Teoria de Espalhamento

Para estudar o problema de espalhamento de uma partícula por um potencial, obteremos a forma integral da Equação de Schrödinger, conhecida por Equação de Lippmann-Schwinger. Para tanto, comece definindo:

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

Conhecemos as soluções na ausência de V

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

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

Usaremos uma estratégia (que utilizaremos em teoria de perturbação) de inverter $(E - H_0)$ e obter uma equação para $|\Psi\rangle$ que tenha a condição de contorno embutida nela. Para tanto, primeiro escrevemos:

$(E - H_0)|\Psi\rangle = V|\Psi\rangle$ que quando invertida fornece $|\Psi\rangle = \dfrac{1}{E - H_0}V|\Psi\rangle$

Falta algo, pois se $V = 0 \Rightarrow |\Psi\rangle = 0$. *O que vc esperaria?*

Teoria de Espalhamento

Antes de inverter, precisamos "somar" a solução da partícula livre em $|\Psi\rangle$, isto é $(E - H_0)(|\Psi\rangle - |\phi\rangle) = V|\Psi\rangle$. Isso vale, pois $|\phi\rangle$ é solução de $(E - H_0)|\phi\rangle = 0$. Com isso, a inversão fornece $|\Psi\rangle = |\phi\rangle + \dfrac{1}{E - H_0} V|\Psi\rangle$.

Agora, quando $V = 0$, temos $|\Psi\rangle = |\phi\rangle$ e isso pode ser entendido como uma condição de contorno do problema: na ausência de V a partícula é livre e é descrita por uma onda plana com momento linear $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$.

Ainda temos um problema: como a energia E é a mesma, com e sem potencial, temos um infinito devido ao zero no denominador. Para ser removido, é preciso utilizar uma estratégia semelhante a que usaremos em teoria de perturbação dependente do tempo (soma-se $\pm i\epsilon$, com ϵ real, ao denominador). Feito isso, a equação de Lippmann-Schwinger fica:

$$\boxed{|\Psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V|\Psi\rangle}$$

Veremos, em seguida, que a presença de $\pm i\epsilon$, além de remover o infinito, permitirá definir as condições assimptóticas adequadas do problema de espalhamento.

Teoria de Espalhamento

Na representação das coordenadas a equação de Lippmann-Schwinger fica:

$$\langle \mathbf{r}|\Psi\rangle = \langle \mathbf{r}|\phi\rangle + \int d^3r' \langle \mathbf{r}|\frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|V|\Psi\rangle, \text{onde } \langle \mathbf{r}'|\mathbf{k}'\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}.$$

Poderíamos usar a normalização da caixa (aresta L) e definir $\langle \mathbf{r}'|\mathbf{k}'\rangle = \dfrac{e^{i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'}}{L^{3/2}}$

Nossa tarefa nesta aula é obter $G_\pm(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \dfrac{\hbar^2}{2m}\langle \mathbf{r}|\dfrac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}|\mathbf{r}'\rangle$, que pode ser re-escrito com auxílio do operador unidade, como:

$$G_\pm(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3k' \int d^3k'' \langle \mathbf{r}|\mathbf{k}'\rangle\langle \mathbf{k}'|\frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}|\mathbf{k}''\rangle\langle \mathbf{k}''|\mathbf{r}'\rangle.$$ Usando que

$$\langle \mathbf{k}'|\frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon}|\mathbf{k}''\rangle = \frac{1}{E - \frac{\hbar^2\mathbf{k}'^2}{2m} \pm i\epsilon}\langle \mathbf{k}'|\mathbf{k}''\rangle = \frac{\delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'')}{E - \frac{\hbar^2\mathbf{k}'^2}{2m} \pm i\epsilon},$$ escrevemos:

$$G_\pm(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{\hbar^2}{2m}\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}\frac{e^{i\mathbf{k}'.(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{E - \frac{\hbar^2\mathbf{k}'^2}{2m} \pm i\epsilon}.$$ Se usarmos $E = \dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ e $\mathbf{k}' \equiv \mathbf{q}$, temos:

$$G_\pm(\mathbf{x},\mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q \frac{e^{i\mathbf{q}.(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon}$$ onde ϵ foi redefinido. Para fazer esta integral, escolhemos $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ na direção $\hat{\mathbf{z}}$ e tomamos $d^3q = q^2 \sin\theta d\theta d\varphi dq$.

Teoria de Espalhamento

E assim: $G_\pm(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty dq\, q^2 \underbrace{\int_0^{2\pi} d\varphi}_{2\pi} \underbrace{\int_0^\pi d\theta \sin\theta}_{\int_1^{-1} -d(\cos\theta) \to \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)} \frac{e^{i|\mathbf{q}||(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\cos\theta}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon}$

$$G_\pm(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi^2}\int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2-q^2\pm i\epsilon}\int_{-1}^{1} d\zeta e^{iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\zeta}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}\int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2-q^2\pm i\epsilon}\, \frac{e^{iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\zeta}}{iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\Big|_{-1}^{+1}$$

$$= \frac{1}{4\pi^2}\frac{1}{i|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\int_0^\infty dq \underbrace{\frac{q}{k^2-q^2\pm i\epsilon}}_{\text{ímpar em } q} \underbrace{\left(e^{iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|} - e^{-iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\right)}_{\text{ímpar em } q}$$

O integrando é par em q, pois: *ímpar em q* e *ímpar em q*

e assim podemos trocar a $\int_0^\infty$ por $\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}$ e com isso obter:

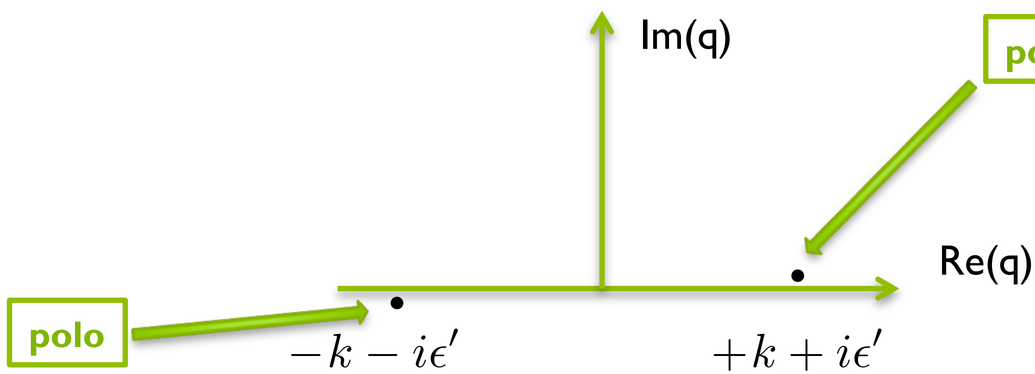
$$G_\pm(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{i|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\int_{-\infty}^{+\infty} dq \underbrace{\frac{q}{q^2-k^2\mp i\epsilon}}_{\text{mudei de ordem}} \left(e^{+iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|} - e^{-iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\right)$$

Estamos prontos para integração no plano complexo. Note os polos.

Teoria de Espalhamento

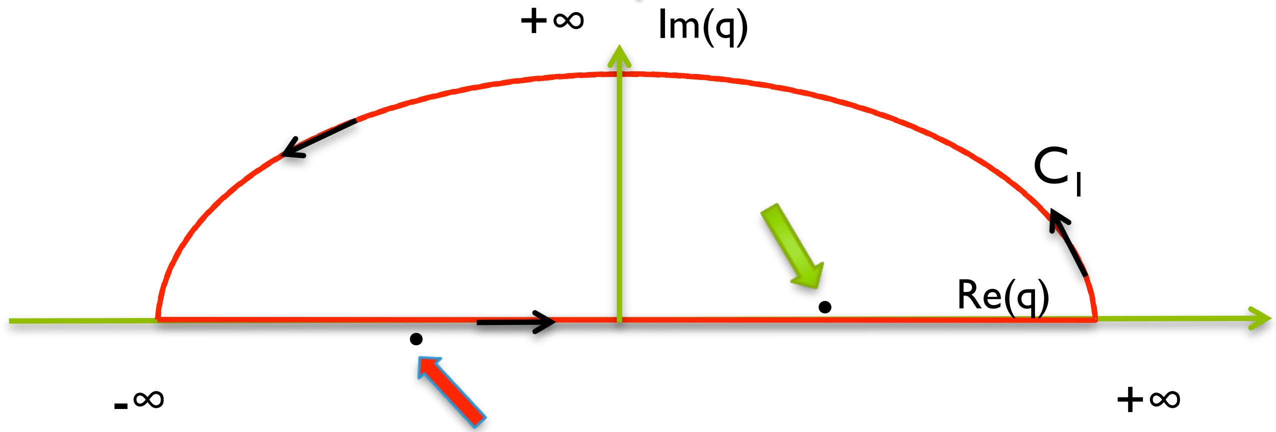
Os polos do integrando são definidos por $q^2 - k^2 \mp i\epsilon = 0 \Rightarrow q^2 = k^2 \pm i\epsilon$ ou melhor $q = \pm\sqrt{k^2 \pm i\epsilon} = \pm k\sqrt{1 \pm i\dfrac{\epsilon}{k^2}} = \pm(k \pm i\epsilon')$. Onde $\epsilon' = \dfrac{\epsilon}{2k^2}$. Note que o $+i\epsilon$ original corresponde à $\begin{cases} +k + i\epsilon' \\ -k - i\epsilon' \end{cases}$ e o $-i\epsilon$ à $\begin{cases} +k - i\epsilon' \\ -k + i\epsilon' \end{cases}$

Os pontos negros na figura abaixo representam os polos no caso $+i\epsilon$



A integral $e^{+iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|} = e^{+iRe(q)|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}.e^{-Im(q)|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}$ deve ser fechada por cima, pois a exponencial com $Im(q)$ garante contribuição zero e isso permite fechar o circuito e obter a mesma integral que antes. Argumento semelhante sugere que $e^{-iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|} = e^{-iRe(q)|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}.e^{+Im(q)|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}$ deve ser fechada por baixo. $\dfrac{q}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon}$ fornece integrando zero para $Re(q) = \pm\infty$.

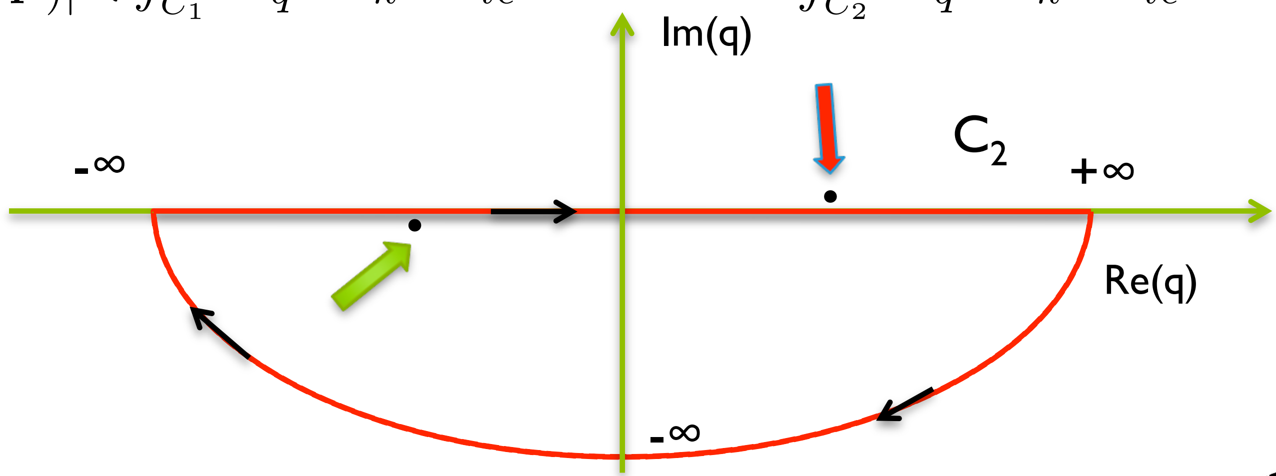
Teoria de Espalhamento



$$\underbrace{\textit{o sinal} +}\ \textit{é para lembrar que estamos analisando o caso } +i\epsilon \textit{ original.}$$

$$G_+(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{-1}{8\pi^2}\frac{1}{i|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\int_{-\infty}^{+\infty} dq\frac{q}{q^2-k^2-i\epsilon}\left(e^{+iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}-e^{-iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\right) =$$

$$\frac{-1}{8\pi^2}\frac{1}{i|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\left(\oint_{C_1} dq\frac{q}{q^2-k^2-i\epsilon}e^{+iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}-\oint_{C_2} dq\frac{q}{q^2-k^2-i\epsilon}e^{-iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\right)$$



Teoria de Espalhamento

Para aplicar o Teorema de Cauchy (cálculo IV): $\oint \frac{f(z)}{z - z_i} dz = 2\pi i f(z_i)$,

onde z_i é um polo no plano complexo e a integração fechada (que circula z_i) corre no sentido anti-horário do circuito, precisamos fazer uma modificação na expressão de G.

Usaremos que $\frac{1}{q^2 - k^2} = \frac{1}{(q-k)(q+k)} = (\frac{1}{q-k} + \frac{1}{q+k})\frac{1}{2q}$ para escrever

$$G_+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|} \oint_{C_1} dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{+iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|} +$$

$$+ \frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|} \oint_{C_2} dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{-iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|} =$$

$$= -\frac{1}{16\pi^2} \frac{1}{i|(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|} \Big(\underbrace{\oint_{C_1} dq \frac{e^{+iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{q-k}}_{contribui} + \underbrace{\oint_{C_1} dq \frac{e^{+iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{q+k}}_{não\ contribui} \Big) +$$

$$+ \frac{1}{16\pi^2} \frac{1}{i|(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|} \Big(\underbrace{\oint_{C_2} dq \frac{e^{-iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{q-k}}_{não\ contribui} + \underbrace{\oint_{C_2} dq \frac{e^{-iq|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{q+k}}_{contribui} \Big)$$

Teoria de Espalhamento

Assim, G (uma função de Green) para o caso $+i\epsilon$ (original) fica:

$$G_+(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{+ik|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}$$

Se repetíssemos todo o procedimento para $-i\epsilon$, obteríamos

$$\underbrace{G_-}_{}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ik|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}$$

o $-$ é para lembrar que é o caso $-i\epsilon$.

Assim, a equação de Lippman-Schwinger pode ser escrita por:

$$\langle\mathbf{r}|\Psi^{(\pm)}\rangle = \langle\mathbf{r}|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3r'\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}\langle\mathbf{r}'|V|\Psi^{(\pm)}\rangle$$

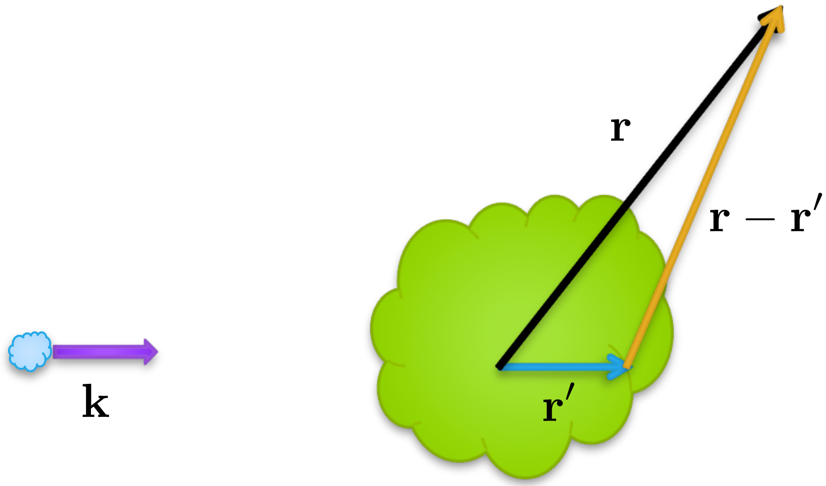
Se $\langle\mathbf{r}'|V|\mathbf{r}''\rangle = V(\mathbf{r}')\delta^{(3)}(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')$ (potencial local), temos:

$$\boxed{\langle\mathbf{r}|\Psi^{(\pm)}\rangle = \langle\mathbf{r}|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3r'\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}V(\mathbf{r}')\langle\mathbf{r}'|\Psi^{(\pm)}\rangle}$$

Será que esta equação fornece a condição assimptótica adequada?

Amplitude de Espalhamento

Suponha um observador longe do alvo. Como é a função de onda lá, em $\mathbf{r}$?



a região verde é a região onde $V(\mathbf{r}') \neq 0$. Note que a equação de Lippman-Schwinger $\langle \mathbf{r}|\Psi^{(\pm)}\rangle = \langle \mathbf{r}|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3r' \frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}}{|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|}V(\mathbf{r}')\langle \mathbf{r}'|\Psi^{(\pm)}\rangle$

nos ensina que só esta região interessa na integração. Se o observador estiver longe o suficiente, temos $|\mathbf{r}| >> |\mathbf{r}'|$ e podemos expandir $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ da seguinte forma $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \sqrt{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2} = \sqrt{\mathbf{r}^2 - 2\mathbf{r}.\mathbf{r}' + \mathbf{r}'^2} = r\sqrt{1 - 2\hat{\mathbf{r}}.(\frac{\mathbf{r}'}{r}) + (\frac{r'}{r})^2}$

$\approx r\left(1 - \hat{\mathbf{r}}.(\frac{\mathbf{r}'}{r})\right)$. Usaremos $\begin{cases} e^{\pm ik|(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|} \approx e^{\pm ikr}e^{\mp ik\hat{\mathbf{r}}.\mathbf{r}'} \\ \\ |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r \text{ (no denominador)} \end{cases}$

Aponta na direção do observador

Amplitude de Espalhamento

Definindo $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}}$ a equação de Lippman-Schwinger fica (caso +)

$$\langle \mathbf{r}|\Psi^{(+)}\rangle \overset{r\to\infty}{\Longrightarrow} \langle \mathbf{r}|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{+ikr}}{4\pi r}(2\pi)^{3/2}\int d^3r' \frac{e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{r}')\langle \mathbf{r}'|\Psi^{(+)}\rangle$$

$$= \frac{e^{+i\mathbf{k}.\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{+ikr}}{4\pi r}(2\pi)^{3/2}\int d^3r' \frac{e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{r}')\langle \mathbf{r}'|\Psi^{(+)}\rangle =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left(e^{+i\mathbf{k}.\mathbf{r}} - \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{+ikr}}{4\pi r}(2\pi)^{3}\int d^3r' \frac{e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{r}')\langle \mathbf{r}'|\Psi^{(+)}\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left(e^{+i\mathbf{k}.\mathbf{r}} + \frac{e^{+ikr}}{r}\left(-\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\int d^3r' \frac{e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{r}')\langle \mathbf{r}'|\Psi^{(+)}\rangle\right)\right)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left(e^{+i\mathbf{k}.\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}',\mathbf{k})\frac{e^{+ikr}}{r}\right) \quad \text{com}$$

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) \equiv -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\int d^3r' \frac{e^{-i\mathbf{k}'.\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\mathbf{r}')\langle \mathbf{r}'|\Psi^{(+)}\rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\langle \mathbf{k}'|V\underbrace{|\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}}\rangle}$$

mudança de notação para lembrar que a partícula chega com momento $\hbar\mathbf{k}$.

Note que $\langle \mathbf{k}'|$ é o bra do ket $|\mathbf{k}'\rangle = |\phi_{\mathbf{k}'}\rangle$ (onda plana na direção $\mathbf{k}'$, que "leva" a partícula até o observador). A matemática nos trouxe até aqui.

saí com **k'** chega com **k**

E já aprendemos o significado físico de $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$?

Outras formas de escrever a Amplitude de Espalhamento

Antes é importante notar que a amplitude de espalhamento pode ser escrita de outras formas. Para ver isso, considere a equação de Lippmann-Schwinger na sua forma geral

$$|\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + G^{(\pm)}V|\Psi_{\mathbf{k}}^{(\pm)}\rangle$$

Multiplique a equação para $|\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}\rangle$ por V e tome o adjunto Hermiteano

$$\left(V|\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}\rangle\right)^{\dagger} = \left(V|\mathbf{k}\rangle + VG^{(-)}V|\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}\rangle\right)^{\dagger}$$

$$\langle\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}|V = \langle\mathbf{k}|V + \langle\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}|VG^{(+)}V$$

$$\langle\mathbf{k}|V = \langle\Psi_{\mathbf{k}}^{(-)}|\left(V - VG^{(+)}V\right)$$

Isto permite re-escrever a amplitude

$$\boxed{f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\langle\mathbf{k}'|V|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\langle\Psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}|\left(V - VG^{(+)}V\right)|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle}$$

Mas $\left(V - VG^{(+)}V\right)|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = V|\mathbf{k}\rangle \;\therefore\; \boxed{f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\langle\Psi_{\mathbf{k}'}^{(-)}|V|\mathbf{k}\rangle}$

Amplitude de Espalhamento

Algumas observações importantes:

- Se $V=0 \Longrightarrow f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\dfrac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\langle \mathbf{k}'|V|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = 0$. Dependendo do ângulo que você olha (um observador distante), f pode dar um resultado diferente. Trata-se da amplitude de probabilidade da partícula entrar na direção $\mathbf{k}$ e, devido ao potencial, sair na direção $\mathbf{k}'$, com $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$.

Vimos que!

- A solução assimptótica $\langle \mathbf{r}|\Psi^{(+)}\rangle \overset{r\to\infty}{\Longrightarrow} \dfrac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left(e^{+i\mathbf{k}.\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}',\mathbf{k})\dfrac{e^{+ikr}}{r}\right)$ é solução da equação de Schrödinger na região onde a partícula é livre, $V(\mathbf{r}')=0$.
- A onda livre deve estar associada a tempos "infinitamente" negativos (antes da colisão) e "infinitamente" positivos (depois da colisão). A onda esférica só para tempos "infinitamente" positivos (depois da colisão).

- *Os próximos passos*
  - Obter $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ por métodos perturbativos;
  - Obter $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ para potenciais esfericamente simétricos, pelo chamado método de ondas parciais.

Série de Born

Nossa intenção agora é calcular $f(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ e, consequentemente, as seções de choque. Em princípio, basta achar $|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle$ e calcular $\langle\mathbf{k}'|V|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle$. Uma forma de fazer isso é resolver a equação de Lippmann-Schwinger

$|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \dfrac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle$ iterativamente, isto é

$$\boxed{|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V|\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V|\mathbf{k}\rangle + \ldots}$$

Outra forma é via matriz T, obtida pela equação de Lippmann-Schwinger multiplicada por V, isto é $V|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = V|\mathbf{k}\rangle + V\dfrac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle$ e trocando $V|\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle$ por $T|\mathbf{k}\rangle \Rightarrow T|\mathbf{k}\rangle = V|\mathbf{k}\rangle + V\dfrac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} T|\mathbf{k}\rangle$

Considere $|\mathbf{k}\rangle$ arbitrário $\rightarrow T = V + V\dfrac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} T$ que iterando fica

$$\boxed{T = V + V\frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V + V\frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V \frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\epsilon} V + \ldots}$$

As duas expressões das caixas tem hierarquia em $\mathcal{O}(V^n)$.

A série de Born é obtida com qualquer uma delas inserida em

$$f(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\langle\mathbf{k}'|V|\Psi_{\mathbf{k}}^{(+)}\rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\langle\mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle.$$

A aproximação de Born ou 1°. termo da série

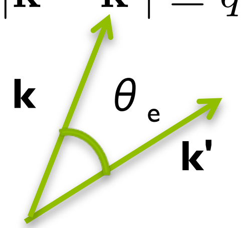
Se o espalhamento é fraco $|\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}}\rangle \approx |\mathbf{k}\rangle \rightarrow \langle \mathbf{r}'|\Psi^{(+)}_{\mathbf{k}}\rangle \approx \langle \mathbf{r}'|\mathbf{k}\rangle = \dfrac{e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}$

Nestas condições, obtemos a amplitude de Born em 1a. ordem:

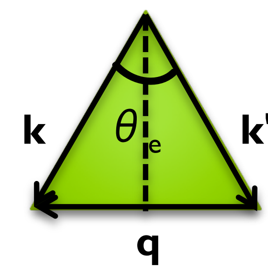
$$f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\langle \mathbf{k}'|V|\mathbf{k}\rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3r' V(\mathbf{r}')e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}').\mathbf{r}'}}_{\substack{\textit{Transformada de Fourier do potencial}\\ \textit{calculada em } \mathbf{q}=\mathbf{k}-\mathbf{k}'}}$$

Se o potencial for esfericamente simétrico, fica mais simples calcular a integral em coordenadas esféricas. Antes, escolha θ_e ângulo de espalhamento da seguinte forma:

$$|\mathbf{k}-\mathbf{k}'| \equiv q = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2\mathbf{k}.\mathbf{k}'} = \underbrace{k\sqrt{2(1-\cos\theta_e)}}$$



$k = k'$ (colisão elástica)



Lembrando da relação trigonométrica $\cos 2\theta_e = \cos^2\theta_e - \sin^2\theta_e = 1 - 2\sin^2\theta_e$

$$\therefore \cos\theta_e = 1 - 2\sin^2\theta_e/2 \rightarrow q = k\sqrt{2(1-1+2\sin^2\theta_e/2)} = 2k\sin\theta_e/2$$

Perceba no triângulo isósceles que $\sin\theta_e/2 = \dfrac{q/2}{k}$

A aproximação de Born ou 1°. Termo da série

Com $\mathbf{q}$ na direção $\hat{\mathbf{z}}$, temos: $f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3r' V(\mathbf{r}')e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}').\mathbf{r}'} =$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int\int\int \sin\theta d\theta d\varphi r^2 e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} V(r) =$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int\int\int \sin\theta d\theta d\varphi r^2 e^{iqr\cos\theta} V(r) =$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\ r^2 V(r)\ 2\pi\ \int_0^\pi \sin\theta e^{iqr\cos\theta} d\theta =$$

$$= -\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\ r^2 V(r)\frac{e^{iqr\chi}}{iqr}\Big|_{-1}^{+1} =$$

$$= -\frac{2m}{q\hbar^2}\int_0^\infty dr\ rV(r)\frac{e^{iqr}-e^{-iqr}}{2i} = -\frac{2m}{q\hbar^2}\int_0^\infty dr\ rV(r)\sin(qr)$$

Exemplo 1: $V(r) = \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r}$ potencial de Yukawa

$\frac{1}{\mu}$ pode ser visto como alcance do potencial, pois quando $r >> \frac{1}{\mu} \Rightarrow V(r) \rightarrow 0$

Usaremos que $\sin qr = \mathrm{Im}\ e^{iqr}$ *para facilitar a realização da integral, ou seja*

$$f^{(1)}(\mathbf{k}',\mathbf{k}) = -\frac{2m}{q\hbar^2}\int_0^\infty dr\ rV(r)\sin(qr) = -\frac{2m}{q\hbar^2}\int_0^\infty dr\ r\frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r}\mathrm{Im}\ e^{iqr}$$

1º. termo da série de Born: Potencial de Yukawa

Assim, $f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2}\text{Im}\int_0^\infty dr\ e^{(-\mu+iq)r} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2}\text{Im}\ \frac{e^{(-\mu+iq)r}}{-\mu+iq}\Big|_0^\infty =$

$$= -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2}\text{Im}\ \frac{1}{\mu - iq} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2}\text{Im}\ \frac{\mu+iq}{\mu^2+q^2} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2}\frac{q}{\mu^2+q^2}$$

Ou seja, $f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\frac{1}{\mu^2+q^2}$. Lembrando que $q = 2k\sin\theta_e/2$ a amplitude fica: $f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\frac{1}{\mu^2+4k^2\sin^2\theta_e/2}$ e isso fornece a seção de choque diferencial: $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\theta_e) = (\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2})^2\frac{1}{(\mu^2+4k^2\sin^2\theta_e/2)^2}$

Note que se tomarmos $\mu \to 0$, mantendo $\frac{V_0}{\mu}$ constante, digamos $\frac{V_0}{\mu} = -ZZ'e^2$ o potencial de Yukawa fica $\lim_{\mu\to 0,\ \frac{V_0}{\mu}=ZZ'e^2} V_0\frac{e^{-\mu r}}{\mu r} = -\frac{ZZ'e^2}{r}$ (esse é potencial Coulombiano de uma partícula de carga $Z'e$, sendo espalhada por uma com carga Ze). Com isso a seção de choque fica (com $E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$) :

$$\sigma(\theta_e) = \frac{1}{16}(\frac{ZZ'e^2}{E})^2\frac{1}{\sin^4\theta_e/2}\ \left\{\begin{array}{l}\textit{Este é resultado clássico do}\\ \textit{espalhamento de Rutherford.}\end{array}\right.$$