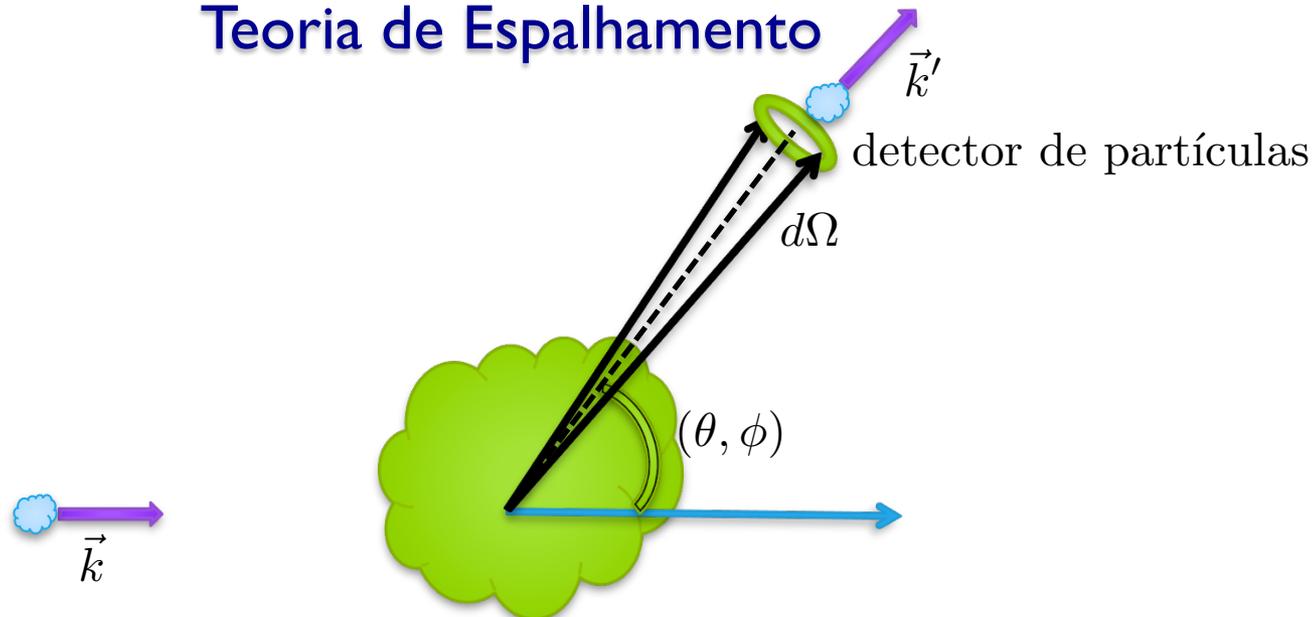


Teoria de Espalhamento



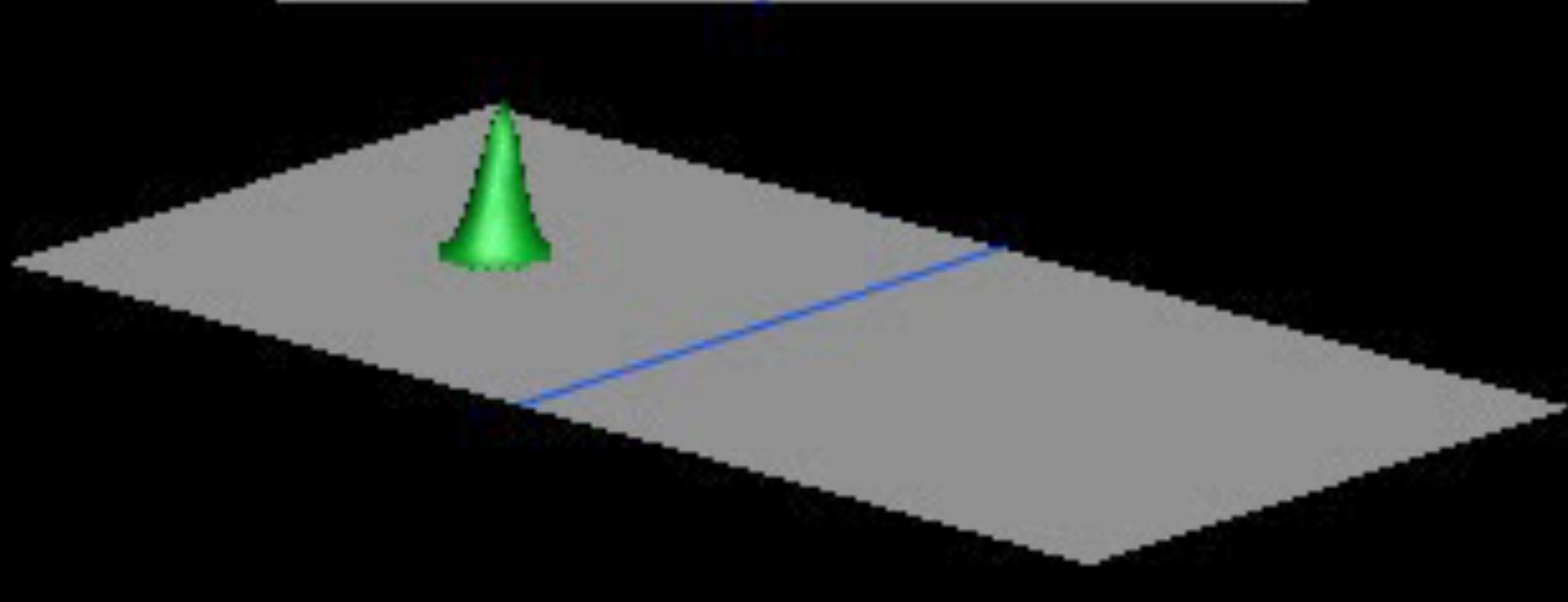
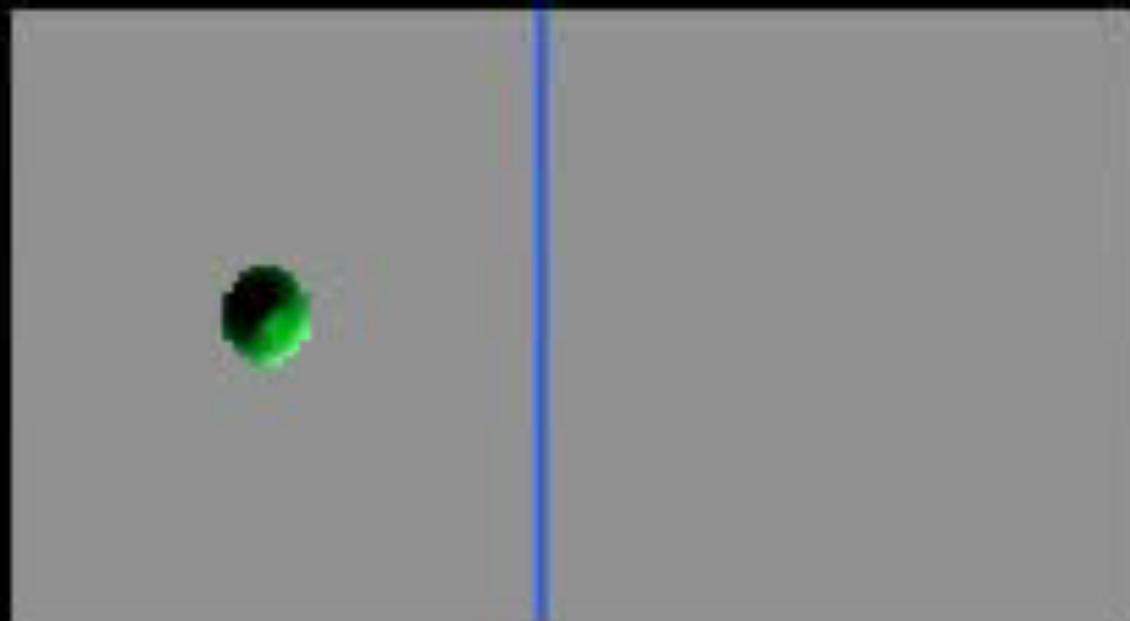
- Suponha um feixe incidente formado por partículas do tipo 1 (uma delas é representada pela nuvem azul) e o alvo feito de partículas do tipo 2 (uma delas é representada nuvem verde). Qual a chance de uma partícula 1, saindo pelo ângulo sólido $d\Omega$, ser coletada no detector na direção (θ, ϕ) ? É isso que queremos estudar. Poderia ser mais complexo, envolvendo vários detectores de diferentes tipos de fragmentos, decorrente da colisão da 1 com a 2.
- Neste curso, substituiremos a partícula 2 por um potencial simples para obter a chance da partícula 1 chegar na região de colisão, com momento \vec{k} , colidir com esse potencial (fruto da nuvem verde!), sair pelo ângulo sólido $d\Omega$, e ser coletada com momento \vec{k}' , com direção (θ, ϕ) , supondo $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$.

Esta aula se encontra no site: <http://sites.ifi.unicamp.br/maplima/>



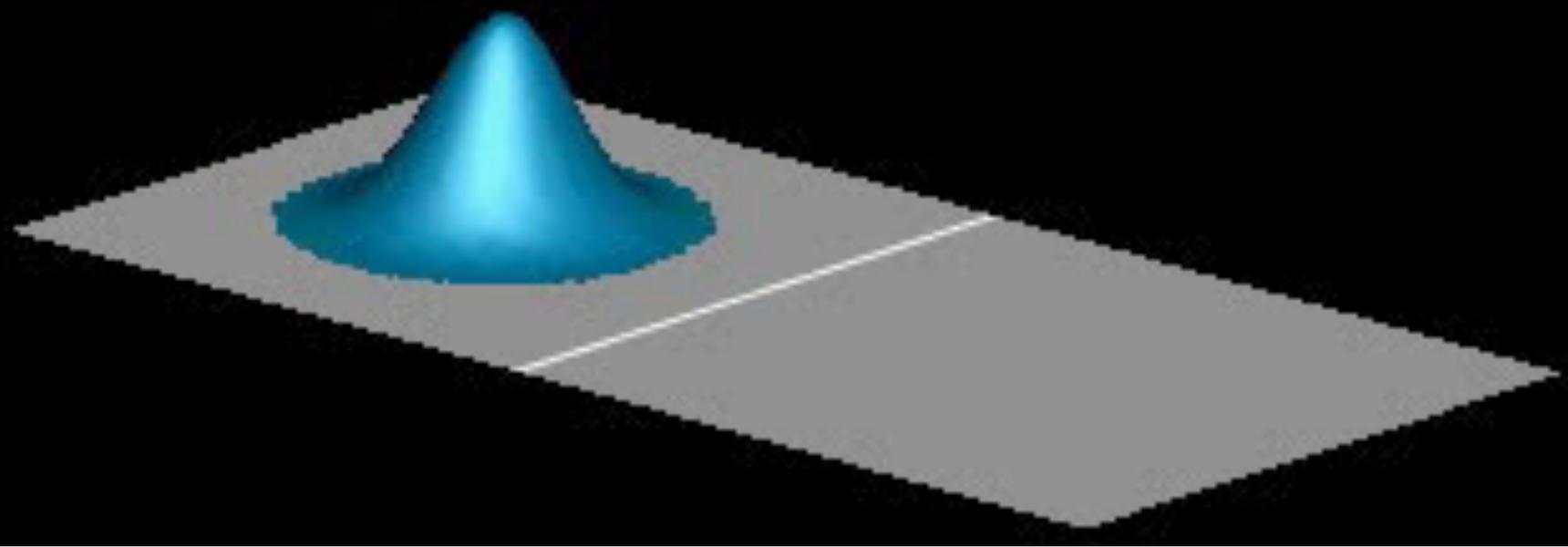
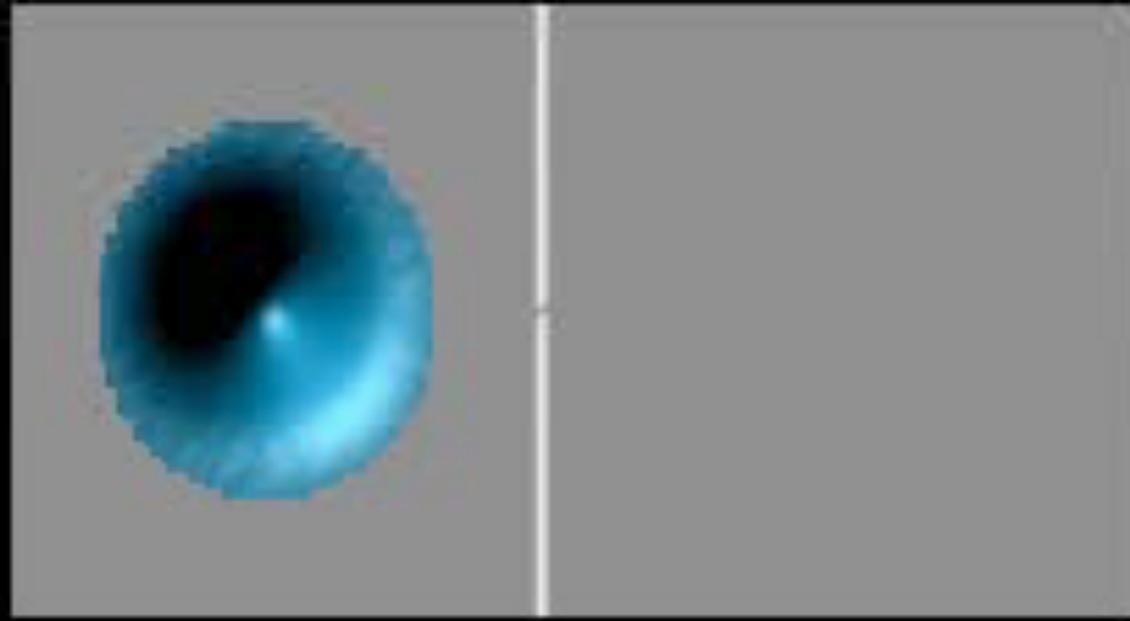
Partícula livre

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



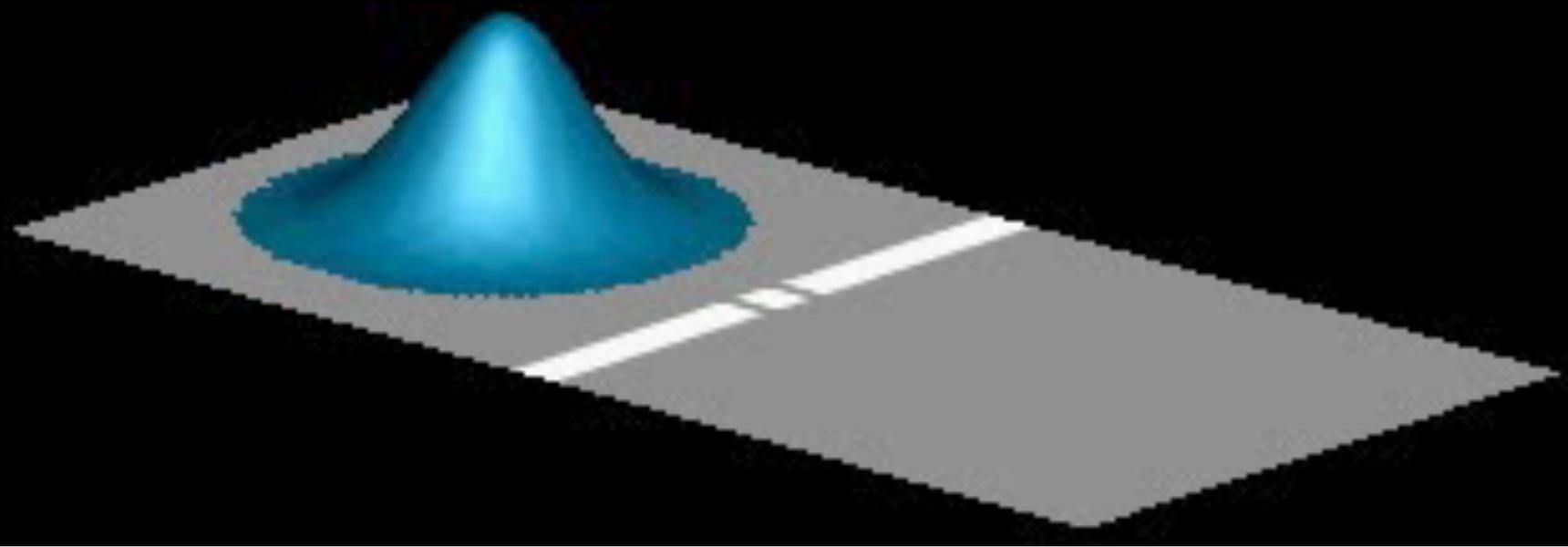
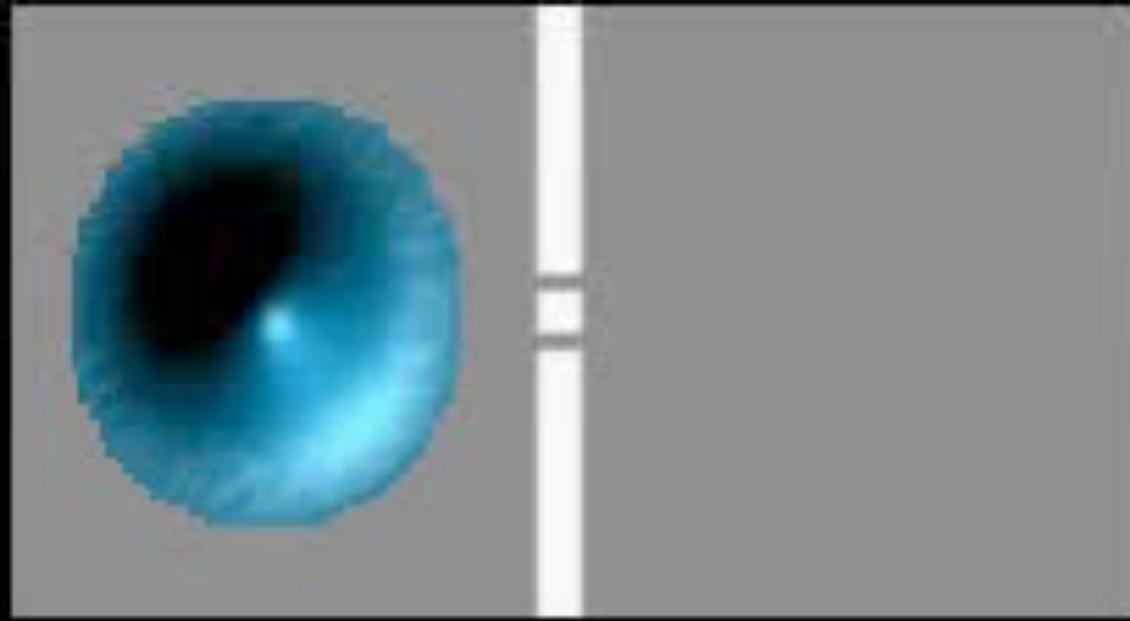
Efeito Túnel

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



Difração: uma fenda

Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>



Interferência – duas fendas

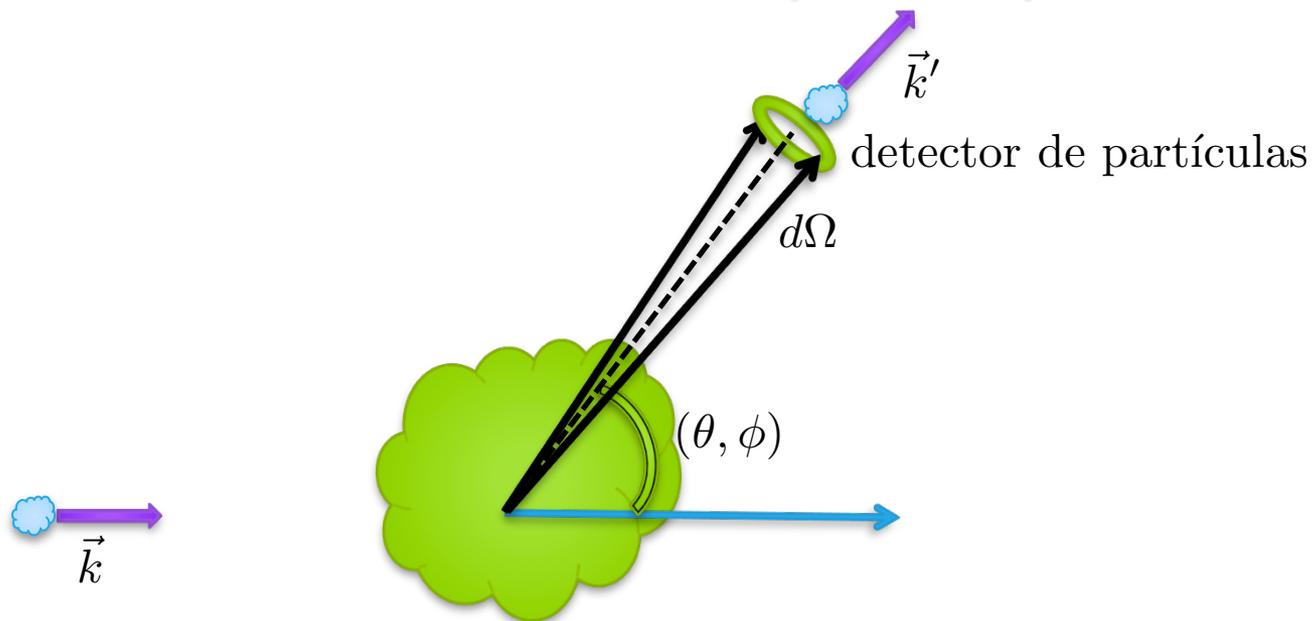
Para ver as animações, visite: <http://www.embd.be/quantummechanics/>

Espalhamento por um Potencial

Simplificações:

- Partículas sem spin;
- Partículas sem estrutura interna \rightarrow Trataremos só espalhamento elástico;
- Alvo ralo \rightarrow Só uma colisão (a partícula 1 não sofre múltiplas colisões). Isso permite trocar o alvo por um potencial;
- Feixe incidente ralo. Nenhuma interferência entre partículas incidentes e entre partículas espalhadas. Isso permite fazer o tratamento teórico de uma partícula incidente contra um potencial espalhador e obter resultados comparáveis com experimentos.
- Potenciais entre a partícula 1 e 2 do tipo $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rightarrow$ Isso permite usar o referencial do centro de massa e ter um potencial do tipo $V(\vec{r})$. Neste caso a massa μ da “partícula relativa” está relacionada com m_1 e m_2 pela fórmula (F689 - semestre passado) $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$

Definição da Seção de Choque de Espalhamento



$$dn \equiv \frac{\text{número de partículas detectadas}}{\text{unidade de tempo}} \propto \begin{cases} \text{fluxo de partículas incidentes } F_i \\ \text{ângulo sólido } d\Omega \end{cases}$$

A constante de proporcionalidade é a chamada seção de choque diferencial:

$$dn = \sigma(\theta, \varphi) F_i d\Omega$$

Diagram illustrating the components of the differential cross-section equation:

- $\frac{\# \text{ partículas}}{\text{tempo}}$ (number of particles per time) is proportional to F_i .
- $\frac{\# \text{ partículas}}{\text{tempo} \times \text{área}}$ (number of particles per time and area) is proportional to $\sigma(\theta, \varphi)$.
- ângulo sólido (solid angle) is proportional to $d\Omega$.

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega \text{ é a seção de choque integral}$$

Espalhamento por um Potencial

Comentários:

- Tipicamente, medimos seções de choque em barn = 10^{-24}cm^2 (caso nuclear) ou $\text{Å}^2 = 10^{-16}\text{cm}^2$ (caso atômico ou molecular).
- Experimentalmente, as seções de choque $\sigma(\theta, \phi)$ de processos inelásticos têm definições semelhantes. Basta (longe de ser simples) coletar partículas com energias inferiores que a da energia da entrada e saber a razão da perda de energia (normalmente devido à estrutura da partícula 2). Sob ponto de vista teórico, o processo inelástico não pode ser feito com auxílio de um potencial simples.

Organização deste capítulo:

- Estudaremos potenciais arbitrários que decrescem mais rapidamente que $1/r$ assintoticamente.
- Estado estacionário de espalhamento, amplitude de espalhamento;
- Comportamento assintótico e seções de choque;
- Equações integrais, funções de Green;
- Métodos aproximativos;
- Métodos de ondas parciais, deslocamento de fase (δ_ℓ) e seções de choque em termos dos δ_ℓ .

Estados Estacionários de Espalhamento

- Como fazer a evolução temporal de pacote de ondas que pode ser espalhado por um potencial de curto alcance? Sabemos que a Hamiltoniana do sistema é dada por:

$$H = H_0 + V, \text{ onde } \begin{cases} H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \rightarrow \text{é a Hamiltoniana da partícula livre} \\ V \rightarrow \text{é o potencial espalhador.} \end{cases}$$

Conhecemos as soluções na ausência de V

$$H_0|\phi_{\vec{k}}\rangle = E|\phi_{\vec{k}}\rangle \begin{cases} |\phi_{\vec{k}}\rangle = |\vec{k}\rangle \rightarrow \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}} \text{ e } \langle \vec{k}'' | \vec{k}' \rangle = \delta(\vec{k}'' - \vec{k}') \\ E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow \text{note degenerescência infinita} \end{cases}$$

Quando $V \neq 0$, queremos a solução de $(H_0 + V)|\Psi_{\vec{k}}\rangle = \underbrace{E}_{\text{mesma energia}} |\Psi_{\vec{k}}\rangle$

mesma energia

- Se tivéssemos resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo, esperaríamos que a solução para $t \rightarrow -\infty$ fosse um pacote feito com uma mistura contínua de $|\phi_{\vec{k}}\rangle$. Isso, por si só, indica que $|\Psi_{\vec{k}}\rangle$ e $|\phi_{\vec{k}}\rangle$ devem estar correlacionados. Veremos que $\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \text{algo}(\vec{r})$. Esse *algo* não deve ser importante para $t \rightarrow -\infty$, mas será importante para $t \rightarrow +\infty$.

Estados Estacionários de Espalhamento

- A evolução temporal do pacote pode ser obtida, se ele for expresso como uma superposição de estados estacionários. Lembra?

$$\psi(\vec{r}, 0) = \sum_n a_n \varphi_n(\vec{r}) \quad \longrightarrow \quad \psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \varphi_n(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}, 0) = \int d^3 k g(k) e^{ikz} \quad \longrightarrow \quad \psi(\vec{r}, t) = \int d^3 k g(k) e^{-i \frac{E_k}{\hbar} t} e^{ikz}$$

- A ideia é jogar esse pacote no centro espalhador. Lembre que quando tomamos $g(k)$ centrada em k_0 e impomos a condição estacionária, com $g(k) = |g(k)| e^{i\alpha(k)}$,

$$\text{temos: } \frac{d}{dk} (\alpha(k) + kz - \frac{E_k}{\hbar} t) \Big|_{k=k_0} = 0 \rightarrow z = z_0 + \frac{d}{dk} \frac{\hbar k^2}{2\mu} t \Big|_{k=k_0} \rightarrow z = z_0 + \frac{\hbar k_0}{\mu} t$$

Ou seja, o centro do pacote anda com a velocidade clássica $\frac{\hbar k_0}{\mu}$.

- Mas esse é o pacote de ondas livres. Como construí-lo na presença do potencial?

$$\text{Que tal começar de novo } \begin{cases} [-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r})] \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{-i \frac{E_k}{\hbar} t} \end{cases}$$

$$\text{e construir } \psi(\vec{r}, 0) = \int d^3 k g(\vec{k}) \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad \longrightarrow \quad \psi(\vec{r}, t) = \int d^3 k g(\vec{k}) e^{-i \frac{E_k}{\hbar} t} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

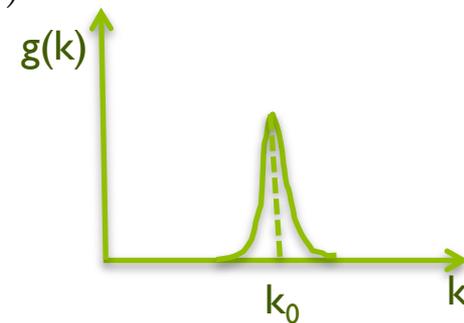
- Considerando que V é de curto alcance, como seria $\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$?

Espalhamento de um pacote de ondas

- Sem provar, tomaremos $\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi_{\vec{k}}(\mathbf{r}) = e^{ikz} + f_k(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$, com $\vec{k} = k\hat{z}$.

Nestas condições $\psi(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty dk g(k) \varphi_{\vec{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$, poderá ser escrito, considerando $g(k)$ real, unidimensional, com um pico em $k = k_0$ e sendo zero para k longe de k_0 , da seguinte forma (para $r \rightarrow \infty$):

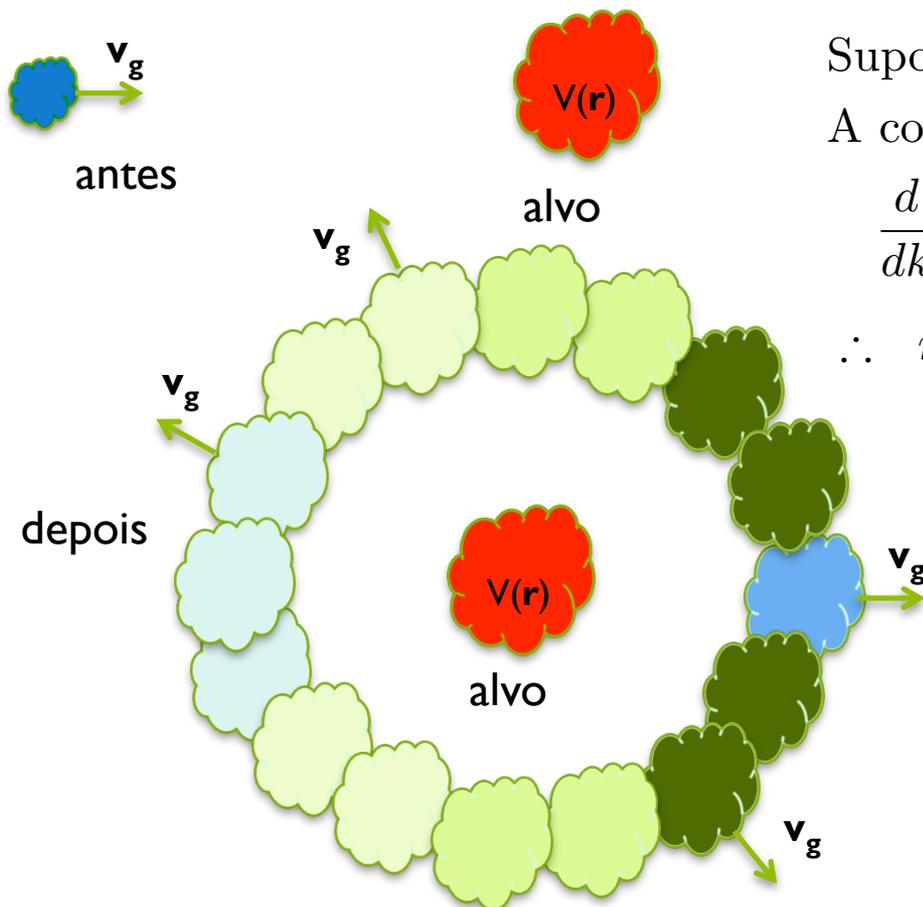
$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty dk g(k) \underbrace{\left(e^{ikz} + f_k(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right)}_{\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi_{k\hat{z}}(\mathbf{r})} e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$$



- Pensando que $g(k)$ está centrado em k_0 , já vimos (condição estacionária) que integral em k , envolvendo a onda livre e^{ikz} , só existe ao redor de um ponto (centro do pacote) que realiza a trajetória clássica, com $v_G = \frac{\hbar k_0}{\mu}$.
- Antes de olhar a onda esférica, mostraremos que $f_k(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r}$ é solução da equação de Schrödinger para $r \rightarrow$ grande. Para isso basta aplicar ~ 0 cai com $1/r^3$

$$(\nabla^2 + k^2) f_k(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} = f_k(\theta, \phi) \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \frac{e^{ikr}}{r} + k^2 \frac{e^{ikr}}{r} \right] - \frac{e^{ikr}}{r^3} \frac{L^2}{\hbar^2} f_k(\theta, \phi) = 0$$

Espalhamento de um pacote de ondas



Suponha $f_k(\theta, \varphi) = e^{-i\alpha_k} |f_k(\theta, \varphi)|$
 A condição estacionária é dada por:

$$\frac{d}{dk} \left(kr - \alpha_k - \frac{E_k}{\hbar} t \right) \Big|_{k=k_0} = 0$$

$$\therefore r = \frac{d\alpha_k}{dk} \Big|_{k=k_0} + \frac{\hbar k_0}{m} t$$

região de interferência do
 pacote de ondas planas com
 pacote de ondas esféricas

A onda espalhada não é esféricamente simétrica. Ela é modulada por $f(\theta, \varphi)$.

Só que r é sempre positivo. Assim p/ $\begin{cases} t \rightarrow -\infty \nexists \text{ condição estacionária.} \\ t \rightarrow +\infty \exists \text{ condição estacionária.} \end{cases}$

O “centro” do pacote espalhado tb viaja com velocidade $v_G = \frac{\hbar k_0}{m}$.

Cálculo da Seção de Choque usando Correntes de Probabilidades

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 (F689) que $\mathbf{J} = \frac{1}{m} \text{Re}[\Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi]$. Para obter $\begin{cases} J_i \text{ use } \Psi = e^{ikz} \\ J_f \text{ use } \Psi = f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \end{cases}$

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 ∇ 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 $\begin{cases} (J_f)_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f_k(\theta, \varphi)|^2; \\ (J_f)_\theta = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r^3} \text{Re} [\frac{1}{i} f_k^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} f_k(\theta, \varphi)]; \\ (J_f)_\varphi = \frac{\hbar}{m} \frac{1}{r^3 \sin \theta} \text{Re} [\frac{1}{i} f_k^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} f_k(\theta, \varphi)]. \end{cases}$

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

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

Partícula chega na direção \mathbf{z} e sai na direção (θ, φ) .