

UFAM – UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA PARA RECURSOS AMAZÔNICOS

“Investigação Teórica do Espalhamento de Elétrons pela Molécula de Pirimidina
(C₄H₄N₂)”

AURELIO IZUKA ZANELATO

ITACOATIARA
2014

**UFAM – UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA PARA RECURSOS AMAZÔNICOS**

“Investigação Teórica do Espalhamento de Elétrons pela Molécula de Pirimidina
(C₄H₄N₂)”

AURELIO IZUKA ZANELATO

Dissertação de Mestrado do Programa de
Pós Graduação em Ciência e Tecnologia
para Recursos Amazônicos

Orientador: Prof. Dr. Gabriel Luiz Cruz de Souza

ITACOATIARA
2014

Ficha Catalográfica

(Catalogação realizada pela Biblioteca ICET da UFAM)

Zanelato, Aurélio Izuka

Z28i

Investigação teórica do espalhamento de elétrons pela molécula de pirimidina (C₄H₄N₂)./ Aurélio Izuka Zanelato. – Itacoatiara-AM, 2014.

54f.; il.

Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia para recursos da Amazônicos) – Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia - Universidade Federal do Amazonas.

Orientador: Prof. Dr. Gabriel Luiz Cruz de Souza.

1.Pirimidina 2. Espalhamento (física) 3. Elétrons - espalhamento
I. SOUZA, Gabriel Luiz Cruz (Orient.) II. Universidade Federal do Amazonas II. Título

CDU 539.1 (043)

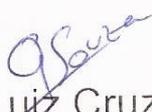
AURELIO IZUKA ZANELATO

Investigação Teórica do Espalhamento de
Elétrons pela Molécula de Pirimidina ($C_4H_4N_2$)

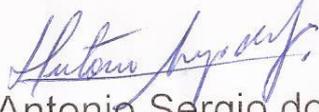
Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia para Recursos Amazônicos da Universidade Federal do Amazonas, como parte do requisito para obtenção do título de Mestre em Ciência e Tecnologia para Recursos Amazônicos, área de concentração Desenvolvimento Científico e Tecnológico em Recursos Amazônicos.

Aprovado em 13 de março de 2014.

BANCA EXAMINADORA


Dr. Gabriel Luiz Cruz de Souza, Presidente
Universidade Federal do Amazonas


Dr. Luiz Eugenio Machado, Membro
Universidade Federal de São Carlos


Dr. Antonio Sergio dos Santos, Membro
Universidade Federal de São Carlos

A minha família:
esposa, pais e irmãos.

AGRADECIMENTOS:

- Ao meu orientador prof. Dr. Gabriel Luiz Cruz de Souza pela orientação e pela confiança.
- A minha esposa Bruna pela compreensão e apoio em todos os momentos.
- Aos meus pais Alceu e Eliana por todos os ensinamentos que me passaram até hoje.
- Aos meus irmãos Alex e Augusto pelo apoio e por serem meus exemplos de vida.
- Aos professores do ICET que me ajudaram de alguma forma no desenvolvimento desse trabalho.

Resumo

Nos últimos anos, diversos trabalhos com materiais biológicos associaram os elétrons de baixa energia como um dos principais causadores de danos celulares, promovendo lesões citotóxicas, mutagênicas e cancerígenas, ao transferir energia à matéria através de vários processos. Para se ter uma compreensão mais quantitativa dos processos induzidos nas células pelas radiações, necessita-se de informações sobre as seções de choque da interação de elétrons com as moléculas constituintes do tecido biológico. No entanto, ainda existe uma grande lacuna de conhecimento entre o que ocorre efetivamente a partir da irradiação primária à série de eventos secundários responsáveis pelos danos celulares. Consequentemente, não existe uma relação quantitativa bem estabelecida entre a dose absorvida e os danos provocados nos materiais ou tecidos biológicos. E é com a motivação de tentar auxiliar no preenchimento dessa lacuna que o presente trabalho foi realizado. No presente trabalho, foram obtidas, através de cálculos teóricos, as seções de choque do espalhamento de elétrons por uma molécula de grande importância biológica: a Pirimidina ($C_4H_4N_2$). Os parâmetros de interesse obtidos neste trabalho foram as seções de choque diferenciais elásticas (SCD), seções de choque integrais elásticas (SCI), seções de choque totais (SCT) e seções de choque de absorção total (SCAT). As seções de choque foram obtidas em uma faixa de energia que se inicia em 1 eV e se estende até 500 eV, em relação ao elétron incidente. Os resultados obtidos foram comparados com outros conjuntos de dados disponíveis na literatura. Os cálculos teóricos dos parâmetros de interesse deste trabalho foram efetuados a partir da utilização do pacote computacional denominado EPolyScatD, utilizando-se da infraestrutura disponível no Laboratório de Espalhamento de Elétrons, do Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia, da Universidade Federal do Amazonas (ICET-UFAM), situado na cidade de Itacoatiara, estado do Amazonas.

Abstract

Recently, several studies involving biological materials have associated the low energies electrons as one of the main responsible for causing cell damage through a great variety of processes. Having the knowledge on the whole path of the processes include obtaining the electron-(bio-molecules) interaction cross sections. However, up to date, there is not complete understanding of the whole situation. The goal of the present work was to provide additional information on these studies. In this work, we report a theoretical investigation on electron-molecule scattering for a important biological compound: Pyrimidine ($C_4H_4N_2$). Differential cross sections (DCS), integral cross sections (ICS), total cross sections, and total absorption cross sections were obtained at the intermediate energy range (1-500 eV). Our calculated results were compared with experimental results and other theoretical results available in the literature. All the computational studies were performed using the EPolyScatD code at the “Laboratório de Espalhamento de Elétrons - Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia, Universidade Federal do Amazonas (ICET-UFAM)”, located in Itacoatiara, Amazonas.

Lista de Figuras

Figura 1.1- Representação esquemática da fórmula estrutural da molécula de Pirimidina.....	14
Figura 2.1- Representação esquemática de um típico experimento de colisão.....	16
Figura 2.2- Representação do ângulo $\delta\theta$ e da área dA	23

Lista de Gráficos

Gráfico 5.1 – SCD para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$ para: (a) 3 eV e (b) 6 eV.....	39
Gráfico 5.2 - SCD para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$ para: (a) 10 eV e (b) 15 eV.....	40
Gráfico 5.3 - SCD para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$ para: (a) 20 eV e (b) 50 eV.....	42
Gráfico 5.4 - SCD para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$ para: (a) 100 eV e (b) 300 eV.....	43
Gráfico 5.5 – SCI para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$	45
Gráfico 5.6 – (a) SCT e (b) SCAT para o espalhamento e^- - $C_4H_4N_2$	47

Lista de Tabelas

Tabela 2.1: Canais de espalhamento inelástico	18
Tabela 5.1: Dados da molécula de pirimidina	38

Lista de Termos e Abreviações

SCD	Seção de Choque Diferencial
SCI	Seção de Choque Integral
SCT	Seção de Choque Total
SCAT	Seção de Choque de Absorção Total
FEG	Free-Electron-Gas
SQFSM	Scaled-Quasi-Free-Scattering-Model
HF	Hartree Fock
NIST	National Institute of Standards and Technology
SMC	Schwinger Multi-Canal
MAI-RA	Modelo dos Átomos Independentes corrigido pela Regra da Aditividade

Sumário

1. INTRODUÇÃO	13
2. TEORIA DE COLISÕES QUÂNTICA	16
2.1 Considerações Iniciais	16
2.2 Definição de Seção de Choque	18
2.3 Função de Onda de Espalhamento	19
2.4 Seções de Choque	21
2.5 Equação de Lippmann-Schwinger	25
3. COLISÃO ELÉTRON-MOLÉCULA	28
3.1 Canais Acoplados	28
3.2 Expansão em Estados Acoplados	28
3.3 Potencial Óptico	29
3.3.1 Potencial Estático	30
3.3.2 Potencial de Troca	30
3.3.3 Potencial de Correlação-Polarização	31
3.3.4 Potencial de Absorção	32
4. MÉTODO DE CÁLCULO EPolyScatD	34
4.1 O EPolyScatD	34
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	38
5.1 Propriedades Moleculares da Pirimidina	38
5.1.1 Seções de Choque Diferenciais Elásticas (SCD)	39

5.1.2	Seções de Choque Integrais Elásticas (SCI)	45
5.1.3	Seções de Choque Total (SCT) e de Absorção Total (SCAT)	47
6.	CONCLUSÃO	49
	REFERÊNCIAS	50

1-INTRODUÇÃO

As interações de elétrons com átomos ou moléculas têm sido muito estudadas ao longo das últimas décadas. O interesse recente, em relação a esse tipo de interação, que é de muita relevância nas áreas acadêmica ^[1-3], industrial/tecnológica ^[4] e ambiental ^[5], tem aumentado significativamente nos últimos anos, devido principalmente à sua importância no entendimento de muitos processos físicos e químicos inicializados por colisões dessa natureza. As principais grandezas referidas a um experimento de colisões são as seções de choque.

Sabe-se que as seções de choque são extremamente importantes para a elucidação quantitativa de mecanismos envolvidos em reações químicas ^[6-8], na dinâmica de interação do plasma ^[9,10], nos processos químicos que ocorrem na atmosfera e são provenientes da interação de elétrons com moléculas produzidas a partir da utilização de fontes de energias renováveis, como os álcoois e o biodiesel ^[11]. Ademais, existe interesse considerável em torno das seções de choque por parte da área de Física Atômica e Molecular, a qual se preocupa com, dentre outros objetivos, o estudo dos fenômenos finos envolvidos em um processo de colisão ^[12,13]. Seções de choque podem ser muito úteis, também, para as indústrias eletrônicas de semicondutores ^[14], na elucidação de alguns mecanismos de fenômenos astrofísicos ^[15] e no entendimento do mecanismo de interação de algumas espécies químicas com o corpo humano ^[16-20].

Na medicina moderna, as radiações ionizantes são muito utilizadas, seja em exames de radiodiagnósticos ou em tratamentos de radioterapia. A energia depositada na matéria condensada, através dessas radiações, pode levar a produção de elétrons de baixa energia (denominados de elétrons secundários) que podem ocasionar sérios problemas ao ácido desoxirribonucleico (DNA) e ao ácido ribonucleico (RNA). Portanto, entender os processos físicos e químicos responsáveis pelos danos causados à essas espécies, através do estudo do impacto de elétrons em seus componentes é de extrema importância ^[20].

Nos últimos anos, diversos trabalhos com materiais biológicos ^[21-25] associaram os elétrons secundários como um dos principais causadores de danos celulares, promovendo lesões citotóxicas, mutagênicas e cancerígenas, ao transferir energia à matéria através de vários processos. Esses elétrons de baixas energias iniciam uma cadeia de eventos formando radicais neutros ou iônicos na escala de femtosegundos. Essas espécies, que são muito reativas, atacam as moléculas próximas, formando novas espécies e, conseqüentemente, provocando modificações celulares. Os processos radiológicos nas células dependem da interação de elétrons com segmentos menores de macromoléculas biológicas, proteínas, DNA e RNA. Portanto, na busca de uma compreensão mais quantitativa dos processos induzidos nas células pelas radiações ionizantes, necessita-se de informações sobre as seções de choque. No entanto, conforme relatado por Sanche ^[21], existe uma grande lacuna de conhecimento entre o que ocorre efetivamente a partir da irradiação primária à série de eventos secundários responsáveis pelos danos celulares. Conseqüentemente, não existe uma relação quantitativa bem estabelecida entre a dose absorvida e os danos provocados nos materiais ou tecidos biológicos ^[26]. E é com a motivação de tentar auxiliar no preenchimento dessa lacuna que o presente trabalho foi realizado.

No presente trabalho, foram obtidas, através de cálculos teóricos, as seções de choque do espalhamento de elétrons por uma molécula de grande importância biológica: a Pirimidina ($C_4H_4N_2$). Na Figura 1.1, pode-se ver a fórmula estrutural da Pirimidina. Essa molécula foi escolhida devido a sua importância biológica, visto que ela é parte constituinte do DNA/RNA, os quais armazenam toda a informação genética de um organismo e transmitem aos descendentes. Portanto, é extremamente relevante se estudar os processos físicos que levam a Pirimidina a sofrer modificações em sua estrutura, bem como utilizar desse conhecimento para prospectar maneiras de se proporcionar a manutenção do DNA/RNA e/ou recuperação da sua integridade estrutural e, por consequência, funcional.

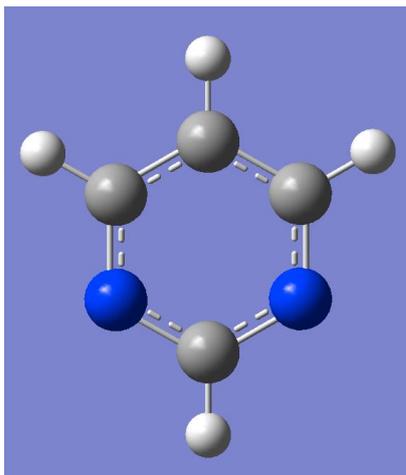


Figura 1.1: Representação esquemática da fórmula estrutural da molécula de Pirimidina.

Os parâmetros de interesse obtidos neste trabalho foram as seções de choque diferenciais elásticas (SCD), seções de choque integrais elásticas (SCI), seções de choque totais (SCT) e seções de choque de absorção total (SCAT). As seções de choque foram obtidas em uma faixa de energia que se inicia em 1 eV e se estende até 500 eV, em relação ao elétron incidente.

Os cálculos teóricos dos parâmetros de interesse deste trabalho foram efetuados a partir da utilização do pacote computacional denominado EPolyScatD, desenvolvido originalmente por Lucchese *et al.* ^[27] e, recentemente, modificado de Souza *et al.* ^[28] e por Lee *et al.* ^[11]. Os cálculos teóricos foram realizados no Laboratório de Espalhamento de Elétrons, do Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia, da Universidade Federal do Amazonas (ICET-UFAM), situado na cidade de Itacoatiara, estado do Amazonas.

2-TEORIA DE COLISÕES QUÂNTICAS

As interações decorrentes da colisão entre um elétron e uma molécula necessitam ser estudadas utilizando-se da mecânica quântica. Nesse capítulo será apresentada uma descrição simples dos processos de colisões quânticas.

2.1 - CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Na Figura 2.1, é apresentado um esboço esquemático de um típico experimento de colisão.

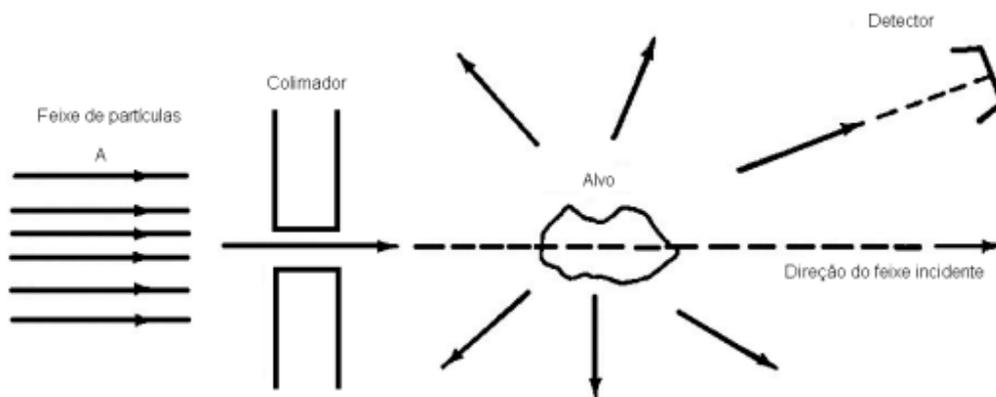


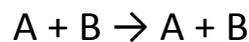
Figura 2.1: Representação esquemática de um típico experimento de colisão.

Na representação mostrada na Figura 2.1, um feixe de partículas A (elétrons), praticamente mono energético, é colimado e incidido sobre o alvo (molécula). A intensidade do feixe deve ser determinada de tal forma para que não ocorram interações entre as partículas produzidas pelo feixe, mas que permita que sejam detectados um número razoável de elétrons espalhados. As partículas incidentes interagem com o alvo e são espalhadas em um ângulo θ em relação a direção do feixe incidente. As partículas espalhadas são coletadas por um detector. O alvo é formado por um grande número de espalhadores, porém considera-se a ocorrência de colisão entre um elétron incidente e um centro espalhador do alvo de cada vez.

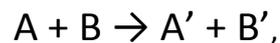
Após ocorrer a colisão, alguns ou todos os elétrons são espalhados, podendo estes serem provenientes do feixe incidente ou pertencente ao alvo. Os elétrons espalhados são registrados por detectores localizados a distâncias macroscópicas do alvo.

Durante a interação entre o elétron incidente, com uma energia inicial E_0 , e o alvo molecular ou atômico, vários processos podem ocorrer, tais como:

- **Espalhamento Elástico:** Quando duas partículas A e B sofrem colisão e são espalhadas sem nenhuma alteração de suas estruturas internas.

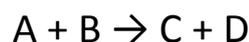


- **Espalhamento Inelástico:** Quando duas partículas A e B sofrem mudanças em seus estados quânticos internos devido ao processo de colisão.

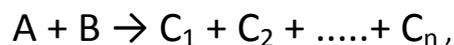


onde A' e B' são novos estados internos de A e B, respectivamente.

- **Reações:** Quando o sistema composto por A + B reage para formar duas ou mais espécies quimicamente diferentes das iniciais.

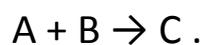


ou



para $n > 2$.

- **Captura:** Quando o sistema inicial A + B fica, temporária ou permanentemente, reduzido a um componente.



- **Canais:** Um canal é descrito como um determinado modo de interação de um sistema composto por A + B durante a colisão. É caracterizado pela natureza das partículas que o sistema (A + B) apresenta após a colisão.

Na interação de apenas um par (elétron + alvo), é possível obter a ocorrência simultânea de vários tipos de canais de espalhamento. Na Tabela 2.1, estão exemplificados os canais possíveis de ocorrer, analisando apenas o processo de espalhamento inelástico.

Estado Inicial		Estado Final	Canais Possíveis
$e^- + A$	\rightarrow	$e^{-*} + A^*$	Excitações Vibracionais, Rotacionais e Eletrônicas.

Tabela 2.1: Canais de espalhamento inelástico.

Na Tabela 2.1, é possível observar os vários canais de espalhamento existentes, levando-se em conta apenas os processos de excitação molecular por impacto de elétrons. Para o estudo completo do sistema (elétron-molécula), seria necessário considerar todos os canais individuais simultaneamente, o que seria praticamente impossível, seja no âmbito experimental ou teórico. Porém, o que pode-se fazer é estudar apenas os canais mais relevantes dos processos, ou seja, os que podem representar o fenômeno global.

2.2 - DEFINIÇÃO DE SEÇÃO DE CHOQUE

Segundo Joachain (1975) ^[29], a seção de choque em um processo de colisão pode ser definida como sendo a "razão entre o número de eventos observados por fluxo de partículas incidentes, por unidade de tempo e por número de centros espalhadores". Dessa forma, podemos representar a seção de choque total elástica, por exemplo, da seguinte forma:

$$\sigma_{tot}^{elás} = \frac{N^{elás}}{\phi_A \eta_B}, \quad [2.1]$$

onde $\sigma_{tot}^{elás}$ é a seção de choque total elástica, $N^{elás}$ é o numero de partículas que foram espalhadas elasticamente por unidade de tempo, ϕ_A é o fluxo de partículas incidentes A sobre o alvo B e η_B é o numero de espalhadores B .

Pode-se definir a seção de choque diferencial (SCD) caso as partículas observadas estiverem associadas a um elemento de ângulo sólido, $d\Omega$, em uma direção $\Omega(\theta, \phi)$, como sendo:

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{dN_A}{\eta_B \phi_A d\Omega} \quad [2.2]$$

onde $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ é a seção de choque diferencial, dN é o numero de eventos registrados por unidade de tempo, Φ_A é o fluxo de partículas incidentes A sobre o alvo B e n_B é o numero de espalhadores B .

2.3 - FUNÇÃO DE ONDA DE ESPALHAMENTO

Para simplificar a situação, em que teríamos que considerar a interação do elétron com cada átomo da molécula alvo, e isso seria impossível, vamos considerar o problema de espalhamento elétron-molécula reduzido ao problema de espalhamento de um elétron por um campo de potencial $V(r)$ de curto alcance, esfericamente simétrico e centrado na origem das coordenadas. Podemos escrever a equação de Schrödinger não relativística da seguinte forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{d\Psi}{dt} (\vec{r}, t). \quad [2.3]$$

Através de uma operação matemática simples, conhecida como separação de variáveis, podemos obter a partir da equação 2.3, a equação de Schrödinger não relativística e independente do tempo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] F(\vec{r}) = EF(\vec{r}). \quad [2.4]$$

Assumindo que o potencial é real, e definindo que \vec{k}_i e \vec{k}_f são os momentos inicial e final, respectivamente, da partícula incidente, e sabendo que $k = |\vec{k}_i| = |\vec{k}_f|$ e que $E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m}$, podemos reescrever a equação 2.4, em unidades atômicas, como:

$$[\nabla^2 + k^2 - U(r)]F(\vec{r}) = 0, \quad [2.5]$$

onde $U(r)$ é denominado de potencial reduzido e está relacionado com $V(r)$ da seguinte forma: $U(r) = 2V(r)$. Portanto, a equação 2.5 descreve a dinâmica do elétron sob a influência de um campo de potencial.

A equação 2.5 é uma equação diferencial não homogênea, portanto a solução para $F(\vec{r})$ é do tipo:

$$F(\vec{r}) = \phi^0(\vec{r}) + \phi(\vec{r}), \quad [2.6]$$

onde $\phi^0(\vec{r})$ e $\phi(\vec{r})$ são as soluções das partes homogênea e não homogênea, respectivamente, da equação 2.5.

A solução da parte homogênea é dada por:

$$\phi_{\vec{k}_i}^0(\vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \quad [2.7]$$

Na região de $V(r) = 0$, o elétron incidente descreve um comportamento semelhante ao de uma onda sem perturbação, ou seja, uma onda plana que é descrita na equação 2.7, a qual se propaga na direção do vetor de onda \vec{k}_i .

Quando o potencial $V(r)$ não é nulo, a função de onda $F(\vec{r})$ sofre um desvio em relação à função não perturbada $\phi_{\vec{k}_i}^0(\vec{r})$. Dessa forma, é necessário se encontrar a solução da parte não homogênea da equação 2.5.

Podemos encontrar a solução da parte não homogênea da equação 2.5 a partir das condições de contorno do sistema. Assim, podemos escrever a solução da seguinte forma:

$$\phi(\vec{r}) = C \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta, \varphi) \quad [2.8]$$

onde $f(\theta, \varphi)$ é a amplitude de espalhamento correspondente ao espalhamento na direção definida pelos ângulos θ e φ , e C é uma constante de normalização independente de r .

Quando substituimos as soluções encontradas anteriormente para a parte homogênea e não homogênea, da equação de espalhamento, podemos reescrever a equação 2.6 da seguinte forma:

$$F(\vec{r})_{r \rightarrow \infty} \rightarrow A[e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + \frac{1}{r} e^{ikr} f(\theta, \varphi)], \quad [2.9]$$

onde A é uma constante independente de r . A equação acima é uma solução assintótica, para se obter $F(\vec{r})$ da equação 2.5 e essa solução descreve muito bem as interações físicas envolvidas no problema descrito, do espalhamento de elétrons por um campo de potencial.

2.4 - SEÇÕES DE CHOQUE

De acordo com Joachain (1975) ^[29], podemos definir “fluxo” utilizando-se da densidade de corrente associada à equação de Schrödinger independente do tempo (equação 2.4), como sendo:

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2m} [\Psi^* \vec{\nabla} \Psi - \Psi \vec{\nabla} \Psi^*], \quad [2.10]$$

onde o fluxo total é composto por três componentes:

$$\vec{j} = \vec{j}_{inc} + \vec{j}_{esp} + \vec{j}_{int}. \quad [2.11]$$

Na equação acima, \vec{j}_{inc} é o fluxo incidente, \vec{j}_{esp} é o fluxo espalhado e \vec{j}_{int} corresponde ao fluxo de interferência.

Sabendo que $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ e que $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, portanto $\hbar k = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = p = mv$ e, utilizando-se da equação 2.9, podemos obter o fluxo de partículas incidentes (\vec{J}_{inc}) na direção r , que atravessam uma área $d\vec{s}$ em direção determinada por θ e φ :

$$\vec{J}_{inc, \vec{r}} = Re(A^* Av). \quad [2.12]$$

Podemos também obter o fluxo de partículas espalhadas ($\vec{J}_{esp, \vec{r}}$):

$$\vec{J}_{esp, \vec{r}} = Re(A^* Av |f(\theta, \varphi)|^2 \frac{1}{r^2}), \quad [2.13]$$

onde A e A^* são, respectivamente, uma constante de normalização e seu complexo conjugado.

É possível obter o número de partículas espalhadas (N_{esp}), a partir da equação 2.13:

$$N_{esp} = Re(A^* Av |f(\theta, \varphi)|^2) d\Omega. \quad [2.14]$$

Dividindo o número de partículas espalhadas por unidade de tempo, (N_{esp}), pelo fluxo de partículas incidentes, por unidade de tempo, é possível obter a seção de choque diferencial (SCD):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2. \quad [2.15]$$

A seção de choque integral (SCI) é obtida com a integração da seção de choque diferencial, descrita acima, sobre todos os ângulos de espalhamento:

$$\sigma = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin\theta |f(\theta, \varphi)|^2. \quad [2.16]$$

No problema de espalhamento de elétrons por um campo de potencial, para qualquer $\theta \neq 0$, o fluxo de interferência é nulo ($\vec{J}_{int,\hat{r}} = 0$). Dessa forma, é necessário estudar o fluxo de interferência apenas para o caso de $\theta = 0$.

Para o estudo descrito acima vamos considerar a figura abaixo ^[29]:

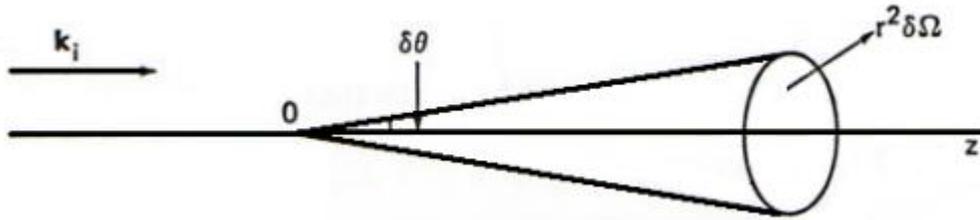


Figura 2.2: Representação do ângulo $\delta\theta$ e da área dA .

Tomemos a expressão do termo do fluxo de interferência radial:

$$\vec{J}_{int,\hat{r}} = A^*A \frac{\hbar k}{m} \left[f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr(1-\cos\theta)}}{r} + f^*(\theta, \varphi) \frac{e^{-ikr(1-\cos\theta)}}{r} \right]. \quad [2.17]$$

Integrando a equação 2.17 sobre uma região angular $\delta\theta$ muito próximo de $\theta = 0$, podemos obter:

$$\vec{J}_{int,\hat{r}} = -4\pi A^*A \frac{\hbar}{m} \text{Im} f(\theta = 0). \quad [2.18]$$

E sabendo que,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0, \quad [2.19]$$

Implicará na seguinte relação:

$$\nabla \vec{j} = \nabla \vec{j}_{inc} + \nabla \vec{j}_{esp} + \nabla \vec{j}_{int} = 0 \quad [2.20]$$

Ou então,

$$r^2 \int \vec{j}_{int, \hat{r}} d\Omega + r^2 \int \vec{j}_{esp, \hat{r}} d\Omega + r^2 \int \vec{j}_{inc, \hat{r}} d\Omega = 0 \quad [2.21]$$

Lembrando que o fluxo incidente para $\theta \neq 0$ é nulo, e ainda utilizando-se da equação 2.15, podemos obter a seguinte expressão:

$$k \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = 4\pi \operatorname{Im} f(\theta = 0), \quad .22]$$

Reescrevendo a expressão acima, obtemos que:

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_{el}(\theta = 0), \quad [2.23]$$

onde $f_{el}(\theta = 0)$ é a amplitude de espalhamento elástico para $\theta = 0$.

A equação 2.23 é denominada *teorema ótico* ^[30], ou ainda relação de Bohr-Peierls-Placzek ^[29]. Essa equação é muito importante para o estudo das seções de choque, pois através dela podemos calcular a seção de choque total (SCT), utilizando apenas o valor da amplitude de espalhamento elástica para o ângulo $\theta = 0$.

Por fim, podemos definir a seção de choque de absorção total (SCAT) como sendo a diferença entre as seções de choque totais e as seções de choque integrais elásticas, ou seja:

$$\sigma_{AT} = SCT - SCI \quad [2.24]$$

2.5 – EQUAÇÃO DE LIPPMANN-SCHWINGER

A equação 2.5 pode ser reescrita na sua forma integral, a qual é conhecida como equação de Lippmann-Schwinger^[29-31]:

$$F_{\vec{k}_i}^-(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}_i}^0(\vec{r}) + \int G_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') F_{\vec{k}_i}^-(\vec{r}') d(\vec{r}'), \quad [2.25]$$

onde $\phi_{\vec{k}_i}^0(\vec{r})$ é uma onda plana incidente, descrita na equação 2.7, com o vetor de onda \vec{k}_i . $\phi_{\vec{k}_i}^0(\vec{r})$ é solução da equação homogênea de espalhamento:

$$[\nabla_r^2 + k^2] \phi(\vec{r}) = 0. \quad [2.25]$$

Ainda com relação à equação 2.25, $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ é a função de Green da partícula livre^[29]:

$$[\nabla_r^2 + k^2] G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r}, \vec{r}'), \quad [2.27]$$

onde $\delta(\vec{r}, \vec{r}')$ é a função delta de Dirac.

Sabendo que $\delta(\vec{r}, \vec{r}') = (2\pi)^{-3} \int e^{i\vec{k}'(\vec{r}-\vec{r}')} d\vec{k}'$, podemos obter a representação integral da função de Green, como sendo:

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = -(2\pi)^{-3} \int \frac{e^{i\vec{k}'(\vec{r}-\vec{r}')}}{k'^2 - k^2} d\vec{k}'. \quad [2.28]$$

A definição de $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ possui uma divergência quando a integração sobre $d\vec{k}' = k'^2 dk' d\hat{k}$ passa através de um dos pólos $k' = \pm k$. Quando se remove essa

singularidade garante-se que a função de Green satisfaça a condição assintótica sobre a função $F_{\vec{k}_i}^{\pm}(\vec{r})$, descrita na equação 2.9, e assim encontramos que:

$$G_0^{\pm}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}. \quad [2.29]$$

Através da equação 2.29, podemos obter as equações de Lippmann-Schwinger que já incorporam as condições assintóticas sobre $F_{\vec{k}_i}^{\pm}(\vec{r})$ da equação 2.9:

$$F_{\vec{k}_i}^{\pm}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}_i}^0(\vec{r}) + \int G_0^{\pm}(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') F_{\vec{k}_i}^{\pm}(\vec{r}') d(\vec{r}'), \quad [2.30]$$

onde o sinal (+) se refere a uma onda esférica emergente e o sinal (-) a uma onda esférica convergente.

Comparando-se a equação 2.30 com a equação 2.9, pode-se obter a representação integral da amplitude de espalhamento da seguinte forma ^[32]:

$$f = -2\pi^2 \left\langle \phi_{\vec{k}_f}^0 \left| U \right| F_{\vec{k}_i}^+ \right\rangle = 2\pi^2 T_{fi}, \quad [2.31]$$

onde a matriz de transição T_{fi} é definida da seguinte forma:

$$T_{fi} = \left\langle \phi_{\vec{k}_f}^0 \left| U \right| F_{\vec{k}_i}^+ \right\rangle, \quad [2.32]$$

ou também:

$$T_{fi} = \left\langle F_{\vec{k}_f}^- \left| U \right| \phi_{\vec{k}_f}^0 \right\rangle. \quad [2.33]$$

A seção de choque diferencial, descrita na equação 2.15, pode então ser representada da seguinte forma:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{i \rightarrow f} = 4\pi^4 |T_{if}|^2. \quad [2.34]$$

Dessa forma, podemos notar que encontrar a matriz de transição T_{fi} , é essencial para solucionar o problema de espalhamento.

3 - COLISÃO ELÉTRON-MOLÉCULA

Neste capítulo será apresentado o potencial óptico de interação entre elétron incidente e molécula alvo, potencial este que foi utilizado para representar as interações físicas envolvidas no processo do espalhamento elétron-molécula.

3.1 - CANAIS ACOPLADOS

Existem algumas situações complicadoras na resolução da equação de Schrodinger para o estudo de colisões de elétrons por moléculas (equação 2.5). Esse estudo se torna bem mais complexo do que o espalhamento de um elétron por um potencial estático central, devido as seguintes dificuldades ^[32]:

- A equação de movimento do sistema é um equação de muitos corpos, dessa forma não existe uma solução analítica;
- O elétron incidente é idêntico aos elétrons da molécula alvo, requerendo assim que a função de onda total satisfaça o princípio de exclusão de Pauli;
- Alguns processos inelásticos podem ocorrer se o elétron incidente possuir energia alta, pois, nestes casos, podem provocar transições da molécula para muitos estados excitados.

Para se resolver a equação de espalhamento e determinar as seções de choque , será necessário lançar mão de algumas aproximações.

3.2- EXPANSÃO EM ESTADOS ACOPLADOS

A expansão em estados acoplados consiste em se expandir a função de onda total do sistema (elétron + molécula) em termos de um conjunto completo de estados não perturbados do alvo isolado, truncando a expansão em um determinado número de canais ^[33]:

$$\psi(\vec{r}, \vec{r}_m, \vec{R}_m) = A \sum_n F_n(\vec{r}) \phi^n(\vec{r}_m, \vec{R}_m), \quad [3.1]$$

onde n representa o n -ésimo canal de espalhamento, $\vec{r}_m = (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N)$ são as coordenadas dos N elétrons e $\vec{R}_m = (\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_i, \dots, \vec{R}_M)$ são as coordenadas dos M núcleos da molécula alvo.

A função de onda total do sistema é representada por uma expansão, onde a função de onda associada ao elétron do espalhamento se torna o coeficiente da mesma, aplicado ao conjunto completo de funções de base, as quais são autofunções do Hamiltoniano molecular do alvo, considerando que os acoplamentos de spins foram tratados corretamente, e ainda que A é o operador de antissimetização usual.

Ao inserirmos a equação 3.1 na equação 2.5 e utilizando da relação $E = \frac{k_n^2}{2} + E_m^n$, podemos chegar a um conjunto de equações acopladas para as funções de um elétron, $F_n(\vec{r})$. Com isso, a situação que inicialmente tratava de $N+1$ elétrons ficou reduzida ao problema de apenas um elétron:

$$[\nabla_r^2 + k_n^2] F_n(\vec{r}) = 2 \sum_m V_{nm}(\vec{r}) F_m(\vec{r}), \quad [3.2]$$

onde $V(\vec{r})$ é a matriz do potencial de interação.

3.3- POTENCIAL ÓPTICO

Na equação de canais acoplados, equação 3.2, conseguimos reduzir o problema de $N+1$ elétrons para um conjunto de equações de um elétron apenas, porém a solução ainda é muito difícil. No entanto, pesquisas recentes tem obtido bons resultados para descrever o espalhamento elástico utilizando-se de potenciais ópticos de interação no cálculo das seções de choque. Para se obter as seções de choque ou, equivalentemente, calcular a matriz de transição, pode-se utilizar de um potencial de interação que descreva adequadamente as dinâmicas de colisão entre elétron-molécula.

O potencial de interação apresenta a seguinte forma:

$$V_{opt} = V_{est} + V_{tro} + V_{cp} + iV_{ab}, \quad [3.3]$$

onde V_{est} é a parte do potencial de interação formado pelas contribuições de potencial estático, V_{tro} é o potencial de troca, V_{cp} é o potencial de correlação-polarização e V_{ab} é o potencial de absorção.

3.3.1 POTENCIAL ESTÁTICO

O potencial V_{est} descreve as interações eletrostáticas médias entre o elétron incidente com os elétrons da molécula alvo (repulsivas) e as interações entre o elétron incidente e os núcleos da molécula alvo (atrativas). Esse potencial pode ser escrito da seguinte maneira:

$$V_{est}(\vec{r}) = \left\langle \phi_m^o(\vec{r}_m, \vec{R}_m) \left| -\sum_{\alpha=1}^M \frac{Z_\alpha}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{R}_\alpha|} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_i|} \right| \phi_m^o(\vec{r}_m, \vec{R}_m) \right\rangle. \quad [3.4]$$

A equação 3.4 descreve as interações eletrostáticas entre o elétron incidente de coordenada \vec{r}_{N+1} com os N elétrons da molécula alvo de coordenadas \vec{r}_i onde $\vec{r}_m \equiv (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_N)$, e também descreve a interação entre o elétron incidente com os M núcleos do alvo de coordenadas \vec{R}_α sendo $\vec{R}_m \equiv (\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_\alpha, \dots, \vec{R}_M)$.

3.3.2 POTENCIAL DE TROCA

O potencial de troca, V_{tro} , leva em consideração a indistinguibilidade dos elétrons do sistema (elétron incidente e elétrons da molécula alvo). Dessa forma o potencial de troca do sistema, atuando na função do elétron do espalhamento é descrito da seguinte forma ^[34]:

$$V_{tro}(\vec{r}) = \left\langle \phi_m^o(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{R}_m) F(\vec{r}_{N+1}) \left| \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_i|} \right| \phi_m^o(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{N-1}, \vec{r}_{N+1}, \vec{R}_m) F(\vec{r}_N) \right\rangle. \quad [3.5]$$

Os potenciais $V_{est}(\vec{r})$ e $V_{tro}(\vec{r})$ são obtidos a partir da função de onda que descreve o estado fundamental da molécula alvo.

3.3.3 POTENCIAL DE CORRELAÇÃO-POLARIZAÇÃO

A ultima parte do potencial real considera as distorções da densidade de carga (nuvem eletrônica) da molécula, devido à interação entre o elétron incidente e os elétrons da molécula alvo. Podemos obter esse potencial via *ab initio* ou por modelos de distribuição de densidade eletrônica local. Utilizamos um potencial modelo sem parâmetros ^[35] obtido em um modelo de gás de elétron livres (FEG, Free-Electron-Gas). Esse potencial é composto por duas partes, de curto e longo alcance, conhecidas por potencial de correlação e potencial de polarização.

O potencial de correlação (V_{co}) é uma função direta da densidade de carga molecular $\rho(\vec{r})$ e da energia de correlação, dessa forma podemos calcular esse potencial para vários intervalos e expressar em termos da variável de densidade r_s ^[35]:

$$r_s(\vec{r}) = \left(\frac{3}{4\pi\rho(\vec{r})} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad [3.6]$$

Em unidades atômicas o potencial é dado por:

$$V_{co}(\vec{r}) = \begin{cases} 0,0311 \ln r_s - 0,0584 + 0,00133 r_s \ln r_s - 0,0084 r_s, & r_s < 1 \\ \frac{\gamma(1+\frac{7}{6}\beta_1 r_s^{\frac{1}{2}}+\frac{4}{3}\beta_2 r_s)}{(1+\beta_1 r_s^{\frac{1}{2}}+\beta_2 r_s)}, & r_s \geq 1 \end{cases} \quad [3.7]$$

Onde $\gamma = -0,1426$, $\beta_1 = 1,0529$ e $\beta_2 = 0,3334$. Esse potencial de correlação não possui simetria esférica, mas podemos expandir em ondas parciais através dos Polinômios de Legendre P_λ ,

$$V_{co}(\vec{r}) = \sum_\lambda V_\lambda^{co}(r) P_\lambda \cos(\theta). \quad [3.8]$$

A parte do potencial referente ao longo alcance, denominada potencial de polarização (V_{pol}), pode ser expressa da seguinte forma:

$$V_{pol}(r) = -\frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_0}{r^4} + \frac{\alpha_2}{r^4} P_2(\cos\theta) \right). \quad [3.9]$$

3.3.4- POTENCIAL DE ABSORÇÃO

Sabe-se que devido aos efeitos de absorção, os valores das seções de choque diferenciais obtidas através da teoria, na faixa de energia intermediária e alta, se afastam dos valores experimentais ^[36], e ainda que o tratamento *ab initio* desses efeitos se torna muito difícil. Por isso, foi utilizado um potencial de absorção semi-empírico, desenvolvido por Lee *et al.* ^[37] e denominado de Scaled-Quasi-Free-Scattering-Model (SQFSM), o qual foi elaborado a partir da terceira versão do potencial modelo de espalhamento quase livre (QSFM), desenvolvido por Staszewska *et al.* ^[38].

O potencial SQFSM é dado, em unidades atômica ($\hbar=m=e=1$), pela seguinte expressão:

$$V_{ab}(\vec{r}, E) = -\rho(\vec{r}) \left(\frac{T_L}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{8\pi}{5k^2} k_F^3 \right) H(\alpha + \beta - k_F^2) (A + B + C) SF. \quad [3.10]$$

onde,

$$T_L = k^2 - V_{SEP}. \quad [3.11]$$

$$A = \frac{5k_F^3}{(\alpha - k_F^2)}. \quad [3.12]$$

$$B = -\frac{k_F^3[5(k^2-\beta)+2k_F^2]}{(k^2-\beta)^2}. \quad [3.13]$$

$$C = 2H(\alpha + \beta - k^2) \frac{(\alpha + \beta - k^2)}{(k^2 - \beta)}. \quad [3.14]$$

onde k^2 é a energia (em rydbergs) do elétron incidente, $k_F(\vec{r})$ é o momento de Fermi do alvo, $\rho(\vec{r})$ é a densidade de elétrons do alvo e $H(x)$ é a função *Heaviside*, definida como sendo $H(x) = 1$ para $x \geq 0$ e $H(x) = 0$ para $x < 0$.

De acordo com Staszewska et al. ^[38],

$$\alpha(\vec{r}, E) = k_F^2 + 2(2\Delta - I) - V_{SEP}. \quad [3.15]$$

$$\beta(\vec{r}, E) = k_F^2 + 2(I - \Delta) - V_{SEP}. \quad [3.16]$$

onde I é o potencial de ionização e Δ é a energia média de excitação.

O fator de escala adimensional introduzido por Lee et al. ^[37] é dado por:

$$SF = 1,0 + Mkr_s - \frac{N}{kr_s}. \quad [3.17]$$

O segundo e o terceiro termo da equação acima representam as correções nas regiões de baixa e alta densidades, respectivamente e, M e N são parâmetros escolhidos empiricamente.

4- MÉTODO DE CÁLCULO EPolyScatD

Nesse capítulo, será abordado o método computacional utilizado nesse trabalho para se calcular as seções de choque de interesse. O pacote computacional utilizado é denominado EPolyScatD.

4.1 O EPolyScatD

O estudo da interação elétron-molécula através de cálculos de seções de choque é algo que requer certo grau de esforços computacionais. Devido à complexidade dos cálculos, ao longo das décadas foram desenvolvidos diversos métodos para se auxiliar na resolução da equação de Schrodinger para espalhamento. Neste trabalho, para calcular os valores das seções de choque de interesse, utilizamos o método denominado EPolyScatD, que foi desenvolvido originalmente por Lucchese *et al.* [27] e, recentemente, modificado de Souza *et al.* [28] e por Lee *et al.* [11].

O EPolyScatD faz uso de um potencial óptico de interação, que tem a forma apresentada na equação 3.3, para descrever a interação elétron-molécula. O uso desse potencial reduz o problema de muitos corpos da interação elétron-molécula ao espalhamento de uma única partícula em um único canal.

A função de espalhamento satisfaz a equação:

$$[\nabla^2 + k^2 - U_{opt}]F(\vec{r}) = 0, \quad [4.1]$$

onde $U_{opt}=2V_{opt}$ é o potencial óptico reduzido e k é a magnitude do momento linear do elétron. O elemento da matriz de transição T pode ser representado da seguinte forma:

$$T_{fi} = \langle \phi_{\vec{k}f}^0 | U_{opt} | F_{\vec{k}i}^+ \rangle, \quad [4.2]$$

onde ϕ é a função da onda plana não perturbada. Utilizando-se do formalismo conhecido como “*two-potential*” [39] é possível separar o potencial óptico como a soma de dois potenciais:

$$U_{opt} = U_1 + U_2. \quad [4.3]$$

A matriz T pode, então, ser reescrita como a soma de duas parcelas

$$T_{fi} = T_1 + T_2, \quad [4.4]$$

onde T_1 está relacionada com o a primeira parcela do potencial U_1 :

$$T_1 = \left\langle \phi_{kf}^0 \left| U_1 \right| \chi_{ki}^+ \right\rangle. \quad [4.5]$$

e T_2 está relacionada com o a segunda parcela do potencial U_2 :

$$T_2 = \left\langle \chi_{kf}^- \left| U_2 \right| F_{ki}^+ \right\rangle. \quad [4.6]$$

Nas equações 4.5 e 4.6, a função χ , denominada de onda distorcida, é a solução da equação de espalhamento considerando-se apenas a primeira parte do potencial:

$$[\nabla^2 + k^2 - U_1]\chi(\vec{r}) = 0. \quad [4.7]$$

Os potenciais U_1 e U_2 podem ser escolhidos arbitrariamente. Na metodologia utilizada pelo EPolyScatD, esses potenciais são definidos como:

$$U_1 = U_{est} + U_{tro}^{loc} + U_{cp} \quad [4.8]$$

e

$$U_2 = U_{tro} - U_{tro}^{loc} + iU_{abs}. \quad [4.9]$$

onde U_{est} é o potencial reduzido estático, U_{tro} é o potencial reduzido de troca, U_{cp} é o potencial reduzido de correlação-polarização, U_{abs} é o potencial reduzido de absorção e U_{tro}^{loc} é o potencial reduzido de troca local. Os potenciais U_{est} e U_{tro} são obtidos a partir da função de onda do alvo, o potencial U_{cp} é um proveniente de um potencial modelo livre de parâmetros obtido em um modelo de gás de elétrons livres (FEG) por Padial *et al.* [36] e o potencial U_{tro}^{loc} é gerado a partir do potencial de Hara, que também é baseado em um modelo de gás de elétrons livres [40].

Para se resolver a equação 4.7, se utiliza um procedimento numérico denominado método de Runge-Kutta e assim obtêm-se χ e T_1 , porém isso só é possível devido ao fato de que o potencial U_1 é composto por potenciais puramente locais.

Para se obter a matriz T_2 , foi utilizada a equação de Lippmann-Schwinger (equação 2.30) combinada com os aproximantes de Padé, assim como foi realizado anteriormente por Lucchese e Mckoy [41] para moléculas lineares. Para isso, escolhe-se uma função arbitrária (ϕ) definida como:

$$\phi^{(i)} = (G_1^+ U_2)^i \chi. \quad [4.10]$$

com $\phi^{(0)} = \chi$. Os aproximantes de Padé para T_2 podem ser calculados de acordo com a expressão descrita por Giaturco et al. [42]:

$$T_2 \left[\frac{N}{N} \right] = \sum_{i,j=1,N-1}^N \langle \chi^- | U_2 | \phi^{(j)+} \rangle (D_{ij}^{-1}) \langle \phi^{(j)-} | U_2 | \chi^+ \rangle. \quad [4.11]$$

onde (D_{ij}^{-1}) é o (i,j)ésimo elemento da matriz inversa da matriz D que possui elementos:

$$D_{ij} = \langle \phi^{(i)-} | U_2 - U_2 G_1^+ U_2 | \phi^{(j)+} \rangle. \quad [4.12]$$

Como a molécula de interesse deste projeto têm alto momento dipolar, a convergência para a expansão em ondas parciais da amplitude de espalhamento de $j_0 = 0$ para $j = l$ se torna extremamente lenta devido às interações de longo alcance do potencial de dipolo. Não levar em conta esses termos significa obter valores equivocados de seções de choque diferenciais (principalmente para ângulos pequenos) e conseqüentemente de todas as outras seções de choque. Para levá-los em conta, se fez necessária a utilização da bastante conhecida: complementação com Born ^[43].

De forma geral, a complementação com Born consiste em utilizar-se de uma fórmula analítica para levar em conta a contribuição dos termos maiores da expansão em ondas parciais para a amplitude de espalhamento. Desta maneira, a amplitude de espalhamento (ou, similarmente, a matriz T) pode ser escrita como:

$$f = f^B + \sum_{p\mu l h l' h'} (f_{l' h h'} - f_{l' h h'}^B). \quad [4.13]$$

onde f^B é a amplitude de Born completa obtida analiticamente, $f_{l' h h'}$ é a amplitude na expansão em ondas parciais obtida pelo EPolyScatD e $f_{l' h h'}^B$ é a componente correspondente obtida pela primeira aproximação de Born.

5- RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos das seções de choque para molécula de pirimidina, além de análise desses resultados em comparação com dados existentes na literatura.

5.1- PROPRIEDADES MOLECULARES DA PIRIMIDINA

A molécula de Pirimidina é um composto semelhante ao benzeno. Com fórmula molecular $C_4H_4N_2$, sua estrutura é formada por um anel heterocíclico contendo dois átomos de nitrogênio nas posições 1 e 3 e possui 42 elétrons.

A função de onda molecular foi obtida através da utilização do pacote computacional denominado GAMESS^[44]. Essa função foi gerada em nível Hartree-Fock (HF) com conjunto de funções de base TZP aumentado com uma função *d*. Para realização do cálculo, definiu-se a pirimidina como pertencente ao grupo pontual de simetria C_{2v} e utilizou-se de geometria de equilíbrio otimizada encontrada na literatura^[45]. Algumas das propriedades obtidas são mostradas na Tabela 5.1.

Energia Total (u.a.)	Momento de Dipolo (u.a.)	α_{xx} (u.a.)	α_{yy} (u.a.)	α_{zz} (u.a.)
-262,76736	2,385	22,54	55,06	59,06

Tabela 5.1: Propriedades da molécula de pirimidina

A energia total calculada foi -262,76736 u.a., valor um pouco menor que o resultado de -262,75 u.a. calculado por Masin *et al.*^[46]. O valor do momento de dipolo (μ) calculado foi de 2,385 D, o que está de acordo com o valor experimental de 2,334 D ($\pm 0,01$)^[45]. Os valores das polarizabilidades (α_{xx} , α_{yy} e α_{zz}), necessárias para a geração da forma assintótica do potencial de correlação-polarização, foram retirados do banco de dados do National Institute of Standards and Technology (NIST)^[45]. As polarizabilidades escolhidas foram calculadas em nível Hartree-Fock (HF) com conjunto de funções de base aug-cc-pVDZ.

5.1.1 – SEÇÕES DE CHOQUE DIFERENCIAIS ELÁSTICAS (SCD)

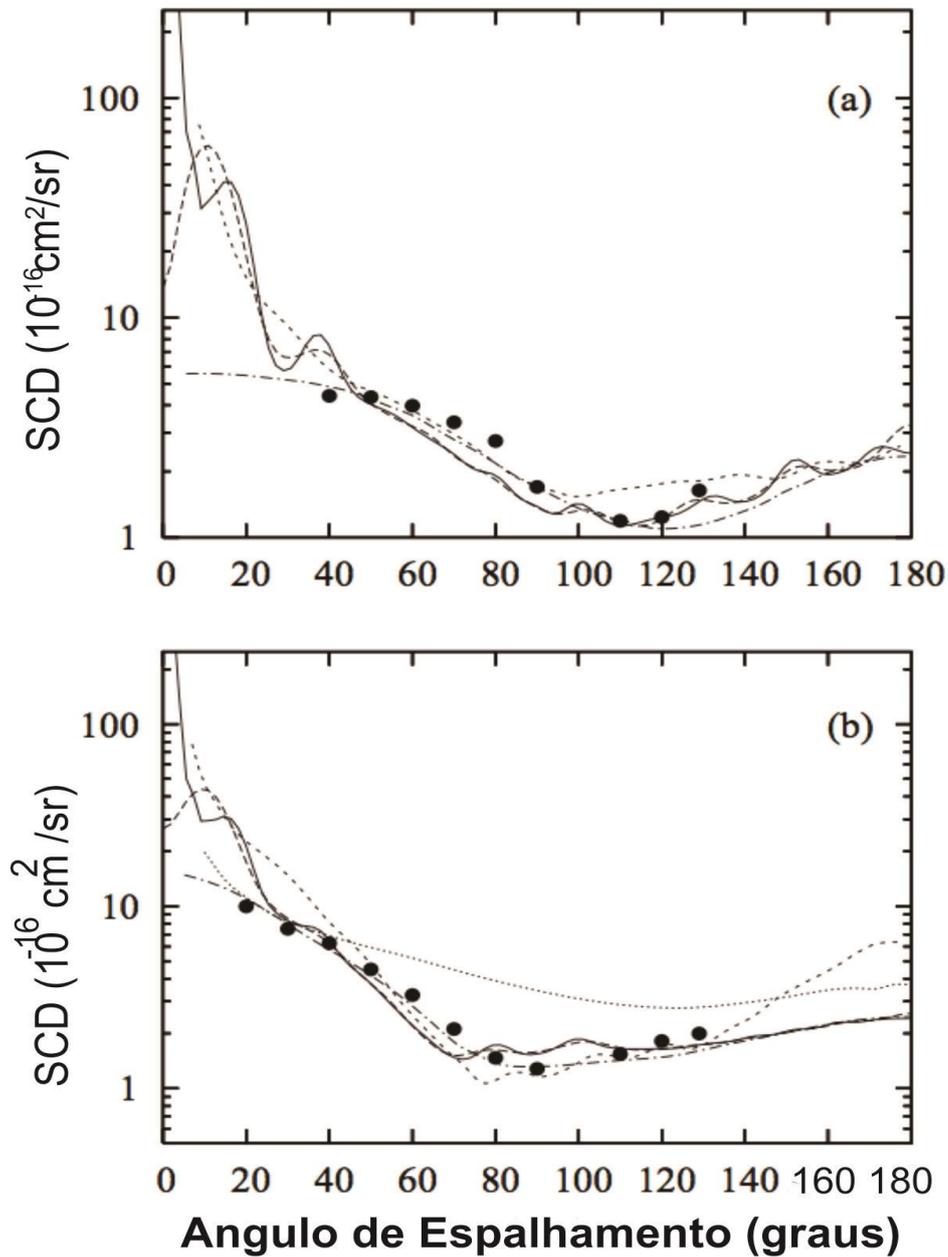


Gráfico 5.1 – SCD para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$ para: (a) 3 eV e (b) 6 eV. Linha sólida, resultados calculados com a correção de Born; linha tracejada, resultados calculados sem a correção de Born; linha tracejada curta, resultados calculados com o método da Matriz-R, por Masín *et al.* ^[46]; linha traço e ponto, resultados calculados com o método de Schwinger Multi-Canal (SMC), por Palihawadana *et al.* ^[47]; linha pontilhada, resultados calculados com o Modelo dos Átomos Independentes e corrigido pela Regra da Aditividade (MAI-RA), por Palihawadana *et al.* ^[47]; círculos sólidos, resultados experimentais de Palihawadana *et al.* ^[47].

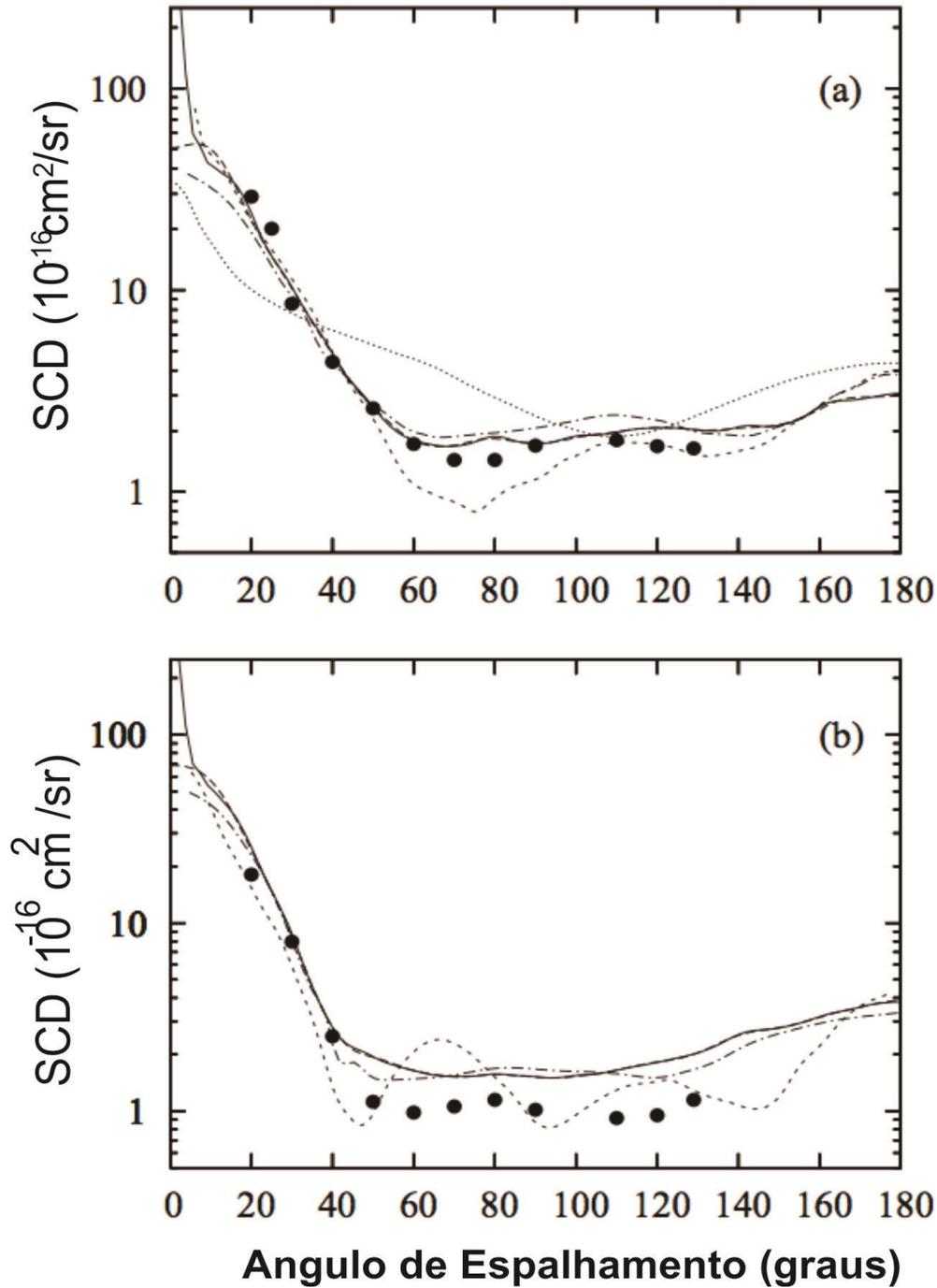


Gráfico 5.2 - SCD para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$ para: (a) 10 eV e (b) 15 eV. Linha sólida, resultados calculados com a correção de Born; linha tracejada, resultados calculados sem a correção de Born; linha tracejada curta, resultados calculados com o método da Matriz-R, por Masín *et al.* ^[46]; linha traço e ponto, resultados calculados com o método de Schwinger Multi-Canal (SMC), por Palihawadana *et al.* ^[47]; linha pontilhada, resultados calculados com o Modelo dos Átomos Independentes e corrigido pela Regra da Aditividade (MAI-RA), por Palihawadana *et al.* ^[47]; círculos sólidos, resultados experimentais de Palihawadana *et al.* ^[47].

Nos gráficos 5.1 e 5.2, são apresentadas as seções de choque diferenciais (SCD) calculadas com e sem a correção de Born, para o espalhamento elástico entre o elétron incidente e a molécula de pirimidina ($C_4H_4N_2$), com a energia do elétron incidente variando entre 3 e 15 eV. Para essa faixa de energia, a qual é denominada faixa de baixas energias, podemos desprezar os efeitos de absorção, uma vez que essas energias estão abaixo ou na proximidade da energia de ionização da molécula e, dessa forma, é pouco plausível a ocorrência de processos de espalhamento inelástico. Para efeito de comparação, apresentamos os dados experimentais e resultados teóricos calculados por Palihawadana *et al.* ^[47], através dos métodos Schwinger Multi-Canal (SMC) e Modelo de Átomos Independentes corrigido pela Regra da Aditividade (MAI-RA), além dos resultados teóricos calculados por Masín *et al.* ^[46], através do método da Matriz-R.

A partir dos resultados mostrados nos gráficos 5.1 (a) e (b), com energias de 3 e 6 eV respectivamente, podemos notar que as curvas das SCD obtidas com a inclusão da correção de Born apresentam oscilações. Recentemente, o mesmo comportamento foi observado para outras moléculas polares, como o metanol e o etanol ^[11,48]. Esse comportamento pode indicar uma limitação do procedimento da correção de Born. No entanto, as oscilações observadas nas SCD calculadas se tornam mais suaves conforme há o aumento nas energias incidentes. Nas energias de 10 e 15 eV, mostradas respectivamente nos gráficos 5.2 (a) e (b), a partir do ângulo de 20° , o qual foi o ponto de partida das medições de Palihawadana *et al.* ^[47], os valores calculados com e sem a correção de Born estão em completo acordo com os dados experimentais.

Para energias baixas, as SCD teóricas calculadas usando método SMC estão em concordância com os resultados obtidos no presente trabalho utilizando-se da correção de Born, exceto para ângulos de espalhamento próximos de 180° e 0° . A ausência da correção de Born nos resultados obtidos através do método SMC é a origem dessa discrepância. A comparação dos resultados obtidos no presente trabalho com os resultados das SCD obtidos por Masín *et al.* ^[46] através do método da Matriz-R também mostra boa concordância, enquanto que os resultados obtidos através do MAI-RA para energias de 6 e 10 eV estão em discordância com todos os resultados teóricos, bem como os dados experimentais.

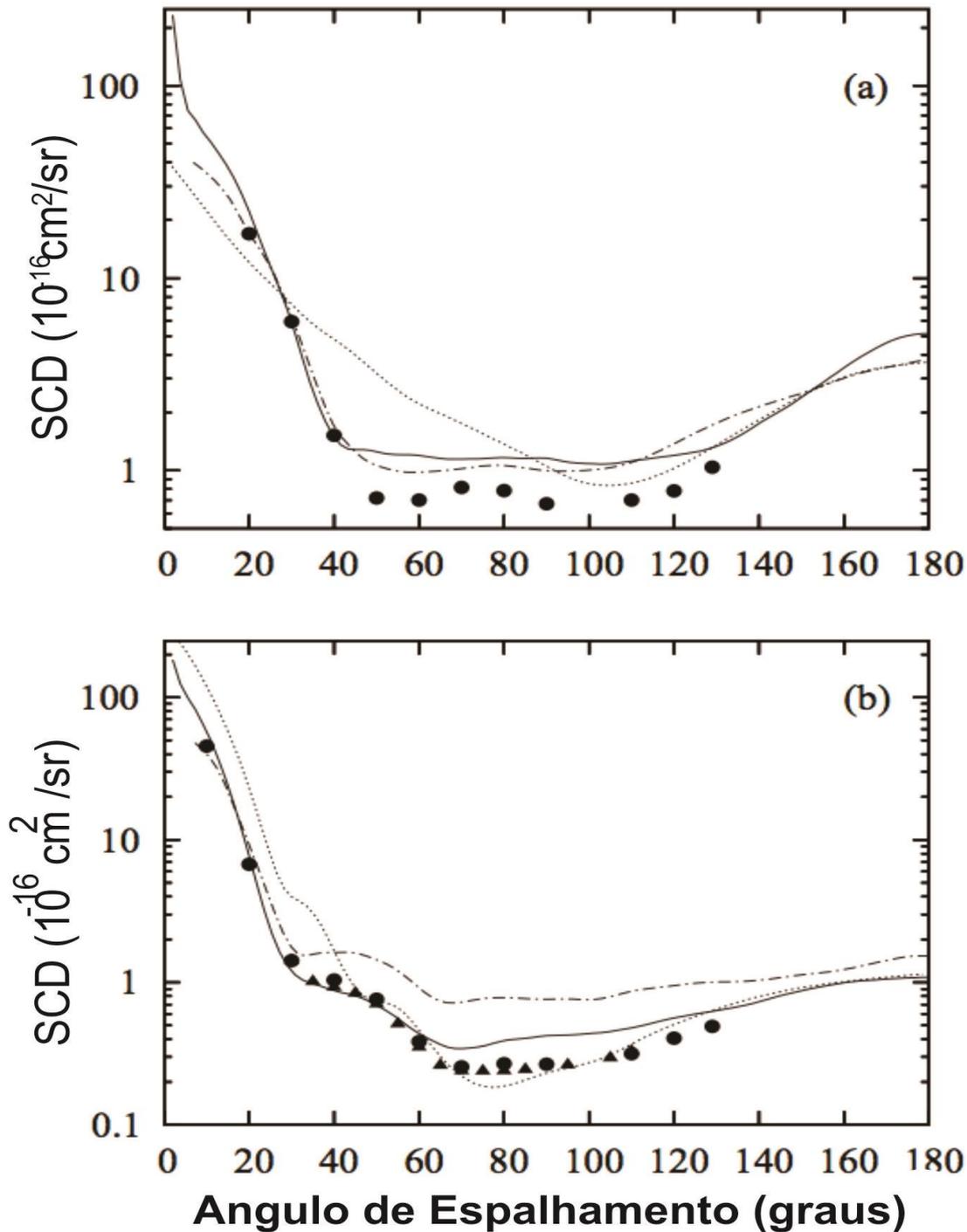


Gráfico 5.3 - SCD para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$ para: (a) 20 eV e (b) 50 eV. Linha sólida, resultados calculados com a correção de Born; linha tracejada, resultados calculados sem a correção de Born; linha tracejada curta, resultados calculados com o método da Matriz-R, por Masín *et al.* ^[46]; linha traço e ponto, resultados calculados com o método de Schwinger Multi-Canal (SMC), por Palihawadana *et al.* ^[47]; linha pontilhada, resultados calculados com o Modelo dos Átomos Independentes e corrigido pela Regra da Aditividade (MAI-RA), por Palihawadana *et al.* ^[47]; círculos sólidos, resultados experimentais de Palihawadana *et al.* ^[47]; triângulos, resultados experimentais de Majkovic *et al.* ^[49].

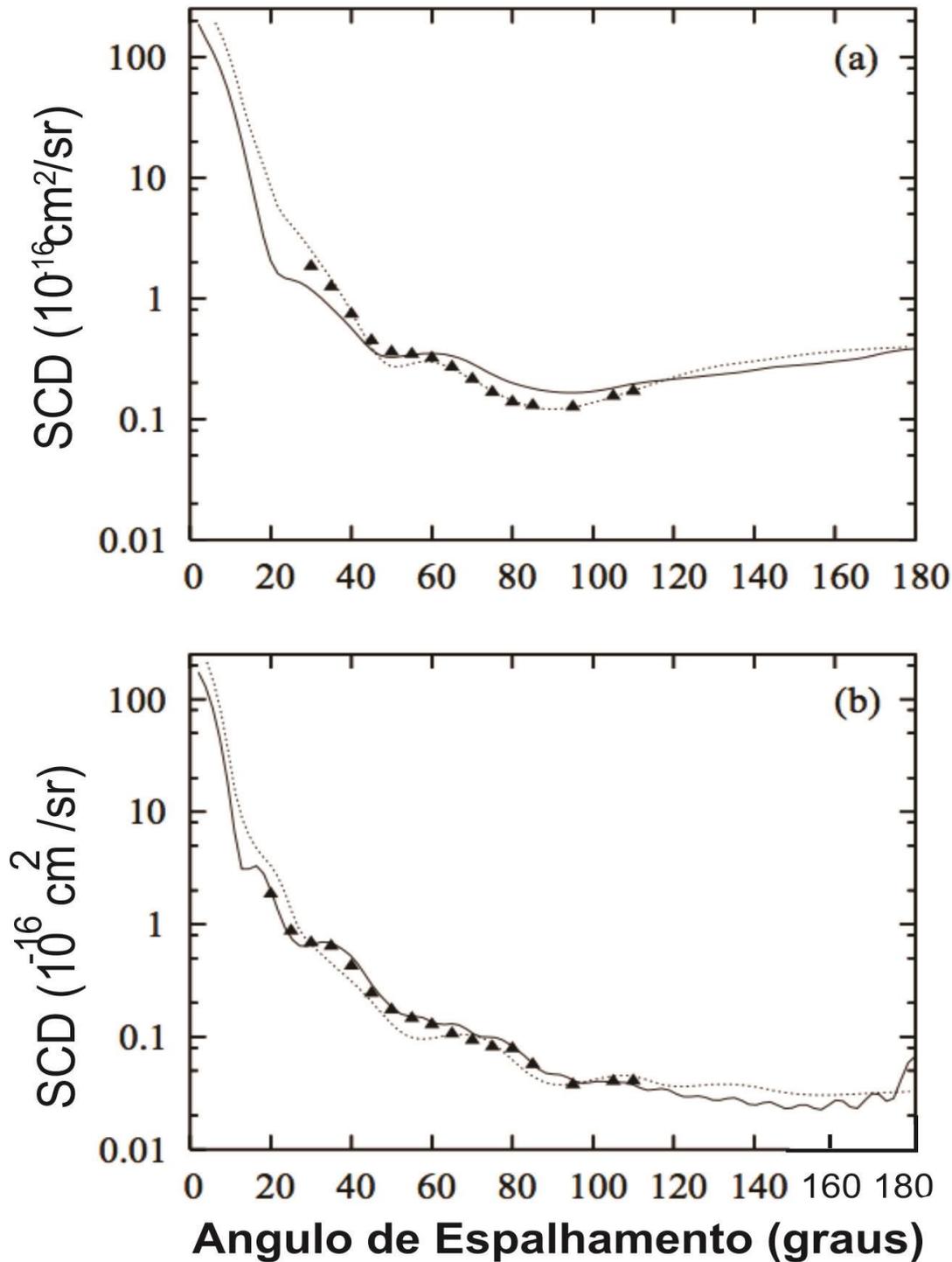


Gráfico 5.4 - SCD para espalhamento elástico e^- - $C_4H_4N_2$ para: (a) 100 eV e (b) 300 eV. Linha sólida, resultados calculados com a correção de Born; linha pontilhada, resultados calculados com o Modelo dos Átomos Independentes e corrigido pela Regra da Aditividade (MAI-RA), por Palihawadana *et al.* ^[47]; triângulos, resultados experimentais de Majkovic *et al.* ^[49].

Nos gráficos 5.3 e 5.4, são apresentados os resultados teóricos de SCD calculados com e sem a correção de Born, para energias do elétron incidente variando entre 20 e 300 eV. Nessa faixa de energia, denominada de intermediária, os cálculos foram realizados incluindo-se os efeitos de absorção, através da utilização do potencial de absorção Scaled Quasi-Free-Scattering Model (SQFSM) ^[37], o qual foi explicitado anteriormente. Os dados experimentais de Palihawadana *et al.* ^[47], para energias acima de 50 eV, de Maljkovic *et al.* ^[49], obtidos na faixa de energia de 50 a 300 eV, juntamente com os resultados teóricos calculados usando os métodos SMC ^[47] e MAI-RA ^[47,49], também são apresentados para comparação.

Para energia incidente de 20 eV, os resultados de SCD obtidos no presente trabalho estão de acordo com os resultados obtidos através do método SMC na aproximação estático-troca-polarização. Isso indica que, para essa energia, a absorção ainda não é significativa, mesmo para uma molécula de porte médio como é a pirimidina. Assim como ocorre para energias baixas, os resultados calculados através do MAI-RA estão bem diferentes dos obtidos no presente trabalho. A comparação dos resultados obtidos no presente trabalho com os dados experimentais mostra boa concordância qualitativa. Quantitativamente, é possível notar boa concordância para ângulos até 40°, enquanto que, para ângulos maiores, os resultados obtidos teoricamente superestimam os valores experimentais.

Na energia incidente de 50 eV, os valores de SCD obtidos através do método SMC, sem levar em conta os efeitos de absorção, está significativamente acima dos resultados obtidos no presente trabalho, o que indica a importância de se considerar a influência desses efeitos na referida energia. Há uma boa concordância entre os resultados calculados e os dois conjuntos de dados experimentais apresentados ^[47,49]. Além disso, existe uma melhora na comparação com os resultados obtidos através do MAI-RA. Nas energias de 100 e 300 eV, é boa a concordância entre os resultados calculados, os dados experimentais de Maljkovic *et al.* ^[49] e os resultados calculados através do MAI-RA.

5.1.2 – SEÇÕES DE CHOQUE INTEGRAIS ELÁSTICAS (SCI)

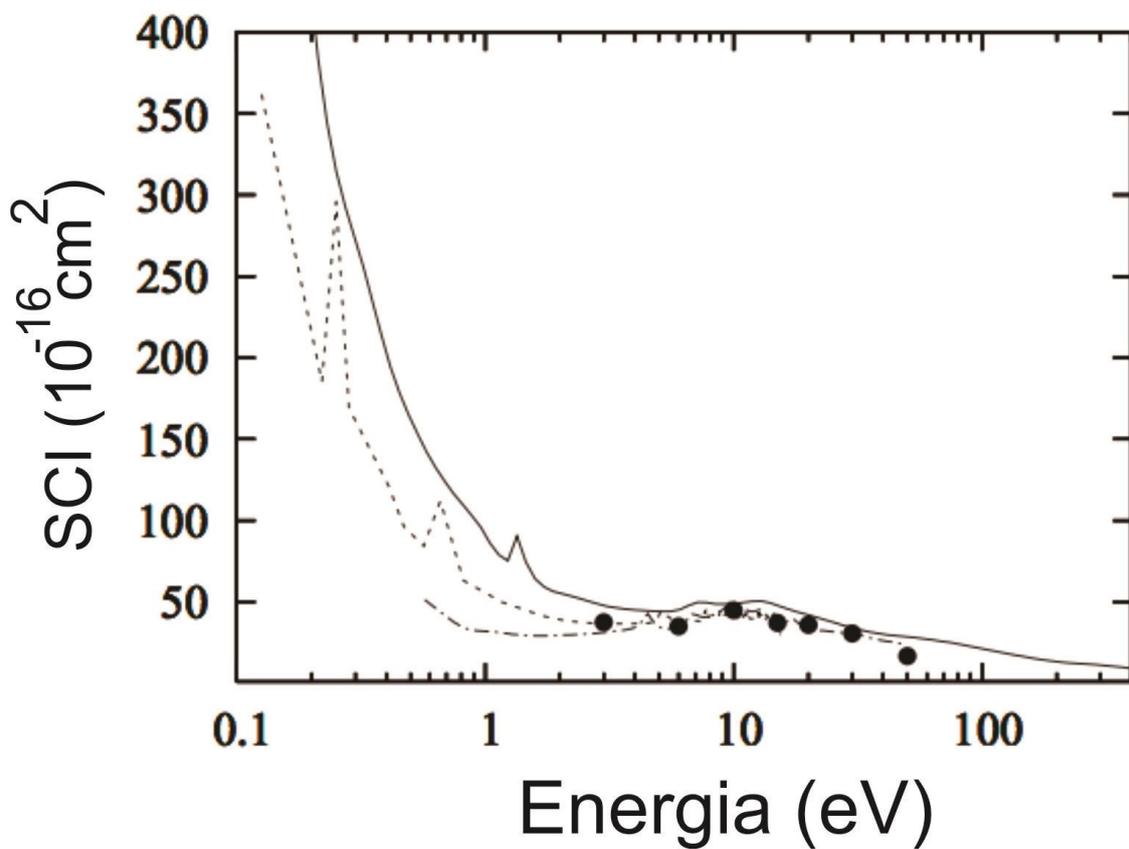


Gráfico 5.5 – SCI para espalhamento elástico $e^- - C_4H_4N_2$. Linha sólida, resultados teóricos sem a correção de Born; linha tracejada curta, resultados calculados através do método Close-Coupling, por Masín *et al.* ^[46]; linha traço e ponto, resultados calculados com o método SMC, por Palihawadana *et al.* ^[47]; círculos sólidos, resultados experimentais de Palihawadana *et al.* ^[47].

No gráfico 5.5, são apresentados os resultados teóricos das SCI obtidos sem a correção de Born, para o espalhamento elástico elétron-pirimidina. Para fins de comparação, os resultados teóricos obtidos através dos métodos SMC ^[47] e da Matriz-R ^[46], bem como os dados experimentais de Palihawadana *et al.* ^[47] também são mostrados.

Para energias superiores a 3 eV, existe boa concordância entre os resultados de SCI obtidos no presente trabalho com os outros conjuntos de dados, referentes tanto a resultados calculados teoricamente quanto a medidas experimentais. Entretanto, para energias menores do que 3 eV, os três conjuntos de resultados de SCI teóricas se diferem umas das outras, acentuadamente. Os resultados obtidos no presente trabalho se apresentam bem acima dos outros. Além disso, os valores das SCI de Masín *et al.* ^[46] apresentam duas ressonâncias centradas em 0,21 eV (2A_2) e 0,63 eV (2B_1), respectivamente, e uma ressonância larga em 5,15 eV (2B_1). Estas ressonâncias também foram identificadas por Winstead e Mckoy ^[50], porém em ordem diferente, isto é, (2B_1), (2A_2) e (2B_1).

No presente trabalho, foram identificadas uma ressonância em 1,4 eV e uma ressonância larga em 7,5 eV. A análise individual dos resultados de SCI para cada canal mostrou que ambas as ressonâncias são de simetria (2B_1) e, provavelmente são as mesmas identificadas por Masín *et al.* ^[46], porém deslocadas para energias incidentes maiores. Esse deslocamento pode ser atribuído a diferença no tratamento dos efeitos de polarização.

5.1.3 –SEÇÕES DE CHOQUE TOTAL (SCT) E DE ABSORÇÃO TOTAL (SCAT)

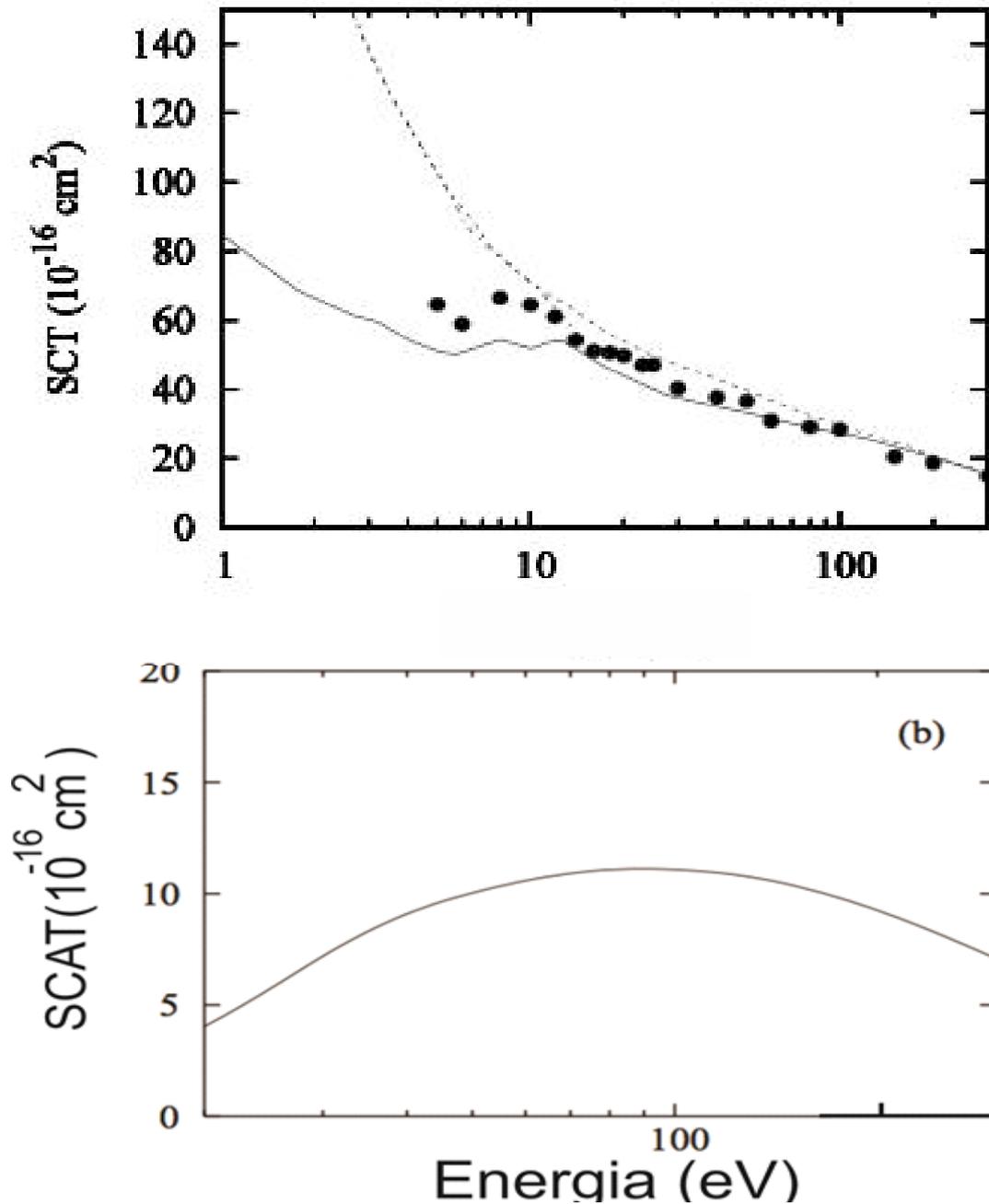


Gráfico 5.6 – (a) SCT e (b) SCAT para o espalhamento e^- - $C_4H_4N_2$. Linha Sólida, resultados teóricos calculados incluindo-se os efeitos de absorção; linha tracejada curta, resultados calculados com a correção de Born, por Masín *et al.* ^[46]; linha pontilhada, resultados calculados através do MAI-RA, por Zecca *et al.* ^[51]; círculos sólidos, valores experimentais, por Fuss *et al.* ^[52].

No gráfico 5.6 (a), são apresentados os resultados de SCT calculados com a correção de Born, para energias incidentes até 300 eV. Para comparação, também são apresentados os resultados de SCT calculados com o método da Matriz-R com SEP e correção de Born ^[46] e as SCT obtidas através do MAI-RA, por Zecca *et al.* ^[51]. Infelizmente, não existem dados experimentais de SCT disponíveis na literatura, até o presente momento. Para baixas energias, os valores de SCT, tanto para os valores obtidos através do método da Matriz-R, quanto os obtidos através do MAI-RA, se projetam bem acima dos resultados calculados no presente trabalho. Essa discrepância, provavelmente existe devido as diferentes formas de se realizar a correção dos efeitos causados pelo alto dipolo. Nos cálculos efetuados no presente trabalho, a correção é feita sobre as amplitudes de espalhamento, enquanto que nos cálculos realizados através do método da Matriz-R ela é feita diretamente sobre as seções de choque. No entanto, existe boa aproximação dos valores de SCT com os obtidos via MAI-RA para energias acima de 50 eV.

No gráfico 5.6 (b), são apresentados os resultados obtidos para a SCAT. Os resultados indicam o máximo de absorção em torno de 90 eV. Infelizmente, não existe dados experimentais ou outros resultados teóricos na literatura para fins de comparação.

6- CONCLUSÃO

Foram apresentados neste trabalho, o estudo teórico para o espalhamento de elétrons por uma molécula de pirimidina ($C_4H_4N_2$) nas faixas de energias baixas e intermediárias. Essa molécula alvo é altamente polar, devido a essa característica a SCD próximo a direção do elétron incidente, ou seja, com ângulos de espalhamento próximos de 180° , possuem varias oscilações. Além disso, os valores das SCI e SCT para energias incidentes baixas são visivelmente maiores que os resultados usados para comparação, porem para energias intermediárias os valores calculados coincidem bem com os outros conjuntos de dados. O nosso método foi capaz de fornecer valores de SCD com boa concordância com os outros resultados teóricos e experimentais disponíveis na literatura.

Nossos cálculos identificaram duas ressonâncias 2B_1 localizadas em 1,4 e 7,5 eV aproximadamente. Estas ressonâncias são provavelmente as mesmas que as observadas por Masín *et al.* ^[46], embora ligeiramente deslocado para energias incidentes mais elevadas, no entanto, a ressonância 2A_2 identificado por ele em 0,21 eV não foi observado nesse trabalho. Essa discrepância pode ser devido as diferentes maneiras de calcular o potencial de correlação-polarização.

Para energias acima de 30 eV, os efeitos de absorção torna-se relevantes, portanto as SCD calculados considerando os efeitos de absorção se projeta abaixo dos valores calculados sem esses efeitos, principalmente para ângulos intermediários e grandes. Em geral, os valores das SCD e SCI calculados incluindo os efeitos de absorção estão em melhor acordo com os dados experimentais disponíveis na literatura, se comparado com os valores calculados sem tais efeitos. Podemos observar que os valores calculados sem o efeito de absorção superestimam os valores experimentais utilizados para comparação nesse trabalho, diferentemente dos valores calculados considerando os efeitos de absorção.

Esperamos que os valores obtidos nesse trabalho possam auxiliar em estudos futuros de interação entre elétron com moléculas orgânicas, além de preencher uma lacuna existente no estudo de seções de choque disponíveis na literatura.

REFERÊNCIAS

- [1] G. L. C. de Souza, “Estudos Teóricos e Experimentais da Interação de Elétrons por Moléculas Poliatômicas”, Tese de Doutorado apresentada ao programa de Pós Graduação em Química da UFSCar (2010).
- [2] E. A. y Castro, “Modelo do Potencial Ótico Complexo para Estudo de Espalhamento de Elétrons por Moléculas e Radicais Livres” Tese de Doutorado apresentada ao programa de Pós Graduação em Física da UFSCar (2008).
- [3] R. T. Sugohara, “Estudo da Interação de Elétrons com Moléculas Relevantes à Atmosfera”, Dissertação de Mestrado apresentada ao programa de Pós Graduação de Física da UFSCar (2008).
- [4] R. K. Janev, “in Atomic and Plasma-Material Interaction Processes in controlled Thermonuclear Fusion”, edited by R. K. Janev and H. W. Drawin (Elsevier, Amsterdam) p.27 (1993).
- [5] K. Kirby, “Atmospheric Physics, Collision Physics and Global Change” in AIP Conference Proceedings 295, The Physics of Electronics and Atomic Collision, XVIII International Conference, Aarhus, Denmark p.48 (1993).
- [6] J. Armstrong, L. Degoricija, A. Hildebrand, J. Koehne e P. M. Fleming, “The ionization energies of the isomers of CN_2 ”, Chem. Phys. Lett. **332**, 591 (2000).
- [7] G. P. Smith, R. A. Copeland e D. R. Crosley, “Electronic quenching, fluorescence lifetime, and spectroscopy of the $A_3\Pi_u$ state of NCN ”, J. Chem. Phys. **391**, 1987 (1989).
- [8] T. R. Taylor, R. T. Bise, K. R. Asmis e D. M. Neumark, “The singlet–triplet splittings of NCN ”, Chem. Phys. Lett. **301**, 413 (1999).
- [9] Plasma Processing of Materials: Scientific Opportunities and Technological Challenges, Plasma Science Committee, Board on Physics and Astronomy, Committee on Physical Science, Mathematics and Applications, National Research Council (1991).
- [10] H. Tanaka, L. Boesten, H. Sato, M. Kimura, M. G. Dillon e D. Spence, “Vibrational excitation of ethane by electron impact”, J. Phys. B: At. Mol. Phys. **23**, 577 (1990).
- [11] M.-T. Lee, G. L. C. de Souza, L. E. Machado, L. M. Brescansin, A. S. dos Santos, R. R. Lucchese, R. T. Sugohara, M. G. P. Homem, I. P. Sanches e I. Iga, “Electron scattering by methanol and ethanol: A joint theoretical-experimental investigation”, J. Chem. Phys. **136**, 114311 (2012).
- [12] M. H. F. Bettega, S. D. Sanchez, M. T. N. Varella, A. Zecca, L. Chiari, E. Trainotti e M. J. Brunger, Phys. Rev. A **86**, 022709 (2012).

- [13] R. T. Sugohara, M. G. P. Homem, I. Iga, G. L. C. de Souza, L. E. Machado, J. R. Ferraz, A. S. dos Santos, L. M. Brescansin, R. R. Lucchese e M.-T. Lee, “Cross sections for electron collisions with dimethyl ether”, *Phys. Rev. A* **88**, 022709 (2013).
- [14] Ver por exemplo: Swarm studies and inelastic electro-molecule collisions, Proceeding of the meeting of the Fourth International Swarm Seminar and the inelastic Electron-Molecule Collision Symposium, ed. Pó L. Pitchford, V Mckoy, A. Chutjian e S Trajmar (Spring-Verlag, N. York, 1986).
- [15] J. J. Perry, Y. H. Kim, J. L. Fox, and H. S. Porter, *J. Geophys. Res.* **104**, 16541 (1999).
- [16] B. Boudaiffa, P. Cloutier, D. Hunting, M. A. Huels, and L. Sanche, “Resonant formation of DNA strand breaks by low-energy (3 to 20 eV) electrons”, *Science* **287**, 1658 (2000).
- [17] L. Sanche, “Role of secondary low energy electrons in radiobiology and chemoradiation therapy of cancer”, *Chem. Phys. Lett.* **474**, 1 (2009).
- [18] E. Brun, P. Cloutier, C. Sicard-Roselli *et al.*, “Damage Induced to DNA by Low-Energy (0–30 eV) Electrons under Vacuum and Atmospheric Conditions”, *J. Chem. Phys. B* **113**, 10008 (2009).
- [19] L. Sanche, “biological chemistry beyond radical thinking”, *Nature* **461**, 358 (2009).
- [20] A. Dumont, Y. Zheng, D. Hunting *et al.*, “Protection by organic ions against DNA damage induced by low energy Electrons”, *J. Chem. Phys.* **132**, 045102 (2010).
- [21] L. Sanche, “Low energy electron- driven damage in biomolecules”, *Eur. Phys. J. D.* **35**, 367 (2005).
- [22] M. A. Huels, B. Boudaiffa, P. Cloutier *et al.*, “Single, Double, and Multiple Double Strand Breaks Induced in DNA by 3–100 eV Electrons”, *J. Am. Chem. Soc.* **125**, 4467 (2003).
- [23] S. S. Leonard, C. Xia, B. H. Jiang, B. Stinefelt, H. Klandorf, G. K. Harris e X. L. Shi, “Resveratrol scavenges reactive oxygen species and effects radical-induced cellular responses”, *Biochem. Bioph. Res. Co.* **309**, 1017 (2003).
- [24] I. P. Kumar, S. V. S. Rana, N. Samanta e H. C. Goel, “Enhancement of radiation-induced apoptosis by *Podophyllum hexandrum*”, *J. Pharm. Pharmacol.* **55**, 1267 (2003).
- [25] H. B. An, J. Xie, J. Q. Zao e Z. S. Li, *Free Radical Res.* **37**, 1107 (2003).
- [26] J. E. Hudson, *Chem. Phys.* **5**, 3162 (2003).
- [27] F. A. Gianturco e R. R. Lucchese, “The elastic scattering of electrons from CO₂ molecules: II. Molecular features and spatial symmetries of some resonant states”, *J. Phys. B* **29**, 17 (1996).

- [28] G. L. C. de Souza, M. -T. Lee, L. E. Machado *et al.*, “Cross sections for electron scattering by propane in the low- and intermediate-energy ranges”, *Phys. Rev. A* **82**, 012709 (2010).
- [29] C. J. Joachain, *Quantum Collision Theory 3a*. Edição, Amsterdam, North Holland (1975).
- [30] E. Feenberg, *Phys. Rev.* **40**, 40 (1932).
- [31] B. A. Lippmann e J. Schwinger, “Variational principles for scattering processes”, *Phys. Rev A* **79**, 469 (1950).
- [32] S. Geltman, “Topics in Atomic Collision Theory”, Academic Press, New York (1969).
- [33] N. F. Lane, “The Theory on Electron-Molecule Collisions”, *Rev. Mod. Phys.* **52**, 33 (1980).
- [34] P. G. Burke and A. L. SinFaiLam, “Electron Molecule Interaction II. Scattering By Closed-Shell Diatomic Molecules”, *Journal Phys B* **3**, 641(1970)
- [35] N. T. Pardial e D. W. Norcross, “Parameter-free model of the correlation-polarization potential for electron-molecule collisions”, *Phys. Rev. A* **29**, 1742 (1984).
- [36] M.-T Lee, I. Iga, L. E. Machado e L. M. Brescansin, “Model absorption potential for electron-molecule scattering in the intermediate-energy range”, *Phys. Rev. A* **62**, 62710 (2000).
- [37] M.-T. Lee, I. Iga, L. E. Machado, L. M. Brescansin, E. A. y Castro, I. P. Sanches and G. L. C. de Souza, “Absorption effects for electron-molecule collisions”, *Journal of Electron Spectroscopy and related Phenomena* **155**, 14 (2007).
- [38] G. Staszewska, D. W. Schwenke, D. Thirumalai e D. G. Truhlar, “Quasifree-scattering model for the imaginary part of the optical potential for electron scattering”, *Phys. Rev. A* **28**, 2740 (1983).
- [39] R. Burke, *Phys. Rev. A* **29**, 1863 (1984).
- [40] S. Hara, “The Scattering of Slow Electrons by Hydrogen Molecules”, *J. Phys. Soc. Jpn.* **22**, 710 (1967).
- [41] R. R. Lucchese e V. McKoy, “Pade-approximant corrections to general variational expressions of scattering theory: Application to So. photoionization of carbon monoxide”, *Phys. Rev. A* **28**, 1382 (1983).
- [42] F. A. Gianturco, R. R. Lucchese e N. Sanna, “On the scattering of low-energy electrons by sulfur-hexafluoride”, *J. Chem. Phys.* **102**, 5743 (1995).

- [43] T. N. Rescigno e B. H. Lengsfeld, “A fixed-nuclei, ab initio treatment of low-energy electron-H₂O scattering”, *Z. Phys. D- Atom. Mol. and Clus.* **24**, 117 (1992).
- [44] M. W. Schmidt, K. K. Baldrige, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. H. Jensen *et al.*, “General Atomic and Molecular Electronic-Structure System”, *J. Comput. Chem.* **14**, 1343 (1993)
- [45] <http://cccbdb.nist.gov>.
- [46] Z. Masin, J. D. Gorfinkiel, D. B. Jones, S. M. Bellm, and M. J. Brunger, “Elastic and inelastic cross sections for low -energy electron collisions with pyrimidine”, *J. Chem. Phys.* **136**, 144310 (2012)
- [47] P. Palihawadana, J. Sullivan, M. Brunger, C. Winstead, V. McKoy, G. Garcia, F. Blanco, and S. Buckman, “Low-energy elastic electron interactions with pyrimidine”, *Phys. Rev. A* **84**, 062702 (2011)
- [48] M. A. Khakoo, J. Blumer, K. Keane, C. Campbell, H. Silva, M. C. A. Lopes, C. Winstead, V. McKoy, R. F. da Costa, L. G. Ferreira, M. A. P. Lima, and M. H. F. Bettega, “Low-energy electron scattering from methanol and ethanol”, *Phys. Rev. A* **77**, 042705 (2008)
- [49] J. B. Maljkovic, A. R. Milosavljevic, F. Blanco, D. Sevic, G. Garcia, and B. P. Marinkovic, “Absolute differential cross sections for elastic scattering of electrons from pyrimidine”, *Phys. Rev. A* **79**, 052706 (2009)
- [50] C. Winstead and V. McKoy, “Interaction of low-energy electrons with the purine bases, nucleosides, and nucleotides of DNA”, *J. Chem. Phys.* **125**, 174304 (2006).
- [51] A. Zecca, L. Chiari, G. Garc´ia, F. Blanco, E. Trainotti, and M. J. Brunger, “Total cross sections for positron and electron scattering from pyrimidine”, *J. Phys. B* **43**, 215204 (2010).
- [52] M. C. Fuss, A. G. Sanz, F. Blanco, J. C. Oller, P. L. Vieira, M. J. Brunger, G. Garc´ia, “Total electron-scattering cross sections from pyrimidine as measured using a magnetically confined experimental system”, *Phys. Rev. A* **88**, 042702 (2013)