

Espelhamento,

Refs.: Caps. 10, 11 e 19, Messiah

Caps. 13 e 20, Henz bacher

2 etapas: (A) espelhamento: descrição via pacote de ondas
 (B) teoria formal do espelhamento.

inicial: definição seção de choque;

consideram: feixe partículas incidentes, massa m , velocidade \vec{v}_0 ;

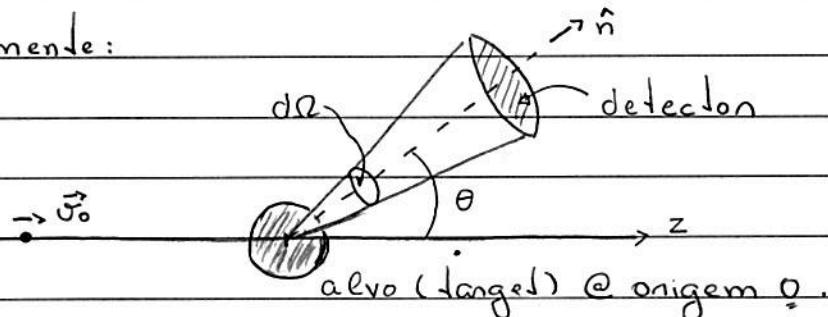
- J : número partículas incidentes / área · tempo : intensidade do feixe

- n : densidade de partículas incidentes : # partículas / volume

$$\hookrightarrow J = n v_0 \quad (95.1)$$

- N : número partículas espelhadas direção $\hat{n} = (\theta, \phi)$
 e c ângulo sólido $d\Omega$ / tempo

esquematicamente:



notam:

$$\sum(\hat{n}) d\Omega = N : \text{probabilidade partícula incidente espelhada direção } \hat{n} \text{ (e c } d\Omega)$$

e [Σ]: área:

se alvo = conjunto N_T centros espalhadores

④ hipóteses:

- n "pequena": partículas incidentes independentes;
- N_T centros espalhadores independentes;
- espelhamentos múltiplos (ondem superion) não considerados;

↳ Eq. (95.2) pode ser reescrita como:

$$\frac{d\sigma(\hat{n})}{d\Omega} d\Omega = \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \equiv N ; [\frac{d\sigma/d\Omega}{N}] : \text{área} \quad (96.1)$$

↑ secção de choque diferencial de espelhamento

integrando sob ângulo sólido:

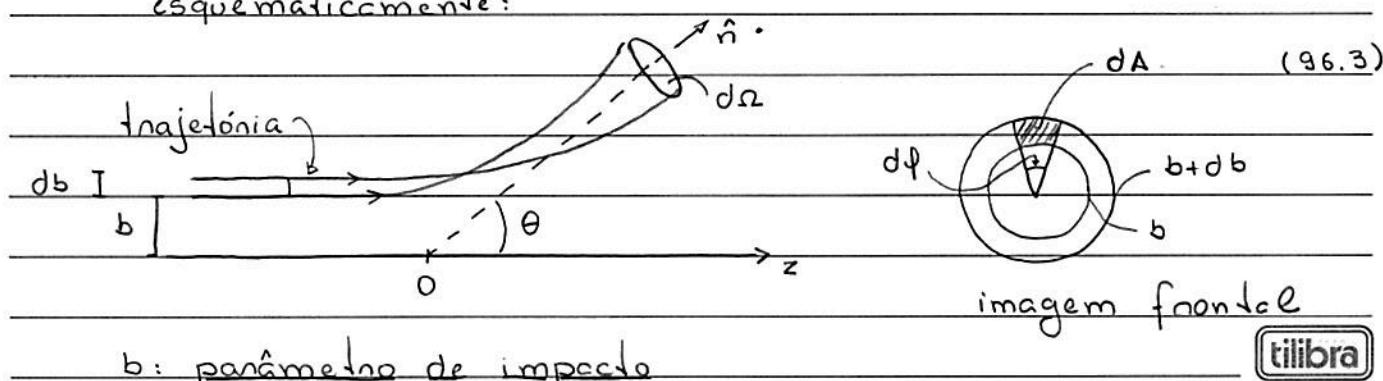
$$\sigma_{tot} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega : \text{secção de choque total} \quad (96.2)$$

· próximas etapas:

- considerar apenas espelhamento elástico;
- alvo (centro espalhador): descrito por escala $V = V(\hat{n})$

Ex.: descrição espelhamento em mecânica clássica;

esquematicamente:



notar Fig.: # partículas espalhadas na direção \hat{n} e
 $C d\Omega = \# \text{ partículas área } dA = b db d\varphi$;

temos que: $N = J dA = J b db d\varphi$

se potencial espalhador esfericamente simétrico $V = V(r)$

\hookrightarrow podemos considerar $b = b(\theta)$ e, assim:

$$\frac{N}{J} = b \left| \frac{db}{d\cos\theta} \right| d\cos\theta d\varphi = b \left| \frac{db}{d\cos\theta} \right| d\Omega \cdot \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| d\Omega$$

$$\text{Eq. (96.3)} \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| : \text{secção de choque} \quad (97.1)$$

diferencial (ch)

Obs.: $\frac{db}{d\theta} < 0$:

notar: se trajetória partícula incidente conhecida

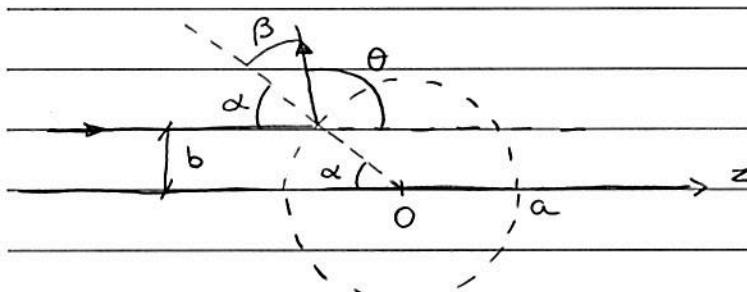
$\hookrightarrow b = b(\theta) \rightarrow d\sigma(\theta)/d\Omega$ determinada!

vamos considerar 2 casos particulares:

(i) potencial "esfera dura",

$$V(r) = \begin{cases} +\infty, & r < a \\ 0, & r \geq a \end{cases} \quad (97.2)$$

geométrica (ch)



θ : ângulo de
espalhamento

como a conservação do momento linear $\rightarrow \alpha = \beta$, temos que

$$\alpha + \beta + \theta = 2\alpha + \theta = \pi$$

$$\text{como } b = a \sin \alpha \rightarrow b = a \cos \theta / 2 = b(\theta)$$

$$\hookrightarrow \frac{db}{d\theta} = -\frac{1}{2} a \sin \theta < 0 \quad \text{Eq. (97.1)} \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} a^2 \quad (\text{cm}) :$$

: isotrópica !

(98.1)

$$\text{Eq. (97.1)} : \sigma_T = \int d\Omega \cdot \frac{1}{4} a^2 = \pi a^2 : \text{seção de choque total}$$

(ii) potencial coulombiano (espalhamento de Rutherford),

$$V(r) = \frac{k}{r} ; \quad k = c/e$$

verifica-se que (veja Cap. 9, notas F 415) :

$$b = b(\theta) = \frac{k}{2E} \cot \frac{\theta}{2} ; \quad E : \text{energia partícula incidente}$$

$$\text{Eq. (97.1)} : \frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{k^2}{16E^2} \frac{1}{\sin^4 \theta/2} \quad (98.2)$$

(A) Espalhamento: descrição via pacote de onda,

· espalhamento de um pacote de onda,

consideram: partícula massa m sob ação potencial $V = V(\vec{r})$;
(espalhador)

$N_r = 1$ centro espalhador;

$V(\vec{r}) \neq 0$ apenas p/ $r < a$: potencial cunha alcance ;

hamiltoniano:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = T + V = H_0 + V \quad (99.1)$$

consideram: estado inicial partícula = pacote de ondas planas:

$$\psi(\vec{r}, t=0) = N \int d^3k \phi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_0)} \quad (99.2)$$

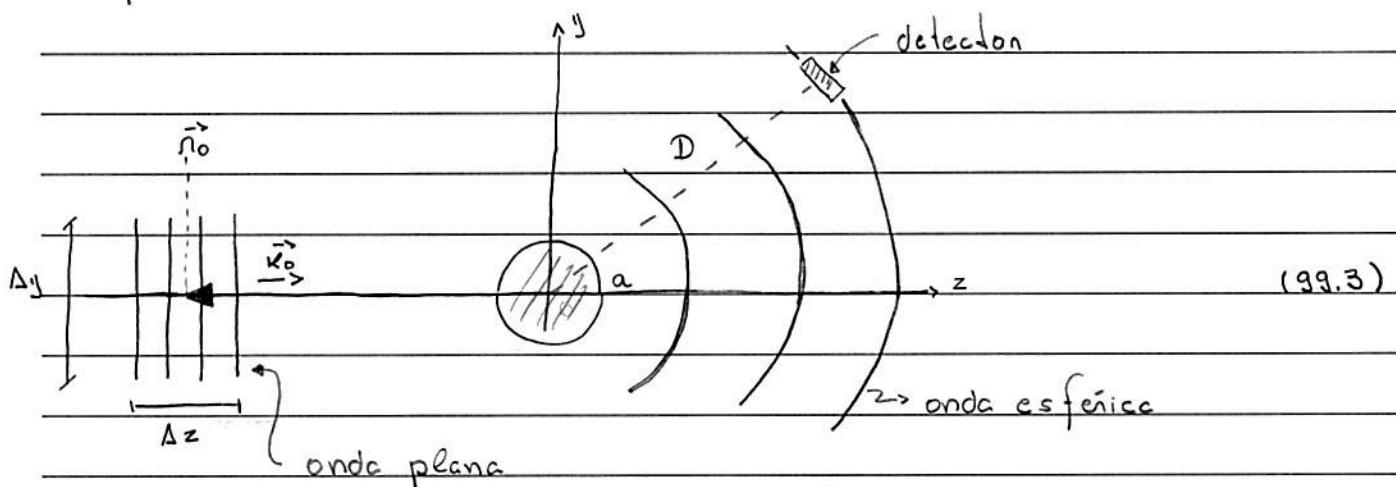
onde:

$$N = (2\pi)^{3/2} : \text{cte de normalização}$$

$\phi(\vec{k})$: função suave, largura "pequena" $\Delta \vec{k}$, centro em \vec{k}_0

$\hookrightarrow \psi(\vec{r}, t=0)$: centro em \vec{r}_0 , largura $\Delta \vec{r} = \Delta_x \times \Delta_y \Delta_z$

esquematicamente:



hipóteses: $a \ll r_0 \sim D$

$$a \ll \Delta z, \Delta_y$$

Obs.: comparar Figs. (96.3) (mec. clássico) e (99.3) (mec. quântico).

ideia: determinar forma do pacote de onda p/ $t \gg 1$
após interacção c/ potencial $V(\vec{r})$.

em princípio, se $\psi_n(\vec{r})$: autoestado hamiltoniano total (99.1),

$$H\psi_n(\vec{r}) = E_n\psi_n(\vec{r}), \quad (100.1)$$

temos que $\psi(\vec{r}, 0) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r})$

$$(100.2)$$

$$\hookrightarrow \psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\vec{r})$$

notar Eq. (99.2):

$$\psi(\vec{r}, t=0) = N \int d^3k \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} : \text{expansão em termos de autoestados de H_0}$$

$\psi(\vec{k})$

$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$: ondas planas

verifica-se que (veja abaixo), 2 resultados:

(1) $\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r})$ é um autoestado do hamiltoniano total (99.1), i.e.,

$$H\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r}) = E\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r}),$$

cujo comportamento assintótico é dado por

$$\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r}) \approx N \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f_{\vec{k}}(\vec{r}) \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{n} \right), \quad n \rightarrow +\infty \quad (100.3)$$

↑ ↑
onda plana onda esférica

(2) coeficientes da expansão $\psi(\vec{r}, 0)$ em termos $\psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r}) =$
 $= " " " " " " " e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$, i.e.,

$$\psi(\vec{r}, t=0) = \int d^3k \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{r}) \quad (100.4)$$

$\psi(\vec{k})$

Dessa forma, temos que

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3k \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0 - i\omega t} \psi^{(1)}_{\vec{k}}(\vec{r}),$$

(101.1)

onde $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$: autovalor de $H \sim$ autovalor de $\psi^{(1)}_{\vec{k}}(\vec{r})$.

próxima etapa: analisar Eq. (101.1) em $t \sim T \gg \tau$

↑ instante medida

partícula no detector.

• notar:

$$\begin{aligned} k^2 &= (\vec{k}_0 + (\vec{k} - \vec{k}_0))^2 = k_0^2 + 2\vec{k}_0 \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) + (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \\ &= (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 + 2\vec{k}_0 \cdot \vec{k} - k_0^2 \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar \vec{k}_0 \cdot \vec{k}}{m} - \frac{\hbar k_0^2}{2m} + \frac{\hbar (\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{2m}$$

como $\vec{v}_0 = \frac{\hbar \vec{k}_0}{m}$: velocidade do grupo pacote de onda incidente

$$\Leftrightarrow \hbar \omega_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}$$

$$\hookrightarrow \omega = \vec{v}_0 \cdot \vec{k} - \omega_0 + \frac{\hbar (\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{2m} \quad (101.2)$$

• estimativa instante detecção partícula;

$$\text{como } D \sim n_0 \rightarrow 2n_0 = v_0 T = \frac{\hbar k_0 T}{m} \rightarrow T = \frac{2m n_0}{\hbar k_0} \quad (101.3)$$

④ condição: instante $T \gg \tau$ porém, é necessário que,

$$\frac{\hbar T}{2m} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 = \frac{n_0}{k_0} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 = \frac{n_0 (\Delta k)^2}{k_0} \ll 1 \quad (101.4)$$

sobre condição (101.4) : indica que o alongamento do pacote de onda inicial é desprezível após pacote se movimentar distância $\sim 2n_0$

(pr detalhes, veja Eqs. (2.30) - (2.31), Menzbecher)

notam Eq. (101.1),

$$e^{-i(\vec{r} \cdot \vec{n}_0 + \omega t)} = e^{-i(\vec{r} \cdot (\vec{n}_0 + \vec{v}_0 t) - \omega_0 t + h^2 (\vec{r} - \vec{r}_0)^2 t / 2m)} \quad (102.1)$$

Eq. (101.2) \uparrow (*)

$$\approx e^{-i\vec{r} \cdot (\vec{n}_0 + \vec{v}_0 t) + i\omega_0 t} ; \quad t \sim T \gg 1$$

condição (101.4) \uparrow

$$\hookrightarrow \psi(\vec{n}, t) = \int d^3k \phi(\vec{k}) \exp(-i\vec{k} \cdot (\vec{n}_0 + \vec{v}_0 t) + i\omega_0 t) \psi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{n}) ; \quad t \sim T$$

$$\begin{aligned} \text{Eq. (100.1)} \quad & \Rightarrow \\ & \approx N \underbrace{\int d^3k \phi(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{n} - \vec{v}_0 t) - \vec{n}_0)}_{\psi(\vec{n} - \vec{v}_0 t, 0)} e^{i\omega_0 t} \end{aligned}$$

$$+ N \underbrace{e^{i\omega_0 t} \int d^3k \phi(\vec{k}) f_{\vec{k}}(\vec{n}) \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{n}_0 + \vec{v}_0 t))}_{(II)}$$

: comportamento assintótico,

$t \sim T$ e $n \rightarrow +\infty$

como $\phi(\vec{k})$: função estreita e centrada em \vec{k}_0 ,
podemos considerar:

$$f_{\vec{k}}(\vec{n}) = f_{\vec{k}_0}(\vec{n}) \quad \text{e} \quad k_n \approx (\vec{k} \cdot \vec{k}_0) n$$

i.e., $\hat{k} \approx \hat{k}_0$!

$$\hookrightarrow (II) \approx f_{\vec{K}_0}(\hat{n}) N \int d^3k \phi(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{K}_{0t} - \vec{J}_0 t - \vec{n}_0))$$

$$\psi(\vec{n} - \vec{J}_0 t, 0)$$

$$\hookrightarrow \psi(\vec{n}, t) \approx \left(\psi(\vec{n} - \vec{J}_0 t, 0) + \frac{f_{\vec{K}_0}(\hat{n})}{N} \psi(\vec{n} - \vec{J}_0 t, 0) \right) e^{i\omega_0 t};$$

$t \sim T$ e $n \rightarrow +\infty$

$$\text{como } \vec{J}_0 = \hbar \vec{K}_0 / m \rightarrow \vec{J}_0 \parallel \vec{K}_0 \rightarrow \vec{J}_0 t = \vec{K}_0 \omega_0 t$$

\hookrightarrow comportamento assintótico de $\psi(\vec{n}, t)$ é dado por

$$\psi(\vec{n}, t) \approx \underbrace{\psi(\vec{n} - \vec{J}_0 t, 0)}_{(I)} e^{i\omega_0 t} + \underbrace{\frac{f_{\vec{K}_0}(\hat{n})}{N} \psi(\vec{n} - \vec{J}_0 t, 0)}_{(II)}$$

(103.1)

(I) : pacote de ondas inicial (99.2) transladado distância $\vec{J}_0 t$:

: propagação sem deformação do pacote inicial

\sim condição (101.4) \rightarrow (*) \rightarrow em (102.1) !

esse termo não é afetado pelo potencial $V(\vec{n})$;

$$(I) \neq 0 \text{ se } \vec{n} - \vec{J}_0 t = \vec{n}_0 \rightarrow \vec{n} = \vec{n}_0 + \vec{J}_0 t;$$

: pacote de onda se move com velocidade da \vec{J}_0 .

(II) : onda esférica espelhada;

$$(II) \neq 0 \text{ se } \vec{K}_0(n - \vec{J}_0 t) = \vec{n}_0 = -n_0 \vec{K}_0 \rightarrow n = -n_0 + \vec{J}_0 t, \text{ i.e.}$$

\vec{t}^* Fig. (99.3)

se $t \sim T = 2n_0 / \vec{J}_0 \rightarrow n \sim n_0$: distância detecção - origem!

amplitude: $\sim 1/n$

\Leftarrow \sim modulação angular $f_{\vec{K}_0}(\hat{n})$:

: amplitude de espelhamento

próxima etapa: determinação de $d\sigma/d\Omega$ a partir Eq. (103.1);

como apenas a onda esférica espalhada (II) se propaga até o detector, temos que:

$$\frac{1}{n^2} |f_{\vec{k}_0}(\hat{n})|^2 |\psi(\vec{k}_0(n - \sigma_0 t), 0)|^2 (\sigma_0 n^2 d\Omega) dt :$$

: probabilidade observação partícula entre instantes t e $t + dt$

$$\hookrightarrow |f_{\vec{k}_0}(\hat{n})|^2 \sigma_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt |\psi(\vec{k}_0(n - \sigma_0 t), 0)|^2 d\Omega :$$

: probabilidade observação partícula no detector

se N_p : # partículas incidentes, independentes, função de onda ψ_i , $i = 1, 2, \dots, N_p$;

$\hookrightarrow N_s$: # partículas espalhadas direção \hat{n} e $d\Omega$:

$$N_s = |f_{\vec{k}_0}(\hat{n})|^2 \sum_{i=1}^{N_p} \sigma_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dt |\psi_i(\vec{k}_0(n - \sigma_0 t), 0)|^2 d\Omega$$

$I_0 = \# \text{partículas incidentes / área}$

$$= |f_{\vec{k}_0}(\hat{n})|^2 I_0 d\Omega$$

$$\hookrightarrow \frac{N_s}{I_0} = \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}_0}(\hat{n})|^2 d\Omega$$

$$\hookrightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}_0}(\hat{n})|^2 : \text{relação entre secção de choque diferencial e amplitude de espalhamento}$$

Exp. teoria

· próxima etapa: verifican os resultados (100.3) e (100.4),

ideia: determinan soluçāo eq. de Schrödinger independente do tempo via método da função de Green;

Eq. de Schrödinger:

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (105.1)$$

$$\hookrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla^2 - \frac{2mV}{\hbar^2} \right) \psi = E \psi \rightarrow \left(\nabla^2 - \frac{2mV}{\hbar^2} \right) \psi = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi$$

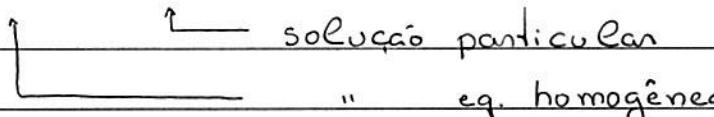
$$\text{Definição: } U(\vec{r}) = 2mV(\vec{r})/\hbar^2 \quad \text{e} \quad k^2 = 2mE/\hbar^2$$

(105.2)

$\hookrightarrow (\nabla^2 + k^2) \psi = U \psi$: eq. diferencial não-homogênea

solução geral Eq. (105.2),

$$\psi(\vec{r}) = \psi_H(\vec{r}) + \psi_P(\vec{r})$$


(105.3)

· Eq. homogênea:

$$(\nabla^2 + k^2) \psi = 0 \rightarrow \psi(\vec{r}) = N e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}}; \quad N = (2\pi)^{-3/2}$$

· $\psi_P(\vec{r})$ pode ser escrita em termos da função de Green $G(\vec{r}, \vec{r}')$;
considerar a eq. auxiliar:

$$(\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (105.4)$$

temos que

$$\psi_p(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}'), \quad (106.1)$$

pois

$$(\nabla^2 + k^2) \psi_p(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' (\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') = U(\vec{r}) \psi(\vec{r})$$

$$Eq. (105.4) \rightarrow = -4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

↳ sol. geral (105.2):

$$\psi_k(\vec{r}) = N e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3 r' G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}'): \quad (106.2)$$

: eq. integração correspondente

" de Schrödinger (105.3)

· próxima etapa: determinação $G(\vec{r}, \vec{r}')$;

hipótese: sistema apresenta invariância translacional

$$\hookrightarrow G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r} - \vec{r}');$$

nesse caso, podemos considerar a eq. auxiliar:

$$(\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}) = -4\pi \delta(\vec{r}) \quad (106.3)$$

transformada de Fourier de $G(\vec{r})$:

$$G(\vec{r}) = \int d^3 k' g(\vec{k}') e^{i \vec{k}' \cdot \vec{r}} \quad (106.4)$$

$$\hookrightarrow \nabla^2 G(\vec{r}) = \int d^3 k' (-k'^2) g(\vec{k}') e^{i \vec{k}' \cdot \vec{r}}$$

$$\text{como } \delta(\vec{r}) = \int_{(2\pi)^3} d^3 k' e^{i \vec{k}' \cdot \vec{r}},$$

temos que

$$\text{Eq. (106.3)} : \int d^3k' \left((k'^2 - k^2) g(\vec{k}') - \frac{1}{2\pi^2} \right) e^{i\vec{k}' \cdot \vec{n}} = 0$$

$$\hookrightarrow g(k') = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{k'^2 - k^2} : \text{transf. Fourier } G(\vec{n}) \quad (107.1)$$

Eqs. (106.4) e (107.1) :

$$G(\vec{n}) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty k'^2 dk' \frac{1}{k'^2 - k^2} \underbrace{\int \sin \theta d\theta d\varphi}_{2\pi} e^{-ik'n \cos \theta} \frac{i k'n}{e^{ik'n} - e^{-ik'n}}$$

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

$k' \rightarrow -k'$

$$= \frac{1}{i\pi n} \int_{-\infty}^{+\infty} dk' \frac{1}{k'^2 - k^2} e^{ik'n} \quad (107.2)$$

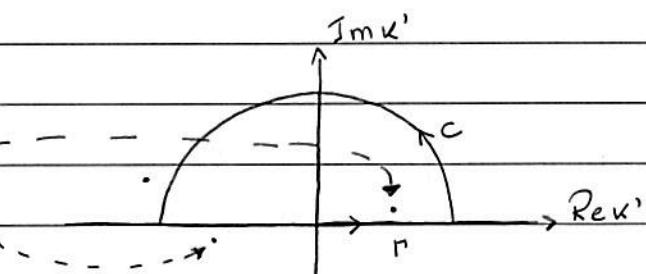
(I)

(I) pode ser calculado por resíduos;
devido ao modo de tratamento das singularidades, é
necessário considerarmos 2 casos:

$$(i) k \rightarrow k + i\eta \quad \eta \rightarrow 0^+$$

$$\text{pólos: } k' = +k \rightarrow k + i\eta \quad \dots$$

$$k' = -k \rightarrow -k - i\eta \quad \dots$$



$$(I) = \oint \frac{dk' k' e^{ik'n}}{(k' + (k + i\eta))(k' - (-k + i\eta))} = 2\pi i (1s) \frac{k}{2\pi} e^{ikn} = \pi i e^{ikn}$$

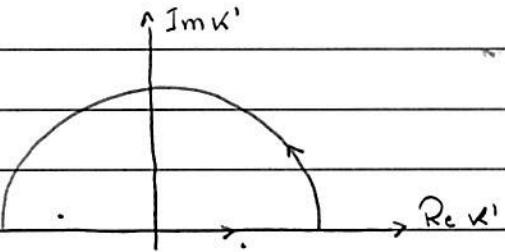
↑
counterclockwise

notar: p/ $\vec{k}' \in$ curva C: $e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \rightarrow 0$ p/ raio R $\rightarrow +\infty$!

(ii) $k \rightarrow k - i\eta$, $\Im k \rightarrow 0^+$

polos: $k' = +k \rightarrow k - i\eta$

$k' = -k \rightarrow -k + i\eta$



$$(I) = \oint_C dk' \frac{k' e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}}}{(k' + (k - i\eta))(k' - (k - i\eta))} = 2\pi i (+1) \frac{(-k)}{(-2k)} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \pi i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Temos que:

• $G_+(n) = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{n}$: função de Green retardada

(108.1)

• $G_-(n) = \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{n}$: .. " " " avançada

sobre os termos retardada e avançada.

Eq. (108.1) + $e^{-iE\vec{t}/\hbar}$:

• $G_+(n,t) = \frac{e^{i(\vec{k}n - \omega t)}}{n}$; se $\vec{k}n - \omega t = c = ct/\lambda$

$$\Leftrightarrow n = c/k + \omega t / \lambda$$

como $n > 0 \rightarrow t > 0$ ou $G_+(n,t) \neq 0$ apenas p/ $t > 0$

Eq. (108.2): $\frac{1}{n} \vec{k}^{(+)}(\vec{n}, t) \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} Ne^{i(\vec{k} \cdot \vec{n} - \omega t)}$,

i.e., $G_+(n,t)$ ou c/ condição de contorno p/ $t \rightarrow -\infty$:

: outgoing wave !

$$\cdot G_{-}(n, t) = \frac{e^{-i(\kappa n + \omega t)}}{n}; \text{ se } \kappa n + \omega t = C = \text{cte}$$

$$\hookrightarrow n = C/\kappa - \omega t/\kappa$$

como $n > 0 \rightarrow t < 0$ ou $G_{-}(n, t) \neq 0$ apenas p/ $t < 0$.

$$\text{Eq. (109.2)}: \psi_{\vec{r}}^{(-)}(n, t) \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} n e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

i.e., $G_{-}(n, t)$ ok c/ condição de contorno p/ $t \rightarrow +\infty$:

: incoming wave !

Resumo: escolha função de Green ~ condição de contorno
do problema !

Dessa forma,

$$G_{\pm}(\vec{n}, \vec{n}') = G_{\pm}(\vec{n} - \vec{n}') = e^{\pm i \times |\vec{n} - \vec{n}'|} \quad (109.1)$$

$$\stackrel{c}{\approx} \text{Eq. (106.2)} : f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{n}) = N e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}} - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{n}' e^{\pm i \times |\vec{n} - \vec{n}'|} U(\vec{n}') f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{n}') : \quad (109.2)$$

: duas possíveis soluções Eq. (105.5)!

vamos determinar o comportamento assintótico ($n \rightarrow +\infty$) Eq. (109.2);

como $U(\vec{n}') \neq 0$ apenas para $n' < a$

$$\hookrightarrow \frac{1}{|\vec{n} - \vec{n}'|} \sim \frac{1}{n}, \text{ pois } n \gg n' \sim a !$$

$$\begin{aligned} \kappa |\vec{n} - \vec{n}'| &= \kappa (n^2 - 2\vec{n} \cdot \vec{n}' + \vec{n}'^2)^{1/2} = \kappa n \left(1 - \frac{(2\vec{n} \cdot \vec{n}' - n'^2)}{n^2} \right)^{1/2} \\ &\sim \kappa n \underbrace{\left(1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{2\vec{n} \cdot \vec{n}' - n'^2}{n^2} \right)}_{\simeq -\hat{n} \cdot \vec{n}' / n} = \kappa n - (\kappa \hat{n}) \cdot \vec{n}' \\ &\quad \uparrow \text{ direção de} \\ &\quad \text{observação!} \end{aligned}$$

$$\text{Definição: } \vec{k}' = \kappa \hat{n} \rightarrow |\vec{k}'| = |\vec{k}| \quad (109.3)$$

\hookrightarrow Eq. (109.2) :

$$\begin{aligned} f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{n}) &\simeq N \left(e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}} + \underbrace{e^{\pm i \kappa n}}_{\substack{\sim \\ 4\pi N}} \int d\vec{n}' e^{\mp i \vec{k}' \cdot \vec{n}'} U(\vec{n}') f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{n}') \right) : \\ &\equiv f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\hat{n}), \text{ pois } \vec{k}' = \kappa \hat{n} \end{aligned}$$

: Eq. (100.3) !

i.e., a amplitude de espalhamento é dada por:

$$f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{n}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 N} \int d^3 n' e^{\mp i\vec{k} \cdot \vec{n}'} v(\vec{n}') \psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{n}') \quad (110.1)$$

notar Eq. (110.1): amplitude de espalhamento em termos do potencial $v(\vec{n})$!

sobre os coeficientes da expansão (100.4).

Eqs. (100.4) e (109.2):

$$\begin{aligned} \psi(\vec{n}, 0) &= N \int d^3 k \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{n}_0} e^{i\vec{k} \cdot \vec{n}} + \\ &- \frac{1}{4\pi} \int d^3 n' \int d^3 k \phi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot |\vec{n} - \vec{n}'|} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{n}_0} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{n}') \frac{U(\vec{n}')}{|\vec{n} - \vec{n}'|} \end{aligned} \quad (110.2)$$

(I)

onde consideramos apenas a outgoing wave;

como $U(\vec{n}') \neq 0$ apenas p/ $\vec{n}' < a \rightarrow$ é necessário verificar que (I) = 0 p/ $\vec{n}' < a$;

como $\phi(\vec{k})$: função estreita, centro em $\vec{k} = \vec{k}_0$

$$\hookrightarrow \vec{k} \approx \vec{k}_0 \rightarrow k |\vec{n} - \vec{n}'| \approx \vec{k} \cdot \vec{k}_0 |\vec{n} - \vec{n}'|$$

$$\begin{aligned} \hookrightarrow (I) &\approx \psi_{\vec{k}_0}^{(+)}(\vec{n}) \int d^3 k \phi(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot (\vec{k}_0 |\vec{n} - \vec{n}'| - \vec{n}_0)) \\ &= N^{-1} \psi(\vec{k}_0 |\vec{n} - \vec{n}'|, 0) : \text{veja Eq. (99.2)} \end{aligned}$$

notar: $\vec{k}_0 |\vec{n} - \vec{n}'|$: pto é eixo $Z > 0$

$$\hookrightarrow \psi(\vec{k}_0 |\vec{n} - \vec{n}'|, 0) = 0, \text{ pois o pacote de ondas}$$

inicial é não-nulo apenas para plos $\vec{n} \approx \hat{n}_0$ e eixo $Z < 0$,
veja Fig. 99.3.

↳ Eq. (100.4) : OK !

• Aproximação de Bonn,

notam Eqs. (109.2) e (110.1) : permite determinar a amplitude
de espalhamento $f_{\vec{k}}(\hat{n})$ iterativamente;

em particular, em primeira aproximação, podemos considerar:

$$f_{\vec{k}}^{(1)}(\hat{n}) \approx N e^{i \vec{k} \cdot \hat{n}},$$

i.e., partícula incidente ~ onda plana;

momento partícula incidente $\vec{p} = h \vec{k}$;

$$\hookrightarrow \text{Eq. (110.1)} : f_{\vec{k}}(\hat{n}) = -\frac{m}{2\pi h^2} \int d^3 n' e^{-i \vec{k}' \cdot \vec{n}'} v(\vec{n}') e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}'} ; \vec{k}' = \kappa \hat{n} :$$

: amplitude de espalhamento na
aproximação de Bonn (\approx ondem)

notam: Eq. (111.1) pode ser escrita como

$$f_{\vec{k}}(\hat{n}) = -\frac{4\pi^2 m}{h^2} \langle \vec{n}' | v | \vec{n} \rangle ; \langle \vec{n}' | \vec{n} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3/2} e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}'} \quad (111.2)$$

como $\langle \vec{n}' | \vec{n} \rangle$: autoestado Ho : Eq. (99.1)

↳ Eq. (111.1) : similar teoric de perturbação não-degenerada,
 \approx ondem !

• hipótese: $v(\vec{n}) = v(n)$: potencial central;
temos que

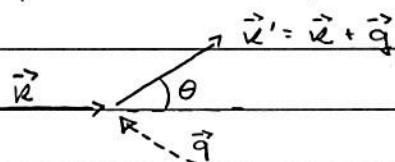
$$f_{\vec{q}}(\hat{n}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 n' V(n') e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \hat{n}'} \quad (112.1)$$

Definindo: $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$;

θ : ângulo entre momento incidente $\hbar\vec{k}$ e

" espalhado $\hbar\vec{k}' = \hbar\vec{k} + \hbar\vec{q}$;

notam: $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}' - \vec{k})$ pode ser visto como o momento transferido no processo de espalhamento; esquematicamente:



como $\hbar\vec{k}' = \hbar\kappa\hat{n}$, i.e., $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$: espalhamento elástico, temos que

$$\begin{aligned} q^2 &= \kappa^2 + \kappa'^2 - 2\vec{k}\cdot\vec{k}' = 2\kappa^2 - 2\kappa^2 \cos\theta = 2\kappa^2(1 - \cos\theta) \\ &= 4\kappa^2 \sin^2\theta/2 \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow q = 2\kappa \sin\frac{\theta}{2}$$

Eq. (112.1): $f_{\vec{q}}(\hat{n}) = f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3 n' V(n') e^{-i\vec{q} \cdot \hat{n}'}$
 Transf. de Fourier do potencial $V(n)$!

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dn' n'^2 V(n') \underbrace{\int \sin\theta' d\theta' d\varphi' e^{-iqn' \cos\theta'}}_{4\pi \sin qn' / qn'}$$

$$\hookrightarrow f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dn' n' V(n') \sin qn'; \quad q = 2\kappa \sin\frac{\theta}{2} \quad (112.2)$$

: amplitude de espalhamento p/ potencial central,
 apox. de Born

Ex.: potencial de Yukawa.

ideia: determinar a seção de choque diferencial na aprox. de Born;

$$V(r) = \frac{V_0 e^{-\alpha r}}{\alpha r} ; V_0, \alpha = \text{cte} ; \frac{1}{\alpha} = a > 0 : \text{alcance do potencial}$$
(113.1)

notam: Eq. (113.1) : potencial de Coulomb blindado, pois

$$V(r) = \frac{V_0 e^{-\alpha r}}{\alpha r} \xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} \frac{C}{r}$$
(113.2)

$$V_0/\alpha \rightarrow C = \text{cte}$$

Eqs. (112.2) e (113.1) :

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dn' n' \frac{V_0 e^{-\alpha n'}}{\alpha n'} \sin qn' = -\frac{2m}{\hbar^2 \alpha} \frac{V_0}{\alpha^2 + q^2} \\ &= -\frac{2m V_0}{\hbar^2 \alpha} \frac{1}{4k^2 \sin^2 \theta/2 + \alpha^2} \end{aligned}$$
(113.3)

em particular, p/ potencial de Coulomb c/ $C = q_1 q_2$:

$$f(\theta) = -\frac{2m q_1 q_2}{\hbar^2} \frac{1}{4k^2 \sin^2 \theta/2} = -\frac{q_1 q_2}{4 \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right)} \frac{1}{\sin^2 \theta/2}$$

E : energia partícula incidente.

$$\hookrightarrow \text{Eq. (104.3): } \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{q_1^2 q_2^2}{16 E^2} \frac{1}{\sin^4 \theta/2} ;$$
(113.4)

: igual resultado mec. clássica, Eq. (98.2); de fato

" " " quântica exata, veja Sec. 13.8, Herzbachen.

sobre a validade da aproximação de Bonn.

consideram Eq. (109.2) p/

$$f_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{n}) = N e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}}$$

$$\hookrightarrow f_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{n}) = N e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}} - \underbrace{N \int_{-\pi}^{\pi} d^3 n' e^{i k | \vec{n} - \vec{n}' |} u(\vec{n}') e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}'}}_{| \vec{n} - \vec{n}' |} \quad (154.1)$$

(II)

como termo (II) não considerado na Eq. (111.1)

\hookrightarrow aprox. de Bonn (\leq ordem) ok se $|(II)| \ll \delta$!

- estimativa p/ (II) :

como $u(\vec{n}) \neq 0$ p/ $n < a \rightarrow (II)_{\max} @ \vec{n} = 0$:

$$\hookrightarrow (II) \sim N \int_{-\pi}^{\pi} d^3 n' \frac{e^{i k n'}}{n'} u(\vec{n}') e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}'}$$

hipótese: $v(\vec{n}) = v(n)$

$$\hookrightarrow (II) \sim \frac{2mN}{\hbar^2} \int d n' n'^2 \frac{e^{i k n'}}{n'} v(n') \int d s' e^{i k n' \cos \theta}$$

$$\frac{4\pi \sin k n'}{k n'}$$

$$= \frac{2mN}{\hbar^2} \frac{1}{k} \int_0^\infty d n' e^{i k n'} \sin k n' v(n') \quad (154.2)$$

notam: $|(II)| \ll \delta$ se, e.g., $k \gg \delta \rightarrow k \ll \delta$, i.e.,

feixe incidente altas energias;

como $\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sin k n'}{k} = n'$, temos que

$$(II) \sim \frac{2mN}{\hbar^2} \int_0^\infty dn' n' V(n')$$

em particular, p/ potencial: escala de energia V_0 e alcance a .

$$(I) \sim ma^2 V_0 \rightarrow ma^2 |V_0|^2 \ll 1 : \text{condição validade} \quad (115.1)$$

aprox. Bonn (3ª ordem)

OBS.: p/ detalhes, veja Sec. 8.3.(b), Gottfried.

Espalhamento por um potencial central:
: método das ondas parciais

ideia: consideram a eq. de Schrödinger em coordenadas esféricas;
determinam o comportamento assintótico ($r \rightarrow \infty$) dos autoestados \sim autovalores $E > 0$ (estados de espalhamento);
determinam $d\sigma/d\Omega$!

consideram: partícula massa m sob potencial central $V(r)$;
eq. de Schrödinger independente do tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(r) \psi - E \psi(\vec{r}) \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi(\vec{r}) ; \quad E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (115.2)$$

Lembrem: em coordenadas esféricas, veja Eq. (11.111), Herzbachen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{L^2}{2m r^2} \quad (115.3)$$

$\psi(\vec{r})$ pode ser determinada via método de separação de variáveis; como $[H, L^2] = [H, L_z] = 0$, podemos considerar:

$$\psi(\vec{r}) = R_{e,k}(r) Y_e^m(\theta, \varphi) - \frac{1}{r} U_{e,k}(r) Y_e^m(\theta, \varphi), \quad (115.4)$$

onde a função radial $u=u(r)$ satisfaz a eq. diferencial:

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2mV(r) - k^2}{\hbar^2} \right) u_{\ell,k}(r) = 0 \quad (116.1)$$

a escolha da condição de contorno depende forma $V(r)$,

veja Cap. 32, Menzbacher p/ detalhes;

em particular, podemos considerar $R(r=0) \neq 0$;

como $u(r) = r R(r)$

\hookrightarrow condição de contorno: $u_{\ell,k}(r=0) = 0$; (116.2)

vamos considerar potenciais $V(r) \propto r^{\alpha}$ c/ c.c. (116.2)!

Lembran:

átomo H: discussão soluções Eq. (115.2) c/ $E < 0$: estados ligados;
aqui : " " " " " " " " $E > 0$: " espelhamento!"

hipótese: $V(r) \neq 0$ apenas p/ $r < a$: potencial de cunho alcance.

como estamos interessados no comportamento assintótico de $u(r)$, vamos considerar Eq. (116.1) p/ $r > a$;
nesse caso, $V(r) = 0$:

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - k^2 \right) u_{\ell,k}(r) = 0 : \quad (116.3)$$

: particularizine como um problema de potencial central!

verifica-se que (veja Sec. 32.2, Menzbacher p/ detalhes):

$$\frac{1}{r} u_{\ell,k}(r) = A e^{kr} + B e^{-kr}, \quad r > a \quad (116.4)$$

onde $A e$ e $B e$: cts.

$$J_\ell(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{\ell+1/2}(z) : \text{função de Bessel esférica}$$

(regular em $z=0$)

$$N_\ell(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{\ell+1/2}(z) : \text{função de Neumann esférica}$$

(singular em $z=0$)

Lembrem: comportamento assintótico:

$$J_\ell(z) \sim \frac{1}{z} \sin\left(z - \frac{\ell\pi}{2}\right) ; z \gg 1 \quad (157.1)$$

$$N_\ell(z) \sim -\frac{1}{z} \cos\left(z - \frac{\ell\pi}{2}\right)$$

↳ comportamento assintótico solução (156.4):

$$\frac{1}{n} U_{\ell, V(n)} \sim A e^{\frac{1}{n}} \sin\left(\ell n - \frac{\ell\pi}{2}\right) - B e^{\frac{1}{n}} \cos\left(\ell n - \frac{\ell\pi}{2}\right), n \gg a \quad (157.3)$$

notar: se $V(n) = 0$ p/ $n \rightarrow B = 0$ pois $N_\ell(0)$: singular;

como $V(n) = 0$ apenas p/ $n > a \rightarrow B \neq 0$

↳ B_e : medida efeito do potencial $V(n)$! (157.4)

em princípio, razão B_e/A_e pode ser obtida:

- determinando sol. (156.1) p/ $n < a$ + c.c. $U(n=0) = 0$ e

- condição: continuidade $\psi(\vec{n})$ e $\psi'(\vec{n})$ em $n = a$.

(Lembrem: sistema 3-D, potenciais seccionalmente
ctes, veja Cap. 6, Henzbacher) (157.5)

inicialmente, procedimento alternativo: consideram A_e e B_e

como parâmetros determinados posteriormente;

em particular, podemos escrever:

$$\frac{B_\theta}{\Delta \epsilon} = - \tan \delta_\theta = - \frac{\sin \delta_\theta}{\cos \delta_\theta}, \quad (118.1)$$

onde $\delta_\theta = 0$ se $V(n) = 0$ p/ n : discussão (117.4)

• Eqs. (117.3) e (118.1):

$$\frac{1}{n} U_{0,\theta}(n) \sim \frac{1}{kn} \left(\sin \left(kn - \frac{\ell \pi}{2} \right) \cos \delta_\theta + \cos \left(kn - \frac{\ell \pi}{2} \right) \sin \delta_\theta \right)$$

$$= \frac{1}{kn} \sin \left(kn - \frac{\ell \pi}{2} + \delta_\theta \right), \quad n \gg a \quad (118.2)$$

↑
phase shift

notar: se $V(n) = 0$ p/ $n \rightarrow \delta_\theta = 0$;

$\delta_\theta \neq 0 \sim V(n) \neq 0$: efeito do potencial $V(n)$

descrito em termos do deslocamento δ_θ

na fase da função radial $u=u(n)$!

de fato, $\delta_\theta = \delta_\theta(k)$, i.e.,

δ_θ depende: momento angular;

energia & partícula incidente.

Resumo: comportamento assintótico dos autoestados de
espalhamento Eq. (115.2) pode ser escrito em
termos dos phase shifts δ_θ .

próxima etapa: determinação da amplitude de espalhamento
 $f_k(\theta)$ em termos δ_θ

↳ determinação de f_k em termos δ_θ .
 $d\Omega$

• como o potencial $V(r)$ é esfericamente simétrico, temos que a direção do momento das partículas incidentes \vec{r} é um eixo de simetria do sistema
 L^a escolha $\vec{r} \parallel \hat{z}$: ok c/ Fig. (119.3) !

nesse caso, temos que: $f_{\vec{r}}^{(+)}(\vec{r}) = f_k(n, \theta)$

(119.1)

$$\Leftrightarrow f_{\vec{r}}(\vec{r}) = f_k(\theta),$$

i.e., $f(\vec{r})$ e $f_{\vec{r}}(\vec{r})$ independem ângulo azimutal ϕ :

: veja Eq. (109.2) p/ $U(\vec{r}') = U(\vec{r}')$;

devido à simetria azimutal, Eq. (119.1) pode ser escrita como:

$$f_k^{(+)}(n, \theta) = \sum_{l>0} C_l(k) \cdot U_{k,l}(n) P_l(\cos \theta)$$

$$\text{Eq. (118.2)} \approx \sum_{l>0} C_l(k) P_l(\cos \theta) \cdot \sin\left(kn - \frac{el\pi}{2} + \delta_l\right), \quad n \gg a \quad (119.2)$$

$$f_k(\theta) = \sum_{l>0} f_l(k) P_l(\cos \theta) \quad (119.3)$$

onde $C_l(k)$ e $f_l(k)$: coeficientes.

notar: comparação entre Eqs. (119.2) e (119.3) \rightarrow determinação $f_l(k)$ em termos δ_l .

• como $\vec{k} \cdot \vec{k}_z$, Eq. (100.3) assume a forma:

$$f_k^{(+)}(n, \theta) = n \left(e^{ikz} + f_k(\theta) e^{ikn} \right) ; \quad z = n \cos \theta \quad (119.4)$$

identidade (veja Sec. 12.2, Henzbacher)

$$e^{ikz} = e^{ikn \cos \theta} = \sum_{l>0} (2l+1) i^l j_{l+1}(kn) P_l(\cos \theta); \quad (120.1)$$

comportamento assintótico:

$$e^{ikz} = \sum_{l>0} (2l+1) i^l \frac{1}{kn} \sin\left(kn - \frac{l\pi}{2}\right) P_l(\cos \theta)$$

$$\frac{1}{2ikn} (e^{ikn} (-i)^l + e^{-ikn} (i)^l)$$

$$= \frac{e^{ikn}}{2ikn} \sum_{l>0} (2l+1) P_l(\cos \theta) - \frac{e^{-ikn}}{2ikn} \sum_{l>0} (2l+1) (-1)^l P_l(\cos \theta);$$

\uparrow outgoing

spherical wave

\uparrow incoming

spherical wave

(120.2)

: onda plana em termos ondas esféricas!

Eqs. (119.3), (119.4) e (120.2):

$$\psi_k^{(+)}(n, \theta) \approx - \frac{e^{-ikn}}{2ikn} \sum_{l>0} (2l+1) (-1)^l P_l(\cos \theta) +$$

$$+ \frac{e^{ikn}}{2ikn} \sum_{l>0} ((2l+1) P_l(\cos \theta) + 2ik f_e(x) P_l(\cos \theta)) \quad (120.3)$$

Eq. (119.2) pode ser escrita como:

$$\psi_k^{(+)}(n, \theta) = - \frac{e^{-ikn}}{2ikn} \sum_{l>0} C_e(x) e^{-il\theta} (i)^l P_l(\cos \theta)$$

$$+ \frac{e^{ikn}}{2ikn} \sum_{l>0} C_e(x) e^{il\theta} (-i)^l P_l(\cos \theta) \quad (120.4)$$

comparando os coeficientes das incoming spherical waves

Eqs. (120.3) e (120.4), temos que

(121)

$$C_{\ell}(x) e^{-i\delta_{\ell}} (-i)^{\ell} = N(2\ell+1) (-1)^{\ell} \rightarrow C_{\ell}(x) = N(2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}(x)} (-i)^{\ell}$$

(121.1)

comparando os coeficientes das outgoing spherical waves

Eqs. (120.3) e (120.4) + Eq. (121.1), temos que

$$C_{\ell}(x) e^{i\delta_{\ell}} (-i)^{\ell} = N(2\ell+1) + N \cdot (2ix) f_{\ell}$$

$$N(2\ell+1) e^{2i\delta_{\ell}} = N(2\ell+1) + N(2ix) f_{\ell}$$

$$\hookrightarrow f_{\ell}(x) = \frac{1}{2ix} (e^{2i\delta_{\ell}(x)} - 1) \quad (121.2)$$

Dessa forma, Eq. (119.3):

$$f_{\ell}(x) = \sum_{\ell \geq 0} (2\ell+1) \underbrace{\frac{e^{2i\delta_{\ell}(x)} - 1}{2ix}}_{\frac{e^{i\delta}}{k} \frac{1}{2i} (e^{i\delta} - e^{-i\delta})} P_{\ell}(\cos\theta)$$

$$= \frac{1}{k} \sum_{\ell \geq 0} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}(x)} \sin \delta_{\ell}(x) P_{\ell}(\cos\theta) : \quad (121.3)$$

: amplitude de espalhamento em termos phase shifts.

notar Eq. (121.3):

termos da expansão $f_{\ell}(x)$: momento angular definido;

denominação: ondas parciais

\hookrightarrow seção de choque diferencial, Eq. (104.1):

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = |f_{\ell}(x)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{\ell \geq 0} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} P_{\ell}(\cos\theta) \right|^2 \quad (121.4)$$

dessa forma, a seção de choque total é dada por:

$$\sigma_T = \int d\Omega d\sigma$$

$$= \frac{1}{\kappa^2} \sum_{l, l' \geq 0} (2l+1)(2l'+1) e^{i\delta_e + i\delta_{e'}} \sin \delta_e \sin \delta_{e'} +$$

$$+ \int \sin \theta d\theta P_l(\cos \theta) P_{l'}(\cos \theta) \int d\phi$$

$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{l'=0}^{\infty}$

$$\hookrightarrow \sigma_T = 4\pi \sum_{l \geq 0} (2l+1) \sin^2 \delta_e (\kappa) \quad (122.1)$$

notar:

• $\sigma_e = 4\pi (2l+1) \sin^2 \delta_e$: contribuição p/ σ_T associada
ao momento angular e :

$$\cdot \sigma_e \leq 4\pi (2l+1)$$

(122.2)

• $(\sigma_e)_{\max}$ corresponde $\delta_e = (n+1/2)\pi$, $n \in \mathbb{Z}$

Obs. 1: Eq. (121.3) p/ $\theta = 0$,

$$f_\kappa(\theta=0) = \frac{1}{\kappa} \sum_{l \geq 0} (2l+1) e^{i\delta_e} \sin \delta_e$$

$$\hookrightarrow \text{Im } f_\kappa(0) = \frac{1}{\kappa} \sum_{l \geq 0} (2l+1) \sin^2 \delta_e = \frac{\kappa}{4\pi} \sum_{l \geq 0} (2l+1) \sin^2 \delta_e$$

 σ_T

$\hookrightarrow \sigma_T = \frac{4\pi}{\kappa} \text{Im } f_\kappa(0)$: teorema óptico (122.3)
(p/ detalhes, veja parte (B))

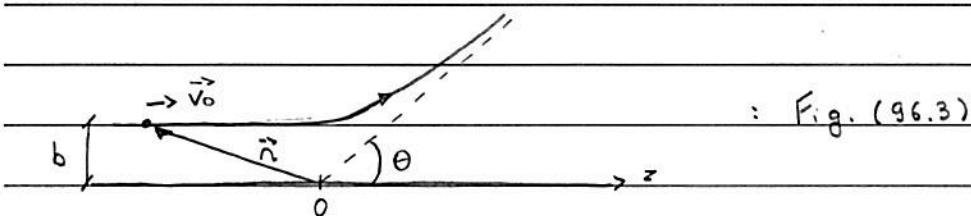
Obs. 2: Eq. (120.4) : a razão entre os coeficientes da outgoing
spherical wave e^{ikn}/n e incoming spherical wave
 e^{-ikn}/n :

$$\hat{S}_e(\kappa) = e^{2i\delta_e(\kappa)} : \text{autovalores matriz - S} \quad (123.1)$$

(p/ de detalhes, veja parte (B))

Obs. 3: análise semiclassica I,

- Lembrar mec. clássica: relação entre o parâmetro de impacto b e o momento angular \vec{l} da partícula incidente:



$$\vec{l} \cdot \vec{n} \times \vec{p} \rightarrow L = p \sin \theta = pb$$

se $b \gg a$: alcance potencial $V(\vec{r})$

↳ efeito $V(\vec{r})$ sob trajetória da partícula $\rightarrow 0$!

• mec. quântica: $L = pb \rightarrow \hbar l = \hbar \kappa b \rightarrow b = l/\kappa$;

similar mec. clássica:

se $b = l \gg a$ ou $l \gg \kappa a \rightarrow$ efeito potencial $V(\vec{r})$
sob partícula $\rightarrow 0$

ou se $\Rightarrow 0$ p/ $l > \kappa a$: apenas os primeiros termos
da série (121.3) contribuem p/ $f_{\kappa}(\theta)$!

Obs. 4: análise semiclassica II,

• mec. clássica: Eq. (97.1)

$$\Delta C = \Delta A = \Delta \sigma = b \Delta b \Delta \varphi$$

• mec. quântica: como $b = l/\kappa$, temos que

$$\Delta b = \Delta l \quad \text{e} \quad \Delta \sigma = b \Delta b \Delta \varphi = \frac{l}{\kappa} \cdot \frac{\Delta l}{\kappa} \cdot 2\pi$$

considerando apenas partículas incidentes c/ momento angular entre ℓh e $(\ell+1)h \rightarrow \Delta \ell = 1$ e

$$\Delta \sigma = \frac{2\pi}{K^2} \ell : \text{contribuição p/ dr partículas incidentes c/ momento angular } \ell$$

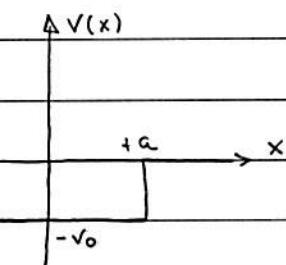
: similar (σ_c)_{MAX}, Eq. (122.2)

. Resumo: Eqs. (123.3) e (122.1) : amplitude de espalhamento e seção de choque p/ potencial central em termos phases shifts se: análise em ondas parciais;
notar: ainda é necessário determinar $\delta(\kappa)$!

. Determinação dos phase shifts.

Lembran: partícula massa m , movimento 1-D, sob potencial seccionalmente cte;

Ex.: $V(x) = \begin{cases} -V_0, & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$



nesse caso, condição: $\psi(x) \in \psi'(x)$ contínuas em $x = \pm a$

$$\sim \left. \frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx} \right|_{x=\pm a} = \left. \frac{d\ln \psi}{dx} \right|_{x=\pm a} : \text{derivada Logarítmica contínua em } x = \pm a$$

similar: solução u(r) eq. diferencial (136.3): como

$V(r) \neq 0$ apenas p/ $r < a$, podemos determinar a solução p/ $r < a$ e $r > a$ (Eq. (136.4)) e impon a continuidade da derivada logarítmica em $r = a$; como $u(r) = r R(r)$

podemos considerar:

$$\beta_e(k) \equiv \left. \frac{d}{dn} R(n) \right|_{n=a} : \text{derivada logarítmica} \quad (125.1)$$

continua: condição.

notas: Eqs. (126.4) e (128.3):

$$R_{e,k}(n) = U_{e,k}(n) = \cos \delta_e j_e(kn) - \sin \delta_e n_e(kn)$$

$$\hookrightarrow \text{Eq. (125.1)}: \beta_e(k) = k_a \cos \delta_e j'_e(k_a) - \sin \delta_e n'_e(k_a) : \quad (125.2)$$

$$\cos \delta_e j_e(k_a) - \sin \delta_e n_e(k_a)$$

: relação entre derivada logarítmica da sol. radial
e phase shifts

notas: se solução radial $R(n)$ p/ $n < a$ determinada

$$\xrightarrow{\text{Eq. (125.1)}} \beta_e \xrightarrow{\text{Eq. (125.2)}} \delta_e !$$

próxima etapa: vamos reescrever Eq. (125.2),

$$\beta_e = k_a (e^{i\delta_e} + \bar{e}^{-i\delta_e}) j' + i (e^{i\delta_e} - \bar{e}^{-i\delta_e}) n' ; \quad j = j_e(ka) \quad n = n_e(ka)$$

$$(e^{i\delta_e} + \bar{e}^{-i\delta_e}) j + i (e^{i\delta_e} - \bar{e}^{-i\delta_e}) n$$

$$j' = j'_e(ka) \quad n' = n'_e(ka)$$

$$= k_a e^{2i\delta_e} (j' + i n') + (j' - i n')$$

$$e^{2i\delta_e} (j + i n) + (j - i n)$$

$$\hookrightarrow e^{2i\delta_e} (\beta_e(j + i n) - k_a(j' + i n')) = -\beta_e(j - i n) + k_a(j' - i n')$$

$$\hookrightarrow \hat{S}_e = e^{2i\beta_e} = - \frac{(j-in)}{(j+in)} \cdot \left(\frac{\beta_e - \kappa_a j - in'}{j-in} \right) \left(\frac{\beta_e - \kappa_a j + in'}{j+in} \right)^{-1}$$

(126.1)

independe potencial $v(r)$

Definição:

$$\bullet e^{2i\beta_e(\kappa)} = - \frac{j_e(\kappa) - i n_e(\kappa)}{j_e(\kappa) + i n_e(\kappa)}$$

(126.2)

$$\bullet \Delta_e(\kappa) + i S_e(\kappa) = \kappa a \frac{j'_e(\kappa) + i n'_e(\kappa)}{j_e(\kappa) + i n_e(\kappa)} ; \Delta_e(\kappa), S_e(\kappa) \in \mathbb{R}$$

↑
cuidado $\neq \hat{S}_e$!

Dessa forma, Eq. (126.1):

$$e^{2i(\delta-\beta)} = \frac{\beta - \Delta + i\delta}{\beta - \Delta - i\delta}$$

(126.3)

$$\text{como } e^{i\delta} \sin \delta = \frac{1}{2i} e^{i\delta} (e^{i\delta} - e^{-i\delta}) = \frac{1}{2i} (e^{2i\delta} - 1)$$

$$\hookrightarrow e^{i\delta} \sin \delta = \frac{1}{2i} \left(\frac{\beta - \Delta + i\delta}{\beta - \Delta - i\delta} e^{2i\beta} - 1 \right)$$

$$= \frac{e^{2i\beta}}{2i} \left(\frac{\beta - \Delta + i\delta}{\beta - \Delta - i\delta} - e^{-2i\beta} \right)$$

$\downarrow - 2i e^{-i\beta} \sin \beta$

$$\hookrightarrow e^{i\delta_e} \sin S_e = e^{2i\beta_e} \left(\frac{S_e(\kappa)}{\beta_e(\kappa) - \Delta_e(\kappa) - i S_e(\kappa)} + e^{-i\beta_e} \sin \beta_e \right)$$

(126.4)

notar: Eqs. (125.2) e (126.4) são equivalentes!

• é interessante reescrever a Eq. (126.3) da seguinte forma:

$$e^{2i(\delta-\beta)} = \frac{1}{(\beta-\Delta)^2 + S^2} \left((\beta-\Delta)^2 - S^2 + 2iS(\beta-\Delta) \right)$$

$$= \cos 2(\delta-\beta) + i \sin 2(\delta-\beta)$$

$$= \cos^2(\delta-\beta) - \sin^2(\delta-\beta) + 2i \sin(\delta-\beta) \cos(\delta-\beta)$$

$$\hookrightarrow \cos(\delta-\beta) = \frac{\beta-\Delta}{\sqrt{(\beta-\Delta)^2 + S^2}} \Leftarrow \sin(\delta-\beta) = \frac{S}{\sqrt{(\beta-\Delta)^2 + S^2}}$$

$$\hookrightarrow \operatorname{tg}(\delta-\beta) = \frac{S}{\beta-\Delta} \quad \text{ou} \quad \delta_e(x) = \beta_e(x) + \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{S_e(x)}{\beta_e(x) - \Delta_e(x)} \right) \quad (126.5)$$

• notar Eqs. (122.2) e (126.4):

$$\Omega_e = \frac{4\pi}{\kappa^2} (2\ell+1) \sin^2 S_e$$

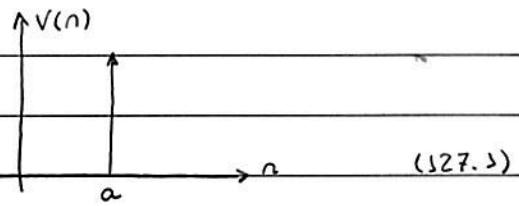
$$= \frac{4\pi \alpha^2 (2\ell+1)}{(\kappa a)^2} \left| \frac{S_e(x)}{\beta_e(x) - \Delta_e(x) - iS_e(x)} + e^{-i\delta_e(x)} \sin \delta_e(x) \right|^2$$

(126.6)

Ex. 1: potencial de esfera dura;

ideia: determinar os phase shifts p/ espalhamento
pelo potencial central:

$$V(r) = \begin{cases} +\infty, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}$$



(127.1)

nesse caso, $R_{e,k}(a) = 0$ Eq. (125.1) $\rightarrow \beta_e(k) \rightarrow +\infty$

Eqs. (126.1) e (126.2) $\rightarrow e^{2iS_e} = e^{2i\beta_e}$, i.e.,

$\beta_e(k) = S_e(k)$: phase shift p/ potencial de esfera dura!

$$\text{Eq. (126.2)}: e^{2iS_e} = \cos 2S_e + i \sin 2S_e =$$

$$= \cos^2 S_e - \sin^2 S_e + 2i \sin S_e \cos S_e = - (j_e(ka) - i n_e(ka))$$

$$= - \frac{1}{j_e^2(ka) + n_e^2(ka)} (n_e^2(ka) - j_e^2(ka) + 2i j_e(ka) n_e(ka))$$

$$\hookrightarrow \cos S_e = \frac{n_e(ka)}{\sqrt{j_e^2(ka) + n_e^2(ka)}} \quad \& \quad \sin S_e = \frac{j_e(ka)}{\sqrt{j_e^2(ka) + n_e^2(ka)}}$$

$$\text{ou} \cotg S_e(k) = \frac{n_e(ka)}{j_e(ka)}$$

em particular, p/ $\ell = 0$:

$$\text{com } j_0(z) = \frac{1}{z} \sin z \quad \& \quad n_0(z) = -\frac{1}{z} \cos z$$

$$\hookrightarrow \cotg S_0(k) = -\cotg ka$$

(127.3)

$\hookrightarrow \delta_0(k) = -ka$: phase shift p/ espalhamento por ondas
(s-wave scattering)

$$\text{Eq. (122.2)}: \sigma_{e=0} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi a^2}{k^2} \left(\frac{\sin ka}{ka} \right)^2$$

(128.1)

: contribuição para a seção de choque total
do espalhamento por onda-s

vamos considerar 2 casos Quidadeis,

(i) baixas energias feixe incidente: $k \rightarrow 0$ ou $ka \ll 1$;

$$\text{como } f_e(z) \approx \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad \text{e} \quad n_e(z) \approx -\frac{(2\ell-1)!!}{z^{2\ell+1}}, \quad z \ll 1$$

(128.2)

$$\hookrightarrow \text{Eq. (127.2)}: \tan \delta_e(k) \approx -\frac{(ka)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!! (2\ell-1)!!}$$

como $ka \ll 1$, temos que

$$\delta_e(k) \approx -\frac{(ka)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!! (2\ell-1)!!} : \text{phase shifts (baixas energias)}$$

(128.3)

nesse caso, o espalhamento por onda-s é dominante
(veja Obs. 3, pg. 123);

Como $\lim_{z \rightarrow 0} \frac{1}{z} \sin z = 1$, temos que

$$\sigma_T \approx \sigma_0 = \frac{4\pi a^2}{k^2} : \text{seção de choque total} \quad (128.4)$$

: comparar mec. clássica, Eq. (98.3) :

$$\sigma_T = \pi a^2 !$$

Obs.: $ka \ll 1 \rightarrow \lambda \sim \frac{1}{k} \gg a$:

: comprimento de onda \gg alcance do
partícula incidente potencial

no limite de baixas energias, é interessante definir

$$a_s = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0(k)}{k} : \text{comprimento de espalhamento} \quad (129.1)$$

em particular, para esfera dura:

$$a_s = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{(-k_c)}{k} = a : \text{comp. espalhamento} = \\ = \text{alcance do potencial}$$

(ii) altas energias feixe incidente: $k_a \gg 1$;

Eqs. (117.2) e (127.2):

$$\cotg \delta_e(k) \approx - \frac{1}{k_a} \cos(k_a - l\pi/2), \quad k_a \gg 1 \\ \sin(k_a - l\pi/2)$$

$\hookrightarrow \delta_e(k) \approx -k_a + \frac{l\pi}{2} : \text{phase shifts (altas energias)}$

(129.2)

$$\text{Eq. (122.3)}: \quad G_T = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k^2} \sin^2(k_a - l\pi/2)$$

como apenas termos c/ $l < k_c$ contribuem para a soma (veja Obs. 3, pg. 123), temos que

$$G_T \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{k_a} (2l+1) \sin^2(k_a - l\pi/2) ; \quad k_a \gg 1$$

$\approx 1/2 : \text{valor médio } \sin^2(x)$,

OK p/ $k \gg 1$

$$\approx \frac{4\pi}{k^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \int_0^{k_a} (2l+1) \quad \approx 2\pi a^2 : \text{seção} \quad (129.3) \\ \text{choque total}$$

$$(k_a)^2 + (k_c)^2 \approx (k_a)^2$$

notam: Eq. (129.3) \neq Eq. (98.1), apesar de

$$\kappa a \gg 1 \rightarrow \lambda \sim \frac{1}{\kappa} \ll a : \quad$$

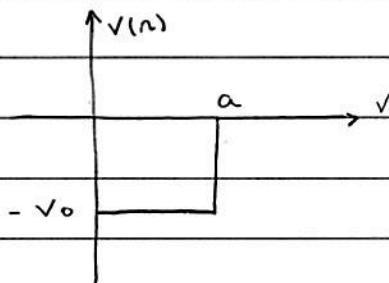
: combinação efeito ondulatório + alteração abrupta do potencial em $r=a$.

Ex. 2: poço quadrado alternativo;

considerar espalhamento pelo potencial central:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a \\ 0, & r > a \end{cases}; \quad V_0 > 0$$

(130.1)



nesse caso, vamos considerar a solução da eq.

diferencial (116.3) para $r < a$ para determinar $\psi(x)$;

verifica-se que (veja Sec. 12.3, Herzbachen):

$$R_{e,k}(r) = \frac{1}{r} U_{e,k}(r) = A e^{i k' r}; \quad A = \text{cte}$$

(130.2)

$$\text{onde } \hbar k' = \sqrt{2m(E + V_0)}$$

$$\text{como } \hbar k = \sqrt{2mE} \rightarrow (\hbar k')^2 = (\hbar k)^2 + (\hbar k_0)^2$$

(130.3)

$$\text{onde } \hbar k_0 = \sqrt{2mV_0}$$

como $R'_{ex}(n) = Ae^{k'n}je(k'n)$, a derivada logarítmica (125.1):

$$\beta_e(k) = \left. \frac{a}{R} \frac{dR}{dn} \right|_{n=a} = k'a \frac{j'_e(k'a)}{j_e(k'a)} \quad (131.1)$$

• Vamos considerar apenas o espalhamento por ondas, $\ell=0$;

inicial: determinar os parâmetros $\beta_0, \Delta_0, S_0 \in \mathbb{Z}_0$;

$$- \text{ como } j'_0(z) = -\frac{1}{z^2} \sin z + \frac{1}{z} \cos z$$

$$\hookrightarrow \text{Eq. (131.1)}: \beta_0(k) = k'a \frac{k'a}{\sin k'a} \frac{1}{(k'a)^2} (-\sin k'a + k'a \cos k'a)$$

$$\hookrightarrow \beta_0(k) = k'a \cot g(k'a) - 1 \quad (131.1)$$

$$- \beta_0(k) = -ka \quad : \text{Eq. (127.3)}$$

$$- \text{ como } j_0(z) + i n_0(z) = \frac{1}{z} (\sin z - i \cos z) = -i \frac{1}{z} e^{iz}$$

$$\hookrightarrow j'_0(z) + i n'_0(z) = \frac{1}{z^2} (z + i) e^{iz}$$

$$\text{Eq. (126.3)}: \Delta_0(k) + i S_0(k) = ka \frac{(ka + i) e^{ika}}{(ka)^2 (-i) e^{ika}}$$

$$= -1 + i ka \rightarrow \Delta_0(k) = -1 \quad \text{e} \quad S_0(k) = ka$$

(131.2)

• Dessa forma, temos que

• Eq. (126.5) : $\delta_0(\kappa) = -\kappa a + \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{\kappa a + \operatorname{tg} \kappa' a}{\kappa' a} \right)$ (132.1)

• Eqs. (125.3) e (126.4) :

$$f_{\ell=0, \kappa}(\theta) = f_{0, \kappa} = \frac{1}{\kappa} e^{i\delta_0} \sin \delta_0$$

$$= \frac{e^{-2i\kappa a}}{\kappa a} \left(\frac{\kappa a}{\kappa' a \operatorname{cotg} \kappa' a - i\kappa a} - e^{i\kappa a} \sin \kappa a \right) : \text{isotrópica}$$

(132.2)

• Eq. (126.6) :

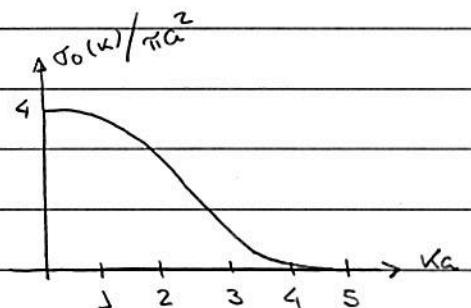
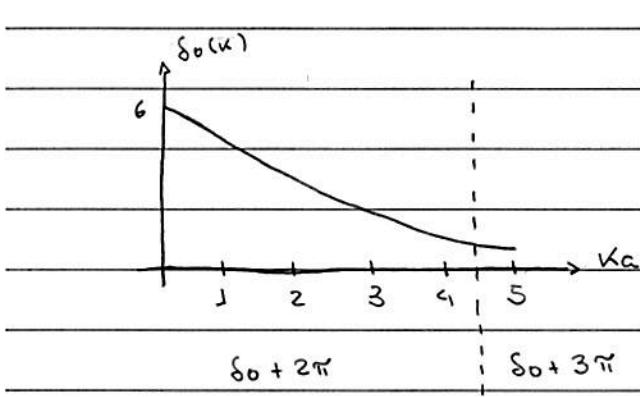
$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left| \frac{1}{\kappa' a \operatorname{cotg} \kappa' a - i\kappa a} - \frac{e^{i\kappa a} \sin \kappa a}{(\kappa a)^2} \right|^2$$

em particular, no limite de baixas energias partícula incidente, $\kappa a \ll 1$:

(132.3)

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(\frac{\operatorname{tg} \kappa' a}{\kappa' a} - 1 \right)^2; (\kappa' a)^2 = (\kappa a)^2 + (\kappa_0 a)^2$$

notar: $\delta_0, f_0 \in \sigma_0$ em termos energéticos ou κa ; $\kappa_0 a$: fixo

(K₀a = 6.2)

Obs.: $\delta_0(\kappa)$ excepto por factores $n\pi$ (+) nonnormalização

$$\delta(\kappa \rightarrow +\infty) \rightarrow 0$$

similar, podemos considerar o espalhamento por onda-p, $\ell=1$:

Nesse caso, verifica-se que (exercício):

$$\beta_1(x) = \kappa' a \frac{j'_1(\kappa' a)}{j_1(\kappa' a)} = \frac{2\kappa' a \cos \kappa' a - 2 \sin \kappa' a + (\kappa' a)^2 \sin \kappa' a}{\sin \kappa' a - \kappa' a \cos \kappa' a}$$

$$\cot \beta_1(x) = - \frac{(\cos \kappa a + \kappa a \sin \kappa a)}{\sin \kappa a - \kappa a \cos \kappa a}$$

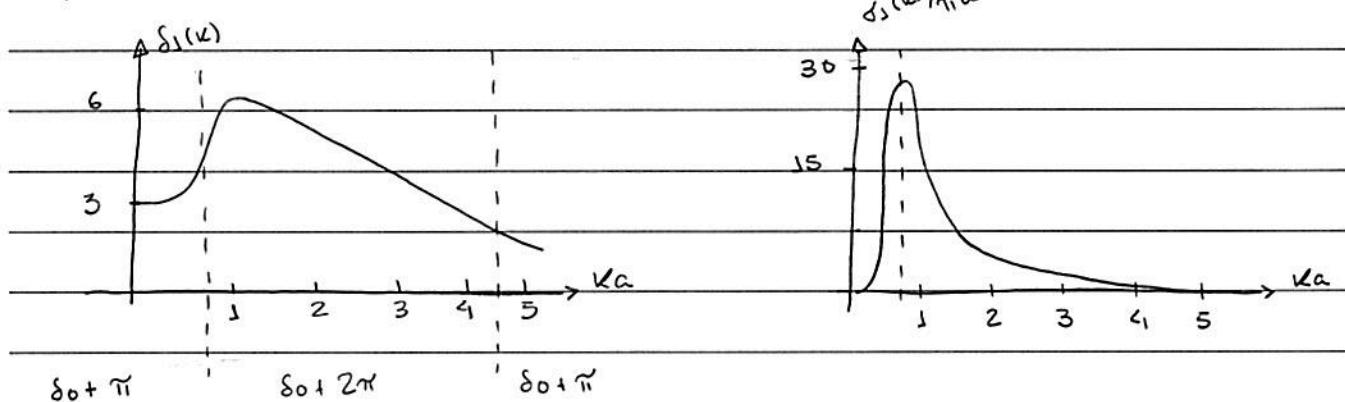
(133.1)

$$\Delta_1(x) = - \frac{(2 + (\kappa a)^2)}{1 + (\kappa a)^2} \quad \Leftrightarrow \quad S_1(x) = \frac{(\kappa a)^3}{1 + (\kappa a)^2}$$

Dessa forma: Eqs. (126.5) e (133.1) $\rightarrow \delta_1(x)$

Eqs. (126.6) e (133.1) $\rightarrow \sigma_1$

P/ $\kappa a = 6.2$, temos que



notam: p/ $\kappa a \approx 0.7$:

(i) δ_1 : variação rápida: $\Delta S_1 \approx \pi$

(133.2)

(ii) σ_1 : pico, $(\sigma_1)_{MAX} \sim 30 \pi a^2$: características:

$$OK \ L (S_1)_{MAX} = 4\pi \cdot 3 \cdot \frac{(\kappa a)^3}{(\kappa a)^2}$$

espalhamento
necessitante!

Eq. (122.2)

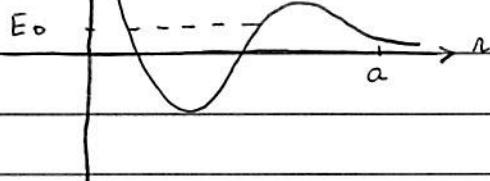
• Análise qualitativa: ressonância,

ideia: descrição qualitativa de uma ressonância em um processo de espalhamento: (scattering resonance)

consideram: partícula incidente, baixas energias, $k \ll 1$; espalhamento, potencial de cunho alcance;

$$\sigma_T \approx \sigma_e ; \quad l \gg 1 \text{ e fixo} : \text{somente onda}$$

$\Delta V(r) \quad$ parcial \sim mom. angular ℓ
apresenta ressonância!



(134.1)

Hipóteses: p/ $E \approx E_0$ (definida abaixo):

$$(i) \beta_e(E) \approx c + bE$$

(134.2)

$$(ii) \underline{\underline{c}} \beta_e(E), \Delta_e(E), S_e(E) \approx cde$$

sobre (i): aprox. linear p/ derivada logarítmica;

$b < 0$, pois $\beta_e(E)$: função monotônica decrescente
(veja nota 4, Cap. 9, Baym);

sobre (ii): OK pois \sim sol. eq. diferencial (125.1) p/ $r > a$,

$$\text{Eq. (126.3)}: e^{2i(\delta-\beta)} = \frac{c + bE - \Delta + iS}{c + bE - \Delta - iS} = \frac{E - E_0 - i\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2}$$

(134.3)

onde $E_0 = (\Delta - c)/b \Rightarrow \frac{\Gamma}{2} = -\frac{s}{b} > 0$ pois $b < 0 \Rightarrow$

$s > 0$ (veja Eq. (13.82), Herzbachen)

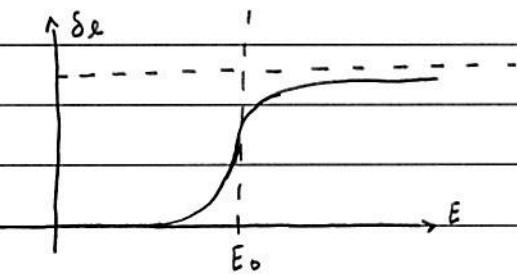
• Eq. (126.5) :

$$\delta_\ell = \beta_\ell + \operatorname{tg}^{-1}\left(\frac{s}{c+bE-\Delta}\right) = \beta_\ell + \operatorname{tg}^{-1}\left(\frac{\Gamma}{2(E_0-E)}\right) \quad (135.1)$$

como $\beta_\ell \sim -(ka)^{2\ell+1}$: Eq. (128.3),

p/ $ka \ll 1$ e $\ell \gg 1$, podemos considerar $\beta_\ell \approx 0$

$$\hookrightarrow \delta_\ell \approx \operatorname{tg}^{-1}\left(\frac{\Gamma}{2(E_0-E)}\right) \quad (135.1)$$



↪ hipóteses (134.2) OK c/ variação rápida em δ_ℓ ,
i.e., $\Delta\delta_\ell \sim \pi$ p/ $E \approx E_0$: Eq. (133.2)

• Eqs. (121.3) e (126.4) p/ $E \approx E_0$:

$$f_{E,K}(\theta) = \frac{1}{K} (2\ell+1) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \theta)$$

$$= \frac{1}{K} (2\ell+1) e^{2i\beta_\ell} \underbrace{\left(\frac{-\Gamma/2}{E-E_0+i\Gamma/2} + e^{i\beta_\ell} \sin \beta_\ell \right)}_{(I) \quad (II)} P_\ell(\cos \theta) \quad (135.2)$$

(I)

(II)

(135.2)

notas: (I): contribuição ressonância p/ amplitude de espalhamento;

(I) \gg (II), pois $\beta_\ell \approx 0$.

• Eq. (126.1):

$$\sigma_e = \frac{4\pi}{\kappa} (2\ell+1) \sin^2 \delta_e = \frac{4\pi a^2 (2\ell+1)}{(\kappa a)^2} \left| \frac{-\Gamma/2}{E - E_0 + i\Gamma/2} \right|^2$$

$$= \frac{4\pi a^2 (2\ell+1)}{(\kappa a)^2} \frac{\Gamma^2}{4(E - E_0) + \Gamma^2} : \quad (136.1)$$

: ionização: máximo em $E = E_0$: energia de ressonância
Largura $\Gamma/2$ alta: largura da ressonância

↳ hipóteses (134.2) ou as características (133.2) do espalhamento ressonante;

$E_0 \ll \Gamma$: parâmetros do sistema;

• sobre o máximo em σ_e p/ $E \approx E_0$;

(p/ detalhes, veja Sec. 10.15, Messiah)

se energia partícula incidente $E \approx E_0$

↳ partícula permanece "ligada" ao potencial

$V(r)$ por $\Delta t \sim \hbar/r \rightarrow$ máximo em σ_e !

E_0 pode ser visto como um "estado ligado" do

potencial $V(r)$ a/ energia $E_0 > 0$ e tempo de vida $2\hbar/r$:

: estado metastável : veja Fig. (134.1)

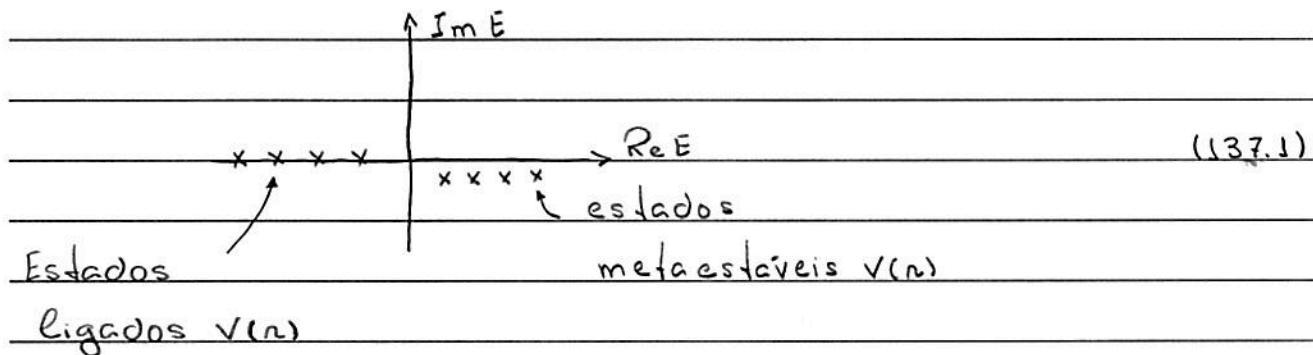
como $e^{i\delta} \sin \delta = \frac{1}{2i} (e^{2i\delta} - 1)$, p/ $E \approx E_0$, temos que

$$e^{2i\delta_e} - 1 \approx -i\Gamma \quad : \text{polo: } E = E_0 - \frac{i\Gamma}{2}$$

termo (1),

Eq. (135.2)

de fato, temos que, polos $e^{2i\theta_e - 1}$:



Equação integral p/ phase shifts.

Lembra:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi \sum_{l>0} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{1}{2l+1} \frac{n_e^l}{n_s^{l+m}} Y_e^m(\theta', \varphi') Y_s^{m*}(\theta, \varphi) : \quad (137.2)$$

: expansão em harmônicos esféricos da função de Green
da eq. de Poisson:

$$\nabla^2 G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (137.3)$$

Obs.: $n_e = \min(r, r')$ e $n_s = \max(r, r')$

similar (veja Sec. 9.6, Jackson)

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{i\chi |\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi i\chi \sum_{l>0} \sum_{m=-l}^{+l} j_l(\chi n_e) h_e^{(1)}(\chi n_s) Y_e^m(\theta', \varphi') Y_s^{m*}(\theta, \varphi) : \quad (137.4)$$

: expansão em harmônicos esféricos da função de Green
da eq. de Helmholtz (105.4):

$$(\nabla^2 + \chi^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

Aqui, $h_e^{(1)}(z) = j_e(z) + i n_e(z)$: função de Hankel esférica (138.1)

ideia: determinar eq. integral p/ phase shifts a partir

Eqs. (109.2), (119.2), (120.1) e (137.4);

· Eq. (109.2) c/ $\vec{r} \parallel \hat{z}$:

$$\psi_{\vec{r}}^{(1)}(\vec{r}) = N e^{ikn \cos \theta} - \underbrace{\frac{1}{4\pi} \int d^3 r' G(\vec{r}, \vec{r}') U(r') \psi_{\vec{r}'}^{(1)}(\vec{r}')}_{(1)} \quad (138.1)$$

potencial central

④ Eqs. (119.2) e (137.4) em (1),

$$(1) = - \frac{1}{4\pi} \cdot 4\pi i k \sum_l \sum_{e, m} C_e(k) \int d^3 r' r'^2 U_{e,k}(r') U(r') j_e(kn') h_e^{(1)}(kn') +$$

$$* Y_e^m(\theta, \phi) \int d\Omega' Y_e^m(\theta', \phi')^* P_e(\cos \theta')$$

$$\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} \delta_{e,e'} \delta_{m,m'}$$

$$P_e(\cos \theta)$$

$$(1) = \sum_l (-1)^k N(2l+1) i^{l+1} e^{i \delta_e} \int_0^\infty d^3 r' r' U_{e,k}(r') U(r') j_e(kn') h_e^{(1)}(kn') +$$

$$* P_e(\cos \theta)$$

$$\int_0^n d^3 r' r' U_{e,k}(r') U(r') j_e(kn') h_e^{(1)}(kn'),$$

pois $U(r') \neq 0$ p/ $r' < a$

④ Eq. (120.1);

↳ Eq. (138.1):

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(n, \theta) = \sum_{l>0} N(2l+1) i^l e^{i l \delta \epsilon} \frac{1}{n} u_{e,v}(n) P_e(\cos \theta) =$$

$$= \sum_{l>0} N(2l+1) i^l j_e(kn) P_e(\cos \theta) +$$

$$+ \sum_{l>0} N(2l+1) i^l (-i) e^{i l \delta \epsilon} \underbrace{\int_0^n d n' n' u_{e,v}(n') U(n') j_e(kn') h_e^{(1)}(kn) P_e(\cos \theta)}_{(II)};$$

considerando a igualdade de coeficientes $P_e(\cos \theta)$:

$$e^{i l \delta \epsilon} \frac{1}{n} u_{e,v}(n) = j_e(kn) - i k e^{i l \delta \epsilon} \quad (II) \quad (139.1)$$

• limite assintótico ($n \rightarrow +\infty$), Eq. (139.1):

$$\text{Eq. (138.2)} : \frac{u_{e,v}(n)}{n} \approx \frac{1}{2ikn} (e^{i(kn - l\pi/2 + \delta \epsilon)} - e^{-i(kn - l\pi/2 + \delta \epsilon)})$$

$$\text{Eq. (137.2)} : j_e(kn) \approx \frac{1}{2ikn} (e^{i(kn - l\pi/2)} - e^{-i(kn - l\pi/2)})$$

$$h_e^{(1)}(kn) \approx -i \frac{e^{i(kn - l\pi/2)}}{kn}$$

veja identidade pg. 326

$$\hookrightarrow \text{Eq. (139.1)} : e^{2i\delta \epsilon} = 1 - 2ik e^{i l \delta \epsilon} \quad (II) = 2i e^{i l \delta \epsilon} \sin \delta \epsilon + 1$$

$$\hookrightarrow \sin \delta \epsilon = -k \int_0^\infty d n' n' u_{e,v}(n') U(n') j_e(kn') :$$

(139.2)

: equação integral para phase shifts!

• em uma aproximação de ordem zero, podemos considerar
(veja Exercício 13.19, Henzbacher)

$$U^{(0)}_{e, v}(n) \approx n \cos \delta e f_e(x_n)$$

L^r Eq. (139.2): $\sin \delta e \approx -\kappa \int_0^\infty dn' n'^2 U(n') j_e^2(x_{n'})$,

em particular, p/ baixas energias $\kappa a \ll \ell$ e $\ell \gg s$ ou $\kappa a \ll \ell$,
podemos considerar Eq. (128.3)

L^r $\sin \delta e \approx -\frac{1}{2} \frac{(x_a)^{2\ell+1}}{((2\ell+1)!!)^2} \int_0^\infty dn' n'^2 U(n')$. (140.1)

i.e., $\delta e \propto (x_a)^{2\ell+1}$, p/ $\kappa a \ll \ell$

(B) Teoria formal do espalhamento.

ideia: descrição espalhamento como processo de transição entre estados não-perturbados (ondas planas) devido ao potencial $V(\vec{r})$; similar tratamento sistema via teoria de perturbação dependente do tempo; descrição espalhamento via formalismo abstrato H.Q.

inicial (1): sobre partícula livre (veja Sec. 4.4, Menzschacher);

Lembra: onda plana,

$$\langle \vec{n} | \vec{p} \rangle = \psi_{\vec{p}}(\vec{n}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{n}/\hbar}; \quad \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

$$\text{se } \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

$$\hookrightarrow \langle \vec{n} | \vec{v} \rangle = \psi_{\vec{v}}(\vec{n}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{v} \cdot \vec{n}}; \quad \langle \vec{v} | \vec{v}' \rangle = \delta(\vec{v} - \vec{v}')$$

: normalização - \vec{v} (141.1)

autovalores: $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$: contínuo; $-\infty < k_x, k_y, k_z < +\infty$

alternativa: partícula livre "na caixa";

caixa = cubo anestá L ⊕ condições periódicas de contorno (c.p.c.)

nesse caso,

$$\langle \vec{n} | \vec{v} \rangle = \psi_{\vec{v}}(\vec{n}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{v} \cdot \vec{n}}; \quad \langle \vec{v} | \vec{v}' \rangle = \delta_{\vec{v}, \vec{v}'} (141.2)$$

$$\text{notar: } \int_V d^3n |\psi_{\vec{v}}(\vec{n})|^2 = \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz |\psi_{\vec{v}}(\vec{n})|^2 = 1$$

$$\text{c.p.c.: } \psi(\vec{n} + L\hat{x}) = \psi(\vec{n}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot (\vec{n} + L\hat{x})} = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i \vec{k} \cdot \vec{n}}$$

$\hookrightarrow k_x L = 2\pi n_x$; $n_x \in \mathbb{Z}$; similar $k_y \in \mathbb{Z}$;

(142.1)

\hookrightarrow autovalores: $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$: discreto

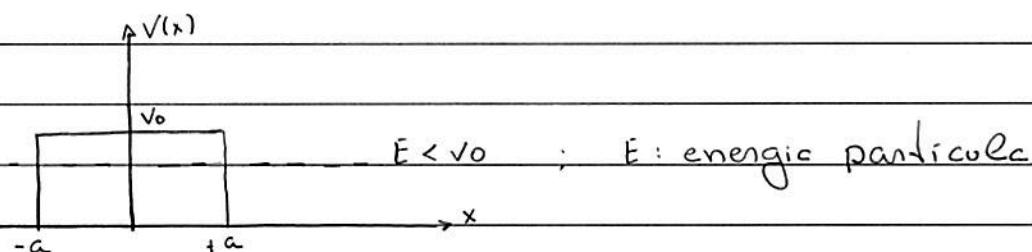
relação entre descrições discretas e contínuas:

$$\frac{1}{L^3} \int_{\vec{k}} \rightarrow \int_{(2\pi)^3} d^3k ; L \rightarrow 2\pi : \text{veja Eq. (4.57), Henzbacher.}$$

inicial (2): partícula movimento 3-D sob potenciais

seccionalmente contínuos (veja Sec. 6.3, Henzbacher)

$$\text{Ex.: } V(x) = \begin{cases} V_0, & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases}; V_0 > 0$$



solução eq. de Schrödinger independente do tempo:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{i k x} + B e^{-i k x}, & x < -a \\ C e^{-k' x} + D e^{+k' x}, & -a < x < a \\ F e^{i k x} + G e^{-i k x}, & x > a \end{cases}; \quad \begin{aligned} \hbar k &= \sqrt{2mE} \\ \hbar k' &= \sqrt{2m(V_0 - E)} \end{aligned} \quad (142.2)$$

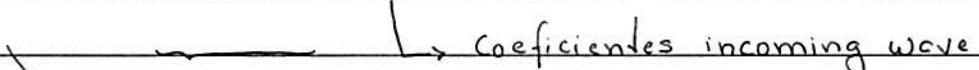
a condição de continuidade de $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ em $x = \pm a$
pode ser escrita como:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} : \text{relação entre coeficientes}$$

funções de onda p/ $x < -a$ e $x > +a$;

alternativamente, podemos escrever:

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \quad (J43.1)$$

 Coeficientes incoming wave

matriz - S

" " outgoing "

verifica-se que: matriz - S : unitária

Lembran: $T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$: coef. de transmissão p/ $G=0$;

$$\text{Eq. (J43.1)} : F = S_{21} A \rightarrow T = \left| \frac{F}{A} \right|^2 = |S_{21}|^2$$

Obs.:

- se $f(x,t) = B e^{ikx-i\omega t}$ $\rightarrow kx + \omega t = C$: cte

$\hookrightarrow x = C/k - \omega t/\omega$: propagação $-\hat{x}$;

p/ $x < -a$ $\rightarrow f(x,t)$: outgoing wave!

- se $f(x,t) = F e^{ikx-i\omega t}$ $\rightarrow kx - \omega t = C$: cte

$\hookrightarrow x = C/k + \omega t/\omega$: propagação $+\hat{x}$;

p/ $x > +a$ $\rightarrow f(x,t)$: outgoing wave!

Obs.: matriz - S \propto potência $v(\vec{n})$;

E: energia partícula incidente;

\neq forma pacote de onda inicial.

inicial (3) : versão de intenção da H.Q., nenhuma definição;

consideram Eq. (45.3) p/ $t_0 = 0$:

$$|\psi_I(t)\rangle = U_0^*(t, 0) |\psi_S(t)\rangle = e^{+iH_0 t/\hbar} |\psi_S(t)\rangle$$

(144.1)

$$A_I(t) = U_0^*(t, 0) A_S U_0(t, 0) = e^{iH_0 t/\hbar} A_S e^{-iH_0 t/\hbar}$$

nesse caso, Eq. (46.3) assume a forma:

$$|\psi_I(t)\rangle = U_0^*(t, 0) U(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle$$

$$\text{como } |\psi_I(t_0)\rangle = U^*(t_0, 0) |\psi_S(t_0)\rangle$$

$$\hookrightarrow |\psi_I(t)\rangle = U_0^*(t, 0) U(t, t_0) U_0(t_0, 0) U_0^*(t_0, 0) |\psi_S(t_0)\rangle$$

$$U_I(t, t_0)$$

$$|\psi_I(t_0)\rangle$$

$$\text{ou } U_I(t, t_0) = e^{+iH_0 t/\hbar} U(t, t_0) e^{-iH_0 t/\hbar} : \text{op. de evolução}$$

temporal p/

(144.2)

versão de intenção

Obs.: - Eq. (144.1) : definições Menzbacher;

- $U_I(t, t_0) = \tilde{T}(t, t_0)$: notação Menzbacher.

· descrição processo de espalhamento;

consideram: espalhamento clássico, partícula s/ spin,
potencial $V(\vec{r})$;

hamiltoniano:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = H_0 + V(\vec{r})$$

(144.3)

onde: $V(\vec{r}) \neq 0$, se $r < a$; a : alcance do potencial

$$H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle ; \langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$$

(145.1)

$$\text{ou } H_0 |\vec{k}\rangle = E_k |\vec{k}\rangle ; E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} : \text{discreto ou contínuo}$$

(veja inicial (1))

• Eq. (144.2) @ base $|n\rangle$: autoestados de H_0 :

$$|\psi_s(t)\rangle = U_s(t, t_0) |\psi_s(t_0)\rangle$$

$$= \sum_{k,s} |k\rangle \langle k| U_s(t, t_0) |s\rangle \langle s| \psi_s(t_0)\rangle \quad (145.2)$$

$$\text{notar: } |\langle k| U_s(t, t_0) |s\rangle|^2 = |\langle k| e^{i H_0 t / \hbar} U(t, t_0) e^{-i H_0 t / \hbar} |s\rangle|^2$$

$$= |e^{i(E_k - E_s)t/\hbar} \langle k| U(t, t_0) |s\rangle|^2 =$$

$= |\langle k| U(t, t_0) |s\rangle|^2$: probabilidade de transição

estado $|s\rangle \rightarrow$ estado $|k\rangle$: Eq. (49.2).

• eq de movimento p/ $\langle k| U_s(t, t_0) |s\rangle$:

Lembra Eq. (47.1):

$$i\hbar \frac{dU_s(t, t_0)}{dt} = V_s(t) U_s(t, t_0) ; V_s(t) = U_s^\dagger(t, 0) V U_s(t, 0)$$

cuja solução formal é dada por:

$$U_s(t, t_0) = 1 - i \int_{t_0}^t dt' V_s(t') U_s(t', t_0) : \text{Eq. (47.2)}$$

temos que.

$$\langle \psi_1 | U_I(t, t_0) | s \rangle = S_{\psi, s} - i \int_{t_0}^t dt' \langle \psi_1 | V_s(t') | U_I(t', t_0) | s \rangle$$

↑
↓

$$\sum_n \langle \psi_1 | e^{iH_0 t'/\hbar} V_s e^{-iH_0 t'/\hbar} | n \rangle \langle n | U_I(t', t_0) | s \rangle$$

$$\exp(i(E_k - E_n)t'/\hbar) \langle \psi_1 | v_n | n \rangle$$

como $\hbar \omega_{kn} = E_k - E_n$, temos que:

$$\langle \psi_1 | U_I(t, t_0) | s \rangle =$$

$$= S_{\psi, s} - i \sum_n \langle \psi_1 | v_n | n \rangle \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{kn} t'} \langle n | U_I(t', t_0) | s \rangle : \quad (146.1)$$

: sistema eqs. pr elementos de matriz $\langle \psi_1 | U_I(t, t_0) | s \rangle$

em princípio, $| \psi_1(t_0) \rangle$: pacote ondas planas ~ Eq. (99.2);
entretanto, vamos considerar as seguintes hipóteses:

(i) $t_0 \rightarrow -\infty$: partícula incidente: estado "IN" $| s \rangle$: onda plana

(ii) $t \rightarrow +\infty$: " espalhada": " " "OUT" $| k \rangle$: " "

(iii) É o elemento de matriz

$$S_{\psi, s} = \langle \psi_1 | U_I(+\infty; -\infty) | s \rangle$$

(146.2)

dessa forma, solução do problema de espalhamento =

= solução Eq. (146.1)

④ condição (146.2).

Definição: S_{kS} : elemento de matriz da chamada matriz de espalhamento ou matriz-S;

notar Eq. (146.2): amplitude de probabilidade sistema no estado OUT irá em $t \rightarrow +\infty$ dado que sistema no estado IN é em $t_0 \rightarrow -\infty$;

similar à Eq. (143.3) p/ sistema 3-2: relação entre estados in e out!

próxima etapa: sol. Eq. (146.1);

em ordem-zero, teoria de perturbação:

$$\langle \psi | U_I(t, t_0) | \psi \rangle \approx S_{kS}$$

↳ em 3º ordem:

$$\langle \psi | U_I(t, t_0) | \psi \rangle \approx S_{kS} - \frac{i}{\hbar} \langle \psi | V | \psi \rangle \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{kS} t'}; \quad (147.1)$$

p/ integral temporal finita, é necessário introduzir o fator $e^{\alpha t'}$, $\alpha > 0$, i.e.:

$$\langle \psi | U_I(t, t_0) | \psi \rangle \approx S_{kS} - \frac{i}{\hbar} \langle \psi | V | \psi \rangle \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{kS} t' + \alpha t'} \quad (147.2)$$

nesse caso, é necessário considerar os limites na ordem:

(1) $t_0 \rightarrow -\infty$

(2) $\alpha \rightarrow 0$

$$\Rightarrow \alpha t \rightarrow 0 \text{ ou } \alpha |t| \ll 1 \rightarrow |t| \ll \frac{1}{\alpha}, \text{ i.e.,} \quad (147.3)$$

solução Eq. (147.2) ou p/ instantes t tais que $|t| \ll 1/\alpha$!

Obs. Eq. (147.3) : $t \rightarrow |t|$ pois $\alpha > 0$!

Eq. (147.2) \rightarrow ansatz pr sol. Eq. (146.1) :

$$\langle \psi(t, t_0) | s \rangle = S_{\psi, s} - i T_{\psi, s} \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{\psi} s t' + \alpha t'} \quad (148.1)$$

notar igualdade,

$\text{NOT } \approx !$

elemento da matriz de

transição T

(determinado posteriormente)

\hookrightarrow solução do problema de espalhamento = determinação $T_{\psi, s}$!

de fato, verifica-se que (veja abaixo) Eq. (148.1) é sol. Eq. (146.1)!

(+)

proxima etapa: verifican as consequências ansatz (148.1);

em seguida: " (+) !

$$(i) \text{ como } \int_{t_0}^t dt' e^{i\omega_{\psi} s t' + \alpha t'} = \frac{1}{i\omega_{\psi} s + \alpha} (e^{i\omega_{\psi} s t + \alpha t} - e^{i\omega_{\psi} s t_0 + \alpha t_0})$$

$\xrightarrow[t_0 \rightarrow -\infty]{L} 0$

$$\hookrightarrow \langle \psi(t, -\infty) | s \rangle = S_{\psi, s} - i \underbrace{\frac{e^{i\omega_{\psi} s t + \alpha t}}{i\omega_{\psi} s + \alpha}}_{T_{\psi, s}} \quad (148.2)$$

$$\xrightarrow[\alpha \rightarrow 0]{\substack{\alpha \rightarrow 0 \\ t \rightarrow +\infty (\alpha t \rightarrow 0)}} 2\pi \delta(\omega_{\psi} s)$$

$$\text{pois } \lim_{\substack{\epsilon \rightarrow 0 \\ T \rightarrow +\infty}} \frac{e^{(i\omega + \epsilon)T}}{i\omega + \epsilon} \quad (\epsilon T \rightarrow 0)$$

$$\text{Como } \frac{1}{\hbar} \delta(\omega_{\psi} s) = \delta(E_{\psi} - E_s), \text{ temos que}$$

$$S_{ks} = \langle \psi | U_I(+\infty, -\infty) | s \rangle = S_{us} - 2\pi i \delta(E_k - E_s) T_{us} : \quad (149.1)$$

: relação entre elementos matriz de espalhamento
 e " " transição.

(ii) Eq. (148.3) p/ $t < +\infty$ e $k \neq s$.

$$|\langle \psi | U_I(t, -\infty) | s \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \frac{e^{2\alpha t}}{\omega_{ks}^2 + \alpha^2} |T_{us}|^2 : \text{probabilidade de transição} \quad (149.2)$$

$$\frac{d}{dt} |\langle \psi | U_I(t, -\infty) | s \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \frac{2\alpha e^{2\alpha t}}{\omega_{ks}^2 + \alpha^2} |T_{us}|^2$$

$$\xrightarrow[\alpha \rightarrow 0]{t \text{ finito}} 2\pi \delta(\omega_{ks})$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_k - E_s) |T_{us}|^2 \quad (149.2)$$

notam Eq. (149.2): prob. de transição / tempo = cte :

: OK c/ Regra de ouro de Fermi (57.3) p/ transição entre estados discretos e perturbação $V \neq V(t)$
 e identificação $T_{us} \rightarrow V_{us}$.

(iii) relação entre T_{us} e $d\sigma/d\Omega$.

consideram: autovalores λ_0 : $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$: Eq (145.1)

autoestados: $|k\rangle \rightarrow |\vec{k}\rangle$ e $|s\rangle \rightarrow |\vec{s}\rangle$, i.e.,

$|s\rangle \rightarrow |\vec{s}\rangle$: partícula incidente, onda plana, momento $\hbar\vec{s}$

$|k\rangle \rightarrow |\vec{k}\rangle$: " espalhada, " $\hbar\vec{k}$

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

(149.3)

detalhes, Eq. (149.3),

como $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, temos que

$$\delta(E_k - E_{k'}) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(E_k - E_{k'})t/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(k^2 - k'^2)t/\hbar}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\left(-i(k - k')(k + k')\hbar t / 2m\right)$$

$$\text{se } x = (k + k')\hbar t \rightarrow dx = (k + k')\hbar dt$$

$$\hookrightarrow \delta(E_k - E_{k'}) = \frac{2m}{(k + k')\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(k - k')x} = \frac{m}{\hbar^2 k} \delta(k - k')$$

$$\text{Eq. (149.2): } \frac{d}{dt} |<\vec{k}'| U(t, -\infty) |\vec{k}>|^2 = \frac{2\pi m}{\hbar^3 \kappa} \delta(\kappa - \kappa') |T_{\vec{k}', \vec{k}}|^2 :$$

$$\text{: notar: } |\vec{k}| = |\vec{k}'|$$

dessa forma,

$$\omega = \sum_{\vec{k}'} \frac{d}{dt} |<\vec{k}'| U(t, -\infty) |\vec{k}>|^2 :$$

: probabilidade de transição / tempo partícula incidente momento $\hbar \vec{k}$ espalhado momento

$$\hbar \vec{k}' = \hbar \kappa \hat{n} = \hbar \times \hat{n} \in \text{ângulo sólido } d\Omega : \text{veja Fig. pg. 95;}$$

temos que,

$$\omega = \sum_{\vec{k}'} \frac{2\pi m}{\hbar^3 \kappa} \delta(\kappa - \kappa') |T_{\vec{k}', \vec{k}}|^2 = \frac{2\pi m}{\hbar^3 \kappa} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 \int d^3 k' \delta(\kappa - \kappa') |T_{\vec{k}', \vec{k}}|^2$$

$$= \frac{m L^3}{\hbar^3 \kappa (2\pi)^2} \int k'^2 dk' \delta(\kappa - \kappa') |T_{\vec{k}', \vec{k}}|^2 d\Omega$$

$$= \frac{m \kappa L^3}{\hbar^3 (2\pi)^2} |T_{\vec{k}', \vec{k}}|^2 d\Omega = \frac{m^2 v L^3}{(2\pi)^2 \hbar^4} |T_{\vec{k}', \vec{k}}|^2 d\Omega \quad (150.1)$$

$$\text{Lembra: } |\vec{k}| = |\vec{k}'| \quad \text{partícula incidente}$$

como ω : probabilidade de transição / tempo

$$\Rightarrow J = \frac{1}{L^3} \sigma : \text{número partículas incidentes / área. tempo :}$$

: Eq. (95.1)

$$\text{Eq. (95.2): } \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{\omega}{J} = \left(\frac{m L^3}{2\pi \hbar^2} \right)^2 |T_{\vec{k}', \vec{k}}|^2 d\Omega \quad (150.2)$$

Lembra Eq. (155.1) :

$$f_{\vec{r}}(\vec{n}) = - \frac{mL^3}{2\pi\hbar^2} \int d^3n' \frac{e^{-i\vec{r} \cdot \vec{n}'}}{L^{3/2}} V(\vec{n}') \frac{e^{i\vec{r} \cdot \vec{n}'}}{L^{3/2}}$$

$\langle \vec{r}' | V | \vec{r} \rangle$

notar similaridade entre Eq. (150.2) e dada na aproximação de Born (1ª ordem); entretanto, Eq. (150.2) é exata!

• Eqs. integrais da teoria de espalhamento.

ideia: verificam que Eq. (148.1) é sol. Eq. (146.1);

Eq. (146.3) p/ $t_0 \rightarrow -\infty$:

$$\langle \psi | U_I(t, -\infty) | s \rangle = S_{\psi, s} - i \sum_n \langle \psi | V | n \rangle \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{ns} t' + \alpha t'} \langle \psi | U_I(t', -\infty) | s \rangle$$

④ Eq. (148.2),

$$S_{\psi, s} - i \frac{e^{i\omega_{ks} t + \alpha t}}{i\omega_{ks} + \alpha} T_{ks} = S_{\psi, s} - i \sum_n \langle \psi | V | n \rangle \delta_{n,s} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{nt} t' + \alpha t'} - i \frac{\langle \psi | V | s \rangle e^{i\omega_{ks} t + \alpha t}}{i\omega_{ks} + \alpha}$$

$$+ \left(-i \right)^2 \sum_n \langle \psi | V | n \rangle \frac{T_{ns}}{i\omega_{ns} + \alpha} \int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{nt} t' + i\omega_{ns} t' + \alpha t'}$$

$$\int_{-\infty}^t dt' e^{i\omega_{ks} t' + \alpha t'} = \frac{e^{i\omega_{ks} t + \alpha t}}{i\omega_{ks} + \alpha}$$

④ condição (147.3) $\alpha t \rightarrow 0$,

temos que,

$$T_{xs} = \frac{\langle \psi_1 | V | \psi_s \rangle + i}{\hbar n} \langle \psi_1 | \psi_n \rangle T_{ns} \quad (JS2.1)$$

④ condição (JS2.3) : $|t| \ll \hbar \omega$

\hookrightarrow se \exists T_{xs} solução (JS2.3) \rightarrow ansatz (JS2.1) OK, p/ $|t| \ll \hbar \omega$

notas: problema inicial (JS2.1) dependente do tempo

\hookrightarrow "equivalente (JS2.1) independente do tempo!"

• vamos verificar a relação do procedimento acima c/ a descrição (A) baseado em pacote de ondas.

notação: $|\psi\rangle \rightarrow |\Psi\rangle$, $|\psi_s\rangle \rightarrow |\Psi_s\rangle$: autoestados de H, Eq. (JS2.1)

Definição: estados $|\Psi_n^{(n)}\rangle$,

$$T|\Psi_n\rangle = \sqrt{E_n}|\Psi_n^{(n)}\rangle; \quad (JS2.2)$$

temos que,

$$T_{xs} = \langle \psi_1 | T | \psi_s \rangle - \langle \Psi_n | T | \Psi_s \rangle = \langle \Psi_n | V | \Psi_s^{(n)} \rangle$$

\hookrightarrow Eq. (JS2.1) :

$$T_{xs} = \frac{\langle \Psi_n | V | \Psi_s \rangle + i}{\hbar n} \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | V | \Psi_s^{(n)} \rangle - \frac{(E_n - E_s)/\hbar + i\omega}{\hbar n}$$

$$\langle \Psi_n | V | \Psi_s^{(n)} \rangle = \langle \Psi_n | V | \Psi_s \rangle + \frac{i}{\hbar n} \langle \Psi_n | V | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | V | \Psi_s^{(n)} \rangle,$$

como o estado $|\Psi_n\rangle$ é arbitrário, temos que

$$\lvert \Psi_s^{(+)} \rangle = \lvert \Psi_s \rangle + \sum_n \frac{1}{E_s - E_n + i\hbar\omega} \lvert \Psi_n \rangle \langle \Psi_n \mid V \lvert \Psi_s^{(+)} \rangle$$

$$= \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\omega} \lvert \Psi_s \rangle$$

Eq. (153.1) →

$$\hookrightarrow \lvert \Psi_s^{(+)} \rangle = \lvert \Psi_s \rangle + \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\omega} V \lvert \Psi_s \rangle : \text{Equação de Lippmann-Schwinger} \quad (153.1)$$

notar:

$$(E_s - H_0 + i\hbar\omega) + \text{Eq. (153.1)} :$$

$$(E_s - H_0 + i\hbar\omega) \lvert \Psi_s^{(+)} \rangle = (E_s - H_0 + i\hbar\omega) \lvert \Psi_s \rangle + V \lvert \Psi_s^{(+)} \rangle$$

$$= i\hbar\omega \lvert \Psi_s \rangle + V \lvert \Psi_s^{(+)} \rangle$$

$$\xrightarrow{\omega \rightarrow 0} (H_0 + V) \lvert \Psi_s^{(+)} \rangle = H \lvert \Psi_s^{(+)} \rangle = E_s \lvert \Psi_s^{(+)} \rangle ; \quad (153.2)$$

i.e., no limite $\omega \rightarrow 0$, $\lvert \Psi_s^{(+)} \rangle$ é um autoestado de $H = H_0 + V$
c/ autovalor E_s : autovalor de H_0
ou E_s : autovalor de $H_0 \neq H$!

↪ hipótese:

esquematicamente:

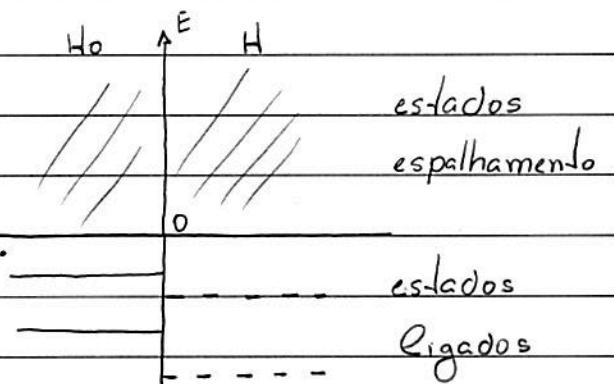
(153.3)

espectro contínuo $H_0 =$

= " " " " " H ;

espectro discreto

(estados ligados) podem
ser distintos



Lembrem Eq. (33.1); podemos considerar

$$G^{(+)}(E) = \frac{1}{E - H_0 + i\hbar\omega} : \text{nesoevento p/hamiltoniano } H_0 \quad (154.1)$$

• consideram Eq. (153.1) na representação de coordenadas,

identificação $|\psi_s^{(+)}\rangle \rightarrow |\psi_{\vec{r}}^{(+)}\rangle$ e, assim

$$\langle \vec{r} | \psi_{\vec{r}}^{(+)} \rangle = \psi_{\vec{r}}^{(+)}(\vec{r}) \quad (154.2)$$

$$\text{e } \langle \vec{r} | \psi_s \rangle - \langle \vec{r} | \psi_{\vec{r}}^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} : \text{autoestado } H_0$$

$$\hookrightarrow \langle \vec{r} | \psi_{\vec{r}}^{(+)} \rangle = \underbrace{\langle \vec{r} | \psi_{\vec{r}}^{(+)} \rangle}_{E_k - H_0 + i\hbar\omega} + \underbrace{\langle \vec{r} | \frac{1}{E_k - H_0 + i\hbar\omega} \nabla | \psi_{\vec{r}}^{(+)} \rangle}_{(I)}$$

Como:

$$(I) = \int d^3x d^3x' d^3n d^3n' \langle \vec{r} | \psi_{\vec{r}}^{(+)} \rangle \langle \psi_{\vec{r}'} | \frac{1}{E_k - H_0 + i\hbar\omega} | \psi_{\vec{r}''} \rangle + \frac{1}{E_k - E_{k'} + i\hbar\omega} \langle \psi_{\vec{r}'} | \psi_{\vec{r}''} \rangle$$

$$+ \langle \psi_{\vec{r}''} | \vec{n}' \rangle \langle \vec{n}' | \nabla | \vec{n}'' \rangle \langle \vec{n}'' | \psi_{\vec{r}}^{(+)} \rangle$$

$$\nabla(\vec{n}') \delta(\vec{n} - \vec{n}'')$$

$$= \frac{(-1)}{(2\pi)^3} \int d^3n' \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{n}') \underbrace{\int d^3x' e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{n}')}}_{k'^2 - (k^2 + i\hbar\omega)} \psi_{\vec{r}}^{(+)}(\vec{r}) \\ = 2\pi^2 \frac{e^{i\vec{k} \times \vec{r} - \vec{n}'}}{|\vec{r} - \vec{n}'|} = 2\pi^2 G_+(\vec{r} - \vec{n}')$$

Eq. (108.3) \uparrow

$$= -\frac{1}{4\pi} \int d^3n' \frac{e^{i\vec{k} \times \vec{r} - \vec{n}'}}{|\vec{r} - \vec{n}'|} \frac{2mV(\vec{n}')}{\hbar^2} \psi_{\vec{r}}^{(+)}(\vec{r})$$

temos que,

$$\psi_{\vec{r}}^{(+)}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3 r' \frac{e^{i\vec{k} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}') \psi_{\vec{r}}^{(+)}(\vec{r}'): \quad (153.2)$$

novamente,

$$|\psi_{\vec{r}}^{(+)}\rangle = |\downarrow_{\vec{r}}\rangle + G_0^{(+)}(E_k) V |\downarrow_{\vec{r}}^{(+)}\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \psi_{\vec{r}}^{(+)} \rangle &= \langle \vec{r} | \downarrow_{\vec{r}} \rangle + \int d^3 r' \langle \vec{r} | G_0^{(+)}(E_k) |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | V |\downarrow_{\vec{r}}^{(+)}\rangle, \\ &= -\frac{2m}{4\pi\hbar^2} G_+(\vec{r}, \vec{r}) \end{aligned}$$

$$\text{i.e., } G_+(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{\langle \vec{r} | G_0^{(+)}(E_k) |\vec{r}'\rangle}{2m} : \quad (155.1)$$

: função de Green (153.1) = representação de coordenadas do resolvente (154.1)

notam Eqs. (153.2), (154.2) e (155.1) :

$|\downarrow_{\vec{r}}^{(+)}\rangle$: autoestado $H = H_0 + V$ e
~ outgoing wave !

• Similar, podemos considerar:

$$G_0^{(-)}(E) = \frac{1}{E - H_0 - i\hbar\alpha}; \quad G_-(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{\langle \vec{r} | G_0^{(-)}(E_k) |\vec{r}'\rangle}{2m} \quad (155.2)$$

$$|\psi_{\vec{r}}^{(-)}\rangle = |\downarrow_{\vec{r}}\rangle + G_0^{(-)}(E_k) V |\downarrow_{\vec{r}}^{(-)}\rangle$$

$|\downarrow_{\vec{r}}^{(-)}\rangle$ ~ incoming wave !

notas: temos $\pm \hbar\omega$ dos polos dos resolventes $G_0^{(\pm)}(E)$

\sim condição (147.3) $\alpha |t| < 1$;

similar tratamento singularidades, determinação
 $G_{\pm}(n)$, pgs. 107 e 108.

• Eq. (152.2):

$$T|\downarrow \vec{z}\rangle = V|\downarrow \vec{z}^{(+)}\rangle$$

$$\hookrightarrow T_{\vec{z}, \vec{z}} = \langle \downarrow \vec{z}' | T |\downarrow \vec{z}\rangle = \langle \downarrow \vec{z}' | V |\downarrow \vec{z}^{(+)}\rangle$$

$$= \int d^3 n \langle \downarrow \vec{z}' | \vec{n} \rangle \langle \vec{n} | V |\downarrow \vec{z}^{(+)}\rangle$$

$$= \frac{1}{L^{3/2}} \int d^3 n e^{i \vec{z}' \cdot \vec{n}} V(\vec{n}) |\downarrow \vec{z}^{(+)}(\vec{n})\rangle$$

$$= - \frac{2\pi \hbar^2 N}{m L^3} f_{\vec{z}}(\hat{n}) ; \quad N = L^{3/2}$$

Eq. (150.1) \xrightarrow{m}

$$\hookrightarrow T_{\vec{z}, \vec{z}} = - \frac{2\pi \hbar^2}{m L^3} f_{\vec{z}}(\hat{n}) : \text{OK c/ Eq. (150.2)!} \quad (156.3)$$

• Resumo:

solução Eq. (153.1) $\rightarrow |\downarrow \vec{s}^{(+)}\rangle$ Eq. (152.2) $\rightarrow T_{\vec{z}, \vec{z}}$ Eq. (150.2) $\rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} !$

• propriedades dos estados $|\downarrow s^{(+)}\rangle$,

• novamente $(E_s - H_0 + i\hbar\alpha) +$ Eq. (153.3):

$$(E_s - H_0 + i\hbar\alpha)|\downarrow s^{(+)}\rangle = (E_s - H_0 + i\hbar\alpha)|\downarrow s\rangle + V|\downarrow s^{(+)}\rangle \pm V|\downarrow s\rangle$$

$$(E_s - (H_0 + V) + i\hbar\alpha)|\downarrow s^{(+)}\rangle = (E_s - (H_0 + V) + i\hbar\alpha)|\downarrow s\rangle + V|\downarrow s^{(+)}\rangle$$

$$\hookrightarrow |\psi_s^{(+)}\rangle = |\psi_s\rangle + \frac{1}{E_s - H + i\hbar\omega} \nu |\psi_s\rangle \quad (157.1)$$

↑ notam H not H_0 !

Definição: $G_+(E) = \frac{1}{E - H + i\hbar\omega}$; resolvendo p/
hamiltoniano $H = H_0 + V$

(157.2)

$$\hookrightarrow |\psi_s^{(+)}\rangle = |\psi_s\rangle + G_+(E_s) \nu |\psi_s\rangle$$

nesse caso, temos que,

$$T_{ks} = \langle \dot{\psi}_k | V | \psi_s^{(+)} \rangle = \langle \dot{\psi}_k | V | \psi_s \rangle + \langle \dot{\psi}_k | V | G_+(E_s) \nu | \psi_s \rangle$$

entretanto, ação $G_+(E)$ sob $\nu |\psi_s\rangle$, "not easy"!

similar, temos que

$$|\psi_s^{(-)}\rangle = |\psi_s\rangle + G_-(E_s) \nu |\psi_s\rangle$$

onde $G_-(E) = \frac{1}{E - H - i\hbar\omega} \quad (157.3)$

notam: $\langle \dot{\psi}_s^{(-)} | = \langle \dot{\psi}_s | + \langle \dot{\psi}_s | V | G_+(E_s) \rangle$

$$T_{ks} = (\langle \dot{\psi}_k | + \langle \dot{\psi}_k | V | G_+(E_s) \rangle) \nu |\psi_s\rangle = \langle \dot{\psi}_k^{(-)} | V | \psi_s \rangle$$

$$\hookrightarrow T_{ks} = \langle \dot{\psi}_k | V | \psi_s^{(+)} \rangle = \langle \dot{\psi}_k^{(-)} | V | \psi_s \rangle \quad (157.4)$$

Eq. (157.2): interessante p/ determinar soluções aproximadas
p/ $|\psi_s^{(+)}\rangle$,

Lembrem Eqs. (35.3) e (35.4):

$$G(z) = G_0(z) + G_0(z)(\lambda v) G(z)$$

$$\stackrel{e}{=} G(z) = \sum_{n>0} \lambda^n G_0(z) \left(\sqrt{G_0(z)} \right)^n$$

$$\hookrightarrow G_+(E) = G_0^{(+)}(E) + G_0^{(+)}(E) \vee G_-(E)$$

(158.1)

$$\stackrel{e}{=} G_+(E) = \sum_{n>0} G_0^{(+)}(E) \left(\sqrt{G_0^{(+)}(E)} \right)^n$$

dessa forma, Eq. (157.2):

$$|\psi_s^{(+)}\rangle = |\psi_s\rangle + \sum_{n>0} G_0^{(+)}(E_s) \left(\sqrt{G_0^{(+)}(E_s)} \right)^n \vee |\psi_s\rangle$$

$$= |\psi_s\rangle + G_0^{(+)}(E_s) \vee |\psi_s\rangle + G_0^{(+)}(E_s) \vee G_0^{(+)}(E_s) \vee |\psi_s\rangle + \dots : \\ (158.2)$$

: série de Born p/ estado de espalhamento $|\psi_s^{(+)}\rangle$

- Eq. (157.2): interessante p/ verificar que

$$\langle \psi_u^{(+)} | \psi_s^{(+)} \rangle = \delta_{u,s} \quad \stackrel{e}{=} \quad \langle \psi_u^{(-)} | \psi_s^{(-)} \rangle = \delta_{u,s} : \quad (158.3)$$

: dois conjuntos de autovalores H (apenas estados de
espalhamento)

Obs.: se o espectro do hamiltoniano H apresenta
estados ligados $\rightarrow |\psi_u^{(+)}\rangle$ e $|\psi_u^{(-)}\rangle$ não formam
um conjunto completo

vamos verificar (158.3):

$$\langle \psi_{\kappa}^{(+)} | \psi_s^{(+)} \rangle = \left(\langle \psi_{\kappa} | + \langle \psi_{\kappa} | \vee G_{-}(E_{\kappa}) \right) | \psi_s^{(+)} \rangle$$

$$= \langle \psi_{\kappa} | \psi_s^{(+)} \rangle + \underbrace{\langle \psi_{\kappa} | \vee G_{-}(E_{\kappa}) | \psi_s^{(+)} \rangle}_{(I)}$$

$$(I) = \langle \psi_{\kappa} | \vee \frac{1}{E_{\kappa} - H - i\hbar\omega} | \psi_s^{(+)} \rangle$$

$$= \langle \psi_{\kappa} | \vee \frac{1}{E_{\kappa} - E_s - i\hbar\omega} | \psi_s^{(+)} \rangle : \text{pois } H | \psi_s^{(+)} \rangle = E_s | \psi_s^{(+)} \rangle$$

$$= \langle \psi_{\kappa} | \frac{1}{E_{\kappa} - E_s - i\hbar\omega} \vee | \psi_s^{(+)} \rangle = \langle \psi_{\kappa} | \frac{1}{H_0 - E_s - i\hbar\omega} \vee | \psi_s^{(+)} \rangle$$

↑
pois $H_0 | \psi_{\kappa} \rangle = E_{\kappa} | \psi_{\kappa} \rangle$

$$= - \langle \psi_{\kappa} | \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\omega} \vee | \psi_s^{(+)} \rangle = - \langle \psi_{\kappa} | G_0^{(+)}(E_s) \vee | \psi_s^{(+)} \rangle$$

$$\hookrightarrow \langle \psi_{\kappa}^{(+)} | \psi_s^{(+)} \rangle = \langle \psi_{\kappa} | \left(| \psi_s^{(+)} \rangle - G_0^{(+)}(E_s) \vee | \psi_s^{(+)} \rangle \right) = \langle \psi_{\kappa} | \psi_s \rangle$$

$$\text{Eq. (153.1)} \quad \underbrace{= | \psi_s \rangle}_{= 1} = \delta_{\kappa s}$$

propriedades da matriz - s.

Eqs. (149.1) e (152.2):

$$S_{\kappa s} = \langle \psi_{\kappa} | \cup_{\delta} (+\infty, -\infty) | \psi_s \rangle = \delta_{\kappa s} - 2\pi i \delta(E_{\kappa} - E_s) T_{\kappa s}$$

(159.2)

$$= \delta_{\kappa s} - 2\pi i \delta(E_{\kappa} - E_s) \langle \psi_{\kappa} | \vee | \psi_s^{(+)} \rangle :$$

: diagonal w.r.t. energia.

como $|\psi_s^{(+)}\rangle$ e $|\psi_s^{(-)}\rangle$: dois conjuntos autoestados H, é possível relacioná-los por uma transformação unitária, i.e.,

$$|\psi_s^{(+)}\rangle = \sum_k |\psi_k^{(-)}\rangle S_{ks} \quad (160.1)$$

$$\hookrightarrow \langle \psi_k^{(-)} | \psi_s^{(+)} \rangle = \sum_k \langle \psi_k^{(-)} | \psi_k^{(-)} \rangle S_{ks} = S_{ks}$$

$$\text{ou } S_{ks} = \langle \psi_k^{(-)} | \psi_s^{(+)} \rangle \quad (160.2)$$

(i) vamos verificá que: Eq. (160.2) : elemento da matriz de espalhamento, matriz-S, (159.2);

notar, Eqs. (157.1) e (157.3) :

$$S_{ks} = \langle \psi_k^{(-)} | \psi_s^{(+)} \rangle = \left(\langle \psi_k | + \langle \psi_k | V \frac{1}{E_k - H + i\hbar\omega} \right) |\psi_s^{(+)}\rangle \quad (1)$$

como

$$(1) = \frac{1}{E_k - E_s + i\hbar\omega} \langle \psi_k | V | \psi_s^{(+)} \rangle ; \text{ pois } H |\psi_s^{(+)}\rangle = E_s |\psi_s^{(+)}\rangle$$

① Eq. Lippmann - Schwinger (153.1), temos que:

$$S_{ks} = \langle \psi_k | \psi_s^{(+)} \rangle + \frac{1}{E_k - E_s + i\hbar\omega} \langle \psi_k | V | \psi_s^{(+)} \rangle$$

$$= \underbrace{\langle \psi_k | \psi_s \rangle}_{S_{ks}} + \underbrace{\langle \psi_k | \frac{1}{E_s - H_0 + i\hbar\omega} V | \psi_s^{(+)} \rangle}_{\langle \psi_k | V | \psi_s^{(+)} \rangle} + \underbrace{\langle \psi_k | V | \psi_s \rangle}_{E_k - E_s + i\hbar\omega}$$

S_{ks}

$$\langle \psi_k | V | \psi_s^{(+)} \rangle ; \text{ pois } H_0 |\psi_k\rangle = E_k |\psi_k\rangle ;$$

$$E_s - E_k + i\hbar\omega$$

: ok c/ hipótese (153.3);

$$\Rightarrow S_{\text{tot}} = S_{\text{tot}} - \left(\frac{1}{E_k - E_S - i\hbar\omega} - \frac{1}{E_k - E_S + i\hbar\omega} \right) \langle \hat{\psi}_k | \psi_i | \hat{\psi}_S^{(+)} \rangle$$

$$\mid \alpha \rightarrow 0 \rightarrow 2\pi i \delta(E_k - E_S) \quad : \text{Eq. (159.2)!}$$

(ii) sobre a unitariedade da matriz-S;
vamos verificar que:

$$S^* S = I \quad \text{ou} \quad \sum_n S_{ni}^* S_{nj} = \delta_{ij}$$

(161.1)

$$\Leftrightarrow S S^* = I \quad \text{ou} \quad \sum_n S_{in} S_{jn}^* = \delta_{ij}$$

(A) $S^* S = I$,

$$\text{Eq. (160.2): } \langle \hat{\psi}_j^{(+)} \rangle = \sum_n \langle \hat{\psi}_n^{(+)} \rangle S_{nj}$$

$$\Rightarrow \langle \hat{\psi}_i^{(+)} | \hat{\psi}_j^{(+)} \rangle = S_{ij} = \underbrace{\sum_n \langle \hat{\psi}_i^{(+)} | \hat{\psi}_n^{(+)} \rangle}_{S_{ni}^*} S_{nj} = \sum_n S_{ni}^* S_{nj}$$

(B) $S S^* = I$.

como: $\underbrace{\sum_n \langle \hat{\psi}_n^{(+)} \rangle \langle \hat{\psi}_n^{(+)} |}_{\text{estados de espalhamento}} + \underbrace{\sum_m \langle \hat{\psi}_m^{(+)} \rangle \langle \hat{\psi}_m^{(+)} |}_{\text{estados ligados}} = I$: relação de complementariedade

temos que,

$$\sum_n S_{in} S_{jn}^* = \sum_n \langle \hat{\psi}_i^{(+)} | \hat{\psi}_n^{(+)} \rangle \langle \hat{\psi}_n^{(+)} | \hat{\psi}_j^{(+)} \rangle =$$

$$= \underbrace{\langle \hat{\psi}_i^{(+)} | \hat{\psi}_i^{(+)} | \hat{\psi}_j^{(+)} \rangle}_{S_{ij}} - \underbrace{\sum_m \langle \hat{\psi}_i^{(+)} | \hat{\psi}_m^{(+)} \rangle \langle \hat{\psi}_m^{(+)} | \hat{\psi}_j^{(+)} \rangle}_{\text{o, pois estados espalhamento e ligados!}} = S_{ij}$$

(iii) como $S_{\text{vs}} = \langle \vec{r} | U_1(+\infty, -\infty) | \vec{r} \rangle$,

formalmente, podemos considerar

$\hat{S} = U_1(+\infty, -\infty)$: operador de espalhamento. (162.1)

· invariância notacional,

considerar: espalhamento pelo potencial central $V = V(r)$;

como $[H, U(R)] = [H_0, U(R)] = 0$, podemos afirmar que:

L op. unitário ~ notação R

$\langle \vec{r}' | U^*(R) \hat{S} U(R) | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r}' | \hat{S} | \vec{r} \rangle$: matriz-s invariante

↑
autoestado H_0 , Eq. (145.3) sob notação (162.2)

vamos verificar a consequência condição (162.2);

Eq. (162.2) \rightarrow podemos considerar a expressão:

$$\delta(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r}' | \hat{S} | \vec{r} \rangle = \delta(r - r') \sum_{l>0} F_l(k) P_l(\hat{r} \cdot \hat{r}')$$

$\delta(E_k - E_{k'}) \sim$

coeficiente

$$\hat{k}' = (\theta', \varphi')$$

pois $\langle \vec{r}' | \hat{S} | \vec{r} \rangle \propto$ energ.;
 $\propto r$ entre direções \hat{r} e \hat{r}'

(162.3)

④ Teorema de adição dos harmônicos esféricos:

$$\langle \vec{r}' | \hat{S} | \vec{r} \rangle = \delta(r - r') \sum_l \sum_{m=-l}^l F_l(k) Y_l^m(\theta', \varphi')^* Y_l^m(\theta, \varphi)$$

próxima etapa: determinan coeficientes $F_e(\kappa)$;
como matriz-s: unitaria, temos que

$$\int d^3\kappa'' \langle \vec{\kappa}' | \hat{S} | \vec{\kappa}'' \rangle \langle \vec{\kappa}'' | \hat{S}^\dagger | \vec{\kappa} \rangle = \delta(\vec{\kappa} - \vec{\kappa}') \quad (163.1)$$

$$\langle \vec{\kappa} | \hat{S} | \vec{\kappa}'' \rangle^*$$

Eqs. (162.3) e (163.1):

$$\sum_{\ell, m} \int d\kappa'' \kappa''^2 \delta(\kappa' - \kappa'') \delta(\kappa'' - \kappa) F_e(\kappa') F_e^*(\kappa) + \frac{(4\pi)^2}{(2\ell+1)(2\ell'+1)}$$

$$* Y_e^m(\theta', \varphi')^* Y_{e'}^{m'}(\theta, \varphi) \int d\Omega'' Y_{e'}^{m'}(\theta'', \varphi'')^* Y_e^m(\theta'', \varphi'')$$

$$\delta_{e'e} \delta_{m,m}$$

$$= \kappa^2 \delta(\kappa' - \kappa) \sum_{\ell, m} \frac{(4\pi)^2}{(2\ell+1)^2} |F_e(\kappa)|^2 Y_e^m(\theta', \varphi')^* Y_e^m(\theta, \varphi)$$

$$= \kappa^2 \delta(\kappa' - \kappa) \sum_{\ell} \frac{(4\pi)}{2\ell+1} |F_e(\kappa)|^2 P_e(\hat{\kappa}, \hat{\kappa}')$$

$$= \delta(\vec{\kappa} - \vec{\kappa}') = \frac{1}{\kappa^2} \delta(\kappa' - \kappa) \sum_{\ell} \frac{2\ell+1}{4\pi} P_e(\hat{\kappa}, \hat{\kappa}')$$

Eq. (11.105), Menzbecher

$$\hookrightarrow F_e(\kappa) = (2\ell+1) \frac{e^{2i\delta_e(\kappa)}}{4\pi \kappa^2}$$

↑
fase, determinada posteriormente

temos que,

$$\langle \vec{\kappa}' | \hat{S} | \vec{\kappa} \rangle = \delta(\kappa - \kappa') \sum_{\ell \geq 0} (2\ell+1) \frac{e^{2i\delta_e(\kappa')}}{4\pi \kappa^2} P_e(\hat{\kappa}, \hat{\kappa}') \quad (163.2)$$

Lembnan: Eqs. (156.1) & (159.2):

$$S_{\vec{v}, \vec{v}'} = S_{\vec{v}', \vec{v}} - 2\pi i \delta(E_{\vec{v}'} - E_{\vec{v}}) f_{\vec{v}, \vec{v}'}$$

$$\begin{aligned} & \downarrow L \rightarrow 2\pi \\ & \frac{m}{k^2 \kappa} \delta(k - k') - \frac{2\pi \hbar^2}{m L^3} f_{\vec{v}}(\hat{n}) \\ & \delta(\vec{v} - \vec{v}') \end{aligned}$$

$$\frac{1}{L \rightarrow 2\pi} \rightarrow \frac{i}{2\pi \kappa}$$

$$\hookrightarrow \langle \vec{k}' | \hat{S}_{\vec{v}, \vec{v}'} | \vec{k} \rangle = \delta(\vec{v} - \vec{v}') + i \frac{f_{\vec{v}}(\hat{n})}{2\pi \kappa} \delta(k - k')$$

$$\text{Eq. (119.3)} = \sum_{e>0} f_e(k) P_e(\vec{v}, \vec{v}')$$

$$= \delta(k - k') \sum_{e>0} \left(\frac{2e+1}{2\pi \kappa^2} + i \frac{f_e(k)}{2\pi \kappa} \right) P_e(\vec{v}, \vec{v}') \quad (169.1)$$

$$= \frac{2e+1}{2\pi \kappa^2} e^{2i \delta_e(k)} : \text{Eq. (163.2)}$$

$$\hookrightarrow f_e(k) = \frac{1}{\kappa} (2e+1) e^{i \delta_e} \sin \delta_e$$

$$\hookrightarrow f_{\vec{v}}(\hat{n}) = \sum_{e>0} \frac{1}{\kappa} (2e+1) e^{i \delta_e} \sin \delta_e P_e(\vec{v}, \vec{v}') : \text{Eq. (121.3)}$$

Resumo: invariancia notacional sistema \rightarrow Eq. (121.3) !

• simetria de inversão temporal.

Lembra: op. inversão temporal Θ : op. antiunitário:

$$\Theta \vec{n} \Theta^* = \vec{n}$$

$$\Theta \vec{p} \Theta^* = -\vec{p} \quad \rightarrow \quad \Theta |\vec{p}\rangle = -|\vec{p}\rangle \quad (165.1)$$

$$\Theta \vec{j} \Theta^* = -\vec{j}$$

$$\text{Como Eq. (145.1)}: H_0 = \frac{p^2}{2m}; \quad H_0 |\downarrow_{\vec{x}}\rangle = E_x |\downarrow_{\vec{x}}\rangle; \quad E_x = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\hookrightarrow \Theta |\downarrow_{\vec{x}}\rangle = |\downarrow_{-\vec{x}}\rangle \quad (165.2)$$

Eq. de Lippmann-Schwinger (153.1):

$$\Theta |\downarrow_{\vec{x}}^{(+)}\rangle = \underbrace{\Theta |\downarrow_{\vec{x}}\rangle}_{|\downarrow_{-\vec{x}}\rangle} + \Theta \frac{1}{E_x - H_0 + i\hbar\alpha} \sqrt{|\downarrow_{\vec{x}}^{(+)}\rangle}$$

$$+ \frac{1}{E_x - H_0 - i\hbar\alpha} \Theta \sqrt{\Theta^* \Theta} |\downarrow_{\vec{x}}^{(+)}\rangle$$

similar,

$$\Theta |\downarrow_{\vec{x}}^{(-)}\rangle = \underbrace{\Theta |\downarrow_{\vec{x}}\rangle}_{|\downarrow_{-\vec{x}}\rangle} + \Theta \frac{1}{E_x - H_0 - i\hbar\alpha} \sqrt{|\downarrow_{\vec{x}}^{(-)}\rangle}$$

$$+ \frac{1}{E_x - H_0 + i\hbar\alpha} \sqrt{\Theta^* \Theta} |\downarrow_{\vec{x}}^{(-)}\rangle$$

notar: se $\Theta \sqrt{\Theta^*} = \sqrt{V}$: V invariante sob inversão temporal

$$\hookrightarrow \Theta |\downarrow_{\vec{x}}^{(+)}\rangle = |\downarrow_{-\vec{x}}^{(-)}\rangle \quad \text{e} \quad \Theta |\downarrow_{\vec{x}}^{(-)}\rangle = |\downarrow_{-\vec{x}}^{(+)}\rangle \quad (165.3)$$

$$\hookrightarrow \langle \downarrow_{\vec{x}}^{(+)} | \Theta^* = \langle \downarrow_{-\vec{x}}^{(-)} | \quad \text{e} \quad \langle \downarrow_{\vec{x}}^{(-)} | \Theta^* = \langle \downarrow_{-\vec{x}}^{(+)} |$$

Dessa forma, Eq. (160.2):

$$S_{\vec{u}; \vec{u}} = \langle \downarrow_{\vec{u}}^{(-)} | \downarrow_{\vec{u}}^{(+)} \rangle = \langle \downarrow_{\vec{u}}^{(-)} | (\theta^+ \theta^-) \downarrow_{\vec{u}}^{(+)} \rangle$$

$$= \left(\underbrace{(\langle \downarrow_{\vec{u}}^{(-)} | \theta^+)(\theta^- | \downarrow_{\vec{u}}^{(+)} \rangle)}_{\langle \downarrow_{\vec{u}}^{(+)} | \downarrow_{\vec{u}}^{(-)} \rangle} \right)^* = \langle \downarrow_{-\vec{u}}^{(-)} | \downarrow_{-\vec{u}}^{(+)} \rangle$$

$$= S_{-\vec{u}, -\vec{u}} \quad \text{ou} \quad \langle \vec{u} | \hat{S} | \vec{u} \rangle = \langle -\vec{u} | \hat{S} | -\vec{u} \rangle \quad (166.1)$$

no tan Eq. (164.1) :

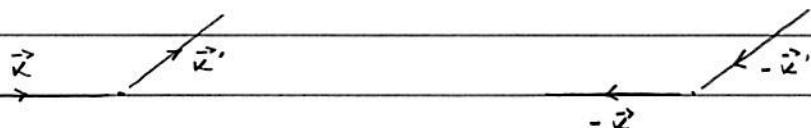
$$\langle \vec{u}' | \hat{S} | \vec{u} \rangle = \delta(\vec{u} - \vec{u}') + i \frac{\delta(v - v')}{2\pi\kappa} f_{\vec{u}}(\hat{u}')$$

$$\langle -\vec{u} | \hat{S} | -\vec{u}' \rangle = \delta(\vec{u} - \vec{u}') + i \frac{\delta(v - v')}{2\pi\kappa} f_{-\vec{u}'}(-\hat{u})$$

$$\text{se } \theta \vee \theta^+ = v$$

Eq. (166.1) \rightarrow $f_{\vec{u}}(\hat{u}') = f_{-\vec{u}'}(-\hat{u})$: relação de reciprocidade : (166.2)

: invariância "sentido" do processo de espalhamento !



teorema ótico,

ideia: mostrar que unitariedade da matriz-s

\hookrightarrow teorema ótico: teorema p/ a amplitude de espalhamento;

Eqs. (159.2) e (165.1) :

$$\sum_n S_{ni} S_{nj}^* = \sum_n (\delta_{ni} + 2\pi i \delta(E_n - E_i) T_{ni}^*) *$$

$$* (\delta_{nj} - 2\pi i \delta(E_n - E_j) T_{nj}) = \delta_{ij}$$

$$\hookrightarrow \delta_{ij} - 2\pi i \delta(E_i - E_j) T_{ij} + 2\pi i \delta(E_j - E_i) T_{ji}^* +$$

$$+ 4\pi^2 \sum_n \delta(E_n - E_i) \delta(E_n - E_j) T_{ni}^* T_{nj} = \delta_{ij}$$

$$\hookrightarrow 2\pi \sum_n \delta(E_n - E_i) \delta(E_n - E_j) T_{ni}^* T_{nj} = i \delta(E_i - E_j) (T_{ij} - T_{ji}^*)$$

$$\text{ou } 2\pi \sum_n \delta(E_n - E_i) T_{ni}^* T_{nj} = i (T_{ij} - T_{ji}^*) \quad (167.1)$$

$$\text{Lembnan: Eq. (156.1): } T_{\vec{k}' \vec{k}} = -\frac{2\pi \hbar^2}{m L^3} f_{\vec{k}}(\hat{n}) ; \vec{k}' = \vec{k} \hat{n}$$

identificando: $i \rightarrow \vec{k}$

$j \rightarrow \vec{k}'$

$n \rightarrow \vec{k}''$

$$\textcircled{D} \text{ Eq. (149.3): } \delta(E_n - E_i) \rightarrow \delta(E_{k''} - E_k) = \frac{m}{\hbar^2 k''} \delta(k'' - k)$$

$$\sum_n \rightarrow \sum_{\vec{k}''} \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3 k''$$

\hookrightarrow Eq. (167.1) assume a forma:

$$\underbrace{2\pi \cdot m \cdot \frac{2\pi \hbar^2}{m L^3} \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3 k'' k''^2}_{1/(2\pi)} \frac{1}{k''} \delta(k'' - k) \int d\Omega'' f_{\vec{k}}^*(\hat{k}'') f_{\vec{k}'}(\hat{k}'') =$$

$1/(2\pi)$

$$= -i (f_{\vec{k}'}(\hat{k}) - f_{\vec{k}}^*(\hat{k}'))$$

$$\text{ou } \int d\Omega'' f_{\vec{k}}^*(\hat{k}'') f_{\vec{k}'}(\hat{k}'') = \frac{4\pi}{2i} f_{\vec{k}'}(\hat{k}) - f_{\vec{k}}^*(\hat{k}') ; \quad (167.2)$$

$$|\vec{k}| = |\vec{k}'| = |\vec{k}''|$$

em particular, p/ $\vec{k}' = \vec{k}$: $\vec{k} \rightarrow \vec{k}'$:
: forward scattering

$$\int d\Omega'' |f_{\vec{k}'}(\vec{\omega}'')|^2 = \int d\Omega'' \frac{d\sigma}{d\Omega''} = \sigma = \frac{4\pi}{\kappa} \operatorname{Im} f_{\vec{k}'}(\vec{\omega}) : \quad (J68.1)$$

: Eq. (J22.3)

Eq. (J68.1): relação entre seção de choque total e a parte imaginária da forward scattering amplitude $f_{\vec{k}'}(\vec{\omega})$;
 $\hookrightarrow \operatorname{Im} f_{\vec{k}'}(\vec{\omega})$: medida diminuição intensidade do feixe incidente;

Verifica-se que conservação probabilidade no processo de espalhamento \rightarrow Eq. (J68.1), veja Sec. 20.7. Descr. p/ detalhes.

novamente: unitariedade matriz - S \rightarrow Eqs. (J67.1), (J67.2) e (J68.1) !