Podemos também calcular

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

sabemos que

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

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

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:

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

e a coordenada relativa:

$$\vec{r} \equiv \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \qquad , \; r \equiv |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$$

Esta transformação pode ser efetuada através de uma transformação canônica. A mudança de variáveis fornece:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\nabla_X^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2 + V(r)$$

O primeiro termo é a energia cinética do Centro de Massa e não tem interesse físico. O segundo termo é a energia cinética relativa, e envolve a "massa reduzida"

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$$

As autofunções de $\mathcal{H}$ podem ser separadas na forma

$$\Psi(\vec{X},\vec{r}) = \Phi(\vec{X})\,\psi(\vec{r}) \; ,$$

onde o segundo fator satisfaz uma equação de Schrödinger do tipo:

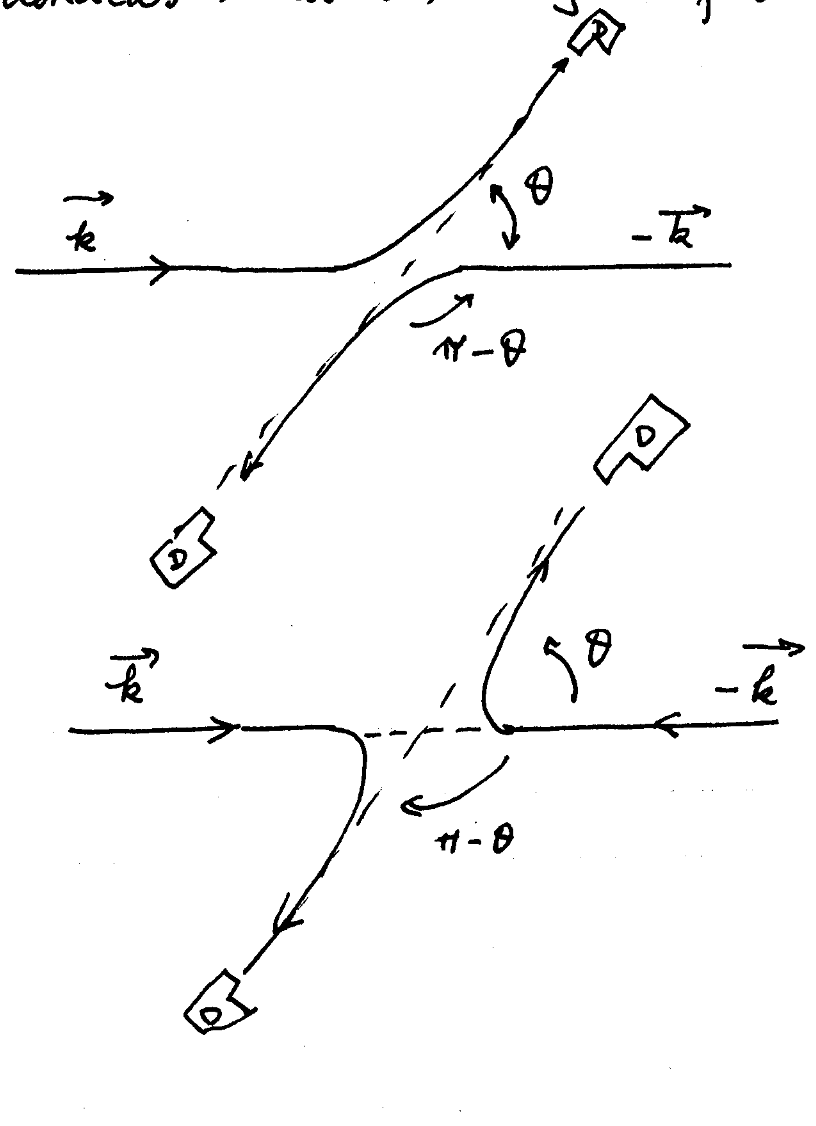
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(r)\,\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r}) \; ,$$

onde E é a energia associada com o movimento relativo das duas partículas no referencial Centro de Massa.

A equação acima, não descreve as fontes de partículas, em um típico problema de espalhamento, de maneira que o fluxo incidente tem que ser imposto como uma condição de contorno. São requeridas soluções da Eq. de Schrödinger, na forma:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_i(\vec{r}) + \psi_s(\vec{r}) \quad ,$$

onde a onda incidente $\psi_i(\vec{r})$ determina o fluxo incidente. Em um típico problema de espalhamento de partículas idênticas temos as situações equivalentes:



Consideremos o caso de partículas carregadas sem spin, para as quais a função de onda espacial é simétrica. Neste caso, a solução assintótica é do tipo:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \left[f(\theta) + f(\pi-\theta)\right]\frac{e^{ikr}}{r},$$

onde $\vec{x} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$ é a coordenada relativa. Este resultado fornece a seguinte seção eficaz de espalhamento:

$$\sigma(\theta,\varphi) = \left| f(\theta) + f(\pi-\theta)\right|^2$$

$$= |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 + 2\,\mathrm{Re}\left[f(\theta)\, f^*(\pi-\theta)\right]$$

e para $\theta = \frac{\pi}{2}$, temos interferência construtiva com

$$\sigma(\theta = \pi/2) = 4\,|f(\pi/2)|^2$$

Se a função espacial for antisimétrica, temos

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \left[f(\theta) - f(\pi-\theta)\right]\frac{e^{ikr}}{r},$$

de maneira que aparece interferência distrutiva.

No caso de dois elétrons, com spin $\frac{1}{2}$, o tripleto é simétrico no spin e antisimétrico na órbita, enquanto que o singleto é antisimétrico no spin e simétrico na órbita. Se os feixes incidentes <u>não</u> estão polarizados, temos uma mistura estatística com peso $\frac{1}{4}$ para o singleto e $\frac{3}{4}$ para o tripleto, com a seção eficaz dada por

$$\sigma(\theta,\varphi) = \frac{1}{4}\left| f(\theta) + f(\pi-\theta)\right|^2 + \frac{3}{4}\left| f(\theta) - f(\pi-\theta)\right|^2$$

$$= |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - Re\left[f(\theta) f^*(\pi-\theta)\right] ,$$

com interferência destrutiva em $\theta \approx \pi/2$.

§ Considerações de Simetria nos processos de espalhamento

Suponhamos que $\mathcal{H}_0$ e o potencial espalhador V são ambos invariantes frente a uma operação de simetria. Pergentamos o que isto implica para os elementos de matriz de T, ou para a amplitude de espalhamento $f(\theta)$.

Assumimos que o operador $\mathcal{U}$ que representa a simetria é unitário. Temos

$$\mathcal{U}\mathcal{H}_0\mathcal{U}^+ = \mathcal{H}_0 , \quad \mathcal{U} V \mathcal{U}^+ = V .$$

Da série perturbativa para T, vemos que ele também é invariante

$$T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \cdots$$

$$\mathcal{U}T\mathcal{U}^{\dagger} = T \quad \text{ou} \quad \mathcal{U}^{\dagger}T\mathcal{U} = T$$

Definimos novos kets por:

$$\widetilde{|\vec{k}\rangle} \equiv \mathcal{U}|\vec{k}\rangle\,, \quad \widetilde{|\vec{k}'\rangle} \equiv \mathcal{U}|\vec{k}'\rangle\,.$$

Assim temos:

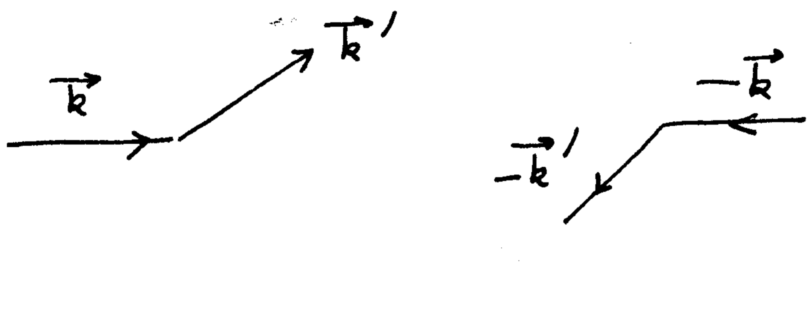
$$\widetilde{\langle\vec{k}'|}\,T\,\widetilde{|\vec{k}\rangle} = \langle\vec{k}'|\mathcal{U}^{\dagger}T\mathcal{U}|\vec{k}\rangle = \langle\vec{k}'|T|\vec{k}\rangle$$

Como exemplo específico, consideremos o caso do operador paridade π

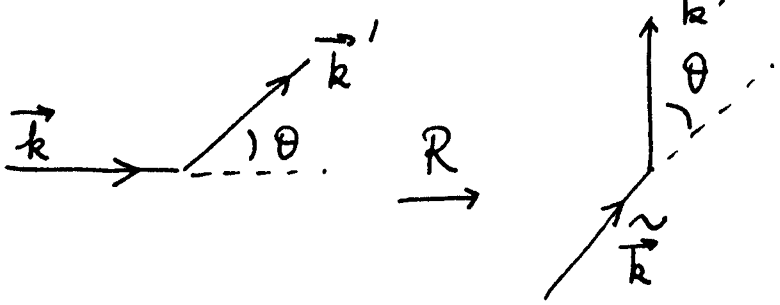
$$\pi|\vec{k}\rangle = |-\vec{k}\rangle\,, \quad \pi|\vec{k}'\rangle = |-\vec{k}'\rangle\,.$$

A invariância de $\mathcal{H}_0$ e V por paridade significa

$$\langle-\vec{k}'|T|-\vec{k}\rangle = \langle\vec{k}'|T|\vec{k}\rangle$$



Se o potencial é central $V(\vec{x}) = V(r)$, temos invariância por rotação e conservação do momentum angular



T apenas depende das orientações relativas entre $\vec{k}$ e $\vec{k}'$!

Se o operador que representa a simetria for anti unitário, como no caso de inversão temporal, precisamos de tomar mais cuidado. Seja então o caso de inversão temporal Θ, e assumamos que H_0 e V são invariantes por Θ

$$\Theta H_0 \Theta^{-1} = H_0 , \quad \Theta V \Theta^{-1} = V .$$

Também temos:

$$\Theta \frac{1}{E - H_0 + i\varepsilon} \Theta^{-1} = \frac{1}{E - H_0 - i\varepsilon} ,$$

de maneira que para a matriz de scattering temos:

$$\Theta T \Theta^{-1} = T^{\dagger}$$

Para operadores unitários também temos:

$$|\tilde{\alpha}\rangle \equiv \Theta|\alpha\rangle \quad , \quad |\tilde{\beta}\rangle \equiv \Theta|\beta\rangle$$

Consideremos agora o caso

$$|\alpha\rangle = T|\vec{k}\rangle \quad , \quad \langle\beta| \equiv \langle\vec{k}'|$$

Temos então que

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta T|\vec{k}\rangle \quad , \quad |\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\beta\rangle = \Theta|\vec{k}'\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta T|\vec{k}\rangle = (\Theta T \Theta^{-1})\,\Theta|\vec{k}\rangle$$
$$= T^{+}|-\vec{k}\rangle$$

$$|\tilde{\beta}\rangle = \Theta|\vec{k}'\rangle = |-\vec{k}'\rangle$$

Com operadores anti-unitários:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle^{*} = \langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle$$

$$\langle\alpha|\beta\rangle^{*} = \langle\beta|\alpha\rangle = \langle\vec{k}'|T|\vec{k}\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\rangle$$
$$= \langle-\vec{k}|T|-\vec{k}'\rangle$$

ou

$$\langle\vec{k}'|T|\vec{k}\rangle = \langle-\vec{k}|T|-\vec{k}'\rangle$$

Os momentos inicial e final são trocados, além de mudar de sinal. Consideramos a ação combinada da inversão temporal e a paridade:

$$\langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle \overset{\Theta}{=} \langle -\vec{k} | T | -\vec{k}' \rangle \overset{\pi}{=} \langle \vec{k} | T | \vec{k}' \rangle ,$$

e obtemos para a amplitude de espalhamento

$$f(\vec{k}, \vec{k}') = f(\vec{k}', \vec{k}) ,$$

que para a seção eficaz significa

$$\boxed{\sigma(\vec{k} \to \vec{k}') = \sigma(\vec{k}' \to \vec{k}) ,}$$

situação que é chamada de Balanço Detalhado. Para partículas com spin, temos

$$\Theta |jm\rangle = i^{2m} |j, -m\rangle .$$

Caraterizando as partículas livres por kets $|\vec{k}\, m_s\rangle$, temos

$$\langle \vec{k}', m_s' | T | \vec{k}, m_s \rangle \overset{\Theta}{=} i^{-2m_s' + 2m_s} \langle -\vec{k}, -m_s | T | -\vec{k}', -m_s' \rangle$$

$$\overset{\pi}{=} i^{-2m_s' + 2m_s} \langle \vec{k}, -m_s | T | \vec{k}', -m_s' \rangle$$

De maneira que:

$$\left|\langle \vec{k}', m_s' | T | \vec{k} m_s \rangle\right| = \left|\langle \vec{k}, -m_s | T | \vec{k}', -m_s' \rangle\right|$$

Para estados iniciais não polarizados, temos uma mistura estatística sobre todos os estados de spin; somamos então sobre todos os estados iniciais dividindo por $(2s+1)$. Se a polarização final não é observada, somamos também sobre os estados de spin ~~total~~. Assim:

$$\overline{\sigma}(\vec{k} \to \vec{k}') \sim \frac{1}{2s+1} \sum_{m_s} \sum_{m_s'} \left|\langle \vec{k}' m_s' | T | \vec{k} m_s \rangle\right|^2$$

$$= \frac{1}{2s+1} \sum_{m_s, m_s'} \left|\langle \vec{k}, -m_s | T | \vec{k}', -m_s' \rangle\right|^2$$

$$\sim \overline{\sigma}(\vec{k}' \to \vec{k}).$$

Obtemos neste caso o <u>Balanço Detalhado</u> na forma

$$\boxed{\overline{\sigma}(\vec{k} \to \vec{k}') = \overline{\sigma}(\vec{k}' \to \vec{k})}$$