§ TEORIA de ESPALHAMENTO

1. A equação de Lippmann-Schwinger

Assumimos que o Hamiltoniano pode ser escrito como:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V \tag{1}$$

com o Hamiltoniano livre

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} . \tag{2}$$

O potencial V descreve o centro espalhador. Na ausência dele $V \equiv 0$ e os autoestados da energia são nada mais que $|p\rangle$, os autoestados da partícula livre.

Para processos de espalhamento elásticos, a energia não muda. Assim estamos interessados em obter soluções da equação de Schrödinger com o Hamiltoniano (1) completo, mas com a mesma energia que a partícula livre.

Seja $|\phi\rangle$ um autoestado do Hamiltoniano livre:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle \tag{3}$$

Queremos resolver:

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{V}) |\psi\rangle = E |\psi\rangle , \tag{4}$$

sendo que ambos, $\mathcal{H}_0$ e $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$, apresentam espectro contínuo (estados livres). Procuramos soluções de (4) que para $V \to 0$, $\Rightarrow |\psi\rangle \to |\phi\rangle$, com $|\phi\rangle$ solução de (3) com o mesmo autovalor da energia.

Argumentamos que a solução pode ser escrita como:

$$\boxed{|\psi\rangle = \frac{1}{E-\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{V}|\psi\rangle + |\phi\rangle} \tag{5}$$

Exploremos esta expressão sem nos preocupar pelo caráter singular de $\dfrac{1}{E-\hat{\mathcal{H}}_0}$! A eq. (4) é satisfeita:

$$(E-\hat{\mathcal{H}}_0)|\psi\rangle = \hat{V}|\psi\rangle + \underbrace{(E-\hat{H}_0)|\phi\rangle}_{0} \; ,$$

pois $|\phi\rangle$ é solução de (3). Também $|\psi\rangle$ se reduz à $|\phi\rangle$ quando $V \to 0$. Porém devemos agir com prudência para tratar o caráter singular de $\dfrac{1}{E-\hat{\mathcal{H}}_0}$.

O truque usado em teoria de perturbações independente do tempo, de projetar nos espaços complementares não funciona mais aqui, pois o espectro é <u>contínuo</u>. A solução neste caso é remover a singularidade introduzindo uma pequena parte complexa da energia:

$$\boxed{|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-\hat{\mathcal{H}}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}|\psi^{(\pm)}\rangle} \tag{6}$$

Esta equação é conhecida como a EQUAÇÃO de LIPPMANN–SCHWINGER. Discutiremos posteriormente o significado físico de $|\psi^{(\pm)}\rangle$.

Passando (6) para a representação de coordenadas:

$$\langle \underset{\sim}{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle \underset{\sim}{x}|\phi\rangle + \int d^3x' \langle \underset{\sim}{x}|\frac{1}{E-\hat{\mathcal{H}}_0 \pm i\varepsilon}|\underset{\sim}{x}'\rangle \cdot \langle \underset{\sim}{x}'|\hat{V}|\psi^{(\pm)}\rangle \tag{6a}$$

obtemos uma equação integral porque o ket $|\psi^{(\pm)}\rangle$ é desconhecido.

Se $|\phi\rangle = |\underset{\sim}{p}\rangle$, escrevemos:

$$\langle \underset{\sim}{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i\frac{\underset{\sim}{p}\cdot\underset{\sim}{x}}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \qquad (7)$$

A equação de Lippmann-Schwinger na representação de momentum fica:

$$\langle \underset{\sim}{p} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \underset{\sim}{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - \frac{p^2}{2m} \pm i\varepsilon} \langle \underset{\sim}{p} | \hat{V} | \psi^{(\pm)} \rangle \qquad (8)$$

▸ Def: Função de Green (núcleo da equação integral (6a))

$$G_{\pm}(\underset{\sim}{x}, \underset{\sim}{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \langle \underset{\sim}{x} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \underset{\sim}{x}' \rangle \qquad (9)$$

Escrevendo $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$,

$$G_{\pm}(\underset{\sim}{x}, \underset{\sim}{x}') = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \langle \underset{\sim}{x} | \underset{\sim}{p}' \rangle \langle \underset{\sim}{p}' | \frac{1}{E - \frac{p^2}{2m} \pm i\varepsilon} | \underset{\sim}{p}'' \rangle \cdot \langle \underset{\sim}{p}'' | \underset{\sim}{x}' \rangle$$

mas:

$$\langle \underset{\sim}{p}' | \frac{1}{E - \frac{p^2}{2m} \pm i\epsilon} | \underset{\sim}{p}'' \rangle = \frac{\delta^{(3)}(\underset{\sim}{p}' - \underset{\sim}{p}'')}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\varepsilon}$$

$$G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3p' \int d^3p'' \; \frac{e^{\frac{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \cdot \frac{e^{\frac{-i\mathbf{p}''\cdot\mathbf{x}'}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

$$\times \; \frac{\delta^{(3)}(\mathbf{p}'-\mathbf{p}'')}{E - \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} \pm i\epsilon}$$

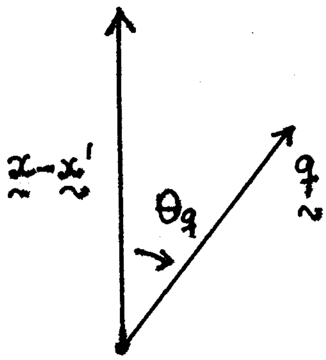
$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int \frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3} \; \frac{e^{i\mathbf{p}'\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')/\hbar}}{E - \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} \pm i\epsilon} .$$

Para resolver esta integral escrevemos:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \,, \qquad \mathbf{p}' = \hbar\mathbf{q}$$

$$G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \cancel{\frac{\hbar^2}{2m}}\,\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q \; \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}}{k^2-q^2 \pm i\epsilon} \cdot \cancel{\frac{2m}{\hbar^2}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{\infty} q^2 dq \int_0^{2\pi} d\varphi_q \int_0^{\pi} \operatorname{sen}\theta_q \, d\theta_q \; \frac{\exp\left(iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\cos\theta_q\right)}{k^2-q^2 \pm i\epsilon}$$



Mudança de variável

$$u_q \equiv \cos\theta_q$$

$$du_q = -\operatorname{sen}\theta_q \, d\theta_q$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{\infty} q^2 dq \int_{-1}^{1} du_q \; \frac{\exp\left(iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|u_q\right)}{k^2-q^2 \pm i\epsilon} =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty q^2 dq \; \frac{1}{k^2-q^2\pm i\epsilon}\;\frac{1}{iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\left\{e^{iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}-e^{-iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\right\}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2 i|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\int_0^\infty dq \; \frac{q}{k^2-q^2\pm i\epsilon}\left\{e^{iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}-e^{-iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\right\}$$

$$= -\frac{1}{8\pi^2 i|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{q\,dq}{q^2-k^2\mp i\epsilon}\left\{e^{iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}-e^{-iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\right\}$$

Polos do integrando:

$$q^2 = k^2 \pm i\epsilon = k^2\left(1\pm\frac{i\epsilon}{k^2}\right)$$

$$q = \pm k\left(1\pm\frac{i\epsilon}{k^2}\right)^{1/2}$$

$$q \approx \pm k\left(1\pm\frac{i\epsilon}{2k^2}\right) = \pm k \pm i\epsilon'$$

$$\exp(iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|) = \exp(\pm ik|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|)\,\exp(\mp\epsilon'|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|)$$

Continuando analíticamente a expressão para o plano complexo, com

$$q = q_1 + iq_2$$

I $\quad \exp(iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|) = \exp(iq_1|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|)\,\exp(-q_2|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|)$

II $\quad \exp(-iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|) = \exp(-iq_1|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|)\,\exp(q_2|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|)$

Convergência da integral para (I) $\Rightarrow q_2 > 0$.
Convergência da integral para (II) $\Rightarrow q_2 < 0$.

$$G_{\pm}(\underset{\sim}{x},\underset{\sim}{x}') = -\frac{1}{8\pi^2 i|\underset{\sim}{x}'-\underset{\sim}{x}|}\left\{\oint_{-\infty}^{\infty}\frac{q\,dq\,e^{iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}}{q^2-k^2\mp i\epsilon} - \right.$$

$$\left. - \oint_{-\infty}^{\infty}\frac{q\,dq\,e^{-iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}}{q^2-k^2\mp i\epsilon}\right\}$$

G_+ tem os polos nos semiplanos superior e inferior:
$(k+i\epsilon' \,,\; -k-i\epsilon')$;
G_- tem os polos no semiplano inferior e superior:

$(k-i\epsilon' \,,\; -k+i\epsilon')$.

$$G_{+}(\underset{\sim}{x},\underset{\sim}{x}') = -\frac{1}{8\pi^2 i|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\left\{2\pi i \underset{k+i\epsilon'}{\mathrm{Res}}\left(\frac{q\,e^{iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}}{q^2-k^2\mp i\epsilon}\right)\right.$$

$$\left. - 2\pi i \underset{-k+i\epsilon'}{\mathrm{Res}}\left(\frac{q\,e^{-iq|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}}{q^2-k^2\mp i\epsilon}\right)\right\}$$

$$= -\frac{1}{8\pi^2 i|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\,2\pi i\left\{\frac{k\,e^{ik|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}}{+2k} - \frac{(-k)\,e^{ik|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}}{2k}\right\}$$

$$= -\frac{1}{4\pi|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}\,e^{ik|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}$$

Exercício: Mostrar que o resultado geral é

$$G_{\pm}(\underset{\sim}{x}, \underset{\sim}{x}') = -\frac{1}{4\pi|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|} e^{\pm ik|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|} \tag{10}$$

$G_{\pm}(\underset{\sim}{x}, \underset{\sim}{x}')$ pode ser reconhecida como a função de Green da equação de Helmholtz:

$$(\nabla^2 + k^2) G_{\pm}(\underset{\sim}{x}, \underset{\sim}{x}') = \delta^{(3)}(\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}') \tag{11}$$

A equação integral (6a) pode ser reescrita como:

$$\boxed{\langle \underset{\sim}{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \underset{\sim}{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|}}{4\pi|\underset{\sim}{x}-\underset{\sim}{x}'|} \cdot \langle \underset{\sim}{x}' | \hat{V} | \psi^{(\pm)} \rangle} \tag{12}$$

Nesta expressão $\langle \underset{\sim}{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \psi^{(\pm)}(\underset{\sim}{x})$ é escrita como a soma da onda plana incidente $\langle \underset{\sim}{x} | \phi \rangle$ mais um termo que representa o efeito do espalhamento. Mostraremos posteriormente que se o potencial V é de alcance finito, o segundo termo se comporta assintóticamente como

$$\frac{e^{\pm ikr}}{r},$$

representando ondas esféricas que saem (+) e entram (−) no centro espalhador. Na maioria das aplicações trabalhamos com $\psi^{+}(\underset{\sim}{x})$, que representa uma situação de fácil reprodução experimental. Para estudar explicitamente o comportamento assintótico das soluções, assumamos que o potencial V é local, e portanto diagonal na representação de coordenadas:

$$\langle \underset{\sim}{x}' | V(\underset{\sim}{x}) | \underset{\sim}{x}'' \rangle = V(\underset{\sim}{x}')\, \delta^{(3)}(\underset{\sim}{x}' - \underset{\sim}{x}'') .$$

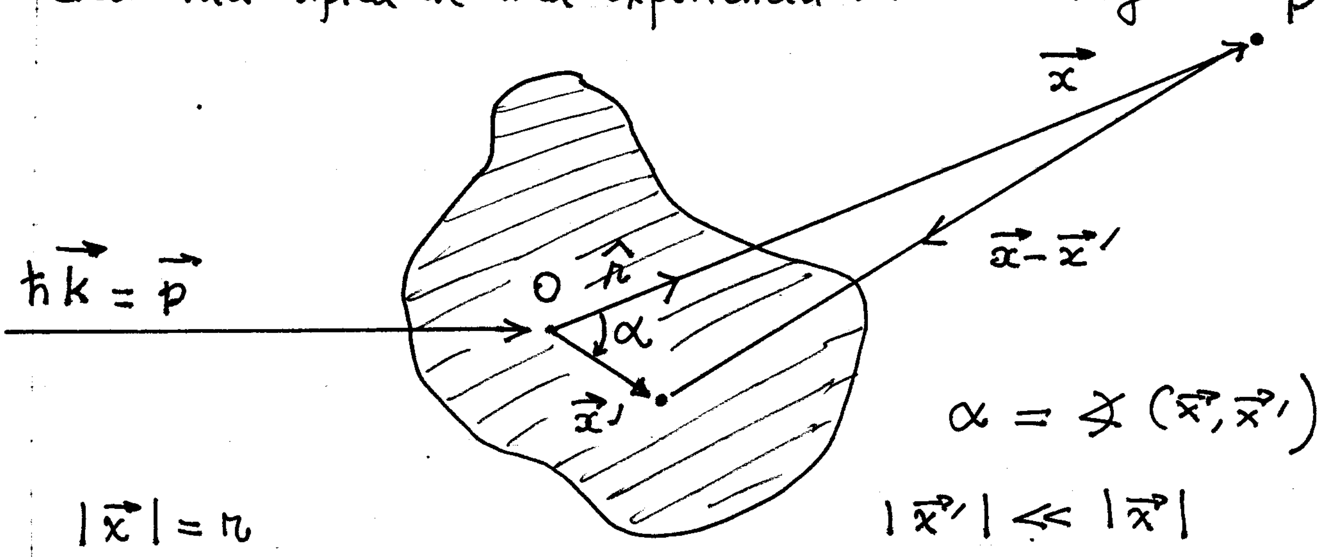
$$\langle \underset{\sim}{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle = \int d^3\underset{\sim}{x}'' \langle \underset{\sim}{x}' | V | \underset{\sim}{x}'' \rangle\, \psi^{(\pm)}(\underset{\sim}{x}'')$$

$$= V(\underset{\sim}{x}') \langle \underset{\sim}{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle ,$$

e a equação (12) passa para:

$$\langle \underset{\sim}{x} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \underset{\sim}{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\underset{\sim}{x}' \frac{e^{\pm ik|\underset{\sim}{x} - \underset{\sim}{x}'|}}{4\pi |\underset{\sim}{x} - \underset{\sim}{x}'|} V(\underset{\sim}{x}') \langle \underset{\sim}{x}' | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (13)$$

Geometria típica de uma experiência de Scattering:



$\alpha = \measuredangle(\vec{x}, \vec{x}')$

$|\vec{x}| = r$ $\qquad$ $|\vec{x}'| \ll |\vec{x}|$

$|\vec{x}'| \equiv r'$

P: ponto de observação (detetor)

$$|\vec{x} - \vec{x}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\alpha}$$

$$|\vec{x}-\vec{x}'| = r\sqrt{1+\left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2\frac{r'}{r}\cos\alpha}$$

$$\approx r\left(1-\frac{r'}{r}\cos\alpha\right) = r - r'\cos\alpha$$

$$= r - \hat{r}\cdot\vec{x}'$$

com $\quad \hat{r} \equiv \dfrac{\vec{x}}{|\vec{x}|} = \dfrac{\vec{x}}{r}$

• Def

$$\vec{k}' \equiv k\hat{r}$$

Temos :

$$\exp\left(\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|\right) \triangleq \exp\left(\pm ikr\right)\exp \mp i(\vec{k}'\cdot\vec{x}')$$

para r grande. Substituindo em (13) obtemos

$$\langle \underset{\sim}{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle \underset{\sim}{x}|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{\pm ikr}}{r}\int d^3x' \frac{e^{\mp i(\vec{k}'\cdot\vec{x}')}}{4\pi\left(1-\frac{\hat{r}\cdot\vec{x}'}{r}\right)} V(\vec{x}') \cdot \langle \underset{\sim}{x}'|\psi^{(\pm)}\rangle$$

Usamos também a representação $|\underset{\sim}{k}\rangle$, $\vec{k} = \dfrac{\vec{p}}{\hbar}$

$$\langle \underset{\sim}{k}|\underset{\sim}{k}'\rangle = \delta^{(3)}(\underset{\sim}{k}-\underset{\sim}{k}')$$

$$\langle \underset{\sim}{x}|\underset{\sim}{k}\rangle = \frac{\exp(i\,\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{x})}{(2\pi)^{3/2}}$$

O comportamento assintótico é dado por

$$\langle \underset{\sim}{x}|\psi^{(\pm)}\rangle \xrightarrow[r\to\infty]{} \langle \underset{\sim}{x}|\underset{\sim}{k}\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r}\int d^3x'\, V(\underset{\sim}{x}')\, e^{\mp i(\vec{k}'\cdot\vec{x}')} \cdot \langle \underset{\sim}{x}'|\psi^{(\pm)}\rangle$$

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left\{ e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x})} + \frac{e^{\pm ikr}}{r} \overset{\pm}{f}(\vec{k}';\vec{k}) \right\} \qquad (14)$$

com

$$\boxed{\overset{\pm}{f}(\vec{k}';\vec{k}) \equiv -(2\pi)^{3/2}\frac{2m}{4\pi\hbar^2}\int d^3x'\, V(\underset{\sim}{x}')\, e^{\mp i(\vec{k}'\cdot\vec{x}')} \langle \underset{\sim}{x}' | \psi^{(\pm)}\rangle} \qquad (14')$$

$\overset{\pm}{f}(\vec{k}',\vec{k})$ é a amplitude da onda esférica (incidente ou emergente):

$$\overset{\pm}{f}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k}) = -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\, \frac{e^{\mp i(\vec{k}'\cdot\vec{x}')}}{(2\pi)^{3/2}} V(\underset{\sim}{x}')\langle \underset{\sim}{x}' | \psi^{(\pm)}\rangle$$

$$= -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\, \langle \pm \underset{\sim}{k}' | \underset{\sim}{x}'\rangle V(\underset{\sim}{x}')\langle \underset{\sim}{x}' | \psi^{(\pm)}\rangle$$

$$\boxed{\overset{\pm}{f}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k}) = -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3\frac{2m}{\hbar^2}\langle \pm \underset{\sim}{k}' | V | \psi^{(\pm)}\rangle} \qquad (15)$$

e a forma assintótica da função de onda:

$$\langle \underset{\sim}{x} | \psi^{(\pm)}\rangle \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left\{ e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{x}} + \frac{e^{\pm ikr}}{r}\overset{\pm}{f}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k})\right\} \qquad (16)$$

Def. Seção eficaz diferencial

Seja N o fluxo de partículas incidentes, isto é número de partículas atravessando uma área unitária normal ao fluxo, por unidade de tempo.

Seja dN o número de partículas espalhada por unidade de tempo no elemento de ângulo sólido $d\Omega$, descrito pelas coordenadas polares (θ, φ). Esperamos que dN seja proporcional ao fluxo incidente e ao tamanho do ângulo sólido. Escrevemos:

$$dN = \sigma(\theta,\varphi) N \, d\Omega \qquad (1)a$$

ou

$$\sigma(\theta,\varphi)\, d\Omega = \frac{dN}{N}, \qquad (1)b$$

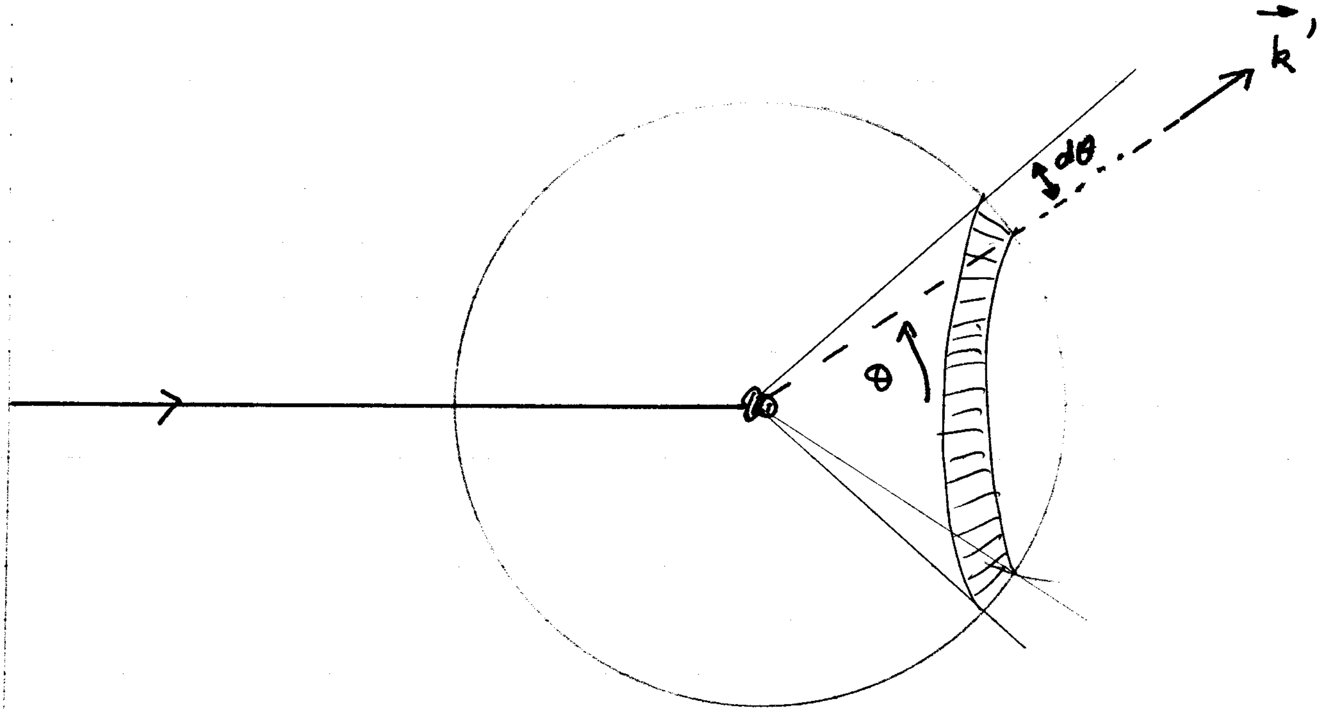
onde a constante de proporcionalidade $\sigma(\theta,\varphi)$ tem dimensão de área.

$\sigma(\theta,\varphi)$: SEÇÃO EFICAZ DIFERENCIAL de ESPALHAMENTO

Integrando (1)a sobre o ângulo sólido total deve fornecer o fluxo total de partículas espalhadas pelo centro. Isso define a SEÇÃO TOTAL de ESPALHAMENTO

$$N_{Esp} = \int dN = \int_{4\pi} \sigma(\theta,\varphi) N \, d\Omega = N \int_{4\pi} \sigma(\theta,\varphi)\, d\Omega$$

$$\sigma_T \equiv \int_{4\pi} \sigma(\theta,\varphi)\, d\Omega$$



Como calcular a seção eficaz de espalhamento no nosso caso?

Comportamento assintótico da função de onda dado por:

$$\langle \underset{\sim}{x} | \psi^+ \rangle \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ e^{i \underset{\sim}{k}\cdot \underset{\sim}{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f^+(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) \right\}$$

$v = \frac{e^{ikr}}{r} f^+(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k})$ representa a onda espalhada longe do centro espalhador. O fluxo de partículas espalhadas pode ser computado de

$$\underset{\sim}{J} = -\frac{i\hbar}{2m}\left[v^* \nabla v - (\nabla v^*) v \right]$$

$$\underset{\sim}{J} = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f(\theta,\varphi)|^2}{r^2}\hat{r} - \frac{i\hbar}{mr^3} I_m\left[f^*(\theta,\varphi)\frac{\partial f}{\partial\theta}\right]\hat{\theta}$$

$$- \frac{i\hbar}{mr^3 \operatorname{sen}\theta} I_m\left[f^*(\theta,\varphi)\frac{\partial f}{\partial\varphi}\right]\hat{\varphi} ,$$

onde $(\hat{r},\hat{\theta},\hat{\varphi})$ são vetores unitários na direção de crescimento das coordenadas polares (r,θ,φ). No limite assintótico, $r\to\infty$, e só ficamos com a parte radial:

$$\underset{\sim}{J}_e \underset{r\to\infty}{\approx} \frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\theta,\varphi)|^2}{r^2}\hat{r}$$

Temos também

$$d\Omega = \frac{dA}{r^2} ,$$

onde dA é a correspondente área associada ao ângulo sólido $d\Omega$ à distância r. Assim obtenho o fluxo na direção de $d\Omega$ como

$$\underset{\sim}{J}\cdot d\underset{\sim}{A} = \frac{\hbar k}{m}\frac{|f(\theta,\varphi)|^2}{r^2} r^2 d\Omega$$

$$= \frac{\hbar k}{m}|f(\theta,\varphi)|^2 d\Omega$$

Devemos calcular também o fluxo incidente com

$$\psi = e^{ikz}$$

$$\underset{\sim}{J}_i = \frac{\hbar k}{m}\hat{z}$$

$$\sigma(\theta,\varphi)\, d\Omega = \frac{r^2\, |\underset{\sim}{J}_e|}{|\underset{\sim}{J}_i|} = |f(\theta,\varphi)|^2 d\Omega$$

Resultado importante :

$$\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2 = |f(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k})|^2 \qquad (2)$$

§ 1ª Aproximação de Born

A equação de Lippman-Schwinger pode ser resolvida de maneira iterativa, como em Teoria de perturbações, e a amplitude $f(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k})$ pode ser correspondentemente calculada. Se o efeito do centro espalhador não é muito forte, esperamos que a série convirja, e os termos dominantes serão de baixa ordem. Em primeira ordem podemos considerar que

$\langle \underset{\sim}{x}' | \psi^{(+)} \rangle$ não é muito diferente de $\langle \underset{\sim}{x}' | \phi \rangle$,

o pacote incidente. Substituímos então:

$$\langle \underset{\sim}{x}' | \psi^{(+)} \rangle \longrightarrow \langle \underset{\sim}{x}' | \phi \rangle = \frac{e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} ,$$

e obtemos uma expressão aproximada de $f(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k})$:

$$f^{(1)}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k}) = -(2\pi)^{3/2} \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3x'\, V(\underset{\sim}{x}')\, e^{-i(\underset{\sim}{k}'\cdot\underset{\sim}{x}')} \frac{e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{x}'}}{(2\pi)^{3/2}}$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\, V(\underset{\sim}{x}')\, e^{i(\underset{\sim}{k}-\underset{\sim}{k}')\cdot\underset{\sim}{x}'}$$

Aparte de fatores constantes, $f^{(1)}(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k})$ é essencialmente a Transformada de Fourier do potencial $V(\underset{\sim}{x}')$. Esta aproximação é chamada de 1ª APROXIMAÇÃO de BORN (comparar com teoria de perturbações em 1ª ordem).
Assumindo que o potencial é esfericamente simétrico:

$$V(\underset{\sim}{x}') = V(r) \quad , \quad r = |\underset{\sim}{x}'|$$

$$(\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}') \cdot \underset{\sim}{x}' = r|\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'| \cos\theta$$

$$f^{(1)}(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \, V(r) \int_0^\pi \operatorname{sen}\theta \, d\theta \; e^{ir|\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'|\cos\theta}$$

$$= -\frac{1}{2} \cdot \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr \, r^2 \, V(r) \frac{1}{ir|\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'|} \left(e^{i|\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'|r} - e^{-i|\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'|r} \right)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{|\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'|} \int_0^\infty dr \, r \, V(r) \operatorname{sen}(|\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'| r)$$

$$\boxed{f^{(1)}(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) = -\frac{2m}{\hbar^2 |\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'|} \int_0^\infty dr \; r \, V(r) \operatorname{sen}(|\underset{\sim}{k} - \underset{\sim}{k}'| r)} \qquad (3)$$

Assim o potencial $V(r)$ deve cair suficientemente rápido em $r \to \infty$, para que a integral converja

▸ Exemplo. Potencial de Yukawa:

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$$

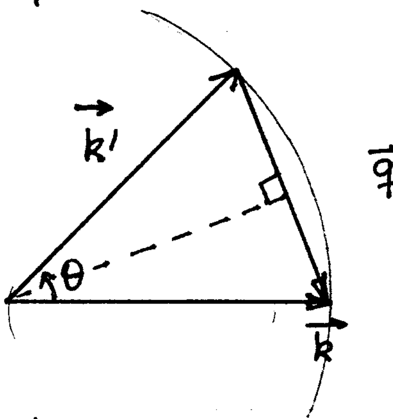
$\frac{1}{\mu}$: alcance do potencial

$V(r) \to 0$, para $r \gg \frac{1}{\mu}$. Calculamos $f^{(1)}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k})$:

$$f^{(1)}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k}) = -\frac{2m\,V_0}{\hbar^2|\underset{\sim}{k}-\underset{\sim}{k}'|\mu}\int_0^\infty dr\,\cancel{r}\,\frac{e^{-\mu r}}{\cancel{r}}\,\mathrm{sen}(|\underset{\sim}{k}'-\underset{\sim}{k}|r)$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar^2\mu|\underset{\sim}{k}-\underset{\sim}{k}'|}\cdot\frac{|\underset{\sim}{k}-\underset{\sim}{k}'|}{|\underset{\sim}{k}-\underset{\sim}{k}'|^2+\mu^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(V_0/\mu)\cdot\frac{1}{(\underset{\sim}{k}-\underset{\sim}{k}')^2+\mu^2}$$

Definindo: $\vec{q} \equiv \vec{k} - \vec{k}'$



$$\frac{q^2}{4} = k^2\,\mathrm{sen}^2\frac{\theta}{2}$$

ou $$q^2 = 4k^2\,\mathrm{sen}^2\frac{\theta}{2}$$
$$= 2k^2(1-\cos\theta)$$

Portanto:

$$f^{(1)}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k}) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{V_0}{\mu}\right)\cdot\frac{1}{2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2}$$

e a seção eficaz diferencial de espalhamento fica, dentro da 1ª aproximação de Born:

$$\sigma(\theta,\varphi) = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2\mu}\right)^2 \frac{1}{\left[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2\right]^2}$$

$$= \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2\mu}\right)^2 \frac{1}{\left[4k^2 \operatorname{sen}^2\frac{\theta}{2}+\mu^2\right]^2}$$

Como caso importante temos o limite $\mu \to 0$, onde o potencial de Yukawa se reduz ao potencial de Coulomb, sempre que a razão (V_0/μ) se mantenha finita:

$$\mu \to 0, \qquad \frac{V_0}{\mu} \longrightarrow ZZ'e^2$$

Z : número atômico do núcleo
Z' : número atômico da partícula incidente.

Neste caso a seção eficaz diferencial é

$$\boxed{\sigma(\theta,\varphi) = \frac{(2m)^2(ZZ'e^2)^2}{\hbar^4} \cdot \frac{1}{16k^4 \operatorname{sen}^4\theta/2},} \qquad (4)$$

que é a conhecida fórmula de Rutherford para a seção eficaz de espalhamento calculada CLASSICAMENTE (!)

§ VALIDADE da APROXIMAÇÃO de BORN

Voltando para a expressão (3) de $f^{(1)}(k',k)$ para um potencial central, podemos observar:

i) $\sigma(\theta,\varphi)$ ou $f(\theta)$ é função de $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ somente,
$\Rightarrow f(\theta)$ depende da energia $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$ e do ângulo θ somente através da combinação $2k^2(1-\cos\theta)$;

ii) $f(\theta)$ é sempre real;

iii) $\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$ independe do sinal de $V(r)$;

iv) para $|\vec{q}| = |\vec{k} - \vec{k}'|$ pequeno aproximamos $f^{(1)}$ por

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr\, r^2 V(r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\underset{\sim}{x}\, V(r)$$

é independente de θ;

v) para $|\vec{q}|$ grande, $f^{(1)}(\theta)$ é pequena devido à oscilações rápidas do integrando.

Na 1ª aproximação de Born, temos substituído $\langle \underset{\sim}{x}' | \psi^{(+)} \rangle$ por $\langle \underset{\sim}{x}' | \phi \rangle$. Portanto para a aproximação ser válida, a distorção da onda incidente deve ser pequena (ver fórmula (13)):

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ik|\underset{\sim}{x} - \underset{\sim}{x}'|}}{|\underset{\sim}{x} - \underset{\sim}{x}'|} V(\underset{\sim}{x}') \right| \ll 1$$

e chamando $r' \equiv |\underset{\sim}{x} - \underset{\sim}{x}'|$:

$$\boxed{\left| \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ikr'}}{r'} V(\underset{\sim}{x}') \right| \ll 1,} \qquad (5)$$

(5) é a condição da validade da 1ª aproximação de Born.

Voltando ao exemplo do potencial de Yukawa, temos que a condição (5) fica:

$$\frac{m}{2\pi\hbar^2} \cdot 4\pi \int_0^\infty r^2 dr \, \frac{e^{ikr'}}{r'} \, \frac{V_0 \, e^{-\mu r}}{\mu r}$$

$$= \frac{2m V_0}{\hbar^2 \mu} \int_0^\infty dr \left(\frac{r}{r'}\right) e^{-\mu r} \, e^{ikr'} ,$$

e para baixas energias $kr' \ll 1$, $e^{ikr'} \to 1$, e $(r/r') \to 1$, resultando:

$$\left| \frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu^2} \right| \ll 1 .$$

Esta condição deve ser comparada com aquela, para que o potencial de Yukawa desenvolva um estado ligado:

$$\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu^2} \geqslant 2{,}7 \quad , \quad \text{com } V_0 < 0 .$$

Significa que se o potencial é suficientemente forte para desenvolver um estado ligado, provavelmente a 1ª aproximação de Born fornecerá um resultado errado

§ A APROXIMAÇÃO de BORN NAS ORDENS MAIS ALTAS

▸ **Def.** Definimos um operador de Transição $\hat{T}$ por:

$$\hat{T}|\phi\rangle \equiv V|\psi^{(+)}\rangle \qquad (6)$$

Multiplicamos a eq. de Lippmann-Schwinger por $\hat{V}$:

$$\hat{V}|\psi^{(+)}\rangle = \hat{V}|\phi\rangle + \hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\epsilon}T|\phi\rangle$$

$$= \hat{T}|\phi\rangle,$$

Como esta equação é válida para todo $|\phi\rangle$ obtemos a identidade:

$$\boxed{\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}\hat{T}} \quad . \qquad (7)$$

A amplitude de espalhamento pode agora ser escrita como

$$f^{(+)}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k}) = -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3\frac{2m}{\hbar^2}\langle\underset{\sim}{k}'|\hat{T}|\phi\rangle$$

$$\boxed{f^{(+)}(\underset{\sim}{k}',\underset{\sim}{k}) = -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3\frac{2m}{\hbar^2}\langle\underset{\sim}{k}'|\hat{T}|\underset{\sim}{k}\rangle} \qquad (8)$$

Obtemos soluções iterativas de $\hat{T}$ como:

$$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}V + \hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0+i\varepsilon}\hat{V}\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}\hat{V}$$

$$+ \cdots$$

Notar a semelhança com o <u>núcleo resolvente da teoria de perturbações</u>. A amplitude de espalhamento é' correspondentemente expandida:

$$f^{(+)}(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) ,$$

onde $\underline{n}$ é o número de vezes que aparece o potencial $\hat{V}$. Assim temos:

$$f^{(1)}(\underset{\sim}{k}, \underset{\sim}{k}') = -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \underset{\sim}{k}' | \hat{V} | \underset{\sim}{k} \rangle$$

1ª Aproximação de Born

$$f^{(2)}(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) = -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \underset{\sim}{k}' | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \hat{V} | \underset{\sim}{k} \rangle ,$$

2ª Aprox. de Born

$$\vdots$$

Escrevemos $f^{(2)}$ na representação de coordenadas:

$$f^{(2)}(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) = -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' \langle \underset{\sim}{k}' | \underset{\sim}{x}' \rangle \langle \underset{\sim}{x}' | V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V | \underset{\sim}{x}'' \rangle$$

$$\langle \underset{\sim}{x}'' | \underset{\sim}{k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' \langle \underset{\sim}{k}' | \underset{\sim}{x}' \rangle V(\underset{\sim}{x}') \left\langle \underset{\sim}{x}' \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| \underset{\sim}{x}'' \right\rangle$$

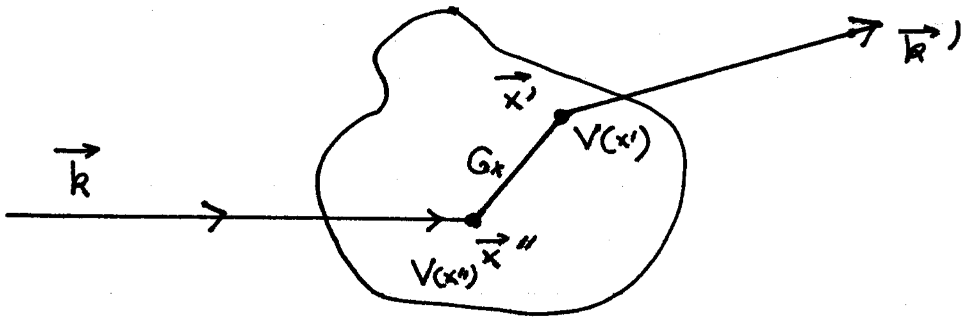
$$V(\underset{\sim}{x}'') \langle \underset{\sim}{x}'' | \underset{\sim}{k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' e^{-i\underset{\sim}{k}' \cdot \underset{\sim}{x}'} V(\underset{\sim}{x}') \frac{2m}{\hbar^2} G_+(\underset{\sim}{x}', \underset{\sim}{x}'') V(\underset{\sim}{x}'')$$

$$\cdot \, e^{i\underset{\sim}{k} \cdot \underset{\sim}{x}''}$$

$$f^{(2)}(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{1}{4\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int d^3x' \int d^3x''\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'}\, V(\vec{x}')\left[\frac{2m}{\hbar^2} G_+(\vec{x}',\vec{x}'')\right] V(\vec{x}'') \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}''}$$

Interpretação diagramática de $f^{(2)}$:



§ OS ESTADOS LIVRES COMO CASO PARTICULAR DE UM POTENCIAL CENTRAL

Partículas livres também têm o momentum angular bem definido, pois a energia cinética comuta com o operador de momentum angular. Neste caso podemos escolher como operadores compatíveis

$$(\hat{H}_0, \hat{L}^2, L_z).$$

Sem considerar o spin das partículas, os kets que diagonalizam os operadores acima são escritos como

$$\{|E, l, m\rangle\},$$

e são chamados estados de ondas esféricas. O estado mais geral de uma partícula livre pode ser considerado como uma combinação linear de $|Elm\rangle$. Esta base joga o mesmo papel que, por exemplo $\{|\vec{k}\rangle\}$, que diagonaliza o momentum linear. Em particular, um ket $|\vec{k}\rangle$ pode ser desenvolvido na base das ondas