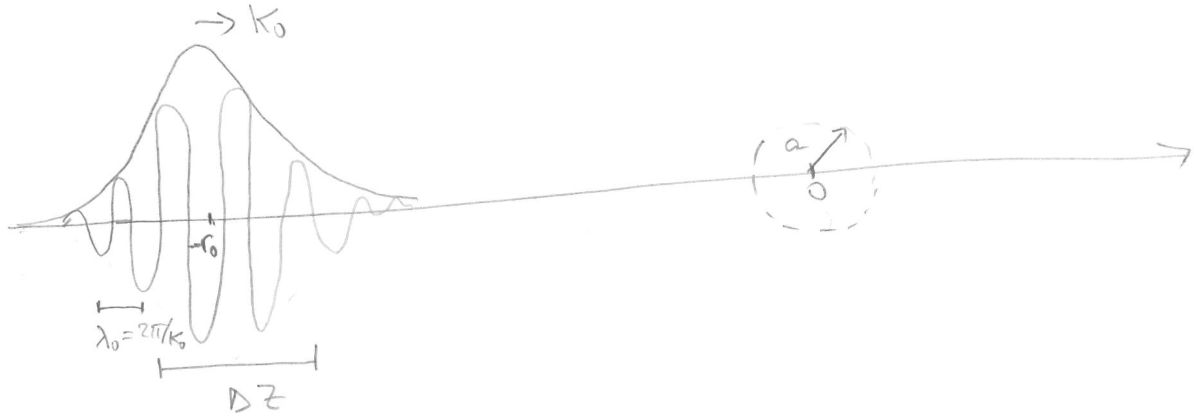
3 - Teoria Formal de Espalhamento

Problemas típicos de espalhamento são representados por Hamiltonianas da forma

$$H = H_0 + V$$

onde $H_0 = \mathbb{P}^2/2m$ e V é um potencial de alcance finito centrado na origem, onde fica o centro espalhador.

A descrição que fizemos anteriormente foi baseada em pacotes de onda, posicionado a uma distância r_0 à esquerda do alvo. A incerteza Δk_z no momento médio $\mathbb{k}_0 = (0,0,k_0) = k_0\hat{z}$ deve ser tal que $r_0 \gg \Delta z \sim \dfrac{1}{\Delta k_z}$:



A descrição do processo de espalhamento por pacotes de onda é fisicamente interessante, mas trás complicações matemáticas. Nesse capítulo vamos tomar o limite em que $\Delta k \to 0$ e trabalhar diretamente com as ondas planas.

Para isso alguns cuidados devem ser tomados. Se definimos $t=0$ como o momento em que o pacote de ondas atinge o alvo, então o momento inicial é $t_0 \approx -r_0/v_0 = -\dfrac{m r_0}{\hbar k_0}$.

Se fazemos $\Delta k_z \to 0$, $r_0 \to \infty$ e $t_0 \to -\infty$, nesse limite o envelope do pacote de ondas fica plano e obtemos a onda plana. Quando $t \to +\infty$ a partícula é livre novamente e podemos calcular a probabilidade de transição

$$\lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to +\infty}} \langle \Psi_{k'} | T(t, t_0) | \Psi_k \rangle \equiv S_{k'k} .$$

Devemos tomar esses limites de forma cuidadosa para que as integrais convirjam.

Seguindo o procedimento do capítulo 2, trabalharemos na representação de interação:

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle \equiv U_0^+(t) |\Psi(t)\rangle \quad ; \quad U_0(t) = e^{-iH_0 t/\hbar}$$

e

$$i\hbar \frac{d|\tilde{\Psi}\rangle}{dt} = \tilde{V} |\tilde{\Psi}\rangle \quad \text{com} \quad \tilde{V} = U_0^+ V U_0 .$$

Vamos supor que V é independente do tempo. Escrevendo

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \tilde{T}(t, t_0) |\tilde{\Psi}(t_0)\rangle$$

vemos que $\quad i\hbar \dfrac{d\tilde{T}}{dt} = \tilde{V}\tilde{T} \quad$ e

$$\tilde{T}(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} \tilde{V}(t') \tilde{T}(t', t_0) \, dt' .$$

Assim

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = \sum_{k,s} |k\rangle\langle k|\tilde{T}(t,t_0)|s\rangle\langle s|\tilde{\Psi}(t_0)\rangle \quad \text{e}$$

$$\langle k|\tilde{T}(t,t_0)|s\rangle = \delta_{ks} - \frac{i}{\hbar}\sum_n \langle k|V|n\rangle \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{kn}t'} \langle n|\tilde{T}(t',t_0)|s\rangle\, dt'$$

No caso mais geral de $H_0 = \mathbb{P}^2/2m$ $\quad \delta_{ks} \rightarrow \delta(\mathbb{K}-\mathbb{K}')$ onde $\mathbb{K}$ e $\mathbb{K}'$ são os momentos incidentes e espalhados, com $K=K'$ devido à conservação de energia (espalhamento elástico). Nesse caso usaremos

$$\Psi_{\mathbb{K}}(\mathbb{r}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbb{K}\cdot\mathbb{r}} \quad \text{com} \quad K_i L = 2\pi n_i$$

$$\rho(E) = \frac{mKL^3}{2\pi^2\hbar}$$

$\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3$ = densidade de estados no espaço $\mathbb{K}$.

Vamos definir a matriz S de espalhamento como

$$\boxed{S_{ks} = \langle k|\tilde{T}(+\infty,-\infty)|s\rangle}$$

e os limites $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow +\infty$ devem ser tomados de forma que S_{ks} convirja.

Na aproximação perturbativa esse elemento de matriz ficaria

$$\langle k|\tilde{T}|s\rangle = \delta_{ks} - \frac{i}{\hbar}\langle k|V|s\rangle \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ks}t'}\, dt' .$$

Vamos usar isso como sugestão e definir

$$\boxed{\langle k|\tilde{T}(t,t_0)|s\rangle \equiv \delta_{ks} - \frac{i}{\hbar} T_{ks} \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ks}t' + \alpha t'}\, dt'}$$

com $\alpha > 0$ para que $\alpha t_0 \rightarrow 0$ quando $t_0 \rightarrow -\infty$.

Além disso, vamos tomar o limite $\alpha \to 0$ deve ser tomado só depois do limite $t_0 - \infty$ e o tempo final deve ser não muito grande, de forma que

$$|t| << \frac{1}{\alpha} \quad \text{ou} \quad \boxed{\alpha t << 1}.$$

Supondo que existam os elementos da matriz de transição T_{ks}

vemos que

$$\langle k|\tilde{T}(t,-\infty)|s\rangle = \delta_{ks} + T_{ks}\frac{e^{i\omega_{ks}t+\alpha t}}{\hbar(-\omega_{ks}+i\alpha)}.$$

Quando $t \to \infty$ com $\alpha t << 1$ isso tende a $\lim_{t\to\infty} \frac{e^{i\omega_{ks}t}}{\omega_{ks}} = 2\pi i\delta(\omega_{ks})$ e

$$\boxed{\langle k|\tilde{T}(\infty,-\infty)|s\rangle = \delta_{ks} - 2\pi i\delta(E_k-E_s)T_{ks}}$$

Para $k \neq s$ e tempos finitos

$$|\langle k|\tilde{T}(t,-\infty)|s\rangle|^2 = \frac{|T_{ks}|^2 e^{2\alpha t}}{\hbar^2(\omega_{ks}^2+\alpha^2)}$$

e a taxa de transição fica

$$\frac{d}{dt}|\langle k|\tilde{T}(t,-\infty)|s\rangle|^2 = \frac{2\alpha}{\omega_{ks}^2+\alpha^2}\frac{1}{\hbar^2}|T_{ks}|^2.$$

O limite de $\alpha \to 0$ diverge quando $\omega_{ks}=0$, pois obtemos $\lim_{\alpha\to 0}\frac{2}{\alpha}$. Se $\omega_{ks} \neq 0$ o limite dá zero. De fato obtemos uma delta:

$$\frac{d}{dt}|\langle k|\tilde{T}(t,-\infty)|s\rangle|^2 = \frac{2\pi}{\hbar^2}\delta(\omega_{ks})|T_{ks}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_k-E_s)|T_{ks}|^2$$

que é independente do tempo, como na teoria de perturbação. No entanto essa teoria é exata.

Usando estados do tipo onda plana para H_0, onde $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$,

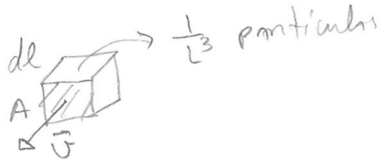
$$\delta(E_k - E_{k'}) = \frac{m}{\hbar^2 k}\, \delta(k - k')$$

e calculamos a taxa de transição W de $\mathbb{k} \to \mathbb{k}'$ somando sobre todos os estados $\mathbb{k}'$ com $|\mathbb{k}'| = k$ e direção de $\mathbb{k}'$ dentro de um ângulo sólido específico $d\Omega$. Como a densidade de estados no espaço $\mathbb{k}$ é $(L/2\pi)^3$ obtemos *

$$W = \sum_{\mathbb{k}'} \frac{d}{dt} \left| \langle \mathbb{k}' | \tilde{T}(t,-\infty) | \mathbb{k} \rangle \right|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}\, d\Omega \int_0^\infty \frac{m}{\hbar^2 k}\, \delta(k - k')\, |T_{\mathbb{k}'\mathbb{k}}|^2\, k'^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk'$$

$$= \frac{m k L^3}{4\pi^2 \hbar^3}\, |T_{\mathbb{k}'\mathbb{k}}|^2\, d\Omega .$$

Para relacionar com a seção de choque igualamos $W = I_0\, d\sigma$ onde W mede quantas partículas são espalhadas e I_0 quantas partículas são incidentes por unidade de área. A densidade de partículas no volume L^3 é $1/L^3$. Se $v = \hbar k / m$ então $I_0 = v / L^3$:



$$I_0 = \left(\frac{1}{L^3}\right) A \cdot \frac{dl}{dt} = \frac{v}{L^3} \quad p/\ A = 1$$

Assim

$$\boxed{d\sigma = \left(\frac{m L^3}{2\pi \hbar^2}\right)^2 |T_{\mathbb{k}'\mathbb{k}}|^2\, d\Omega}$$

* Veja que $\Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k_z = 2\pi / L$, pois $k_i L = 2\pi n_i$. Assim, dois estados vizinhos estão separados por $\Delta^3 k = (2\pi/L)^3$ e a densidade é $\Delta n / \Delta^3 k = 1/\Delta^3 k = (L/2\pi)^3$.

3.2 - Equações Integrais

Vamos agora usar a definição de T_{ks} na equação principal para a amplitude de transição:

$$\langle k|\tilde{T}(t,-\infty)|s\rangle = \delta_{ks} - \frac{i}{\hbar}\sum_n \langle k|V|n\rangle \int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{kn}t'} \langle n|\tilde{T}(t',-\infty)|s\rangle\, dt' ,$$

$$\delta_{ks} - \frac{i}{\hbar} T_{ks} \underbrace{\int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{ks}t'+\alpha t'} dt'}_{\frac{e^{i\omega_{ks}t+\alpha t}}{(i\omega_{ks}+\alpha)}} = \delta_{ks} - \frac{i}{\hbar}\sum_n \langle k|V|n\rangle \,*$$

$$\int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{kn}t'} \Big[\delta_{ns} - \frac{i}{\hbar} T_{ns} \underbrace{\int_{-\infty}^{t'} e^{i\omega_{ns}t''+\alpha t''} dt''}_{\frac{e^{i\omega_{ns}t'+\alpha t'}}{i\omega_{ns}+\alpha}} \Big] dt'$$

$$T_{ks} \frac{e^{i\omega_{ks}t+\alpha t}}{i\omega_{ks}+\alpha} = \sum_n \langle k|V|n\rangle \left[\int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{kn}t'} \delta_{ns}\, dt' - \int_{-\infty}^{t} \frac{i T_{ns}}{\hbar(i\omega_{ns}+\alpha)} e^{i(\omega_{kn}+\omega_{ns})t'+\alpha t'} dt' \right]$$

$$= \langle k|V|s\rangle \frac{e^{i\omega_{ks}t}}{i\omega_{ks}} - \frac{i}{\hbar}\sum_n \langle k|V|n\rangle\, T_{ns} \frac{e^{i(\omega_{ks})t+\alpha t}}{(i\omega_{ns}+\alpha)(i\omega_{ks}+\alpha)}$$

Tomando limite $\alpha t \to 0$,

$$\boxed{T_{ks} = \langle k|V|s\rangle + \frac{1}{\hbar}\sum_n \frac{\langle k|V|n\rangle T_{ns}}{-\omega_{ns}+i\alpha}}$$

Os estados $|n\rangle$ são autoestados de H_0, ondas planas sobre toda a caixa de volume L^3. Queremos agora conectar esses estados com aqueles do tipo pacote de ondas, que são soluções para um pacote que chega ao espalhador e se dispersa a partir dele.

Na aproximação de 1ª ordem de perturbação, $T_{KS} \sim \langle K|V|S\rangle$.

Vamos então definir $|\Psi_s^+\rangle$ tal que

$$T_{KS} = \langle \Psi_K | V | \Psi_s^+ \rangle$$

A equação para T_{KS} se transforma em uma equação para $|\Psi^+\rangle$:

$$\langle \Psi_K | V | \Psi_s^+ \rangle = \langle \Psi_K | V | \Psi_s \rangle + \sum_n \frac{\langle \Psi_K | V | \Psi_n \rangle}{E_s - E_n + i\hbar\alpha} \langle \Psi_n | V | \Psi_s^+ \rangle$$

ou

$$|\Psi_s^+\rangle = |\Psi_s\rangle + \sum_n \frac{\langle \Psi_n | V | \Psi_s^+ \rangle}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha} |\Psi_n\rangle$$

ou ainda

$$\boxed{|\Psi_s^+\rangle = |\Psi_s\rangle + \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha} V |\Psi_s^+\rangle} \equiv \text{EQUAÇÃO DE LIPMANN-SCHWINGER}$$

A onda $|\Psi_s^+\rangle$ corresponde à onda incidente de H_0 mais a parte espalhada por V. Aplicando o operador $E_s - H_0 + i\hbar\alpha$ dos dois lados e fazendo $\alpha \to 0$ vemos que

$$(E_s - H_0)|\Psi_s^+\rangle = (E_s - H_0)|\Psi_s\rangle + V|\Psi_s^+\rangle$$

$$= V|\Psi_s^+\rangle \quad , \text{ ou}$$

$$\boxed{(H_0 + V)|\Psi_s^+\rangle = E_s |\Psi_s^+\rangle}$$

que mostra que $|\Psi_s^+\rangle$ é solução de H com a mesma energia incidente E_s.

A equação

$$(E_s - H_0)|\Psi_s^+\rangle = V|\Psi_s^+\rangle$$

pode ser vista como uma equação não homogênea, cuja solução é

$$|\Psi_s^+\rangle = |\Psi_s\rangle + G_+(E_s)V|\Psi_s^+\rangle$$

onde a função de Green G_+ deve satisfazer

$$(E_s - H_0)G_+(E_s) = 1 - \mathbb{P} \qquad ; \qquad \mathbb{P} = |\Psi_s\rangle\langle\Psi_s| .$$

A condição p/ solução, que $V|\Psi_s^+\rangle$ seja ortogonal à $|\Psi_s\rangle$ não será satisfeita, mas como pensamos no espectro contínuo, essa não deve ser crítica. Uma ortogonalidade com apenas um estado não deve se crítica. Uma solução dessa equação é de fato

$$G_+(E_s) = \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha} .$$

Isso pode ser visto aplicando a equação primeiro em $|\Psi_s\rangle$:

$$(E_s - H_0)\frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha}|\Psi_s\rangle = 0 \quad \text{p/ } \alpha \text{ fixo}$$

$$= (1-\mathbb{P})|\Psi_s\rangle = 0$$

ou em um estado $|\Psi_K\rangle \perp$ à $|\Psi_s\rangle$;

$$(E_s - H_0)\frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha}|\Psi_K\rangle = \frac{E_s - E_K}{E_s - E_K + i\hbar\alpha}|\Psi_K\rangle \to |\Psi_K\rangle$$

$$= (1-\mathbb{P})|\Psi_K\rangle = |\Psi_K\rangle .$$

Na representação de posição, usando

$$\langle \mathbf{r} | \psi_s^+ \rangle = \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r})$$

$$\langle \mathbf{r} | \psi_s \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\langle \mathbf{r}' | V | \mathbf{r}'' \rangle = V(\mathbf{r}')\,\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')$$ obtemos

$$\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int \langle \mathbf{r} | G_+(E_s) | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | V | \mathbf{r}'' \rangle \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}'')\, d^3r'\, d^3r''$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \int \langle \mathbf{r} | G_+(E_s) | \mathbf{r}' \rangle V(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}')\, d^3r'$$

Podemos ainda escrever

$$\langle \mathbf{r} | G_+(E_s) | \mathbf{r}' \rangle = \int d^3k' \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha} | \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r}' \rangle$$

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})}}{k^2 - k'^2 + i\varepsilon} \frac{2m}{\hbar^2}\, d^3k' \quad ; \quad \varepsilon \equiv \frac{2m\alpha}{\hbar}$$

e

$$\boxed{\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k'^2 - (k^2 + i\varepsilon)}\, d^3k'\, \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{r}')\, d^3r'}$$

Essas funções são chamadas de "outgoing".

Veja que

$$T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \langle \psi_{\mathbf{k}'} | V | \psi^+_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}')\, \psi^+(\mathbf{r}')\, d^3r'$$

que é parte do integrando de ψ^+. Para conectar essa expressão com a amplitude de espalhamento fazemos primeiramente a integral sobre d^3k':

$$\int \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2-k'^2-i\varepsilon}\, d^3k' = -2\pi^2 \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Como $V(\mathbf{r}')$ só é importante se $r'<a$ podemos calcular $\psi^+_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ para $r >> r'$ aproximando $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx r - \hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'$ no expoente e $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \sim r$ no denominador. Assim

$$\psi^+_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \frac{2m}{\hbar^2}\cdot\frac{2\pi^2}{(2\pi)^{3/2}}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-ik\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'}\, V(\mathbf{r}')\, \psi^+(\mathbf{r}')\, d^3r' \right]$$

Identificamos então

$$f_{\mathbf{k}}(\hat{r}) = +\frac{4m\pi^2}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int e^{-ik\hat{r}\cdot\mathbf{r}'}\, V(\mathbf{r}')\, \psi^+(\mathbf{r}')\, d^3r'$$

ou

$$\boxed{f_{\mathbf{k}}(\hat{r}) = +\frac{4m\pi^2}{\hbar^2}\, T_{k\hat{r},\mathbf{k}}}$$

e

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{4m\pi^2}{\hbar^2}\right) \left| T_{\bar{\mathbf{k}},\mathbf{k}} \right|^2$$ onde $\bar{\mathbf{k}} = k\hat{r}$

Esse resultado é o mesmo que obtivemos na pag. 68, fazendo $L^3 \to (2\pi)^3$. Note que a expressão

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

é exata. Olhamos o limite de $r\to\infty$ apenas para extrair $f_{\mathbf{k}}(\hat{r})$.

Finalmente é possível definir

$$G_-(E_s) = \frac{1}{E_s - H_0 - i\hbar\alpha}$$

$$G_1(E_s) = \frac{1}{2}\left(G_+ + G_-\right) = \mathcal{P}\left(\frac{1}{E_s - H_0}\right).$$

As funções de onda correspondentes $\psi^-(\mathbf{r})$ e $\psi^1(\mathbf{r})$ são chamadas de "incoming" e "estacionária". Em particular

$$|\psi^-_{\mathbf{k}}\rangle = |\psi_{\mathbf{k}}\rangle + \frac{1}{E_k - H_0 - i\hbar\alpha} V|\psi^-_{\mathbf{k}}\rangle.$$

3.3 Propriedades dos Estados de Espalhamento

Se conseguirmos determinar $|\Psi_s^+\rangle$ poderemos calcular $T_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} = \langle \Psi_{\mathbf{k}'} | V | \Psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle$ e, portanto, as seções de choque. Podemos escrever duas equações para $|\Psi_s^+\rangle$:

$$\boxed{|\Psi_s^+\rangle = |\Psi_s\rangle + \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha} V |\Psi_s^+\rangle = |\Psi_s\rangle + G_+(E_s) V |\Psi_s^+\rangle}$$

ou, multiplicando tudo por $E_s - H_0 + i\hbar\alpha$ e subtraindo $V|\Psi^s\rangle$,

$$(E_s - H_0 + i\hbar\alpha)|\Psi_s^+\rangle - V|\Psi_s\rangle = (E_s - H_0 + i\hbar\alpha - V)|\Psi_s\rangle + V|\Psi_s^+\rangle$$

$$(E_s - H + i\hbar\alpha)|\Psi_s^+\rangle = (E_s - H + i\hbar\alpha)|\Psi^s\rangle + V|\Psi_s\rangle \quad \text{ou}$$

$$\boxed{|\Psi_s^+\rangle = |\Psi_s\rangle + \frac{1}{E_s - H + i\hbar\alpha} V |\Psi_s\rangle \equiv |\Psi_s\rangle + g_+(E_s) V |\Psi_s\rangle}$$

As duas funções de Green $G_+(E)$ e $g_+(E)$ estão ligadas por uma relação simples:

$$g_+ = \frac{1}{E - H + i\hbar\alpha} = \frac{1}{E - H_0 - V + i\hbar\alpha}$$

$$(E - H_0 - V + i\hbar\alpha)\, g_+ = 1$$

$$[G_+^{-1} - V]\, g_+ = 1$$

$$[1 - G_+ V]\, g_+ = G_+ \quad \text{ou}$$

$$\boxed{g_+ = G_+ + G_+ V g_+}$$

A solução de $|\psi_s^+\rangle$ com g^+ é inútil, pois envolve H, cujas auto-funções estamos justamente procurando. Vemos no entanto que $g_+ = G_+ + O(V)$, o que nos dá um esquema perturbativo:

$$g_+ = G_+ + G_+V\left[G_+ + G_+Vg_+\right]$$

$$= G_+ + G_+VG_+ + G_+VG_+V\left[G_+ + G_+Vg_+\right]$$

$$\vdots$$

$$= \left[\sum_{k=0}^{n}(G_+V)^k\right]G_+ + (G_+V)^{n+1}g_+$$

Com isso obtemos uma solução em série para $|\psi_s^+\rangle$:

$$\boxed{|\psi_s^+\rangle = |\psi_s\rangle + G_+(E_s)V|\psi_s\rangle + G_+(E_s)VG_+(E_s)V|\psi_s\rangle + \ldots}$$

que é a série de Born. Note que essa solução poderia ter sido obtida formalmente também a partir da primeira equação na página anterior:

$$|\psi_s^+\rangle = |\psi_s\rangle + G_+V|\psi_s^+\rangle$$

$$(1 - G_+V)|\psi_s^+\rangle = |\psi_s\rangle$$

$$|\psi_s^+\rangle = \frac{1}{1-G_+V}|\psi_s\rangle = \sum_{k=0}^{\infty}(G_+V)^k|\psi_s\rangle$$

Na aproximação de ordem mais baixa obtemos

$$f_{k'k} = \frac{-m}{2\pi\hbar^2}\int e^{-ik'\cdot r}\,V\,e^{ik\cdot r}\,d^3r = \frac{-mL^3}{2\pi\hbar^2}\langle k'|V|k\rangle .$$

Finalmente vemos que se $\langle \psi_k | \psi_s \rangle = \delta_{ks}$, então os estados de espalhamento associados também serão ortogonais:

$$\langle \psi_k^+ | \psi_s^+ \rangle = \left[\langle \psi_k | + \langle \psi_k | V \frac{1}{E_k - H - i\hbar\alpha} \right] | \psi_s^+ \rangle$$

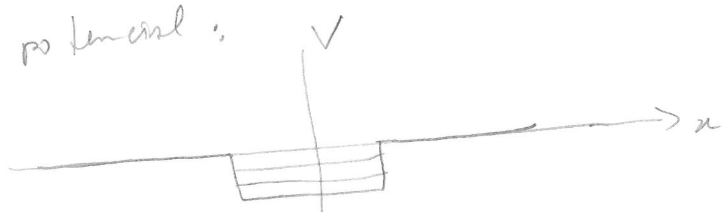
$$= \langle \psi_k | \psi_s^+ \rangle + \langle \psi_k | V \frac{1}{E_k - E_s - i\hbar\alpha} | \psi_s^+ \rangle$$

$$= \langle \psi_k | \psi_s^+ \rangle + \langle \psi_k | \frac{1}{H_0 - E_s - i\hbar\alpha} V | \psi_s^+ \rangle$$

$$= \langle \psi_k | \left[| \psi_s^+ \rangle - \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha} V | \psi_s^+ \rangle \right]$$

$$= \langle \psi_k | \psi_s \rangle = \delta_{ks} .$$

Note que para cada estado $|\psi_s\rangle$ geramos $|\psi_s^+\rangle$ e $|\psi_s^-\rangle$. Esse conjunto de estados, no entanto, pode não ser completo. Se V induzir estados ligados, eles não poderão ser relacionados com estados de H_0. Um exemplo é espalhamento por um poço de potencial:



Assim, as relações de completeza são

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1$$

$$\sum_n |\psi_n^\pm\rangle\langle\psi_n^\pm| + \sum_i |\psi^b\rangle\langle\psi^b| = 1$$

onde $|\psi^b\rangle$ = estados ligados de H.

3.4 Propriedades da Matriz S

Nesta seção vamos mostrar três propriedades importantes da matriz de espalhamento S:

(1) $$S_{ks} = \langle k | \tilde{T}(\infty, -\infty) | s \rangle = \langle \psi_k^- | \psi_s^+ \rangle$$

Para provar essa relação começamos escrevendo

$$|\psi_k^- \rangle = |\varphi_k \rangle + \frac{1}{E_k - H_0 - i\hbar\alpha} V |\psi_k^- \rangle .$$

Multiplicando tudo por $E_k - H_0 - i\hbar\alpha$ e subtraindo $V|\psi_k\rangle$ obtemos

$$|\psi_k^- \rangle = |\varphi_k \rangle + \frac{1}{E_k - H - i\hbar\alpha} V |\varphi_k \rangle .$$

Assim,

$$\langle \psi_k^- | \psi_s^+ \rangle = \langle \varphi_k | \psi_s^+ \rangle + \langle \varphi_k | V \frac{1}{E_k - H + i\hbar\alpha} | \psi_s^+ \rangle$$

$$= \langle \varphi_k | \varphi_s \rangle + \langle \varphi_k | \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\alpha} V | \psi_s^+ \rangle + \langle \varphi_k | V \frac{1}{E_k - H + i\hbar\alpha} | \psi_s^+ \rangle$$

$$= \delta_{ks} + \left[\frac{1}{E_s - E_k + i\hbar\alpha} + \frac{1}{E_k - E_s + i\hbar\alpha} \right] \langle \varphi_k | V | \psi_s^+ \rangle$$

$$= \delta_{ks} + \frac{-2i\hbar\alpha}{(E_k - E_s)^2 + \hbar^2\alpha^2} T_{ks} = \delta_{ks} - 2\pi i \delta(E_k - E_s) T_{ks}$$

$$= S_{ks} .$$

(2) Definimos os operadores S, T, $\Omega^{(+)}$, $\Omega^{(-)}$ por

$$S_{KS} = \langle K | S | s \rangle$$

$$|\Psi_K^+\rangle = \Omega^{(+)} |\Psi_K\rangle$$

$$|\Psi_K^-\rangle = \Omega^{(-)} |\Psi_K\rangle$$

$$T_{KS} = \langle K | T | s \rangle = \langle K | V | \Psi_s^+ \rangle = \langle K | V \Omega^{(+)} | s \rangle$$

Fica claro que $S = \tilde{T}(+\infty, -\infty)$

$$\boxed{T = V \Omega^{(+)}}$$

Da propriedade anterior vemos ainda que

$$S_{KS} = \langle \Psi_K^- | \Psi_s^+ \rangle = \langle \Psi_K | \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} | \Psi_s \rangle \quad \text{e}$$

$$\boxed{S = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)}}$$

Além disso,

$$H \Omega^{\pm} |\Psi_r\rangle = H |\Psi_r^{\pm}\rangle = E_r |\Psi_r^{\pm}\rangle$$

$$\Omega^{\pm} H_0 |\Psi_r\rangle = E_r \Omega^{\pm} |\Psi_r\rangle = E_r |\Psi_r^{\pm}\rangle \rightarrow \boxed{H \Omega^{\pm} = \Omega^{\pm} H_0}$$

e

$$S H_0 = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} H_0 = \Omega^{(-)\dagger} H \Omega^{(+)}$$

$$H_0 S = H_0 \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} = \Omega^{(-)\dagger} H \Omega^{(+)} \rightarrow \boxed{[S, H_0] = 0}$$

(3) S é unitária : $S^\dagger S = S S^\dagger = 1$

$$\sum_n (S^\dagger)_{\ell n} S_{nj} = \sum_n S^*_{n\ell} S_{nj} = \sum_n \langle \psi^+_\ell | \psi^-_n \rangle \langle \psi^-_n | \psi^+_j \rangle$$

$$= \langle \psi^+_\ell | \left[\mathbb{1} - \sum_i | \psi^b_i \rangle \langle \psi^b_i | \right] | \psi^+_j \rangle$$

$$= \langle \psi^+_\ell | \psi^+_j \rangle = \delta_{\ell j}$$

onde usamos a relação de completeza da pag. 76 e o fato de que os estados de espalhamento são ortogonais aos estados ligados de H, que são localizados.

3.5 Invariância Rotacional e por Reversão Temporal

Se $H_0 = \mathbb{P}^2/2m$ e $V(r)$ são invariantes por rotações então $\langle \mathbb{k}' | S | \mathbb{k} \rangle$ só pode depender do ângulo entre $\mathbb{k}'$ e $\mathbb{k}$, e não de sua direção absoluta. Podemos então expandir

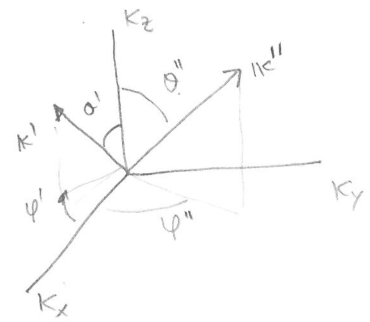
$$\langle \mathbb{k}' | S | \mathbb{k} \rangle = \delta(k - k') \sum_{\ell=0}^{\infty} F_\ell(k)\, P_\ell(\hat{\mathbb{k}} \cdot \hat{\mathbb{k}}')$$

Usando esse resultado na relação $SS^\dagger = 1$ e algumas propriedades dos polinomios de Legendre podemos calcular $F_\ell(k)$ a menos de uma fase:

$$\int \langle \mathbb{k}' | S | \mathbb{k}'' \rangle \langle \mathbb{k} | S | \mathbb{k}'' \rangle^* \, d^3k'' = \delta(\mathbb{k} - \mathbb{k}')$$

$$= \sum_{\ell, n} \int \delta(k' - k'')\, \delta(k - k'')\, F_\ell(k')\, F_n^*(k)\, P_\ell(\hat{\mathbb{k}}' \cdot \hat{\mathbb{k}}'')\, P_n(\hat{\mathbb{k}} \cdot \hat{\mathbb{k}}'')\, d^3k''$$

Temos três vetores, $\mathbb{k}$, $\mathbb{k}'$ e $\mathbb{k}''$ e pensamos em k_x, k_y, k_z como eixos fixos. Os ângulos entre eles são



Aqui β é o ângulo entre $\mathbb{k}'$ e $\mathbb{k}''$. β também varia, enquanto conforme θ'' e φ'' variam, β também varia, enquanto θ' e φ' permanecem fixos.

O teorema da adição diz que

$$P_\ell(\hat{k}'\cdot\hat{k}'') = \frac{4\pi}{2\ell+1}\sum_{m=-\ell}^{\ell} Y^*_{\ell m}(\theta'',\varphi'')\,Y_{\ell m}(\theta',\varphi') \quad . \quad \text{Além disso}$$

$$\underbrace{P_\ell(\hat{k}'\cdot\hat{k}'')}_{\cos\beta}$$

$$\underbrace{P_n(k\cdot k'')}_{\cos\theta''} = \sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}}\;Y_{n0}(\theta'',\varphi'')$$

Então,

$$\int P_\ell(k'\cdot k'')\,P_n(k\cdot k'')\,d\Omega'' = \sum_m\left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)\sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}}\;Y_{\ell m}(\theta',\varphi')\int Y^*_{\ell m}(\theta'',\varphi'')\,Y_{n0}(\theta'',\varphi'')\,d$$

$$= \left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\;Y_{\ell m}(\theta',\varphi')\;\delta_{n\ell}\,\delta_{m0}$$

$$= \frac{4\pi}{2\ell+1}\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}}\;Y_{\ell 0}(\theta',\varphi')\;\delta_{n\ell} = \frac{4\pi}{2\ell+1}\,P_\ell(\hat{k}'\cdot\hat{k})$$

Assim a identidade $SS^\dagger = 1$ fica

$$\sum_\ell k^2\,\delta(k-k')\,\frac{4\pi}{2\ell+1}\,|F_\ell(k)|^2\,P_\ell(k\cdot k') = \delta(k-k')$$

O último truque é escrever a delta 3-D como

$$\delta(k-k') = \frac{\delta(k-k')}{k^2}\,\delta(\hat{k},\hat{k}')$$

$$= \frac{\delta(k-k')}{k^2}\sum_{\ell,m} Y^*_{\ell m}(\beta,\alpha)\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

$$= \frac{\delta(k-k')}{k^2}\sum_\ell \frac{2\ell+1}{4\pi}\,P_\ell(\hat{k}\cdot\hat{k}')$$

onde (β,α) e (θ,φ) são os ângulos de $\hat{k}$ e $\hat{k}'$ em um sistema fixo e usamos completeza dos harmônicos e o teorema de adição. Veja que

$$\sum_{\ell m} Y^*_{\ell m}(\beta,\alpha)\,Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sin^2\theta}\,\delta(\theta-\beta)\,\delta(\varphi-\alpha)$$

Com isso vemos que

$$|F_l(k)|^2 = \left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^2 \frac{1}{k^4}$$

ou

$$\boxed{F_l(k) = \frac{2l+1}{4\pi k^2} e^{2i\delta_l(k)}}$$

(o fator 2 é introduzido por conveniência)

e

$$\langle k' | S | k \rangle = \delta(k-k') \sum_l \frac{2l+1}{4\pi k^2} e^{2i\delta_l(k)} P_l(\hat{k}\cdot\hat{k}')$$

Da relação entre as matrizes S e T e entre T e f temos

ainda

$$\langle k' | S | k \rangle = \delta(k'-k) - 2\pi i \underbrace{\delta(E_k - E_{k'})}_{\frac{m}{\hbar^2 k}\delta(k-k')} \underbrace{T_{k'k}}_{-\frac{2\pi\hbar^2}{mL^3} f_k(k')}$$

$$= \delta(k-k') \left[\sum_l \frac{2l+1}{4\pi k^2} P_l(\hat{k}\cdot\hat{k}') + \frac{i}{2\pi k} f_k(k') \right] \qquad \left((2\pi)^3 \leftrightarrow L^3 \right)$$

e

$$\sum_l \frac{2l+1}{4\pi k^2} e^{2i\delta_l} P_l(\hat{k}\cdot\hat{k}') = \sum_l \frac{2l+1}{4\pi k^2} P_l(\hat{k}\cdot\hat{k}') + \frac{i}{2\pi k} f_k(k')$$

$$f_k(k') = \sum_l \frac{2l+1}{2ki}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) P_l(\hat{k}\cdot\hat{k}')$$

ou ainda

$$\boxed{f_k(k') = \frac{1}{k} \sum_k (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l \, P_l(\hat{k}\cdot\hat{k}')}$$

que é a expansão em "phase shifts". Isso mostra que as fases δ_l contém toda a informação sobre o potencial. Todo o resto da estrutura da fórmula é consequência geral da unitariedade da evolução temporal.

Se V for invariante por reversão temporal obtemos a relação de reciprocidade $f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{k}}') = f_{-\mathbf{k}'}(-\hat{\mathbf{k}})$.

Escrevendo

$$|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = |\psi_{\mathbf{k}}\rangle + \frac{1}{E_k - H_0 + i\hbar\alpha} V |\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$$

$$|\psi_{\mathbf{k}}^-\rangle = |\psi_{\mathbf{k}}\rangle + \frac{1}{E_k - H_0 - i\hbar\alpha} |\psi_{\mathbf{k}}^-\rangle$$

e usando $\Theta|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = |\psi_{-\mathbf{k}}\rangle$ vemos que

$$\Theta|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = |\psi_{-\mathbf{k}}\rangle + \frac{1}{E_k - H_0 - i\hbar\alpha} \underbrace{\Theta V \Theta^{-1}}_{V} \Theta |\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$$

$$= |\psi_{-\mathbf{k}}^-\rangle$$

Exercício: resolva essa equação para $\Theta|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$ e mostre que o resultado é, de fato, $|\psi_{-\mathbf{k}}^-\rangle$.

Da sua definição, se $|\psi'\rangle = \Theta|\psi\rangle$ e $|\varphi'\rangle = \Theta|\varphi\rangle$, então $\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$. Então,

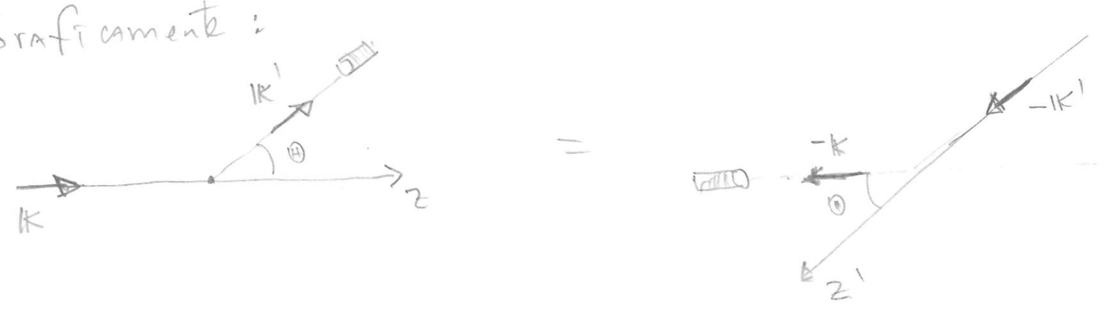
$$\langle\mathbf{k}'|S|\mathbf{k}\rangle = \langle\psi_{\mathbf{k}'}^-|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = \left(\langle\psi_{-\mathbf{k}'}^+|\psi_{-\mathbf{k}}^-\rangle\right)^*$$

$$= \langle\psi_{-\mathbf{k}}^-|\psi_{-\mathbf{k}'}^+\rangle = \langle-\mathbf{k}|S|-\mathbf{k}'\rangle$$

Pela relação da página anterior, onde $S_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ é escrito em termos de f, vemos que isso implica que

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}') = f_{-\mathbf{k}'}(-\mathbf{k}) .$$

Graficamente:



3.6 O teorema óptico

Integrando

$$\int f^*_{\mathbb{k}}(\mathbb{k}'')\, f_{\mathbb{k}'}(\mathbb{k}'')\, d\Omega'' = \frac{1}{kk'} \sum_{l,n} (2l+1)(2n+1)\, e^{2i(\delta_l-\delta_n)} \sin\delta_l \sin\delta_n \times \underbrace{\int P_l(\mathbb{k}\cdot\mathbb{k}'')\, P_n(\mathbb{k}'\cdot\mathbb{k}'')\, d\Omega''}_{\frac{4\pi}{2l+1} P_l(\mathbb{k}\cdot\mathbb{k}')\,\delta_{ln}}$$

$$= \frac{1}{kk'} \sum_l 4\pi(2l+1) \sin^2\delta_l\, P_l(\mathbb{k}\cdot\mathbb{k}')$$

Por outro lado,

$$\mathrm{Im}\left(f_{\mathbb{k}}(\mathbb{k}')\right) = \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) \sin^2\delta_l\, P_l(\mathbb{k}\cdot\mathbb{k}') \quad \text{e}$$

$$\boxed{\int f^*_{\mathbb{k}}(\mathbb{k}'')\, f_{\mathbb{k}'}(\mathbb{k}'')\, d\Omega'' = \frac{4\pi}{k'} \mathrm{Im}\left(f_{\mathbb{k}}(\mathbb{k}')\right)}$$

Para $\mathbb{k} = \mathbb{k}'$ obtemos o teorema óptico:

$$\sigma = \int d\sigma = \int |f_{\mathbb{k}}(\mathbb{k}'')|^2\, d\Omega'' = \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im}\left(f_{\mathbb{k}}(\mathbb{k})\right).$$

Assim, a parte imaginária da amplitude de espalhamento à ângulo zero mede o quanto o feixe perdeu de partículas devido ao espalhamento. De certa forma o teorema expressa uma lei de conservação do número de partículas.

APÊDICE – FUNÇÕES DELTA E PARTE PRINCIPAL

Considere a quantidade

$$f_\varepsilon^{\pm}(E) = \frac{1}{E-E_0 \pm i\varepsilon} = \frac{E-E_0}{(E-E_0)^2+\varepsilon^2} \mp \frac{i\varepsilon}{(E-E_0)^2+\varepsilon^2}$$

Se $E \neq E_0$ o limite $\varepsilon \to 0$ fornece

$$\lim_{\varepsilon\to 0} f_\varepsilon^{\pm}(E)\Big|_{E\neq E_0} = \frac{1}{E-E_0} \equiv \mathcal{P}\left(\frac{1}{E-E_0}\right)$$

onde a "parte principal" $\mathcal{P}$ indica que $E \neq E_0$.

Se $E = E_0$ o primeiro termo de $f_\varepsilon(E)$ se anula e

$$\lim_{\varepsilon\to 0} f_\varepsilon^{\pm}(E_0) = \mp\frac{i}{\varepsilon} \to \infty .$$

Assim podemos escrever

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\varepsilon}{(E-E_0)^2+\varepsilon^2} = A\,\delta(E-E_0) .$$

Integrando obtemos a constante:

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\varepsilon\, dE}{(E-E_0)^2+\varepsilon^2} = A$$

Fazendo $E-E_0 = \varepsilon \operatorname{tg}\theta$, $dE = \frac{\varepsilon}{\cos^2\theta}d\theta$ e

$$A = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{\varepsilon^2 d\theta/\cos^2\theta}{\varepsilon^2\left[\operatorname{tg}^2\theta+1\right]} = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\theta = \pi$$

Então,

$$f_\varepsilon^\pm(E) = \frac{1}{E-E_0 \pm i\varepsilon} = \mp i\pi\delta(E-E_0) + \mathcal{P}\left(\frac{1}{E-E_0}\right),$$

$$f^+ - f^- = \frac{-2i\varepsilon}{(E-E_0)^2+\varepsilon^2} = -2\pi i\,\delta(E-E_0)$$

$$f^+ + f^- = \frac{2(E-E_0)}{(E-E_0)^2+\varepsilon^2} = 2\mathcal{P}\left(\frac{1}{E-E_0}\right)$$