

HENRIQUE GOMES DE PAIVA LINS DE BARROS

ESTUDO DE COLISÕES NA PRESENÇA DE CAMPOS EXTERNOS

Tese de

DOCTORADO

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Rio de Janeiro, 1978

R E S U M O

Estudamos processos de colisão na presença de campo externo (magnético ou eletromagnético), utilizando o formalismo de Green. Consideramos processos de excitação de hidrogênio por colisão eletrônica e de excitação vibracional de moléculas diatômicas por impacto com partículas neutras na presença de campo de laser, além de tratarmos o problema de espalhamento de partículas carregadas por potencial sem estrutura na presença de campo magnético homogêneo. Apresentamos resultados para as amplitudes de espalhamento e seções de choque dos diversos processos na aproximação de altas energias da partícula incidente (aproximação de Born ou Born-Oppenheimer).

S U M Á R I O

	<u>Pág.</u>
AGRADECIMENTOS	iii
RESUMO	iv
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	ix
<u>CAPÍTULO 1</u> - <i>INTRODUÇÃO</i>	1
<u>CAPÍTULO 2</u> - <i>ESTUDO DE COLISÕES ELÉTRON-HIDROGÊNIO NA PRESENÇA DE CAMPOS DE LASER</i>	4
2.1 - Introdução	4
2.2 - Teoria	5
2.3 - Aproximação de Born-Oppenheimer	15
2.4 - Excitação 1s-2s	19
2.5 - Resultados e Conclusões	21
<u>CAPÍTULO 3</u> - <i>COLISÃO DE PARTÍCULAS COM MOLÉCULAS DIATÔMICAS NA PRESENÇA DE CAMPO DE LASER</i>	31
3.1 - Introdução	31
3.2 - Formalismo	32
3.3 - Colisões de Partículas Neutras com Moléculas Homopolares	43
3.4 - Colisão He + H ₂ ⁺ . Resultados e Conclusões	47
<u>CAPÍTULO 4</u> - <i>ESPALHAMENTO DE PARTÍCULAS CARREGADAS POR POTENCIAL SEM ESTRUTURA NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME</i>	53
4.1 - Introdução	53
4.2 - Teoria	57
4.3 - Espalhamento de Elétron por um Potencial Coulombiano	63
4.4 - Discussões e Conclusões	66

	<u>Pág.</u>
<u>CAPÍTULO 5 - DISCUSSÃO E CONCLUSÕES GERAIS</u>	74
5.1 - Introdução	74
5.2 - Colisão e + H na Presença de Campo de Laser	76
5.3 - Colisão de Partículas com Moléculas Diatômicas na Pre sença de Campo de Laser	78
5.4 - Espalhamento de Elêtrons por Potencial sem Estrutura na Presença de Campo Magnético	79
 <u>APÊNDICE A - ÁTOMO DE HIDROGÊNIO NA PRESENÇA DE CAMPO DE LASER: APRO XIMAÇÃO DE TRANSLAÇÃO ESPACIAL</u>	 81
 <u>REFERÊNCIAS</u>	 88

LISTA DE FIGURAS

<u>Fig.</u>	<u>Pág.</u>
<p>2.5.1 - Seção de choque total para o processo de excitação 1s-2s do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de campo de laser de rubi ($\epsilon_0 = 5 \times 10^6$ V/cm, $\omega = 1,78$ eV) para processos com absorção de 0,1 e 2 fótons, em função da energia do elétron incidente, E_0 (eV). σ em unidades de πa_0^2; — aproximação de Born; ---- aproximação de Born-Oppenheimer</p>	25
<p>2.5.2 - Seção de choque diferencial para a excitação 1s-2s do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de campo da laser de rubi ($\epsilon_0 = 5 \times 10^6$ V/cm, $\omega = 1,78$ eV) para processos com absorção de 0,1 e 2 fótons. Energia do elétron incidente, $E_0 = 30$ eV. $d\sigma/d\Omega$ em unidades de πa_0^2. — aproximação de Bor; ---- aproximação de Born-Oppenheimer</p>	27
<p>2.5.3 - Seção de choque diferencial para a excitação 1s-2s do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de campo de laser de rubi ($\epsilon_0 = 5 \times 10^6$ V/cm, $\omega = 1,78$ eV) para processos com absorção de 0,1 e 2 fótons. Energia do elétron incidente, $E_0 = 50$ eV. $d\sigma/d\Omega$ em unidades de πa_0^2. — aproximação de Born; ---- aproximação de Born-Oppenheimer</p>	28
<p>2.5.4 - Seção de choque total para o processo de excitação 1s-2s do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de campo de laser ($\epsilon_0 = 10^7$ V/cm; $\omega = 1,78$ eV) para processos com absorção de 0,1,2,3 e 4 fótons, em função da energia do elétron incidente, E_0 (eV). σ em unidades de πa_0^2; — aproximação de Born; ---- aproximação de Born-Oppnheimer.....</p>	29
<p>3.2.1 - Definição das Coordenadas Generalizadas x e z para o caso colisão colinear unidimensional. $x = (r_B - r_C) - d_0$, $z = r_A - (m_B r_B - m_C r_C) / (m_B + m_C)$; r_A, r_B e r_C - coordenadas das partículas A, B e C, respectivamente; m_B e m_C - massas das partículas B e C; d_0 - distância de equilíbrio entre os μ -</p>	

	<u>Pág.</u>
cleos da molécula B-C; CM - posição do Centro de Massa da molécula B-C	34
4.1.1 - Trajetória clássica de uma partícula na presença de um campo magnético uniforme ($B_0 \hat{z}$) e de um potencial espalhador $V(\vec{r})$. r e r' são os raios da órbita antes e depois da colisão. p_z e $p_{z'}$ são os momenta na direção do campo antes e depois da colisão.....	55
4.4.1 - Comportamento qualitativo da amplitude de transição parcial $ f(k_0 00, k_n, n's') $ em função da razão E_0/ω_c . ω_c é a frequência de ciclotron; E_0 é a energia cinética associada ao movimento translacional do elétron antes da colisão.....	70
4.4.2 - Comportamento qualitativo da probabilidade de transição parcial $P(k_0 00, k_n, n's')$ em função da razão E_0/ω_c . ω_c é a frequência de ciclotron; E_0 é a energia cinética associada ao movimento translacional do elétron antes da colisão.....	71

LISTA DE TABELAS

<u>Tab.</u>	<u>Pág.</u>
3.4.1 - Razão R_{01}^v para colisão $\text{He} + \text{H}_2^+$ na presença de campo de laser de CO_2 ($\omega_{\text{CO}_2} = 10^3 \text{ cm}^{-1} \approx 0,12 \text{ eV}$), em função da intensidade do campo. ² Energia da colisão, $E_0 = 3 \text{ eV}$. $\epsilon_0 = 1,4 \times 10^7 \text{ V/cm}$; ν - número de fótons absorvidos	49
3.4.2 - Razão R_{01}^v para colisão $\text{He} + \text{H}_2^+$ na presença de campo de laser com amplitude do campo elétrico $\epsilon_0 = 1,4 \times 10^7 \text{ V/cm}$ em função da frequência do CEM. Energia da colisão $E_0 = 3 \text{ eV}$; $\omega_{\text{CO}_2} = 10^3 \text{ cm}^{-1}$; ν - número de fótons absorvidos.....	50
3.4.3 - Razão R_{01}^v para a colisão $\text{He} + \text{H}_2^+$ na presença de campo de laser de CO_2 ($\epsilon_0 = 1,4 \times 10^7 \text{ V/cm}$; $\omega_{\text{CO}_2} = 10^3 \text{ cm}^{-1}$) em função da energia de colisão E_0 (eV).....	51

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é o de estudar o problema de espalhamento de partículas por um potencial ou por um sistema atômico ou molecular na presença de um campo externo, em particular, um campo magnético ou eletromagnético (CEM).

A existência de campos eletromagnéticos monocromáticos intensos, campos de laser, possibilita a ocorrência de processos de excitação de sistemas atômicos ou moleculares envolvendo a absorção ou emissão de muitos fótons. Um grande número de trabalhos teóricos recentes têm sido feitos com o intuito de se obter uma explicação satisfatória dos diversos mecanismos microscópicos de excitação, ionização ou dissociação na presença destes campos. Métodos perturbativos para o tratamento do problema são excessivamente trabalhosos e normalmente não podem ser aplicados no caso de campos intensos.

O problema de colisão de partículas com átomos ou moléculas na presença de campo eletromagnético intenso é de grande importância para a compreensão dos mecanismos microscópicos que surgem na ótica não linear⁽¹⁻¹⁴⁾ além de ser fundamental para o estudo microscópico dos processos de população de níveis atômicos em atmosferas de estrelas, uma vez que para o cálculo da população de estados excitados é necessário o conhecimento de seções de choque das partículas mais abundantes (elétrons,

dependente do tempo. O campo eletromagnético é tratado classicamente na aproximação de dipolo e as funções atômicas são obtidas através da aproximação de translação espacial em primeira ordem no campo, descrito no Apêndice A. Adotamos a aproximação de Born-Oppenheimer para a amplitude de espalhamento⁽²⁷⁾ e apresentamos resultados numéricos para as seções de choque do processo de excitação do estado 2s do hidrogênio a partir do estado fundamental por colisão eletrônica na presença de campo de laser de rubi.

O estudo de excitações vibracionais de moléculas diatômicas por colisão com partículas neutras na presença de campo eletromagnético intenso é apresentado no Capítulo 3. Usamos o método de função de Green dependente do tempo para tratar o problema de colisão unidimensional e a aproximação de Born para a amplitude de espalhamento.

O Capítulo 4 é dedicado ao problema de colisão de elétrons por um potencial sem estrutura na presença de campo magnético. Adotamos o formalismo de Green independente do tempo e definindo adequadamente a amplitude de espalhamento, particularizamos o problema para tratar o caso de colisão de elétrons por um potencial coulombiano na aproximação de Born.

No Capítulo 5 apresentamos, de forma breve, os principais resultados dos capítulos anteriores, e discutimos algumas generalizações possíveis do formalismo utilizado nos capítulos anteriores para o tratamento de outros problemas.

CAPÍTULO 2

ESTUDO DE COLISÕES ELÉTRON-HIDROGÊNIO NA PRESENÇA DE CAMPOS DE LASER

2.1 - Introdução

O estudo de colisões de elétrons com átomos na presença de um campo eletromagnético tem recebido grande atenção nos últimos anos (1-9, 28-47).

Com a obtenção de CEM intensos, tais como os campos de laser, o estudo da interação entre elétrons e átomos na presença desses campos, torna-se fundamental para a compreensão dos mecanismos microscópicos de excitação ressonante de átomos (9), de aquecimento de plasma por ondas eletromagnéticas (6,34), da quebra de transparência de gases rarefeitos (34), etc.

A excitação atômica via absorção de muitos fótons é um dos mecanismos responsáveis pela população de estados atômicos excitados em um gás. Este processo, porém, é muito provável somente próximo à ressonância, isto é, quando a energia total dos fótons absorvidos pelo sistema atômico é próxima à diferença de energia dos estados final e inicial do átomo. Esta condição de ressonância, para ser obtida experimentalmente, geralmente envolve técnicas de variação de frequência do campo. A inte-

ração do sistema atômico com uma partícula, na presença de laser, permite a existência de processos inelásticos, mesmo fora da condição de ressonância do campo, desde que a energia cinética da partícula incidente seja suficiente para compensar a diferença entre a energia de excitação do átomo e a energia dos fótons envolvidos. Neste caso, a partícula participa do processo compensando a diferença de frequência do campo, cedendo ou absorvendo a energia necessária para possibilitar a transição.

Uma das dificuldades do tratamento teórico do problema de colisão de partículas com átomos na presença de CEM intenso reside na descrição de estados ligados do sistema atômico. Para campos suficientemente intensos as distorções das funções ligadas não podem ser ignoradas e o efeito do CEM deve ser levado em conta na descrição do átomo.

Neste capítulo desenvolvemos uma expressão para a amplitude de espalhamento para o caso de excitação do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de CEM^(31,32). O problema atômico é tratado numa representação de interação adequada através de uma teoria de perturbação. As seções de choque diferencial e total para a excitação $1s - 2s$ do hidrogênio são calculadas na aproximação de Born - Oppenheimer e desta forma efeitos de troca são considerados.

2.2 - Teoria

Tratamos o campo eletromagnético classicamente atra -

vês do potencial vetor $\vec{A}(\vec{r}, t)$. Desprezando correções relativísticas e considerando o próton infinitamente massivo e em repouso, a equação de Schrödinger para o problema de espalhamento de um elétron por um átomo de hidrogênio na presença de CEM é dada por ($\hbar = c = 1$):

$$\mathcal{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = i \frac{\partial F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)}{\partial t} \quad (2.2.1)$$

onde

$$\mathcal{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{(\vec{p}_1 - e\vec{A}(\vec{r}_1, t))^2}{2m} + \frac{(\vec{p}_2 - e\vec{A}(\vec{r}_2, t))^2}{2m} + V(\vec{r}_2) + V(\vec{r}_1) + W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.2.2)$$

com

$$V(\vec{r}) = -e^2/r \quad (2.2.3)$$

$$W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \quad (2.2.4)$$

e

$$\vec{p}_j = -i \vec{\nabla}_j \quad j=1,2 \quad (2.2.5)$$

\vec{r}_1 e \vec{r}_2 são as coordenadas espaciais do elétron incidente e do elétron atômico; $F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ é a função de onda total do sistema elétron-átomo na presença do CEM.

Tratamos o CEM na aproximação de dipolo, isto é, espacialmente homogêneo e descrito pelo potencial vetor:

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \cos \omega t$$

onde ω é a frequência do campo.

Introduzindo o operador unitário definido por:

$$T = \exp \left\{ i \vec{\alpha}(t) \cdot (\vec{p}_1 + \vec{p}_2) + 2i\eta(t) \right\} \quad (2.2.6)$$

com

$$\vec{\alpha}(t) = -\frac{e}{m} \int_0^t \vec{A}(t') dt' = -\frac{e\vec{A}_0}{m\omega} \text{sen}\omega t = -\vec{\alpha}_0 \text{sen}\omega t \quad (2.2.7)$$

$$\eta(t) = \frac{e^2}{2m} \int_0^t dt' A^2(t')$$

A equação de Schrödinger, eq. (2.2.1), se transforma como:

$$i T \mathcal{H} T^\dagger T F = i T \frac{\partial F}{\partial t}$$

ou, efetuando a transformação:

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = i \frac{\partial \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)}{\partial t} \quad (2.2.8)$$

com

$$\hat{\mathcal{H}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(\vec{r}_1 + \vec{\alpha}(t)) + V(\vec{r}_2 + \vec{\alpha}(t)) + W(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

e

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = T F(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \quad (2.2.9)$$

e onde usamos explicitamente o fato de $W(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ser invariante por translação das duas coordenadas, isto é:

$$W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = W(\vec{r}_1 + \vec{\alpha}(t), \vec{r}_2 + \vec{\alpha}(t))$$

O operador T corresponde a uma translação espacial de $\vec{\alpha}(t)$ nas coordenadas \vec{r}_1 e \vec{r}_2 .

Podemos escrever $\tilde{\mathcal{H}}$ na forma:

$$\tilde{\mathcal{H}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \mathcal{H}_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) + U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \quad (2.2.10)$$

onde

$$\mathcal{H}_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{p_1^2}{2m} + V(\vec{r}_1 + \vec{\alpha}) + \frac{p_2^2}{2m} \quad (2.2.11)$$

é a hamiltoniana de um elétron livre descrito pelas coordenadas \vec{r}_2 e um elétron sob a ação do potencial $V(\vec{r}_1 + \vec{\alpha})$.

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = V(\vec{r}_2 + \vec{\alpha}(t)) + W(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

A função de Green para a eq. (2.2.9) é dada por:

$$G(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t' ; \vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{i}{(2\pi)^3} \sum_{\vec{k}, n} \int d^3 k' \psi_{\vec{k}', n}^*(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t') \psi_{\vec{k}, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \theta(t' - t) \quad (2.2.12)$$

onde $\psi_{\vec{k}, n}$ é a solução da equação:

$$\mathcal{H}_0 \psi_{\vec{k}, n} = i \frac{\partial \psi_{\vec{k}, n}}{\partial t}$$

e $\theta(t' - t) = 0$ para $t < t'$ e 1 caso contrário.

Podemos escrever:

$$\psi_{\vec{k},n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} e^{-i \frac{k^2}{2m} t} \phi_n(\vec{r}_1, t) \quad (2.2.13)$$

onde $\phi_n(\vec{r}_1, t)$ é a solução da equação:

$$\left(\frac{p_1^2}{2m} + V(\vec{r}_1 + \vec{\alpha}(t)) \right) \phi_n(\vec{r}_1, t) = i \frac{\partial \phi_n(\vec{r}_1, t)}{\partial t} \quad (2.2.14)$$

Para CEM nulo a eq. (2.2.14) se reduz à equação do átomo de hidrogênio. As funções $\phi_n(\vec{r}_1, t)$, em ordem zero no campo, podem ser aproximadas pelas funções do átomo de hidrogênio, isto é:

$$\phi_n(\vec{r}, t) \sim \phi_n(\vec{r}) e^{-i\epsilon_n t}$$

Para CEM intensos devemos levar em conta o efeito do campo sobre os estados ligados do átomo. Adotaremos uma solução corrigida em primeira ordem no campo⁽³¹⁾, apresentada no Apêndice A, dada por:

$$\phi_n(\vec{r}_1, t) \sim \phi_n(\vec{r}_1) e^{-i\epsilon_n t} e^{-i\rho_n \cos \omega t} \quad (2.2.15)$$

com ρ_n solução da equação secular:

$$\det |\omega \rho_n \delta_{\alpha\beta} + V_{\alpha\beta}| = 0$$

e

$$V_{\alpha\beta} = \frac{e^3}{m\omega^2} \int d^3r \frac{\vec{E}_0 \cdot \vec{r}}{r^3} \phi_{n\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{n\beta}(\vec{r})$$

e onde $\phi_{n\alpha}$ e $\phi_{n\beta}$ são funções de estados degenerados do nível atômico ϵ_n .

Substituindo as eqs. (2.2.13) e (2.2.15) na eq.(2.2.12) temos:

$$G(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t'; \vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{i}{(2\pi)^3} \sum_{n'} \int d^3k' \phi_{n'}^*(\vec{r}'_1) \phi_{n'}(\vec{r}_1) \theta(t-t') e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'_2} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}_2} e^{-i\Delta_{n'}(t')} e^{-i\Delta_{n'}(t)} \quad (2.2.16)$$

com

$$\Delta_n(k, t) = \left(\frac{k^2}{2m} + \epsilon_n \right) t + p_n \cos \omega t$$

A solução da eq. (2.2.8) é escrita como:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \Psi_{\vec{k}_{0,n}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \Psi_{\vec{k}_{0,n}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) -$$

$$\int d^3r'_1 d^3r'_2 dt' G(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t'; \vec{r}_1, \vec{r}_2, t) W(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t') \otimes \Psi_{\vec{k}_{0,n}}(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t') \theta(t-t')$$

$$= \Psi_{\vec{k}_{0,n}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) - \frac{i}{(2\pi)^3} \sum_{n'} \int d^3r'_1 d^3r'_2 d^3k' dt' \phi_{n'}^*(\vec{r}'_1) \phi_{n'}(\vec{r}_1) e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}'_2)} \left[e^{i\{\Delta_{n'}(k', t') - \Delta_{n'}(k', t)\}} \right] \left[V(\vec{r}'_2 + \vec{\alpha}(t')) + \right.$$

$$W(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) \Big] \psi_{\vec{k}_0 n}(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t') \theta(t-t')$$

com:

$$\begin{aligned} \Delta_n(k', t') &= \left(\frac{k'^2}{2m} + \epsilon_n \right) t' + \rho_n \cos \omega t' = \\ &= \left(\frac{k'^2}{2m} - \frac{k_0^2}{2m} + \epsilon_n - \epsilon_n \right) t' + \rho_n \cos \omega t' + \beta(k_0, n, t') \end{aligned}$$

e

$$\beta(k_0, n, t') = \left(\frac{k_0^2}{2m} + \epsilon_n \right) t' .$$

Usando-se a periodicidade da função (6):

$$\psi_{\vec{k}_0}^n(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t') = e^{i\beta(k_0, n, t')} \psi_{\vec{k}_0 n}(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t') = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} e^{ij\omega t'} \psi_{\vec{k}_0 n}^j(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2)$$

e as expansões em funções de Bessel (28):

$$e^{i\rho_n \cos \omega t'} = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} i^\ell J_\ell(\rho_n) e^{i\ell \omega t'}$$

$$V(\vec{r}'_2 + \vec{\alpha}(t')) = e^{-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla}_2} V(\vec{r}'_2) = \sum_s J_s(\vec{\alpha}_0 \cdot \vec{p}_2) V(\vec{r}'_2) e^{is\omega t'} \quad (2.2.17)$$

a integração em t' pode ser feita e temos:

$$\psi_{\vec{k}_0 n} = \psi_{\vec{k}_0 n} - \frac{i}{(2\pi)^3} \sum_n \int d^3\vec{r}'_1 d^3r'_2 d^3k' \phi_n^*(\vec{r}'_1) \phi_n(\vec{r}'_1) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}'_2 - \vec{r}'_2)}$$

$$\left\{ \sum_{\mu \ell s} \left[J_s(\vec{\alpha}_0 \cdot \vec{p}_2) V(\vec{r}'_2) \right] \Psi_{k_0 n}^{\nu-\ell-s}(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) e^{-i\Delta_{n'}(k', t)} \frac{i^\ell J_\ell(\rho_{n'})}{2i(k^2 - k^2(\nu))} + \right. \\ \left. \sum_{\nu \ell} W(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) \cdot \Psi_{k_0 n}^{\nu-\ell}(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) e^{-i\Delta_{n'}(k', t)} i^\ell J_\ell(\rho_{n'}) \frac{1}{2i(k^2 - k^2(\nu))} \right\} \quad (2.2.18)$$

com

$$\frac{k^2(\nu)}{2m} = \frac{k_0^2}{2m} + \epsilon_n - \epsilon_{n'} - \nu\omega \quad (2.2.19)$$

$$\nu = j + \ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

e

$$\frac{k^2(\mu)}{2m} = \frac{k_0^2}{2m} + \epsilon_n - \epsilon_{n'} - \mu\omega$$

$$\mu = j + \ell + s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Escolhendo o contorno de integração apropriado, isto é, aquele que fornece a condição assintótica de onda emergente (27), a integração em k' fornece:

$$\Psi_{\vec{k}_0, n} = \Psi_{\vec{k}_0, n} - \frac{m}{2\pi} \sum_{n'} \int_{s \ell \mu} \left[d^3 r'_1 d^3 r'_2 \phi_{n'}^*(\vec{r}'_1) \phi_{n'}(\vec{r}'_1) e^{-i\Delta_{n'}(t)} \right. \\ \left. \left[J_s(\vec{\alpha}_0 \cdot \vec{p}_2) V(\vec{r}'_2) \right] \frac{e^{ik(\mu)|\vec{r}'_2 - \vec{r}'_1|}}{|\vec{r}'_2 - \vec{r}'_1|} i^\ell J_\ell(\rho_{n'}) \Psi_{k_0 n}^{\mu-s-\ell}(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) \right] - \\ \frac{m}{2\pi} \sum_{n'} \sum_{\ell \nu} \int \left[d^3 r'_1 d^3 r'_2 \phi_{n'}^*(\vec{r}'_1) e^{-i\Delta_{n'}(t)} W(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) \right]$$

$$e^{\frac{ik(v)|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}} i^{\ell} j_{\ell}(\rho_n) \psi_{k_0 n}^{v-\ell}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.2.20)$$

Definindo a transformada inversa da função $\psi_{k_0 n}^j$ como:

$$\psi_{k_0 n}^j(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -\frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} dt e^{-ij\omega t} \psi_{k_0}^n(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

e efetuando as somas em ℓ e s obtemos, para a função de onda total, a expressão:

$$\psi_{k_0 n}^j = \psi_{k_0 n} + \sum_n \int_v \frac{m \omega}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi/\omega} dt' \langle \phi_n(\vec{r}_1, t') | e^{-i \frac{k^2(v)}{2m} t'} \frac{e^{-ik(v)|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \left[\left[V(r_2 - \vec{\alpha}(t')) + W(r_1, r_2) \right] \right] | \psi_{k_0 n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \rangle e^{-i \frac{k^2(v)}{2m} t} \phi_n(\vec{r}_1, t) \quad (2.2.21)$$

onde o símbolo $\langle \psi | V | \psi \rangle$ representa a integração nas coordenadas eletrônicas:

$$\langle \psi | V | \psi \rangle = \int \psi^* V \psi d^3 r_1 d^3 r_2$$

O comportamento assintótico da função de onda total é obtido tomando-se o limite de $|r_2| \rightarrow \infty$ e utilizando a expansão assintótica usual ⁽²⁶⁾

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{ikr} e^{-ikr'(\vec{r} \cdot \vec{r}')}}{r}$$

onde \vec{r} e \vec{r}' são os vetores unitários na direção \vec{r} e \vec{r}' , respectivamente.

Ignorando totalmente a contribuição de estados atômicos do contínuo (e desta forma desprezando a possibilidade de ionização do átomo de hidrogênio) (27) a função de onda total se comporta assintoticamente como:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}_0, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &\underset{r_2 \rightarrow \infty}{\sim} \psi_{k_0, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) + \\ &+ \sum_{n', \nu} f_{n', \nu}^{\vec{k}_0, \vec{k}(\nu)}(\theta, \psi) \frac{e^{ik(\nu)r_2}}{r_2} e^{-i \frac{k^2(\nu)}{2m} t} \phi_{n'}(\vec{r}_1, t) \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

com

$$\begin{aligned} f_{n', \nu}^{\vec{k}_0, \vec{k}(\nu)} &= \frac{m\omega}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi/\omega} dt' \langle \psi_{\vec{k}(\nu), n'}(r_1', r_2', t') \rangle \left\{ v(\vec{r}_2' + \vec{a}(t')) \right. \\ &\left. + W(\vec{r}_1', \vec{r}_2') \right\} \langle \psi_{\vec{k}_0, n}(\vec{r}_1', \vec{r}_2', t') \rangle \end{aligned} \quad (2.2.23)$$

onde definimos o momentum final do elétron espalhado como:

$$\vec{k}(\nu) = k(\nu) \vec{r}_2$$

sendo \vec{r}_2 o vetor unitário na direção \vec{r}_2 , $\vec{r}_2 = \frac{\vec{r}_2}{r_2}$; $f_{n', \nu}^{\vec{k}_0, \vec{k}(\nu)}$

amplitude de espalhamento para o processo de colisão no qual o elétron incidente com momentum \vec{k}_0 é espalhado para o estado $\vec{k}(v)$ e o átomo sofre uma transição do estado n para o estado n' com a absorção ($v < 0$) ou emissão ($v > 0$) de $|v|$ fótons.

O limite de campo nulo fornece a expressão usual da amplitude de espalhamento (ver, por exemplo, ref. (27)).

Na obtenção da eq. (2.2.22) desprezamos os termos relativos à ionização do átomo. Problema análogo ocorre no caso de colisões na ausência de campo (27), e este procedimento é usual.

A seção de choque diferencial é dada pela expressão (27) :

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_v^{n \rightarrow n'} = \frac{k(v)}{k_0} \left| f_{n'v}^{\vec{k}_0 \vec{k}(v)} \right|^2$$

2.3 - Aproximação de Born-Oppenheimer

A eq. (2.2.23) é a forma integral da amplitude de espalhamento. A aproximação de Born-Oppenheimer (27) é obtida substituindo-se na eq. (2.2.23) a função de onda exata $\Psi_{k_0 n}$ pela função aproximada devidamente antissimetrizada:

$$\Psi_{k_0 n}^{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \sim \Psi_{k_0 n}^{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \pm \Psi_{k_0 n}^{\pm}(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t) \quad (2.3.1)$$

onde o sinal \pm corresponde ao estado singlete (triplete) do

sistema elétron-hidrogênio.

Substituindo a eq. (2.3.1) na eq. (2.2.23) obtemos a expressão para a amplitude na aproximação de Born-Oppenheimer:

$$\begin{aligned}
 \left[f_{n'v}^{k_0 k(v)} \right]^{B-0} &= \frac{m\omega}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi/\omega} dt' \left\{ \langle \psi_{\vec{k}(v)n'}^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t') \mid \left[V(\vec{r}_2 + \vec{\alpha}(t')) \right. \right. \\
 &+ W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \left. \left. \right] \mid \psi_{\vec{k}_0 n}^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t') \rangle \pm \langle \psi_{\vec{k}(v)n'}^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t') \mid \right. \\
 &\left. \left[V(\vec{r}_2 + \vec{\alpha}(t')) + W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right] \mid \psi_{\vec{k}_0 n}^+(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t') \rangle \right\} \quad (2.3.2)
 \end{aligned}$$

A primeira parcela da eq. (2.3.2) é o termo direto da amplitude de espalhamento na aproximação de Born-Oppenheimer. Corresponde à primeira aproximação de Born⁽³¹⁾. Nesta parcela o potencial V não fornece nenhuma contribuição para o caso de espalhamento inelástico, devido à ortogonalidade das funções atômicas. A segunda parcela de (2.3.2) é o termo de troca.

Podemos efetuar a integração em t' ⁽⁴⁸⁾ e obtemos, para a amplitude de espalhamento, a expressão:

$$\begin{aligned}
 \left[f_{n'v}^{k_0 k(v)} \right]^{B-0} &= \frac{m}{2\pi} \left\{ \int d^3r_1 d^3r_2 e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}(v)) \cdot \vec{r}_2} \phi_n^*(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_1) W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right. \\
 &+ i v_j \rho_n(-\rho_n) \pm \left[\int d^3r_1 d^3r_2 e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_1 - i\vec{k}(v) \cdot \vec{r}_2} \phi_n^*(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_2) \right.
 \end{aligned}$$

$$W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) i^{\nu} J_{\nu}(\rho_n, -\rho_n) + \frac{e^{i\nu\xi}}{(2\pi)^3} \left[d^3k J_{\nu}(\{(k \cdot \vec{\alpha})^2 + (\rho_n, -\rho_n)^2\}^{1/2}) \right. \\ \left. \tilde{V}(\vec{k}) \tilde{\phi}_n(-\vec{k}(\nu) - \vec{k}) \tilde{\phi}_n^*(-\vec{k}_0) \right] \quad (2.3.3)$$

onde

$$\xi = \frac{1}{2} \arccos \left\{ \frac{(\rho_n, -\rho_n)^2 - (\vec{k} \cdot \vec{\alpha}_0)^2}{(\rho_n, -\rho_n)^2 + (\vec{k} \cdot \vec{\alpha}_0)^2} \right\}$$

e $\tilde{V}(\vec{k})$, $\tilde{\phi}_n$ e $\tilde{\phi}_n^*$, são as transformadas de Fourier de $V(\vec{r})$, ϕ_n e ϕ_n^* , respectivamente, definidas como:

$$V(\vec{r} + \vec{\alpha}(t)) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\alpha}(t)} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \tilde{V}(\vec{k}) d^3k \quad (2.3.4)$$

$$\phi_j(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \tilde{\phi}_j(\vec{q}) d^3q \quad (2.3.5)$$

O sinal + (-) representa a amplitude de espalhamento do estado singlete (tripleto).

A seção de choque diferencial para a excitação do átomo de hidrogênio do estado ϕ_n para o estado ϕ_n , com a absorção, ou emissão, de ν fótons no caso de feixe e alvo não polarizado, é dada pela expressão usual obtida no caso de colisão na ausência de campo (27)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{nn}^{\nu} = \frac{k_0}{k(\nu)} \left\{ \frac{1}{4} |f_{sing}^{\nu}|^2 + \frac{3}{4} |f_{trip}^{\nu}|^2 \right\} \quad (2.3.6)$$

onde f_{sing}^v é a amplitude de espalhamento para excitação do estado singlete definida pela eq. (2.3.3) com o sinal positivo e f_{trip}^v é a amplitude para a excitação do estado triplete (eq. (2.3.3) com o sinal -).

A seção de choque total de excitação é dada por:

$$\sigma = \int \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{nn'}^v d\Omega \quad (2.3.7)$$

onde $d\Omega = \sin\theta d\theta d\psi$ é o elemento de ângulo sólido.

A parte direta da amplitude de espalhamento pode ser escrita como (31) :

$$f_{\text{dir}}^v(\vec{k}_0, \vec{k}(v)) = \mathcal{F}_{n'n}^v i^v J_v(\rho_{n'} - \rho_n)$$

com

$$\mathcal{F}_{n'n}^v = \frac{m}{2\pi} \int d^3r_1 d^3r_2 e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}(v)) \cdot \vec{r}_2} \phi_{n'}^*(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_1) W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.3.8)$$

$\mathcal{F}_{n'n}^v$ é a amplitude de espalhamento de Born para o caso de colisão e-H na ausência de campo, calculada com $\vec{k} = \vec{k}(v)$. Mesmo que o sistema e-H não absorva ou emita fótons ($v=0$) a presença do campo altera as funções atômicas e muda a expressão da amplitude de Born através do fator multiplicativo $J_0(\rho_{n'} - \rho_n)$.

2.4 - Excitação 1s-2s

A eq. (2.3.3) pode ser escrita na forma:

$$\left[\begin{matrix} \vec{k}_0, \vec{k}(v) \\ f_{n'n} \end{matrix} \right]^{B=0} = \left[\mathcal{G}_{n'n}^v \pm G_{n'n}^v \right] i^{\nu} J_{\nu}(\rho_{n'} - \rho_n) \pm \frac{i^{\nu} \xi}{(2\pi)^4} \int d^3 k J_{\nu}(\{(\vec{k} \cdot \vec{\alpha}_0)^2 + (\rho_{n'} - \rho_n)^2\}^{1/2}) \tilde{\phi}_n(-\vec{k}(v) - \vec{k}) \tilde{\phi}_n^*(-\vec{k}_0) \quad (2.4.1)$$

com $\mathcal{G}_{n'n}^v$ definido pela eq. (2.3.8) e

$$G_{n'n}^v = \frac{m}{2\pi} \int d^3 r_1 d^3 r_2 e^{i(\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_1 - \vec{k}(v) \cdot \vec{r}_2)} \phi_n^*(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_2) \otimes W(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.4.2)$$

Para excitação 1s-2s do hidrogênio as integrais que sur-
gem nas eqs. (2.3.8) e (2.4.2) podem ser resolvidas de forma
analítica e obtemos, em unidades atômicas, as expressões (49) :

$$\mathcal{G}_{n'n}^v = \frac{m}{2\pi} \left\{ 1024 \sqrt{2} \pi (t^2 + 9)^{-3} \right\} \quad (2.4.3)$$

$$G_{n'n}^v = \frac{m}{2\pi} \left\{ 8 \sqrt{2} \chi^{-3} (3\chi^2 B_1 + 16\chi B_2 + 32B_3) - 3\sqrt{2} \pi \chi^{-4} (\chi^3 C_1 + 8\chi^2 C_2 + 128\chi C_3 + 256 C_4) \right\} \quad (2.4.4)$$

com

$$t^2 = 4q^2 \quad ; \quad \vec{q} = \vec{k}_0 - \vec{k}(v) \quad ; \quad \chi = 1 + 4 k_0^2$$

$$X = \text{arc sen} \left(\frac{t^2+3}{\sqrt{(t^2+9)(t^2+1)}} \right) + \text{arc sen} \left(\frac{t^2-3}{\sqrt{(t^2+9)(t^2+1)}} \right)$$

$$B_1 = 64(t^2 + 9)^{-2}$$

$$B_2 = -48t^{-2}(t^2 + 9)^{-1} + 8t^{-3}X$$

$$B_3 = 6t^{-4}(t^2+3) + t^{-5}(t^4 - 10t^2 - 27)X$$

$$C_1 = \frac{512}{3}(t^2 + 27)(t^2 + 9)^{-3}$$

$$C_2 = 128(t^2 + 9)^{-2}$$

$$C_3 = -8t^{-4}(t^2-27)(t^2 + 9)^{-1} + 4t^{-5}(t^2 - 9)X$$

$$C_4 = \frac{1}{3}t^{-6}(9t^4 - 58t^2 - 135) + \frac{1}{2}t^{-7}(t^6 - 7t^4 + 63t^2 + 135)X$$

Para energias altas do elétron incidente, vemos que $G_{n'n} \propto 1/k_0^2$.

A última parcela da eq. (2.4.1) não pode ser reduzida a uma forma analítica simples. Porém, a dependência básica em energia da partícula incidente está contida no termo $\phi_n^*(-k_0^2)$. Para o caso de excitação do estado 2s temos $\phi_{2s}^*(-k_0^2) \sim 1/k_0^6$, enquanto que para outros estados excitados a dependência em $1/k_0$ é de ordem maior. Como nesta região de energia os outros termos da amplitude de espalhamento tem comportamento proporcional a $1/k_0^2$, podemos desprezar as contribuições para amplitude de espalhamento do termo em $V(\vec{r}_2)$. Esta aproximação é semelhante àquela introduzida por Ochkur (27, 50) no caso de colisões

elêtron-átomo na ausência de campo. A amplitude de espalhamento é dada, nesta aproximação, por:

$$f_{n'0}^{\vec{k}} \vec{k}(\nu) = \left[\mathcal{F}_{nn'}^{\nu} \pm G_{nn'}^{\nu} \right] i^{\nu} J_{\nu}(\rho_{n'} - \rho_n) \quad (2.4.5)$$

com $\rho_{1s} = 0$ e $|\rho_{2s}| = \frac{e^3 E_0}{2m\omega^3}$ (ver Apêndice A), onde E_0 é a intensidade do campo elétrico associado ao CEM, e escolhemos \vec{E}_0 paralelo ao eixo de quantização \hat{z} . A utilização de funções aproximadas em ordem zero no campo corresponde considerar $\rho_n = \rho_{n'} = 0$, fornecendo resultado nulo para a amplitude de espalhamento de processos de excitação que envolvem absorção ou emissão de fótons (porque $J_{\nu}(0) = 0$ para $\nu \neq 0$). A eq. (2.4.5) mostra que nesta aproximação a amplitude de espalhamento para o processo de excitação com absorção (ou emissão) de $|\nu|$ fótons é constituída pelo produto de um termo que depende da intensidade e da frequência do campo ($J_{\nu}(\rho_{n'} - \rho_n)$) por um termo formalmente idêntico ao caso de colisões elêtron-átomo livre, calculado com o momentum final dado por:

$$\frac{k^2(\nu)}{2m} = \frac{k_0^2}{2m} + \epsilon_n - \epsilon_{n'} - \nu\omega \quad ; \quad (\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

2.5 - Resultados e Conclusões

A aproximação de Born-Oppenheimer é válida para problemas de colisões eletrônicas na região de energias do elêtron

incidente muito superiores à energia cedida ao sistema atômico durante a colisão (27,50,51), isto é:

$$\frac{k_0^2}{2m} \gg \Delta \epsilon \quad \text{com} \quad \Delta \epsilon = \epsilon_{n_1} - \epsilon_{n_2} - \nu \omega$$

Para processos que envolvem a absorção de muitos fótons ($\nu < 0$) a condição de validade desta aproximação é menos restritiva (em relação à diferença $(\epsilon_{n_1} - \epsilon_{n_2})$) do que no caso de colisões livres, isto é, sem CEM. O termo de troca, por sua vez, é importante na região de baixas energias do elétron incidente. Para excitações óticamente permitidas o termo de troca deve dar pequena contribuição para a seção de choque.

A amplitude de espalhamento do problema livre é dada pela eq. (2.3.3) com $\rho_{n_1} = \rho_{n_2} = \alpha = 0$. Neste caso, pode-se mostrar que somente os termos que envolvem o potencial de dois corpos $W(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ contribuem para o processo de excitação na região de altas energias (49). No problema livre é conhecido o fato de que o termo em $V(\vec{r}_2)$ da aproximação de Born-Oppenheimer introduz a discrepância anterior-posterior quando as funções atômicas são soluções aproximadas (27,50,51). Como foi comentado anteriormente, podemos desprezar as contribuições do termo em $V(\vec{r}_2)$ na região de altas energias do elétron incidente, e desta forma, utilizarmos a forma aproximada da amplitude de espalhamento dada pela eq. (2.4.5), que não apresenta distinção entre as interações anterior e posterior.

Para campos fracos $\Delta \rho = |\rho_{n_1} - \rho_{n_2}| \ll 1$ (uma vez que $\rho_{n_1} \ll E_0$) e, pela eq. (2.4.5),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{nn'}^{\nu} \propto I |\nu|$$

onde I é a intensidade de campo eletromagnético ($I \propto E_0^2$). Esta conclusão nos diz que neste caso, a probabilidade de excitação decresce rapidamente com o aumento do número de fótons que participa do processo, conforme apontado por Perel'man e Kovarskiy (9).

A maior seção de choque para processo de excitação com absorção (ou emissão) de m fótons ocorre na região de campo em que $\Delta\rho \sim m (J_m(z))$ é máximo para $z \sim m$.

Para determinados valores do campo pode ocorrer que $\Delta\rho$ seja um zero da função de Bessel J_m e isto implica na impossibilidade de excitação por impacto eletrônico com a absorção ou emissão de m fótons dentro desta aproximação.

Utilizando a aproximação de Born e funções de onda atômicas obtidas através da aproximação ressonante em um modelo de três níveis (4), Perel'man e Kovarskiy (5) obtiveram uma expressão para a seção de choque diferencial do processo de excitação direto que apresenta uma forma idêntica à parte direta da eq. (2.4.5), em que a única diferença está no argumento da função de Bessel, que exibe uma dependência no ângulo de espalhamento.

Brandi e colaboradores (31), usando um formalismo idêntico ao apresentado no presente trabalho, onde a transformação unitária (eq. (2.2.6)) é feita somente sobre as coordenadas do elétron incidente, obtém resultado idêntico ao apresentado neste capítulo para o termo direto da amplitude de espalhamento.

Choudhury⁽²⁾; usando funções atômicas não perturbadas e as aproximações de Born e de Glauber⁽⁵²⁾ para a amplitude de espalhamento, obteve um resultado que, em alguns aspectos, é semelhante aos de Perel'man e Kovarskii⁽⁵⁾ e à parte direta da eq. (2.4.5). A amplitude de espalhamento obtida por Choudhury pode ser escrita como o produto de uma função de Bessel pela amplitude de espalhamento do problema livre calculada com o momento final do elétron definido pela eq. (2.2.19). O argumento da função de Bessel também apresenta uma dependência com o ângulo de espalhamento, de acordo com Perel'man e Kovarskii⁴. As seções de choque diferenciais obtidas para a excitação eletrônica do estado 2p do hidrogênio, a partir do estado fundamental na presença de campos de laser de Nd com a absorção de 8 fótons (únicos resultados publicados) são excessivamente pequenas (inferiores a 10^{-26} a₀², a₀ raio de Bohr) e apresentam um comportamento não usual com o ângulo de espalhamento (há um crescimento de 9 ordens de grandeza para ângulos de 50° em comparação com o espalhamento frontal para elétrons incidentes com energia de 3.0 eV).

A fig. 2.5.1 apresenta os resultados obtidos para a seção de choque total de excitação 1s-2s do hidrogênio na presença de um campo característico do laser de rubi (intensidade do campo elétrico $E_0 \approx 5 \times 10^6$ V/cm, frequência $\omega = 1.78$ eV). Com estes valores do campo temos $\Delta\rho = \rho_{2s} - \rho_{1s} \sim 1.74$, que se encontra dentro da região de validade da aproximação usada para a função de onda ligada (Apêndice A). A fig. 2.5.1 mostra o comportamento da seção de choque total nas aproximações de Born e de Born-Oppenheimer, com o aumento de energia do elétron inci -

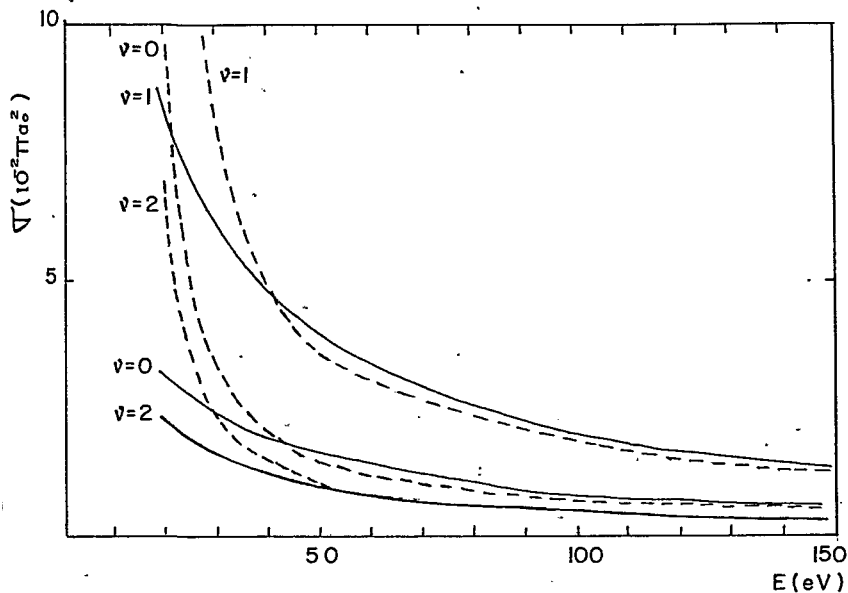


Fig. 2.5.1 - Seção de choque total para o processo de excitação 1s-2s do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de campo de laser de rubi ($\epsilon_0 = 5 \times 10^6$ V/cm, $\omega = 1,78$ eV) para processos com absorção de 0, 1 e 2 fótons, em função da energia do elétron incidente, E (eV).

σ em unidades de πa_0^2 ; ν número de fótons absorvidos.

— aproximação de Born

----- aproximação de Born-Oppenheimer

dente para processos de excitação com absorção de 0, 1 e 2 fôtons. O comportamento global de σ é análogo ao caso de espalhamento e+H na ausência de campo externo, apresentando um máximo na região de limiar de excitação e um decaimento rápido com o aumento da energia do elétron incidente. As contribuições dos termos de troca são importantes na região de energias incidentes baixas. Para campos de laser de rubi, os processos de excitação com absorção de um fóton são os mais prováveis. Processos com mais de três fôtons absorvidos não são relevantes, apresentando seções de choque totais excessivamente pequenas ($\sim 10^{-4} \text{ pa}_0^2$).

A seção de choque diferencial apresenta um comportamento análogo ao encontrado no problema livre, com um máximo correspondente ao espalhamento frontal e um decaimento rápido com o aumento do ângulo de espalhamento. As figs. 2.5.2 e 2.5.3, mostram o comportamento das seções de choque diferenciais para o caso de excitação do estado 2s na presença de campo de laser de rubi, para energias do elétron incidente de 30 eV e 50 eV, respectivamente. A aproximação de Born e de Born-Oppenheimer não descreve corretamente o comportamento da seção de choque diferencial na região de ângulo de espalhamento grande, e a utilização de outras aproximações, tais como a aproximação de Glauber⁽⁵²⁾, ou de acoplamento forte⁽⁵⁰⁾, pode fornecer resultados que apresentam um decaimento mais lento.

Para campos intensos ($E_0 = 10^7$ V/cm) de mesma frequência, verificou-se um aumento das seções de choque totais para processos com absorção de mais de um fóton e os processos de 2 e 3 fôtons são os mais prováveis. Estes resultados são apresentados na fig. 2.5.4.

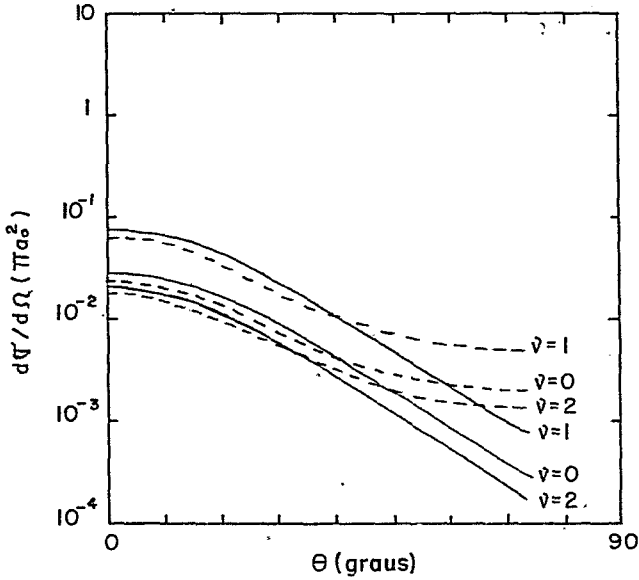


Fig. 2.5.2 - Seção de choque diferencial para a excitação 1s-2s do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de campo de laser de ru b1 ($\epsilon_0 = 5 \times 10^6$ V/cm, $\omega = 1,78$ eV) para processos com absorção de 0, 1 e 2 fôtons. Energia do elétron incidente, $E = 30$ eV. $d\sigma/d\Omega$ em unidades de πa_0^2 ; ν número de fôtons absorvidos.

— aproximação de Born
 - - - - - aproximação de Born-Oppenheimer.

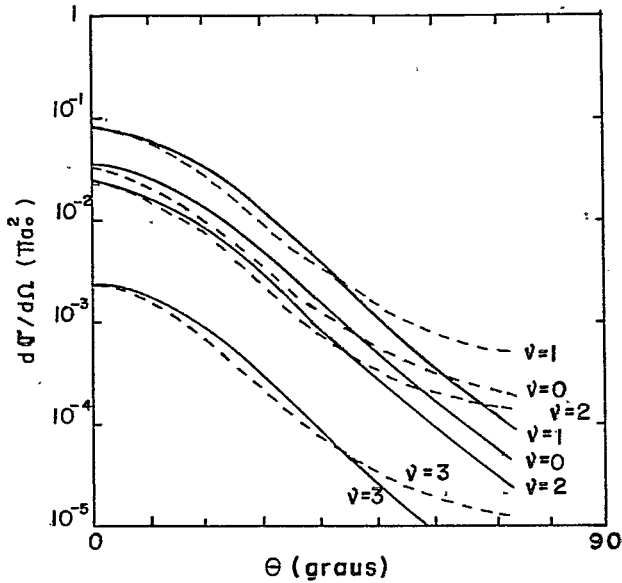


Fig. 2.5.3 - Seção de choque diferencial para a excitação $1s-2s$ do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de campo de laser de rubi ($\epsilon_0 = 5 \times 10^6$ V/cm, $\omega = 1,78$ eV) para processos com absorção de 0, 1 e 2 fótons. Energia do elétron incidente, $E = 50$ eV. $d\sigma/d\Omega$ em unidades de πa_0^2 . ν número de fótons absorvidos.

— aproximação de Born

----- aproximação de Born-Oppenheimer.

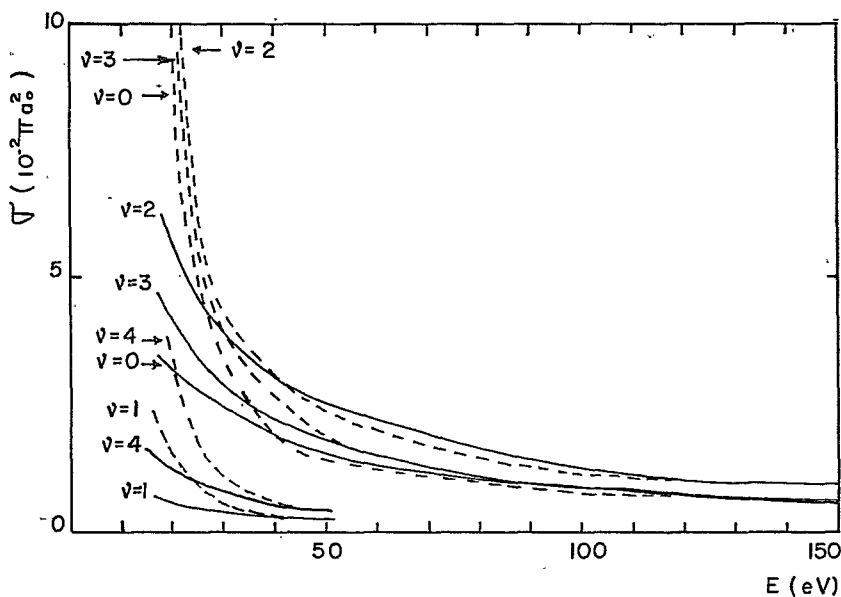


Fig. 2.5.4 - Seção de choque total para o processo de excitação 1s-2s do hidrogênio por colisão eletrônica na presença de campo de laser ($E_0 = 10^7$ V/cm ; $\omega = 1,78$ eV) para processos com absorção de 0, 1, 2, 3 e 4 fótons, em função da energia do elétron incidente, E (eV)

σ em unidades de πa_0^2 ; ν número de fótons absorvidos.

— aproximação de Born

- - - - - aproximação de Born-Oppenheimer.

O termo de troca é importante na região de energias incidentes baixas (cerca de 30 eV). Nesta região, porém, a aproximação de Born-Oppenheimer costuma superestimar as seções de choque totais no caso de colisão livre, e comportamento análogo deve ser esperado para o caso de processos de espalhamento na presença de campos de laser.

CAPÍTULO 3

COLISÃO DE PARTÍCULAS COM MOLÉCULAS DIATÔMICAS NA PRESENÇA DE CAMPO DE LASER

3.1 - Introdução

No processo de colisão de uma partícula com uma molécula diatômica pode haver transições entre níveis rotacionais, ou transições entre níveis vibracionais da molécula, além da possibilidade de ocorrer dissociação, ionização, etc. Em todos os casos a orientação do eixo da molécula em relação à direção da velocidade da partícula incidente é um fator importante para a determinação de probabilidades de transição. Colisões colineares, isto é, colisões em que o eixo da molécula é colinear à direção da velocidade da partícula incidente, são as mais favoráveis para induzir transições vibracionais em moléculas diatômicas homopolares (53).

Apresentamos, neste capítulo, um formalismo para o tratamento do problema de excitações vibracionais de moléculas diatômicas por colisão com partículas sem estrutura na presença de CEM. O estudo de excitação vibracional de moléculas na presença de laser é fundamental para a compreensão dos mecanismos de fotodissociação (10-14, 54-57). Basicamente, existem dois mecanismos

possíveis: a excitação da molécula para um termo eletrônico de repulsão, com subsequente decomposição da molécula em átomos ou íons, e a dissociação via excitação de estados vibracionais altamente excitados. No primeiro caso, que em geral envolve poucos fótons na faixa do ultra-violeta, o tipo de ligação não é importante para o processo, enquanto que no segundo caso, que pode ser favorecido pela absorção de muitos fótons na região do infra-vermelho, o tipo de ligação é fundamental (10).

Utilizamos o método de função de Green dependente do tempo e consideramos o caso de colisão colinear unidimensional e uma descrição clássica do CEM, e obtivemos resultados numéricos para o caso particular de colisão $\text{He} + \text{H}_2^+$ na presença de campo de laser de CO_2 (57).

Como é usual, o tratamento teórico envolvendo átomos e moléculas, exige um grande número de aproximações e a utilização de modelos simples para descrever o efeito das interações

3.2 - Formalismo

Estamos interessados no problema de excitação vibracional molecular por colisão na presença de CEM e, desta forma, não consideramos nenhum tipo de movimento de rotação da molécula. Tratamos o problema em uma dimensão e consideramos somente o caso de colisão colinear. Na ausência de campo externo a hamiltoniana clássica do problema de colisão entre uma partícula A, de massa m_A e carga q_A , e uma molécula diatômica constituída

ida por dois núcleos B e C, de massas m_B e m_C e cargas q_B e q_C , pode ser escrita como:

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_M + \frac{p_A^2}{2m_A} + V(r_A, r_B, r_C) \quad (3.2.1)$$

com

$$\mathcal{H}_M = \frac{p_B^2}{2m_B} + \frac{p_C^2}{2m_C} + U(r_B, r_C) \quad (3.2.2)$$

O movimento dos elétrons da molécula está considerado de forma aproximada, através do potencial fenomenológico $U(r_B, r_C)$.

As coordenadas r_A , r_B e r_C , representam as posições das partículas A, B e C, respectivamente, e p_A , p_B e p_C os momentos a elas associados. O potencial $V(r_A, r_B, r_C)$, representa a interação entre a partícula incidente e a molécula. $U(r_B, r_C)$ é o potencial fenomenológico que descreve a interação entre os núcleos B e C da molécula, estando aí incluída uma média sobre os termos eletrônicos. Tratamos a molécula através de um modelo simples e na descrição dos estados vibracionais $U(r_B, r_C)$ pode ser aproximado por um potencial que depende apenas da coordenada x (fig. 3.2.1)

$$U(r_B, r_C) = U(x) \quad (3.2.3)$$

$$x = (r_B - r_C) - d_0 \quad (3.2.4)$$

onde d_0 é a distância de equilíbrio entre os núcleos B e C.

A interação $V(r_A, r_B, r_C)$ é tratada de forma aproximada

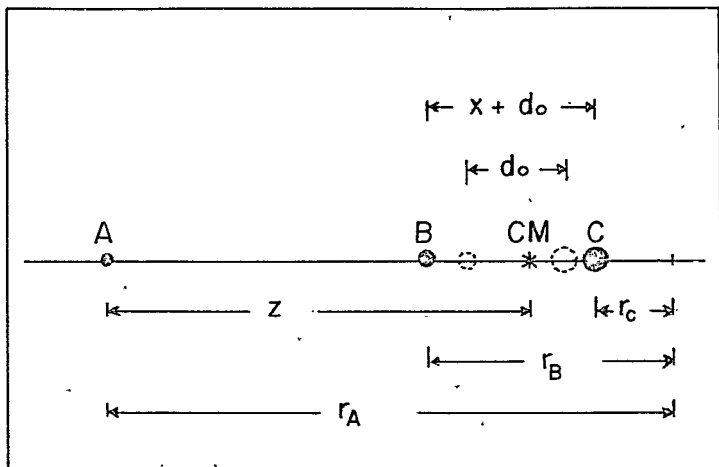


Fig. 3.2.1 - Definição das Coordenadas Generalizadas x e z para o caso de colisão colinear unidimensional.

$$x = (r_B - r_C) - d_0, \quad z = r_A - (m_B r_B - m_C r_C) / (m_B + m_C)$$

r_A, r_B e r_C - coordenadas das partículas A, B e C, respectivamente.

m_B e m_C - massas das partículas B e C

d_0 - distância de equilíbrio entre os núcleos da molécula B-C.

CM - posição do Centro de Massa da molécula B-C.

através de um potencial efetivo que depende da distância entre a partícula A e o centro de massa da molécula e da coordenada x definida pela eq. (3.2.4), isto é (fig. 3.2.1):

$$V(r_A, r_B, r_C) = V(x, z) \quad (3.2.5)$$

com

$$z = r_A - \frac{m_B r_B - m_C r_C}{m_B + m_C} \quad (3.2.6)$$

Tratando x e z como coordenadas generalizadas do problema, os momenta conjugados de x e z são definidos como:

$$p_x = \frac{m_C p_B - m_B p_C}{m_B + m_C} \quad (3.2.7)$$

$$p_z = \frac{(m_B + m_C) p_A - (m_A p_B + m_A p_C)}{m_B + m_B + m_C} \quad (3.2.8)$$

A hamiltoniana do sistema, eq. (3.2.1), em termos das variáveis canônicas definidas pelas eqs. (3.2.4), (3.2.6) (3.2.7) e (3.2.8) é:

$$\mathcal{H}(x, z, p_x, p_z) = \mathcal{H}_M(x, p_x) + V(x, z) + \frac{p_z^2}{2\mu} \quad (3.2.9)$$

com:

$$\mathcal{H}_M(x, p_x) = \frac{p_x^2}{2m} + U(x) \quad (3.2.10)$$

e

$$m = \frac{m_B m_C}{m_B + m_C} \quad (3.2.11)$$

$$\mu = \frac{m_A(m_B + m_C)}{m_A + m_B + m_C} \quad (3.2.12)$$

A introdução de um CEM no formalismo clássico é feita da forma usual através da substituição dos momenta generalizados p_x e p_z por: ($\hbar = c = 1$)

$$p_x = q'A \quad (3.2.13)$$

$$p_z = qA \quad (3.2.14)$$

com q e q' obtidos através das eqs. (3.2.7) e (3.2.8), quando se faz substituição análoga dos momenta p_A , p_B e p_C . Obtemos:

$$q' = \frac{m_C q_B - m_B q_C}{m_B + m_C} \quad (3.2.15)$$

$$q = \frac{(m_B + m_C)q_A + m_A(q_B + q_C)}{m_A + m_B + m_C} \quad (3.2.16)$$

Nas eqs. (3.2.13) e (3.2.14) está implícito o fato de estarmos assumindo válida a aproximação de dipolo para o CEM, isto é, o potencial vetor $A(r,t)$ é espacialmente homogêneo e possui uma dependência temporal da forma:

$$A(r,t) = A(t) = A_0 \cos \omega t$$

onde ω é a frequência do campo.

A polarização é linear e paralela à direção de colisão. Esta aproximação para o CEM é válida desde que o comprimento de onda associado ao campo seja suficientemente maior do

que a dimensão característica do sistema que interage. Esta restrição é normalmente satisfeita para campos de laser de baixa frequência e para processos de colisão, envolvendo moléculas ou átomos neutros (isto é, $q_B + q_C = 0$ ou $q_A = 0$).

A hamiltoniana clássica do sistema na presença do campo é dada por:

$$\mathcal{H}(x, z, p_x, p_z, t) = \mathcal{H}_M(x, p_x, t) + \frac{1}{2\mu}(p_z - qA(t))^2 + V(x, z) \quad (3.2.17)$$

com

$$\mathcal{H}_M(x, p_x, t) = \frac{1}{2m}(p_x - q'A(t))^2 + U(x) \quad (3.2.18)$$

A equação de Schrödinger associada à hamiltoniana de finida pela eq. (3.2.18) é:

$$\mathcal{H}(x, z, p_x, p_z, t)\Gamma(x, z, t) = i \frac{\partial \Gamma(x, z, t)}{\partial t} \quad (3.2.19)$$

onde p_x e p_z representam os operadores de momentum linear, $-i\vec{\nabla}_x$ e $-i\vec{\nabla}_z$, respectivamente, e $\Gamma(x, z, t)$ é a função de onda total do sistema partícula-molécula na presença de CEM.

Introduzindo o operador unitário de translação espacial definido como:

$$T = \exp \left\{ -i(\delta(t)p_x + \eta(t)) \right\} \quad (3.2.20)$$

com

$$\delta(t) = -\frac{q'}{m} \int^t A(t') dt' = -\delta_0 \text{sen}\omega t \quad (3.2.21)$$

com

$$\delta_0 = q'A_0/m\omega$$

e

$$\eta(t) = \frac{q'}{2m} \int^t A^2(t') dt'$$

A equação de Schrödinger se transforma segundo a relação:

$$T\mathcal{H}T^+T\Gamma = i T \frac{\partial T}{\partial t}$$

ou seja:

$$\left[\mathcal{H}_M + \frac{1}{2\mu} (p_z - qA(t))^2 + V(x+\delta(t), z) \right] \Psi(x, z, t) = i \frac{\partial \Psi(x, z, t)}{\partial t} \quad (3.2.22)$$

com

$$\mathcal{H}_M \phi_n(x, t) = \left[\frac{p_x^2}{2m} + U(x+\delta(t)) \right] \phi_n(x, t) = i \frac{\partial \phi_n(x, t)}{\partial t} \quad (3.2.23)$$

e

$$\Psi(x, z, t) = T\Gamma(x, z, t)$$

As funções $\phi_n(x, t)$, soluções da hamiltoniana molecular transformada, \mathcal{H}_M , não são conhecidas exatamente. Adotamos a aproximação de translação espacial em ordem zero (STA) (28, 29) (Apêndice A) para as funções $\phi_n(x, t)$, que consiste essencial -

mente em tratar o potencial $U(x+\delta(t))$ em ordem zero no deslocamento $\delta(t)$. Esta aproximação s \tilde{o} \tilde{e} v \tilde{a} lida quando $|\delta(t)| \sim q'A_0/m\omega$ \tilde{e} muito menor do que a dimens \tilde{a} o caracter \tilde{i} stica da mol \tilde{e} cula, isto \tilde{e} , quando tratamos campos pouco intensos de alta frequ \tilde{e} ncia. Esta aproxima \tilde{c} o para o problema molecular pode ser incompat \tilde{i} vel com a aproxima \tilde{c} o de dipolo para certos valores de CEM. Na STA, a fun \tilde{c} o molecular $\phi_n(x,t)$ pode ser separada em uma parte esp \tilde{a} cial e uma parte temporal (estamos considerando $U(x+\delta(t)) \sim U(x)$)

$$\phi_n(x,t) = \phi_n(x) e^{-i\epsilon_n t} \quad (3.2.24)$$

onde $\phi_n(x)$ \tilde{e} a solu \tilde{c} o do problema molecular livre, isto \tilde{e} , na aus \tilde{e} ncia de campo, e ϵ_n \tilde{e} o autovalor de energia associado ao estado $\phi_n(x)$.

Em uma dimens \tilde{a} o o processo de espalhamento s \tilde{o} pode ocorrer em dois sentidos, a part \tilde{i} cula espalhada no mesmo sentido que incidiu ou em sentido oposto. Consideramos a part \tilde{i} cula A incidindo na dire \tilde{c} o +z, e a fun \tilde{c} o de onda total deve satisfazer a condi \tilde{c} o assint \tilde{o} tica apropriada, que ser \tilde{a} definida posteriormente.

A equa \tilde{c} o de Schr \ddot{o} dinger, eq. (3.2.22), pode ser escrita na forma integral:

$$\Psi(x,z,t) = \psi_{k_0 n}(x,z,t) = \psi_{k_0 n}(x,z,t) - \int dx' dz' dt' G(x,z,t,x',z',t') V(x'+\delta(t'),z') \psi_{k_0 n}(x',z',t') \quad (3.2.25)$$

onde $\psi_{kn}(x, z, t)$ é a solução exata da hamiltoniana total na ausência de interação entre a partícula A e a molécula:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 \psi_{kn}(x, z, t) &= \left\{ \mathcal{H}_M + \frac{1}{2\mu} (p_z - qA(t))^2 \right\} \psi_{kn}(x, z, t) = \\ &= i \frac{\partial \psi_{kn}(x, z, t)}{\partial t} \end{aligned} \quad (3.2.26)$$

e $G(x, z, t, x', z', t')$ é a função de Green que satisfaz a condição de contorno de onda emergente:

$$G(x, z, t, x', z', t') = \frac{i}{2\pi} \sum_n \int dk \psi_{n,k}^*(x', z', t') \psi_{n,k}(x, z, t) \theta(t-t') \quad (3.2.27)$$

onde $\theta(t-t')$ é definido como:

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 0 & t < t' \\ 1 & t > t' \end{cases}$$

Assumindo a STA, as soluções do operador \mathcal{H}_0 são dadas por:

$$\psi_{kn}(x, z, t) = \phi_n(x) e^{-i\epsilon_n t} \xi_k(z, t) \quad (3.2.28)$$

com

$$\left[\frac{1}{2\mu} (p_z - qA)^2 \right] \xi_k(z, t) = i \frac{\partial \xi_k(z, t)}{\partial t}$$

As funções ξ_k são as funções de onda de uma partícula de massa μ e carga q na presença de um campo de frequência ω descrito classicamente pelo potencial vetor $A_0 \cos \omega t$ (aproximação de dipolo)

$$\xi_k(z, t) = e^{ik(z - \alpha(t))} e^{-iE_k t} \quad (3.2.29)$$

com

$$E_k = k^2 / 2\mu \quad (3.2.30)$$

e

$$\alpha(t) = \frac{q}{\mu} \int_0^t A(t') dt' = \alpha_0 \sin \omega t \quad (3.2.31)$$

e

$$\alpha_0 = qA_0 / \mu\omega$$

Levando as eqs. (3.2.24), (3.2.27) e (3.2.29) na eq. (3.2.25), e usando a expansão em funções de Bessel do potencial $V(x + \delta(t), t)$, eq. (2.2.17), e a periodicidade da função (6):

$$\begin{aligned} e^{ik' \alpha_0 \sin \omega t'} e^{i(\epsilon_{k_0} + \epsilon_n)t'} \psi_{k_0 n}(x', z', t') &= \\ = \psi_{k', k_0, n}(x', z', t) &= \sum_{j=-\infty}^{+\infty} e^{ij\omega t'} \psi_{kk_0 n}^j(x, z) \end{aligned} \quad (3.2.32)$$

Podemos efetuar a integração em t' e em k' de forma análoga a apresentada no capítulo anterior (eq. (2.2.18) a eq. (2.2.21)),

obtendo para a função de onda total a forma assintótica:

$$\Psi_{k_0 n}(x, z, t) \underset{|z| \rightarrow \infty}{\sim} \Psi_{k_0 n}(x, z, t) + \sum_{n' \nu} f_{nn'}^{\nu}(k_0, k(\nu)) \Psi_{k(\nu), n'}(x, z, t) \quad (3.2.33)$$

onde $k(\nu)$ é definido como:

$$\frac{k^2(\nu)}{2\mu} = \frac{k_0^2}{2\mu} + (\epsilon_{n'} - \epsilon_n - \nu\omega) \quad (3.2.34)$$

e o sinal de $k(\nu)$ é escolhido de acordo com a região de interesse: $k(\nu) > 0$ representa espalhamento frontal ($z \rightarrow +\infty$) enquanto que $k(\nu)$ negativo representa espalhamento no sentido contrário ao de incidência ($z \rightarrow -\infty$). O número de fótons envolvidos no processo de colisão é dado por $|\nu|$.

A amplitude de espalhamento para o processo de excitação da molécula do estado inicial ϕ_n para o estado final $\phi_{n'}$, com a absorção ($\nu < 0$) ou emissão ($\nu > 0$) de $|\nu|$ fótons é:

$$f_{nn'}^{\nu}(k_0, k(\nu)) = - \frac{i\mu\omega}{2\pi k(\nu)} \int_0^{2\pi/\omega} \langle \Psi_{k(\nu), n'}(x, z, t) | V(x+\delta(t), z) | \Psi_{k_0 n}(x, z, t) \rangle \quad (3.2.35)$$

onde o símbolo $\langle || \rangle$ representa a integração nas coordenadas x e z .

A eq. (3.2.35) é a forma integral da amplitude de espa

lhamento e supõe conhecida a solução exata do problema de colisão. Na região de altas energias, a aproximação de Born pode ser usada e corresponde a substituir a função de onda exata $\Psi_{k_0 n}$ pela solução do problema sem interação $\psi_{k_0 n}$, na equação integral de f_{nn}^v .

O potencial de interação, $V(x,z)$, normalmente pode ser escrito na forma (58)

$$V(x,z) = V_1(x) V_2(z)$$

e com esta escolha de $V(x,z)$ obtemos a amplitude de espalhamento na aproximação de Born:

$$f_{nn}^v(k_0, k(v)) = \frac{-i\mu}{(2\pi)^2 k(v)} \hat{V}_2(Q(v)) \int_{-\infty}^{+\infty} ds F_{n'n}(s) \hat{V}_1(s) J_v(\alpha_0 Q(v) + \delta_0 s) \quad (3.2.36)$$

onde $Q(v) = k(v) - k_0$ é o momentum transferido, e

$$F_{n'n}(s) = \int dx e^{isx} \phi_n^*(x) \phi_n(x) \quad (3.2.37)$$

$$V_i(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{V}_i(\omega) e^{i\omega y} d\omega \quad \text{com } i = 1, 2 \text{ e } y=x, z \quad (3.2.38)$$

3.3 - Colisões de Partículas Neutras com Moléculas Homoplares

No caso de moléculas homoplares a carga efetiva q'

definida pela eq. (3.2.15) é nula, e o CEM não pode induzir diretamente transições vibracionais. Este fato é observado experimentalmente (10), e está ligado à aproximação de dipolo para o campo. Classicamente os dois núcleos moleculares sentem a ação do campo de forma idêntica, o que faz com que não haja movimento relativo entre eles devido à interação com o CEM. Durante o processo de colisão pode haver distorção da densidade de carga molecular, acarretando mudanças na carga q' . Este efeito, porém, deve ser pequeno e não será considerado. No caso de moléculas heteropolares, a carga q' não é nula e a molécula se comporta como um oscilador carregado na presença do CEM. O efeito do campo no problema de colisão deve ser muito mais importante para o caso de moléculas polares, uma vez que existe uma contribuição direta do CEM no sentido de induzir transições vibracionais, mesmo quando se adota a aproximação de dipolo para o campo de laser.

A amplitude de espalhamento para a colisão de partículas neutras ($q_A \equiv 0$) com moléculas homopolares ($q' \equiv 0 \rightarrow \delta_0 \equiv 0$) na aproximação de Born, é dada por:

$$f_{nn}^v(k_0, k(v)) = - \frac{\mu i}{(2\pi)^2 k(v)} \tilde{V}_\alpha(Q(v)) J_\nu(\alpha_0 Q(v)) \int ds F_{nn}(s) \tilde{V}_1(s) \quad (3.3.1)$$

A eq. (3.3.1) mostra que a dependência na intensidade do campo ($I \propto \epsilon_0^2$, onde ϵ_0 é a amplitude do campo elétrico) está contida no argumento da função de Bessel, J_ν . Para campos fracos, a amplitude de espalhamento é proporcional à potência $|v|/2$ da intensidade do campo, uma vez que $J_\nu(x) \sim x^\nu$ quando $x \rightarrow 0$.

A seção de choque diferencial definida como:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k(\nu)}{k_0} \left| f_{nn'}^{\nu} \right|^2$$

é proporcional à potência $|\nu|$ da intensidade do campo:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto I |\nu|$$

A probabilidade de ocorrer processos de $|\nu|$ fôtons em campos fracos cai rapidamente com o aumento do número de fôtons que participa do processo.

A eq. (3.3.1) nos mostra também que a amplitude de espalhamento possui uma parte que engloba toda a dependência no campo (tanto na intensidade, quanto na frequência) e um termo que depende dos estados vibracionais da molécula e do termo vibracional do potencial de interação, $V_1(x)$.

A razão entre a amplitude de espalhamento na presença e na ausência de campo, $R_{nn'}^{\nu}$, envolve somente os termos que dependem da interação com o CEM sem incluir o fator de forma molecular. Este resultado é decorrência direta da aproximação usada para os estados ligados (STA):

$$R_{nn'}^{\nu} = \frac{k(0)}{k(\nu)} \frac{\tilde{V}_2(Q(\nu))}{\tilde{V}_2(Q(0))} J_{\nu} \left(\frac{qA_0 Q(\nu)}{\mu\omega} \right) \quad (3.3.2)$$

A eq. (3.3.2) mostra que $R_{nn'}^{\nu}$, não depende fortemente da escolha do potencial de interação e desta forma podemos utilizar um modelo puramente repulsivo⁽⁵⁸⁾ para $V_2(z)$:

$$V_2(z) = A e^{-\beta|z|} \quad (3.3.3)$$

de forma que a razão R_{nn}^V , para esta escolha de potencial de interação é dada por:

$$R_{nn}^V = \frac{k(0)}{k(v)} \frac{\beta^2 + Q^2(0)}{\beta^2 + Q^2(v)} J_\nu \left(\frac{q A_0 Q(v)}{\mu \omega} \right) \quad (3.3.4)$$

Como $q/\mu = (q_B + q_C)/(m_B + m_C)$, a dependência da razão R_{nn}^V , com a massa da partícula incidente está totalmente contida nos vários momenta que surgem na condição de conservação de energia, e o comportamento global de R_{nn}^V , deve ser o mesmo para qualquer valor de m_A .

O potencial de Morse foi adotado para descrever os estados moleculares. Este potencial representa, de maneira satisfatória, os estados vibracionais de moléculas homopolares e é definido como ⁽⁵⁹⁾ :

$$U(x) = D(e^{-2ax} - 2e^{-ax}) ,$$

onde D é a energia de dissociação da molécula e $1/a$ é o parâmetro de alcance. As autofunções e autovalores de energias para os estados ligados da molécula são dados por ⁽⁵⁹⁾ :

$$\phi_n(x) = e^{-\xi/2} \xi^s F(-n, 2s+1, \xi)$$

onde F é a função hipergeométrica degenerada e

$$s = \sqrt{-\frac{2m \epsilon_n}{a}} \quad (\epsilon_n < 0, \text{ estado ligado})$$

$$n = \sqrt{\frac{2mD}{a}} - (s + 1/2)$$

$$\epsilon_n = -D \left\{ 1 - \frac{a}{\sqrt{2mD}} (n+1/2) \right\}^2$$

3.4 - Colisão He + H₂⁺. Resultados e Conclusões

Consideramos o caso de excitação do primeiro estado vibracional da molécula de H₂⁺ a partir do estado fundamental devido à colisão com He na presença de um campo de laser de CO₂. Restringimos o estudo ao caso de colisão colinear e espalhamento frontal, isto é, k(v) > 0. Estudamos a dependência de R₀₁^v com a frequência e intensidade do CEM, com a energia inicial e com a massa da partícula incidente.

Valores típicos do laser de CO₂ são:

- Amplitude do Campo Elétrico: $\epsilon_0 = 1,4 \times 10^7$ V/cm
- Frequência da Radiação : $\omega_{CO_2} = 10^3$ cm⁻¹.

A aproximação adotada para as funções moleculares(STA) é sempre satisfeita para moléculas homopolares (q' = 0 → δ₀ = 0) e com estes valores de campo a aproximação de dipolo é satisfatória.

Os parâmetros característicos do potencial de Morse para a molécula iônica H₂⁺ são (11):

$$D = 2.79 \text{ eV}$$

$$a = 0.72 a_0^{-1} \quad (a_0 - \text{r\aa}io \text{ de Bohr})$$

Estes par\ametros fornecem uma separa\c{c}o de n\iveis vibracionais de:

$$\Delta\epsilon = \epsilon_1 - \epsilon_0 \approx 0,28 \text{ eV}$$

Para o potencial de intera\c{c}o $V_2(z) = Ae^{-\beta|z|}$, adotamos um valor $\beta = 10^8 \text{ cm}^{-1}$. Como foi visto anteriormente, a escolha de β n\ao \e importante para a determina\c{c}o de R_{nn}^v , na aproxima\c{c}o de Born.

A tabela 3.4.1 mostra os resultados obtidos para R_{01}^v em fun\c{c}o da intensidade do campo, para colis\o com He. A energia de colis\o ($E_0 = k_0^2/2\mu$) \e de .3 eV, e a frequ\ecia do CEM \e a do laser de CO_2 . O aumento da amplitude do campo el\etrico aumenta significativamente a amplitude de espalhamento para processos que envolvem a absor\c{c}o de f\otons e diminui a probabilidade dos processos de zero f\otons.

A depend\ecia de R_{01}^v com a frequ\ecia do campo \e apresentada na tabela 3.4.2 para frequ\ecias variando de ω_{CO_2} a $\omega_{\text{CO}_2}/10$. A energia de colis\o \e de 3 eV, e a intensidade de campo a do laser de CO_2 . Para baixas frequ\ecias, os processos envolvendo absor\c{c}o de um ou mais f\otons s\ao mais importantes que os processos sem f\otons. Para frequ\ecias altas, os processos de zero f\otons s\ao os mais prov\aveis.

A depend\ecia de R_{01}^v com a energia de colis\o, \e

ϵ/ϵ_0	1	2	4	6	8	10
0	1	1	0,99	0,99	0,98	0,96
1	$0,24 \times 10^{-1}$	$0,48 \times 10^{-1}$	$0,97 \times 10^{-1}$	0,15	0,19	0,24
2	$0,94 \times 10^{-5}$	$0,38 \times 10^{-4}$	$0,15 \times 10^{-3}$	$0,34 \times 10^{-3}$	$0,60 \times 10^{-3}$	$0,94 \times 10^{-3}$
3	$0,16 \times 10^{-6}$	$0,13 \times 10^{-5}$	$0,10 \times 10^{-4}$	$0,34 \times 10^{-4}$	$0,80 \times 10^{-4}$	$0,16 \times 10^{-3}$

TABELA 3.4.1 - Razão R_{01}^v para colisão $He + H_2^+$ na presença de campo de laser de CO_2

($\omega_{CO_2} = 10^3 \text{ cm}^{-1} \approx 0,12 \text{ eV}$), em função da intensidade do campo. Energia da colisão, $E_0 = 3 \text{ eV}$.

$\epsilon_0 = 1,4 \times 10^7 \text{ V/cm}$

v - número de fótons absorvidos.

ω_{CO_2}/ω	1	2	4	6	8	10
R_{01}^v	1	0,99	0,90	0,56	$0,49 \times 10^{-1}$	0,40
ν	1	$0,25 \times 10^{-1}$	0,32	0,59	0,58	$0,45 \times 10^{-1}$
	2	$0,21 \times 10^{-2}$	$0,42 \times 10^{-1}$	0,20	0,48	0,52
	3	$0,94 \times 10^{-5}$	$0,26 \times 10^{-2}$	$0,36 \times 10^{-1}$	0,19	0,46
	4	*	$0,80 \times 10^{-4}$	$0,39 \times 10^{-2}$	$0,44 \times 10^{-1}$	0,21
	5	*	$0,11 \times 10^{-5}$	$0,25 \times 10^{-3}$	$0,68 \times 10^{-2}$	$0,65 \times 10^{-1}$
	6	*	*	$0,99 \times 10^{-5}$	$0,71 \times 10^{-2}$	$0,13 \times 10^{-1}$

* $R_{01}^v < 10^{-6}$

TABELA 3.4.2 - Razão R_{01}^v para colisão $He + H_2^+$ na presença de campo de laser com amplitude do campo elétrico $\epsilon_0 = 1,4 \times 10^7$ V/cm em função da frequência do CEM. Energia da colisão $E_0 = 3$ eV; $\omega_{CO_2} = 10^3$ cm^{-1} ; ν - número de fótons absorvidos.

E_0 (eV)	3	5	7	9	10
R_{01}^v					
v	1	1	1	1	1
0					
1	$0,24 \times 10^{-1}$	$0,16 \times 10^{-1}$	$0,12 \times 10^{-1}$	$0,10 \times 10^{-1}$	$0,94 \times 10^{-2}$
2	$0,94 \times 10^{-5}$	$0,39 \times 10^{-5}$	$0,22 \times 10^{-5}$	$0,15 \times 10^{-5}$	$0,12 \times 10^{-5}$

TABELA 3.4.3 - Razão R_{01}^v para a colisão $\text{He} + \text{H}_2^+$ na presença de campo de laser de CO_2
 ($\epsilon_0 = 1,4 \times 10^7$ V/cm, $\omega_{\text{CO}_2} = 10^3 \text{ cm}^{-1}$) em função da energia de colisão
 E_0 (eV).

apresentada na tabela 3.4.3, para uma variação de $E_0 = 3 \text{ eV}$ a 10 eV (com os parâmetros do laser de CO_2). R_{01}^v depende fracamente da energia de colisão apresentando um pequeno acréscimo com a diminuição da energia de colisão.

Comparando os resultados para R_{nn}^v , para o caso de colisão com He com os obtidos no limite de $m_A \rightarrow \infty$, verificamos que R_{01}^v ($v > 3$), cresce de um fator inferior a 2 (mantivemos os valores de laser de CO_2 e $E_0 = 3 \text{ eV}$) e, desta forma, o comportamento global da razão R_{01}^v é a mesma para colisão com qualquer partícula neutra sem estrutura.

Para campos de CO_2 e $E_0 = 3 \text{ eV}$ estudamos a variação de R_{01}^v com a escolha do parâmetro do potencial de interação. Para $\beta/10$, R_{01}^v sofre pequeno acréscimo em relação aos resultados apresentados nas tabelas 3.4.1 a 3.4.3, exceto para processos que envolvem a absorção de 2 fótons. Neste caso R_{01}^v sofre um acréscimo de cerca de uma ordem de grandeza. Para os valores de campo escolhidos o processo de 2 fótons é o mais próximo à ressonância, de forma que o momentum transferido, $Q(v)$, é mínimo.

CAPÍTULO 4

ESPALHAMENTO DE PARTÍCULAS CARREGADAS POR POTENCIAL SEM ESTRUTURA NA PRESENÇA DE CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME

4.1 - Introdução

A interação de sistemas físicos com campos magnéticos é de fundamental importância no estudo de problemas em Astrofísica, em Estado Sólido, em Espectroscopia, etc⁽¹⁵⁾. Efeitos de campos fracos sobre sistemas atômicos são bem compreendidos atualmente⁽¹⁵⁾, mas a região de campos intermediários e fortes ($\sim 10^7$ G a 10^{12} G), quando o campo magnético não pode ser tratado como perturbação do campo coulombiano, apresenta aspectos novos que vêm sendo estudados com interesse^(15-25,60).

O estudo de colisão de partículas carregadas por potencial sem estrutura ou por sistemas atômicos na presença de campo magnético, pode ser de grande importância para a compreensão de mecanismos de inversão de população em laser, de aquecimento de plasmas, de processos de excitação seletivo de moléculas, etc.

Na presença de um campo magnético uniforme ($\vec{B} = B_0 \hat{z}$) uma partícula clássica descreve como trajetória uma hélice ci-

lindrica de eixo paralelo à direção do campo. O tratamento quântico do problema introduz a quantização dos níveis de energia associados ao movimento de rotação em torno da direção do campo, enquanto que o movimento de translação paralelo ao campo é análogo ao de uma partícula livre em uma dimensão.

No tratamento clássico de espalhamento de uma partícula carregada por um potencial de alcance finito, na presença de um campo magnético uniforme, o movimento de translação na região assintótica é paralelo à direção do campo e, em certo sentido, o problema de colisão é unidimensional. Durante o tempo de colisão a partícula pode transferir parte de sua energia associada ao movimento de translação para mudar seu estado de rotação, e desta forma, atingir a região assintótica após a colisão em uma nova trajetória.

A fig. 4.1.1 mostra, de forma esquemática, a trajetória de uma partícula A carregada quando esta interage com um potencial $V(\vec{r})$ na presença de um campo uniforme. Sendo θ o ângulo de espalhamento, a partícula A só atinge a região assintótica quando $\theta = 0$, ou $\theta = \pi$. Considerando o potencial de interação sem estrutura, a energia total da partícula se conserva, e podemos escrever a condição de conservação de energia no tratamento clássico, como (em unidades de $c = 1$):

$$\frac{1}{2m} (p_z^2 + q^2 B_0^2 r^2) = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 r^2 =$$

$$= \frac{1}{2m} (p_z'^2 + q^2 B_0^2 r'^2) = \frac{p_z'^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 r'^2 \quad (4.1.1)$$

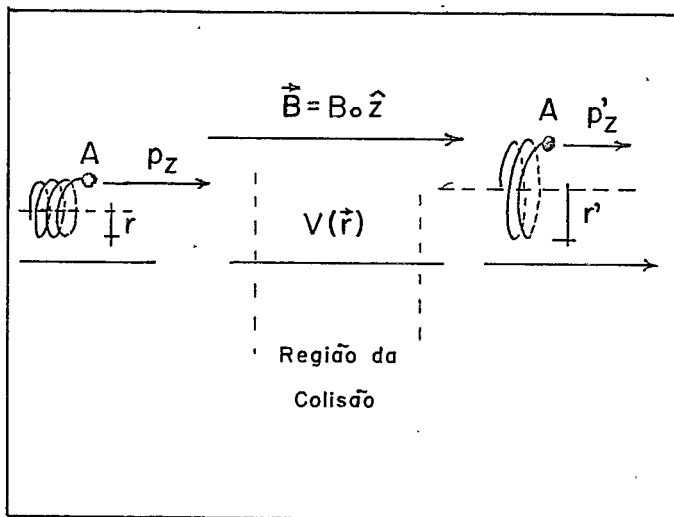


Fig. 4.1.1 - Trajetória clássica de uma partícula na presença de um campo magnético uniforme ($B_0 \hat{z}$) e de um potencial espalhador $V(\vec{r})$. r e r' são os raios da órbita antes e depois da colisão. p_z e p'_z são os momenta na direção do campo antes e depois da colisão.

onde m e q' são a massa e a carga da partícula A, p_z e p_z' os momentos lineares na direção do campo, antes e depois da colisão, r e r' os raios da hélice cilíndrica, antes e depois da colisão, e $\omega_c = q'B_0/m$ a frequência de ciclotron. Para $r' = r_M' = \sqrt{2mE/q'^2B_0}$, onde E é a energia total da partícula, o momentum final na direção do campo é nulo ($p_z' = 0$) e a partícula não atinge a região assintótica. Uma vez que o movimento assintótico de translação é paralelo ao eixo do campo, o espalhamento só ocorre na direção \bar{z} ($\theta = 0$ ou $\theta = \pi$) com o raio da trajetória final satisfazendo a relação $r' < r_M'$.

No tratamento quântico, a quantização dos níveis associados ao movimento de rotação faz com que excitação de níveis de Landau só possam ocorrer quando a energia associada ao movimento de translação antes da colisão seja maior que a separação dos níveis quânticos.

Neste capítulo, estudamos o problema de espalhamento de partículas carregadas por um potencial sem estrutura, na presença de um campo magnético uniforme. Usamos o formalismo de função de Green independente do tempo e obtemos a forma integral da amplitude de transição, que pode ser generalizada para o caso de espalhamento com átomos de hidrogênio⁽⁶⁰⁾. Usando a primeira aproximação de Born, obtemos uma expressão para a amplitude de transição do problema de colisão de elétrons por um potencial coulombiano na presença de campo magnético. O potencial de interação possibilita transições entre níveis de Landau e a amplitude de transição apresenta ressonâncias periódicas associadas a essas excitações.

4.2 - Teoria

A hamiltoniana de uma partícula de carga q' e massa m , na presença de um campo magnético uniforme, $\vec{B} = B_0 \vec{z}$, é dada por:

$$\mathcal{H}_0(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q'\vec{A}(\vec{r}))^2 \quad (4.2.1)$$

onde \vec{p} é o momentum generalizado da partícula e $\vec{A}(\vec{r})$ o potencial vetor que descreve o campo magnético.

A equação de Schrödinger independente do tempo é dada por: ($\hbar = c = 1$)

$$\mathcal{H}_0 \psi(\vec{r}) = \left\{ \frac{1}{2m} (\vec{p} - q'\vec{A}(\vec{r}))^2 \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (4.2.2)$$

onde $\vec{p} = -i\vec{\nabla}$ é o operador momentum linear e E é a energia total da partícula. $\psi(\vec{r})$ é a parte espacial da função de onda total da partícula. Na eq. (4.2.2) não estamos considerando a interação do campo magnético com o momento magnético intrínseco associado à partícula.⁽⁶¹⁾ Interação de spin com o campo não traz nenhuma característica nova para o problema de espalhamento se o potencial de interação que considerarmos só depender das coordenadas espaciais.

O potencial vetor $\vec{A}(\vec{r})$ satisfaz à regra de comutação:

$$[\vec{p}, \vec{A}(\vec{r})] = -i\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r})$$

Para campo magnético uniforme na direção \vec{z} e usando o

gauge simétrico de Landau (em que $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$ e $[\vec{p}, \vec{A}] = 0$):

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$$

a eq. (4.2.2) é escrita na forma (61)

$$\mathcal{H}_0 \psi(\vec{r}) = \left[\frac{p_z^2}{2m} + \mathcal{H}_{\vec{\rho}} \right] \psi(\vec{r}) = (E_0 + \epsilon) \psi(\vec{r}) \quad (4.2.3)$$

com

$$E = E_0 + \epsilon$$

onde $\vec{r} = \{\rho, \phi, z\}$, $\mathcal{H}_{\vec{\rho}}$ é a parte de \mathcal{H}_0 que depende somente das coordenadas ρ e ϕ . $\mathcal{H}_{\vec{\rho}}$ é a hamiltoniana de um oscilador bi-dimensional isotrópico ($\vec{\rho} = x\hat{x} + y\hat{y}$). A função de onda $\psi(\vec{r})$ pode ser separada em uma parte que depende da coordenada z e outra que expressa a dependência em $\vec{\rho}$:

$$\psi_{k_0 n_s}(\vec{r}) = e^{i k_0 z} \phi_{n_s}(\vec{\rho}) \quad (4.2.4)$$

com

$$\frac{k_0^2}{2m} = E_0$$

onde $\phi_{n_s}(\vec{\rho})$ são as autofunções de $\mathcal{H}_{\vec{\rho}}$, isto é:

$$\mathcal{H}_{\vec{\rho}} \phi_{n_s}(\vec{\rho}) = \epsilon_n \phi_{n_s}(\vec{\rho}) = (n + 1/2) \omega_c \phi_{n_s}(\vec{\rho}) \quad (4.2.5)$$

$n = 0, 1, \dots$

onde ω_c é a frequência de ciclotron definida como:

$$\gamma = \frac{q B_0}{2} = \frac{m \omega_c}{2} = \frac{1}{R} \quad (4.2.6)$$

e R é o raio do ciclotron.

As soluções da eq. (4.2.5) podem ser escritas como:

$$\phi_{ns}(\vec{p}) = \left(\frac{\gamma}{\pi}\right)^{1/2} e^{i(n-s)\psi} I_{ns}(\xi^2) \quad (4.2.7)$$

com

$$\xi^2 = \gamma p^2 \quad (4.2.8)$$

e

$$i_{ns}(\xi^2) = \xi^{|n-s|} e^{-\xi^2/2} Q_s^{n-s}(\xi^2) (n!s!)^{1/2} \quad (4.2.9)$$

onde Q_ℓ^m é o polinômio associado de Laguerre normalizado ⁽¹⁹⁾, de-
finido como:

$$Q_s^{n-s}(x) = \begin{cases} \mathcal{L}_n^{n-s}(x) & n < s \\ \mathcal{L}_s^{s-n}(x) & s > n \end{cases}$$

e $\mathcal{L}_\lambda^q(x)$ é o polinômio de Laguerre generalizado ⁽⁶²⁾; n é o número quântico principal e s está relacionado à distância do centro da órbita da origem.

O movimento na direção do campo não é quantizado. O movimento no plano perpendicular à direção do campo é um movimento circular de raio constante. As coordenadas do centro da órbita, porém, podem assumir quaisquer valores e não são conhecidas simultaneamente ⁽¹⁵⁾. Para uma energia do movimento translacional constante, isto é, E_0 constante, os níveis de energia

são espaçados igualmente de ω_c a partir do primeiro nível, de energia $\omega_c/2$ (15,61).

Na presença de um potencial de interação $V(\vec{r})$ (com $\lim_{r \rightarrow \infty} V(\vec{r}) = 0$) a equação de Schrödinger para a partícula é dada por:

$$\mathcal{H}_0 \Psi = [\mathcal{H}_0 + V(\vec{r})] \Psi = E \Psi \quad (4.2.10)$$

Usando o formalismo de função de Green obtemos a equação integral para a função de onda total Ψ :

$$\Psi_{k_0 n_s}(\vec{r}) = \Psi_{k_0 n_s}(\vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_{k_0 n_s}(\vec{r}') \quad (4.2.11)$$

onde $G(\vec{r}, \vec{r}')$ é a função de Green, solução da equação:

$$(E - \mathcal{H}_0) G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', z, z') = \delta(\vec{\rho} - \vec{\rho}') \delta(z - z') \quad (4.2.12)$$

Usando os métodos usuais de uma teoria de espalhamento (52) temos:

$$G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', z, z') = \frac{1}{2\pi} \sum_{n_s} \int dk \phi_{n_s}^*(\vec{\rho}') \phi_{n_s}(\vec{\rho}) e^{ik(z-z')} g_n(k) \quad (4.2.13)$$

$g_n(k)$ é determinado levando-se a eq. (4.2.13) na eq. (4.2.12) e obtemos:

$$g_n(k) = \frac{1}{(E - \epsilon_n - k^2/2m)} = \frac{2m}{k_n^2 - k^2}$$

onde k_n é definido como:

$$\frac{k_n^2}{2m} = E - \epsilon_n = \frac{k_0^2}{2m} + \epsilon_{n_0} - \epsilon_n \quad (4.2.14)$$

A função de Green é escrita como:

$$G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', z, z') = -\frac{m}{\pi} \sum_{n_s} \phi_{n_s}^*(\vec{\rho}') \phi_{n_s}(\vec{\rho}) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk e^{ik(z-z')}}{k^2 - k_n^2} \quad (4.2.15)$$

A eq. (4.2.14) expressa a condição de conservação de energia e k_n é o momentum da partícula espalhada na direção do campo após a colisão.

A integração em k que surge na eq. (4.2.15) é, essencialmente, a integral que surge no problema unidimensional. Usando a condição de comportamento assintótico de ψ apropriada, isto é, onda emergente na região $|z| \rightarrow \infty$, a integração em k fornece (52):

$$G(\vec{\rho}, \vec{\rho}', z, z') = -im \sum_{n_s} \phi_{n_s}^*(\vec{\rho}') \phi_{n_s}(\vec{\rho}) \frac{e^{ik_n|z-z'|}}{k_n} \quad (4.2.16)$$

A equação integral para a função de onda total que satisfaz a condição de comportamento assintótico apropriada para o problema de espalhamento é obtida substituindo-se a eq. (4.2.16) na eq. (4.2.11):

$$\begin{aligned} \psi_{k_0 n_s}(\vec{r}) = \psi_{k_0 n_s}(\vec{r}) - im \sum_{n'_s} \int \phi_{n'_s}^*(\vec{r}') \phi_{n'_s}(\vec{\rho}) \frac{e^{ik_{n'}|z-z'|}}{k_{n'}} \otimes \\ \otimes V(\vec{r}') \psi_{k_0 n_s}(\vec{r}') d^3r' \end{aligned} \quad (4.2.17)$$

O comportamento assintótico de $\psi_{k_0 n s}$ é obtido através da expansão de $e^{ik_n |z-z'|}$ na região $|z| \rightarrow \infty$:

$$\psi_{k_0 n s}(\vec{r}) \underset{|z| \rightarrow \infty}{\sim} \psi_{k_0 n s}(\vec{r}) - \sum_{n's'} \phi_{n's'}(\vec{p}) e^{ik_n z} f(k_0 n s, k_n, n's') \quad (4.2.18)$$

com

$$f(k_0 n s, k_n, n's') = - \frac{m}{k_n} \int d^3 r. e^{-ik_n z} \phi_{n's'}(\vec{p}) V(\vec{r}) \psi_{k_0 n s}(\vec{r}) \quad (4.2.19)$$

$f(k_0 n s, k_n, n's')$ é a amplitude de transição do processo de colisão em que a partícula incide sobre o potencial de interação no estado $\psi_{k_0 n s}$ e é espalhada para o estado final $\psi_{k_n, n's'}$. O espalhamento frontal corresponde à solução $k_n > 0$.

O potencial de interação introduz a possibilidade de transições entre níveis de Landau. A partícula pode sofrer variação do seu momentum translacional (k_0), através da transferência de energia translacional para produzir excitação (ou desexcitação) de níveis associados ao movimento em torno da direção do campo. Qualquer diferença entre o momentum linear na direção do campo, antes e depois da colisão, é associada a transições entre níveis de Landau.

A probabilidade de transição do estado $\psi_{k_0 n s}$ para o estado final $\psi_{k_n, n's'}$ é definida como:

$$P(k_n n s, k_n, n's') = |f(k_0 n s, k_n, n's')|^2 \quad (4.2.20)$$

A primeira aproximação de Born para a amplitude de transição é obtida substituindo-se a solução exata para a função de onda total, $\Psi_{k_0 n s}$, pela solução aproximada em ordem zero no potencial, $\psi_{k_0 n s}$, no lado direito da eq. (4.2.19).

$$f^B(k_0 n s, k_n, n' s') = - \frac{i m}{k_n} \int d^3 r e^{-i q z} \phi_{n' s'}^*(\vec{p}) \phi_{n s}(\vec{p}) \quad (4.2.21)$$

onde

$$q = k_n - k_0 \quad (4.2.22)$$

é o momentum transferido na direção do campo.

A eq. (4.2.21) pode ser generalizada para o caso de espalhamento elétron-hidrogênio na presença de campo magnético (60).

4.3 - Espalhamento de Elétron por um Potencial Coulombiano

No caso de um potencial de interação com simetria esférica, podemos efetuar a integração no ângulo azimutal e obtemos, para a amplitude de transição na aproximação de Born:

$$f^B(k_0 n s, k_n, n' s') = - \frac{i m}{k_n} \delta(n-s, n'-s') \int_0^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-i q z} I_{n' s'}(x) I_{n s}(x) V \left\{ (x/\gamma + z^2)^{1/2} \right\} \quad (4.3.1)$$

com $x = \gamma \rho^2$, γ definido pela eq. (4.2.6), e $(j, j') = 1$, quando $j = j'$, e nulo no caso de $j \neq j'$.

Consideramos o caso de espalhamento de elétrons por um potencial coulombiano de carga Ze

$$V(\vec{r}) = V(r) = -\frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{(\rho^2 + z^2)^{1/2}} \quad (4.3.2)$$

A transformada de Laplace de $V(\vec{r})$ definido pela eq. (4.3.2) é (63) :

$$V(\vec{r}) = \frac{Ze^2}{(\rho^2 + z^2)^{1/2}} = -Ze^2 \int_0^\infty dy e^{-yz} J_0(y\rho) \quad (z > 0) \quad (4.3.3)$$

A amplitude de transição na aproximação de Born para o caso de espalhamento pelo potencial coulombiano é:

$$f^B(k_0 n s, k_n, n' s') = + \frac{2im}{k_{n'}} Ze^2 \delta(n-s, n'-s') \int_0^\infty dx \int_0^\infty dz \cos qz \otimes \int_0^\infty dy e^{-yz} I_{n's'}(x) J_0\left(y\frac{x}{\gamma}\right)^{1/2} I_{ns}(x) \quad (4.3.4)$$

Efetuada a integração na coordenada z temos:

$$f^B(k_0 n s, k_n, n' s') = \frac{2Ze^2 m}{k_{n'}} \delta(n-s, n'-s') \int_0^\infty \frac{y dy}{y^2 + q^2} \int_0^\infty I_{n's'}(x) \otimes J_0\left(y\frac{x}{\gamma}\right)^{1/2} I_{ns}(x) dx \quad (4.3.5)$$

A integração em x pode ser feita usando-se a relação (19) :

$$\int_0^{\infty} dx I_{\alpha\beta}(x) I_{\gamma\delta}(x) J_{(\alpha-\beta)-(\gamma-s)}(2\sqrt{Ax}) = I_{\alpha\gamma}(A) I_{\beta\delta}(A) \quad (4.3.6)$$

Obtemos:

$$f^B(k_0 n s, k_n, n' s') = \frac{iZe^2 m}{k_{n'}} \delta(n-s, n'-s') \int_0^{\infty} d\omega \frac{I_{n'n}(\omega) I_{s's}(\omega)}{\omega + \lambda} \quad (4.3.7)$$

onde

$$\lambda = q^2/4 \quad (4.3.8)$$

$$\omega = y^2 \quad (4.3.9)$$

Da definição dos polinômios de Laguerre, temos ⁽⁶⁴⁾:

$$I_{n'n}(x) I_{s's}(x) = e^{-x} \sum_{m=0}^{M_1} \sum_{p=0}^{M_2} (-1)^{m+p} c(n' n s' s m p) x^{m+p+|n-s|} \quad (4.3.10)$$

onde

$$c(n' n s' s m p) = \left(\frac{n! s!}{n'! s'!} \right)^{1/2} \frac{e^{2|n'-n|}}{m! p!} \begin{pmatrix} s+|s'-s| \\ s-m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n-|n'-n| \\ n-p \end{pmatrix}$$

e $M_1 = n$ para $n > n'$, e $M_1 = n'$ para $n' > n$, $M_2 = s$ para $s > s'$, e $M_2 = s'$ para $s' > s$.

Levando a eq. (4.3.10) em (4.3.7) a integração em ω fornece ⁽⁶⁵⁾ :

$$f^B(k_0 n s, k_n, n' s') = - \frac{iZe^2 m}{k_{n'}} \delta(n-s, n'-s') \left\{ I_{n'n}(-\lambda) I_{s's}(-\lambda) Ei(-\lambda) \right.$$

$$+ (-1)^{|n-s|+1} \sum_{m=0}^{M_1} \sum_{p=0}^{M_2} \sum_{\ell=1}^{m+p+M_1+M_2} (-1)^{m+p-1} c(n'ns'smp) \otimes$$

$$\left. (\ell-1)! \lambda^{m+p+|n-s|-\ell} \right\} \quad (4.3.11)$$

$E_i(-\lambda) = - E_1(\lambda)$ é a função integral exponencial (66,67)

$$E_1(\lambda) = \int_z^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt \quad , \quad (|\text{arc } z| < \pi)$$

A eq. (4.3.11) é a expressão da amplitude de transição na aproximação de Born associada ao processo de colisão de um elétron por um potencial coulombiano de interação, definido pela eq. (4.3.2) na presença de campo magnético uniforme na direção \vec{z} . A dependência no campo magnético está contida no parâmetro γ definido pela eq. (4.2.6). O elétron incide com momentum k_0 na direção \vec{z} no estado de Landau definido pelos números quânticos n, s . Após a colisão o elétron sofre uma transição do nível n, s para o nível n', s' , através da troca de energia com o movimento translacional. O momentum final do elétron paralelo ao campo tem módulo k_n , que satisfaz a condição de conservação de energia definida pela eq. (4.2.14).

4.4 - Discussões e Conclusões

Para efeito de discussão, particularizamos para o ca-

so de excitação a partir do estado inicial k_0 , $n = 0$, $s = 0$. Como o problema de uma partícula carregada na presença de um campo magnético é infinitamente degenerado no número quântico s (15,61), a discussão que se segue tem um caráter puramente formal.

Considerando o estado inicial do elétron incidente descrito pela função $\psi_{k_0 0 0}$ a expressão da amplitude de transição na aproximação de Born é:

$$f^B(k_0 0 0, k_n, n' s') = i \frac{Ze^2 m}{k_{n'}} \left[I_{n', 0}(-\lambda) \right]^2 Ei(-\lambda) \quad (4.4.1)$$

Usando a relação entre as funções I_{ns} e os polinômios associados de Laguerre normalizados, eq. (4.2.9), e a definição dos polinômios de Laguerre generalizados para o caso de $s = 0$, temos (62) :

$$Q_{n'}^{n'}(x) = (-1)^{n'} n' !$$

A eq. (4.4.1) é escrita como:

$$f^B(k_0 0 0, k_n, n' s') = \frac{iz e^2 m}{k_{n'}} (n'!)^2 e^\lambda E_1(\lambda) \quad (4.4.2)$$

A condição de conservação de energia, eq. (4.2.14), é escrita, neste caso, como:

$$\frac{k_{n'}^2}{2m} = \frac{k_0^2}{2m} - n' \omega_c \quad (4.4.3)$$

Para energia translacional do elétron incidente ($E_0 = k_0^2/2m$) inferior a $n'\omega_c$ a eq. (4.4.3) garante a impossibilidade de excitação para o nível de Landau com energia $(n'+1/2)\omega_c$. O limiar de excitação do estado n' , s' é dado por:

$$E_{0Min} = \frac{k_0^2}{2m} = n'\omega_c \quad (4.4.4)$$

Nesta situação, o elétron cede toda a energia do movimento de translação na direção do campo para excitar o nível de Landau $(n' + 1/2)\omega_c$. O momentum final na direção de \hat{z} é nulo, e a amplitude de transição diverge, o que significa que o elétron não atinge a região assintótica ($|z| \rightarrow +\infty$).

Os parâmetros relevantes para uma discussão do comportamento da amplitude de transição são: $\lambda = q^2/4\gamma$, $k_{n'}$ e $E_0 = k_0^2/2m$. Usando as definições de γ e q , eqs. (4.2.6) e (4.2.22), temos:

$$0 \leq \lambda \leq E_0/\omega_c \quad (4.4.5)$$

$$0 \leq k_{n'} \leq k_0 \quad (4.4.6)$$

$$n' \leq E_0/\omega_c \leq \infty \quad (4.4.7)$$

A amplitude de transição para a excitação do nível de Landau n' (fixo), eq. (4.4.2), diverge para $E_0 = E_{0Min} = n'\omega_c$ devido à presença do fator multiplicativo $1/k_{n'}$, e tem um comportamento monotonicamente decrescente para $E_0 > E_{0Min}$. Evidentemente, para $E_0 < n'\omega_c$ a amplitude de transição é nula. Este

limiar de excitação não está presente no problema clássico, uma vez que a energia associada ao movimento no plano perpendicular ao campo pode assumir qualquer valor positivo. O comportamento da amplitude de transição para o caso de excitação dos níveis n' de Landau, a partir do nível $n = 0$, é representado qualitativamente na fig. 4.4.1.

A probabilidade total de transição a partir do estado inicial $(k_0, 0; 0)$ é definida como:

$$P(k_0, 0, 0) = \sum_{n', s'} P(k_0, 0, 0, k_{n'}, n', s') = \sum_{n', s'} |f(k_0, 0, 0, k_{n'}, n', s')|^2$$

$P(k_0, 0, 0)$ apresenta ressonância para valores de k_0 que satisfazem a relação: $(k_0^2/2m) = n'\omega_c$.

A fig. 4.4.2 apresenta o comportamento qualitativo de $P(k_0, 0, 0)$ em função de E_0/ω_c .

Uma discussão do comportamento da amplitude de transição em função de E_0/ω_c para o caso de excitação a partir de um estado inicial qualquer (k_0, n, s) deve ser feita usando-se a eq. (4.3.11), mas o comportamento global de $P(k_0, n, s)$ deve ser análogo ao apresentado na fig. 4.4.2. As ressonâncias ocorrem para valores do momentum incidente na direção do campo que satisfazem a relação:

$$\frac{k_0^2}{2m} = |n - n'| \omega_c \quad \text{ou} \quad k_{n'} = 0$$

O fator $k_{n'}^{-1}$ que surge na expressão da amplitude de

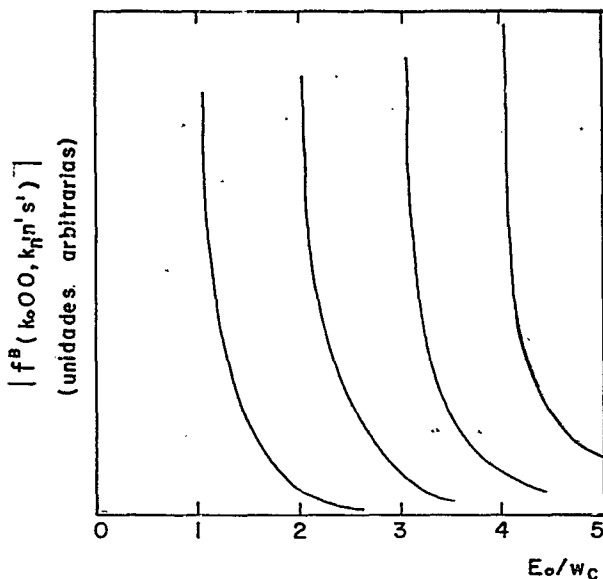


Fig. 4.4.1 - Comportamento qualitativo da amplitude de transiçã parcial $|f(k_0 0 0, k_n, n's')|$ em função da razão E_0/ω_c . ω_c é a frequência de ciclotron; E_0 é a energia cinética associada ao movimento translacional do elétron antes da colisão.

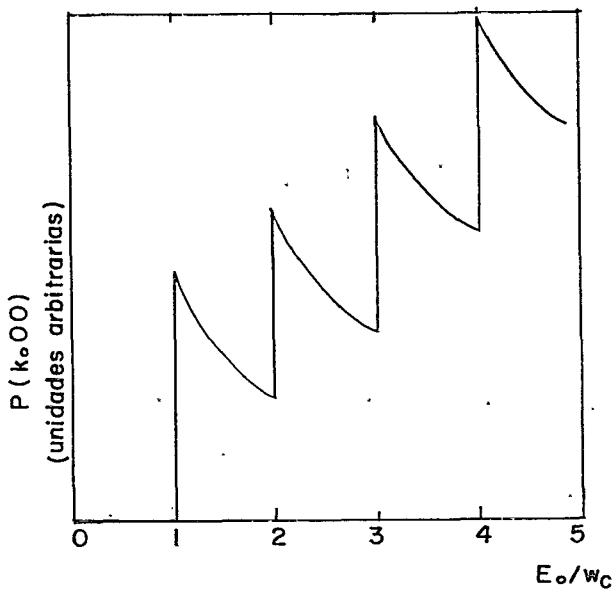


Fig. 4.4.2 - Comportamento qualitativo da probabilidade de transiç~ao parcial $P(k_0 0 0, k_n, n's')$ em funç~ao da raz~ao E_0 / ω_c . ω_c ~e a frequ~encia de ciclotron; E_0 ~e a energia cin~etica associada ao movimento translacional do el~etron antes da colis~ao.

transição é o responsável pelas ressonâncias de $P(k_0, n, s)$. O comportamento crescente da probabilidade total de transição, que aparece na fig. 4.4.2, é devido ao aumento do número de estados finais acessíveis.

Para o caso de elétrons em um campo magnético uniforme a separação entre os níveis de Landau é dada por:

$$\omega_c = \frac{eB_0}{m} \sim 7.3 \times 10^{-8} B_0 \text{ (Gauss) eV} \quad (4.4.8)$$

onde B_0 é expresso em Gauss e ω_c em eV.

Os campos mais fortes obtidos atualmente em laboratório são da ordem de 10^5 G e a separação entre os níveis de Landau é de cerca de 10^{-2} eV. Experimentalmente a resolução dos picos de ressonância que aparecem na fig. 4.4.2 é difícil de se conseguir, observando-se somente um lento crescimento de $P(k_n, n, s)$ com o aumento da energia translacional do elétron. Blumberg e colaboradores (68), em um experimento de foto-desprendimento de elétrons em $S^- ({}^2P_{3/2})$ na presença de campo magnético, observaram ressonâncias periódicas da seção de choque afastadas por um intervalo de frequências de cerca de 40 GHz ($\omega_c \sim 29 \times 10^{-3}$ eV) em campos de 15.7 kG e de cerca de 36 GHz ($\omega_c \sim 23 \times 10^{-3}$ eV) em campos de 10.7 kG. A interpretação destas ressonâncias apresentada no trabalho de Blumberg e colaboradores é a de que o elétron ejetado pelo fion é excitado para níveis discretos de Landau. A frequência de ciclotron em tais campos é de cerca de 18GHz (campo de 15.7 kg) e 12 GHz (campo de 10.7 kG).

Observações indiretas de campos magnéticos superiores

a 10^7 G foram feitas em estrelas anãs brancas ⁽¹⁵⁾ e a separação entre níveis de Landau para estes campos é de cerca de 1 eV. A estrutura ressonante da probabilidade de transição em tais campos pode ser facilmente resolvida. As teorias atuais de estrelas de neutrons e pulsares, preveem a existência de campos magnéticos muito intensos ($\sim 10^{12}$ G) e neste caso, a probabilidade de transição apresenta uma estrutura ressonante com o afastamento de cerca de 10^2 eV entre os picos.

CAPÍTULO 5

DISCUSSÃO E CONCLUSÕES GERAIS

5.1 - Introdução

Em uma teoria de colisão de partícula com sistemas atômicos, dois formalismos básicos são normalmente utilizados: o formalismo de função de Green, que fornece a equação integral para a função de onda total (equação de Lippman-Schwinger), e a expansão da função de onda total em uma base apropriada, que fornece um conjunto infinito de equações integro-diferenciais acopladas (27, 50, 51). O primeiro formalismo é particularmente útil para se obter uma compreensão maior de diversas aproximações semi-clássicas e quânticas, necessárias para a solução do problema (como, por exemplo, a primeira aproximação de Born, as aproximações de Born-Oppenheimer (27), Bethe (27, 51), Glauber (52, 70), etc) enquanto que o segundo é apropriado para o tratamento de problemas na região de baixas energias da partícula incidente, de forma que, aproximadamente, o conjunto de equações acopladas pode ser reduzido a um número suficientemente pequeno para ser tratado numericamente (50). Evidentemente, os dois formalismos são equivalentes.

A utilização do formalismo de função de Green para se tratar o problema de colisão na presença de um campo externo (magnético ou eletromagnético), conforme apresentado nos capítulos anteriores, possibilita a obtenção de uma equação integral exata para a função de onda total que satisfaz a condição assintótica apropriada, da mesma forma que no caso de colisão livre, isto é, na ausência de campo externo. Aproximações usuais em problemas de colisão livre feitas sobre a função total podem ser generalizadas e o estudo da viabilidade destas soluções aproximadas do problema na presença de campo externo pode ser feito através da expressão integral da amplitude de espalhamento.

Analogamente ao caso de colisão livre, a solução de estados ligados associados ao problema atômico ou molecular se apresenta como um problema em si, ou seja, um problema em que métodos de aproximação próprios devem ser estudados devido à complexidade do sistema considerado. Neste sentido, a utilização do operador de translação espacial no caso de colisão com campo eletromagnético, possibilita a utilização de uma teoria de perturbação dependente do tempo para se obter soluções aproximadas do sistema atômico considerado, mesmo na região de campos fortes, quando o tratamento perturbativo usual é excessivamente trabalhoso. Ainda assim, as soluções do problema ligado transformado pelo operador unitário são trabalhosas e a utilização de aproximações de ordem zero ou de primeira ordem torna-se necessária (Apêndice A).

O formalismo da eletrodinâmica quântica não é necessário para se tratar fontes de laser fora da ressonância⁽¹⁾, e por esta razão, adotamos um tratamento clássico do campo eletro

magnético.

Apresentamos, a seguir, algumas características gerais dos problemas estudados nos capítulos anteriores, com o objetivo de sintetizar as principais conclusões e mostrar a possibilidade de generalizações que o formalismo utilizado possui. Adotamos em todos os capítulos a primeira aproximação de Born (ou de Born-Oppenheimer) para a amplitude de espalhamento, que corresponde a uma aproximação de ordem zero no potencial de interação para a função de onda total. Não discutiremos a possibilidade de utilização de métodos de aproximação mais sofisticados, uma vez que a equação integral da função de onda total é análoga à obtida num tratamento de colisão livre e as aproximações usadas neste último caso podem, formalmente, ser utilizadas para se tratar o problema na presença de campo externo.

5.2 - Colisão e + H na Presença de Campo de Laser

Processos de colisão com absorção de muitos fótons são possíveis e introduzem um efeito interessante na região de energias muito baixas do elétron incidente (energia do elétron incidente menor que o limiar de excitação do estado considerado do átomo livre), quando a frequência do campo não satisfaz a condição de ressonância para induzir transições atômicas. Nesta situação o elétron não possui energia suficiente para produzir excitação atômica na ausência de campo, e o processo só ocorre através da transferência de energia do elétron para o átomo e

da absorção de fótons.

Experimentalmente, a observação da energia final do elétron não é suficiente para se determinar o processo de excitação atômica. Medidas simultâneas da energia do elétron espalhado e do estado final atômico são necessárias para se conhecer o mecanismo de excitação.

Campos de laser muito intensos podem fornecer condições em que processos com a absorção de vários fótons são mais importantes que os processos sem fótons. Do formalismo apresentado no Capítulo 2 vemos, porém, que a probabilidade de excitação do átomo na presença de campo eletromagnético com a absorção de um número N de fótons é menor que a probabilidade de excitação na ausência de campo, para qualquer dos processos possíveis.

Sob o ponto de vista formal, o tratamento apresentado pode ser facilmente generalizado para o caso de espalhamento com átomos complexos, de forma análoga ao caso de uma teoria de colisões livre. A determinação de funções atômicas, porém, torna-se excessivamente complicada, e métodos para resolver o problema ligado na presença de um campo de laser externo devem ser pesquisados.

Na região de energias do elétron incidente, próximas ao limiar de excitação do estado $2s$ do hidrogênio (~ 10 eV), o termo de troca é importante e a utilização de um formalismo do tipo do acoplamento forte (obtido a partir do formalismo de equações acopladas), usado no caso de colisão livre, poderá fornecer resultados confiáveis para as seções de choque, uma vez

que a aproximação de Born-Oppenheimer costuma superestimar o valor da seção de choque total. O formalismo de equações acopladas dependente do tempo para o tratamento do problema de colisão na presença de campo de laser foi apresentado por Gersten e Mittleman⁽³⁾ para o caso de excitação 1s-2p do hidrogênio.

5.3 - Colisão de Partículas com Moléculas Diatômicas na Presença de Campo de Laser

Na aproximação considerada no Capítulo 3 excitação vibracional de moléculas homopolares na presença de campo de laser só é possível através de colisão com partículas. O formalismo apresentado se aplica também ao tratamento de colisão de partículas neutras com moléculas heteropolares na presença de campo eletromagnético. Neste caso, o campo contribui diretamente para induzir transições entre níveis vibracionais da molécula, mesmo na aproximação de dipolo.

Processos que envolvem a absorção de muitos fótons podem ser importantes na região de campos intensos de baixa frequência.

O tratamento apresentado no Capítulo 3 considera somente excitações vibracionais por colisão colinear, reduzindo o problema real a um problema de uma dimensão, onde os graus de liberdade associados à rotação não são considerados. A principal contribuição para o processo de excitação vibracional surge quando a molécula se encontra na orientação preferencial, situa

ção obtida experimentalmente, uma vez que o tempo de colisão é normalmente muito superior ao período de rotação da molécula. A generalização para o tratamento tridimensional do problema, sem se levar em conta os graus de liberdade associados à rotação, pode ser facilmente obtida a partir do formalismo apresentado no Capítulo 3. Na região de altas energias da partícula incidente os resultados obtidos para o caso de colisão tridimensional coincidem com os apresentados no Capítulo 3. Esta concordância se deve ao fato de que nesta região de energias da partícula incidente o espalhamento é, essencialmente, frontal e as contribuições relativas a ângulo de espalhamento não nulo podem ser desprezadas. Além disso, a principal contribuição para o processo de excitação ocorre quando, classicamente, o parâmetro de impacto é nulo.

As conclusões básicas apresentadas anteriormente para o problema de espalhamento elétron-hidrogênio na presença de CEM são aplicáveis ao estudo de colisões com moléculas, tratado no Capítulo 3.

5.4 - Espalhamento de Elétrons por Potencial sem Estrutura na Presença de Campo Magnético

A mais importante característica do problema de espalhamento de partículas carregadas por um potencial na presença de campo magnético é a existência de ressonâncias periódicas associadas a transições entre níveis de Landau. Este comporta -

mento da amplitude de espalhamento não depende do tipo de potencial espalhador e a existência de ressonâncias periódicas deve ocorrer sempre em problemas dessa natureza.

O formalismo apresentado no Capítulo 4 pode ser generalizado para o caso do alvo ser um átomo de hidrogênio⁽⁶⁰⁾. Soluções analíticas de átomos na presença de campo magnético não são conhecidas e o comportamento geral da probabilidade de transição para o espalhamento elétron-átomo não pode ser previsto sem um cálculo específico.

APÊNDICE A

ÁTOMO DE HIDROGÊNIO NA PRESENÇA DE CAMPO DE LASER: APROXIMAÇÃO DE TRANSLAÇÃO ESPACIAL

A equação de Schrödinger não relativística para o átomo de hidrogênio na presença de um campo eletromagnético (CEM) é ($\hbar = c = 1$)

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 + V(\vec{r}) \right] F_n(\vec{r}, t) = i \frac{\partial F_n(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (A.1)$$

onde m e e são a massa e a carga do elétron, respectivamente, e

$$V(\vec{r}) = -e^2/r$$

$F_n(\vec{r}, t)$ é a função de onda total do elétron e $V(r)$ o potencial de interação coulombiana do elétron com o núcleo.

\vec{p} é o operador momentum linear, definido na forma usual:

$$\vec{p} = -i\vec{\nabla}$$

$\vec{A}(\vec{r}, t)$ é o potencial vetor que descreve o CEM (estamos tratando o campo classicamente). O campo elétrico associado ao CEM é da-

do pelas equações de Maxwell do eletromagnetismo clássico:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (A.2)$$

Considerando o campo na aproximação de dipolo, isto é, espacialmente homogêneo e com uma dependência temporal senoidal:

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}(t) = \vec{A}_0 \cos \omega t$$

O campo elétrico \vec{E} é dado por:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(t) = \vec{E}_0 \sin \omega t \quad (A.3)$$

com

$$\vec{E}_0 = \omega \vec{A}_0 \quad (A.4)$$

e ω é a frequência associada ao campo.

Introduzindo o operador unitário:

$$T = \exp. \left\{ i \vec{\alpha}(t) \cdot \vec{p} + 2in(t) \right\} \quad (A.5)$$

com

$$\vec{\alpha}(t) = - \frac{e}{m} \int^t \vec{A}(t') dt' = - \frac{e \vec{A}_0}{m} \sin \omega t = - \vec{\alpha}_0 \sin \omega t \quad (A.6)$$

$$\vec{\alpha}_0 = \frac{e \vec{A}_0}{m \omega} \quad (A.7)$$

e

$$n(t) = \frac{e^2}{2m} \int_0^t \dot{A}^2(t') dt'$$

A equação de Schrödinger se transforma como (28, 29):

$$T \mathcal{H} T^\dagger F_n(\vec{r}, t) = i T \frac{\partial F_n(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{A.8})$$

onde $\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A}(t))^2 + V(\vec{r})$.

A eq. (A.8) pode ser escrita como:

$$\mathcal{H} \phi_n(\vec{r}, t) = i \frac{\partial \phi_n(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (\text{A.9})$$

onde

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \quad (\text{A.10})$$

com:

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r} + \vec{\alpha}(t)) = - \frac{e^2}{|\vec{r} + \vec{\alpha}(t)|} \quad (\text{A.11})$$

e

$$\phi_n(\vec{r}, t) = T F_n(\vec{r}, t)$$

A aproximação de translação espacial (28, 29) é dada por:

$$V(\vec{r}, t) \sim V(\vec{r}) \quad (\text{A.12})$$

Expandindo a eq. (A.11) em série de potenciais de $\vec{\alpha}(t)$ temos (28):

$$V(\vec{r} + \alpha(t)) \approx V(\vec{r}) + (\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla})V(\vec{r}) + \dots \quad (\text{A.13})$$

Considerando somente os dois primeiros termos da eq. (A.13), a equação de Schrödinger aproximada é dada por:

$$\left\{ \frac{p^2}{2m} + \frac{e^2}{r} - \frac{e^3}{m\omega^2} \frac{\vec{E} \cdot \vec{r}}{r^3} \right\} \phi_n(\vec{r}, t) = i \frac{\partial \phi_n(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

onde usamos as eqs. (A.4) e (A.7).

Tratando o termo dependente do campo elétrico \vec{E} como uma perturbação, a função de onda do nível n (com degenerescência g) em primeira ordem é:

$$\phi_n^{(i)}(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^g a_{nj}(t) \phi_{nj}^{(o)}(\vec{r}) e^{-i\epsilon_n t} \quad (\text{A.14})$$

onde $\phi_{nj}^{(o)}(\vec{r}) e^{-i\epsilon_n t}$ é a função de onda na aproximação de ordem zero, isto é, na ausência de campo.

Escrevendo os coeficientes $a_{nj}(t)$ na forma:

$$a_{nj}(t) = c_{nj} e^{-i\rho_n \cos \omega t} \quad (\text{A.15})$$

obtemos o sistema de equações lineares acopladas para os coeficientes c_{nj}

$$\sum_j \left\{ \rho_n \omega c_{nj} \delta_{ij} + c_{nj} V_{ij} \right\} = 0$$

e ρ_n deve satisfazer a equação secular:

$$\det |\rho_n \omega \delta_{ij} + V_{ij}| = 0 \quad (\text{A.16})$$

com:

$$V_{ij} = \frac{e^3}{m\omega^2} \langle i | \frac{\vec{E}_0 \cdot \vec{r}}{r^3} | j \rangle \quad (\text{A.17})$$

onde

$$|i\rangle = \phi_{ni}^{(0)}(\vec{r}) e^{-i\epsilon_n t}$$

A eq. (A.14) s̄o considera contribuiç̄ao de estados de um n̄ivel degenerado na aus̄encia de campo e desta forma n̄o pr̄ev̄e a possibilidade de transiç̄ao por absorç̄ao de f̄otons. Como foi descrito no Cap̄itulo 2, estamos considerando o caso em que processos de transiç̄ao ocorrem devido à colisīo de el̄etrons com absorç̄ao de f̄otons (ou seja, $\omega \neq \Delta\epsilon$, onde $\Delta\epsilon$ ̄e a diferenç̄a de energia entre o estado inicial e final envolvido no processo de excitaç̄ao).

A funç̄ao de onda total nesta aproximaç̄ao ̄e dada por:

$$\phi_n^{(1)}(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^g c_{nj} e^{-i\rho_n \cos\omega t} e^{-i\epsilon_n t} \phi_n^{(0)}(\vec{r}, t) \quad (\text{A.18})$$

Esta aproximaç̄ao ̄e v̄alida desde que seja satisfeita a desigualdade:

$$a \gg \alpha_0 = eE_0/m\omega^2 \quad (\text{A.19})$$

onde a ̄e uma dimens̄ao caracter̄istica do at̄omo. A eq.(A.19) mostra que na regīo de campos de altas freqūencias e baixa inten-

sidade, a função de onda (A.18) descreve, de forma satisfatória, o átomo de hidrogênio

$$\alpha_0 \approx \frac{E_0 (\text{V/cm})}{[\hbar\omega (\text{eV})]^2} 10^{-9} \text{ u.a.} \quad (\text{A.20})$$

onde, na eq. (A.20), a intensidade do campo elétrico é expressa em V/cm, a energia do fóton em eV, e α_0 é expresso em unidades atômicas. Para os valores característicos do laser de Rubi ($E_0 \sim 5 \times 10^6$ V/cm e $\hbar\omega \sim 1.78$ eV) $\alpha_0 \sim 10^{-3}$ u.a. e a aproximação de translação espacial em primeira ordem é totalmente justificável. Para laser de CO_2 ($E_0 \sim 10^7$ V/cm e $\hbar\omega \sim 0.12$ eV), porém, o parâmetro α_0 é da ordem da dimensão do átomo ($\alpha_0 \sim 1$ u.a.) e a aproximação apresentada não é adequada.

Escolhendo o campo elétrico $\vec{E}(t)$ orientado na direção de quantização (campo linearmente polarizado), o parâmetro ρ_2 é calculado a partir da equação secular, eq. (A.16), onde incluímos os estados $2s$, $2p_{\pm 1}$, $2p_0$

$$|\rho_2| = \frac{e^3 E_0}{2m\omega^3} \approx 1.9 \times 10^{-6} \frac{E_0 (\text{V/cm})}{[\hbar\omega (\text{eV})]^3} \quad (\text{A.21})$$

Para campos de laser de Rubi temos

$$|\rho_2| = 1.72$$

Para os cálculos efetuados no Capítulo 2, utilizamos funções de onda perturbadas da forma:

$$\phi_{2s}(\vec{r}, t) = \phi_{2s}^0(\vec{r}) e^{-\epsilon_{2s} t} e^{-i\rho_2 \cos \omega t}$$

e não incluímos termos de mistura com outros estados da camada $n = 2$.

Nesta aproximação, a função de onda do estado fundamental não é alterada pela presença do campo ($\rho_1 \equiv 0$).

Keldysh⁽⁷⁾ propôs funções para os estados ligados que possuem a mesma estrutura básica, e a mesma dependência tempo - ral, diferindo somente na forma de obtenção dos parâmetros ρ_n . Keldysh utilizou parâmetros do efeito Stark (σ_n). A aproximação de Keldysh, em princípio, não está sujeita à condição de validade do método perturbativo discutido anteriormente.

A eq. (A.19) mostra que o parâmetro α_0 depende inversamente da massa da partícula incidente. No caso de colisão com átomos-moléculas, o parâmetro α_0 pode ser algumas ordens de magnitude menor, e torna-se justificável o uso de uma aproximação de translação espacial de ordem zero no campo (ou seja, tratar o potencial de interação na aproximação definida pela eq. (A.12)).

REFERÊNCIAS

- (1) - H. Barry Bebb e Albert Gold. *Multiphoton Ionization of Hydrogen and Rare-Gas Atoms*. Phys. Rev. 143 (1966) 1-24.
- (2) - B.D. Choudhury. *Collision-Induced Multiphoton Excitation of Hydrogen*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 8 (1975) , 1420 - 1427.
- (3) - J.I. Gersten e M.H. Mittleman. *Electron Scattering from Atoms in the Presence of a Laser Field*. Phys. Rev. A 13 (1976), 123-130.
- (4) - V.A. Kovarskiĭ e N.F. Perel'man. *Multiphoton Processes Associated with the Resonant Scattering of Light by Atoms*. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 60 (1971) 509-512; Soviet Phys. JETP 33 (1971) 274-276.
- (5) - V.A. Kovarskiĭ e N.F. Perel'man. *Role of the Atom's Spectrum in Multiphoton Ionization Processes*. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 61 (1971) 1389-1398; Soviet Phys. JETP 34 (1972) 738-743.
- (6) - N.M. Kroll e K.M. Watson. *Inelastic Atom-Atom Scattering within an Intense Laser Beam*. Phys. Rev. A 13 (1976) 1018-1033.
- (7) - L.V. Keldysh. *Ionization in the Field of a Strong Electromagnetic Field*. J. Exptl. Theoret. Phys. 47 (1964) 1945 - 1957; Sov. Phys. JETP, 20 (1965) 1307 - 1314.
- (8) - M.H. Mittleman. *Electron Scattering from Atoms in the Presence of a Laser Field. II*. Phys. Rev. A 14 (1976) 1338 - 1344.
- (9) - N.F. Perel'man e V.A. Kovarskiĭ. *Contribution of Collisions to Multiphoton Resonances in Gases*. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 63 (1972) 831-837; Soviet Phys. JETP 36 (1973) 436-439.

- (10) - F.V. Bunkin, R.V. Karapetyan e A.M. Prokhorov. *Dissociation of Molecules in a Strong Radiation Field*. J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R.) 47 (1964) 216-220; Soviet Phys. JETP 20 (1965) 145-148.
- (11) - F.V. Bunkin e I.I. Tugov. *Multiphoton Processes in Homopolar Diatomic Molecules*. Phys. Rev. A 8 (1973) 601-612.
- (12) - M.H. Mittleman. *Atomic Charge Transfer in the Presence of a Laser Field*. Phys. Rev. A 14 (1976) 586-592.
- (13) - Yuan, J.M., J.R. Laing e T.F. George. *Semiclassical Theory of Molecular Collisions in a Laser Field*. J. Chem. Phys. 66 (1977) 1107-1121.
- (14) - I.H. Zimmerman, Iian-Min Yuan e T.F. George. *Quantum Mechanical Theory of Molecular Collisions in a Laser Field*. J. Chem. Phys. 66 (1977) 2638-2646.
- (15) - R.H. Garstang. *Atoms in High Magnetic Fields*. Rep. Prog. Phys. 40 (1977) 105-154.
- (16) - H.S. Brandi. *Hydrogen Atoms in Strong Magnetic Fields*. Phys. Rev. A 11 (1975) 1835-1839.
- (17) - H.S. Brandi, R.R. Santos e L.C.M. Miranda. *Hydrogen Atoms in Strong Magnetic Fields: Oscillator Strengths*. Lettere al Nuovo Cimento 16 (1976) 187-192.
- (18) - R. Cohen, J. J. Lodenquai e M. Ruderman. *Atoms in Superstrong Magnetic Fields*. Phys. Rev. Letters 25 (1970) 467-469.
- (19) - V. Canuto e D.C. Kelly. *Hydrogen Atom in Intense Magnetic Field*. Astrophys. Space Sci. (1972) 17 n° 2, 277 - 291.
- (20) - B. Kadomtsev. *Heavy Atom in a Ultrastrong Magnetic Field*. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 58 (1970) 1765-1769; Sov. Phys. JETP 31 (1970) 945-947.

- (21) - C.P. de Mello, R. Ferreira, H.S. Brandi e L.C.M. Miranda. *Hydrogen Molecule Ion in Strong Magnetic Fields*. Phys. Rev. Letters 37 (1976) 676-679.
- (22) - H.G. Praddaude. *Energy Levels of Hydrogen Atoms in a Magnetic Field*. Phys. Rev. A 6 (1972) 1321 - 1324.
- (23) - A.R.P. Rau, R.O. Mueller e Larry Spruch. *Simple Model and Wave Functions for Atoms in Intense Magnetic Fields*. Phys. Rev. A 11 (1975) 1865-1879.
- (24) - E.R. Smith, R.J.W. Henry, G.L. Surmelian, R.F. O'Connell e A.K. Rajagopal. *Energy Spectrum of Hydrogen Atom in a Strong Magnetic Field*. Phys. Rev. D 6 (1970) 3700-3701.
- (25) - R.R. dos Santos e H.S. Brandi. *Addendum to "Hydrogen Atoms in Strong Magnetic Fields"*. Phys. Rev. A 13 (1976) 1970-1974.
- (26) - S. Geltman. *Topics in Atomic Collision Theory*. Pure and Applied Physics, vol. 30. Academic Press N.Y. and London (1969) part I.
- (27) - S. Geltman. *Topics in Atomic Collision Theory*. Pure and Applied Physics vol. 30. Academic Press N.Y. and London (1969) part II.
- (28) - W.C. Hernneberger. *Perturbation Method for Atoms in Intense Light Beams*. Phys. Rev. Letters 21 (1968) 838-841.
- (29) - F.H.M. Faisal. *Multiple Absorption of Laser Photons by Atoms*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 6 (1973) L89-L92.
- (30) - I.J. Berson. *Multiphoton Ionization and Stimulated Bremsstrahlung Radiation in the Case of Short-Range Potentials*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 8 (1975) 3078-3088.
- (31) - H.S. Brandi, Belita Koiller, H.G.P. Lins de Barros, L.C.M. Miranda e J.J. Castro. *Theory of Electron-Hydrogen Atom Collisions in the Presence of a Laser Field*. Phys. Rev. A 17 (1978) 1900.

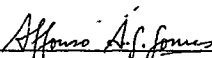
- (32) - H.S. Brandi, Belita Koiller e H.G.P. Lins de Barros. *Electron-Hydrogen Atom Collisions in the Presence of a Laser Field: The Born-Oppenheimer Approximation*. Phys. Rev. A (em publicação).
- (33) - N.D. Blashkar, B. Jaduszliwer e B. Bederson. *Scattering of Low-Energy Electrons by Excited Sodium Atoms Using a Photon and Electron Atomic Beam Recoil Technique*. Phys. Rev. Letters 38 (1977) 14-17.
- (34) - B.J. Choudhury e B.S. Bhakar. *Potential Scattering of Electrons in the Presence of an Electromagnetic Field*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 7 (1974) L137-L140.
- (35) - B.J. Choudhury e B.S. Bhakar. *Charged-Particle Scattering in the Presence of Electromagnetic Field: Eikonal Approximation*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 8 (1975) L228-L229.
- (36) - B.J. Choudhury e B.S. Bhakar. *Coulomb T-Matrix in the Glauber Approximation in the Presence of a Low Frequency Electromagnetic Field*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 7 (1974) L314-L316.
- (37) - R.N. DeWitt. *Circular Versus Linear Polarization in Multiphoton Ionization of Hydrogen*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 6 (1973) L93-L95.
- (38) - F.H.M. Faisal. *Collision of Electrons with Laser Photons in a Background Potential*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 6 (1972) L312-L315.
- (39) - Y. Gontier e M. Trahin. *Four-Photon Resonant Ionization of Caesium*. J. Phys. B: Atom and Molec. Phys. 11 (1978) L131-L135.
- (40) - N.M. Kröll e K.M. Watson. *Charged-Particle Scattering in the Presence of a Strong Electromagnetic Wave*. Phys. Rev. A 8 (1973) 804-809.

- (41) - E. Karule. *Two-Photon Ionisation of Atomic Hydrogen Simultaneously with One-Photon Ionisation*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 11 (1978) 441-447.
- (42) - A.M. F. Lau. *Radiative Transitions in Atom-Atom Scattering in Intense Laser Fields*. Phys. Rev. A 13 (1976) 139-147.
- (43) - A.M.F. Lau, C.K. Rhodes. *Control Collisionless and Collisional Processes by Nonresonant Laser Fields*. Phys. Rev. A 15 (1977) 1570-1587.
- (44) - M. Mohan e P. Chand. *Electron Scattering in the Presence of an Intense Electromagnetic Field*. Z. Physik A 285 (1978) 115-120.
- (45) - V.S. Smirnov e A.V. Chaplik. *Atomic Collisions in a Strong Electromagnetic Field*. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 71 (1976) 1741-1747; Sov. Phys. JETP 44 n° 5 (1976) 913-916.
- (46) - A. Weingartshofer, J.K. Holmes, G. Caudie e E.M. Clarke. *Direct Observation of Multiphoton Processes in Laser Induced Free-Free Transitions*. Phys. Rev. Letters 39 (1977) 269-270.
- (47) - B.A. Zon. *Charged Particle Scattering in the Presence of a Strong Electromagnetic Field: Eikonal Approximation*. J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. 8 (1975) L86-L87.
- (48) - I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press N.Y. and London (1965) 4th ed. pg. 979.
- (49) - E. Corinaldesi e L. Trainor. *Evaluation of Integrals in the Theory of Atomic Scattering of Electrons*. II Nuovo Cimento 19 (1952) 940-945.
- (50) - V.I. Ochkur. *The Born-Oppenheimer Method in the Theory of Atomic Collisions*. J. Exptl. Theoret. Phys.(U.S.S.R.) 45 (1963) 734-741; Soviet Phys. JETP 18 (1964) 503-508.

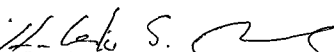
- (51) - B.H. Bransden e M.R.C. McDowell. *Electron Scattering by Atoms at Intermediate Energies. I. Theoretical Models*. Phys. Rev. 30 c (1977).
- (52) - R.J. Glauber. *High Energy Collisions Theory*. Lectures in Theoretical Physics Vol. 1, ed. W.E. Brittin and L. G. Dunham N.Y.: Interscience (1959) 315-414.
- (53) - H.K. Shin. *Excitation of Molecular Vibration on Collision. I. Preferential Orientations for Vibrational Transitions*. J. Chem. Phys. 49 (1968) 3964-3973.
- (54) - N.G. Basov, E.M. Belenov, E.P. Mørkin, A.N. Oraevskii e A.V. Pankratov. *Stimulation of Chemical Reactions by a Laser Radiation*. Zh. Eksp. Teor. 64 (1973) 485-497; Sov. Phys. JETP 37 (1973) 247-252.
- (55) - L. Dubé e A. Herzenberg. *Vibrational Excitation of Polar Molecules by Slow Electrons: HCl*. Phys. Rev. Letters, 38 (1977) 820-823.
- (56) - I. Rusinek e R.E. Roberts. *Semiclassical Calculation for Collision Induced Dissociation*. J. Chem. Phys. 65 (1976) 872-880.
- (57) - H.S. Brandi, Belita Koiller, H.G.P. Lins de Barros e L. C.M. Miranda. *Inert Gas-Atom-Molecule Collisions in a Laser Field: Vibrational Excitations in Homopolar Molecules Ions*. J. Chem. Phys. (1978) (em publicação).
- (58) - H.K. Shin. *Nonadjacent Vibrational Transitions in Molecular Collisions. Interference Between One- and Two-Quantum Excitation Processes*. J. Phys. Chem. 77 (1973) 1394-1400.
- (59) - L. Landau e E. Lifchitz. *Mécanique Quantique*. Editions MIR (1966) pg. 92-93.
- (60) - H.S. Brandi, Belita Koiller, H.G.P. Lins de Barros e L. C.M. Miranda. *Charged Particle Scattering in the Presence of a Homogeneous Magnetic Field*. Phys. Rev. A (1978) (em publicação).

- (61) - L. Landau e E. Lifchitz. *Mécanique Quantique*. Editions MIR (1966) capítulo XV.
- (62) - L. Landau e E. Lifchitz. *Mécanique Quantique*. Editions MIR (1966). Apêndice.
- (63) - M. Abramowitz e I.A. Segun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, N.Y. (1968) cap. 29.
- (64) - I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press N.Y. and London (1965) 4th ed. pg. 1037-1039.
- (65) - I.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press, N.Y. and London (1965) 4th ed. pg. 976.
- (66) - M. Abramowitz e I.A. Segun. *Handbook of Mathematical Functions*. Dover, N.Y. (1968) cap. 5.
- (67) - I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series and Products*. Academic Press, N.Y. London (1965) 4th ed. pg. 925.
- (68) - W.A.M. Blumberg, R.M. Jopson e D.J. Larson. *Precision Laser Photodetachment Spectroscopy in Magnetic Fields*. Lyman Laboratory of Physics. Harvard University. Cambridge, Mass. (1978).

Tese apresentada ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tec-
nológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes
professores:



Affonso Augusto Guidão Gomes - Presidente



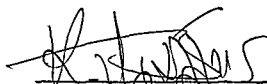
Humberto Siqueira Brandão



Belita Koiller



Roberto Leal Lobo e Silva Filho



Constantino Tsallis

Rio de Janeiro, 11 de setembro de 1978