

ARTHUR EDUARDO DE SERPA VIEIRA

ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE ELÉTRONS POR ÁTOMO DE HIDROGÊNIO  
ATRAVÉS DE UMA FUNÇÃO DE ONDA CORRELACIONADA

TESE DE

MESTRADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

RIO DE JANEIRO, 1984

À minha família,

Maria Alba S. Vieira, Justiniano S.  
Vieira, Elaine G. Quintana e Ana  
Carolina Q.S. Vieira, Little Jo S.  
Vieira e Puppy S. Vieira.

## AGRADECIMENTOS

- ao Professor Dr. Ricardo Ferreira pela orientação segura, pelo estímulo e amizade constantes;

- ao Professor Dr. Lee Mu Tao pelas discussões proveitosas e paciência nas sugestões;

- aos amigos, Jorge Botelho, Saul G. Jacchieri, Eduardo C. Valadares e Henrique A.S. Neto, pelas discussões, sugestões e amizade;

- à Helena de Souza Ferreira, pela boa vontade, bela datilografia e estímulo vibrante;

- à CAPES pelo apoio financeiro;

- Ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas-CNPq, pelo apoio material e científico.

## RESUMO

Neste trabalho, abordamos o problema de colisão inelástica entre um elétron e um átomo de hidrogênio. Empregamos uma função correlacionada utilizada, anteriormente, para o mesmo sistema em colisões elásticas <sup>(16)</sup>, no qual há dois parâmetros ajustados na faixa de energia estudada. Com esta função desenvolvemos uma equação para os elementos de matriz de transição direta e de troca para as transições 1s-2s e 1s-2p. Os resultados obtidos são comparados com medidas experimentais de Williams, bem como os resultados fornecidos pelos tratamentos teóricos de Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup>.

## S U M Á R I O

	<u>Pág.</u>
Agradecimento .....	iii
Resumo .....	iv
Lista de Figuras .....	vii
Lista de Tabelas .....	viii
<u>INTRODUÇÃO</u> .....	1
<u>CAPÍTULO I</u> - TEORIA DE ESPALHAMENTO .....	3
1.1 - Tipos de Colisões .....	3
1.2 - Seção de Choque Diferencial .....	3
1.3 - Equação Integral .....	8
1.4 - Soluções da Equação de Lippmann-Schwinger .....	10
1.5 - Operadores de Green .....	13
1.6 - Matriz de Transição .....	15
1.7 - Probabilidade de Transição e Seções de Choque .....	18
<u>CAPÍTULO II</u> - FUNÇÃO CORRELACIONADA .....	20
2.1 - Aproximação de Hylleraas .....	20
2.2 - Aproximação de Born .....	22
2.3 - Aproximação de Ochkur .....	24
2.4 - Outra Aproximação .....	26
2.5 - Aplicação ao Espalhamento Inelástico Elétron-Hidrogênio .....	28
<u>CAPÍTULO III</u> - CÁLCULO DA SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL .....	32
3.1 - Espalhamento Inelástico 1s-2s .....	32
3.1-a) - Matriz Direta $T_{1s-2s}^d$ .....	32
3.1-b) - Matriz de Troca $T_{1s-2s}^{tr}$ .....	35
3.2 - Espalhamento Inelástico 1s-2p .....	45

3.2-a) - Matriz Direta $T_{1s-2p}^d$ .....	45
3.2-b) - Matriz de Troca $T_{1s-2p}^{tr}$ .....	53
<u>CAPÍTULO IV</u> - RESULTADOS E CONCLUSÕES .....	59
4.1 - Espalhamento Inelástico 1s-2s .....	59
4.2 - Espalhamento Inelástico 1s-2p .....	70
4.3 - Influência da Matriz de Troca e dos Parâmetros $\alpha$ e $\beta$ .	81
<u>BIBLIOGRAFIA</u> .....	B5

## LISTA DE FIGURAS

<u>Figura</u>	<u>Página</u>
1.1 - Arranjo experimental de espalhamento .....	3
1.2 - Figura do ângulo sólido .....	5
3.1 - Coordenadas esféricas $r_1, \theta_1, \phi_1$ e $r_2, \theta_2, \phi_2$ , com o vetor de onda $\vec{K}_i$ na direção Z .....	40
3.2 - Coordenadas esféricas $r_2, \theta_2, \phi_2$ e $r_{12}, \theta_{12}, \phi_{12}$ , com o vetor de onda $\vec{K}$ na direção Z .....	47
3.3 - Coordenadas esféricas $r_1, \theta_1, \phi_1$ e $r_2, \theta_2, \phi_2$ , com o vetor de onda $\vec{K}$ na direção Z .....	50
3.4 - Esquematisação dos vetores de onda $\vec{K}_i$ , $\vec{K}_f$ e $\vec{K}$ e os ângulos de espalhamento $\theta$ e $\theta_K$ .....	55
4.1.1 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2s a 54.40 eV .....	66
4.1.2 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2s a 100 eV .....	67
4.1.3 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2s a 200 eV .....	68
4.1.4 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2s a 300 eV .....	69
4.2.1 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2p a 54.40 eV .....	76
4.2.2 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2p a 100 eV .....	77
4.2.3 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2p a 200 eV .....	78
4.2.4 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2p a 300 eV .....	79

## LISTA DE TABELAS

<u>Tabela</u>	<u>Figura</u>
4.1.1 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2s a 54.40 eV .....	62
4.1.2 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2s a 100 eV .....	63
4.1.3 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2s a 200 eV .....	64
4.1.4 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2s a 300 eV .....	65
4.2.1 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2p a 54.40 eV .....	71
4.2.2 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2p a 100 eV .....	72
4.2.3 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2p a 200 eV .....	73
4.2.4 - Variação da seção de choque diferencial para excitação 1s-2p a 300 eV .....	74
4.2.5 - Soma das seções de choque diferenciais dos estados 1s-2s e 1s-2p para energias de 100, 200 e 300 eV .....	75
4.3.1 - Seção de choque diferencial inelástica para as transições 1s-2s. $\alpha = 0,30$ , $\beta = 0,98$ e $E_1 = 54,4$ eV .....	83
4.3.2 - Seção de choque diferencial inelástica para as transições 1s-2p. $\alpha = 0,80$ , $\beta = 0,98$ e $E_1 = 54,4$ eV .....	84



## INTRODUÇÃO

A excitação do estado fundamental do átomo de hidrogênio para os estados  $n = 2$  por espalhamento de elétron, constitui o processo de espalhamento elétron-átomo mais simples<sup>(22)</sup>. Do ponto de vista teórico, o átomo de hidrogênio é o único alvo cujas funções de onda do estado ligado são bem conhecidas, de modo que a descrição teórica do processo de espalhamento se torna exata neste caso. Além disso, existem medidas experimentais das seções de choque diferenciais disponíveis<sup>(19,22)</sup>. Assim, é interessante obter-se seções de choque diferenciais teóricas a fim de podermos compará-las com estas medidas e com outros tratamentos teóricos.

Historicamente, o uso de funções correlacionadas teve início nos primórdios da Mecânica Quântica com os trabalhos de Hylleraas<sup>(11)</sup> sobre o átomo de hélio.

O presente trabalho descreve o espalhamento inelástico elétron-hidrogênio por meio de uma função de onda correlacionada, introduzida anteriormente no tratamento do espalhamento elástico para o mesmo sistema<sup>(16)</sup>.

No referido trabalho, a introdução da função de onda correlacionada não visava um cálculo rigoroso da seção de choque diferencial para a colisão elétron-átomo de hidrogênio, mas analisar a importância da correlação para o problema em questão. A função proposta continha dois parâmetros ajustáveis para cada energia estudada.

O cálculo aqui apresentado tem em vista determinar

como esta função se comporta no caso de espalhamento inelástico elétron-átomo de hidrogênio, bem como conferir se os parâmetros encontrados anteriormente são adequados para descrever o comportamento da seção de choque diferencial na colisão inelástica elétron-átomo de hidrogênio. Além disso, são calculadas as seções de choque diferenciais para as transições  $1s-2s$  e  $1s-2p$ . Estas seções de choque diferenciais são comparadas com os valores experimentais de Williams e Willis<sup>(19)</sup> e de Williams<sup>(22)</sup>, e com os valores teóricos calculados segundo as aproximações de Born<sup>(3)</sup> e de acoplamento forte<sup>(20)</sup>, na faixa de energia de 54.4, 100, 200 e 300 eV, respectivamente.

Este trabalho é dividido em 4 capítulos. No Capítulo I, são apresentados alguns conceitos básicos sobre a teoria de espalhamento. No Capítulo II, descrevemos algumas aproximações usualmente empregadas nos problemas de colisões atômicas. No Capítulo III, são desenvolvidos os elementos de matriz (direta e de troca) para a excitação do átomo de hidrogênio, do estado fundamental para os estados  $n = 2$ . Finalmente, os resultados obtidos são apresentados e discutidos no Capítulo IV.

## CAPÍTULO I

### TEORIA DE ESPALHAMENTO

#### 1.1 - TIPOS DE COLISÕES

Um feixe de partículas A, colimado e monoenergético, incide num alvo B. A fim de podermos desprezar a interação entre as partículas incidentes, o feixe não deve ser muito intenso e, uma vez que desejamos realizar observações, também não deve ser muito fraco.

Um arranjo experimental típico está ilustrado na Figura 1.1.

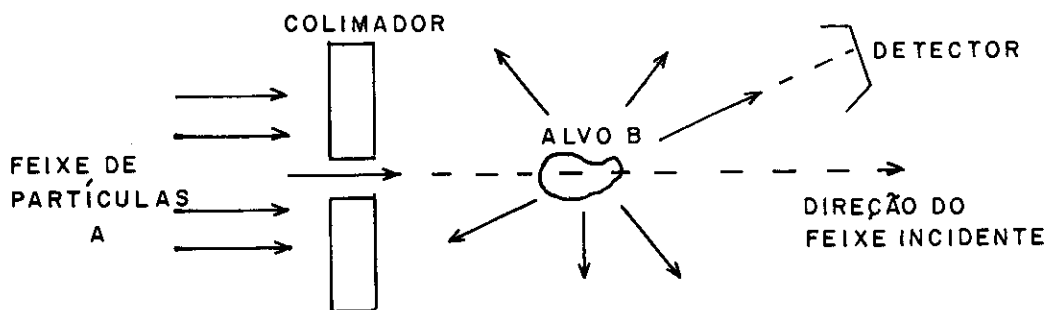


Figura 1.1 - Arranjo experimental de espalhamento.

O alvo, normalmente um gás, consiste geralmente de uma amostra contendo vários espalhadores B, devendo a distância entre eles ser grande em relação ao comprimento de onda de de Broglie de partícula incidente. Isto permite que os efeitos de coerência entre as ondas espalhadas por cada espalhador sejam desprezados. Além disso, sendo o alvo suficientemente fino, podemos desprezar o espalhamento múltiplo. Neste quadro, pode-se considerar cada espa-

lhador B isoladamente, havendo uma colisão entre a partícula A do feixe incidente e o espalhador B do alvo.

Após a colisão, são registradas partículas emergentes em detectores localizados à distância macroscópicas do alvo. Assim, vários processos podem ocorrer:

1) *Espalhamento Elástico:*

As partículas A e B são espalhadas sem qualquer mudança em sua energia;

2) *Espalhamento Inelástico:*

As partículas A e B experimentam uma mudança de sua energia;

3) *Espalhamento Reativo:*

O sistema (A+B) dá origem a duas partículas diferentes de A e B, ou em  $n \geq 2$  partículas.

Neste trabalho nos preocuparemos somente com Espalhamento Inelástico (ítem 2).

## 1.2 - SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL

Os resultados de uma experiência de espalhamento, são expressos em termos da seção de choque diferencial, a qual pode ser definida para um feixe de partículas como <sup>(1)</sup>

*"O número de partículas espalhadas num dado ângulo sólido por unidade de tempo, dividido pelo número de partículas do*

feixe incidente que cruza a unidade de área por unidade de tempo."

Assim, a seção de choque diferencial<sup>(2)</sup> é

$$d\sigma(\theta, \phi) = \frac{I(\theta, \phi)}{I} \quad (1.2.1)$$

onde  $I$  é o fluxo de partículas incidentes e  $I(\theta, \phi)$  o fluxo de partículas espalhadas no ângulo sólido  $d\Omega$ , Figura 1.2.

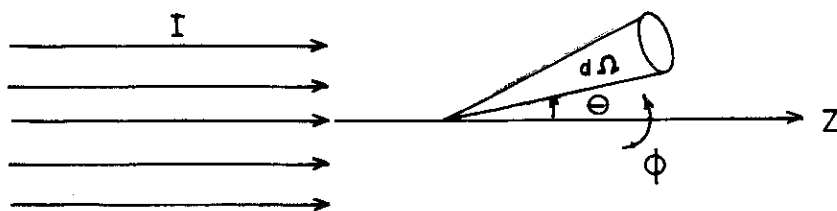


Figura 1.2 - Figura do ângulo sólido.

Esta seção de choque, em termos de uma partícula, é equivalente à probabilidade total de que a partícula seja espalhada num dado ângulo sólido pela probabilidade total que cruza uma unidade de área do alvo.

Quanticamente, o problema é descrito como um feixe de partículas incidentes e emergentes. A função de onda que descreve o feixe incidente (normalizada a 1), paralelo ao eixo-Z é uma onda plana

$$\phi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} = e^{iK_i Z} \quad (1.2.2)$$

onde  $\vec{k}_i$  é o vetor de onda incidente.

A função de onda das partículas espalhadas é descrita por uma onda esférica da forma

$$\psi_{sc} = f(\theta, \phi) \frac{e^{iK_s Z}}{r} \quad (1.2.3)$$

onde  $f(\theta, \phi)$ , amplitude de espalhamento, modula o fluxo de partículas espalhadas.

onde para grandes  $r$ ,  $\psi_{sc}$  satisfaz a equação de Schroedinger independente do tempo para partículas livres

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_{sc} = E \psi_{sc} \quad (1.2.4)$$

onde  $m$  é a massa da partícula e  $E$  a energia da partícula livre

$$E = \frac{\hbar^2 K_i^2}{2m} \quad (1.2.5)$$

Contudo, a função de onda que descreve o espalhamento deve satisfazer a equação de Schroedinger para o movimento de uma partícula na presença de um potencial  $V$ ,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (1.2.6)$$

ou

$$\left[ \nabla_{\vec{r}}^2 + K^2 \right] \psi(\vec{r}) = U(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \quad (1.2.7a)$$

$$\left[ \nabla_{\vec{r}}^2 + K^2 - U(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = 0 \quad (1.2.7b)$$

onde

$$U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \quad (1.2.8)$$

Supondo que o potencial  $V(r)$  tenda a zero mais rapidamente do que  $(1/r)$  quando  $r \rightarrow \infty$ , já que queremos descrever as partículas incidentes e espalhadas movendo-se livremente, devemos ter uma solução de (1.2.7) como

$$\psi(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} \Phi_{K_i} + \psi_{sc}$$

ou denotando por  $\psi_{K_i}^{(+)}$ , na sua forma assintótica como <sup>(3)</sup>

$$\psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} A \left[ e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{iKr}}{r} \right] \quad (1.2.9)$$

Esta é a condição de contorno apropriada para o problema de espalhamento, onde  $A$  é independente de  $r$ ,  $\theta$  e  $\phi$ . Qualquer que seja  $f(\theta, \phi)$ , a eq. (1.2.9) satisfaz a eq. (1.2.6) assintoticamente na região onde podemos desprezar  $V(\vec{r})$ .

A quantidade  $f(\theta, \phi)$  é a amplitude de espalhamento, sendo o fator que determina as seções de choque. A fim de obtermos estas quantidades, precisamos da densidade de probabilidade de corrente originada por  $\psi_{sc}$  associada à equação de Schrodinger (1.2.6),

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} [\psi^*(\vec{r}) \nabla \psi(\vec{r}) - (\nabla \psi^*(\vec{r})) \psi(\vec{r})] \quad (1.2.10)$$

A componente radial  $J_r$  da densidade de probabilidade de corrente, correspondente à onda  $\psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r})$  é dada por

$$J_r = A^* A \frac{|f|^2 \hbar K}{mr^2} = A^* A \frac{|f|^2 v}{r^2} \quad (1.2.11)$$

Conforme visto, o fluxo  $I(\theta, \phi) d\Omega$  é o número de partículas emergentes por unidade de tempo num ângulo sólido,  $d\Omega$ , igual, portanto, ao produto  $J_r \times$  área normal  $r^2 d\Omega$  do ângulo sólido, assim,

$$I(\theta, \phi) d\Omega = J_r r^2 d\Omega = A^* A |f|^2 d\Omega \quad (1.2.12)$$

Para uma onda plana incidente do tipo

$$\psi_{\vec{K}_i}(\vec{r}) = A \exp(i\vec{K}_i \cdot \vec{r})$$

o seu fluxo através da área normal ao vetor de onda  $\vec{K}_i$  é

$$J_r^{\text{inc}} = A^* A \frac{\hbar K_i}{m} = A^* A v \quad (1.2.13)$$

Assim, por definição, dividindo (1.2.12) por (1.2.13), para o campo elástico, temos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (1.2.14)$$

A equação (1.2.14) é importante porque ela une o comportamento assintótico da função de onda  $\psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r})$  com a seção de choque diferencial, ou seja, vincula o conhecimento teórico, contido em  $\psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r})$ , à quantidade experimental  $d\sigma/d\Omega$ .

### 1.3 - EQUAÇÃO INTEGRAL

Na resolução da equação diferencial de Schrödinger (1.2.6) para espalhamento estacionário, introduzida na seção anterior, impomos que a função de onda  $\psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r})$  deva satisfazer às condições assintóticas fisicamente corretas. Todavia, quando transformamos o problema numa equação integral, impomos que a função de onda  $\psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r})$  que é uma solução da equação integral, incorpore automaticamente a condição de contorno (1.2.9).

A solução geral <sup>(3)</sup> da equação (1.2.7) é

$$\psi(\vec{r}) = \phi(\vec{r}) + \int G_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (1.3.1)$$

onde  $\phi(\vec{r})$  é solução da equação de Schroedinger homogênea como a eq. (1.2.4) e  $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$  é a função de Green <sup>(5)</sup> do operador  $\nabla_r^2$ .

$$[\nabla_r^2 + K^2] G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.3.2)$$



No espalhamento, a função de onda  $\Phi(\vec{r})$  é uma onda plana (1.2.2) com o fator de normalização  $(2\pi)^{-3/2}$ . Assim, podemos escrever a eq. (1.3.1) como

$$\psi_{\vec{K}_i}(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}} + \int G_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (1.3.3)$$

A função de Green  $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$  obtida com a condição de contorno (1.2.9) e a eq. (1.3.2), após a integração <sup>(3)</sup>, leva a uma onda esférica emergente (+) ou incidente (-) quando  $r \rightarrow \infty$ , de modo que para grandes valores de  $r$  ela se comporta como uma onda puramente emergente ou incidente,

$$G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}') = - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm iK|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (1.3.4)$$

Portanto, podemos escrever a eq. (1.3.3) como

$$\psi_{\vec{K}_i}^{(\pm)}(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}} + \int G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_{\vec{K}_i}^{(\pm)}(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (1.3.5)$$

Esta é a equação integral de Lippmann-Schwinger <sup>(6)</sup> do potencial de espalhamento. Ela substitui a equação de Schrödinger (1.2.6) mais a condição de contorno (1.2.9) incluída na eq. (1.3.5) através da função de Green  $G_0^{(\pm)}(\vec{r}, \vec{r}')$ . A solução da eq. (1.3.5) possui o comportamento assintótico (1.2.9). Se colocarmos  $A = (2\pi)^{-3/2}$ , a sua solução <sup>(3,4)</sup> fica dada por

$$\psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\rightarrow} (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}} + \frac{e^{iKr}}{r} \left[ - \frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}'} \cdot U(\vec{r}') \psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r}') d\vec{r}' \right] \quad (1.3.6)$$

Onde o vetor de onda final  $\vec{K}_f = K\hat{r}$ .

A comparação entre as eqs. (1.3.6) e (1.2.9) nos fornece a amplitude de espalhamento na forma integral

$$f = - \frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (1.3.7)$$

Com a eq. (1.2.8), e fazendo uso da notação bracket de Dirac, obtemos a expressão

$$f = - \frac{2\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \phi_{\vec{k}_f} | V | \psi_{\vec{k}_i}^{(+)} \rangle \quad (1.3.8)$$

onde  $\phi_{\vec{k}_f}$  é a onda plana correspondente ao vetor de onda  $\vec{k}_f$ .

O elemento da matriz de transição  $T_{fi}$  é definido como

$$T_{fi} = \langle \phi_{\vec{k}_f} | V | \psi_{\vec{k}_i}^{(+)} \rangle \quad (1.3.9)$$

Assim, podemos escrever as eqs. (1.3.8) e (1.2.14) em termos da matriz de transição.

A amplitude de espalhamento e a seção de choque diferencial ficam dadas pelas expressões

$$f = - \frac{2\pi^2 m}{\hbar^2} T_{fi} \quad (1.3.10a)$$

e

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} |T_{fi}|^2 \quad (1.3.10b)$$

#### 1.4 - SOLUÇÕES DA EQUAÇÃO DE LIPPMANN-SCHWINGER

Vimos na seção 1.2 que no espalhamento de partículas livres, a função de onda total que descreve o sistema pode ser expressa como a soma das funções de onda das partículas incidente

e espalhada. Podemos, de modo análogo, escrever a equação de Lippmann-Schwinger (1.3.5) na forma

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) + \psi_{sc}^{(+)}(\vec{r}) \quad (1.4.1)$$

Com a onda espalhada  $\psi_{sc}^{(+)}$  satisfazendo a equação não homogênea,

$$[\nabla_{\vec{r}}^2 + K^2 - U(\vec{r})]\psi_{sc}^{(+)}(\vec{r}) = U(\vec{r})\phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) \quad (1.4.2)$$

obtida com (1.4.1) em (1.2.7a). A função de Green total  $G^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}')$  do sistema satisfaz a equação

$$[\nabla_{\vec{r}}^2 + K^2]G^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') + U(\vec{r})G^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') \quad (1.4.3)$$

tal que a função de onda espalhada  $\psi_{sc}^{(+)}$  corresponda a uma onda esférica emergente,

$$\psi_{sc}^{(+)}(\vec{r}) = \int G^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}')U(\vec{r}')\phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}')d\vec{r}' \quad (1.4.4)$$

Portanto, podemos escrever a solução da equação de Lippmann-Schwinger (1.4.1) na forma integral explicitamente

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) + \int G^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}')U(\vec{r}')\phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}')d\vec{r}' \quad (1.4.5)$$

A função de Green total  $G^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}')$  na forma integral é obtida da eq. (1.4.3) com ajuda da eq. (1.3.2). Assim, obtemos

$$G^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') = G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') + \int G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}'' )U(\vec{r}'')G^{(+)}(\vec{r}'', \vec{r}')d\vec{r}'' \quad (1.4.6)$$

O problema de se resolver a equação de Lippmann-Schwinger (1.3.5) se resume em encontrar a solução da equação integral (1.4.6) da função de Green total. As relações (1.4.5) e (1.4.6) são importantes para a discussão dos métodos de aproximação usados na teoria de espalhamento.

A eq. (1.4.6) nos fornece a relação entre os operadores de Green  $G^{(+)}$  e  $G_0^{(+)}$ . Temos assim

$$G^{(+)} = G_0^{(+)} + G_0^{(+)} U G^{(+)} \quad (1.4.7)$$

A eq. (1.4.7) está escrita independentemente da representação. No espaço de configuração temos as equações (1.4.5), (1.4.6) e (1.3.4). Com a eq. (1.2.8) escrevemos a representação integral da amplitude de espalhamento (1.3.8) como

$$f = - 2\pi^2 \langle \phi_{\vec{K}_f} | U + U G^{(+)} U | \phi_{\vec{K}_i} \rangle \quad (1.4.8)$$

Também podemos ter uma função de onda  $\psi_{\vec{K}_f}^{(-)}(\vec{r})$  correspondendo às condições de contorno que descrevem uma onda plana incidente, com vetor de onda  $\vec{K}_f$ , e uma onda esférica incidente. Deste modo, a equação de Lippmann-Schwinger assume a forma

$$\psi_{\vec{K}_f}^{(-)}(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}} + \int G_0^{(-)}(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_{\vec{K}_f}^{(-)}(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (1.4.9)$$

onde a função de Green  $G_0^{(-)}(\vec{r}, \vec{r}')$  é dada pela eq. (1.3.4). Embora a função de onda  $\psi_{\vec{K}_f}^{(-)}(\vec{r})$  não satisfaça a condição de contorno (1.2.9), ela desempenha um papel importante na teoria de espalhamento <sup>(3)</sup>.

A função de Green total  $G^{(-)}(\vec{r}, \vec{r}')$  obedecerá às equa -

ções semelhantes às eqs. (1.4.6)–(1.4.7), trocando-se apenas o sinal (+) pelo (-).  $\psi_{\vec{k}_f}^{(-)}$  representa portanto uma solução explícita da eq. (1.4.9), na forma dada pela eq. (1.4.5). Comparando-se esta última equação com a eq. (1.4.8), temos uma outra representação integral para a amplitude de espalhamento.

$$f = - 2\pi^2 \langle \psi_{\vec{k}_f}^{(-)} | U | \phi_{\vec{k}_i} \rangle \quad (1.4.10)$$

## 1.5 - OPERADORES DE GREEN

O Hamiltoniano de um dado sistema pode ser decomposto usualmente em duas partes,

$$H = H_c + V_c \quad (1.5.1)$$

onde  $V_c$  representa o termo de interação entre a partícula e o sistema e  $H_c$  descreve o sistema na ausência de interação. A decomposição (1.5.1) é determinada pelo número e pela natureza das partículas que participam da colisão. Os vetores correspondentes aos estados livres,  $\phi_n$ , que descrevem o sistema no estado  $n$  satisfazem à equação de Schrödinger (1.2.6). Podemos transformar os autoestados  $\phi_n$  do Hamiltoniano  $H_c$  nos autoestados  $\psi_n^{(\pm)}$  do Hamiltoniano total  $H$  por meio dos operadores

$$\psi_n^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\pm i\epsilon}{E_n - H \pm i\epsilon} \phi_n \quad (1.5.2)$$

Os espaços de todos autoestados  $\psi_n^{(\pm)}$  do Hamiltoniano total do sistema são ortogonais. Com as eqs. (1.2.4) e (1.5.1), a equação (1.5.2) pode ainda ser escrita como

$$\psi_n^{(\pm)} = \phi_n + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E_n - H_c \pm i\epsilon} V_c \phi_n \quad (1.5.3)$$

A equação (1.5.3) nos permitem calcular os vetores estados  $\psi_n^{(\pm)}$  se conhecemos os operadores de Green

$$G_c^{(\pm)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E - H_c \pm i\epsilon} \quad (1.5.4)$$

Para partículas livres, os operadores de Green correspondem ao Hamiltoniano  $H_c = H_0$ ,  $G_c^{(\pm)} = G_0^{(\pm)}$ , nas eqs. (1.5.1) e (1.5.4). Se as colisões forem diretas, nas quais  $V_i = V_f = V_d$  e  $H_d = H_i = H_f$ , e se  $V_d$  for a interação total entre as partículas em colisão, então os operadores de Green ficam dados pela eq. (1.5.4). A relação (1.4.7), usada nas eqs. (1.5.3), nos fornecem as equações de Lippmann-Schwinger

$$\psi_n^{(\pm)} = \phi_n + \frac{1}{E_n - H_c \pm i\epsilon} V_c \psi_n^{(\pm)} \quad (1.5.5)$$

O símbolo  $\epsilon \rightarrow 0^+$  está implícito a fim de não sobrecarregar a notação. As equações de Lippmann-Schwinger acima foram obtidas de um modo que independem da representação. Além disso, elas se tornam equações integrais na representação do espaço de configuração ou de fase.

Na seção 1.3 foi visto que as equações de Lippmann-Schwinger para o potencial de espalhamento de 2 corpos têm uma solução única  $\psi_{\vec{k}_i}^{(\pm)}$  apresentando o comportamento assintótico (1.2.9) e (1.4.9). Isto não acontece quando há mais de 2 partículas. A primeira dificuldade surge<sup>(7)</sup> porque o operador  $G_n V_n$  na eq. (1.5.5) não é quadrado integrável; uma dificuldade<sup>(8,9)</sup> adicional decorre do fato das equações de Lippmann

-Schwinger (1.5.5) não possuem solução única se tomamos o  $\lim \epsilon \rightarrow 0^+$  antes de resolvermos a equação.

## 1.6 - MATRIZ DE TRANSIÇÃO

Vimos na eq. (1.3.10b) que a matriz de transição é importante para o cálculo da seção de choque diferencial. Assim, definimos o operador transição pela relação<sup>(3)</sup>

$$T_{fi}(E) = V_i + V_f \frac{1}{E-H+i\epsilon} V_i \quad (1.6.1)$$

Deste modo, os elementos da matriz de transição do operador (1.6.1) na transição entre 2 estados assintóticos  $\Phi_a$  e  $\Phi_b$  com energia  $E = E_a = E_b$  ficam expressos por

$$\langle b|T|a\rangle = \langle \Phi_b(E) | T_{fi}(E) | \Phi_a(E) \rangle \quad (1.6.2)$$

Pode-se demonstrar<sup>(3)</sup> que a generalização da equação (1.3.9) é dada por

$$\langle b|T|a\rangle = \langle \Phi_b | V_f | \psi_a^{(+)} \rangle = \langle \psi_b^{(-)} | V_i | \Phi_a \rangle \quad (1.6.3)$$

Quando o sistema é constituído de  $N = N_0 + 1$  partículas idênticas, das quais  $N_0$  estão inicialmente ligadas ao alvo e uma está livre, a função de onda total do sistema pode ser escrita como o produto de funções,

$$\Phi_a(r_0, r_1, \dots, r_{N_0}) = \psi_\alpha(r_0) \psi_\beta(r_1, \dots, r_{N_0}) \quad (1.6.4)$$

onde os  $r_j$  são as variáveis dinâmicas das partículas. As funções

de onda  $\psi_\alpha$  e  $\psi_\beta$  descrevem a partícula incidente e o alvo, respectivamente. A função de onda  $\psi_\beta$  deve ser ainda simetrizada corretamente. Para que possamos construir através de  $\Phi_a$  um novo estado livre, que leve em conta a identidade das partículas, devemos definir os operadores de simetrização como (10),

$$J = \frac{1}{N!} \sum_p \delta_p P \quad (1.6.5)$$

onde  $P$  é uma permutação;  $\delta_p = +1$  para bosons e  $\delta_p = \pm 1$  para permutação par ou ímpar no caso de fermions. Com isto, o estado inicial (1.6.4), agora simetrizado, fica:

$$\bar{\Phi}_a = \frac{C}{N!} \sum_p \delta_p \Phi_{pa} \quad (1.6.6)$$

onde  $C$  é uma constante de normalização e  $\Phi_{pa} = P\Phi_a$ . Impondo a condição de que os estados não simetrizado  $\Phi_a$  e simetrizado  $\bar{\Phi}_a$  satisfaçam a mesma condição de normalização, encontramos  $C = \sqrt{N}$ . Existem  $N_0!$  permutações das variáveis  $r_{N_0}$  que deixam  $\Phi_a$  invariante, ao passo que existem  $N_0$  permutações obtidas pela ação do operador  $P_{0j}$ . Estas considerações, juntamente com a relação (1.6.4), permitem escrever

$$\bar{\Phi}_a = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N_0} \delta_j P_{0j} \Phi_a \quad (1.6.7)$$

De modo análogo, podemos representar a simetrização do estado livre final  $\Phi_b$  como

$$\bar{\Phi}_b = \frac{C'}{(N')!} \sum_{p'} \delta_{p'} \Phi_{p'b} \quad (1.6.8)$$

Por analogia, podemos escrever o vetor correspondente ao estado simetrizado  $\psi_n^{(\pm)}$  na forma



$$\bar{\psi}_a^{(+)} = \bar{\phi}_a + \frac{C}{N!} \sum_p \delta_p G_{(E_a)}^{(+)} V_p \phi_{pa} \quad (1.6.9a)$$

e

$$\bar{\psi}_b^{(-)} = \bar{\phi}_b + \frac{C'}{(N')!} \sum_{p'} \delta_{p'} G_{(E_b)}^{(-)} V_{p'} \phi_{p'b} \quad (1.6.9b)$$

Estes resultados podem ser generalizados para um sistema com  $n_A$  partículas presentes no feixe A e  $n_B$  ligadas ao alvo B. Neste caso, o estado simetrizado continua sendo dado pela equação (1.6.6). A mesma situação geral ocorre quando estão presentes diferentes tipos de partículas, bastando apenas generalizar os operadores de simetrização.

Finalmente, levando as relações (1.6.9) na eq. (1.6.3), obtemos as seguintes expressões para os elementos da matriz-T para a transição entre os estados  $\bar{\phi}_a$  e  $\bar{\phi}_b$ :

$$\langle \bar{b} | T | \bar{a} \rangle = \frac{C'}{(N')!} \sum_{p'} \delta_{p'} \langle P'b | T | \bar{a} \rangle \quad (1.6.10a)$$

ou

$$\langle \bar{b} | T | \bar{a} \rangle = \frac{C}{N!} \sum_p \delta_p \langle \bar{b} | T | P_a \rangle \quad (1.6.10b)$$

Consideremos a situação em que o mesmo número de partículas idênticas se encontra nos estados inicial e final, com o alvo mantendo o mesmo número de partículas ligadas a ele antes e após a colisão. Uma vez que ao se permutar as variáveis  $r_0$  e  $r_j$  equivale à permutação das variáveis  $r_0$  e  $r_k$ , podemos com ajuda da eq. (1.6.9a) escrever a eq. (1.6.10a) na forma

$$\langle \bar{b} | T | \bar{a} \rangle = \langle b | T | a \rangle \pm N_0 \langle P_{0j} b | T | a \rangle \quad (1.6.11)$$

O primeiro termo à direita da equação (1.6.11) representa a matriz de transição direta e o segundo termo a matriz

de troca. Na camada dos momentos, a equação (1.6.11) é escrita como

$$\bar{T}_{ba} = T_{ba}^d \pm N_0 T_{ba}^{ex} \quad (1.6.12)$$

onde

$$\langle b | T | a \rangle = \delta(\mathbb{P}_b - \mathbb{P}_a) T_{ba}^d \quad (1.6.13a)$$

$$\langle P_{0j} b | T | a \rangle = \delta(\mathbb{P}_b - \mathbb{P}_a) T_{ba}^{ex}$$

A função delta  $\delta(\mathbb{P}_b - \mathbb{P}_a)$  garante a conservação do momento (energia) numa transição  $a \rightarrow b$ , e onde  $\mathbb{P}_a$  e  $\mathbb{P}_b$  são os autovalores do operador momento nos estados assintóticos inicial e final,  $\Phi_a$  e  $\Phi_b$ , respectivamente, tal que

$$\mathbb{P}\Phi_a = \mathbb{P}_a \Phi_a \quad (1.6.13b)$$

$$\mathbb{P}\Phi_b = \mathbb{P}_b \Phi_b \quad (1.6.13c)$$

## 1.7 - PROBABILIDADE DE TRANSIÇÃO E SEÇÕES DE CHOQUE

A probabilidade de transição, por unidade de tempo, de ocorrer uma transição do estado  $\Phi_a$  para  $\Phi_b$  é definida por <sup>(3)</sup>

$$\omega = 2\pi \sum_b \delta(E_b - E_a) \delta(\mathbb{P}_b - \mathbb{P}_a) |T_{ba}|^2 \quad (1.7.1)$$

A seção de choque diferencial, definida na seção 1.2, fica então

$$\Delta\sigma = \frac{\omega}{\Phi_A} \quad (1.7.2)$$

onde o fluxo de partículas A normalizado é expresso por

$$\Phi_A = (2\pi)^{-3} v_i = (2\pi)^{-3} |\vec{v}_a - \vec{v}_b| \quad (1.7.3)$$

Finalmente, a seção de choque diferencial dos estados internos bem definidos é dada por

$$d\sigma = \frac{(2\pi)^4}{\hbar v_i} \int d\vec{K}_f \delta(E_b - E_a) |T_{ba}|^2 \quad (1.7.4)$$

A dinâmica do processo está contida na matriz  $T_{ba}$  enquanto os fatores do espaço de fase apresentam o caráter cinético. Tomando-se  $\vec{K}_f$  como o vetor de onda na direção do ângulo sólido  $d\Omega$ , a integração<sup>(3)</sup> da equação (1.7.4) nos fornece, no caso não relativístico, a expressão seguinte para a seção de choque diferencial para a emissão de partículas na direção  $\Omega$  :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 \frac{m_i m_f}{\hbar^4} \frac{K_f}{K_i} |T_{ba}|^2 \quad (1.7.5)$$

onde  $v_i = \frac{K_i m_i}{\hbar^2}$  e  $v_f = \frac{K_f m_f}{\hbar^2}$  com os  $m$  sendo as massas reduzidas inicial e final, calculadas no C.M. do sistema.

Analogamente ao caso do potencial de espalhamento, a amplitude de espalhamento,  $f_{ba}$ , é dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{K_f}{K_i} |f_{ba}|^2 \quad (1.7.6)$$

A comparação entre as eqs. (1.7.5) e (1.7.6) nos fornece

$$f_{ba} = - \frac{(2\pi)^2}{\hbar^2} (m_i m_f)^{1/2} T_{ba} \quad (1.7.7)$$

Portanto, para o potencial de espalhamento no caso em

que  $m_i = m_f = m$ , as eqs. (1.7.5) e (1.7.7) se reduzem às equações (1.3.10).

Em termos das amplitudes de espalhamento direto e com troca, a eq. (1.7.7) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} f_{ba} &= - \frac{(2\pi)^2}{\hbar^2} (m_i m_f)^{1/2} T_{ba}^d \\ g_{ba} &= - \frac{(2\pi)^2}{\hbar^2} (m_i m_f)^{1/2} T_{ba}^{ex} \end{aligned} \quad (1.7.8)$$

## CAPÍTULO II

### FUNÇÃO CORRELACIONADA

Na física atômica, no cálculo da seção de choque diferencial, não dispomos de soluções exatas para a função de onda, daí necessitarmos de tratamentos aproximados.

#### 2.1 - APROXIMAÇÃO DE HYLLERAAS

Funções de onda correlacionadas foram introduzidas por Hylleraas <sup>(11)</sup>, que empregou a função correlacionada no estudo do estado fundamental do hélio. A função apresenta a seguinte forma:

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = e^{-\frac{Ks}{2}} P(Ks, Kt, Ku) \quad (2.1.1)$$

onde  $K$  é um fator de escala e  $P$  um polinômio

$$P(s, t, u) = \sum_{n, \ell, m} C_{n, \ell, m} S^n t^{2\ell} u^m \quad (2.1.2)$$

com

$$\begin{aligned} S &= r_1 + r_2 \\ t &= r_2 - r_1 \\ u &= r_{12} \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

Como decorrência dos métodos variacionais, Hylleraas observou que uma função de onda correlacionada descreve o sistema mais apropriadamente à medida em que se aumenta o número de parâmetros nela contidos.

Algumas funções de Hylleraas do tipo (2.1.1) usadas no cálculo da energia do estado fundamental do átomo de hélio são

$$\psi = e^{-\frac{Ks}{2}} (1 + C_1 Ku + C_2 (Kt)^2) \quad (2.1.4)$$

onde

$$K = 0,91$$

$$C_1 = 0,08$$

$$C_2 = 0,01$$

A eq. (2.1.4) produz um valor da energia que é cerca de 0,033 eV acima do valor experimental disponível.

A aproximação seguinte é dada por

$$\psi = e^{-\frac{Ks}{2}} (1 + C_1 Ku + C_2 (Kt)^2 + C_3 Ks + C_4 (Ks)^2 + C_5 (Ku)^2) \quad (2.1.5)$$

onde

$$K = 0,91$$

$$C_1 = 0,0972$$

$$C_2 = 0,0097$$

$$C_3 = -0,0277$$

$$C_4 = 0,0025$$

$$C_5 = -0,0024$$

A eq. (2.1.5) reduz a diferença entre o valor teórico e experimental para 0,0115 eV.

Usando um polinômio do tipo (2.1.2) com 14 termos, Hylleraas reduziu a diferença para 0,0016 eV. Isto confirma que as funções de onda correlacionadas dos sistemas atômicos e moleculares proporcionam melhores resultados, no cálculo da energia, à medida que se aumenta o número de parâmetros nelas presentes.

No cálculo da energia do primeiro estado excitado do átomo de hélio, Hylleraas introduziu as funções de onda correlacionadas do tipo

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = e^{-\frac{Ks}{2}} \sinh\left(\frac{Ct}{2}\right) P(Ks, Kt, Ku) \quad (2.1.6)$$

P sendo dado pela equação (2.1.2).

Ao compararmos as equações (2.1.1) e (2.1.6) vemos que as funções de Hylleraas possuem formas funcionais diferentes para as funções de onda do estado fundamental e do primeiro estado excitado.

## 2.2 - APROXIMAÇÃO DE BORN

No espalhamento não basta aumentarmos a expansão do tipo (2.1.1) ou (2.1.6) para obtermos garantidamente melhores resultados <sup>(13)</sup>. Em virtude de características do processo de espalhamento, são necessárias aproximações de outra natureza.

Uma das aproximações amplamente empregadas são as séries de Born. Essencialmente, trata-se de uma expansão do tipo perturbativo da função de onda ou da amplitude de espalhamento em série de potências do potencial de interação.

A equação de Lippmann-Schwinger (1.3.5) pode ser resolvida por iteração tendo a onda plana como aproximação de ordem

zero. Assim, obtemos a sequência de funções

$$\begin{aligned}
 \psi_0(\vec{r}) &= \Phi_{\vec{K}_i}(\vec{r}) \\
 \psi_1(\vec{r}) &= \Phi_{\vec{K}_i}(\vec{r}) + \int G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \Phi_{\vec{K}_i}(\vec{r}') d\vec{r}' \\
 \psi_2(\vec{r}) &= \Phi_{\vec{K}_i}(\vec{r}) + \int G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_1(\vec{r}') d\vec{r}' \\
 &\vdots \\
 \psi_n(\vec{r}) &= \Phi_{\vec{K}_i}(\vec{r}) + \int G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_{n-1}(\vec{r}') d\vec{r}'
 \end{aligned} \tag{2.2.1}$$

onde as funções de Green são dadas pela eq. (1.3.4), sendo o potencial de interação real. Obtemos a série de Born da função de onda do espalhamento ao fazermos  $n \rightarrow \infty$ . Supondo-se que a sequência (2.2.1) converge na direção da solução  $\psi_{\vec{K}_i}^{(+)}(\vec{r})$ , obtemos uma expansão das funções  $\psi_n$ . Ao substituirmos sucessivamente, a função de onda espalhada  $\psi_{\vec{K}_f}^{(+)}(\vec{r})$ , dada pela sequência (2.2.1), na eq. (1.3.8) da representação integral da amplitude de espalhamento, encontramos a sequência

$$\begin{aligned}
 f_{B_1} &= -2\pi^2 \langle \Phi_{\vec{K}_f} | U | \Phi_{\vec{K}_i} \rangle \\
 f_{B_2} &= -2\pi^2 \langle \Phi_{\vec{K}_f} | U | \psi_1 \rangle \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 f_{B_n} &= -2\pi^2 \langle \Phi_{\vec{K}_f} | U | \psi_{n-1} \rangle
 \end{aligned} \tag{2.2.2}$$

onde as quantidades  $f_{B_1}, f_{B_2}, \dots, f_{B_n}$  são as 1ª, 2ª, ..., 2ª aproximações de Born da amplitude de espalhamento. Analogamente, se a série converge para a amplitude de espalhamento  $f$ , podemos escrevê-la na forma de expansão nas amplitudes  $f_n$ .

Podemos também gerar as aproximações de Born da ampli



tude de espalhamento pelas funções  $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$  com o comporta -  
 mento assintótico (1.2.9).

Similarmente à amplitude de espalhamento, a série de Born pode ser definida para o elemento da matriz de transição  $T_{fi}$ , dado pela eq. (1.3.9). Assim, obtemos

$$T_{fi} = \sum_{j=1}^{\infty} T_{fi}^{Bj} \quad (2.2.3)$$

onde

$$\left. \begin{aligned} T_{fi}^{B1} &= \langle \phi_{\vec{k}_f} | V | \phi_{\vec{k}_i} \rangle \\ e \\ T_{fi}^{Bj} &= \langle \phi_{\vec{k}_f} | V G_0^{(+)} V \dots G_0^{(+)} V | \phi_{\vec{k}_i} \rangle \end{aligned} \right\} \quad (2.2.4)$$

com a função de Green sendo dada pela equação (1.3.4).

Uma outra maneira de gerarmos a série de Born seria re  
 solvendo a equação integral (1.4.6) da função de Green total por  
 iterações sucessivas com  $G_0^{(+)}$  como aproximação de ordem zero.

Quanto à convergência, a série de Born converge se a  
 partícula incidente é muito rápida ou se o potencial é fraco. Pa  
 ra um potencial central  $U(r)$ , a série converge para todas ener -  
 gias se o potencial não contiver estados ligados<sup>(3)</sup>.

### 2.3 - APROXIMAÇÃO DE ÖCHKUR

A probabilidade de espalhamento de elétron por átomo  
 com o termo de troca decresce com o aumento da energia. Para al-  
 tas energias, a aproximação de Born proporciona bons resultados.  
 Todavia, ao tentarmos extrapolar-la para o domínio das baixas ener  
 gias, os resultados não são tão bons<sup>(15)</sup>.

Na primeira aproximação de Born, os elétrons incidente e espalhado são descritos por ondas planas, o que é correto somente quando  $|\vec{k}_i| \gg 1$  e  $|\vec{k}_f| \gg 1$  (com u.a.). A fim de que estas condições sejam satisfeitas ao expandirmos a amplitude de espalhamento segundo  $K_i^{-1}$  ou  $K_f^{-1}$ , tomamos apenas o 1º termo da série, desprezando assim os efeitos associados aos termos de ordem superior<sup>(14)</sup>.

A aproximação de Ochkur foi empregada na colisão elétron-átomo de hélio<sup>(14)</sup>, porém seus cálculos são válidos para a colisão entre um elétron e um átomo qualquer. Assim, a amplitude de espalhamento com troca, na transição entre os estados a e b, é dada em 1ª aproximação por

$$g_{ba}^{(1)} = 2 K_i^{-2} \int \psi_b^*(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (2.3.1)$$

onde  $\psi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  e  $\psi_b(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$  são as funções de onda que descrevem os estados inicial e final, com  $\vec{k}$  sendo o vetor de momento transferido dado por

$$\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_f \quad (2.3.2)$$

Verifica-se<sup>(14)</sup> que para  $K_i \gg 1$ , as aproximações de 2ª e 3ª ordens são expressas por

$$\begin{aligned} g_{ba}^{(2)} &= \mathcal{O}(K_i^{-6}) \\ g_{ba}^{(3)} &= \mathcal{O}(K_i^{-6}) \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

onde  $\mathcal{O}$  significa ordem de grandeza.

Ao compararmos estas relações com a eq. (2.3.1) verificamos que os termos presentes nas relações (2.3.3) podem ser desprezados.

A amplitude de espalhamento com troca  $g_{ba}$  se reduz, portanto, à eq. (2.3.1) e difere da amplitude de espalhamento direto por um fator  $K_i^{-2}$  substituindo o fator  $K^{-2}$ . Esta diferença se torna fundamental já que leva a seção de choque diferencial a ter uma dependência da energia diferente.

A contribuição dominante a altas energias decorre da interação elétron-elétron  $1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ , que decresce com  $K_i^{-2}$  (eq. (2.3.1)), enquanto a contribuição  $1/r_1$  decresce com  $K_i^{-6}$  (equação (2.3.3)), o que faz com que a aproximação de Born não seja tão eficiente a baixas energias. Este último termo é desprezado <sup>(14)</sup> já que em qualquer caso ele se cancela com os termos de ordem superior da série de Born. Portanto, a altas energias o termo de troca é desprezível quando comparado à 1ª aproximação de Born. Todavia, ele se torna importante nas regiões de energias intermediárias.

## 2.4 - OUTRA APROXIMAÇÃO

Em um trabalho limitado inicialmente ao espalhamento elástico de elétron por átomo de hidrogênio <sup>(16)</sup>, a função de onda que descreve o estado inicial do sistema foi descrita pela expressão

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} \phi_0(r_2) \phi(r_{12}) \quad (2.4.1)$$

onde  $\phi_0(r_2)$  é a função de onda do átomo de hidrogênio no seu estado fundamental. A função  $\phi(r_{12})$  é dada pela expressão

$$\phi(r_{12}) = 1 - \beta e^{-\alpha r_{12}^2} \quad (2.4.2)$$

A função (2.4.2) permite tratar a correlação eletrônica como uma função da distância relativa  $r_{12}$  entre os elétrons incidente e atômico bem como da energia do elétron incidente. Os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  são ajustáveis, sendo o primeiro uma função crescente da energia e o segundo uma função decrescente. Isto pode ser visto através dos limites:

$$\lim_{\substack{\alpha \rightarrow \infty \\ \beta \rightarrow 0}} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1} \Phi_0(r_2) \quad (2.4.3)$$

Deste modo, a influência da energia é introduzida pelos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ . Quando a energia do elétron incidente é grande, a função de onda (2.4.1) fica sendo o produto da função de onda correspondente a uma onda plana pela função de onda do átomo de hidrogênio no estado fundamental. Além disso, o elemento de matriz de transição  $T^d$ , dado pela eq. (1.6.12), recai <sup>(16)</sup> na 1ª aproximação de Born (2.2.4).

Através da função de onda (2.4.2), vemos que

$$\lim_{r_{12} \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1} \Phi_0(r_2) \quad (2.4.4)$$

e

$$\lim_{r_{12} \rightarrow 0} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1} \Phi_0(r_2) (1-\beta) \quad (2.4.5)$$

A comparação entre as eqs. (2.4.4) e (2.4.5) mostra que a amplitude da função de onda (2.4.1) decresce quando a distância relativa entre os elétrons diminui.

O termo  $(-\beta e^{-\alpha r_{12}} (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1} \Phi_0(r_2))$  em (2.4.1) representa, na eq. (2.2.4), o papel de um termo corretivo <sup>(16)</sup> à aproximação de Born.

A função de onda correlacionada (2.4.1) reproduz <sup>(16)</sup>, qualitativamente, o comportamento da correlação elétron-elétron como função da energia do elétron incidente e do ângulo de espalhamento.

## 2.5 - APLICAÇÃO AO ESPALHAMENTO INELÁSTICO ELÉTRON-HIDROGÊNIO

No espalhamento inelástico elétron-hidrogênio abordado neste trabalho, as interações dependentes dos spins dos 2 elétrons serão desprezadas. Elas entrarão no espalhamento através do Princípio de Pauli. Também será desprezado o spin do próton. Supõe-se que o átomo de hidrogênio no estado inicial se encontra no seu estado fundamental.

A função de onda do sistema no estado inicial é portanto, descrita por

$$\psi_a = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} \Phi_0(r_2) \chi_{\nu_1}(s_1) \chi_{\nu_2}(s_2) \quad (2.5.1)$$

onde  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$  são as coordenadas dos 2 elétrons em relação ao próton:  $s_i$  são as variáveis de spin dos elétrons e  $\chi_{\nu_i}$  seus autovetores do spin  $\alpha(\uparrow)$  ou  $\beta(\downarrow)$ .

Se o átomo de hidrogênio é excitado diretamente ao estado  $\Phi_n(r_2)$ , o estado final do sistema é dado por

$$\psi_b = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \Phi_n(r_2) \chi_{\nu'_1}(s_1) \chi_{\nu'_2}(s_2) \quad (2.5.2)$$

Caso o elétron incidente ocupe o lugar do elétron atômico, com o átomo de hidrogênio sendo excitado ao estado  $\Phi_n(r_1)$  o estado final do sistema fica sendo

$$\psi_{pb} = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_2} \phi_n(r_1) \chi_{v, r_1}(s_2) \chi_{v, r_2}(s_1) \quad (2.5.3)$$

As eqs. (2.5.2) e (2.5.3) satisfazem a relação da conservação de energia total do sistema, a saber

$$\frac{1}{2} K_f^2 + \omega_n = \frac{1}{2} K_i^2 + \omega_0 \quad , \quad \omega_0 = -\frac{1}{2} \quad (2.5.4)$$

Conforme a eq. (1.6.12), o elemento de matriz de transição, corretamente simetrizado, é representado, neste caso por

$$T_{ba} = T_{ba}^d - T_{ba}^{ex} \quad (2.5.5)$$

Sendo o elemento de matriz de transição direta dado pela eq. (1.6.2), com  $V_i = V_f = V_d$ ,

$$T_{ba}^d = \langle \psi_b | V_d | \psi_a^{(+)} \rangle \quad (2.5.6a)$$

$$= \langle \psi_b^{(-)} | V_d | \psi_a \rangle \quad (2.5.6b)$$

onde as funções  $\psi_n^{(\pm)}$  são dadas pela eq. (1.5.3) e

$$V_d = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1} \quad (2.5.6c)$$

O elemento da matriz de troca fica expresso por

$$T_{ba}^{ex} = \langle \psi_{pb} | V_p | \psi_a^{(+)} \rangle \quad (2.5.7a)$$

$$= \langle \psi_{pb}^{(-)} | V_d | \psi_a \rangle \quad (2.5.7b)$$

onde as funções  $\psi_{pb}$  e  $\psi_{pb}^{(-)}$  são dadas pelas eqs. (2.5.3) e (1.5.3), respectivamente, com a aplicação do operador simetrização (1.6.5):

$$\psi_{pb}^{(-)} = \psi_{pb} + \frac{1}{E-H-i\epsilon} V_p \psi_{pb} \quad (2.5.7c)$$

onde

$$V_p = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} \quad (2.5.7d)$$

Para o feixe de elétrons não polarizado, com os elétrons sendo indistinguíveis quanto ao seu estado de spin, as probabilidades de ocorrerem os estados singleto e tripleto são 1/4 e 3/4, respectivamente. As suas contribuições para a seção de choque diferencial são  $\frac{1}{4}|f_{ba}+g_{ba}|^2$  e  $\frac{3}{4}|f_{ba}-g_{ba}|^2$ . Portanto, a seção de choque diferencial dada pela eq. (1.7.5) se torna

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^4 \frac{K_f}{K_i} \left\{ \frac{1}{4}|T_{ba}^d+T_{ba}^{ex}|^2 + \frac{3}{4}|T_{ba}^d-T_{ba}^{ex}|^2 \right\} \quad (2.5.8)$$

onde, em termos das amplitudes de espalhamento direto e de troca,

$$f_{ba} = -(2\pi)^2 T_{ba}^d \quad (2.5.9a)$$

$$g_{ba} = -(2\pi)^2 T_{ba}^{ex} \quad (2.5.9b)$$

Vê-se na eq. (2.5.8) que, para uma mistura de estados de spin inicial e final, a seção de choque diferencial deve ser calculada com uma função de onda espacial simétrica em 1/4 dos casos e com uma função de onda espacial anti-simétrica nos 3/4 restantes. Isto é uma consequência direta do Princípio de Pauli que requer que a função de onda de um sistema de fêrmions idênticos seja anti-simétrica, já que a função de spin anti-simétrica do estado singleto

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)] \quad (2.5.10a)$$

deve ser multiplicada pela função de onda espacial simétrica  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ , enquanto que as 3 funções de spin simétricas do estado tripleto

$$\begin{aligned} & \alpha(1)\alpha(2) \\ & \beta(1)\beta(2) \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(1)\beta(2) + \alpha(2)\beta(1)] \end{aligned} \tag{2.5.10b}$$

devem ser multiplicadas pela função de onda espacial anti-simétrica  $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)$ .



CÁLCULO DA SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL

3.1 - ESPALHAMENTO INELÁSTICO 1s-2s

3.1-a) - Matriz Direta  $T_{1s-2s}^d$

No seu estado inicial, o sistema é descrito pela função de onda dada na eq. (2.4.1). Por conveniência, introduziremos a notação

$$\Phi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_1} \Phi_0(r_2)$$

(3.1.1)

e

$$\Phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1} \Phi_n(r_2)$$

onde  $\Phi_0(r_2)$  e  $\Phi_n(r_2)$  são as funções de onda dos estados fundamental e excitado do átomo de hidrogênio. Para a transição 1s-2s, elas assumem a forma

$$\begin{aligned} \Phi_0(r) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \\ \Phi_{2s}(r) &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} (2-r) e^{-\frac{1}{2}r} \end{aligned}$$

(3.1.2)

As funções na eq. (3.1.2) descrevem os estados inicial e final, respectivamente, do átomo de hidrogênio.

Inserindo as eqs. (2.4.1) e (3.1.1), com ajuda da eq. (3.1.2), na eq. (2.5.6) encontramos a seguinte expressão para o elemento de matriz direta <sup>(16)</sup>:

$$T_{1s-2s}^d = \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle - \beta \langle \phi_f | V | e^{-\alpha r_1^2} \phi_i \rangle \quad (3.1.3)$$

onde  $V$  é dado pela eq. (2.5.6c). Verifica-se na eq. (3.1.3) que o 1º termo é a aproximação de Born, eq. (2.2.4), e que o 2º termo atua como uma correção à aproximação de Born <sup>(16)</sup>. Podemos ainda colocar a eq. (3.1.3) na forma

$$T_{1s-2s}^d = T_{1s-2s}^B - T_{1s-2s}^C \quad (3.1.4)$$

sendo  $T_{1s-2s}^B$  a matriz de Born e  $T_{1s-2s}^C$  a matriz devido à correlação elétron-elétron.

A matriz de Born,  $T_{1s-2s}^B$ , é dada pela eq. <sup>(3)</sup>

$$T_{1s-2s}^B = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{1}{(K^2 + \frac{9}{4})^3} \quad (3.1.5)$$

enquanto o termo de correção,  $T_{1s-2s}^C$ , é calculado segundo a equação <sup>(16)</sup>:

$$T_{1s-2s}^C = \int_0^\infty \frac{\text{sen}Kr_1}{Kr_1} F_1(r_1) dr_1 + \int_0^\infty \int_{r_2}^\infty F_2(r_2, r_{12}) dr_{12} dr_2 \quad (3.1.6)$$

onde as funções  $F_1$  e  $F_2$  nos integrandos da eq. (3.1.6) são dadas, respectivamente, por

$$F_1(r_1) = \frac{\sqrt{2}}{32\pi} \frac{\beta}{\alpha^{3/2}} \frac{e^{\frac{9}{16\alpha}}}{\alpha^{5/2}} \left\{ \left(\frac{3}{2} - 2\alpha r_1\right) \left[1 - \phi\left(\frac{\frac{3}{2} - 2\alpha r_1}{2\sqrt{\alpha}}\right)\right] e^{-\frac{3}{2}r_1} - \left(\frac{3}{2} + 2\alpha r_1\right) \left[1 - \phi\left(\frac{\frac{3}{2} + 2\alpha r_1}{2\sqrt{\alpha}}\right)\right] e^{\frac{3}{2}r_1} \right\} - \frac{\beta e^{9/32\alpha}}{16\pi \alpha^{5/2}} \left\{ e^{-\frac{1}{2}\alpha r_1^2} - \frac{3}{4}r_1 D_{-3}\left(\frac{\frac{3}{2} - 2\alpha r_1}{\sqrt{2\alpha}}\right) - \right.$$

$$= e^{-\frac{1}{2}\alpha r_1^2 + \frac{3}{4}r_1} D_{-3}\left(\frac{\frac{3}{2} + 2\alpha r_1}{\sqrt{2\alpha}}\right) \} \quad (3.1.7)$$

$$F_2(r_2, r_{12}) = \frac{\beta}{2\sqrt{2}\pi^2 K^2} \text{sen}Kr_2 (r_2^2 - 2r_2) e^{-\frac{3}{2}r_2} \text{sen}Kr_{12} e^{-\alpha r_{12}^2} \quad (3.1.8)$$

A notação  $D_{-3}(Z)$  designa a função cilíndrica parabólica. Esta função, com os argumentos que aparecem na eq. (3.1.7), apresenta a seguinte forma <sup>(17)</sup>:

$$D_{-3}(Z) = \frac{1}{2} \left\{ Z e^{-\frac{1}{4}Z^2} + \sqrt{\pi/2} (1-Z^2) [1-\phi\left(\frac{Z}{\sqrt{2}}\right)] e^{\frac{1}{4}Z^2} \right\} \quad (3.1.9)$$

$$\text{com } Z = \frac{\frac{3}{2} \pm 2\alpha r_1}{\sqrt{2\alpha}}$$

onde  $\phi(x)$ , que aparece nas eqs. (3.1.7) e (3.1.9), é a função erro <sup>(17)</sup>. Introduzindo a eq. (3.1.9) na eq. (3.1.7) obtemos para a eq. (3.1.6), após alguma manipulação algébrica, o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} T_{1s-2s}^C &= \frac{\sqrt{2}}{(4\pi\alpha)^2} \int_0^\infty dr_1 \frac{\text{sen}Kr_1}{Kr_1} \left\{ r_1 e^{-\alpha r_1^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\alpha}} e^{\frac{9}{16\alpha}} \left[ \alpha r_1^2 - (2\alpha + \frac{3}{2})r_1 \right. \right. \\ &+ \left. \left. 1 + \frac{9}{16\alpha} \right] [1-\phi\left(\frac{\frac{3}{2} - 2\alpha r_1}{2\sqrt{\alpha}}\right)] e^{-\frac{3}{2}r_1} \right. \\ &\left. - \left[ \alpha r_1^2 + (2\alpha + \frac{3}{2})r_1 + 1 + \frac{9}{16\alpha} \right] [1-\phi\left(\frac{\frac{3}{2} + 2\alpha r_1}{2\sqrt{\alpha}}\right)] e^{\frac{3}{2}r_1} \right\} \quad (3.1.10) \\ &+ \frac{\beta}{2\sqrt{2}(\pi K)^2} \int_0^\infty \text{sen}Kr_2 (r_2^2 - 2r_2) e^{-\frac{3}{2}r_2} \left[ \int_{r_2}^\infty \text{sen}Kr_{12} e^{-\alpha r_{12}^2} dr_{12} \right] dr_2 \end{aligned}$$

Portanto, com as eqs. (3.1.5) e (3.1.10), podemos obter a seguinte expressão para o elemento  $T_{1s-2s}^d$  da matriz de transição direta:

$$T_{1s-2s}^d = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{1}{(K^2 + \frac{9}{4})^3} - T_{1s-2s}^C \quad (3.1.11)$$

com  $T_{1s-2s}^C$  sendo dada pela eq. (3.1.10) e onde  $K$  é o módulo do vetor do momento transferido, dado pela eq. (2.3.2). O valor de  $K$  é obtido da relação

$$K = (K_i^2 + K_f^2 - 2K_i K_f \cos\theta)^{1/2} \quad (3.1.12)$$

sendo  $\theta$  o ângulo de espalhamento entre os vetores de onda incidente  $\vec{K}_i$  e espalhado  $\vec{K}_f$ . A conservação de energia conduz à relação entre os módulos  $K_i$  e  $K_f$ , expressa <sup>(3)</sup> por

$$K_f = (K_i^2 - \frac{3}{4})^{1/2} \quad (3.1.13)$$

para a excitação ao estado  $|n\rangle$ , onde  $n = 2$ .

Nota-se na eq. (3.1.5) que a matriz de transição, na 1ª aproximação de Born, decresce com  $K^{-6}$  ao passo que a matriz de transição elástica <sup>(3)</sup> nesta mesma aproximação decresce com  $K^{-2}$ , ou seja, a eq. (3.1.5) decresce mais rapidamente para grandes momentos  $K$ . Pode-se mostrar <sup>(3)</sup> que o 2º termo de Born, para a transição 1s-2s, comporta-se como  $K_i^{-1} K^{-2}$ , de modo que o 2º termo de Born fornece a contribuição dominante para  $T_{ba}^d$  em altas energias no espalhamento inelástico.

### 3.1-b) - Matriz de Troca $T_{1s-2s}^{tr}$

A matriz de troca, dada pela eq. (2.5.7) pode ser expressa como

$$T_{1s-2s}^{tr} = \langle \Phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V_d | \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \rangle \quad (3.1.14)$$

onde as funções  $\Phi_f$  e  $\psi$  são dadas, respectivamente, por

$$\begin{aligned}\Phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1} \Phi_{2s}(r_2) \\ \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) &= (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \Phi_{1s}(\vec{r}_1) (1 - \beta e^{-\alpha r_1^2})\end{aligned}\quad (3.1.15)$$

e as funções  $\Phi_{1s}$  e  $\Phi_{2s}$  são apresentadas na eq. (3.1.2), as quais, por conveniência, são colocadas na forma

$$\begin{aligned}\Phi_{1s}(r) &= R_{10}(r) Y_{00}(\hat{r}) \\ \Phi_{2s}(r) &= R_{20}(r) Y_{00}(\hat{r})\end{aligned}\quad (3.1.16)$$

onde  $Y_{0,0}(\hat{r}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$  é o harmônico esférico e

$$\begin{aligned}R_{10}(r) &= 2e^{-r} \\ R_{20}(r) &= \frac{1}{2^{3/2}} (2-r)e^{-\frac{1}{2}r}\end{aligned}\quad (3.1.17)$$

Assim, com a eq. (3.1.15), a eq. (3.1.14) pode ser escrita na forma

$$T_{1s-2s}^{tr} = \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle - \beta \langle \Phi_f | V | \Phi_i e^{-\alpha r_1^2} \rangle \quad (3.1.18)$$

com

$$\Phi_i = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \Phi_{1s}(r_1)$$

O potencial  $V$  é dado pela eq. (2.5.6c). O 1º termo na eq. (3.1.18) corresponde à aproximação de Ochkur, enquanto que o 2º termo representa uma correção. Podemos colocar a eq. (3.1.18) na forma

$$T_{1s-2s}^{tr} = T_{1s-2s}^{Och} - T_{1s-2s}^{trC} \quad (3.1.19)$$

A aproximação de Ochkur,  $T_{1s-2s}^{Och}$ , pode ser colocada na forma

$$T_{1s-2s}^{Och} = T_1 - T_2 \quad (3.1.20)$$

onde

$$T_1 = \langle (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{2s}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \phi_{1s}(r_1) \rangle \quad (3.1.21a)$$

$$T_2 = \langle (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{2s}(r_2) \left| \frac{1}{r_1} \right| (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \phi_{1s}(r_1) \rangle \quad (3.1.21b)$$

A fim de calcularmos  $T_1$ , devemos usar a relação

$$\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2 - \vec{K}_f \cdot \vec{r}_1 = \vec{K} \cdot \vec{r}_1 - \vec{K}_i \cdot \vec{r}_{12} \quad (3.1.22)$$

onde  $\vec{K}$  é o vetor momento transferido, dado pela eq. (2.3.2) e  $\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  designa o vetor posição relativa entre os vetores  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$ . Inserindo a relação (3.1.22) na eq. (3.1.21a) encontramos

$$T_1 = (2\pi)^{-3} \int e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} \phi_{1s}(r_1) I_1(\vec{r}_1, \vec{r}_{12}) d\vec{r}_1 \quad (3.1.23)$$

com

$$I_1(\vec{r}_1, \vec{r}_{12}) = \int e^{-i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_{12}} \phi_{2s}^*(\vec{r}_1 - \vec{r}_{12}) \frac{1}{r_{12}} d\vec{r}_2 \quad (3.1.24)$$

Na integração em  $r_2$ , as coordenadas esféricas,  $r_1$ ,  $\theta_1$  e  $\phi_1$ , do vetor  $\vec{r}_1$  permanecem constantes. Deste modo, o elemento de volume  $d\vec{r}_2$  da integral (3.1.24) pode ser reescrito como  $d\vec{r}_{12} = r_{12}^2 \sin\theta_{12} dr_{12} d\theta_{12} d\phi_{12}$ , sendo  $r_{12}$ ,  $\theta_{12}$  e  $\phi_{12}$  as coordenadas esféricas do vetor  $\vec{r}_{12}$ . Colocando a origem do vetor  $\vec{r}_{12}$  na extremidade do vetor  $\vec{r}_2$  e tendo o vetor  $\vec{K}_i$  dirigido ao longo do eixo -Z, encontramos que

$$I_1(\vec{r}_1, \vec{r}_{12}) = \int_0^\infty dr_{12} \int_{-1}^1 \psi(r_1, r_{12}, x) e^{-iK_i r_{12} x} r_{12} dx$$

com

$$x = \cos\theta_{12}$$

e onde

$$\Psi(r_1, r_{12}, x) = \int_0^{2\pi} \Phi_{2s}^*(\vec{r}_1 - \vec{r}_{12}) d\phi_{12} \quad (3.1.25)$$

Integrando  $I_1$  por partes em relação a  $\theta_{12}$  e em relação a  $r_{12}$ , e levando-se em conta a condição de contorno  $\Psi(r_1, r_{12}, x) \rightarrow 0$  quando  $r_{12} \rightarrow \infty$ , obtemos

$$I_1 = \frac{1}{K_i^2} [\Psi(r_1, r_{12}, 1) + \Psi(r_1, r_{12}, -1)]$$

Expandindo a função  $\Psi(r_1, r_{12}, \pm 1)$  em torno de  $r_{12} \sim 0$  e tomando apenas o 1º termo da expansão, obtemos, com ajuda da eq. (3.1.25),

$$\Psi(r_1, 0, \pm 1) = \int_0^{2\pi} \Phi_{2s}^*(r_1) d\phi_{12} = 2\pi \Phi_{2s}^*(r_1)$$

Assim, a eq. (3.1.23) assume a forma

$$T_1 = \frac{1}{2\pi^2 K_i^2} \int e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} \Phi_{2s}^*(r_1) \Phi_{1s}(r_1) d\vec{r}_1 \quad (3.1.26)$$

Desenvolvendo agora  $e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1}$  em harmônicos esféricos

$$e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} 4\pi i^{\ell} j_{\ell}(Kr) Y_{\ell m}^*(\hat{K}) Y_{\ell m}(\hat{r}) \quad (3.1.27)$$

onde os harmônicos esféricos são dados por

$$Y_{\ell m}(\hat{K}) = (-1)^m \left[ \frac{(2\ell+1)}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!} \right]^{1/2} P_{\ell}^m(\cos\theta_K) e^{im\phi_K}$$

e

Podemos então reescrever a equação (3.1.26), usando para isto as equações (3.1.16) e (3.1.27). Obtemos finalmente:

$$T_1 = \frac{1}{2(\pi K_1)^2} \int_0^\infty \sum_{\ell'} \sum_{m'} 4\pi i^{\ell'} j_{\ell'}(Kr_1) R_{20}(r_1) R_{10}(r_1) r_1^2 dr_1 Y_{\ell', m'}^*(\hat{K}) \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'}$$

onde, por facilidade de cálculo, usamos

$$\int_0^{4\pi} Y_{\ell', m'}^*(\hat{r}_1) Y_{\ell m}(\hat{r}_1) d\hat{r}_1 = \delta_{\ell \ell'} \delta_{m m'} \quad (3.1.28)$$

Para o nível  $s$ ,  $\ell' = \ell = 0$ ,  $m' = m = 0$ ,  $\delta_{\ell \ell'} = \delta_{m m'} = 1$ . Neste caso, levando em conta a equação (3.1.17), a equação (3.1.26) fica:

$$T_1 = \frac{1}{2\sqrt{2} (\pi K_1)^2 K} \int_0^\infty (2r_1 - r_1^2) e^{-\frac{3}{2}r_1} \text{sen}(Kr_1) dr_1 \quad (3.1.29)$$

Na obtenção da equação (3.1.29) usamos a função de Bessel  $j_0(Kr_1) = \text{sen}(Kr_1)/Kr_1$ . A integral (3.1.29) tem solução (17)

$$T_1 = \frac{4}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{K^2}{K_1^2 (K^2 + \frac{9}{4})^3} \quad (3.1.30)$$



A fim de calcularmos  $T_2$ , devemos colocar a equação (3.1.21b) na seguinte forma:

$$T_2 = (2\pi)^{-3} \int e^{-i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1} \Phi_{1s}(r_1) I_2(r_2) \frac{d\vec{r}_1}{r_1} \quad (3.1.31)$$

Utilizamos na solução de  $I_2$  o sistema de coordenadas ilustrado na Figura 3.1.

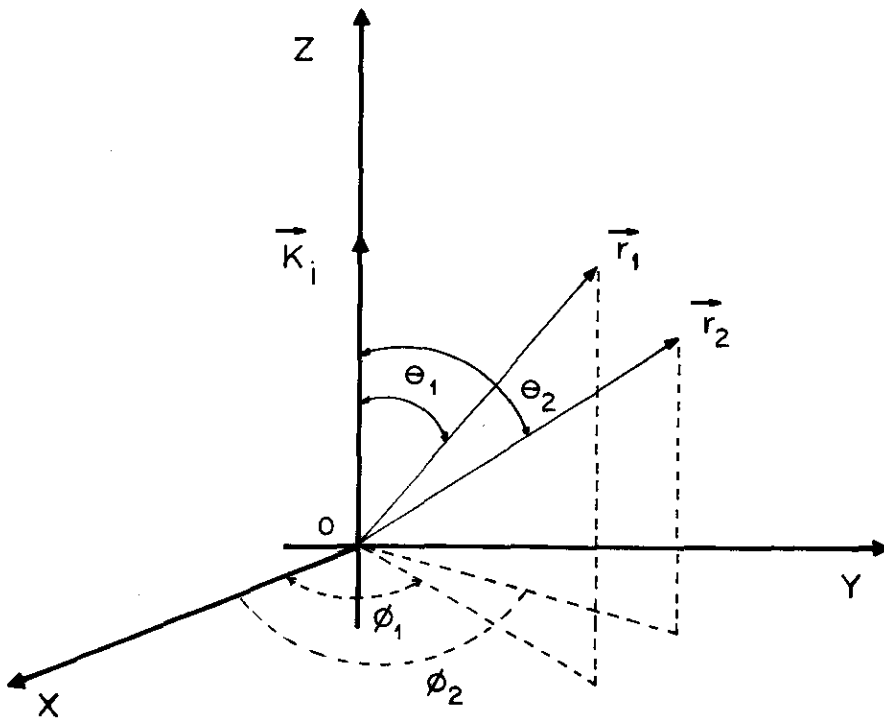


Figura 3.1

Sistema de coordenadas com as coordenadas esféricas  $r_1$ ,  $\theta_1$  e  $\phi_1$  e  $r_2$ ,  $\theta_2$  e  $\phi_2$  tendo o vetor  $\vec{K}_i$  dirigido ao longo do eixo-z.

Por meio da 2ª relação na eq. (3.1.2), verificamos que a solução da integral  $I_2(r_2)$  é

$$I_2(r_2) = \int e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2} \phi_{2s}^*(r_2) d\vec{r}_2 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{4K_i^2 - 1}{(K_i^2 + \frac{1}{4})^3}$$

Assim, a eq. (3.1.31) fica

$$T_2 = \frac{1}{8\pi^2 \sqrt{2}\pi} \frac{4K_i^2 - 1}{(K_i^2 + \frac{1}{4})^3} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{1s}(r_1) \frac{d\vec{r}_1}{r_1}$$

Procedendo da mesma maneira que no caso  $T_1$ , e usando a 1ª relação das eqs. (3.1.16) e (3.1.17), encontramos:

$$T_2 = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi^2} \frac{4K_i^2 - 1}{(K_i^2 + \frac{1}{4})^3 K_f} \int_0^\infty \text{sen}(K_f r_1) e^{-r_1} dr_1$$

cuja solução nos fornece

$$T_2 = \frac{1}{2\sqrt{2}\pi^2} \frac{4K_i^2 - 1}{(K_i^2 + \frac{1}{4})^3} \frac{1}{K_f + 1} \quad (3.1.32)$$

Portanto, com as eqs. (3.1.30) e (3.1.32), podemos escrever a eq. (3.1.20) na forma

$$T_{1s-2s}^{Och} = \frac{4}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{K^2}{K_i^2 (K^2 + \frac{9}{4})^3} - \frac{1}{2\sqrt{2}\pi^2} \frac{4K_i^2 - 1}{(K_i^2 + \frac{1}{4})^3 (K_f^2 + 1)} \quad (3.1.33)$$

O 2º termo da eq. (3.1.19),  $T_{1s-2s}^{trC}$ , pode como na equação (3.1.20), ser colocado na forma:

$$T_{1s-2s}^{\text{trC}} = T_3 - T_4 \quad (3.1.34)$$

onde

$$T_3 = (2\pi)^{-3} \beta \langle e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1} \Phi_{2s}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \Phi_{1s}(r_1) e^{-\alpha r_{12}^2} \rangle \quad (3.1.35a)$$

$$T_4 = (2\pi)^{-3} \beta \langle e^{i\vec{K}_f \cdot \vec{r}_1} \Phi_{2s}(r_2) \left| \frac{1}{r_1} \right| e^{i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_2} \Phi_{1s}(r_1) e^{-\alpha r_{12}^2} \rangle \quad (3.1.35b)$$

Fazendo uso da relação (3.1.22) e mediante um procedimento análogo ao adotado no desenvolvimento da matriz  $T_1$ , podemos escrever a eq. (3.1.35a) na forma

$$T_3 = (2\pi)^{-3} \beta \int e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} \Phi_{1s}(r_1) I_3(r_1, r_{12}) d\vec{r}_1$$

onde

$$I_3(r_1, r_{12}) = \int \Phi_{2s}^*(\vec{r}_1 - \vec{r}_{12}) e^{-i\vec{K}_i \cdot \vec{r}_{12}} \frac{e^{-\alpha r_{12}^2}}{r_{12}} d\vec{r}_{12}$$

Seguindo os mesmos passos usados no cálculo de  $I_1$ , obtemos para  $I_3$

$$I_3 = \frac{4\pi}{K_i} \Phi_{2s}^*(r_1) \int_0^\infty \text{sen}(K_i r_{12}) e^{-\alpha r_{12}^2} dr_{12}$$

Com isto,  $T_3$  pode ser escrita como:

$$T_3 = \frac{\beta}{2\pi^2 K_i} \int_0^\infty e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(K_i r_{12}) I_{31}(r_1) dr_{12}$$

onde

$$I_{31}(r_1) = \int e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_1} \Phi_{2s}^*(r_1) \Phi_{1s}(r_1) d\vec{r}_1 \quad .$$

Através das eqs. (3.1.27), (3.1.16) e (3.1.17) e seguindo o mesmo método usado no desenvolvimento de  $T_1$ , encontramos a seguinte solução para  $I_{31}$ :

$$I_{31} = \frac{4\sqrt{2} K}{(K^2 + \frac{9}{4})^3}$$

Assim,  $T_3$  apresenta a forma

$$T_3 = \frac{2\sqrt{2}\beta}{\pi^2} \frac{K^2}{K_i (K^2 + \frac{9}{4})^3} \int_0^\infty e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(K_i r_{12}) dr_{12} \quad (3.1.36)$$

No desenvolvimento de  $T_4$ , seguimos a mesma sistemática empregada para a eq. (3.1.23). Assim, a eq. (3.1.35b) nos fornece

$$T_4 = (2\pi)^{-3} \beta \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \phi_{1s}(r_1) \frac{1}{r_1} I_4(r_1, r_{12}) d\vec{r}_1$$

onde

$$I_4(r_1, r_{12}) = \int e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_{12}} \phi_{2s}^*(\vec{r}_1 - \vec{r}_{12}) e^{-\alpha r_{12}^2} d\vec{r}_{12} .$$

Com as coordenadas esféricas do vetor  $\vec{r}_{12}$  tendo a origem na extremidade do vetor  $\vec{r}_2$  e o vetor  $\vec{k}_i$  dirigido ao longo do eixo-Z. Fazendo a mesma substituição como no caso de  $I_1$  e seguindo um procedimento análogo ao de  $I_3$ , encontramos para  $I_4$ , cuja integral se encontra tabelada em (17), a seguinte expressão:

$$I_4 = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{K_i^2}{4\alpha}} \phi_{2s}^*(r_1)$$

portanto,

$$T_4 = \frac{\beta}{8(\pi\alpha)^{3/2}} e^{-K_i^2/4\alpha} \int e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}_1} \phi_{2s}^*(r_1) \phi_{1s}(r_1) \frac{d\vec{r}_1}{r_1} \quad (3.1.37)$$

Usando as eqs. (3.1.16) e procedendo-se do mesmo modo como  $T_1$ , podemos resolver a integral em (3.1.37), obtendo:

$$T_4 = \frac{\beta}{16\sqrt{2}(\pi\alpha)^{3/2}} \frac{4K^2+3}{(K^2 + \frac{9}{4})^2} e^{-\frac{K_i^2}{4\alpha}} \quad (3.1.38)$$

A eq. (3.1.34), pode, portanto, ser escrita na forma:

$$\begin{aligned} T_{1s-2s}^{trC} &= \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{\beta K^2}{K_i (K^2 + \frac{9}{4})^3} \int_0^\infty e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(K_i r_{12}) dr_{12} - \\ &\quad - \frac{K_i^2}{4\alpha} \\ &\quad - \frac{\beta e}{16\sqrt{2}(\alpha\pi)^{3/2}} \frac{4K^2+3}{(K^2 + \frac{9}{4})^2} \end{aligned} \quad (3.1.39)$$

Deste modo, fazendo uso das eqs. (3.1.33) e (3.1.39), podemos expressar a matriz de troca  $T_{1s-2s}^{tr}$ , como:

$$\begin{aligned} T_{1s-2s}^{tr} &= \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2} \left\{ \frac{K^2}{K_i (K^2 + \frac{9}{4})^3} - \frac{1}{8} \frac{4K_i^2 - 1}{(K_i + \frac{1}{4})^3 (K_f + 1)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sqrt{\pi} \beta e^{-\frac{K_i^2}{4\alpha}}}{64\alpha^{3/2}} \frac{4K^2+3}{(K^2 + \frac{9}{4})^2} - \frac{\beta K^2}{K_i (K^2 + \frac{9}{4})^3} \int_0^\infty e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(K_i r_{12}) dr_{12} \right\} \end{aligned} \quad (3.1.40)$$

### 3.2 - ESPALHAMENTO INELÁSTICO 1s-2p

#### 3.2.a) - Matriz Direta - $T_{1s-2p}^d$

Na transição 1s-2p, o estado inicial do sistema ainda é descrito pela eq. (2.4.1), e o estado final é dado por

$$\Phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \Phi_{2p_m}(r_2) \quad (3.2.1)$$

Devido ao fato do estado 2p ser triplamente degenerado, existem 3 contribuições para a transição 1s-2p:

$$1s \rightarrow 2\bar{p}_0$$

$$1s \rightarrow 2p_1$$

$$1s \rightarrow 2p_{-1}$$

Contudo, somente a primeira transição não é nula, quando escolhemos o eixo de quantização ao longo do vetor momento transferido  $\vec{k}$ . Isto decorre do fato de ser nula <sup>(3,21)</sup> a integração envolvendo os fatores  $e^{im\phi}$  que aparecem nas funções de onda dos micro-estados  $m = \pm 1$  do estado 2p. Assim, o único micro-estado excitado é então o micro-estado  $2p = 2p_0$ .

Com isto, inserindo as eqs. (2.4.1) e (3.2.1) na eq. (2.5.6), obtemos o resultado

$$T_{1s-2p}^d = \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle - \beta \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle e^{-\alpha r_{12}^2} \quad (3.2.2)$$

onde V é dado pela eq. (2.5.6c). Novamente, verificamos que o

1º termo na eq. (3.2.2) constitui a aproximação de Born, enquanto o 2º termo representa uma correção. As funções  $\phi_i$  e  $\phi_f$  são dadas pela eq. (3.1.1).

A eq. (3.2.2) pode ser ainda colocada na forma

$$T_{1s-2p}^d = T_{1s-2p}^{\text{Born}} - T_{1s-2p}^C \quad (3.2.3)$$

onde

$$T_{1s-2p}^C = T_1 - T_2$$

com

$$T_1 = \beta \langle \phi_f | \frac{1}{r_{12}} | \phi_i \rangle e^{-\alpha r_{12}^2} \quad (3.2.4a)$$

$$T_2 = \beta \langle \phi_f | \frac{1}{r_1} | \phi_i \rangle e^{-\alpha r_{12}^2} \quad (3.2.4b)$$

A matriz de Born,  $T_{1s-2p}^{\text{Born}}$ , é fornecida pela equação (3)

$$T_{1s-2p}^{\text{Born}} = \frac{3\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{i}{k(k^2 + \frac{9}{4})^3} \quad (3.2.5)$$

onde  $k$  é o módulo do vetor momento transferido obtido da eq. (2.3.2). Na eq. (3.2.5), nota-se que a matriz de Born decresce com  $k^{-7}$ , o que faz com que para grandes momentos transferidos ela decresça mais rapidamente do que no caso do espalhamento elástico (3). Isto acarreta que a secção de choque diferencial exiba um pico mais acentuado do que o apresentado pela secção de choque diferencial elástica e o correspondente à transição 1s-2s.

Fazendo uso da relação

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{12}}$$

e das funções

$$\Phi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r} \quad (3.2.6a)$$

$$\Phi_{2p}(r) = \frac{1}{2^{5/2}\sqrt{\pi}} r e^{-\frac{1}{2}r} \cos\theta \quad (3.2.6b)$$

e com a eq. (3.1.1) inserida na eq. (2.5.6), obtemos para  $T_1$ , fornecida pela eq. (3.2.4a), o seguinte resultado:

$$T_1 = \frac{(2\pi)^{-3}}{2^{5/2}\pi} \beta \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_2} e^{-\frac{3}{2}r_2} r_2 \cos\theta_2 I_1 d\vec{r}_2, \quad (3.2.7)$$

onde

$$I_1 = \int e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_{12}} \frac{e^{-\alpha r_{12}^2}}{r_{12}} d\vec{r}_{12}. \quad (3.2.8)$$

Utilizamos acima o sistema de coordenadas, ilustrado na Figura 3.2, com as coordenadas esféricas  $r_2$ ,  $\theta_2$  e  $\phi_2$ , e  $r_{12}$ ,  $\theta_{12}$  e  $\phi_{12}$  dos vetores  $\vec{r}_2$  e  $\vec{r}_{12}$ , respectivamente, em relação ao vetor  $\vec{k}$  tomado sobre o eixo-z de quantização.

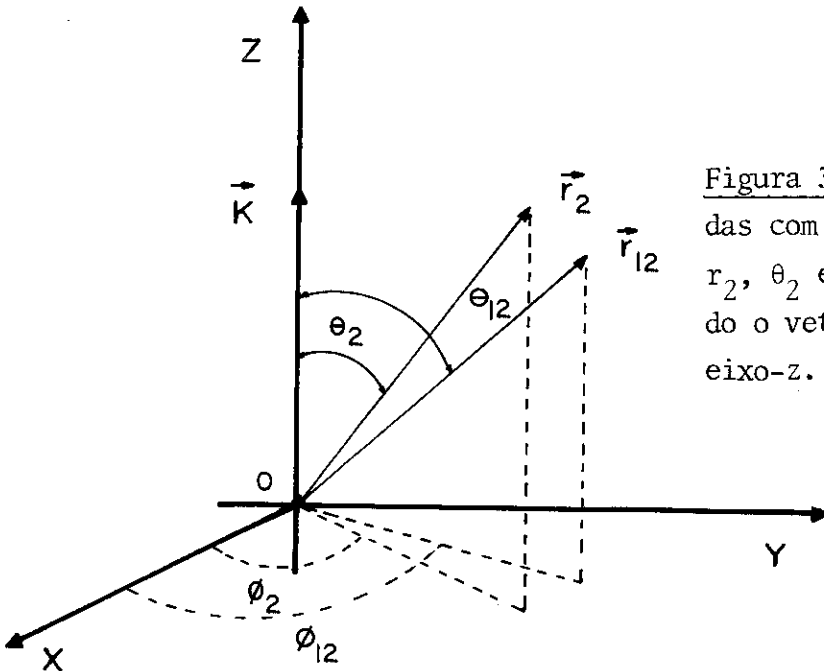


Figura 3.2 - Sistema de coordenadas com as coordenadas esféricas  $r_2$ ,  $\theta_2$  e  $\phi_2$  e  $r_{12}$ ,  $\theta_{12}$  e  $\phi_{12}$  tendo o vetor  $\vec{k}$  dirigido ao longo do eixo-z.



Levando-se em conta que  $r_2$ ,  $\theta_2$  e  $\phi_2$  permanecem constantes durante a integração em  $d\vec{r}_1$ , demonstra-se<sup>(16)</sup>, através do determinante Jacobiano da transformação  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2 + \vec{r}_{12}$ , que  $d\vec{r}_1 = d\vec{r}_{12}$ . Isto implica que podemos trocar  $d\vec{r}_1$  na eq. (3.2.8) por  $d\vec{r}_{12}$ . Uma vez que as coordenadas  $r_1$ ,  $r_2$  e  $r_{12}$  estão relacionadas através da equação

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta$$

onde  $\theta$  é o ângulo entre os vetores  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$ , durante a integração em  $d\vec{r}_{12}$ ,  $r_2$  permanece constante no intervalo  $0 \leq r_2 < \infty$  correspondente ao intervalo  $r_2 \leq r_{12} < \infty$ . Da Figura 3.2, segue-se que os intervalos das variáveis angulares  $\theta_{12}$  e  $\phi_{12}$  são

$$\begin{aligned} 0 &\leq \theta_{12} < \pi \\ 0 &\leq \phi_{12} < 2\pi \end{aligned}$$

Assim, podemos reescrever a eq. (3.2.8) na forma:

$$I_1 = \int_{r_2}^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} e^{-\alpha r_{12}^2} e^{i k r_{12} \cos \theta_{12}} r_{12} \sin \theta_{12} dr_{12} d\theta_{12} d\phi_{12}$$

A parte angular desta integral é efetuada facilmente dando o resultado

$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} e^{i k r_{12} \cos \theta_{12}} \sin \theta_{12} d\theta_{12} d\phi_{12} = \frac{4\pi}{k r_{12}} \text{sen}(k r_{12})$$

Assim, podemos escrever  $I_1$  como

$$I_1 = \frac{4\pi}{k} \int_{r_2}^{\infty} e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen} k r_{12} dr_{12}$$

e portanto, a eq. (3.2.7) fica

$$T_1 = \frac{\beta}{2^{7/2} \pi^3 k} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} r_2^{-3/2} r_2 \cos \theta_2 \left[ \int_{r_2}^{\infty} \text{sen}(kr_{12}) e^{-\alpha r_{12}^2} dr_{12} \right] d\vec{r}_2$$

Expandindo o termo  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2}$  em harmônicos esféricos e usando as relações

$$P_1^0(\cos \theta) = \cos \theta$$

$$\int_0^\pi P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) \text{sen} \theta d\theta = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell\ell'}$$

$$\int_0^{2\pi} e^{im\phi} d\phi = 2\pi \delta_{m,0}$$

isto permite simplificar a parte angular de  $T_1$ , obtendo-se o resultado

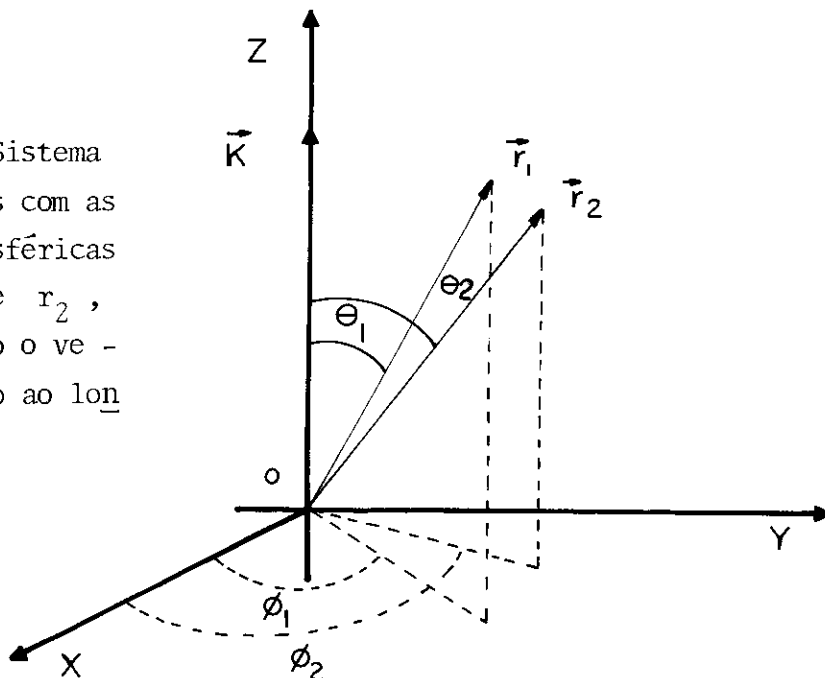
$$T_1 = \frac{i\beta}{2^{3/2} \pi^2 k} P_1^0(\cos \theta_k) \int_0^\infty j_1(kr_2) e^{-\frac{3}{2}r_2^2} r_2^3 dr_2 \cdot \left[ \int_{r_2}^{\infty} e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(kr_{12}) dr_{12} \right]$$

Levando-se em conta que  $P_1^0(\cos \theta_k) = \cos \theta_k = 1$ , já que o vetor  $\vec{k}$  se encontra sobre o eixo-z, Fig. 3.2, e que  $j_1(kr_2) = \frac{\text{sen} kr_2}{(kr_2)^2} - \frac{\cos(kr_2)}{kr_2}$ , encontramos  $T_1$  na forma

$$T_1 = \frac{i\beta}{2^{3/2} \pi^2 k^3} \int_0^\infty [r_2 \text{sen}(kr_2) - kr_2^2 \cos(kr_2)] e^{-\frac{3}{2}r_2^2} \left[ \int_{r_2}^{\infty} e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(kr_{12}) dr_{12} \right] dr_2 \quad (3.2.9)$$

Utilizando o sistema de coordenadas ilustrado na Figura 3.3

Figura 3.3 - Sistema de coordenadas com as coordenadas esféricas  $r_1, \theta_1$  e  $\phi_1$  e  $r_2, \theta_2$  e  $\phi_2$  tendo o vetor  $\vec{k}$  dirigido ao longo do eixo-z.



e a relação

$$e^{-\alpha r_{12}^2} = e^{-\alpha r_1^2} e^{-\alpha r_2^2} e^{2\alpha r_1 r_2 \cos \theta_2}$$

e usando ainda as eqs. (3.1.1) e (3.2.6), podemos escrever a eq. (3.2.4b) como

$$T_2 = \frac{\beta}{2^{11/2} \pi^4} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \frac{e^{-\alpha r_1^2}}{r_1} I_2 d\vec{r}_1 \quad (3.2.10)$$

onde

$$I_2 = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{-\alpha r_2^2 - \frac{3}{2} r_2} e^{2\alpha r_1 r_2 \cos \theta_2} r_2^3 \cos \theta_2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\phi_2$$

A parte angular desta integral pode ser efetuada com o auxílio da tabela <sup>(17)</sup>, dando o resultado

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{2\alpha r_1 r_2 \cos \theta_2} \cos \theta_2 \sin \theta_2 d\theta_2 d\phi_2 =$$

$$= -\frac{\pi}{2\alpha^2 r_1^2 r_2^2} (e^{2\alpha r_1 r_2} - e^{-2\alpha r_1 r_2}) + \frac{\pi}{\alpha r_1 r_2} (e^{2\alpha r_1 r_2} + e^{-2\alpha r_1 r_2}) .$$

Assim, podemos escrever  $I_2$  como

$$I_2 = -\frac{\pi}{2\alpha^2 r_1^2} \left\{ \int_0^\infty r_2 e^{-\alpha r_2^2 - ar_2} dr_2 - \int_0^\infty r_2 e^{-\alpha r_2^2 - br_2} dr_2 \right\} \\ + \frac{\pi}{\alpha r_1} \left\{ \int_0^\infty r_2^2 e^{-\alpha r_2^2 - ar_2} dr_2 + \int_0^\infty r_2^2 e^{-\alpha r_2^2 - br_2} dr_2 \right\}$$

onde

$$a = \frac{3}{2} - 2\alpha r_1 \quad (3.2.11a)$$

$$b = \frac{3}{2} + 2\alpha r_1 \quad (3.2.11b)$$

Com auxílio da tabela de integrais <sup>(17)</sup>, encontramos o seguinte resultado para  $I_2$

$$I_2 = -\frac{\pi}{4\alpha^3 r_1^2} \left\{ e^{\frac{a^2}{8\alpha}} D_{-2} \left( \frac{a}{\sqrt{2\alpha}} \right) - e^{\frac{b^2}{8\alpha}} D_{-2} \left( \frac{b}{\sqrt{2\alpha}} \right) \right\} \\ + \frac{\pi}{\sqrt{2}\alpha^{5/2} r_1} \left\{ e^{\frac{a^2}{8\alpha}} D_{-3} \left( \frac{a}{\sqrt{2\alpha}} \right) + e^{\frac{b^2}{8\alpha}} D_{-3} \left( \frac{b}{\sqrt{2\alpha}} \right) \right\}$$

Usando a relação dada pela eq. (3.1.9) e a relação dada pela tabela <sup>(17)</sup>,

$$D_{-2}(z) = -e^{-\frac{z^2}{4}} + \sqrt{\pi/2} z [1 - \phi(\frac{z}{\sqrt{2}})] e^{\frac{z^2}{4}}$$

após um pouco de algebrismo, encontramos que

$$I_2 = -\frac{\pi^{3/2}}{8\alpha^{7/2} r_1^2} \left\{ a \left[ 1 - \phi \left( \frac{a}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right] e^{\frac{a^2}{4\alpha}} - b \left[ 1 - \phi \left( \frac{b}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right] e^{\frac{b^2}{4\alpha}} \right\}$$

$$+ \frac{\pi^{3/2}}{4\alpha^{5/2} r_1} \left\{ \frac{3}{\sqrt{\pi\alpha}} + \left( 1 - \frac{a^2}{2\alpha} \right) \left[ 1 - \phi \left( \frac{a}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right] e^{\frac{a^2}{4\alpha}} + \left( 1 - \frac{b^2}{2\alpha} \right) \left[ 1 - \phi \left( \frac{b}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right] e^{\frac{b^2}{4\alpha}} \right\}$$

(3.2.12)

Com a eq. (3.2.12) na eq. (3.2.10) e utilizando o sistema de coordenadas ilustrado na Figura 3.3, podemos efetuar a parte angular para obtermos a expressão

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{ikr_1 \cos \theta_1} \sin \theta_1 d\theta_1 d\phi_1 = 4\pi \frac{\text{sen} kr_1}{kr_1}$$

(3.2.13)

Assim, com as eqs. (3.2.12) e (3.2.13), podemos simplificar a eq. (3.2.10) para obtermos

$$T_2 = -\frac{\beta e^{\frac{9}{16\alpha}}}{64\sqrt{2} \pi^{3/2} \alpha^{7/2}} \int_0^\infty \frac{\text{sen} kr_1}{kr_1} \frac{1}{r_1} \left\{ a \left[ 1 - \phi \left( \frac{a}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right] e^{-\frac{3}{2}r_1} - \right.$$

$$\left. - b \left[ 1 - \phi \left( \frac{b}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right] e^{\frac{3}{2}r_1} \right\} dr_1$$

$$+ \frac{\beta e^{\frac{9}{16\alpha}}}{32\sqrt{2} \pi^{3/2} \alpha^{5/2}} \int_0^\infty \frac{\text{sen} kr_1}{kr_1} \left\{ \frac{3}{\sqrt{\pi\alpha}} e^{-\alpha r_1^2} - \frac{9}{16\alpha} + \right.$$

$$\left. + \left( 1 - \frac{a^2}{2\alpha} \right) \left[ 1 - \phi \left( \frac{a}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right] e^{-\frac{3}{2}r_1} + \left( 1 - \frac{b^2}{2\alpha} \right) \left[ 1 - \phi \left( \frac{b}{2\sqrt{\alpha}} \right) \right] e^{\frac{3}{2}r_1} \right\} dr_1$$

(3.2.14)

Por fim, a matriz direta,  $T_{1s-2p}^d$ , fornecida pela eq. (3.2.3) com as eqs. (3.2.5), (3.2.9) e (3.2.14), pode ser expressa na forma:

$$\begin{aligned}
 T_{1s-2p}^d &= \frac{3\sqrt{2}}{\pi^2} \frac{i}{k(k^2 + \frac{9}{4})^3} - \frac{i\beta}{2^{3/2}\pi^2 k^3} \int_0^\infty [(r_2 \text{sen}(kr_2) - kr_2^2 \cos(kr_2))] \\
 &e^{-\frac{3}{2}r_2} \left[ \int_{r_2}^\infty \text{sen}(kr_{12}) e^{-\alpha r_{12}^2} dr_{12} \right] dr_2 \\
 &- \frac{\beta e^{9/16\alpha}}{64\sqrt{2}\pi^{3/2}\alpha^{7/2}} \int_0^\infty \frac{\text{sen}kr_1}{kr_1} \frac{1}{r_1} \left\{ \left(\frac{3}{2} - 2\alpha r_1\right) \left[1 - \left(\frac{\frac{3}{2} - 2\alpha r_1}{2\sqrt{\alpha}}\right)\right] e^{-\frac{3}{2}r_1} \right. \\
 &\left. - \left(\frac{3}{2} + 2\alpha r_1\right) \left[1 - \phi\left(\frac{\frac{3}{2} + 2\alpha r_1}{2\sqrt{\alpha}}\right)\right] e^{\frac{3}{2}r_1} \right\} dr_1 \\
 &+ \frac{\beta e^{9/16\alpha}}{32\sqrt{2}\pi^{3/2}\alpha^{5/2}} \int_0^\infty \frac{\text{sen}kr_1}{kr_1} \left\{ \frac{3}{\sqrt{\pi\alpha}} e^{-\alpha r_1^2 - \frac{9}{16\alpha}} + \right. \\
 &+ \left[1 - \frac{\left(\frac{3}{2} - 2\alpha r_1\right)^2}{2\alpha}\right] \left[1 - \phi\left(\frac{\frac{3}{2} - 2\alpha r_1}{2\sqrt{\alpha}}\right)\right] e^{-\frac{3}{2}r_1} \\
 &+ \left. \left[1 - \frac{\left(\frac{3}{2} + 2\alpha r_1\right)^2}{2\alpha}\right] \left[1 - \phi\left(\frac{\frac{3}{2} + 2\alpha r_1}{2\sqrt{\alpha}}\right)\right] e^{\frac{3}{2}r_1} \right\} dr_1 \tag{3.2.15}
 \end{aligned}$$

### 3.2b - Matriz de Troca - $T_{1s-2p}^{\text{tr}}$

A matriz de troca para a transição 1s-2p é fornecida pela eq. (2.5.7)

$$T_{1s-2p}^{\text{tr}} = \langle \Phi_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | V | \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \rangle \tag{3.2.16}$$

Inserindo na eq. (3.2.16) as funções  $\psi$  e  $\Phi_f$ , dadas pelas eqs. (3.1.15) e (3.2.1), respectivamente, obtemos para  $T_{1s-2p}^{\text{tr}}$  a equação

$$T_{1s-2p}^{tr} = T_{1s-2p}^{Och} - T_{1s-2p}^{trc} \quad (3.2.17)$$

onde as matrizes  $T_{1s-2p}^{Och}$  e  $T_{1s-2p}^{trc}$  podem ser expressas nas formas

$$T_{1s-2p}^{Och} = T_1 - T_2$$

$$T_{1s-2p}^{trc} = T_3 - T_4$$

com

$$T_1 = \langle (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{2p}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2} \phi_{1s}(r_1) \rangle \quad (3.2.18a)$$

$$T_2 = \langle (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{2p}(r_2) \left| \frac{1}{r_1} \right| (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2} \phi_{1s}(r_1) \rangle \quad (3.2.18b)$$

$$T_3 = \beta \langle (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{2p}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2} \phi_{1s}(r_1) e^{-\alpha r_{12}^2} \rangle \quad (3.2.18c)$$

$$T_4 = \beta \langle (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{2p}(r_2) \left| \frac{1}{r_1} \right| (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2} \phi_{1s}(r_1) e^{-\alpha r_{12}^2} \rangle \quad (3.2.18d)$$

A comparação entre as eqs. (3.2.18a) e (3.1.21a) mostra que as integrais são semelhantes. Assim, mediante um desenvolvimento análogo empregado no desenvolvimento que leva da eq. (3.1.21a) à eq. (3.1.26), obtemos

$$T_1 = \frac{1}{2\pi^2 k_i^2} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \phi_{2p}^*(r_1) \phi_{1s}(r_1) d\vec{r}_1$$

A parte angular desta integral é resolvida com o desenvolvimen-

to do termo  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1}$  em harmônicos esféricos. Com auxílio das eqs. (3.2.6a) e (3.2.6b), temos que

$$\int_0^\pi P_1^0(\cos\theta_1) P_\ell^m(\cos\theta_1) \sin\theta_1 d\theta_1 \int_0^{2\pi} e^{im\phi_1} d\phi_1 = \frac{4\pi}{3} \quad (3.2.19)$$

Assim,  $T_1$  fica expressa na forma

$$T_1 = \frac{i}{2\sqrt{2}\pi^2 k_i^2} \cos\theta_k \int_0^\infty \left[ \frac{\text{sen}kr_1}{(kr_1)^2} - \frac{\text{cos}kr_1}{kr_1} \right] e^{-\frac{3}{2}r_1} r_1^3 dr_1 \quad (3.2.20)$$

A solução tabelada <sup>(17)</sup> da integral na eq. (3.2.20) nos conduz ao resultado

$$T_1 = \frac{6i}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{k}{k_i^2 (k^2 + \frac{9}{4})^3} \cos\theta_k \quad (3.2.21)$$

onde o ângulo  $\theta_k$  está ilustrado na Figura 3.4.

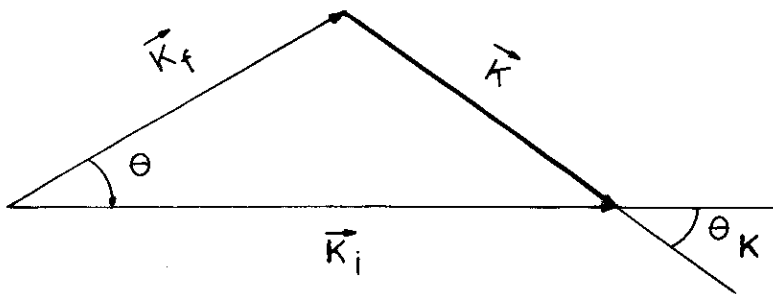


Figura 3.4 - Esquemati-  
zação dos vetores de on-  
da incidente  $\vec{k}_i$ , espa-  
lhado  $\vec{k}_f$ , e do vetor mo-  
mento transferido  $\vec{k}$  e  
os ângulos  $\theta$  e  $\theta_k$ .

A comparação entre as eqs. (3.2.18b) e (3.1.21b) nos fornece

$$T_2 = (2\pi)^{-3} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{1s}(r_1) \frac{d\vec{r}_1}{r_1} I_2$$

onde



$$I_2 = \int e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_2} \phi_{2p}^*(r_2) d\vec{r}_2$$

No desenvolvimento de  $I_2$ , utilizamos o sistema de coordenadas ilustrado na Figura 3.1. Com o auxílio dos harmônicos esféricos (3.1.27), encontramos que

$$I_2 = \frac{4\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}} \frac{k_i}{(k_i^2 + \frac{1}{4})^3} i \quad .$$

Assim,  $T_2$  fica expressa por

$$T_2 = \frac{i}{2\sqrt{2}\pi^{5/2}} \frac{k_i}{(k_i^2 + \frac{1}{4})^3} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}_1} \phi_{1s}(r_1) \frac{d\vec{r}_1}{r_1}$$

A parte angular desta integral é resolvida com o auxílio dos harmônicos esféricos e da eq. (3.2.6a), dando

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi P_\ell^m(\cos\theta_1) e^{-im\phi_1} \sin\theta_1 d\theta_1 d\phi_1 = 4\pi$$

Com isto,  $T_2$  assume a forma

$$T_2 = \frac{2i}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{k_i}{(k_i^2 + \frac{1}{4})^3} \int_0^\infty j_0(k_f r_1) e^{-r_1} r_1 dr_1$$

com  $j_0(k_f r_1) = \text{sen}k_f r_1 / k_f r_1$ , a integral tabelada <sup>(17)</sup> nos dá:

$$T_2 = \frac{2i}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{k_i}{(k_i^2 + \frac{1}{4})^3 (k_f^2 + 1)} \quad (3.2.22)$$

A comparação da eq. (3.2.18c), com a eq. (3.1.35a) nos mostra que elas são similares, assim, de uma maneira análoga, obtemos a expressão

$$T_3 = \frac{\beta}{2\pi^2 k_i} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \phi_{2p}^*(r_1) \phi_{1s}(r_1) d\vec{r}_1 \int_0^\infty e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(k_i r_{12}) dr_{12} \quad (3.2.23)$$

Com o auxílio dos harmônicos esféricos, eq. (3.1.27), e das eqs. (3.2.6a,b), podemos efetuar a parte angular da integral em  $dr_1$ , obtendo-se o valor dado pela eq. (3.2.19). Este resultado levado na eq. (3.2.23) nos fornece

$$T_3 = \frac{\beta i}{2\sqrt{2}\pi^2 k_i} \cos\theta_k \int_0^\infty \left[ \frac{\text{sen}kr_1}{(kr_1)^2} - \frac{\text{cos}kr_1}{kr_1} \right] e^{-\frac{3}{2}r_1} r_1^3 dr_1 \int_0^\infty e^{-\alpha r_{12}^2} \cdot \text{sen}(k_i r_{12}) dr_{12}$$

A solução tabelada<sup>(17)</sup> da integração em  $r_1$  nos fornece o seguinte resultado

$$T_3 = \frac{6\beta i}{\sqrt{2}\pi^2 k_i} \frac{k}{(k^2 + \frac{9}{4})^3} \cos\theta_k \int_0^\infty e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(k_i r_{12}) dr_{12} \quad (3.2.24)$$

A eq. (3.2.18d) é similar à eq. (3.1.35b). Assim, procedendo do mesmo modo empregado anteriormente para se obter a eq. (3.1.37), encontramos que

$$T_4 = \frac{\beta}{8(\pi\alpha)^{3/2}} e^{-\frac{k_i^2}{4\alpha}} \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \phi_{2p}^*(r_1) \phi_{1s}(r_1) \frac{d\vec{r}_1}{r_1} \quad (3.2.25)$$

Fazendo uso das eqs. (3.2.6a,b), e desenvolvendo o termo  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1}$  em harmônicos esféricos, obtemos que a parte angular da eq. (3.2.25) é dada pela eq. (3.2.19). Assim, a eq. (3.2.25) fica

$$T_4 = \frac{i\beta e^{-\frac{k_i^2}{4\alpha}}}{8\sqrt{2}(\pi\alpha)^{3/2}} \cos\theta_k \int \left[ \frac{\text{sen}kr_1}{(kr_1)^2} - \frac{\text{cos}kr_1}{kr_1} \right] r_1^2 e^{-\frac{3}{2}r_1} dr_1$$

O valor desta integral, fornecido pela tabela<sup>(17)</sup>, nos dá o resultado

$$T_4 = \frac{i\beta e^{-\frac{k_i^2}{4\alpha}}}{4\sqrt{2}(\pi\alpha)^{3/2}} \frac{k}{(k^2 + \frac{9}{4})^2} \cos\theta_k \quad (3.2.26)$$

Portanto, com as eqs. (3.2.21), (3.2.22), (3.2.24) e (3.2.26) na eq. (3.2.17) temos como resultado final a equação

$$\begin{aligned} T_{1s-2p}^{\text{tr}} &= \frac{i6}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{k}{k_i^2 (k^2 + \frac{9}{4})^3} \cos\theta_k - \frac{2i}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{k_i}{(k_i^2 + \frac{1}{4})^3 (k_f^2 + 1)} \\ &- \frac{6\beta i}{\sqrt{2}\pi^2 k_i} \frac{k}{(k^2 + \frac{9}{4})^3} \cos\theta_k \int_0^\infty e^{-\alpha r_{12}^2} \text{sen}(k_i r_{12}) dr_{12} \\ &+ \frac{i\beta e^{-k_i^2/4\alpha}}{4\sqrt{2}(\pi\alpha)^{3/2}} \frac{k}{(k^2 + \frac{9}{4})^2} \cos\theta_k \end{aligned} \quad (3.2.27)$$

As integrais nas eqs. (3.1.11), (3.1.40), (3.2.15) e (3.2.27), foram desenvolvidas numericamente pelo método de Simpson<sup>(18)</sup>. Os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  foram variados até que se estabelecesse uma boa concordância entre a secção de choque diferencial, calculada mediante a eq. (2.5.8), e os dados experimentais de Williams<sup>(22)</sup> e de Williams e Willis<sup>(19)</sup> e os dados teóricos de Burke<sup>(20)</sup>. Os resultados são apresentados e comentados no Capítulo IV.

## CAPÍTULO IV

### RESULTADOS E CONCLUSÕES

#### 4.1 - ESPALHAMENTO INELÁSTICO 1s-2s

As Tabelas 4.1.1, 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4 mostram os valores calculados com a função de onda correlacionada (FOC), dada pelas eqs. (3.2.11) e (3.1.40) inseridas na eq. (2.5.8). Uma análise destes dados, plotados nas Figuras 4.1.1, 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4, nos mostra uma boa concordância destes resultados com os valores experimentais de Williams<sup>(22)</sup> e os cálculos teóricos de Kingston, Fon e Burke<sup>(20)</sup> na aproximação Close-Coupling (CC).

A Tabela 4.1.1 e Figura 4.1.1 correspondem aos dados experimentais de Williams (1981) da secção de choque diferencial 1s-2s para a energia de 54.4 eV. As Tabelas 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4 e as Figuras 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4 apresentam os valores experimentais de Williams<sup>(19)</sup> para soma  $\sigma(2s+2p)$  nas energias 100, 200 e 300 eV, respectivamente.

Uma análise da Tabela 4.1.1 mostra que para ângulos de espalhamento  $\theta \leq 30^\circ$ , os resultados fornecidos pela aproximação FOC são cerca de 11% maiores do que os valores de Williams<sup>(22)</sup> e que para ângulos maiores, são cerca de 15% menores, exceto para  $\theta = 140^\circ$  em que o valor é 16% maior.

Os resultados da Tabela 4.1.1 são apresentados na Figura 4.1.1. Como podemos ver, a curva da aproximação FOC possui

um comportamento assintótico correto quanto à distribuição angular da seção de choque diferencial comparada com as curvas de Williams<sup>(22)</sup> e de Kingston, Fom e Burke<sup>(20)</sup>. Para ângulos pequenos, as curvas teóricas estão muito próximas umas das outras e estão em bom acordo com os valores experimentais. A grandes ângulos, os dados teóricos divergem um pouco ( $\theta > 30^\circ$ ), mas ainda apresentam um bom acordo com a curva experimental. Em relação à curva de Born, eq. (3.1.5), o resultado é consideravelmente melhorado.

Em nosso resultado para a transição 1s-2s do átomo de hidrogênio, na energia de 54.4 eV, não aparece a formação de estrutura em ângulos intermediários ( $\sim 40^\circ - 60^\circ$ ), prevista por Buckley e Walters<sup>(26)</sup> para a transição  $1^1s-2^1s$  do átomo de hélio e que Kingston e Walters<sup>(25)</sup> também encontraram para a excitação  $e^- + H(2s)$ , resultado este que foi confirmado pelo cálculo de Dewangan<sup>(27)</sup> para o espalhamento elétron-átomo de hidrogênio na mesma faixa de energia. Morgan acha que esta estrutura possivelmente não seja de origem física<sup>(28)</sup>.

Nas Tabelas 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4, comparamos os resultados da aproximação FOC com os dados teóricos da aproximação CC para as energias de 100, 200 e 300 eV, respectivamente. Novamente podemos ver que os resultados da aproximação FOC apresentam melhor concordância com a aproximação CC, que a 1ª aproximação de Born, principalmente a pequenos ângulos. Isto pode melhor ser visto através das Figuras 4.1.1, 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4.

As Tabelas 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4, apresentam os valores experimentais de Williams-Willis para a soma das seções de choque diferenciais  $\sigma_{2s}$  e  $\sigma_{2p}$ . A soma  $\sigma(2s+2p)$ , obtida pela aproximação FOC, correspondente aos estados excitados  $n = 2$  do átomo

de hidrogênio, na faixa de energia estudada, é apresentada na Tabela 4.2.5. Verificamos através destes dados o bom acordo entre a aproximação FOC e os valores experimentais de Williams-Willis<sup>(19)</sup> e os cálculos teóricos de Kingston, Fon e Burke<sup>(20)</sup>, sobretudo a pequenos ângulos.

A análise da Tabela 4.2.5 mostra que ao compararmos os valores da soma  $\sigma(2s+2p)$ , calculados segundo a aproximação FOC, com os valores correspondentes aos obtidos por Williams-Willis<sup>(19)</sup> para 100 eV, verificamos que nossos resultados apresentam valores maiores do que os dados experimentais a pequenos ângulos. Para ângulos de espalhamento  $\theta > 30$ , nossos resultados são menores que as medidas experimentais. A 200 eV, os resultados fornecidos pelos cálculos FOC são sempre menores que os dados de Williams-Willis<sup>(19)</sup> e em relação aos cálculos de aproximação CC, os nossos resultados são menores em ângulos pequenos, ao passo que a ângulos grandes eles são maiores. Em 300 eV, os resultados da aproximação FOC são maiores do que os valores experimentais e aos fornecidos pela aproximação CC para todos os ângulos.

Os valores do parâmetro  $\alpha$  para as energias de 54.4 , 100, 200 e 300 eV, mostram que  $\alpha$  cresce com o aumento da energia, eq. (2.4.3), e que  $\beta$  permanece constante. Verificamos também que o crescimento de  $\alpha$  com a energia diminui o efeito de correlação, pois quando  $\alpha$  cresce a exponencial que aparece na eq. (2.4.2) decresce, diminuindo assim o efeito do termo de correlação, como foi visto na eq. (3.1.18). Quando isto acontece, as eqs. (3.1.4) e (3.1.18) tendem às aproximações de Born e de Ochkur, respectivamente.

Através da análise das Figuras 4.1.1, 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4, vemos que a pequenos ângulos a aproximação FOC tende a

1ª aproximação de Born e que a grandes ângulos a diferença entre estas duas aproximações se acentua. Portanto, a aproximação FOC age como uma correção à aproximação de Born.

A aproximação de Born, levando em consideração o termo de troca, através da aproximação de Ochkur, não foi considerada neste trabalho porque apesar de uma melhora acentuada, dando resultados maiores, estes continuam pequenos quando comparados com os valores experimentais e teóricos<sup>(20)</sup>. Também não consideramos o efeito de polarização<sup>(23)</sup>, em vista dele ser pequeno nesta faixa de energia.

Tabela 4.1.1 - Seção de choque diferencial inelástica comparada com os dados experimentais de Williams<sup>(22)</sup> e teóricos de Kingston, Fon e Burke<sup>(20)</sup> para as transições 1s-2s.

$$\alpha = 0.30, \quad \beta = 0.98 \quad \text{e} \quad E_i = 54.4 \text{ eV.}$$

$\theta$	ESTE TRABALHO	WILLIAMS	KINGSTON-FON e BURKE
10°	5.95 <sup>-1</sup>	5.94 <sup>-1</sup> (94)	5.75 <sup>-1</sup>
20°	1.63 <sup>-1</sup>	1.16 <sup>-1</sup> (17)	1.23 <sup>-1</sup>
30°	4.39 <sup>-2</sup>	3.75 <sup>-2</sup> (40)	4.43 <sup>-2</sup>
40°	1.67 <sup>-2</sup>	1.84 <sup>-2</sup> (47)	1.90 <sup>-2</sup>
60°	8.29 <sup>-3</sup>	1.06 <sup>-2</sup> (31)	9.93 <sup>-3</sup>
70°	6.67 <sup>-3</sup>	7.04 <sup>-3</sup> (218)	8.18 <sup>-3</sup>
80°	3.99 <sup>-3</sup>	5.27 <sup>-3</sup> (163)	6.66 <sup>-3</sup>
90°	3.88 <sup>-3</sup>	5.70 <sup>-3</sup> (128)	5.37 <sup>-3</sup>
100°	3.77 <sup>-3</sup>	3.85 <sup>-3</sup> (129)	4.42 <sup>-3</sup>
120°	3.04 <sup>-3</sup>	3.21 <sup>-3</sup> (114)	3.31 <sup>-3</sup>
140°	2.70 <sup>-3</sup>	2.24 <sup>-3</sup> (87)	2.75 <sup>-3</sup>

O índice denota a potência de 10 pelo qual o número deverá ser multiplicado.

Tabela 4.1.2 - Seção de choque diferencial inelástica comparada com os dados experimentais de Williams e Willis<sup>(19)</sup> e teóricos de Kingston, Fon e Burke<sup>(20)</sup> para as transições 1s-2s.  
 $\alpha = 0.40$ ,  $\beta = 0.98$  e  $E_i = 100$  eV.

$\theta$	ESTE TRABALHO	WILLIAMS	KINGSTON-FON e BURKE
10°	$5.05^{-1}$	—	$3.65^{-1}$
20°	$1.20^{-1}$	$2.97^{-1}$ (25)	$8.81^{-2}$
30°	$2.35^{-2}$	$5.19^{-2}$ (23)	$2.00^{-2}$
40°	$1.02^{-2}$	$1.82^{-2}$ (16)	$7.59^{-3}$
60°	$3.18^{-3}$	$6.19^{-3}$ (57)	$2.74^{-3}$
70°	$2.33^{-3}$	$4.07^{-3}$ (41)	$1.84^{-3}$
80°	$1.55^{-3}$	$2.38^{-3}$ (29)	$1.28^{-3}$
90°	$1.45^{-3}$	—	$9.28^{-4}$
100°	$1.19^{-3}$	$1.82^{-3}$ (37)	$7.05^{-4}$
120°	$8.47^{-4}$	$1.79^{-3}$ (68)	$4.70^{-4}$
140°	$6.34^{-4}$	$1.25^{-3}$ (25)	$3.62^{-4}$



Tabela 4.1.3 - Seção de choque diferencial inelástica comparada com os dados experimentais de Williams e Willis<sup>(19)</sup> e teóricos de Kingston, Fon e Burke<sup>(20)</sup> para a transição 1s-2s.  
 $\alpha = 0.50$ ,  $\beta = 0.98$  e  $E_i = 200$  eV.

$\theta$	ESTE TRABALHO	WILLIAMS	KINGSTON-FON e BURKE
$10^\circ$	$3.02^{-1}$	—	$2.57^{-1}$
$20^\circ$	$2.73^{-2}$	$4.97^{-2}$ (57)	$2.78^{-2}$
$30^\circ$	$2.20^{-3}$	$6.72^{-3}$ (61)	$4.22^{-3}$
$40^\circ$	$1.83^{-3}$	$2.54^{-3}$ (38)	$1.56^{-3}$
$60^\circ$	$5.53^{-4}$	$7.27^{-4}$ (72)	$4.11^{-4}$
$70^\circ$	$2.94^{-4}$	$4.48^{-4}$ (66)	$2.50^{-4}$
$80^\circ$	$1.94^{-4}$	$2.71^{-4}$ (33)	$1.61^{-4}$
$90^\circ$	$1.18^{-4}$	$1.99^{-4}$ (29)	$1.11^{-4}$
$100^\circ$	$1.13^{-4}$	$1.66^{-4}$ (36)	$8.02^{-5}$
$120^\circ$	$8.37^{-5}$	$1.20^{-4}$ (29)	$5.14^{-5}$
$140^\circ$	$6.68^{-5}$	$1.17^{-4}$ (39)	$3.82^{-5}$

Tabela 4.1.4 - Seção de choque diferencial inelástica comparada com os dados experimentais de Williams e Willis <sup>(19)</sup> e teóricos de Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup> para a transição 1s-2s.  
 $\alpha = 0.60$ ,  $\beta = 0.98$  e  $E_i = 300$  eV.

$\theta$	ESTE TRABALHO	WILLIAMS	KINGSTON-FON e BURKE
$10^\circ$	$1.97^{-1}$	—	$1.77^{-1}$
$20^\circ$	$1.25^{-2}$	$1.16^{-2}$ (25)	$1.00^{-2}$
$30^\circ$	$1.49^{-3}$	$1.57^{-3}$ (27)	$1.45^{-3}$
$40^\circ$	$5.58^{-4}$	$6.11^{-4}$ (82)	$5.23^{-4}$
$60^\circ$	$1.33^{-4}$	$1.85^{-4}$ (30)	$1.25^{-4}$
$70^\circ$	$9.61^{-5}$	—	$7.26^{-5}$
$80^\circ$	$8.15^{-5}$	$1.01^{-4}$ (18)	$4.70^{-5}$
$90^\circ$	$5.53^{-5}$	—	$3.16^{-5}$
$100^\circ$	$3.95^{-5}$	$8.33^{-5}$ (97)	$2.26^{-5}$
$120^\circ$	$2.52^{-5}$	$6.42^{-5}$ (142)	$1.38^{-5}$
$140^\circ$	$2.01^{-5}$	$4.10^{-5}$ (122)	$9.84^{-6}$

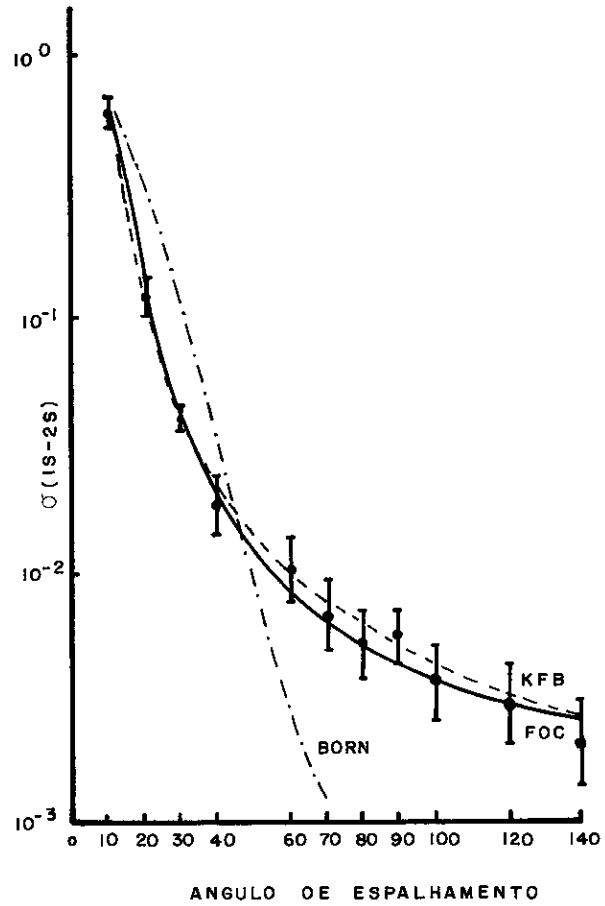


Figura 4.1.1 - Variação da secção de choque diferencial com o ângulo de espalhamento, para a excitação 1s-2s do átomo de hidrogênio.

$\alpha = 0.30$        $\beta = 0.98$        $E = 54.4$  eV.

- ..... Aproximação de Born
- Função de onda correlacionada (FOC) <sup>(16)</sup>
- Williams <sup>(22)</sup>
- Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup>

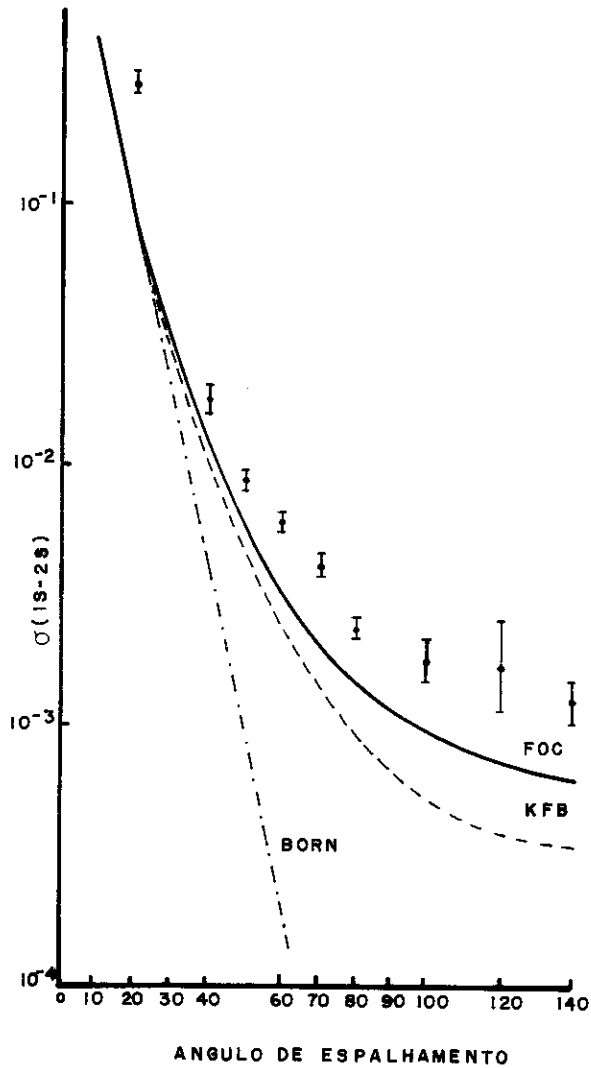


Figura 4.1.2 - Variação da secção de choque diferencial com o ângulo de espalhamento, para a excitação 1s-2s do átomo de hidrogênio  $\alpha = 0.40$   $\beta = 0.98$   $E = 100$  eV.

- . - . - . - . Aproximação de Born
- Função de onda correlacionada (FOC) <sup>(16)</sup>
- Williams-Willis <sup>(19)</sup>
- Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup>

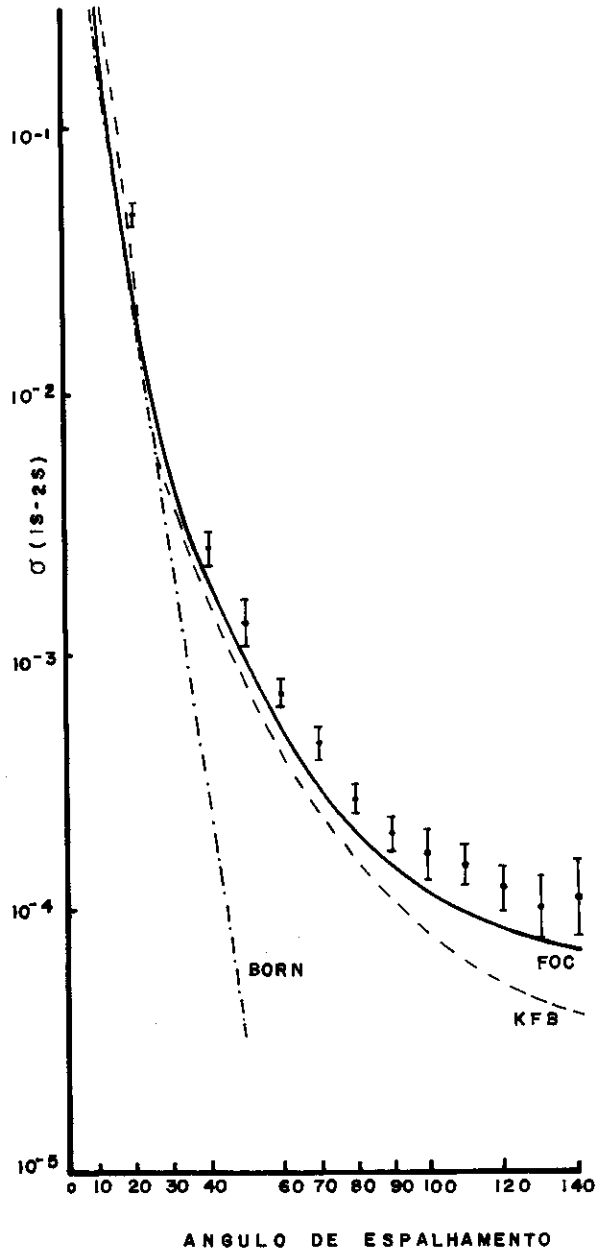


Figura 4.1.3 - Variação da secção de choque diferencial com o ângulo de espalhamento, para a excitação 1s-2s do átomo de hidrogênio.

$$\alpha = 0.50 \quad \beta = 0.98 \quad E = 200 \text{ eV.}$$

- .-.-.-. Aproximação de Born
- Função de onda correlacionada (FOC) <sup>(16)</sup>
- Williams-Willis <sup>(19)</sup>
- Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup>

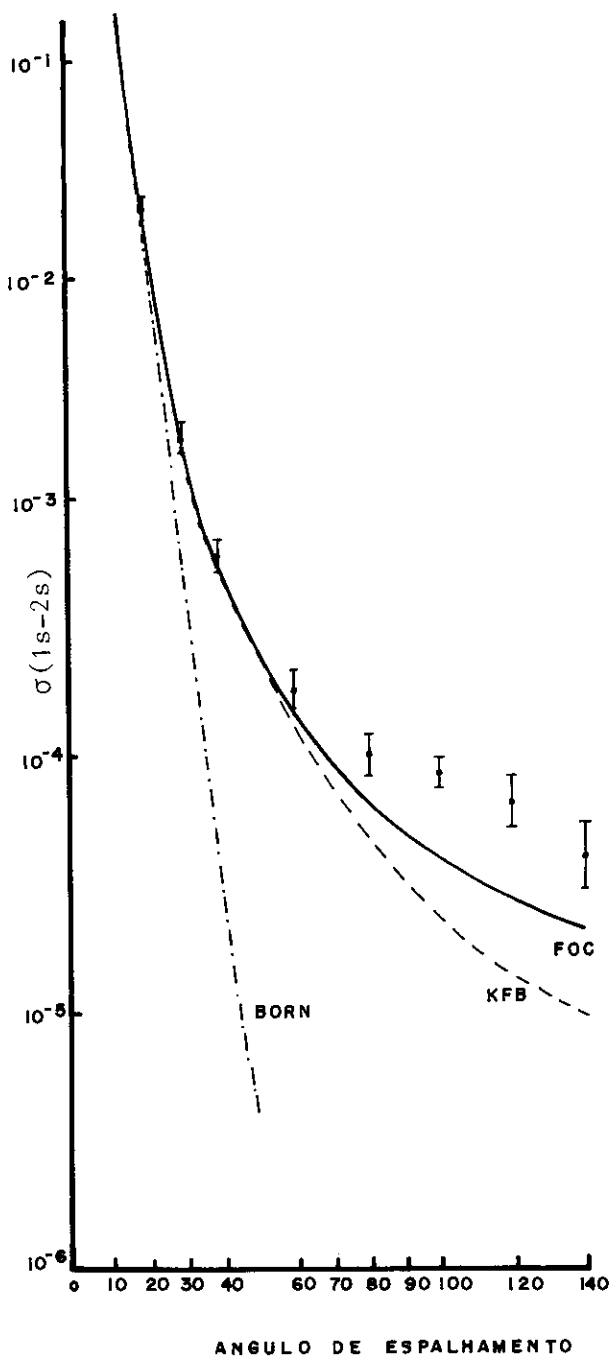


Figura 4.1.4 - Variação da secção de choque diferencial com o ângulo de espalhamento, para a excitação 1s-2s do átomo de hidrogênio.

$\alpha = 0.60$      $\beta = 0.98$      $E = 300$  eV.

- . - . - . -    Aproximação de Born
- Função de onda correlacionada (FOC) <sup>(16)</sup>
- Williams-Willis <sup>(19)</sup>
- - - -        Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup>

## 4.2 - ESPALHAMENTO INELÁSTICO 1s-2p

As Tabelas 4.2.1, 4.2.2, 4.2.3 e 4.2.4, contêm resultados fornecidos pelas eqs. (3.2.15) e (3.2.27) inseridas na eq. (2.5.8). Os resultados obtidos se encontram nas Figuras 4.2.1, 4.2.2, 4.2.3 e 4.2.4, indicando uma boa concordância entre as aproximações FOC e CC. A pequenos ângulos, para energia de 54.4eV, a aproximação FOC fornece secções de choque diferenciais que são cerca de 21% maiores do que os valores obtidos por Williams<sup>(22)</sup>, ao passo que a grandes ângulos são menores em cerca de 24%.

As Tabelas 4.2.1, 4.2.2, 4.2.3 e 4.2.4, juntamente com as Figuras correspondentes, mostram uma boa concordância entre as aproximações FOC e CC para as energias de 100, 200 e 300 eV, respectivamente. A pequenos ângulos, as duas aproximações tendem à aproximação de Born.

Na transição 1s-2p vemos que com o aumento da energia, os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  assumem os valores constantes 0.80 e 0.98, respectivamente, pelo menos na faixa de energia estudada. Não é surpreendente o fato destes parâmetros assumirem valores diferentes para as transições aos estados 2s e 2p. De fato, Hylleraas<sup>(11)</sup> já utilizou diferentes funções de onda bem como parâmetros distintos para estudar o estado fundamental do átomo de hélio e o seu 1º estado excitado. Os nossos resultados, portanto, são esperados. Em particular, sabe-se que o uso de diferentes funções de onda atômicas altera significativamente os resultados da secção de choque<sup>(24)</sup>.

O resultado para  $\alpha$  e  $\beta$  com valores diferentes no problema da colisão elétron-hidrogênio, utilizando a aproximação FOC, já fôra previsto por Jacchieri<sup>(16)</sup> quando tratou da coli -

são elástica do mesmo sistema.

Não será surpreendente que se possa encontrar outros valores para os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  no estudo de espalhamento tanto para a transição 1s-2s quanto para a transição 1s-2p, já que os intervalos de variação dos parâmetros<sup>(16)</sup> são

$$0 < \beta < 1 \quad , \quad 0 < \alpha < \infty$$

Assim, pode-se encontrar valores para  $\alpha$  e  $\beta$  diferentes dos encontrados neste trabalho, como já mencionado por outros autores<sup>(11,16,24)</sup>.

Tabela 4.2.1 - Seção de choque diferencial inelástica comparada com os dados experimentais de Williams<sup>(22)</sup> e teóricos de Kingston-Fon e Burke<sup>(20)</sup> para a transição 1s-2p.

$$\alpha = 0.80, \quad \beta = 0.98 \quad \text{e} \quad E_i = 54.4 \text{ eV.}$$

$\theta$	ESTE TRABALHO	WILLIAMS	KINGSTON-FON e BURKE
10°	9.06	7.54 (71)	7.81
20°	1.30	1.04 (11)	1.18
30°	2.20 <sup>-1</sup>	1.57 <sup>-1</sup> (21)	1.99 <sup>-1</sup>
40°	4.37 <sup>-2</sup>	4.36 <sup>-2</sup> (69)	4.71 <sup>-2</sup>
60°	8.16 <sup>-3</sup>	1.19 <sup>-2</sup> (21)	1.11 <sup>-2</sup>
70°	4.73 <sup>-3</sup>	6.12 <sup>-3</sup> (131)	6.88 <sup>-3</sup>
80°	3.34 <sup>-3</sup>	4.05 <sup>-3</sup> (87)	4.66 <sup>-3</sup>
90°	2.65 <sup>-3</sup>	3.56 <sup>-3</sup> (56)	3.38 <sup>-3</sup>
100°	2.14 <sup>-3</sup>	2.16 <sup>-3</sup> (46)	2.56 <sup>-3</sup>
120°	1.28 <sup>-3</sup>	1.59 <sup>-3</sup> (36)	1.69 <sup>-3</sup>
140°	1.16 <sup>-3</sup>	1.03 <sup>-3</sup> (28)	1.31 <sup>-3</sup>



Tabela 4.2.2 - Seção de choque diferencial inelástica comparada com os dados teóricos de Kingston-Fon e Burke<sup>(20)</sup>.  
 $\alpha = 0.80$ ,  $\beta = 0.98$  e  $E_i = 100$  eV.

$\theta$	ESTE TRABALHO	KINGSTON-FON e BURKE
$10^\circ$	5.01	4.60
$20^\circ$	$3.56^{-1}$	$3.22^{-1}$
$30^\circ$	$3.48^{-2}$	$3.00^{-2}$
$40^\circ$	$5.51^{-3}$	$6.35^{-3}$
$60^\circ$	$1.30^{-3}$	$1.54^{-3}$
$70^\circ$	$8.39^{-4}$	$1.01^{-3}$
$80^\circ$	$6.54^{-4}$	$7.35^{-4}$
$90^\circ$	$4.69^{-4}$	$5.77^{-4}$
$100^\circ$	$3.84^{-4}$	$4.74^{-4}$
$120^\circ$	$2.88^{-4}$	$3.50^{-4}$
$140^\circ$	$2.37^{-4}$	$2.80^{-4}$

Tabela 4.2.3 - Seção de choque diferencial inelástica comparada com os dados teóricos de Kingston-Fon e Burke <sup>(20)</sup>.  
 $\alpha = 0.80$ ,  $\beta = 0.98$  e  $E_i = 200$  eV.

$\theta$	ESTE TRABALHO	KINGSTON-FON e BURKE
$10^\circ$	1.66	3.02
$20^\circ$	$1.19^{-1}$	$1.36^{-1}$
$30^\circ$	$1.15^{-2}$	$9.43^{-3}$
$40^\circ$	$2.58^{-3}$	$2.37^{-3}$
$60^\circ$	$6.90^{-4}$	$6.40^{-4}$
$70^\circ$	$3.99^{-4}$	$4.30^{-4}$
$80^\circ$	$2.73^{-4}$	$3.14^{-4}$
$90^\circ$	$2.37^{-4}$	$2.39^{-4}$
$100^\circ$	$1.66^{-4}$	$1.91^{-4}$
$120^\circ$	$1.23^{-4}$	$1.31^{-4}$
$140^\circ$	$1.08^{-4}$	$1.01^{-4}$

Tabela 4.2.4 - Seção de choque diferencial inelástica comparada com os dados teóricos de Kingston-Fon e Burke<sup>(20)</sup>.  
 $\alpha = 0.80$ ,  $\beta = 0.98$  e  $E_i = 300$  eV.

$\theta$	ESTE TRABALHO	KINGSTON-FON e BURKE
$10^\circ$	$6.90^{-1}$	$6.70^{-1}$
$20^\circ$	$7.87^{-3}$	$7.82^{-3}$
$30^\circ$	$3.19^{-4}$	$5.59^{-4}$
$40^\circ$	$1.41^{-4}$	$1.88^{-4}$
$60^\circ$	$5.07^{-5}$	$6.06^{-5}$
$70^\circ$	$3.98^{-5}$	$4.17^{-5}$
$80^\circ$	$2.56^{-5}$	$2.98^{-5}$
$90^\circ$	$2.16^{-5}$	$2.40^{-5}$
$100^\circ$	$1.69^{-5}$	$2.08^{-5}$
$120^\circ$	$1.18^{-5}$	$1.36^{-5}$
$140^\circ$	$8.90^{-6}$	$1.16^{-5}$

Tabela 4.2.5 - Soma das seções de choque diferenciais dos estados 2s e 2p na excitação do átomo de hidrogênio aos estados  $n = 2$ .

E (eV)	100		200		300	
	*FOC	*CC	FOC	CC	FOC	CC
10 <sup>0</sup>	5.52	4.97	1.96	3.28	8.87 <sup>-1</sup>	8.47 <sup>-1</sup>
20 <sup>0</sup>	4.76 <sup>-1</sup>	4.10 <sup>-1</sup>	1.46 <sup>-1</sup>	1.64 <sup>-1</sup>	2.04 <sup>-2</sup>	1.78 <sup>-2</sup>
30 <sup>0</sup>	5.83 <sup>-2</sup>	5.00 <sup>-2</sup>	1.37 <sup>-2</sup>	1.37 <sup>-2</sup>	1.81 <sup>-3</sup>	2.01 <sup>-3</sup>
40 <sup>0</sup>	1.57 <sup>-2</sup>	1.39 <sup>-2</sup>	4.41 <sup>-3</sup>	3.93 <sup>-3</sup>	6.99 <sup>-4</sup>	7.11 <sup>-4</sup>
60 <sup>0</sup>	4.48 <sup>-3</sup>	4.28 <sup>-3</sup>	1.24 <sup>-3</sup>	1.05 <sup>-3</sup>	1.84 <sup>-4</sup>	1.86 <sup>-4</sup>
70 <sup>0</sup>	3.17 <sup>-3</sup>	2.83 <sup>-3</sup>	6.93 <sup>-4</sup>	6.80 <sup>-4</sup>	1.36 <sup>-4</sup>	1.14 <sup>-4</sup>
80 <sup>0</sup>	2.20 <sup>-3</sup>	2.02 <sup>-3</sup>	4.31 <sup>-4</sup>	4.75 <sup>-4</sup>	1.07 <sup>-4</sup>	7.68 <sup>-5</sup>
90 <sup>0</sup>	1.92 <sup>-3</sup>	1.51 <sup>-3</sup>	3.55 <sup>-4</sup>	3.50 <sup>-4</sup>	7.69 <sup>-5</sup>	5.56 <sup>-5</sup>
100 <sup>0</sup>	1.57 <sup>-3</sup>	1.18 <sup>-3</sup>	2.79 <sup>-4</sup>	2.71 <sup>-4</sup>	5.64 <sup>-5</sup>	5.34 <sup>-5</sup>
120 <sup>0</sup>	1.14 <sup>-3</sup>	8.20 <sup>-4</sup>	2.07 <sup>-4</sup>	1.82 <sup>-4</sup>	3.70 <sup>-5</sup>	1.74 <sup>-5</sup>
140 <sup>0</sup>	8.17 <sup>-4</sup>	6.42 <sup>-4</sup>	1.75 <sup>-4</sup>	1.39 <sup>-4</sup>	2.90 <sup>-5</sup>	2.14 <sup>-5</sup>

\*CC - Close-Coupling<sup>(20)</sup>

\*FOC - Função de Onda Correlacionada.

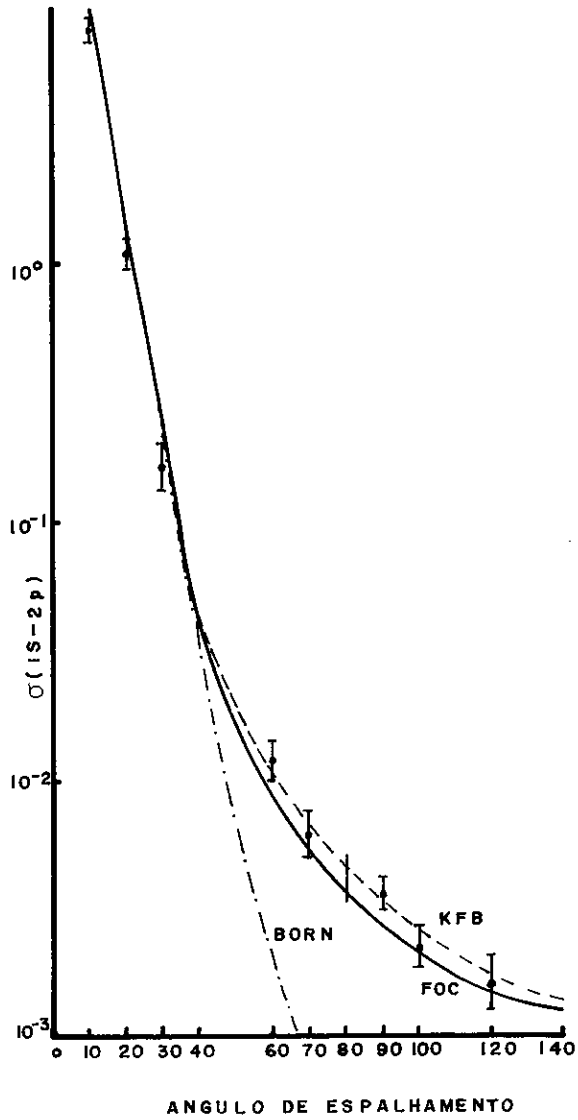


Figura 4.2.1 - Variação da secção de choque diferencial com o ângulo de espalhamento, para a excitação 1s-2p do átomo de hidrogênio.

$$\alpha = 0.80 \quad \beta = 0.98 \quad E = 54.4 \text{ eV.}$$

- .-.-.- Aproximação de Born
- Função de onda correlacionada (FOC) <sup>(16)</sup>
- Williams <sup>(22)</sup>
- - - - Kingston Fon e Burke <sup>(20)</sup>

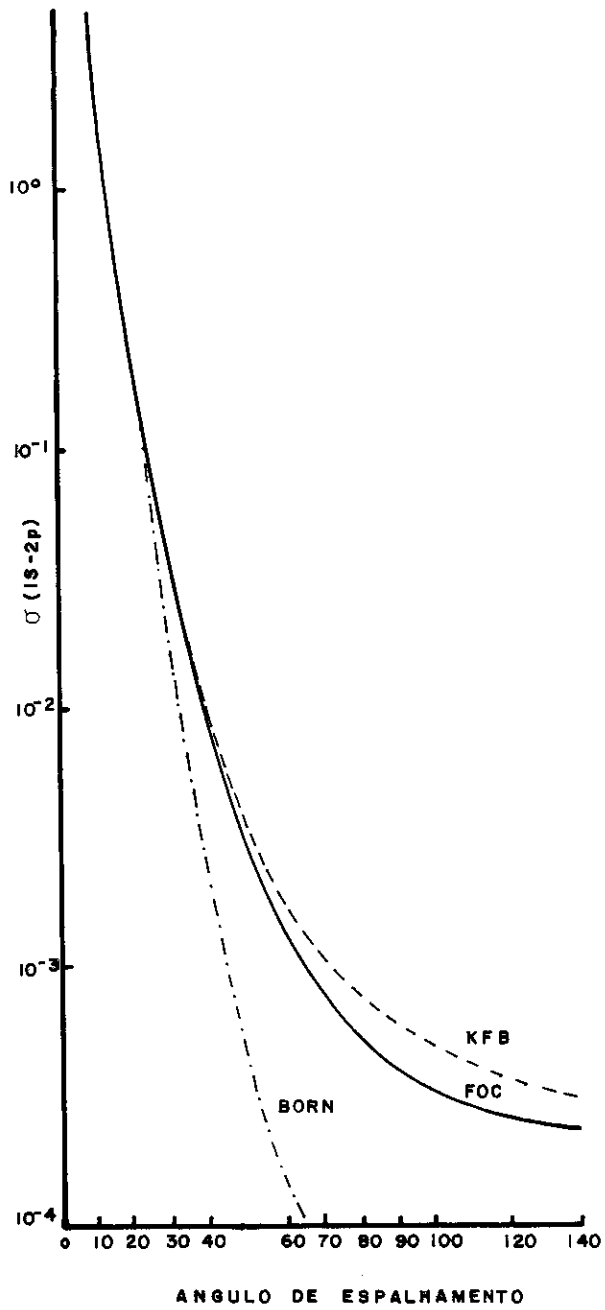


Figura 4.2.2 - Variação da secção de choque diferencial com o ângulo de espalhamento, para a excitação 1s-2p do átomo de hidrogênio.

$$\alpha = 0.80 \quad \beta = 0.98 \quad E = 100 \text{ eV}$$

-.-.-.- Aproximação de Born

———— Função de onda correlacionada (FOC) <sup>(16)</sup>

- - - - Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup>

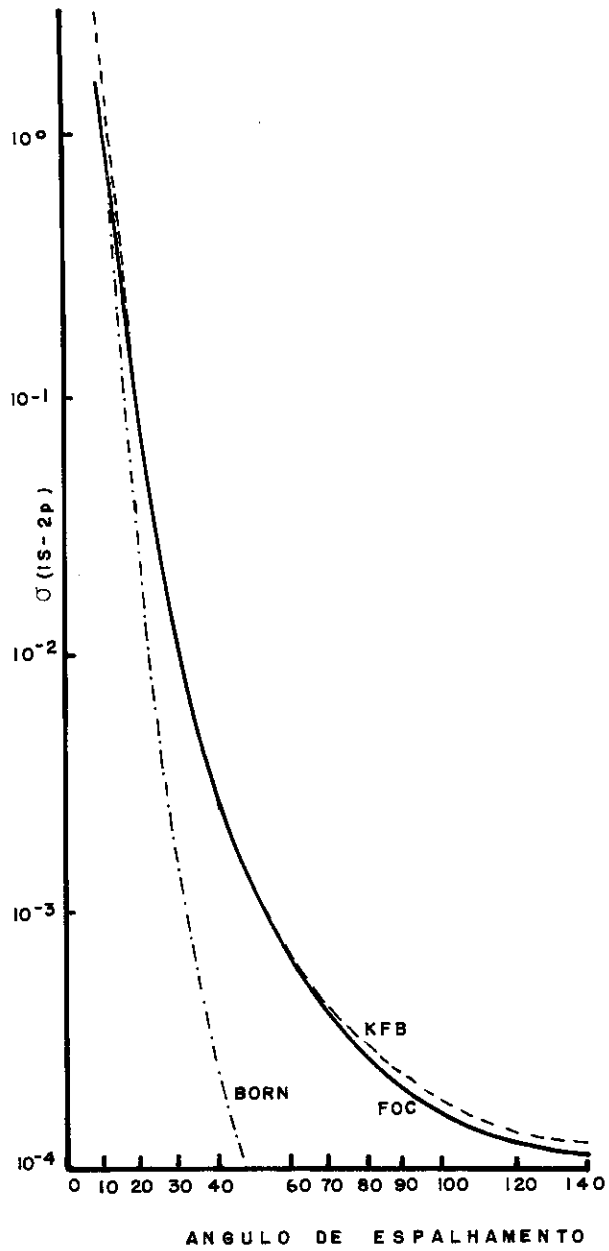


Figura 4.2.3 - Variação da secção de choque diferencial com o ângulo de espalhamento, para a excitação 1s-2p do átomo de hidrogênio.

$$\alpha = 0.80 \quad \beta = 0.98 \quad E = 200 \text{ eV.}$$

-.-.-.- Aproximação de Born

———— Função de onda correlacionada (FOC) <sup>(16)</sup>

- - - - Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup>

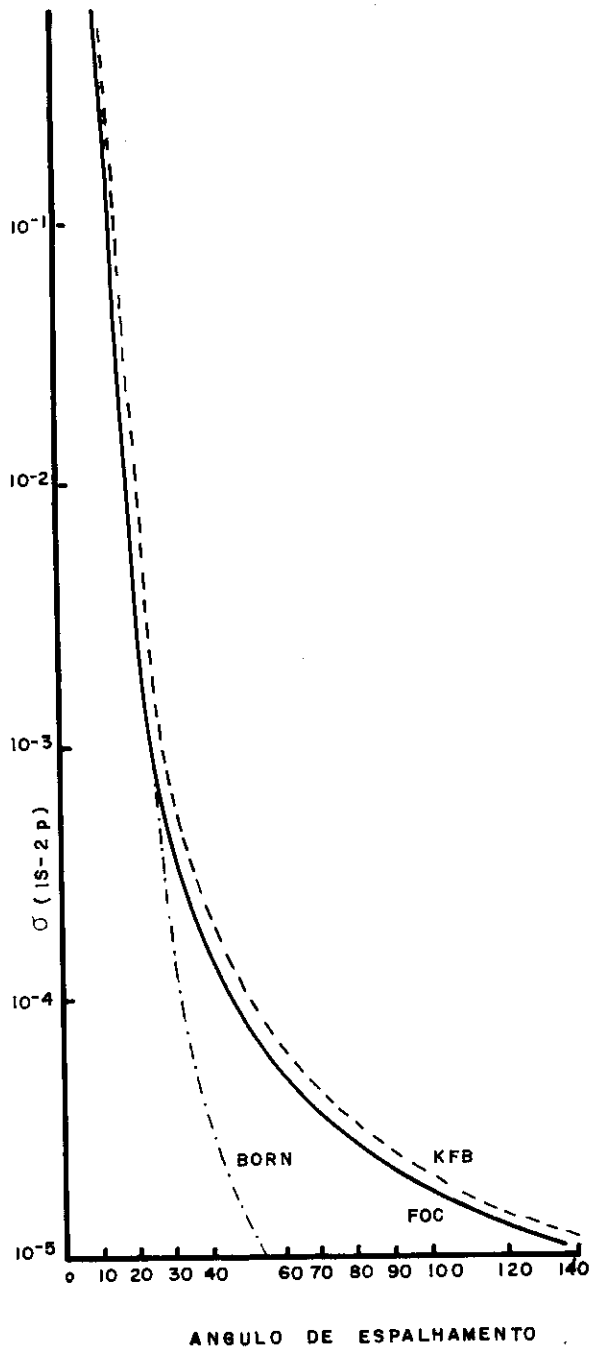


Figura 4.2.4 - Variação da seção de choque diferencial com o ângulo de espalhamento, para a excitação 1s-2p do átomo de hidrogênio.

$\alpha = 0.80$        $\beta = 0.98$        $E = 300$  eV.

-.-.-.- Aproximação de Born

———— Função de onda correlacionada (FOC) <sup>(16)</sup>

- - - - Kingston, Fon e Burke <sup>(20)</sup>



#### 4.3 - INFLUÊNCIA DA MATRIZ DE TROCA E DOS PARÂMETROS $\alpha$ E $\beta$

Na Tabela 4.3.1 são repetidos nas duas primeiras colunas os dados de Williams<sup>(22)</sup> e os resultados obtidos com a função de onda correlacionada (FOC), eq. (2.4.1), que aparecem na Tabela 4.1.1 para o espalhamento 1s-2s na energia de 54.4 eV. As duas últimas colunas apresentam os resultados da seção de choque diferencial da aproximação FOC sem o termo de troca e da aproximação de Born, respectivamente.

Uma análise da Tabela 4.3.1 mostra que os resultados da aproximação FOC pioram quando não consideramos o efeito da matriz de troca, na aproximação de Ochkur<sup>(14)</sup>. Isto reflete a importância do termo de troca para o espalhamento no domínio das baixas energias.

A análise em relação à aproximação de Born mostra que, em geral, os resultados da aproximação FOC ainda melhoram a aproximação de Born, mesmo não levando em consideração o termo de troca, sendo a correção ao termo de Born devido somente à matriz direta da função de correlação; a despeito dos dois resultados coincidirem seus valores nos ângulos de  $10^\circ$ ,  $80^\circ$  e  $90^\circ$ , e o resultado de Born ser melhor nos ângulos de  $60^\circ$  e  $70^\circ$ . Isto mostra que os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  estão contribuindo para o espalhamento. Portanto, como já visto na eq. (3.1.4), o termo de correlação age como uma correção à aproximação de Born<sup>(16)</sup>.

Na Tabela 4.3.2 são repetidos nas duas primeiras colunas os dados de Williams<sup>(22)</sup> e os resultados da aproximação FOC da Tabela 4.2.1, obtidos no espalhamento 1s-2p para a energia de 54.4 eV, respectivamente. As duas últimas colunas apresentam os resultados da aproximação FOC sem o termo de troca e da aproximação

ção de Born, respectivamente.

A análise da Tabela 4.3.2 mostra que a aproximação FOC obtém resultados piores, quando comparados aos valores experimentais, se o termo de troca não é considerado no espalhamento nesta faixa de energia, refletindo, mais uma vez, a importância da matriz de troca.

A análise em relação à seção de choque diferencial de Born, nos mostra que, em geral, os resultados da aproximação FOC são melhores do que os obtidos pela aproximação de Born, mesmo quando não levamos em conta o termo de troca, a despeito dos valores de Born para ângulos  $\theta \leq 30^\circ$  serem melhores que os valores fornecidos pela aproximação FOC. Isto nos mostra a contribuição dos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  para o espalhamento 1s-2p.

Portanto, podemos dizer pela análise das Tabelas 4.3.1 e 4.3.2 que os resultados da aproximação de Born, quando comparados com os valores experimentais, são melhorados pela aproximação FOC e que o termo de troca, na aproximação de Ochkur, é importante para o espalhamento inelástico de elétrons por átomo de hidrogênio utilizando a função de onda correlacionada (2.4.1).

Tabela 4.3.1 - Seção de choque diferencial inelástica para as transições 1s-2s.

$\alpha = 0.30$ ,  $\beta = 0.98$  e  $E_i = 54.4$  eV.

$\theta$	Williams	Este Trabalho	Sem o termo de troca	Born
$10^\circ$	$5.94^{-1}$ (94)	$5.95^{-1}$	$6.06^{-1}$	$6.06^{-1}$
$20^\circ$	$1.16^{-1}$ (17)	$1.63^{-1}$	$1.79^{-1}$	$2.83^{-1}$
$30^\circ$	$3.75^{-2}$ (40)	$4.39^{-2}$	$5.06^{-2}$	$9.70^{-2}$
$40^\circ$	$1.84^{-2}$ (47)	$1.67^{-2}$	$2.18^{-2}$	$2.92^{-2}$
$60^\circ$	$1.06^{-2}$ (31)	$8.29^{-3}$	$1.60^{-3}$	$2.75^{-3}$
$70^\circ$	$7.04^{-3}$ (218)	$6.67^{-3}$	$7.47^{-4}$	$9.53^{-4}$
$80^\circ$	$5.27^{-3}$ (163)	$3.99^{-3}$	$3.67^{-4}$	$3.67^{-4}$
$90^\circ$	$5.70^{-3}$ (128)	$3.88^{-3}$	$1.57^{-4}$	$1.57^{-4}$
$100^\circ$	$3.85^{-3}$ (129)	$3.77^{-3}$	$8.00^{-5}$	$7.47^{-5}$
$120^\circ$	$3.21^{-3}$ (114)	$3.04^{-3}$	$1.52^{-3}$	$2.28^{-5}$
$140^\circ$	$2.24^{-3}$ (87)	$2.70^{-3}$	$8.60^{-4}$	$1.00^{-5}$

Tabela 4.3.2 - Seção de choque diferencial inelástica para as transições 1s-2p.

$\alpha = 0.80$ ,  $\beta = 0.98$  e  $E_i = 54.4$  eV.

$\theta$	Williams	Este Trabalho	Sem o termo de troca	Born
$10^\circ$	7.54(71)	9.06	9.20	9.19
$20^\circ$	1.04(11)	1.30	1.36	1.34
$30^\circ$	$1.57^{-1}$ (21)	$2.20^{-1}$	$2.29^{-1}$	$2.17^{-1}$
$40^\circ$	$4.36^{-2}$ (69)	$4.37^{-2}$	$4.58^{-2}$	$3.81^{-2}$
$60^\circ$	$1.19^{-2}$ (21)	$8.16^{-3}$	$7.76^{-3}$	$1.70^{-3}$
$70^\circ$	$6.12^{-3}$ (131)	$4.73^{-3}$	$4.58^{-3}$	$4.48^{-4}$
$80^\circ$	$4.05^{-3}$ (87)	$3.34^{-3}$	$3.15^{-3}$	$1.37^{-4}$
$90^\circ$	$3.56^{-3}$ (56)	$2.65^{-3}$	$2.36^{-3}$	$4.87^{-5}$
$100^\circ$	$2.16^{-3}$ (46)	$2.14^{-3}$	$1.89^{-3}$	$1.98^{-5}$
$120^\circ$	$1.59^{-3}$ (36)	$1.28^{-3}$	$8.99^{-4}$	$4.72^{-6}$
$140^\circ$	$1.05^{-3}$ (28)	$1.16^{-3}$	$6.95^{-4}$	$1.77^{-6}$

## REFERÊNCIAS

- (1) - Gordin Baym, "Lectures on Quantum Mechanics", W.A. Benjamin, Inc. Advanced Book Program. Reading Massachusetts (1969).
- (2) - Farina, J.E.G., "Quantum Theory of Scattering Processes", Pergamon Press, Oxford (1973).
- (3) - Charles J. Joachain, "Quantum Collision Theory", North - Holland-Amsterdam (1975).
- (4) - Sydney Geltman, "Topics in Atomic Collision", Academic Press, New York (1969).
- (5) - Byron Jr., F.W. and R.W. Fuller, "Mathematics of Classical and Quantum Physics", Addison-Wesley, Reading, Massachusetts (1970).
- (6) - Lippmann, B.A. and J. Schwinger, Phys. Rev. 79(1950) , 469.
- (7) - Faddeev, L.D., Soviet Phys., JETP 12, 1014(1961): Zh. Eksp. I. Teor. Fiz., 39, 1459 (1960).
- (8) - Lippmann, B.A., Phys. Rev. 102(1956) 264.
- (9) - Epstein, S.T., Phys. Rev., 106(1957) 598.
- (10) - Goldberger, M.L. and K.M. Watson, "Collision Theory", Wiley, New York (1964).
- (11) - Hylleraas, Zeits. F. Physik 54(1929)347.
- (12) - Hylleraas, Advances in Quantum Chemistry 1(1964)1.
- (13) - Schwartz, Phys. Rev. 124(1961)1468.
- (14) - Ochkur, Soviet Physics JETP, 18(1964)503.

- (15) - Bates, Fundaminsky, Massey, and Leech, Phil. Trans. Roy. Soc. London, A243(1950)93.
- (16) - Saul G. Jacchieri, Tese de Mestrado, Instituto de Química da USP, São Paulo (1982).
- (17) - J.S. Gradsteyn and I.M. Ryzhik, "Table of Integrals Series and Products", Academic Press Inc., New York (1980).
- (18) - Bevington, P., "Data Reduction and Error Analysis for the Physical", McGraw-Hill Book, New York (1969).
- (19) - Williams, J.F. and Willis, B.A., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., Vol. 8, N. 10 (1975).
- (20) - Kingston, A.E., Fon, W.C. and Burke, P.G.: J. Phys. B : Atom. Molec. Phys., Vol. 9, N.4 (1976).
- (21) - Saul G. Jacchieri, Cálculos não publicados.
- (22) - Williams, J.F., J. Phys. B:Atom. Molec. Phys. 14 (1981).
- (23) - Shelton, W.N., Leherissey, E.S. and Madison, D.H.; Physical Review A, Vol. 3, N. 1 (1971).
- (24) - Lins de Barros, H.G.P. and Brandi, H.S.; Canadian Journal of Physics, Vol. 53, N. 7 (1975).
- (25) - Kingston, A.E. and Walters, H.R.J., J. Phys. B: Atom Molec. Phys. 13(1980).
- (26) - Buckley, B.O. and Walters, N.R.J., J. Phys. B:Atom Molec. Phys. 8 (1975).
- (27) - Dewangan, D.P., J. Phys. B: Atom.Molec.Phys. 16 (1983).
- (28) - Morgan, L.A., J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 15 (1982).

**“ESPALHAMENTO INELÁSTICO DE ELÉTRONS POR ÁTOMO DE  
HIDROGÊNIO ATRAVÉS DE UMA FUNÇÃO DE ONDA  
CORRELACIONADA”**

**ARTHUR EDUARDO DE SERPA VIEIRA**

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:

Ricardo de Carvalho Ferreira /CBPF

Luiz Carlos Gomide de Freitas/UFSC

Henrique Gomes de Paiva Lins e Barros/CBPF