AULA 11

A Evolução do pacote

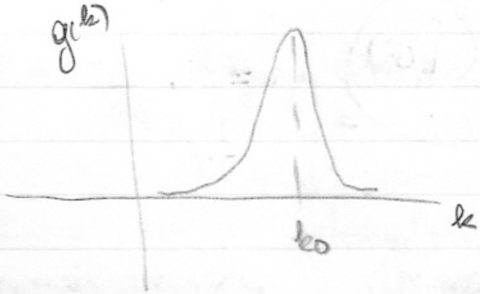
$$\psi(\vec{r},t) = \int_0^\infty dk\, g(k)\, \psi_k^{(+)}(\vec{r})\, e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$$

p/ simplificar $g(k)$ real, unidimensional e tem pico em $k=k_0$ e zero p/ k longe de k_0

p/ $r \to \infty$

$$\psi(\vec{r},t) = \int_0^\infty dk\, g(k) \underbrace{\left[e^{ikz} + f_k(\theta,\varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \right]}_{\lim_{r\to\infty} \psi_k^{(+)}(\vec{r})} e^{-i\frac{E_k t}{\hbar}}$$

onde que a integral contribui?



pacote de ondas livres

se $\left(kz - \frac{E_k t}{\hbar}\right)$ variar ao redor de k_0 $e^{i\left(kz - \frac{E_k t}{\hbar}\right)}$ vai oscilar muito e matar a integral. Para que isto não ocorra seja

$$\frac{d}{dk}\left(kz - \frac{E_k t}{\hbar}\right)\Big|_{k=k_0} = 0 \rightarrow z = \frac{1}{\hbar}\frac{dE_k}{dk}\Big|_{k=k_0} t =$$

constante

$$= \frac{1}{\hbar}\frac{d}{dk}\frac{\hbar^2 k^2}{2m} t = \frac{\hbar k}{m} t$$

ou seja $\boxed{z = v_G t = \frac{\hbar k}{m} t}$

interprete como
nas proximidades de z
o pacote vai existir
e z muda linearmente com t
∴ centro anda com velocidade $\frac{\hbar k}{m}$

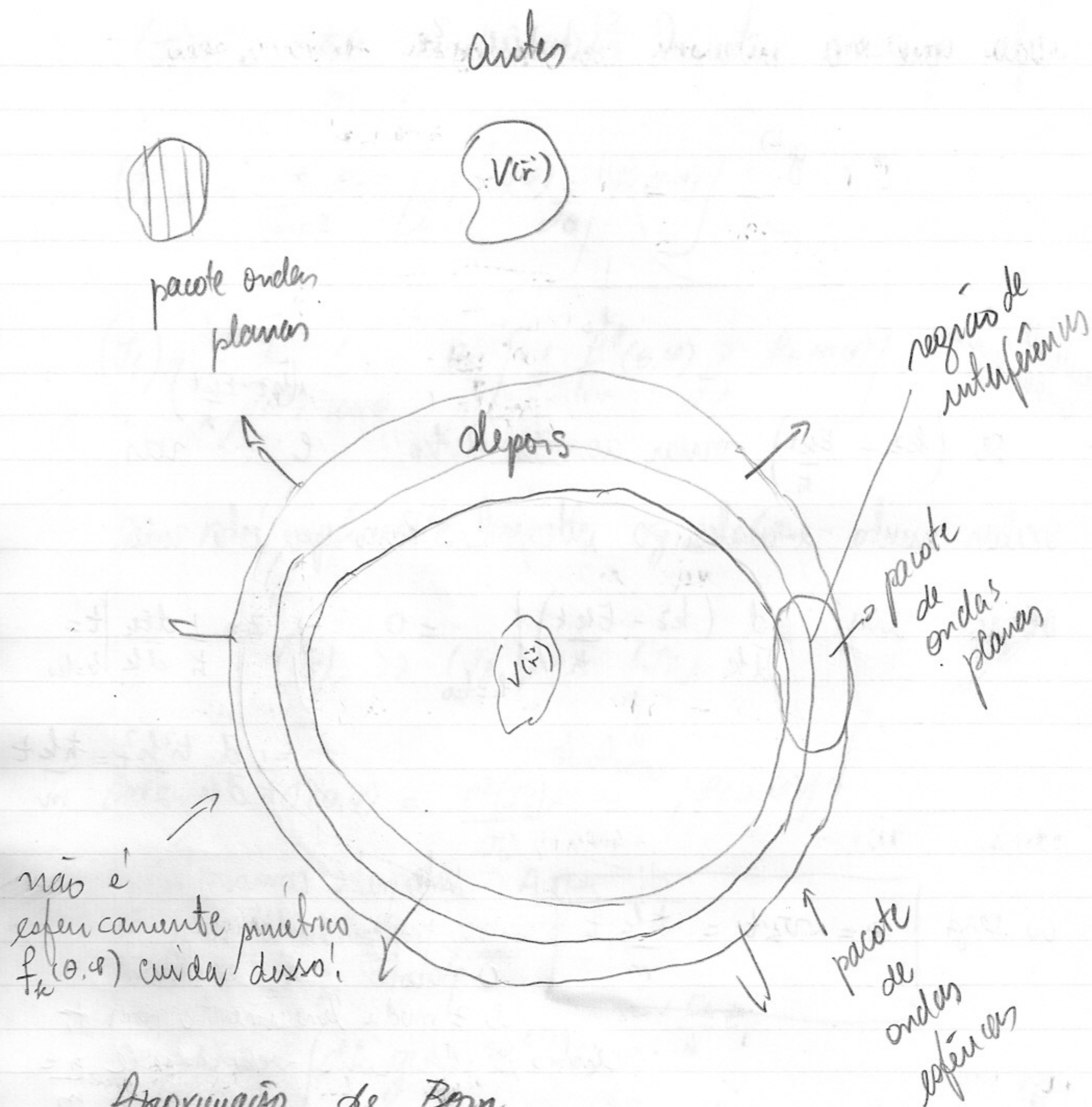
pacote de ondas espalhadas

suponha $f_k(\theta,\varphi) = e^{-i\alpha_k}\,|f_k(\theta,\varphi)|$ (todo numero complexo tem esta forma)

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

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

só que r é sempre positivo assim p/ $t \to -\infty$ $\nexists$ condição estacionária
$t \to +\infty$ $\exists$ condição estacionária



Aproximação de Born

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | V | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle$$

desconhecida

Se o espalhamento não é muito forte

$$\langle \vec{x}' | \psi^{(+)}_{\vec{k}} \rangle \to \langle \vec{x}' | \phi_{\vec{k}} \rangle = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'}}{(2\pi)^{3/2}}$$

nestas condições obtemos a amplitude de Born em 1ª ordem

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

transformada de Fourier
do potencial calculada
em $\vec{q} \equiv \vec{k}-\vec{k}'$

Se o potencial for esférico vale a pena calcular a integral em coordenadas esféricas. Antes escolha θ_e (ângulo de espalhamento)

$\vec{k}\ \theta_e\ \vec{k}'$ $\quad |\vec{k}-\vec{k}'| \equiv q = \sqrt{k^2+k'^2-2\vec{k}\cdot\vec{k}'} = k\sqrt{2(1-\cos\theta_e)}$

$k=k'$ (colisão elástica)

lembrando que (relação trigonométrica)

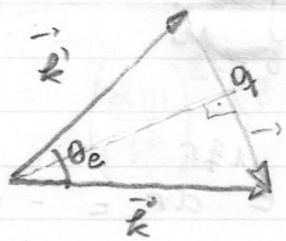
$\cos 2\theta_e = \cos^2\theta_e - \operatorname{sen}^2\theta_e = 1-2\operatorname{sen}^2\theta_e$

$\therefore \cos\theta_e = 1-2\operatorname{sen}^2\theta_e/2 \to q = k\sqrt{2(1-1+2\operatorname{sen}^2\theta_e/2)} = 2k\operatorname{sen}\theta_e/2$

Veja geometricamente

Δ isósceles

$k=k'$



$\operatorname{sen}\frac{\theta_e}{2} = \frac{q/2}{k}$ (Δ retângulo)

assim temos (em coordenadas esféricas)

$$f^{(1)}(\theta_e) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\iiint \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\varphi\, r^2\, e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}\, V(r)$$

q depende de θ_e

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty r^2V(r)\cdot \underset{\varphi}{2\pi}\int_0^\pi \operatorname{sen}\theta\, e^{iqr\cos\theta}\, d\theta = -\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty r^2V(r)\left.\frac{e^{iqr\xi}}{iqr}\right|_{-1}^{1}$$

$\vec{q}$ ao longo do eixo z

$$-\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty r\frac{V(r)}{iq}\, e^{iqr} - e^{-iqr}$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty r\, V(r)\, \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2i} = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty r\, V(r) \operatorname{sen} qr\, dr$$

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

$\frac{1}{\mu}$ pode ser visto como o alcance do potencial

pois qdo $r \gg \frac{1}{\mu}$ $V(r) \to 0$

assim

$$f^{(1)}(\theta_c) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty \frac{V_0}{\mu} e^{-\mu r} \operatorname{sen} qr\, dr$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{V_0}{q\mu} \operatorname{Im}\int_0^\infty e^{-\mu r} e^{iqr}\, dr = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\frac{1}{q} \operatorname{Im} \left.\frac{e^{(-\mu+iq)r}}{(-\mu+iq)}\right|_0^\infty$$

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

mas $\operatorname{Im}\frac{1}{\mu-iq} = \operatorname{Im}\frac{\mu+iq}{\mu^2+q^2} = \frac{q}{\mu^2+q^2}$

$$\therefore \quad f^{(1)}(\theta_e) = \frac{-2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{\mu^2+q^2}$$

lembrando que $q = 2k\,\text{sen}\,\theta_e/2$

$$f^{(1)}(\theta_e) = \frac{-2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{\mu^2+4k^2\text{sen}^2\theta_e/2}$$

$$\therefore \frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma(\theta_e) = \left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{(4k^2\text{sen}^2\theta_e/2+\mu^2)^2}$$

note que se $\mu \to 0$, mas mantendo $\frac{V_0}{\mu}$ = constante

= por exemplo = $zz'e^2$

teríamos $$\boxed{\sigma(\theta_e) = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 (zz'e^2)^2 \frac{1}{16k^4\,\text{sen}^4(\theta_e/2)}}$$

ou ainda lembrando $E_k = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$

$$\boxed{\sigma(\theta_e) = \frac{1}{16}\left(\frac{zz'e^2}{E_k}\right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4(\theta_e/2)}}$$

espalhamento de Rutherford
secção de choque obtida classicamente

Alguns comentários gerais sobre a amplitude de Born $f^{(1)}$ p/ potenciais esféricos

1. $f(\theta_c)$ é uma função de q somente, pois

$$f^{(1)} = \frac{-2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty r\, V(r) \operatorname{sen} qr \, dr$$

a dependência em θ_c e em $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ entra via q, pois

$$q = 2k \operatorname{sen}\theta/2$$

2. $f(\theta_c)$ é sempre real

3. $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ independe do sinal de V

4. p/ q pequeno, supondo qr pequeno (se r grande V(r) cuida dele)

$$f^{(1)} = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty \underbrace{r^2 V(r)\, dr}_{\text{geométrico!}} = \frac{-1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int V(r)\, d^3x$$

5. Qdo q cresce $f^{(1)}$ decresce, pois o integrando oscila muito.

Validade do primeiro termo de Born

$$\langle \vec{x}|\psi^{(\pm)}_{\vec{k}}\rangle = \langle \vec{x}|\phi_{\vec{k}}\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}')\langle \vec{x}'|\psi^{(\pm)}_{\vec{k}}\rangle$$

queremos $\langle \vec{x}|\psi^{(\pm)}\rangle \approx \langle \vec{x}|\phi\rangle$ na região do potencial
precisamente p/ $\vec{x} \approx 0$

isto implica em solicitar que

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int d^3x' \frac{e^{ikr'}}{r'} V(\vec{x}') e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}'} \right| << 1$$

Considere o potencial Yukawa $V(r) = V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$

Para k pequeno, tome $kr' << 1$ e $\vec{k}\cdot\vec{x}' << 1$ isso é possível se $k << \mu$ (se μ grande kr' e $\vec{k}\cdot\vec{x}'$ são pequenos na região do potencial)

BAIXA energia $k<<1$

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2}\frac{V_0}{4\pi\mu} \right| 4\pi \left| \int_0^\infty r'^2 \frac{1}{r'} \frac{e^{-\mu r'}}{r'} \right| << 1$$

assim $\left| \frac{2mV_0}{\hbar^2\mu} \right| \left| \int_0^\infty e^{-\mu r'} \right| << 1 \to \left| \frac{2mV_0}{\hbar^2\mu^2} \right| << 1$

Quando é que $V_0 \frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$ fornece um estado ligado?

lembre que $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ e exija $\lambda < \frac{1}{\mu}$ → pelo menos uma oscilação no alcance do potencial $\therefore \frac{2\pi}{\lambda} > 2\pi\mu$

$k > 2\pi\mu \sim \mu \quad \therefore k > \mu$

$$k^2 > \mu^2$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} > \frac{\hbar^2 \mu^2}{2m}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \qquad \text{queremos } E = 0 \xrightarrow{} \text{quase ligado} \qquad \therefore \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = 0$$

tome V no alcance $V = V_0 \frac{e^{-1}}{1} = \frac{V_0}{e}$

$$\therefore \; -\frac{V_0}{e} > \frac{\hbar^2 \mu^2}{2m}$$

$$\frac{2m}{\hbar^2 \mu^2} |V_0| > e \sim 2.7$$

Assim se o potencial permite um estado ligado o primeiro termo de Born não funciona.

Para k grande (Merzbacher pag. 231) é possível

Alta energia $k \gg 1$

mostrar que $\frac{2m}{\hbar^2} \frac{|V_0|}{\mu k} \ln\left(\frac{k}{\mu}\right) \ll 1$ (exercício da lista 3)

Qdo k cresce isto é mais fácil de satisfazer

$\therefore$ Born funciona melhor p/ altas energias

Aproximação de Born em ordens superiores

começamos definindo

$$V|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle \equiv T|\phi_{\vec{k}}\rangle$$

T é chamado operador de transição

note

$$f(\vec{k}',\vec{k}) = -4\pi^2 \frac{m}{\hbar^2} \langle \vec{k}'| \underbrace{V|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle}_{T|\vec{k}\rangle} = -4\pi^2\frac{m}{\hbar^2}\langle\vec{k}'|T|\vec{k}\rangle$$

começando pela eq. L.S.

$$|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle = |\phi_{\vec{k}}\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} V|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle$$

multiplica por V

$$\underbrace{V|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle}_{T|\phi_{\vec{k}}\rangle} = V|\phi_{\vec{k}}\rangle + V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}\underbrace{V|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle}_{T|\phi_{\vec{k}}\rangle}$$

assim como vale p/ $\forall\ |\phi_{\vec{k}}\rangle$

$$\boxed{T = V + V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}T}$$

se resolvermos p/ T achamos f

Tentemos iterativamente

$$T = V + V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V + V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}V + \dots$$

assim $f(\vec{k}',\vec{k}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\vec{k}',\vec{k})$

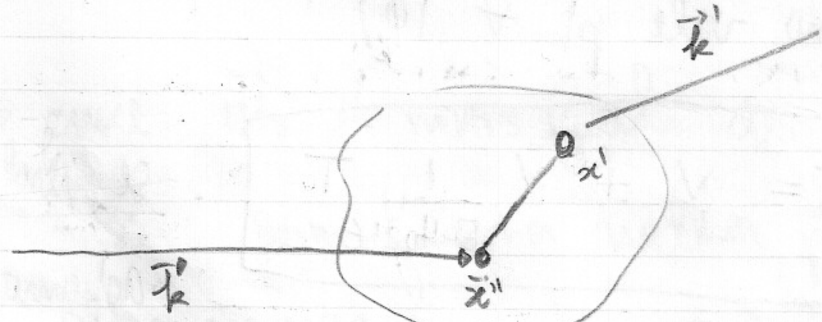
$$f^{(1)}(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\langle\vec{k}'|V|\vec{k}\rangle$$

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

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

$$\langle\vec{x}'|\frac{1}{E-H_0+i\epsilon}|\vec{x}''\rangle V(\vec{x}'')\langle\vec{x}''|\vec{k}\rangle$$

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



Teorema Ótico (relação entre $f(\theta=0)$ e σ_{TOTAL})

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

$$f(\theta=0) \equiv f(\vec{k},\vec{k}) = \frac{-4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle$$

e

$$\sigma_{tot} \equiv \int \frac{d\sigma}{d\Omega}\, d\Omega$$

$$\int |f(\vec{k},\vec{k})|^2 d\Omega$$

$$\frac{\overset{m}{[M]}}{\underset{\substack{(r\times p)^2\\(r\times mv)^2}}{\hbar^2 \to [L]^2[M]^2 \frac{[L]^2}{[T]^2}}} \quad \overbrace{\frac{[M][L]^2}{[T]^2}}^{\substack{\text{energia}\\ \frac{1}{2}mv^2}} [L]^3 = [L]$$

$$\uparrow \frac{1}{k^3}$$

$$T|\vec{k}\rangle = V|\psi_{\vec{k}}\rangle$$

$$\langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k} | \vec{k} \rangle T = \boxed{\delta(k-k')}\boxed{V} = \frac{[V]}{[k^3]}$$

$\underset{\text{simplifique}}{}$ $\quad \uparrow \frac{1}{k^3}$

$$\therefore \sigma_{total} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im}(f(\theta=0)) = [L]^2$$

$$\operatorname{Im} \langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle = \operatorname{Im} \langle \vec{k} | V | \psi_{\vec{k}}^{(+)} \rangle$$

MAS $\quad |\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle = |\vec{k}\rangle + G_0^{(+)} V |\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle$

$\therefore$

$$V|\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle = V|\vec{k}\rangle + V G_0^{(+)} V |\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle$$

$$\therefore \left(V - V G_0^{(+)} V\right) |\psi_{\vec{k}}^{(+)}\rangle = V|\vec{k}\rangle \therefore \langle \vec{k} | V = \langle \psi_{\vec{k}}^{(+)} | \left(V - V G_0^{(+)} V\right)^{\dagger}$$

assim

$$\mathrm{Im}\ \langle \vec{k}|T|\vec{k}\rangle = \mathrm{Im}\ \langle \psi^{(+)}_{\vec{k}}|(V - VG^{(+)}V)^{\dagger}|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle$$

mas $$G^{(+)} = \frac{1}{E-H_0+i\epsilon} = \underbrace{P_r\left(\frac{1}{E-H_0}\right)}_{\text{real}} \underbrace{-i\pi\delta(E-H_0)}_{\text{imaginário}}$$

$$\therefore\ \mathrm{Im}\ \langle \vec{k}|T|\vec{k}\rangle = \mathrm{Im}\Big\{ \underbrace{\langle \psi^{(+)}_{\vec{k}}|V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle}_{\text{Hermiteano} \therefore \text{ real}}$$

$$- \underbrace{\langle \psi^{(+)}_{\vec{k}}|V\ P_r\frac{1}{E-H_0}\ V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle}_{\text{Hermiteano} \therefore \text{ real}} - i\pi \underbrace{\langle \psi^{(+)}_{\vec{k}}|V\delta(E-H_0)V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle}_{\text{Hermiteano} \therefore \text{ imaginário puro}} \Big\}$$

0 "-" do "dagger"
0 "-" do VGV
0 "-" da definição

$$= -\pi\ \langle \psi^{(+)}_{\vec{k}}|V\ \delta(E-H_0)\ V|\psi^{(+)}_{\vec{k}}\rangle$$

$$= -\pi\ \langle \vec{k}|T^{\dagger}\delta(E-H_0)\,T|\vec{k}\rangle$$

$$= -\pi\int \langle \vec{k}|T^{\dagger}|\vec{k}''\rangle\langle \vec{k}''|\delta(E-H_0)T|\vec{k}\rangle\, d^3k'$$

mas $$\langle \vec{k}''|\delta(E-H_0)T|\vec{k}\rangle = \langle \vec{k}''|\delta\left(E-\frac{\hbar^2k''^2}{2m}\right)T|\vec{k}\rangle$$

$$= \langle \vec{k}''|\delta(\underbrace{E-E'}_{\downarrow\ \hbar^2k''^2/2m})\ T|\vec{k}\rangle$$

$|\vec{k}'\rangle = |E', \hat{k}'\rangle$

mas $d^3k' = k'^2 \, d\Omega \, dk'$

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

$$\therefore \; d^3k' = k'^2 d\Omega \frac{dE}{\frac{\hbar^2 k'}{m}} = d\Omega \, dE' \frac{k' m}{\hbar^2}$$

assim

$$\therefore \; \mathrm{Im} \langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle = -\pi \int d\Omega' dE' \, k'(E') \frac{m}{\hbar^2} \langle \vec{k} | T^{+} | E', \hat{k}' \rangle.$$

$$\langle E', \hat{k}' | \, \delta(E - E') T | \vec{k} \rangle =$$

$$= \frac{-\pi m}{\hbar^2} k'(E) \int d\Omega' \left| \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle \right|^2_{k' = k}$$

finalmente

$$\mathrm{Im}\left(f(\theta = 0) \right) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \, \mathrm{Im} \langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle$$

$$= k \left[\frac{\pi m}{\hbar^2} \cdot \frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int d\Omega \left| \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle \right|^2_{k' = k} \right.$$

$$= \frac{k}{4\pi} \left(\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \right)^2 \int d\Omega \left| \langle \vec{k}' | T | \vec{k} \rangle \right|^2 = \frac{k}{4\pi} \left[\int d\Omega' \left| f(\vec{k}', \vec{k}) \right|^2 \right]$$

$$= \frac{k}{4\pi} \sigma_{tot}$$

cqd