

CARLOS EDUARDO BIELSCHOWSKY

ESTUDO DE COLISÕES INELÁSTICAS $e^- + \text{ÁTOMOS}$
ALCALINOS COM A APROXIMAÇÃO DE GLAUBER

TESE DE

DOUTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro, 1984

Dalila

Pablo Cauê

e ao Nenem

AGRADECIMENTOS

– Ao Henrique Lins de Barros por estes anos que trabalhamos num bom clima, e também pelo apoio que deu em diversas oportunidades.

– A Mena Bielschowsky e Ricardo Amorim, pela ajuda dada neste período.

– À equipe do Laboratório de Impacto de Elétrons do IQ-UFRJ, em especial ao Carlos A. Lukas, por terem mostrado os detalhes da experiência.

– Ao Laboratório de Computação Científica, LCC-CNPq, em especial ao Luis Carlos, pelo apoio na parte de computação.

– À Vanda Wood e Myriam Coutinho pela força nestes anos que passei no CBPF.

– À Helena S. Ferreira pela excelente e rápida datilografia.

– Ao CNPq pelo apoio financeiro.

RESUMO

A aproximação de Glauber é utilizada no estudo de excitações a estados do espectro discreto de átomos alcalinos por impacto de elétrons. A interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e $(N-1)$ cargas nucleares é descrita através de um potencial do tipo Yukawa. São obtidas expressões analíticas para excitações a estados m^2S e m^2P , bem como resultados numéricos para diversos processos de excitação dos átomos alcalinos.

SUMMARY

Glauber's approximation is used to study discrete excitations in alkali atoms by electron impact. The interaction between the incident electron and the core electrons and $(N-1)$ nuclear charges is described through an Yukawa-like potential. Analytical expressions for m^2S and m^2P excitations are obtained, as well as numerical results for several excitations processes in alkali atoms.

SUMÁRIO

	<u>Pág</u>
AGRADECIMENTOS	iii
RESUMO	iv
SUMMARY	iv
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	ix
<u>CAPÍTULO I</u> - INTRODUÇÃO	1
<u>CAPÍTULO II</u> - FORMALISMO BÁSICO DA TEORIA DE COLISÃO ATÔMICA	6
2.1 - Descrição da Experiência	6
2.2 - Aspectos Ligados à Formulação Teórica	9
2.3 - Forma Assintótica e Seção de Choque Diferencial	12
2.4 - Forma Integral para a Equação de Auto-Vetores e Princípio de Pauli	17
<u>CAPÍTULO III</u> - MÉTODOS DE APROXIMAÇÃO	26
3.1 - Método de Acoplamento-Forte	26
3.2 - Aproximação de Born	32
3.3 - Aproximação de Glauber	38
<u>CAPÍTULO IV</u> - RESUMO DOS TRABALHOS NA ÁREA	51
4.1 - Alguns Aspectos dos Átomos Alcalinos	52
4.2 - Colisões Inelásticas Envolvendo Átomos de Lítio	56
4.3 - Colisões Inelásticas Envolvendo Átomos de Sódio	62
4.4 - Colisões Inelásticas Envolvendo Átomos de Potássio	68
<u>CAPÍTULO V</u> - DESCRIÇÃO DO ÁTOMO	73
5.1 - Função de Onda Atômica	73
5.2 - Orbitais do Tipo Slater	78
5.3 - Aproximação de Não Relaxamento dos Orbitais do Caróço Atô mico	81

5.4 - Aproximação de Caroco Inerte	81
<u>CAPÍTULO VI</u> - EXPRESSÕES ANALÍTICAS PARA A SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL	91
6.1 - Fase de Glauber	92
6.2 - Expressão Analítica para a Seção de Choque Diferencial em Transições do Tipo $ns \rightarrow ms$	94
6.3 - Expressão Analítica para a Seção de Choque Diferencial em Transições do tipo $ns \rightarrow mp$	102
<u>CAPÍTULO VII</u> - DETALHES DOS CÁLCULOS NUMÉRICOS	114
7.1 - A Função de Lommel Modificada e Procedimentos Visando à Redução do Tempo de Computação	117
7.2 - A Integração	121
7.3 - Testes	125
<u>CAPÍTULO VIII</u> - RESULTADOS	129
8.1 - Análise da Descrição dos Elétons do Caroco Atômico....	130
8.2 - Processo $e^- + Li(2s) \rightarrow e^- + Li(2p)$	136
8.3 - Processo $e^- + Li(2s) \rightarrow e^- + Li(3s)$	140
8.4 - Processo $e^- + Li(2s) \rightarrow e^- + Li(3p)$	144
8.5 - Processo $e^- + Na(3s) \rightarrow e^- + Na(3p)$	147
8.6 - Processo $e^- + K(4s) \rightarrow e^- + K(4p)$	153
<u>CAPÍTULO IX</u> - CONCLUSÕES	180
<u>BIBLIOGRAFIA</u>	184

LISTA DE FIGURAS

<u>FIG.</u>	<u>PÁG.</u>
2.1 - Esquema do equipamento experimental	24
2.2 - Espectro de perda de energia para a molécula de N ₂ , ângulo de espalhamento de 2° e energia de impacto de 1 keV	25
3.1 - Definição de ângulos	41
3.2 - Excitação do átomo de lítio ao estado 3 ² S _{1/2} , mostrando alguns processos possíveis	50
4.1 - Seção de choque integral para os átomos de lítio, sódio e potássio	72
7.1 - Fluxograma dos programas computacionais utilizados neste trabalho	128
8.1 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de lítio, em várias energias de impacto.....	167
8.2 - Seção de choque integral para a excitação ressonante nos átomos de lítio, sódio e potássio	168
8.3 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio ao estado 3 ² S _{1/2} na energia de impacto de 10 eV	169
8.4 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio ao estado 3 ² S _{1/2} na energia de impacto de 20 eV	170
8.5 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio ao estado 3 ² S _{1/2} na energia de impacto de 60 eV	171
8.6 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio aos estados 3 ² P nas energias de impacto de 20 e 60 eV	172
8.7 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de sódio na energia de impacto de 54.4 eV.....	173
8.8 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de sódio na energia de impacto de 100 eV	174
8.9 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de sódio na energia de impacto de 150 eV	175

8.10 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de sódio na energia de impacto de 217.7 eV	176
8.11 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de potássio na energia de impacto de 60 eV	177
8.12 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de potássio na energia de impacto de 100 eV	178
8.13 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de potássio na energia de impacto de 200 eV	179

LISTA DE TABELAS

<u>TAB.</u>	<u>PÁG.</u>
5.1 - Forma dos orbitais do tipo Slater para os átomos de lítio, sódio e potássio	87
5.2 - Parâmetros A e λ do potencial de Yukawa para os estados 2^2S , 2^2P e 3^2S do átomo de lítio	88
5.3 - Parâmetros A e λ do potencial de Yukawa para os estados 3^2S e 3^2P do átomo de sódio	89
5.4 - Parâmetros A e λ do potencial de Yukawa para o estado 4^2S do átomo de potássio	90
6.1 - Coeficientes $C(n, \ell, t)$ das expressões para a amplitude de espalhamento	113
7.1 - Diferenças percentuais entre resultados obtidos no presente trabalho e resultados obtidos por outros autores	127
8.1 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de lítio, em várias energias de impacto	158
8.2 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio ao estado $3^2S_{1/2}$, em várias energias de impacto	159
8.3 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de sódio, em várias energias de impacto	160
8.4 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de potássio, em várias energias de impacto	161
8.5 - Seção de choque diferencial para a excitação ressonante do átomo de lítio na energia de impacto de 122 eV	162
8.6 - Comportamento dos resultados para a seção de choque diferencial como função dos parâmetros A e λ do potencial de Yukawa.....	163
8.7 - Comportamento dos resultados para a seção de choque diferencial com relação à função de onda atômica	164

8.8 - Diferença percentual entre os resultados para a seção de choque diferencial nas aproximações de Glauber IFC e YFC, para os processos de excitação do átomo de lítio aos estados 2^2P e 3^2S	165
8.9 - Seção de choque íntegral para o processo de excitação do átomo de lítio ao estado $3^2S_{1/2}$, nas energias de impacto de 10, 20 e 60 eV.	166

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A espectroscopia atômica e molecular por impacto de elétrons tem despertado crescente interesse desde o final dos anos cinquenta ⁽¹⁾. Um dos motivos que justificam este fato é que esta técnica permite, sem mudança nos equipamentos, o estudo de excitações de estados de valência e do caroço atômico, o que em termos de espectroscopia por radiação eletromagnética só foi viabilizado recentemente com o emprego do equipamento sofisticado que gera radiação sinclotrônica. Além disto, esta técnica permite o estudo de transições permitidas ou proibidas óticamente, bem como de transições onde os estados inicial e final de spin do alvo são diferentes. A obtenção de dados como função do ângulo em que os elétrons são espalhados gera uma série de importantes informações adicionais sobre os sistemas em estudo. Finalmente, trata-se de uma técnica relativamente pouco sofisticada em termos de equipamentos experimentais, o que permite, por exemplo, o desenvolvimento de espectrômetros no País.

Esta técnica, entretanto, apresenta uma forte desvantagem com relação à espectroscopia ótica, relacionada com a resolução dos espectros obtidos. Neste sentido pode ocorrer que informações sobre dois ou mais estados excitados se encontrem misturados nos espectros por impacto de elétrons, sem o estar nos espectros óticos. Convém salientar que avanços com relação à esta ques

tão têm sido obtidos, já sendo possível hoje a obtenção de espectros muito mais detalhados que nos anos sessenta.

Com relação ao esforço teórico, este sofre de significativa complexidade matemática decorrente da Hamiltoniana do problema comportar, além do sistema em estudo, um elétron adicional não ligado⁽²⁾. Para contornar estas dificuldades, foi elaborada uma série de métodos comportando diferentes aproximações na Hamiltoniana do problema, que geram expressões analíticas passíveis de obtenção de resultados numéricos. O surpreendente avanço na área de informática, bem como a maior disponibilidade de resultados experimentais, têm gerado crescentes avanços com relação à abordagem teórica.

Pretendemos nos quatro primeiros capítulos deste trabalho, situar a questão teórica mostrando o formalismo básico e sua relação com a experiência, descrevendo diversos métodos de aproximação, bem como apresentando uma revisão da pesquisa teórica e experimental de excitações para estados discretos em átomos alcalinos por impacto de elétrons.

Conforme será discutido nestes capítulos a primeira aproximação de Born⁽³⁻⁴⁾, que requer um esforço numérico relativamente baixo, gera resultados em razoável acordo com os resultados experimentais para altas energias de impacto. Na região de baixas energias de impacto, um bom acordo com a experiência é obtido com o método de acoplamento-forte^(5,6) e métodos correlatos, que se baseiam na expansão da função de onda como produtos antissimetrizados de orbitais atômicos e funções que representam o elétron adicional. Estes métodos, em princípio, não se adequam à pesquisa em energias intermediárias, tendo sido feitas, nesta região de energias de impacto, abordagens com diversos métodos, tais como,

séries de Born ^(2,7), aproximação de Glauber, aproximação de ondas distorcidas ^(8,9), aproximação de Vainshtein ⁽¹⁰⁾, extensões ao método de acoplamento-forte ⁽¹¹⁾, etc.

A aproximação de Glauber, oriunda da física nuclear, foi aplicada em colisões atômicas inicialmente por Franco (1968) ⁽¹²⁾ no estudo de alvos de hidrogênio e utilizada em seguida no estudo de alvos de hélio ⁽¹³⁾. Em 1973, Walters ⁽¹⁴⁾ mostrou que a aproximação de Glauber é adequada ao estudo de transições ressonantes em átomos alcalinos na região de energias intermediárias. Seus resultados, juntamente com os resultados obtidos com o método de ondas distorcidas ⁽⁹⁾, apresentaram bom acordo com os resultados experimentais e estão bastante superiores aos resultados obtidos com outros métodos.

O trabalho de Walters, entretanto, é um pouco restrito, uma vez que foram abordadas apenas transições ao primeiro estado excitado dos átomos de lítio, sódio e potássio, e os elétrons do caroço atômico não foram considerados no modelo utilizado. Dada a baixa disponibilidade de outros resultados nesta aproximação, a questão de sua adequação a uma aplicação mais ampla abordando outras excitações em átomos alcalinos, bem como em alvos diferentes dos mencionados, ficou em aberto.

Neste trabalho obtivemos resultados numéricos para diversos processos de excitação de átomos alcalinos com a aproximação de Glauber, num modelo onde os elétrons do caroço atômico são descritos através de um potencial do tipo Yukawa. Para tal fim desenvolvemos expressões analíticas para processos onde o elétron de valência é excitado de estados do tipo s a estados do tipo s e p , bem como elaboramos uma série de programas computacionais que viabilizaram a obtenção de resultados numéricos.

Trata-se de uma aplicação mais ampla da aproximação de Glauber uma vez que abordamos, por exemplo, transições óticamente proibidas, bem como utilizamos uma descrição mais realista do átomo no processo de colisão. Com isto acreditamos contribuir, entre outras coisas, a uma mais ampla análise das potencialidades da aproximação de Glauber, a um maior entendimento dos processos abordados neste trabalho, bem como ao estudo do efeito dos elétrons do caroço atômico nestes processos.

No Capítulo II descrevemos uma montagem experimental, abordamos alguns aspectos relacionados com a ligação entre o trabalho experimental e a formulação teórica, e descrevemos o formalismo básico da teoria de colisão atômica.

No Capítulo III descrevemos alguns métodos de aproximação, utilizados na pesquisa teórica de excitações a estados discretos de átomos alcalinos por impacto de elétrons.

Fazemos, no Capítulo IV, uma revisão dos trabalhos experimentais e teóricos referentes a excitações a estados discretos de átomos alcalinos por impacto de elétrons, discutindo alguns aspectos ligados a estes processos.

No Capítulo V, discutimos as diversas aproximações utilizadas na descrição teórica dos átomos alvos.

Colocamos, no Capítulo VI, a dedução das expressões analíticas para a seção de choque diferencial na aproximação de Glauber, referente a excitações do tipo $n^2S_{1/2} \rightarrow m^2S_{1/2}$ e $n^2S_{1/2} \rightarrow m^2P_{1/2,3/2}$ em átomos alcalinos.

Os procedimentos adotados nos cálculos numéricos estão descritos no Capítulo VII.

No Capítulo VIII, apresentamos os resultados deste trabalho. Estes resultados são comparados aos resultados de traba -

lhos experimentais e outros trabalhos teóricos, e discutimos alguns aspectos ligados aos processos abordados. Fazemos uma análise da adequação da aproximação de Glauber ao estudo dos processos abordados, bem como da descrição utilizada para os elétrons do caroço atômico.

No Capítulo IX, encontram-se as conclusões deste trabalho.

CAPÍTULO II

FORMALISMO BÁSICO DA TEORIA DE COLISÃO ATÔMICA

Neste capítulo procuramos descrever o formalismo básico da teoria de colisão atômica, que constitui o ponto de partida para os diversos métodos de aproximação abordados no próximo capítulo.

Uma vez que a formulação teórica pretende a descrição dos resultados obtidos nos laboratórios, iniciamos o capítulo com uma descrição da experiência. Procuramos, no decorrer do texto, mostrar como é feita a ligação entre a teoria e a experiência, ressaltando algumas aproximações realizadas na formulação teórica básica como função do procedimento experimental.

2.1 - DESCRIÇÃO DA EXPERIÊNCIA

O método experimental consiste basicamente ⁽¹⁾ em incidir um feixe de elétrons sobre um conjunto de átomos ou moléculas e contar, num sistema de detecção, o número de elétrons espalhados como função da energia e ângulo de espalhamento. Os componentes do alvo, ao interagirem com os elétrons incidentes, podem ser excitados para estados do espectro discreto ou contínuo, com conseqüente perda de energia dos elétrons causadores destes processos.

Como exemplo do equipamento experimental mostramos, na Figura 2.1, o esquema de um espectrômetro utilizado no Laboratório de Impacto de Elétrons da UFRJ ⁽¹⁵⁾. A letra A representa um canhão de elétrons basicamente composto de um filamento incandescente acoplado à uma lente eletrostática, cujo campo elétrico arranca elétrons do filamento e os acelera até uma determinada velocidade. A letra B representa uma agulha pela qual é injetado um gás de átomos ou moléculas que constituem o alvo. O feixe de elétrons colide perpendicularmente com o feixe que compõe o alvo, e os elétrons espalhados num certo ângulo θ com relação à direção dos elétrons incidentes passam por um sistema de fendas representado pela letra C. Este conjunto de equipamentos está numa região de vácuo da ordem de 10^{-5} torr. Os elétrons que emergem das fendas incidem numa região de campo elétrico que os separa por trajetórias como função de suas velocidades, equipamento denominado de analisador de velocidades, e está representado pela letra D. Os elétrons que seguem uma determinada faixa de trajetórias no analisador, e portanto dentro de uma determinada faixa de velocidades, atingem um detector representado pela letra E. Este detector gera um pulso para cada elétron que o atinge. Variando o campo elétrico aplicado no analisador, varia-se a faixa de velocidades dos elétrons que atingem o detector, viabilizando portanto a contagem como função da perda de energia. Finalmente, a letra F representa um conjunto de equipamentos eletrônicos que armazena o número de pulsos gerados no detector como função dos diversos campos elétricos aplicados no analisador, ou seja, como função da perda de energia. Desta forma teremos armazenado um espectro de perda de energia para um determinado alvo, num determinado ângulo de espalhamento e para uma determinada energia de impacto.

Na Figura 2.2^(*) colocamos um exemplo de espectro obtido no referido laboratório para um alvo de N_2 , ângulo de espalhamento de 2° e energia de impacto de 1 KeV. No eixo vertical está o número de elétrons que atingem o detector como função da perda de energia, colocada no eixo horizontal. Podemos observar vários picos de contagem, sendo cada um associado a um ou uma série de estados finais da molécula. O primeiro pico, por exemplo, é associado a colisões elásticas, o segundo a excitações da molécula ao estado $a^1\pi_g$ (processo óticamente proibido), o terceiro a uma série de estados finais da molécula com forte predominância do estado $b^1\pi_u$, etc.

Pela posição dos picos no espectro é possível, sempre que a resolução o permite, obter energias de transição. A área de cada pico é relacionada com a probabilidade de excitação do alvo ao(s) estado(s) a ele associado(s). Desde que um pico esteja associado a apenas um processo, obtém-se a partir de sua área um ponto da seção de choque diferencial para este processo. A obtenção de espectros para diferentes ângulos de espalhamento gera uma série de informações adicionais sobre o sistema em estudo, que costumam ser colocadas em gráficos de seção de choque diferencial.

A seção de choque diferencial é definida como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta, \phi) = \frac{I(\theta, \phi)}{I_0} \quad i \rightarrow f \quad (2.1)$$

onde $I(\theta, \phi)d\Omega$ é o número de partículas espalhadas por área unitária e unidade de tempo num ângulo sólido $d\Omega$, e I_0 é o número de partículas incidentes por área unitária e unidade de tempo. O

(*) Comunicação Pessoal, G.G. de Souza e C.A. Lucas, IQ-UFRJ, 1984.

símbolo $i \rightarrow f$ define o processo em estudo, relacionado com os estados inicial a final do alvo, ou seja, com a perda de energia.

Pela definição acima podemos observar que a seção de choque diferencial relata a probabilidade de, num processo de colisão, um elétron ser espalhado num determinado ângulo sólido $d\Omega$ tendo excitado o alvo a um determinado estado $|f\rangle$. Neste sentido ela é facilmente conectável à formulação teórica, dado o caráter probabilístico da Mecânica Quântica.

Ainda com relação à experiência, pode-se melhorar a resolução dos espectros acoplando um monocromador de elétrons à saída do canhão. Com isto aumenta-se o número de picos relacionados com apenas um processo de excitação, logo, há possibilidade de obter seções de choque diferenciais para um maior número de processos. Tal procedimento, entretanto, reduz a intensidade do feixe incidente, o que acarreta problemas de contagem, restringindo a faixa angular viável à obtenção de espectros (o número de elétrons espalhados cai rapidamente com o ângulo de espalhamento). Convém salientar que a intensidade dos feixes deve ser sempre suficientemente pequena para que se possa desprezar interações entre elétrons do feixe de elétrons incidente e entre átomos ou moléculas do feixe que constitui o alvo.

2.2 - ASPECTOS LIGADOS À FORMULAÇÃO TEÓRICA

A formulação teórica comporta diversos níveis de aproximação, que vão desde sua relação com a experiência até os diversos métodos de aproximação às equações fundamentais do problema.

Uma das aproximações relacionadas com a questão experi-

mental consiste em assumir uma onda plana para descrever o elétron incidente. Trata-se de uma aproximação, uma vez que é impossível experimentalmente construir um feixe incidente totalmente monocromático (o próprio princípio de incerteza o proíbe). Deveria-se, a rigor, considerar para a função de onda do elétron incidente um pacote de ondas, tanto mais estreito em \vec{k} e difuso em \vec{r} , quanto mais bem definida a energia dos elétrons incidentes. Pode-se mostrar ⁽¹⁶⁾ que a aproximação mencionada é adequada para o problema de colisão atômica, excluindo-se certos casos onde ocorrem ressonâncias.

Ao considerarmos uma onda plana para descrever o elétron incidente, nosso sistema terá energia total bem definida e estaremos apenas interessados nas soluções estacionárias da Hamiltoniana. Por outro lado, considerar um pacote de ondas para descrever o elétron incidente implica na complicação adicional, de difícil solução, relacionada com a evolução temporal do referido pacote de ondas.

Uma segunda aproximação consiste em considerar o processo de colisão como decorrente apenas das interações Coulombianas entre os elétrons do sistema e destes com o núcleo. Com isto estaremos desprezando, por exemplo, as interações magnéticas que contribuem para as interações finas e hiperfinas dos átomos. O efeito destes termos é levado em conta apenas na construção das funções de onda atômicas ao utilizar, conforme veremos no Capítulo V, um acoplamento vetorial adequado para descrever os estados atômicos.

Desta forma, a Hamiltoniana do problema é descrita em unidades atômicas por:

$$H(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1}) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N+1} \nabla_j^2 - \sum_{j=1}^{N+1} \frac{Z}{r_j} + \sum_{i>j=1}^{N+1} \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.2)$$

onde $\hat{\mathbf{r}}_j$ representa o conjunto de coordenadas espaciais e de spin do j -ésimo elétron, ou seja, $\hat{\mathbf{r}}_j = (\vec{\mathbf{r}}_j, \vec{\mathbf{s}}_j)$; $r_j = |\vec{\mathbf{r}}_j|$; $r_{ij} = |\vec{\mathbf{r}}_i - \vec{\mathbf{r}}_j|$; dado que a massa do núcleo é muito maior que a dos elétrons, consideramos o centro de massa como coincidente com o núcleo, Z é o número atômico, e N é o nº de elétrons do átomo.

Os estados do sistema são descritos pelas funções de onda $\theta(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, t)$, que satisfazem à equação de Schrödinger dada por:

$$H(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1})\theta(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, t) = i \frac{\partial \theta}{\partial t}(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, t). \quad (2.3)$$

Uma vez que a Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo, podemos realizar a separação de variáveis:

$$\theta(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1}, t) = \psi(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1}) \exp(-iEt), \quad (2.4)$$

o que nos remete à procura das soluções estacionárias $\psi(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1})$ da seguinte equação de auto-valores:

$$H(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1})\psi(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1}) = E \psi(\hat{\mathbf{r}}_1 \dots \hat{\mathbf{r}}_{N+1}), \quad (2.5)$$

sendo E a energia total do sistema que, por conservação de energia, atende à relação:

$$E = \varepsilon_0 + \frac{k_0^2}{2} = \varepsilon_\alpha + \frac{k_\alpha^2}{2}, \quad (2.6)$$

onde ε_0 e $k_0^2/2$ são, respectivamente, a energia total do átomo

no estado fundamental e a energia cinética do elétron incidente ; ϵ_α e $k_\alpha^2/2$ são, respectivamente, a energia total do átomo no estado final $|\alpha\rangle$ e a energia cinética do elétron espalhado.

O sistema expresso pela Hamiltoniana (2.2) comuta com o operador P_{ij} que permuta as coordenadas dos elétrons, refletindo o fato destes serem indistinguíveis. Desta forma, podemos encontrar soluções estacionárias que sejam também auto-funções deste operador, ou seja, que tenham simetria definida com relação à troca de coordenadas dos elétrons (Mott e Massey (1971)) (17). No caso de fêrmions o princípio de exclusão de Pauli exige que:

$$P_{ij} \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_i \dots \hat{r}_j \dots \hat{r}_{N+1}) = \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_j \dots \hat{r}_i \dots \hat{r}_{N+1}) = -\psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_i \dots \hat{r}_j \dots \hat{r}_{N+1}) \quad (2.7)$$

Este fato traz importantes consequências na procura de soluções aproximadas à equação (2.5), que serão discutidas no final deste capítulo.

2.3 - FORMA ASSINTÓTICA E SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL

A procura das soluções da equação de auto-valores (2.5) é iniciada com a obtenção de sua forma assintótica. Para tal é conveniente escrever a Hamiltoniana na forma (2):

$$H(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = H_a(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) + H_0(\hat{r}_{N+1}) + V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) \quad (2.8)$$

onde

$$H_a(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \nabla_j^2 - \sum_{j=1}^N \frac{Z}{r_j} + \sum_{i>j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.9)$$

é a Hamiltoniana atômica,

$$H_0(\hat{r}_{N+1}) = -\frac{1}{2} \nabla_{N+1}^2 \quad , \quad (2.10)$$

é a Hamiltoniana do elétron livre, e

$$V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = \sum_{j=1}^N \left[-\frac{1}{r_{N+1}} + \frac{1}{r_{j,N+1}} \right] = \sum_{j=1}^N V_j(\vec{r}_j, \vec{r}_{N+1}) \quad , \quad (2.11)$$

é o potencial de interação entre o elétron incidente e o átomo.

Podemos escrever a equação de auto-valores (2.5) na forma:

$$\begin{aligned} [H_0(\hat{r}_{N+1}) + H_a(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) + V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1})] \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = \\ = E \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) \quad . \end{aligned} \quad (2.12)$$

Uma vez que estamos tratando de átomos neutros, o potencial de interação $V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1})$ se anula mais rapidamente que o Coulombiano na medida em que o elétron adicional se afasta do átomo. Dentro destas condições, pode-se mostrar que esta equação admite a seguinte solução assintótica (2):

$$\begin{aligned} \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) \cong \exp(i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_j) \chi_{m_s}^S(S_j) u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1}, \hat{r}_{j+1} \dots \hat{r}_{N+1}) + \\ \sum_{\alpha, m_s} \frac{\exp(i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}_j)}{r_j} f_{0\alpha}(\theta_j, \phi_j) \chi_{m_s}^S(S_j) u_\alpha(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1}, \hat{r}_{j+1} \dots \hat{r}_{N+1}) \\ + \text{Termo de Ionização} \quad , \end{aligned} \quad (2.13)$$

sendo u_α as funções de onda atômicas do espectro discreto, soluções da equação de auto-valores:

$$H_a u_\alpha = \epsilon_\alpha u_\alpha \quad . \quad (2.14)$$

Na expressão (2.13) $\chi_{m_s}^S(S_j)$ é a função de spin do j -ésimo elétron, o somatório em m_s' é referente aos possíveis estados finais de spin do j -ésimo elétron, o somatório em α refere-se a todos os possíveis estados discretos que o átomo pode atingir no processo de colisão, ou seja, aos estados discretos energeticamente acessíveis dados pela condição que k_α na equação (2.6) sejam números reais. Estes estados são denominados canais abertos de espalhamento.

Nos casos onde a energia do elétron incidente é maior que o potencial de ionização, o átomo poderá também ser ionizado, e deve-se considerar na equação (2.13) um termo de ionização dado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \text{Termo de Ionização} = & \lim_{r_j \rightarrow \infty} - \frac{1}{4\pi} \int dk u_k(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1}, \hat{r}_{j+1} \dots \hat{r}_{N+1}) \\ & \int d\hat{r}_1 \dots d\hat{r}_{N+1} \frac{e^{ik|\vec{r}_j - \vec{r}_j'|}}{|\vec{r}_j - \vec{r}_j'|} u_k^*(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1}, \hat{r}_{j+1} \dots \hat{r}_{N+1}) \\ & V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) \quad . \quad (2.15) \end{aligned}$$

Os dois primeiros termos do lado direito da equação (2.13) comportam uma visualização bastante clara. O primeiro termo representa um elétron com energia bem definida $k_0^2/2$, incidindo sobre um átomo no estado fundamental. Cada um dos termos do somatório em α e m_s' no segundo termo, representam uma onda espalhada radialmente, modulada angularmente pela função $f(\theta, \phi)$, estando o átomo num dos estados discretos acessíveis $|\alpha\rangle$.

É fácil perceber que estando o detector à uma distância macroscópica do alvo, o dado experimental estará relacionado com a função de onda na região assintótica, logo com as funções $f(\theta, \phi)$, conhecidas como amplitude de espalhamento. Pela equação

(2.13) pode-se intuir que esta função determina as probabilidades relativas de excitação do átomo aos estados acessíveis, bem como sua correlação com o ângulo de espalhamento. É óbvio que as amplitudes de espalhamento dependem do que ocorre durante o processo de colisão, só podendo ser determinadas a partir do conhecimento da função de onda em todo o espaço.

A seção de choque diferencial (eq. (2.1)) é igual ao fluxo de partículas espalhadas numa superfície esférica $r^2 d\Omega$ (para $r \rightarrow \infty$), dividido pelo fluxo incidente numa área unitária. Podemos então expressá-la, no contexto da teoria quântica ⁽¹⁶⁾, como:

$$\frac{d\sigma_{0 \rightarrow \alpha}}{d\Omega} = \frac{j_r}{j_0} r^2 d\Omega / j_0 \quad , \quad (2.16)$$

onde j_r é a densidade de corrente de probabilidade radial para $r \rightarrow \infty$, relacionada com um determinado processo $|0\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$, e j_0 a densidade de corrente de probabilidade incidente.

Calculando as densidades de corrente de probabilidade a partir da função de onda expressa pela equação (2.13), teremos para o caso de excitações discretas:

$$\frac{d\sigma_{0 \rightarrow \alpha}(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{k_\alpha}{k_0} |f_{0 \rightarrow \alpha}(\theta, \phi)|^2 \quad . \quad (2.17)$$

A seção de choque integral para um processo $|0\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$ é dada por:

$$\sigma_{0 \rightarrow \alpha} = \int \frac{d\sigma_{0 \rightarrow \alpha}(\theta, \phi)}{d\Omega} d\Omega = \frac{k_\alpha}{k_0} \int |f_{0 \rightarrow \alpha}(\theta, \phi)|^2 d\Omega \quad , \quad (2.18)$$

sendo $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$.

Em geral, se a função de onda que descreve o estado ini

cial do átomo não é esfericamente simétrica, a seção de choque integral, dada pela expressão acima, ainda é função da direção do feixe incidente, o que não corresponde, em certos casos, à situação experimental. Tal problema pode ser contornado ao tomarmos uma média da expressão acima em todas as direções de incidência \hat{k}_0 , na forma:

$$\sigma_{0\alpha} = \frac{1}{4\pi} \int d\hat{k}_0 \sigma_{0\alpha}(\hat{k}_0) \quad (2.19)$$

e notarmos a equivalência, com relação à seção de choque integral, em incidir feixes de elétrons em todas as possíveis direções de incidência sobre átomos numa determinada orientação particular (conforme realizado na expressão acima), ou tomar uma média sobre todas as possíveis orientações do átomo ao incidir um feixe numa particular direção. Trata-se da última quantidade que é efetivamente medida no laboratório quando o alvo está no estado gasoso, ou compõe-se de um feixe de átomos não polarizado ⁽²⁾.

Conforme mencionado na primeira seção deste capítulo, é usual nos espectros de perda de energia ter um determinado pico de contagem associado a diversos estados finais do átomo. Nestes casos a área subentendida por este pico estará relacionada com a soma das seções de choque diferenciais aos referidos estados finais. Para que se faça nestes casos a equivalência entre os resultados teóricos e experimentais, é necessário somar na expressão (2.17) todos os estados finais do alvo subentendidos pelo pico de contagem, o que fornece:

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} \Big|_{0 \rightarrow \{f\}} = \sum_{\alpha} \frac{k_{\alpha}}{k_0} \left| f(\theta, \phi) \right|_{0 \rightarrow \alpha}^2, \quad (2.17b)$$

onde representamos por $\{f\}$ o conjunto de estados finais $|\alpha\rangle$ misturados no particular pico de contagem. Da mesma forma, deve-se somar nas expressões (2.18) e (2.19) todos os estados finais.

2.4 - FORMA INTEGRAL PARA A EQUAÇÃO DE AUTO-VETORES E PRINCÍPIO DE PAULI

A equação de auto-vetores (2.5) não admite solução exata. Uma forma de se obter soluções aproximadas consiste em trabalhar diretamente com esta equação diferencial e impor às suas soluções a condição ao contorno do problema expressa na eq. (2.13). Uma outra forma de trabalho, consiste em transformá-la numa equação integral através do formalismo da função de Green, onde neste processo já é imposta a condição ao contorno do problema ao escolher a função de Green apropriada. É então a partir da forma integral para a equação de auto-vetores que se inicia a procura das soluções aproximadas. São, evidentemente, duas maneiras formalmente equivalentes de se abordar o problema, sendo que a última é, em muitos casos, mais apropriada no trato de diversos métodos de aproximação, tais como, Born, Glauber, etc.

A equação (2.5) pode ser escrita como:

$$[E - H_0(\hat{r}_{N+1}) - H_a(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N)] \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) \quad (2.20)$$

Definindo a função de Green como:

$$G_{0a}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}; \hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) [E - H_0(\hat{r}_{N+1}) - H_a(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N)] = \delta(\hat{r}_1 - \hat{r}'_1) \dots \delta(\hat{r}_{N+1} - \hat{r}'_{N+1}) \quad (2.21)$$

Podemos colocar as soluções da equação (2.20) na forma:

$$\psi(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_{N+1}) = \phi_0(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_{N+1}) + \int d\tilde{r}'_1 \dots d\tilde{r}'_{N+1} G_{0a}(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_{N+1}; \tilde{r}'_1 \dots \tilde{r}'_{N+1}) V(\tilde{r}'_1 \dots \tilde{r}'_{N+1}) \psi(\tilde{r}'_1 \dots \tilde{r}'_{N+1}) \quad , \quad (2.22)$$

onde $\phi_0(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_{N+1})$ são as soluções da equação homogênea:

$$[E - H_0(\tilde{r}_{N+1}) - H_a(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_N)] \phi_0(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_{N+1}) = 0 \quad . \quad (2.23)$$

As equações (2.20) e (2.22) são equivalentes, uma vez que ainda não se tratou da questão das condições ao contorno. Isto pode ser observado ao realizar o processo inverso, ou seja, aplicar o operador $[E - H_0 - H_a]$ na equação (2.22) o que, utilizando a definição (2.21), gera a equação (2.20).

A solução da equação homogênea que satisfaz às condições ao contorno adequadas, quais sejam, de uma partícula incidente de momento \vec{k}_0 e direção \hat{k}_0 e o alvo no estado $u_0(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_N)$, é dada por:

$$\phi_0(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_{N+1}) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(S_{N+1}) u_0(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_N) \quad . \quad (2.24)$$

A função de Green, definida pela equação (2.21) admite infinitas soluções. Apenas uma, entretanto, satisfaz às condições ao contorno do problema, ou seja, fornece o comportamento assintótico da função de onda na forma expressa pela equação (2.13). Pode-se mostrar ⁽²⁾ que esta função é dada pela expressão:

$$G_{0a}(\tilde{r}_1 \dots \tilde{r}_{N+1}; \tilde{r}'_1 \dots \tilde{r}'_{N+1}) = -\frac{1}{4\pi} \sum_{\beta, m'_s} \frac{e^{ik_\beta |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} \chi_{m'_s}^s(S_{N+1})$$

$$\chi_{m_s}^{s*}(s_{N+1}') u_\beta(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) u_\beta^*(\hat{r}_1' \dots \hat{r}_N') \quad . \quad (2.25)$$

Convém salientar que o símbolo \sum_β denota não apenas uma soma sobre todos os estados discretos, como também a integração sobre todos os estados do contínuo, sejam estes energeticamente acessíveis ou não. Em outras palavras, k_β , definido pela equação (2.6), pode assumir valores reais e imaginários.

Inserindo as expressões (2.25) e (2.24) na expressão (2.22) obtemos finalmente:

$$\begin{aligned} \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) &= e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) - \frac{1}{4\pi} \int d\hat{r}'_1 \dots d\hat{r}'_{N+1} \\ &\sum_{\beta, m'_s} \frac{e^{ik_\beta |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} \chi_{m'_s}^s(s_{N+1}) \chi_{m'_s}^{s*}(s_{N+1}') u_\beta(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) u_\beta^*(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_N) \\ &V(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) \psi(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) \quad . \quad (2.26) \end{aligned}$$

De novo, o somatório em β inclui todos os estados do espectro discreto e contínuo. É apenas na expressão assintótica (2.13), que descreve excitações reais, que o número de estados possíveis, é limitado pela energia disponível ⁽²⁾.

Ao tomarmos o limite em que \vec{r}_{N+1} tende a infinito, verifica-se facilmente que a expressão acima cai na forma da expressão assintótica (2.13), ao tomarmos na expressão (2.13) $j = N+1$. Neste processo podemos identificar as duas expressões termo a termo e obter a expressão para a amplitude de espalhamento:

$$\begin{aligned} f_{0\alpha}(\theta_j, \phi_j) &= -\frac{1}{4\pi} \int d\hat{r}'_1 \dots d\hat{r}'_{N+1} e^{-i\vec{k}_\alpha \cdot \vec{r}'_j} \chi_{m_s}^{s*}(s_j) u_\alpha^*(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{j-1}, \\ &\hat{r}'_{j+1} \dots \hat{r}'_{N+1}) V(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) \psi(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) \quad , \quad (2.27) \end{aligned}$$

sendo $\vec{k}_\alpha = k_\alpha \vec{r}_j / |\vec{r}_j|$.

Podemos observar pela expressão acima que, conforme mencionado, a determinação da amplitude de espalhamento para um determinado processo de excitação do alvo depende do conhecimento da função de onda em todo o espaço. No próximo capítulo descreveremos diversas formas de aproximar a função de onda do problema, que viabilizam a obtenção de resultados numéricos passíveis de confrontação com os resultados experimentais.

Consideremos agora a questão dos elétrons serem indistinguíveis, expressa através da função de onda ser antissimétrica com relação à permutação nas coordenadas de dois elétrons.

Para que a expressão integral satisfaça este fato é necessário que a função de onda, expressa pela equação (2.26), apresente apenas uma troca de sinal ao permutarmos as coordenadas de dois elétrons. Para facilitar a discussão, reproduzimos abaixo a expressão (2.26) bem como a expressão obtida ao permutar na expressão (2.26) as coordenadas N+1 e j.

$$\begin{aligned} \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) &= e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(S_{N+1}) u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \\ &- \frac{1}{4\pi} \int d\hat{r}'_1 \dots d\hat{r}'_{N+1} \sum_{\alpha, m'_s} \frac{e^{i\vec{k}_\alpha \cdot |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} \chi_{m'_s}^s(S_{N+1}) \\ &\chi_{m'_s}^{s*}(S'_{N+1}) u_\alpha(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) u_\alpha^*(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) V(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) \psi(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1}, \hat{r}_{N+1}, \hat{r}_{j+1}, \dots, \hat{r}_N, \hat{r}_j) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_j} \chi_{m_s}^s(S_j)$$

$$u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j+1}, \hat{r}_{N+1}, \hat{r}_{j+1} \dots \hat{r}_N) = \frac{1}{4\pi} \int d\hat{r}'_1 \dots d\hat{r}'_{N+1}$$

$$\sum_{\alpha, m_s'} \frac{e^{ik_\alpha |\vec{r}_j - \vec{r}_j'|}}{|\vec{r}_j - \vec{r}_j'|} \chi_{m_s}^s(S_j) \chi_{m_s}^{s*}(S_j') u_\alpha(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{j-1}, \vec{r}_{N+1}, \vec{r}_{j+1} \dots \vec{r}_N) u_\alpha^*(\vec{r}_1' \dots \vec{r}_{j-1}', \vec{r}_{N+1}', \vec{r}_{j+1}' \dots \vec{r}_N') v(\vec{r}_1' \dots \vec{r}_{N+1}') \psi(\vec{r}_1' \dots \vec{r}_{j-1}', \vec{r}_{N+1}', \vec{r}_{j+1}' \dots \vec{r}_N') \quad (2.29)$$

Não é em absoluto óbvio que estas expressões difiram apenas por uma troca de sinal. Para tal, basta comparar o primeiro termo do lado direito destas expressões, que colocamos abaixo:

$$\text{exp. (2.28):} \quad e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(S_{N+1}) u_0(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \quad (2.30)$$

$$\text{exp. (2.29):} \quad e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_j} \chi_{m_s}^s(S_j) u_0(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{j-1}, \vec{r}_{N+1}, \vec{r}_{j+1} \dots \vec{r}_N)$$

Para perceber a diferença entre estes dois termos, basta pensar em seus valores para valores grandes de $|\vec{r}_{N+1}|$, e ter em mente que as funções de onda atômicas do espectro discreto caem rapidamente na medida em que uma de suas coordenadas cresce. Desta forma, para as expressões (2.28) e (2.29) diferirem apenas por um sinal é necessário que o segundo termo do lado direito de cada expressão compense a diferença apresentada no primeiro termo.

A diferença entre estas expressões fica patente ao tomarmos, em cada uma, o limite em que a coordenada espacial $N+1$ tende a infinito. Para simplificar consideramos o caso em que a energia de impacto é menor que o potencial de ionização, com o que obtemos respectivamente:

$$\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(\vec{S}_{N+1}) u_0(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) + \sum_{\alpha, m_s}$$

$$\frac{e^{ik_{\alpha} \cdot \hat{r}_{N+1}}}{r_{N+1}} f(\theta_{0\alpha N+1}, \phi_{N+1}) \chi_{m_s}^s(S_{N+1}) u_{\alpha}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \quad (2.31)$$

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{r}_{N+1} \rightarrow \infty}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1}, \hat{r}_{N+1}, \hat{r}_{j+1} \dots \hat{r}_N, \hat{r}_j) &= \lim_{\vec{r}_{N+1} \rightarrow \infty} -\frac{1}{4\pi} \int dk \tilde{u}_k(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1} \hat{r}_{N+1} \\ &\hat{r}_{j+1} \dots \hat{r}_N) \int d\hat{r}_1 \dots d\hat{r}_{N+1} \frac{e^{ik|\vec{r}_j - \vec{r}'_j|}}{|\vec{r}_j - \vec{r}'_j|} u_k^*(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1}, \hat{r}_{N+1}, \hat{r}_{j+1} \dots \\ &\hat{r}_N) V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{j-1}, \hat{r}_{N+1}, \hat{r}_{j+1} \dots \hat{r}_N, \hat{r}_j) \end{aligned} \quad (2.32)$$

A primeira expressão é a expressão (2.13), e a segunda contém apenas estados atômicos do espectro contínuo, dado que a função de onda do espectro discreto se anula na medida em que uma de suas coordenadas tende a infinito.

Fica claro, a partir das expressões acima colocadas, que para que as expressões (2.28) e (2.29) difiram apenas por uma troca de sinal é necessário que o somatório em α englobe todos os estados do espectro contínuo e discreto. Em outras palavras, é necessário que a expressão integral para a função de onda contenha todos os estados atômicos, sejam estes energeticamente acessíveis ou não. Conforme mencionamos, é apenas na forma da expressão assintótica que o número de estados é limitado pela energia disponível. De fato, Geltman (1969) ⁽²⁾ mostrou, para o caso de alvos de hidrogênio, que levando em conta todos os estados as equações (2.31) e (2.32) devem ser idênticas, o que forçosamente deve ocorrer, dado que na obtenção da expressão integral para a função de onda não foi feita nenhuma aproximação quebrando a descrição da indistinguibilidade dos elétrons do sistema.

Este aparente detalhe tem importância fundamental na análise dos resultados teóricos, obtidos com métodos de aproximação. Estes métodos não conseguem levar em conta, de forma correta, todos os estados atômicos na expressão para a função de onda (2.26), e portanto, no cálculo da amplitude de espalhamento dada pela expressão (2.27). Não considerando todos os estados atômicos no somatório se estará tratando de uma equação que não expressa, de forma correta, o fato dos elétrons serem indistinguíveis. O que se faz é impor que as soluções aproximadas sejam antissimétricas, o que pelo acima exposto nem sempre conduz a bons resultados.

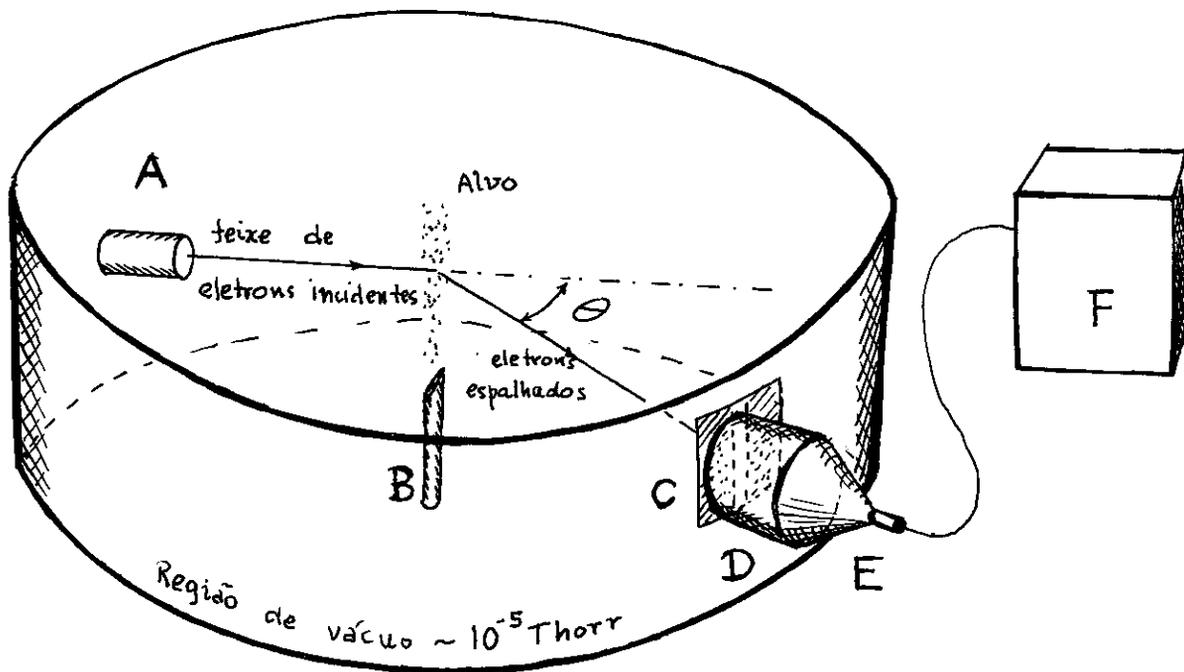


FIGURA 2.1 - Esquema do espectrômetro utilizado no Laboratório de Impacto de Elétrons do IQ-UFRJ.

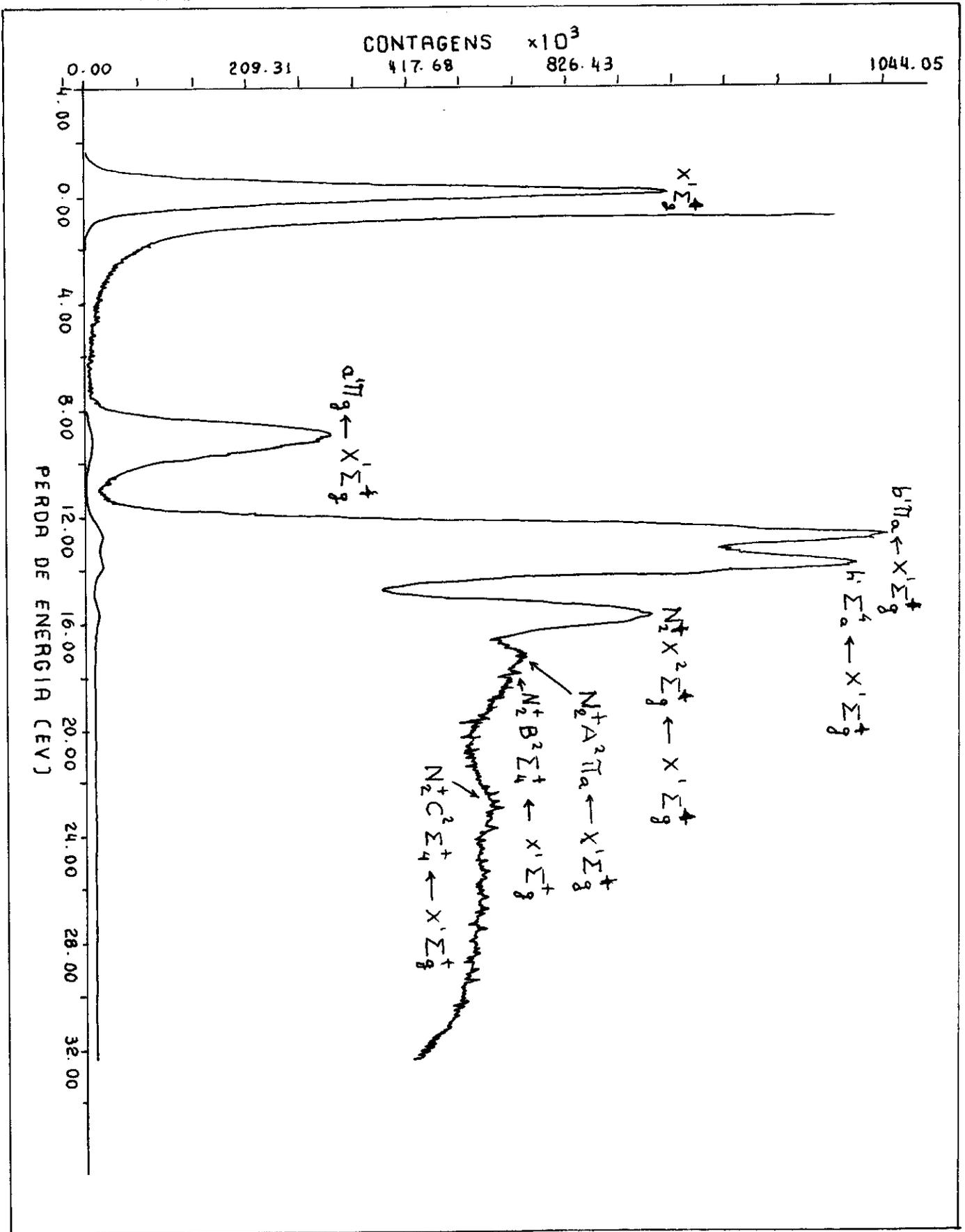


FIGURA 2.2 - Espectro de perda de energia do N_2 no ângulo de espalhamento de 2° e energia de impacto de 1 keV.

CAPÍTULO III

MÉTODOS DE APROXIMAÇÃO

A equação (2.26), referente à função de onda total do sistema, não admite solução exata. Os resultados numéricos são então obtidos através de métodos de aproximação.

Cada método, como decorrência das aproximações contidas e do esforço computacional requerido na obtenção de resultados numéricos, consegue descrever, de forma satisfatória, alguns processos, dentro de determinadas faixas de energia de impacto. É da soma do esforço com os diversos métodos disponíveis, que se consegue uma descrição teórica mais ampla do problema.

Visamos neste capítulo principalmente descrever a aproximação de Glauber. Para uma compreensão mais ampla da aproximação de Glauber é interessante analisar também alguns outros métodos de aproximação. Neste sentido descrevemos também, ainda que de forma sucinta, a aproximação de acoplamento-forte, bem como a aproximação de Born.

O conjunto das aproximações descritas neste capítulo compõe as ferramentas teóricas mais utilizadas no estudo de excitações a estados discretos em átomos alcalinos.

3.1 - MÉTODO DE ACOPLAMENTO-FORTE

Pode-se expandir a função de onda total na forma:

$$\psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = \sum_{\beta} F_{\beta}(\hat{r}_{N+1}) u_{\beta}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \quad (3.1)$$

sendo $u_{\beta}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N)$ as funções de onda atômicas, o somatório em β inclui todos os estados do espectro discreto e contínuo, contendo portanto infinitos estados e $F_{\beta}(\hat{r}_{N+1})$ forma uma base completa no espaço de um elétron.

Introduzindo esta expansão na expressão integral para a função de onda, eq. (2.26), e utilizando funções de onda atômicas ortonormais, determina-se a equação integral que $F_{\beta}(\hat{r}_{N+1})$ deve satisfazer:

$$F_{\alpha'}(\hat{r}_{N+1}) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) \delta_{\alpha',0} - \frac{1}{4\pi} \sum_{\beta, m_s'} \int d\hat{r}'_{N+1} \frac{e^{ik_{\alpha} |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} \chi_{m_s'}^s(s_{N+1}) \chi_{m_s'}^{s*}(s'_{N+1}) V_{\alpha'\beta}(\hat{r}'_{N+1}) F_{\beta}(\hat{r}'_{N+1}) \quad , \quad (3.2)$$

onde

$$V_{\alpha'\beta}(\hat{r}_{N+1}) = \int d\hat{r}_1 \dots d\hat{r}_N u_{\alpha'}^*(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) V(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) u_{\beta}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \quad . \quad (3.3)$$

A equação (3.2) representa um conjunto infinito de equações integrais acopladas. Se fosse possível resolvê-las, estaríamos obtendo uma solução exata para a equação (2.26). A aproximação de acoplamento-forte consiste justamente em truncar a expansão (3.1), considerando apenas alguns estados atômicos, conforme proposto inicialmente por Massey e Mohr (1932) (18).

Uma primeira consequência deste fato é que não estaremos mais considerando na equação (2.26) todos os estados do espec

tro atômico discreto e contínuo. Com isto, conforme discutido no capítulo anterior, a função de onda total não apresentará mais a simetria correta com relação à permutação das coordenadas de dois elétrons ⁽²⁾. Procura-se então impor que a solução aproximada apresente a simetria correta, expressando a função de onda na forma:

$$\psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = A \sum_{\beta=1}^M F_{\beta}(\hat{r}_{N+1}) u_{\beta}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \quad , \quad (3.4)$$

onde A é o operador de antissimetrização definido como:

$$A = 1 - \sum_{j=1}^N P_{j,N+1} \quad , \quad (3.5)$$

e $P_{j,N+1}$ é o operador que permuta as coordenadas do elétron j com o elétron N+1. Introduzindo a expressão acima na eq. (2.26) e projetando num estado atômico $|\alpha\rangle$, obtemos:

$$\begin{aligned} F_{\alpha'}(\hat{r}_{N+1}) &= e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s \delta_{\alpha',0} + N \sum_{\beta=1}^M \int d\hat{r}_1 \dots d\hat{r}_N \\ &F_{\alpha'}(\hat{r}_1) u_{\alpha'}^*(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) u_{\beta}(\hat{r}_2 \dots \hat{r}_{N+1}) - \frac{1}{4\pi} \sum_{\beta} \sum_{m_s'} \int d\hat{r}'_{N+1} \\ &\frac{e^{iK_{\alpha'} |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} \chi_{m_s'}^s(s_{N+1}) \chi_{m_s}^s(s'_{N+1}) V_{\alpha',\beta}(\hat{r}'_{N+1}) F_{\beta}(\hat{r}'_{N+1}) \\ &+ \frac{1}{4\pi} \sum_{\beta} \sum_{m_s'} \int d\hat{r}'_{N+1} \frac{e^{iK_{\alpha'} |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} \chi_{m_s'}^s(s_{N+1}) \\ &\chi_{m_s}^s(s'_{N+1}) \int d\hat{r}'_1 W_{\alpha',\beta}(\hat{r}_1, \hat{r}'_{N+1}) F_{\beta}(\hat{r}'_1) \quad , \quad (3.6) \end{aligned}$$

onde $V(\hat{r}_{N+1})$ é definido por (3.3) e $W(\hat{r}_1, \hat{r}'_{N+1})$ é o operador de troca definido por:

$$W_{\alpha, \beta}(\hat{r}_1, \hat{r}_{N+1}) \equiv \int d\hat{r}_2 \dots d\hat{r}_N u_{\alpha}^*(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) V(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) u_{\beta}(\hat{r}_2 \dots \hat{r}_{N+1}). \quad (3.7)$$

Além da questão relacionada com a simetria da função de onda total, o truncamento da série (3.1) acarreta outros problemas. Uma detalhada discussão à respeito se encontra no artigo de revisão do Bransden e McDowell (1977) ⁽⁵⁾. Vejamos estas questões de forma sucinta:

Um problema ocorre sempre que não considerarmos na expansão truncada todos os possíveis estados atômicos finais, ou seja, não representamos explicitamente todos os canais abertos de espalhamento. Com isto não estará descrita a perda de fluxo dos M canais abertos representados na expansão truncada, devido aos demais canais abertos não representados nesta expansão. Em outras palavras, a probabilidade de excitação do átomo para um determinado estado $|\alpha\rangle$ é relacionada com as probabilidades de excitação do átomo para os demais estados acessíveis. As equações acopladas do tipo (3.6) descrevem apenas a interdependência entre os canais abertos referentes aos M estados considerados na expansão truncada.

Um outro problema refere-se à distorção do átomo durante a colisão. Ao truncarmos a série (3.1), a função de onda total não será mais expressa numa base completa, não descrevendo de forma correta este efeito.

Este método deve, em princípio, apresentar bons resultados para baixas energias de impacto quando poucos canais abertos estão presentes. Neste caso, se pudermos representar, na expansão truncada, todos os estados finais acessíveis, não estaremos incorrendo no primeiro problema acima mencionado. O método pode, entretanto, apresentar bons resultados mesmo para energias inter-

mediárias, quando infinitos canais abertos de espalhamento estão presentes. Discutiremos no próximo capítulo o caso da excitação dos átomos alcalinos ao primeiro estado excitado. Neste caso, o método apresenta, de uma maneira geral, resultados em razoável acordo com a experiência para energias intermediárias, mesmo considerando apenas dois estados na expansão, ou seja, os estados inicial e final.

O número de estados considerados na expansão (3.4) nos diversos trabalhos realizados com este método varia como função do processo abordado, da energia de impacto considerada e da disponibilidade de computação de seus autores. No próximo capítulo veremos alguns exemplos de cálculos com este método de seção de choque para excitações discretas em átomos alcalinos.

Existem diversas maneiras de procurar minimizar o efeito do truncamento da expansão (3.1) ⁽⁵⁾.

Uma forma de representar o efeito de polarização do átomo no processo de colisão consiste em substituir os termos $F_{\beta}(\hat{r}_{N+1})u_{\beta}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N)$ da expansão truncada por termos na forma:

$$[u_{\beta}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) + u_{\beta}^P(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N, \hat{r}_{N+1})] F_{\beta}(\hat{r}_{N+1}) \quad , \quad (3.8)$$

onde $u_{\beta}^P(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N, \hat{r}_{N+1})$ representa a perturbação da auto-função $u_{\beta}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N)$ do alvo durante a colisão. Na forma mais simples $u_{\beta}^P(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N, \vec{r}_{N+1})$ é determinado por teoria de perturbação de primeira ordem, assumindo a partícula incidente como fixa no ponto \vec{r}_{N+1} . Este procedimento adicional ao método de acoplamento forte é chamado de aproximação de orbitais polarizados, e constitui a base do método de ondas distorcidas com orbitais polarizados ("distorted waves polarized orbitals", DWPO) ⁽⁵⁾.

Uma forma de representar a perda de fluxo para canais abertos de espalhamento não considerados na expansão truncada consiste em adicionar à esta expansão pseudo-estados correspondentes a canais abertos de espalhamento fictícios. As funções de onda que descrevem estes pseudo-estados são escolhidas de forma a serem ortogonais às funções de onda consideradas na expansão truncada, porém superpondo com orbitais não considerados nesta expansão. Desta maneira, com apenas alguns pseudo-estados, pode-se representar, de forma aproximada, vários canais abertos de espalhamento⁽⁵⁾.

Uma outra maneira de representar a perda de fluxo para canais abertos de espalhamento não considerados na expansão, consiste inicialmente em expressar a função de onda na forma:

$$\psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = A \sum_{n=1}^M F_n(\hat{r}_{N+1}) u_n(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) + A \sum_{n=M+1}^{\infty} F_n(\hat{r}_{N+1}) u_n(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N), \quad (3.9)$$

separando-a portanto em duas partes, uma relacionada aos M primeiros estados, e a outra relacionada com os infinitos estados em que $n > M+1$. Da mesma forma separa-se, nas equações acopladas para F_n , os termos relacionados com os M primeiros estados, dos demais termos associados ao segundo somatório da eq. (3.9). A seguir trata-se de forma aproximada os termos relacionados com os estados em que $n > M+1$. Existem diversas maneiras de aproximar estes termos, estando no mencionado artigo de revisão do Bransden e McDowell⁽⁵⁾ uma detalhada discussão a respeito.

3.2 - APROXIMAÇÃO DE BORN

A aproximação de Born é perturbativa com relação ao potencial de interação entre o elétron incidente e o alvo, $V(\hat{r}_1 \dots \dots \hat{r}_{N+1})$. Vejamos como obter a função de onda nas diversas ordens do potencial de interação, partindo da solução em ordem zero, dada por:

$$\psi^{B0}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \quad (3.10)$$

Esta expressão corresponde à função de onda do sistema na ausência de interação entre o elétron incidente e o alvo, ou seja, ao considerarmos $V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = 0$ na expressão integral para a função de onda, eq. (2.26).

A função de onda na primeira aproximação de Born é obtida ao substituir, no lado direito da equação (2.26), a função de onda total $\psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1})$ pela expressão acima, o que fornece:

$$\begin{aligned} \psi^{B1}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = & e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) - \frac{1}{4\pi} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) \\ & \sum_{\alpha} u_{\alpha}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \int d^3 r'_{N+1} \frac{e^{iK_{\alpha} |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}'_{N+1}} V_{\alpha,0}(\hat{r}'_{N+1}) \quad , \end{aligned} \quad (3.11)$$

sendo $V_{\alpha,0}(\hat{r}'_{N+1})$ dado pela expressão (3.3).

Tomando na expressão acima o limite em que \vec{r}_{N+1} tende a infinito e comparando com a expressão assintótica para a função de onda, eq. (2.13), obtemos a amplitude de espalhamento na primeira aproximação de Born, dada por:

$$f_{0\alpha}^{B1}(\theta, \phi) = - \frac{1}{4\pi} \int d\hat{r}_{N+1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_{N+1}} V_{\alpha,0}(\hat{r}_{N+1}) \quad , \quad (3.12)$$

sendo $\vec{q} = \vec{k}_0 - \vec{k}_\alpha$ o momento transferido.

Se considerarmos apenas a parcela Coulombiana do potencial de interação $V(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1})$, e utilizarmos a integração proposta por Bethe ⁽¹⁹⁾, a expressão acima reduz-se a:

$$f_{0\alpha}^{B1}(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \int u_n^*(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_i} u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) d\hat{r}_1 \dots d\hat{r}_N \quad (3.13)$$

A força de oscilador generalizada, que é utilizada em diversos trabalhos por reduzir-se à força de oscilador ótico no limite em que q tende a zero, é definida como:

$$g_{0\alpha}(\vec{q}) = \frac{k_0}{k_\alpha} \frac{\Delta E_{0\alpha}}{2} |\vec{q}|^2 \frac{d\sigma_{0 \rightarrow \alpha}(\theta, \phi)}{d\Omega} \quad (3.14)$$

sendo $\Delta E_{0\alpha}$ a energia de excitação do alvo do estado $|0\rangle$ ao estado $|\alpha\rangle$.

A análise da energia de impacto e processos onde deve-se esperar que a primeira aproximação de Born forneça resultados confiáveis é tarefa complexa, tendo sido objeto de inúmeras discussões (Moisewich e Smith ⁽³⁾ (1968), Geltman ⁽²⁾ (1969), Mott e Massey ⁽¹⁷⁾ (1971), etc). Podemos entretanto ter uma idéia sobre esta questão se observarmos que a função de onda em ordem zero é igual à função de onda do sistema na ausência de interação entre o elétron incidente e o alvo, sendo esta interação considerada ao aplicarmos a equação (3.10) na equação (2.26). Pode-se então intuir que esta aproximação deve se tornar progressivamente mais realista na medida em que a interação entre o elétron incidente e o alvo seja mais fraca, o que ocorre na medida em que consideramos energias de impacto mais altas.

A função de onda na aproximação de Born não apresenta a simetria correta com relação à troca nas coordenadas do j -ésimo elétron atômico com o elétron $N+1$. Neste sentido a primeira aproximação de Born não descreve efeitos de troca, não podendo ser utilizada nos casos onde os estados inicial e final de spin do alvo são diferentes.

Para que a solução aproximada apresente a simetria correta, Oppenheimer propôs antissimetrizar a função de onda em ordem zero, o que fornece:

$$\psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = A e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \quad , \quad (3.15)$$

onde A é o operador de antissimetrização, definido por (3.5).

Inserindo esta expressão na equação (2.26), e adotando um procedimento análogo ao descrito anteriormente, obtém-se uma expressão para a amplitude de espalhamento. A amplitude de espalhamento contém, agora, um termo referente ao processo direto, dado pela eq. (3.12), e uma série de termos relacionados com processos de troca.

Esta aproximação, conhecida como Born-Oppenheimer, introduz uma série de problemas formais associados ao termo de troca, além de fornecer resultados piores que a 1ª de Born. Isto resulta do fato da antissimetrização proposta por Oppenheimer introduzir termos espúrios na expressão para amplitude de espalhamento.

Visando contornar este problema, Ochkur⁽²⁰⁾ e Bonham⁽²¹⁾, independentemente, propuseram uma aproximação baseada na aproximação de Oppenheimer que é coerente com uma teoria perturbativa no potencial de interação. Considerando que essencialmente a aproxi-

mação de Oppenheimer é correta, tanto Ochkur quanto Bonham, procuraram identificar os termos espúrios da amplitude de troca através da expansão da amplitude de espalhamento na região de altas energias. Retendo somente os termos de mesma ordem em k_0 , obtiveram uma expressão para amplitude de espalhamento que corresponde ao termo perturbativo em primeira ordem no potencial de interação. Este procedimento, conhecido como aproximação de Born-Ochkur, fornece resultados em melhor acordo com os resultados experimentais que os obtidos na aproximação de Born-Oppenheimer. Rudge⁽²²⁾ (1965) propôs uma pequena modificação na aproximação de Ochkur para que esta satisfizesse o princípio variacional. Belly⁽²³⁾ (1965) propôs uma modificação à aproximação de Ochkur para que esta satisfizesse o princípio de balanço detalhado de energia.

Vejamos ainda uma questão relacionada com a simetria da função de onda na primeira aproximação de Born. O efeito de indistinguibilidade entre o elétron incidente e os elétrons atômicos deve ser importante em baixas energias de impacto onde, numa visão clássica, o elétron incidente "passa mais tempo" perto dos elétrons atômicos. De fato, a seção de choque para processos onde os estados inicial e final de spin do alvo são diferentes cai rapidamente com a energia de impacto. Devido à ortogonalidade das funções de spin, estes processos não são descritos pela primeira aproximação de Born. Da mesma forma para processos onde os estados inicial e final de spin do alvo são idênticos, deve-se esperar que o efeito da indistinguibilidade entre o elétron incidente e os elétrons atômicos seja pequeno para altas energias de impacto. Esta questão pode ser analisada ao compararmos na amplitude de espalhamento o valor do termo direto com o do termo de troca. Esta comparação foi feita para diversos casos utilizando o método de

acoplamento-forte⁽¹¹⁾ bem como a aproximação de Ochkur⁽⁴⁾ do termo de troca, mostrando que de fato, em altas energias de impacto, o termo de troca praticamente não contribui para a seção de choque total e diferencial, exceto na região de ângulos grandes.

Uma vez que a primeira aproximação de Born só é adequada ao estudo de processos com altas energias de impacto, a questão da simetria não é fundamental quando se aplica esta aproximação de forma consistente.

A primeira aproximação de Born é, dentre os métodos usualmente utilizados, aquela que implica num menor esforço numérico. Apesar das limitações impostas em sua formulação ela é extremamente útil por diversos motivos. Consegue-se, por exemplo, para uma determinada disponibilidade de computador, abordar sistemas mais complexos que em outras aproximações (átomos mais pesados, moléculas com maior número de átomos, etc). Além disto, ela fornece, de uma maneira geral, resultados em razoável acordo com os resultados experimentais para altas energias de impacto. Como consequência ela é utilizada muitas vezes para normalizar os resultados experimentais.

A função de onda na segunda aproximação de Born é obtida substituindo no lado direito da equação (2.26) a função de onda total pela função de onda na primeira aproximação de Born. A correspondente amplitude de espalhamento, com o potencial de interação em segunda ordem, contém um somatório nos infinitos estados atômicos intermediários do espectro discreto e contínuo, não admitindo solução exata. É usual considerar apenas alguns estados no mencionado somatório, obtendo-se soluções aproximadas.

A função de onda na aproximação de Born em terceira ordem é obtida de forma análoga, ou seja, aplicando a função de on-

da em segunda ordem no lado direito da expressão (2.26). Repetindo este procedimento diversas vezes, obtém-se uma expansão da função de onda total em séries de potência do potencial de interação conhecida como série de Born, que pode ser representada na forma:

$$\psi^{BS}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = \phi_0(V^0) + \phi_1(V) + \phi_2(V^2) + \phi_3(V^3) + \dots \quad (3.16)$$

sendo $\phi_0(V)$ a função de Born em ordem zero, dada pela equação (3.10); $\phi_1(V)$ o segundo termo do lado direito da expressão (3.11), que contém o potencial de interação em primeira ordem; $\phi_2(V^2)$ o termo que contém o potencial de interação em segunda ordem, etc.

A convergência da série de Born é muito difícil de ser analisada (Mott e Massey⁽¹⁷⁾ (1971)). Pode-se, entretanto, mostrar que a série (3.16) converge no caso em que o alvo é representado por certas classes de potencial. De qualquer forma, trabalhar no contexto da terceira aproximação de Born já implica num formalismo matemático intratável quando atribui-se graus de liberdade ao alvo, mesmo para o caso do átomo de hidrogênio. Convém mencionar o esforço neste sentido realizado por Byron e Joachain⁽²⁴⁾ (1977), onde a contribuição do termo em terceira ordem na amplitude de espalhamento é estimada através de um termo da expansão da amplitude de espalhamento na aproximação de Glauber.

As séries de Born representam um esforço de aplicar este tipo de formalismo em energias de impacto mais baixas que as abordadas pela primeira aproximação de Born. A complexidade matemática que ocorre, já no contexto da segunda aproximação de Born, aliada à dificuldade de inferir a respeito da convergência destas

séries, parece resultar num esforço reduzido nesta direção, ao menos no caso de excitações discretas em átomos alcalinos. Neste caso ao que nos conste, só foi realizado um trabalho, referente à aplicação da segunda aproximação de Born em excitações do átomo de sódio do estado fundamental ao estado $4s$ ⁽⁷⁾, que será comentado no próximo capítulo.

3.3 - APROXIMAÇÃO DE GLAUBER

A aproximação de Glauber ⁽²⁵⁾, oriúnda da física nuclear, foi inicialmente aplicada em física atômica por Franco ⁽¹²⁾ (1968). Desde então ela tem sido utilizada por diversos autores, encontrando-se nos artigos de revisão de Thomas e Guerjuoy ⁽²⁶⁾ (1974) e Chan et al. ⁽²⁷⁾ (1979) uma detalhada discussão de sua aplicação em física atômica.

Glauber propôs esta aproximação em 1953 ⁽²⁸⁾, estando basicamente interessado em aplicações a problemas da física nuclear. Sua dedução para a expressão da amplitude de espalhamento, num tratamento onde descreve-se o alvo através de um potencial, partiu da equação integral para a função de onda. (A equação integral para a função de onda em colisões por potencial é obtida de forma análoga à apresentada no capítulo anterior.) A expressão para a amplitude de espalhamento na aproximação de Glauber pode também ser obtida partindo diretamente da aproximação eikonal da física clássica. Neste caso, pode-se observar que a aproximação de Glauber é apenas um caso particular da classe das possíveis aproximações eikonais para a amplitude de espalhamento ⁽²⁶⁾.

Para o caso que nos interessa neste trabalho, ou seja,

quando se considera graus de liberdade internos do alvo, Glauber deduziu a expressão para a amplitude de espalhamento de uma forma mais complexa, partindo da equação de Schroedinger dependente do tempo. Em 1974 Thomas e Gerjuoy⁽²⁶⁾ propuseram uma forma de deduzir a expressão para a amplitude de espalhamento na aproximação de Glauber partindo da expressão integral para a amplitude de espalhamento, eq. (2.26), que descrevemos abaixo.

São utilizadas duas fortes aproximações na dedução da expressão para a amplitude de espalhamento na aproximação de Glauber a partir da equação integral para a função de onda, equação (2.26). A primeira consiste em substituir a equação (2.26) por uma equação integral aproximada. A eq. (2.26) contém um somatório em todos os estados atômicos, sejam estes energeticamente acessíveis ou não. O princípio de conservação de energia fornece:

$$k_{\beta} = k_0 \left(1 - \frac{2\Delta\varepsilon_{0,\beta}}{k_0^2} \right)^{1/2}, \quad (3.17)$$

onde k_0 é o momento do elétron incidente e $\Delta\varepsilon_{0,\beta}$ a energia de excitação do átomo do estado $|0\rangle$ ao estado $|\beta\rangle$.

Para altas energias de impacto teremos um grande número de estados intermediários em que $k_0^2/2 \gg \Delta\varepsilon_{0,\beta}$, e portanto $k_{\beta} \approx k_0$. Existirão sempre estados $|\beta\rangle$ onde $k_0^2/2 < \Delta\varepsilon_{0,\beta}$, logo com k_{β} imaginários. Estes estados virtuais correspondem, para energias de impacto altas, a estados do espectro contínuo e, dependendo da energia de impacto, a estados com excitação de elétrons de camadas internas.

Se considerarmos $k_{\beta} = k_0$ para todos os estados intermediários $|\beta\rangle$, e usarmos a relação de completeza dos estados atômicos:

$$\sum_{\beta} u_{\beta}(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) u_{\beta}^*(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_N) = \delta(\hat{r}_1 - \hat{r}'_1) \dots \delta(\hat{r}_N - \hat{r}'_N) \quad (3.18)$$

obtemos, a partir da eq. (2.26), uma equação integral aproximada que a função de onda total, ψ , obedece:

$$\begin{aligned} \psi(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N+1}) = & e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) - \frac{1}{4\pi} \sum_{m'_s} \\ & \int d\hat{r}'_{N+1} \frac{e^{ik_0 |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} \chi_{m'_s}^s(s_{N+1}) \chi_{m'_s}^{s*}(s'_{N+1}) V(\vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_{N+1}) \psi(\hat{r}'_1 \dots \hat{r}'_{N+1}) \end{aligned} \quad (3.19)$$

Este procedimento leva em consideração, de forma aproximada, todos os canais (abertos ou fechados) de espalhamento e é, de certa forma, uma maneira complementar à adotada na aproximação de acoplamento-forte, onde somente alguns estados são tratados exatamente ⁽²⁹⁾.

Veremos no próximo capítulo a seguinte característica dos processos de colisão de elétrons com energias de impacto intermediárias em átomos alcalinos. A soma das probabilidades dos átomos permanecerem no estado fundamental (colisões elásticas) ou terem o elétron de valência excitado aos estados do espectro discreto, é muito maior que a probabilidade destes átomos serem ionizados. Para os estados intermediários referentes aos estados do espectro discreto, e para energias de impacto intermediárias, teremos em boa aproximação $k_{\beta} \approx k_0$. Neste sentido estaremos tratando, de forma razoável, os estados que mais contribuem no processo de colisão acima mencionado. Isto talvez explique parcialmente o bom desempenho da aproximação de Glauber para descrever excitações discretas em átomos alcalinos.

A função de onda, eq. (3.19), pode ser escrita na forma:

$$\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) \Omega(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) u_0(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \quad (3.20)$$

Inserindo esta expressão na eq. (3.19), obtemos a equação que Ω deve satisfazer:

$$\Omega(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) = 1 - \frac{1}{4\pi} \int d^3 r_{N+1} \frac{\exp\{ik_0 |\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}| - \vec{k}_0 \cdot (\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1})\}}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}|} V(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) \Omega(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) \quad (3.21)$$

Fazendo a mudança de variáveis $\vec{r}' = \vec{r}_{N+1} - \vec{r}'_{N+1}$, representando o conjunto de variáveis atômicas $(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$ por \vec{R} , tomando a direção de incidência paralela \hat{z} e chamando de θ' o ângulo polar de \vec{r}' conforme representado na Figura 3.1, obtemos:

$$\Omega(\vec{R}, \vec{r}_{N+1}) = 1 - \frac{1}{4\pi} \int d^3 r' \frac{e^{ik_0 r' (1 - \cos\theta')}}{r'} V(\vec{R}, \vec{r}_{N+1} - \vec{r}') \Omega(\vec{R}, \vec{r}_{N+1} - \vec{r}') \quad (3.22)$$

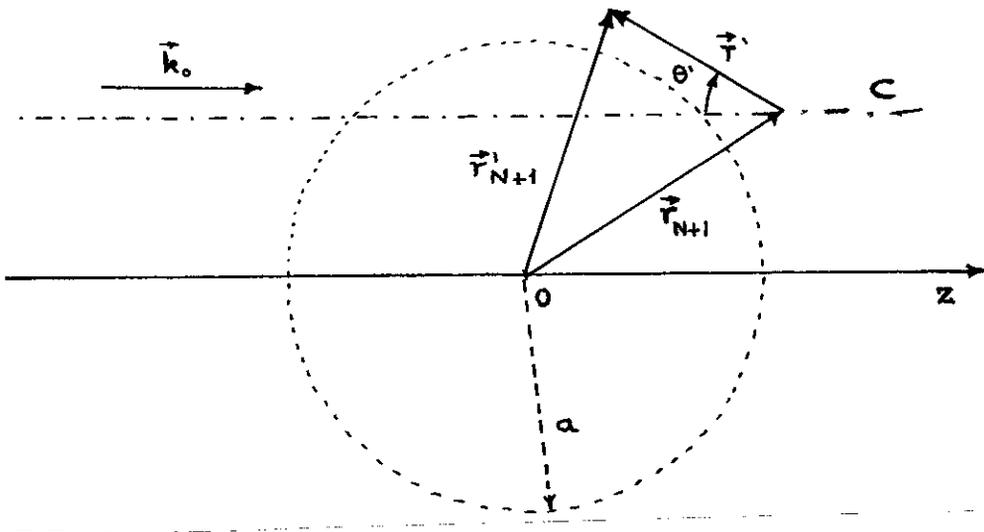


Figura 3.1

Glauber⁽²⁵⁾ mostrou que as contribuições mais importantes ao integrando da expressão (3.22) ocorrem em $\theta' = 0$, desde que: 1) $\underline{a} \gg 1/k_0$, onde \underline{a} corresponde à uma distância média de variação do potencial, geralmente da ordem do alcance do potencial; 2) $V_0 \ll 1/2 k_0^2$, sendo V_0 um valor característico da intensidade do potencial. Estas duas condições são satisfeitas ao se considerar altas energias de impacto.

Nestas condições o integrando pode ser expandido em séries de potência em torno de $\theta' = 0$ e retendo-se apenas o termo dominante, que corresponde a $\theta' = 0$, temos:

$$\Omega(\vec{R}, \vec{r}_{N+1}) = 1 - \frac{i}{v_0} \int_0^\infty dr' V(\vec{R}, \vec{r}_{N+1} - \vec{r}') \Omega(\vec{R}, \vec{r}_{N+1} - \vec{r}') \quad , \quad (3.23)$$

$(\theta'=0)$

onde a notação $(\theta' = 0)$ indica que a direção do vetor \vec{r}' é a mesma de \vec{k}_0 (caminho de integração C na Figura 3.1) e $v_0 = k_0$ corresponde à velocidade clássica associada ao elétron incidente (em unidades atômicas).

Estaremos, portanto, para efeito de resolver a equação integral (3.22), associando trajetórias retilíneas aos elétrons incidentes. Esta aproximação restringe, em princípio, a aplicação da aproximação de Glauber a pequenos ângulos de espalhamento. Para colisões inelásticas, entretanto, Thomas e Guerjuoy⁽²⁶⁾ (1974) mostraram que a aproximação de Glauber pode fornecer bons resultados em ângulos de espalhamento maiores. Os resultados para excitações discretas em átomos de hidrogênio confirmam esta hipótese, que será discutida posteriormente com base em nossos resultados.

Expressando o vetor \vec{r}_{N+1} em coordenadas cartesianas, a eq. (3.23) assume a forma:

$$\Omega(\vec{R}, X_{N+1}, Y_{N+1}, Z_{N+1}) = 1 - \frac{i}{v_0} \int_{-\infty}^{Z_{N+1}} dz V(\vec{R}, X_{N+1}, Y_{N+1}, Z) \Omega(\vec{R}, X_{N+1}, Y_{N+1}, Z) \quad (3.24)$$

A solução para esta equação integral é dada por (Glauber 1959 ⁽²⁵⁾):

$$\Omega(\vec{R}, \vec{r}_{N+1}) = e^{i\Delta(\vec{R}, \vec{r}_{N+1})} \quad , \quad (3.25)$$

onde

$$\Delta(\vec{R}, \vec{r}_{N+1}) = - \frac{i}{v_0} \int_{-\infty}^{Z_{N+1}} V(\vec{R}, X_{N+1}, Y_{N+1}, Z_{N+1}) dz_{N+1} \quad (3.26)$$

Levando esta expressão na eq. (3.20), obtemos finalmente:

$$\psi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_{N+1}} e^{i\Delta(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N, \vec{r}_{N+1})} \chi_{m_s}^s(s_{N+1}) u_0(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \quad (3.27)$$

A função de onda dada pela eq. (3.27) não apresenta a simetria correta com relação à troca nas coordenadas entre o elétron N+1 e elétrons atômicos. Desta forma ela não pode ser aplicada ao estudo de processos onde os estados inicial e final de spin do átomo são diferentes. Para processos onde os estados inicial e final de spin do alvo são idênticos, e para energias de impacto onde se espera que, por força das aproximações realizadas, a aproximação de Glauber forneça bons resultados, a questão da simetria não deve ser muito importante. Isto porque o termo de troca, nestas condições, apresenta uma contribuição pequena quando comparado com o termo direto, conforme pode ser constatado em cálculos

com os métodos de acoplamento-forte ⁽¹¹⁾ e Born-Ochkur ⁽⁴⁾. Os processos e energias de impacto abordados neste trabalho estão dentro das condições acima colocadas.

A função de onda dada pela equação (3.27) não possui a forma assintótica correta, dada pela expressão (2.13). Isto decorre ⁽²⁶⁾ de termos retido apenas o primeiro termo na expansão do integrando de (3.22) em potências de θ' . Neste caso, assumimos que a principal contribuição ao integrando decorria do potencial V , o que não é verdade para regiões onde este potencial é desprezível. Por outro lado, para as regiões onde o potencial de interação V não é desprezível, devemos esperar que a função de onda na aproximação de Glauber seja superior à função de onda na primeira aproximação de Born. Isto porque estamos considerando na aproximação de Glauber, ainda que de forma aproximada, os infinitos estados intermediários, que devem ser importantes a menos que a energia de impacto seja muito alta.

Além disto, o processo de colisão é basicamente determinado nas regiões onde o potencial de interação entre o elétron incidente e o alvo não é desprezível. Pode-se verificar esta questão na formulação teórica, através da expressão para a amplitude de espalhamento, eq. (2.27), onde aparece um elemento de matriz contendo o potencial de interação V .

Dado ao fato da função de onda na aproximação de Glauber não apresentar a forma assintótica correta, não podemos obter a expressão para a amplitude de espalhamento comparando a forma assintótica da função de onda aproximada com a equação (2.13). Neste caso a amplitude de espalhamento é obtida diretamente da expressão (2.27), onde precisamos conhecer a função de onda apenas na região onde o potencial de interação não é desprezível. Toman-

do na expressão (2.27) $j = N+1$ e usando a expressão (3.27), obtemos:

$$f_{0\alpha}(\theta, \phi) = \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}'_1 \dots d\vec{r}'_{N+1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}'_{N+1}} u_{\alpha}^*(\vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_N) \\ V(\vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_{N+1}) e^{i\Delta(\vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_N, \vec{r}'_{N+1})} u_0(\vec{r}'_1 \dots \vec{r}'_N) . \quad (3.28)$$

Se compararmos esta expressão com a expressão da amplitude de espalhamento na primeira aproximação de Born, eq. (3.12), podemos observar que elas diferem apenas pela presença na expressão acima da exponencial que é função do potencial de interação. Para altas energias de impacto o argumento desta exponencial tende a zero, conforme pode ser observado através da eq. (3.26). Neste sentido, no limite que a energia de impacto tende a infinito, a aproximação de Glauber coincide com a primeira aproximação de Born.

Visando minorar as dificuldades envolvidas no cálculo da expressão (3.28) é usual considerar ainda uma aproximação adicional proposta também por Glauber⁽²⁵⁾ (1959). Esta aproximação consiste em considerar o momento transferido, $\vec{q} = \vec{k}_0 - \vec{k}_f$ como perpendicular a \vec{k}_0 . Para colisões elásticas, onde o momento transferido depende apenas do ângulo de espalhamento dado que $|\vec{k}_f| = |\vec{k}_0|$, é fácil perceber que esta aproximação vale para pequenos ângulos de espalhamento. Para colisões inelásticas, onde o momento transferido depende também da troca de energia entre o elétron incidente e o alvo, a análise da região de validade desta aproximação é mais complexa, tendo sido discutida em detalhe por Thomas e Guerjuoy⁽²⁶⁾ (1974). De qualquer forma, para processos de excitação

discretos e altas energias de impacto, devemos esperar o mesmo tipo de condição que para colisões elásticas, dado que a energia de excitação é muito menor que a energia cinética dos elétrons incidentes.

Expressando \vec{r}_{N+1} em coordenadas cilíndricas, ou seja:

$$\vec{r} = \vec{b} + z\hat{z} \quad , \quad (3.29)$$

onde \vec{b} , denominado parâmetro de impacto, é a projeção de \vec{r}_{N+1} no plano perpendicular à direção de incidência \hat{z} , atendendo, portanto, a $\vec{b} \cdot \hat{z} = 0$. Nestas condições a integração em z pode ser feita imediatamente, fornecendo:

$$f_{0\alpha}(\theta, \phi) = \frac{ik_0}{2\pi} \int d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_N d^2b_{N+1} e^{i\vec{q} \cdot \vec{b}_{N+1}} u_\alpha^*(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \{1 - e^{i\chi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N, \vec{b}_{N+1})}\} u_0(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \quad , \quad (3.30)$$

onde $\chi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N, \vec{b}_{N+1})$ é conhecida como fase de Glauber e dada pela relação:

$$\chi(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N, \vec{b}_{N+1}) = -\frac{1}{v_0} \int_{-\infty}^{\infty} dz_{N+1} V(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N, x_{N+1}, y_{N+1}, z_{N+1}) \quad . \quad (3.31)$$

Assim como a maioria dos trabalhos em colisão atômica com a aproximação de Glauber, utilizamos a expressão (3.30) em nossos cálculos.

Alguns autores propuseram métodos para ampliar a região angular de validade da expressão (3.30) (30,31). O procedimento mais simples consiste em, ao invés de orientar o eixo z paralelo a \vec{k}_0 , orientá-lo perpendicularmente a \vec{q} (Glauber 1959) (25). Este procedimento, embora permita obter a expressão (3.30) diretamente da

(3.28) é, no entanto, incompatível com (3.26) (Castro 1977⁽³²⁾).

A equação (3.30) é de difícil aplicação para átomos mais pesados que o hélio. Isto porque, se obtivermos as funções de onda atômicas através do método Hartree-Fock, a eq. (3.30) será composta de $N!$ termos, cada um contendo uma integral em $3N+2$ dimensões. Este fato é mais facilmente visualizável se reescrevermos a equação (3.30) na forma:

$$f_{0\alpha}(\theta, \phi) = \frac{ik_0}{2\pi} \int d^2 b \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) \langle u_0(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) | \Gamma_1 \dots \Gamma_N | u_\alpha(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \rangle, \quad (3.32)$$

onde

$$\Gamma_j = \exp(i\chi_j) \quad , \quad \chi_j = -\frac{1}{v_0} \int_{-\infty}^{\infty} dz_{N+1} v_j(\vec{r}_j, x_{N+1}, y_{N+1}, z_{N+1}) \quad (3.33)$$

e utilizamos $\langle u_0 | u_\alpha \rangle = \delta_{0\alpha}$.

Podemos observar pela eq. (3.32) que, se tomarmos as funções de onda atômicas como produtos antissimetrizados de orbitais monoelétrônicos, a equação (3.30) conterá $N!$ termos.

Para atribuímos um significado físico a cada termo que aparece nesta equação, é interessante analisar o caso do processo de excitação do átomo de lítio do estado fundamental ao estado descrito na notação de Russel-Sanders como $3^2S_{1/2}$. Na Figura 3.2 colocamos diversos processos possíveis associados à esta transição. Na Figura 3.2a colocamos o processo de excitação "direto", onde o elétron de valência é excitado ao estado $3s$, e os orbitais do caroço relaxam. Este processo é descrito pelo termo:

$$\langle \phi_{1s}(\vec{r}_1) | \Gamma_1 | \phi'_{1s}(\vec{r}_1) \rangle \langle \phi_{1s}(\vec{r}_2) | \Gamma_2 | \phi'_{1s}(\vec{r}_2) \rangle \langle \phi_{2s}(\vec{r}_3) | \Gamma_3 | \phi_{3s}(\vec{r}_3) \rangle, \quad (3.34)$$

que na região de altas energias de impacto reduz-se à aproximação de Born ⁽³³⁾. A Figura 3.2b representa um dos possíveis processos "indiretos", onde o elétron de valência é desexcitado a um orbital do caroço relaxado, e um elétron do caroço é excitado ao estado 3s. Este processo é descrito pelo termo:

$$\langle \phi_{1s}(\vec{r}_1) | \Gamma_1 | \phi_{3s}(\vec{r}_1) \rangle \langle \phi_{1s}(\vec{r}_2) | \Gamma_2 | \phi'_{1s}(\vec{r}_2) \rangle \langle \phi_{2s}(\vec{r}_3) | \Gamma_3 | \phi'_{1s}(\vec{r}_3) \rangle \quad . \quad (3.35)$$

É interessante observar que, apesar da aproximação de Glauber não levar em conta a antissimetrização da função de onda total, os termos que decorrem da antissimetrização da função de onda atômica estão presentes. Esta característica da aproximação de Glauber está diretamente relacionada com o fato do potencial estar considerado em todas as ordens na expressão para a amplitude de espalhamento.

Para o processo de excitação do átomo de lítio ao conjunto de estados 2^2P , foi possível obter resultados numéricos a partir da expressão (3.30), considerando apenas uma aproximação adicional: considerou-se que os orbitais dos elétrons do caroço não relaxam no processo de excitação do átomo. Para átomos mais pesados que o lítio não foi possível até o momento a obtenção de resultados numéricos sem considerar outras aproximações adicionais, dado ao grande número de termos que aparecem na expressão (3.30).

Visando viabilizar os cálculos numéricos, foi proposta uma aproximação relacionada com a descrição do caroço, que será discutida em detalhe no capítulo em que relatamos a forma utilizada para descrever o alvo no processo de colisão. Em linhas gerais

esta aproximação consiste em representar a interação Coulombiana do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e N-1 cargas nucleares através de um potencial esfericamente simétrico $V_c(r_{N+1})$. O potencial Coulombiano de interação entre o elétron incidente e o alvo fica então descrito como:

$$V(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N+1}) = V_c(\vec{r}_{N+1}) - \frac{1}{|\vec{r}_{N+1}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_N|} \quad . \quad (3.36)$$

Utilizando esta aproximação adicional, e não desprezando o relaxamento dos orbitais do caroço atômico, os termos correspondentes aos processos indiretos se anulam. Além disto a ordem da integral do termo "direto" reduz-se a 5, sendo posteriormente reduzida por métodos analíticos à uma soma de integrais unidimensionais.

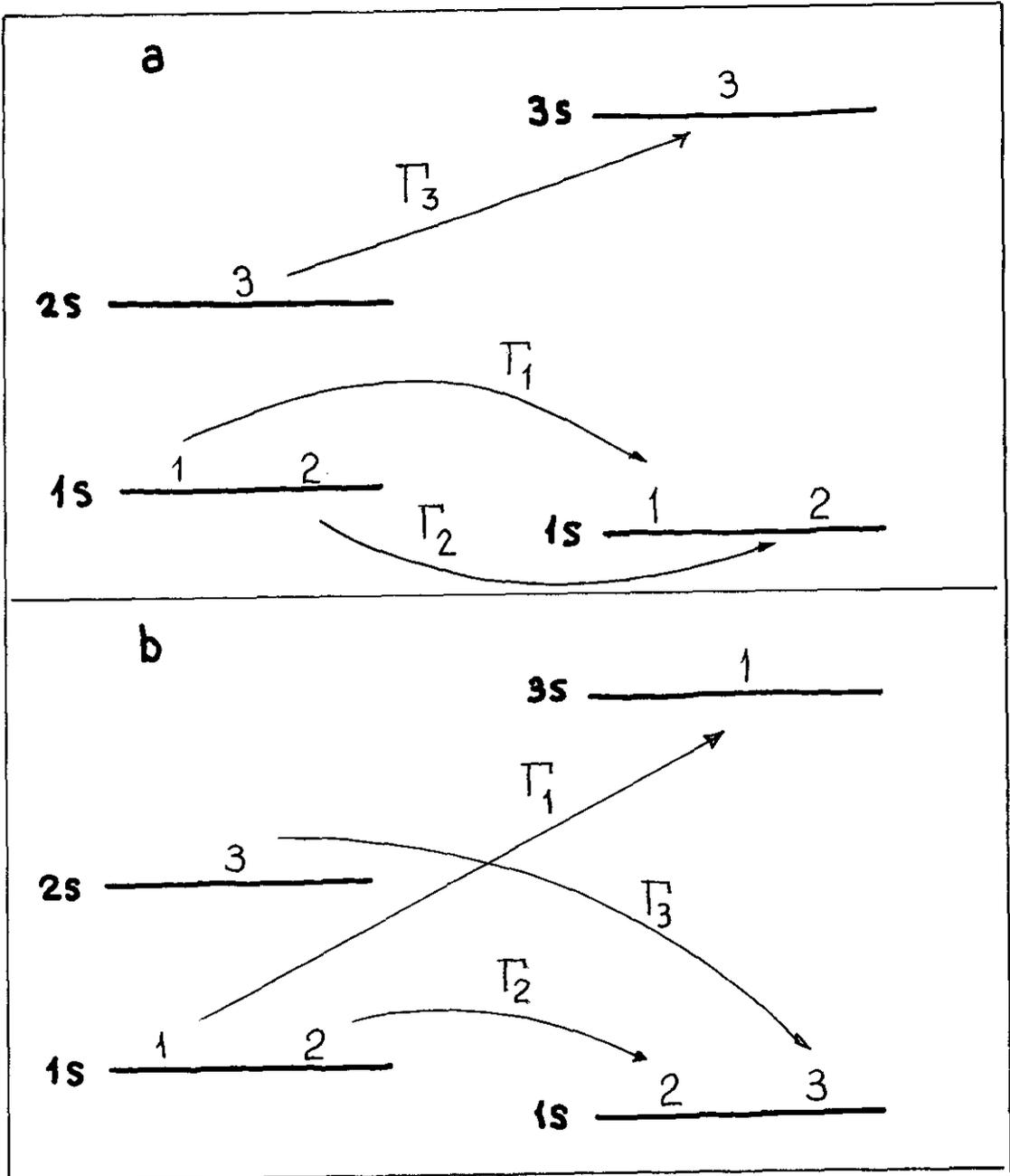


FIGURA 3.2 - Excitação do átomo de lítio ao estado 3s. A fig. (a) representa um processo "direto", onde o elétron de valência é excitado ao estado 3s, e os orbitais dos elétrons do caroço relaxam. A fig. (b) representa um processo "indireto", onde o elétron de valência é desexcitado a um estado 1s, e um elétron do caroço excitado ao estado 3s.

CAPÍTULO IV

RESUMO DOS TRABALHOS NA ÁREA

O estudo de excitações para estados do espectro discreto em átomos alcalinos por impacto de elétrons, foi objeto de inúmeros trabalhos experimentais e teóricos. Este interesse decorre de uma série de fatores, tais como, a relativa facilidade de interpretar os resultados experimentais, o interesse destes tipos de dados nas pesquisas de astrofísica⁽³⁴⁾. Além disto, são átomos com camadas fechadas e um elétron de valência, e portanto, sistemas bastante adequados à abordagem teórica, servindo para analisar uma série de características dos métodos de aproximação.

Neste capítulo descrevemos, de forma sucinta, o esforço teórico no estudo destes processos de excitação, bem como mencionamos os trabalhos experimentais mais importantes. Visamos com isto, situar nosso trabalho no contexto da pesquisa na área, permitindo uma discussão mais fluída de nossos resultados no Capítulo VIII.

Existem alguns artigos de revisão na literatura, sendo o mais completo realizado por Bransden e McDowell⁽⁵⁾ em 1977. Neste sentido, este capítulo serve também para atualizar a bibliografia dos trabalhos nesta área.

O capítulo é dividido em quatro seções. Na primeira, discutimos alguns aspectos dos átomos alcalinos aos quais podemos as

sociar algumas características nos resultados para se seções de choque diferencial e integral. A segunda seção trata de processos envolvendo átomos de lítio, a terceira de processos envolvendo átomos de sódio e a quarta de processos envolvendo átomos de potássio. Cada seção é dividida em sub-seções referentes a um ou diversos processos de excitação. Para cada processo de excitação abordado citamos os principais resultados dos trabalhos experimentais mais importantes, bem como apresentamos uma descrição sucinta dos diversos trabalhos teóricos. Esta descrição contém o método teórico utilizado, alguns detalhes dos cálculos, os principais resultados obtidos e algumas questões que consideramos importantes.

4.1 - ALGUNS ASPECTOS DOS ÁTOMOS ALCALINOS

O estado fundamental dos átomos alcalinos é descrito na notação de Russel-Sanders como $n^2S_{1/2}$, possuindo um elétron de valência num estado de simetria s , e o restante dos elétrons em camadas fechadas. O potencial Coulombiano médio gerado pelos elétrons do caroço atômico é esfericamente simétrico, sendo usual representá-lo através de um potencial fenomenológico esfericamente simétrico. A utilização desta aproximação adicional facilita sobremaneira os cálculos com os diversos métodos de aproximação.

O potencial de ionização destes átomos (Li: 5.4 eV ; Na: 5.1 eV; K: 4.3 eV; Rb: 4.2 eV; Cs: 3.9 eV) é pequeno quando comparado com o potencial de ionização do átomo de hidrogênio (13.6 eV). Também é pequena a diferença de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado (Li: 1.85 eV; Na: 2.1 eV; K: 1.61 eV) quando comparada com a do átomo de hidrogênio, onde

o primeiro estado excitado situa-se 10.2 eV acima do estado fundamental. Como consequência, o início da região de energias de impacto intermediárias, (ligada com a relação entre a energia do elétron incidente e as energias de excitação aos diversos estados do espectro discreto, bem como com a energia de ionização) é bem menor para os átomos alcalinos que para o átomo de hidrogênio (alcalinos ~ 10 eV; hidrogênio ~ 20 eV; hélio ~ 30 eV - Bransden e MacDowell ⁽⁵⁾ (1977)).

A transição ao primeiro estado excitado nos átomos alcalinos é opticamente permitida, ou seja, o elemento de matriz de dipolo entre os estados inicial e final não é nulo, dado que $\Delta l = \pm 1$. Isto traz consequências nos resultados para a seção de choque pois apesar das regras de seleção para excitações por impacto de elétrons serem diferentes das apresentadas para excitações por radiação eletromagnética, algumas semelhanças se apresentam. Por exemplo, a força de oscilador generalizada, definida pela equação (3.14), tende à força de oscilador ótica no limite em que o momento transferido $\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$ tende a zero, sendo portanto, nulo neste limite para o caso de transições opticamente proibidas. Pode-se mostrar ⁽³⁵⁾ que esta relação não depende da validade da aproximação de Born, ao contrário do que se supunha até 1970. Uma outra questão relacionada com este processo é que o estado fundamental e o primeiro estado excitado nos átomos alcalinos possuem o mesmo número quântico principal n , sendo a energia de excitação para este processo pequena, conforme pode-se observar pelos dados colocados no parágrafo anterior. Estas questões trazem as seguintes consequências nos resultados para a seção de choque diferencial:

(a) - Para elétrons incidindo na região de energias intermediárias, a probabilidade dos átomos alcalinos serem excitados para o primeiro estado excitado é muito maior que a probabilidade destes permanecerem no estado fundamental (canal elástico), ou serem excitados a outros estados do espectro discreto ou contínuo. Esta questão pode ser observada através da Figura 4.1, onde para cada átomo alcalino, a linha A representa a seção de choque integral total; a linha C representa a seção de choque integral para a excitação ao primeiro estado excitado; a linha B representa colisões elásticas; a linha D a soma das outras excitações discretas, e a linha E os processos onde o átomo é ionizado. Estas curvas foram traçadas por Walters⁽³⁶⁾ (1976), utilizando resultados obtidos com diversos métodos de aproximação, bem como resultados experimentais. Podemos observar que para energias de impacto acima de 10 eV, a seção de choque integral para a excitação ao primeiro estado excitado é maior que a soma das seções de choque integral para todos os outros canais abertos de espalhamento.

Devido à grande probabilidade de ocorrência de excitações ao primeiro estado excitado em átomos alcalinos, denomina-se este tipo de transição de transição ressonante.

(b) Ocorre um forte acoplamento entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, que determina boa parte das características do espalhamento elástico, bem como do inelástico. Este acoplamento, por exemplo, faz com que o espalhamento elástico seja mais fortemente ligado ao canal referente ao primeiro estado excitado que qualquer outro, sendo 98% da polarizabilidade do átomo de lítio decorrente do estado 2p (Bransden e McDowell⁽⁵⁾ 1977).

Estas questões explicam, em parte, a razão do método de acoplamento-forte fornecer resultados em bom acordo com os resultados experimentais, para o processo de excitação ao primeiro estado excitado, em energias de impacto intermediárias. Este razoável acordo é obtido mesmo considerando uma expansão em que são tratados apenas os estados inicial e final. O método de acoplamento-forte não descreve a perda do fluxo dos canais abertos de espalhamento considerados na expansão da função de onda para os não considerados nesta expansão. Esta questão passa a ter importância reduzida, pois, conforme mencionado, os canais abertos de espalhamento não considerados na expansão da função de onda representam uma contribuição pequena à seção de choque total. O forte acoplamento entre os estados inicial e final reduz também, de certa forma, o efeito da má descrição da distorção do átomo no processo de colisão gerado ao se truncar a série (3.1), referente à expansão da função de onda total. Por motivos semelhantes, o método de ondas distorcidas também é favorecido ao tratar processos deste tipo.

A seção de choque diferencial para o processo de excitação ao primeiro estado excitado, cai mais rapidamente que quatro ordens de grandeza entre ângulos de espalhamento de 0° a 20° , para energias de impacto acima de 50 eV. Para energias de impacto entre 10 e 50 eV ela cai entre 2 e 4 ordens de grandeza nos mesmos ângulos, caindo mais lentamente para energias de impacto menores. Para outros processos de excitação, a seção de choque diferencial apresenta, de uma maneira geral, uma variação mais lenta como função do ângulo de espalhamento e energia de impacto.

Como consequência, a seção de choque integral para este processo será determinada, para energias de impacto superiores a

10 eV, basicamente pelos valores da seção de choque diferencial a ângulos pequenos (inferiores a 20°). Para energias de impacto abaixo de 10 eV, e para outras excitações, deve-se esperar alguma contribuição de ângulos maiores.

Isto explica o bom desempenho dos resultados para a seção de choque integral na aproximação de Glauber, para energias de impacto acima de 10 eV. Isto decorre de que a aproximação de Glauber fornece resultados para a seção de choque diferencial, em ângulos pequenos e energias intermediárias, em bom acordo com os resultados experimentais (trata-se de uma situação adequada à aplicação desta aproximação, conforme exposto no capítulo anterior).

Finalmente, cabe alguns comentários gerais a respeito da indistinguibilidade entre os elétrons. Ela é representada nos cálculos teóricos através da utilização, nas equações aproximadas, de uma função de onda antissimétrica com relação à troca das coordenadas de dois elétrons. Para processos onde os estados inicial e final do átomo são idênticos, o efeito da indistinguibilidade entre os elétrons pode ser estimado através da comparação entre os termos direto e de troca. De uma maneira geral, estimou-se que o termo de troca apresenta uma magnitude considerável na região de baixas energias de impacto, pequena no início da região de energias intermediárias e desprezível na faixa de energias de impacto maiores.

4.2 - COLISÕES INELÁSTICAS ENVOLVENDO ÁTOMOS DE LÍTIU

a) Processo $e^{-} + \text{Li}(2s) \rightarrow e^{-} + \text{Li}(2p)$

i: Trabalhos Experimentais - Dentre os diversos traba-

lhos experimentais realizamos mencionaremos somente os mais recentes: Vuskovic et al. ⁽³⁷⁾ (1982), determinaram seções de choque diferencial e integral para as energias de impacto de 10, 20, 60, 100, 150 e 200 eV. Williams et al. ⁽³⁸⁾ (1976), obtiveram as mesmas grandezas para energias de impacto de 10, 20 e 60 eV. Leep e Gallagher ⁽³⁹⁾ (1974), bem como Zapesochnyi et al. ⁽⁴⁰⁾ (1975), obtiveram seções de choque integrais em energias de impacto do limiar de excitação até 100 eV.

ii: Trabalhos Teóricos:

1) 1ª aproximação de Born: Greene e Williamson ⁽⁴⁾ (1974), calcularam seções de choque integrais para diversas energias de impacto, utilizando funções de onda numéricas geradas através do método Hartree-Fock- $X\alpha$. Neste trabalho também estão apresentados resultados obtidos nesta aproximação por Veinhstein e resultados nas aproximações de Bethe e Born-Ochkur, onde o termo de troca é calculado através da aproximação de Ochkur. Roy ⁽⁴¹⁾ (1978) obteve resultados para a seção de choque integral em diversas energias de impacto na aproximação de Born, bem como descrevendo o termo de troca nas aproximações de Ochkur, Ochkur-Rudge e Ochkur-Rudge-Belly. Walters ⁽¹⁴⁾ (1973) determinou a seção de choque integral para energias de impacto do limiar de excitação até 50eV e a seção de choque diferencial para a energia de impacto de 5.4 eV.

Os resultados apresentados nos trabalhos de Greene e Williamson ⁽⁴⁾ e no de Roy ⁽⁴¹⁾ estão de uma maneira geral concordes, podendo-se atribuir as pequenas diferenças entre os diversos resultados, às diferentes funções de onda utilizadas (Roy ⁽⁴¹⁾)

1978). A comparação com os resultados de Walters ⁽¹⁴⁾ é dificultada por estarem apresentados em gráficos logarítmicos, porém parecem estar em bom acordo com os resultados dos outros trabalhos mencionados.

A introdução do termo de troca altera os resultados para a seção de choque integral nas energias de impacto de 10, 20 e 60 eV em, no máximo, 8%, 4% e 1%, respectivamente. Como esperamos, os resultados para a seção de choque integral apresentam um bom acordo com os resultados experimentais para altas energias de impacto, estando progressivamente discordantes para energias de impacto menores.

A força de oscilador generalizada (no contexto da primeira aproximação de Born) foi determinada por Tripathi ⁽⁴²⁾ (1981), e Ganas ⁽⁴³⁾ (1983).

2) Aproximação de Glauber: A transição ressonante no átomo de lítio foi bastante estudada com a aproximação de Glauber. O motivo é que além de ser a transição mais provável para energias de impacto acima de 10 eV, trata-se do caso menos trabalhoso no que diz respeito à obtenção de resultados com esta aproximação para átomos mais pesados que o hélio, além da disponibilidade de um grande número de resultados experimentais. O primeiro trabalho com a aproximação de Glauber para este processo foi realizado por Mathur et al. ⁽⁴⁴⁾ (1972), tendo sido utilizada uma aproximação adicional conhecida como Inert Frozen Core (I.F.C.), onde a interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico é desprezada. Os resultados deste trabalho estão, entretanto, em desacordo com os resultados dos trabalhos posteriores, indicando que houve erros nos cálculos numéricos (Walters ⁽¹⁴⁾, 1973). Em 1973,

Walters ⁽¹⁴⁾ obteve resultados para seções de choque diferencial e integral, também utilizando a aproximação I.F.C.

Este processo foi o único, envolvendo átomos alcalinos, onde se conseguiu obter resultados numéricos levando em conta a contribuição de todos os termos referentes aos elétrons do caroço atômico, o que foi feito independentemente por Kumar e Srivastava ⁽⁴⁵⁾ (1976), e Castro ⁽³²⁾ (1977). Nestes trabalhos foram obtidos resultados também na aproximação I.F.C., estando os resultados concordantes entre si e com os resultados de Walters ⁽¹⁴⁾.

Os resultados para a seção de choque integral apresentam um bom acordo com os resultados experimentais para energias de impacto acima de 10 eV.

3) Aproximação de Acoplamento-Forte e Ondas Distorcidas: A aproximação de acoplamento-forte foi utilizada por Burke e Taylor ⁽⁴⁶⁾ (1969), e por Issa ⁽¹¹⁾ (1977), no cálculo da seção de choque integral para energias de impacto do limiar de excitação até 50 eV. Issa ⁽¹¹⁾ obteve também resultados para a seção de choque diferencial. Nestes dois trabalhos, utilizou-se, na maior parte dos cálculos, apenas os estados inicial e final (2s e 2p) na expansão da função de onda total. Para energias de impacto muito pequenas, Burke e Taylor ⁽⁴⁶⁾ levaram em conta também o estado 3p na expansão da função de onda, não tendo observado mudanças sensíveis nos resultados com a introdução deste estado. Issa ⁽¹¹⁾ estimou o efeito dos canais abertos de espalhamento não considerados na expansão da função de onda através da descrição aproximada, nas equações acopladas, dos infinitos termos correspondentes a estes canais. Os resultados apresentaram diferenças significativas com a inclusão desta descrição apenas para energias de impacto abaixo de 25 eV.

Com relação à descrição dos elétrons do caroço atômico, Issa ⁽¹¹⁾ levou-os em conta através de um potencial efetivo e Burke e Taylor ⁽⁴⁶⁾ consideraram explicitamente todos os termos. A boa concordância entre os resultados para a seção de choque integral obtida nestes dois trabalhos indica que, para efeito do cálculo da seção de choque integral nesta região de energias de impacto, a descrição dos elétrons do caroço atômico não é fundamental.

Kennedy et al. ⁽⁹⁾ (1977), utilizou o método Unitarized Distorted-Wave Polarized Orbital (UNDWPO II) no cálculo de seções de choque diferencial e total em energias de impacto de 5.1 a 100 eV.

Os resultados para a seção de choque integral dos trabalhos mencionados estão em bom acordo com os resultados experimentais.

4) Outros Métodos de Aproximação: Em 1972, McCavert e Rudge ⁽⁴⁷⁾ calcularam seções de choque integrais utilizando um método variacional baseado em ondas planas. Em 1978, Roy ⁽¹⁰⁾ calculou seções de choque integrais utilizando a aproximação de Vainshtein, e também com um método denominado 1ª Aproximação de Born Modificada, onde a interação do elétron incidente com o núcleo é levada em conta. Recentemente Desai e Rao ⁽⁴⁸⁾ (1983), propuseram, sem contudo obterem resultados numéricos, uma forma de determinar a amplitude de espalhamento para este processo, utilizando a idéia de associar termos oriundos da expansão em séries da expressão de Glauber com termos da série de Born.

Os resultados numéricos obtidos por Roy ⁽¹⁰⁾, assim como aqueles obtidos por McCavert e Rudge ⁽⁴⁷⁾ apresentaram, de uma

maneira geral, um acordo com os resultados experimentais bem mais pobre que aqueles obtidos com os métodos UNDWPO II, acoplamento - forte e aproximação de Glauber.

b) Outras Excitações Discretas Envolvendo Átomos de Lítio

i: Trabalhos experimentais - Zajonc e Gallagher⁽⁴⁹⁾, (1979), obtiveram seções de choque integrais a partir da energia de impacto de 10 eV para excitações aos estados 3s, 4s, 3d e 4d. Williams et al.⁽³⁸⁾ (1976), obtiveram seções de choque diferencial e integral em energias de impacto de 10, 20 e 60 eV para excitações aos estados 3s, 3p e 4p.

ii: Trabalhos teóricos:

1) Primeira Aproximação de Born: Resultados para a seção de choque integral foram obtidos no mencionado trabalho de Greene e Williamson⁽⁴⁾ (1974), onde estão colocados os resultados obtidos nesta aproximação por Vainshtein, e os resultados nas aproximações de Bethe e Born-Ochkur. São considerados excitações aos estados 3s, 4s, 5s, 3p, 4p, 5p, 3d, 4d, e 5d. Roy⁽⁴¹⁾ (1978), obteve resultados para a seção de choque integral nas aproximações de Born, Born-Ochkur, Born-Ochkur-Rudge e Born-Ochkur-Rudge-Belly. A diferença nos resultados ao introduzir o termo de troca é, de uma maneira geral, maior que no caso da excitação ao estado 2p, apresentando em certos casos, diferenças de até 10%, já em energias de impacto de 20 eV. A concordância nos resultados dos dois trabalhos mencionados acima é razoável, sendo a pequena diferença entre os resultados atribuída à utilização de diferentes funções de onda atômicas (Roy⁽⁴¹⁾ 1978).

Tripathi⁽⁴²⁾ (1981), e Ganas⁽⁴³⁾ (1983), determinaram a força de oscilador generalizada para diversos processos. No traba

lho de Tripathi ⁽⁴²⁾ foram abordadas excitações do estado fundamental aos estados 3s, 3p e 3d, bem como do estado 2p aos estados 3s, 3p e 3d, do estado 3s aos estados 3p e 3d e do estado 3p ao estado 3d. No trabalho de Ganas ⁽⁴³⁾ são tratadas excitações do estado fundamental aos estados 3s, 4s, 3p, 4p, 5p, 3d e 4d.

2) Outros Métodos: Recentemente, Winters et al. ⁽⁵⁰⁾, (1982), estudou com o método UNDWPO II o processo de excitação do átomo de lítio do estado fundamental ao estado 3s, obtendo resultados para a seção de choque diferencial e integral em energias de impacto de 10, 20 e 60 eV.

Utilizando uma aproximação denominada Two Potencial Modified Born (TWPO), Sharma et al. ⁽⁵¹⁾, (1982), obtiveram seções de choque diferencial e integral para excitações ao estado 3s em energias de impacto de 60 a 200 eV. Esta aproximação leva em conta a interação entre o elétron incidente e o núcleo atômico considerando, ao invés de ondas planas, ondas distorcidas para o elétron incidente.

4.3 - COLISÕES INELÁSTICAS ENVOLVENDO ÁTOMOS DE SÓDIO

3-a: Processo $e^- + Na(3s) \rightarrow e^- + Na(3p)$

i: Trabalhos experimentais: Este processo vem sendo estudado desde 1933, e só mencionaremos alguns trabalhos mais recentes: Shuttleworth et al. ⁽⁵²⁾ (1977), obtiveram seções de choque diferenciais a ângulos de espalhamento pequenos, para energias de impacto de 54.4, 100, 150 e 250 eV. Bukman e Teubner ⁽⁵³⁾, de-

terminaram seções de choque integral e diferencial para energias de impacto de 54.4, 100, 150 e 217.7 eV. Seções de choque integrais foram determinadas por Enemark e Gallagher⁽⁵⁴⁾ (1972), Stumpf et al.⁽⁵⁵⁾ (1978), e Phelps e Lin⁽⁵⁶⁾ (1981). Neste último trabalho, que trata também de diversas outras excitações, está colocada uma interessante discussão a respeito dos diversos trabalhos experimentais.

ii: Trabalhos teóricos

1) Primeira Aproximação de Born - Greene e Williamson⁽⁴⁾ (1974), obtiveram seções de choque integrais, tendo também colocado os resultados obtidos com esta aproximação por Veinshstein. Calcularam também a seção de choque integral com as aproximações de Bethe e Born-Ochkur. Roy⁽⁴¹⁾ (1978), determinou seções de choque integrais nas aproximações de Born, Born-Ochkur, Born-Ochkur-Rudge, Born-Ochkur-Rudge-Belly. Walters⁽¹⁴⁾, obteve na aproximação de Born, resultados para a seção de choque diferencial em energia de impacto de 54.4 eV, bem como a seção de choque integral para energias de impacto do limiar até 100 eV.

A introdução do termo de troca altera os resultados para as energias de impacto de 10, 20 e 80 eV, no máximo em 7%, 3% e 1% respectivamente (estimativa tirada dos resultados de Roy⁽⁴¹⁾). Os resultados contidos nos artigos citados estão em bom acordo entre si, sendo difícil, entretanto, uma comparação precisa com os resultados de Walters⁽¹⁴⁾ por se encontrarem em gráficos logarítmicos.

Os resultados para a seção de choque integral, apresentam boa concordância com os resultados experimentais para energias de impacto acima de 100 eV, passando a discordar, fortemente,

na medida em que se considera energias de impacto menores.

2) Aproximações de Acoplamento-Forte e Ondas Distorcidas - A aproximação de acoplamento-forte foi bastante utilizada no estudo deste processo. No trabalho de Korff et al. ⁽⁵⁷⁾ (1973), que aborda energias de impacto do limiar a 24 eV, estão apresentadas uma série de discussões interessantes. Neste trabalho, onde o efeito de troca é desprezado, são calculadas seções de choque integrais utilizando na expansão da função de onda 2 estados (3s e 3p); 3 estados (3s, 3p e 3d); 7 estados (3s, 3p, 4s, 4p, 4d e 4f), e 8 estados (3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f e 5p). Observa-se uma mudança significativa nos resultados entre os cálculos onde se utilizou 2 estados (3s e 3p) e o em que se utilizou os estados 3s, 3p e 3d. A introdução de estados com $n = 4$ e $n = 5$, praticamente não modifica os resultados obtidos ao considerar os estados 3s, 3p e 3d.

A diferença nos resultados de Korff et al. ⁽⁵⁷⁾ entre os cálculos com 2 e 3 estados na expansão do método decorre de que a integral radial $(3p|r|3d)$ é de magnitude comparável à integral $(3s|r|3d)$ implicando que o acoplamento 3p - 3d causa uma perda de fluxo da excitação $3^2S \rightarrow 3^2P$ para a excitação 3^2S+3^2D . Este problema, relacionado com a questão de levar ou não em conta na expansão do método um canal aberto de espalhamento com o mesmo número quântico principal n (e portanto, com pequenas diferenças de energia entre os estados), não se coloca no caso da excitação ao estado 2p no átomo de lítio, uma vez que para $n = 2$ temos apenas estados de simetria s e p.

Barnes et al. ⁽⁵⁸⁾ (1965), obtiveram seções de choque integrais utilizando na expansão apenas os estados inicial e final

e desprezando o termo de troca. Seus resultados apresentaram, de uma maneira geral, uma diferença de 10% com relação aos resultados em que Korff et al. ⁽⁵⁷⁾ utilizaram também apenas dois estados. Esta diferença pode ser atribuída, segundo Korff ⁽⁵⁷⁾, ao fato de que no trabalho de Barnes et al. ⁽⁵⁸⁾ foram utilizados orbitais hidrogenóides e no de Korff ⁽⁵⁷⁾ expansões do tipo Slater. Karule e Peterkop ⁽⁵⁹⁾ (1965), determinaram seções de choque integrais para baixas energias de impacto. Nesta região de energias de impacto eles mostraram que, conforme esperado nestas energias de impacto, a inclusão de termos de troca altera sensivelmente os resultados. Carse ⁽⁶⁰⁾ (1972), e Issa ⁽¹¹⁾ (1977), determinaram seções de choque intetraais considerando os elétrons do caroço através de um potencial fenomenológico (radial) e desprezando os termos de troca. No trabalho de Issa ⁽¹¹⁾ foram também realizados alguns cálculos, levando em conta os termos de troca, tendo ele estimado uma diferença nos resultados ao introduzir termos de troca de 10%, 3% e 1%, respectivamente, para energias de impacto de 10, 20 e 50 eV. Esta estimativa concorda, em linhas gerais, com a mencionada estimativa retirada de cálculos com a aproximação de Ochkur ^(4,41) do termo de troca. Estes dados indicam que para este caso, apesar da aproximação de Born não ser adequada à esta região de energias de impacto, a aproximação de Born-Ochkur, curiosamente, estima bem o efeito do termo de troca.

Com a aproximação UNDWPOII, Kennedy et al. ⁽⁹⁾ (1977), determinaram seções de choque integral e diferencial para as energias de impacto de 5.1, 8.1, 12.1, 34.4 e 100 eV.

Os resultados com estas aproximações estão, de uma maneira geral, em bom acordo com os resultados experimentais, conforme será mostrado no Capítulo VIII.

3) Aproximação de Glauber - A aproximação de Glauber foi utilizada no estudo deste processo de excitação por Walters ⁽¹⁴⁾ (1973), utilizando a aproximação adicional I.F.C., onde se despreza a interação entre o elétron incidente e os elétrons atômicos. Os resultados para a seção de choque diferencial em pequenos ângulos de espalhamento e para a seção de choque integral, apresentam um bom acordo com os resultados experimentais.

4) Outras Aproximações - A seção de choque integral para este processo foi determinada também por Roy ⁽¹⁰⁾ (1978), McCavert e Rudge ⁽⁴⁷⁾ (1972). No trabalho de Roy ⁽¹⁰⁾ foi utilizada a aproximação de Vainshtein e no de McCavert e Rudge ⁽⁴⁷⁾ um método variacional baseado em ondas planas, estando os resultados destes trabalhos, de uma maneira geral, em pobre acordo com os experimentais.

3-b: Outras Excitações Discretas Envolvendo Átomos de Sódio

i: Trabalhos experimentais - O já mencionado trabalho de Phelps e Lin ⁽⁵⁶⁾ (1981), apresenta seções de choque integrais para excitações do estado fundamental aos estados 4s, 5s, 6s, 7s, 4p, 5p, 6p, 3d, 4d, 5d, 6d, 6f e 7f, numa larga faixa de energias de impacto. Srivastava e Vuskovic ⁽⁶¹⁾ (1980), determinaram seções de choque diferencial e integral para excitações ao estado 4s, e aos estados não resolvidos em seu experimento (3d+4p) e (4d+4f+5p+5s) para energias de impacto de 10, 20, 40 e 54.4 eV. Resultados para excitações aos estados 3d, 4p, 4d e 4f foram também determinados por Zapesochnyi e Shimon ⁽⁶²⁾ (1965).

ii: Trabalhos teóricos

1) Com a primeira aproximação de Born - De novo o traba

lho de Greene e Williamson⁽⁴⁾ (1974), contém resultados nesta aproximação, os resultados determinados por Vainshtein, assim como os resultados nas aproximações de Bethe e Born-Ochkur. São determinadas seções de choque integrais para transições aos estados 4p, 5p, 6p, 7p, 4s, 5s, 6s, 7s, 3d, 4d, 5d, 6d e 7d. Roy⁽⁴¹⁾ (1978), obtém seções de choque integrais para a excitação ao estado 3d, com as aproximações de Born, Born-Ochkur, Born-Ochkur-Rudge e Born-Ochkur-Rudge-Belly.

Deve-se esperar (Korff et al.⁽⁵⁷⁾ 1973) que o termo de troca contribua mais neste caso que nas excitações ressonantes 3s-3p, o que de fato indicam os resultados de Green e Williamson⁽⁴⁾ com a aproximação de Born-Ochkur. Como exemplo extremo, para o processo de excitação 3s-5p, o termo de troca altera os resultados ainda em 10% em energias de impacto de 100 eV. Para excitações a estados do tipo s, entretanto, a diferença nos resultados ao incluir o termo de troca é, de uma maneira geral, semelhante ao caso do processo ressonante 3s-3p.

2) Outros trabalhos teóricos - O já mencionado trabalho de Korff et al.⁽⁵⁷⁾ (1973), que utiliza a aproximação de acoplamento-forte, trata também de excitações aos estados 3d, 4s, 4p, 4d e 4f, utilizando até os 8 estados na expansão do método já descritos na seção anterior. São obtidos resultados para a seção de choque integral em energias de impacto do limiar até 24 eV. A excitação ao estado 4s foi estudada por Hertel e Rost⁽⁷⁾ (1971), com a segunda aproximação de Born. São obtidos resultados para a seção de choque integral em uma larga faixa de energias de impacto, bem como para a seção de choque diferencial em energias de impacto de 25, 50, 100 e 500 eV, tendo sido considerados em segun

da ordem os estados intermediários 3s, 3p e 4s. Neste trabalho estimou-se que os resultados para energias de impacto acima de 100eV eram confiáveis, e que os termos em ordem superior devem ser importantes em energias abaixo de 50 eV, uma vez que nesta região os termos em segunda ordem já representaram um papel importante.

McCavert e Rudge⁽⁴⁷⁾ (1972), determinaram seções de choque integrais com um método variacional baseado em ondas planas para excitações aos estados 4s, 3d e 4p. Roy⁽⁶³⁾ (1977), determinou seções de choque integrais com a teoria clássica combinada de Percival para excitações aos estados 4s, 5s e 6s.

4.4 - COLISÕES INELÁSTICAS ENVOLVENDO ÁTOMOS DE POTÁSSIO

4-a: Processo $e^- + K(4s) \rightarrow e^- + K(4p)$

i: Trabalhos experimentais - O trabalho de Phelps et al.⁽⁶⁴⁾ (1979), apresenta uma interessante discussão do esforço experimental relacionado com este e outros processos de excitação discretos envolvendo átomos de potássio. São apresentados resultados para a seção de choque integral em uma larga faixa de energia de impacto. Entre outros trabalhos mais recentes, Buckman et al.⁽⁶⁵⁾ (1979), obtiveram seções de choque integral e diferencial para energias de impacto de 54.4, 75, 100 e 200 eV, e Williams e Trajmar⁽⁶⁶⁾ (1977), para as energias de impacto de 6.7, 16 e 60 eV; Slevin et al.⁽⁶⁷⁾ (1972), determinaram seções de choque diferenciais para energias de impacto de 3.0, 4.4 e 5.4 eV; Chen e Gallagher⁽⁶⁸⁾ (1978), bem como Zapesochnyi et al.⁽⁴⁰⁾ (1975), determinaram seções de choque integrais para uma larga faixa de energias de impacto.

ii: Trabalhos teóricos

1) Primeira aproximação de Born - A seção de choque integral para diversas energias de impacto foi determinada por Greene e Williamson⁽⁴⁾ (1974) contendo também os resultados nesta aproximação determinados por Vainshtein, bem como resultados nas aproximações de Bethe e Born-Ochkur. Walters⁽¹⁴⁾ (1973), determinou a seção de choque integral para energias de impacto até 50 eV, bem como a seção de choque diferencial para a energia de impacto de 54.4 eV. Uma vez que os resultados de Walters⁽¹⁴⁾ são apresentados em gráfico logarítmico, é difícil a comparação com os outros resultados, estando acima dos demais cerca de 10%, uma diferença média maior daquela que inferimos nos casos do Li e Na. Aliás, neste caso, os resultados de Greene e Williamson⁽⁴⁾ apresentam uma diferença maior com relação aos resultados de Vainshtein (ainda que pequena, menores que 5%) que no caso do Li e Na.

O termo de troca, estimado através da aproximação de Ochkur⁽⁴⁾, altera os resultados em 5%, 2% e 1%, respectivamente, para energias de impacto de 10, 20 e 70 eV. De novo os resultados para a seção de choque integral apresentam um pobre acordo com os resultados experimentais na região de baixas energias de impacto, apresentando-se progressivamente mais concordantes para energias de impacto maiores.

A força de oscilador generalizada (no contexto da primeira aproximação de Born) foi determinada por Ganas⁽⁶⁹⁾ (1983).

2) Outros trabalhos teóricos - O método de acoplamento-forte, ao que nos consta, foi apenas aplicado em energias de impacto abaixo de 5 eV, numa faixa de energia fora de nosso interesse principal. Este estudo foi realizado por Moores⁽⁶⁾ (1976), bem

como por Karule e Peterkop ⁽⁵⁹⁾ (1965). Nestes trabalhos foram determinadas seções de choque diferencial e integral, sendo que no primeiro, foram utilizados 3 estados na expansão do método (4s,4p e 3d), e no segundo apenas os estados inicial e final.

Com o método UNDWPOII, Kennedy et al. ⁽⁹⁾ (1977), obtiveram seções de choque integral e diferencial em energias de impacto de 5.1, 8.1, 12.1, 27.2, 54.4 e 100 eV. A aproximação de Glauber foi utilizada por Walters ⁽¹⁴⁾ (1973) no cálculo de seções de choque diferencial e integral, utilizando a aproximação adicional I.F.C., onde é desprezada a interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico. Os resultados com as aproximações UNDWPOII e Glauber apresentam, de uma maneira geral, bom acordo com os resultados experimentais para a seção de choque integral em energias de impacto acima de 10 eV.

A seção de choque integral para este processo, foi também determinada por Roy ⁽¹⁰⁾ (1978) com a aproximação de Vainshtein.

4-b: Outras Excitações Discretas Envolvendo Átomos de Potássio

i: Trabalhos experimentais - No trabalho de Phelps et al. ⁽⁶⁴⁾ (1979) são obtidas seções de choque integrais para inúmeros processos de excitação em larga faixa de energias de impacto; Williams e Trajmar ⁽⁶⁶⁾ (1977) determinaram seções de choque integral e diferencial em energias de impacto de 5.4, 16 e 60 eV para a excitação aos estados não resolvidos em seu experimento (5s+3d), e Hertel e Ross ⁽⁷⁰⁾ (1969) determinaram forças de oscilador generalizadas para diversos processos de excitação.

ii: Trabalhos teóricos - Resultados para a seção de choque integral na primeira aproximação de Born, nas aproximações de Born-Ockhur e Bethe, para diversos processos de excitação, foram determinados por Green e Williamson⁽⁴⁾ (1974). Ganas⁽⁶⁹⁾ (1982) determinou a força de oscilador generalizada (no contexto da primeira aproximação de Born) para diversos processos de excitação do átomo de Potássio.

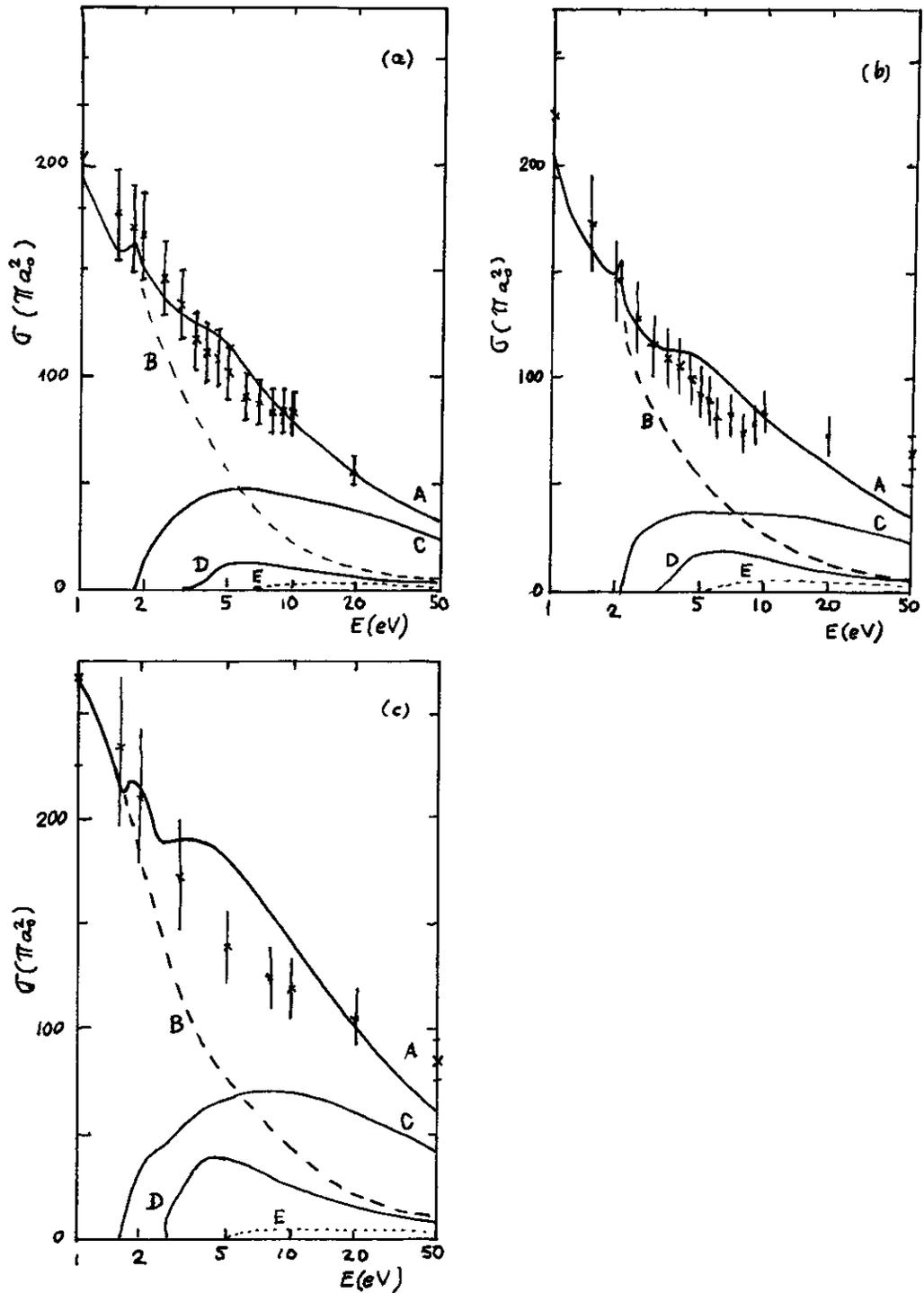


FIGURA 4.1 - Seção de choque integral para ⁽¹⁴⁾: (a) lítio, (b) sódio e (c) potássio. Na curva A está a estimativa teórica para a seção de choque integral total, na B a seção de choque integral elástica, na C o processo de excitação ressonante, na D outras excitações discretas e na E processos de ionização. Estão colocados também os pontos experimentais para a seção de choque integral total.

CAPÍTULO V

DESCRIÇÃO DO ÁTOMO

Os diversos métodos de aproximação mencionados no Capítulo III utilizam, em seu formalismo, de funções de onda atômicas obtidas através de métodos de aproximação. Além disto são utilizadas algumas aproximações adicionais referentes à descrição do átomo no processo de colisão.

Neste capítulo descrevemos diversas aproximações que utilizamos neste trabalho no que concerne ao átomo. Neste sentido descrevemos a forma como são obtidas as funções de onda atômicas, bem como as aproximações adicionais utilizadas para descrever o átomo no processo de colisão.

5.1 - FUNÇÃO DE ONDA ATÔMICA

A Hamiltoniana não relativística para um átomo de N elétrons e Z cargas nucleares é dada, em unidades atômicas, por:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N v_i^2 - \sum_{i=1}^N \frac{Z}{r_i} + \sum_{j < i=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (5.1)$$

O primeiro termo do lado direito desta expressão é referente à energia cinética dos elétrons, o segundo descreve a interação Coulombiana dos elétrons com o núcleo, e o terceiro a inte-

ração Coulombiana entre os elétrons, com $r_i = |\vec{r}_i|$ e $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$.

Dentre os efeitos não considerados na Hamiltoniana acima, o mais importante é a interação spin-órbita. Para os átomos relativamente leves abordados neste trabalho, este efeito é quantitativamente pouco intenso quando comparado com as interações Coulombianas consideradas na Hamiltoniana acima, e pode ser tratado a posteriori através da teoria de perturbações.

A determinação de auto-funções para esta Hamiltoniana em átomos com $Z > 1$ implica na resolução de um problema de muitos corpos, o que não se consegue de forma fechada. Para separar as variáveis de cada elétron foi proposto por Hartree um modelo onde se supõe que cada elétron se move num campo central produzido pelo núcleo e pela distribuição média de cargas dos outros elétrons. Foi proposto então representar a função de onda como um produto simples de orbitais mono-eletrônicos. Visando satisfazer o Princípio de Pauli, Fock (71) e Slater (72), independentemente, propuseram representar a função de onda como um produto antissimetrizado de orbitais mono-eletrônicos, na forma:

$$\psi(v_1 \dots v_N | \hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) = A \prod_{k=1}^N \phi(v_k | \hat{r}_k) \quad , \quad (5.2)$$

onde v_k representa o conjunto de números quânticos associados ao k -ésimo elétron, \hat{r}_k o conjunto de coordenadas do k -ésimo elétron, $\phi(v_k | \hat{r}_k)$ são as referidas funções de onda mono-eletrônicas conhecidas como spin-orbitais, e A o operador de antissimetrização, dado por:

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left\{ 1 - \sum_{i>j=1}^N P_{ij} \right\} \quad , \quad (5.3)$$

sendo P_{ij} (73, 74) o operador que permuta as coordenadas \hat{r}_i e \hat{r}_j .

Neste contexto é utilizado o método variacional minimizando a energia total $\langle H \rangle$ com relação à função de onda na forma acima colocada, sujeito ao vínculo da ortonormalidade entre os diversos spin-orbitais ⁽⁷⁵⁾. Obtém-se então equações para cada spin-orbital que são funções da densidade de carga média dos demais elétrons. Uma vez que a determinação das densidades de carga dependem do conhecimento dos spin-orbitais, resolve-se o problema de forma iterativa. Considera-se inicialmente spin-orbitais tentativas, gerando-se a partir destes as densidades de cargas, o que permite a obtenção de novos spin-orbitais, e assim sucessivamente até o processo convergir.

Para o sistema descrito pela Hamiltoniana (5.1), ou seja, na ausência do efeito spin-órbita e outros efeitos relativísticos, o momento angular orbital total, $\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i$, bem como o momento de spin total, $\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{s}_i$, comutam com a Hamiltoniana. Neste sentido seus módulos e o módulo de suas projeções num determinado eixo são "constantes" de movimento, e o conjunto (L, M, S, S_z) são considerados "bons" números quânticos. Trata-se de uma boa aproximação para átomos leves, o que não ocorre para átomos pesados onde a interação spin-órbita não pode mais ser considerada apenas como uma perturbação.

Ainda para o sistema descrito pela Hamiltoniana (5.1), dado ao caráter não esférico da interação Coulombiana entre os elétrons, os momentos angulares orbitais individuais de cada elétron, \vec{l}_i , não comutam com a Hamiltoniana. Ao fazermos a aproximação de campo central o potencial percebido por cada elétron passa a ser central, e os momentos angulares orbitais de cada elétron passam a comutar com a nova Hamiltoniana. Assim sendo, na expressão (5.2), referente à expansão da função de onda como produtos

de spin-orbitais onde assume-se o modelo de campo central, o símbolo v_k passa a representar o conjunto de números quânticos $(n, \ell_k, m_k, s_k, s_{zk})$. O momento angular total \vec{J} será portanto construído a partir do acoplamento vetorial do conjunto dos momentos angulares orbital, $\{\vec{\ell}_k\}$, e de spin, $\{\vec{s}_k\}$.

Uma vez que estamos construindo uma teoria com sucessivas aproximações, a forma com a qual são construídos estes acoplamentos numa aproximação de campo central depende de seu sucesso na descrição dos fatos experimentais. Para átomos leves ($Z < 50$) mostrou-se que acoplando inicialmente os momentos angulares orbitais, $\vec{L} = \sum_{k=1}^N \vec{\ell}_k$, e de spin, $\vec{S} = \sum_{k=1}^N \vec{s}_k$, e posteriormente $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ consegue-se, considerando a interação spin-órbita como perturbação, uma boa descrição do espectro atômico. Fica então implícito que o termo referente à interação spin-órbita é muito menor que os termos referentes às interações Coulombianas considerados na Hamiltoniana, e que constitui uma boa aproximação considerar o módulo dos momentos angulares totais orbital e de spin como constantes de movimento.

Os estados atômicos ficam então caracterizados pelo conjunto de números quânticos $\alpha = (n, L, S, J, M_J)$, onde M_J é o valor da projeção de \vec{J} no eixo \vec{z} , e n indica os outros números quânticos necessários à especificação do estado. É usual descrever os estados através da notação de Russel-Sanders ⁽⁷⁵⁾: $2S+1L_J$, onde as letras S, P, D, F, etc, representam, respectivamente $L=0, 1, 2, 3$, etc.

Neste trabalho abordamos apenas alvos compostos de átomos alcalinos. Estes átomos situam-se na tabela periódica uma coluna após os gases nobres, sendo portanto caracterizados como possuindo uma camada fechada mais um elétron de valência. Como exem-

plô os três átomos mais leves desta série são representados no estado fundamental como: Li - $1s^2 2s$; Na - $1s^2 2s^2 2p^6 3s$; K - $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$.

Uma forma de escrever a função de onda (5.2) para átomos alcalinos é:

$$\psi(v_1 \dots v_N | \hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) = A \phi_C(v_1 \dots v_{N-1} | \hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N-1}) \phi_V(v_N | \hat{r}_N) \quad , \quad (5.4)$$

onde $\phi_C(v_1 \dots v_{N-1} | \hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N-1})$ é um produto simples dos N-1 spin-orbitais dos elétrons do caroço atômico e $\phi_V(v_N | \hat{r}_N)$ o spin-orbital associado ao elétron de valência.

Para átomos de camadas fechadas os auto-valores de $\vec{L}_Z = \sum_{k=1}^N \vec{\ell}_{zk}$ e $\vec{S}_Z = \sum_{k=1}^N \vec{s}_{zk}$ serão nulos dado ao cancelamento dos auto-valores da projeção dos momentos angulares orbitais e de spin de cada elétron m_k e s_k . Uma vez que $-L \leq M \leq L$ e $-S \leq S_Z \leq S$, os módulos do momento angular orbital total, \vec{L} , e de spin total, \vec{S} , também serão nulos. Desta forma os momentos angulares totais orbital e de spin de um átomo alcalino, no contexto das aproximações consideradas, serão iguais aos do elétron de valência. Em outras palavras, $\vec{L} = \vec{\ell}$ e $\vec{S} = \vec{s}$ onde representamos agora por $\vec{\ell}$, e \vec{s} respectivamente os momentos angulares orbital e de spin do elétron de valência. Da mesma forma teremos a equivalência entre os números quânticos: (L, M_L, S, S_Z) e (ℓ, m, s, s_z) , sendo o primeiro conjunto referente ao átomo completo e o segundo ao elétron de valência. O momento angular total \vec{J} será dado por: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{\ell} + \vec{s}$.

As funções de onda expressas na forma da equação (5.2) não são obrigatoriamente auto-funções de J^2 e J_Z . Para torná-las é necessário, em certos casos, tomar combinações lineares de auto-funções daquele tipo. Para o caso de átomos alcalinos é bastante

fácil construir auto-funções de J^2 e J_z a partir daquelas funções, bastando acoplar os momentos angulares orbital e de spin do elétron de valência \vec{l} e \vec{s} .

Desta forma, podemos reescrever as equações (5.2) ou (5.4) como:

$$\psi(v_1 \dots v_N | \hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) = \psi(v_V | \hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) = A \phi_C(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N-1}) \phi_V(v_V | \hat{r}_N) \quad , \quad (5.5)$$

onde $v_V \equiv (n, \ell, m, s, s_z)$ são os números quânticos associados ao elétron de valência. Para obter auto-funções de J^2 e J_z a partir destas funções, utiliza-se a seguinte relação:

$$\psi(n, \ell, s, J, M_J | \hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) = \sum_{m_\ell, m_s} \langle \ell, s, m_\ell, m_s | J, M_J \rangle \psi(v_V | \hat{r}_1 \dots \hat{r}_N) \quad , \quad (5.6)$$

onde os símbolos $\langle \ell, s, m_\ell, m_s | J, K_J \rangle$ são os coeficientes de Clebsch-Gordon referentes ao acoplamento vetorial de \vec{l} com \vec{s} .

5.2 - ORBITAIS DO TIPO SLATER

A parte radial dos spin-orbitais $\phi(v_k, \hat{r}_k)$ é obtida numericamente ou como combinação linear de funções analíticas. Neste trabalho optamos pela segunda forma escrevendo a referida parte radial como combinação linear de orbitais hidrogenoides na forma proposta inicialmente por Slater ⁽⁷⁶⁾. A parte orbital dos estados com número quântico principal n e $\ell = 0$, referidos como ns , são dados pela expressão:

$$\psi_{ns}(r, \theta, \phi) = \sum_{j=1}^{n'} \left(\sum_{d=1}^{d_j} a_{jd} \exp(-\alpha_{jd} r) \right) r^{j-1} Y_{00}(\theta, \phi) \quad (5.7a)$$

Os orbitais com número quântico principal m , $\ell = 1$ e $m_\ell = 0, \pm 1$, referidos como $m p_{m_\ell}$, são dados por:

$$\psi_{m p_{m_\ell}}(r, \theta, \phi) = \sum_{k=2}^{m'} \left(\sum_{g=1}^{g_k} b_{kg} \exp(-\beta_{kg} r) \right) r^{k-1} Y_{1, m_\ell}(\theta, \phi) \quad (5.7b)$$

sendo $Y_{\ell, m_\ell}(\theta, \phi)$ harmônicos esféricos, os números d_j e g_k determinam o número de combinações lineares por potência de r , e os coeficientes a_{jd} e b_{kg} bem como α_{jd} e β_{kg} , são determinados através do método Hartree-Fock na forma inicialmente proposta por Roothaan (77), procedimento conhecido como método Hartree-Fock - Roothaan.

O método Hartree-Fock-Roothaan utiliza-se dos mesmos conceitos físicos expostos na seção anterior para o método Hartree-Fock, ou seja, considera a Hamiltoniana não relativística expressa na equação (5.1) aliada a uma aproximação de campo central, e a função de onda total é expressa como um produto antissimetrizado de spin-orbitais na forma da equação (5.2). Os spin-orbitais são expressos na forma acima colocada ou através de outro tipo de expansão analítica. Para um determinado conjunto de parâmetros $\{\alpha_{jd}\}$ determina-se, através do método variacional, o conjunto de coeficientes $\{a_{jd}\}$ que minimiza a energia total $\langle H \rangle$ sujeito ao vínculo da ortonormalidade entre os spin-orbitais. O conjunto de parâmetros $\{\alpha_{jd}\}$ é determinado através de um processo de otimização.

A qualidade dos spin-orbitais depende do número de combinações lineares por potências de r dadas nas expressões acima pe

los números d_j e g_k , bem como da tentativa inicial para os parâmetros $\{\alpha_{jd}\}$ e $\{\beta_{kg}\}$. Trata-se de um estudo que depende do bom senso aliado a um trabalho sistemático, cujo mais conhecido foi realizado por Clementi e colaboradores ^(78,79) (1967,1974).

Na literatura se encontram orbitais do tipo Slater para os estados 2s, 2p, 3s e 3p do átomo de lítio ⁽⁷⁸⁻⁸²⁾, 3s e 3p do átomo de sódio ^(78,79,83), bem como 4s e 4p do átomo de potássio ^(78,79,83). Na Tabela 5.1 colocamos as referências de onde se encontram estes orbitais e suas formas, sendo que chamamos de SZ ("Single Zeta") aos orbitais onde se usou apenas um termo por potência de r, ou seja $d_j = g_k = 1; j,k = 0,1\dots$. Chamamos DZ ("Double Zeta") quando são considerados dois termos por potência de r e de VZ (Vários Zeta...) quando são considerados mais de dois termos por potência de r. Dispomos também implantando o programa originalmente escrito por Clementi e colaboradores ⁽⁷⁸⁾ e otimizado posteriormente por diversos pesquisadores. Este programa entretanto, só permite o cálculo de apenas um orbital por simetria, ou seja, o orbital de energia mais baixa para cada simetria. Uma vez que só nos interessa orbitais do tipo s e p em átomos alcalinos, este programa só nos fornece orbitais do tipo Slater para o estado fundamental e primeiro estado excitado dos átomos de lítio, sódio e potássio. Dado que estes estados foram estudados detalhadamente por diversos pesquisadores (vide Tabela 5.1), só utilizamos o programa para analisar alguns detalhes dos mencionados orbitais, e usamos em nossos cálculos os orbitais colocados na literatura.

5.3 - APROXIMAÇÃO DE NÃO RELAXAMENTO DOS ORBITAIS DO CAROÇO ATÔMICO

Quando se compara o cálculo de um átomo no estado fundamental com um em que o elétron de valência está num estado excitado, observa-se obviamente mudanças em todos os spin-orbitais do átomo. O orbital referente ao elétron de valência será mais "difuso" no cálculo de estados excitados que no caso do estado fundamental. Uma vez que os orbitais referentes aos elétrons do caroço atômico possuem, na sua determinação, um termo de interação Coulombiana média com o elétron de valência, estes tendem também a ficar mais "difusos", em outros termos, os orbitais dos elétrons do caroço "relaxam". Como consequência, uma vez que se estará obtendo spin-orbitais de Hamiltonianas diferentes, os spin-orbitais gerados no cálculo em que o átomo se encontra no estado fundamental não serão mais ortogonais aos gerados no cálculo para um estado excitado.

Tal fato gera dificuldades adicionais na determinação de seções de choque diferenciais através de diversos métodos de aproximação, uma vez que a condição de ortonormalidade entre spin-orbitais reduz drasticamente a complexidade do problema teórico, e conseqüentemente, o tempo de computação necessário aos cálculos numéricos. Por outro lado, é razoável supor, na maioria dos casos, que o efeito do relaxamento do caroço atômico é desprezível face às aproximações adotadas nos diversos métodos.

5.4 - APROXIMAÇÃO DE CAROÇO INERTE

Introduzindo na expressão para a amplitude de espalha -

mento na aproximação de Glauber (eq. (3.34)) a função de onda dada pela equação (5.2), e utilizando orbitais do tipo Slater, é possível reduzir analiticamente a integral de $(3N+2)$ dimensões daquela expressão a uma soma de integrais unidimensionais (Franco ⁽⁸⁴⁾ 1971, Thomas e Chan ⁽⁸⁵⁾ 1973).

Ocorre, entretanto, que o cálculo das várias integrais unidimensionais que aparecem na expressão resultante é extremamente trabalhoso. Isto é verdade já para o caso da excitação do átomo de lítio (que possui apenas três elétrons) do estado fundamental 2^2S ao primeiro estado excitado 2^2P . Para outras excitações do átomo de lítio o problema é mais trabalhoso, no que concerne ao cálculo numérico, uma vez que o número de termos que aparecem na expansão dos orbitais do tipo Slater (eq. (5.7)) aumenta quanto mais excitado for o estado atômico.

Quando pretendemos tratar do segundo átomo da série dos alcalinos, ou seja, do átomo de sódio que possui 9 elétrons, o trabalho numérico envolvido já parece ser inviável. O fato é que utilizando "apenas" as aproximações apresentadas até o momento só foram obtidas seções de choque diferenciais na aproximação de Glauber para a excitação do átomo de lítio do estado fundamental ao primeiro estado excitado (Castro ⁽³²⁾ 1977, Kunar et al. ⁽⁴⁵⁾ 1976).

Visando contornar esta dificuldade, alguns autores introduziram uma aproximação adicional no que concerne à descrição dos elétrons do caroço no processo de colisão, conhecida como aproximação de caroço inerte. Esta aproximação consiste em supor que além dos orbitais dos elétrons do caroço atômico não relaxarem com a excitação do elétron de valência, estes não são afetados durante o processo de colisão com o elétron incidente. Nesta aproximação a interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço

atômico é descrita através de um potencial médio esfericamente simétrico, $V_C(|\vec{r}_{N+1}|)$, dado por:

$$V_C(|\vec{r}_{N+1}|) = \langle \phi_C(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N-1}) \left| -\frac{N-1}{|\vec{r}_{N+1}|} + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_i|} \right| \phi_C(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N-1}) \rangle \quad (5.8)$$

sendo $\phi_C(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N-1})$ o produto simples dos (N-1) spin-orbitais dos elétrons do caroço atômico, $-(N-1)/|\vec{r}_{N+1}|$ a interação Coulombiana entre o elétron incidente e (N-1) cargas nucleares e $\sum_{i=1}^{N-1} 1/|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_i|$ a interação Coulombiana entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico.

O potencial de interação entre o elétron incidente e o alvo é então dado por:

$$V(\vec{r}_{N+1}, \vec{r}_N) = -\frac{1}{|\vec{r}_{N+1}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_N|} + V_C(|\vec{r}_{N+1}|) \quad , \quad (5.9)$$

sendo $1/|\vec{r}_{N+1}|$ a interação Coulombiana entre o elétron incidente e uma carga nuclear e $1/|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_N|$ a interação Coulombiana entre o elétron incidente e o elétron de valência.

Em 1973, Walters⁽¹⁴⁾ calculou com a aproximação de Glauber seções de choque diferenciais para transições ao primeiro estado excitado dos átomos de Li, Na e K, considerando ainda uma aproximação adicional às já citadas: ele desprezou em seus cálculos o termo $\langle V_C(\mathbf{r}) \rangle$, afirmando que a contribuição dos elétrons do caroço atômico, descrita de forma aproximada por este termo, seria desprezível em energias de impacto altas, e pequena em energia de impacto intermediárias. Neste trabalho não estão contidos os argumentos que o levaram à tal afirmação, que veremos ser discutível dependendo do átomo considerado, bem como da energia de impacto e

ângulos de espalhamento considerados. Este ponto será analisado em detalhe na medida que discutimos nossos resultados.

A grandes distâncias do átomo, o potencial de interação Coulombiano do elétron incidente com os elétrons do caroço e (N-1) cargas nucleares, assume a forma de um potencial do tipo Yukawa ⁽⁸⁶⁾ dado por:

$$V_Y(r_{N+1}) = A \exp(-\lambda |\vec{r}_{N+1}|) / |\vec{r}_{N+1}| \quad , \quad (5.10)$$

sendo as constantes A e λ respectivamente a profundidade e alcance do potencial, determinadas pelo comportamento assintótico do potencial $V_C(|\vec{r}_{N+1}|)$.

Em 1980, Lins de Barros e Brandi ⁽³³⁾ propuseram representar o potencial $V_C(r)$ pela expressão acima para quaisquer distâncias atômicas. Com esta aproximação foi possível reduzir a integrais unidimensionais, as integrais em (3N+2) dimensões da expressão (3.30) referente à amplitude de espalhamento na aproximação de Glauber. Foi abordado o caso de transições do tipo $n^2S_{1/2} \rightarrow m^2S_{1/2}$. A expressão obtida apresentou entretanto algumas incorreções.

Neste trabalho utilizamos esta aproximação, representando, portanto, o potencial $V_C(|\vec{r}_{N+1}|)$ por um potencial do tipo Yukawa. Não devemos esperar que o potencial de Yukawa represente bem o potencial $V_C(|\vec{r}_{N+1}|)$ para quaisquer distâncias atômicas $|\vec{r}_{N+1}|$. Mostraremos, por outro lado, que trata-se de uma boa descrição do mencionado potencial para certas faixas de distâncias atômicas, ou seja, para valores de $|\vec{r}_{N+1}|$ entre determinadas distâncias atômicas r_a e r_b . Veremos que para cada estado atômico é possível obter diferentes conjuntos de parâmetros A e λ referen-

tes ao potencial de Yukawa (eq. (5.10)). Cada um destes conjuntos de parâmetros faz o potencial de Yukawa descrever de forma satisfatória o potencial $V_c(|\vec{r}_{N+1}|)$ para determinadas faixas de distâncias atômicas (r_a, r_b) .

Mostraremos no Capítulo VIII que este fato não constitui uma séria limitação à utilização do potencial de Yukawa em nosso modelo. Discutiremos o comportamento dos resultados como função da variação do potencial de Yukawa, ou seja, resultados obtidos utilizando diferentes conjuntos de parâmetros A e λ . Será proposto um critério para a escolha, em cada átomo alvo, de um determinado conjunto de parâmetros A e λ .

Os conjuntos de parâmetros A e λ para um determinado estado atômico é obtido da seguinte maneira: Inicialmente é gerado um potencial numérico referente aos elétrons do caroço atômico e $(N-1)$ cargas nucleares através do método Hartree-Fock- $X\alpha$. Para tal, foram feitas modificações no programa Hermman-Skillman⁽⁸⁷⁾, que utiliza a aproximação $X\alpha$ ao termo de troca, para que o referido potencial numérico fosse também gerado no cálculo de um determinado estado atômico. A seguir os conjuntos de parâmetros A e λ são obtidos a partir do potencial numérico através de um programa que utiliza o método de mínimos quadrados. Neste programa são realizados diversos ajustes entre o potencial numérico e o potencial de Yukawa para diferentes regiões de distâncias atômicas (r_a, r_b) , com o qual determinamos os conjuntos de parâmetros A e λ , cada conjunto referente a um ajuste numa determinada região de distâncias atômicas.

Para estimar se o potencial numérico estava adequadamente representado pelo potencial de Yukawa, este programa gera também o erro percentual entre o potencial de Yukawa e o potencial

numérico para cada conjunto de parâmetros A e λ em diferentes distâncias atômicas r .

Os parâmetros A e λ , bem como os erros percentuais, estão apresentados nas Tabelas 5.2, 5.3 e 5.4. A Tabela 5.2 trata do átomo de lítio, referente ao cálculo do estado fundamental 2^2S , do primeiro estado excitado 2^2P e do segundo estado excitado 3^2S . A Tabela 5.3 trata do átomo de sódio referente ao cálculo do estado fundamental 3^2S e do primeiro estado excitado 3^2P , e a Tabela 5.4 trata do átomo de potássio no estado fundamental 4^2S .

Podemos observar por estas tabelas que o potencial de Yukawa representa, de forma satisfatória, o potencial $V_C(|\vec{r}_{N+1}|)$ em largas faixas de distâncias atômicas, desde que se escolha de forma adequada os parâmetros A e λ .

ÁTOMO	ESTADO	REFERÊNCIA	TIPO	d_1 ou g_1	d_2 ou g_2	d_3 ou g_3	d_4 ou g_4
Li	2s	Vaselov ⁽⁸⁰⁾	SZ	1	1	0	0
Li	2s	Stone ⁽⁸¹⁾	SZ	1	1	0	0
Li	2s	Clementi ⁽⁷⁹⁾	SZ	1	1	0	0
Li	2s	Clementi ⁽⁷⁹⁾	DZ	2	2	0	0
Li	2s	Clementi ^(78,79)	VZ	2	4	0	0
Li	2s	Weiss ⁽⁸²⁾	VZ	1	0	5	0
Li	2p	Vaselov ⁽⁸⁰⁾	SZ	0	1	0	0
Li	2p	Stone ⁽⁸¹⁾	SZ	0	1	0	0
Li	2p	Weiss ⁽⁸²⁾	VZ	0	1	0	4
Li	3s	Weiss ⁽⁸²⁾	VZ	1	0	6	1
Li	3p	Weiss ⁽⁸²⁾	VZ	0	1	0	6
Na	3s	Clementi ⁽⁷⁹⁾	SZ	1	1	1	0
Na	2s	Clementi ⁽⁷⁹⁾	DZ	2	2	2	0
Na	3s	Clementi ^(78,79)	VZ	1	0	7	0
Na	3s	Satz ⁽⁸³⁾	VZ	2	2	3	0
Na	3p	Satz ⁽⁸³⁾	VZ	0	2	3	0
K	4s	Clementi ⁽⁷⁹⁾	SZ	1	1	1	1
K	4s	Clementi ⁽⁷⁹⁾	DZ	2	2	2	2
K	4s	Clementi ^(78,79)	VZ	2	2	3	4
K	4s	Satz ⁽⁸³⁾	VZ	2	2	3	4
K	4p	Satz ⁽⁸³⁾	VZ	0	2	3	4

TABELA 5.1: Forma dos orbitais do tipo Slater disponíveis na literatura para os estados de valência dos átomos alcalinos. Os números d_j e g_k indicam o número de combinações lineares por potência r^{j-1} ou r^{k-1} , conforme expressões (5.7a) e (5.7b).

ESTADO ATÔMICO	REGIÃO DE AJUSTE (u. a.)		PARÂMETROS		DIFERENÇA PERCENTUAL ENTRE OS POTENCIAIS NUMÉRICO E YUKAWA PARA R (u. a.) =				
	R _{INIC}	R _{FIN}	A	λ	R=0.5	R=1.2	R=2.5	R=4.5	R=7.0
2s	0.5	1.5	16.289	5.129	9	1	91	823	8566
2s	0.5	2.5	12.899	4.866	21	9	23	252	1631
2s	0.5	5.0	9.074	4.573	49	10	17	32	217
2s	1.5	5.5	4.983	4.385	146	31	6	2	54
2s	2.5	7.5	3.079	4.262	274	82	11	6	5
2s	4.5	7.5	2.206	4.208	409	138	35	3	1
2p	0.5	2.5	13.130	4.900	20	9	23	244	1563
2p	0.5	5.0	9.300	4.613	47	9	16	32	215
2p	2.5	7.5	3.170	4.304	270	83	12	6	5
3s	0.5	2.5	13.552	4.950	18	8	20	193	1152
3s	0.5	5.0	10.031	4.700	42	9	14	26	192
3s	2.5	7.5	3.729	4.414	231	74	12	7	7

TABELA 5.2: Parâmetros A e λ do potencial de Yukawa para os estados 2s, 2p e 3s do átomo de lítio. Cada conjunto A e λ é referente a um "fitting" entre o potencial numérico e o de Yukawa nas distâncias (R_{INIC}, R_{FINAL}). Estão colocadas as diferenças percentuais, $\left| \frac{V(R)_{\text{NUMÉRICO}} - V(R)_{\text{YUKAWA}}}{V(R)_{\text{NUMÉRICO}}} \right| \times 100$, para várias distâncias R.

ESTADO ATÔMICO	REGIÃO DE AJUSTE (u. a.)		PARÂMETROS		DIFERENÇA PERCENTUAL ENTRE OS POTENCIAIS NUMÉRICO E YUKAWA PARA R(u. a.) =				
	R _{INIC}	R _{FINAL}	A	λ	R=0.5	R=1.2	R=2.5	R=4.5	R=7.0
3s	0.5	1.5	79.643	4.393	7	1	113	1583	—
3s	0.5	2.5	59.620	4.063	21	11	24	400	4352
3s	0.5	5.0	36.924	3.670	61	10	25	35	343
3s	1.5	5.5	16.321	3.428	223	52	8	2	80
3s	2.5	7.5	8.400	3.262	477	141	18	7	8
3s	4.5	7.5	5.672	3.197	727	230	49	3	1
3p	0.5	2.5	61.500	4.110	20	10	22	363	3688
3p	0.5	5.0	38.972	3.736	57	10	24	34	322
3p	2.5	7.5	9.286	3.341	442	136	18	7	8

TABELA 5.3: Parâmetros A e λ do potencial de Yukawa para os estados 3s e 3p do átomo de sódio. Cada conjunto A e λ é referente a um "fitting" entre o potencial numérico e o de Yukawa nas distâncias (R_{INIC}, R_{FINAL}). Estão colocadas as diferenças percentuais,

$$\left| \frac{(V(R)_{\text{NUMÉRICO}} - V(R)_{\text{YUKAWA}}) / V(R)_{\text{NUMÉRICO}}}{\text{distâncias } R} \right| \times 100, \text{ para várias distâncias } R.$$

REGIÃO DE AJUSTE (u. a.)		PARÂMETROS		DIFERENÇA PERCENTUAL ENTRE OS POTENCIAIS NUMÉRICO E YUKAWA PARA R(u. a.) =				
R _{INIC}	R _{FINAL}	A	λ	R=0.5	R=1.2	R=2.5	R=4.5	R=7.0
0.5	1.5	88.039	3.103	4	0.1	18	144	799
0.5	2.5	83.174	3.041	7	2	7	94	509
0.5	5.0	68.908	2.890	20	1	12	18	153
1.5	5.5	48.315	2.777	61	23	5	1	63
2.5	7.5	28.670	2.644	154	76	14	6	7
4.5	7.5	19.828	2.584	255	136	42	3	1

TABELA 5.4: Parâmetros A e λ do potencial de Yukawa para o estado 4s do átomo de potássio. Cada conjunto A e λ é referente a um "fitting" entre o potencial numérico e o de Yukawa nas distâncias (R_{INIC}, R_{FINAL}). Estão colocadas as diferenças percentuais,

$$\left| \frac{(V(R)_{\text{NUMÉRICO}} - V(R)_{\text{YUKAWA}}) / V(R)_{\text{NUMÉRICO}}}{V(R)_{\text{NUMÉRICO}}} \right| \times 100, \text{ para várias distâncias } R.$$

CAPÍTULO VI

EXPRESSÕES ANALÍTICAS PARA A SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL

Neste capítulo são obtidas expressões analíticas, numa forma adequada aos cálculos numéricos, para a seção de choque diferencial na aproximação de Glauber em processos onde o elétron de valência é promovido a estados do tipo s ou p .

A expressão para a amplitude de espalhamento na aproximação de Glauber, eq. (3.30), contém integrais em $3N+2$ dimensões.

Em 1973, Thomas e Chan ⁽⁸⁵⁾ propuseram um interessante método de redução na ordem das integrais para o caso do átomo de hélio. Neste trabalho introduziu-se a função de Lommel estendida no cálculo das amplitudes de espalhamento.

Em 1980, Lins de Barros et al. ⁽³³⁾, partindo da forma de redução na ordem das integrais proposta por Tomas e Chan ⁽⁸⁵⁾ e utilizando as aproximações referentes aos alvos descritos no capítulo anterior, obtiveram uma expressão analítica para a amplitude de espalhamento que permite abordar quaisquer transições do tipo $n^2S_{1/2} \rightarrow m^2S_{1/2}$ em átomos alcalinos.

Neste capítulo é apresentada uma versão corrigida da expressão obtida por Lins de Barros et al. ⁽³³⁾, comportando, além disto, uma melhor descrição das funções de onda do elétron de valência. É deduzida também uma expressão analítica para transições

onde o elétron de valência é promovido a estados do tipo p, sendo utilizado o mesmo tipo de aproximação no que concerne ao alvo.

6.1 - FASE DE GLAUBER

No Capítulo III foi obtida a expressão para a amplitude de espalhamento na aproximação de Glauber (eq. (3.30)) que reproduzimos abaixo:

$$f_{0\alpha}(\theta, \phi) = \frac{ik_0}{2\pi} \int d^2b e^{i\vec{q} \cdot \vec{b}} \langle \psi_0(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) [1 - \exp\{i\chi(\vec{b}, \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)\}] \psi_\alpha(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) \rangle \quad , \quad (6.1)$$

sendo \vec{k}_f o momento do elétron espalhado; $\vec{q} = (\vec{k}_0 - \vec{k}_f)$ o momento transferido e $\chi(\vec{b}, \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N)$ a fase de Glauber (eq. (3.31)) dada por:

$$\chi(\vec{b}, \vec{r}_1 \dots \vec{r}_N) = \sum_j \chi_j \quad \text{e} \quad \chi_j = -\frac{1}{k_0} \int_{-\infty}^{\infty} dz'_{N+1} V_j(x_{N+1}, y_{N+1}, z'_{N+1}, \vec{r}_j) \quad , \quad (6.2)$$

onde $\vec{r}_{N+1} \equiv (x_{N+1}, y_{N+1}, z_{N+1})$ são as coordenadas do elétron espalhado; \vec{b} é a projeção de \vec{r}_{N+1} no plano perpendicular à direção de incidência \hat{z} (parâmetro de impacto clássico); \vec{r}_j as coordenadas do j-ésimo elétron atômico e $V_j(x_{N+1}, y_{N+1}, z'_{N+1}, \vec{r}_j)$ o potencial Coulombiano de interação do elétron incidente com o j-ésimo elétron atômico e uma carga nuclear, dado por:

$$V_j(\vec{r}_j, \vec{r}_{N+1}) = -\frac{1}{|\vec{r}_{N+1}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_j|} \quad . \quad (6.3)$$

Podemos reescrever a expressão (6.2) como:

$$\chi = \left(\sum_{j=1}^{N-1} \chi_j \right) + \chi_V = \chi_C + \chi_V \quad , \quad (6.4)$$

onde χ_C representa a fase de Glauber dos elétrons do caroço, e (N-1) cargas nucleares, dada por:

$$\begin{aligned} \chi_C &= \sum_{j=1}^{N-1} \chi_j = \frac{1}{k_0} \sum_{j=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{-1}{|\vec{r}_{N+1}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_j|} \right) dz_{N+1} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} V_C(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N-1}, \vec{r}_{N+1}) dz_{N+1} \quad . \end{aligned} \quad (6.5)$$

Conforme mencionado no capítulo anterior, trabalhamos no contexto da aproximação de caroço inerte e utilizamos um potencial do tipo Yukawa para representar a interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e (N-1) cargas nucleares. Assim sendo, teremos:

$$V_C(\vec{r}_1 \dots \vec{r}_{N-1}, \vec{r}_{N+1}) = V_C(|\vec{r}_{N+1}|) = \frac{A e^{-\lambda r_{N+1}}}{r_{N+1}} \quad ,$$

e

$$\chi_C = \frac{1}{k_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{A e^{-\lambda r_{N+1}}}{r_{N+1}} dz_{N+1} = \frac{2A}{k_0} K_0(\lambda b) \quad , \quad (6.6)$$

onde $K_0(\lambda b)$ é a função de Bessel modificada.

O termo $\chi_V(\hat{r}_N, \hat{r}_{N+1})$, referente à fase de Glauber do elétron de valência e uma carga nuclear, é dado por:

$$\chi_V(\hat{r}_N, \hat{r}_{N+1}) = \frac{1}{k_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-1}{|\vec{r}_{N+1}|} + \frac{1}{|\vec{r}_{N+1} - \vec{r}_N|} = \frac{2}{k_0} \ln \left(\frac{|\vec{b} - \vec{s}|}{b} \right) \quad , \quad (6.7)$$

onde \vec{s} é a projeção de \vec{r}_N no plano perpendicular à direção do elétron incidente \hat{z} .

6.2 - EXPRESSÃO ANALÍTICA PARA A SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL EM TRANSIÇÕES DO TIPO NS → MS

Com transições do tipo ns → ms nos referimos a transições onde os estados inicial e final do átomo são descritos, respectivamente, pelos termos espectroscópicos $n^2S_{1/2}$ e $m^2S_{1/2}$, com excitação do elétron de valência de um estado ns a um estado ms.

Neste caso o elétron de valência terá como números quânticos nos estados inicial e final, respectivamente, $(n, \ell = 0, m = 0, s = 1/2, s_z = m_s)$ e $(m, \ell = 0, m = 0, s = 1/2, s_z = \pm 1/2)$. Desta forma, $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} = \vec{S}$.

Os auto-estados de J^2 e J_z , conforme a equação (5.6), serão descritos apenas por um termo:

$$\psi_{k_S}(k, \ell, s, J, M_J) = A \phi_C(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N-1}) \phi_V(k, \ell, m_\ell, s, m'_S) \quad , \quad (6.8)$$

sendo $M_J = m'_S$. Para o estado inicial $k = n$; $\ell = 0$; $s = \frac{1}{2}$; $J = \frac{1}{2}$; $m = 0$ e $m'_S = m_S$, onde m_S é o estado inicial de spin. Para o estado final $k = m$; $m'_S = m_S$, permanecendo inalterados os outros números quânticos.

A seção de choque diferencial é dada por (eq. (2.17b)):

$$\frac{d\sigma_{0 \rightarrow f}(\theta, \phi)}{d\Omega} = \frac{k_f}{k_0} \sum_{\alpha \equiv J, M_J} |f_{0\alpha}(\theta, \phi)|^2 \quad . \quad (6.9)$$

A expressão (6.1) para a amplitude de espalhamento se anula ao realizarmos a integração nas variáveis de spin quando $m'_S \neq m_S$. Desta forma teremos apenas um termo contribuindo no somatório em α na expressão acima, referente ao estado final $|\alpha\rangle$ com $J = 1/2$ e $M_J = m_S$.

Conforme vimos na seção 1, a fase de Glauber, no contexto das aproximações consideradas, não depende das coordenadas dos elétrons do caroço atômico. Neste sentido podemos integrar a expressão (6.1) para a amplitude de espalhamento nas coordenadas dos elétrons do caroço. Uma vez que supomos a aproximação de não relaxamento dos orbitais referentes aos elétrons do caroço, estes formam conjuntos idênticos para os estados inicial e final, ortogonais entre si. Utilizando esta aproximação, inserindo as funções de onda dos estados inicial e final, na forma da equação (6.8) na expressão (6.1) e integrando nas variáveis dos elétrons do caroço, a expressão (6.1) reduz-se a:

$$f_{0f}(\theta, \phi) = \frac{-ik_0}{2\pi} \int d^2b \, d\vec{r}_N \, \phi_{\vec{v}_{ms}}(n, \ell, m_\ell, s, m_s | \vec{r}_N) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b})$$

$$\left\{ \frac{|\vec{b} - \vec{s}|}{b} \right\}^{2i\eta} \exp\left(\frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0}\right) \phi_{\vec{v}_{ms}}(m, \ell, m_\ell, s, m_s | \vec{r}_N) \quad , \quad (6.10)$$

sendo $\eta = 1/k_0$, e $\phi_{\vec{v}_{i,f}}(m, \ell, m_\ell, s, m_s | \vec{r}_N)$ o spin-orbital do elétron de valência no estado inicial, ns , ou final, ms .

Conforme mencionado no capítulo anterior, a parte espacial dos spin-orbitais é representada através de orbitais do tipo Slater, na forma:

$$\phi_{\vec{v}_{ns}}(\vec{r}_N) = \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^{d_j} a_{jd} r^{j-1} \exp(-\alpha_{jd} r) Y_{00}(\theta, \phi)$$

$$\phi_{\vec{v}_{ms}}(\vec{r}_N) = \sum_{K=1}^m \sum_{g=1}^{g_K} b_{kg} r^{k-1} \exp(-\beta_{kg} r) Y_{00}(\theta, \phi) \quad , \quad (6.11)$$

onde $Y_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$. Inserindo-os na expressão (6.10), e integrando nas variáveis de spin, esta toma a forma:

$$f_{0f} = \frac{-ik_0}{8\pi^2} \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^d \sum_{k=1}^m \sum_{g=1}^{g_k} a_{jd} b_{kg} \int d^2b \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) \exp\left(\frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0}\right) \left\{ \int d^3r r^{j+k-2} \exp(-\gamma r) \left(\frac{|\vec{b}-\vec{s}|}{b}\right)^{2i\eta} \right\} , \quad (6.12)$$

onde $\gamma = \alpha_{jd} + \beta_{kg}$.

A parte entre colchetes na expressão acima, a que chamamos de I , pode ser escrita como:

$$I = \frac{\partial^{j+k-1}}{\partial \gamma^{j+k-1}} (-1)^{j+k-1} I_0 \Big|_{\gamma=\alpha_{jd}+\beta_{kg}} , \quad (6.13)$$

sendo I_0 a integral dada por:

$$I_0 = \int_0^\infty s ds \int_0^{2\pi} d\phi_s \left(\frac{|\vec{b}-\vec{s}|}{b}\right)^{2i\eta} \int_{-\infty}^\infty \frac{e^{-\gamma(s^2+z^2)^{1/2}}}{\sqrt{s^2+z^2}} dz , \quad (6.14)$$

e tomamos $d^3r = s ds d\phi_s dz$ e $r^2 = s^2+z^2$.

A integral I_0 é resolvida analiticamente. Para tal integra-se inicialmente em dz :

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{e^{-\gamma(s^2+z^2)^{1/2}}}{\sqrt{s^2+z^2}} dz = 2K_0(\gamma s) ,$$

o que fazendo uso de:

$$\left(\frac{|\vec{b}-\vec{s}|}{b}\right)^{2i\eta} = \left(\frac{(b^2+s^2-2bs\cos\phi_s)^{1/2}}{b}\right)^{2i\eta} = \left(1 + \left(\frac{s}{b}\right)^2 - 2\left(\frac{s}{b}\right)\cos\phi_s\right)^{i\eta} , \quad (6.15)$$

e inserindo na expressão (6.14) resulta:

$$I_0 = 2 \int_0^\infty s K_0(\gamma s) ds \int_0^{2\pi} \left(1 + \left(\frac{s}{b}\right)^2 - 2\left(\frac{s}{b}\right)\cos\phi_s\right)^{i\eta} d\phi_s \quad (6.16)$$

Fazendo na expressão (6.16) a transformação de variáveis $s \rightarrow sb$, obtemos

$$I_0 = 2b^2 \int_0^\infty s K_0(\gamma s) ds \int_0^{2\pi} (1+s^2-2s \cos\phi_s)^{i\eta} d\phi_s \quad (6.17)$$

A parcela acima é igual a $4\pi b^2 M(x)$, sendo $M(x)$ dado por:

$$M(x) = x^{-2} + (2i\eta)^2 (ix)^{-2i\eta-2} L(ix)_{2i\eta-1,0} \quad (6.18)$$

onde $x = \gamma b$ e $L(ix)_{2i\eta-1,0}$ é a função de Lommel modificada definida como (85):

$$L(ix)_{\mu,\nu} = S(ix)_{\mu,\nu} - \exp\left[\frac{i\pi\mu}{2}\right] 2^{\mu-1} \Gamma\left(\frac{1+\mu+\nu}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1+\mu-\nu}{2}\right) I_\nu(x) \quad (6.19)$$

sendo $\Gamma(x)$ a função gama; $S(ix)_{\mu,\nu}$ a função de Lommel e $I_\nu(z)$ a função de Bessel modificada.

Inserindo a eq. (6.18) em (6.17), obtém-se:

$$I_0 = 4\pi b^2 M(\gamma b) = \frac{4\pi}{\gamma^2} + 16\pi\eta^2 e^{\pi\eta} \gamma^{-2i\eta-2} b^{-2i\eta} L(i\gamma b)_{2i\eta-1,0} \quad (6.20)$$

Levando esta expressão na eq. (6.13) obtém-se:

$$I = \frac{\partial^{j+k-1}}{\partial \gamma^{j+k-1}} (-1)^{j+k-1} \left\{ \frac{4\pi}{\gamma^2} + 16\pi\eta^2 e^{\pi\eta} \gamma^{-2i\eta-2} b^{-2i\eta} L(i\gamma b)_{2i\eta-1,0} \right\} \quad (6.21)$$

logo,

$$I = \frac{4\pi (j+k)!}{\gamma^{j+k+1}} + 16\pi\eta^2 e^{\pi\eta} b^{-2i\eta} \frac{\partial^{j+k-1}}{\partial \gamma^{j+k-1}} (-1)^{j+k-1} \gamma^{-2i\eta-2} L(i\gamma b)_{2i\eta-1,0} \quad (6.22)$$

A amplitude de espalhamento é então escrita como:

$$\begin{aligned}
 f(\theta, \phi)_{of} &= \frac{-ik_0}{2\pi} \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^{d_j} \sum_{k=1}^m \sum_{g=1}^{g_k} a_{jd} b_{kg} \frac{(j+k)!}{\gamma^{j+k+1}} \int d^2b \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) \\
 &\exp \left\{ \frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0} \right\} - \frac{2ik_0}{\pi} \eta^2 e^{\pi\eta} \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^{d_j} \sum_{k=1}^m \sum_{g=1}^{g_k} a_{jd} b_{kg} \int d^2b \\
 &\exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) \exp \left\{ \frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0} \right\} b^{-2i\eta} \frac{\partial^{j+k-1}}{\partial \gamma^{j+k-1}} (-1)^{j+k-1} \gamma^{-2i\eta-2} L_{2i\eta-1,0}(i\gamma b)
 \end{aligned} \tag{6.23}$$

A ortogonalidade entre os spin-orbitais do estado inicial e final do elétron de valência nos dá a seguinte relação:

$$\langle \phi_{ns} | \phi_{ms} \rangle = 0 = \frac{1}{4\pi} \int \phi_{ms}^*(\vec{r}) \phi_{ns}(\vec{r}) r^2 dr d\Omega \quad . \tag{6.24}$$

Utilizando a expansão (6.11) e integrando em $d\Omega$ teremos:

$$\sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^{d_j} \sum_{k=1}^m \sum_{g=1}^{g_k} a_{jd} b_{kg} \int r^{i+j} e^{-\gamma r} dr = 0 \quad \text{com } \gamma = \alpha_{jd} + \beta_{kg} \quad . \tag{6.25}$$

Integrando em dr obtemos a relação:

$$\sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^{d_j} \sum_{k=1}^m \sum_{g=1}^{g_k} \frac{a_{jd} b_{kg} (i+j)!}{\gamma^{i+j+1}} = 0 \quad . \tag{6.26}$$

Isto significa que o primeiro termo do lado direito da expressão (6.23) é nulo.

Para desenvolver o segundo termo precisamos obter uma expressão para as derivadas nele contidas que chamaremos de D , dada por:

$$D = \frac{\partial^{j+k-1}}{\partial \gamma^{j+k-1}} (-1)^{j+k-1} \gamma^{2i\eta-2} L(i\gamma b)_{2i\eta-1,0} \quad (6.27)$$

Chamando $x = \gamma b$, teremos:

$$D = b^{j+k+2i\eta+1} \frac{\partial^{j+k-1}}{\partial x^{j+k-1}} (-1)^{j+k-1} x^{-2i\eta-2} L(ix)_{2i\eta-1,0} \quad (6.28)$$

O cálculo das derivadas em relação a x pode ser feito diretamente, usando as propriedades de $L(ix)_{2i\eta-1,0}$, onde para reduzir a notação fizemos $a = -2i\eta-2$ e $L(ix)_{2i\eta-1,0} = L$. Desta forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial (x^a L)}{\partial x} &= a x^{a-1} L + x^{a+1} \left(\frac{1}{x} L' \right) \\ \frac{\partial^2 (x^a L)}{\partial x^2} &= a(a-1) x^{a-2} L + (2a+1) x^a \left(\frac{1}{x} L' \right) + \\ &\quad + x^{a+2} \left[\frac{1}{x} \left(\frac{1}{x} L' \right)' \right] \\ \frac{\partial^3 (x^a L)}{\partial x^3} &= a(a-1)(a-2) x^{a-3} L + 3a^2 x^{a-1} \left(\frac{1}{x} L' \right) \\ &\quad + (3a+3) x^{a+1} \left[\frac{1}{x} \left(\frac{1}{x} L' \right)' \right] + x^{a+3} \left\{ \frac{1}{x} \left[\frac{1}{x} \left(\frac{1}{x} L' \right)' \right]' \right\} \quad (6.29) \end{aligned}$$

O último termo acima pode ser escrito na forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 (x^a L)}{\partial x^3} &= C(3,3) x^{a-3} L + C(3,2) x^{a-1} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} L \right) + C(3,1) x^{a+1} \\ &\quad \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^2 L + C(3,0) x^{a+3} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^3 L \quad (6.30) \end{aligned}$$

Podemos então escrever de uma maneira geral:

$$\frac{\partial^n x^a L}{\partial x^n} = \sum_{\ell=0}^n C(n, \ell) x^{a+n-2\ell} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^{n-\ell} L \quad (6.31)$$

Na Tabela 6.1 estão colocados os coeficientes $C(n, \ell)$ até $n = 6$.

A expressão acima está numa forma em que podemos utilizar a relação (85):

$$\left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx}\right)^m [x^\nu L(ix)] = \frac{i^m}{\mu+\nu+1} \left(\prod_{p=0}^m (\mu+\nu+1-2p) x^{\nu-m} L(ix) \right)_{\mu-m, \nu-m} \quad (6.32)$$

Considerando na eq. (6.31) $a = -2i\eta-2$ e $n = j+k-1$, e na eq. (6.32) $\nu = 0$, $\mu = 2i\eta-1$ e $m = n-1$, e inserindo a eq. (6.32) na (6.28), teremos:

$$D = \frac{b^{j+k+2i\eta+1}}{2i\eta} \sum_{\ell=0}^{j+k-1} (-1)^{j+k-1} C(j+k-1, \ell) x^{-2i\eta-2+j+k-1-2\ell} i^{j+k-1-\ell} \prod_{p=0}^{j+k-\ell-1} (2i\eta-2p) x^{-j-k+1+\ell} L(ix)_{2i\eta-1-j-k+1, j+k-1-\ell} \quad (6.33)$$

Uma vez que $x = \gamma b$, temos:

$$D = \sum_{\ell=0}^{j+k-1} b^{j+k-\ell-1} (-1)^{j+k-1} \gamma^{-2i\eta-\ell-2} \frac{i^{j+k-\ell-1}}{2i\eta} C(j+k-1, \ell) \sum_{p=0}^{j+k-\ell-1} (2i\eta-2p) L(i\gamma b)_{2i\eta-j-k+\ell, j+k-\ell-1} \quad (6.34)$$

Tomando $d^2 b = b db d\phi_b$ a integração em $d\phi_b$ na equação (6.23) pode ser realizada analiticamente, ou seja:

$$\int_0^{2\pi} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) d\phi_b = 2\pi J_0(qb) \quad , \quad (6.35)$$

onde $J_0(qb)$ é a função de Bessel.

Com o resultado (6.35) e inserindo a expressão (6.34) no segundo termo do lado direito da equação (6.23), obtemos finalmente a expressão para a amplitude de espalhamento em termos de integrais em b:

$$\begin{aligned}
 f_{0f}(\theta, \phi) = & -2\eta k_0 e^{\pi\eta} \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^j \sum_{k=1}^m \sum_{g=1}^g a_{jd} b_{kg} \sum_{\ell=0}^{j+k-1} C(j+k-1, \ell) \\
 & (-1)^\ell (-i)^{j+k-\ell-1} \gamma^{-2i\eta-\ell-2} \left[\prod_{p=0}^{j+k-\ell-2} (2i\eta-2p) \right] \\
 & \int_0^\infty db \exp \left\{ \frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0} \right\} b^{-2i\eta+j+k-\ell} J_0(qb) L(i\gamma b) \\
 & \qquad \qquad \qquad 2i\eta-j-k+\ell, j+k-\ell-1
 \end{aligned} \tag{6.36}$$

A expressão (6.36) consiste basicamente num somatório de produtos de coeficientes, potências de γ e integrais unidimensionais em b , apresentando uma forma adequada aos cálculos numéricos. A especificação na expressão (6.36) do particular processo abordado, é feita através do conjunto de coeficientes a_{jd} , b_{kg} , k_0 , ΔE_{0f} , $\gamma = \alpha_{jd} + \beta_{kg}$, A e λ . Neste sentido, com apenas um programa numérico pode-se abordar quaisquer transições do tipo $ns \rightarrow ms$ em átomos alcalinos.

O efeito dos elétrons do caroço atômico é expresso através do termo $\exp[2iAK_0(\lambda b)/k_0]$. Variando-se os parâmetros A e λ no estudo de um particular processo de colisão, pode-se inferir alguns aspectos relacionados com o efeito dos elétrons do caroço atômico no processo de colisão. Em particular, se tomamos $A = 0$, estaremos desprezando a contribuição dos elétrons do caroço, num procedimento semelhante ao utilizado por Walters⁽¹⁴⁾ no estudo da primeira transição ópticamente permitida em átomos alcalinos. To

mando $A = 0$ obtemos também a expressão para a amplitude de espalhamento para transições do tipo $ns \rightarrow ms$ em átomos de hidrogênio.

6.3 - EXPRESSÃO ANALÍTICA PARA A SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL EM TRANSIÇÕES DO TIPO $NS \rightarrow MP$.

Com transições do tipo $ns \rightarrow mp$ nos referimos a transições onde o átomo é descrito no estado inicial pelo termo $n^2S_{1/2}$, e no estado final pelo conjunto de termos $m^2P_{1/2}$ e $m^2P_{3/2}$, com excitação do elétron de valência de estados ns a estados $mp_{0,\pm 1}$.

O elétron de valência no estado excitado será descrito pelo conjunto de números quânticos ($m; \ell = 0, 1; s = 1/2; m'_s = \pm 1/2$). Utilizando a Hamiltoniana dada pela eq. (5.1), aliada a uma aproximação de campo central (procedimento utilizado no método Hartree-Fock, conforme descrito no capítulo anterior) estes estados apresentam níveis de energia degenerados. O acoplamento spin-órbita levanta parcialmente a degenerescência destes níveis, agrupando-os em dois sub-níveis, auto-estados de J^2 e J_z , um destes com $J = 3/2$ ($M_J = \pm 3/2, \pm 1/2$) e o outro com $J = 1/2$ ($M_J = \pm 1/2$).

A diferença de energia entre estes dois sub-níveis, determinados multipletes, é possível de se detectar em experiências de espectroscopia ótica. Nas experiências de colisão atômica geralmente não se consegue resolução suficiente para relacionar contagens no detector com o particular multiplete ao qual o átomo foi excitado. Em outras palavras, os elétrons espalhados após excitarem átomos para estes multipletes, são somados na contagem do número de elétrons que chegam ao detector. Assim sendo, para conectar os resultados teóricos com os experimentais, teremos que so -

mar na expressão (6.9) referente à seção de choque diferencial to dos os estados finais $|\alpha\rangle$ com $J = 3/2$ e $M_J = \pm 3/2, \pm 1/2$ e com $J = 1/2$ e $M_J = \pm 1/2$.

A função de onda para cada estado excitado $|\alpha\rangle$, auto-estado de J^2 e J_z , será dada por:

$$\psi_\alpha(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_N | JM_J\rangle = \sum_{m_\ell m_s} \langle \ell, s, m_\ell, m_s | J, M_J \rangle A \phi_C(\hat{r}_1 \dots \hat{r}_{N-1}) \phi_V(m, \ell, s, m_\ell, m_s | \hat{r}_N) \quad (6.37)$$

onde utilizamos os mesmos símbolos que na equação (5.6).

Utilizamos na expressão (6.1), referente à amplitude de espalhamento, a função de onda acima colocada para descrever um estado $|\alpha\rangle$, a função de onda dada pela equação (6.8) para descrever o estado fundamental $|0\rangle$. Utilizamos também a aproximação de caroço inerte aliada à uma descrição da interação elétron incidente com os elétrons do caroço e (N-1) cargas nucleares através de um potencial do tipo Yukawa. Consideramos da mesma forma que na seção anterior a aproximação de caroço rígido, ou seja, o mesmo conjunto ortonormal de spin-orbitais para os elétrons do caroço, no estado fundamental e nos estados excitados. Neste contexto, podemos integrar a expressão (6.1) nas coordenadas dos elétrons do caroço, obtendo:

$$f_{0\alpha}(\theta, \phi) = \frac{-ik_0}{2\pi} \int d^2b \, d\hat{r}_N \, \phi_{ns}(n, 0, 0, \frac{1}{2}, m_s | \hat{r}_N) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) \left(\frac{|\vec{b} - \vec{s}|}{b}\right)^{2in} \exp\left[\frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0}\right] \phi_\alpha(m, \ell, s, J, M_J | \hat{r}_N) \quad (6.38)$$

A seção de choque diferencial será dada pelo somatório

do módulo ao quadrado da expressão (6.38), para todos os estados finais $|\alpha\rangle$. Vejamos agora como expressá-la em termos dos auto-estados de L^2 e L_z ($|\ell, m_\ell\rangle$) e de S^2 e S_z ($|s, m_s\rangle$).

Calculados os coeficientes de Glebsh-Gordon para o acoplamento entre os momentos angulares \vec{L} ($\ell=1$) e S ($s = \frac{1}{2}$), podemos expressar os auto-estados de J^2 e J_z ,

$$|j, m_j\rangle = \sum_{m_\ell, m_s} \langle \ell, s, m_\ell, m_s | JM_J \rangle | \ell, m_\ell \rangle | s, m_s \rangle ,$$

como:

$$\begin{aligned} |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle &= |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \quad ; \quad |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad ; \quad |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = |1, -1\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\ |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad ; \quad |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle \\ & \quad |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \quad . \quad (6.39) \end{aligned}$$

Para facilitar a discussão que se segue, chamamos, sem associar nenhum significado físico, de termos a cada produto do tipo $|\ell, m_\ell\rangle |s, m_s\rangle$.

Ao integrarmos a expressão (6.38) nas variáveis de spin, se anularão todas as integrais contendo termos em que o estado de spin do elétron no estado excitado ($|S, m_s'\rangle$) for diferente do estado de spin do elétron no estado fundamental ($|S, m_s\rangle$). Consideramos o caso que no estado fundamental o elétron de valência está no auto-estado de spin $|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$.

Além disso, mostraremos a seguir que ao integrar a expressão (6.38) nas coordenadas espaciais \vec{r}_N , se anulam todas as

integrals contendo termos com $m_\ell = 0$ para o estado final. Darão, portanto, contribuição não nula apenas integrals com termos do tipo $|1,1\rangle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ e $|1,-1\rangle|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$. Estes termos aparecem nos estados finais $|J,M_J\rangle = |\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle$ e $|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$, conforme pode ser observado pela expressão (6.39). Nestes auto-estados de J^2 e J_z os mencionados auto-estados de L^2 , L_z , S^2 e S_z aparecem respectivamente com os coeficientes 1 , $\sqrt{1/3}$, e $\sqrt{2/3}$.

Mostraremos também que a contribuição na expressão (6.38) de termos com $m_\ell = +1$ é a mesma que aquela com os termos com $m_\ell = -1$. Chamando de $f'(\theta, \phi)$ à uma destas contribuições, esta será dada por:

$$f'(\theta, \phi) = \frac{-ik_0}{2\pi} \int d^2b \, d\hat{r}_N \, \phi_0(n, 0, 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{r}_N) \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) \left(\frac{|\vec{b} - \vec{s}|}{b} \right)^{2i\eta} \exp\left\{ \frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0} \right\} \phi_V(m, 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{r}_N) \quad , \quad (6.40)$$

sendo a parte angular e de spin do spin-orbital $\phi_V(m, 1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} | \hat{r}_N)$, os auto-estados de L^2 , L_z , S^2 , S_z : $|1,1\rangle$ e $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$. Desta forma, teremos:

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} \Big|_{0 \rightarrow f} = \frac{k_0}{k_f} \sum_{|\alpha\rangle = |J, M_J\rangle} \left| \frac{f(\theta, \phi)}{0\alpha} \right|^2 = \frac{k_0}{k_f} \left\{ |f'(\theta, \phi)|^2 + \left| \frac{1}{\sqrt{3}} f'(\theta, \phi) \right|^2 + \left| \sqrt{2/3} f'(\theta, \phi) \right|^2 \right\} \quad , \quad (6.41a)$$

o que fornece finalmente:

$$\frac{d\sigma(\theta, \phi)}{d\Omega} \Big|_{0 \rightarrow f} = 2 \frac{k_0}{k_f} |f'(\theta, \phi)|^2 \quad . \quad (6.41b)$$

Passemos então à dedução da expressão analítica para

$f'(\theta, \phi)$.

A parte espacial do spin-orbital do elétron de valência é descrita como orbital do tipo Slater, na forma:

$$\begin{aligned} \phi_{V_{ns}}(\vec{r}_N) &= \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^{d_j} a_{jd} r^{j-1} \exp(-\alpha_{jd} r) Y_{00}(\theta, \phi) \quad ; \quad Y_{00}(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi} \\ \phi_{V_{m_p m_\ell}}(\vec{r}_N) &= \sum_{k=2}^m \sum_{g=1}^{g_k} b_{kg} r^{k-1} \exp(-\beta_{kg} r) Y_{1, m_\ell}(\theta, \phi) \end{aligned} \quad (6.42)$$

Inserindo na expressão (6.38) e integrando nas coordenadas de spin, a amplitude de espalhamento para um termo com m_ℓ qualquer será dada por:

$$\begin{aligned} f_{ns \rightarrow mp_{m_\ell}}(\theta, \phi) &= \frac{-ik_0 \sqrt{\pi}}{4\pi^2} \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^{d_j} \sum_{k=2}^m \sum_{g=1}^{g_k} a_{jd} b_{kg} \int d^2b \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) \\ &\exp\left\{\frac{2iAK_0(\lambda b)}{b}\right\} \int d^3r r^{j+k-2} \exp(-\gamma r) \left(\frac{|\vec{b}-\vec{s}|}{b}\right)^{2in} Y_{1, m_\ell}(\theta, \phi) \quad , \end{aligned} \quad (6.43)$$

sendo $\gamma = \alpha_{jd} + \beta_{kg}$.

Chamamos I_0 como:

$$I_0 = \int d^3r e^{-\gamma r} \left(\frac{|\vec{b}-\vec{s}|}{b}\right)^{2in} Y_{1, m_\ell}(\theta, \phi) \quad . \quad (6.44)$$

A última integral do lado direito da expressão (6.43), a que chamaremos de I , pode ser escrita como:

$$I = \frac{\partial^{j+k-2}}{\partial \gamma^{j+k-2}} (-1)^{j+k-2} I_0 \Bigg|_{\gamma = \alpha_{jd} + \beta_{kg}} \quad . \quad (6.45)$$

a) Caso em que $m_\ell = 0$.

Uma vez que $Y(\theta, \phi) = \cos\theta = z/r$; $r^2 = s^2 + z^2$ e $d^3r = s ds d\phi_s dz$, teremos:

$$I_0 = \int_0^{2\pi} d\phi_s \int_0^\infty s ds \left(\frac{|\vec{b}-\vec{s}|}{b}\right)^{2i\eta} \int_{-\infty}^\infty dz \frac{z \exp(-\gamma\sqrt{s^2+z^2})}{\sqrt{s^2+z^2}} \quad (6.46)$$

A integral em dz tem um integrando ímpar e, dado os limites de integração, será nula. Desta forma, $f'(\theta, \phi) = 0$, ficando portanto demonstrado que os termos com $m_\ell = 0$ para o estado final não contribuem na expressão (6.38).

b) Caso em que $m_\ell = \pm 1$.

Uma vez que $Y(\theta, \phi) = -\sqrt{3/8\pi} e^{\pm i\phi_s} \sin\theta = -\sqrt{3/8\pi} e^{\pm i\phi_s} \frac{s}{r}$ teremos:

$$I_0 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \int_0^\infty ds s^2 \int_0^{2\pi} d\phi_s e^{\pm i\phi_s} \left(\frac{|\vec{b}-\vec{s}|}{b}\right)^{2i\eta} \int_{-\infty}^\infty dz \frac{\exp(-\gamma\sqrt{s^2+z^2})}{\sqrt{s^2+z^2}} \quad (6.47)$$

onde $\int_{-\infty}^\infty dz \exp(-\gamma\sqrt{s^2+z^2})/\sqrt{s^2+z^2} = 2K_0(\gamma s)$. Expressando:

$$\left(\frac{|\vec{b}-\vec{s}|}{b}\right)^{2i\eta} = \left(\sqrt{\frac{b^2+s^2-2bs\cos(\phi_s-\phi_b)}{b^2}}\right)^{2i\eta} = \left(1+\left(\frac{s}{b}\right)^2-2\left(\frac{s}{b}\right)\cos(\phi_s-\phi_b)\right)^{i\eta} \quad (6.48)$$

onde ϕ_s e ϕ_b são respectivamente os ângulos azimutais de \vec{b} e \vec{s} , obtemos:

$$I_0 = -\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \int_0^\infty ds s^2 K_0(\gamma s) \int_0^{2\pi} d\phi_s e^{\pm i\phi_s} \left(1+\left(\frac{s}{b}\right)^2-2\left(\frac{s}{b}\right)\cos(\phi_s-\phi_b)\right)^{i\eta} \quad (6.49)$$

Fazendo na expressão (6.49) as mudanças de variáveis $\phi_s = \phi_s - \phi_b$ e $s = sb$, temos:

$$I_0 = -\sqrt{\frac{3}{2\pi}} b^3 e^{\pm i\phi_b} \int_0^\infty ds s^2 K_0(sb\gamma) \int_0^{2\pi} d\phi_s e^{\pm i\phi_s} (1+s^2-2s\cos\phi_s)^{i\eta} d\phi_s \quad (6.50)$$

Chamaremos a última integral do lado direito na expressão (6.50) de I_1 , ou seja:

$$I_1 = \int_0^{2\pi} e^{\pm i\phi_s} (1+s^2-2s\cos\phi_s)^{i\eta} d\phi_s \quad (6.51)$$

Pode-se então utilizar a relação ⁽⁸⁸⁾:

$$I_1 = -2\pi 2^{i\eta} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} \int_0^\infty dt t^{-2i\eta} \frac{d}{dt} [J_1(st)J_1(t)]. \quad (6.52)$$

Integrando por partes, obtemos:

$$I_1 = -4\pi i\eta (2)^{2i\eta} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} \int_0^\infty t^{-2i\eta-1} J_1(st)J_1(t) dt \quad (6.53)$$

Levando este termo na eq. (6.50) obtemos:

$$I_0 = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} 4\pi i\eta (2)^{2i\eta} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} b^3 e^{\pm i\phi_b} \int_0^\infty s^2 ds K_0(sb\gamma) \int_0^\infty dt t^{-2i\eta-1} J_1(st)J_1(t) \quad (6.54)$$

Invertendo a ordem de integração na expressão (6.54) e utilizando a relação $J_1(st) = -\frac{1}{s} \frac{d}{dt} J_0(st)$, obtemos:

$$I_0 = -\sqrt{\frac{3^1}{2\pi}} 4\pi i\eta e^{2i\eta} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} b^3 e^{\pm i\phi} b \int_0^\infty t^{-2i\eta-1} J_1(t) dt \frac{d}{dt} \int_0^\infty s K_0(\gamma s b) J_0(st) ds \quad (6.55)$$

Podemos utilizar na última integral do lado direito da expressão (6.55) a relação:

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty s K_0(\gamma s b) J_0(st) ds = \frac{d}{dt} \{ (t^2 + (\gamma b)^2)^{-1} \} = -2t (t^2 + (\gamma b)^2)^{-2} \quad (6.56)$$

Desta forma, chamando $x = \gamma b$, a expressão (6.55) reduz-se a:

$$I_0 = +\sqrt{\frac{3^1}{2\pi}} 4\pi i\eta 2^{2i\eta} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} b^3 e^{\pm i\phi} b^2 \int t^{-2i\eta} J_1(t) (t^2 + x^2)^{-2} dt \quad (6.57)$$

Uma vez que:

$$(t^2 + x^2)^{-2} = -\frac{1}{2x} \frac{\partial}{\partial x} (t^2 + x^2)^{-1} \quad (6.58)$$

teremos:

$$I_0 = -\sqrt{\frac{3^1}{2\pi}} 4\pi i\eta 2^{2i\eta} \frac{\Gamma(1+i\eta)}{\Gamma(1-i\eta)} b^3 e^{\pm i\phi} b \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \int_0^\infty t^{-2i\eta} J_1(t) (t^2 + x^2)^{-1} dt \quad (6.59)$$

A integral na relação (6.59) é dada por ⁽⁸⁵⁾:

$$(ix)^{-2i\eta-1} \frac{\Gamma(1-i\eta)}{\Gamma(1+i\eta)} 2^{-2i\eta} L_{2i\eta,1}(ix) \quad (6.60)$$

logo:

$$I_0 = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} 4\pi i \eta b^3 e^{\pm i\phi} b \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} [(ix)^{-2i\eta-1} L_{2i\eta,1}(ix)] \quad (6.61)$$

Utilizando a relação A13 do artigo de Thomas e Chan ⁽⁸⁵⁾ (1973), para realizar a derivada na expressão (6.61), teremos, após algumas manipulações:

$$I_0 = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} 4\pi i \eta b^3 e^{\pm i\phi} b i^{-2i\eta-1} x^{-2i\eta-2} \left\{ -\frac{(2i\eta+2)}{x} L_{2i\eta,1} + i2i\eta L_{2i\eta-1,0}(ix) \right\} \quad (6.62)$$

Agrupando os termos, obtemos para I_0 a expressão:

$$I_0 = \sqrt{\frac{3}{2\pi}} 4\pi i \eta b^3 e^{\pm i\phi} b \sum_{t=0}^1 (2i\eta+2t) i^{-2i\eta+t} x^{-2i\eta-t-2} L_{2i\eta-1+t,t}(ix) \quad (6.63)$$

Inserindo a expressão (6.63) com o auxílio da equação (6.45) na expressão (6.43), teremos:

$$f'_{ns \rightarrow mp_{\pm 1}}(\theta, \phi) = \sqrt{3/2} \frac{i\eta k_0}{\pi} \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^j \sum_{k=2}^m \sum_{g=1}^{g_k} a_{jd} b_{kg} \sum_{t=0}^1 (2i\eta+2t) i^{-2i\eta+t+1} \int d^2b \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) e^{\pm i\phi} b \exp\left[-\frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0}\right] b^{j+k+1} (-1)^{j+k-2} \frac{\partial^{j+k-2}}{\partial \gamma^{j+k-2}} [(ix)^{-2i\eta-2-t} L_{2i\eta-1+t,t}(ix)] \quad (6.64)$$

onde ainda $x = \gamma b = (\alpha_{jd} + \beta_{kg}) b$.

Para obter as derivadas do lado direito da expressão acima utilizamos um procedimento semelhante ao realizado na segunda seção deste capítulo. Chamando agora estas derivadas de $D1$, ou seja:

$$D1 = \frac{\partial^{j+k-2}}{\partial \gamma^{j+k-2}} [(x)^{-2i\eta-2-t} \underset{2i\eta-1+t,t}{L(ix)}] \quad (6.65)$$

Chamando agora $a' = -2i\eta-2-2t$, teremos:

$$D1 = \frac{\partial^{j+k-2}}{\partial x^{j+k-2}} [x^a \{ x^t \underset{2i\eta-1-t,t}{L(ix)} \}] \quad (6.66)$$

Repetindo o procedimento realizado para a obtenção da expressão (6.31), obtemos:

$$D1 = \sum_{\ell=0}^{j+k-2} C(j+k-1, \ell, t) x^{a-2\ell+j+k-2} \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^{j+k-2-\ell} [x^t \underset{2i\eta-1+t,t}{L(ix)}] \quad (6.67)$$

onde os coeficientes $C(n, \ell, t)$ estão apresentados na Tabela 6.1 . Utilizando a relação (6.32) obtemos:

$$\left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^{j+k-2-\ell} [x^t \underset{2i\eta-1+t,t}{L(ix)}] = \frac{i^{j+k-2-\ell}}{(2i\eta+2t)} \left\{ \prod_{p=0}^{j+k-2-\ell} (2i\eta+2t+2p) \right\} x^{t-j-k+2+\ell} \underset{IND}{L(ix)}, \quad (6.68)$$

onde $IND = 2i\eta-j-k+\ell+t+1, j+k-\ell-t-2$.

Inserindo esta relação na expressão (6.67), e tomando $a = -2i\eta-2t-1$, temos:

$$D1 = \sum_{\ell=0}^{j+k-2} \frac{C(j+k-2, \ell, t)}{(2i\eta+2t)} i^{j+k-2-\ell} x^{-2i\eta-2-t-\ell} \underset{IND}{L(ix)} \prod_{p=0}^{j+k-2-\ell} (2i\eta+2t-2p) \quad (6.69)$$

Tomando $d^2_b = b db d\phi_b$, a integração angular da expressão (6.64) pode ser realizada, uma vez que:

$$\int_0^{2\pi} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{b}) e^{\pm i\phi} b_d d\phi_b = 2\pi e^{\frac{\pm\pi i}{2}} J_{\pm 1}(qb) = \pm 2\pi i J_{\pm 1}(qb) = 2\pi i J_1(qb) \quad . \quad (6.70)$$

Utilizando esta relação e inserindo a eq. (6.69) na eq. (6.64), obtemos, finalmente, a expressão final para a amplitude de espalhamento, dada por:

$$f(\theta, \phi)_{ns \rightarrow mp_{\pm 1}} = i\sqrt{6} \sum_{j=1}^n \sum_{d=1}^j \sum_{k=2}^m \sum_{g=1}^g \sum_{\ell=0}^{j+k-2} \sum_{t=0}^1 a_{jd} b_{kg} (i)^{-2i\eta+j+k+t-\ell} (-1)^{j+k-2} \gamma^{-2i\eta-2-\ell-t} C(j+k-2, \ell, t) \left[\prod_{p=0}^{j+k-2-\ell} (2i\eta+2t-2p) \right] \int_0^{\infty} db b^{-2i\eta+j+k-\ell-t} \exp\left[\frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0}\right] J_1(qb) \frac{L(i\gamma b)}{IND} \quad , \quad (6.71)$$

com $\gamma = \alpha_{jd} + \beta_{kg}$ e $IND = 2i\eta+t+\ell+1-j-k, j+k-\ell-t-2$.

Podemos observar que, de fato, os termos com $m_{\ell} = +1$ e $m_{\ell} = -1$ dão a mesma contribuição na expressão (6.38). Podemos observar também que a expressão (6.71) apresenta uma forma bastante semelhante à expressão obtida para transições do tipo $ns \rightarrow ms$. Isto facilita sobremaneira a elaboração dos programas numéricos, uma vez que se utilizará de procedimentos computacionais parecidos no cálculo das duas expressões.

Processo $ns \rightarrow ms$ - $a = -2i\eta - 2$					
Processo $ns \rightarrow mp$ - $a = -2i\eta - 2 - 2t$, $t = 0, 1$					
n	ℓ	$C(n, \ell, t)$	n	ℓ	$C(n, \ell, t)$
1	0	1	5	0	1
1	1	a	5	1	$5a+10$
2	0	1	5	2	$10a^2+20a+15$
2	1	$2a+1$	5	3	$10a^3+5a^2$
2	2	$a(a-1)$	5	4	$(a-1)(a-2)(5a^2-5a)$
3	0	1	5	5	$a(a-1)(a-2)(a-3)(a-4)$
3	1	$3a+3$	6	0	1
3	2	$3a^2$	6	1	$6a+15$
3	3	$a(a-1)(a-2)$	6	2	$15a^2+45a+45$
4	0	1	6	3	$20a^3+35a^2+35a+15$
4	1	$4a+6$	6	4	$(a-1)(15a^3-10a^2+10a)$
4	2	$6a^2+6a+3$	6	5	$a(a-1)(a-2)(a-3)(6a-9)$
4	3	$(4a^2-2a)(a-1)$	6	6	$a(a-1)(a-2)(a-3)(a-4)(a-5)$
4	4	$a(a-1)(a-2)(a-3)$			

TABELA 6.1: Coeficientes $C(n, \ell, t)$ referentes às expressões para a amplitude de espalhamento.

CAPÍTULO VII

DETALHES DOS CÁLCULOS NUMÉRICOS

Neste capítulo descrevemos os procedimentos adotados no cálculo numérico das seções de choque diferenciais, através das expressões (6.36) e (6.71).

A obtenção de resultados numéricos envolve uma série de programas computacionais que podem ser classificados em dois tipos:

1) Programas relacionados com a descrição dos átomos no processo de colisão, assunto que já foi abordado no Capítulo V. São estes, o programa Hermman-Skilmman modificado para gerar um potencial numérico referente aos elétrons do caroço atômico e $(N-1)$ cargas nucleares; o programa de mínimos quadrados que gera, a partir deste potencial numérico, as constantes A e λ referentes ao potencial de Yukawa, e o programa que determina os orbitais do tipo Slater.

2) Programas referentes ao cálculo numérico das expressões (6.36) e (6.71). O cálculo numérico destas expressões esbarra num sério problema, no que concerne ao tempo de computação necessário à obtenção do conjunto de resultados requeridos. Este problema é gerado basicamente por quatro fatores:

a) o tempo gasto para o cálculo de cada ponto do integrando é longo. Isto decorre de que a função de Lommel modificada $L(\mu, \nu)$, é

demorada no que concerne à obtenção de seu valor para cada ponto de seu argumento, ix , para cada conjunto de índices (μ, ν) . Este assunto será abordado em detalhe na primeira seção.

- b) As integrais tem convergência lenta. Este problema foi enormemente minorado com a obtenção de uma expressão analítica para a região assintótica do integrando, e será discutido em detalhe na segunda seção.
- c) O grande número de integrais que aparecem no cálculo da seção de choque diferencial para um determinado ângulo de espalhamento, num determinado processo, com uma particular descrição dos elétrons do caroço atômico e com uma particular energia de impacto. Este fato decorre do número de somatórios que aparecem nas expressões (6.36) e (6.71).
- d) A necessidade de calcular um grande número de pontos de seção de choque diferencial no estudo de um determinado processo de colisão, ou seja, com um determinado átomo alvo e envolvendo uma particular excitação do elétron de valência. Este fato decorre, inicialmente, da necessidade de obter resultados com diferentes energias de impacto. Para cada particular energia de impacto realizamos geralmente três conjuntos de cálculos, onde variamos a descrição dos elétrons do caroço atômico. Finalmente, para cada caso acima citado, é necessário calcular um mínimo de 25 pontos de seção de choque diferencial em vários ângulos de espalhamento, para obter a seção de choque integral.

Podemos dar uma idéia quantitativa do problema analisando o caso do processo $e^- + Na(3s) \rightarrow e^- + Na(3p)$. Este caso nos dá uma idéia média do problema, uma vez que é mais rápido na obtenção de resultados que quando o alvo é composto de átomos de K, e

mais lento que quando tratamos de alvos com átomos de Li.

Vejamos inicialmente o número de vezes que necessitamos de calcular expressões do tipo (6.71). Estudamos este processo para 6 diferentes energias de impacto. Multiplicando este número por 3, referente às várias descrições dos elétrons do caroço atômico, e por 25, referente aos vários ângulos de espalhamento, chegamos ao número 450.

Neste caso, os orbitais do tipo Slater são tais que precisamos calcular cerca de 325 integrais para obter um ponto da seção de choque diferencial. Multiplicando este número pelo número de pontos de seção de choque diferencial, estimado no parágrafo anterior, chegamos à necessidade de calcular um total de 146.250 integrais numéricas.

Para cada integração numérica consideramos uma média de 600 pontos do integrando, mesmo utilizando a integração analítica para a região assintótica do integrando (os motivos serão discutidos posteriormente). Multiplicando este número pelo número de integrais a calcular, chegamos à necessidade de determinar cerca de 85 milhões de pontos do integrando para o estudo do referido processo de colisão.

Para tornar os cálculos viáveis, introduzimos um procedimento computacional referente à função de Lommel modificada que reduziu o tempo de computação em cerca de duas ordens de grandeza, introduzindo um erro estimado em inferior a 0.5%, assunto que será abordado na próxima seção.

No final deste capítulo colocamos um fluxograma dos diversos programas computacionais utilizados (os detalhes dos programas estão descritos no decorrer do texto).

7.1 - A FUNÇÃO DE LOMMEL MODIFICADA E PROCEDIMENTOS VISANDO À REDUÇÃO DO TEMPO DE COMPUTAÇÃO

A função de Lommel modificada é definida como ⁽⁸⁵⁾:

$$L_{\mu, \nu}(ix) = S_{\mu, \nu}(ix) - i e^{i\pi\mu/2} 2^{\mu-1} \Gamma\left(\frac{1+\mu+\nu}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1+\mu-\nu}{2}\right) I_{\nu}(x) \quad , \quad (7.1)$$

onde $S_{\mu, \nu}(z)$ é a função de Lommel definida por

$$S_{\mu, \nu}(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m \left(\frac{z}{2}\right)^{2m+2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\mu - \frac{1}{2}\nu + \frac{1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}\mu + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\mu - \frac{1}{2}\nu + m + \frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{2}\mu + \frac{1}{2}\nu + m + \frac{3}{2}\right)} \quad , \quad (7.2)$$

e $I_{\nu}(z)$ a função de Bessel modificada dada por:

$$I_{\nu}(z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m! \Gamma(\nu+m+1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2m} \quad . \quad (7.3)$$

As expressões acima mostram a dificuldade, em termos numéricos, na determinação do valor da função de Lommel modificada para um ponto do argumento x , e um conjunto de índices (μ, ν) . A questão é que temos de somar duas séries cuja convergência em m cai na medida em que x aumenta. É então necessário realizar, para cada ponto, uma série de testes de convergência em m para determinar o valor de m , onde se cortarão as séries.

A função de Lommel modificada admite as seguintes relações de recorrência ⁽⁸⁵⁾:

$$L_{\mu, \nu}(ix) = L_{\mu, -\nu}(ix) \quad \text{se} \quad \nu = 0, 1, 2, \dots$$

$$\frac{d}{dx} L_{\mu, \nu}(ix) = i(\mu+\nu-1) L_{\mu-1, \nu-1}(ix) - \frac{\nu}{x} L_{\mu, \nu}(ix) \quad (7.4)$$

$$L_{\mu+2, \nu}(ix) = (ix)^{\mu+1} - [(\mu+1)^2 - \nu^2] L_{\mu, \nu}(ix) .$$

Se analisarmos as expressões (6.36) e (6.71), podemos observar que aparecerão apenas os seguintes índices (μ, ν) da função de Lommel modificada: $(\mu, \nu) = (2i\eta, -1), (2i\eta-1, 0), (2i\eta-2, 1), (2i\eta-3, 2), \dots, (2i\eta-k, k-1)$, onde k é um número inteiro que depende do processo em estudo.

Utilizando as relações de recorrência acima colocadas, podemos gerar todas as funções de Lommel que necessitamos a partir das funções $L_{2i\eta, 1}(ix)$ e $L_{2i\eta-1, 0}(ix)$. Este procedimento é mais rápido, em termos computacionais, que gerar as funções diretamente da expressão (7.1).

Para valores pequenos de x , o cálculo número das funções $S_{\mu, \nu}(ix)$ e $I_{\nu}(x)$ é feito com relativa facilidade, uma vez que estas séries convergem com $x^{2n}/(n!)^2$. Para valores grandes de x estas funções comportam-se assintoticamente com $e^{x/\sqrt{x}}$. Isto implica que para $x \gg 1$ a função de Lommel modificada envolve a diferença entre funções fortemente divergentes, o que, numericamente, exige uma precisão extremamente grande (Castro 1977) ⁽³²⁾.

Desta forma, é conveniente utilizar, sempre que possível, a forma assintótica para as funções $L_{\mu, \nu}(ix)$, dadas por:

$$L_{\mu, \nu}(ix) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} (ix)^{\mu-1} \left\{ \sum_{n=0}^m \left(\frac{1-\mu+\nu}{2}\right)_n \left(\frac{1-\mu-\nu}{2}\right)_n \left(\frac{x}{2}\right)^{-2n} \right\} + O(x^{-2m-2}) , \quad (7.5)$$

onde $(a)_n$ é o símbolo de Pochhammer, definido como:

$$(a)_n = a(a-1)\dots(a-n+1) \quad \text{e} \quad (a)_0 \equiv 1 .$$

O valor de x a partir do qual já se pode utilizar a for

ma assintótica da função de Lommel modificada é determinado comparando resultados numéricos obtidos a partir das eqs. (7.1) e (7.5).

Castro ⁽³²⁾ (1977) observou, para alguns índices (μ, ν) utilizados em seu trabalho, que havia uma concordância progressivamente melhor entre os resultados numéricos obtidos com as duas expressões a partir de $x = 10$ até $x = 20$. Para $x > 20$, a concordância é progressivamente menor devido à precisão limitada do computador. Resolvemos também utilizar a forma assintótica no cálculo da função de Lommel modificada a partir de $x = 20$.

Convém ressaltar um pequeno detalhe: conforme mencionado, para $x < 20$ calculamos as funções $L_{2i\eta, 1}(ix)$ e $L_{2i\eta-1, 0}(ix)$ diretamente da expressão (7.1), obtendo as outras funções de Lommel a partir das relações de recorrência (7.4). Para $x > 20$, todas as funções de Lommel são calculadas diretamente através da expressão (7.5). Obtivemos boa concordância para todas as funções de Lommel em $x = 20$, entre seus valores obtidos nas duas formas acima mencionadas. Isto indica que a obtenção numérica das funções $L_{\mu, \nu}(ix)$ com $\nu > 1$ para $x < 20$ através das relações de recorrência (7.4), fornece bons resultados.

Para reduzir o tempo computacional utilizamos o seguinte procedimento:

Inicialmente armazenamos os valores de $L_{\mu, \nu}(ix)$ referentes a um número discreto de pontos do argumento x para todos os índices (μ, ν) utilizados nos cálculos. Estes valores são armazenados em matrizes, uma para cada energia de impacto considerada. Ao iniciar o cálculo da expressão (6.36) ou (6.71) para um determinado processo de colisão, chama-se os valores armazenados na matriz referente a energia de impacto considerada, e obtém-se no decorrer dos cálculos os valores $L_{\mu, \nu}(ix)$ interpolando valores contidos

nesta matriz.

Chamamos estas matrizes de $L(\text{IND}, nx)$ onde IND referencia os índices (μ, ν) e nx os pontos do argumento. Escolhemos o conjunto de pontos discretos do argumento x visando ter uma maior densidade de pontos onde a função $L(ix)$ variasse mais. Após analisar vários gráficos destas funções $L(ix)$, bem como os erros percentuais introduzidos no processo de interpolação, optamos em dividir o eixo x em cinco intervalos, com espaçamento entre os pontos Δ , dados por:

- | | | | |
|----------------------------|-----------------|------------------------------|-----------------|
| 1) $0.01 \leq x \leq 1.51$ | $\Delta = 0.01$ | 3) $1.51 < x \leq 20.01$ | $\Delta = 0.05$ |
| 2) $20.01 < x \leq 100.01$ | $\Delta = 0.5$ | 4) $100.01 < x \leq 1600.01$ | $\Delta = 5$ |
| | | 5) $x > 1600.01$ | $\Delta = 20$ |

Com esta escolha, as matrizes $L(\text{IND}, nx)$, que armazenam números complexos e de dupla precisão, ocupam uma área de memória do computador que não causa problemas ao sistema.

Esta escolha com uma grande densidade de pontos em x nos permite utilizar uma interpolação linear para determinar um particular valor de $L(ix)$ a partir de dois valores $L(ix_-)$ e $L(ix_+)$, onde x_- e x_+ são os pontos discretos do argumento mais próximos de x . Poderíamos escolher uma menor densidade de pontos em x se utilizássemos polinômios para interpolar, entretanto o tempo de computação necessário ao cálculo das expressões (6.36) ou (6.71) cresceria bastante.

Em resumo, ao iniciar o trabalho escolhemos quais os átomos alcalinos abordados e as excitações consideradas. Com isto fixamos os índices (μ, ν) necessários aos cálculos. Calculamos, através de um programa auxiliar, as matrizes $L(\text{IND}, nx)$ referentes às energias de impacto abordadas e armazenamos estas matrizes em dis

co ou fita. Cada matriz é então suficientemente geral para ser utilizada, para uma determinada energia de impacto, nos cálculos para ambos os tipos de processos $ns \rightarrow ms$ e $ns \rightarrow mp$. e para todos os alcalinos abordados.

Com este procedimento, o tempo de computação necessário aos cálculos numéricos tornou-se viável. Por último, cabe comentar que, após uma série de testes, estimamos o erro introduzido nos cálculos por este procedimento como inferior a 0.5%.

7.2 - A INTEGRAÇÃO

Conforme mencionado, as integrais que aparecem nas equações (6.36) e (6.71) caem lentamente com b . Isto pode ser observado comparando o valor desprezado ao interrompermos o processo de integração numérica num determinado valor grande de b com o valor da integral numérica até aquele ponto. Observamos, ao comparar estes valores, que em certos casos não é possível simplesmente desprezar o restante da integral. Isto ocorre, geralmente, para grandes ângulos de espalhamento, onde a seção de choque diferencial é extremamente baixa. Nestes casos, teríamos que ir, na integração numérica, até valores extremamente grandes de b , o que consome tempo de computação.

Buscamos então uma expressão analítica desta integral, para a região assintótica do integrando. Desta forma, a integração é feita de forma numérica até um certo valor b_a , a partir do qual esta é realizada analiticamente.

Vejamos, inicialmente, a expressão analítica para processos do tipo $ns \rightarrow ns$. As integrais que aparecem na expressão

(6.26) têm a forma:

$$I = \int_0^{\infty} b^{j+k-\ell-2i\eta} \exp\left[\frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0}\right] J_0(qb) \frac{L(i\gamma b)}{2i\eta-j-k+\ell, j+k-\ell-1} db \quad (7.6)$$

Para valores grandes do argumento a função de Bessel modificada $K_0(\lambda b)$ tende a zero, logo, o termo referente aos elétrons do caroço atômico tende à unidade, ou seja:

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \exp\left[\frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0}\right] = 1 \quad (7.7)$$

Fizemos testes numéricos variando A, k_0 bem como λb , e concluimos que podemos, em boa aproximação, considerar este termo como unidade para $b > 30$, ou seja, para $b_a > 30/\lambda$.

A expressão (7.6), tomando $\mu = j+k-\ell$, reduz-se a:

$$I \cong I_{\text{(NUMÉRICO)}} \int_0^{b_a} + \int_{b_a}^{\infty} b^{\mu-2i\eta} J_0(qb) \frac{L(i\gamma b)}{2i\eta-\mu, \mu-1} db \quad (7.8)$$

Para $b > 20/\gamma$ utilizamos a relação assintótica (7.5) para a função de Lommel modificada, dada por:

$$\frac{L(i\gamma b)}{2i\eta-\mu, \mu-1} = (i\gamma b)^{2i\eta-\mu-1} \left\{ 1 + \left[\frac{(2i\eta-\mu-1)^2 - (\mu-1)^2}{(i\gamma b)^2} \right] \right\} + o\left(\frac{1}{b^4}\right) \quad (7.9)$$

Temos assim uma segunda condição: $b_a > 20/\gamma$.

Desprezando os termos em ordem $1/b^4$, e chamando:

$$C_1 = (i\gamma)^{2i\eta-\mu-1} ; \quad C_2 = \frac{1}{2} [(2i\eta-\mu-1)^2 - (\mu-1)^2] \quad , \quad (7.10)$$

a expressão (7.8) se reduz a:

$$I \equiv I_{\text{(NUMÉRICO)}} \Big|_0^{b_a} + \left\{ C_1 \int_{b_a}^{\infty} \frac{J_0(qb)}{b} db + C_1 C_2 \int_{b_a}^{\infty} \frac{J_0(qb)}{b^3} db \right\} \quad (7.11)$$

O segundo termo do lado direito desta expressão fornece ⁽⁸⁹⁾:

$$I_{\text{(ANALÍTICO)}} \Big|_{b_a}^{b_b} = \left[C_1 \left\{ \begin{matrix} -2qb J_0(qb) S_{-2,-1}(qb) & - & (qb) J_{-1}(qb) S_{-1,0}(qb) \end{matrix} \right\} \right. \\ \left. + C_1 C_2 \left\{ \begin{matrix} -4qb J_0(qb) S_{-4,-1}(qb) & - & qb J_{-1}(qb) S_{-3,0}(qb) \end{matrix} \right\} \right] \Big|_{b_a}^{b_b} \quad (7.12)$$

onde $b_b = \infty$ e $S_{i,j}(qb)$ são funções de Lommel. A expressão (7.12) é simples de obter resultados numéricos, desde que se possa utilizar a forma assintótica para a função de Lommel $S_{i,j}(qb)$. Após alguns testes, concluímos ser apropriado utilizar a relação assintótica para $qb > 8$, o que nos dá uma terceira condição $b_a > 8/q$. Desta forma, o ponto b_a , a partir do qual a integral é calculada de forma analítica, será dado pelo maior número dentre $8/q$, $30/\lambda$ e $20/\gamma$.

Observamos que a integração numérica entre dois pontos b_a e b_b da expressão (7.6) tende ao valor calculado através da expressão (7.12), na medida em que reduzimos o passo da integral numérica, e obviamente b_a satisfaça às condições acima colocadas. Com isto, concluímos que o procedimento está correto.

Para transições do tipo $ns \rightarrow mp$ as integrais que aparecem na expressão (6.71) tem a forma:

$$I = \int_0^{\infty} db b^{-2i\eta+\mu} L_{2i\eta-\mu+1, \mu-2}(i\gamma b) J_1(qb) \exp\left[\frac{2iAK_0(\lambda b)}{k_0}\right] \quad (7.13)$$

sendo $\mu = j+k-l-t$.

Seguindo passos semelhantes aos descritos no caso de transições $n_s \rightarrow m_s$, obtemos:

$$I_{(ANALÍTICA)} \left[\begin{matrix} b_b \\ b_a \end{matrix} \right] = \left[\begin{matrix} \frac{C_1 J_0(qb)}{q} - C_1 C_2 \{-2qb J_1(qb) S(qb) - \\ qb J_0(qb) S(qb)\} \\ -3,0 \\ -2,1 \end{matrix} \right]_{b_a}^{b_b}, \quad (7.14)$$

sendo agora

$$C_1 = (i\gamma)^{-2i\eta-\mu} \quad e \quad C_2 = \frac{1}{\gamma^2} [(2i\eta-\mu)^2 - (\mu-2)^2].$$

O número b_a tem de satisfazer às mesmas condições que no caso anterior, e de novo o procedimento foi checado comparando integração numérica com analítica para um determinado intervalo (b_a, b_b) .

Quanto ao método de integração numérica, utilizamos o método dos trapézios. Este método apresenta a forte desvantagem de ser mais lento que outros métodos de integração numérica. Apresenta porém a vantagem de ser bastante transparente quanto à convergência das integrais numéricas, sendo portanto, adequado à fase de elaboração do método. Trata-se de um procedimento que pode ser melhorado visando uma redução no tempo de computação gasto.

Quanto ao passo Δb , utilizado na integração numérica via método dos trapézios, dividimos o eixo b em alguns intervalos. Nos intervalos onde o integrando varia mais fortemente, utilizamos passos Δb menores. Além disto, os passos Δb em cada região foram colocados como função do ângulo de espalhamento nos programas que calculam as expressões finais (6.36) e (6.71), e conseqüentemente, as seções de choque diferencial e integral.

Para realmente nos garantirmos com relação à questão

dos passos utilizados, no programa que calcula a seção de choque diferencial são sempre realizados quatro testes, para quatro ângulos diferentes, onde as expressões finais são calculadas com passos de integração bem pequenos. Com isto, podemos saber se no cálculo de seções de choque diferenciais para cada processo e energia de impacto considerada, as integrais numéricas convergiram com o conjunto de passos utilizados.

7.3 - TESTES

Comparamos nossos resultados numéricos com os resultados de diversos autores. Convém salientar que nesta comparação de resultados utilizamos as mesmas funções de onda que as utilizadas, em cada caso, nos diversos trabalhos comparados. A comparação de resultados foi feita dentro das mesmas aproximações no que se refere à descrição dos átomos alvos. Além disto, pudemos comparar resultados para quando o alvo é composto de átomos de hidrogênio, bastando para isto não considerar, nos cálculos numéricos, o termo referente aos elétrons do caroço.

A mencionada comparação entre nossos resultados e o de outros autores, está representada na Tabela 7.1. Na primeira coluna estão os processos comparados. Na segunda coluna os autores dos trabalhos comparados. A terceira e quarta colunas, referem-se ao caso onde comparamos resultados para a seção de choque diferencial, estando colocados, respectivamente, as energias de impacto dos resultados comparados e o número de pontos da seção de choque diferencial comparados (referentes aos diversos ângulos de espalhamento). A quinta coluna se refere ao caso onde comparamos as

seções de choque integrais, constando o número de energias de impacto comparadas. Finalmente, na sexta coluna, está a diferença percentual entre os nossos resultados e os resultados comparados.

Foram comparados um total de 112 resultados diferentes em diferentes processos de excitação e obtidos por diferentes autores. A diferença percentual média entre todos os resultados comparados foi de 8 %. Convém salientar que os resultados dos diversos autores foram tirados, na maioria dos casos, de gráficos logarítmicos, o que introduz uma razoável faixa de incerteza nesta comparação. Além disto, a seção de choque diferencial varia cerca de 5 ordens de grandeza com a variação do ângulo de espalhamento, sendo portanto razoável uma pequena diferença entre os resultados obtidos com diferentes métodos numéricos.

Acreditamos que a diferença percentual entre os resultatados comparados é inteiramente compatível com o acima exposto, e concluimos que as expressões analíticas bem como o método numérico estão corretos.

Processo	Autores	Seção de choque diferencial		Seção de Choque total nº de pontos comparados	Diferença percentual média
		ϵ_0 (eV)	nº de pontos comparados		
$e^- + H(1s) \rightarrow e^- + H(2s)$	Tai et al. ⁽⁹⁰⁾	100	11	-	7%
	Gosh et al. ⁽⁹¹⁾	50, 100, 200	24	-	8%
	Tai et al. ⁽⁹⁰⁾	-	-	4	9%
$e^- + H(1s) \rightarrow e^- + H(3s)$	Tai et al. ⁽⁹⁰⁾	100	11	-	12%
	Tai et al. ⁽⁹⁰⁾	-	-	5	6%
$e^- + H(1s) \rightarrow e^- + H(2p)$	Tai et al. ⁽⁹⁰⁾	100	10	-	7%
	Gosh et al. ⁽⁹¹⁾	50, 200	11	-	6%
	Tai et al. ⁽⁹⁰⁾	-	-	4	1%
	Gosh et al. ⁽⁹¹⁾	-	-	4	3%
$e^- + H(1s) \rightarrow e^- + H(3p)$	Tai et al. ⁽⁹⁰⁾	100	10	-	9%
	Tai et al. ⁽⁹⁰⁾	-	-	3	10%
$e^- + Li(2s) \rightarrow e^- + Li(2p)$	Castro ⁽³²⁾ (IFC)	122.4	6	-	2%
	Walters ⁽¹⁴⁾ (IFC)	-	-	6	13%
$e^- + Na(3s) \rightarrow e^- + Na(3p)$	Walters ⁽¹⁴⁾ (IFC)	-	-	2	8%
$e^- + K(4s) \rightarrow e^- + K(4p)$	Walters ⁽¹⁴⁾ (IFC)	-	-	1	7%

TABELA 7.1 - Diferença percentual média, para vários processos de excitação, entre os resultados obtidos no presente trabalho e resultados obtidos com a aproximação de Glauber por outros autores.

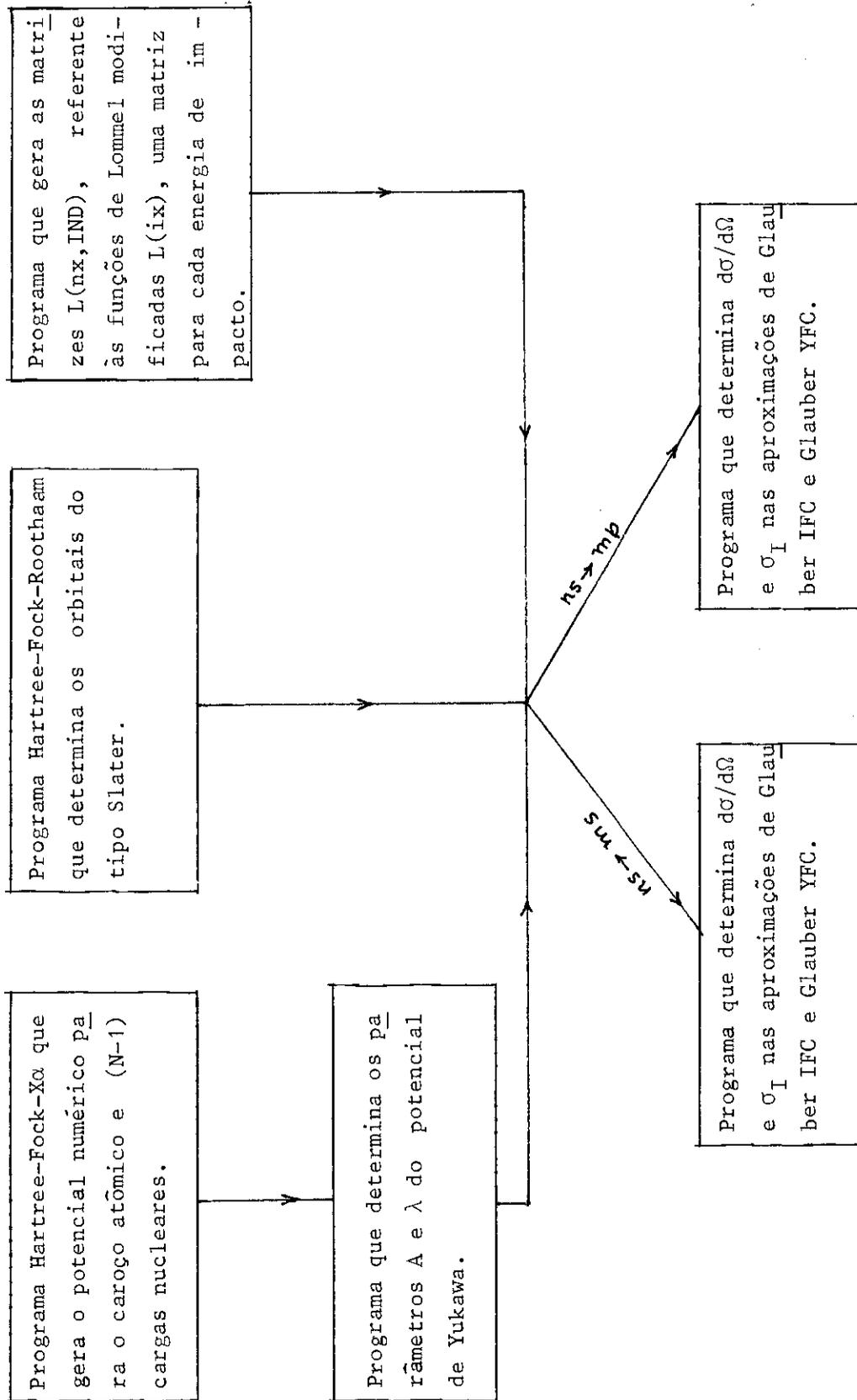


FIGURA 7.1 - Fluxograma dos programas utilizados.

CAPÍTULO VIII

RESULTADOS

Neste capítulo estão apresentados e discutidos os principais resultados obtidos neste trabalho.

Na primeira seção analisamos se nossa descrição da interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e (N-1) cargas nucleares, através do potencial de Yukawa, produz resultados fisicamente consistentes. É discutida a maneira com que determinamos os parâmetros referentes ao potencial de Yukawa.

As seções que se seguem referem-se cada uma a um determinado processo de excitação abordado neste trabalho. Desta forma, as seções 2, 3 e 4 referem-se respectivamente à excitação aos estados 2p, 3s e 3p do átomo de lítio. A seção 5 trata da excitação do átomo de sódio ao estado 3p e a seção 6 da excitação do átomo de potássio ao estado 4p.

Em cada uma destas seções discutimos inicialmente a escolha adotada para as funções de onda referentes aos estados inicial e final, bem como analisamos o comportamento dos resultados ao variar estas funções de onda. Os resultados obtidos são comparados com os resultados experimentais e discutimos o modelo adotado para descrever os elétrons do caroço no processo de colisão. Os resultados são comparados com outros resultados teóricos sendo discutidos detalhes concernentes à aproximação de Glauber e sua adequação na descrição do processo abordado na seção.

8.1 - ANÁLISE DA DESCRIÇÃO DOS ELÉTRONS DO CAROÇO ATÔMICO

Conforme discutido no Capítulo V, representamos a interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e (N-1) cargas nucleares através de um potencial do tipo Yukawa, da do por:

$$V(r_{N+1}) = A \exp(-\lambda |\vec{r}_{N+1}|) / |\vec{r}_{N+1}| \quad . \quad (8.1)$$

Pretendemos, nesta seção, analisar se esta descrição gera resultados fisicamente consistentes, ou seja, se o modelo proposto é adequado.

Para facilitar a discussão chamaremos de I.F.C. (Inert Frozen Core) à aproximação que despreza inteiramente o efeito dos elétrons do caroço atômico na descrição do processo de colisão, o que é equivalente a tomar $A = 0$ na expressão acima. Chamaremos de Y.F.C. (Yukawa Frozen Core) ao modelo que propomos, utilizando o potencial de Yukawa para representar o efeito dos elétrons do caroço atômico e (N-1) cargas nucleares no processo de colisão.

Uma forma de analisar este modelo consiste em comparar resultados obtidos com as aproximações I.F.C. e Y.F.C., cuja diferença está relacionada com a nossa descrição do efeito dos elétrons do caroço atômico e (N-1) cargas nucleares.

Esperamos algumas tendências nos resultados para a seção de choque diferencial relacionadas com efeitos dos elétrons do caroço, a saber:

a) O efeito dos elétrons do caroço deve depender do número de elétrons nele contido. Assim sendo, na medida em que con-

sideramos átomos mais pesados, o efeito dos elétrons do caroço nos resultados deve ser mais importante. Esta tendência pode ser observada em nossos resultados comparando, por exemplo, os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. contidos nas Tabelas 8.1 e 8.4. Estas tabelas referem-se, respectivamente, a excitações dos átomos de lítio e potássio em várias energias de impacto. Podemos observar nestas tabelas que para a mesma energia de impacto os resultados na aproximação Y.F.C. apresentam, de uma maneira geral, uma maior diferença percentual dos resultados na aproximação I.F.C. para o átomo de potássio que para o átomo do lítio.

b) Os elétrons espalhados em grandes ângulos de espalhamento representam classicamente uma situação de grande penetração do elétron incidente no átomo, o inverso ocorrendo para elétrons espalhados em pequenos ângulos de espalhamento.

b.i) - Como consequência, os elétrons espalhados a pequenos ângulos de espalhamento não devem interagir sensivelmente com os elétrons do caroço atômico, o inverso ocorrendo para elétrons espalhados a grandes ângulos de espalhamento. Desta forma, devemos esperar que a introdução de uma descrição dos elétrons do caroço altere significativamente os resultados para a seção de choque diferencial apenas para elétrons espalhados a grandes ângulos de espalhamento. De fato, analisando as Tabelas 8.1 a 8.4, observamos que a diferença percentual nos resultados para a seção de choque diferencial nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. é desprezível para pequenos ângulos de espalhamento, crescendo na medida em que consideramos ângulos de espalhamento maiores.

b.ii) - Os resultados obtidos na aproximação I.F.C. referem-se à descrição de um processo de colisão $e^- + \text{átomo hidrogênio}$

nóide. Na medida em que introduzimos o potencial de Yukawa o elétron incidente passa a "perceber" a existência de um átomo mais pesado. Como consequência os elétrons incidentes passam a ter maior probabilidade de serem desviados, ou seja, com a introdução de uma descrição do caroço a seção de choque diferencial deve crescer para grandes ângulos de espalhamento e, conseqüentemente, diminuir para pequenos ângulos de espalhamento. As Tabelas 8.3 e 8.4 mostram que de fato esta tendência se verifica, uma vez que os resultados para a seção de choque diferencial na aproximação Y.F.C. estão maiores que os na aproximação I.F.C. em grandes ângulos de espalhamento, o inverso ocorrendo para pequenos ângulos de espalhamento.

c) Para um determinado processo de excitação esperamos que os elétrons do caroço desempenhem um papel tanto mais relevante, quanto maior for a energia de impacto considerada, uma vez que, classicamente, a probabilidade de penetração do elétron no átomo cresce com a energia de impacto. Desta forma, os elétrons do caroço passam a ser mais importantes na medida em que a energia de impacto cresce e o ângulo de espalhamento diminui. Esta tendência foi observada, como mostram as Tabelas 8.1 a 8.4. Observamos que, fixando um determinado ângulo de espalhamento, a diferença percentual entre os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. é, de uma maneira geral, maior para energias de impacto maiores. Além disso o caroço passa a contribuir significativamente a partir de ângulos de espalhamento menores, quando se considera energias de impacto maiores.

Uma outra maneira de analisar o modelo proposto consiste em comparar os resultados para a excitação do átomo de lítio

ao estado $2p$ com os resultados obtidos na aproximação de Glauber por Castro⁽³²⁾ (1977), onde os elétrons do caroço foram considerados explicitamente nos cálculos numéricos. Ocorre, entretanto, que por ser o átomo de lítio um átomo leve e os dados de Castro cobrem apenas até ângulos de espalhamento de 40° , a diferença entre os resultados para a seção de choque diferencial incluindo ou não uma descrição dos elétrons do caroço é pequena, por vezes menor que a diferença devida a problemas numéricos.

Castro⁽³²⁾ também obteve resultados na aproximação I.F.C.. A diferença entre seus resultados ao considerar explicitamente os elétrons do caroço atômico e na aproximação I.F.C. representa, de forma exata, o que pretendemos descrever de forma aproximada com o potencial de Yukawa. Desta maneira é interessante comparar a tendência nos resultados de Castro com a tendência de nossos resultados. Para facilitar a discussão chamaremos de F.C. (Frozen Core) à aproximação utilizada por Castro ao considerar explicitamente os elétrons do caroço nos cálculos.

Na Tabela 8.5 apresentamos os resultados nas aproximações F.C., I.F.C. e Y.F.C obtidos por Castro⁽³²⁾ e no presente trabalho, para a seção de choque diferencial do processo de excitação do átomo de lítio aos estados 2^2P , em energia de impacto de 122.4 eV. Observamos que os resultados obtidos ao se descrever os elétrons do caroço através do potencial de Yukawa apresenta a mesma tendência dos resultados obtidos quando os elétrons do caroço são explicitamente tratados.

Apesar da concordância entre os comportamentos dos resultados, os resultados na aproximação Y.F.C. não são idênticos aos obtidos na aproximação F.C., indicando que a descrição dos elétrons do caroço via um potencial do tipo Yukawa corrige apenas par

cialmente os resultados obtidos na aproximação I.F.C.

A escolha dos parâmetros A e λ que surgem no potencial de Yukawa (eq. (8-1)) constitui um ponto delicado, uma vez que se deve escolher um critério para selecionar um dentre os diversos conjuntos de parâmetros para um determinado alvo. Estes parâmetros são obtidos ao ajustar o potencial de Yukawa com um potencial numérico referente aos elétrons do caroço e $(N-1)$ cargas nucleares gerado por um programa Hartree-Fock- $X\alpha$. São realizados diversos ajustes para diferentes intervalos de distâncias atômicas (r_a, r_b) , cada um gerando um conjunto de parâmetros A e λ .

Vejamos inicialmente o comportamento dos resultados para a seção de choque diferencial como função destes parâmetros. Na Tabela 8.6 apresentamos resultados referentes ao processo de excitação do átomo de potássio aos estados 4^2P na energia de impacto de 60 eV, obtidos com dois conjuntos de parâmetros A e λ , bem como na aproximação I.F.C.. Os dois conjuntos de parâmetros foram escolhidos ao ajustar o potencial de Yukawa com o numérico em duas regiões de distâncias atômicas bem diferentes, a primeira (de 0.5 u.a. a 5.0 u.a.) uma região de pequenas e médias distâncias atômicas, a segunda (de 2.5 u.a. a 7.5 u.a.) uma região de distâncias médias e grandes.

A tendência nos resultados ao introduzir o potencial de Yukawa para os dois conjuntos de parâmetros é semelhante. Os resultados com os parâmetros ajustados entre 0.5 e 5.0 u.a. apresentam uma maior diferença percentual dos resultados na aproximação I.F.C., que aqueles onde os parâmetros foram ajustados entre 2.5 e 7.5 u.a.. Este fato é esperado uma vez que as densidades de carga referente aos elétrons do caroço atômico é maior na região de distâncias atômicas de 0.5 a 5.0 u.a. que na região de

2.5 a 7.5 u.a..

Este mesmo tipo de comportamento foi observado para todas as energias de impacto e processos abordados, onde obtivemos sempre resultados na aproximação Y.F.C. com no mínimo dois conjuntos de parâmetros diferentes.

O fato da tendência nos resultados não se alterar com relação à mudança nos parâmetros A e λ (desde que o potencial de Yukawa represente bem o potencial numérico em largas faixas de distâncias atômicas) é importante. Isto porque a escolha de um determinado conjunto de parâmetros introduz sempre um certo grau de arbitrariedade. Neste sentido podemos confiar que nosso modelo corrige, de forma consistente, os resultados na aproximação I.F.C. na direção correta, embora o mesmo não possa ser dito de forma categórica com relação à correção em termos quantitativos.

Escolhemos um determinado conjunto de parâmetros baseados em que consistentemente os resultados, com a introdução de uma descrição dos elétrons do caroço, se alteram sensivelmente apenas para ângulos de espalhamento não muito pequenos, ou seja, para regiões de parâmetro de impacto pequenas e médias. Desta maneira, apenas nas regiões de distâncias atômicas pequenas e médias deve ser importante uma boa descrição do potencial gerado pelos elétrons do caroço atômico e $(N-1)$ cargas nucleares, não trazendo maiores consequências uma descrição pobre deste em regiões de grandes distâncias atômicas.

Devemos então utilizar potenciais de Yukawa com os parâmetros ajustados em regiões de pequenas distâncias atômicas, desde que o potencial gerado represente bem o potencial numérico para largas faixas de distâncias atômicas. Podemos observar através das Tabelas 5.2 à 5.4 que os ajustes realizados entre as dis-

tâncias atômicas de 0.5 a 5.0 atendem bem à esta condição, tendo sido utilizados para gerar os parâmetros A e λ que serviram para a obtenção do conjunto de resultados apresentados neste trabalho.

Em alguns casos, utilizamos conjuntos de parâmetros A e λ obtidos a partir de potenciais gerados em cálculos de estados atômicos excitados. Os resultados para a seção de choque diferencial obtidos utilizando estes parâmetros não apresentarem mudanças significativas com relação aos resultados onde utilizamos conjuntos de parâmetros obtidos de potenciais gerados de cálculos do estado atômico fundamental, desde que se compare cálculos onde se ajustou os parâmetros na mesma região de distâncias atômicas. Isto pode ser interpretado com uma pequena indicação de que o efeito do relaxamento dos spin-orbitais, quando da excitação do elétron de valência, não deve ser fundamental na descrição do processo de colisão. Deve-se salientar entretanto que trata-se de um tipo de informação bastante questionável, uma vez que em primeiro lugar é duvidoso que este modelo dê conta de explicar este efeito, e em segundo lugar porque em princípio não é consistente utilizar parâmetros tirados de cálculos onde os spin-orbitais dos elétrons do caroço atômico relaxaram, e utilizar num formalismo onde se partiu da condição de que estes spin-orbitais não relaxam.

8.2 - PROCESSO $e^- + \text{Li}(2s) \rightarrow e^- + \text{Li}(2p)$

Vejamos, inicialmente, a questão relacionada com a escolha das funções de onda utilizadas para descrever os estados $2s$ e $2p$ do elétron de valência. Para descrever estes estados existem na literatura diversos orbitais do tipo Slater, conforme pode ser

observado na Tabela 5.1. O comportamento dos resultados para a seção de choque diferencial e total como função do orbital utilizado para descrever o estado 2s está colocado na Tabela 8.7, onde utilizamos a mesma notação para descrever estes orbitais que no Capítulo V, energia de impacto de 122.4 eV e aproximação I.F.C..

Os resultados obtidos com os dois orbitais mais completos VZ (vários termos por potência de r) estão praticamente idênticos, embora estes orbitais sejam bastante diferentes. Isto indica uma consistência no que concerne à aplicação da aproximação de Glauber a este caso. Os resultados obtidos com os dois orbitais mais resumidos SZ (um orbital por potência de r) apresentam uma diferença percentual média com relação aos resultados obtidos com os orbitais mais completos VZ de apenas 5%. Os orbitais DZ (dois orbitais por potência de r) apresentam resultados com uma diferença percentual média dos resultados obtidos com os orbitais VZ de 10%, acima do esperado, uma vez que deveriam representar uma descrição melhor do estado 2s que os orbitais SZ.

Observamos um comportamento nos resultados semelhante ao acima descrito ao variar a função de onda para o estado 2p, bem como ao utilizar a aproximação Y.F.C. e considerar outras energias de impacto ao variar o orbital 2s do elétron de valência.

Uma vez que os resultados obtidos ao utilizar orbitais SZ estiveram bem próximos dos resultados em que utilizamos orbitais mais completos VZ, e o tempo de computação necessário para obter resultados com orbitais SZ é muito menor que ao utilizar orbitais VZ, utilizamos os orbitais SZ de Vaselov⁽⁸⁰⁾ para obter o conjunto de resultados apresentados nesta seção.

Este processo foi bastante estudado, tanto teórica quanto experimentalmente. Com a aproximação de Glauber já foram obti-

dos resultados tanto na aproximação I.F.C. (14,32) quanto considerando explicitamente os elétrons do caroço nos cálculos (32). Neste sentido nossos resultados não chegam a representar uma contribuição importante ao estudo deste processo.

Nas Figuras 8.1 a,b,c e d apresentamos nossos resultados bem como resultados experimentais (37,38) e resultados obtidos com outros métodos de aproximação (9,11), respectivamente para as energias de impacto de 10, 20, 60 e 100 eV. Na Tabela 8.1 estão os resultados nas aproximações Y.F.C. e I.F.C.

Dado que o átomo de lítio possui apenas dois elétrons no caroço atômico, a diferença nos resultados com as aproximações I.F.C. e Y.F.C. não é perceptível nos gráficos logarítmicos apresentados, excetuando-se a região de grandes ângulos de espalhamento para energia de impacto de 100 eV. Neste sentido não é possível, neste caso, tecer considerações a respeito do modelo proposto para descrever os elétrons do caroço atômico a partir dos resultados experimentais. Deve, entretanto, ser salientado que os resultados apresentaram as tendências mencionadas na primeira seção deste capítulo ao introduzir o potencial de Yukawa.

Conforme pode ser observado através destas figuras, os resultados com a aproximação de Glauber apresentaram um excelente acordo com os resultados experimentais (37,38) para pequenos ângulos de espalhamento. De uma maneira geral, um razoável acordo com os resultados experimentais é alcançado para maiores ângulos de espalhamento na medida que consideramos energias de impacto maiores. Podemos observar que os resultados experimentais para a seção de choque diferencial variam cerca de 3, 4, 6 e 7 ordens de grandeza respectivamente para as energias de impacto de 10, 20, 60 e 100 eV entre os ângulos de espalhamento de 0° a 60° . De uma

maneira geral, os resultados com a aproximação de Glauber forneceram estas ordens de grandeza.

Com relação à comparação com os outros resultados teóricos, os resultados com as aproximações de Glauber e UDWPO II ⁽⁹⁾ (Unitarized Distorted-Wave Polarized Orbital) estiveram, de uma maneira geral, bastante parecidos para ângulos de espalhamento pequenos e médios, estando os resultados com a aproximação UDWPO II para grandes ângulos de espalhamento bastante superiores que os obtidos com a aproximação de Glauber.

Os resultados com a aproximação de acoplamento-forte ⁽¹¹⁾ apresentaram um bom acordo com os resultados experimentais para ângulos de espalhamento médios e grandes, superiores aos obtidos com as aproximações de Glauber e UDWPO II. Para ângulos de espalhamento muito pequenos, estes resultados estão, entretanto, abaixo dos resultados experimentais e dos resultados obtidos com as aproximações de Glauber e UDWPO II. O sucesso do método de acoplamento-forte no estudo deste processo nas energias de impacto consideradas, se deve, conforme exposto no Capítulo IV, ao forte acoplamento entre os estados inicial e final, o que minimiza os efeitos decorrentes da não descrição dos outros canais abertos de espalhamento na expansão da função de onda do método.

Estão colocados também resultados com a aproximação de Born para a energia de impacto de 10 eV. Estes resultados foram obtidos por Walters e publicados, a título de comunicação pessoal, por Vuskovic et al. ⁽³⁷⁾ (1982), não tendo sido comentados em detalhe. Estes resultados apresentam um razoável acordo com os resultados experimentais para pequenos ângulos de espalhamento, apesar de estarem em pior concordância que os resultados obtidos com os outros métodos mencionados. Dado que a energia de impacto considera

rada é de apenas 10 eV, este fato vai de encontro ao que se espera com relação à região onde a aproximação de Born deve fornecer resultados razoáveis, ou seja, para energias de impacto altas.

Os resultados para a seção de choque integral estão apresentados na Figura 8.2a, juntamente com os resultados experimentais e resultados de outros trabalhos teóricos. A seção de choque integral é basicamente determinada pelos valores da seção de choque diferencial em ângulos pequenos, onde a contribuição dos elétrons do caroço atômico é desprezível. Neste sentido os resultados para a seção de choque integral nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. são praticamente idênticos.

Os resultados na aproximação de Glauber apresentam um excelente acordo com os resultados experimentais, superior ao obtido com os outros métodos teóricos. Este fato já era conhecido em 1973 com o trabalho de Walters⁽¹⁴⁾, cujos resultados foram obtidos na aproximação de Glauber I.F.C.. Nossos resultados estão em acordo com os resultados de Walters.

8.3 - PROCESSO $e^- + \text{Li}(2s) \rightarrow e^- + \text{Li}(3s)$

Para o estado 3s do átomo de lítio encontramos na literatura apenas o orbital do tipo Slater de Weiss⁽⁸²⁾, que possui vários termos por potência de r ou, segundo nossa nomenclatura, do tipo VZ. Para testar a consistência dos resultados e escolher um particular orbital do tipo Slater para o estado 2s, obtivemos uma série de resultados para a seção de choque diferencial variando o orbital 2s. Observamos uma diferença média de 20% entre os resultados obtidos utilizando para o estado 2s orbitais do tipo SZ e

VZ. Optamos então em utilizar os orbitais mais completos VZ de Clementi ⁽⁷⁹⁾ para o estado 2s.

Na dedução da expressão para a amplitude de espalhamento (Capítulo 6) utilizamos uma relação decorrente de considerar funções de ondas atômicas ortogonais. Devemos então, em princípio, ortogonalizar a função de onda do orbital 3s com relação à do orbital 2s. Se este procedimento fosse importante deveríamos esperar resultados bastante diferentes ao utilizarmos diferentes funções para o orbital 2s não ortogonais ao orbital 3s no cálculo da seção de choque diferencial. Isto porque, neste caso, estaríamos considerando funções de onda do estado 2s com diferentes valores não nulos para o somatório (6.26), que seria nulo caso considerássemos funções ortogonais. Conforme mencionamos no parágrafo anterior, os resultados para a seção de choque diferencial variaram pouco em cálculos onde utilizamos funções de onda para o orbital 2s bastante diferentes, o que indica que, neste caso, não é fundamental ortogonalizar as funções de onda atômicas. Por estes motivos não realizamos esta ortogonalização.

Este processo foi pouco estudado tanto teórica quanto experimentalmente, sendo nossos resultados pioneiros no que concerne à aplicação da aproximação de Glauber ao estudo deste processo. Nossos resultados, bem como outros resultados experimentais ⁽³⁸⁾ e teóricos ⁽⁵⁰⁾, estão apresentados nas Figuras 8.3, 8.4 e 8.5, respectivamente para as energias de impacto de 10, 20 e 60 eV. Na Tabela 8.2 estão colocados os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C.

A diferença entre os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. ainda é relativamente pequena como consequência do átomo de lítio ser leve, porém bem maior que a diferença obtida para o processo de excitação do átomo de lítio ao estado 2p. Uma vez que as Figuras 8.3 à 8.5 contêm gráficos logarítmicos, a diferença entre os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. só é perceptível para a energia de impacto de 60 eV em ângulos de espalhamento acima de 50° .

É interessante comparar nossa estimativa do efeito dos elétrons do caroço atômico para este processo e para o processo abordado na seção anterior. Colocamos na Tabela 8.8 a diferença percentual entre os resultados obtidos nas aproximações I.F.C. e Y.F.C., para os dois processos mencionados, nas energias de impacto de 10, 20 e 60 eV. A Tabela mostra que o efeito dos elétrons do caroço atômico é bem maior para a excitação do elétron de valência ao estado 3s que quando este é excitado ao estado 2p.

Acreditamos que este fato decorre da transição ao estado 3s ser ópticamente proibida, ao contrário da excitação ao estado 2p que é ópticamente permitida e muito intensa. Desta forma, a excitação ao estado 2p é basicamente determinada pelo forte acoplamento entre os estados inicial e final do elétron de valência, o que não ocorre para a excitação ao estado 3s, onde a interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico já deve ser percentualmente mais importante.

Pelas Figuras 8.3 à 8.5 observamos que, de uma maneira geral, os resultados na aproximação de Glauber estão

parecidos com os resultados na aproximação de ondas distorcidas (UDWPO) obtidos por Winters e Vanderpoorten⁽⁵⁰⁾ (1982). Nos cálculos de Winters e Vanderpoorten são considerados efeitos relacionados com estados intermediários, polarização do átomo, bem como com o termo de troca. O termo de troca, que não é considerado em nossos cálculos, é estimado como sendo muito pequeno para as energias de impacto de 20 a 60 eV.

Vejamos, inicialmente, os resultados referentes à energia de impacto de 20 eV, apresentados na Figura 8.4. Os resultados nas aproximações de Glauber e ondas distorcidas⁽⁵⁰⁾ apresentam um bom acordo com os resultados experimentais para ângulos de espalhamento acima de 40° , estando abaixo dos resultados experimentais para ângulos menores. Winters e Vanderpoorten⁽⁵⁰⁾, baseados no espectro de perda de energia a zero graus de Shuttleworth et al. (1979), sugeriram um valor experimental para a seção de choque diferencial a zero graus entre 23 e $44 \text{ a}_0\text{sr}^{-1}$, estando o valor obtido na aproximação de ondas distorcidas em $29.4 \text{ a}_0\text{sr}^{-1}$, na aproximação de Glauber em $43.6 \text{ a}_0\text{sr}^{-1}$, e o valor experimental extrapolado de Williams et al. em $82 \text{ a}_0\text{sr}^{-1}$. Este fato coloca em discussão os resultados experimentais de Williams et al.⁽³⁸⁾, cuja diferença com relação aos resultados teóricos não pode ser atribuída simplesmente a questões de normalização dado que a forma da curva experimental para a seção de choque diferencial é bastante diferente daquela obtida com os métodos teóricos. Esta questão é levantada por Winters⁽⁵⁰⁾, e os resultados com

a aproximação de Glauber introduzem uma nova variável à esta questão. Isto porque se a aproximação de Glauber forneceu bons valores para a seção de choque diferencial em grandes ângulos de espalhamento, os resultados obtidos para pequenos ângulos de espalhamento deveriam ser ainda melhores, pois é justamente nesta região de ângulos que espera-se um bom desempenho da aproximação de Glauber.

Ainda com relação à seção de choque diferencial na energia de impacto de 20 eV, podemos observar um mínimo em torno de 30° , tanto para os resultados obtidos na aproximação de Glauber, quanto na aproximação de ondas distorcidas. Os resultados experimentais, entretanto, não apresentam este mínimo, ficando uma outra questão em aberto.

Para a energia de impacto de 10 eV, os resultados na aproximação de Glauber estiveram bem abaixo dos resultados experimentais, apresentando um bom acordo com os resultados obtidos com o método de ondas distorcidas. Trata-se, entretanto, de uma energia de impacto muito baixa para que se possa tirar conclusões na comparação entre os resultados experimentais e teóricos, dado que tanto a aproximação de Glauber quanto a aproximação de ondas distorcidas devem apresentar bons resultados para energias de impacto intermediárias, sendo 10 eV considerada uma energia pertencente ao limiar entre baixas energias e energias intermediárias para o átomo de lítio.

Para a energia de impacto de 60 eV os resultados experimentais de Williams et al. ⁽³⁸⁾ cobrem até ângulos de espalhamento de 30° . Nesta região de ângulos os resultados na aproximação de Glauber e ondas distorcidas ⁽⁵⁰⁾ estão abaixo dos resultados experi

mentais ⁽³⁸⁾. Da mesma forma que para a energia de impacto de 20eV, o valor estimado do espectro de perdas de energia a zero graus de Shuttleworth et al., assim como os resultados nas aproximações de ondas distorcidas e Glauber, estão abaixo do valor extrapolado do espectro experimental de Williams et al.. Além disto, os resultados experimentais não indicam uma oscilação na seção de choque diferencial em torno de 20° , que pode ser observado nos resultados nas aproximações de ondas distorcidas e Glauber.

Seria, portanto, interessante um maior esforço experimental com relação a este processo de excitação, para elucidar as divergências entre os resultados teóricos e experimentais.

Conforme vimos, a aproximação de Glauber deu conta de descrever de forma satisfatória este processo de excitação, que é oticamente proibido. Trata-se de um elemento novo, pois até o momento a aproximação de Glauber não havia sido aplicada a processos oticamente proibidos em alvos mais pesados que o hélio.

Os resultados para a seção de choque integral estão apresentados na Tabela 8.9 juntamente com resultados experimentais ⁽³⁸⁾ e resultados na aproximação de Born ⁽⁴⁾.

A discordância entre os resultados na aproximação de Glauber e os resultados experimentais é devida a discordância apresentada para os valores da seção de choque diferencial em ângulos de espalhamento pequenos, que basicamente determina a seção de choque integral.

8.4 - PROCESSO $e^- + Li(2s) \rightarrow e^- + Li(3p)$

Para o estado 3p do átomo de lítio encontramos apenas o

orbital do tipo Slater de Weiss ⁽⁸²⁾, que segundo nossa classificação, é do tipo VZ. Ao contrário do ocorrido com os outros processos abordados neste trabalho, os resultados para a seção de choque diferencial com diferentes funções de onda para o estado 2s apresentaram significativas diferenças entre si. Obtivemos resultados utilizando para o estado 2s as funções de onda SZ de Vaselov ⁽⁸⁰⁾, VZ de Clementi ⁽⁷⁹⁾, bem como VZ de Weiss ⁽⁸²⁾, para as energias de impacto de 10, 20, 60, 100 e 200 eV. Para a energia de impacto de 10 eV, os resultados com as diferentes funções de onda para o estado inicial apresentaram, de uma maneira geral, discordâncias entre si. Para a energia de impacto de 20 eV, os resultados com as diferentes funções de onda para o estado 2s apresentaram um razoável acordo entre si a partir do ângulo de espalhamento de 20°. Para a energia de impacto de 60 eV, este acordo é obtido a partir de 15°, e para as energias de impacto de 100 e 200 eV, respectivamente a partir de 9° e 7°.

Na medida em que consideramos energias de impacto maiores, os resultados se apresentam consistentes, com relação à variação da função de onda para o estado inicial, a partir de ângulos de espalhamento cada vez menores. Levando em consideração que a probabilidade de penetração do elétron incidente no átomo cresce com o aumento da energia de impacto, estes resultados indicam problemas na descrição da região de grandes parâmetros de impacto.

Os problemas acima mencionados poderiam decorrer dos seguintes fatores:

- 1) Inadequação da aproximação de Glauber para descrever este processo;
- 2) Erros na dedução das expressões analíticas ou nos programas numéricos;
- 3) Problemas nas funções de onda utilizadas para descrever o estado 2s;
- 4) Problemas na função de onda de Weiss utili-

zada para descrever o estado 3p. Podemos descartar as hipóteses 2 e 3 pois tanto as expressões analíticas e programas numéricos, quanto as funções de onda utilizadas para descrever o estado 2s, foram utilizados no estudo de outros processos de excitação estando os resultados obtidos inteiramente consistentes. Seria estranho concluir, a partir destes resultados, que a aproximação de Glauber é inadequada para descrever este processo. Isto porque os problemas se apresentaram para pequenos ângulos de espalhamento, justamente uma faixa angular onde a aproximação de Glauber é aplicada de forma mais consistente com seu formalismo.

Acreditamos que estes problemas se devem, provavelmente, à uma má descrição da função de onda de Weiss⁽⁸²⁾ para o orbital 3p do elétron de valência. Como função da análise, em termos de parâmetros de impacto, dos problemas ocorridos nos resultados, estaríamos tentados a localizar o problema da função de onda de Weiss na cauda, ou seja, uma possível má descrição do comportamento assintótico da função de onda.

Apesar dos problemas acima mencionados, comparamos os resultados na aproximação I.F.C. com os resultados experimentais para as regiões angulares onde os resultados estiveram consistentes. Isto porque, ao que nos conste, trata-se da primeira vez que este processo é estudado teoricamente com uma aproximação diferente da primeira aproximação de Born⁽⁴⁾. Os resultados são comparados com os resultados experimentais⁽³⁸⁾ para as energias de impacto de 20 e 60 eV nas Figuras 8.6a e 8.6b, respectivamente.

Para a energia de impacto de 20 eV, os resultados com a aproximação de Glauber apresentaram uma diferença percentual média com relação aos resultados experimentais⁽³⁸⁾, entre os ângulos de espalhamento de 20° e 40° , de 20%. Para a energia de im -

pacto de 60 eV esta diferença percentual média, entre os ângulos de espalhamento de 15° e 40° , esteve em torno de 40%.

Para que se possa obter uma informação conclusiva a respeito da adequação da aproximação de Glauber ao estudo deste processo seria necessário a obtenção de resultados com outras funções de onda para descrever o estado 3p, o que infelizmente não foi possível neste trabalho. O razoável acordo apresentado pelos resultados teóricos com relação aos resultados experimentais nas regiões angulares onde estes são confiáveis, serve como uma primeira indicativa que esta aproximação pode ser útil ao estudo deste processo.

Não colocamos resultados para a seção de choque integral para este processo pois esta é basicamente determinada pelos valores da seção de choque diferencial em pequenos ângulos de espalhamento, região onde nossos resultados não são confiáveis. Da mesma maneira, não utilizamos a aproximação Y.F.C. pois para estudar um efeito mais fino relacionado com a interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico, é necessário antes resolver os problemas apresentados pelos resultados.

8.5 - PROCESSO $e^{-} + \text{Na}(3s) \rightarrow e^{-} + \text{Na}(3p)$

Para descrever o estado 3s encontram-se na literatura orbitais do tipo Slater de Satz ⁽⁸³⁾ e de Clementi ⁽⁷⁹⁾, ambos do tipo VZ. Para o estado 3p encontramos apenas o orbital do tipo Slater de Satz ⁽⁸³⁾, que é do tipo VZ. Comparando os resultados para a seção de choque diferencial utilizando para o estado 3s o orbital de Satz com os resultados obtidos utilizando o orbital de Cle

menti, observamos uma diferença percentual média inferior a 5% . Uma vez que estes orbitais são bastante diferentes, concluímos que os resultados estiveram consistentes com relação a este teste. Utilizamos os orbitais de Satz ⁽⁸³⁾ para obter o conjunto de resultados apresentados nesta seção.

Os resultados obtidos nas aproximações I.F.C. e Y.F.C , bem como diversos outros resultados experimentais ^(52,53) e teóricos ^(9,11) estão apresentados nas Figuras 8.7, 8.8, 8.9 e 8.10, referentes respectivamente às energias de impacto de 54.4, 100, 150 e 217.7 eV.

Comparando os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. observa-se que, neste caso, a interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e (N-1) cargas nucleares já desempenha importante papel. Este fato é esperado uma vez que o átomo do sódio possui 10 elétrons no caroço atômico. Neste caso já podemos obter informações a respeito do modelo adotado para descrever este efeito a partir da confrontação dos resultados teóricos com os resultados experimentais.

As aproximações I.F.C. e Y.F.C. geram resultados substancialmente diferentes para ângulos de espalhamento acima de 50°, 30°, 25° e 20° respectivamente para as energias de impacto de 54.4, 100, 150 e 217.7 eV. Estes resultados indicam que, na medida em que consideramos energias de impacto maiores, os elétrons do caroço atômico passam a desempenhar um papel importante em ângulos de espalhamento cada vez menores, tendência esta coerente com o exposto na seção 1. Para ângulos de espalhamento menores que os acima mencionados, a diferença entre os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. não é perceptível nos gráficos logarítmicos. Para mostrar o comportamento dos resultados nas aproximações

I.F.C. e Y.F.C. para pequenos ângulos de espalhamento, colocamos na Tabela 8.3 os resultados para a seção de choque diferencial obtidos com estas duas aproximações nas energias de impacto de 54.4, 100, 150 e 217.7 eV.

Para pequenos ângulos de espalhamento, os resultados na aproximação de Glauber apresentam um excelente acordo com os resultados experimentais ^(52,53) nas energias de impacto consideradas.

Para as energias de impacto de 100, 150 e 217.7 eV podemos observar nas Figuras 8.8, 8.9 e 8.10 que, a partir dos ângulos de espalhamento acima mencionados, os resultados na aproximação I.F.C. subestimam demasiadamente a seção de choque diferencial. Por outro lado, os resultados com a aproximação Y.F.C. apresentam um bom acordo com os resultados experimentais até ângulos de espalhamento de 80° . Desta maneira a introdução de uma descrição da interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e (N-1) cargas nucleares através do potencial de Yukawa, coloca os resultados na aproximação de Glauber num bom acordo com os resultados experimentais para uma faixa de ângulos de espalhamento bem maior que no caso da aproximação I.F.C..

É interessante comentar a respeito de um erro de interpretação cometido no artigo de Buckman et al. ⁽⁵³⁾ onde são obtidos os resultados experimentais. Neste artigo é comentado que os resultados na aproximação de Born só dão conta de descrever os resultados experimentais até ângulos de espalhamento de 20° , principalmente porque nesta aproximação não é levada em conta a interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico, que é importante para ângulos de espalhamento maiores. A seguir eles comentam que os resultados na aproximação de Glauber obtidos por

Walters ⁽¹⁴⁾ descrevem os resultados experimentais até ângulos de espalhamento um pouco maiores, cerca de 30° , porque neste caso esta interação é levada em conta. Segundo estes autores, a aproximação de Glauber não dá conta de descrever os resultados experimentais para ângulos de espalhamento maiores devido ao fato de se assumir, em seu formalismo básico, uma trajetória retilínea na integração das coordenadas do elétron incidente.

Ocorre que os resultados na aproximação de Glauber obtidos por Walters ⁽¹⁴⁾ não levam em conta a interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico, ou seja, foram obtidos na aproximação I.F.C.. A partir dos resultados na aproximação Y.F.C. fica claro que, neste caso, o problema está principalmente relacionado com o fato de Walters não ter descrito a interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico.

Para a energia de impacto de 54.4 eV, cujos resultados estão apresentados na Figura 8.7, a aproximação de Glauber só fornece resultados em bom acordo com os experimentais para pequenos ângulos de espalhamento. O desacordo apresentado nesta energia de impacto, para ângulos de espalhamento intermediários, não está relacionado com as questões discutidas anteriormente. Ocorre que neste caso os resultados experimentais apresentam um mínimo na seção de choque diferencial por volta do ângulo de espalhamento de 50° , que os resultados na aproximação de Glauber claramente não dão conta de descrever. Os resultados na aproximação de Glauber Y.F.C. descrevem uma média dos resultados experimentais, estando os resultados na aproximação I.F.C. bem abaixo dos resultados experimentais a partir do ângulo de espalhamento de 50° .

Na comparação com os resultados de outros métodos teóricos é interessante considerar inicialmente a energia de impacto de

100 eV. Neste caso, cujos resultados estão colocados na Figura 8.8, dispomos também dos resultados na aproximação de Born, ondas distorcidas ⁽⁹⁾ e acoplamento-forte ⁽¹¹⁾. De maneira geral, os métodos teóricos mencionados fornecem resultados em bom acordo com os resultados experimentais para pequenos ângulos de espalhamento.

Para ângulos de espalhamento maiores que 20° , os resultados na primeira aproximação de Born estão fortemente discordantes dos resultados experimentais e dos outros resultados teóricos.

Os métodos de acoplamento-forte e ondas distorcidas (UDWPO) apresentam resultados em razoável acordo com os resultados experimentais entre os ângulos de espalhamento de 20° a 80° , estando os resultados na aproximação de Glauber Y.F.C. bastante superiores nesta região angular. Isto ressalta a competitividade da aproximação de Glauber, uma vez que esta aproximação requer um esforço numérico bem inferior ao das aproximações de acoplamento-forte e ondas distorcidas. O relativo sucesso da aproximação de acoplamento-forte, para esta energia de impacto, pode novamente ser atribuído ao forte acoplamento entre os estados inicial e final que ocorre nas transições ressonantes em átomos alcalinos.

Para ângulos de espalhamento superiores que 80° a aproximação de Glauber fornece resultados discordantes dos resultados experimentais, estando os resultados na aproximação de ondas distorcidas ⁽⁹⁾ com o comportamento qualitativo correto. Deve-se atribuir a falha da aproximação de Glauber para descrever ângulos desta ordem principalmente ao fato de se assumir uma trajetória retilínea para o elétron incidente em seu formalismo básico. É interessante, entretanto, analisar um outro aspecto importante na descrição da região de ângulos de espalhamento muito grandes. Os elétrons espalhados nestes ângulos de espalhamento têm forte probabi

lidade de grande penetração no alvo. Neste caso eles, numa visão clássica, "permanecem" mais tempo perto dos elétrons atômicos, devendo portanto ser mais importante uma descrição do efeito de troca não considerada em nosso modelo.

A comparação com os outros resultados teóricos para as energias de impacto de 150 e 217.7 eV apresenta basicamente as mesmas características das apresentadas para a energia de impacto de 100 eV. Novamente, conforme podemos observar nas Figuras 8.9 e 8.10, os resultados na aproximação de Glauber Y.F.C. apresentam um melhor acordo com os resultados experimentais na região de ângulos de espalhamento de 20° a 80° que os outros resultados teóricos.

Para a energia de impacto de 54.4 eV, da mesma forma que nos casos tratados anteriormente, a primeira aproximação de Born falha para ângulos de espalhamento maiores. É difícil neste caso tecer comentários da comparação dos resultados na aproximação de Glauber e ondas distorcidas para ângulos de espalhamento intermediários, uma vez que ambas as aproximações não dão conta de descrever corretamente o mínimo apresentado nos resultados experimentais em torno do ângulo de espalhamento de 50° . A aproximação de ondas distorcidas, entretanto, dá conta de descrever, de forma qualitativa, os resultados para ângulos de espalhamento superiores que 100° , o que não é possível com a aproximação de Glauber.

Os resultados para a seção de choque integral estão apresentados na Figura 8.2b, juntamente com os resultados experimentais e outros resultados teóricos. Nossos resultados estão em acordo com os resultados de Walters ⁽¹⁴⁾ e, por motivos já anteriormente mencionados, os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. estão praticamente idênticos.

Assim como para a excitação ressonante no átomo de lítio, os resultados apresentam um excelente acordo com os resultados experimentais.

8.6 - PROCESSO $e^- + K(4s) \rightarrow e^- + K(4p)$

Encontramos na literatura os orbitais do tipo Slater para o estado 4s de Clementi ⁽⁷⁹⁾ e de Satz ⁽⁸³⁾, ambos do tipo VZ. Para o estado 4p encontramos apenas o orbital VZ de Satz. Os resultados para a seção de choque diferencial obtidos ao utilizarmos os orbitais acima mencionados para o estado 4s apresentaram-se praticamente idênticos, logo, consistentes com relação a este teste. Utilizamos os orbitais de Satz ⁽⁸³⁾ para obter o conjunto de resultados apresentados nesta seção.

Nas Figuras 8.11, 8.12 e 8.13, apresentamos, para as energias de impacto de 60, 100 e 200 eV respectivamente, os resultados para a seção de choque diferencial nas aproximações Y.F.C. e I.F.C., os resultados experimentais ^(65,66) bem como resultados obtidos com outros métodos de aproximação ⁽⁹⁾. Os resultados experimentais para a energia de impacto de 200 eV cobrem apenas até ângulos de espalhamento de 16° , motivo pelo qual não colocamos a figura referente a grandes ângulos de espalhamento. Na Tabela 8.4 estão os resultados para a seção de choque diferencial nas energias de impacto acima mencionadas, obtidos com as aproximações I.F.C. e Y.F.C.

Podemos observar na Figura 8.11, referente à energia de impacto de 60 eV, que os resultados dos trabalhos experimentais de Buckman et al. ⁽⁶⁵⁾ (1979) e Williams et al. ⁽⁶⁶⁾ (1977) estão em

desacordo. Buckman et al. atribuem um maior grau de confiabilidade a seus resultados dado que, entre outros motivos, seu valor extrapolado para a seção de choque diferencial a zero graus, coincide com os valores obtidos nos trabalhos teóricos, ao contrário do valor apresentado no trabalho de Williams et al..

Os resultados nas aproximações I.F.C. e Y.F.C., apresentam diferenças significativas, o que é esperado pois o átomo de potássio possui 18 elétrons no caroço atômico. Para pequenos ângulos de espalhamento, conforme demonstram os resultados, o efeito dos elétrons do caroço atômico é pequeno. A diferença entre os resultados obtidos nas aproximações I.F.C. e Y.F.C. só é perceptível, nos gráficos logarítmicos, para ângulos de espalhamento acima de 30° e 20° para as energias de impacto de 60 e 100 eV respectivamente.

Os resultados para a seção de choque diferencial na aproximação de Glauber apresentam um excelente acordo com os resultados experimentais para pequenos ângulos de espalhamento. Para ângulos de espalhamento maiores aparece um mínimo local nos resultados experimentais por volta do ângulo de espalhamento de 70° na energia de impacto de 60 eV, e 60° na energia de impacto de 100eV. Este mínimo local claramente não é descrito pelos resultados na aproximação de Glauber, a exemplo do ocorrido para os resultados referentes ao processo de excitação do átomo de sódio ao estado 3p na energia de impacto de 54.4 eV.

Para a energia de impacto de 60 eV os resultados na aproximação I.F.C. subestimam demasiadamente a seção de choque diferencial para ângulos de espalhamento superiores a 30° . Os resultados na aproximação Y.F.C. estão em bom acordo com os resultados experimentais até ângulos de espalhamento de 60° , não dan-

do conta de descrever os resultados experimentais entre os ângulos de espalhamento de 60° e 80° por força do mínimo local apresentado nos resultados experimentais.

Para a energia de impacto de 100 eV, a comparação dos resultados obtidos com a aproximação I.F.C. e Y.F.C. com os resultados experimentais é dificultada pelo mínimo local apresentado nos resultados experimentais. Os resultados na aproximação I.F.C. apresentam um melhor acordo com os resultados experimentais que os resultados na aproximação Y.F.C. para ângulos de espalhamento intermediários, acordo este que consideramos fortuito. Isto porque os resultados experimentais apresentam uma queda acentuada a partir do ângulo de espalhamento de 40° por força do mínimo local apresentado, que conforme mencionamos a aproximação de Glauber não dá conta de descrever. Os resultados na aproximação de Glauber I.F.C. apresentam a mesma queda por outros motivos, isto é, pelo fato de não descrever interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico. Neste sentido, acreditamos que os resultados na aproximação Y.F.C., apesar de apresentarem um acordo mais pobre com os resultados experimentais que o obtido na aproximação I.F.C., estão mais coerentes com uma aplicação correta da aproximação de Glauber.

Estas considerações são reforçadas pelo conjunto de resultados obtidos para o átomo de sódio, onde este mínimo local só ocorreu de forma significativa para a energia de impacto 54.4 eV. Um outro fator que contribui nesta interpretação dos resultados consiste na análise feita para o processo de excitação abordado nesta seção para a energia de impacto de 60 eV. Nesta o mínimo local se encontra com uma largura menor, e portanto fica mais fácil de perceber sua influência nos resultados.

Conforme mencionado no Capítulo IV, este processo só foi estudado com o método de acoplamento-forte ^(6,55) para energias de impacto perto do limiar de excitação. Desta forma, não é possível comparar os resultados na aproximação de acoplamento-forte e Glauber, dado que esta última não é adequada ao estudo de processos nesta faixa de energias de impacto.

As Figuras 8.11 à 8.13 mostram que a primeira aproximação de Born gera resultados em razoável acordo com os resultados experimentais apenas para ângulos de espalhamento muito pequenos. É interessante observar que, neste caso, os resultados na primeira aproximação de Born apresentam um razoável acordo com os resultados experimentais para ângulos de espalhamento menores que para o processo de excitação do átomo de sódio aos estados 3^2P , desde que se compare resultados na mesma energia de impacto. Este comportamento deve-se provavelmente ao fato de que nesta aproximação não é descrita a interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico, que é mais importante para o átomo de potássio que para o de sódio, especialmente para energias de impacto maiores onde classicamente o elétron penetra mais no alvo.

Os resultados na aproximação de ondas distorcidas (UDWPO) ⁽⁹⁾ apresentam um bom acordo com os resultados experimentais para pequenos ângulos de espalhamento, estando bastante parecidos com os resultados na aproximação de Glauber. Para ângulos de espalhamento maiores só dispomos de resultados na aproximação de ondas distorcidas para a energia de impacto de 54.4 eV. Estes resultados dão conta de descrever qualitativamente os resultados experimentais nesta faixa angular, apresentando inclusive os mínimos que aparecem nos resultados experimentais. O acordo com termos quantitativos, entretanto, é pobre, estando os resultados na

aproximação de Glauber em melhor acordo até ângulos de espalhamento de 60° onde a presença do mínimo na seção de choque diferencial começa a ser importante.

Os resultados para a seção de choque integral estão apresentados na Figura 8.2c, juntamente com os resultados experimentais e resultados de outros métodos teóricos. Os motivos do excelente acordo entre os resultados na aproximação de Glauber e os experimentais já foram discutidos anteriormente, e, novamente, os resultados para a seção de choque integral nas aproximações Y.F.C. e I.F.C. estão praticamente idênticos. Os resultados de Walters⁽¹⁴⁾ só cobrem energias de impacto em torno de 50 eV, estando de acordo com os resultados determinados neste trabalho.

$\frac{d\sigma}{d\Omega} (a_0^2)$	10 eV		20 eV		60 eV		100 eV		200 eV	
	IFC	YFC	IFC	YFC	IFC	YFC	IFC	YFC	IFC	YFC
0	2390	2390	6299	6299	21724	21724	36948	36948	74893	74893
5°	1200	1200	1212	1211	484	484	265.3	265.2	98.71	98.67
10°	373	373	232	232	56.7	56.7	22.6	22.6	4.09	4.07
20°	38.8	38.0	16.1	16.1	1.76	1.74	0.41	0.40	0.043	0.045
30°	4.98	4.98	1.93	1.91	0.227	0.226	0.056	0.058	0.005	0.007
40°	1.22	1.21	0.64	0.63	0.069	0.071	0.014	0.016	0.0010	0.0018
60°	0.457	0.451	0.194	0.191	0.0097	0.012	0.0015	0.0026	0.00009	0.0004
80°	0.239	0.234	0.0673	0.0668	0.0022	0.0036	0.0003	0.0009	0.00002	0.0001

TABELA 8.1: Seção de choque diferencial para o processo de excitação do átomo de lítio aos estados 2^2P , nas aproximações Glauber IFC e Glauber YFC, em várias energias de impacto.

θ	$\frac{d\sigma}{d\Omega} (a_0^2)$	10 eV		20 eV		60 eV	
		IFC	YFC	IFC	YFC	IFC	YFC
0		16.64	16.56	58.0	57.7	87.9	86.5
5°		12.04	11.97	28.6	28.4	19.1	18.5
10°		5.05	5.01	7.32	7.26	3.58	3.35
20°		0.263	0.257	0.26	0.24	0.24	0.18
30°		0.115	0.121	0.15	0.13	0.13	0.12
40°		0.099	0.105	0.17	0.15	0.054	0.054
60°		0.073	0.079	0.080	0.068	0.0098	0.014
80°		0.059	0.064	0.037	0.033	0.0035	0.0064

TABELA 8.2: Seção de choque diferencial para o processo de excitação do átomo de lítio ao estado $3^2S_{1/2}$, nas aproximações Glauber IFC e Glauber YFC em várias energias de impacto.

θ	$\frac{d\sigma}{d\Omega} (a_0^2)$	54.4 eV		100 eV		150 eV		217.7 eV	
		IFC	YFC	IFC	YFC	IFC	YFC	IFC	YFC
0		19282	19281	36544	36543	55403	55402	80912	80911
5°		550.6	550.1	264.7	264.3	147.4	147.1	78.8	78.6
10°		60.0	57.7	17.8	17.6	6.25	6.14	1.91	1.86
20°		1.54	1.46	0.298	0.295	0.088	0.101	0.025	0.038
30°		0.264	0.266	0.045	0.061	0.010	0.022	0.0023	0.0090
40°		0.077	0.092	0.0092	0.021	0.0018	0.0085	0.00035	0.0038
60°		0.0088	0.019	0.0008	0.0055	0.00016	0.0024	—	0.0011
80°		0.0020	0.008	0.00017	0.0023	0.00004	0.001	—	0.0004

TABELA 8.3: Seção de choque diferencial para o processo de excitação do átomo de sódio aos estados 3^2P , nas aproximações Glauber IFC e Glauber YFC, em várias energias de impacto.

$\frac{d\sigma}{d\Omega} (a_0^2)$ θ	60 eV		100 eV		200 eV	
	IFC	YFC	IFC	YFC	IFC	YFC
0	54843	54840	105031	105028	—	—
5°	707.5	704.5	322.8	320.5	99.9	98.5
10°	58.5	56.8	16.3	15.5	2.14	1.99
20°	2.48	2.22	0.44	0.48	0.033	0.091
30°	0.38	0.42	0.038	0.119	0.003	0.030
40°	0.063	0.137	0.005	0.052	0.0003	0.016
60°	0.004	0.036	0.00034	0.017	0.00002	0.0046
80°	0.0007	0.025	0.00009	0.007	0.000007	0.0023

TABELA 8.4: Seção de choque diferencial para o processo de excitação do átomo de potássio aos estados 4^2P , na aproximação Glauber IFC e Glauber YFC, em várias energias de impacto.

$\frac{d\sigma}{d\Omega} (a_0^2)$	PRESENTE TRABALHO				Castro (32)	
	IFC	YFC { A=16.3 λ=5.13 }	YFC { A=4.23 λ=2.59 }	YFC	IFC	FC
θ						
0	39800	39800	39800	39800	39800	39800
6°	109.1	109.0	109.0	109.0	109	108
10°	1.512	1.508	1.511	1.511	1.52	1.49
20°	0.227	0.224	0.226	0.226	0.221	0.203
30°	0.0325	0.0349	0.0337	0.0337	0.0316	0.0311
40°	0.00714	0.00908	0.00797	0.00797	0.00735	0.00780

TABELA 8.5: Seção de choque diferencial para o processo de excitação do átomo de Li a os estados 2^2P na energia de impacto de 122.4 eV. Nas três primeiras colunas estão os resultados deste trabalho nas aproximações IFC e YFC, e nas duas últimas os resultados de Castro nas aproximações IFC e FC.

θ	$\frac{d\sigma}{d\Omega}(a_0^2)$	IFC	YFC Fiting 0.5 → 5.0 A = 68.9 $\lambda = 2.89$	YFC Fiting 2.5 → 7.5 A = 28.7 $\lambda = 2.64$
0		54844	54840	54841
5°		707.5	704.5	705.4
10°		58.5	56.8	57.4
20°		2.48	2.22	2.35
30°		0.38	0.42	0.43
40°		0.063	0.137	0.118
60°		0.004	0.053	0.037
80°		0.0007	0.025	0.018

TABELA 8.6: Comportamento dos resultados como função dos parâmetros do potencial de Yukawa, para o processo de excitação ressonante do átomo de potássio, na energia de impacto de 60 eV.

$\frac{d\sigma}{d\Omega}(a_0^2)$	SZ (Vaslov ⁽⁸⁰⁾)	SZ (Clementi ⁽⁷⁹⁾)	DZ (Clementi ⁽⁷⁹⁾)	VZ (Clementi ⁽⁷⁹⁾)	VZ (Weiss ⁽⁸²⁾)
θ					
0	39768	454120	48191	43180	43142
6°	109	115	114	112	112
14°	2.23	2.12	1.97	2.18	2.18
26°	0.0623	0.0579	0.0526	0.0588	0.0586
38°	0.00961	0.00875	0.0109	0.00896	0.00905
50°	0.00197	0.00181	—	0.00191	0.00191

TABELA 8.7: Comportamento dos resultados para a seção de choque diferencial com relação à função de onda para o estado 2s, no processo de excitação do átomo de lítio aos estados 2²P, na energia de impacto de 122.4 eV.

diferença percentual entre IFC e YFC θ	10 eV		20 eV		60 eV	
	2s → 2p	2s → 3s	2s → 2p	2s → 3s	2s → 2p	2s → 3s
0	0.0002	0.5	0.001	0.5	0.0005	1.5
10°	0.0003	0.5	0.01	0.9	0.1	6.4
30°	0.07	4.5	0.7	16	0.7	11.5
50°	0.9	4.2	2	14.4	9	14.3
70°	2	9	1.5	12.3	37	73

TABELA 8.8: Diferença percentual entre os resultados para a seção de choque diferencial nas aproximações IFC e YFC, para os processos de excitação do átomo de lítio aos estados 2^2P e $3^2S_{1/2}$, em várias energias de impacto.

$\sigma_I^2 (\pi a_0^2)$ energia de impacto (eV)	Glauber	Born (4)	exp (38)
10	0.60	2.10 (12 eV)	2.16
20	0.99	1.33	1.25
60	0.62	0.41 (72 eV)	0.95

TABELA 8.9: Seção de choque integral para o processo de excitação do átomo de lítio ao estado $3^2S_{1/2}$.

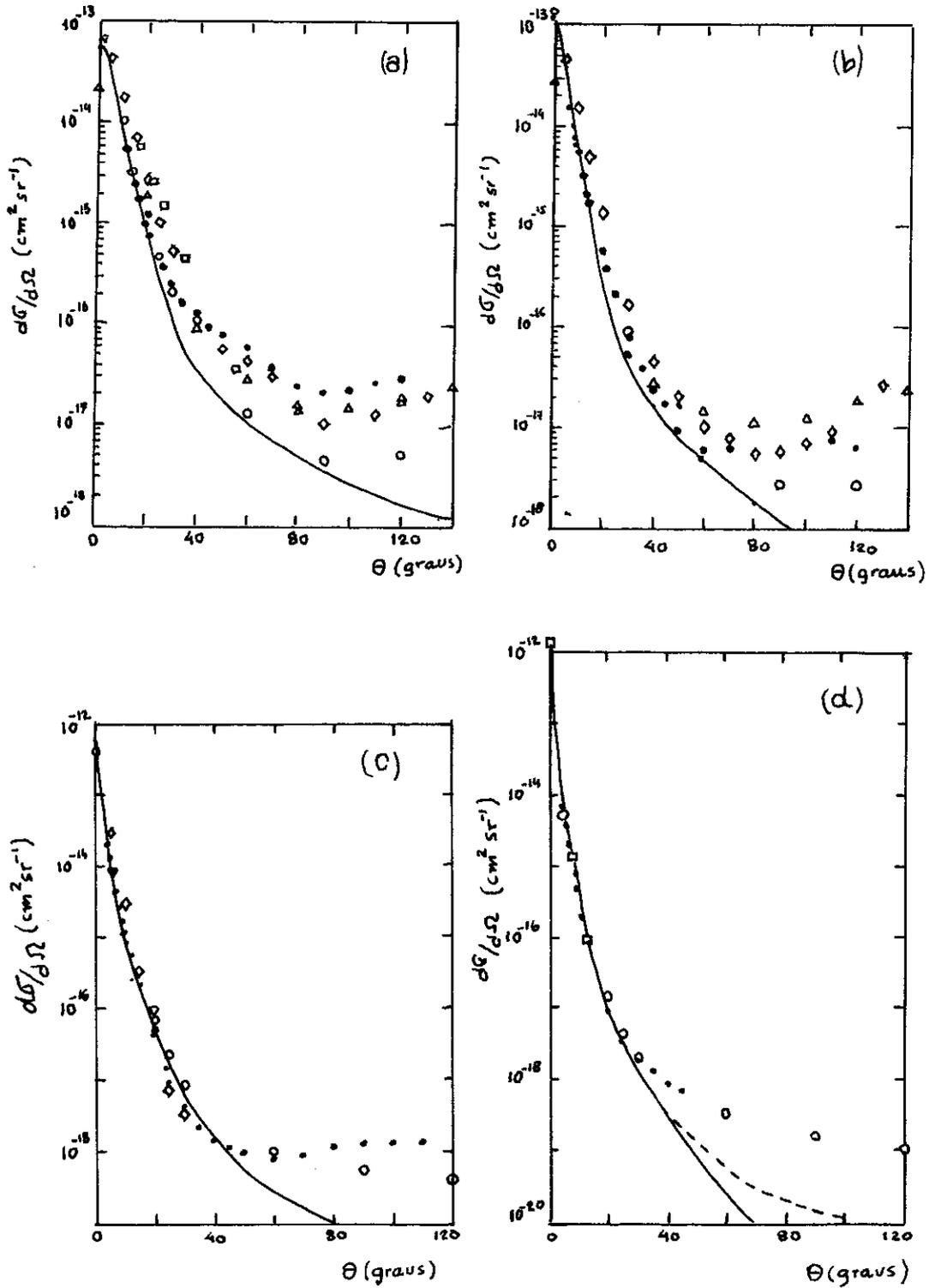


FIGURA 8.1 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio aos estados 2^2P , nas energias de impacto de: (a) 10 eV , (b) 20 eV, (c) 60 eV, (d) 100 eV. Linha cheia, presente trabalho ; \circ , método UDWPOII (9) ; Δ , método de acoplamento-forte (11) ; \square , aproximação de Born (37) ; \bullet , resultados experimentais (37) ; \diamond , resultados experimentais (38) .

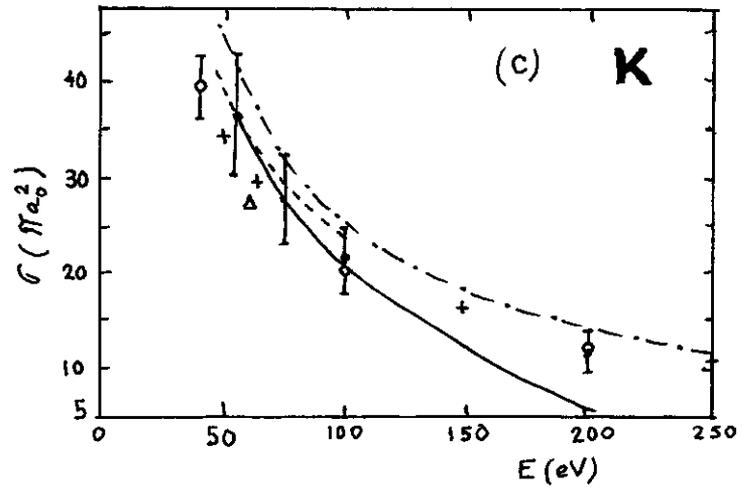
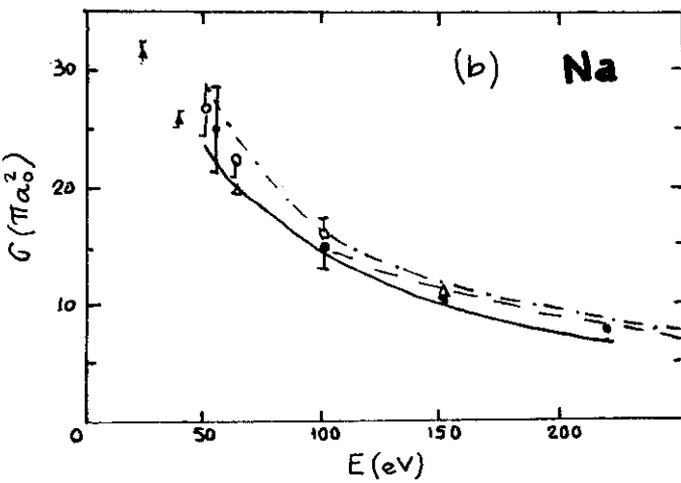
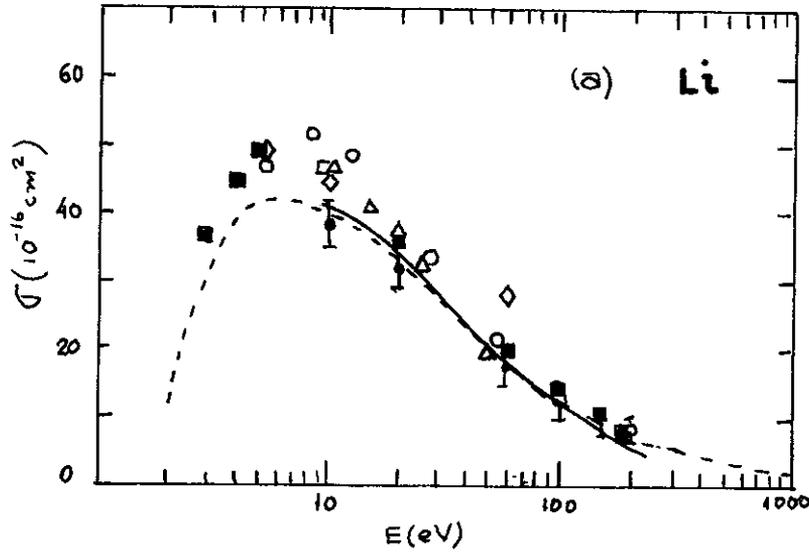


FIGURA 8.2 - Seção de choque integral para a excitação ressonante.

- (a) - átomo de lítio: Linha cheia, presente trabalho; \circ , UDWPOII (9); Δ , acoplamento-forte (11); \bullet , exp. (37); \diamond , exp. (38); ----, exp. (39); \blacksquare , exp. (40).
- (b) - átomo de sódio: Linha cheia, presente trabalho; ---, UDWPOII (9); -.-, Born (53); \bullet , exp. (53); \circ , exp. (40); Δ , exp. (54).
- (c) - átomo de potássio: Linha cheia, presente trabalho; ---, UDWPOII (9); -.-, Born (65); \bullet , exp. (65); Δ , exp. (66); +, exp. (68); \circ , exp. (40).

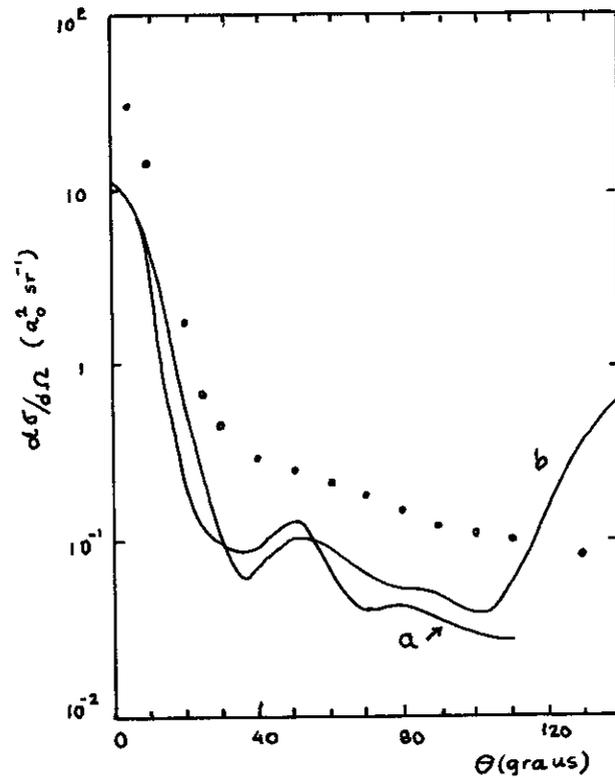


FIGURA 8.3 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio ao estado $3^2S_{1/2}$, na energia de impacto de 10 eV. Linha cheia a, presente trabalho; linha cheia b, método UDWPOII (50); •••, resultados experimentais (38).

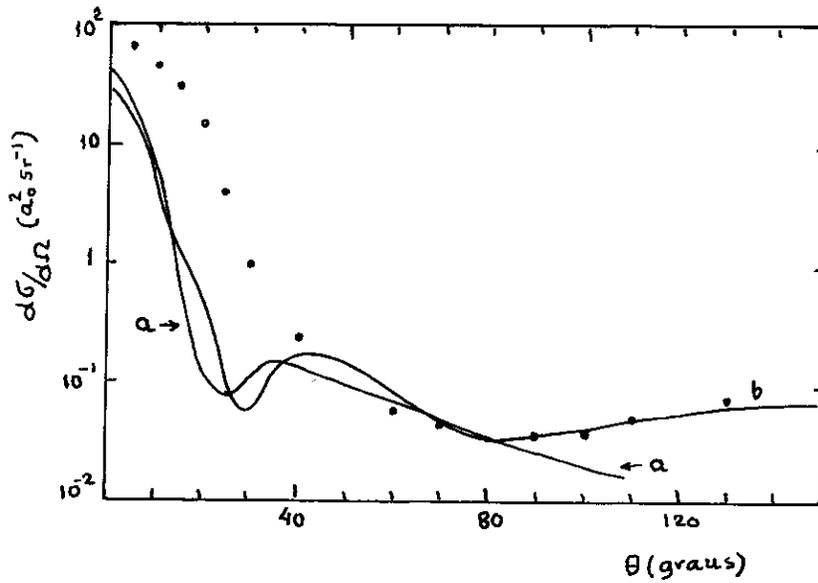


FIGURA 8.4 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio ao estado $3^2S_{1/2}$, na energia de impacto de 20 eV. Linha cheia a, presente trabalho; linha cheia b, método UDWPOII (50); ●, resultados experimentais (38).

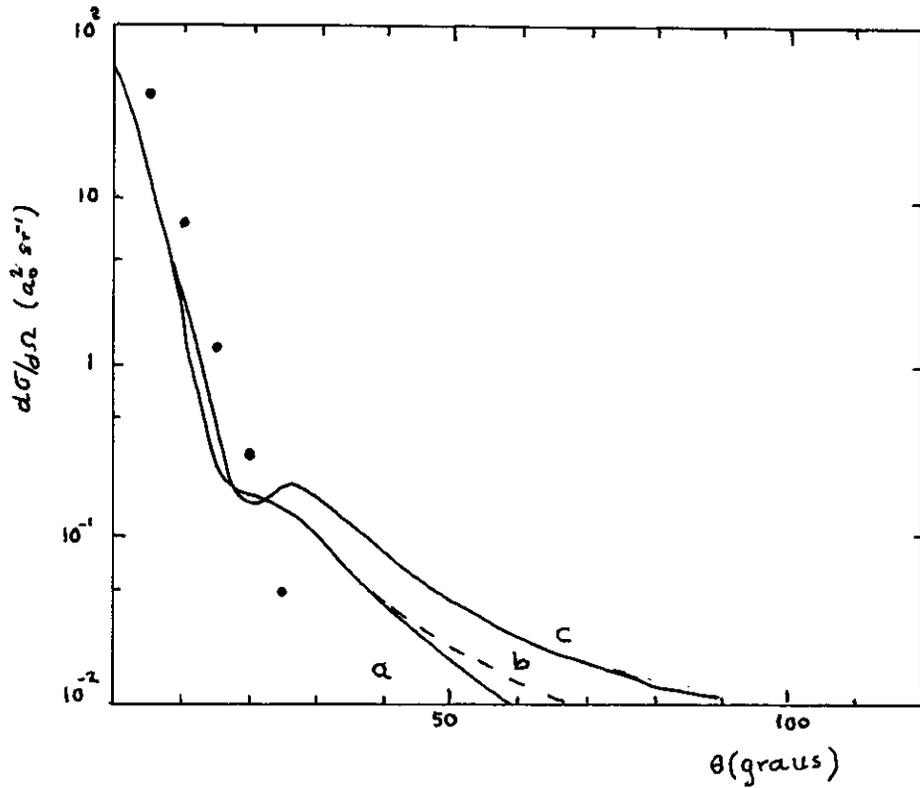


FIGURA 8.5 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio ao estado $3^2S_{1/2}$, na energia de impacto de 60 eV. Linha cheia a, presente trabalho na aproximação IFC; linha tracejada b, presente trabalho na aproximação YFC; linha cheia c, método UDWPOII ⁽⁵⁰⁾; • , resultados experimentais ⁽³⁸⁾.

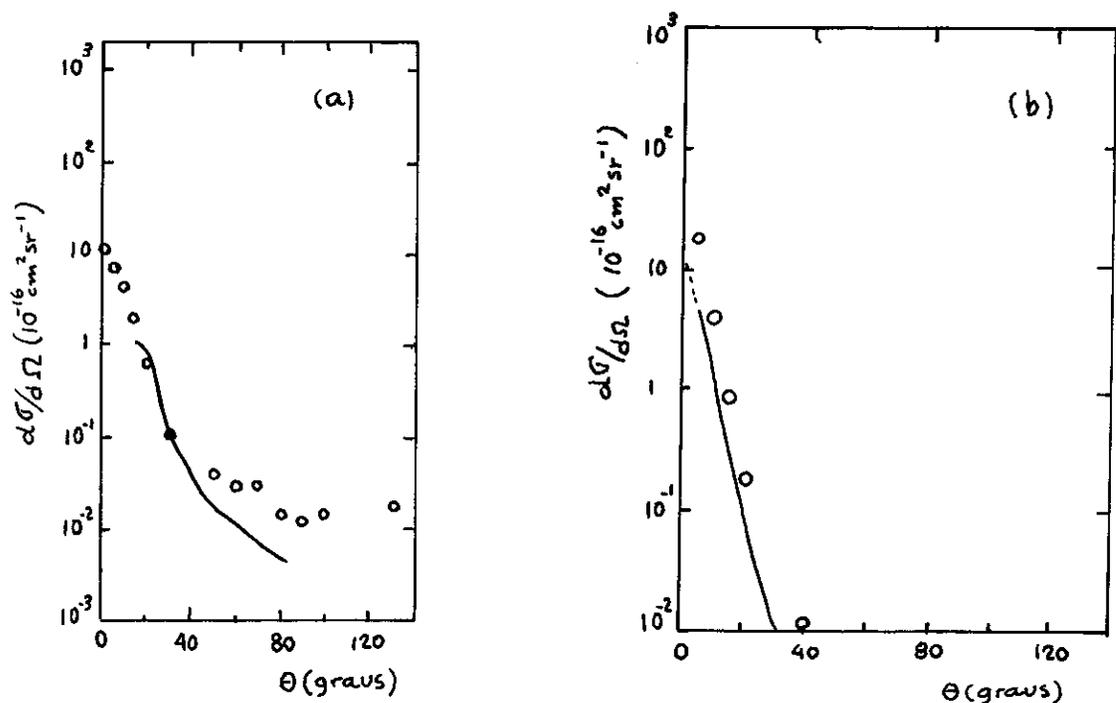


FIGURA 8.6 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de lítio aos estados 3^2P , nas energias de impacto de: (a) 20 eV, (b) 60 eV. Linha cheia, presente trabalho; \circ , resultados experimentais ⁽³⁸⁾.

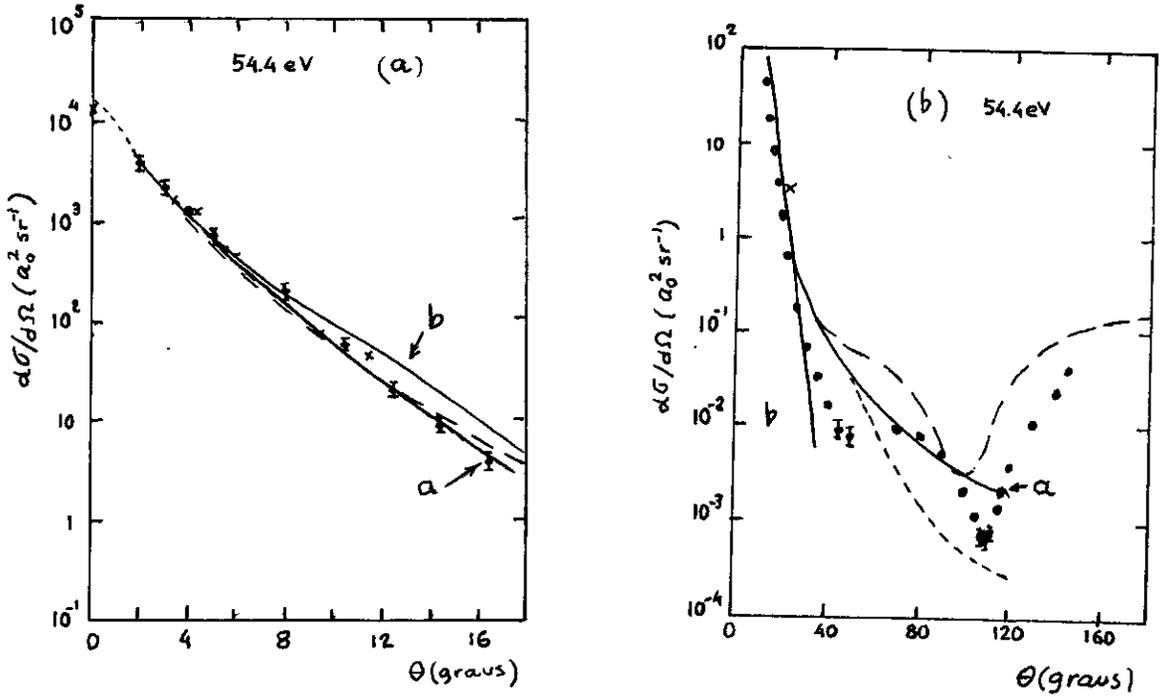


FIGURA 8.7 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de sódio aos estados 3^2P , na energia de impacto de 54.4 eV, (a) - pequenos ângulos de espalhamento, (b) - grandes ângulos de espalhamento. Linha cheia a, presente trabalho na aproximação YFC; ----, presente trabalho na aproximação IFC; - - - - , UDWPOII ⁽⁹⁾; linha cheia b, aproximação de Born ⁽⁵³⁾; ●, resultados experimentais ⁽⁵³⁾; ×, resultados experimentais ⁽⁵²⁾.

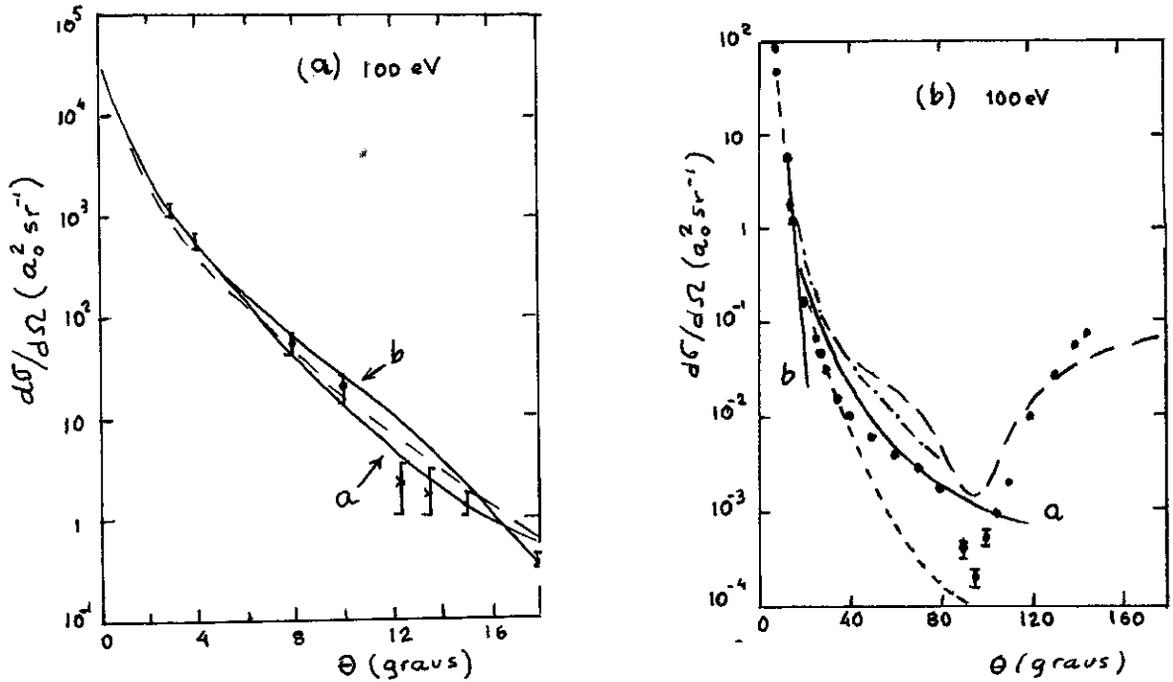


FIGURA 8.8 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de sódio aos estados 3^2P , na energia de impacto de 100 eV; (a) - pequenos ângulos de espalhamento, (b) - grandes ângulos de espalhamento. Linha cheia a, presente trabalho na aproximação YFC; ----, presente trabalho na aproximação IFC; - - - - , UDWPOII ⁽⁹⁾; - . - , acoplamento-forte ⁽¹¹⁾; linha cheia b, aproximação de Born ⁽⁵³⁾; •, resultados experimentais ⁽⁵³⁾; x, resultados experimentais ⁽⁵²⁾.

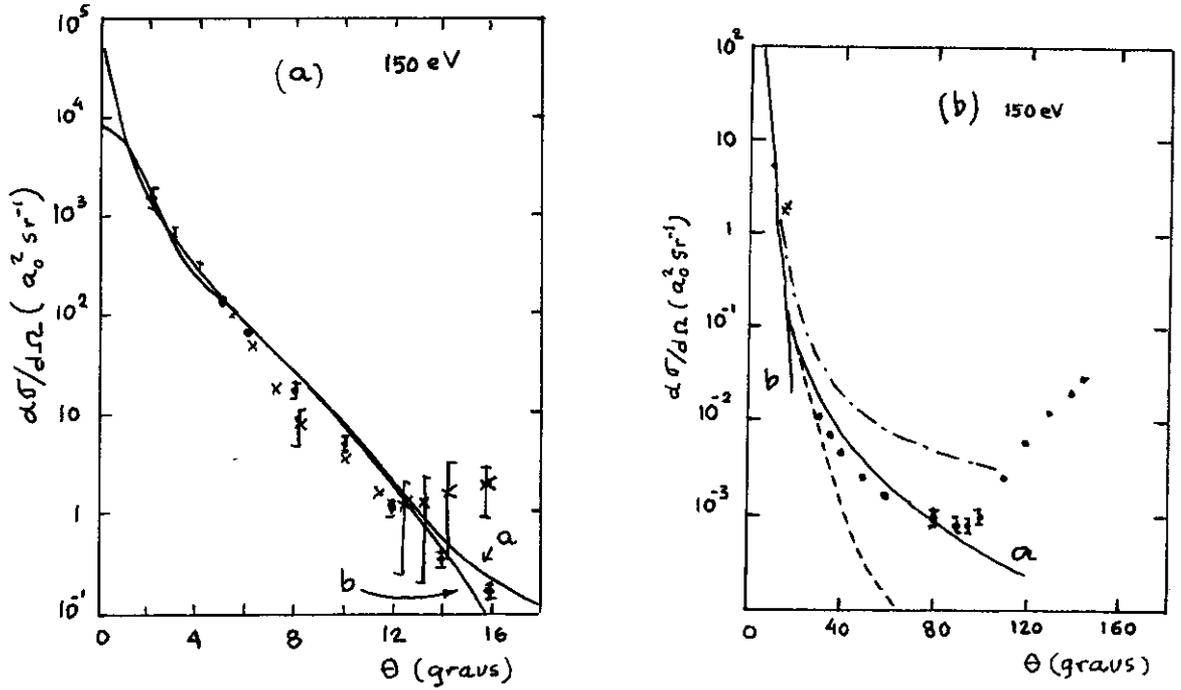


FIGURA 8.9 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de sódio aos estados 3^2P , na energia de impacto de 150 eV; (a) - pequenos ângulos de espalhamento, (b) - grandes ângulos de espalhamento. Linha cheia a, presente trabalho na aproximação YFC; ---, presente trabalho na aproximação IFC; -.-.-, acoplamento-forte ⁽¹¹⁾; linha cheia b, aproximação de Born ⁽⁵³⁾; ●, resultados experimentais ⁽⁵³⁾; ×, resultados experimentais ⁽⁵²⁾.

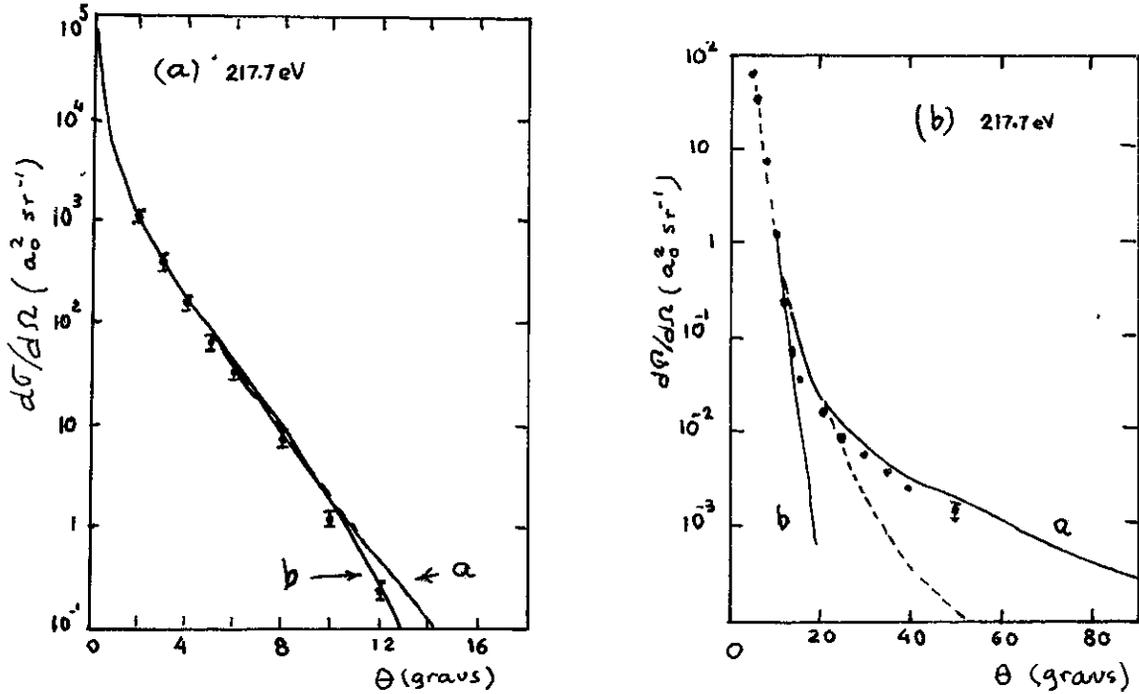


FIGURA 8.10 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de sódio aos estados 3^2P , na energia de impacto de 217.7 eV, (a) - pequenos ângulos de espalhamento, (b) - grandes ângulos de espalhamento. Linha cheia a, presente trabalho na aproximação YFC; ----, presente trabalho na aproximação IFC; linha cheia b, aproximação de Born ⁽⁵³⁾; ●, resultados experimentais ⁽⁵³⁾.

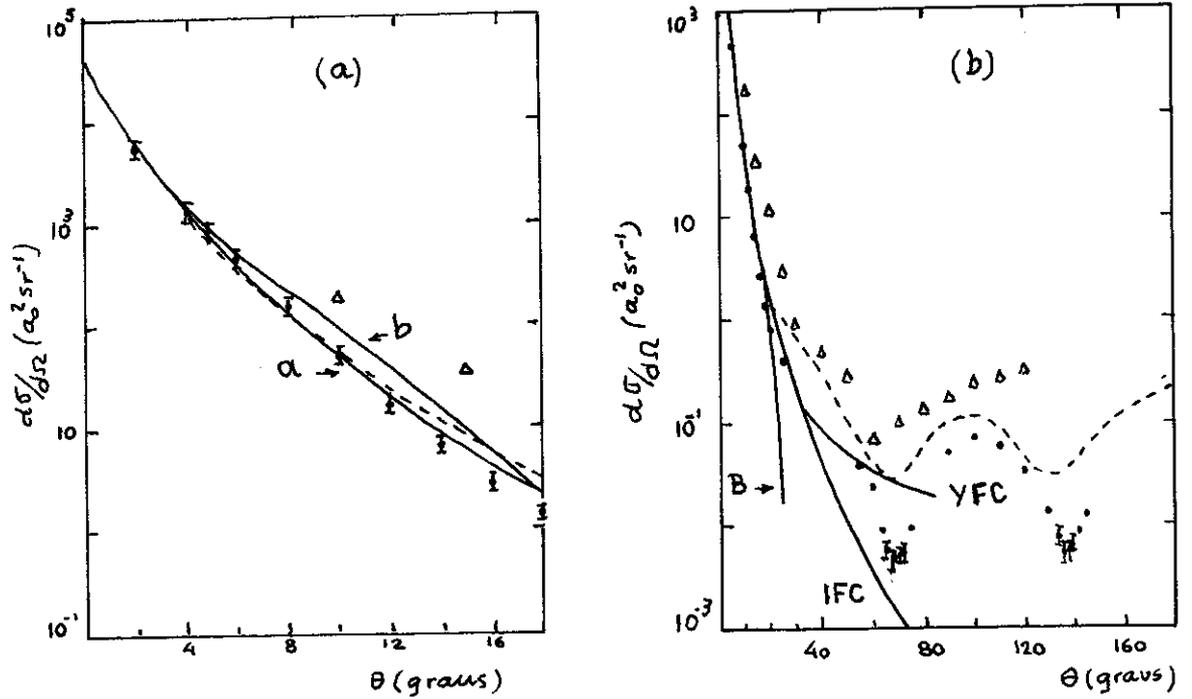


FIGURA 8.11 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de potássio aos estados 4^2P , na energia de impacto de 60 eV, (a) - pequenos ângulos de espalhamento, (b) - grandes ângulos de espalhamento. Linhas cheias a, presente trabalho nas aproximações IFC e YFC; linha cheia b, aproximação de Born⁽⁶⁵⁾ (54.4 eV); ---, UDWPOLI⁽⁹⁾ (54.4 eV); ●, resultados experimentais⁽⁶⁵⁾ (54.4 eV); Δ, resultados experimentais⁽⁶⁶⁾.

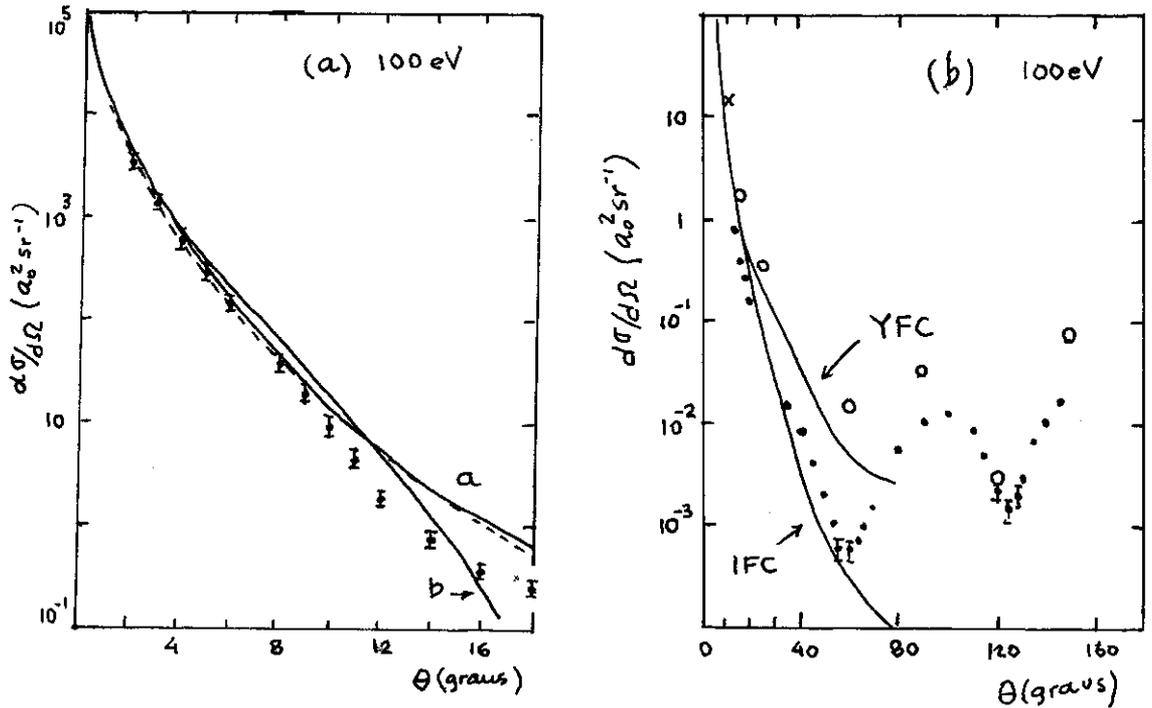


FIGURA 8.12 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de potássio aos estados 4^2P , na energia de impacto de 100 eV, (a) - pequenos ângulos de espalhamento, (b) - grandes ângulos de espalhamento. Linhas cheias a, presente trabalho nas aproximações YFC e IFC; --- e o, UDWPOII ⁽⁹⁾; linha cheia b, aproximação de Born ⁽⁶⁵⁾; ●, resultados experimentais ⁽⁶⁵⁾.

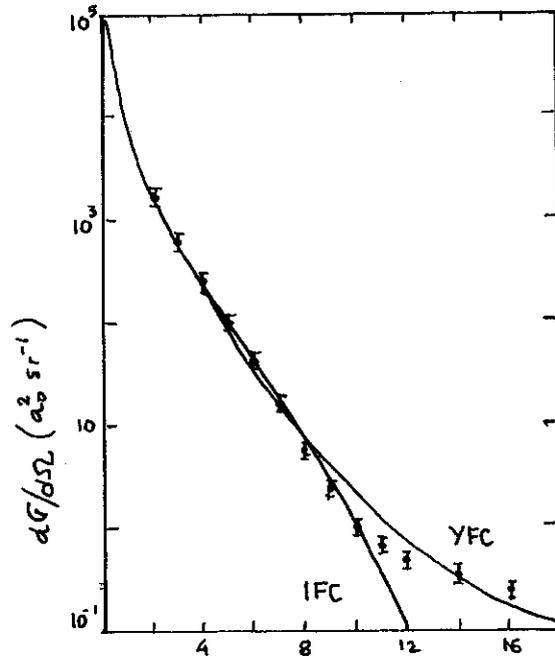


FIGURA 8.13 - Seção de choque diferencial para a excitação do átomo de potássio aos estados 4^2P , na energia de impacto de 200 eV. Linhas cheias, presente trabalho nas aproximações IFC e YFC; ●, resultados experimentais (65).

CAPÍTULO IX

CONCLUSÕES

A descrição da interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e $(N-1)$ cargas nucleares, através do potencial de Yukawa, gerou resultados fisicamente consistentes. Verificamos que a parcela dos resultados para a seção de choque diferencial, relacionada com este efeito, apresentou as tendências esperadas ao variarmos a energia de impacto, o número de elétrons no caroço atômico, os parâmetros que surgem neste potencial, bem como o processo abordado.

Uma vez que o átomo de lítio possui apenas dois elétrons no caroço atômico, a interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico representa uma pequena parcela dos resultados para a seção de choque diferencial. Para a transição ressonante esta parcela é desprezível, pois este processo é basicamente determinado pelo forte acoplamento entre os estados inicial e final do elétron de valência. Para a excitação ao estado $3^2S_{1/2}$ os elétrons do caroço atômico apresentam uma contribuição um pouco maior nos resultados, por se tratar de um processo óticamente proibido.

Para os átomos de sódio e potássio a descrição da interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico é importante, pois estes possuem, respectivamente, 10 e 18 elétrons no

caroço atômico. Isto se verifica especialmente para ângulos de espalhamento maiores que 20° , onde, classicamente, o elétron incidente penetra bastante no alvo. Os resultados para os processos ressonantes na aproximação de Glauber I.F.C., em que se despreza a interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico, só apresentam um bom acordo com os resultados experimentais para pequenos ângulos de espalhamento (até cerca de 20°). Com a introdução do potencial de Yukawa, os resultados, de uma maneira geral, passam a concordar com os resultados experimentais até ângulos de espalhamento de 80° , aumentando enormemente a região angular descrita de forma satisfatória pela aproximação de Glauber.

Estes resultados indicam claramente que a falha da aproximação de Glauber I.F.C. em ângulos intermediários se deve, nestes casos, principalmente por não considerar a interação entre o elétron incidente e os elétrons do caroço atômico. Carece portanto de fundamento a interpretação dada por alguns autores que este fato decorria principalmente por se considerar uma trajetória retilínea para o elétron incidente no formalismo básico da aproximação de Glauber. Convém salientar que estes resultados apenas estendem a átomos alcalinos as considerações feitas para certos processos de excitação do átomo de hidrogênio, onde os resultados na aproximação de Glauber apresentam um bom acordo com os resultados experimentais para ângulos de espalhamento intermediários.

Os resultados experimentais para a seção de choque diferencial do processo de excitação ressonante do átomo de sódio apresentam um mínimo local na energia de impacto de 60 eV. Para o átomo de potássio os resultados experimentais apresentam também um mínimo local em energias de impacto maiores. Os resultados na aproximação de Glauber não dão conta de descrever este efeito, colocan

do uma limitação na aplicação da aproximação de Glauber ao estudo destes processos.

Os resultados para o processo de excitação do átomo de lítio ao estado $3^2S_{1/2}$ apresentam um bom acordo com os resultados experimentais para ângulos de espalhamento intermediários. Para pequenos ângulos de espalhamento, da mesma forma que os resultados na aproximação de ondas distorcidas (UDWPO), os resultados na aproximação de Glauber estão abaixo dos resultados experimentais de Williams et al.. Concluimos, após analisar diversos aspectos, que seria interessante um maior esforço experimental com relação a este processo.

Para o processo de excitação aos estados 3^2P do átomo de lítio, os resultados com a aproximação de Glauber apresentaram problemas na região de pequenos ângulos de espalhamento, que acreditamos serem decorrentes da função de onda utilizada para descrever o estado $3p$. Na faixa angular onde os resultados obtidos estão confiáveis, entre 20° e 50° , apresentam um razoável acordo com os resultados experimentais.

Trata-se, ao que nos conste, da primeira vez que a aproximação de Glauber é aplicada ao estudo de processos não ressonantes em átomos mais pesados que o hélio. O bom desempenho dos resultados indica que, também para os átomos alcalinos, a aproximação de Glauber é adequada ao estudo deste tipo de processo.

Para o conjunto de processos abordados, os resultados na aproximação de Glauber apresentam um acordo bastante superior com os resultados experimentais que os obtidos na primeira aproximação de Born. Para ângulos de espalhamento até 80° os resultados na aproximação de Glauber com o potencial de Yukawa apresentam, de uma maneira geral, um acordo com os resultados experimen-

tais igual ou superior ao obtido com as aproximações de acoplamento-forte e ondas distorcidas (UDWPO). Considerando que o esforço numérico ao utilizar a aproximação de Glauber é bastante inferior ao requerido para as aproximações de acoplamento-forte e ondas distorcidas, concluímos que a aproximação de Glauber é competitiva com relação aos métodos atualmente utilizados no estudo de excitações a estados discretos em átomos alcalinos.

Neste sentido, acreditamos que vale a pena investir numa aplicação ainda mais ampla da aproximação de Glauber em colisão atômica. Por exemplo, seria interessante abordar outros processos de excitação a estados discretos em átomos alcalinos, estudar processos envolvendo íons, bem como processos envolvendo átomos alcalinos terrosos. Para alvos de alcalinos terrosos pode-se utilizar um potencial do tipo Yukawa para descrever a interação do elétron incidente com os elétrons do caroço atômico e $(N-2)$ cargas nucleares, o que, pelos resultados apresentados neste trabalho, deve descrever de forma satisfatória esta interação.

BIBLIOGRAFIA

- (1) - Trajmar, S.; Register, D.F.; Chutjian, A. - Phys. Rep. 97, n^o 5(1983)219.
- (2) - Geltman, S. - "Topics in Atomic Collisions Theory", Academic Press (1969).
- (3) - Moiseiwitsch, B.L.; Smith, S.J. - Rev. Mod. Phys. 40, n^o 2 (1968).
- (4) - Greene, T.J., Williamson, Jr., At. Data Nucl. Data Tables 14(1974),161.
- (5) - Bransden, B.H.; McDowell M.R.C. - Phys. Rep. 30, n^o 3(1977) 207, Phys. Rep. 46, n^o 7(1978)249.
- (6) - Moores, D.L. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 9, n^o 8(1976) 1329.
- (7) - Hertel, I.V.; Rost, K.A. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 4 (1971)690.
- (8) - Vanderpoorten, R.; Winters, K.H. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 12, n^o 3(1979)473.
- (9) - Kennedy, J.V.; Myerscough, V.P.; McDowell, M.R.C. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 10, n^o 18(1977)3759.
- (10) - Roy, D.N. - Phys. Lett. 64A, n^o 4 (1978)373.
- (11) - Issa, M.R. - Thesis University of Durham (1977).
- (12) - Franco, V. - Phys. Rev. Lett. 20, (1968)709.
- (13) - Franco, V. - Phys. Rev. A1 (1970)1705.
- (14) - Walters, H.R.J. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 6(1973)1003.

- (15) - Sousa, G.G.; Sousa, A.C. - submetido ao J.Phys. E.
- (16) - Joachain, C.J. - in "Quantum Collision Theory", North Holland Pub. Comp. (1975).
- (17) - Mott, N.F.; Massey, H.S.W. - "The Theory of Atomic Collisions", Oxford at the Clarendon Press (1971).
- (18) - Massey, H.S.W.; Mohr, C.B.O. - Proc. Roy. Soc. (London) A136 (1932)289.
- (19) - Inokuti, M. - Rev. Mod. Phys. 43, nº 3 (1971)257.
- (20) - Ochkur, V.I. - Soviet Phys. JETP, 18(1964)503.
- (21) - Bonham, R.A. - J. Chem. Phys. 36(1962)3260.
- (22) - Rudge, M.R.H. - Proc. Phys. Soc. 85(1965)607; Proc. Phys. Soc. 86(1965)763.
- (23) - Bely, O. - Nuovo Cim. B49(1967)66.
- (24) - Byron Jr., F.J.; Joachain, C.J. - Phys. Rep. 34(1977)233.
- (25) - Glauber, R.J. - in "Lectures in Theoretical Physics", ed. Brittin, W.E. et al. (Interscience, N.Y.) Vol. 1 (1959).
- (26) - Thomas, K.B.; Gerjuoy, E. - Rep. Prog. Phys. 37(1974)1345.
- (27) - Chan, F.T.; Lieber, M.; Foster, G.; Williamson Jr., W. - Advances in Electronics and Electron Physics 49(1979)133.
- (28) - Glauber, R.J. - Phys. Rev. 91(1953)459.
- (29) - Byron, Jr., F.W. - Phys. Rev. A4(1971)1907.
- (30) - Gau, J.N.; Macek, J. - Phys. Rev. A10(1974)552.
- (31) - Chen, J.C.Y.; Hambro, L. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 5(1972)199.
- (32) - Castro, J.A. - Tese de Mestrado, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (1977).

- (33) - Barros, H.G.P.L.; Brandi, H.S. - Revista Brasileira de Física, 10, nº 4 (1980)765.
- (34) - Hertel, I.V.; Ross, K.J. - J.Phys. B2 (1969)484.
- (35) - Lassetre, E.M.; Skerbelle, A.; Dillon, M.A. - J.Chem.Phys. 50, nº 4 (1969)1829.
- (36) - Walters, H.R.J. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 9, (1976) 227.
- (37) - Vuskovic, L.; Trajmar, S.; Register, D.F. - J. Phys. B : Atom. Mol. Phys. 15 (1982)2517.
- (38) - Williams, W.; Trajamar, S.; Bozinis, D. - J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 9 (1976)1529.
- (39) - Leep, D.; Gallagher, A. - Phys. Rev. A10, nº 8 (1974)1082.
- (40) - Zapesochnyi, I.P.; Postoi, I.V.; Aleksakhin, I.S. - Sov. Phys. JEPT, 41(1975)865.
- (41) - Roy, D.N.; Indian J. Phys. 52B (1978)149.
- (42) - Tripathi, A.N. - Phys. Rev. A23, nº 4 (1981)1801.
- (43) - Ganas, P.S. - Can. J. Phys. 61 (1983) 1.
- (44) - Mathur, K.C.; Tripathi, A.N.; Joshi, S.K. - Phys. Rev. A5, nº 2(1972)746.
- (45) - Kumar, S.; Srivastava, M.K. - Phys. Rev. A13, nº 4(1976)1307.
- (46) - Burke, P.G.; Taylor, A.J. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 2, ser. 2 (1969)869.
- (47) - McCavert, P.; Rudge, M.R.H. - J. Phys. B: Atom.Molec.Phys. 5(1972)508.
- (48) - Desai, H.S.; Rao, N.S. - Indian J. Phys. 57B(1983)37.
- (49) - Zajonc, A.; Gallagher, A. - Phys. Rev. A20, nº 4(1979)1393.

- (50) - Winters, K.H.; Vanderpoorten, R. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 15(1982)3945.
- (51) - Sharma, R.K.; Gupta, G.P.; Mathur, K.C. - Phys. Rev. A26, n^o 2(1982)1122.
- (52) - Shuttleworth, T.; Newell, W.R.; Smith, A.C.H. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 10, n^o 9(1977)1641.
- (53) - Buckman, S.J.; Teubner, P.J.O. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 12, n^o 10 (1979)1741.
- (54) - Enemark, E.A.; Gallagher, A. - Phys. Rev. A6, n^o 1 (1972)192.
- (55) - Stumpf, B.; Becker, K.; Schulz, G. - J. Phys. B: Atom.Molec. Phys. 11(1978) L639.
- (56) - Phelps, O.J.; Lin, C.C. - Phys. Rev. A24, n^o 3 (1981)1299.
- (57) - Korff, D.F.; Chung, S; Lin, C.C. - Phys. Rev. A7,n^o 2 (1973) 545.
- (58) - Barnes, L.L.; Lane, N.F.; Lin, C.C. - Phys. Rev.137(1965)388.
- (59) - Karule, E.M.; Peterkop, R.K. - in "Atomic Collisions", editado por V. Ya Veldre (Latvian Academy of Sciences, Institute of Physics, Riga, USSR, vol. 3 (1965).
- (60) - Carse, G.D. - J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. 5 (1972)1928.
- (61) - Srivastava, S.K.; Vuskovic, L. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 13 (1980) 1741.
- (62) - Zapesochnyi, I.P.; Shimon, L.L. - Opt. Spectros. (USSR) 19 (1965)268.
- (63) - Roy, D.N. - Indian J. Phys. 51A (1977) 1.
- (64) - Phelps, J.O., Solomon, J.E.; Korff, D.F.; Lin C.C. ; Lee , E.T.P. - Phys. Rev. A20, n^o 4 (1979)1418.
- (65) - Buckman, S.J.; Noble, C.J.; Teubner, P.J.O. - J.Phys. B : Atom. Molec. Phys. 12(1979)3077.

- (66) - Williams, W.; Trajmar, S. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 10, n^o 10 (1977)1955.
- (67) - Slevin, J.A.; Visconti, P.J.; Rubin, K. - Phys. Rev. A5 , n^o 5 (1972)2065.
- (68) - Chen, S.T.; Gallagher, A.C. - Phys.Rev. A17, n^o 2(1978)551.
- (69) - Ganas, P.S. - Physica 119C (1983)337.
- (70) - Hertel, I.V.; Ross, K.J. - J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 2, ser. 2 (1969)285.
- (71) - Fock, V. - Z. Physic 61(1930)126.
- (72) - Slater, J.C. - Phys. Rev. 35 (1930)210.
- (73) - Seaton, J.J. - Agregates of Particles, in "Quantum Theory", ed. D.R. Bates, Pure and Applied Physics, Academic Press , New York (1962).
- (74) - Condon, E.U.; Shortley, G.H. - "The Theory of Atomic Spectra", Cambridge (1970).
- (75) - Pilar, F.L. - "Elementary Quantum Chemistry", McGraw-Hill, New York (1968).
- (76) - Slater, J.C. - Phys. Rev. 36(1930)57.
- (77) - Roothaan, C.C.J. - Rev. Mod. Phys. 23(1951)69.
- (78) - Clementi, E. - "Tables of Atomic Functions", Supplement to IBM Journal 9 (1965)2.
- (79) - Clementi, E.; Roetti, C. - Atomic Data and Nuclear Data Tables 14(1974)177.
- (80) - Vaselov, M.G.; Antonova, I.M., Brattsev, V.F.; Kirillova , I.V - Opt. Spectr. 10, n^o 6 (1961)367.
- (81) - Stone, P.M. - Phys. Rev. 141 (1966) 137.
- (82) - Weiss, A.W. - Astrophys. J. 138 (1963)1262.

- (83) - Szasz, L.; McGinn, G. - J. Chem. Phys. 47, n^o 9 (1967)3495.
- (84) - Franco, V. - Phys. Rev. Lett. 26(1971)1088.
- (85) - Thomas, B.K.; Chan, F.T. - Phys. Rev. A8(1973)252.
- (86) - Hartree, D.R. - "The Calculations of Atomic Structure",pg. 77-78, Cap. 5, John Wiley and Sons, Inc. (1957).
- (87) - Herman, F.; Skillman, S. - "Atomic Structure Calculations", Prentice-Hall, Englewood Cliffs (1963).
- (88) - Thomas, B.K.; Gerjuoy, E. - J. Mathem. Phys. 12, n^o8(1971) 1567.
- (89) - Magnus, N.; Oberhettinger, F.; Soni, R.P. - in "Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics" - Springer-Verlag, New York Inc.,1966.
- (90) - Tai, H.; Bassel, R.H.; Guerjuoy, E.; Franco, V. -Phys.Rev. A1 (1970)1819.
- (91) - Gosh, A.S.; Sil, N.C. - Indian J.Phys. 44(1970)153.

“ESTUDO DE COLISÕES INELÁSTICA E ÁTOMOS ALCALINOS COM APROXIMAÇÃO DE GLAUBER ”

CARLOS EDUARDO BIELSCHOWSKY

Tese de mestrado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes Professores:

Henrique Gomes de Paiva Lins de Barros/CBPF

Luiz Carlos Gomide de Freitas/UFSCarlos

Luiz Davidotch/PUC-RJ

Mirian Malvina Segre de Giambiagi/CBPF

Ricardo de Carvalho Ferreira/CBPF

Rio de Janeiro, 17 de dezembro 1984