VI.3) Espalhamento como perturbação do contínuo

Até o momento atacamos o problema do espalhamento de 2 formas: determinação da amplitude de espalhamento via a equação integral envolvendo a função de Green ou a determinação dos phase shifts para potenciais seccionalmente constantes. Vamos agora desenvolver um novo método que nos permite calcular os phase shifts para potenciais mais gerais e que, além disso, nos apresenta uma maneira direta de tratar os estados ligados do problema.

O nosso ponto de partida é a relação entre os phase shifts e a energia.

Consideremos uma partícula num potencial $V(r)$, tal que $\lim_{r\to\infty} rV(r) = 0$, sujeita às condições de contorno impostas por uma esfera de raio R $(\to \infty)$.

A solução do problema é

$$\psi_l(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi) \sim \frac{1}{r}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) Y_l^m(\theta,\varphi), \quad \text{(VI.3.1)}$$

e se $V = 0$

$$\psi_l^{(0)}(r)\, Y_l^m(\theta,\varphi) \sim \frac{1}{r}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) Y_l^m(\theta,\varphi). \quad \text{(VI.3.2)}$$

As condições de contorno nos dois casos implicam em

$$\begin{array}{l} \psi_l^{(0)}(R) = 0 \;\Rightarrow\; k_{l,n}^{(0)} R - l\pi/2 = n\pi \\ \psi_l(R) = 0 \;\Rightarrow\; k_{l,n} R - l\pi/2 + \delta_l = n\pi \end{array} \quad \text{(VI.3.3)}$$

onde $k_{n,l}^{(0)}$ e $k_{n,l}$ são tais que

$$E_{n,l}^{(0)} = \hbar^2 \frac{\left(k_{n,l}^{(0)}\right)^2}{2m}$$

e

$$E_{n,l} = \hbar^2 \frac{k_{n,l}^2}{2m}.$$

Para que $E_{n,l} \to E_{n,l}^{(0)}$ quando $V \to 0$ devemos ter $\delta_l(E) \to 0$ se $V \to 0$.

Quando $R \to \infty$, $k_{n+1}^{(0)} - k_n^{(0)} \cong \mathcal{O}\left(\frac{\pi}{R}\right)$ para um dado l. Temos ainda, para um dado l,

$$\Delta E_n \equiv E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)} \approx \frac{\hbar^2 k_n^{(0)}}{m}\left(k_{n+1}^{(0)} - k_n^{(0)}\right) = \frac{\hbar^2 k_n^{(0)}}{m}\frac{\pi}{R}. \quad \text{(VI.3.4)}$$

Por outro lado, podemos definir

$$\begin{aligned} \delta E_n &\equiv E_n - E_n^{(0)} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_n + k_n^{(0)}\right)\left(k_n - k_n^{(0)}\right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_n + k_n^{(0)}\right)\frac{\delta_l}{R}, \quad \text{(VI.3.5)} \end{aligned}$$

onde subtraimos a 2ª da 1ª em (VI.3.3). Como $k_n = k_n^{(0)} + \mathcal{O}(1/R)$ temos

$$\frac{\delta E_{n,l}}{\Delta E_{n,l}} = -\frac{1}{\pi}\delta_l(E). \quad \text{(VI.3.6)}$$

(δE =variação de energia $\to 0$ se $R \to \infty$)

De posse deste resultado podemos desenvolver a chamada teoria de Fredholm para o espalhamento.

Consideremos o seguinte problema: Como calcular $D(z)$ definido como

$$D(z) = \frac{\det(z-H)}{\det(z-H_0)},$$

onde $H = H_0 + V$ e $D(z) = \lim_{R\to\infty} D_R(z)$?

Como sabemos,

$$\begin{aligned} D_R(E) &= \frac{\det(E-H)}{\det(E-H_0)} \\ &= \prod_{l=0}^{\infty}\left[\prod_n \frac{E-E_{nl}}{E-E_{nl}^{(0)}}\right]^{2l+1} \\ &= \prod_{l=0}^{\infty}\left[\prod_n 1 - \frac{\delta E_{nl}}{E-E_{nl}^{(0)}}\right]^{2l+1}. \qquad \text{(VI.3.7)} \end{aligned}$$

Então, considerando apenas um canal l temos:

$$D_R^{(l)}(z) = \prod_n \left(1 - \frac{\delta E_{nl}}{z-E_{nl}^{(0)}}\right). \qquad \text{(VI.3.8)}$$

Como $\delta E \sim \mathcal{O}(1/R)$ espera-se que $\prod\limits_n$ convirja se $\mathrm{Im}z \neq 0$. Vemos, então, que $D_R^{(l)}(z)$ é uma função analítica de z exceto por polos (auto valores de H_0) no eixo real. $D_R^{(l)}(z)$ possui também zeros (auto valores de H) no eixo real que podem distar $\mathcal{O}(1/R)$ de um polo ou ser negativos.

Quando $R\to\infty$, zeros e polos coalescem dando origem a um corte no plano E-complexo. Zeros ao longo do eixo real negativo são os estados ligados do problema.

Para $H = H_0 + gH_1$ pode-se mostrar que $D_R^{(l)}(z)$ existe e é uma função inteira de g se $\lim\limits_{r\to 0} r^2 V(r) = 0$ e $\lim\limits_{r\to\infty} rV(r) = 0$.

Omitindo o índice l, podemos escrever

$$\begin{aligned} D_R(z) &= \prod_{b=1}^{N}\left(\frac{z+E_b}{z}\right)\exp\left\{\sum_{n>N}^{\infty}\ln\left(1-\frac{\delta E_n}{z-E_n^{(0)}}\right)\right\} + \mathcal{O}(1/R) \\ &= \prod_{b=1}^{N}\left(\frac{z+E_b}{z}\right)\exp -\left\{\sum_{n>N}^{\infty}\frac{\delta E_n/\Delta E_n}{z-E_n}\Delta E_n\right\} + \mathcal{O}(1/R), \qquad \text{(VI.3.9)} \end{aligned}$$

onde assumimos que

i) H tenha N estados ligados E_b, $b = 1, \ldots, N$.

ii) estes estados ligados são obtidos, um a um, aumentando-se $|g|$ (para R fixo $\to \infty$) a partir de H_0. Assim todos estes estados originam-se dos estados de mais baixa energia ($E_n^{(0)}$, $n = 1\ldots N$) de H_0 que, quando $R\to\infty$, são todos praticamente nulos.

Então, quando $R\to\infty$,

$$D_\infty(z) = \prod_{b=1}^{N}\left(\frac{z+E_b}{z}\right)\exp\left\{\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\delta(E')\,dE'}{z-E'}\right\}. \qquad \text{(VI.3.10)}$$

Usando que

$$\lim_{z\to x\pm i\epsilon}\frac{1}{\pi}\int\limits_a^b\frac{f(x')\,dx'}{z-x'}=\frac{\mathcal{P}}{\pi}\int\limits_a^b\frac{f(x')\,dx'}{x-x'}\mp if(x)\,,\quad\text{(VI.3.11)}$$

temos $(z=E\pm i\epsilon)$

$$\frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty\frac{\delta(E')\,dE'}{E\pm i\epsilon-E'}=\mp i\delta(E)+\frac{\mathcal{P}}{\pi}\int\limits_0^\infty\frac{\delta(E')\,dE'}{E-E'}.\quad\text{(VI.3.12)}$$

Então, usando a (VI.3.12) na (VI.3.10) e omitindo o subscrito ∞ de D_∞ de agora em diante, temos

$$D(E\pm i\epsilon)=e^{\mp i\delta(E)}\prod_b\left(\frac{E+E_b}{E}\right)\exp\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int\limits_0^\infty\frac{\delta(E')\,dE'}{E-E'},\quad\text{(VI.3.13)}$$

ou ainda

$$\frac{D(E+i\epsilon)}{D(E-i\epsilon)}=e^{-2i\delta(E)}.\quad\text{(VI.3.14)}$$

Assim, quando $R\to\infty$, $D_R(z)$ apresenta um salto no eixo $\mathbb{R}^+$, ou seja, $D(z)$ é analítica no plano z exceto por um corte ao longo de $\mathbb{R}^+$. Além disso, como

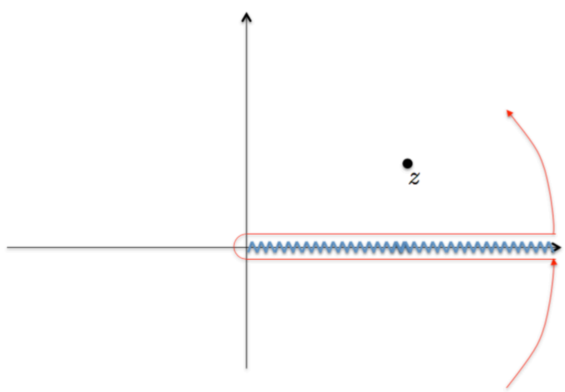
$$D(z)\underset{|z|\to\infty}{\to}\exp\left\{\frac{1}{\pi z}\int\limits_0^\infty\delta(E)\,dE\right\},\quad\text{(VI.3.15)}$$

$D(z)\to 1$ se $|z|\to\infty$.

Pela fórmula de Cauchy, sabemos que

$$\frac{1}{2\pi i}\oint\frac{D(z')-1}{z'-z}dz'=D(z)-1$$

ao longo de qualquer caminho $\mathcal{C}$ que contenha z no seu interior. Podemos, então, deformá-lo como na figura abaixo



e assim

$$D(z)=1+\frac{1}{2\pi i}\int\limits_\infty^0\frac{D(E-i\epsilon)-1}{E-z}dE+\frac{1}{2\pi i}\int\limits_0^\infty\frac{D(E+i\epsilon)-1}{E-z}dE,\quad\text{(VI.3.16)}$$

ou ainda

$$D(z)=1+\int\limits_0^\infty\frac{A(E)\,dE}{z-E},\quad\text{(VI.3.17)}$$

onde

$$\begin{aligned} A(E) &\equiv \frac{1}{2\pi i}\left[D(E-i\epsilon)-D(E+i\epsilon)\right] \\ &= \frac{1}{\pi}D(E+i\epsilon)\,e^{i\delta(E)}\sin\delta(E)\,. \quad \text{(VI.3.18)} \end{aligned}$$

Como $D^*(z)=D(z^*)$, $A(E)$ (chamado de *peso espectral*) $\in\mathbb{R}$. Usando $z=E+i\epsilon$ em (VI.3.17) temos

$$D(E+i\epsilon)=1-i\pi A(E)+\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{A(E')\,dE'}{E-E'}, \quad \text{(VI.3.19)}$$

que combinada com (VI.3.18) nos dá

$$\pi A(E)\cot\delta(E)=1+\mathcal{P}\int_0^\infty \frac{A(E')}{E-E'}dE', \quad \text{(VI.3.20)}$$

uma equação integral para $A(E)$ em função de $\delta(E)$.

Do ponto de vista prático as vantagens de (VI.3.20) são:

i) $A(E)$ é uma função inteira de g que esperamos poder representar por poucos termos.

ii) o lado direito de (VI.3.20) pode ser aproximado por um polinômio em E quando $E\to 0$.

iii) os estados ligados podem ser tratados como raízes de

$$\int_0^\infty \frac{A(E')\,dE'}{E'+E_b}=1. \quad \text{(VI.3.21)}$$

que é obtida de $D(-E_b)=0$.

Nosso próximo passo será, então, descrever $A(E)$ como série de potências em g. Como $H=H_0+gH_1$ temos

$$D(z)=\det\left[1-\frac{gH_1}{z-H_0}\right]. \quad \text{(VI.3.21)}$$

Usando que $\det A=\exp\{\mathrm{tr}\ln A\}$ teremos

$$D(z)=\exp\left\{\mathrm{tr}\ln\left(1-gG^{(0)}(z)\,H_1\right)\right\}, \quad \text{(VI.3.22)}$$

onde $G^{(0)}(z)=(z-H_0)^{-1}$. Então,

$$D(z)=1-g\mathrm{tr}G^{(0)}(z)\,H_1-\frac{g^2}{2}\left\{\left[\mathrm{tr}G^{(0)}(z)\,H_1\right]^2-\mathrm{tr}\left[G^{(0)}(z)\,H_1\right]^2\right\}+\ldots, \quad \text{(VI.3.23)}$$

onde os traços podem ser calculados na base $\{|n\rangle\}$ tal que $H_0|n\rangle=E_n^{(0)}|n\rangle$.

Quando $R<\infty$

$$\langle\mathbf{r}|n\rangle=\left(\frac{2k_n^2}{R}\right)^{1/2} j_l(k_n r)\,.$$

No limite $R\to\infty$ passamos ao contínuo e

$$\sum_n |n\rangle\langle n|=\sum_n \Delta E_n\frac{|n\rangle}{\sqrt{\Delta E_n}}\frac{\langle n|}{\sqrt{\Delta E_n}}\to\int dE|E\rangle\langle E|,$$

onde definimos

$$|E\rangle = \lim_{R\to\infty} \frac{|n\rangle}{\sqrt{\Delta E_n}}$$

e como $\Delta E_n = \hbar k_n \pi / mR$, temos,

$$\langle \mathbf{r}|E\rangle = \left(\frac{2km}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2} j_l\left(kr\right). \quad \text{(VI.3.24)}$$

Portanto,

$$\mathrm{tr} G^{(0)}\left(z\right) H_1 = \int_0^\infty \frac{\langle E|H_1|E\rangle}{z-E} dE,$$

$$\left[\mathrm{tr} G^{(0)}\left(z\right) H_1\right]^2 - \mathrm{tr}\left[G^{(0)}\left(z\right) H_1\right]^2 = 2\int_0^\infty\int_0^\infty \frac{dEdE'}{\left(z-E\right)\left(z-E'\right)} \begin{vmatrix} \langle E|H_1|E\rangle & \langle E|H_1|E'\rangle \\ \langle E'|H_1|E\rangle & \langle E'|H_1|E'\rangle \end{vmatrix} \ldots \text{etc.}$$

Assim usando a (VI.3.17) podemos concluir que

$$\begin{aligned} A\left(E\right) &= -g\left\langle E|H_1|E\right\rangle + g^2 \int_0^\infty \frac{dE_1}{E-E_1} \begin{vmatrix} \langle E|H_1|E\rangle & \langle E|H_1|E_1\rangle \\ \langle E_1|H_1|E\rangle & \langle E_1|H_1|E_1\rangle \end{vmatrix} + \ldots \\ &+ \frac{\left(-g\right)^{n+1}}{n!} \int_0^\infty \ldots \int_0^\infty \frac{dE_1 \ldots dE_n}{\left(E-E_1\right)\ldots\left(E-E_n\right)} \begin{vmatrix} \langle E|H_1|E\rangle & \ldots & \langle E|H_1|E_n\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle E_n|H_1|E\rangle & \ldots & \langle E_n|H_1|E_n\rangle \end{vmatrix} + \ldots \quad \text{(VI.3.25)} \end{aligned}$$

onde

$$g\left\langle E|H_1|E'\right\rangle = \left(\frac{2m}{\pi\hbar^2}\right)\sqrt{kk'} \int_0^\infty dr r^2 j_l\left(kr\right) j_l\left(k'r\right) V\left(r\right).$$

A relação entre o método de Fredholm e a série de Born pode ser obtida através de (VI.3.18),

$$e^{i\delta}\sin\delta = \frac{\pi A\left(E\right)}{D\left(E+i\epsilon\right)},$$

expandindo-se $\left[D\left(E+i\epsilon\right)\right]^{-1}$ em série de potências de g, mas este procedimento falha se $D\left(E+i\epsilon\right)$ possui zeros. Note que se $\delta \to 0$ e $D \to 1$, o que significa energias muito altas, podemos reescrever o resultado de Born como

$$\delta_l\left(k\right) = -\frac{2mk}{\hbar} \int_0^\infty \left[j_l\left(kr\right)\right]^2 V\left(r\right) r^2 dr.$$

A grande vantagem do método de Fredholm, contido na equação (VI.3.20) é o de podermos estudar o problema para baixas energias. Consideremos o comportamento de $A^{(l)}\left(E\right)$ quando $E \to 0$. O elemento de matriz é dado por

$$g\left\langle E|H_1|E'\right\rangle \underset{E,E'\to 0}{\longrightarrow} \frac{2m}{\pi\hbar^2}\left[\left(2l+1\right)!!\right]^{-2}\left(kk'\right)^{l+1/2} \int_0^\infty r^{2l+2} V\left(r\right) dr.$$

Assumindo que $V\left(r\right)$ seja exponencialmente decrescente (potencial de alcance finito), o elemento de matriz convege para todos os l's. Assim, a expansão (VI.3.25) tem a forma

$$A^{(l)}\left(E\right) \to c_0 E^{l+1/2}\left(1 + c_1 E + c_2 E^2 + \ldots\right), \quad \text{(VI.3.26)}$$

que implica que $A^{(l)}(E)$ possui um ponto de ramificação em $E=0$. Portanto, devemos fazer o prolongamento analítico de (VI.3.20) como

$$\pi A^{(l)}(z)\cot\delta(z)=1+\int\limits_0^\infty \frac{A^{(l)}(E')}{z-E'}dE'+i\pi A^{(l)}(z), \quad \text{(VI.3.27)}$$

pois se $E+i\epsilon=z$ recuperamos a (VI.3.20). Nenhum dos dois termos não constantes do lado direito de (VI.3.27) são analíticos, mas a sua soma o é pois

$$\int\limits_0^\infty \frac{A^{(l)}(E')}{E-E'+i\epsilon}dE'-\int\limits_0^\infty \frac{A^{(l)}(E')}{E-E'-i\epsilon}dE'=-2i\pi A^{(l)}(E),$$

e por (VI.3.26) se z varia entre E e $Ee^{2\pi i}$, $A^{(l)}(E)\to -A^{(l)}(E)$ e os dois saltos se cancelam. Então, expandindo o lado direito de (VI.3.27) em torno de $z=0$ e usando (VI.3.26) temos

$$\pi c_0 E^{l+\frac{1}{2}}\cot\delta(E)=1-\int\limits_0^\infty \frac{A^{(l)}(E')}{E'}dE'+\frac{E}{W_l}+\mathcal{O}\left(E^2\right), \quad \text{(VI.3.28)}$$

que implica em

$$k^{2l+1}\cot\delta_l \underset{k\to 0}{\to} -\frac{1}{a_l}+\frac{1}{2}r_l k^2 \quad \text{(VI.3.29)}$$

e, portanto, a amplitude de espalhamento f_l é dada por

$$\frac{1}{k}e^{i\delta_l}\sin\delta_l\to\frac{k^{2l}}{\left[-\frac{1}{a_l}+\frac{1}{2}r_l k^2\right]-ik^{2l+1}}, \quad \text{(VI.3.30)}$$

que pode variar rapidamente quando $k\to 0$ para $\frac{1}{2}a_l r_l k^2\approx 1$.

No caso de onda s a (VI.3.29) torna-se

$$k\cot\delta_0 \underset{k\to 0}{\to} -\frac{1}{a_0}+\frac{1}{2}r_0 k^2, \quad \text{(VI.3.31)}$$

onde agora tanto a_0 quanto r_0 têm dimensão de comprimento e são chamados de *comprimento de espalhamento* e *alcance efetivo*, respectivamente. A amplitude de espalhamento é, então,

$$\frac{1}{k}e^{i\delta_0}\sin\delta_0=\frac{1}{-\frac{1}{a_0}+\frac{1}{2}r_0k^2-ik}. \quad \text{(VI.3.32)}$$

No caso de estados ligados, como $D(z)$ possui zeros no eixo real negativo, a amplitude de espalhamento admite polos complexos e, portanto, se há estados ligados em onda s devemos ter um polo em $k=i\alpha$ em (VI.3.32). Neste caso, $E_b=-\hbar^2\alpha^2/2m$ e α é solução de $\alpha=\frac{1}{a_0}+\frac{1}{2}r_0\alpha^2$. Esta equação deve ter soluções positivas para que haja estado ligado, o que é o caso quando $a_0>0$ e $a_0\to\infty$ pois assim $\alpha\to 0^+$. Esta análise só é válida para estados fracamente ligados.

Relação com a densidade de estados

A densidade de estados de uma dada hamiltoniana pode ser escrita para um dado l como

$$\begin{aligned}\rho(E) &= \sum_n \delta(E-E_n)\\ &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\sum_n\frac{1}{E-E_n+i\epsilon}, \quad \text{(VI.3.33)}\end{aligned}$$

pois

$$\frac{1}{E-E_n+i\epsilon}=\mathcal{P}\left(\frac{1}{E-E_n}\right)-i\pi\delta\left(E-E_n\right).$$

Como

$$\frac{1}{E-E_n+i\epsilon}=\mathrm{tr}\left\{\frac{1}{E^{(+)}-H}\right\},$$

onde $E^{(+)}=E+i\epsilon$, temos,

$$\begin{aligned}\rho\left(E\right) &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\ \mathrm{tr}\left\{\frac{1}{E^{(+)}-H}\right\}\\ &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\ \mathrm{tr}\frac{\partial}{\partial E}\ln\left\{E^{(+)}-H\right\}\\ &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\mathrm{tr}\ \ln\left\{E^{(+)}-H\right\}\\ &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\ln\ \det\left\{E^{(+)}-H\right\} \qquad \text{(VI.3.34)}\end{aligned}$$

Como $H=H_0+V$ temos

$$\begin{aligned}\rho\left(E\right) &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\ln\det\left\{E^{(+)}-H_0+H_0-H\right\}\\ &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\ln\det\left\{\left(E^{(+)}-H_0\right)-V\right\}\\ &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\ln\det\left\{\left(E^{(+)}-H_0\right)\left[1-\left(E^{(+)}-H_0\right)^{-1}V\right]\right\}\\ &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\ln\ \det\left\{E^{(+)}-H_0\right\}-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\ln\det\left[1-\left(E^{(+)}-H_0\right)^{-1}V\right]. \qquad \text{(VI.3.35)}\end{aligned}$$

Como o 1º termo do último passo de (VI.3.35) é $\rho^{(0)}(E)$ temos

$$\rho\left(E\right)-\rho^{(0)}\left(E\right)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\ln\det\left[\frac{E^{(+)}-H}{E^{(+)}-H_0}\right]$$

ou seja,

$$\rho\left(E\right)-\rho^{(0)}\left(E\right)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E}\ln D(E+i\epsilon). \qquad \text{(VI.3.36)}$$

Integrando esta expressão com relação à energia temos,

$$\int\limits_{-\infty}^{E}\left[\rho\left(E'\right)-\rho^{(0)}\left(E'\right)\right]dE'=-\int\limits_{-\infty}^{E}\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial E'}\ln D(E'+i\epsilon)\,dE',$$

que por sua vez, se há N_b estados ligados, resulta em

$$N_b+\int\limits_{0}^{E}\left[\rho\left(E'\right)-\rho^{(0)}\left(E'\right)\right]dE'=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left\{\ln D(E+i\epsilon)-\ln D(-\infty+i\epsilon)\right\}. \qquad \text{(VI.3.37)}$$

Então , por (VI.3.15), vemos que se $|z|\to\infty,\ D(z)\to 1$ e assim,

$$N_b+\int\limits_{0}^{E}\left[\rho\left(E'\right)-\rho^{(0)}\left(E'\right)\right]dE'=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left\{\ln D(E+i\epsilon)\right\}. \qquad \text{(VI.3.38)}$$

Agora, usando a (V.3.19), podemos escrever

$$\operatorname{Im}\left\{\ln D(E+i\epsilon)\right\} = -\tan^{-1}\left\{\frac{\pi A(E)}{1+\mathcal{P}\int\limits_0^\infty \frac{A(E')}{E-E'}dE'}\right\} + 2n\pi, \quad \text{(VI.3.39)}$$

e tomando tan dos dois lados de (VI.3.38) tem-se

$$\tan\left\{N_b\pi + \pi\int\limits_0^E \left[\rho\left(E'\right) - \rho^{(0)}\left(E'\right)\right]dE'\right\} = \frac{\pi A(E)}{1+\mathcal{P}\int\limits_0^\infty \frac{A(E')}{E-E'}dE'} = \tan\delta(E), \quad \text{(VI.3.40)}$$

onde a última igualdade segue de (VI.3.20). Portanto,

$$\delta(E) = N_b\pi + \pi\int\limits_0^E \left[\rho\left(E'\right) - \rho^{(0)}\left(E'\right)\right]dE'. \quad \text{(VI.3.41)}$$

Quando $E \to 0$, e não há estados ligados com $E = 0$, podemos escrever que

$$\delta(0) = N_b\pi, \quad \text{(VI.3.42)}$$

que é o chamado teorema de Levinson. Por outro lado, derivando-se a (VI.3.41) com respeito a E temos

$$\frac{1}{\pi}\frac{d\delta(E)}{dE} = \Delta\rho(E),$$

onde $\Delta\rho(E) \equiv \rho\left(E\right) - \rho^{(0)}\left(E\right)$.

Como na realidade $\ln D = \ln\prod\limits_g D^g$, onde g é a degenerescência do subespaço considerado (por exemplo, $g = 2l+1$ no caso de $V(\mathbf{r}) = V(r)$), temos

$$\Delta\rho(E) = \frac{1}{\pi}\sum_s g_s\frac{d\delta_s(E)}{dE}. \quad \text{(VI.3.43)}$$

Podemos ainda estudar o que ocorre na vizinhança de uma ressonância. Como já vimos anteriormente em (VI.2.22), quando δ_l varia rapidamente através de um múltiplo ímpar de $\pi/2$, ocorre uma ressonância. Como a (VI.3.40) pode ser reescrita como

$$\tan\delta_s(E) = -\frac{\operatorname{Im}D_s(E)}{\operatorname{Re}D_s(E)}, \quad \text{(VI.3.44)}$$

podemos dizer que esta variação rápida ocorrerá quando $\operatorname{Re}D_s(E_s) = 0$, o que implica em

$$\operatorname{Re}D_s(E) \approx \left(E - E_s\right)\left.\frac{d\operatorname{Re}D_s(E)}{dE}\right|_{E=E_s}. \quad \text{(VI.3.45)}$$

Como, em geral, $\operatorname{Im}D_s(E_s) \neq 0$ temos

$$\tan\delta_s(E) = \frac{\Gamma_s}{2\left(E_s - E\right)}, \quad \text{(VI.3.46)}$$

onde definimos

$$\Gamma_s = \frac{2\operatorname{Im}D_s(E_s)}{\left.(d\operatorname{Re}D_s(E))/dE\right|_{E=E_s}}. \quad \text{(VI.3.47)}$$

A equação (VI.3.46) nos mostra que o phase shift varia de $\pi/2$ quando E passa por E_s de $E < E_s$ para $E > E_s$. Desta forma derivando a (VI.3.46) com relação à energia e sustituindo na (VI.3.43) teremos

$$\Delta\rho_s(E) = \frac{g_s}{\pi}\frac{d\delta_s(E)}{dE} = g_s \frac{\Gamma_s}{2\pi}\frac{1}{(E-E_s)^2 + \Gamma_s^2/4}, \quad \text{(VI.3.48)}$$

o que nos mostra que Γ_s é a largura da ressonância que está ligada ao inverso do tempo de vida do estado como já vimos anteriormente.

Antes de finalizar esta seção é importante notar que a passagem de (VI.3.41) para (VI.3.42) nem sempre é da forma aqui mencionada. Para problemas em dimensões espaciais $D \geq 2$ o procedimento é válido. Entretanto , se $D = 1$, pode haver estados ligados de energia nula, o que faria com que a integral na variação da densidade de estados contribuisse com "metade" de uma função delta para o teorema de Levinson.

No caso de potenciais simétricos em $1 - D$ as soluções estacionárias são pares ou ímpares e o teorema de Levinson é nestes casos

$$\delta_e(0) = \pi\left(N_b^{(e)} - \frac{1}{2}\right) \qquad \text{e} \qquad \delta_o(0) = \pi N_b^{(o)} \quad \text{(VI.3.49)}$$

onde $\delta_e(0)$ e $\delta_o(0)$ são os phase shifts pares e ímpares enquanto que $N_b^{(e)}$ e $N_b^{(o)}$ são, respectivamente, o número de estados ligados pares e ímpares do potencial em questão. Portanto, a aplicação desta formulação para problemas unidimensionais requer cuidado especial.