptamos o procedimento quadratura dupla para obter aumenta o número de pontos no processo de integração numérica. Nossos resultados preliminares indicam uma boa concordância com dados experimentais.

2. Introdução

Nos últimos anos o cálculo de seções de choque vem atraindo muito interesse devido aos grandes avanços experimentais no que se refere a fontes estáveis de partículas incidentes. Vários métodos para estudar teoria de colisões podem ser obtidos na literatura e especificamente o processo de espalhamento de elétrons por moléculas vem sendo tratado adequadamente pelo método chamado Princípio Variacional de Schwinger (PVS) [1, 2]. O PVS, baseado na utilização de uma função tentativa pode incorporar fenômenos físicos como o termo de troca, polarização, ressonâncias e processos de excitação eletrônica. Embora o PVS possa ser atraente, existe uma grande desvantagem no que tange a qualidade da função de onda. A função de onda usada no PVS é tradicionalmente do tipo Gaussianas Cartesianas e isso é muito adequado para potenciais de curto alcance de espalhamento. Para potenciais de longo alcance como é o caso de moléculas polares, o PVS passa a fornecer resultados incoerentes, necessitando portanto de ajustes. O procedimento tradicional para resolver problemas de tal natureza estaria ligado a utilização do chamado primeiro termo de Born para completar as seções de choque (embora seja comodamente usado, completar as seções de choque com Born pode acarretar problemas de divergência numérica).

Nossa proposta consiste em modificar o PVS utilizando como função tentativa de espalhamento ondas planas na função de base [3, 4, 5]. O PVS utilizando tais funções passa a necessitar obrigatoriamente do chamado primeiro termo e segundo termo de Born. Como uma primeira etapa de nosso estudo analisaremos o primeiro termo de Born (PTB) com duas adaptações:

- a) a inclusão do termo de troca (identidade dos elétrons) e;
- b) efeito de polarização do alvo (distorção do alvo devido o elétron incidente).

O estudo será feito para a molécula do tipo C₂H₂ e duas energias específicas serão testadas, ou seja, 10 eV e 100 eV. Nosso PTB utiliza o processo de quadratura dupla, isto é, a técnica de Gauss-Legendre para resolver a integral PTB envolve dois pares de quadraturas para Θ e ϑ e isso faz com que o número e pontos aumente demasiadamente, ocasionando portanto maior precisão nos resultados. Todo o procedimento numérico foi devidamente testado para se obter estabilidade numérica nas seções de choque. Para isso aumentamos gradativamente os pontos da quadratura e concentramos a estabilidade por volta de 57.600 pontos.

3. Formalismo

Os termos de Born podem ser visualizados na forma de uma série para a amplitude de espalhamento

$$f = \langle S_f | V | S_i \rangle + \langle S_f | VGV | S_i \rangle + \dots \quad (1)$$

onde “S” representa a onda plana para “i” inicial e “f” final, V o potencial de interação do elétron incidente com o alvo e “G” a função de Green. A solução de cada termo exige um considerável tempo de computação que pode ser mais dramático no segundo termo. O

primeiro de Born (PTB) normalmente fornece resultados razoáveis para altas energias do elétron incidente mas evidentemente alguns ajustes precisam ser feitos. Para elétrons como partícula incidente, a natureza “idêntica” com o elétron do alvo obriga a sua diferenciação pelo modelo de troca, ou modelo de Born-Ockhur. Nosso modelo de Born utiliza portanto o termo de troca como forma de identificação das partículas e com isso temos a intenção de gerar seções de choque mais adequadas. Uma segunda situação seria a de acoplar ao Born o chamado potencial de polarização, ou seja, no processo de espalhamento há uma distorção do alvo (devido a partícula incidente) que precisa ser considerada. O chamado modelo de Buckingham [6] embora seja tradicionalmente usado, necessita de alguns cuidados tendo em vista o parâmetro de corte dependente de energia, isto é,

$$V_{\text{pol}} = -\alpha / [r^2 + r_c^2] \quad (3)$$

onde “ α ” representa a polarizabilidade do alvo e “ r_c ” o parâmetro de corte que serve como artifício para evitar a descontinuidade para “ r ” nulo. Seguindo os estudos de Salvat [6] o parâmetro de corte pode ser aproximado para a expressão analítica do tipo

$$r_c^4 = (1/2) \alpha Z^{-1/3} b_{\text{pol}}^2 \quad (4)$$

e portanto determinar o valor de r_c .

4. Resultados

Para o estado fundamental do C_2H_2 utilizamos a geometria pertencente ao grupo $D_{\infty h}$ e conseguimos obter uma energia de -76.3 au. Para a polarizabilidade do alvo, utilizamos o valor experimental $\alpha = 22.449$ au. Como um primeiro teste apresentamos na Figura 1 seções de choque do C_2H_2 por impacto de elétrons para a energia de 10 eV usando o primeiro termo de Born. No presente resultado nosso modelo não usa o termo de troca e nem polarização, tendo em vista que inicialmente precisamos calibrar nosso procedimento com a literatura. O resultado de Lee Mu Tao et al [7] usando

também o PTB (sem troca e polarização) apresenta uma boa concordância com o nosso, (isso demonstra boa estrutura computacional). Na figura 2 mostramos uma seção de choque diferencial para 100 eV (alta energia) comparado com dados experimentais (veja Ref. [7]). Como observado, há uma ligeira igualdade para os ângulos grandes. A correção dos ângulos pequenos está prevista na inserção do parâmetro de corte do potencial de polarização. No entanto podemos observar que de forma geral há uma boa concordância.

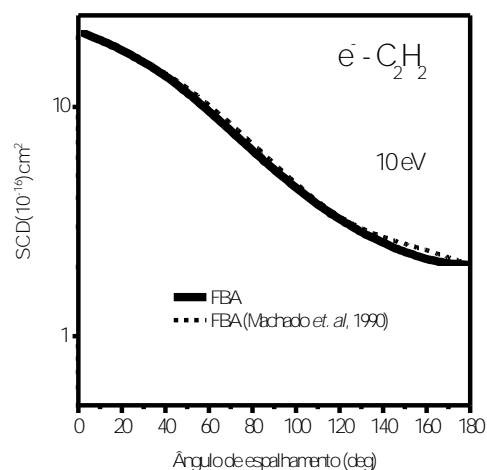


Figure 1: Seção de choque diferencial elástica do C_2H_2 por impacto de elétrons usando o FBA para 10 eV. A linha cheia representa o nosso resultado e a tracejada resultados de Lee Mu Tao et al [2].

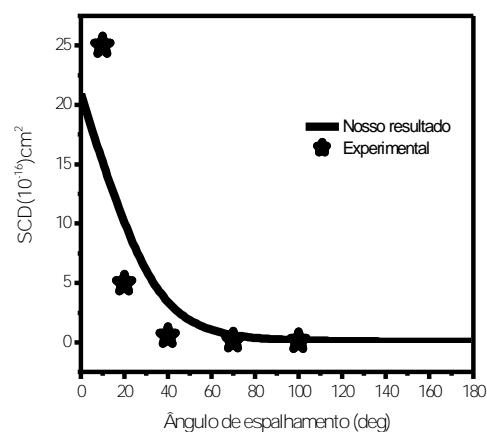


Figure 2: Seção de choque diferencial elástica do C_2H_2 por impacto de elétrons usando o FBA para 100 eV. A linha cheia representa o nosso resultado e as estrelas representam dados experimentais [2].

5. Conclusão

Nosso trabalho visa um melhor enquadramento do chamado primeiro termo de Born para uma futura utilização no método de Schwinger. Como podemos observar nossos resultados são satisfatórios comparados com dados experimentais e demonstraram a viabilidade do formalismo.

Agradecimentos.

O projeto possui o apoio da Universidade Braz Cubas, Mogi das Cruzes -SP. Parte do projeto foi inicialmente financiado pelo Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho de São Paulo.

Referências

- [1]- K. Takatsuka, V. McKoy, Phys. Rev A 30, 3005 (1984).
- [2]- K. Takatsuka, V. McKoy, Phys. Rev A 24, 2473 (1981).
- [3]- J. L. S. Lino, M. A. P. Lima, Braz. J. Phys. 32, 432 (2000).
- [4]- J. L. S. Lino, Rev. Mex. Fis. 50, 10 (2005)
- [5]- J. L. S. Lino, Chin. J. Phys. 41, 497 (2003)
- [6]- F. Salvat, Phys. Rev. A 68 012708 (2003) .
- [7]- L. M. Tao, L. M. Brescansin, M. A. P. Lima, L. E. Machado, J. Phys. B 23 (1990) 4331.