

## **DETERMINAÇÃO DAS SEÇÕES DE CHOQUE ELÁSTICAS PARA COLISÕES DE PÓSITRONS COM AS MOLÉCULAS $F_2$ E $Cl_2$**

**JOSINEY DE SOUZA GLÓRIA<sup>1</sup>; WAGNER TENFEN<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Universidade Federal de Pelotas (UFPel) – josineyjp3@gmail.com*

<sup>2</sup>*Universidade Federal de Pelotas (UFPel) – wttenfen@ufpel.edu.br*

### **1. INTRODUÇÃO**

O presente trabalho tem como objetivo apresentar os resultados dos cálculos das seções de choque elásticas diferenciais (DCS's-*Differential Cross Sections*) e as seções choque elásticas integrais (ICS's-*Integral Cross Sections*) para as colisões de pósitrons com as moléculas  $F_2$  e  $Cl_2$ , bem como analisar os efeitos que a inserção da polarização de ordens superiores produzem nestas seções de choque e nos deslocamentos de fase (*phase shifts*). Através dos resultados obtidos podemos fazer a comparação com os trabalhos existentes na literatura, contribuindo, assim, para o aprofundamento da descrição da dinâmica de espalhamento para as moléculas citadas anteriormente. Este trabalho está vinculado à Linha de Pesquisa Física da Matéria Condesada Teórica e está contido no projeto Estrutura Eletrônica e Teoria de Espalhamento.

O tratamento do espalhamento de pósitrons e elétrons a partir de átomos e moléculas é semelhante e tem sido estudado extensivamente tanto teórica quanto experimentalmente. Os parâmetros de espalhamento de interesse são as seções de choque de espalhamento. Apesar dos avanços dos estudos, fornecer dados, tanto teóricos como experimentais, para pósitrons, nem sempre é uma tarefa fácil quando se considera os dados publicados disponíveis, pois a comunidade de pósitrons não é conhecida por publicar valores tabulados de seções de choque medidas de acordo com RATNAVELU (2019). MORGAN (1984) calculou as seções de choque para espalhamento elástica de elétrons por moléculas de flúor  $F_2$ . PATEL (2010) demonstra resultados das seções de choque totais (elásticas e inelásticas) de colisões de elétrons com moléculas de  $N_2O$ ,  $CF_2$ ,  $NO$  e  $F_2$ . SCHNEIDER (1976) mostra resultados para seções de choque elásticas de colisões de elétrons com moléculas de  $F_2$ . RESCIGNO (1994) apresenta resultados de colisões de elétrons com moléculas de  $Cl_2$  a baixa energia. MAKOCHEKANWA (2003) apresentou medidas de seções de choque total para espalhamento de elétrons com  $Cl_2$  em várias faixas de energia. CHRISTOPHOROU (1999) analisou as interações eletrônicas de baixa energia com a molécula  $Cl_2$ , incluindo seções de choque total, elástica e de várias excitações eletrônicas. O único resultado disponível na literatura que se aproxima do tema do estudo aqui proposto é a curva dos deslocamentos de fase para as colisões de pósitrons com  $Cl_2$  determinada por SWANN; GRIBAKIN (2020) os resultados apresentados por eles têm um caráter ainda preliminar, pois indicam a existência de um estado ligado ou de um estado virtual dependendo do modelo de polarização adotado. Ainda que os estudos de espalhamento de elétrons e pósitrons com átomos e moléculas ocorram há bastante tempo, ainda não existem resultados de seções de choque de pósitron com as moléculas  $F_2$  e  $Cl_2$  e o presente trabalho tenta preencher essa lacuna significativa na área de espalhamento.

## 2. METODOLOGIA

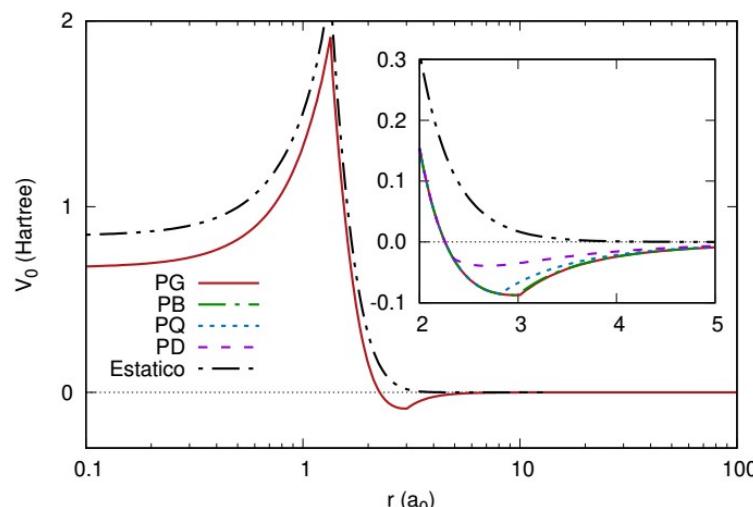
Para resolver as equações de espalhamento e consequentemente a determinação das seções de choque utilizamos o método das frações continuadas (MCF - *Method of Continued Fractions*) conforme descrito por HORACEK; SASAKAWA (1983). O MCF se mostrou eficiente no cálculo das seções de choque para as colisões de pósitrons com outras moléculas, tanto na aplicabilidade computacional, quanto na exatidão dos resultados conforme observado nos trabalhos de TENFEN (2019); ARRETCHE (2010). Esse método é descrito juntamente com o modelo de potencial espalhador dado na aproximação estático-correlação-polarização (SCP-Static Correlation Polarization), um modelo de potencial espalhador que envolve o termo de polarização dipolar, quadrupolar, a primeira e a segunda hiperpolarizabilidades, o potencial de correlação entre pósitrons e moléculas, e o potencial eletrostático.

No desenvolvimento deste trabalho, analisamos as contribuições do potencial de polarização nas seções de choque para as colisões de pósitrons com as moléculas consideradas ao incluir a interação da polarização termo a termo no potencial de espalhamento. As polarizabilidades e hiperpolarizabilidades entram no nosso modelo de espalhamento como parâmetros externos, de modo que podemos empregar livremente os seus valores teóricos. Ao determinar o potencial espalhador nestes diferentes níveis de polarização, podemos calcular as seções de choque integrais e diferenciais para cada um destes potenciais, e então verificar os efeitos das polarizações de ordem superior sobre os resultados obtidos. Este estudo foi realizado por TENFEN (2019) para a molécula de O<sub>2</sub>, demonstrando a importância de considerar polarizações para além do termo dipolar.

## 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

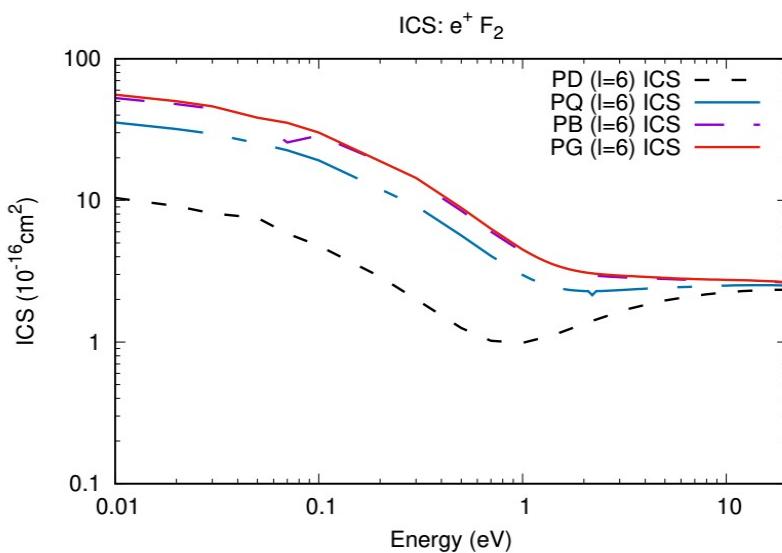
Com a utilização do MCF foi possível determinar o potencial espalhador para colisões de pósitrons com as moléculas F<sub>2</sub> e Cl<sub>2</sub>, um dos resultados é verificado na Figura 1 para o potencial para F<sub>2</sub>. O potencial espalhador envolve o termo estático e o termo de correlação-polarização, onde PD é o termo de polarização dipolar; PQ o termo quadrupolar; PB a primeira hiperpolaribilidade e PG a segunda hiperpolaribilidade. Podemos observar que o termo de polarização do potencial é acentuado com a inserção da polarização PQ e principalmente com os termos de polarização de ordens superiores PB e PG, no qual o potencial converge. O raciocínio é o mesmo para o potencial espalhador para a molécula Cl<sub>2</sub>.

Figura 1. Comparação do termo estático e esférico do potencial espalhador para F<sub>2</sub>.



Nessa mesma perspectiva, obtivemos resultados de seções de choque elásticas diferenciais (DCS's) e seções choque elásticas integrais (ICS's) de 1 a 20 eV para as colisões de pósitrons com as moléculas  $F_2$  e  $Cl_2$ . A Figura 2 apresenta as ICS's para o  $F_2$ , é claramente visível que os níveis de polarização influenciam na convergência da seção de choque. Conforme observado na Figura 2, podemos verificar o surgimento de um mínimo de Ramsauer nas ICS's e que esse mínimo torna-se menos evidente conforme ele avança para as energias mais altas. À medida que o nível de polarização aumenta, ou seja, com a inclusão dos termos PQ, PB e PG no potencial observamos a convergência das seções de choque, principalmente com a inclusão dos termos PB e PG (as hiperpolarizabilidades). A correção do termo PB torna-se quase indistinguível do termo PG, o mesmo pode ser observado para o potencial espalhador (Figura 1).

Figura 2. Dependência da seção integral para  $F_2$  com o nível de polarização considerado .



#### 4. CONCLUSÕES

Diante do exposto, podemos concluir neste trabalho que o Método das Frações Continuadas (MCF) mostrou-se mais uma vez eficaz para determinar seções de choque de espalhamento. Nesse sentido, através do MCF foi possível determinar o potencial espalhador e consequentemente obter resultados de seções de choque elásticas integrais e seções de choque elásticas diferenciais para as colisões de pósitrons, dessa vez com as moléculas  $F_2$  e  $Cl_2$ , resultados esses ainda inexistentes na literatura até o momento, preenchendo, assim essa pequena lacuna, na grande área de espalhamento. Da mesma forma, foi feita a comparação dos *phase shifts* para o  $Cl_2$  com o modelo de potencial utilizado por Swann com o modelo de potencial utilizado nesse trabalho. Foi possível verificar também que nas seções de choque obtidas, o aparecimento do mínimo de Ramsauer é, em parte, devido à falta de polarização da molécula, ou seja, a inclusão de níveis de polarização de ordens superiores com é o caso do PB e PG presentes no potencial de correlação-polarização utilizado influenciam de maneira significativa nesse mínimo e também na convergência das referidas seções de choque.

## 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ARRETCHE, F., et al. Low Energy Scattering of Positrons By. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, vol. 268, nº 2, janeiro de 2010, p. 178–82.
- CHRISTOPHOROU, L. G., e J. K. Olthoff. Electron Interactions with Cl<sub>2</sub>. *Jornal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 28, nº 1, janeiro de 1999, p. 131–69. <https://doi.org/10.1063/1.556036>.
- HORÁČEK, J., e T. SASAKAWA. Method of Continued Fractions with Application to Atomic Physics. *Physical Review A*, vol. 28, nº 4, outubro de 1983, p. 2151–56. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.28.2151>.
- MAKOCHEKANWA, C., et al. Total cross section measurement for electron scattering from chlorine molecules in the energy region from 0.8 to 600 eV. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 36, nº 9, maio de 2003, p. 1673–80. <https://doi.org/10.1088/0953-4075/36/9/301>.
- MORGAN, L. A., e C. J. Noble. Elastic scattering of electrons by fluorine molecules. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 17, nº 11, junho de 1984, p. L369–73. <https://doi.org/10.1088/0022-3700/17/11/008>.
- PATEL, P. M.; PANDYA, C. V.; BALUJA, K. L. Total (elastic+ Inelastic) Cross Sections For Electron Scattering From N<sub>2</sub>O, Cf4, No And F<sub>2</sub> Molecules. *Fizika A (Zagreb)*, v. 19, n. 1, p. 47-54, 2010.
- RATNAVELU, KURU, et al. Recommended Positron Scattering Cross Sections for Atomic Systems. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 48, nº 2, junho de 2019, p. 023102. <https://doi.org/10.1063/1.5089638>.
- RESCIGNO, T. N. Low-Energy Electron-Collision Processes in Molecular Chlorine. *Physical Review A*, vol. 50, nº 2, agosto de 1994, p. 1382–89. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.50.1382>.
- SCHNEIDER, B. I. E P. J. Hay. Elastic scattering of electrons from F<sub>2</sub>. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, vol. 9, nº 6, abril de 1976, p. L165–67. <https://doi.org/10.1088/0022-3700/9/6/009>.
- SWANN, A. R., e G. F. Gribakin. Model-Potential Calculations of Positron Binding, Scattering, and Annihilation for Atoms and Small Molecules Using a Gaussian Basis. *Physical Review A*, vol. 101, nº 2, fevereiro de 2020, p. 022702.
- TENFEN, Wagner, et al. Low-Energy Elastic Scattering of Positrons by O<sub>2</sub>. *Physical Review A*, vol. 99, nº 2, fevereiro de 2019, p. 022703. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.99.022703>.