§ Perturbações e Resolvente para o espectro contínuo: Aplicação na Teoria de Scattering

Consideramos como exemplo o caso de espalhamento por um potencial
$$V(\vec{r})$$

Neste caso, o Hamiltoniano não perturbado é um Hamiltoniano livre:

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{p^2}{2m}$$

Como condição de contorno temos:

$$V(\vec{r}) \underset{|\vec{r}|\to\infty}{\longrightarrow} 0 \quad ,$$

e o Hamiltoniano total $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V(\vec{r})$, é um Hamiltoniano livre perto de $|\vec{r}| \to \infty$. Escolhemos como autofunções de $\mathcal{H}_0$, ondas planas:

$$\langle \vec{r} \,|\, \vec{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} ,$$

com normalização $\langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}')$
e energias não perturbadas

$$E_k = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} .$$

Se o potencial for suficientemente localizado, sua transformada de Fourier existe

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\vec{r}\, V(\vec{r})\, e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \equiv v(\vec{k})$$

Neste caso específico, não existe deslocamento da energia, e estamos interessados em encontrar as funções de onda espalhadas, que chamamos de

$$|\psi^{\pm}_{\vec{k}}\rangle$$

Seja $|\vec{k}_0\rangle$ o estado incidente. Temos para o Resolvente:

$$\langle\vec{k}|G(z)|\vec{k}_0\rangle \overset{\text{Dyson}}{=} \langle\vec{k}|\left[G_0(z) + G_0(z)\,V\,G(z)\right]|\vec{k}_0\rangle$$

$$= \sum_{m=0}^{\infty} \langle\vec{k}|\, G_0(z)\left(V G_0(z)\right)^m |\vec{k}_0\rangle$$

$$= \langle\vec{k}|\Big[G_0(z) + G_0(z)\,V\,G_0(z) + G_0(z)VG_0(z)VG_0(z)\cdots + \cdots\Big]|\vec{k}_0\rangle$$

$$= \frac{\delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}_0)}{z-E_i} + \frac{1}{z-E_f}\langle\vec{k}|\left(V + V\,G_0(z)\,V + \cdots\right)|\vec{k}_0\rangle \times \frac{1}{z-E_i}$$

com $\quad E_f \equiv \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad , \quad E_i \equiv \dfrac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$

▸ <u>Def</u>: Matriz de Espalhamento:

$$\langle\vec{k}|T(z)|\vec{k}_0\rangle \equiv \langle\vec{k}|\left(V + VG_0(z)V + \cdots\right)|\vec{k}_0\rangle$$

$$T(z) = V + V\,G_0(z)\,V + V\,G_0(z)\,V\,G_0(z)\,V + \cdots$$

Temos a identidade:

$$T(z) = V + V\left(G_0(z) + G_0(z) V G_0(z) + \cdots \right) V$$
$$= V + V\, G(z)\, V$$

e

$$G_0(z) T(z) = G(z)\, V \quad , \quad T(z) G_0(z) = V G(z)$$

Para o Resolvente, obtemos a expressão:

$$\boxed{\langle \vec{k} | G(z) | \vec{k}_0 \rangle = \frac{\delta^{(3)}(\vec{k} - \vec{k}_0)}{z - E_i} + \frac{1}{z - E_f} \langle \vec{k} | T(z) | \vec{k}_0 \rangle \times \frac{1}{z - E_i}} \qquad (1)$$

A matriz de espalhamento pode ser expandida em aproximações sucessivas:

$$\langle \vec{k} | T(z) | \vec{k}_0 \rangle = \langle \vec{k} | V | \vec{k}_0 \rangle + \langle \vec{k} | V G_0(z) V | \vec{k}_0 \rangle + \cdots$$

$$= \int d\vec{x}\, \langle \vec{k} | \vec{x} \rangle V(\vec{x}) \langle \vec{x} | \vec{k}_0 \rangle +$$

$$+ \sum_{\substack{\vec{k}' \\ \vec{k}''}} \langle \vec{k} | V | \vec{k}' \rangle \underbrace{\langle \vec{k}' | G_0(z) | \vec{k}'' \rangle}_{\frac{\delta^{(3)}(\vec{k}'' - \vec{k}')}{z - E_{k'}}} \langle \vec{k}'' | V | \vec{k}_0 \rangle$$

$\cdots$

Calculamos $\langle \vec{k} | V | \vec{k}_0 \rangle$:

$$\langle \vec{k} | V | \vec{k}_0 \rangle = \int d\vec{x} \, \langle \vec{k} | \vec{x} \rangle \, V(\vec{x}) \, \langle \vec{x} | \vec{k}_0 \rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{x} \; e^{-i(\vec{k}-\vec{k}_0)\cdot\vec{x}} \; V(\vec{x})$$

$$= v(\vec{k}-\vec{k}_0) \quad , \text{ para o termo em Ordem "0";}$$

e o termo de 1 a ordem:

$$I_1(z) \equiv \int d\vec{k}' \int d\vec{k}'' \; \frac{\delta^{(3)}(\vec{k}''-\vec{k}')}{z - E_{k'}} \; v(\vec{k}-\vec{k}') \, v(\vec{k}''-\vec{k}_0)$$

$$= \int d\vec{k}' \, \frac{v(\vec{k}-\vec{k}') \, v(\vec{k}'-\vec{k}_0)}{z - E_{k'}}$$

Os primeiros termos da matriz de espalhamento são:

$$\langle \vec{k} | T(z) | \vec{k}_0 \rangle = v(\vec{k}-\vec{k}_0) \; +$$

$$+ \int d\vec{k}' \, \frac{v(\vec{k}-\vec{k}') \, v(\vec{k}'-\vec{k}_0)}{z - E_{k'}} + \cdots \tag{2}$$

Queremos estudar as singularidades no plano complexo do Resolvente, através da relação (1). Vemos que ela contém pólos em $z = E_i, E_f$. Precisamos agora estudar as propriedades analíticas de $T(z)$. Vemos em (2), que o primeiro termo da expansão, $v(\vec{k}-\vec{k}_0)$ é regular. Estudamos agora as propriedades analíticas de $I_1(z)$:

$$I_1(z) = \int_0^\infty k'^2 dk' \int_{4\pi} d\Omega_{k'} \frac{v(\vec{k}-\vec{k}')\, v(\vec{k}'-\vec{k}_0)}{z - E_{k'}}$$

Mudamos para variável : $\xi \equiv \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} k'$

$$dk' = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} d\xi \quad ,$$

$$k'^2 dk' = \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)^3 \xi^2 d\xi \, .$$

Realizamos a integração sobre a parte angular e definimos uma função:

$$\mathcal{U}_{\vec{k}\vec{k}_0}(\xi) \equiv - \int_{4\pi} d\Omega_{k'} \left(\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\right)^3 v(\vec{k}-\vec{k}')\, v(\vec{k}'-\vec{k}_0)$$

Obtemos finalmente:

$$I_1(z) = \int_0^\infty d\xi \frac{\xi^2\, \mathcal{U}_{\vec{k}\vec{k}_0}(\xi)}{\xi^2 - z}$$

O Integrando é:

$$\frac{\xi^2}{\xi^2 - z} = \frac{(\xi^2 - z) + z}{\xi^2 - z} = 1 + \frac{z}{\xi^2 - z}$$

$\frac{z}{\xi^2 - z}$ pode ser escrito em frações parciais

$$\frac{z}{\xi^2 - z} = \frac{A}{\xi - \sqrt{z}} + \frac{B}{\xi + \sqrt{z}} = \frac{(1/2)\sqrt{z}}{\xi - \sqrt{z}} - \frac{(1/2)\sqrt{z}}{\xi + \sqrt{z}}$$

Com a troca de variável $\xi \to -\xi$

$$I_1(z) = \int_{-\infty}^{0} d\xi \; \xi^2 \; \frac{u_{\vec{k}\vec{k}_0}(-\xi)}{\xi^2 - z}$$

Assumindo que $u_{\vec{k}\vec{k}_0}(-\xi) = u_{\vec{k}\vec{k}_0}(\xi)$, obtemos

$$I_1(z) = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \; \xi^2 \frac{u(\xi)}{\xi^2 - z}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left(1 + \frac{\frac{1}{2}\sqrt{z}}{\xi - \sqrt{z}} - \frac{\frac{1}{2}\sqrt{z}}{\xi + \sqrt{z}} \right) u(\xi)$$

O Resolvente tem singularidades no eixo real e a variável complexa $z = E + i\eta$ pode chegar ao eixo real pelo semiplano superior $(\eta > 0)$, ou pelo semiplano inferior $(\eta < 0)$. Os pólos no integrando são:

a) $z = E + i\eta, \; \eta > 0,$

$\sqrt{z} = \sqrt{E + i\eta} = \alpha + i\beta$, no semiplano superior

$-\sqrt{z} = -\alpha - i\beta$, no semiplano inferior

b) $z = E + i\eta, \; \eta < 0$

$\sqrt{z} = \sqrt{E - i|\eta|} = \alpha - i\beta$, no semiplano inferior

$-\sqrt{z} = -\alpha + i\beta$, no semiplano superior

Usando a representação polar: $z = \sqrt{E^2 + \eta^2} \; e^{i\theta}$

com $\tan\theta = \dfrac{\eta}{E}$, $E > 0$

para $\eta \to 0$, temos $\sqrt{E^2+\eta^2} = E\left(1+\frac{1}{2}\frac{\eta^2}{E^2}\right)$

$$\tan\theta \approx \theta \approx \frac{\eta}{E}$$

$$z \approx E\, e^{i(\eta/E)}$$

$$\sqrt{z} \approx \sqrt{E}\, e^{i(\eta/2E)}$$

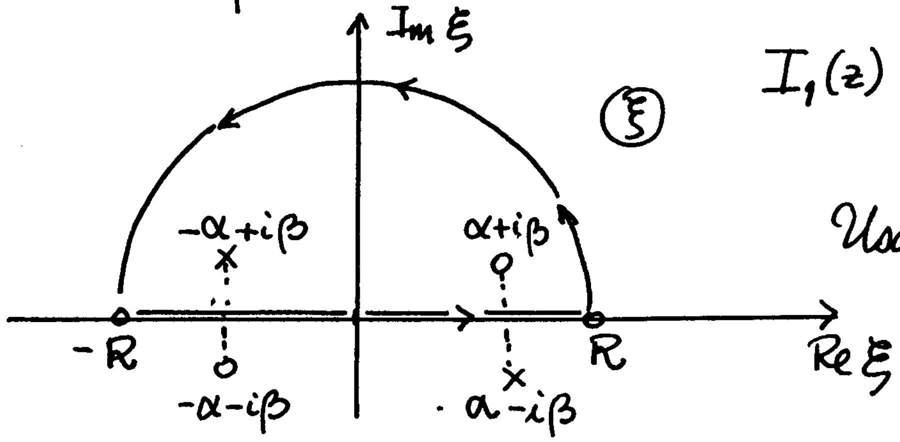
$$\approx \sqrt{E} + i\sqrt{E}\,\frac{\eta}{2E} = \sqrt{E} + \frac{i}{2}\frac{\eta}{\sqrt{E}}$$

$$= \alpha + i\beta$$

Prolongando analiticamente ξ para o plano complexo, e assumindo propriedades de $U(\xi)$ para $|\xi| \to \infty$, como

$$U(\xi) \to 0\,, \quad |\xi| \to 0\,;$$

com $U(\xi)$ como sendo uma função regular no semi-plano superior da variável complexa ξ, podemos transformar $I_1(z)$ em uma integral sobre um contorno fechado:



$$I_1(z) = \frac{1}{2}\lim_{R\to\infty} \oint \frac{\xi^2 U(\xi)}{\xi^2 - z}\, d\xi$$

Usamos o teorema dos Resíduos

a) $\eta > 0$, resíduo em $\xi = \sqrt{z} = \alpha + i\beta$

$$I_1(E + i|\eta|) = 2\pi i \operatorname*{Res}_{\alpha+i\beta}\left(\frac{\frac{1}{2}\sqrt{z}\; u(\xi)}{\xi - \sqrt{z}}\right)$$

$$= 2\pi i \; \frac{1}{2}\left(\sqrt{E} + \frac{i}{2}\frac{|\eta|}{\sqrt{E}}\right) u\left(\sqrt{E} + \frac{i}{2}\frac{|\eta|}{\sqrt{E}}\right)$$

b) $\eta < 0$, resíduo em $\xi = -\sqrt{z} = -\alpha + i\beta$

$$I_1(E - i|\eta|) = -2\pi i \operatorname*{Res}_{-\alpha+i\beta}\left(\frac{\frac{1}{2}\sqrt{z}\; u(\xi)}{\xi + \sqrt{z}}\right)$$

$$= -2\pi i \; \frac{1}{2}\left(\sqrt{E} - \frac{i}{2}\frac{|\eta|}{\sqrt{E}}\right) u\left(-\sqrt{E} + \frac{i}{2}\frac{|\eta|}{\sqrt{E}}\right)$$

E tomando o limite $|\eta| \to 0$, obtemos:

$$\lim_{|\eta|\to 0}\left[I_1(E + i|\eta|) - I_1(E - i|\eta|)\right] =$$

$$= \pi i\left(\sqrt{E}\; u(\sqrt{E}) + \sqrt{E}\; u(-\sqrt{E})\right)$$

$$= \pi i \sqrt{E}\; \left[u(\sqrt{E}) + u(-\sqrt{E})\right]$$

$$= 2\pi i \sqrt{E}\; u(\sqrt{E}),$$

onde $E > 0$, e temos assumido que $u(-\sqrt{E}) = u(\sqrt{E})$. Com hipóteses bastante razoáveis, temos mostrado que $I_1(z)$ tem um corte no eixo real ("branch cut"). Isto pode também ser mostrado para termos de ordem superior de $\langle \vec{k} | T(z) | \vec{k}_0 \rangle$. Concluímos, pela relação (1), que o resolvente $G(z)$ tem também um "branch cut", no eixo real, além de pólos em $z = E_i, E_f$.

Temos então que os limites abaixo existem e <u>são diferentes</u>:

I) $\lim_{z \to E_i + i\eta^+} (z - E_i) \langle \vec{k} | G(z) | \vec{k}_0 \rangle$,

II) $\lim_{z \to E_i - i\eta^+} (z - E_i) \langle \vec{k} | G(z) | \vec{k}_0 \rangle$.

Construímos então dois kets a partir do resolvente, segundo se o limite para o eixo real é tomado desde o semiplano superior ou inferior:

• <u>Def</u> - Kets espalhados:

$$\boxed{\begin{aligned} |\psi_{\vec{k}}^{+}\rangle &\equiv \lim_{z \to E_i + i\eta^+} (z - E_i) G(z) |\vec{k}_0\rangle \\ |\psi_{\vec{k}}^{-}\rangle &\equiv \lim_{z \to E_i - i\eta^+} (z - E_i) G(z) |\vec{k}_0\rangle \end{aligned}}$$

Mostremos agora que $|\psi_{\vec{k}}^{\pm}\rangle$ são autoestados do Hamiltoniano total $\mathcal{H}$. Mostramos isso para $|\psi_{\vec{k}}^{+}\rangle$, com $E_i + i\eta$ (com $\eta \to 0^+$ depois). Usamos a identidade:

$$\mathcal{H} - E_i - i\eta = (\mathcal{H} - z) + (z - E_i - i\eta)$$

Aplicamos sobre $(z - E_i) G(z) |\vec{k}_0\rangle$

$$(\mathcal{H} - E_i - i\eta)\left[(z - E_i) G(z) |\vec{k}_0\rangle\right] = \cancel{(\mathcal{H} - z)}(z - E_i) \cancel{G(z)} |\vec{k}_0\rangle$$

$$+ (z - E_i - i\eta)(z - E_i) G(z) |\vec{k}_0\rangle =$$

$$= -(z-E_i)|\vec{k}_0\rangle + (z-E_i-i\eta)(z-E_i)G(z)|\vec{k}_0\rangle$$

Agora tomamos o limite $z \to E_i + i\eta$ (com $\eta \to 0^+$ sobreentendido depois). O membro da direita é identicamente nulo:

$$(\mathcal{H}-E_i)\lim_{z\to E_i+i\eta}\left[(z-E_i)G(z)|\vec{k}_0\rangle\right] = 0$$

ou

$$(\mathcal{H}-E_i)|\psi^+_{\vec{k}}\rangle = 0 \qquad \text{c.q.d} \ \blacksquare$$

De maneira análoga podemos mostrar que:

$$(\mathcal{H}-E_i)|\psi^-_{\vec{k}}\rangle = 0,$$

passando para o processo limite desde o semiplano inferior.

Para obter as fórmulas usuais da Teoria de Espalhamento, definimos o limite:

$$\lim_{z\to E_i\pm i\eta}\langle\vec{k}|T(z)|\vec{k}_0\rangle \equiv \overset{\pm}{T}(\vec{k},\vec{k}_0),$$

e trabalhamos com o estado $|\psi^+_{\vec{k}}\rangle$ de espalhamento. Expandimos $|\psi^+_{\vec{k}}\rangle$ na base não perturbada de ondas planas:

$$|\psi^+_{\vec{k}}\rangle = \int d\vec{k}\,|\vec{k}\rangle\langle\vec{k}|\psi^+_{\vec{k}}\rangle$$

ou

$$\langle\vec{x}'|\psi^+_{\vec{k}}\rangle = \overset{+}{\psi}_{\vec{k}}(\vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d\vec{k}\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'}\langle\vec{k}|\psi^+_{\vec{k}}\rangle$$

Para calcular o coeficiente $\langle\vec{k}|\psi^+_{\vec{k}}\rangle$ usamos novamente a fórmula (1), multiplicando por $(z-E_i)$ e depois tomando o limite

$$z \to E_i + i\eta$$

$$(z-E_i)\langle \vec{k}|G(z)|\vec{k}_0\rangle = \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}_0) + $$
$$+ \frac{1}{z-E_f}\langle \vec{k}|T(z)|\vec{k}_0\rangle$$

Assim:

$$\langle \vec{k}|\psi^+_{\vec{k}}\rangle = \langle \vec{k}|\left(\lim_{z\to E_i+i\eta}(z-E_i)G(z)|\vec{k}_0\rangle\right) =$$

$$= \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}_0) + \frac{1}{E_i-E_f+i\eta}\lim_{z\to E_i+i\eta}\langle \vec{k}|T(z)|\vec{k}_0\rangle$$

$$= \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{k}_0) + \frac{1}{E_i-E_f+i\eta}\,T^+(\vec{k},\vec{k}_0)$$

e voltando para $\psi^+_{\vec{k}}(\vec{x}')$, temos

$$\langle \vec{x}'|\psi^+_{\vec{k}}\rangle = \psi^+_{\vec{k}}(\vec{x}') = \frac{e^{i\vec{k}_0\cdot\vec{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} + \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d\vec{k}\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'} \times$$
$$\times \frac{T^+(\vec{k},\vec{k}_0)}{\vec{k}_0^2-\vec{k}^2+i\varepsilon}$$

A expressão acima dá origem à <u>série de Born</u>, quando expandimos $T(\vec{k},\vec{k}_0)$ em série perturbativa. Lembrar que

$$T(z) = V + VG_0(z)V + VG_0(z)VG_0(z)V$$
$$= \sum_{m=0}^{\infty} V\left(G_0(z)V\right)^m$$

logo: $\displaystyle T^+(\vec{k},\vec{k}_0) = \lim_{z\to E_i+i\eta}\langle \vec{k}|T(z)|\vec{k}_0\rangle =$

$$= \langle \vec{k} | V | \vec{k}_0 \rangle + \lim_{z \to E_i + i\eta} \langle \vec{k} | V G_0(z) V | \vec{k}_0 \rangle + \cdots$$

Na chamada 1ª aproximação de Born :

$$T^+(\vec{k}, \vec{k}_0) \approx \langle \vec{k} | V | \vec{k}_0 \rangle$$

$$= v(\vec{k} - \vec{k}_0) \ ,$$

e a função de onda espalhada fica:

$$\boxed{ {}^{(1)}\psi^+_{\vec{k}}(\vec{x}') = \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} + \frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{k} \, \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} \, \frac{v(\vec{k} - \vec{k}_0)}{\vec{k}_0^2 - \vec{k}^2 + i\varepsilon} } \ ,$$

onde é entendido que $\varepsilon \to 0^+$.

▸ Exercício. Mostrar que o cálculo explícito para a 1ª aproximação de Born fornece o resultado:

$$ {}^{(1)}\psi^+_{\vec{k}}(\vec{x}) = \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{x}' \, \frac{e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} \times V(\vec{x}') \times \frac{e^{ik|\vec{x} - \vec{x}'|}}{4\pi |\vec{x} - \vec{x}'|}$$

Com a expansão da matriz $T(\vec{k}, \vec{k}_0)$ podemos obter de maneira sistemática todos os termos da série de Born.

Além da Eq. de Schrödinger, os kets espalhados $|\psi^{\pm}_{\vec{k}}\rangle$ satisfazem as eq's. de Lippmann-Schwinger

Seja $|\psi_{\vec{k}}\rangle$ o ket antes do limite:

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = (z-E_i)\,G(z)\,|\vec{k}_0\rangle$$

Usamos a equação de Dyson para $G(z)$

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = (z-E_i)\left[G_0(z) + G_0(z)\,V\,G(z)\right]|\vec{k}_0\rangle$$

$$= (z-E_i)\,\frac{1}{z-\mathcal{H}_0}\,|\vec{k}_0\rangle + G_0(z)\,V\,(z-E_i)\,G(z)\,|\vec{k}_0\rangle$$

$$= |\vec{k}_0\rangle + G_0(z)\,V\left[(z-E_i)\,G(z)\,|\vec{k}_0\rangle\right]$$

e agora tomamos o limite:

$$|\psi^{\pm}_{\vec{k}}\rangle = \lim_{z\to E_i \pm i\eta} |\psi_{\vec{k}}\rangle$$

$$\boxed{|\psi^{\pm}_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}_0\rangle + G_0(E_i^{\pm})\,V\,|\psi^{\pm}_{\vec{k}}\rangle,} \qquad (2)$$

onde $E_i^{\pm} = \lim_{\eta\to 0^+}(E_i \pm i\eta)$. As eq.'s (2) são chamadas de Equações de Lippmann-Schwinger:

B. A. Lippmann e J. Schwinger, Phys. Rev. 79, 469 (1950)

De maneira mais geral escrevos:

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\phi\rangle + G_0(E^{\pm})\,V\,|\psi^{\pm}\rangle,$$

onde $|\phi\rangle$ satisfaz a equação homogênea

$$(E - H_0)|\phi\rangle = 0 \ ,$$

e a notação $E^{\pm}$ em $G_0(E^{\pm})$ significa que devemos tomar o limite para o eixo real vindo pelo semiplano superior (inferior):

$$G_0(E^{\pm}) = \lim_{\varepsilon \to 0} G_0(E \pm i\varepsilon) \ , \quad \varepsilon > 0$$

Usando a representação de coordenadas, por exemplo, Lippmann-Schwinger pode ser transformada em uma equação integral onde a condição de contôrno é

$$\lim_{V \to 0} |\psi^{\pm}\rangle = |\phi\rangle$$

Posteriormente damos o significado físico das duas soluçõe $|\psi^{\pm}\rangle$.

A equação de Lippmann-Schwinger pode ser re-escrita como:

$$[1 - G_0(E^{\pm})V]|\psi^{\pm}\rangle = |\phi\rangle,$$

que pode ser resolvida formalmente por

$$|\psi^{\pm}\rangle = [1 + G(E^{\pm})V]|\phi\rangle,$$

e portanto obtemos a relação:

$$V|\psi^{\pm}\rangle = \left[V + V\,G(E^{\pm})\,V\right]|\phi\rangle$$

ou

$$\boxed{V|\psi^{\pm}\rangle = T(E^{\pm})|\phi\rangle} \;.$$

Temos finalmente :

$$|\psi^{\pm}\rangle = |\phi\rangle + G_0(E^{\pm})\,T(E^{\pm})\,|\phi\rangle$$