Maria Vittoria A. P. Heller

SBI-IFUSP

305M810T0663

DOUTORAMENTO

ESTUDO DE DISTRIBUIÇÕES DE MOMENTOS ELETRÔNICOS

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
663
INSTITUTO DE FÍSICA

TESE APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE DOUTOR EM CIÊNCIAS.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. José Roberto Moreira pela oportunidade de pesquisa, pelo seu interesse e dedicação na orientação do presente trabalho.

Ao Prof. Dr. Max Cohenca e Prof. Philippe Gouffon pela assessoria na parte computacional.

Ao Prof. Hamilton João Targa do Instituto de Biociências da USP que facilitou o uso da fonte de Césio.

Ao pessoal da oficina eletrônica do Laboratório de Acelerador Linear, e ao pessoal da oficina mecânica e da marcenaria do Departamento de Física Experimental pela presteza demonstrada nos reparos de aparelhagem e na construção dos equipamentos necessários às medidas realizadas.

Aos motoristas do Acelerador Linear sem os quais não teria sido possível a montagem do equipamento.

A Dirce, datilógrafa deste trabalho, pela gentileza e dedicação com que o realizou.

I N D I C E

pag.

RESUMO i

ABSTRACT ii

INTRODUÇÃO 1

CAPÍTULO I - ESPALHAMENTO COMPTON

1) Introdução 4

2) Espalhamento por elétrons livres 6

3) Espalhamento por elétrons ligados 7

3a) Formalismo não relativístico 7

3b) Caso hidrogenoide 12

3c) Aproximação A^2 17

3d) Fator de espalhamento incoerente 19

3e) Aproximação de impulso 22

3f) Abordagem relativística 27

3f1) Seção de choque isotrópica para qualquer ângulo de espalhamento 27

3f2) Seção de choque - Efeitos de polarização 36

3f3) Cálculos de perfil Compton 42

CAPÍTULO II - CÁLCULO DE MONTE CARLO - ESPALHAMENTO SIMPLES E MÚLTIPLO

1) Introdução 45

2) Processo Monte Carlo para espalhamento simples 48

3) Tratamento geométrico e procedimento para obtenção dos pesos dos eventos 54

3a) Determinação do ângulo de espalhamento no sistema de laboratório 54

pag.

3b) Considerações geométricas sobre as condições de polarização do fóton incidente 59

3c) Coordenadas no sistema do 1º fóton e determinação dos pesos do fóton 61

4) Processo Monte Carlo para espalhamento duplo 66

4a) Considerações gerais 66

4b) Coordenadas no sistema do 2º fóton 68

CAPÍTULO III - MÉTODO EXPERIMENTAL

1) Introdução 71

2) Parte experimental 71

2a) Esquema de aparelhagem 71

2b) Fonte 73

2c) Detetor, blindagem e eletrônica 73

2d) Obtenção de dados experimentais 76

2e) Tratamento dos dados experimentais 80

CAPÍTULO IV - TRATAMENTO DE DADOS

1) Introdução 86

2) Obtenção de perfil Compton - processo Monte Carlo 86

2a) Tabelas e Ajustes 86

2b) Testes de Geometria do sistema 91

2c) Obtenção de dados 103

2d) Tratamento do espalhamento duplo 114

2e) Comparação de resultados experimentais e teóricos. 120

2f) Simulação dos efeitos de polarização 121

CAPÍTULO V - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA OUTROS EXPERIMENTOS

1) Conclusões 145

2) Sugestões 146

pag.

APÊNDICE 1 - PERFIS COMPTON PARA FUNÇÕES HIDROGENÓIDES... 148

APÊNDICE 2 - AJUSTES DE PERFIS COMPTON HARTREE-FOCK RELATIVÍSTICOS 153

REFERÊNCIAS..... 159

RESUMO

Um modelo matemático foi desenvolvido, para avaliar o perfil Compton produzido por diferentes distribuições de momento do elétron. Estas distribuições de momento são avaliadas a partir das funções de onda dos elétrons orbitais. Perfis Compton para cinco elementos (Pb^{82}, W^{74}, Ag^{47}, Cu^{29} e Al^{13}) e para três ângulos de espalhamento (30°, 15°, 10°) foram calculados usando funções hidrogenóides e Hartree-Fock relativísticas.

Experimentalmente usando um γ de 662 Kev de energia mediu-se, com um detetor GeLi, o perfil Compton desses elementos nas condições geométricas acima, observando-se boa concordância com as distribuições de momento relativístico, calculadas por Biggs, Mendelsohn e Mann.

Este acordo entretanto só foi conseguido quanto utilizamos as correções propostas for Ribberford, que permitem associar o conceito de perfil Compton para qualquer ângulo de espalhamento.

Isto mostra que é possível associar univocamente o perfil Compton às distribuições de momento para qualquer ângulo de espalhamento ao contrário do que tradicionalmente se aceitava (apenas 180°).

O modelo matemático foi extendido para cálculos de perfis Compton com feixes incidentes e emergentes polarizados.

INTRODUÇÃO

Grande parte do nosso conhecimento do mundo físico origina-se de experiências de espalhamento.

Tais experiências provocaram, por exemplo, as descobertas do núcleo atômico, da fissão nuclear, de novas partículas em aceleradores modernos e a determinação da estrutura dos cristais.

Da teoria do espalhamento Compton segue-se que desde que, os momentos dos fótons incidentes e espalhados sejam conhecidos, pode-se determinar uma componente do momento do elétron alvo. Ou seja, o espalhamento Compton pode ser usado para determinar as distribuições de momento dos elétrons orbitais.

Com o desenvolvimento de detetores de radiação γ de alta resolução, é possível medir-se larguras de linhas de radiação com precisão maior que 1% na região de energia de algumas centenas de Kev.

Nesta faixa de energia, dispõe a U.S.P. de uma fonte de Cs^{137} de alta intensidade e perfeitamente adequada para análise de espalhamento Compton, por ser monocromática.

A possibilidade de usando tal fonte detetar larguras do pico Compton devido ao momento de elétrons é uma realidade, conforme foi mostrado por diversos autores, utilizando γ de até 412 Kev [6]. No caso de radiação γ de 662 Kev (γ do Cs^{137}) as informações são escassas e limitam-se a medidas de seções de choque.

Além disso, todos os trabalhos que se preocupavam com esse tipo de medida, utilizavam ângulo de espalhamento próximo de 180°, visto que a correlação entre momento eletrônico e largura da linha Compton era conhecida até 1975, como sendo correta apenas para ângulos de 180°.

Os trabalhos de Ribberford [33,34], mostraram que a partir do alargamento da linha Compton, medido em ângulos de espalhamento de qualquer valor também se pode inferir a distribuição de momento eletrônico. É portanto interessante conduzir experiências para ângulos pequenos e desta forma obter as informações procuradas.

Este interesse é baseado nas seguintes razões:

1) o espalhamento duplo, sensível, fonte de erro na obtenção de espectros experimentais tem seu efeito minimizado quando trabalhamos com ângulos pequenos.

2) Supondo que as funções de onda eletrônica disponíveis atualmente, permitem uma razoável confiança no espectro Compton obtido por simulação, assim sendo, podemos utilizar as fórmulas propostas por Ribberford e as expressões de Klein-Nishima para verificar a validade das conclusões de Ribberford, quando comparamos a simulação com o espectro experimental.

3) A seção de choque para ângulos pequenos é sabidamente maior, que a 180°, principalmente quando a energia do γ cresce. Como esse tipo de experiências requer um mínimo de contribuição no alargamento do pico Compton devido à geometria, as distâncias fonte-espalhador e espalhador detetor, devem ser grandes comparadas com as dimensões do detetor e espalhador, o que torna o período de coleta de dados muito longo e portanto susceptível a instabilidade do equipamento eletrônico.

Qualquer abreviação do tempo de coleta de dados é um fator positivo, para um trabalho mais preciso.

4) Existe também a possibilidade de evitar a contribuição ao espalhamento das camadas eletrônicas mais internas (principalmente de elementos pesados) o que pode se tentar observar experimentalmente.

No capítulo I apresentamos os fundamentos teóricos do espalhamento Compton, tanto na abordagem relativística como não relativística; dando especial destaque à aproximação de impulso para os cálculos do perfil Compton.

No capítulo II tratamos da simulação do perfil Compton por um processo Monte Carlo, tanto para espalhamento simples como múltiplo.

No capítulo III é descrita a aparelhagem experimental assim como a obtenção dos dados experimentais e o tratamento dos mesmos.

No capítulo IV apresentamos os resultados da simulação da distribuição de energia para efeito Compton, usando o método Monte Carlo, e comparamos os resultados experimentais com os teóricos.

No capítulo V relatamos as conclusões a que chegamos com o presente trabalho, e sugerimos futuras experiências baseando-nos nos resultados obtidos.

CAPÍTULO I - ESPALHAMENTO COMPTON

1) INTRODUÇÃO

Os três processos essencialmente responsáveis pela atenuação da radiação eletromagnética na matéria são: o efeito fotoelétrico, espalhamento Compton e produção de pares.

O espalhamento Compton é o espalhamento inelástico de um fóton por um elétron que sofre recuo (Vide fig. 1-1). Tipicamente, para um dado elemento, o efeito fotoelétrico domina à energias baixas do fóton ($\simeq$ 100 Kev), o espalhamento Compton domina em energias intermediárias (até $\simeq$ 1,02 Mev) e a produção de pares em altas energias ($\simeq$ acima de 1,02 Mev).

No espalhamento Compton por elétrons ligados, o elétron que espalha o fóton é ejetado do átomo. No caso que a emissão se-

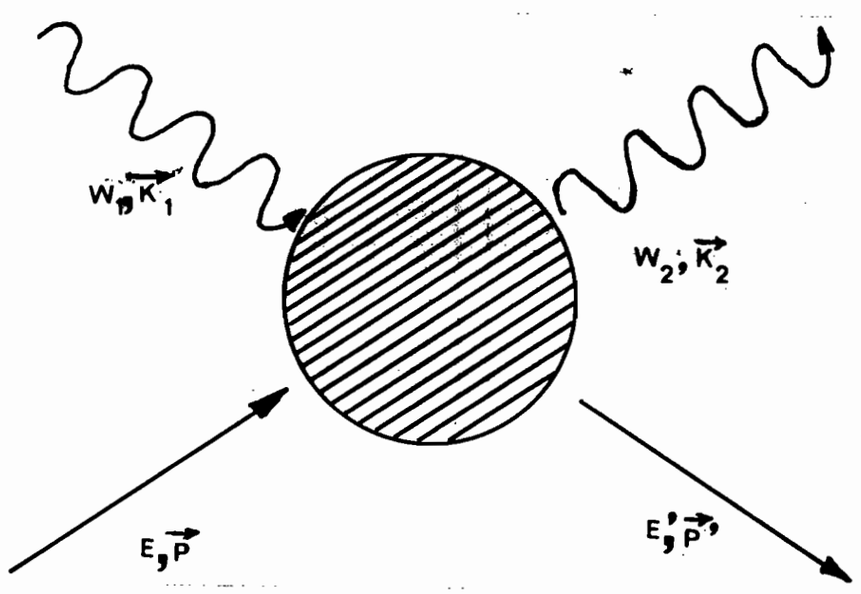


Fig. 1-1 - Esquema do espalhamento Compton. Fóton incidente $(w_1, \vec{k}_1)$, espalhado $(w_2, \vec{k}_2)$, elétron alvo $(E, \vec{p})$, elétron depois do espalhamento $(E', \vec{p}')$.

ja de uma camada interna do elemento, um elétron externo realiza uma transição para a camada incompleta, emitindo uma radiação característica.

Em princípio, podemos observar os seguintes aspectos do espalhamento Compton: a energia (comprimento de onda) o momento (ângulo de espalhamento) e polarização de fóton espalhado; a energia, o momento spin do elétron emitido. Embora, em princípio todas as quantidades mencionadas são mensuráveis, na prática somente algumas são medidas. As experiências usualmente realizadas medem a energia e direção do fóton espalhado [6,17,25,30,33,41] sem observar o elétron emitido. Outra classe comum de experiências [3,6,32] , mede a energia e a direção do fóton espalhado em coincidência com o raio X característico emitido durante o preenchimento da vacância, portanto registrando de que camada o elétron foi ejetado. Finalmente uma terceira classe de experiências mede somente a direção do fóton espalhado [1,35].

Os tratamentos teóricos mais comumente usados para descrever o espalhamento Compton são baseados na "aproximação de impulso" e "na aproximação do fator de espalhamento incoerente".

A "aproximação de impulso", relaciona a distribuição de momento dos elétrons no alvo com o espectro de energia e direção da radiação espalhada. Em contraste com esta teoria, a "aproximação de fator incoerente de espalhamento" é usada geralmente para descrever experiências que medem somente a direção da radiação espalhada. Nas páginas seguintes discutiremos o espalhamento Compton por elétrons livres, as várias teorias para espalhamento Compton por elétrons ligados e as aproximações necessárias para obtê-las, dando ênfase especial à "aproximação de impulso".

2) ESPALHAMENTO POR ELÉTRONS LIVRES

Quando a energia inicial do fóton é bem maior que as outras energias envolvidas no processo de espalhamento, podemos descrever o mesmo como espalhamento por elétrons livres estacionários. Compton considerando as equações relativísticas para conservação de energia e momento e assumindo um elétron inicial livre e estacionário obteve para a variação de energia do fóton espalhado.

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m\,c}\,(1 - \cos\theta) \qquad (1,1)$$

θ = ângulo de espalhamento

Este resultado prevê que para um dado ângulo de espalhamento somente será observado um comprimento de onda. Mesmo nas primeiras experiências realizadas com raios X, comprovou-se que a radiação espalhada não era uma linha, mas uma região relativamente alargada.

Du Mond [7,8] explicou isto, como devido à distribuição inicial de momento dos elétrons ligados e de condução.

Assumindo que o elétron é livre, mas não estacionário, para pequenos momentos iniciais do elétron, a variação no comprimento de onda é dada por:

$$\Delta\lambda \sim \frac{h}{m\,c}\,(1 - \cos\theta) - \frac{2\lambda\ \mathrm{sen}\ \theta/2}{mc}\,p_z \qquad (1,2)$$

λ comprimento de onda inicial do fóton.

p_z componente do momento inicial do elétron paralela ao fóton inicial.

A seção de choque relativística $d\sigma/d\Omega$, para espalhamento Compton por um elétron livre, foi inicialmente calculada por Klein-Nishima-Tamm. A seção de choque diferencial para radiação incidente plano-polarizada é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_o^2}{4}\left(\frac{w_2}{w_1}\right)^2\left(\frac{w_1}{w_2} + \frac{w_2}{w_1} - 2 + 4(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}')\right) \qquad (1\text{-}3)$$

onde w_1 e w_2 representam a energia dos fótons inicial e espalhado respectivamente $\vec{\varepsilon}$ e $\vec{\varepsilon}'$ vetores do campo elétrico da radiação incidente e espalhada, respectivamente. Sabemos ainda que:

$$w_2 = w_1 / 1 + \frac{w_1}{m}(1 - \cos\theta) \qquad (1\text{-}4)$$

Para $w_1 \to 0$ a eq. (1-3) se reduz à fórmula clássica para espalhamento de Thomson. O espalhamento Thomson se refere ao espalhamento da radiação eletromagnética por uma carga livre; é uma teoria clássica.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Thomson}} = r_o^2(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}') \qquad (1\text{-}5)$$

Assim quando $\theta \to 0$, $w_2 \to w_1$ e a seção de choque Thomson se confunde com a seção de choque Compton para todas as energias na direção para frente.

3) ESPALHAMENTO COMPTON PARA ELÉTRONS LIGADOS

3a) Formalismo não relativístico

Não relativisticamente, na teoria semi-clássica da ra-

diação (considerando a interação do átomo com a radiação como uma perturbação) substitui-se o momento $\vec{p}$ na Hamiltoniana por $\vec{p}$- e $\vec{A}$.

A Hamiltoniana de acoplamento contém então dois termos diferentes:

$$H_c = \frac{e^2\ \vec{A}.\vec{A}}{2\ m} - \frac{e\ \vec{p}.\vec{A}}{m} \qquad (1\text{-}6)$$

$\vec{A}$ potencial vetor

$\vec{p}$ momento do elétron

$\vec{m}$ massa de repouso do elétron

Na teoria de perturbação de la. ordem o tempo $\vec{p}.\vec{A}$ descreve a emissão e absorção de um fóton. Num processo de espalhamento, o fóton deve sofrer aniquilação (criação) e depois criação (aniquilação).

Expandindo $\vec{A}$ em operadores de criação e aniquilação temos: [9]

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k}(k_x \geq 0)} \sum_{\lambda=1,2} \left[q_{\vec{k}\lambda}(t)\vec{u}_{\vec{k}\lambda}(\vec{r}) + q^{+}_{\vec{k}\lambda}(t)u_{\vec{k}\lambda}(\vec{r}) \right] \qquad (1\text{-}7)$$

O índice λ denota o estado de polarização do vetor de onda transversal e portanto pode ter dois valores.

$$\vec{u}_{\vec{k}\lambda} = L^{-3/2}\ \varepsilon_{\vec{k}\lambda}\ e^{i\vec{k}.\vec{r}} \qquad (1\text{-}8)$$

L dimensão do lado do cubo

$\vec{k}$ vetor de onda

$q^{+}_{k\lambda}$, $q_{k\lambda}$ operadores de criação e aniquilação.

O processo de espalhamento tem então que ser pelo menos da ordem de A^2.

Portanto para cálculos de perturbação da 1a. ordem o termo $\vec{p}.\vec{A}$ não contribui; efetivamente o operador de 2a. ordem da Hamiltoniana pode ser escrito:

$$H' = \sum_n \vec{p}.\vec{A} \; \frac{|n > < n|}{E_1 + w - E_n} \; \vec{p}.\vec{A} \qquad (1\text{-}9)$$

E_n energia do estado contínuo intermediário

E_1 energia do estado atômico inicial.

É somente na segunda ordem que este termo pode contribuir.

Se porém assumirmos que a energia do fóton incidente está acima do limiar de ionização, os denominadores de energia nas expressões de perturbação de 2a. ordem tornam pequenas as contribuições de $\vec{p}.\vec{A}$.

A razão de transição é dada pela "regra de ouro" da teoria da perturbação dependente do tempo, isto é,

$$W = |M\, f_i|^2 \; \rho \qquad (1\text{-}10)$$

onde ρ é a densidade de estados finais do sistema.

Mf_i é o elemento de matriz.

A seção de choque diferencial para espalhamento Compton por um elétron ligado é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{W}{\text{fluxo de fótons incidentes}} \qquad (1\text{-}11)$$

então: $$\frac{d^2\sigma}{dw_2\, d\Omega\, d\Omega_e} = \frac{e^4}{m^2}\,\frac{w_2}{w_1}\,|Mf_i|^2 \qquad (1\text{-}12)$$

No caso não relativístico:

$$Mf_i = \overbrace{(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}')\,\langle f|e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}_2).\vec{r}}|i\rangle}^{\text{termo } A^2} - \overbrace{\int_n \frac{\langle f|e^{i\vec{k}_2.\vec{r}}\vec{\varepsilon}'.\vec{p}|n\rangle\langle n|e^{i\vec{k}_1.\vec{r}}\vec{\varepsilon}\,\vec{p}|i\rangle}{E_n-(E_1+w_1+i\eta)}}^{\text{termo } p.A \text{ em 2a. ordem}}$$

$$-\int_n \frac{\langle f|e^{i\vec{k}_1.\vec{r}}\,\vec{\varepsilon}.\vec{p}|n\rangle\langle n|e^{-i\vec{k}_2.\vec{r}}\,\vec{\varepsilon}'.\vec{p}|\,i\rangle}{E_n-(E_1-w_2)} \qquad (1\text{-}13)$$

$\vec{k}_1$ e $\vec{k}_2$ momentos dos fótons inicial e final

$\vec{\varepsilon}$ e $\vec{\varepsilon}'$ suas respectivas polarizações

$\vec{p}$ momento assintótico do elétron ejetado

$\vec{p}$ e $\vec{k}_2$ se referem aos ângulos sólidos $d\Omega_e$ e $d\Omega$ respectivamente

i denota o estado atômico inicial

f denota o estado final do átomo e elétron ejetado (E_2). A quantidade infinitesimal que aparece no denominador da 1a. soma previne o acontecimento de uma singularidade não física, quanto o fóton inicial excita o elétron num estado contínuo intermediário com energia $E_n = E_1 + w_1$.

O elemento de matriz de 2a. ordem que descreve o espalhamento Compton não relativístico é mostrado graficamente na fig. (1-2).

As linhas sólidas representam o sistema eletrônico e as linhas ondulantes os fótons que chegam e saem. O primeiro termo em (1-13) é simplesmente a parte A^2; isto é visto na fig. (1-2)(a)

na qual um fóton é aniquilado e criado no mesmo ponto. O segundo termo representa os estados intermediários n na ausência de fótons, e o terceiro o mesmo que o segundo, porém na presença de 2 fótons.

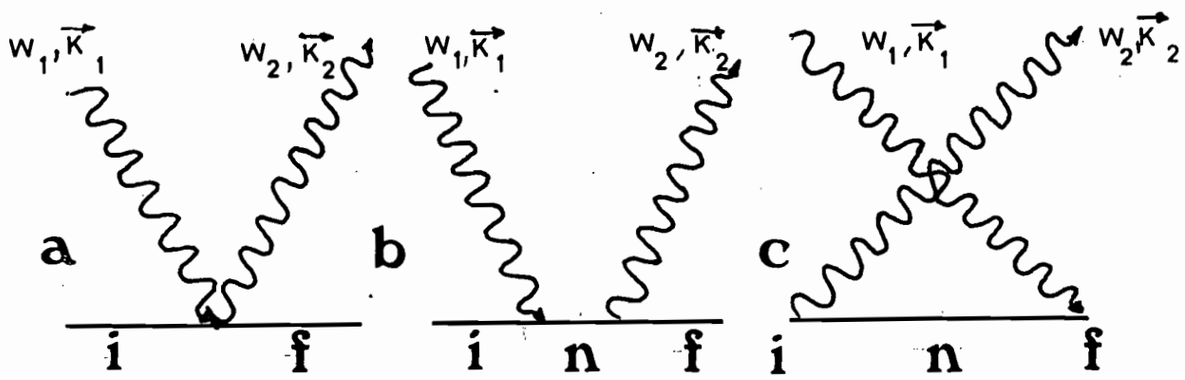


Fig. 1-2 -Diagramas de espalhamento que contribuem para o espalhamento Compton a) é a parte A^2 (b) e (c) partes que vem dos termos $\vec{p}.\vec{A}$ na Hamiltoniana de acoplamento

A conservação de energia requer que:

$$E_1 + w_1 = E_2 + w_2 \qquad (1\text{-}14)$$

O momento não se conserva no processo aqui descrito,

desde que o momento é transferido também ao núcleo do átomo (é na realidade uma interação de três corpos: fóton, elétron e núcleo).

Portanto as direções do fóton e elétron que saem são determinadas unicamente por argumentos de conservação de momento. Para cada ângulo de espalhamento a energia do fóton final pode variar continuamente de 0 até um limite superior fixado pela equação (1-14), em constraste com o valor bem definido que tem, quando o elétron é tomado inicialmente como livre. A expressão (1-13) se refere a átomos hidrogenóides. No caso de átomos de muitos elétrons, descrito numa aproximação de campo central auto consistente (os elétrons atômicos e o elétron emitido se movem num mesmo campo central, nos estados inicial, intermediário e final) quando o espalhamento envolve uma transição de um elétron, o elemento de matriz é ainda dado pela equação (1-13) segundo Gavrila [18,19].

3b) Caso hidrogenóide

Como se observa na equação (1-13) o cálculo do elemento de matriz exige o conhecimento da função de onda dos elétrons e a expressão mais simples para a função de onda dos elétrons é a obtida supondo-se átomos hidrogenóides. Gavrila et al [18,19] obtiveram uma expressão analítica para o elemento de matriz, na aproximação de dipolo, para espalhamento nas camadas K e L. A aproximação de dipolo é uma aproximação que se baseia no fato de que o comprimento de onda do fóton incidente, é grande comparado com as dimensões lineares do outro sistema. Neste caso o operador exponencial do elemento de matriz (1-13) é expandido em série de potências.

$$e^{i\vec{k}.\vec{r}} = e^{i\vec{k}.\vec{r}_o} (1 + i\ \vec{k}_o.(\vec{r} - \vec{r}_o) + ...) \qquad (1\text{-}15)$$

A origem do sistema de coordenadas é escolhida no centro de massa do átomo e somente se retém o 1º termo na série correspondente de elementos de matriz.

Esta aproximação é equivalente a substituir o átomo por um dipolo elétrico de momento igual ao da carga real, tomada no centro do átomo descrito pela coordenada $\vec{r}_o$[2].

Podemos supor uma onda plana deslocando-se na direção x com o potencial vetor $\vec{A}$ na direção z, o que permite calcular os elementos de matriz do tipo:

$$\alpha_{mn} = \int U_m^*(p_z\ e^{ikx})\, U_n\ d^3\vec{r} = \frac{\hbar}{i} \int U_m^*\ e^{ikx} \frac{\partial U_n}{\partial z} d^3\ \vec{r} \qquad (1\text{-}15a)$$

Com a aproximação de dipolo da equação (1-15), a equação (1-15a) torna-se:

$$\alpha_{mn} \cong \frac{\hbar}{i}\ e^{i\vec{k}x_o} \int U_m^*\ \frac{\partial U_n}{\partial z}\ d^3\ \vec{r} \qquad (1\text{-}15b)$$

Suponhamos que $\Psi_m(xt) = U_m(x)\, e^{-iE_m\ t/\hbar}$ é uma solução da equação de Shrödinger para o sistema não perturbado.

$$\frac{d}{dt} \int \Psi_m^*\ z\Psi_n\ d^3r = \frac{\hbar}{im} \int \Psi_m^* \frac{\partial}{\partial z}\ \Psi_n\ d^3\vec{r} \qquad (1\text{-}15c)$$

efetivamente isto é o mesmo que:

$$\frac{d}{dt} < n|z|m > = \frac{1}{i\hbar} < n|[\,z,H\,]|\ m > = \frac{1}{i\hbar} < n\ |[z,T\,]|\ m >$$

$$+ \frac{1}{i\hbar} \underbrace{<n|[\,z,V\,]|m>}_{=\ 0}$$

$$= \frac{1}{i\hbar} < n \left| \left[z, \frac{p^2}{2m} \right] \right| m >$$

então: $$\frac{d}{dt} < n|\dot{z}|m > = \frac{1}{2mi\hbar} <|[z, p_z^2]| m >$$

$$= \frac{1}{2mi\hbar} < n|\left\{ [z,p_z]\, p_z + p_z\, [z,p_z] \right\}| m >= n|p_z| m >$$

que é a equação (1-15c).

Colocando em (1-15c) a solução da equação de Shrödinger citada:

$$\frac{d}{dt}\left[e^{i(E_m-E_n)t/\hbar}\right] \int U_m^* z\, U_n\, d^3\vec{r} = e^{i(E_m-E_n)t/\hbar} \int U_m^* \frac{\hbar\, \partial}{i_m \partial_z} U_n d^3\vec{r}$$

$$E_m - E_n = \hbar\, w_{mn}$$

então:

$$\frac{\hbar}{im} \int U_m^* \frac{\partial}{\partial z} U_n\, d^3\vec{r} = iw_{mn} \int U_m^* z\, U_n\, d^3\vec{r} \qquad (1\text{-}15d)$$

A integral à direita é um tipo de média sobre a coordenada z, com uma função Um*Un que envolve os estados inicial e final. É às vezes chamado "momento de dipolo entre os estados m e n e representado por:

$$z_{mn} = \int U_m^* z\, U_n\, d^3\vec{r} \qquad (1\text{-}15e)$$

Temos então que

$$\alpha_{mn} = i\, w_{mn} m\, z_{mn}$$

Na aproximação de dipolo, se não se observa o elétron

que sai, assim como as polarizações dos fótons a seção de choque obtida por Gavrila [18,19] é:

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2\, d\Omega} = (C_{1j} + C_{2j} \cos^2\theta)/2Ej \qquad (1\text{-}16)$$

onde j se refere à subcamada da qual o elétron é ejetado. Isto fornece a forma do espectro de espalhamento para cada ângulo.

Para o caso da camada K e para pequenas energias dos fótons incidentes onde a aproximação de dipolo é válida, Gavrila [18,19] previu que a distribuição angular é isotrópica. Neste regime o elemento de matriz, juntamente com a seção de choque (1.16) decresce com $1/w_2$. Este mesmo autor mostrou que para energias do fóton incidente mais altas o 1º termo da equação (1-13) se torna mais e mais importante. Para ângulos de espalhamento não muito pequenos este termo produz um máximo na seção de choque $\frac{d^2\sigma}{dw_2\, d\Omega}$ perto da freqüência Compton para espalhamento por elétrons livres. Este máximo se move para freqüências mais baixas assim que o ângulo aumenta.

O máximo alargado relacionado com a distribuição de momento dos elétrons de espalhamento, contrasta com o comportamento bem pronunciado da seção de choque de Klein-Nishima onde w_2 é determinado unicamente pela energia do fóton incidente e o ângulo de espalhamento.

A fig. 1-3 mostra aspectos típicos obtidos com a hipótese de Klein-Nishima e de Gavrila para um determinado ângulo de espalhamento.

A parte de baixa energia do espectro, não é dominada por este máximo alargado, mas por um comportamento de $1/w_2$. Para calcular a intensidade total de fótons espalhados num certo ângulo deve-se integrar a equação (1-12). Isto daria o análogo da seção

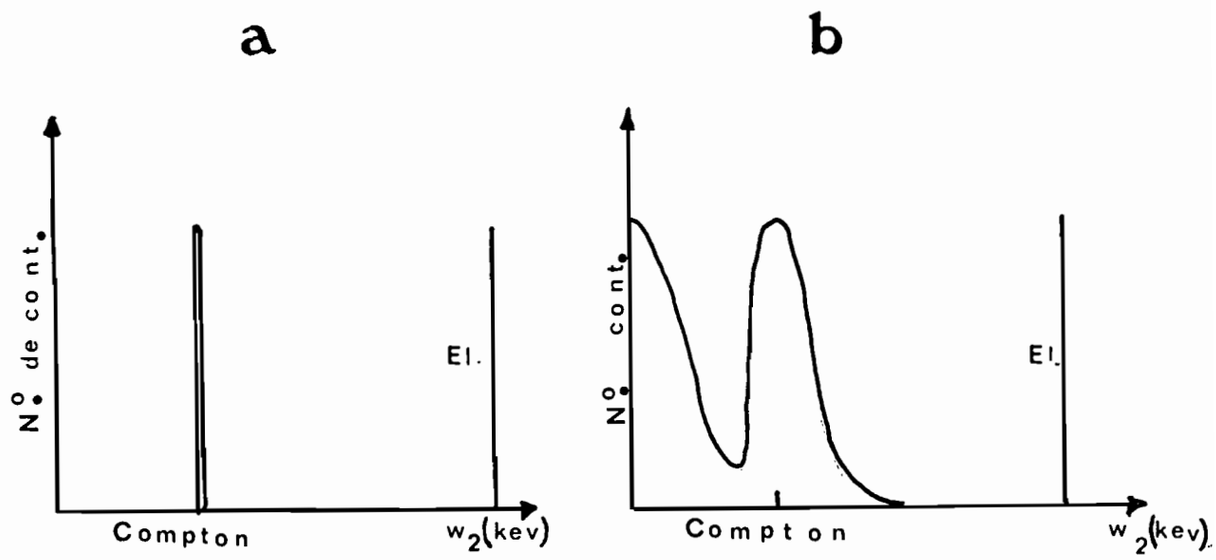


Fig. 1-3 -a) hipótese de Klein-Nishima
b) hipótese de Gavrila

de choque de Klein-Nishima para elétrons ligados. Porém, devido ao comportamento $1/w_2$ do elemento de matriz quando $w_2 \to 0$, $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ não existe.

Para calcular esta quantidade deve-se incluir as correções radiativas mostradas na fig. 1-4, ao processo Compton.

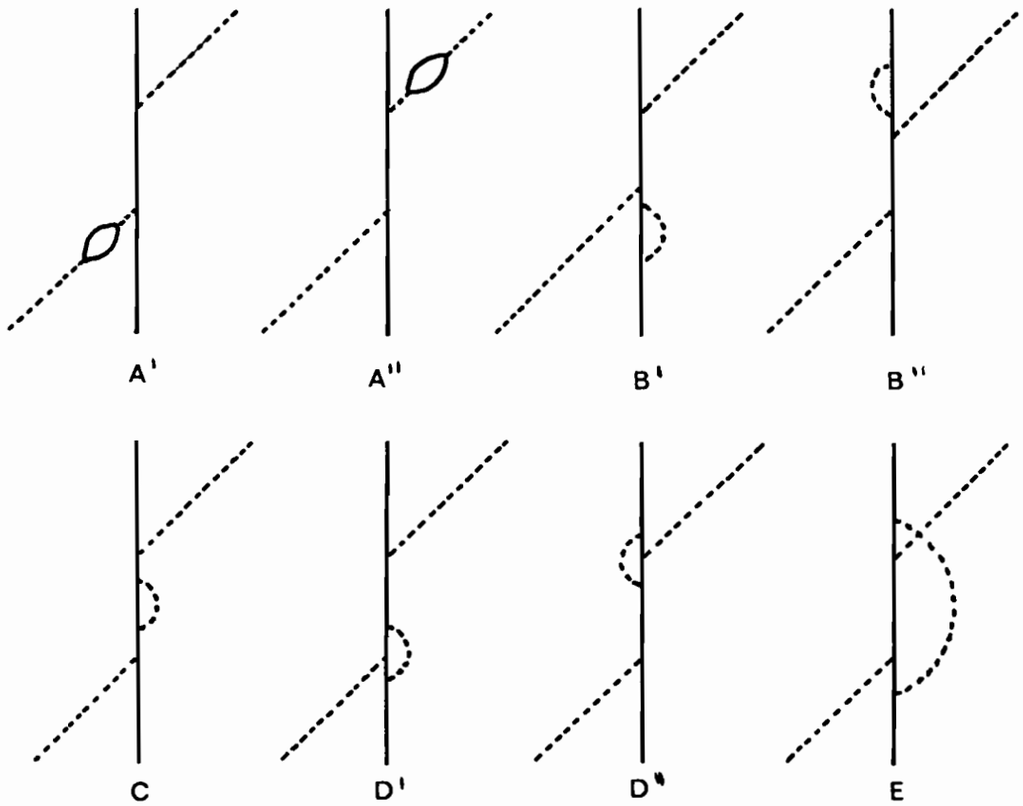


Fig. 1-4 -Correções radiativas ao processo Compton [23]

3c) A aproximação A^2

Exceto pelo trabalho de Gavrila, os tratamentos não relativísticos do espalhamento Compton por elétrons ligados estão em geral baseados na aproximação A^2 do elemento de matriz Mf_i (isto é, despreza-se $\vec{p}.\vec{A}$, na fórmula (1-13)).

$$Mf_i \sim (\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}') < f|e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\vec{r}}| i> \qquad (1\text{-}17)$$

Eisenberger e Platzman [10] estabeleceram que se w_1 e w_2 são muito maiores que E_B (energia de ligação) ainda se consi-

dera os termos $\vec{p}.\vec{A}$. porém aproximados de forma a tratar Mf_i por

$$Mf_i \simeq \langle f|e^{i\vec{k}.\vec{r}}|\, i\rangle \left(1 + \frac{p_f p_i}{m} \frac{w_1 - w_2}{w_1\, w_2}\right) \qquad (1\text{-}18)$$

Nesta expressão não foram considerados os fatores de polarização. Nota-se que para um elétron livre estacionário o termo $\vec{p}.\vec{A}$ de correção é zero $(p_i=0)$ A contribuição de $\vec{p}.\vec{A}$. é pequena em relação à contribuição de A^2 se $w_1, w_2 >> E_B$. Se porém w_1, $w_2 \sim E_B$ os termos $\vec{p}.\vec{A}$. darão uma contribuição dominante, como o fazem em experiências de espalhamento realizadas usando lasers que operam em comprimento de onda visíveis.

Schnaidt, Sujowski e Nagel usando funções de onda do tipo hidrogenóide tanto para as funções de onda iniciais como finais e assumindo radiação não polarizada obtiveram a aproximação A^2, para espalhamento incoerente de um fóton num intervalo de energia dw_2, num ângulo sólido $d\Omega$ para o elétron da camada K.

Shimizu et al obtiveram uma expressão para o espalhamento incoerente do fóton, usando uma função de onda de Coulomb para o elétron inicial da camada K, e uma onda plana para o elétron emitido e integraram sobre todos os estados finais possíveis.

O fato de que o elemento de matriz tende a zero assim que o ângulo de espalhamento diminui é uma característica geral de todas as aproximações A^2, conforme pode ser observado em (1-17). Esta característica é uma conseqüência da ortogonalidade das funções de onda. À ângulos pequenos, a transferência de momento ao elétron alvo tende a ser pequena comparada com seu momento inicial e há pequena probabilidade que o átomo absorva energia suficiente para remover o elétron-alvo.

3d) Fator de espalhamento incoerente

A aproximação de espalhamento incoerente parte da eq. (1-17) com mais algumas aproximações.

Em geral as tabelas existentes das seções de choque diferenciais $d\sigma/d\Omega$ de fótons espalhados por átomos são baseadas na função de espalhamento incoerente. Desde que a energia do fóton espalhado não é observada, a seção de choque diferencial deve incluir tanto a excitação como a ionização do átomo e deve ser somada sobre todos os possíveis estados finais. Num modelo de partícula independente, a excitação ou ionização envolve só um elétron, deixando os outros elétrons inalterados. Então a função de espalhamento incoerente para um átomo representa uma média das funções de espalhamento incoerente para seus elétrons individuais. As aproximações usadas para a aproximação de espalhamento incoerente são as seguintes:

1) na seção de choque diferencial

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dw_2} = (\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}')^2 \frac{w_2}{w_1} \sum_f \langle f | \sum_j e^{i(\vec{k}_1-\vec{k}_2).\vec{r}_j} | i\rangle^2 \times \partial(E_2 + w_2 - E_1 - w_1) \tag{1-19}$$

substitui $\vec{k}_1 - \vec{k}_2$ por $\vec{k}_1 - w_2^o\bar{k}_2$ onde $\bar{k} = \vec{k}/k_1$ e w_2 por w_2^o onde w_2^o é a média de w_2, pode-se então integrar analiticamente sobre w_2, e geralmente toma-se w_1 ou w_2^o como w_2^o onde w_2^o corresponde à freqüência Compton dada pela eq. (1-4). Esta aproximação seria equivalente a assumir que a principal contribuição à integral sobre w_2 é da região imediatamente próxima à freqüência Compton.

2) Assume que o estado inicial e todos os possíveis estados finais, formam um conjunto completo e usa a propriedade de completeza. Isto ignora o fato que transições do estado inicial

para estados ocupados ligados são proibidas e que nem todos os estados contínuos são acessíveis, devido às exigências da conservação da energia.

De maneira geral o fator de forma atômica $F(\vec{p},\vec{Z})$ para um átomo de número atômico Z é definido como o elemento da matriz:

$$\vec{F}(\vec{p},Z) = \sum_{n=1}^{Z} < \Psi_o | \exp(i\vec{p}.\vec{r}_n) | \Psi_o > \qquad (1\text{-}20)$$

Ψ_o é a função de onda do estado fundamental do átomo

$\vec{p}$ é o momento transferido

$\vec{r}_n$ raio vetor do núcleo ao n-ésimo elétron.

O fator de forma também pode ser dado por:

$$F(\vec{p},z) = \int \rho(\vec{r}) \exp (i\vec{p}.\vec{r}) d^3r \qquad (1\text{-}21)$$

onde $\rho(\vec{r})$ é a densidade total de elétrons em $\vec{r}$

A função de espalhamento incoerente $S(\vec{p},Z)$, pode se exprimir em função de um fator de forma generalizado para incluir estados excitados:

$$F_\epsilon(\vec{p},Z) = < \epsilon | \sum_{j=1}^{Z} \exp(i\vec{p}.\vec{r}_j) \; 0 > \qquad (1\text{-}22)$$

ϵ indica a energia de um estado estacionário excitado (ou ionizado) medido de um estado fundamental. A função de espalhamento incoerente é então:

$$S(\vec{p},Z) = \sum_{\epsilon>0} |F_\epsilon(\vec{p},Z)|^2 \qquad (1\text{-}23)$$

onde a soma, significa uma soma sobre estados discretos e uma in-

tegral sobre estados contínuos, excluindo o estado fundamental $\epsilon = 0$.

Para remover a soma sobre os estados excitados a equação anterior pode ser escrita:

$$S(\vec{p},Z) = \sum_{\varepsilon=0} < 0 | \sum_{n} \exp(-i\vec{p}.\vec{r}_n) | \varepsilon >$$

$$< \varepsilon | \sum_{m} \exp(i\vec{p}.\vec{r}_m) | 0 >$$

$$- | < 0 | \sum_{j} \exp (i\vec{p}.\vec{r}_j) | 0 > |^2 \qquad (1\text{-}24)$$

Empregando a propriedade da completeza.

$$\sum_{\varepsilon=0} |\varepsilon><\varepsilon| = 1 \qquad (1\text{-}25)$$

e identificando o último termo de (1-24) com $|F(\vec{p},Z)|^2$ como dado na eq. (1-20), temos:

$$S(\vec{p},Z) = \sum_{m=1}^{Z} \sum_{n=1}^{Z} < \Psi_o |\exp [i\vec{p}.(\vec{r}_m - \vec{r}_n)]|\Psi_o> - |F(\vec{p},Z)|^2 \qquad (1\text{-}26)$$

escrita somente em termos da função de onda do estado fundamental.

Obtém-se integrando sobre as energias do fóton espalhado w_2,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \frac{w_2^o}{w_1} \left(\sum_{mn} < i |\exp [i\vec{p}(\vec{r}_m - \vec{r}_n)]| i >-|F(p,Z)|^2 \right) \qquad (1\text{-}27)$$

A função de espalhamento incoerente é igual a zero a

$\theta = 0$, devido a ortogonalidade das funções de onda. Assim que θ aumenta, a função de espalhamento incoerente aumenta, tornando-se igual a um para momentos transferidos grandes. A eq. (1-27) foi calculada usando vários tipos de funções de onda (Herman-Skillman, Hartree-Fock), etc.). Os valores obtidos para os diferentes cálculos variam de vários por cento.

3e) Aproximação de Impulso

A teoria mais comumente usada para descrever a distribuição espectral de fótons espalhados por um átomo, $\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dw_2}$ é a aproximação de impulso.

A aproximação de impulso assume que a energia transferida ao elétron é grande, de forma que as energias de ligação podem ser desprezadas. Na parte (2) já discutimos sucintamente o espalhamento de fótons por elétrons livres estacionários, num processo onde a energia do fóton espalhado é determinada pelo ângulo de espalhamento e pela energia do fóton incidente (1.4).

Se o elétron é livre mas não estacionário a seção de choque é dada como Jauch-Rohrlich [23] por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_o^2}{4\gamma^2\,(1-\beta\cos\alpha)^2}\left(\frac{w_2}{w_1}\right)^2\left(\frac{w_1}{w_2} - \frac{w_2}{w_1} - 2 + 4(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}')\right) \tag{1-28}$$

onde:

$$\frac{w_2}{w_1} = \frac{1 - \beta\cos\alpha}{1 + (w_1/m)(1-\cos\theta) - \beta\cos\alpha'} \tag{1-29}$$

α e α' são os ângulos entre o elétron incidente e os fótons incidentes e espalhado respectivamente.

$$|\vec{p}| = \beta\gamma m \qquad\qquad \gamma = 1/\sqrt{1+\beta^2}$$

O ângulo ϕ seria o ângulo entre os planos formados por $\vec{k}_1$, $\vec{p}$ e $\vec{k}_1$, $\vec{k}_2$, α' pode ser colocado em função de α, Θ, ϕ.

$$\cos\alpha' = \cos\alpha \cos\beta + \operatorname{sen}\alpha \operatorname{sen}\Theta \cos\phi \qquad (1\text{-}30)$$

Se o elétron não tem um momento único, mas uma distribuição de momento como no caso do elétron ligado, a energia do fóton espalhado não será uma única freqüência a um dado ângulo de espalhamento. A distribuição de momento dos elétrons produzirá uma distribuição de freqüências à cada ângulo de espalhamento.

Du Mond [35,36] com argumentos semi-clássicos relacionou a distribuição espectral da radiação espalhada com a distribuição de momento dos elétrons ligados. Estes resultados foram refinados por Eisenberg e Platzmann [23]. A aproximação de impulso segue da aproximação A^2 já citada e ainda assume que os elétrons espalhados são livres (porém se movem) durante todo o processo da colisão.

Usando a regra de ouro para calcular a probabilidade de transição e depois a seção de choque, na aproximação A^2, Eisenberger e Platzmann [23] obtiveram:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dw} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \frac{w_2}{w_1} \sum_2 |\langle\Psi_2|e^{i\vec{k}.\vec{r}}|\Psi_1|\partial(E' - E - w) \qquad (1\text{-}31)$$

w_1 e w_2 são energias dos fótons incidentes e espalhados.
$w = w_1 - w_2$ e E e E' são as energias dos elétrons inicial e final, respectivamente; $\vec{k} = \vec{k}_1 - \vec{k}_2$ é o vetor de espalhamento; Θ é o ângulo de espalhamento; Ψ_1 e Ψ_2 são as funções de onda para o elétrons no seu estado inicial ligado e no seu estado final contínuo, respectivamente. A função ∂ na equação (1-31) garante a conservação da energia. No caso geral de espalhamento não se re-

quer conservação de momento entre o fóton e o elétron porque o núcleo pode receber momento durante a colisão. Antes da colisão o momento do elétron é $\vec{p}$ e depois da mesma $\vec{p}'$.

Então:

$$E' = p'^2/2m$$

$$E = p^2/2m \qquad (1\text{-}32)$$

A conservação de momento para o caso do elétron livre permite escrever:

$$\vec{p}' = \vec{p} + \hbar\vec{k} \qquad p'^2 = p^2 + 2h\vec{k}.\vec{p} + \hbar^2k^2 \qquad (1\text{-}33)$$

a função delta em (1-31) fica:

$$\partial\left\{(2\hbar\vec{k}.\vec{p} + \hbar^2k^2 - w)/2m\right\} = \partial\left\{\frac{\hbar k}{m}\left[\frac{\vec{k}.\vec{p}}{k} - \left(\frac{mw}{\hbar k} - \frac{\hbar k}{2}\right)\right]\right\} \qquad (1\text{-}34)$$

Dentro da aproximação de impulso o estado final é tomado como uma onda plana

$$\Psi_2(r) = e^{i\vec{p}'.\vec{r}_2/\hbar} \qquad (1\text{-}35)$$

A função de onda X_1 $(\vec{p})$ de estado ligado no espaço de momento é a transformada de Fourier da correspondente função de posição

$$X_1(\vec{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \Psi_1(\vec{r})\, e^{-i\vec{p}.\vec{r}/\hbar}\, d^3r \qquad (1\text{-}36)$$

Para transições para o contínuo, a soma, sobre os estados finais é substituída por uma integral sobre $\vec{p}$ isto é:

Colocando p e p_z em unidades atômicas de momento $\hbar/a_o$ a eq. (1-31) se torna o resultado conhecido para o perfil Compton na aproximação de impulso

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dw_2} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_T \frac{w_2}{w_1} \frac{ma_o^2}{\hbar^2} \frac{1}{ka_o} J(p_z) \qquad (1\text{-}43)$$

A aproximação de impulso é equivalente à um fóton espalhado inelasticamente por um gás de elétrons livres com uma distribuição de momento esfericamente simétrica onde tanto a energia como o momento são conservados durante a colisão. A densidade de momento $X_1(\vec{p})$ para um momento determinado, no gás de elétrons livres, é obtido do quadrado da transformada de Fourier da função de onda radial do estado inicial ligado. As relações de conservação de momento e energia determinam que para um fator incidente de energia w_1 espalhado a um determinado $\vec{k}$ (θ e w_2) as contribuições ao espalhamento por elétrons de momento $\vec{p}$ podem ocorrer somente se a projeção de $\vec{p}$ sobre o vetor de espalhamento $\vec{k}$ for igual a q (equação 1-40) isto pode ocorrer se p é maior ou igual a q. O perfil Compton é a projeção da distribuição de momento dos elétrons sobre o vetor de espalhamento. A integração da equação (1-43) sobre w_2 dará uma quantidade que é comparável com o fator de espalhamento incoerente (equação 1-27).

A maior parte dos trabalhos em perfis Compton usa funções de onda de estados ligados bastante precisas. Em particular os perfis foram calculados usando funções Hartree-Fock não relativísticas, funções de onda correlacionadas e modelos de átomo livre renormalizados.

Vários pesquisadores representaram o elétron emitido por uma onda plana em lugar de uma onda hidrogenóide. A soma sobre os estados finais é substituída por uma integral sobre o momento do

elétron emitido e faz-se então a média sobre as direções do momento do elétron; dividindo depois pela seção de choque de Thomson e a razão das energias do fóton, obtém.se o valor do perfil Compton. Para energias de ligação baixas e altas energias incidentes os dois resultados são similares. [10 e 4] .

3f) Abordagem relativística

3f1) Seção de Choque isotrópica para qualquer ângulo de espalhamento

Na sua maior parte, as tentativas de cálculos relativísticos da seção de choque Compton envolveram a avaliação do elemento de matriz A^2 da equação (1-17), a função de espalhamento incoerente e a aproximação de impulso usando funções de onda relativísticas. Discutiremos essencialmente a seção de choque dentro da aproximação de impulso que é a que usaremos na aplicação experimental.

Embora, os princípios gerais para o cálculo da seção de choque relativística para espalhamento inelástico de fótons, contra um sistema ligado sejam bem conhecidos, uma avaliação real é difícil devido aos elementos da matriz complicados e à grande quantidade de estados intermediários que devem ser somados. Isto foi claramente mostrado por Casimir [5], que avaliou a seção de choque usando estados de onda plana para os estados intermediários. Mesmo para um ângulo de espalhamento próximo de zero, como o usado por Casimir, tais cálculos são heróicos.

Eisenberger, Reed e Manninem [12,25] propuseram uma abordagem heurística que consiste essencialmente na exploração do fato que a seção de choque para feixes de fótons e elétrons que colidem é acessível numa forma analítica.

Assim sendo, quando desprezamos efeitos de ligação, podemos considerar o caso de um espalhamento contra um pacote de onda estacionário composto de estados de ondas planas (ou uma coleção de feixes de elétrons) caracterizados pela função de probabilidade $\rho(\vec{p})$. Com um fator de fluxo conveniente, a seção de choque diferencial relativística pode ser escrita como uma integral sobre cada evento de espalhamento de partícula livre, vezes o fator de peso $\rho(\vec{p})$. A forma resultante porém é relativamente complicada.

Eisenberger, Reed e Manninem [12,25] discutiram várias condições de simplificação. Em particular, escolheram um ângulo de espalhamento de 180°. Esta escolha simplifica a álgebra e tem o efeito de que certos fatores podem ser tomados fora da integração sobre $\vec{p}$, de maneira que sobrevive o conceito convencional de perfil Compton, também no contexto relativístico.

Ribberford [33,34] estudou a dependência angular da seção de choque diferencial relativística assim como o perfil Compton e provou que o mesmo pode ser definido para todos os ângulos θ de espalhamento.

Considerando que no nosso tratamento de dados experimentais usamos a seção de choque dada por Ribberford assim como a correção do perfil Compton para ângulos pequenos apresentada pelo mesmo autor daremos a seguir uma discussão um pouco mais extensa do método usado por Ribberford.

O tratamento proposto se inicia de uma expressão para seção de choque total relativística para espalhamento de fótons dada por Jauch e Rohrlich:

$$\sigma = m^2 r_o^2 \int d^3k_2 d^3p' \frac{1}{2KE'w_2} X(K,K') \, \partial(\Pi + k_3 - \Pi' - k_4) \tag{1-44}$$

Sendo que:

$k_3 = (\vec{k}_1, iw_1)$ é o quadrivetor que caracteriza o estado do fóton inicial.

$\vec{k}_1$ é o vetor de onda, e w_1 é a freqüência do fóton.

$\Pi = (\vec{p}, iE)$ é o quadrivetor que caracteriza o elétron alvo que está livre.

$\vec{p}$ é o momento e E é a energia relativística do elétron.

Depois do espalhamento o elétron está no estado

$\Pi' = (\vec{p}, iE')$ e o fóton $k_4 = (\vec{k}_2, iw_2)$

$$K = Ew_1 - \vec{p}.\vec{k}_1 \tag{1-45}$$

$$K' = Ew_2 - \vec{p}.\vec{k}_2 = K + k_3\, k_4 = K - w_1 w_2(1-\cos\theta) \tag{1-46}$$

$$X(K,K') = \frac{K}{K'} + \frac{K'}{K} + 2m^2\left(\frac{1}{K} - \frac{1}{K'}\right) + m^4\left(\frac{1}{K} - \frac{1}{K'}\right)^2 \tag{1-47}$$

e

$$\partial(\Pi + k_3 - \Pi' - k_4) \equiv \partial(\vec{p} + \vec{k}_1 - \vec{p}' - \vec{k}_2)\,\partial(E + w_1 - E' - w_2) \tag{1-48}$$

Esta fórmula se refere a uma experiência entre colisão de feixes. A polarização do fóton não é observada no estado inicial e final; isto será tratado posteriormente.

Estamos interessados na seção de choque diferencial para o espalhamento de fótons por elétrons ligados, caracterizada pela distribuição de momento $\rho(\vec{p})$. O alvo está em repouso, ou seja $\langle\vec{p}\rangle = 0$. Na aproximação de impulso podemos escrever a seção de choque diferencial usando a eq. (1-44), como:

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2\ d\Omega} = \frac{m^2 r_o^2}{2w_1}\int d^3p\ d^3p'\ \rho\ (p)\ \frac{w_2}{E\ E'}\ \bar{X}\ (K,K')\ \partial\ (\Pi + k_3 - \Pi' - k_4) \tag{1-49}$$

onde $d\Omega$ = elemento de ângulo sólido na direção $\vec{k}_2$.

Para obter esta equação usou-se $d^3k_2 = w_2^{\ 2}\ dw_2\ d\Omega$ e as derivadas de σ com relação a w_2 e Ω. O fator de fluxo K/Ew na equação (1-44) se refere a feixes que colidem, e foi substituído por $1 (c=1)$. A integração sobre $\vec{p}'$ dá:

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2\ d\Omega} = \frac{m^2\ r_o^{\ 2}\ w_2}{2\ w_1}\int d^3p\ \rho(\vec{p})\ \frac{\bar{X}\ (K,K')}{E\ E'}\ \partial\ (E + w_1 - E' - w_2) \tag{1-50}$$

Ribberford [33,34] introduz então um sistema conveniente de coordenadas (fig. 1-5)

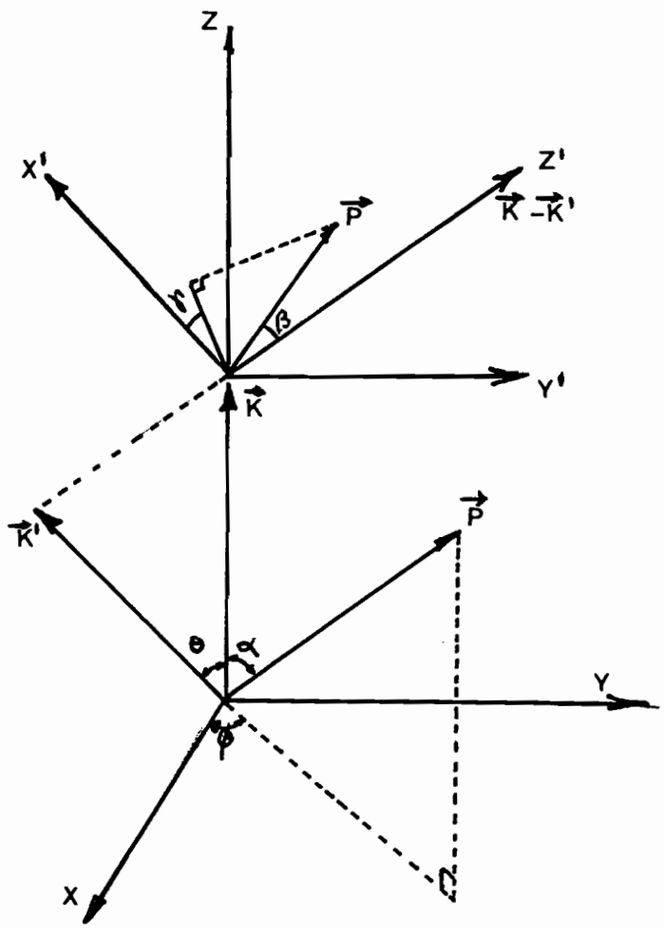


Fig. 1-5 - Sistemas de coordenadas (x,y,z) e (x'y'z').

No 1º sistemas (x,y,z) o eixo z é escolhido na direção de k_1. O sistema (x'y',z') é obtido rodando o sistema (x,y,z) em torno de y de maneira que z' coincide com $\vec{k}_1 - \vec{k}_2$. O vetor $\vec{p}$ tem componentes no sistema (x'y'z') determinados pelos ângulos esféricos β e γ.

No sistema (x'y'z') o elemento de volume para $\vec{p}$ pode ser escrito

$$d^3p = d\gamma \, d\beta \, dp \, \text{sen}\beta \, p^2 .$$

Obtém-se então

$$\int \partial(E + w_1 - E' - w_2) \, \text{sen}\beta \, d\beta = \left(\frac{E'}{p|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|}\right)_{E'+w_2=E+w_1}$$

e a eq. (1-50) se torna

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2 \, d\Omega} = \frac{m^2 r_o^2 w_2}{2|\vec{k}_1 - \vec{k}_2| w_1} \int dp \, d\gamma \, p \, \rho(\vec{p}) \, \frac{\bar{X}}{E(p)} \qquad (1\text{-}51)$$

O valor de p na expressão segue de considerações de momento e energia.

$$p = \frac{E(w_1 - w_2) - w_1 w_2 (1 - \cos\Theta)}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2| \cos\beta} \qquad (1\text{-}52)$$

A eq. (1-51) é válida para qualquer tipo de distribuição de momento $\rho(\vec{p})$; se porém nos restringirmos à distribuições isotrópicas, podemos fazer a integral sobre γ analiticamente.

O fator $\bar{X}$ é função de p cos α porque:

$$K = w_1 \, (E - p \cos\alpha) \qquad K' = K - w_1 \, w_2 (1 - \cos\Theta)$$

(1-53)

Como $\rho(\vec{p})$ é independente de γ pode-se fazer a integração em γ sabendo-se apenas a transformação de $p\cos\alpha$ de (x,y,z) para $(x'y'z')$

$$p\cos\alpha = p\,\mathrm{sen}\beta\cos\gamma\,\frac{w_2\,\mathrm{sen}\theta}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} + \frac{p\cos\beta\,(w_1 - w_2\cos\theta)}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \tag{1-54}$$

Definem-se as quantidades

$$D \equiv (w_1 - w_2\cos\theta)\,p\cos\beta/|\vec{k}_1 - \vec{k}_2| \tag{1-55}$$

$$H \equiv (w_2\,\mathrm{sen}\theta\; p\,\mathrm{sen}\beta)/|\vec{k}_1 - \vec{k}_2| \tag{1-56}$$

então $p\cos\alpha = D(p) + H(p)\cos\gamma$

reescrevemos então (1-53) e o fator $\bar{X}$ e podemos fazer a integração de $\bar{X}$ sobre γ obtendo-se:

$$\int \bar{X}(D + H\cos\gamma)\,d\gamma = 2\pi\bar{X}_{int} \tag{1-57}$$

onde

$$\bar{X}int = 2 + F\left(\frac{1}{[(E + W - D)^2 - H^2]^{1/2}} - \frac{1}{[(E - D)^2 - H^2]^{1/2}}\right)$$

$$+ \frac{m^4}{w^2}\left(\frac{E - D}{[(E - D)^2 - H^2]^{3/2}} + \frac{E - D - W}{[(E - D - W)^2 - H^2]^{3/2}}\right) \tag{1-58}$$

$$F = W - 2m^2/w_1 - 2m^4/w_1{}^2\,W$$

$$W = w_2(1 - \cos\theta)$$

A expressão para a seção de choque diferencial se torna:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega\, dw_2} = \frac{m^2 r_o^{\,2}\, 2\Pi w_2}{2w_1 |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \int_{p_{min}}^{\infty} \frac{p\ \rho(p)\ \bar{X}_{int}\ dp}{E(p)} \qquad (1\text{-}59)$$

$$p_{min} = \frac{|E(w - w') - ww'(1 - \cos\Theta)|}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \quad e \quad E = (p_{min}^{\,2} + m^2)^{1/2}$$

(1-60)

A expressão (1-59) permite calcular na aproximação de impulso seções de choque diferenciais para ângulos arbitrários para qualquer distribuição isotrópica de momento $\rho(\vec{p})$.

Uma aproximação razoável para p_{min} da equação (1-60) é

$$p_{min} = \frac{|m(w_1 - w_2) - w_1 w_2\ (1 - \cos\Theta)|}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} = p_z \qquad (1\text{-}61)$$

$m(w_1 - w_2) - w_1 w_2\ (1 - \cos\Theta) < 0$ se refere ao lado de alta energia do espectro.

Já vimos que na aproximação de impulso a seção de choque diferencial é (no tratamento não relativístico simplesmente proporcional ao perfil Compton, eq. (1-43) e:

$$J(p_z) = \int\int dp_x\ dp_y\ \rho(\vec{p}) \qquad (1\text{-}62)$$

$\rho(\vec{p})$ é a distribuição de momento do conjunto de elétrons orbitais antes do espalhamento.

p_z é a componente do momento do elétron ao longo do vetor de espalhamento.

A escolha de um ângulo Θ de 180° tem o efeito de que o perfil Compton pode ser definido também quando existem efeitos relativísticos, veremos que isto é também verdade para outros valores de Θ.

A eq. (1-62) para um sistema isotrópico pode ser escrita

$$J(p_z) = \int_{p_z}^{\infty} 2\Pi\ \rho(p)\ pdp \qquad (1\text{-}63)$$

que é uma função positiva monotonicamente decrescente.

Portanto pode-se escrever a função primitiva de $2\Pi p\ \rho(p)$ como $-J(p)$, com $J(\infty) = 0$.

Uma integração parcial da equação (1-59) dá:

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2\ d\Omega} = \frac{m^2 r_o^2 w_2}{2w_1 |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \left(-J(p)\ \frac{\bar{X}_{int}}{E}\Big|_{p_{min}}^{\infty} + \right.$$

$$\left. + \int_{p_{min}}^{\infty} \frac{J(p)}{E}\ \frac{d\bar{X}_{int}\ dp}{dp} - \int_{p_{min}}^{\infty} J(p)\ \bar{X}_{int}\ \frac{p}{E^3}\ dp \right) \qquad (1\text{-}64)$$

O 1º termo entre parêntesis dá:

$$J(p_{min})\ \bar{X}_{int}(p_{min})/E(p_{min}) \qquad (1\text{-}65)$$

porque $J(\infty) = 0$ e $\bar{X}_{int}$ é limitado.

O 2º termo tem o caráter de uma correção e é pequeno comparado com o 1º termo, e o terceiro termo é da ordem de $1/m^3$ portanto pode ser desprezado. $\bar{X}_{int}\ (p_{min})$ pode ser simplificado e reescrito:

$$\tilde{X} \equiv X_{int}(p_{min}) = \frac{R}{R'} + \frac{R'}{R} + 2\ m^2 \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R'}\right) + m^4\left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R'}\right)^2 \qquad (1\text{-}66)$$

$$R = w_1 \left[E(p_{min}) - \frac{w_1\ w_2 \cos\Theta\ p_z}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \right] \qquad (1\text{-}67)$$

$$R' = R - w_1\ w_2 (1 - \cos\Theta) \qquad (1\text{-}68)$$

Como resultado final:

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2\, d\Omega} = \frac{m^2 r_o^2 w_2}{2w_1 |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \left(J(p_{min}) \frac{\tilde{X}}{E_p(min)} + \int_{p_{min}}^{\infty} \frac{J(p)}{E(p)} \frac{d\bar{X}_{int}\, dp}{dp} \right) \tag{1-69}$$

Esta equação é útil para calcular o perfil Compton a partir de dados experimentais de seção de choque, porque o 2º termo é pequeno e desprezа, então:

$$J_o(p_{min}) = \frac{2\, w_1 |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|\, E(p_{min})}{m^2\, r_o^2\, w_2\, \tilde{X}} \frac{d^2\sigma}{dw_2\, d\Omega} \tag{1-70}$$

nesta fórmula não há restrições de ângulo.

Para resultados mais exatos:

$$J(p_{min}) = J_o(p_{min}) - \frac{Ep_{min}}{\tilde{X}} \int_{p_{min}}^{p_{max}} \frac{J_o(p)}{E(p)} \frac{d\bar{X}_{int}\, dp}{dp} \tag{1-71}$$

J_o é uma 1a. aproximação; para dados experimentais o J_o é suficientemente preciso, como foi provado por Ribberford [33,34].

Para 180° Eisenberger Reed Manninem [12,25] usaram:

$$J_{180}(p_z) = \frac{2\, w_1 \left[|\vec{k}_1 - \vec{k}_2| + p_z (w_1 - w_2)/m \right] E}{m^2\, r_o^2\, w_2\, X_{180}} \frac{d^2\sigma}{dw_2\, d\Omega} \tag{1-72}$$

Em geral os perfis tabelados foram obtidos com a equação (1-72) então estes perfis devem ser corrigidos para ângulos diferentes de 180° multiplicando por:

$$f(p_z) = \frac{X_{180}}{\tilde{X}\left[1 + p_z\, (w_1 - w_2)/m\, |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|\right]} \tag{1-73}$$

e depois é preciso renormalizá-los. Isto será explicado em deta-

lhes no capítulo II. (Ver tabela 2-3).

Uma relação similar à obtida na equação (1-71) para distribuições isotrópicas de momento também foi obtida por Ribberford [33,34] para distribuições de momento anisotrópicas e também para fótons polarizados.

3f2 - Seção de choque - Efeitos de polarização

Como já foi mencionado, a técnica do espalhamento Compton dá informação da distribuição de momento e da estrutura eletrônica do espalhador. Porém, os dados experimentais devem ser corrigidos para efeitos de espalhamento múltiplo. Mesmo que o feixe incidente seja não polarizado o espalhamento Compton produz um feixe parcialmente polarizado. Desta forma a seção de choque para o segundo e outros espalhamentos exige fórmulas onde se considera explicitamente a polarização do feixe incidente. Tal tipo de avaliação baseada na técnica de Monte Carlo e na fórmula de Klein-Nishima, foi publicado por Felsteiner et al [15,16,17]. Desde que a fórmula de Klein-Nishima se refere à elétrons iniciais em repouso, Ribberford [33,34] desenvolveu uma fórmula para o caso mais geral válida para fótons iniciais e finais polarizados.

Esta fórmula descreve o espalhamento de fótons contra um sistema de elétrons não estacionário melhor que a fórmula de Klein-Nishima. O espalhamento múltiplo (embora dependa do ângulo de espalhamento) pode contribuir consideravelmente no espalhamento total. Portanto é necessário usar um modelo mais preciso para a dependência de polarização, se quisermos estimar o efeito do espalhamento múltiplo numa determinada experiência de efeito Compton.

Uma relação similar à obtida na equação (1-70), para distribuições isotrópicas de momento, foi obtida por Ribberford, pa

para fótons polarizados.

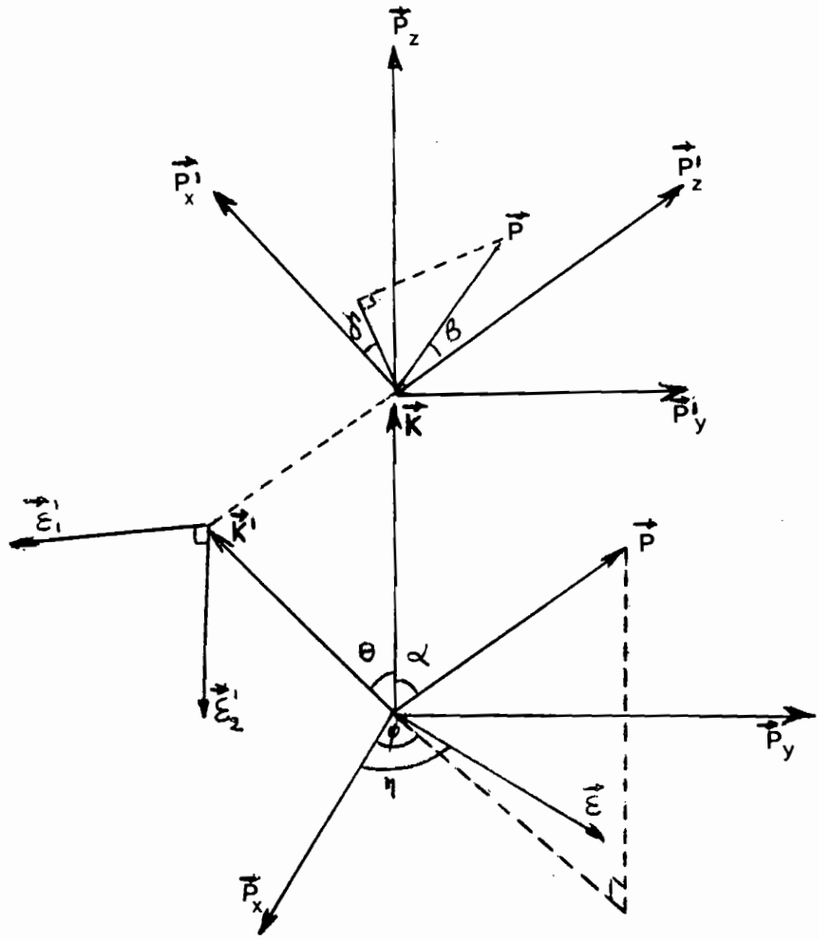


Fig. 1-6 -Esquema do sistema de coordenadas para obter seção de choque para fótons polarizados

O fator X para fótons polarizados é dado por Jauch e Rohrlich [23]

$$X = \frac{1}{2}\left(\frac{K}{K'} + \frac{K'}{K}\right) - 1 + 2\left(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}' + \frac{\vec{\varepsilon}.\vec{p}\,\vec{\varepsilon}'.\vec{p}'}{K} - \frac{\vec{\varepsilon}'.\vec{p}\,\vec{\varepsilon}.\vec{p}'}{K'}\right)^2 \qquad (1\text{-}74)$$

K e K' já foram definidos (1-53).

Considerando a fig. (1-6) vemos que é possível exprimir os vários termos no sistema (p_x, p_y, p_z) como:

$$\vec{\varepsilon} = (\cos\eta,\ \operatorname{sen}\eta,\ 0) \qquad (1\text{-}75)$$

$$\vec{\varepsilon}'_1 = (0,\ -1,\ 0) \tag{1-76}$$

$$\vec{\varepsilon}'_2 = (\cos\theta,\ 0,\ -\mathrm{sen}\theta) \tag{1-77}$$

$$\vec{p} = p\ (\mathrm{sen}\alpha\ \cos\phi,\ \mathrm{sen}\alpha\ \mathrm{sen}\phi,\ \cos\alpha) \tag{1-78}$$

$$= (L\ p'_x - Np'_z,\ p'_y,\ Np'_x + Lp'_z)$$

$$N \equiv w_2\ \mathrm{sen}\theta/|\vec{k}_1 - \vec{k}_2| \tag{1-79}$$

$$L \equiv (w_1 - w_2\cos\theta)/|\vec{k}_1 - \vec{k}_2| \tag{1-80}$$

$$\vec{k}_1 = (0,0,w_1) \tag{1-81}$$

$$\vec{k}_2 = (w_2\ \mathrm{sen}\theta,\ 0,\ w_2\ \cos\theta) \tag{1-82}$$

Como $X = X(p'_x,\ p'_y,\ p'_z)$ nos restringiremos à distribuição isotrópica de momento e temos para a seção de choque diferencial no sistema esférico (p,β,γ).

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2\ d\Omega} = \frac{m\ r_o^2\ w_2}{2w_1|\vec{k}_1-\vec{k}_2|} \int dpd\gamma p\rho(p)\ X\ (p,\beta,\gamma) \tag{1-83}$$

$$p\ \cos\beta = \frac{m(w_1 - w_2) - w_1w_2\ (1 - \cos\theta)}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} = p'_z \tag{1-84}$$

dado que $p\ \cos\beta$ é constante pode-se escrever:

$$X(p'_x,\ p'_y,\ p'_z) = X((p^2 - p_z'^2)^{1/2}\cos\gamma,\ (p^2 - p_z'^2)^{1/2}\mathrm{sen}\gamma,\ p'_z)$$

então a integral de (1-83)

$$dpd\gamma p\rho(p)X(p,\beta,\gamma) = \int_{|p'_z|}^{\infty} dpp\rho(p)\int_0^{2\Pi} d\gamma X(p,p'_z\ \gamma) \tag{1-85}$$

e

$$\int_0^{2\Pi} d\gamma X(p,p'_z,\gamma) \equiv 2\Pi X_{int}((p^2 - p'^2_z)^{1/2}, p'_z) \qquad (1\text{-}86)$$

Agora se integramos (1-83) parcialmente e desprezamos o 2º termo por ser pequeno.

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2 d\Omega} = \frac{mr_o^2 w_2}{2w_1 |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} \int_{|p'_z|}^{\infty} dp p\rho(p) \; 2\Pi X_{int}$$

$$\simeq \frac{mr_o^2 w_2}{2w_1 |\vec{k}_1 - \vec{k}_2|} J(|p'_z|) \quad X_{int}(0,p'_z) \qquad (1\text{-}87)$$

As expressões para o X_{int} $(0,p'_z)$ são obtidas:

$$X_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{R}{R'} + \frac{R'}{R}\right) - 1 + 2 \operatorname{sen}^2\eta \text{ para } \vec{\varepsilon}' = \vec{\varepsilon}'_1 \qquad (1\text{-}88)$$

$$X_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{R}{R'} + \frac{R'}{R}\right) - 1 + 2\left[\cos\theta + C\left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R'}\right)^2\right]\cos^2\eta$$

$$\text{para } \vec{\varepsilon}' = \vec{\varepsilon}'_2 \qquad (1\text{-}89)$$

onde R e R' já foram definidos por (1-67) e (1-68) e pode-se mostrar que C é uma quantidade muito pequena. Então como resultado final de (1-88) e (1-89) temos:

$$X = \frac{1}{2}\left(\frac{R}{R'} + \frac{R'}{R}\right) - 1 + 2\,(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}')^2 \qquad (1\text{-}90)$$

Este é um resultado importante porque pode-se ver como a polarização do fóton afeta a seção de choque diferencial.

A equação (1-90) se reduz ao fator X correto de Klein-Nishima quando $p'_z \to 0$ (elétron em repouso).

$$X_{KN} = \frac{1}{2}\left(\frac{w_1}{w_2} + \frac{w_2}{w_1}\right) - 1 + 2\,(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}\,') \qquad (1\text{-}91)$$

Fazendo a média sobre a polarização do fóton incidente e somando sobre os dois estados de polarização do fóton espalhado obtém-se:

$$\bar{X} = \frac{R}{R'} + \frac{R'}{R} - \operatorname{sen}^2\theta \qquad (1\text{-}92)$$

Desde que o fator de Klein-Nishima (1-91) é usado em muitas aplicações, como por exemplo em cálculos de espalhamento múltiplo mesmo quando o elétron alvo não é estacionário, é interessante observar as diferenças entre as equações (1-90) e (1-91).

Ribberford [33,34] apresentou o valor do fator X considerando a componente da radiação espalhada com polarização na direção $\vec{\varepsilon}_1'$, (Vide fig. 1-6) e a radiação incidente não polarizada. A diferença entre as curvas aumenta com o aumento do momento do elétron e não pode ser desprezada.

Ribberford mostrou também a razão X_1/X_2 que é a razão entre as intensidades da radiação espalhada com polarizações $\vec{\varepsilon}_1'$ e $\vec{\varepsilon}_2'$ respectivamente (vide fig. 1-8). Os desvios são especialmente significativos para ângulos perto de 90°. A radiação não polarizada incidente não será tão fortemente polarizada como previsto pela fórmula de Klein-Nishima, se o elétron alvo está em movimento.

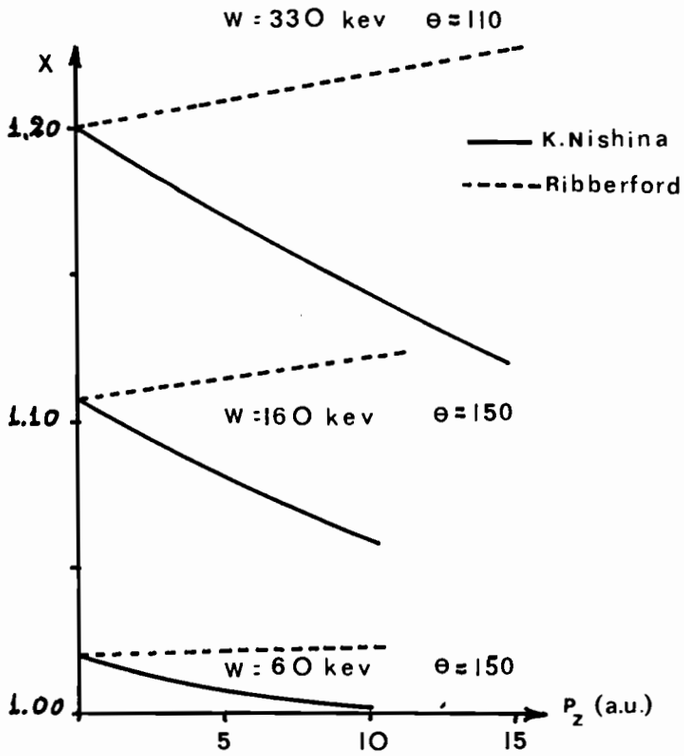


Fig. 1-7 - Comparação entre os fatores X para $\vec{\varepsilon}_1'$, dados pelas equações (1-98) e (1-99) a radiação incidente não polarizada [33,34], em função do momento do elétron alvo.

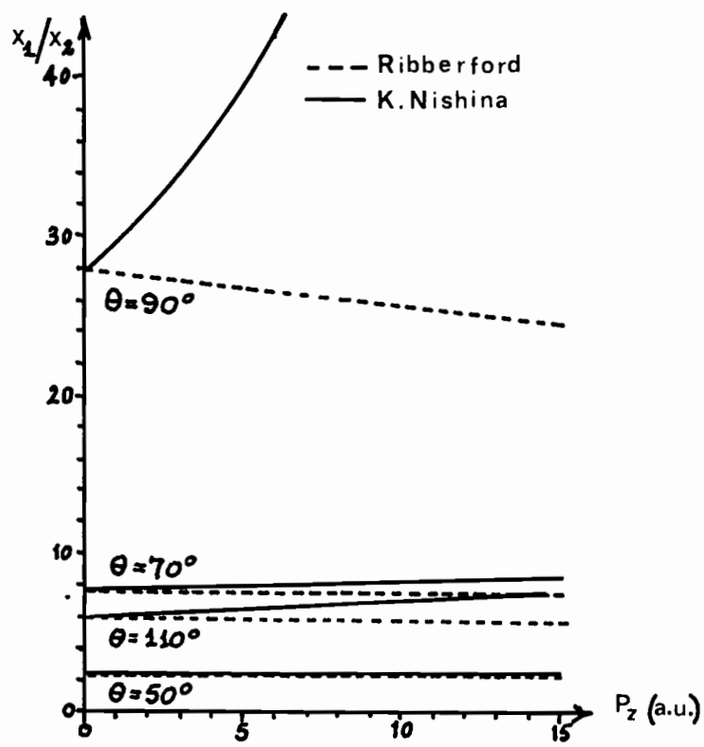


Fig. 1-8 - Razão entre fatores X_1/X_2 com radiação espalhada com polarização $\vec{\varepsilon}_1'$ e $\vec{\varepsilon}_2'$ radiação incidente não polarizada [33,34], em função do momento do elétron alvo.

3f3 - Cálculos do perfil Compton

Cálculos do perfil Compton Hartree-Fock relativístico foram apresentados por Mendelsohn, Biggs e Mann, [26,27] as funções de onda usadas são funções de onda Hartree-Fock relativístico numéricas desenvolvidas por Mann. Estas foram obtidas resolvendo de forma autoconsistente as equações de Dirac tomando as interações entre as duas partículas como coulombianas.

No caso do campo central relativístico Hartree-Fock um determinado orbital n,ℓ (exceto os orbitais s) se divide em dois orbitais, um com $j = \ell + 1/2$ e outro com $j = \ell - 1/2$. Para qualquer um dos orbitais $n\ell j$, a função radial é descrita por duas componentes: $G_{n\ell j}(r)$ a componente maior que é semelhante à função não relativística para átomos pequenos e $F_{n\ell j}$ a componente menor. Em função destas componentes a condição de normalização da função de onda pode ser tomada como:

$$\int_0^\infty \left\{(G_{n\ell j}(r))^2 + (F_{n\ell j}(r))^2\right\} r^2 dr = 1 \qquad (1\text{-}93)$$

As duas componentes do "spinor" que contém G(r) multiplicam-se por harmônicos esféricos de ordem ℓ. As duas componentes do "spinor" que contém F(r) são multiplicadas pelos harmônicos esféricos de ordem $\ell + 1$ para o caso $j = \ell + 1/2$, e de ordem $\ell - 1$ para o caso $j = \ell - 1/2$. Tomando as transformadas de Fourier das componentes individuais de "spinor" a função de momento de "spinor" pode também ser escrita em função das duas componentes de momento radiais $X_{n\ell j}^{G}(p)$ e $X_{n\ell j}^{F}(p)$

onde

$$X_{n\ell j}^{G}(p) = (2/\Pi)^{1/2} \int_0^\infty G_{n\ell j}(r)\ j_\ell(p_r) r^2 dr \qquad (1\text{-}94)$$

e

$$X_{n\ell j}^{F}(p) = \left(\frac{2}{\Pi}\right)^{1/2}\int_0^\infty F_{n\ell j}(r)\, j_{\ell+1}(pr)\, r^2 dr, \quad j = \ell + \frac{1}{2} \tag{1-95}$$

$$X_{n\ell j}^{F}(p) = \left(\frac{2}{\Pi}\right)^{1/2}\int_0^\infty F_{n\ell j}(r)\, j_{\ell-1}(pr)\, r^2 dr, \quad j = \ell - \frac{1}{2} \tag{1-96}$$

e $j_\ell(pr)$ é uma função de Bessel de la. ordem. Finalmente o perfil Compton na aproximação de impulso é calculado como:

$$J_{n\ell j}(p_z) = \frac{1}{2}\int_{p_z}^\infty |X_{n\ell j}|^2\, pdp = \frac{1}{2}\int_{p_z}^\infty \left\{ (X_{n\ell j}^{G}(p))^2 + (X_{n\ell j}^{F}(p))^2 \right\} pdp \tag{1-97}$$

onde temos o fator $\frac{1}{2}$ em vez de 2Π, devido à normalização de G e F dada pela equação (1-93).

O resultado mais interessante dos cálculos relativísticos é o efeito sobre os elétrons externos, e portanto os perfis Compton totais são maiores que os esperados a priori.

Os orbitais que contribuem significativamente no centro do perfil são os orbitais dos elementos atômicos externos. Em geral não se pensa que estes orbitais, onde os elétrons se movem relativamente devagar, possam ser muito afetados por efeitos relativísticos. Por outro lado espera-se que as funções de onda relativísticas dos elétrons que se movem mais rapidamente nos orbitais mais internos dos átomos pesados sofram uma "encolhida" considerável quando comparadas com as funções de onda não relativísticas.

Este "encolhimento" pode ser entendido considerando o

efeito massa-velocidade como uma perturbação na Hamiltoniana não relativística e como tal tem o mesmo sinal que o potencial atrativo nuclear "encolhendo" portanto a função de onda do elétron porque é maior próximo do núcleo. Desde que uma função de onda do elétron interno com pico mais pronunciado conduz a uma função de onda no espaço de momento e perfil Compton mais achatados espera-se que uma função de onda relativística dê um perfil Compton mais achatado (menor no centro e maior nos extremos) que uma função de onda não relativística. Estes efeitos foram publicados por Mendelsohn, Biggs e Mann [26,27] e são as tabelas destes perfis que foram usadas no presente trabalho.

CAPÍTULO II - CÁLCULO DE MONTE CARLO - ESPALHAMENTO SIMPLES E MÚLTIPLO

1) INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, houve um ressurgimento de interesse no espalhamento de fótons para energias menores que 5 Mev.

Para um ângulo de espalhamento fixo, o espectro de energia da radiação espalhada (o perfil Compton) fornece uma determinação direta, da projeção da distribuição de momento dos elétrons da amostra em estudo, sobre a direção de espalhamento, se cada fóton é espalhado uma única vez. O primeiro problema que surge é então simular teoricamente o perfil Compton, considerando a distribuição de momento dos elétrons e a geometria finita da experiência para poder comparar este perfil com a medidas experimentais de perfil Compton.

A simulação dp problema é feita então através de um método Monte Carlo, que consiste em seguir as trajetórias de um grande número de fótons através de uma amostra, usando para isso os cálculos um computador.

Outro problema, inerente às medidas experimentais de perfil Compton envolve a questão do espalhamento múltiplo.

Com a finalidade de considerar os efeitos do espalhamento múltiplo nas medidas de perfil Compton devemos responder a duas questões a) Em que extensão os fótons do espalhamento múltiplo são observados? e b) Como estes fótons mascaram o espectro de energia referente ao espalhamento simples.

Em 1930, Du Mond [7,8] previu que numa experiência típica Compton, os eventos de espalhamento duplo poderia contribuir perto de 15% da intensidade total. Somente nos últimos anos, po-

rém o espalhamento múltiplo foi redescoberto e realizaram-se progressos tanto teóricos como experimentais no sentido de entender os detalhes deste efeito.

Existem alguns métodos diferentes que podem ser usados para reduzir ou para calcular o espalhamento múltiplo no estudo dos perfis Compton vamos citar apenas dois deles.

O 1º envolve mudanças na geometria do espalhador de tal maneira a reduzir os eventos que sofram mais de um espalhamento. Para isto usam-se várias amostras de espessuras diferentes extrapolam-se os resultados para uma espessura zero. Isto foi feito por Reed e Eisenberger [11] usando uma extrapolação linear. Tanner e Epstein [37,38,39] usaram uma dependência da raiz quadrada da espessura. A extrapolação porém parece inconveniente para as condições experimentais por duas razões: primeiro a dependência funcional da intensidade de espalhamento múltiplo com a espessura é complexa, tornando-se não linear mesmo para amostras relativamente finas; segundo, é a suposição de que a forma do perfil de espalhamento é independente da espessura da amostra. Esta suposição é crucial no sucesso de qualquer processo de extrapolação no qual as mesmas operações são feitas em cada ponto do perfil. Processos que permitem fórmulas de extrapolação diferentes para momentos diferentes são possíveis em princípio, mas são necessariamente dificultosas de desenvolver. Infelizmente, esta suposição falha para uma espessura de amostra razoável e pode tornar os processos de extrapolação inúteis, exceto para amostras muito finas, nas quais em todo caso o espalhamento múltiplo é mínimo.

Um segundo método, permite calcular a distribuição espectral do espalhamento múltiplo para um dado arranjo experimental, usando no cálculo parâmetros experimentais determinados, e usar os resultados para corrigir o perfil Compton. Este último mé

todo parece ser o melhor sucedido.

Uma primeira tentativa teórica para entender o efeito do espalhamento duplo foi feita por Du Mond [7,8] que usou a seção de choque de espalhamento clássico de Thomson e calculou analiticamente a intensidade de radiação espalhada duplamente por elétrons livres e estacionários desprezando a absorção.

Kirkpatrick estendeu o trabalho incluindo absorção. Embora estas pesquisas teóricas sejam relativamente simples contém a essência do espalhamento múltiplo.

Somente 35 anos depois o trabalho de Du Mond foi extendido por Williams, Pattison e Cooper [42] para incluir o momento dos elétrons. Usaram uma gaussiana para modelo de perfil e podiam obter informação qualitativa da forma do perfil duplo. Estes autores exploraram em certo detalhe a contribuição de fótons espalhados uma vez elasticamente e outra inelasticamente.

McIntire calculou este efeito para fóton de 60 Kev e a 180°, usando uma situação geométrica simples de forma a reduzir o tridimensional para um espalhamento no plano. Tanner, Epstein [38,39] examinaram o problema analiticamente, para determinar os efeitos da geometria do espalhador, ângulos de espalhamento, coeficiente de absorção e forma das seções de choque de espalhamento sobre a intensidade do espalhamento simples e de maior ordem.

Paatero e Halonen [29] apresentaram expressões analíticas para a quantidade de espalhamento duplo, quando o primeiro espalhamento no duplo processo é isotrópico. Embora todos estes processos semi-analíticos tenham fornecido uma informação considerável sobre o espalhamento múltiplo, nenhum deles fornece toda a informação necessária para corrigir as medidas de perfil Compton. Por esta razão as técnicas Monte Carlo também foram usadas para estimar a distribuição espectral do espalhamento múltiplo. O pro-

blema do espalhamento múltiplo é complexo e o efeito sobre o perfil experimental é essencialmente um alargamento do perfil.

A seguir, daremos os passos usados no nosso programa Monte Carlo de previsão do perfil Compton.

2) PROCESSO MONTE CARLO PARA ESPALHAMENTO SIMPLES

O processo consiste em simular, seguir e registrar as trajetórias de um grande número de fótons, através de uma amostra, usando um computador.

Felsteiner e al [1,5,7] foi o primeiro a aplicar técnicas Monte Carlo, para o problema de obter distribuições de momento de perfis Compton experimentais, que contém contribuições de espalhamento múltiplo.

Trata-se de um problema de transporte de partículas de alta energia na matéria.

Em geral, na região de energia usada em experiências de efeito Compton, somente três efeitos são prováveis, sendo que a sua importância relativa depende da energia inicial do fóton incidente e da composição da amostra. Estes processos são: espalhamento Compton (inelástico), espalhamento Rayleigh (elástico) e absorção fotoelétrica.

Para um evento de espalhamento Compton a seção de choque diferencial de Klein-Nishima já mencionada no caso de radiação incidente plano-polarizada é dada por:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{KN} = \frac{1}{4}\, r_o^{\,2} \left(\frac{w_2}{w_1}\right)^2 \left(\frac{w_1}{w_2} + \frac{w_2}{w_1} - 2 + 4\cos^2\Theta\right) \qquad (2\text{-}1)$$

$$\cos^2 \Theta = (1 - \text{sen}^2\theta \cos^2\eta) \cos^2\beta$$

onde r_o = raio clássico do elétron

w_1 e w_2 energias dos fótons incidente e espalhado.

A relação entre w_1 e w_2 é a expressão conhecida de Compton

$$\frac{w_1}{w_2} = 1 + \frac{w_1}{m_o C^2} (1 - \cos \theta) \qquad (2\text{-}2)$$

θ é o ângulo de espalhamento

m_oC^2 a energia de repouso do elétron

A seção de choque diferencial para radiação incidente não polarizada é dada pela equação

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_o^2}{2} \left(\frac{w_2}{w_1}\right)^2 \left(\frac{w_1}{w_2} + \frac{w_2}{w_1} - \text{sen}^2 \theta\right) \qquad (2\text{-}3)$$

Voltando à equação (2-1) e referindo-se à figura (2-1) (Evans [14]) η é o ângulo azimutal entre o plano de polarização OAC e o plano de espalhamento ODC, β é o ângulo entre o plano OADB (definido por $\vec{\varepsilon}$ e a direção de espalhamento) e o plano de polarização depois do espalhamento (definido por $\vec{\varepsilon}'$ e a direção de espalhamento). No caso de espalhamento elástico ($w_2 = w_1$) temos $\beta = 0$ a seção de choque diferencial se torna:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{EL} = r_o^2 \ (1 - \text{sen}^2\theta \cos^2\eta) \qquad (2\text{-}4)$$

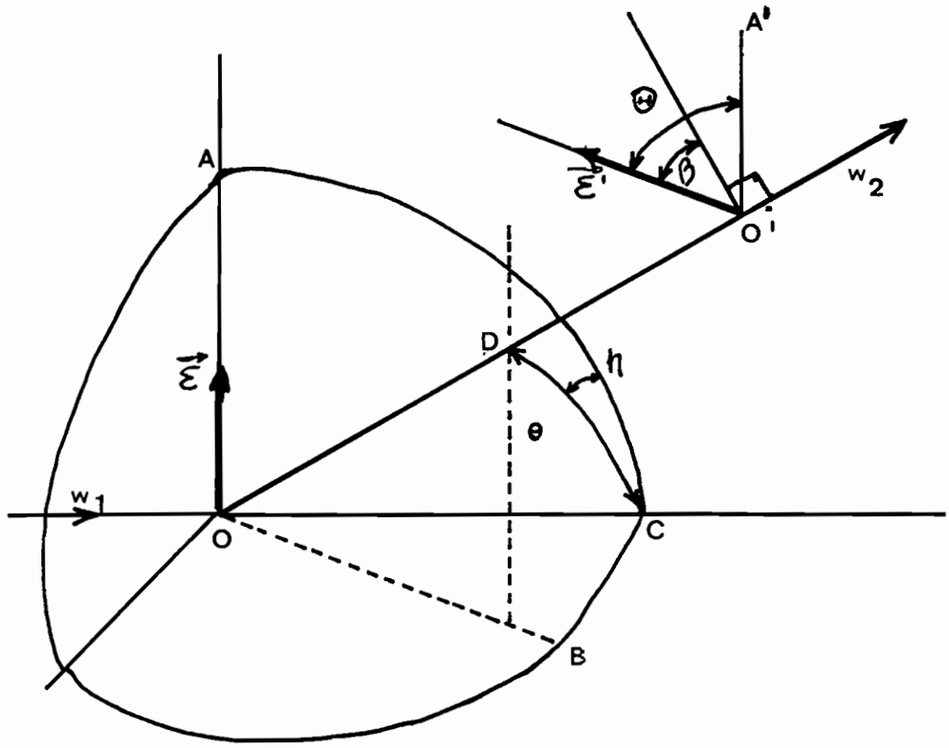


Fig. 2-1 -Espalhamento Compton $\vec{\varepsilon}$ e $\vec{\varepsilon}'$ são os vetores elétricos dos fótons incidentes e espalhados, de energias w_1 e w_2

Com a finalidade de se levar em conta o movimento dos elétrons ligados, a seção de choque diferencial pode ser modificada incluindo o perfil Compton $J(p_z)$ usando a seção de choque apresentada por Ribberford no cap. I eq. (1-87) temos:

$$\frac{d^2\sigma}{dw_2\, d\Omega} = \frac{m\, r_o^2\, w_2}{2w_1\, \Delta k}\, J(p_z)\, X \qquad (2\text{-}5)$$

onde:

$$X = \frac{1}{2}\left(\frac{R}{R'} + \frac{R'}{R}\right) - 1 + 2\,(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}') \qquad (2\text{-}6)$$

m é a energia de repouso do elétron

$$\Delta k = (w_1^2 + w_2^2 - 2\, w_1 w_2 \cos\theta)^{1/2}$$

A energia w_2 do fóton espalhado é obtida da componente do elétron p_z e do ângulo de espalhamento θ resolvendo a equação (2-7), (p_z está em unidades atômicas) que já foi citada no capítulo I equação (1-61)

$$p_z = 137\, \frac{\left[w_2 - w_1 + w_1 w_2 (1 - \cos\theta)/m\right]}{\Delta k} \qquad (2\text{-}7)$$

R e R' estão definidos nas equações (1-67) e (1-68) respectivamente.

O fator (2-6) se reduz ao fator X Klein-Nishima para $p_z \to 0$

$$X_{KN} = \frac{1}{2}\left(\frac{w_1}{w_2} + \frac{w_2}{w_1} - 1 + 2(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}')\right) \qquad (2\text{-}8)$$

e se fazemos a média sobre a polarização do fóton incidente e somamos sobre os dois estados de polarização do fóton espalhado obtemos:

$$\bar{X} = \frac{R}{R'} + \frac{R'}{R} - \operatorname{sen}^2\theta \qquad (2\text{-}9)$$

Caso a energia transferida ao elétron seja insuficiente para arrancá-lo então o evento Compton não pode ocorrer. No processo Monte Carlo a camada atômica é selecionada ao acaso, considerando o número de elétrons de cada camada.

Quando a energia de ligação desta camada, for suficiente para impedir o espalhamento, então o evento é rejeitado.

Descreveremos a seguir os passos usados para simular as

trajetórias dos fótons para espalhamento simples:

1) Escolhemos sistemas de referência que serão abordados depois mais detalhadamente, para permitir ao programa flexibilidade de usar qualquer forma geométrica de amostras, inclinada de qualquer ângulo em relação ao feixe incidente, que pode ser divergente. O ponto de entrada do fóton na amostra é escolhido ao acaso.

2) Para dinamizar o programa, o fóton é forçado a ter a la. colisão usando uma relação Monte Carlo entre a profundidade da penetração t_f e o coeficiente de atenuação total. (Cashwell e Everett 1959).

$$t_f = -\frac{1}{\mu}\,\ell n(1 - r\,[1 - \exp(-\mu\, t_{eff_1})]\,) \qquad (2\text{-}10)$$

t_{eff_1} , a espessura efetiva da amostra
r , número ao acaso entre (0,1)
μ , coeficiente de atenuação total

A probabilidade de que o fóton passe através da amostra sem sofrer espalhamento é $e^{-\mu t_{eff_1}}$ então, a probabilidade de pelo menos um espalhamento é $1 - e^{-\mu t_{eff_1}}$.

Para considerar então a parte do fluxo que seria transmitida sem colisão damos ao fóton um peso de acordo com a expressão (2-11)

$$p_1 = 1 - \exp(-\mu t_{eff_1}) \qquad (2\text{-}11)$$

3) Para levar em conta a possibilidade de que o fóton pode ser absorvido fotoeletricamente, reduzimos o peso por uma razão R, entre a seção de choque fotoelétrica e o coeficiente de atenuação total.

$$p_2 = p_1 \ (1 - R) \qquad (2\text{-}12)$$

4) Os ângulos θ, η que seguem a colisão são escolhidos respectivamente para η entre $(0, 2\Pi)$ e para θ dentro de um cone conveniente.

Após a colisão, β o ângulo de polarização se necessário, é escolhido ao acaso entre $(0,\Pi)$. Depois disto o peso do fóton é ainda reduzido de acordo com a seção de choque diferencial para uma colisão elástica equação (2-4) ou Compton equação (2-5) com fatores (2-9) ou (2-6) se consideramos o fóton incidente sem polarização ou com polarização nos eixos x, ou y (Fig. 2-3).

5) O caminho percorrido depois da colisão é calculado usando a fórmula (Cashwell-Everett 1959)

$$R_2 = \frac{1}{\mu'} \ \ell n(r) \qquad (2\text{-}13)$$

μ', coeficiente de atenuação total para a nova energia do fóton e r é um número ao acaso entre (0,1).

Pelo valor de R_2 determinamos se o fóton escapa da amostra antes de sofrer uma nova colisão, caso contrário, determina-se a posição do novo espalhamento. Isto será tratado no ítem específico de duplo espalhamento.

Devemos lembrar que os ângulos θ, η, β são calculados em relação ao sistema de referência do fóton em cada colisão, que não corresponde necessariamente ao sistema de laboratório. Entraremos durante a discussão de cada ítem em mais detalhes a respeito do tratamento dado a estes sistemas.

6) Interação do fóton - Durante a colisão com o elétron orbital, a partir de fórmulas apropriadas, obtidas das tabelas de Mendelson, Biggs, Mann [26], para cada elemento considerado, de-

terminamos o perfil Compton e o corrigimos usando a correção para ângulos pequenos de Ribberford (Eq. 1-73). Modificamos assim o peso do fóton, multiplicando o peso anterior pelo valor do perfil Compton corrigido.

7) Verificamos se o fóton espalhado colide com o detetor supondo que a interação tenha sido puramente fotoelétrica (o detetor usado é um detetor GeLi com razão Pico/Compton > 30).

A informação que relaciona então a energia e o ângulo de espalhamento é armazenada para construção de histogramas. Ao mesmo tempo, o peso total dos eventos elásticos e inelásticos é guardada em registradores convenientes.

3) TRATAMENTO GEOMÉTRICO E PROCEDIMENTO PARA OBTENÇÃO DE PESOS

3a) Determinação do ângulo de espalhamento no sistema de laboratório.

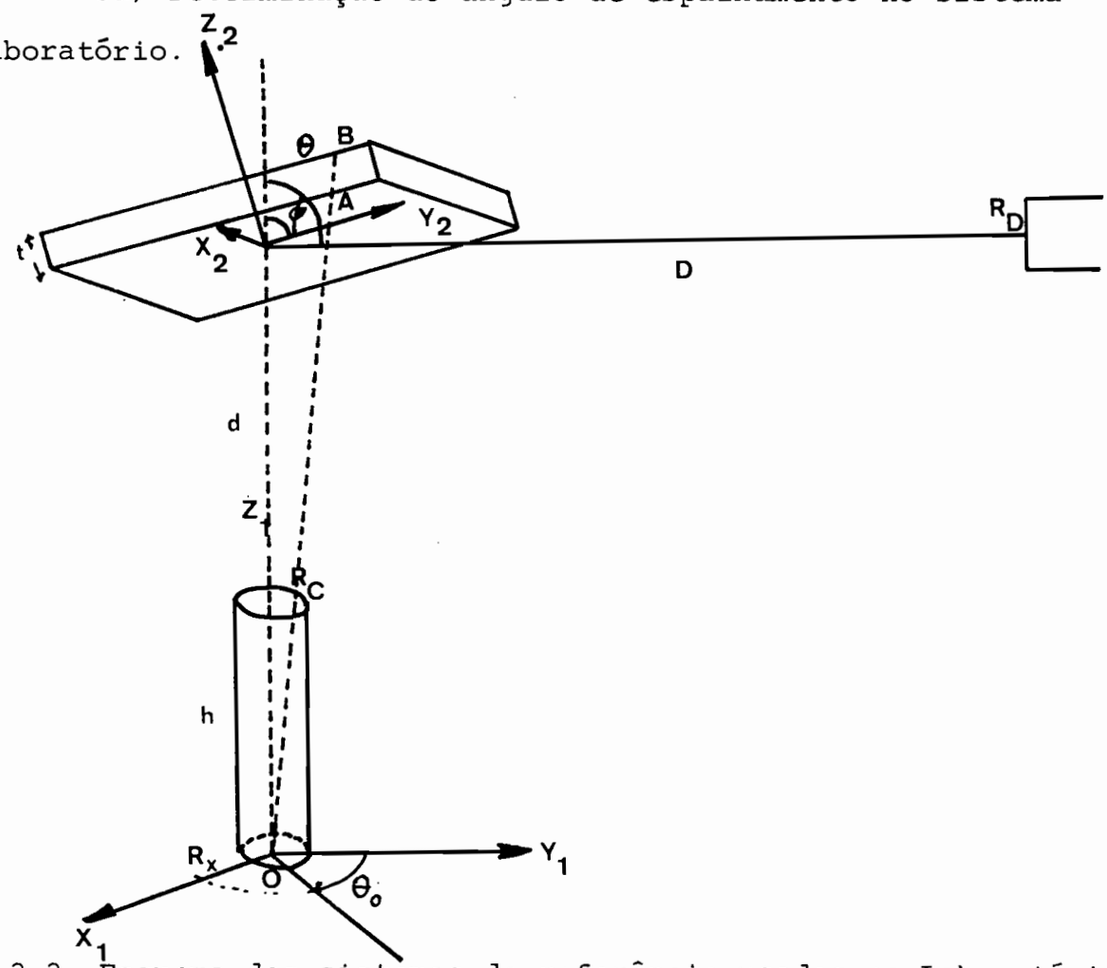


Fig. 2-2 -Esquema dos sistemas de referência usados no Laboratório

Sistema (1) x_1, y_1, z_1 no plano da fonte com centro em O.

Ponto de partida do γ na fonte (R_x, θ_o).

Sistema (2) com centro em O (centro do espalhador) no plano do espalhador.

h = altura do colimador R_c = raio do colimador

R_D= raio do detetor t = espessura do espalhador

d = distância da fonte ao espalhador

D = distância do centro do espalhador ao detetor

Sorteia-se inicialmente R_x e θ_o e com isso tem-se as coordenadas do ponto de partida; sorteia-se a direção de saída da fonte (θ_1,ϕ_1) que está relacionada com um ângulo máximo que depende do raio da fonte, raio do colimador e altura do colimador; verifica-se a saída do fóton pelo colimador.

Obtém-se o valor da espessura efetiva para o 1º espalhamento determinando as coordenadas de A e B da fig. (2-2) (eq.2-14).

$$D_1 = \operatorname{sen}\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1 \cos\phi - \cos\theta_1 \operatorname{sen}\phi$$

$$\left.\begin{aligned}
x_{2A} &= \frac{(-R_x \cos\theta_o \cos\phi - d \operatorname{sen}\phi) \operatorname{sen}\theta_1 \cos\phi_1}{D_1} + R_x \operatorname{sen}\theta_o \\
y_{2A} &= \frac{(-R_x \cos\theta_o \cos\phi - d \operatorname{sen}\phi) \operatorname{sen}\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1}{\operatorname{sen}\phi \cdot D_1} + R_x \frac{\cos\theta_o}{\operatorname{sen}\phi} \\
z_{2A} &= 0 \\
x_{2B} &= \frac{(-t - d \operatorname{sen}\phi\ R_x \cos\theta_o \operatorname{sen}\phi) \operatorname{sen}\theta_1 \cos\phi_1}{D_1} + R_x \operatorname{sen}\theta \\
y_{2B} &= \frac{(-t - d \operatorname{sen}\phi - R_x \cos\theta_o \operatorname{sen}\phi) \operatorname{sen}\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1}{\operatorname{sen}\phi \cdot D_1} + \frac{R_x \cos\theta_o}{\operatorname{sen}\phi} + \frac{t \cos\phi}{\operatorname{sen}\phi}
\end{aligned}\right\} \quad (2\text{-}14)$$

$$z_{2B} = t$$

Com isto determina-se a espessura efetiva da amostra t_{eff_1}, e utilizando-se a equação (2-10) obtemos a profundidade de penetração t_f na amostra.

Os valores dos coeficientes de atenuação da radiação incluindo ou não espalhamento coerente que serão usados a seguir foram obtidos a partir das tabelas de Hubbell [20,21] fazendo-se um ajuste dos dados destas tabelas do tipo:

$$\ell n\left(\frac{\mu}{\rho}\right) = a + b\,\ell n\,E + c(\ell n\,E)^2 + d(\ell n\,E)^3 + e(\ell n\,E)^4 + f(\ell n\,E)^5 + g(\ell n\,E)^6 \qquad (2\text{-}15)$$

onde E é a energia em Kev.

μ coeficiente de atenuação (cm^2/g)

A razão R da equação (2-12) entre a seção de choque fotoelétrica e o coeficiente de atenuação total foi obtida a partir de uma fórmula empírica para o efeito fotoelétrico da camada K (Hubbell [20,21]) do tipo:

$$\tau_K \simeq Z^5 \sum_{n=1}^{4} \frac{a_n + b_n Z}{1 + c_n Z} E^{-p_n} \qquad (2\text{-}16)$$

os parâmetros a_n, b_n, c_n, p_n estão na tabela (2-2) abaixo:

TABELA 2-2: Parâmetros para a obtenção da seção de choque fotoelétrica da camada K

n	a_n	b_n	c_n	p_n
1	1.6268×10^{-9}	-2.683×10^{-12}	4.173×10^{-2}	1
2	1.5274×10^{-9}	-5.110×10^{-13}	1.027×10^{-2}	2
3	1.1330×10^{-9}	-2.177×10^{-12}	2.013×10^{-2}	3,5
4	$-9.12 \cdot 10^{-11}$	0	0	4

A fórmula (2-16) coincide com os valores numéricos de Pratt no limite de alta energia e reproduz os dados experimentais e teóricos de forma satisfatória [21] . Os desvios destes dados na região 0,2 Mev $\leqslant$ E $\leqslant$ 100 Mev e 13 $\leqslant$ Z $\leqslant$ 92 são menores que 1º e 2%, e nunca excedem a 5%. Os valores da seção de choque total τ_{pe} podem ser obtidos multiplicando τ_k pelas razões τ_{pe}/τ_k. Hultberg [21] sugeriu que para efeitos práticos, esta razão é independente da energia. A razão foi obtida por Kirchner e Davisson [21]. Damos a seguir a razão para os elementos considerados no trabalho.

TABELA 2-3: Razão experimental $(\tau_{pe}/\tau_k)_{cam.k}$ (Kirchner e Davisson)

Elemento	(τ_{pe}/τ_k)
Al	1,09
Cu	1,13
Ag	1,17
W	1,20
Pb	1,22

A partir dos valores da espessura t_f determina-se a intersecção do 1º raio com o espalhador ou seja as coordenadas (x_2I_1, y_2I_1, z_2I_1). Fazemos um teste inicial para rejeitar qualquer evento cujas coordenadas não estejam dentro das dimensões estabelecidas para o espalhador. Sorteamos então a direção do fóton espalhado (Θ_2, ϕ_2) respectivamente entre $(0,\Pi)$ e $(0,2\Pi)$ e aqui estabelecemos uma etiqueta que permita eventualmente calcular só espalhamento simples ou duplo. Caso optarmos só pelo simples estabelecemos um cone conveniente em torno do detetor, onde sorteamos

(θ_2, ϕ_2) entre valores limitados pelo cone, com a finalidade de pouparmos tempo de computador.

Para determinarmos o ângulo do 1º espalhamento procedemos assim:

Consideramos o detetor como um círculo associando ao mesmo um sistema de referência conveniente (3) paralelo à face do detetor e com centro no espalhador. Obtemos as coordenadas do detetor no sistema (2) do espalhador. A equação do detetor no sistema (3) será:

$$(x_3)^2 + (y_3{}^2) = R_D{}^2 \qquad z_3 = -D \tag{2-17}$$

No sistema (2)

$$\left.\begin{aligned} x_2 &= x_3 \\ y_2 &= -\mathrm{sen}(\theta - \phi)y_3 + \cos(\theta - \phi)D \\ z_2 &= -\cos(\theta - \phi)y_3 - \mathrm{sen}(\theta - \phi)D \end{aligned}\right\} \tag{2-18}$$

Um raio espalhado teria no sistema (2):

$$\left.\begin{aligned} x_2 &= r_3 \mathrm{sen}\theta_2 \cos\phi_2 + x_2 I_1 \\ y_2 &= r_3 \mathrm{sen}\theta_2 \mathrm{sen}\phi_2 + y_2 I_1 \\ z_2 &= r_3 \cos\theta_2 + z_2 I_1 \end{aligned}\right\} \tag{2-19}$$

Usando (2-18) e (2-19)

Obtemos:

$$r_3 = \frac{-y_3\ \mathrm{sen}(\theta - \phi) + D\cos(\theta - \phi) - y_2 I_1}{\mathrm{sen}\theta_2\ \mathrm{sen}\phi_2} \tag{2-20}$$

e $$y_3 = \frac{-D\,\mathrm{sen}(\theta-\phi) - z_2 I_1\,\mathrm{sen}\theta_2 \mathrm{sen}\phi_2 - D\cos(\theta-\phi)\cos\theta_2 + y_2 I_1 \cos\theta_2}{\cos(\theta-\phi)\,\mathrm{sen}\,\theta_2\,\mathrm{sen}\phi_2 - \mathrm{sen}\,(\theta-\phi)\cos\theta_2}$$

Então podemos diretamente obter o ângulo θ do 1º espalhamento usando:

$$X_{21} = -R_x \cos\theta_o + x_2 I_1$$
$$y_{21} = \mathrm{sen}\phi\; R_x \mathrm{sen}\theta_o + \cos\phi\; D + y_2 I_1$$
$$z_{21} = -\cos\phi\; R_x \mathrm{sen}\theta_o + \mathrm{sen}\phi\; D + z_2 I_1$$

$$X_{23} = r_3\,\mathrm{sen}\theta_2\,\cos\phi_2$$
$$y_{23} = r_3\,\mathrm{sen}\theta_2\,\mathrm{sen}\phi_2$$
$$Z_{23} = r_3\,\cos\theta_2$$

$$\cos\theta = \frac{X_{21}.X_{23} + Y_{21}.Y_{23} + Z_{21}\,.\,Z_{23}}{\sqrt{X_{21}^2 + Y_{21}^2 + Z_{21}^2}\,\sqrt{X_{23}^2 + Y_{23}^2 + Z_{23}^2}} \qquad (2\text{-}21)$$

3b) Considerações geométricas sobre as condições de polarização do fóton incidente

Com a finalidade de considerar a possibilidade de radiação incidente polarizada, passamos a dividir o programa em 3 partes: a) fóton sem polarização inicial correspondente a uma etiqueta INPOL = 0; b) fóton com polarização no plano do sistema de laboratório yz, etiqueta INPOL = 1; c) fóton com polarização no plano do sistema de laboratório yz, etiqueta INPOL = 2. Estudaremos então a geometria de cada caso.

Consideramos na fig. 2-3 $\vec{\varepsilon}$ como o vetor campo elétrico. Para INPOL = 0, o ângulo do vetor elétrico é sorteado entre, 0 e 2Π.

Para garantir a polarização sobre o plano do sistema de laboratório xz, (INPOL = 1) precisamos fazer uma rotação de $-\gamma$ no eixo x". Idem no plano yz (INPOL = 2)

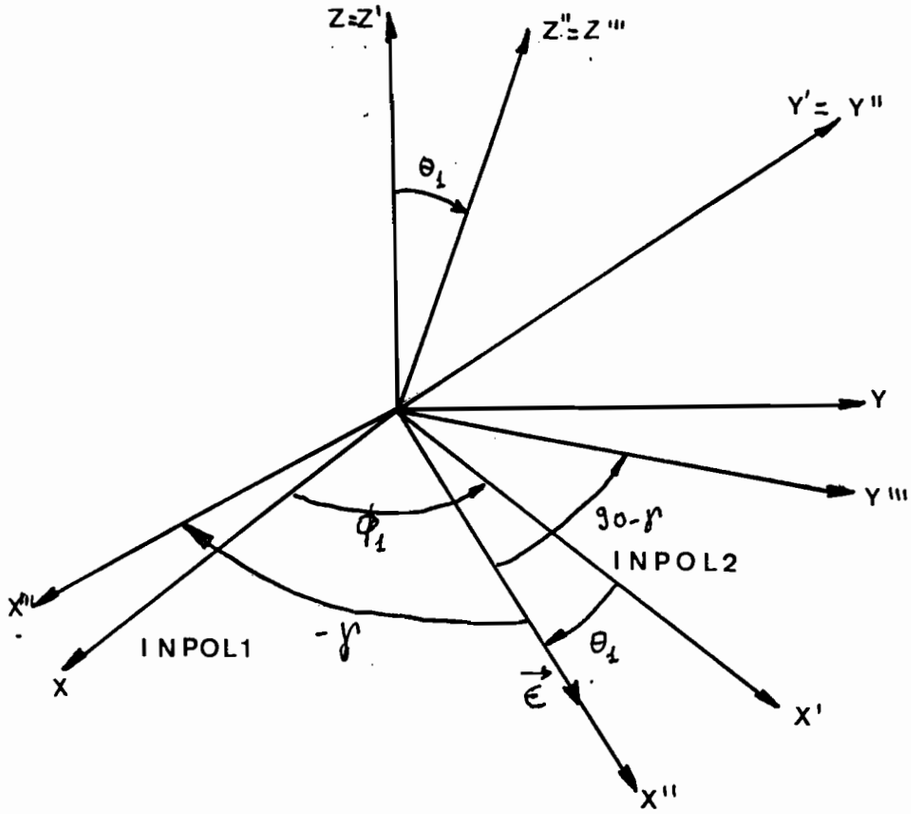


Fig. 2-3 - Rotações para polarização 1 e 2; $\vec{\varepsilon}$ vetor campo elétrico

Apenas por condições geométricas obtemos o ângulo γ para dois casos de polarização.

$$\text{Para INPOL} = 1 \begin{cases} \cos\gamma = \dfrac{\cos\phi_1}{\sqrt{\operatorname{sen}^2\theta_1 \cos^2\phi_1 + \cos^2\theta_1}} \\[2ex] \operatorname{sen}\gamma = \dfrac{-\operatorname{sen}\phi_1 \cos\theta_1}{\sqrt{\operatorname{sen}^2\theta_1 \cos^2\phi_1 + \cos^2\theta_1}} \end{cases} \qquad (2\text{-}22)$$

$$\text{Para INPOL} = 2 \begin{cases} \cos\gamma = \dfrac{\operatorname{sen}\phi_1}{\sqrt{\operatorname{sen}^2\theta_1 \operatorname{sen}^2\phi_1 + \cos^2\theta_1}} \\ \operatorname{sen}\gamma = \dfrac{\cos\theta_1 \cos\phi_1}{\sqrt{\operatorname{sen}^2\theta_1 \operatorname{sen}^2\phi_1 + \cos^2\theta_1}} \end{cases} \qquad (2\text{-}23)$$

3c) Coordenadas no sistema do 1º fóton e determinação dos pesos do fóton

De acordo com o exposto no item (5) devemos determinar θ, η, β (fig. 2-1) no sistema de referência do fóton em cada colisão; para isto determinamos a matriz M_1.

A matriz M_1, nos dá a passagem das coordenadas em que o fóton atinge o detetor no sistema de laboratório para o sistema do fóton.

$$M_1 = \begin{pmatrix} F_1A & F_1B & F_1C \\ F_1D & F_1E & D_1F \\ F_1G & F_1H & F_1L \end{pmatrix} \qquad (2\text{-}24)$$

onde:

$$F_1A = -\operatorname{sen}\gamma \cos\theta_1 \cos\phi_1 - \cos\gamma \operatorname{sen}\phi_1$$

$$F_1B = \operatorname{sen}\phi(-\operatorname{sen}\gamma \cos\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1 + \cos\gamma \cos\phi_1) - \cos\phi \operatorname{sen}\gamma \operatorname{sen}\theta_1$$

$$F_1C = \cos\phi(-\operatorname{sen}\gamma \cos\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1 + \cos\gamma \cos\phi_1) + \operatorname{sen}\phi \operatorname{sen}\gamma \operatorname{sen}\theta_1$$

$$F_1D = \operatorname{sen}\theta_1 \cos\phi_1$$

$$F_1E = \operatorname{sen}\phi \operatorname{sen}\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1 - \cos\phi \cos\theta_1$$

$$F_1F = \cos\phi \operatorname{sen}\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1 + \operatorname{sen}\phi \cos\theta_1$$

$$F_1G = \cos\gamma \cos\theta_1 \cos\phi_1 - \operatorname{sen}\phi_1 \operatorname{sen}\gamma$$

$$F_1H = \operatorname{sen}\phi(\cos\gamma \cos\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1 + \operatorname{sen}\gamma \cos\phi_1) - \cos\phi \operatorname{sen}\theta_1 \cos\gamma$$

$$F_1L = \cos\phi(\cos\gamma\cos\theta_1 \operatorname{sen}\phi_1 + \operatorname{sen}\gamma\cos\phi_1) - \operatorname{sen}\phi\operatorname{sen}\theta_1\cos\gamma$$

Com isto e dispondo de X_{23}, Y_{23} e Z_{23} obtemos facilmente as coordenadas no sistema do fóton incidente (X_{2S}, Y_{2S}, Z_{2S}), e também θ_{2F} e ϕ_{2F} e θ_S o ângulo de espalhamento no sistema procurado.

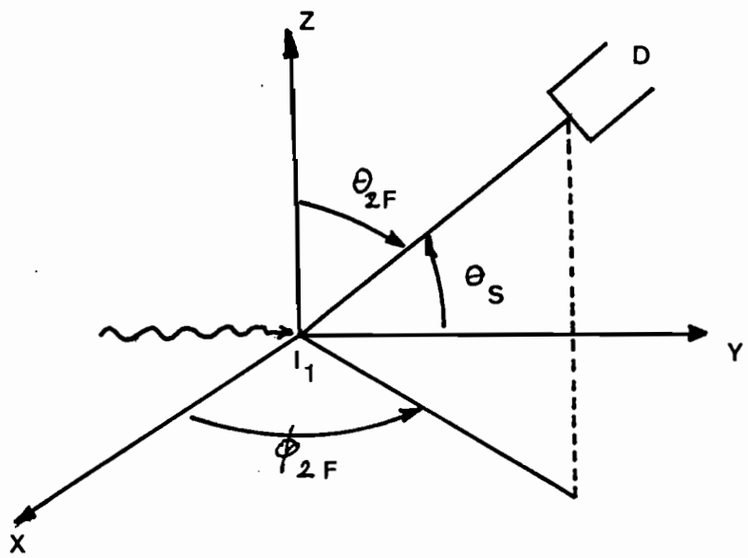


Fig. 2-4 - Coordenadas no sistema do fóton

Determinamos agora o ângulo η entre o plano de polarização e o plano de espalhamento.

$$\cos\eta = \frac{Z_{2S}}{\sqrt{Z_{2S}^2 + X_{2S}^2}}$$

$$\operatorname{sen}\eta = \frac{X_{2S}}{\sqrt{Z_{2S}^2 + X_{2S}^2}} \qquad (2\text{-}25)$$

Escolhemos se o espalhamento é elástico ou Compton calculando,

$$F_1 = \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{\sigma_1}$$

onde σ_1 é a soma $\sigma_c + \sigma_R$, σ_c seção de choque Compton (incoerente) σ_R a seção de choque Rayleigh (coerente).

σ_2 é a seção de choque Compton para elétron livre

$$e\ (r - F_1) \begin{cases} \leqslant 0 \text{ para eventos elásticos} \\ > 0 \text{ para eventos Compton} \end{cases}$$

sendo r um número sorteado ao acaso entre (0,1). Caso o evento seja elástico, reduz-se o peso do mesmo de acordo com a seção de choque diferencial para colisão elástica eq. (2-4).

Com a finalidade de considerar o espalhamento coerente por um átomo, esta distribuição foi modificada para ser:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{E\ell} F^2 \qquad (2\text{-}26)$$

onde F é o fator de forma atômica obtido a partir de tabelas de Hubbell [20,21].

Caso o evento seja inelástico com a finalidade de levar em conta o movimento dos elétrons ligados sorteamos a componente de momento do elétron p_z, e a partir da fórmula (2-7) obtemos o valor da energia w_2 do fóton espalhado.

Reduzimos o peso do evento de acordo com a seção de choque diferencial para colisão inelástica Eq. (2-5) e com fatores X dados por (2-6) e (2-9) no caso de radiação incidente polarizada e no caso de radiação incidente não polarizada, respectivamente.

O perfil Compton $J(p_z)$ é corrigido para ângulos pequenos usando a equação de Ribberford (1-73).

Para poder introdudir o perfil Compton, primeiro selecionamos ao acaso a camada atômica de um determinado elemento,

considerando o número de elétrons de cada camada e rejeitamos eventos, quando a energia de ligação da camada é suficiente para impedir o espalhamento.

Para valores de J (p_z) usamos neste trabalho, como foi explicado na parte teórica, funções hidrogenóides (Ver Apêndice A1) e funções de onda numéricas Hartree-Fock relativísticas, obtidas por Biggs, Mendelsohn, Mann [26,27].

Os valores de J (p_z) são obtidos para cada elemento ajustando (para poupar tempo de computador) os valores apresentados pelas tabelas publicadas por Biggs, Mendelsohn e Mann [26,27], já citadas na parte correspondente à teoria geral.

Estas tabelas dão os perfis Compton relativísticos para todos os elementos para 76 valores de p_z.

O erro estimado no valores tabelados é indicado como sendo ± 3 no quarto algarismo significativo para $p_z = 0$; ± 3 no terceiro significativo para $p_z = 1$, continuando desta forma com ± 3 com significativo menor para cada fator no caso de múltiplos de 10 de p_z.

As tabelas apresentam os valores dos perfis Compton individuais

$$J_{n\ell j}(p_z) = \frac{1}{2} \int_{p_z}^{\infty} \frac{I_{n\ell j}}{p} (p)\, dp$$

e valores de perfis Compton J (p_z) para átomos completos em função de p_z.

$I_{n\ell j}(p)$ é a densidade de momentos dos elétrons, para elétrons de momento p no orbital $n\ell j$; p_z está em unidades de $me^2/\hbar$ (o momento médio do elétron no estado fundamental do hidrogênio e já nos referimos ao mesmo no capítulo I).

O perfil Compton total é obtido multiplicando os valo-

res orbitais individuais pelo número de elétrons no orbital e somando.

Os perfis são normalizados de modo a

$$J_{n\ell j}(p_z)\ dp_z = 1 \text{ (por elétron)} \qquad (2\text{-}28)$$

O perfil Compton para cada orbital, dos 5 elementos estudados, foram ajustados com funções com a finalidade de facilitar o trabalho computacional e serão apresentados no capítulo correspondente ao tratamento de dados. (Ver outras informações Apêndice A2 - Ajustes de perfis Compton).

Como foi anteriormente mencionado, os perfis são multiplicados por um fator de correção proposto por Ribberford, para poder usar os mesmos para qualquer ângulo de espalhamento. Este fator é porém normalizado. Por exemplo, para o caso do Pb^{82}, usamos o perfil Compton das tabelas de Biggs de 0-200 au (unidades atômicas) e depois corrigimos as mesmas tabelas para ângulos pequenos (ver tabela 2-3); a seguir multiplicamos o fator de normalização obtido da relação das duas integrais relativas à tabelas anteriores, pelo fator de correção de Ribberford.

TABELA 2-3: Renormalização do fator de correção Ribberford para ângulos diferentes de 180°.

$\int$ Perfil Biggs	θ âng. de esp.	$\int$ Perfil corrig.	Fator de normalização
304.453	30°	611.235	.4604
	15°	605.650	.5027
	10°	549.403	.5122
	5°	587.455	.5183

Verificamos que há boa precisão na normalização pois a integral do perfil Compton, deve ser igual ao número atômico (eq. 2-28). Neste caso achamos para o Pb o valor 81,7, aproximadamente igual ao número real do 82 elétrons.

Finalmente, temos então o fóton espalhado com o peso conveniente. Resta então, determinar o caminho percorrido depois da colisão, usando a fórmula (2-13).

Sendo considerado espalhamento simples, testamos sua colisão com o detetor. A energia que este fóton apresenta, é então corrigida pela resolução do detetor usando uma função do tipo;

$$Y_1 = \sqrt{-2\log r}, \text{ sen } (6.283185.r)^*$$

onde r é um número ao acaso.

$w_1 = w_2 + y_1 .$ RESOL

w_2 é a energia do fóton espalhado

RESOL é o valor da resolução do detetor em Kev.

Esta função gera desvios ao acaso para distribuições conhecidas, no caso a distribuição normal.

O peso e o número deste evento é então somado nos respectivos registradores e colocado nos histogramas de distribuição angular e de energia.

4) PROCESSO MONTE CARLO PARA ESPALHAMENTO DUPLO

4a) Considerações gerais

O nosso programa prevê somente uma dupla colisão. Exis-

---

* Handbook of Mathematical Functions Edited by Milton Abramovitz and Irene Stegun, pg. 953

tem vários artigos de espalhamento múltiplo que estão citados na bibliografia [15,16,17,29,37,38,39] . Viu-se que o efeito do terceiro espalhamento é muito baixo para ser considerado, no caso,específico da nossa experiência. O artigo de Felsteiner et al [33] por exemplo apresenta uma relação entre espalhamento simples e triplo, para uma amostra de 3 cm de H_2O, para energia do fóton incidente de 60 Kev e ângulo de espalhamento de 30°. Esta razão é aproximadamente 18 vezes. Estas condições corresponderiam a uma amostra de 5 cm de espessura de Pb a 30° para uma energia incidente de 662 Kev.

Isto foi obtido da seguinte forma. Sabemos que para um meio considerado homogêneo:

$$I = I_o e^{-\mu t}$$

onde I_o é a intensidade do feixe incidente sobre a amostra

I intensidade do feixe incidente sobre a amostra

μ coeficiente de atenuação

t espessura do material

μ_{H_2O} para 60 Kev = 2.06×10^{-1} cm^2/g

μ_{Pb} para 662 Kev = .1098 cm^2/g

δ = 11,34 g/cm^3

$$\left(\frac{I}{Io}\right)_{H_2O} = .53902 = e^{-1.245\ t} \qquad t_{Pb} = .496 \simeq .5 \text{ cm}$$

No nosso caso, a espessura usada para a amostra de Pb^{82}, (que foi o elemento de Z mais alto estudado) foi .2 cm, por isso não foi considerado necessário o cálculo do 3º espalhamento, embora este, acrescentaria apenas tempo de computação, dado que seria um processo repetitivo semelhante ao 2º espalhamento.

Para o 2º espalhamento, o fóton segue exatamente os ítens 1), 2) e 3) já citados no 1º espalhamento. No ítem 4), o ângulo é agora escolhido entre $(0,\Pi)$. No ítem 5) determina-se se o fóton, sofre uma nova colisão, e a posição do novo espalhamento. Tratando-se de um 2º espalhamento então procura-se determinar se o evento é útil, vendo se o fóton espalhado atinge o detetor.

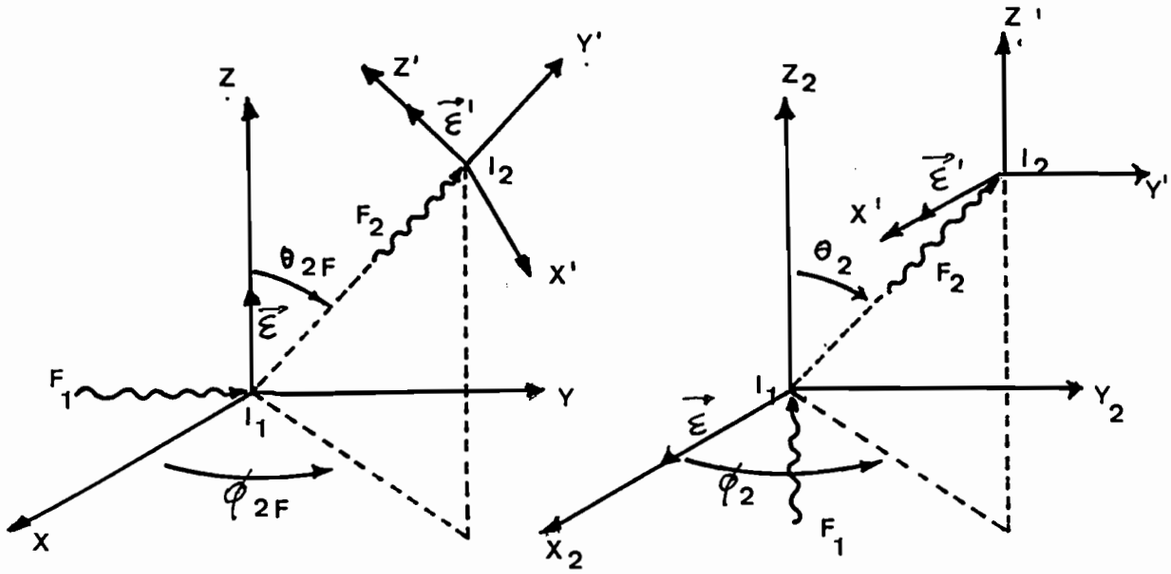
Caso isto aconteça voltamos a repetir o item 3) para mudar o peso do fóton. Calculamos os ângulos já citados (Θ,η,β) no sistema de referência do 2º fóton. Passamos depois a repetir o item 6). A informação que relaciona então a energia e o ângulo de espalhamento é armazenada para a construção de histogramas duplo Compton e inelásticos-elásticos, e duplos elásticos em registradores convenientes.

4b) Coordenadas no sistema do 2º fóton

Caso o evento tenha sido considerado duplo, com um processo semelhante ao descrito no espalhamento simples, sorteamos (Θ_3,ϕ_3), porém para dinamizar o programa, dentro de um cone conveniente em torno do detetor e verificamos se o evento atinge o detetor.

A partir da energia apresentada pelo fóton antes de sofrer um duplo espalhamento identificamos o tipo de fóton, para podermos ver quais os eventos elástico-elástico, Compton-elástico , elástico-Compton, já que o programa permite a construção dos histogramas dos mesmos, embora tenham sido considerados na parte de tratamento de dados, somente os eventos duplo Compton.

Os pesos dados são do mesmo tipo descrito no primeiro espalhamento. No caso de 2º espalhamento teremos uma nova transformação de coordenadas do detetor no sistema de fóton 2, de forma semelhante à citada para o 1º espalhamento (Fig. 2-5).



a) Sistema do fóton b) Sistema de laboratório

Fig. 2-5 -Esquema do 1º e 2º espalhamento

$\vec{\varepsilon}_o$, $\vec{\varepsilon}'$ vetores campos elétricos la. e 2a. colisão respectivamente.

Teríamos uma matriz:

$M' = (M_2)(M_1)$

M_1 é a matriz de transformação de coordenadas do sistema do 1º fóton

M_2 é a matriz de transformação do sistema do 2º fóton.

$$M_2 = \begin{pmatrix} A_4 & A_5 & A_6 \\ B_4 & B_5 & B_6 \\ C_4 & C_5 & C_6 \end{pmatrix}$$

$A_4 = R_5 \times R_6 \times R_8 - R_4 \times R_7$ onde $R_1 = \cos^2\beta\cos^2\phi_{2F} + \text{sen}^2\beta$

$A_5 = R_4 \times R_6 \times R_8 + R_5 \times R_7$ $R_2 = \text{sen}\beta\cos\phi_{2F} - \cos\beta\cos\theta_{2F}\,\text{sen}\,\phi_{2F}$

$A_6 = -R_1 \times R_8$ $R_3 = -\text{sen}\beta\ \text{sen}\phi_{2F} - \cos\beta\cos\theta_{2F}\cos\phi_{2F}$

$B_4 = -R_5 \times R_6 \times R_7 - R_4 \times R_8$ $R_4 = R_2/R_1$

$B_5 = -R_4 \times R_6 \times R_7 + R_5 \times R_8$ $R_5 = R_3/R_1$

$B_6 = R_1 \times R_7$ $R_6 = \cos\beta\ \text{sen}\theta_{2F}$

$C_4 = R_5 \times R_1$ $R_7 = \cos\theta_{2F}/R_1$

$C_5 = R_4 \times R_1$ $R_8 = -\text{sen}\theta_{2F}\text{sen}\beta/R_1$

$C_6 = R_6$

e daqui os ângulos ϕ_{3F}, θ_{3F} no sistema do 2º fóton e θ_{2S} ângulo de espalhamento no mesmo sistema.

Como no caso do 1º espalhamento, sorteia-se o p_z, determina-se a energia do fóton espalhado pela 2a. vez, calcula-se o respectivo perfil, a seção de choque como indicado anteriormente, o ângulo de espalhamento no sistema de laboratório e colocam-se os dados nos respectivos registradores para construção de histogramas de distribuição angular e de energia.

O programa Monte Carlo prevê a utilização dos 5 elementos escolhidos (Pb^{82}, W^{74}, Ag^{47}, Cu^{29}, Al^{13}) num processamento sucessivo.

Para evitar prováveis perdas de dados devidos a defeitos do sistema, tem subrotinas que permitem guardar um certo número de eventos e recomeçar o programa a partir do instante em que aconteceu algum problema no sistema de computação.

Como são seguidos de um grande número de eventos e o número de cálculos efetuados é considerável, o tempo para obtenção de um resultado para um dado elemento, a um dado ângulo, é muito longo; o programa roda num sistema de baixa prioridade dias seguidos.

CAPÍTULO III - MÉTODO EXPERIMENTAL

1) INTRODUÇÃO

Compton realizou medidas quantitativas precisas do deslocamento Compton e relacionou isto com uma teoria que requeria somente conservação de energia e momento. Os trabalhos de Du Mond [7,8] e outros mostraram que o espalhamento Compton ainda podia ser usado para determinar as distribuições de momento do elétron.

O interesse recente nas medidas de espalhamento Compton, recomeçando em 1960, foi uma continuação daquele trabalho. Na época citada, melhoramentos na tecnologia dos semicondutores permitiram o acesso a detetores de estado sólido de resolução suficiente para trabalhos Compton.

Da teoria já exposta sabemos que desde que são fixados os momentos dos fótons incidentes e espalhados, pode ser determinada uma componente do momento do elétron de espalhamento.

Numa experiência Compton, portanto, um feixe monocromático e colimado de fótons é espalhado por uma amostra e se realiza a análise do comprimento de onda ou energia de feixe espalhado num ângulo fixo. A seguir exporemos a técnica experimental usada.

2) PARTE EXPERIMENTAL

2a) Esquema de aparelhagem

A fig. (3-1) apresenta um esquema dos aparelhos usados. Os fótons de energia 662 Kev são emitidos por uma fonte F, de Cs^{137} de ≈ 30 Ci* colimados através de um cilindro F_1 de 10 cm de comprimento e 4 x 8 mm de abertura e depois de uma fenda F_2 de

4mm de diâmetro e 5 cm de comprimento e feitos incidir sobre um espalhador colocado numa plataforma girante.

A radiação espalhada é contada por um detetor de GeLi precedido de um colimador e colocado sobre uma estrutura conveniente móvel, que permite posicionar o detetor em vários ângulos em relação ao alvo.

Os pulsos são amplificados e registrados num munticanal ORTEC de 1024 canais com saída através de impressora de fita de papel.

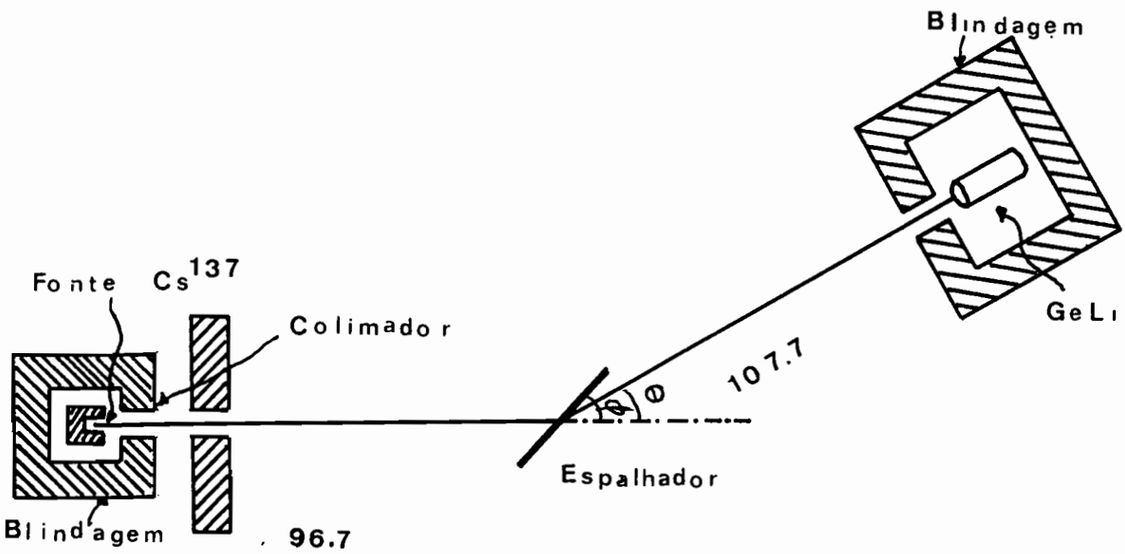


Fig. 3-1 - Diagrama esquemático do sistema experimental

---

* A fonte pertence ao Departamento de Biologia do Instituto de Biociências da USP. Foi preparada pelo Oak Ridge National Laboratory.
Agradecemos ao Departamento de Biologia, em particular ao Prof. Hamilton João Targa, a permissão para utilizá-la.

2b) Fonte

Os critérios que regem a escolha de uma fonte conveniente são os seguintes:

a) deve possuir uma linha isolada γ numa região de energia conveniente para o objetivo da experiência e ter a maior fração da radioatividade total emitida nesta energia.

b) ter uma meia vida pelo menos maior que 100 dias.

c) e uma intensidade maior que a 1 Ci. A primeira exigência é uma necessidade técnica porque outras linhas logo abaixo ou acima da linha Compton mascaram os fótons espalhados por efeito Compton e colaborarão para um acréscimo de fundo.

A resolução de momento dos elétrons orbitais alcançada numa experiência Compton com γ, depende do alargamento da linha de espalhamento Compton e da resolução de energia do detetor. A resolução de momento melhora com o aumento da energia γ [43]. A fonte escolhida de Cs^{137} de 30 Ci de meia vida 30.2 anos emite apenas γ de 662 Kev; portanto está dentro dos critérios anteriores. A sua intensidade permite a obtenção de dados num tempo razoável. A desvantagem apresentada porém por esta fonte é o problema de blindagem. Este foi resolvido construindo um castelo com tijolos de Pb com espessura total de 20 cm e uma estrutura especial de Pb em torno do próprio castelo onde estava a fonte, de forma a reduzir drasticamente, depois de inúmeros testes, as contagens de fundo.

2c) Detetor, blindagem e eletrônica

O detetor de estado sólido usado é um GeLi ORTEC Modelo 8101-0323. Estes detetores trabalham baseados no princípio, de que um fóton é absorvido na região ativa do cristal semicondutor

por um processo fotoelétrico e cria um certo número de pares elétron-buraco que é proporcional à energia do fóton absorvido. Um campo elétrico de (~ 2 KV/cm) arrasta os elétrons e buracos para os eletrodos e o tamanho do pulso de corrente é detetado por um amplificador sensível à carga.

Os detetores GeLi são operados à temperatura de nitrogênio líquido, para reduzir o ruído no preamplificador e para impedir que o Li se difunda fora do cristal. O aquecimento do detetor significa a destruição do mesmo. O tamanho do nosso detetor é 40.3 mm de diâmetro x 22.8 mm de comprimento com um volume ativo de 26,8 cm^3. A resolução total, largura e meia altura fornecida pelo fabricante é 2.3 Kev para fótons de 1.33 Mev.

As contribuições à resolução do detetor especialmente à altas energias não são devidas somente à impurezas e imperfeições do cristal, mas também porque alguns fótons são espalhados no cristal e saem do mesmo; como se deteta apenas a energia fornecida ao elétron de recuo tem-se uma avaliação parcial da energia. Além disso podem ocorrer outros processos como saída do elétron na superfície do cristal e recombinação de elétron-buraco. O resultado das várias contribuições resulta numa resolução que é essencialmente gaussiana. A probabilidade de que um fóton seja absorvido na região ativa do detetor, diminui quando a energia aumenta, devido a dependência com a energia da seção de choque fotoelétrica.

A eficiência relativa do detetor, pode ser medida usando isótopos radioativos dos quais se conhecem as intensidades relativas das linhas. No caso da experiência o detetor foi colocado numa base móvel sobre rolamentos que podia sustentar um peso considerável (≃ 600 kg de blindagem) já que a parte de blindagem foi feita com tijolos de Pb; presa à base móvel havia uma haste gros-

sa de ferro que por sua vez estava ligada à base da plataforma onde estava o espalhador. O espalhador foi pendurado num suporte de Al de forma a minimizar o efeito do suporte na contagem. A blindagem da fonte como já citado foi feita com grande número de tijolos de Pb, colocados de tal forma que o número de contagens quando a fonte estava dentro do castelo próprio para sua armazenagem e quando estava exposta dentro da nossa blindagem, era o mesmo.

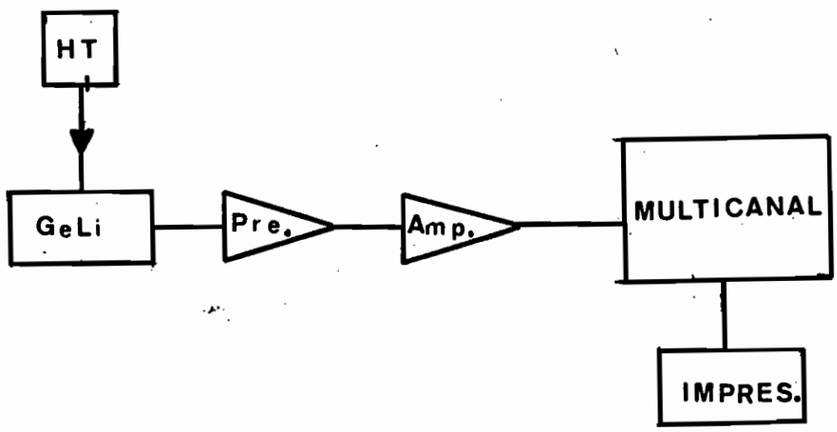


Fig. 3-2 - Esquema da eletrônica dos sistema

A eletrônica do sistema são módulos usados comumente.

O preamplificador é parte integrante do sistema do detetor desde que o primeiro estágio do amplificador é resfriado e montado no mesmo bloco que o cristal de GeLi. O resto consiste na fonte de alimentação do detetor, amplificador e multicanal com uma saída em fita perfurada.

Em todos os casos porém o sistema deve ter uma excelente linearidade, estabilidade e baixo ruído.

O exposto anteriormente serve para enfatizar que este

tipo de experiência é realizável com um custo relativamente modesto.

2d) Obtenção dos dados experimentais

Os espalhadores usados foram paralelepípedos de 5 elementos (Pb^{82}, W^{74}, Ag^{47}, Cu^{29}, Al^{13}) com as dimensões dadas na tabela 3-1.

TABELA 3-1: Dimensões dos espalhadores usados

Elemento	Largura (mm)	Compr. (mm)	Espessura (mm)
Pb	20	50	2
W	16,5	61	.8
Ag	20	50	2
Cu	22	61	6
Al	19,8	60,3	19,6

Os ângulos escolhidos para a realização da experiência foram $(30.1 \pm .7)^{o}$, $(15^{o}.0 \pm .4)$ e $(10^{o},9 \pm .3)$.

Contrariamente às experiências de perfil Compton tradicionais em que se escolhiam ângulos próximos de 180° como foi citado na parte teórica, porque simplifica notavelmente o cálculo, os ângulos escolhidos foram relativamente pequenos devido a quatro fatores:

1) existia interesse de uma parte do grupo em tentar eliminar o efeito Compton das camadas mais internas e portanto de energia de ligação maiores. Para ângulos suficientemente pequenos e elementos com Z alto seria mais difícil arrancar elétrons das

camadas mais internas.

2) Como se conheciam os trabalhos de Ribberford que estabelecem a validade da teoria para qualquer ângulo, desejava-se testar a teoria proposta por este autor.

3) Acelerar o experimento, pois a seção de choque para espalhamento Compton é maior em ângulos menores. Para $\alpha \simeq 1 (\alpha = w/mo c^2)$, $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \cong 5 \times 10^{-26}$ cm^2/elétron para 30° e $\simeq 2 \times 10^{-26} cm^2$/elétron para 170°. Evans [14].

4) A intensidade do espalhamento duplo é menor a ângulos menores. Isto será abordado com mais detalhes no capítulo IV, onde damos o tratamento de dados para espalhamento duplo.

Foi feita uma calibração em energia do sistema com Eu^{154} e Na^{22} para cada ângulo de espalhamento; a fig. (3-3) apresenta uma calibração para ângulo de 30°.

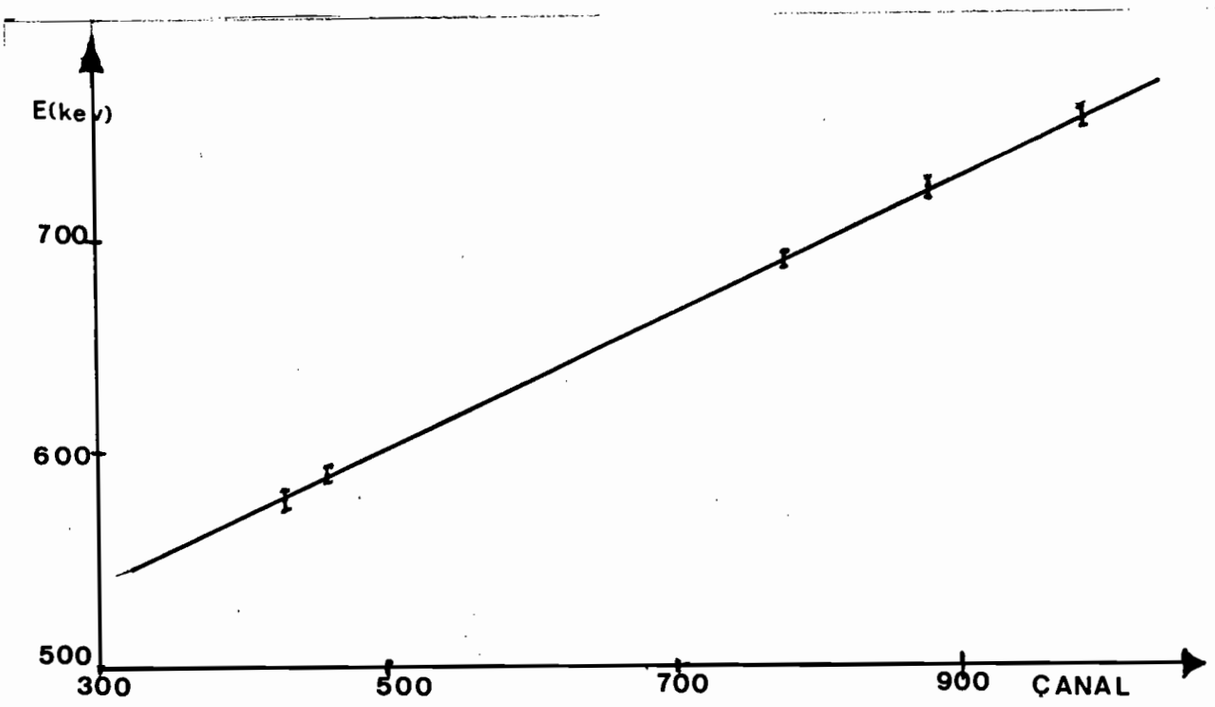


Fig. 3-3 - Calibração em energia para ângulo de 30°.

Obtemos $\simeq$ .3 Kev/canal.

Para alinhar o centro da fonte, colimador e centro do

espalhador usamos um Laser He-Ne.

O posicionamento do ângulo de espalhamento apropriado também foi feito com Laser.

Passamos então a medidas sistemáticas dos 5 elementos citados, em intervalos de tempo razoáveis (algumas horas) que permitissem um número apropriado de contagem no pico. Um espectro típico é mostrado na fig. 3-4 (colhido em ≃ 4,5 horas) onde temos o pico Compton e o elástico para o Pb^{82}, a um ângulo de 10°.

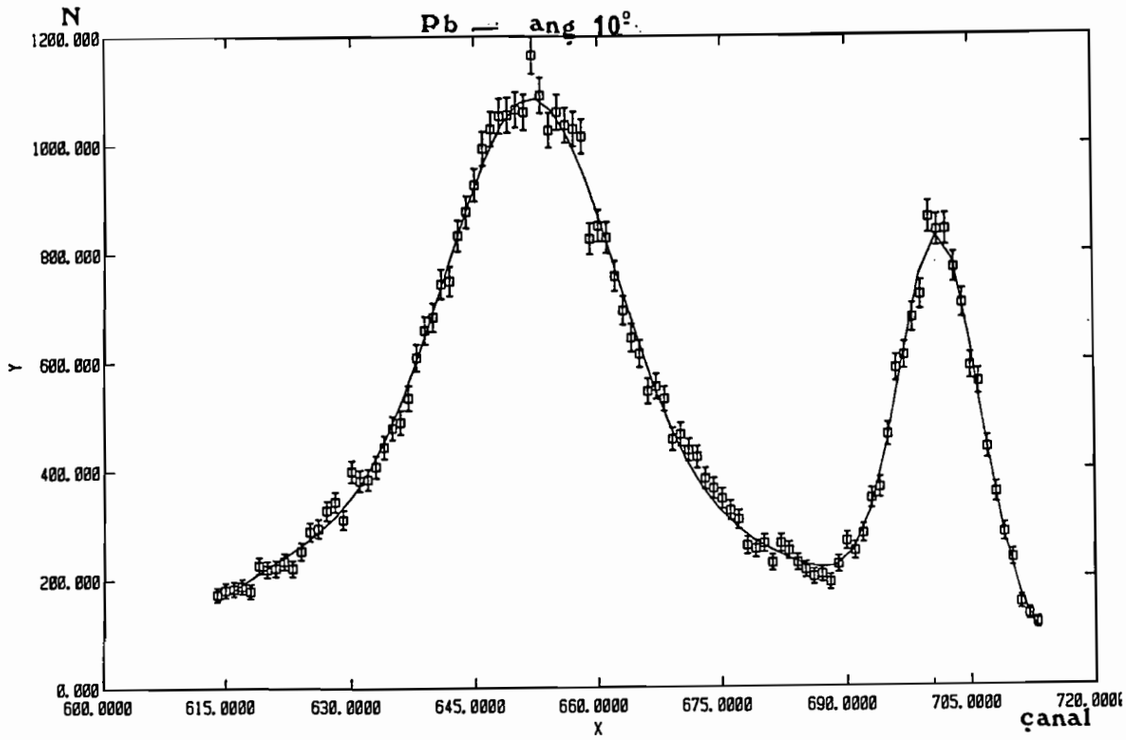


Fig. 3-4 -Espectro típico obtido com fonte de Cs^{137}, espalhador Pb^{82} e ângulo de espalhamento $\theta = 10^{o}$. N = número de eventos

Para cada ângulo foi feita também uma medida de fundo; um espectro típico é o da fig. 3-5. Como trabalhamos com ângulos

de espalhamento relativamente pequenos e colimamos o feixe suficientemente, podemos pensar que o detetor "vê" quase somente os fótons que foram espalhados pelo próprio espalhador.

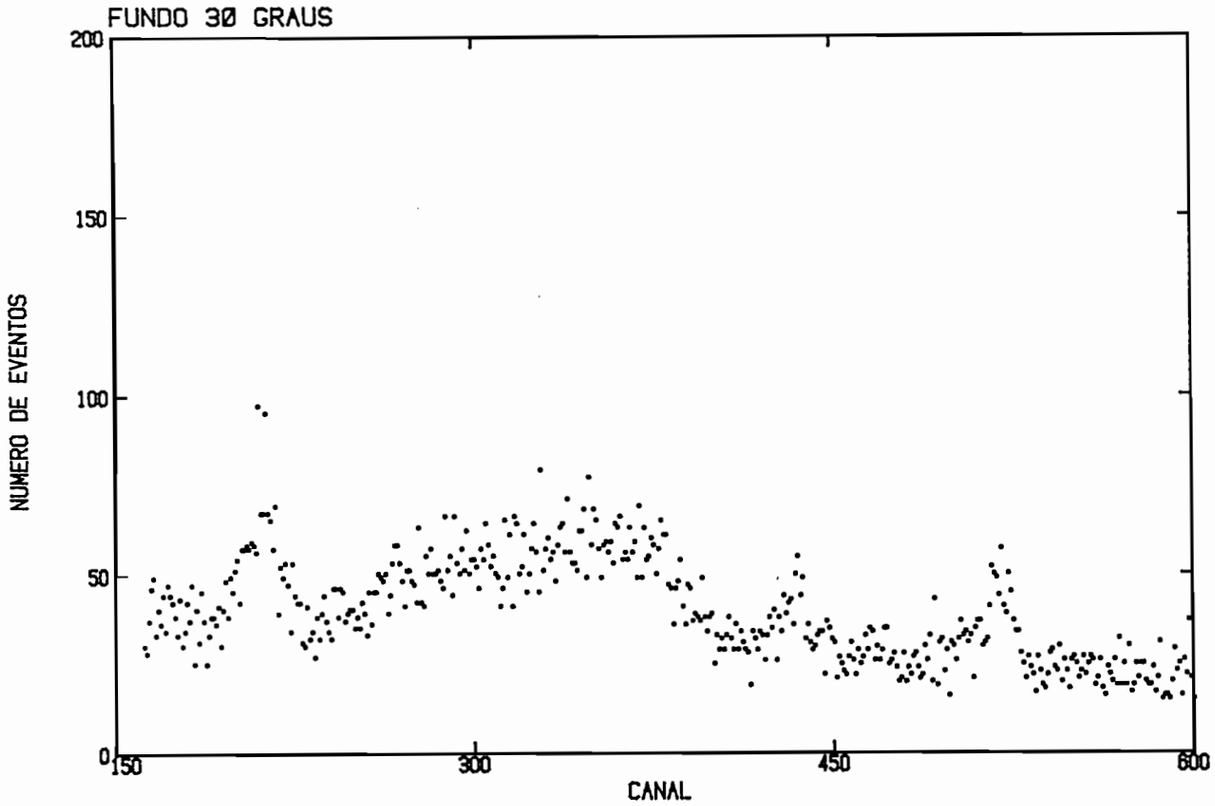


Fig. 3-5 - Espectro típico de fundo para um tempo de contagem de ≃ 13 horas com a fonte de Cs^{137}, ângulo 30°

A eficiência do detetor foi medida usando o isótopo Eu^{154} que tem a intensidade das linhas bem conhecidas. Determinou-se a área sob os espectros e fez-se uma curva de eficiência. Na região de interesse que varia de um mínimo de 510 para 660 Kev, podemos observar na fig. 3-6 que a variação da eficiência do detetor pode ser descrita com razoável precisão por uma reta. Conclui-se que para cada 100 Kev de variação da energia a eficiência do detetor varia de 13%.

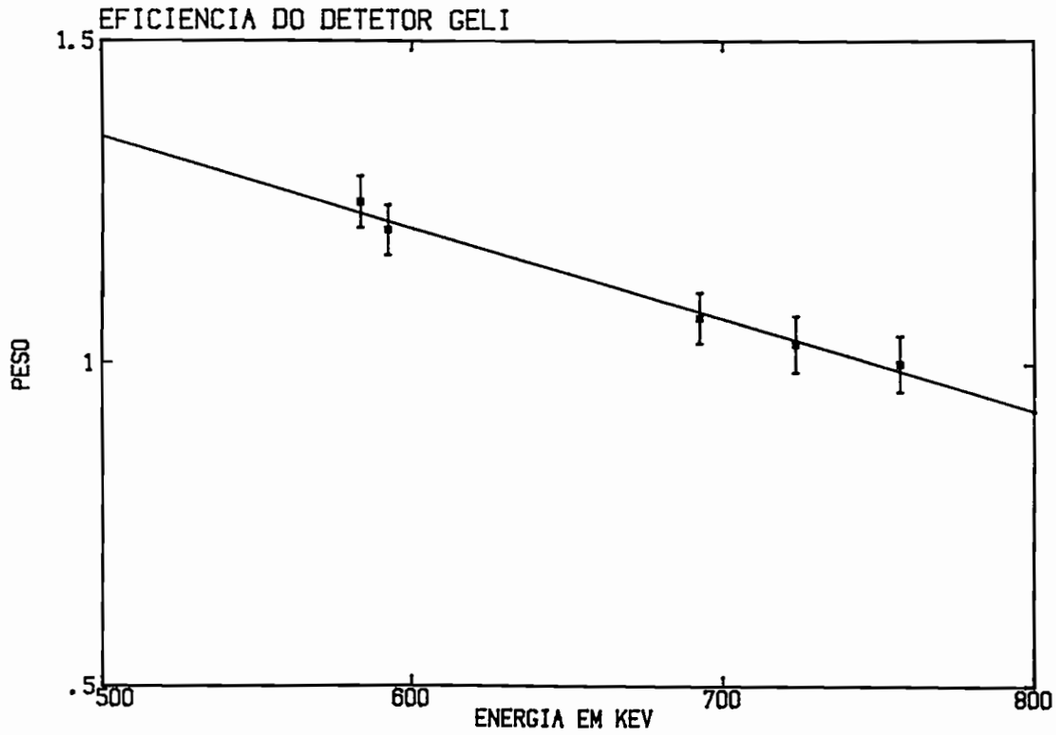


Fig. 3-6 - Curva de eficiência do detetor usado na experiência, na região de interesse.

2e) Tratamento dos dados experimentais

Os dados coletados precisam agora ser corrigidos pelo fundo e eficiência do detetor, antes de serem propriamente analisados. Para isso escreveu-se um pequeno programa de computador que lê os dois arquivos (Compton e fundo) ajusta o fator tempo para o fundo, permite deslocar se necessário os canais do espectro em relação ao fundo.

Em alguns poucos casos,onde o fundo tinha um pequeno efeito, subtraia-se o fundo deslocando alguns canais para a direita ou esquerda (deslocamento este compatível com a instabilidade do multicanal) procurando obter um ajuste dos dados experimentais que mais se aproximasse do histograma calculado.

O programa citado também faz a diferença de 2 arquivos, calcula o desvio e compacta ou soma o número de contagens, de 2

canais ou de 3 em 3 canais, para obtermos uma estatística melhor e termos somente 100 pontos. Isto é necessário para poder usar o programa AJUSTE* que já faz parte da biblioteca do computador PDP-11 do Acelerador Linear do Instituto de Física.

O espectro diferença dos 2 arquivos já citados foi a seguir corrigido pela eficiência do detetor considerada linear em relação à energia e com uma inclinação de $(13 \pm 3)\%$ para cada 100 Kev de variação em região em que trabalhamos.

Uma vez de posse do espectro, usamos então o programa AJUSTE já citado que dispõe de inúmeras funções, para poder ajustar uma curva conveniente no pico Compton.

Embora a parte elástica do espectro pudesse facilmente ser ajustada por uma gaussiana mais um fundo conveniente, a parte Compton não apresentava possibilidade de um ajuste razoável com as funções existentes.

Para resolver isto introduzimos então, além do fundo dado por uma reta, uma Laurentziana e uma gaussiana e observamos que o ajuste para a parte experimental Compton se tornava razoável. (Isso exige oito parâmetros para 100 pontos no caso de $\theta = 30$, para $\theta = 15^{\circ}$ e 10° da ordem de 54 e 42 pontos respectivamente.

O tipo de curva que pode ser ajustada tem então uma equação do tipo:

$$x_1 = x - A_4$$
$$y = A_1 + A_2 x_1 + \frac{A_3 \, x \, (A_5 x)^2}{(x^2 - A_4^2)^2 + (A_5 x)^2} + A_6 e^{-\frac{(x-A_7)^2}{2 A_8^2}} \qquad (9\text{-}1)$$

Na tabela 3-2 damos os resultados do ajuste dos dados experimentais para os 5 elementos estudados; em alguns casos temos uma única espessura e em outros temos espessura simples e dupla. Notamos que para os casos de es-

---

*Programa desenvolvido pelo Prof. Philippe Gouffon - Laboratório do Acelerador Linear do Instituto de Física da USP

pessura simples e dupla a largura a meia altura não apresentava variações notáveis que poderiam ser atribuídas ao duplo espalhamento. Entretanto na região de baixa energia e já distante do pico Compton as contagens apesar de serem até 100 vezes menores as do valor no pico, não caem a zero o que pode ser explicado em grande parte pelo duplo espalhamento que será discutido no cap. IV ao compararmos os resultados experimentais com o modelo teórico por nós desenvolvido.

A incerteza nos valores de $\sigma_{1/2}$ cotada na tabela 3-2 foi avaliada pela largura dos canais e pelo desvio que apresenta o próprio ajuste.

Nas figuras seguintes Fig. 3-7, 3-8 e 3-9 mostramos alguns ajustes para alguns elementos a vários ângulos.

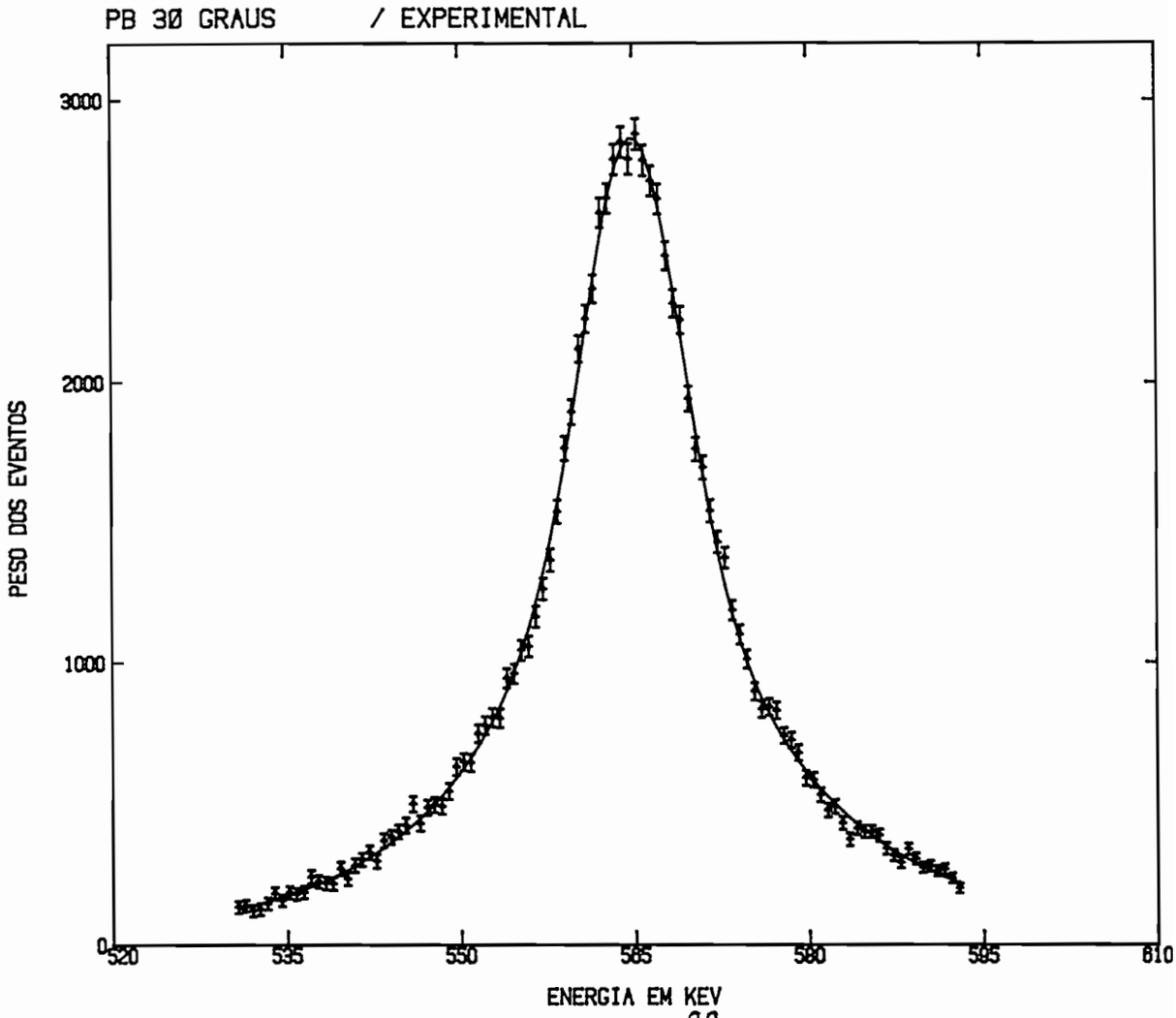


Fig. 3-7 - Espectro Compton para o Pb^{82} a 30°, tempo de contagem $\simeq$ 10 horas.

Uma vez obtido um ajuste razoável passamos a comparar estes ajustes, com os obtidos pela simulação da experiência usando o método Monte Carlo.

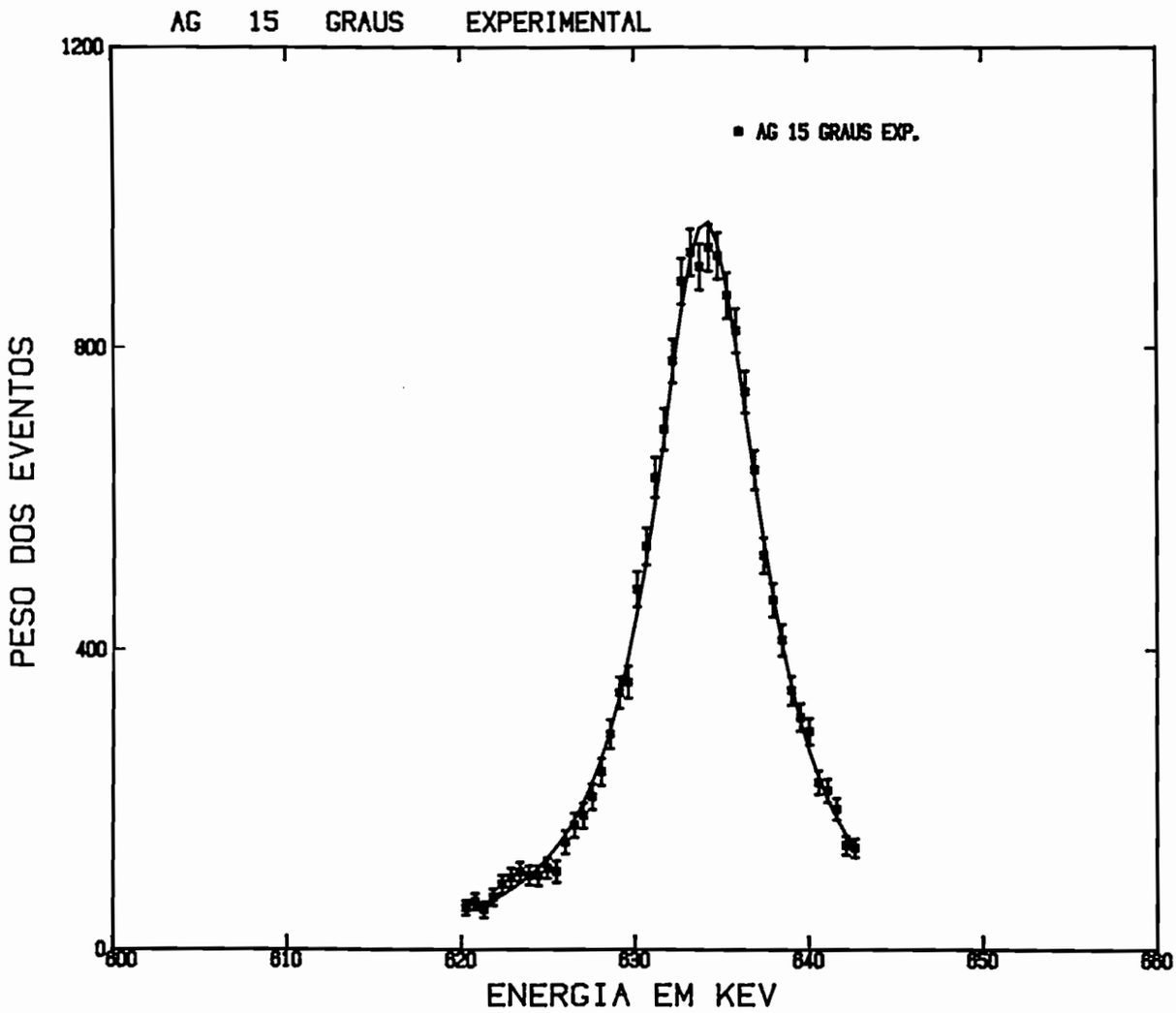


Fig. 3-8 - Espectro Compton para Ag^{47} a 15°, tempo de contagem ≃ 3 horas

Tabela 3-2 - Resultados do ajuste dos dados experimentais para os 5 elementos estudados para 3 ângulos, eapalhador a 90° - Energia do fóton incidente 662 Kev

Elemento	Espessura	Ang. $(30.1 \pm .7)^{o}$			Ang. $(15.0 \pm .4)^{o}$			Ang. $(10^{o}.9 \pm .3)^{o}$		
		X^2	%	(Kev) $(\sigma_{1/2})$	X^2	%	(Kev) $(\sigma_{1/2})$	X^2	%	(Kev) $(\sigma_{1/2})$
Pb	Simples	.952	61.06	14,21 $\pm$ .95	1.002	46.63	8,58 $\pm$.51	1.10	30.47	9,00 $\pm$.54
	Duplo	1.13	17.50	14,16 $\pm$ .89	1.423	3.38	9,24 $\pm$.55	1.19	19.7	8,00 $\pm$.48
W	Simples	1.093	25.42	13.62 $\pm$ .81	1.598	.77	9,38 $\pm$.56	1.044	39.79	8,52 $\pm$.51
Ag	Simples	.9768	54.34	12.28 $\pm$.73	.973	52.7	7,38 $\pm$.44	1.00	46.62	7,55 $\pm$.45
	Dupla	.9870	51.54	12.13 $\pm$.72	-	-	-	1.02	42.60	6,41 $\pm$.41
Cu	Simples	1.149	17.63	12.42 $\pm$.74	1.558	1.18	7.58 $\pm$.45	1.257	14.40	7,29 $\pm$.43
Al	Simples	1.47	.3	10.53 $\pm$.63	.978	51.19	6.40 $\pm$.38	1.346	8.59	6.54 $\pm$.39

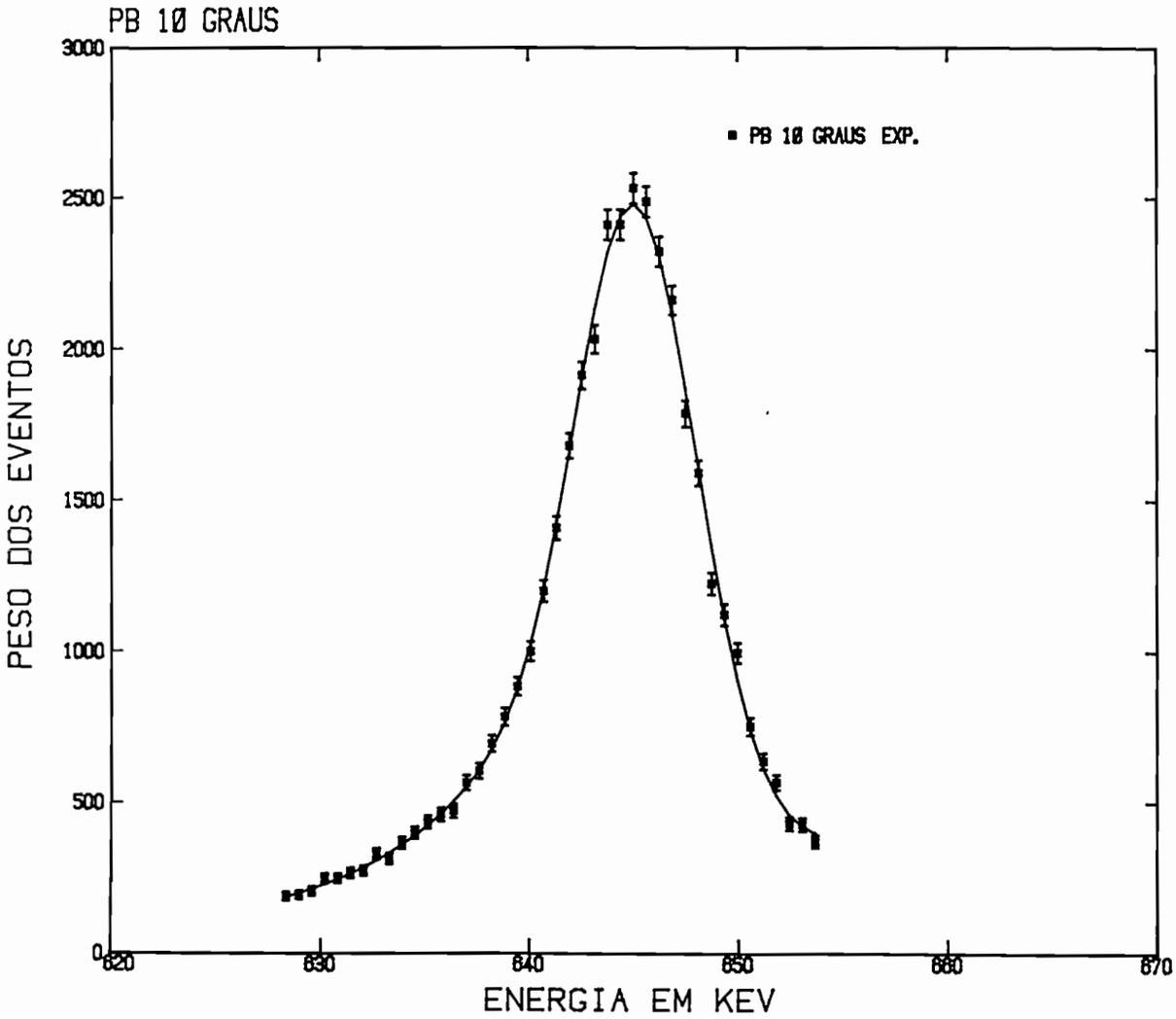


Fig. 3-9 - Espectro Compton para o Pb^{82} a 10°, tempo de contagem ≃ 4,5 horas

CAPÍTULO IV - TRATAMENTO DE DADOS

1) INTRODUÇÃO

No capítulo II, descrevemos o método usado para simular os perfis Compton na aproximação de impulso, tanto para espalhamento simples como duplo.

Neste capítulo tentaremos detalhar o tratamento dos dados obtidos com o método Monte Carlo, e a sua comparação com os resultados experimentais, ou seja, usando os perfis Compton calculados com funções Hartree-Fock relativísticas verificar se as mesmas descrevem o comportamento experimental do perfil Compton, para fótons incidentes de alta energia espalhados em qualquer ângulo.

Consideraremos também resultados de ajustes e mencionaremos alguns testes feitos para verificar se o programa não apresentavam erros de lógica na parte geométrica.

2) OBTENÇÃO DO PERFIL COMPTON, PROCESSO MONTE CARLO

2a) Tabelas e ajustes

Embora no capítulo II, detalhamos o processo seguido para a obtenção do perfil Compton por simulação dos eventos, não entramos em detalhes quanto a tabelas usadas, ajustes de perfis etc., isto é o que faremos a seguir.

Para a obtenção da fórmula (2-15) para os diferentes elementos estudados foi usada a seguinte tabela de coeficientes:

TABELA 4-1 - Coeficientes da fórmula 2.15 para os elementos estudados

El.	Coeficiente de atenuação Compton + Raleigh							Coeficiente de atenuação Compton					
	a	b	c	d	e	f	g	a	b	c	d	e	f
Pb^{82}	24.9134	-7.0908	.4488	--	--	--	--	25.0094	-7.1258	.4510	--	--	--
W^{74}	10.7567	-.8853	-.1887	$-.4732 \times 10^{-1}$	$.7660 \times 10^{-2}$	--	--	12.5301	-.6237	-.6990	$.6784 \times 10^{-1}$	--	--
Ag^{47}	66.7296	-30.5276	4.5707	-.2334	--	--	--	57.2734	-25.3602	3.6589	-.1807	--	--
Cu^{29}	25.7216	-8.5792	.1288	.1605	$-.1083 \times 10^{-1}$	$-.3005 \times 10^{-3}$	--	25.2984	-8.4432	.1190	.1579	$-.1063 \times 10^{-1}$	$-.2129 \times 10^{-3}$
Al^{13}	.3409	-.4735	$.1505 \times 10^{-2}$	$.2936 \times 10^{-3}$	--	--	--	1.5313	-.8667	$-.5036 \times 10^{-1}$	$.2766 \times 10^{-1}$	$-.2222 \times 10^{-2}$	--

Mostraremos a seguir alguns ajustes dos perfis Comtpon tabelados por Biggs, Mendelsohn e Mann [26,27], o tipo de equação e a figura obtida.

Por exemplo para o Pb^{82}, o orbital 1s, visto na fig. 4-1, é dado por:

$$Pb^{J}{}_{1s} = .881573.10^{-2} + .948026.10^{-5}\, p_z - .537736.10^{-5} p_z{}^2 + .132203.10^{-6}\, p_z{}^3 \qquad (4\text{-}1)$$

o orbital 2s do W^{74}, visto na fig. 4-2, é dado por:

$$W^{J}{}_{2s} = .313679.10^{-2} - .124236.10^{-3} p_z - .169601.10^{-5} p_z{}^2 + .330233.10^{-1} \times e^{-\left(\frac{p_z - .215353.10^{-1}}{2 \times 96667^2}\right)^2} \qquad (4\text{-}2)$$

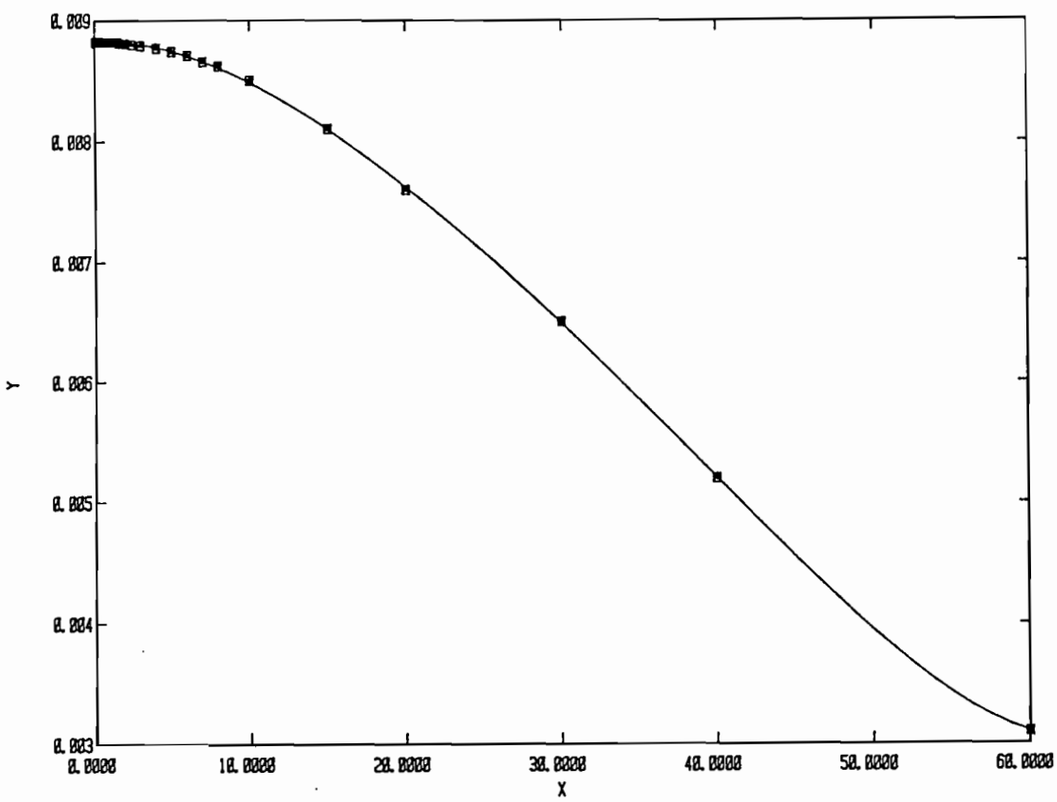


Fig. 4-1 - Perfil Compton J_{1s} para o Pb^{82} em função do momento do elétron alvo

Para o perfil total da Ag^{47} obtivemos a fig.(4-3), usando respectivamente para p_z de 0 - 2 au, 2 - 40 au, e de 40 - 200 au, equações:

$$J_{Ag1} = 2.02288 + 2.0369\, e^{\frac{-(p_z+.0375905)^2}{2x.235312^2}} + 4.40217\, e^{\frac{-(p_z-40295)^2}{2x1.0553^2}} \qquad (4\text{-}3)$$

$$J_{Ag2} = .991216x10^{-4} - .224399x10^{-2}p_z + 49.0912\, e^{-1.98386p_z} + 3.79186\, e^{-.242010p_z} \qquad (4\text{-}4)$$

$$J_{Ag3} = e^{-.657392-.113537p_z+.570586x10^{-3}p_z^{\,2} -.183968x10^{-5}p_z^{\,3} + .262601x10^{-8}p_z^{\,4}} \qquad (4\text{-}5)$$

e assim sucessivamente, com tipos de funções semelhantes para todos os elementos estudados (outras informações no Apêndice A2).

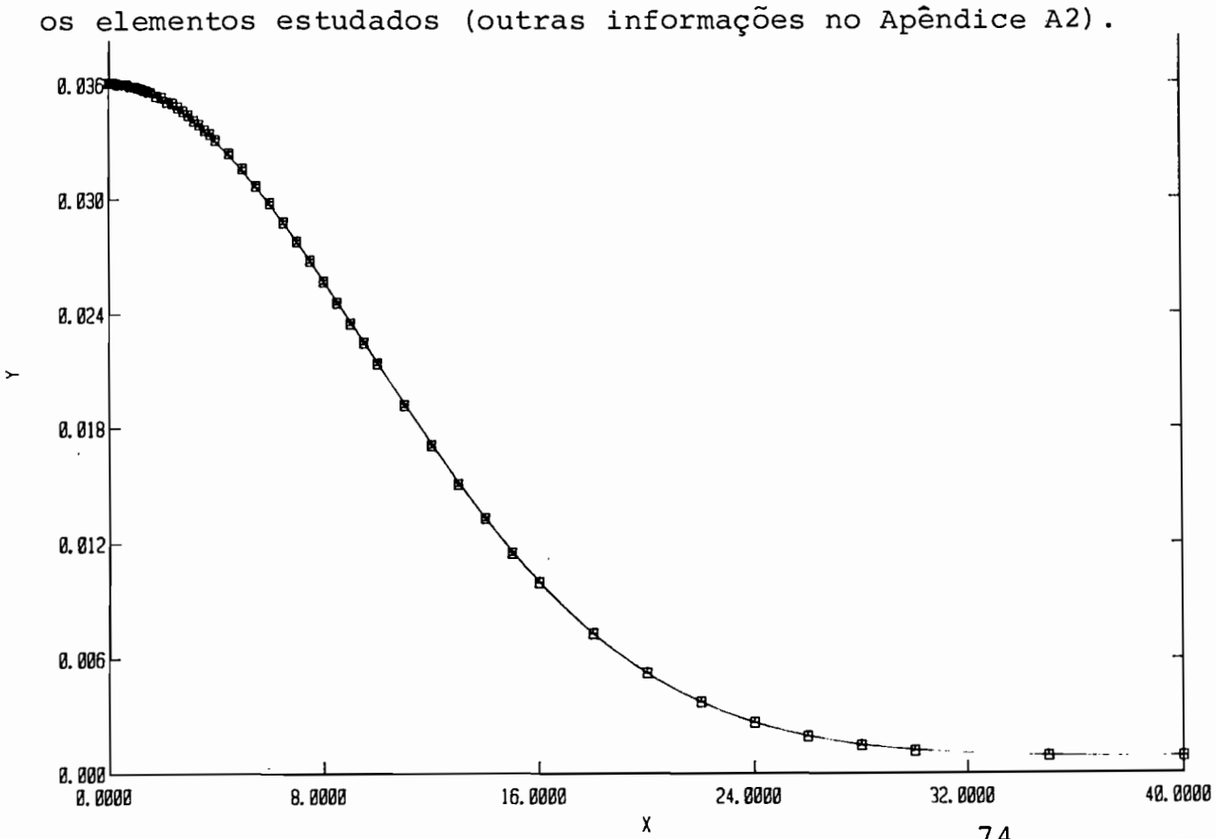


Fig. 4-2 - Perfil Compton para o orbital 2s para W^{74}, em função do momento do elétron

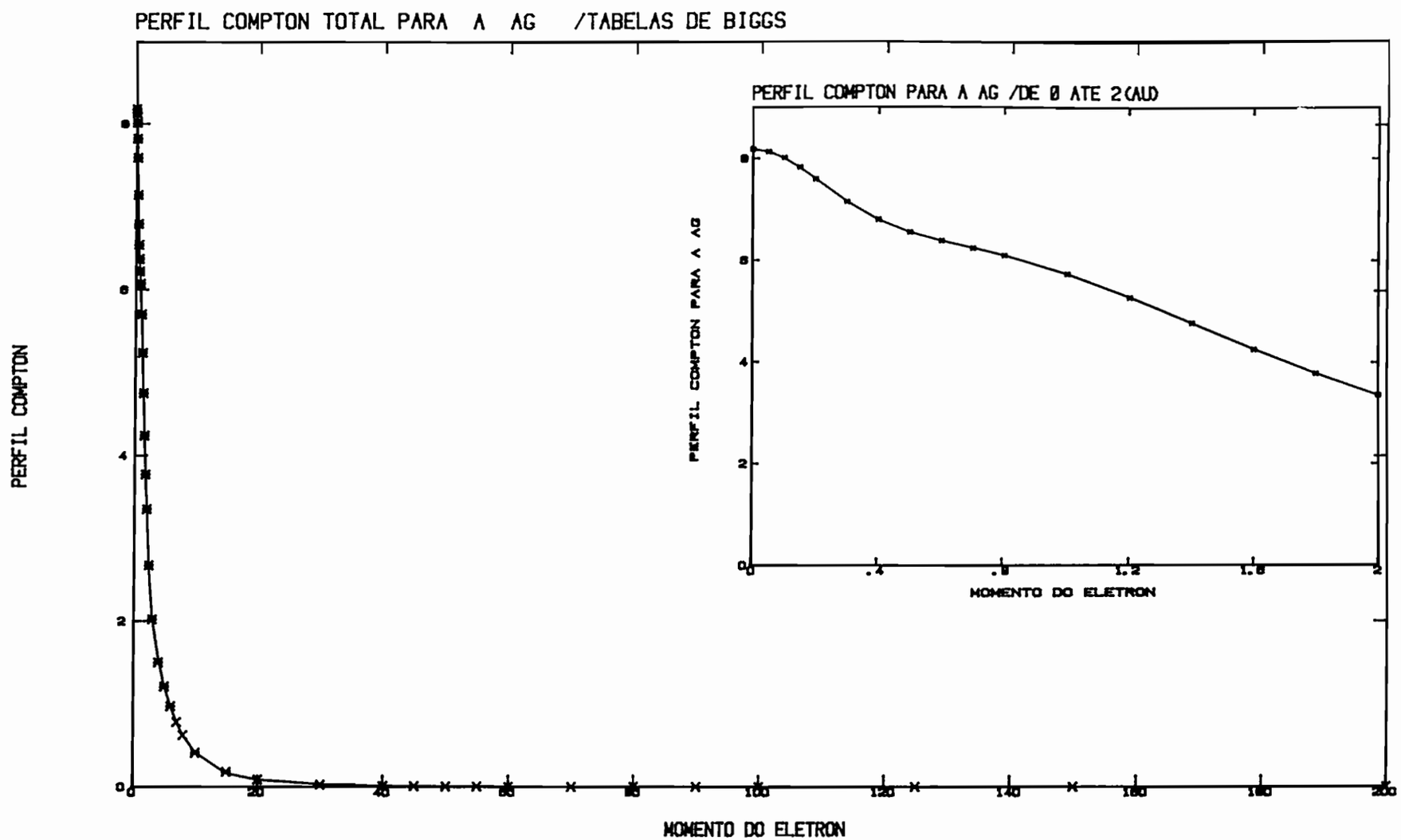


Fig. 4-3 - Perfil Compton total para Ag^{47} para p_z de 0 - 200 au

2b) Testes de geometria do sistema

Com um programa que constrói um "display" das coordenadas (x,y) para um pequeno número de eventos (≈ 1000), verificou-se a distribuição que tomariam as colisões dos fótons no espalhador e no detetor. Obtivemos a distribuição que pode ser vista nas figs- 4-4 e 4-5, onde cada ponto corresponde à colisão de um fóton no espalhador e no detetor respectivamente.

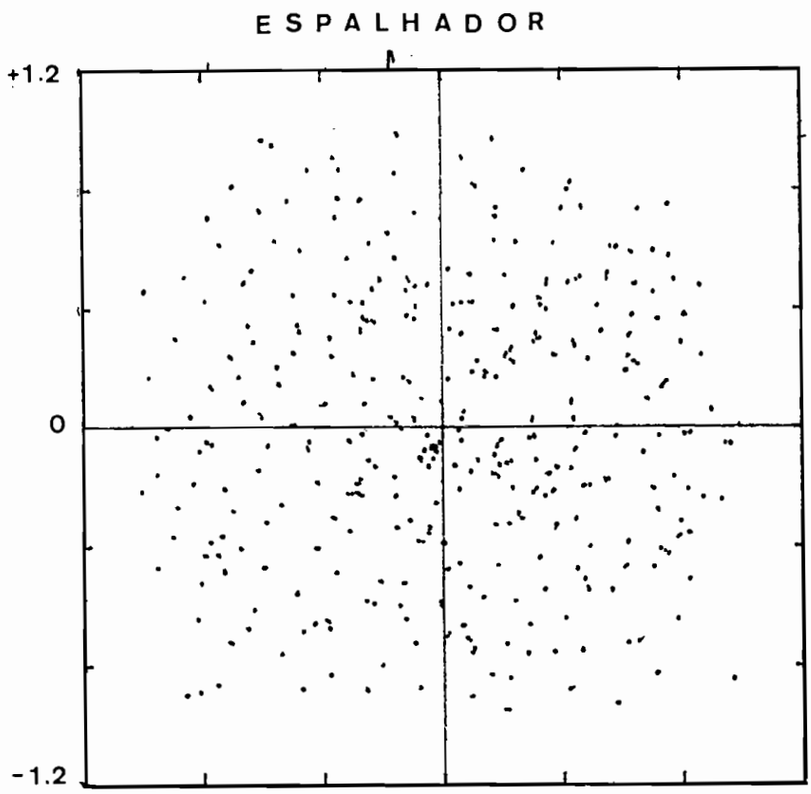


Fig. 4-4 - Distribuição dos pontos de colisão do fóton no espalhador.
Espalhador = 1,2 cm colimador =.35 cm
Detetor =.6 cm de raio

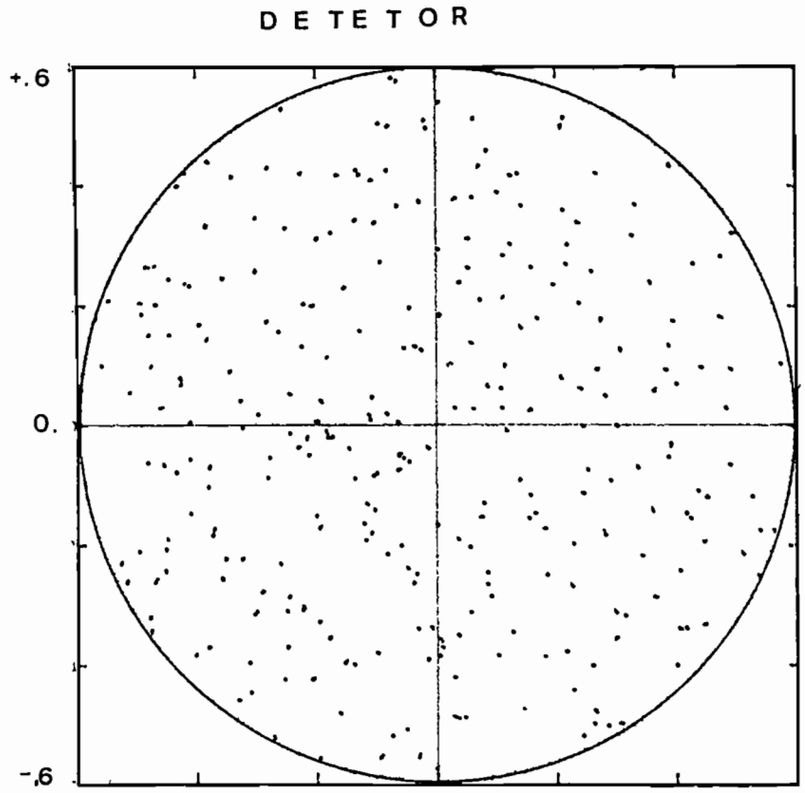


Fig. 4-5 - Distribuição dos pontos de colisão do fóton no detetor para as mesmas condições anteriores. O círculo mostrado representa a dimensão geométrica do detetor.

Conforme se depreende destas figuras, observa-se uma distribuição isotrópica dos pontos de colisão gerados pelo nosso programa Monte Carlo.

O próximo teste, visando verificar a correção da formulação geométrica é descrito da seguinte forma: com o detetor e a fonte puntiforme e o feixe incidente divergente porém contido no plano do papel, e o feixe espalhado contido também no mesmo plano, calculamos analiticamente os ângulos limites (ver fig. 4-6) de espalhamento θ_E e θ_E', e fizemos o mesmo no computador com uma distribuição angular de 2000 eventos.

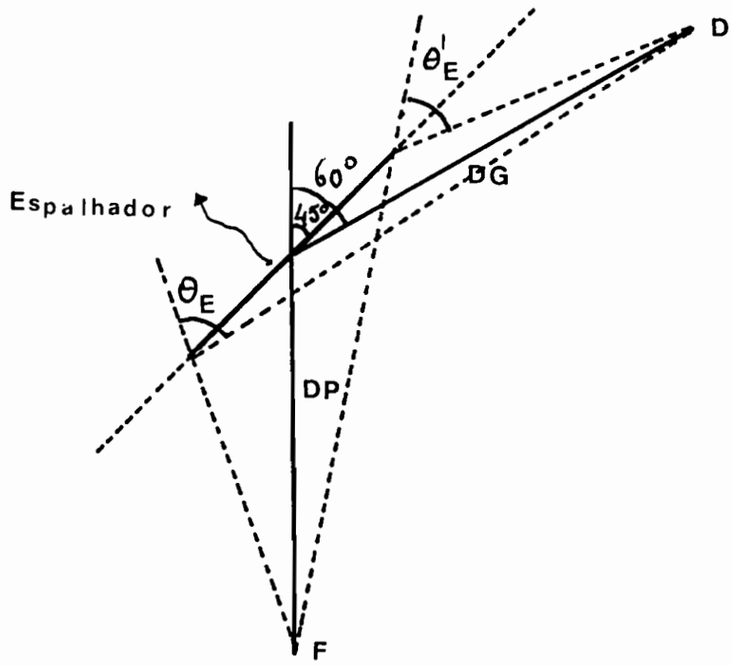


Fig. 4-6 - Ângulos limites de espalhamento para feixe no plano do papel, caso $\theta = 60^o$, $\phi = 45^o$, espalhador L = 16 cm

As condições da simulação eram:(ver fig. 2-2)

ϕ_1 e $\phi_2 = 90^o$

$\theta = 60^o$ $\phi = 45^o$

DP = 96.7 DG = 107.7 cm

RF = .01 cm

T = .01 cm

RD = .1 cm Espalhador L = 16 cm, sem usar o colimador

e $\phi_1 = 270^o$ e $\phi_2 = 270^o$ respectivamente.

Pelos cálculos geométricos analíticos, obtivemos $\theta'_E = 1.012$ rad e $\theta_E = 1.090$ rad, pelo computador obtivemos $\theta'_E = 1.011$ rad e $\theta_E = 1.090$ rad que dentro das aproximações do histograma estão compatíveis.

As figs. 4-7 e 4-8 seguintes mostram as distribuições angulares para fótons que atingem o espalhador, à esquerda e direita do seu centro respectivamente, dos ângulos de espalhamento.

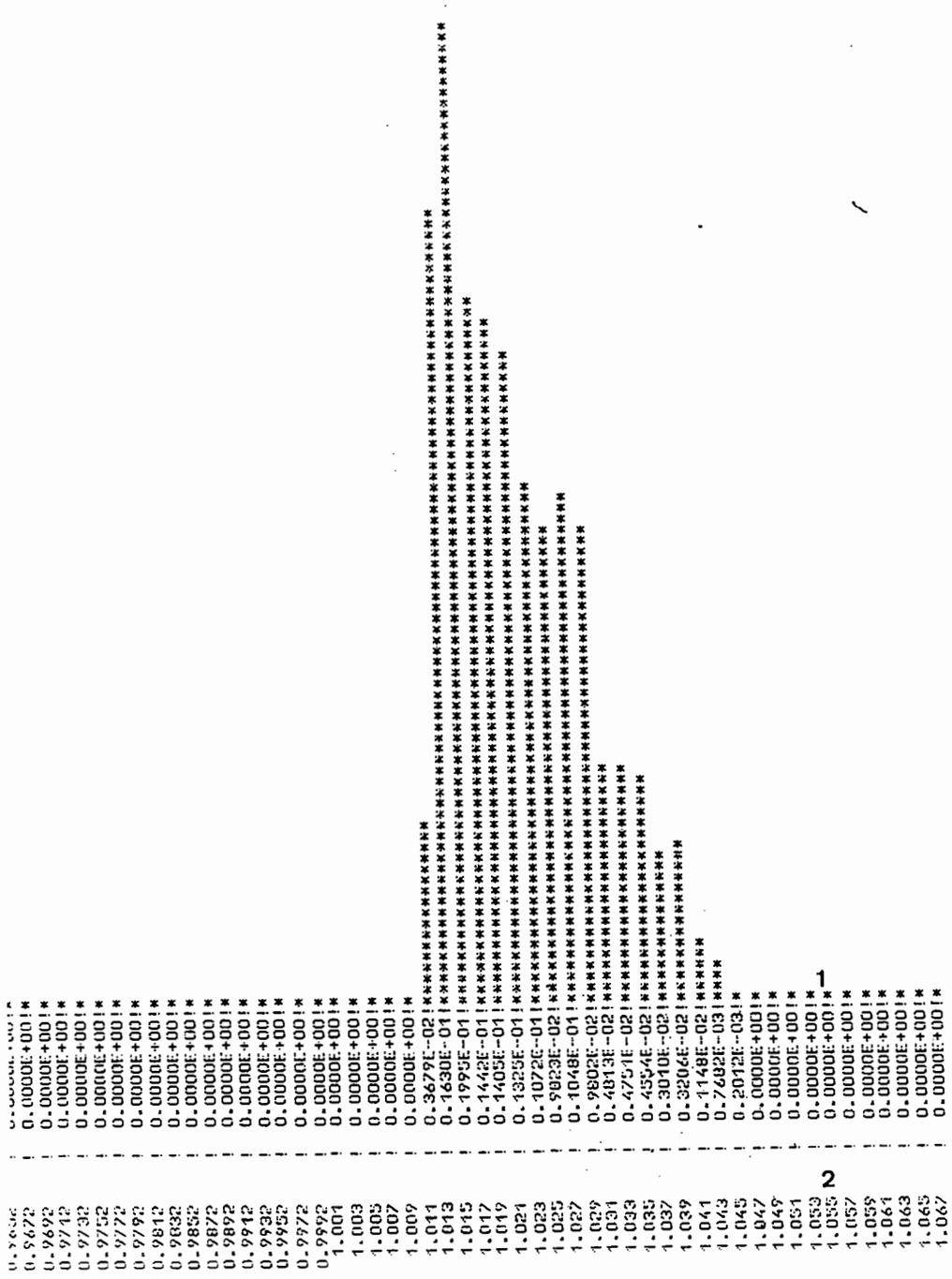


Fig. 4-7 - Distribuição angular para 2000 eventos; com $\Theta = 60^{o}$ = 1.0472 rad $\phi = 45^{o}$ $\phi_1 = 90^{o}$ $\phi_2 = 90^{o}$

Escala 1 corresponde ao peso dos eventos

Escala 2 corresponde ao ângulo Θ

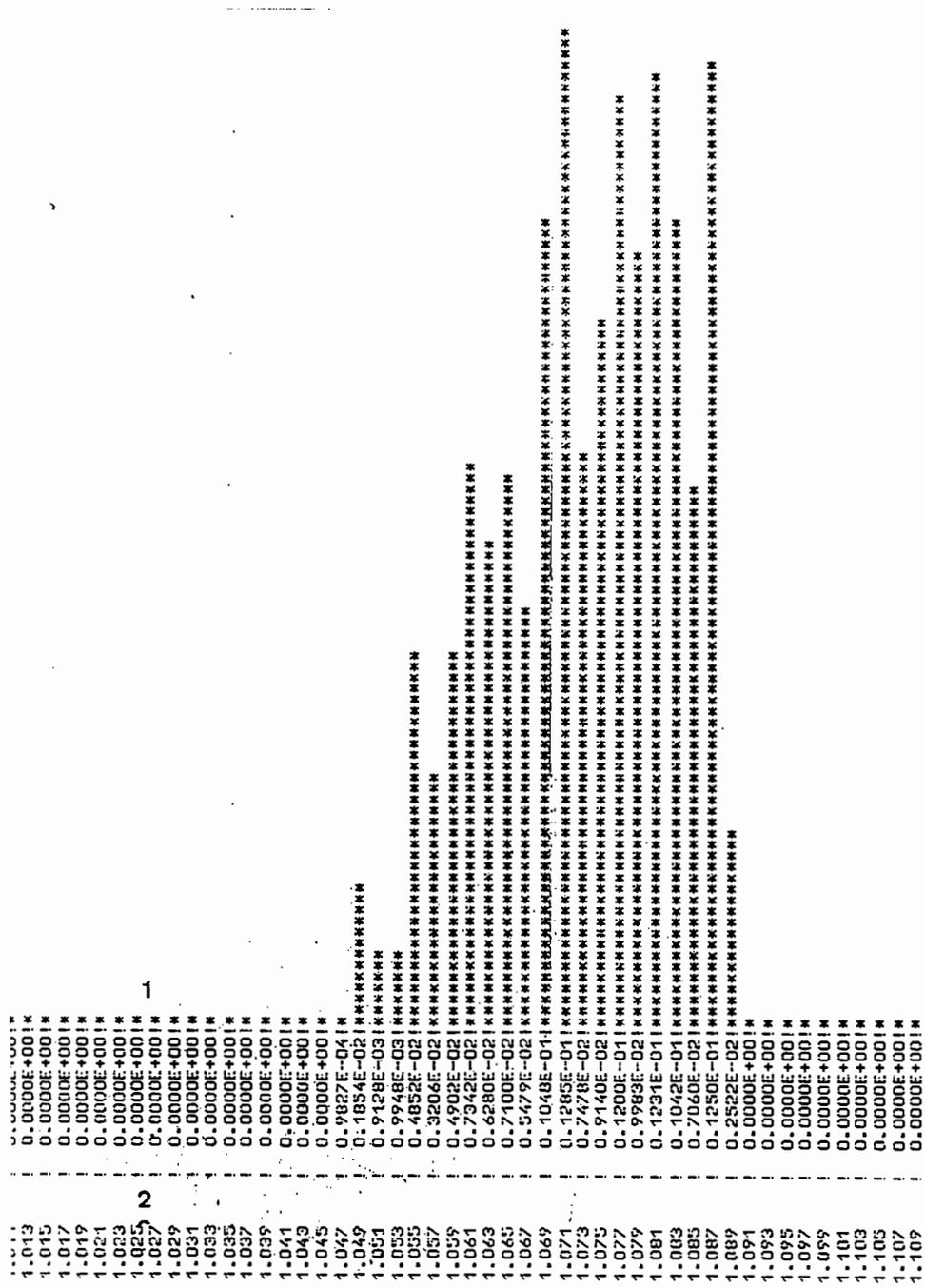


Fig. 4-8 - Distribuição angular para 2000 eventos, com Θ 60°

$\phi = 45^{o}$ $\phi_1 = 270^{o}$ $\phi_2 = 270^{o}$ $\Theta = 60^{o} = 1.0472$ rad

Escala 1 corresponde ao peso dos eventos

Escala 2 corresponde ao ângulo Θ

Para a operação do programa do computador como não podemos supor valores nulos para as dimensões físicas, assumimos valores pequenos, no caso de querer simular condições pontuais.

Prosseguimos então, fazendo alguns outros testes de geometria admitindo agora: o feixe incidente e espalhado tomando todo o espaço (ao contrário da situação plana anterior) e um espalhador grande (16 cm de lado). Obtivemos a tabela (4-2), para simulação com 1000 eventos, espalhamento simples.

TABELA 4-2 - Testes geométricos - Espalhamento simples

	Largura da base da distr. em rad.	$\sigma_{1/2}$ (rad)	RF (cm)	RD (cm)	RC (cm)
1	.002	.002	.01	.1	.03
2	.026	.018	.01	1.4	.03
3	.032	.018	.01	1.4	.2

Os gráficos das situações 1 e 3 estão nas figs. (4-9) e (4-10).

As condições da simulação foram:

A distância fonte-espalhador (DP) = 96.7 cm.

A distância espalhador-detetor (DG) = 107.7 cm.

ϕ ângulo de inclinação do espalhador em relação ao feixe incidente = 45.

θ ângulo de espalhamento 60°.

T = espessura da amostra = 0,1 cm.

RD = raio do detetor.

RF = raio da fonte.

RC = raio do colimador.

$\sigma_{1/2}$ = largura a meia altura

A medida que nos afastamos da geometria puntiforme temos uma distribuição angular crescente, como era de se prever.

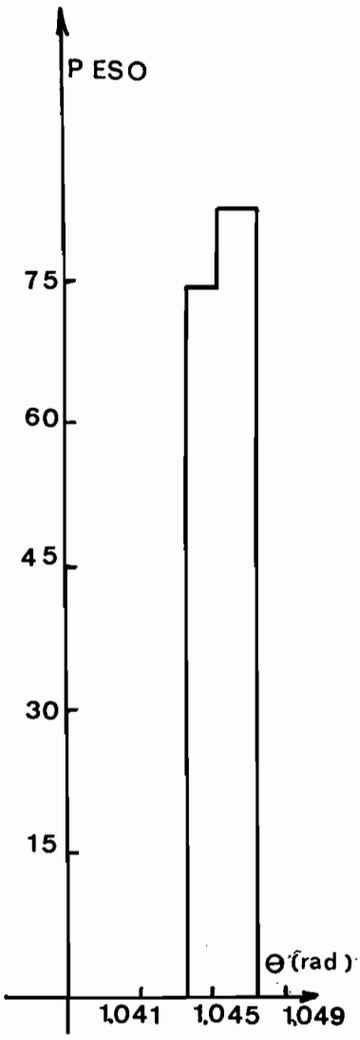


Fig. 4-9 -Distribuição angular, geometria puntiforme, feixe no espaço.

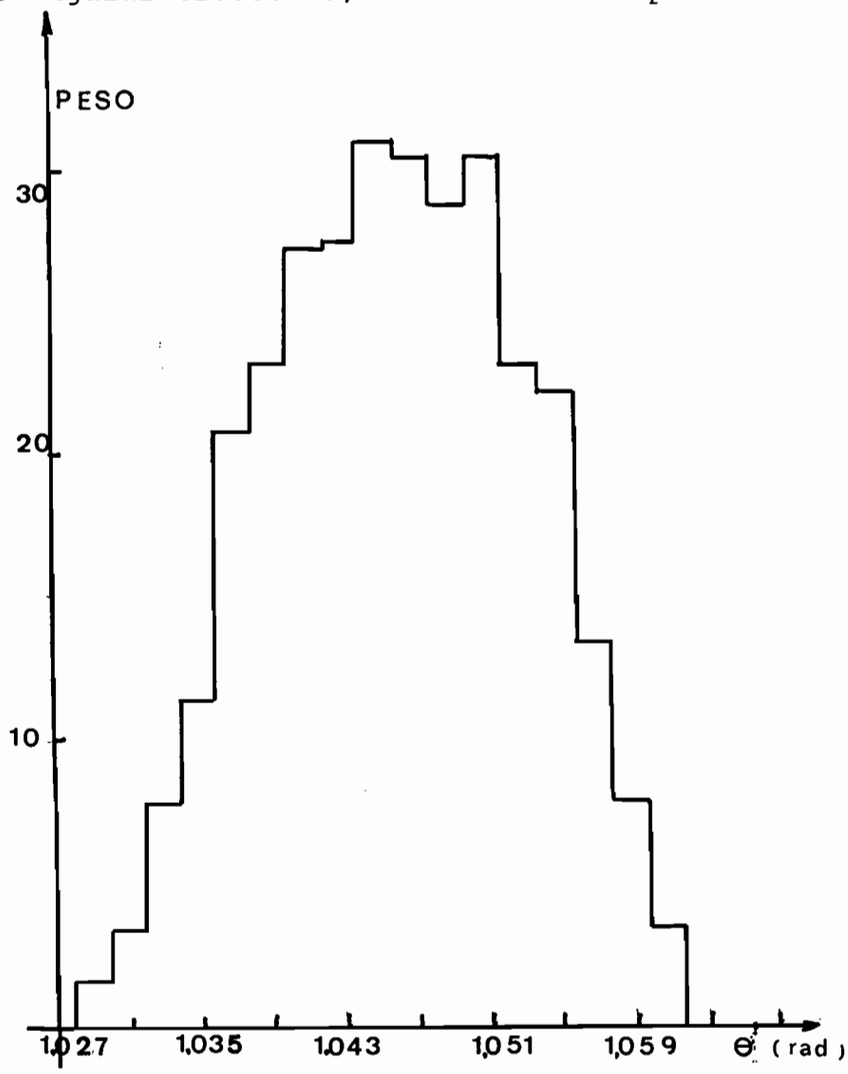


Fig. 4-10 - Distribuição angular RD e RC não puntiformes, feixe no espaço.

Também para um espalhador menor no caso 2cm de lado e ângulo de espalhamento 30° variamos o colimador de .2 cm para .3 cm. Fig. (4-11). Passamos uma curva pelos histogramas, apenas para ver o andamento da largura dos mesmos; observamos um aumento compatível na distribuição angular.

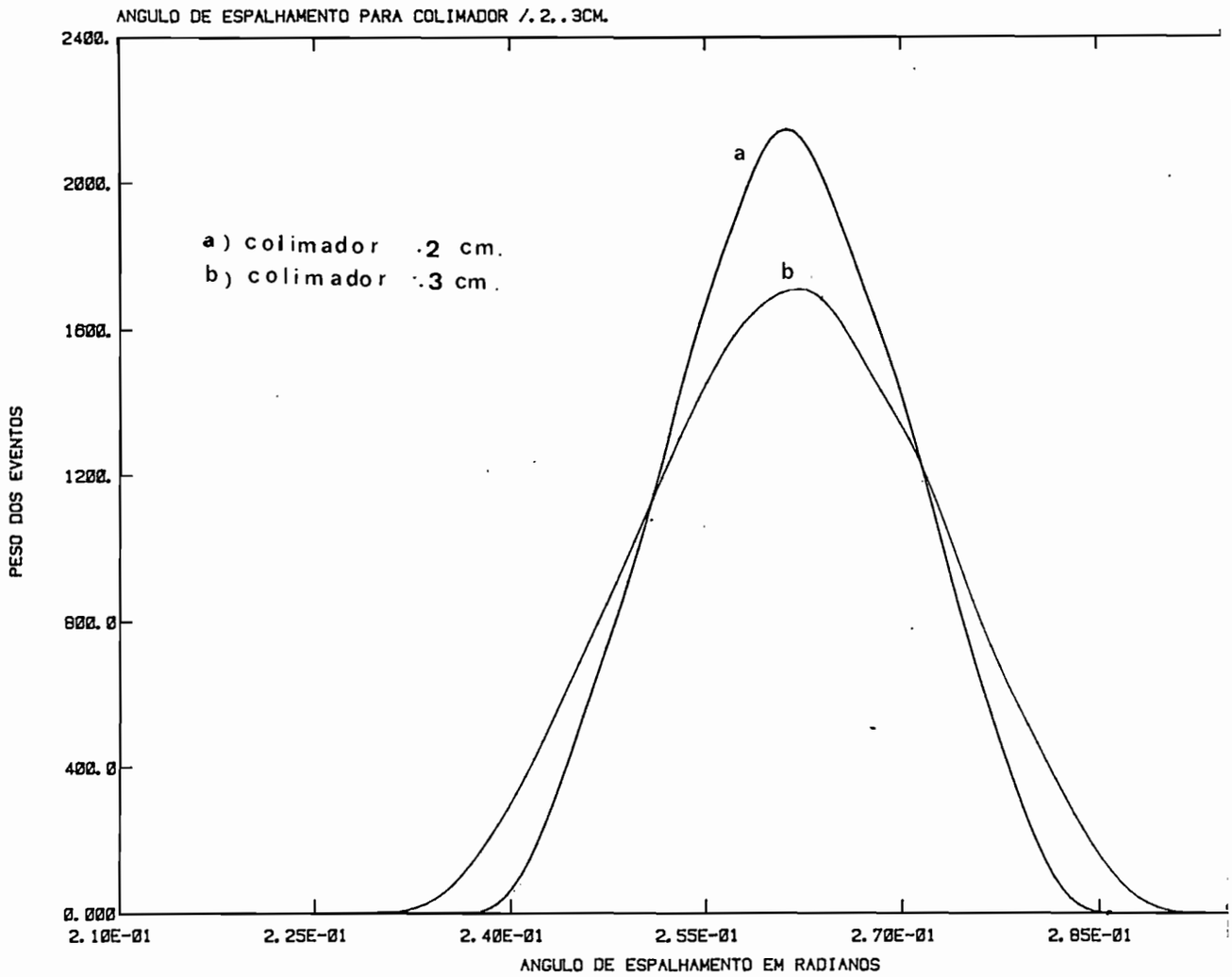


Fig. 4-11 - Distribuição angular dos eventos que atingiram o detetor para Pb^{82}, θ 30°, colimador .2 e .3 cm respectivamente.

Para testar a parte geométrica associada à polarização dos fótons para o espalhamento, fizemos histogramas para o ângulo η (ver fig. 2-1) ângulo entre o plano de polarização e o plano de espalhamento , para condições específicas mantendo o fóton incidente e espalhado no plano (y,z).

Para radiação incidente não polarizada (INPOL = 0) (fig. 4-12), obtivemos como era de ser esperar uma distribuição uniforme em todos os ângulos de $-\Pi$ a $+\Pi$.

Para radiação incidente polarizada no eixo x (INPOL = 1)

(fig. 4-13), nas mesmas condições indicada acima, obtivemos um só valor para η ou seja 90°.

Para radiação incidente polarizada no eixo (INPOL = 2) nas mesmas condições indicadas anteriormente, obtivemos η a zero graus.

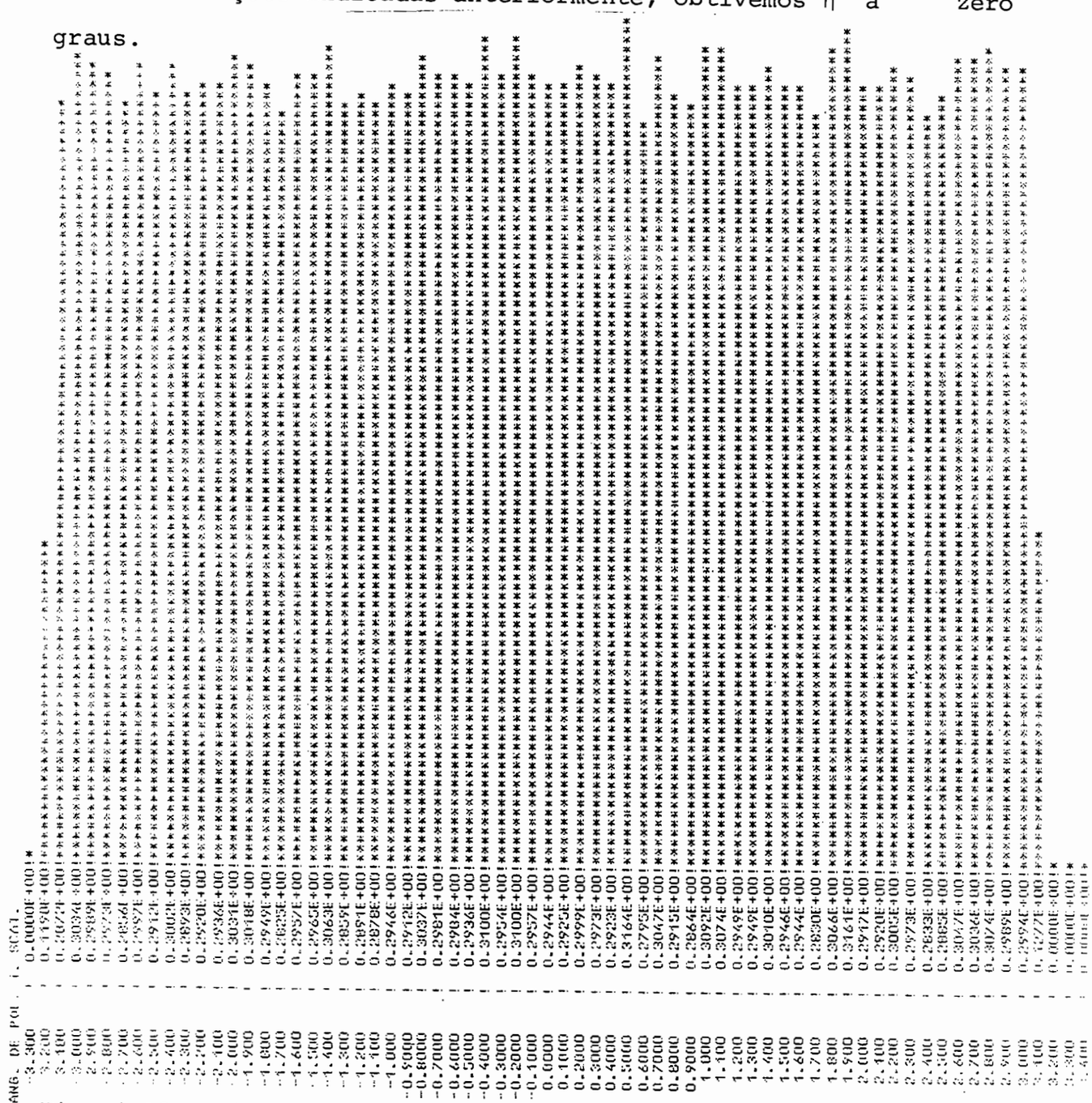


Fig. 4-12 -Distribuição ângulo η, para radiação incidente não polarizada (INPOL = 0), fóton incidente e espalhada no plano yz

Escala 1 peso dos eventos

Escala 2 ângulo de polarização

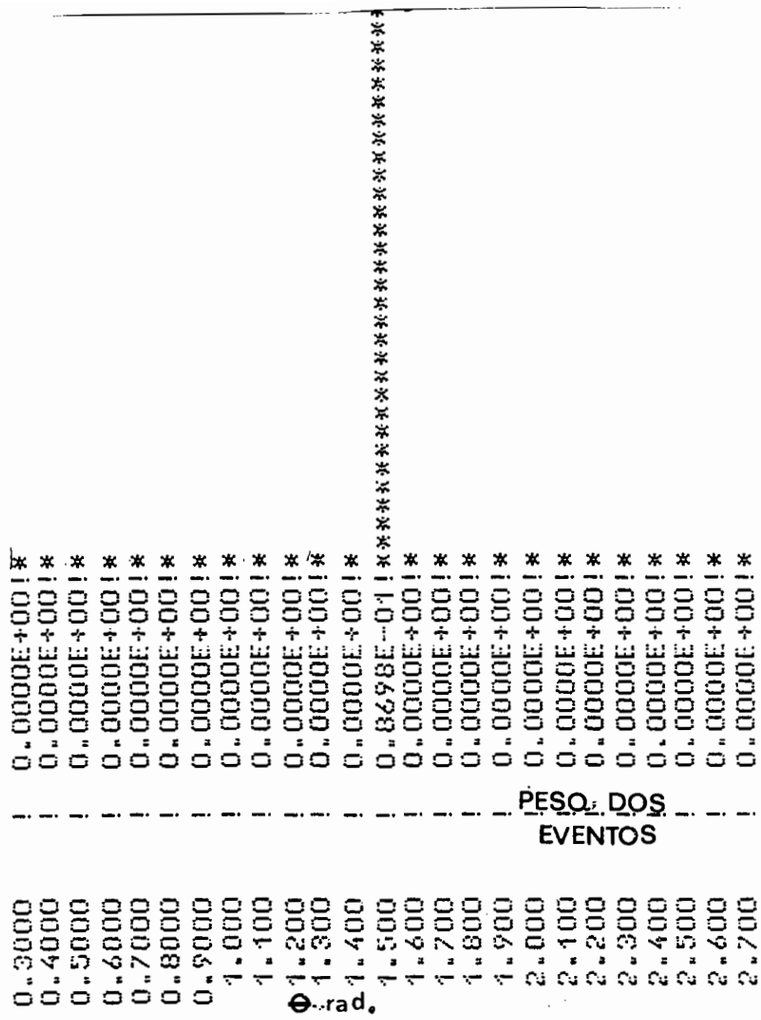


Fig. 4-13 - Distribuição ângulo η para radiação incidente polarizada (INPOL = 1) fóton incidente e espalhado no plano yz.

Agora usando dados específicos da experiência realizada a 30°, passamos a fazer outros testes do programa.

1) Supondo condições pontuais e o elétron orbital parado, portanto Klein-Nishima, verificamos que a distribuição da energia, apresenta ($\sigma_{1/2}$) correspondente ao valor dado para a resolução do detetor fig. (4-14(1); já para a distribuição angular, observamos uma distribuição pontual. Estes resultados estão de acordo com o que seria de se esperar.

2) Supondo condições pontuais, exceto para o detetor e o elétron parado verificamos que na distribuição para a energia, a largura a meia altura é:

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
663
INSTITUTO DE FÍSICA

($\sigma_{1/2} \simeq 7.83 \pm 47$) Kev fig. (4-15(2)). A distribuição angular é praticamente uniforme no entorno do ângulo de espalhamento.

3) Supondo condições pontuais exceto o colimador, próximo da fonte e o elétron parado verificamos que na distribuição para energia a largura a meia altura é:

($\sigma_{1/2} = 5.22 \pm .31$) Kev fig. (4-15(3)) e a distribuição angular é uma gaussiana.

4) Supondo condições reais e o elétron parado verificamos na distribuição de energia $\sigma_{1/2} = 8.44 \pm .55$ (Fig.4-14(4)). A distribuição angular é uma gaussiana.

Os resultados dos ítens (1-4) estão sintetizados na tabela (4-3).

TABELA 4-3 - Testes programa Monte Carlo para Pb^{82} a 30° e condições específicas da experiência - Radiação incidente 662 Kev, não polarizada-Espalhador 2 x 2 cm.

DP(cm)	DG(cm)	$\phi(^{o})$	$\theta(^{o})$	T(cm)	RD(cm)	RF(cm)	RC(cm)	p_z(cm)	$\sigma_{1/2}$ (Kev)	caso
96,7	107,7	90°	30°	.01	.01	.01	.03	0	3,78± .19	1
96,7	107,7	90°	30°	.01	1.4	.01	.03	0	7,83± .47	2
96,7	107,7	90°	30°	.01	0.1	.01	.2	0	5,22 ± .31	3
96,7	107,7	90°	30°	.2	1.4	.01	.2	0	8,44 ± .55	4

Onde DP, DG, σ, θ, T, RD, RF, RC, p_z, $\sigma_{1/2}$ já foram definidos na página

A distribuição de energia que está ligada à variação do ângulo de espalhamento através da fórmula de Compton (eq. 1-1) é uma função das variáveis (RC e RD), entretanto não conseguimos

afirmar, que $\sigma_{1/2}$ da distribuição mostrada nas fig. (4-14(4) quando RC e RD são finitos é obtido da pura convolução entre RC finito, RD puntiforme e vice-versa porque as dispersões de energia causadas por cada uma destas variáveis não são totalmente independentes.

Mais precisamente a expectativa de que $\sigma_{1/2}$ do caso (4) (σ_4) seja dado por: $\sigma_4 = \sqrt{\sigma_3^2 + \sigma_2^2}$ não se verifica, conforme se depreende dos resultados mostrados na tabela 4-3.

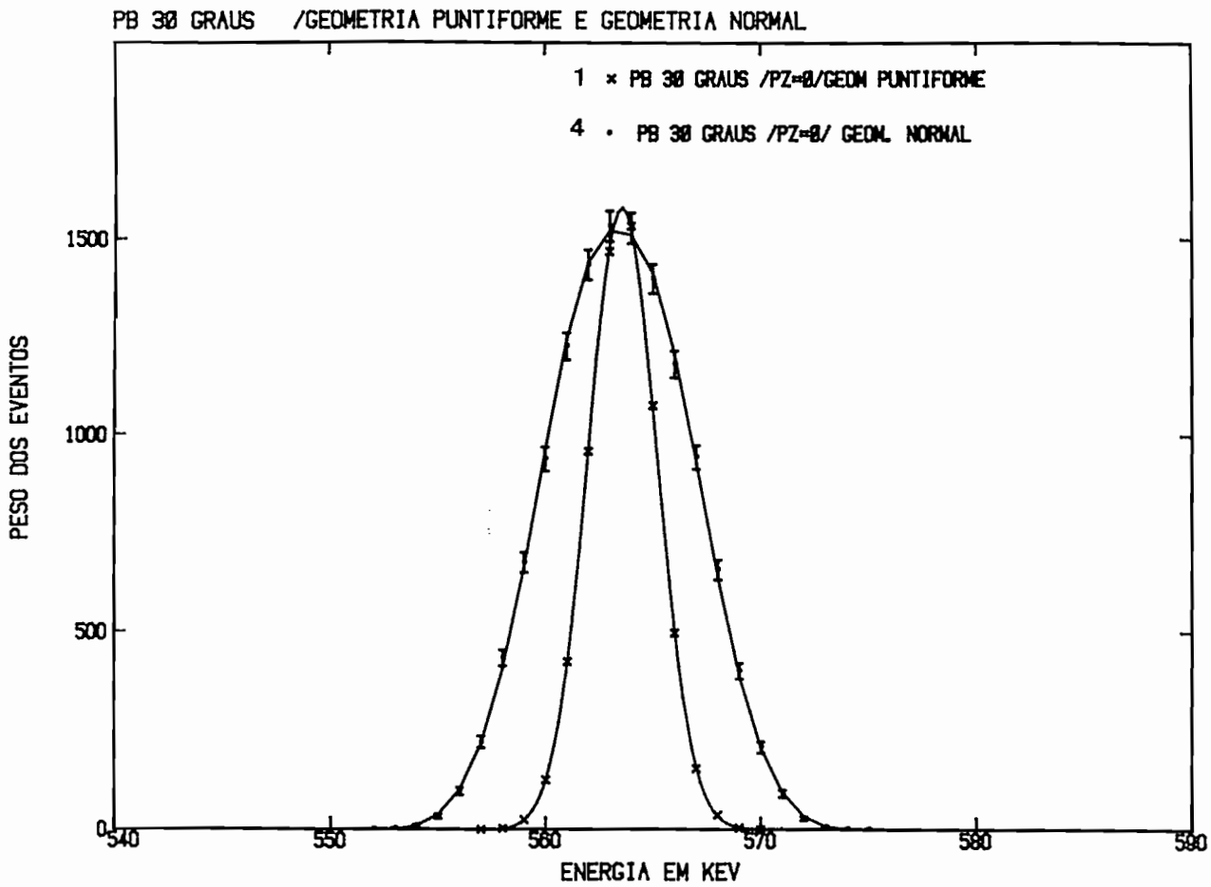


Fig. 4-14-1,4 - Distribuições de energia para p_z=0 e Pb^{82} a 30°
1) condições de geometria puntiforme
4) condições de geometria normal

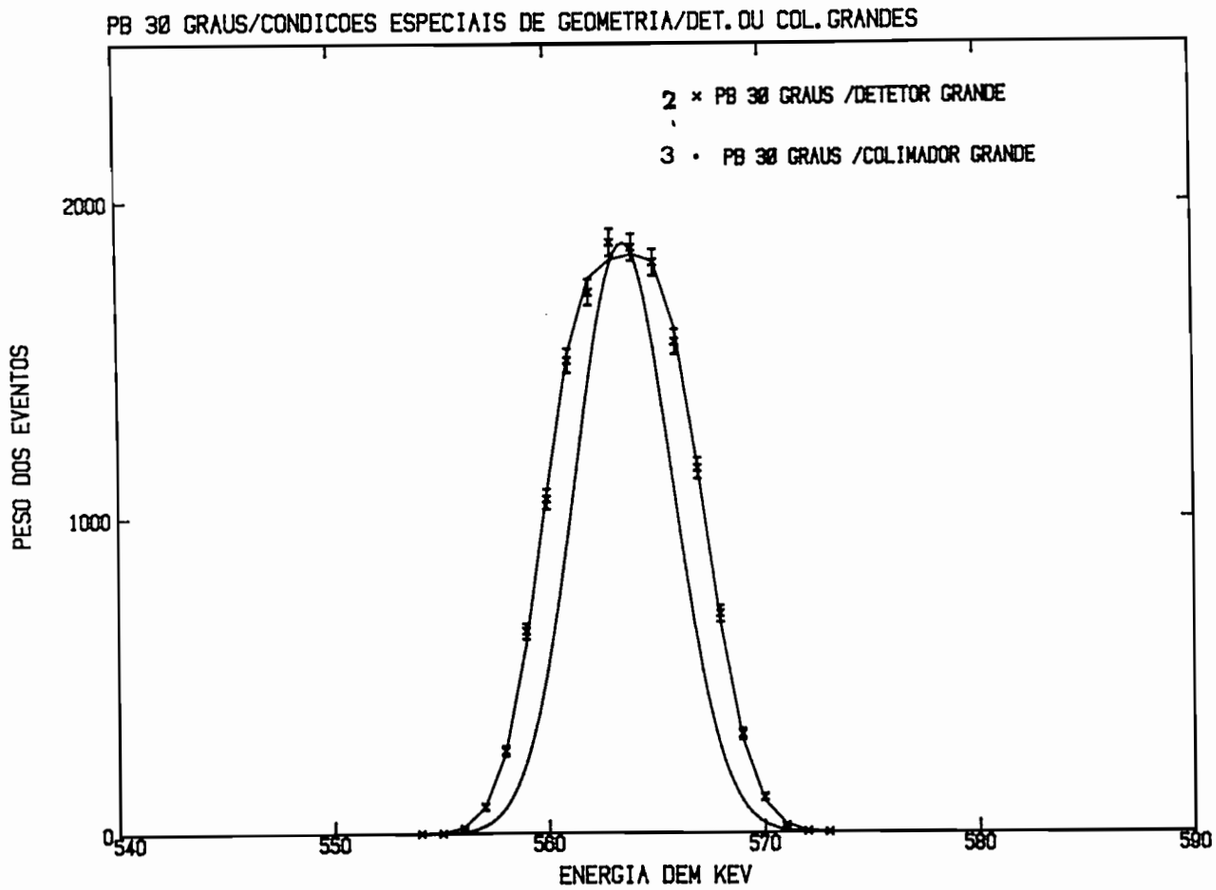


Fig. 4-15 -2,3) Distribuições de energia para $p_z = 0$ e Pb^{82} a 30°
2) condições pontuais menos detetor
3) condições pontuais menos colimador

2c) Obtenção de dados

Uma vez testada a parte geométrica do programa, passamos a estabelecer o tipo de perfil Compton, associado ao movimento dos elétrons, a ser usado.

Inicialmente fizemos cálculos para perfis Compton obtidos a partir de funções hidrogenóides (ver Apêndice A1). O tipo de espectro obtido para Pb^{82}, para um ângulo de espalhamento de 30° é mostrado na fig. 4-16.

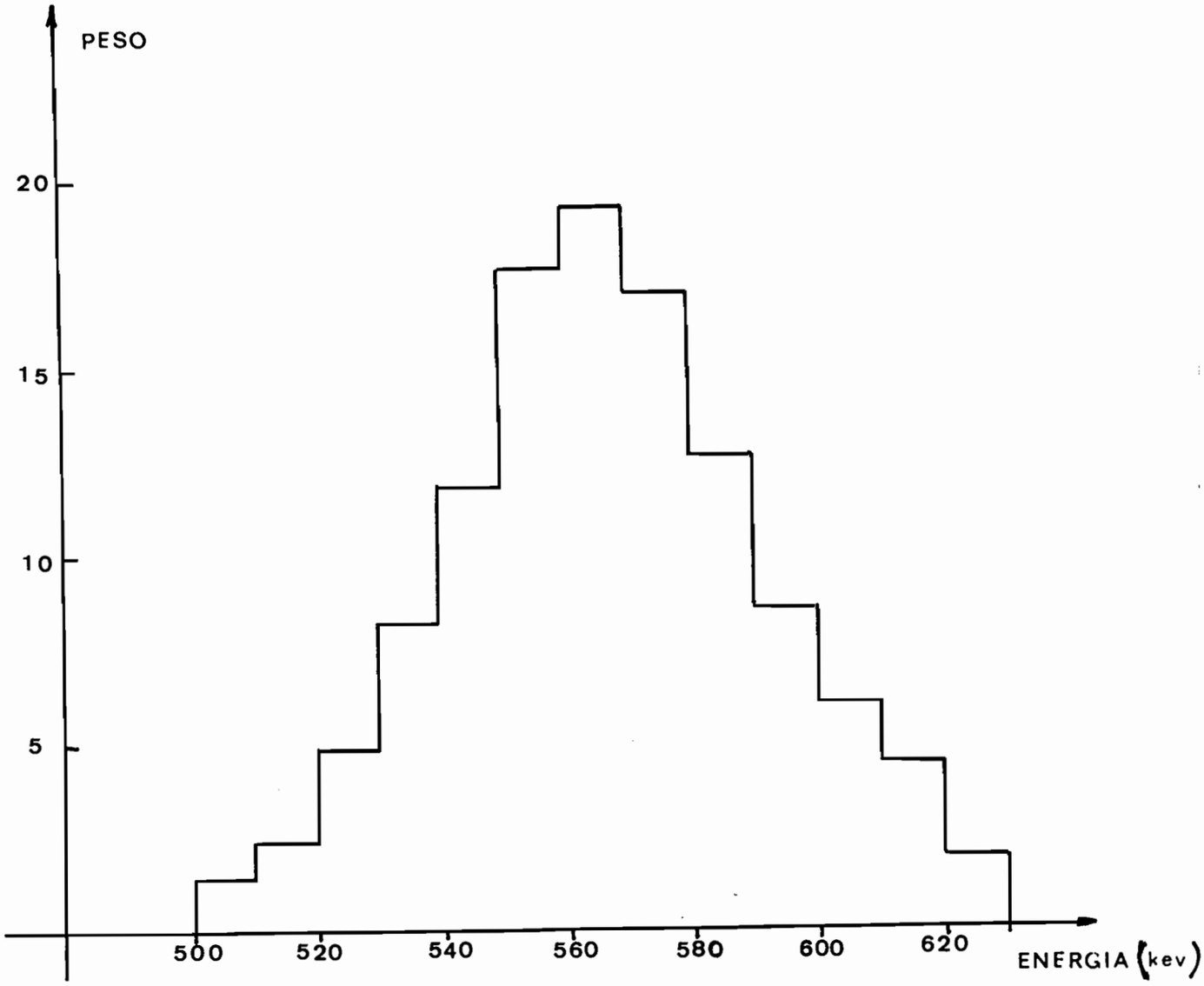


Fig. 4-16 - Perfil Compton para Pb^{82}, usando funções do tipo hidrogenóide

Como podemos observar este tipo de espectro, não reproduz o espectro experimental, Fig.3-7 Cap. III, se mostra muito distribuído em torno da energia correspondente à linha Compton a 30°, a largura a meia altura para distribuição hidrogenóide ($\sigma_{1/2}$= 56,0 $\pm$ 3.8) Kev e $\sigma_{1/2}$ experimental para o Pb^{82} a 30°, ($\sigma_{1/2}$ = 14,21 $\pm$ .95) Kev. Cálculos mais precisos de funções de onda eletrônicas, são obtidos por técnicas Hartree-Fock, sendo que resultados ainda melhores são obtidos pela descrição por meio das equações de Dirac (Hartree-Fock-relativístico).

Biggs, Mendelsohn [26,27] publicaram tabelas de perfil Compton baseadas em funções de onda Hartree-Fock relativísticas.

No nosso trabalho passamos a aplicar o perfil Compton no peso do fóton, como citado no Cap. I, através das tabelas de Biggs.

Para testar a sensibilidade da nossa técnica de medição do perfil Compton, calculamos histogramas do espectro de energia, considerando a presença de todas as camadas eletrônicas, bem como removendo as últimas camadas.

A interação do fóton se processa ao acaso com os elétrons orbitais. Entretanto, conforme a camada eletrônica, temos um peso para o evento dado pelo perfil Compton da camada. Conforme se pode ver há diferenças substanciais entre o perfil Compton de uma camada 1s e 6s. Esta diferença é bem visível nas figs. 4-1 e 4-17 para o perfil Compton do Pb camada 1s e 6s que mostram o peso do perfil Compton em função do momento do elétron.

A camada 1s, que representa o elétron próximo ao núcleo, indica que há grande probabilidade de se encontrar estes eletrons com grande momento linear.

Já no caso 6s, os elétrons tem praticamente momento linear próximo de zero.

A pergunta que fazemos é: até que ponto é possível detetar uma certa camada eletrônica quando o que medimos é o efeito de todas as camadas? Ou seja, não há dúvida que é possível distinguir a distribuição da camada 1s da 6s, porém quando estamos trabalhando com todos os 82 elétrons do Pb, qual será a alteração de forma do perfil Compton devido a remoção dos elétrons da camada 6s?

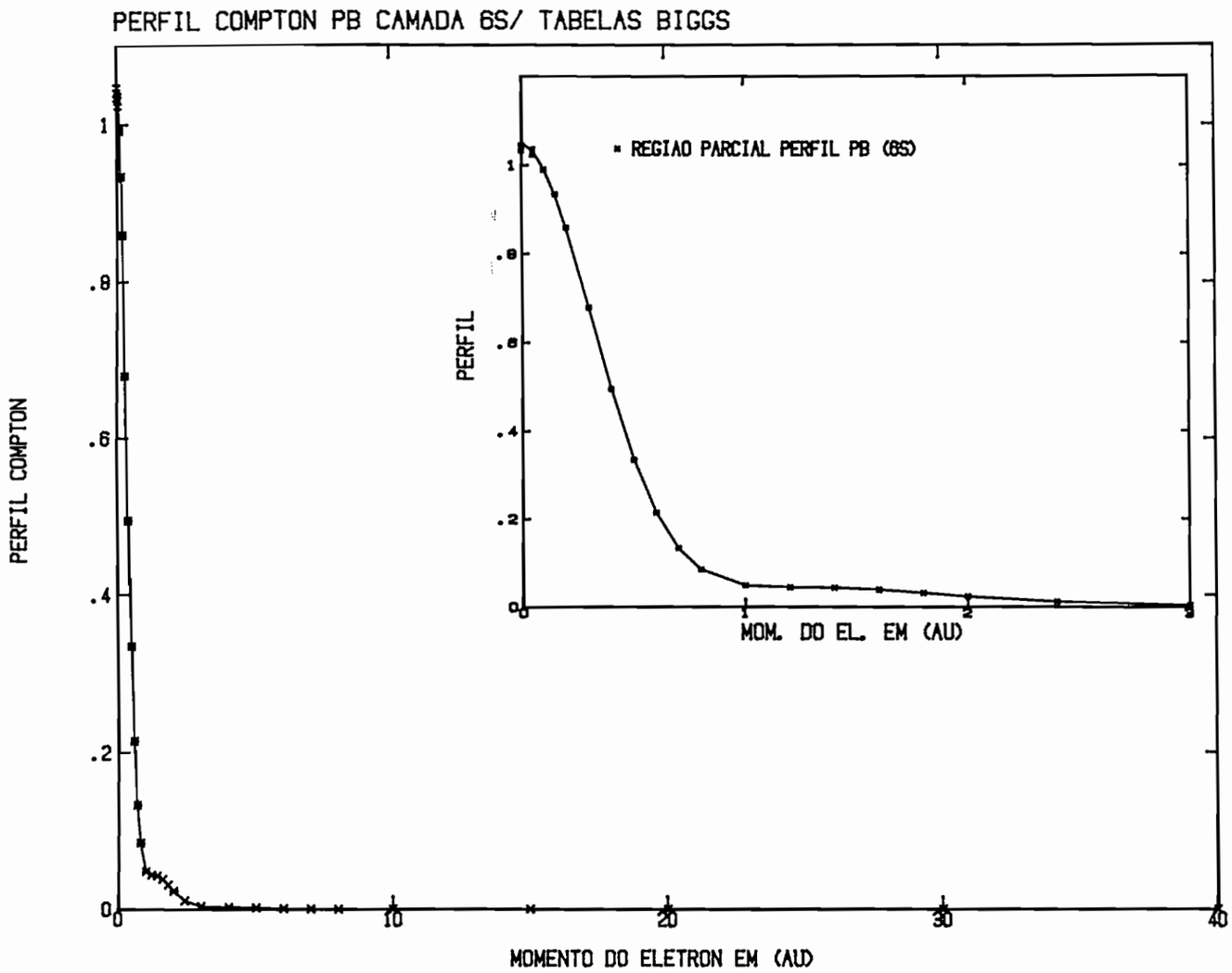


Fig. 4-17 -Perfil Compton do Pb^{82} para a camada 6s em função do momento do elétron

A resposta a esta pergunta está mostrada nas figuras (4-18 a,b) e fig. (4-19 a,b).

A fig. (4-18 a) se refere a distribuição obtida considerando todas as camadas para o Pb^{82}, enquanto a fig. (4-18 b) se refere ao Pb^{82}, ângulo de espalhamento 30°, tendo sido retiradas as camadas 6s, 6p. As larguras a meia altura são respectivamen-

te 13.27 ± Kev* e 14.81 ± .74 Kev*.

A segunda fig.(4-19 a,b) se refere ao Cu a 30°, com e sem camadas 4s, larguras respectivas (11.64 ± .58) Kev e (12.66 ± .60) Kev.

Concluímos que há uma pequena diferença, porém sua deteção exige medidas experimentais de alta precisão (< 5%).

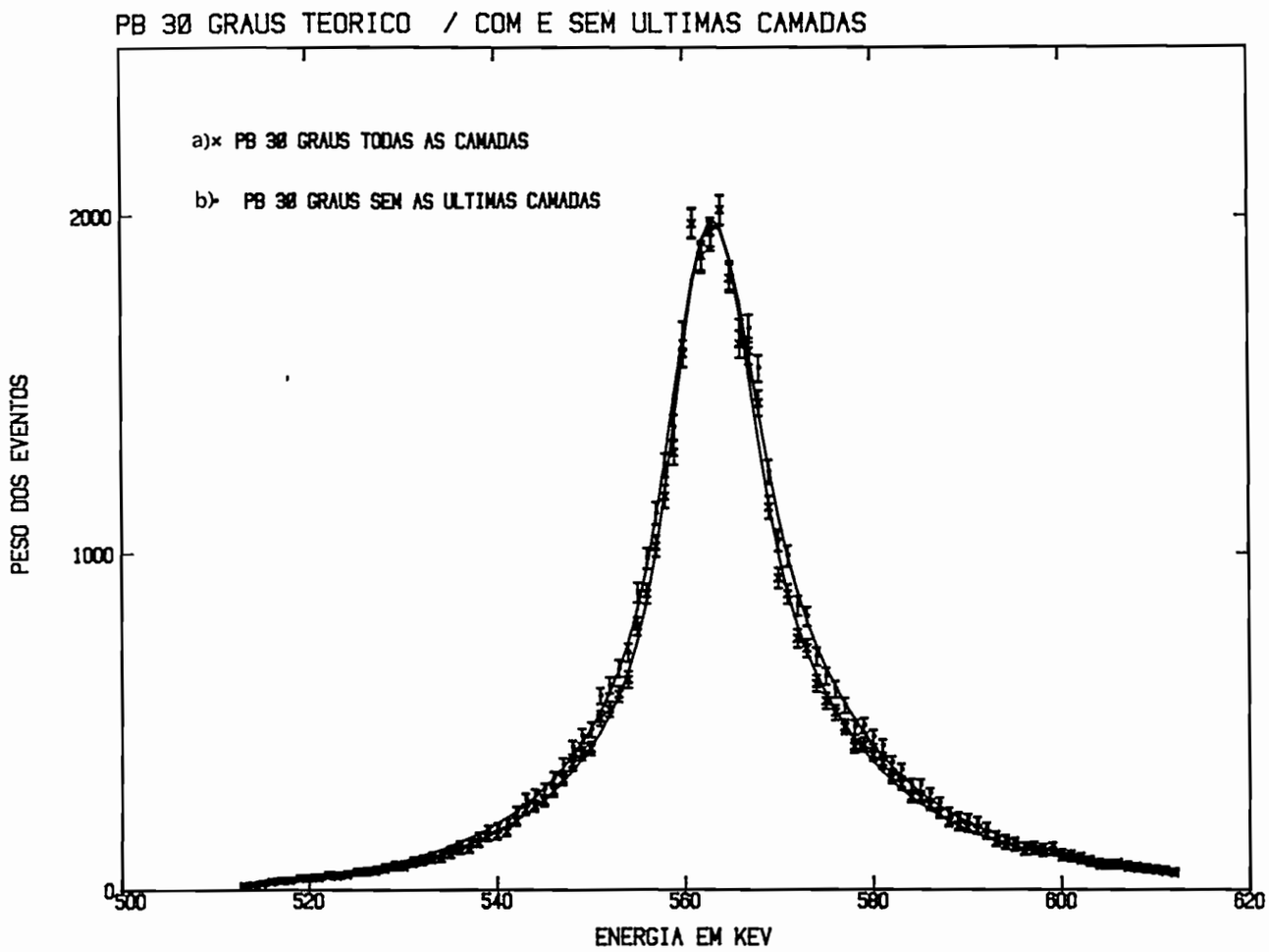


Fig. (4-18) a e b - Distribuição de energia para Pb^{82} 30 graus
a) para todas as camadas
b) sem últimas camadas 6s, 6p

* a incerteza associada aos $\sigma_{1/2}$ obtidos pela simulação teórica da experiência através do computador é explicada com detalhes na pág. 110.

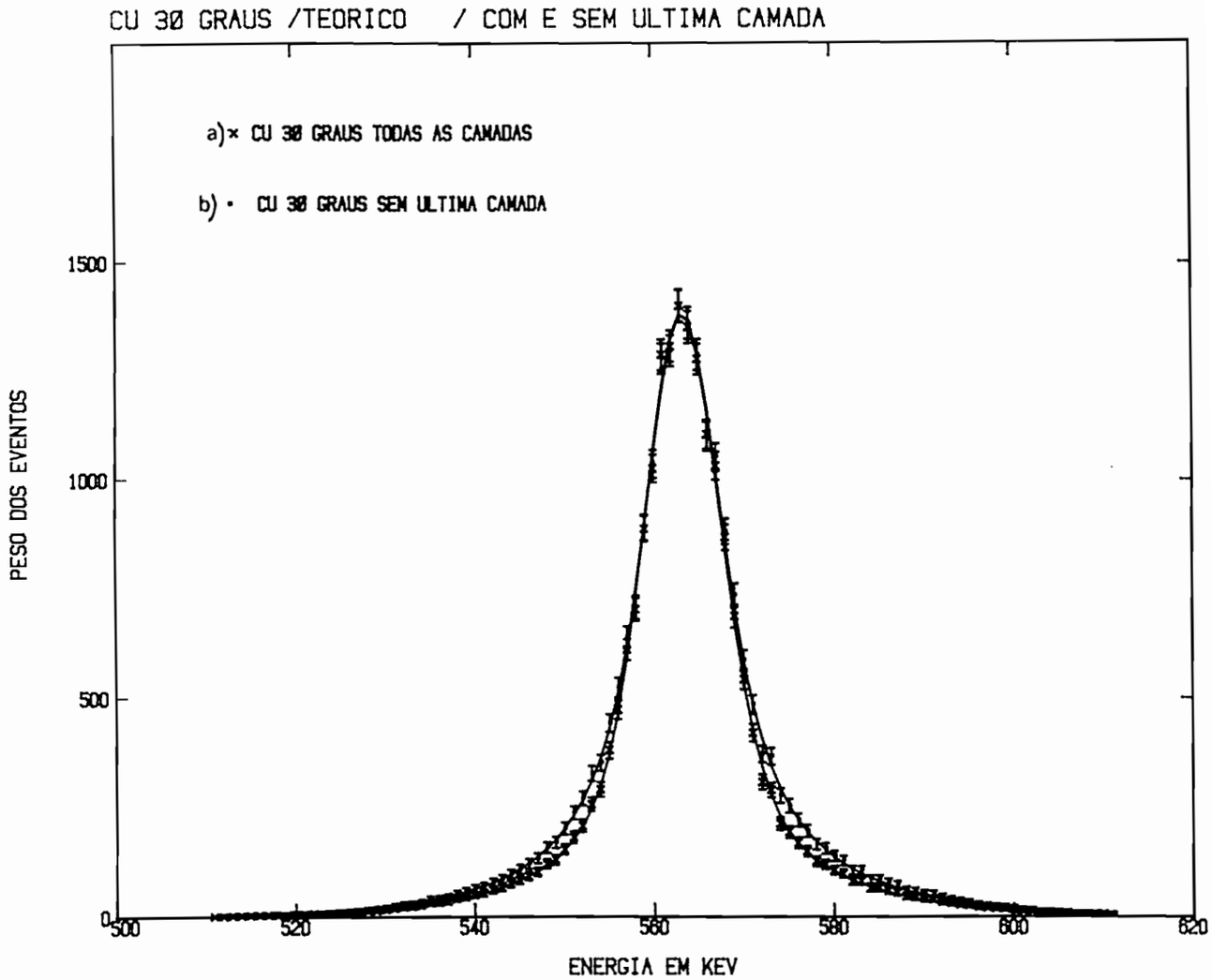


Fig. 4-19 (a e b) - Distribuição de energia para Cu^{29}, 30 graus, para todas as camadas e sem a última camada 4s. Mesmo número de eventos nas duas distribuições.

Conforme discutido na teoria devemos esperar que as distribuições obtidas aplicando os perfis Compton de Biggs [26,27] não devem reproduzir de modo satisfatório os dados experimentais. Passamos então a calcular o perfil Compton usando a correção dada por Ribberford para ângulos pequenos e o fator X de Ribberford eqs.[1-73, 1-90] . Uma comparação entre os dois tipos de distribuição para alguns elementos é vista na tabela (4-4) e fig. (4-20) e fig. (4-21) Cu^{29} e Ag^{47} a 30°. Tais cálculos não foram feitos para todos os casos (5 elementos a 3 ângulos de

espalhamento) por uma questão de tempo.

TABELA 4-4 - Comparação das distribuições obtidas sem e com correção Ribberford para alguns elementos, energia do fóton incidente 662 Kev.

Ângulo	Elemento	$(\sigma_{1/2})B$	$(\sigma_{1/2})R$	$(\sigma_{1/2})Exp.$
30°	Pb^{82}	13.27 ± .88	15.00 ± 1.04	14.21 ± .95
30°	Ag^{47}	10.9 ± .73	12.97 ± .89	12.28 ± .84
30°	Cu^{29}	11.45 ± .76	12.61 ± .87	12.49 ± .86

$(\sigma_{1/2})B$ largura a meia altura da distribuição obtida sem correção Ribberford
$(\sigma_{1/2})R$ largura a meia altura da distribuição obtida com correção Ribberford
$(\sigma_{1/2})Exp.$ largura a meia altura da distribuição experimental.

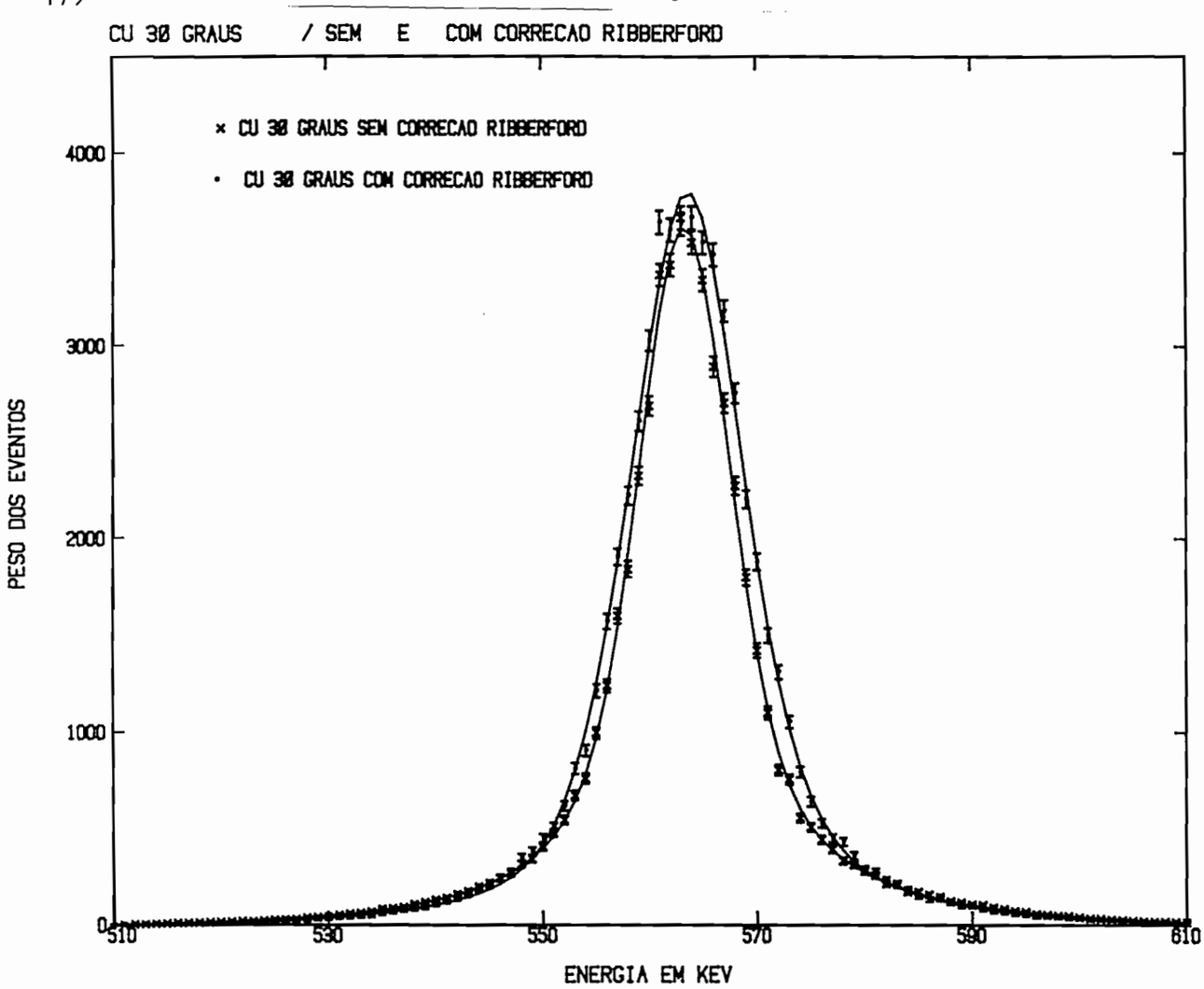


Fig. 4-20 - Distribuição de energia para o Cu^{29} a 30°, sem e com correção Ribberford para ângulos pequenos

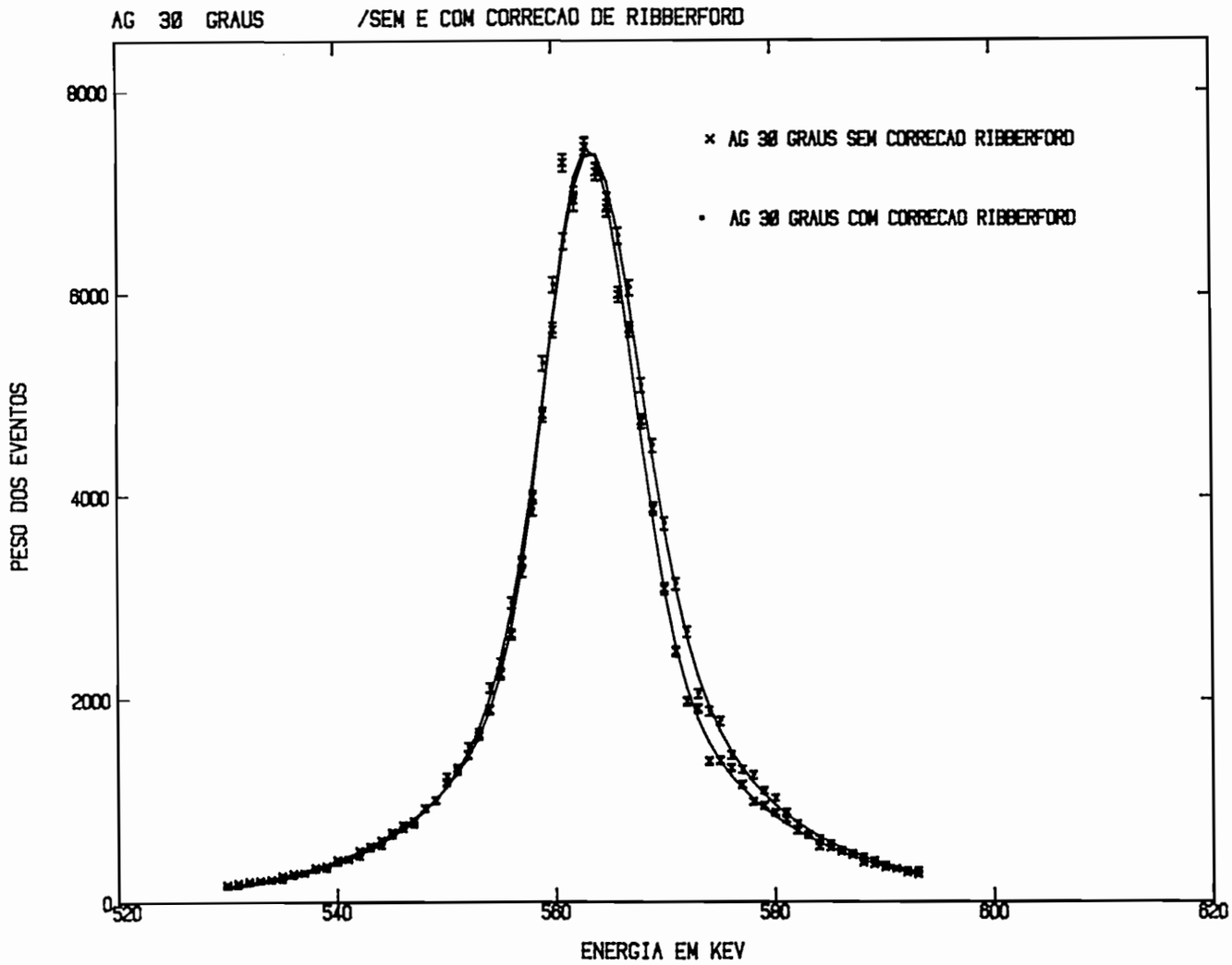


Fig. 4-21 - Distribuição de energia para a Ag^{47} a 30°, sem e com correção Ribberford para ângulos pequenos

A introdução da correção de Ribberford para ângulos pequenos, em geral tende a melhorar o ajuste teórico comparado com o experimental.

Os desvios na determinação do $\sigma_{1/2}$ das distribuições de perfil Compton, foram obtidos calculando várias vezes distribuições de perfil Compton, usando o programa de computação com números "randômicos" iniciais diferentes. A estes erros acrescentamos a incerteza devida à largura dos canais que formam o histograma. A rigor este processo deveria ser repetido inúmeras vezes e feita

depois uma distribuição de $\sigma_{1/2}$, e ali obtido o desvio mais exato. Isto representava porém um número excessivo de horas de computador, de forma que, optou-se por fazer apenas para alguns casos, e 2 ou 3 valores de $\sigma_{1/2}$ foram obtidos.

Para observar a variação da largura da distribuição de energias em função do ângulo de espalhamento obtivemos a tabela 4-5.

TABELA 4-5 - Variação da largura a meia altura da distribuição de energia obtida pela simulação de computador, para vários ângulos de espalhamento (valores colimador, detetor, etc. das condições experimentais para 10, 15 e 30°). Para Pb^{82}.

θ^{o}	$(\sigma_{1/2})$ (Kev)	$(\sigma_{1/2})$ (Kev)
	$p_z \neq 0$	$p_z = 0$
10,9°	8.10 ± .56	4.71 ± .32
15°	9.24 ± .61	5.10 ± .34
30°	15.00 ± 1.04	8.44 ± .56
60°	15.78 ± 1.02	6.31 ± .42
110°	10.00 ± .67	4.10 ± .25
169°	10,51 ± .63	3.80 ± .25

Isto mostra que há possivelmente uma posição de máxima distribuição energética dos fótons. Porém é preciso separar a parte da distribuição que é devida à geometria, da parte que se deve ao perfil Compton dos elétrons.

Para o mesmo ângulo de espalhamento ($\theta = 30^{o}$) e mesmas condições anteriores variamos o ângulo de inclinação do espalha-

dor (considerando elétrons em movimento e 2 casos para elétrons parados). Os resultados estão mostrados na tabela 4-6.

TABELA 4-6 -Variação da largura e meia altura, com o ângulo de inclinação do espalhador, da distribuição de energia dos fótons por programa Monte Carlo ($\theta = 30^o$); Pb^{82}

$\phi(^o)$	$(\sigma_{1/2})$ (Kev)	$(\sigma_{1/2})$ (Kev)
	$p_z \neq 0$	$p_z = 0$
7°	13.11 $\pm$ .87	-
15°	13.48 $\pm$ .90	6.89 + .46
45°	13.85 $\pm$ .92	-
60°	14.00 $\pm$ .93	-
90°	15.00 $\pm$ 1.04	8.44 $\pm$ .56

Sabe-se que existe uma relação geométrica do tipo: $\frac{\text{sen}\phi}{\text{sen}(\theta-\phi)} = \frac{DP}{DG}$ que permite o mínimo de abertura angular, portanto mínima dispersão em energia, impondo um valor de ϕ, para cada valor do ângulo de espalhamento θ. Os resultados da tabela 4-6, mostram que é pouco relevante a posição de ϕ para o nosso arranjo experimental, quando incluímos na simulação o perfil Compton dos elétrons. Isto entretanto não justifica a escolha de um ϕ qualquer. Nosso objetivo experimental é determinar a contribuição do perfil Compton na dispersão em energia o que exige minimizar a contribuição geométrica. Entretanto, considerando que a dispersão na largura total no espectro de energia é dada pela largura do perfil, mais a contribuição geométrica e que podemos escrever * $\sigma_T = \sqrt{\sigma_{PC}^2 + \sigma_G^2}$ (σ_{PC} = contr. do perfil Compton, σ_G = contri-

* Isto é decorrência da independência dos dois fenômenos

buição geométrica) obtemos σ_{PC} da tabela 4-6, para $\phi = 15^{o}$ e 90°, respectivamente 11.61 e 12.19, ou seja uma diferença pequena. Considerando as dificuldades experimentais da colocação de um ϕ determinado e devido à facilidade de reproduzir experimentalmente $\phi = 90^{o}$, optamos no nosso trabalho experimental por este valor.

As tabelas anteriores foram elaboradas essencialmente para o Pb^{82}; uma pergunta que precisamos procurar responder imediatamente diz respeito à possibilidade de se observar contribuição do perfil Compton no espectro de dispersão de energia para elementos mais leves.

A tabela 4-7 mostra que mesmo para o Al dotado de apenas 13 elétrons ainda se percebe uma contribuição do momento dos mesmos na distribuição de energia. Supomos as condições geométricas idênticas para todos os elementos usados já que os nossos espalhadores tinham a mesma área.

TABELA 4-7 - Largura a meia altura das distribuições de energia para diversos elementos, $\theta = 30^{o}$, mesma geometria para $p_z \neq 0$ e $p_z = 0$.

Elemento	$(\sigma_{1/2})$ (Kev)	$(\sigma_{1/2})$ (Kev)
	$p_z = 0$	$p_z = 0$
Pb^{82}	15.00 ± 1.0	8.44 + .56
W^{74}	15.38 ± 1.06	8.71 ± .58
Ag^{47}	12.97 ± .89	8.00 ± .53
Cu^{29}	12.61 ± .87	8.00 ± .53
Al^{13}	10.87 ± .75	8,52 ± .57

Na figura (4-22 a,b) temos as distribuições de energia para o Al^{13} a 30°, no caso de considerar os elétrons parados e em

movimento respectivamente. (Tabela 4-7). As figuras para os outros elementos são semelhantes.

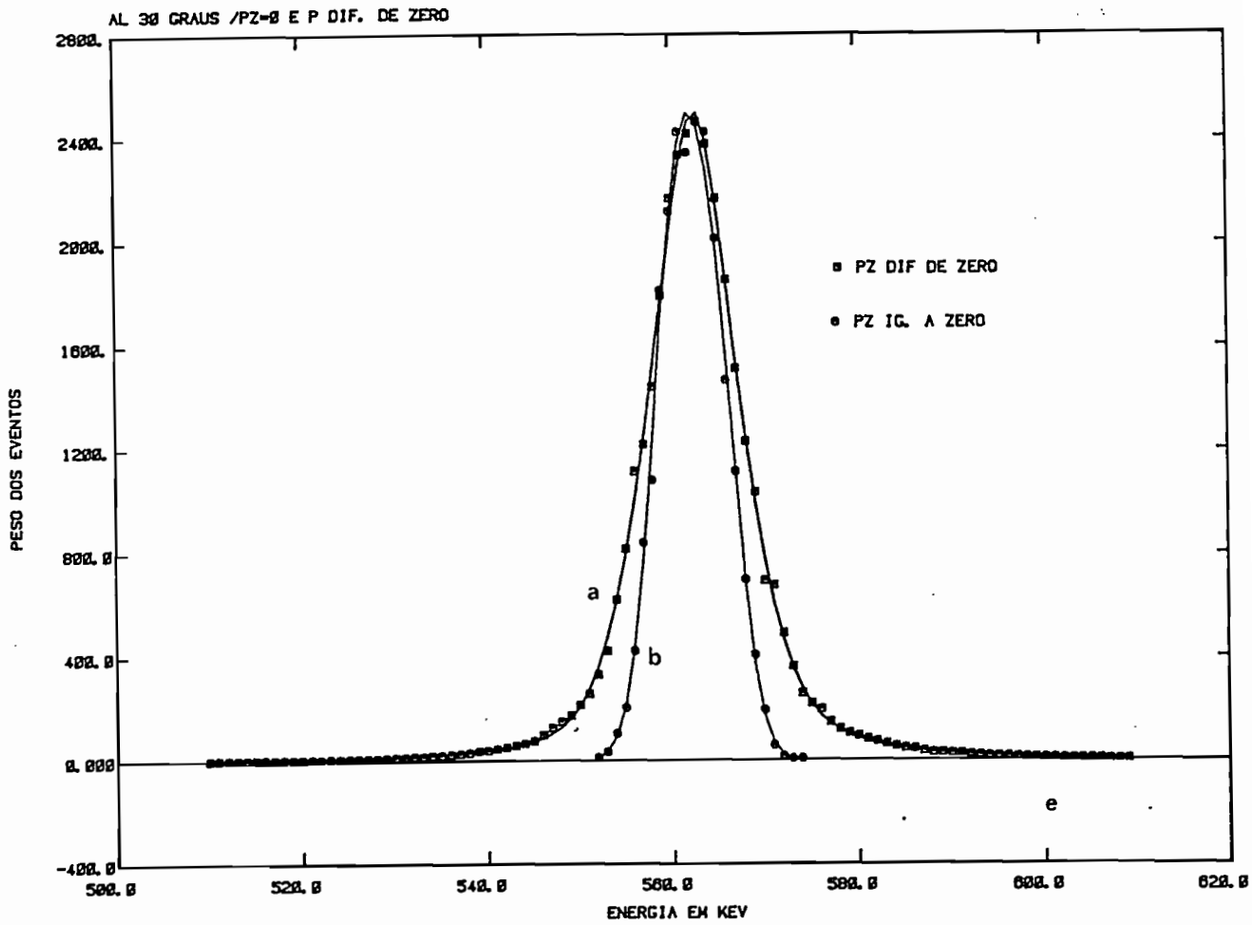


Fig. 4-22 a,b - Distribuição de energia para Al^{13}, 30°
a) para $p_z \neq 0$
b) para $p_z = 0$

2d) Tratamento do espalhamento duplo

Como está indicado no cap. 2, também estamos interessados em cálculos do perfil Compton para espalhamento duplo.

Os perfis duplos Compton se tornam mais finos, assim que o ângulo de espalhamento aumenta. Isto é esperado porque para um ângulo de espalhamento total θ, a gama dos ângulos em que o fóton pode ser defletido com respeito ao feixe incidente esten-

de-se de θ a $(360 - \theta)$.

Como a perda de energia depende do ângulo de deflexão do fóton, esta condição fornecerá perfis largos para ângulos baixos e perfis finos, assim que se aproxima de 180°. Isto pode ser observado nas fig. 4-23 e 4-24, em que foi simulado um perfil Compton, produzido apenas por espalhamento simples, e um produzido somente por espalhamento duplo para o Al a 412 Kev e $\theta = 169.7^{o}$, e para o Al a 30° e w_1 = 662 Kev.

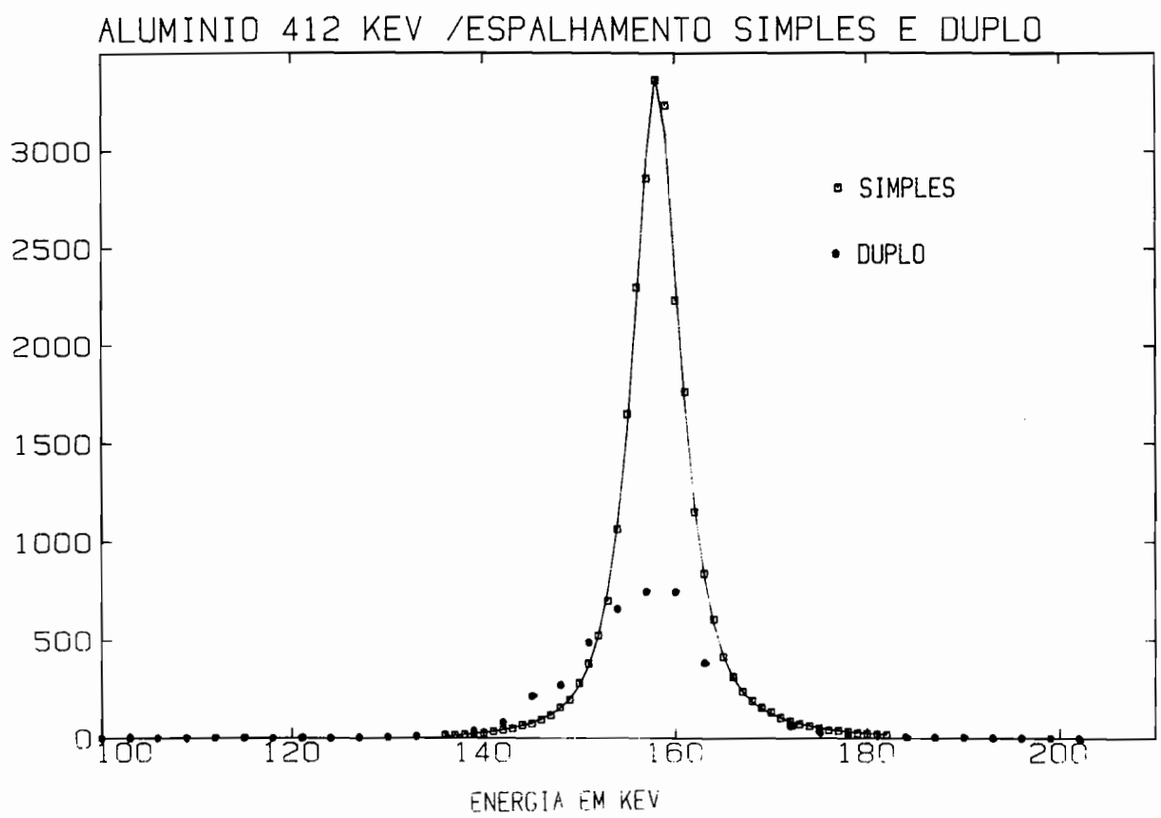


Fig. 4-23 a) Perfil Compton simples do Al para w_1 = 412 Kev $\theta = 169^{o}7$

b) Perfil Compton duplo do Al para w_1 = 412 Kev $\theta = 169^{o}7$

A simulação feita a 412 Kev foi realizada com a finalidade de comparar os resultados que obteríamos com o nosso programa e o proposto por Cóoper et al [6], que dá para a contribuição dos fótons que se espalharam mais de uma vez ≃ 20% da intensidade total para um alvo de espessura = .65 cm. Achamos no nosso programa o valor de 16.4%.

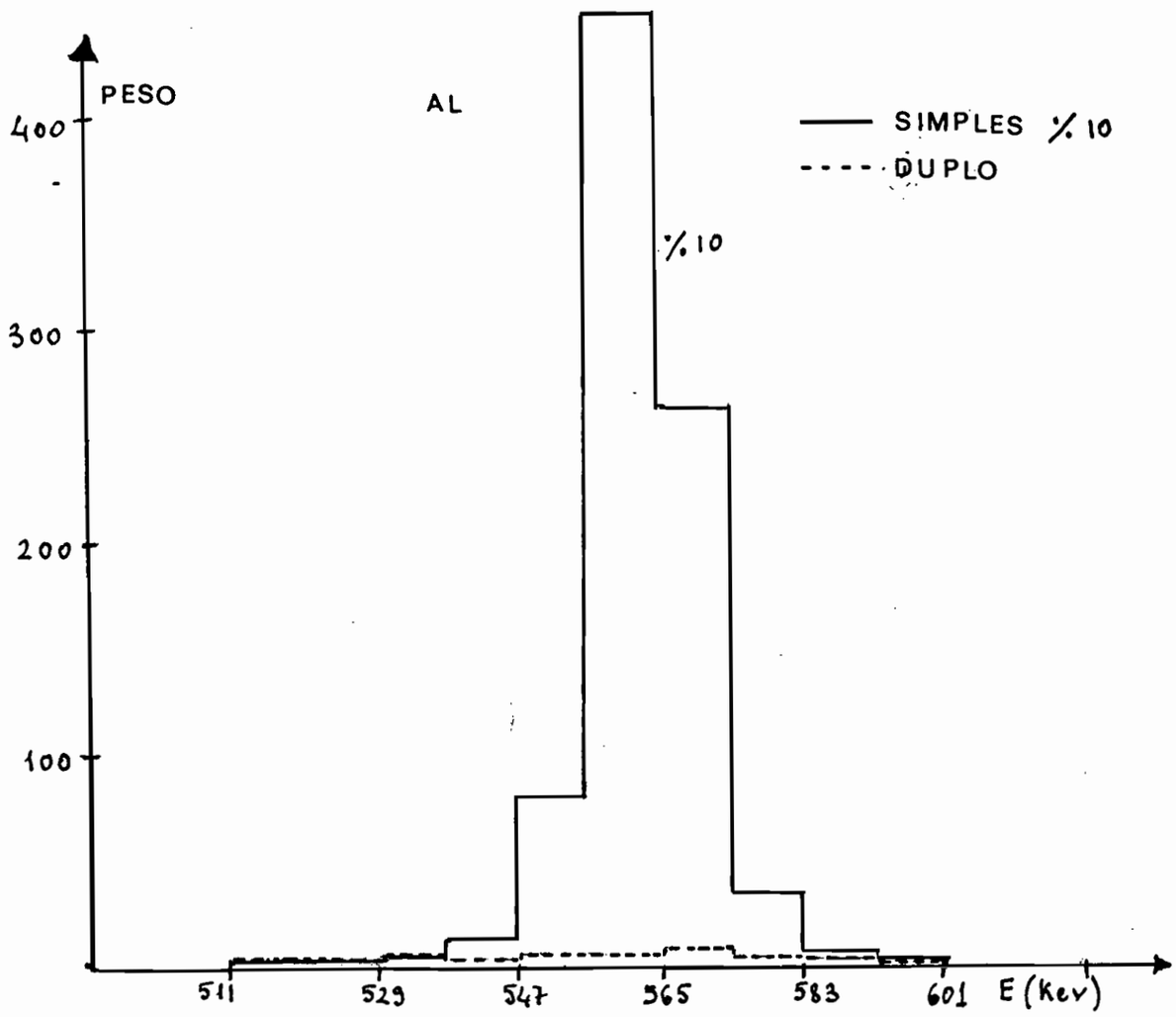


Fig. 4-24 a) Perfil Compton simples do Al para w_1 = 662 Kev $\theta = 30^o$

b) Perfil Compton duplo do Al para w_1 = 662 Kev $\theta = 30^o$ espessura 1.96 cm

No capítulo II já citamos, que para acelerar o programa, sorteamos as direções do feixe espalhado dentro de um cone con

veniente, que contém o espalhador.

Apenas para ilustração vejamos o seguinte cálculo.

A seção de choque de Klein-Nishima para fótons não polarizados é:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r_o^2}{2}\left(\frac{w_2}{w_1}\right)^2\left[\frac{w_1}{w_2} + \frac{w_2}{w_1} - \text{sen}^2\,\theta\right] \qquad (4\text{-}6)$$

Então para espalhamento simples a probabilidade dele ocorrer quando o fóton atravessa uma espessura t e atinge o detetor que ocupa um ângulo sólido $\text{sen}\theta\Delta\theta\Delta\phi$, será dado por:

$$d\sigma_1 = \left(\frac{r_o^2}{2}\right)\left(\frac{w_2}{w_1}\right)^2\left[\frac{w_1}{w_2} + \frac{w_2}{w_1} - \text{sen}^2\theta\right]\ \text{sen}\theta\Delta\theta\Delta\phi\ t \qquad (4\text{-}7)$$

Já para o espalhamento duplo teremos que considerar que há um 1º espalhamento $d\sigma_1$ para um ângulo qualquer θ_1. Definido o ângulo θ_1 teremos vários valores de ϕ_1 que vão definir qual a região do anel onde se dará o 2º espalhamento. Agora o fóton deverá sofrer um espalhamento num ângulo γ tal que a combinação de θ_1 e γ resulte numa deflexão total θ (supondo as distâncias muito grandes comparadas às dimensões do alvo e do detetor podemos supor que o ângulo de espalhamento total será sempre θ). O ângulo γ é facilmente calculado por

$$\cos\gamma = \cos\theta_1\cos\theta + \text{sen}\,\theta_1\,\text{sen}\,\theta\,\cos(\phi_1 - \phi)$$

onde $\phi = 90^o$ (estamos supondo detetor pequeno).

Com o conhecimento do ângulo γ podemos avaliar a nova energia do fóton espalhado no 2º espalhamento, bem como calcular a probabilidade

$$d\sigma_2 = \left(\frac{r_o}{2}\right)\left(\frac{w_3}{w_2}\right)\left(\frac{w_3}{w_2} + \frac{w_2}{w_3} - \text{sen}^2\,\gamma\right)\text{sen}\,\gamma\Delta\gamma\Delta\phi \quad t' \qquad (4\text{-}8)$$

onde sen $\gamma\Delta\gamma\Delta\phi$ é o ângulo sólido do detetor e t' é a espessura que o fóton atravessa após o 1º espalhamento.

Finalmente podemos calcular a probabilidade do duplo espalhamento, dada por

$$d\sigma_{12} = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{r_o}{2}^2\right)\left(\frac{w_{2i}}{w_1}\right)^2\left(\frac{w_{2i}}{w_1} + \frac{w_1}{w_{2i}} - \text{sen}^2\theta_{1i}\right)\text{sen}\,\theta_{1i}\;\Delta\theta\Delta\,\phi_1\;t_1 \times$$

$$\times\sum_{j=1}^{m}\left(\frac{r_o}{2}^2\right)\left(\frac{w_{3j}}{w_{2i}}\right)^2\left(\frac{w_{3j}}{w_{2i}}\;\frac{w_{2i}}{w_{3j}} - \text{sen}^2\,\gamma_j\right)\text{sen}\gamma_j\Delta\gamma\Delta\phi \quad t'_j \qquad (4\text{-}9)$$

Este tipo de avaliação foi feita usando um programa simples de computação, onde se teve o cuidado de procurar melhorar a precisão dividindo a espessura da amostra em várias fatias, o que significa ampliar a fórmula acima, induzindo uma nova somatória ou seja

$$d\sigma_{12}^{novo} = \sum_k \left[e^{-u(k-1)t} - e^{-u(k)t} \right] d\sigma_{12}^{antigo} \qquad (4\text{-}10)$$

e onde agora devemos definir

t_i como a largura da fatia

enquanto

t'_j é a distância, disponível para viagem do fóton espalhado uma primeira vez, dentro da amostra e que depende essencialmente da espessura e ângulo θ_1.

Este tipo de cálculo bastante mais simples e explícito confirma os resultados obtidos pelo modelo matemático desenvolvido e que vale mesmo quando as distâncias detetor alvo não são grandes comparadas com as dimensões destes elementos.

Para perfil Compton do Al simples e duplo usado no nosso trabalho, no caso de 30°, observamos que a contribuição do duplo, não supera 1%, além de estar espalhada num grande espectro de ângulos (e energia).

Para o Pb a 30°, também foram feitas simulações para o duplo e pudemos então verificar pela fig. 4-25 que a contribuição é inferior a 2%. Por estes resultados vemos que a contribuição do espalhamento duplo está dentro do erro experimental para a maioria dos pontos do espectro, apenas foram feitas correções para o lado de baixa energia no espectro, subtraindo se o espectro de duplo espalhamento previsto pelo modelo matemático. Esta correção é de pequena monta e não influi no ajuste do perfil Compton exceto pela alteração da reta que determina a linha de base do espectro.

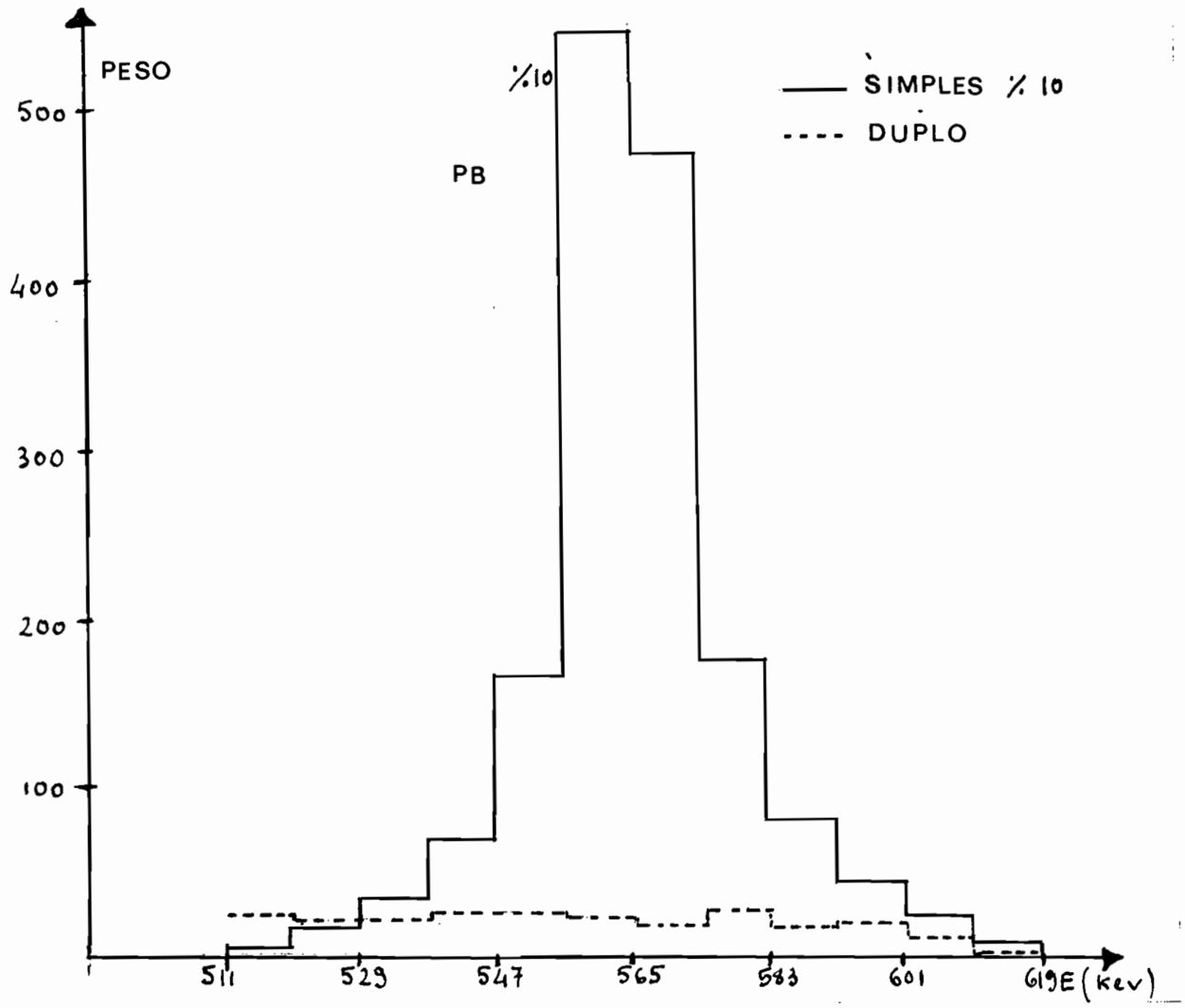


Fig. 4-25 - Perfil simples e duplo para Pb^{82} a 30° energia incidente 662 Kev.

2e) Comparação de resultados experimentais e teóricos

A comparação é feita ajustando com funções convenientes, primeiro a parte experimental e depois usando as mesmas funções e tentando ajustar os dados obtidos pela simulação Monte Carlo.

Entendemos que se os X^2 de ambos ajustes são razoáveis, então,podemos supor que a curva teórica, reproduz a curva experimental.

Os dados obtidos para os diversos elementos a vários ângulos são mostrados na tabela 4-8. Alguns dos ajustes feitos são mostrados nas figuras 4-26 até 4-37.

Observando os valores de X^2 notamos valores insatisfatórios apenas para o Al^{13}, a 30° (X^2 = 1.96) e W^{74} a 15° (X^2=1.880). Como para os outros ângulos o resultado é bom, não nos permite concluir nenhuma sistemática de erro ligada a elementos leves ou pesados.

Podemos atribuir o erro, a imprecisões experimentais, principalmente ligadas à instabilidade de ganho do sistema devido a grande extensão temporal das medidas. Observamos deslocamento no espectro do multicanal, durante a obtenção da calibração em energia de amplitude máxima de (10) canais portanto 3 (Kev).

Sabemos que para 10° e 15°, praticamente não há contribuição da camada K, para os elementos pesados (Pb,W). Esta vantagem, que em princípio permitiria observar melhor o perfil dos elementos das camadas mais externas, não é muito útil do ponto de vista prático pois a inspeção do perfil do pico Compton, exige grande precisão instrumental, já que a geometria nestas condições contribui com ≈ 20% da largura absoluta observada na tabela (4-5), enquanto que para ângulos para trás a contribuição é de ≈ 10%.

Então temos que ângulo baixo elimina a camada K, porém a expectativa de ver melhor a influência das camadas externas não é atendida porque a contribuição de uma camada de elétrons no total já é pequena conforme mostrou-se na fig. 4-18 e 4-19 (apesar destes dados serem para camadas externas, podemos esperar o mesmo efeito para a remoção de uma camada interna).

2f) Simulação dos efeitos de polarização

A polarização dos fótons espalhados fornece uma informa

TABELA 4-8 - Comparação dos resultados experimentais com teóricos para os 3 ângulos escolhidos (30.1^{o}, $15,0^{o}$, 10.9^{o}) para os 5 elementos já citados

ÂNGULO	ELEMENTO	ESPESSURA	$\sigma_{(1/2)}$ Kev Experimental	χ^2	$\sigma_{(1/2)}$ Kev Teórico	χ^2
	Pb^{82}	simples	14.21 ± .95	.952	15.00 ± 1.04	1.240
		duplo	14.86 ± .89	1.13	-	-
$30^{o}1$	W^{74}	simples	13.62 ± .81	1.093	15.38 ± 1.06	1.240
	Ag^{47}	simples	12.28 ± .73	.9768	12.97 ± .89	1.132
		dupla	12.13 ± .72	.9870	-	-
	Cu^{29}	simples	12.42 ± .74	1.149	12.61 ± .87	1.399
	Al^{13}	simples	10.53 ± .63	1.47	10.87 ± .75	1.960
15°	Pb^{82}	simples	8.58 ± .51	1.002	9.24 ± -64	1.480
		duplo	9.24 ± .55	1.423	-	-
	W^{74}	simples	9.38 ± .56	1.598	9.74 ± .67	1.880
	Ag^{47}	simples	7.38 ± .44	.973	7.52 ± .52	.930
		dupla	-	-	-	-
	Cu^{29}	simples	7.58 ± .45	1.558	8.08 ± .55	1.487
	Al^{13}	simples	6.40 ± .38	.978	7.06 ± .49	1.01
$10,9^{o}$	Pb^{82}	simples	9.00 ± .54	1.110	8.10 ± .56	1.180
		duplo	8.00 ± .48	1.19	-	-
	W^{74}	simples	8.52 ± .51	1.044	7.87 ± .54	1.19
	Ag^{47}	simples	7.55 ± .45	1.00	7.00 ± .48	.930
		duplo	6.41 ± .41	1.02	-	-
	Cu^{29}	simples	7.29 ± .43	1.257	6.60 ± .46	1.520
	Al^{13}	simples	6.54 ± .39	1.346	6.53 ± .45	.824

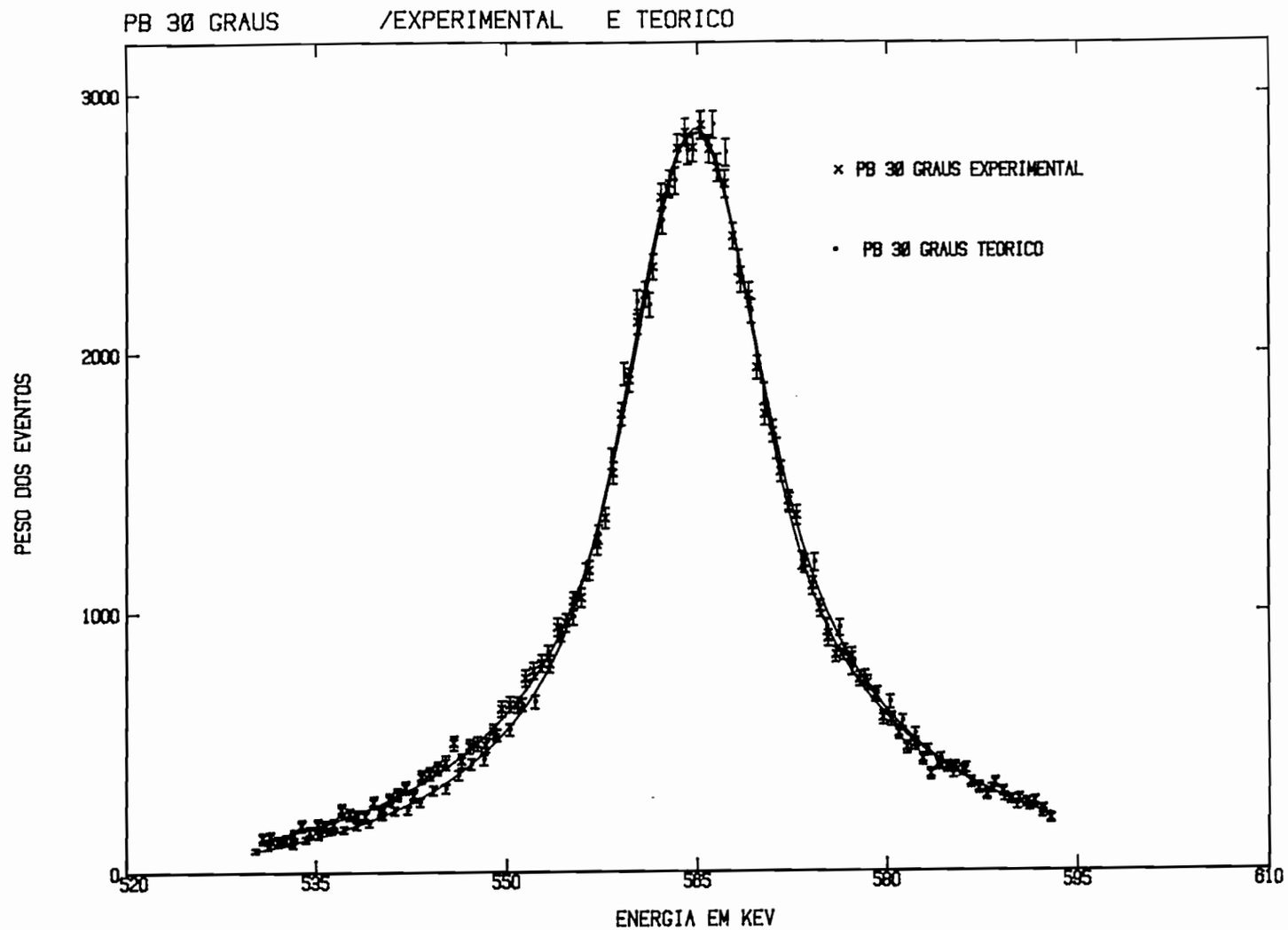


Fig. 4-26 -Distribuição de energia, Pb 30°, experimental e teórico

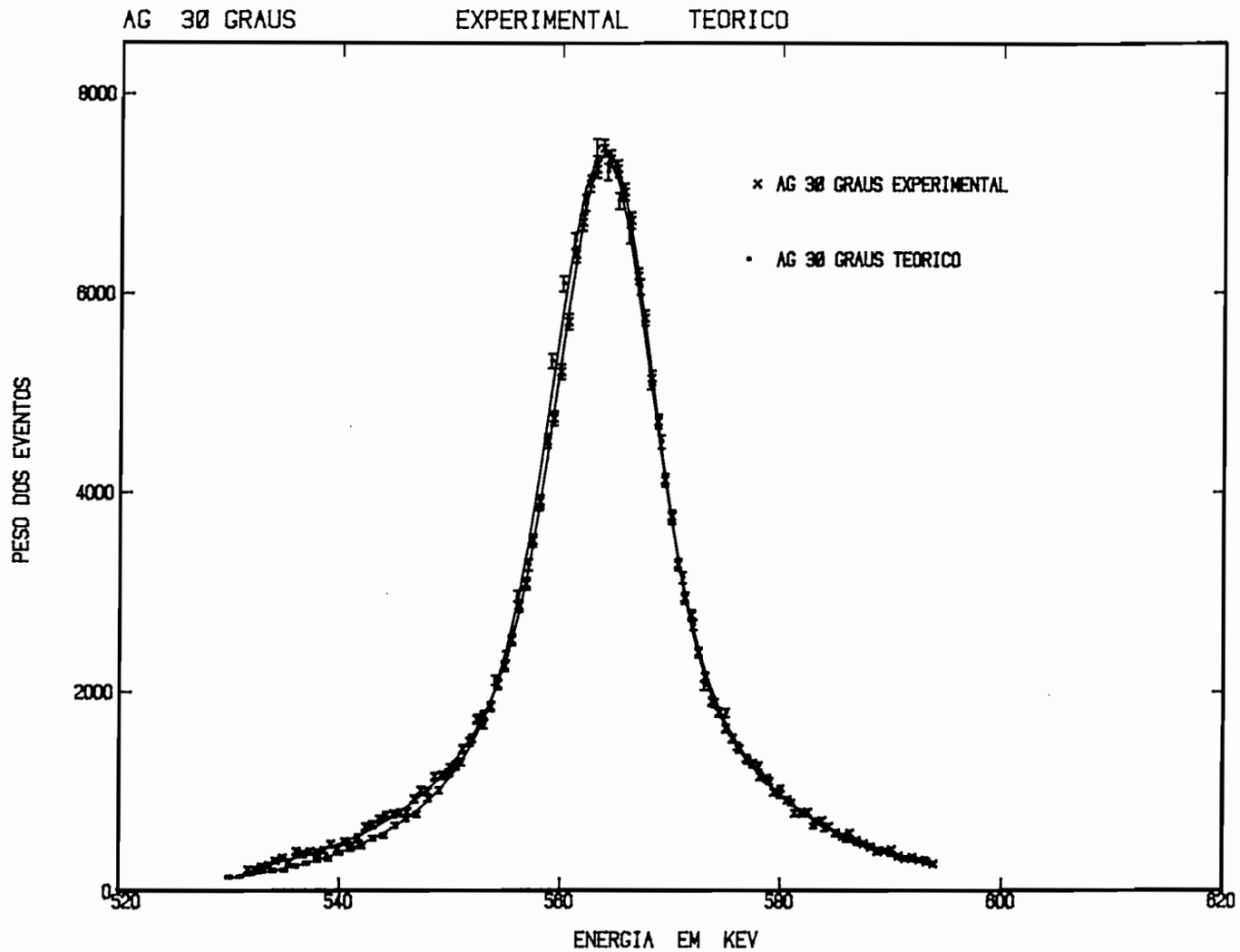


Fig. 4-27 - Distribuição de energia Ag 30°, experimental e teórico

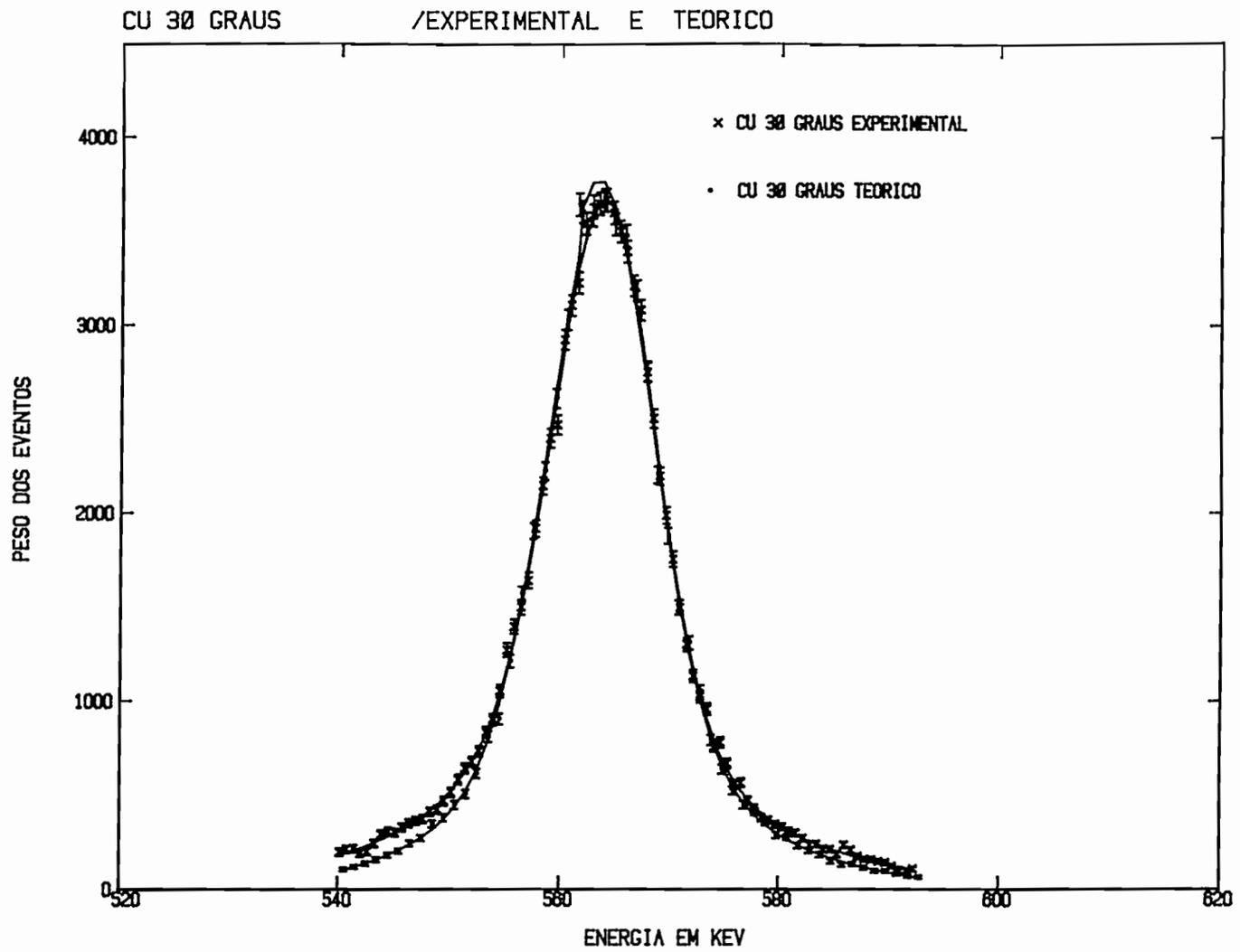


Fig. 4-28 - Distribuição de energia, Cu 30° experimental e teórico

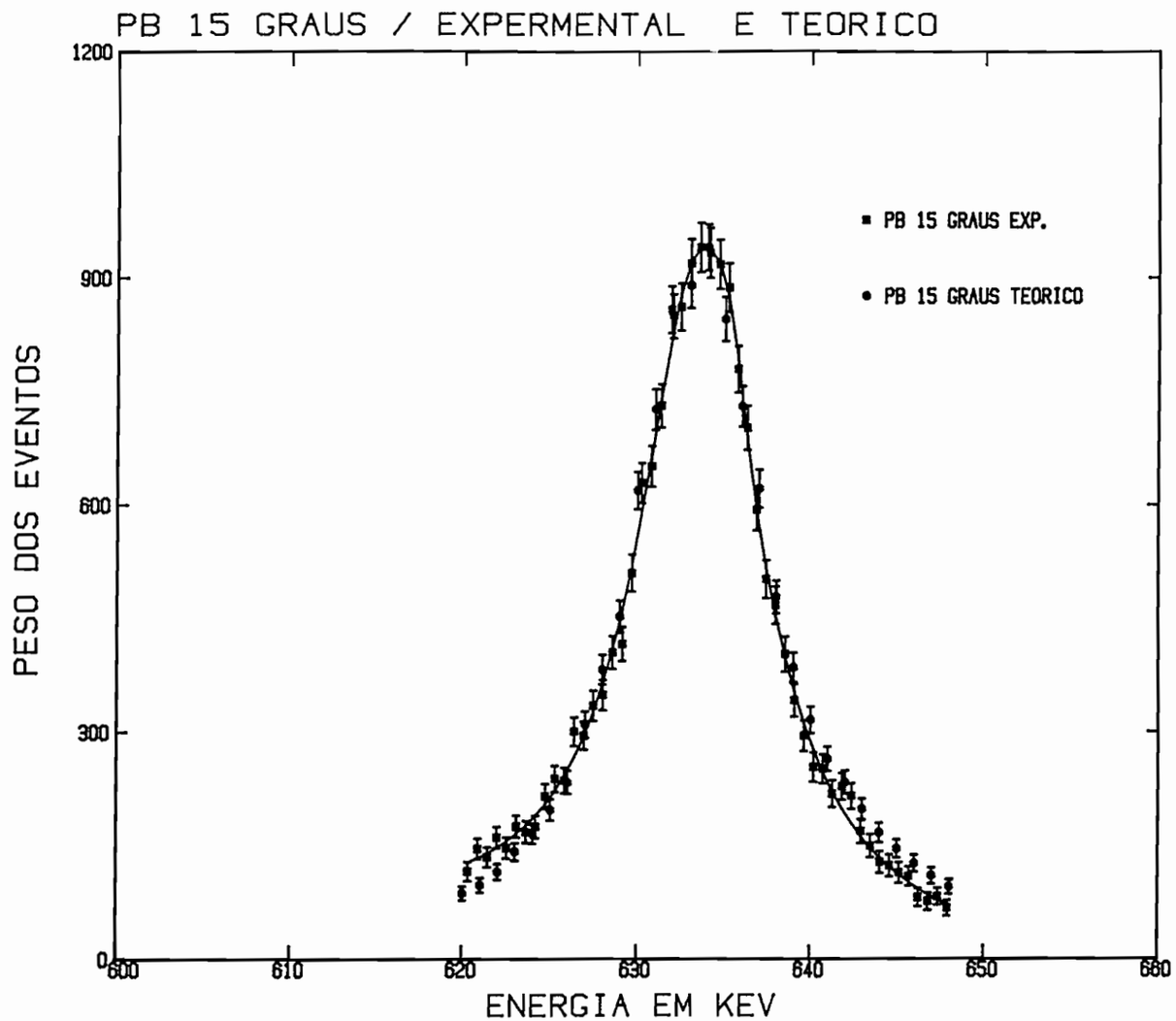


Fig. 4-29 - Distribuição de energia Pb 15°, experimental e teórico

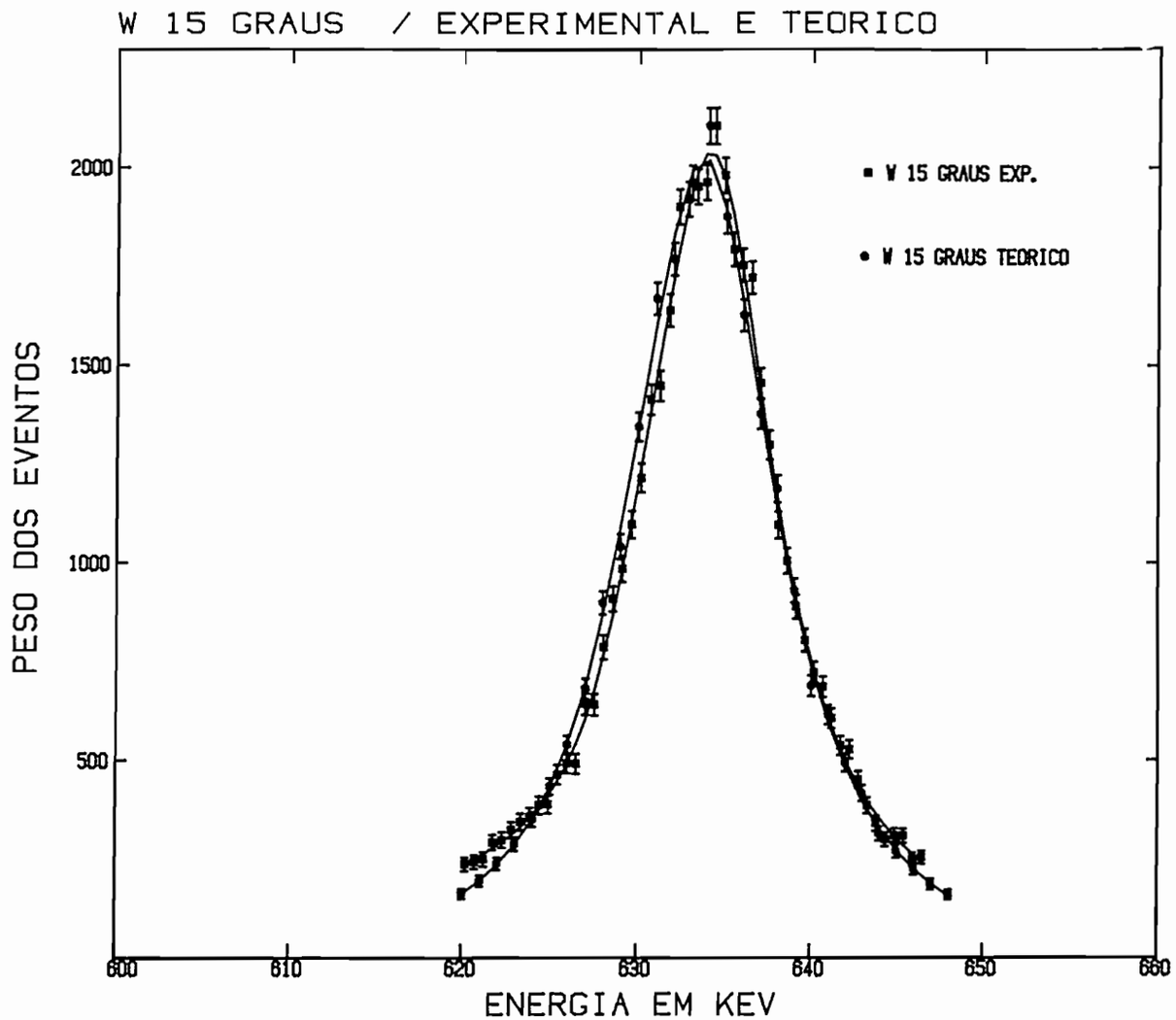


Fig. 4-30 - Distribuição de energia W 15°, experimental e teórico

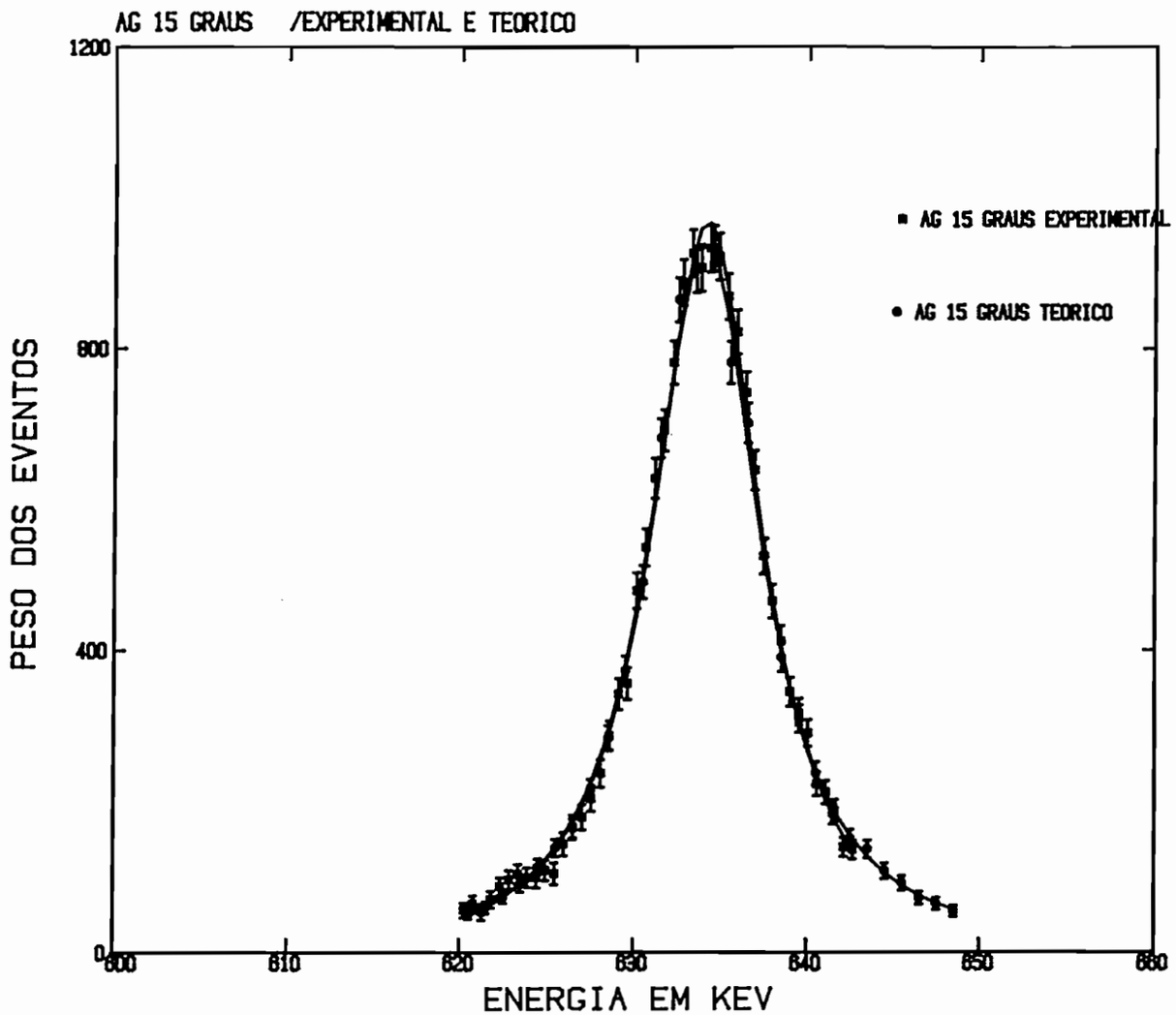


Fig. 4-31 - Distribuição de energia Ag 15°, experimental e teórico

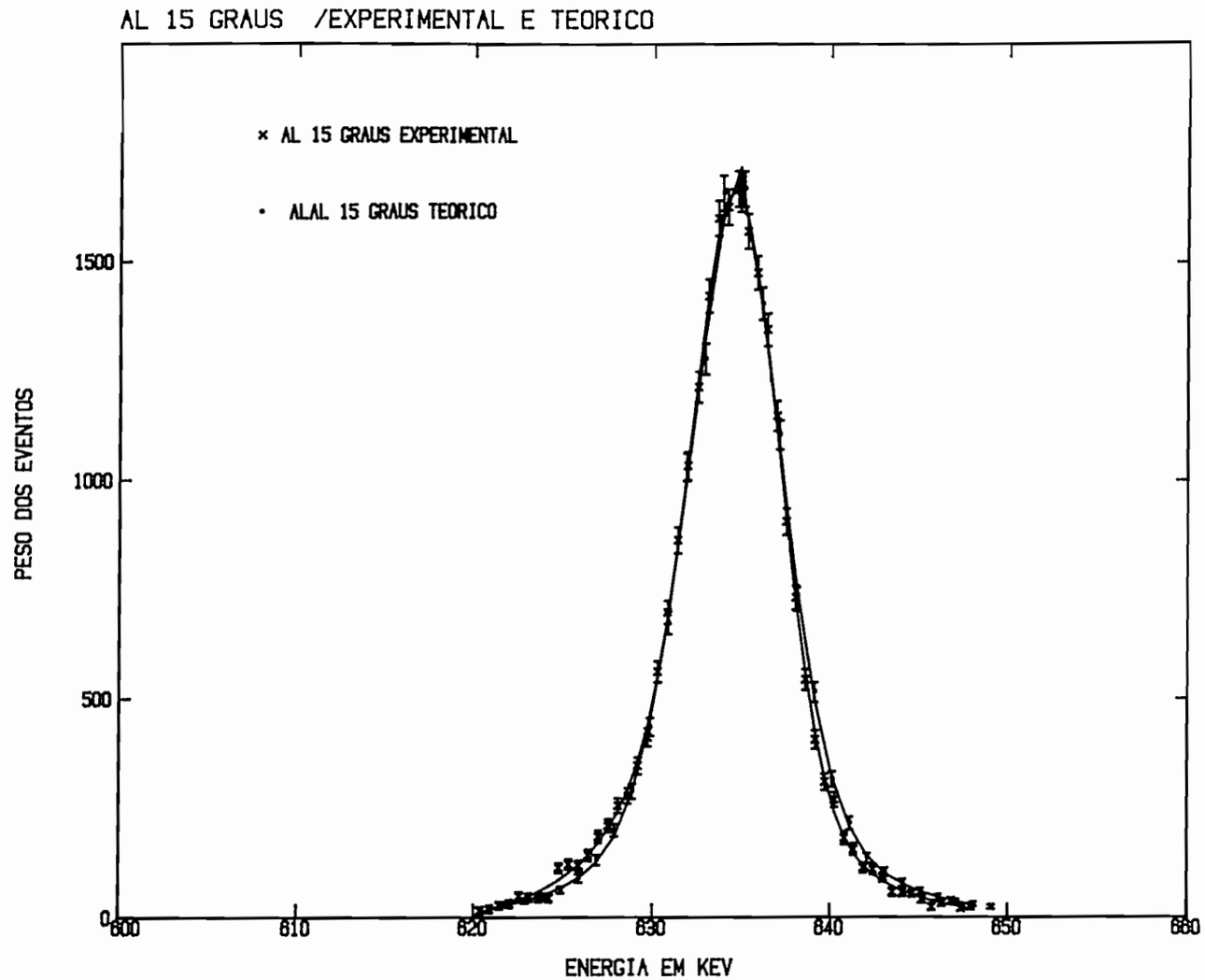


Fig. 4-32 - Distribuição de energia Al 15°, experimental e teórico

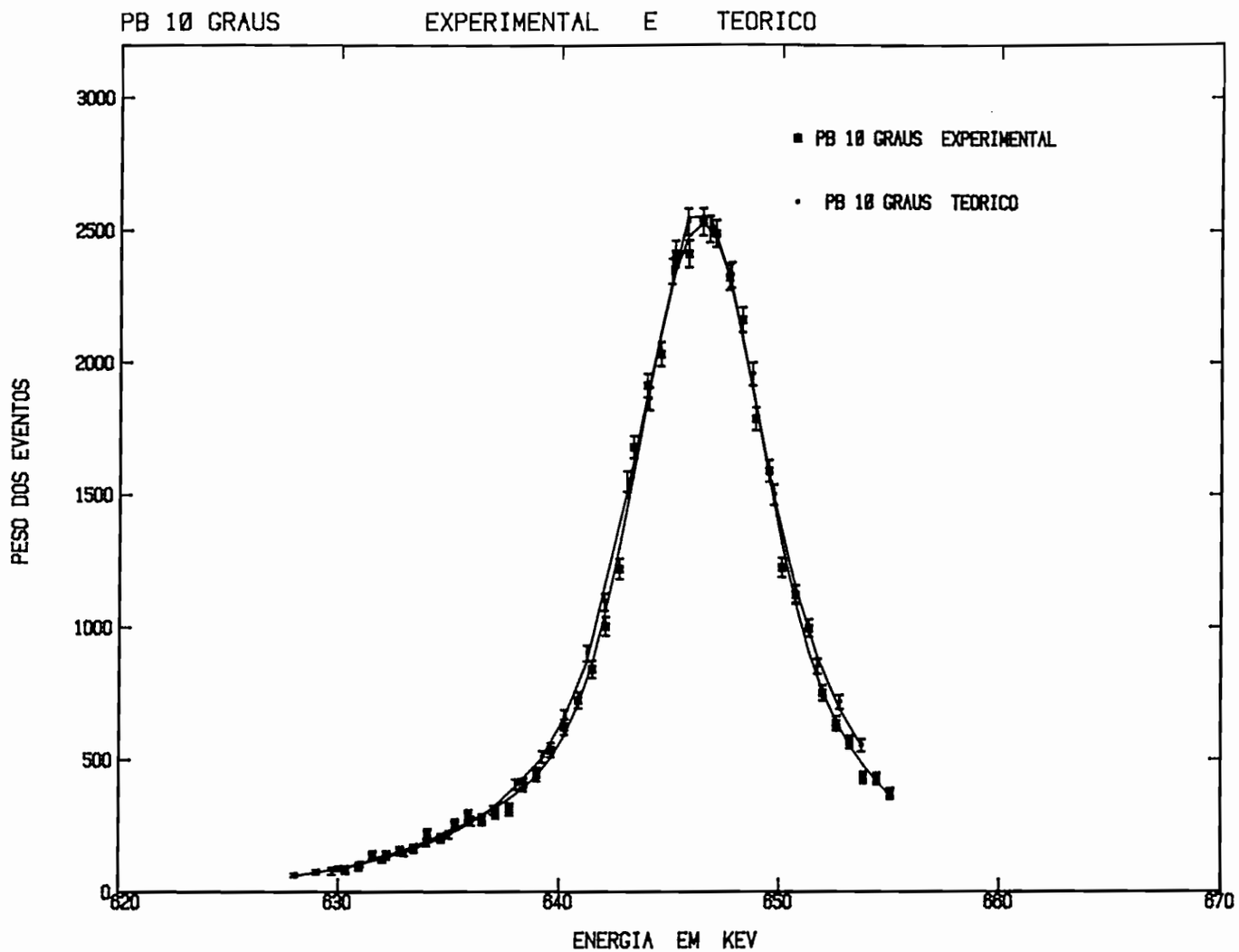


Fig. 4-33 - Distribuição de energia Pb 10°, experimental e teórico

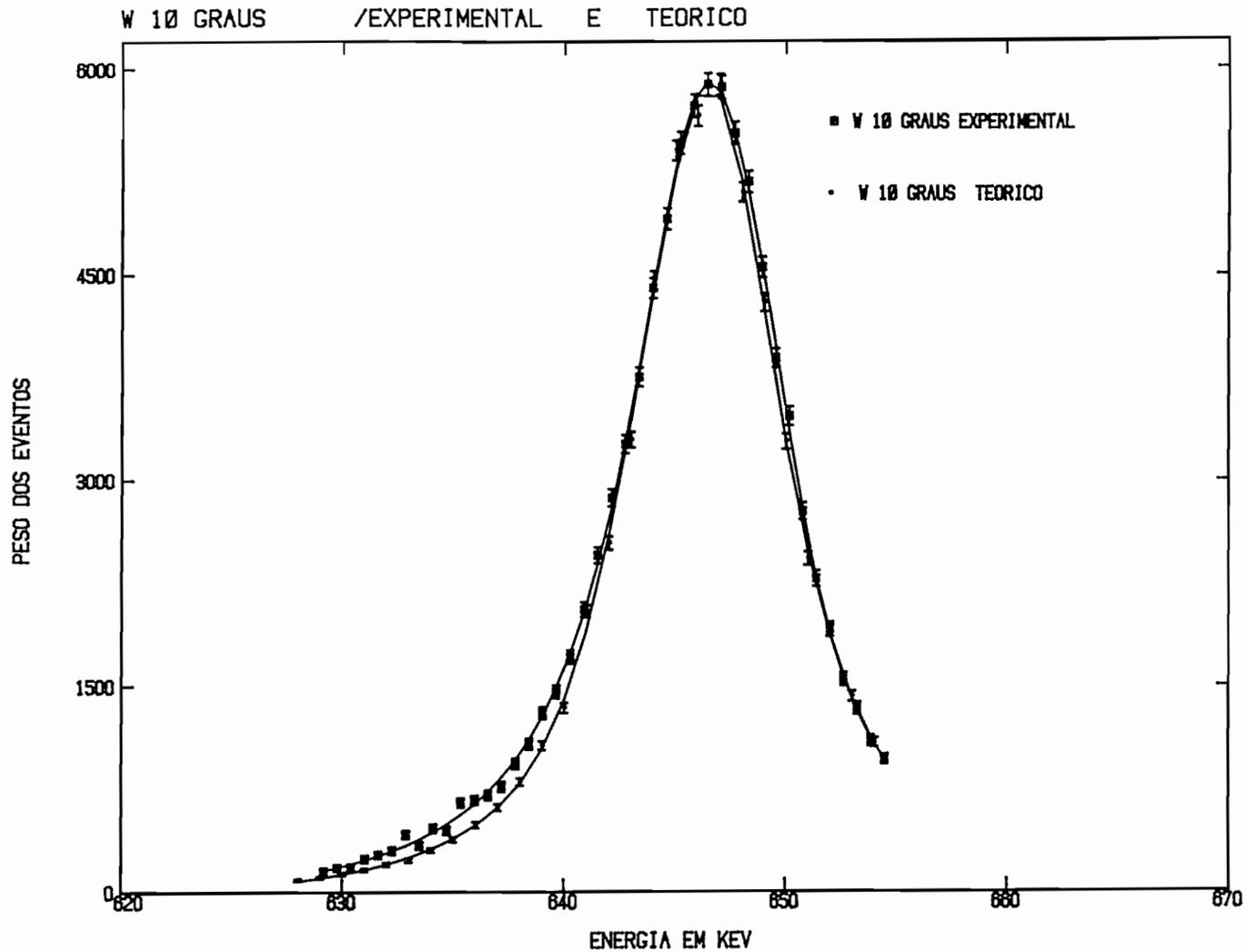


Fig. 4-34 - Distribuição de energia W 10°, experimental e teórico

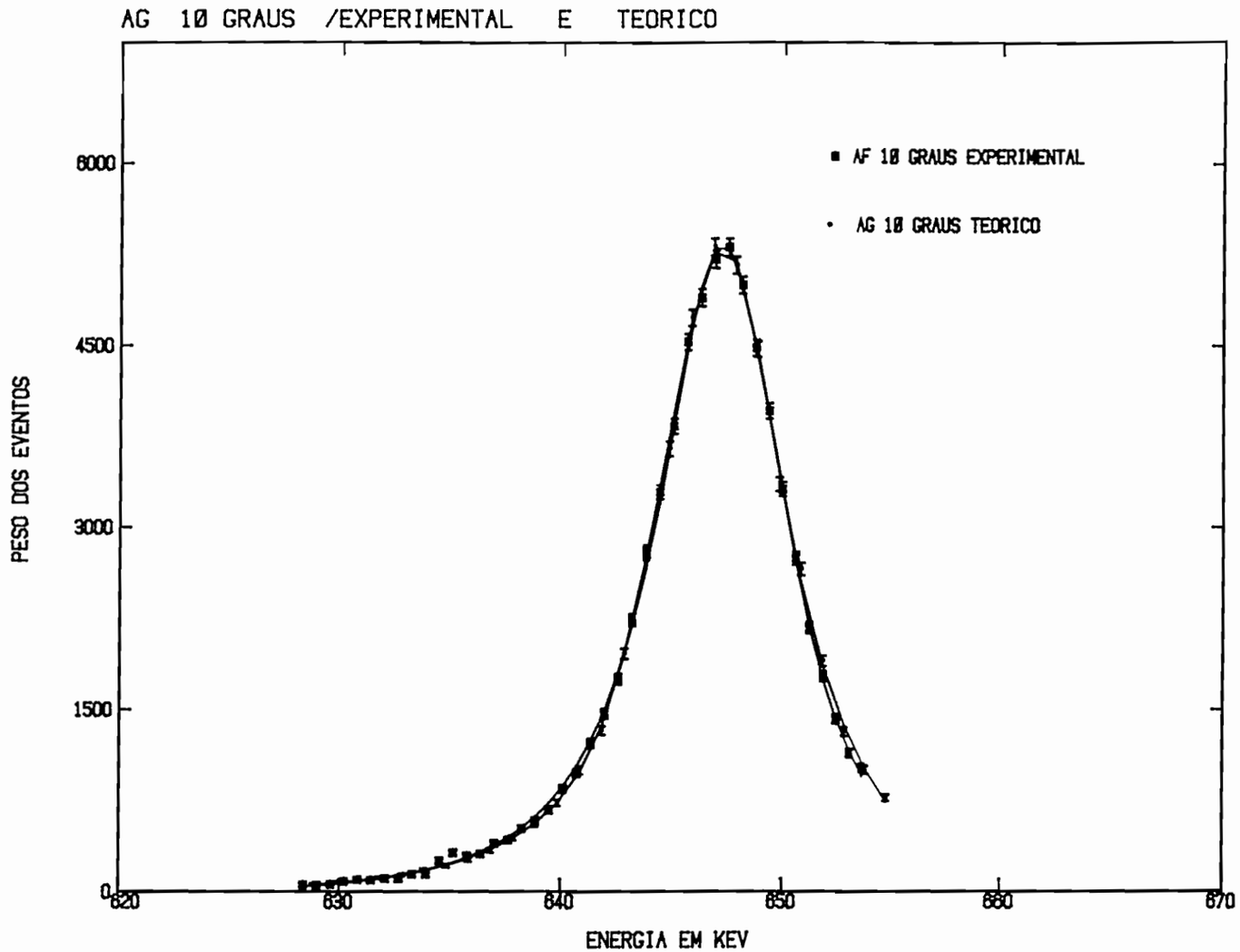


Fig. 4-35 - Distribuição de energia Ag 10°, experimental e teórico

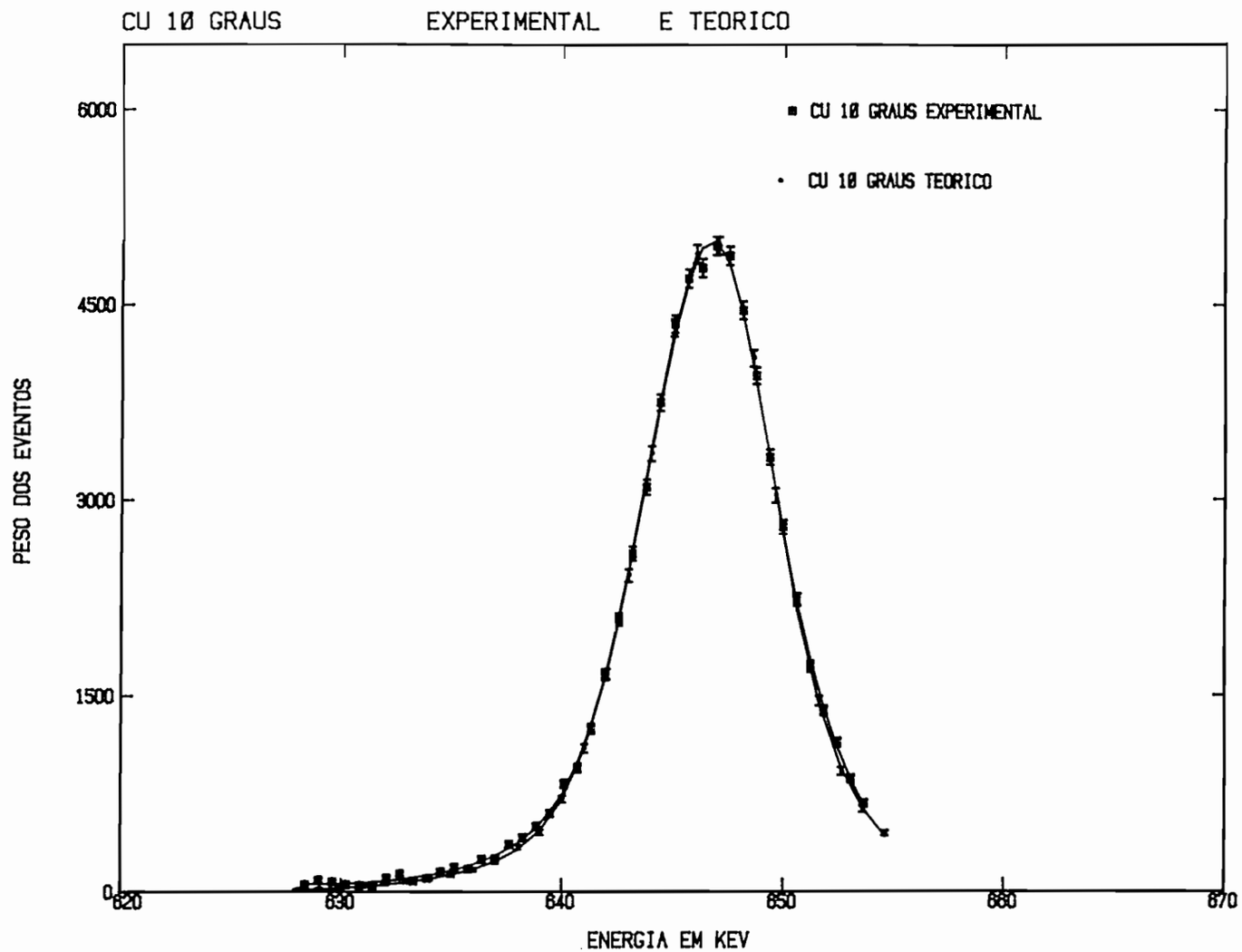


Fig. 4-36 - Distribuição de energia Cu 10°, experimental e teórico

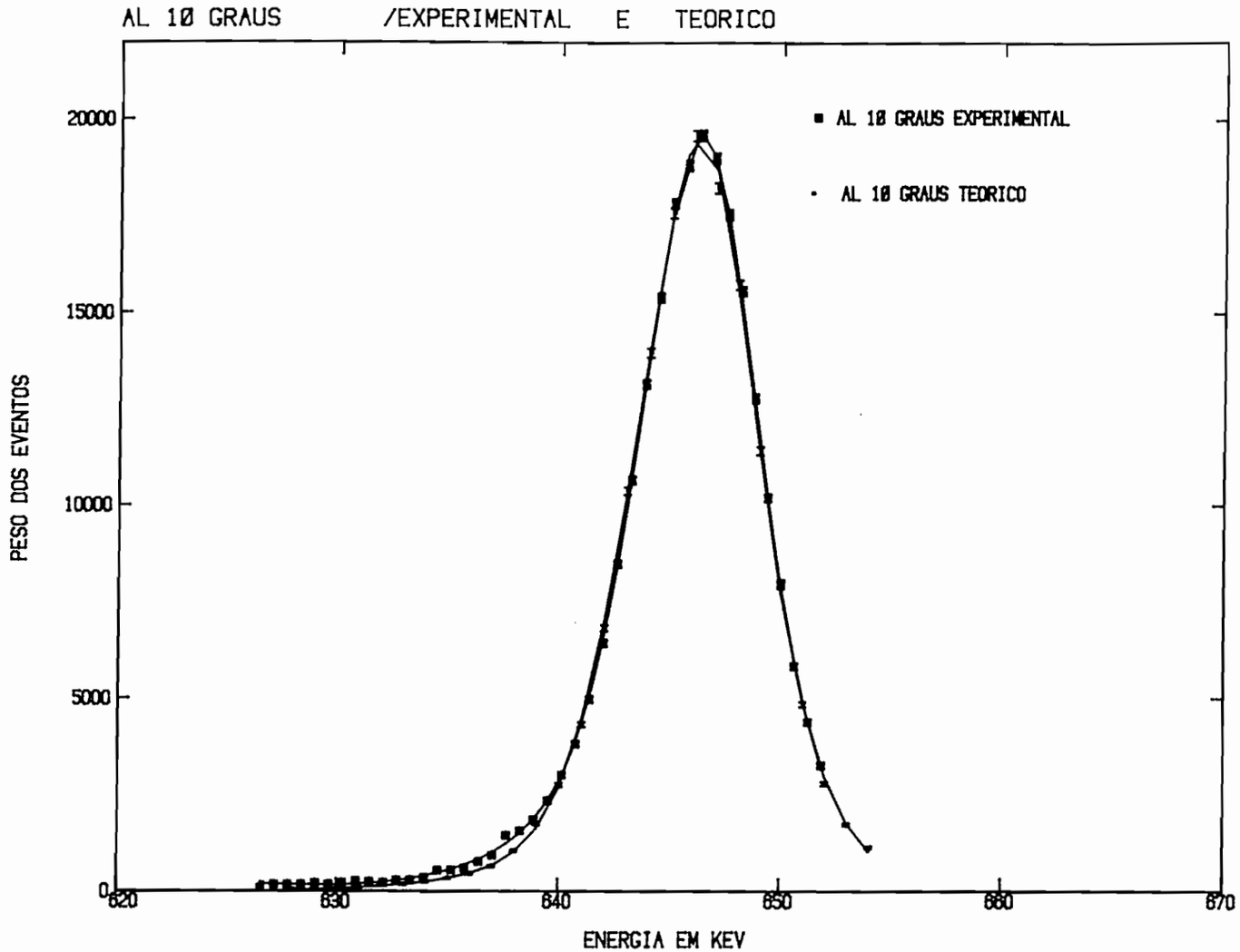


Fig. 4-37 - Distribuição de energia Al 10°, experimental e teórico

ção adicional, que pode ser medida numa experiência Compton. Mesmo que o feixe incidente não seja polarizado, a radiação espalhada inelasticamente será parcialmente polarizada. Na literatura existem medidas para testar o grau de polarização prevista pela fórmula de Klein-Nishima [19 (a),40].

Quando a radiação incidente é polarizada é até possível pesquisar a interação destes fótons polarizados com elétrons magnéticos*. Não é de nosso conhecimento que tenham sido feitas medidas de perfil Compton com fótons polarizados. Localizamos apenas uma citação de um Abstract** de uma experiência realizada com γ circularmente polarizados de uma fonte de C_o^{57}.

A partir da fórmula de Klein-Nishima prova-se que o máximo de polarização (razão entre fótons espalhados com polarização $\vec{\varepsilon}_1'$ e fótons espalhados com polarização $\vec{\varepsilon}_2'$ fig. 1-6 , para fótons incidentes não polarizados ocorre a 90°, para energia $w_1 = 0$, e se desloca para baixo para energias maiores. No caso de 662 Kev a tese de Mestrado de Marina Toscano [40], mostra que o máximo está aproximadamente em 75°.

Quando se deseja examinar a diferença devida à polarização é lógico que se trabalhe em ângulos próximos a 90°.

Ribberford [33,34] para uma radiação incidente de 60 Kev não polarizada, mostrou que suas previsões cinemáticas são suficientemente diferentes das de Klein-Nishima. Ele entretanto, não calculou quanto estas diferenças vão influir no espalhamento do pico Compton e em princípio não há nenhuma razão para acreditar que as diferenças experimentais sejam substanciais para poderem

---

* Nos materiais ferromagnéticos há elétrons que são susceptíveis de perturbação por campo magnético externo

** Hosoya - Abstracts apresentados na Conferência Internacional de Cristalografia, Melbourne, Austrália, 1974

ser medidas.

Como o fator X Klein-Nishima (eq. 1-91) é usado em muitas aplicações, por exemplo para cálculos de espalhamento múltiplo, mesmo quando o elétron alvo não é estacionário, é interessante estudar as diferenças entre as duas expressões do fator X eqs.[1-90 e 1-91].

Usando as condições da nossa experiência vemos na fig. 4-38 ($\theta = 30^{o}$) e radiação incidente de 662 Kev não polarizada a comparação entre o fator X Ribberford e X Klein-Nishima para radiação espalhada com o vetor campo elétrico em $\vec{\varepsilon}_1'$, em função do momento do elétron alvo.

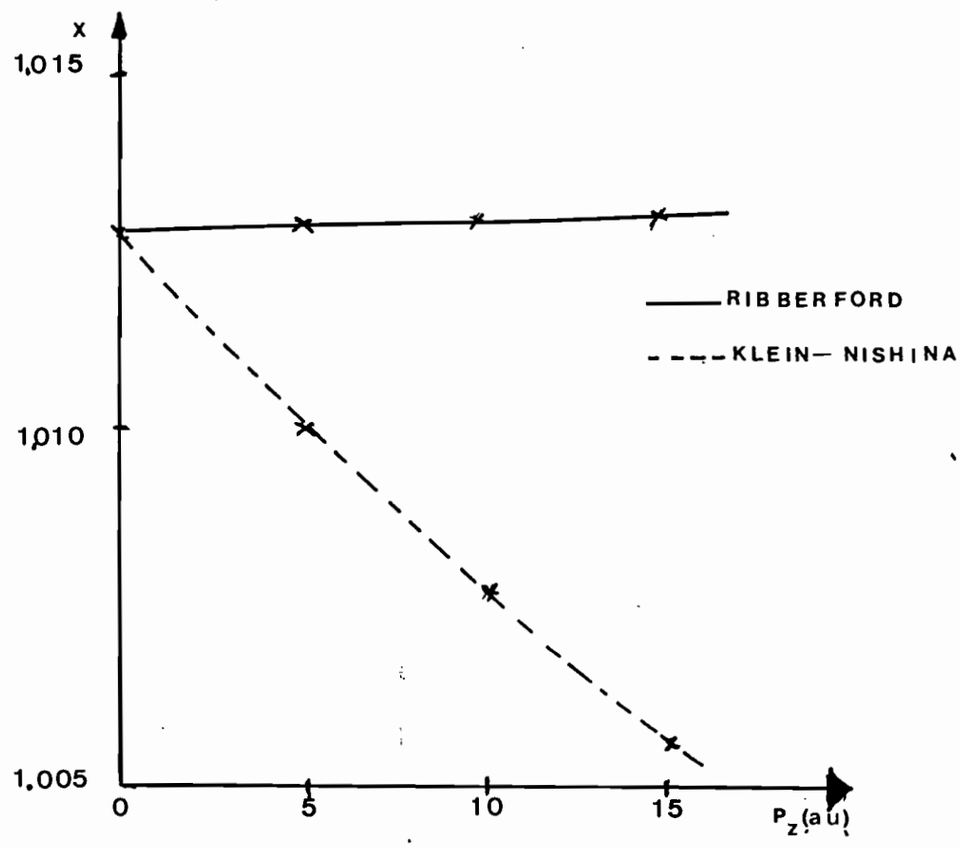


Fig. 4-38 -Comparação entre o fator X Ribberford e Klein-Nishima, radiação incidente não polarizado ($\theta = 30^{o}$, $w_1 = 662$ Kev) para $\vec{\varepsilon}_1'$, em função do momento do elétron alvo.

Notamos que para ângulos de espalhamento pequenos a diferença entre os dois fatores se torna menos acentuada ver [fig. 1-17] mesmo para valores mais elevados de p_z.

Se fizermos as razões X_1/X_2 para Ribberford e Klein-Nishima sendo X_1 fator para radiação incidente não polarizada e radiação espalhada polarizada na direção $\vec{\varepsilon}'_1$ e X_2 o mesmo fator porém para radiação espalhada polarizada na direção $\vec{\varepsilon}'_2$ $\theta = 30^o$ notamos pela fig. 4-39 que para Ribberford a relação é praticamente constante, ao passo que Klein-Nishima varia um pouco com o aumento do momento do elétron.

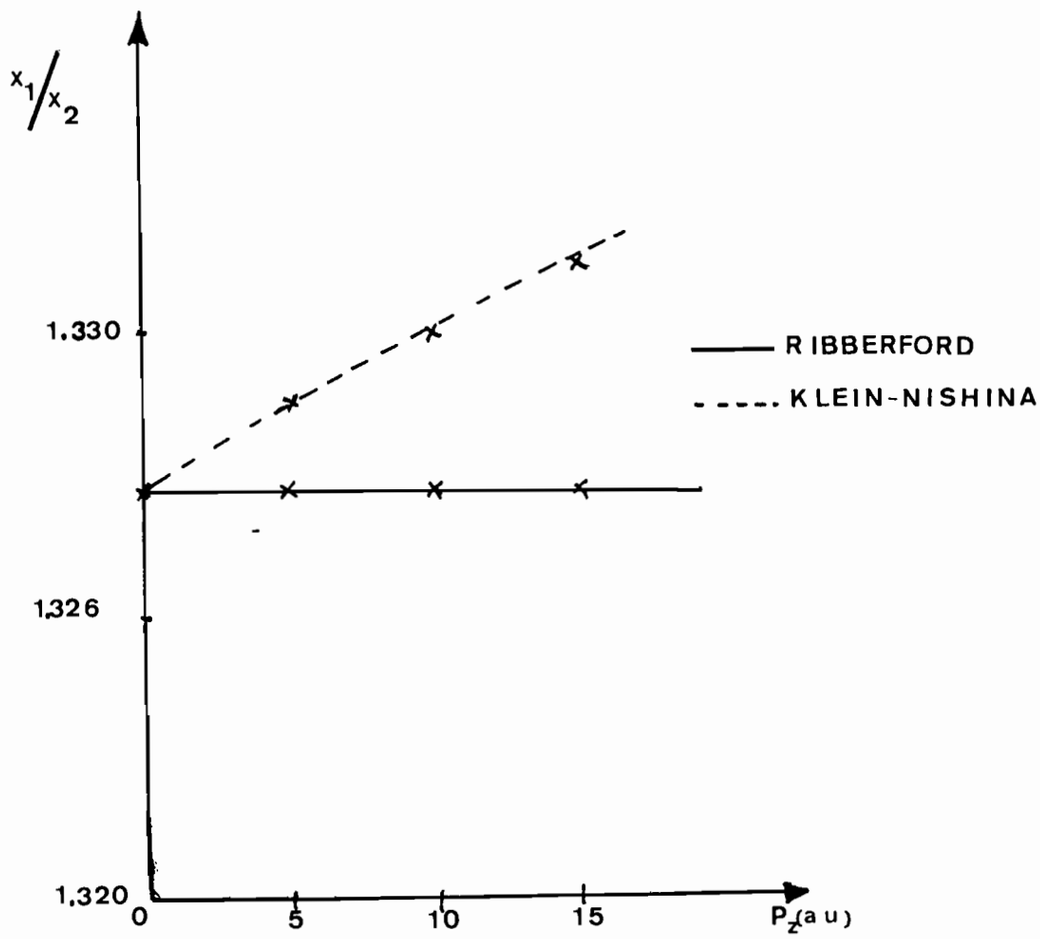


Fig. 4-39 - Razão X_1/X_2, para Klein-Nishima e Ribberford, radiação incidente não polarizada em função do momento do elétron alvo. $\theta = 30^o$

Supondo agora que o fóton de entrada está polarizado, com polarização de entrada sobre o eixo x, e saída em $\vec{\varepsilon}_1'$ ou $\vec{\varepsilon}_2'$ podemos calcular novamente os fatores X_1 e X_2 respectivamente. Temos para 30° a relação entre X_2 e X_1 para Klein-Nishima e Ribberford fig. 4-40 . A diferença entre as curvas aumenta com o aumento do momento do elétron.

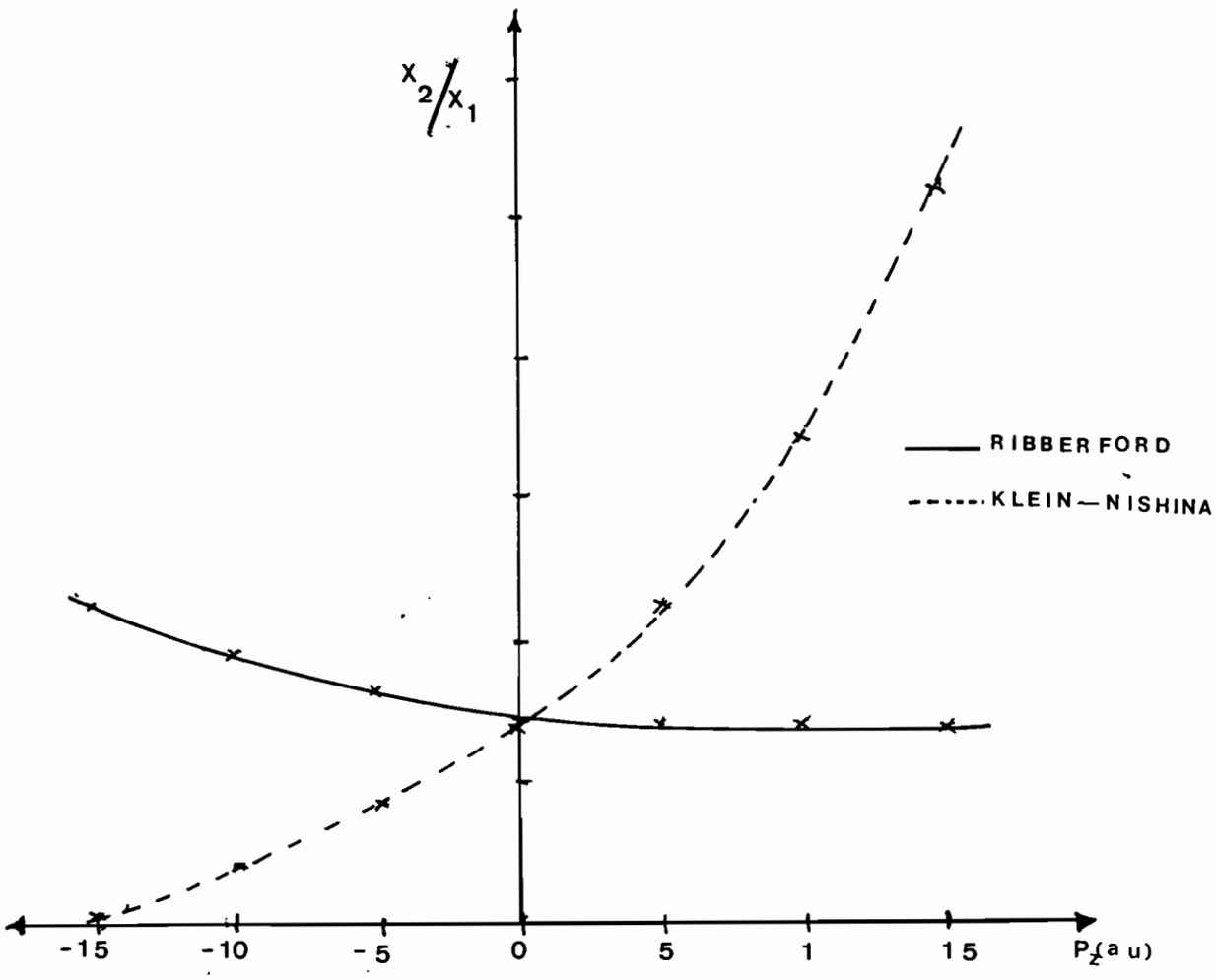


Fig. 4-40 - Razão X_2/X_1 para Klein-Nishima e Ribberford respectivamente, para $\theta = 30^o$ e w_1 = 662 Kev, fóton polarizada na entrada eixo x, em função do momento do elétron alvo.

A razão do X_2/X_1 dá a razão entre as intensidades da radiação espalhada com vetores de polarização $\vec{\varepsilon}_2'$, $\vec{\varepsilon}_1'$ respectivamente.

Nas figs. (4-41) e (4-42) observamos a relação entre X_{1R}/X_{1KN} e X_{2R}/X_{2KN}, no caso de polarização incidente no eixo x. A diferença entre os fatores é maior quando temos polarização na direção de $\vec{\varepsilon}_1'$.

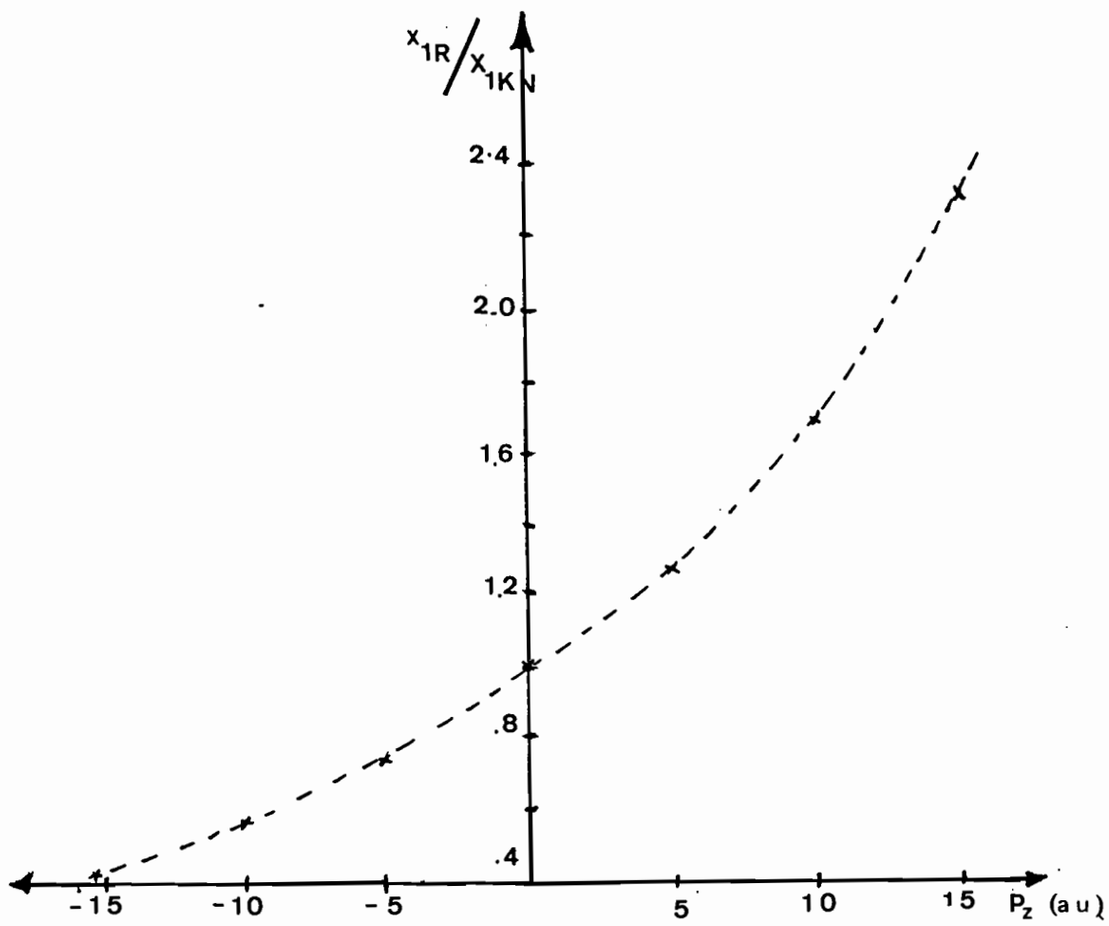


Fig. 4-41 - Relação entre X_{1R}/X_{1KN} polarização x de entrada e fóton espalhado polarização $\vec{\varepsilon}_1'$, em função do momento de elétron alvo.

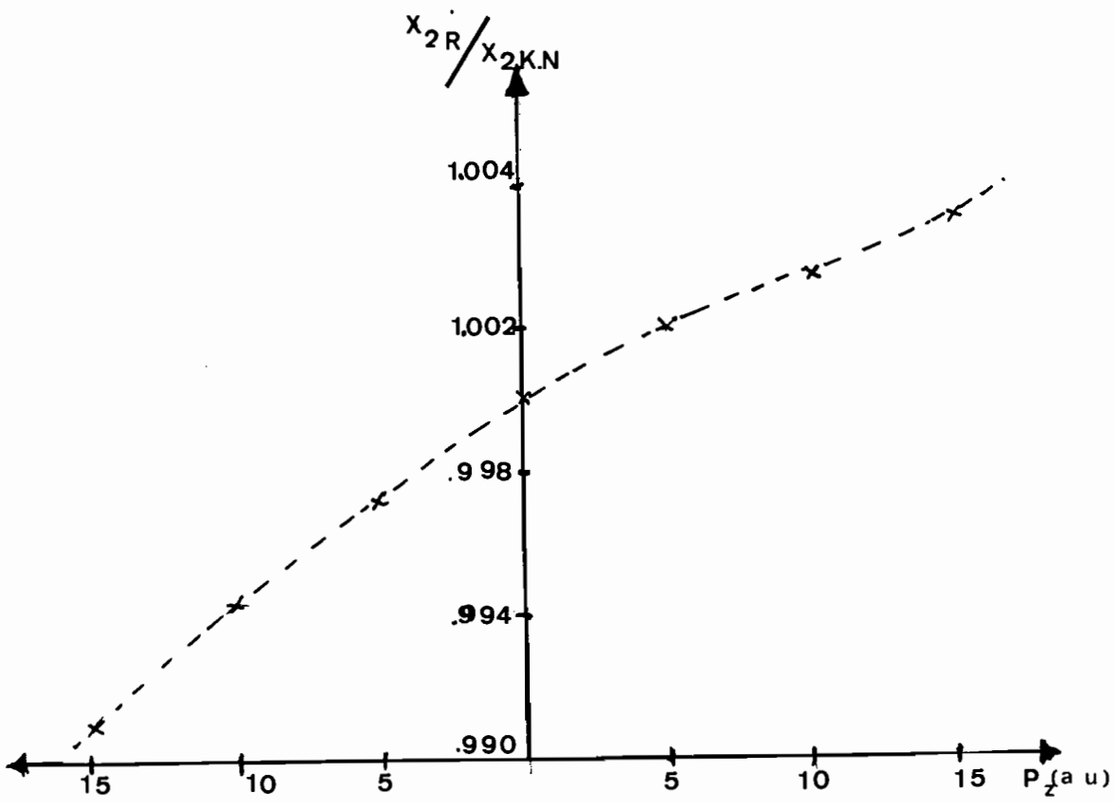


Fig. 4-42 - Relação entre X_{2R}/X_{2KN}, polarização x de entrada e fóton espalhado polarização $\vec{\varepsilon}'_2$,em função do momento do elétron alvo.

Poderíamos então reproduzir o espectro simulando uma situação ideal onde deveríamos observar diferença entre os espectros obtidos por Ribberford e Klein-Nishima para valores de p_z

grandes, ou seja o "rabo" do espectro a esquerda e direita do centro.

Isto foi feito então para polarização incidente no eixo x (INPOL=1) e polarização incidente no eixo y (INPOL = 2) e para polarização de saída no eixo ε'_1 (fig. 1- 6). Observa-se que há possibilidade de verificação experimental* da diferença entre o espectro Klein-Nishima e o espectro usando Ribberford (fig. 4-43) e (fig.4-44).

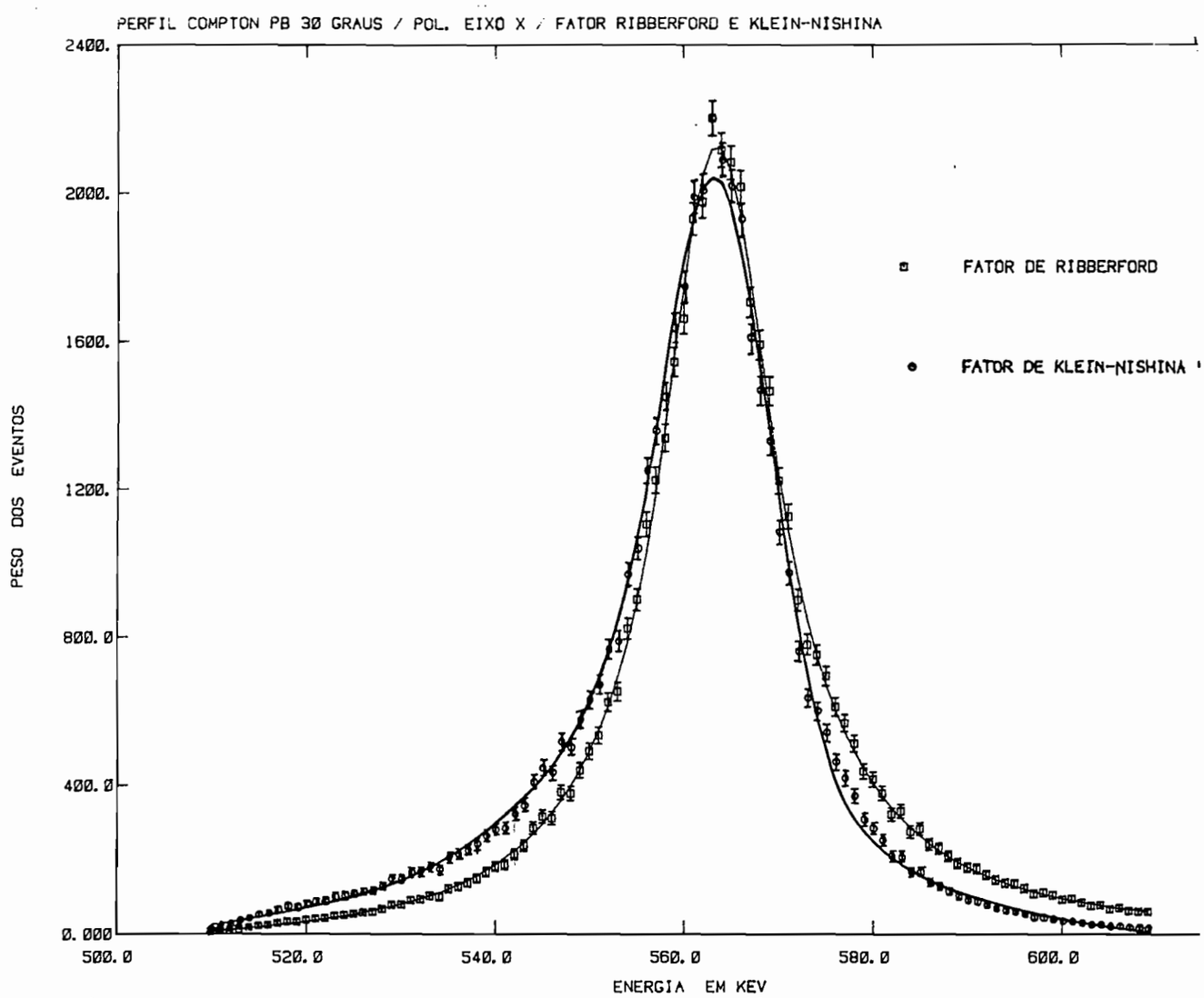


Fig. 4-43 - Distribuição de energia $\Theta = 30^{\circ}$ para Pb^{82}, radiação incidente 662 Kev, polarizada segundo o eixo x, radiação espalhada $\vec{\varepsilon}' = \vec{\varepsilon}'_1$. Fator X Ribberford e Klein-Nishima

---

* Supomos que o modelo teórico reproduz bem os resultados experimentais

Podemos Podemos observar que se comportam como previsto na fig (4-40). Ou seja, para energias abaixo da linha Compton o fator Klein-Nishima é maior que o de Ribberford, acontecendo o contrário para a parte de energia maior que a linha Compton.

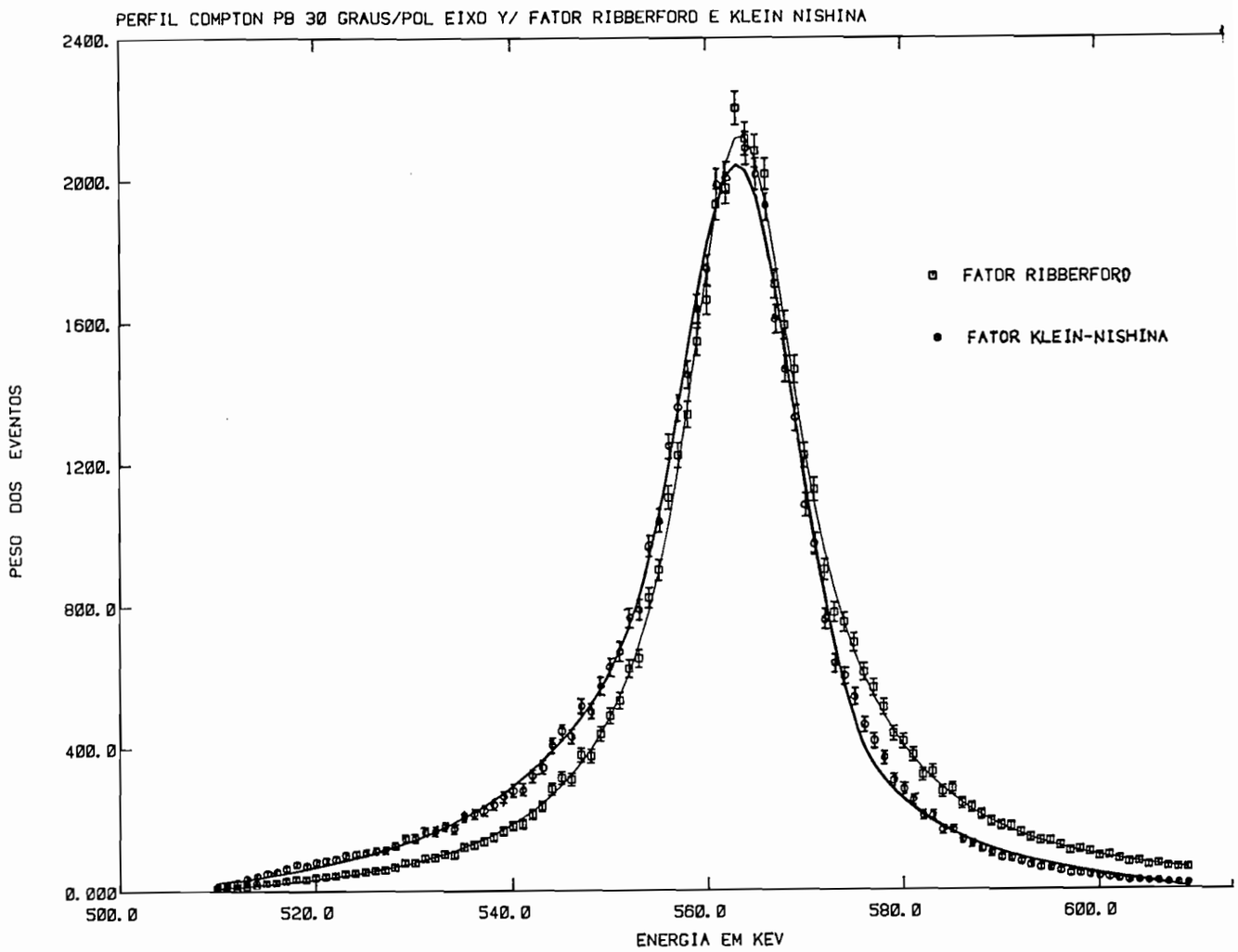


Fig- 4-44 -Distribuição de energia $\Theta = 30^{o}$, para o Pb^{82} radiação incidente 662 Kev, polarizada segundo o eixo y, radiação espalhada $\vec{\varepsilon}' = \vec{\varepsilon}'_1$. Fator X Ribberford e Klein-Nishima

Por outro lado, se considerarmos a radiação incidente polarizada segundo o eixo x e a espalhada $\vec{\varepsilon}' = \vec{\varepsilon}'_2$ notamos que há superposição entre os espectros usando fator X Klein-Nishima e

X Ribberford (fig. 4-45) confirmando a variação mínima obtida entre X_{2R} e X_{2KN} (fig. 4-42).

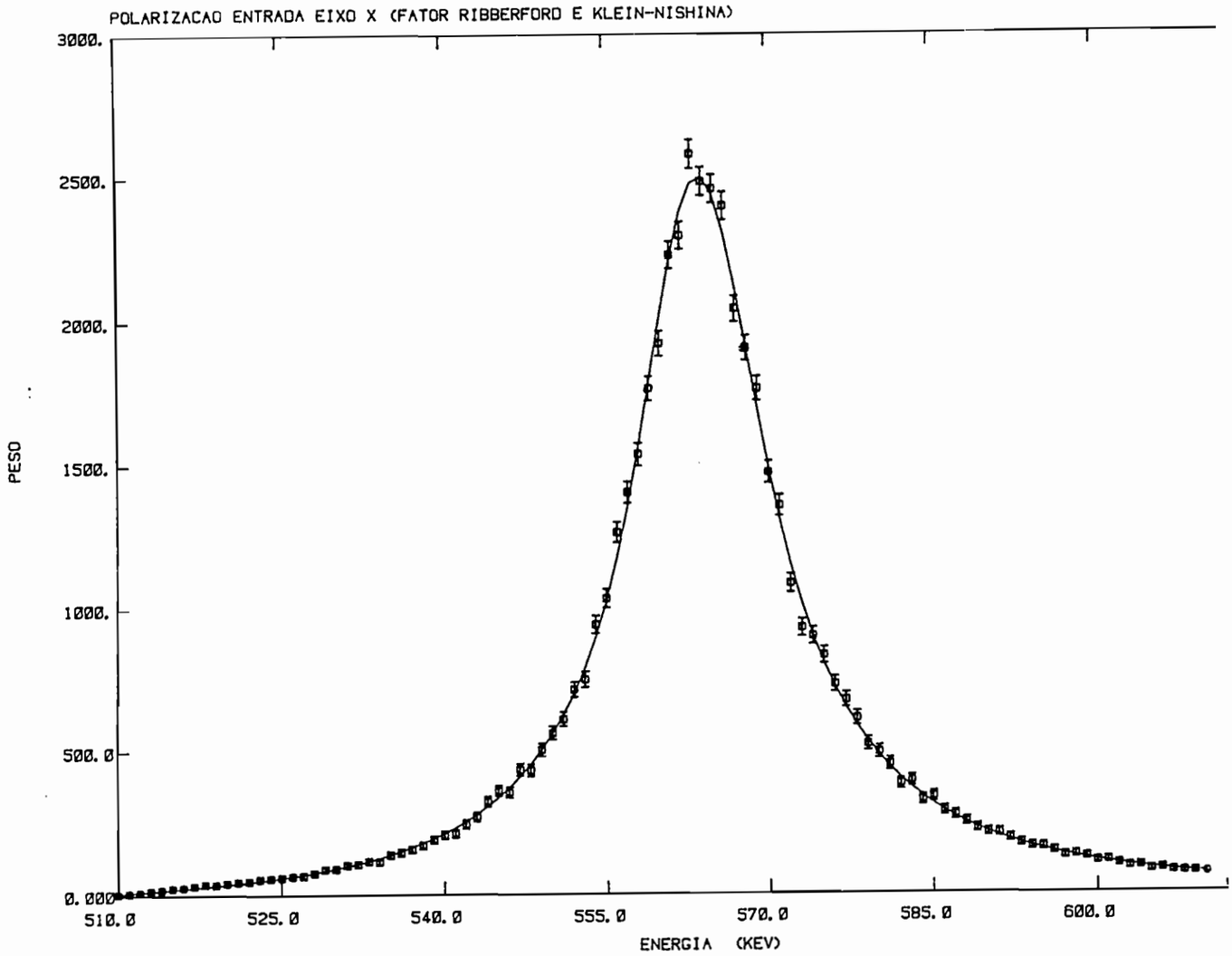


Fig. 4-45 -Distribuição de energia $\theta = 30^{o}$ para Pb^{82} radiação incidente 662 Kev, polarizada segundo eixo X, radiação espalhada $\vec{\varepsilon}' = \vec{\varepsilon}'_2$. Fator X Ribberford e Klein-Nishima

Poder-se-ia mostrar então que para outros ângulos, mesmo pequenos ($\simeq 30^{o}$), é possível distinguir experimentalmente as previsões cinemáticas de Ribberford das de Klein-Nishima, quando se usa polarização incidente e mede-se a polarização emergente. Isso tem a vantagem de verificar a fórmula Ribberford diretamen-

te, o que não acontece quando trabalhamos em feixes não polarizados, os quais permitem apenas a verificação parcial de suas expressões já que estamos unicamente analisando a média obtida das fórmulas para polarização em cada um dos seus eixos.

CAPÍTULO V - CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA OUTROS EXPERIMENTOS

1) CONCLUSÕES

O presente experimento mostra que utilizando-se equipamento experimental simples é possível, obter-se informação de vanguarda ligada à física dos elétrons.

O perfil Compton foi profundamente medido e calculado para 3 ângulos diferentes e para cinco elementos.

Os resultados mostram que apesar de não termos explorado detalhes extremamente finos das funções de onda, tipo potencial de troca, acreditamos que isto pode ser observado através de uma melhoria na resolução geométrica e com o uso de um sistema eletrônico mais estável. Mesmo no atual arranjo experimental é perfeitamente detetável a diferença no perfil decorrente do uso de funções hidrogenóides e de funções Hartree-Fock relativísticas.

Quanto à possibilidade de observar melhor a contribuição dos elétrons, mais externos, em situação energética favorável para a não participação da camada K no processo de espalhamento, concluímos que fomos incapazes de usar esta vantagem pois ela exige maior resolução experimental.

Considerando que os ajustes aos dados experimentais foram melhores através das fórmulas cinemáticas propostas por Ribberford, concluímos que a sua idéia de associar univocamente a distribuição de momento dos elétrons, ao alargamento Compton para ângulos pequenos de espalhamento está correta.

As simulações da contribuição do duplo espalhamento,bem como os resultados experimentais confirmam a vantagem de se trabalhar a ângulos baixos.

Notamos que as correções devidas ao espalhamento múltiplo são de pequena monta, pelo menos ao nível da nossa resolução experimental.

Quanto ao trabalho de Ribberford que prevê para radiação não polarizada incidente, uma diferença considerável no fator cinemático da seção de choque em relação às previsões de Klein - Nishima, concluímos que um experimento do mesmo tipo que o nosso, quando efetuado para pequenos ângulos é incapaz de distinguir as duas fórmulas. Porém quando a radiação incidente é polarizada e contando-se com um polarímetro para examinar o fóton espalhado pode-se com os recursos experimentais utilizados, detetar a diferença por ele prevista de sua teoria com os cálculos de Klein-Nishima.

2) SUGESTÕES

As pequenas variações no perfil Compton devidas a diferentes tipos de potencial de troca assumido nos cálculos das funções de onda relativísticas podem ser medidas com a técnica proposta desde que se faça uma melhoria de um fator dois na geometria, (por exemplo aumentar as distâncias entre fonte-espalhador, e espalhador-detetor, mantendo-se iluminada a mesma área do alvo) e uma melhoria no sistema de estabilização do multicanal através do uso de um estabilizador de ganho,do mesmo.

Sugerimos entretanto que um cálculo preliminar seja feito com o modelo desenvolvido, para determinar o limite de variação das funções de onda eletrônicas que podem resultar em espectros Compton diferentes, em função da geometria e estabilidade do sistema eletrônico.

As diferenças de polarização apontadas pelas fórmulas

de Ribberford e Klein-Nishima podem ser verificadas com esse tipo de experimento utilizando feixe incidente não polarizado e ângulo de espalhamento conveniente (ao redor de 90°), desde que se acrescente um polarimetro para análise do γ final.

Essas diferenças serão ainda mais visíveis caso se disponha de um feixe parcialmente polarizado, o que pode ser obtido fazendo-se um espalhamento Compton preliminar com o feixe de 662 Kev.

APÊNDICE A1 - PERFIS COMPTON PARA FUNÇÕES HIDROGENÓIDES

A transformação de Dirac-Fourier da função de onda Ψ de N elétrons fundamentalmente baseia-se na transformação de funções orbitais do espaço, para espaço de momento. No caso mais simples do hidrogênio Podolsky e Pauling [31] transformaram as soluções de posição $\Psi(\vec{r})$ para obter o estado ligado exado $X(\vec{p})$. As soluções que correspondem as soluções de espaço

$$\Psi(r) = f_{n\ell}(r)\ Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

são:

$$X(p) = u_{n\ell}(p)\ Y_{\ell m}(\theta_p,\phi_p)$$

onde $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ e $Y_{\ell m}(\theta_p,\phi_p)$ são os harmônicos esféricos usuais no espaço, e no espaço de momento respectivamente.

As auto funções $\Psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)$ obtidas resolvendo a equação de Shrödinger para um átomo de hidrogênio são funções das coordenadas espaciais do elétron em relação ao núcleo. A interpretação é que o quadrado do valor absoluto de uma autofunção, representa a probabilidade por unidade de volume de que experimentalmente um átomo de hidrogênio no estado caracterizado por esta autofunção seja achado com a configuração descrita por (r,θ,ϕ). Então $|\Psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)|^2 dV$ é a probabilidade que o elétron seja achado no elemento de volume dV, na região dada por certos valores das coordenadas relativas ao núcleo. Para o espaço de momento então teríamos a probabilidade de que o elétron tenha um momento total dentro de um certo valor.

$$\Psi_{n\ell m}(r,\Theta,\phi) = \left\{\frac{1}{(2\Pi)^{1/2}} e^{\pm im\phi}\right\}\left\{\left(\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}\right)^{1/2} P_\ell^m(\cos\Theta)\right\} x$$

$$\left\{\frac{(2\gamma)^{\ell+1}}{(n+\ell)!}\left(\frac{\gamma(n-\ell-1)!}{n(n+\ell)!}\right)^{1/2} e^{-\gamma r} r^{\ell} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(2\gamma r)\right\}$$

$\gamma = Z/na_o$

P_ℓ^m (cos Θ) polinômio de Legendre

$L_{n+\ell}^{2\ell+1}$ é um polinômio de Laguerre

As autofunções no espaço de momento são dadas pela expressão:

$$\gamma_{n\ell m}(P,\Theta,\Phi) = \left\{\frac{1}{(2\Pi)^{1/2}} e^{\pm im\phi}\right\}\left\{\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!}\right^{1/2} p_\ell^m(\cos\Theta)\right\} x$$

$$\left\{\frac{-(-i)^{\ell}\,\Pi\, 2^{2\ell+4}\,\ell!}{(\gamma h)^{3/2}}\left(\frac{n(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!}\right)^{1/2}\frac{\xi^{\ell}}{(\xi^2+1)^{\ell+2}} C_{n-\ell-1}^{\ell+1}\left(\frac{\xi^2-1}{\xi^2+1}\right)\right\}$$

onde $\xi = p/\gamma\hbar$

p, Θ, Φ são as coordenadas polares do vetor de momento total referidas aos mesmos eixos que as coordenadas r,Θ,ϕ do elétron.

C = funções de Gegenbauer.

Conhecendo as autofunções no espaço de momento elevando ao quadrado e integrando segundo a equação (1-42) teremos o perfil Compton.

Com a finalidade de simplificar a integração usamos:

$$x = \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2 + 1}$$

então

$$F^2 pdp = \frac{(x+1)^{\ell}(1-x)^{\ell+2}}{2^{\ell+4}}\left(\frac{Z^2}{n^2}\right) d_x$$

e os limites de integração: $\dfrac{p_z^{\,2} n^2 - z^2}{p_z^{\,2}\, n^2 + z^2}$ e 1

Damos a seguir uma lista dos perfis para diversos orbitais.

$$J_{1s} = \frac{8}{3\Pi} \frac{z^5}{(p_z^{\,2} + z^2)^3}$$

$$z_2 = z/2$$

$$J_{2s} = \frac{z_2^{\,5}\, 2^3}{15\ \Pi} \frac{(20p_z^4 - 20p_z^{\,2} z_2^{\,2} + 8z_2^{\,4})}{(p_z^{\,2} + z_2^{\,2})^5}$$

$$J_{2p} = \frac{2^5\ z_2^{\,7} (5p_z^{\,2} + z_2^{\,2})}{5\Pi\ (p_z^{\,2} + z_2^{\,2})^5}$$

$$z_3 = z/3$$

$$J_{3s} = \frac{2^3\ z_3^5\ [315\ p_z^{\,8} - 1260p_z^{\,6}\ z_3^{\,2} + 1722p_z^{\,4} z_3^{\,4} - 476\ \ p_z^{\,2} z_3^{\,6} + 67z_3^{\,8}\ ]}{7.15\Pi\ (p_z^{\,2} + z_3^{\,2})^7}$$

$$J_{3p} = \frac{2^6\ z_3^{\,7} |21p_z^{\,6} - 21p_z^{\,4} z_3^{\,2} + 7p_z^{\,2} z_3^{\,4} + z_3^{\,6}|}{7\Pi\ (p_z + z_3^{\,2})^{\,7}}$$

$$J_{3d} = \frac{2^{10}\ z_3^{\,9}\ [21p_z^{\,4} + 7z_3^{\,2} p_z^{\,2} + z_3^{\,4}]}{3.5.7\Pi\ (p_z^{\,2} + z_3^{\,2})^7}$$

$$Z_4 = z/4$$

$$J_{4s} = \frac{2^7 z_4^{\,5} [15p_z^{12} - 135p_z^{\,10} z_4^{\,2} + 432p_z^{\,8} z_4^{\,4} - 462p_z^{\,6} z + 207p_z^{\,4}\ z_4^{\,8}}{9.5\ \Pi\ (p_z^{\,2} + z_4^{\,2})^{\,9}}$$

$$\underline{- 27p_z^{\,2} z_4^{\,10} + 2z_4^{\,12}\ ]}$$

$$J_{4p} = \frac{2^7 z_4^7 [175p_z^{10} - 609p_z^8 z_4^2 + 742p_z^6 z_4^4 - 242p_z^4 z_4^6 + 27p_z^2 z_4^8 + 3z_4^{10}]}{7.5\Pi (p_z^2 + z_4^2)^9}$$

$$J_{4d} = \frac{2^{11} z_4^9 [126p_z^8 - 126p_z^6 z_4^2 + 36p_z^4 z_4^4 + 9p_z^2 z_4^6 + z_4^8]}{9.5.7\,\Pi (p_z^2 + z_4^2)^9}$$

$$J_{4f} = \frac{2^{12} z_4^{11} [84p_z^6 + 36p_z^4 z_4^2 + 9p_z^2 z_4^4 + z_4^6]}{9.5.7.\Pi (p_z^2 + z_4^2)^9}$$

$$z_5 = z/5$$

$$J_{5s} = \frac{2^3 z_5^5 [28875p_z^{16} - 462000p_z^{14} z_5^2 + 2721180p_z^{12} z_5^4 - 6357120p_z^{10} z_5^6 + 6906570p_z^8 z_5^8 - 3355440p_z^6 z_5^{10} + 752620p_z^4 z_5^{12} - 57376p_z^2 z^{14} + 2659z_5^{16}]}{(p_z^2 + z_5^2)^{11}}$$

$$J_{5p} = \frac{z_5^7\, 2^6 [28875p_z^{14} - 209055p_z^{12} z_5^2 + 560175\, p_z^{10} z_5^4 - 595155p_z^8 z_5^6 + 279345p_z^6 z_5^8 - 45485p_z^4 z_5^{10} + 2453p_z^2 z_5^{12} + 223z_5^{14}]}{1155\Pi (p_z^2 + z_5^2)^{11}}$$

$$J_{5d} = \frac{z_5^9 . 2^9 [46283p_z^{12} - 111573p_z^{10} z_5^2 + 129195p_z^8 z_5^4 - 44550p_z^6 z_5^6 + 4015p_z^4 z_5^8 + 803p_z^2 z_5^{10} + 73\, z_5^{12}]}{4851\Pi (p_z^2 + z_5^2)^{11}}$$

$$z_6 = z/6$$

$$J_{6s} = \frac{2^6 z_6^5 \left[152010p_z^{20} - 3378375p_z^{18}z_6^2 + 31873842p_z^{16}z_6^4 - 129933804p_z^{14} z_6^6 + 264621786p_z^{12}z_6^8 - 277186338p_z^{10}z_6^{10} + 152884160p_z^8 z_6^{12} - 43305692p_z^6 z_6^{14} + 5714390p_z^4 z_6^{16} - 286356p_z^2 z_6^{18} + 9158z_6^{20}\right]}{90090 \Pi \ (p_z^2 + z_6^2)^{13}}$$

etc.

Este exercício, foi completado testando estes resultados com um programa de cálculo de $\int$ para 3 valores de p_z (0,5,10) confirmando as equações obtidas.

APÊNDICE A-2 - AJUSTES DE PERFIS COMPTON HARTREE-FOCK RELATIVÍSTICOS

As tabelas de Biggs, Mendelsohn e Mann [28] apresentam os valores dos perfis Compton relativísticos de orbitais individuais e de átomos eletronicamente completos para todos os elementos e para 76 valores de p_z.

Os perfis Compton para o átomo completo e também para cada orbital do Pb, W, Ag, Cu e Al foram ajustados procurando funções convenientes. Os ajustes foram feitos com a finalidade de poupar tempo de computador e memória, porque trabalhamos com um computador tipo PDP.

Para o caso do Pb foram ajustados os orbitais 1s até 4s e para Al de 1s até 3p, além dos átomos completos para cada elemento.

Em vários casos como o perfil Compton tem um andamento relativamente complicado, optou-se por dividir convenientemente as regiões de p_z que melhor se ajustavam a determinadas funções.

Assim para o Pb o orbital 3D(-) se ajustou com uma única função fig. (A-2,1) do tipo

$$J_{3D} = .178095^{10^{-1}} - .933837^{10^{-3}} - 3p_z + .242212^{10^{-5}} p_z^{\,2} + .307746^{10^{-6}} p_z^{\,3} + .870375^{10^{-2}} e^{\frac{-(p_z-8.43221)^2}{2.5.50697^2}}$$

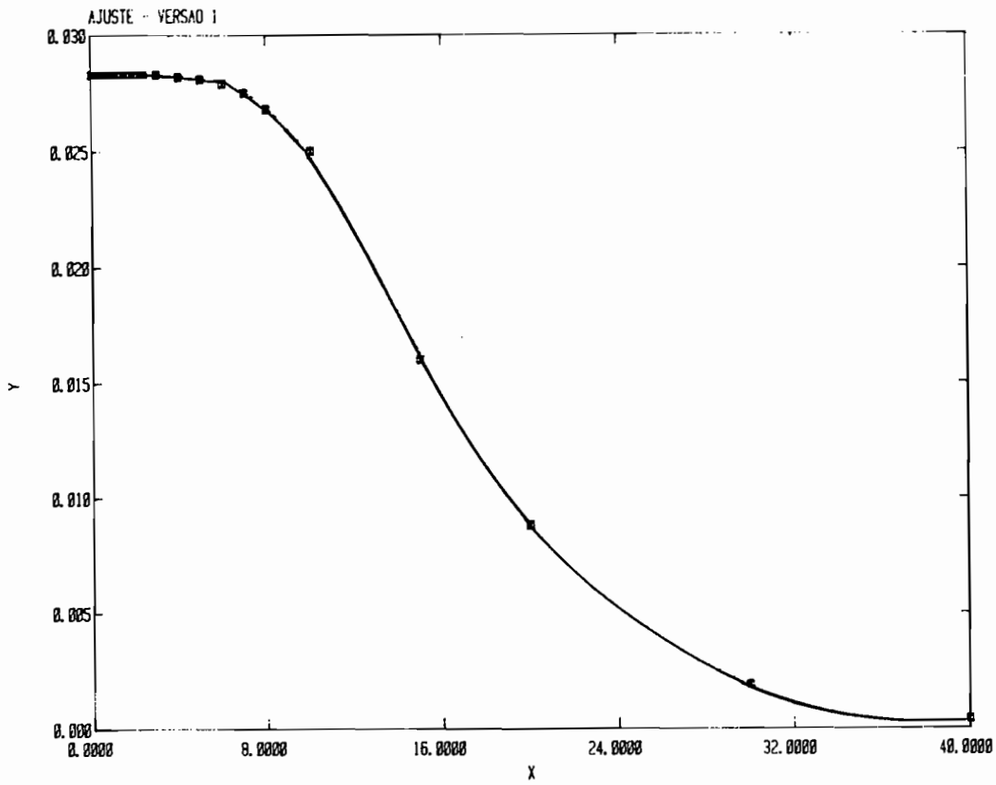


Fig. A2-1 -Perfil Compton para orbital (3D-) do Pb^{82}

Para o orbital 4F(+) usamos 2 funções para o ajuste fig. (A-2).

$$1J_{4F} = .448607.10^{-1} - .452459.10^{-2}\, p_z - .174475.10^{-3}\, p_z^{\,2} +$$

$$+ .18626610^{-4} p_z^{\,3} + .124726.10^{-1}\, e^{-\frac{(p_z - 3,84028)^2}{2 \times 2.22582^2}}$$

$$2J_{4f} = e^{-1.15061 - .302160 p_z - .274947.10^{-3} p_z^{\,2}}$$

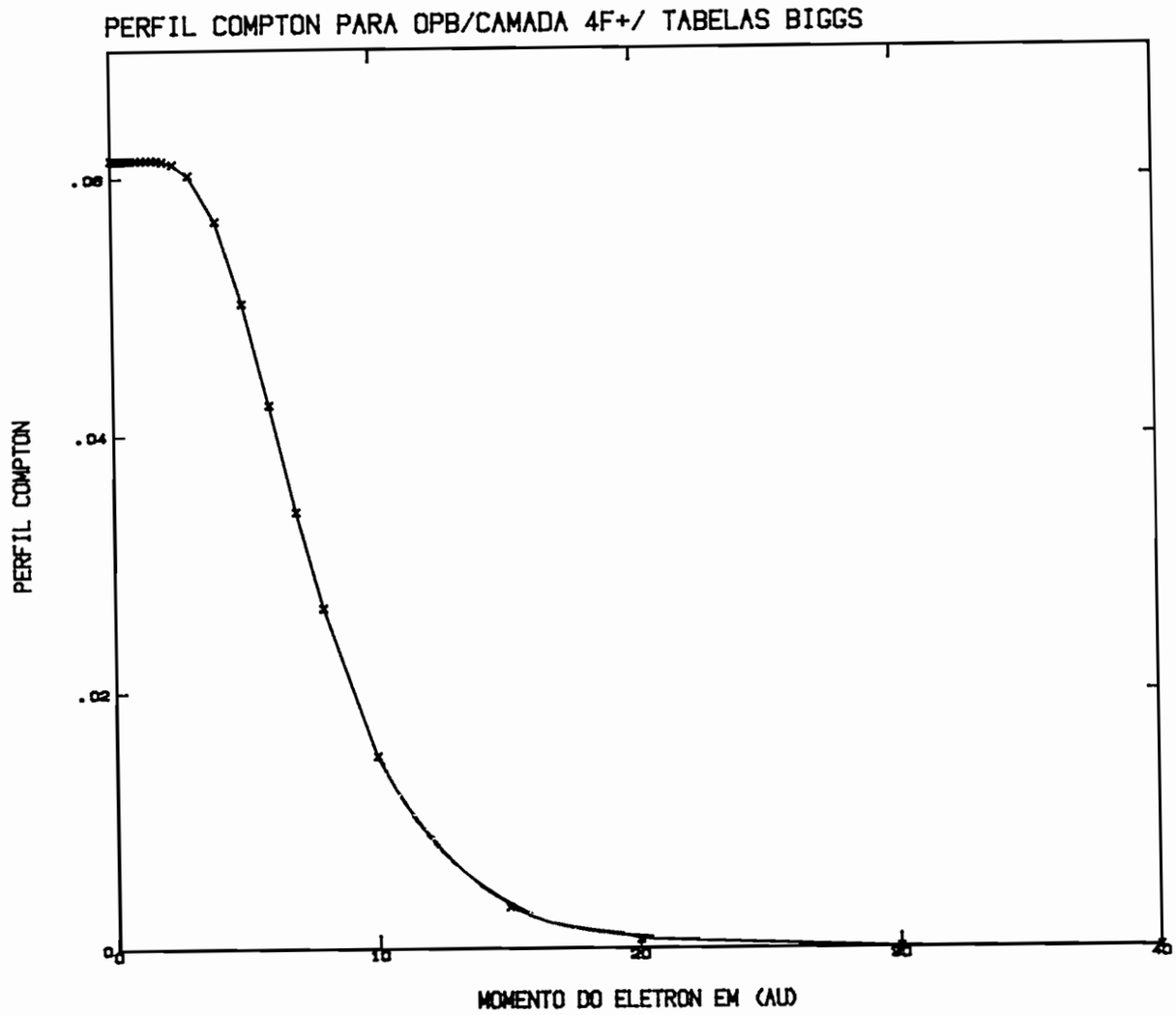


Fig. A2-2 - Perfil Compton do orbital (4F+) do Pb^{82}

Isto foi feitO exaustivamente para todos os casos dos outros elementos citados com funções semelhantes às apresentadas anteriormente.

Testamos também a influência da correção de Ribberford normalizada para ângulos pequenos aplicando-a sobre os valores das tabelas de Biggs do perfil total (correção para ângulo de 30°) para o Pb^{82}.

Devido ao tipo peculiar de funções dividimos o perfil em trechos convenientes fig. (A2 -3) onde mostramos de $-40p_z$ a $40p_z$, e fig. A2-3a) onde mostramos em detalhe a região de - 2 a + 2 au.

Ajuste correspondente a p_z entre -199.6 e -40 (au).

$$J_{1T} = e^{.544416 + .130381p_z + .895284\,10^{-3}\,p_z^{\,2} + .422388\,10^{-5}\,p_z^{\,3} + .859678\,10^{-8}\,p_z^{\,4}}$$

Ajuste correspondente a p_z entre -40 e -6 au

$$J_{2T} = e^{1.52256 + .119338p_z - .78527\,10^{-2}\,p_z^{\,2} + .372884\,10^{-3}\,p_z^{\,3} - .450813\,10^{-5}\,p_z^{\,4}}$$

Ajuste correspondente a p_z entre - 6 e -2 au

$$J_{3T} = e^{3.00671 + 1.01133p_z + .179871p_z + .129841\,10^{-1}\,p_z^{\,3}}$$

Ajuste correspondente a p_z entre -2 + 2au

$$J_{4T} = -6.31706 + 3.31018\, e^{-\frac{(p_z - .2286\,10^{-2})^2}{2 \times .366791^2}} + 14.2978\, e^{-\frac{(p_z - .03273)^2}{2 \times 1.036452}}$$

Ajuste correspondente à p_z entre 2 e 6 au

$$J_{5T} = 16.1017 - 9.91796p_z + 2.9725p_z^{\,2} - .41689p_z^{\,3} + .21993\,10^{-1}\,p_z^{\,4}$$

Ajuste correspondente p_z entre 6 e 40 au

$$J_{6T} = e^{1.81315 - .175455p_z - .1607\,10^{-2}\,p_z^{\,2} + .16135\,10^{-3}\,p_z^{\,3}}$$

Como podemos ver a introdução da correção introduz no perfil uma ligeira assimetria que pode ser observada especialmente na região da figura correspondente a -2 a +2au. (Fig. A3-3a)

Os ajustes citados permitiram a obtenção a obtenção dos perfis Compton tanto usando todas as camadas como eventualmente retirando algumas camadas para observar o efeito sobre a largura do perfil.

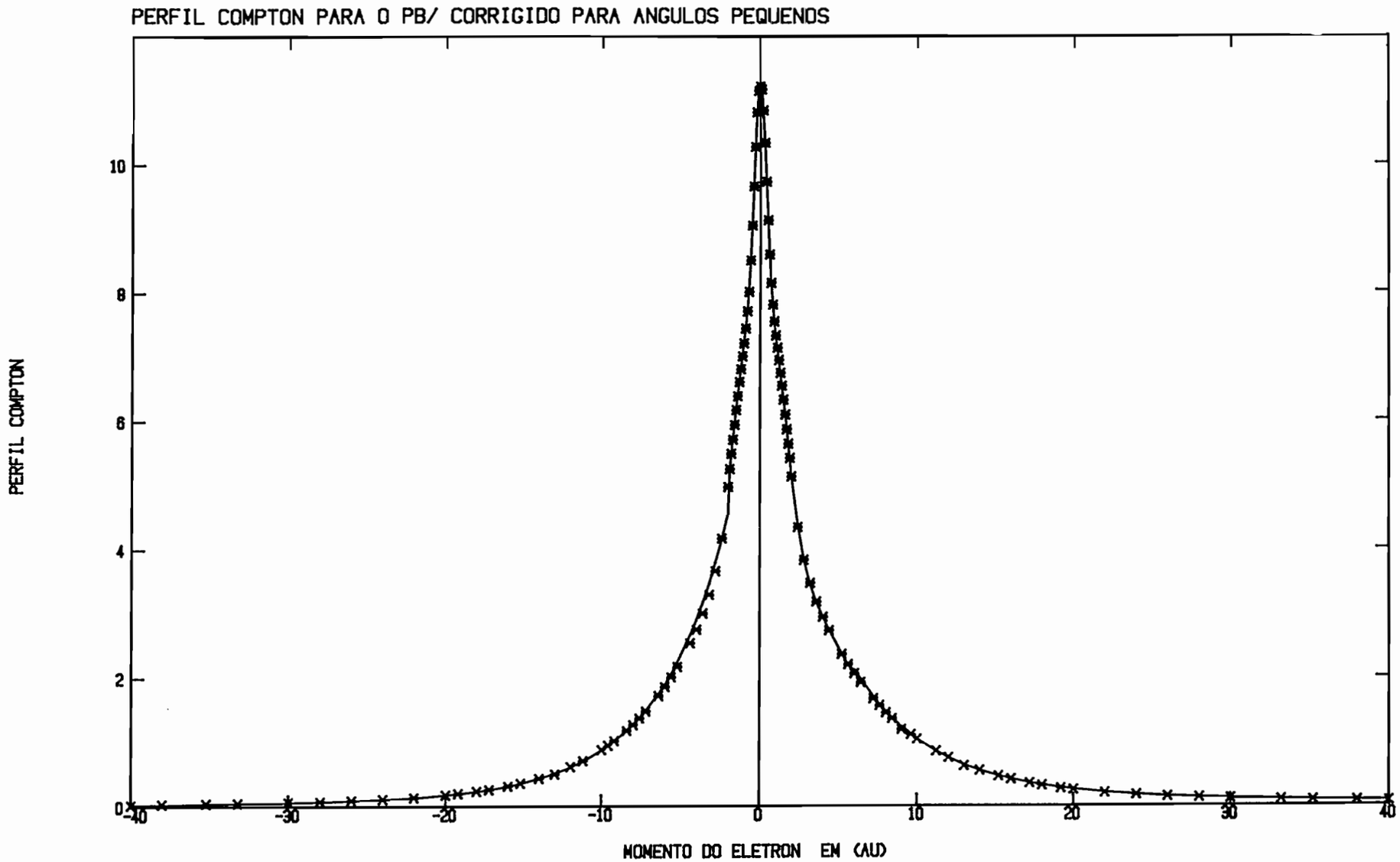


Fig. A2-3 - Perfil Compton total para o Pb^{82} com correção de Ribberford para ângulos pequenos

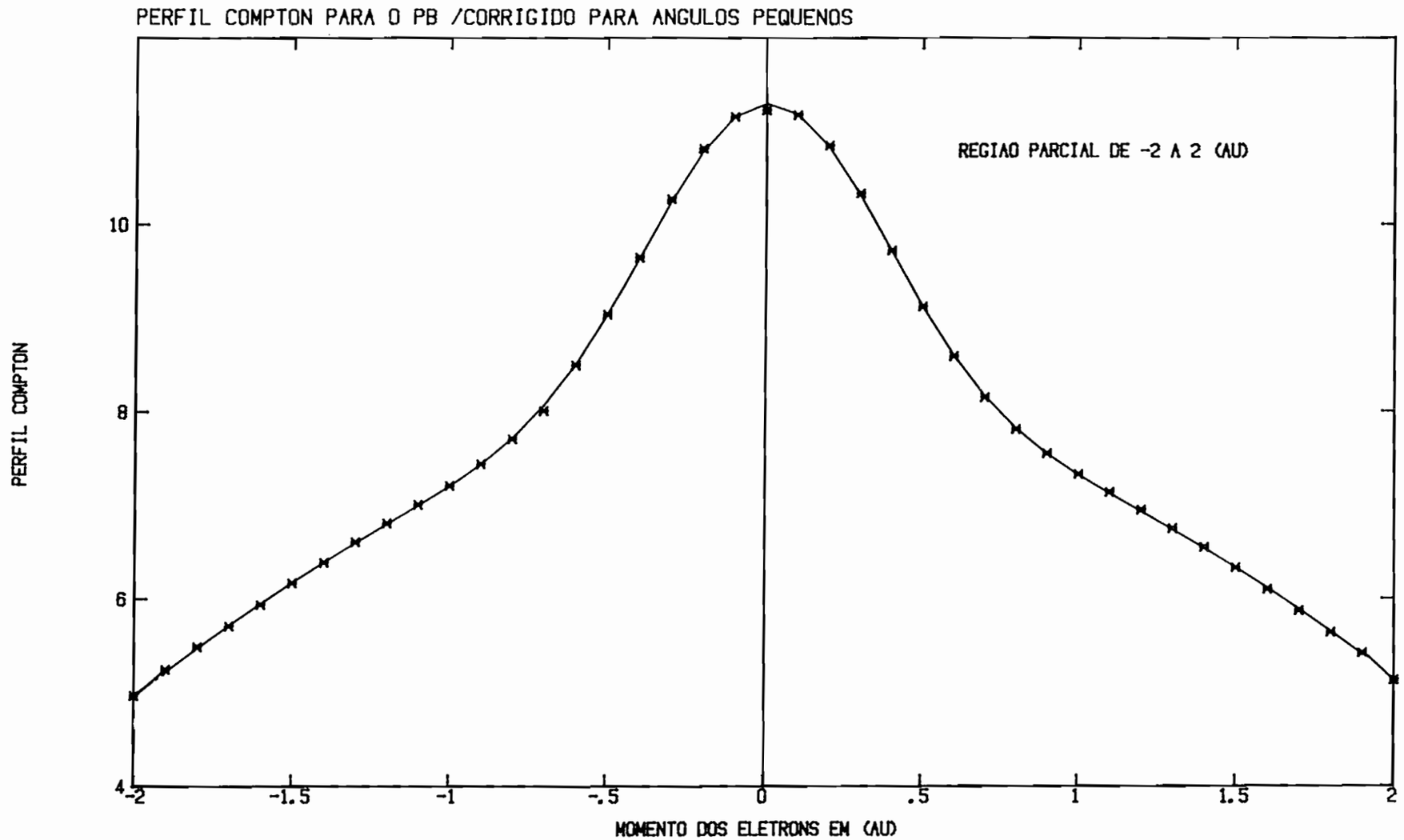


Fig. A2-3a) Perfil Compton total para o Pb^{82} com correçao de Ribberford para ângulos pequenos. -2 a + 2 au

REFERÊNCIAS

1) Allawadhi KL, Werma SL, Ghimmann and Sood B.S. - Phys. Rev. A, Vol. 17, nº 3 March 1978.

2) Bohm David - Quantum Theory - Constable and Company Ltda.10-12 Orange Street-London WC 2 1954

3) Botto David J. and Pratt H.R. Department of Physics and Astronomy University of Pittsburgh - Internal Report - Pitt. 213 May 1979

4) Bloch B.J., Mendelsohn D.B. Phys. Rev. A9, 129, 1974

5) Casimir H, Helv. Phys. Acta 6, 287,1933

6) Cooper M., Pattison, Schneider - Phil.Magazine Vol. 34, 2243 - 257, 1976

7) Du Mond J.W.M. - Phys. Rev. 35, 643, 1929

8) Du Mond J.W.M. - Rev. Mod. Phys. 5,1,1933

9) Eisenberger - Greiner - Nuclear Theory - Excitation Mechanism of the nucleus Vol. 2, 1976

10) Eisenberg - Platzman - Phys. Rev. A, Vol. 2, nº 2, 415, 1970

11) Eisenberg and Reed - Phys. Rev. A. Vol. 5, nº 5, 2085, May 1972

12) Eisenberg and Reed - Phys, Rev. B, Vol. 9, nº 8, April 1974

13) Eisenberg and Reed - Phys. Rev. B, Vol. 9, nº 8, 3242, April 1974.

14) Evans - The Atomic Nucleus - MacGraw Hill Co. Inc., 1955

15) Felsteiner, Pattison and Cooper - Phil. May 30, 537, 1974

16) Felsteiner and Pattison - Nucl.Instr. and Methods 124, 449-453, 1975

17) Felsteiner and Pattison - Phys. Rev. B, Vol. 13, nº 6, March 1976

18) Gavrila M. - Phys. Rev. A,6,1348, 1972

19) Gavrila M. - Phys. Rev. A, 6, 1360, 1972

19a) Hamilton M.C., McIntyre J.A. Bull. Am. Phys. Soc. 12, 177,1967

20) Hubbell J.H. 1969 U.S. National Bureau of Standards Circular NSROS - NBS29

21) Hubbell and Berger. Photon attenuation - Vol. 1 - Shielding Fundamentals and Methods - Engineering Compendium of Radiation Shielding-Springer-Verlag - Berlin- Heidelberg - N.York, 1968

22) Hubbell, Veigele, Briggs, Brown, Comer, Howerton - J. Phys. Chem. Ref. Data Vol. 4, nº 3, 1975

23) Jauch and Rohrlich - Addison - Wesley Publishing Company - Reading Mass. 1955

24) Mandl - Introduction Quantum Field Theory - Interscience Publishers Inc. New York 1959

25) Manninem, Paakari, Kajantie - Phil. May 29, 167-178, 1974

26) Mendelsohn. Lawrence, Biggs Frank, Mann Joseph - Int. Jour. Quantum Chem. 7, 395, 1973

27) Mendelsohn, Biggs, Mann - Chem. Phys. Letters, Vol. 26, nº 4, 521, June 1974

28) Mendelsohn, Biggs, Mann - Atomic Data and Nuclear Data Tables Vol. 16 nº 3 September 1975

29) Paatero and V. Halonem - Nuclear Instr. and Methods 135, 537-539-1976

30) Paakari and Manninem - Phys. Rev. B, Vol. 8,8, October 1973.

31) Podolsky and Linus Pauling - Phys. Rev. Vol. 34, 109, July 1929

32) Pradoux M., Meunier H, Avan M, Roche 6 - Phys. Rev. A, Vol. 16, nº 5, November 1977.

33) Ribberford Roland - Phys. Rev. B, Vol. 12, nº 6, 15 (Sep. 1975)

34) Ribberford Roland - Phys. Rev. B, Vol. 12, nº 8, 15 (Oct.1975)

35) Shivaru, Opal S.G., Sanjoevaiah B - Nuclear Instr. and Methods 140, 1977

36) Swany and D.S.R. Murty - Phys. Letters 55A, 1, Nov. 75

37) Tanner Anthony, Epstein Irving - Phys. Rev. A, Vol. 13, nº 1, jan. 76

38) Tanner Anthony, Epstein Irving - Phys. Rev. A, Vol. 14, nº 1, Julu 1976

39) Tanner Anthony, Epstein Irving - Phys. Rev. A, Vol. 14 nº 1, July 1976

40) Toscano Marina Lia - Tese de Mestrado - Estudo da razão de polarização de radiação γ de 662 Kev elasticamente espalhada em chumbo e platina

41) Watchtel S, Felsteiner J, Kahanes S, and Opher R - Phys. Rev. B, Vol. 12, 4, 15, August 1975

42) Williams B, Pattison P and Cooper M.J, Phil. Mag. 30,307, 1974

43) William S - Compton scattering - Edited by Brian William S, 1977 University of Stratchclyde - MacGraw Hill Int. Book Company

ERRATA

Em lugar de "Ribberford" leia-se "Ribberfors "

Pag.8-2º parágrafo "o tempo $\vec{p}.\vec{A}$ " leia-se "o termo $\vec{p}.\vec{A}$ "

Pag.10-Fórmula (1-12) " $\frac{d^2\sigma}{dw_2 d\Omega d\Omega_e}$ " leia-se " $\frac{d^3\sigma}{dw_2 d\Omega d\Omega_e}$ "

Pag.23-3º parágrafo "Eisenberg e Platzmann [23]" leia-se "Eisenberger e Platzmann [10] "

Pag.23-3º parágrafo "os elétrons espalhados são" leia-se "os elétrons são"

Pag.23-Eq.(1-37) "...$\int (2\pi\hbar)^3 d^3p'$ ..." leia-se"...$\int (2\pi\hbar)^{-3} d^3p'$ ..."

Pag.25-Eq.(1-31) "...$\sum_2 |\langle\psi_2|e^{i\vec{k}.\vec{r}}|\psi_1\rangle|$ ..." leia-se "...$\sum_2 |\langle\psi_2|e^{i\vec{k}.\vec{r}}|\psi_1\rangle|^2$.. "

Pag.25-...$-\frac{\hbar k}{2}]\}^2$.. (1-38)

Pag.26-2º parágrafo "para um fator incidente" leia-se "para um fóton incidente"

Pag.33-Eq.(1-60) "w e w' " leia-se "w_1 e w_2"

Pag.40-Eq.(1-91) "...2.$(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}')$" leia-se "...2.$(\vec{\varepsilon}.\vec{\varepsilon}')^2$ "

Pag.41-Fig. 1-7 "equações (1-98) e (1-99)" leia-se "equações (1-90) e (1-91) "

Pag43-3º parágrafo "dos elementos atómicos" leia-se "dos elétrons atómicos"

Pag.49- "m_oC^2 " leia-se "m_oc^2 "

Pag.65-Tabela 2-3 " .4604" leia-se " .498 "

Pag.66- " $w_1 = w_2 + Y_1$.RESOL " leia-se " $w_2 = w_2 + Y_1$.RESOL "

Pag.67- " 5cm de espessura" leia-se " .5cm de espessura"

Pag.81-Eq.(9-1) "...$+A_3x(A_5x)^2$..." leia-se "...$+A_3.(A_5x)^2$ "

Pag.99-1º parágrafo "no eixo" leia-se "no eixo y"

Pag.101- " $\sigma_{1/2} \simeq 7.83 \pm 47$ " leia-se "$\sigma_{1/2} \simeq 7.83 \pm .47$ "

Pag.101-penúltimo parágrafo "na página 96"

Pag.107- "13.27±.68 keV "

Pag.109-Tabela 4-4 "Pb^{82} 13.27±.50;Ag^{47} 12.28±.73;Cu^{29} 11.64±.43; 12.42±.74"

Pag.113-Tabela 4-7- 1º coluna $p \neq 0$

Pag.121-4º parágrafo "elementos" leia-se "elétrons"

Pag.135-último parágrafo "no espalhamento" leia-se "no alargamento"