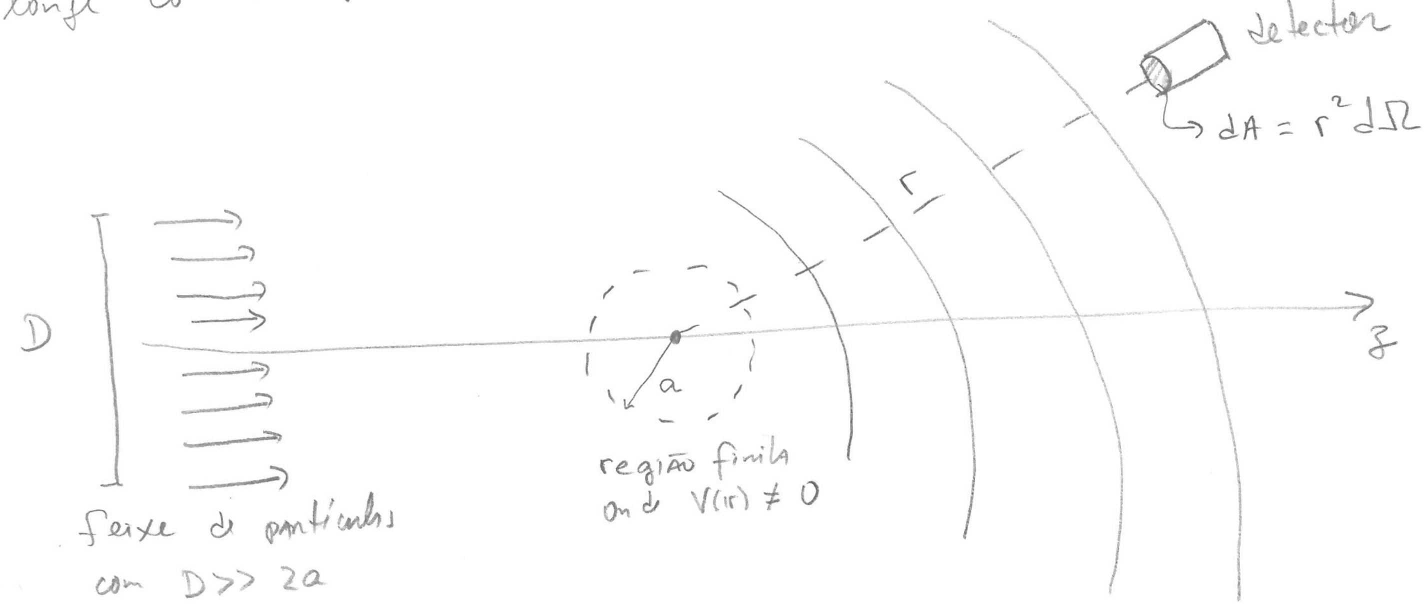
Introdução à Teoria de Espalhamento

Experimentos de espalhamento são realizados basicamente com o objetivo de entender as interações entre partículas (colimadas em um feixe) e o alvo selecionado. A natureza do problema é assintótica: as partículas são preparadas longe do alvo e são medidas após a interação por detectores também longe do alvo:



Assumiremos que:

- espalhamento é elástico: energia das partículas é conservada
- feixe é rarefeito: partículas do feixe não interagem entre si
- potencial tem alcance finito: $V(\mathbf{r}) \approx 0$ se $r > a$
- o tratamento será estatístico, e não baseado em um único evento.
- o caso inelástico pode ser tratado de forma similar

DEFINIÇÃO DA SEÇÃO DE CHOQUE

Temos um feixe de partículas (clássico ou quântico) vindo da esquerda. A intensidade do feixe incidente é

$I_0 \equiv$ número de partículas por unidade de tempo e por unidade de área transversal incidentes. UNIDADE é $T^{-1} L^{-2}$
= fluxo

$dn \equiv$ número de partículas por unidade de tempo que atingem o detector com ângulo sólido $d\Omega$. UNIDADE é T^{-1}

Deve ser proporcional à I_0 e à $d\Omega$

$$dn(\theta,\varphi) \equiv d\sigma(\theta,\varphi)\, I_0 = \frac{d\sigma}{d\Omega} I_0\, d\Omega$$

$$\frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega} = \frac{1}{I_0}\frac{dn}{d\Omega}$$ = seção de choque diferencial =

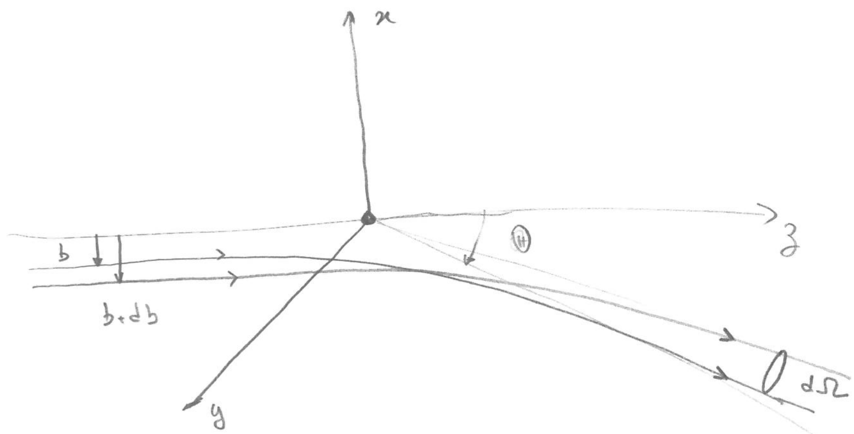
= nº de partículas espalhadas por unidade de ângulo sólido / I_0

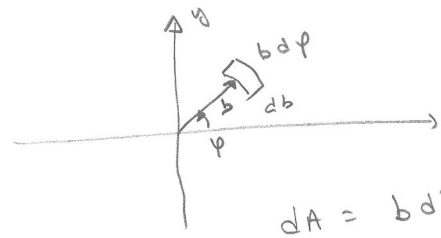
= "proporção do fluxo incidente que espalha em $d\Omega$"

UNIDADE é $\frac{1}{T^{-1}L^{-2}} T^{-1} = L^2$

$$\sigma = \int \frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega} d\Omega$$ = seção de choque total.

REVISÃO DO ESPALHAMENTO CLÁSSICO





$dA = b\,db\,d\varphi$

$b =$ parâmetro de impácto ; $\Theta =$ Ângulo de espalhamento

$dn =$ nº de partículas que passa por $dA = b\,db\,d\varphi$

$= I_0 * (b\,db\,d\varphi)$

Como $d\Omega = \sin\Theta\, d\Theta\, d\Phi$ $\quad \dfrac{d\sigma}{d\Omega} = \dfrac{1}{I_0}\dfrac{I_0\, b\,db\,d\varphi}{\sin\Theta\, d\Theta\, d\Phi}$. Para potenciais centrais a trajetória fica sempre sobre um plano, e $\Phi = \varphi$.

Nesse caso obtemos

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|\frac{b}{\sin\Theta}\frac{db}{d\Theta}\right|}$$

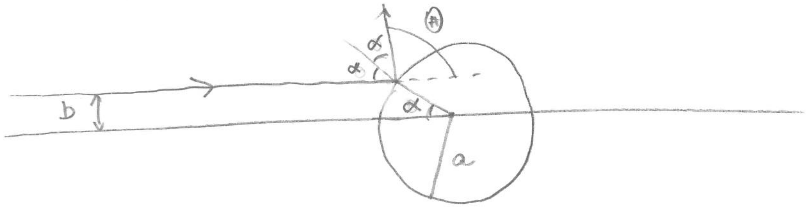
onde o módulo garante que o resultado é positivo.

Note que $\Theta = \Theta(b, \varphi)$, é dado pela solução da equação de movimento. Se $V(r)$ é central, $\Theta = \Theta(b)$ apenas. Para Coulomb temos (veja Eisberg / Resnick)

$$b(\Theta) = \frac{D}{2}\cot g\left(\frac{\Theta}{2}\right) \quad ; \quad D = \frac{zZe^2}{4\pi\epsilon_0\left(\frac{\mu v^2}{2}\right)}$$

$$\frac{d\sigma(\Theta)}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\left(\frac{zZe^2}{2\mu v^2}\right)^2\frac{1}{\sin^4(\Theta/2)}$$

1) Para o caso de um esfera rigida temos



$\Theta = \pi - 2\alpha$

$$b = a\sin\alpha = a\sin(\pi/2 - \Theta/2) = a\cos\Theta/2$$

$$\frac{db}{d\Theta} = -\frac{a}{2}\sin\Theta/2$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|\frac{b}{\sin\Theta}\cdot -\frac{a}{2}\sin\Theta/2\right| = \frac{a}{2}\cdot\frac{a\cos\Theta/2}{\sin\Theta}\cdot\sin\Theta/2 = \frac{a^2}{4}$$

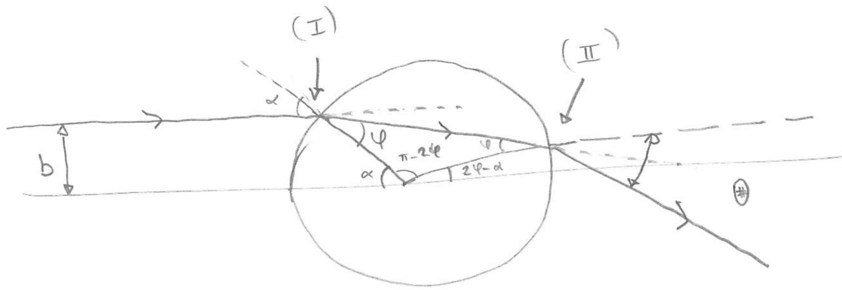
$$\sigma_{TOT} = \int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \pi a^2$$

Esse exemplo ilustra o significado da seção de choque total: ela mede a área efetiva, perpendicular ao feixe, que provoca o espalhamento.

Para o caso do potencial de Coulomb σ_{TOT} é infinita, já que o potencial tem alcance infinito, e todas as partículas do feixe são espalhadas.

?) Outro exemplo importante é a "esfera mole" atrativa, definida por

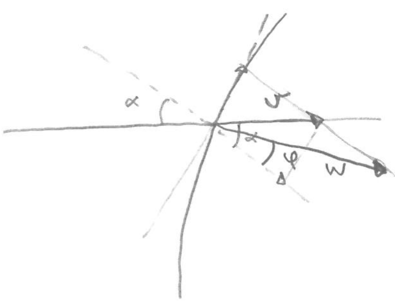
$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r < a \\ 0 & \text{se } r \geq a \end{cases}.$$



$b = a \sin\alpha$

precisamos obter
$b = b(\theta)$

) 1ª colisão



Decompondo $\vec{v}$ em componentes paralela e perpendicular à superfície da esfera, vemos que, como não existem forças na direção //, $v_{//}$ não deve mudar.

Além disso,

$$E = \frac{mv^2}{2} \quad \text{fora} \quad \text{e}$$

$$E = \frac{mw^2}{2} - V_0 \quad \text{dentro}$$

$$\Rightarrow \quad w = \sqrt{\frac{2}{m}(E + V_0)} \; > v$$

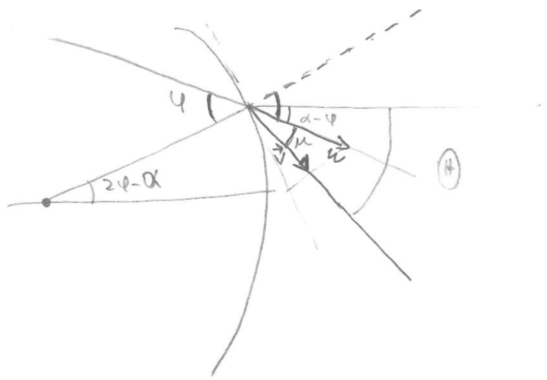
Pela figura $\quad v \sin\alpha = w \sin\varphi$

$$\boxed{\sin\alpha = \sqrt{\frac{E+V_0}{E}} \sin\varphi}$$

que é uma lei de Snell p/ $\boxed{n = \sqrt{\frac{E+V_0}{E}} \geq 1}$.

O desvio angular após a primeira colisão é $(\alpha - \varphi)$.

(II) 2ª colisão



$\Theta = \alpha - \varphi + \mu$

Novamente a componente paralela da velocidade se conserva:

$$w \sin\varphi = v \sin(\varphi+\mu)$$

$$\sqrt{\frac{E+V_0}{E}}\ \sin\varphi = \sin(\varphi+\mu)$$

$\Rightarrow$ comparando com (I) $\varphi+\mu = \alpha$
e o desvio angular é $\mu = \alpha - \varphi$. Assim

$$\Theta = (\alpha-\varphi)+(\alpha-\varphi) = 2(\alpha-\varphi)$$ e $\alpha = \varphi + \Theta/2$:

$$b = a\sin\alpha = a\sin(\varphi+\Theta/2) = a\sin\varphi\cos\Theta/2 + a\sin\Theta/2\cos\varphi$$
$$= a\cos\varphi\left[\sin\Theta/2 + \cos\Theta/2 \,\mathrm{tg}\,\varphi\right]$$

Como
$$n\sin\varphi = \sin\alpha = \sin(\varphi+\Theta/2)$$
$$= \sin\varphi\cos\Theta/2 + \sin\Theta/2\cos\varphi$$
$$\sin\varphi(n-\cos\Theta/2) = \sin\Theta/2\cos\varphi \rightarrow \boxed{\mathrm{tg}\,\varphi = \frac{\sin\Theta/2}{n-\cos\Theta/2}}$$

e
$$\cos\varphi = \frac{1}{\sqrt{1+\mathrm{tg}^2\varphi}} = \frac{n-\cos\Theta/2}{\sqrt{n^2+1-2n\cos\Theta/2}}$$. Assim,

$$b = a\cos\varphi\left[\sin\frac{\Theta}{2} + \frac{\cos\Theta/2\,\sin\Theta/2}{n-\cos\Theta/2}\right] = \frac{na\sin\Theta/2}{n-\cos\Theta/2}\cdot\frac{n-\cos\Theta/2}{\sqrt{n^2+1-2n\cos\Theta/2}}$$

$$\boxed{b = \frac{na\sin\Theta/2}{\sqrt{n^2+1-2n\cos\Theta/2}}}$$

Note que Θ varia de 0, quando $b=0$, até $\Theta_c = 2\arccos\left(\frac{1}{n}\right)$ quando $b=a$

(50c)

$$\frac{db}{d\theta} = \frac{na\cos\theta/2}{2\sqrt{\quad}} - \frac{na\sin\theta/2\,(n\sin\theta/2)}{2[\quad]^{3/2}} = \frac{na}{2[\quad]^{3/2}}\left[\cos\frac{\theta}{2}\left(n^2+1-2n\cos\frac{\theta}{2}\right) - n\sin^2\frac{\theta}{2}\right]$$

$$= \frac{na}{2[\quad]^{3/2}}\left[(n^2+1)\cos\frac{\theta}{2} - n \quad - n\cos^2\frac{\theta}{2}\right]$$

$$= \frac{na}{2[\quad]^{3/2}}\left(n\cos\frac{\theta}{2}-1\right)\left(n-\cos\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{b}{2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}}\frac{db}{d\theta} = \frac{na}{[\quad]^{1/2}}\frac{1}{2\cos\frac{\theta}{2}}\frac{na}{2[\quad]^{3/2}}\left(n\cos\frac{\theta}{2}-1\right)\left(n-\cos\frac{\theta}{2}\right)$$

$$\boxed{\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{n^2a^2\left(n\cos\frac{\theta}{2}-1\right)\left(n-\cos\theta/2\right)}{4\cos\theta/2\left[n^2+1-2n\cos\theta/2\right]^2}}$$

A seção de choque total fica

$$\sigma = 2\pi\int_0^{\theta_c}\sigma(\theta)\sin\theta\,d\theta = 8\pi\int_0^{\theta_c}\sigma(\theta)\sin\theta/2\cos\theta/2\,d(\theta/2) \quad ; \quad \cos\left(\frac{\theta_c}{2}\right) = \frac{1}{n}$$

$$x \equiv \cos\theta/2$$

$$= 2\pi n^2a^2\int_{1/n}^{1}\frac{(nx-1)(n-x)}{(n^2+1-2nx)^2}\,dx$$

$$y \equiv n^2+1-2nx \quad ; \quad nx = \frac{n^2+1-y}{2} \quad ; \quad nx-1 = \frac{n^2-1-y}{2} \qquad n-x = n-\frac{n^2+1-y}{2n} = \frac{n^2-1+y}{2n}$$

$$\sigma = \frac{2\pi n^2a^2}{2n}\int_{(n-1)^2}^{n^2-1}\frac{1}{4n}\frac{(n^2-1-y)(n^2-1+y)}{y^2}\,dy = \frac{\pi a^2}{4}\int_{(n-1)^2}^{n^2-1}\left[\frac{(n^2-1)^2-y^2}{y^2}\right]dy$$

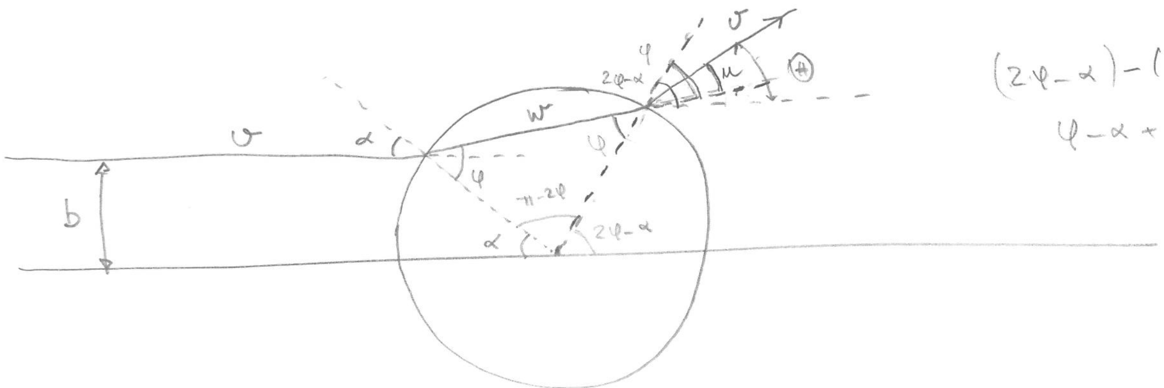
$$= \frac{\pi a^2}{4}\left\{(n^2-1)^2\left[\frac{1}{(n-1)^2}-\frac{1}{n^2-1}\right]-\left[(n^2-1)-(n-1)^2\right]\right\}$$

$$= \frac{\pi a^2}{4}\left\{\frac{(2n-2)(n^2-1)^2}{(n-1)^2(n^2-1)}-2n+2\right\} = \frac{\pi a^2}{4}2(n-1)\left[\frac{(n^2-1)}{(n-1)^2}-1\right] = \frac{\pi a^2}{4}\cdot\frac{4(n-1)^2}{(n-1)^2}$$

$$= \pi a^2$$

3) Outro exemplo ainda é a esfera mole repulsiva:

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{se} \quad r \leq a \\ 0 & \text{se} \quad r > a \end{cases}$$



$$(2\varphi - \alpha) - (\varphi - \mu) = (4)$$
$$\varphi - \alpha + \mu = (4)$$

a) 1ª colisão: Como não existem forças na direção // à superfície, $\upsilon_{\parallel}$ se conserva. Além disso

$$E = \frac{m\upsilon^2}{2} = \frac{m w^2}{2} + V_0 \Rightarrow w = \sqrt{\frac{2}{m}(E - V_0)} < \upsilon$$

– Se $E > V_0$ $\left(\frac{m\upsilon^2}{2} > V_0 \rightarrow \upsilon > \sqrt{\frac{2V_0}{m}} \equiv \upsilon_0 \right)$

a partícula penetra na esfera.

– Se $E < V_0$, $\upsilon < \upsilon_0$, a partícula é refletida como na esfera rígida.

Assumindo $\upsilon > \upsilon_0$ e decompondo $\vec{\upsilon}$ em $\upsilon_{\parallel}$ e $\upsilon_{\perp}$ temos:

$$\upsilon \sin\alpha = w \sin\varphi \rightarrow \boxed{\sin\alpha = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \sin\varphi}$$

que é uma lei de Snell p/ $n = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} < 1$.

O desvio angular depois da 1ª colisão é $(\varphi - \alpha)$.

b) 2º colisão

$$v \sin\varphi = v \sin(\varphi - \mu)$$

$$\sin(\varphi-\mu) = \sqrt{\frac{E-V_0}{E}} \sin\varphi \rightarrow \varphi - \mu = \alpha \rightarrow \boxed{\mu = \varphi - \alpha}$$

$$e \quad \Theta = (\varphi-\alpha) + (\varphi-\alpha) = 2(\varphi-\alpha) \rightarrow \alpha = \varphi - \Theta/2$$

Usamos agora $b = a\sin\alpha = b \sin(\varphi - \Theta/2) = a\sin\varphi\cos\Theta/2 - a\sin\Theta/2\cos\varphi$

$$= a\cos\varphi\left[\operatorname{tg}\varphi \cos\Theta/2 - \sin\Theta/2 \right]$$

Eliminamos φ usando

$$n\sin\varphi = \sin\alpha = \sin(\varphi - \Theta/2)$$

$$= \sin\varphi\cos\Theta/2 - \sin\Theta/2\cos\varphi$$

$$\sin\varphi\,(n - \cos\Theta/2) = -\sin\Theta/2\cos\varphi$$

$$\boxed{\operatorname{tg}\varphi = \frac{\sin\Theta/2}{\cos\Theta/2 - n}}$$

$$\cos\varphi = \frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\varphi}} = \frac{\cos\Theta/2 - n}{\left[(\cos\Theta/2 - n)^2 + \sin^2\Theta/2\right]^{1/2}} = \frac{\cos\Theta/2 - n}{\sqrt{1 - 2n\cos\Theta/2 + n^2}}$$

$$b = a\cos\varphi\left[\frac{\sin\Theta/2\cos\Theta/2}{\cos\Theta/2 - n} - \sin\Theta/2\right] = \frac{a\cos\varphi\, n\sin\Theta/2}{\cos\Theta/2 - n} = \frac{n\,a\sin\Theta/2}{\sqrt{n^2+1-2n\cos\Theta/2}}$$

$$\boxed{b(\Theta) = \frac{n\,a\sin\Theta/2}{\sqrt{n^2+1-2n\cos\Theta/2}}}$$

Como no caso da esfera atrativa, podemos calcular σ_{tot}. Para isso notamos que $\varphi \to \pi/2$ para $\sin\alpha = n = b/a < 1$. Nesse ponto temos uma "reflexão total" da partícula e, pela expressão de $b(\Theta)$, $\boxed{\cos\Theta_c/2 = n}$. Como $b(\Theta)$ é formalmente igual ao da esfera atrativa, a mesma sequência de transformações se aplica, com a diferença que a integral em x vai de $n \to 1$, e na variável y de $(n-1)^2$ a $1-n^2$.

A integral resulta em $n^2\pi^2 a^2$.

No entanto, isso não é tudo! Para $b > na$ ocorre a reflexão total, e o espalhamento é como na esfera dura, onde

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Theta) = a^2/4$$

e

$$\int_0^{\Theta_c} \frac{a^2}{4} \cdot 2\pi \sin\Theta \, d\Theta = \frac{\pi a^2}{2}\left[1 - \cos\Theta_c\right] = \frac{\pi a^2}{2}\left[2 - 2\cos^2\Theta/2\right]$$

$$= \pi a^2 (1 - n^2)$$

Assim:

$$\sigma_{tot}^{T} = \pi a^2 n^2 = \text{seção de choque de transmissão}$$

$$\sigma_{tot}^{R} = \pi a^2 (1 - n^2) = \text{seção de choque de reflexão}$$

e a soma dá πa^2. Da mesma forma

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Theta) = \frac{d\sigma^T}{d\Omega}(\Theta) + \frac{d\sigma^R}{d\Omega}(\Theta)$$

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega}(\Theta) = \frac{n^2 a^2 (n\cos\Theta/2 - 1)(n - \cos\Theta/2)}{4\cos\Theta/2\left[n^2 + 1 - 2n\cos\Theta/2\right]^2} + \frac{a^2}{4}}$$

com $0 \le \Theta \le \Theta_c$

TRATAMENTO QUÂNTICO

a)- Feixe é composto por partículas que incidem à taxa de 1 part. por unidade de tempo

b)- cada partícula do feixe é representada por um pacote de ondas localizado que em $t=0$, está à esquerda do alvo. O centro do pacote está em $-r_0\hat{z}$.

Note que (a) NÃO implica em $I_0 = 1$, pois I_0 é partículas incidentes por unidade de área e por unidade de tempo.

(c)- O momento do pacote é mais ou menos bem definido em torno de $k_0\hat{z}$. A incerteza em k_z, Δk_z é pequena mas não tão pequena: $\Delta z \simeq \frac{1}{\Delta k_z}$ deve ser menor que r_0 (o centro do pacote está em $\mathbf{r} = -r_0\hat{z}$) para que ele esteja localizado à esquerda do alvo em $t=0$

O PACOTE DE ONDAS INICIAL

$$\Psi(\mathbf{r},0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \varphi(\mathbf{k})\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}\, d^3k \quad ; \quad \mathbf{r}_0 = -r_0 \hat{z}$$

$\varphi(\mathbf{k})$ é um função com um pico agudo em $\mathbf{k} = (0,0,k_0) = k_0 \hat{z}$.

Tomaremos como exemplo uma gaussiana:

$$\varphi(\mathbf{k}) = \frac{1}{\pi^{3/4}(\alpha\beta\gamma)^{1/2}} \exp\left\{ -\frac{(k_z-k_0)^2}{2\alpha^2} - \frac{k_x^2}{2\beta^2} - \frac{k_y^2}{2\gamma^2} \right\}$$

Nesse caso podemos calcular $\Psi(\mathbf{r},0)$ explicitamente:

$$\Psi(\mathbf{r},0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\pi^{3/4}(\alpha\beta\gamma)^{1/2}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_x x - k_x^2/2\beta^2} dk_x \right] \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_y y - k_y^2/2\gamma^2} dk_y \right] \left[\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik_z(z+r_0) - (k_z-k_0)^2/2\alpha^2} dk_z \right]$$

Usando

$$ik_x x - \frac{k_x^2}{2\beta^2} = -\frac{1}{2\beta^2}\left[k_x - i\beta^2 x\right]^2 - \frac{\beta^2 x^2}{2} \qquad \text{e}$$

$$ik_z(z+r_0) - \frac{(k_z-k_0)^2}{2\alpha^2} = -\frac{1}{2\alpha^2}\left[k_z - k_0 - i\alpha^2(z+r_0)\right]^2 - \frac{\alpha^2(z+r_0)^2}{2} + ik_0(z+r_0)$$

reduzimos cada integral à $\int e^{-\xi u^2} du = \sqrt{\frac{\pi}{\xi}}$. O resultado final é:

$$\boxed{\Psi(\mathbf{r},0) = \frac{\sqrt{\alpha\beta\gamma}}{\pi^{3/4}} \exp\left\{ -\frac{\alpha^2}{2}(z+r_0)^2 - \frac{\beta^2 x^2}{2} - \frac{\gamma^2 y^2}{2} + ik_0(z+r_0) \right\}}$$

Exercícios

1) Faça as integrais e mostre esse resultado.

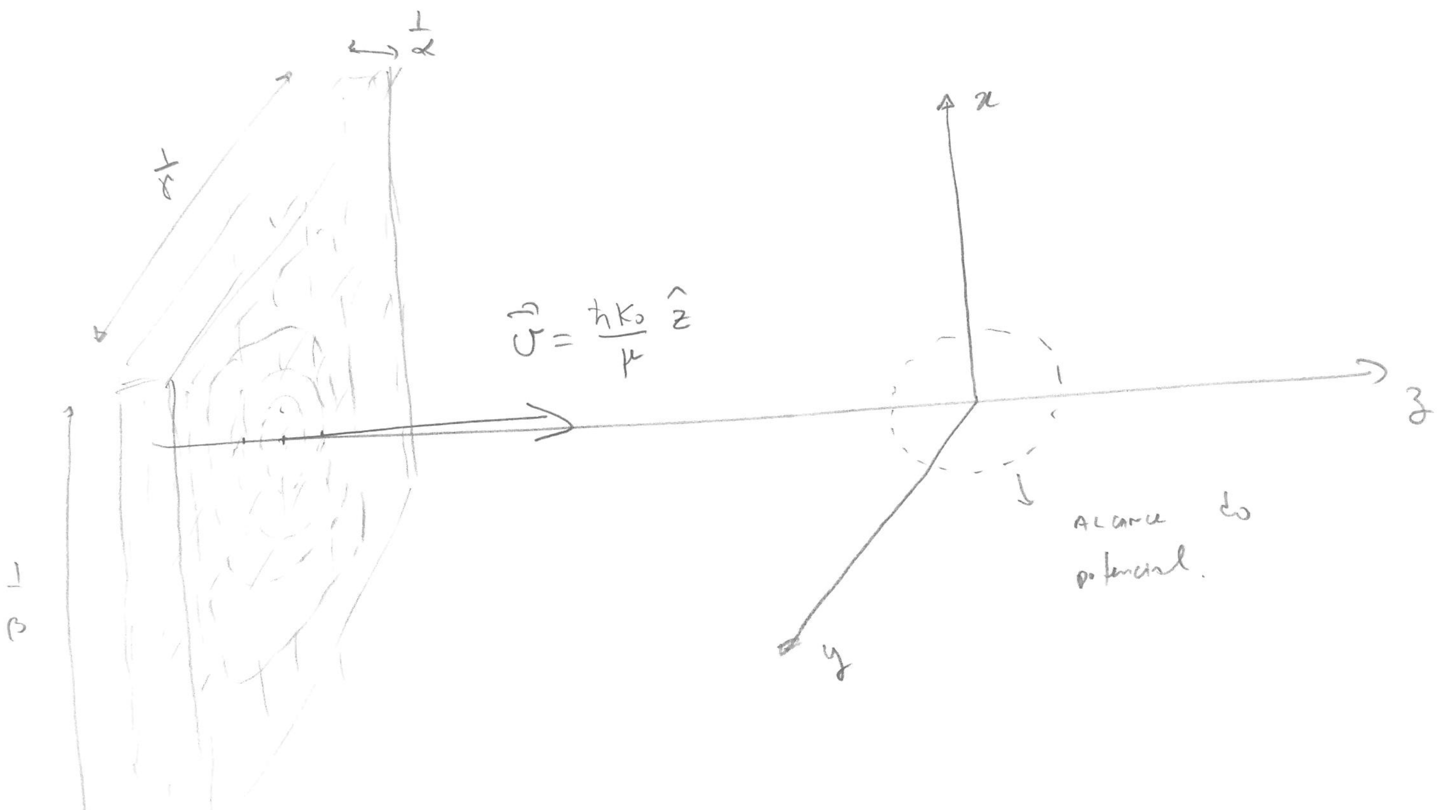
2) Mostre que $\langle \mathbb{P} \rangle = \int \Psi^* (-i\hbar \nabla \Psi)\, d^3r = \hbar k_0 \hat{z}$

3) Mostre que $\langle \mathbb{R} \rangle = \int \Psi^* \mathbf{r} \Psi\, d^3r = -r_0 \hat{z}$

A densidade de probabilidade em $t=0$ é

$$|\psi(\mathbf{r},0)|^2 = \frac{\alpha\beta\gamma}{\pi^{3/2}} \exp\left\{-\alpha^2(z+r_0)^2 - \beta^2 x^2 - \gamma^2 y^2\right\}$$

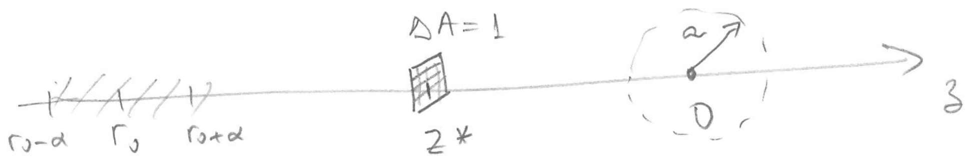
com β e $\gamma \approx 0$, i.e., o pacote é "uma parede" perpendicular ao eixo z com largura $\Delta z = \frac{1}{\alpha}$ e centrado em $z = -r_0$ com $\Delta k_z = \alpha$. Devemos impor $\Delta z << r_0$



A densidade de probabilidade inicial NÃO depende de x e y no limite $\beta, \gamma \to 0$.

A Intensidade I_0 do feixe incidente

Em $t=0$ temos uma gaussiana centrada em $\mathbf{r} = (0,0,-r_0)$ com momento médio $\mathbf{k} = (0,0,k_0)$. O pacote representa 1 partícula, e o feixe é tal que são emitidas 1 partícula por unidade de tempo. Então, I_0 = nº de partículas p/ unidade de área p/ unidade de tempo é dada pela proporção do pacote que vai cruzar uma área unitária $\Delta A = 1$ como na figura abaixo:



A probabilidade da partícula cruzar ΔA = probabilidade de ela estar no tubo à esquerda de ΔA:

$$= \int_{-\infty}^{z^*} dz \int_{-1/2}^{1/2} dx \int_{-1/2}^{1/2} dy\, |\psi(\mathbf{r},0)|^2 \simeq \underbrace{\Delta A}_{1} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r},0)|^2 dz = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\mathbf{r},0)|^2 dz$$

Estamos supondo que $\psi(\mathbf{r},0) \simeq$ independente de x, y em $t=0$.

Podemos ainda escrever

$$|\psi(\mathbf{r},0)|^2 = |\psi(x,y,z,0)|^2 \simeq |\psi(0,0,z,0)|^2 = |\psi(z\hat{z},0)|^2$$

e

$$\boxed{I_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(z\hat{z},0)|^2 dz}$$

Exercício: mostre que $I_0 = \beta\gamma/\pi$ para o pacote Gaussiano.

Usaremos esse resultado adiante.

ESPALHAMENTO DO PACOTE DE ONDAS : EVOLUÇÃO TEMPORAL

Seja $$H = \frac{p^2}{2\mu} + V = H_0 + V$$

onde $V \neq 0$ dentro de uma esfera de raio $\underline{a}$. Em $t=0$ temos

$$\psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \varphi(\mathbf{k})\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}\, d^3k$$ onde

- $\varphi(\mathbf{k})$ = função centrada em $\mathbf{k}_0 = k_0 \hat{z}$
- $\mathbf{r}_0 = -r_0 \hat{z}$
- $\Delta z << r_0$

Se $H = H_0$, então

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \varphi(\mathbf{k})\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) - i\omega t}\, d^3k \qquad \omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2\mu}$$

Só para recordar, suponha que o movimento só ocorre na direção z:

$$\psi(z,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \frac{e^{-(k_z-k_0)^2/2\alpha^2}}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{\alpha}} e^{ik_z(z+r_0)} dk_z = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{\frac{1}{4}}} \exp\left\{-\frac{\alpha^2}{2}(z+r_0)^2 + ik_0(z+r_0)\right\}$$

$$\psi(z,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \frac{e^{-(k_z-k_0)^2/2\alpha^2}}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{\alpha}} e^{ik_z(z+r_0) - \frac{i\hbar k_z^2 t}{2\mu}} dk_z$$

$$= \frac{\sqrt{\Delta z}}{\pi^{\frac{1}{4}}} \frac{1}{\sqrt{(\Delta z)^2 - i\hbar t/\mu}} \exp\left\{-\frac{\left(z+r_0+\frac{\hbar k_0 t}{\mu}\right)^2}{2(\Delta z)^2\left[1+\frac{2\hbar^2 t^2}{\mu^2(\Delta z)^4}\right]} + i\varphi\right\}$$

onde $\Delta t = \frac{1}{\alpha}$.

Note que o alongamento do pacote é dado pelo termo $\frac{2\hbar^2 t^2 \alpha^4}{\mu^2}$. Podemos desprezar o alargamento se

$$\Delta z(t) = \Delta z(0)\sqrt{1+\frac{2\hbar^2 t^2 \alpha^4}{\mu^2}} \simeq \Delta z(0) + \frac{\hbar^2 t^2 \alpha^4}{\mu^2}\Delta z(0) \simeq \Delta z(0),$$

ou

$$\frac{\hbar^2 t^2 \alpha^4}{\mu^2} << 1$$

ou ainda

$$\boxed{\frac{\hbar t \alpha^2}{\mu} << 1}$$

No espalhamento temos $t \approx 2 * \frac{r_0}{v_0} = \frac{2 r_0 \mu}{\hbar k_0}$ e

$$\frac{\hbar t \alpha^2}{\mu} = \frac{2 r_0 \alpha^2}{k_0}$$ e vamos supor que $\boxed{\frac{2 r_0 \alpha^2}{k_0} << 1}$

Como $H \neq H_0$ temos que encontrar as auto-funções de H e expandir $\Psi(\mathbf{r},0)$ na base dessas auto-funções.

Vamos mostrar que:

1) Existem soluções de $H\Psi = E\Psi$, $\Psi^+_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ t.q.

$$\Psi^+_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\underset{\substack{\uparrow \\ \text{onda plana}}}{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}} + \underset{\substack{\uparrow \\ \text{onda esférica}}}{f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r}} \right] \quad \text{p/ } r \to \infty$$

2) Em termos dessas funções o pacote de ondas incidente, em $t=0$, fica

$$\Psi(\mathbf{r},0) = \int \varphi(\mathbf{k})\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}\, \Psi^+_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, d^3k$$

e portanto

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \int \varphi(\mathbf{k})\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}\, \Psi^+_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\, e^{-i\omega t}\, d^3k$$

com

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2\mu}$$

Vamos assumir (1) e (2) e mostrar que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dn}{I_0\, d\Omega} = |f_{\mathbb{K}_0}(\hat{\mathbb{r}})|^2 .$$

Em seguida provaremos (1) e (2) e mostraremos, ao mesmo tempo, como calcular $f_{\mathbb{K}_0}(\hat{\mathbb{r}})$.

Aproximação 1 : o pacote de ondas não alarga muito no intervalo $t \approx 2 * \frac{r_0}{v_0} = \frac{2 r_0 \mu}{\hbar k_0}$, i.e.,

$$\frac{\hbar t \Delta k_3^2}{\mu} = \frac{2 r_0 \Delta k_3^2}{k_0} << 1$$

Assim,

$$\omega t = \frac{\hbar k^2}{2\mu} t = \frac{\hbar t}{2\mu}\left(\mathbb{K}_0 + (\mathbb{K}-\mathbb{K}_0)\right)^2 \quad *$$

$$= \frac{\hbar t}{2\mu}\left[k_0^2 + 2\mathbb{K}_0\cdot(\mathbb{K}-\mathbb{K}_0) + (\mathbb{K}-\mathbb{K}_0)^2\right] \approx \frac{\hbar t}{2\mu}\left[2\mathbb{K}_0\cdot\mathbb{K} - k_0^2\right]$$

Definindo $v_0 = \frac{\hbar k_0}{\mu}$ $\qquad \omega_0 = \frac{\hbar k_0^2}{2\mu}$

e usando a

* Ao integrarmos sobre $\mathbb{K}$ estamos supondo que apenas os $\mathbb{K}$ próximos de $\mathbb{K}_0$ contribuem. Valores de $\mathbb{K}$ tal que $|\mathbb{K}-\mathbb{K}_0| \gtrsim \Delta k_3 = \alpha$ dão contribuições pequenas. O tempo t é grande mas tal que $\frac{\hbar t\,(\mathbb{K}-\mathbb{K}_0)^2}{2\mu} << 1$ p/ os $\mathbb{K}$'s relevantes.

APROXIMAÇÃO 2 : só interessa $\Psi(\mathbf{r}, t)$ p/ r grande

obtemos

$$\Psi(\mathbf{r},t) \approx \int \frac{\varphi(\mathbf{k})\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} \right] e^{+i\omega_0 t - i\mathbf{v}_0\cdot\mathbf{k}\, t}$$

$$= e^{i\omega_0 t} \int \frac{\varphi(\mathbf{k})}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t - \mathbf{r}_0)} d^3k + e^{i\omega_0 t} \int \frac{\varphi(\mathbf{k})}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 t)} f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} d^3k$$

No segundo termo fazemos ainda as seguintes aproximações:

como $\varphi(\mathbf{k})$ é centrada em $\mathbf{k}_0$, $f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) \sim f_{\mathbf{k}_0}(\hat{\mathbf{r}})$ e

$kr = (\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{k}})\, r \sim \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{k}}_0\, r$ * vemos que

$$\Psi(\mathbf{r},t) = e^{i\omega_0 t}\, \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t, 0) + e^{i\omega_0 t} \frac{f_{\mathbf{k}_0}(\hat{\mathbf{r}})}{r} \underbrace{\int \frac{\varphi(\mathbf{k})}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\hat{\mathbf{k}}_0 r - \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 t)} d^3k}_{\Psi(\hat{\mathbf{k}}_0 (r + v_0 t),\, 0)}$$

pacote igual ao inicial centrado em $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 t$, como se não houvesse espalhamento

pacote cujo máximo é atingido quando

$\hat{\mathbf{k}}_0 (r - v_0 t) = \mathbf{r}_0 = -r_0 \hat{z}$

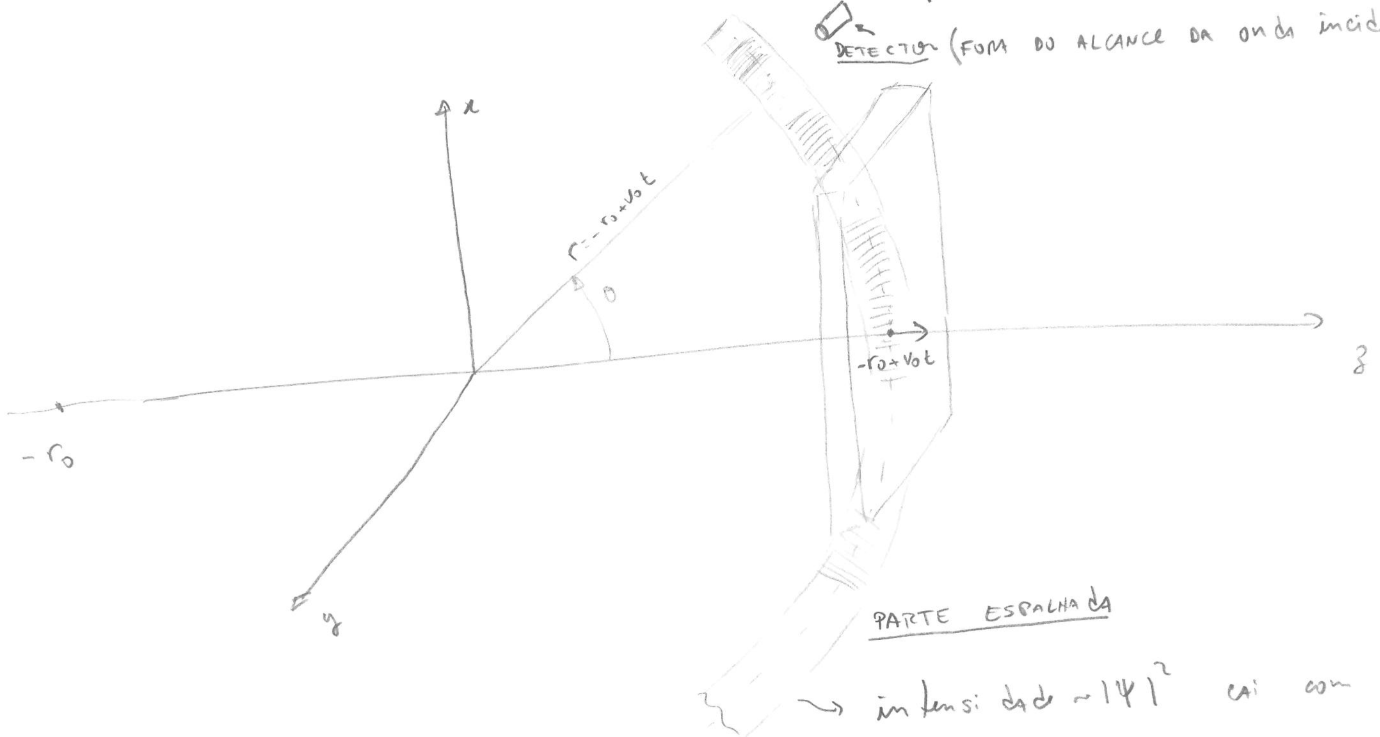
$\Rightarrow \boxed{r = -r_0 + v_0 t}$

independente da direção de $\mathbf{r}$!

$\Rightarrow$ ONDA ESFÉRICA. VALE p/ $t > r_0/v_0$

* Note que $\varphi(\mathbf{k})$ só é significativa se $|\mathbf{k}| \simeq k_0$ e se $\hat{\mathbf{k}} \approx \hat{\mathbf{k}}_0$. Se variarmos $\mathbf{k}$ a partir de $\mathbf{k}_0$ em uma direção diferente de $\hat{\mathbf{k}}_0$, φ vai a zero rapidamente. Veja $\varphi(\mathbf{k})$ na página 5 e note que as larguras β e γ são ≈ 0 (veja página 6 também).

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i\omega_0 t}\, \psi(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t, 0) + e^{i\omega_0 t}\, \frac{f_{\mathbf{k}_0}(\hat{\mathbf{r}})}{r}\, \psi(\hat{\mathbf{k}}_0 (r - v_0 t), 0)$$



$\rightsquigarrow$ intensidade $\sim |\psi|^2$ cai com $\frac{1}{r^2}$

e é modulada por $|f_{k_0}(\theta, \varphi)|^2$

A probabilidade de observarmos o pacote no detector com ângulo sólido $d\Omega$ entre t e $t + dt$ é:

$dA = r^2 d\Omega$

$\rightsquigarrow dr = v_0 dt$

$$\frac{|f_{k_0}(\hat{\mathbf{r}})|^2}{r^2}\, |\psi(\hat{z}(r - v_0 t), 0)|^2 * (r^2\, dr\, d\Omega) \qquad \text{onde} \quad dr = v_0\, dt$$

$\Rightarrow$ Probabilidade de observarmos a partícula no detector é

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f_{k_0}(\hat{\mathbf{r}})|^2\, |\psi(\hat{z}(r - v_0 t), 0)|^2\, v_0\, d\Omega\, dt = dn$$

pois temos no feixe 1 partícula p/ unidade de tempo. Assim

$$dn = |f_{\mathbb{K}_0}(\theta,\varphi)|^2 \, d\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\hat{z}(r - v_0 t), 0)|^2 \, v_0 \, dt$$

$$\xi = r - v_0 t \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} v_0 \, dt = -\int_{\infty}^{-\infty} d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \qquad e$$

$$dn = |f_{\mathbb{K}_0}(\theta,\varphi)|^2 \, d\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\hat{z}\xi, 0)|^2 \, d\xi = |f_{\mathbb{K}_0}(\theta,\varphi)|^2 \, I_0 \, d\Omega$$

(veja PÁGINA 7).

Assim,

$$\boxed{\frac{d\sigma_{\mathbb{K}_0}(\theta,\varphi)}{d\Omega} = \frac{dn}{I_0 \, d\Omega} = |f_{\mathbb{K}_0}(\theta,\varphi)|^2}$$

<u>DEMONSTRAÇÃO DAS HIPÓTESES DA PÁGINA 10</u> : <u>FUNÇÕES DE GREEN</u>

A equação que temos que resolver é

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V\right) \psi = E \psi \quad , \quad \text{ou}$$

$$\left(\nabla^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\right) \psi = 0$$

$$\boxed{(\nabla^2 + k^2)\psi = U\psi} \qquad \boxed{k^2 = 2\mu E/\hbar^2} \quad \boxed{U \equiv \frac{2\mu V}{\hbar^2}}$$

A solução geral dessa equação NÃO-homogênea pode ser escrita

omo:

$$\psi_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}) = \psi^0_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}) - \frac{1}{4\pi}\int G(\mathbb{r},\mathbb{r}')\, U(\mathbb{r}')\, \psi(\mathbb{r}')\, d^3r'$$

nde ψ^0 é solução da equação livre, i.e., $\psi^0_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r}}$,

A <u>função de Green</u> $G(\mathbb{r},\mathbb{r}')$ é solução de

$$(\nabla^2 + k^2)\, G = -4\pi\, \delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}')$$

PROVA:

$$\nabla^2 \psi_{\mathbb{k}} = \nabla^2 \psi^0_{\mathbb{k}} - \frac{1}{4\pi}\int \nabla^2 G\; U(\mathbb{r}')\,\psi(\mathbb{r}')\, d^3r'$$

$$= -k^2 \psi^0_{\mathbb{k}} - \frac{1}{4\pi}\int \left(-4\pi\,\delta(\mathbb{r}-\mathbb{r}') - k^2 G(\mathbb{r},\mathbb{r}')\right) U(\mathbb{r}')\,\psi(\mathbb{r}')\, d^3r'$$

$$= -k^2 \psi^0_{\mathbb{k}} + U(\mathbb{r})\psi(\mathbb{r}) - k^2 \underbrace{\left[-\frac{1}{4\pi}\int G(\mathbb{r},\mathbb{r}')\, U(\mathbb{r}')\,\psi(\mathbb{r}')\, d^3r'\right]}_{\psi_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}) - \psi^0_{\mathbb{k}}(\mathbb{r})}$$

$$= U(\mathbb{r})\psi(\mathbb{r}) - k^2 \psi_{\mathbb{k}}(\mathbb{r})$$

Vamos então calcular G e obter uma <u>equação integral</u> para ψ:

$$\psi_{\mathbb{k}}(\mathbb{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbb{k}\cdot\mathbb{r}} - \frac{1}{4\pi}\int G(\mathbb{r},\mathbb{r}')\, U(\mathbb{r}')\,\psi(\mathbb{r}')\, d^3r'$$

(note a semelhança formal com ψ^+ na página 10).

CÁLCULO DE G

Existem várias soluções possíveis para G, dependendo das condições de contorno impostas sobre ela. Faremos $G(\mathbb{r},\mathbb{r}') = G(\mathbb{r}-\mathbb{r}')$ e

$$G_{\mathbb{K}}(\mathbb{r}) = \int g(\mathbb{K}')\, e^{i\mathbb{K}'\mathbb{r}}\, d^3k'$$

$$\delta(\mathbb{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\mathbb{K}'\cdot\mathbb{r}}\, d^3k'$$

Substituindo na equação obtemos (fazemos $\mathbb{r}'=0$ agora e no final fazemos $\mathbb{r}\longrightarrow\mathbb{r}-\mathbb{r}'$) :

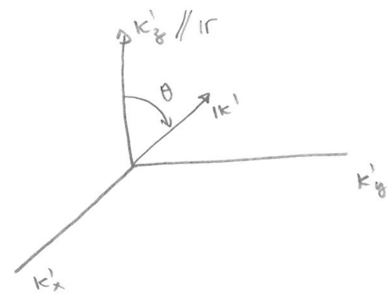
$$\int g(\mathbb{K}')\, \underbrace{\nabla^2\left(e^{i\mathbb{K}'\cdot\mathbb{r}}\right)}_{-k'^2 e^{i\mathbb{K}'\cdot\mathbb{r}}}\, d^3k' + k^2\int g(\mathbb{K}')\, e^{i\mathbb{K}'\cdot\mathbb{r}}\, d^3k' = -\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\int e^{i\mathbb{K}'\cdot\mathbb{r}}\, d^3k'$$

Assim,

$$g(\mathbb{K}')\left(k^2-k'^2\right) = -\frac{1}{2\pi^2} \longrightarrow \boxed{g(\mathbb{K}') = -\frac{1}{2\pi^2}\,\frac{1}{k^2-k'^2}}$$

e

$$G_{\mathbb{K}}(\mathbb{r}) = \frac{-1}{2\pi^2}\int \frac{e^{i\mathbb{K}'\cdot\mathbb{r}}}{k^2-k'^2}\, d^3k'$$



Escolhendo k'_3 paralelo à $\mathbb{r}$ temos

$$\mathbb{K}'\cdot\mathbb{r} = k'r\cos\theta$$

$$d^3k' = k'^2 dk' \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

Fazendo ainda $u=\cos\theta$, $du = -\sin\theta\, d\theta$ e

$$G_{\mathbb{K}}(\mathbb{r}) = -\frac{1}{2\pi^2} * 2\pi \int_{-1}^{+1} d\mu \int_0^{\infty} dk' \frac{e^{ik'r\mu}}{k^2-k'^2} \, k'^2$$

$$= -\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} dk' \frac{k'^2}{k^2-k'^2} \frac{1}{ik'r}\left(e^{ik'r} - e^{-ik'r} \right)$$

$$= -\frac{1}{i\pi r} \int_0^{\infty} \frac{k' dk'}{k^2-k'^2} e^{ik'r} + \frac{1}{i\pi r} \int_0^{\infty} \frac{k' e^{-ik'r}}{k^2-k'^2} dk'$$

Na segunda integral fazemos $k' \longrightarrow -k'$ e obtemos $-\frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^{0} \frac{k' e^{+ik'r}}{k^2-k'^2} dk'$ e

$$G_{\mathbb{K}}(\mathbb{r}) = -\frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik'r} \, k' dk'}{k^2-k'^2}$$

ou ainda

$$\boxed{G_{\mathbb{K}}(\mathbb{r}) = -\frac{1}{\pi r} \frac{d}{dr} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik'r}}{k'^2-k^2} dk' \right]}$$

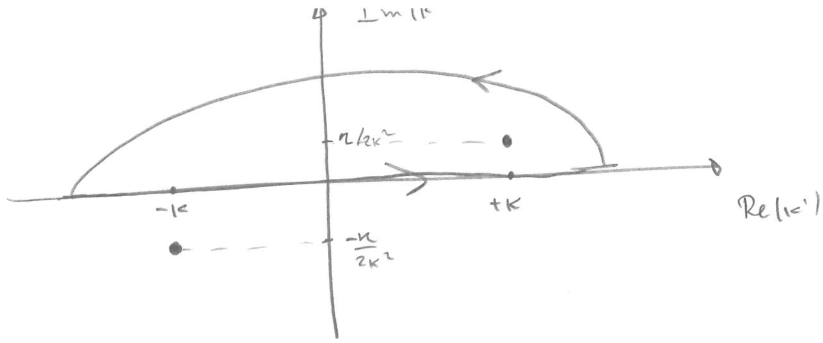
Polos em $k' = \pm k$

Como o caminho de integração passa pelos polos, temos que definir como iremos incluí-los no cálculo. Definimos então

$$G^+_{\mathbb{K}}(\mathbb{r}) = \lim_{n \to 0} -\frac{1}{\pi r} \frac{d}{dr} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik'r}}{k'^2-(k^2+in)} dk'$$

Os polos agora estão em $k' = \pm\sqrt{k^2+in} \simeq \pm k\left(1+\frac{in}{2k^2}\right)$

$$= \begin{cases} k + in/2k \\ -k - in/2k \end{cases}$$



A integral no circuito superior é nula, pois $\mathrm{Im}(k')>0$. Como apenas o polo à direita está incluído temos

$$G^{+}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi r}\frac{d}{dr}\left[\oint \frac{e^{ik'r}}{(k'-k)(k'+k)}\,dk'\right] = -\frac{1}{\pi r}\frac{d}{dr}\left[2\pi i\,\frac{e^{ikr}}{2k}\right]$$

$$= -\frac{i}{kr}\frac{d}{dr}\left(e^{ikr}\right) = \frac{e^{ikr}}{r}$$

Da mesma forma podemos definir $G^{-}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ trocando $\eta \to -\eta$ e o resultado é

$$\boxed{G^{\pm}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{\pm ikr}}{r}}$$

e

$$\psi^{\pm}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi}\int \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,U(\mathbf{r}')\,\psi^{\pm}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\,d^3r'\right]$$

O que nos interessa para a teoria de espalhamento é o comportamento de ψ para r grande. Como r' fica restrito à região $r'<a$, onde $U\neq 0$, podemos expandir

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = \sqrt{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2} = \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}' + r'^2} = r\sqrt{1 - \frac{2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2}} \approx r\left(1 - \frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^2}\right)$$

$$\approx r - \hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'$$

e

$$\psi^{\pm}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \frac{e^{\pm ikr}}{r} \int e^{\mp ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi^{\pm}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r' \right]$$

de onde identificamos

$$\boxed{f^{\pm}_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{(2\pi)^{3/2}}{4\pi} \int e^{\mp ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi^{\pm}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r'}$$

Note que essa solução para $\psi^{\pm}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ é apenas formal, pois $\psi^{\pm}$ aparece também na integral. Antes de vermos como esse problema pode ser resolvido, vamos provar nossa segunda hipótese na página 10, isto é, que $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},0)$ pode ser expresso em termos de $\psi^{+}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ com os mesmos coeficientes que usamos para ondas planas:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \varphi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0 + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k = \int \varphi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0} \psi^{+}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3k .$$

Para que isso seja verdade basta mostrar que

$$\int \varphi(\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0} \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi^{+}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r' d^3k = 0$$

A integral em d^3k é

$$\int \varphi(\mathbf{k})\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0 + ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\, \psi^{+}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\, d^3k \qquad (\varphi(\mathbf{k}) \text{ é centrada em } \mathbf{k}_0)$$

$$\approx \psi^{+}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}') \int \varphi(\mathbf{k})\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0 + ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\, d^3k \quad ; \quad k = \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{k}} \simeq \mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{k}}_0$$

$$\simeq \psi^{+}_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}') \underbrace{\int \varphi(\mathbf{k})\, e^{i\mathbf{k}\cdot(\hat{\mathbf{k}}_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| - \mathbf{r}_0)}\, d^3k}_{(2\pi)^{3/2}\psi_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{k}}_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|,\, 0)}$$

$(2\pi)^{3/2}\psi_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{k}}_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, 0)$ = função inicial calculada em $\mathbf{r} = (0, 0, |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$

Como $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, 0)$ é zero à direita do alvo, $\psi_{\mathbf{k}}(\hat{z}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|, 0) = 0$.

A APROXIMAÇÃO DE BORN

Assumindo que o espalhamento provocado pelo potencial $U(\mathbf{r})$ é "pequeno", podemos aproximar a ψ^+ que aparece na integral de $f^+_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}})$ na PÁG. 19 pela onda plana:

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'}\, U(\mathbf{r}')\, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}\, d^3r'$$

$$\boxed{f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)\int e^{i(\mathbf{k}-\bar{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{r}'}\, V(\mathbf{r}')\, d^3r'} \qquad \text{onde} \qquad \boxed{\bar{\mathbf{k}} \equiv k\hat{\mathbf{r}}}$$

transf. de Fourier do potencial.

Para potenciais centrais, $V = V(r)$, podemos escolher o eixo z' paralelo a $(\mathbf{k}-\bar{\mathbf{k}})$ e escrever

$$(\mathbf{k}-\bar{\mathbf{k}})\cdot\mathbf{r}' = |\mathbf{k}-\bar{\mathbf{k}}|\, r'\cos\theta' = \beta r'\cos\theta' \qquad \boxed{\beta \equiv |\mathbf{k}-\bar{\mathbf{k}}|}$$

$$d^3r' = r'^2\, dr'\, d\varphi'\, \sin\theta'\, d\theta'$$

Chamando ainda $\mu = \cos\theta$ obtemos

$$f_{\mathbf{k}}(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2\mu}{\hbar^2}\, 2\pi\int_{-1}^{1} d\mu \int_0^\infty dr'\, e^{i\beta r'\mu}\, V(r')\, r'^2$$

$$= -\frac{\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty r'^2 V(r')\,\frac{e^{i\beta r'} - e^{-i\beta r'}}{i\beta r'}\, dr' = -\frac{2\mu}{\beta\hbar^2}\int_0^\infty r' V(r')\sin\beta r'\, dr'$$

Finalmente, para $\mathbb{K} = \mathbb{K}_0 = k_0\hat{z}$

$$\beta^2 = (\mathbb{K}_0 - \mathbb{K})^2 = k_0^2 + \bar{k}^2 - 2\mathbb{K}_0\cdot\mathbb{K} = 2k_0^2 - 2k_0^2\hat{z}\cdot\hat{r}$$

$$= 2k_0^2(1-\cos\theta) = 4k_0^2\sin^2\theta/2 \qquad e \qquad \boxed{\beta = 2k_0\sin\theta/2}$$

e

$$\boxed{f_{\mathbb{K}_0}(\theta) = -\frac{\mu}{k_0\hbar^2\sin(\theta/2)}\int_0^\infty r'\,V(r')\sin\beta r'\,dr'} = \text{Aprox. de Born.}$$

Vemos que a aproximação é boa se k_0 é grande (altas energias)

ou se $\max\limits_{r<a} V(r)$ é pequeno.

Exemplos

1) $$V(r) = \frac{V_0\, e^{-\alpha r}}{\alpha r} \qquad \text{(Potencial de Yukawa)}$$

$$\int_0^\infty r'\,V(r')\sin\beta r'\,dr' = \frac{V_0}{2i\alpha}\int_0^\infty e^{-\alpha r'}\left(e^{i\beta r'} - e^{-i\beta r'}\right)dr'$$

$$= \frac{V_0}{2i\alpha}\left[\left.\frac{e^{(-\alpha+i\beta)r'}}{-\alpha+i\beta}\right|_0^\infty - \left.\frac{e^{(-\alpha-i\beta)r'}}{-\alpha-i\beta}\right|_0^\infty\right] = \frac{V_0}{2i\alpha}\left[\frac{1}{\alpha-i\beta} - \frac{1}{\alpha+i\beta}\right]$$

$$= \frac{V_0}{2i\alpha}\,\frac{2i\beta}{\alpha^2+\beta^2} = \frac{V_0\beta}{\alpha(\alpha^2+\beta^2)}$$

Substituindo em $f_{\mathbb{K}_0}(\theta)$ e usando $\beta = 2k_0\sin\theta/2$,

$$f_{k_0}(\theta) = \frac{-\mu}{\alpha k_0 \hbar^2 \sin(\theta/2)} \frac{V_0\, 2k_0 \sin(\theta/2)}{4k_0^2 \sin^2(\theta/2) + \alpha^2} = -\frac{2V_0\mu}{\alpha \hbar^2} \frac{1}{4k_0^2 \sin^2(\frac{\theta}{2}) + \alpha^2}$$

2) Potencial Coulombiano.

Tomando o limite $\alpha \to 0$ com $\frac{V_0}{\alpha} \to \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0} \equiv K$

obtemos

$$f_{k_0}(\theta) = -\frac{K\mu}{2\hbar^2 k_0^2} \frac{1}{\sin^2(\theta/2)}$$

e

$$\boxed{\frac{d\sigma_{k_0}}{d\Omega}(\theta) = \frac{\mu^2}{4\hbar^4 k_0^4} \frac{q_1^2 q_2^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}}$$

que coincide com o resultado clássico (veja PÁGINA 3 com $q_1 = ze$, $q_2 = Ze$, $\hbar k_0 = p_0 = \mu v_0$).

3) Barreira Esférica

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & \text{se} \quad r \leq a \\ 0 & \text{se} \quad r > a \end{cases}$$

$$\int_0^\infty r' V(r') \sin\beta r' \, dr' = V_0 \int_0^a r' \sin\beta r' \, dr'$$

$$= -\frac{V_0 r}{\beta} \cos\beta r \Big|_0^a + \frac{V_0}{\beta} \int_0^a \cos\beta r' \, dr' = -\frac{V_0 a}{\beta} \cos\beta a + \frac{V_0}{\beta^2} \sin\beta a$$

$$f_{K_0}(\theta) = \frac{-\mu}{k_0 \hbar^2 \sin(\theta/2)} \frac{V_0}{\beta^2} \left(\sin\beta a - \beta a \cos\beta a \right)$$

$$= \frac{-\mu V_0}{4 k_0^3 \hbar^2 \sin^3(\theta/2)} \left(\sin\beta a - \beta a \cos\beta a \right)$$

A SÉRIE PERTURBATIVA DE BORN

Voltemos agora à equação integral p/ $\psi^+_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ da página 18.

Chamando $\psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

podemos reescreve-la como

$$\psi^+(\mathbf{r}) = \psi^0(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi}\int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, U(\mathbf{r}')\, \psi^+(\mathbf{r}')\, d^3r'$$

ou

$$\langle \mathbf{r}|\psi^+\rangle = \langle \mathbf{r}|\psi^0\rangle - \frac{1}{4\pi}\int d^3r' \,\langle \mathbf{r}|G|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|U|\psi^+\rangle$$

onde $G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv \langle \mathbf{r}|G|\mathbf{r}'\rangle$. Formalmente temos

$$|\psi^+\rangle = |\psi^0\rangle - \frac{1}{4\pi} GU|\psi^+\rangle$$

(VEJA QUE G NÃO COMUTA COM U)

Essa equação pode ser resolvida p/ $|\psi^+\rangle$:

$$\left(1 + \frac{1}{4\pi}GU\right)|\psi^+\rangle = |\psi^0\rangle \longrightarrow \boxed{|\psi^+\rangle = \left(1+\frac{1}{4\pi}GU\right)^{-1}|\psi^0\rangle}$$

Usando $\displaystyle\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$ podemos escrever

$$|\psi^+\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{1}{4\pi}\right)^n (GU)^n |\psi^0\rangle$$

$$= |\psi^0\rangle - \frac{1}{4\pi}GU|\psi^0\rangle + \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 GUGU|\psi^0\rangle + \dots$$

ou

$$\psi^+(\mathbf{r}) = \psi^0(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi}\int \langle \mathbf{r}|G|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|U|\psi^0\rangle\, d^3r' + \frac{1}{(4\pi)^2}\int \langle \mathbf{r}|G|\mathbf{r}'\rangle\langle \mathbf{r}'|UG|\mathbf{r}''\rangle\langle \mathbf{r}''|U|\psi^0\rangle\, d^3r'\, d^3r'' \dots$$

$$= \Psi^0(\mathbf{r}) - \frac{1}{4\pi}\int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, U(\mathbf{r}')\, \Psi^0(\mathbf{r}')\, d^3r'$$

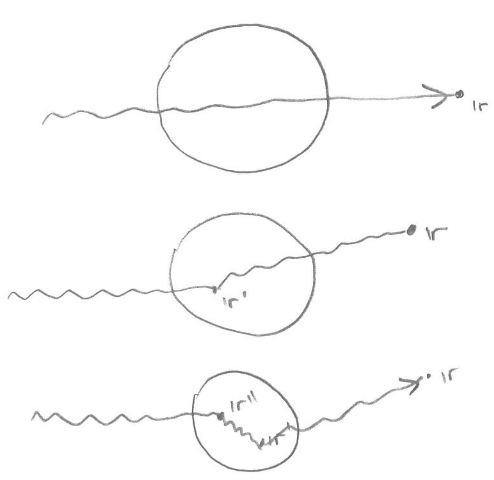
$$+ \frac{1}{(4\pi)^2}\int d^3r'\, d^3r''\, G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\, U(\mathbf{r}')\, G(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')\, U(\mathbf{r}'')\, \Psi^0(\mathbf{r}'') + \ldots\ldots$$

= [ONDA livre calculada em $\mathbf{r}$] +

[SOMA de infinitas ondas vindas de cada ponto do espalhador, $\mathbf{r}'$. A ONDA incidente $\Psi^0(\mathbf{r}')$ adquire amplitude $U(\mathbf{r}')$ e é propagada livremente por G até o ponto $\mathbf{r}$] +

[SOMA de ondas que interagem duas vezes com o potencial: $\Psi^0(\mathbf{r}'')$ ganha amplitude $U(\mathbf{r}'')$, propaga até $\mathbf{r}'$, ganha nova amplitude $U(\mathbf{r}')$ e propaga até $\mathbf{r}$.]

+ . . .



= não há interação +

partícula interage uma vez +

partícula interage duas vezes +

. . .

EXPANSÃO EM ONDAS PARCIAIS : PHASE SHIFTS

Para potenciais com simetria esférica, a solução da eq. de Schrödinger é da forma $\psi_{k\ell m}(r,\theta,\varphi) = \frac{u_{k\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$.

Podemos então resolver a equação radial para $u(r)$ e escrever ψ^+ em termos de $\psi_{k\ell m}$. Teremos dessa forma uma expansão de $f_{k}(\theta)$ em "ondas parciais". Como ψ^+ não depende de φ p/ $V = V(r)$, essas expansões só vão envolver $Y_{\ell 0}(\theta)$.

Da representação clássica do espalhamento vemos que o momento angular é dado por $L = \mu b v$, onde b é o parâmetro de impacto. Assim, quanto maior L, maior b e menor o espalhamento. Esperamos assim que os primeiros termos na expansão em ℓ contenham a parte principal da seção de choque. Note, por exemplo, que a aproximação de Born não consegue tratar a esfera dura (limite de $V_0 \to \infty$ no terceiro exemplo na página 23), enquanto que, para baixas energias $(k_0 a \ll 1)$ bastará calcular o termo em $\ell = 0$.

Como o espalhamento é um problema assintótico, começaremos por tratar a partícula livre em coordenadas esféricas.

A PARTÍCULA LIVRE EM COORD. ESFÉRICAS

A partícula livre é um caso particular do potencial central e suas auto-funções podem ser escritas como

$$\psi_{k,\ell,m}(r,\theta,\varphi) = \frac{u_{k,\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

onde

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right] u = E u \quad , \text{ ou}$$

$$\boxed{\frac{d^2 u}{dr^2} + k^2 u - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = 0} \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

Para $\ell = 0$ temos a equação de um oscilador harmônico clássico.

As soluções são

$$u_{k,0}(r) = \begin{cases} A \sin kr \\ \text{ou} \\ B \cos kr \end{cases}$$

ou combinação linear de ambas. Vamos tomar primeiro o seno.

A normalização, A, é obtida por

$$\int_0^\infty u^*_{k,0}(r)\, u_{k',0}(r)\, dr = \delta(k-k')$$

$$= |A|^2 \int_0^\infty \left(\frac{e^{ik'r} - e^{-ik'r}}{(2i)}\right)\left(\frac{e^{-ikr} - e^{ikr}}{(-2i)}\right) = \frac{|A|^2}{4}\int_0^\infty \left[e^{i(k+k')r} - e^{-i(k+k')r} + e^{i(k-k')r} + e^{-i(k-k')r}\right] dr$$

$$= \frac{|A|^2}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(e^{i(k+k')r} + e^{i(k-k')r} \right) dr = \frac{2\pi\, |A|^2}{4} \left(-\delta(k+k') + \delta(k-k') \right)$$

A primeira delta é sempre zero, pois $k, k' > 0$. Assim,

$$|A| = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$$ e

$$u_{k,0}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin kr$$

$$R_{k,0}(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \frac{\sin kr}{kr} \equiv \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_0(kr)$$

↑ função de Bessel esférica

Pode-se mostrar (veja, por exemplo, Cohen - complemento A_{VIII} ou Dicke-Wittke, cap. 10.4) que para $l \neq 0$

$$R_{k,l}(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr)$$ onde

$$j_l(\rho) = (-1)^l \rho^l \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^l \frac{\sin \rho}{\rho}$$

EXEMPLO: $l = 1$

$$j_1(\rho) = -\rho \left(\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \frac{\sin\rho}{\rho} \right) = -\frac{\cos\rho}{\rho} + \frac{\sin\rho}{\rho^2}$$

$$R_{k1}(\rho) = -\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \left[\frac{\cos kr}{kr} - \frac{\sin kr}{(kr)^2} \right]$$

Exercício: mostre que R_{k1} satisfaz à eq. radial para $l = 1$,

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{l(l+1)}{r^2} R = k^2 R$$

Para problemas de espalhamento é importante o comportamento assintótico dessas soluções, p/ $\rho = kr \to \infty$: Escrevendo

$$j_\ell(\rho) = (-1)^\ell \rho^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^{\ell-1} \left[\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho^3} \right]$$

↑ Termo dominante p/ ρ grande

$$\simeq (-1)^\ell \rho^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^{\ell-2} \left[-\frac{\sin\rho}{\rho^3} - \frac{3\cos\rho}{\rho^4} + \frac{3\sin\rho}{\rho^5} \right]$$

↑ Termo dominante

⋮

$$\simeq (-1)^\ell \rho^\ell \frac{1}{\rho^{\ell+1}} \left[(-1)^\ell \sin(\rho - \pi\ell/2) \right] = \frac{\sin(\rho - \ell\pi/2)}{\rho}$$

As funções de Bessel esféricas $j_\ell(\rho)$ são finitas na origem. Por exemplo, $j_0(0) = 1$ e $j_1(\rho) \rightsquigarrow \frac{5\rho}{6}$ p/ $\rho \to 0$.

A equação para $u_k(r)$ na página 28, no entanto, também admite as soluções do tipo $\cos kr$ para $\ell = 0$. Normalizando da mesma forma obtemos

$$R_{k0}(r) = -\sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} \frac{\cos kr}{kr} \equiv \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}}\, n_0(kr)$$

e, em geral;

$$R_{k\ell}(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}}\, n_\ell(kr)$$

$$n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell \left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^\ell \left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right) = \text{FUNÇÕES DE Neumann esféricas}$$

As funções $n_\ell(\rho)$ divergem na origem $\rho = 0$ e seu comportamento assintótico é dado por $-\frac{1}{\rho}\cos(\rho - \ell\pi/2)$.

RESUMO DA PARTÍCULA LIVRE

SOLUÇÃO geral da equação radial : $R_{k,\ell}(r) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}}\left[A\, j_\ell(kr) + B\, n_\ell(kr)\right]$

FUNÇÕES de Bessel esféricas :

$$j_\ell(z) = (-1)^\ell z^\ell \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^\ell \frac{\sin z}{z}$$

$$\lim_{z\to\infty} j_\ell(z) \simeq \frac{1}{z}\sin(z - \ell\pi/2)$$

$$\lim_{z\to 0} j_\ell(z) \simeq z^\ell$$

FUNÇÕES de Neumann esféricas :

$$n_\ell(z) = (-1)^{\ell+1} z^\ell \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^\ell \frac{\cos z}{z}$$

$$\lim_{z\to\infty} n_\ell(z) \simeq -\frac{1}{z}\cos(z - \ell\pi/2)$$

$$\lim_{z\to 0} n_\ell(z) = z^{-\ell-2}$$

Antes de voltarmos à teoria de espalhamento, lembramos uma fórmula importante :

$$\boxed{e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}\, j_\ell(kr)\, Y_{\ell,0}(\theta)}$$

PHASE SHIFTS

Na região $r > a$, onde $V(r) = 0$, a solução da equação radial é

$$R_{k,l}(r) = A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr) \quad ; \quad |A_l|^2 + |B_l|^2 = 1$$

(vamos omitir o pré-fator $\sqrt{2k^2/\pi}$). Como r é grande,

$$R_{k,l}(r) \sim \frac{A_l \sin(kr - l\pi/2)}{kr} - \frac{B_l \cos(kr - l\pi/2)}{kr}$$

Definindo $\boxed{tg\, \delta_l = -B_l / A_l}$ re-escrevemos

$$R_{k,l}(r) \simeq \frac{A_l/\cos\delta_l}{kr} \left[\sin(kr - l\pi/2) \cos\delta_l + \sin\delta_l \cos(kr - l\pi/2) \right]$$

$$\boxed{R_{k,l}(r) \simeq \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)}{kr}}$$

pois $\dfrac{A_l^2}{\cos^2\delta_l} = A_l^2 (1 + tg^2\delta_l) = A_l^2 + B_l^2 = 1$

Se $V(r) = 0$, $\delta_l = 0$ pois a solução deve ser regular na origem. Assim, os phase-shifts δ_l medem a ação do potencial, e podem ser relacionados com $f_k(\theta)$. Para isso vamos expandir $\Psi_k^+(r,\theta)$ na base de funções esféricas e comparar essa expansão com a forma da função radial acima:

Para r grande temos:

$$\psi_k^+(r,\theta) \sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{ikr\cos\theta} + f_k(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r}\right] \approx \sum_\ell a_\ell(k)\, Y_{\ell 0}(\theta)\,\frac{\sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)}{kr}$$

onde os a_ℓ devem ser determinados. Usando a fórmula da página 31 para r grande temos:

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}\;\frac{\sin(kr-\ell\pi/2)}{kr}\,Y_{\ell,0}(\theta) + f_k(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r}\right] = \sum_\ell a_\ell\, Y_{\ell 0}(\theta)\,\frac{\sin(kr-\ell\pi/2+\delta_\ell)}{kr}$$

Escrevendo os senos em termos de exponenciais e igualando os termos em $\left[e^{-ikr+i\ell\pi/2}\, Y_{\ell,0}(\theta)\right]/(2ikr)$ obtemos

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\, i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)} = a_\ell\, e^{-i\delta_\ell} \;\longrightarrow\; \boxed{a_\ell = \frac{i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}\; e^{i\delta_\ell}}{(2\pi)^{3/2}}}$$

Igualando agora os termos em e^{ikr} obtemos

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[\sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}\;\frac{e^{-i\ell\pi/2}}{2ikr}\,Y_{\ell,0}(\theta) + \frac{f_k(\theta)}{r}\right] = \sum a_\ell\, Y_{\ell,0}\,\frac{e^{-i\ell\pi/2+i\delta_\ell}}{2ikr}$$

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k}\sum (i)^\ell \sqrt{4\pi(2\ell+1)}\; Y_{\ell,0}(\theta)\, e^{-i\ell\pi/2}\left(\frac{e^{2i\delta_\ell}-1}{2i}\right)$$

. Usando $e^{-\frac{i\pi}{2}\ell} = (-i)^\ell$

$$\boxed{f_k(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2\ell+1)}\; Y_{\ell,0}(\theta)\, e^{i\delta_\ell}\sin\delta_\ell}$$

Essa última expressão é a análise em ondas parciais de $f_k(\theta)$. Cada termo é a contribuição de um valor bem definido de momento angular, como se, ao invez da onda plana incidente, uma onda incidente com aquele $\underline{l}$ atingisse o alvo.

Classicamente o parâmetro de impacto é dado por $b = \frac{L}{p}$. Escrevendo $L \sim \hbar l$, $p = \hbar k$, $\boxed{b \simeq l/k}$. Para uma energia fixa, quanto maior l maior b e menor o espalhamento.

Fazendo $b = a$ (o alcance do potencial) vemos que as contribuições principais ocorrem para $\boxed{l \lesssim ka}$. Se $ka \gg 1$ apenas $l=0$ (a <u>onda esférica</u>) contribui.

A seção de choque total pode ser obtida:

$$\sigma_{TOT} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta)\, d\Omega = \int |f_k(\theta)|^2\, d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l,l'} \sqrt{(2l+1)(2l'+1)}\; e^{i(\delta_l - \delta_{l'})} \sin\delta_l \sin\delta_{l'}$$

$$* \underbrace{\int Y_{l,0}(\theta)\, Y^*_{l',0}(\theta)\, d\Omega}_{\delta_{l,l'}}$$

$$\boxed{\sigma_{TOT} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2\delta_l}$$

Exemplo 1 — Esfera rígida

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{se} \quad r<a \\ 0 & \text{se} \quad r \geq a \end{cases}$$

para $r > a$ $\quad R_\ell(r) = A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(kr) \equiv A_\ell \left[j_\ell(kr) - \operatorname{tg}\delta_\ell \, n_\ell(kr) \right]$

como $R_\ell(a) = 0$, $\quad \operatorname{tg}\delta_\ell = \dfrac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)}$

Escrevendo a tangente explicitamente obtemos

$$\frac{e^{i\delta_\ell} - e^{-i\delta_\ell}}{e^{i\delta_\ell} + e^{-i\delta_\ell}} = \frac{i j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)} \quad ; \quad x \equiv e^{i\delta_\ell}$$

$$\frac{x^2-1}{x^2+1} = \frac{i j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)} \longrightarrow x^2\left(1 - \frac{i j_\ell}{n_\ell}\right) = 1 + \frac{i j_\ell}{n_\ell} \quad \text{e}$$

$$x^2 = \frac{n_\ell(ka) + i j_\ell(ka)}{n_\ell(ka) - i j_\ell(ka)} = -\frac{h_\ell^*(ka)}{h_\ell(ka)}$$

onde $h_\ell(z) = j_\ell(z) + i n_\ell(z)$ são as funções de Haenkel.

Assim

$$\boxed{\delta_\ell = \frac{1}{2i} \ln\left(-\frac{h_\ell^*(ka)}{h_\ell(ka)}\right)}$$

Para $l=0$

$$h_0(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho} - i\frac{\cos\rho}{\rho} = \frac{-i}{\rho}e^{i\rho}$$

$$-\frac{h_0^*}{h_0} = -\frac{ie^{-i\rho}/\rho}{-ie^{i\rho}/\rho} = e^{-2i\rho} \Rightarrow \boxed{\delta_0 = ka}$$

Para $l=1$

$$h_1(\rho) = \left[-\frac{\cos\rho}{\rho} + \frac{\sin\rho}{\rho^2}\right] + i\left[-\frac{\sin\rho}{\rho} - \frac{\cos\rho}{\rho^2}\right]$$

$$= -\frac{1}{\rho}e^{i\rho} - \frac{i}{\rho^2}e^{i\rho} = -\frac{ie^{i\rho}}{\rho^2}(1-i\rho)$$

Escrevendo $1-i\rho = \sqrt{1+\rho^2}\, e^{-i\varphi}$; $tg\,\varphi = \rho$,

$$h_1(\rho) = \frac{-i\sqrt{1+\rho^2}}{\rho^2}\, e^{i(\rho-\varphi)}$$

$$e^{2i\delta_1} = -\frac{h_1^*}{h_1} = -\frac{(+ie^{-i\rho+i\varphi})}{(-ie^{i\rho-i\varphi})} = e^{-2i\rho+2i\varphi}$$

$$\delta_1 = -ka + \varphi = -ka + \text{Arctg}(ka)$$

Exemplo 2 - Poço de Potencial

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } r < a \\ 0 & \text{si } r \geq a \end{cases}$$

Nesse caso as soluções radiais são:

(a) para $r < a$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} + \left(-V_0 + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}\right) u_\ell = E\, u_\ell \quad \text{ou}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} u_\ell = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2\mu} \quad \text{onde} \quad \boxed{k_1 \equiv \sqrt{2\mu(E+V_0)}/\hbar}$$

b) para $r > a$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} u_\ell = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad \text{onde} \quad \boxed{k \equiv \sqrt{2\mu E}/\hbar}$$

e

$$R_{k\ell}(r) = \begin{cases} C_\ell\, j_\ell(k_1 r) & \text{si } r < a \\ A_\ell\, j_\ell(kr) + B_\ell\, n_\ell(kr) & \text{si } r > a \; ; \; B_\ell \equiv -A_\ell \operatorname{tg}\delta_\ell \end{cases}$$

Impondo continuidade de $\psi(r,\theta) = \sum_\ell a_\ell R_{k\ell}(r) Y_{\ell 0}(\theta)$ e de sua derivada em $r = a$ p/ todo θ é o mesmo que impor continuidade de $R_{k\ell}(r)$ e sua derivada:

$$C_\ell\, j_\ell(k_1 a) = A_\ell\, j_\ell(ka) + B_\ell\, n_\ell(ka)$$

$$k_1 C_\ell\, j_\ell'(k_1 a) = k\left[A_\ell\, j_\ell'(ka) + B_\ell\, n_\ell'(ka)\right]$$

$$\Rightarrow \quad k_1 j_\ell'(k_1 a)\frac{\left[A_\ell j_\ell + B_\ell n_\ell\right]}{j_\ell(k_1 a)} = k A_\ell\, j_\ell'(ka) + k B_\ell\, n'(ka)$$

Para $l=0$ podemos escrever diretamente

$$R_{kl}(r) = \cos\delta_l\, j_l(kr) - \sin\delta_l\, n_l(kr)$$ com $A_l \equiv \cos\delta_l$, $B_l = -\sin\delta_l$, $\frac{B_l}{A_l} = -\operatorname{tg}\delta_l$

$$j_0(kr) = \frac{\sin(kr)}{kr}$$

$$n_0(kr) = -\frac{\cos(kr)}{kr}$$

$$R_{k0}(r) = \frac{\sin(kr+\delta_0)}{kr}$$ e as condições de continuidade ficam

1) $$C_0 \frac{\sin(k_1 a)}{k_1 a} = \frac{\sin(ka+\delta_0)}{ka}$$

2) $$C_0\left[\frac{\cos k_1 a}{a} - \cancel{\frac{\sin(k_1 a)}{k_1 a^2}}\right] = \frac{\cos(ka+\delta_0)}{a} - \cancel{\frac{\sin(ka+\delta_0)}{ka^2}}$$

pela 1ª equação

$$\frac{1}{k_1}\operatorname{tg} k_1 a = \frac{1}{k}\operatorname{tg}(ka+\delta_0)$$

$$\delta_0 = -ka + \psi$$ onde $$\boxed{\operatorname{tg}\psi = \frac{k}{k_1}\operatorname{tg} k a}$$

Determinação dos Phase-Shifts para Potenciais Centrais

Vamos assumir potenciais esféricos $V = V(r)$ com $V(r) = 0$ se $r \geq a$.

Mostraremos que os δ_ℓ's podem ser obtidos se conhecermos o valor de

$$\beta_\ell \equiv \left(\frac{a}{R_\ell} \frac{dR_\ell}{dr} \right)_{r=a}$$

Para $r \geq a$ podemos escrever

$$R_\ell(r) = A_\ell \, j_\ell(kr) + B_\ell \, n_\ell(kr) \quad ; \quad B_\ell = -A_\ell \operatorname{tg} \delta_\ell$$

$$\beta_\ell = ak \frac{A_\ell j'_\ell(ka) + B_\ell n'_\ell(ka)}{A_\ell j_\ell(ka) + B_\ell n_\ell(ka)}$$

$$= ak \frac{\cos\delta_\ell \, j'_\ell(ka) - \sin\delta_\ell \, n'_\ell(ka)}{\cos\delta_\ell \, j_\ell(ka) - \sin\delta_\ell \, n_\ell(ka)}$$

escrevendo $\cos\delta_\ell = \frac{1}{2}\left(e^{i\delta_\ell} + e^{-i\delta_\ell}\right)$; $\sin \frac{1}{2i}\left(e^{i\delta_\ell} - e^{-i\delta_\ell}\right)$

$$h_\ell = j_\ell + i n_\ell$$

$$h^*_\ell = j_\ell - i n_\ell$$

$$\frac{\beta_\ell}{ak}\left[e^{i\delta_\ell} h_\ell + e^{-i\delta_\ell} h^*_\ell \right] = e^{i\delta_\ell} h'_\ell + e^{-i\delta_\ell} h^{*\prime}_\ell \quad \text{ou},$$

multiplicando tudo por $ak \, e^{i\delta_\ell}$,

$$e^{2i\delta_\ell}\left[\beta_\ell h_\ell - ak\, h_\ell'\right] = ak\, h_\ell^{*'} - \beta_\ell h_\ell^*$$

$$e^{2i\delta} = \frac{-h_\ell^*\left(\beta_\ell - ak\,\frac{h_\ell^{*'}}{h_\ell^*}\right)}{h_\ell\left(\beta_\ell - ak\,\frac{h_\ell'}{h_\ell}\right)}$$

FINALmente notamos que z^*/z tem módulo 1 e definimos:

(a) $$-\frac{h_\ell^*}{h_\ell} \equiv e^{2i\xi_\ell}$$

(b) $$ka\,\frac{h_\ell'}{h_\ell} \equiv \Delta_\ell + iS_\ell \qquad \text{c/ } \Delta_\ell \text{ e } S_\ell \text{ reais}$$

veja que $$ka\,\frac{h'}{h} = ka\,\frac{(j'+in')}{j+in} = \frac{ka}{j^2+n^2}(j'+in')(j-in)$$

$$\Rightarrow \quad \Delta_\ell = \frac{ka}{j_\ell^2+n_\ell^2}\left(j_\ell j_\ell' + n_\ell n_\ell'\right)$$

$$S_\ell = \frac{ka}{j_\ell^2+n_\ell^2}\left(n_\ell' j_\ell - j_\ell' n_\ell\right)$$

Assim,

$$\boxed{e^{2i\delta_\ell} = e^{2i\xi_\ell}\left[\frac{\beta_\ell - \Delta_\ell + iS_\ell}{\beta_\ell - \Delta_\ell - iS_\ell}\right]}$$

Para um esfera rígida, $R(a) = 0$ e $\beta_\ell \to \infty$. Nesse caso $\delta_\ell = \xi_\ell$, como havíamos obtido diretamente na pág. (34a).

Veja que o momento angular da partícula é

$$\mu b v_0 = b\hbar k_0 \approx \ell \hbar \quad \to \quad \boxed{\ell \approx b k_0}$$

Para $b = a$ temos o valor máximo $\ell_{max} = a k_0$, e só precisamos calcular δ_ℓ de $\ell = 0$ a ℓ_{max}. Se $k_0 a \ll 1$, só $\ell = 0$ contribui de forma significativa.