

ESPALHAMENTO ELÁSTICO DE PÓSITRON POR N₂

SARAH ESTHER DA SILVA SAAB¹; WAGNER TENFEN²

¹Universidade Federal de Pelotas – sarahesthersaab@outlook.com

²Universidade Federal de Pelotas – wtenfen@gmail.com

1. INTRODUÇÃO

Após a detecção da primeira antipartícula, primeiramente chamada de “elétron positivo” (ANDERSON, 1933) e mais tarde nomeada de “pósitron”, essa passou a ser objeto de estudo de cientistas que buscam compreender a natureza da interação dessa partícula com a matéria. Sabendo que o estudo da teoria de espalhamento é uma importante ferramenta para quem busca conhecer sobre a estrutura da matéria, é possível, realizar cálculos para obter a seção de choque de interação entre eles (BRANSDEN; JOACHIN, 2003).

Para isso, é necessário ter a estrutura e densidade eletrônica do alvo, que no presente estudo é a molécula de N₂, bem definida. Sendo essencial a resolução da equação de Schrödinger para ela, que nesse estudo deverá ser solucionada somente por métodos numéricos aproximados. Também é essencial conhecer os potenciais estático e de correlação-polarização.

Devido à riqueza de dados experimentais e teóricos para o espalhamento de pósitron pela molécula de N₂, este é um alvo convidativo para estudos iniciais pois os resultados obtidos podem ser comparados com dados estabelecidos na literatura. Este trabalho visa agregar resultados que possuem maior concordância de seções de choque diferencial e integral com dados experimentais bem estabelecidos na área (PRZYBYLA et al., 1999).

2. METODOLOGIA

Usando o método Hartree-Fock para resolver a equação de Schrödinger para muitos corpos, se faz necessário o uso de um conjunto de funções gaussianas para representar os orbitais atômicos de N. Os orbitais moleculares são obtidos a partir da combinação linear de orbitais atômicos. Dessa forma, a base escolhida foi a duplo-zeta de Dunning-Hay com um acréscimo proposto por MAROULIS; THAKKAR (1988), excluídas as funções do tipo f. Assim, o software GAMESS (SCHMIDT et al., 1993) resolve a seguinte equação

$$H(r_1, r_2, \dots, r_N) \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = E \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (1)$$

para N elétrons, a fim de encontrar a estrutura e densidade eletrônica do N₂.

Posteriormente, determinamos o potencial eletrostático produzido pela distribuição de cargas correspondente à molécula N₂. Este potencial é calculado com um programa (STP3D) desenvolvido por RIBEIRO; MACHADO; BRESCANSIN (2001). Após a determinação do potencial eletrostático, determinamos o potencial espalhador adicionando a interação de polarização obtida através de teoria de perturbação, na forma

$$V_{pol}(\vec{r}) = \frac{-\alpha_0}{2r^4} - \frac{\alpha_2}{2r^4} P_2(\cos \theta) - \frac{\alpha_Q}{2r^6} + \frac{B}{2r^7} - \frac{\gamma}{24r^8} \quad (2)$$

onde as polarizabilidades utilizadas são aquelas determinadas por MAROULIS; TAKKAR (1988). Em seguida, executando o programa MCF3D elaborado por RIBEIRO; MACHADO; BRESCANSIN (2001), que utiliza o método das frações continuadas para resolver a seguinte equação de espalhamento

$$|\psi\rangle = |s\rangle + G_0 V_{\text{int}} |\psi\rangle \quad (3)$$

que permite a determinação dos elementos da matriz de reatância de espalhamento, para então calcular as seções de choque diferenciais e integrais da molécula com o programa XSEC3D produzido por RIBEIRO; MACHADO; BRESCANSIN (2001) para o espalhamento elástico.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O ponto chave desse trabalho é a consideração das polarizabilidades nos cálculos, pois ao deixar de considerar a molécula de N_2 “congelada” em seu estado fundamental, onde ela não distorce seu campo elétrico com a aproximação da partícula, passa-se a trabalhar com potenciais interativos que consideram os efeitos de atração entre o campo elétrico do pósitron e a nuvem eletrônica da molécula e a repulsão entre ela e os núcleos, o que torna a modelagem mais próxima da realidade.

A Figura 1 mostra a seção de choque diferencial (SCD), em unidades atômicas, para 6.75 eV de energia. A SCD representa a probabilidade de espalhamento do pósitron de acordo com o ângulo. Observa-se que há um comportamento ondulatório de interferência, justamente por ter ocorrido a sobreposição das funções de onda incidente com a onda espalhada.

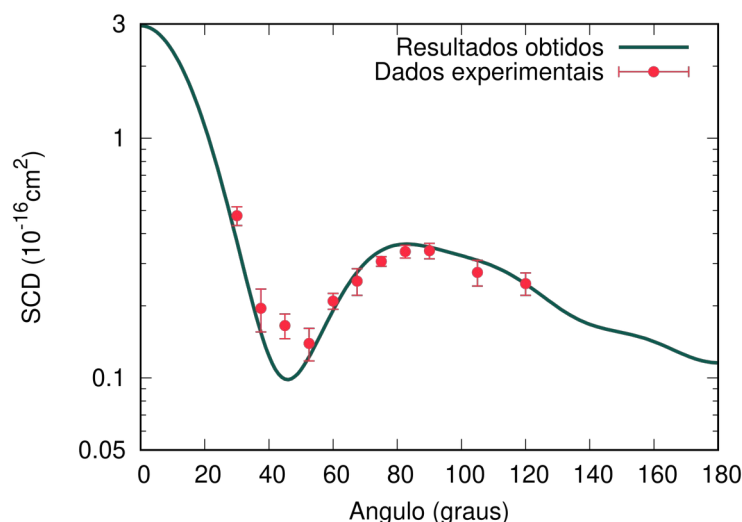


Figura 1: Seção de Choque Diferencial Pósitron-Molécula

Nota-se que há uma concordância satisfatória com os dados experimentais (PRZYBYLA, 1999), visto que mesmo que não esteja em escala linear, e sim logarítmica, a diferença é pequena entre o estabelecido pela literatura e o que calculamos nesse trabalho.

Integrando a seção de choque diferencial para todo o espaço para diferentes valores de energia elabora-se a Figura 2, que representa a seção de choque integral (SCI). Novamente comparando com a referência experimental, há uma

boa convergência entre resultados até a abertura do canal de formação de pósitronio, em aproximadamente 8.8 eV.

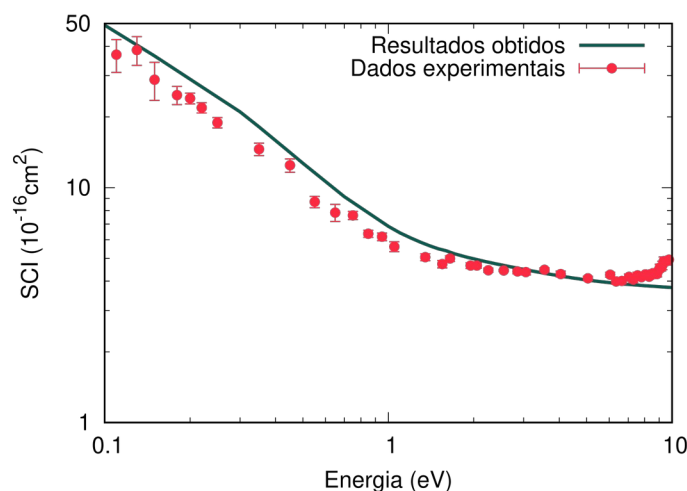


Figura 2: Seção de Choque Integral Pósitron-Molécula

4. CONCLUSÕES

Determinamos as seções de choque para as colisões elásticas de pósitrons com moléculas de N_2 . A concordância entre os resultados obtidos e os dados experimentais indica que o modelo de polarização adotado representa corretamente a interação de pósitrons com esta molécula. Este é um resultado importante, pois nos estudos teóricos realizados até hoje, apenas os termos de polarização dipolar foram empregados, deixando de fora termos importantes para a convergência do potencial espalhador determinado em série perturbativo.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Anderson, C. D. The positive electron. **Physical Review**, 43(6), 491, 1933.
- BRANDSEN, Brian Harold; JOACHIN, Charles Jean. Physics of atom and molecules. **Person Education India**, 2003.
- MAROULIS, G.; THAKKAR, A. J. Multipole moments, polarizabilities, and hyperpolarizabilities for N_2 from fourth-order many-body perturbation theory calculations. **The Journal of chemical physics**, v. 88, n. 12, p. 7623-7632, 1988.
- SCHMIDT, M.W. et al. **The general atomic and moleculelectronic structure system**. J. Comput. Chem.,14, 1347, 1993.
- PRZYBYLA, D. A. et al. Measurements of differential cross sections for positrons scattered from N_2 , CO, O $_2$, N $_2$ O, and CO $_2$. **Physical Review A**, v. 60, n. 1, p. 359, 1999.
- RIBEIRO, E. M. S.; MACHADO, L. E., Lee, M. T.; & BRESCANSIN, L. M. Application of the method of continued fractions to electron scattering by polyatomic molecules. **Computer physics communications**, 136(1-2), 117-125, 2001.