

Série de Born

Nossa intenção agora é calcular $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ e, conseqüentemente, as seções de choque. Em princípio, basta achar $|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle$ e calcular $\langle \mathbf{k}' | V | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle$. Uma forma de fazer isso é resolver a equação de Lippmann-Schwinger

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V |\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle \text{ iterativamente, isto é}$$

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V |\mathbf{k}\rangle + \dots$$

Outra forma é via matriz T , obtida pela equação de Lippmann-Schwinger

$$\text{multiplicada por } V, \text{ isto é } V |\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = V |\mathbf{k}\rangle + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V |\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle \text{ e}$$

$$\text{trocando } V |\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle \text{ por } T |\mathbf{k}\rangle \Rightarrow T |\mathbf{k}\rangle = V |\mathbf{k}\rangle + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} T |\mathbf{k}\rangle$$

$$\text{Considere } |\mathbf{k}\rangle \text{ arbitrário} \rightarrow T = V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} T \text{ que iterando fica}$$

$$T = V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V + V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V + \dots$$

As duas expressões das caixas tem hierarquia em $\mathcal{O}(V^n)$.

A série de Born é obtida com qualquer uma delas inserida em

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle.$$

A aproximação de Born ou 1º termo da série

Se o espalhamento é fraco $|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle \approx |\mathbf{k}\rangle \rightarrow \langle \mathbf{x}' | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \approx \langle \mathbf{x}' | \mathbf{k} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}}{(2\pi)^{3/2}}$

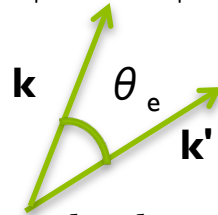
Nestas condições, obtemos a amplitude de Born em 1a. ordem:

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x' V(\mathbf{x}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}'}}_{\text{Transformada de Fourier do potencial calculada em } \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'}$$

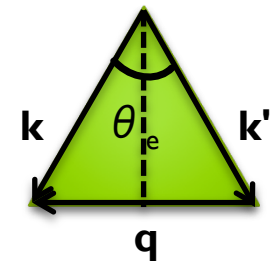
*Transformada de Fourier do potencial
calculada em $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$*

Se o potencial for esfericamente simétrico, fica mais simples calcular a integral em coordenadas esféricas. Antes, escolha θ_e ângulo de espalhamento da seguinte forma:

$$|\mathbf{k} - \mathbf{k}'| \equiv q = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2\mathbf{k}\cdot\mathbf{k}'} = k \underbrace{\sqrt{2(1 - \cos \theta_e)}}_{\text{colisão elástica}}$$



$k = k'$ (colisão elástica)



Lembrando da relação trigonométrica $\cos 2\theta_e = \cos^2 \theta_e - \sin^2 \theta_e = 1 - 2 \sin^2 \theta_e$

$$\therefore \cos \theta_e = 1 - 2 \sin^2 \theta_e / 2 \rightarrow q = k \sqrt{2(1 - 1 + 2 \sin^2 \theta_e / 2)} = 2k \sin \theta_e / 2$$

Perceba no triângulo isósceles que $\sin \theta_e / 2 = \frac{q/2}{k}$

A aproximação de Born ou 1º Termo da série

$$\begin{aligned}
 \text{Com } \mathbf{q} \text{ na direção } \hat{\mathbf{z}}, \text{ temos: } f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) &= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 x' V(\mathbf{x}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{x}'} = \\
 &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int \int \int \sin \theta d\theta d\varphi r^2 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} V(r) = \\
 &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int \int \int \sin \theta d\theta d\varphi r^2 e^{iqr \cos \theta} V(r) = \\
 &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 V(r) 2\pi \int_0^\pi \sin \theta e^{iqr \cos \theta} d\theta = \\
 &= -\frac{1}{2} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 V(r) \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} = \\
 &= -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2i} = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) \sin(qr)
 \end{aligned}$$

Exemplo 1: $V(r) = \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r}$ potencial de Yukawa

$\frac{1}{\mu}$ pode ser visto como alcance do potencial, pois quando $r \gg \frac{1}{\mu} \Rightarrow V(r) \rightarrow 0$

Usaremos que $\sin qr = \text{Im } e^{iqr}$ para facilitar a realização da integral, ou seja

$$f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr r V(r) \sin(qr) = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr r \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r} \text{Im } e^{iqr}$$

1º termo da série de Born: Potencial de Yukawa

$$\begin{aligned} \text{Assim, } f^{(1)}(\theta_e) &= -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \text{Im} \int_0^\infty dr e^{(-\mu+iq)r} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \text{Im} \frac{e^{(-\mu+iq)r}}{-\mu+iq} \Big|_0^\infty = \\ &= -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \text{Im} \frac{1}{\mu-iq} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \text{Im} \frac{\mu+iq}{\mu^2+q^2} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \frac{q}{\mu^2+q^2} \end{aligned}$$

Ou seja, $f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{\mu^2+q^2}$. Lembrando que $q = 2k \sin \theta_e/2$ a amplitude

fica: $f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{\mu^2+4k^2 \sin^2 \theta_e/2}$ e isso fornece a seção de choque

$$\text{diferencial: } \frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\theta_e) = \left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{(\mu^2+4k^2 \sin^2 \theta_e/2)^2}$$

Note que se tomarmos $\mu \rightarrow 0$, mantendo $\frac{V_0}{\mu}$ constante, digamos $\frac{V_0}{\mu} = -ZZ'e^2$

o potencial de Yukawa fica $\lim_{\mu \rightarrow 0, \frac{V_0}{\mu} = ZZ'e^2} V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r} = -\frac{ZZ'e^2}{r}$ (esse é potencial

Coulombiano de uma partícula de carga $Z'e$, sendo espalhada por uma com

carga Ze). Com isso a seção de choque fica (com $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$):

$$\sigma(\theta_e) = \frac{1}{16} \left(\frac{ZZ'e^2}{E}\right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta_e/2} \left\{ \begin{array}{l} \text{Este é resultado clássico do} \\ \text{espalhamento de Rutherford.} \end{array} \right.$$

1º. termo da série de Born: esfera mole

O poço de potencial finito (esfera mole) é caracterizado por $V(r) = \begin{cases} V_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$

A amplitude (1o. Born) é obtida diretamente da integral:

$$f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr rV(r) \sin qr = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{V_0 a^3}{(qa)^2} \left(\frac{\sin qa}{qa} - \cos qa \right)$$

Esta função tem zeros em $qa = 4,49; 7,73; 10,9; \dots$ e as posições destes zeros, com auxílio de $q = 2k \sin \theta_e/2$, podem ser usados para determinar o raio da esfera a .

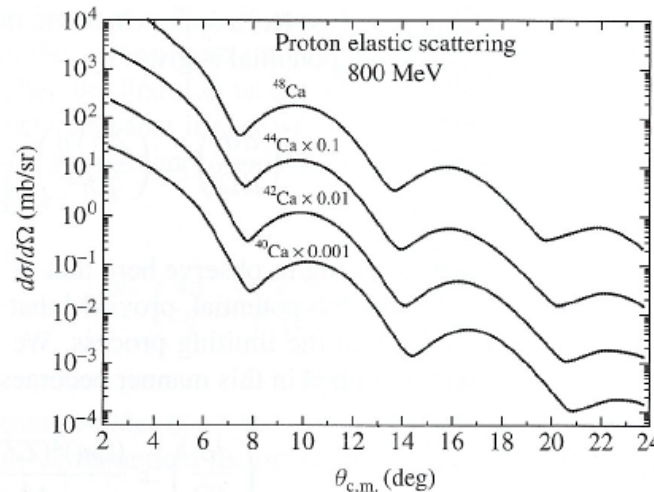


Figura 6.6 do livro texto.

Note que os mínimos na DCS se movem para esquerda para núcleos mais pesados. Como o tamanho “a” da caixa aumenta com a inclusão de nêutrons, “q” precisa diminuir (pois, qa está fixo). Como k é fixo, θ precisa diminuir.

A figura mostra seções de choque diferenciais de espalhamento de prótons por isótopos de Cálcio. O potencial de esfera mole é uma aproximação bastante razoável deste processo, como sugerem os mínimos nas curvas de seções de choque diferenciais relativas a cada alvo.

Observações importantes sobre 1º termo da série de Born

- $f^{(1)}(\theta_e)$ é uma função de q somente. Isso está claro em

$$f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr rV(r) \sin qr$$

a dependência em θ_e e em $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ entra via q , pois $q = 2k \sin \theta_e/2$.

- $f^{(1)}(\theta_e)$ é uma função real. Problema: não vale o teorema óptico.

- $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ independe do sinal de V .

- Para q pequeno, supondo qr pequeno (se r grande, $V(r)$ cuida dele)

$$f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr r^2 V(r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' V(r) \text{ (é geométrico)}$$

- Quando q cresce, $f^{(1)}(\theta_e)$ decresce, pois o integrando oscila muito.

Validade do 1º termo da série de Born

Comece com $\langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} \rangle$

Queremos $\langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} \rangle \approx \langle \mathbf{x} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle$ que significa ter:

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \phi_{\mathbf{k}} \rangle \right| \ll |\langle \mathbf{x} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle| \quad \forall |\mathbf{x}|.$$

Na região $r \approx 0$ temos:

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{\pm ikr'}}{r'} V(\mathbf{x}') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'} \right| \ll 1$$

Aqui o denominador é mínimo ($x'=0$) onde o potencial é máximo. Se vale para $r=0$ vale para todo r .

onde usamos que para $r \approx 0$, vale

$$\begin{cases} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \approx \frac{e^{\pm ikr'}}{r'} \\ \langle \mathbf{x} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \end{cases}$$

Considere o potencial de Yukawa $V(r) = \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r}$

Um comprimento de onda não "cabe" no alcance do potencial

Para k pequeno: tome $kr' \ll 1$ e $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}' \ll 1$. Isso é possível se $\frac{1}{\mu} \div \frac{\lambda}{2\pi} \ll 1$,

O valor máximo de x' para $V(x') \neq 0$ é $\sim 1/\mu$

com $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, ou seja $k \ll \mu$, pois se μ grande, kr' e $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}'$ são pequenos na região do potencial. Com isso, podemos escrever a condição de validade por:

Validade do 1º termo da série de Born: Potencial de Yukawa

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{1}{r'} \frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'} \right| \ll 1 \text{ ou ainda}$$

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} 4\pi \int_0^\infty r'^2 \frac{1}{r'} \frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'} \right| \ll 1 \Rightarrow \left| \frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu} \right| \left| \int_0^\infty e^{-\mu r'} \right| \ll 1$$

e assim, finalmente obter, para energias baixas, a condição de validade do 1o. termo de Born para o potencial Yukawa: $\left| \frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu^2} \right| \ll 1$.

Para entender o significado desta expressão, estudaremos em que condições

o potencial $\frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'}$ fornece um estado ligado. Que tal $\frac{1}{\mu} \div \frac{\lambda}{2\pi} > 1$, isto é,

$\mu\lambda < 2\pi$ (pelo menos uma oscilada dentro do alcance do potencial) $\therefore \frac{2\pi}{\lambda} > \mu$

Ou seja, para o potencial de Yukawa ter um estado ligado, é preciso que $k > \mu$.

Isto implica em $k^2 > \mu^2 \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > \frac{\hbar^2 \mu^2}{2m}$. A energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \approx 0$ (quase

ligado) e \therefore no alcance de $V \approx V_0 e^{-1}$, temos $-\frac{V_0}{e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > \frac{\hbar^2 \mu^2}{2m}$ ou seja,

$\frac{2m}{\hbar^2 \mu^2} |V_0| > e \sim 2,7$ (se o potencial permite um estado ligado, o 1o. termo de

Born não funciona). **O caso k grande, fica para lista de exercícios.**

Série de Born

O exercício 7 da lista 3 pede para você mostrar que quando k é grande, o 1o.

termo de Born para o potencial de Yukawa funciona se $\frac{2m|V_0|}{\hbar^2 \mu k} \ln \frac{k}{\mu} \ll 1$.

Isso é mais fácil de satisfazer e \therefore 1o. termo de Born funciona melhor para altas energias.

Consulte tabela de integrais de I. S. Gradshteyn/I. M. Ryzhik, *Corrected and enlarged edition*, pg. 491-2

Aproximação de Born em ordens superiores.

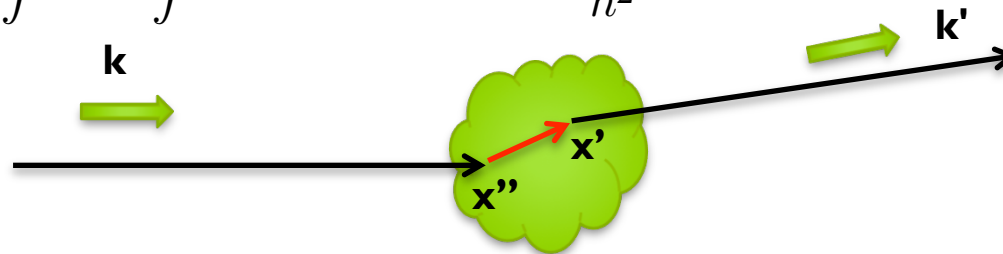
Tome, por exemplo a segunda ordem $T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V$ para obter

$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = f^{(1)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) + f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ onde já escrevemos o termo de 1a ordem e

$$f^{(2)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{m(2\pi)^3}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' \langle \mathbf{k}' | \mathbf{x}' \rangle V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \mathbf{x}' \rangle \times$$

$$\times V(\mathbf{x}'') \langle \mathbf{x}'' | \mathbf{k} \rangle =$$

$$= -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}'} V(\mathbf{x}') \frac{2m}{\hbar^2} G^{(+)}(\mathbf{x}', \mathbf{x}'') V(\mathbf{x}'') e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}''}$$



Interpretação: onda incidente \mathbf{k} “interage” (via V) em \mathbf{x}'' , propaga (via G) até \mathbf{x}' , “interage” (via V) em \mathbf{x}' e sai com \mathbf{k}' .

Um método variacional para a amplitude de espalhamento

Vimos que $\langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} \rangle = \langle \mathbf{x} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)} \rangle$,
(Existem outros!)

que formalmente pode ser re-escrita:

$|\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle = |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + G_0^{(\pm)} V |\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle$ com $G_0^{(\pm)} = \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}$. Multiplicando por

V e reorganizando temos:

$$A^{(\pm)} |\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle = V |\phi_{\mathbf{k}}\rangle \begin{cases} \bullet A^{(\pm)} = V - V G_0^{(\pm)} V \text{ (coisas conhecidas).} \\ \bullet \text{ Resolver esta equação equivale a resolver} \\ H |\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle = E |\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle \text{ com condições de contorno.} \end{cases}$$

A amplitude de espalhamento, $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, pode ser escrita por

$$\underbrace{-\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \phi_{\mathbf{k}'} | V | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle}_{f_1} = \underbrace{-\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^{(-)} | V | \phi_{\mathbf{k}} \rangle}_{f_2} = \underbrace{-\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^{(-)} | A^{(+)} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle}_{f_3}$$

O Método Variacional de Schwinger

$$[f(\mathbf{k}', \mathbf{k})] = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} [\langle \phi_{\mathbf{k}'} | V | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle + \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^{(-)} | V | \phi_{\mathbf{k}} \rangle - \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^{(-)} | A^{(+)} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle]$$

Note que trata-se de $f_1 + f_2 - f_3$ e observe que se $|\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle$ são soluções exatas $[f(\mathbf{k}', \mathbf{k})] = f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, pois $\Rightarrow f_1 = f_2 = f_3$

O Método Variacional de Schwinger

- Mostre que $\delta[f] = 0 \rightarrow A^{(\pm)}|\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle = V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$ (use que $A^{(+)\dagger} = A^{(-)}$).
Dica: trate variações $\delta|\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}\rangle$ independente de variações $\delta\langle\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}|$

- Se V é de curto alcance, convença-se que $|\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle$ pode ser expandida em uma base de funções quadraticamente integráveis, ou seja

$$|\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle = \sum_m a_m^{(\pm)}(\mathbf{k})|\varphi_m\rangle$$

- Insira esta expansão na fórmula de Schwinger do slide anterior e trate $a_m^{(\pm)}(\mathbf{k})$ como parâmetros variacionais para obter:

$$[f] = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \sum_{mn} \langle\phi_{\mathbf{k}'}|V|\varphi_m\rangle (d^{-1})_{mn} \langle\varphi_n|V|\phi_{\mathbf{k}}\rangle \text{ com } d_{mn} = \langle\varphi_m|A^{(+)}|\varphi_n\rangle$$

Dica: considere $a_m^{(+)}(\mathbf{k})$ independente de $a_m^{(-)}(\mathbf{k})$.

- Note que as integrais envolvem coisas conhecidas: $|\phi_{\mathbf{k}'}\rangle$; $|\varphi_m\rangle$; V ; $G_0^{(+)}$