

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA - UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS - CCT
DEPARTAMENTO DE FÍSICA - DFIS
PROGRAMA DE PÓS - GRADUAÇÃO EM FÍSICA - PPGF

CLAUDIA DUMS SCHMIDT

**ESTUDO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE FOTOIONIZAÇÃO EM
ESTADOS DE RYDBERG**

Joinville/SC

2012

CLAUDIA DUMS SCHMIDT

ESTUDO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE FOTOIONIZAÇÃO EM
ESTADOS DE RYDBERG

Dissertação apresentada para a obtenção
do Título de Mestre em Física da Uni-
versidade do Estado de Santa Catarina,
Centro de Ciências Tecnológicas.

Orientador: Dr. André Luiz de Oliveira.

Co-Orientador: Dr. Ricardo Antônio de
Simone Zanon

Joinville/SC

2012

FICHA CATALOGRÁFICA

S349e

Schmidt, Claudia Dums.

Estudo da Seção de Choque de Fotoionização de Estados de Rydberg/ Claudia Dums Schmidt; Orientador: André Luiz de Oliveira. - Joinville-SC.

66f; il; 30 cm

Incluem referências

Dissertação - Universidade do Estado de Santa Catarina, Centro de Ciências Tecnológicas, Mestrado em Física, Joinville, 2012.

1. Física. 2. Física Atomica e Molecular.

CDD535

**ESTUDO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE FOTOIONIZAÇÃO EM
ESTADOS DE RYDBERG**

por

CLAUDIA DUMS SCHMIDT

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do Título de

MESTRE EM FÍSICA

área de concentração em "Física", e aprovada em sua forma final pelo

CURSO DE MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA

CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS DA

UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA

Banca Examinadora:

Dr. André Luiz de Oliveira
CCT/UDESC (Presidente/Orientador)

Dr. Daniel Vieira
CCT/UDESC

Dr. Marcus Werner Beims
UFPR

Dr. Ricardo Antonio de Simone Zanon
CCT/UDESC (Suplente)

Joinville, 31 de julho de 2012.

Ao meu Marido e ao meu
Filho que está chegando.

AGRADECIMENTOS

Mais um objetivo foi alcançado, mais um degrau foi vencido. Mas, só foi possível devido ao apoio e incentivo recebido durante todo o trajeto.

Gostaria de agradecer primeiramente a Deus, por ter me dado forças nos momentos difíceis, para que não desistisse e desviasse do caminho.

A minha família, meu Marido Fábio, meus Pais, meus Irmãos, que sempre de um modo ou outro me apoiavam para que conseguisse chegar neste momento.

Aos meus colegas professores e amigos, Cleudade e Cleder, que no início muito me incentivaram para que prosseguisse nesta jornada acadêmica.

Aos meus orientadores, André e Ricardo, por me aceitarem com minhas limitações e as compreenderem. Principalmente ao professor André por ter me convidado a retornar ao Mestrado, portanto, responsável por mim passagem.

Aos amigos que fiz no mestrado: Anne, Cris, Juliane, Kelaine, Taline, Amilson, Thiago, Douglas, José Carlos, Júlio, Willian, Karla, Amanda, Ana, Anderson, Jailson, Rafael e aos amigos que reencontrei no mestrado, Iara, Alex, Jorge, Antônio, pelos momentos de estudo e descontração.

De um modo geral a todos que de uma forma ou outra colaboraram para que este objetivo fosse alcançado.

RESUMO

Átomos de Rydberg têm como uma de suas principais características o alto número quântico principal. Uma das consequências é a sua dimensão da ordem n^2 , implicando em um grande momento de dipolo, o que permite usá-los para estudos de interações atômicas com campos eletromagnéticos, incluindo processos de fotoionização. A atenção crescente dada à investigação de seções de choque de fotoionização desses átomos altamente excitados, é devido a sua importância para diversas áreas como Física Atômica e Molecular, Astrofísica, Física de Plasma, entre outros. Com base no modelo proposto por Aymar e colaboradores, estudamos as seções de choque de fotoionização de alguns átomos alcalinos, ou seja, Sódio, Potássio, Rubídio e Césio, ampliando a análise anterior para $n \leq 44$. Uma vez que os processos de fotoionização podem ser enormemente afetados pela energia dos fotoelétrons, realizou-se uma análise do comportamento das funções de onda radiais em função das energias do fotoelétron. E, desta análise, também estudamos a possível evidência dos mínimos Cooper.

Palavras-chave: Seção de Choque, Estados de Rydberg, Fotoionização, Mínimos de Cooper.

ABSTRACT

Rydberg atoms have as one of their characteristic the high principal quantum number. One consequence is the dimension of the order n^2 implying in a large dipole moment, which allows one to use them for studies of atomic interactions with electromagnetic fields, including processes of photoionization. The increasing attention given to the investigation of photoionization cross sections of these highly excited atoms, is due to its importance to several areas like Atomic and Molecular Physics, Astrophysics, Plasma Physics, among others. Based on the model proposed by Aymar and co-workers, we studied the photoionization cross sections of some alkali atoms, namely, Sodium, Potassium, Rubidium and Cesium, expanding the previous analysis to $n \leq 44$. Since the photoionization processes can be enormously affected by the photoelectron energy, the we performed an analysis of the behaviour of radial wave functions depending on the photoelectron energies. And, this analysis, also studied the possible evidence of the Cooper minima.

Key-words: Cross Section, Rydberg States, Photoionization, Cooper Minimum.

Lista de Figuras

2.1	Funções de onda do Hidrogênio e dos alcalinos. O potencial mais baixo dos alcalinos introduz um deslocamento radial, δ . Este deslocamento leva a um decréscimo das energias nos estados de baixo ℓ dos alcalinos em relação ao Hidrogênio.[7]	19
3.1	Funções de onda para os estados discretos e contínuos do "Rb nl	33
4.1	Comparativo da Seção de Choque do Na - 3p	37
4.2	Comparativo da Seção de Choque do Rb - 5p	38
4.3	Seção de Choque de Fotoionização do Na - ns	39
4.4	Seção de Choque de Fotoionização do Na - np	40
4.5	Seção de Choque de Fotoionização do Na - nd	40
4.6	Seção de Choque de Fotoionização do K - ns	41
4.7	Seção de Choque de Fotoionização do K - np	42
4.8	Seção de Choque de Fotoionização do K - nd	42
4.9	Seção de Choque de Fotoionização do Rb - ns	43
4.10	Seção de Choque de Fotoionização do Rb - np	44
4.11	Seção de Choque de Fotoionização do Rb - nd	45
4.12	Seção de Choque de Fotoionização do Cs - ns	45
4.13	Seção de Choque de Fotoionização do Cs - np	46
4.14	Seção de Choque de Fotoionização do Cs - nd	47

4.15	Seção de Choque de Fotoionização do Na - 3p	49
4.16	Seção de Choque de Fotoionização do K - 6p	50
4.17	Seção de Choque de Fotoionização do Rb - 8d	50
4.18	Seção de Choque de Fotoionização do Na - 44s	52
4.19	Seção de Choque de Fotoionização do K - 20s	52
4.20	Seção de Choque de Fotoionização do K - 30s	53
4.21	Seção de Choque de Fotoionização do Rb - 44s	54
4.22	Seção de Choque de Fotoionização do Rb - 30p	54
4.23	Seção de Choque de Fotoionização do Rb - 44d	55
4.24	Seção de Choque de Fotoionização do Cs - 30p	56
4.25	Seção de Choque de Fotoionização do Cs - 20d	56
4.26	Mínimos de Cooper do Na	58
4.27	Mínimos de Cooper do K	58
4.28	Mínimos de Cooper do Rb	59
4.29	Mínimos de Cooper do Cs	59

Sumário

1	Introdução	12
2	Átomos de Rydberg	15
2.1	Propriedades dos Átomos de Rydberg	17
3	Estudo das seções de choque de fotoionização de estados de Rydberg	22
3.1	Modelo do campo central de uma única partícula	23
3.1.1	Formulação Básica	23
3.1.2	Potenciais utilizados para o cálculo da seção de choque de fotoionização	25
3.2	Mínimos de Cooper	32
4	Resultados e Discussões	35
4.1	Comparação com Dados Experimentais	36
4.2	Comportamento da Seção de Choque de Fotoionização em uma Função de n	37
4.3	Comportamento da Seção de Choque de Fotoionização como uma função da energia $h\nu$ e Mínimos de Cooper	48
5	Conclusões	61

Capítulo 1

Introdução

Quando o elétron de valência de um átomo está excitado em um nível de energia mais elevado, apresentando um alto número quântico principal, dizemos que este átomo encontra-se em Estado de Rydberg, ou simplesmente o denominamos Átomo de Rydberg. Devido a este elétron de valência altamente excitado, estes átomos possuem propriedades bastante incomuns, entre elas possuir um grande momento de dipolo, o que os faz serem de grande interesse nos estudos de interações atômicas com campos eletromagnéticos. Assim, ao analisarmos os processos colisionais em estados de Rydberg, estamos tratando de um tipo de colisão atômica onde o par de átomos está em um nível de energia altamente excitado, apresentando como característica uma grande seção de choque. Por este motivo, tem-se grande interesse nos estudos envolvendo processos de fotoionização e também de fotoexcitação. Estudos das seções de choque de fotoionização para o estado fundamental são conhecidos [1, 2, 3, 4], tanto teórica quanto experimentalmente, o que já não ocorre para os estados excitados.

Recentemente, a importância nos estudos das seções de choque de fotoionização em átomos em estados de Rydberg deve-se principalmente à sua

importância nas áreas de Física Atômica e Molecular, Astrofísica, Física de Plasma, transferências radioativas, entre outras [4].

No entanto, os avanços nos estudos dos átomos em estados de Rydberg só foram possíveis devido ao desenvolvimento de lasers largamente sintonizáveis, permitindo que uma grande população atômica fosse seletivamente excitada [4]. Com estas populações atômicas em níveis excitados é possível realizar experimentos de ionização, que forneçam medidas diretas de seção de choque de fotoionização ou permitam o estudo da ionização em colisões entre diferentes espécies excitadas. Geralmente, experiências desse gênero são realizadas com átomos alcalinos.

Neste trabalho iremos estudar o comportamento da seção de choque de fotoionização de átomos alcalinos em estados de Rydberg, incluindo o comportamento da seção de choque em função do número quântico principal, em função da energia do fotoelétron e as evidências da ocorrência de Mínimos de Cooper. O interesse em estudar átomos em estados de Rydberg foi despertado devido a experiência prévia do Grupo de Óptica do Departamento de Física do Centro de Ciências Tecnológicas da Universidade do Estado de Santa Catarina no assunto. Utilizaremos para o cálculo das seções de choque de fotoionização o modelo proposto por Aymar e colaboradores [4, 5, 6], para os estados s , p e d de átomos alcalinos (Na, K, Rb e Cs) com $n \leq 44$.

Este trabalho subdivide-se no estudo realizado sobre os Átomos de Rydberg e suas principais propriedades no Capítulo 2. No Capítulo 3, apresentamos o estudo das seções de choque de fotoionização, incluindo o Modelo do campo central de uma única partícula, a formulação geral, os potenciais possíveis de utilização dentro do modelo e também apresentamos um breve estudo referente aos Mínimos de Cooper. O Capítulo 4, traz os resultados

encontrados e as discussões acerca do comportamento da seção de choque de fotoionização em estados de Rydberg e a análise da evidência dos Mínimos de Cooper. E finalizamos com nossas conclusões no Capítulo 5.

Capítulo 2

Átomos de Rydberg

Os átomos de Rydberg, assim denominados em homenagem ao físico sueco Johannes Rydberg, são átomos que possuem um ou mais elétrons excitados até um elevado número quântico principal n . Tal característica faz com que apresentem propriedades bastante incomuns, entre elas podemos citar: eles podem ser mais de dez mil vezes maiores que um átomo no estado fundamental; seu tempo de vida pode ser maior que $1ms$; apresentam um comportamento quase clássico; grande susceptibilidade magnética; pequena energia de ligação; efeitos da radiação exagerados em relação a átomos no estado fundamental; interações de colisões que apresentam uma seção de choque geométrica que cresce com n^4 , dentre outras características [7]. Devido a tais propriedades, eles estão sendo utilizados nas mais diversas aplicações: estudos de eletrodinâmica quântica, dos limites clássicos da quântica, transições de vários fótons, interações atômicas com campos eletromagnéticos especialmente em virtude do seu grande momento de dipolo [7, 8].

O estudo dos Átomos de Rydberg originou-se do estudo das linhas espectrais, na espectroscopia. No final do século XIX, Liveing e Dewar descreveram as observações feitas em longas séries em espectros de alcalinos.

Poucos anos depois, seguindo os passos de Liveing e Dewar, Rydberg elencou considerações importantes no espectro dos alcalinos[7, 9]. Ele propôs que os números de onda das séries estavam relacionados e poderiam ser expressos da seguinte forma:

$$\nu_n = \nu_0 - \frac{R_y}{(n - \delta)^2}. \quad (2.1)$$

Onde ν_0 e δ são constantes características do átomo da série, R_y é uma constante universal (conhecida como constante de Rydberg) e n é um número inteiro. Em 1906, R. W. Wood observou as linhas de absorção no gás de Sódio de transições para estados de $n = 60$ [8]. Desde o início tinha-se interesse em transições que envolvessem ns grandes, e estas foram as primeiras experiências em laboratório envolvendo átomos de Rydberg .

Apesar das primeiras experiências em laboratório envolvendo átomos de Rydberg terem ocorrido no início do século XX, após este início, devido a dificuldade encontrada na produção dos átomos de Rydberg, eles possuem pequena energia de ligação e grande seção de choque, os estudos se concentraram no desenvolvimento da teoria quântica. E, em 1913, Bohr incluiu nas ideias da física clássica dois importantes postulados, sendo que o primeiro refere ao fato do momento angular ser quantizado em unidades de \hbar , e o segundo que o elétron não irradia continuamente, mas apenas nas transições entre estados de energias definidas. Estes postulados possibilitaram a compreensão de muitas propriedades dos Átomos de Rydberg em termos da teoria clássica [9].

Em meados do século XX, os astrônomos B. Höblund e P.G. Mezger reanimaram os estudos dos átomos de Rydberg ao observarem em nuvens de hidrogênio no espaço interestelar transições ns próximas a 100 [8]. Tal interesse também recebeu um novo e importante impulso com o surgimento dos lasers sintonizáveis de corante. Com estes lasers e um aparato experimen-

tal relativamente simples, tornou-se possível acessar estados específicos de Rydberg e estudar detalhadamente as suas propriedades em laboratório[9]. Até hoje, a excitação por laser é o principal meio de produção de Átomos de Rydberg [8].

2.1 Propriedades dos Átomos de Rydberg

Para obtermos as propriedades dos átomos de Rydberg precisamos definir as suas funções de onda. Utilizaremos o método da teoria do defeito quântico para descrever as funções de onda para um elétron em um potencial coulombiano. Nesta aproximação, consideramos aplicá-la para um átomo com um único elétron de valência em estado de Rydberg, incluindo o átomo de Hidrogênio como um caso especial.

Ao analisarmos o raio médio da órbita de um elétron em um átomo de Hidrogênio podemos escrever a expressão

$$r = a_0 n^2. \tag{2.2}$$

Na qual verificamos que os elétrons em estado de Rydberg podem atingir raios de órbitas até cinco ordens de grandezas maiores que os raios típicos de elétrons no estado fundamental (considerando atualmente que podemos obter estados de Rydberg com $n = 300$ em laboratório e transições astronômicas envolvendo $n = 700$ [8]). Assim sendo, o elétron excitado interage com o restante do átomo (núcleo e elétrons não excitados) como se este fosse um núcleo com $Z' = n_R$, onde n_R é o número de elétrons no estado de Rydberg [8].

Como o elétron em estado de Rydberg possui um elevado número quântico principal, segundo o modelo semi - clássico de Bohr, ele está muito

afastado do núcleo e dos demais elétrons. Assim sendo, ele "visualiza" o núcleo com carga Z blindado com $Z - 1$ elétrons. Conseqüentemente, teremos um potencial similar ao de um átomo de hidrogênio. Da equação de Schrödinger independente do tempo, podemos determinar a energia para um átomo de hidrogênio:

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{r}\right)\psi = E\psi, \quad (2.3)$$

a qual podemos separar em uma parte angular e uma parte radial e resolver analiticamente para obtermos a solução na forma

$$\psi_{n\ell}^H(\theta, \phi, r) = Y_{\ell m}(\theta, \phi) \frac{f(E_n, \ell, r)}{r}, \quad (2.4)$$

com autovalores

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}. \quad (2.5)$$

Sendo $Y_{\ell m}$ os harmônicos esféricos e $f(E_n, \ell, r)$ as funções radiais de Coulomb. A energia de um estado de Rydberg hidrogenóide depende somente de n , tal que estados com iguais n , porém com diferentes ℓ , são degenerados. Ao analisarmos a expressão que define a energia para os átomos alcalinos e a que define a energia para o hidrogênio, verificamos que ambas diferem em dois aspectos, sendo que na expressão para a energia dos átomos alcalinos a constante de Rydberg leva em consideração a massa reduzida do elétron e é utilizado o número quântico efetivo n^* , que corresponde ao defeito quântico subtraído de n .

$$E_{n\ell} = -\frac{Ryd}{(n - \delta_\ell)^2}. \quad (2.6)$$

O defeito quântico δ_ℓ surge da interação do elétron com o caroço nuclear (demais elétrons e o núcleo) quando durante a sua trajetória o mesmo passar próximo ao caroço nuclear. Logo, a função de onda do elétron sofre uma mudança de fase correspondente a δ_ℓ . Na figura 2.1 visualizamos a forma da função de onda radial para o hidrogênio e para os alcalinos [7]. Para estados

altamente excitados, o comportamento no regime quântico aproxima-se do comportamento no regime clássico e podemos usar este modelo para entender sua dinâmica e descrever esses estados em termos da órbita do elétron.

A teoria clássica de Bohr-Sommerfeld descreve o movimento do

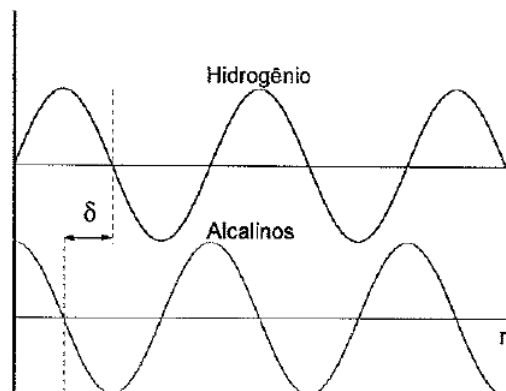


Figura 2.1: Funções de onda do Hidrogênio e dos alcalinos. O potencial mais baixo dos alcalinos introduz um deslocamento radial, δ . Este deslocamento leva a um decréscimo das energias nos estados de baixo ℓ dos alcalinos em relação ao Hidrogênio.[7]

elétron ao redor do caroço nuclear, prevendo que para baixos valores de momento angular orbital ℓ , as órbitas são elípticas de grande excentricidade, assim o elétron passa a maior parte do tempo longe da caroço nuclear, mas ao se aproximar pode tanto penetrá-lo quanto polarizá-lo, efeito este que gera o defeito quântico. Para altos valores de ℓ as órbitas se tornam circulares, com isso os átomos se tornam mais hidrogenóides e os defeitos quânticos menores (δ varia com ℓ^{-5}). Assim, para estados excitados hidrogenóides, em uma primeira aproximação consideramos o caroço pontual, e para baixos ℓ o elétron de valência penetra no caroço a cada revolução.

Assim, faz-se necessário distinguir órbitas penetrantes (baixos valores de ℓ) e órbitas não penetrantes (altos valores de ℓ) para as quais é válido o modelo do caroço pontual. Para o caso específico de órbitas penetrantes, em que o modelo de caroço pontual não é válido, a consideração do defeito quântico é necessária, satisfazendo o fato da interação entre o elétron de valência e o caroço nuclear com raio r_0 . Tal consideração se adapta a série de Rydberg.

De um modo geral, as propriedades gerais dos átomos de Rydberg obedecem uma lei de escala que varia com o número quântico efetivo $n^* = n - \delta_\ell$. Basicamente este irá depender do momento angular, ℓ , uma vez que δ também depende. A seguir apresentamos na tabela 2.1 algumas propriedades dos átomos de Rydberg que nos apresentam excelentes razões pelas quais tais átomos são tão interessantes.

Após esta breve introdução sobre as propriedades dos átomos de Rydberg descreveremos uma ideia geral sobre o estudo das seções de choque de fotoionização.

Tabela 2.1: Propriedades dos Átomos de Rydberg

Propriedades	Dependência com n^*
Energia de ligação	$(n^*)^{-2}$
Energia entre estados adjacentes	$(n^*)^{-3}$
Raio Orbital	$(n^*)^2$
Seção de Choque Geométrica	$(n^*)^4$
Momento de Dipolo: $\langle nl r n'\ell'\rangle$	$(n^*)^2$
Campo ionizante	$(n^*)^{-4}$
Polarizabilidade	$(n^*)^7$
Tempo de vida radioativa	$(n^*)^3$ (para ℓ pequeno) $(n^*)^5$ (para ℓ grande)
Intervalo de estrutura fina	$(n^*)^{-3}$

Capítulo 3

Estudo das seções de choque de fotoionização de estados de Rydberg

A fotoionização consiste em um processo que envolve a interação entre a radiação eletromagnética e um sistema atômico, resultando na ionização deste último. Ao longo do processo, o campo de radiação fornece a energia necessária para que seja arrancado e ejetado um elétron do sistema para a região do espectro contínuo de energias.

A seção de choque diferencial é definida como o número de fotoelétrons que atingem, por unidade de tempo, um detector colocado a uma certa distância do alvo (longe o suficiente para estar fora do alcance do potencial iônico) que subtende um ângulo infinitesimal dividido pelo fluxo de fótons incidentes.

Os processos colisionais envolvendo átomos em estados de Rydberg tratam de um tipo de interação na qual o par atômico se encontra em

um nível de energia altamente excitado, apresentando como característica uma grande seção de choque. Assim, há um grande interesse nos processos de fotoionização e também de fotoexcitação, uma vez que estes passam a ser de auxílio no estudo dos processos de interações.

Em nossos estudos utilizamos o modelo proposto por Aymar e colaboradores [4, 5], para o cálculo e análise do comportamento das seções de choque de fotoionização para os estados s , p , d dos alcalinos: Sódio (Na), Potássio (K), Rubídio (Rb) e Césio (Cs).

3.1 Modelo do campo central de uma única partícula

O modelo proposto por Aymar, trata-se de um modelo não relativístico com um campo central de uma única partícula[4, 5].

O problema que vamos tratar a seguir refere-se ao cálculo das seções de choque de fotoionização que poderão servir de referência para experimentos envolvendo átomos de Rydberg.

3.1.1 Formulação Básica

A formulação quântica da seção de choque de fotoionização (cm^2) (ejeção de fotoelétrons em qualquer direção de um sistema de N-elétrons - átomos ou íons - pela absorção de fótons de energia $h\nu$ e comprimento de

onda λ de um feixe não polarizado), segundo uma aproximação dipolar [10], para o estado nl de um único elétron sujeito a um potencial central é dada por

$$\sigma_{nl}(\varepsilon) = 0.855 \times 10^{-18} (\varepsilon - \varepsilon_{nl}) \left(\frac{\ell}{2\ell + 1} R_{nl,\ell-1}^2(\varepsilon) + \frac{\ell + 1}{2\ell + 1} \frac{\ell}{2\ell + 1} R_{nl,\ell+1}^2(\varepsilon) \right), \quad (3.1)$$

$\varepsilon_{nl} (< 0)$ é a energia de ligação do elétron no estado nl , $\varepsilon (> 0)$ é a energia do fotoelétron, estas energias estão em Rydberg. A energia de ligação do elétron nos estados nl são obtidas considerando os defeitos quânticos calculados por Gallagher (para o Rubídio) [11] e por Lorenzen (para os demais átomos alcalinos analisados) [12]. A energia de incidência do fóton é $h\nu = \varepsilon - \varepsilon_{nl}$. Para $\ell \neq 0$, $\sigma_{nl}(\varepsilon)$ é a soma das duas seções de choque parciais $\sigma_{nl,\ell-1}(\varepsilon)$ e $\sigma_{nl,\ell+1}(\varepsilon)$ respectivamente associadas com o fotoelétron contínuo $\ell - 1$ e $\ell + 1$.

Os elementos de matriz radiais $R_{nl,\ell\pm 1}(\varepsilon)$ são expressos em unidades atômicas. Na formulação do comprimento de dipolo tem-se:

$$R_{nl,\ell'}(\varepsilon) = \int P_{nl}(r) Q(r) P_{\varepsilon\ell'}(r) dr, \quad (3.2)$$

$Q(r)$ é o operador de dipolo e $P_{nl}(r)$ e $P_{\varepsilon\ell'}(r)$ são as funções de onda radiais do elétron de valência no estado inicial e final.

As funções de onda $P_{nl}(r)$ e $P_{\varepsilon\ell'}(r)$ são geradas pelas soluções da equação de Schrödinger (Equação 3.3) com o uso do mesmo potencial central $V(r)$ para ambas as funções de onda

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + E - 2V(r) - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right) P_{\varepsilon\ell}(r) = 0, \quad (3.3)$$

com $E = \varepsilon_{nl}$ ou ε , sendo a energia total. O termo $-2V(r)$ representa o potencial coulombiano do elétron e o termo $-\frac{\ell(\ell + 1)}{r^2}$ representa o potencial

centrífugo.

O fator numérico na equação (3.1) é uma normalização para um dada oscilação dessa função contínua por unidade de escala de energia de modo que a equação (3.4) seja satisfeita

$$\int_0^{\infty} P_{\varepsilon\ell}(r)P_{\varepsilon'\ell}(r)dr = \pi\delta(\varepsilon - \varepsilon'). \quad (3.4)$$

Aqui $P_{\varepsilon\ell}(r)$ tem a forma assintótica

$$P_{\varepsilon\ell}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \varepsilon^{-1/4} \sin \left[\sqrt{\varepsilon}r - \frac{\ell\pi}{2} + \frac{z}{\sqrt{\varepsilon}} \ln 2\sqrt{\varepsilon}r + \text{arg}\Gamma \left(\ell + 1 - \frac{iz}{\sqrt{\varepsilon}} \right) + \delta_{\ell}(\varepsilon) \right], \quad (3.5)$$

onde $z = Z - N + 1$ é a carga residual do íon resultante e $\delta_{\ell}(\varepsilon)$ é a mudança de fase com relação à função de onda do hidrogênio livre.

3.1.2 Potenciais utilizados para o cálculo da seção de choque de fotoionização

Para o cálculo das seções de choque de fotoionização dispomos de três aproximações de potenciais centrais que se adaptam bem aos átomos alcalinos em estados de Rydberg, o potencial central paramétrico, o potencial central analítico e o potencial de polarização. Passaremos a descrever cada um deles:

Potencial Central Paramétrico

O potencial central correspondente ao potencial paramétrico introduzido por Klapisch [13] é representado por uma função analítica dependente da determinação de um conjunto de parâmetros. Nesta representação cada parâmetro

descreve a distribuição das cargas em uma camada do núcleo atômico.

A formulação é descrita de modo a representar o potencial eletrostático de uma distribuição de carga efetiva descrevendo a estrutura de camadas do núcleo do átomo.

Considerando um subnível eletrônico fechado de q elétrons, assumindo uma simetria esférica, descrita pela densidade radial de carga

$$-qN \left(r^{\ell+1} e^{-(1/2)\alpha r} \right)^2, \quad (3.6)$$

onde

$$N^{-1} = \frac{(2\ell + 2)!}{\alpha^{2\ell+3}}, \quad (3.7)$$

é um fator de normalização. Então a energia potencial de um outro elétron, em uma órbita de raio r , no campo dessa densidade de carga positiva em um núcleo pontual de carga $+Z$ é

$$V(\alpha, r) = -\frac{1}{r} [qf(\ell, \alpha, r) + Z - q], \quad (3.8)$$

onde

$$f(\ell, \alpha, r) = e^{-\alpha r} \sum_{j=0}^{2\ell+1} \left(1 - \frac{j}{2\ell+2} \right) \frac{(\alpha r)^j}{j!}. \quad (3.9)$$

Sendo ℓ o número quântico secundário do elétron, r o raio da órbita do elétron, e α o raio médio da densidade de carga.

Se o núcleo do átomo é composto por mais de uma subcamada, então é comum definir outra função, que descrevemos com uma camada n completa, dada por

$$g(L, \alpha, r) = \frac{1}{2n^2} \sum_{\ell=0}^L (4\ell + 2) f(\ell, \alpha_\ell, r), \quad (3.10)$$

na qual

$$n = L + 1,$$

e

$$\alpha_\ell = \frac{\alpha_0(\ell + 1)}{1 - 0,03\ell(\ell + 1)},$$

o que nos permite descrever os átomos de forma mais realista.

Sendo assim, a energia potencial de um elétron externo, em um átomo pode ser escrito como:

$$V(\alpha, r) = \frac{1}{r} \left[\sum_{s=1}^{N_s} q_s g(L_s, \alpha_s, r) + \sum_{t=1}^{N_t} q_t f(\ell_t, \alpha_t, r) + I \right], \quad (3.11)$$

no qual: I é o grau de ionização $+1$, e N_s e N_t representam respectivamente, o número de elétrons na última camada completa do átomo e na camada em que o elétron de valência se encontra.

Os parâmetros q e α representam os seguintes significados físicos: q é o número eficaz de elétrons numa dada camada. Isto significa que:

$$\sum_s q_s + \sum_t q_t + I = Z, \quad (3.12)$$

e α é o raio médio da densidade de carga pela igualdade

$$\alpha_\ell = \frac{2\ell + 3}{\langle r \rangle}, \quad (3.13)$$

mas, na função g , α é dado por

$$\alpha_0 = \frac{2}{\langle r \rangle}. \quad (3.14)$$

Os subscritos s e t representam respectivamente a última camada completa do átomo e a camada em que o elétron de valência se encontra.

(a) Obtenção da expressão do potencial paramétrico de Klapisch:

Sendo a energia potencial de um elétron na camada de valência de um átomo descrito conforme a equação 3.11

$$V(\alpha, r) = \frac{1}{r} \left[\sum_{s=1}^{N_s} q_s g(L_s, \alpha_s, r) + \sum_{t=1}^{N_t} q_t g(\ell_t, \alpha_t, r) + I \right],$$

substituindo na mesma as funções f e g pelas referidas equações (3.9) e (3.10)

$$V(\alpha, r) = \frac{1}{r} \left[\sum_{s=1}^{N_s} q_s \frac{1}{2n^2} \sum_{\ell=0}^{L_s} (4\ell + 2) f(\ell_s, \alpha_s, r) + \sum_{t=1}^{N_t} q_t f(\ell_t, \alpha_t, r) + I \right],$$

$$V(\alpha, r) = \frac{1}{r} \left[\sum_{s=1}^{N_s} q_s \frac{1}{2n^2} \sum_{\ell=0}^{L_s} (4\ell + 2) \left[e^{-\alpha_s r} \sum_{j=0}^{2\ell_s+1} \left(1 - \frac{j}{2\ell_s + 2} \right) \frac{(\alpha_s r)^j}{j!} \right] \right. \\ \left. + \frac{1}{r} \left[\sum_{t=1}^{N_t} q_t \left[e^{-\alpha_t r} \sum_{j=0}^{2\ell_t+1} \left(1 - \frac{j}{2\ell_t + 2} \right) \frac{(\alpha_t r)^j}{j!} \right] + I \right] \right].$$

Sendo α os raios médios da densidade de carga descritos pelas equações (3.10) e (3.14) se originados da função g , e pela equação (3.13) se originado pela função f .

$$V(\alpha, r) = \frac{1}{r} \left\{ \sum_{s=1}^{N_s} q_s \frac{1}{2n^2} \sum_{\ell=0}^{L_s} (4\ell + 2) \left[e^{-\left(\frac{2}{\langle r \rangle} \frac{(\ell + 1)}{1 - 0,03\ell(\ell + 1)} \right) r} \right] \right\} \times \\ \left[\sum_{j=0}^{2\ell_s+1} \left(1 - \frac{j}{2\ell_s + 2} \right) \frac{\left(\left(\frac{2}{\langle r \rangle} \frac{(\ell + 1)}{1 - 0,03\ell(\ell + 1)} \right) r \right)^j}{j!} \right] \\ + \frac{1}{r} \left\{ \sum_{t=1}^{N_t} q_t \left[e^{-\frac{2\ell + 3}{\langle r \rangle} r} \sum_{j=0}^{2\ell_t+1} \left(1 - \frac{j}{2\ell_t + 2} \right) \frac{\left(\frac{2\ell + 3}{\langle r \rangle} r \right)^j}{j!} \right] + I \right\}. \quad (3.15)$$

Esta é a equação geral para o potencial central paramétrico descrito por Klapisch.

Potencial Central Analítico

O potencial central analítico também foi descrito por Klapisch [13], e utilizado com sucesso por Aymar em seus trabalhos [4, 6]. Este potencial apresenta uma forma analítica simples dependente de três parâmetros α_1 , α_2 e

α_3 :

$$V_0 = -r^{-1} [z + (Z - z)\exp(-\alpha_1 r) + \alpha_2 r \exp(-\alpha_3 r)] \quad (3.16)$$

O potencial ideal é determinado pela minimização do desvio da raiz quadrada média entre a energia de ordem zero calculada e a energia experimental dos níveis mais baixos excitados.

Os parâmetros α_1 , α_2 e α_3 utilizados na obtenção do potencial central variam conforme o átomo e em alguns casos, como para o Potássio, também conforme os estados.

Em nossas análises utilizamos os parâmetros fornecidos pela Dra. Ay-mar [14]. Seguem os parâmetros utilizados conforme o átomo e os estados:

Para o Sódio, estados ns , np e nd :

$$\alpha_1 = 8,04278920,$$

$$\alpha_2 = 23.30981074,$$

$$\alpha_3 = 2.66286396.$$

Para o Potássio, estados ns e np :

$$\alpha_1 = 3.47075267,$$

$$\alpha_2 = 10.56079349,$$

$$\alpha_3 = 1.73382442.$$

Para o Potássio, estado nd :

$$\alpha_1 = 4.90057930,$$

$$\alpha_2 = 27.83664574,$$

$$\alpha_3 = 2.48539448.$$

Para o Rubídio, estados ns , np e nd :

$$\alpha_1 = 3.33190481,$$

$$\alpha_2 = 6.40692593,$$

$$\alpha_3 = 1.36792864.$$

Para o Césio, estados ns , np e nd :

$$\alpha_1 = 3.12712720,$$

$$\alpha_2 = 3.12397705,$$

$$\alpha_3 = 1.29062979.$$

Potencial de Polarização

Segundo a teoria clássica de Bohr-Sommerfeld o movimento do elétron ao redor do caroço nuclear, para baixos valores de momento angular orbital ℓ , apresenta órbitas elípticas de grande excentricidade, assim o elétron passa a maior parte do tempo longe da caroço nuclear, mas ao se aproximar pode tanto penetrá-lo quanto polarizá-lo, efeito este que gera o defeito quântico. Para altos valores de ℓ as órbitas se tornam circulares, com isso os átomos se tornam mais hidrogenóides e os defeitos quânticos menores (δ varia com ℓ^{-5}).

Os efeitos desta polarização nuclear são considerados pela adição, ao potencial V_0 , de um potencial de polarização efetiva V_{pol} [4], com a forma

$$V_{pol} = -\frac{1}{2}\alpha_d r^{-4} \left[1 - \exp - \left(\frac{r}{r_c} \right)^6 \right] \quad (3.17)$$

no qual α_d é a polarizabilidade dipolo estática do núcleo e r_c é o raio nuclear efetivo.

Segundo Weisheit [15] :

$$\alpha_d = 8,976,$$

$$r_c = 3,505,$$

em unidades atômicas.

Operadores de Dipolo

No cálculo dos elementos da matriz radial (Equação (2.2)) faz-se uso da expansão dipolar do operador dipolo sendo que: nas aproximações do Potencial Central Paramétrico e do Potencial Central Analítico, $Q(r)$ é o operador usual r ; na aproximação do Potencial de Polarização, utiliza-se um operador dipolo modificado [4], que inclui os efeitos da polarização nuclear:

$$Q(r) = r \left\{ 1 - \alpha_d r^{-3} \left[1 - \exp \left(\frac{-r}{r_c} \right)^3 \right] \right\}. \quad (3.18)$$

Em nossos estudos utilizamos o potencial central analítico acrescido do potencial de polarização, por apresentar uma aproximação mais eficaz em comparação com os dados teóricos e experimentais existentes. Em seus estudos, Aymar [4, 6] utilizou ambos potenciais elencados, verificando a viabilidade dos mesmos em relação aos dados teóricos e experimentais existentes. Salientamos que utilizamos em nossos cálculos os defeitos quânticos atualizados por Gallagher [11] e Lorenzen [12], como já descrito anteriormente.

3.2 Mínimos de Cooper

Em uma aproximação de dipolo não relativística, a seção de choque é proporcional a soma ponderada dos quadrados dos elementos de matriz de dipolo $\ell \rightarrow \ell + 1$ e $\ell \rightarrow \ell - 1$ (somente no caso do elétron no estado s há somente o $\ell \rightarrow \ell + 1$). Uma característica extremamente interessante dos elementos de matriz de dipolo $\ell \rightarrow \ell + 1$ é a existência de zeros em um grande número de casos. A existência de zeros nos elementos de matriz e os mínimos associados (chamados Mínimos de Cooper) às seções de choque de fotoionização são bem conhecidos para os estados fundamentais dos átomos alcalinos. Isto foi evidenciado experimentalmente pela primeira vez por Dichtburn e colaboradores [16]. A explicação básica do fenômeno em átomos alcalinos foi dada por Bates [17] e mais tarde por Seaton [18] e Cooper [19], [20], estes Mínimos ocorrem na fotoionização do elétron de valência $n\ell$ (e próximo a ele), desde que a função de onda do estado discreto $n\ell$ tenha pelo menos um nó. Tipicamente, uma função de onda, para o caso, do estado contínuo de energia zero conterá antinodos com muitas regiões internas como existem nas subcamadas do átomo correspondente ao valor de ℓ . Com o aumento de energia, os nós da função de onda do estado contínuo irão se mover para menor valor de r . Para as funções de onda de estado inicial e final de onda que têm nós dentro do átomo, os valores dos elementos de matriz e, portanto, as seções de choque, dependerão das posições relativas desses nós com uma energia específica.

Geralmente, ambos os estados discretos e contínuos têm funções de onda que são oscilatórias. Assim, o perfil da distribuição espectral da seção de choque de fotoionização, apresenta uma dependência dos elementos de matriz do estado inicial e final. Aumentando o número quântico principal, o número de nós no estado discreto aumenta de acordo com seu número

quântico orbital. Além disso, a função de onda contínua torna-se mais compacta, com o aumento da energia, isto é, os seus nodos movem-se em direção do núcleo. Nas complicadas sobreposições de amplitudes positivas e negativas, que vão para o elemento de matriz de dipolo, pode ser que em alguma energia os componentes positivos e negativos se cancelam resultando em um zero no elemento de matriz de dipolo [21]. Na figura 3.1, apresentamos as funções de onda para os estados discretos e contínuos do "K 44d", evidenciando a sobreposição de suas amplitudes positivas e negativas que resultam no cancelamento dos elementos de matriz radial. Esta é a razão por trás da aparência de um mínimo de Cooper em curvas de seção de choque de fotoionização.

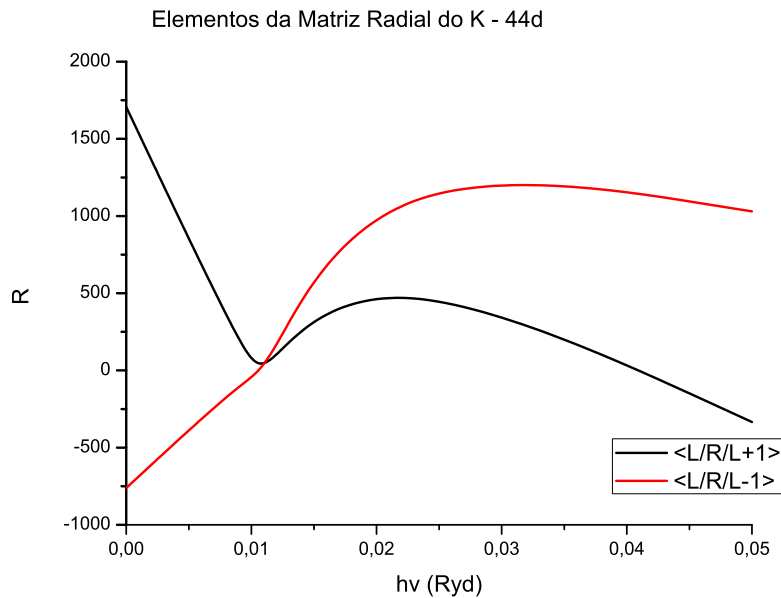


Figura 3.1: Funções de onda para os estados discretos e contínuos do "Rb nl

Recentemente vários estudos estão sendo dedicados aos Mínimos

de Cooper, em especial, envolvendo seções de choque de fotoionização: nas áreas da espectroscopia [22]; no estudo de propriedades eletrônicas de átomos e moléculas [23, 24]; no espalhamento de raio X [25]; na recombinação eletrônica [26]; na análise molecular e tomografia molecular [27]; nas áreas de fotoemissão e dicroísmo [28] e nas áreas de plasmas [29, 30].

Apresentaremos no próximo capítulo os resultados obtidos e faremos as discussões sobre estes resultados.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

No estudo da seção de choque de fotoionização analisamos o processo de interação entre a radiação eletromagnética e um sistema atômico que pode resultar na ejeção de um elétron do sistema para a região do espectro contínuo de energias.

Utilizamos em nossos estudos, um programa em linguagem *Fortran* 77, desenvolvido e gentilmente cedido pela Dra. Mireille Aymar (Laboratoire Aimé Cotton), com qual obtivemos as seções de choque de fotoionização dos estados de Rydberg, bem como as funções de onda radiais $\ell + 1$ e $\ell - 1$ necessárias para análise das evidências dos mínimos de Cooper do Sódio, Potássio, Rubídio e Césio para $n \leq 44$ e $0 \leq \ell \leq 2$.

Para um melhor refino nos resultados, calculamos as energias dos estados nl utilizando os valores dos defeitos quânticos atualizados por Gallagher [11], para o Rubídio, e por Lorenzen [12], para os demais. Posteriormente, com as novas energias dos estados, aferimos os parâmetros de inicialização para cada estado nl de cada átomo, assim obtendo uma seção de choque de fotoionização mais coerente.

4.1 Comparação com Dados Experimentais

A seção de choque de fotoionização para os estados fundamentais são bem conhecidos, tanto teórica quanto experimentalmente, o mesmo não ocorre para os estados excitados, ainda mais altamente excitados.

A fim de avaliar nossos resultados, os comparamos com dados experimentais, mesmo para baixos números quânticos.

Os resultados do Sódio são comparados com os obtidos experimentalmente por Amin (2006) [31] e também com os resultados teóricos de Aymar (1976) [5]. Como é mostrado na figura 4.1 os resultados, por nós encontrados, apresentam uma discrepância significativa em relação aos dados experimentais, mas uma boa aproximação em relação aos dados teóricos, obtidos anteriormente. Isto nos leva a crer que necessitamos aperfeiçoar o modelo para o Sódio, embora o número de pontos experimentais seja baixo para uma análise mais apurada. O que nos reporta a necessidade da obtenção de mais dados experimentais.

A comparação para o átomo de Rubídio foi feita com os resultados teóricos de Aymar (1984) [4] e experimentais de Gabbanini (1998) [2]. Na figura 4.2 verificamos que as seções de choque de fotoionização encontradas por nós, utilizando os defeitos quânticos de Gallagher, se aproximam consideravelmente dos valores experimentais obtidos por Gabbanini, o que nos leva a acreditar que os valores são bastantes consistentes, convergindo para o esperado, inclusive mostrando-se melhor que os resultados teóricos obtidos anteriormente por Aymar para $5p$ e $5p, d$. Mas ainda necessitamos de um maior número de dados experimentais.

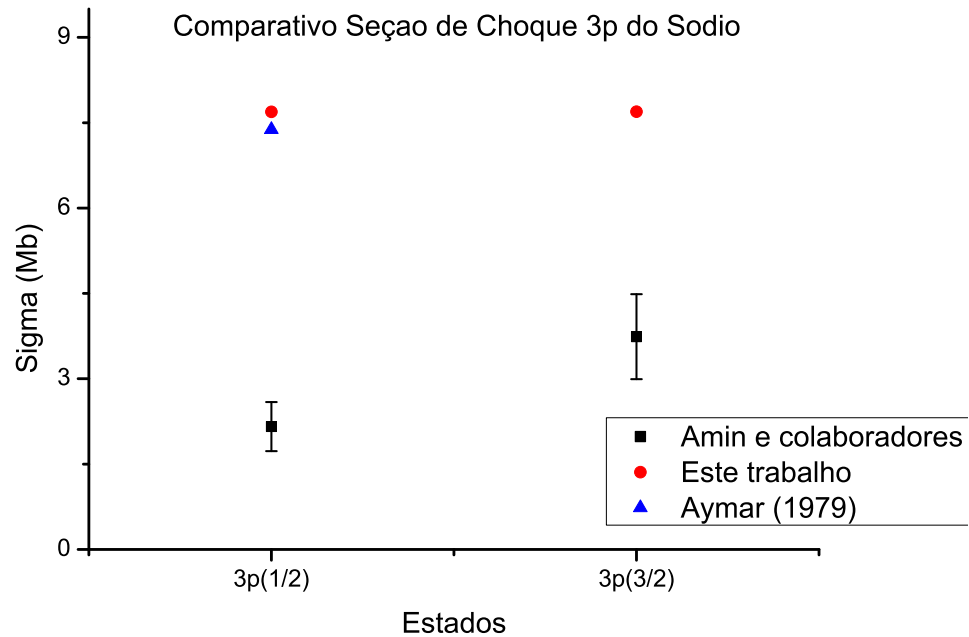


Figura 4.1: Comparativo da Seção de Choque do Na - 3p

Para o Césio, os dados experimentais, existentes até então (até o que conhecemos), apresentam apenas um ponto, o que não nos permite qualquer comparação.

Para o Potássio, até o momento não encontramos dados experimentais para a comparação com nossos resultados teóricos.

4.2 Comportamento da Seção de Choque de Fotoionização em uma Função de n

Nos átomos em estados de Rydberg, seu elétron de valência está altamente excitado, isto faz com que tenha um comportamento diferencia-

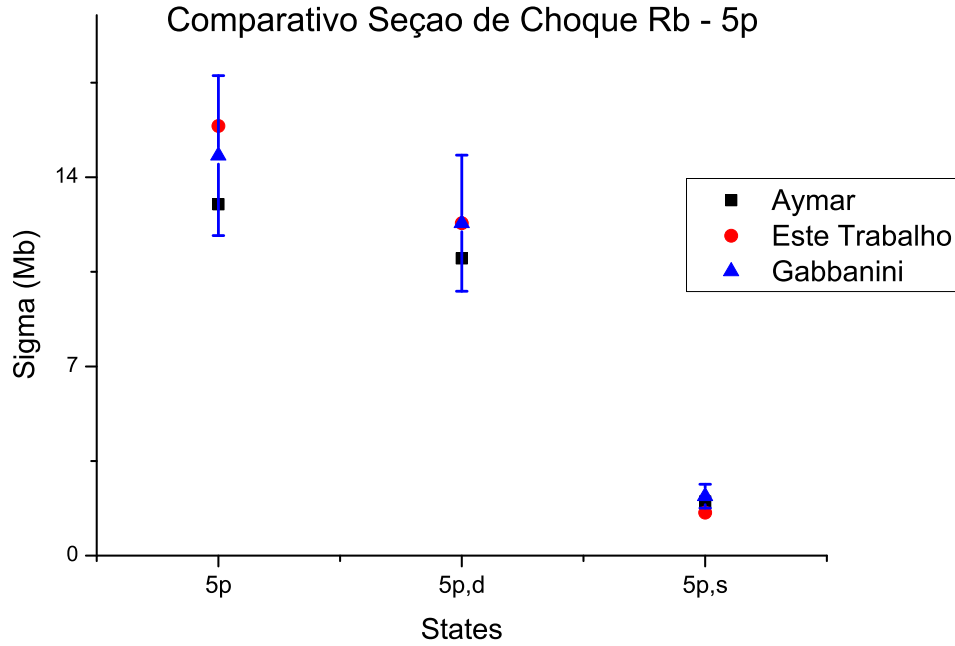


Figura 4.2: Comparativo da Seção de Choque do Rb - 5p

do, aproximando-se do comportamento do átomo de Hidrogênio. As propriedades gerais dos átomos em estados de Rydberg mostram que a seção de choque tem uma dependência geométrica com o número quântico efetivo que varia com $(n^*)^4$.

As seções de choque de fotoionização do Sódio foram calculadas para $4 \leq n \leq 44$ e $0 \leq \ell \leq 2$, utilizando os defeitos quânticos atualizados por Lorenzen e Niemax (1983) [12] para a energia do limiar. Analisando os resultados obtidos para as seções de choque de fotoionização do Sódio para ns (Figura 4.3), np (Figura 4.4) e nd (Figura 4.5) constatamos uma grande conformidade com os valores, também teóricos, obtidos anteriormente por Aymar [5] ($4 \leq n \leq 8$), mas obviamente uma pequena diferença por estarmos tratando com um defeito quântico diferente. O comportamento das

curvas de seção de choque encontradas para o Sódio, apresentam a característica esperada quanto a propriedade da seção de choque em função de n , ou seja, apresentam uma dependência com $(n^*)^4$.

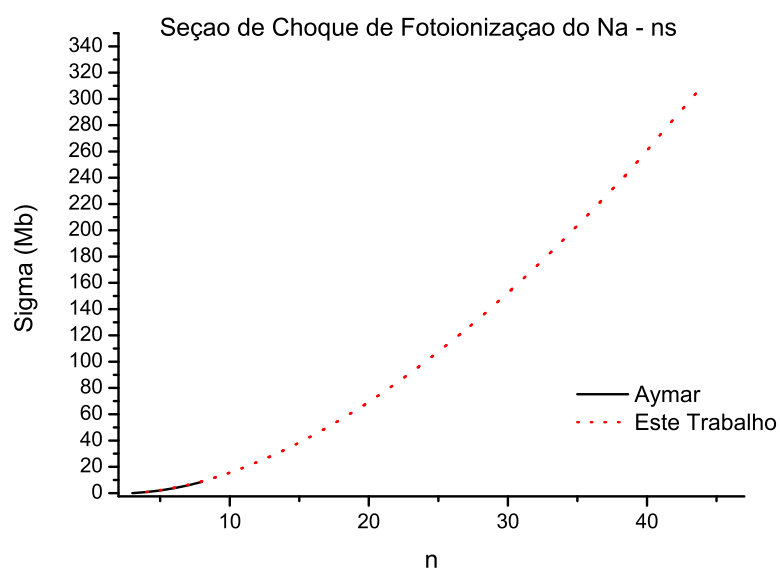


Figura 4.3: Seção de Choque de Fotoionização do Na - ns

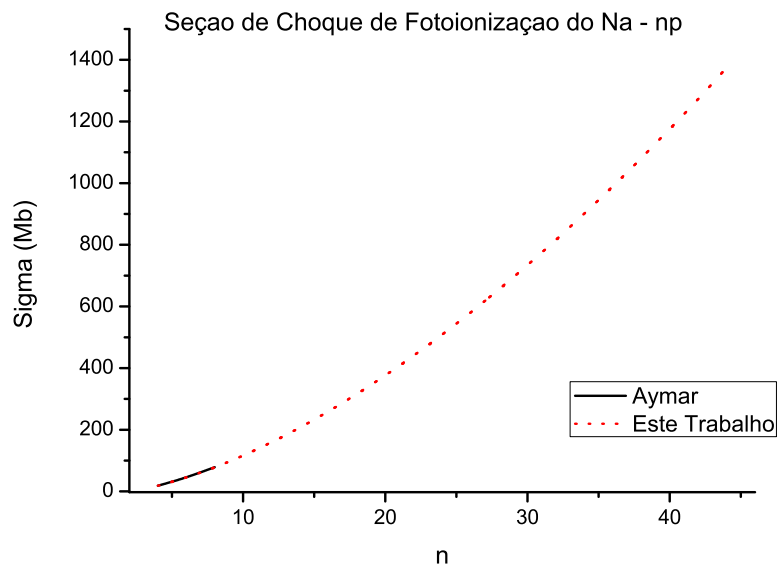


Figura 4.4: Seção de Choque de Fotoionização do Na - np

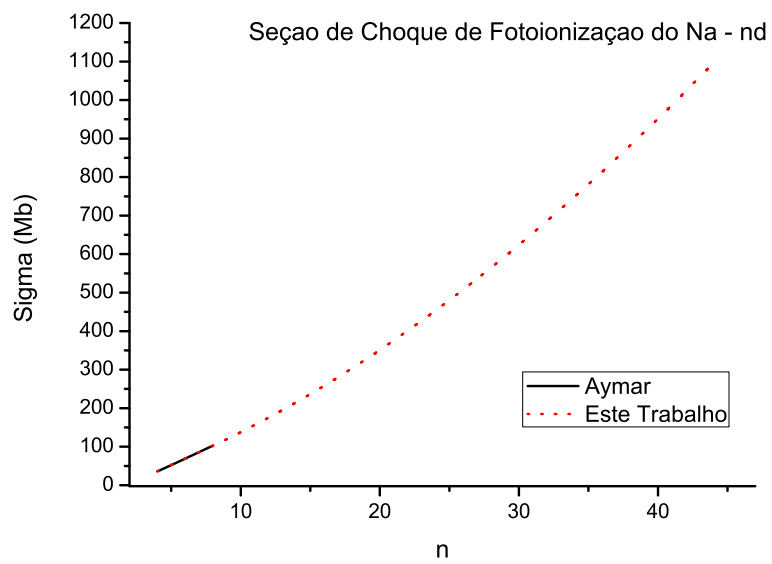


Figura 4.5: Seção de Choque de Fotoionização do Na - nd

Ao analisarmos os resultados da seção de choque de fotoionização do Potássio calculadas para ns (Figura 4.6), np (Figura 4.7) e nd (Figura 4.8) de $5 \leq n \leq 44$ obtidos com os valores do defeito quântico atualizados por Lorenzen e Niemax (1983) [12] para a energia no limiar, verificamos uma boa conformidade com os valores teóricos de Aymar para os estados ns e np com baixos n ($n < 15$), mas uma pequena diferença por estarmos tratando com um defeito quântico diferente. Já para o estado nd esta conformidade com os dados da Aymar se restringem a $n < 10$. O comportamento das curvas de seção de choque encontradas para o Potássio, apresentam a característica esperada quanto a propriedade da seção de choque em função de n , ou seja, apresentam uma dependência com $(n^*)^4$.

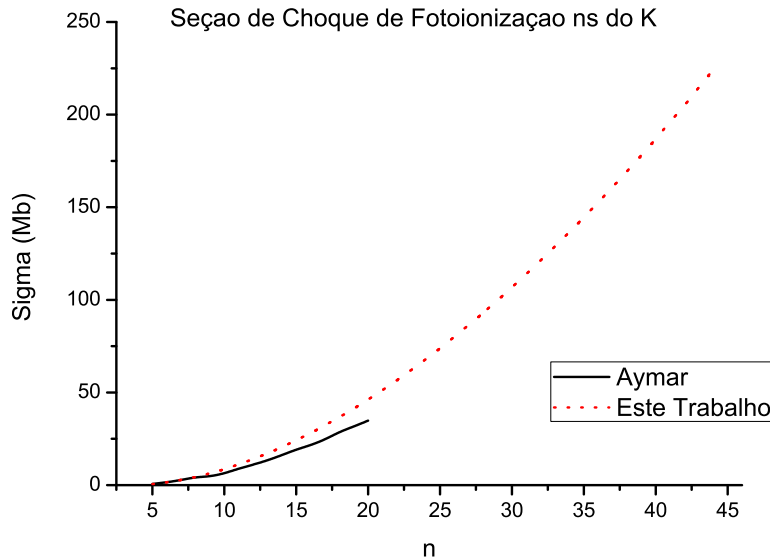


Figura 4.6: Seção de Choque de Fotoionização do K - ns

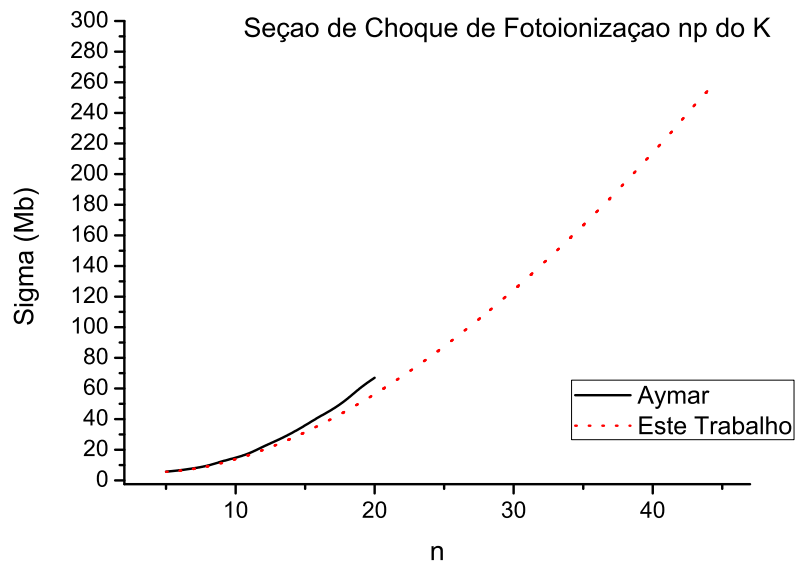


Figura 4.7: Seção de Choque de Fotoionização do K - np

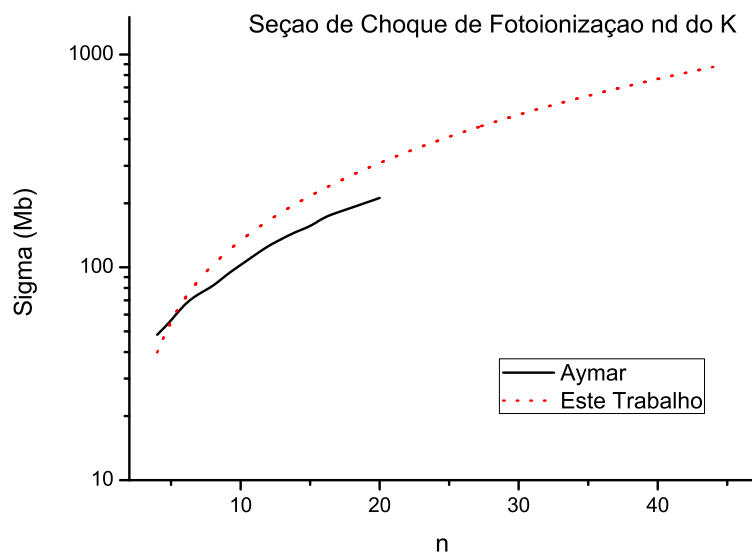


Figura 4.8: Seção de Choque de Fotoionização do K - nd

Os resultados da seção de choque de fotoionização do Rubídio para ns (Figura 4.9), np (Figura 4.10), e nd (Figura 4.11), são analisados utilizando os defeitos quânticos atualizados por Gallagher (2003) [11] para a energia do limiar e calculados para $10 \leq n \leq 44$. Nestes verificamos uma grande conformidade com os valores teóricos obtidos por Aymar [4] para $10 \leq n \leq 20$, apesar de uma pequena diferença já esperados devido ao defeito quântico utilizado. O comportamento das curvas de seção de choque de fotoionização para o Rubídio encontradas, apresentam a característica esperada quanto a propriedade da seção de choque em função de n , ou seja, apresentam uma dependência com $(n^*)^4$.

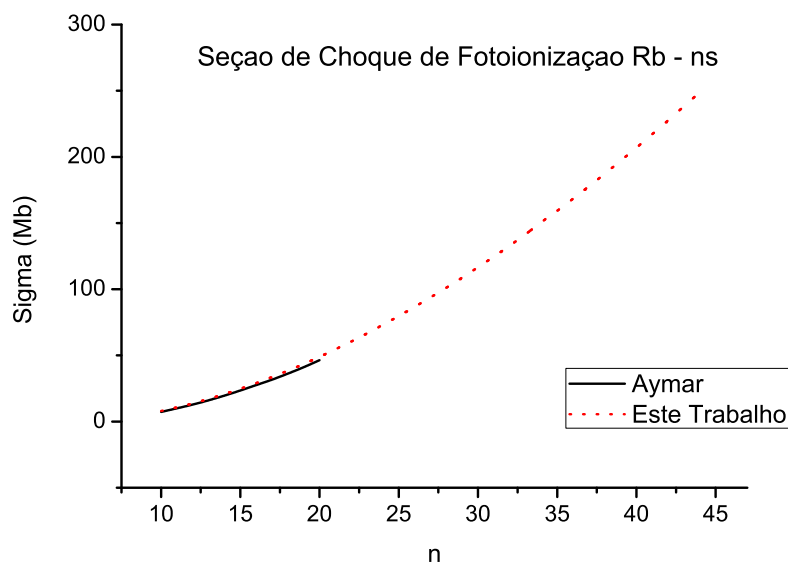


Figura 4.9: Seção de Choque de Fotoionização do Rb - ns

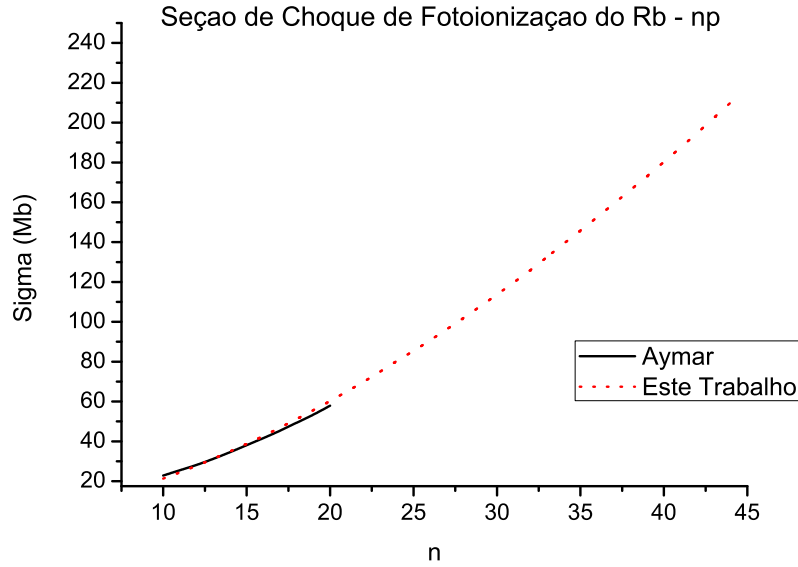


Figura 4.10: Seção de Choque de Fotoionização do Rb - np

Os cálculos da seção de choque de fotoionização do Césio para ns (Figura 4.12), np (Figura 4.13), e nd (Figura 4.14), são analisados utilizando os defeitos quânticos atualizados por Lorenzen (1983) [12] para a energia do limiar e calculados para $5 \leq n \leq 44$. Para o Césio não foi encontrado na literatura resultados teóricos para a seção de choque de fotoionização a fim de realizarmos um comparativo, apresentamos assim somente os resultados por nós obtidos. O comportamento das curvas de seção de choque do Césio apresentam a característica esperada quanto a propriedade da seção de choque em função de n , ou seja, apresentam uma dependência com $(n^*)^4$.

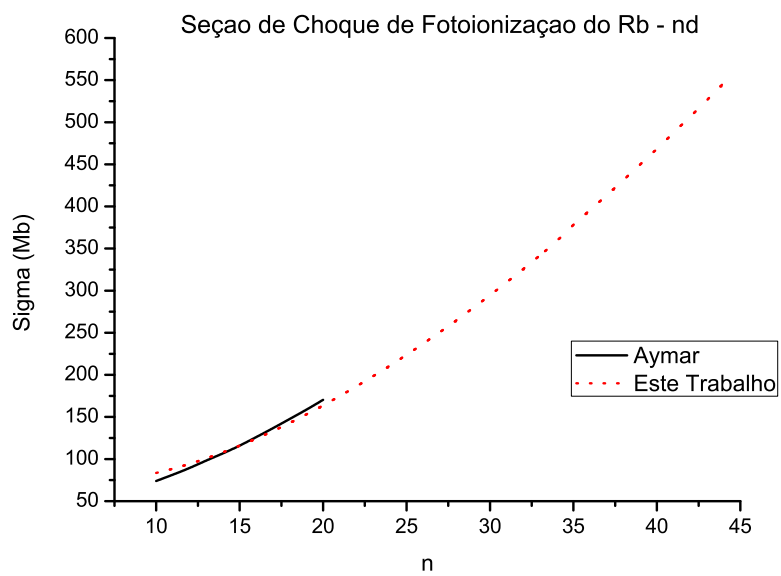


Figura 4.11: Seção de Choque de Fotoionização do Rb - nd

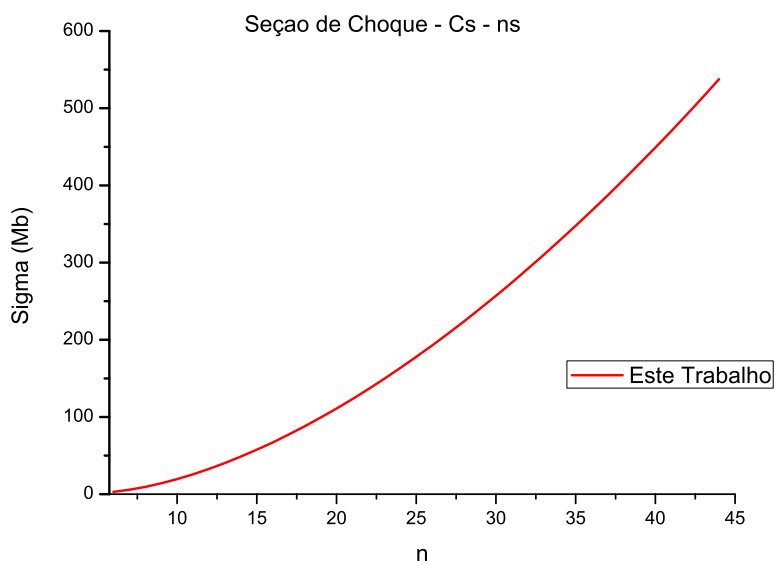


Figura 4.12: Seção de Choque de Fotoionização do Cs - ns

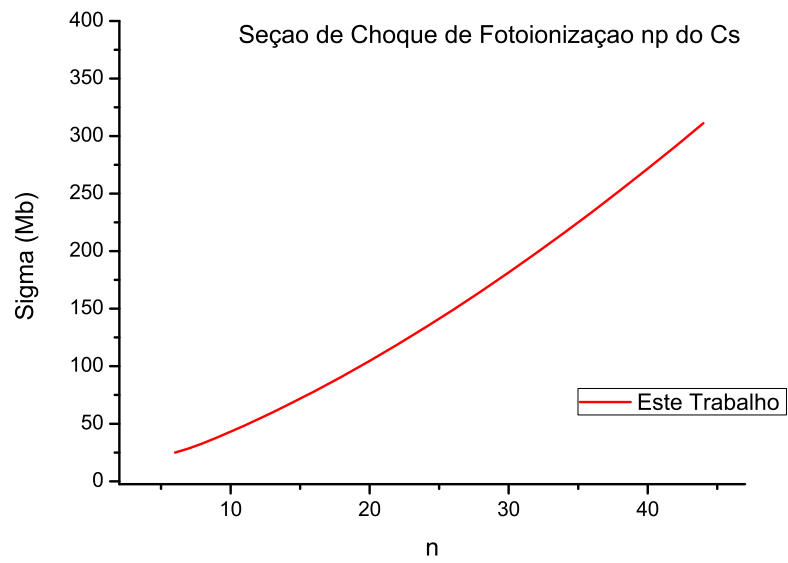


Figura 4.13: Seção de Choque de Fotoionização do Cs - np

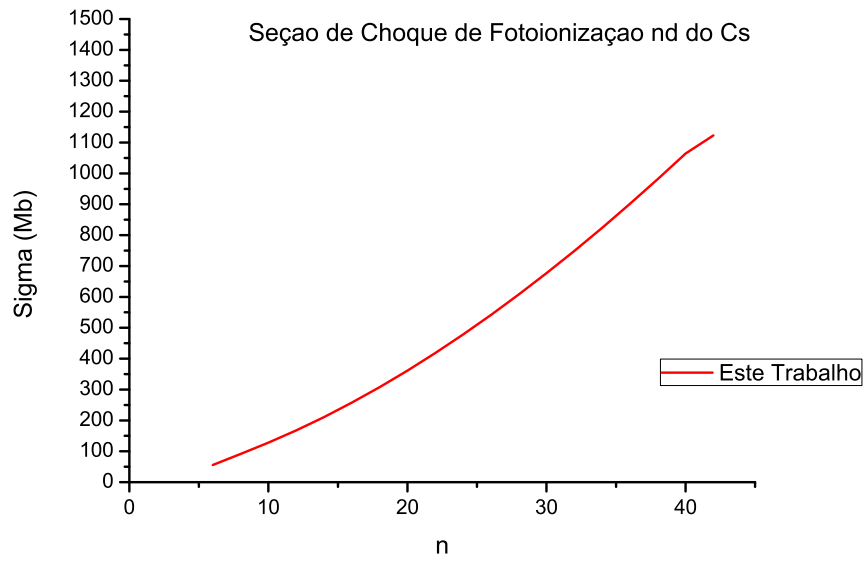


Figura 4.14: Seção de Choque de Fotoionização do Cs - nd

4.3 Comportamento da Seção de Choque de Fotoionização como uma função da energia $h\nu$ e Mínimos de Cooper

Ao analisarmos um átomo em um dado estado quântico a energia do mesmo irá fornecer as informações do sistema onde ele se encontra. Portanto, analisamos o comportamento das seções de choque de fotoionização dos átomos alcalinos, Sódio, Potássio, Rubídio e Césio, em função da energia do fotoelétron, para n altamente excitados (20, 30, 40 e 44) e para alguns n baixos (com a finalidade de comparação com os dados disponíveis na literatura).

As seções de choque de fotoionização foram analisadas para energias (em *Ryd*) variando conforme o átomo alcalino e o estado em que se encontra, tal energia refere-se a energia do fotoelétron descrita na equação (3.1).

Inicialmente, comparamos os resultados das seções de choque de fotoionização em função da energia do fotoelétron encontrada por nós e os existentes na literatura, tanto para o Sódio (Figura 4.15), para o Potássio (Figura 4.16) e para o Rubídio (Figura 4.17). Para o Césio não dispomos de dados para fazer o comparativo.

Na figura 4.15, analisamos a seção de choque de fotoionização do Sódio no estado 3p, comparando os nossos resultados com os de Aymar (1976) [5]. No mesmo verificamos uma pequena diferença para energias próximos a $1Ryd$, mas uma excelente concordância para baixas e altas energias.

Na figura 4.16, apresentamos um comparativo entre a seção de choque de fotoionização do Potássio no estado 6p calculada neste trabalho com os

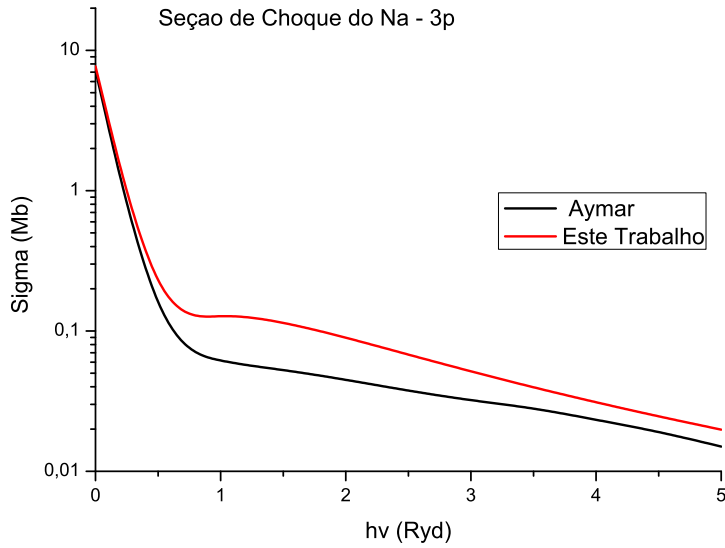


Figura 4.15: Seção de Choque de Fotoionização do Na - 3p

obtidos por Aymar (1987) [32]. Verificamos uma grande conformidade entre os valores por nós obtidos e por Aymar.

Na figura 4.17 verificamos que os nossos resultados da seção de choque de fotoionização do Rubídio no estado 8d apresentam uma grande conformidade com os resultados de Aymar (1984) [4].

Da análise do comportamento das seções de choque de fotoionização em função da energia para o Sódio (Figura 4.16), Potássio (Figura 4.16) e Rubídio (4.17), verificamos que para os três casos a seção de choque apresenta um decréscimo com o aumento da energia do fotoelétron, ou seja, com o aumento da energia do fotoelétron a probabilidade de fotoionização para o

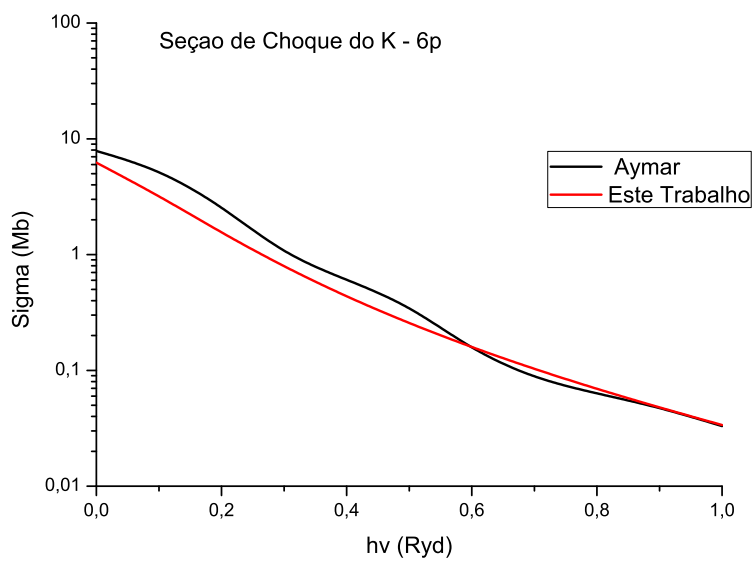


Figura 4.16: Seção de Choque de Fotoionização do K - 6p

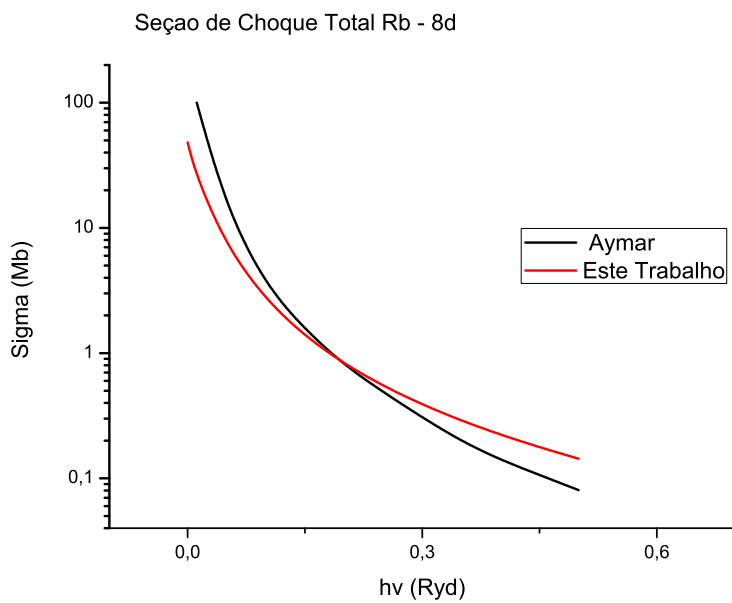


Figura 4.17: Seção de Choque de Fotoionização do Rb - 8d

estado analisado decaiu.

Para a comparação das seções de choque de fotoionização calculadas com as existentes na literatura, verificamos uma escassez de dados, principalmente para estados de energia mais elevados. Dispomos somente de dados para baixos estados de energia, como verificamos nas comparações feitas acima.

Um dos objetivos de nossos estudos, além de expandir os dados obtidos por Aymar [4, 5], é analisar a ocorrência de mínimos de seção de choque para determinadas energias. Para tal, inicialmente estudamos o comportamento da seção de choque de fotoionização em função da variação da energia do fotoelétron.

Apresentamos, a seguir, o comportamento das seções de choque de fotoionização dos átomos alcalinos, Sódio (Figura 4.18), Potássio (Figuras 4.19 e 4.20), Rubídio (Figuras 4.21, 4.22 e 4.23) e Césio (Figuras 4.24 e 4.25) analisados para $n = 20, n = 30, n = 40$ e $n = 44$ em função da energia do fotoelétron, para alguns estados nl .

Analisando o comportamento da seção de choque de fotoionização em função da energia para o estado $44s$ do Sódio (Figura 4.18) evidenciamos a presença de um mínimo de seção de choque muito evidente para uma energia próxima a $0,01Ryd$, verificando-se que para esta energia teremos uma queda considerável no processo de fotoionização para este estado.

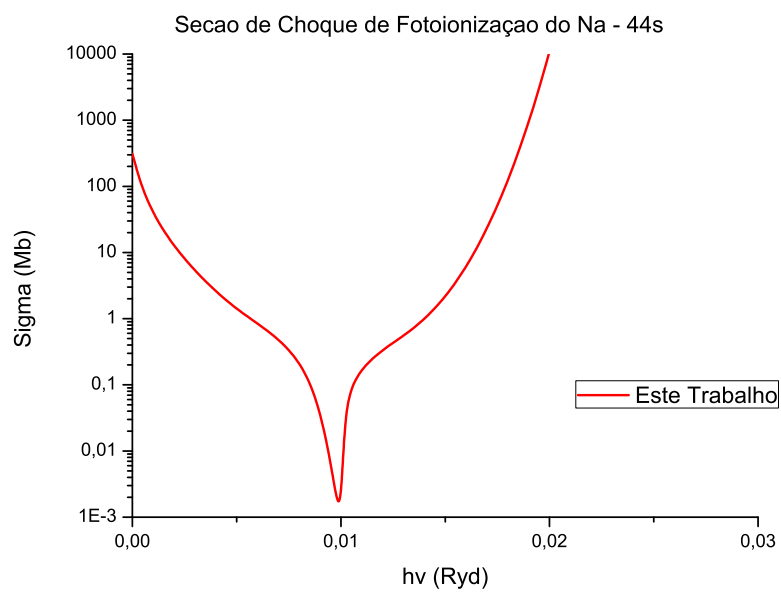


Figura 4.18: Seção de Choque de Fotoionização do Na - 44s

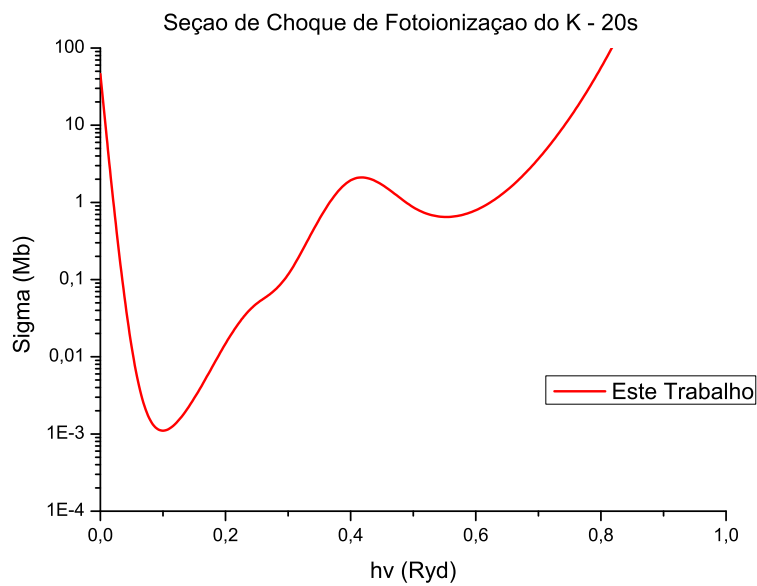


Figura 4.19: Seção de Choque de Fotoionização do K - 20s

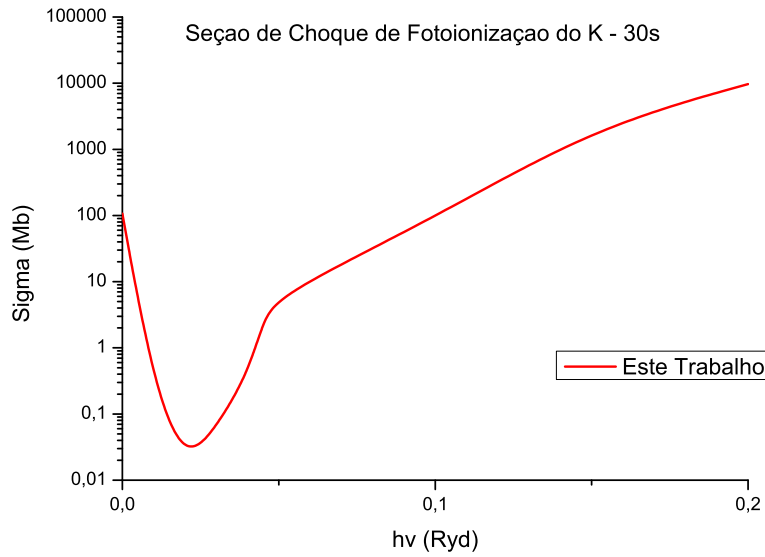


Figura 4.20: Seção de Choque de Fotoionização do K - 30s

O comportamento das seções de choque de fotoionização do Potássio são apresentadas para os estados $20s$ (Figura 4.19) e $30s$ (Figura 4.20), nos quais podemos visualizar um comportamento similar em ambos os estados, ou seja as curvas apresentam as mesmas tendências, isto por estarmos tratando de um mesmo átomo e mesmo momento angular ℓ . Para o estado $20s$ evidenciamos um mínimo principal de seção de choque para energias próximas a $0,1Ryd$ e também um mínimo secundário para energias próximas a $0,6Ryd$; e para o estado $30s$ evidenciamos um mínimo próximo a $0,02Ryd$.

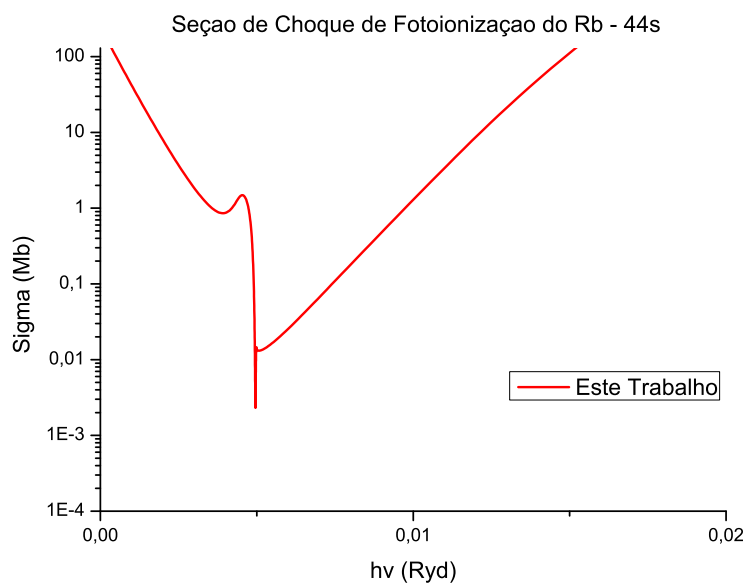


Figura 4.21: Seção de Choque de Fotoionização do Rb - 44s

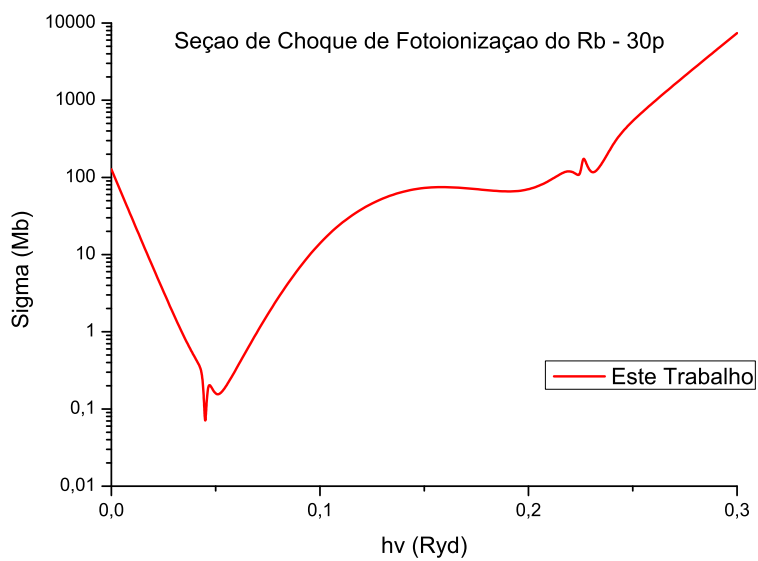


Figura 4.22: Seção de Choque de Fotoionização do Rb - 30p

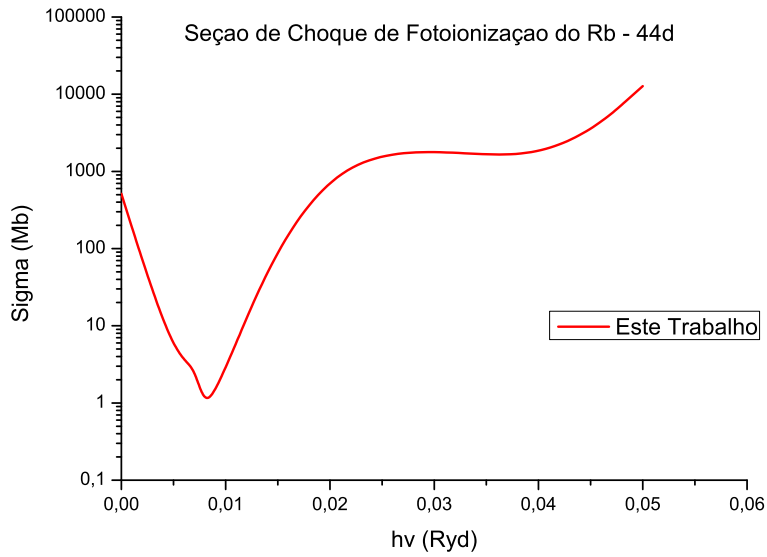


Figura 4.23: Seção de Choque de Fotoionização do Rb - 44d

Para o Rubídio apresentamos o comportamento das seções de choque de fotoionização para os estados $44s$ (Figura 4.21), $30p$ (Figura 4.22) e $44d$ (Figura 4.23), nos quais podemos visualizar um comportamento similar em ambos os estados, ou seja as curvas apresentam as mesmas tendências, isto por estarmos tratando de um mesmo átomo. Para o estado $44s$ evidenciamos um mínimo de seção de choque para energias próximas a $0,005 Ryd$; para o estado $30p$ verificamos um mínimo principal para energias próximas a $0,05 Ryd$ e também um mínimo secundário para energias próximas a $0,25 Ryd$; e para o estado $44d$ evidenciamos um mínimo principal próximo a $0,01 Ryd$ e um mínimo secundário para energias próximas a $0,035 Ryd$.

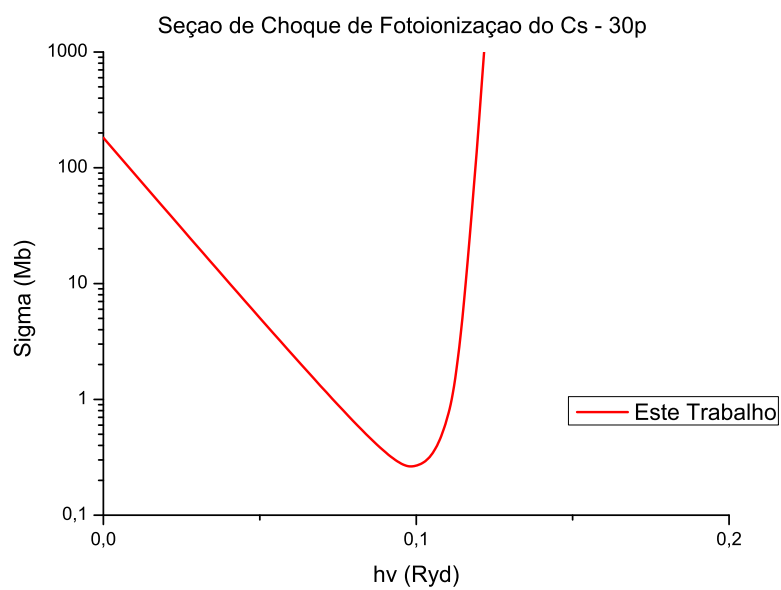


Figura 4.24: Seção de Choque de Fotoionização do Cs - 30p

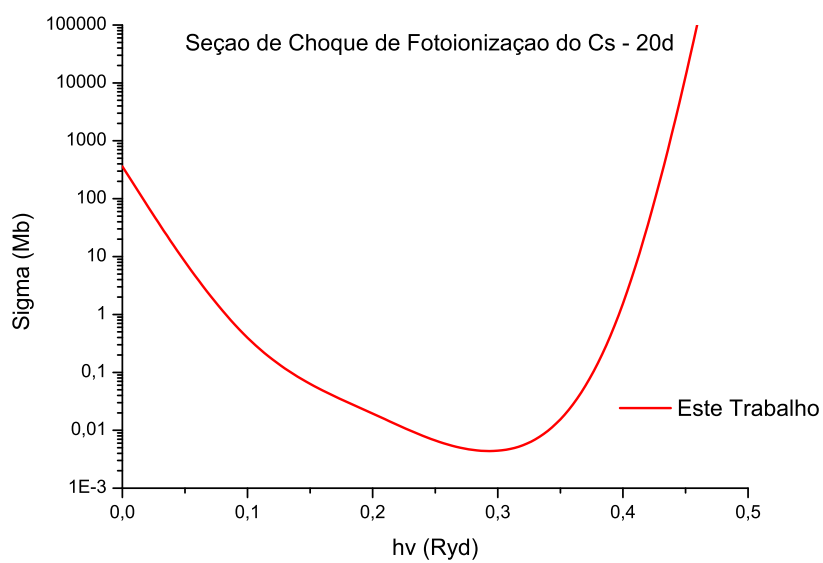


Figura 4.25: Seção de Choque de Fotoionização do Cs - 20d

Analisando o comportamento da seção de choque de fotoionização em função da energia do Césio para o estado $30p$ (Figura 4.24) evidenciamos a presença de um mínimo de seção de choque para uma energia próxima a $0,1Ryd$ e para o estado $20d$ (Figura 4.25) visualizamos a presença de um mínimo para uma energia próxima a $0,3Ryd$. Também verificamos que para ambos estados o comportamento das curvas de seção de choque são similares, ou seja, apresentam a mesma tendência, o que se espera por estarmos analisando um mesmo átomo.

Ao estudarmos o comportamento das seções de choque de fotoionização em função da energia do fotoelétron também analisamos o comportamento das funções de onda radiais dos mesmos, observando os pontos onde os elementos da matriz de dipolo tendiam a zero, e, assim determinamos a ocorrência de possíveis Mínimos de Cooper para os átomos alcalinos estudados.

Os resultados para os Mínimos de Cooper foram obtidos para n iguais a 20, 30, 40 e 44 para os estados ns , np e nd (estados nl que estudamos o comportamento da seção de choque de fotoionização em função da energia do fotoelétron), para os átomos alcalinos: Sódio (Figura 4.26), Potássio (Figura 4.27), Rubídio (Figura 4.28) e Césio (Figura 4.29,). Onde são apresentadas as energias em que os Mínimos foram observados em função do número quântico principal.

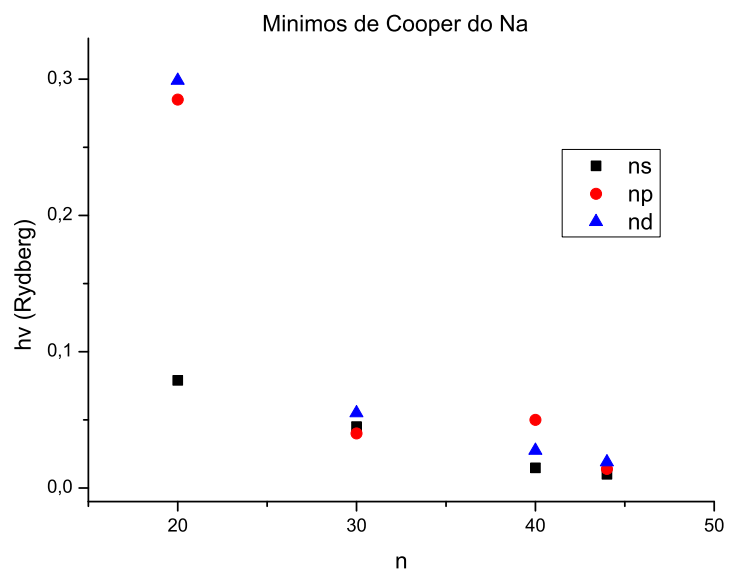


Figura 4.26: Mínimos de Cooper do Na

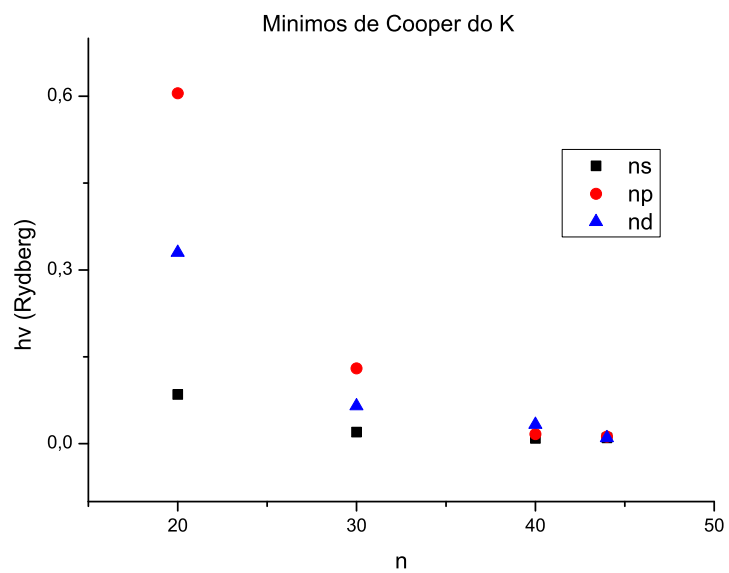


Figura 4.27: Mínimos de Cooper do K

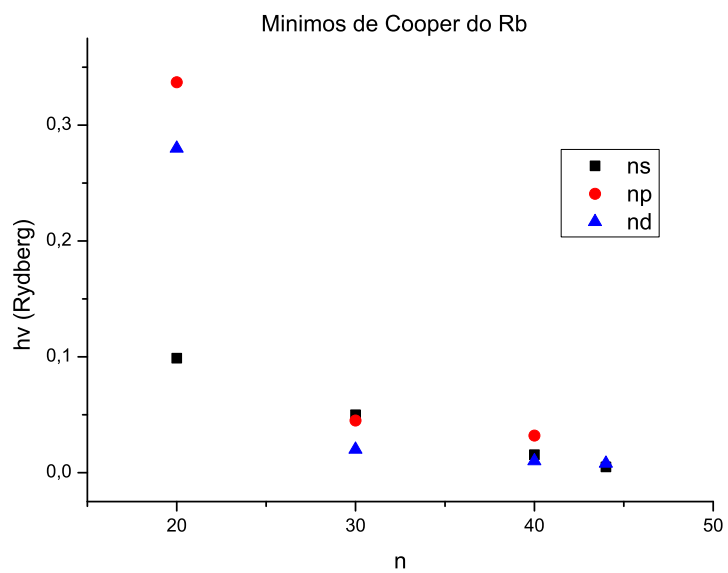


Figura 4.28: Mínimos de Cooper do Rb

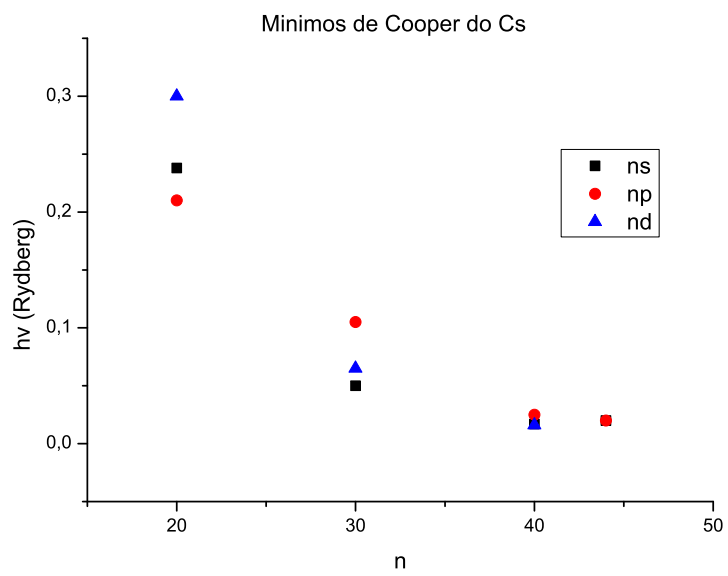


Figura 4.29: Mínimos de Cooper do Cs

Da análise dos gráficos dos Mínimos de Cooper, verificamos uma mesma tendência para todos os átomos analisados, sendo que a energia em que os mínimos são encontrados decaim de forma aproximadamente exponencial a medida que aumentamos o número quântico principal n . Já a dependência com ℓ é minimizada com o aumento de n , ou seja para altos estados excitados os Mínimos de Cooper dependem somente de n .

Capítulo 5

Conclusões

Os átomos em estados de Rydberg caracterizam-se por apresentarem um ou mais elétrons excitados até um elevado número quântico principal n . Esta característica torna suas propriedades bastante incomuns, e os mesmos bastante interessantes, em especial o que tange as interações entre campos de radiação e o sistema atômico, proporcionando a ionização através de fótons. Esta fotoionização é caracterizada por apresentar uma seção de choque geométrica que cresce com n^4 .

Nesta dissertação estudamos o comportamento da seção de choque de fotoionização dos átomos alcalinos (Sódio, Potássio, Rubídio e Césio) em estados de Rydberg. Para tal, utilizamos o modelo proposto por Aymar [4], mas com os defeitos quânticos atualizados por Gallagher [11] (para o Rubídio) e por Lorenzen [12] (para o Sódio, Potássio e Césio). Verificamos que as novas seções de choque calculadas apresentaram uma grande conformidade com os dados anteriormente obtidos pela própria Aymar [4, 5], para n baixos. Assim sendo expandimos nossos estudos até $n = 44$ e observamos que os dados obtidos seguiram a tendência esperada conforme as propriedades gerais dos átomos em estados de Rydberg.

Apesar dos resultados obtidos apresentarem grande conformidade com dados teóricos, dados experimentais ainda são escassos, especialmente para estados excitados. Mesmo para o estado fundamental ou de baixa energia, os dados experimentais são insuficientes para uma verificação eficaz dos resultados obtidos. Da comparação de nossos resultados com os resultados experimentais observamos que para o Sódio (Figura 4.1) não tivemos a conformidade esperada, mas para o Rubídio (Figura 4.2) os resultados ficaram dentro do esperado.

O comportamento das seções de choque de fotoionização também foi analisado através da variação da energia do fotoelétron, no qual observamos que cada átomo, para diferentes estados, apresentava as mesmas tendências para as suas curvas de seção de choque em função da energia. Na mesma análise evidenciamos a presença de mínimos de seção de choque para energias específicas conforme o estado que o átomo se encontrava. Tais mínimos indicavam a ocorrência de possíveis Mínimos de Cooper. Analisando o comportamento das funções de onda radiais, observando os pontos onde os elementos de matriz de dipolo tendiam a zero, e combinando com os pontos de mínimo seção de seção de choque observados nas curvas em relação a energia, determinamos a ocorrência dos mínimos de Cooper para os átomos alcalinos estudados.

De um modo geral, verificamos que as energias correspondentes aos mínimos em função dos números quânticos principais apresentaram uma mesma tendência para todos os átomos analisados, e a medida que tratamos com átomos em elevados estados de Rydberg a dependência das energias dos Mínimos se limita ao número quântico principal n .

Este trabalho é um ponto de partida para demais nesta área, tanto para um refino nos dados obtidos através da reformulação do programa,

quanto fornecendo dados teóricos para futuros experimentos que poderão ser realizados no laboratório do Grupo de Óptica do CCT.

Bibliografia

- [1] C. Gabbanini, S Gozzini and A. Lucchesini, Opt. Commun. **141**, 25 (1997).
- [2] C. Gabbanini, F. Ceccherini, S Gozzini and A. Lucchesini, J. Phys. B, **31**, 4143 (1998).
- [3] D. Ciampini, M. Anderlini, J. H. Müller, F. Fuso, O. Morsch, J. W. Thomsen, and E. Arimondo, Phys. Rev. A , **66**, 043409 (2002).
- [4] M. Aymar, O. Rrobaux and S. Wane, J. Phys. B , **17**, 993 (1984).
- [5] M. Aymax, E. Luc-Koenig and F. Comber Farnoux, J. Phys. B, **9**, 1279 (1976).
- [6] Aymar M and Crance M, J. Phys. B:, **11**, 1413 (1980).
- [7] Gallagher, Thomas F., **Rydberg Atoms**, Cambridge University Press (1994).
- [8] Carneiro T P , Cesar C L, *Átomos de Rydberg*, IF - UFRJ (2009).
- [9] Oliveira A L, *Estudos em Átomos de Rydberg Frios*, Tese de Doutorado, UFSCar (2001).
- [10] Stewart. A. L., Adv. At. Mol. Phys., **3**, 1 (1967).

- [11] Wenhui Li, I. Mourachko, M. W. Noel and T. F. Gallagher, Phys. Rev. A, **67**, 052502 (2003).
- [12] Lorenzen C J and Niemax K, Physica Scripta **27**, 300 (1983).
- [13] Klapisch M., Comput. Phys. Commun., **2**, 239 (1971).
- [14] M. Aymar, Comunicação Privada.
- [15] Weisheit J C, Phys. Rev. A, **5**, 1621 (1972a).
- [16] R.W. Ditchburn, J. Tunstead, and J. G. Yates, Proceedings of the Royal Society A, **181**, 386 (1943).
- [17] D. R. Bates, Proceedings of the Royal Society A, **188**, 350 (1947).
- [18] M. J. Seaton, Proceedings of the Royal Society A, **208**, 418 (1951).
- [19] J. W. Cooper, Physical Review, **128**, 681 (1962).
- [20] J.W. Cooper, Physical Review Letters, **13**, 762 (1964).
- [21] S. T. Manson, Physical Review A, **31**, 3698 (1985).
- [22] J. P. Farrrel et al, Phys. Rev. A, **83**, 023420 (2011).
- [23] A. D. Shiner et al, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, **45**, 074010 (2012).
- [24] Cheng Jin, Anh-Thu Le, and C. D. Lin, Phys. Rev A, **83**, 023411 (2011).
- [25] Sang-Kil Son, Linda Young and Robin Santra, Phys. Rev. A, **83**, 033402 (2011).
- [26] J. Higuete et al, Phys. Rev. A, **83**, 053401 (2011).
- [27] S. Haessler, J. Caillat, P. Salières, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, **44**, 203001 (2011).

- [28] J. Niskanen et al, Phys. Rev. A,**81**, 013406 (2010).
- [29] C. Y. Lin and Y. K. Ho, Phys. Rev. A,**81**, 033405 (2010).
- [30] Satyabrata Sahoo, Y. K. Ho, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer,**111**, 52 (2010).
- [31] N. Amin, S. Mahmood, M. Anwar-ul-Haq, M. Riaz, and M. A. Baig, Eur. Phys. J. D.,**37**, 23 (2006).
- [32] S. Wave and M. Aymar, J. Phys. B: At. Mol. Phys.,**20**, 2657 (1987).