

Efeitos de Correlação do Alvo em Espalhamento de Elétrons por Moléculas: Aplicações do Método de Ondas Distorcidas

Lee Mu-Tao[†], I.M.Brescansin^{}, F.B.C.Machado[‡], M.A.P.Lima[‡], L.E.Machado[†], e E.P.Leal[†]*

[†] UFSCar; ^{*} Unicamp; [‡] IEAv

O espalhamento inelástico de elétrons de baixa energia por moléculas apresenta várias aplicações importantes, tais como modelagem de atmosferas dos planetas, lasers a gás, litografia por plasma, etc. Recentemente, foram desenvolvidas algumas novas teorias para o cálculo das seções de choque deste espalhamento.¹⁻³ Estes métodos teóricos não impõem qualquer condição restritiva de ortogonalidade entre as funções de espalhamento e os orbitais moleculares. Comparando-se os cálculos realizados para a excitação $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$ do H_2 através destes métodos com os resultados obtidos pelo método "close-coupling" a dois estados,⁴ observa-se uma significativa discrepância entre os primeiros e este último. Tal discrepância tem sido atribuída a condições de ortogonalidade não físicas (ausência dos "termos de correlação") presentes no cálculo "close-coupling" a dois canais, desde que neste método impõe-se ortogonalidade entre os orbitais do contínuo e os orbitais moleculares $1\sigma_g$ e $1\sigma_u$ do H_2 . Por outro lado, quando a mesma comparação é feita com cálculos realizados pelo Método de Ondas Distorcidas^{5,6} (DW), que é, em princípio, uma aproximação mais simples do que o método "close-coupling", a concordância é muito melhor. Esta melhor concordância pode ser explicada pelo fato de que no cálculo DW os "termos de correlação" são parcialmente levados em conta, uma vez que o orbital do contínuo é feito ortogonal apenas ao orbital $1\sigma_g$.

Há alguns anos, foi constatado⁷ que o espalhamento inelástico de elétrons é sensível ao efeito de correlação do alvo. Especificamente no caso do átomo de Ne, o fator de espalhamento inelástico pode ser reduzido em até 25% pela inclusão deste efeito.

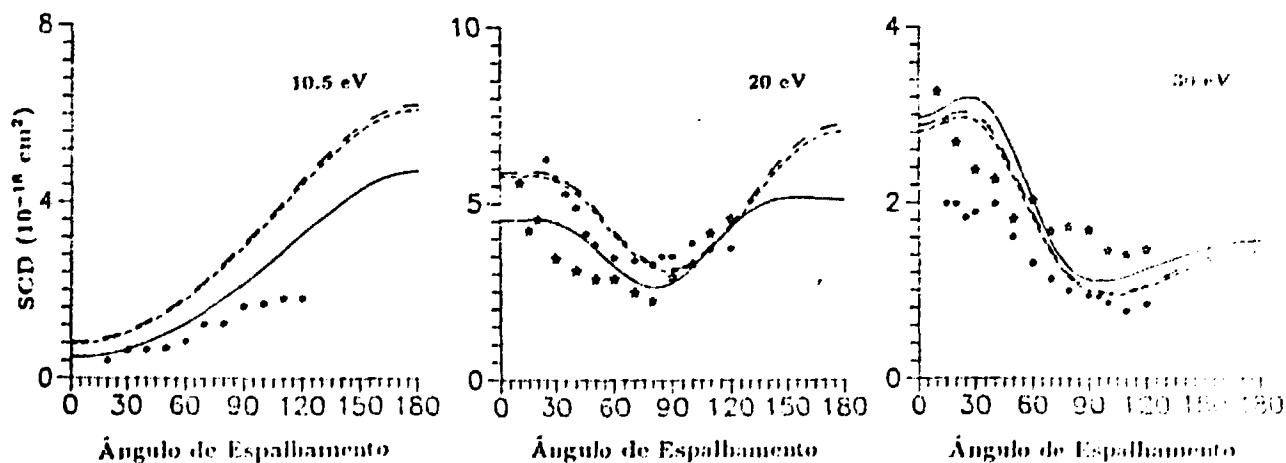
O nosso objetivo é estudar o efeito de correlação do alvo nas seções de choque do espalhamento inelástico de elétrons por H_2 . Particularmente, neste trabalho apresentamos os resultados do cálculo DW para a excitação $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$, levando em conta, primeiramente, apenas as configurações que correspondem às excitações simples do estado $b^3\Sigma_u^+$. As seções de choque de excitação para as energias do elétron incidente de 10.5, 20 e 30 eV são mostradas na figura abaixo, em comparação com outros dados teóricos e experimentais disponíveis.⁸⁻¹⁰

Os cálculos de seções de choque utilizando funções de onda de um CI completo, tanto para o

estado fundamental quanto para o estado excitado do alvo, estão em andamento.

- ¹ K.L.Baluja, C.J.Noble and J.Tennyson, *J.Phys.B* **18**, L851 (1985).
- ² B.I.Schneider and L.A.Collins, *J.Phys.B* **18**, L857 (1985).
- ³ M.A.P.Lima, T.L.Gibson, W.M.Huo, and V.McKoy, *J.Phys.B* **18**, L865 (1985).
- ⁴ S.Chung and C.C.Lin, *Phys.Rev.A* **17**, 1874 (1978).
- ⁵ A.W.Fliflet and V.McKoy, *Phys.Rev.A* **21**, 1863 (1980).
- ⁶ L.Mu-Tao, R.R.Lucchese, and V.McKoy, *Phys.Rev.A* **26**, 3240 (1982).
- ⁷ M.Naon, M.Cornille, and Y.Ki-Kim, *J.Phys.B* **8**, 864 (1975).
- ⁸ R.I.Hall and L.Andrić, *J.Phys.B* **17**, 3815 (1984).
- ⁹ H.Nishimura and A.Danjo, *J.Phys.Soc.Japan* **55**, 3031 (1986).
- ¹⁰ M.A.Khakoo, S.Trajmar, R.McAdams, and T.W. Shyn *Phys.Rev.A* **35**, 2832 (1987).

*** Trabalho parcialmente financiado pelo CNPq



Seções de choque diferenciais (SCD) para a excitação $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow b^3\Sigma_u^+$ da molécula de H_2 :
 — Ref. 3; - - - resultados DW; - . - . resultados DWCI; * * * * Ref. 10 e Ref. 8 para 10.5 eV;
 * * * * Ref. 9.