UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E INFORMÁTICA

Novos Métodos Teóricos para Estudos
de Espalhamento de Elétrons e Pós-
trons envolvendo Processos Multica-
nais

OTIL LARA

Tese apresentada ao Instituto de Física
de São Carlos- USP; para obtenção do
título de Doutor em Ciências Física
Básica.

Orientador: Prof.Dr Lee Mu-Tao

São Carlos - São Paulo
1995

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE DOUTORADO DE OTIL LARA
APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, UNIVERSIDADE DE SÃO
PAULO, EM 01/09/1995.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Lee Mu-Tao

Prof. Dr. Luiz Eugênio Machado

Prof. Dr. Milan Tasic

Prof. Dr. Marco Aurélio Pinheiro Lima

Prof. Dr. Francisco Bolivar Correto Machado

AGRADECIMENTOS

ao prof. Dr. Lee Mu-Tao, meus sinceros agradecimentos pela orientação segura e amiga com que me conduziu durante todo este trabalho, pelo convívio entre nossas famílias durante todos estes anos, tendo ao seu lado a prof^a. Dr^a. Ione Iga, sempre cordial, amiga e solidária. É um privilégio tê-los como amigos.

aos colegas e amigos Sérgio E. Michelin, Milton Fujimoto e Rogério pelas proveitosas discussões e também pelas horas descontraídas que passamos juntos, meus agradecimentos.

aos amigos de todas as horas: Márcio e Karla, Otávio Aggio, Helena Bragato, Mário Galeano, Agda e João Carlos, Mariazinha, Ana, Struckel, Ronaldo Barbieri, Paulo Eduardo, Luíz Eugênio e Regina, e tantos outros.

à minha esposa Maria Cristina e aos nossos Guilherme, Tiago e Maria Luiza, pelo apoio carinhoso e paciente durante todo este tempo, que teve seus momentos de dificuldades e também de muita alegria.

ao Instituto de Física de São Carlos, onde fui muito bem recebido, e tive o prazer de fazer grandes amizades.

aos colegas e amigos do Departamento de Física da Universidade de Brasília, em particular ao prof. Dr. Oyanarte Portilho.

ao prof. Dr. Charles A. Dauwe, amigo que só a distancia nos separa.

às meninas da biblioteca do Instituto de Física de São Carlos, sempre solícitas, competentes e gentis.

à Wladerez e suas companheiras de trabalho na secção de alunos da Pós-Graduação, pelo carinho com que todos, a que ali se dirigem, são tratados.

à CAPES, FINEP-PADCT, CNPq e FAPESP cujo auxílio financeiro e material foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.

***Dedico este trabalho
á minha esposa Maria
Cristina e aos nossos
Guilherme, Tiago e
Maria Luiza.***

ÍNDICE

RESUMO	i
ABSTRACT	ii
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - TEORIAS	5
2.1 - FORMALISMO DE CLOSE-COUPLING	6
2.2 - FORMALISMO DE TWO-POTENTIAL E APROXIMAÇÕES DE ACOPLAMENTOS FRACOS	7
2.3 - SÉRIES DE BORN	9
2.4 - A APROXIMAÇÃO DE ONDA DISTORCIDA	10
2.5 - UNITARIZAÇÃO	10
CAPÍTULO 3 - MÉTODOS PROPOSTOS	12
3.1 - TWO-POTENTIAL MULTICANAL	12
3.2 - O FUNCIONAL - $\tilde{C}$	14
3.3 - O MÉTODO DAS FRAÇÕES CONTÍNUAS	17
CAPÍTULO 4 - CÁLCULOS E RESULTADOS	24
4.1 - POTENCIAL DE HUCK	24
4.2 - ESTUDO DE ESPALHAMENTO $e^+ \rightarrow H$ AO NÍVEL DE DOIS CANAIS ACOPLADOS (1S A 2S)	30
4.3 - ESTUDO DE ESPALHAMENTO $e^+ \rightarrow H$ AO NÍVEL DE CINCO CANAIS ACOPLADOS (1S A 2P)	36
CAPÍTULO 5 - CONCLUSÃO	40
APÊNDICE	
A - CÁLCULO DO TERMO $\langle \xi_f V_2 G_1 V_2 \xi_i \rangle$	42
B - POTENCIAIS DE INTERAÇÃO	48
REFERÊNCIAS	49

RESUMO

Dada a relevância de efeitos multicanais na interação de elétrons de baixa energia com átomos e moléculas, a consideração destes, nos cálculos de secção de choque, se torna indispensável. O objetivo do presente trabalho visa encontrar um método teórico aplicável aos espalhamentos multicanal de elétrons por moléculas, que deve reunir qualidades, tais como a exatidão de resultados calculados e a eficiência computacional. Foram propostos dois novos formalismos teóricos, que são, respectivamente, o Método de "Two-Potential" Multicanal e o Método do Funcional- $\tilde{C}$ Multicanal. Estes dois métodos foram desenvolvidos com base no Método de Ondas Distorcidas e no Princípio Variacional de Schwinger. Por outro lado, um método iterativo, conhecido como Método das Frações Contínuas, proposto por Horacek e Sakawa, em 1983, foi também adaptado, pela primeira vez, para espalhamentos multicanais.

Estes três novos métodos foram testados para resolver problemas de espalhamento multicanais com o modelo de potencial de Huck, e também para o espalhamento de pósitron por átomos de hidrogênio, a nível de dois e de cinco canais.

Nossos resultados mostraram que, entre estes três métodos, o de Frações Contínuas apresenta o melhor desempenho, tanto na eficiência computacional, quanto na exatidão dos resultados obtidos. Nosso estudo indica o grande potencial do Método de Frações Contínuas para o estudo de espalhamento de elétrons por moléculas. A generalização deste método para cálculos realísticos está em andamento.

ABSTRACT

It is well-known that multichannel effects strongly influence the low-energy electron scattering by atoms and molecules. Nevertheless, the inclusion of such effects in the calculations of scattering cross sections remains a considerable task for the researches of the area due to the complexity of the problem. In the present study, we aim to develop a new theoretical method which can be efficiently applied to the multichannel scattering studies. Two new theoretical formalism, namely, the Multichannel Two-Potential Method and the Multichannel $\tilde{C}$ -Functional Method have been proposed. Both methods were developed on the base of well-known Distorted-Wave Method combined with Schwinger Variational Principle. In addition, an iterative method proposed by Horacek and Sasakawa in 1983, the Method of Continued Fractions, is adapted by the first time to multichannel scatterings.

Numerical test of these three methods were carried out through applications to solve the multichannel scattering problems involving the interaction of an electron with Huck model potential as well as to treat the positron scattering by atomic hydrogen in the two-channel-coupling and five-channel-coupling levels.

The results of these applications show that the Method of Continued Fractions is computationally the most efficient and can provide "exact" cross sections within the numerical precision of the method. Thus, the present study indicates the potential of this method and some realistic studies of electron-molecule scattering using the Method of Continued Fractions are now in progress.

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

Colisões elétron-átomo e elétron-molécula são processos básicos em física atômica. O conhecimento das diversas secções de choque provenientes dos diferentes processos de espalhamento, tanto elástico quanto inelástico, é de fundamental importância para o entendimento da estrutura eletrônica dos átomos e moléculas, bem como dos efeitos dinâmicos que afetam os processos de colisão. Secções de choque de ionização por impacto de elétrons são dados importantes na modelagem da estrutura e na dinâmica de plasmas a altas temperaturas, que ocorrem tanto naturalmente nas estrelas e na atmosfera¹⁻³, inclusive de outros planetas, quanto artificialmente em aparelhos de fusão de plasmas, e também plasmas de baixa temperatura (plasmas frios), que se apresentam como tecnologia^{4,5} de ponta neste final de século. Esses avanços tecnológicos que têm ocorrido nos últimos anos gerou uma necessidade, cada vez maior, na precisão das secções de choque em muitas áreas de estudos fundamentais e aplicados.

Apesar de sua importância, medidas de secções de choque são muito difíceis

de serem realizadas. Existem muito poucos resultados publicados^{6,7} na literatura e aqueles disponíveis são fragmentários e, às vezes, inconsistentes entre si.

Desta forma, está clara a necessidade de desenvolver métodos teóricos eficientes e confiáveis para o cálculo de secções de choque de diversos tipos. Além de oferecer suportes técnicos aos experimentalistas, estes métodos permitirão a obtenção de secções de choque de processos difíceis, ou mesmo impossíveis, de se medir experimentalmente, como o espalhamento de elétrons por espécies quimicamente instáveis (p.ex., radicais livres) ou por espécies eletronicamente excitadas. Nos últimos dez anos várias teorias multicanais foram propostas, como o Método Variacional de Schwinger Multicanal (SMC)⁸⁻¹², Método Variacional de Kohn¹³⁻¹⁵ e matriz-R¹⁶⁻¹⁹. Estes métodos apresentam, em princípio, uma base teórica muito sólida. Entretanto, os cálculos computacionais são muito custosos e daí, os cálculos ab-initio já realizados, que incluem explicitamente todas as interações, ficaram restritos a poucos canais abertos^{17,18,20}, e também restritos a poucas moléculas, as pequenas. Muito recentemente, Lima et al^{21,22} estenderam o SMC para o cálculo de moléculas maiores aproveitando a vantagem do método de pseudo-potenciais desenvolvidos para cálculos em estado sólido. Por outro lado, as aproximações de ordem menores, tais como o método de ondas distorcidas^{23,24} que foi bastante aplicado para o cálculo de secções de choque e parâmetro de alinhamento nas colisões de elétrons com átomos, deu resultados bastante satisfatórios quando a energia do elétron incidente era alta. No início dos anos 80 o método das ondas distorcidas também foi aplicado para o cálculo de excitações eletrônicas de moléculas²⁵⁻³⁵, para moléculas pequenas. Em alguns casos, o método das ondas distorcidas, quando compara os resultados calculados com os experimentais, se mostrou satisfatório, porém, noutros casos, os resultados obtidos foram muito discrepantes. No caso

particular da excitação $X^1\Sigma_g^+ \rightarrow c^3\Pi_u$ do H_2 , embora as secções de choque calculadas com o método das ondas distorcidas estejam muito semelhantes às calculadas pelo Método Multicanal de Schwinger²⁸, ao nível de dois canais, quantitativamente ambas as teorias superestimam as secções de choque, por um fator de 3 a 4, quando comparadas com os dados experimentais³⁶ e também com os cálculos realizados com o Método Variacional de Kohn²⁰ ao nível de 5 canais, e com a matriz-R envolvendo 7 canais^{17,18}, evidenciando assim, os efeitos de acoplamento multicanal. Na tentativa de incorporar o acoplamento multicanal, Silva Jr³⁷ introduziu o método da teoria de muitos corpos de primeira ordem unitarizado para o espalhamento de elétrons por átomos de He, na faixa de energia de 29 a 80 eV, envolvendo todos os estados do He com número quântico principal $n < 3$. Em alguns casos, por exemplo, para a excitação de 1^1S a 2^3S , a introdução do acoplamento por unitarização parece ter melhorado a forma da curva de secção de choque, e já em outros casos não se registrou o mesmo efeito.

Na tentativa de entendermos os efeitos de acoplamento multicanal, realizamos um estudo sistemático para a colisão pósitron + hidrogênio, a nível de 2 e de 5 canais. Neste estudo, foram aplicados diversos métodos teóricos, desde o mais simples, que é a primeira aproximação de Born (PAB), até um método ab-initio recentemente adaptado por nós para estudos de colisões multicanais, conhecido como Método das Frações Contínuas (MFC)³⁸. Comparamos a sistemática entre os resultados obtidos por diversos métodos do presente estudo, assim como o custo computacional de cada método, o que vai nos possibilitar escolher um método teórico mais conveniente para cálculos realísticos envolvendo elétrons e moléculas.

Como o alvo mais simples e também o mais estudado é o hidrogênio atômico, elejemos a colisão $e^+ \rightarrow H$ como o objetivo deste estudo.

No Capítulo 2 apresentamos os formalismos teóricos dos diversos métodos. No Capítulo 3, dois novos métodos, Two-Potencial Multicanal (MTPM) e Método das Frações Contínuas (MCF), são mostrados com detalhes. Os resultados deste estudo são discutidos no Capítulo 4, e as conclusões são apresentadas no Capítulo 5.

CAPÍTULO 2 - TEORIAS

Neste capítulo, apresentamos os formalismos teóricos que foram utilizados neste trabalho para termos de comparação. Embora o nosso objetivo neste estudo seja o espalhamento de pósitron por átomos de hidrogênio, os formalismos foram derivados para o espalhamento de elétrons por um átomo ou molécula, onde o efeito de troca devido à indistinguibilidade entre o elétron espalhado e os elétrons do alvo é considerada. Para espalhamento de pósitrons por átomos ou moléculas esta indistinguibilidade não existe, portanto, o efeito de troca entre o projétil e os elétrons do alvo não precisa ser considerado.

2.1 FORMALISMO DE CLOSE - COUPLING

A equação de Schroedinger para a interação de um elétron com uma molécula pode ser escrita como:

$$(H_0 + V)\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

onde H_0 é o operador Hamiltoniano da molécula isolada mais o operador da energia cinética da partícula incidente, e V é o operador do potencial de interação entre o projétil e o alvo. Expandindo Ψ em termos de autoestados moleculares Φ_n , temos:

$$\Psi = \sum_n A[\Phi_n(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)F_n(\vec{r}_0)] \quad (2.2)$$

onde $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$, são as coordenadas (espacial e de spin) dos N elétrons do alvo e $\vec{r}_0$ é a coordenada do elétron espalhado, e A é o operador de antissimetria que antissimetriza a função de onda Ψ com respeito à troca de coordenadas entre o elétron-projétil e um dos elétrons do alvo. Substituindo a eq. (2.2) em (2.1) e projetando sobre o autoestado Φ_n , obteremos o conjunto de equações:

$$(\nabla^2 + k_n^2)F_n(\vec{r}_0) = \sum_{m=0}^{\infty} U_{nm}(\vec{r}_0)F_m(\vec{r}_0) \quad (2.3)$$

onde F_n corresponde à função de espalhamento no canal n , com a energia cinética do canal correspondente igual a:

$$k_n^2 = 2(E - \varepsilon_n) \quad (2.4)$$

sendo ε_n a energia correspondente ao estado Φ_n . Se $k_n^2 > 0$ o canal é aberto, caso contrário o canal é fechado. Os elementos da matriz do potencial são dados por:

$$U_{mm}(\vec{r}_0)F_m(\vec{r}_0) = 2\langle\Phi_n(r_1, \dots, r_N)|V|A(\Phi_m F_m)\rangle \quad (2.5)$$

Na prática, o somatório na eq.(2.3) é truncado para poucos canais abertos. Como os efeitos de acoplamento intercanal é levado explicitamente em conta, o método é conhecido como método de acoplamento forte (close-coupling). Em geral, o estudo de espalhamento de elétrons por moléculas com N canais retidos segue a resolução de N equações integro-diferenciais do tipo da equação (2.3), que exige um grande esforço computacional. De fato, os métodos existentes tais como o Método da matriz-R, SMC e Método Variacional de Khon pertencem à classe de acoplamento forte, embora utilizem maneiras diferentes para a resolução de equações acopladas.

2.2 FORMALISMO DE TWO-POTENTIAL E APROXIMAÇÕES DE ACOPLAMENTOS FRACOS

A eq. (2.1), que descreve a interação de um elétron com uma molécula, pode ser convertida em uma equação integral

$$\Psi = \Phi + G_0 V \Psi \quad (2.6)$$

conhecida como equação de Lippmann-Schwinger, onde Φ é a solução da equação

$$H_0 \Phi = E \Phi \quad \text{e}$$

$$G_0 = -\frac{1}{H_0 - E} \quad (2.7)$$

é o operador de Green da partícula livre. Fisicamente, Φ corresponde à solução quando não existe a interação entre o projétil e o alvo, ou seja, $V=0$.

O potencial V pode ser dividido arbitrariamente em duas partes, ou seja,

$$V = V_1 + V_2 \quad (2.8)$$

a eq.(2.1) toma a forma

$$(H_1 + V_2)\Psi = E\Psi \quad (2.9)$$

onde definimos $H_0 + V_1 = H_1$. De maneira análoga à equação (2.6), a solução geral Ψ pode ser escrita como

$$\Psi = \xi + G_1 V_2 \Psi \quad (2.10)$$

onde $G_1 = -\frac{1}{H_1 - E}$ é o novo operador de Green da onda distorcida.

A função de onda distorcida (pelo potencial V_1) é a solução da equação de Schrodinger

$$(H_0 + V_1)\xi = E\xi \quad (2.11)$$

cuja equação de Lippmann-Schwinger correspondente é

$$\xi = \Phi + G_0 V_1 \xi \quad (2.12)$$

Agora, a matriz T_{fi} de transição completa poderá ser escrita como

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (2.13)$$

e no formalismo de two-potential, T_{fi} será

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 | \Psi_i \rangle \quad (2.14)$$

2.3 SÉRIES DE BORN

Agora, se tomarmos $V_1=0$, teremos em consequência que $V=V_2$, $G_1=G_0$, $H_1=H_0$ e $\xi=\Phi$ e a equação (2.10) reduzir-se-á à equação (2.6). Substituindo a equação (2.6) na equação (2.13), sucessivamente, então a matriz-T será representada por uma série

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | V G_0 V | \Phi_i \rangle + \dots \quad (2.15)$$

que é conhecida como série de Born. Quando esta série é truncada no primeiro termo, teremos

$$T_{fi}^{B_1} \approx \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle \quad (2.16)$$

que é a matriz-T na primeira aproximação de Born (PAB).

Da mesma forma, a matriz-T na segunda aproximação de Born (SAB) é dada por

$$T_{fi}^{B_2} = \langle \Phi_f | V | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | V G_0 V | \Phi_i \rangle \quad (2.17)$$

e assim, sucessivamente.

2.4 A APROXIMAÇÃO DE ONDA DISTORCIDA

Escolhemos $V_1 \neq 0$ de tal forma que a eq. (2.11) apresenta a solução exata ξ . A substituição sucessiva da equação (2.10) na equação (2.14) nos fornece uma série semelhante à série de Born, conhecida como série de ondas distorcidas

$$T = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle + \dots \quad (2.18)$$

A matriz T_{fi} , na aproximação de ondas distorcidas de várias ordens são dadas por

$$T_{fi}^{DW_1} = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 | \xi_i \rangle \quad (2.19)$$

e

$$T_{fi}^{DW_2} = T_{fi}^{DW_1} + \langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle \quad (2.20)$$

e assim sucessivamente.

2.5 UNITARIZAÇÃO

Nas aproximações de Born e de ondas distorcidas, anteriormente discutidas, os elementos de matriz-T são calculados para cada transição, separadamente. Desta forma, a matriz-S de espalhamento global (incluindo todos os canais abertos) não é unitária. Entretanto, nas expressões anteriores, se tomarmos apenas a parte principal da função de onda, como também a parte principal da função de Green,

obteremos a matriz-K para cada transição, ao invés da matriz-T. A matriz-K global que inclui todos os canais abertos, incorporados num determinado cálculo (por exemplo , de 2 canais) pode ser obtida. A unitarização se processa através da relação

$$S = \frac{1+iK}{1-iK} \quad (2.21)$$

A matriz-S acima obtida é unitária dentro do sub-espço dos canais abertos incluídos no cálculo. A matriz-T global é obtida pela expressão

$$T = -\frac{2iK}{1-iK} \quad (2.22)$$

e a matriz da amplitude de espalhamento, dada por

$$f = -2\pi^2 T \quad (2.23)$$

CAPÍTULO 3 - MÉTODOS PROPOSTOS

Neste capítulo, apresentamos os dois novos formalismos teóricos que foram utilizados neste trabalho, que são, respectivamente, Two-Potential Multicanal (MTPM) e o Método das Frações Contínuas (MCF), tratados com detalhes, bem como o Método do Funcional- $\tilde{C}$ Multicanal que é uma extensão imediata do MTPM.

3.1 TWO - POTENTIAL MULTICANAL

Nesta secção, apresentaremos um novo formalismo teórico, desenvolvido por nosso grupo, denominado de Método "Two-Potential" Multicanal (MTPM). O MTPM é uma combinação da aproximação de ondas distorcidas e do método variacional de Schwinger. Os acoplamentos de canais são introduzidos naturalmente e a matriz-S obtida é unitária. Reescrevendo a equação (2.14) utilizando somente os valores principais das funções, obteremos a matriz-K para uma determinada transição, que pode ser escrita de tres formas diferentes

$$K_{fi} = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 | \Psi_i \rangle \quad (3.1a)$$

$$K_{\hat{f}} = \langle \xi_f | V_1 | \Phi_i \rangle + \langle \Psi_f | V_2 | \xi_i \rangle \quad (3.1b)$$

e

$$K_{\hat{f}} = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \langle \Psi_f | V_2 - V_2 G_1 V_2 | \Psi_i \rangle \quad (3.1c)$$

Podemos definir um funcional para $T_{\hat{f}}$ como

$$[T] = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 | \Psi'_i \rangle + \langle \Psi'_f | V_2 | \xi_i \rangle - \langle \Psi'_f | V_2 - V_2 G_1 V_2 | \Psi'_i \rangle \quad (3.2)$$

onde Ψ'_i (Ψ'_f) é a função de onda tentativa

$$\Psi' = \Psi + \delta\Psi$$

e o funcional assim definido é estável na primeira ordem com a variação da função de onda, isto é, $\delta[T] = 0$

Tomando as funções de onda tentativa na forma

$$|\Psi'_i\rangle = \sum_m c_m |\xi_{im}\rangle \quad \text{e} \quad \langle \Psi'_f| = \sum_n \langle \xi_n | c_n^* \quad (3.3)$$

onde m,n representam conjunto de autofunções de H_1 , e c_m , c_n são parâmetros variacionais, então,

$$\frac{\delta[T]}{\delta c_n} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\delta[T]}{\delta c_m} = 0 \quad (3.4)$$

Desta forma, aplicando estas condições na equação (3.2) obteremos

$$c_m = \sum_n \frac{\langle \Psi_f | V_2 | \xi_i \rangle}{\langle m | V_2 - V_2 G_1 V_2 | n \rangle} \quad (3.5)$$

Nestes termos, a matriz T_{fi} de transição toma a forma

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \sum_{m,n} \langle \xi_f | V_2 | \xi_m \rangle \langle \xi_m | V_2 - V_2 G_1 V_2 | \xi_n \rangle^{-1} \langle \xi_n | V_2 | \xi_i \rangle \quad (3.6)$$

sendo ξ_m a função de onda distorcida no canal de espalhamento m .

Finalmente, fazendo $V_1=0$, o que implica em que $V_2=V_1$, $\xi=\Phi$, $G_1=G_0$, teremos

$$T_{fi} = \sum_{m,n} \langle \Phi_f | V | m \rangle \langle m | V - V G_0 V | n \rangle^{-1} \langle n | V | \Phi_i \rangle \quad (3.7)$$

que nos dá a aproximação de Born-Schwinger. Na equação (3.6), o termo $\langle \xi_m | V_2 G_1 V_2 | \xi_n \rangle$ é o que exige maior esforço computacional. O cálculo deste termo e os resultados dos testes de convergência são mostrados em detalhes no Apêndice A.

3.2 O FUNCIONAL - $\tilde{C}$

Uma extensão imediata do MTPM é o Método do Funcional- $\tilde{C}$ Multicanal (MFCM). O funcional- $\tilde{C}$ foi introduzido inicialmente por Takatsuka e McKoy, para espalhamento de elétrons por átomos e moléculas, onde as funções de base utilizadas são do tipo quadraticamente integráveis (L^2 -functions). Mais tarde, Lee et al introduziram a versão do funcional- $\tilde{C}$ iterativo e demonstraram que o funcional- $\tilde{C}$ converge em 1ª ordem mais rápido que o Método Variacional de Schwinger normal, isto é, a solução da 1ª iteração do funcional- $\tilde{C}$ corresponde aproximadamente à solução da 2ª iteração do método variacional de Schwinger, e assim por diante. Uma outra vantagem do funcional- $\tilde{C}$ é que este não aumenta em muito os esforços com-

putacionais em comparação com o MTPM, desde que as integrais necessárias sejam as mesmas. A seguir, derivaremos resumidamente o método do funcional- $\tilde{C}$ multi-canal, baseado na combinação do método de ondas distorcidas e do funcional- $\tilde{C}$ normal.

Começamos pela equação integral

$$\Psi = \xi + G_1 V_2 \Psi \quad (3.8)$$

A parte da função de onda que corresponde à parte espalhada da função- $\tilde{C}$, é definida como sendo

$$\tilde{C} = \Psi - \xi = G_1 V_2 \Psi = G_1 V_2 \xi + G_1 V_2 \tilde{C} \quad (3.9)$$

e utilizando as equações (3.8) e (3.1a), a matriz-K do espalhamento poderá ser re-escrita, em termos de $\tilde{C}$ como

$$K_{fi} = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \tilde{C}_i \rangle \quad (3.10)$$

É também possível demonstrar as seguintes identidades

$$\langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \tilde{C}_i \rangle = \langle \tilde{C}_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle = \langle \tilde{C}_f | V_2 - V_2 G_1 V_2 | \tilde{C}_i \rangle \quad (3.11)$$

para a função $\tilde{C}$. Desta forma podemos definir um funcional variacional associado com a equação (2.33), como

$$[X] = \langle C'_f | V_2 G_1 V_2 | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | V_2 G_1 V_2 | C'_i \rangle - \langle C'_f | V_2 - V_2 G_1 V_2 | C'_i \rangle \quad (3.12)$$

onde C_i' (C_f') são as funções-C tentativas, associadas com os canais de espalhamento iniciais (e finais), e estão relacionadas com C exato através da relação $C' = C + \delta C$, o funcional $[X]$ é estável em relação a δC , até primeira ordem.

Tomando as funções de onda tentativa na forma

$$|C\rangle = \sum_m d_m |\xi_m\rangle \quad \text{e} \quad \langle C| = \sum_n d_n \langle \xi_n| \quad (3.13)$$

onde ξ_i são as soluções da equação de ondas distorcidas para o canal de espalhamento n, e substituindo a equação (3.13) na (3.12), obtemos

$$[X] = \sum_n d_n \langle C_n | V_2 G_1 V_2 | \Phi \rangle + \sum_m \langle \Phi | V_2 G_1 V_2 | C_m \rangle d_m - \sum_{n,m} d_n \langle C_n | V_2 - V_2 G_1 V_2 | C_m \rangle d_m \quad (3.14)$$

Impondo a condição

$$\frac{\delta [X]}{\delta d_n} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\delta [X]}{\delta d_m} = 0 \quad (3.15)$$

chegamos a

$$\langle \xi_n | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle - \sum_m \langle \xi_n | V_2 - V_2 G_1 V_2 | \xi_m \rangle d_m = 0 \quad (3.16)$$

com $n = 1, 2, 3, \dots, N$.

Teremos assim na forma matricial

$$\tilde{A} = \tilde{B} \tilde{d} \quad (3.17)$$

onde $\tilde{A}$ é uma matriz de dimensão $1 \times N$, com elementos $A = \langle \xi_n | V_1 G_2 V_1 | \xi_i \rangle$, $\tilde{B}$ é uma matriz quadrada de dimensão $N \times N$ com elemento $B_{nm} = \langle \xi_n | V_2 - V_2 G_1 V_1 | \xi_m \rangle$, e $\tilde{d}$ é a matriz da solução da equação (3.16). Assim, podemos escrever

$$\tilde{d} = \tilde{B}^{-1} \tilde{A} \quad (3.18)$$

Substituindo a equação (3.17) na equação (3.10), obteremos a matriz- K_f de espalhamento na forma

$$K_f = \langle \Phi_f | V_1 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 | \xi_i \rangle + \langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle + \tilde{X} \quad (3.19)$$

onde

$$X = \sum_{nm} \langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle \langle \xi_n | V_2 - V_2 G_1 V_2 | \xi_m \rangle^{-1} \langle \xi_m | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle \quad (3.20)$$

Novamente, tomando $V_1=0$, $V_2=V$ e $\xi = \Phi$, obteremos o MFCM-Born, cuja matriz- K de espalhamento é dada por

$$K_f^{MCFM-B} = \langle \Phi | V | \Phi \rangle + \langle \Phi | V G_0 V | \Phi \rangle + \sum_{nm} \langle \Phi_f | V G_0 V | \Phi_n \rangle \langle \Phi_n | V - V G_0 V | \Phi_m \rangle^{-1} \langle \Phi_m | V G_0 V | \Phi_i \rangle \quad (3.21)$$

3.3 MÉTODO DAS FRAÇÕES CONTÍNUAS

A resolução da equação de Lippmann-Schwinger para o espalhamento de elétrons por átomos, utilizando o Método das Frações Contínuas (MCF), foi proposto inicialmente por Horacek e Sasakawa³⁸, em 1.983. Naquele trabalho, estes autores

aplicaram o MCF para calcular o deslocamento de fase parcial ($l=0$) no espalhamento de elétrons por átomos de hidrogênio ao nível das aproximações de potencial estático e de estático-troca, e verificaram que o MCF é um método muito eficiente para tratar problemas de elétron-átomos. Desde então, várias versões extendidas⁴¹⁻⁴⁴ e vários testes numéricos^{38,41,45,46}, utilizando potenciais modelo, tanto local quanto não local, foram realizados. Em todos estes testes verificaram que a convergência do MCF é rápida, mesmo para potencial de interação forte, o que sugere a aplicação do MCF para estudos de espalhamento elétron-átomo e elétron-molécula. Entretanto, mais de dez anos se passaram e o MCF continua sendo muito pouco explorado nos problemas de espalhamento.

Neste trabalho, o MCF é utilizado pela primeira vez para estudos de espalhamento de pósitron por átomo de hidrogênio, ao nível de 2 canais e de 5 canais e, os resultados obtidos são extremamente animadores. A seguir mostramos, resumidamente, o método para o espalhamento por um potencial.

Para um potencial V , local ou não local, suposto ser Hermitiano, consideremos a equação de espalhamento:

$$\Psi = \Phi + G_0 V \Psi \quad (3.22)$$

onde G_0 denota a função de Green da onda plana, dada em termos da função de Ricatti-Bessel $u_l(kr)[v_l(kr)]$ por:

$$G_0 = -\frac{1}{k} \begin{cases} u_l(kr)v_l(kr'), & p/r' > r \\ u_l(kr')v_l(kr), & p/r' < r \end{cases} \quad (3.23)$$

Nosso propósito é calcular a matriz de espalhamento K definida por:

$$K = \langle \Phi | V | \Psi \rangle \quad (3.24)$$

que está relacionada com o desvio de fase δ por:

$$K = -\frac{1}{k} \text{tg} \delta \quad (3.25)$$

Suponhamos que a primeira aproximação de Born para K , ou seja, $\langle \Phi | V | \Phi \rangle$, não seja igual a zero. Pode ser definido um potencial já “enfraquecido” $V^{(1)}$ por:

$$V^{(1)} = V - \frac{V | \Phi \rangle \langle \Phi | V}{\langle \Phi | V | \Phi \rangle} \quad (3.26)$$

Colocando esta expressão na equação (3.22), obtemos:

$$\Psi = \Phi + G_0 V | \Phi \rangle \frac{\langle \Phi | V | \Phi \rangle}{\langle \Phi | V | \Psi \rangle} + G_0 V^{(1)} | \Psi \rangle \quad (3.27)$$

A solução desta equação é expressa formalmente como:

$$\Psi = \Phi + \left(1 - G_0 V^{(1)}\right)^{-1} G_0 V | \Phi \rangle \frac{\langle \Phi | V | \Psi \rangle}{\langle \Phi | V | \Phi \rangle} \quad (3.28)$$

onde fizemos uso da propriedade ortogonal de $V^{(1)}$ em relação a Φ ,

$$\begin{aligned} V^{(1)} | \Phi \rangle &= 0, \\ \langle \Phi | V^{(1)} &= 0, \end{aligned} \quad (3.29)$$

Definimos duas funções Φ_1 e Ψ_1 por:

$$\Phi_1 = G_0 V \Phi \quad (3.30a)$$

$$\Psi_1 = \left(1 - G_0 V^{(1)}\right)^{-1} \Phi_1 \quad (3.30b)$$

Em termos destas funções, a equação (3.28) fica:

$$\Psi = \Phi + \Psi_1 \frac{\langle \Phi | V | \Psi \rangle}{\langle \Phi | V | \Phi \rangle} \quad (3.31)$$

Multiplicando $\langle \Phi | V$ pela esquerda em ambos os lados da equação (3.31), obtemos, após alguns cálculos:

$$\Psi = \Phi + \Psi_1 \frac{\langle \Phi | V | \Phi \rangle}{\langle \Phi | V | \Phi \rangle - \langle \Phi | V | \Psi_1 \rangle} \quad (3.32)$$

Ainda, se colocarmos esta expressão na equação (3.24) obtemos:

$$K = \frac{\langle \Phi | V | \Phi \rangle^2}{\langle \Phi | V | \Phi \rangle - \langle \Phi | V | \Psi_1 \rangle} \quad (3.33)$$

Com estas equações terminamos o primeiro passo.

No próximo passo, seguimos um procedimento semelhante. Da equação (3.30b), vemos que a função Ψ_1 satisfaz à equação de Lippmann-Schwinger

$$\Psi_1 = \Phi_1 + G_0 V^{(1)} \Psi_1 \quad (3.34)$$

que é do mesmo tipo que aquelas equações com que iniciamos o primeiro passo, ou seja, a equação (3.23). Portanto, podemos seguir o mesmo procedimento do primeiro passo. Analogamente às equações (3.26), (3.30a) e (3.30b), definimos $V^{(2)}$, Φ_2 e Ψ_2 por:

$$\begin{aligned} V^{(2)} &= V^{(1)} - \frac{V^{(1)} |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| V^{(1)}}{\langle \Phi_1 | V^{(1)} | \Phi_1 \rangle} \\ \Phi_2 &= G_0 V^{(1)} \Phi_1 \\ \Psi_2 &= (1 - G_0 V^{(2)})^{-1} \Phi_1 \end{aligned} \quad (3.35)$$

O potencial $V^{(2)}$ é ortogonal a ambos Φ e Φ_1 ,

$$\begin{aligned} V^{(2)}|\Phi\rangle &= V^{(2)}|\Phi_1\rangle = 0 \\ \langle\Phi|V^{(2)} &= \langle\Phi_1|V^{(2)} = 0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

Procedendo da mesma maneira que no passo anterior, obtemos a seguinte equação para Ψ_1 e Ψ_2 :

$$\Psi_1 = \Phi_1 + \Psi_2 \frac{\langle\Phi_1|V^{(1)}|\Phi_1\rangle}{\langle\Phi_1|V^{(1)}|\Phi_1\rangle - \langle\Phi_1|V^{(1)}|\Psi_2\rangle} \quad (3.37a)$$

$$\Psi_2 = \Phi_2 + G_0 V^{(2)} \Psi_2 \quad (3.37b)$$

Este procedimento é repetido. Após N passos, temos

$$\Psi_N = \Phi_N + \Psi_{N+1} \frac{\langle\Phi_N|V^{(N)}|\Phi_N\rangle}{\langle\Phi_N|V^{(N)}|\Phi_N\rangle - \langle\Phi_N|V^{(N)}|\Psi_{N+1}\rangle} \quad (3.38a)$$

$$\Phi_{N+1} = G_0 V^{(N)} \Phi_{N+1} \quad (3.38b)$$

$$\Psi_{N+1} = \Phi_{N+1} + G_0 V^{(N+1)} \Psi_{N+1} \quad (3.38c)$$

O operador $V^{(N)}$ é ortogonal a Φ , Φ_1 , Φ_2 , ..., Φ_{N-1}

$$\begin{aligned} V^{(N)}|\Phi_i\rangle &= 0 \\ \langle\Phi_i|V^{(N)} &= 0 \end{aligned} \quad \text{para } i = 0, 1, 2, \dots, N-1. \quad (3.39)$$

Portanto, esperamos que o operador $V^{(N)}$ venha a ficar cada vez mais fraco com o aumento de N. Como um resultado, seremos capazes de parar o procedimento após certo número de passos M. Desprezando o termo $G_0 V^{(M)} \Psi_M$, podemos colocar:

$$\Psi_M \cong \Phi_M \quad (3.40)$$

e usando as equações (3.38), construímos a função de onda Ψ_i .

Na prática, o cálculo da amplitude de espalhamento é mais simples que a função de onda. Em virtude das equações (3.38b) e (3.39), obtemos as seguintes relações :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_N | V^{(N)} | \Phi_{N+2} \rangle &= \langle \Phi_{N+1} | V^{(N+1)} | \Phi_{N+1} \rangle \\ \langle \Phi_N | V^{(N)} | \Phi_{N+M} \rangle &= 0 \end{aligned} \quad \text{para } M=3, 4, \dots \quad (3.41)$$

Aquí,

$$\Phi_0 = \Phi, \quad \text{e} \quad V^{(0)} = V \quad (3.42)$$

Vamos definir a amplitude parcial K_i ($i=1,2,3,\dots$) por

$$K_i = \langle \Phi_{i-1} | V^{(i-1)} | \Psi_i \rangle \quad (3.43)$$

Se usamos as equações (3.38) e (3.41), podemos expressar K_i na forma de uma fração contínua

$$K_i = \langle \Phi_{i-1} | V^{(i-1)} | \Phi_i \rangle + \frac{\langle \Phi_i | V^{(i)} | \Phi_i \rangle^2}{\langle \Phi_i | V^{(i)} | \Phi_i \rangle - K_{i+1}} \quad (3.44)$$

A amplitude K_1 é dada pela equação (3.44), enquanto que ela está relacionada à amplitude de espalhamento por:

$$K = K_B + K_1 \frac{K_B}{K_B - K_1} \quad \text{onde} \quad K_B = \langle \Phi | V | \Phi \rangle \quad (3.45)$$

Como o núcleo do método proposto é a equação (3.44), devemos chamar este método de Método das Frações Contínuas (MCF). Uma vez obtida K_1 , a função de onda Ψ é calculada com a ajuda de Ψ_1 pela equação (3.32)

$$\Psi = \Phi + \Psi_1 \frac{K_B}{K_B - K_1} \quad (3.46)$$

Em suma, começamos com $i=1$. A amplitude parcial K_1 é calculada colocando-se $K_2=0$ na equação (3.44),

$$K_1 = \langle \Phi | V | \Phi_1 \rangle + \langle \Phi_1 | V^{(1)} | \Phi_1 \rangle \quad (3.47)$$

Armazenamos as duas integrais $\langle \Phi | V | \Phi_1 \rangle$ e $\langle \Phi_1 | V^{(1)} | \Phi_1 \rangle$ e a função Φ_1 na memória. Para $i=N(>2)$, calculamos a função Φ_N , as duas integrais $\langle \Phi_{N-1} | V^{(N-1)} | \Phi_N \rangle$ e $\langle \Phi_N | V^{(N)} | \Phi_N \rangle$. Armazenamos estas na memória e apagamos Φ_{N-1} . Colocamos $K_{N+1}=0$, calculamos $K_N, K_{N-1}, \dots, K_1$ usando $\langle \Phi_{i-1} | V^{(i-1)} | \Phi_i \rangle$ e $\langle \Phi_i | V^{(i)} | \Phi_i \rangle$ para $i=1, 2, \dots, N$, armazenados. Seguimos este procedimento no cálculo de K_{N+1} . Calculamos $\langle \Phi_N | V^{(N)} | \Phi_{N+1} \rangle$ e $\langle \Phi_{N+1} | V^{(N+1)} | \Phi_{N+1} \rangle$ e a função Φ_{N+1} . Armazenamos estes na memória e apagamos Φ_N . Calculamos K_{N+1} colocando $K_{N+2}=0$. Os valores melhorados de $K_N, \dots, K_1$ são obtidos pelo uso do valor de K_{N+1} e das integrais armazenadas $\langle \Phi_{i-1} | V^{(i-1)} | \Phi_i \rangle$ e $\langle \Phi_i | V^{(i)} | \Phi_i \rangle$ para $i=1, 2, \dots, N$. Repetimos este procedimento até que o valor de K_1 não varie mais. Então, paramos com o procedimento iterativo. Levamos este valor de K_1 na equação (3.45) para obter a amplitude de espalhamento. Tendo os valores convergentes de $K_N, \dots, K_1$, e fazendo uso da equação (3.43) nas equações (3.37a), (3.38a) e (3.46) podemos calcular a função de onda.

CAPÍTULO 4 - CÁLCULOS E RESULTADOS

4.1 POTENCIAL DE HUCK

Como primeira aplicação, utilizamos os Métodos de Two-Potential Multicanal (MTPM), do Funcional- $\tilde{C}$ Multicanal (MFCM) e das Frações Contínuas (MCF) para o estudo do espalhamento de elétrons por um potencial modelo de dois canais, conhecido como potencial de Huck⁴⁷.

O potencial de Huck é um potencial multicanal com a forma:

$$V_{ij} = \begin{cases} C(1 - \delta_{ij}) & \text{para } r \leq a \\ 0 & \text{para } r > a \end{cases} \quad i, j = 1, 2 \quad (4.1)$$

onde a é o alcance do potencial e C é a altura da barreira de potencial. A forma simples da matriz do potencial fornece a solução analítica da equação de Lippmann-Schwinger que apresenta a condição de contorno na região $r > a$ como:

$$\Psi_{ij}(\vec{r})_{r \rightarrow \infty} \rightarrow \Phi_{ij}(\vec{r}) + K_{ij} \frac{\cos(k_i r)}{(k_i)^{1/2}}, \quad k_{ij}^2 > 0 \quad (4.2)$$

onde podemos obter os valores exatos para os elementos da matriz-K. Devido a que os elementos da diagonal do potencial serem iguais a zero, este modelo representa equações fortemente acopladas e nos permite simular vários potenciais de diferentes intensidades mudando-se a constante C. Pela sua simplicidade, este modelo tem sido frequentemente utilizado para testar métodos aproximados^{42,48} e para comparar a convergência, a acurácia, etc, dos diferentes enfoques. Assim procedemos fazendo cálculos utilizando o método de two-potential multicanal (MTPM) e, também o método das frações contínuas (MCF), comparando os resultados com os valores exatos.

Para testarmos nosso método, começamos com o espalhamento de elétrons pelo potencial modelo de Huck, de 2 canais. O Hamiltoniano completo, i.e., projétil mais alvo, é dado por:

$$H = H_0 + V \quad (4.3)$$

onde

$$H_0 = |\varphi_1\rangle \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} \right) \langle \varphi_1| + |\varphi_2\rangle \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \Delta E \right) \langle \varphi_2| \quad (4.4)$$

sendo que $|\varphi_i\rangle$ são as funções ortonormais dos estados do alvo,

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn} \quad (4.5)$$

No nosso estudo, estabelecemos $V_1 = 0$, então $V_2 = V$, e isto implica em que

$$\begin{aligned} G_1 &= G_0 \\ \xi_i &= S_i \end{aligned} \quad (4.6)$$

ou seja, a função de Green distorcida pelo potencial V_1 é substituída pela função de Green da partícula livre, G_0 , e a onda distorcida ξ_m é substituída pela onda plana S_m ($t=0$).

Assim, a equação para um elemento da matriz - K , neste MTPM, se reduz a :

$$K_{fn} = \sum_{m,n} \frac{\langle S_f | V | S_m \rangle \langle S_n | V | S_i \rangle}{\langle S_m | V - V G_0 V | S_n \rangle}, \quad m, n = 1, 2 \quad (4.7)$$

onde a função de Green da partícula livre, G_0 , é:

$$G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}_1', \vec{r}_2') = \sum_{m=1}^2 S_m(r_1, r_<) C_m(r_1', r_>) \quad (4.8)$$

e as funções S_m e C_m , são dadas por:

$$\begin{aligned} S_m(r_1, r_<) &= k_m^{-1/2} \sin(k_m r) | \varphi_m \rangle \\ C_m(r_1, r_>) &= k_m^{-1/2} \cos(k_m r) | \varphi_m \rangle \end{aligned} \quad (4.9)$$

Com relação ao método das frações contínuas multicanal (MCFM), a matriz-K será:

$$K_{fn} = \langle S_f | V | S_i \rangle + \langle S_f | V G_0 V | S_i \rangle + \sum_{m,n} \frac{\langle S_f | V G_0 V | S_m \rangle \langle S_n | V G_0 V | S_i \rangle}{\langle S_m | V - V G_0 V | S_n \rangle} \quad (4.10)$$

Para podermos comparar os nossos resultados com os dados disponíveis na literatura, escolhemos os mesmos parâmetros utilizados por outros autores, i.e.,

$$a = 1.0 a_0, \quad k_1 = 1.0 a_0^{-1}, \quad k_2 = 0.5 a_0^{-1} \quad (4.11)$$

Mostramos agora os resultados obtidos, pela utilização do MCF, após cada iteração, onde podemos observar a rápida convergência deste método. Com apenas 3 iterações já temos o valor convergido.

Tabela 1 - Evolução dos resultados obtidos para os elementos da matriz-K, a dois canais, utilizando-se do potencial de Huck, e pelo método MCF, após cada iteração.

		iteração 0	iteração 1	iteração 2	iteração 3
$C^2 = 2.0$	k_{11}	0.00000000D+00	0.24372131D+00	0.24393307D+00	0.24393310D+00
	k_{12}	-0.29385442D+00	-0.36105080D+00	-0.36116573D+00	-0.36116575D+00
	k_{22}	0.00000000D+00	0.97680660D-01	0.97788881D-01	0.97788895D-01
$C^2 = 4.0$	k_{11}	0.00000000D+00	0.63625696D+00	0.63806425D+00	0.63806476D+00
	k_{12}	-0.41557291D+00	-0.66363324D+00	-0.66475770D+00	-0.66475802D+00
	k_{22}	0.00000000D+00	0.25500438D+00	0.25585136D+00	0.25585159D+00
$C^2 = 6.0$	k_{11}	0.00000000D+00	0.13736860D+01	0.13838527D+01	0.13838571D+01
	k_{12}	-0.50897078D+00	-0.11648370D+01	-0.11713701D+01	-0.11713730D+01
	k_{22}	0.00000000D+00	0.55055734D+00	0.55503272D+00	0.55503462D+00
$C^2 = 8.0$	k_{11}	0.00000000D+00	0.32663444D+01	0.33344302D+01	0.33344712D+01
	k_{12}	-0.58770884D+00	-0.23883056D+01	-0.24320905D+01	-0.24321168D+01
	k_{22}	0.00000000D+00	0.13091128D+01	0.13376935D+01	0.13377105D+01
$C^2 = 10.0$	k_{11}	0.00000000D+00	0.18832380D+02	0.21768170D+02	0.21770724D+02
	k_{12}	-0.65707846D+00	-0.12262798D+02	-0.14129275D+02	-0.14130897D+02
	k_{22}	0.00000000D+00	0.75477987D+01	0.87350226D+01	0.87360532D+01
$C^2 = 12.0$	k_{11}	0.00000000D+00	-0.86526887D+01	-0.80873802D+01	-0.80868950D+01
	k_{12}	-0.71979339D+00	0.51209201D+01	0.47673951D+01	0.47670905D+01
	k_{22}	0.00000000D+00	-0.34678968D+01	-0.32460709D+01	-0.32458792D+01

Na Tabela 2, apresentamos os elementos de matrizes- K, para 4 processos de espalhamentos, calculadas com MTPM e MCF, utilizando-se do potencial de Huck, de dois canais. Para $C^2 = 10$, os resultados exatos são também mostrados.

Tabela 2 - Elementos de matrizes- K, calculadas utilizando-se do potencial de Huck, de dois canais. Únicodado disponível na literatura é aquele correspondente a $C^2 = 10$.

C^2	2	4	6	8	10	12
two-potential	$k_{00} = 0.24118598$	0.61930358	1.2971913	2.8654397	10.433999	-13.71298
	$k_{01} = -0.35882732$	-0.65151137	-1.1142349	-2.1315463	-6.9422345	8.3289394
	$k_{11} = 0.09666422$	0.24820887	0.51989746	1.1484312	4.1818123	-5.495986
MCF	$k_{00} = 0.24393307$	0.63806476	1.3838571	3.3344712	21.770724	-8.0868950
	$k_{01} = -0.36116575$	-0.66475802	-1.171373	-2.4321168	-14.130897	4.7670905
	$k_{11} = 0.097788895$	0.25585159	0.55503462	1.3377105	8.7360532	-3.2458792
Exato ⁴³					21.7653 -14.1274 8.733	

Observa-se que para $C^2 = 10$, os nossos resultados, obtidos com MCF, estão em excelente concordância com os resultados exatos, enquanto todos os elementos de matriz- K obtidos com MTPM são, praticamente, metade dos valores exatos. Por outro lado, como é esperado para as interações fracas, e.g., $C^2 = 2.0$, os resultados de MTPM e os do MCF estão em boa concordância entre si. Os resultados obtidos com MFCM são idênticos aos do MTPM e, portanto, não foram mostrados.

Nas Tabelas de 3 a 6, apresentamos os resultados de secção de choque total para os canais de espalhamento $1 \rightarrow 1$ (Q_{11}), $1 \rightarrow 2$ (Q_{12}), $2 \rightarrow 1$ (Q_{21}) e $2 \rightarrow 2$ (Q_{22}) obtidos por nós utilizando os métodos MTPM e MCF. Os resultados do MCF foram obtidos com 3 iterações. Estes resultados são comparados com os valores exatos.

Tabela 3 - Secções de choque integral para o espalhamento elástico $1 \rightarrow 1$ (Q_{11}) em unidades de πa_0^2 .

C^2	2	4	6	8	10	12
two-potential	0.207429	0.771895	1.39246	1.84652	2.12103	2.27435
MCF	0.211328	0.796658	1.44020	1.90054	2.16792	2.30905
Exato ⁴⁸	0.211324	0.796646	1.44018	1.90053	2.16791	2.30904

Tabela 4 - Secções de choque integral para o espalhamento elástico $1 \rightarrow 2$ (Q_{12}) em unidades de πa_0^2 .

C^2	2	4	6	8	10	12
two-potential	0.385458	0.717192	0.862518	0.857831	0.788288	0.704392
MCF	0.388996	0.726205	0.866754	0.849441	0.767458	0.674327
Exato ⁴⁸	0.388993	0.726203	0.866754	0.849444	0.767462	0.674333

Tabela 5 - Secções de choque integral para o espalhamento elástico $2 \rightarrow 1$ (Q_{21}) em unidades de πa_0^2 .

C^2	2	4	6	8	10	12
two-potential	1.54183	2.86877	3.45007	3.43132	3.15315	2.81757
MCF	1.55598	2.90482	3.46702	3.39776	3.06983	2.69731
Exato ⁴⁸	1.55597	2.90481	3.46702	3.39777	3.06985	2.69733

Tabela 6 - Secções de choque integral para o espalhamento elástico $2 \rightarrow 2$ (Q_{22}) em unidades de πa_0^2 .

C^2	2	4	6	8	10	12
two-potential	0.245029	0.911814	1.64487	2.18124	2.50551	2.68662
MCF	0.249588	0.940709	1.70029	2.24333	2.55844	2.72445
Exato ⁴⁸	0.249583	0.940700	1.70028	2.24333	2.55844	2.72445

Novamente, para toda a faixa de intensidade de potencial estudada, a concordância entre as secções de choque calculadas por MCF estão em excelente concordância com os valores exatos. Entretanto, é interessante notar que os resultados de secções de choque obtidos por MTPM estão, também, em boa concordância com os resultados de MCF e do cálculo exato, mesmo para as interações mais fortes.

Através deste estudo podemos concluir que o MCF é um método muito superior ao MTPM, tanto na exatidão dos resultados quanto no esforço computacional. Esta disparidade se torna muito mais evidente nos estudos de espalhamento multicanais de $e^+ \rightarrow H$, conforme veremos mais adiante.

4.2 ESTUDO DE ESPALHAMENTO $e^+ \rightarrow H$ AO NÍVEL DE DOIS CANAIS ACOPLADOS (1S - 2S)

Nesta e na próxima secção apresentamos os estudos de espalhamento de pósitrons de baixa energia por átomos de hidrogênio, a nível de dois canais (1S - 2S) e de cinco canais (1S - 2S - $2P_0$ - $2P_1$ - $2P_{-1}$). O principal objetivo de nosso estudo visa uma investigação sistemática sobre os diversos métodos aproximados que são aplicáveis aos espalhamentos multicanais, tanto no aspecto da exatidão do método quanto a eficiência do mesmo. Esperamos que, através deste estudo, possamos selecionar dentre os diversos métodos propostos neste trabalho, aquele que une ambas as qualidades para nossos estudos futuros de espalhamento de elétrons por moléculas. O processo de espalhamento de pósitron por átomos de hidrogênio foi

escolhido por ser, a nível de modelo matemático, um dos processos mais simples (desconsiderando tanto a formação de positronium quanto os processos de aniquilação), pelo fato também do pósitron ser distinto do elétron do alvo e, em consequência, não existir o efeito de troca. Por outro lado, alguns resultados de secção de choque de espalhamento de $e^+ \rightarrow H$ já foram publicados na literatura, o que nos permitirá uma comparação.

Neste estudo, calculamos somente as secções de choque integradas parciais para o momento angular total (alvo + projétil) $L = 0$. Esta secção de choque, para uma dada transição $i \rightarrow f$ é dada por:

$$\sigma_{fi}^{(L=0)} = \frac{\pi}{k_i^2} |T_{fi}^{(L=0)}|^2 \quad (4.12)$$

onde $T_{fi}^{(L=0)}$ é o elemento parcial da matriz - T de transição, que está relacionada com a matriz - K da reatância, através de:

$$T = -\frac{2iK}{1-iK} \quad (4.13)$$

onde, por sua vez, os elementos da matriz - K, K_{fi} são dados por:

$$K_{fi} = \langle \phi_f | U_{fi} | \Psi_i^P \rangle \quad (4.14)$$

onde Ψ_i^P é o valor principal da função do espalhamento do canal i, e ϕ_f é a função de onda da partícula livre, e $U_{fi} = 2V_{fi}$ é o potencial de interação reduzido, sendo V_{fi} dado por:

$$V_{fi}(2) = \langle \phi_f(1) | V(1,2) | \phi_i(1) \rangle \quad (4.15)$$

em que o operador de energia potencial V é dado por:

$$V(1,2) = \frac{1}{r_2} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \tag{4.16}$$

As expressões dos potenciais de interação para os canais considerados neste trabalho estão listados no Apêndice B.

Na Tabela 7, a seguir, apresentamos as secções de choque parcial ($L = 0$) para o espalhamento de pósitron por H, ao nível de dois canais, obtidos por diversos métodos, na energia incidente de 1 Ryd (13.606 eV, $k = 1.0$).

Tabela 7 - Secções de choque total parcial ($L= 0$), em unidades de πa_0^2 , para o espalhamento de e^+ por hidrogênio, ao nível de dois canais, e para $k_i = 1.0$.

	1S $\rightarrow$ 1S	1S $\rightarrow$ 2S	2S $\rightarrow$ 2S
PAB	1.424	0.196	26.4
PABU	0.997	0.0191	13.7
SAB	0.355	0.0470	2.61
SABU	0.311	0.0258	6.21
MODPO	0.667	0.0929	12.0
MODPOU	0.631	0.02	12.6
MODSO	0.560	0.000954	9.98
MTPM-OP	0.554	0.0035	11.2
MTPM-OD	0.530	0.0152	6.25
Funcional - $\tilde{C}$ OP	0.554	0.0035	11.2
Funcional - $\tilde{C}$ OD	0.535	0.0096	6.28
MCF	0.598	0.0093	15.01
S.C. ⁵¹	0.608	0.0093	15.04

Nossos resultados são comparados com os de Smith e Burke⁴⁹ aplicando a aproximação de acoplamentos fortes (strong-coupling, SC). Como é esperado, os resultados obtidos pela primeira aproximação de Born (PAB) está muito discrepante daquelas do SC. Entretanto, aplicando o processo de unitarização, os resultados da primeira aproximação de Born unitarizada (PABU) apresenta concordância sensivelmente melhor com SC. Introduzindo os efeitos de segunda ordem, observamos que os resultados obtidos pela segunda aproximação de Born (SAB) e também a unitarizada (SABU), apresentam resultados aproximadamente da mesma qualidade; ambos subestimam as secções de choque dos canais de espalhamento elástico e superestimam as do canal de excitação, embora apresentem resultados em melhor concordância com SC do que PAB. Os métodos da família de ondas distorcidas, tais como ondas distorcidas de primeira ordem (MODPO), de segunda ordem (MODSO) e as unitarizadas (MODPOU), apresentam resultados em concordância sensivelmente melhores com as do SC do que as aproximações de Born, especificamente para os canais de espalhamento elásticos. O processo de unitarização aplicado no MODPO levam a uma melhoria também na secção de choque do canal de excitação ($1S \rightarrow 2S$).

A terceira classe de aproximação, os métodos de two-potential multicanais e de funcional- $\tilde{C}$ multicanais, foram aplicados utilizando tanto as funções de ondas planas (OP) como ondas distorcidas como a base da expansão das funções de ondas do espalhamento. Em termos gerais, os resultados obtidos não representam uma melhoria significativa em relação às aproximações de ondas distorcidas.

Finalmente, as secções de choque obtidas pelo método de fração contínuas (MCF) apresenta uma excelente concordância com os resultados do SC, mostrando que é o método muito superior, em termos de exatidão do método, a todos os outros.

Na Tabela 9, apresentamos uma comparação das secções de choque parciais ($L=0$) calculadas por MCF com os valores obtidos pela SC na faixa de energia compreendida entre $k^2 = 1.0$ Ryd a $k^2 = 4.0$ Ryd. Todos os resultados do MCF são convergidos em 3 iterações. Observe-se que a concordância entre estes dois conjuntos de secções de choque é excelente nas energias em estudo. Esta boa concordância é esperada, pois como já foi mostrado na secção II, uma vez que o processo iterativo do MCF tenha convergido, os resultados correspondem de fato aos valores exatos dentro da precisão numérica do cálculo.

Em termos de esforço computacional, sem dúvida nenhuma que a PAB se constitui o mais econômico, a PABU é também muito econômico, entretanto, os resultados obtidos por estes métodos deixam muito a desejar. Ainda referindo-se às aproximações de primeira ordem, os MODPO e MODPOU são muito superiores em relação a PAB e PABU. Em particular, os resultados obtidos por MODPOU apresentam as mesmas qualidades que MTPM e o MCFM, entretanto, computacionalmente é muito eficiente e não requer muito equipamento. Por outro lado, o MODPOU não requer mudanças grandes no código computacional do MODPO normal e é, portanto, um método que merece ser investigado com mais atenção e profundidade.

Por outro lado, os métodos de segunda ordem (SAB, SABU, MODSO) e os MTPM e MFCM requerem esforços computacionais consideravelmente maiores. A grande dificuldade computacional envolvida nestes métodos é o cálculo do termo $\langle \chi_f^- | V_2 G_1 V_2 | \chi_i^+ \rangle$ que foi tratado com detalhes no Apêndice A. A parte mais demorada se refere à integração sobre o momento k , onde, para obter a precisão desejada foi necessário computar os integrandos numa malha suficientemente fina em k , e também, estender a integração até $k = 4.0$ u.a. ≈ 218 eV, para garantir a convergência.

Os cálculos efetuados com base em ondas planas são substancialmente mais rápidos porque a função de Green da partícula livre $G_0^+(\vec{r}, \vec{r}')$, que pode ser expandida diretamente em funções esféricas de Bessel e de Neumann como:

$$G_0^+(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -ik \sum_{l,m} j_l(kr'_<) n_l(kr'_>) Y_{l,m}^*(\hat{r}_1) Y_{l,m}(\hat{r}_2) \quad (4.17)$$

e os termos $\langle \phi_f | V G_0 V | \phi_i \rangle$, podem ser integrados diretamente, utilizando métodos numéricos conhecidos.

Comparativamente, o MCF é um método extremamente eficiente. Particularmente para este estudo de dois canais, o tempo de computação do MCF, com três iterações, é comparável ao MODPO, entretanto, os resultados são muito melhores.

4.3 ESTUDO DE ESPALHAMENTO $e^+ \rightarrow H$ AO NÍVEL DE CINCO CANAIS ACOPLADOS ($1S - 2S - 2P_0 - 2P_1 - 2P_{-1}$)

Agora, reportamos nosso estudo comparativo de resultados de seções de choque do espalhamento de pósitrons por H, ao nível de cinco canais ($1S - 2S - 2P_0 - 2P_1 - 2P_{-1}$), acoplados. Estes resultados são mostrados na Tabela 8, para uma energia incidente $k^2 = 1.0$ Ryd. Os resultados de Burke et al⁵¹, obtidos pelo método de “close-coupling” (CC), com três canais, são também mostrados.

Tabela 8 - Seções de choque parcial ($L=0$), em unidades de πa_0^2 , para cinco canais, e para $k_i = 1.0$.

	$1S \rightarrow 1S$	$1S \rightarrow 2S$	$1S \rightarrow 2P$
PAB	1.42	0.196	0.00163
PABU	0.997	0.182	0.0065
SAB	0.290	0.0249	0.0869
SABU	0.283	0.0140	0.00436
MODPO	0.667	0.093	0.00000894
MODPOU	0.633	0.0186	0.0054
MODSO	0.464	0.00433	0.00486
MODSOU	0.468	0.0060	0.0011
MTPM OP	0.510	0.000142	0.00198
MTPM OD	0.697	0.0078	0.0077
Funcional - $\tilde{C}$ OP	0.510	0.000143	0.00194
Funcional - $\tilde{C}$ OD	0.695	0.0131	0.0069
MCF	0.576	0.0032	0.0051
CC ⁵¹	0.541	0.0070	0.011

As conclusões são semelhantes às aquelas apresentadas na secção anterior, para estudos de dois canais, isto é, as aproximações do tipo Born não apresentam boa concordância com os resultados obtidos com o MCF (o que assumimos como resultados exatos ao nível de cinco canais). Aqueles resultados obtidos através da classe de métodos de ondas distorcidas, particularmente as versões unitarizadas, apresentam concordância bem melhor que os das aproximações de Born. Por outro lado, os resultados obtidos pela classe de MTPM, MFCM e funcional- $\tilde{C}$ são, aproximadamente, da mesma qualidade dos métodos de ondas distorcidas, entretanto, o custo computacional é muito maior.

Nas Tabela 9 e 10, e nas Figuras 4.1 a 4.3, são mostrados as comparações entre nossos resultados obtidos com o MCF, a dois e cinco canais acoplados, com aqueles do CC, a três canais acoplados, na faixa de energia entre 0.81 e 4.0 Ryd.

Tabela 9 - Secções de choque de onda parcial e^+ -hidrogênio para 2 canais.

k(u.a.)	L=0	Secção de Choque Parcial		
		1S→1S	1S→2S	2S→2S
1.0	a	0.598	0.0093	15.01
	b	0.608	0.0093	15.04
1.2	a	0.487	0.0192	5.71
	b	0.487	0.0192	5.71
1.5	a	0.356	0.0209	2.58
	b	0.356	0.0209	2.58
2.0	a	0.221	0.0125	1.11
	b	0.221	0.0125	1.11

a: resultados deste trabalho

b: resultado da aproximação de strong-coupling de Smith et al (1960)⁵².

Em termos gerais, a concordância entre os dois cálculos é boa para os canais de espalhamento 1S→1S e 1S→2S. Para o canal de excitação 1S→2P, a discrepância é bem maior, aproximadamente um fator de 2. Provavelmente, esta discrepância se deve a diferentes maneiras em que os cálculos foram conduzidos. No cálculo de Burke

et al, apenas um canal de espalhamento 2P foi explicitamente incluído, enquanto que em nossos cálculos, todos os canais de 2P foram levados em conta. Para energias maiores (que 4.0 Ryd), a contribuição da excitação $1S \rightarrow 2P_n$ ($n = 0, 1$ e -1), são praticamente iguais, e nosso resultado de MCF coincide com os resultados de CC.

Tabela 10 - Secções de choque de onda parcial e^+ -hidrogênio para 5 canais.

k(u.a.)	L=0	Secção de Choque Parcial		
		1S → 1S	1S → 2S	1S → 2P
0.9	a	0.642	0.00167	0.00222
	b	0.586	0.0070	0.001
1.0	a	0.576	0.0032	0.00509
	b	0.541	0.0070	0.011
1.2	a	0.469	0.0136	0.00472
	b	0.453	0.0124	0.012
1.5	a	0.348	0.0178	0.00263
	b	0.343	0.0171	0.005
2.0	a	0.217	0.0112	0.00105
	b	0.218	0.0116	0.001

a: resultados deste trabalho
b: resultado da aproximação de close-coupling de Burke e Smith⁵¹ (1962).

Figura 4.1 - Curva a: nosso cálculo pelo MCF e, curva b: pelo CC.

Figura 4.2 - Curva a: nosso cálculo pelo MCF e, curva b: pelo CC.

Figura 4.3 - Curva a, nosso cálculo pelo MCF e, curva b: pelo CC.

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES

Neste trabalho, nosso principal objetivo foi desenvolver um formalismo teórico para o estudo da interação de elétrons com moléculas. Propomos os formalismos teóricos MTPM, Funcional - $\tilde{C}$ e MCF, com o intuito de, ao final, escolhermos o melhor método, já que fizemos um estudo comparativo dos mesmos para o espalhamento multicanal de pósitron por átomos de hidrogênio, a nível de 2 e 5 canais, testando, desta maneira, suas eficiências computacionais bem como a exatidão dos resultados obtidos. Em todos os testes realizados, o MCF se mostrou como o mais eficiente dos três, apresentando resultados “exatos” no nível de aproximação imposto nos cálculos, tanto que já está sendo aplicado no estudo do espalhamento de elétrons por moléculas, ao nível da aproximação estático-troca. A generalização do MCF, para o espalhamento multicanal de elétrons por moléculas, também já está em andamento.

Por outro lado, este nosso trabalho revelou que algumas aproximações, de baixa ordem, especificamente o MODPOU, tem apresentado resultados bastante

razoáveis em comparação com outros métodos. Devido ao baixo custo computacional, o MODPOU serviria como método para primeiros estudos de problemas mais complexos como, por exemplo, o cálculo de parâmetros de correlação e coerência de excitação molecular por impacto de elétrons.

APÊNDICE

A - CÁLCULO DO TERMO $\langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle$

Na aplicação do MTPM e MFCM, é necessário o cálculo do termo

$$\langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle \quad (\text{A.1})$$

o que é computacionalmente o mais difícil.

Em nosso cálculo, a função de Green de ondas distorcidas é representada, no espaço de momento e expandida na base de autofunções do operador H_1 , isto é:

$$G_1 = \sum_n \int dE |\xi_n\rangle \langle \xi_n | G_1 | \xi_m\rangle \langle \xi_m | \quad (\text{A.2})$$

como $G_1 | \xi_k \rangle = \frac{1}{E - H_1} | \xi_k \rangle = \frac{1}{E - E_k} | \xi_k \rangle$, isto porque $(E - H_1) | \xi_k \rangle = (E - E_k) | \xi_k \rangle$.

Assim, teremos,

$$G_1 = \sum_n \int \frac{dE |\xi_n\rangle \langle \xi_n |}{E - E_n} \quad (\text{A.3})$$

Tomando $E_n = \frac{k_n^2}{2} + \varepsilon_n$ e também $\xi_n = \chi_n \varphi_n$, onde φ_n é a função de onda do alvo isolado, e χ_n , é a função de onda distorcida do elétron espalhado, o termo $\langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle$ se torna,

$$\langle \xi_f | V_2 G_1 V_2 | \xi_i \rangle = 2 \int dk \frac{\langle \chi_f | V_{fn} | \chi_n \rangle \langle \chi_n | V_{ni} | \chi_i \rangle}{k_n^2 - k^2 \pm i\varepsilon} \quad (\text{A.4})$$

onde podemos escrever para as ondas distorcidas expandidas:

$$\chi_f = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \sum_{l_f m_f} i^{l_f} \Psi_{k_f l_f m_f}(\vec{r}) Y_{l_f m_f}(\vec{k}_f) \quad (\text{A.5})$$

$$\chi_n = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} \sum_{l_n m_n} i^{l_n} \Psi_{k_n l_n m_n}(\vec{r}) Y_{l_n m_n}(\vec{k}_n) \quad (\text{A.6})$$

o que implicará para os numeradores da equação (A.4):

$$T_{fn} = \left(\frac{2}{\pi} \right) \sum_{l_f m_f} i^{l_f - l_f} \langle \Psi_{k_f l_f m_f}(\vec{r}) | V_{fn} | \Psi_{k_i l_i m_i}(\vec{r}) \rangle Y_{l_f m_f}^*(\hat{k}_f) Y_{l_i m_i}(\hat{k}_i) \quad (\text{A.7})$$

$$T_{ni} = \left(\frac{2}{\pi} \right) \sum_{l_n m_n} i^{l_i - l_n} \langle \Psi_{k_n l_n m_n}(\vec{r}) | V_{ni} | \Psi_{k_i l_i m_i}(\vec{r}) \rangle Y_{l_n m_n}^*(\hat{k}_n) Y_{l_i m_i}(\hat{k}_i) \quad (\text{A.8})$$

Substituindo as equações (A.7) e (A.8) na equação (A.9), teremos para a matriz $T_{fi}^{(2)}$ que:

$$T_{fi}^2 = 2\left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \sum_{\substack{l_1 m_1 l_1 m_1 \\ l_2 m_2 l_2 m_2}} i^{l_1 - l_2 + l_1 - l_2} Y_{l_1 m_1}(\hat{k}_i) Y_{l_2 m_2}(\hat{k}_f) \int \frac{k^2 dk}{k_n^2 - k^2} \langle \Psi_{k_f l_f m_f} | V_{fn} | \Psi_{k_i l_i m_i} \rangle \langle \Psi_{k_2 l_2 m_2} | V_{ni} | \Psi_{k_1 l_1 m_1} \rangle \cdot \int d\hat{k} Y_{l_2 m_2}^*(\hat{k}_2) Y_{l_1 m_1}(\hat{k}_1) \quad (\text{A.9})$$

onde temos:

$$\int d\hat{k} Y_{l_2 m_2}^*(\hat{k}_2) Y_{l_1 m_1}(\hat{k}_1) = \begin{cases} 1 & \text{p/ } l_1 = l_2, m_1 = m_2 \\ 0 & \text{p/ } l_1 \neq l_2, m_1 \neq m_2 \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

ou seja:

$$T_{fi}^{(2)} = 2\left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \sum_{\substack{l_1 m_1 \\ l_f m_f}} i^{l_1 - l_f} \left[\sum_{l_1 m_1} \int \frac{k^2 dk}{k_n^2} \langle \Psi_{k_f l_f m_f} | V_{fn} | \Psi_{k_i l_i m_i} \rangle \right] \langle \Psi_{k_f l_f m_f} | V_{ni} | \Psi_{k_i l_i m_i} \rangle Y_{l_1 m_1}^*(\hat{k}_i) Y_{l_f m_f}(\hat{k}_f) \quad (\text{A.11})$$

ou, usando ondas parciais:

$$T_{fi}^{(2)} = 2\left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \sum_{\substack{l_1 m_1 \\ l_f m_f}} i^{l_1 - l_f} \left[\sum_{l_1 m_1} \int \frac{k^2 dk}{k_n^2 - k^2} A(k) Y_{l_1 m_1}^*(\hat{k}_i) Y_{l_f m_f}(\hat{k}_f) \right] \quad (\text{A.12})$$

onde colocamos:

$$A(k) = \langle \Psi_{k_f l_f m_f} | V_{fn} | \Psi_{k_n l_n m_n} \rangle \langle \Psi_{k_n l_n m_n} | V_{ni} | \Psi_{k_i l_i m_i} \rangle \quad (\text{A.13})$$

Agora, sendo:

$$I = \int \frac{kdkA(k)}{k_n^2 - k^2} = \frac{1}{2} \left[\int_0^\infty \frac{A(k)kdk}{k_n - k} - \int_0^\infty \frac{A(k)kdk}{k_n + k} \right] = \frac{1}{2}(I_1 + I_2) \quad (\text{A.14})$$

Assim,

$$I_1 = \int_0^\infty \frac{A(k)kdk}{k_n - k} = P \int_0^\infty \frac{A(k)kdk}{k_n - k} + i\pi k_n A(k_n) \quad \text{e} \quad I_2 = \int_0^\infty \frac{A(k)kdk}{k_n + k} \quad (\text{A.15})$$

Agora, utilizando o teorema de Cauchy, temos:

$$\int_0^\infty \frac{A(k)kdk}{k_n + k + i\varepsilon} = P \int_0^\infty \frac{A(k)kdk}{k_n + k} + i\pi k_n A(k_n) \quad (\text{A.16})$$

Finalmente, a expressão para a matriz de segunda ordem é:

$$T_{\hat{f}}^{(2)} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^2 \sum_{\substack{l_i m_i \\ l_f m_f}} i^{l_i - l_f} \left[P \int_{-\infty}^\infty \frac{A(k)kdk}{k_n - k} + i\pi k_n A(k_n) \right] Y_{l_i m_i}(\hat{k}_i) Y_{l_f m_f}^*(\hat{k}_f) \quad (\text{A.17})$$

O comportamento de alguns integrandos relevantes $A(k)$, em função de k , são mostrados nas Figuras de A.1 a A.8, a seguir:

Figura A.1

Figura A.2

Figura A.3

Figura A.4

Figura A.5

Figura A.6

Figura A.7

Figura A.8

B - POTENCIAIS DE INTERAÇÃO

A seguir, listamos os potenciais de interação utilizados nos cálculos de secção de choque $e^+ \rightarrow H$ (apenas as expressões finais):

$$V_{1s \rightarrow 1s} = \left(1 + \frac{1}{r}\right) e^{-2r}$$

$$V_{1s \rightarrow 2s} = -\frac{2^{3/2}}{9} e^{-3/2 r} \left(r + \frac{2}{3}\right)$$

$$V_{2s \rightarrow 2s} = \frac{e^{-r}}{8} \left(r^2 + 2r + \frac{8}{r} + 6\right)$$

$$V_{1s \rightarrow 2p_0} = \frac{4}{9\sqrt{2}} \left[\left(\frac{8}{3} + \frac{32}{9r} + \frac{64}{27r^2} + r \right) e^{-3/2 r} - \frac{64}{27r^2} \right] \cos \theta Y_{1,0}$$

$$V_{1s \rightarrow 2p_1} = \frac{2}{9} \left[-\left(\frac{8}{3} + \frac{32}{9r} + \frac{64}{27r^2} + r \right) e^{-3/2 r} + \frac{64}{27r^2} \right] \sin \theta e^{i\varphi} Y_{1,1}$$

$$V_{2s \rightarrow 2p_0} = -\frac{1}{2} \left[\left(3 + \frac{6}{r^2} + \frac{6}{r} + r + \frac{r^2}{4} \right) e^{-r} - \frac{6}{r^2} \right] \cos \theta \sqrt{\frac{4}{3}} Y_{1,0}$$

$$V_{2s \rightarrow 2p_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(3 + \frac{6}{r^2} + \frac{6}{r} + r + \frac{r^2}{4} \right) e^{-r} - \frac{6}{r^2} \right] \sin \theta e^{i\varphi}$$

$$V_{2p_0 \rightarrow 2p_0} = \left(\frac{r^2}{24} + \frac{r}{4} + \frac{1}{r} + \frac{3}{4} \right) e^{-r} - \left[\frac{6}{r^3} - \left(\frac{r^2}{24} + \frac{r}{4} + \frac{3}{r} + \frac{6}{r^2} + \frac{6}{r^3} + 1 \right) e^{-r} (3 \cos^2 \theta - 1) \sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_{2,0} \right]$$

$$V_{2p_0 \rightarrow 2p_1} = \frac{3}{\sqrt{2}} \left[\frac{6}{r^3} - \left(\frac{r^2}{24} + \frac{r}{4} + \frac{3}{r} + \frac{6}{r^2} + \frac{6}{r^3} + 1 \right) e^{-r} \right] \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} Y_{2,1}$$

$$V_{2p_1 \rightarrow 2p_1} = \left(\frac{r^2}{24} + \frac{r}{4} + \frac{1}{r} + \frac{3}{4} \right) e^{-r} + \left[\frac{6}{r^3} - \left(\frac{r^2}{24} + \frac{r}{4} + \frac{3}{r} + \frac{6}{r^2} + \frac{6}{r^3} + 1 \right) e^{-r} \right] \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_{2,0}$$

$$V_{2p_1 \rightarrow 2p_{-1}} = \frac{3}{2} \left[\frac{6}{r^3} - \left(\frac{r^2}{24} + \frac{r}{4} + \frac{3}{r} + \frac{6}{r^2} + \frac{6}{r^3} + 1 \right) e^{-r} \right] \sin^2 \theta e^{2i\varphi} \sqrt{\frac{32\pi}{15}} Y_{2,2}$$

REFERÊNCIAS

01. Czyzk S.L., "Atomic Process with Special Application of Gaseous Nebulae", in Nebulae and Interstellar Matter, Eds. Middlehurst, B.M. and Allen, L.H. (University of Chicago Press, 1969) p. 403.
02. "Atmospheric Physics and Chemistry", vol. 1 in Applied Atomic Collisions, Eds. Massey, H.S.W. and Bates, D.R. (Academic Press, New York, 1982).
03. "Gas Lasers", vol. III in Applied Atomic Collisions Physics, Eds. McDaniel, E.W. (Academic Press, New York, 1982).
04. Capitelli M., Dilonardo M. and Gorse C., Chem. Phys. 56, 29 (1981).
05. Moisan M., Barbeau C., Claude R., Ferreira C.M., Margot J., Paraszczak J., Sá A.B., Sauvé G. and Wertheimer M.R., J. Vac. Sci. Technol. B 9(1), 8 (1991).
06. Trajmar S., Register D.F. and Chutjian A., Phys. Rep. 97, 219 (1983).
07. Collins L.A. and Schneider B.I., in "Electronic and Atomic Collisions", Edited by Gilbody H.B., Newell W.R., Read F.H. and Smith A.C. (Amsterdam, Elsevier).
08. Lima M.A.P., Gibson T.L., Huo W.M. and McKoy V., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 18, 865 (1985).
09. Lima M.A.P., Gibson T.L., McKoy V. and Huo W.M., Phys. Rev. A 38, 4527 (1988).
10. Sun Q., Winstead C., McKoy V. and Lima M.A.P., J. Chem. Phys. 96(5), 3531 (1991).
11. Pritchard H.P., McKoy V. and Lima M.A.P., Phys. Rev. A 41(1), 546 (1990).
12. Sun Q., Winstead C. and McKoy, Phys. Rev. A 46, 6987 (1992).
13. Rescigno T.N. and Schneider B.I., J. Phys. B 21, L691 (1988).
14. Lengsfeld B.H. and Rescigno T.N., Phys. Rev. A 44, 2913 (1991).
15. Rescigno T.N. and Schneider B.I., Phys. Rev. A 45(5), 2894 (1992).
16. Baluja K.L., Noble C.J. and Tennyson J., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 18, L851 (1985).
17. Branchet S.E. and Tennyson J., Phys. Rev. Lett. 64, 2889 (1990).

18. Branchet S.E. and Tennyson J. and Morgan L.A., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23, 4625 (1990).
19. Noble C.J. and Burke P.G., Phys. Rev.Lett. 68, 2001 (1992).
20. Parker S.D., McCurdy C.W., Rescigno T.N. and Lensfield III B.H., Phys. Rev. 43, 3514 (1991).
21. Germano J.S.E. and Lima M.A.P., Phys. Rev. A 47, 3976 (1993)
22. Bettega M.H.F., Policastro A.P., Ferreira L.G. and Lima M.A.P., Abstracts of Contributed Papers Vol.1, 260, XVIII ICPEAC, AARHUS, Denmark (1993)
23. Andersen N., Gallager J.W. and Hertel I.V., Phys. Rep. 65, 1 (1988).
24. Batschat K. and Madison D.H., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 20, 5839 (1987)
25. Fliflet A.W. and McKoy V., Phys. Rev. A 21, 1863 (1980)
26. Lee M.T. and McKoy V., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 15, 3971 (1982).
27. Lee M.T. and McKoy V., Phys. Rev. A 28, 697 (1983).
28. Lee M.T., Brescansin L.M. and Lima M.A.P., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23, 3895 (1990).
29. Lee M.T., Machado L.E., Leal E.P., Brescansin L.M., Lima M.A.P. and Machado F.B.C., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 23, L233 (1990).
30. Lee M.T., Machado L.E., Brescansin L.M., and Menezes G.D., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24, 509 (1991).
31. Lee M.T., Machado L.E., Brescansin L.M., and Menezes G.D., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24, 509 (1991).
32. Menezes G.D., Brescansin L.M., Lee M.T., Michelin S.L., Machado L.E., and Csanak G., Phys. Rev. Lett. 71, 1701 (1993).
34. Lee M.T., Michelin S.L., Machado L.E., and Brescansin L.M., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 26, L203 (1993).
35. Lee M.T., Michelin S.L., Kroin J., Machado L.E., and Brescansin L.M., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 28, 1859 (1995).
36. Khakoo M.A. and Trajmar S., Phys. Rev. A 34, 146 (1986).
37. O.S. Silva Jr, Tese de Doutorado, IFGW- UNICAMP, 1993.

38. Horacek J. and Sasakawa T., Phys. Rev. A 28, 2151 (1983).
39. Takatsuka K. and McKoy V., Phys. Rev. A 23, 2352 (1981).
40. Lee M.T., Takatsuka K. and McKoy V., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 14, 4115 (1981).
41. Horacek J. and Sasakawa T., Phys. Rev. A 30, 2274 (1984).
42. Znojil M., Phys. Rev. A 30, 2080 (1984).
43. Makowski A.J., Raczynski A. and Staszewska G., Chem. Phys. Lett. 114, 325 (1985).
44. Meyer H.D., Horacek J. and Cederbaum L.S., Phys. Rev. A 43, 3587 (1991).
45. Makowski A.J., Raczynski A. and Staszewska G., Phys. Rev. A 33, 733 (1986).
46. Makowski A.J., Raczynski A. and Staszewska G., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 19, 336 (1986).
47. Huck R.J., Proc. Phys. Soc. (London), 70, 369 (1957).
48. Nesbet R.K., Phys. Rev. 179, 60 (1969)
49. Smith K. and Burke P.G., Phys. Rev. 123, 174 (1961).
50. Burke P.G., Schey H.M. and Smith K., Phys. Rev. 129, 1258 (1963).
51. Burke P.G., and Smith K., Rev. Mod. Phys., 34, 3, 475 (1962).
52. Smith K., Miller W.F. and Mumford A.J.P., Proc. Phys. Soc. (London) 76, 532 (1960).