



UNIVERSIDADE FEDERAL DA FRONTEIRA SUL

CAMPUS REALEZA

CURSO DE FÍSICA

FELIPE BURILLE

Efeito Ramsauer-Townsend: espalhamento de elétrons por átomos de Xe a baixas energias.

REALEZA

2016

FELIPE BURILLE

**Efeito Ramsauer-Townsend: espalhamento de elétrons
por átomos de Xe a baixas energias.**

Trabalho de conclusão de curso de graduação
apresentado como requisito para obtenção de
grau de Licenciado em Física da Universidade
Federal da Fronteira Sul.

Orientador: Prof. Dr. Wagner Tenfen
Coorientador: Prof. Dr. Tobias Heimfarth

REALEZA

2016

Felipe Burille

Efeito Ramsauer-Townsend: espalhamento de elétrons por átomos de Xe a baixas energias./ FELIPE BURILLE. – REALEZA, 2016-
63 p. : il. (algumas color.) ; 30 cm.

Orientador: Prof. Dr. Wagner Tenfen

Trabalho de conclusão de curso – , 2016.

1. Espalhamento de elétron. 2. Xenônio. 2. Efeito Ramsauer-Townsend. I. Wagner Tenfen. II. Universidade Federal da Fronteira Sul. III. Efeito Ramsauer-Townsend: espalhamento de elétrons por átomos de Xe a baixas energias

FELIPE BURILLE

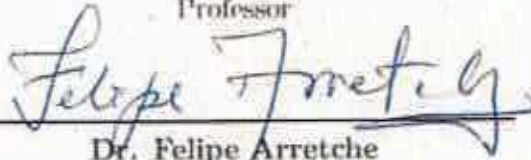
**Efeito Ramsauer-Townsend: espalhamento de elétrons
por átomos de Xe a baixas energias.**

Trabalho de conclusão de curso de graduação
apresentado como requisito para obtenção de
grau de Licenciado em Física da Universidade
Federal da Fronteira Sul.

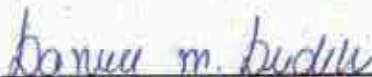
Este trabalho de conclusão de curso foi defendido e aprovado pela banca em: 01 de
dezembro de 2016.



Dr. Wagner Tenfen
Professor



Dr. Felipe Arretche
Professor



Dr^a. Danuce Marcele Dudek
Professora



Me. Edson Antonio Santolin
Técnico em eletroeletrônica

Este trabalho é dedicado aos meus pais.

Agradecimentos

- Ao meu orientador, Dr. Wagner Tenfen pelas discussões sobre espalhamento atômico e molecular, pelo convívio e amizade que construímos durante a graduação.
- Aos laboratoristas da UFFS por sempre colaborarem e contribuírem com a realização desse trabalho.
- Aos meus pais, Laodecir e Luciana, que nunca mediram esforços para minha formação no curso.
- Aos meus colegas do curso, pela amizade cultivada durante esses anos de graduação.
- A todos os professores do curso, que foram importantes em minha formação acadêmica.
- Aos meus orientadores e colegas dos projetos em que participei, pela troca de conhecimento, aprendizado e companheirismo.
- Ao L^AT_EX por deixar o “word” no chinelo!

"I was born not knowing, and have only had a little time to change that here and there."(Richard Philips Feynman)

Resumo

A pesquisa buscou demonstrar a partir do estudo experimental de espalhamento de elétrons por átomos de Xenônio em baixas energias o efeito Ramsauer-Townsend e com isso comparar os resultados experimentais e aproximações teóricas da literatura. Este estudo foi realizado no laboratório de Física Moderna na Universidade Federal da Fronteira Sul, submetendo um tiratron a gás (mod. 2D21) a diferentes condições de temperatura. Visto que o tal efeito requeria a teoria ondulatória da mecânica quântica, a análise deste não era possível a partir de considerações exclusivamente clássicas, deste modo, a formulação da teoria de espalhamento dada pela mecânica quântica foi necessária para explicar este fenômeno. Com isso, a pesquisa foi observar o efeito Ramsauer-Townsend experimentalmente e comparar com os resultados teóricos disponíveis na literatura. Após, o estudo foi proposto um roteiro experimental em nível de graduação para o estudo deste efeito, proporcionando uma discussão do uso da equação de Schrödinger nos fenômenos de espalhamento neste nível de ensino.

Palavras-chave: Efeito Ramsauer-Townsend; espalhamento de elétrons; xenônio; atividades experimentais no ensino de física.

Abstract

The research sought to demonstrate from the experimental study of electron scattering by xenon atoms at low energies the Ramsauer-Townsend effect and thus compare the experimental results and theoretical literature approaches. This study was conducted in Modern Physics Laboratory at the Federal University da Fronteira Sul, submitting a gas thyratron (mod. 2D21) at different temperature conditions. Since such an effect would require the wave theory of quantum mechanics, this analysis was not possible from purely classical considerations, thus the formulation of scattering theory given by quantum mechanics is needed to explain this phenomenon. Thus, the research was to observe the Ramsauer-Townsend effect experimentally and compare with the theoretical results available in the literature. After the study was proposed an experimental script undergraduate level for the study of this effect, providing a discussion of the use of the Schrodinger equation in scattering phenomena at this level of education.

Keywords: Ramsauer-Townsend effect; scattering of electrons; xenon; experimental activities in physics teaching.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Esquema de um experimento de espalhamento. Um feixe de partículas incidentes A que sofre um espalhamento esférico por um alvo B.	19
Figura 2 – Espalhamento clássico de uma partícula incidende sobre um alvo que é considerado como uma esfera rígida.	20
Figura 3 – Espalhamento em uma esfera rígida de raio R, conforme previsto pela mecânica clássica.	21
Figura 4 – Espalhamento de um pacote de onda plana incidente gerando uma onda esférica de saída.	22
Figura 5 – Ilustração do espalhamento de um pacote de onda plana para definição da seção de choque.	24
Figura 6 – Representação esquemática do efeito sobre a onda radial livre $j_l(kr)$. A figura (a) mostra um potencial repulsivo (positivo), enquanto (b) um potencial atrativo (negativo).	39
Figura 7 – Poço quadrado de potencial atrativo	40
Figura 8 – Comportamento da mudança de fase na onda em baixas energias. A primeira curva corresponde a um potencial que não pode suportar um estado ligado fraco. A segunda curva refere-se a um potencial que pode produzir um estado ligado fraco.	42
Figura 9 – A figura a) representa os pinos do Tiratron a gás (mod. 2D21), com suas respectivas partes. Na figura b) Fotografia do Tiratron a gás, c) suporte utilizado para o Tiratron a gás.	46
Figura 10 – Diagrama do circuito para o experimento do Efeito Ramsauer-Townsend.	47
Figura 11 – Gráfico da corrente na placa I_p com a presença do gás de Xe e da corrente na placa I_p^* sem a presença do gás de Xe em função da diferença de potencial do cátodo e grade $V - V_s$	48
Figura 12 – Gráfico da probabilidade de espalhamento do elétron P_s em função da energia dos elétrons.	49
Figura 13 – Mudança de fase δ_0 e seção de choque parcial σ_0 em função da energia do elétron da onda de simetria esférica por Gibson et al.	50
Figura 14 – Seções de choque parciais em função da energia dos elétrons para o átomo de Xe por Ferch et al.	51
Figura 15 – Na figura a) representa os pinos do Tiratron a gás (mod. 2D21), com suas respectivas partes. Na figura b) Fotografia do Tiratron a gás, c) suporte utilizado para o Tiratron a gás.	60
Figura 16 – Diagrama do circuito para o experimento do Efeito Ramsauer-Townsend.	61

Figura 17 – Efeito Ramsauer-Townsend. A figura da esquerda nos mostra a corrente na placa I_p e I_p^* em função da energia do elétron. A figura a direita evidencia o mínimo de Ramsauer-Townsend, através da probabilidade de espalhamento do elétron em função de sua energia. 63

Lista de tabelas

Tabela 1 – Conexões do Tiratron a gás conforme a convenção utilizada.	46
Tabela 2 – Dados experimentais do efeito Ramsauer-Townsend no espalhamento de elétrons por átomos de xenônio para uma tensão de 3 V no filamento.	58
Tabela 3 – Conexões do Tiratron a gás conforme a convenção utilizada.	60

Lista de símbolos

\hbar	Constante reduzida de Planck
$\vec{\nabla}_r$	Operador gradiente das coordenadas esféricas
G_0	Função de Green
σ_{cl}	Seção de choque clássica
$f(\Omega)$	Amplitude de espalhamento
δ_0	Mudança de fase
T_{fi}	Matriz de transição
$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}$	Função de onda de espalhamento
\vec{j}_{inc}	Fluxo da onda plana incidente
\vec{j}_{out}	Fluxo da onda esférica de saída
P_s	Probabilidade de espalhamento do elétron
I_s	Corrente na grade com a presença do Xe
I_p	Corrente na placa coletora com a presença do Xe
I_s^*	Corrente na grade sem a presença do Xe
I_p^*	Corrente na placa coletora sem a presença do Xe

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
2	CONSIDERAÇÕES SOBRE O ESPALHAMENTO	18
2.1	Descrição dos tipos de colisões	18
2.2	Teoria do espalhamento clássico	19
2.3	Função de onda estacionária de espalhamento	22
2.4	Seção de choque	24
2.5	Equação de Schrödinger como uma equação integral	27
2.6	Função de Green para o espalhamento	28
2.7	Equação de Lippmann-Schwinger	29
3	MÉTODO DE ONDAS PARCIAIS	31
3.1	Equação radial	31
3.2	As condições de contorno	32
3.3	Amplitude de espalhamento e seção de choque	34
3.4	Função de onda de espalhamento	36
3.5	Mudança de fase da onda	37
3.6	Espalhamento por um poço quadrado	39
4	ESPALHAMENTO EM BAIXAS ENERGIAS	44
4.1	Efeito Ramsauer-Townsend	44
4.2	Materiais	45
4.3	Procedimento Experimental	45
4.4	Resultados e Discussão	48
5	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	53
	REFERÊNCIAS	55
A	DADOS EXPERIMENTAIS	57
B	ROTEIRO EXPERIMENTAL	59
B.1	Introdução	59
B.2	Objetivos	59
B.3	Material	59
B.4	Montagem	59
B.5	Procedimento experimental	60

B.6	Previsões experimentais	62
------------	--	-----------

Capítulo 1

Introdução

Os estudos de colisões envolvendo o espalhamento entre elétrons e átomos ou moléculas vêm sendo desenvolvidos desde o início do século XX, antes mesmo da formulação da equação de Schrödinger, trazendo algum conhecimento sobre a estrutura eletrônica de átomos e moléculas além de permitir a análise de propriedades dos elétrons.

Em 1911, Rutherford realizou seus experimentos originais sobre o espalhamento de partículas alfa energéticas em núcleos atômicos, que lhe permitiu defender que os átomos teriam sua carga positiva concentrada no núcleo. A partir deste momento, o espalhamento tornou-se cada vez mais estudado como uma ferramenta de investigação das forças entre as partículas elementares [1]. Mesmo o modelo de Rutherford para o átomo sendo insustentável teoricamente, forneceu a Niels Bohr indícios para o desenvolvimento de seus postulados e modelo atômico, que apresentava concordância quantitativa com alguns dados espectroscópicos [2], e baseava-se na ideia de quantização de energia proposta por Max Planck [3]. Em particular, os experimentos de Franck e Hertz [4], deram bom fundamento experimental para o modelo atômico de Bohr, demonstrando a existência de um limiar de ionização para os átomos bem como a estruturação da eletrosfera destes em níveis de energia[5].

No início da década de 1920, com o aprimoramento das técnicas experimentais de avaliação da dinâmica de elétrons em gases, Carl Wilhelm Ramsauer e Edward John Sealy Townsend descobriram, independentemente, uma característica interessante nas seções de choque de colisão de elétrons com átomos nobres: um pronunciado mínimo na seção de choque elástica para energias cinéticas do elétron incidente inferiores ao já conhecido potencial de ionização [6]. O interessante desta descoberta é que não era possível fazer uma previsão teórica deste efeito a partir de considerações puramente clássicas, isto é, uma nova teoria seria necessária para a correta descrição de tal mínimo. Em 1924, com a formulação da hipótese de Louis de Broglie [7], que a matéria apresentava características tanto ondulatórias como corpusculares, a natureza do átomo e o modelo

atômico de Bohr foram reformulados com a proposta de Erwin Schrödinger dando ênfase ao comportamento ondulatório das partículas microscópicas [8]. A partir da equação de Schrödinger, uma nova teoria de espalhamento foi capaz de dar conta dos fenômenos observados anteriormente por Ramsauer e Townsend. De fato, o fenômeno então conhecido como efeito Ramsauer-Townsend finalmente foi explicado, com base nos princípios da mecânica quântica [6].

Deste modo, a exploração do efeito Ramsauer-Townsend no contexto do espalhamento de elétrons por átomos de gases nobres proporciona uma excelente discussão sobre as implicações do uso da equação de Schrödinger na descrição dos fenômenos de espalhamento em nível de graduação em cursos de física.

Do ponto de vista experimental os estudos de colisões consistem no bombardeamento de um alvo por partículas incidentes (elétrons, pósitrons ou outras partículas) com energias bem definidas. Nesse processo de colisão podem ocorrer o espalhamento elástico e o espalhamento inelástico. No espalhamento elástico, o alvo permanecerá no seu estado pré-colisão, enquanto no espalhamento inelástico o alvo atingirá um estado diferente do seu estado inicial.

O principal observável dos experimentos de colisão é a seção de choque, que é a medida da probabilidade de interação entre o projétil e o alvo em um determinado canal de espalhamento. Uma forma alternativa e de comparação das medidas realizadas é a partir de previsões teóricas em termos de seção de choque para o processo específico. A comparação entre os resultados experimentais e teóricos permitem avaliar a qualidade das aproximações teóricas utilizadas no cálculo da seção de choque bem como identificar a confiabilidade dos resultados experimentais.

O estudo de espalhamento de elétron-átomo e elétron-molécula na fase gasosa tem sido objeto de extensas investigações experimentais e teóricas. Os resultados da seção de choque da interação entre elétron-átomo ou elétron-molécula são de grande importância para a compreensão em muitos campos de pesquisas em física atômica e molecular, tais como processos de elétrons conduzidos na Terra e fenômenos planetários, química de radiação, descargas gasosas, plasmas, entre outros [9]. Em Física dos lasers, a colisão inelástica de elétron por lasers que utilizam íons de gases nobres [10], consiste de uma tentativa de aumentar a lista de lasers conhecido como transições Bell, investigando o comportamento de altas descargas de corrente pulsada em gases nobres de neônio, argônio, criptônio e xenônio. Na indústria, o estudo de espalhamento de elétrons por átomos e moléculas está relacionado com a análise e modelagem de plasmas. O processamento de plasma, na fabricação de circuitos é de vital importância para várias das maiores indústrias de manufatura no mundo, como também, para as indústrias do ramo aeroespacial, automação, biomédica, e nas indústrias de gestão de resíduos tóxicos [11]. Fica evidente que a modelagem destes plasmas requer grande quantidade de dados, entre os quais as seções de choque de espalhamento

dos gases que formam os plasmas.

Em radiobiologia as colisões entre elétrons com moléculas biológicas em baixas energias $0 - 4 \text{ eV}$ podem induzir um número significativo de quebras simples e duplas de fitas da cadeia de DNA [12]. Esse estudo possibilita investigar os efeitos da radiação ionizante em células e organismos vivos através da análise da sequência de acontecimentos pela qual a radiação modifica um sistema biológico. No meio interestelar, a partir dos resíduos ejetados pelas estrelas quando elas morrem, o estudo da interação entre elétrons e moléculas interestelares possibilita a compreensão da formação de fragmentos moleculares e o nascimento de novas estrelas em nuvens interestelares [13].

Neste sentido, tanto os estudos experimentais como teóricos sobre o espalhamento entre partículas subatômicas e átomos ou moléculas são de grande importância em atividades de pesquisa. Portanto, o presente estudo, tem como objetivo evidenciar experimentalmente o surgimento do efeito Ramsauer-Townsend no estudo das colisões a partir das características ondulatórias dos elétrons incidentes em átomos de xenônio. Com isso, comparar os resultados experimentais com diferentes aproximações teóricas da literatura obtidas a partir da equação de Schrödinger. Por fim, propor um procedimento experimental em nível de graduação para o estudo do efeito Ramsauer-Townsend nos cursos de Física.

Este trabalho foi dividido em 5 capítulos, obedecendo a seguinte estrutura; no capítulo 1, foi realizada uma breve introdução, no capítulo 2, serão expostas considerações gerais sobre espalhamento, como seu formalismo para a interação entre um feixe de partículas incidentes sobre um alvo. Serão realizadas descrições dos tipos de colisões, discussões da teoria do espalhamento clássico, cujas características quânticas de colisão são ignoradas. A introdução da teoria de espalhamento quântico, seção de choque diferencial e total, função de Green e equação de Lippmann-Schwinger para o espalhamento.

No capítulo 3, é feita a descrição do método de ondas parciais, o estudo consiste em obter explicitamente a amplitude de espalhamento e a seção de choque estudados no capítulo anterior. Dessa forma, será discutido a equação radial da onda, condições de contorno do espalhamento, amplitude de espalhamento, seção de choque diferencial e total, função de onda de espalhamento, mudanças de fase que permitem obter a amplitude de espalhamento, e por fim, o espalhamento por um poço quadrado, que evidencia o mínimo de Ramsauer em baixas energias a partir da mudança de fase.

No capítulo 4, apresentaremos os procedimentos experimentais no estudo do espalhamento de elétrons por átomos de Xenônio. Primeiramente será debatido o estudo realizado por Edward John Sealy Townsend e Carl Wilhelm Ramsauer na observação do mínimo de Ramsauer, os materiais utilizados para realização do experimento, procedimento experimental e discussões dos resultados obtidos. No capítulo 5, são apontadas as conclusões e perspectivas no desenvolvimento desse trabalho. No apêndice A, mostraremos

uma proposta de roteiro experimental em nível de graduação para trabalhar com esse fenômeno nas disciplinas de Física Moderna, proporcionando a discussão do uso da equação de Schrödinger nos fenômenos de espalhamento atômico e molecular.

Capítulo 2

Considerações sobre o espalhamento

Neste capítulo são apresentadas considerações sobre o espalhamento, como seu formalismo para a interação entre um feixe de partículas incidentes sobre um alvo. Na seção 2.1, foram classificados os diferentes tipos de colisões com suas respectivas particularidades. Na seção 2.2, foi introduzida a teoria de espalhamento clássica cujas características quânticas de colisão são ignoradas. Na seção 2.3, função de onda estacionária de espalhamento, será discutida a interação entre uma partícula com um alvo em um espalhamento quântico. Na seção 2.4, discutiremos como a seção de choque esta relacionada com o comportamento assintótico da função de onda de espalhamento. Na seção 2.5, equação de Schrodinger como uma equação integral tratará da função de onda estacionária de espalhamento $\psi_{k_i}^{(+)}(\vec{r})$ que é também solução de uma equação integral equivalente que incorpora a condição de contorno. A função de Green necessária será avaliada na seção 2.6. E por fim, A equação integral resultante para o potencial de espalhamento ou Equação de Lippmann-Schwinger é obtida na seção 2.7. O capítulo 2 foi baseado nas referências [14], [15], [16], [17] e [18].

2.1 Descrição dos tipos de colisões

O processo de espalhamento consiste em um bombardeamento de um alvo por partículas ou pacote de ondas com energias bem definidas. Consideremos uma colisão experimental como na figura 1. O feixe de partícula A incidente, monoenergético é colimado, o feixe que emerge do colimador é direcionado ao alvo B que contém centros espalhadores. As partículas incidentes interagem com o alvo de maneira a serem espalhadas, propagando-se em diferentes direções com frentes de ondas esféricas (delimitada como região assintótica). Com isso, o detector coleta as partículas espalhadas situado em um ângulo sólido $d\Omega$ centrado nas direções θ e ϕ .

Diferentes processos podem ocorrer durante experimentos de colisões, e estes processos podem ser classificados como resultantes do espalhamento elástico ou espalhamento inelástico. No espalhamento elástico, duas partículas A e B colidem e são espalhadas sem

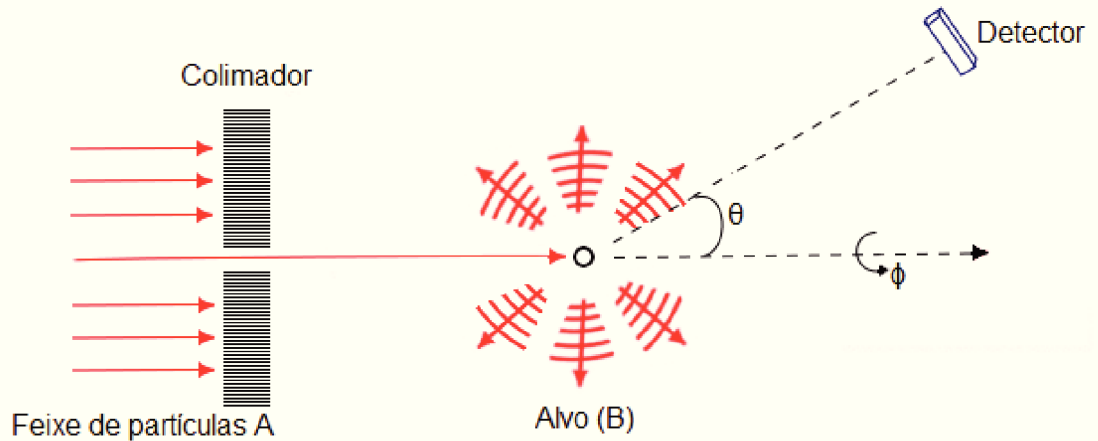


Figura 1 – Esquema de um experimento de espalhamento. Um feixe de partículas incidentes A que sofre um espalhamento esférico por um alvo B.

provocar qualquer alteração em sua estrutura interna,

$$A + B \rightarrow A + B. \quad (2.1)$$

Portanto, considerando o espalhamento elástico entre um elétron e um átomo de xenônio, na colisão não ocorrerá nenhuma alteração na estrutura eletrônica do átomo ($e^- + Xe \rightarrow e^- + Xe$). No espalhamento inelástico, a interação entre duas partículas A e B provocará uma mudança na estrutura interna (estado quântico) de alguma das partículas:

$$A + B \rightarrow \begin{cases} A' + B \\ A + B' \\ A' + B'. \end{cases} \quad (2.2)$$

Dessa maneira, no espalhamento inelástico, a interação de um elétron com um átomo de xenônio alteraria sua estrutura interna ($e^- + Xe \rightarrow e^- + Xe^*$), em que Xe^* é um estado excitado ou ionizado do átomo de xenônio.

2.2 Teoria do espalhamento clássico

Considerando o espalhamento de partículas clássicas com momento inicial p_i por uma força central no alcance finito, a partícula incidente possui energia E e parâmetro de impacto b bem definido, após a colisão com o alvo a partícula sai com um ângulo de espalhamento θ . A medida que o parâmetro de impacto b diminui, maior será o ângulo de espalhamento. Isto, é claro, representa a idealização que as características quânticas de colisão são ignoradas. Nesse caso, é mais conveniente utilizar o conceito de trajetória.

Pode-se perceber pela figura 2 que a posição de cada partícula incidente pode ser definida em coordenadas cilíndricas (b, ϕ, z) . Logo, a quantidade $d\sigma$ é à área das partículas

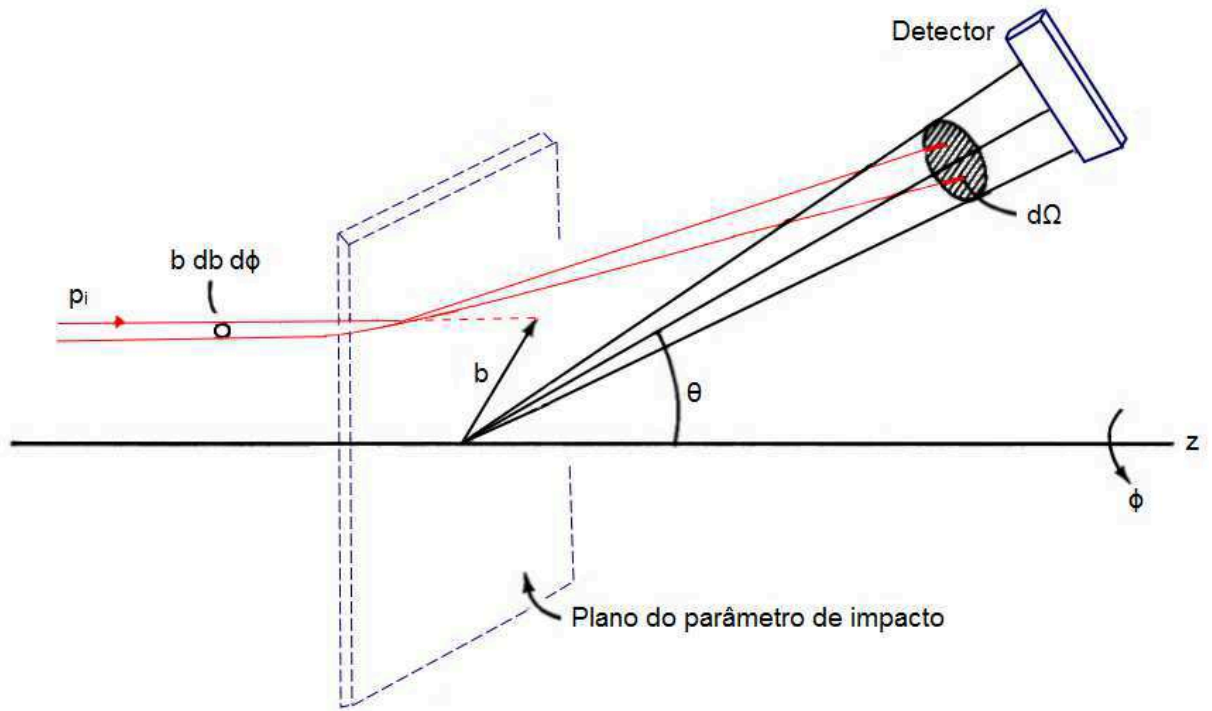


Figura 2 – Espalhamento clássico de uma partícula incidente sobre um alvo que é considerado como uma esfera rígida.

incidentes que encontra-se em um plano perpendicular ao momento p_i . Após a colisão as partículas espalhadas tornam-se independente do ângulo sólido $d\Omega$ centrado em torno da direção $\Omega(\theta, \phi)$. Portanto, classicamente

$$d\sigma_{cl} = b|db|d\phi \quad (2.3)$$

$$d\sigma_{cl} = b \left| \frac{db}{d \cos \theta} \right| |d \cos \theta| d\phi \quad (2.4)$$

onde,

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi = |d \cos \theta| d\phi \quad (2.5)$$

$$d\sigma_{cl} = b \left| \frac{db}{d \cos \theta} \right| d\Omega \quad (2.6)$$

com isso, temos,

$$\frac{d\sigma_{cl}}{d\Omega} = b \left| \frac{db}{d \cos \theta} \right| = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|. \quad (2.7)$$

De maneira geral, quando o parâmetro de impacto b diminui o ângulo de espalhamento θ aumentará, logo a seção de choque diferencial clássica $\frac{d\sigma_{cl}}{d\Omega}$ pode ser obtida se o parâmetro de impacto b é conhecido como função do ângulo de espalhamento θ .

Agora, vamos supor um caso específico na mecânica clássica em um espalhamento elástico, em que o alvo é fixo e rígido de raio R , e o fluxo de partículas incidentes por unidade de tempo colide com esse alvo, conforme a figura 3.

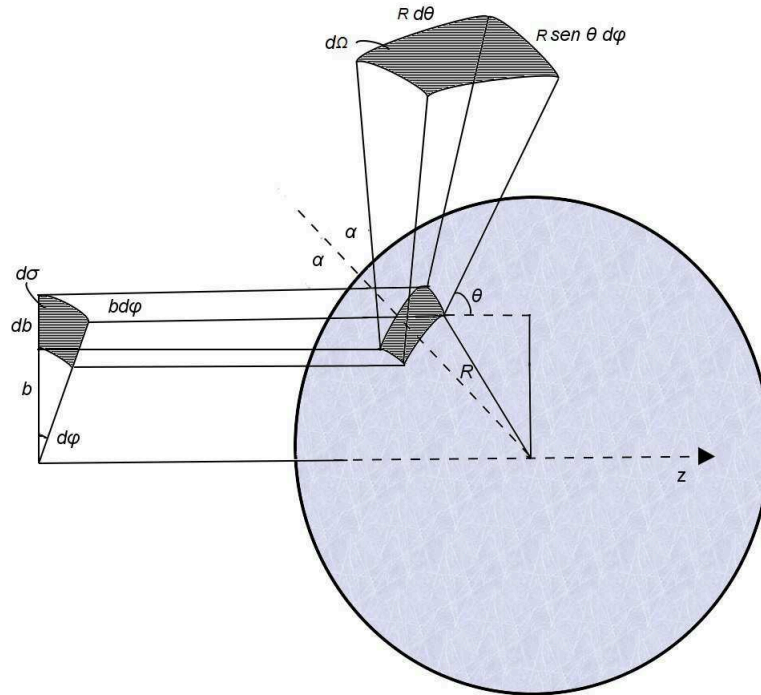


Figura 3 – Espalhamento em uma esfera rígida de raio R , conforme previsto pela mecânica clássica.

As partículas incidentes colidem com o alvo com velocidade v , parâmetro de impacto b e ângulo α , dada por,

$$b = R \sin \alpha. \quad (2.8)$$

Como trata-se de uma colisão elástica a velocidade deve ser a mesma antes e após a colisão. As partículas sofreram um espalhamento pela esfera rígida com um ângulo $\theta = \pi - 2\alpha$, relacionando com o parâmetro de impacto, temos

$$b = R \cos \frac{\theta}{2}, \quad (2.9)$$

e pela simetria axial do problema, a partícula deve mover-se num plano ϕ que é constante.

Dessa forma, pode-se calcular o número de partículas espalhadas na direção dos ângulos θ , ϕ dentro dos intervalos angulares $d\theta$ e $d\phi$. As partículas espalhadas através de ângulos entre θ e $\theta + d\theta$ são aquelas que vieram com os parâmetros de impacto entre b e $b + db$. Logo, utilizando a equação (2.9) defimos que

$$db = -\frac{R}{2} \sin \frac{\theta}{2} d\theta. \quad (2.10)$$

Como resultado, encontramos a seção de choque diferencial substituindo b e db na equação (2.7),

$$\frac{d\sigma_{cl}}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{R^2}{4}. \quad (2.11)$$

Integrando a seção de choque diferencial, temos

$$\sigma_{tot} = \iint \frac{d\sigma_{cl}}{d\Omega} d\Omega = \pi R^2. \quad (2.12)$$

Fica evidente que a seção de choque total é a área da esfera rígida, em que mede a probabilidade de interação entre um feixe de partículas incidentes com um alvo. Portanto, os fenômenos de espalhamentos clássicos são tratados como colisões, quais tem a característica especial de ser isotrópico ou independente do ângulo de espalhamento, ou seja, as partículas espalhadas sobre o alvo são independente do sentido em que é incidido.

Os físicos Ramsauer e Townsend observaram que em determinada quantidade de energia cinética do elétron em espalhamento entre elétrons e gases nobres, como xenônio, o feixe de elétrons passava através do alvo quase ileso, no qual observa-se pela probabilidade de espalhamento um valor mínimo, este conhecido como efeito Ramsauer-Townsend. Até então com a teoria de espalhamento clássico não existia nenhuma explicação para esse fenômeno, somente após a introdução da nova mecânica quântica e equação de Schrödinger, verifica-se que o efeito resultava da propriedade ondulatória dos elétrons.

2.3 Função de onda estacionária de espalhamento

Sabendo que o elétron pode se comportar como partícula e onda, imaginemos agora uma onda plana incidente, $\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}}$, que se move na direção z , encontra-se um potencial de espalhamento produzindo uma onda esférica, conforme a figura 4.

Considerando o espalhamento não relativístico de partícula subatômica sem spin de massa m por potencial $V(\vec{r})$ a equação de Schrödinger dependente do tempo é,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.13)$$

admitindo soluções estacionárias da forma

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}, \quad (2.14)$$

a função de onda $\psi(\vec{r})$ é a solução da equação de Schrödinger independente do tempo e a energia E da partícula é definida como,

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{mv^2}{2} \quad (2.15)$$

partindo das relações de de Broglie-Einstein. Portanto, o momento inicial da partícula,

$$\vec{p}_i = \hbar \vec{k}_i = m\vec{v}_i \quad (2.16)$$

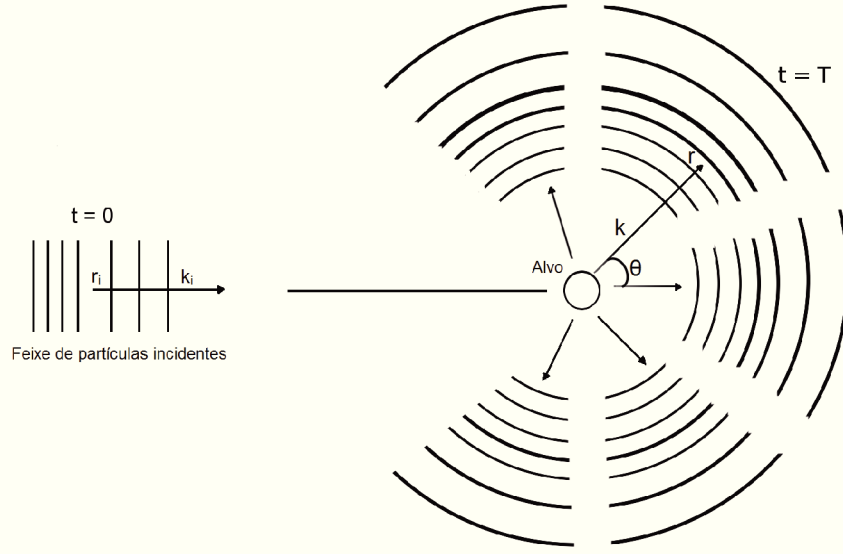


Figura 4 – Espalhamento de um pacote de onda plana incidente gerando uma onda esférica de saída.

sendo que, \vec{k}_i é o vetor de onda inicial, $\hbar = h/2\pi$ é a constante de Planck dividida por 2π e \vec{v}_i a velocidade inicial da partícula incidente. Introduzindo o potencial reduzido

$$U(\vec{r}) = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right) V(\vec{r}) \quad (2.17)$$

e reescrevendo a equação de Schrödinger independente do tempo

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (2.18)$$

com o potencial reduzido $U(\vec{r})$ e energia da partícula E , obtemos

$$[\nabla_r^2 + k^2 - U(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = 0. \quad (2.19)$$

Assumindo que um potencial $V(\vec{r})$ tende a zero mais rapidamente que r^{-1} conforme $r \rightarrow \infty$, o potencial reduzido $U(\vec{r})$ vai a zero em uma certa região do espaço, a região assintótica. O comportamento assintótico representa o limite do comportamento quando r cresce. Essa região pode-se considerar uma solução particular para a equação de Schrödinger independente do tempo (2.19), a qual será nomeada função de onda estacionária de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r})$.

Função esta que satisfaz a condição de contorno assintótica para r muito grande, tal que

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A(k) \left[e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right], \quad (2.20)$$

$e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}}$ é a onda incidente, $\frac{e^{ikr}}{r}$ é a onda esférica de saída do alvo, $f(\theta, \phi)$ é a amplitude de espalhamento dos elétrons, A é a constante de normalização que é independente de r e os ângulos θ e ϕ .

Dessa maneira, verifica-se que a amplitude de espalhamento $f(\theta, \phi)$ satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo assintótica (2.18), desprezando os termos de ordem r^{-1} na região onde o potencial reduzido $U(\vec{r})$ é desconsiderado, desde que, este potencial desapareça mais rapidamente que r^{-1} .

Pela figura 4 e com a definição da função de onda (2.20) pode-se concluir que para uma distância grande da função de onda estacionária de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r})$ na região assintótica espera-se que a equação de Schrödinger (2.18) seja uma superposição da onda plana incidente, de vetor de onda \vec{k}_i , com uma onda esférica de saída do centro espalhador, com amplitude dependente de θ e ϕ e inversamente proporcional a r .

2.4 Seção de choque

Os resultados dos processos de colisões experimentais são expressados em termos de seção de choque. A partir da figura 5, pode ser construído a definição de seção de choque. Considerando que N_A é o número médio de partículas incidentes A por unidade de tempo que incidem ao longo da região de área S

$$\phi_A = \frac{N_A}{S}. \quad (2.21)$$

Supondo que o alvo é muito fino, com espessura l perpendicular ao feixe incidente, pode-se denotar que n_B é o número de centros espalhadores na superfície S

$$n_B = S \cdot l \cdot N_B = S \widehat{N}_B \quad (2.22)$$

o qual N_B é o número de partículas B por unidade de volume no alvo e $\widehat{N}_B = N_B l$ é a densidade superficial média de partículas do alvo.

Denominando que o número total N_{tot} de partículas A que interagem por unidade de tempo com o alvo espalhador. Considerando as condições anteriores, a quantidade N_{tot} é diretamente proporcional ao fluxo incidente ϕ_A e número de centros espalhadores n_B . Dessa forma, é capaz de escrever-se o número total como

$$N_{tot} = \phi_A n_B \sigma_{tot}, \quad (2.23)$$

σ_{tot} é chamado de seção de choque total para o espalhamento da partícula A pela partícula B . Dessa maneira, pode-se reescrever a equação (2.23) como

$$\sigma_{tot} = \frac{N_{tot}}{\phi_A n_B}. \quad (2.24)$$

Logo, a definição de seção de choque total de um certo processo de espalhamento de uma colisão é definida como a razão entre o número de eventos observados N_{tot} por fluxo de partículas incidentes ϕ_A por unidade de tempo e por unidade de espalhador n_B , para o fluxo relativo de partículas incidente com respeito ao alvo[15].

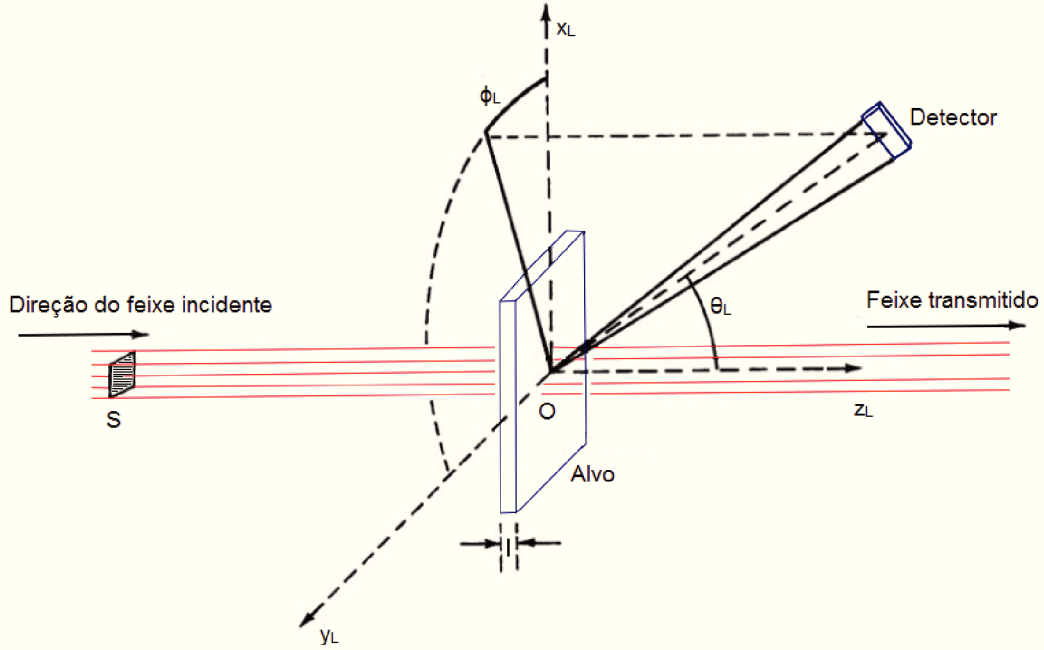


Figura 5 – Ilustração do espalhamento de um pacote de onda plana para definição da seção de choque.

A seção de choque total σ_{tot} fornece informações sobre a interação envolvida em colisões de partículas. No entanto, para termos detalhes mais significantes da natureza dessa interação precisa-se conhecer a seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$. No estudo de seções de choques diferenciais, o interesse está na distribuição angular das partículas espalhadas em função do ângulo sólido de espalhamento,

$$d\sigma(\Omega)d\Omega = \frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega, \quad (2.25)$$

$d\sigma(\Omega)$ é o número de partículas subatômicas por unidade de tempo e unidade de fluxo incidente dentro do ângulo sólido $d\Omega$ na direção $\Omega(\theta, \phi)$.

Para isso, é preciso considerar a densidade de corrente de probabilidade associada com a equação de Schrödinger independente do tempo (2.18),

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \{ \psi^*(\vec{r})(\vec{\nabla}_r \psi(\vec{r})) - (\vec{\nabla}_r \psi^*(\vec{r}))\psi(\vec{r}) \}$$

onde

$$\vec{j}(\vec{r}) = Re \left\{ \frac{\hbar}{mi} \psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla}_r \psi(\vec{r}) \right\}. \quad (2.26)$$

Essa expressão satisfaz a equação de continuidade

$$\vec{\nabla}_r \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (2.27)$$

o qual $\rho = \psi^* \psi = |\psi|^2$ é a densidade de probabilidade. Para casos estacionários, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, a equação (2.27) é reduzida

$$\vec{\nabla}_r \cdot \vec{j} = 0. \quad (2.28)$$

Partindo do operador gradiente $\vec{\nabla}_r$ das coordenadas esféricas dado por

$$\vec{\nabla}_r = \frac{\partial}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \hat{\phi} \quad (2.29)$$

pode-se reescrever a parte radial da densidade de corrente de probabilidade correspondente a função de onda estacionária de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}$ (2.20) como,

$$\vec{j} \cdot \hat{r} = A^* A \frac{\hbar}{mi} \left\{ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f^*(\Omega) \frac{e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{r} \right\} \times \frac{\partial}{\partial r} \left\{ e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\Omega) \frac{e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{r} \right\}. \quad (2.30)$$

Considerando a onda plana de entrada

$$\Phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} \quad (2.31)$$

e substituindo a função de onda estacionária (2.20) na equação de continuidade (2.27), pode-se obter o fluxo de uma onda incidente através de uma unidade de área normal ao vetor \vec{k}_i dada por

$$\begin{aligned} \vec{j}_{inc} \cdot \hat{k}_i &= Re \left\{ A^* A \frac{\hbar}{mi} e^{-ikr} \frac{d}{dz} e^{ikr} \right\} \\ \vec{j}_{inc} \cdot \hat{k}_i &= A^* A \frac{\hbar k}{m} e^{-ikr} \\ \vec{j}_{inc} \cdot \hat{k}_i &= A^* A v \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde $v = \hbar k/m$. Logo, o fluxo radial da onda esférica de saída é escrito como

$$\begin{aligned} \vec{j}_{out} \cdot \hat{r} &= Re \left\{ A^* A \frac{\hbar}{mi} f^*(\Omega) \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r} \right) \right\} \\ \vec{j}_{out} \cdot \hat{r} &= A^* A \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\Omega)|^2 \\ \vec{j}_{out} \cdot \hat{r} &= A^* A v \frac{1}{r^2} |f(\Omega)|^2. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Quando temos r grande, o fluxo radial da onda de saída de uma superfície esférica é $r^2 d\Omega = \vec{j} \cdot \hat{r} d\Omega / d\Omega$. Com isso, se dividirmos o fluxo de onda de saída (2.33) pelo fluxo de onda incidente (2.32) obtemos a seção de choque diferencial em termos de amplitude de espalhamento

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\Omega)|^2. \quad (2.34)$$

Para determinarmos a seção de choque integral sobre todos os ângulos sólidos, integramos todas as contribuições para uma dada energia em todos os elementos de ângulo sólido.

$$\sigma = \int \frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} d\Omega. \quad (2.35)$$

A expressão (2.34) estabelece a ligação fundamental entre a amplitude de espalhamento $f(\Omega)$ com a seção de choque diferencial, conforme aumenta $d\sigma$, maior será o ângulo sólido $d\Omega$ centrado em torno da direção $\Omega(\theta, \phi)$. Sendo (2.34) a equação de fundamental importância para o estudo da natureza de espalhamento, pois esta relação é a quantidade que os experimentalistas fornecem aos teóricos, que a seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ é interpretada em termos de probabilidade de espalhamento $f(\Omega)$ calculadas a partir das funções de onda estacionária de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r})$.

2.5 Equação de Schrödinger como uma equação integral

Nessa seção, trataremos da função de onda estacionária de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r})$ que é também solução de uma equação integral equivalente que incorpora a condição de contorno.

Partindo da equação de Schrödinger independente do tempo com o potencial reduzido (2.19),

$$[\nabla_{\vec{r}}^2 + k^2 - U(\vec{r})]\psi(k, \vec{r}) = 0 \quad (2.36)$$

podemos reescrever a equação, como

$$[\nabla_{\vec{r}}^2 + k^2] \psi(k, \vec{r}) = U(\vec{r})\psi(k, \vec{r}) \quad (2.37)$$

o lado direito dessa expressão é considerado como um termo não homogêneo da equação diferencial. Pode-se escrever a solução geral desta equação como

$$\psi(k, \vec{r}) = \Phi(k, \vec{r}) + \int G_0(k, \vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(k, \vec{r}') d\vec{r}', \quad (2.38)$$

em que a onda plana $\Phi(k, \vec{r})$ é solução da equação homogênea

$$[\nabla_{\vec{r}}^2 + k^2] \Phi(k, \vec{r}) = 0 \quad (2.39)$$

e $G_0(k, \vec{r}, \vec{r}')$ é a função de Green correspondente ao operador $\nabla_{\vec{r}}^2$ e o número de onda k . Isto é,

$$[\nabla_{\vec{r}}^2 + k^2] G_0(k, \vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.40)$$

Dessa forma, podemos simplificar a notação eliminando a dependência explícita em k nas funções ψ , Φ e G_0 .

Em problemas de espalhamento pode-se considerar a função $\Phi(\vec{r})$ simplesmente uma onda plana incidente $e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} = e^{ikz}$ com o eixo z em \vec{k}_i . Para onda plana, temos que $\Phi_{\vec{k}_i}$ é normalizada, de tal maneira que

$$\Phi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}}. \quad (2.41)$$

De modo mais geral,

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2.42)$$

e

$$\Phi_{\vec{k}'}(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} | \vec{k}' \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}. \quad (2.43)$$

De acordo com as ondas planas correspondentes, temos a relação de ortogonalidade

$$\langle \Phi_{\vec{k}'} | \Phi_{\vec{k}} \rangle \equiv \langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \delta(\vec{k}' - \vec{k}) \quad (2.44)$$

e

$$\int d\vec{k} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}| = 1. \quad (2.45)$$

Dessa maneira, a função de Green $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ soluciona a expressão (2.37), devido as propriedades da função delta. Com isso, reescrevendo já normalizada a equação (2.38), como

$$\psi_{\vec{k}_i}(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + \int G_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}_i}(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (2.46)$$

A equação (2.46) nos indica que a função $\psi_{\vec{k}_i}$ corresponde a uma onda plana particular $\Phi_{\vec{k}_i}$ tal que \vec{k}_i é o vetor de onda incidente. Para solucionar o problema de espalhamento por um dado potencial $U(\vec{r})$ estabelecido, falta esclarecer a função de Green com as condições de contorno.

2.6 Função de Green para o espalhamento

A função de Green é utilizada geralmente para resolver equações diferenciais não-homogêneas sujeitas a condições iniciais ou condições de contorno determinadas. Na teoria de muitos corpos, a função é utilizada especificamente na teoria quântica de campos, eletrodinâmica e mecânica estatística [19].

Para determinar a função de Green $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ é conveniente escrever a função delta no espaço de vetor de onda

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = (2\pi)^{-3} \int e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d\vec{k}' \quad (2.47)$$

e a função de Green $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ como

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = (2\pi)^{-3} \int G_0(\vec{k}', \vec{r}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} d\vec{k}'. \quad (2.48)$$

Após substituirmos a função $G_0(\vec{r}, \vec{r}')$ (2.48) na equação (2.40), temos

$$g_0(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}}}{k^2 - k'^2}, \quad (2.49)$$

portanto

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = -(2\pi)^{-3} \int \frac{e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{k^2 - k'^2} d\vec{k}'. \quad (2.50)$$

Integrando a equação (2.50) contornando os pólos $k' = \pm k$, precisamos definir bem para evitar estas singularidades dando significado para a integral. Conseqüência, a integração no plano complexo k' contornando os pólos e garantindo que a função de Green satisfaça para $r \rightarrow \infty$ as condições de contorno para a expressão (2.20), função de onda estacionária de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r})$. Resultando na função de Green, que pode ser escrita como

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (2.51)$$

onde as condições de contorno para $r \rightarrow \infty$ são indicadas com o sobrescrito (+) na função de Green.

2.7 Equação de Lippmann-Schwinger

A equação de Lippmann-Schwinger é definida quando retornamos a equação de integral (2.46), escrita como

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} + \int G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.52)$$

e substituímos $G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}')$ dado pela equação (2.51). Esta equação substitui a equação de Schrödinger independente do tempo (2.36) com a função de onda estacionária de espalhamento (2.20), satisfazendo as condições de contorno na região assintótica, por utilizá-las na função de Green.

Para verificar que a solução da equação de Lippmann-Schwinger (2.52) tem comportamento assintótico, deve-se analisar para um limite que r seja muito grande. Dessa maneira, a integral

$$J = \int \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (2.53)$$

Expandindo o denominador para $r' \ll r$,

$$|\vec{r}-\vec{r}'| = \sqrt{r^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}' + r'^2} \rightarrow r - \hat{r} \cdot \vec{r}' + \frac{1}{2r} (\hat{r} \times \vec{r}')^2 + \dots \quad (2.54)$$

os termos em r de ordem mais elevada são desprezados. Dessa forma, pode-se escrever

$$\frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr} e^{-ik\hat{r} \cdot \vec{r}'}}{r}. \quad (2.55)$$

Retornando para a função de onda estacionária (2.52), temos

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} \left[-\frac{1}{4\pi} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}') d\vec{r}' \right], \quad (2.56)$$

o vetor de onda final é definido como $\vec{k}_f = k\hat{r}$ e tem coordenadas polares esféricas (k, θ, ϕ) .

Retornando as condições de contorno (2.20), o qual $A = (2\pi)^{-3/2}$, temos

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} \left\{ e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}}{r} \right\}. \quad (2.57)$$

Comparando com a equação (2.56), obtem-se a representação da integral de amplitude de espalhamento

$$f = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(\vec{r}') d\vec{r}' \quad (2.58)$$

ou na forma da notação de Dirac

$$f = -2\pi^2 \langle \Phi_{\vec{k}_f} | U | \psi_{\vec{k}_i} \rangle, \quad (2.59)$$

o qual foi introduzida a onda plana $\Phi_{\vec{k}_f}$ correspondente ao vetor de onda \vec{k}_f , escrito como

$$\Phi_{\vec{k}_f} = (2\pi)^{-3/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}}. \quad (2.60)$$

Escrevendo a amplitude de espalhamento (2.59) em termos do potencial de espalhamento $V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 U(\vec{r})}{2m}$, temos

$$f = -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \langle \Phi_{\vec{k}_f} | V | \psi_{\vec{k}_i}^{(+)} \rangle. \quad (2.61)$$

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

$$T_{fi} = \langle \Phi_{\vec{k}_f} | V | \psi_{\vec{k}_i}^{(+)} \rangle, \quad (2.62)$$

portanto a amplitude de espalhamento (2.61) pode ser escrita como

$$f = -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} T_{fi}. \quad (2.63)$$

Com isso, com a equação (2.63) pode-se reescrever a equação da seção de choque diferencial (2.34),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} |T_{fi}|^2, \quad (2.64)$$

em que relaciona a amplitude de espalhamento $f(\Omega)$ com a matriz de transição T_{fi} .

No capítulo 2 definimos a função de onda estacionária de espalhamento ($\psi_{\vec{k}_i}^+$) como uma solução da equação diferencial parcial de Schrödinger (2.18) que satisfaz as condições de contorno (2.20). Foi demonstrado que a amplitude de espalhamento e seção de choque diferencial são determinadas através do comportamento assintótico da função de onda estacionária de espalhamento. No próximo capítulo será utilizado as mesmas propriedades porém usando o conhecimento do método de ondas parciais.

Capítulo 3

Método de ondas parciais

Neste capítulo vamos utilizar a mesma propriedade do capítulo 2 para obtermos explicitamente a amplitude de espalhamento e a seção de choque, fazendo a consideração de que o potencial de interação $V(\vec{r})$ é central, depende apenas da magnitude do vetor \vec{r} . Nesse caso, a solução da equação de Schrödinger (2.18) é separada em coordenadas esféricas, que pode-se encontrar a ligação entre a função radial e a função de onda assintótica da função de onda estacionária de espalhamento. Este procedimento é chamado como método de ondas parciais. O capítulo 3 foi baseado nas referências [14], [15], [16], [17] e [18].

3.1 Equação radial

Considerando no sistema de coordenadas esféricas o espalhamento de uma partícula de massa m por um potencial central $V(\vec{r})$, a equação de Schrödinger independente do tempo é escrito como

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) \right] \psi^{(+)}(\vec{r}) = E \psi^{(+)}(\vec{r}), \quad (3.1)$$

de forma que o laplaciano em coordenadas esféricas ∇_r^2 é definido como

$$\nabla_r^2 = \left[\frac{1}{r^2} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (3.2)$$

Escrevendo o quadrado do operador do momento angular orbital L^2 , tal que

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (3.3)$$

Com a equação (3.3) podemos escrever o Hamiltoniano da equação (3.1) como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r), \quad (3.4)$$

de modo que

$$[H, L^2] = [H, L_z] = 0. \quad (3.5)$$

Os operadores H , L^2 e L_z comutam, e possuem autofunções comuns $Y_{lm}(\theta, \phi)$, de tal modo que

$$L^2 Y_{lm}(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (3.6)$$

e

$$L_z Y_{lm}(\theta, \phi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (3.7)$$

em que l é o número de momento orbital angular e m o número quântico magnético, associados aos autovalores destes operadores. Com isso, pode-se expandir a função de onda de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}$ em termos de ondas parciais, de números quânticos l e m , da seguinte forma

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm}(k) R_{lm}(k, r) Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (3.8)$$

Temos aqui explicitamente a dependência da função de onda $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}$, de função radial R_{lm} e coeficiente de expansão c_{lm} no número de onda $k = \frac{(2mE)^{1/2}}{\hbar}$. O método de ondas parciais tem vantagem na expansão da equação (3.8) obtendo uma expressão conveniente de amplitude de espalhamento.

Primeiramente, utilizando a expansão (3.8) na equação de Schrödinger independente do tempo (3.1) e fazendo o uso das equações (3.4) e (3.6), obtemos a equação para cada função radial

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(k, r) + V(r) R_l(k, r) = E R_l(k, r). \quad (3.9)$$

É conveniente definirmos uma nova função a ser determinada

$$u_l(k, r) = r R_l(k, r) \quad (3.10)$$

e introduzir a equação (3.9) em termos do potencial reduzido $U = \frac{2mV}{\hbar^2}$ e do número de onda, obtemos a seguinte expressão

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l(k, r) = 0, \quad (3.11)$$

em que é definida como equação radial.

3.2 As condições de contorno

Utilizando a equação radial (3.11) para examinar as condições de contorno que devemos impor as funções radiais $u_l(k, r)$. É de se esperar que o intervalo de saída a do potencial pode ser expresso $u_l(k, r)$ como

$$u_l(k, r) = kr \left[C_l^{(1)}(k) j_l(kr) + C_l^{(2)} n_l(kr) \right] \quad (3.12)$$

em que $r \ll a$ e os dois pares $C_l^{(1)}$ e $C_l^{(2)}$ são constantes de integração que dependem de k . Supondo que r é tão grande que os termos $U(r)$ e $\frac{l(l+1)}{r^2}$ podem ser desconsiderados na equação (3.11). A solução assintótica é na forma $e^{\pm ikr}$. Dessa forma, pode-se escrever para r grandes

$$u_l(k, r) = F_l(k, r)e^{\pm ikr} \quad (3.13)$$

no qual $F_l(k, r)$ é uma função de variação lenta de r . Substituindo a equação (3.13) na equação (3.11) temos

$$\frac{F_l''}{F_l} \pm 2ik \frac{F_l'}{F_l} = W_l(r) \quad (3.14)$$

onde

$$W_l(r) = U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3.15)$$

em que são escritos $F_l' = \frac{dF_l}{dr}$, $F_l'' = \frac{d^2F_l}{dr^2}$. Como a função F_l está variando lentamente, retirando o termo do $\frac{F_l''}{F_l}$ na equação (3.14), pode-se reescrever como

$$\pm 2ik \frac{F_l'}{F_l} \simeq W_l(r) \quad (3.16)$$

de modo que para r grande

$$F_l(k, r) = e^{\left[\pm \frac{1}{2ik} \int^r W_l(r') dr' \right]}. \quad (3.17)$$

Portanto, se

$$\lim_{r \rightarrow \infty} |U(r)| < \frac{M}{r^{1+\epsilon}} \quad (3.18)$$

o qual M é uma constante e ϵ é maior que zero, podemos deduzir que a equação (3.17) é independente de r para $r \rightarrow \infty$. Dessa forma, a condição (3.18) é satisfeita se a solução geral da equação (3.11) para r grandes for dada como

$$u_l(k, r) = B_l^{(1)}(k)e^{ikr} + B_l^{(2)}(k)e^{-ikr}, \quad (3.19)$$

em que $B_l^{(1)}(k)$ e $B_l^{(2)}(k)$ são independentes de r . Usando o fato que a partir das funções esféricas de Bessel, para x reais um pouco maior que $l(l+1)$ pode-se utilizar as expressões assintóticas,

$$j_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{1}{2}l\pi\right) \quad (3.20)$$

e

$$n_l(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} -\frac{1}{x} \cos\left(x - \frac{1}{2}l\pi\right). \quad (3.21)$$

Podemos utilizar as equações (3.20) e (3.21) para expressar diferentes maneiras a condição de contorno. Por exemplo, pode-se obter

$$u_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_l(k) \sin\left[kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(k)\right] \quad (3.22)$$

com

$$A_l(k) = \left\{ [C_l^{(1)}(k)]^2 + [C_l^{(2)}(k)]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (3.23)$$

e

$$\tan \delta_l(k) = -\frac{C_l^{(2)}(k)}{C_l^{(1)}(k)}. \quad (3.24)$$

A partir da equação (3.10) e (3.24) implica que também consegue-se escrever

$$R_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \hat{A}_l [j_l(kr) - \tan \delta_l(k) n_l(kr)] \quad (3.25)$$

em que $\hat{A}_l(k)$ é independente de r . Para o momento, observa-se que as mudanças de fase δ_l mostram a influência da interação no espalhamento. De fato, na ausência de interação, a solução normal $\nu_l(k, r)$ da equação radial (3.11) é apenas dada por $\nu_l(k, r) \sim r j_l(kr)$, de modo que

$$\nu_l(k, r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sin \left[kr - \frac{1}{2} l \pi \right]. \quad (3.26)$$

Comparando as equações (3.22) e (3.26) vemos que a interação em processos de espalhamento é claramente responsável pela presença das mudanças de fase δ_l , o qual são medidas em radianos ou graus.

3.3 Amplitude de espalhamento e seção de choque

Para determinação da amplitude de espalhamento precisa utilizar a forma assintótica da função de onda de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}$ que tem dependência em k , dada por

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A(k) \left[e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right]. \quad (3.27)$$

Usando a equação (3.20), pode-se reescrever a expressão (3.27) como

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A(k) \left[\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{\sin(kr - \frac{1}{2} l \pi)}{kr} P_l(\cos \theta) + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (3.28)$$

ou utilizando os os polinômios de Legendre $P_l(\cos \theta)$, escrito como

$$P_l(\cos \theta) = \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l,0}(\theta), \quad (3.29)$$

podemos reescrever na forma

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A(k) \left[\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} i^l \times \frac{e^{i(kr - \frac{1}{2} l \pi)} - e^{-i(kr - \frac{1}{2} l \pi)}}{2ikr} Y_{lm}(\theta, \phi) \delta_{m,0} + f(k, \theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right]. \quad (3.30)$$

Por outro lado, considerando a expansão da onda parcial (3.8) para r grandes. Usando o fato de que $R_{lm}(k, r) \equiv R_l(k, r) = r^{-1}u_l(k, r)$ e com a equação (3.22) obtém-se a relação

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{lm}(k) A_l(k) \frac{1}{2ir} \left[e^{i(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)} - e^{-i(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)} \right] Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (3.31)$$

Comparando os coeficientes das ondas esféricas de entrada nas equações (3.30) e (3.31), temos

$$c_{lm}(k) = \frac{A(k)}{kA_l(k)} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} i^l e^{i\delta_l} \delta_{m,0}. \quad (3.32)$$

Nota-se que a equação (3.32) implica na expansão de onda parcial (3.8) como

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) = A(k) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{[4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}}}{kA_l(k)} i^l e^{i\delta_l} R_l(k, r) Y_{l,0}(\theta) \quad (3.33)$$

ou

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) = A(k) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{kA_l(k)} i^l e^{i\delta_l} R_l(k, r) P_l(\cos \theta) \quad (3.34)$$

Em seguida, combinando os coeficientes das ondas esféricas de saída $\frac{e^{ikr}}{r}$, e utilizando as equações das funções de onda estacionária (3.32) e (3.29) encontramos que a amplitude de espalhamento é independente do ϕ e dada pela

$$f(k, \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[e^{2i\delta_l(k)} - 1 \right] P_l(\cos \theta). \quad (3.35)$$

Introduzindo que a amplitude das ondas parciais $a_l(k)$ é escrita como

$$a_l(k) = \frac{1}{2ik} \left[e^{2i\delta_l(k)} - 1 \right]. \quad (3.36)$$

Assim, com o conhecimento da mudança de fase $\delta_l(k)$ permite obter a amplitude de espalhamento. Na próxima seção discutiremos melhor como se procede essa mudança de fase da onda. Dessa forma, com a amplitude das ondas parciais $a_l(k)$ consegue-se reescrever a equação (3.35) na forma

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l(k) P_l(\cos \theta). \quad (3.37)$$

Para o momento, nota-se que também é capaz reescrever a equação (3.35) como

$$f(k, \theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos \theta), \quad (3.38)$$

enquanto a equação (3.36) pode ser escrita como

$$a_l(k) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k). \quad (3.39)$$

Esta equação é de grande importância, uma vez que ela fornece a amplitude de espalhamento através da mudança de fase. De acordo com a relação (2.34), a seção de choque diferencial de espalhamento é dado por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Omega) = |f(\Omega)|^2, \quad (3.40)$$

em que o angulo sólido Ω depende de (k, θ) . Considerando a mudança de fase δ_l pode-se também escrever a seção choque diferencial de espalhamento (3.40) como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k, \theta) = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l(k)} \sin \delta_l(k) P_l(\cos\theta) \right|^2, \quad (3.41)$$

e a seção de choque total através da integração sobre os ângulos sólidos total é obtida como

$$\sigma_{tot}(k) = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (3.42)$$

Dessa maneira, pode-se notar que a contribuição máxima de cada onda parcial para a seção de choque total é dada por

$$\sigma_{tot}^{max}(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (3.43)$$

ocorrendo quando

$$\delta_l(k) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.44)$$

Quando a mudança de fase $\delta_l(k) = n\pi$ não há contribuição para o espalhamento da onda parcial na energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Fica evidente que as expressões acima que o método de ondas parciais é mais útil quando apenas um pequeno número de ondas parciais contribuem para o espalhamento. Esta situação surge apenas em baixas energias incidentes, como no caso do efeito Ramsauer-Townsend. Assim se, em um poço quadrado

$$ka \ll 1 \quad (3.45)$$

em que a é o alcance do potencial no poço e k é o número de onda da partícula, precisa-se apenas calcular um pequeno número de mudanças de fase de modo a obter a amplitude de espalhamento.

3.4 Função de onda de espalhamento

Voltando à expansão da onda parcial (3.33) e (3.34) da função de onda de espalhamento $\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}$. Em termos da função de onda radial $u_l(k, r)$, é possível escrever

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) = A(k) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{[4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}}}{A_l(k)} i^l e^{i\delta_l} \frac{u_l(k, r)}{kr} Y_{(l,0)}(\theta) \quad (3.46)$$

ou

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) = A(k) \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{A_l(k)} i^l e^{i\delta_l} \frac{u_l(k, r)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (3.47)$$

no qual a função $u_l(k, r)$ é exibido o comportamento assintótico (3.22). Dessa forma,

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) = A(k) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \frac{\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l)}{kr} P_l(\cos \theta) \quad (3.48)$$

percebe-se pela expressão que os coeficientes $A_l(k)$ não têm influência alguma sobre o espalhamento. Pode-se também escrever a equação (3.47) na forma

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) = r^{-1} \sum_{l=0}^{\infty} \chi_l(k, r) P_l(\cos \theta) \quad (3.49)$$

no qual é introduzido uma nova função $\chi_l(k, r)$, de modo que

$$\chi_l(k, r) = \bar{A}_l(k) u_l(k, r), \quad (3.50)$$

com

$$\bar{A}_l = \frac{A(k)}{k A_l(k)} (2l+1) i^l e^{i\delta_l}. \quad (3.51)$$

Então utilizando a equação (3.22), temos

$$\chi_l(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{A(k)}{k} (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l). \quad (3.52)$$

Sendo possível escrever a relação (3.47) como

$$\psi_{\vec{k}_i}^{(+)}(k, \vec{r}) = A(k) \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{i}{2kr} \times [(-1)^l e^{-ikr} - e^{2i\delta_l} e^{ikr}] P_l(\cos \theta), \quad (3.53)$$

onde a função de onda de espalhamento é escrita em termos de onda incidente e onda esférica de saída.

3.5 Mudança de fase da onda

Na seção de amplitude de espalhamento e seção de choque 3.3 percebe-se que o conhecimento das mudanças de fase permitem obter a amplitude de espalhamento por meio da relação (3.35). Nessa seção, discutiremos com mais detalhes essas mudanças de fase, primeiramente precisa-se estabelecer algumas relações entre as mudanças de fase e o potencial de interação. Considerando em um processo de espalhamento dois potenciais reduzidos $U(r)$ e $\bar{U}(r)$ com as seguintes equações radiais com dependência em k , temos

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l(r) = 0 \quad (3.54)$$

e

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \bar{U}(r) \right] \bar{u}_l(r) = 0. \quad (3.55)$$

Devemos assumir que as funções $u_l(r)$ e $\bar{u}_l(r)$ são normalizadas e são escritas como

$$u_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \left[\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) + \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi) \tan \delta_l \right] \quad (3.56)$$

e

$$\bar{u}_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \left[\sin(kr - \frac{1}{2}l\pi) + \cos(kr - \frac{1}{2}l\pi) \tan \bar{\delta}_l \right]. \quad (3.57)$$

O Wronskiano das duas soluções u_l e \bar{u}_l é definido como

$$W(u_l, \bar{u}_l) = u_l \bar{u}_l' - \bar{u}_l' u_l \quad (3.58)$$

em que o primeiro termo denota uma derivada em relação à variável r . Então, se multiplicarmos a equação (3.54) em \bar{u}_l e a equação (3.55) em u_l e subtrairmos termo a termo, obtém-se

$$\bar{u}_l u_l'' - u_l \bar{u}_l'' - (U - \bar{U}) u_l \bar{u}_l = 0 \quad (3.59)$$

ou

$$\frac{d}{dr} W(u_l, \bar{u}_l) = -(U - \bar{U}) u_l \bar{u}_l. \quad (3.60)$$

Após a integração através da variável r no intervalo (a, b) , deduzimos que

$$[W(u_l, \bar{u}_l)]_a^b = - \int_a^b \bar{u}_l(r) [U(r) - \bar{U}(r)] u_l(r) dr. \quad (3.61)$$

Se os limites de integração forem $a = 0$ e $b = \infty$ e $u_l(0) = \bar{u}_l = 0$ obtemos com a ajuda das equações (3.56) e (3.57) que

$$\tan \delta_l - \tan \bar{\delta}_l = -k \int_0^\infty \bar{u}_l(r) [U(r) - \bar{U}(r)] u_l(r) dr \quad (3.62)$$

desde que $U(r)$ e $\bar{U}(r)$ tenda para zero mais rapidamente do que r^{-1} quando $r \rightarrow \infty$. Para um caso particular quando $\bar{U} = 0$ a equação (3.62) pode ser escrita como

$$\tan \delta_l = -k \int_0^\infty j_l(kr) U(r) R_l(r) r^2 dr \quad (3.63)$$

em que a função radial $R_l(r)$ é normalizada de acordo com a equação

$$R_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} j_l(kr) - \tan \delta_l n_l(kr). \quad (3.64)$$

A relação (3.62) fornece uma maneira de investigar a dependência das mudanças de fase sobre o potencial.

Primeiramente, observa-se que a partir da equação (3.26) que a solução com ausência de $\nu_l(k, r)$ temos

$$r = \frac{1}{k} (n\pi + \frac{1}{2}l\pi), \quad (3.65)$$

enquanto que a equação (3.22) é correspondente a função radial $u_l(k, r)$ na região assintótica

$$r = \frac{1}{k} (n\pi + \frac{1}{2}l\pi - \delta_l). \quad (3.66)$$

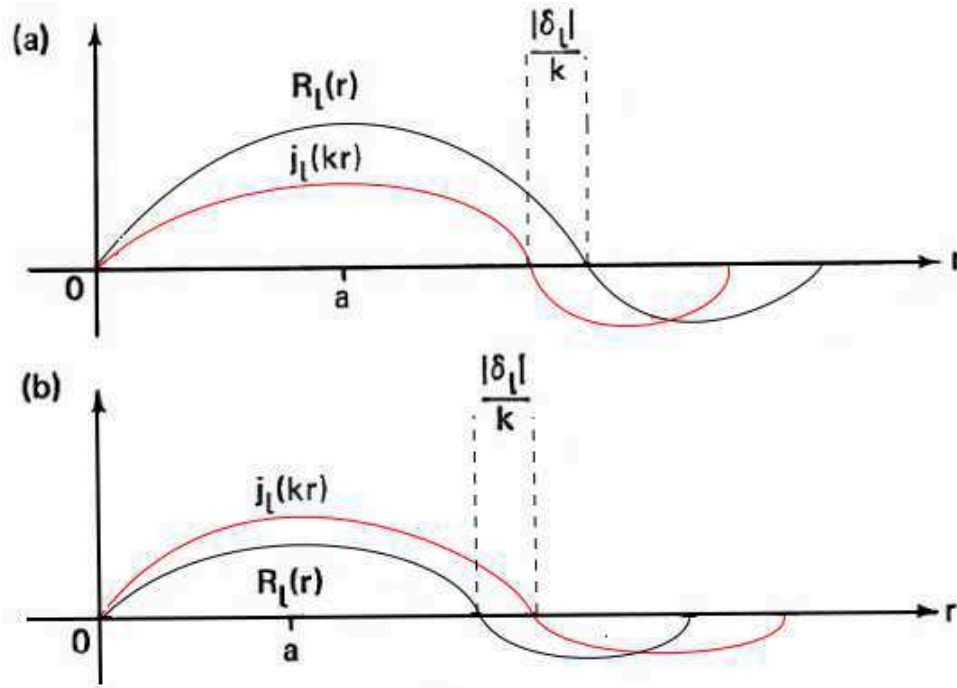


Figura 6 – Representação esquemática do efeito sobre a onda radial livre $j_l(kr)$. A figura (a) mostra um potencial repulsivo (positivo), enquanto (b) um potencial atrativo (negativo).

Para os potenciais repulsivos espera-se que a função de onda radial $u_l(k, r)$ deva ser empurrada para fora em relação à onda radial livre $\nu_l(k, r)$. Assim, os zeros dado pela equação (3.66) devem ser deslocados com respeito a equação (3.65) por um valor positivo ($-\delta_l/k$). Dessa maneira, a mudança de fase é menor do que zero ($\delta_l < 0$), conforme a figura (6. a). Pelo mesmo raciocínio, vemos que para potenciais atrativos a função de onda radial $u_l(k, r)$ é puxado para dentro em relação à onda radial livre $\nu_l(k, r)$ para que a mudança de fase seja maior que zero ($\delta_l > 0$), como mostrado na figura (6. b).

Anteriormente vimos que se $\delta_l(k) = n\pi$ para valores particulares de l e k não haverá espalhamento da onda parcial considerando a energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Por exemplo, em baixas energias ($ka \ll 1$) se um potencial atrativo for suficientemente forte para produzir uma onda s ($l = 0$), a mudança de fase δ_0 será igual à $n\pi$ para n inteiros. Dessa forma, considera-se que as outras mudanças de fase podem ser desprezadas. No caso de que não haverá essencialmente espalhamento naquela energia. Tal fenômeno pode ser visto no efeito Ramsauer-Townsend, onde ocorre colisões de elétrons com átomos de um gás rarefeito em baixas energias, como em nosso caso com o gás de Xenônio.

3.6 Espalhamento por um poço quadrado

Nessa seção ilustraremos o método de ondas parciais em dois exemplos, o potencial em um poço quadrado e de uma esfera rígida. Primeiramente vamos considerar um poço

quadrado de potencial atrativo, conforme a figura (7), de tal forma que

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 (U_0 > 0), & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}. \quad (3.67)$$

Na região $r < a$, em que há interação, a equação radial (3.11) se torna

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \kappa^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \quad (3.68)$$

em que temos

$$\kappa = \sqrt{k^2 + U_0} \quad (3.69)$$

e não é escrito explicitamente a dependência em k de u_l a fim de simplificar a notação. Portanto, a solução regular da equação (3.68), para $r < a$, é dada por

$$u_l(r) = C_l r j_l(\kappa r) \quad (3.70)$$

no qual C_l é independente da variação r . A função de onda radial no “interior”, em $r < a$, é dada pela

$$R_l(r) = C_l j_l(\kappa r). \quad (3.71)$$

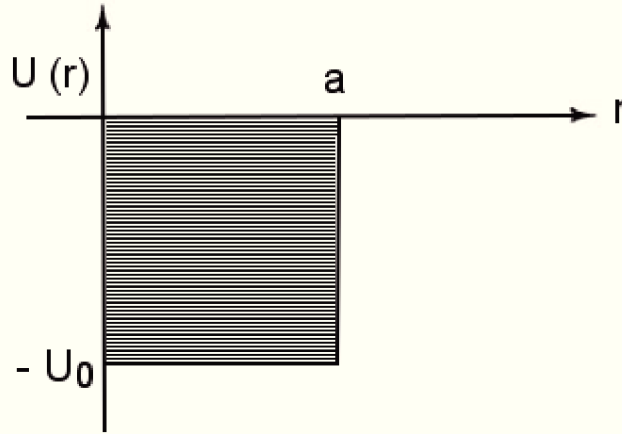


Figura 7 – Poço quadrado de potencial atrativo

Na região $r > a$, em que não há nenhuma interação, a função de onda radial no “exterior” é normalizada, tal que

$$R_l(r) = j_l(kr) - \tan \delta_l n_l(kr). \quad (3.72)$$

Dessa forma, combinando as funções (3.71) e (3.72) junto com suas primeiras derivadas de $r = a$, descobrimos que a quantidade $\tan \delta_l$ é dada por

$$\tan \delta_l(k) = \frac{k j_l'(ka) - \gamma_l(k) j_l(ka)}{k n_l'(ka) - \gamma_l(k) n_l(ka)} \quad (3.73)$$

com

$$\gamma_l = \frac{\kappa j_l'(\kappa a)}{j_l(\kappa a)}. \quad (3.74)$$

Primeiramente considerando o espalhamento de ondas, para $l = 0$, usamos o fato de que $j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$ e $n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}$ para deduzirmos as equações (3.73) e (3.74), tal que

$$\tan \delta_0 = \frac{k \tan(\kappa a) - \kappa \tan(ka)}{\kappa + k \tan(ka) \tan(\kappa a)} \quad (3.75)$$

ou

$$\delta_0 = -ka + \tan^{-1} \left[\frac{k}{\kappa} \tan \kappa a \right]. \quad (3.76)$$

O comportamento da mudança de fase δ_0 em baixas energias ($ka \ll 1$) é de particular interesse nos estudos de espalhamento de elétrons e átomos de xenônio. Assumindo que o potencial é fraco, ou seja, as funções atômicas são mais estendidas espacialmente, de tal maneira que $U_0 a^2 \ll 1$, podemos constatar a partir da equação (3.69) que também temos $\kappa \ll 1$. Portanto, se exigirmos de acordo com a mudança de fase que $\delta_0 \rightarrow 0$ quando $U_0 \rightarrow 0$, conclui-se que a partir da equação (3.76) que $\delta_0 \rightarrow 0$ como $k \rightarrow 0$. Por isso, para valores finitos de $ka \ll 1$ temos aproximadamente

$$\delta_0 \simeq ka \left[\frac{\tan \kappa a}{\kappa a} - 1 \right]. \quad (3.77)$$

Nota-se também que o comprimento de onda de espalhamento é dado como

$$\alpha = a \left[1 - \frac{\tan \lambda_0 a}{\lambda_0 a} \right], \quad (3.78)$$

em que $\lambda_0 = U_0^{1/2}$. Quando $\lambda_0 a \ll 1$ para uma interação fraca, vemos que a partir da equação (3.78) que α é negativo nesse caso. Enquanto, a seção de choque é dada por

$$\sigma_0 = 4\pi\alpha^2. \quad (3.79)$$

Em baixas energias, se aumentarmos a força de acoplamento U_0 de modo que a quantidade κa também se torne maior, percebe-se que κa aumenta de 0 para $\frac{1}{2}\pi$, enquanto a mudança de fase δ_0 cresce de 0 para $\frac{1}{2}\pi$, conforme a figura (8). Em particular, na energia igual a zero temos $\kappa a = \lambda_0 a$ e então $\lambda_0 a = \frac{1}{2}\pi$ ou $U_0 a^2 = \frac{1}{4}\pi^2$ a mudança de fase na energia igual a zero é dada por

$$\lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k) = \frac{1}{2}\pi. \quad (3.80)$$

Nesse caso, existe uma energia de ressonância zero conduzindo a divergência do comprimento de onda de espalhamento (3.78) e da seção de choque de espalhamento, porque a influência do alvo no espalhamento torna-se eficaz no infinito. Quando $\lambda_0 a = \frac{3}{2}\pi$, o potencial torna-se capaz de acolher um segundo estado ligado da onda, e existe uma outra

energia de ressonância zero, e assim por diante. Em particular, se $\lambda_0 a$ é maior que $\frac{1}{2}\pi$, a mudança de fase δ_0 passa por $\frac{1}{2}\pi$ conforme a figura (8) e possui

$$\lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k) = \pi. \quad (3.81)$$

Dessa maneira, vemos que a partir da equação (3.75) e as discussões já feitas que a mudança de fase torna-se

$$\delta_0 \simeq \pi - ka \left\{ 1 - \frac{\tan \kappa a}{\kappa a} \right\}. \quad (3.82)$$

Se repetirmos os argumentos apresentados acima, é possível mostrar que se U_0 ou λ_0 aumentam de tal forma que o potencial pode suportar n estados ligados, a mudança de fase da onda na energia zero é igual a

$$\lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k) = n\pi. \quad (3.83)$$

Nesse caso, a equação (3.83) deixa explícito que a seção de choque de espalhamento total (3.42) desaparece para n inteiros e o alvo torna-se invisível para o elétron atribuindo um mínimo, conhecido este como efeito Ramsauer-Townsend.

Quando $\lambda_0 a = \frac{1}{2}(2n+1)\pi$ tal que o potencial suporta $(n+1)$ estados ligados, temos

$$\lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi. \quad (3.84)$$

Portanto, os resultados das equações (3.83) e (3.84) são de fato os verdadeiros casos gerais de interação do poço quadrado.

Até agora, foi demonstrado o comportamento da mudança de fase δ_0 em baixas energias e a função da força de acoplamento U_0 . Também podemos ver que a mudança de fase $\delta_0(k)$ pode ter valores fixos de U_0 ou λ_0 , por exemplo, se $\lambda_0 a < \frac{1}{2}\pi$ de modo que o potencial não suporta um estado ligado, vemos que as equações (3.76) e (3.77) em baixas energias, que a medida que ka aumenta, a mudança de fase δ_0 primeiro cresce para um valor próximo de $\frac{1}{2}\pi$ e depois diminui, conforme ilustrado na figura (8). Essa figura também nos mostra o comportamento em baixas energias da mudança de fase δ_0 correspondente a um poço quadrado que pode suportar um estado ligado fraco. Em geral, a medida que ka aumenta, a mudança de fase δ_0 aumenta de seu valor máximo $\delta_0(k=0) = n\pi$ para um máximo que é próximo a $(n + \frac{1}{2})\pi$.

Se exigirmos que a mudança de fase seja uma função contínua de k , aumentando ainda mais ka deixando a região de baixas energias, podemos ver que a partir da equação (3.76) que a mudança de fase δ_0 irá diminuir progressivamente do seu valor máximo $\delta_0^{max} \simeq (n + \frac{1}{2})\pi$ de modo que em última análise

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \delta_0(k) = 0. \quad (3.85)$$

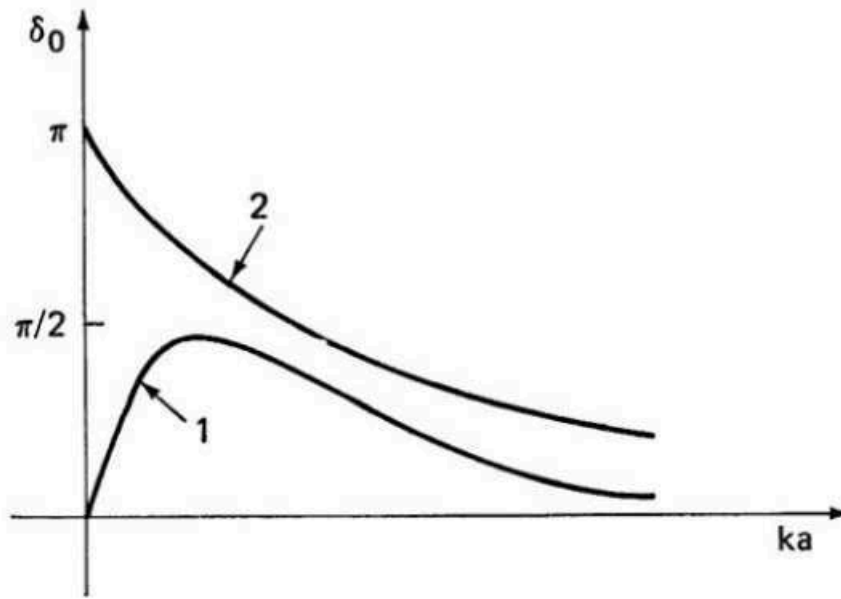


Figura 8 – Comportamento da mudança de fase na onda em baixas energias. A primeira curva corresponde a um potencial que não pode suportar um estado ligado fraco. A segunda curva refere-se a um potencial que pode produzir um estado ligado fraco.

Agora vamos considerar um potencial de uma esfera rígida, de tal forma que

$$U(r) = \begin{cases} +\infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases} \quad (3.86)$$

A condição de contorno nesse caso é simples, por causa que a função de onda exterior (3.25) deve desaparecer em $r = a$, de modo que

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{n_l(ka)} \quad (3.87)$$

e γ_l é infinito. No limite de baixas energias ($ka \ll 1$), a mudança de fase é dada pela

$$\delta_0 = -ka. \quad (3.88)$$

No limite $k \rightarrow 0$ todas as mudanças de fase desaparecem e apenas a onda s contribui para a amplitude de espalhamento (3.38). O comprimento de espalhamento é dada por $\alpha = a$. Além disso, a seção de choque diferencial na energia zero é tal que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} a^2 \quad (3.89)$$

enquanto que a seção de choque total na energia zero, torna-se

$$\sigma_{tot} \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} 4\pi a^2. \quad (3.90)$$

Este resultado é intrigante uma vez que a seção de choque total é 4 vezes maior que a esperada pela mecânica clássica de πa^2 . De fato, a análise está correta de tal forma que a dependência em θ da função de onda é mais detalhada, mostrando que uma parte da amplitude de espalhamento acontece nas regiões externas da esfera rígida.

Capítulo 4

Espalhamento em baixas energias

Neste capítulo é apresentado o estudo realizado na Universidade Federal da Fronteira Sul, campus Realeza. O trabalho consiste no processo de espalhamento entre elétrons e átomos de xenônio em baixas energias, para demonstração do mínimo na seção de choque, conhecido como efeito Ramsauer-Townsend. O capítulo 4 foi baseado nas referências [6], [20] e [21]

4.1 Efeito Ramsauer-Townsend

No início da década de 1920, Carl Ramsauer e John Townsend com o aprimoramento das técnicas experimentais de avaliação da dinâmica de elétrons em gases, estudaram independentemente colisões entre átomos e elétrons em baixas energias. Naquela época observaram que para certos valores de energia do elétron, estes eram transmitidos através de um átomo de gás nobre, dessa forma o gás nobre atua como se fosse transparente para esses elétrons. Este ficou conhecido como efeito Ramsauer-Townsend, que é um fenômeno físico que envolve o espalhamento de elétrons de baixa energia por átomos de gases nobres, como, argônio, criptônio e xenônio: um pronunciado mínimo na seção de choque elástica para energias cinéticas do elétron incidente inferiores ao já conhecido potencial de ionização. Visto que a explicação de tal mínimo requeria a teoria ondulatória da mecânica quântica, não era possível fazer uma previsão teórica naquela época deste efeito a partir de considerações puramente clássicas.

Se fosse prever a probabilidade de espalhamento utilizando a mecânica clássica, que tratava o elétron e átomo como esferas rígidas, poderia concluir-se que a probabilidade de espalhamento deveria diminuir com o aumento da energia dos elétrons. Até a introdução da mecânica quântica no século XX não havia nenhuma boa explicação para esse fenômeno. A partir da formulação da nova mecânica quântica com a equação de Schrödinger, uma nova teoria de espalhamento foi capaz de dar conta dos fenômenos observados. Se os átomos de gases nobres fossem considerados como um potencial atrativo, a solução da equação de

Schrödinger para os elétrons no espalhamento indicava que a seção de choque teria um mínimo em energias de elétrons próximo de 1 eV . De fato, o fenômeno então conhecido como efeito Ramsauer-Townsend finalmente tinha sido explicado pela teoria ondulatória, com base nos princípios da mecânica quântica. Pode-se relacionar esse experimento com o problema de espalhamento de elétrons por um poço quadrado finito, onde há uma transmissão perfeita para alguns valores de energia.

Deste modo, a exploração do efeito Ramsauer-Townsend no contexto do espalhamento de elétrons por átomos de gases nobres proporciona uma excelente discussão sobre as implicações do uso da equação de Schrödinger na descrição dos fenômenos de espalhamento em nível de graduação em cursos de física.

4.2 Materiais

Para evidenciar o efeito Ramsauer-Townsend a partir do espalhamento de elétrons por átomos de Xe em baixas energias utilizou-se os seguintes materiais:

Tiratron a gás (mod. 2D21) - equipamento para a demonstração do Efeito Ramsauer-Townsend, tubo que contém gás de Xe composto por uma estrutura em forma de caixa metálica. Este conjunto foi montado em um suporte de modo que o filamento estivesse na parte superior, enquanto a parte inferior pudesse ser mergulhada em nitrogênio líquido NL_2 .

2 fontes de alimentação DC - utilizou-se a fonte para fornecer energia ao tubo tiratron a gás, aquecendo o seu filamento em 3 V e acelerando os elétrons do filamento no intervalo de $0 - 5 \text{ V}$, de maneira que precisou somente de energias baixas para a realização do experimento para não danificar o equipamento.

Resistores de 100Ω e $21,7 \text{ k}\Omega$ - foram utilizados para medir as correntes da placa coletora I_p e grade I_s do experimento.

Multímetros digitais - estes foram usados para medir a tensão da placa V_p , tensão da grade V_s e a diferença de potencial do cátodo e grade $V - V_s$.

Nitrogênio Líquido NL_2 - foi utilizado para condensação do gás de Xe dentro do tubo tiratron a gás (mod. 2D21).

Frasco de isopor - recipiente para diminuir a ebulição do nitrogênio líquido em contato com o ambiente durante a realização do experimento.

Cabos conector banana - os cabos foram utilizados para realizar as conexões do experimento.

4.3 Procedimento Experimental

Primeiramente, foram identificadas as partes que compõem o tubo tiratron a gás (mod. 2D21), conforme a figura (9). Para facilitar o entendimento das conexões foram conectados fios com diferentes cores no tubo, todas as partes estão representadas com suas respectivas cores na tabela 1. Após a identificação das conexões do tubo tiratron a gás (mod. 2D21), encaixou-se o tubo no suporte para facilitar a obtenção dos dados quando em contato com o nitrogênio líquido. Em seguida, foi montado o diagrama do circuito, figura (10), conforme proposto na referência [6].

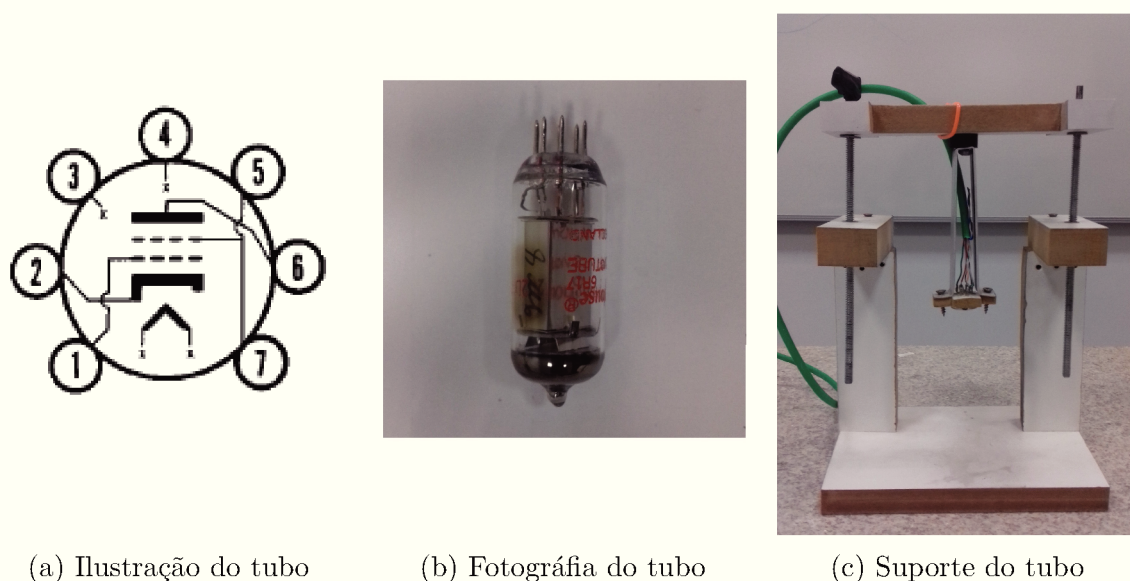


Figura 9 – A figura a) representa os pinos do Tiratron a gás (mod. 2D21), com suas respectivas partes. Na figura b) Fotografia do Tiratron a gás, c) suporte utilizado para o Tiratron a gás.

Tabela 1 – Conexões do Tiratron a gás conforme a convenção utilizada.

Pino	Conexão	Cor do fio
1	grade	verde
2	cátodo	laranja
3	filamento	marrom
4	filamento	marrom e branco
5 e 7	escudo	verde e branco
6	placa coletora	laranja e branco

Na primeira parte, foi realizada a experimentação com a presença do gás de Xe no tubo. Como tratava-se de um experimento termiônico, o filamento do tiratron a gás (tubo) foi submetido a uma diferença de potencial de $3 V$ com a fonte de alimentação DC, assim produzindo elétrons em seu interior. Para não danificar o tubo a tensão no filamento não poderia ultrapassar $6 V$. Após isso, esperou-se 5 minutos até que o filamento

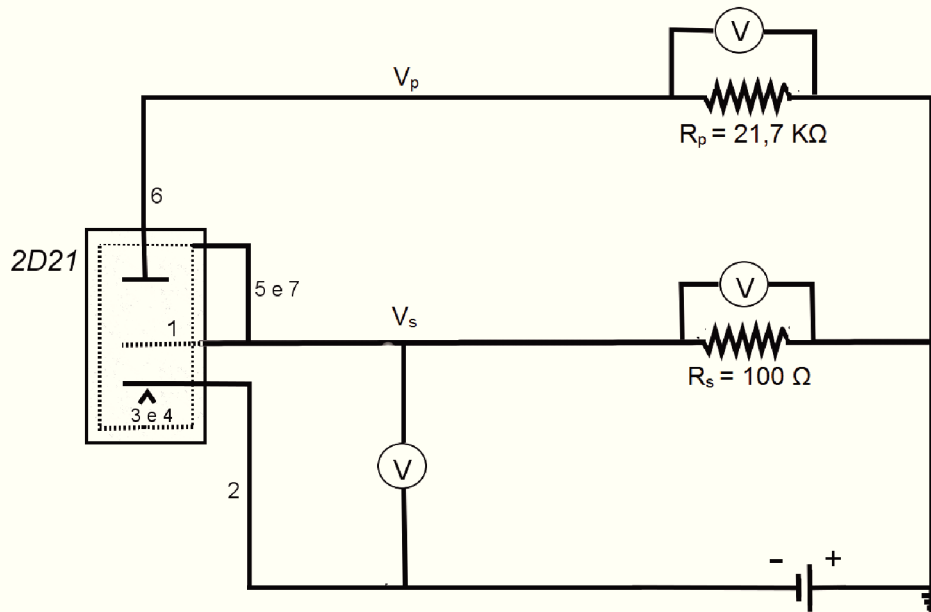


Figura 10 – Diagrama do circuito para o experimento do Efeito Ramsauer-Townsend.

estivesse aquecido e estável. Em seguida, com a fonte de alimentação DC foi aplicada uma no cátodo uma diferença de potencial entre 0 - 5 V em intervalos pequenos, de forma a induzir a aceleração do elétron para a grade e conseqüentemente para placa coletora. Com a utilização dos multímetros digitais foram medidas as tensões do cátodo em relação a grade $V - V_s$, tensões da grade V_s e tensões na placa coletora V_p .

Na segunda parte, a experimentação foi realizada sem a presença do gás de Xe no tubo. Para isso, utilizando nitrogênio líquido reduziu-se a pressão do gás Xe dentro do tubo, onde sua temperatura limite é de $-75^\circ C$. Para a condensação do gás somente a parte inferior metálica do tubo foi colocada em contato com o NL_2 dentro do frasco de isopor. Dessa forma a parte de vidro do equipamento não seria danificada. Com o gás condensado, repetiu novamente o procedimento experimental obtendo os valores das tensões do cátodo em relação a grade $V - V_s^*$, tensões na grade V_s^* e tensões na placa V_p^* . O símbolo de (*) representará nesse experimento as medidas do tubo sem a presença do gás de Xe .

Com os dados das tensões foram calculadas as correntes utilizando as resistências medidas do experimento, $R_s = 100 \Omega$ e $R_p = 21,7 k\Omega$. Assim, para calcular as correntes com a presença do gás de Xe no tubo, temos

$$I_p = \frac{V_p}{R_p} \quad I_s = \frac{V_s}{R_s} \quad (4.1)$$

e correntes sem a presença do gás Xe no tubo,

$$I_p^* = \frac{V_p^*}{R_p} \quad I_s^* = \frac{V_s^*}{R_s}. \quad (4.2)$$

Com os valores das correntes e para uma melhor compressão optou-se por fazer uma interpolação dos pontos do experimento, obtendo-se os seguintes valores anotados na tabela 2. Na próxima seção será discutido os resultados experimentais alcançados do efeito Ramsauer-Townsend.

4.4 Resultados e Discussão

Os valores obtidos experimentalmente da tensão $V - V_s$, corrente na grade I_s e I_s^* , corrente na placa I_p e I_p^* e probabilidade de espalhamento de elétrons P_s , respectivamente, com e sem a presença do gás de xenônio, estão representados na tabela 2 no apêndice A.

Em seguida, com os dados da tabela 2 e a utilização de um software computacional gratuito plotou-se o gráfico da corrente na placa com e sem a presença do gás xenônio no tubo, respectivamente, I_p e I_p^* em função da diferença de potencial no cátodo e grade $V - V_s$.

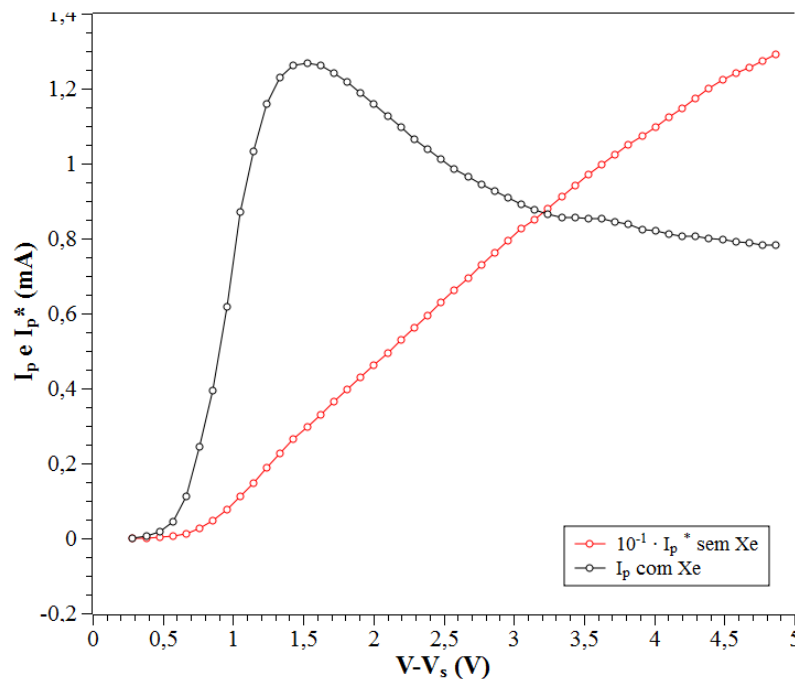


Figura 11 – Gráfico da corrente na placa I_p com a presença do gás de Xe e da corrente na placa I_p^* sem a presença do gás de Xe em função da diferença de potencial do cátodo e grade $V - V_s$.

Na figura (11) podemos observar que com a presença do gás no tubo a medida que aumenta a energia dos elétrons ocorre o espalhamento com os átomos de Xe . Sendo que próximo de $1,2$ V encontra-se um máximo na corrente na placa I_p , evidenciando o efeito

Ramsauer-Townsend. Essa corrente é máxima devido a seção de choque de espalhamento se tornar muito pequena permitindo que um grande número de elétrons passe através do gás de Xe ilesos e atinjam a placa coletora I_p . Quando não há presença do gás de Xe dentro do tubo não ocorre esse espalhamento e os elétrons tem caminho livre para placa coletora I_p^* , a medida que aumenta a energia dos elétrons maior será sua corrente.

A fim de descrever a probabilidade de espalhamento dos elétrons P_s no átomo de xenônio podemos definir

$$f(V) = \frac{I_p^*}{I_s^*} \quad (4.3)$$

em que a função $f(V)$ representa as correntes na placa I_p^* e correntes na grade I_s^* sem a presença do gás de Xe no tubo. Se denotamos que I_p é a corrente induzida na placa coletora e I_s é a corrente sobre a grade devido aos elétrons espalhados. Temos,

$$I_p = f(V)I_s(1 - P_s). \quad (4.4)$$

Então utilizando a equação (4.3) na equação (4.4) definimos que a probabilidade de espalhamento dos elétrons é

$$P_s = 1 - \frac{I_p I_s^*}{I_s I_p^*}. \quad (4.5)$$

Com isso, com a equação (4.5) pode-se plotar o gráfico da probabilidade de espalhamento do elétron em função da energia do elétron.

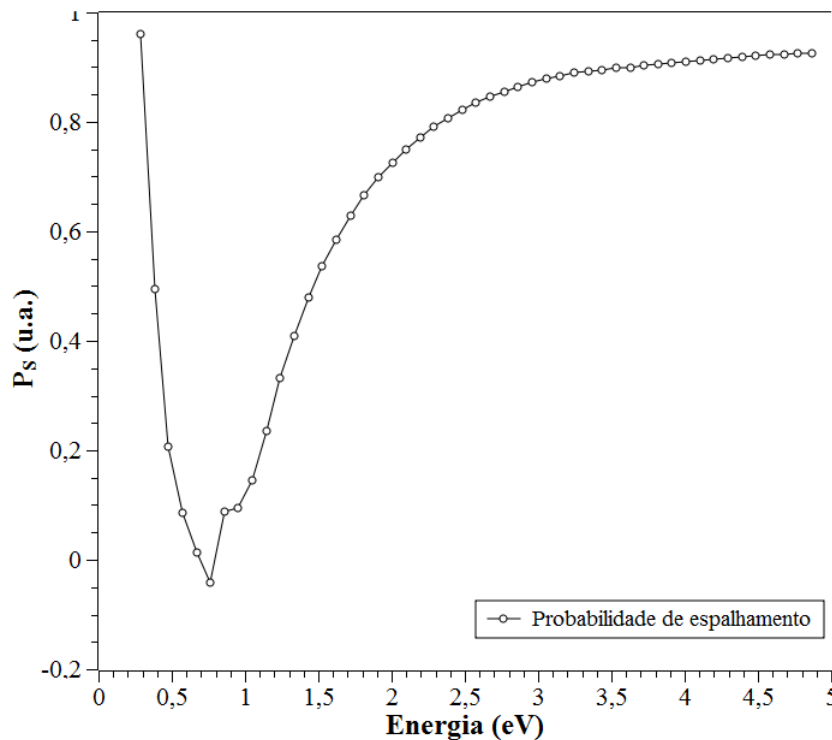


Figura 12 – Gráfico da probabilidade de espalhamento do elétron P_s em função da energia dos elétrons.

A figura (12) evidencia que existe um mínimo de probabilidade de espalhamento dos elétrons quando sua energia esta próximo de $0,80 \text{ eV}$, conhecido como o mínimo de Ramsauer-Townsend. Cabe destacar que por tratar-se de valores baixos próximo do mínimo, ao realizar o cálculo da probabilidade de espalhamento dos elétrons ocorre um ruído no mínimo, mas que não impede de verificar tal fenômeno. Dessa forma, a observação experimental desse efeito com o presente procedimento, conforme sugerido na referência [6], foi bem sucedida.

Agora cabe interpretar estes resultados a partir das previsões da mecânica quântica. A equação (3.42) evidencia claramente que as seções de choque parciais, dadas por

$$\sigma_{tot}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k), \quad (4.6)$$

quando a mudança de fase é

$$\delta_l(k) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi, \quad (4.7)$$

sendo que, a contribuição máxima de cada onda parcial para a seção de choque total é dada por

$$\sigma_{tot}^{max}(k) = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1). \quad (4.8)$$

Porém, quando a mudança de fase é $\delta_l(k) = n\pi$ não há contribuição para o espalhamento da onda parcial e terão valores mínimos quando se aproximam de números múltiplos inteiros de $(n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots)$. Avaliando a probabilidade de espalhamento observada com ajuda dessa expressão, suposto que o mínimo de Ramsauer-Townsend esta associado com a mudança de fase δ_0 de onda esférica no espalhamento elétron-xenônio.

Com os dados da referência [22] das mudanças de fase δ_0 em função da energia do elétron por átomo de xenônio em baixas energias, podemos observar que as mudanças de fase de espalhamento nesse sistema que são apresentadas na figura (13).

Fica evidente na figura (13) que a mudança de fase δ_0 da onda s anula-se para energia do elétron próxima de $0,85 \text{ eV}$. Fazendo uma interpolação dos dados da mudança de fase e utilizando o conhecimento da seção de choque parcial da mecânica quântica, percebe-se que nessa energia a seção de choque parcial σ_0 para $l = 0$ terá um valor mínimo, originando o efeito conhecido como mínimo de Ramsauer-Townsend. Cabe resaltar que a energia em que esse mínimo ocorre é bastante próxima do resultado que obtivemos nesse trabalho, isto é, o mínimo da probabilidade de espalhamento é observado quando o elétron tem energia próxima de $0,80 \text{ eV}$, conforme a figura (12).

A referência [20] mostra o ajuste da teoria do intervalo modificado (MERT) para seções de choque totais por Ferch et al. e também as contribuições das ondas parciais s no espalhamento entre elétron e átomo de xenônio em baixas energias.

Fica claro na figura (14) a partir da análise das seções de choque parciais, a medida que a energia do elétron aproxima-se de 1 eV existe tal mínimo no espalhamento elétron-

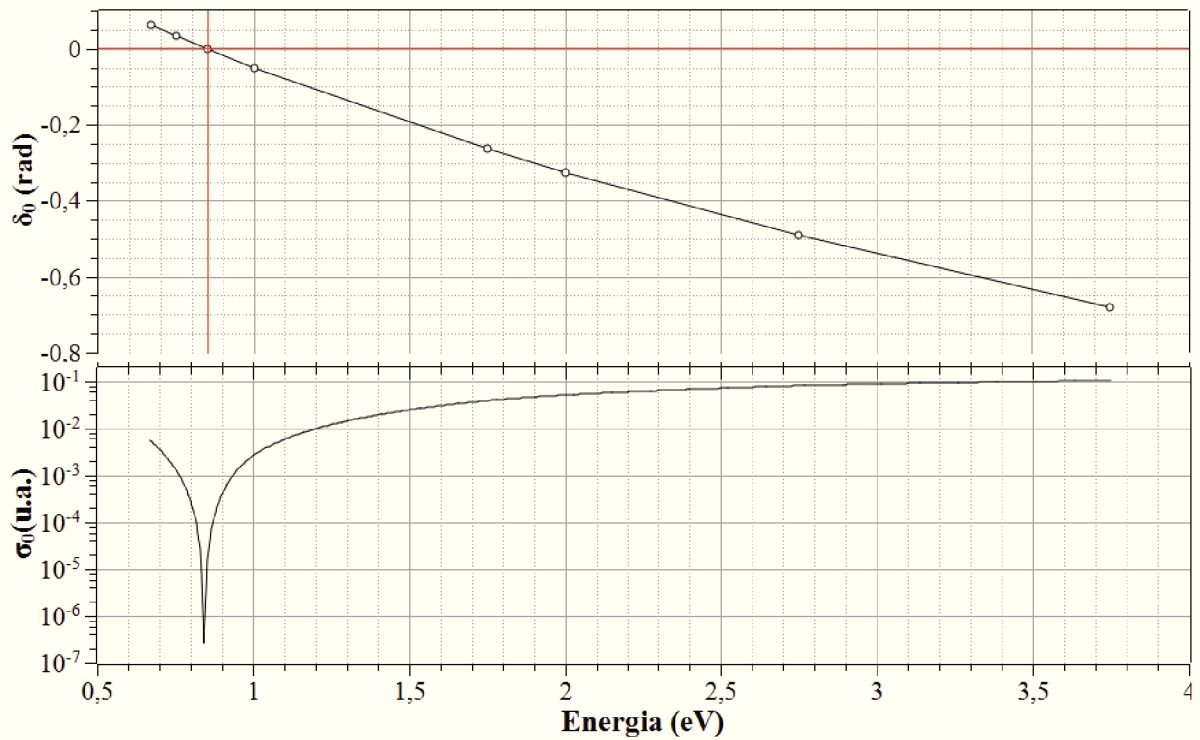


Figura 13 – Mudança de fase δ_0 e seção de choque parcial σ_0 em função da energia do elétron da onda de simetria esférica por Gibson et al.

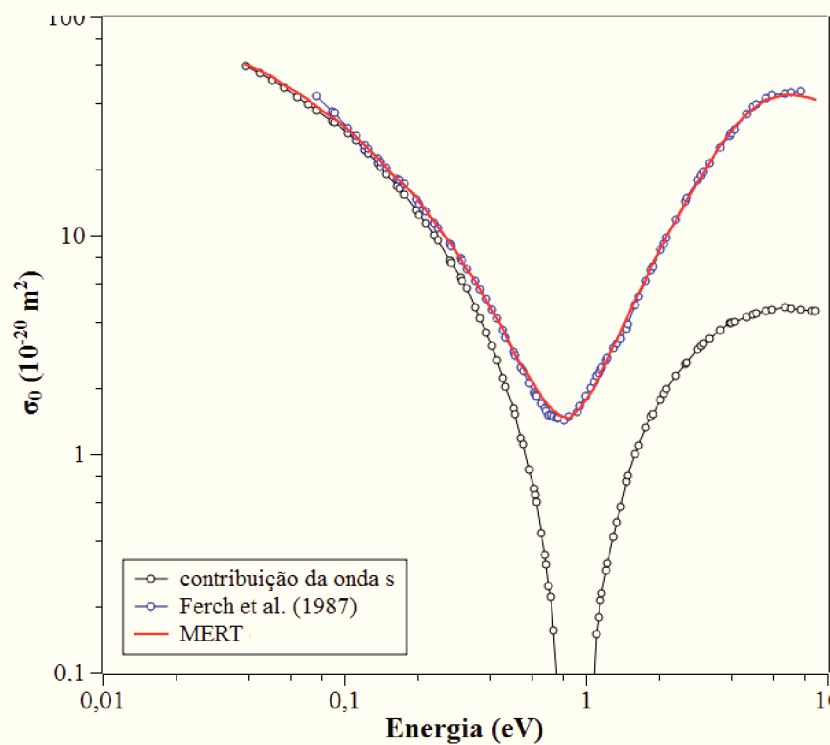


Figura 14 – Seções de choque parciais em função da energia dos elétrons para o átomo de Xe por Ferch et al.

xenônio, conhecido como efeito Ramsauer-Townsend. Cabe destacar, que o objetivo da análise da figura (14) não é a discussão da técnica MERT, mas a demonstração que a onda

s também vai a zero na energia de 1 eV.

Estes artigos confirmam a existência de tal mínimo comprovando o experimento realizado no trabalho. Isto, resulta na importância da utilização da equação de Schrödinger na teoria de espalhamento quântico e o conhecimento das mudanças de fase para interpretação da seção de choque no método de ondas parciais. Dessa forma, no apêndice B apresentaremos um roteiro experimental para trabalhar-se com a demonstração do efeito Ramsauer-Townsend em nível de graduação para os cursos de Física, proporcionando discussões em mecânica quântica nos espalhamento atômico e molecular.

Capítulo 5

Conclusão e Perspectivas

Neste trabalho, demonstramos o efeito Ramsauer-Townsend no espalhamento entre elétrons e átomos de xenônio com a utilização do Tiratron a gás (2D21). O procedimento experimental utilizado no presente trabalho foi proposto por Kukolich [6]. Os resultados experimentais apresentados no capítulo 4 do mínimo de Ramsauer-Townsend foi próximo de $0,80 \text{ eV}$. Concluímos que o resultado experimental foi bem sucedido comparado com as previsões teóricas da análise de ondas parciais de outros trabalhos desenvolvidos. Na pesquisa de Fedus et al. [20] a análise das seções de choque parciais evidencia um mínimo na faixa de 1 eV na energia do elétron. Já no trabalho realizado por Gibson et al. [22] nas seções de choque parciais e mudanças de fase a energia do elétron esta próxima de $0,85 \text{ eV}$.

A importância desse efeito é que não havia explicação na mecânica clássica, quando as colisões entre elétrons e átomos ou moléculas eram tratados somente como esferas rígidas. Devido ao cálculo das seções de choque parciais σ_0 e mudanças de fase δ_0 a existência de tal mínimo foi evidenciado, demonstrando a importância da introdução da mecânica quântica. Dessa forma, os resultados dos trabalhos [20] e [22] foram de grande relevância para avaliação das aproximações teóricas das seções de choque parciais, bem como identificar a confiabilidade do resultado do presente trabalho realizado.

Além deste resultado, foi elaborado uma proposta de roteiro experimental para trabalhar-se com a exploração do efeito Ramsauer-Townsend em nível de graduação, uma forma de proporcionar uma discussão sobre as implicações do uso da equação de Schrödinger em processos de espalhamento. Logo, esse roteiro é de grande importância nos cursos introdutórios de física moderna, tendo em vista que o mínimo de Ramsauer-Townsend foi explicado teoricamente somente com a introdução da mecânica quântica. Algo positivo no desenvolvimento desse roteiro experimental que é possível utilizar materiais de baixo custo para evidenciar o mínimo, sem a necessidade de kits didáticos prontos que reproduzam o efeito Ramsauer-Townsend.

Uma perspectiva para continuação deste trabalho, é a inclusão do estudo da

ressonância de Feshbach para o átomo de xenônio em baixas energias, como proposto na referência [23]. No contexto de processos de espalhamento atômico e molecular, a ressonância de Feshbach ocorre quando a energia cinética de um processo de colisão elástica é igual a energia de um estado ligado de um potencial interatômico. Em configurações experimentais, a ressonância de Feshbach fornece uma maneira de variar a força entre os átomos, mudando o comprimento de espalhamento nessas colisões. Dessa maneira, uma forma de evidenciar átomos que possuem esta ressonância, como xenônio, é a partir da variação da força da interação através da aplicação de um campo magnético uniforme.

Uma outra perspectiva que é mais concreta no presente momento, é o cálculo das seções de choque parciais e mudanças de fase em baixas energias para os demais átomos, dos mais fundamentais aos mais pesados.

Referências

- [1] J. Napolitano, “EXPERIMENTAL PHYSICS Notes for Course PHYS2350,” 1999.
- [2] N. Bohr, “On the constitution of atoms and molecules,” *Philos*, no. 26, 1, 1913.
- [3] M. Planck, “On the law of the energy distribution in the normal spectrum,” *Ann. Phys*, no. 4, 453, 1901.
- [4] Frank and Hertz, “Collisions between electrons and mercury vapor molecules and the ionization potential of such molecules,” *Physik, Ges.*, no. 457-467, 1914.
- [5] W. G. Hertz., “Messung der ionisierungsspannung in verschiedenen gasen,” *Verh. Phys. Ges. Berlin*, 15:34-44, 1913.
- [6] S. G. Kukolich, “Demonstration of the Ramsauer-Townsend Effect in a Xenon Thyatron,” *American Journal of Physics*, vol. 36, no. 8, 1968.
- [7] L. Broglie, “Revisiting louis de broglie famous 1924 paper in the philosophical magazine,” *Philosophical Magazine Letters*, no. 86, 405-410, 2006.
- [8] E. Schrodinger, “An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules,” *Physical Review*, no. 28, 6, 1926.
- [9] M. Kitajima, “Ultra-low-energy electron scattering cross section measurements of ar, kr and xe employing the threshold photoelectron source,” *The European Physical Journal D*, 2012.
- [10] A. Corney, *Atomic and Laser Spectroscopy*. Oxford: Oxford University Press, Nov. 2006.
- [11] M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*. New York: Wiley-Interscience, 1 edition ed., Oct. 1994.
- [12] F. Martin, “Dna strand breaks induced by 0-4 ev electrons: The role of shape resonances,” *Physical Review Letters*, no. 93, 6, 2004.

-
- [13] D. Flower, *Molecular Collisions in the Interstellar Medium*. New York; Cambridge: Cambridge University Press, 2nd edition ed., 1948.
- [14] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*. Harlow, England ; New York: Pearson, 2 edition ed., June 2003.
- [15] C. J. Joachain, *Quantum Collision Theory*. Amsterdam; Oxford: Elsevier Science Ltd, reprint edition ed., Feb. 1984.
- [16] S. K. Adhikari, *Variational Principles and the Numerical Solution of Scattering Problems*. São Paulo; Universidade Estadual Paulista: Wiley-Interscience, reprint edition ed., 1948.
- [17] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*. New York: Wiley, 3 edition ed., Dec. 1997.
- [18] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*. Upper Saddle River, NJ: Addison-Wesley Professional, edição: 2nd revised ed. ed., Mar. 2004.
- [19] G. Stephenson, *Mathematical Methods for Science Students*. London: Prentice Hall, 1st revised edition edition ed., July 1973.
- [20] K. Fedus, “Markov Chain Monte Carlo Effective Range Analysis of Low-Energy Electron Elastic Scattering from Xenon,” *Brazilian Journal of Physics*, vol. 46, pp. 1–9, Feb. 2016.
- [21] G. A. Woolsey, “An Extension of the Ramsauer-Townsend Experiment in a Xenon Thyatron,” *American Journal of Physics*, vol. 39, pp. 558–560, May 1971.
- [22] J. C. Gibson, D. R. Lun, L. J. Allen, R. P. McEachran, L. A. Parcell, and S. J. Buckman, “Low-energy electron scattering from xenon,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 31, no. 17, p. 3949, 1998.
- [23] M. Kurokawa, M. Kitajima, K. Toyoshima, T. Kishino, T. Odagiri, H. Kato, M. Hoshino, H. Tanaka, and K. Ito, “High-resolution total-cross-section measurements for electron scattering from Ar, Kr, and Xe employing a threshold-photoelectron source,” *Physical Review A*, vol. 84, p. 062717, Dec. 2011.

Apêndice A

Dados experimentais

A tabela a seguir representa os valores obtidos experimentalmente da tensão $V - V_s$, corrente na grade I_s e I_s^* , corrente na placa I_p e I_p^* e probabilidade de espalhamento de elétrons P_s , respectivamente, com e sem a presença do gás de xenônio.

$V - V_s$ (V)	I_p (mA)	I_s (mA)	$I_p^*(10^{-1}$ mA)	I_s^* (mA)	P_s
0,286364	0,000236576	273,221	0,000717178	320,433	0,961313
0,381818	0,0060019	306,356	0,00137551	355,081	0,49426
0,477273	0,0173915	341,054	0,00251236	390,654	0,207091
0,572727	0,0451319	377,537	0,00557343	425,757	0,0868068
0,668182	0,112242	412,462	0,0126911	460,168	0,0132997
0,763636	0,244898	449,587	0,0259788	497,025	-0,0421503
0,859091	0,394638	480,275	0,0481502	534,913	0,0871622
0,954545	0,618658	512,759	0,0763646	572,981	0,0947137
1,05	0,87121	561,085	0,110934	611,54	0,144039
1,14545	1,03228	593,384	0,147745	649,281	0,235498
1,24091	1,15739	634,431	0,18827	689,519	0,331869
1,33636	1,22804	670,656	0,225985	728,734	0,409525
1,43182	1,26037	706,977	0,263458	768,751	0,479802
1,52727	1,26647	741,703	0,296561	806,762	0,53549
1,62273	1,26275	778,293	0,330141	846,78	0,583855
1,71818	1,24042	812,938	0,363972	886,378	0,628413
1,81364	1,21741	846,312	0,396453	923,691	0,66485
1,90909	1,18689	880,814	0,42975	962,5	0,698207
2,00455	1,15835	913,652	0,462614	1.001,14	0,725633
2,1	1,1278	946,298	0,495579	1.038,59	0,750234
2,19545	1,09608	978,604	0,528519	1.075,18	0,772145
2,29091	1,06577	1.011,5	0,561328	1.112,57	0,791162
2,38636	1,03961	1.041,17	0,594763	1.150,14	0,806914

2,48182	1,0116	1.072,14	0,628427	1.186,55	0,82185
2,57727	0,985139	1.103,38	0,661615	1.221,45	0,835167
2,67273	0,963625	1.131,68	0,695378	1.257,5	0,846017
2,76818	0,943782	1.160,6	0,728617	1.293,17	0,855674
2,86364	0,925889	1.191,32	0,760716	1.327,5	0,864374
2,95909	0,908501	1.218,31	0,793034	1.361,94	0,871935
3,05455	0,89231	1.244,39	0,825446	1.396,22	0,87871
3,15	0,87715	1.270,14	0,848899	1.423,33	0,88421
3,24545	0,863657	1.293,8	0,879859	1.458,68	0,889333
3,34091	0,857143	1.301,97	0,910818	1.494,02	0,892011
3,43636	0,85525	1.315,93	0,941778	1.529,37	0,894459
3,53182	0,852535	1.348,92	0,970979	1.563,11	0,898257
3,62727	0,852535	1.353,27	0,998108	1.594,96	0,89933
3,72273	0,845056	1.374,98	1,025	1.626,79	0,902457
3,81818	0,838251	1.389,63	1,04917	1.658,22	0,90466
3,91364	0,824763	1.411,86	1,07334	1.689,65	0,90804
4,00909	0,820364	1.438,85	1,09775	1.720,51	0,91064
4,10455	0,810362	1.451,64	1,12303	1.749,32	0,913044
4,2	0,806452	1.469,51	1,14831	1.778,14	0,915021
4,29545	0,806452	1.482,85	1,17371	1.807,17	0,916263
4,39091	0,80053	1.503,13	1,19924	1.836,44	0,918445
4,48636	0,796506	1.543,49	1,22348	1.865,27	0,921326
4,58182	0,78979	1.562,63	1,23977	1.891,37	0,922894
4,67727	0,788018	1.578,67	1,25606	1.917,46	0,923799
4,77273	0,783518	1.588,65	1,27235	1.943,56	0,924663
4,86818	0,78341	1.608,87	1,29137	1.969,2	0,925748

Tabela 2 – Dados experimentais do efeito Ramsauer-Townsend no espalhamento de elétrons por átomos de xenônio para uma tensão de 3 V no filamento.

Apêndice B

Roteiro Experimental

Nesse capítulo apresentaremos uma proposta de roteiro experimental em nível de graduação para trabalhar-se com o mínimo de Ramsauer-Townsend, proporcionando a discussão do uso da equação de Schrödinger nos fenômenos de espalhamento atômico e molecular.

B.1 Introdução

Com o aprimoramento das técnicas experimentais de avaliação da dinâmica de elétrons em gases nobres em energias baixas os físicos Ramsauer e Townsend evidenciaram o mínimo de Ramsauer, que poderia ser explicado somente pela mecânica quântica. Em vez de tratar os elétrons somente como partícula e o alvo uma esfera rígida, como proposto pela mecânica clássica, o efeito foi descrito usando as ferramentas da mecânica quântica. Considera-se que o elétron pode se comportar tanto como partícula quanto como onda e o átomo cria uma barreira de potencial.

B.2 Objetivos

Observar o efeito Ramsauer-Townsend a partir da probabilidade de espalhamento do elétron no tiratron gás (2D21) e analisar o uso da equação de Schrödinger comparando os resultados experimentais e teóricos nos fenômenos de espalhamentos atômicos e moleculares.

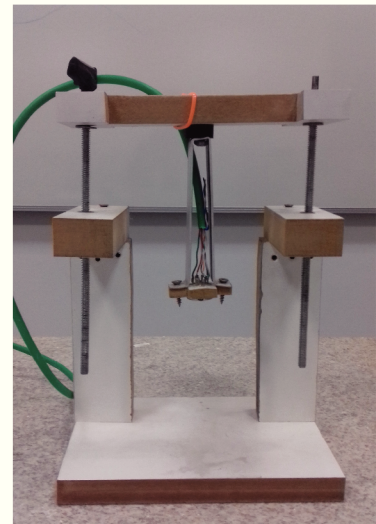
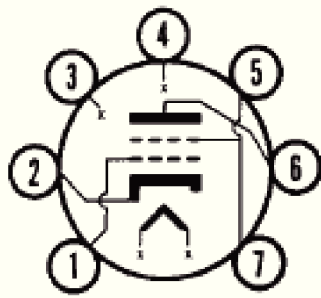
B.3 Material

- Tiratron a gás (mod. 2D21);
- 2 fontes de alimentação DC;
- Multímetros digitais;

- Resistores de $100\ \Omega$ e $21,7\ k\Omega$;
- Nitrogênio Líquido NL_2 ;
- Frasco de isopor;
- Cabos conector banana;

B.4 Montagem

Primeiramente identifique as partes que compõem o tubo Tiratron a gás (mod. 2D21) e coloque o tubo no suporte para facilitar a obtenção dos dados. As partes que compõem o experimento estão representadas na figura (15) e tabela 3.



(a) Ilustração do tubo

(b) Fotografia do tubo

(c) Suporte do tubo

Figura 15 – Na figura a) representa os pinos do Tiratron a gás (mod. 2D21), com suas respectivas partes. Na figura b) Fotografia do Tiratron a gás, c) suporte utilizado para o Tiratron a gás.

Tabela 3 – Conexões do Tiratron a gás conforme a convenção utilizada.

Pino	Conexão	Cor do fio
1	grade	verde
2	cátodo	laranja
3	filamento	marrom
4	filamento	marrom e branco
5 e 7	escudo	verde e branco
6	placa coletora	laranja e branco

Cabe destacar que as conexões representadas na tabela 3 podem ser alteradas conforme o autor.

Após a identificação das conexões do tubo tiratron a gás (mod. 2D21), monte o experimento conforme o diagrama do circuito, figura (16).

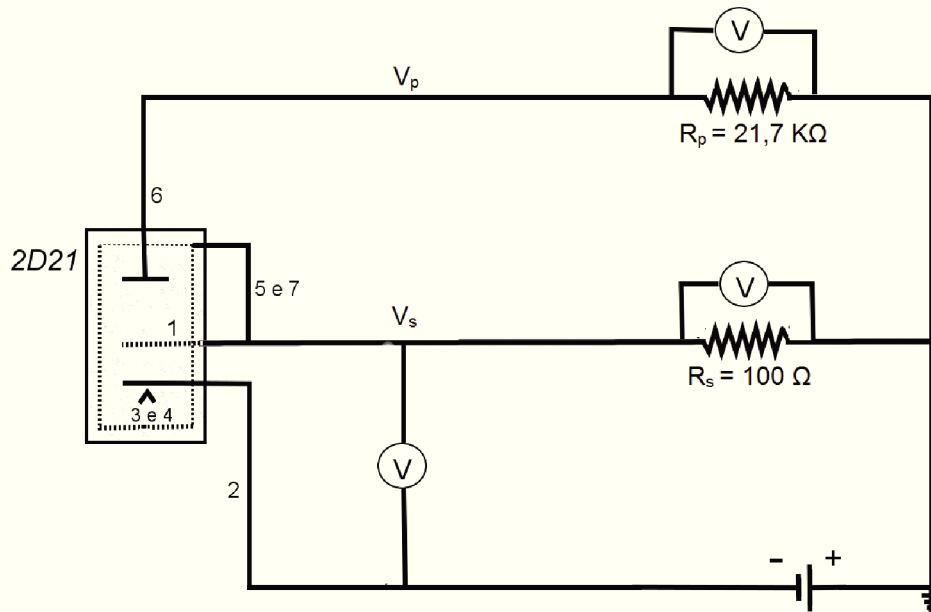


Figura 16 – Diagrama do circuito para o experimento do Efeito Ramsauer-Townsend.

B.5 Procedimento experimental

- **Primeira parte:** com o a presença do gás de Xe no tubo.
 - Aplique uma diferença de potencial na fonte de alimentação de 3 V no filamento; (Obs: espere 5 minutos para que o filamento esteja aquecido e estável.)
 - Varie a tensão entre $0 - 5 \text{ V}$ em intervalos pequenos no cátodo.
 - Anote em uma tabela as tensões do cátodo em relação a grade $V - V_s$, tensões da grade V_s e tensões na placa coletora V_p .
- **Segunda parte:** sem a presença do gás de Xe no tubo.
 - Reduza a pressão do gás Xe dentro do tubo, com o nitrogênio líquido. (Obs: somente a parte inferior metálica do tubo deve entrar em contato com o NL_2 de forma a não danificar o equipamento.)
 - Aplique uma diferença de potencial de 3 V no filamento; (Obs: espere 5 minutos para que o filamento esteja aquecido e estável.)

- Varie novamente a tensão entre 0 - 5 V em intervalos pequenos no cátodo.
- Anote em uma tabela os valores das tensões do cátodo em relação a grade $V - V_s$, tensões da grade V_s^* e tensões na placa coletora V_p^* . (Obs: o símbolo de $(^*)$ representará nesse experimento as medidas do tubo sem a presença do gás de Xe.

• Terceira parte: Análise de dados

- Com os dados obtidos, calcule as correntes na placa,

$$I_p = \frac{V_p}{R_p} \quad I_p^* = \frac{V_p^*}{R_p} \quad (\text{B.1})$$

e correntes na grade,

$$I_s = \frac{V_s}{R_s} \quad I_s^* = \frac{V_s^*}{R_s}. \quad (\text{B.2})$$

- Realize uma interpolação dos pontos das correntes com a presença do gás de Xe e sem a presença do gás de Xe.
- Faça o gráfico da corrente na placa I_p e I_p^* em função da diferença de potencial $V - V_s$.
- Calcule a probabilidade de espalhamento do elétron P_s .

$$P_s = 1 - \frac{I_p I_s^*}{I_s I_p^*} \quad (\text{B.3})$$

- A fim de descrever o mínimo de Ramsauer, faça o gráfico da probabilidade de espalhamento P_s em função da energia do elétron $V - V_s$.
- Interprete os resultados experimentais com as previsões teóricas das seções de choque parciais σ_0 e mudança de fase δ_0 da literatura.

B.6 Previsões experimentais

O presente procedimento pode ser trabalhado em cursos de introdução a mecânica quântica, proporcionando uma boa discussão do uso da equação de Schrödinger nos fenômenos de espalhamento atômico e molecular. Espera-se a partir da realização desse roteiro que o experimentalista consiga prever o mínimo de Ramsauer-Townsend, conforme a figura (17).

O efeito Ramsauer-Townsend é demonstrado próximo de 0,80 eV nessa configuração experimental, conforme demonstrado na figura (17). Até a introdução da mecânica quântica não havia uma teoria de espalhamento para explicar tal mínimo. Após a formulação da mecânica quântica e com a equação de Schrödinger pode-se explicar este efeito. Com isso, uma forma de comparar os resultados experimentais obtidos pelo presente procedimento

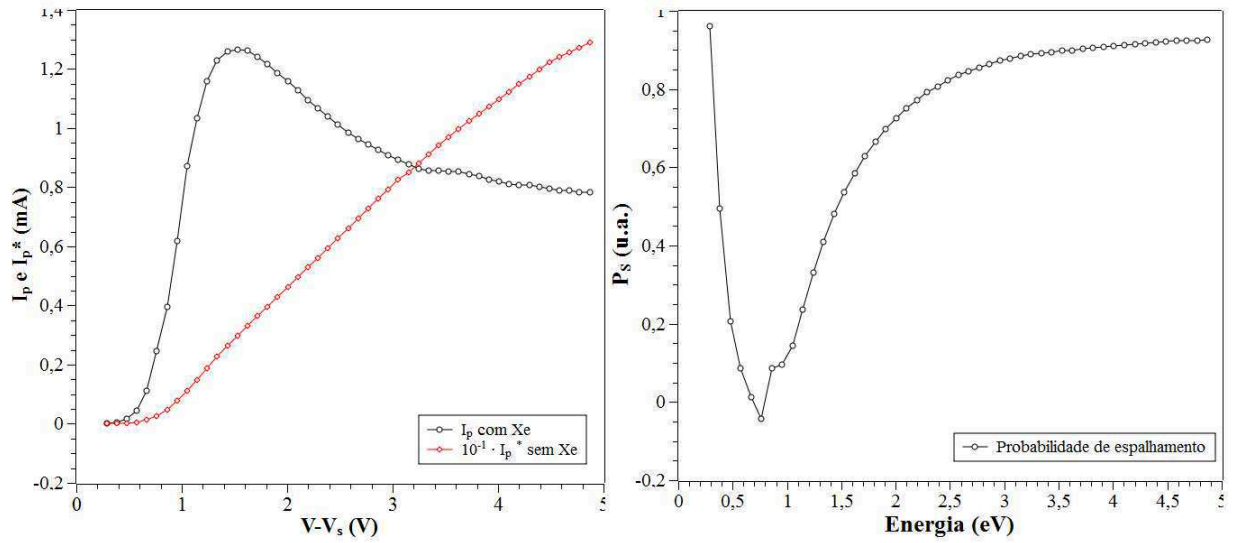


Figura 17 – Efeito Ramsauer-Townsend. A figura da esquerda nos mostra a corrente na placa I_p e I_p^* em função da energia do elétron. A figura a direita evidencia o mínimo de Ramsauer-Townsend, através da probabilidade de espalhamento do elétron em função de sua energia.

é a partir de previsões teóricas utilizando a análise de ondas parciais e as mudanças de fase da onda de simetria esférica. Dessa forma, a seção de choque parcial de espalhamento torna-se

$$\sigma_{tot}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k). \quad (\text{B.4})$$

Quando a mudança de fase é

$$\delta_l(k) = n\pi \quad (\text{B.5})$$

não há contribuição para o espalhamento da onda parcial e terão valores mínimos quando se aproximam de números múltiplos inteiros de $(n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots)$, incluindo o zero. Avaliando a probabilidade de espalhamento observada com ajuda dessa expressão, podemos supor que o mínimo de Ramsauer-Townsend esta associado com a mudança de fase δ_0 de onda esférica no espalhamento elétron-xenônio.