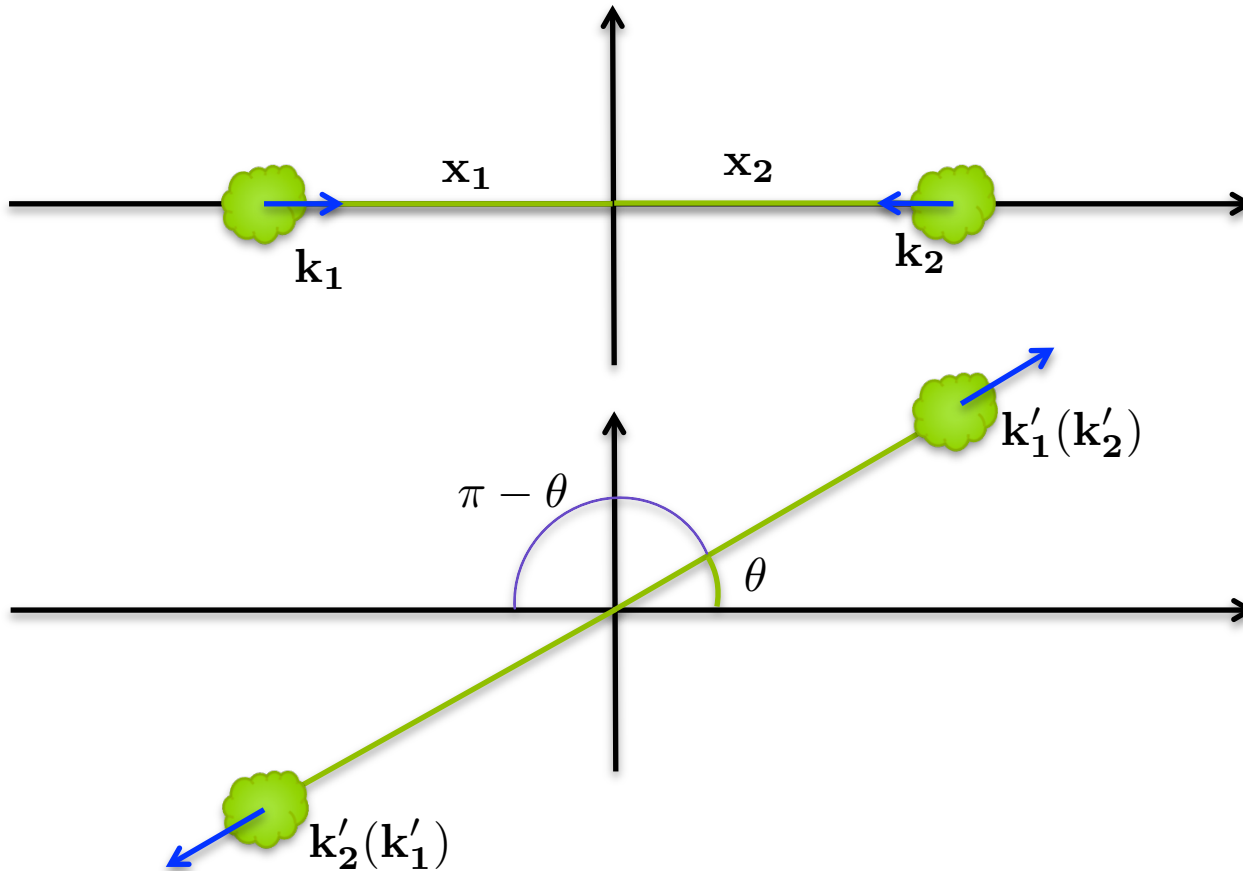


## Considerações de simetria em espalhamento

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  $\theta$  (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:

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

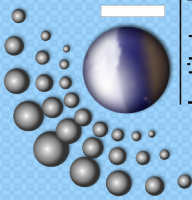
onde  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$  é a coordenada relativa das partículas e  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$  é a “velocidade” de aproximação de 1 com respeito à 2 e  $-\mathbf{k}$  é a “velocidade” de aproximação de 2 com respeito à 1. **Note que se trocarmos  $\mathbf{x}_1$  com  $\mathbf{x}_2$ ,  $\Psi$  fica igual**

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

$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 + 2\text{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \Rightarrow$  interferência totalmente construtiva em  $\theta = \pi/2$ . Se as partículas tivessem spin 1/2, o sistema de duas partículas teria spin 0 (singleto) ou 1 (triplete). No capítulo 7, veremos que a

parte espacial da função de onda será para  $\begin{cases} S = 0 \rightarrow \text{simétrica} \\ S = 1 \rightarrow \text{anti-simétrica} \end{cases}$

**Usaremos isso. No próximo capítulo mostramos**



## 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

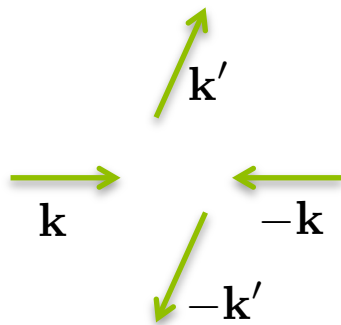
Como exemplo, vamos olhar o caso específico, no qual  $U = \pi$ , o operador de

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

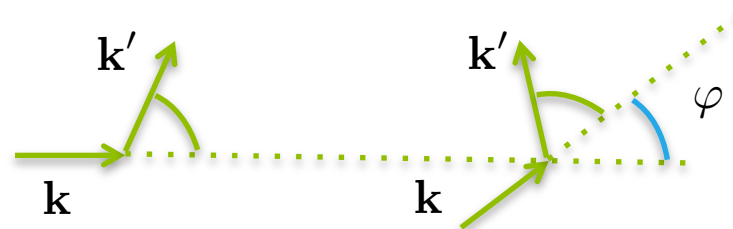
$H_0$  e  $V$  sob a ação do operador paridade  $\pi$ , levaria à  $\langle -\mathbf{k}'|T|-\mathbf{k}\rangle = \langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle$ .

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  $\pi$*



*Rodado de  $\varphi$   
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  $\rightarrow$  veja aulas 27 e 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  $\frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k})$

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).

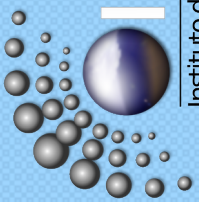
O ket livre do sistema  $e^- + \text{átomo no estado fundamental}$  pode ser escrito por

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

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!*



Aula 18 Considerando que a teoria de perturbação dependente do tempo é válida, podemos escrever

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

$$\left(\frac{k'}{k}\right) L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle \right|^2$$

← Aula 9 slide 3

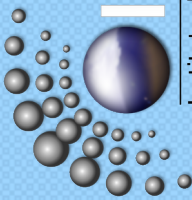
← Aula 11 slide 14

← Aula 10 slide 4

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

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

$$\text{escrever } \langle \mathbf{k}', n | V | \mathbf{k}, 0 \rangle = \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \langle n | -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} | 0 \rangle =$$

$$= \frac{1}{L^3} \int d^3x e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \prod_{j=1}^z \int d^3x_j \psi_n^*(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z) \left[ -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|} \right] \psi_0(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_z)$$

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

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

*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,

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

*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

que  $ZF_n(\mathbf{q}) = \langle n | \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}_i} | 0 \rangle$  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

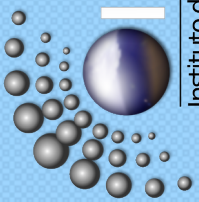
caso inelástico fica 
$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow n) = 4Z^2 a_0^2 \left(\frac{k'}{k}\right) \frac{1}{(qa_0)^4} |F_n(\mathbf{q})|^2.$$

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

lousa

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

*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:

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

$\exists$  muitos artigos sobre o cálculo deste expressão

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

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

## Teoria de Perturbação dependente do tempo: potencial constante

Finalmente, temos

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \int dE_n \rho(E_n) |c_n^{(1)}|^2 &= \frac{2\pi t}{\hbar} \int dE_n \rho(E_n) \overline{|V_{ni}|^2} \delta(E_n - E_i) = \\ &= \frac{2\pi t}{\hbar} \overline{|V_{ni}|^2} \rho(E_n) \Big|_{E_n = E_i} \end{aligned}$$

O valor médio de  $|V_{ni}|^2$  é necessário, pois pressupomos um quase contínuo de estados com autovalores ao redor de  $E_n$ . Nem sempre os  $V_{ni}$  são iguais para  $|n\rangle$ 's diferentes, mesmo tendo o mesmo  $E_n$ . Daí a média. Observe também que esta quantidade é linear em  $t$ . Isto é consequência do que vimos nas figuras que o pico de  $f(\omega)$  vai com  $t^2$  e a largura com  $1/t$ .

**Taxa de transição total**, definida por  $\frac{d}{dt} \left( \sum_n |c_n^{(1)}|^2 \right) \equiv w_{i \rightarrow [n]}$

Em primeira ordem, temos  $w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|V_{ni}|^2} \rho(E_n) \Big|_{E_n = E_i} \Rightarrow$  esta é a chamada *Regra de Ouro de Fermi*.

As vezes a escrevemos como  $w_{i \rightarrow [n]} = \frac{2\pi}{\hbar} \overline{|V_{ni}|^2} \delta(E_n - E_i)$  onde fica subentendido que é preciso integrar em  $\int dE_n \rho(E_n)$ .

[volta](#)

Condições periódicas de contorno da caixa, de aresta  $L$ , fornece  $\langle \mathbf{x} | \mathbf{k}_f \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{x}}}{L^{3/2}}$

com  $k_{f_{i=x,y,z}} = \frac{2\pi}{L} n_i$ , e  $n_i$  inteiro positivo ou negativo. A energia de uma partícula nesta caixa é

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(2\pi)^2}{L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\hbar^2 n^2}{2m} \frac{(2\pi)^2}{L^2}$$

Para calcular  $\rho(E)dE$  (número de estados com energia entre  $E$  e  $E + dE$ ), podemos imaginar uma folha esférica de raio  $n$  e espessura  $dn$ . O número de estados nesta folha espessa é:  $4\pi n^2 dn$ . Se quiséssemos apenas o número de estados em um pequeno volume desta casca esférica, definido pelo ângulo sólido  $d\Omega$ , bastaria trocar  $4\pi$  por  $d\Omega$ , isto é  $d\Omega n^2 dn$ . Com isso,  $\rho(E)dE$  pode ser escrito na forma  $\rho(E)dE = d\Omega n^2 dn$  e assim, obtemos [volta](#)

$$\rho(E) = d\Omega n^2 \frac{dn}{dE} = d\Omega n^2 \frac{1}{\frac{dE}{dn}} = d\Omega \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 \frac{m}{\hbar^2} \frac{n^2}{n} = \frac{mn}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 d\Omega = \frac{mk}{\hbar^2} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d\Omega$$

Pense em  $dE$  como a energia total dentro do elemento de “volume”  $d\Omega n^2 dn$  que contém estados com energia entre  $E$  e  $E + dE$ . A dedução da seção de choque diferencial do efeito fotoelétrico para elétrons emitidos na direção  $\hat{\mathbf{k}}_f$ , dentro do ângulo sólido  $d\Omega$ , definida por  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ , fica para casa.

A Seção de choque pode ser escrita por:  $\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dn}{F_i d\Omega}$

onde  $\begin{cases} F_i \propto J_i \text{ (fluxo de probabilidade)} \\ dn = \mathbf{F}_f \cdot d\mathbf{S} \propto \mathbf{J}_f \cdot d\mathbf{S} \end{cases}$

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{\mathbf{F}_f \cdot d\mathbf{S}}{F_i d\Omega} = \frac{J_f r^2 d\Omega}{J_i d\Omega} = \frac{J_f r^2}{J_i}$$

Vimos (FI001) que  $\mathbf{J} = \frac{1}{m} \text{Re}[\Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi]$ . Para obter  $\begin{cases} J_i \text{ use } \Psi = e^{ikz} \\ J_f \text{ use } \Psi = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \end{cases}$

Assim  $\mathbf{J}_i = \frac{1}{m} [e^{-ikz} \frac{\hbar}{i} ik \hat{\mathbf{z}} e^{ikz}] = \frac{\hbar k}{m} \hat{\mathbf{z}}$  e  $\mathbf{J}_f$  é obtido, usando  $\nabla$  em coordenadas esféricas  $\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\boldsymbol{\varphi}} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi}$ . **Faça isso em casa** e obtenha as

componentes de  $\mathbf{J}_f$   $\begin{cases} (J_f)_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2; \\ (J_f)_\theta = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r^3} \text{Re}[\frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} f(\theta, \varphi)]; \\ (J_f)_\varphi = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r^3 \sin \theta} \text{Re}[\frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} f(\theta, \varphi)] \end{cases}$

Note que  $r \rightarrow \infty \Rightarrow (J_f)_r \gg (J_f)_\theta$  e  $(J_f)_\varphi$  e isso permite obter

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2$$

Partícula chega na direção  $\mathbf{z}$  e sai na direção  $(\theta, \varphi)$ .

Transformada de Fourier da densidade de elétrons dada por

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

$$\int d^3r \rho_{\text{átomo}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \int d^3r \left( \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \right) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}$$

slide 10

$$dq = -d(\cos \theta) \frac{kk'}{q} = \sin \theta d\theta \frac{kk'}{q} = 2\pi \sin \theta d\theta \frac{kk'}{2\pi q} = d\Omega \frac{kk'}{2\pi q}$$

$$\therefore \frac{1}{dq} = \frac{2\pi q}{kk'} \frac{1}{d\Omega}$$