



# **Espalhamento de Elétrons, Fator Forma e Dedução do Raio Quadrático Médio Extrapolado.**

**Física Nuclear e de Partículas**

***Welken Charlois Gonçalves***

Welken Charlois Gonçalves

**Espalhamento de Elétrons, Fator  
Formas e Dedução do Raio Quadrático  
Médio Extrapolado**

1<sup>a</sup> Edição

Belém-PA  
Home Editora  
2023

© 2023 Edição brasileira  
by Home Editora

© 2023 Texto  
by Autor

Todos os direitos reservados

Home Editora

CNPJ: 39.242.488/0002-80

www.homeeditora.com

contato@homeeditora.com

9198473-5110

Av. Augusto Montenegro, 4120 - Parque Verde, Belém - PA, 66635-110

**Editor-Chefe**

Prof. Dr. Ednilson Ramalho

**Diagramação e capa**

Autor

**Revisão de texto**

Autor

**Produtor editorial**

Laiane Borges

**Catálogo na publicação**  
**Home Editora**



E77

Espalhamento de elétrons, fator formas e dedução do raio quadrático médio extrapolado / Welken Charlois Gonçalves. – Belém: Home, 2023.

Livro em PDF

ISBN 978-65-85712-00-2

DOI 10.46898/home.d4aa5dc8-9b86-4ce3-b004-6ef0a1a92b9d

1. Espalhamento de elétrons, fator formas e dedução do raio quadrático médio extrapolado. I. Gonçalves, Welken Charlois. II. Título.

CDD 530

Índice para catálogo sistemático

I. Física.



Todo o conteúdo apresentado neste livro é de responsabilidade do(s) autor(es).  
Esta obra está licenciada com uma Licença Creative Commons Atribuição-SemDerivações 4.0 Internacional.

### **Conselho Editorial**

Prof. Dr. Ednilson Sergio Ramalho de Souza - UFOPA  
(Editor-Chefe)

Prof. Dr. Laecio Nobre de Macedo-UFMA

Prof. Dr. Aldrin Vianna de Santana-UNIFAP

Prof. Dr. Carlos Erick Brito de Sousa-UFMA

Prof<sup>a</sup>. Dra. Renata Cristina Lopes Andrade-FURG

Prof. Dr. Clézio dos Santos-UFRRJ

Prof. Dr. Rodrigo Luiz Fabri-UFJF

Prof. Dr. Manoel dos Santos Costa-IEMA

Prof. Dr. Rodolfo Maduro Almeida-UFOPA

Prof. Dr. José Moraes Souto Filho-FIS

Prof. Dr. Deivid Alex dos Santos-UEL

Prof<sup>a</sup>. Dra. Maria de Fatima Vilhena da Silva-UFPA

Profa. Dra. Dayse Marinho Martins-IEMA

Prof. Dr. Daniel Tarciso Martins Pereira-UFAM

Prof<sup>a</sup>. Dra. Elane da Silva Barbosa-UERN

*“Acreditamos que um mundo melhor se faz com a difusão do conhecimento científico”.*

Equipe Home Editora

# **Espalhamento de Elétrons, Fator Formas e Dedução do Raio Quadrático Médio Extrapolado.**

**Citar como Welken Charlois Gonçalves ou W.C. Gonçalves Espalhamento de Elétrons, Fator Formas e Dedução do Raio Quadrático Médio Extrapolado.**

**Email: [welkengoncalvesc@gmail.com](mailto:welkengoncalvesc@gmail.com)**

# Resumo:

O livro resume-se basicamente em explicar a extrapolação do fator forma vetorial, na estudo do espalhamento de elétrons do decaimento beta, na introdução é explicado o início, com a descoberta do átomo de Rutherford em que provou a concentração da massa do átomo estar toda concentrada no centro do mesmo, após uma breve discussão dos átomo de Bohr e níveis de energia, também a equação de Schroedinger e seus desenvolvimento com o postulado de Planck-Einstein, que gera as equações de De Broglie e Schroedinger desenvolve sua equação fundamentais para o desenvolvimento da Mecânica Quântica, finalizando com um breve exposto de Wolfgang Pauli, Paul Dirac e Feynman, nas teorias das partículas elementares e física nuclear, em especial espalhamentos. No referencial teórico, temos a demonstração da seção de choque diferencial de Rutherford, a seção de choque diferencial de Mott na QED, o desenvolvimento e a demonstração de Lifshitz e Landau do fator forma, com as condições de aproximação de Born, também a experiência de Hofstadter no espalhamento do elétron. Na discussão o breve exposto, do livro Mizrahi e Galetti das medidas de extrapolação através do fator forma, representado pelo raio quadrático médio de extrapolação. .... No apêndice temos deduções interessantes como A Equação de Schroedinger, A equação de Schroedinger em Coordenadas Esféricas, a Representação da Equação de Schroedinger, Separação de Variáveis, A equação angular, Equação Radial, O Átomo de hidrogênio, O Estado Fundamental do Hélio, Um Exemplo de Separação de Variáveis, Equação Radial, Aproximação de Born demonstração e Energia Relativística do Elétron Livre.

Logo o fator forma atômico é baseado neste livro é tratado de maneira detalhada para obter a fórmula do raio quadrático médio por extrapolação, é um livro com as devidas demonstrações do parágrafo precedente para se chegar à fórmula do raio quadrático médio extrapolado, em função do fator forma. É relevante este estudo pois abrange todo o desenvolvimento da teoria atômica e de física nuclear e de partículas em quesitos de física nuclear e da mecânica quântica, o livro é basicamente teórico, os resultados empíricos podem ser consultados nas referências bibliográfica,, como a pesquisa de Ann T. Nelms e Irwin Oppenheim de 1955, com uma fórmula simples e básica do raio quadrático médio, temos uma teoria densa com referência não muito acessível, como por exemplo, na rede word wibe web, nos países latinos, e como no parágrafo precedente uma explicação do desenvolvimento da construção do desenvolvimento da mecânica quântica, que geralmente não é transmitida de forma adequada nos institutos de ensino, abrangendo a parte matemática e conceitual do desenvolvimento da mesma facilita o prosseguimento no estudo da mecânica quântica. Interessante é que se entenda a Física Clássica do século XIX e a Física Moderna, como o livro de Resnick e Eisberg, levando em conta que a fase posterior a Mecânica Quântica é embutida de álgebra linear e os conceitos e as ferramentas matemática da equação de Schroedinger, que por exemplo, que culminam com a equação de Klein-Gordon e Dirac, mas não é só isso a mecânica quântica, há possibilidade da teoria gera vários campos individuais da física, por exemplo, associada a Relatividade Restrita e Geral temos diversas ramificações de estudo e áreas da Física, logo a teoria da mecânica quântica se torna uma enciclopédia. A aplicação da mecânica quântica para um melhor entendimentos e possíveis suposições teóricas, tem que estar a par e adotar um ponto de vista das realidades da mecânica quântica e a realidade, visto que isto gera dúvidas pois o mundo microscópico é limitado a  $10^{-19}$  m, e um desenvolvimento com uma coerência só seria possível em dimensões menores, visto que os físicos com aparelhos mais desenvolvimento através, por exemplo, das suposições de Dirac e Pauli, tentam provar se o limite do mundo da mecânica quântica são limitadas as partículas elementares que existem hoje no mundo atual, por exemplo, através de Pauli e Dirac chegou-se as condições da teoria de hoje, com necessidade dessas duas teorias de preencherem lacunas nas teorias ou experimentos, como aconteceu

com Rutherford e Born, a até mesmo por Richard Feynman em cria a eletrodinâmica Quântica, na parte filosófica em várias escolas da realidade Quântica, temos a teoria de Bell e sua interpretação para a realidade Quântica, dentre várias outras possíveis que efervesceram desde Heisenberg, Schroedinger, Born, até a escola de Princeton na década de 50[1].

“O que hoje é, para nós, um paradoxo, será, para a posteridade, uma verdade demonstrada.”  
Denis Diderot;

O Iluminismo culminou com a revolução francesa de 1789, que derrubou um regime de 2000 anos, A Batalha de Waterloo de 1815 foi o Golpe Fatal para derrubada da consolidação de uma sociedade ocidental de igualdade, fraternidade e liberdade, mas a esperança ressurgiu com o Comuna de Paris de 1848, novamente por água abaixo. Hoje vemos manipulação, alienação e desigualdade.

“A Bíblia não é um livro qualquer, mas sim uma Criatura Viva, com um poder que conquista tudo que se opõe a ela.” Napoleão Bonaparte.

# Índice:

1. Introdução:
  - 1.1. A descoberta do Núcleo
  - 1.2. O átomo de Born
  - 1.3. A equação de Schroedinger
  - 1.4. Dirac, O Póstron e as Partículas Elementares
  - 1.5. Wolfgang Ernst Pauli, O Spin e a Exclusão de Pauli
2. Referencial Teórico
  - 2.1. A seção de Choque Diferencial de Rutherford
  - 2.2. Hofstadter, O espalhamento de Elétrons, formas de densidades nucleares
  - 2.3. Espalhamento de Mott
  - 2.4. Aproximação de Born e fator Forma
  - 2.5. Distribuição de Fermi ou Woods-Saxons
3. Discussão
  - 3.1. Dedução do Raio Quadrático Médio Extrapolado
4. Conclusão
5. Apêndice
  - A- A Equação de Schroedinger
  - B- A equação de Schroedinger em Coordenadas Esféricas
  - C- Uma Representação da Equação de Schroedinger
  - D- Separação de Variáveis
  - E- A equação angular
  - F- Equação Radial
  - G- O Átomo de hidrogênio
  - H- O Estado Fundamental do Hélio
  - I- Um Exemplo de Separação de Variáveis
  - J- Equação Radial
  - K- Aproximação de Born
  - L- Energia Relativística do Elétron Livre
  - M- A superfície Nuclear
6. Referências Bibliográficas



# 1-Introdução:

## 1.1-A descoberta do Núcleo [4],[7]:

A Mecânica Quântica é supostamente compreendida por uma linguagem matemática que descreve as experiências da Física no mundo microscópico, após absorver teoricamente, aplicados os exercícios dos livros das referências, uma compreensão e um pensamento indutivo e dedutivo desta ciência pode ser realizado através do estudo das discussões filosóficas e das escolas que discutem a realidade do mundo físico através da mecânica quântica. Esta monografia é apenas uma discussão de um conceito físico, com uma breve construção do formalismo e sua ideia, uma discussão que envolve o desenvolvimento do fator médio e o raio quadrado médio da teoria de física de partículas e nuclear e o raio atômico, no apêndice vê-se a principal ideia da equação de Schroedinger e as condições do átomo de hidrogênio, o limite do desenvolvimento das funções de onda e suas soluções como exemplo o átomo de Hélio. Os livros universitários são expressões de ideias dos autores originais como Dirac, Heisenberg, Schroedinger, Pauli, Neumann, Born, Openheimer, Feynman entre outros que contribuíram. Nota-se que temos uma cúpula unida de Físico nos grandes centros de tecnologia e ciência.

Temos o sucesso da radioatividade no mundo da Mecânica Quântica, que gerou consequências negativas para o bem estar humano, porém considera-se um tipo de energia limpa para humanidade, mas temos o caso de Goiânia, Chernobyl e Fukushima, recentemente. E associado a área biológica, o mapeamento do DNA que partiu da física da mecânica quântica e associada a ela, pode alongar o tempo de vida do humano no universo, pois mecânica quântica e a estrutura cromossômica do DNA, torna ilimitado o poder científico na mão dos humanos, como só um exemplo das possibilidades dos investimentos e interesses dos governos e empresas no mundo, no Brasil não estamos favoráveis neste cenário. Ou o pendrive inventado em Israel.

Falaremos da parte central do átomo: o núcleo. Os últimos 90 anos, uma meta primordial da física em aplicar os princípios da física quântica ao estudo dos núcleos, e uma meta importante da engenharia utilizando os conhecimentos assim obtidos em aplicações práticas como o uso da radiação no tratamento do câncer até a detecção do gás radônio no porão das casas. Antes de abordar as aplicações práticas e da física quântica dos núcleos, nosso interesse é o que os físicos deduziram que o átomo possui um núcleo, de acordo com os experimentos e construindo uma linguagem matemática que descreve essa hipótese. A existência do núcleo, constituiu inicialmente uma grande surpresa, apesar de ser óbvia.

No início do século XX, a única coisa a respeito da estrutura dos átomos era que continham elétrons e que os mesmos possuíam uma carga elétrica e por convenção era considerada negativa. A primeira partícula elementar, o elétron, foi descoberto por J. J. Thomson em 1897, entretanto a massa do elétron era desconhecida. Ou seja, não sabia quantos elétrons um átomo continha. Já se sabia, que os átomos eram eletricamente neutros e, por consequência deveria conter também cargas positivas, não se imaginava como eram as cargas positivas. Um modelo muito popular na época, as cargas positivas e negativas estavam distribuídas uniformemente em uma esfera. Ernest Rutherford, em 1911, postulou que a carga positiva estava concentrada no centro do átomo, formando um núcleo e o núcleo era responsável pela maior parte da massa do átomo. A teoria de Rutherford, se baseava nos resultados de um experimento e executado por ele e Hans Geiger (o inventor do contador Geiger) e Ernest Marsden, um estudante de 20 anos que ainda não havia terminado o curso de graduação.

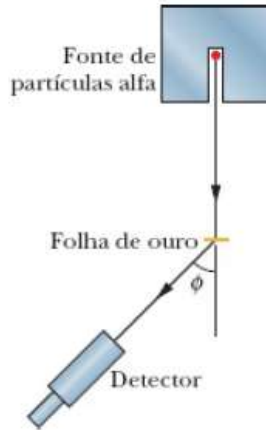


Figura 1 Arranjo experimental (visto de cima) usado no laboratório de Rutherford entre 1911 e 1913 para estudar o espalhamento de partículas  $\alpha$  por folhas finas de metal. A posição do detector podia ser ajustada para vários valores do ângulo de espalhamento  $\phi$ . A fonte de partículas  $\alpha$  era o gás radônio, um produto do decaimento do rádio. Foi esse experimento relativamente simples que levou à descoberta do núcleo atômico.

Na década de 1910, já se sabia que elementos radioativos, transformam-se espontaneamente em outros elementos, emitindo partículas no processo. Exemplo, é o gás radônio, que emite partículas  $\alpha$  com uma energia de aproximadamente 5,5 MeV. Atualmente as partículas  $\alpha$  são núcleos de átomos de hélio. Rutherford, idealizou e executou que as partículas  $\alpha$  incidirem em uma folha fina de metal e medir o desvio da trajetória das partículas ao passarem pelo material, essas partículas de massa é cerca de 7300 vezes maior que a do elétron, têm uma carga de  $+2e$ . A Fig. 1-1 reconstrói o arranjo experimental de Geiger e Marsden. A fonte de partículas  $\alpha$  era um tubo de vidro de paredes finas contendo radônio. O experimento consistia em medir o número de partículas  $\alpha$  em função do ângulo de espalhamento  $\phi$ . Os resultados obtidos estão na Fig. 1-2. Sendo que a escala vertical é logarítmica. O ângulo de espalhamento é pequeno para a grande maioria das partículas; entretanto, sendo a grande surpresa, poucas partículas tem ângulos de espalhamento extremamente elevados, próximos de  $180^\circ$ . Rutherford, relatou: "Foi a coisa mais incrível que aconteceu em toda a minha vida. É quase como se você desse um tiro de canhão em uma folha de papel e a bala ricocheteasse."

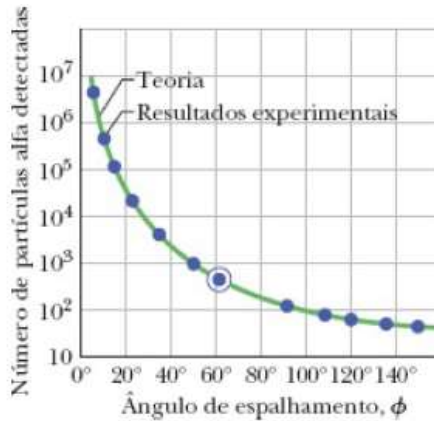


Figura – 2

Assim, caiu a teoria de J. J. Thomson, da esfera de passas. Logo, a carga positiva do átomo estava uniformemente distribuída em todo o volume do átomo. Os elétrons (as “passas” do modelo) vibravam em torno de posições fixas no interior dessa esfera de carga positiva (o “pudim”). Uma partícula  $\alpha$  ao passar por uma esfera de carga positiva do tamanho de um átomo produziria uma deflexão menor que 1°. (A deflexão esperada foi comparada, por um pesquisador, à que aconteceria se alguém desse um tiro em um saco cheio de bolas de neve.) Os elétrons do átomo praticamente não afetariam a partícula  $\alpha$ , muito mais pesada. Assim, os elétrons é que seriam espalhados para todos os lados. Logo, uma deflexão de mais de 90°, Rutherford, deduziu que a partícula  $\alpha$  teria que ter a uma força agindo considerável; que seria explicada se a carga positiva, estivesse concentrada em uma pequena região central. Com isso, a partícula  $\alpha$  poderia se aproximar muito da carga positiva, sem atravessá-la, e essa aproximação resultaria em uma força considerável. A Fig. 1-3 mostra possíveis trajetórias de partículas  $\alpha$  no interior da folha de metal. Vemos que a maioria das partículas não sofre nenhuma deflexão ou sofre apenas uma pequena deflexão, mas poucas que passam pelas proximidades do núcleo sofrem grandes deflexões. Assim, Rutherford concluiu de que o raio do núcleo era aproximadamente  $10^4$  vezes menor que o raio do átomo. Ou seja, o átomo era composto principalmente de espaço vazio.

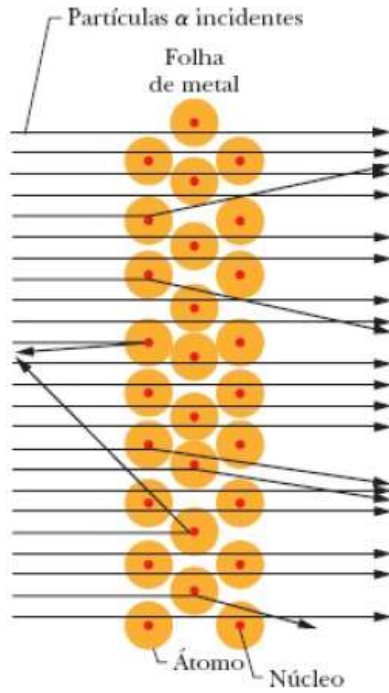


Figura 3 O ângulo de espalhamento de uma partícula  $\alpha$  depende da distância a que a partícula passa de um núcleo atômico. Para sofrer uma grande deflexão, a partícula tem que passar muito perto de um núcleo.

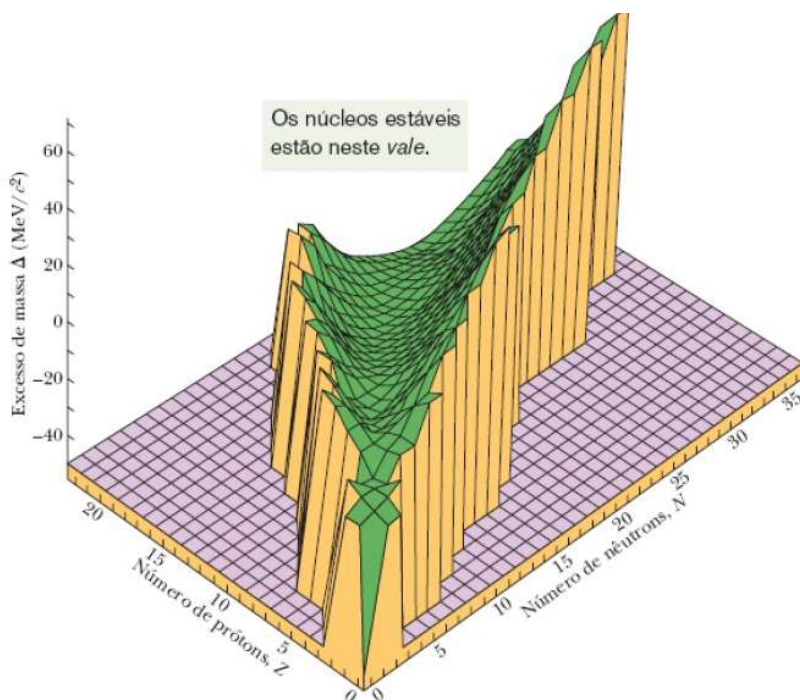


Figura 4 Gráfico dos núcleos conhecidos. A cor verde indica os núcleos estáveis; a cor amarela, os radionuclídeos. Os núcleos estáveis de pequena massa têm aproximadamente o mesmo número de nêutrons e prótons, mas os núcleos pesados têm um excesso de nêutrons. A figura mostra que não existem núcleos estáveis com  $Z > 83$  (bismuto).

## 1-2 Átomo de Niels Born [4],[22]:

Com a experiência de Rutherford a suposição das partículas elementares positivas e neutras, prótons e nêutrons estar concentrada no centro além da eletrosfera, que seria uma região ao redor do núcleo. Contudo se fosse, assim, os elétrons sendo negativo, iriam adquirir movimento na forma de espiral e chocar-se-iam com o núcleo. Com o postulado de Planck-Einstein e a descoberta dual do comportamento da luz gerou nova possibilidade para o modelo atômico, através da descoberta de que os gases dos elementos químicos diferentes passam por um prisma, produzindo espectros descontínuos de linhas ou raias finas de cores diferentes, que são eletromagnéticas visíveis, cada com comprimento de onda diferente, o espectro de luz emitido por uma fonte chama-se espectro de emissão. Neste espectro apresenta-se algumas faixas visíveis do espectro de emissão. Outro tipo de espectro de linhas existentes é o espectro de absorção, que mostra variações para um conjunto discreto de comprimentos de onda. O espectro de absorção é obtido fazendo a luz de espectro contínuo passar pela substância, substância que irá absorver alguns comprimentos de ondas., aplicando o princípio da correspondência. Logo Niels Born, relaciona os espectros de linhas dos elementos, como o hidrogênio, como a constituição do átomo, assim em 1913, altera o modelo proposto por Rutherford, demonstra que os elétrons se movem ao redor do núcleo

atômico em órbitas circulares com energia bem definida e característica, que nada mais é, que um nível de energia ou camada eletrônica. Sendo que para cada elétron são permitidas somente determinadas energia, discretizados, assim como sugerem as fórmulas espectroscópicas descobertas empiricamente por Balmer e Rydberg, sendo valores múltiplos inteiros do fóton, ou seja, quantum de energia. Através da fórmula de Balmer, Bohr analisou o espectro do hidrogênio verificou que os resultados concordavam com seu modelo. Seu modelo atômico foi apresentado por meio de postulados que seguem:

**1º postulado:** Um elétron em um átomo, se move em órbita circular estável em torno do núcleo sob interferência da atração coulombiana entre o elétron e o núcleo. Esse movimento está de acordo com as leis da mecânica clássica.

**2º postulado:** No lugar de um número infinito de órbitas possíveis, como previsto pela mecânica clássica, o elétron só pode se mover em órbitas determinadas, que podem ser associadas a números inteiros.

**3º postulado:** A frequência da luz emitida está relacionada com a variação de energia entre os níveis de energia que o átomo pode ocupar. A frequência é dada pela equação de Planck – Einstein.

Também Niels Born demonstra que os elétrons se movimentam no estado fundamental, ou de menor energia que é o mais estável. E quando o elétron absorve fótons que dizer que ele salta de um nível mais próximo do núcleo para de um de maior energia, mais externo, ou seja, o estado excitado ou estado ativado. Mas como é instável retorna para o nível de menor energia, que para isso o elétron emite a energia excedente. Niels Born assim, com os espectros de energia calcula a energia para cada estado de energia e a quantidade máxima de níveis de energia são, K, L, M, N, O, P E Q, totalizando setes níveis. Modelos conhecido como Rutherford-Born, conclui-se que cada elemento tem um espectro descontínuo, devido os níveis de energia serem quantizados, com energias bem definidas, correspondendo ao comprimento de onda. Quando Bohr estabeleceu seu modelo atômico tudo que ele tinha era a quantização da energia de Planck e o conceito de fóton de Einstein. Algumas de suas afirmações foram derrubadas e em particular o conceito de elétron orbitando o núcleo em órbitas definidas. A ideia de órbita viola a incerteza de Heisenberg, porque ela junta a imagem da partícula com uma quantidade de movimento ocupando uma posição conhecida, quando essas duas variáveis não podem ser determinadas simultaneamente. Sendo representados nas escolas o modelo de Niels Born e nos vestibulares na Mecânica Quântica as equações de energias previstas nestes modelos são a mesma prevista no modelo avançado, átomo de Schroedinger.

## 1-3 A equação de Schroedinger [4],[7],[8]:

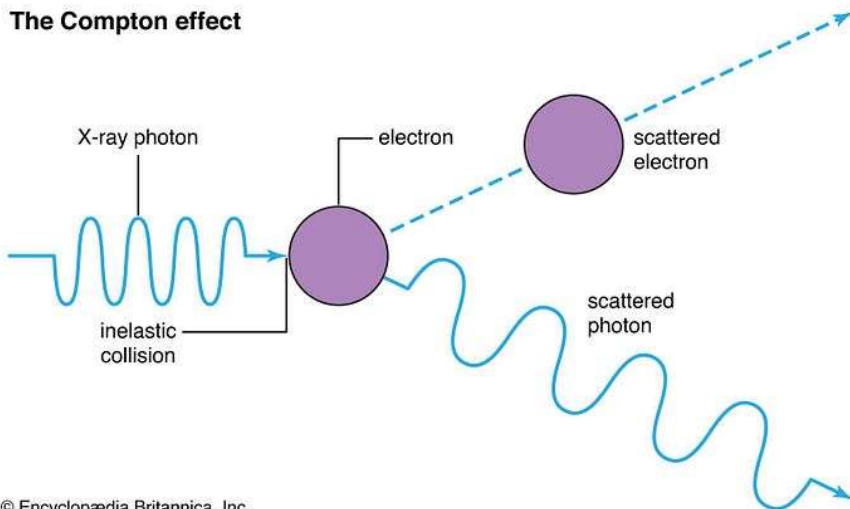
Na virada do século 20, novas descobertas experimentais são realizadas, desafiando a noção amplamente aceita pela luz que era composta simplesmente por ondas eletromagnéticas

governadas pelas equações de Maxwell. Com a teoria de radiação de corpo negro de Max Planck, que solucionou o problema da “catástrofe ultravioleta”, reconhecido com o Nobel de 1918, sugere uma natureza discreta e corpuscular da luz. Através disso surge a teoria do efeito foto elétrico, Nobel de 1921. Einstein e Planck, propõe então que a luz, embora com características de onda, também, propagada e absorvida em “pacotes” discretos ou ‘quanta’ de energia, que passaram a ser conhecidos como fótons, cujas energias foram dadas pela relação de Planck-Einstein.

$$E = h\nu$$

Onde  $\omega$  denota a frequência angular da onda eletromagnética,  $E$  indica a energia do fóton correspondente e  $h$  é simplesmente uma constante de proporcionalidade chamada de constante de Planck. O comportamento de partículas da luz foi talvez demonstrado de forma conclusiva por Arthur Compton em 1923. Para confirmar a teoria, teoria corpuscular da luz proposta por Einstein e Planck, Compton realizou uma série de experimentos nos quais espalhou raio-X pareciam experimentar uma diminuição repentina na frequência após a dispersão. Este fenômeno agora conhecido como efeito Compton.

### The Compton effect



© Encyclopædia Britannica, Inc.

Figura-5

Em suas observações Compton observa a teoria da onda eletromagnética da luz não pode ser explicada pela teoria clássica, que previa nenhuma mudança na frequência após a dispersão. Entretanto, o efeito pode ser explicado se adotarmos a teoria do fóton de Einstein e Planck e considerasse o raio X como uma partícula colidindo inelasticamente com o elétron livre perdendo energia no processo. O choque resultante entre as descrições de onda e partícula da luz veio a ser conhecido como a teoria da dualidade onda-partícula.

Na década de 1920, surgem evidências que a luz parecia demonstrar não apenas o comportamento de onda de partículas da luz, mas também o comportamento de onda das partículas materiais. Que teve início no experimento de Davisson-Germer de 1927, no qual os

elétrons espalhados por uma superfície cristalina mostraram produzir padrões de difração. Padrões de difração só podem ser produzidos como resultados de interferência entre ondas em propagação. Logo, o experimento de Davisson-Germer é explicado se os elétrons dispersos fossem descritos matematicamente pela propagação de ondas.

Para explicar a teoria ondulatória do elétron, o historiador Louis de Broglie propôs em sua tese de doutorado de 1924 intitulada "On the Theory of Quanta" que toda partícula material tem uma onda associada, que é conhecida como onda de matéria ou onda de Broglie, com um comprimento de onda de Broglie correspondente. Essa onda de matéria captaria os aspectos ondulatórios do comportamento da partícula. De Broglie também, descobre que esse conceito de matéria também poderia fornecer uma explicação para os espectros de frequência discretos observados dos átomos, que indicavam a presença apenas de órbitas eletrônicas discretas e permitidas.

*"O elétron não pode mais ser concebido como um único e pequeno grânulo de eletricidade; deve estar associado a uma onda, e essa onda não é um mito; seu comprimento de onda pode ser medido e suas interferências previstas."*

Louis De Broglie, Palestra Nobel, 1929

Broglie postulou para resolver o problema em aberto entre as descrições de partícula e onda da matéria, concebendo a relação entre as propriedades de uma partícula e as propriedades de sua onda de matéria correspondente, através do momento da partícula ao comprimento de onda de Broglie de sua onda de matéria

$$p = h \frac{2\pi}{\lambda} = hk$$

Onda  $p$  é o momento da partícula,  $\lambda$  é o comprimento de onda de Broglie da onda de matéria correspondente e  $k$  é o 'vetor de onda' ou 'número de onda' da onda de matéria. Em três dimensões espaciais:

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

Essa é a chamada relação de Broglie, que a relação Einstein-Planck preenche a lacuna entre as descrições de onda e partícula da matéria, relacionando a energia e o momento de uma partícula à frequência e ao comprimento de onda de sua onda associada. As duas relações formam os fundamentos da teoria quântica inicial.

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

considere uma "onda plana" de Broglie unidimensional simples, que é definida por uma amplitude  $A$ , um vetor de onda  $k$  e uma frequência angular  $\omega$ . Essa onda, que daqui em diante chamaremos de função de onda, pode ser representada da seguinte forma:

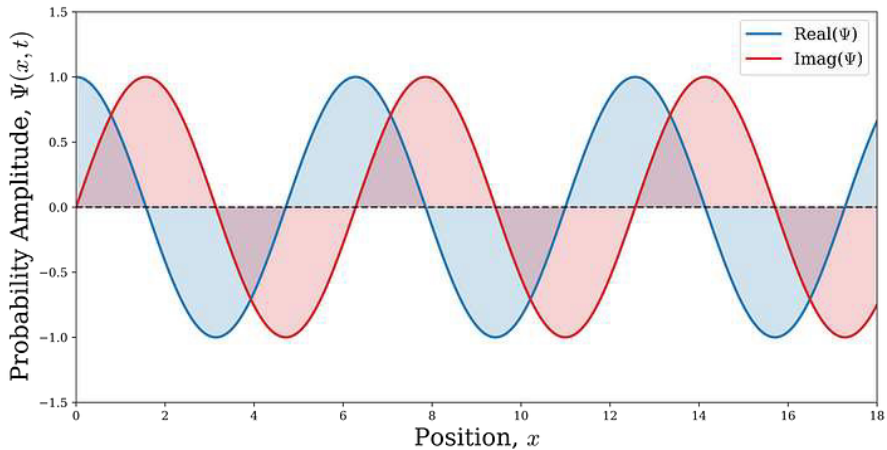


$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

$$\psi(x, t) = Ae^{ikx}e^{-i\omega t}$$

$$\psi(x, t) = A[\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)]$$

a identidade de Euler para mostrar também o exponencial complexo em sua forma trigonométrica. Também consideramos apenas a propagação da onda plana na direção  $x$  positiva para simplificar. Para ilustrar isso, podemos plotar os componentes reais e imaginários da onda de matéria em algum tempo inicial  $t$ :



No entanto, a quantidade real representada por  $\Psi(x, t)$  só mais tarde seria interpretada como uma amplitude de probabilidade. Essa interpretação é conhecida como interpretação da amplitude de probabilidade de Born.

Agora podemos usar as relações de Broglie e Einstein-Planck para relacionar as propriedades da função de onda com as propriedades da partícula correspondente. Isso nos dá:

$$\psi(x, t) = Ae^{ipx/\hbar}e^{-iEx/\hbar}$$

Agora que temos nossa descrição da onda de matéria da partícula, vamos também definir a energia total da partícula. Em geral, a energia total será composta por um termo de energia cinética e um termo de energia potencial da seguinte forma:

$$E = \frac{1}{2}m\dot{x} + V(x)$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

Onde  $m$  é a massa da partícula,  $p$  é o momento da partícula e  $V(x)$  representa algum campo potencial espacialmente dependente.

A equação de Schroedinger, publicada por Erwin Schroedinger em seu artigo de 1926 intitulado "Uma teoria ondulatória da mecânica de átomos e moléculas", é uma equação diferencial que descreve como a função de onda que representa o estado de uma partícula evolui no tempo. Como tal, vamos calcular a derivada temporal da nossa expressão de onda de matéria ou função de onda  $\Psi(x, t)$  para obter o seguinte:

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= Ae^{i(kx - \omega t)} \\ \frac{d\psi(x, t)}{dt} &= -\frac{i}{\hbar} E e^{ipx/\hbar} e^{-iEx/\hbar} = -\frac{i}{\hbar} E \psi(x, t) \\ i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt} &= E \psi(x, t)\end{aligned}$$

Se substituirmos em nossa expressão a energia total da partícula, teremos:

$$i\hbar \frac{d\psi(x, t)}{dt} = \left( \frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \psi(x, t)$$

Agora, tudo o que resta é colocar o momento  $p$  em função da posição  $x$ . Para fazer isso, vamos calcular a 2ª derivada espacial da função de onda  $\Psi(x, t)$ .

$$\begin{aligned}\frac{d\psi(x, t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar} p \psi(x, t) \\ \frac{d^2\psi(x, t)}{dx^2} &= \left( \frac{p}{\hbar} \right)^2 \psi(x, t)\end{aligned}$$

Se então multiplicarmos e dividirmos ambos os lados por  $2m$  e reorganizarmos, obtemos:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m} \psi(x, t)$$

Ou em uma representação de operador onde extraímos o termo da função de onda:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m}$$

Podemos, portanto, substituir essa expressão em nossa derivada de tempo na eq. (13) para obter:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t)$$

O que nos dá exatamente a equação de Schroedinger dependente do tempo unidimensional. De forma mais geral, em três dimensões espaciais, podemos simplesmente substituir nossa posição  $x$  por um vetor de posição  $r$  e substituir a derivada parcial em  $x$  pelo laplaciano.

$$i\hbar \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t)$$

Os termos entre colchetes ainda representam efetivamente a energia total da partícula. Agora podemos simplificar as coisas compilando esses termos em um operador hamiltoniano  $H$ : Os termos entre colchetes ainda representam efetivamente a energia total da partícula. Agora podemos simplificar as coisas compilando esses termos em um operador hamiltoniano  $H$ :

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$$

Isso nos dará a seguinte representação da equação de Schroedinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t)$$

A equação de Schroedinger dependente do tempo é a forma mais geral da equação de Schroedinger a partir da qual todas as outras formas podem ser derivadas. Ao considerar o caso de um campo potencial independente do tempo e, conseqüentemente, um hamiltoniano independente do tempo, pode-se derivar a forma independente do tempo da equação de Schroedinger. Isso está além do escopo deste artigo, no entanto, se você quiser aprender mais sobre as várias representações da equação de Schroedinger com mais detalhes, sugiro que verifique meu outro artigo sobre o assunto:

A hipótese de Broglie foi um trampolim incrivelmente importante para alguns dos conceitos mais fundamentais da mecânica quântica. Assim como a aprovação de Schroedinger, também podemos pegar nosso conceito de onda de matéria e construí-lo para derivar diretamente o princípio da meditação quântica de Heisenberg. Essa derivação é o foco de outro artigo meu no qual discutimos como ondas de matéria localizadas podem ser representadas usando a transformada de Fourier e como isso resulta não natural do princípio da reflexão de Heisenberg.

## **1-3 Dirac, O Pósitron e as Partículas Elementares [9]:**

Dirac com formação em engenharia elétrica em Bristol parte para Cambridge teve como orientador R.H. Fowler que trabalhou com Niels Bohr, um fato notável na Física é os Físicos de sucessos são águias que voam com águias. Dirac se envolve a problemas teóricos e, conhece Heisenberg em 1925, então se envolve profundamente na Mecânica Quântica que se estruturava em Gatinhem e Copenhagen, e torna-se o principal arquiteto da nova teoria a Física. Aos 22 anos, em 1924 começa a publicar com altíssima produtividade, em 1926 publica 1926, a obra “Sobre a Teoria da Mecânica Quântica”. Desenvolvendo nesta obra o formalismo especial e aplica conceitos matemáticos, principalmente de análise funcional, assim é possível uma melhor compreensão do comportamento e interação de átomos, elétrons e fótons, o principal problema da Física dos anos 20 e 30. Dirac então, ajuda a construir a Mecânica Quântica com Heisenberg e os maiores Físicos da Europa o qual conheceu, e soviéticos. Uma da grande conquista de Dirac foi aperfeiçoar uma descrição de certas partículas elementares, particularmente os elétrons, através da Equação de Dirac, do qual foi reconhecido com o Nobel, que compartilhou com Erwin Schroedinger, onde partiu de uma equação que Schroedinger havia estabelecido, dois anos antes, em 1928. Devido ao seu grande interesse a Relatividade desde do curso de engenharia elétrica, obtém uma nova equação, as “Lacunas de Dirac” ou elétrons positivos, que são os pósitrons. Verificadas em agosto de 1932, por C.D. Anderson, encontrados por exemplo em tomografias por emissão de pósitrons técnica semelhante de raios-x. A descoberta do pósitron levou à compressão de existem antipartículas correspondentes a todos os tipos de partículas do Universo. Um elétron e um antielétron circundando um ao outro formam um “átomo” pósitônico. Dirac também supõe a condição dos antiprótons. Em 1931, supõe, concluindo teoricamente a existência de partículas elementares de um só polo magnético, norte ou sul, o que explica o caráter discretos das cargas elétricas. Inspirado em problemas de resistências dos materiais reintroduzido em 1927 em uma função conhecida no século XIX por G. Kirchoff, não havia sido explorado ainda, ficou conhecido como delta de Dirac. Indispensável a Física Matemática e Engenharia Elétrica e com Enrico Fermi associado a estatística que desenvolveram juntos independentemente em 1926. Dirac constrói as bases da Eletrodinâmica Quântica e introduziu ideias originais e importantes para a cosmologia. Von Neumann, o pai do computador, fez algumas críticas a escola de Copenhagen e o formalismo de Dirac.

## **1-4 Wolfgang Ernst Pauli, O Spin e a Exclusão de Pauli [10]:**

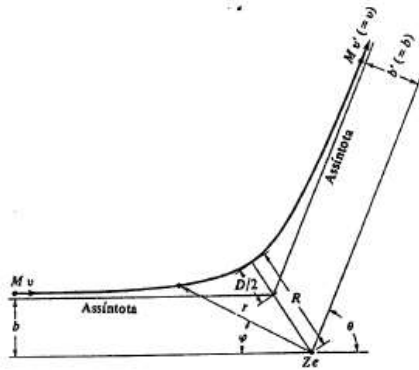
Pauli, reconhecido com o Nobel, por sua contribuição fundamental sobre a descoberta de uma nova lei da Natureza, o princípio de exclusão ou princípio de Pauli, teoria que envolve a teoria do spin, que é a base da estrutura da matéria. Publicou seu primeiro artigo sobre a Relatividade de Albert Einstein. Frequentou a Universidade Ludwig-Maximilian em Munique, sobre orientação de Arnold Sommerfeld, recebe em 1921 em julho o PHD, sobre a teoria quântica do hidrogênio diatômico ionizado. Sua monografia foi sobre a Relatividade, a pedido

de Sommerfeld, chega então a 237 páginas, que foi elogiado por Albert Einstein e seus companheiros que procuravam progresso na Física. Pauli, então passa um ano em Gottingen como assistente de Max Born, no ano seguinte no Instituto de Física Teórica de Copenhague, agora o Instituto de Niels Born. Neste período, foi peça fundamental, desenvolve o princípio de exclusão e a teoria do spin não relativística, escreve também em 1924 um artigo em medicina sobre química coloidal, então é nomeado professor de ETH, em Zurique. Em 1930 postula a teoria do Neutrino, crítica também na efervescência teoria epistemológica dos sonhos na psicanálise a teoria de Jung. Publica então, o livro de Física, Handbuch der Physik, livro definitivo da mecânica quântica. Robert Oppenheimer, chama como “a única introdução adulta à mecânica quântica”. Em 1940 com a segunda guerra mundial, muda-se para a América, e torna-se professor no Instituto de física teórica de Estudos Avançados. Em 1946, volta para Zurique. Sempre preferiu correspondências com seus amigos, ao invés de publicar seus artigos, com Niels Bohr e Werner Heisenberg. Em 1921 trabalha com Bohr para criar o princípio Aufbau. Em 1924, propõe um novo grau de liberdade (ou número quântico) com dois valores possíveis, para resolver inconsistências entre os espectros moleculares observados e a teoria em desenvolvimento da mecânica quântica. Formula assim, o princípio da exclusão de Pauli, talvez o mais importante, que afirma que dois elétrons não podem existir no mesmo estado quântico, identificados por quatro números quânticos, incluindo seu novo grau de liberdade de dois valores. A ideia se origina do spin, com Ralph Kronig, um ano depois, George Uhlenbeck e Samuel Goudsmit identificam o novo grau de liberdade de Pauli como spin do elétron, no qual Pauli demorou para acreditar. Em 1926, Heisenberg publica a teoria da matriz da mecânica quântica moderna e Pauli, assim, usa para derivar o espectro observado do átomo de hidrogênio. Introduce-se então as matrizes de Pauli  $2 \times 2$  como base dos operadores de spin, resolve-se assim a teoria não relativística do spin, com a equação de Pauli, influencia Paul Dirac em sua equação para o elétron relativístico, porém Dirac afirma que foi independente. E Dirac cria as matrizes  $4 \times 4$  do spin fermiônico. Pauli propõe no decaimento beta, uma partícula neutra o neutrino, em 1930, não superior a 1% da massa do próton, para explicar o espectro contínuo do decaimento beta. Enrico Fermi incorpora a partícula no decaimento e em 1956 o neutrino é confirmado por Frederick Reines e Clyde Cowan, dois anos e meio da morte de Pauli, aos 58 anos.

## 2-Referencial Teórico.

### 2.1- A seção de Choque Diferencial de Rutherford:

Dado a Figura da deflexão da partícula alfa incidida por Rutherford em seu experimento:



Considerando da Mecânica Clássica, usando a expressão da força repulsiva:

$$F = \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \frac{zZe^2}{r^2}$$

Obtendo a seguinte equação para a trajetória da partícula alfa:

$$\frac{1}{r} = \frac{1}{b} \sin \varphi + \frac{D}{2b^2} (\cos \varphi - 1) \quad 2-1-1$$

Que é uma equação de hipérbole em coordenadas polares.

Onde:

$$D = \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \frac{zZe^2}{Mv^2 / 2}$$

Sendo D um parâmetro conveniente, igual a distância de maior aproximação ao núcleo em uma colisão frontal ( $b=0$ ), assim que D é a distância para a qual a energia potencial:

$$V(q) = \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \frac{zZe^2}{D}$$

É igual a energia cinética:

$$K = \frac{Mv^2}{2}$$

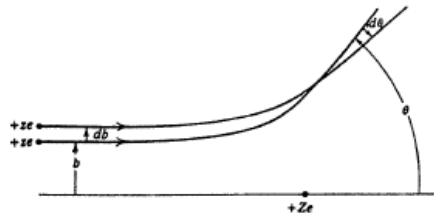
Isso é provado igualando as expressões e extraindo o valor de D. Neste ponto a particulariza pararia e mudara de direção em seu movimento. Assim, o ângulo de espalhamento teta é obtido a partir de 4-3, fazendo r infinito, e usando teta \*\*\*. Encontrando:

$$\cot g \frac{\theta}{2} = \frac{2b}{D}$$

De 4-5 vê-se que o parâmetro de impacto de espalhamento da partícula alfa está entre b e b+db, então o ângulo de espalhamento está entre  $\theta$  e  $\theta+d\theta$ , onde a relação de b e  $\theta$  é dada pela equação, isso é ilustrado na figura 4-5.

O número  $N(\Theta)d\Theta$  de partículas alfa espalhadas entre  $\Theta$  e  $\Theta+d\Theta$  ao atravessar toda a folha é equivalente aos problemas de cálculo aos que incidem, com parâmetro de impacto b e b+db, sobre o núcleo da folha:

$$N(\Theta)d\Theta = \left( \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 \left( \frac{zZe}{2Mv^2} \right)^2 \frac{I \rho t 2\pi \sin \Theta d\Theta}{\sin^4(\Theta/2)} \quad 2-1-1$$



A relação entre o parâmetro de impacto be o engulo de espalhamento II. Quando b cresce: (maior afastamento do núcleo), o ângulo II decresce (menor engulo de espalhamento). As par- dulas a com parâmetros de impacto entre b e b + db sio espalhadas em ângulos entre II e II +d/J,

Onde I é o número de partículas alfa incidentes sobre a folha de espessura t cm contendo p núcleos por centímetro cubico.

Deduzindo 2-1-1 através de

Considerando um pedaço de folha com seção de área 1cm, como mostrado na figura 4-6, de raio interno b e externo b +db, é traçado em torno de um eixo incidente passando por cada núcleo, sendo a área de cada anel  $2\pi b db$ . O número desses anéis neste de folha é pt. A probabilidade de que uma partícula alfa passe através de um desses anéis,  $P(b)db$ , é igual a área total ocupada por esses anéis dividida pela área total do pedaço de folha. Supomos que a folha seja suficientemente fina para que possamos ignorar superposição de anéis de núcleos diferentes. O processo envolve, envolve um núcleo de espalhamento, e a probabilidade de que haja espalhamento considerável por mais de um núcleo é muito pequena. Logo:

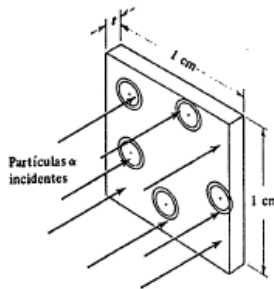
$$P(b)db = \rho t 2\pi b db$$

Porém  $b = (D/2) \cot g(\theta/2)$ , de forma que:

$$db = -\frac{D}{2} \frac{d\theta/2}{\sin^2(\theta/2)}$$

Dados:

$$bdb = -\frac{D^2}{8} \frac{\cos(\theta/2)d\theta}{\sin^2(\theta/2)} = -\frac{D^2}{16} \frac{\sin \theta d\theta}{\sin^4(\theta/2)}$$



Um feixe de partículas  $a$  incidente sobre uma folha de  $1 \text{ cm}^2$  de área e  $t \text{ cm}$  de espessura. Os anéis, que são apenas construções geométricas e não algo físico, são concentrados sobre os núcleos. Na realidade há muito mais núcleos do que os mostrados, e eles são muito menores do que é mostrado.

Portanto:

$$P(b)db = -\frac{\pi}{8} \rho t D^2 \sin \theta \frac{d\theta}{\sin^4(\theta/2)}$$

Mas  $-P(b)db$  é igual à probabilidade de que as partículas sejam espalhadas entre os ângulos  $\theta$  e  $\theta + d\theta$ . O sinal de menos aparece do fato de que uma diminuição em  $b$ , isto é,  $-db$ , corresponde a um acréscimo em  $\theta$ , isto é,  $+d\theta$ . Usando nossa notação anterior, sendo  $\Theta$  o ângulo de espalhamento pela folha inteira, isto dá

$$N(\Theta)d\Theta = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{zZe}{2Mv^2}\right)^2 \frac{I\rho t 2\pi \sin \Theta d\Theta}{\sin^4(\Theta/2)}$$

Finalmente, fazendo:

$$D = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{zZe^2}{Mv^2/2}$$

Dado por 2-1-1.

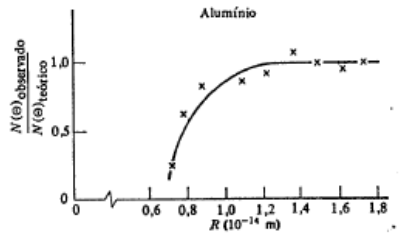


Logo a formula 4-7 expressa em termos de seção choque diferencial  $d\sigma / d\Omega$ . Dado por que,  $dN$  números de partículas alfa espalhadas dentro de um ângulo solido  $d\Omega$  em torno de um ângulo de espalhamento  $\Theta$ .

$$dN = \frac{d\sigma}{d\Omega} I n d\Omega$$

Se  $I$  partículas alfas incidem sobre um alvo de  $n$  núcleos por centímetro quadrado, a definição é a análogo a 2-18[4].

$$N = \sigma I n$$



Alguns dados obtidos no espalhamento de partículas  $\alpha$ , emitidas por uma fonte radioativa, por alumínio. A abscissa a distância de maior aproximação ao centro nuclear. A figura 4-8 ilustra. O ângulo sólido  $d\Omega$ , que é uma região bidimensional, é medida numericamente pela área que a região angular subtende sobre uma esfera de região unitário centrada no local onde ocorre do espalhamento. O interesse onde no espalhamento de Rutherford, que é simétrico em relação ao feixe incidente, o interesse é no ângulo sólido  $d\Omega$  que abrange todos acontecimentos nos quais o ângulo de espalhamento está na região  $d\Theta$  em  $\Theta$ .

$d\Omega = 2\pi \sin \Theta d\Theta$  Usando em 2-1-1,  $N(\Theta)d\Theta$  como  $dN$  e  $pt$  como  $n$ , obtemos :

$$dN = \left( \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 \left( \frac{zZe}{2Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)} I n d\Omega$$

Comparando com a definição 4-8, obrado por a seção de choque diferencial de espalhamento de Rutherford:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{1}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 \left( \frac{zZe}{2Mv^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\Theta/2)}$$

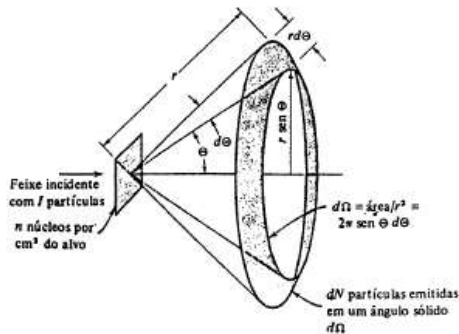


Ilustração da definição de secção de choque diferencial  $da/dn$ . Se o alvo for suficientemente fino para que uma parte (cula incidente tenha uma possibilidade desprezível de interagir com mais de um núcleo ao atravessa-lo, então  $dN = (da/dn) \ln do$ .

## 2-2. Hofstadter, O espalhamento de Elétrons, formas de densidades nucleares [4]:

### FORMAS E DENSIDADES NUCLEARES

O espalhamento de partículas alfa pelos núcleos fornece informação sobre a distribuição de carga como, por exemplo, sua forma. Considerando um "microscópio eletrônico" para "ver" a distribuição de carga, que não é em si, uma distribuição e sim uma figura de difração, produzida pelo espalhamento da função de onda do elétron. Considera-se os mínimos, qualitativamente da separação angular teta adjacentes da figura de difração, tendo a relação de difração usual

$$\theta \approx \frac{\lambda}{r'}$$

Onde  $\lambda$  é o comprimento de onda de De Broglie do elétron e  $r'$  o raio de distribuição de carga. Consequentemente teta, é resulta um valor aproximado de  $r'$ , pois lambda deve ser calculado a partir da energia cinética do elétron, que é conhecida.

Quantitativamente determina-se pelas figuras de difração uma determinação precisa da distribuição de carga. Com isso, considera-se as funções de onda do elétron espalhadas por cada região do núcleo, ponderadas por uma região de carga supostamente e considerando as diferenças de fases em suas interferências construtivas e destrutivas segundo os diferentes ângulos da figura de difração. A distribuição de carga suposta gradativamente é mudada até coincidir com as figuras de difração. Constatou-se que pode ser determinada mesmo se a figura da difração apresenta apenas um mínimo. Este tipo de análise relaciona-se com os cálculos de espalhamento de Schroedinger unidimensionais. A dificuldade aparece no tratamento tridimensional e relativístico da análise, assim como no tratamento relativista, o que implica no uso da versão de Dirac da mecânica quântica.

Na figura 2-2-1, tem-se o dispositivo de Hofstadter e colaboradores em que se mede o espalhamento dos elétrons de alta energia por vários núcleos. Os elétrons são produzidos em um acelerador linear, assemelha-se a grandes canhoes usados em microscópios eletrônicos ou em tubos de televisão, as partículas elementares são espalhadas em uma folha muito fina, cujos núcleos dos átomos desejamos estudar, dentro das câmaras de espalhamento, no interior do qual se faz vácuo, após o espalhamento, o espectrômetro detecta os elétrons determinando sua energia cinética através do encurvamento das trajetórias dos elétrons em um campo magnético.

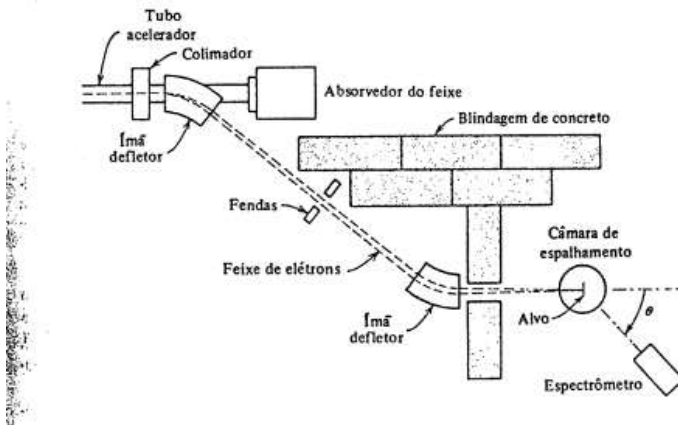


Figura 2-2-1. Esquerda: Uma distribuição de carga alongada correspondente a um momento quadruplar  $q$  positivo (forma de uma bola de futebol americano). Direita: Uma distribuição de carga oblonga (forma de um comprimido) corresponde a um momento quadruplar negativo. Ambos os elipsoides são simétricos em relação ao eixo que contém, seus centros.

Somente os elétrons espalhados são contabilizados, ou seja, aqueles cuja energia cinética é igual à dos elétrons do feixe incidente menos uma pequena quantidade de energia no recuo dos núcleos. Resultando na garantia que os núcleos não sejam excitados neste processo, com isso a cara de seu estado fundamental pode ser determinada.

A figura 2-1-2 mostra os resultados de elétrons de 420 MeV  $6^\circ\text{C}$ , um núcleo de número de massa pequeno. No eixo das ordenadas a seção de choque diferencial de espalhamento  $d\sigma/d\Omega$ , quantidade definida em 4-8 e que é proporcional aos números de elétrons espalhados em cada ângulo.

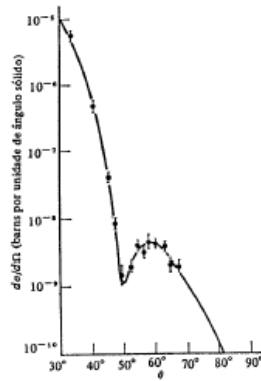


Figura 2-2-2

A distribuição angular dos elétrons espalhados pelo  $^{12}\text{C}$ , correspondente a um feixe incidente de 420 MeV. A grandeza usada na medida do número de elétrons espalhados em função do ângulo de espalhamento é a seção de choque diferencial de espalhamento da/díl. Ela é a definição em termos de uma unidade de área normalmente usada em física nuclear denominada barn;  $1\text{bn} = 10^{-28}\text{cm}^2$ . A curva é o melhor ajuste aos dados experimentais obtido através da análise de espalhamento descrita no texto.

A distribuição radial de densidade de carga nuclear  $\rho(r)$ , deduzida dessa distribuição de carga angular, corresponde ao  $^{12}\text{C}$  e é uma das curvas apresentadas na figura 15-6.

Para uma dada energia dos elétrons incidentes, núcleos de números de massa  $A$  mais elevado apresentam mínimos adicionais, cada vez mais próximos à medida que  $A$  aumenta, este fato com a equação abaixo mostra que o raio da distribuição de carga aumenta proporcionalmente com o aumento de  $A$ . Os resultados quantitativos são apresentados na figura 2-1-3 em que as curvas representam as densidades de carga  $\rho(r)$  obtidas por um certo número de núcleos. As quais são reproduzidas com bastante precisão através da equação empírica:

$$\rho(r) = \frac{\rho(0)}{1 + e^{(r-a)/b}}$$

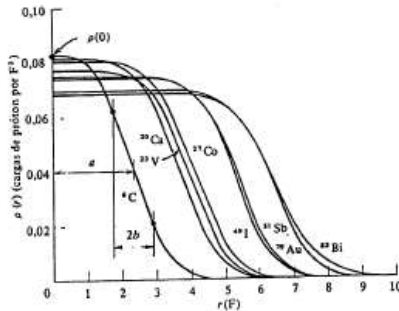


FIGURA 2-2-3. As densidades de carga de alguns núcleos. A curva referente ao  $^{12}\text{C}$  corresponde à distribuição angular apresentada na figura 15-5. O parâmetro  $a$  - correspondente ao raio  $a$ , meia altura-, a espessura superficial  $2b$  e a densidade de carga no interior  $p(0)$  são apresentadas para o  $^{12}\text{C}$ .

cujos parâmetros  $a$  e  $b$  têm os valores

$$a = 1,07 A^{1/3} \times 10^{-15} \text{ m} = 1,07 A^{1/3} F$$

$$b = 0,55 \times 10^{-15} \text{ m} = 0,55 F$$

Com base nas figuras e nas equações deste item, esboçamos as seguintes conclusões:

A densidade de carga dos núcleos, que é essencialmente a distribuição de prótons nos núcleos, é constante no seu interior e cai rapidamente a zero na superfície nuclear.

O raio, para o qual a densidade de carga de carga possui a metade do valor relativo ao interior do núcleo, aumenta lentamente à medida que o número de núcleos  $A$  no núcleo. Mais precisamente, o raio  $a$  é proporcional a  $A$ .

A espessura da superfície nuclear é dada aproximadamente pela quantidade  $2b$ , uma vez que a maior parte de variação do fator... de um no interior e próximo de zero no exterior, ocorre para quando  $r$  varia de  $a-b$  a  $a+b$ . O valor  $2b$  da espessura superfície é aproximadamente o mesmo para todos os núcleos.

O valor  $p(0)$  da densidade de carga no interior do núcleo diminui lentamente à medida que  $A$  aumenta.

Se fizermos a hipótese de que a distribuição de prótons no núcleo é a mesma que a distribuição de existências (existem certas evidências para esta hipótese), então a densidade de carga  $p(r)$ , que representa a densidade de prótons no núcleo, é a mesma que a densidade de  $p_m(r)$ , que representa a densidade de todos os núcleos, exceto por um fator proporcional a  $Z/A$ , razão o número de prótons e o número total de núcleos presentes no núcleo. Isto é,

$$\rho(r) \propto \frac{Z}{A} \rho_M(r)$$

Com isso  $\rho(0)$  decresce quando A aumenta está relacionado a diminuição da razão Z/A quando A aumenta. (A tabela periódica mostra que Z/A=1/2 para A=40 enquanto que Z/A=2,5 para A=240.). Isto indica que o valor no interior da densidade de pm (0) é aproximadamente o mesmo para todos os núcleos.

#### MASSAS E ABUNDÂNCIAS NUCLEARES

A espectrometria de massa ou de equilíbrio energético em reações nucleares, determina as propriedades nucleares dos átomos e suas peculiaridades. Estas massas, as dos núcleos correspondentes podem ser determinadas eliminando-se Z vezes a massa do elétron. O equivalente em massa das energias de ligação eletrônicas são suficientemente e podem ser desprezadas.

## 2.3 – Espalhamento de Mott [12]:

Agora demonstraremos a fórmula de Mott pelo método QED, sabendo que a equação de Dirac de Queda inclui efeitos relativísticos e de spin, quando se considera os efeitos relativismo chegamos à equação de espalhamento de Mott, sendo que a QED é apenas uma linguagem “matemática” e a partir do método QED não podemos imaginar o mundo real. Usando a relação clássica de Coulomb. Logo o potencial escalar ( $A^0 = \phi/c$ ) é (2-3-1)

$$A^0(x) = \frac{\varphi}{c} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{|\vec{x}|} \frac{1}{c} \quad \vec{A}(x) = A^i(x) = 0 \quad (i=1,2,3)$$

onde supomos o campo elétrico estático, então o potencial vetorial (=  $A^i$ ) é zero.

De Ap.1 e (2-3-1), a interação Laringiana entre fóton e férmion é (2-3-2)

$$L_I = ceA_\mu(x) \bar{\psi}(x) \gamma^\mu \psi(x) = - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{x}|} \bar{\psi}(x) \gamma^0 \psi(x)$$

onde usamos a versão (-1, 1, 1, 1).

O número (N) da partícula (carga = e) se espalhando durante o longo tempo T é (2-3-3)

$$dN = T \rho_1 v_1 d\sigma$$

onde  $\rho_1$  é a densidade numérica da partícula,  $v_1$  é sua velocidade e  $d\sigma$  é a seção transversal diferencial.

Aproximadamente, a velocidade  $v_1$  é

$$v_1 = \frac{c^2 \left| \vec{P}_1 \right|}{E_1} \quad E_1 \approx mc^2 \quad \rightarrow \quad v_1 \approx \frac{\left| \vec{P}_1 \right|}{m}$$

Em QED, o número de eventos de espalhamento em algum espaço de momento infinitesimal ( $= d^3 p_2$ ) é expresso como

$$dN = \left| \langle \beta | S | \alpha \rangle \right|^2 \frac{d^3 P_2}{(2\pi\hbar)^3 2E_2} \quad (2-3-5)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são estados iniciais e finais do espalhamento de Coulomb, e S significa matriz S. E e  $2\pi\hbar$  são necessários para a normalização.

A matriz S pode ser expressa como operador unitário de interação hamiltoniana, como segue,

$$S = e^{-iWt} = e^{-iH_I x^0 / \hbar c} = 1 - i \frac{H_I x^0}{\hbar c} + \dots \quad (x^0 = ct, \hbar c = H_I) \quad (2-3-6)$$

Conforme mostrado no Ap.1, esta homepage expressa o estado inicial com número de onda ( $k_1$ ), como segue,

$$|\alpha\rangle = \sqrt{(2\pi)^3 2\hbar\omega_1} c_{s1}^\dagger(k_1) |0\rangle = \sqrt{(2\pi)^3 2E_1} c_{s1}^\dagger(k_1) |0\rangle \quad (2-3-7)$$

Esses coeficientes são censados pelo fator de normalização da 2-3-12.

E o estado final pode ser expresso usando o operador de aniquilação, como segue,

$$\langle \beta | = \sqrt{(2\pi)^3 2\hbar\omega_2} \langle 0 | c_{s_2}(k_2) = \sqrt{(2\pi)^3 2E_2} \langle 0 | c_{s_2}(k_2) \quad (2-3-8)$$

Aqui, os estados inicial e final devem ter a mesma energia. Portanto, o fator de normalização da 2-3-12 pode ser expresso como

$$E_1 = E_2 \rightarrow \frac{d^3 P_2}{(2\pi\hbar)^3 2E_2} = \frac{d^3 k_2}{\sqrt{(2\pi)^3 2E_1} \sqrt{(2\pi)^3 2E_2}} \quad (2-3-9)$$

E a densidade numérica ( $= \rho_1$ ) da partícula deve ser

$$\rho_1 = 2E_1 \quad \left( \approx \sqrt{2E_1} \sqrt{2E_2} \right) \quad (2-3-10)$$

. De fato, esse valor de  $\rho_1$  pode ser manipulado artificialmente.

Esta dimensão de energia é introduzida para tornar a dimensão da seção transversal um quadrado de metros.

Considerando a contração de Lorentz, a razão entre a densidade e a energia relativística se torna invariante de Lorentz, como segue,

$$\rho = \frac{\rho_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad \frac{\rho}{E} = \frac{\rho_0}{mc^2} \quad (2-3-11)$$

Da (2-3-3), (2-3-4), (2-3-5) e (2-3-10) a seção transversal diferencial é

$$d\sigma = \frac{dN}{T\rho_1 v_1} = \frac{dN}{2c^2 T \left| \vec{P} \right|} = \frac{|\langle \beta | S | \alpha \rangle|^2}{2c^2 T \left| \vec{P} \right|} \frac{d^3 P_2}{(2\pi\hbar)^3 2E_2} \quad (2-3-12)$$

A energia total é conservada, então podemos expressar a amplitude de probabilidade da translação, como segue,

$$\langle \beta | S | \alpha \rangle = i2\pi\delta(E_1 - E_2) S_{\beta\alpha} \quad (2-3-13)$$



A função delta de Dirac pode ser expressa da seguinte forma,

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ikx} \quad (2-3-14)$$

Usando a (2-3-14), a próxima equação pode ser obtida.

$$\begin{aligned} [2\pi\delta(E_1 - E_2)] &= 2\pi\delta(E_1 - E_2) \cdot \frac{1}{h} \int dt e^{ik(E_1 - E_2)t/h} \quad (E_1 = E_2 = E) \\ &= 2\pi\delta(E_1 - E_2) \cdot \frac{1}{h} \int dt e^{ik(0)t/h} = \frac{2\pi T}{h} \cdot \delta(E_1 - E_2) \end{aligned} \quad (2-3-15)$$

E o espaço de momento infinitesimal da (2-3-19) pode ser expresso usando um ângulo sólido, como segue,

$$d^3 P_2 = \left| \vec{P}_2 \right|^2 d \left| \vec{P}_2 \right|^2 d\Omega \quad (d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi) \quad (2-3-16)$$

De acordo com a fórmula relativística de Einstein,

$$E_2^2 = c^2 \left| \vec{P}_2 \right|^2 + m^2 c^4 \quad \rightarrow \quad E_2 dE_2 = c^2 \left| \vec{P}_2 \right|^2 d \left| \vec{P}_2 \right|^2 \quad (2-3-17)$$

Da (2-3-16) e (2-3-17),

$$\frac{d^3 \vec{P}_2}{2E_2} = \frac{\left| \vec{P}_2 \right|^2}{2c^2} dE_2 d\Omega \quad (2-3-18)$$

Da (2-3-12), (2-3-13), (2-3-15) e (2-3-18),

$$d\sigma = \frac{|\vec{S}_{\beta\alpha}|^2}{16\pi^2 \hbar^4 c^2} \delta(E_1 - E_2) dE_2 d\Omega \quad (2-3-19)$$

onde usamos  $|P1| = |P2|$ .

Integrando a (2-3-19) por  $E_2$ ,

$$\int \delta(E_1 - E_2) dE_2 = 1 \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{|\vec{S}_{\beta\alpha}|^2}{16\pi^2 \hbar^4 c^2} \quad (2-3-20)$$

Na matriz  $S$  da 2-3-13, consideramos apenas o efeito de interação de primeira ordem. De (2-3-2) e (2-3-6),

$$S^{(1)} = -i \frac{H_I}{\hbar c} x^0 \rightarrow \frac{i}{\hbar c} \int d^4 x L_I = -\frac{iZe^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar c} \int d^4 x \frac{1}{|x|} \bar{\psi}(x) \gamma^0 \psi(x) \quad (2-3-21)$$

Onde  $L_I$  significa densidade Lagrangiana, então integramos em todo o espaço (+ todo o tempo).

Aqui usamos as próximas funções de onda de Dirac.

### unphysical Dirac wavefunction

$$\psi(x) = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar\omega_k}} \left( \underbrace{c_{\sigma}(k) u_{\sigma}(k)}_{\text{electron?}} e^{ikx} + \underbrace{d_{\sigma}^{\dagger}(k) v_{\sigma}(k)}_{\text{antiparticle?}} e^{-ikx} \right) \quad \text{4x1 matrix}$$

$$\psi^{\dagger}(x) = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar\omega_k}} \left( \underbrace{c_{\sigma}^{\dagger}(k) u_{\sigma}^{\dagger}(k)}_{\text{electron created}} e^{-ikx} + \underbrace{d_{\sigma}(k) v_{\sigma}^{\dagger}(k)}_{\text{electron annihilated}} e^{ikx} \right) \quad \text{1x4 matrix}$$

$$e^{ikx} = e^{-i\omega_k t + i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad \begin{array}{l} c_{\sigma}^{\dagger}|0\rangle \\ \text{electron created} \end{array} \quad \begin{array}{l} c_{\sigma}|0\rangle = 0 \\ \text{electron annihilated} \end{array}$$

$$\psi(x) = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar w_k}} = (c_{\sigma}(k) u_{\sigma}(k) e^{ikx} + d_{\sigma}^{\dagger}(k) v_{\sigma}(k) e^{-ikx})$$

$$\psi^{\dagger}(x) = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar w_k}} = (c_{\sigma}^{\dagger}(k) u_{\sigma}^{\dagger}(k) e^{-ikx} + d_{\sigma}(k) v_{\sigma}^{\dagger}(k) e^{ikx})$$

$$e^{ikx} = e^{-i w_k t + i \vec{k} \cdot \vec{x}} \quad c_{\sigma}^{\dagger} |0\rangle \quad c_{\sigma} |0\rangle = 0 \quad (2-3-22)$$

E sua transposta conjugada ( $\times \gamma^0$ ) é

$$\bar{\psi}(x) = \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^3 k}{\sqrt{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{mc^2}{\hbar w_k}} = \left( c_{\sigma}^{\dagger}(k) \bar{u}_{\sigma}(k) e^{-ikx} + d_{\sigma}(k) \bar{v}_{\sigma}(k) e^{ikx} \right)$$

$$\bar{u}_{\sigma}(k) = u_{\sigma}^{\dagger}(k) \gamma^0 \quad (2-3-23)$$

Substituindo as funções de onda de Dirac ((2-3-22) e (2-3-23)), na (2-3-21), e usando os estados in e out ((2-3-22) e (2-3-23)),

$$\begin{aligned} \langle \beta | S^{(1)} | \alpha \rangle &= \\ &= -\frac{iZe^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar c} \frac{mc^2}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 k}{\sqrt{\hbar w_k}} \int \frac{d^3 k'}{\sqrt{\hbar w_{k'}}} \int d^4 x \frac{e^{i(k-k')x}}{\left| \begin{array}{c} \rightarrow \\ x \end{array} \right|} \bar{u}_{\sigma'}(k') \gamma^0 u_{\sigma}(k) \\ &\times 2(2\pi)^3 \sqrt{\hbar w_1} \sqrt{\hbar w_2} \delta^3(k_1 - k) \delta^3(k_2 - k') \delta_{\sigma s_1} \delta_{\sigma' s_2} \\ &= -\frac{iZe^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar c} \frac{mc^2}{(2\pi)^3} 2(2\pi)^3 \int d^4 x \frac{e^{i(k_1 - k_2)x}}{\left| \begin{array}{c} \rightarrow \\ x \end{array} \right|} \bar{u}_{\sigma s_2}(k_2) \gamma^0 u_{\sigma s_1}(k_1) \end{aligned} \quad (2-3-24)$$

onde usamos a relação de anticomutação de Ap.1[12]

Aqui usamos a fórmula de

$$\Delta \left( \frac{1}{|\vec{x}|} \right) = -4\pi\delta^3(x) \quad (2-3-25)$$

Podemos provar a (2-3-25)  
pela lei de Gauss, como segue,

$$\begin{aligned} \int_V d^3x \Delta \left( \frac{1}{|\vec{x}|} \right) &= \int_V d^3x \nabla \cdot \nabla \left( \frac{1}{|\vec{x}|} \right) = \int_S \nabla \left( \frac{1}{|\vec{x}|} \right) \cdot \vec{n} dS \\ &= -\frac{1}{|\vec{x}|} \times 4\pi |\vec{x}|^2 = -4\pi = \int_V d^3x [-4\pi\delta^3(x)] \end{aligned} \quad (2-3-26)$$

Usando a (2-3-25),

$$\begin{aligned} \int d^4x \frac{e^{i(k-k')x}}{|\vec{x}|} &= \int_V dx^0 e^{i(k^0-k'^0)x^0} \frac{-1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx^3 \frac{\Delta e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}}}{|\vec{x}|} = \\ &= \int_V dx^0 e^{i(k^0-k'^0)x^0} \frac{-1}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2} \int dx^3 e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}} \Delta \left( \frac{1}{|\vec{x}|} \right) = \\ &= 2\pi\delta(k^0-k'^0) x^0 \frac{4\pi \frac{e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{0}}}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2}}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2} = \frac{8\pi^2 \delta(k^0-k'^0)}{|\vec{k}-\vec{k}'|^2} \end{aligned} \quad (2-3-27)$$

Fazemos integração parcial duas vezes na segunda linha.

Substituindo a (2-3-26)

na (2-3-27),

$$\langle \beta | S^{(1)} | \alpha \rangle = -\frac{i2\pi Ze^2 mc^2}{\epsilon_0} \frac{2\delta(E_1^0 - E_2^0)}{\left| \vec{k}_1 - \vec{k}_2 \right|^2} u_{\sigma s_2}^-(k_2) \gamma^0 u_{\sigma s_1}(k_1) \quad (2-3-28)$$

onde usamos a relação de

$$\delta(k^0 - k'^0) = hc\delta(E_1^0 - E_2^0) \quad \left( P^0 = \frac{E}{c} = \hbar k^0 \right) \quad (2-3-29)$$

Da (2-3-13) e (2-3-28)

$$S_{\beta\alpha} = \frac{Ze^2 m}{4\pi^2 \hbar^4 \epsilon_0} \frac{1}{\left| \vec{k}_1 - \vec{k}_2 \right|^2} \left| u_{\sigma s_2}^-(k_2) \gamma^0 u_{\sigma s_1}(k_1) \right| \quad (2-3-30)$$

Substituindo a (2-3-30) na (2-3-20),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4 m^2}{4\pi^2 \hbar^4 \epsilon_0^2} \frac{1}{\left| \vec{k}_1 - \vec{k}_2 \right|^4} \left| u_{\sigma s_2}^-(k_2) \gamma^0 u_{\sigma s_1}(k_1) \right|^2 \quad (2-3-31)$$

Como mostrado nesta página , podemos usar a técnica de rastreamento de

$$\begin{aligned} \bar{v}(p') \gamma^\mu u(p) \bar{u}(p) \gamma^\nu v(p') &= \\ \bar{v}_a(p') \gamma_{ab}^\mu u_b(p) \bar{u}_a(p) \gamma_{cd}^\nu v_c(p') &= \\ \left[ v_b(p') \bar{v}_a(p') \right] \gamma_{ab}^\mu \left[ u_b(p) \bar{u}_a(p) \right] \gamma_{cd}^\nu &= \\ \text{trace} \left[ -\frac{mc + \gamma^\mu p_\mu}{2mc} \gamma^\mu \frac{mc - \gamma^\nu p_\nu}{2mc} \gamma^\nu \right] & \end{aligned}$$

(2-3-32)

$$\bar{v}(p') \dots v(p') = (a_1 \ a_2 \ a_3 \ a_4) \dots \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix}$$

$$= \text{trace} \left[ \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{pmatrix} (a_1 \ a_2 \ a_3 \ a_4) \dots \right]$$

(2-3-33)

Usando Ap.1,

$$\left| \bar{u}_{\sigma s_2}^-(k_2) \gamma^0 u_{\sigma s_1}(k_1) \right|^2 = \bar{u}_{s_2}^-(k_2) \gamma^0 u_{s_1}(k_1) u_{s_1}^\dagger(k_2) \gamma^0 \bar{u}_{s_2}^\dagger(k_1)$$

$$= \text{Tr} \left[ u_{s_2}(k_1) \bar{u}_{s_2}(k_2) \gamma^0 u_{s_1}(k_1) \bar{u}_{s_1}(k_1) \gamma^0 \right]$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{s_1, s_2} \text{Tr} \left[ u_{s_2}(k_1) \bar{u}_{s_2}(k_2) \gamma^0 u_{s_1}(k_1) \bar{u}_{s_1}(k_1) \gamma^0 \right]$$

$$= \frac{1}{2} \text{Tr} \left[ \frac{mc - \gamma^\mu P_\mu}{2mc} \gamma^0 \frac{mc - \gamma^\mu P_\mu}{2mc} \gamma^0 \right]$$

(2-3-34)

onde usamos

$$\bar{u} = u^\dagger \gamma^0 \quad \left( u^\dagger = (u_*)^T \right) \quad \gamma^{0\dagger} = \gamma^0 \quad (2-3-35)$$

E depois de somar todos os estados de spin, dividimos por dois, pois apenas o estado inicial está em um dos dois estados de spin.  
(Isso pode ser difícil de imaginar. Mas isso é necessário para obter resultados corretos.)

Aqui usamos as próximas fórmulas de rastreamento de matrizes gama.

$$Tr[\gamma^\mu \gamma^\nu] = -4g^{\mu\nu}$$

$$Tr[\text{any odd } \gamma] = 0$$

$$Tr[\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma] = -4(g^{\mu\nu} g^{\rho\sigma} - g^{\mu\rho} g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma} g^{\nu\rho}) \quad (2-3-36)$$

Esta página inicial usa o tensor métrico da versão (-1, 1, 1, 1).  
O ponto importante é que traços de quaisquer matrizes gama ímpares tornam-se zero.

Usando a (2-3-36), os termos restantes da (2-3-34) são

$$\begin{aligned} & \frac{1}{8m^2 c^2} \left( Tr \left[ P_{\mu(2)} P_{\nu(1)} \gamma^\mu \gamma^0 \gamma^\nu \gamma^0 + m^2 c^2 \gamma^0 \gamma^0 \right] \right) = \\ & = \frac{1}{8m^2 c^2} \cdot 4 \times \left( Tr \left[ P_1^0 P_2^0 + \vec{P}_1 \cdot \vec{P}_2 + m^2 c^2 \right] \right) \end{aligned} \quad (2-3-37)$$

onde somamos todos os  $\mu$  e  $\nu$ .

Quando o ângulo entre os vetores de momento  $P_1$  e  $P_2$  é  $\theta$ ,

$$\vec{P}_1 \cdot \vec{P}_2 = |\vec{P}|^2 \cos \theta = |\vec{P}|^2 \left( 1 - \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \quad (2-3-38)$$

Substituindo a (2-3-37) e a (2-3-38) na (2-3-31),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4 m^2}{4\pi^2 \hbar^4 \epsilon_0^2 \left| \vec{k}_1 - \vec{k}_2 \right|^4} \cdot \frac{1}{2m^2 c^2} \left[ P_1^0 P_2^0 + m^2 c^2 |\vec{P}|^2 \left( 1 - \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \right] \quad (2-3-39)$$

Da equação relativística de Einstein,

$$|\vec{P}|^2 + m^2 c^2 = \frac{E^2}{c^2} = (P^0)^2 = P_1^0 P_2^0 \quad (2-3-40)$$

Como no caso clássico da Eq.5,

$$\left| \vec{P}_1 - \vec{P}_2 \right| = 2 \left| \vec{P} \right| \sin \frac{\theta}{2} = \hbar \left| \vec{k}_1 - \vec{k}_2 \right| \quad (2-3-41)$$

Substituindo a (2-3-41) e a (2-3-40) na (2-3-56),

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4 m^2}{4\pi^2 \hbar^4 \epsilon_0^2} \cdot \frac{\hbar^4}{16^2 \left| \vec{P} \right|^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \left[ (2P^0)^2 P_2^0 + 2 \left| \vec{P} \right|^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right] \quad (2-3-42)$$

onde usamos a próxima relação de

$$v = \frac{c^2 \left| \vec{P} \right|}{E} \rightarrow P^0 = \frac{E}{c} = \frac{c \left| \vec{P} \right|}{E} \quad (2-3-43)$$

Substituindo a (2-3-43) na (2-3-42), podemos obter a fórmula do espalhamento Mott relativístico de

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{64\pi^2 \epsilon_0^2 c^2 \left| \vec{P} \right|^2 \beta^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \left( 1 - \beta^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) \quad (2-3-44)$$

$$\beta = \frac{v}{c}$$

Diz-se que a (2-3-44) inclui o efeito "relatividade" e "spin" (= matrizes  $\gamma$  ). Mas, infelizmente, não podemos imaginar nenhuma imagem concreta desse processo de cálculo "abstrato". Você consegue imaginar alguma imagem de matrizes ?? E há várias partes que podemos manipular nesse processo. De acordo com o efeito relativístico, à medida que as partículas se tornam mais rápidas, é mais difícil acelerar a partícula mais pesada. Mas, como mostrado nesta página, podemos explicar esse efeito de massa relativístico pela teoria do "éter" elétrico naturalmente.



Quando  $\beta$  da 2-3-44 está próximo de zero (= aproximação não relativística), e substituindo  $|P|$  por  $mv$ ,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{64\pi^2 \epsilon_0^2 m^2 v^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (2-3-45)$$

$$\beta \rightarrow 0, \quad \left| \vec{P} \right| = mv$$

Podemos obter a fórmula clássica de Rutherford.

## 2.4 - Aproximação de Born e fator Forma [11]:

A seção de choque de espalhamento efetivo pode ser calculada de forma geral em um caso muito importante, ou seja, aquele em que o campo de espalhamento pode ser considerado como uma perturbação. Foi mostrado em §45 [11] que isso é possível quando qualquer uma das duas condições

$$|U| \leq h^2 / ma^2 \quad (2-4-1)$$

ou

$$|U| \leq hv / a = (h^2 / ma^2) ka \quad (2-4-1)$$

A aproximação de Born para o potencial retardado usado em §45 é demonstrado no apêndice K, dá referência [18], mantém, sendo  $a$  a faixa de ação do campo  $U(r)$  e  $U$  a ordem de magnitude do campo na faixa em que é significativo. Quando a primeira condição é satisfeita, a aproximação é válida para todas as velocidades; a segunda condição mostra que é sempre aplicável para partículas suficientemente rápidas. De acordo com §45[11], buscamos a função de onda na forma,

$$\psi = \psi^{(0)} + \psi^{(1)} \quad (2-4-3)$$

onde

$$\psi^{(0)} = e^{ik \cdot r} \quad (2-4-4)$$

corresponde a uma partícula incidente com vetor de onda  $k = p / \hbar$ . Da fórmula (45.3) temos então

$$\psi^{(1)}(x, y, z) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(x', y', z') e^{i(k \cdot r' + kR)} \frac{dV'}{R} \quad (2-4-5)$$

Tomando a origem no centro de dispersão, introduzimos o vetor de raio  $R_0$  da origem até o ponto onde o valor de  $\psi^{(1)}$  é necessário e denotamos por  $n'$  um vetor unitário ao longo de  $R_0$

• Seja o vetor de raio de um elemento de volume  $dV'$  ser  $r'$ ; então  $R = R_0 - r'$ . A grandes distâncias do centro,  $R_0 \gg r'$ , de modo que

$$R = |R_0 - r'| \cong R_0 - r' \cdot n \quad (2-4-6)$$

Substituindo isso em (2-4-3), temos a seguinte expressão assintótica para

$$\psi^{(1)}(x, y, z) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{i(k \cdot r' + kR)}}{R} \int U(x', y', z') dV' \quad (2-4-7)$$

(onde  $k' = kn'$  é o vetor de onda da partícula após o espalhamento). Comparando isso com a amplitude de espalhamento dada pela fórmula (122.3) [11], encontramos para esta última a expressão

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int U(x', y', z') e^{iq \cdot r'} dV' \quad (2-4-8)$$

onde renomeamos a variável de integração e introduzimos o vetor

$$q = k' - k, \quad (2-4-9)$$

cujas magnitude absoluta é

$$q = 2k \sin \frac{1}{2} \theta \quad (2-4-10)$$

$\theta$  sendo o ângulo entre  $k$  e  $k'$ , ou seja, o ângulo de dispersão.

Finalmente, elevando ao quadrado o módulo da amplitude de espalhamento, temos a seguinte expressão para a seção transversal efetiva para espalhamento no elemento de ângulo sólido:

$$d\sigma = \frac{m}{4\pi^2\hbar^2} \left| \int U e^{-iq \cdot r} dV \right|^2 do \quad (2-4-11)$$

Vemos que o espalhamento com uma mudança de momento  $\hbar q$  é determinado pelo módulo ao quadrado da correspondente componente de Fourier do campo  $U$ . A fórmula (2-4-7) foi obtida pela primeira vez por M. BORN (1926). Na teoria das colisões, a aproximação considerada aqui é frequentemente chamada de aproximação de Born.

Pode-se notar que, nesta aproximação, a relação

$$f(k, k') = f^*(k', k) \quad (2-4-12)$$

mantém entre as amplitudes dos processos de espalhamento direto e inverso, ou seja, processos que diferem pelo intercâmbio dos momentos inicial e final, sem a mudança de sinal, como ocorre na reversão do tempo. Assim, outra propriedade de simetria, além do teorema da reciprocidade (124.12) [11], aparece na dispersão. Esta propriedade está intimamente relacionada com a pequenez das amplitudes de dispersão na teoria da perturbação, e decorre imediatamente da condição de unitariedade (124.8) [11] se negligenciarmos o termo integral quadrático em  $f$ . A fórmula (2-4-7) também pode ser obtida por outro método (que, entretanto, não determina a fase da amplitude do espalhamento). Podemos partir da fórmula geral (43.1), segundo a qual a probabilidade de transição entre estados do espectro contínuo é dada pela expressão

$$dw_{v,v'} = (2\pi / \hbar) |U_{vv'}|^2 \delta(E_v - E_{v'}) dv \quad (2-4-13)$$

No caso em questão, temos que aplicar esta fórmula a uma transição do estado da partícula incidente com um dado momento inicial  $p'$  para o estado da partícula, com momento  $p$ , espalhada no elemento de ângulo sólido  $do$ . Como o "intervalo" de estados  $dv$  podemos tomar o elemento de volume  $dp'_x dp'_y dp'_z$  no espaço de momento. Substituindo por  $E_v - E_{v'}$ , a diferença  $(p'^2 - p^2) / 2m$  das energias das partículas livres com momentos  $p'$  e  $p$ , obtemos

$$dw_{pp'} = (4\pi m / \hbar) |U_{pp'}|^2 \delta(p'^2 - p^2) dp'_x dp'_y dp'_z dv \quad (2-4-14)$$

As funções de onda das partículas incidentes e espalhadas são as funções de movimento livre, ou seja, ondas planas:

$$\psi_p = \text{const} \tan te \times e^{ip \cdot r / \hbar}, \quad \psi_{p'} = \text{const} \tan te \times e^{ip' \cdot r / \hbar} \quad (2-4-15)$$

Como tomamos como "intervalo"  $dv'$  um elemento do espaço de momento, a função de onda ' $\psi_{p'}$ ' deve ser normalizada pela função delta no espaço de momento:

$$\psi_{p'} = e^{(i/\hbar)p' \cdot r} / (2\pi\hbar)^{3/2} \quad (2-4-16)$$

Normalizamos a função  $\psi_p$  para densidade de corrente unitária:

$$\psi_p = \sqrt{(m/p)} e^{(i/\hbar)p \cdot r} \quad (2-4-17)$$

Então a probabilidade (2-4-9) terá as dimensões de área e é a seção transversal de dispersão efetiva diferencial. A presença da função delta na fórmula (2-4-9) significa que  $p' = p$ , ou seja, a magnitude absoluta do momento é inalterada, como deveria ser na dispersão elástica. Podemos remover a função delta alterando para "coordenadas esféricas" no espaço de

momento (ou seja, substituindo  $dp'_x dp'_y dp'_z$  por  $p'^2 dp' d\Omega' = \frac{1}{2} p' (dp'^2) d\Omega'$  e integrando sobre  $p'^2$  • A integração equivale a substituir  $p'$  por  $p$  no integrando, e obtemos

$$d\sigma = (2\pi m / \hbar) \int \psi_p^* U \psi_p dV d\Omega' \quad (2-4-18)$$

Substituindo as funções (2-4-10), (2-4-11), chegamos mais uma vez à expressão final (2-4-7). Na forma (2-4-7), esta fórmula é aplicável ao espalhamento em um campo  $U(x, y, z)$  que é qualquer função das coordenadas, e não apenas uma função der. No caso  $U = U(r)$ , no entanto, esta fórmula pode ser posteriormente transformada.

na integral

$$\int U(r) e^{-iq \cdot r} dV \quad (2-4-19)$$

usamos coordenadas de espaço esférico  $r, \vartheta, \phi$ , com o eixo polar na direção do vetor  $q$ , denotando o ângulo polar por,  $\vartheta$  para distingui-lo do ângulo de espalhamento  $\theta$ . A integração sobre  $\vartheta$  e  $\phi$  podem ser efetuados, e obtemos

$$\int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} U(r) e^{-iqr \cos \theta} r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr = 4\pi \int U(r) \frac{\sin qr}{q} dr \quad (2-4-20)$$

Substituindo esta expressão em (2-4-4), obtemos a seguinte fórmula para a amplitude do espalhamento em um campo com simetria central:

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int U(r) \frac{\sin qr}{q} dr \quad (2-4-21)$$

Para  $\theta = 0$  (ou seja,  $q = 0$ ), a integral diverge quando  $U(r)$  decresce no infinito não mais rapidamente do que  $1/r^3$  (de acordo com os resultados gerais de §123[11]). Podemos chamar a atenção para o seguinte fato interessante. O momento  $p$  da partícula e o ângulo de espalhamento  $\theta$  entram em (2-4-12) somente através de  $q$ . Assim, na aproximação de Born, a

seção efetiva depende de  $p$  e  $\theta$  somente na combinação  $p \sin \frac{1}{2} \theta$ . Voltando ao caso de campos arbitrários  $U(x, y, z)$ , vamos considerar os casos limites de pequenas velocidades ( $ka \ll 1$ ) e grandes velocidades ( $ka \gg 1$ ). Para pequenas velocidades, podemos colocar  $e^{-iq \cdot r} \cong 1$  em (2-4-4), de modo que

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int U(r) dV \quad (2-4-22)$$

enquanto se  $U = U(r)$ ,

$$f = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^{\infty} U(r) r^2 dr \quad (2-4-23)$$

Aqui o espalhamento é isotrópico e independente da velocidade, de acordo com os resultados gerais de §130[11]. No caso limite oposto de altas velocidades, o espalhamento é marcadamente anisotrópico e principalmente para a frente em um cone estreito de ângulo  $\Delta\theta \sim 1/ka$ ; desde fora desse cone, a quantidade  $q$  é grande, o fator  $e^{-iq \cdot r}$  é uma função que oscila rapidamente e a integral de seu produto com a função de variação lenta  $U$  é quase zero. A lei de diminuição para  $q$  grande não é universal e depende da forma específica do campo. Se o campo  $U = U(r)$  tem uma singularidade em  $r = 0$  ou em qualquer outro valor real de  $r$ , a integral (2-4-12) é determinada principalmente pelo alcance próximo ao ponto singular, e a seção transversal diminui de acordo com um poder Mandíbula. O mesmo se aplica ao caso em que a função  $U(r)$  não tem singularidade, mas não é uma função par; aqui a região próxima a  $r = 0$  é a mais importante na integral. Se  $U(r)$  for uma função par de  $r$ , no entanto, a integração pode ser formalmente estendida para valores negativos de  $r$ , ou seja, tomada ao longo de todo o eixo real da variável  $r$ , após o que (se  $U(r)$  não tiver singularidade no eixo real) o caminho de integração pode ser movido para o plano complexo até encontrar a singularidade complexa mais próxima. Então, para  $q$  grande, a integral diminuirá exponencialmente. Deve-se ter em mente, no entanto, que a aproximação de Born é geralmente inadequada para calcular essa

quantidade exponencialmente pequena (ver também §127). Embora o valor da seção transversal de espalhamento diferencial dentro do cone  $\Delta\theta \sim 1/ka$  não dependa muito da velocidade, a seção transversal de espalhamento total (assumindo que os J dados integrais convergem) diminui em altas energias devido ao ângulo decrescente do cone, em proporção ao ângulo sólido do cone, ou seja, como  $(\Delta\theta)^2 \sim 1/k^2 a^2$ , ou inversamente como a energia.

Em muitas aplicações físicas da teoria da colisão, a quantidade que descreve a dispersão é a integral

$$\sigma_{tr} = \int (1 - \cos \theta) d\sigma \quad (2-4-24)$$

frequentemente chamada de seção transversal de transporte. Argumentos similares aos dados acima mostram que em altas velocidades esta quantidade é inversamente proporcional ao quadrado da energia.

## 2-6 Distribuição de Fermi ou Woods-Saxons [4]:

Comparação entre as funções de distribuição

Considera inicialmente a distribuição de Boltzmann

$$n(\xi) = A e^{-\xi/kT}$$

Se fizermos a constante multiplicava A igual a  $e^{-\alpha}$ , a distribuição de Boltzmann se escreverá

$$n_{Boltz}(\xi) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\xi/kT}}$$

A distribuição de Bose é dada por

$$n_{Bose}(\xi) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\xi/kT} - 1}$$

E a equação (11-20) nos diz que a distribuição de Fermi é definida

$$n_{Fermi}(\xi) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\xi/kT} + 1}$$

Está demonstrada no capítulo 11 da referência [4]

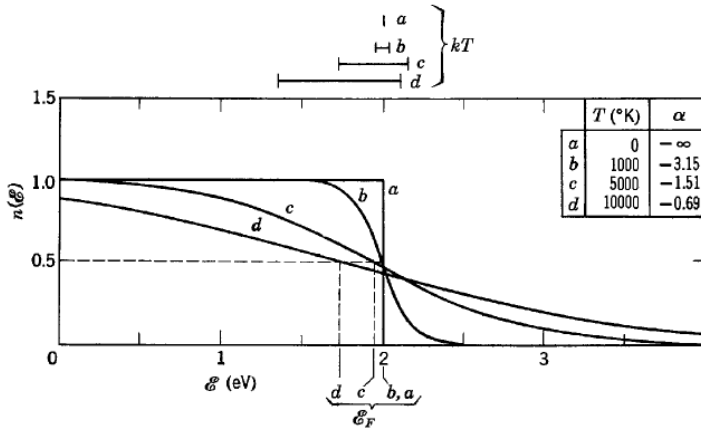


Figura 2-6-1

Na figura 2-6-1, aparece a função distribuição de Fermi em função da energia, para quatro valores diferentes de  $T$  e  $\alpha$ . Como o princípio de exclusão se aplica aqui, não pode existir mais de uma partícula por estado quântico. Isso explica a forma totalmente diferente das curvas, a baixas energias, em comparação com as outras duas distribuições, onde não havia restrição contra a ocupação múltipla dos estados. Definindo-se a energia de Fermi como  $\xi_F = -\alpha kT$ , isolando  $\alpha$ ,  $\alpha = -\xi_F / kT$ , podemos escrever da distribuição de Fermi de forma mais conveniente, como

$$n_{Fermi}(\xi) = \frac{1}{e^{(\xi - \xi_F) / kT} + 1}$$

Isto facilita a interpretação da função distribuição. Analisando,  $\xi \ll \xi_F$ , o termo exponencial tendo a 0 a baixas temperaturas e  $n_{Fermi} = 1$ . Nestes estados contém um férmion. Para estados com  $\xi \gg \xi_F$  a exponencial prevalece no denominador a baixas temperaturas e a distribuição de Fermi se aproxima da distribuição de Boltzmann. Observando, este intervalo, o número de partículas por estado quântico é muito menor do que um. Para  $\xi = \xi_F$ , o número médio de partículas por estado quântico é exatamente  $\frac{1}{2}$  em consequência da maneira pela qual foi definido  $\xi_F$ .

Se  $T=0$ , a distribuição de Fermi  $n_{Fermi} = 1$  para todos os estados com energias inferiores a  $\xi_F$  e  $n_{Fermi} = 0$ , para todos os demais estados de energia superiores a  $\xi_F$ . Assim, a  $T=0$ , os estados de menor energia são preenchidos, a partir do limite inferior colocando-se um férmion em cada um dos sucessivos estados de energia mais alta, até que o último férmion do sistema ocupe o estado de energia mais alta em  $\xi_F$ , minimizando obviamente a energia total do sistema, como é esperado do zero absoluto. Observe a figura 11-3 que para todo  $T \ll \xi_F / k$ ,

$\xi_F$  tem praticamente o mesmo valor para  $T=0$ . Nestas temperaturas, relativamente baixas, a energia térmica do sistema é utilizada para levar férmions de estados cuja energia é pouco inferior ao valor de  $\xi_F$  e  $T=0$ , para estados cuja energia é pouco superior a esse valor. As mudanças populacionais ficam assim restritas a estados cujas energias se situam num intervalo de largura  $kT$ , pois  $kT$  é uma medida da energia térmica por partícula do sistema. O decréscimo de população dos níveis de energia inferiores ao valor de  $\xi_F$  para temperatura zero é praticamente simétrico ao acréscimo de população dos níveis de energia superiores a esse valor, e então  $\xi_F$ , definida como a energia para a qual  $n_{Fermi} = 0,5$ , praticamente não muda de valor. Para temperaturas mais altas,  $\xi_F$  começa a se deslocar em direção a valores inferiores, à medida que essa simetria começa a desaparecer. A distribuição de Fermi, pode ser escrita como:

$$\rho = \frac{\rho_0}{1 + e^{\left(\frac{r-c}{a_0}\right)}}$$

Da referência de Física Moderna de Resnick e Eisberg [4], extraímos a tabela abaixo:



**Table 11-1** Comparison of the Three Distribution Functions

	Boltzmann	Bose	Fermi
Basic characteristic	Applies to distinguishable particles	Applies to indistinguishable particles not obeying the exclusion principle	Applies to indistinguishable particles obeying the exclusion principle
Example of system	Distinguishable particles, or approximation to quantum distributions at $\mathcal{E} \gg kT$	Bosons—identical particles of zero or integral spin	Fermions—identical particles of odd half integral spin
Eigenfunctions of particles	No symmetry requirements	Symmetric under exchange of particle labels	Antisymmetric under exchange of particle labels
Distribution function	$Ae^{-\mathcal{E}/kT}$	$\frac{1}{e^{\alpha} e^{\mathcal{E}/kT} - 1}$	$\frac{1}{e^{(\mathcal{E} - \mathcal{E}_F)/kT} + 1}$
Behavior of distribution function versus $\mathcal{E}/kT$	Exponential	For $\mathcal{E} \gg kT$ , exponential For $\mathcal{E} \ll kT$ , lies above Boltzmann	For $\mathcal{E} \gg kT$ , exponential where $\mathcal{E} \gg \mathcal{E}_F$ If $\mathcal{E}_F \gg kT$ , decreases abruptly near $\mathcal{E}_F$
Specific problems applied to in this chapter	Gases at essentially any temperature; modes of vibration in an isothermal enclosure	Photon gas (cavity radiation); phonon gas (heat capacity); liquid helium	Electron gas (electronic specific heat, contact potential, thermionic emission)

## 3-Discussão

### 3-1. Raio Quadrático Médio Extrapolado, dedução da fórmula [3]:

Tendo o mesmo significado a seção de choque diferencial na mecânica quântica estudado na mecânica clássica.

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \frac{I(\Omega)}{I_0}$$

Tal que  $I_0$  é o número de elétrons incidentes no alvo, no caso, um núcleo, por  $cm^2$  e por segundo; E  $I(\Omega)$  ( $\Omega$  para o par  $(\theta, \varphi)$ ) é o número de elétrons espalhados, por unidade de tempo de ângulo sólido  $d\Omega$ , que é um cone que tem como vértice o alvo e a área do detector como base. Uma seção de choque diferencial pode ser escrita como:

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} = \frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} \Big|_{Mott} \left| F\left(\vec{q}\right) \right|^2 \quad (2.6-2)$$

Onde:

$$\frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} \Big|_{Mott} = \frac{d\sigma(\Omega)}{d\Omega} \Big|_{Ruth} \cos^2(\theta/2) \quad (2.6-3)$$

É a seção de choque de Mott e o fator  $\cos^2(\theta/2)$ , que multiplica a seção de choque de Rutherford, é uma correção relativística por Nevill Francis Mott. A seção de choque diferencial de Mott corresponde àquela que seria medida caso o núcleo não tivesse uma distribuição espacial de carga elétrica, ou seja, como se toda a carga a Zé estivesse localizada em um único

ponto. Portanto,  $\left| F\left(\vec{q}\right) \right|^2$  é uma quantidade que descreve a distribuição da carga

elétrica no núcleo. A função  $F\left(\vec{q}\right)$  é adimensional e é chamada fator forma,  $q = \left| \vec{q} \right|$  é o

momentum linear transferido do elétron ao núcleo no processo de colisão, sendo dada por

$$q = \frac{2E}{hc} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{2}{\lambda/2\pi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2.6-4)$$

Lembrando que  $E = (c^2 p^2 + m_e^2 c^4)^{1/2}$  (demonstrado no Apêndice) é a energia relativística do elétron livre (no caso ultra relativístico  $E \approx cp$ ) e  $p / \hbar = \lambda / 2\pi$ , onde  $\lambda$  é o seu comprimento de onda.

Usando a aproximação de Born, também tem um exemplo no apêndice, nos dá:

$$F(\vec{q}) = \int \rho_c(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3r$$

É a transformada de Fourier da densidade de carga nuclear  $\rho_c(\vec{r})$ , e a carga colombiana nuclear é obtida efetuando a integração

$$\int \rho_c(\vec{r}) d^3r = Ze$$

No caso geral, a partir dos experimentos obtém-se um conjunto de pontos, que ajudam a traçar - um método usado é os mínimos quadrados - uma curva contínua, como mostrados na figura.

A distribuição de carga determina-se da seguinte forma:

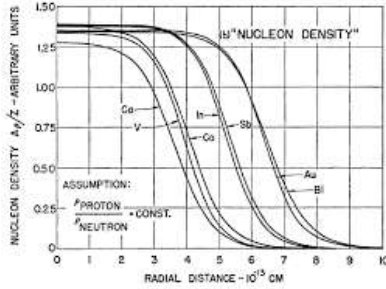
1-Supondo que a distribuição é simétrica, ou seja,  $\rho_c(\vec{r}) = \rho_c(r)$  e atribui-se a expressão analítica que depende de alguns poucos parâmetros.

2-Calcula-se  $F(\vec{q})$  e os parâmetros são então ajustados para fazer coincidir a curva analítica com os pontos experimentais.

Há muitas expressões para a representação de expressões analíticas que podem ser escolhidas para representar, mas uma de interesse especial, pelo menos histórico é a distribuição de Fermi ou de Woods-Saxon, dada por:

$$\rho_c(r) = \frac{\rho_0}{1 + \exp[(r-c)/a_0]}$$

Onde  $c$  é a distância entre o centro do núcleo e o ponto a meia densidade e  $a_0$  é o parâmetro de "difusidade"; a forma da função acima, que está esboçado na figura, abaixo, possuindo as seguintes propriedades



1-Descreve o núcleo como tendo uma superfície(borda) suave e não abrupta, com comprovação experimental.

2-Para  $c \gg a_0$  a densidade no interior do núcleo é essencialmente constante, valendo  $\rho_0$ , e  $c$  é, aproximadamente, o raio do núcleo a meia densidade. Valores típicos comumente usados são  $c = 1,07 A^{1/3} \text{ fm}$  e  $a_0 = 0,55$ ; um ajuste mais fino consiste em escrever  $c = 1,12 A^{1/3} - 0,86 A^{-1/3} \text{ fm}$

3-Para qualquer densidade  $\rho_c(\vec{r})$ , o raio quadrático médio é definido como a razão

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int \rho_c(\vec{r}) r^2 d^3r}{\int \rho_c(\vec{r}) d^3r}$$

Dadas as propriedades abaixo

4-O valor do raio quadrático médio pode ser medido por extrapolação a partir do fator forma medindo, usando a expressão

$$\langle r^2 \rangle_{\text{exp}} = 6 \lim_{q \rightarrow 0} \left[ \frac{1 - F(q) / F(0)}{q^2} \right]$$

Considerando o fator forma

$$F(\vec{q}) = \int \rho_c(\vec{r}) e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} d^3r$$

Expandindo

$$F(q) = 1 - \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle + \frac{1}{120} q^4 \langle r^4 \rangle + \dots$$

Onde:

$$\langle r^n \rangle = \int p_c(\vec{r}) r^n d^3r$$

Dado que:

$$q = \frac{2E}{\hbar c} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{2}{\lambda/2\pi} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

Tal que pela Transformada de Fourier:

$$\rho_c(\vec{r}) = (2\pi)^{-3} \int F(\vec{q}, Z) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3q$$

Visto que a densidade de carga nuclear é dada por:

$$\rho(r) = \left(\frac{1}{4\pi r}\right) \frac{d^2 Z_p(r)}{dr^2}$$

E o fator forma, escreve-se:

$$F(\vec{q}) = \int_0^\infty \rho_c(\vec{r}) \frac{\sin(qr)}{qr} dr$$

Que pode ser escrito em termos de carga nuclear:

$$F(\vec{q}) = Z - \int_0^\infty Z_p(\vec{r}) \sin(qr) d(kr)$$

A expansão da Carga nuclear  $Z_\rho(\vec{r})$  é dada por:

$$Z_\rho(\vec{r}) = e^{-\alpha r} \sum_{i=0}^n a_i r^i$$

Átomos do tipo Hidrogênio são dados por:

$$Z_\rho(\vec{r}) = e^{-2r} (Z + rZ)$$

Substituindo na expressão fator Forma:

$$\frac{F(\vec{q})}{Z} = 1 - \left(\frac{k}{Z}\right) \sum_m \sum_i a_i^{(n)} (-1)^i - \frac{\partial^i}{\partial \alpha^i} \int_{r_{m-1}}^{r_m} e^{-\alpha(m)r} \sin(qr) dr$$

Expandindo o seno em séries:

$$f(q) = Z + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-q)^{2n}}{(2n-1)!} \int_0^\infty Z_\rho(r) r^{2n-1} dr$$

Tal que as condições com carga nuclear 0.

$$f(0) = Z \quad e \quad \left( \frac{df(q)}{dq} \right)_{q=0} = 0$$

Com isso, considerando as condições:

$$Z = \int p_c(\vec{r}) 4\pi r^2 dr$$

Temos que pelo fator Forma dá em:

$$\left\{ \begin{array}{l} F(\vec{q}) = \int p_c(\vec{r}) 4\pi r^2 dr - \frac{q^2}{6} \langle r^2 \rangle + \dots \\ F(0) = \int p_c(\vec{r}) 4\pi r^2 dr \end{array} \right.$$

Conclui-se:

$$\frac{q^2}{6} \langle r^2 \rangle = F(0) - F(\vec{q})$$

Isolando:

$$\langle r^2 \rangle = 6 \left[ \frac{F(0) - F(\vec{q})}{q^2} \right]$$

Tal que:

$$\langle r^2 \rangle = 6F(0) \left[ \frac{1 - F(\vec{q})/F(0)}{q^2} \right]$$

Tal que:

$$\langle r^n \rangle = \int p_c(\vec{r}) r^n d^3r$$

Chegando ao raio quadrático médio extrapolado

$$\langle r^2 \rangle_{\text{exp}} = 6 \left[ \frac{1 - F(\vec{q})/F(0)}{q^2} \right]$$

4-Para núcleos mais pesados, a espessura da superfície nuclear  $t$  é definida como a distância que separa a densidade  $0,9 \rho_0$  e a  $0,1 \rho_0$ , o que dá  $t = (4 \ln 3) a_0$   $a_0 \approx 0,39 a_0$ ; experimentalmente tem-se  $t = 2,4 \pm 0,3 \text{ fm}$ , demonstrado no apêndice M.

## 4-Conclusão:

Sabendo que extrapolação é um método matemático é o processo de estimar, considerando medidas fora do intervalo de observação original, a variável adquire um valor de uma variável com base em sua relação com outra variável. Sendo semelhante à interpolação, diferente da interpolação, que produz estimativas entre observações conhecidas, a extrapolação está sujeita a maior incerteza e um maior risco de produzir resultados sem sentido. A extrapolação, contudo, pode significar a extensão de um método, relevando que métodos semelhantes serão aplicáveis. A extrapolação aplica-se à experiência para projetar, estender ou expandir o empírico conhecido em uma área desconhecida ou anteriormente experiente, de modo a chegar a um conhecimento (geralmente conjectural) do desconhecido (por exemplo, um pirata extrapolando as condições do oceano atlântico durante a condução da Caravelas, na chegada na América Central). O método de extrapolação pode ser aplicado no problema de reconstrução interior, temos alguns métodos, o linear, o polinomial, a cônica e a curva francesa.

O livro só foi um exposto da obtenção do raio quadrático médio extrapolado em medida empírica para extrapolação e estudos de átomos com as condições da aproximação de Born e do fator de forma, é notável que envolve o desenvolvimento da física nuclear e de partículas para o entendimento conceitual, abarcado pelas explicações do apêndice com suas demonstrações da mecânica quântica na equação de Schrodinger para a explicação do modelo do átomo atual, para aplicabilidade do raio extrapolado tem-se o desenvolvimento e produção de diversas referências, artigos e livros, detalhados com as explicações dos parâmetros e números atômicos para cada situação e possibilidade da discussão do item 3, como um início de discussão de extrapolação a referência [20] de Niels e Openheimm demonstram o início do desenvolvimento da questão por volta da década de 1950, que se mostra uma área muito fértil para o desenvolvimento atual ainda da Física, uma discussão teórica e qualitativa de determinados elementos é abrangente, sendo que uma discussão para o fator forma e raio quadrático médio extrapolado em experiência tem diversas ramificações, um exemplo, de avanço em física de partícula no estudo da extrapolação encontra-se na referência [23].

# Apêndice

## A - A Equação de Schroedinger [2] [18]:

A equação temporal dependente Schroedinger onda equation é função de onda quântica:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x,t)\psi(x,t) \quad (\text{A-1})$$

Explicar Parâmetros

Em três dimensions espaciais

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + V\psi \quad (\text{A-2})$$

A equação de Schroedinger foi postulada, não é derivada, são verificadas experimentalmente.

Isto fornece uma correta descrição observável, podemos dizer para a equação de Newton:

$$F = m \frac{d^2 x}{dt^2} \quad (\text{A-3})$$

É um outro exemplo postulado da descrição de observações físicas.

Solução da equação de Schroedinger Para o Estado Fundamental do Hidrogênio



# B - A equação de Schroedinger em Coordenadas Esféricas [2] [18]:

A generalização para três dimensões é simples. Dada a equação:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (\text{B-1})$$

O operador Hamiltoniano H é obtido da energia clássica

$$\frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V \quad (\text{B-2})$$

Com as seguintes definições:

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{B-3})$$

Ou

$$\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (\text{B-4})$$

Chegando a:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi \quad (\text{B-5})$$

## E o Laplaciano, em coordenadas cartesianas.

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (\text{B-6})$$

A energia potencial V e a função de onda  $\Psi$  são agora função  $r=(x,y,z)$  e t. A probabilidade de

se encontrar a partículas no volume infinitesimal  $d^3r = dx dy dz$  é de  $\left| \Psi \left( \vec{r}, t \right) \right|^2 d^3r$ , e a

condição de normalização dado por:

$$\int |\Psi|^2 d^3r = 1 \quad (\text{B-7})$$

Com a integral percorrendo todo o espaço. Se o potencial é independente do tempo, haverá um conjunto completo de estados estacionários,

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r}) e^{iE_n t/\hbar}, \quad (\text{B-8})$$

Nos quais a função de onda espacial  $\psi_n$ , satisfaz a equação de Schroedinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (\text{B-9})$$

## **A solução geral a equação de Schroedinger** (dependente do tempo) é dada, por

$$\Psi_n(\vec{r}, t) = \sum c_n \psi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (\text{B-10})$$

Com as constantes  $c_n$  determinadas pela função de onda inicial,  $\Psi(\vec{r}, 0)$ , como sempre. (Se o potencial admite estados contínuos, então a somatória da Equação 4-9, se torna uma integral.).

## **C – Uma Representação da Equação de Schroedinger [5] [2] [18]:**

Os problemas descritos por Hamiltonianos da forma

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad r^2 = x^2 \quad (\text{C-1})$$

Que é a base de muitíssimas do mundo físico. Sua importância sendo esfericamente simétrico. Classicamente, espera-se que em um sistema deste tipo o momento angular orbital seja uma grandeza conservada. É verdadeiro, pois é fácil mostrar, que:

$$[L, p^2] = [L, x^2] = 0$$

$$\text{logo,} \quad (\text{C-2})$$

$$[L, H] = [L^2, H] = 0$$

Quando H for dado por (A-1), refere-se a potenciais ou forças centrais. Mesmo que o Hamiltoniano não, este é um esquema de um bom ponto de partida quando consideramos esquemas aproximativos baseados em correções “pequenas” de problemas de potencial central.

Logo, (A-2), com função de H mostra que devemos procurar por auto estados de energia  $|\alpha\rangle = |Elm\rangle$ , para os quais, temos:

$$H | Elm \rangle = E | Elm \rangle \quad (C-3)$$

$$L^2 | Elm \rangle = l(l+1)\hbar^2 | Elm \rangle \quad (C-4)$$

$$L_z | Elm \rangle = m\hbar | Elm \rangle \quad (C-5)$$

Então, temos:

$$\frac{1}{2m} \langle x' | p^2 | \alpha \rangle = - \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} \langle x' | \alpha \rangle + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \langle x' | \alpha \rangle + \frac{1}{\hbar^2 r^2} \langle x' | L^2 | \alpha \rangle \right) \quad (C-6)$$

Adotando as condições de número quântico, com o operador espacial:

$$\psi_{nlm}(x) = \langle x' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (C-7)$$

Para abordarmos o problema na mecânica quântica é trabalhar na representação de coordenadas e resolver a equação diferencial apropriada para as autofunções em ter de uma função radial  $R_{El}(r)$ . Juntando todas acima, obtemos:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_{El}(r) = ER_{El}(r) \quad (C-8)$$

Dependendo da forma específica de  $V(r)$ , podemos com esta equação ou alguma variante desta para identificarmos a parte radial  $R_{El}(r)$  da autofunção e/ou dos autovalores de energia E.

## D - Separação de Variáveis [2] [18]:

O potencial é uma função somente da distância da origem. Na coordenadas esféricas adotando as seguintes coordenadas  $(r, \theta, \phi)$  **o Laplaciano tomando**

**forma:**

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (D-1)$$

Temos então nas coordenadas esférica a equação de Schroedinger dada da seguinte maneira:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right) + V\psi = E\psi \quad (D-2)$$

Buscando soluções que sejam variáveis do produto:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (D-3)$$

Colocando na equação de Schroedinger com o Laplacianos em Coordenadas Esféricas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{Y}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right) + VRY = ERY \quad (D-4)$$

Dividindo por RY e multiplicando por,  $-2mr^2 / \hbar^2$ :

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} + \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right\} = 0 \quad (D-5)$$

Considerando a dependencia de primeiro termo somente de r e o restante somente  $(\theta, \phi)$ , consequentemente cada um deve ser uma constante e escreve-se a constante como  $l(l+1)$ .

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} = l(l+1) \quad (D-6)$$

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left( \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right\} = -l(l+1)$$

## E - A equação angular [2] [18]:

A equação acima só é necessária multiplicar por  $Y \sin^2 \theta$ , o que mostra a dependencia de  $\psi$  e  $(\theta, \phi)$

$$\left\{ \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} = -l(l+1) \sin^2 \theta Y \quad (G-1)$$

Parecida com a solução de Laplace na eletrodinâmica clássica, separando as variáveis:

$$\psi(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (C-2)$$

Colocando na equação e dividindo  $\Theta\Phi$  por, temos:

$$\frac{1}{\Theta} \left\{ \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \sin^2 \theta \right\} + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = 0 \quad (\text{G-3})$$

O primeiro termo é uma função somente de  $\theta$ , e o segundo somente uma função de  $\phi$  de modo que cada um deverá ser uma constante, resultando em:

$$\frac{1}{\Theta} \left\{ \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \right\} + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2 \quad (\text{G-4})$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m^2 \quad (\text{G-5})$$

Portanto

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m^2 \rightarrow \Phi(\phi) = e^{im\phi} \text{ ou } e^{-im\phi} \quad (\text{G-6})$$

Poderia haver um fator constante na frente, mas provavelmente o observaremos em  $\Theta$ . Na mecânica clássica escreveríamos a função azimutal  $\Phi$  em termos de senos e cossenos em vez de exponenciais, pois os potenciais elétricos devem ser reais. Na mecânica quântica não há estas restrições, pois exponenciais são mais fáceis de se tratar. Ágora, quando  $\phi$  progride em  $2\pi$ , voltamos ao mesmo ponto no espaço, de modo que é natural exigir que

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(2\pi) \quad (\text{G-7})$$

Exprimindo, em outras palavras,  $\exp[im(\phi + 2\pi)] = \exp(im(\phi))$  ou  $\exp(2\pi im) = 1$ .

Concluindo, que  $m$  deve ser um número inteiro:

$$m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (\text{G-8})$$

A equação em  $\theta$ ,

$$\left\{ \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \right\} + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2] \Theta = 0 \quad (\text{G-9})$$

Não é tão simples. A solução é

$$\Theta(\theta) = AP_l^m(\cos \theta) \quad (\text{G-10})$$

A função de Legendre é definida, por:

$$P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{|m|/2} \left( \frac{d}{dx} \right)^l (x^2-1)^l \quad (\text{G-11})$$

E  $P_l^m(x)$  é o  $l$ -ésimo polinômio de Legendre, definido pela fórmula de Rodrigues:

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left( \frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l \quad (\text{G-12})$$

$P_l$  é um polinômio (de grau  $l$ ), em  $x$  e é par ou ímpar, de acordo com a paridade de  $l$ , porém,

$P_l^m(x)$  não é, em geral, um polinômio; sem é ímpar, ele carrega um fator de  $\sqrt{1-x^2}$  :

## Tabela dos Primeiros Polinômios de Legendre [2][18]:

$P_0^0(x) = 1$	$P_3^1(x) = \frac{3}{2}(1-5x^2)(1-x^2)^{1/2}$
$P_1^{-1}(x) = -\frac{1}{2}P_1^1(x)$	$P_3^2(x) = 15x(1-x^2)$
$P_1^0(x) = x$	$P_3^3(x) = 15x(1-x^2)^{3/2}$
$P_1^1(x) = -(1-x^2)^{1/2}$	$P_4^{-4}(x) = \frac{1}{40320}P_4^4(x)$
$P_2^{-2}(x) = \frac{1}{24}P_2^2(x)$	$P_4^{-3}(x) = -\frac{1}{5040}P_4^3(x)$
$P_2^{-1}(x) = -\frac{1}{6}P_2^1(x)$	$P_4^{-2}(x) = \frac{1}{360}P_4^2(x)$
$P_2^0(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$	$P_4^{-1}(x) = -\frac{1}{20}P_4^1(x)$
$P_2^1(x) = -3x(1-x^2)^{1/2}$	$P_4^0(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3)$
$P_2^2(x) = 3(1-x^2)$	$P_4^1(x) = -\frac{5}{2}(7x^3 - 3x)(1-x^2)^{1/2}$
$P_3^{-3}(x) = -\frac{1}{720}P_3^3(x)$	$P_4^2(x) = \frac{15}{2}(7x^2 - 1)(1-x^2)$
$P_3^{-2}(x) = \frac{1}{120}P_3^2(x)$	$P_4^3(x) = -105x(1-x^2)^{3/2}$
$P_3^{-1}(x) = -\frac{1}{12}P_3^1(x)$	$P_4^4(x) = 105(1-x^2)^2$
$P_3^0(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x)$	

Precisamos de  $P_l^m(\cos \theta)$  e  $\sqrt{1-\cos^2 \theta} = \sin \theta$ , de modo que  $P_l^m(\cos \theta)$  sempre será u polinômio em  $\cos \theta$  multiplicado pelo  $\sin \theta$  - sem for ímpar. Observe que  $l$  dever ser número

inteiro não negativo para que a fórmula de Rodrigues faça sentido; além disso, se  $|m| > l$ , então a equação diz que  $P_l^m = 0$ . Para qualquer  $l$  dado, então, há  $(2l+1)$  possíveis valores de  $m$ :

$$l=0,1=2, m=-l, -l+1, \dots, -1,0, 1, l-1, l. \quad (G-13)$$

Deveria ter duas soluções independentes para quaisquer valores de  $l$  e  $m$ , porém como soluções matemáticas são fisicamente inaceitáveis, pois divergem em  $\theta=0$  e ou  $\theta=\pi$ .

$$P_0^0 = 1$$

$$P_1^1 = -\sin \theta$$

$$P_1^0 = \cos \theta$$

$$P_2^2 = 3 \sin^2 \theta$$

$$P_2^1 = -3 \sin \theta \cos \theta$$

$$P_2^0 = \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1)$$

$$P_3^2 = 15 \sin^2 \theta \cos \theta$$

$$P_3^1 = -\frac{3}{2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$$

$$P_3^0 = -15 \sin \theta (1 - \cos^2 \theta)$$

agora, O elemento de volume em coordenadas esféricas é

$$d^3 \vec{r} = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (G-14)$$

A condição de normalização se torna:

$$\int |\psi|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \int |R|^2 r^2 dr \int |Y|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 1 \quad (G-15)$$

É conveniente que  $R$  e  $Y$  sejam normalizados individualmente:

$$\int_0^{\infty} |R|^2 r^2 dr = 1 \quad e \quad \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |Y|^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = 1 \quad (\text{G-16})$$

**As funções angulares normalizadas**  
**são chamadas Harmônicos**  
**Esféricos:**

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta) \quad (\text{G-18})$$

Em que  $\epsilon = (-1)^m$  para  $m \geq 0$  e  $\epsilon = 1$  para  $m \leq 0$ .

Que são ortogonais:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} [Y_l^m(\theta, \phi)]^* [Y_l^m(\theta, \phi)] \sin \theta dr d\theta d\phi = \delta_{ll} \delta_{mm} \quad (\text{G-19})$$

Onde,  $l$  é chamado de número quântico azimutal, e  $m$ , de número quântico magnético.

## Tabela Dos Harmônicos Esféricos [2] [18]:

Calculando os harmônicos esféricos, são dados abaixo:

$l = 0$

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}}$$

$l = 1$

$$Y_1^{-1}(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot e^{-i\phi} \cdot \sin \theta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \left( \frac{x - iy}{r} \right)$$

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cdot \cos \theta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \left( \frac{z}{r} \right)$$

$$Y_1^1(\theta, \phi) = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot e^{i\phi} \cdot \sin \theta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cdot \left( \frac{x + iy}{r} \right)$$



$I = 2$

$$\begin{aligned}
 Y_2^{-2}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot e^{-2i\varphi} \cdot \sin^2 \theta = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \frac{(x-iy)^2}{r^2} \\
 Y_2^{-1}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot e^{-i\varphi} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \frac{(x-iy)z}{r^2} \\
 Y_2^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{2\pi}} \cdot (3 \cos^2 \theta - 1) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{2\pi}} \cdot \frac{(2z^2 - x^2 - y^2)}{r^2} \\
 Y_2^1(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot e^{i\varphi} \cdot \sin \theta \cdot \cos \theta = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \frac{(x+iy)z}{r^2} \\
 Y_2^2(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot e^{2i\varphi} \cdot \sin^2 \theta = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cdot \frac{(x+iy)^2}{r^2}
 \end{aligned}$$

$I = 3$

$$\begin{aligned}
 Y_3^{-3}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \cdot e^{-3i\varphi} \cdot \sin^3 \theta = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{\pi}} \cdot \frac{(x-iy)^3}{r^3} \\
 Y_3^{-2}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cdot e^{-2i\varphi} \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos \theta = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cdot \frac{(x-iy)^2 z}{r^3} \\
 Y_3^{-1}(\theta, \varphi) &= \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{2\pi}} \cdot e^{-i\varphi} \cdot \sin \theta \cdot (5 \cos^2 \theta - 1) = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{2\pi}} \cdot \frac{(x-iy)(4z^2 - x^2 - y^2)}{r^3} \\
 Y_3^0(\theta, \varphi) &= \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} \cdot (5 \cos^2 \theta - 3 \cos \theta) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{7}{\pi}} \cdot \frac{z(2z^2 - 3x^2 - 3y^2)}{r^3} \\
 Y_3^1(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{2\pi}} \cdot e^{i\varphi} \cdot \sin \theta \cdot (5 \cos^2 \theta - 1) = -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{21}{2\pi}} \cdot \frac{(x+iy)(4z^2 - x^2 - y^2)}{r^3} \\
 Y_3^2(\theta, \varphi) &= \frac{1}{8} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cdot e^{2i\varphi} \cdot \sin^2 \theta \cdot \cos \theta = \frac{1}{8} \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \cdot \frac{(x+iy)^2 z}{r^3} \\
 Y_3^3(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{2\pi}} \cdot e^{3i\varphi} \cdot \sin^3 \theta = -\frac{1}{8} \sqrt{\frac{35}{2\pi}} \cdot \frac{(x+iy)^3}{r^3}
 \end{aligned}$$

## F - Equação Radial [2]:

Observe que a parte angular da função de onda,  $Y(\theta, \phi)$ , é a mesma para todos os potenciais esfericamente simétricos; o formato do potencial,  $V(r)$ , afeta somente a parte radial da função de onda,  $R(r)$ , a qual é determinada pela Equação (D-6):

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = l(l+1)R \quad (\text{F-1})$$

Se mudarmos a variável a equação fica mais simples, por:

$$u(r) \equiv rR(r), \quad (\text{F-2})$$

Tal que,

$$R = \frac{u}{r} \quad \frac{dR}{dr} = \left[ r \left( \frac{du}{dr} \right) - u \right] r^{-2}$$

$$\left( \frac{dR}{dr} \right) \left[ r^2 \left( \frac{du}{dr} \right) \right] r \frac{d^2u}{dr^2} \quad (\text{F-3})$$

Portanto,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[ V - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu \quad (\text{F-4})$$

Essa é a chamada equação radial, ela é idêntica à equação de Schroedinger unidimensional, mas a energia potencial efetiva

$$V_{ef} = V - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (\text{F-5})$$

Onde, o termo centrífugo é

$$\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (\text{F-6})$$

Ele tende a jogar a partícula para fora, para longe da origem, assim como a (pseudo) força centrífuga o faz na mecânica clássica. Enquanto isso a condição de normalização é

$$\int_0^\infty |u|^2 dr = 1 \quad (\text{F-7})$$

**Para ir mais longe além o Potencial  $V(r)$  tem que ser fornecido.**

**Veja o Exemplo do Átomo de Hidrogênio e Hélio Abaixo.**

## **G - O Átomo de hidrogênio [2]:**

O átomo de hidrogênio consiste em um próton pesado e essencialmente imóvel (também podemos colocá-lo na origem) de carga e junto eletrônem mais leve (carga -e) que orbita em torno dele, ligado pela atração mútua de cargas opostas, veja figura 4.3. Pela lei de Coulomb, a energia potencial é, no sistema internacional:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \quad (\text{G-1})$$

E a equação radial diz que:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right] u_{El}(r) = E u_{El}(r) \quad (\text{G-2})$$

Nosso problema é resolver essa equação para  $u(r)$  e determinar as energias permitidas  $E$ . O átomo de hidrogênio é um caso tão importante que não darei as soluções dessa vez; vamos trabalha-las em detalhes, por meio do método que usamos na solução analítica para oscilador harmônico. Coincidentemente, o potencial de Coulomb admite estados contínuos, com  $E > 0$ , descrevendo o espalhamento eletrôn-proton, assim como estados ligados discretos que representam o átomo de hidrogênio, mas devemos limitar nossa atenção ao último:

A função de onda radial:

Nossa primeira tarefa será organização a notação, dado:

$$k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (\text{G-3})$$

Para estes estados ligados,  $E$  é negativo, então,  $k$  é real. Dividindo por  $E$ , teremos:

$$\frac{1}{k^2} \frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} = \left[ 1 + \frac{l(l+1)}{(kr)^2} - \frac{me^2}{2\pi \epsilon_0 \hbar^2 (kr)} \right] u_{El}(r) \quad (\text{G-4})$$

Isso sugere que façamos:

$$\rho \equiv kr \quad e \quad \rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi \epsilon_0 \hbar^2 k} \quad (\text{G-5})$$

Da maneira que:

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} = \left[ 1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] u_{El}(r) \quad (\text{G-6})$$

Em seguida, examinaremos a forma assintótica das soluções. Quando  $\rho \rightarrow \infty$ , o termo constante em colchetes domina, assim, aproximadamente,

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{d\rho^2} = u_{El}(r) \quad (\text{G-7})$$

A solução geral é

$$u_{El}(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho} \quad (\text{G-8})$$

Porém,  $e^{\rho}$  diverge (quando  $\rho \rightarrow \infty$ ), por tanto  $B = 0$ . Com isso:

$$u(\rho) \sim Ae^{-\rho} \quad (\text{G-9})$$

Para grandes valores de  $\rho$ . Pôr sua vez, quando  $\rho \rightarrow 0$ , o termo centrífugo domina, então, aproximadamente,

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u_{El}(r) \quad (\text{G-10})$$

A solução geral é

$$u_{El}(\rho) = Ce^{l+1} + De^{-l} \quad (\text{G-11})$$

Porém,  $e^{-l}$  diverge (quando  $\rho \rightarrow \infty$ ), por tanto  $D = 0$ . Com isso:

$$u(\rho) \sim Ce^{l+1} \quad (\text{G-12})$$

Para pequenos valores de  $\rho$ .

O próximo passo é remover o comportamento assintótico, introduzindo a nova função  $v(\rho)$ :

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \quad (\text{G-13})$$

Na esperança de que  $v(\rho)$  se torne mais simples do que  $u(\rho)$ . As primeiras indicações não são favoráveis:

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} = \rho^l e^{-\rho} \left[ (l+1-\rho)v + \rho \frac{dv}{d\rho} \right],$$

e (G-14)

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} = \rho^l e^{-\rho} \left[ \left( -2l+2+\rho + \frac{l(l+1)}{\rho} \right) v + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + \rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} \right],$$

Em termos de  $v(\rho)$ , então, a equação radial, diz que:

$$\left[ (\rho_0 - 2(l+1))v + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + \rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} \right] = 0. \quad (G-15)$$

Por fim, supomos que a solução,  $v(\rho)$ , pode ser expressa como uma série de potencias em  $\rho$ :

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j \quad (G-16)$$

Nosso problema é determinar os coeficientes  $(c_0, c_1, c_2, \dots)$ . Diferenciando pôr termo a termo:

$$\frac{dv(\rho)}{d\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j \quad (G-17)$$

Onde  $j=j+1$  para rearranjar os termos. Diferenciando mais uma vez:

$$\frac{d^2 v(\rho)}{d\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^{j-1} \quad (G-18)$$

Ao colocar na equação G-15, teremos:

$$\left[ (\rho_0 - 2(l+1)) \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j + \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^{j-1} - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^j \right] = 0. \quad (G-19)$$

Igualando os coeficientes de mesmas potências, produz-se:

$$(\rho_0 - 2(l+1))c_j - 2c_j + 2(l+1)(j+1)c_{j+1} + j(j+1)c_{j+1} = 0. \quad (G-20)$$

Ou:

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{2(j+2l+2)(j+1)} \quad (G-21)$$

Essa fórmula de recursão, determina os coeficientes, e, portanto, a função  $v(\rho)$ . Diz que:

$$c_{j+1} \approx \frac{2j}{2j(j+1)} c_j = \frac{2j}{j+1} c_j \quad (\text{G-22})$$

Suponha por um momento que isso fosse exato, então:

$$c_{j+1} = \frac{2^j}{j!} c_0 \quad (\text{G-23})$$

E, por isso,

$$v(\rho) = c_0 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = c_0 e^{2\rho} \quad (\text{G-24})$$

Portanto:

$$u(\rho) = c_0 \rho^{l+1} e^\rho \quad (\text{G-25})$$

Que diverge para grandes valores de  $\rho$ . Na equação (G-8), exponencial positivo é precisamente o comportamento assintótica que não queremos. Não é, por acaso, pois, representa a forma assintótica de algumas soluções para a equação radial. Mas eles não são os que nos interessam, pois não são normalizáveis. Há apenas uma maneira de pôr fim a esse dilema: a série deve terminar. Deve ocorrer algum número máximo,  $j_{\max}$ , tal que

$$c_{(j_{\max}+1)} = 0 \quad (\text{G-26})$$

Além do qual todos os coeficientes são eliminados de forma automática. Evidentemente, equação (G-21), ataca o problema na raiz e na face do problema:

$$2(j_{\max} + l + 1) - \rho_0 = 0 \quad (\text{G-27})$$

Definindo...

$$n \equiv j_{\max} + l + 1 \quad (\text{G-28})$$

O chamado número quântico principal, temos:

$$\rho_0 = 2n \quad (\text{G-29})$$

Porém,  $\rho_0$  determina  $E$ , equações (G-4) e (G-6):

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{me^4}{8\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \rho_0^2} \quad (\text{G-30})$$

Então, as energias permitidas são:

$$E_n = -\left[ \frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{G-31})$$

Essa é a famosa fórmula de Bohr, o resultado mais importante de toda a mecânica, quântica. Born obteve em 1913 por meio de uma combinação casual de física clássica inaplicável e teoria quântica prematura, a equação de Schroedinger não surgirá até 1924.

Combinando as equações 4.55 e 4.68, descobrimos que

$$k = \left( \frac{me^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} \right) \frac{1}{n} = \frac{1}{an}, \quad (\text{G-32})$$

Onde:

$$a \equiv \left( \frac{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \right) = 0,529 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (\text{G-34})$$

É chamado raio de Bohr. Conclui-se que, por causa da equação 4-55

$$\rho = \frac{r}{an} \quad (\text{G-35})$$

As funções de onda espaciais para os hidrogênios são classificadas por três números quânticos (n, l e m):

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (\text{G-36})$$

Em que, referência das equações 4.36. r 4.60

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \quad (\text{G-37})$$

E  $v(\rho)$  é um polinômio de grau  $j_{\text{max}} = n - l - 1$  em  $\rho$ , cujos coeficientes são determinando.

Até um fator de normalização generalizado, pela formula de recursão:

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{2(j+2l+2)(j+1)} c_j \quad (\text{G-38})$$

Assim, pode se pensar, isto é, o estado fundamental que é o estado de menor energia, é o caso generalizado  $n=1$ ; colocando os valores aceitos para as constantes físicas, teremos:

$$E_1 = - \left[ \frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 \right] = 13,6 \text{ eV} \quad (\text{G-40})$$

Evidentemente, a energia de ligação dos hidrogênios., a quantidade de energia que você teria que dar ao elétron no estado fundamental a fim de ionizar o átomo, é de 13,6 eV. A equação (G-28) força  $l=0$  em que também  $m=0$ , veja equação (C-13), então:

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \phi), \quad (\text{G-41})$$

A fórmula de recursão trunca após o primeiro termo, equação (G-38) com  $j=0$ , produzindo

$$c_1 = 0, \text{ assim que } v(\rho) \text{ é uma constante } (c_0) \text{ e}$$

$$R_{10}(r) = \frac{c_0}{a} e^{-r/a} \quad (\text{G-42})$$

Normalizando-a de acordo com a equação 4.31:

$$\int_0^{\infty} |R_{10}|^2 r^2 dr = \frac{|c_0|^2}{a^2} \int_0^{\infty} e^{-2r/a} r^2 dr = |c_0|^2 \frac{a}{4} = 1 \quad (\text{G-43})$$

Com isso:

$$c_0 = \frac{2}{\sqrt{a}} \quad (\text{G-44})$$

E ainda:

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (\text{G-45})$$

Portanto, o estado fundamental do hidrogênio é:

$$Y_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad (\text{G-46})$$

Se  $n=2$ , a energia é

$$E = \frac{-13,6eV}{4} = 3,4eV \quad (\text{G-47})$$

Esse é o primeiro estado excitado, ou melhor, estado, um nível acima do estado de equilíbrio fundamental, pois, podemos tanto ter  $l=0$ , caso no qual  $m=0$ , quanto  $l=1$ , com  $m=-1, 0$ , ou  $+1$ ; evidentemente, quatro diferentes estados compartilham da mesma energia. Se  $l=0$ , a relação de recursão, (G-38), leva a

$$\begin{aligned} c_1 &= c_0 & \text{usando } j=0 \\ c_2 &= 0 & \text{usando } j=1 \end{aligned} \quad (\text{G-48})$$

De maneira que:

$$v(\rho) = c_0(1-\rho), \text{ e por tanto :}$$

$$R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \quad (\text{G-49})$$



Notando que os coeficientes da expansão da série  $c_j$  são completamente diferentes para  $n$  e  $l$ , a fórmula de recursão termina a série após um único termo,  $v(\rho)$ , é uma constante, e encontramos:

$$R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a} \quad (\text{G-50})$$

A constante  $c_0$  deve ser determinada pela normalização em cada caso. Problema 4.11[2].

Para  $n$  arbitrário, os valores possíveis de  $l$ , compatíveis com a equação (G-28) são

$$l=0, 1, 2, n-1 \quad (\text{G-51})$$

E para cada  $l$  há  $(2l+1)$  valores possíveis de  $m$ , equação 4,29, de modo que degenerescência total do nível de energia em são:

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \quad (\text{G-52})$$

O polinômio  $v(\rho)$ , definido pela fórmula de recursão, através da equação (G-38), é uma função bem conhecida dos matemáticos aplicados, a parte da normalização, pode ser escrito como:

$$v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho), \quad (\text{G-57})$$

Em que:

$$L_{q-p}^p \equiv (-1)^p \left( \frac{d}{dx} \right)^p L_q(x) \quad (\text{G-58})$$

É um polinômio de Laguerre.

Logo, a função de onda normalizadas dos hidrogênios são:

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left( \frac{2}{na} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/2a} \left( \frac{2r}{ns} \right)^l \left[ L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na) \right] Y_l^m(\theta, \phi) \quad (\text{G-59})$$

Esse é um dos poucos sistemas realistas que podem ser resolvidos completamente, de forma fechada perfeita. Apesar de as funções de onda dependerem dos três números quânticos, as energias, equação (G-32), são determinadas unicamente por  $n$ . Esta é a peculiaridade do Potencial de Coulomb; no caso do poço esférico, você deve lembrar, as energias dependem também de  $l$ , equação G-5. As funções de onda são mutuamente ortogonais:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left[ Y_l^m(\theta, \phi) \right]^* \left[ Y_l^{m'}(\theta, \phi) \right] r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \delta_{nm} \delta_{ll} \delta_{mm'} \quad (\text{G-60})$$

O primeiro polinômio de Laguerre,  $L_q(x)$ .

$$L_q(x) = 1$$

$$L_1 = -x + 1$$

$$L_2 = x^2 - 4x + 2$$

$$L_3 = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$$

$$L_4 = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$$

$$L_5 = -x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 200x^2 - 600x + 120$$

$$L_6 = x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4300x + 72$$

Alguns polinômios associados de Laguerre,  $L_{a-p}^p(x)$ .

$$L_0^0 = 1$$

$$L_1^0 = -x + 1$$

$$L_2^0 = x^2 - 4x + 2$$

$$L_0^1 = 1$$

$$L_1^1 = -2x + 4$$

$$L_2^1 = 3x^2 - 18x + 18$$

$$L_0^2 = 2$$

$$L_1^2 = -6x + 18$$

$$L_2^2 = 12x^2 - 96x + 144$$

$$L_0^3 = 6$$

$$L_1^3 = -24x + 96$$

$$L_2^3 = 60x^2 - 600x + 1200$$

As primeiras funções de Onda radiais para o Hidrogênio,  $R_{nl}(r)$

$$R_{10}(r) = 2a^{-3/2} \exp(-r/a)$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{r}{a}\right) \exp(-r/2a)$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right) \exp(-r/2a)$$

$$R_{30}(r) = \frac{1}{\sqrt{27}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a} + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \exp(-r/3a)$$

$$R_{31}(r) = \frac{1}{27\sqrt{6}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{2}{6} \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right) \exp(-r/3a)$$

$$R_{32}(r) = \frac{1}{81\sqrt{30}} a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \exp(-r/3a)$$

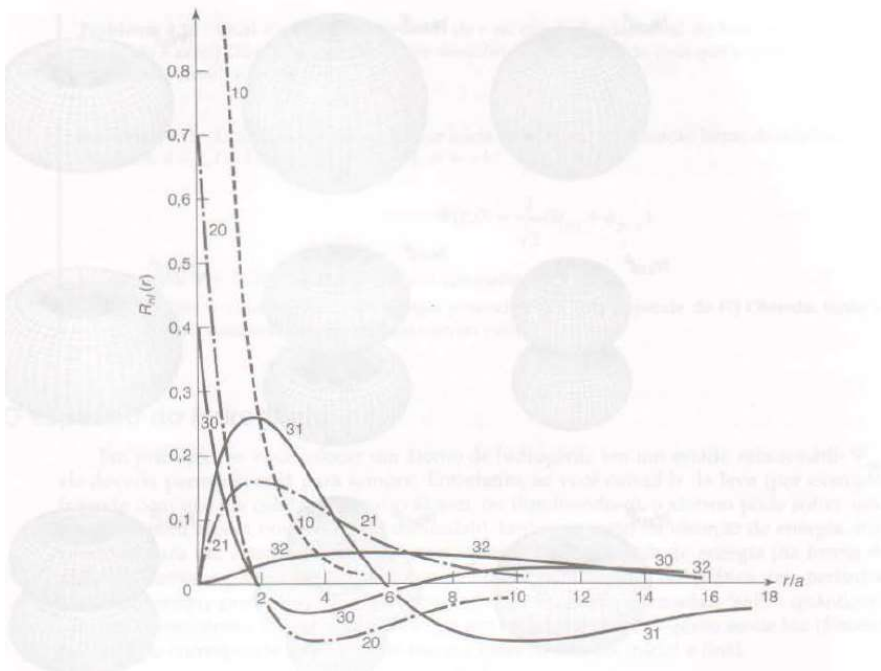
$$R_{40}(r) = \frac{1}{4} a^{-3/2} \left(1 - \frac{3}{4} \frac{r}{a} + \frac{1}{8} \left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{192} \left(\frac{r}{a}\right)^3\right) \exp(-r/4a)$$

$$R_{41}(r) = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{4} \frac{r}{a} + \frac{1}{80} \left(\frac{r}{a}\right)^2\right) \frac{r}{a} \exp(-r/4a)$$

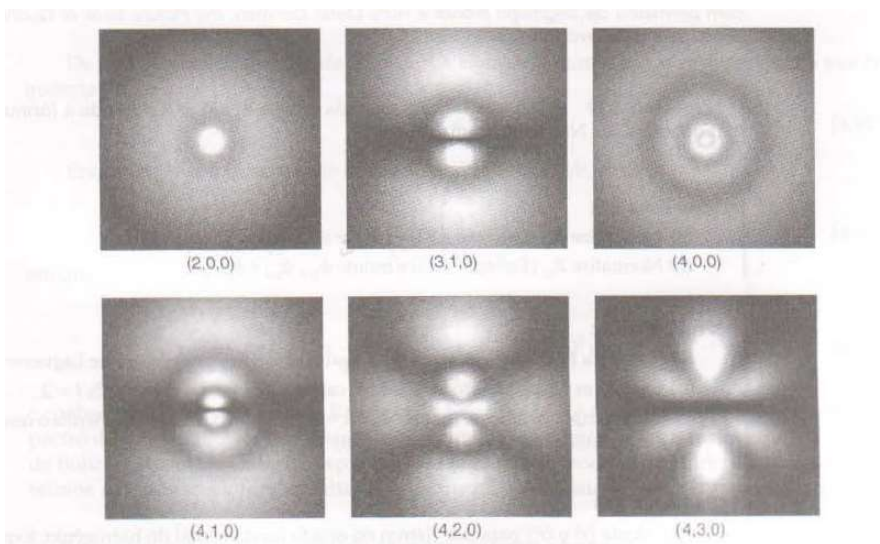
$$R_{42}(r) = \frac{1}{64\sqrt{5}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{12} \frac{r}{a}\right) \left(\frac{r}{a}\right)^2 \exp(-r/4a)$$

$$R_{43}(r) = \frac{1}{768\sqrt{35}} a^{-3/2} \left(\frac{r}{a}\right)^3 \exp(-r/4a)$$

Isso é em decorrência da ortogonalidade dos harmônicos esféricos, equação (G-60), e para  $n \neq n'$  do fato de serem autofunções de H com autovalores distintos. A visualização das funções de ondas do hidrogênio não é fácil. Os químicos geralmente desenham “gráficos de densidade”, nos quais o brilho da ovelha é proporcional a  $|\psi|^2$  figura G-2. Mais quantitativas, (Talvez, mais difíceis de ler) são as superfícies de densidade de probabilidade constante, Figura G-3.

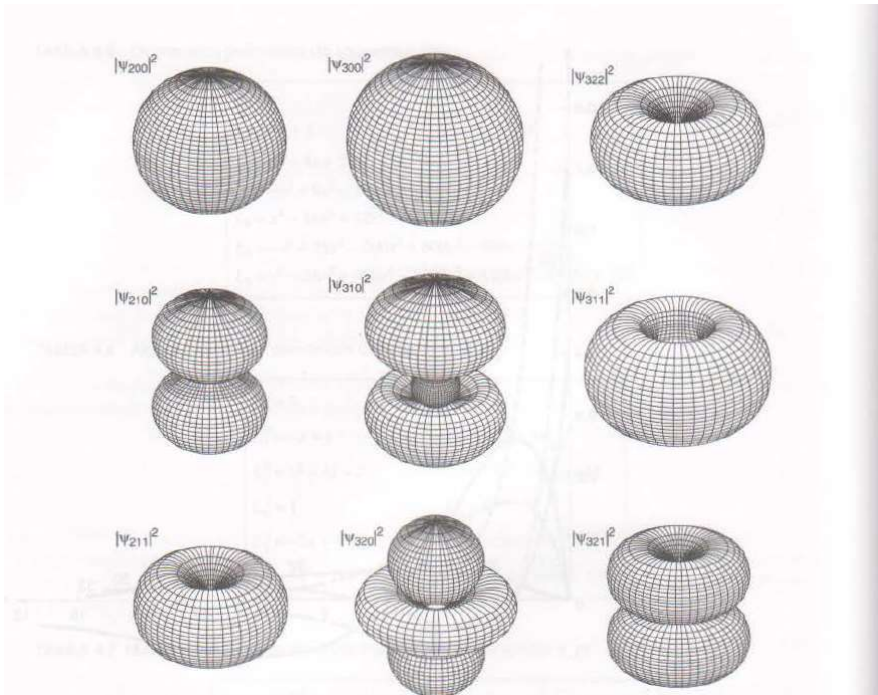


G-1 Gráfico das primeiras funções de onda Radiais do Hidrogênio,  $R_{nl}(r)$ .



G-2 Gráficos de densidade para as funções de onda do hidrogênio ( $n, l, m$ ). Imagine cada uma das imagens girando sobre o eixo (vertical)  $z$ . Impressa com a devida permissão usando 'Átomo

na Caixa' v1.0.8, De Auger Research. Você pode fazer suas próprias imagens acessando o site <http://dauger.com>



G-3 Superfícies de  $|\psi|^2$  constantes para as primeiras funções de onda do hidrogênio.  
Reimpresso do [1] Griffiths de Siegmund Brandt e Hans Dieter Dahmen, The Picture Book of  
The Quantum Mechanics 3ª ed., Springer, Nova York (2001).

## G- O Estado Fundamental do Hélio [2]:

O átomo do hélio consiste de dois elétrons orbitando ao redor de um núcleo com dois prótons, e também alguns nêutrons, os quais irrelevantes para o estudo. O Hamiltoniano desse sistema, ignorando a estrutura fina e correções menores é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{2}{|r_1 - r_2|} \right) \quad (\text{G-1})$$

$$V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{|r_1 - r_2|}$$

O problema é calcular a energia do estado fundamental  $E_{gs}$ , que representa a energia necessária para arrancar ambos elétrons. Essa energia  $E_{gs}$  medida experimentalmente é dada por:

$$E_{gs} = -78,975 \text{ eV} \quad (\text{G-2})$$

Dado que:

$$V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{|r_1 - r_2|} \quad (\text{G-3})$$

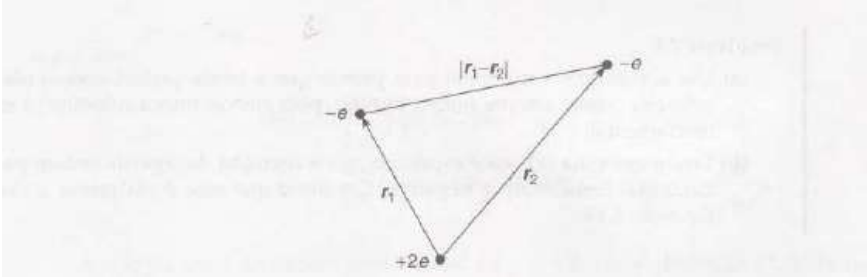
Mostra que um problema tão simples para o átomo de Hélio, com a condição acima da repulsão elétron-elétron e também não tem uma solução exata conhecida. Ignorando completamente este termo, H irá se dividir em dois Hamiltonianos de Hidrogênio independentes, com uma carga enuclear de 2e em vez de e; logo a solução exata será, será o produto das funções de Hidrogênio:

$$\psi_0(r_1, r_2) \equiv \psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1+r_2)/a} \quad (\text{G-4})$$

E a energia é  $8E_1 = 109 \text{ eV}$ , equação 5.31. Há uma diferença grande entre esse resultado e 79 eV.

Para uma melhor aproximação para  $E_{gs}$  aplicaremos o princípio variacional, utilizando  $\psi_0$  como função de onda teste. Essa é uma escolha conveniente, pois é uma autofunção das maiorias dos Hamiltonianos:

$$H\psi_0 = (8E_1 + V_{ee})\psi_0 \quad (\text{G-5})$$



Átomo do Hélio

Assim, temos que,

$$\langle H \rangle = 8E_1 + \langle V_{ee} \rangle \quad (\text{G-6})$$

Onde,

$$\langle V_{ee} \rangle = \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left( \frac{8}{\pi a^3} \right) \int \frac{e^{-4(r_1+r_2)/a}}{|r_1+r_2|} d^3r_1 d^3r_2 \quad (\text{G-7})$$

Resolve-se, da seguinte maneira,

$$|r_1+r_2| = \sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta_2} \quad (\text{G-8})$$

Que é a integral em  $r_2$ , primeiro, para isso  $r_1$  é fixo e podemos também orientar o sistemas em coordenadas  $r_2$  de modo que o eixo polar se situe ao longo de  $r_1$ , a equação acima é dada pela leis dos cossenos. E, portanto, temos,

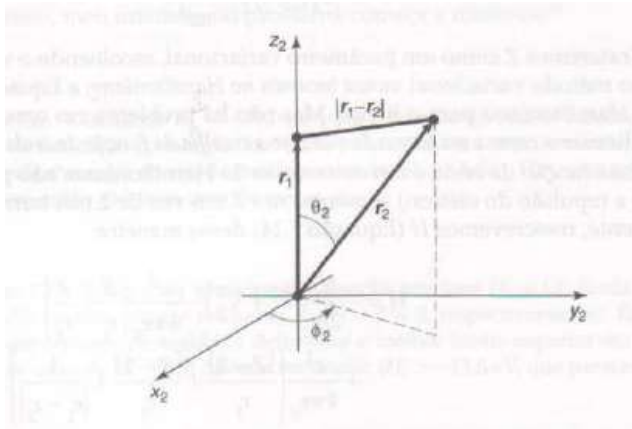
$$I_2 = \int \frac{e^{-4r_2/a}}{|r_1+r_2|} d^3r_2 = \int \frac{e^{-4r_2/a}}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos\theta_2}} r_2^2 \sin\theta_2 dr_2 d\theta_2 d\phi_2 \quad (\text{G-9})$$

A integral de  $\phi_2$  é trivial  $2\pi$ , a integral em  $\theta_2$  é

$$\int_0^\pi \frac{e^{-4r_2/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}} r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 =$$

$$\frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}}{r_1r_2} \Big|_0^\pi = \frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1r_2} - \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2}}{r_1r_2} =$$

$$\frac{1}{r_1r_2} [(r_1 + r_2) + |r_1 - r_2|] = \begin{cases} 2/r_1, & r_2 < r_1 \\ 2/r_2, & r_2 > r_1 \end{cases}$$



Escolha de coordenadas para integral em  $r_2$

Logo,

$$I_2 = 4\pi \left( \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-4r_2/a} r_2^2 dr_2 + \frac{1}{r_1} \int_{r_1}^\infty e^{-4r_2/a} r_2^2 dr_2 \right) =$$

$$I_2 = \frac{\pi a^3}{8r_1} \left( 1 - \left( 1 - \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right) = \quad (G-10)$$

Tal que  $\langle V_{ee} \rangle$

$$\langle V_{ee} \rangle = \left( \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right) \left( \frac{8}{\pi a^3} \right) \int \left( 1 - \left( 1 - \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right) e^{-4r_1/a} r_1 \sin \theta_1 dr_1 d\theta_1 d\phi_1 \quad (G-11)$$



As integrais angulares são de fáceis cálculos dando  $4\pi$ , e integral em  $r_1$ , nos dá

$$\int_0^{\infty} \left( r e^{-8r_1/a} - \left( r - \frac{2r^2}{a} \right) e^{-8r_1/a} \right) dr = \frac{5a^2}{128}$$

$$\langle V_{ee} \rangle = \left( \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right) \left( \frac{8}{\pi a^3} \right) \frac{5a^2}{128} = -5E_1 = 34eV$$

Portanto

$$\langle H \rangle = -109eV + 34eV = -75eV$$

Lembrando que o valor experimental é  $-79eV$ . Pode-se aproximar da melhor maneira, pensando em uma função mais realista do  $\psi_0$ , na qual trata os dois elétrons como se eles não interagissem de maneira alguma. Em vez de ignorar a influência do elétron, consideramos que cada elétron represente uma nuvem de carga negativa que protege parcialmente o núcleo, assim, o outro elétron, na verdade, vê uma carga nuclear efetiva ( $Z$ ), que é de certa forma, menor que 2. Portanto devemos usar uma função teste da forma

$$\psi_1(r_1, r_2) = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a} \quad (\text{G-12})$$

Tratando  $Z$  como um parâmetro variacional, escolhe o valor que minimize o  $H$ , continua o Hamiltoniano para o Hélio, nunca tocamos no Hamiltoniano pelo método variacional. Logo consideraremos uma aproximação para adequar a função teste. Tal função de onda é um estado do Hamiltoniano 'não perturbado', quando preza a repulsão do Elétron, somente com  $Z$  em vez de 2 nos termos de Coulomb. Logo escreve-se  $H$ , como,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \left( \frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} \right) + \quad (\text{G-13})$$

$$+ \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \left( \frac{(Z-2)}{r_1} + \frac{(Z-2)}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right)$$

O valor esperado de  $H$ , é,

$$\langle H \rangle = 2Z^2 E_1 + 2(Z-2) \left( \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \langle V_{ee} \rangle \quad (\text{G-14})$$

Onde  $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$  é o valor esperado de  $1/r$  no estado fundamental do hidrogênio de uma partícula,

$\psi_{100}$  (mas com carga  $Z$ ), que pela equação 6.55,

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a} \quad (\text{G-15})$$

O valor esperado de  $V_{ee}$  é o mesmo de antes, equação 7.25, exceto que em vez de  $Z=2$ , agora queremos o  $Z$  arbitrário, multiplicando a por  $2/Z$ :

$$\langle V_{ee} \rangle = \frac{5Z}{8a} \left( \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right) = -\frac{5Z}{4} E_1 \quad (\text{G-16})$$

Reunindo tudo isso,

$$\langle H \rangle = [2Z^2 + 4Z(Z-2) - (5/4)Z] E_1 = [-2Z^2 + (27/4)Z] E_1$$

De acordo com o princípio variacional, essa quantidade excede  $E_{gs}$  para qualquer valor de  $Z$ .

O limite superior mais baixo ocorre quando  $\langle H \rangle$  for minimizado:

$$\frac{d}{dZ} \langle H \rangle = [-4Z + (27/4)] E_1 = 0$$

Tal que:

$$Z = \frac{27}{16} = 1,69.$$

Parece razoável, a resposta quer dizer que o elétron protege parcialmente o núcleo, reduzindo sua carga efetiva de 2 até cerca de 1,69. Considerando esse valor para  $Z$ , obtemos:

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \left( \frac{3}{2} \right)^6 E_1 = -77,5 \text{ eV}$$

*O Estado Fundamental do Hélio tem sido calculado dessa maneira com muita precisão, utilizando funções de onda teste cada vez mais complicadas, com mais e mais parâmetros ajustáveis. Mas estamos 2 por cento dentro da*

reposta correta e, francamente, a essa altura, o problema começa a diminuir.

## H - Um Exemplo de Separação de Variáveis [18]:

Considerando a radiação do som de um cilindro infinito, descrita por:[8]

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2} \right) - \frac{1}{c^2} \left( \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \right) = 0$$

Que métodos análogos aos osciladores harmônicos:

$$\varphi(r, \theta, t) = \psi(r, \theta) e^{-i\omega t}$$

Considerando a função de onda nas variáveis de coordenadas esféricas, dada por:

Usando para as seguintes variáveis para separação:

$$\varphi(r, \theta, t) = R(r)\theta(\theta)T(t)$$

Colocando na Equação:

$$\frac{\theta T}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{TR}{r^2} \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial \theta^2} \right) - \frac{\theta R}{c^2} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \right) = 0$$

$$\frac{1}{rR} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\theta r^2} \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial \theta^2} \right) = \frac{1}{Tc^2} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \right)$$

Tratando como uma variável dependente e sendo uma constante:

$$\left( \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} \right) = l^2 T c^2$$

$$\frac{1}{rR} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\theta r^2} \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial \theta^2} \right) = l^2$$

Multiplicando por  $r^2$  :

$$\frac{r}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\theta} \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial \theta^2} \right) = l^2 r^2$$

Isolando os termos:

$$\frac{r}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) - l^2 r^2 = -\frac{1}{\theta} \left( \frac{\partial^2 \theta}{\partial \theta^2} \right)$$

Tratando a dependência de teta e considerando como uma constante:

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial \theta^2} = -m^2 \theta$$

Colocando a condição acima na equação:

$$r \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial R}{\partial r} \right) - (l^2 r^2 + m^2) R = 0$$

Adotando as seguintes condições das variáveis:

$$x = l^2 r^2 \qquad y(x) \equiv R(r)$$

$$m = l(l+1)$$

A **Equação Radial**, torna-se:

$$x^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + 2x \frac{\partial y}{\partial x} - (x^2 + l(l+1)^2) y = 0$$

Considerando o valor, da função da equação radial, como:

$$y(x) = u(x) / \sqrt{x}$$

Vai te dar:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{u} \frac{\partial y}{\partial x} - \left( 1 + \frac{(l+1/2)^2}{x^2} \right) u = 0$$

Considere o seguinte Teorema:

$x_0$  são o ponto singular regular da EDO, tal que a EDO sempre possui uma solução  $y = y_1(x)$  dada por:

$$y_1(x) = (x-x_0)^{r_1} \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x-x_0)^n, \quad a_0 \neq 0$$

E consideramos uma segunda solução,  $y = y_2(x)$ , sendo o conjunto  $\{y_1, y_2\}$  linearmente independente, com as seguintes condições:

1 – Se  $r_1 - r_2$  não for um inteiro positivo, então:

$$y_2(x) = (x-x_0)^{r_2} \sum_{n=0}^{\infty} b_n (x-x_0)^n, \quad b_0 \neq 0$$

2 – Se  $r_1 = r_2 = 0$ , então:

$$y_2(x) = y_1(x) \ln|x-x_0| + (x-x_0)^{r_1} \sum_{n=0}^{\infty} b_n (x-x_0)^n, \quad b_1 \neq 0$$

3 – Se  $r_1 - r_2 = N$ , com  $N=1,2,3$ , então:

$$y_2(x) = c y_1(x) \ln|x-x_0| + (x-x_0)^{r_1} \sum_{n=0}^{\infty} b_n (x-x_0)^n, \quad b_0 \neq 0 \text{ e } c \in \mathbb{R}$$

As soluções são válidas nos intervalos  $0 < x-x_0 < R$  e  $R = \min\{r_1, r_2\}$  e  $r_1$  e  $r_2$  raízes de convergências das expansões das séries das funções  $\bar{P}(x)$  e  $\bar{Q}(x)$  em torno de  $x_0$ .

Temos que:

$$x^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + 2x \frac{\partial y}{\partial x} + (x^2 - m^2)y = 0$$

## Aplicando o método de Frobenius,

através da seguinte função:

$$y = x^r \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+r)(n+r-1) a_n x^{n+r} + \sum_{n=0}^{\infty} (n+r) a_n x^{n+r} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r+2} - \sum_{n=0}^{\infty} m^2 a_n x^{n+r} = 0$$

Rearranjando:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left( (n+r)^2 + m^2 \right) a_n x^{n+r} - \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+r+2} = 0$$

Com  $k = n+2$ ,

Ficando:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+r+m)(n+r-m)a_n x^{n+r} + \sum_{k=2}^{\infty} a_{k-2} x^{k+r} = 0$$

Aplicando  $k=n+2$  e rearranjando os termos:

$$(n+m)(r-m)a_0 x^r + (n+m+1)(r-m+1)a_1 x^{r+1} + \sum_{k=2}^{\infty} ((n+r+m)(n+r-m)a_n + a_{n-2}) x^{n+r} = 0$$

A seguintes condições dos coeficientes, para igualar a zero:

$$(n+m)(r-m) = 0$$

$$(n+m+1)(r-m+1) = 0$$

$$(n+r+m)(n+r-m)a_n + a_{n-2} = 0$$

$$r_1 = p \quad r_2 = -p$$

Temos a primeira solução:

$$r_1 = p > 0$$

$$(2p+1)a_1 = 0$$

$$a_1 = 0$$

$$(n+2p)na_n + a_{n-2} = 0, \quad n = 2, 3, 4$$

$$a_n = \frac{a_{n-2}}{(n+2p)n}, \quad n = 2, 3, 4$$

$$a_{2n+1} = 0$$

$$a_2 = \frac{a_0}{(2+2p)2}$$

$$a_4 = \frac{a_0}{(2+2p)(4+2p)2 \cdot 4}$$

$$a_6 = \frac{a_0}{(2+2p)(4+2p)(6+2p)2 \cdot 4 \cdot 6}$$

$$a_2 = \frac{(-1)^n a_0}{1(1+p)2^2}$$

$$a_4 = \frac{a_0}{1 \cdot 2(1+p)(2+p)2^4}$$

$$a_6 = -\frac{a_0}{1 \cdot 2 \cdot 3(1+p)(2+p)(3+p)2^6}$$

$$a_{2n} = -\frac{a_0}{n!(1+p)(2+p)\dots(n+p)2^{2n}}$$

Portanto, a função é:

$$y_1 = \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(1+p+n)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n+p}$$

## Que é a função esférica de Bessel:

$$J_p(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(1+p+n)} \left(\frac{x}{2}\right)^{2n+p}$$

## A Equação Indicial é dada por:

$$F(r) = r^2 - (\bar{P}-1)r - \bar{q}_0 = 0$$

Retomando a Equação:

$$x^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} + 2x \frac{\partial y}{\partial x} + (x^2 - m^2)y = 0$$

Considerando, como:

$$F(r) = (r-1)r + r = 0$$

A solução é para Equação Ordinária é:

$$y_2(x) = y_1(x) \ln|x| + \sum_{n=1}^{\infty} b_n x^n$$

$$\begin{cases} [(r-1)r + r]a_0 = 0 \\ [(r-1)r(r+1)]a_1 = 0 \end{cases} \quad a_1 = 0$$

Relação de Recorrência:

$$a_n(r) = \frac{-a_{n-2}(r)}{(n+r)^2}, \quad n = 2, 3, \dots$$

$$n = 2 \quad a_2(r) = -\frac{a_0(r)}{(2+r)^2}$$

$$n = 3 \quad a_3(r) = -\frac{a_1(r)}{(3+r)^2}$$

Onde:

$$a_1 = 0 \qquad n = 2m$$

$$a_{2m}(r) = \frac{(-1)^m a_0}{(2+r)^2 (4+r)^2 (6+r)^2 \dots (2m-2+r)^2 (2m+r)^2}, m = 1, 2, 3, \dots$$

Fazendo um  $a'(r)$  com a relação de recorrência:

$$\frac{a'_{2m}(r)}{a_{2m}(r)} = -2 \left[ \frac{1}{(2+r)} + \frac{1}{(4+r)} + \dots + \frac{1}{(2m-2+r)} + \frac{1}{(2m+r)} \right]$$

Para

$$r = 0$$

$$a'_{2m}(0) = - \left[ 1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{m-1} + \frac{1}{m} \right] a_{2m}(0) = -H_m a_{2m}(0)$$

Tal que:

$$a'_{2m}(0) = H_m \frac{(-1)^{m+1} a_0}{2^{2m} (m!)^2}$$

A solução é:

$$y_2(x) = a_0 J_0(x) \ln|x| + \sum_{m=1}^{\infty} H_m \frac{(-1)^{m+1} a_0}{2^{2m} (m!)^2} x^{2m}$$

## A solução Geral torna-se:

$$y = c_1 J_0(x) + c_2 Y_0(x)$$

Ou

$$Y_0 = \frac{2}{\pi} \left[ \left( \gamma - \ln \frac{x}{2} \right) J_0(x) + \sum_{m=1}^{\infty} H_m \frac{(-1)^{m+1} a_0}{2^{2m} (n!)^2} x^{2n} \right]$$

Exercício 4 Física Matemática Eugene Butkov 1967.

## J - Equação Radial [18]:

Considerando a equação radial:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_{El}(r) = ER_{El}(r)$$



Ou

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = l(l+1)R$$

Fica mais simples se mudarmos a equação:

$$R_{El}(r) = \frac{u_{El}(r)}{r}$$

Colocando, torna-se:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] u_{El}(r) = E u_{El}(r)$$

Essa equação é chamada radial, ela é idêntica em forma a equação de Schroedinger unidimensional, mas a energia potencial efetiva:

$$V_{ef} = V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

Onde o segundo termo é chamado centrífugo. Ele tende a jogar a partícula para fora (longe da origem), assim como a (pseudo) força centrífuga o faz na mecânica clássica. E a condição de normalização se transforma em:

$$\int_0^{\infty} |u|^2 dr = 1$$

Aqui é o mais longe que se pode ir, até que determinado potencial  $V(r)$  seja fornecido:

Considerando:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} v$$

## Para $l=0$

Temos:

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} = \left[ -\frac{2m}{\hbar^2} V_0 - \frac{2m}{\hbar^2} E \right] u_{El}(r)$$

Adotando:

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 + E] \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V_0 + E]}$$

Fica:

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} = -k^2 u_{El}(r)$$

Cujas Soluções são:

$$u_{El}(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr)$$

Tal que:

$$R_{El}(r) = \frac{u_{El}(r)}{r} = \frac{A \sin(kr) + B \cos(kr)}{r}$$

Uma vez que:

$$B \rightarrow 0$$

Então:

$$\text{Se } R_{El}(r) = \frac{A \sin(ka)}{r} = 0$$

Onde:

$$ka = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{a}$$

Portanto:

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} [V_0 + E]} = \frac{n\pi}{a}$$

$$E_{n0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - V_0$$

## Já para $l=1$

$$l=1$$

$$\frac{d^2 u_{El}(r)}{dr^2} = \left[ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V_0 - \frac{2m}{\hbar^2} E \right] u_{El}(r)$$

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 + \frac{2m}{\hbar^2} E$$

As soluções são:

$$u_{El}(r) = (\text{Bessel}) Ar_j_l(kr) + (\text{Neumann}) Br_n_l(kr)$$

As funções de Bessel e Neumann dadas por:

$$j_l(x) = (-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}$$

$$n_l(x) = -(-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x}$$

Fazendo  $r \rightarrow 0$  :

$$u_{El}(r) = Arj_l(kr)$$

$$R_{El}(r) = \frac{u_{El}(r)}{r} = Aj_l(kr)$$

Exemplos de Equação de Bessel:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$$

$$j_2(x) = \left( \frac{3}{x^3} - \frac{1}{x} \right) \sin x - \frac{3}{x^2} \cos x$$

Condições de Contorno:

$$R(a) = 0 \quad j_l(k0) = 0$$

Tal que:

$$\frac{\beta_{nl}^2}{a^2} = k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 + E]$$

O que nos dá a seguinte definição de Energia:

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\beta_{nl}^2}{a^2} - V_0$$

## K- Aproximação de Born [18]

Formulando a aproximação de Born, consiste em fazer:

$$\psi(r) = \psi_0(r) + \psi_1(r)$$

Em três dimensões é tratar o problema pelo mesmo método de ataque de uma dimensão, consideremos os problemas em três dimensões:

$$\nabla^2 \psi(r) + k^2 \psi(r) + \epsilon^2 u(x) \psi(r) = 0$$

$U(r)$  é uma função desprezível fora da região finita  $r < a$  e pode ser considerada uma perturbação pequena da equação de Helm Holtz. Desejamos uma solução que se reduza à solução de onda plana

$$\psi_0(r) = e^{i(kr)}$$

Quando a perturbação tender para zero (G-0). Como antes, façamos

$$\psi(r) = \psi_0(r) + \psi_1(r)$$

Onde  $\psi_1(r)$  é da mesma ordem de grandeza que  $\epsilon^2$ . Então  $\psi_1$  satisfaz

$$\nabla^2 \psi_1(r) + k^2 \psi_1(r) = -\epsilon^2 u(x) e^{i(kr)}$$

Podemos resolver a equação com a ajuda da função de Green:

$$\nabla^2 G(r | r_0) + k^2 G(r | r_0) = \delta(r - r_0)$$

É a condição radiação, pois  $\psi$  deve ter esta propriedade. Podemos calcular G, tomando transformadas de Fourier em relação a todas três coordenadas. Seja  $R = |r - r_0|$ , então G pode ser uma função R e deve poder ser escrita como

$$G(R) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} g(K) e^{-i(K.R)} d^3 K$$

Onde  $g(K)$  é a transformada de Fourier Tripla de G(R).

$$\delta(R) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(K.R)} d^3 K$$

Substituindo na EDP, obtido por

$$(-K^2 + k^2) g(K) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3}$$

De maneira que

$$G(R) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i(K.R)}}{k^2 - K^2} d^3 K$$

É agora conveniente calcular esta integral em coordenadas esféricas no espaço K e efetuar, em primeiro lugar, a integração em relação aos ângulos. Se o eixo polar estiver situado na direção R, teremos.

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int e^{-iKR \cos\theta} \sin\theta d\theta = 4\pi \frac{\sin KR}{KR}$$

De maneira que

$$G(R) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \pi \frac{\sin KR}{KR} \frac{K^2 dK}{(k^2 - K^2)}$$

Como o integrando é uma função par, podemos estender a integração (-infinity, infinity) e escrever

$$G(R) = -\frac{1}{8\pi^2 Ri} \int \frac{(e^{iKR} - e^{-iKR}) K dK}{(K+k)(K-k)}$$

Escrevendo também  $\sin KR$  em termos de funções exponenciais. A integral pode ser calculada pelo cálculo dos resíduos, mas devemos especificar o tratamento dos polos em  $K = \pm k$ . É evidente que  $G(R)$  conterá, em princípio, fatores  $e^{iKR} - e^{-iKR}$ , pois os resíduos contribuirão com tais fatores. No entanto, somente os termos com  $e^{iKR} - e^{-iKR}$  satisfarão a condição de radiação de Sommerfeld. Por conseguinte, o caminho de integração de ser escolhido de tal maneira que somente os termos com  $e^{iKR} - e^{-iKR}$  ocorram.

O caminho está mostrado na Figura 15.1

Com efeito, como  $R > 0$ , o contorno para a primeira parte da integral com  $e^{iKR} - e^{-iKR}$  deve ser fechado por cima, fornecendo

$$\int_0^\infty \frac{e^{iKR} K dK}{(K-k)(K+k)}$$

Enquanto que a segunda parte com  $e^{iKR} - e^{-iKR}$  deve ser fechada por baixo, fornecendo

$$\int_0^\infty \frac{e^{-iKR} K dK}{(K-k)(K+k)} = 2\pi i \frac{e^{iKR} (-k)}{(-2k)}$$

Ou, explicitamente,

$$G(R) = G(r | r_0) = -\frac{e^{ik|r-r_0|}}{4\pi |r-r_0|}$$

Podemos escrever a expressão para  $\psi_1(r)$

$$\psi_1(r) = \frac{1}{4\pi} \iiint \frac{e^{ik|r-r_0|}}{|r-r_0|} e^2 u(r_0) e^{i(k \cdot r_0)} d^3 r_0$$

**Um Exemplo:**

Considerando  $u(r_0) = -U_0$  para  $r < a$ ,  $u(r_0) = 0$  para  $r > a$

Partindo da Dedução do Fator Forma (2-4-4), onde se chega à dedução da equação (2-4-12) [11]

$$\psi_1(r) = \int_0^\infty \frac{\sin kr}{k} e^2 u(r_0) dr$$

O Cálculo da Integral a equação acima:

$$d\sigma = 4a^2 \left( \frac{mu_0 a^2}{h^2} \right)^2 \frac{(\sin qa - qa \cos qa)^2}{(qa)^6} do$$

. A integração sobre todos ângulos, com a variável  $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$  e trocando  $do$  por  $2\pi \frac{dq}{k^2}$ , dá a equação de Seção Choque Diferencial

$$\sigma = 4a^2 \left( \frac{mu_0 a^2}{h^2} \right)^2 \left[ 1 - \frac{1}{(2ka)^2} + \frac{\sin 4ka}{(2ka)^3} + \frac{\sin^2 2ka}{(2ka)^4} \right]$$

Onde  $d^3r$  é o elemento de volume no espaço da variável de integral  $r_0$ . Esta expressão representa a aproximação de Born para a onda espalhada phiesp.

É costume fazer mais aproximações na integral, acima, mas não as apresentaremos aqui.

## L- Energia Relativística do Elétron Livre [4]:

Consideremos uma partícula cuja massa de repouso é  $m_0$ , inicialmente parada em  $x=0$ . É aplicada então uma força de modulo  $F$  no sentido positivo do eixo  $x$ , e a partícula se move sob influência desta força. É interessante calcular o trabalho total realizado pela força quando a

partícula se move até  $x=x_f$ . Chamaremos este trabalho de  $K$ . Usando a definição usual de trabalho,

$$K = \int_0^{x_f} F dx = \int_0^{t_f} F \frac{dx}{dt} dt = \int_0^{t_f} F v dt$$

Onde  $t_f$  é o tempo no qual a partícula atinge  $x_f$ . Para calcularmos esta integral, devem conhecer a forma relativística da equação de Newton para o movimento. Com uma expressão aceitável relativisticamente para o momento  $p=mv$ , onde  $m$  é a massa relativística, pode confiantemente introduzir na relatividade a equação de Newton na forma de (A-14)

$$F = \frac{dp}{dt} = \frac{d(mv)}{dt}$$

Isto é basicamente apenas uma definição da força  $F$ . Usando-a para substituir  $F$  na integral, dado por

$$K = \int_0^{v_f} v \frac{dp}{dt} dt = \int_0^{v_f} v dp$$

Integrando por obrado por

$$K = [vp]_0^{v_f} - \int_0^{v_f} p dv$$

Substituindo o  $m$  de  $p=mv$  por (A-18), e expressando  $vdv$  como  $d(v^2)$ , dado por

$$K = \left[ \frac{m_0 v^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \right]_0^{v_f} - \frac{m_0}{2} \int_0^{v_f} \frac{d(v^2)}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$$

Esta integral é conhecida, e dá

$$K = m_0 v^2 \left[ \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \right]_0^{v_f}$$

Substituindo os limites, e então omitindo o índice  $f$  para implicar a notação, dado por

Mas a lei clássica da conservação da energia implica que o trabalho total realizado pela força que atua sobre a partícula deve igual a sua energia cinética. Assim, gostaríamos de chamar  $K$  de energia da partícula. Para verificar o limite clássico, tomemos  $v/c \ll 1$ , e façamos a expansão do recíproco da raiz quadrada; obsedado por

$$K(v) = E(v) - E(0)$$

Ou

$$K \approx \frac{m_0 c^2}{2} \frac{v^2}{c^2} = \frac{m_0 v^2}{2}$$

Isto está de acordo com a expressão clássica para energia cinética, e confirma nossa identificação de K em (A-19) com sendo a a energia cinética relativística.

Continuando a interpretação de (A-19), observamos que K é uma função de v que pode ser escrita como a diferença entre um termo que depende de v e um termo constante, como se segue

$$K(v) = E(v) - E(0)$$

Identificamos por

$$E(v) = K(v) + E(0)$$

A conclusão é inevitável, condiz com as pesquisas. Assim,,  $E(v)$  é interpretados como a energia total da partícula se movendo com velocidade v, já que é a soma da energia cinética  $K(v)$  da partícula e uma energia intrínseca  $E(0)$  associada à partícula quando ela está em repouso. A energia  $E(v)$  é chamada energia relativística total, e  $E(0)$  é chamada a energia de repouso:

$$E(0) = m_0 c^2$$

Estabelecemos relativística total E uma partícula é  $c^2$  multiplicado por sua massa relativística m

$$E = m_0 c^2$$

A equação (A-19) nos dá a relação entre a energia relativística total E, a energia cinética relativística K e a energia de repouso  $m_0 c^2$

$$E = K + m_0 c^2$$

Normalmente é conveniente ter uma expressão para a energia relativística total que envolva explicitamente o momento p. Esta expressão pode ser obtida se desenvolvemos a expressão

$$m^2 c^2 - m_0^2 c^2 =$$

*Separando*

$$m_0^2 c^2 \left( \frac{m_0 c^2}{2} \frac{v^2}{c^2} - 1 \right) = m_0^2 c^2 \left( \frac{v^2 / c^2}{1 - v^2 / c^2} \right)$$

$$= \left( \frac{m_0^2 c^2 v^2}{1 - v^2 / c^2} \right) = m_0^2 c^2 v^2 = c^2 p^2$$



Assim

$$m^2 c^4 = m^2 p^2 - m_0^2 c^4$$

Ou

$$E^2 = c^2 p^2 - m_0^2 c^4$$

Embora as escolhas feitas na teoria da mecânica relativística pareçam razoáveis, sua justificativa definitiva é obtida pela comparação das previsões da teoria com as experiências apropriadas. A energia de repouso não está em conflito com a física clássica. Como as experiências nesse campo envolvem sempre sistemas nos quais a energia de repouso é basicamente constante, as energias de repouso são basicamente constantes, as energias de repouso apropriadas podem ser somadas aos dois lados de todas as equações de balanço de energia clássicas, sem destruir sua validade.

A teoria é, no entanto, de interesse maior do que o interesse acadêmico, porque há importantes processos na natureza em que a massa de repouso total de um sistema isolado muda de forma significativa. Para estes processos, as experiências na física quântica mostram que a variação na energia de repouso é compensada exatamente por uma variação em energia cinética, de forma tal que a energia relativística total do sistema se conserve. Isto é, evidentemente, o que acontece em um reator nuclear. Conseqüentemente, na relatividade devemos substituir as leis clássicas separadas de conservação de massa e conservação de energia por uma única lei compreensível da conservação da energia relativística total:

Quando a medida em um dado sistema de referência, a energia relativística total de um sistema isolado se mantém constante.

Concluímos nosso desenvolvimento conciso da relatividade afirmando que cálculos explícitos demonstram que nem a equação de Newton, quando expressa como em (A-14), nem as equações de Maxwell mudam de forma sob uma transformação de Lorentz de um sistema de referência a outro se movendo em relação ao primeiro. No entanto, estes cálculos mostram a força, no caso da equação mecânica, e o campo elétrico e magnético, no caso das equações eletromagnéticas, mudam quando sofrem uma transformação de Lorentz de um referencial para o outro. Embora não possamos prosseguir nestes assuntos aqui, recomendamos ao estudante que o estude em algum outro lugar, para que obtenha uma visão física bastante importante – particularmente em relação à ligação entre campos elétricos e magnéticos. Apêndice L.

$$E \approx cp \text{ e } \vec{p} = m \vec{v}, \vec{v} = \frac{dx}{dt}$$

## M-Superfície Nuclear:[3]

Alisando o gráfico abaixo, podemos calcular a superfície nuclear:

Temos que

$$t = x + y$$

Tal que, consideremos:

$$r_1 = c - x$$

$$r_2 = c + y$$

$$c = r \quad 50\% p_0$$

Logo, temos:

$$0,9\rho_0 = \frac{P_0}{1 + e^{\left(\frac{c-x-c}{a_0}\right)}} \rightarrow 0,9\rho_0 = \frac{P_0}{1 + e^{\left(\frac{-x}{a_0}\right)}}$$

$$0,9\rho_0 + 0,9\rho_0 e^{\left(\frac{-x}{a_0}\right)} = \rho_0$$

Portanto,

$$0,9e^{\left(\frac{-x}{a_0}\right)} = 0,1$$

$$e^{\left(\frac{-x}{a_0}\right)} = -\frac{1}{9}$$

Aplicando logaritmo neperiano:

$$\frac{x}{a_0} = \ln \frac{1}{9}$$

$$\frac{x}{a_0} = -\ln 1 + \ln 9$$

Considerando a segunda hipótese:

$$0,1p_0 = \frac{P_0}{1 + e^{\left(\frac{c+y-c}{a_0}\right)}} \rightarrow 0,1p_0 = \frac{P_0}{1 + e^{\left(\frac{+y}{a_0}\right)}}$$

$$0,1e^{\left(\frac{+y}{a_0}\right)} = 0,9$$

Tal que,

$$\frac{y}{a_0} = \ln 9$$

Considerando

$$t = x + y$$

$$t = x + y = -a_0 \ln 1 + a_0 \ln 9 + a_0 \ln 9$$

$$t = (4 \ln 3) a_0 = 4,39 a_0$$

# Referências Bibliográficas:

- [1] Sindicato Nacional dos Editores de Livros, RJ. Herbert, Nick. H46r. A realidade quântica : nos confins da nova física/Nick Herbert ;
- [2] GRIFFITHS, David J., Mecânica Quântica. Edição 2ª Ed. Pearson Education (2011)
- [3] S.S. Mizrahi e D. Galetti, Física Nuclear e de Partículas: Uma introdução (Editora Livraria da Física, São Paulo, 2016), página 91.
- [4] EISBERG, R., RESNICK, R. Física Quântica. Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas. Rio de Janeiro: Campus Ltda, 1979, página 705.
- [5] A. F. R de Toledo Piza, Mec,nica quântica, (EDUSP, 2003).
- [6] SAKURAI, J. J. Modern Quantum Mechanics. Reading: Addison Wesley. (1994), página 200.
- [7] HALLIDAY, D.; WALKER, J.; RESNICK R. Fundamentos de Física. 8. ed., Rio de Janeiro: LTC, 2009.
- [8] <https://www.cantorsparadise.com/thG-origins-of-thG-schr%C3%B6dinger-equation-47bdfddced17>
- [9] <http://www.sbfisica.org.br/rbef/pdf/vol05a08.pdf>
- [10] [Peierls, Rudolf\(1960\). "Wolfgang Ernst Pauli 1900-1958". Memórias biográficas de membros da Royal Society . Sociedade Real](#)
- [11] Vol 3 - Landau, Lifshitz - Quantum Mechanics. Non-Relativistic Theory
- [12] <http://www7b.biglobe.ne.jp/~kcy05t/rathef.html>
- [13] P.A.M. Dirac the Principles of Quantum Mechanics (Oxford University Press, New York, 1947).
- [14] W. Heisenberg, em The Physical Principles of the Quantum Theory (Dover, New York, 1950).
- [15] E. Schrödinger, Collected Papers of Wave Mechanics (AMS Chelsea Publis, Providence, Island, 1982).
- [16] R. P. Feynman, Science 152, 699 (1966).
- [17] J. von Neumann, Mathematical Foundations of Quantum Mechanics (Princeton University Press, New Jersey, 1955).
- [18] BUTKOV, Eugene. Física Matemática. BELLANDI FILHO, J., Funções Especiais, Ed. Papirus, 1985.
- [19]: Journal of Physical and Chemical Reference Data 4, 471 (1975); <https://doi.org/10.1063/1.555523> Published Online: 15 October 2009
- [20] Journal of Research of the National Bureau of Standards Vol. 55, No. 1, July 1955 Research Paper 2604 Data on the Atomic Form Factor: Computation and Survey Ann T. Nelms and Irwin Oppenheim
- [21] ARFKEN, G.; WEBER, H. Física Matemática - Métodos Matemáticos para Engenharia e Física, Editora CAMPUS ELSEVIER (UNIVERSITÁRIOS) Edição 1ª ED 2007 ISBN 9788535220506.
- [22] <https://proqg.ufabc.edu.br/mnpef-sites/leis-de-conservacao/momento-angular-e-a-fisica-moderna-e-contemporanea/#:~:text=Bohr%20acreditava%20que%20o%20momento,comportamento%20de%20onda%20e%20part%C3%ADcula.>
- [23] Extrapolation and unitarity bounds for the  $B \rightarrow \pi$  form factor I. Sentitemsu Imsong, Alexander Khodjamirian, Thomas Mannel, Danny van Dyk Theoretische Physik 1, Naturwissenschaftlich-Technische Fakultät, Universität Siegen, D-57068 Siegen, Germany

# **Espalhamento de Elétrons, Fator Formas e Dedução do Raio Quadrático Médio Extrapolado**

O livro resume-se basicamente em explicar a extrapolação do fator forma vetorial, na estudo do espalhamento de elétrons do decaimento beta, na introdução é explicado o início, com a descoberta do átomo de Rutherford em que provou a concentração da massa do átomo estar toda concentrada no centro do mesmo, após uma breve discussão dos átomo de Bohr e níveis de energia, também a equação de Schroedinger e seus desenvolvimento com o postulado de Planck-Einstein, que gera as equações de De Broglie e Schroedinger desenvolve sua equação fundamentais para o desenvolvimento da Mecânica Quântica , finalizando com um breve exposto de Wolfgang Pauli, Paul Dirac e Feynman, nas teorias das partículas elementares e física nuclear , em especial espalhamentos.

Welken Charlois Gonçalves

Home Editora  
CNPJ: 39.242.488/0002-80  
www.homeeditora.com  
contato@homeeditora.com  
9198473-5110  
Av. Augusto Montenegro, 4120 - Parque Verde, Belém - PA, 66635-110

