

Potenciais modelo para o cálculo de seções de choque de espalhamento de pósitrons de baixa energia em átomos e moléculas

L. A. Poveda^{1*}, D. Assafrão², J. Pinheiro², J. R. Mohallem³

¹Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil

²Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, ES, Brazil

³Universidade Federal de Minas Gerais, 30123-970 Belo Horizonte, MG, Brasil

*email: poveda.calvino@gmail.com

Nesta palestra serão apresentadas ideias fundamentais sobre os trabalhos desenvolvidos no Laboratório de Átomos e Moléculas Especiais (LAAtME) relacionados ao estudo teórico da interação de pósitrons de baixa energia com átomos e moléculas. Esta linha de pesquisa tem como objetivo estabelecer uma metodologia baseada na Correção de Massa Nuclear Finita (FNMC) [1], para a obtenção de potenciais de interação pósitron-alvo, com aplicações no cálculo de seções de choque de espalhamento [2,3,4,5,6]. A FNMC, através de um hamiltoniano eletrônico modelo, permite a inclusão de correções adiabáticas devido à massa finita dos núcleos, em cálculos de estrutura eletrônica. Desta forma, em vez de um “elétron positivo” (desprezando o spin), o pósitron é tratado como “núcleo leve”, cujas posições fixas no espaço afetam, adiabaticamente, a nuvem eletrônica do alvo. Esta “visão química” da interação de um pósitron de baixa energia com alvos atômicos e moleculares, sustentada por evidências teóricas e experimentais de estados ligados pósitron-alvo [7,8], tem se mostrado apropriada para a descrição correta das seções de choque de espalhamento para energias abaixo do limiar de formação de positrônio. Nossa metodologia tem sido aplicada, com bons resultados, no cálculo de seções de choque elásticas para diferentes alvos como gases nobres [2,3], metais alcalinos [2,4] e moléculas diatômicas homonucleares [5,6]. Para os alvos moleculares, obtemos também as seções de choque de excitação vibracional e rotacional, em boa concordância com resultados teóricos e experimentais.

Referências

1. José R. Mohallem. *J. Mol. Struct. (Theochem)* **709**, 11 (2004).
2. Denise Assafrão, H. R. J. Walters, Felipe Arretche, Adriano Dutra and J. R. Mohallem. *Phys. Rev. A* **84**, 022713 (2011).
3. Luis A. Poveda, Adriano Dutra, Denise Assafrão and José R. Mohallem. *Phys. Rev. A* **87**, 052702 (2013).
4. Luis A. Poveda, Denise Assafrão and José R. Mohallem. *Eur. Phys. J. D* **70**, 152 (2016).
5. Luis A. Poveda, Denise Assafrão, Jenifer G. Pinheiro and José R. Mohallem. *Phys. Rev. A* **100**, 062706 (2019).
6. Jenifer G. Pinheiro, Denise Assafrão, Luis A. Poveda and José R. Mohallem. (Enviado a *Phys. Rev. A*).
7. C. M. Surko, G. F. Gribakin and S. J. Buckman. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38**, R57 (2005).
8. Paulo H. R. Amaral and José R. Mohallem. *Phys. Rev. A* **86**, 042708 (2012).