

Excitação por Elétrons do Átomo de Hélio Metaestável

Adriana França

Orientador: Fernando J. da Paixão

Tese apresentada ao Instituto de Física *Gleb Wataghin*

para obtenção do título de Mestre em Física

Abril 1992

Este exemplar corresponde a versão final da tese de
mestrado defendida pelo aluno Adriana França e
aprovada pela Comissão Examinadora.

12/05/92

Fernando Paixão

*Aos meus pais, meus irmãos e aos amigos
França, Carmem, Montanha e Cláudia.*

Agradecimentos

Agradeço ao Prof. Fernando Paixão pela orientação deste trabalho e pela paciência ao longo destes anos.

Ao Osmar pela imensa ajuda com os cálculos, com o computador e pelas discussões sobre o trabalho.

Ao França pela ajuda com o computador, pelo apoio e amizade.

Ao Prof. Marco Aurélio Lima pelas sugestões e preocupação com este trabalho.

À Profa. Gilda Meneses pelas discussões e sugestões.

Ao Mansanares e à Leila pela ajuda com o \LaTeX .

Ao CNPQ pelo apoio financeiro.

Sumário

Capítulo 1

Para situar o nosso problema, apresentamos uma revisão bibliográfica sobre os cálculos de seção de choque diferencial da excitação do hélio metaestável. Mostramos os processos que levam à população desses estados e sua importância do ponto de vista tecnológico.

Capítulo 2

Fazemos um resumo da Teoria de Muitos Corpos para espalhamento elástico e inelástico a partir do estado fundamental e para espalhamento inelástico a partir de um estado excitado. Obtemos equações desacopladas de spin e tempo, numa forma adequada à implementação numérica das mesmas.

Capítulo 3

Apresentamos a Teoria de Fano-Macek para a Experiência de Coincidência Elétron-Fóton. Obtivemos os parâmetros de alinhamento e orientação para excitação entre estados tripletos no acoplamento LS. Mostramos as diferenças para a excitação entre os singletos.

Capítulo 4

Mostramos os resultados da aplicação da Teoria de Muitos Corpos em Primeira Ordem às transições entre estados tripletos. Obtivemos os resultados para a seção de choque de excitação $2^3S \rightarrow 2^3P, 3^3S$ e 3^3P e os parâmetros de alinhamento e orientação para as transições $2^3S \rightarrow n^3P$.

Abstract

We use the First Order Many Body Theory (FOMBT), to study the electron impact excitation of the 2^3S state of helium. We present results for the differential cross section for the $2^3S \rightarrow 2^3P, 3^3S$ e 3^3P transitions. We use Fano-Macek Theory to study the alignment and orientation for $^3S \rightarrow ^3P$ transitions. We present FOMBT results for these parameters.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	A Teoria de Muitos Corpos	7
2.1	Espalhamento Elástico	8
2.2	Espalhamento Inelástico	10
2.3	Espalhamento a partir de um estado excitado	13
2.4	Obtenção das Amplitudes Irreduzíveis	18
2.5	Expansão em Ondas Parciais	19
2.5.1	Expansão do Termo Direto	20
2.5.2	Termo de Troca	21
3	Alinhamento e Orientação	22
3.1	Introdução	22

3.2	Experiência de Coincidência Elétron-Fóton	24
3.2.1	Histórico	24
3.2.2	Configuração Experimental	25
3.2.3	A Teoria de Fano-Macek	27
3.3	Matriz Densidade	32
3.3.1	Propriedades	33
3.4	O Spin do Alvo	34
3.5	Alinhamento e Orientação para $^3S \rightarrow ^3P$	37
3.5.1	Autovalores da Matriz Densidade	40
3.6	Diferenças entre $S_0 = S_1 = 0$ e $S_0 = S_1 = 1$	41
4	Aplicações	43
4.1	Implementação Numérica	43
4.2	Análise dos Resultados	46
4.2.1	Seção de Choque Diferencial	46
4.2.2	Parâmetros de Alinhamento e Orientação	50

Lista de Figuras

1.1	Espectro do átomo de hélio [57].	5
3.1	a) Esquema de uma experiência de Coincidência Elétron-Fóton; b) Colisão com inversão temporal estudada por Hertel [52].	23
3.2	Espectro de perda de energia por impacto eletrônico no átomo de hélio [61].	26
3.3	Espectro de coincidência retardada para a transição $2^1P \rightarrow 1^1S$ do hélio para uma energia do elétron de 80 eV, ângulo de espalhamento $\theta_e = 16^\circ$ e ângulo do fóton $\theta_\gamma = 126^\circ$. Tempo de acumulação ~ 12 horas [67].	27
3.4	Sistema do detetor [66].	29
4.1	Seção de Choque Diferencial para a transição $2^3S \rightarrow 2^3P$, para energias do elétron espalhado de 15, 20 e 30eV.	47
4.2	Seção de Choque Diferencial para a transição $2^3S \rightarrow 3^3S$	48
4.3	Seção de Choque Diferencial para a transição $2^3S \rightarrow 3^3P$	49

4.4	Esquema da nuvem eletrônica. O ângulo γ é o ângulo entre a nuvem e o feixe de elétrons incidentes. O índice superior c caracteriza os eixos do sistema da colisão e o índice n , o sistema natural.	51
4.5	Ângulo γ quando a) $k_i \approx k_f$; b) $k_f \ll k_i$	52
4.6	Parâmetros de Alinhamento e Orientação para a transição $2^3S \rightarrow 2^3P$	54
4.7	Parâmetros de Alinhamento e Orientação para a transição $2^3S \rightarrow 3^3P$	55
4.8	Parâmetro P^+ para a transição $2^3S \rightarrow 2^3P$	56
4.9	Parâmetro P^+ para a transição $2^3S \rightarrow 3^3P$	57

Capítulo 1

Introdução

Nas últimas duas décadas, o interesse em excitações a partir de um estado excitado, previamente populado, tem crescido enormemente. Este tipo de colisão aparece, com frequência, em descargas gasosas [1], plasmas astrofísicos, nebulosas gasosas [2], máquinas iônicas [3], lasers de gases raros e seu estudo é imprescindível, por exemplo, no desenvolvimento de lasers de *excimers*, que figuram entre os mais potentes [4, 5]. Não obstante, a quantidade de trabalhos, tanto teóricos quanto experimentais, acumulada ao longo desse período, ainda é muito reduzida. Essa situação vem se modificando ao longo dos últimos dez anos: vários grupos experimentais importantes na área de colisões têm desenvolvido técnicas para o estudo de excitações a partir de um estado excitado. Na sua quase totalidade, estes grupos produzem o estado 3^2P do Na, devido a existência de *dye lasers* no comprimento de onda da transição. Com isto, consegue-se uma população apreciável de átomos neste estado excitado, para o estudo de colisões com elétrons. Como exemplos representativos, nós temos os trabalhos de Stumpf e Gallagher [6] estudando a transição $3^2P \rightarrow 3^2D$ no Na, McClelland *et al* [7] sobre colisão de elétrons polarizados com Na no 3^2P e Zuo *et al* [8] sobre seção de choque diferencial para o espalhamento elástico de elétrons pelo $3^2P_{3/2}$ do sódio. Uma outra maneira de se trabalhar com átomos excitados consiste em se escolher um estado, cujo tempo de

vida seja maior que o normal (*estado metaestável*). Neste caso, conseguimos popular suficientemente o estado inicial, tornando esse tipo de excitação viável do ponto de vista experimental. Nesse sentido, os estados metaestáveis $2^{1,3}S$ do hélio despertam maior interesse. São todas essas razões que motivam este trabalho sobre algumas excitações a partir do estado 2^3S do hélio. Antes porém, faremos uma pequena revisão bibliográfica, descrevendo o que foi abordado até o presente momento, pela literatura, sobre excitações a partir desse estado.

Os primeiros trabalhos teóricos visavam a obtenção da seção de choque total para o espalhamento elástico pelo átomo de hélio no estado 2^3S e foram realizados ao longo da década de 60. Foram usadas as aproximações de acoplamento forte [9, 10] e de polarização estendida [11], cálculos variacionais [12], aproximação de núcleo polarizado [13] e cálculos de potencial efetivo [14]. No final da década de 60 começaram as pesquisas envolvendo especificamente transições a partir do estado 2^3S . Em 1969, Kim e Inokuti [15] apresentaram a força generalizada do oscilador para as transições $2^3S \rightarrow 2^3P$, 3^3S , 3^3P , 3^3D e 4^3P . Foram usadas funções de onda de Weiss, muito boas quando comparadas com cálculos mais elaborados efetuados por Pekeris *et al* [16-18]. Na época existiam apenas outros resultados de aproximações de Born para seções de choque total, tais como os de Moiseiwitsch [19] e Ochkur e Bratsev [20] e nenhum resultado experimental.

Normalmente a função de onda total do sistema é expandida em termos de estados não perturbados e a interação entre o elétron incidente e o átomo é tratada apenas como uma perturbação. No entanto, quando o átomo está inicialmente no estado excitado, o elétron está, principalmente no caso do hélio, muito distante do núcleo. Isto faz com que o elétron incidente sofra a ação de dois campos coulombianos fortes: repulsão elétron-elétron e atração elétron-núcleo. Vainshtein *et al* [21] usaram uma função de onda que descreve o movimento relativo e que é o produto de duas ondas coulombianas. Aplicaram tal método para o espalhamento de elétrons pelo átomo de hidrogênio. Motivados pelo sucesso obtido por Vainshtein, Flannery *et al* [22] aplicaram a aproximação acima, chamada VPS (Vainshtein, Presnyakov, Sobel'man), para colisões elétron - hélio metaestável. Isto se justifica pelo fato do hélio com um elétron excitado apresentar características similares às

do átomo de hidrogênio. Em 1975, Flannery e McCann [1] calcularam seções de choque diferencial e total para excitações dos estados 2^3P , 3^3S , 3^3P e 3^3D a partir do estado 2^3S usando a aproximação Eikonal de Dez Canais ¹. Khayrallah *et al* [24] calcularam seções de choque total e diferencial para energias entre 4 e 1000 eV para a transição $2^3S \rightarrow 3^3S$ usando as aproximações de Born e Glauber. Foram utilizadas duas funções de onda diferentes com o objetivo de se fazer uma análise a respeito da dependência das seções de choque com as funções de onda. Em 1986, surgiu o trabalho de Onda Distorcida de Mathur *et al* [25] que concorda muito bem com os resultados da aproximação Eikonal Multicanal [1, 23].

Resumindo, podemos dizer que com a exceção de aproximações mais simples (Born [15] e VPS [22]), que não são adequadas à solução do problema, os únicos resultados até o momento para a seção de choque diferencial pertencem à teoria Eikonal Multicanal [1], à aproximação de Glauber [24] (aplicada apenas à transição $2^3S \rightarrow 3^3S$) e à teoria de Ondas Distorcidas [25].

Do ponto de vista experimental, os trabalhos existentes são ainda mais escassos. As primeiras medidas eram voltadas para a determinação da seção de choque total em colisões elásticas, tais como as de Neynaber *et al* [26], Wilson e Williams [27] e Khakhaev *et al* [28]. No entanto, existe apenas uma publicação que exhibe medidas de seções de choque diferencial: em 1983, Müller-Fiedler *et al* [29] investigaram as transições $2^3S \rightarrow 2^3P$, 3^3S , 3^3P e 3^3D . Em 1986, em face a algumas discrepâncias dos dados com as teorias de Onda Distorcida e Eikonal Multicanal, Mathur *et al* [25] sugeriram que novas medidas experimentais fossem realizadas.

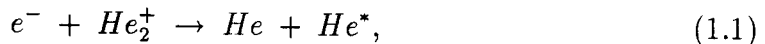
Estamos interessados em processos onde elétrons com energias inferiores a 50 eV, colidem inelasticamente com átomos de hélio, inicialmente no estado metaestável 2^3S . Usaremos a Teoria de Muitos Corpos em Primeira Ordem, motivados pelos bons resultados que esta teoria tem apresentado até o presente momento quando aplicada a outros estados do He [30-33], Ne [34, 35], Ar [36, 37] e Kr [38]. Principalmente para transições entre estados de mesmo spin, a concordância é muito boa entre os resultados teóricos e experimentais, tanto para seções de choque

¹Uma versão melhorada dessa aproximação foi feita por Mansky e Flannery [23].

quanto para os parâmetros de alinhamento e orientação.

Para entender qualquer teoria de espalhamento é necessário ter em mente certos aspectos peculiares ao espectro do átomo de hélio. A fig.1.1 apresenta os níveis de energia desse átomo. Nessa figura, podemos observar dois conjuntos bastante distintos: singletos ($S=0$) e tripletos ($S=1$). Isto se deve ao fato das transições entre singletos e tripletos serem proibidas pela aproximação LS. Por isso, antigamente, pensava-se que dois tipos de hélio existissem: parahélio (singlete) e ortohélio (triplete) [39]. Também podemos observar, na fig.1.1, o estado inicial do átomo alvo: o estado triplete 2^3S . A energia de excitação é de 19.8 eV, a maior entre os átomos neutros para o primeiro estado excitado. Além disso, o elétron $1s$ exerce um efeito de blindagem sobre a carga nuclear, o que faz com que o elétron externo fique fracamente ligado. Portanto, efeitos de correlação entre o elétron interno e o externo podem ser desprezados e podemos usar uma aproximação de caroço congelado para o cálculo da função de onda. Por isso, as energias de excitação a partir do 2^3S variam de 1.14eV para o 2^3P até 5eV para a ionização. Como o estado fundamental é um estado singlete e a transição ótica $2^3S \rightarrow 1^1S$ não é permitida, o elétron excitado permanece no estado 2^3S por um tempo muito maior que o normal [40-42], decaindo por efeitos menores, como por exemplo, emissão de dois fótons [43]. Por essa razão, o estado 2^3S é chamado *metaestável*.

A fim de entender a importância do hélio metaestável nas reações químicas que ocorrem em plasmas, vamos investigar certos aspectos da sua formação e eliminação. Denotaremos o átomo de hélio no estado metaestável por He^* , o íon molecular de hélio por He_2^+ e o elétron por e^- . Em uma descarga gasosa de grande densidade, os estados metaestáveis são predominantemente populados pela reação [22]:



chamada de *recombinação dissociativa*. A excitação por impacto eletrônico a partir do estado fundamental também contribui para a manutenção da população de estados 2^3S . Por outro lado, sua eliminação é feita via:

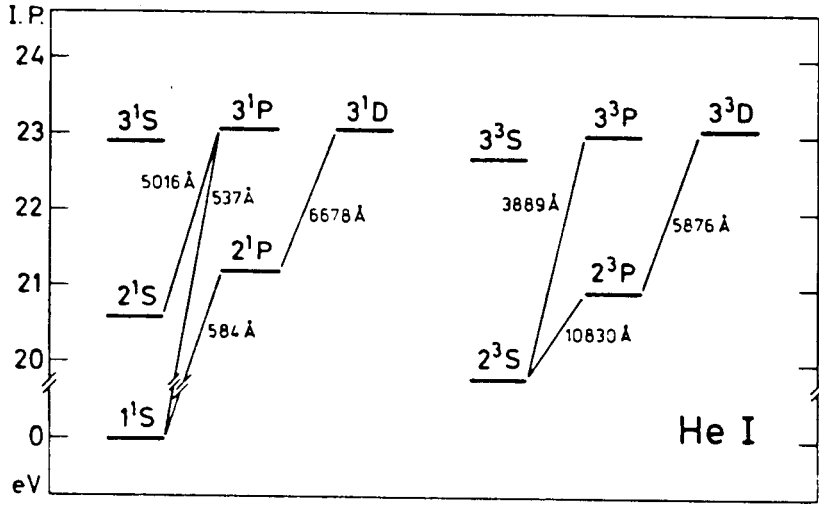
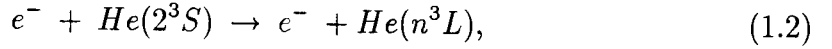


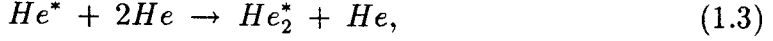
Figura 1.1: Espectro do átomo de hélio [57].



onde $n = 2 - 4$ e $L = S, P, D$.

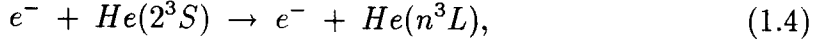
O conhecimento das seções de choque envolvidas na reação acima é fundamental, por exemplo, quando estudamos lasers de *excimers*. Excimers são moléculas excitadas cujo estado fundamental é repulsivo. Como o átomo de hélio apresenta apenas uma camada fechada, a formação de uma molécula de hélio não é possível no estado fundamental. Excitando-se dois átomos de hélio, conseguimos dois átomos com as características do hidrogênio, que conseguem dar origem a uma molécula, graças aos seus elétrons externos. Este é um modo natural de se manter uma inversão de população: quando os elétrons decaem produzindo a emissão laser, a molécula se dissocia. Tais lasers são importantes pois emitem no ultravioleta, uma região onde não existem muitos tipos de laser. Como os estados moleculares

excitados (He_2^*) são formados principalmente através de:

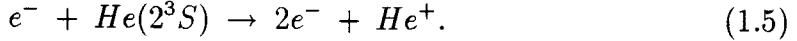


é imprescindível saber com que taxa o estado metaestável está sendo eliminado pela reação (1.2).

Os processos de colisão podem provocar excitação do átomo de hélio:



ou ionização:



Ao longo deste trabalho vamos nos deter apenas nos processos envolvendo excitação. No Capítulo 2, apresentaremos a fundamentação teórica do problema (cálculo das amplitudes de espalhamento). No Capítulo 3, determinaremos, pela primeira vez, os parâmetros de alinhamento e orientação para transições entre estados tripletos. Finalmente, no Capítulo 4, serão apresentados os resultados da implementação numérica da teoria juntamente com cálculos anteriores e com os resultados experimentais disponíveis.

2.1 Espalhamento Elástico

Trataremos o problema do espalhamento por meio do formalismo *in-out* ou formalismo de redução LSZ. Chamando de $\psi(rt)$ ¹ o operador de campo do elétron e $|\Psi_0\rangle$ o estado fundamental do alvo, pode-se mostrar que:

$$\lim_{t \rightarrow \mp\infty} \psi(rt) = \left\{ \begin{array}{c} \psi^{in} \\ \psi^{out} \end{array} \right\} (rt) = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} \psi^{livre}(rt), \quad (2.1)$$

ou seja, as formas assintóticas (ψ^{in}, ψ^{out}) do operador $\psi(rt)$ no passado e futuro distantes, isto é, longe da ação do potencial do alvo, são idênticas à forma assintótica da partícula livre. Podemos expandir ψ^{in} , ψ^{out} e $\psi(rt)$ em termos de ondas planas:

$$\begin{aligned} \psi^{in,out}(rt) &= \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{in,out} \varphi_{\vec{k}}(rt), \\ \psi(rt) &= \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}}(t) \varphi_{\vec{k}}(rt). \end{aligned} \quad (2.2)$$

De (2.1) e (2.2):

$$a_{\vec{k}}^{\dagger in,out} = \lim_{t \rightarrow \mp\infty} a_{\vec{k}}^{\dagger}(t). \quad (2.3)$$

O estado do espalhamento correspondente a um elétron incidente ou espalhado com momento \vec{k} é dado por:

¹Neste e nos próximos capítulos, as notações r e \vec{r} indicarão as coordenadas espaciais com e sem a inclusão do spin, respectivamente. Um simples número N designará de maneira compacta as coordenadas de espaço \vec{r}_N e tempo t_N .

$$| \Psi_{\vec{k}}^{+-} \rangle = a_{\vec{k}}^{\dagger in, out} | \Psi_0 \rangle . \quad (2.4)$$

Então, podemos montar a matriz do espalhamento:

$$\begin{aligned} S_{\vec{k}'\vec{k}} &= \langle \Psi_{\vec{k}'}^- | \Psi_{\vec{k}}^+ \rangle \\ &= \langle \Psi_0 | a_{\vec{k}'}^{out} a_{\vec{k}}^{\dagger in} | \Psi_0 \rangle \\ &= \lim_{t' \rightarrow +\infty, t \rightarrow -\infty} \langle \Psi_0 | a_{\vec{k}'}(t') a_{\vec{k}}^{\dagger}(t) | \Psi_0 \rangle \\ &= \lim_{t' \rightarrow +\infty, t \rightarrow -\infty} \int \langle \Psi_0 | \psi(r't') \psi^{\dagger}(rt) | \Psi_0 \rangle \varphi_{\vec{k}'}^*(r't') \varphi_{\vec{k}}(rt) dr dr' \\ &= i \lim_{t' \rightarrow +\infty, t \rightarrow -\infty} \int G_1(r't', rt) \varphi_{\vec{k}'}^*(r't') \varphi_{\vec{k}}(rt) dr dr'. \end{aligned} \quad (2.5)$$

A *amplitude de Feynman-Dyson da partícula* é definida como:

$$f_{\vec{k}}^{(+,-)}(rt) \equiv \langle \Psi_0 | \psi(rt) | \Psi_{\vec{k}}^{+,-} \rangle . \quad (2.6)$$

A *amplitude de Feynman-Dyson do buraco* é definida como:

$$g_m^{(+,-)}(rt) \equiv \langle \Psi_m^{+,-} | \psi(rt) | \Psi_0 \rangle . \quad (2.7)$$

A função de Green de uma partícula é definida como:

$$G_1(1, 1') \equiv i^{-1} \langle \Psi_0 | T(\psi(1) \psi^{\dagger}(1')) | \Psi_0 \rangle . \quad (2.8)$$

Esta função obedece a equação de Dyson:

$$G_1(rt, r't') = G_1^0(rt, r't') + \int G_1^0(rt, r_1t_1) \sum(r_1t_1, r_2t_2) G_1(r_2t_2, r't') dr_1 dt_1 dr_2 dt_2, \quad (2.9)$$

onde \sum é chamado *auto-energia* ou *potencial ótico*.

Então:

$$\begin{aligned} f_{\vec{k}}^{(+)}(rt) &= \langle \Psi_0 | \psi(rt) a_{\vec{k}}^{\dagger in} | \Psi_0 \rangle \\ &= \lim_{t' \rightarrow -\infty} \langle \Psi_0 | \psi(rt) a_{\vec{k}}^{\dagger}(t') | \Psi_0 \rangle \\ &= i \lim_{t' \rightarrow -\infty} \int G_1(rt, r't') \varphi_{\vec{k}}(r't') dr'. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Substituindo a eq.(2.9) na eq.(2.10):

$$f_{\vec{k}}^{(+)}(rt) = \varphi_{\vec{k}}(rt) + \int G_1^0(rt, r_1t_1) \sum(r_1t_1, r_2t_2) f_{\vec{k}}^{(+)}(r_2t_2) dr_1 dt_1 dr_2 dt_2. \quad (2.11)$$

Usando (2.5) e (2.10):

$$S_{\vec{k}'\vec{k}} = \lim_{t' \rightarrow +\infty} \int \varphi_{\vec{k}'}^*(r't') f_{\vec{k}}^{(+)}(r't') dr'. \quad (2.12)$$

2.2 Espalhamento Inelástico

Consideraremos o caso onde o espalhamento inelástico provoca uma transição do estado fundamental para um estado excitado $|\Psi_n\rangle$. A matriz S será escrita:

$$\begin{aligned}
S_{0p,nq} &= \langle \Psi_n | a_q^{out} a_p^{\dagger in} | \Psi_0 \rangle \\
&= \lim_{t \rightarrow +\infty, t' \rightarrow -\infty} \int \langle \Psi_n | a_q(t) a_p^\dagger(t') | \Psi_0 \rangle dr dr' \\
&= \lim_{t \rightarrow +\infty, t' \rightarrow -\infty} \int \langle \Psi_n | \psi(rt) \psi^\dagger(r't') | \Psi_0 \rangle \varphi_q^*(rt) \varphi_p(r't') dr dr' \\
&= \lim_{t \rightarrow +\infty, t' \rightarrow -\infty} \int \langle \Psi_n | T(\psi(rt) \psi^\dagger(r't')) | \Psi_0 \rangle \varphi_q^*(rt) \varphi_p(r't') dr dr',
\end{aligned} \tag{2.13}$$

onde T é o operador de ordenação de Wick e $\langle \Psi_n | T(\psi(rt) \psi^\dagger(r't')) | \Psi_0 \rangle \equiv \chi_n(rt, r't')$ é chamada *amplitude de Bethe-Salpeter*.

A *função resposta linear generalizada* é definida como ²:

$$R(12, 1'2') \equiv \left. \frac{\delta G_1(11')}{\delta U(2'2)} \right]_{U=0}. \tag{2.14}$$

Define-se a função de Green de 2-partículas como:

$$G_2(12, 1'2') \equiv i^{-2} \langle \Psi_0 | T(\psi(1) \psi(2) \psi^\dagger(2') \psi^\dagger(1')) | \Psi_0 \rangle. \tag{2.15}$$

As duas grandezas acima estão relacionadas através de:

$$R(12, 1'2') = -[G_2(12, 1'2') - G_1(1, 1') G_1(2, 2')]. \tag{2.16}$$

Usaremos ³:

²O símbolo δ indica a derivada funcional.

³Veja a eq.(2.12) na ref.[45].

$$\frac{\delta G_1(11')}{\delta U(2'2)} = G_1(12')G_1(21') + \int d3d3'G_1(13)\frac{\delta \Sigma(33')}{\delta U(2'2)}G_1(3'1'). \quad (2.17)$$

Mas:

$$\frac{\delta \Sigma(33')}{\delta U(2'2)} = \int d4d4'\frac{\delta \Sigma(33')}{\delta G_1(4'4)}\frac{\delta G_1(4'4)}{\delta U(2'2)} = \int d4d4'\Xi(34, 3'4')R(4'2, 42'), \quad (2.18)$$

onde usamos a definição de *potencial generalizado* [49]:

$$\Xi(34, 3'4') \equiv \left. \frac{\delta \Sigma(33')}{\delta G_1(4'4)} \right]_{U=0}. \quad (2.19)$$

Portanto:

$$R(12, 1'2') = G_1(12')G_1(21') + \int d3d3'd4d4'G_1(13)G_1(3'1')\Xi(34, 3'4')R(4'2, 42'). \quad (2.20)$$

Com esta expressão deduzida, podemos facilmente encontrar a amplitude de Bethe-Salpeter $\chi_n(11')$. Basta usar os operadores de Gell-Mann e Low [50] definidos como ⁴:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} f(t) &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{T} \int_T^{2T} f(t) dt, \\ dn &= \int dr_2 \chi_0^n(22^+) \chi_n^0(22^+), \end{aligned} \quad (2.21)$$

⁴O índice superior "++" indica $t = t_2 + \delta$, onde δ é um número infinitesimal. Ele é usado para efeito de ordenação temporal.

na eq.(2.20), para obter:

$$\chi_n(11') = \int d3d3'd4d4' G_1(13)G_1(3'1')\Xi(34,3'4')\chi_n(4'4). \quad (2.22)$$

Usando as identidades:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow +\infty} \int G_1(rt, r_1 t_1) \varphi_q^*(rt) dr &= \frac{1}{i} f_q^{(-)}(r_1 t_1), \\ \lim_{t' \rightarrow -\infty} \int G_1(r_2 t_2, r' t') \varphi_p(r' t') dr' &= \frac{1}{i} f_p^{(+)}(r_2 t_2), \end{aligned} \quad (2.23)$$

e substituindo a eq.(2.22) em (2.13), chegamos a:

$$S_{0p,nq} = \frac{1}{i^2} \int f_q^{(-)*}(1) f_p^{(+)}(2) \Xi(13, 24) \chi_n(4, 3) d1 d2 d3 d4. \quad (2.24)$$

2.3 Espalhamento a partir de um estado excitado

Analogamente aos casos anteriores, a matriz S é escrita como:

$$\begin{aligned} S_{nq,mp} &= \lim_{t \rightarrow +\infty, t' \rightarrow -\infty} \langle \psi_n | a_q(t) a_p^\dagger(t') | \psi_m \rangle \\ &= \lim_{t \rightarrow +\infty, t' \rightarrow -\infty} \int dr_1 dr'_1 \varphi_q^*(1) \varphi_p(1') \chi_m^n(11'), \end{aligned} \quad (2.25)$$

onde $|\psi_m\rangle$ denota o estado inicial e:

$$\chi_m^n(11') \equiv \langle \psi_n | T(\psi(1)\psi^\dagger(1')) | \psi_m \rangle \quad (2.26)$$

é a amplitude de *Bethe-Salpeter*.

Vamos definir:

$$R(123, 1'2^+3^+) \equiv \left. \frac{\delta^2 G_1(11')}{\delta U(2)\delta U(3)} \right]_{U=0}. \quad (2.27)$$

Usando a eq.(2.20) e derivando uma vez:

$$\begin{aligned} R(123, 1'2^+3^+) &\equiv R(13, 23^+)G_1(21') + G_1(12')R(23, 1'3^+) + \\ &+ \int d4d4'd5d5'[R(13, 43^+)G_1(4', 1') + G_1(1, 4)R(4'3, 1'3^+)]\Xi(45, 4'5')R(5'2, 52^+) \\ &+ \int d4d4'd5d5'G_1(14)G_1(4'1')\Xi(45, 4'5')R(5'23, 52^+3^+). \end{aligned} \quad (2.28)$$

Aplicando a operação de Gell-Mann e Low, obtemos:

$$\begin{aligned} \chi_m^n(11') &= i^{-1} \int d2d2'd3d3'[\chi_0^m(12')G_1(21') + G_1(12')\chi_0^m(21')]\Xi(2'3', 23)\chi_n^0(33') \\ &+ \int d2d2'd3d3'G_1(12')G_1(21')\Xi(2'3', 23)\chi_m^n(33'). \end{aligned} \quad (2.29)$$

Define-se:

$$\begin{aligned} f_q^{m(-)*}(2') &\equiv \lim_{t_1 \rightarrow \infty} \int dr_1 \chi_0^m(12')\varphi_q^*(1), \\ f_p^{m(+)}(2) &\equiv \lim_{t'_1 \rightarrow \infty} \int dr'_1 \chi_0^m(21')\varphi_p(1'). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Substituindo as equações acima na eq.(2.26), obtemos:

$$\begin{aligned}
S_{nq,mp} = & - \int d2d2'd3d3' [f_q^{m(-)*}(2')f_p^{(+)}(2) + f_q^{(-)*}(2')f_p^{m(+)}(2)]\Xi(2'3',23)\chi_n^0(33') \\
& - \int d2d2'd3d3' f_q^{(-)*}(2')f_p^{(+)}(2)\Xi(2'3',23)\chi_m^n(33'). \quad (2.31)
\end{aligned}$$

Na aproximação de Muitos Corpos Primeira Ordem, usamos $G_1(11')$ na aproximação de Hartree-Fock e:

$$\begin{aligned}
\Xi(2'3',23) &= \frac{\delta \sum_{HF}(2'2)}{\delta U(33')} \\
&= i[\delta(2'-3)\delta(3'-2) - \delta(2'-2)\delta(3'-3)]V(2'-3'). \quad (2.32)
\end{aligned}$$

É conveniente separar a parte espacial da parte temporal. Usa-se que ⁵:

$$\begin{aligned}
f_p^{(+)}(2) &= e^{-i\epsilon_p t_2} f_p^{(+)}(r_2), \\
f_q^{(-)*}(2') &= e^{-i\epsilon_q t'_2} f_q^{(-)*}(r'_2), \\
f_p^{m(+)}(2) &= e^{-i(\epsilon_p + \omega_m) t_2} f_p^{m(+)}(r_2), \\
f_q^{m(-)*}(2') &= e^{i(\epsilon_q - \omega_m) t'_2} f_q^{m(-)*}(r'_2), \quad (2.33)
\end{aligned}$$

onde ϵ_p , ϵ_q e ω_m são as energias do elétron incidente, do elétron espalhado e a energia de excitação.

Da eq.(2.32) com as eqs.(2.33) em (2.31), conseguimos determinar a matriz T:

⁵Para maiores detalhes, o leitor interessado deverá consultar a ref.[48].

$$\begin{aligned}
T_{nq,mp} = & \int dr_2 dr'_2 dr_3 dr'_3 \left[f_q^{m(-)*}(r'_2) f_p^{(+)}(r_2) + f_q^{(-)*}(r'_2) f_p^{m(+)}(r_2) \right] \\
& \times W(r'_2 r'_3, r_2 r_3) \tilde{\chi}_n(r'_3, r_3) \\
& + \int dr_2 dr'_2 dr_3 dr'_3 f_q^{(-)*}(r'_2) f_p^{(+)}(r_2) W(r'_2 r'_3, r_2 r_3) \chi_m^n(r'_3, r_3), \quad (2.34)
\end{aligned}$$

onde $\tilde{\chi}_n$ é χ_n^0 sem a parte temporal.

Sabendo que:

$$W(r'_2 r'_3, r_2 r_3) = [\delta(r_2 - r'_2) \delta(r_3 - r'_3) - \delta(r_2 - r'_3) \delta(r_3 - r'_2)], \quad (2.35)$$

finalmente chegamos a:

$$\begin{aligned}
T_{nq,mp} = & \int dr_2 dr_3 \left[f_q^{m(-)*}(r_2) f_p^{(+)}(r_2) + f_q^{(-)*}(r_2) f_p^{m(+)}(r_2) \right] V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \tilde{\chi}_n(r_3, r_3) \\
& - \int dr_2 dr_3 \left[f_q^{m(-)*}(r_3) f_p^{(+)}(r_2) + f_q^{(-)*}(r_3) f_p^{m(+)}(r_2) \right] V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \tilde{\chi}_n(r_2, r_3) \\
& + \int dr_2 dr_3 f_q^{(-)*}(r_2) f_p^{(+)}(r_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \chi_m^n(r_3, r_3) \\
& - \int dr_2 dr_3 f_q^{(-)*}(r_3) f_p^{(+)}(r_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \chi_m^n(r_2, r_3). \quad (2.36)
\end{aligned}$$

Resultados preliminares de aplicação desta teoria mostram que para o estado inicial 2^3S , de nosso interesse, a contribuição devido aos dois primeiros termos pode ser desprezada [48]. O primeiro devido a uma regra de spin e o segundo por sua contribuição ser muito pequena (menor que 5 %). Assim neste trabalho, nós vamos tratar apenas com o terceiro e o quarto termos ⁶ desta expressão. Portanto:

⁶Esses termos são chamados de "direto" e "de troca", respectivamente.

$$\begin{aligned}
T_{nq,mp}^D &= \int dr_2 dr_3 f_q^{(-)*}(r_2) f_p^{(+)}(r_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \chi_m^n(r_3, r_3), \\
T_{nq,mp}^E &= - \int dr_2 dr_3 f_q^{(-)*}(r_3) f_p^{(+)}(r_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \chi_m^n(r_2, r_3).
\end{aligned} \tag{2.37}$$

Para eliminar a dependência no spin, usa-se que:

$$f_p^{(+)}(r_2) = f_p^{(+)}(\vec{r}_2) \eta_{M_p}(\sigma_2), \tag{2.38}$$

$$f_q^{(-)}(r_2) = f_q^{(-)}(\vec{r}_2) \eta_{M_q}(\sigma_2), \tag{2.39}$$

$$\chi_m^n(r_2, r_3) = \sum_{k,q} (-1)^{k-q} C_{qM_S^m M_S^n}^{kS^m S^n} \xi_{k,-q}(\sigma_2, \sigma_3) \chi_m^{n(k)}(\vec{r}_2, \vec{r}_3), \tag{2.40}$$

onde $\eta_m(\gamma)$ é função de spin:

$$\eta_m(\gamma) = \begin{cases} 1, & \sigma = m \\ 0, & \sigma \neq m, \end{cases} \tag{2.41}$$

$$\xi_{k,-q}(\sigma_2, \sigma_3) = \sum_{m_2, m_3} (-1)^{\frac{1}{2}+m_2} C_{-m_2 m_3 -q}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} k} \eta_{m_2}^*(\sigma_2) \eta_{m_3}(\sigma_3). \tag{2.42}$$

Na aproximação de Hartree-Fock:

$$\chi_m^{n(k)} = (-1)^{1+S_n} [(2S_m + 1)(2k + 1)]^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} k & S^m & S^n \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \varphi_{nL_n}^*(\vec{r}_1') \varphi_{mL_m}(\vec{r}_1'). \tag{2.43}$$

O termo direto é dado por:

$$T_{nq,mp}^D = \delta_{M_q, M_p} I_{nq,mp}^D, \tag{2.44}$$

onde:

$$I_{nq,mp}^D = \int d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 f_q^{(-)*}(\vec{r}_2) f_p^{(+)}(\vec{r}_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \chi_m^{n(0)}(\vec{r}_3, \vec{r}_3). \quad (2.45)$$

Analogamente, o termo de troca é dado por:

$$\begin{aligned} T_{nq,mp}^E &= \sum_{k,q} (-1)^{k+q} [(2S_m + 1)(2k + 1)]^{\frac{1}{2}} C_{qM_S^m M_S^n}^{kS^m S^n} (-1)^{\frac{1}{2} + M_p} C_{-M_p M_q - q}^{\frac{1}{2} \frac{1}{2} k} \\ &\times \left\{ \begin{array}{ccc} k & S^m & S^n \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \right\} I_{nq,mp}^E, \end{aligned} \quad (2.46)$$

onde:

$$I_{nq,mp}^E = \int d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 f_q^{(-)*}(\vec{r}_3) f_p^{(+)}(\vec{r}_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \chi_m^n(\vec{r}_2, \vec{r}_3). \quad (2.47)$$

2.4 Obtenção das Amplitudes Irredutíveis

Para um problema de colisão de elétrons com alvos de spins no estado inicial e final não nulos, é muito mais conveniente trabalhar com amplitudes em que o spin total é definido. Assim, o número de amplitudes a serem calculadas diminuirá e nossas expressões ficarão mais simplificadas.

Para obter estas amplitudes vamos utilizar a relação [51]:

$$f_{m_1 m_2; m_3 m_4} = \sum_{S, M_S} C_{m_1 m_2 M_S}^{\frac{1}{2} S_m S} C_{m_3 m_4 M_S}^{\frac{1}{2} S_n S} f^{(S)}, \quad (2.48)$$

onde $m_1(m_3)$ é o spin do elétron incidente (espalhado) e $m_2(m_4)$ é o spin do alvo

inicial (final). É fácil notar que se S_m ou S_n for nulo, o problema fica muito simplificado.

Para excitações do tipo $m^3S \rightarrow n^3L$ onde $S_m = S_n = 1$, nós precisamos de duas amplitudes, $f^{(\frac{1}{2})}$ e $f^{(\frac{3}{2})}$. Para obter estas amplitudes nós calculamos explicitamente duas amplitudes de spin ($f_{\frac{1}{2}1;\frac{1}{2}1}$ e $f_{\frac{1}{2}1;\frac{1}{2}0}$) e com o auxílio da eq.(2.48) obtemos $f^{(\frac{1}{2})}$ e $f^{(\frac{3}{2})}$:

$$\begin{aligned} f^{(\frac{1}{2})} &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_f}{k_i}} \left(I_{nq,mp}^D + \frac{1}{2} I_{nq,mp}^E \right), \\ f^{(\frac{3}{2})} &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_f}{k_i}} \left(I_{nq,mp}^D - I_{nq,mp}^E \right). \end{aligned} \quad (2.49)$$

2.5 Expansão em Ondas Parciais

Para a expansão em ondas parciais usaremos:

$$V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) = \frac{1}{r_{23}} = \sum_{k,m_k} \frac{4\pi}{(2k+1)} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} Y_{km_k}(\Omega_2) Y_{km_k}^*(\Omega_3), \quad (2.50)$$

$$f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{r}) = \sum_{l,m} \frac{4\pi}{r} i^l e^{\pm i\delta_l(k)} P_{kl}(r) Y_{lm}(\Omega_r) Y_{lm}^*(\Omega_k), \quad (2.51)$$

onde o comportamento assintótico de P_{kl} é:

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} P_{kl}(r) = \frac{1}{k} \text{sen} \left(kr - \frac{1}{2} l\pi + \delta_l(k) \right). \quad (2.52)$$

2.5.1 Expansão do Termo Direto

Vamos fazer a expansão em ondas parciais do termo direto:

$$\begin{aligned}
I_{nq,mp}^D &= \int d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 f_q^{(-)*}(\vec{r}_2) f_p^{(+)}(\vec{r}_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \chi_m^n(\vec{r}_3, \vec{r}_3) \\
&= \sum_{l'm'} \sum_{l''m''} \sum_{km_k} (4\pi)^3 \frac{i^{l'''-l'}}{(2k+1)} \int d\Omega_2 Y_{l'm'}^* Y_{l''m''} Y_{km_k} \int d\Omega_3 Y_{km_k}^* Y_{L_n M_n}^* Y_{00} \\
&\quad \times I^k(ql', pl''; nL_n, 2S) Y_{l''m''}^*(\Omega_p) Y_{l'm'}(\Omega_q) e^{i(\delta_{l''}(p) + \delta_{l'}(q))}, \tag{2.53}
\end{aligned}$$

onde:

$$I^k(ql', pl''; nL_n, 2S) = \int dr_2 dr_3 \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{ql'}(r_2) P_{pl''}(r_2) P_{nL_n}(r_3) P_{2S}(r_3). \tag{2.54}$$

Usaremos:

$$\int d\Omega_2 Y_{l'm'}^* Y_{l''m''} Y_{km_k} = \left[\frac{(2k+1)(2l''+1)}{4\pi(2l'+1)} \right]^{\frac{1}{2}} C_{m''m_k m'}^{l'''kl'} C_{000}^{l'''kl'}, \tag{2.55}$$

onde $C_{m''m_k m'}^{l'''kl'}$ é o coeficiente de Clebsch-Gordon.

Tomamos o feixe incidente na direção z e a colisão ocorrendo no plano x-z. Isto acarreta, $\phi_q = \phi_p = \theta_p = 0$. Logo:

$$\begin{aligned}
I_{nq,mp}^D &= \sum_{l'l''} 4\pi i^{l'''-l'} \frac{(2l''+1)}{(2L_n+1)^{\frac{1}{2}}} e^{i(\delta_{l''}(p) + \delta_{l'}(q))} C_{0M_n M_n}^{l'''L_n l'} C_{000}^{l'''L_n l'} I^{L_n}(pl'', ql'; nL_n, 2S) \\
&\quad \times (-1)^{(|M_n|-M_n)/2} (-1)^{M_n} \left[\frac{(l'-|M_n|)!}{(l'+|M_n|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_{l'}^{|M_n|}(\cos\theta_q). \tag{2.56}
\end{aligned}$$

2.5.2 Termo de Troca

Analogamente, vamos calcular o termo de troca:

$$\begin{aligned}
I_{nq,mp}^E &= \int d\vec{r}_2 d\vec{r}_3 f_q^{(-)*}(\vec{r}_3) f_p^{(+)}(\vec{r}_2) V(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \chi_m^n(\vec{r}_2, \vec{r}_3) \\
&= \sum_{l''m''} \sum_{l'm'} \sum_{k,m_k} (4\pi)^3 \frac{i^{l''-l'}}{(2k+1)} e^{i(\delta_{l''}(p)+\delta_{l'}(q))} \int d\Omega_2 Y_{l''m''}^* Y_{km_k} Y_{L_n M_n}^* \\
&\quad \times \int d\Omega_3 Y_{l'm'}^* Y_{km_k}^* Y_{00} I^k(ql', pl''; M_{L_n}, 2S) \\
&\quad \times Y_{L_n M_n}(\Omega_q) Y_{00}(\Omega_p), \tag{2.57}
\end{aligned}$$

onde:

$$I^k(pl'', nL_n; ql', 2S) = \int dr_2 dr_3 \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{pl''}(r_2) P_{nL_n}(r_2) P_{ql'}(r_3) P_{2S}(r_3). \tag{2.58}$$

Então:

$$\begin{aligned}
I_{nq,mp}^E &= \sum_{l''l'} 4\pi i^{l''-l'} e^{i(\delta_{l''}(p)+\delta_{l'}(q))} \frac{(2l''+1)}{(2l'+1)} (2L_n+1)^{\frac{1}{2}} I^{l''}(pl'', nL_n; ql', 2S) \\
&\quad \times C_{000}^{l''L_n l'} C_{0M_n M_n}^{l''L_n l'} (-1)^{-M_n} (-1)^{(|M_n|-M_n)/2} \\
&\quad \times \left[\frac{(l' - |M_n|)!}{(l' + |M_n|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_{l'}^{|M_n|}(\cos\theta_q). \tag{2.59}
\end{aligned}$$

Capítulo 3

Alinhamento e Orientação

3.1 Introdução

A excitação de um *ensemble* de partículas (átomos ou núcleos) pode ser conseguida de várias maneiras: interação com campos externos, absorção de radiação, impacto de outras partículas, e outras. Estamos interessados na situação onde o impacto eletrônico sobre um *ensemble* de átomos é capaz de promover a excitação de um *sub-ensemble*. Observando o elétron espalhado (fig.3.1a) em coincidência com o fóton proveniente da deexcitação do *sub-ensemble* atômico teremos informações sobre o estado criado pela colisão.

Esse tipo de experiência, denominada de **Coincidência Elétron-Fóton**, é análoga ao fenômeno do relâmpago e do trovão: o fóton é observado antes do elétron espalhado que causou a excitação.

A detecção simultânea de elétrons e fótons quebra a simetria cilíndrica do espalhamento e permite a obtenção de novas grandezas físicas. A análise teórica, feita por Fano e Macek [53], sobre esse tipo de experiência, separou os aspectos

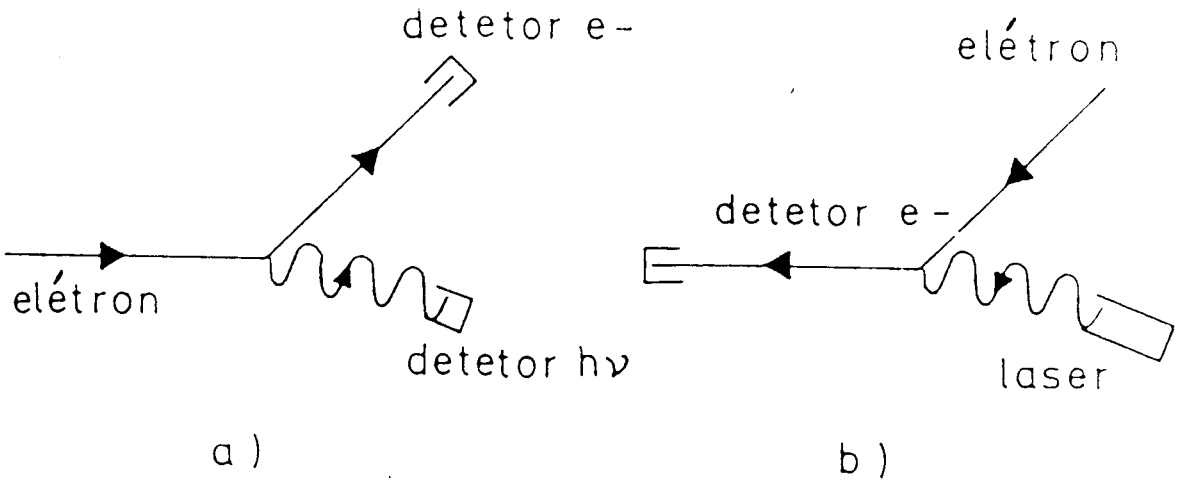


Figura 3.1: a) Esquema de uma experiência de Coincidência Elétron-Fóton; b) Colisão com inversão temporal estudada por Hertel [52].

geométricos dos aspectos dinâmicos e mostrou que a distribuição angular da intensidade do fóton emitido poderia ser analisada em termos do alinhamento (forma da nuvem eletrônica excitada e sua direção de alinhamento no espaço) e a orientação (momento angular transferido ao átomo durante o processo de colisão).

Neste capítulo nós resumiremos a teoria de Fano e Macek para as experiências de coincidência elétron-fóton junto com o formalismo da matriz densidade para a obtenção das grandezas dinâmicas. Apresentaremos a aplicação desses formalismos para excitações do tipo $^3S \rightarrow ^3P$. O estado 2^3S do átomo de He e o 3^2P do átomo de sódio são os de maior interesse na área de excitação a partir de um estado excitado.

3.2 Experiência de Coincidência Elétron-Fóton

3.2.1 Histórico

As primeiras experiências de Coincidência Elétron-Fóton foram feitas por Read *et al*, que aplicando técnicas há muito tempo conhecidas em Física Nuclear, investigaram o tempo de vida de estados atômicos e moleculares [54] e a polarização de limiar [55]. Como o ângulo de espalhamento estudado era 0° (mesma direção do feixe incidente) as experiências ainda possuíam simetria axial. Porém, em 1973, Eminyan *et al* [56] realizaram experimentos envolvendo a excitação dos estados 2^1P e 3^1P do átomo de hélio, onde o elétron foi espalhado em diversos ângulos possibilitando a análise ângulo *versus* amplitude. O número de informações adicionais que eram obtidas, motivou o aparecimento de pesquisas com outros átomos: hidrogênio, neônio, argônio, kriptônio, xenônio, mercúrio e sódio [57].

Em 1974, Hertel *et al* [52] desenvolveram um método experimental alternativo usando lasers *cw* de corante para excitar átomos de sódio (fig.3.1b). Nesse método são criados o alinhamento e a orientação desejados por meio de um bombeamento óptico e a seção de choque diferencial é analisada em função dessas grandezas (experimento com inversão temporal). A teoria para o novo método foi desenvolvida Macek e Hertel [58].

A interpretação teórica das experiências de Coincidência Elétron-Fóton teve seu início com o trabalho de Macek e Jaecks [59], em 1971, onde eles procuram traduzir para o formalismo da Física Atômica os experimentos que já eram conhecidos em Física Nuclear (veja também o trabalho contemporâneo de Wykes [60] sobre o assunto). Em 1973, Fano e Macek [53] apresentaram uma teoria, colocando de maneira compacta e clara, o problema da anisotropia gerada no processo de colisão. A partir de então, tornou-se corrente o uso dos parâmetros de alinhamento e orientação para quantificar essa anisotropia. Trabalhos de revisão importantes sobre o assunto foram feitos por Blum e Kleinpoppen [61] e Andersen, Gallagher e Hertel [57].

Até 1985, praticamente todos os experimentos se referiam às transições entre estados eletrônicos óticamente permitidas. Tais estados foram escolhidos porque possuem as maiores seções de choque e assim provocam grande número de elétrons espalhados, principalmente para ângulos pequenos. Williams e Humphrey [62] e Silim *et al* [63] começaram a tratar com experiências de coincidência elétron-fóton para excitações não permitidas pela interação dipolo elétrico. A análise teórica da excitação dos estados n^3P do He ($n=2,3,\dots$) a partir do estado 1^1S foi feita por Eminyan *et al* [64], Blum e Kleinpoppen [61] e por Humphrey *et al* [65]. Esses autores mostraram que, como no caso do n^1P ($n=2,3,\dots$) as experiências de Coincidência Elétron-Fóton dão informação sobre a fase relativa da amplitude de espalhamento do subnível magnético, ou equivalentemente, sobre o momento angular transferido e o ângulo de orientação da nuvem eletrônica. Humphrey *et al* [65] apresentaram resultados experimentais para parâmetros de coerência e correlação para os estados 3^3P , 3^3D e 3^1D do hélio, através da análise dos parâmetros de Stokes.

3.2.2 Configuração Experimental

O primeiro passo para a realização de um experimento de coincidência elétron-fóton é a análise de um espectro de perda de energia do elétron (fig.3.2) a fim de saber quais estados são excitados via colisão. Assim, o analisador de elétrons deverá ser sintonizado para uma dada perda de energia, de modo que estaremos sempre estudando a mesma transição. Fixada a energia que será medida e a posição do detetor de elétrons, deve-se calibrar o dispositivo eletrônico que provoca o retardo entre a detecção do fóton e do elétron para que seja obtido o máximo de coincidência (fig.3.3).

Como resultado experimental obtemos as **curvas de correlação**, que representam a intensidade dos fótons nos diversos ângulos para uma posição fixa do detetor de elétrons. Essa intensidade possui caráter senoidal (veja a eq.(3.5)), tornando possível a determinação de dois parâmetros independentes. Uma outra maneira de se obter essas informações é através da medida dos parâmetros de Stokes (veja eq.(6.1.1) na ref. [66]). Entretanto, por limitações experimentais, a obtenção dos

parâmetros de Stokes nem sempre é fácil, dependendo do comprimento [61]. Daí a importância das curvas de correlação angular.

As experiências de correlação podem ser feitas levando-se em conta os spins do elétron e do alvo. Porém, neste trabalho, vamos assumir que e átomos encontram-se não polarizados e desprezar a interação spin-órbita elétron e átomo.

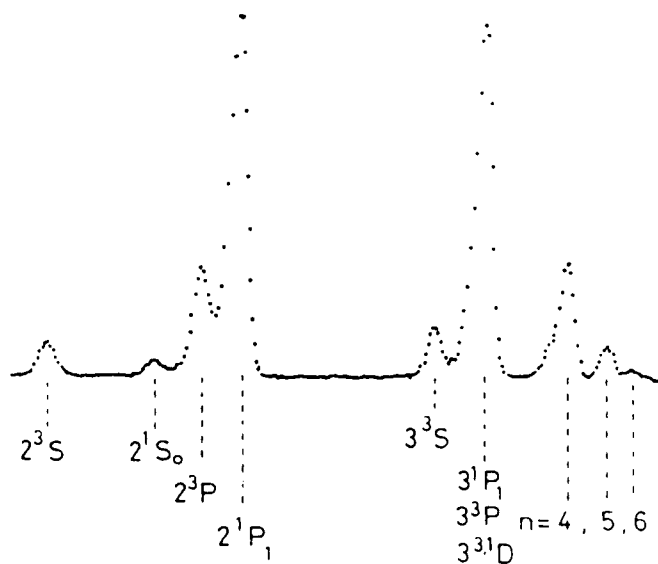


Figura 3.2: Espectro de perda de energia por impacto eletrônico no átomo [61].

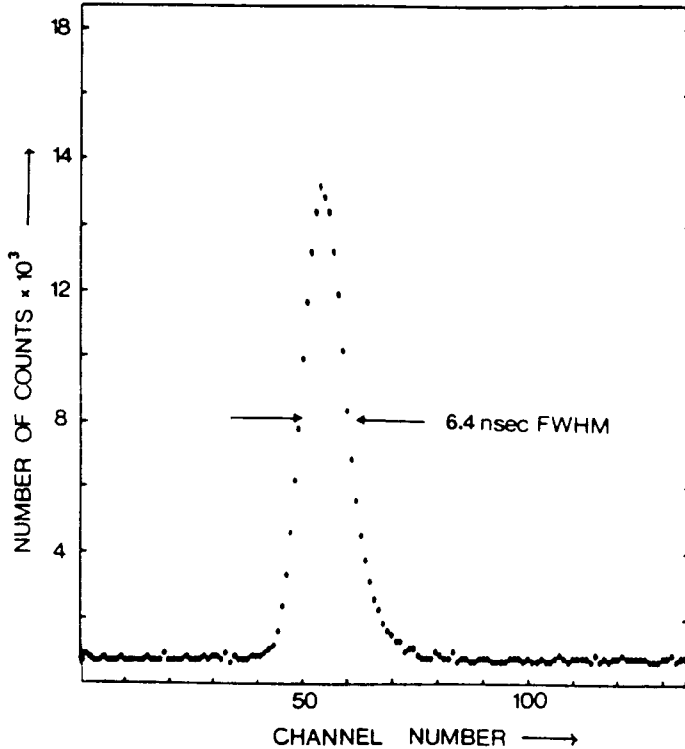


Figura 3.3: Espectro de coincidência retardada para a transição $2^1P \rightarrow 1^1S$ do hélio para uma energia do elétron de 80 eV, ângulo de espalhamento $\theta_e = 16^\circ$ e ângulo do fóton $\theta_\gamma = 126^\circ$. Tempo de acumulação ~ 12 horas [67].

3.2.3 A Teoria de Fano-Macek

O processo da colisão faz com que o átomo (ou molécula) excitado fique em um estado anisotrópico. Através do estudo da polarização e distribuição angular da luz proveniente da deexcitação, teremos informações sobre essa anisotropia. A essência da teoria de Fano e Macek é separar os aspectos dinâmicos dos aspectos geométricos relacionados com a colisão. Isto ficará muito mais claro, após recordarmos as idéias principais no desenvolvimento algébrico da teoria.

A intensidade I medida por um detector ideal com vetor de polarização \hat{e} e

operador transição dipolo elétrico \vec{r} é dada por:

$$I = C \sum_{m_f} \langle (i' | \hat{e} \cdot \vec{r} | f) (f | \hat{e}^* \cdot \vec{r} | i) \rangle, \quad (3.1)$$

onde m_f é o número quântico magnético do estado final, $\langle \rangle$ indica média sobre m_i (número quântico magnético inicial) e:

$$C = \frac{e^2 w_{fi}^2}{2\pi c^3 R^2},$$

contém a frequência da luz w_{fi} e a distância R do detetor ao átomo.

A equação acima é transformada para que a dependência do detetor de fótons com a posição e a polarização fique separada da anisotropia do estado excitado criado. O problema será resolvido no chamado **sistema do detetor**. Os fótons emitidos podem ser observados na direção do eixo $\hat{\zeta}$ que tem coordenadas θ e ϕ no sistema de colisão (fig.3.4). O vetor de polarização dos fótons \hat{e} é restrito à direção perpendicular à direção de propagação e $\hat{\xi}$ e $\hat{\eta}$ são os vetores que varrem esse plano. Neste sistema, $\hat{e} \equiv (\cos\beta, i\sin\beta, 0)$, onde $\beta = 0$ e $\beta = \pi/4$ determinam a *polarização linear* e a *polarização circular*, respectivamente. Reescrevendo a eq.(3.1) nesse sistema, é fácil ver que:

$$\begin{aligned} I = & C \frac{1}{3} \left\{ \langle (i' | \vec{r}' \cdot \vec{r} P_f(\vec{r}', \vec{r}) | i) \rangle \right. \\ & - \frac{1}{2} \langle (i' | (3\zeta'\zeta - \vec{r}' \cdot \vec{r}) P_f(\vec{r}', \vec{r}) | i) \rangle \\ & + \frac{3}{2} \langle (i' | (\xi'\xi - \eta'\eta) P_f(\vec{r}', \vec{r}) | i) \rangle \cos 2\beta \\ & \left. + \frac{3}{2} \langle (i' | i^{-1}(\vec{r}' \times \vec{r}) \cdot \hat{\zeta} P_f(\vec{r}', \vec{r}) | i) \rangle \sin 2\beta \right\}, \quad (3.2) \end{aligned}$$

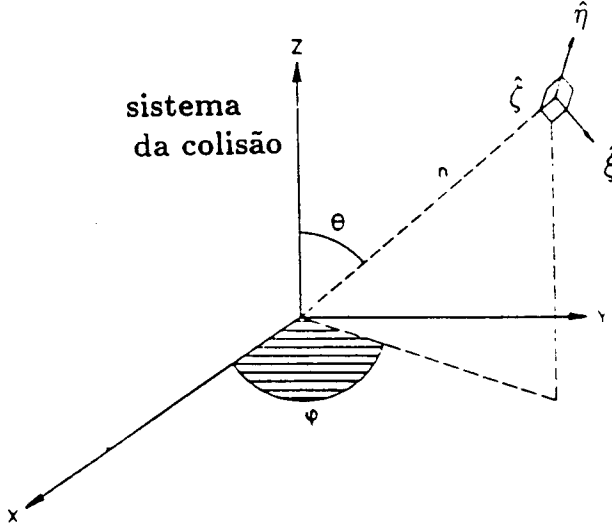


Figura 3.4: Sistema do detetor [66].

onde:

$$P_f(\vec{r}', \vec{r}) = \sum_{m_f} |f\rangle \langle f|.$$

Como cada termo na eq.(3.2) é proporcional ao valor médio de um operador do tipo tensor irredutível, podemos designá-los por S_{KQ} . Assim, $S_{00} = \vec{r}' \cdot \vec{r} P_f(\vec{r}', \vec{r})$ será um operador escalar, cuja média $S = \langle S_{00} \rangle$, será a média da emissão ponderada sobre todas as direções e polarizações.

O cálculo dos elementos S_{KQ} é feito através do operador irredutível momento angular T_{KQ} [53]. Usando o teorema de Wigner-Eckart é possível mostrar que:

$$\langle i' | S_{KQ} | i \rangle = \langle i' | T_{KQ} | i \rangle > \frac{\langle i || S_K || i \rangle}{\langle i || T_K || i \rangle}. \quad (3.3)$$

Ainda não sabemos o valor de $(i \parallel S_K \parallel i)$. Contudo é possível mostrar, por reacoplamento, que:

$$\begin{aligned} \frac{(i \parallel S_K \parallel i)}{(i \parallel T_K \parallel i)} &= (-1)^{j_i - j_f} \frac{\left\{ \begin{matrix} j_i & j_i & K \\ 1 & 1 & j_f \end{matrix} \right\}}{\left\{ \begin{matrix} j_i & j_i & K \\ 1 & 1 & j_i \end{matrix} \right\}} \frac{(i \parallel S_0 \parallel i)}{(i \parallel T_0 \parallel i)} \\ &= h_K(j_i, j_f) \frac{(i \parallel S_0 \parallel i)}{(i \parallel T_0 \parallel i)}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

ou seja, o único valor que realmente precisamos é $(i \parallel S_0 \parallel i)$, que como sabemos é S , por definição. De posse desses resultados é possível, por meio de substituições, obter:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{3}CS \left\{ 1 - \frac{1}{2}h_2(j_i, j_f) \frac{\langle i' \mid 3J_{\zeta^2} - \vec{J}^2 \mid i \rangle}{j_i(j_i + 1)} \right. \\ &\quad + \frac{3}{2}h_2(j_i, j_f) \frac{\langle i' \mid J_{\xi^2} - J_{\zeta^2} \mid i \rangle}{j_i(j_i + 1)} \cos 2\beta \\ &\quad \left. + \frac{3}{2}h_1(j_i, j_f) \frac{\langle i' \mid J_{\zeta} \mid i \rangle}{j_i(j_i + 1)} \sin 2\beta \right\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

que pode ser simplificada para:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{3}CS \left\{ 1 - \frac{1}{2}h_2(j_i, j_f) A_0^{det} \right. \\ &\quad + \frac{3}{2}h_2(j_i, j_f) A_{2+}^{det} \cos 2\beta \\ &\quad \left. + \frac{3}{2}h_1(j_i, j_f) O_0^{det} \sin 2\beta \right\}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde:

$$A_0^{det} = \frac{\langle i' | 3J_{\zeta^2} - \vec{J}^2 | i \rangle}{j_i(j_i + 1)}, \quad (3.7)$$

$$A_{2+}^{det} = \frac{\langle i' | J_{\xi^2} - J_{\zeta^2} | i \rangle}{j_i(j_i + 1)}, \quad (3.8)$$

são chamadas componentes do tensor de alinhamento A, definidas no sistema do detetor, e:

$$O_0^{det} = \frac{\langle i' | J_{\zeta} | i \rangle}{j_i(j_i + 1)} \quad (3.9)$$

é uma componente do vetor de orientação. O cálculo destas grandezas nesta forma é complexa, pois os operadores estão definidos num sistema de referência e os estados tensoriais noutro. Por isso, transforma-se os operadores do sistema do detetor para o sistema do laboratório. Assim, a Teoria de Fano-Macek, separa os aspectos dinâmicos dos aspectos geométricos. No sistema de colisão, esses parâmetros, que independem das coordenadas do detetor de fótons, valem:

$$A_0 = \frac{\langle 3L_z^2 - \vec{L}^2 \rangle}{L(L + 1)}, \quad (3.10)$$

$$A_{1+} = \frac{\langle L_x L_z + L_z L_x \rangle}{L(L + 1)}, \quad (3.11)$$

$$A_{2+} = \frac{\langle L_x^2 - L_y^2 \rangle}{L(L + 1)}, \quad (3.12)$$

$$O_{-1} = \frac{\langle L_y \rangle}{L(L + 1)}. \quad (3.13)$$

No caso mais simples, onde não detectamos as partículas espalhadas, isto é, apenas a polarização é analisada, temos simetria cilíndrica em torno do eixo-z. O tensor de alinhamento possui apenas uma componente não nula A_0 . Também é nulo o vetor de orientação, por ser um vetor axial (pseudovetor).

3.3 Matriz Densidade

O estado anisotrópico causado pela colisão determina os 4 parâmetros descritos pelas eqs.(1.10-1.13). Esses parâmetros dependem de médias de expressões contendo momentos angulares. Uma maneira eficiente para o cálculo dessas médias é usar o formalismo da matriz densidade ρ . A média de um operador $\langle Q \rangle$ é dada pela fórmula $\langle Q \rangle = \text{tr}(\rho Q)/\text{tr}\rho$, onde $\text{tr}M$ significa o *traço* de M . Se o sistema tem momento angular definido L , esse método é bastante adequado, por sua simplicidade. Caso contrário, por exemplo, se tivermos um *ensemble* de partículas com momento angular L' e um segundo com momento angular L , que estão interagindo produzindo um momento angular total K e componente-z Q , o uso do método dos multipolos do estado torna-se imprescindível [61]. Como esse não é nosso caso, nos restringiremos à matriz densidade. A seguir, mostraremos a definição formal de matriz densidade e suas principais propriedades.

Vamos considerar uma mistura de estados $|\psi_n\rangle$ ($n=1,2,\dots$), preparados independentemente, com pesos estatísticos W_n . O **operador densidade**, também chamado **operador estatístico**, é definido como:

$$\rho = \sum_n W_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|. \quad (3.14)$$

Vamos escrever os $|\psi_n\rangle$ como combinação linear de estados $|\phi_i\rangle$ ($i=1,2,\dots$) que formam uma base:

$$| \psi_n \rangle = \sum_m a_m^n | \phi_m \rangle . \quad (3.15)$$

Então:

$$\langle \phi_i | \rho | \phi_j \rangle = \sum_n W_n a_i^n a_j^{n*} \quad (3.16)$$

é a representação matricial do operador ρ .

3.3.1 Propriedades

Usando a base atômica $| LM \rangle$, apenas para maior clareza, listaremos algumas propriedades gerais da matriz densidade.

1. A matriz ρ é hermitiana:

$$\langle LM | \rho | L'M' \rangle = \langle L'M' | \rho | LM \rangle^* . \quad (3.17)$$

2. Um elemento da diagonal é a probabilidade de encontrar o sistema no estado $| LM \rangle$:

$$\rho_{MM} = \sum_n W_n | a_M^n |^2 . \quad (3.18)$$

3. Como as probabilidades são números positivos, temos:

$$\rho_{MM} \geq 0.$$

4. O traço de ρ é constante, isto é, independe da representação.

5. O valor esperado de um operador Q é dado por:

$$\langle Q \rangle = \frac{\text{tr}(\rho Q)}{\text{tr} \rho}. \quad (3.19)$$

Como toda informação sobre o comportamento do sistema está contida no valor esperado dos operadores, a matriz densidade contém toda informação sobre o sistema.

6. A seção de choque diferencial do sistema é dada por:

$$\sigma = \text{tr} \rho = \sum_M \rho_{MM}. \quad (3.20)$$

7. A reflexão é obtida através de:

$$\langle LM' | \rho | LM \rangle = (-1)^{M'+M} \langle L - M' | \rho | L - M \rangle. \quad (3.21)$$

8. Um sistema em um estado puro é caracterizado por:

$$\text{tr}(\rho^2) = (\text{tr} \rho)^2. \quad (3.22)$$

9. As matrizes que descrevem um sistema antes e após uma transição, descritas por ρ_{in} e ρ_{out} e o operador transição T encontram-se relacionados por:

$$\rho_{out} = T \rho_{in} T^\dagger. \quad (3.23)$$

3.4 O Spin do Alvo

Uma vez que não estamos considerando os spins do elétron e do alvo, devemos discutir com cuidado como isso afeta a matriz densidade. Suponha que o átomo está no estado quântico inicial completamente caracterizado por $| M_i M_{S_0} \rangle$ e o

elétron por $|m_0\rangle$ ¹. Após a colisão os estados mudam para $|M_f M_{S_1}\rangle$ e $|m_1\rangle$, respectivamente. Para calcular explicitamente os elementos da matriz densidade, usaremos a eq.(3.23). Então:

$$\begin{aligned}
& \langle M'_f M'_{S_1} m'_1 | \rho_{out} | M_f M_{S_1} m_1 \rangle = \\
& = \sum_{\substack{M'_{S_0} m'_0 \\ M_{S_0} m_0}} \langle M'_f M'_{S_1} m'_1 | T | M'_i M'_{S_0} m'_0 \rangle \langle M'_i M'_{S_0} m'_0 | \rho_{in} | M_i M_{S_0} m_0 \rangle \\
& \quad \times \langle M_i M_{S_0} m_0 | T^\dagger | M_f M_{S_1} m_1 \rangle \\
& = \frac{1}{2(2S_0 + 1)} \sum_{M_{S_0} m_0} f(M'_f M'_{S_1} m'_1, M_{S_0} m_0) f(M_f M_{S_1} m_1, M_{S_0} m_0)^*, \quad (3.24)
\end{aligned}$$

onde usamos:

$$\langle M'_i M'_{S_0} m'_0 | \rho_{in} | M_i M_{S_0} m_0 \rangle = \frac{1}{2(2S_0 + 1)(2L_i + 1)} \delta_{M'_i M_i} \delta_{M'_{S_0} M_{S_0}} \delta_{m'_0 m_0}. \quad (3.25)$$

Esta matriz densidade significa que o feixe de elétrons e o alvo atômico estão numa distribuição estatística uniforme. . Deve-se somar sobre as componentes de spin do estado final do alvo e do elétron espalhado, pois não são observadas. O processo de emissão de luz, numa aproximação não relativística, só depende do momentum angular orbital. Por isso, a matriz densidade ficará:

¹ M_i e M_{S_0} (M_f e M_{S_1}) indicam os momentos magnéticos orbital e de spin antes (depois) da colisão.

$$\begin{aligned}
& \langle M' | \rho | M \rangle = \\
& = \sum_{M_{S_1} m_1} \langle M' M_{S_1} m_1 | \rho_{out} | M M_{S_1} m_1 \rangle \\
& = \frac{1}{2(2S_0 + 1)(2L_i + 1)} \sum_{\substack{M_{S_1} m_1 \\ M_{S_0} m_0}} f(M' M_{S_1} m_1, M_{S_0} m_0) f(M M_{S_1} m_1, M_{S_0} m_0)^* \\
& \equiv \langle f_{M'} f_M^* \rangle.
\end{aligned} \tag{3.26}$$

É conveniente escrever a equação acima de forma que a conservação total do spin fique evidente. Então:

$$\begin{aligned}
S &= S_0 \pm \frac{1}{2} = S_1 \pm \frac{1}{2}, \\
M_S &= M_{S_1} + m_1 = M_{S_0} + m_0,
\end{aligned} \tag{3.27}$$

onde S é o spin total do sistema elétron-alvo e M_S é sua componente- z . Observe que em uma transição tripleto-tripletto temos duas possibilidades distintas de spin total.

Podemos escrever as amplitudes de espalhamento como [51]:

$$f(M M_{S_1} m_1, M_{S_0} m_0) = \sum_{S M_S} C_{M_{S_1} m_1 M_S}^{S_1 \frac{1}{2} S} C_{M_{S_0} m_0 M_S}^{S_0 \frac{1}{2} S} f_M^S. \tag{3.28}$$

Usando a expressão acima e as relações de ortogonalidade para coeficientes de Clebsch-Gordan é fácil provar que:

$$\langle f_{M'} f_M^* \rangle = \frac{1}{2(2S_0 + 1)} \sum_S (2S + 1) f_{M'}^S f_M^{S*}. \tag{3.29}$$

Quando $S_0 = S_1 = 1$ (como no caso das transições ${}^3S \rightarrow {}^3P$) teremos $S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$. Logo, f_M^S dependerá do spin total e só conseguiremos observar médias em experiências que não levam em conta o spin. A situação é diferente para $S_0 = S_1 = 0$. Como consequência, $S = \frac{1}{2}$ e:

$$\langle f_{M'} f_M^* \rangle = f_{M'}^{\frac{1}{2}} f_M^{\frac{1}{2}*}. \quad (3.30)$$

Posteriormente, discutiremos com mais detalhes o papel da eq.(3.29) nas transições quando os spins inicial e final são iguais e quando são diferentes.

Substituindo a eq.(3.21) na eq.(3.29), obtemos a simetria:

$$\langle M' | \rho | -M \rangle = (-1)^M \langle M' | \rho | M \rangle. \quad (3.31)$$

As eqs.(3.17,3.21,3.31) serão importantes quando formos escrever os elementos da matriz densidade: elas diminuem o número de parâmetros desconhecidos que deverão ser medidos.

3.5 Alinhamento e Orientação para ${}^3S \rightarrow {}^3P$

Apresentaremos, a seguir, os cálculos feitos para os parâmetros de alinhamento e orientação para as transições ${}^3S \rightarrow {}^3P$. É importante notar que as expressões encontradas são válidas para qualquer estado tripleto, sendo que o estado inicial deverá ser considerado apenas quando calcularmos explicitamente os elementos da matriz densidade. Esses parâmetros já foram calculados para os estados 1P [61] e expressos em termos de σ , λ , χ , onde:

$$f_1 = -f_{-1} = |f_1| e^{i\chi},$$

$$\begin{aligned} |f_0|^2 &= \lambda\sigma, \\ \sigma &= 2|f_1|^2 + |f_0|^2. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Para estados 3P , partindo do estado fundamental 1S , as mesmas equações foram encontradas, devido à conservação do spin; obviamente, os parâmetros σ, λ, χ , por sua relação com as amplitudes de espalhamento f_M , terão outros valores. Por outro lado, se o estado inicial for 3S , teremos:

$$\langle f_{M'} f_M^* \rangle = \frac{1}{6} (2f_{M'}^{\frac{1}{2}} f_M^{\frac{1}{2}*} + 4f_{M'}^{\frac{3}{2}} f_M^{\frac{3}{2}*}). \quad (3.33)$$

ou seja, os elementos da matriz densidade agora serão médias. Isto faz com que o número de parâmetros desconhecidos aumente de 3 para 4. Portanto, as expressões para os parâmetros de alinhamento e orientação apresentadas são absolutamente gerais e englobam todos os casos já abordados pela literatura.

Vamos calcular os parâmetros de alinhamento e orientação para $^3S \rightarrow ^3P$. Para essas transições, a matriz densidade é dada por:

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle |f_{+1}|^2 \rangle & \langle f_1 f_0^* \rangle & \langle f_1 f_{-1}^* \rangle \\ \langle f_0 f_1^* \rangle & \langle |f_0|^2 \rangle & \langle f_0 f_{-1}^* \rangle \\ \langle f_{-1} f_1^* \rangle & \langle f_{-1} f_0^* \rangle & \langle |f_{-1}|^2 \rangle \end{pmatrix}, \quad (3.34)$$

onde a matriz foi construída usando-se a base atômica $|p_1\rangle, |p_0\rangle$ e $|p_{-1}\rangle$. Usando as eqs.(3.17,3.21,3.31) e mudando para uma notação mais compacta:

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_1 & \rho_{10} & -\rho_1 \\ \rho_{10}^* & \rho_0 & -\rho_{10}^* \\ -\rho_1 & -\rho_{10} & \rho_1 \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

onde:

$$\begin{aligned}\rho_{M'M} &= \langle f_{M'} f_M^* \rangle, \quad M' \neq M, \\ \rho_M &= \langle f_M f_M^* \rangle, \quad M' = M,\end{aligned}\tag{3.36}$$

ρ_M é a seção de choque diferencial para o subnível magnético M e $\rho_{M'M}$ é o termo de coerência.

Esta matriz densidade fornece:

$$A_0 = \frac{\rho_1 - \rho_0}{\sigma},\tag{3.37}$$

$$A_{1+} = \frac{\sqrt{2} \operatorname{Re}\{\rho_{10}\}}{\sigma},\tag{3.38}$$

$$A_{2+} = -\frac{\rho_1}{\sigma},\tag{3.39}$$

$$O_{-1} = -\frac{\sqrt{2} \operatorname{Im}\{\rho_{10}\}}{\sigma}.\tag{3.40}$$

O número de parâmetros desconhecidos é 4, a saber: $\operatorname{Re}\{\rho_{10}\}, \operatorname{Im}\{\rho_{10}\}, \rho_1$ e ρ_0 (ou σ , pois existe a relação $\sigma = \rho_0 + 2\rho_1$). A seção de choque diferencial σ poderá ser determinada por meio de outros experimentos. Então, a determinação completa dos elementos acima da matriz densidade é possível através de medidas de alinhamento e orientação. Como são 4 os parâmetros da Teoria de Fano e Macek e apenas 3 parâmetros livres na matriz densidade, então nem todos eles são independentes. As poucas medidas experimentais que foram realizadas até o momento para as transições $2^3S \rightarrow n^3P$ referem-se apenas a experimentos de *não coincidência* (onde os elétrons espalhados não são detectados). Como já vimos, este tipo de medidas apenas possibilita a obtenção de σ .

3.5.1 Autovalores da Matriz Densidade

Para entender melhor o "estado" criado pela colisão, nós vamos passar a matriz densidade do sistema de colisão para o sistema natural ². A matriz mudança de base é dada por:

$$\begin{pmatrix} -i/2 & -1/\sqrt{2} & i/2 \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ i/2 & 1/\sqrt{2} & i/2 \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Assim, a matriz ρ no sistema natural é dada por:

$$\rho^n = \frac{1}{\sigma} \begin{pmatrix} \frac{\sigma}{2} - Im\{\rho_{10}\}\sqrt{2} & 0 & \rho_1 - \frac{\rho_0}{2} - Re\{\rho_{10}\}\sqrt{2}i \\ 0 & 0 & 0 \\ \rho_1 - \frac{\rho_0}{2} + Re\{\rho_{10}\}\sqrt{2}i & 0 & \frac{\sigma}{2} + Im\{\rho_{10}\}\sqrt{2} \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

A vantagem de se trabalhar nesse sistema é que a matriz é mais esparsa. A diagonalização é imediata e produz:

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 + P^+ & 0 \\ 0 & 0 & 1 - P^+ \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

onde:

$$P^+ = \frac{2}{\sigma} \sqrt{\left(\rho_1 - \frac{\rho_0}{2}\right)^2 + 2 |\rho_{10}|^2}.$$

²No sistema natural, mais comum na descrição dos resultados experimentais, o eixo "z" é paralelo ao momento angular transferido, correspondendo ao eixo "y" do sistema de colisão [57].

A existência de dois autovalores não nulos na matriz densidade implica que, ao contrário do que acontece com transições entre estados singletos, o estado criado não é puro.

Com a eq.(3.42) podemos encontrar uma parametrização que é mais conveniente do ponto de vista experimental [57]:

$$\rho^n = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - P_3 & 0 & -P_l \exp(-2i\gamma) \\ 0 & 0 & 0 \\ -P_l \exp(2i\gamma) & 0 & 1 + P_3 \end{pmatrix}, \quad (3.44)$$

isso porque esses parâmetros se relacionam com grandezas físicas mensuráveis: o momento angular L_\perp , a polarização linear da nuvem P_l e o ângulo de alinhamento γ . Comparando (3.42) com (3.44):

$$P_3 = \frac{2\sqrt{2}Im\{\rho_{10}\}}{\sigma}, \quad (3.45)$$

$$\gamma = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{\sqrt{2}Re\{\rho_{10}\}}{\rho_1 - \rho_0/2} \right), \quad (3.46)$$

$$P_l = \frac{2}{\sigma} \left[\left(\rho_1 - \frac{\rho_0}{2} \right)^2 + 2 * Re^2\{\rho_{10}\} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.47)$$

3.6 Diferenças entre $S_0 = S_1 = 0$ e $S_0 = S_1 = 1$

A diferença no processo de excitação entre estados $^3S \rightarrow ^3P$ em comparação com $^1S \rightarrow ^1P$ é claramente visível na diagonalização da matriz densidade. Observamos que se a eq.(3.29) for usada para transições entre singletos, teremos:

$$|\rho_{10}|^2 = \rho_{10}\rho_{10}^* = f_1 f_0^* f_1^* f_0 = \rho_1 \rho_0. \quad (3.48)$$

Substituindo na eq.(3.43):

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\rho_1 + \rho_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.49)$$

que é a matriz densidade diagonalizada para singletos. Portanto, mostramos que os estados excitados n^3P a partir de 2^3S não são puros, ao contrário do que acontece com os estados n^3P a partir do estado fundamental. Na eq.(3.43) temos a superposição de dois estados que apareceram devido ao *exchange*. Um deles é representado por uma nuvem eletrônica bastante semelhante à que aparece no caso de transições entre singletos. Como vimos acima, essa nuvem se torna igual à dos singletos quando usamos a condição (3.48). Tudo isso acontece pois estamos utilizando um feixe de elétrons totalmente incoerente e o resultado final é um aumento no número de parâmetros desconhecidos na matriz densidade (3.35).

Capítulo 4

Aplicações

Neste capítulo apresentaremos os resultados da implementação numérica da FOMBT para o cálculo das seções de choque e dos parâmetros de alinhamento e orientação para as transições a partir do estado 2^3S do átomo de hélio . Os poucos resultados experimentais disponíveis se referem às transições $2^3S \rightarrow 2^3P, 3^3S$ e 3^3P , para energias do elétron espalhado de 15, 20 e 30 eV [29]. Compararemos nossos resultados com os de Ondas Distorcidas [25] e Eikonal Multicanal [23].

4.1 Implementação Numérica

Para obter as funções de onda dos estados ligados, utilizamos o programa MCHF-77 (*Multi-Configuration Hartree Fock*) de Charlotte Fröese-Fischer [68]. Calcula-se o estado fundamental do hélio na aproximação de Hartree-Fock. Para o estados excitados, usa-se a aproximação de Hartree-Fock com caroço congelado (orbital 1s). Passamos as funções de onda para uma grade quadrática utilizando uma Interpolação de Lagrange com 1000 pontos, para um alcance radial de 70u.a. O valor das funções após o truncamento é menor do que 10^{-7} . As energias de

estado	MCHF-77	C.Moore
2^3S	19.802	19.811
2^3P	21.225	20.955
3^3S	23.032	22.708
3^3P	23.356	22.997

Tabela 4.1: Energias em eV referentes aos 4 primeiros estados tripletos do átomo de hélio.

excitação utilizadas são as energias experimentais obtidas da tabela de C. Moore [69]. A comparação entre as energias experimentais e as fornecidas pelo programa MCHF-77 é mostrada na tabela (4.1).

As funções do contínuo foram obtidas na mesma grade numérica por um programa desenvolvido a partir do publicado por Bates [70]. Elas são a solução no contínuo para o potencial de Hartree-Fock do estado fundamental do átomo de hélio.

No Capítulo 2, fizemos a expansão em ondas parciais para a amplitude de espalhamento calculada com a FOMBT. O termo direto é dado por:

$$T_{nq,mp}^D = \delta_{M_q, M_p} I_{nq,mp}^D, \quad (4.1)$$

onde:

$$\begin{aligned}
I_{nq,mp}^D = & \sum_{l''l'''} 4\pi i^{l'''-l''} \frac{(2l''' + 1)}{(2L_n + 1)^{\frac{1}{2}}} e^{i(\delta_{l'''}(p) + \delta_{l''}(q))} C_{0-M_n M_n}^{l''' L_n l''} C_{000}^{l''' L_n l''} I^{L_n}(pl'', ql'; n L_n, 2S) \\
& \times (-1)^{(|M_n| - M_n)/2} (-1)^{M_n} \left[\frac{(|l' - |M_n||)!}{(|l' + |M_n||)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_{l'}^{|M_n|}(\cos \theta_q), \quad (4.2)
\end{aligned}$$

$$I^k(ql', pl''; nL_n, 2S) = \int dr_2 dr_3 \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{ql'}(r_2) P_{pl''}(r_2) P_{nL_n}(r_3) P_{2S}(r_3). \quad (4.3)$$

O termo de troca é dado por:

$$T_{nq,mp}^E = \sum_{k,q} (-1)^{k-q} C_{qM_S^m M_S^n}^{kS^m S^n} (-1)^{\frac{1}{2}+M_p} C_{-M_p M_q -q}^{\frac{1}{2}\frac{1}{2}k} I_{nq,mp}^E, \quad (4.4)$$

onde:

$$\begin{aligned} I_{nq,mp}^E &= \sum_{l''l'} 4\pi i^{l''-l'} e^{i(\delta_{l''}(p)+\delta_{l'}(q))} \frac{(2l''+1)}{(2l'+1)} (2L_n+1)^{\frac{1}{2}} I^{l'}(pl'', nL_n; ql', 2S) C_{000}^{l''L_n l'} \\ &\times C_{0M_n M_n}^{l''L_n l'} (-1)^{-M_n} (-1)^{(|M_n|-M_n)/2} \left[\frac{(l'-|M_n|)!}{(l'+|M_n|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_{l'}^{|M_n|}(\cos\theta_q), \quad (4.5) \end{aligned}$$

$$I^k(pl'', nL_n; ql', 2S) = \int dr_2 dr_3 \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{pl''}(r_2) P_{nL_n}(r_2) P_{ql'}(r_3) P_{2S}(r_3). \quad (4.6)$$

Para obter a convergência dos termos $I_{nq,mp}^D$ e $I_{nq,mp}^E$ na soma nos l , usamos duas estratégias distintas. Para o termo direto ($I_{nq,mp}^D$) quando o deslocamento de fase δ_l vai a zero, implica que a solução do contínuo é a mesma da partícula livre. Então, a técnica utilizada foi a seguinte: os termos são somados em l' e l'' até o ponto em que $\delta = 0$. Neste ponto a FOMBT apresenta o mesmo resultado da aproximação de Born. Soma-se a aproximação de Born total e subtrai-se a ondas parciais de Born incluídas via FOMBT. Com isso, fica garantida a convergência da série. Para o termo de troca, incluiu-se as somas nos l até que a seção de choque diferencial não variasse em mais que 0.1%.

Para testar a convergência das integrais com a grade usada, calculamos as funções para 1000 e 1500 pontos e não observamos diferença significativa.

Na aproximação de Born, para excitações a partir do estado 2^3S , a expansão em ondas parciais é dada por:

$$f = -4\sqrt{\pi} \sum_{LL'} i^{L-L'} Y_{L'-m}(\theta_f, \phi_f) \left(\frac{2L'+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} C_{000}^{L'lL} C_{M'm_0}^{L'lL} \\ \times \int dr_0 r_0^2 j_L(k_i r_0) j_{L'}(k_f r_0) \int dr_1 r_1^2 \frac{r_{1<}^l}{r_{1>}^{l+1}} R_{nl}(1) R_{20}(1), \quad (4.7)$$

onde n e l se referem ao estado inicial.

4.2 Análise dos Resultados

4.2.1 Seção de Choque Diferencial

Para a transição $2^3S \rightarrow 2^3P$, os cálculos com a FOMBT concordam muito bem com os de Ondas Distorcidas e Eikonal Multicanal e encontram-se dentro do erro experimental. No entanto, o que se observa em todas as transições é que os dados experimentais apresentam valores superiores aos teóricos. Para a transição $2^3S \rightarrow 3^3P$, a concordância também é boa, principalmente para 20eV. Contudo nota-se, por volta de $\theta \approx 15^\circ$, uma queda abrupta no valor da DCS ($DCS \approx 10^{-2} \pi a_0^2$ para as energias de 15 e 30eV). Nessa região, as outras transições apresentam um valor mínimo ocorrendo para $\approx 10^{-1} \pi a_0^2$. Para essa transição, os resultados fornecidos pela teoria e os experimentais, não seguem o mesmo comportamento. Para a transição $2^3S \rightarrow 3^3S$, a FOMBT fornece DCS's que seguem

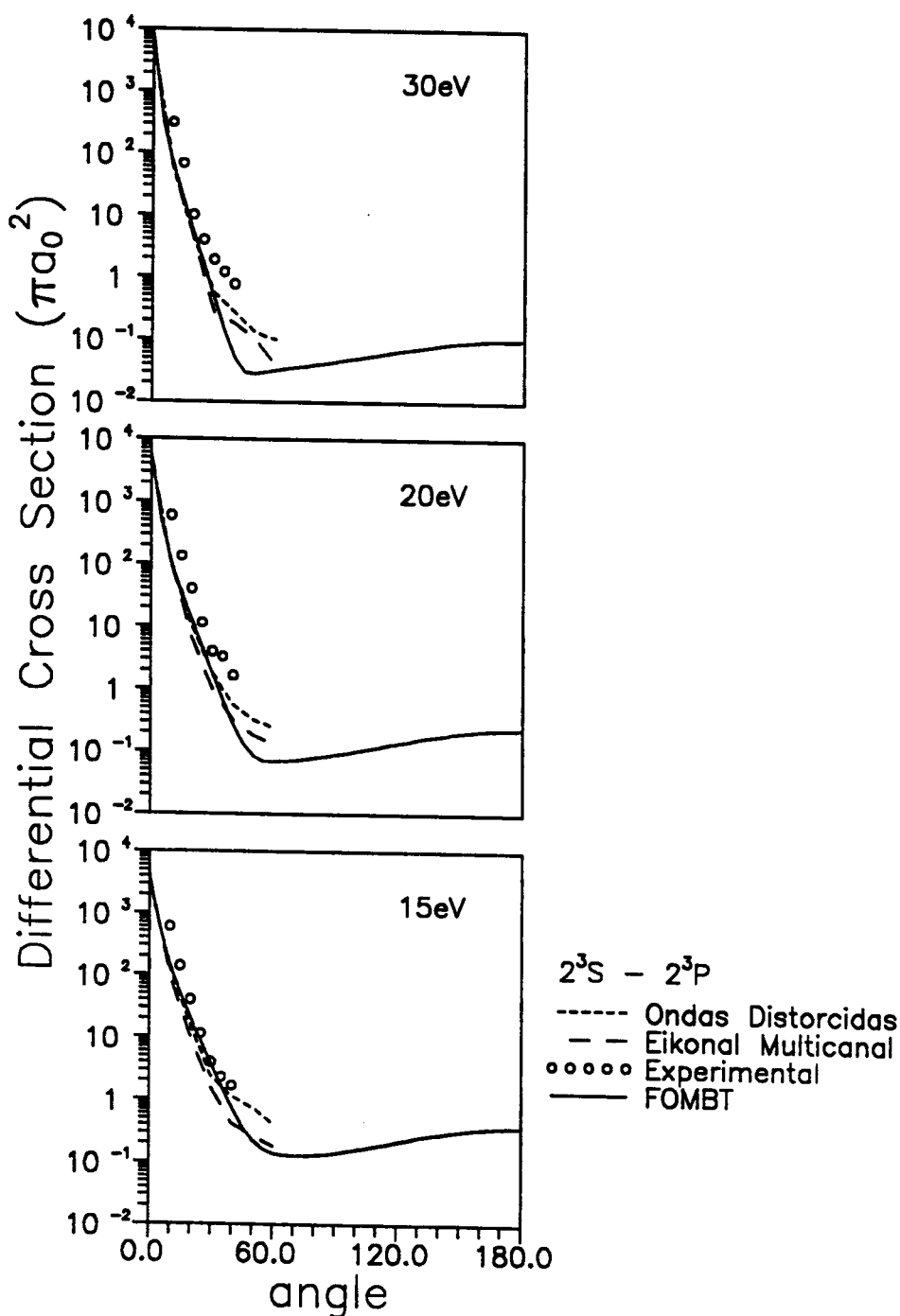


Figura 4.1: Seção de Choque Diferencial para a transição $2^3S \rightarrow 2^3P$, para energias do elétron espalhado de 15, 20 e 30eV.

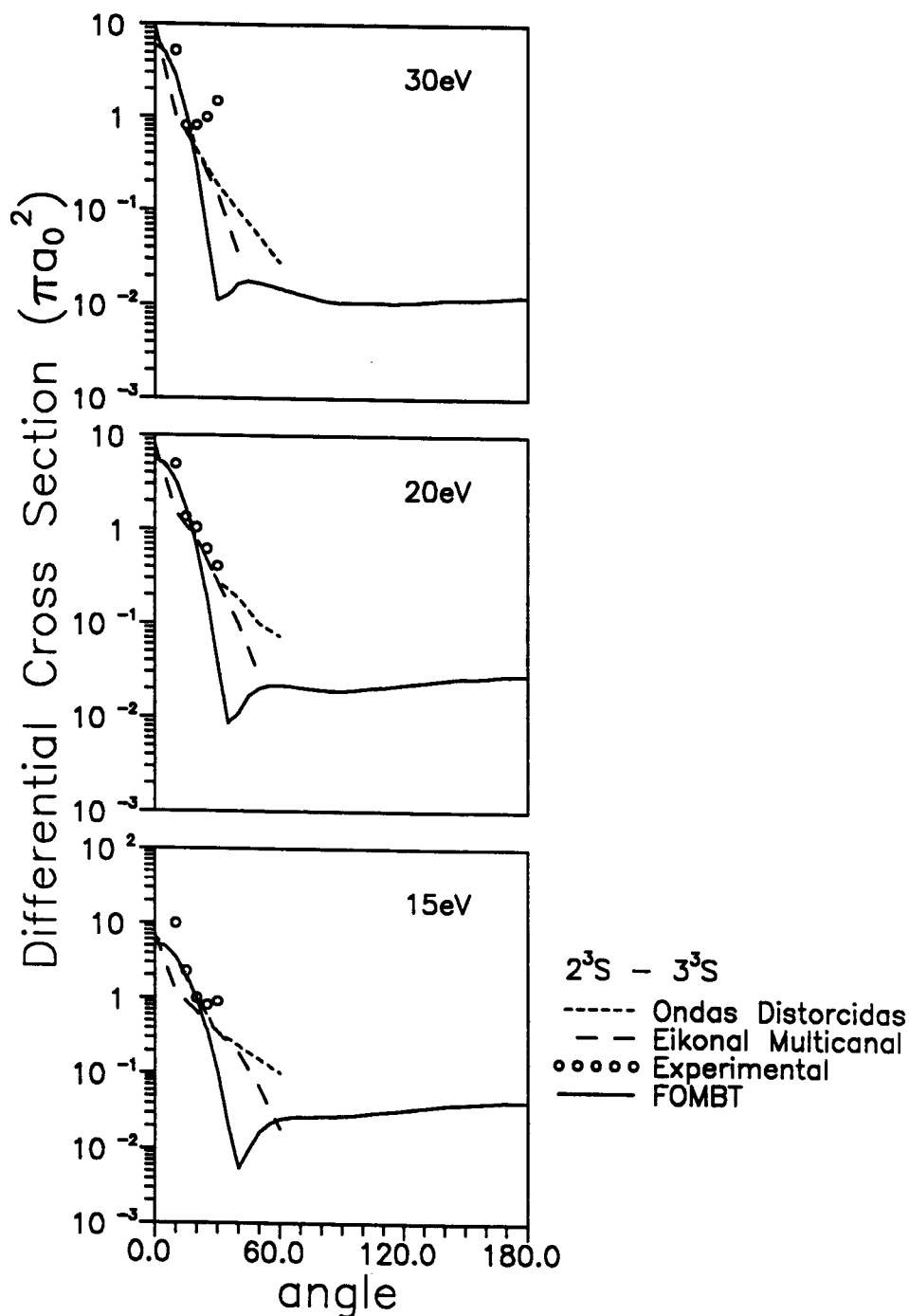


Figura 4.2: Seção de Choque Diferencial para a transição $2^3S \rightarrow 3^3S$.

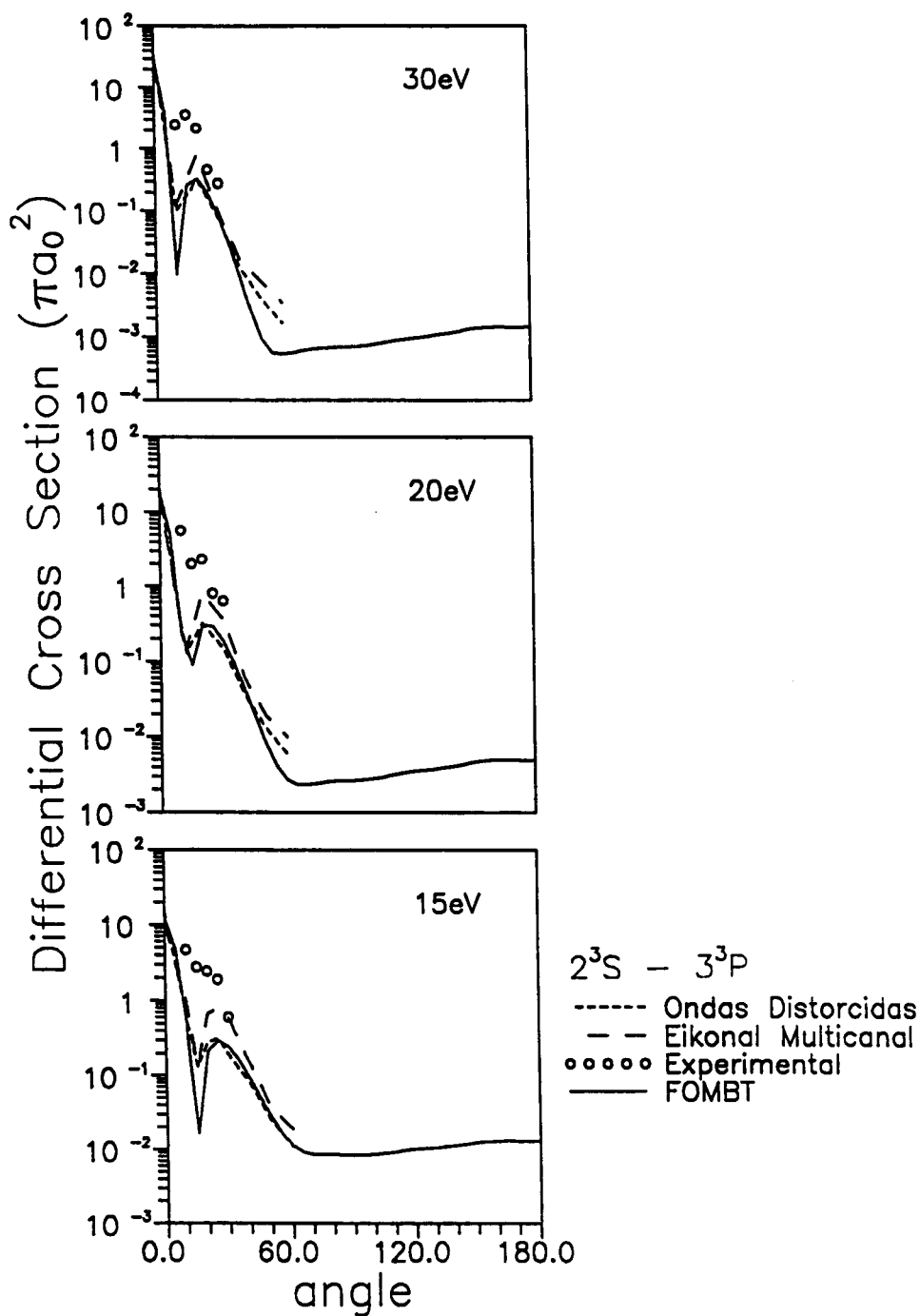


Figura 4.3: Seção de Choque Diferencial para a transição $2^3S \rightarrow 3^3P$.

o perfil das calculadas usando-se a aproximação de Glauber [24], com a presença de um ponto de mínimo. Entretanto, a posição desses mínimos é diferente nas duas teorias. Por exemplo, para 20eV, a FOMBT fornece um ponto de mínimo em $\theta \approx 30^\circ$, enquanto que na DCS calculada com Glauber, o ponto aparece em $\theta \approx 20^\circ$. A profundidade desses mínimos tende a diminuir com o aumento da energia tanto na FOMBT, como na teoria de Glauber. As diferenças entre a FOMBT e Ondas Distorcidas para essa transição sugerem que o campo onde são calculadas as funções do contínuo passa a ser importante, visto que esta é a diferença básica entre as duas teorias. No caso de Ondas Distorcidas, o potencial é composto pela parte estático-troca do estado inicial do alvo mais a polarização. No caso da FOMBT, os orbitais do contínuo são calculados no campo do estado fundamental do alvo. Os resultados publicados não fornecem DCS para ângulos maiores que 60° . Assim, a nossa comparação fica restrita a esta região angular.

4.2.2 Parâmetros de Alinhamento e Orientação

Uma vez que não existem resultados experimentais para os parâmetros de alinhamento e orientação, fizemos uma análise desses parâmetros com a variação da energia e vamos comparar os parâmetros obtidos com os da transição $^1S \rightarrow ^1P$, ressaltando semelhanças e diferenças. Para os ângulos $\theta = 0^\circ, 180^\circ$, a polarização linear é máxima (P_l). Nesta situação, restaura-se a simetria cilíndrica, que leva o momento angular transferido ser nulo e o orbital p encontrar-se alinhado na direção do eixo do elétron incidente. Os parâmetros P_3 e P_l encontram-se limitados pela desigualdade [57]:

$$P^+ = (P_l^2 + P_3^2)^{\frac{1}{2}} \leq 1. \quad (4.8)$$

Para transições entre singletos temos a igualdade (coerência completa), o mesmo não acontecendo no caso dos tripletos, como apresentamos no Capítulo 3. Isso significa que em transições entre singletos os parâmetros P_3 e P_l não são

independentes. O parâmetro P^+ fornece o *grau de coerência* do estado: quanto mais distante ele for de 1, mais incoerente é o estado.

O ângulo γ mede a orientação da nuvem eletrônica em relação ao eixo de colisão (fig.4.4). Os ângulos de espalhamento $\theta = 0^\circ, 180^\circ$ correspondem a $\gamma = 0^\circ$. Isso significa que a nuvem eletrônica está alinhada no eixo-z.

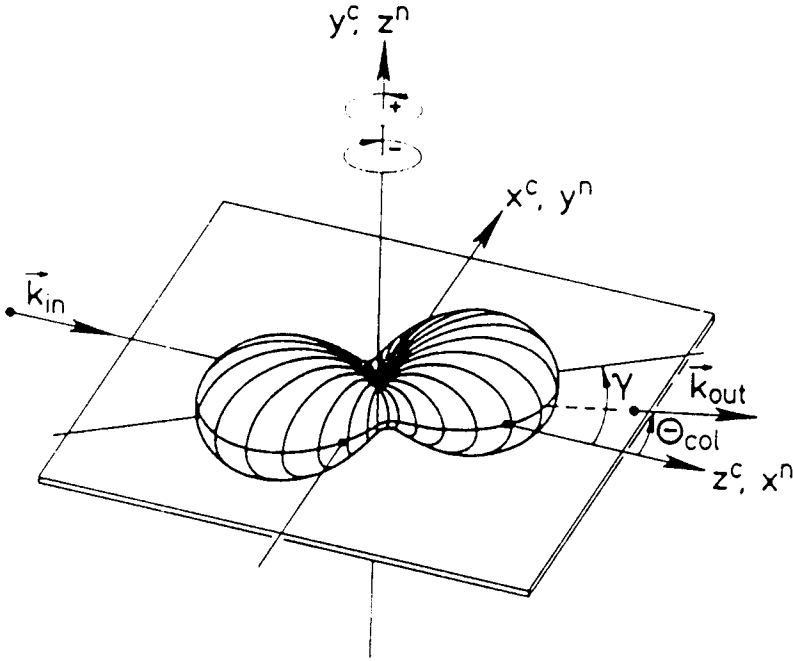


Figura 4.4: Esquema da nuvem eletrônica. O ângulo γ é o ângulo entre a nuvem e o feixe de elétrons incidentes. O índice superior c caracteriza os eixos do sistema da colisão e o índice n , o sistema natural.

Existem duas características distintas nos nossos resultados para a transição $^3S \rightarrow ^3P$ quando comparados com os da transição $^1S \rightarrow ^1P$. Uma é a brusca variação de γ para ângulos pequenos de espalhamento e a outra é que γ é sempre negativo. Para pequenos ângulos de espalhamento, a aproximação de Born explica bem os resultados para todas as transições conhecidas [57]. Nesta aproximação a

nuvem eletrônica se alinha ao longo do momentum transferido $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ [71]. Como a energia de excitação é pequena, \vec{k}_i e \vec{k}_f são próximos em módulo, para as energias estudadas. Por isso, para ângulos de espalhamento pequenos, o ângulo γ predito por FBA é grande e negativo (fig.4.5). Este comportamento é consistente com os resultados conhecidos para a transição $3^2S \rightarrow 3^2P$ no Na [72], que possui uma energia de excitação de 2.0 eV. Para ângulos maiores, o comportamento de γ é distinto do previsto por Born. O seu comportamento é determinado pela interferência das diversas ondas parciais que participam do processo de colisão.

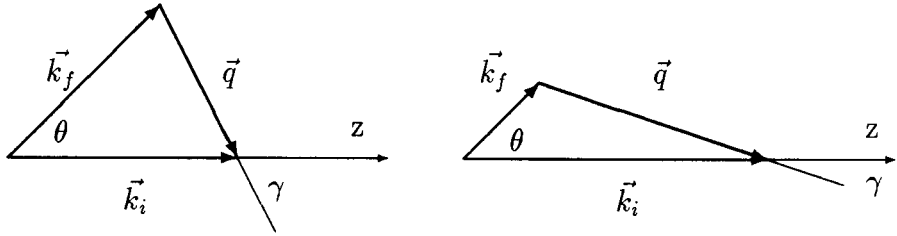


Figura 4.5: Ângulo γ quando a) $k_i \approx k_f$; b) $k_f \ll k_i$.

Para o parâmetro P_3 , os resultados obtidos mostram um comportamento positivo para ângulos pequenos, o contrário de todas as transições $S \rightarrow P$ conhecidas no H, He e Na. O sinal negativo de P_3 foi identificado como decorrente do potencial atrativo do átomo sobre o elétron [73]. Esta idéia foi elaborada em vários outros trabalhos [74, 75]. Os nossos resultados são os primeiros a mostrar um comportamento oposto para as transições $S \rightarrow P$. Anteriormente, um resultado experimental [76] para a transição $S \rightarrow D$ do hélio, já havia observado um comportamento positivo à ângulos pequenos. Assim, nossos resultados, são evidências adicionais de que esta conexão entre o sinal de P_3 e o sinal do potencial não é tão direta como inicialmente se pensou, além de serem os primeiros para este tipo de transição.

O parâmetro P_l descreve a polarização linear, ou seja, está relacionado com o comprimento:

$$\frac{1}{2}(1 + P_l), \quad (4.9)$$

e a altura:

$$\frac{1}{2}(1 - P_l), \quad (4.10)$$

da nuvem eletrônica. Portanto, um orbital s , possui uma polarização linear nula. Como P^+ é muito próximo de 1, ainda podemos relacionar a diminuição de P_l com o crescimento de P_3 .

A incoerência do estado, descrita pelo parâmetro P^+ , é maior na transição $2^3S \rightarrow 2^3P$ para energias menores. O contrário é observado para a transição $2^3S \rightarrow 3^3P$. No geral, os casos estudados apresentam pouca incoerência, não ultrapassando 0.75. Isto significa que o efeito de troca é pequeno em geral nestas transições.

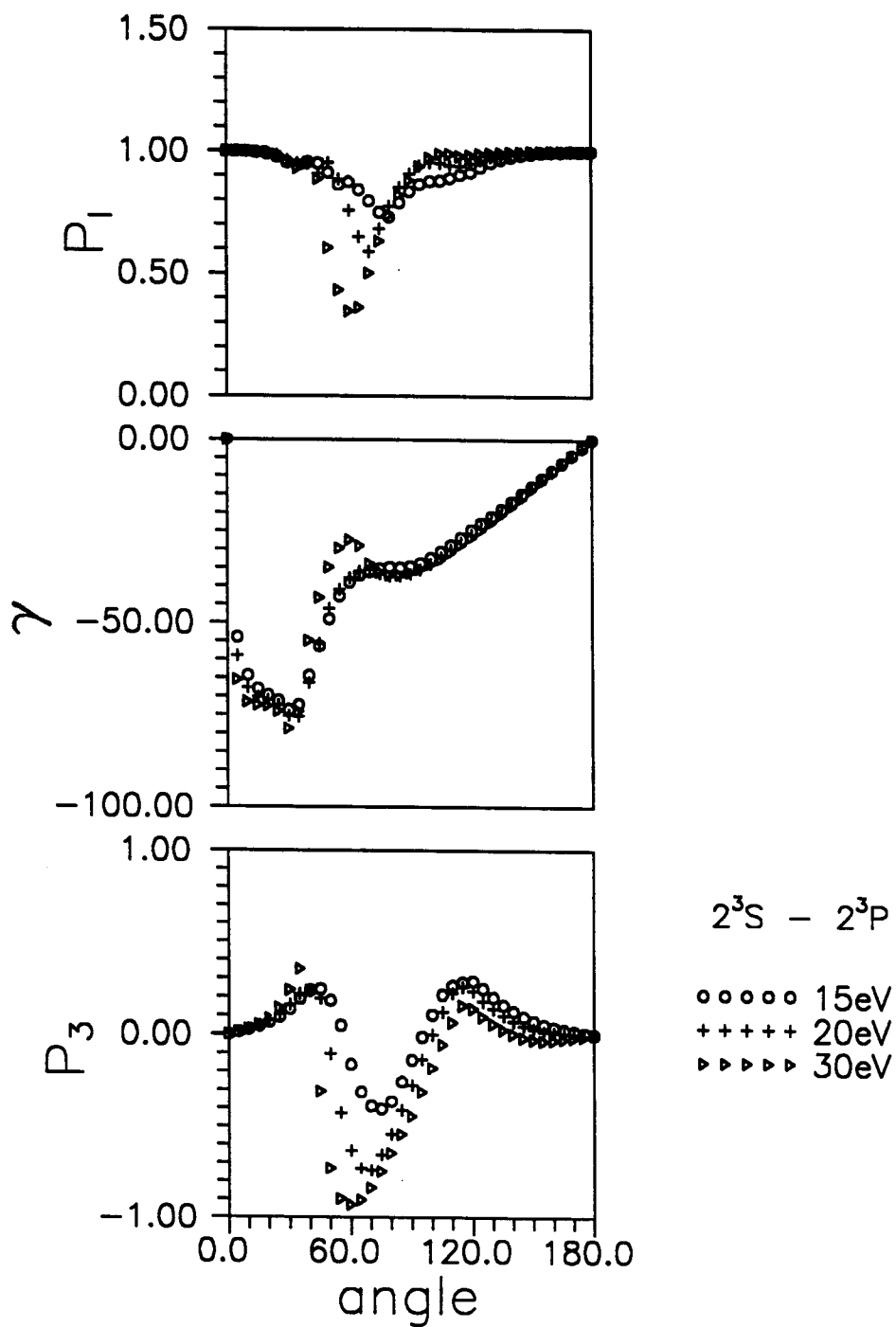


Figura 4.6: Parâmetros de Alinhamento e Orientação para a transição $2^3S \rightarrow 2^3P$.

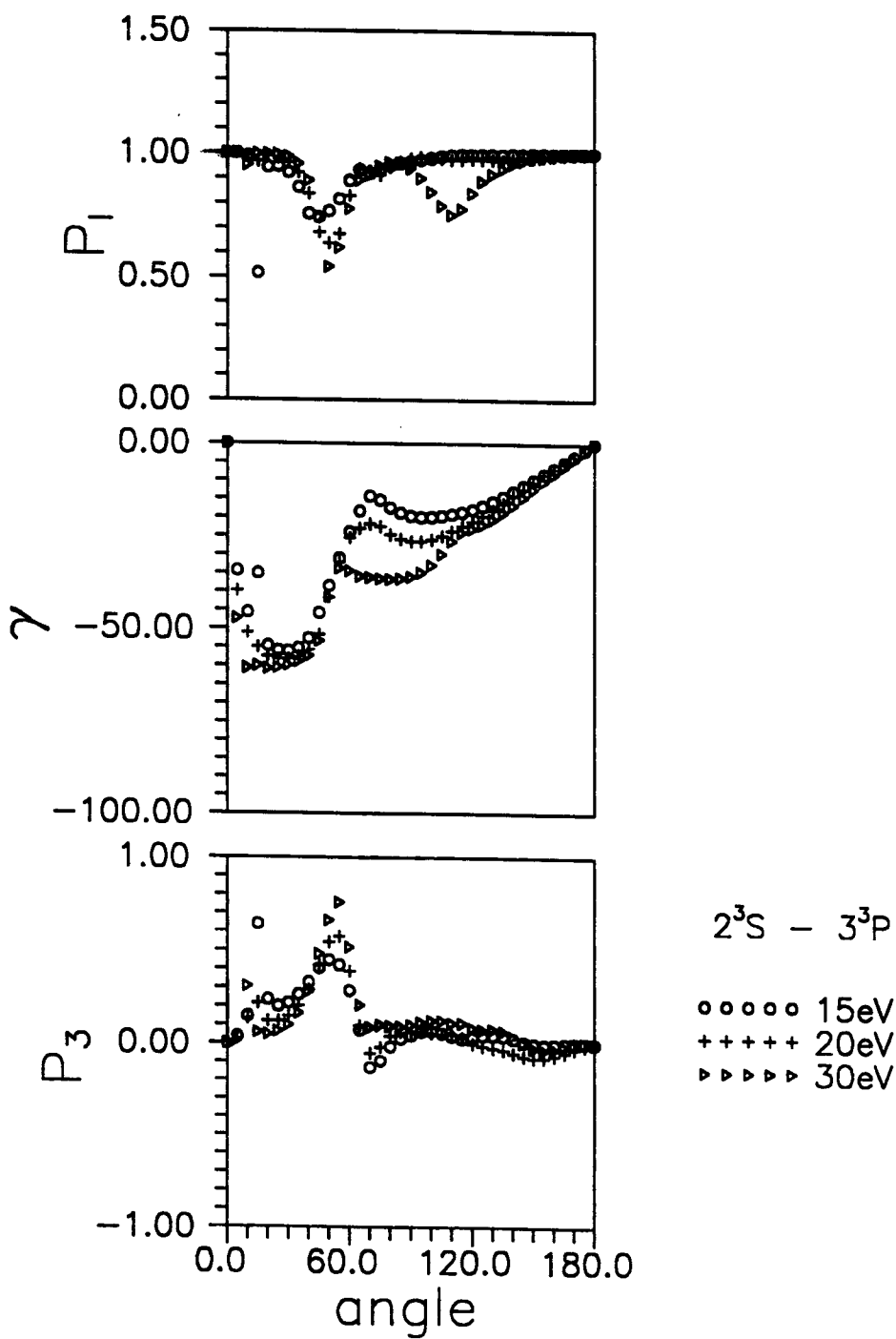


Figura 4.7: Parâmetros de Alinhamento e Orientação para a transição $2^3S \rightarrow 3^3P$.

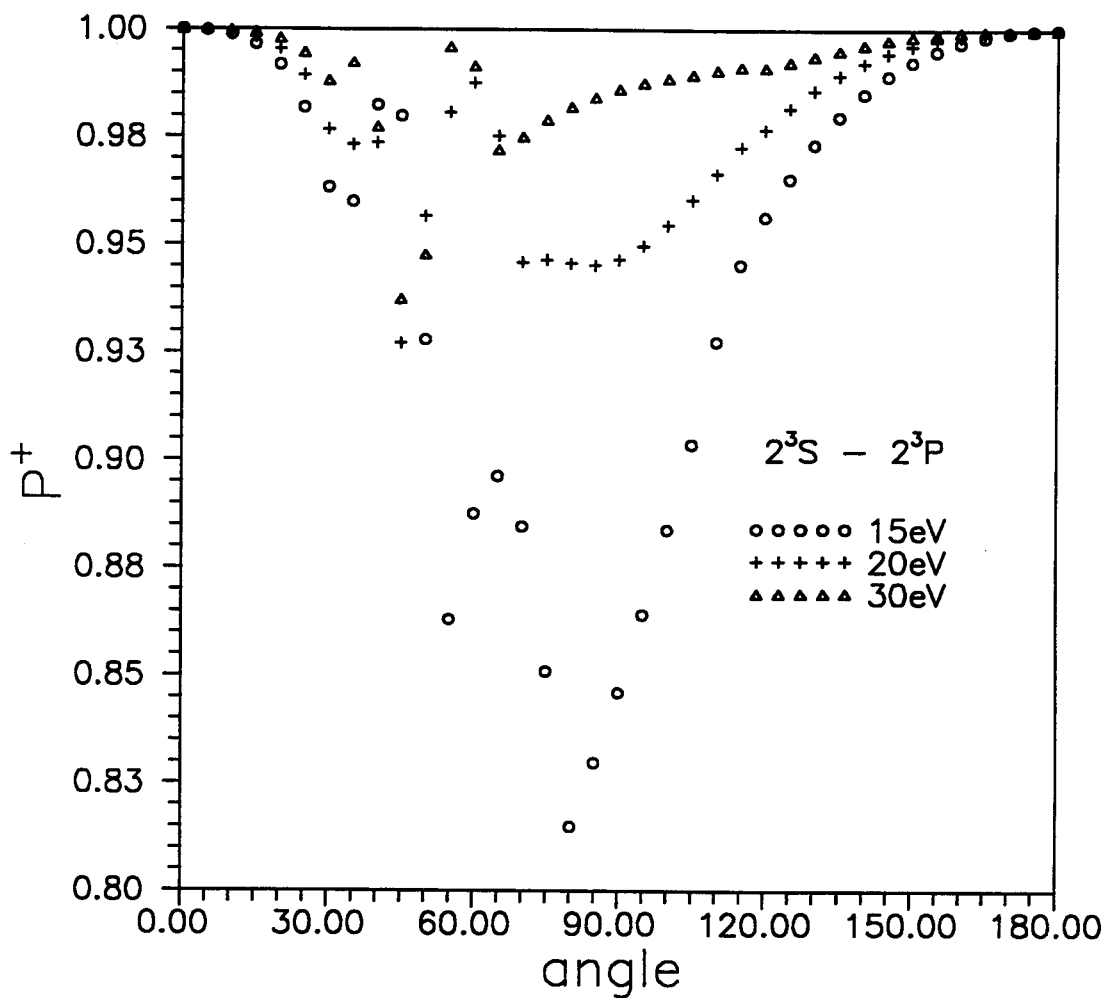


Figura 4.8: Parâmetro P^+ para a transição $2^3S \rightarrow 2^3P$.

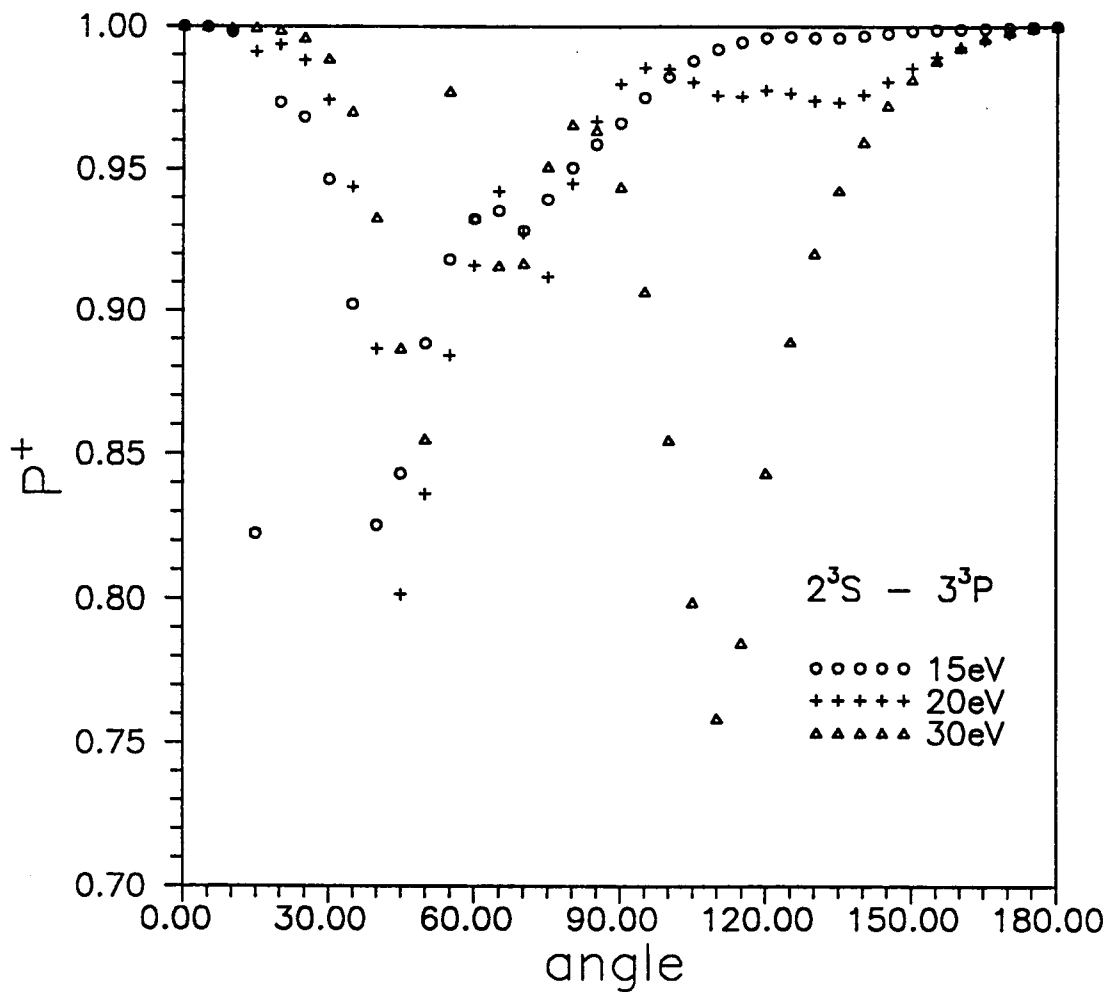


Figura 4.9: Parâmetro P^+ para a transição $2^3S \rightarrow 3^3P$.

Bibliografia

- [1] M. R. Flannery e K. J. McCann, *Phys. Rev. A* 12, 846 (1975).
- [2] D. E. Osterbrock, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* 2, 95 (1964).
- [3] A. R. Martin, *J. Phys. B* 7, 1161 (1974).
- [4] *Topics in Applied Physics* 30, ed: C. K. Rhodes (1979).
- [5] M. H. R. Hutchinson, *Appl. Phys.* 21, 95 (1980).
- [6] B. Stumpf e A. Gallagher, *Phys. Rev. A* 32, 3344 (1985).
- [7] J. J. McClelland, M. I. Kelley e R. J. Celotta, *Phys. Rev. Letters* 55, 688 (1985).
- [8] M. Zuo, T. Y. Jiang, L. Vušković e B. Bederson, *Phys. Rev. A* 41, 2489 (1990).
- [9] R. Marriott, *Proc. Phys. Soc.* 87, 407 (1966).
- [10] P. G. Burke, J. W. Cooper e S. Ormonde, *Phys. Rev.* 183, 245 (1969).
- [11] R. C. Sklarew e J. Callaway, *Phys. Rev.* 175, 103 (1968).
- [12] R. S. Oberoi e R. K. Nesbet, *Phys. Rev. A* 8, 2969 (1973).
- [13] D. Husain, A. L. Choudhury, A. K. Rafiqullah, C. W. Nestor Jr. e F. B. Malik, *Phys. Rev.* 161, 68 (1967).

- [14] E. J. Robinson, *Phys. Rev.* 182, 196 (1969).
- [15] Y. K. Kim e M. Inokuti, *Phys. Rev.* 181, 205 (1969).
- [16] C. L. Pekeris, *Phys. Rev.* 115, 1216 (1959).
- [17] C. L. Pekeris, *Phys. Rev.* 126, 1470 (1962).
- [18] C. L. Pekeris, *Phys. Rev.* 127, 509 (1962).
- [19] B. L. Moiseiwitsch, *Monthly Notices Roy. Astron. Soc.* 117, 189 (1957).
- [20] V. I. Ochkur e V. F. Bratsev, *Soviet Astron. AJ* 9, 797 (1966).
- [21] L. Vainshtein, L. Presnyakov e I. Sobel'man, *Sov. Phys. - JETP* 18, 1383 (1964).
- [22] M. R. Flannery, W. F. Morrison e B. L. Richmond, *J. Appl. Phys.* 46, 1186 (1975).
- [23] E. J. Mansky e M. R. Flannery, *Proc. 14th Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions (Palo Alto)* Ed: M. J. Coggiola, D. L. Huestis e R. P. Saxon, 197 (1985).
- [24] G. A. Khayrallah, S. T. Chen e J. R. Rumble Jr., *Phys. Rev. A* 17, 513 (1978).
- [25] K. C. Mathur, R. P. McEachran, L. A. Parcell e A. D. Stauffer, *J. Phys. B* 20, 1599 (1987).
- [26] R. H. Neynaber, S. M. Trujillo, L. L. Marino e E. W. Rothe, *Proc. 3rd. Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions*, Amsterdam: North-Holland, 1089 (1964).
- [27] W. G. Wilson e W. L. Williams, *J. Phys. B* 9, 423 (1976).
- [28] A. D. Khakhaev, V. A. Gostev e Y. V. Saitsev, *Proc. 10rd. Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions*, Paris: Commissariat à l'Energie Atomique, 1308 (1977).

- [29] R. Müller-Fiedler, P. Schlemmer, K. Jung, H. Hotop e H. Ehrhardt, J. Phys. B 17, 259 (1984).
- [30] L. D. Thomas, G. Csanak, H. S. Taylor e B. S. Yarlagadda, J. Phys. B 7, 1719 (1974).
- [31] A. Chutjian e L. D. Thomas, Phys. Rev. A 11, 1583 (1975).
- [32] H. S. Taylor, A. Chutjian e L. D. Thomas, *Electron and Photon Interaction with Atoms*, ed: H. Kleinpoppen e M. R. C. McDowell (Plenum: New York), 435 (1975).
- [33] G. D. Meneses, N. T. Padial e G. Csanak, J. Phys. B 11, L237 (1978).
- [34] L. E. Machado, E. P. Leal e G. Csanak, Phys. Rev. A 29, 1811 (1984).
- [35] L. E. Machado, E. P. Leal e G. Csanak, J. Phys. B 15, 1773 (1983).
- [36] N. T. Padial, G. D. Meneses, F. J. Paixão F., G. Csanak e D. C. Cartwright, Phys. Rev. A 23, 2194 (1981).
- [37] F. J. Paixão F., N. T. Padial e G. Csanak, Phys. Rev. A 30, 1697 (1984).
- [38] G. D. Meneses, F. J. Paixão F. e N. T. Padial, Phys. Rev. A 32, 156 (1985).
- [39] I. I. Sobel'man, *Atomic Spectra and Radiative Transition*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (1979).
- [40] A. Dalgarno, Monthly Notices Roy. Astron. Soc. 131, 311 (1966).
- [41] G. W. F. Drake e A. Dalgarno, Astrophys. J. 152, L121 (1968).
- [42] O. Bely, J. Phys. B 1, 718 (1968).
- [43] M. Chrétien e E. Lipworth, *Atomic Physics and Astrophysics*, Gordon and Breach Science Publishers, vol. 2 (1969).
- [44] P. C. Martin e J. S. Schwinger, Phys. Rev. 115, 1342 (1959).

- [45] B. Schneider, H. S. Taylor e R. Yaris, Phys. Rev. A1, 855 (1970).
- [46] G. Csanak, H. S. Taylor e R. Yaris, Phys. Rev. A 4, 1322 (1971).
- [47] F. J. da Paixão, G. Csanak e D. Cartwright, "Many-body Theory of Electron Impact Excitation from Metastable Targets", XII ICPEAC - Gatlinburg, Tenn - (1981).
- [48] F. J. da Paixão, Tese de Doutorado, Unicamp (1980).
- [49] G. Baym e L. P. Kadanoff, Phys. Rev. A 124, 287 (1961).
- [50] M. Gell-Mann e F. Low, Phys. Rev. A 84, 350 (1951).
- [51] L. S. Rodberg e R. M. Thaler, *Introduction to The Quantum Theory of Scattering*, Academic Press (1967).
- [52] I. V. Hertel e W. Stoll, J. Phys. B 7, 570 (1974).
- [53] U. Fano e J. Macek, Rev. Mod. Phys. 45, 553 (1973).
- [54] R. E. Imhof e F. H. Read, J. Phys. B 4, 450 (1971).
- [55] G. C. M. King, A. Adams e F. H. Read, J. Phys. B 5, 254 (1972).
- [56] M. Eminyan, K. B. MacAdam, J. Slevin e H. Kleinpoppen, Phys. Rev. Lett. 31, 576 (1973).
- [57] N. Andersen, J. W. Gallagher e I. V. Hertel, Phys. Rep. 165 (1988).
- [58] J. Macek e I. V. Hertel, J. Phys. B 7, 2173 (1974).
- [59] J. Macek e D. H. Jaecks, Phys. Rev. A 4, 6 (1971).
- [60] J. Wykes, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 5, 1126 (1972).
- [61] K. Blum e H. Kleinpoppen Phys. Rep. 52, 203 (1979).

- [62] J. F. Williams e I. Humphrey, *Proc. 14th Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions* (Palo Alto), ed M. J. Coggiola, D. L. Huestis e R. P. Saxon (Amsterdam: North Holland), Abstracts p 112 (1985).
- [63] H. A. Silim, H. J. Beyer, A. El-Sheikh e H. Kleinpoppen, *Proc. 14th Int. Conf. on Physics of Electronic and Atomic Collisions* (Palo Alto), ed M. J. Coggiola, D. L. Huestis e R. P. Saxon, Abstracts p 117 (1985).
- [64] M. Eminyan, H. Kleinpoppen, J. Slevin e M. C. Standage, *Electron and Photon Interactions with Atoms* ed H. Kleinpoppen e M. R. C. McDowell (Plenum: New York), 455 (1976).
- [65] I. Humphrey, J. F. Williams e E. L. Heck, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 20, 267 (1987).
- [66] K. Blum, *Density Matrix Theory and Applications*, Plenum: New York (1981).
- [67] M. Emynian, K. B. MacAdam, J. Slevin e H. Kleinpoppen, *J. Phys. B: At. Mol. Phys* 7, 1519 (1974).
- [68] C. Fröese-Fischer, *Comput. Phys. Commun.* 14, 145 (1978).
- [69] C. E. Moore, *Atomic Energy Levels* (National Bureau of Standards, Circular No. 467, U. S. Government Printing Office, Washington, D. C., 1948).
- [70] G. N. Bates, *Comput. Phys. Commun.* 8, 220 (1974).
- [71] H. W. Hermann e I. V. Hertel, *Z. Phys. A* 307, 89 (1982).
- [72] D. L. Moores e D. W. Norcross, *J. Phys. B* 5, 1482 (1972).
- [73] M. Kohmoto e U. Fano, *J. Phys. B* 14, L447 (1981).
- [74] N. C. Steph e D. E. Golden, *Phys. Rev. A* 21, 1848 (1980).
- [75] H. J. Beyer, H. Kleinpoppen, I. McGregor e L. C. McIntyre Jr., *J. Phys. B* 15, L545 (1982).
- [76] H. Batelaan, J. van Eck e H. G. M. Heideman, *J. Phys. B* 21, L741 (1988).