

IONIZAÇÃO DE MOLÉCULAS POR IMPACTO DE ELÉTRONS E PÓSITRONS UTILIZANDO O MODELO BEB

BEATRIZ RODRIGUES DE OLIVEIRA¹; WAGNER TENFEN²

¹Universidade Federal de Pelotas – beatriz.oliveira@ufpel.edu.br

²Universidade Federal de Pelotas – wtenfen@ufpel.edu.br

1. INTRODUÇÃO

A ionização de átomos e moléculas por impacto de elétrons é objeto de estudo da mecânica quântica desde seu primórdio e permanece relevante até os dias atuais. A seção de choque de ionização traz como informação fundamental a quantificação da probabilidade de um átomo individual ser ionizado ao ser atingido por um elétron. Esse evento de ionização resulta na ejeção de um único elétron do átomo, deixando o alvo em um estado iônico enquanto os elétrons incidente e secundário são dispersados (BARTLETT & STEBOLVICS, 2009).

Uma abordagem comumente utilizada para calcular estas seções de choque, é o Modelo de Encontro Binário Bethe (BEB), desenvolvido por Kim e Rudd. Este modelo baseia-se na combinação da teoria de encontro binário, que descreve bem seções de choque inelásticas em baixas energias com as equações desenvolvidas por Hans Bethe, que descreve seções de choque de ionização a altas energias. Uma de suas principais características é ser um modelo teórico livre de parâmetros ajustados, fundamentado em princípios teóricos. O modelo permite calcular seções de choque de ionização para diversos átomos e moléculas em diferentes faixas de energia, desde o limiar de ionização até vários keV (KIM & RUDD, 1994).

Embora o modelo BEB tenha sido originalmente desenvolvido para descrever a ionização por impacto de elétrons, ele também pode ser estendido para pósitrons, levando em conta similaridades e diferenças entre o elétron e sua antipartícula. Para a ionização por impacto de pósitrons, ao ignorar os efeitos de troca e suas interferências consideradas no modelo original de Kim, é possível obter fórmulas analíticas que podem ser usadas para estimar as seções de choque de ionização direta de pósitrons para diversos átomos e moléculas (FEDUS & KARWASZ, 2019). Para colisões em altas energias, as seções de choque para as duas partículas são semelhantes, e em energias perto do limiar de ionização espera-se que as seções de choque sejam diferentes devido às cargas opostas das partículas. (FRANZ, M.; PAWŁOWSKA; FRANZ, J., 2021).

O cálculo das seções de choque é essencial em uma ampla gama de aplicações, abrangendo simulações de plasmas, fenômenos astrofísicos e iluminação fluorescente (BARTLETT & STEBOLVICS, 2009) além de pesquisas básicas em astrofísica, física atômica, molecular e de plasmas (KIM & RUDD, 1994).

2. METODOLOGIA

A metodologia usada neste trabalho constituiu na implementação computacional do método BEB desenvolvido por Kim e Rudd para cálculo de seções de choque de ionização por impacto de elétrons (KIM & RUDD, 1994), e posteriormente adaptado por Fedus e Karwasz para considerar pósitrons

incidentes (FEDUS & KARWASZ, 2019). As expressões usadas para a ionização por impacto de elétrons e pósitrons, são, respectivamente

$$\sigma_{BEB(e^-)} = \frac{S}{t+u+1} \left[\frac{Q}{2} \ln t \left(1 - \frac{1}{t^2} \right) + (2 - Q) \left[\left(1 - \frac{1}{t} \right) - \frac{\ln t}{t+1} \right] \right]$$

$$\sigma_{BEB(e^+)} = \frac{S}{t+u+1} \left[\frac{Q}{2} \ln t \left(1 - \frac{1}{t^2} \right) + (2 - Q) \left(1 - \frac{1}{t} \right) \right]$$

onde $u=U/B$, $t=T/B$, $S=4\pi a_0^2 N R^2 / B^2$, sendo a_0 o raio de Bohr, R a constante de Rydberg, T a energia dos elétrons incidentes, B a energia de ligação dos elétrons do alvo em cada orbital e U as suas energias cinéticas. Também foram usadas as variações BEB-W, BEB-A e BEB-B do modelo para calcular as seções de choque, onde em cada uma das variações é introduzida uma função de escala f de acordo com sua respectiva lei do limiar.

Uma vez implementadas as equações, foi possível calcular as seções de choque para moléculas diatômicas simples como o H_2 e N_2 e comparar os resultados obtidos com a base de dados disponível no NIST (National Institute of Standards and Technology, 2004) para impacto de elétrons, e com os resultados obtidos posteriormente por Fedus e Karwasz, e Franz *et al.* para impacto de pósitrons (FEDUS & KARWASZ, 2019; FRANZ, M.; PAWŁOWSKA; FRANZ, J., 2021).

Após obtenção da concordância com os trabalhos publicados, pode-se usar os programas para o cálculo das seções de choque para as bases nitrogenadas do DNA e RNA (adenina, timina, citosina, guanina e uracila) por impacto de elétrons e comparar os resultados obtidos com os dados previamente determinados por Mozejko e Sanche (MOŽEJKO E SANCHE, 2003). Também calculou-se a seção de choque de ionização por impacto de pósitrons para estas moléculas, dados escassos na literatura até o momento.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nas Figuras 1 e 2 é possível observar que o modelo computacional do BEB e suas variantes, utilizados neste trabalho, obtiveram boa concordância com os resultados previamente publicados por Fedus & Karwasz (2019) e Franz *et al.* (2021) para as moléculas de H_2 e N_2 com exceção da variação BEB-A, que próximo ao limiar de ionização apresentou maior discrepância com os dados dos autores. Essa discrepância ainda se encontra sob investigação.

Quando comparados os modelos BEB para impacto por pósitrons e elétrons é possível observar que a ionização de pósitrons resulta em seções de choque maiores do que de elétrons, isso se deve aos efeitos de troca, que são desconsiderados no espalhamento por pósitrons (FEDUS & KARWASZ, 2019). A principal diferenciação entre os modelos está perto do limiar de ionização até energias subsequentes ao pico da seção de choque, sendo que em altas energias os modelos apresentam o mesmo comportamento, obtendo seções de choque muito similares.

Figura 1 - Seções de Choque de Ionização Direta para moléculas de H_2 por impacto de elétrons e pósitrons

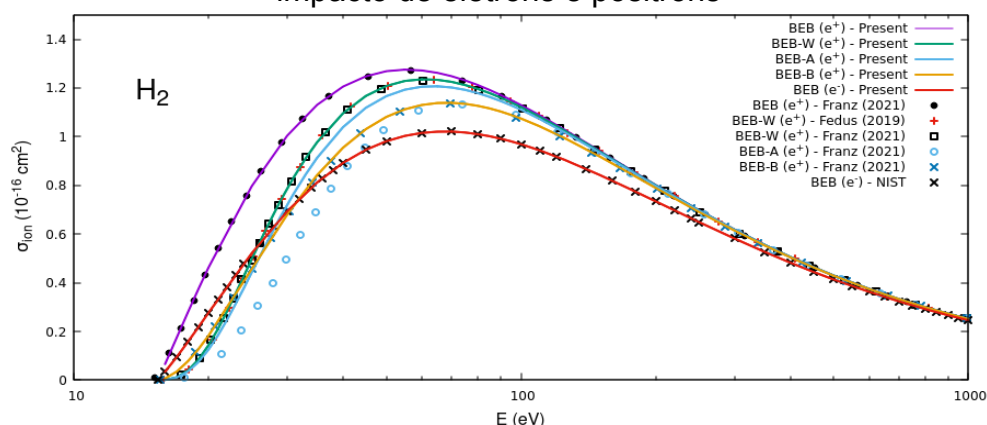
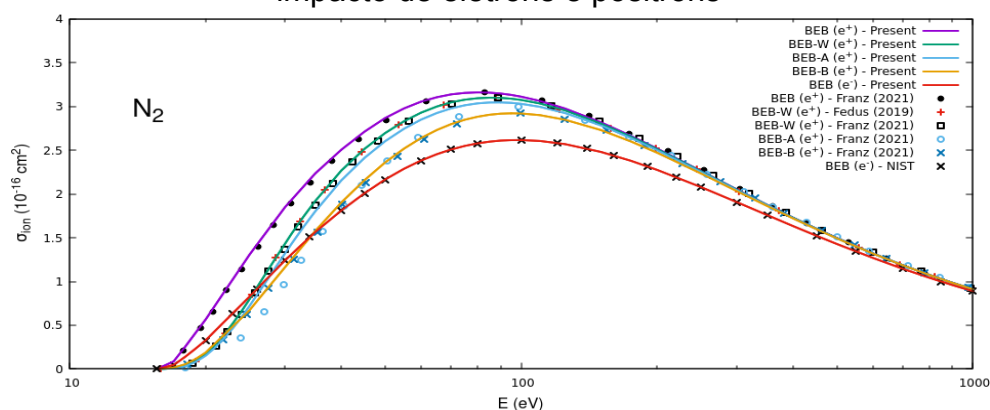
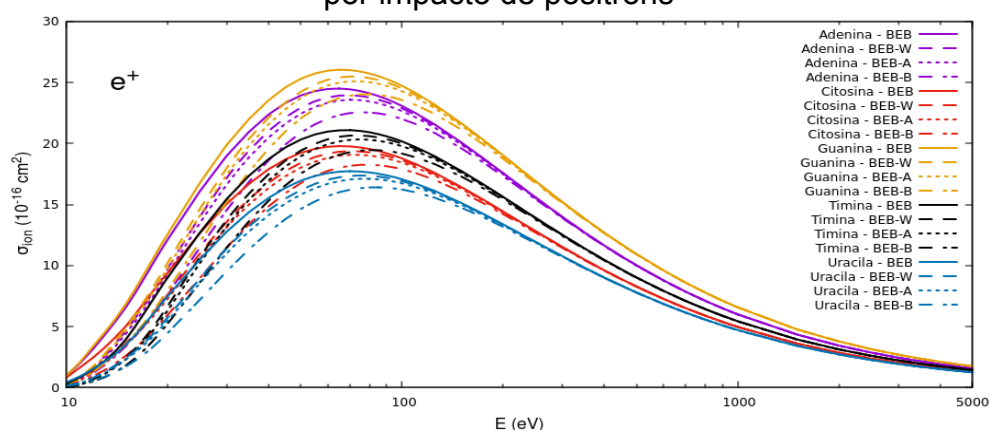


Figura 2 - Seções de Choque de Ionização Direta para moléculas de N_2 por impacto de elétrons e pósitrons



Devido a boa concordância dos modelos para as moléculas de H_2 e N_2 foi possível aplicar o modelo computacional para moléculas maiores. Foram usadas para este trabalho as moléculas que compõem o DNA e RNA para o espalhamento de pósitrons (Figura 3) e elétrons (não mostrado neste resumo). As energias B e U utilizadas para o cálculo foram obtidas de Mozejko & Sanche (2003), e para o espalhamento de elétrons utilizando o modelo BEB foi obtida boa concordância.

Figura 3 - Seções de Choque de Ionização Direta para moléculas do DNA e RNA por impacto de pósitrons



4. CONCLUSÕES

Os modelos BEB, BEB-W e BEB-B desenvolvidos computacionalmente neste trabalho mostraram-se consistentes com resultados publicados, enquanto que para o modelo BEB-A é preciso uma revisão do código programado com base no modelo teórico para necessários ajustes. Esses resultados permitem a continuidade do estudo, possibilitando a aplicação dos modelos para estimar seções de choque de ionização para moléculas maiores que as diatômicas simples.

Os modelos computacionais trazem a possibilidade de calcular seções de choque de ionização para sistemas que são difíceis de determiná-las experimentalmente. A capacidade de lidar com sistemas moleculares mais complexos abre novas perspectivas para explorar uma maior diversidade de sistemas químicos e biológicos, onde as moléculas estudadas são comumente compostas por vários átomos.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BARTLETT, P. L.; STELBOVICS, A. T. Ionization of atoms by electron impact. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, v. 619, n. 1, p. 1–6, 1 jul. 2010.

KIM, Y.-K.; RUDD, M. E. Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization. **Physical Review A**, v. 50, n. 5, p. 3954–3967, 1 nov. 1994.

FEDUS, K.; & KARWASZ, G. Binary-encounter dipole model for positron-impact direct ionization. **Physical Review A**, v. 100, n. 6, p. 062702, 4 dez. 2019.

FRANZ, M.; WICIAK-PAWŁOWSKA, K.; FRANZ, J. Binary-Encounter Model for Direct Ionization of Molecules by Positron-Impact. **Atoms**, v. 9, n. 4, p. 99, 1 dez. 2021.

MOŽEJKO, P., & SANCHE, L. Cross section calculations for electron scattering from DNA and RNA bases. **Radiation and environmental biophysics**, v. 42, n. 3, p. 201-211

JANSEN, K. *et al.* Absolute cross section for positron-impact ionization of hydrogen near threshold. **Physical Review A**, v. 79, n. 2, p. 022704, 5 fev. 2009