

Investigação teórica e experimental do espalhamento elástico de elétrons por moléculas de acetona na região de energias intermediárias (30 – 800 eV)

Gabriel Errera de Oliveira Camargo^{1*}, Manoel Gustavo Petrucelli Homem²

1. Estudante de IC da Universidade Federal de São Carlos - UFSCar; *gabriel_errera@yahoo.com.br

2. Pesquisador do Departamento de Química, UFSCar, São Carlos/SP

Palavras Chave: Seção de choque, espalhamento de elétrons, acetona.

Introdução

O presente trabalho se insere dentro de uma linha de pesquisa mais ampla que está sendo desenvolvida pelo nosso grupo de pesquisa voltada para o estudo da dinâmica de interação de radiação ionizante com espécies moleculares^{1,2}. Sabe-se que quando radiação ionizante interage com a matéria um grande número de elétrons secundários de energias baixas e intermediárias é produzido. Esses elétrons secundários são de fato os responsáveis pelo transporte e termalização da energia depositada no meio pela radiação primária. Dentre os inúmeros mecanismos de interação elétron-molécula que podem ocorrer, o canal de espalhamento elástico é de particular interesse em vista de sua alta probabilidade de ocorrência (seção de choque). Nesse sentido, o estudo do canal de espalhamento elástico constitui o ponto de partida para o entendimento da dinâmica de interação elétron-molécula. Neste trabalho apresentamos um estudo experimental e teórico do espalhamento elástico para a molécula de acetona na região de energias intermediárias (30 – 800 eV). Especificamente, as seções de choque diferenciais elásticas absolutas (SCDEA) foram medidas em função do ângulo de espalhamento na faixa de 10 a 125°. Cálculos teóricos baseados no modelo de átomos independentes (MAI) também foram realizados para comparação.

Resultados e Discussão

Os dados experimentais de SCDEA foram obtidos com o espectrômetro disponível no Laboratório de Espalhamento de Elétrons do Departamento de Química da UFSCar. Essencialmente, as intensidades de elétrons espalhados em função do ângulo de espalhamento são medidas para uma energia fixa do elétron incidente usando-se a técnica de feixes cruzados. As intensidades medidas são convertidas em SCDEA usando-se a Técnica de Fluxo Relativo (TFR)^{3,4}. Os cálculos teóricos foram realizados usando o Modelo de Átomos Independentes (MAI) sendo que o potencial de interação elétron-molécula foi descrito dentro da aproximação estática, troca, polarização e absorção¹. Na Fig. 1 observam-se resultados obtidos para as energias de 100 e 500 eV. Não encontramos na literatura outros dados para comparação. Observa-se uma excelente concordância qualitativa entre os dados experimentais e os dados teóricos sendo que para a energia de 500 eV observa-se também concordância quantitativa. Esse resultado é esperado e está estabelecido na literatura que o MAI descreve bem o processo de espalhamento elástico para elétrons de altas energias. Entretanto, uma descrição teórica mais apropriada é necessária para descrever o processo de espalhamento para energias mais baixas. Nesse sentido os dados experimentais de SCDEA podem ser usados para validar metodologias mais sofisticadas. O conjunto completo de resultados obtidos na faixa de 30 a 800 eV será apresentado durante o evento.

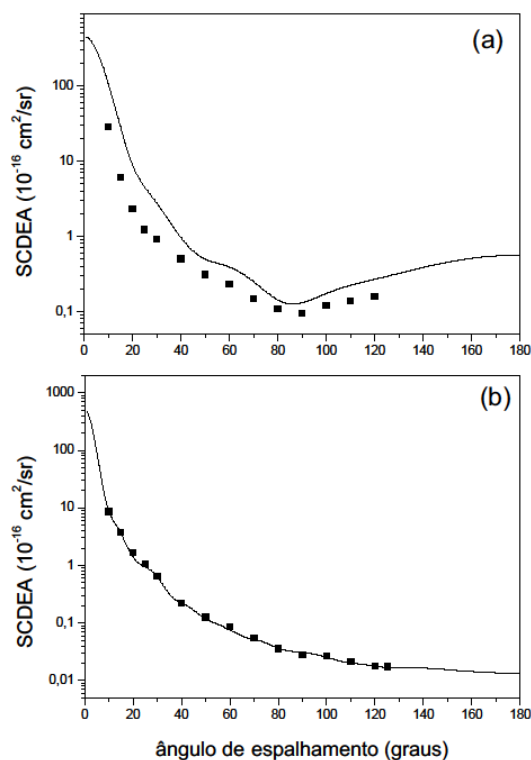


Figura 1. SDCEA para a molécula de acetona para elétrons incidentes de (a) 100 eV e (b) 500 eV. Os dados experimentais são comparados com cálculos teóricos obtidos através do MAI (linha sólida).

Conclusões

Dados experimentais inéditos de SCDEA para o espalhamento elástico de elétrons para a molécula de acetona foram obtidos na região de energias de 30 a 800 eV. Comparados com cálculos teóricos realizados dentro da aproximação MAI os dados experimentais mostram boa concordância qualitativa e quantitativa.

Agradecimentos

Trabalho financiado pelo CNPq e FAPESP. Gabriel E. de O. Camargo agradece ao CNPq pela concessão da bolsa de Iniciação Científica (PIBIC).

[1] M. G. P. Homem *et al.* Theoretical and experimental investigation of electron collisions with dimethyl sulfide. *Phys. Rev. A* **91**, 012713 (2015).

[2] M. G. P. Homem *et al.* Electron collisions with ammonia and formamide in the low- and intermediate-energy range. *Phys. Rev. A* **90**, 062704 (2014).

[3] S. K. Srivastava *et al.* Absolute elastic differential electron scattering cross sections in the intermediate energy region. *J. Chem. Phys.* **63**, 2659 (1975).

[4] M. G. P. Homem *et al.* Role of adsorption effects on absolute electron-molecule cross-section calibration using the relative flow technique. *Rev. Sci. Instrum.* **82** (1), 013109 (2011).