

ÁTOMOS E MOLÉCULAS NA PRESENÇA
DE CAMPOS DE LASERS INTENSOS

Nilson Sena de Almeida

Orientador: Prof. Dr. Luiz Carlos M. Miranda

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas, como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Doutor em Ciências.

Outubro/1981

À Renato, meu pai, irmão e amigo

e

Gracinha, Lica, Nina e Nilson Filho

AGRADECIMENTOS

Certamente cometeria injustiça se tivesse a pretensão de listar aqui, todos aqueles que contribuíram para que este trabalho chegasse a um final. Desta maneira, quero deixar claro que as pessoas ou instituições que aqui apresento o meu reconhecimento, são aquelas que em um passado mais recente contribuíram mais significativamente para o final desta etapa.

Gostaria de fazer um agradecimento especial ao Prof. Dr. L.C.M. Miranda, não só pelo seu desempenho como professor, sugerindo e orientando de forma segura e objetiva o problema que aqui apresento, mas principalmente pelo apoio e amizade a mim dispensada desde 1976, incentivando e transmitindo o entusiasmo pelo trabalho científico, o que certamente foi fundamental para conclusão do presente curso.

Registro também o meu reconhecimento:

- Ao Prof. Dr. C.A.S. Lima pelas proveitosas discussões e sobretudo pelas correções no manuscrito.
- Ao Departamento de Física da UFRN por "investir" na formação de seus docentes e por ter, indiretamente, assumido, durante meu afastamento, a carga didática que a mim seria destinada.
- A Universidade Federal do Rio Grande do Norte, nas pessoas do Magnífico Reitor Diógenes da Cunha Lima e do Pró-reitor de Pesquisa e Pós-Graduação, Lauro Gonçalves Bezerra, que tornaram possível o meu afastamento para conclusão deste curso.

- A CAPES (PICD) pela ajuda financeira.
- Ao Prof. Dr. José Busnardo Neto pela ajuda na solução dos problemas burocráticos, durante a minha permanência na UNICAMP.
- A Orlando e Marcio pelas informações que minoraram os problemas de usuário do PDP-10.
- A minha esposa pelo companheirismo de sempre e que sem o qual, as dificuldades enfrentadas, durante a execução deste trabalho, certamente seriam muito maiores.
- A meus filhos pelos dias de laser que me foram "emprestados".
- A Augusto pelo excelente trabalho de datilografia.
- Aos colegas que direta ou indiretamente, contribuíram para término deste trabalho.

S U M Á R I O

CAPÍTULO I -	
I.1 - Introdução	2
I.2 - Soluções não perturbativas	3
I.3 - Resumo	17
CAPÍTULO II - ESPECTRO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO EM PRESENÇA DE CAMPO ELETROMAGNÉTICO SUPERINTENSO	
II.1 - Introdução	20
II.2 - Formalismo	21
II.3 - Base de Funções Hidrogenóide	25
II.4 - Base de Funções de Oscilador Harmônico	35
II.5 - Resultado Final e Conclusões	45
CAPÍTULO III - ESPALHAMENTO DE ELÉTRON POR ÁTOMO DE HIDROGÊNIO EM PRESENÇA DE CAMPO DE LASER INTENSO	
III.1 - Introdução	54
III.2 - Formulação	55
III.3 - Avaliação do Fator de Forma	60
III.4 - Análise dos Resultados	67
CAPÍTULO IV - ÁTOMO DE HIDROGÊNIO NA PRESENÇA SIMULTÂNEA DE CAMPO MAGNÉTICO E DE CAMPO DE RADIAÇÃO SUPER INTENSOS	
IV.1 - Introdução	70
IV.2 - Formalismo	71
IV.3 - Funções de Onda Tipo Hidrogênio	76
IV.4 - Funções de Onda Tipo Landau	85
IV.5 - Estudos Comparativo das Funções de Partida e Conclusões	91
CAPÍTULO V - ÍON MOLECULAR H_2^+ NA PRESENÇA SIMULTÂNEA DE UM CAMPO MAGNÉTICO d.c. FORTE E DE CAMPO DE LASER INTENSO	
V.1 - Introdução	97

V.2 - Formulação do Problema e Geometria	98
V.3 - Conclusões	115
APÊNDICE	117
REFERÊNCIAS	120

R E S U M O

O esquema variacional proposto por Lima e Miranda é usado para resolver o problema do átomo de hidrogênio em presença de campo de laser super intenso. Partindo dos orbitais atômicos modificados pelo campo, obtemos o espectro de energia para vários valores de intensidade do campo de radiação. Esses resultados foram posteriormente aplicados ao estudo do espalhamento de elétron por átomo de hidrogênio neutro, na presença de campo de laser intenso.

Usando procedimento semelhante, foram também estudadas as modificações sentidas pelo átomo de hidrogênio e pelo íon molecular H_2^+ quando da presença simultânea de campo de laser super intenso e campo magnético d.c. forte.

A B S T R A C T

The variational approach proposed by Lima and Miranda is used to solve the problem of the hydrogen atom in presence of super intense laser field. Using the atomic orbitals modified by this field, we obtain the energy spectro for some values of intensity of the radiation field. These results were later applied to the electron scattering by hydrogen atom in super intense laser field.

Using a similar approach, we study the effect of the simultaneous presence of the laser and d.c. magnetic field on the hydrogen atom and on the molecular ion H_2^+ .

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

1.1 - Introdução

O desenvolvimento de fontes de radiação de grandes intensidades fez com que nos últimos anos o estudo teórico de sistemas atômicos em presença de campos super fortes fosse intensificado, o que pode ser comprovado pelo grande número de artigos, tratando deste assunto, publicados nos últimos anos. Tal interesse é justificável, visto que, o entendimento detalhado destes sistemas em presença de tais campos, traz significativas contribuições a vários campos da física, como por exemplo, à Física Atômica^(1,14), Física de Plasma^(15,20) e Física do Estado Sólido^(21,27).

Deve ser ressaltado que em presença de campos intensos, as informações sobre propriedades físicas dos vários sistemas não podem ser obtidas considerando-se a interação radiação matéria como uma perturbação, o que dificulta em muito o tratamento teórico do problema. No caso específico da Física Atômica, o desenvolvimento de lasers de grandes intensidades motivou vários autores^(1,6) a buscarem soluções não-perturbativas para o problema mais simples, ou seja, o do átomo de hidrogênio irradiado por laser intenso. Essencialmente este problema consiste em obter soluções para a equação de Schrödinger

$$i\hbar \dot{\Psi}(\vec{r}, t) = H \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

sendo o Hamiltoniano H dado por

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right]^2 + v(r) \quad (1.2)$$

onde \vec{p} , m e e são respectivamente o operador momento, a massa e a carga do elétron, c a velocidade da luz no vácuo, $\vec{A}(t)$ o potencial vetor que descreve o campo de radiação e $v(r) = -e^2/|\vec{r}|$.

Na seção 1.2 faremos uma breve discussão dos métodos de Keldysh⁽¹⁾, de translação de momento⁽³⁻⁵⁾ e de translação espacial⁽²⁾ uma vez que estes são os métodos não-perturbativos mais utilizados na última década.

1.2 - Soluções não-perturbativas

a) Aproximação de Keldysh

O método de Keldysh foi inicialmente usado no estudo do problema de ionização de átomos em presença de campo eletromagnético forte⁽¹⁾. Neste trabalho, a influência do potencial ligante sobre o elétron ionizado é desprezado e supõe-se que o efeito do campo de radiação nos estados ligados pode ser representado pela introdução do fator

$$\exp \left[- \frac{eE}{\hbar\omega} \sigma_s \sin \omega t \right] \quad (1.3)$$

na função de onda solução do problema para campo zero, onde E e ω são respectivamente a intensidade do campo elétrico e a frequência do campo de radiação e σ_s o parâmetro que descreve o deslocamento Stark do s -ésimo nível.

Este método apresenta resultados satisfatórios pa-

ra intensidades menores que I_c , onde I_c é a intensidade para a qual a amplitude de oscilação do elétron é igual ao primeiro raio de Bohr, apesar da introdução daquele fator ser uma tentativa de descrever a afirmativa do autor, que a ação mais efetiva do campo elétrico da radiação é sobre os estados excitados, o que, como veremos no capítulo II, é pelo menos discutível.

b) Aproximação de Translação do Momento (MTA)

Este método, devido a Reiss⁽³⁻⁵⁾, trata o problema de sistemas ligados em presença de campos intensos introduzindo a transformação unitária

$$\bar{\Psi}(\vec{r}, t) = \exp(-i e \vec{A} \cdot \vec{r} / \hbar c) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.4)$$

a qual transforma a Eq. I.1 na forma

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\Psi}(\vec{r}, t) = \bar{H} \bar{\Psi}(\vec{r}, t)$$

onde a barra indica o operador transformado, isto é,

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} = \exp(-i e \vec{A} \cdot \vec{r} / \hbar c) i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \exp(i e \vec{A} \cdot \vec{r} / \hbar c)$$

$$\bar{H} = \exp(-i e \vec{A} \cdot \vec{r} / \hbar c) H \exp(i e \vec{A} \cdot \vec{r} / \hbar c).$$

Desta maneira a Eq. I.1 pode ser escrita como

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{\Psi}(\vec{r}, t) = (H_0 + H_1) \bar{\Psi}(\vec{r}, t)$$

onde

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + v(r)$$

e

$$H_I = \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(t) \cdot \vec{r} = -e \vec{E}(t) \cdot \vec{r}$$

quando o campo de radiação pode ser descrito na aproximação do dipolo.

As circunstâncias nas quais este método torna-se de utilidade são⁽³⁾: (a) A energia de interação E_I , representada por H_I é pequena quando comparada com a energia características do problema na ausência de campo. (b) E_I é pequena quando comparada com a perturbação semi-clássica representada por H' ($H' = \frac{e^2}{2mc^2} [\vec{A}(t)]^2 - \frac{e}{mc} \vec{A}(t) \cdot \vec{p}$). Estas condições fazem com que a aproximação de translação de momento seja aplicável com sucesso nos mesmos limites de intensidades em que vale a aproximação de Keldysh, isto é, apenas para intensidades tais que $I \ll I_c = m^2 c^3 \omega^4 / 4 \pi e^2$.

Recentemente este autor apresenta a MTA de uma forma revisada⁽¹⁴⁾ onde a função de onda da formulação original é obtida através de dois métodos diferentes: usando teoria de perturbação e pelo método de integrais de trajetória (Feynman). Também neste artigo, Reiss responde a algumas críticas feitas a aproximação de translação de Momento^(12,13), mas não remove as limitações inerentes ao método.

c) Aproximação de Translação Espacial (STA)

O método de translação espacial, devido a Henneberger⁽²⁾ consiste essencialmente em introduzir uma nova representação, através de uma transformação unitária, que elimina a dependência no campo de radiação do termo cinético do Hamiltoniano, isto é, propõe como solução da Eq. 1.1 a fun-

ção

$$\psi(\vec{r}, t) = u\phi(\vec{r}, t)$$

onde $\phi(\vec{r}, t)$ é a função de onda na nova representação,

$$u = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \vec{\delta}(t) \cdot \vec{p} \right] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \eta(t) \right] \quad (I.5)$$

$$\vec{\delta}(t) = - \frac{e}{mc} \int_{-\infty}^t \vec{A}(\tau) d\tau \quad (I.6)$$

e

$$\eta(t) = - \frac{e^2}{2mc^2} \int_{-\infty}^t [A(\tau)]^2 d\tau \quad (I.7)$$

É fácil verificar que a transformação (I.5) não elimina a dependência do Hamiltoniano no campo de radiação, apenas a transfere do termo cinético para o potencial; isto é,

$$u^+ (H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}) u \rightarrow \frac{p^2}{2m} + v(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (I.8)$$

Deve-se notar que a validade da transformação acima independe da intensidade, sendo portanto aplicável desde que o campo de radiação possa ser descrito na aproximação de dipolo.

Nesta representação, que pode ser entendida como aquela na qual apenas o núcleo oscila no campo do laser, as soluções de (I.1) são obtidas através de

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left[\frac{p^2}{2m} + v(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (I.9)$$

As limitações introduzidas pela STA usual⁽²⁾ são na verdade mais restritivas do que aquelas que condicionam a

a validade da transformação (I.5), e se deve ao fato que na solução da Eq.(I.9) $v(\vec{r} - \vec{\delta}(t))$ é substituído por $v(\vec{r})$. Portanto, tal aproximação justifica-se apenas se na expansão

$$v(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) \approx v(\vec{r}) - (\vec{\delta}(t) \cdot \nabla) v(\vec{r}) + \frac{1}{2} (\vec{\delta}(t) \cdot \nabla)^2 v(\vec{r}) - \dots$$

todos os termos, a partir do segundo, são muito menores que $v(\vec{r})$. Esta condição nos leva a mesma limitação na intensidade que as aproximações de Keldysh e de translação de momento; isto é, $I \ll I_c$, onde I_c foi anteriormente definido. No caso de um laser de CO_2 ($\lambda_{CO_2} = 10^{-5} \text{ cm}$) tem-se $I \ll 10^7 \text{ Wcm}^{-2}$.

Recentemente, Brandi et al.⁽¹³⁾ melhoraram esta aproximação considerando o segundo termo da expansão de $v(\vec{r} - \vec{\delta}(t))$ como uma perturbação (STA 1). Mostram estes autores que a STA 1 apesar de estender a região de validade em relação a STA usual, é aplicável apenas para campos de radiação tais que a intensidade seja menor que um certo valor limite, obtido através da desigualdade $\frac{c}{m c \omega} A \ll 10^{-8}$.

Em resumo podemos afirmar que todos os métodos acima descritos apresentam sérias restrições quando aplicados a campos de laser com intensidades maiores ou da ordem de I_c , uma vez que as aproximações feitas para obtenção de $\phi(\vec{r}, t)$ (ou $\psi(\vec{r}, t)$) são tais que os valores esperados de alguns parâmetros físicos do sistema terminam por não incorporarem, em toda sua extensão, os efeitos direto do campo de radiação. Este fato é suficiente para introduzir sérias limitações na capacidade de descrever o comportamento de sistemas atômicos quando em presença de campos intensos.

Procurando um melhor entendimento dos sistemas atômicos

nicos em presença de campos de laser super intenso, Lima e Miranda⁽⁶⁾ desenvolveram um novo procedimento, que embora utilize a transformação de translação espacial, descreve o efeito do campo de radiação sobre o potencial ligante através de uma parametrização adequada, que leva em conta, intrinsecamente, as modificações sofridas na estrutura atômica. Esta formulação permite o tratamento destes sistemas sob condições menos restritivas que a STA usual, uma vez que o limite de aplicabilidade deste método vem apenas da condição de validade do uso da aproximação de dipolo para descrever o campo de radiação.

Estes autores, considerando o potencial vetor do campo de radiação $\vec{A}(t)$, e o potencial atômico ligante $v(\vec{r})$ da Eq.(I.2) dados por

$$\vec{A}(t) = A(\check{x} \cos \omega t + \check{y} \text{ sen } \omega t)$$

e

$$v(\vec{r}) = - \frac{e^2}{|\vec{r}|}$$

conseguiram desenvolver um formalismo que pode, sem maiores objeções, ser aplicado ao problema, mesmo quando a amplitude de oscilação do elétron no campo do Laser, ($a = |\vec{\delta}(t)| = eA/mc\omega$) é muito maior que a dimensão do sistema na ausência de campo ($a_0 = \hbar^2/me^2$), isto é, para intensidades tais que $I \gg I_c$, com uma confiabilidade superior a dos métodos usuais para os quais I_c representa um limite superior de aplicabilidade.

O método utilizado e os resultados obtidos por Lima e Miranda⁽⁶⁾ são apresentados no que segue.

Usando a transformação de translação espacial de

Henneberger, estes autores obtiveram para função de onda eletrônica na representação onde o núcleo oscila com a frequência do campo de radiação, a equação:

$$i \hbar \dot{\phi}(\vec{r}, t) = \left[\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{\delta}(t)|} \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{I.10})$$

onde

$$\begin{aligned} \vec{\delta}(t) &= \frac{e \Lambda}{mc\omega} (\check{x} \text{ sen } \omega t - \check{y} \text{ cos } \omega t) \\ &= a(\check{x} \text{ sen } \omega t - \check{y} \text{ cos } \omega t) \end{aligned}$$

Observando que o potencial ligante dependente do campo de laser, $-e^2/|\vec{r} - \vec{\delta}(t)|$, pode ser escrito como

$$\begin{aligned} v(\vec{r}) &= - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} \left[1 - \frac{2 \vec{r} \cdot \vec{\delta}(t)}{r^2 + a^2} \right]^{-1/2} \\ &= - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} \left[1 + \frac{\vec{r} \cdot \vec{\delta}(t)}{r^2 + a^2} + \dots \right] \end{aligned}$$

e que a expansão converge rapidamente visto que $|\vec{r} \cdot \vec{\delta}(t)/(r^2 + a^2)|^n$ é sempre menor que $(1/2)^n$, foi possível considerar, numa primeira aproximação, que $v(\vec{r})$ é razoavelmente bem descrito pelo primeiro termo desta expansão, isto é, tomando $v(\vec{r})$ na forma

$$v(\vec{r}) \approx - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}}$$

Ressalte-se ainda que a inclusão do segundo termo pode ser feito de uma maneira similar a aquela da Ref.(13), resultando daí como correção para função de onda de ordem zero, um fator de fase tipo Keldysh. O terceiro termo (primeiro termo a modificar a energia obtida com $v(r)$ na aproxima-

ção acima) introduz uma correção que nas condições mais desfavoráveis para a aproximação utilizada, é da ordem de 10%⁽⁶⁾.

Utilizando o método variacional, Lima e Miranda obtiveram a solução para o estado de mais baixa energia da Eq. (I.10), com $|\vec{r} - \vec{\delta}(t)| \rightarrow (r^2 + a^2)^{1/2}$, escolhendo uma função de partida tipo hidrogênio, isto é, uma função da forma

$$\phi_0(r,t) = \phi_0(r) e^{-i\epsilon_0 t/\hbar}$$

onde ϵ_0 é a energia do estado considerado e $\phi_0(r)$ é da forma

$$\begin{aligned} \phi_0(r) &= A \exp | - \bar{n}r/a | \\ &= A \exp | - \bar{n}r/\lambda a_0 | \end{aligned}$$

onde A é a constante de normalização, \bar{n} o parâmetro variacional e $\lambda = a/a_0$.

Seguindo o procedimento usual do cálculo variacional, obteve-se que \bar{n} deve satisfazer a:

$$\frac{1}{\lambda} \bar{n} = 12\bar{n}^2 I_1(\bar{n}) - 8\bar{n}^3 I_2(\bar{n}) . \quad (I.11)$$

onde

$$I_1(\bar{n}) = \int_0^\infty dx \frac{x^2 e^{-2\bar{n}x}}{(x^2+1)^{1/2}}$$

e

$$I_2(\bar{n}) = \int_0^\infty dx \frac{x^3 e^{-2\bar{n}x}}{(x^2+1)^{1/2}}$$

e a energia de ionização, em unidades de e^2/a é dada por,

$$\epsilon_I(\lambda) = \bar{n} I_1(\bar{n}) - \frac{-2}{8\lambda}$$

sendo \bar{n} solução numérica da eq.(I.11) para uma dada intensi-

dade.

As Figs.(I.a - I.c) mostram respectivamente o comportamento do parâmetro variacional e energia de ionização em unidades de e^2/a , da energia de ionização em unidades atômicas (Ry) e da razão $\frac{\lambda}{\bar{n}}$ com a intensidade do campo λ . A distribuição eletrônica no estado fundamental para alguns valores de λ são mostradas na Fig.(I.d)

Dos resultados obtidos pelos autores, pode -se observar que a energia de ionização do átomo de hidrogênio em um campo de laser forte, é inversamente proporcional a intensidade do campo e que o máximo da distribuição eletrônica localiza-se no entorno de λa_0 , mostrando com isto a tendência do elétron em ficar livre na medida que o campo de radiação aumenta em intensidade. Tais resultados indicam também que, com este procedimento, os autores puderam descrever não só as modificações na função de onda, mas também o efeito do campo de radiação sobre os valores esperados dos operadores que representam os parâmetros físicos. Observe-se ainda que as modificações destes parâmetros são aquelas fisicamente esperadas. É o caso, por exemplo, da distribuição de probabilidade para o elétron a qual podemos estimar através do uso de um argumento clássico, como segue. Consideremos o modelo simples unidimensional de um elétron movendo-se em um campo oscilante. Denominando por $w(x)$ a probabilidade do elétron se encontrar entre x e $x + dx$, temos

$$\begin{aligned} W(x) dx &= 2 \frac{dt}{T} \\ &= \frac{\omega}{\pi} \frac{dx}{|\dot{x}|} \end{aligned}$$

onde T é o período de oscilação e \dot{x} a velocidade em x . Como $x(t)$ é da forma:

$$x(t) = a \sin \omega t$$

obtemos para $W(x)dx$ a expressão:

$$W(x)dx = \frac{1}{\pi a} \frac{dx}{[1 - (x/a)^2]^{1/2}}$$

indicando assim que a probabilidade clássica de encontrar o elétron é máxima em $x = a$, o que vem reforçar os resultados obtidos na Ref.(6).

Finalmente, podemos obter o limiar de aplicabilidade do método aqui apresentado, o qual é determinado através da condição do comprimento de onda da radiação ser muito maior que as dimensões do sistema. Esta imposição nos leva a determinar uma intensidade limite dada por:

$$I_{\text{sup}} = \frac{\pi c^3 m^2}{e^2} \omega^2$$

que está bem acima do limite imposto pelos métodos acima mencionados.

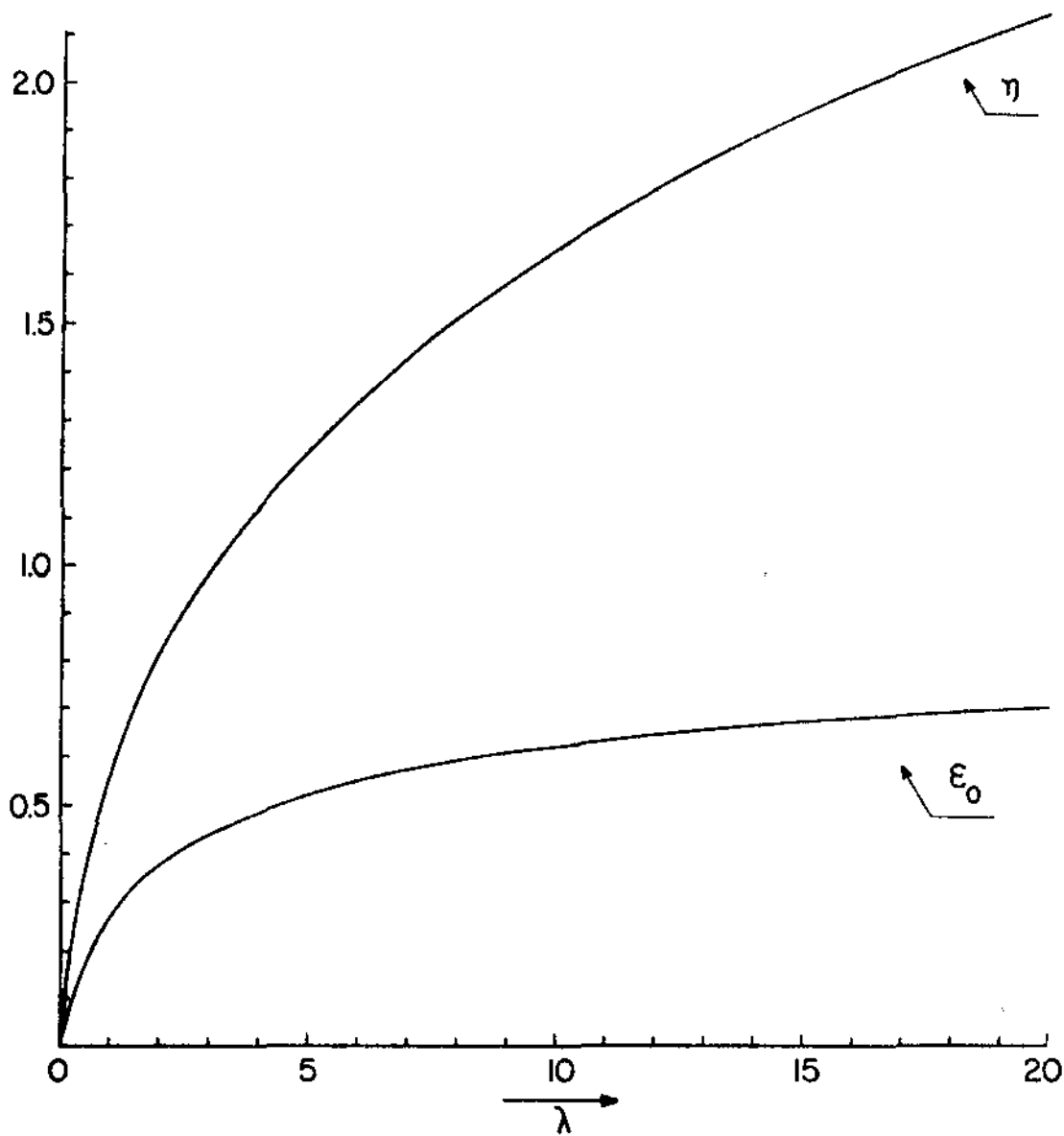


Fig. I.a - Comportamento do parâmetro variacional e da energia de ionização (em unidades de $-e^2/a$) com a intensidade do campo de laser.

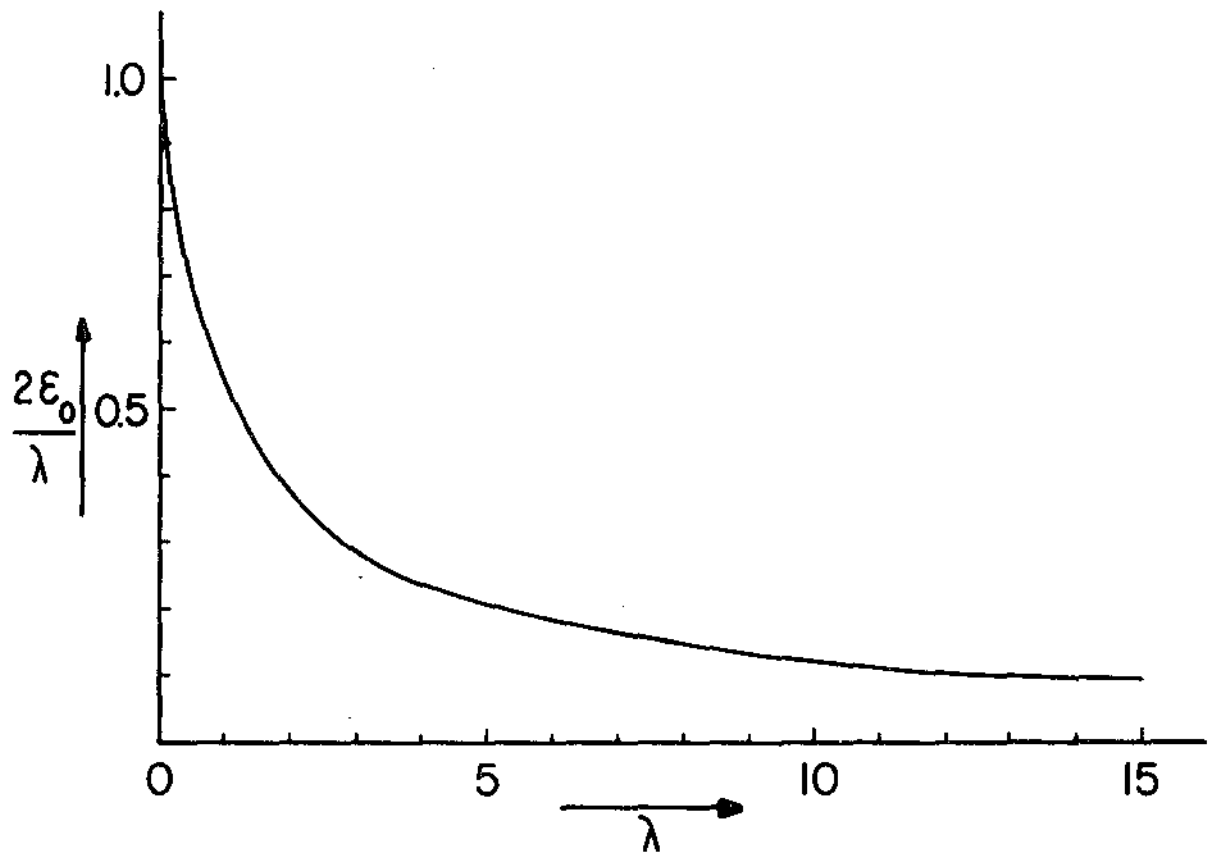


Fig. I.b - Energia de ionização (em unidades atômicas) em função da intensidade do campo de laser.

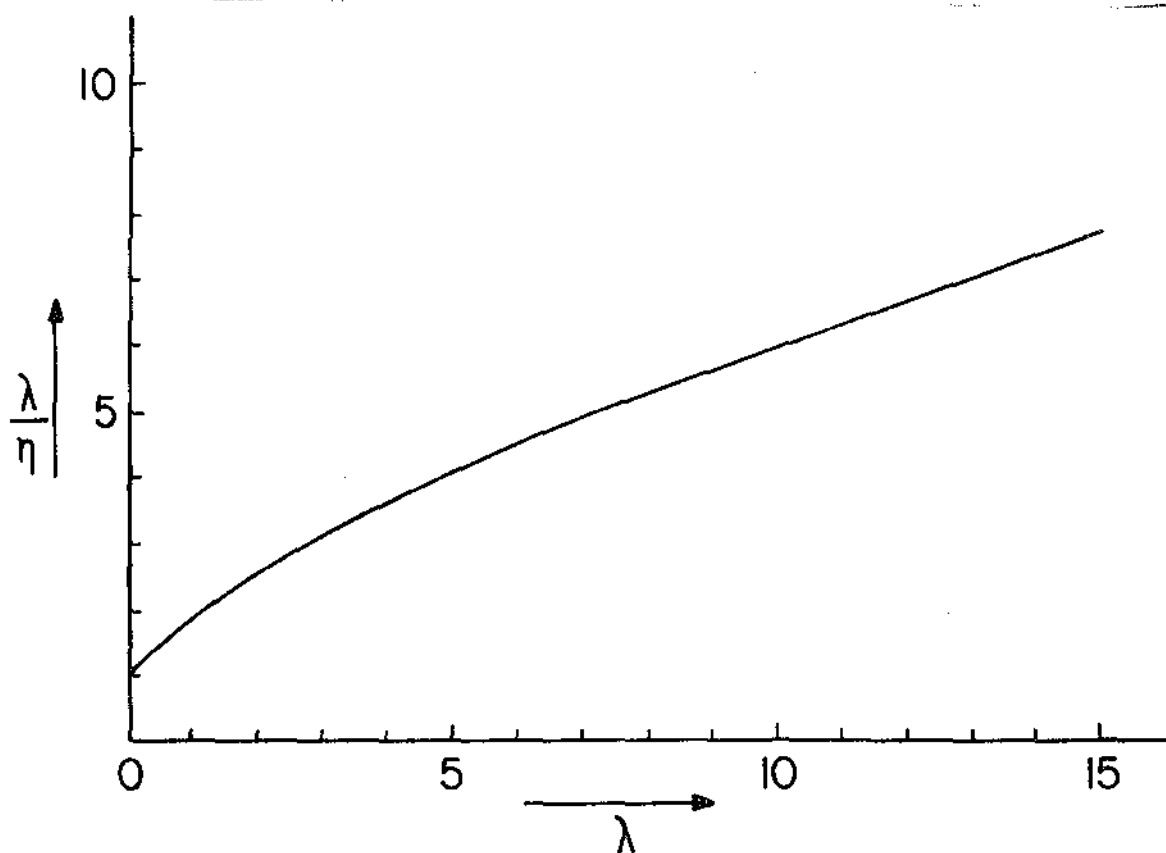


Fig. I.c - Comportamento de λ/η com a intensidade do campo de laser.

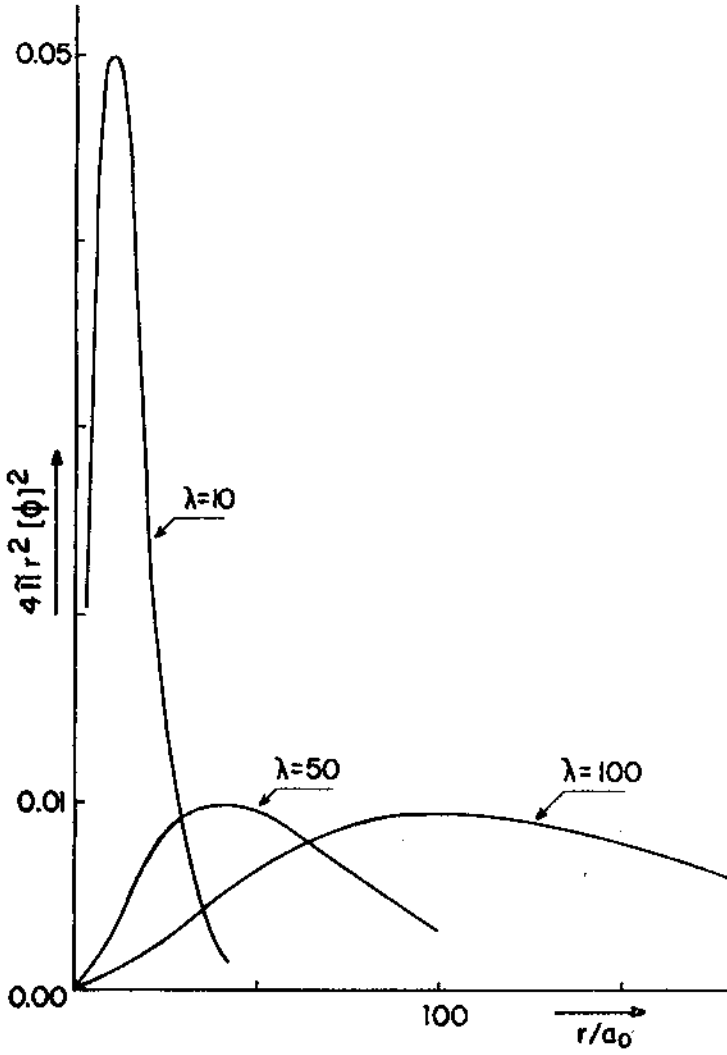


Fig. I.d - Distribuição eletrônica para diferentes valores da intensidade do campo de laser.

I.3 - Resumo

Em contraste com os outros métodos mencionados anteriormente, onde I_c é o limite superior, o procedimento utilizado por Lima e Miranda apresenta bons resultados não só para intensidades menores que I_c mas também para $I \gg I_c$, limitado apenas pela validade da aproximação de dipolo, isto é, que as dimensões do átomo em presença de Laser permaneçam muito menores que o comprimento de onda da radiação ($2\pi c/\omega \gg a$). Encorajados por esses resultados é que neste trabalho estendemos o procedimento descrito no final da seção I.2, com a finalidade de observarmos também o comportamento dos estados excitados do átomo de hidrogênio neste regime de campo, bem como a influência de um campo magnético super intenso em sistemas atômicos irradiados.

Assim é que, no capítulo II obteremos a solução da eq.(I.10) para os dez primeiros estados do átomo de hidrogênio em presença de campo de laser intenso, usando para isto uma expansão da função $\phi(\vec{r}, t)$ em uma base conveniente.

No capítulo III, usando os resultados obtidos no capítulo anterior, isto é, os orbitais atômicos modificados pela presença do campo eletromagnético, estudaremos o comportamento do fator de forma para o espalhamento inelástico de elétron por átomo de hidrogênio em presença de campo intenso de radiação.

As influências de um campo magnético d.c. super forte ($H \gtrsim 10^7 \text{ KG}$) no estado de mais baixa energia do átomo de hidrogênio e do íon molecular H_2^+ na presença simultânea

de um campo de laser super intenso, serão estudadas nos capítulos IV e V respectivamente.

As discussões dos resultados bem como as limitações dos métodos utilizados serão apresentadas no final de cada capítulo.

CAPÍTULO II

ESPECTRO DO ÁTOMO DE HIDROGÊNIO EM
PRESENÇA DE CAMPO ELETROMAGNÉTICO
SUPER INTENSO

II.1 - Introdução

No capítulo anterior descrevemos o trabalho de Lima e Miranda⁽⁶⁾ no qual o estado fundamental do átomo de hidrogênio na presença de um campo de Laser super intenso é resolvido. Neste capítulo propomo-nos a estender o trabalho destes autores, visando a obtenção do comportamento dos estados excitados de momento angular zero, para diferentes valores da intensidade do campo eletromagnético.

Deve ser ressaltado que apesar de voltarmos nossas atenções para grandes intensidades do campo de radiação o formalismo e resultados aqui obtidos são válidos para qualquer valor do campo, desde que a aproximação dipolar possa ser utilizada, isto é, desde que o comprimento de onda da radiação seja muito maior que as dimensões do sistema.

Para as intensidades hoje disponíveis, a limitação imposta pela aproximação de dipolo é essencialmente acadêmica, uma vez que, sendo a dimensão do átomo de hidrogênio no campo de Laser aproximadamente igual a $a = \frac{c}{m c \omega} \lambda$, temos que esta aproximação é satisfeita se,

$$\frac{2\pi c}{\omega} \gg \frac{e \lambda}{m c \omega}$$

o que limita, os nossos resultados a intensidades do campo de radiação tais que,

$$I \ll I_{\text{sup}} = 3,68 \times 10^{-11} \omega^2 \text{ W cm}^{-2}$$

que para um laser de CO₂ ($\omega = 1,9 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$) corresponde a $I_{\text{sup}} = 1,33 \times 10^{18} \text{ W cm}^{-2}$, valor que está bem acima daqueles

obtidos até o presente.

II.2 - Formalismo

Nosso problema consiste em resolver a equação de Schrödinger para a função de onda eletrônica $\psi(\vec{r}, t)$

$$i \hbar \dot{\psi}(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}(t))^2 + v(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{II.1})$$

onde $\vec{A}(t) = A(\check{x} \cos \omega t + \check{y} \sin \omega t)$ é o potencial vetor para um feixe de laser circularmente polarizado e $v(\vec{r}) = e^2/|\vec{r}|$ é o potencial atômico ligante

Fazendo uso da transformação de translação espacial⁽²⁾, isto é, escrevendo $\psi(\vec{r}, t)$ na forma

$$\psi(\vec{r}, t) = \exp(i\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p}/\hbar) \exp(i\eta(t)/\hbar) \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{II.2})$$

onde

$$\vec{\delta}(t) = \frac{e A}{m\omega c} (\check{x} \sin \omega t - \check{y} \cos \omega t) \quad (\text{II.3-a})$$

$$\eta(t) = - \frac{e^2}{2mc^2} \int^t d\tau [\vec{A}(\tau)]^2 \quad (\text{II.3-b})$$

obtemos uma nova representação na qual toda a dependência no campo de Laser do operador Hamiltoniano transformado, encontra-se no potencial, resultando para a função de onda transformada a equação

$$i \hbar \dot{\phi}(\vec{r}, t) = \left[\frac{p^2}{2m} + v(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{II.4})$$

Tratando o potencial $v(\vec{r} - \vec{\delta}(t))$ na forma da Ref. (6), obtemos.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta}) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} \right] \phi(\vec{r}, t)$$

onde (r, θ, ϕ) são as coordenadas esféricas e $a = |\vec{\delta}(t)|$.

Uma vez que, para um dado valor da intensidade do campo de laser, o potencial depende apenas da distância entre o elétron e o núcleo, $\phi(\vec{r}, t)$, na aproximação mais baixa, pode ser escrita como:

$$\phi(\vec{r}, t) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) e^{-iEt/\hbar}$$

onde E é a energia, $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ são as funções harmônicas esféricas e $R_{n\ell}(r)$ é a solução de

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{n\ell}(r)}{dr^2} + \left[\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} - E_{n\ell} \right] u_{n\ell}(r) = 0 \quad (II.5)$$

onde $u_{n\ell}(r) = rR_{n\ell}(r)$ deve satisfazer a condição de normalização

$$\int_0^\infty |u_{n\ell}(r)|^2 dr = 1 \quad (II.6)$$

Com a finalidade de resolvermos a eq.(II.5) expandiremos $u(r)$ na forma

$$u_\ell(r) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \phi_{n\ell}(\beta r) \quad (II.7)$$

sendo β o parâmetro variacional que incorpora informações sobre o campo de Laser, o qual será determinado através da resolução do estado fundamental de uma maneira similar a aque-

la da Ref. (6) $\{ \phi_{n\ell} \}$ é um conjunto de funções ortonormais o qual se $N \rightarrow \infty$ pode ser qualquer. Se N é finito e igual a N_0 , $\{ \phi_{n\ell} \}$ deve ser escolhido de tal maneira que os valores das energias obtidas para $N = N_0$ e $N = N_0 + 1$ não difiram para a aproximação desejada.

Usando o método variacional temos que, os valores das energias são determinadas por

$$\delta \left\{ \int_0^{\infty} dr u(r) \left[- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} - E \right] u(r) \right\} = 0 \quad (\text{II.8})$$

Substituindo a expansão de $u(r)$ dada pela Eq. (II.7) na Eq. (II.8) e minimizando em relação aos c_n 's obtemos

$$\sum_{m=0}^{N-1} [E_{nm} - E \delta_{nm}] c_m = 0 \quad (\text{II.9})$$

onde

$$E_{nm} = \int_0^{\infty} dr \phi_{n\ell}(\beta r) \left[- \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} \right] \phi_{m\ell}(\beta r) \quad (\text{II.10})$$

e δ_{nm} é o delta de Kronecker.

O sistema de equações (II.9) terá solução diferente da trivial apenas se E for auto valor da matriz cujos elementos são E_{nm} . Desta maneira, determinada a matriz $[E_{nm}]$, as energias dos estados estacionários serão obtidas através do cálculo dos seus auto valores.

Por outro lado, para uma dada intensidade de campo de laser, o valor de β será obtido através de

$$\frac{\partial}{\partial \beta} E_{00} = 0 \quad ; \quad \ell = 0 \quad (\text{II.11})$$

onde

$$E_{00} = K_{00} - J_{00}$$

sendo

$$K_{00} = \int_0^{\infty} dr \phi_{00}(\beta r) \frac{\hat{p}^2}{2m} \phi_{00}(\beta r) \quad (II.11-a)$$

e

$$J_{00} = \int_0^{\infty} dr \phi_{00}(\beta r) \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} \phi_{00}(\beta r) \quad (II.11-b)$$

A escolha de $\{\phi_{n\lambda}(r)\}$ esta estreitamente relacionada à intensidade do campo que estivermos interessados, isto é, se a amplitude de oscilação do elétron é muito menor que a dimensão do átomo na ausência de campos ($a \ll a_n^0 = \frac{h^2 n^2}{me^2} \Rightarrow I \ll I_c$) é de se esperar que a função de onda para o sistema no estado n não difira muito daquela para o átomo de hidrogênio puro. Ao contrário, se os valores de r em torno de $r_n(\lambda)$ (valor de r para o qual a distribuição eletrônica do estado n é máxima), são muito menores que a , o potencial ligante pode ser representado por:

$$\begin{aligned} v(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) &\approx - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} = - \frac{e^2}{a} \left(1 + \frac{r^2}{a^2}\right)^{-1/2} \\ &\approx - \frac{e^2}{a} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r^2}{a^2}\right) \end{aligned}$$

mostrando que para este estado, neste regime de campo, o potencial tem um comportamento de oscilador harmônico, cuja frequência é proporcional a $\lambda^{-3/2}$.

Desta maneira, através desta análise do potencial, podemos esperar que pelo menos dois tipos de base podem ser usadas para expandir as funções de onda do sistema. Uma base de funções de onda tipo hidrogênio (hidrogenóide) para pe-

quenos valores de a (baixas intensidades) e uma base de funções, soluções da equação de Schrödinger para um potencial tipo oscilador harmônico tridimensional. Expansões equivalentes foram utilizadas por Brandi⁽²⁸⁾ na obtenção de soluções para os estados ligados ao átomo de hidrogênio em presença de campos magnéticos d.c. superfortes e por Reinhardt et al. (29-30) no estudo do espalhamento por um campo Coulombiano e da foto-ionização.

II.3 - Base de Funções Hidrogenóides

Denominamos de base hidrogenóide aquela formado pelas soluções da equação radial para o elétron do átomo de hidrogênio, isto é, por funções $\phi_{n\ell}$ que satisfazem a equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \right] \phi_{n\ell}(r) = E_{n\ell} \phi_{n\ell}(r)$$

Tais funções são dadas por⁽³¹⁾.

$$\phi_{n\ell}(\beta r) = N_{n\ell} \exp\left(-\frac{\beta r}{n}\right) \left(\frac{2\beta r}{n}\right)^{\ell+1} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2\beta r}{n}\right); n = 1, 2, \dots \quad (II.12)$$

onde $L_K^\alpha(u)$ são os polinômios de Laguerre.

Usando o fato de

$$\int_0^\infty \phi_{n\ell}(\beta r) \phi_{m\ell}(\beta r) dr = (N_{n\ell})^2 \left[\frac{n^2 \Gamma(n+\ell+1)}{\beta \Gamma(n-\ell-1)} \right] \delta_{n,m}$$

obtemos que a constante de normalização $N_{n\ell}$ é dado por

$$N_{n\ell} = \left[\frac{\beta \Gamma(n-\ell-1)}{n^2 (n+\ell+1)} \right]^{1/2}$$

sendo

$$\Gamma(x) = \frac{2i\pi}{\int_0^{\infty} \frac{e^{-t}}{t^x} dt}$$

Desta maneira os elementos de matriz em unidades de $\frac{e^2}{2a_0}$, ϵ_{nm} ($E_{nm} = -\frac{e^2}{2a_0} \epsilon_{nm}$), são dados por

$$\begin{aligned} \epsilon_{nm} = & \frac{2\beta a_0^2}{m} \int_0^{\infty} dt \phi_{n\ell} \left(\frac{n}{m}t\right) \left[-\frac{d^2}{dt^2} + \frac{1}{4} \frac{(\alpha^2 - 1)}{t^2} \right] \phi_{m\ell}(t) \\ & - 2a_0 \int_0^{\infty} dt \phi_{n\ell} \left(\frac{n}{m}t\right) \frac{1}{[t^2 + (\frac{2\beta a_0}{m})^2]^{1/2}} \phi_{m\ell}(t) \end{aligned}$$

onde fizemos $t = \frac{2\beta r}{m}$ e $\alpha = 2\ell + 1$

Definindo $\eta = \beta a_0$, $\lambda = a/a_0$, após algumas manipulações algébricas, obtemos para ϵ_{nm} a expressão

$$\epsilon_{nm} = -\left(\frac{n}{m}\right)^2 \delta_{nm} + C_{nm} I_{nm} - B_{nm} J_{nm}(\eta, \lambda),$$

onde

$$C_{nm} = \frac{2\eta^2}{nm} \left(\frac{m}{n}\right)^{(\alpha+1)/2} \left(\frac{2n}{n+m}\right) \left[\frac{\Gamma(n - \frac{1}{2}(\alpha-1)) \Gamma(m - \frac{1}{2}(\alpha-1))}{\Gamma(n + \frac{1}{2}(\alpha+1)) \Gamma(m + \frac{1}{2}(\alpha+1))} \right]^{1/2}$$

$$I_{nm} = \int_0^{\infty} dx e^{-x} x^{\alpha} L_{n-(\alpha+1)/2}^{\alpha} \left(\frac{2m}{n+m}x\right) L_{m-(\alpha+1)/2}^{\alpha} \left(\frac{2n}{n+m}x\right)$$

$$B_{nm} = \eta \left(\frac{2n}{n+m}\right) C_{nm}$$

$$J_{nm}(\eta, \lambda) = \int_0^{\infty} dx e^{-x} \frac{x^{\alpha+1}}{[(\frac{2n}{n+m})^2 x^2 + (\frac{2n\lambda}{m})^2]^{1/2}} L_{n-(\alpha+1)/2}^{\alpha} \left(\frac{2m}{n+m}x\right)$$

$$L_{m-(\alpha+1)/2}^{\alpha} \left(\frac{2n}{n+m}x\right)$$

O valor de $\eta = \beta a_0 \tilde{\epsilon}$ é determinado por

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ \eta^2 - 2\eta \int_0^{\infty} du \frac{e^{-u} u^2}{[u^2 + (2\eta\lambda)^2]^{1/2}} \right\} = 0$$

o que nos leva a equação

$$\eta = 3 I_1(\eta, \lambda) - I_2(\eta, \lambda)$$

onde

$$I_1(\eta, \lambda) = \int_0^{\infty} du \frac{e^{-u} u^3}{[u^2 + (2\eta\lambda)^2]^{1/2}}$$

e

$$I_2(\eta, \lambda) = \int_0^{\infty} du \frac{e^{-u} u^3}{[u^2 + (2\eta\lambda)^2]^{1/2}}$$

Nas tabelas II-1 - II-3 os resultados obtidos numericamente para os dez estados de momento angular nulo de mais baixa energia são mostrados para diferentes intensidades do campo de Laser com N_0 igual a 14, 15 e 16 respectivamente.

Na figura II.a apresentamos a variação da energia dos quatro estados mais ligados com a intensidade do campo, usando $N_0 = 16$.

λ	η	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}	E_{5s}
0.1	0.94	-0.947	-0.243	-0.109	-0.061	-0.039
0.5	0.69	-0.705	-0.206	-0.095	-0.063	-0.034
1.0	0.54	-0.539	-0.174	-0.081	-0.045	-0.029
1.5	0.45	-0.442	-0.152	-0.070	-0.039	-0.025
2.0	0.40	-0.377	-0.137	-0.064	-0.036	-0.023
2.5	0.36	-0.330	-0.124	-0.058	-0.032	-0.021
3.0	0.32	-0.294	-0.115	-0.054	-0.030	-0.019
3.5	0.30	-0.266	-0.107	-0.050	-0.028	-0.018
4.0	0.28	-0.243	-0.100	-0.047	-0.026	-0.017
4.5	0.26	-0.225	-0.094	-0.044	-0.025	-0.016
5.0	0.24	-0.209	-0.089	-0.042	-0.023	-0.015
6.0	0.22	-0.183	-0.080	-0.038	-0.021	-0.013
7.0	0.21	-0.163	-0.074	-0.035	-0.020	-0.013
8.0	0.19	-0.148	-0.069	-0.033	-0.018	-0.012
9.0	0.18	-0.135	-0.064	-0.030	-0.017	-0.011
10.0	0.16	-0.124	-0.060	-0.029	-0.016	-0.010
15.0	0.13	-0.090	-0.047	-0.023	-0.013	-0.008
20.0	0.11	-0.071	-0.038	-0.019	-0.010	-0.007
25.0	0.09	-0.059	-0.033	-0.017	-0.009	-0.006
30.0	0.08	-0.050	-0.028	-0.014	-0.008	-0.005
35.0	0.08	-0.044	-0.026	-0.013	-0.008	-0.005
40.0	0.07	-0.039	-0.024	-0.012	-0.007	-0.004
45.0	0.07	-0.035	-0.022	-0.011	-0.007	-0.004
50.0	0.06	-0.032	-0.020	-0.010	-0.006	-0.004
60.0	0.05	-0.027	-0.017	-0.009	-0.005	-0.003
70.0	0.04	-0.024	-0.015	-0.008	-0.005	-0.003
80.0	0.04	-0.021	-0.013	-0.007	-0.004	-0.003
90.0	0.04	-0.019	-0.013	-0.007	-0.004	-0.003
100.0	0.04	-0.017	-0.011	-0.006	-0.004	-0.002

Tab.II.1 - Resultados com base tipo hidrogênio

$$(N_0 = 14)$$

λ	n	E_{6s}	E_{7s}	E_{8s}	E_{9s}	E_{10s}
0.1	0.94	-0.027	-0.020	-0.015	-0.012	-0.010
0.5	0.69	-0.024	-0.017	-0.013	-0.010	-0.008
1.0	0.54	-0.020	-0.014	-0.011	-0.009	-0.007
1.5	0.45	-0.017	-0.012	-0.009	-0.007	-0.006
2.0	0.40	-0.016	-0.011	-0.009	-0.007	-0.005
2.5	0.36	-0.014	-0.010	-0.008	-0.006	-0.005
3.0	0.32	-0.013	-0.009	-0.007	-0.006	-0.004
3.5	0.30	-0.012	-0.009	-0.007	-0.005	-0.004
4.0	0.28	-0.011	-0.008	-0.006	-0.005	-0.004
4.5	0.26	-0.011	-0.008	-0.006	-0.005	-0.004
5.0	0.24	-0.010	-0.007	-0.006	-0.004	-0.003
6.0	0.22	-0.009	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003
7.0	0.21	-0.009	-0.006	-0.005	-0.004	-0.003
8.0	0.19	-0.008	-0.006	-0.004	-0.003	-0.003
9.0	0.18	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003	-0.002
10.0	0.16	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003	-0.002
15.0	0.13	-0.006	-0.004	-0.003	-0.002	-0.002
20.0	0.11	-0.005	-0.003	-0.002	-0.002	-0.002
25.0	0.09	-0.004	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001
30.0	0.08	-0.003	-0.003	-0.002	-0.001	-0.001
35.0	0.08	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
40.0	0.07	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
45.0	0.07	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
50.0	0.06	-0.003	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001
60.0	0.05	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001
70.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
80.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
90.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
100.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001

Tab.II.1 - Continuação

λ	η	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}	E_{5s}
0.1	0.94	-0.947	-0.243	-0.109	-0.061	-0.039
0.5	0.69	-0.705	-0.206	-0.095	-0.053	-0.034
1.0	0.54	-0.539	-0.174	-0.081	-0.045	-0.029
1.5	0.45	-0.442	-0.152	-0.070	-0.039	-0.025
2.0	0.40	-0.377	-0.137	-0.064	-0.036	-0.023
2.5	0.36	-0.330	-0.124	-0.058	-0.032	-0.021
3.0	0.32	-0.294	-0.115	-0.054	-0.030	-0.019
3.5	0.30	-0.266	-0.107	-0.050	-0.028	-0.018
4.0	0.28	-0.243	-0.100	-0.047	-0.026	-0.017
4.5	0.26	-0.225	-0.094	-0.044	-0.025	-0.016
5.0	0.24	-0.209	-0.089	-0.042	-0.023	-0.015
6.0	0.22	-0.183	-0.080	-0.038	-0.021	-0.013
7.0	0.21	-0.163	-0.074	-0.035	-0.020	-0.013
8.0	0.19	-0.148	-0.069	-0.033	-0.018	-0.012
9.0	0.18	-0.135	-0.064	-0.030	-0.017	-0.011
10.0	0.16	-0.124	-0.060	-0.029	-0.016	-0.010
15.0	0.13	-0.090	-0.047	-0.023	-0.013	-0.008
20.0	0.11	-0.071	-0.038	-0.019	-0.010	-0.007
25.0	0.09	-0.059	-0.033	-0.017	-0.009	-0.006
30.0	0.08	-0.050	-0.028	-0.014	-0.008	-0.005
35.0	0.08	-0.044	-0.026	-0.013	-0.008	-0.005
40.0	0.07	-0.039	-0.024	-0.012	-0.007	-0.004
45.0	0.07	-0.035	-0.022	-0.011	-0.007	-0.004
50.0	0.06	-0.032	-0.020	-0.010	-0.006	-0.004
60.0	0.05	-0.027	-0.017	-0.009	-0.005	-0.003
70.0	0.04	-0.024	-0.015	-0.008	-0.005	-0.003
80.0	0.04	-0.021	-0.013	-0.007	-0.004	-0.003
90.0	0.04	-0.019	-0.013	-0.007	-0.004	-0.003
100.0	0.04	-0.017	-0.011	-0.006	-0.004	-0.002

Tab.II.2 - Resultados com base tipo hidrogênio

 $(N_0 = 15)$

λ	n	E_{6s}	E_{7s}	E_{8s}	E_{9s}	E_{10s}
0.1	0.94	-0.027	-0.020	-0.015	-0.012	-0.010
0.5	0.69	-0.024	-0.017	-0.013	-0.010	-0.008
1.0	0.54	-0.020	-0.014	-0.011	-0.009	-0.007
1.5	0.45	-0.017	-0.013	-0.009	-0.007	-0.006
2.0	0.40	-0.016	-0.011	-0.009	-0.007	-0.005
2.5	0.36	-0.014	-0.010	-0.008	-0.006	-0.005
3.0	0.32	-0.013	-0.009	-0.007	-0.006	-0.004
3.5	0.30	-0.012	-0.009	-0.007	-0.005	-0.004
4.0	0.28	-0.011	-0.008	-0.006	-0.005	-0.004
4.5	0.26	-0.011	-0.008	-0.006	-0.005	-0.004
5.0	0.24	-0.010	-0.007	-0.006	-0.004	-0.003
6.0	0.22	-0.009	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003
7.0	0.21	-0.009	-0.006	-0.005	-0.004	-0.003
8.0	0.19	-0.008	-0.006	-0.004	-0.003	-0.003
9.0	0.18	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003	-0.002
10.0	0.16	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003	-0.002
15.0	0.13	-0.006	-0.004	-0.003	-0.002	-0.002
20.0	0.11	-0.005	-0.003	-0.002	-0.002	-0.002
25.0	0.09	-0.004	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001
30.0	0.08	-0.003	-0.003	-0.002	-0.001	-0.001
35.0	0.08	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
40.0	0.07	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
45.0	0.07	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
50.0	0.06	-0.003	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001
60.0	0.05	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001
70.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
80.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
90.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
100.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001

Tab.II.2 - Continuação

λ	η	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}	E_{5s}
0.1	0.94	-0.947	-0.243	-0.109	-0.061	-0.039
0.5	0.69	-0.705	-0.206	-0.095	-0.054	-0.034
1.0	0.54	-0.539	-0.174	-0.081	-0.045	-0.029
1.5	0.45	-0.442	-0.152	-0.070	-0.040	-0.025
2.0	0.40	-0.377	-0.137	-0.064	-0.036	-0.023
2.5	0.36	-0.330	-0.124	-0.058	-0.032	-0.021
3.0	0.32	-0.294	-0.115	-0.054	-0.030	-0.019
3.5	0.30	-0.266	-0.107	-0.050	-0.028	-0.018
4.0	0.28	-0.243	-0.100	-0.047	-0.026	-0.017
4.5	0.26	-0.225	-0.094	-0.044	-0.025	-0.016
5.0	0.24	-0.209	-0.089	-0.042	-0.023	-0.015
6.0	0.22	-0.183	-0.080	-0.038	-0.021	-0.013
7.0	0.21	-0.163	-0.074	-0.035	-0.020	-0.013
8.0	0.19	-0.148	-0.069	-0.033	-0.018	-0.012
9.0	0.18	-0.135	-0.064	-0.030	-0.017	-0.011
10.0	0.16	-0.124	-0.060	-0.029	-0.016	-0.010
15.0	0.13	-0.090	-0.047	-0.023	-0.013	-0.008
20.0	0.11	-0.071	-0.038	-0.019	-0.010	-0.007
25.0	0.09	-0.059	-0.033	-0.017	-0.010	-0.006
30.0	0.08	-0.050	-0.028	-0.014	-0.008	-0.005
35.0	0.08	-0.044	-0.026	-0.013	-0.008	-0.005
40.0	0.07	-0.039	-0.024	-0.012	-0.007	-0.004
45.0	0.07	-0.035	-0.022	-0.011	-0.006	-0.004
50.0	0.06	-0.032	-0.020	-0.011	-0.006	-0.004
60.0	0.05	-0.027	-0.017	-0.009	-0.005	-0.003
70.0	0.04	-0.024	-0.015	-0.008	-0.005	-0.003
80.0	0.04	-0.021	-0.013	-0.007	-0.004	-0.003
90.0	0.04	-0.019	-0.013	-0.007	-0.004	-0.003
100.0	0.04	-0.017	-0.011	-0.006	-0.004	-0.002

Tab.II.3 - Resultados com base tipo hidrogênio

 $(N_0 = 16)$

λ	η	E_{6s}	E_{7s}	E_{8s}	E_{9s}	E_{10s}
0.1	0,94	-0.027	-0.020	-0.015	-0.012	-0.010
0.5	0.69	-0.024	-0.017	-0.013	-0.010	-0.008
1.0	0.54	-0.020	-0.015	-0.011	-0.009	-0.007
1.5	0.45	-0.017	-0.013	-0.010	-0.007	-0.006
2.0	0.40	-0.016	-0.011	-0.009	-0.007	-0.005
2.5	0.36	-0.014	-0.010	-0.008	-0.006	-0.004
3.0	0.32	-0.013	-0.010	-0.007	-0.006	-0.004
3.5	0.30	-0.012	-0.009	-0.007	-0.005	-0.004
4.0	0.28	-0.011	-0.008	-0.006	-0.005	-0.004
4.5	0.26	-0.011	-0.008	-0.006	-0.005	-0.004
5.0	0.24	-0.010	-0.007	-0.006	-0.004	-0.003
6.0	0.22	-0.009	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003
7.0	0.21	-0.009	-0.006	-0.005	-0.004	-0.003
8.0	0.19	-0.008	-0.006	-0.004	-0.003	-0.003
9.0	0.18	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003	-0.003
10.0	0.16	-0.007	-0.005	-0.004	-0.003	-0.002
15.0	0.13	-0.006	-0.004	-0.003	-0.002	-0.002
20.0	0.11	-0.005	-0.003	-0.003	-0.002	-0.002
25.0	0.09	-0.004	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001
30.0	0.08	-0.004	-0.003	-0.002	-0.001	-0.001
35.0	0.08	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
40.0	0.07	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
45.0	0.07	-0.003	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001
50.0	0.06	-0.003	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001
60.0	0.05	-0.002	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001
70.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
80.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
90.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001
100.0	0.04	-0.002	-0.001	-0.001	-0.001	-0.001

Tab.II.3 - Continuação

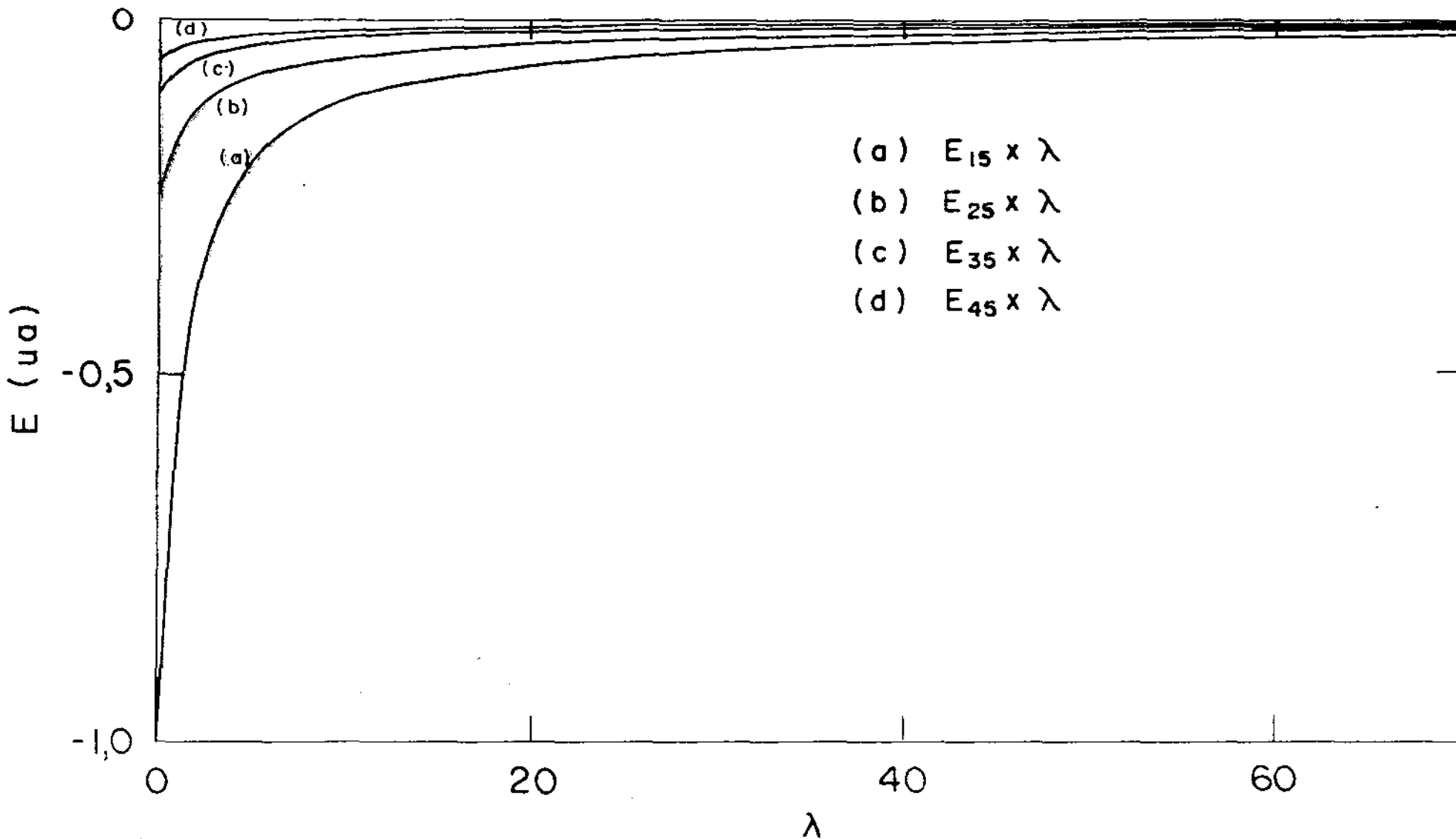


Fig. II.a - Energia dos quatro primeiros estados ligados de momento angular zero como função da intensidade do campo de laser (base HDG).

II.4 - Base de Funções de Oscilador Harmônico

Repetiremos aqui os cálculos efetuados na seção II.3 usando como funções de base as soluções da equação radial para o oscilador harmônico tridimensional, isto é, funções $\phi_{n\ell}(r)$ obtidos através da solução de:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \epsilon - r^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \phi_{n\ell}(r) = 0 \quad (\text{II.17})$$

Explicitamente, estas funções tem a forma⁽³²⁾.

$$\phi_{n\ell}(\beta_1 r) = N_{n\ell}(\beta_1 r)^{\ell+1} e^{-\beta_1^2 r^2} L_n^{\ell+1/2}(\beta_1^2 r^2), \quad n=0,1,2,\dots \quad (\text{II.18})$$

onde $N_{n\ell}$ é a constante de normalização obtida através de

$$\int_0^\infty \phi_{n\ell}^*(\beta_1 r) \phi_{m\ell}(\beta_1 r) dr = \left[\frac{\Gamma(n+\ell+3/2)}{2\beta_1 \Gamma(n+1)} \right] N_{n\ell}^2 \delta_{nm} = 1$$

Fazendo $t = \beta_1^2 r^2$ na eq.(II.10) obtemos para $\epsilon_{nm} = 2a_0 E_{nm}/e^2$ a expressão:

$$\begin{aligned} \epsilon_{nm} = \frac{1}{2\beta} \int_0^\infty \frac{dt}{t^{1/2}} \phi_{n\ell}(t^{1/2}) \left\{ -4 \left(\frac{\beta_1 a_0}{\lambda} \right)^2 t^{1/2} \frac{d}{dt} \left(t^{1/2} \frac{d}{dt} \right) + \right. \\ \left. + \left(\frac{\beta_1 a_0}{\lambda} \right)^2 \frac{(\alpha^2 - 1/4)}{t} - \frac{2\beta_1 a_0}{\lambda} [t - (\beta_1 a_0)^2]^{-1/2} \right\} \phi_{m\ell}(t^{1/2}) \end{aligned} \quad (\text{II.20})$$

Definindo $\eta_1 = \beta_1 a_0$, $\lambda = a/a_0$, $\alpha = \ell + 1/2$, substituindo $\phi_{n\ell}(t^{1/2})$ dado pela Eq.(II.18) na Eq.(II.20), obtemos, após algumas manipulações algébricas,

$$\begin{aligned} \epsilon_{nm} &= \frac{\eta_1^2}{\lambda^2} [2(\alpha+1) + 4n] \frac{N_{n\ell} N_{m\ell}}{2\beta} \int_0^\infty dt t^\alpha e^{-t} L_n^\alpha(t) L_m^\alpha(t) \\ &- \frac{\eta_1^2}{\lambda^2} \frac{N_{n\ell} N_{m\ell}}{2\beta} \int_0^\infty dt t^{\alpha+1} e^{-t} L_n^\alpha(t) L_m^\alpha(t) \\ &- \frac{2\eta_1}{\lambda} \frac{N_{n\ell} N_{m\ell}}{2\beta} \int_0^\infty dt t^\alpha \frac{e^{-t}}{(t+\eta_1)^{1/2}} L_n^\alpha(t) L_m^\alpha(t) \end{aligned}$$

Substituindo os valores das constantes de normalização e efetuando as duas primeiras integrais obtemos

$$\epsilon_{nm} = \frac{\eta_1^2}{\lambda^2} \left\{ [4n + 2(\alpha+1)] \delta_{nm} - I_{nm} \right\} - \frac{2\eta_1}{\lambda} J_{nm}(\eta_1) \quad (\text{II.21})$$

onde

$$I_{nm} = (2n + \alpha + 1) \delta_{nm} - [n(n+\alpha)]^{1/2} \delta_{n-1,m} - [(n+1)(n+\alpha+1)]^{1/2} \delta_{n+1,m}$$

$$J_{nm}(\eta_1) = \left[\frac{\Gamma(n+1) \Gamma(m+1)}{\Gamma(n+\alpha+1) \Gamma(m+\alpha+1)} \right]^{1/2} \int_0^\infty dt \frac{t^\alpha e^{-t}}{(t+\eta_1)^{1/2}} L_n^\alpha(t) L_m^\alpha(t)$$

Usando (II.18) em (II.11) obtemos para $\eta_1 = \beta_1 a_0$ a equação:

$$\frac{\partial}{\partial \eta_1} \left[\frac{\eta_1^2}{\lambda} (3 - I_{00}) - \frac{2\eta_1}{\lambda} J_{00} \right] = 0$$

e finalmente, efetuando as derivadas obtemos a expressão

$$\frac{\eta_1}{\lambda} = \frac{8}{\pi^{1/2}} \left[\eta_1^2 F_1(\eta_1) - \frac{2}{3} \eta_1^4 F_2(\eta_1) \right] \quad (\text{I.22})$$

onde

$$F_1(\eta) = \int_0^\infty dx \frac{x^2 e^{-\eta^2 x^2}}{(x^2 + 1)^{1/2}}$$

e

$$F_2(n) = \int_0^{\infty} dx \frac{x^4 e^{-n^2 x^2}}{(x^2 + 1)^{1/2}}$$

Apresentamos nas tabelas II.4 - II.6 os valores obtidos numericamente para as energias dos dez estados mais ligados para diferentes valores de λ , tomando N_0 igual a 14, 15 e 16 respectivamente.

A Fig. II.b mostra a variação da energia dos quatro primeiros estados ligados com a intensidade do campo de Laser tomando $N_0 = 16$.

λ	n_{pa}	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}	E_{5s}
0.1	0,07	-0.954	-0.230	0.114	0.631	1.364
0.5	0.29	-0.720	-0.205	0.037	0.398	0.900
1.0	0.46	-0.552	-0.185	-0.025	0.201	0.515
1.5	0.58	-0.453	-0.166	-0.048	0.110	0.331
2.0	0.67	-0.387	-0.153	-0.059	0.059	0.223
2.5	0.75	-0.339	-0.141	-0.062	0.032	0.163
3.0	0.82	-0.303	-0.132	-0.063	0.014	0.123
3.5	0.88	-0.274	-0.124	-0.063	0.002	0.094
4.0	0.94	-0.250	-0.118	-0.062	-0.005	0.075
4.5	0.99	-0.231	-0.112	-0.060	-0.011	0.058
5.0	1.03	-0.214	-0.106	-0.059	-0.059	0.045
6.0	1.12	-0.188	-0.098	-0.056	-0.021	0.029
7.0	1.19	-0.168	-0.090	-0.054	-0.024	0.017
8.0	1.25	-0.152	-0.084	-0.051	-0.026	0.008
9.0	1.31	-0.139	-0.079	-0.049	-0.027	0.002
10.0	1.36	-0.128	-0.074	-0.047	-0.027	-0.002
15.0	1.58	-0.092	-0.058	-0.039	-0.026	-0.011
20.0	1.75	-0.072	-0.048	-0.034	-0.024	-0.014
25.0	1.88	-0.060	-0.042	-0.030	-0.022	-0.014
30.0	2.00	-0.051	-0.037	-0.027	-0.020	-0.014
35.0	2.10	-0.045	-0.033	-0.024	-0.019	-0.014
40.0	2.20	-0.040	-0.030	-0.022	-0.017	-0.013
45.0	2.28	-0.036	-0.027	-0.021	-0.016	-0.013
50.0	2.35	-0.033	-0.025	-0.019	-0.015	-0.012
60.0	2.49	-0.028	-0.022	-0.017	-0.014	-0.011
70.0	2.61	-0.024	-0.010	-0.015	-0.013	-0.010
80.0	2.72	-0.021	-0.017	-0.014	-0.012	-0.010
90.0	2.80	-0.019	-0.016	-0.013	-0.011	-0.009
100.0	2.90	-0.017	-0.014	-0.012	-0.010	-0.008

Tab.II.4 - Resultados com base tipo oscilador harmônico - ($N_0 = 14$)

λ	$n = \rho a$	E_{6s}	E_{7s}	E_{8s}	E_{9s}	E_{10s}
0.1	0.07	2.259	3.411	4.718	6.371	8.176
0.5	0.29	1.527	2.313	3.229	4.351	5.620
1.0	0.46	0.912	1.404	1.984	2.685	3.489
1.5	0.58	0.611	0.957	1.367	1.861	2.430
2.0	0.67	0.433	0.692	1.000	1.369	1.797
2.5	0.75	0.331	0.538	0.785	1.080	1.423
3.0	0.82	0.262	0.434	0.638	0.883	1.168
3.5	0.88	0.211	0.356	0.529	0.736	0.976
4.0	0.94	0.177	0.304	0.455	0.635	0.845
4.5	0.99	0.148	0.259	0.391	0.549	0.733
5.0	1.03	0.123	0.220	0.335	0.373	0.635
6.0	1.12	0.093	0.172	0.267	0.380	0.512
7.0	1.19	0.069	0.135	0.214	0.307	0.417
8.0	1.25	0.052	0.108	0.174	0.253	0.345
9.0	1.31	0.041	0.089	0.146	0.215	0.294
10.0	1.36	0.031	0.073	0.123	0.183	0.252
15.0	1.58	0.008	0.033	0.063	0.098	0.140
20.0	1.75	-0.001	0.016	0.037	0.061	0.090
25.0	1.88	-0.005	0.008	0.022	0.040	0.061
30.0	2.00	-0.007	0.003	0.015	0.029	0.045
35.0	2.10	-0.008	0.000	0.009	0.021	0.034
40.0	2.20	-0.008	-0.002	0.006	0.016	0.027
45.0	2.28	-0.009	-0.003	0.004	0.012	0.021
50.0	2.35	-0.008	-0.004	0.002	0.009	0.017
60.0	2.49	-0.008	-0.005	0.000	0.005	0.011
70.0	2.61	-0.008	-0.005	-0.002	0.003	0.008
80.0	2.72	-0.008	-0.005	-0.002	0.001	0.005
90.0	2.80	-0.007	-0.005	-0.003	0.000	0.003
100.0	2.90	-0.007	-0.005	-0.003	0.001	0.002

Tab.II.4 - Continuação

λ	$n = \rho a$	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}	E_{5s}
0.1	0.07	-0.955	-0.232	0.083	0.578	1.236
0.5	0.29	-0.720	-0.207	0.018	0.358	0.818
1.0	0.46	-0.552	-0.184	-0.035	0.176	0.466
1.5	0.58	-0.453	-0.166	-0.054	0.093	0.297
2.0	0.67	-0.387	-0.153	-0.062	0.047	0.199
2.5	0.75	-0.339	-0.142	-0.065	0.022	0.144
3.0	0.82	-0.303	-0.132	-0.065	0.007	0.107
3.5	0.88	-0.274	-0.124	-0.064	-0.004	0.081
4.0	0.94	-0.250	-0.118	-0.063	-0.010	0.063
4.5	0.99	-0.231	-0.112	-0.061	-0.015	0.049
5.0	1.03	-0.214	-0.106	-0.060	-0.020	0.036
6.0	1.12	-0.188	-0.098	-0.057	-0.024	0.022
7.0	1.19	-0.168	-0.090	-0.054	-0.026	0.011
8.0	1.25	-0.152	-0.084	-0.052	-0.028	0.004
9.0	1.31	-0.139	-0.079	-0.049	-0.028	-0.001
10.0	1.36	-0.128	-0.074	-0.047	-0.028	-0.005
15.0	1.58	-0.092	-0.058	-0.039	-0.027	-0.013
20.0	1.75	-0.072	-0.048	-0.034	-0.024	-0.015
25.0	1.88	-0.060	-0.042	-0.030	-0.022	-0.015
30.0	2.00	-0.051	-0.037	-0.027	-0.020	-0.015
35.0	2.10	-0.045	-0.033	-0.024	-0.019	-0.014
40.0	2.20	-0.040	-0.030	-0.022	-0.017	-0.013
45.0	2.28	-0.036	-0.027	-0.021	-0.016	-0.013
50.0	2.35	-0.033	-0.025	-0.019	-0.015	-0.012
60.0	2.49	-0.028	-0.022	-0.017	-0.014	-0.011
70.0	2.61	-0.024	-0.010	-0.015	-0.013	-0.010
80.0	2.72	-0.021	-0.017	-0.014	-0.012	-0.010
90.0	2.80	-0.019	-0.016	-0.013	-0.011	-0.009
100.0	2.90	-0.017	-0.014	-0.012	-0.010	-0.008

Tab.II.5 - Resultados com base tipo oscilador
harmônico - ($N_0 = 15$)

λ	$n = \rho \omega$	E_{6s}	E_{7s}	E_{8s}	E_{9s}	E_{10s}
0.1	0.07	2.103	3.119	4.392	5.810	7.579
0.5	0.29	1.411	2.122	2.990	3.984	5.184
1.0	0.46	0.838	1.287	1.831	2.460	3.210
1.5	0.58	0.559	0.876	1.259	1.704	2.232
2.0	0.67	0.394	0.633	0.919	1.253	1.648
2.5	0.75	0.300	0.491	0.720	0.988	1.304
3.0	0.82	0.237	0.395	0.585	0.807	1.069
3.5	0.88	0.190	0.324	0.484	0.672	0.893
4.0	0.94	0.159	0.275	0.415	0.579	0.772
4.5	0.98	0.132	0.234	0.357	0.500	0.669
5.0	1.03	0.109	0.198	0.306	0.431	0.579
6.0	1.12	0.082	0.155	0.243	0.346	0.367
7.0	1.19	0.060	0.121	0.194	0.279	0.379
8.0	1.25	0.045	0.096	0.157	0.229	0.314
9.0	1.31	0.035	0.079	0.132	0.194	0.267
10.0	1.36	0.026	0.064	0.111	0.165	0.229
15.0	1.58	0.005	0.028	0.056	0.088	0.126
20.0	1.75	-0.002	0.012	0.032	0.054	0.080
25.0	1.88	-0.006	0.005	0.019	0.035	0.055
30.0	2.00	-0.008	0.001	0.012	0.025	0.040
35.0	2.10	-0.009	-0.001	0.007	0.017	0.030
40.0	2.20	-0.009	-0.003	0.004	0.013	0.023
45.0	2.28	-0.009	-0.004	0.002	0.009	0.018
50.0	2.35	-0.009	-0.005	0.001	0.007	0.014
60.0	2.49	-0.009	-0.005	-0.001	0.003	0.009
70.0	2.61	-0.008	-0.006	-0.002	0.001	0.006
80.0	2.72	-0.008	-0.006	-0.003	0.000	0.004
90.0	2.80	-0.007	-0.006	-0.003	-0.001	0.002
100.0	2.90	-0.007	-0.006	-0.004	-0.001	0.001

Tab.II.5 - Continuação

λ	$n=\beta a$	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}	E_{5s}
0.1	0.07	-0.957	-0.231	0.106	0.614	1.326
0.5	0.29	-0.720	-0.185	0.002	0.311	0.740
1.0	0.46	-0.552	-0.185	-0.043	0.151	0.420
1.5	0.58	-0.453	-0.167	-0.059	0.078	0.269
2.0	0.67	-0.387	-0.153	-0.065	0.036	0.178
2.5	0.75	-0.339	-0.142	-0.067	0.014	0.128
3.0	0.82	-0.305	-0.132	-0.066	0.000	0.094
3.5	0.88	-0.274	-0.124	-0.065	-0.009	0.070
4.0	0.94	-0.250	-0.118	-0.063	-0.014	0.054
4.5	0.98	-0.231	-0.112	-0.062	-0.019	0.041
5.0	1.03	-0.214	-0.106	-0.060	-0.023	0.029
6.0	1.12	-0.188	-0.098	-0.057	-0.026	0.017
7.0	1.19	-0.168	-0.090	-0.054	-0.028	0.007
8.0	1.25	-0.152	-0.084	-0.052	-0.029	0.000
9.0	1.31	-0.139	-0.079	-0.049	-0.029	-0.004
10.0	1.36	-0.128	-0.074	-0.047	-0.029	-0.007
15.0	1.58	-0.092	-0.058	-0.039	-0.027	-0.014
20.0	1.75	-0.072	-0.048	-0.034	-0.024	-0.016
25.0	1.88	-0.060	-0.042	-0.030	-0.022	-0.016
30.0	2.00	-0.051	-0.037	-0.027	-0.020	-0.015
35.0	2.10	-0.045	-0.033	-0.024	-0.019	-0.014
40.0	2.20	-0.040	-0.030	-0.022	-0.017	-0.014
45.0	2.28	-0.036	-0.027	-0.021	-0.016	-0.013
50.0	2.35	-0.033	-0.025	-0.019	-0.015	-0.012
60.0	2.49	-0.028	-0.022	-0.017	-0.014	-0.011
70.0	2.61	-0.024	-0.019	-0.015	-0.013	-0.010
80.0	2.72	-0.021	-0.017	-0.014	-0.012	-0.010
90.0	2.80	-0.019	-0.016	-0.013	-0.011	-0.009
100.0	2.90	-0.017	-0.014	-0.012	-0.010	-0.008

Tabl.II.6 - Resultados com base tipo oscilador harmônico - ($N_0 = 16$)

λ	$n=\beta a$	E_{6s}	E_{7s}	E_{8s}	E_{9s}	E_{10s}
0.1	0.07	2.202	3.306	4.568	6.177	7.822
0.5	0.29	1.277	1.943	2.719	3.650	4.699
1.0	0.46	1.181	1.674	2.259	2.927	3.716
1.5	0.58	0.512	0.810	1.162	1.578	2.055
2.0	0.67	0.360	0.583	0.847	1.159	1.516
2.5	0.75	0.273	0.451	0.663	0.912	1.199
3.0	0.82	0.214	0.362	0.538	0.744	0.982
3.5	0.88	0.171	0.296	0.444	0.619	0.820
4.0	0.94	0.143	0.252	0.381	0.533	0.709
4.5	0.98	0.118	0.214	0.327	0.460	0.614
5.0	1.03	0.097	0.180	0.280	0.396	0.531
6.0	1.12	0.072	0.140	0.221	0.317	0.428
7.0	1.19	0.053	0.109	0.176	0.255	0.347
8.0	1.25	0.038	0.086	0.143	0.209	0.287
9.0	1.31	0.029	0.070	0.119	0.177	0.244
10.0	1.36	0.021	0.057	0.100	0.150	0.209
15.0	1.58	0.003	0.024	0.049	0.079	0.114
20.0	1.75	-0.004	0.010	0.028	0.072	0.100
25.0	1.88	-0.007	0.003	0.016	0.049	0.069
30.0	2.00	-0.009	0.000	0.010	0.035	0.051
35.0	2.10	-0.009	-0.003	0.005	0.026	0.039
40.0	2.20	-0.009	-0.004	0.003	0.020	0.031
45.0	2.28	-0.009	-0.005	0.001	0.016	0.025
50.0	2.35	-0.009	-0.005	0.000	0.012	0.020
60.0	2.49	-0.009	-0.006	-0.002	0.008	0.014
70.0	2.61	-0.008	-0.006	-0.003	0.005	0.010
80.0	2.72	-0.008	-0.006	-0.003	0.003	0.007
90.0	2.80	-0.007	-0.006	-0.004	0.001	0.005
100.0	2.90	-0.007	-0.006	-0.004	0.001	0.004

Tab.II.6 - Continuação

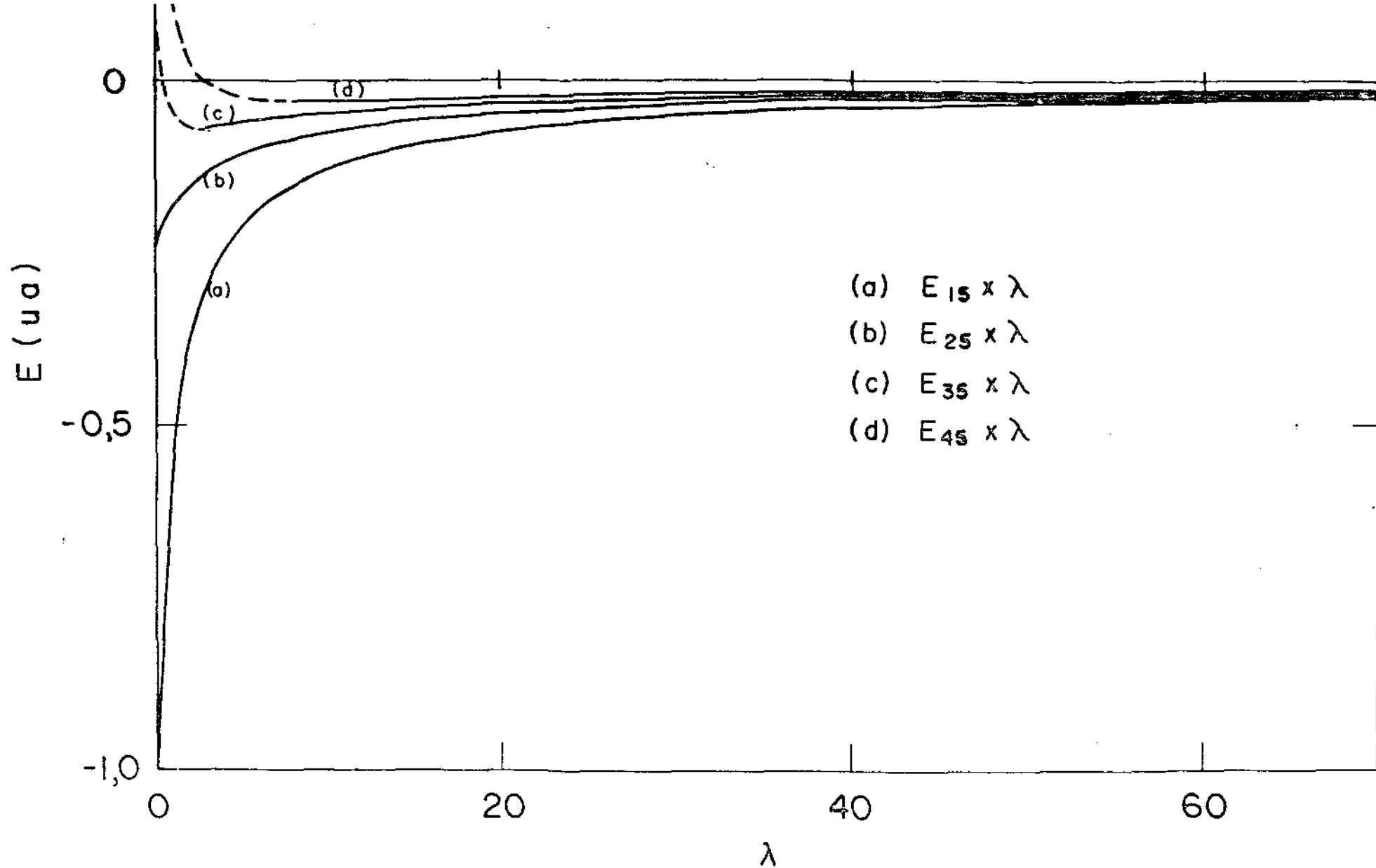


Fig. II.b - Energia dos quatro primeiros estados ligados de momento angular zero, como função da intensidade do campo de laser. (base O.H.)

II.5 - Resultado Final e Conclusões

Usando os resultados obtidos nas seções II.3 e II.4 construímos a tabela II.7, na qual estão listados os valores para energia dos dez primeiros estados ligados do sistema que tem momento angular zero. Estes valores são obtidos através da escolha, dentre os valores correspondentes nas tabelas anteriores, daqueles que, dentro do critério de convergência aqui utilizado, representam a melhor aproximação para a energia do estado considerado, na precisão desejada em nossos cálculos. A Fig. II.c sintetiza graficamente o comportamento dos quatro estados de mais baixa energia com a intensidade do campo de laser.

Analisando estes resultados podemos concluir que:

- a) O estado fundamental do átomo de hidrogênio irradiado é melhor descrito por uma combinação linear de funções de onda tipo oscilador harmônico, exceto para aqueles valores de intensidade tais que $I \ll I_c$ (isto é, $\lambda \ll 1$), para os quais a representação por uma base hidrogenóide apresenta melhores resultados, dentro do critério estabelecido pelo método variacional.
- b) Para intensidades do campo de laser igual ou menor que a intensidade I_c , as energias dos estados mais ligados obedecem aproximadamente a relação

$$n^2 E_n = m^2 E_m$$

indicando que estes estados tem um comportamento que se aproxima daquele observado para o átomo de hidrogênio puro.

c) Para $\lambda \gg 1$ ($\lambda \gtrsim 80$) os estados mais ligados tornam-se igualmente espaçados e suas energias obedecem aproximadamente a relação

$$\lambda_1^{3/2} E_n(\lambda_1) \approx \lambda_2^{3/2} E_n(\lambda_2) \quad (\text{II.23})$$

mostrando que neste regime de campo o sistema em estudo se comporta como um oscilador harmônico cuja frequência é proporcional a $\lambda^{-3/2}$.

d) Para um dado λ , existe sempre um estado n tal que, para o estado m , ($m > n$) o sistema é melhor descrito por uma combinação linear de funções de onda tipo hidrogênio.

e) A energia dos estados excitados são menos afetadas pela presença do campo de laser, isto é, $\frac{dE_n}{d\lambda}$ é tanto menor quanto menos ligado for o estado n .

Fisicamente as afirmativas acima podem ser entendidas observando-se o comportamento do potencial ligante

$$V(r) = \frac{-e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} \quad (\text{II.24})$$

para diferentes regimes de campo.

Na Fig. II.d é mostrado o comportamento de $V(r)$ dado pela Eq.(II.24) e de suas expansões para $r \gg a$

$$V(r) \approx -\frac{e^2}{|\vec{r}|}$$

e para $r \ll a$

$$\begin{aligned} V(r) &\approx -\frac{e^2}{a} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r^2}{a^2}\right) \\ &\approx -E_0(\lambda) + \frac{1}{2} m\Omega^2 r^2; \left(\Omega^2 = \frac{e^2}{m\lambda^3 a_0^3}\right) \end{aligned} \quad (\text{II.25})$$

No caso em estudo devemos comparar o tamanho do sistema ligado ($r_n(\lambda)$) com a amplitude de oscilação do elétron no campo de Laser ($a = \lambda a_0$). Em particular, para o estado fundamental Lima e Miranda⁽⁶⁾ observaram que para grandes valores de λ ($\lambda \gg 1$), $r_0(\lambda) \approx a$, o que explica o fato deste estado, neste regime de campo, ser melhor descrito por uma combinação de funções de onda de oscilador harmônico uma vez que para valores próximos de $r_1(\lambda)$ o potencial ligante usado em nossos cálculos ($-e^2/(r^2+a^2)^{1/2}$) é razoavelmente bem descrito pela expansão (II.25) (Fig. II.d).

Ainda com o auxílio da Fig.II.d podemos entender as afirmativas (b) e (d) uma vez que para pequenos valores de λ (pequenas intensidades) ou para grandes valores n ($r_n(\lambda)$ grande mesmo para $\lambda = 0$) $V(r)$ dado pela Eq.(II.23) aproxima-se do potencial Coulombiano puro. Por outro lado para $\lambda \gg 1$ o potencial ligante dependente do campo de Laser pode ser aproximado por II.25 para um grande domínio de valores de r , o que nos permite entender a afirmativa (c) visto que, para os valores de n tais que $r_n(\lambda)$ esteja neste domínio, deve ser esperado que os níveis de energia tendam a ser igualmente espaçados e a equação (II.23) seja satisfeita.

Finalmente, observando que a dimensão do sistema cresce para estados mais excitados, a afirmativa (e) pode ser interpretada, visto que para os estados de grandes n , os valores de r em torno de $r_n(\lambda)$ são tais que torna o potencial ligante II.24, menos sensível a variações de λ .

Em resumo, podemos dizer que neste capítulo apresentamos um esquema variacional para calcular o espectro de

energia e auto-funções do átomo de hidrogênio na presença de campo de Laser intenso, considerando a função de partida como uma combinação linear de funções hidrogenóides ou de osciladores harmônicos. A rápida convergência do método aqui utilizado, sugere que esta é uma maneira conveniente para tratar sistemas mais complexos.

λ	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}	E_{5s}
0.1	-0.957 ^x	-0.243 ⁺	-0.109 ⁺	-0.061 ⁺	-0.039 ⁺
0.5	-0.720 ^x	-0.209 ^x	-0.095 ⁺	-0.054 ⁺	-0.034 ⁺
1.0	-0.552 ^x	-0.185 ^x	-0.081 ⁺	-0.045 ⁺	-0.029 ⁺
1.5	-0.453 ^x	-0.167 ^x	-	-0.040 ⁺	-0.025 ⁺
2.0	-0.387 ^x	-0.153 ^x	-	-0.036 ⁺	-0.023 ⁺
2.5	-0.339 ^x	-0.142 ^x	-0.067 ^x	-0.032 ⁺	-0.021 ⁺
3.0	-0.303 ^x	-0.132 ^x	-0.066 ^x	-0.030 ⁺	-0.019 ⁺
3.5	-0.274 ^x	-0.124 ^x	-0.065 ^x	-	-0.018 ⁺
4.0	-0.250	-0.118 ^x	-0.063 ^x	-	-0.017 ⁺
4.5	-0.231 ^x	-0.112 ^x	-0.062 ^x	-	-0.016 ⁺
5.0	-0.214 ^x	-0.106 ^x	-0.060 ^x	-	-
6.0	-0.188 ^x	-0.098 ^x	-0.057 ^x	-	-
7.0	-0.168 ^x	-0.090 ^x	-0.054 ^x	-	-
8.0	-0.152 ^x	-0.084 ^x	-0.052 ^x	-0.029 ^x	-
9.0	-0.139 ^x	-0.079 ^x	-0.049 ^x	-0.029 ^x	-
10.0	-0.128 ^x	-0.074 ^x	-0.047 ^x	-0.029 ^x	-
15.0	-0.092 ^x	-0.058 ^x	-0.039 ^x	-0.027 ^x	-
20.0	-0.072 ^x	-0.048 ^x	-0.034 ^x	-0.024 ^x	-0.016 ^x
25.0	-0.060 ^x	-0.042 ^x	-0.030 ^x	-0.022 ^x	-0.016 ^x
30.0	-0.051 ^x	-0.037 ^x	-0.027 ^x	-0.020 ^x	-0.015 ^x
35.0	-0.045 ^x	-0.033 ^x	-0.024 ^x	-0.019 ^x	-0.014 ^x
40.0	-0.040 ^x	-0.030 ^x	-0.022 ^x	-0.017 ^x	-0.014 ^x
45.0	-0.036 ^x	-0.027 ^x	-0.021 ^x	-0.016 ^x	-0.013 ^x
50.0	-0.033 ^x	-0.025 ^x	-0.019 ^x	-0.015 ^x	-0.012 ^x
60.0	-0.028 ^x	-0.022 ^x	-0.017 ^x	-0.014 ^x	-0.011 ^x
70.0	-0.024 ^x	-0.019 ^x	-0.015 ^x	-0.013 ^x	-0.010 ^x
80.0	-0.021 ^x	-0.017 ^x	-0.014 ^x	-0.012 ^x	-0.009 ^x
90.0	-0.019 ^x	-0.016 ^x	-0.013 ^x	-0.011 ^x	-0.009 ^x
100.0	-0.017 ^x	-0.014 ^x	-0.012 ^x	-0.010 ^x	-0.008 ^x

Tab. II.7 - Resultados para os primeiros estados excitados de momento angular zero, obtidos com a expansão adequada. (+) - base hidrogenóide - (x) base de funções tipo oscilador harmônico - ~~X~~

λ	E_{6s}	E_{7s}	E_{8s}	E_{9s}	E_{10s}
0.1	-0.027 ⁺	-0.020 ⁺	-0.015 ⁺	-0.012 ⁺	-0.010 ⁺
0.5	-0.024 ⁺	-0.017 ⁺	-0.013 ⁺	-0.010 ⁺	-0.008 ⁺
1.0	-0.020 ⁺	-0.015 ⁺	-0.011 ⁺	-0.009 ⁺	-0.007 ⁺
1.5	-0.017 ⁺	-0.013 ⁺	-0.010 ⁺	-0.007 ⁺	-0.006 ⁺
2.0	-0.016 ⁺	-0.011 ⁺	-0.009 ⁺	-0.006 ⁺	-0.005 ⁺
2.5	-0.014 ⁺	-0.010 ⁺	-0.008 ⁺	-0.006 ⁺	-0.004 ⁺
3.0	-0.013 ⁺	-0.010 ⁺	-0.007 ⁺	-0.006 ⁺	-0.004 ⁺
3.5	-0.012 ⁺	-0.009 ⁺	-0.007 ⁺	-0.005 ⁺	-0.004 ⁺
4.0	-0.011 ⁺	-0.008 ⁺	-0.006 ⁺	-0.005 ⁺	-0.004 ⁺
4.5	-0.011 ⁺	-0.008 ⁺	-0.006 ⁺	-0.005 ⁺	-0.004 ⁺
5.0	-0.010 ⁺	-0.007 ⁺	-0.006 ⁺	-0.004 ⁺	-0.003 ⁺
6.0	-0.009 ⁺	-0.007 ⁺	-0.005 ⁺	-0.004 ⁺	-0.003 ⁺
7.0	-0.009 ⁺	-0.006 ⁺	-0.005 ⁺	-0.004 ⁺	-0.003 ⁺
8.0	-	-0.006 ⁺	-0.004 ⁺	-0.003 ⁺	-0.003 ⁺
9.0	-	-	-0.004 ⁺	-0.003 ⁺	-0.003 ⁺
10.0	-	-	-0.004 ⁺	-0.003 ⁺	-0.002 ⁺
15.0	-	-	-	-0.003 ⁺	-0.002 ⁺
20.0	-	-	-	-0.002 ⁺	-0.002 ⁺
25.0	-	-	-	-0.002 ⁺	-0.001 ⁺
30.0	-0.009 ^x	-	-	-	-0.001 ⁺
35.0	-0.009 ^x	-	-	-	-0.001 ⁺
40.0	-0.009 ^x	-	-	-	-0.001 ⁺
45.0	-0.009 ^x	-	-	-	-0.001 ⁺
50.0	-0.009 ^x	-	-	-	-0.001 ⁺
60.0	-0.009 ^x	-0.006 ^x	-	-	-0.001 ⁺
70.0	-0.008 ^x	-0.006 ^x	-	-	-0.001 ⁺
80.0	-0.008 ^x	-0.006 ^x	-	-	-0.001 ⁺
90.0	-0.007 ^x	-0.006 ^x	-0.004 ^x	-	-0.001 ⁺
100.0	-0.007 ^x	-0.006 ^x	-0.004 ^x	-0.002 ^x	-0.001 ⁺

Tab.II.7 - Continuação

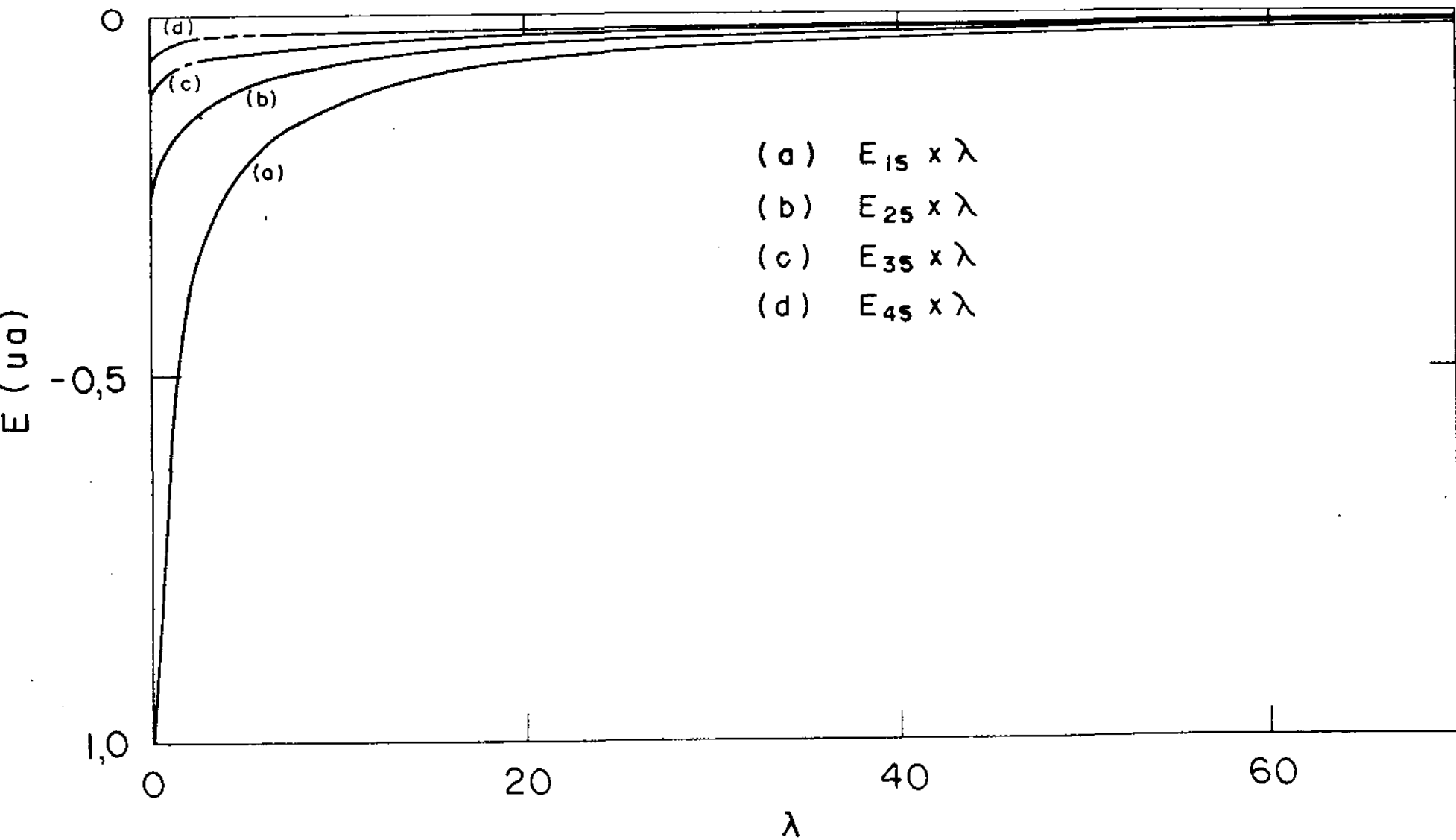


Fig. II.c - Energia dos quatro primeiros estados ligados de momento angular zero, utilizando a descrição mais adequada à intensidade de campo.

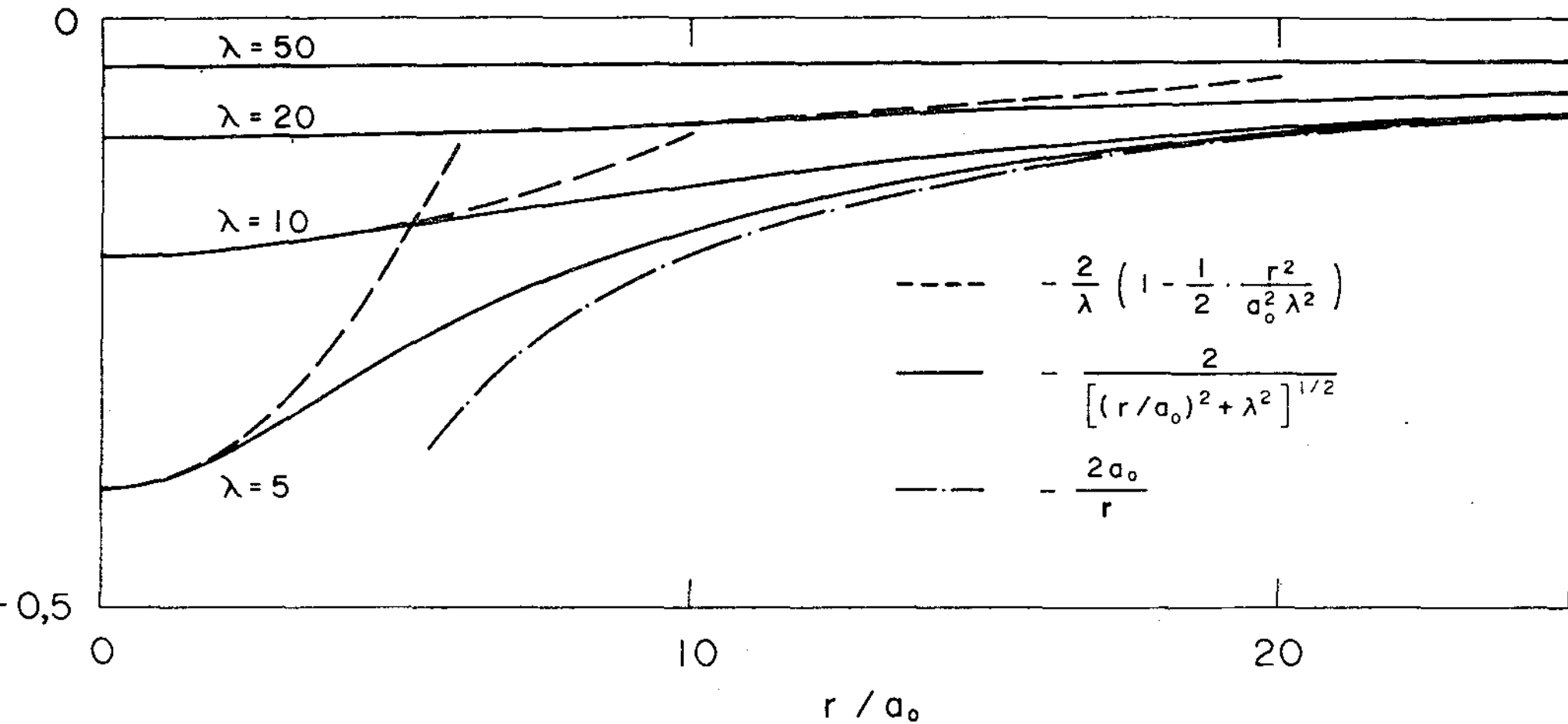


Fig. II.d - Potencial atômico ligante e suas aproximações.

CAPÍTULO III

ESPALHAMENTO DE ELÉTRON POR ÁTOMO DE
HIDROGÊNIO EM PRESENÇA DE CAMPO DE
LASER INTENSO

III.1 - Introdução

A solução teórica para o espalhamento de elétron em presença de campo eletromagnético é conhecida já a algum tempo⁽³³⁾. Recentemente, isto é, desde que foi mostrado ser este processo o principal responsável pelo aquecimento de plasmas, vários pesquisadores intensificaram seus trabalhos visando um melhor entendimento deste problema^(20,34,35). Em particular, tem sido procurada soluções para o espalhamento de elétrons por átomos neutros em presença de campo de radiação intenso, e é observado que, neste caso, a principal dificuldade do desenvolvimento teórico do problema está na descrição correta dos estados atômicos ligados quando em presença de tais campos. Esta dificuldade é analisada em detalhes na Ref. (13) onde são comparadas as amplitudes de espalhamento obtidas através dos vários métodos em uso.

Neste capítulo estaremos interessados em discutir o espalhamento de elétron por um átomo de hidrogênio em um campo de laser super intenso, usando o formalismo de funções de Green e a descrição dos estados ligados mostrada no capítulo II. Atenção especial será dada ao espalhamento inelástico, isto é, na contribuição da interação elétron incidente com o elétron ligado, desprezando o efeito de troca e fazendo uso da aproximação de Born.

III.2 - Formulação

Usando o sub-índice 1 para representar o elétron atômico, o 2 para o elétron incidente e considerando o próton em repouso na origem, o Hamiltoniano total do sistema é

escrito como

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p}_1 + \frac{e}{c} \vec{A}(t))^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_1|} + \frac{1}{2m} (\vec{p}_2 + \frac{e}{c} \vec{A}(t))^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_2|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (\text{III.1})$$

onde $\vec{A}(t) = A (\check{x} \cos \omega t + \check{y} \sin \omega t)$ é o potencial vetor para um feixe de laser circularmente polarizado na aproximação de dipolo.

De uma maneira análoga ao que foi feito no capítulo II, introduzimos a transformação

$$U_1 = e^{i\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p}_1 / \hbar} e^{i\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p}_2 / \hbar} e^{i2\eta(t) / \hbar} \quad (\text{III.2})$$

onde $\vec{\delta}(t)$ e $\eta(t)$ são definidos pela Eqs. (II.3). Com esta transformação obtemos para o Hamiltoniano (III.1) na nova representação, a expressão:

$$\begin{aligned} \bar{H} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} &= U^\dagger (H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}) U = \\ &= \frac{p_1^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{\delta}(t)|} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{\delta}(t)|} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{III.3})$$

A solução assintótica para equação de Schrödinger ($|\vec{r}_2| \rightarrow \infty$) associada ao Hamiltoniano \bar{H} dado por (III.3), é obtida através de

$$i\hbar \dot{\phi}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \left[\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{\delta}(t)|} \right] \phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t). \quad (\text{III.4})$$

Desprezando a troca entre os elétrons, as soluções da Eq. (III.4) podem ser escritas como um produto da solução exata para as variáveis de sub-índice 2 (partícula livre) por $\phi_n(\vec{r}, t)$ solução de:

$$i\hbar\dot{\phi}_n(\vec{r}_1, t) = \left[\frac{p_1^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{\delta}(t)|} \right] \phi_n(\vec{r}, t) \quad (\text{III.5})$$

Na aproximação de mais baixa ordem temos

$$\phi_n(\vec{r}, t) = \phi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$$

onde $\phi_n(\vec{r})$ é a solução estacionária para o átomo de hidrogênio em presença de campo de laser super intenso obtida no capítulo II.

Desta maneira, a função de Green associada ao Hamiltoniano dado pela Eq.(III.3), pode ser escrita como

$$G(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t'; \vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{i}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \sum_n \int d^3k \phi_{kn}^*(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t) \phi_{kn}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \quad (\text{III.6})$$

onde

$$\phi_{kn}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} e^{-iE_k t/\hbar} \phi_n(r_1) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (\text{III.7})$$

Segue daí que a função de onda aproximada para equação de Schrödinger, com o Hamiltoniano total transformado, é dada por:

$$\begin{aligned} \psi_{k_0, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) &= \phi_{k_0, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) - \\ &- \int d^3r'_1 \int d^3r'_2 \int dt' G(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t'; \vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \left[\frac{e^2}{|\vec{r}'_1 - \vec{r}'_2|} - \frac{e^2}{|\vec{r}'_2 - \vec{\delta}(t)|} \right] \psi_{k_0, n}(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t') \end{aligned} \quad (\text{III.8})$$

onde $\phi_{k_0, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ representa a função de onda inicial considerando-se o elétron 2 (incidente) com momento $\hbar\vec{k}_0$ e o átomo de hidrogênio, na presença do laser, no estado n .

Apesar da ineficiência da aproximação de Born, para potenciais na forma do que temos na Eq.(III.8), a usaremos, com a finalidade de obtermos informações qualitativas a respeito do efeito do campo de laser sobre a amplitude de espalhamento.

Seguindo o procedimento ditado pela aproximação de Born, $\psi_{k_0, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ no lado direito da Eq.(III.8), deve ser substituída por sua expressão assintótica, resultando para $\psi_{k_0, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ a expressão:

$$\psi_{\vec{k}_0, n} = \phi_{\vec{k}_0, n}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) + \psi_{\text{esp}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

onde

$$\begin{aligned} \psi_{\text{esp}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = & - \frac{i}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{n'} \int d^3k \int d^3\vec{r}'_1 \int d^3\vec{r}'_2 \int dt' \phi_{n'}^*(\vec{r}'_1) \phi_{n'}(\vec{r}'_1) \\ & e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}'_2 - \vec{r}_2)} \left[- \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}'_2(t)|} + \frac{e^2}{|\vec{r}'_1 - \vec{r}_2|} \right] \phi_n(r'_1) e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}'_2} e^{i(E_k + E_{n'} - E_{k_0} - E_n)t/\hbar} \\ & e^{-i(E_k + E_n)t/\hbar} \end{aligned} \quad (\text{III.9})$$

Efetuando a integração em t' e \vec{k} e tomando o limite $|\vec{r}'_2| \ll |\vec{r}_2| \rightarrow \infty$, obtemos para $\psi_{\text{esp}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$ a forma:

$$\psi_{\text{esp}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2}}{r_2} \sum_{n'} f_{nn'}^{k_0, \vec{k}} e^{-i(E_k + E_n)t/\hbar} \quad (\text{III.10})$$

onde \vec{k} satisfaz a

$$\vec{k}^2 = k_0^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_{n'})$$

e

$$f_{n\bar{n}}^{k\bar{k}} = - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_1' \int d^3r_2' e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}') \cdot \vec{r}_2'} \phi_{n'}^*(\vec{r}_1')$$

$$\left[- \frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{\delta}(t)|} + \frac{e^2}{|r_1' - r_2'|} \right] \phi_n(\vec{r}_1') \quad (\text{III.11})$$

sendo

$$\vec{k}' = \frac{\bar{k} \vec{r}_2}{|\vec{r}_2|}$$

Das equações (III.10) e (III.11) segue que a contribuição do termo atrativo para a função de onda espalhada é obtida através de

$$f_{n\bar{n}}^{k\bar{k}} = \frac{me^2}{2\pi\hbar^2} \int d^3r_1' \int d^3r_2' e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}') \cdot \vec{r}_2'} \phi_{n'}^*(r_1') \frac{1}{|\vec{r}_2 - \vec{\delta}(t)|} \phi_n(\vec{r}_1')$$

Devido a ortonormalidade das funções $\phi_n(\vec{r})$, a integração em \vec{r}_1' resulta em $\delta_{n,n'}$, indicando que este termo contribue apenas para o espalhamento elástico. Tal fato indica que esta contribuição para a amplitude de espalhamento pode facilmente ser obtido seguindo-se por exemplo a Ref. (13) e seu resultado é o bem conhecido processo a muito fôtons onde os efeitos do campo de radiação intenso são sentidos através da modulação dos resultados para campo zero, por funções de Bessel.

No que se segue estudaremos a contribuição do termo repulsivo, o qual pode ser escrito em termos de sua transformada de Fourier

$$- \frac{e^2}{|\vec{r}_1' - \vec{r}_2'|} = - \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q v(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1' - \vec{r}_2')} \quad (\text{III.12})$$

onde

$$v(q) = \frac{4\pi e^2}{q^2}$$

resultando para a amplitude de espalhamento a expressão

$$f_{nn'}^{k_0 k} = - \frac{m}{(2\pi)^4 h} \int d^3 q \int d^3 r_1' \int d^3 r_2' v(q) e^{i(\vec{k}_0 - \vec{k}' + q) \cdot \vec{r}_2'} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}_1'} \phi_{n'}^*(\vec{r}_1) \phi_n(\vec{r}_1) \quad (\text{III.13a})$$

que após a integração em \vec{r}_2' e \vec{q} toma a forma

$$f_{nn'}^{k_0 \bar{k}} = \frac{m}{2\pi h^2} v(\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}_0) F_{nn'}(\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}_0) \quad (\text{III.13b})$$

onde

$$F_{nn'}(\vec{q}) = \int d^3 r e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \phi_{n'}(\vec{r}) \phi_n(\vec{r}) \quad (\text{III.14})$$

é o assim chamado Fator de forma.

Nesse ponto devemos salientar que o presente resultado (Eqs. III.13) para a amplitude de espalhamento inelástico difere bastante daquele obtido por Brandi et al. (13) baseado na STA, onde o efeito da presença do campo de laser no espalhamento é essencialmente traduzida pela modulação da amplitude calculada considerando o campo de radiação nulo, por funções de Bessel cujos argumentos dependem de $\vec{A}(t)$, isto é,

$$f_{nn'}^{k_0, k(v)} = - \frac{m\omega}{(2\pi)^2} \sum_{\ell, s, p=-\infty}^{\infty} (-1)^p (i)^{\ell+p} \int_0^{2\pi/\omega} dt e^{i(p-\ell+s)\omega t} J_{\ell}(c_{n'}) J_p(c_{n'})$$

$$\langle \phi_{k(v), n'} | J_s \left(\frac{1}{k} \vec{a} \cdot \vec{p}_1 \right) V_3(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \psi_{k_0, n} \rangle$$

onde v representa o número de fótons emitidos ou absorvidos

no processo, ρ_n , um parâmetro introduzido na função de onda através da STA 1, o qual é equivalente ao parâmetro Stark de Keldysh, e ϕ e ψ são as soluções assintóticas para a função de onda total. Esta diferença se deve essencialmente ao fato que na obtenção do Fator de forma $F_{nn'}$, consideramos explicitamente as modificações dos orbitais atômicos devidas a intensidade do campo de radiação presente.

III.3 - Avaliação do Fator de Forma

Como pode ser observado na Eq.(III.14), o cálculo de $F_{nn'}(\vec{q})$ envolve o conhecimento das funções $\phi_n(\vec{r})$ soluções da Eq.(III.5). Estas soluções foram discutidas no capítulo II onde foi mostrado que, na aproximação mais baixa, isto é, considerando o potencial Coulombiano na forma

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}}$$

podemos escrever

$$\phi_n(r) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (\text{III.15})$$

Substituindo (III.15) em (III.14), obtemos a expressão geral para $F_{nn'}(\vec{q})$ na forma

$$F_{nn'}(q) = \sum_{\ell''} [4\pi(2\ell''+1)]^{1/2} (-i)^{\ell''} \int dr u_{n\ell}^*(r) u_{n\ell}(r) j_{\ell}(qr) \\ \int d\Omega Y_{\ell'' 0}(\theta, \phi) Y_{\ell' m}(\theta, \phi) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

onde $u_{n\ell}(r) = R_{n\ell}(r) \cdot r$, $j_{\ell}(r)$ são as funções esféricas de Bessel, $P_{\ell}(\cos\theta)$ são os polinômios de Legendre e usamos a ex

expansão

$$e^{iqr \cdot \cos \theta} = \sum_{\ell''=0}^{\infty} (2\ell''+1) (-i)^{\ell''} j_{\ell''}(qr) P_{\ell''}(\cos \theta).$$

No caso em estudo, estamos interessados em obter informações a respeito do espalhamento onde os estados ligados envolvidos tem momento angular nulo. Desta maneira, o fator de forma é escrito como

$$F_{nn'}(q) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dr \int_{-1}^1 dx e^{iqr x} u_{n'}(r) u_n(r)$$

onde durante os cálculos temos sempre considerado espalhamentos tais que \vec{k}_0 e \vec{k}' são paralelos.

Fazendo uso da expansão para as funções $u_n(r)$ dada pela Eq.(II.7) e efetuando a integração em x , finalmente obtemos para o fator de forma a expressão:

$$F_{nn'}(\vec{q}) = \sum_{m'} \sum_m C_{m'}^{n'} C_m^n I_{m',m}$$

onde $\{ C_m^n \}$ são os parâmetros variacionais obtidos através da Eq.(II.9) para a energia E_n e que são fortemente dependentes da intensidade do campo de laser, e $I_{m',m}$ é dada por

$$I_{m',m} = \int_0^{\infty} dr \phi_{m'}^b(r) \phi_m^b(r) \frac{\sin qr}{qr}$$

sendo $\{ \phi_m^b(r) \}$ os elementos da base que melhor descreve o estado n do sistema no regime de campo considerado.

Nas tabelas III.1 a III.3, apresentamos os valores de C_m^n para os dez primeiros estados ligados do sistema, considerando uma base tipo hidrogênio com 16 elementos e diferentes valores da intensidade do campo de laser.

Os resultados numéricos obtidos para $F_{1s,2s}$ para intensidades da ordem de 10^6 , regime de campo onde os estados $1s$ e $2s$ são razoavelmente bem descritos por uma base tipo hidrogênio com 16 elementos, são mostrados na Fig. III.a e tabela III.4.

C_p^n	1s	2s	3s	4s	5s	6s	7s	8s	9s	10s
1	0,964	0,223	0,110	0,067	0,046	0,033	0,025	0,019	0,014	0,011
2	-0,256	0,928	0,231	0,111	0,066	0,044	0,031	0,023	0,017	0,013
3	-0,064	-0,287	0,018	0,227	0,107	0,063	0,042	0,029	0,021	0,015
4	-0,032	-0,071	-0,289	0,920	0,219	0,101	0,059	0,038	0,026	0,018
5	-0,020	-0,036	-0,073	-0,280	0,926	0,208	0,094	0,054	0,034	0,023
6	-0,013	-0,022	-0,037	-0,073	-0,264	0,935	0,195	0,086	0,048	0,030
7	-0,010	-0,015	-0,023	-0,036	-0,070	0,244	0,945	0,180	0,077	0,042
8	-0,007	-0,011	-0,015	-0,022	-0,035	-0,066	-0,221	0,955	0,103	0,067
9	-0,005	-0,008	-0,011	-0,015	-0,021	-0,033	-0,061	-0,196	0,065	0,145
10	-0,004	-0,006	-0,008	-0,010	-0,014	-0,019	-0,030	-0,055	-0,170	0,974
11	-0,003	-0,004	-0,005	-0,007	-0,009	-0,012	-0,017	-0,026	-0,048	0,143
12	-0,002	-0,003	-0,004	-0,005	-0,006	-0,008	-0,011	-0,015	-0,022	-0,040
13	-0,001	-0,002	-0,002	-0,003	-0,004	-0,005	-0,006	-0,008	-0,012	-0,018
14	-0,001	-0,001	-0,001	-0,002	-0,002	-0,003	-0,004	-0,005	-0,006	-0,009
15	0,000	0,000	-0,001	-0,001	-0,001	-0,001	-0,002	-0,002	-0,003	-0,004
16	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	-0,001

C_p^n	1s	2s	3s	4s	5s	6s	7s	8s	9s	10s
1	0,777	0,440	0,294	0,214	0,163	0,128	0,102	0,082	0,066	0,053
2	-0,626	0,466	0,410	0,308	0,230	0,174	0,134	0,104	0,081	0,063
3	0,063	-0,756	0,281	0,363	0,300	0,230	0,174	0,132	0,101	0,077
4	-0,015	0,132	-0,799	0,188	0,333	0,291	0,225	0,169	0,126	0,094
5	-0,009	-0,016	0,170	-0,812	0,158	0,323	0,285	0,218	0,160	0,117
6	-0,006	-0,009	-0,018	0,180	-0,816	0,169	0,328	0,280	0,209	0,150
7	-0,005	-0,007	-0,009	-0,017	0,169	-0,813	0,211	0,341	0,275	0,197
8	-0,004	-0,005	-0,007	-0,010	-0,016	0,145	-0,803	0,277	0,357	0,267
9	-0,003	-0,004	-0,005	-0,008	-0,010	-0,015	0,110	-0,782	0,360	0,371
10	-0,002	-0,003	-0,004	-0,006	-0,008	-0,011	-0,016	0,070	-0,748	0,456
11	-0,002	-0,002	-0,003	-0,005	-0,006	-0,009	-0,013	-0,018	0,051	-0,697
12	-0,001	-0,002	-0,003	-0,003	-0,005	-0,007	-0,009	-0,014	-0,021	-0,005
13	-0,001	-0,001	-0,002	-0,003	-0,003	-0,005	-0,007	-0,010	-0,014	-0,023
14	-0,001	-0,001	-0,001	-0,002	-0,002	-0,003	-0,004	-0,006	-0,009	-0,014
15	0,000	0,000	-0,001	-0,001	-0,001	-0,002	-0,002	-0,003	-0,004	-0,007
16	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	-0,001	-0,001

Tabela III.2 - Valores dos parâmetros variacionais para $\lambda = -1,0$.

$\frac{C_p^n}{p}$	1s	2s	3s	4s	5s	6s	7s	8s	9s	10s
1	0,720	-0,459	0,326	0,246	0,192	0,153	0,124	0,100	0,082	0,066
2	-0,680	-0,321	0,384	0,327	0,262	0,207	0,163	0,129	0,102	0,081
3	0,136	0,789	0,081	0,296	0,303	0,257	0,206	0,162	0,126	0,098
4	-0,021	-0,249	-0,799	-0,042	0,241	0,284	0,250	0,201	0,156	0,119
5	-0,006	0,035	0,314	-0,791	-0,089	0,221	0,276	0,244	0,193	0,147
6	-0,005	0,006	-0,044	0,340	-0,788	-0,090	0,226	0,276	0,237	0,183
7	-0,004	0,005	-0,006	-0,047	0,338	-0,795	-0,056	0,250	0,281	0,230
8	-0,003	0,004	-0,005	-0,006	-0,043	0,313	-0,805	0,008	0,286	0,285
9	-0,002	0,003	-0,004	-0,006	-0,007	-0,035	0,271	-0,813	0,099	0,325
10	-0,002	0,003	-0,004	-0,005	-0,006	-0,008	-0,027	0,217	-0,809	0,211
11	-0,001	0,002	-0,003	-0,004	-0,005	-0,007	-0,009	-0,020	0,156	-0,785
12	-0,001	0,002	-0,002	-0,003	-0,004	-0,005	-0,007	-0,010	-0,016	0,094
13	-0,001	0,001	-0,001	-0,002	-0,003	-0,004	-0,005	-0,007	-0,010	-0,015
14	-0,001	0,001	-0,001	-0,001	-0,002	-0,002	-0,003	-0,004	-0,006	-0,010
15	0,000	0,000	0,000	-0,001	-0,001	-0,001	-0,002	-0,002	-0,003	-0,005
16	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	-0,001

Tabela III.3 - Valores dos parâmetros variacionais para $\lambda = 3,0$.

$\frac{E_I}{F_{1s,2s} \lambda}$	1,00	2,25	4,00	6,25	9,00	12,25	16,00	2,500
0,00	0,091	0,034	0,018	0,012	0,008	0,006	0,004	0,003
0,10	0,305	0,130	0,072	0,045	0,031	0,022	0,017	0,011
0,50	0,549	0,324	0,199	0,133	0,095	0,070	0,054	0,035
1,00	0,888	0,534	0,342	0,234	0,168	0,126	0,098	0,064

Tablca III.4 - $F_{1s,2s}$ para diferentes valores da energia do elétron incidente e do campo de radiação.

III.4 - Análise dos Resultados

Na Fig. III.a pode ser observado que o efeito de um campo de laser intenso no espalhamento de elétron por átomo de hidrogênio neutro é o de favorecer o espalhamento inelástico, uma vez que a amplitude deste espalhamento torna-se tanto maior quanto mais intenso for o campo de radiação presente, para um mesmo valor de energia do elétron incidente. Este crescimento da amplitude do espalhamento inelástico com o aumento da intensidade do campo de Laser, pode ser entendido como se segue: Nas tabelas III.1 - III.3 observa-se que, com o aumento de λ , os estados irradiados pelo laser, passam a ser descritos como uma mistura de estados puros fazendo com que o "overlap" entre as funções de onda que representam os estados considerados seja aumentado. Por outro lado, a separação entre os níveis de energia é diminuído com o aumento de λ (Fig.II.c) o que vem a favorecer processos em que a transferência de momento é pequena. Assim, tendo em mente estes dois efeitos, o aumento da amplitude de probabilidade para transição deve necessariamente ser esperado.

Em resumo podemos afirmar que os nossos cálculos contêm um número razoável de aproximações e suposições, no entanto, acreditamos que um formalismo mais rigoroso apenas reforçara as conclusões, aqui apresentadas, para o comportamento físico do sistema.

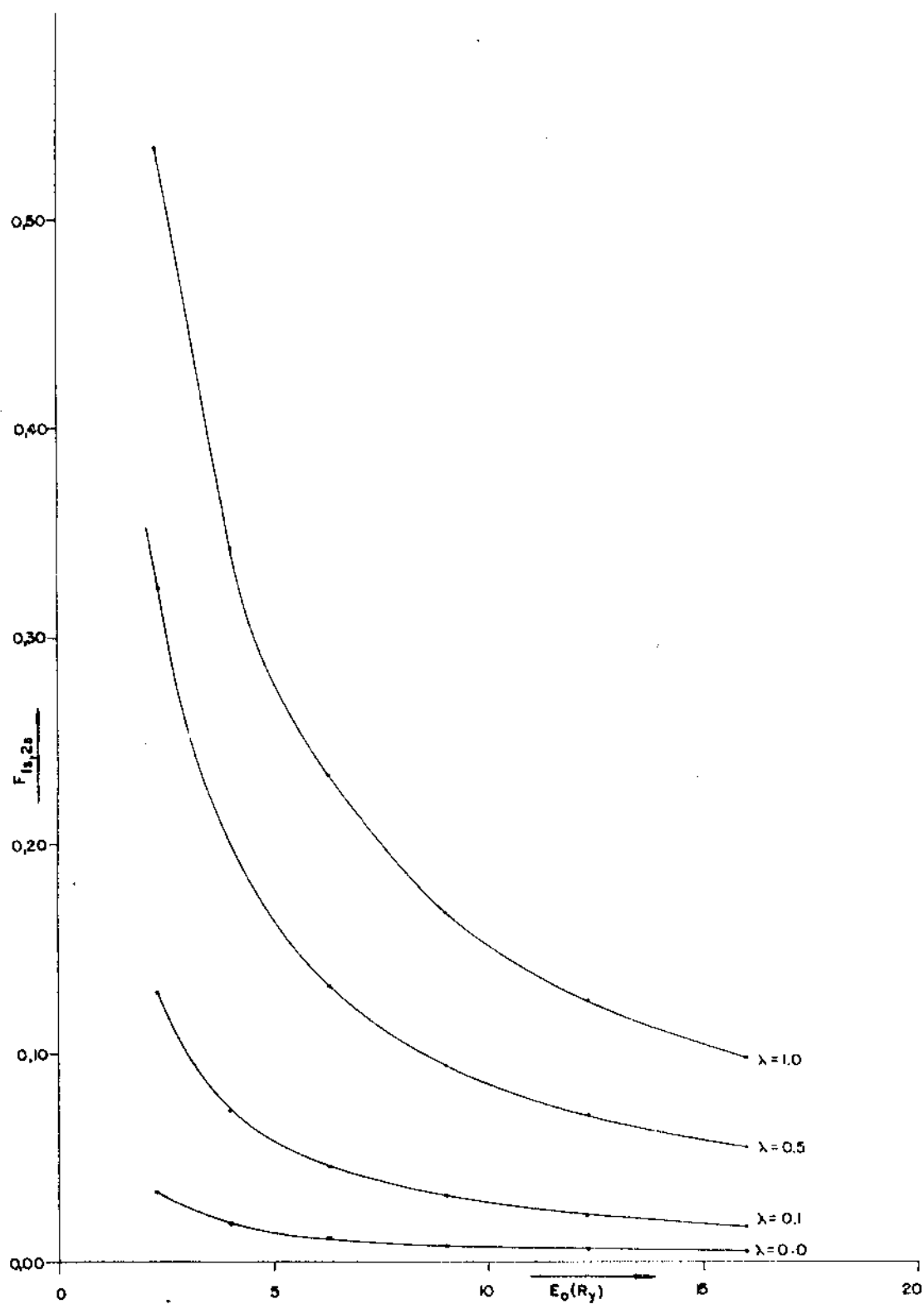


Fig. III.a - Fator de forma $F_{1s,2s}$ como função da energia do elétron incidente.

CAPÍTULO IV

ÁTOMO DE HIDROGÊNIO NA PRESENÇA SI-
MULTÂNEA DE CAMPO MAGNÉTICO E DE
CAMPO DE RADIAÇÃO SUPER INTENSOS

IV.1 - Introdução

O interesse no comportamento de átomos em campos magnéticos foi despertado à quase um século, isto é, desde que Zeeman em 1896 observou o desdobramento das linhas espectrais de uma fonte de luz quando colocada entre os polos de um ímã. Mais recentemente, a descoberta de campos magnéticos super fortes ($H = 10^8 - 10^{11} \text{G}$) em alguns objetos estelares, tais como anãs brancas⁽³⁶⁾ e pulsares⁽³⁷⁾, fez com que o comportamento de sistemas atômicos, neste regime de campo, se tornasse objeto de investigação de um grande número de pesquisadores^(27,38-46). Entretanto, apesar da coexistência de campos magnéticos super fortes e radiação eletromagnética intensa nas frequências de rádio, visível e raio-x ser conhecida a algum tempo (como por exemplo, no caso da Nebulosa do Caranguejo⁽³⁷⁾), os efeitos desta radiação tem sido sistematicamente negligenciados nos trabalhos até hoje apresentados.

Assim, uma vez que dispomos de um formalismo que permite a descrição de sistemas atômicos em presença de campo de laser intenso, é que neste capítulo investigaremos as modificações introduzidas no estado fundamental do átomo de hidrogênio irradiado, quando um campo magnético d.c. forte é adicionado.

Ressalte-se que campos magnéticos de grandes intensidades ($\sim 10^7 \text{G}$) tem sido observados nas experiências de fusão inercial de pelotas de D-T (deutério e Trício) induzidos por laser⁽⁴⁷⁾, o que torna mais amplo o interesse pelo presente trabalho, uma vez que, para o perfeito entendimento deste processo, é de vital importância o conhecimento da foto

ionização do hidrogênio atômico (na forma de deutério ou trítio) quando em presença de tais campos. Por outro lado, quando tratado em conexão com a física de plasma, o problema aqui proposto torna-se bastante atual, visto que o desenvolvimento de laser intensos de grandes comprimentos de onda⁽⁴⁸⁾ nos leva a acreditar que os efeitos da ressonância ciclotônica (frequência do laser igual a frequência de cicloton do elétron) nas condições de intensidades aqui discutidas, possam em breve ser exploradas, uma vez que o uso de tais lasers permitirão a obtenção das condições de ressonância ciclotônica para campos magnéticos hoje obtidos em laboratórios.

No que se segue, usaremos um procedimento semelhante ao empregado na Ref.(6) e iremos supor o átomo de hidrogênio em presença de um campo magnético d.c. forte orientado na direção do eixo z, e simultaneamente irradiado por um campo de laser super intenso propagando-se na direção paralela ao campo magnético.

IV.2 - Formalismo

Nas condições acima descritas e considerando o próton em repouso na origem, a equação de Schrödinger para o átomo de hidrogênio é escrita como:

$$i\hbar\dot{\Psi}(\vec{r}, t) = H\dot{\Psi}(\vec{r}, t) \quad (\text{IV.1a})$$

onde

$$H = \frac{1}{2m} \left[\hat{P} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) + \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right]^2 + V(r) \quad (\text{IV.1b})$$

sendo $\vec{A}(t) = A(\check{x} \cos \omega t + \check{y} \text{sen } \omega t)$ o potencial vetor para um feixe de laser de frequência ω propagando-se na direção paralela ao eixo z , na aproximação de dipolo, $\vec{A}_0(r) = \vec{B} \times \vec{r}/2$ o potencial vetor que descreve o campo magnético \vec{B} no gauge simétrico de Landau e $V(\vec{r}) = -e^2/|\vec{r}|$ o potencial atômico ligante.

Para resolvermos a Eq.(I.1a), buscaremos uma transformação que, de uma maneira semelhante a usada na Ref.6, elimine a dependência no campo de radiação do termo cinético do Hamiltoniano (IV.1b).

Definindo

$$\Psi(\vec{r}, t) = U_2 \phi(\vec{r}, t)$$

onde

$$U_2 = e^{i\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p}/\hbar} e^{i\vec{\gamma}(t) \cdot \vec{r}/\hbar} e^{i\eta(t)/\hbar} \quad (\text{IV.2})$$

$$\vec{\delta}(t) = (-a \text{sen } \omega t, a \text{cos } \omega t, 0)$$

$$\vec{\gamma}(t) = -\frac{1}{2} m\omega_c (\vec{\delta}(t) \times z)$$

$$\eta(t) = -\frac{e^2}{2mc^2} \int^t d\tau \left\{ [\vec{A}(t)]^2 - [m\omega_c (\vec{\delta}(t) \times z)]^2 \right\}$$

sendo $\omega_c = eB/mc$ a frequência de cicloton do elétron livre no campo magnético, $a = |\vec{\delta}(t)| = eA/mc|\omega_c - \omega|$ a amplitude de oscilação do elétron na presença simultânea dos dois campos, é fácil mostrar que a solução da Eq.(IV.1a) é obtida através da equação:

$$i\hbar \dot{\phi}(\vec{r}, t) = \left\{ \frac{1}{2m} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) \right]^2 + V(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) \right\} \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{IV.4})$$

A transformação U_2 é tratada em detalhes no apêndi

ce ao final deste trabalho e deve ser observado que, de uma maneira análoga à da Ref.(6), esta transformação não elimina a dependência no campo de laser do operador Hamiltoniano, apenas a localiza no termo da energia potencial. Por outro lado, a dependência ali introduzida nos permite interpretar U_2 como aquela transformação que leva o sistema para uma representação onde o núcleo aparece oscilando com a frequência do laser e amplitude $|\vec{\delta}(t)|$.

Desta maneira, o problema inicialmente proposto fica resumido a encontrarmos soluções para a Eq.(IV.4), que será o objeto das discussões que se seguem.

Expressando a energia potencial da Eq.(IV.4), como:

$$\begin{aligned}
 V(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) &= - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} \left[1 - \frac{2\vec{r} \cdot \vec{\delta}(r)}{r^2 + a^2} \right]^{-1/2} \\
 &= - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} \left[1 + \frac{\vec{r} \cdot \vec{\delta}(t)}{r^2 + a^2} + \dots \right] \quad (IV.5)
 \end{aligned}$$

e observando que $|\vec{r} \cdot \vec{\delta}(t)/(r^2 + a^2)^n|$ é sempre menor que $(1/2)^n$, podemos numa primeira aproximação, descrever o potencial ligante considerando apenas o primeiro termo da expansão (IV.5), i.e., tomando o potencial na forma

$$V(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) \approx - \frac{e^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} \quad (IV.5a)$$

Deve ser ressaltado que, nas condições em que o campo de radiação pode ser descrita na aproximação de dipolo, tal aproximação é ditada apenas pela forma do potencial ligante mantendo sua capacidade de representar $V(\vec{r} - \vec{\delta}(t))$ independente das intensidades dos campos presentes. Em particular, esta

forma é conveniente para descrever a estrutura atômica nas condições de ressonância ciclotônica ($a \gg 1$ para $\omega \approx \omega_c$).

Assim, considerando o potencial ligante na forma (IV.5a), as soluções procuradas podem ser obtidas usando-se o método variacional de uma maneira similar à da Ref.(6), se o interesse for apenas no estado de mais baixa energia, ou usando o procedimento do capítulo II se estivermos interessados em uma descrição mais completa do sistema.

No que se segue, estudaremos apenas o estado fundamental ($\ell = 0$) e iremos supor que $\phi(\vec{r}, t)$ pode ser escrita na forma:

$$\phi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) e^{iEt/\hbar}$$

o que permite escrever a Eq.(IV.4) na forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{e^2 B^2}{8mc^2} r^2 \sin^2 \theta - \frac{c^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} - E \right] \phi(\vec{r}) = 0 \quad (\text{IV.6})$$

Noticiamos que, apesar do formalismo aqui desenvolvido ser válido para quaisquer intensidades dos campos presentes, limitado apenas pela validade da aproximação de dipolo, concentraremos nossas atenções naqueles campos magnéticos para os quais o raio ciclotônico, $r_c = (\hbar c / eB)^{1/2}$, seja da ordem ou menor que o primeiro raio de Bohr, i.e., naquele regime de campo magnético para o qual métodos não perturbativos devem ser empregados para obter informações do sistema.

Procedendo de uma maneira similar a da Ref.(6) devemos obter a solução de

$$\delta \langle \phi(\vec{r}) | \tilde{H} | \phi(\vec{r}) \rangle = 0 \quad (\text{IV.7})$$

onde

$$\tilde{H} = \frac{1}{2m} (\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r))^2 - \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} \quad (\text{IV.7a})$$

Segundo a literatura, na ausência do campo de radiação a Eq.(IV.7) apresenta duas classes de soluções, através das quais o comportamento do sistema pode ser entendido. A primeira, para campos magnéticos da ordem ou menores que B_c , definido como o campo para o qual o raio ciclotônico para o elétron livre é igual ao primeiro raio de Bohr ($B_c = \hbar c / e a_0^2 = 2.5 \times 10^9 \text{G}$), observa-se que $\phi(\vec{r})$ não difere em muito da função de onda que descreve o átomo puro, indicando que os efeitos de campos com estas intensidades são fracamente sentidos pelo sistema. A segunda classe de soluções trata de campos muito maiores que B_c , isto é, $B \gtrsim 10^{10} \text{G}$. Para estes valores de B , sabe-se que o átomo tem sua distribuição eletrônica alterada, uma vez que no plano perpendicular a \vec{B} , os efeitos do campo magnético dominam sobre aqueles produzidos pelo campo Coulombiano, os quais prevalecem apenas na direção do eixo z . Tal comportamento se manifesta através do aumento da energia de ionização do átomo, provocado pela maior proximidade entre o elétron e o núcleo imposta pelo campo magnético. Assim, neste regime de campo, é entendido que a estrutura eletrônica do átomo é adequadamente descrita supondo que no plano perpendicular a direção do campo, o elétron move-se em círculos nos níveis mais baixo de Landau, isto é, a forma da função de onda para o estado fundamental é a de um produto de um orbital de Landau⁽⁴⁸⁾ com $n = 0$ por uma função $f(z)$ a qual descreve o movimento ao longo do eixo z .

Tendo em mente estes resultados e com o intuito de verificarmos se o comportamento acima descrito é ainda observado quando o átomo está sob a influência de um campo de radiação intenso, é que, no que se segue, dois tipos de funções de partida são usadas no estudo do estado fundamental ao Hamiltoniano da Eq.(7a): (a) Funções de onda tipo hidrogênio. (b) Produto de uma função de onda tipo Landau ($n = 0$) por uma Gaussiana.

IV.3 - Funções de Onda Tipo Hidrogênio

Inicialmente iremos tomar como função de partida para resolvermos a Eq.(IV.7), uma semelhante à aquela do átomo de hidrogênio na ausência de campos, isto é,

$$\phi(\vec{r}) = A e^{-\beta_1 r} \quad (IV.8)$$

sendo A a constante de normalização e β_1 o parâmetro variacional que incorpora informações sobre as intensidades dos campos presentes.

Seguindo com o procedimento usual do método variacional, obtemos que β_1 deve satisfazer a:

$$\frac{\partial}{\partial \beta_1} \left[\frac{\hbar^2 \beta_1^2}{2m} + \frac{1}{4} m \omega_c^2 \beta_1^{-2} - 4\beta_1^3 e^2 \int_0^\infty \frac{r^2}{(r^2 + a^2)^{1/2}} e^{-2\beta_1 r} dr \right] = 0$$

o que nos leva a equação transcendental

$$\eta_1 = \frac{1}{2} \frac{\mu}{\eta_1} = 3 I_1\left(\eta_1, \frac{\alpha}{\mu}\right) - I_2\left(\eta_1, \frac{\alpha}{\mu}\right) \quad (IV.9)$$

sendo

$$I_1(n, \frac{\alpha}{\mu^2}) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} \frac{t^2}{[t^2 + (2n\alpha/\mu^2)]^{3/2}} \quad (\text{IV.10a})$$

$$I_2(n, \frac{\alpha}{\mu^2}) = \int_0^{\infty} dt e^{-t} \frac{t^3}{[t^2 + (2n\alpha/\mu^2)]^{3/2}} \quad (\text{IV-10b})$$

e onde introduzimos o parâmetro $\alpha = \Lambda/\Lambda^*$ ($\Lambda^* = \hbar c/ea_0$), como a medida da intensidade do campo de radiação, $n_1 = \beta_1 a_0$, como medida do parâmetro variacional em unidade atômicas e $\mu^2 = B/B_C$ para expressarmos a intensidade do campo magnético. Em termos destes parâmetros, a intensidade do laser é dada por $I = 4,15 \times 10^{-15} \omega^2 \alpha^2$ (w cm^{-2}) que no caso do laser de CO_2 ($\omega = 1,9 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$) é dada por $I = 1,5 \times 10^{12} \alpha^2$ (w cm^{-2}).

Definindo a energia de ionização ϵ_I como a diferença entre a energia do estado fundamental e aquela do elétron a uma distância infinita do núcleo, mas ainda em presença do campo magnético, temos:

$$\epsilon_I(\bar{n}_1, \alpha, \mu^2) = \mu^2 - \bar{n}_1^2 - \frac{1}{2} \frac{\mu^4}{\bar{n}_1} + \frac{8\alpha^2}{-3^4} I_1(\bar{n}_1, \frac{\alpha}{\mu^2}) \quad (\text{IV.11})$$

onde \bar{n}_1 é a solução da Eq.(IV.9) para o α e μ considerados, $I_1(\bar{n}_1, \alpha/\mu^2)$ dado pela Eq.(IV.10a) e ϵ_I é escrita em unidades de $e^2/2a_0$.

Nas tabelas IV.1 e IV.2 apresentamos os resultados obtidos numericamente para n_1 e ϵ_I para diversos valores de intensidades dos campos magnético e de laser, considerando $\omega_C \gg \omega$, condição esta que para os valores de B aqui considerados ($B = 10^8$ a 10^{10} G), é facilmente satisfeita para os

$\frac{n_i}{\alpha} \mu^2$	0.01	0.04	0.1	0.40	1.00	2.00	4.00
0.05	0.240	0.500	0.700	0.940	1.200	1.540	2.000
0.1	0.170	0.370	0.555	0.910	1.190	1.570	1.990
0.2	0.120	0.270	0.450	0.810	1.140	1.490	1.970
0.4	0.090	0.210	0.340	0.690	1.060	1.430	1.940
0.5	0.090	0.190	0.320	0.660	1.020	1.405	1.920
0.6	0.084	0.190	0.310	0.640	1.000	1.385	1.900
0.8	0.084	0.180	0.290	0.610	0.970	1.350	1.880
1.0	0.084	0.175	0.280	0.590	0.940	1.330	1.850
1.6	0.084	0.170	0.270	0.560	0.895	1.270	1.800
2.0	0.084	0.168	0.270	0.550	0.880	1.245	1.780
2.5	0.084	0.168	0.265	0.540	0.870	1.240	1.760
3.5	0.084	0.168	0.265	0.535	0.855	1.220	1.730
4.0	0.084	0.168	0.265	0.535	0.855	1.210	1.720
6.0	0.084	0.168	0.265	0.535	0.845	1.200	1.700

Tab. IV.1 - Parâmetro variacional obtido através da Eq. IV.9.

$\frac{\epsilon_I}{\mu^2} \backslash \alpha$	0,05	0,10	0,40	0,60	0,80	1,00	1,80	2,00	2,50	3,00	4,00
0,01'	0,217	0,132	0,041	0,028	0,020	0,015	0,007	0,006	0,004	0,003	0,001
0,04	0,520	0,362	0,141	0,099	0,074	0,058	0,027	0,023	0,015	0,010	0,003
0,10	0,793	0,620	0,291	0,214	0,166	0,133	0,064	0,054	0,036	0,024	0,008
0,40	1,240	1,134	0,733	0,481	0,481	0,401	0,211	0,182	0,124	0,082	0,025
1,00	1,580	1,522	1,165	0,985	0,481	0,723	0,407	0,352	0,241	0,157	0,038
2,00	1,844	1,805	1,502	1,316	1,152	1,009	0,586	0,507	0,342	0,211	0,016
4,00	1,986	1,959	1,711	1,531	1,361	1,202	0,686	0,582	0,0354	0,165	-

Tab. IV.2 - Energia de ionização usando função de partida tipo hidrogênio.

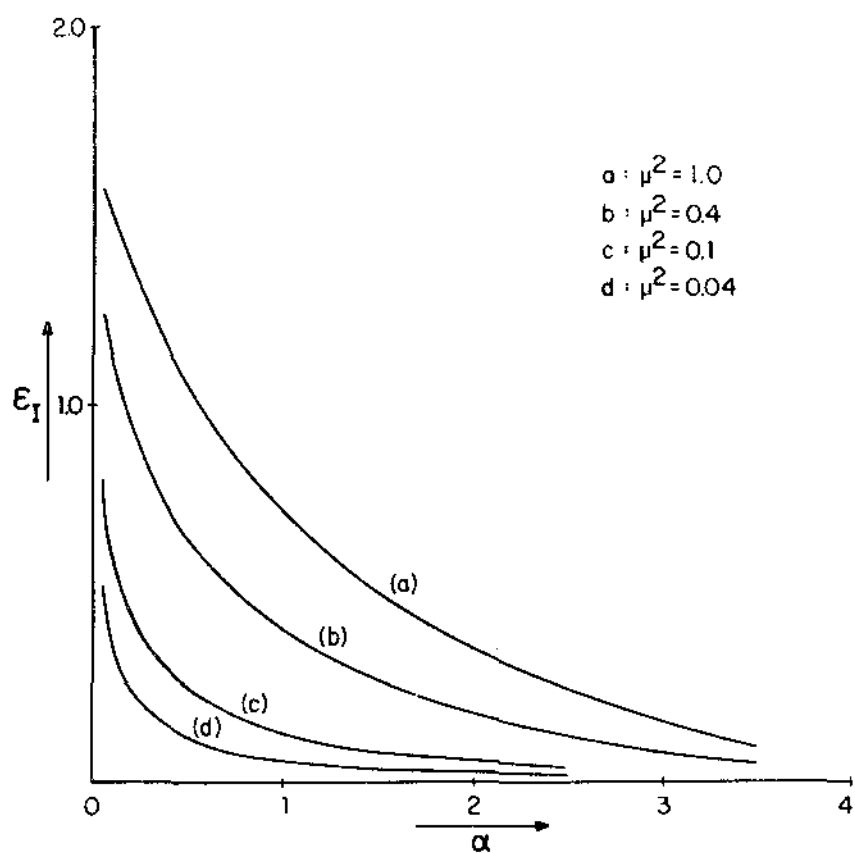


Fig. IV.a - Energia de ionização como função da intensidade do campo de laser.

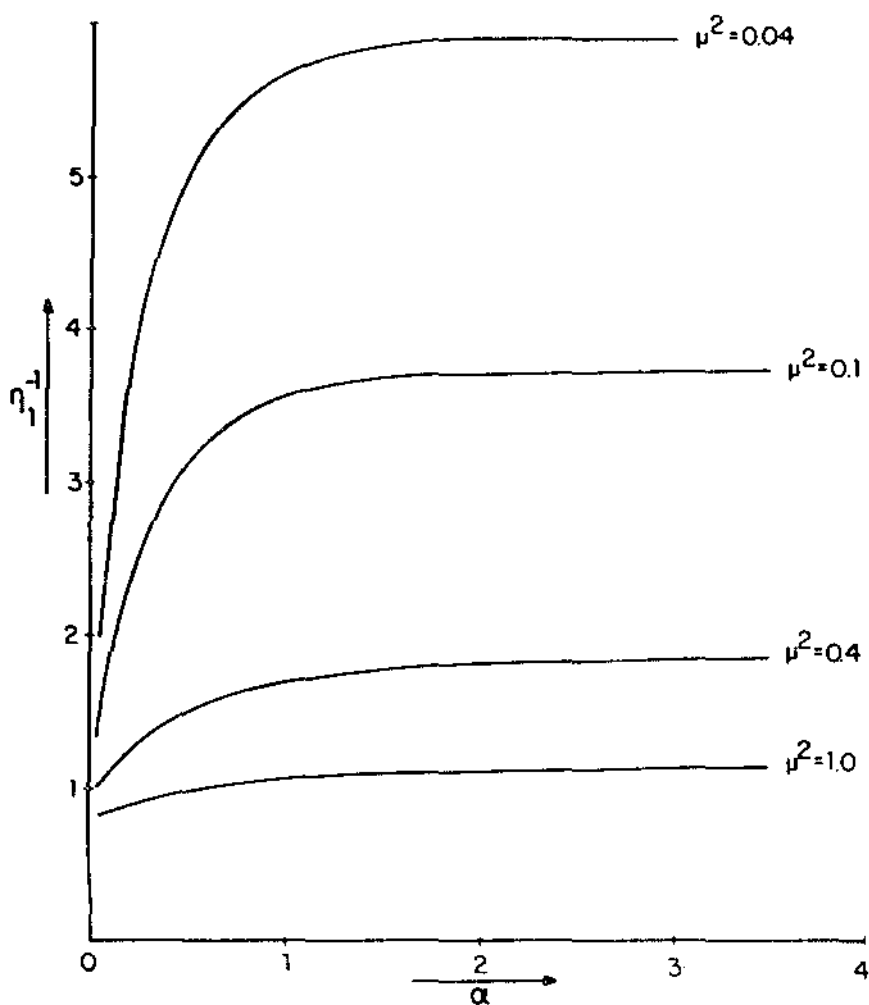


Fig. IV.b - Comportamento do parâmetro variacional η_1^{-1} com a intensidade do campo de laser.

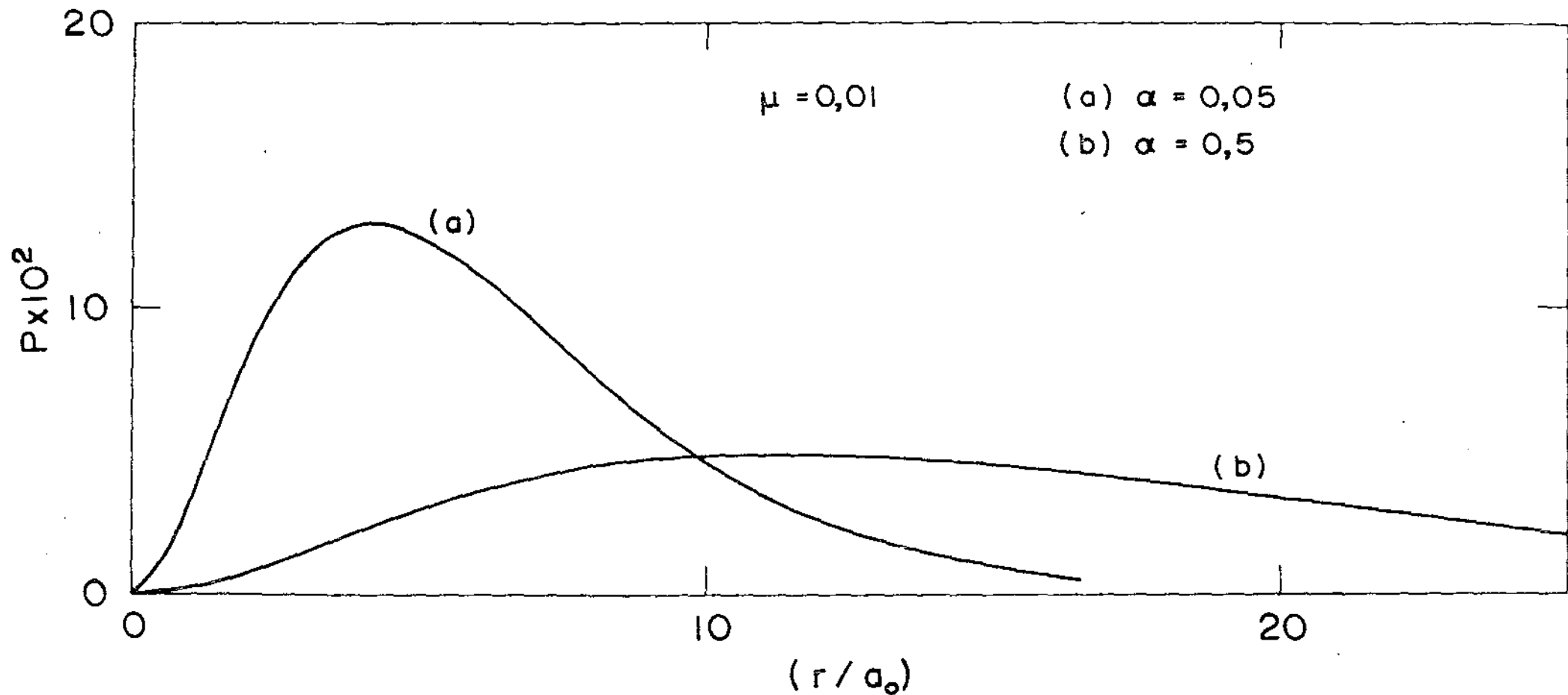


Fig. IV.c - Distribuição eletrônica do estado fundamental, considerando $B = 10^{-2} B_c$ e diferentes intensidades do campo de laser.

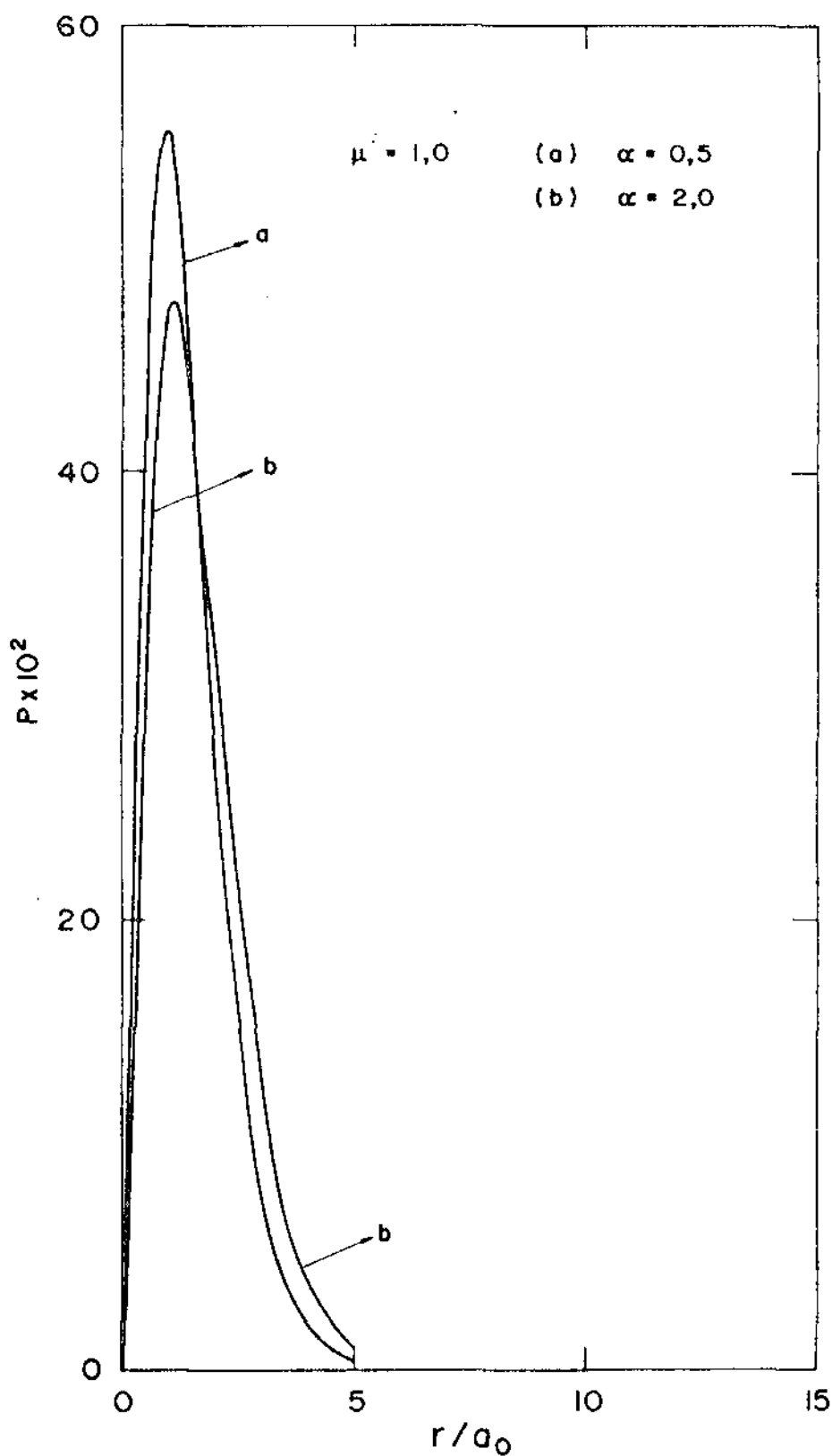


Fig. IV.d - Distribuição eletrônica do estado fundamental considerando $B = B_c$ e diferentes intensidades do campo de laser.

lasers de alta intensidade em uso.

Nas Figs. IVa e IVb mostramos graficamente a dependência na intensidade do campo de laser para diversos valores do campo magnético, da energia de ionização e do inverso do parâmetro variacional, sendo este último interpretado como a dimensão do sistema no estado fundamental no regime de campos considerado.

As Figs. IVc e IVd mostram o comportamento da distribuição eletrônica para alguns valores de intensidade do campo de laser considerando-se campos magnéticos de $10^{-2}B_c$ e B_c respectivamente.

Segue do comportamento de η_1 e ϵ_1 mostrado nas Figs. IVa e IVb que também em presença de campos magnéticos super fortes, o efeito do campo de radiação é essencialmente o de enfraquecer a ligação elétron-núcleo fazendo com que, para grandes intensidade, o átomo tenha a tendência de se tornar ionizado. Por outro lado, podemos observar ainda nestas figuras, que a taxa de variação de η_1^{-1} e ϵ_1 com a intensidade do campo de laser é fortemente dependente do campo magnético (μ^2).

É observado na Fig. IVa que para uma dada intensidade do campo de radiação, η_1^{-1} decresce com o aumento do campo magnético e, em particular, para $\mu^2 = 1$ ($B = 10^9$ G), η_1^{-1} é praticamente independente do campo de laser para as intensidades consideradas. Este comportamento pode ser entendido fisicamente como o resultado da tendência do elétron em permanecer perto do núcleo para grandes valores de B o que pode ser visto de uma forma ainda mais clara observando-se o comportamentos dos máximos das distribuição e-

letrônicas, mostradas nas Figs. IV.c e IV.d, com a intensidade do campo magnético.

IV.4 - Funções de Onda Tipo Landau

Utilizando o mesmo procedimento da seção anterior, resolveremos aqui a Eq.(IV.7) escolhendo como função de partida o produto de uma função que descreve um elétron livre em um campo magnético d.c. paralelo ao eixo z, por uma Gaussiana na variável z. Tal escolha é similar à aquela feita por Yafet et al.⁽³⁸⁾ quando do estudo de impurezas rasas em semicondutores de alta constante dielétrica e pequena massa efetiva, na presença de campos magnéticos fortes.

Assim a função de onda que denominamos tipo Landau é dada por:

$$\phi(\rho, z) = N e^{-\rho^2/4r_c^2} e^{-\beta_2^2 z^2} \quad (\text{IV.12})$$

onde $\rho^2 = x^2 + y^2$, N é a constante de normalização e β_2 o parâmetro variacional dependente das intensidades dos campos presentes.

Noticiamos que a escolha da função IV.12 se deve essencialmente a possível semelhança entre o problema aqui estudado e aquele no qual apenas o efeito do campo magnético forte é considerado.

De uma maneira análoga à aquela da seção IV.3, obtemos da Eq.(IV.7) que o parâmetro variacional $n_2 = \beta_2 a_0$ é determinado pela solução de:

$$\frac{\partial}{\partial \beta_2} \left[\frac{\hbar^2 \beta_2^2}{2m} + \frac{1}{2} \hbar \omega_c - \frac{e^2 \beta_2}{r_c^2} \left(\frac{8}{\pi}\right)^{1/2} \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^\infty dz \frac{e^{-\rho^2/2r_c} e^{-2\beta_2^2 z^2}}{(\rho^2 + z^2 + a^2)^{1/2}} \right] = 0$$

o que nos leva a obter para η_2 a equação transcendental

$$\eta_2 = \left(\frac{8}{\pi}\right)^{1/2} \mu^2 \left[J_1(\eta_2, \alpha, \mu^2) - 4\eta_2^2 J_2(\eta_2, \alpha, \mu^2) \right] \quad (IV.13)$$

onde

$$J_1(\eta_2, \alpha, \mu^2) = \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^\infty dz \frac{e^{-\mu^2 \rho^2/2} e^{-2\eta_2^2 z^2}}{(\rho^2 + z^2 + \alpha^2/\mu^4)^{1/2}} \quad (IV.13a)$$

$$J_2(\eta_2, \alpha, \mu^2) = \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^\infty z^2 dz \frac{e^{-\mu^2 \rho^2/2} e^{-2\eta_2^2 z^2}}{(\rho^2 + z^2 + \alpha^2/\mu^4)^{1/2}} \quad (IV.13b)$$

Por sua vez, a energia de ionização ϵ_I , definida como na seção anterior, é dada por:

$$\epsilon_I(\bar{\eta}_2, \alpha, \mu^2) = 2\bar{\eta}_2 \mu^2 J_1(\bar{\eta}_2, \alpha, \mu^2) - \bar{\eta}_2^2 \quad (IV.14)$$

onde $\bar{\eta}_2$ é a solução de IV.13 para as intensidades de campo dadas, $J_1(\bar{\eta}_2, \alpha, \mu^2)$ é a integral IV.13a e ϵ_I é dada em unidades atômicas.

Nas tabelas IV.3 e IV.4, apresentamos os resultados obtidos numericamente para $\bar{\eta}_2$ e ϵ_I para vários valores de intensidades dos campos magnéticos e de laser. As Figs. IV.e e IV.f, mostram o comportamento destes dois parâmetros com a intensidade do campo de laser para diversos valores do campo magnético. Outra vez, fica ali evidenciado o mesmo tipo de efeito competitivo observado na seção IV.3, isto é, o aumento da intensidade do campo de laser tende a enfraque-

$\mu^2 \backslash \alpha$	0,1	0,3	0,5	0,7	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0	4,5	5,0	5,5	6,0	6,5	7,0	7,5	8,0	8,5	9,0	9,5	10,0
0,5	0,387	0,346	0,308	0,276	0,238	0,194	0,165	0,143	0,127	0,114	0,104	0,095	0,088	0,082	0,077	0,072	0,068	0,065	0,061	0,059	0,056	0,054	0,052
1,0	0,480	0,451	0,417	0,386	0,345	0,294	0,255	0,226	0,203	0,185	0,170	0,157	0,146	0,137	0,129	0,122	0,115	0,110	0,105	0,100	0,096	0,092	0,089
2,0	0,589	0,571	0,545	0,517	0,478	0,423	0,379	0,343	0,314	0,289	0,268	0,250	0,235	0,221	0,209	0,199	0,189	0,181	0,173	0,166	0,159	0,153	0,148
3,0	0,660	0,647	0,620	0,603	0,567	0,513	0,467	0,428	0,395	0,367	0,343	0,322	0,304	0,288	0,273	0,260	0,248	0,238	0,228	0,220	0,212	0,204	0,197
4,0	0,715	0,705	0,687	0,667	0,634	0,582	0,536	0,496	0,462	0,432	0,405	0,382	0,362	0,344	0,327	0,317	0,299	0,287	0,276	0,266	0,256	0,248	0,240
5,0	0,759	0,751	0,736	0,718	0,689	0,639	0,593	0,553	0,517	0,486	0,459	0,434	0,412	0,393	0,375	0,359	0,344	0,331	0,318	0,307	0,297	0,287	0,278
6,0	0,797	0,790	0,776	0,762	0,734	0,687	0,642	0,602	0,566	0,534	0,506	0,480	0,457	0,436	0,417	0,400	0,384	0,370	0,357	0,344	0,333	0,323	0,313
7,0	0,831	0,825	0,814	0,799	0,774	0,729	0,685	0,645	0,609	0,577	0,548	0,521	0,497	0,476	0,456	0,438	0,421	0,406	0,392	0,374	0,367	0,355	0,345
8,0	0,860	0,855	0,845	0,832	0,809	0,766	0,723	0,682	0,648	0,615	0,585	0,554	0,512	0,491	0,473	0,449	0,439	0,439	0,424	0,411	0,398	0,386	0,375
9,0	0,887	0,883	0,874	0,862	0,840	0,799	0,748	0,719	0,683	0,650	0,620	0,593	0,568	0,545	0,529	0,505	0,487	0,470	0,449	0,440	0,427	0,414	0,403
10,0	0,912	0,908	0,899	0,888	0,868	0,829	0,789	0,751	0,716	0,683	0,653	0,625	0,599	0,576	0,554	0,535	0,516	0,499	0,483	0,468	0,464	0,441	0,429

Tab. IV.3 - Parâmetro variacional obtido através da Eq. IV.13.

α	0,10	0,50	1,00	1,50	2,00	3,00	4,00	5,00	6,00	8,00	10,00
$\frac{\epsilon I}{\rho^2}$	0,10	0,462	0,260	0,159	0,113	0,087	0,060	0,045	0,031	0,023	0,010
1,00	1,329	1,139	0,914	0,750	0,632	0,475	0,379	0,315	0,269	0,209	0,171
4,00	2,309	2,207	2,005	1,804	1,628	1,349	1,144	0,990	0,871	0,701	0,586
5,00	2,515	2,425	2,236	2,058	1,859	1,565	1,342	1,171	1,067	0,842	0,708
10,00	3,256	3,201	3,063	2,891	2,717	2,397	2,129	1,907	1,724	1,441	1,236
20,00	4,174	4,143	4,055	3,950	3,785	3,484	3,200	2,945	2,721	2,552	2,065
30,00	4,803	4,781	4,717	4,620	4,502	4,234	3,962	3,703	3,466	3,058	2,727

Tab. IV.4 - Energia de ionização usando função tentativa tipo Landau

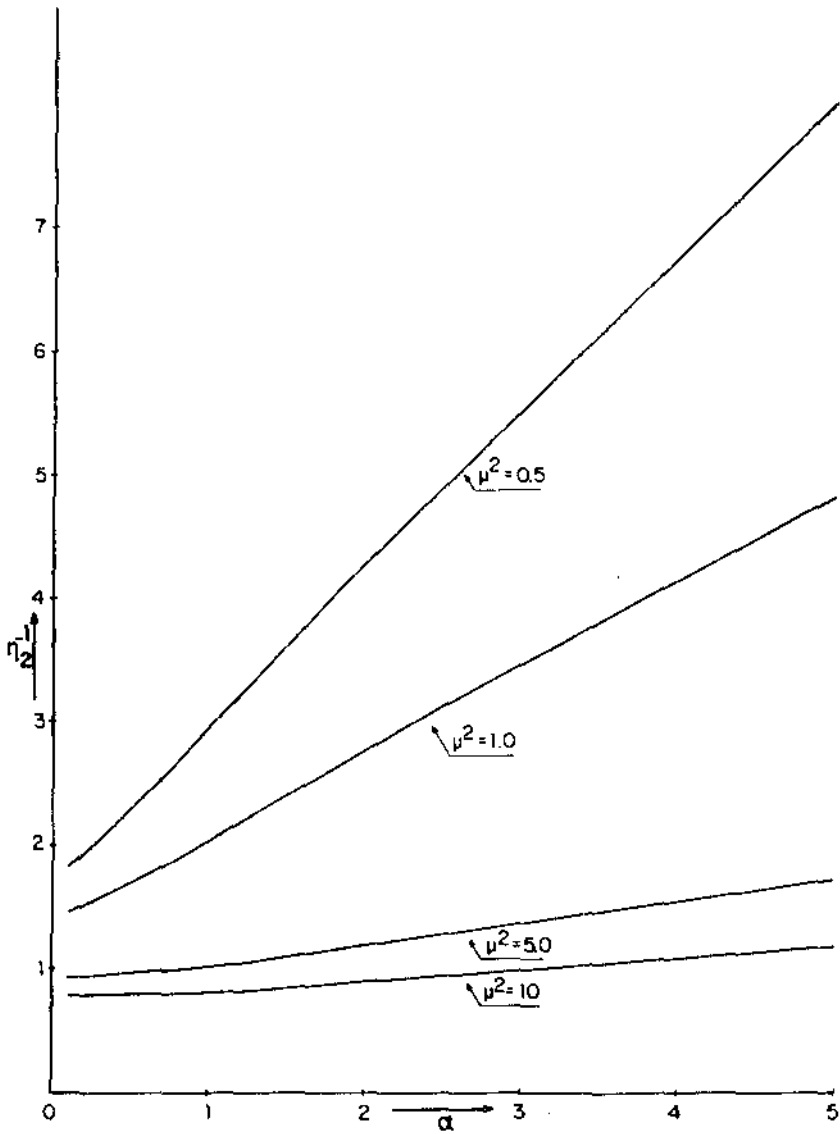


Fig. IV.e - Comportamento do parâmetro variacional η_2 com a intensidade do campo de laser.

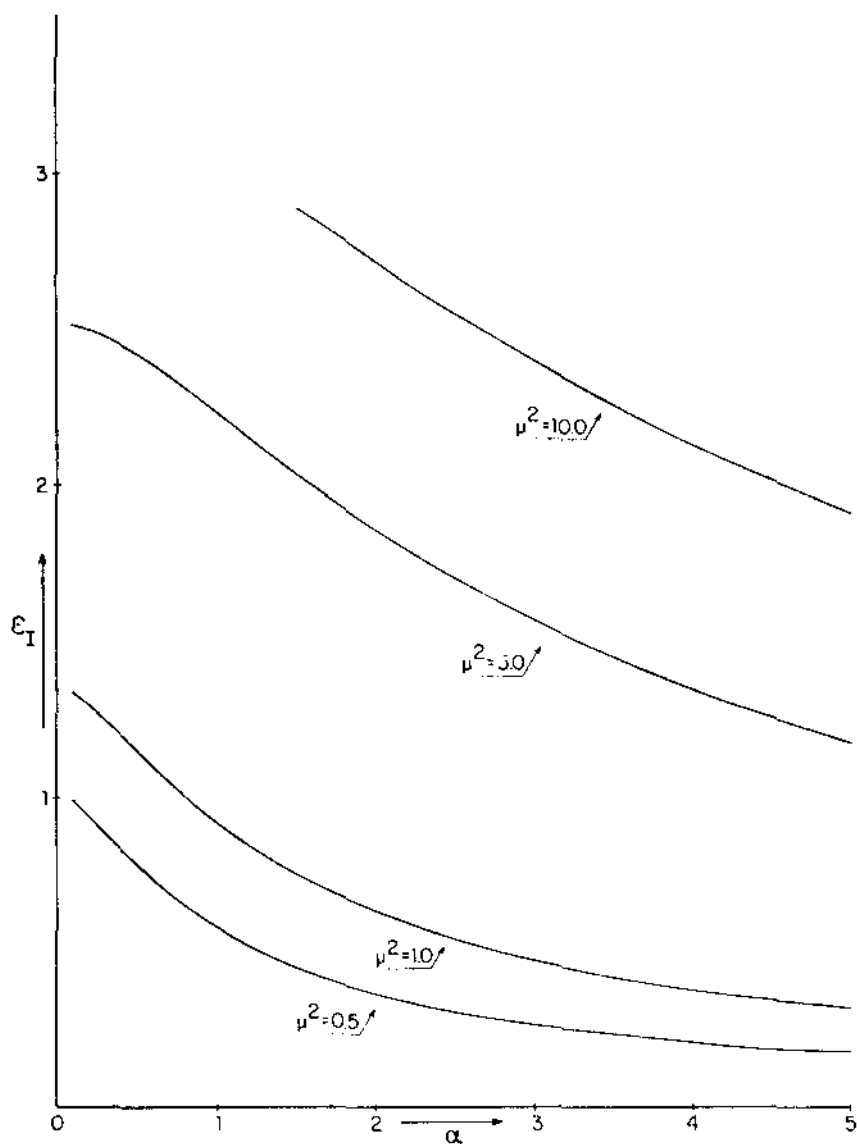


Fig. IV.f - Energia de ionização como função da intensidade do campo de laser.

cer a ligação do elétron com o núcleo enquanto que o aumento ao campo magnético tende a torná-la mais forte.

IV.5 - Estudo Comparativo das Funções de Partida e Conclusões

Como mencionamos anteriormente, a escolha de diferentes funções tentativas para resolver a Eq.(IV.7) foi determinada essencialmente pelos resultados conhecidos para o problema do átomo de hidrogênio em presença apenas do campo magnético d.c.. Basicamente, estávamos interessados em investigar se o mesmo tipo de descrição utilizada naquele problema poderia ser aplicado a situação onde um campo de radiação intenso é adicionado. Os nossos resultados mostram que, para grandes valores de B, isto é, $\mu^2 > 4.0$ ($B > 10^{10}$ G) as funções de onda tipo Landau nos levam a melhores valores para a energia de ionização que aquelas tipo hidrogênio mostrando ser esta a melhor descrição para o sistema dentro do critério estabelecido pelo princípio variacional. Tal resultado pode facilmente ser explicado observando-se que para $\mu^2 \gg 1$ o potencial ligante dependente dos campos, $-e^2/(r^2 + a_0^2 \alpha^2 / \mu^4)^{1/2}$ praticamente se reduz ao potencial Coulombiano puro, $-e^2/|\vec{r}|$, que por sua vez é dominado pelo termo cinético da Eq.IV.7a. No entanto, a expectativa de encontrarmos como a melhor descrição do sistema as funções de onda tipo hidrogênio se $\mu^2 < 4$ não foi confirmada. Como pode ser concluído da observação cuidadosa dos resultados para energia de ionização, mostrados nas Figs. IV.a e IV.f, a descrição do problema em estudo é um pouco mais complexa. Por exemplo, para $\mu^2 = 1$ ($B = 2,5 \times 10^9$ G)

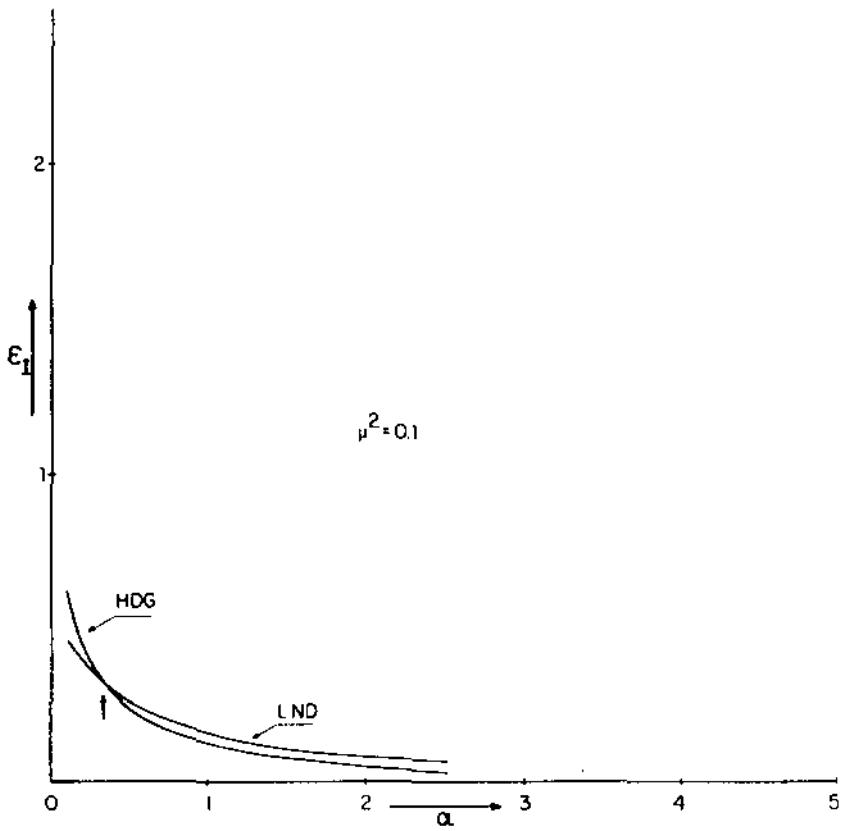


Fig. IV.g - Dependência da energia de ionização como função da intensidade do campo de laser obtida usando-se funções de partida tipo hidrogênio (HDG) e tipo Landau (LND).

a energia de ionização obtida usando funções de onda tipo hi drogênio torna-se menor que as obtidas com as funções tipo Landau para $\alpha \geq 0,38$, no entanto para $\mu^2 = 0.1$ ($B = 2.5 \times 10^8 \text{G}$), esta última nos dá melhores resultados para $\alpha > 0.34$, como é mostrado na Fig. IV.g. Fisicamente podemos entender este resultado, observando o comportamento do potencial ligante dependente das intensidades dos campos. Deve ser observado que, para um valor fixo da intensidade do campo de radiação (valor fixo de α), a diminuição do campo magnético (mantendo-se ainda a relação $\omega_c \gg \omega$) faz com que o campo de radiação atue mais efetivamente sobre o sistema, o que é traduzido pelo enfraquecimento do potencial

$$- \frac{e^2}{\left(r^2 + \frac{a_0^2 \alpha^2}{\mu^4}\right)^{1/2}} \quad (\text{IV.15})$$

Em outras palavras, podemos observar em (IV.15) que para um α fixo, uma diminuição do valor de μ^2 enfraquece o potencial ligante, podendo alcançar a situação onde este termo é desprezível quando comparado com o termo da energia cinética transversal o qual é proporcional a μ^4 . Nestas circunstâncias não é surpreendente que as funções de onda tipo Landau seja mais adequadas para descrever o sistema que aquelas tipo hidrogênio. Em resumo, podemos afirmar que exceto para os casos em que $\alpha \ll 1$ e $\mu^2 \ll 1$, as funções de onda tipo Landau são aquelas que nos dão uma melhor representação para o estado fundamental de um átomo de hidrogênio em presença simultânea de um feixe de laser e de um campo magnético d.c. forte.

Finalmente devemos mencionar que para $(\frac{\alpha}{\mu^2}) \gg 1$, a energia de ionização é essencialmente proporcional a $(\alpha/\mu^2)^{-1}$. Tal comportamento é facilmente observado na Fig. IV. na qual as curvas correspondentes a $\mu^2 = 0,5$ e $1,0$ apresentam esta dependência para $\alpha \gtrsim 1,0$. Deve ser notado que este fato é similar à aquele observado para o átomo de hidrogênio em presença apenas do campo de laser⁽⁶⁾, e retrata o enfraquecimento da energia de ligação do elétron com o aumento da intensidade do campo de radiação. Formalmente, este comportamento pode ser entendido observando-se que, para $\alpha/\mu^2 \gg 1$, o potencial ligante pode ser aproximado por

$$V = - \frac{e^2}{a_0(\alpha/\mu^2)} \left[1 - \frac{1}{2} \frac{\mu^4}{\alpha^2} \frac{r^2}{a_0^2} \right] \quad (\text{IV.16})$$

A Eq.(IV.16) mostra que, nas condições para as quais $(\alpha/\mu^2) \gg 1$, não só a energia de ionização do átomo de hidrogênio tende a ser proporcional a $(\alpha/\mu^2)^{-1}$, mas também os espaçamentos entre os níveis de energia tendem a se tornar constante e igual a $\hbar\Omega = \hbar(e^2\mu^6/ma_0^3\alpha^3)^{1/2}$. Este fato também estabelece que transições eletrônica com energias tipicamente da ordem de $\hbar\Omega$ poderão ocorrer nestes sistemas. Uma estimativa para Ω , em um caso de interesse, pode ser feita considerando um pulsar típico, como o PSR 1919, para o qual temos os seguintes valores para os parâmetros físicos⁽³⁷⁾: $\mu^2 = 1,0$, potência emitida com $\omega = 10^{10} \text{ seg}^{-1}$ da ordem de 10^{21} W , resultando uma intensidade de 10^9 W/cm o que corresponde a $\alpha \approx 50$. Substituindo estes valores obtemos que $\Omega = 1,2 \times 10^{14} \text{ seg}^{-1}$. Este resultado sugere que, devido a processos de recombinação

na atmosfera de pulsares, podemos esperar radiação na frequência do infravermelho proveniente destes objetos. Deve ser notado que o mecanismo aqui proposto para emissão de infravermelho de pulsares é consideravelmente diferente daquele recentemente proposto por Usov e co-autores⁽⁵⁰⁾ no qual a fonte para emissão de infravermelho é a mistura de ondas de plasma na atmosfera dos pulsares.

CAPÍTULO V

ÍON MOLECULAR H_2^+ NA PRESENÇA SIMUL-
TÂNEA DE UM CAMPO MAGNÉTICO d.c.
FORTE E DE CAMPO DE LASER INTENSO

V.1 - Introdução

Provavelmente devido a sua aplicação em várias áreas da física, o problema de átomos de hidrogênio em presença de campos magnéticos intensos tem sido exaustivamente estudado, como pode ser visto na lista de publicações apresentada na resenha escrita por Garstang⁽⁵¹⁾. É também considerável o número de autores que tratam o problema de átomos na presença de campos de laser intensos não ressonantes^(1,10). No entanto, observa-se na literatura que, nos últimos anos, a penas um número relativamente pequeno de pesquisadores dedicou-se ao estudo da molécula de hidrogênio e do íon molecular H_2^+ . Em particular, as investigações sobre o comportamento do H_2^+ tem sido restrita a influência de um campo magnético d.c. forte^(52,55) ou de um campo de laser ressonante intenso⁽⁵⁶⁻⁵⁸⁾. Só recentemente, Lima e Miranda⁽⁵⁹⁾, usando combinação linear de orbitais eletrônicos obtidos através do método descrito na Ref.(6), estudaram este íon molecular em presença de campos eletromagnéticos super intensos e não ressonantes, obtendo resultados que são válidos para um grande domínio de intensidade.

Neste capítulo propomo-nos a investigar, usando a mesma técnica da Ref.(59), a influência da presença simultânea de um campo magnético d.c. forte e de um campo de laser não ressonante sobre o íon molecular H_2^+ , explorando principalmente os efeitos destes campos na energia de dissociação e na estabilidade do íon.

V.2 - Formulação do Problema e Geometria

Visto que o efeito do laser sobre o núcleo \tilde{c} pelo menos mil vezes menor que aquele sentido pelo elétron em situação equivalente, consideraremos que apenas este último interage com o campo de radiação o qual supomos ser descrito como uma onda eletromagnético plana de frequência ω na aproximação de dipolo.

Desta maneira, representando por r_A e r_B as distâncias entre o elétron e os núcleos A e B respectivamente, podemos escrever o Hamiltoniano para o íon molecular H_2^+ , na aproximação onde as coordenadas dos núcleos são consideradas fixas, (aproximação adiabática), como:

$$H_0 = \frac{1}{2m} \left[p + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) + \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right]^2 - \frac{e^2}{r_A} - \frac{e^2}{r_B} + \frac{e^2}{R}$$

sendo $\vec{A}_0(r) = \frac{B}{2}(\hat{z} \times \vec{r})$ o potencial vetor que descreve o campo magnético de intensidade B na direção paralela ao eixo z, $\vec{A}(t) = A(\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t)$ o potencial vetor para um feixe de laser circularmente polarizado propagando-se na direção paralela ao campo magnético e R a distância entre os núcleos. Noticiamos que o termo Zeeman foi desprezado uma vez que, devido ao regime de campo magnético aqui considerado, podemos supor que os spins estão todos alinhados anti-paralelamente ao campo d.c..

No capítulo anterior foi observado que, exceto para $\mu^2 \ll 1$ e $\alpha \ll 1$, a função de onda que descreve o átomo de hidrogênio na presença de campos magnéticos e de radiação super intensos, é da forma:

$$\phi(\vec{r}) = A e^{-\rho^2/4r_c^2} e^{-\beta^2 r^2} \quad (V.1)$$

Tal resultado indica que para os valores de intensidades de campos para os quais métodos não perturbativos são absolutamente necessários, o movimento transversal do elétron é regido unicamente pelo campo magnético enquanto que o potencial Coulombiano influencia apenas o movimento uni-dimensional na direção do eixo z. Conseqüentemente, a distribuição eletrônica daí resultante sugere para o problema aqui proposto, a geometria mostrada na Fig. V.a. Deve ser ressaltado que para $\mu^2 < 0,4$ e $\alpha = 0$, esta descrição se torna inadequada⁽⁵¹⁾ mas, no caso aqui estudado, os limites são aqueles para os quais a função (V.1) se torna a melhor representação para o problema do átomo estudado no capítulo anterior.

Com as considerações acima, o problema de encontrar a energia de dissociação de H_2^+ se resume a encontrar a energia do estado fundamental associada a equação

$$i\hbar \dot{\Psi}(\vec{r}, t) = H_0 \Psi(\vec{r}, t) \quad (V.2)$$

a qual na representação usada no capítulo anterior, isto é, escrevendo $\Psi(\vec{r}, t) = U_2 \phi(\vec{r}, t)$, se reduz a obter a solução de mais baixa energia para:

$$i\hbar \dot{\phi}(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} (\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r))^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_A - \vec{\delta}(t)|} - \frac{e^2}{|\vec{r}_B - \vec{\delta}(t)|} + \frac{e^2}{R} \right] \phi(\vec{r}, t)$$

onde U_2 é transformação dada pela Eq.(IV.13).

Os termos do potencial ligante podem ser tratados dentro da mesma aproximação utilizada no capítulo anterior,

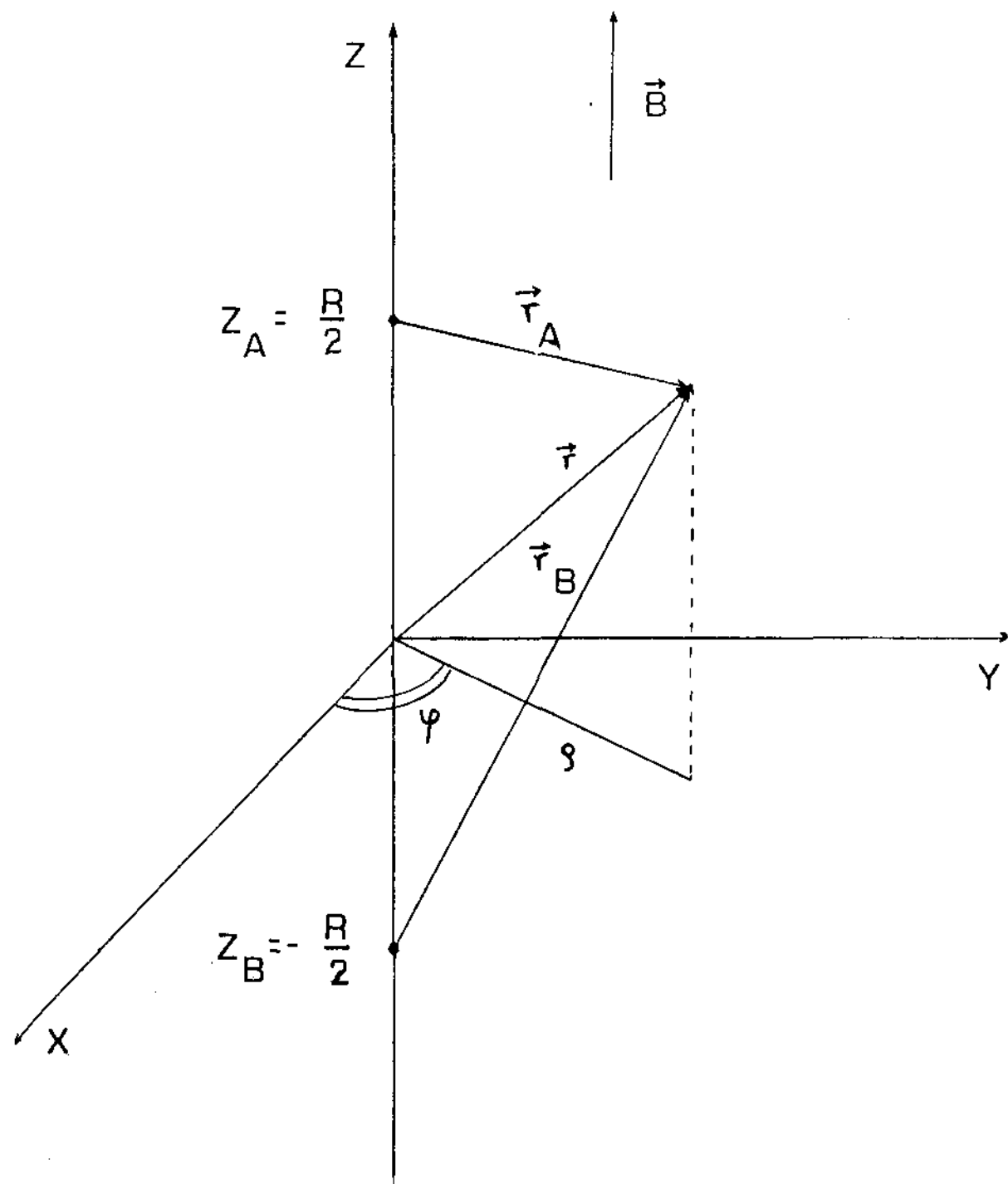


Fig. V.a - Geometria usada na solução do íon molecular.

resultando para $\phi(\vec{r}, t)$ a equação:

$$i\hbar \dot{\phi}(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) \right)^2 - \frac{e^2}{|(z-z_A)^2 + \rho^2 + a^2|^{1/2}} - \frac{e^2}{|(z-z_B)^2 + \rho^2 + a^2|^{1/2}} - \frac{e^2}{R} \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (V.2a)$$

onde $a = \frac{e \Lambda}{mc |\omega_c - \omega|}$

Para resolver a Eq.(V.2a), usaremos um procedimento semelhante ao da Ref.(59), isto é, usaremos o método variacional usando como função de partida uma combinação linear de funções de onda do elétron movendo-se independentemente no campo Coulombiano dependente das intensidades dos campos presentes,

$$\phi(\vec{r}, t) = c_1 \phi_A(\rho, z-z_A, t) + c_2 \phi_B(\rho, z-z_B, t) \quad (V.3)$$

onde $\phi_{A,B}(\rho, z-z_{A,B}, t)$ são soluções de:

$$i\hbar \dot{\phi}_{A,B}(\rho, z, t) = \left\{ \frac{1}{2m} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) \right]^2 - \frac{e^2}{(\rho^2 + z^2 + a^2)^{1/2}} \right\} \phi_{A,B}(\rho, z, t)$$

que tem a forma indicada na Eq.(V.1) sendo β determinado pela Eq.(IV.13).

Assim, substituindo (V.1) em (V.3) e seguindo o procedimento usual do método variacional para determinar os parâmetros c_1 e c_2 , a função de onda e a energia do estado eletrônico fundamental são escritas como:

$$\phi(\vec{r}, t) = [2(1+S)]^{-1/2} (\phi_A(\rho, z-z_A, t) + \phi_B(\rho, z-z_B, t))$$

$$\epsilon(R_0) = \epsilon_G + \frac{2}{R_0} - \left(\frac{8}{\pi}\right)^{1/2} n\mu^2 \frac{I_1 + e^{-n^2 R_0^2/2} I_2}{1 + S} \quad (V.4)$$

onde $\epsilon(R_0)$ é dado em unidades de $e^2/2a_0$, $R_0 = R/a_0$, $n = \beta a_0$, α e μ^2 os parâmetros que representam as intensidades dos campos de laser e magnéticos definidos como no capítulo IV, ϵ_G a energia do estado fundamental atômico,

$$I_1 = \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \frac{e^{-\mu^2 \rho^2/2} e^{-2n^2(z-R_0/2)^2}}{[\rho^2 + (z + R_0/2)^2 + \alpha^2/\mu^4]^{1/2}}$$

$$I_2 = \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty dz \frac{e^{-\mu^2 \rho^2/2} e^{-2n^2 z^2}}{[\rho^2 + (z + R_0/2)^2 + \alpha^2/\mu^4]^{1/2}}$$

e

$$S = \exp | -nR^2/2 |$$

Os resultados para energia de dissociação definida como a diferença entre $\epsilon(R)$ e a energia do átomo e do próton no estado de mais baixa energia quando separados por uma distância infinita, mas ainda em presença dos campos, são mostrados nas tabelas (V.1-V.3) para diferentes valores da distância internuclear e alguns valores de λ e μ^2 . Nas Figs. (V.b-V.d) o comportamento da energia de dissociação com as intensidades do campo pode facilmente ser observado.

Na tabela (V.4) listamos os valores das posições de equilíbrio e energia de dissociação para alguns valores das intensidades dos campos e uma análise comparativa destes resultados pode ser feita através das Figs. (V.e) e (V.f).

Salientamos ainda que os resultados para energia

de dissociação para pequenos valores de α e μ^2 , isto é, para os valores de intensidades tais que a função que melhor descreve o estado atômico é da forma

$$\phi(\vec{r}) = A e^{-n_1 r/a_0}$$

onde n_1 é a solução da Eq.(IV.9), podem ser obtidos sem grandes dificuldades, seguindo o mesmo procedimento acima utilizado. Para este regime de campo, a expressão para energia do estado eletrônico de mais baixa energia, estando os núcleos separados por uma distância R_0 , torna-se

$$\epsilon(R_0) = \frac{2}{R_0} - \frac{I_0 + J_0}{1 + S}$$

onde

$$I_0 = n^3 R_0^2 \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 dv \frac{(\xi^2 - v^2) e^{-\eta R_0 (\xi + v)}}{[(\xi - v)^2 + 4\alpha^2 / \mu^4 R_0^2]^{1/2}}$$

$$J_0 = n^3 R_0^2 \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 dv \frac{e^{-\eta R_0 \xi}}{[(\xi + v)^2 + 4\alpha^2 / \mu^4 R_0^2]^{1/2}}$$

e

$$S = \left[1 + \eta R_0 + \frac{1}{3} (\eta R_0)^2 \right] e^{-\eta R_0}$$

Como ilustração apresentamos na tabela (V.5) os resultados obtidos numericamente para $\epsilon(R_0)$ considerando $\mu^2 = 0,08$ e $1,0$ ($B \approx 2 \times 10^8$ e $2,5 \times 10^9$ G), e alguns valores de α . O comportamento de $\epsilon(R_0)$ com R_0 para $\mu^2 = 0,5$ e $\alpha = 0,05$ e $0,5$, é mostrado na Fig.(V.g).

$\mu^2 = 1,00$	$\epsilon(R_0)$	R_0											
	α		1,60	2,00	2,60	3,00	4,00	5,00	5,50	6,00	6,50	7,00	8,00
	0,10		-0,034	-0,175	-0,168	-0,139	-0,060	-0,019	-0,009	-0,003	-0,001	-	-
	1,00		0,317	0,106	-0,042	-0,083	-0,098	-0,067	-0,050	-0,035	-0,024	-0,016	-0,006
	2,00		1,021	0,364	0,156	0,076	-0,024	-0,052	-0,054	-0,050	-0,045	-0,045	-0,024

$\mu^2 = 2,00$	$\epsilon(R_0)$	R_0											
	α		1,20	1,60	2,00	2,60	3,00	4,00	4,60	5,00	5,50	6,00	7,00
	0,10		-0,096	-0,348	-0,300	-0,190	-0,124	-0,34	-0,013	-0,006	-0,002	-	-
	1,00		0,221	-0,083	-0,194	-0,207	-0,175	-0,080	-0,043	-0,028	-0,015	-0,008	-0,002
	2,00		0,584	0,197	0,007	-0,110	-0,132	-0,111	-0,081	-0,062	-0,042	-0,028	-0,011

Tab. V.1 - Valores de $\epsilon(R_0)$ usando combinação de função tipo Landau

$\mu^2 = 5,00$	$\epsilon(R_0)$												
	α	R_0	1,20	1,60	2,00	2,60	3,00	3,60	4,00	4,60	5,00	6,00	7,00
	1,00		-0,450	-0,491	-0,364	-0,175	-0,098	-0,038	-0,019	-0,006	-0,003	-	-
	2,00		-0,193	-0,363	-0,352	-0,233	-0,153	-0,073	-0,042	-0,018	-0,010	-0,002	-
	5,00		0,449	0,082	-0,082	-0,165	-0,168	-0,140	-0,113	-0,074	-0,053	-0,021	-0,007

$\mu^2 = 10,00$	$\epsilon(R_0)$												
	α	R_0	1,00	1,40	1,80	2,00	2,60	3,00	3,60	4,00	4,60	5,00	6,00
	2,00		-0,644	-0,722	-0,453	-0,343	-0,129	-0,063	-0,020	-0,009	-0,003	-0,001	-
	5,00		-0,006	-0,344	-0,392	-0,369	-0,242	-0,158	-0,074	-0,043	-0,018	-0,010	-0,002
	10,00		0,705	0,168	-0,064	-0,123	-0,187	-0,180	-0,141	-0,109	-0,068	-0,048	-0,017

Tab. V.2 - Valores de $\epsilon(R_0)$ usando combinação de funções tipo Landau

$\mu^2 = 20,00$	$\epsilon(R_0)$	0,80	1,00	1,40	1,80	2,00	2,40	3,00	3,40	4,00	4,40	5,00
	R_0											
	α											
	2,00	-1,211	-1,243	-0,691	-0,301	-0,194	-0,077	-0,018	-0,007	-0,002	-0,001	-
5,00	-0,588	-0,795	-0,721	-0,453	-0,330	-0,164	-0,053	-0,024	-0,008	-0,004	-0,001	
10,00	0,268	-0,153	-0,434	-0,435	-0,393	-0,284	-0,141	-0,081	-0,034	-0,018	-0,007	

$\mu^2 = 30,00$	$\epsilon(R_0)$	0,60	0,80	1,00	1,40	1,80	2,00	2,40	3,00	3,40	4,00	4,40
	R_0											
	α											
	2,00	-1,418	-1,740	-1,363	-0,574	-0,209	-0,124	-0,043	-0,009	-0,004	-0,001	-
5,00	-0,793	-1,152	-1,184	-0,728	-0,533	-0,217	-0,088	-0,022	-0,009	-0,003	-0,001	
10,00	0,309	-0,411	-0,661	-0,684	-0,481	-0,371	-0,199	-0,070	-0,034	-0,011	-0,006	

Tab. V.3 - Valores de $\epsilon(R_0)$ usando combinação de funções tipo Landau

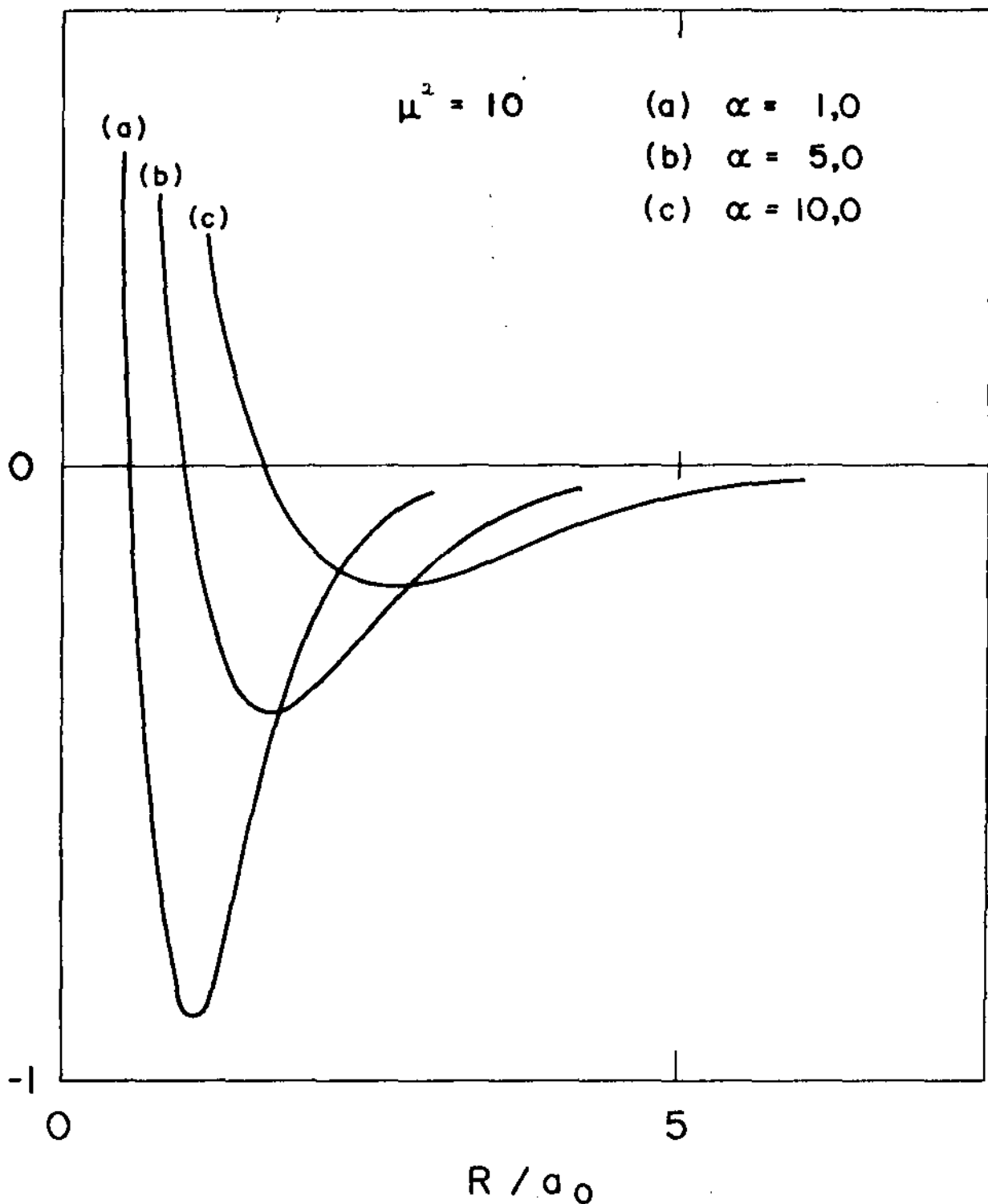


Fig. V.b - Energia de dissociação como função da distância internuclear para $B = 10 B_c$ e alguns valores da intensidade do campo de radiação.

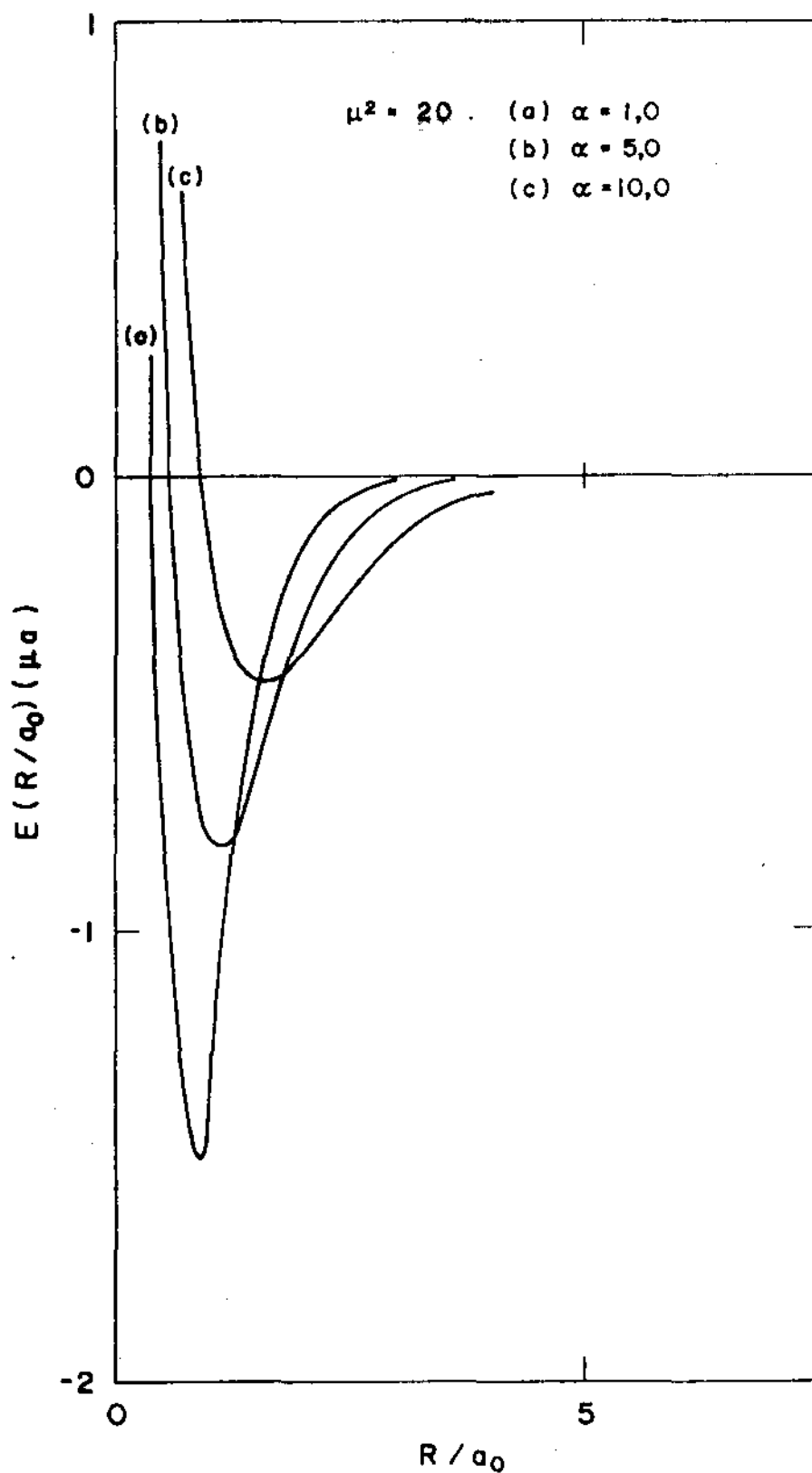


Fig. V.c - Energia de dissociação como função da distância internuclear para $B = 20B_c$ e alguns valores da intensidade do campo de radiação.

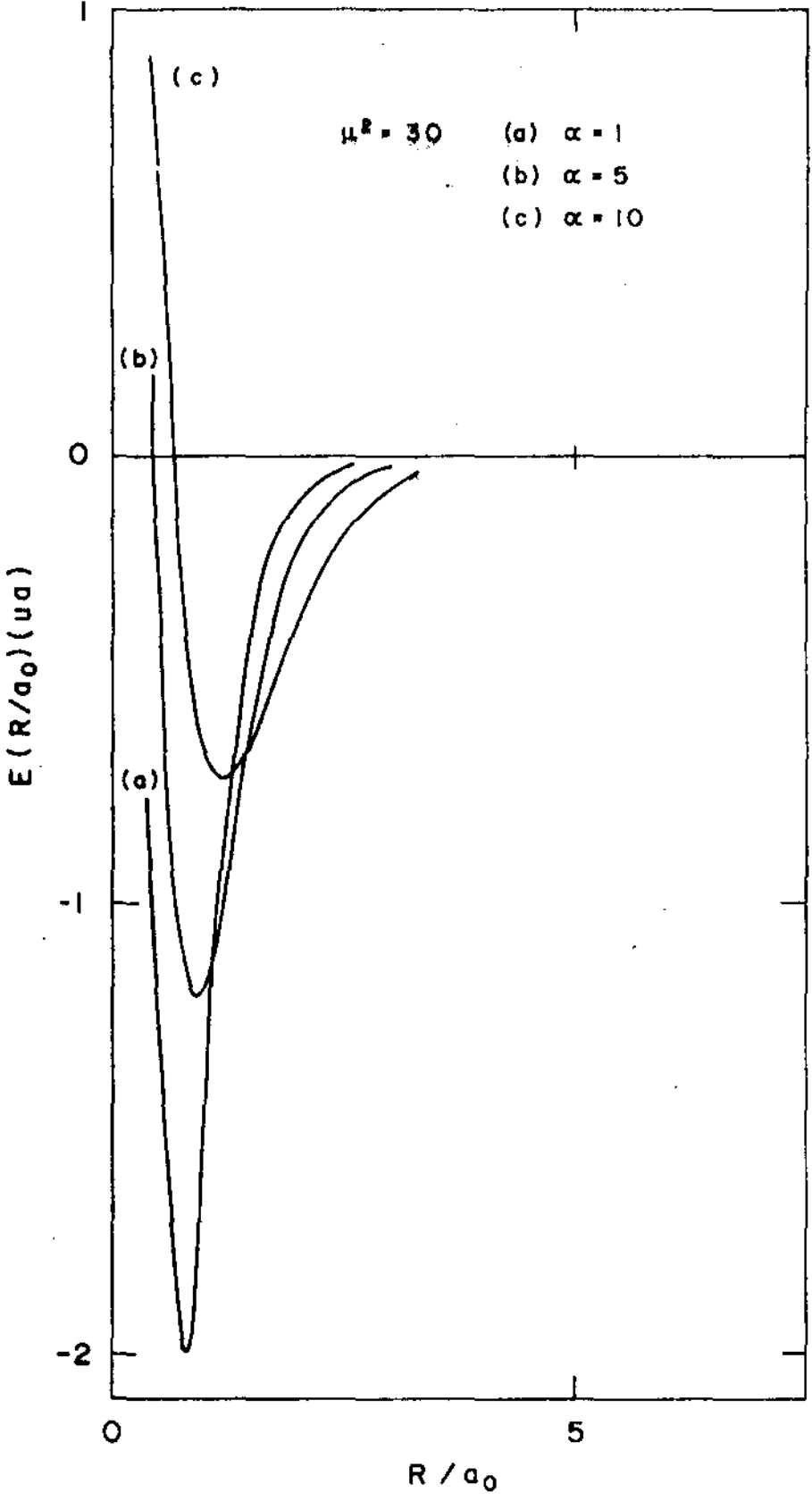


Fig. V.d - Energia de dissociação como função da distância internuclear para $B = 30B_c$ e alguns valores da intensidade do campo de radiação.

	α	0,1	1,0	2,0	5,0	10,0
$\mu^2 = 10$	$R_o = R/a_o$	1,0	1,1	1,2	1,8	2,8
	$\epsilon_D(\mu a)$	1,13	0,89	0,72	0,39	0,19
$\mu^2 = 20$	$R_o = R/a_o$	0,9	0,9	0,9	1,15	1,6
	$\epsilon_D(\mu a)$	1,72	1,52	1,28	0,81	0,45
$\mu^2 = 30$	$R_o = R/a_o$	0,8	0,8	0,8	0,9	1,2
	$\epsilon_D(\mu a)$	2,27	2,0	1,74	1,21	0,72

Tabela V.4 - Posição de equilíbrio e energia de dissociação para diversos valores de α e μ^2 .

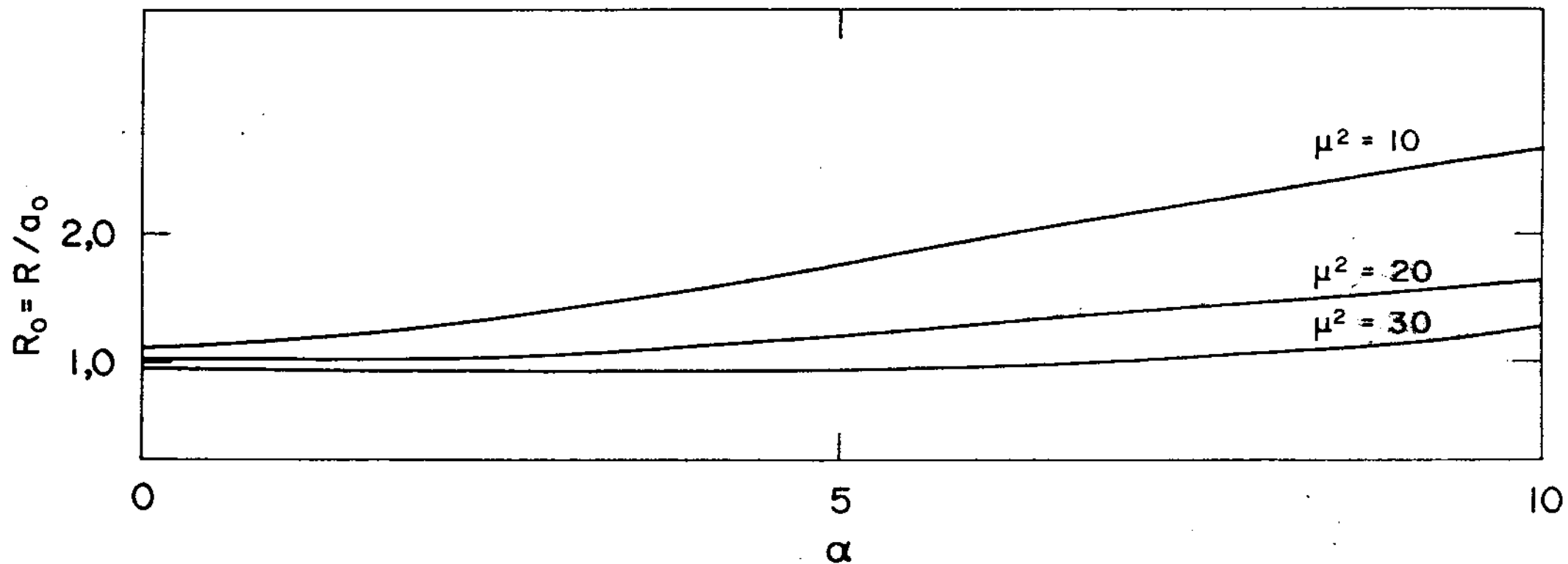


Fig. V.e - Comportamento da distância internuclear com a intensidade do campo de radiação para diversos valores do campo magnético.

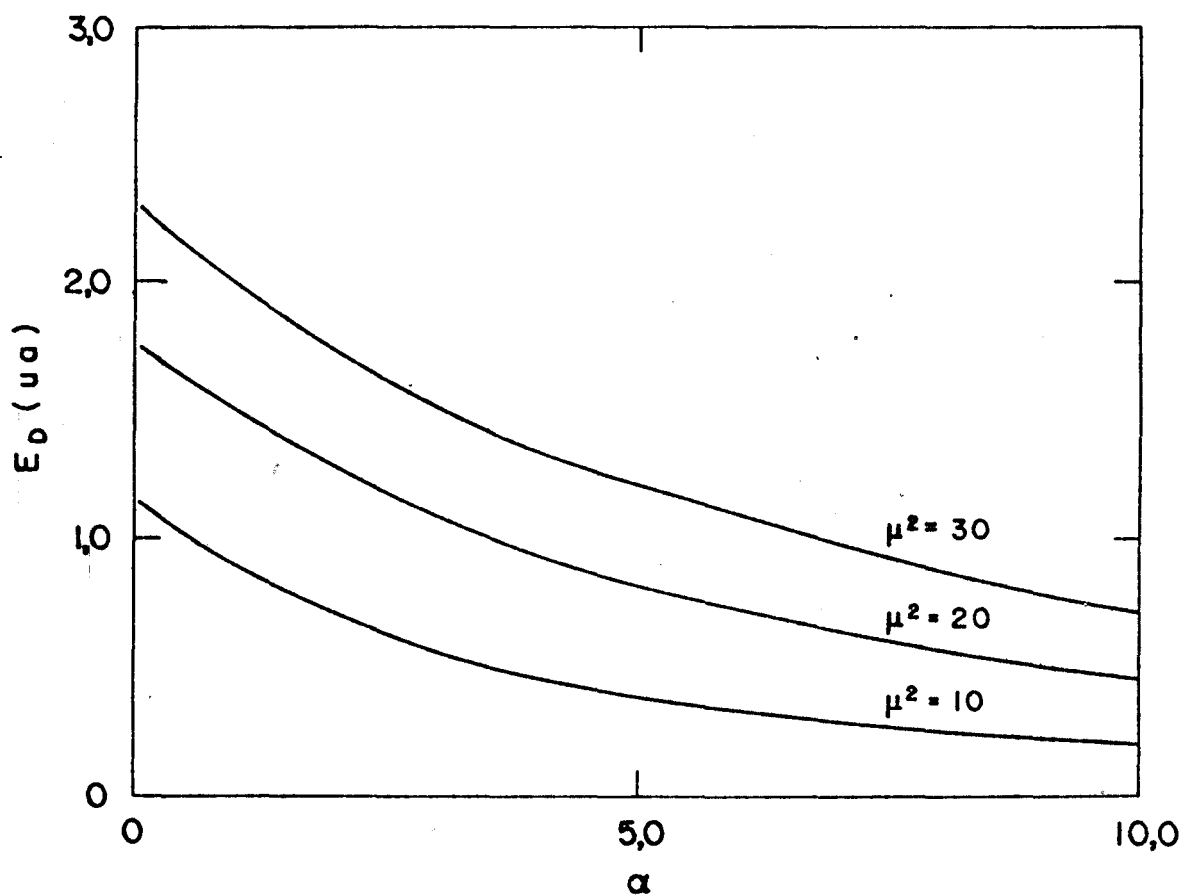


Fig. V.f - Comportamento da energia de dissociação com a intensidade do campo de radiação para diversos valores do campo magnético.

$\mu^2 = 0,08$	$\epsilon(R_0)$	R_0	1,00	2,00	3,00	4,00	5,00	6,00	7,00	8,00	9,00	10,00	11,00
	α												
	0,02		-0,411	-0,491	-0,423	-0,358	-0,310	-0,271	-0,240	-0,213	-0,192	-0,173	-0,159
	0,05		0,125	-0,199	-0,238	-0,227	-0,208	-0,190	-0,173	-0,158	-0,145	-0,133	-0,122
	0,1		0,894	0,232	0,047	-0,020	-0,048	-0,059	-0,064	-0,065	-0,064	-0,062	-0,060

$\mu^2 = 1,00$	$\epsilon(R_0)$	R_0	0,80	1,00	1,40	1,80	2,00	2,40	3,00	3,40	4,00	4,40	5,00
	α												
	0,05		-0,795	-0,835	-0,816	-0,748	-0,712	-0,644	-0,558	-0,512	-0,453	-0,420	-0,377
	0,50		-0,032	-0,200	-0,357	-0,402	-0,406	-0,397	-0,369	-0,348	-0,319	-0,300	-0,275
	1,00		0,742	0,448	0,126	-0,027	-0,072	-0,126	-0,161	-0,169	-0,172	-0,169	0,162

Tab. V.5 - Valores de $\epsilon(R_0)$ usando combinação de funções tipo hidrogênio

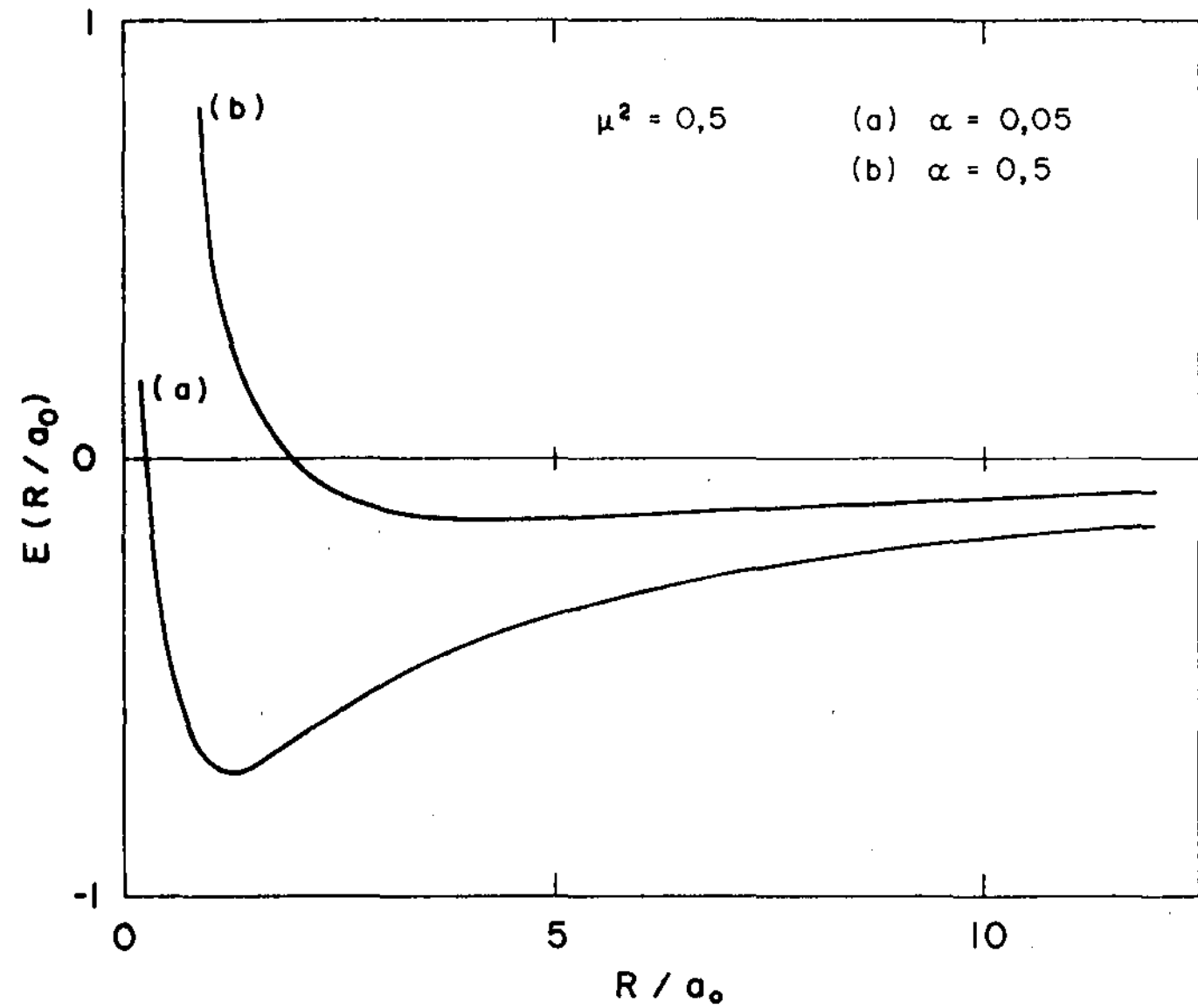


Fig. V.g - Energia de dissociação como função da distância internuclear para $B = 0,5 B_c$.

V.3 - Conclusões

Observando as Figs.(V.a-V.f), podemos concluir que o íon molecular H_2^+ sofre um efeito semelhante à aquele observado no átomo de hidrogênio em presença dos dois campos, como aqui considerado. Por um lado o aumento da intensidade do campo de radiação tende a diminuir a energia de dissociação ϵ_D enquanto que o aumento do campo magnético favorece a estabilidade do íon a uma distância interatômica menor aumentando assim o valor de ϵ_D .

Estes efeitos podem ser fisicamente explicados observando-se que o aumento de α (intensidade do campo de laser) faz com que o elétron tenda a se "deslocalizar" o que é refletido no aumento da largura da distribuição eletrônica que por sua vez é responsável não só pela diminuição da energia de dissociação mas também pela estabilização do íon a uma distância internuclear maior que aquela a campo de radiação nulo, uma vez que, no equilíbrio, a distribuição eletrônica deve estar localizado entre os prótons. Por outro lado o acréscimo do campo magnético faz com que o elétron tenda a ficar confinado em torno do eixo z fazendo com que o H_2^+ tome a forma de um "charuto". Esta geometria favorece a estabilidade a uma distância internuclear menor e justifica o comportamento da energia de dissociação com o campo magnético.

Em resumo, podemos afirmar que o íon molecular H_2^+ na presença simultânea de um campo de laser e de um campo magnético d.c. forte tem suas características ditadas não pela intensidade de um dos campos presentes mas sim pela relação entre estas intensidades.

APÉNDICE

- Dado o Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m} \left[\hat{\vec{p}} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) + \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right]^2 + V(\vec{r}) \quad (\text{VI.1})$$

onde $\vec{A}_0(\vec{r}) = \frac{1}{2} B(\hat{z} \times \vec{r})$ e $\vec{A}(t) = A(\hat{x} \cos \omega t + \hat{y} \sin \omega t)$ temos a equação de Schrödinger

$$i\hbar \dot{\psi}(\vec{r}, t) = H \psi(\vec{r}, t) \quad (\text{VI.2})$$

É proposta a transformação

$$\psi(\vec{r}, t) = e^{i\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p}/\hbar} e^{i\vec{\gamma}(t) \cdot \vec{r}/\hbar} e^{in(t)/\hbar} \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{VI.3})$$

onde $\vec{\delta}(t)$, $\vec{\gamma}(t)$ e $n(t)$ devem ser tais que a equação para a função de onda transformada, $\phi(\vec{r}, t)$, tenha a forma:

$$i\hbar \dot{\phi}(\vec{r}, t) = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) \right]^2 + V(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) \phi(\vec{r}, t) \quad (\text{VI.4})$$

Com a finalidade de simplificarmos a notação definimos

$$\Omega_1 = e^{i\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p}/\hbar} \quad (\text{VI.5a})$$

$$\Omega_2 = e^{i\vec{\gamma}(t) \cdot \vec{r}/\hbar} \quad (\text{VI.5b})$$

$$\Omega_3 = e^{in(t)/\hbar} \quad (\text{VI.5c})$$

Usando a Eq.(VI.3) e a notação definida pelas Eqs. (VI.5), a Eq.(IV.2), toma a forma

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) + \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right]^2 + \frac{\partial}{\partial t} \left[\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p} + n(t) + \vec{\gamma}(t) \cdot \vec{r} \right] \Omega_1 \Omega_2 \Omega_3 \phi(\vec{r}, t) + \\ & + V(\vec{r}) \Omega_1 \Omega_2 \Omega_3 \phi(\vec{r}, t) = \Omega_1 \Omega_2 \Omega_3 i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \end{aligned} \quad (\text{VI.6})$$

Deve ser notado que Ω_3 comuta com todos operadores da Eq.(VI.6) e desta maneira a multiplicação a esquerda por $\Omega_3^+ \Omega_2^+ \Omega_1^+$, nos leva a:

$$\begin{aligned} \Omega_2^+ \Omega_1^+ \frac{1}{2m} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A}_0(r) + \frac{e}{c} \vec{A}(t) \right]^2 + \frac{\partial}{\partial t} \left[\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p} + n(t) + \vec{\gamma}(t) \cdot \vec{r} \right] \Omega_1 \Omega_2 \phi(\vec{r}, t) \\ + V(\vec{\gamma} - \vec{\delta}(t)) = i\hbar \dot{\phi}(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (VI.7)$$

onde usamos o fato que

$$\begin{aligned} \Omega_2^+ \Omega_1^+ \left[\hat{O}_1(\vec{r}) + \hat{O}_2(\vec{p}) \right] \Omega_1 \Omega_2 = \Omega_2^+ \left| \hat{O}_1(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) - \hat{O}_2(\vec{p}) \right| \Omega_2 \\ = \hat{O}_1(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) - \hat{O}_2(\vec{p} - \vec{\gamma}(t)) \end{aligned} \quad (VI.8)$$

sendo \hat{O}_1 e \hat{O}_2 operadores que dependem da posição \vec{r} e do momento \vec{p} respectivamente.

Comparando a equação (VI.7) com a (VI.4) e usando a relação dada pela Eq.(VI.8), obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{mc^2} \left[\vec{A}(t) + \vec{A}' \right] \cdot \vec{A}_0(\vec{r}) + \frac{e}{mc} \left[\Lambda(t) + \Lambda' \right] \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{2mc^2} \left[A(t) \right]^2 - \left[A' \right]^2 = \\ = - \frac{\partial}{\partial t} \left[\vec{\delta}(t) \cdot \vec{p} + n(t) + \vec{\gamma}(t) \cdot \vec{r} \right] \end{aligned} \quad (VI.9)$$

onde temos definido

$$- \frac{e}{c} \vec{A}' = \vec{\gamma}(t) + \frac{e}{2c} B \vec{z} \times \vec{\delta}(t) \quad (VI.9a)$$

Desde que

$$\left[\vec{A}(t) + \vec{A}' \right] \cdot \vec{A}_0(r) = \frac{m\omega c}{2} \left[\frac{e}{mc} (\vec{A}(t) + \vec{A}') \times \vec{z} \right] \cdot \vec{r}$$

comparando os dois lados da Eq.(VI.9), podemos escrever:

$$\vec{\delta}(t) = - \frac{e}{mc} \int^t [\vec{A}(\tau) + \vec{A}'] d\tau \quad (\text{VI.10a})$$

$$\vec{\gamma}(t) = - \frac{1}{2} m\omega_c (\vec{\delta}(t) \times \vec{z}) \quad (\text{VI.10b})$$

$$n(t) = - \frac{e^2}{2mc^2} \int^t d\tau \left\{ |\vec{A}(\tau)|^2 - |\vec{\gamma}(t) + \frac{e}{2c} B \vec{z} \times \vec{\delta}(t)|^2 \right\} \quad (\text{VI.10c})$$

Assim sendo o conhecimento de $\vec{\delta}(t)$ nos define toda a transformação. Esta determinação pode ser feita facilmente observando que $\vec{\delta}(t)$ satisfaz a equação.

$$\frac{\partial}{\partial t} \vec{\delta}(t) = - \frac{e}{mc} [\vec{A}(t) - \vec{A}']$$

Sabendo que $\vec{\delta}(t)$ tem componentes apenas no plano perpendicular a direção do eixo z, isto é, $\vec{\delta}(t) = (\delta_1(t), \delta_2(t), 0)$, usando as Eqs. (VI.9a) e (VI.10b e c), obtemos para as componentes $\delta_1(t)$ e $\delta_2(t)$ as equações:

$$\frac{d}{dt} \delta_1 - \omega_c \delta_2 = - \frac{e A}{mc} \cos \omega t$$

$$\frac{d}{dt} \delta_2 + \omega_c \delta_1 = - \frac{e A}{mc} \sin \omega t$$

O conjunto de equações diferenciais acopladas acima pode facilmente ser resolvido e seu resultado é dado por:

$$\vec{\delta}(t) = (- a \sin \omega t, a \cos \omega t, 0)$$

onde

$$a = \frac{e A}{mc} \frac{1}{|\omega_c - \omega|}$$

Desta maneira $\delta(t)$ é dado por

$$\vec{\delta}(t) = \frac{1}{2} m\omega_c a (\vec{x} \cos \omega t - \vec{y} \sin \omega t)$$

definindo assim toda a transformação.

REFERÊNCIAS

- (01) - L.V. Keldysh, J. Exptl. Theoret. Phys. 47, 1945 (1964)
(Sov. Phys. - JETP-20, 1307 (1965))
- (02) - W.C. Henneberger, Phys. Rev. Lett. 21, 838 (1968)
- (03) - H.R. Reiss, Phys. Rev. A 1, 803 (1970)
- (04) - H.R. Reiss, Phys. Rev. Lett. 25, 1149 (1970)
- (05) - H.R. Reiss, Phys. Rev. D 4, 3533 (1971)
- (06) - C.A.S. Lima e L.C.M. Miranda, Phys. Rev. A 23, 3335
(1981) e C.A.S. Lima e L.C.M. Miranda (subm. a Phys.
Lett. (1981))
- (07) - F.H.M. Faisal, J. Phys. B 6, L89 (1973)
- (08) - W.F. Perel'man e V.A. Kovarskii, Zh. E bsp. Teor.
Fiz. 63, 831 (1972) (Sov. Phys. - JETP-36, 436 (1973))
- (09) - M.H. Mittleman, Phys. Lett. 47 A, 55 (1974)
- (10) - H.R. Reiss, Phys. Rev. A 22, 1786 (1980)
- (11) - C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, C. Fabre e G.
Grymberg, Phys. Rev. A 8, 2747 (1973)
- (12) - A. Decoster, Phys. Rev. A 9, 1446 (1974)
- (13) - H.S. Brandi, B. Koiller, H.G.P. Lins de Barros, L.C.
M. Miranda e J.J. Castro, Phys. Rev. A 17, 1900 (1978)
- (14) - H.R. Reiss, Phys. Rev. A 23, 3019 (1981)
- (15) - J.F. Seely e E.G. Harris, Phys. Rev. A 7, 1064 (1973)
- (16) - B.S. Bhakar e B.J. Chudhury, J. Phys. B 7, 1866 (1974)
- (17) - J.F. Seely, Phys. Rev. A 10, 1863 (1974)
- (18) - Y. Shima e H. Yatom, Phys. Rev. A 12, 2106 (1975)
- (19) - M. Jain e N. Tzoar, Phys. Rev. A 15, 147 (1977)
- (20) - M.B.S. Lima, C.A.S. Lima e L.C.M. Miranda, Phys. Rev.
A 19, 1796 (1979)
- (21) - É.M.É pshtein, Fizika Tredogo Tela, 11, 2732 (1969)
(Sov. Phys.- Solid State-11, 2213 (1970))

- (22) - H.R. Fetterman, D.M. Larsen, G.E. Stillman, P.E. Tannenwald e J. Waldman, Phys. Rev. Lett. 26, 975 (1971)
- (23) - F.G. Bass e M.Ya. Granouskii, Fizika Tverdogo Tela 12, 2437 (1970) (Sov. Phys.-Solid State-12, 1948 (1971))
- (24) - V.I. Pushckov e E.M. Epshtein, S.
(Sov. Phys.-Semicond.- 7, 1254 (1974))
- (25) - L.C.M. Miranda, J. Phys. C 9, 2971 (1976)
- (26) - R. Luzzi e L.C.M. Miranda, Phys. Rep. 43, 423 (1978)
- (27) - H.S. Brandi, Phys. Rev. A 11, 1835 (1975), e R.R. dos Santos e H.S. Brandi, Phys. Rev. A 13, 1970 (1976)
- (28) - E.J. Heller, W.P. Reinhardt e W.A. Yamani, J. Comp. Rev. 13, 536 (1973)
- (29) - E.J. Heller, T.N. Reseigno e W.P. Reinhardt, Phys. Rev. A 8, 2946 (1973)
- (30) - H.A. Yamani e W.P. Reinhardt, Phys. Rev. A 11, 1145 (1975)
- (31) - A. Messiah, Quantum Mechanics (Wiley, New York, 1966), Vol. II, pag. 1057
- (32) - A.S. Davydov, Quantum Mechanics (Adison-Wesley Publishing Company, Inc. - (1965), pág. 134)
- (33) - S. Rand, Phys. Rev. 136, B 231 (1964)
- (34) - N.M. Kroth e K.M. Watson A 8, 804 (1973)
- (35) - B.J. Chodhury e B.S. Bhakar, J. Phys. B 7, L 137 (1974)
- (36) - J.C. Kemp, Astrophys. J. 162, L69 (1970)
- (37) - D. Ter. Haar, Phys. Reports 3, 1 (1972)
- (38) - Y. Yafet, R.W. Keyes e E.N. Adams, J. Phys. Chem. Solids I, 137 (1956)
- (39) - R.F. Wallis e H.J. Bowlden, J. Phys. Chem. Solids. 7, 78 (1958)

- (40) - D.M. Larsen, J. Phys. Chem. Solids 29, 271 (1968)
- (41) - R. Cohen, J. Lodenguai e M. Ruderman, Phys. Rev. Lett. 25, 467 (1970)
- (42) - A.K. Rajagopal, G. Chanmugan, R.F. O'Connell e G.L. Surmelian, Astrophys. J. 177, 713 (1972)
- (43) - E.R. Smith, R.J.W. Henry, G.L. Surmelian, R.F. O'Connell e A.K. Rajagopal, Phys. Rev. D 6, 3700 (1972)
- (44) - H.C. Praddoude, Phys. Rev. A 6, 1321 (1972)
- (45) - G.L. Sumelian e R.F. O'Connell, Astrophys. J. 190 741 (1974)
- (46) - A.R.P. Rau, R.O. Mueller, L. Spruch, Phys. Rev. A 11, 1865 (1975)
- (47) - K.A. Brucckner e S.Jorna, Rev. Mod. Phys. 46, 325 (1974)
- (48) - B. Lax e D.R. Cohn, Appl. Phys. Lett. 23, 363 (1973)
- (49) - L.D. Landau e E.M. Lifchitz, Quantum Mechanics, (Pergamon, Oxford, 1965), p. 421
- (50) - G.Z. Machabeli e V.V. Usov, Pis'ma Astron. Ah. 5, 445 (79) (Sov. Astron. Lett. 6, 238 (1979)), Yu. P. Ochelkov e V.V. Usov, Astrophys. and Space Sci. 69, 439 (1980) e D.G. Lominadze, G.Z. Machabeli, A.B. Mikhailovskii, Yu. P. Ochelkov e V.V. Usov, Usp. Fiz. Nauk 131, 516 (1980) (Sov. Phys. Usp. 23, 422 (1980))
- (51) - R.H. Garstang, Rep. Prog. Phys. 40, 105 (1977)
- (52) - C.P. de Melo, R. Ferreira. H.S. Brandi e L.C.M. Miranda, Phys. Rev. Lett. 37, 676 (1976) e referências
- (53) - R.K. Bhaduki, Y. Nogami e C.S. Warke, Astrophys. J. 217, 324 (1977) e referências
- (54) - L.C. de Melo, T.W. Das, R.C. Ferreira, L.C.M. Miranda, H.S. Brandi, Phys. Rev. A 18, 12 (1978)
- (55) - J. Ozaki e Y. Tomishima, J.Phys. Soc. Jap. 49, 1497 (1980)

- (56) - N. Bloemberger, Opt. Commun., 15, 416 (1975)
- (57) - E.M. Belenov, S. Yu. Guskov e U.A. Isakov, Sov. J. Quant. Electron. 4, 1135 (1975)
- (58) - A. Lau, Phys. Rev. A 18, 172 (1978) e referências
- (59) - C.A. S. Lima e L.C.M. Miranda, submetido a publicação.