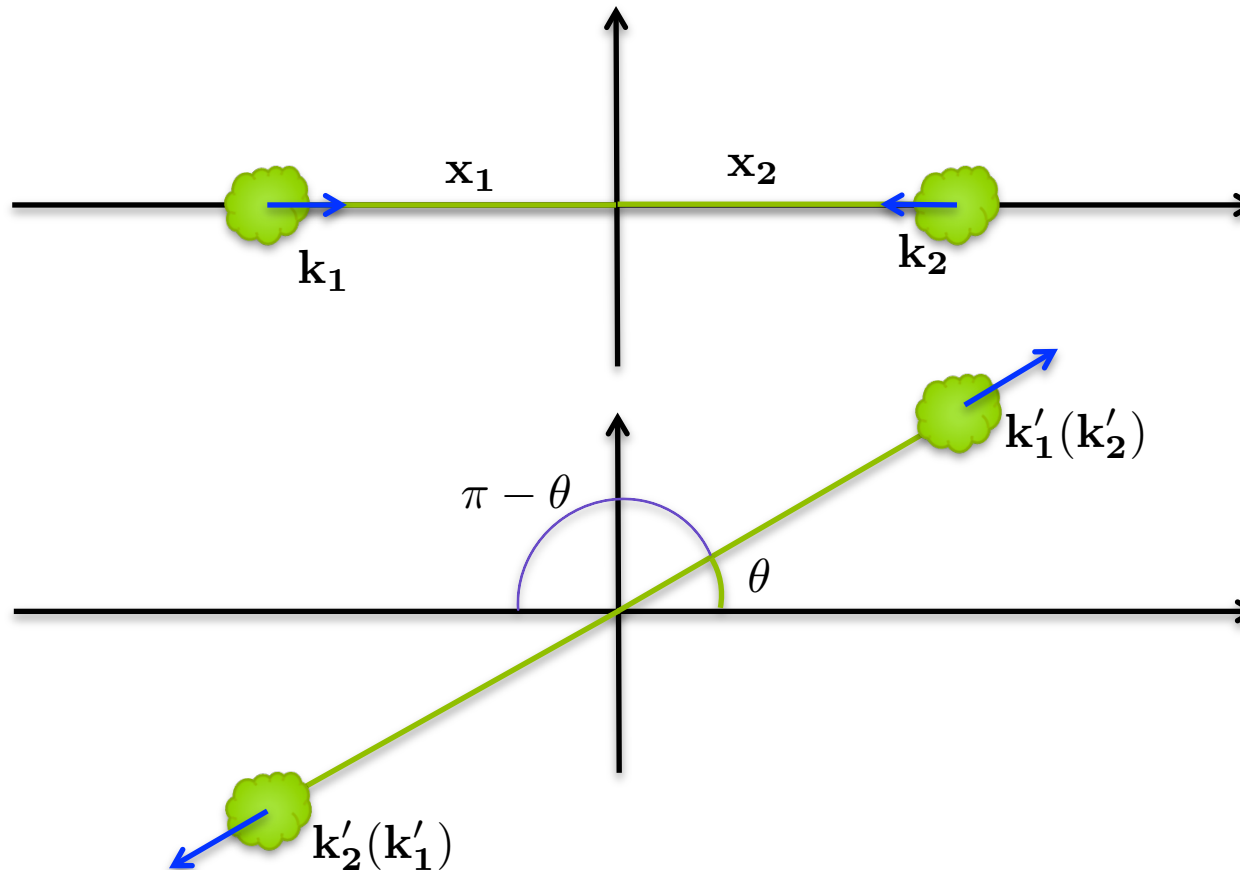


Considerações de simetria em espalhamento

Considere duas partículas idênticas sem spin colidindo (via potencial central $V(r)$, $r = |\mathbf{x}| = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|$), conforme a figura.



Note que após a colisão, não sabemos se temos em θ (com respeito à \mathbf{k}_1), a partícula 1 chegando de \mathbf{x}_1 ou se é a partícula 2 vindo de \mathbf{x}_2 e chegando em $\pi - \theta$ (com respeito à \mathbf{k}_2), pois elas são idênticas e as nuvens de probabilidade se misturaram na colisão.

Considerações de simetria em espalhamento

Veremos no próximo capítulo que um sistema de partículas idênticas têm função de onda simétrica ou anti-simétrica mediante a operação de permutação de duas partículas. As funções que representam partículas com spin inteiro são simétricas e com spin semi-inteiro são anti-simétricas. Com isso em mente, nosso sistema de duas partículas sem spin (spin 0), precisa ter função simétrica, mesmo assintoticamente. Que tal exigir a condição:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} + [f(\theta) + f(\pi - \theta)] \frac{e^{ikr}}{r}$$

onde $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ é a coordenada relativa das partículas e $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ é a “velocidade” de aproximação de 1 com respeito à 2 e $-\mathbf{k}$ é a “velocidade” de aproximação de 2 com respeito à 1.

A seção de choque diferencial é dada por: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2$ ou ainda

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \Rightarrow \text{interferência totalmente}$$

construtiva em $\theta = \pi/2$. Se as partículas tivessem spin 1/2, o sistema de duas partículas teria spin 0 (singlete) ou 1 (triplete). No capítulo 7, veremos que a

parte espacial da função de onda será para

$$\begin{cases} S = 0 \rightarrow \text{simétrica} \\ S = 1 \rightarrow \text{anti-simétrica} \end{cases}$$

Considerações de simetria em espalhamento

Se tivéssemos feixes completamente não polarizados, teríamos 1/4 de pares de partículas no estado singlete e 3/4 no estado tripleto. A seção de choque

diferencial seria dada por: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2$

ou ainda $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - 2\text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \Rightarrow$ interferência totalmente destrutiva em $\theta = \pi/2$.

Vamos agora explorar outras simetrias além da simetria de troca. Suponha V e H_0 , ambos invariantes sob alguma operação de simetria. Qual é o impacto disso na amplitude de espalhamento, $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$?

Caso 1: operações de simetria unitárias. Exemplos: paridade e rotação.

$$\text{As condições } \begin{cases} UH_0U^\dagger = H_0 \\ UVU^\dagger = V \end{cases} \implies UTU^\dagger = T$$

$$\text{Suponha } \begin{cases} |\tilde{\mathbf{k}}\rangle = U|\mathbf{k}\rangle \\ |\tilde{\mathbf{k}}'\rangle = U|\mathbf{k}'\rangle \end{cases} \implies \langle \tilde{\mathbf{k}}' | T | \tilde{\mathbf{k}} \rangle = \langle \mathbf{k}' | U^\dagger U T U^\dagger U | \mathbf{k} \rangle = \langle \mathbf{k}' | T | \mathbf{k} \rangle$$

Considerações de simetria em espalhamento

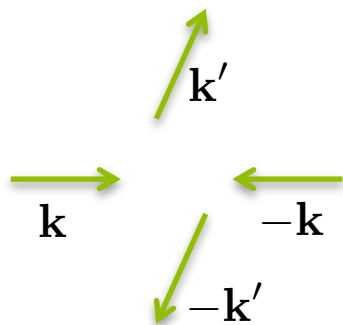
Como exemplo, vamos olhar o caso específico, no qual $U = \pi$, o operador de

paridade. Vimos em FI001 que $\begin{cases} \pi|\mathbf{k}\rangle = |-\mathbf{k}\rangle \\ \pi|-\mathbf{k}\rangle = |\mathbf{k}\rangle \end{cases} \implies$ assim, a invariância de

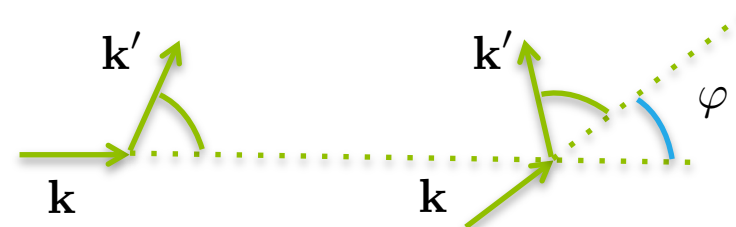
H_0 e V sob a ação do operador paridade π , levaria à $\langle -\mathbf{k}'|T|-\mathbf{k}\rangle = \langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle$.

Quando discutimos o espalhamento de uma partícula por um potencial esfericamente simétrico, exploramos a simetria de rotação (e como consequência obtivemos uma matriz T diagonal na representação $|E, \ell, m\rangle$). A figura abaixo mostra as duas operações de simetria, paridade e rotação, e seus efeitos na matriz T .

Operador paridade π



*Rodado de φ
ao redor do eixo
saindo do slide.*



Operador Rotação R

Em seguida estudaremos operadores de simetria anti-unitários.

Considerações de simetria em espalhamento

Caso II: operações de simetria anti-unitárias. Exemplo: Reversão

temporal. As condições $\begin{cases} \Theta H_0 \Theta^{-1} = H_0 \\ \Theta V \Theta^{-1} = V \\ \Theta c \Theta^{-1} = c^* \end{cases} \implies \Theta T \Theta^{-1} = T^\dagger$, uma vez \rightarrow mostre a partir de $\Theta c|\alpha\rangle = c^* \Theta|\alpha\rangle$

que $\Theta \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \Theta^{-1} = \frac{1}{E - H_0 - i\epsilon}$ usei $c = i\epsilon$ na relação acima

Lembre que se $\begin{cases} |\tilde{\alpha}\rangle \equiv \Theta|\alpha\rangle \\ |\tilde{\beta}\rangle \equiv \Theta|\beta\rangle \end{cases} \implies \langle\beta|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle$. Assim, se considerarmos \curvearrowright veja aula 28 de FI001

que $|\alpha\rangle = T|\mathbf{k}\rangle$ e $\langle\beta| = \langle\mathbf{k}'|$ $\begin{cases} |\tilde{\alpha}\rangle = \Theta T|\mathbf{k}\rangle = \Theta T \Theta^{-1} \Theta|\mathbf{k}\rangle = T^\dagger|-\mathbf{k}\rangle \\ |\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\mathbf{k}'\rangle = |-\mathbf{k}'\rangle \end{cases}$ e \therefore

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle \implies \langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = \langle-\mathbf{k}|T|-\mathbf{k}'\rangle$$

É interessante combinar o operador de reversão temporal com o de paridade:

$$\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle \stackrel{\text{sob } \Theta}{=} \langle-\mathbf{k}|T|-\mathbf{k}'\rangle \stackrel{\text{sob } \pi}{=} \langle\mathbf{k}|T|\mathbf{k}'\rangle$$

E como consequência $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ e isso dá origem ao chamado

balanceamento detalhado $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k})$

Aula 18 Vamos considerar agora o espalhamento de elétrons por átomos, podendo ocorrer

- **espalhamento elástico:**

$e^- + \text{átomo no estado fundamental} \rightarrow e^- + \text{átomo no estado fundamental}.$

- **espalhamento inelástico:**

$e^- + \text{átomo no estado fundamental} \rightarrow e^- + \text{átomo no estado excitado}.$

Neste caso, a energia cinética do elétron espalhado é menor que a do elétron incidente (foi usada para excitar o átomo).

O ket livre do sistema $e^- + \text{átomo no estado fundamental}$ pode ser escrito por

$$|\mathbf{k}, 0\rangle \equiv |\mathbf{k}\rangle \otimes |0\rangle \begin{cases} |\mathbf{k}\rangle \text{ é a onda livre (elétron)} \\ |0\rangle \text{ é o estado fundamental do alvo (átomo)} \end{cases}$$

Na representação das coordenadas, temos para o

$$\text{estado livre do sistema} \begin{cases} \text{antes: } \langle \mathbf{x}; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{k}, 0 \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}}{L^{3/2}} \psi_0(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \\ \text{depois: } \langle \mathbf{x}; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N | \mathbf{k}, n \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{x}}}{L^{3/2}} \psi_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \end{cases}$$

Já fizemos uma aproximação, uma vez que o elétron espalhado é idêntico aos elétrons do alvo. As funções precisariam ser anti-simétricas na troca de elétrons. A aproximação vale para altas energias!

Espalhamento inelástico elétron-átomo

Considerando que a teoria de perturbação dependente do tempo é válida, podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow n) &= \overbrace{\frac{1}{\hbar k/(m_e L^3)}}^{\frac{1}{J_i}} \overbrace{\frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle|^2}_{\omega(0 \rightarrow n)} \overbrace{\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{k' m_e}{\hbar^2}\right)}^{\rho(E')/d\Omega} = \\ &= \left(\frac{k'}{k}\right) L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

Aula 9 slide 3
Aula 10 slide 4
Aula 11 slide 14

Tudo é muito similar com a primeira aproximação de Born para o caso de espalhamento elástico por um potencial, exceto que $|k'|$ pode ser diferente de $|k|$. Vamos dar um pouco mais de detalhes sobre o processo. Como é o

potencial? Que tal $V = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|}$, onde o elétron incidente

interage com o núcleo com Z prótons na origem e com cada um dos elétrons do alvo. Um tratamento mais rigoroso exigiria impor que o elétron incidente é idêntico aos elétrons do átomo, mas aqui consideraremos apenas elétrons suficientemente rápidos, onde a integral de recobrimento entre os estados ligados e a onda plana é desprezível. Sem a anti-simetrização o elétron não consegue excitar estados tripletos em alvos de camada fechada. Estes estados são muito comuns e têm energias mais baixas que os singletos de mesma configuração orbital.

Espalhamento inelástico elétron-átomo

Em seguida, calculamos o elemento de matriz $\langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle$ para o potencial

$$V = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|}, \text{ com } r = |\mathbf{x}|. \text{ Se definirmos } \mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}' \text{ podemos}$$

$$\begin{aligned} \text{escrever } \langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \langle n | -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \prod_{j=1}^z \int d^3x_j \psi_n^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z) \left[\frac{-Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \right] \psi_0(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z) \end{aligned}$$

Vamos ver primeiro o cálculo do primeiro termo (interação do elétron incidente

$$\text{com o núcleo atômico): } \frac{-Ze^2}{L^3} \int d^3x \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{r} \underbrace{\prod_{j=1}^z \int d^3x_j \psi_n^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z) \psi_0(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z)}_{\langle n | 0 \rangle = \delta_{n0}}$$

Ou seja esse termo só contribui para o espalhamento elástico. Note que neste caso a integração em d^3x pode ser feita com auxílio do potencial de Yukawa,

$$\text{isto é: } \int d^3x \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{r} = \lim_{\mu \rightarrow 0} \int d^3x \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x} - \mu r}}{r} = \frac{4\pi}{q^2}$$

Em seguida, tratamos o segundo termo (interação do elétron incidente com os elétrons do átomo. De novo é possível integrar em d^3x).

Espalhamento inelástico elétron-átomo

A integral em d^3x que precisamos fazer é: $\sum_i \int d^3x \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|}$. Para realizá-la,

$$\text{troque } \mathbf{x} - \mathbf{x}_i = \mathbf{x}'' \text{ e faça } \sum_i \int \underbrace{d^3x'' \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}'' + \mathbf{x}_i)}}{|\mathbf{x}''|}} = \frac{4\pi}{q^2} \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i}$$

é igual à do núcleo do slide anterior

Note que esse resultado nada mais é do que a transformada de Fourier do potencial Coulombiano vezes a transformada de Fourier da densidade de

elétrons dada por $\rho_{\text{átomo}} = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rightarrow$ elétrons situados em \mathbf{r}_i .

É costume definir um fator de forma $F_n(\mathbf{q})$ para a excitação $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$, tal

$$\text{que } ZF_n(\mathbf{q}) = \langle n | \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} | 0 \rangle \text{ onde: } \begin{cases} \lim_{q \rightarrow 0} F_n(\mathbf{q}) = 1 \text{ para } n = 0 \\ \lim_{q \rightarrow 0} F_n(\mathbf{q}) = 0 \text{ para } n \neq 0 \end{cases}$$

Podemos agora escrever o elemento de matriz envolvendo o potencial, como:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle &= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \langle n | -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{L^3} \frac{4\pi Ze^2}{q^2} [-\delta_{n0} + F_n(\mathbf{q})] \end{aligned}$$

Espalhamento inelástico elétron-átomo

Assim na aproximação do primeiro termo da série de Born, a seção de choque diferencial para o caso inelástico (e elástico) do espalhamento de elétrons por átomos fica:

Slide 7

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow n) &= \left(\frac{k'}{k}\right) L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle \right|^2 = \\ &= \left(\frac{k'}{k}\right) L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{1}{L^3} \frac{4\pi Z e^2}{q^2} [-\delta_{n0} + F_n(\mathbf{q})] \right|^2 = \frac{4m_e^2}{\hbar^4} \frac{(Ze^2)^2}{q^4} \left(\frac{k'}{k}\right) |-\delta_{n0} + F_n(\mathbf{q})|^2 \end{aligned}$$

No caso de espalhamento de elétrons por átomos e moléculas, é comum escrever a seção de choque em termos do raio de Bohr, definido por $a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{e^2 m_e}$. Assim, o

caso inelástico fica
$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow n) = 4Z^2 a_0^2 \left(\frac{k'}{k}\right) \frac{1}{(qa_0)^4} |F_n(\mathbf{q})|^2.$$

É comum usar $\frac{d\sigma}{dq}$ no lugar de $\frac{d\sigma}{d\Omega}$. Para obter uma expressão para $\frac{d\sigma}{dq}$, note que

$$q^2 = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 = k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta \Rightarrow dq = -d(\cos \theta)kk'/q \text{ e } \therefore \frac{d\sigma}{dq} = \frac{2\pi q}{kk'} \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

A seção de choque inelástica que obtivemos pode ser usada para discutir a “capacidade freamento” (stopping power) - a energia perdida por uma partícula carregada quando ela atravessa a matéria.

Aula 18 Estamos interessados na perda de energia de uma partícula carregada sob o ponto de vista da seção de choque inelástica. Mais precisamente na perda de energia por unidade de comprimento da partícula carregada incidente decorrente de sua travessia na matéria. A taxa de colisão por unidade de comprimento é dada por $N\sigma$, onde N é o número de átomos por unidade de volume. A cada colisão a energia perdida pela partícula carregada é $E_n - E_0$. Assim, dE/dx pode ser escrito por:

$$\frac{dE}{dx} = N \sum_n (E_n - E_0) \int dq \frac{d\sigma}{dq} (0 \rightarrow n)$$

Usando nossos resultados temos:

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dx} &= N \sum_n (E_n - E_0) \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} dq 4Z^2 a_0^2 \left(\frac{k'}{k}\right) \frac{1}{(qa_0)^4} \frac{2\pi q}{kk'} |F_n(q)|^2 = \\ &= \frac{8\pi N}{k^2 a_0^2} \sum_n (E_n - E_0) \underbrace{\int_{q_{\min}}^{q_{\max}} \frac{dq}{q^3} |\langle n | \sum_i^Z e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} | 0 \rangle|^2}_{\text{}} \end{aligned}$$

\exists muitos artigos sobre o cálculo deste expressão

Os resultados são comparados com a fórmula quântica proposta por Bohr (1913):

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi N Z e^4}{m_e v^2} \ln \left(\frac{2m_e v^2}{I} \right) \text{ onde } I \text{ é um parâmetro semi-empírico.}$$