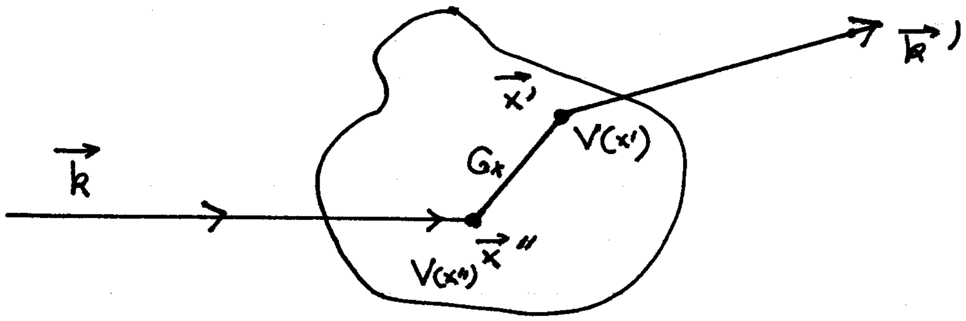
$$f^{(2)}(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{1}{4\pi}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int d^3x' \int d^3x''\, e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}'}\, V(\vec{x}')\left[\frac{2m}{\hbar^2} G_+(\vec{x}',\vec{x}'')\right] V(\vec{x}'') \cdot e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}''}$$

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 <u>ondas esféricas</u>. 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 esféricas:

$$|\underset{\sim}{k}\rangle = \sum_{l,m} \int dE \; |Elm\rangle\langle Elm|\underset{\sim}{k}\rangle$$

Adotamos a normalização seguinte:

$$\langle E'l'm'|Elm\rangle = \delta_{ll'}\,\delta_{mm'}\,\delta(E-E'),$$

onde a energia E varia continuamente. Queremos calcular os coeficientes lineares $\langle Elm|\underset{\sim}{k}\rangle$ da transformação. O Hamiltoniano da partícula livre pode ser escrito como:

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \frac{p^2}{2m} = \frac{L^2}{2mr^2} - \frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right).$$

Em analogia com a representação espacial dos Harmônicos Esféricos, escrevemos:

$$\langle\underset{\sim}{k}|Elm\rangle = g_{El}(k)\, Y^l_m(\hat{k}),$$

onde $\hat{k}$ é um vetor unitário na direção de $\underset{\sim}{k}$ e $k = |\underset{\sim}{k}|$. Determinemos $g_{El}(k)$. Notemos que:

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 - E)|Elm\rangle = 0$$

$$\langle\underset{\sim}{k}|(\hat{\mathcal{H}}_0 - E) = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - E\right)\langle\underset{\sim}{k}|$$

Assim:

$$\langle\underset{\sim}{k}|(\mathcal{H}_0 - E)|Elm\rangle = 0 = \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - E\right)\langle\underset{\sim}{k}|Elm\rangle$$

Portanto $\langle \underset{\sim}{k} | E\ell m \rangle$ é não nulo só no caso

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

Tratando-se de espectro contínuo escrevemos:

$$g_{E\ell}(k) = A\,\delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)$$

Para determinar a constante A usamos a convenção da normalização

$$\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\delta(E-E') = \langle E'\ell'm' | E\ell m\rangle = \int d^3k'' \langle E'\ell'm' | \underset{\sim}{k}''\rangle \cdot$$
$$\cdot \langle \underset{\sim}{k}'' | E\ell m\rangle$$

$$= \int_0^\infty k''^2 dk'' \int_{4\pi} d\Omega_{k''} |A|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right)\delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E\right) Y^{\ell'^*}_{m'}(\hat{k}'')\, Y^{\ell}_{m}(\hat{k}'')$$

mudar de variável para $E'' = \dfrac{\hbar^2 k''^2}{2m}$

$$k'' dE'' = \frac{\hbar^2 k''^2 dk''}{m} \qquad\qquad k''^2 dk'' = \frac{m}{\hbar^2} k'' dE''$$

$$= \int dE'' \frac{mk''}{\hbar^2}\, \delta(E''-E')\delta(E''-E)\, |A|^2 \cdot \underbrace{\int_{4\pi} d\Omega_{k''}\, Y^{\ell'^*}_{m'}(\hat{k}'')\, Y^{\ell}_{m}(\hat{k}'')}_{\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}}$$

$$= |A|^2 \delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\, \delta(E-E')\, \frac{mk}{\hbar^2}$$

$$\Longrightarrow \qquad |A|^2 = \frac{\hbar^2}{mk} \quad , \quad |A| = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}$$

$$\boxed{\langle \underset{\sim}{k} | E\ell m\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\,\delta\!\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right) Y^{\ell}_{m}(\hat{k})} \qquad (9)$$

Assim:

$$|\underset{\sim}{k}\rangle = \sum_{\ell m}\int dE\; |E\ell m\rangle\langle E\ell m|\underset{\sim}{k}\rangle$$

$$= \sum_{\ell m}\int dE\, |E\ell m\rangle \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\,\delta\!\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right) Y^{\ell *}_{m}(\hat{k})$$

$$= \sum_{\ell}\sum_{m} |E\ell m\rangle_{E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\,Y^{\ell *}_{m}(\hat{k})\right)$$

mais explícitamente:

$$|\underset{\sim}{k}\rangle = \sum_{\ell=0}^{\infty}\sum_{-\ell\le m\le \ell} |E\ell m\rangle\Big|_{E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}} \left(\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\,Y^{\ell *}_{m}(\hat{k})\right)$$

Consideremos agora as funções $|E\ell m\rangle$ na representação de coordenadas (Exercício do semestre passado)

$$\langle \underset{\sim}{x} | E\ell m\rangle = C_\ell\; j_\ell(kr)\, Y^{\ell}_{m}(\hat{r}) \quad ,$$

onde $j_\ell(kr)$ é a função de Bessel esférica de ordem $\underline{\ell}$. As constantes C_ℓ têm que ser determinadas. Usar:

$$\langle \underset{\sim}{x}|\underset{\sim}{k}\rangle = \frac{e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_{\ell}\sum_{m}\int dE\; \langle \underset{\sim}{x}|E\ell m\rangle\langle E\ell m|\underset{\sim}{k}\rangle$$

$$= \sum_{\ell}\sum_{m}\int dE\; C_\ell\, j_\ell(kr)\, Y^{\ell}_{m}(\hat{r})\,\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\,\delta\!\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}-E\right) Y^{\ell *}_{m}(\hat{k})$$

Usamos o teorema de adição dos Harmônicos esféricos:

$$\sum_m Y^{\ell}_m(\hat{r}) Y^{\ell *}_m(\hat{k}) = \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\hat{k}\cdot\hat{r})$$

$$\hat{k}.\hat{r} = \cos\vartheta$$

$$\langle \underset{\sim}{x} | \underset{\sim}{k} \rangle = \sum_\ell \frac{2\ell+1}{4\pi} P_\ell(\hat{k}\cdot\hat{r})\, C_\ell\, j_\ell(kr) \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}$$

e comparando com a decomposição de uma onda plana em ondas esféricas:

$$\frac{e^{i\underset{\sim}{k}\cdot\underset{\sim}{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_\ell (2\ell+1)\, i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\hat{k}.\hat{r})$$

obtemos:

$$C_\ell = \frac{\sqrt{mk}}{\hbar} 4\pi \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} i^\ell$$

$$= \frac{i^\ell}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}} ,$$

logo:

$$\boxed{\begin{aligned} \langle \underset{\sim}{x} | E\ell m \rangle &= \frac{i^\ell}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}}\, j_\ell(kr)\, Y^\ell_m(\hat{r}) \\ \langle \underset{\sim}{k} | E\ell m \rangle &= \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\, \delta\!\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) Y^\ell_m(\hat{k}) \end{aligned}} \quad (10)$$

§ MÉTODO das ONDAS PARCIAIS

Assumamos agora que $V \neq 0$, mas ainda um potencial central

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

Por simetria, o operador de transição $\hat{T}$ comuta com $\underset{\sim}{L}^2$ e $\underset{\sim}{L}$. Lembremos que:

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

Assim esperamos que:

$$\langle E'\ell'm' | \hat{T} | E\ell m \rangle = T_\ell(E,E')\, \delta_{\ell\ell'}\, \delta_{mm'} .$$

Calculemos agora a amplitude de espalhamento:

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

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3 \sum_{\ell,\ell'}\sum_{m,m'} \int dE \int dE' \langle \underset{\sim}{k}' | E'\ell'm' \rangle \langle E'\ell'm' | \hat{T} | E\ell m \rangle \cdot$$

$$\cdot \langle E\ell m | \underset{\sim}{k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3 \sum_{\ell,\ell'}\sum_{m,m'} \int dE \int dE' \frac{\hbar^2}{m\sqrt{kk'}}\, \delta\!\left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - E'\right) \cdot$$

$$\cdot T_\ell(E,E')\,\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}\, \delta\!\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \cdot$$

$$\cdot Y^{\ell'}_{m'}(\hat{k}')\, Y^{\ell *}_{m}(\hat{k})$$

usamos o teorema de adição dos Harmônicos Esféricos outra vez:

$$f(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3 \sum_{\ell} \frac{\hbar^2}{mk} \quad T_\ell(E,E)\Big|_{E=\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \cdot$$

$$\cdot \sum_{m} Y^{\ell}_{m}(\hat{k}')\, Y^{\ell *}_{m}(\hat{k})$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\frac{\hbar^2}{mk}\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{2\ell+1}{4\pi}P_\ell(\hat{k}\cdot\hat{k}')\,T_\ell(E,E)\Big|_{E=\frac{\hbar k^2}{2m}}$$

▶ <u>Def</u>.

$$\cos\theta \equiv \hat{k}\cdot\hat{k}' \quad ,$$

$$f_\ell(k) \equiv -\pi\frac{T_\ell(E,E)}{k}\Bigg|_{E=\frac{\hbar k^2}{2m}} \qquad (11)$$

$f_\ell(k)$: AMPLITUDE de ONDA PARCIAL

Finalmente obtemos:

$$\boxed{f(\underset{\sim}{k}', \underset{\sim}{k}) = f(\cos\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)f_\ell(k)\,P_\ell(\cos\theta)} \qquad (12)$$

Significado físico de $f_\ell(k)$?

Estudamos comportamento assintótico da onda espalhada:

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

Desenvolvemos em ondas parciais:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, i^l\, j_l(kr)\, P_l(\cos\theta)$$

$$f(\theta)\, \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, f_l(k)\, \frac{e^{ikr}}{r}\, P_l(\cos\theta)$$

Precisamos do comportamento assintótico de $j_l(kr)$, para $r \to \infty$:

$$j_l(kr) \xrightarrow[kr\to\infty]{} \frac{e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})}}{2ikr},$$

e notando que
$$i^l = e^{i\frac{\pi}{2}l}$$

$$e^{ikz} \xrightarrow[r\to\infty]{} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left[\frac{e^{ikr} - e^{-i(kr - l\pi)}}{2ikr} \right] P_l(\cos\theta)$$

e a função completa:

$$\langle x | \psi^{(+)} \rangle \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{P_l(\cos\theta)}{2ik} \cdot \left\{ \left[1 + 2ikf_l(k)\right] \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr - \pi l)}}{r} \right\}$$

Sem potencial $(V=0)$, a onda plana pode ser analizada como a soma de uma onda esférica emergente $\frac{e^{ikr}}{r}$ e uma onda esférica incidente $- \frac{e^{-i(kr-\pi l)}}{r}$, para cada l.

A presença do centro espalhador só modifica o coeficiente da onda emergente:

$$1 \longrightarrow 1 + 2ikf_l(k)$$

Conservação da probabilidade:

Na formulação independente do tempo devemos ter

$$\nabla \cdot \underset{\sim}{j} = - \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = 0 \,,$$

isto é não temos fluxo através de superfícies fechadas. Consideremos uma esfera de raio muito grande $(r \to \infty)$. O Teorema de Gauss nos fornece:

$$\int_{\substack{\text{Superfície}\\ \text{da}\\ \text{Esfera}}} \underset{\sim}{j} \cdot d\underset{\sim}{S} = 0 \,,$$

ou o fluxo que entra é igual aquele que sai. Como o momentum angular é conservado, isto deve ser válido para cada onda parcial por separado. Em outras palabras, o coeficiente de $\frac{e^{ikr}}{r}$ deve ser sempre igual em módulo ao coeficiente de $\frac{e^{-ikr}}{r}$. Chamando:

$$S_l(k) \equiv 1 + 2ikf_l(k) \,,$$

deve ser

$$|S_l(k)| = 1 \,, \qquad (13)$$

isto é o efeito do potencial é apenas uma mudança da fase da onda emergente. Escrevemos:

$$S_\ell(k) \equiv e^{2i\delta_\ell}$$

▶ <u>Def.</u> δ_ℓ é chamado de DESLOCAMENTO da FASE

$$f_\ell(k) = \frac{S_\ell - 1}{2ik} = \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2ik}$$

$$= \frac{e^{i\delta_\ell}}{k} \frac{(e^{i\delta_\ell} - e^{-i\delta_\ell})}{2i} = \frac{e^{i\delta_\ell}}{k} \operatorname{sen}\delta_\ell$$

$$= \frac{1}{k \operatorname{cotan}\delta_\ell - ik},$$

e a amplitude de espalhamento por:

$$\boxed{f(\cos\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{e^{i\delta_\ell} \operatorname{sen}\delta_\ell}{k} P_\ell(\cos\theta),} \qquad (14)$$

com δ_ℓ real. O interessante da presente formulação é que a expressão (14), e a unitaridade de $S_\ell(k)$, foram obtidas como conseqüência da INVARIÂNCIA ROTACIONAL e a CONSERVAÇÃO da PROBABILIDADE.

A seção eficaz diferencial é obtida como:

$$\dot{\sigma}(\theta) = |f(\cos\theta)|^2,$$

e a seção eficaz total é obtida

$$\sigma_{Tot} = \int_{4\pi} \sigma(\theta,\varphi)\, d\Omega = \int_{4\pi} |f(\theta)|^2 d\Omega$$

$$= \frac{1}{k^2}\, 2\pi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \sum_{l,l'} (2l+1)(2l'+1)\, e^{i\delta_l}\, e^{-i\delta_{l'}} \cdot$$

$$\cdot\, \mathrm{sen}\,\delta_l \cdot \mathrm{sen}\,\delta_{l'}\, P_l(\cos\theta)\, P_{l'}(\cos\theta)$$

Ortogonalidade dos polinômios de Legendre:

$$\int_{-1}^{1} dx\, P_l(x)\, P_{l'}(x) = \frac{2}{2l+1}\, \delta_{ll'}$$

$$\boxed{\sigma_{Tot} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\, \mathrm{sen}^2\delta_l} \qquad (15)$$

Podemos também calcular

$$\mathrm{Im}\, f(\theta=0) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{\mathrm{sen}\,\delta_\ell\, \mathrm{Im}\,(e^{i\delta_\ell})}{k} P_\ell(1),$$

sabemos que

$$P_\ell(1) = 1$$

$$\mathrm{Im}\, f(\theta=0) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{\mathrm{sen}^2\delta_\ell}{k} = \frac{k}{4\pi}\sigma_{Tot}$$

ou

$$\boxed{\mathrm{Im}\, f(\theta=0) = \frac{k}{4\pi}\sigma_{tot}}$$

Este resultado é chamado de "Teorema Óptico".

§ Espalhamento de partículas idênticas

O Hamiltoniano de duas partículas interagentes é

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\vec{x}_1 - \vec{x}_2)$$

Mudamos variáveis para o centro de massa:

$$\vec{X} = \frac{m_1\vec{x}_1 + m_2\vec{x}_2}{m_1+m_2}$$