



CÁLCULOS RELATIVÍSTICOS EM ÁTOMOS EXCITADOS

Marcelo Falsarella Carazzolle (Bolsista SAE/UNICAMP) e Prof. Dr. Richard Landers (Orientador), Instituto de Física "Gleb Wataghin" - IFGW, UNICAMP

Na linha de pesquisa de estudos de superfícies, as técnicas de espectroscopia de elétrons (XPS - X-Ray Photoelectron Spectroscopy; XAES - X-Ray Auger Electron Spectroscopy) são largamente utilizadas. Para um total entendimento do espectro de emissão experimental é necessário um modelamento teórico das energias e probabilidades de transição entre níveis atômicos. O cálculo da probabilidade de transição envolve o conhecimento das energias e funções de onda no estado fundamental e em vários estados excitados; além dos estados no contínuo. Para o cálculo das funções de onda utilizamos com algumas modificações o código "Multiconfiguracional Relativistic Dirac-Fock", programa que calcula as funções de onda relativísticas e suas respectivas energias de ligação para várias configurações, os estados no contínuo são obtidos resolvendo numericamente a equação de Dirac. Com estas funções de onda relativísticas podemos obter os elementos de matriz para Transições Auger, Fotoemissão e Fluorescência, especialmente para átomos pesados onde os efeitos relativísticos são importantes. Neste trabalho iremos apresentar os resultados obtidos na resolução de átomos genéricos em múltiplas configurações : auto estados, auto energias, funções de onda no contínuo. Apresentaremos também, espectros teóricos de emissão Auger para várias transições e suas comparações com o experimental.

Processo Auger - Relativístico - Funções no contínuo