

DR3206216

IFT-T-02/81

INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA

São Paulo - SP

ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR

ÁTOMOS DE HIDROGÊNIO

Tese de Mestrado

Darcy Hiroe Fujii

São Paulo-fevereiro 1981.

A

Maria C. Tijero

Agradecimentos

Muitas pessoas colaboraram para que este trabalho pudesse ser realizado, pessoas às quais sou extremamente grata.

Agradeço ao prof. Valdir C. Aquilera Navarro que me orientou com paciência, compreensão e notória clarividência. Agradeço ao prof. C.R. Gurubelli pela proposição do tema e confiança depositada; ao prof. E. Ley Kos pelas discussões que impulsionaram sobremaneira o desenvolvimento dos cálculos analíticos; ao prof. Paulo L. Ferreira pelo interesse constante demonstrado quanto à minha integração no Instituto de Física Teórica; aos profs. C.O. Escobar e B.M. Pimentel pelos incentivos e amizade e a todos os professores do I.F.T. responsáveis também pela minha formação.

Não poderei deixar sem registrar, os momentos alegres de "bute pepe" e de leituras junto aos colegas e funcionários do I.F.T. e em especial os meus colegas de turma, Hiroshi, Alfredo, Gerson, Suyana e Pedro pela solidariedade constante.

Agradeço ao Sr. Moacyr A. dos Santos pela amizade e colaboração na pesquisa bibliográfica deste trabalho; à Ione A. Cordeiro e Carlos A. C. da Costa pelo excelente trabalho de datilografia e impressão da tese, respectivamente.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, pela bolsa de estudos concedida.

Finalmente, agradeço aos meus pais, Yoshuhira e Tomoko, aos meus irmãos, Clélia, Amelia e Oscar e à Sônia pelos gestos e palavras de apoio moral e compreensão necessários em todos os momentos.

CONTEÚDO

I. INTRODUÇÃO	1
II. TEORIA	
a. Cinemática	4
b. Aproximação de Born	7
III. SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL	17
IV. RESULTADO E DISCUSSÕES	20
V. APÊNDICE	22
VI. BIBLIOGRAFIA	32

Resumo: Neste trabalho ^{-ll} apresentamos um método variacional para calcular a seção de choque diferencial do processo de espalhamento elétron-átomo (hidrogênio). Calculamos ^{-ll} a segunda aproximação de Born através de um cálculo variacional usando como parâmetros a energia e a carga eletrônica simultaneamente, a fim de calcular a seção de choque diferencial que é escrita numa forma fracional conforme o princípio variacional de Schringer. Incluímos ^{-ll} efeitos devidos à troca de elétrons no final dos cálculos.

I - INTRODUÇÃO

O espalhamento elástico de elétrons por átomos tem sido estudado, para casos de energias intermediárias, em vista dos recentes dados experimentais que mostram uma incidência grande de espalhamento na região de pequenos ângulos. E nota-se que este fenômeno não é reproduzido pela primeira aproximação de Born.

A ineficiência da primeira aproximação de Born é explicada, para este caso, pelo aparecimento dos efeitos de polarização e distorção atômicas devidas à interação com o elétron incidente e esses efeitos não serem considerados no cálculo. Surge, então, a necessidade de que esses efeitos estejam presentes na seção de choque diferencial.

Existem formalmente duas formas de introduzir essas contribuições. Através de um potencial de polarização adequadamente escolhido e introduzido nas equações de espalhamento que são resolvidas numericamente (La Bahn, Callaway, 1969), ou então, introduzindo esses efeitos na amplitude de espalhamento incluindo termos de segunda ordem de Born. Essa segunda forma é uma maneira simples e

natural, conforme mostraram Garibotti e Massaro(1971). Contudo, incluir termos de segunda ordem envolve o problema de definir de que forma é possível calcular a soma infinita associada e decidir qual é o método de aproximação mais confiável. Nas cinco seções que constituem este trabalho, definimos o problema elétron-átomo de hidrogênio com detalhes.

Na seção II, inicialmente definimos o sistema em interação, resolvemos a equação de Schroedinger correspondente e calculamos a amplitude de espalhamento exata do problema. Em seguida, calculamos as duas primeiras aproximações de Born e a primeira aproximação de Born de troca.

Na seção III, fazemos a dedução da expressão para a amplitude de espalhamento e seção de choque diferencial segundo o princípio variacional de Schwinger. Discutimos extensamente o método variacional para o cálculo da seção de choque e discutimos o critério variacional para determinar parâmetros variacionais que surgem na segunda aproximação de Born.

Na seção IV, discutimos os resultados obtidos através do método variacional e analisamos a curva do espalhamento para frente ($\theta = 0$) em função da carga eletrô-

nica Z_1 . Fazemos uma discussão do resultado obtido em relação ao esperado e concluímos que Z_1 não é um bom parâmetro variacional para energias intermediárias, dentro das aproximações consideradas neste trabalho.

Na seção V, deduzimos explicitamente as expressões mais importantes utilizadas na seção II-b, que aí não foram introduzidas para não prejudicar a unicidade da idéia com muitos detalhes. Além disso, discutimos brevemente o princípio variacional de Schwinger para amplitude de espalhamento.

II - TEORIA

a) Cinemática

Consideremos o espalhamento elástico de uma partícula de carga Ze , massa m , vetor de onda \vec{k} , por um átomo de hidrogênio de carga Ze . Mais tarde, Ze será considerado um parâmetro do problema. Tomando o núcleo atômico como a origem do sistema de coordenadas, denotemos a coordenada da partícula incidente por \vec{r}_1 e a coordenada do elétron atômico por \vec{r}_2 .

Esse sistema é descrito pelo hamiltoniano

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

onde H_0 representa o movimento da partícula colidindo,

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}_1}^2 + H_A(\vec{r}_2), \quad (2)$$

e H_A é o hamiltoniano do átomo com auto estados $\phi_n(\vec{r}_2) \equiv |n\rangle$ associados a energias internas correspondentes E_n . Finalmente, V é o potencial (coulombiano) de interação entre o elétron incidente e o átomo, isto é,

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{Ze^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{Ze^2}{r_2} \quad (3)$$

A equação de Schroedinger que descreve o processo é

$$H\Psi = E\Psi, \quad E > 0, \quad (4)$$

e a solução completa é dada pela soma da solução geral da equação diferencial homogênea, $(E - H_0)\Psi = 0$, e de uma solução particular da equação diferencial não homogênea, $(E - H_0)\Psi = V\Psi$, isto é,

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_0 + \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2m}{\hbar^2} \sum_n \int d\vec{k} d\vec{r}'_1 d\vec{r}'_2 \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}'_1)}}{\kappa^2 - k_n^2} \phi_n^*(\vec{r}'_2) \phi_n(\vec{r}'_1) V(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) \Psi(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2), \quad (5)$$

com $k_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_n)$.

Usando a fórmula de Bethe, discutida na seção V, temos que

$$\int d\vec{k} \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}'_1)}}{\kappa^2 - k_n^2} \phi_n^*(\vec{r}'_2) \phi_n(\vec{r}'_1) = \frac{e^{ik_n |\vec{r}_1 - \vec{r}'_1|}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}'_1|} \phi_n(\vec{r}'_2) \phi_n^*(\vec{r}'_1) \quad (6)$$

e, considerando $r_1 \gg r'_1$ (situação assintótica), temos que (6) é igual a

$$\frac{e^{ik_n r_1}}{r_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}'_1} \phi_n(\vec{r}'_2) \phi_n^*(\vec{r}'_1), \quad (7)$$

onde definimos $k_n^2 \equiv \vec{k}_n$.

Substituindo (7) na solução completa (6) com a condição de contorno abaixo,

$$\Psi_{\vec{k}_i}^+(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \Psi_0 + f(\vec{E}, \theta) \sum_n \frac{e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_1}}{r_1} \phi_n(\vec{r}_2). \quad (8)$$

temos que,

$$f(\vec{E}, \theta) = - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} \phi_i^*(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \Psi_{\vec{k}_i}^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2, \quad (9)$$

que é a amplitude de espalhamento exata, ou seja,

$$f(\vec{E}, \theta) = - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}_i, f | V | \Psi_{\vec{k}_i}^+ \rangle \quad (10)$$

Em (10) $\langle \vec{k}_i, f | \equiv e^{-i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} \phi_i^*(\vec{r}_2)$, e $\Psi_{\vec{k}_i}^+$ são as

funções de Lippmann-Schwinger,

$$|\Psi_{\vec{k}_i}^+\rangle = |\vec{k}_i, \lambda\rangle + G_0^+ V |\Psi_{\vec{k}_i}^+\rangle, \quad (11)$$

onde G_0^+ é o operador livre de Green do sistema.

$$G_0^+ = \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \quad (12)$$

b. Aproximação de Born

A expressão na forma integral (5) é o ponto de partida de uma expansão em série de Born para a amplitude de espalhamento. Tomando Ψ_0 representando uma onda plana incidente e o estado atômico inicial do átomo alvo,

$$\Psi_0 = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} \phi_i(\vec{r}_2) \equiv |\vec{k}_i, i\rangle, \quad (13)$$

como termo de ordem zero, obteremos uma sequência de funções se resolvermos a equação de Lippmann-Schwinger por iteração, ou seja,

$$\Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_1} \phi_i(\vec{r}_2),$$

$$\Psi_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \int G_0^+(\vec{r}; \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_0(\vec{r}') d\vec{r}', \quad \vec{r}' \equiv (\vec{r}_1', \vec{r}_2'), \quad (14)$$

$$\Psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_0(\vec{r}) + \Psi_1(\vec{r}) + \iint G_0^+(\vec{r}; \vec{r}') V(\vec{r}') G_0^+(\vec{r}'; \vec{r}'') V(\vec{r}'') \Psi_0(\vec{r}'') d\vec{r}' d\vec{r}'', \quad (15)$$

⋮

$$\Psi_n(\vec{r}) = \Psi_0(\vec{r}) + \int G_0^+(\vec{r}; \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi_{n-1}(\vec{r}') d\vec{r}', \quad \vec{r}' \equiv (\vec{r}_1', \vec{r}_2'). \quad (16)$$

Assim, por definição, a primeira aproximação de Born é obtida tomando (13) na amplitude de espalhamento (9) ou (10)

$$f_1(E, \theta) = - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}_f, f | V | \vec{k}_i, i \rangle, \quad (17)$$

e o elemento de matriz pode ser calculado com o auxílio da fórmula de Bethe (ver seção V),

$$\frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}}{k^2} = \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}}{|\vec{r}-\vec{R}|}, \quad (18)$$

de tal maneira que,

$$\langle \vec{k}_m, n | V | \vec{k}_i, m \rangle = \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{i\vec{k}_m\cdot\vec{r}_1} \phi_n^*(\vec{r}_1) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_i\cdot\vec{r}_2} \phi_m(\vec{r}_2). \quad (19)$$

Admitindo que o espalhamento é elástico, isto é, o átomo permanece no estado fundamental depois da colisão, vamos tomar a função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio, normalizado na forma

$$\phi_{10}(\vec{r}_1) = \sqrt{\frac{\lambda^3}{\pi}} e^{-\lambda r_1}, \quad \lambda = \frac{Z_1}{a_0}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}. \quad (20)$$

Assim, temos que o elemento de matriz para esse estado é

$$\langle \vec{k}_f, 1s | V | \vec{k}_i, 1s \rangle = -4\pi Z e^2 \frac{|\vec{k}_i - \vec{k}_f|^2 + 8\lambda^2}{[|\vec{k}_i - \vec{k}_f|^2 + 4\lambda^2]^2}, \quad (21)$$

onde fizemos uso novamente da fórmula de Bethe.

Nesses termos, vemos que a primeira aproximação de Born fica

$$f_1(E, \theta) = \frac{ze^2}{\hbar^2} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{|\vec{k}_i - \vec{k}_f|^2 + 8\lambda^2}{[|\vec{k}_i - \vec{k}_f|^2 + 4\lambda^2]^2}, \quad (22)$$

e, sendo θ o ângulo de espalhamento,

$$f_1(E, \theta) = \frac{2m}{\mu} \lambda \frac{4k^2 \sin^2 \theta / 2 + 8\lambda^2}{[4k^2 \sin^2 \theta / 2 + 4\lambda^2]^2}. \quad (23)$$

A segunda aproximação de Born é obtida iterando duas vezes,

$$\overline{f_2}(E, \theta) = \overline{f_1}(E, \theta) + \overline{f_2}(E, \theta), \quad (24)$$

onde $\overline{f_1}(E, \theta) \equiv f_1(E, \theta)$ dado por (23) e

$$\overline{f_2}(E, \theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}_f | |V G_0^+ V| | \vec{k}_i \rangle. \quad (25)$$

Substituindo,

$$G_0^+(\vec{r}_2, \vec{r}_2; \vec{r}_1, \vec{r}_1) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \frac{2m}{\hbar^2} \sum_n \int d\vec{k} \frac{e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}}{k^2 - k_n^2} \phi_n^*(\vec{r}_2) \phi_n(\vec{r}_1), \quad (26)$$

e denotando, $|\vec{k}_n\rangle \equiv e^{i\vec{k}_n \cdot \vec{r}_1} \phi_n(\vec{r}_2)$, temos

$$\overline{f_2(\epsilon, \theta)} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_n \int \frac{d\vec{k}}{k^2 - k_n^2} \langle \vec{k}_f, f | V | \vec{k}, n \rangle \langle \vec{k}, n | V | \vec{k}_i, i \rangle. \quad (27)$$

A somatória em n na expressão (27) significa uma soma sobre todos os estados atômicos intermediários, estados discretos e do contínuo, que são infinitos. Vemos então, que é uma soma impossível de ser calculada exatamente.

Reescrevendo (27) numa forma mais conveniente para expressar a soma, temos,

$$\overline{f_2(\epsilon, \theta)} = \int f(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (28)$$

onde, definindo

$$g_n(\vec{k}) = \frac{1}{4\pi (2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \langle \vec{k}_f, f | V | \vec{k}, n \rangle \langle \vec{k}, n | V | \vec{k}_i, i \rangle, \quad (29)$$

temos que

$$f(\vec{k}) = \sum_n \frac{g_n(\vec{k})}{k^2 - k_n^2}. \quad (30)$$

Nota-se que, a função $f(\vec{k})$ possui infinitas singularidades, correspondendo a polos (estados ligados) e cortes (espectro contínuo). O cálculo aproximado dessa soma pode ser feito reduzindo o conjunto infinito a um número finito de singularidades. Isto é, calculando exatamente os N primeiros termos de (30) e tirando uma média dos termos restantes de forma a ter apenas um parâmetro a justável.

Assumindo então,

$$f(\vec{k}) \cong f^N(\vec{k}) = \sum_{n=1}^N \frac{g_n(\vec{k})}{k^2 - k_n^2} + \sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{g_n(\vec{k})}{k^2 - p_N^2},$$

$$f^N(\vec{k}) = \sum_{n=1}^N \frac{g_n(\vec{k})}{k^2 - k_n^2} + \frac{1}{k^2 - p_N^2} \sum_{n=1}^{\infty} g_n(\vec{k}) - \frac{1}{k^2 - p_N^2} \sum_{n=1}^N g_n(\vec{k}). \quad (31)$$

O parâmetro único p_N^2 é interpretado fisicamente, como sendo a energia média dos estados atômicos intermediários restantes.

Especificamente, no presente cálculo consideramos apenas o primeiro termo da soma, conforme (31). Esta

aproximação é razoável uma vez que o estado fundamental
 está distante dos outros estados ligados e do contínuo.
 Obtemos assim, (c.f. Ap. B),

$$\psi(\vec{k}) = \frac{g_1(\vec{k})}{k^2 - k_1^2} + \frac{\pi c^2}{(2\lambda)^2} \left(\frac{2\pi c}{k} \right)^2 \frac{1}{k^2 - p_1^2} \frac{1}{|\vec{k} - \vec{k}_1|^2 |\vec{k} - \vec{k}_2|^2} \left[|\vec{k}_1 - \vec{k}_1|^2 \langle \vec{k}_1 | s | \vec{k}_1 | s \rangle - \right. \\
 \left. - |\vec{k} - \vec{k}_1|^2 \langle \vec{k}_1 | s | \vec{k}_1 | s \rangle - |\vec{k} - \vec{k}_2|^2 \langle \vec{k}_2 | s | \vec{k}_2 | s \rangle \right] - \frac{g_1(\vec{k})}{k^2 - p_1^2}. \quad (32)$$

Então, conforme (28),

$$\overline{J_2(\lambda, \theta)} = \frac{2m^2 Z^2}{\pi} \left\{ 16 \lambda^4 \left[J(2, 2, 2\lambda, 2\lambda, k_1) - J(2, 2, 2\lambda, 2\lambda, p_1) \right] + 2 J(1, 1, 2\lambda, 0, p_1) \right. \\
 + 8 \lambda^2 \left[J(2, 1, 2\lambda, 2\lambda, k_1) - J(2, 1, 2\lambda, 2\lambda, p_1) \right] + J(1, 1, 2\lambda, 2\lambda, k_1) - J(1, 1, 2\lambda, 2\lambda, p_1) \\
 \left. + 8 \lambda^2 J(2, 1, 2\lambda, 0, p_1) - |\vec{k}_1 - \vec{k}_1|^2 \frac{|\vec{k}_1 - \vec{k}_1|^2 + 8 \lambda^2}{[|\vec{k}_1 - \vec{k}_1|^2 + 4 \lambda^2]^2} J(1, 1, 0, 0, p_1) \right\}, \quad (33)$$

onde $J(m, n, \lambda, \mu, \alpha)$ são as integrais de Dalitz, definidas

$$J(m, n, \lambda, \mu, \alpha) := \int \frac{d\vec{k}}{k^2 - k_1^2} \frac{1}{[|\vec{k} - \vec{k}_1|^2 + \lambda^2]^m [|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|^2 + \mu^2]^n}. \quad (34)$$

Cada um dos termos integrais são calculadas analiticamente, reduzindo-se os integrais unidimensionais, usando o método de Laplace e as identidades de Ferreras (Bonham 1971).

As derivadas mais simples de serem resolvidas são as dos casos especiais $m=n=1$. Através da operação de derivada podem-se avaliar os integrais para m e n maiores que 1, simplificando assim grandemente o trabalho analítico, isto é, nota-se da definição (34) que

$$J(m,n,\lambda,\mu,x) = - \frac{\partial J(m,n,\lambda,\mu,x)}{\partial \lambda^2},$$

$$J(m,n,\lambda,\mu,x) = \frac{\partial J(m,n,\lambda,\mu,x)}{\partial \mu^2},$$

$$J(m,n,\lambda,\mu,x) = + \frac{\partial}{\partial \lambda^2 \partial \mu^2} J(m,n,\lambda,\mu,x). \quad (35)$$

Osciladores de λ e μ iguais e ângulo de espalhamento zero são caracterizados por indeterminações. Então, efetuamos a derivação dos "Jotas" diretamente, sem o uso do método de Laplace. Apesar de ser bastante trabalhoso o cálculo analítico permite-nos obter os resultados contornando as indeterminações.

Derivando as equações de integrais presentes em (33) e juntando-as com as (22), temos a segunda aproximação

Admitindo ainda que no processo ocorrem troca de elétrons, torna-se necessário considerar as correções devidas a esses efeitos. A primeira aproximação de troca de Born, é facilmente conseguida, usando funções de ondas incidentes simetrizadas ou antissimetrizadas,

$$\Psi_{\vec{k}}^{\pm} = e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_2} \phi_{1s}(\vec{r}_2) \pm e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_1} \phi_{1s}(\vec{r}_1), \quad (36)$$

na amplitude de espalhamento (10). De forma que, a função g de troca, é

$$g = -\frac{1}{4\pi} \frac{2me^2}{\hbar^2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 e^{-i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_1} \phi_{1s}^*(\vec{r}_2) \left[\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{1}{r_1} \right] e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}_2} \phi_{1s}(\vec{r}_1). \quad (37)$$

Os dois termos de (37) podem ser calculados aplicando sucessivamente integrações por partes. Os detalhes para calcular integrais do tipo,

$$I := \int du w(u) e^{v\phi(u)}, \quad (38)$$

são dados no Apêndice A, onde mostra-se que, em primeira aproximação

$$I \cong \frac{1}{v} \frac{\int \phi(\vec{u})}{\phi(\vec{u})} \quad (39)$$

Usando o resultado acima, temos que, o primeiro termo de (37) escreve-se como

$$\frac{2me^2}{\hbar^2 k^2} \int d\vec{r}_1 e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}) \cdot \vec{r}_1} |\phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1)|^2. \quad (40)$$

Da mesma forma, a segunda parcela de (37) pode ser escrita como,

$$\frac{2me^2}{\hbar^2 k^2} \int d\vec{r}_1 \phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \phi_{\vec{k}_2}(\vec{r}_1) \quad (41)$$

A consideração deste termo (41) vai nos fornecer uma contribuição irrelevante, como mostrado no Apêndice C.

Assim, temos que

$$g \cong - \frac{2me^2}{\hbar^2 k^2} \int d\vec{r}_1 e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}) \cdot \vec{r}_1} |\phi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1)|^2. \quad (42)$$

Para o átomo de hidrogênio no estado fundamen-
tal, cuja função de onda é dada por (20), temos que (42)
se escreve finalmente como

$$g = \frac{2}{a^3 (1 + k^2 \sin^2 \theta/2)^2} \cdot \quad (43)$$

III- SEÇÃO DE CHOQUE DIFERENCIAL

A seção de choque diferencial pode ser calculada a partir das expressões perturbativas. Nós usamos uma expressão perturbativa na forma fracional obtida do princípio variacional de Schwinger, para a amplitude de espalhamento, ver ap.D,

$$[f] = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\kappa^2} \frac{\langle \Psi_{\vec{k}_1}^- | V | \Phi_{\vec{k}_1} \rangle \langle \Phi_{\vec{k}_1} | V | \Psi_{\vec{k}_1}^+ \rangle}{\langle \Psi_{\vec{k}_1}^- | V - V G_0^+ V | \Psi_{\vec{k}_1}^+ \rangle} \quad (44)$$

Substituímos nesta expressão as quantidades $|\Psi_{\vec{k}_1}^{\pm}\rangle$ e $\langle \Psi_{\vec{k}_1}^{\pm}|$ por ondas $|\Phi_{\vec{k}_1}\rangle = e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \phi_1(\vec{r}_2)$ e $\langle \Phi_{\vec{k}_1}| = e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \phi_1(\vec{r}_2)$, isto é,

$$[f] = \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\kappa^2} \frac{\langle \Phi_{\vec{k}_1} | V | \Phi_{\vec{k}_1} \rangle \langle \Phi_{\vec{k}_1} | V | \Phi_{\vec{k}_1} \rangle}{\langle \Phi_{\vec{k}_1} | V - V G_0^+ V | \Phi_{\vec{k}_1} \rangle} \quad (45)$$

Identificamos que,

$$[f] = \frac{(f_1(E, \theta))^2}{f_1(E, \theta) - f_2(E, \theta)} \quad (46)$$

conforme definições (17) e (24). Finalmente, usando (46), expressamos a seção de choque

$$\sigma(\theta) = |f(E, \theta)|^2 = \left| \frac{(f_1(E, \theta))^2}{f_1(E, \theta) - f_2(E, \theta)} \right|^2 \quad (47)$$

Ao se incluir a amplitude de troca onde se levam em consideração as multiplicidades dos spins, obtemos

$$\sigma(\theta) = \frac{1}{4} \left| \frac{[f_1(E, \theta) + g_1(E, \theta)]^2}{f_1(E, \theta) + g_1(E, \theta) - f_2(E, \theta)} \right|^2 + \frac{3}{4} \left| \frac{[f_1(E, \theta) - g_1(E, \theta)]^2}{f_1(E, \theta) - g_1(E, \theta) - f_2(E, \theta)} \right|^2. \quad (48)$$

admitindo que tanto o elétron incidente como o átomo de hidrogênio não estão polarizados.

A expressão (48) nos permite calcular a seção de choque diferencial desde que o parâmetro p_M^2 (contido em $f_2(E, \theta)$) seja determinado.

Determina-se o parâmetro desconhecido p_M^2 para a aproximação de $f_2(E, \theta)$, de acordo com o critério de Garibotti e Massaro que consiste em impor condição de estacionariedade de (48) para $\theta = 0$. Essa condição é razoável para este trabalho, em vista de que a região de nosso interesse é justamente para regiões de ângulos pequenos.

De acordo com os autores acima citados, da determinação de p_M^2 , segue-se para o cálculo da seção de choque diferencial através de (48) para todo e qualquer ângulo. Este procedimento foi utilizado para energias entre 100 eV e 700 eV.

Tendo como objetivo tentar melhorar os resultados obtidos por Garibotti e Massaro, introduzimos em nossos cálculos, mais um parâmetro, além de ρ_1^2 , a ser ajustado de maneira a termos $f(\theta=0)$ estacionário. O parâmetro escolhido foi Z_1 , a carga eletrônica do átomo alvo, admitindo que devido a interação com o elétron incidente, a carga do elétron atômico é alterada, variando, por hipótese, em torno de $Z_1=1$. Ambos os parâmetros estão contidos na expressão perturbativa desenvolvida anteriormente, equação (48).

IV- RESULTADOS E DISCUSSÃO

Através de um método, tomando Z_1 e p_1^2 como parâmetros variáveis, procuramos um par (Z_1, p_1^2) que satisfizesse o critério de estacionariedade imposta para cada energia 100 eV $\leq E \leq 1000$ eV. O intervalo de variação de Z_1 utilizado foi o seguinte, que representa um intervalo fisicamente aceitável para Z_1 em uma:

Na figura 1, apresentamos uma curva qualitativa, referente a todas as energias consideradas, de $\sigma(0;0)$ contra Z_1 . Para cada valor de Z_1 procuramos um valor de p_1^2 , tal que $\sigma(0;0)$ seja estacionário. A cada energia fixada, encontramos uma curva com comportamento semelhante ao da figura 1, isto é, a mesma que não há nenhum intervalo em que $\sigma(0;0)$ seja estacionário na região estudada, se fosse possível, então não nos forneceu um Z_1 particular que possibilitasse recalcular a seção de choque diferencial.

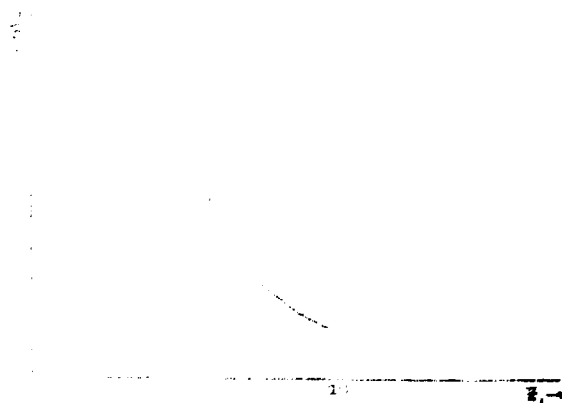


Fig. 1 - Curva qualitativa de $\sigma(0)$ para dada energia. O eixo Z_1 é do processo de espalhamento diferencial.

A conclusão que chegamos é que, considerando a apenas um estado intermediário na soma (31), z_1 não é um parâmetro variacional suficiente. Acreditamos na possibilidade de que z_1 possa vir a ser uma boa escolha, caso se considere mais termos na expressão da segunda aproximação de Born. Esperamos, no entanto, aumento considerável das dificuldades na obtenção das expressões analíticas para as integrais do tipo (34).

Para o caso particular de $z_1=1$, os resultados obtidos neste trabalho reproduzem os de Garibotti e Massaro para as seções de choque diferenciais, como era de se esperar. O acordo desses resultados com dados experimentais (Williams, 1975) é razoável (ver Garibotti e Massaro, 1979).

V- APÊNDICE

A. Consideremos a integral

$$I := \int du w(u) e^{v\phi(u)}. \quad (A.1)$$

Como

$$e^{v\phi(u)} du = \frac{1}{v\phi'(u)} d(e^{v\phi(u)}), \quad (A.2)$$

podemos reescrever (A.1) como

$$I = \int \frac{w(u)}{v\phi'(u)} d(e^{v\phi(u)}). \quad (A.3)$$

Separando os termos em $\frac{w(u)}{v\phi'(u)}$ e $d(e^{v\phi(u)})$ e integrando por partes, teremos

$$I = e^{v\phi(u)} \frac{w}{v\phi'(u)} - \int e^{v\phi(u)} du \frac{d}{du} \left(\frac{w(u)}{v\phi'(u)} \right). \quad (A.4)$$

Aqui, deixamos de escrever explicitamente $w(u)$ e $\phi(u)$ como função de u , por simplicidade, tomando o cuidado de lembrar todavia que somente v não depende de u .

Na sequência de (A.4), repetimos o processo de integração por partes obtendo

$$I = \frac{e^{v\phi} w}{\phi' v} - \frac{e^{v\phi}}{\phi'} \frac{d}{du} \left(\frac{w}{\phi'} \right) \frac{1}{v^2} + \left(e^{v\phi} du \frac{d}{du} \left[\frac{1}{v\phi} \frac{d}{du} \left(\frac{w}{v\phi'} \right) \right] \right). \quad (A.5)$$

Na m-ésima integração por partes, teremos

$$\begin{aligned}
 I = & \frac{e^{\nu\phi}}{\phi'} \left[\frac{w}{\nu} - \left(\frac{d w}{d u \phi} \right) \frac{1}{\nu^2} + \left(\frac{d}{d u} \frac{1}{\phi'} \frac{d w}{d u \phi} \right) \frac{1}{\nu^3} - \left(\frac{d}{d u} \frac{1}{\phi'} \frac{d}{d u} \frac{d w}{d u \phi} \right) \frac{1}{\nu^4} + \right. \\
 & + \dots + (-1)^{m-1} \underbrace{\left(\frac{d}{d u} \frac{1}{\phi'} \dots \frac{d}{d u} \frac{d}{d u} \frac{d w}{d u \phi} \right)}_{m-1 \text{ operadores } \frac{d}{d u}} \frac{1}{\nu^m} + \\
 & + \frac{(-1)^m}{\nu^m} \int e^{\nu\phi} du \underbrace{\frac{1}{\phi'} \frac{1}{\phi'} \frac{d}{d u} \frac{1}{\phi'} \dots \frac{d}{d u} \frac{1}{\phi'} \frac{d w}{d u \phi}}_{m \text{ operadores } \frac{d}{d u}}. \quad (A6)
 \end{aligned}$$

Temos, então, uma série de potências em $1/\nu$. No limite em que $\nu \rightarrow \infty$, a integral é dominada pelo termo que $\phi(u) = 0$ em todo intervalo de integração. Nessa expansão, quando $\nu \rightarrow \infty$, o termo dominante é

$$I \approx \frac{w(u)}{\nu} \frac{e^{\nu\phi(u)}}{\phi'(u)}, \quad (A7)$$

calculado nos extremos do intervalo de integração de u .

5. Temos definido na equação (29)

$$g_n(\vec{k}) = \frac{1}{4\pi(2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 \langle \vec{k}, n | |V| \vec{k}, n \rangle \langle \vec{k}, n | |V| \vec{k}, n \rangle.$$

Substituindo os elementos de matriz por sua expressão (19) e somando em n , vem

$$\begin{aligned} \sum_n g_n(\vec{k}) = \sum_n \frac{1}{4\pi(2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 & \left(\int e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \phi_1(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} \phi_n(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \right. \\ & \left. \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \phi_n(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} \phi_1(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \right). \end{aligned} \quad (B1)$$

Através da relação de fechamento,

$$\sum_n \phi_n(\vec{r}_2) \phi_n(\vec{r}_2') = \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_2'), \quad (B2)$$

podemos integrar em $d\vec{r}_2'$ obtendo

$$\begin{aligned} \sum_n g_n(\vec{k}) = \frac{1}{4\pi(2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^2 & \left(\int e^{i(\vec{k}-\vec{k}_1) \cdot \vec{r}_1} \phi_1(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}) \cdot \vec{r}_1} \right. \\ & \left. \cdot V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \phi_1(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 d\vec{r}_1 \right). \end{aligned} \quad (B3)$$

Abstrair o potencial do tipo

$$\chi(\vec{R}) = \frac{1}{\sqrt{4\pi R}} \left[\frac{1}{R} \right] \quad (84)$$

e usando a fórmula de Poisson (16), substituímos em \vec{r} e \vec{r}' , obtendo

$$\sum_n g_n(\vec{r}) = \frac{(Ze)^2}{4\pi(2\pi)^2} \left(\frac{4\pi}{R} \right)^2 \int \frac{e^{i(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{k}}}{|\vec{r}-\vec{r}'|^2 |\vec{r}-\vec{r}'|} \left[e^{i(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{k}} - 1 \right] \cdot \left[e^{i(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{k}} - 1 \right] \chi(\vec{r}) \chi(\vec{r}') \quad (85)$$

Desenvolvendo o produto de Poisson, ficamos com

$$\sum_n g_n(\vec{r}) = \frac{(4\pi Ze)^2}{4\pi(2\pi)^2} \left(\frac{4\pi}{R} \right)^2 \int \frac{e^{i(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{k}}}{|\vec{r}-\vec{r}'|^2 |\vec{r}-\vec{r}'|} \left[e^{i(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{k}} - 1 \right] \phi_1(\vec{r}) d\vec{r}' - \int \phi_1(\vec{r}) \left[e^{i(\vec{r}-\vec{r}')\cdot\vec{k}} - 1 \right] \phi_1(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (86)$$

Como,

$$\langle \vec{r}_n | \chi(\vec{r}) | \vec{r}_n \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi R}} \left[\frac{1}{R} \right] \chi(\vec{r}),$$

podemos reescrever (B.6) na forma,

$$\sum_{\pi} g_{\pi}(\vec{k}) = \frac{1}{4\pi(2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{(4\pi Ze^2)^2}{|\vec{k}_i - \vec{k}'|^2 |\vec{k} - \vec{k}_f|^2} \left\{ |\vec{k}_i - \vec{k}_f|^2 \langle \vec{k}_i, \uparrow | v | \vec{k}_i, \downarrow \rangle - \right. \\ \left. - |\vec{k}_i - \vec{k}'|^2 \langle \vec{k}_i, \uparrow | v | \vec{k}_i, \downarrow \rangle - |\vec{k} - \vec{k}_f|^2 \langle \vec{k}_f, \uparrow | v | \vec{k}_f, \downarrow \rangle \right\}. \quad (B.7)$$

Substituindo os elementos de matriz pela sua expressão dada em (21), temos que

$$\sum_{\pi} g_{\pi}(\vec{k}) = \frac{1}{4\pi(2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{(4\pi Ze^2)^2}{\Delta_i^2 \Delta_f^2} \left\{ \frac{\Delta^2 \Delta^2 + 8\lambda^2}{(\Delta^2 + 4\lambda^2)^2} - \Delta_i^2 \frac{\Delta_i^2 + 8\lambda^2}{(\Delta_i^2 + 4\lambda^2)^2} - \Delta_f^2 \frac{\Delta_f^2 + 8\lambda^2}{(\Delta_f^2 + 4\lambda^2)^2} \right\},$$

onde definimos

$$\vec{\Delta} = \vec{k}_i - \vec{k}_f \quad , \quad \vec{\Delta}_i = \vec{k}_i - \vec{k}' \quad , \quad \vec{\Delta}_f = \vec{k} - \vec{k}_f .$$

substituindo a expressão (41)

$$\phi_{15}(\vec{r}_2) = \frac{1}{4\pi r_2} \int d\Omega \phi_{15}(\vec{r}_1) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \phi_{15}(0).$$

onde $d\Omega = r_2^2 dr_2 \sin\theta d\theta d\varphi$ e definindo $\chi = \cos\theta$,
 a expressão (42) escreva-se como

$$\phi_{15}(\vec{r}_2) = \frac{1}{4\pi r_2} \int_{-1}^1 d\chi \int_0^{2\pi} d\varphi e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \phi_{15}(0) \phi_{15}(\vec{r}_2) \quad (C-1)$$

$$\text{onde } \vec{k} \cdot \vec{r}_2 = kr_2 \chi, \quad \chi = \chi, \quad w(\chi) = \phi_{15}(\vec{r}_2),$$

onde a equação (C.1) pode ser escrita

$$\phi_{15}(\vec{r}_2) = \frac{1}{4\pi r_2} \int_{-1}^1 d\chi \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty w(u) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} e^{-ku} du. \quad (C-2)$$

De acordo com a equação (A.7) ainda escrevemos que é igual a

$$\frac{2\pi e^i}{k^2} \frac{2\pi}{(2\pi)^2} \int_0^\infty w(u) \left[\phi_{15}(\vec{r}_2, 1) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} - \phi_{15}(\vec{r}_2, -1) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \right] du. \quad (C-3)$$

Assim, após a integração em r_2 , temos

$$\frac{4\pi e^i}{k^2} \int_0^\infty w(u) \left[r_2 e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \phi_{15}(\vec{r}_2, 1) + r_2 e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \phi_{15}(\vec{r}_2, -1) \right] du. \quad (C-4)$$

Como a função ϕ ainda se anula no infinito, en-
tão

$$e^{ik_2 r_2} \phi_{15}^{(2)}(r_2) \xrightarrow{r_2 \rightarrow \infty} 0 \quad .$$

Consequentemente, a expressão (41) é nula em
primeira aproximação.

D. Seja a amplitude de espalhamento

$$f(E, \theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \phi_{k_f} | V | \psi_{k_i}^+ \rangle, \quad (D1)$$

e

$$f(E, \theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \psi_{k_f}^- | V | \phi_{k_i} \rangle. \quad (D2)$$

Usando a equação de Lippmann-Schwinger,

$$|\phi_{k_i}\rangle = |\psi_{k_i}^+\rangle - G_0^+ V |\psi_{k_i}^+\rangle, \quad (D3)$$

obtemos

$$f(E, \theta) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \psi_{k_f}^- | V - V G_0^+ V | \psi_{k_i}^+ \rangle. \quad (D4)$$

Escrevendo um princípio variacional para a amplitude de espalhamento, $[f]$ temos

$$[f] = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ \langle \phi_{k_f} | V | \psi_{k_i}^+ \rangle + \langle \psi_{k_f}^- | V | \phi_{k_i} \rangle - \langle \psi_{k_f}^- | V - V G_0^+ V | \psi_{k_i}^+ \rangle \right\}. \quad (D5)$$

Se $|\psi_{k_i}^+\rangle$ e $\langle \psi_{k_f}^-|$ forem exatas, então $\delta[f] = 0$
ou $[f] = f$

Se tivermos funções proporcionais às funções exatas, com coeficientes variáveis, isto é,

$$|\psi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle = A |\phi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle,$$

$$\langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | = A \langle \phi_{\vec{k}}^{\pm} |. \quad (D6)$$

e fazendo $\delta[\mathcal{F}] = 0$ com A e \vec{k} variáveis, podemos determinar que,

$$A = \frac{\langle \phi_{\vec{k}}^{\pm} | V | \phi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle}{\langle \phi_{\vec{k}}^{\pm} | -VG | \phi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle}, \quad (D7)$$

e

$$B = \frac{\langle \phi_{\vec{k}}^{\pm} | V | \phi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle}{\langle \phi_{\vec{k}}^{\pm} | -VG | \phi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle}. \quad (D8)$$

Portanto,

$$|f| = -\frac{i}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | V | \psi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle \langle \phi_{\vec{k}}^{\pm} | V | \psi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle}{\langle \psi_{\vec{k}}^{\pm} | -VG | \psi_{\vec{k}}^{\pm} \rangle}, \quad (D9)$$

que é expressão (44) para o princípio variacional de Schwinger para a amplitude de espalhamento.

E. Seja a integral

$$I = \int d\vec{r} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{|\vec{r}-\vec{R}|} \quad (E.1)$$

Usando a identidade abaixo

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{R}|} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{R})}, \quad (E.2)$$

temos que

$$I = \frac{1}{2\pi^2} \iint d\vec{r} \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{i(\vec{k}+\vec{K})\cdot\vec{r}} \quad (E.3)$$

A integral em $d\vec{r}$ é uma representação da função delta de Dirac. Então

$$I = 4\pi \int \frac{d\vec{k}}{k^2} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}} \delta(\vec{k}+\vec{K}), \quad (E.4)$$

de onde, vemos que

$$\int d\vec{r} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{|\vec{r}-\vec{R}|} = 4\pi \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}}{k^2}, \quad (E.5)$$

considerando que

$$\delta(\vec{k}+\vec{K}) = \frac{1}{k^2} \delta(k+K) \delta(\phi_k+\phi_K) \delta(\cos\theta_k+\cos\theta_K). \quad (E.6)$$

A relação (E.5) é a chamada Fórmula de Bethe.

VI- BIBLIOGRAFIA

- R.A. Bonhan - Phys. Rev. A.3 (1971),298
- C.R. Garibotti, P.A. Massaro, Rev. Bras. de Fís. 9(1979),679
- S. Geltman, "Topics in Atomic Collision Theory" (Academic Press, 1969)
- I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, "Table of Integrals Series and Products" (Academic Press, 1965).
- C.J. Joachain, "Quantum Collision Theory" (North-Holland Publishing Company, 1975)
- R.W. La Bahn, and J. Callaway Phys. Rev. 180(1969),91
- M.F. Mott, H.S.W. Massey "The Theory of Atomic Collisions" (Oxford at the Clarendon Press, 1965).
- V.I. Ochkur, Soviet Physics JETP-18(1964),503
- J.F. Williams, J. Phys. B.8(1975)1683.