

Força do Oscilador Óptico: estudo comparativo com as seções de choque diferenciais para a excitação de moléculas por impacto de elétrons⁽¹⁾

Marcos A. Scopel⁽²⁾; Humberto L. Oliveira⁽²⁾; Adriana Marin⁽²⁾; Evelin P. Lambertes⁽³⁾

Resumo Expandido

⁽¹⁾ Trabalho executado com recursos do Edital 12/2012, da Pró-Reitoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação.

⁽²⁾ Professor; Instituto Federal de Santa Catarina; Araranguá - SC; scopel@ifsc.edu.br.

⁽²⁾ Professor; Instituto Federal de Santa Catarina; Araranguá - SC; humberto.oliveira@ifsc.edu.br.

⁽²⁾ Professor; Instituto Federal Catarinense; Rio do Sul - SC; adriana@ifc-riodosul.edu.br.

⁽³⁾ Estudante; Instituto Federal de Santa Catarina; Araranguá - SC; evelin.lambertes@gmail.com.

RESUMO: Neste trabalho realizamos uma breve revisão bibliográfica de resultados para a seção de choque diferencial (DCS) e para a força do oscilador generalizado (GOS) para a excitação eletrônica de moléculas por impacto de elétrons. Discutimos os resultados das DCS's para algumas excitações singletos das moléculas de CO, CO₂, OCS, N₂ e N₂O e GOS para excitações singletos das moléculas de N₂ e C (1s) do C₂N₂. Os resultados mostram a convergência da GOS para a força do oscilador óptico (OOS) na região de baixo momento transferido para as transições permitidas por dipolo elétrico. Nessa região, o espectro óptico da excitação eletrônica por fotoabsorção pode ser comparado com o espectro da excitação eletrônica por impacto de elétron.

Palavra Chave: excitação eletrônica, regras de seleção, força do oscilador generalizado.

INTRODUÇÃO

O estudo de colisões entre elétrons e moléculas é uma das linhas de pesquisa de maior investigação em física atômica e molecular e encontra diversas aplicações em áreas científicas e tecnológicas (COUSTENIS, 2009), (GUPTA, 2006), (PINDZOLA, 2005), (NISHIMURA, 2002) e (VARELLA, 2000). Por exemplo, no estudo de plasmas, meio gasoso onde existem moléculas neutras, íons e elétrons livres, torna-se fundamental o conhecimento da seção de choque de espalhamento de elétrons para o entendimento da dinâmica do plasma, ou seja, é necessário conhecer a eficiência de cada processo na colisão eletrônica. A excitação eletrônica tem ainda fundamental importância na compreensão de fenômenos relacionados com a química do meio interestelar, com a aurora boreal, com a composição de cometas e com a opacidade das estrelas.

A força do oscilador generalizado (GOS) e a força do oscilador óptico (OOS) são formas alternativas de se representar a seção de choque diferencial (DCS) para processos de excitação eletrônica por impacto de elétrons e por fotoabsorção, respectivamente. Conhecer a DCS na colisão elétron-molécula é fundamental para entendermos mais sobre a natureza da interação e quantificar a eficiência de cada possível processo na colisão.

A organização desse resumo é a seguinte: além da introdução já descrita acima, na seção Metodologia apresentamos um *outline* da teoria

apresentada. Na seção Resultados e Discussões mostramos e discutimos os resultados encontrados na literatura das DCS's para excitações singletos das moléculas de CO, OCS, CO₂, N₂ e N₂O e GOS para excitações singletos da molécula de N₂ e C₂N₂.

METODOLOGIA

Detalhes da teoria básica usada neste trabalho pode ser encontrada em Rocco (1998), Michelin (2009) e Kroin (2011). A $GOS(K)$ em Primeira Aproximação de Born (PAB), está diretamente relacionada com a seção de choque diferencial inelástica, para a excitação de um átomo ou molécula do estado fundamental o para um estado excitado n , pela expressão:

$$GOS = \frac{E_{on}}{2} \frac{|k_i|}{|k_f|} |K|^2 \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{on} \quad (1)$$

onde E_{on} é a energia de excitação (ROCCO, 1998) apud (INOKUTI, 1971).

Expandindo a equação acima em potências de K , vemos que $GOS \rightarrow OOS$ para $K \rightarrow 0$.

$$GOS = OOS + K f^{(1)} + K^2 f^{(2)} + \dots \quad (2)$$

Transições ópticamente permitidas e transições permitidas por dipolo elétrico.

Transições ópticamente permitidas são aquelas ocasionadas pela interação da radiação com a matéria, em outras palavras do fóton, com o alvo molecular. Uma vez que o fóton possui spin = 1 esse tipo de transição obedece a uma regra de seleção dada por:

Nenhuma transição ópticamente permitida ocorre a menos que

$$\Delta m = \pm 1 \text{ ou } 0 \text{ e } \Delta l = \pm 1 \quad (3)$$

Esse tipo de transição eletrônica gerada pelo fóton também é conhecido como transição permitida por dipolo elétrico (GRIFFITHS, 2011).

O espectro das transições ópticamente permitidas e o espectro das transições por colisão eletrônica

Acontece também que o espectro óptico é equivalente ao espectro das transições por impacto eletrônico no regime de baixo valor do momento transferido na colisão, condição que acontece para baixo ângulo de espalhamento e energia do elétron incidente muito maior que a energia de excitação E_{on} , veja a equação abaixo:

$$K^2 = k_1^2 + k_2^2 - 2 k_1 k_2 \cos \theta \quad (4)$$

Onde k_1 é o módulo do momento inicial do elétron incidente, k_2 o módulo do momento do elétron espalhado e K o módulo do momento transferido na colisão com a molécula. Facilmente percebemos na equação acima que $K \rightarrow 0$, quando $\theta \rightarrow 0$ e $k_2 \approx k_1$.

Transições ópticamente permitidas e as transições eletrônicas entre estados singletos

O fóton sendo um Bóson e tendo spin inteiro, não pode alterar a função de onda do spin do alvo. Se a função de onda do estado inicial do alvo for singlete, permanecerá como função de onda final também singlete.

Nas Fig. 1 e 2 mostramos as DCS's para a transições singletos: ($2\sigma \rightarrow 2\pi$) para o CO e ($1\sigma_g \rightarrow 1\pi_g$) para o N_2 , respectivamente.

Em seguida, nas Fig. 3 e 4 mostramos as DCS's para as transições singletos: ($2\sigma \rightarrow 2\pi$) e ($3\sigma \rightarrow 3\pi$) para o N_2O e O ($1s$)⁻¹ para o CO ($1\sigma \rightarrow 2\pi$), OCS ($2\sigma \rightarrow 2\pi$) e CO₂ ($1\sigma_g \rightarrow 1\pi_g$),

respectivamente. Na Fig. 5 mostramos a para a excitação $1s$ de elétrons ($1\sigma_g \rightarrow 1\pi_g$) e ($1\sigma_u \rightarrow 1\pi_g$) do N_2 . Finalmente na Fig. 6 mostramos a GOS como função de K^2 para a excitação ($1\sigma_g \rightarrow 1\pi_g$) para C ($1s$) do C_2N_2 para energia do elétron incidente em 1290 eV.

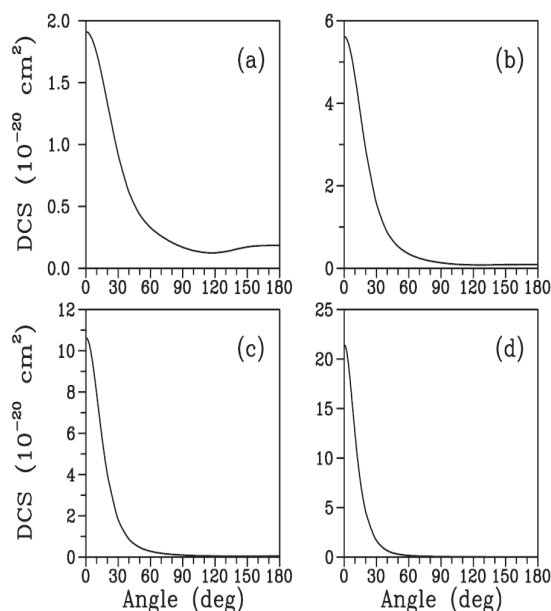


Fig. 1. DCS para a excitação do CO por impacto de elétron. Excitação singlete $2\sigma \rightarrow 2\pi$ em (a) 400 eV, (b) 500 eV, (c) 600 eV e (d) 800 eV. Para maiores detalhes ver Kroin (2011).

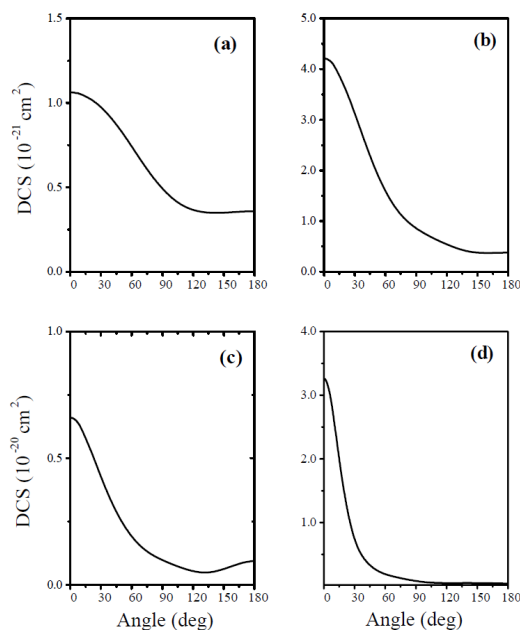


Fig. 2. DCS para a excitação do N_2 por impacto de elétron. Excitação singlete ($1\sigma_g \rightarrow 1\pi_g$) em (a) 418 eV; (b) 450 eV; (c) 500 eV e 800 eV. Para maiores detalhes ver Michelin (2003).

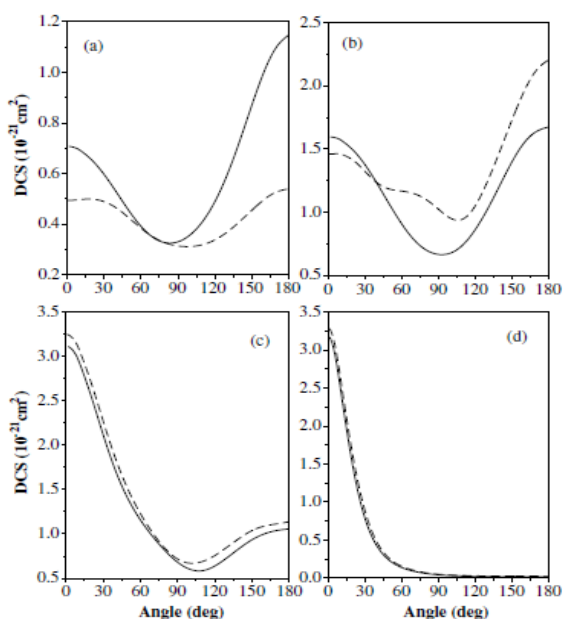


Fig. 3. DCS para excitação de N_2O por impacto de elétrons. Excitação singlete em (a) 420 eV, (b) 450 eV, (c) 500 eV e (d) 800 eV. Linha sólida transição $2\sigma \rightarrow 2\pi$; linha tracejada transição $3\sigma \rightarrow 3\pi$. Para maiores detalhes ver Michelin (2007).

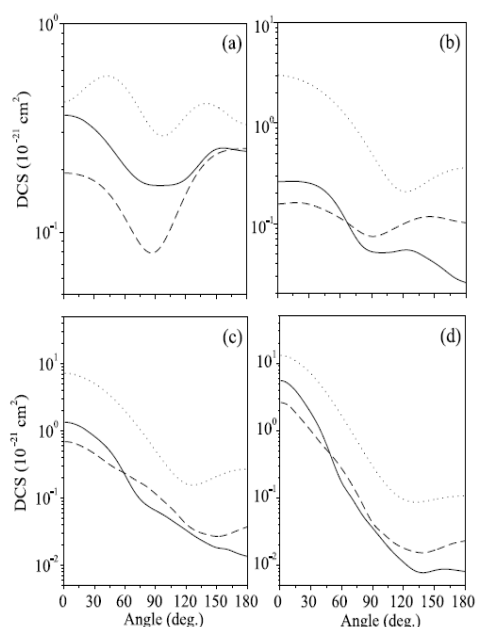


Fig. 4. DCS para a excitação singlete $O(1s)^{-1}$ para o CO , CO_2 e OCS para energia do elétron incidente em (a) 556 eV, (b) 600 eV, (c) 700 eV e (d) 900 eV. Linha sólida, resultados para OCS , tracejada para CO_2 e linha pontilhada para o CO . Para maiores detalhes ver Arretche (2008).

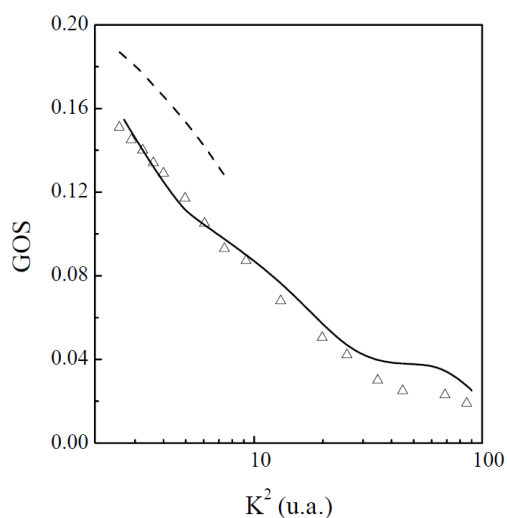


Fig. 5 GOS para a excitação singlete do N_2 por impacto de elétron. Excitação $1s$ de elétrons ($1\sigma_g \rightarrow 1\pi_g$) e ($1\sigma_u \rightarrow 1\pi_g$) para energia do elétron incidente de 1400 eV. Para maiores detalhes ver Michelin (2003).

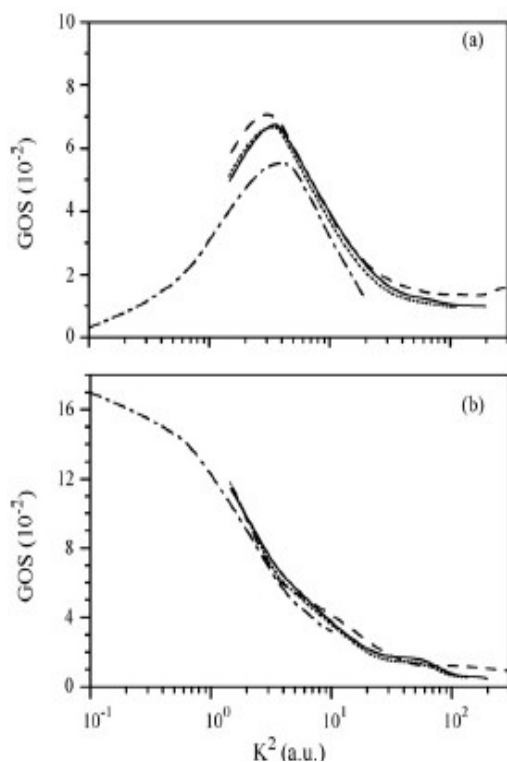


Fig. 6. GOS (a) para transições proibidas por dipolo e (b) para transições permitidas por dipolo para $C(1s)$ do C_2N_2 em 1290 eV. Para maiores detalhes ver Michelin (2009).

Nas Fig. 1, 2, 3 e 4, pode ser visto a diminuição em intensidade das DCS's com o aumento do ângulo de espalhamento. Esse comportamento era esperado, pois as excitações singletos devem predominar para regiões de baixo ângulo de espalhamento. Outro comportamento esperado para esse tipo de transição e que pode ser visto nessas figuras é o aumento da intensidade das DCS's com o respectivo aumento da energia do elétron incidente, pois a OOS deve predominar para baixos valores do momento transferido, condição que é favorecida com a elevação da energia do elétron incidente.

Nas Fig. 5 e 6 (b) como esperado, o GOS para as transições singletos decai com o aumento de K^2 , confirmando o predomínio da OOS em regiões baixo K para esse tipo de transição. De outra forma na Fig. 6 (a) para as transições ópticamente proibidas, transições do tipo tripleto, a GOS aumenta para regiões de baixo K, diminuindo a importância das transições dominadas pela OOS.

CONCLUSÕES

Transições ópticamente permitidas, transições eletrônicas entre estados singletos, predominam sob condições de baixo momento transferido pelo elétron incidente na colisão com o alvo molecular. Sob essa condição, o elétron incidente perturba pouco a nuvem eletrônica molecular dificultando efeitos de troca e transições proibidas por dipolo elétrico. Para essa região de baixo momento transferido os espectros ópticos e eletrônico se confundem e podem ser comparados.

AGRADECIMENTOS

M. A. S. e E. P. L agradecem ao IFSC e ao CNPq por suas bolsas de pesquisa.

REFERÊNCIAS

ARRETCHE, F. et al. Core-excitation processes of O (1s) in CO, CO₂ and OCS molecules by electron impact. **Journal of Physics: Conference Series**, **115**, 2008.

COUSTENIS, A. e HIRTZIG, M. Cassini-Huygens results on Titan's surface. **Res. Astron. Astrophys.** **9**, 249 (2009).

GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. Tradução de Lara Freitas. 2 ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.

GUPTA, M. e BALUJA, K. L. **Low energy elastic and inelastic scattering of electrons from SO₂ using R-matrix method**. *Phys. Rev. A* **73**, 042702, 2006.

INOKUTI, M. **Rev. Mod. Physics**, vol 43, 1971.

KROIN, T.; MICHELIN, S. E. e LEE, M. -T. A distorted-wave study for core-excitation processes in CO by electron impact. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, **34**, pp. 1829-1838, 2011.

PINDZOLA, M. S. et al. **Electron-impact excitation and ionization of H₂ using a configuration-average distorted wave method** *Phys. Rev. A* **72**, 012716, 2005.

MICHELIN, S. E. et al. Comparative study of electron-impact C (1s) core-excitation processes in C₂ and C₂N₂ molecules. **Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena**, **171**, 30-36, 2009.

MICHELIN, S. E. et al. Study of inner-shell excitations processes from N (1s) orbitals in N₂O molecules by electron impact. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, **40**, 2007.

MICHELIN, S. E. et al. Angle-resolved inner-shell excitation in N₂ molecules by electron impact. **Chemical Physics**, **293**, 2003.

NISHIMURA, T. e GIANTURCO, F. A. **Vibrational excitation of CH₄ by electron impact: a close-coupling treatment**. *J. Phys B* **35**, 2002.

ROCCO, M. L. M. et al. Excitação eletrônica das moléculas de metacrilato de metila e estireno na região do ultravioleta de vácuo. **Revista Química Nova**, **21**, 43-46, 1998.

VARELLA, M. T. N. O método multicanal de Schwinger aplicado ao espalhamento de elétrons I: Aspectos Formais. **Revista Physicae** **1**, 45, 2000.