

MODELO DE CORRELAÇÃO NO ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS E PÓSITRONS POR ÁTOMOS DE He, Ne e Ar

Vinicius Ferrucci¹;
Régis Sperotto de Quadros²; Wagner Tenfen³

¹Universidade Federal de Pelotas – vinicius.taveiros@hotmail.com

²Universidade Federal de Pelotas – regis.quadros@ufpel.edu.br

³Universidade Federal de Pelotas – wtenfen@ufpel.edu.br

1. INTRODUÇÃO

O espalhamento de elétrons e pósitrons encontra aplicações em diversas áreas, como na astrofísica, biofísica, medicina e física dos materiais. Nestes e em demais contextos, a grandeza que caracteriza o espalhamento tanto do ponto de vista teórico quanto experimental é a chamada seção de choque, definida como a área efetiva de interação da partícula incidente sobre um determinado alvo com uma certa energia (MERZBACHER, 1997).

A principal diferença no espalhamento de elétrons e pósitrons por átomos e moléculas é a indistinguibilidade do elétron incidente em relação aos elétrons que constituem o alvo. Neste sentido, surge uma importante interação entre o projétil e o alvo, chamada de interação de troca. Do ponto de vista teórico, esta interação pode ser determinada exatamente, uma vez que se conheçam os orbitais eletrônicos do alvo (BRANSDEN e JOACHAIN, 1992). Ainda que esta interação possa ser determinada exatamente, é muito comum a adoção de potenciais modelo para contornar o custo computacional de tal procedimento (ARRECTHE et al., 2024). Os mesmos orbitais eletrônicos empregados no cálculo da interação de troca podem ser utilizados para a determinação da densidade eletrônica do alvo, e consequentemente da interação eletrostática entre projétil e alvo, que possui forma idêntica para o espalhamento de elétrons e pósitrons, exceto pelo sinal da carga da partícula incidente. Finalmente, a distorção da nuvem eletrônica do alvo em função da aproximação da partícula incidente carregada é idêntica tanto para a incidência de elétrons quanto de pósitrons, desde que a partícula incidente esteja na região externa do alvo, isto é, a superposição da sua função de onda com a função de onda dos elétrons do alvo é nula. Esta distorção é determinada por teoria de perturbação, e parametrizada em termos das chamadas polarizabilidades do alvo (STONE, 2013), e, portanto, chamada de interação de polarização. Já para o caso em que as partículas incidentes encontram-se dentro do campo do alvo, a energia inserida no sistema é chamada de correlação, e a princípio sua forma funcional é desconhecida. Existem diversos modelos para tratar desta interação, entretanto estes geralmente são determinados a partir de ajustes semiempíricos (ARRETCHE et al., 2019) ou de funções numéricas (JAIN e GIANTURCO, 1991) que dificultam a interpretação física do potencial espalhador. De todo modo, as seções de choque podem ser calculadas uma vez que todas estas interações são determinadas numericamente para o contexto da incidência de um elétron ou pósitron sobre um alvo atômico.

Depois da determinação teórica das seções de choque para o espalhamento de elétrons ou pósitrons por alvos atômicos, pode-se fazer a comparação com os resultados experimentais disponíveis na literatura. Esta comparação cumpre dois papéis: o de validar a abordagem teórica na escolha do modelo para a descrição

da interação de correlação e, também, o de verificar a razoabilidade dos resultados experimentais disponíveis. No caso do espalhamento de elétrons e pósitrons por átomos de gases nobres, há riqueza de estudos experimentais e teóricos prévios, o que permite explorar os conceitos envolvidos na construção do modelo de interação. Isto é, avaliar a precisão de modelos de interação de troca e de abordagens teóricas utilizadas na construção dos potenciais de correlação e de polarização. Para este fim, destacamos os resultados apresentados na revisão de CHIARI e ZECCA (2014), bem como os estudos de KUOKAWA et al. (2011) e SHIGEMURA et al. (2014).

Considerando o vasto conjunto de dados teóricos e experimentais voltados para a determinação das seções de choque para as colisões de elétrons e pósitrons com átomos de gases nobres, e também a dificuldade na determinação de uma interação de correlação que permita uma interpretação física desta interação, propomos uma construção conceitual da interação de correlação que permita a determinação teórica das seções de choque de espalhamento para baixas energias, e posterior comparação com os dados experimentais com o objetivo de validar o modelo de correlação proposto.

2. METODOLOGIA

Para a determinação das seções de choque de espalhamento, adotamos a metodologia padrão da expansão da função de onda de espalhamento em ondas parciais (MERZBACHER, 1997; BRANSDEN e JOACHAIN, 1992). Isto é, determina-se para um dado potencial espalhador as respectivas diferenças de fase, e estas diferenças de fase são utilizadas para a determinação das seções de choque de espalhamento. Sabendo que as diferenças de fase são relacionadas aos elementos da matriz K, adotamos um procedimento numérico iterativo especificamente construído para a determinação da matriz K para um dado potencial espalhador (HORACEK e SASAKAWA, 1983; RIBEIRO et al., 2001). O potencial espalhador é determinado como uma função local da partícula incidente, na aproximação que inclui os potenciais eletrostático, de polarização-correlação e, no caso do espalhamento de elétrons, o potencial de troca (aproximação SEP)

$$V(r) = V_s(r) + V_p(r) + V_t(r).$$

Caso o estudo seja de espalhamento de pósitrons, o potencial de troca é nulo e temos a interação dada na aproximação estático-polarização (SP).

Como os potenciais eletrostático, de troca e de polarização são determinados exatamente, e o potencial de correlação é a princípio desconhecido, propomos neste trabalho a elaboração de uma função de correlação baseada na interpolação linear de dois pontos em que esta função pode ser aproximadamente estimada. Estes pontos são o raio de Van der Waals e a coordenada nuclear do alvo atômico. Uma vez que o raio de Van der Waals é uma medida dos limites de um átomo, sugerimos que para coordenadas radiais da partícula incidente maiores que o raio de Van der Waals do átomo alvo, a interação de correlação-polarização pode ser satisfatoriamente aproximada pela função de polarização. Além disso, assumimos que a função de correlação é idêntica à função de polarização exatamente sobre o raio de Van der Waals, o que garante a continuidade do potencial de correlação-polarização e permite que a correlação seja determinada em função da polarizabilidade do alvo. Por outro lado, quando a partícula incidente ocupa a coordenada do núcleo do alvo atômico, a nuvem eletrônica do referido alvo se comporta como se o núcleo atômico possuísse uma

unidade de carga a mais (espalhamento de pósitrons) ou a menos (espalhamento de elétrons). Sendo assim, no caso do espalhamento de pósitrons a nuvem eletrônica do alvo tem energia idêntica à da nuvem eletrônica do próximo átomo da tabela periódica no estado ionizado. Por exemplo, para o espalhamento de pósitrons pelo átomo de He, a energia de correlação para quando o pósitron ocupa a coordenada do núcleo é igual à energia do átomo de Li monoionizado subtraída da energia do estado fundamental do átomo de He. Para o espalhamento de elétrons, um cálculo similar vai revelar que a energia de correlação na coordenada nuclear deve ser igual ao negativo da afinidade eletrônica do átomo anterior da tabela periódica. Isto é, para o espalhamento de elétrons por átomos de He, a energia de correlação para quando o elétron ocupa a coordenada nuclear deve ser igual à afinidade eletrônica do átomo de H multiplicada por -1.

Conhecendo estes dois valores da função de correlação para os átomos em estudo, isto é, o valor da função de correlação para o raio de Van der Waals e para a coordenada nuclear, unimos estes valores com uma função linear, por se tratar da aproximação mais simples possível. Outras metodologias para a interpolação destes pontos podem ser propostas futuramente.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Vale ressaltar que este trabalho se encontra em sua fase inicial, isto é, na etapa da determinação das energias de correlação para os átomos em estudo. Na tabela a seguir, apresentamos os valores da função de correlação determinadas nas duas coordenadas de interesse, bem como outros parâmetros importantes como o raio de Van der Waals (BATSANOV, 2001) e as polarizabilidades atômicas α (THAKKAR e LUPINETTI, 2006).

Tabela 1: Valores de interesse encontrados.

	$V_{\text{corr}}(0)$ elétrons (Ha)	$V_{\text{corr}}(0)$ pósitrons (Ha)	$V_{\text{corr}}(R_{\text{vdW}})$ (a_0)	R_{vdW} (a_0)	α (a_0^3)
He	-0,028	-4,376	-0,014	2,660	1,383
Ne	-0,125	-33,188	-0,018	2,921	2,661
Ar	-0,133	-72,647	-0,034	3,582	11,085

O conjunto de valores apresentados na Tabela 1 permite a determinação dos potenciais espalhadores para os átomos em estudo e a determinação das respectivas seções de choque. A validação do modelo que resulta nestas quantidades será feita a partir da comparação das seções de choque resultantes, ainda a serem determinadas, com os dados experimentais e de outras teorias disponíveis na literatura.

4. CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi proposto um novo modelo de correlação para o espalhamento de elétrons e pósitrons por átomos, baseado em simples regras de conservação de energia. Após a sua validação, este modelo pode ser estendido para o estudo de espalhamento por outros átomos relevantes (C, N, O), bem como para moléculas. O elemento mais importante deste modelo é a possibilidade de interpretar a interação de correlação de forma conceitualmente

simples, algo difícil de ser concretizado com os demais modelos de correlação geralmente empregados em estudos de espalhamento.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ARRETCHE, F.; BARP, M. V.; SCHEIDT, A.; SEIDEL, E. P.; TENFEN, W. Semiempirical models for low energy positron scattering by Ar, Kr and Xe. **J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.**, v.52, n.21, p.215-201, 2019.

ARRETCHE, F.; SEIDEL, E. P.; TENFEN, W. Scale transformations in model exchange potentials in low energy electron-atom scattering. **Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena**, v.274, p.147-460, 2024.

BATSANOV, S.S. Van der Waals Radii of Elements. **Inorganic Materials**. v.37, p.871-885, 2001.

BRANSDEN, B. H.; JOACHAIN, C. J. **Physics of atoms and molecules**. Harlow (GB) New York: Longman scientific & technical copublished in the United States with J. Wiley & sons, 1992.

CHIARI, L.; ZECCA, A. Recent positron-atom cross section measurements and calculations. **Eur. Phys. J. D**, v.68, n.10, p.297, 2014.

MERZBACHER, E. **Quantum Mechanics**. 3rd ed. Wiley, 1997.

HORÁČEK, J.; SASAKAWA, T. Method of continued fractions with application to atomic physics. **Phys. Rev. A**, v.28, n.4, p.2151-2156, 1983.

JAIN, A.; GIANTURCO, F. A. Low-energy positron collisions with CH₄ and SiH₄ molecules by using new positron polarization potentials. **J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.**, v. 24, n. 9, p. 2387-2398, 1991.

KUROKAWA, M. et al. High-resolution total-cross-section measurements for electron scattering from Ar, Kr, and Xe employing a threshold-photoelectron source. **Phys. Rev. A**, v.84, n.6, p.062-717, 2011.

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**, v.136, n.1-2, p.117-125, 2001.

SHIGEMURA, K. et al. Total cross sections for electron scattering from He and Ne at very low energies. **Phys. Rev. A**, v.89, n.2, p.022-709, 2014.

STONE, A. The Theory of Intermolecular Forces. **Oxford University Press**, 2013.

THAKKAR, A. J.; LUPINETTI, C. Atomic polarizabilities and hyperpolarizabilities: A critical compilation. In: **Atoms, Molecules and Clusters in Electric Fields**. Published by Imperial College Press and distributed by World Scientific Publishing Co., p.505-529, 2006.