UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

IFUSP - Departamento de Física Experimental

Apostila do curso

FCN0404 - Introdução à Física Nuclear

Prof. Dr. Airton Deppman

Evandro Segundo

Julho/2011

Sumário

1	Introdução 5				
	1.1	Núcleos e Carta de Nuclídeos	5		
	1.2	O Núcleo Atômico	5		
	1.3	Dispersão Simples	6		
		1.3.1 Espalhamento Rutherford	8		
	1.4	Raio Nuclear	12		
		1.4.1 Experiência de Espalhamento com Partículas Alfa	12		
2	Intr	rodução à Mecânica Quântica	15		
	2.1	Equação de Schrödinger e Estados de um Sistema	15		
	2.2	Sistema de Coordenadas e Operadores	17		
		2.2.1 Transformação de Sistema de Coordenadas	17		
		2.2.2 Operadores em Coordenadas Esféricas	18		
3	For	ça Central e Momento Angular	25		
	3.1	Equação de Schrödinger em Coordenadas Esféricas	25		
		3.1.1 Solução da Equação de Schrödinger: Parte Angular	27		
		3.1.2 Parte Radial	29		
4	Mo	odelos Nucleares	33		
	4.1	Modelo da Gota Líquida	33		
		4.1.1 Energia de ligação nuclear	33		
		4.1.2 Energias de Separação	34		
		4.1.3 Fórmula Semi-Empírica de Massa: modelo da Gota Líquida	34		
		4.1.4 Parábolas de Massa e Estabilidade Beta	35		
	4.2	Ressonâncias Gigantes	38		
		4.2.1 Modelo Goldhaber-Teller	38		
		4.2.2 Modelo de Steinwedel-Jensen	40		
	4.3	Modelo do Gás de Fermi	43		
		4.3.1 Ensemble Canônico	45		
		4.3.2 Ensemble Grande-Canônico	47		
		4.3.3 Fator de Boltzman	48		
		4.3.4 Gás Ideal Quântico	49		
		4.3.5 Temperatura nuclear	52		
		4.3.6 Modelo de Partícula Independente \ldots	53		
	4.4	Modelo de Partícula Independente com Potencial Harmônico	54		
	4.5	Acoplamento Spin-Órbita	55		
5	Inte	erações Entre Sistemas Quânticos	59		
	5.1	A regra de ouro de Fermi	59		
	5.2	Oscilações de Rabi em sistemas de 2 estados	61		

6	Dec	caimentos	67
	6.1	Decaimento Alfa	67
		6.1.1 Taxa de Decaimento	68
	6.2	Decaimento Beta e Captura Eletrônica	69
		6.2.1 Análise do Diagrama Energético	69
		6.2.2 Probabilidade de Transição do Decaimento β	70
		6.2.3 Probabilidade de Transição na Captura Eletrônica	71
	6.3	Campo Eletromagnético	71
		6.3.1 Equações de Maxwell	71
		6.3.2 Transformações de Gauge	72
		6.3.3 Gauge de Lorentz	73
		6.3.4 Gauge de Coulomb ou Transversal	73
7	Apr	roximação WKB	81
8	Teo	oria de Espalhamento	85
	8.1	Aproximação de Born	89
	8.2	Operador de Transição - Aproximação de Born em Ordens Superiores	89
	8.3	Matriz de Espalhamento S	91
	8.4	Método de Ondas Parciais	92
		8.4.1 Unitariedade e Defasagem	93
		8.4.2 Espalhamento a Energia Nula e Estados Ligados	94
		8.4.3 Alcance Efetivo e Função de Onda do Dêuteron	95
		8.4.4 Espalhamento Ressonante	98
	8.5	Teorema Óptico	99
	8.6	Espalhamento por Dois Potenciais	100
	8.7	Formalismo de Feshbach	101
	8.8	Espalhamento Rutherford Quântico	104
		8.8.1 Espalhamento por um Potencial Externo (Aproximação de Born)	105
9	Esp	palhamento Múltiplo	107
	9.1	Aproximação Eikonal	108
	9.2	Aproximação de Glauber	110
	9.3	Potencial Óptico	111

Capítulo 1

Introdução

1.1 Núcleos e Carta de Nuclídeos

Os números $A, Z \in N$ denotam, respectivamente o número de massa, o número atômico e o número de neutrons de um sistema nuclear, sendo A = Z + N. Os núcleos com mesmo número Z de prótons são chamados isótopos, com mesmo número de neutrons, isótonos e com mesmo número de massa, isóbaros. O hipernúcleo ${}^{A}_{\Lambda}Z$ é um núcleo com Z prótons, A - Z - 1 neutrons e 1Λ (1 híperon). Núcleos com o mesmo número de massa A, mas com o Z de um igual ao N do outro são chamados núcleos especulares, por exemplo ${}^{13}_{6}C$ e ${}^{13}_{7}N$.

Núcleos com A > 4 são chamados núcleos complexos, e somente existem na natureza aqueles com $Z \le 92$. De acordo ao número de massa, os núcleos podem ser separados em núcleos leves (A < 20), núcleos médios (20 < A < 70) e núcleos pesados (A > 70).

Nuclídeo é um sinônimo para espécie nuclear. Para cada um dos aproximadamente 1700 nuclídeos conhecidos há um número arbritariamente grande de núcleos. Quando plotados num gráfico Z por N, todos os nuclídeos ocupam uma região bem definida, seguindo a reta Z = N para pequenos valores de A e desviando-se dela para a região com N > Z (Figura 1.1). As linhas horizontais indicam famílias de isótopos, as verticias indicam famílias de isótonos.



Figura 1.1: Tabela de nuclídeos.

1.2 O Núcleo Atômico

A existência do núcleo atômico foi comprovada por Ernest Rutherford (1911-1913) por meio de experiências de dispersão com partículas alfa. Métodos semelhantes de investigação da matéria ainda estão entre os mais importantes da física nuclear. Àquele tempo estava em vigor o modelo atômico de Thomson, segundo o qual as cargas positivas e negativas estavam homogeneamente distribuídas dentro do átomo. Apesar de ser uma hipótese plausível, as experiências de dispersão das partículas alfa numa folha fina de ouro mostraram que ocorriam, eventualmente, grandes ângulos de desvio, o que não é compatível com a ideia de uma distribuição praticamente homogênea de carga no átomo dispersor. Rutherford, então, supôs que as cargas positivas estavam concentradas num pequeno volume no centro do átomo e calculou a distribuição angular das partículas desviadas, admitindo que a dispersão era causada por um potencial de Coulomb puro [3]. A influência dos elétrons foi desprezada uma vez que, diante das energias em questão, ela seria desprezível na distribuição angular.

De acordo com a mecânica clássica, existe uma relação unívoca entre o ângulo de desvio ϑ e a distância de máxima aproximação entre a partícula incidente e o centro dispersor, para uma dada energia da partícula incidente. Esperava-se, portanto, medir o raio R do então chamado "núcleo de carga" a partir de desvios entre a distribuição angular observada e a calculada para o potencial de Coulomb puro. As partículas alfa tinham energia máxima de 7,7*MeV* de modo que não se observou nenhum desvio. Geiger e Marsden usaram folhas de ouro, prata, cobre e alumínio em suas experiências e concluiram que $R < 3 \times 10^{-12} cm$ [4]. Rutherford detectou os primeiros desvios ao estudar dispersão de alfas em hidrogênio [5]. Mais tarde verificaram-se outros casos de dispersão anômala para vários elementos leves. Nesses casos concluiu-se que a distância mínima entre os núcleus participantes estava entre $2.4 \times 10^{-13} cm$ (He) e $4 \times 10^{-13} cm$ (Mg). Os raios nucleares são dessa ordem de grandeza.

É interessante notar que os resultados obtidos para a dispersão a partir da mecânica clássica coincidem com os que se obtêm com base na mecânica quântica apenas para o potencial de Coulomb. Quando a energia empregada é suficiente para aproximar os participantes da colisão até distâncias da ordem do raio nuclear, as forças entre nucleons passam a contribuir para a dispersão. Se os projéteis são neutrons, caso em que o potencial de Coulomb não está presente, a distribuição angular observada fica determinada exclusivamente pelo potencial das forças nucleares. Nestes casos, é imprescindível um tratamento com base na mecânica quântica.

1.3 Dispersão Simples

Em uma experiência de dispersão, um feixe paralelo de partículas (projéteis) incide sobre um alvo fino. Há ainda um detector de partículas para além do alvo a uma distância r e fazendo um ângulo ϑ com o feixe incidente. Esse detector cobre uma área dS que capta, assim, partículas emergentes segundo um ângulo sólido $d\Omega = dS/r^2$. O objetivo é determinar o número de partículas desviadas dividido pelo número de partículas incidentes, por unidade de tempo e por unidade de área, considerando que a intensidade do feixe desviado não depende do ângulo azimutal φ .

Para descrever o processo de dispersão, define-se uma seção eficaz. Parte-se, então, do princípio de que a cada centro dispersor está associada uma área σ , bem definida. Há reação sempre que a direção da partícula incidente passar por essa superfície (a dimensão da partícula é pequena comparada à superfície σ). Define-se ainda a densidade de corrente j como o número de partículas que incide numa área A num intervalo de tempo dt. Se existirem, nessa superfície, ωA centros dispersores, cada uma com uma área σ , de modo que a superfície coberta por eles seja $\omega A\sigma$, então o número de reações num intervalo de tempo dt será

$$\frac{\text{número de reações}}{dt} = \omega \sigma j A \tag{1.1}$$

onde o fator $\omega\sigma$ é a fração do alvo coberta pelas superfícies dispersoras. Esta fração tem também o significado de probabilidade, W, de uma partícula incidente participar de uma reação:

$$W = \omega \sigma \tag{1.2}$$

Por inversão de (1.1) tem-se

 σ

$$= \frac{\text{Número de reações no tempo } dt}{\text{Densidade de corrente } (j) \text{Número de centros dispersores } (\omega A)}$$
(1.3)

Deve-se especificar a que tipo de reação se refere a seção eficaz. Pode-se ainda escrever

1.3. DISPERSÃO SIMPLES

$$\sigma = \frac{\text{Número de reações de um dado tipo por centro dispersor/} dt}{\text{Densidade de corrente das partículas incidentes } (j)}$$
(1.4)

Considerando agora o tipo de reação que leva à emissão dentro de um certo ângulo sólido $d\Omega$, pode-se falar em seção eficaz diferencial

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\vartheta} = \frac{(\text{Número de partículas dispersas no elemento de ângulo sólido } d\Omega) / dt}{\text{Densidade de corrente das partículas incidentes } (j)}$$
(1.5)

onde o índice ϑ significa que esta quantidade depende apenas do ângulo de desvio. $d\sigma/d\Omega$ tem unidades de área, assim como σ .

A equação (1.2) é sempre válida. A seção eficaz total é dada, então por

$$\sigma_T = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) d\Omega \tag{1.6}$$

A partir de (1.4) pode-se ainda especificar todas as reações com ângulo de desvio entre $\vartheta \in \vartheta + d\vartheta$, conforme esquematizado na Figura 1.2. A seção eficaz é tal que

$$\begin{pmatrix} \frac{d\sigma}{d\vartheta} \end{pmatrix} d\vartheta = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\vartheta} d\Omega = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\vartheta} \int_{\varphi=0}^{2\pi} sen\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\vartheta} 2\pi \, sen\vartheta \, d\vartheta \\ \left(\frac{d\sigma}{d\vartheta} \right) = 2\pi \, sen\vartheta \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\vartheta}$$
(1.7)



Figura 1.2: Geometria da dispersão

Classicamente, relaciona-se o parâmetro de impacto b (distância entre o centro dispersor e a assíntota da trajetória da partícula incidente) com o ângulo de desvio, ϑ (Figura 1.3).



Figura 1.3: Duas situações de colisão com parâmetros de impacto, b, diferentes. S é o centro dispersor.

O ângulo de desvio é também dependente da energia E da partícula incidente, de modo que $\vartheta = \vartheta(b, E)$. As partículas que se aproximam do centro dispersor com parâmetro de impacto entre b e b + db, isto é, as que incidem sobre a coroa circular de área $2\pi b db$ em torno do eixo de simetria, serão desviadas dentro do ângulo sólido $d\Omega$. Por conservação do número de partículas, temos que o fluxo das que incidem na coroa circular é igual ao fluxo das que são dispersas em $dR = 2\pi sen\vartheta d\vartheta$. Logo,

$$j2\pi bdb = jdR \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

$$= j2\pi \, sen\vartheta \, d\vartheta \frac{d\sigma}{d\Omega}$$
(1.8)

de onde

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\vartheta} = \frac{b}{sen\vartheta} \left|\frac{db}{d\vartheta}\right| \tag{1.9}$$

O módulo garante que a seção eficaz seja uma quantidade não negativa, em coerência com a definição. Conhecendo-se $\vartheta(b, E)$, pode-se determinar a seção eficaz diferencial do processo.

1.3.1 Espalhamento Rutherford

A dispersão de Rutherford é uma dispersão num campo de Coulomb. De modo que o potencial do sistema núcleo (Ze) - partícula (Z'e) pode ser escrito como

$$V(r) = \frac{ZZ'e^2}{r} = \frac{C}{r}$$
(1.10)

onde C > 0 para o caso repulsivo. Vamos admitir que o centro dispersor tenha uma massa muito superior à da partícula incidente, fazendo assim com que os sistemas de coordenadas do laboratório e do centro de massa coincidam.

Da mecânica clássica, por exemplo em [6], sabemos que em problemas que envolvam a ação de uma força central, o movimento ficará confinado ao plano e o momento angular l será conservado, de modo que

$$m\ddot{r} - mr\dot{\theta}^2 = F(r)$$

$$mr^2\dot{\theta} = l = constante$$
(1.11)

onde r e θ são as coordenadas polares. As equações (1.11) podem ser escritas como

$$m\ddot{r} = F(r) + \frac{l^2}{mr^3}$$
 (1.12)

Pode-se determinar uma forma simples para a trajetória da partícula como $r(\theta)$ fazendo-se a substituição $u = \frac{1}{r}$ na equação de movimento. Feito isso, chega-se a

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} = -u - \frac{m}{l^2 u^2} F\left(\frac{1}{u}\right) \tag{1.13}$$

que pode ser simplificada usando o fato que $F(1/u) = Cu^2$, chegando-se que

$$\frac{d^2u}{d\theta^2} + u = -\frac{mC}{l^2} \tag{1.14}$$

cuja solução geral é

$$u(\theta) = \frac{1}{r(\theta)} = -\frac{mC}{l^2} + A\cos\theta \tag{1.15}$$

Esta é a equação de uma seção cônica (seja um elipse, uma parábola ou uma hipérbole) com o foco em r = 0. Os pontos de retorno no movimento, em r são

$$\frac{1}{r_1} = -\frac{mC}{l^2} + A$$

$$\frac{1}{r_2} = -\frac{mC}{l^2} - A$$
(1.16)

1.3. DISPERSÃO SIMPLES

No caso C > 0 (caso repulsivo), $A > -mC/l^2$, existirá apenas um ponto de retorno. Para uma dada energia E, os pontos de retorno são soluções do potencial efetivo

$$V'(r) = \frac{C}{r} + \frac{l^2}{2mr^2} = E$$
(1.17)

e são

$$\frac{1}{r_1} = -\frac{mC}{l^2} + \left[\left(\frac{mC}{l^2}\right)^2 + \frac{2mE}{l^2} \right]^{1/2}$$

$$\frac{1}{r_2} = -\frac{mC}{l^2} - \left[\left(\frac{mC}{l^2}\right)^2 + \frac{2mE}{l^2} \right]^{1/2}$$
(1.18)

Comparando as equações (1.16) e (1.18), verificamos que

$$A^2 = \frac{m^2 C^2}{l^4} + \frac{2mE}{l^2} \tag{1.19}$$



Figura 1.4: Geometria da hipérbole.

Na dispersão simples a trajetória descrita pela partícula incidente é uma hipérbole, com o centro dispersor em um dos focos. A equação geral da trajetória é

$$r = \frac{a(\varepsilon^2 - 1)}{\pm 1 + \varepsilon \cos\theta} \tag{1.20}$$

onde a é distância de qualquer dos ramos da hipérbole à interseção das assíntotas e ε é a excentricidade (Figura 1.4). O sinal + se refere ao ramo + da hipérbole e o sinal – se refere ao ramo – da hipérbole. O raio mínimo da hipérbole é

$$r_{min} = a(\varepsilon \mp 1) \tag{1.21}$$

onde o sinal superior refere-se ao ramo+e o sinal inferior ao ramo-.

As equações para as três seções cônicas também podem ser escritas na seguinte forma padrão

$$\frac{1}{r} = B + A\cos\theta \tag{1.22}$$

sendo A e B dados, no caso da hipérbole, por

0 < B < A, ramo positivo

$$B = \frac{1}{a(\varepsilon^2 - 1)} \quad A = \frac{\varepsilon}{a(\varepsilon^2 - 1)} \tag{1.23}$$

-A < B < 0, ramo negativo

$$B = -\frac{1}{a(\varepsilon^2 - 1)} \quad A = \frac{\varepsilon}{a(\varepsilon^2 - 1)} \tag{1.24}$$

Em ambos os casos vale

$$\varepsilon = \frac{A}{|B|}$$

$$a = \left|\frac{B}{A^2 - B^2}\right|$$
(1.25)

A partir de (1.15), (1.19) e (1.22), chega-se a

$$B = -\frac{mC}{l^2}$$

$$A = \left(B^2 + \frac{2mE}{l^2}\right)^{1/2}$$
(1.26)

De onde temos ainda, considerando (1.25),

$$\varepsilon = \left(1 + \frac{2El^2}{mC^2}\right)^{1/2} \tag{1.27a}$$

$$a = \left| \frac{C}{2E} \right| \tag{1.27b}$$

A equação da trajetória fica portanto

$$r = \frac{l^2/mC}{-1 + \varepsilon \cos\theta} \tag{1.28}$$

Para uma força repulsiva, (C > 0), deve-se ter E > 0, e a órbita só pode ser o ramo – da hipérbole. Em lugar do ângulo polar, θ , pode-se usar o ângulo de desvio da trajetória, ϑ . A equação (1.28) dá $r = \infty$ para $-1 + \varepsilon \cos \theta = 0$, ou seja, $|\cos \theta| = \cos(\psi/2)$, sendo ψ o ângulo entre as assíntotas da trajetória da partícula (Figura 1.5).

Tem-se ainda $-1 + \varepsilon \cos \psi/2 = 0$ ou $\cos \psi/2 = 1/\varepsilon$. Além disso, extrai-se da figura a relação $\vartheta = \pi - \psi$, a partir da qual se escreve $\sin \vartheta/2 = \sin(\pi/2 - \psi/2) = \cos \psi/2 = 1/\varepsilon$. A partir de (1.27a), usando o último resultado e sabendo que $l = b(2mE)^{1/2}$, temos

$$\varepsilon^{2} = 1 + \frac{4E^{2}b^{2}}{C^{2}} = \frac{1}{sen^{2}\frac{1}{2}\vartheta} = 1 + \cot^{2}\frac{1}{2}\vartheta$$
(1.29)

de onde se obtém que

$$b = \frac{C}{2E}\cot\frac{1}{2}\vartheta\tag{1.30}$$

Esta é a relação que se procura entre $E, b \in \vartheta$. A partir de (1.9) e usando sen $\vartheta = 2\cos(\vartheta/2) sen(\vartheta/2)$, temos

$$\begin{pmatrix} \frac{d\sigma}{d\Omega} \end{pmatrix}_{\vartheta} = \frac{C}{2E} \frac{\cos\frac{1}{2}\vartheta}{\sin\frac{1}{2}\vartheta} \frac{1}{2\cos\frac{1}{2}\vartheta \sin\frac{1}{2}\vartheta} \frac{C}{2E} \frac{1}{2\sin^{2}\frac{1}{2}\vartheta}$$

$$= \frac{C^{2}}{16E^{2}} \frac{1}{\sin^{4}\frac{1}{2}\vartheta}$$

$$(1.31)$$



Figura 1.5: Geometria da dispersão Rutherford.

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\vartheta} = \left(\frac{ZZ'e^2}{4E}\right)^2 \frac{1}{sen^4 \frac{1}{2}\vartheta}$$
(1.32)

Esta última expressão é a equação da seção de choque do espalhamento Rutherford. É importante notar que não sendo a massa do centro dispersor infinita, a equação (1.32) é rigorosamente válida no sistema do centro de massa desde que E seja a energia cinética nesse sistema, i.e., $E = m_r v^2/2$ (v: velocidade relativa, $m_r = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$).



Figura 1.6: Vetores momento linear no processo de colisão.

A expressão de espalhamento de Rutherford apresenta outro aspecto se em vez do ângulo de desvio se utilizar o momento linear transferido $\vec{q} = \vec{p} - \vec{p'}$, como esquematizado na Figura 1.6 e sendo $\vec{p} \in \vec{p'}$ os momentos da partícula, respectivamente antes e depois da colisão. Considerando um processo elástico, a equação (1.32) pode ser escrita como

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\vartheta} = (ZZ'2me^2)^2 \frac{1}{q^4}$$
(1.33)

O significado de (1.33) é: a seção eficaz de Rutherford varia com o inverso da quarta potência do momento linear transferido. Esse resultado coincide com aquele obtido com o tratamento quântico da aproximação de Born a ser tratado no Capítulo 8.

1.4 Raio Nuclear

Os núcleos atômicos encontram-se, em condições normais, no seu estado fundamental. Algumas propriedades observáveis podem ser extraidas desses núcleus. O raio nuclear é uma das mais fáceis de se observar e pode ser obtido a partir de experiências de dispersão como as realizadas por Rutherford. Como base nessas experiências, percebeu-se que era uma boa aproximação considerar o raio nuclear R como relacionado à massa nuclear pela expressão

$$R = r_0 A^{1/3} \tag{1.34}$$

onde $r_0 = (1.3 \pm 0.1) \times 10^{-13}$ cm, de acordo com as experiências de Rutherford. Pollard, em 1935 [7], estudando a barreira de potencial nuclear também chega à expressão (1.34) e obtém por extrapolação $r_0 = 1.4 \times 10^{-13}$ cm.

O objetivo inicial das experiências de Rutherford era determinar a energia das partículas alfa para a qual surgiam desvios em relação à distribuição angular calculada com base no potencial de Coulomb, a fim de definir, a partir daí, a que distância a partícula incidente "tocava" o núcleo. O raio nuclear determina a forma da distribuição angular, a partir da qual se pode então calculá-lo.

1.4.1 Experiência de Espalhamento com Partículas Alfa

Farwell e Wegner, em 1954, realizaram experiências de espalhamento elástico de partículas alfa de energia intermediária (13 a 43 MeV) por vários núcleos pesados, usando para iso o ciclotron de 60 polegadas da Universidade de Washington [8].



Figura 1.7: Seção de choque para o espalhamento de partículas alfa pelo chumbo a 60°, no sistema do laboratório. A curva tracejada e a escala à direita do gráfico se referem à distância de máxima aproximação para a trajetória clássica em função da energia da partícula alfa.

O resultado que Farwell e Wegner obtiveram para o Pb a 60° está reproduzido na Figura 1.7. A "curva de Coulomb corrigida" está normalizada pelos dados experimentias de baixa energia. Esta curva segue aproximadamente a dependência com o inverso do quadrado da seção de choque de Coulomb (Rutherford) com a energia, mas está levemente alterada a fim de levar em conta pequenas variações do ângulo de espalhamento com a energia devido ao campo magnético do ciclotron.

A baixas energias, a seção de choque observada segue satisfatoriamente a dependência prevista usando espalhamento Rutherford, mas a partir de aproximadamente 27 MeV, a seção de choque cai rapidamente com o aumento da energia da partícula alfa. A partir desse ponto outros modelos devem ser usados, pois

1.4. RAIO NUCLEAR

a partícula, desse ponto para energias mais altas, se aproxima do núcleo o suficiente para que o potencial nuclear se torne relevante.

Farwell e Wegner utilizaram então um modelo elaborado por Blair [9] para a absorção das partículas alfas que colidiam diretamente com o núcleo. Essa teoria prevê que a soma dos raios nuclear e da partícula alfa é aproximadamente igual à distância de máxima aproximação calculada na energia para a qual a seção de choque experimental é 1/4 da seção de choque Coulomb. É essa energia que aparece como $E_{1/4}$ na Figura 1.7. De acordo com essa interpretação, tem-se que

$$D_{1/4} = R_n + R_\alpha \tag{1.35}$$

onde $D_{1/4}$ é a distância de máxima aproximação, R_n é o raio do núcleo, calculado como $R_n = r_0 A^{1/3}$ e R_α é o raio da partícula alfa. A Figura 1.8 mostra os valores experimentais de $D_{1/4}$ plotados com respeito a $A^{1/3}$. O melhor ajuste aos pontos experimentais foi obtido para $r_0 = 1, 5 \times 10^{-13}$ cm e $R_\alpha = 1, 38 \times 10^{-13}$ cm.



Figura 1.8: Distância clássica de maior aproximação.

A energia $E_0 = 27.5$ MeV na Figura 1.7, a partir da qual o espalhamento Rutherford simples deixa de valer corresponde a uma distância de máxima aproximação entre o projétil e o alvo de $(12.76 \pm 0.21) \times 10^{-13} cm$, uma valor apenas um pouco superior à soma dos valores atualmente aceitos para os raios do núcleo de chumbo $(8 - 9 \times 10^{-13} cm)$ e da partícula alfa $(1 - 2 \times 10^{-13} cm)$.

Com isto, vimos que o experimento de espalhamento (ou dispersão) alfa usado por Rutherford serviu não apenas para verificar a existência do núcleo, mas também para determinar o seu raio.

Exercícios

- **1.1** Mostre que a equação (1.17) é verdadeira.
- **1.2** Mostre que a equação geral da hipérbole é dada pela equação (1.20).
- **1.3** Mostre que a equação (1.33) é verdadeira.

Problemas

1.4 Justifique a afirmação feita no texto de que a equação (1.32) é rigorosamente válida no sistema do centro de massa desde que E seja a energia cinética nesse sistema, ou seja, $E = m_r v^2/2$ (v : velocidade relativa, $m_r = m_1 m_2/(m_1 + m_2)$).

- **1.5** Obtenha uma expressão para $r_{min}(E)$ no espalhamento Rutherford.
- 1.6 A partir de (1.19), obtenha a condição para que se tenha dispersão simples.
- **1.7** A partir de dados experimentais para vários núcleos:

- 1. Determine o raio nuclear em cada caso.
- 2. Mostre que o raio nuclear varia com $R(A) = r_o A^{1/3}$.
- 3. Determine r_o . Qual o significado físico deste parâmetro. O valor obtido para r_o é compatível com o seu significado físico?

Capítulo 2

Introdução à Mecânica Quântica

2.1 Equação de Schrödinger e Estados de um Sistema

A equação fundamental da Mecânica Quântica é a mesma da Mecânica Clássica, onde é chamada equação de Hamilton-Jacobi, acrescida, no caso quântico, das relações de comutação

$$[x, p] = xp - px = i\hbar$$

[t, E] = i\hbar (2.1)

Estas relações são incorporadas à teria através da identificação de x e p com operadores. Na formulação de Heisenberg eles são matrizes, e na formulação de Schrödinger eles são operadores derivada-parcial. No formalismo de Schrödinger, o momento e a energia são considerados operadores definidos, por

$$E \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$p \to -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$
(2.2)

que são aplicadas sobre uma função $\Psi(x,t)$ chamada função de onda, e que contém toda informação sobre o sistema. Com isso a equação de Hamilton se transforma na equação de Schrödinger

$$\mathbf{H}\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{2.3}$$

ou, escrevendo o operador hamiltoniano, H, explicitamente,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V(x,t)\Psi = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$
(2.4)

Vemos assim que a expressão de Schrödinger é uma equação diferencial parcial de primeira ordem em t e de segunda ordem em x. Sabemos da teoria das equações diferenciais que uma equação de segunda ordem deve ter duas soluções linearmente independentes. Vamos chamar $\Psi_1(x,t) \in \Psi_2(x,t)$ estas duas soluções.

Como a derivada parcial é um operador linear, qualquer combinação linear de Ψ_1 e Ψ_2 também é solução da equação de Schrödinger. Então

$$\Psi(x,t) = a\Psi_1(x,t) + b\Psi_2(x,t)$$
(2.5)

é a solução geral da equação (2.4), com $a \in b$ constantes que são determinadas a partir das chamadas condições de contorno do problema analisado. Diferentes condições levam a funções de onda $\Psi(x,t)$ diferentes, e assim a função de onda representa o estado do sistema.

Impõem-se ainda as condições de continuidade da função de onda e de sua derivada. Com isso, observa-se que aparecem restrições aos auto-valores de momento e energia, os quais são associados aos

estados acessíveis ao sistema. A solução geral da equação de Schrödinger é, então, uma combinação linear dessas soluções, isto é,

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_{n} a_n \Psi_n(\vec{r},t) \tag{2.6}$$

onde $\Psi_n(\vec{r}, t)$ são os autovetores do Hamiltoniano,

$$\mathbf{H}\Psi_n = E_n \Psi_n \,. \tag{2.7}$$

Os estados do sistema são totalmente determinados pela função $\Psi(\vec{r},t)$, e portanto esse estado é uma combinação linear dos autovetores Ψ_n . Com isso, a Meânica Quântica, no seu aspecto formal, é semelhante à Álgebra Linear. A representação de Dirac deixa isso mais evidente com a introdução dos kets ($|\rangle$) para representar os autovetores. Assim o estado de um sistema S é representado por $|S\rangle$ tal que

$$|S\rangle = \sum_{n} a_n |n\rangle \tag{2.8}$$

 $\operatorname{com} \mathbf{H}|n\rangle = E_n|n\rangle.$

Há uma diferença importante em relação à Álgebra Linear. Essa diferença é a existência de um espaço dual repesentado pelo bra ($\langle | \rangle$). Para cada vetor $|n\rangle$ há um vetor correspondente no espaço dual, $\langle n|$. Neste espaço os operadores agem de forma diferente. O Hamiltoniano, por exemplo, age de forma que

$$\langle n|\mathbf{H} = \langle n|E_n^* = \langle n|E_n \tag{2.9}$$

e de forma geral, um operador \mathbf{O} age sobre um vetor dual de forma que

$$\langle n | \mathbf{O} = \langle n | O_n^* \,. \tag{2.10}$$

Há um produto interno na Mecânica Quântica, que é definido por

$$\langle S|S\rangle = \sum_{n'} \langle n'|a_{n'}^* \sum_n a_n |n\rangle = \sum_{n'n} \langle n'|n\rangle a_{n'}^* a_n \tag{2.11}$$

e, como os autovetores são linearmente independentes, segue que

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n'n} \tag{2.12}$$

e o produto escalar fica

$$\langle S|S\rangle = \sum_{n} a_n^* a_n \langle n|n\rangle = \sum_{n} |a_n|^2 \tag{2.13}$$

Como há um significado de probabilidade associado à função de onda, e portanto ao vetor $|S\rangle$, os coeficientes a_n são normalizados de forma que

$$\sum_{n} |a_n|^2 = 1.$$
 (2.14)

Com a representação de Dirac fica evidente que a ação de um operador sobre um estado $|S\rangle$ é uma transformação que age sobre a base de autoestados $|n\rangle$, isto é,

$$|S'\rangle = \mathbf{O}|S\rangle = \sum_{n} a_n \mathbf{O}|n\rangle = \sum_{n} a_n O_n |n\rangle.$$
(2.15)

Se o operador preserva o produto interno, isto é, se $\langle S' | S' \rangle = 1$, dizemos que esse operador é unitário, e

$$\langle S'|S'\rangle = \langle S|\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U}|S\rangle = \langle S|S\rangle$$
(2.16)

e portanto,

$$\mathbf{U}^{\dagger}\mathbf{U} = \mathbf{1} \tag{2.17}$$

onde $\mathbf{U}^{\dagger} = (\mathbf{U}^t)^*$.

Vejamos agora como esse formalismo funciona no caso de um Hamiltoniano

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{W}(\vec{r}) \tag{2.18}$$

 com

$$\mathbf{W}(\vec{r}) = \mathbf{V}(\vec{r}) + \mathbf{U}(\vec{r}). \tag{2.19}$$

Podemos escrever

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V}(\vec{r}) \tag{2.20}$$

 com

$$\mathbf{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{U}(\vec{r}) \tag{2.21}$$

Vamos procurar um estado $|\psi\rangle$ do sistema determinado pelo Hamiltoniano **H**. Devemos ter

$$\mathbf{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{2.22}$$

mas podemos adotar uma base qualquer de modo que

$$|\psi\rangle = \sum_{n} a_{n} |\phi_{n}\rangle \tag{2.23}$$

A base $|\phi_n\rangle$ pode ser escolhida de modo que sejam autovetores de \mathbf{H}_0 , de modo que

$$\mathbf{H}_0|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \tag{2.24}$$

então

$$\mathbf{H}|\psi\rangle = (\mathbf{H}_0 + \mathbf{V})\sum_n a_n |\phi_n\rangle = \sum_n a_n \mathbf{V}|\phi_n\rangle + \sum_n a_n E_n |\phi_n\rangle$$
(2.25)

Existem métodos aproximativos para se determinar $|\psi\rangle$ a partir da equação acima, e veremos mais adiante alguns destes métodos. Observe que a equação

$$\mathbf{W}(\vec{r}) = \mathbf{V}(\vec{r}) + \mathbf{U}(\vec{r}) \tag{2.26}$$

também envolve escolhas arbitrárias, uma vez que existem vários pares $\mathbf{V}(\vec{r}) \in \mathbf{U}(\vec{r})$ que satisfazem a igualdade acima. Portanto, $\mathbf{U}(\vec{r})$ pode sempre ser escolhido de modo que os autovetores de \mathbf{H}_0 sejam facilmente determinados.

2.2 Sistema de Coordenadas e Operadores

Na Física Nuclear lidamos principalmente com potenciais centrais, os quais conferem ao sistema uma simetria esférica que pode ser usada para facilitar os cálculos. Para isso precisamos frequentemente escrever a equação de Schrödinger em coordenadas esféricas. Nesta seção vamos recordar o procedimento para obter essa representação da equação de Schrödinger.

2.2.1 Transformação de Sistema de Coordenadas

No sistema cartesiano temos coordenadas ortogonais indicadas pelos eixos \hat{x} , $\hat{y} \in \hat{z}$. Nesse sistema, um deslocamento $d\hat{s}$ é dado por

$$d\hat{s} = dx\hat{x} + dy\hat{y} + dz\hat{z} \tag{2.27}$$

Considere agora as funções contínuas e diferenciáveis f(x, y, z), $g(x, y, z) \in h(x, y, z)$. Temos

$$df = \frac{\partial f}{\partial x}dx + \frac{\partial f}{\partial y}dy + \frac{\partial f}{\partial z}dz$$

$$dg = \frac{\partial g}{\partial x}dx + \frac{\partial g}{\partial y}dy + \frac{\partial g}{\partial z}dz$$

$$dh = \frac{\partial h}{\partial x}dx + \frac{\partial h}{\partial y}dy + \frac{\partial h}{\partial z}dz$$
(2.28)

que são as variações infinitesimais dessas funções quando nos deslocamos do ponto inicial de um deslocamento $d\vec{s}$. Matricialmente temos

$$\begin{pmatrix} df \\ dg \\ dh \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial x} & \frac{\partial g}{\partial y} & \frac{\partial g}{\partial z} \\ \frac{\partial h}{\partial x} & \frac{\partial h}{\partial y} & \frac{\partial h}{\partial z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = [J] \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix}$$
(2.29)

sendo [J] o Jacobiano da transformação (2.28). Se $J = det[J] \neq 0$, temos uma transformação inversa, e neste caso podemos dizer que a transformação é uma mudança de sistema de coordenadas. Então podemos também escrever

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial f} & \frac{\partial x}{\partial g} & \frac{\partial x}{\partial h} \\ \frac{\partial y}{\partial f} & \frac{\partial y}{\partial g} & \frac{\partial y}{\partial h} \\ \frac{\partial z}{\partial f} & \frac{\partial z}{\partial g} & \frac{\partial z}{\partial h} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} df \\ dg \\ dh \end{pmatrix}$$
(2.30)

Podemos escolher \vec{ds} de forma que dg = dh = 0, então

$$\vec{ds} = \left(\frac{\partial x}{\partial f}\hat{x} + \frac{\partial y}{\partial f}\hat{y} + \frac{\partial z}{\partial f}\hat{z}\right)df$$

 \mathbf{e}

$$ds = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial f}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial f}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial f}\right)^2} df = l_f df$$

onde

$$l_f = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial f}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial f}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial f}\right)^2} \tag{2.31}$$

é um fator de escala que aparece na transformação. De forma análoga teremos para as outras coordenadas

$$ds = l_g dg$$

$$ds = l_h dh$$
(2.32)

e portanto, para um deslocamento arbitrário temos 1

$$\vec{ds} = l_f df \hat{f} + l_g dg \hat{g} + l_h dh \hat{h}$$
(2.33)

2.2.2 Operadores em Coordenadas Esféricas

Em coordenadas esféricas temos a transformação

$$\begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} sen\theta cos\varphi & rcos\theta cos\varphi & -rsen\theta sen\varphi \\ sen\theta sen\varphi & rcos\theta sen\varphi & rsen\theta cos\varphi \\ cos\theta & -rsen\theta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dr \\ d\theta \\ d\varphi \end{pmatrix}$$
(2.34)

onde a matriz de transformação, [J],é o jacobiano, sendo $det[J] \neq 0.$

Para um deslocamento \vec{ds} tal que $d\theta = d\varphi = 0$, temos

$$\vec{ds} = (sen\theta cos\varphi \,\hat{x} + sen\theta sen\varphi \,\hat{y} + cos\theta \,\hat{z})dr \tag{2.35}$$

e portanto

$$ds = \sqrt{sen^2\theta(\cos^2\varphi + sen^2\varphi) + \cos^2\theta} \, dr = dr \tag{2.36}$$

 $^{^1 \}mathrm{Aqui}$ estamos supondo que $\hat{f},\,\hat{g}$ e \hat{h} sejam ortogonais.

2.2. SISTEMA DE COORDENADAS E OPERADORES

Para um deslocamento com $dr=d\varphi=0,$ temos

$$\vec{ds} = (\cos\theta\cos\varphi\,\hat{x} + \cos\theta\sin\varphi\,\hat{y} + \sin\theta\,\hat{z})\,rd\theta \tag{2.37}$$

então

$$ds = \sqrt{\cos^2\theta(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi) + \sin^2\theta} \, rd\theta \tag{2.38}$$

e assim $ds = rd\theta$. Observe que agora há uma escala não unitária entre $ds \in d\theta$, e que ainda depende do ponto a partir do qual o deslocamento é feito.

Finalmente, para $dr = d\theta = 0$, temos

$$ds = (-sen\varphi\,\hat{x} + \cos\varphi\,\hat{y})\,rsen\theta d\varphi \tag{2.39}$$

então

$$ds = rsen\theta d\varphi \tag{2.40}$$

Novamente temos um fator de escala dependente da posição. Estes fatores de escala são importantes na derivação da forma dos operadores gradiente, divergente, rotacional e laplaciano em coordenadas esféricas, como veremos a seguir. Estes operadores, por sua vez, determinam a forma da equação de Schrödinger nessas coordenadas.

Gradiente em Coordenadas Esféricas

Num deslocamento $d\vec{s}$, a variação de uma função F(x, y, z) é dada por,

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x}dx + \frac{\partial F}{\partial y}dy + \frac{\partial F}{\partial z}dz$$
(2.41)

que pode ser escrito na forma

$$dF = \left(\frac{\partial F}{\partial x}\hat{x} + \frac{\partial F}{\partial y}\hat{y} + \frac{\partial F}{\partial z}\hat{z}\right) \cdot (dx\,\hat{x} + dy\,\hat{y} + dz\,\hat{z}) \tag{2.42}$$

e definindo o operador gradiente como

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x}\hat{x} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{y} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{z}$$
(2.43)

temos

$$dF = \vec{\nabla}F \cdot \vec{ds} \tag{2.44}$$

Quando usamos as coordenadas esféricas, temos $F(r, \theta, \varphi)$ e

$$dF = \frac{\partial F}{\partial r}dr + \frac{\partial F}{\partial \theta}d\theta + \frac{\partial F}{\partial \varphi}d\varphi$$
(2.45)

que pode reescrita na forma

$$dF = \left(\frac{\partial F}{\partial r}\right)dr + \left(\frac{1}{r}\frac{\partial F}{\partial \theta}\right)rd\theta + \left(\frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial F}{\partial \varphi}\right)rsen\theta d\varphi$$
(2.46)

ou, na forma vetorial

$$dF = \left[\frac{\partial F}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial F}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial F}{\partial\varphi}\hat{\varphi}\right]\cdot\vec{ds}$$
(2.47)

de onde obtemos o gradiente em coordenadas esféricas

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\hat{\theta} + \frac{1}{rsen\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\hat{\varphi}$$
(2.48)

Divergente em Coordenadas Esféricas

O operador divergente está associado ao fluxo de um campo vetorial, $\vec{V}(\vec{r})$, através de um elemento de volume infinitesimal. Considerando esse volume um paralelepípedo, temos que o fluxo através de uma das faces perpendiculares ao eixo \hat{x} é

$$d\phi_{\hat{x}}(x) = -dydz\,\hat{x}\cdot\vec{V}(x,y,z) \tag{2.49}$$

e para a face oposta, em (x + dx, y, z), o fluxo é

$$d\phi_{\hat{x}}(x+dx) = dydz\,\hat{x}\cdot\vec{V}(x+dx,y,z)\,. \tag{2.50}$$

Escrevendo

$$\vec{V}(x+dx,y,z) = \vec{V}(x,y,z) + \frac{\partial(\vec{V}\cdot\hat{x})}{\partial x}dx$$
(2.51)

podemos calcular o fluxo através das faces perpendiculares a \hat{x} como

$$d\phi_{\hat{x}} = d\phi_{\hat{x}}(x) + d\phi_{\hat{x}}(x+dx) = dxdydz \frac{\partial(\vec{V}\cdot\hat{x})}{\partial x}$$
(2.52)

Analogamente obtemos

$$d\phi_{\hat{y}} = dxdydz \frac{\partial(\vec{V} \cdot \hat{y})}{\partial y}$$

$$d\phi_{\hat{z}} = dxdydz \frac{\partial(\vec{V} \cdot \hat{z})}{\partial z}$$
(2.53)

para as outras coordenadas.

Sendo dv = dxdydzo volume do paralelepípedo, podemos escrever o fluxo total através desse volume como

$$d\phi(x, y, z) = d\phi_{\hat{x}} + d\phi_{\hat{y}} + d\phi_{\hat{z}} = \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z}\right)dv$$
(2.54)

e o operador divergente é definido como

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z}$$
(2.55)

de modo que $% \left({{{\left({{{}}}}}} \right)}}}\right($

$$d\phi(x, y, z) = \vec{\nabla} \cdot \vec{V}(x, y, z) \, dv \tag{2.56}$$

Ao passarmos para coordenadas esféricas é conveniente tomarmos superfícies perpendiculares às direções $\hat{r}, \hat{\theta} \in \hat{\varphi}$. Neste caso teremos

$$d\phi_{\hat{r}}(r) = -rd\theta rsen\theta d\varphi \,\hat{r} \cdot \vec{V}(r,\theta,\varphi) \tag{2.57}$$

 \mathbf{e}

$$d\phi_{\hat{r}}(r+dr) = (r+dr)^2 sen\theta d\theta d\varphi \,\hat{r} \cdot \vec{V}(r+dr,\theta,\varphi)$$
(2.58)

Usando

$$\vec{V}(r+dr,\theta,\varphi) = \vec{V}(r,\theta,\varphi) + \frac{\partial(\vec{V}\cdot\hat{r})}{\partial r}dr$$
(2.59)

e mantendo apenas termos de ordem dr, obtemos

$$d\phi_{\hat{r}} = d\phi_{\hat{r}}(r) + d\phi_{\hat{r}}(r+dr) = drd\theta d\varphi \left(2rsen\theta \,\hat{r} \cdot \vec{V} + r^2sen\theta \frac{\partial(\vec{V} \cdot \hat{r})}{\partial r}\right)$$
(2.60)

e, portanto

$$d\phi_{\hat{r}} = dr d\theta d\varphi \frac{\partial (r^2 sen\theta \,\hat{r} \cdot \vec{V})}{\partial r} \tag{2.61}$$

Vamos calcular o fluxo através das superfícies perpendiculares a $\hat{\theta}$. Sobre a primeira face temos

.

$$d\phi_{\hat{\theta}} = dr \, rsen\theta d\varphi \,\hat{\theta} \cdot \vec{V}(r,\theta,\varphi) \tag{2.62}$$

e sobre a segunda face

$$d\phi_{\hat{\theta}}(\theta + d\theta) = dr \, rsen(\theta + d\theta) \, d\varphi \, \hat{\theta} \cdot \vec{V}(r, \theta + d\theta, \varphi) \tag{2.63}$$

e através do mesmo método usado para $\hat{r},$ temos

$$d\phi_{\hat{\theta}} = dr d\theta d\varphi \left(r \cos\theta \,\hat{\theta} \cdot \vec{V}(r,\theta,\varphi) + r \sin\theta \,\frac{\partial(\vec{V} \cdot \hat{\theta})}{\partial\theta} \right)$$
(2.64)

e finalmente

$$d\phi_{\hat{\theta}} = dr d\theta d\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} \left(rsen\theta V_{\theta} \right) \tag{2.65}$$

Para $\hat{\varphi}$

$$d\phi_{\hat{\varphi}}(\varphi) = dr \, r d\theta \, \hat{\varphi} \cdot \vec{V}(\varphi)$$

$$d\phi_{\hat{\varphi}}(\varphi + d\varphi) = dr \, r d\theta \, \hat{\varphi} \cdot \vec{V}(\varphi + d\varphi)$$

(2.66)

e portanto

$$d\phi_{\hat{\varphi}} = dr \, r d\theta \, \frac{\partial (\vec{V} \cdot \hat{\varphi})}{\partial \varphi} d\varphi = dr d\theta d\varphi \frac{\partial (rV_{\varphi})}{\partial \varphi} \tag{2.67}$$

Agora temos

$$dv = r^2 sen\theta \, dr d\theta d\varphi \tag{2.68}$$

 $ent \tilde{a} o$

$$d\phi = dv \frac{1}{r^2 sen\theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r^2 sen\theta V_r) + \frac{\partial}{\partial \theta} (rsen\theta V_\theta) + \frac{\partial}{\partial \varphi} (rV_\varphi) \right]$$
(2.69)

e o divergente em coordenadas esféricas fica

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{V} = \frac{1}{r^2 sen\theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r^2 sen\theta V_r) + \frac{\partial}{\partial \theta} (r sen\theta V_\theta) + \frac{\partial}{\partial \varphi} (r V_\varphi) \right]$$
(2.70)

Rotacional em Coordenadas Esféricas

O rotacional de um campo vetorial está relacionado à integral de linha sobre um caminho fechado. Para um campo $\vec{V}(x, y, z)$, a componente do rotacional na direção \hat{z} está associada à integral de um caminho que define uma área infinitesimal no plano xy, $I_{\hat{z}}$, dada, conforme Figura 2.1 por

$$\begin{split} I_{\hat{z}} &= \left(V_x - \frac{\partial V_x}{\partial y}\frac{dy}{2}\right)dx + \left(V_y + \frac{\partial V_y}{\partial x}\frac{dx}{2}\right)dy - \left(V_x + \frac{\partial V_x}{\partial y}\frac{dy}{2}\right)dx - \left(V_y - \frac{\partial V_y}{\partial x}\frac{dx}{2}\right)dy \\ &= V_xdx - \frac{\partial V_x}{\partial y}\frac{dxdy}{2} + V_ydy + \frac{\partial V_y}{\partial x}\frac{dxdy}{2} - V_xdx - \frac{\partial V_x}{\partial y}\frac{dxdy}{2} - V_ydy + \frac{\partial V_y}{\partial x}\frac{dxdy}{2} \\ &= \left[\frac{\partial V_y}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial y}\right]dxdy \\ I_{\hat{z}} &= \left[\frac{\partial V_y}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial y}\right]da_{\hat{z}} \end{split}$$
(2.71)

Da mesma forma obtemos

$$I_{\hat{x}} = \left[\frac{\partial V_y}{\partial z} - \frac{\partial V_z}{\partial y}\right] da_{\hat{x}}$$

$$I_{\hat{z}} = \left[\frac{\partial V_z}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial z}\right] da_{\hat{y}}$$
(2.72)



Figura 2.1: Integral de caminho no plano xy

A integral no caminho fechado é

$$I = I_{\hat{x}} + I_{\hat{y}} + I_{\hat{z}} = \left[\left(\frac{\partial V_y}{\partial z} - \frac{\partial V_z}{\partial y} \right) da_{\hat{x}} + \left(\frac{\partial V_z}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial z} \right) da_{\hat{y}} + \left(\frac{\partial V_y}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial y} \right) da_{\hat{z}} \right]$$
(2.73)

ou ainda,

$$I = I_{\hat{x}} + I_{\hat{y}} + I_{\hat{z}} = \left[\left(\frac{\partial V_y}{\partial z} - \frac{\partial V_z}{\partial y} \right) \hat{x} + \left(\frac{\partial V_z}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial z} \right) \hat{y} + \left(\frac{\partial V_y}{\partial x} - \frac{\partial V_x}{\partial y} \right) \hat{z} \right] \cdot \vec{da}$$
(2.74)

sendo o termo entre colchetes é chamado rotacional do campo \vec{V} em coordenadas cartesianas.

Procedimento idêntico é usado na determinação do rotacional em coordenadas esféricas. Para um campo $\vec{V}(r,\theta,\varphi)$, a componente do rotacional na direção \hat{r} está associada à integral de um caminho que define uma área infinitesimal no plano $r^2 \, sen\theta \, d\theta \, d\varphi$, $I_{\hat{r}}$, dada, conforme Figura 2.2 por

$$\begin{split} I_{\hat{r}} &= -\left(V_{\varphi}rsen\theta - \frac{\partial V_{\varphi}rsen\theta}{\partial\theta}\frac{d\theta}{2}\right)d\varphi + \left(V_{\theta}r - \frac{\partial V_{\theta}r}{\partial\varphi}\frac{d\varphi}{2}\right)d\theta \\ &+ \left(V_{\varphi}rsen\theta + \frac{\partial V_{\varphi}rsen\theta}{\partial\theta}\frac{d\theta}{2}\right)d\varphi - \left(V_{\theta}r + \frac{\partial V_{\theta}r}{\partial\varphi}\frac{d\varphi}{2}\right)d\theta \\ &= -V_{\varphi}rsen\theta d\varphi + \frac{\partial V_{\varphi}rsen\theta}{\partial\theta}\frac{d\theta d\varphi}{2} + V_{\theta}rd\theta - \frac{\partial V_{\theta}r}{\partial\varphi}\frac{d\varphi d\theta}{2} \\ &+ V_{\varphi}rsen\theta d\varphi + \frac{\partial V_{\varphi}rsen\theta}{\partial\theta}\frac{d\theta d\varphi}{2} - V_{\theta}rd\theta - \frac{\partial V_{\theta}r}{\partial\varphi}\frac{d\varphi d\theta}{2} \\ I_{\hat{r}} &= \frac{1}{rsen\theta} \left[\frac{\partial(sen\theta V_{\varphi})}{\partial\theta} - \frac{\partial V_{\theta}}{\partial\varphi}\right]r^{2}sen\theta d\theta d\varphi \end{split}$$
(2.75)



Figura 2.2: Integral de caminho no plano $r^2 sen\theta \, d\theta \, d\varphi$.

De modo similar encontramos

$$I_{\hat{\theta}} = \frac{1}{r} \left[\frac{1}{sen\theta} \frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial (rV_{\varphi})}{\partial r} \right] rsen\theta dr d\varphi$$

$$I_{\hat{\varphi}} = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial (rV_{\theta})}{\partial r} - \frac{\partial V_r}{\partial \theta} \right] r dr d\theta$$
(2.76)

A integral no caminho fechado é, portanto

$$I = I_{\hat{r}} + I_{\hat{\theta}} + I_{\hat{\varphi}} = \begin{cases} \frac{1}{rsen\theta} \left[\frac{\partial(sen\theta V_{\varphi})}{\partial \theta} - \frac{\partial V_{\theta}}{\partial \varphi} \right] \hat{r} + \frac{1}{r} \left[\frac{1}{sen\theta} \frac{\partial V_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial(rV_{\varphi})}{\partial r} \right] \hat{\theta} + \\ \frac{1}{r} \left[\frac{\partial(rV_{\theta})}{\partial r} - \frac{\partial V_r}{\partial \theta} \right] \hat{\varphi} \end{cases} \cdot \vec{da}$$

$$(2.77)$$

onde

$$\vec{da} = r^2 sen\theta d\theta d\varphi \ \hat{r} + r sen\theta dr d\varphi \ \hat{\theta} + r dr d\theta \ \hat{\varphi} \tag{2.78}$$

é o diferencial de área em coordenadas esféricas, e o termo entre chaves em (2.77) é o rotacional em coordenadas esféricas.

Exercícios

2.1 Mostre que o determinante do Jacobiano correspondente à transformação (2.34) tem determinante não-nulo. O que pode ser concluído deste resultado?

Problemas

2.2 Dadas as funções contínuas e diferenciáveis f(x,y,z), g(x,y,z) e h(x,y,z) tais que o Jacobiano $\partial(f,g,h)/\partial(x,y,z) \neq 0$, determinar nas coordenadas curvilíneas (f,g,h) o gradiente, o divergente, o laplaciano e o rotacional.

2.3 Escreva a equação de Schrödinger em coordenadas esféricas.

Capítulo 3

Força Central e Momento Angular

A equação de Schrödinger em coordenadas esféricas pode ser obtida diretamente usando as expressões para coordenadas curvilíneas. Podemos também obter essa representação da equação a partir de argumentos físicos. Neste capítulo desenvolveremos esses argumentos até obtermos a equação de Schrödinger em coordenadas esféricas, e então passaremos a estudas as soluções dessa equação para alguns casos importantes.

3.1 Equação de Schrödinger em Coordenadas Esféricas

Na Mecânica Clássica o momento angular é definido pelo vetor

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{3.1}$$

Na Mecânica Quântica o momento \vec{p} é trocado pelo operador

$$\vec{\mathbf{p}} = -i\hbar\vec{\nabla} \tag{3.2}$$

e portanto temos o operador momento angular

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{r} \times (-i\hbar\vec{\nabla}) \tag{3.3}$$

Podemos escrever explicitamente as componentes de $\vec{\mathbf{L}}$ como

$$\mathbf{L}_{x} = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$$
$$\mathbf{L}_{y} = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right)$$
$$\mathbf{L}_{z} = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$
(3.4)

e a partir dessas expressões calcular os comutadores entre as componentes do operador momento angular. Por exemplo,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{L}_{x}, \mathbf{L}_{y} \end{bmatrix} = -\hbar^{2} \left[\left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \right]$$

$$= -\hbar^{2} \left[\left(y \frac{\partial}{\partial x} + y z \frac{\partial^{2}}{\partial z \partial x} - y x \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} - z^{2} \frac{\partial^{2}}{\partial y \partial x} + z x \frac{\partial^{2}}{\partial y \partial z} \right) - \left(z y \frac{\partial^{2}}{\partial x \partial z} - z^{2} \frac{\partial^{2}}{\partial x \partial y} - x y \frac{\partial^{2}}{\partial z^{2}} + x \frac{\partial}{\partial y} + x z \frac{\partial^{2}}{\partial z \partial y} \right) \right]$$

$$= \hbar^{2} \left[x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right]$$
(3.5)

e portanto

$$[\mathbf{L}_x, \mathbf{L}_y] = i\hbar \mathbf{L}_z \tag{3.6}$$

Cálculo idêntico mostra que

$$[\mathbf{L}_y, \mathbf{L}_z] = i\hbar \mathbf{L}_x \quad \mathbf{e} \quad [\mathbf{L}_z, \mathbf{L}_x] = i\hbar \mathbf{L}_y \tag{3.7}$$

Estes resultados, juntamente com os triviais $[\mathbf{L}_x, \mathbf{L}_x] = [\mathbf{L}_y, \mathbf{L}_y] = [\mathbf{L}_z, \mathbf{L}_z] = 0$ formam o conjunto de comutadores das componentes do momento angular.

Também é fácil mostrar que o quadrado do momento angular comuta com cada uma de suas componentes, e portanto com o próprio momento angular. Por exemplo, temos

$$[\mathbf{L}^2, \mathbf{L}] = \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} - \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{L} = 0$$
(3.8)

Sabendo

$$\vec{r} \times \vec{p} = \sum_{ijk} \varepsilon_{ijk} \hat{x}_i x_j p_k$$

$$\vec{r} \cdot \vec{p} = \sum_{ij} x_i p_j \delta_{ij}$$
(3.9)

temos que

$$\mathbf{L}^{2} = (\vec{r} \times \vec{p}) \cdot (\vec{r} \times \vec{p})$$

$$= \sum_{il} \left(\sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \hat{x}_{i} x_{j} p_{k} \sum_{mn} \varepsilon_{lmn} \hat{x}_{l} x_{m} p_{n} \delta_{il} \right)$$

$$= \sum_{i} \left(\sum_{jk} \varepsilon_{ijk} \hat{x}_{i} x_{j} p_{k} \sum_{mn} \varepsilon_{imn} \hat{x}_{i} x_{m} p_{n} \right)$$

$$= \sum_{i} \sum_{jk} \sum_{mn} \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{imn} x_{j} p_{k} x_{m} p_{n}$$
(3.10)

As duas somas, em jk e em mn, permitem apenas duas possibilidades não nulas para a combinação entre seus índices: $j = m, k = n \Rightarrow \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ijk} = 1$ e $j = n, k = m \Rightarrow \varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ikj} = -1$. De modo que

$$\mathbf{L}^{2} = \sum_{\substack{jk\\j\neq k}} x_{j}p_{k}x_{j}p_{k} - x_{j}p_{k}x_{k}p_{j}$$
$$= \sum_{\substack{jk\\j\neq k}} x_{j}^{2}p_{k}^{2} - x_{j}(x_{k}p_{k} - \mathrm{i}\hbar)p_{j}$$
(3.11)

Na última passagem da equação (3.11) também se usou o fato $xp - px = i\hbar$, o qual é válido para cada componente. Temos portanto

$$\mathbf{L}^{2} = \sum_{\substack{jk\\j\neq k}} x_{j}^{2} p_{k}^{2} - x_{j} x_{k} p_{k} p_{j} + i\hbar x_{j} p_{j}$$

$$= \sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} x_{j}^{2} p_{k}^{2} - x_{j} x_{k} p_{k} p_{j} + i\hbar x_{j} p_{j}$$
(3.12)

logo

26

$$\mathbf{L}^2 = r^2 p^2 - \vec{r} (\vec{r} \cdot \vec{p}) \cdot \vec{p} + 2\mathbf{i}\hbar\vec{x} \cdot \vec{p}$$
(3.13)

Mas usando o operador momento linear, temos

$$\vec{r} \cdot \vec{p} = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \tag{3.14}$$

que, substituído na equação (3.13), resulta

$$\mathbf{L}^{2} = r^{2}p^{2} + \hbar^{2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{2}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$
(3.15)

Como o operador energia cinética é

$$T = \frac{p^2}{2m} \tag{3.16}$$

usando a equação (3.15), segue

$$T = \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right)$$
(3.17)

As autofunções do Hamiltoniano são, portanto, autofunções do operador $\mathbf{L}^2,$ isto é

$$\mathbf{L}^2 \Psi_l = \lambda^2 \hbar^2 \Psi_l \tag{3.18}$$

onde $\lambda^2 = l(l+1)$, e por isso a equação de onda completa é

$$H\Psi_l = E_l\Psi_l \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]\Psi_l = E_l\Psi_l \tag{3.19}$$

Com a equação de Schrödinger escrita dessa forma fica evidente que ela pode ser separada nas suas componentes radial e angular. De fato, escrevendo

$$\Psi_l = R(r)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{3.20}$$

e substituindo na equação de onda segue

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]R(r) = E_lR(r)$$
(3.21)

Esta é a forma da equação de Schrödinger radial em coordenadas esféricas. Compare com a solução do Problema 2.3. A seguir estudaremos a solução dessa equação para alguns casos específicos de grande importância na Física Nuclear.

3.1.1 Solução da Equação de Schrödinger: Parte Angular

A equação

$$\mathbf{L}^2 \Psi_l = l(l+1)\hbar \Psi_l \tag{3.22}$$

determina uma equação diferencial para a parte angular da função de onda. Como

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{r} \times (-\mathrm{i}\hbar)\vec{\nabla} \tag{3.23}$$

usando coordenadas esféricas temos

$$\vec{\mathbf{L}} = r\hat{r} \times \left[(-i\hbar) \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \frac{1}{r \, sen\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \right]$$
(3.24)

O produto vetorial em coordenadas esfércias (3.24) é definido de modo que $\hat{\theta} \times \hat{\varphi} = \hat{r}$ para que tenha a mesma paridade usualmente adotada em coordenadas cartesianas, $\hat{x} \times \hat{y} = \hat{z}$.

Então

$$\vec{\mathbf{L}} = -\mathrm{i}\hbar \left(\hat{\varphi} \frac{1}{r\,sen\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \tag{3.25}$$

Daqui podemos obter a forma do operador \mathbf{L}^2 em coordenadas esféricas, já que $\mathbf{L}^2 = \vec{L} \cdot \vec{L}$. Este produto escalar deve ser calculado com cuidado uma vez que os versores $\hat{\varphi} \in \hat{\theta}$ dependem dos ângulos $\varphi \in \theta$.

A projeção dos eixos coordenados esféricos sobre os eixos cartesianos é dada por

$$\hat{r} = sen\theta \cos\varphi \,\hat{i} + sen\theta \,sen\varphi \,\hat{j} + \cos\theta \,\hat{k} \tag{3.26a}$$

$$\hat{\theta} = \cos\theta \cos\varphi \,\hat{i} + \cos\theta \,\sin\varphi \,\hat{j} - \,\sin\theta \,\hat{k} \tag{3.26b}$$

$$\hat{\varphi} = -sen\varphi\,\hat{i} + cos\varphi\,\hat{j} \tag{3.26c}$$

Podemos, a partir das projeções (3.26), calcular as derivadas dos versores esféricos com respeito a θ e φ , que serão usadas para o cálculo do produto escalar $\vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{L}}$.

Temos, então

$$\frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \theta} = 0 \qquad \qquad \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \varphi} = -sen\theta \,\hat{r} - \cos\theta \,\hat{\theta} \tag{3.27}$$

$$\frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} = -\hat{r} \qquad \qquad \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \varphi} = \cos\theta \left(-\sin\varphi \,\hat{i} + \cos\varphi \,\hat{j} \right) \tag{3.28}$$

$$\frac{\partial \hat{r}}{\partial \theta} = \hat{\theta} \qquad \qquad \frac{\partial \hat{r}}{\partial \varphi} = sen\theta \,\hat{\varphi} + \cos\theta \,\hat{k} \tag{3.29}$$

Com estas derivadas podemos calcular facilmente o produto escalar $\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\mathbf{L}},$ pois

$$\frac{\mathbf{L}^{2}}{-\hbar^{2}} = \left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \cdot \left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \hat{\theta}\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \\
= \hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\hat{\theta}\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) - \hat{\theta}\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\hat{\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \hat{\theta}\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\hat{\theta}\frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{3.30}$$

 $\acute{\mathrm{E}}$ conveniente calcularmos separadamente cada um dos termos dessa equação. Temos

$$T_1 = \hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = \hat{\varphi} \cdot \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \cdot \hat{\varphi} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad \Rightarrow \quad T_1 = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \tag{3.31}$$

$$T_2 = \hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\hat{\theta} \frac{1}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \hat{\varphi} \cdot \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \theta} \frac{1}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{\varphi} \cdot \hat{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad T_2 = 0 \tag{3.32}$$

$$T_3 = \hat{\theta} \frac{1}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\hat{\varphi} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) = \hat{\theta} \cdot \frac{\partial \hat{\varphi}}{\partial \theta} \frac{1}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\theta} \cdot \hat{\varphi}}{sen\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \theta} = -\frac{\cos\theta}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad \Rightarrow \quad T_3 = -\frac{\cos\theta}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \tag{3.33}$$

e finalmente

$$T_4 = \hat{\theta} \frac{1}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left(\hat{\theta} \frac{1}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = \hat{\theta} \cdot \frac{\partial \hat{\theta}}{\partial \varphi} \frac{1}{sen^2\theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\hat{\theta} \cdot \hat{\theta}}{sen^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad \Rightarrow \quad T_4 = \frac{1}{sen^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \tag{3.34}$$

Portanto,

$$\frac{\mathbf{L}^2}{-\hbar^2} = T_1 - T_2 - T_3 + T_4 = \frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$
(3.35)

que pode ainda ser escrita na forma

$$\mathbf{L}^{2} = -\hbar^{2} \left[\frac{1}{sen^{2}\theta} \frac{\partial^{2}}{\partial\varphi^{2}} + \frac{1}{sen\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(sen\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right]$$
(3.36)

Agora podemos escrever explicitamente a equação diferencial da parte angular da função de onda. Uma vez que

$$\mathbf{L}^2 \Psi_l = l(l+1)\hbar^2 \Psi_l \tag{3.37}$$

temos

$$\left[\frac{1}{sen^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{sen\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sen\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\right]Y(\theta,\varphi) = -l(l+1)Y(\theta,\varphi)$$
(3.38)

que pode ser facilmente separada nas variáveus $\theta \in \varphi$, já que, escrevendo $Y(\theta, \varphi) = \Phi(\varphi)\Theta(\theta)$ temos

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = \frac{sen^2\theta}{\Theta} \left[\frac{1}{sen\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sen\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + l(l+1)\Theta\right]$$
(3.39)

que pode ser separada em duas equações:

$$\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -m^2 \tag{3.40a}$$

$$\frac{1}{sen\theta} \frac{d}{d\theta} \left(sen\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) - \frac{m^2}{sen^2\theta} \Theta + l(l+1)\Theta = 0$$
(3.40b)

A equação (3.40a) pode ser facilmente resolvida, e obtemos

$$\Phi(\varphi) = e^{im\varphi} \tag{3.41}$$

3.1.2 Parte Radial

A parte radial da equação de Schrödinger é

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left\{\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] - \frac{\lambda^2}{r^2}\right\}R = 0$$
(3.42)

Esta equação pode ser simplificada usando a função u(r) definida pela igualdade

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \tag{3.43}$$

Daqui é fácil mostrar que a equação (3.42) fica

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left\{\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r)\right] - \frac{\lambda^2}{r^2}\right\} u = 0$$
(3.44)

Esta forma da equação radial é útil para se estudar o caso $\lambda = 0$, que corresponde a momento angular nulo. Veremos adiante que este caso é importante em espalhamento nuclear de baixa energia.

E importante observar que a identidade (3.43) leva a uma restrição nas possíveis soluções da equação (3.44). A função de onda deve ser finita em todos os pontos, e portanto para $r \to 0$ devemos ter $u(r) \to 0$ de forma que R(r) permaneça finita na origem.

No caso de $\lambda \neq 0$, e se $V(r) = V_0$ é constante, é mais vantajoso fazermos outro tipo de substituição na equação (3.42). Definindo

$$\rho = kr \tag{3.45}$$

29

com

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - |E|)}$$
(3.46)

e substituindo na equação (3.42) obtemos

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{\lambda^2}{\rho^2}\right]R = 0$$
(3.47)

A equação (3.47) não tem solução analítica. A soluções são obtidas a partir das funções de Bessel, que são na verdade séries que resolvem um problema de ondulatória com simetria cilíndrica, a chamada equação de Helmholtz para propagação do som.

A equação de Helmholtz tem a forma

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{1}{x}\frac{dy}{dx} + \left(1 - \frac{\mu^2}{x^2}\right)y = 0$$
(3.48)

que é muito parecida com a equação (3.47). Por isso, podemos supor que as soluções da parte radial podem ser expressas em termos das funções de Bessel, $J_l(x)$, que resolvam a equação (3.48). Há, no entanto, uma dificuldade: a equação (3.48) resolve um problema com simetria cilíndrica, e y(x = 0) não é necessariamente nulo. Por isso fazemos uma "regularização" das funções de Bessel definindo as funções esféricas de Bessel,

$$j_{l}(\rho) = \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$$
(3.49)

e as funções esféricas de Newmann,

$$n_l(\rho) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi}{2\rho}} J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho)$$
(3.50)

É possível escrever as funções $j_l(\rho) \in n_l(\rho)$ como séries em $sen\rho \in cos\rho$. Por exemplo, para l = 0 e l = 1 temos

$$j_o(\rho) = sen\rho/\rho \tag{3.51}$$

 \mathbf{e}

$$j_1(\rho) = \frac{sen\rho}{\rho^2} - \frac{cos\rho}{\rho}$$
(3.52)

para as funções esféricas de Bessel, e para as funções esféricas de Neumann temos

$$n_o(\rho) = -\cos\rho/\rho \tag{3.53}$$

е

$$n_1(\rho) = -\cos\rho/\rho^2 - \frac{sen\rho}{\rho}.$$
(3.54)

Daqui vemos que as funções de Neumann não são bem definidas para $\rho = 0$, o que é um dado importante quando estudarmos as condições de contorno de problemas com simetria esférica.

Será útil, mais adiante, observarmos também o comportamento assintótico dessas funções. De modo geral, as funções esféricas de Bessel se comportam, para $\rho \to 0$ como

$$j_l(\rho) \to \frac{\rho^l}{(2l+1)!!},$$
 (3.55)

enquanto as funções esféricas de Neumann se comportam como

$$n_l(\rho) \to -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}.$$
 (3.56)

É comum encontrarmos essas funções em combinações lineares específicas chamadas funções esféricas de Hankel, que são dadas por

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho)$$
(3.57)

 \mathbf{e}

$$h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho)$$
(3.58)

Exercícios

3.1 Considere um espalhamento de uma partícula de massa m e energia E por um poço de potencial $V(r) = -V_0$ para $r < r_0$. Supondo que a energia seja suficientemente baixa, podemos considerar apenas a contribuição do estado l = 0 para o estado espalhado.

- 1. Defina R(r) = u(r)/r, substitua na equação radial (3.21) e obtenha a equação para u(r). Compare com a equação de Schrödinger unidimensional. Qual o significado físico do termo $l(l+1)\hbar^2/2mr^2$?
- 2. Justifique a afirmação de que somente l = 0 é relevante para o espalhamento.
- 3. Obtenha a solução geral da equação de Schrödinger para a região $r < r_0, u_1(r)$.
- 4. Sem resolver explicitamente a equação para a região $r > r_0$, $u_2(r)$, mostre que esta solução deve satisfazer a relação

$$\frac{u_2'}{u_2} = \kappa \cot g(\kappa r) \,, \tag{3.59}$$

onde $\kappa^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2$.

5. Agora, suponha que $E \approx 0$ e mostre que a solução da equação de Schödinger para $r > r_0$ é da forma

$$u_2(r) = C(r-a), (3.60)$$

com C e a sendo parâmetros ajustados às condições iniciais e à condição de normalização da função de onda.

6. Usando os resultados anteriores, mostre que no espalhamento a energia extremamente baixa (também chamado espalhamento a energia nula), devemos ter a relação

$$\lim_{k \to 0} \kappa \cot g(\kappa r) = \frac{1}{r - a}$$
(3.61)

3.2 Mostre que o produto vetorial (3.24) deve ser definido de modo que $\hat{\theta} \times \hat{\varphi} = \hat{r}$ para que tenha a mesma paridade usualmente adotada em coordenadas cartesianas, $\hat{x} \times \hat{y} = \hat{z}$.

3.3 Mostre que as projeções dos versores esféricos sobre os eixos cartesianos são dadas por (3.26).

3.4 Calcule as derivadas dos versores esféricos (3.26) em relação a $\theta \in \varphi$.

3.5 Mostre que a equação (3.38) pode ser escrita na forma da equação (3.39) com a substituição $Y(\theta, \varphi) = \Phi(\varphi)\Theta(\theta)$.

3.6 Por que a equação (3.39) pode ser escrita na forma (3.40)?

3.7 Mostrar que a substituição da equação (3.43) na equação (3.42) leva à equação (3.44).

3.8 Mostrar que com a substituição de (3.45) em (3.42) obtemos (3.47).

3.9 Use $R(\rho) = J(\rho)/\sqrt{\rho}$ na equação (3.47) e mostre que a equação resultante para $J(\rho)$ é a equação (3.48).

Capítulo 4

Modelos Nucleares

O cálculo e a dedução de todas as propriedades nucleares a partir de "primeiros princípios" é uma tarefa muito complexa do ponto de vista prático. Isto porque o núcleo atômico é um sistema de muitas partículas, e a força entre elas é "muito complicada". Além disso, ainda não conhecemos completamente essas forças que agem entre os nucleons.

Para se contornar estes problemas e dificuldades, criam-se modelos nucleares que, embora não sejam teorias completamente fundamentadas da estrutura nuclear, servem para podermos compreender vários aspéctos dessa estrutura e para calcularmos muitas de suas propriedades.

Os modelos nucleares variam de acordo com a faixa de energia dos procesos de interese e do número de massa do núcleo estudado. De modo geral, podem ser agrupados em duas grandes classes: Modelos de partícula independente (MPI) e Modelos nucleares coletivos (MNC).

Nos MPI, supõe-se que as interações entre as partículas do núcleo são desprezíveis - o que só pode ser compreendido à luz do Princípio de Pauli. Nos MNC, por outro lado, considera-se que a interação entre elas é tão forte que não se pode considerar o movimento de cada partícula individualmente. Aqui já fica clara a importância da energia dos processos na escolha dos modelos, já que o bloqueio de Pauli é importante principalmente na faixa de pequenas energias de excitação, sendo menos efetivo em núcleos altamente excitados.

4.1 Modelo da Gota Líquida

4.1.1 Energia de ligação nuclear

A massa de um núcleo com Z prótons e N nêutrons não é simplesmente a soma das massas de prótons e nêutrons. Como os nucleons estão ligados, têm uma energia menor do que quando estão livres. Segundo a Teoria da Relatividade, a massa aumenta quando a energia cresce, e portanto os nucleons dentro do núcleo têm uma massa menor do que quando estão fora. A diferença de massas é

$$\Delta M = Zm_p + Nm_n - M(Z, A), \qquad (4.1)$$

onde m_p e m_n são, respectivamente, as massas do prótons e nêutron, e M(Z, A) é a massa de um núcleo com número atômico Z e número de massa A. Essa diferença de massas corresponde, portanto, à eergia de ligação nuclear,

$$B = \Delta M c^2 \,. \tag{4.2}$$

Usando o sistema de unidades naturais, onde $\hbar = c = 1$, temos $B = \Delta M$, e portanto,

$$B = Zm_p + Nm_n - M(Z, A).$$
(4.3)

Esta energia corresponde àquela que deve ser cedida ao núcleo para que ele se torne completamente fragmentado, isto é, cada nucleon fique completamente isolado dos demais.



Figura 4.1: Energia de ligação

4.1.2 Energias de Separação

A energia de separação é a energia mínima necessária para separar o último nucleon (aquele menos ligado) do núcleo. De acordo com o parágrafo anterior, e considerando que os prótons são mais ligados ao núcleo devido à barreira Coulombiana, podemos escrever

$$S_n = M(Z, N-1) + m_n - M(Z, N), \qquad (4.4)$$

ou, em termos de energia de ligação, temos

$$S_n = B(Z, N) - B(Z, N-1).$$
(4.5)

4.1.3 Fórmula Semi-Empírica de Massa: modelo da Gota Líquida

O embasamento fenomenológico para o modelo da gota líquida parte das seguintes propriedades, encontradas tanto no núcleo quanto numa gota de água:

a) densidade aproximadamente independente do volume;

b) energia de separação aproximadamente constante.

Devido à semelhança de propriedades entre os dois sistemas, procurou-se desenvolver um modelo nuclear em que este é considerado uma gota líquida. A energia de separação do núcleo é formada, então, pelos vários termos descritos a seguir.

- Termo de Volume: $a_v A$

A energia de ligação por partícula é aproximadamente constante, então a energia de ligação total é aproximadamente proporcional ao número de nucleons, A.

- Termo de superfície: $a_s A^{2/3}$

O termo de volume trata todos os nucleons como se estivesse igualmente ligados. Mas claramente isto não é verdadeiro, ao menos para os nucleons que se encontram próximos da superfície nuclear. Estes não estão completamente circundados por outros nucleons, já que não há nenhum deles além da superfície. Este termo deve ser proporcional ao número de nucleons que se encontram na superície, que, por sua vez, deve ser proporcional à área da superfície do núcleo, e portanto proporcional a R^2 que, por sua vez, é proporcional a $A^{2/3}$.

- Termo Coulombiano: $a_c \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}$

A energia coulombiana, para uma distribuição esférica com carga Z, é dada por

$$E_c = \frac{Z(Z-1)}{R} = \frac{Z(Z-1)}{A1/3}.$$
(4.6)

- Termo de Simetria: $a_{sim} \frac{(N-Z)^2}{A}$

Este termo garante que não haverá uma partícula (próton ou nêutron) preferencial, e o núcleo tenderá a ter números próximos de uma e de outra.



Figura 4.2: Diagrama de níveis para um núcleo com A = 11.

- Termo de Emparelhamento: δ

O emparelhamento de nucleons do mesmo tipo dentro do núcleo afeta a energia de ligação, podendo fazê-la aumentar, diminuir ou permanecer inalterada. Um único nucleon extra, próton ou neutron, é suficiente para que a energia de ligação deixe de ser influenciada pelo emparelhamento. Temos, então, as regras,

$$\delta = \begin{cases} 34A^{-3/4} & \text{MeV} & \text{impar-impar} \\ 0 & \text{MeV} & \text{impar-par ou par-impar} \\ -34A^{-3/4} & \text{MeV} & \text{par-par} \end{cases}$$
(4.7)

Juntando todos estes termos, a energia de separação nuclear fica

$$B(Z,A) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - a_{sim} \frac{(N-Z)^2}{A} - \delta.$$
(4.8)

Segundo Myers-Swiatecki, os coeficientes são (todos em MeV): $a_v = 15.68, a_s = 18.56, a_c = 0.717$ e $a_{sim} = 28.1$.

A massa nuclear pode ser calculada, então, como

$$M(Z,A) = Zm_p + Nm_n - B(Z,A)$$

$$\tag{4.9}$$

com B(Z, A) dada por (4.8). Esta é a fórmula semi-empírica de massa.

4.1.4 Parábolas de Massa e Estabilidade Beta

A maior parte dos nuclídeos conhecidos são instáveis, de modo que se transformam, conforme a meiavida de cada um, em nuclídeos diferentes por emissão ou absorção de partículas, processos que recebem os nomes de decaimento ou desintegração nuclear. Estes processos serão estudados mais detalhadamente no próximo capítulo. Neste momento, estamos interessados num processo que mantém o número de massa nuclear mudando a proporção de prótons e nêutrons dentro do núcleo. Este decaimento é a desintegração beta, que engloba três processos básicos:

a) Decaimento β^- (beta menos);

$$(Z, A) \to (Z+1, A) + e^- + \bar{\nu}_e$$
 (4.10)

b) Decaimento β^+ (beta mais);

$$(Z, A) \to (Z - 1, A) + e^+ + \nu_e$$
 (4.11)

c) Captura eletrônica;

$$(Z, A) + e^- \to (Z - 1, A) + \nu_e$$
 (4.12)

É fácil de ver, através da fórmula de massa nuclear, que para um mesmo número de massa, A, nuclídeos com diferentes valores para número atômico, Z, e número de nêutrons, N, terão massas diferentes. De fato, fórmula (4.9) pode ainda ser escrita como

$$M(Z,A) = xA + yZ + zZ^2 \pm \delta \tag{4.13}$$

 com

$$x \equiv m_n - a_v + a_{sim} + \frac{a_s}{A^{1/3}}$$

$$y \equiv -4a_{sim} - (m_n - m_p) - \frac{a_c}{A^{1/3}}$$

$$z \equiv \frac{4a_{sim}}{A} + \frac{a_c}{A^{1/3}}$$
(4.14)

A expressão (4.13) deixa evidente a dependencia da massa M(A, Z) em relação a Z quando A permanece constante. Para os cálculos a seguir convém explicitar o sinal de δ na fórmula de massa (4.13) para cada caso a ser discutido.

Quando se adiciona um terceiro eixo à tabela de nuclídeos (Figura 1.1) representando a massa, nota-se que a massa dos nuclídeos se encontra sobre parábolas, quando plotada com respeito a Z. Um núcleo tende a decair para um vizinho isóbaro de menor massa, por β^- , β^+ ou captura eletrônica. Os núcleos estáveis com relação a esses três processos são chamados núcleos beta-estáveis. Os núcleos de menor massa estão, portanto, no fundo das parábolas e são beta-estáveis.

É fácil demonstrar que o valor aproximado de Z que minimiza a massa é dado por (veja problema no final do capítulo)

$$Z_o = \frac{[4a_{sim} + (m_n - m_p)]A + a_c A^{2/3}}{8a_{sim} + 2a_c A^{2/3}}.$$
(4.15)

Aqui Z_o não é necessariamente um inteiro, portanto esta fórmula dá apenas uma aproximação do número atômico mais estável.

Parábolas para A-ímpar

Conforme (4.7), $\delta = 0$ para A-ímpar, de modo que há apenas uma parábola possível. Para um isótopo real, M(Z, A), temos

$$M(Z, A) - M(Z_0, A) = yZ + zZ^2 + zZ_0^2$$

= $-2zZ_0Z + zZ^2 + zZ_0^2$ (4.16)
$$M(Z, A) - M(Z_0, A) = z(Z - Z_0)^2$$

Para um processo de decaimento beta, temos

$$Q_{\beta} = M(Z, A) - M(Z \pm 1, A)$$
(4.17)

onde Z+1 se refere ao decaimento β^- , e Z-1 se refere ao decaimento β^+ . Usando a expressão parabólica para a massa, temos

$$Q_{\beta} = z(Z - Z_0)^2 + M(Z_0, A) - z[(Z \pm 1) - Z_0]^2 + M(Z_0, A)$$

= $z(Z^2 - 2ZZ_0 + Z_0^2) - z[(Z \pm 1)^2 - 2(Z \pm 1)Z_0 + Z_0^2]$
= $\mp 2zZ \pm 2zZ_0 - z$ (4.18)
$$Q_{\beta} = 2z \left[\pm (Z_0 - Z) - \frac{1}{2} \right]$$

Agora, temos que, se
$$Q_{\beta^-} > 0$$
 ou $M(Z, A) > M(Z+1, A)$ (4.19)

então, ocorrerá decaimento β^- de Z para Z + 1. Se

$$Q_{\beta^+} > 0$$
 ou $M(Z, A) > M(Z - 1, A)$ (4.20)

então, ocorrerá captura eletrônica de ${\cal Z}$ para ${\cal Z}-1.$ Ainda, se

$$Q_{\beta^+} > 1.02 MeV$$
 ou $M(Z, A) > M(Z - 1, A) + 2m_0$ (4.21)

onde m_0 é a massa de repouso do elétron, então ocorrerá decaimento de pósitron.

Para núcleos com A-ímpar, só pode existir portanto, um isóbaro estável, para o qual as transições beta já não ocorrem. Há duas excessões: A = 119 e A = 123. A Figura 4.3 mostra a parábola de massa para A-ímpar e um exemplo para A = 135.



Figura 4.3: Parábola de massa para A-ímpar e exemplo para A = 135.

Parábolas de Massa para A-par

Para o caso de núcleos com A-par, são geradas duas parábolas que diferem em valor de massa por 2δ . Em total analogia com o caso anterior, escrevemos

$$M(Z, A) - M(Z_0, A) = z(Z - Z_0)^2 + 2\delta$$
 ímpar-ímpar

$$M(Z, A) - M(Z_0, A) = z(Z - Z_0)^2$$
 par-par
(4.22)

E ainda,

$$Q_{\beta} = 2z \left[\pm (Z_0 - Z) - \frac{1}{2} \right] + 2\delta \qquad \text{impar-impar}$$

$$Q_{\beta} = 2z \left[\pm (Z_0 - Z) - \frac{1}{2} \right] - 2\delta \qquad \text{par-par} \qquad (4.23)$$

A condição para decaimento β^- é

$$Q_{\beta^-} > 0$$
 ou $M(Z, A) > M(Z+1, A)$ (4.24)

Para captura eletrônica, tem-se

$$Q_{\beta^+} > 0$$
 ou $M(Z, A) > M(Z - 1, A)$ (4.25)

E para decaimento β^+ ,

$$Q_{\beta^+} > 2m_0$$
 ou $Q_{\beta^+} > 10.2MeV$ ou $M(Z,A) > M(Z-1,A) + 2m_0$ (4.26)

Pode haver alguns isóbaros par-par que são estáveis, o que depende da curvatura das parábolas e da separação 2δ entre elas (Figura 4.4). O maior número de isóbaros achado na natureza é três. Não deveria haver núcleos tipo ímpar-ímpar estáveis, mas há, de fato, quatro excessões: ²H, ⁶Li, ¹⁰B e ¹⁴N. Isso se deve a variações rápidas das energias de ligação dos núcleos muito leves, devidas a efeitos de estrutura nuclear que não são explicados pelo modelo da gota líquida.

Certos nuclídeos tipo ímpar-ímpar podem inclusive decair tanto por processo β^- como β^+ .



Figura 4.4: Parábolas de massa para A-par e exemplo para A = 102.

4.2 Ressonâncias Gigantes

4.2.1 Modelo Goldhaber-Teller



Figura 4.5: Observação de ressonância gigante na curva da seção de choque.

No modelo GT, a ressonância gigante é considerada como uma oscilação dos fluídos formados por prótons e nêutrons. Uma força externa move um dos fluídos em relação ao outro, e uma força restauradora tende a reaproximá-los.

Neste modelo, a força restauradora é formada partir do termo de simetria na fórmula de massa,

$$E_{sim} = a_{sim} \frac{(N-Z)^2}{A} \tag{4.27}$$

com $a_{sim} \approx 20$ MeV.

A fórmula 4.27 não pode ser diretamente aplicada neste modelo, pois as regiões em que há quebra da simetria nas densidades de prótons e nêutrons os fluidos são formados por somente uma dessas partículas. A variação de energia para uma separação ξ entre os centros de massa de cada fluido é dada, etão, por

$$\Delta E = \phi(\rho_p + \rho_n) \Delta V = \phi(Z + N) \frac{\Delta V}{V}, \qquad (4.28)$$

onde ΔV é o volume onde há somente um tipo de partícula, que é dado aproximadamente por

$$\Delta V = \pi R^2 |\xi| \,. \tag{4.29}$$

Aqui estamos assumindo que o potencial ϕ seja linear nas densidades $\rho_{p,n}$, o que é uma hipótese razoável, como veremos abaixo. Com isto, temos

$$\Delta E = \frac{3}{4}\phi A \frac{|\xi|}{R} \,. \tag{4.30}$$



Figura 4.6: Esquema do movimento nuclear na ressonância gigante.

Esta expressão é linear em $|\xi|$, e portanto não leva à solução do tipo oscilador harmônico. Por isso, Golhaber e Teller simplesmente assumiram uma expressão

$$E_s = \frac{1}{2}k\xi^2\tag{4.31}$$

para ξ pequeno, com k determinado de modo a dar Δ , como calculado a partir de ?? para $\xi = \epsilon$, onde ϵ foi escolhido como sendo igual a 2 fm. Com isso temos

$$\frac{1}{2}k\epsilon^2 = \frac{3}{4}\phi A\frac{\epsilon}{R} \to k\epsilon = \frac{3}{4}\frac{\phi A}{R}.$$
(4.32)

Neste modelo, como cada um dos fluidos permanece na forma esférica, não precisamos introduzir variações da energia Coulombiana.

A energia ϕ é determinada como sendo aquela necessária para tirar um próton ou nêutron do núcleo no seu estado fundamental, ou seja,

$$-\phi = a_s \frac{(N-Z)^2}{A} - a_s \frac{(N-Z+1)^2}{A}, \qquad (4.33)$$

de onde resulta

$$\phi = \frac{a_s}{A},\tag{4.34}$$

e com isso temos

$$E_s = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{4} \frac{a_s}{\epsilon R} \right). \tag{4.35}$$

A frequência de oscilação é

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \qquad (4.36)$$

onde $\mu = ZNm/A$ é a massa reduzida do sistema formado pelo fluido de prótons e pelo fluido de nêutrons, com m sendo a massa do nucleon. Podemos obter k a partir de (4.32) e substituir em (4.36), de onde resulta a energia da ressonância de dipolo elétrico,

$$\hbar\omega = \hbar \sqrt{\frac{3}{4}} \frac{\phi}{\epsilon m} \sqrt{\frac{A}{ZNR}} \approx \frac{45}{A^{1/6}} MeV \,. \tag{4.37}$$

onde foi usado que $R = r_0 A^{1/3}$ e ϕ obtido em (4.34), além de valores para r_0 e para a_s obtidos fenomenologicamente.

4.2.2 Modelo de Steinwedel-Jensen

No modelo de SJ o núcleo é entendido como um corpo formado por dois fluidos, o de prótons e o de nêutrons, com densidades

$$\rho_n(\overrightarrow{r},t) = \rho_n^{(o)} - \eta(\overrightarrow{r},t)
\rho_p(\overrightarrow{r},t) = \rho_p^{(o)} + \eta(\overrightarrow{r},t),$$
(4.38)

 com

$$\int d^3r \eta(\vec{r}, t) = 0.$$
(4.39)

Com isso, a energia devido à simetria de prótons e nêutrons no núcleo fica

$$E_{s} = a_{s} \int d^{3}r \frac{(\rho_{n}(\vec{r},t) - \rho_{p}(\vec{r},t))^{2}}{\rho_{o}}.$$
(4.40)

 Como

$$\rho_n - \rho_p = \rho_n^{(o)} - \rho_p^{(o)} - 2\eta \to (\rho_n - \rho_p)^2 = (\rho_n^{(o)} - \rho_p^{(o)})^2 - 4(\rho_n^{(o)} - \rho_p^{(o)})\eta + 4\eta^2, \qquad (4.41)$$

 $ent \tilde{a} o$

$$\int d^3r \frac{(\rho_n - \rho_p)^2}{\rho_o} = \int d^3r \frac{(\rho_n^{(o)} - \rho_p^{(o)})^2}{\rho_o} - 4\frac{N - Z}{A} \int d^3r \eta(\vec{r}, t) + \frac{4}{\rho_o} \int d^3r \eta^2(\vec{r}, t) \,. \tag{4.42}$$

O primeiro termo do lado direito é simplesmente uma constante igual à energia de simetria do núcleo no estado fundamental,

$$\int d^3 r \frac{(\rho_n^{(o)} - \rho_p^{(o)})^2}{\rho_o} = \frac{(N - Z)^2}{A}, \qquad (4.43)$$

enquanto que o segundo é nulo, pela própria definição de $\eta(\vec{r}, t)$, e assim, a energia é dada por

$$E_s = E_s^{(o)} + \frac{4}{\rho_o} \int d^3 r \eta^2(\vec{r}, t) , \qquad (4.44)$$

onde

$$E_s^{(o)} = \frac{(N-Z)^2}{A} \,. \tag{4.45}$$

A variação da energia depende, portanto, inteiramente de $\eta(\vec{r}, t)$.

A energia cinética é dada por

$$T = \frac{m}{2} \int d^3 r (\rho_p |\overrightarrow{v_p}|^2 + \rho_n |\overrightarrow{v_n}|^2) , \qquad (4.46)$$

onde $\overrightarrow{v_p}$ e $\overrightarrow{v_n}$ são as velocidades dos fluxos de prótons e nêutrons, respectivamente, na posição \overrightarrow{r} no instante t.

Transformando para as velocidades relativa e do centro-de-massa, temos

$$\vec{v}(\vec{r},t) = \vec{v}_p(\vec{r},t) - \vec{v}_n(\vec{r},t)$$

$$\vec{V}(\vec{r},t) = [\rho_p(\vec{r},t)\vec{v}_p(\vec{r},t) + \rho_n\vec{v}_n(\vec{r},t)]/\rho_o,$$
(4.47)

e a energia cinética fica

$$T = \frac{m}{2} \int d^3 r (\rho_o V^2 + \rho_{red} v^2) , \qquad (4.48)$$

onde

$$\rho_{red} = \frac{\rho_p \rho_n}{\rho_p - \rho_n} = \frac{\rho_p^o \rho_n^o}{\rho_o} + \frac{\rho_n^o - \rho_p^o}{\rho_o} \eta - \frac{\eta^2}{\rho_o}$$
(4.49)

é a densidade reduzida.

Considerando $\vec{V} = 0$ e tomando apenas o primeiro termo na expressão para a densidade reduzida, temos

$$T = \frac{m}{2} \frac{ZN}{A^2} \int d^3 r \, v^2 \,. \tag{4.50}$$

4.2. RESSONÂNCIAS GIGANTES

Com a energia cinética dada acima, e com a energia potencial obtida anteriormente, temos a Lagrangiana

$$L = \frac{m}{2} \frac{ZN}{A^2} \rho_o \int d^3 r \, v^2 - \frac{4a_s}{\rho_o} \int d^3 r \, \eta^2 \,. \tag{4.51}$$

A esta Lagrangiana devemos acrescentar o vínculo da conservação do número de partículas,

$$\frac{\partial \rho_{p,n}}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla} . (\rho_{p,n} \overrightarrow{v_{p,n}}) = 0, \qquad (4.52)$$

que deve satisfazer a condição de contorno

$$\overrightarrow{r}.\overrightarrow{v_{p,n}}|_{|\overrightarrow{r}|=R_o} = 0.$$
(4.53)

Para o caso dos prótons, podemos escrever a equação 4.52, até primeira ordem, como

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} = \frac{\partial \eta}{\partial t} = -\overrightarrow{\nabla} \cdot [(\rho_p^o + \eta)\overrightarrow{v_p}] \approx -\rho_p^o \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{v_p} = -\frac{ZN}{A^2} \rho_o \overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{v} \,. \tag{4.54}$$

Podemos, agora, minimizar a Lagrangiana 4.51, aplicando o método variacional, que resulta

$$\delta \int dt \int d^3r \left(\frac{m}{2} \frac{ZN}{A^2} \rho_o v^2 - \frac{4a_s}{\rho_o} \eta^2 \right) = 0.$$
 (4.55)

Definindo \overrightarrow{s} como o vetor posição relativa do próton em relação ao nêutron, temos

$$\vec{v} = \frac{\partial \vec{s}}{\partial t}, \qquad (4.56)$$
$$\delta \vec{v} = \frac{\partial \delta \vec{s}}{\partial t}.$$

A partir destas igualdades, e usando a equação 4.54, obtemos

$$\delta \frac{\partial \eta}{\partial t} = -\frac{ZN}{A^2} \rho_o \overrightarrow{\nabla} \cdot \frac{\partial \overrightarrow{s}}{\partial t} , \qquad (4.57)$$

e portanto

$$\delta\eta = -\frac{ZN}{A^2}\rho_o \overrightarrow{\nabla}\delta\overrightarrow{s} . \tag{4.58}$$

Voltando à equação 4.55, agora usando os resultados 4.56 e 4.57, temos

$$\delta \int dt L = \int dt \int d^3r \left(\frac{m}{2} \frac{ZN}{A^2} \rho_o 2v \delta v - \frac{4a_s}{\rho_o} 2\eta \delta \eta \right) =$$

$$= \int dt \int d^3r \left(m \frac{ZN}{A^2} \rho_o \frac{\partial \overrightarrow{s}}{\partial t} \frac{\partial \delta \overrightarrow{s}}{\partial t} + 8a_s \frac{ZN}{A^2} \eta \overrightarrow{\nabla} . \delta \overrightarrow{s} \right) = 0.$$

$$(4.59)$$

 Como

$$\frac{\partial \overrightarrow{s}}{\partial t} \frac{\partial \delta \overrightarrow{s}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \overrightarrow{s}}{\partial t} \cdot \delta \overrightarrow{s} \right) - \frac{\partial^2 \overrightarrow{s}}{\partial t^2} \cdot \delta \overrightarrow{s} , \qquad (4.60)$$

е

$$\eta \overrightarrow{\nabla} . \delta \overrightarrow{s} = \overrightarrow{\nabla} . (\eta \delta \overrightarrow{s}) - (\overrightarrow{\nabla} \eta) . \delta \overrightarrow{s} , \qquad (4.61)$$

e notando que

$$\int dt \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \overrightarrow{s}}{\partial t} \cdot \delta \overrightarrow{s} \right) = \left[\frac{\partial \overrightarrow{s}}{\partial t} \cdot \delta \overrightarrow{s} \right]_{-\infty}^{\infty} = 0, \qquad (4.62)$$

e que

$$\int d^3r \,\overrightarrow{\nabla}(\eta \delta \,\overrightarrow{s}) = \int_A da(\eta \delta \,\overrightarrow{s}) = 0 \tag{4.63}$$

para a superfície ${\cal A}$ suficientemente grande, segue

$$\int dt \int d^3r \left(-m \frac{ZN}{A^2} \rho_o \frac{\partial^2 \overrightarrow{s}}{\partial t^2} - 8a_s \frac{ZN}{A^2} \overrightarrow{\nabla} \eta \right) \cdot \delta \overrightarrow{s} = 0.$$
(4.64)

 $\operatorname{Portanto}$

$$m\frac{ZN}{A^2}\rho_o\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -8a_s\frac{ZN}{A^2}\vec{\nabla}\eta\,. \tag{4.65}$$

Com este resultado, a equação de continuidade, 4.52, pode ser reescrita como

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = -\frac{\partial}{\partial t} \overrightarrow{\nabla} . (\rho \overrightarrow{v}) \approx -\frac{ZN}{A^2} \rho_o \frac{\partial}{\partial t} \overrightarrow{\nabla} . \overrightarrow{v} , \qquad (4.66)$$

onde foi usada a equação 4.54. Daqui segue

$$\frac{\partial}{\partial t} \overrightarrow{\nabla} . \overrightarrow{v} = -\frac{A^2}{ZN} \frac{1}{\rho_o} \frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2}, \qquad (4.67)$$

e portanto, tomando-se o divergente da equação 4.65, temos

$$m\frac{ZN}{A^2}\rho_o\frac{\partial}{\partial t}\overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{v} = -m\frac{ZN}{A^2}\rho_o\frac{A^2}{ZN}\frac{1}{\rho_o}\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2} = -8a_s\frac{ZN}{A^2}\overrightarrow{\nabla}\eta, \qquad (4.68)$$

e assim, finalmente,

$$m\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2} = -8a_s\frac{ZN}{A^2}\overrightarrow{\nabla}^2\eta\,,\tag{4.69}$$

que é uma equação de onda para a flutuação de densidade, ou seja,

$$\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\eta}{\partial t^2} = \overrightarrow{\nabla}^2\eta, \qquad (4.70)$$

 com

$$u^2 = \frac{ZN}{A^2} \frac{8a_s}{m} \,. \tag{4.71}$$

A solução usual para esta equação é

$$\eta(\overrightarrow{r},t) = \eta(\overrightarrow{r})e^{i\omega t}, \qquad (4.72)$$

onde $\eta(\overrightarrow{r})=\eta(\overrightarrow{r},0)$ deve satisfazer a equação de Helmholtz,

$$\nabla^2 \eta + k^2 \eta = 0, \qquad (4.73)$$

cuja solução é bem conhecida, e dada por

$$\eta_{klm}(r) = Bj_l(kr)Y_{lm}(\hat{r}), \qquad (4.74)$$

com $k = \omega/c$. Devemos ainda impor a condição de contorno correspondente à superfície estacionária, isto é, a velocidade da matéria nuclear deve ser nula na superfície nuclear, o que, a partir da equação 4.65, corresponde a

$$\hat{r}\overrightarrow{v_p}|_{r=R_o} = 0 \rightarrow \hat{r}\overrightarrow{\nabla}\eta|_{r=R_o} = 0 \rightarrow j'_l(kR_o) = 0.$$

$$(4.75)$$

Usando valores típicos, $a_s=23~{\rm MeV},\,l=1,$ temos $kR\approx 2.08,$ e então

$$\hbar\omega = \hbar u k \approx \hbar \sqrt{\frac{ZN}{A^2} \frac{8a_s}{m}} \frac{2.08}{1.2A^{1/3}} (fm^{-1}), \qquad (4.76)$$

onde usamos $R=1.2A^{1/3}$ fm, resultando

$$\hbar\omega = \sqrt{\frac{4ZN}{A^2}} \frac{76,5}{A^{1/3}}.$$
(4.77)

O termo d
entro da raiz varia lentamente com A, e se reduz a 1 prar
a $\rm Z=N.$ Assim, a energia da ressonância gigante depende aproximadamente d
e $A^{-1/3}$, o que está de acordo co as observações experimentais.

4.3 Modelo do Gás de Fermi

Neste modelo o núcleo é considerado como um gás ideal, onde os nucleons fazem o papel de átomos ou moléculas do gás. Devemos ter sempre em mente, porém, que os nucleons são partículas de spin 1/2, e portanto obedecem á esatística de Fermi-Dirac. As partículas são pouco interagentes (gás ideal), sendo a interação com a "parede nuclear" a mais significativa. Como o raio nuclear é muito pequeno, os níveis de energia são bastante espaçados, e por isso, transições nucleares são mais energéticas do que as atômicas, por exemplo.

Os estados de cada partícula podem ser facilmente calculados a partir da hipótese de que o núcleo seja uma caixa cúbica, dentro da qual os nucleons se movem livremente, colidindo com as paredes duras (potencial infinito) da caixa, que correspondem aos limites físicos do espaço disponível a essas partículas. Neste caso, a equação de Schrödinger independente do tempo se reduz a

$$H\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \qquad (4.78)$$

onde $H = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2$.

Como consideramos o núcleo cúbico, é conveniente escrever

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(x)\Psi(y)\Psi(z), \qquad (4.79)$$

que, substituída na equação 1, resulta

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial_i}\Psi_i = E_i\Psi_i\,,\tag{4.80}$$

onde i = x, y, z.

As condições de contorno são dadas pelo fato de os nucleons não poderem sair da caixa, isto é, a função de onda deve se anular nas paredes do núcleo. Então $\Psi_x(0) = \Psi_x(L)$, onde L é o comprimeto das arestas da caixa cúbica que forma o núcleo neste modelo. O mesmo ocorre para as funções dependentes de $y \in z$.

Com estas condições de contorno, as soluções da equação de Schödinger são

$$\Psi_x = A_x sen(k_x x), \qquad (4.81)$$

onde $k_x = n_x \pi/L$, com $n_x = 1, 2, ...$ Para as equações em $y \in z$ a solução é idêntica, e a função de onda completa fica

$$\Psi(\vec{r}) = Asen(k_x x)sen(k_y y)sen(k_z z).$$
(4.82)

A energia dos estados nucleares é dada por

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},\tag{4.83}$$

onde $k^2 = k_x^2 + k_z^2 + k_z^2$. A constante de normalização, A, é calculada impondo-se a condição

$$|\Psi|^{2} = 1 \rightarrow A^{2} \int_{0}^{L} sen^{2} k_{x} x, \int_{0}^{L} sen^{2} k_{y} y, \int_{0}^{L} sen^{2} k_{z} z = 1, \qquad (4.84)$$

de onde resulta $A = (2/L)^{3/2}$. Finalmente, podemos escrever

$$\Psi(\overrightarrow{r}) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} sen(k_x x) sen(k_y y) sen(k_z z) \,. \tag{4.85}$$

Os estados do sistema são, portanto, caracterizados pelos números quânticos n_x , n_y , n_z . Graficamente, estes estados podem ser representados como na figura 4.7. Cada ponto no espaço de fase representa um estado. Cada cubo nesse espaço tem 8 estados, mas por outro lado, cada ponto pertence a 8 cubos diferentes. Assim, é possível fazer uma relação 1 para 1 entre cubos e estados (por exemplo, podemos relacionar cada cubo ao estado correspondente aos menores n_x , n_y , e n_z , encontrado entre os estados que o formam; é fácil ver, observando a figura 4.7, que esta regra mapeia um único estado para um único cubo). Assim, a densidade de estados por volume do espaço de fase é igual ao inverso do volume do cubo



Figura 4.7: Diagrama do espaço de fase.

correspondente a um estado, e como v = 1 (o volume é adimensional!), segue que a densidade corresponde a um estado por unidade de volume.

Podemos usar uma esfera de raio ρ , centrada na origem, para contarmos o número de estados acesíveis em função de ρ . Como $n_{x,y,z}$ são sempre positivos, devemos nos restringir ao octante do espaço correspondente aos valores positivos dos números quânticos. Como o volume da esfera é $V = 4\pi\rho^3/3$, o volume útil para a contagem dos estados será $\Omega = V/8 = \frac{\pi}{6}\rho^3$, de onde segue que

$$\frac{d\Omega}{d\rho} = \frac{\pi}{2}\rho^2 \to d\Omega = \frac{\pi}{2}\rho^2 d\rho.$$
(4.86)

O momento correspondente a cada estado é dado por $p^2 = k^2 \hbar^2$, portanto

$$p^{2} = (n_{x}^{2} + n_{y}^{2} + n_{z}^{2}) \left(\frac{\pi\hbar}{L}\right)^{2} \to \rho = \frac{L}{\pi\hbar}p.$$
(4.87)

Como a densidade de estados é igual a 1, temos

$$dn = \frac{\pi}{2} \left(\frac{L}{\pi\hbar}\right)^3 p^2 dp \,. \tag{4.88}$$

Podemos relacionar, ainda, $n \in E$, a energia do nível, da seguinte forma:

$$E = \frac{p^2}{2m} \to p^2 = 2mE \to 2pdp = 2mdE \to pdp = mdE$$
(4.89)

ou

$$dp = \frac{mdE}{\sqrt{2mE}} \,. \tag{4.90}$$

Assim temos

$$dn = \frac{\pi}{2} \left(\frac{L}{\pi\hbar}\right)^3 2mE \frac{mdE}{\sqrt{2mE}} \to dn = \frac{\pi}{2} \left(\frac{L}{\pi\hbar}\right)^3 m\sqrt{2mE} dE \,, \tag{4.91}$$

ou $dn = CL^3\sqrt{E}dE$, onde $C = m^{3/2}/(\sqrt{2}\pi^2\hbar^3)$.

Sendo E_f a energia do último estado ocupado, comumente chamada de energia de Fermi, o número total de níveis ocupados será dado por

$$n = \int_0^{E_f} CL^3 \sqrt{E} dE = \frac{2}{3} CL^3 E_f^{3/2}, \qquad (4.92)$$

ou ainda

$$n = \frac{\sqrt{2}}{3} \frac{m^{3/2} L^3}{\pi^2 \hbar^3} E_f^{3/2} \,. \tag{4.93}$$

4.3. MODELO DO GÁS DE FERMI

O princípio de Pauli nos príbe de colocarmos 2 partículas idênticas no mesmo nível. Assim, no caso do núcleo atômico, podemos colocar um próton e um nêutron no mesmo nível, mas nunca dois prótons ou dois nêutrons. Os níveis que consideramos até agora são definidos pelos números quânticos n_i , mas devemos considerar também o spin do nucleon para distinguirmos um estado do outro. Neste caso, como os nucleons têm spin 1/2, podemos colocar dois prótons e dois nêutrons em cada um dos níveis obtidos neste modelo. Vamos considerar o caso de um tipo de partícula apenas, com spin 1/2: o número total de partículas que podem ser colocadas até o nível de Fermi, E_f , será

$$n_p = \frac{(2m)^{3/2} L^3 E_f^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3}, \qquad (4.94)$$

e daqui podemos obter a relação entre energia de Fermi e densidade nuclear, isto é,

$$E_f = \frac{(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2}{(2m)} \left(\frac{n_p}{L^3}\right)^{2/3}$$
(4.95)

onde n_p/L^3 é a densidade partículas no núcleo.

Concluímos, portanto, que a energia de Fermi depende apenas da densidade nuclear, e não do tamanho do núcleo ou dos seus números atômico ou de massa. Como a densidade nuclear é aproximadamente constante ao longo da tabela periódica, resulta que **a energia de Fermi é aproximadamente a mesma para todos os núcleos!**.

Podemos fazer uma avaliação da energia de Fermi a partir de uma estimativa do raio nuclear: $L^3 = (4\pi/3)r_o^3 A$. Daqui segue que a densidade de partículas é

$$\frac{n_p}{L^3} = \left(\frac{4}{3}\pi r_o^3\right)^{-1}.$$
(4.96)

Substituindo-se este resultado na expresão para a energia de Fermi, e usando o valor empírico para r_o , temos $E_f \sim 30$ MeV.

Deste resultado, por outro lado, podemos fazer uma estimativa da profundidade do poço de potencial nuclear, pois sabemos que a energia de separação de nêutrons, B_n , também é aproimadamente constante ao longo da tabela periódica, tendo o valor $B_f \sim 8$ MeV. Observando a figura 4.8, vemos que o fundo do poço deve ser $V_o \sim 40$ MeV.



Figura 4.8: Diagrama do poço de potencial nuclear.

4.3.1 Ensemble Canônico

Seja P_j a probabilidade de encontrar o sistema S num estado microscópico j, e $\Omega_R(E)$ o número de microsestados do reservatório R à energia E. Sendo E_0 a energia total do sistema composto R + S, e sendo E_j a energia do sistema S no estado j, segue que



Figura 4.9: Esquema da relação entre reservatório e sistema no ensemble canônico.

$$E = E_0 - E_j \tag{4.97}$$

é a energia de R.

Supondo que as probabilidades de ocupar os microestados sejam iguais, podemos escrever

$$P_j = c\Omega_R(E_0 - E_j) \tag{4.98}$$

Em geral $E_0 \gg E_j,$ então podemos expandir P_j na série

$$\ln P_{j} = \ln c + \ln \Omega_{R}(E_{0}) + \frac{\partial \ln \Omega_{R}(E)}{\partial E} \Big|_{E=E_{0}} (-E_{j}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \ln \Omega_{R}(E)}{\partial E^{2}} \Big|_{E=E_{0}} (-E_{j})^{2} + \dots$$
(4.99)

Agora usamos o postulado da Mecânica Estatística que define a entropia,

$$\frac{\partial \left[ln \,\Omega_R(E) \right]}{\partial E} = \frac{1}{k_B T} \tag{4.100}$$

Como a temperatura do reservatório é considerada constante, temos

$$\frac{\partial^2 \left[ln \,\Omega_R(E) \right]}{\partial E^2} = 0. \tag{4.101}$$

Então podemos concluir que

$$\ln P_j = C - \frac{E_j}{k_B T},\tag{4.102}$$

o que nos leva à importante relação

$$P_j = A e^{-\beta E_j},\tag{4.103}$$

 com

$$\beta = \frac{1}{k_B T}.\tag{4.104}$$

Como as probabilidades ${\cal P}_j$ devem ser normalizadas, segue que

$$A = \frac{1}{\sum_{j} e^{-\beta E_j}} = Z^{-1} \tag{4.105}$$

 com

$$Z = \sum_{k} e^{-\beta E_j} \tag{4.106}$$

sendo chamada função de partição.

De forma geral, existem vários estados microscópicos j com a mesma energia. Então, podemos escrever

$$Z = \sum_{E} \Omega(E) e^{-\beta E}$$
(4.107)

onde $\Omega(E)$ é a função de degeneres cência. Podemos então escrever

$$Z = \sum_{E} e^{-\beta [E - k_B T \ln \Omega]} = \sum_{E} e^{-\beta [E - TS]}$$
(4.108)

Daqui segue que Ztem seu valor máximo quando F=E-TSé mínimo. A função Fé a energia de Helmholtz.

4.3.2 Ensemble Grande-Canônico

No ensemble grande-canônico, além de troca de energia entre o sistema e o reservatório, há também troca de partículas. Então a probabilidade P_j fica

$$P_j = c\Omega_R (E_0 - E_j, N_0 - N_j), \tag{4.109}$$

mas ainda temos $E_j \ll E_0$
e $N_j \ll N_0.$ Portanto podemos fazer a expansão

$$\ln P_{j} = \ln c + \ln \Omega_{R}(E_{0}, N_{0}) + \frac{\partial \ln \Omega_{R}(E, N)}{\partial E} \Big|_{\substack{E=E_{0}\\N=N_{0}}} (-E_{j}) + \frac{\partial \ln \Omega_{R}(E, N)}{\partial N} \Big|_{\substack{E=E_{0}\\N=N_{0}}} (-N_{j}) + \dots \quad (4.110)$$

De acordo com os postulados da Mecânica Estatística, temos as relações

$$\frac{\partial \ln \Omega_R}{\partial E} = \frac{1}{k_B T} \qquad e \qquad \frac{\partial \ln \Omega_R}{\partial N} = -\frac{\mu}{k_B T}$$
(4.111)

onde μ é o potencial químico do reservatório. Portanto, temos

$$\ln P_j = C - \frac{E_j}{k_B T} + \frac{\mu N_j}{k_B T},$$
(4.112)

e usando o fato de P_j ser normalizado, segue

$$P_{j} = \frac{e^{-\beta(E_{j} - \mu N_{j})}}{\Xi}$$
(4.113)

 com

$$\Xi = \sum_{j} e^{-\beta(E_j - \mu N_j)} \tag{4.114}$$

4.3.3 Fator de Boltzman

Há várias semelhanças entre as funções de partição dos ensembles canônico e grande-canônico que não são meramente formais. Podemos deixar essas semelhanças mais evidentes reescrevendo essas funções de partição em termos de um elemento comum chamado fator de Boltzman.

Vamos começar pela função de partição do ensemble canônico,

$$Z = \sum_{j} e^{-\beta E_j} \tag{4.115}$$

onde E_j é a energia do microestado j. Esse microestado é caracterizado pela distribuição de N partículas do gás entre os M possíveis estados de partícula do gás, ou seja, por uma n-tupla

$$\{n\}_{i} = \{n_{1}, n_{2}, \dots, n_{M}\}$$

$$(4.116)$$

onde n_1, n_2, \dots são o número de partículas em cada estado de partícula independente. Sejam $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_k, \dots, \varepsilon_M$ as energias que cada partícula nesses estados carregam. Então a energia do microestado j é

$$E_j = \sum_k n_k \varepsilon_k, \tag{4.117}$$

então podemos escrever a função Z na forma

$$Z = \sum_{j} exp\left[-\beta \sum_{k} n_k \varepsilon_k\right] = \sum_{j} \prod_{k} exp\left[-\beta n_k \varepsilon_k\right]$$
(4.118)

Observe que quando mudamos do microestado j para o microestado j', o número de partículas no estado de partícula independente, n_k , também pode mudar para $n'_k \neq n_k$. Além disso, no limite termodinâmico $N \to \infty$ e então os n_k são completamente independentes, isto é, fixados os valores de $n_1, n_2, \dots n_{k-1}, n_{k+1}, \dots, n_M$, podemos ter para n_k qualquer valor entre $0 \in \infty$.

Com isso podemos fatorar a expressão para Z na forma

$$Z = \prod_{k=0}^{M} \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \varepsilon_k n} \right]$$
(4.119)

Vamos ver agora o caso do ensemble grande-canônico. Aqui temos

$$\Xi = \sum_{j} e^{-\beta(E_j - \mu N_j)} \tag{4.120}$$

e novamente, temos

$$E_j = \sum_k n_k \varepsilon_k \tag{4.121}$$

para n_k pertencente à n-tupla n_{kj} . Obviamente também temos

$$N_j = \sum_k n_k \tag{4.122}$$

Então, com N_j podendo variar entre 0 e ∞ , temos

$$\Xi = \prod_{k=0}^{M} \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n} \right]$$
(4.123)

4.3.4 Gás Ideal Quântico

O ingrediente importante na estatística de sistemas quânticos é a simetria (bósons) ou a anti-simetria (férmions) da função de onda. Por exemplo, para um gás de duas partículas com função de onda $\Psi_1(\vec{r_1})$ e $\Psi_2(\vec{r_2})$, temos duas funções de onda que podemo ser

$$\Psi_S(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_1(\vec{r_1}) \Psi_2(\vec{r_2}) + \Psi_1(\vec{r_2}) \Psi_2(\vec{r_1}) \right]$$
(4.124)

 \mathbf{e}

$$\Psi_A(\vec{r_1}, \vec{r_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_1(\vec{r_1}) \Psi_2(\vec{r_2}) - \Psi_1(\vec{r_2}) \Psi_2(\vec{r_1}) \right]$$
(4.125)

que são as funções simétrica e anti-simétrica, respectivamente.

Daqui segue que dois férmions não podem ocupar o mesmo estado, já que nesse caso $\Psi_A \equiv 0$. Já no caso de bósons, um número ilimitado de partículas podemo ocupar o mesmo estado. Este resultado tem implicações importantes na estatística dessas partículas.

Gás de Férmions

Para férmions a função de partição no ensemble grande-canônico é

$$\Xi = \prod_{k=0}^{M} \left[\sum_{n} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n} \right]$$
(4.126)

mas agora, devido à anti-simetria da função de onda, n pode assumir somente os valores 0 e 1. Então

$$ln\Xi = \sum_{k} ln \left[e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1 \right]$$
(4.127)

Gás de Bósons

No caso dos bósons não há limitação no número de partículas em cada estado, então a somatória na equação para a função de partição é feita para n variando de 0 a ∞ . Agora notemos que a função

$$f(x) = (1 - x)^{-1} \tag{4.128}$$

tem sua n-ésima derivada dada por

$$f^{(n)}(x) = n!(1-x)^{-(n+1)}$$
(4.129)

e, portanto, a expansão em série de Taylor de f(x) é

$$f(x) = 1 + x + x^2 + \dots \tag{4.130}$$

Substituindo x por $e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}$, segue que

$$\left[1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right]^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n}$$
(4.131)

Com este resultado, a função de partição para o gás ideal de bósons fica

$$\Xi = \prod_{k} \left[1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right]^{-1} \tag{4.132}$$

e, então

$$ln \Xi = -\sum_{k} ln \left[1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)} \right]$$
(4.133)

Número de Ocupação Médio

A partir de Ξ podemos obter o número médio de partículas que ocupam o estado k. Observe que

$$ln \Xi = \sum_{k} ln \left[\sum_{n} e^{-\beta(\varepsilon_{k} - \mu)n} \right]$$
(4.134)

então, derivando essa expressão em relação
a ε_k temos

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} ln \Xi = \frac{\sum_n (-\beta) n e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n}}{\sum_n e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n}}$$
(4.135)

e, portanto

$$-\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial\varepsilon_k}\ln\Xi = \langle n_k \rangle \tag{4.136}$$

com o valor médio do número de partículas no estado k dado por

$$\langle n_k \rangle \equiv \frac{\sum_k n e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n}}{\sum_k e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)n}} \tag{4.137}$$

Com isso podemos calcular o número de ocupação para gases de férmions e de bósons. Para bósons segue que

$$\langle n_k \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \left\{ -\sum_k \ln\left[1 - e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)}\right] \right\}$$
(4.138)

 $ent \tilde{a} o$

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} - 1} \tag{4.139}$$

No caso de férmions temos, pelo mesmo procedimento

$$\langle n_k \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_k - \mu)} + 1} \tag{4.140}$$

Por ora estamos mais interessados no gás de férmions, então nos restringiremos ao estudo do gás de Fermi. Toda a análise que será feita aqui pode ser facilmente extendida ao caso dos bósons.

No limite termidinâmico, podemos relacionar o valor esperado da energia do gás à energia interna do gás, então

$$U = \sum_{k} \langle n_k \rangle \,\varepsilon_k \tag{4.141}$$

Do mesmo modo, o número total de partículas fica dado por

$$N = \sum_{k} \langle n_k \rangle \tag{4.142}$$

Até o momento não consideramos o spin a partícula nas estatísticas desenvolvidas. Podemos facilmente incorporar o spin levando em conta que partículas com spins diferentes são diferenciáveis, isto é, pertencem a estados distintos. Levando isto em conta teremos

$$\Xi = \sum_{j} e^{-\beta\gamma(E_j - \mu N_j)} \tag{4.143}$$

onde $\gamma = 2s + 1$, sendo s o spin da partícula.

A partir dessas expressões obtemos, no limite termodinâmico,

$$N = \gamma \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\vec{k} \left[exp\left(\frac{\beta\hbar^2k^2}{2m} - \beta\mu\right) + 1 \right]^{-1}$$
(4.144)

 \mathbf{e}

$$U = \frac{\gamma V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{k} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left[exp\left(\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m} - \beta \mu\right) + 1 \right]^{-1}$$
(4.145)

onde foi usada a energia da partícula,

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad \text{com} \qquad k = \frac{L}{2\pi} \tag{4.146}$$

sendo L o comprimento da região onde o gás está contido e $V = L^3$.

Expansão do Sommerfeld

Vimos que a energia interna de um gás de férmions é dada por

$$U = \int D(\varepsilon)\sigma_{\beta}(\mu - \varepsilon)d\varepsilon$$
(4.147)

onde

$$\sigma_{\beta}(x) = \frac{1}{e^{-\beta(x)} + 1}$$
(4.148)

é uma função conhecida como função sigmó
ide, devido à forma carcaterística do gráfico $\sigma(x) \times x$

A função $D(\varepsilon) = C\sqrt{\varepsilon}$ tem um comportamento suave para todos os valores $\varepsilon > 0$. Essas características das funções $D(\varepsilon)$ e $\sigma(\mu - \varepsilon)$ permitem fazermos uma expansão de $U(T, V, \mu)$ que possibilita calcular facilmente a integral da equação para a energia interna do gás.

De fato, intergrando por partes temos

$$U = [F(\varepsilon)\sigma_{\beta}(\mu - \varepsilon)]_{\varepsilon=0}^{\varepsilon=\infty} - \int_{0}^{\infty} F(\varepsilon)\sigma_{\beta}'(\mu - \varepsilon)d\varepsilon$$
(4.149)

onde

$$F(\varepsilon) = \int_0^\infty D(\varepsilon') d\varepsilon'$$
(4.150)



Figura 4.10: Gráficos da função sigmóide (a) e de sua derivada (b).

Como $\sigma'(x)$ apresenta um pico pronunciado na vizinhança de x = 0, sendo aproximadamente nula fora dessa região, segue que a principal contribuição para a intergral vem dessa vizinhança em torno de x = 0.

No caso do problema que estamos tratando, isso significa que podemos expandir $F(\varepsilon)$ na região $\varepsilon - \mu$, isto é,

$$F(\varepsilon) \approx F(\mu) + \frac{\partial F(\mu)}{\partial \varepsilon} \varepsilon + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F(\mu)}{\partial \varepsilon^2} \varepsilon^2 + \dots$$
(4.151)

Com
o $\sigma'(\varepsilon)$ é simétrica em torno de $\varepsilon=\mu,$ segue que a contribuição do termo linear
na integração é nulo. Por isso temos

$$U(T) = A(\mu) + B(\mu)T^{2} + \dots$$
(4.152)

onde

$$A(\mu) = \frac{\gamma V}{10\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \mu^{5/2}$$
(4.153)

e

$$B(\mu) = \frac{\gamma V}{16} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{7/5} \mu^{1/2} k_B^2$$
(4.154)

Portanto, a energia interna pode ser escrita em função da temperatura T, como

$$U(T) = aT^2 \tag{4.155}$$

onde a é uma constante chamada parâmetro de densidade de níveis.

4.3.5 Temperatura nuclear

De acordo com a Mecânica Estatística para sistemas fermiônicos, a temperatura de um desses sistemas pode ser definida por

$$E = \frac{\pi^2}{4} (A - Z) \frac{(kT)^2}{\mu_o} = aT^2.$$
(4.156)

Fazendo $\mu_o=p_{max}^2/(2m),$ sendo ma massa do nucleon. Aqui p_{max} dado por

$$E_f^{3/2} = \left(\frac{p_{max}^2}{2m}\right)^{3/2},\tag{4.157}$$

e como, considerando um sistema de N partículas,

$$E_f = \frac{(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2}{(2m)} \left(\frac{n_p}{L^3}\right)^{2/3}$$
(4.158)

e $E_f = p_f^2/(2m)$, podemos escrever

$$p_f = (3\pi^2)^{1/3} \hbar \left(\frac{N}{L^3}\right)^{1/3}.$$
(4.159)

Portanto, para prótons temos

$$p_f^{(p)} = (3\pi^2)^{1/3} \hbar \left(\frac{Z}{L^3}\right)^{1/3}, \qquad (4.160)$$

e para nêutrons

$$p_f^{(n)} = (3\pi^2)^{1/3} \hbar \left(\frac{A-Z}{L^3}\right)^{1/3}.$$
(4.161)

Agora, usando $L^3 = (4\pi/3)r_o^3 A$, temos que a energia total (soma das energias de prótons e nêutrons) é

$$E_t = 0.07A^{2/3}(Z^{1/3} + (A - Z)^{1/3})(kT)^2(MeV).$$
(4.162)

4.3.6 Modelo de Partícula Independente

Os modelos de partícula independente usam o conceito de potencial médio, formado pela soma dos potencias gerados por cada nucleon. Devido à saturação do potencial nuclear, dentro do núcleo esse potencial médio é aproximadamente constante, diminuindo, em módulo, suavemente à medida que se aproxima da superfície nuclear. Fora do núcleo o potencial é nulo.

Há várias formas para o potencial nuclear médio, sempre central, que são geralmente utilizadas, entre elas temos

1) Poço quadrado: V(r) dado por

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r \leqslant R\\ 0 & \text{se } r > R \end{cases}$$

$$(4.163)$$

onde R é o raio nuclear. Este potencial tem a vantegam de ser prático devido à facilidade nos cálculos.

2) Potencial Harmônico:

$$V(r) = \frac{m\omega^2}{2}r^2\tag{4.164}$$

que não se anula para r > R.

3) Potencial de Woods-Saxon:

$$V(r) = \frac{-V_0}{1 + exp\left[r - \frac{R}{a}\right]}$$

$$(4.165)$$

que é um potencial mais realista, mas não leva a funções de onda analíticas, dificultando os cálculos.

Em geral as solução para a equação radial não são analíticas, sendo então expressas em termos de séries polinomiais bem conhecidas, como por exemplo as funcções esféricas de Besse, Neumann ou Hankel. Como exemplo, vamos tratar aqui do caso de um potencial harmônico (4.164).



Figura 4.11: Autovalores de energia de neutrons em função do número de massa A.

4.4 Modelo de Partícula Independente com Potencial Harmônico

A equação da parte radial (3.44) fica

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left\{\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{m^2 \omega^2 r^2}{\hbar^2}\right] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\} u = 0.$$
(4.166)

Vamos introduzir o comprimento

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \tag{4.167}$$

e fazer a substituição de variáveis $r \rightarrow \xi = r/a$. Com esta substituição a equação acima fica

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - \left[\xi^2 + \frac{l(l+1)}{\xi} - 2\epsilon\right]u(\xi) = 0, \qquad (4.168)$$

onde

$$\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \,. \tag{4.169}$$

Agora definimos os números $s \in n$ tais que

$$l(l+1) = 4s(s-1/2) \tag{4.170}$$

 \mathbf{e}

$$\epsilon = 2(n+s+1/4), \qquad (4.171)$$

e fazemos outra substituição de variáveis, $\xi \to z = \xi^2.$ Com isso a equação (4.168) fica na forma

$$z\frac{d^{2}u}{dz^{2}} + \frac{1}{2}\frac{du}{dz} + \left[2\epsilon - z - \frac{l(l+1)}{z}\right]u = 0.$$
(4.172)

Vamos escrever a função u(z) na forma

$$u(z) = \epsilon^{-z/2} z^s W(z) , \qquad (4.173)$$

que subsituída na equação (4.172) resulta em

$$z\frac{d^2W}{dz^2} + \left(2s + \frac{1}{2} - z\right)\frac{dW}{dz} + nW = 0..$$
(4.174)

As soluções desta equação são as Funções Confluentes Hypergeométricas, que são conhecidas e se encontram nas tabelas de funções matemáticas, assim como as de Bessel, Neumann, Hankel, etc. Então temos

$$W(z) = F(-n, 2s - 1/2; z).$$
(4.175)

Como sempre acontece, os níveis de energia são obtidos a partir das condições de contorno, e neste caso a condição relevante é que para $z \to \infty$ a função $W(z) \to 0$. Para que isso ocorra devemos ter $n = 0, 1, 2, \dots$ Substituíndo n na equação (4.171) e usando a equação (4.170), obtemos os níveis de energia para o potencial harmônico,

$$E_{nl} = (2n + l + 3/2)\hbar\omega.$$
(4.176)

Podemos ver que as energias dependem de dois números quânticos, $n \in l$, mas combinados na relação $\Lambda = 2n + l$, de forma que os níveis de energia são igualmente espaçados, isto é, são múltiplos inteiros de $\hbar\omega/2$.

Neste caso conseguimos obter uma expressão analítica para os níveis de energia, o que nem sempre é possível. Nem mesmo para o caso do poço de potencial os níveis podem ser obtidos analiticamente.



Figura 4.12: Ordem dos níveis de energia de acordo com o modelo de partícula independente com várias hipóteses da forma do potencial nuclear.

4.5 Acoplamento Spin-Órbita

O que se observa é que o modelo de camadas não reproduz corretamente os números mágicos nucleares. Por isso um novo termo foi introduzido no potencial, acoplando o spin do nucleon e o seu momento angular. Este potencial tem a forma

$$V_{SL} = f(r)\vec{\mathbf{s}} \cdot \vec{\mathbf{l}} \tag{4.177}$$

e como o momento angular total, $\vec{\mathbf{J}}$, é

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{l}} + \vec{\mathbf{s}} \tag{4.178}$$

temos

$$\vec{\mathbf{J}}^{2} = (\vec{\mathbf{l}} + \vec{\mathbf{s}}^{2}) = \vec{\mathbf{l}}^{2} + \vec{\mathbf{s}}^{2} + 2\vec{\mathbf{s}} \cdot \vec{\mathbf{l}}$$
(4.179)

 Como

$$(\vec{\mathbf{J}})^{2} = j(j+1)\hbar^{2}$$

$$(\vec{\mathbf{l}})^{2} = l(l+1)\hbar^{2}$$

$$(\vec{\mathbf{s}})^{2} = s(s+1)\hbar^{2}$$

(4.180)

segue que

$$\vec{\mathbf{s}} \cdot \vec{\mathbf{l}} = \frac{\hbar^2}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right]$$
(4.181)



Figura 4.13: Energia de alguns níveis de partícula única em função do parâmetro de distorção do modelo de Nilsen.

Exercícios e Problemas

4.1 Usando a fórmula de massa (4.9), demosntre que para um dado número atômico A, o isótopo com menor massa é aquele com número atômico Z mais próximo de Z_o dado pela expressão (4.15).

4.2 A partir da equação (4.33) mostre que a energia ϕ para tirar um próton ou nêutron do núcleo é dada pela equação (4.34).

4.3 Mostre que, quando consideramos o spin, obtemos

$$\Xi = \sum_{j} e^{-\beta\gamma(E_j - \mu N_j)} \tag{4.182}$$

no ensemble grande-canônico. Obtenha a expressão correspondente para o ensemble canônico.

4.5. ACOPLAMENTO SPIN-ÓRBITA

- **4.4** Obtenha as expressões para $N \in U$ dadas acima a partir de Ξ .
- **4.5** Sendo $\langle n_{\mu} \rangle'$ a derivada de $\langle n_k \rangle$ para os estados com energia $\varepsilon_k = \mu$, isto é,

$$\langle n_{\mu} \rangle' = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_k} \langle n_k \rangle (\varepsilon_k = \mu),$$
(4.183)

mostre que a temperatura do gás de Fermi é dada por

$$T = \frac{1}{k_B \langle n_\mu \rangle'} \tag{4.184}$$

- **4.6** Obtenha explicitamente U(T) usando a expansão de Sommerfeld até ordem T^2 .
- **4.7** Mostre que com a substituição $\xi \rightarrow z = \xi^2$ e usando

$$u(z) = \epsilon^{-z/2} z^s W(z), \qquad (4.185)$$

obtem-se a equação para W(z) dada por (4.174).

4.8 Obtenha a solução geral para um modelo de partícula independente usando o poço de potencial. Obtenha os níveis de energia para os casos l = 0 e l = 1.

4.9 Encontre a equação para a função de onda na borda de um poço quadrado finito com raio r_0 e profundidade V_0 (caso geral, l não necessariamente igual a zero). Use as relações entre as funções de Bessel para obter um expressão conveniente para os cálculos. Encontre a diferença de energia entre os estados 1s e 1p quando $V_0 = 45$ MeV e $r_0 = 4$ fm.

4.10 Use teoria de perturbação para calcular a separação spin-órbita dos estados 1p, 1d e 1f do modelo de camadas para um núcleo com A = 20. O potencial spin-órbita é dado por

$$V_{SL} = -a_{S0}^2 \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \vec{s} \cdot \vec{l}$$
(4.186)

onde a_{S0} é um fator determinado experimentalmente como aproximadamente 1 fm e V é um potencial central. Use um poço quadrado com $V_0 = 40$ MeV e $r_0 = 1.4A^{1/3}$ fm.

No cálculo perturbativo, assuma que a inclinação do poço em $r = r_0$ é finita, ou seja, $V = -V_0$ em $r = r_0$ e V = 0 para $r = r_0 + \Delta$.

Capítulo 5

Interações Entre Sistemas Quânticos

5.1 A regra de ouro de Fermi

A equação de Schrödinger dependente do tempo é

$$H\varphi = i\hbar \frac{\partial\varphi}{\partial t}\,,\tag{5.1}$$

e uma solução para esta equação é do tipo

$$\varphi_n = u_n(\overrightarrow{x})e^{-iE_nt/\hbar}.$$
(5.2)

A esta solução se aplica a condição de ortonormalidade,

$$\int d^3x \, u_m^*(\vec{x}) u_n(\vec{x}) = \delta(mn) \,. \tag{5.3}$$

O operador Hamiltoniano deve representar a parte cinética e a parte de interação. É conveniente separarmos explicitamente estas duas partes, escrevendo $H = H_o + H_{int}$, sendo que H_o tem como autovetores as soluções φ_n definidas acima. A equação de Schrödinger fica

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = (H_o + H_{int})\Psi.$$
(5.4)

Podemos escrever

$$\Psi = \sum_{n} a_n(t)\varphi_n(t), \qquad (5.5)$$

já que os φ_n formam uma base no espaço de Hilbert. Substituindo-se Ψ na equação de Schrödinger, temos

$$i\hbar\sum_{n}\dot{a}_{n}u_{n}e^{-iE_{n}t/\hbar} + \sum_{n}E_{n}a_{n}u_{n}e^{-iE_{n}t/\hbar} = \sum_{n}a_{n}(H_{o} + H_{int})u_{n}e^{-iE_{n}t/\hbar}.$$
(5.6)

Como φ_n é autovetor de H_o temos

$$i\hbar\sum_{n} \dot{a}_{n} u_{n} e^{-iE_{n}t/\hbar} = \sum_{n} a_{n} H_{int} u_{n} e^{-iE_{n}t/\hbar} \,.$$
(5.7)

Multiplicando-se, pela esquerda, por $u_N^* e^{iE_N t/\hbar}$, e integrando-se em todo o espaço, temos

$$i\hbar\dot{a}_N = \sum_n a_n \int d^3x \, u_N^* e^{iE_N t/\hbar} \, H_{int} \, u_n e^{-iE_n t/\hbar} \,, \tag{5.8}$$

e portanto

$$\dot{a}_N = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n \langle N | H_{int} | n \rangle e^{i(E_N - E_n)t/\hbar} , \qquad (5.9)$$

onde

$$\langle N|H_{int}|n\rangle = \int u_N^*(\overrightarrow{x}) H_{int} u_n(\overrightarrow{x}) d^3x \,.$$
(5.10)

Se no instante inicial, t = 0, quando a interação H_{int} é "ligada", o sistema se encontra em um único auto-estado $|\alpha\rangle$, então, para um instante t próximo de t_o teremos $a_{\alpha} \approx 1$ e $a_n \ll 1$ para $n \neq \alpha$. Então a equação 5.9 fica

$$\dot{a}_N(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle N | H_{int} | \alpha \rangle e^{i(E_N - E_\alpha)t/\hbar} , \qquad (5.11)$$

e para qualquer instante t = T pequeno temos

$$a_N(T) = \frac{1}{i\hbar} \langle N | H_{int} | \alpha \rangle \frac{\hbar}{i(E_N - E_\alpha)} \left[e^{i(E_N - E_\alpha)T/\hbar} - 1 \right]$$
(5.12)

e portanto

$$a_N(T) = \frac{\langle N | H_{int} | \alpha \rangle}{E_N - E_\alpha} \left(1 - e^{i(E_N - E_\alpha)T/\hbar} \right).$$
(5.13)

A probabilidade de se encontrar o sistema, que inicialmente estava no estado $|\alpha\rangle$, num estado $|N\rangle$ no instante T é

$$P_{N\alpha}(T) = |a_n(T)|^2 = \frac{|\langle N|H_{int}|\alpha\rangle|^2}{(E_N - E_\alpha)^2} \left(2 - e^{-i(E_N - E_\alpha)T/\hbar} - e^{i(E_N - E_\alpha)T/\hbar}\right),$$
(5.14)

que pode ser reescrito como

$$P_{N\alpha}(T) = 4 \frac{|\langle N|H_{int}|\alpha\rangle|^2}{(E_N - E_\alpha)^2} sen^2 \left[\frac{(E_N - E_\alpha)T}{2\hbar}\right].$$
(5.15)



Figura 5.1: Probabilidade de transição $P_{N\alpha}$ em função de ΔE .

Este resultado mostra que a probabilidade de transição decresce com o inverso do quadrado de $\Delta E = E_N - E_{\alpha}$. Na figura 5.1 mostramos um gráfico de $P_{N\alpha}$ em função de ΔE , onde fica mais clara a dependência da probabilidade de transição em razão da diferença de energias dos estados envolvidos na transição.

Se em torno do estado $|\alpha\rangle$ existe uma alta densidade de estados, como ilustra a figura 5.2, podemos sempre achar um estado tal que ΔE seja suficientemente pequeno ($|\Delta E| < 2\pi\hbar/T$) para que esta probabilidade seja relevante mesmo para intervalos de tempo T razoavelmente grandes, como ocorre nas condições experimentais.

Podemos então calcular a probabilidade de transição entre o estado inicial $|\alpha\rangle$ e qualquer outro estado $|N\rangle$ como

$$P_{\alpha} = \sum_{N} P_{N\alpha}(T) \,. \tag{5.16}$$

Como estamos considerando uma região de alta densidade de estados, fazemos $\Sigma_N \rightarrow \int dE \rho$, onde $\rho = \frac{dN}{dE}$ é a densidade de estados em torno do estado inicial. Com isso temos

$$P_{\alpha}(T) = \int dE \, 4 \frac{|\langle N|H_{int}|\alpha\rangle|^2}{(E_N - E_{\alpha})^2} sen^2 \left[\frac{(E_N - E_{\alpha})T}{2\hbar}\right] \rho \,. \tag{5.17}$$



Figura 5.2: Níveis em torno no estado $|\alpha\rangle$.

Como $1/(E_N - E_\alpha)^2$ tende a zero rapidamente, a contribuição relevante para a integral acima vem principalmente dos estados $|N\rangle$ com energias próximas a E_α . Nessa região, consideramos ρ aproximadamente constante, e $\langle N | H_{int} | \alpha \rangle = \langle \beta | H_{int} | \alpha \rangle$ também aproximadamente constante. Então temos

$$P(T) = 4|\langle \beta | H_{int} | \alpha \rangle|^2 \rho \frac{T^2}{(2\hbar)^2} \frac{2\hbar}{T} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{sen^2 x}{x^2} dx, \qquad (5.18)$$

onde fizemos a substituição $E \to x = (E - E_{\alpha})T/(2\hbar)$, e finalmente obtemos

$$P(T) = \frac{2\pi T}{\hbar} |\langle \beta | H_{int} | \alpha \rangle|^2 \rho.$$
(5.19)

Definindo a taxa de transição w como a variação da probabilidade de transição com o tempo, $w = \frac{dP}{dT}$, temos

$$w_{\beta\alpha} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta | H_{int} | \alpha \rangle|^2 \rho \,. \tag{5.20}$$

Este resultado é conhecido como Regra de Ouro de Fermi, e tem uma importância fundamental na mecânica quântica. No entanto, só pode ser aplicado nos casos em que o sistema apresenta níveis discretos, quando $E_N \neq E_{\alpha}$. Quando os sistemas apresentam estados contínuos a regra de ouro de Fermi não pode ser aplicada. No próximo capítulo desenvolveremos uma teoria que se aplica a estes casos.

5.2 Oscilações de Rabi em sistemas de 2 estados

Um exemplo interessante de aplicações da regra de ouro de Fermi é o problema das oscilações de Rabi num sistema de dois estados. Sistemas como esse são encontrados em vários campos da Física, como por exemplo a interação entre campo eletromagnético e átomo em cavidade ressonante. Basicamente o problema é formado por um sistema de dois estados, $|1\rangle e |2\rangle$, que interage com um potencial externo tal que

$$V|n\rangle = \begin{cases} \gamma e^{iwt} |2\rangle; \ se \ |n\rangle = |1\rangle\\ \gamma e^{-wt} |1\rangle, \ se \ |n\rangle = |2\rangle \end{cases}$$

O hamiltoniano completo é dado por

$$H = H_0 + V$$

com ${\cal H}_0$ tal que

 $H_0 |n,t\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n,t\rangle$

$$H_0|n,t\rangle = E_n |n,t\rangle$$

de modo que

$$|n,t\rangle = |n\rangle \ e^{iw_n t}$$

 ${\rm onde}$

e

$$w_n = \frac{E_n}{\hbar}$$

 \mathbf{e}

Vamos inicialmente trabalhar com um número
$$n$$
 de estados arbitrário, e posteriormente nos restringire-
mos a $n = 2$. Um estado qualquer do sistema pode ser escrito como

 $|n\rangle = |n, t = 0\rangle$

$$\psi = \sum_{n} C_n (t) |n, t\rangle,$$

A equação de Schrödinger fica então

$$H \ \psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$$

O lado esquerdo dessa equação pode ser expandido na forma

$$H \ \psi = (H_0 + V) \sum_n C_n \ (t) \ |n, t\rangle = \sum_n C_n \ (t) \ H_0 |n, t\rangle + \sum_n C_n \ (t) \ V |n, t\rangle$$
(5.21)

O lado direito da equação de Schrödinger também pode ser expandido, de modo que

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_{n} \frac{\partial}{\partial t} [C_n(t) \mid n, t\rangle] = \sum_{n} C_n(t) \mid n, t\rangle + \sum_{n} C_n(t) \frac{\partial}{\partial t} \mid n, t\rangle$$

Usando

$$H_0|n,t\rangle=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|n,t\rangle$$

na equação para a derivada em relação ao tempo, temos

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \sum_{n} C_{n} |n, t\rangle + \sum_{n} C_{n} \frac{i}{\hbar} H_{0} |n, t\rangle$$
(5.22)

Substituindo (5.21) e (5.22) na equação de Schrödinger temos

$$\sum_{m} C_m H_0 |m,t\rangle + \sum_{m} C_m V |m,t\rangle = -i\hbar \sum_{n} \dot{C}_n |n,t\rangle + \sum_{n} C_n H_0 |n,t\rangle$$

Na expressão acima deixamos de indicar explicitamente a dependência temporal de $C_m(t)$. Vemos que a primeira somatória do lado esquerdo cancela a última somatória do lado direito. Resulta que

$$\sum_{m} \dot{C}_{m} |m,t\rangle = \sum_{n} \frac{i}{\hbar} C_{n} V |n,t\rangle$$
(5.23)

Vamos agora estudar a ação de V sobre o sistema. Temos

$$V|n,t\rangle = \sum_{n'} |n',t\rangle \langle n',t|V|n,t\rangle$$

e como

$$|n,t\rangle = |n\rangle e^{iw_n t}$$

 \mathbf{e}

$$\langle n', t | = e^{-iw_{n'}t} \langle n' |$$

então segue que

$$V|n,t\rangle = \sum_{n'} e^{i(w_n - w_{n'})t} \langle n'|V|n\rangle |n'\rangle$$
(5.24)

Substituindo (5.24) e (5.23) temos

$$\sum_{m} \dot{C}_{m} |m,t\rangle = \frac{-i}{\hbar} \sum_{n} \sum_{n'} C_{n} e^{iw_{n'n}t} \langle n'|V|n\rangle |n',t\rangle, \qquad (5.25)$$

Agora vamos restringir o ssitema aos dois estados apenas. Temos

$$|n\rangle = \left\{ \begin{array}{c} |1\rangle \\ |2\rangle \end{array} \right.$$

 \mathbf{e}

$$\begin{cases} V|1\rangle = \gamma e^{iwt}|2\rangle \\ V|2\rangle = \gamma e^{-iwt}|1\rangle \end{cases}$$

 $ent \tilde{a} o$

$$\begin{cases} V|1,t\rangle = e^{iw_{12}t}\gamma e^{iwt}|2\rangle \\ V|2,t\rangle = e^{iw_{21}t}\gamma e^{-iwt}|1\rangle \end{cases}$$

Usando as igualdades acima na equação (5.25) obtemos duas equações diferenciais acopladas

$$\dot{C}_1 = \frac{-i\gamma}{\hbar} C_2 \ e^{i(w_{21}+w)t} \tag{5.26a}$$

$$\dot{C}_2 = \frac{-i\gamma}{\hbar} C_1 \ e^{i(w_{12}-w)t}$$
 (5.26b)

Da equação (5.26a) segue que

$$C_2 = \frac{i\hbar}{\gamma} \dot{C}_2 \ e^{+i(w_0 - w)t}$$
(5.27)

e portanto, derivando essa equação em relação ao tempo obtemos

$$\dot{C}_2 = \frac{i\hbar}{\gamma} \left[\ddot{C}_1 e^{i(w_0 - w)t} + i(w_0 - w)e^{i(w_0 - w)t} \right]$$

Substituindo a equação acima na equação (5.26a) temos

$$\ddot{C}_1 + i(w_0 - w)\dot{C}_1 + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}C_1 = 0$$
(5.28)

A solução dessa equação é da forma

 $C_1(t) = e^{i\lambda t}$

e substituindo $C_1(t)$ na equação (5.28) segue que λ pode assumir os valores

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(-\Delta \pm \sqrt{\Delta^2 + 4\frac{\gamma^2}{\hbar^2}} \right)$$
(5.29)

onde $\Delta = w - w_0$.

A solução geral para $C_1(t)$ fica então

$$C_1(t) = C_+ \ e^{i\lambda_+ t} + C_- \ e^{i\lambda_- t}$$

e usando a equação (5.27), segue que

$$C^{2} = \frac{-i\hbar}{\gamma} \left[\lambda_{+} C_{+} e^{i\lambda_{+}t} + \lambda_{-} C_{-} e^{i\lambda_{-}t} \right]$$
(5.30)

Agora usamos a condição inicial, $C_1(0) = 1 \in C_2(0) = 0$ para determinar $C_+ \in C_-$. Temos

$$C_2(0) = 0 \Rightarrow \lambda_+ C_+ \lambda_- C_- = 0$$

e

$$C_1(0) = 0 \Rightarrow C_+ + C_- = 1$$

Dessas equações temos

$$C_{+} = \frac{-\lambda_{-}}{\lambda_{+} - \lambda_{-}}$$
$$C_{-} = \frac{\lambda_{+}}{\lambda_{+} - \lambda_{-}}$$

e substituindo λ_+ e λ_- chegamos em

$$C_{+} = \frac{\frac{-\Delta}{2}}{\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}} + 1$$
$$C_{-} = \frac{\frac{-\Delta}{2}}{\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}} - 1$$

Note porém que a expressão para $C_2(t)$ adquire uma forma mais simples, já que

$$C_2(t) = \frac{-i\hbar}{\gamma} \left(\lambda_+ C_+ e^{i\lambda_+ t} + \lambda_- C_- e^{i\lambda_- t} \right)$$

e como

$$\lambda_{+}C_{+} = \frac{-\lambda_{+}\lambda_{-}}{\lambda_{+} - \lambda_{-}}$$
$$\lambda_{-}C_{-} = \frac{\lambda_{+}\lambda_{-}}{\lambda_{+} - \lambda_{-}}$$

Segue que

$$\lambda_{+}C_{+} = -\lambda_{-}C_{-}$$

$$\frac{\lambda_{+} \lambda_{-}}{\lambda_{+} - \lambda_{-}} = \frac{\hbar^{2}}{\sqrt{\frac{\Delta^{2}}{4} + \frac{\gamma^{2}}{\hbar^{2}}}}$$

Com isso podemos escrever

$$C_2(t) = \frac{i\frac{\gamma}{\hbar}}{\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}} \left(e^{i\lambda_+ t} - e^{i\lambda_- t}\right)$$

sendo que esta expressão ainda pode ser simplificada para

$$C_2(t) = \frac{i\frac{\gamma}{\hbar} e^{-i\frac{\Delta}{2}t}}{\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}} \left(e^{iDt} - e^{-iDt}\right),$$

onde

$$D = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}$$

Daqui segue que

$$e^{iDt} - e^{-iDt} = 2i \ senDt$$

e portanto

$$C_2(t) = \frac{\frac{\gamma}{2\hbar} e^{i\frac{\Delta}{2}t} senDt}{\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}}.$$

A probabilidade de observar o sistema no estudo e no instante t é então

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\frac{\gamma^2}{4\hbar^2}sen^2(Dt)}{\frac{\Delta^2}{4} + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}}$$

já que a função é normalizada. Obviamente teremos

$$|C_2(t)|^2 = 1 - |C_2(t)|^2$$

A amplitude $C_1(t)$ ainda pode ser obtida a partir da equação (5.26b).

Ao usarmos a regra de ouro no problema de oscilações de Rabi devemos tomar cuidado em não aplicar diretamente a equação 5.20 ou 5.12. De fato, estas equações são obtidas a partir da integração no tempo da equação 5.11 supondo que H_{int} é independente do tempo, o que não é o caso neste problema.

Devemos então partir de 5.11,

$$\dot{a}_2(t) = \frac{-i}{\hbar} \langle 2|H_{int}|1\rangle e^{i\omega_{21}t}$$
(5.31)

 com

$$\langle 2|H_{int}|1\rangle = \gamma e^{-i\omega t},\tag{5.32}$$

portanto,

$$\dot{a}_2(t) = \frac{-i\gamma}{\hbar} e^{i(\omega_{21}-\omega)t}.$$
(5.33)

Agora podemps integrar essa expressão para obter

$$a_{2}(t) = \frac{-i\gamma}{\hbar} \frac{1}{\omega_{21} - \omega} \left[e^{i(\omega_{21} - \omega)t} - 1 \right]$$
(5.34)

Daqui podemos calcular $|a_2(t)|^2$. Usando a identidade trigonométrica $1 - \cos(2\alpha) = 2sen^2\alpha$ obtemos

$$|a_2(t)|^2 = \frac{4\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}{(\omega_{21} - \omega)^2} sen^2\left(\frac{\omega_{21} - \omega}{2}t\right)$$
(5.35)

Comparando este resultado com o resultado exato,

$$|C_2(t)|^2 = \frac{\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} sen^2 \left[\left(\frac{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + (\omega - \omega_{21})^2}{4} \right)^{1/2} t \right]$$
(5.36)

vemos que as duas soluções não coincidem. Porém, supondo que o potencial $V \rightarrow 0$, isto é, $\gamma \rightarrow 0$, temos

$$|c_2(t)|^2 \approx \frac{4\frac{\gamma^2}{\hbar^2}}{(\omega - \omega_{21})^2} sen^2 \left[\left(\frac{\omega - \omega_{21}}{2} \right) t \right]$$
 (5.37)

que é resultado idêntico àquele obtido usando a regra de ouro. A equação acima foi obtida anteriormente através de argumentos heurísticos, resultando na Regra de Ouro de Fermi.

Exercícios

- **5.1** Para $t = \frac{\pi}{2D}$, faça o gráfico da probabilidade $P_2(t)$ em função de w. Interprete o resultado.
- **5.2** Para $\Delta = 0$, $\frac{\gamma}{2\hbar}$, $\frac{\gamma}{\hbar} e^{\frac{2\gamma}{\hbar}}$, faça o gráfico de $C_2(t)$ vs. t. Interprete os resultados.

5.3 A partir da expressão $a_n(t) = \frac{T_{sn}e^{i(\omega_{sn}-i\alpha)t}}{\hbar(\omega_{sn}+i\alpha)}$ obtenha a Regra de Ouro de Fermi para V independente do tempo. T_{sn} é o operador relacionado à transição entre diferentes estados, e $a_n(t)$ é o coeficiente da expansão do estado final (depois da interação).

Capítulo 6

Decaimentos

6.1 Decaimento Alfa

Existem núcleos que são emissores naturais de radiação alfa. Isto ocorre devido a uma vantagem energética na emissão da partícula alfa, obtendo-se no estado final um núcleo mais estável. O diagrama da Figura 6.1 ilustra a transição de energia do núcleo inicial, (A, Z) de massa M_i , ao emitir a partícula e formar o núcleo (A - 4, Z - 2) de massa M_f .



Figura 6.1: Diagrama da transição de energia do núcleo (A, Z).

Antes da emissão supomos o núcleo em repouso, então a energia inicial é

$$E_i = M_i c^2 \tag{6.1}$$

Após a emissão da alfa, a energia final é

$$E_f = M_f c^2 + M_{\alpha} c^2 + T_f + T_{\alpha}$$
(6.2)

onde T_f e T_{α} são as energias cinéticas do núcleo final e da partícula alfa, respectivamente.

Como a energia liberada é tipicamente muito menor do que a massa da partícula alfa, podemos desprezar correções relativísticas e escrever as equações cinéticas como

$$T_f = \frac{p_f^2}{2M_f}$$

$$T_\alpha = \frac{p_\alpha^2}{2M_\alpha}$$
(6.3)

Por conservação de momento temos $p_f^2=p_\alpha^2,$ então

$$T_f + T_\alpha = \frac{M_{\alpha + M_f}}{M_f} T_\alpha$$

$$E_f = M_f c^2 + M_\alpha c^2 + Q$$
(6.4)

 sendo

$$Q = \frac{M_{\alpha} + M_f}{M_f} T_{\alpha} \tag{6.5}$$

a energia liberada no decaimento.

Naturalmente,

$$Q = (M_i - M_f)c^2 \tag{6.6}$$

então é possível determinar Q a partir da fórmula de massa.

6.1.1 Taxa de Decaimento

Um modelo simples da decaimento alfa foi proposto por Gamov, onde se supõe que a partícula seja pré-formada no interior do núcleo ao qual fica ligada por um potencial, V(r) (Figura 6.2), que combina o potencial nuclear entre o núcleo (A - 4, Z - 2) e a alfa.



Figura 6.2: Potencial nuclear.

Num modelo simplificado, supomos a partícula α sujeita a um potencial constante dentro do núcleo e ao potencial Coulombiano fora do núcleo de raio R. A partícula pode escapar do núcleo por tunelamento da barreira, e a probabilidade de escape é dada pela expressão obtida através da aproximação WKB (Capítulo 7), sendo $P = e^{-\gamma}$ com

$$\gamma = \frac{2}{\hbar} \int_{R}^{a} \left[2m(V(x) - Q) \right]^{1/2} dx$$
(6.7)

Então, a cada vez que a partícula alfa chega na superfície do núcleo, ela tem probabilidade P de escapar, e 1 - P de permanecer dentro do núcleo.

A taxa de decaimento pode ser calculada, num modelo semi-clássico, multiplicando a probabilidade de escape pela freqüência com que chega à superfície nuclear. Essa freqüência pode ser estimada por

$$f \approx \frac{v}{R} \tag{6.8}$$

onde vé a velocidade com que a partícula α se move dentro do núcleo. Portanto, a taxa de decaimento, $w_{\alpha},$ é

$$w_{\alpha} \approx \frac{v}{R} e^{-\gamma} \tag{6.9}$$

O expoente γ é calculado a partir da equação (6.7), usando o potencial Coulombiano

$$V(r) = \frac{2Ze^2}{r} \tag{6.10}$$

e portanto

$$\gamma = \frac{2}{\hbar} \int_{R}^{b} \left[2mE\left(\frac{2Ze^{2}/E}{r} - 1\right) \right]^{1/2} dr$$
(6.11)

onde b é tal que

68

$$E = \frac{2Ze^2}{b} \tag{6.12}$$

Portanto

$$\gamma = \frac{2\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{R}^{b} \left(\frac{b}{r} - 1\right)^{1/2} dr$$
(6.13)

6.2 Decaimento Beta e Captura Eletrônica

É conhecido o decaimento do nêutron no vácuo através de interação fraca,

$$n \to p + \beta^- + \nu_e \tag{6.14}$$

Este processo também ocorre no inteior do núcleo, mas neste caso depende da existência de estados fermiônicos desocupados para o próton.

O processo inverso,

$$p \to n + \beta^+ + \bar{\nu}_e \tag{6.15}$$

chamado decaimento β^+ , também pode ocorrer no interior do núcelo, embora seja desfavorecido energeticamente no vácuo. Finalmente, um processo puramente atômico é a captura eletrônica, na qual um elétron que orbita próximo ao núcleo é capturado por este. Neste capítulo vamos estudar estes processos usando uma teoria bastante simples proposta por Fermi.

6.2.1 Análise do Diagrama Energético

Considere um átomo com número atômico Z - 1 e número de massa A. Na Figura ...a mostramos os esquemas de níveis para prótons e nêutrons, e a seta preta indica a possível transição para um estado menos energético através do decaimento β^- , formando um núcleo com número atômico Z.

Na Figura ...b vemos a situação oposta, com A e Z + 1. Neste caso a transição favorecida é para o núcelo (A,Z) através de decaimento β^+ ou por captura eletrônica.

Para que o processo ocorra devemos ter a conservação de energia total, isto é,

$$E_i = E_f + E_\beta + E_\nu \tag{6.16}$$

sendo $E_{\beta,\nu}$ no contínuo para o decaimento $\beta,$ ou

$$E_i = E_f + \Delta E^{eletr} + E_\nu \tag{6.17}$$

onde

$$\Delta E^{eletr} = E_f^{eletr} - E_i^{eletr} \tag{6.18}$$

é a variação de energia devido à mudança na configuração eletrônica na captura do elétron. Em geral este elétron vem da camada K, que apresenta maior densidade próxima ao núcleo, mas pode ocorrer captura de elétrons de outras camadas também.

Tanto o elétron quanto o netrino apresentam massas muito pequenas quando comparadas às energias dos nucleons, então devemos utilizar a expressão da energia relativística, e assim temos

$$E_{\beta} = \sqrt{p_{\beta}^2 c^2 + m_{\beta}^2 c^4} \tag{6.19}$$

para elétron ou pósitron, e

$$E_{\nu} = \sqrt{p_{\nu}^2 c^2 + m_{\nu}^2 c^4} \approx p_{\nu} c \tag{6.20}$$

para o neutrino, desprezando-se sua massa $(m_{\nu} \approx 0)$.

69

6.2.2 Probabilidade de Transição do Decaimento β

No vácuo o operador fraco, $\mathbf{W},$ é tal que

$$\mathbf{W}|p\rangle = |n\beta^{+}\nu\rangle
\mathbf{W}|n\rangle = |p\beta^{-}\bar{\nu}\rangle$$
(6.21)

mas no núcleo é preciso considerar o estado nuclear. Desprezando interações no estado final de β e ν , podemos escrever a transição entre os estados inicial e final por

$$H_{if} = \langle Z_f, \beta, \nu | \mathbf{W} | Z_i \rangle \tag{6.22}$$

onde

$$Z_f, \beta, \nu \rangle = |Z_f\rangle \otimes |\beta\nu\rangle = |Z_f\rangle \otimes |\beta\rangle \otimes |\nu\rangle \tag{6.23}$$

com $|Z_f\rangle$ representando o estado nuclear. Obviamente $Z_f = Z_i \pm 1$ para o decaimento β^{\pm} , e $Z_f = Z_i - 1$ para a captura eletrônica. A função de onda do nucleon fica, então, incorporada à função de onda nuclear.

Agora que temos a matriz de transição podemos calcular a taxa de transição usando a regra de ouro de Fermi (5.20)

$$w_{\beta} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle Z_f \beta \nu | \mathbf{W} | Z_i \rangle|^2 \rho \tag{6.24}$$

onde ρ é a densidade de níveis no estado final, e é dada por

$$\rho = \frac{dn}{dE} = V \frac{p_\beta^2 p_\nu^2}{4\pi^4 \hbar^6 c} dp_\beta \tag{6.25}$$

com $E = E_{\beta} + E_{\nu}$. Com o ganho de energia nuclear dado por $E = E_i - E_f$, é possível escrever $\frac{dn}{dE}$ como

$$\frac{dn}{dE} = \frac{V^2}{4\pi^4 \hbar^6 c^3} \, p_\beta^2 \, (E - E_\beta)^2 \, dp_\beta \tag{6.26}$$

Usando esse resultado na regra de ouro de Fermi, segue que

$$\omega_{\beta} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle Z_f \beta \nu | \mathbf{W} | Z_i \rangle|^2 \frac{V^2}{4\pi^4 \hbar^6 c^3} \left(E - E_{\beta} \right)^2 p_{\beta}^2 \, dp_{\beta} \tag{6.27}$$

Note que ao usarmos a expressão da densidade de níveis do gás de Fermi, implicitamente confinamos o sistema numa caixa de volume V. Com isso devemos normalizar os estados $|\beta\rangle \in |\nu\rangle$ de acordo com este volume. Isto significa fazer

$$\begin{aligned} |\beta\rangle &\to \frac{1}{\sqrt{V}} |\beta\rangle \\ |\nu\rangle &\to \frac{1}{\sqrt{V}} |\nu\rangle \end{aligned} \tag{6.28}$$

Portanto obtemos

$$\omega_{\beta} = \frac{|\langle Z_f \beta \nu | \mathbf{W} | Z_i \rangle|^2}{2\pi^3 \hbar^7 c^3} \left(E - E_{\beta} \right)^2 p_{\beta}^2 \, dp_{\beta} \tag{6.29}$$

para a taxa de transição. É mais comum usarmos o termo probabilidade de emissão β com momento entre $p_{\beta} e p_{\beta} + dp_{\beta}$, então

$$P(p_{\beta})dp_{\beta} = \frac{|\langle Z_f \beta \nu | \mathbf{W} | Z_i \rangle|^2}{2\pi^3 \hbar^7 c^3} \left(E - E_{\beta} \right)^2 p_{\beta}^2 dp_{\beta}$$
(6.30)

define a densidade de probabilidade do momento do elétron ou pósitron emitido.

Probabilidade de Transição na Captura Eletrônica 6.2.3

No caso de captura eletrônica a energia do elétron não é mais aquela dada pela expressão (6.19), mas a variação de energia na captura do elétron, ΔE_a , isto é, $E_\beta = \Delta E_a$.

Agora a densidade de níveis é também uma delta de Dirac para a pate eletrônica, já que a transição é a partir de um npivel eletrônico específico. Então,

$$\frac{dn}{dE} = c^{-1} \frac{dn}{dp_{\nu}} \tag{6.31}$$

e usando novamente o gás de Fermi,

$$\frac{dn}{dE} = \frac{V p_{\nu}^2}{2\pi^2 \hbar^3 c} \tag{6.32}$$

A probabilidade de transição agora fica expressa em termos do momento do neutrino, isto é,

$$\omega_{\nu} = \frac{V p_{\nu}^2}{\pi \hbar^4 c} |\langle Z_f \nu | \mathbf{W} | Z_i \rangle|^2$$
(6.33)

6.3 Campo Eletromagnético

6.3.1Equações de Maxwell

A Teoria Eletromagnética Clássica é completamente descrita por um conjunto de quatro equações, conhecidas como equações de Maxwell

$$\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}, t) = 4\pi\rho(\overrightarrow{r}, t), \qquad (6.34)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}(\vec{r}, t) = \frac{4\pi}{c} \vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}(\vec{r}, t), \qquad (6.35)$$

$$\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{E}(\overrightarrow{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial \overrightarrow{H}}{\partial t}(\overrightarrow{r}, t) = 0$$
(6.36)

$$\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{H}(\overrightarrow{r}, t) = 0.$$
(6.37)

Nestas equações, $\vec{E} \in \vec{H}$ representam, respectivamente, os campos elétrico e magnético. Os termos ρ e \vec{j} representam a densidade de carga e a densidade de corrente, respectivamente, c é a velocidade da luz no vácuo, t o tempo e \overrightarrow{r} a posição no espaço onde estes campos são definidos. Além disso, $\rho \in \overrightarrow{j}$ obedecem à equação de conservação de cargas,

$$\overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{j}(\overrightarrow{r},t) + \frac{\partial\rho}{\partial t}(\overrightarrow{r},t) = 0.$$
(6.38)

Notemos que os vetores \overrightarrow{E} e \overrightarrow{H} têm, juntos, seis componentes, que devem ser determinadas através destas equações que têm como únicos parâmetros as densidades $\rho \in \vec{j}$, que por sua vez apresentam, juntas, quatro componentes apenas. Isto significa que os campos eletromagnéticos não podem ser completamente determinados através destas equações, ou, em outros termos, o número de parâmetros introduzidos através dos campos \acute{E} e \acute{H} é maior do que o número de parâmetros físicos envolvidos no sistema. Isto nos permitirá fazer escolhas de "gauge", posteriormente, que nada mais são escolhas sobre os parâmetros "não-físicos" introduzidos a mais nessas equações.

É conveniente introduzirmos dois outros potenciais, que substituem os campos elétrico e magnético nas equações acima. Um deles é o vetor potencial \overline{A} , definido como

$$\vec{H}(\vec{r},t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r},t).$$
(6.39)

Substituindo esta equaçõa em 6.36, temos

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \times \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = 0 \rightarrow \vec{\nabla} \times \left(\vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right), \tag{6.40}$$

de onde segue a definição do potencial escalar

$$\overrightarrow{\nabla}\varphi = \overrightarrow{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial\overrightarrow{A}}{\partial t}.$$
(6.41)

Com estas definições, a equação 6.34 fica

$$\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{\nabla} \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = \nabla^2 - \frac{1}{c} \frac{\partial (\vec{\nabla} \cdot \vec{A})}{\partial t} = -4\pi\rho, \qquad (6.42)$$

e a equação 6.35 nos dá

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = \frac{4\pi}{c} \vec{j} - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\nabla \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right).$$
(6.43)

Usando o fato de que

$$\overrightarrow{\nabla} \times (\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A}) = -\nabla^2 \overrightarrow{A} + \overrightarrow{\nabla} (\overrightarrow{\nabla} \cdot \overrightarrow{A})$$
(6.44)

segue a equação para o vetor potencial eletromagnético,

$$\vec{\nabla}^2 \vec{A} - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j} + \vec{\nabla} \left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right). \tag{6.45}$$

As equações 6.42 e 6.45 são equivalentes às equações de Maxwell, mas escritas em função dos potenciais \overrightarrow{A} e φ .

6.3.2 Transformações de Gauge

Coo dissemos, as equações de Maxwell apenas delimitam as possíveis formas dos campos $\vec{E} \in \vec{H}$, não podendo determiná-los completamente. Com isso, podemos sempre modificar as formas de $\vec{A} \in \varphi$ sem que os campos elétrico e magnético se modifiquem. Usaremos esta arbitrariedade para desacoplar os campos $\vec{A} \in \varphi$ nas equações 6.45 e 6.42.

Antes, porém, vamos iustrar a invariância dos campos $\vec{E} \in \vec{H}$ por transformações de gauge. Da definição de \vec{A} , temos que um campo

$$\overrightarrow{A'} = \overrightarrow{A} + \overrightarrow{\nabla}\Lambda \tag{6.46}$$

não modifica o campo \overrightarrow{H} , pois

$$\overrightarrow{H'} = \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A'} = \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A} + \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} \Lambda = \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{A} = \overrightarrow{H}, \qquad (6.47)$$

já que $\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} \Lambda = 0.$

Por outro lado, com $\overrightarrow{A'}$ obtemos, a partir da equação 6.41, um campo escalar φ' tal que

$$\nabla \varphi' = \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A'}}{\partial t} = \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \frac{1}{c} \vec{\nabla} \Lambda , \qquad (6.48)$$

e portanto devemos escolher

$$\varphi' = \varphi + \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \tag{6.49}$$

para que o campo elétrico permaneça o mesmo.

Isto mostra que existem infinitos potenciais $\vec{A} e \varphi$ que resultam nos mesmos campos $\vec{E} e \vec{H}$. Podemos usar esta liberdade para transformar as equações 6.42 e 6.45 segundo a maior conveniência para se resolver um determinado problema.
6.3.3 Gauge de Lorentz

O gauge de Lorentz é muito utilizado na eletrodinâmica, pois ele mantém a invariância por transformação de Lorentz. Esta condição é

$$\overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = 0.$$
(6.50)

É evidente que esta condição simplifica e desacopla as equações 6.42 e 6.45. Vamos mostrar que esta condição podeser obtida através de uma transformação de gauge.

Para qualquer par $\overrightarrow{A} \in \varphi$, temos

$$\overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{A} + \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = f(\overrightarrow{r},t).$$
(6.51)

Agora fazemos $\overrightarrow{A} \to \overrightarrow{A'} = \overrightarrow{A} + \overrightarrow{\nabla} \Lambda$ e $\varphi = \varphi' + \overrightarrow{\nabla} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}$, que não modificam os vetores \overrightarrow{E} e \overrightarrow{H} , mas que substituídos em 6.51 resultam em

$$\overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{A'} - \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi'}{\partial t} = \overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{A} + \nabla^2\Lambda - \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \frac{1}{c}\frac{\partial^2\Lambda}{\partial t^2}.$$
(6.52)

Podemos sempre escolher Λ tal que

$$\nabla^2 \Lambda - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial t^2} = -f(\overrightarrow{r}, t), \qquad (6.53)$$

e portanto teremos

$$\overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{A'} - \frac{1}{c}\frac{\partial\varphi'}{\partial t} = 0.$$
(6.54)

Com este gauge, as equações de Maxwell, 6.42 e 6.45 se reduzem a

$$\vec{\nabla}^2 \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -4\pi\rho \,. \tag{6.55}$$

е

$$\overrightarrow{\nabla}^2 \overrightarrow{A} - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \overrightarrow{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \overrightarrow{j} .$$
(6.56)

6.3.4 Gauge de Coulomb ou Transversal

Nos problemas em que a invariância por transformação de Lorentz não precisa ser explicitamente evidenciada, pode ser conveniente usar outros tipos de gauge. Um dos que é mais frequentemente usado é o gauge de Coulomb, no qual impomos a condição

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0, \qquad (6.57)$$

o que reduz a equação 6.42 a

$$\overrightarrow{\nabla}^2 \varphi = -4\pi\rho, \qquad (6.58)$$

e a equação 6.45 a

$$\vec{\nabla}^2 \vec{A} - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j} + \frac{1}{c} \frac{\partial(\vec{\nabla}\varphi)}{\partial t}.$$
(6.59)

Da equação 6.55, podemos escrever

$$\varphi(\overrightarrow{r},t) = \int d\overrightarrow{r} \frac{\rho(\overrightarrow{r},t)}{|\overrightarrow{r}-\overrightarrow{r'}|}, \qquad (6.60)$$

que, untamente com a equação de continuidade, resultam em

$$\frac{\partial \overrightarrow{\nabla} \varphi}{\partial t} = \overrightarrow{\nabla} \int d\overrightarrow{r'} \frac{\frac{\partial \rho}{\partial t}(\overrightarrow{r'}, t)}{|\overrightarrow{r'} - \overrightarrow{r'}|} = \overrightarrow{\nabla} \int d\overrightarrow{r'} \frac{-\overrightarrow{\nabla}' \overrightarrow{j}(\overrightarrow{r'}, t)}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r'}|}, \qquad (6.61)$$

e então

$$\frac{1}{c}\frac{\partial \overrightarrow{\nabla}\varphi}{\partial t} = -\frac{1}{c}\overrightarrow{\nabla}\int d\overrightarrow{r'}\frac{\overrightarrow{\nabla}'\overrightarrow{j}(\overrightarrow{r'},t)}{|\overrightarrow{r'}-\overrightarrow{r'}|} = \frac{4\pi}{c}j^l(\overrightarrow{r'},t), \qquad (6.62)$$

sendo $j^{l}(\overrightarrow{r'},t)$ a chamada corrente longitudinal. Notemos que $\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{j^{l}} = 0$, como pode ser facilmente verificado, já que $\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} \varphi = 0$ para quiquer campo φ .

Portanto

$$\vec{\nabla}^2 \vec{A} - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \vec{j^t} (\vec{r}, t) , \qquad (6.63)$$

onde $\overrightarrow{j^t}(\overrightarrow{r},t) = \overrightarrow{j^t}(\overrightarrow{r},t) - \overrightarrow{j^l}(\overrightarrow{r},t)$ é a corrente transversal. A seguir determinaremos a expressão para a corrente transversal, que é aquela que contrinui efetivamente para os campos $\overrightarrow{A} = \varphi$.

Sabemos, da Lei de Coulomb, que o potencial gerado por uma partícula carregada com carga unitária é $\stackrel{}{\longrightarrow}$ 1

$$\varphi(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{r'}) = \frac{1}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r'}|}, \qquad (6.64)$$

onde \overrightarrow{r} é a posição da carga, e $\overrightarrow{r'}$ é a posição onde o potencial é calculado.. Como, no gauge de Coulomb,

$$\vec{\nabla}^2 \varphi = -4\pi \rho(\vec{r}), \qquad (6.65)$$

temos que

$$\vec{\nabla}^2 \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r'}|} = -4\pi \delta(\vec{r} - \vec{r'}).$$
(6.66)

A corrente total, para um conjunto de cargas, pode ser escrita como

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \int \vec{j}(\vec{r},t)\delta(\vec{r}-\vec{r})d\vec{r} = -\frac{1}{4\pi}\int \vec{j}(\vec{r},t)\vec{\nabla}^2 \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}|}d\vec{r}.$$
(6.67)

Usando a propriedade $\overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{\nabla} \times \overrightarrow{v} = \overrightarrow{\nabla}(\overrightarrow{\nabla}, \overrightarrow{v}) - \overrightarrow{\nabla}^2 \overrightarrow{v}$, temos

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \int \frac{\vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r}-\vec{r'}|} d\vec{r'} - \frac{1}{4\pi} \int \vec{j}(\vec{r'},t) \vec{\nabla} \left(\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r'}|}\right) d\vec{r'}.$$
(6.68)

 Como

$$\overrightarrow{\nabla} \left(\frac{1}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r'}|} \right) d\overrightarrow{r'} = -\overrightarrow{\nabla}' \left(\frac{1}{|\overrightarrow{r} - \overrightarrow{r'}|} \right) d\overrightarrow{r'}, \qquad (6.69)$$

onde $\overrightarrow{\nabla}'$ é o gradiente calculado em relação
a $\overrightarrow{r'},$ segue

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \int \frac{\vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r}-\vec{r'}|} d\vec{r'} + \frac{1}{4\pi} \int \vec{j}(\vec{r'},t) \vec{\nabla}' \left(\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r'}|}\right) d\vec{r'}.$$
(6.70)

Por outro lado,

$$\vec{\nabla}'\left(\frac{\vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r'}-\vec{r'}|}\right) = \vec{\nabla}'\vec{j}(\vec{r'},t)\left(\frac{1}{|\vec{r'}-\vec{r'}|}\right) + \vec{j}(\vec{r'},t)\vec{\nabla}'\left(\frac{1}{|\vec{r'}-\vec{r'}|}\right)$$
(6.71)

e então podemos escrever

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \int \frac{\vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r}-\vec{r'}|} d\vec{r'} + \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \int \vec{\nabla}' \left(\frac{\vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r}-\vec{r'}|}\right) d\vec{r'} - \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \int \frac{\vec{\nabla}' \vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r}-\vec{r'}|} d\vec{r'} .$$

$$(6.72)$$

6.3. CAMPO ELETROMAGNÉTICO

Pelo Teorema de Gauss, segue que

$$\int \vec{\nabla}' \left(\frac{\overrightarrow{j}(\overrightarrow{r'},t)}{|\overrightarrow{r'}-\overrightarrow{r'}|} \right) d\overrightarrow{r'} = \int_{S} \frac{\overrightarrow{j}(\overrightarrow{r'},t)}{|\overrightarrow{r'}-\overrightarrow{r'}|} d\overrightarrow{S} , \qquad (6.73)$$

onde $d\vec{S}$ é o vetor elemento de superfície, tomado sobre a superfície S. Podemos sempre escolher a superfície gaussiana, S, numa região distante o suficiente para que $\vec{j}(\vec{r},t) = 0$, de modo que este termo é nulo. Assim, resta

$$\vec{j}(\vec{r},t) = \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \int \frac{\vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r}-\vec{r'}|} d\vec{r'} - \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \int \frac{\vec{\nabla}' \vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r'}-\vec{r'}|} d\vec{r'}.$$
(6.74)

O segundo termo do lado direito da expressão acima pode ser identificado como sendo $\vec{j^l}(\vec{r},t)$, e portanto o primeiro termo representa a corrente transversal,

$$\vec{j^t}(\vec{r'},t) = \frac{1}{4\pi} \vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \int \frac{\vec{j}(\vec{r'},t)}{|\vec{r'}-\vec{r'}|} d\vec{r'}$$
(6.75)

No gauge de Coulomb, apenas esta corrente transversal é importante na determinação de \overrightarrow{A} e φ . No caso em que não existem cargas livres, temos $\rho(\overrightarrow{r},t) = 0$ e $\overrightarrow{j}(\overrightarrow{r},t) = 0$, então temos, além da escolha do gauge $\overrightarrow{\nabla} \overrightarrow{A} = 0$, também $\frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$, e então esta escolha satisfaz tanto o gauge de Coulomb quanto o gauge de Lorentz.

Este gauge é muito utilizado no estudo da radiação eletromagnética clássica e quântica. Neste gauge temos

$$\vec{\nabla}^2 A - \frac{1}{c} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = 0;$$

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t};$$

$$\vec{H} = \vec{\nabla} \times \vec{A}.$$
(6.76)

A solução da equação do potencial vetor eletromagnético são funções de onda plana

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \vec{A_0}e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} + \vec{B_0}e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$
(6.77)

O Hamiltoniano do eletromagnetismo é

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{mc}\vec{A}\cdot\vec{p} + \frac{e}{2mc}\vec{p}\cdot\vec{A} + \frac{e^2|\vec{A}|^2}{2mc^2} + e\phi$$
(6.78)

o que nos leva à equação de Schrödinger para o núcleo na presença de campo eletromagnético,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{ie\hbar}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla} + \frac{ie\hbar}{2mc}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}) + \frac{e^2}{2mc^2}\vec{A}^2 + e\phi + V\right]\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$
(6.79)

onde V é o potencial nuclear.

Se as cargas que geraram o potencial eletromagnético estão suficientemente longe do sistema, temos

$$\phi = 0 \tag{6.80}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$$

Considerando

$$\frac{eA}{cp} \ll 1 \tag{6.81}$$

a equação de Schrödinger se reduz a

CAPÍTULO 6. DECAIMENTOS

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) + \frac{ie\hbar}{mc}\vec{A}\cdot\vec{\nabla}\right]\Psi$$
(6.82)

e definimos

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$$

$$H_{int} = \frac{ie\hbar}{mc} \vec{A} \cdot \vec{\nabla}$$
(6.83)

Como

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \left[e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega t)} + e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}+\omega t)} \right]$$
(6.84)

agora podemos usar a regra de ouro de Fermi para calcular as amplitudes de transição devido à interação eletromegnética.

Usando a equação (5.11) temos

$$\dot{a}_m(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle m | H_{int} | n \rangle e^{i\omega_{mn}t/\hbar}$$
(6.85)

 com

$$\langle m|H_{int}|n\rangle = \frac{ie\hbar}{mc} \langle m|(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}})\vec{A_0}\cdot\vec{\nabla}|n\rangle e^{i\omega t} \langle m|H_{int}|n\rangle = \frac{ie\hbar}{mc} \left[\langle m|e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{A_0}\cdot\vec{\nabla}|n\rangle e^{-i\omega t} + \langle m|e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{A_0}\cdot\vec{\nabla}|n\rangle e^{i\omega t} \right]$$

$$(6.86)$$

portanto

$$\dot{a}_m(t) = \frac{e}{mc} \left[\langle m | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{A_0} \cdot \vec{\nabla} | n \rangle e^{i(\omega_{mn}-\omega)t/\hbar} + \langle m | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{A_0} \cdot \vec{\nabla} | n \rangle e^{i(\omega_{mn}-\omega)t/\hbar} \right]$$
(6.87)

Considerando que H_{int} começa a agir sobre o sistema em t = 0, e que $a_m(0) = 0$ para $m \neq n$ e $a_n(0) = 1$, temos, para qualquer $t \ge 0$

_

$$a_{m}(t) = -\frac{ie\hbar}{mc} \left[\frac{\langle m | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{A_{0}}\cdot\vec{\nabla} | n \rangle}{\omega_{mn} - \omega} \left(e^{i(\omega_{mn} - \omega)t/\hbar} - 1 \right) + \frac{\langle m | e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{A_{0}}\cdot\vec{\nabla} | n \rangle}{\omega_{mn} + \omega} \left(e^{i(\omega_{mn} + \omega)t/\hbar} - 1 \right) \right]$$

$$(6.88)$$

Exercícios

6.1 Calcule o expoente γ , dado por (6.13).

6.2 O estado fundamental do ²¹¹Po pode decair por emissão alfa para o estado fundamental do ²⁰⁷Pb. Um estado metaestável (isômero) do ²¹¹Po também pode decair por emissão alfa para o estado fundamental do ²⁰⁷Pb (partículas alfa de "longo alcance"). (a) Faça o diagrama de níveis de energia mostrado esses processos. (b) Os dois grupos de partículas alfa são observados simultaneamente em um espectrógrafo magnético de campo homogêneo a 180°. Os raios de curvatura das suas trajetórias são $r_1 e r_2$ (maior). Qual a razão entre suas energias? (c) Dada a energia de excitação E do estado metaestável além das informações acima, encontre uma expressão para a indução magnética B no espectrógrafo. Use mecânica não relativística.

76



Figura 6.3: Decaimento alfa do ^{238}Pu .

6.3 Na Figura 6.3 são dadas as energias de decaimento alfa do ^{238}Pu , assim como as energias dos estados excitados do ^{234}U . Calcule a energia cinética do grupo de de partículas alfa que leva ao estado excitado de energia 0.499 MeV do ^{234}U .

6.4 Assuma que dois isótopos do elemento ${}_{98}Cf$ ($A \approx 250$), diferindo em número de neutrons por 4, tem energias de decaimento alfa idênticas. (a) Qual isótopo deve ter a maior meia-vida? (b) Calcule a diferença percentual esperada nas meias-vidas.

6.5 O nuclídeo ²³³U emite seis grupos de partículas alfa, com energias cinéticas de 4.816 MeV, 4.773 MeV, 4.717 MeV, 4.655 MeV, 4.582 MeV e 4.489 MeV. Raios gama com energias 0.0428 MeV, 0.0561 MeV e 0.099 MeV também foram encontrados. Construa um esquema de decaimento baseado nesses dados.

6.6 A altura U da barreira de Coulomb em torno de um núcleo de carga Z_1e e raio r para uma partícula de carga positiva Z_2e pode ser obtida em primeira aproximação calculando-se a energia da repulsão de Coulomb a uma distância igual ao raio do núcleo.

$$U = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$
(6.89)

Suponha que o raio do núcleo é dado pela fórmula $r = 1.5 \times 10^{-13} A^{1/3}$ cm, onde A é o número de massa do núcleo. Calcule a altura da barreira para partículas alfa e para os núcleos ²⁰Ne, ⁴⁰Ca, ⁶⁶Zn, ¹¹²Sn, ¹⁷⁴Yb e ²³²Th. Repita o cálculo para prótons e deuterons.

6.7 Descobriu-se que uma amostra de hidrogênio contendo 2.57 cm^3 de trítio nas CNTP produz 0.1909 cal/h de calor. A meia-vida do trítio é 12,46 anos. Ache (a) a razão de desintegração, (b) a energia média das partículas beta emitidas, (c) a razão entre a energia média e a energia máxima.

6.8 Na fissão nuclear do ²³⁵U, cerca de 9% da energia total liberada vêm do decaimento β dos produtos de fissão. Qual a potência carregada pelos neutrinos de uma instalação nuclear que libera 100000 kW de calor?

6.9 Coloque num gráfico $\log \lambda$ contra $\log T_0$ para os emissores de pósitrons listados abaixo (onde λ é a constante de desintegração e T_0 a energia máxima disponível para a desintegração). O resultado é a curva de Sargent para decaimentos β permitidos. A partir da curva, obtenha a energia máxima das partículas emitidas pelo ²⁵Al (meia-vida de 7,3 s) e ³³Cl (meia-vida de 2,0 s).</sup>

6.10 O nuclídeo ¹⁵³Sm emite quatro grupos de raios beta, com energias máximas de 0.83, 0.72, 0.65 e 0.13 MeV. Também são emitidos raios gama com energias de 0.1032, 0.06697, 0.172, 0.545 e 0.615 MeV. Construa um esquema de desintegração que englobe esses dados.

6.11 O nuclídeo ${}^{94}Tc$ decai por captura de elétron orbital e emissão β^+ . Descobriram-se raios gama com energias 3.27, 2.73, 1.85 e 0.874 MeV, assim como pósitrons com uma energia máxima de 2.41 MeV. Deduza um esquema de decaimento que englobe estes dados.

Nuclídeo	Meia-vida (s)	Energia máxima (MeV)	Nuclídeo	Meia-vida (s)	Energia máxima (MeV)
^{11}C	1200	0.98	^{23}Mg	11.9	2.99
^{13}N	606	1.24	^{27}Si	4.9	3.48
^{15}O	122	1.68	^{29}P	4.6	3.60
^{17}F	70	1.72	^{31}Si	3.2	3.86
^{19}Ne	18.4	2.18	^{35}A	1.86	4.40
^{21}Na	22.8	2.52	^{41}Sc	0.87	4.94

6.12 Derive uma expressão para a energia cinética (em eV) com a qual o núcleo recua quando um raio γ é emitido. Expresse a energia do raio γ em KeV, e a massa do núcleo que recua em u.m.a.

6.13 O nuclídeo ⁴⁹Cr decai por emissão de pósitrons, emitindo três grupos de partículas com energias de 1.54 MeV, 1.39 MeV e 0.73 MeV. Observam-se raios gama com energias de 0.15 MeV, 0.061 MeV, 0.089 MeV. Construa um esquema de decaimento adequado a estes dados.

6.14 Calcule o fator de penetração em barreira $P = e^{-\gamma}$, com γ dado pela equação (6.7) para uma barreira triangular (veja Figura 6.4). Use o resultado para estimar o fator de penetração em barreira para partículas alfa com l = 0 de um núcleo com Z = 70, assumindo que a curva de energia potencial entre $R_i \in R_0$ é aproximadamente uma reta. Use Q = 5 MeV, $R_i = 9$ fm, e calcule R_0 como o ponto onde a energia potencial $V = Zze^2/4\pi\epsilon_0 r$ é igual a Q. Use a mesma fórmula para encontrar V_0 .



Figura 6.4: Barreira de potencial triagnular.

6.15 Mostre que

$$\frac{dn}{dE} = \rho = V \frac{p_\beta^2 p_\nu^2}{4\pi^4 \hbar^6 c} dp_\beta \tag{6.90}$$

 $com \ E = E_{\beta} + E_{\nu}$

6.16 Seja $E = E_i - E_f$ o ganho de energia nuclear, mostre que

$$\frac{dn}{dE} = \frac{V^2}{4\pi^4 \hbar^6 c^3} \, p_\beta^2 \, (E - E_\beta)^2 \, dp_\beta \tag{6.91}$$

6.17 Prove que a transformação 6.28 normaliza corretamente os estados do elétron e do neutrino. **6.18** Obter $\vec{E}(\vec{r},t) \in \vec{H}(\vec{r},t)$ a partir do potencial vetor 6.77. Calcular o vetor de Poynting.

$$\vec{P} = \frac{c}{4\pi}\vec{E}\times\vec{H} \tag{6.92}$$

correspondete a estes campos, e mostrar que o valor médio no período de oscilação é

$$\bar{P} = \frac{\omega^2}{8\pi c} \left(|\vec{A_0}|^2 + |\vec{B_0}|^2 \right) \hat{k}$$
(6.93)

6.3. CAMPO ELETROMAGNÉTICO

6.19 Mostre que a amplitude $\vec{A_0}$ do potencial vetor 6.84 está relacionada à intensidade da onda eletromagnética através da relação

$$|\vec{A_0}|^2 = \frac{2\pi c}{\omega^2} I(\omega) \Delta \omega \tag{6.94}$$

onde $I(\omega)\Delta\omega$ é a intensidade numa janela de freqüência angular $\Delta\omega$.

6.20 .

a) Mostre que a probabilidade de, num instante $t \ge 0$, encontrar-se o sistema no estado m com energia $E_m = E_n + \hbar \omega$ é

$$|a_m(t)|^2 = \sum_{\omega} \frac{8\pi e^2}{m^2 c \omega^2} I(\omega) \Delta \omega |\langle m| e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\nabla}_{\hat{A}} |n\rangle|^2 sen^2 \left[\frac{(\omega_{mn} - \omega)t}{2(\omega_{mn} - \omega)} \right]$$
(6.95)

b) e a probabilidade de encontrar o sistema no estado m' com $E_{m'} = E_n - \hbar \omega$ é

$$|a_{m'}(t)|^2 = \sum_{\omega} \frac{8\pi e^2}{m^2 c\omega^2} I(\omega) \Delta \omega |\langle m'| e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{\nabla}_{\hat{A}} |n\rangle|^2 sen^2 \left[\frac{(\omega_{m'n} - \omega)t}{2(\omega_{m'n} - \omega)} \right]$$
(6.96)

6.21 Considerando $\Delta \omega$ infinitesimal ($\Delta \omega \rightarrow d\omega$), mostre que a somatória nas expressões acima vira uma integral em ω , e que esta integral pode ser resolvida facilmente se levarmos em conta que o termo senoidal se transforma numa delta de Dirac, e que

$$|a_{m}(t)|^{2} = \frac{4\pi^{2}e^{2}}{m^{2}c\omega_{mn}^{2}}I(\omega_{mn})|\langle m|e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\nabla}_{\hat{A}}|n\rangle|^{2}$$

$$|a_{m'}(t)|^{2} = \frac{4\pi^{2}e^{2}}{m^{2}c\omega_{m'n}^{2}}I(\omega_{m'n})|\langle m'|e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\vec{\nabla}_{\hat{A}}|n\rangle|^{2}$$

(6.97)

Com esses resultados podemos interpretar o significado físico dessas expressões. A transição do estado $|n\rangle$ para o estado $|m\rangle$ representa a absorção de um fóton de energia $\hbar\omega$, levando a partícula carregada para o novo estado com energia $E_m = E_n + \hbar\omega$. A transição do estado $|n\rangle$ para $|m'\rangle$ representa a emissão de um fóton de energia $\hbar\omega$, sendo portanto $E_m = E_n - \hbar\omega$.

Capítulo 7

Aproximação WKB

A equação de Schrödinger

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + v(x)^{\psi} = E \ \psi$$
(7.1)

tem solução simples se $V(x) = V_0$, com V_0 constante. Neste caso obtem-se

$$\psi(x) = A \ e^{i\frac{\mu}{\hbar}} \tag{7.2}$$

onde $p = \sqrt{2(E - V_0)}$

Quando V(x) não é constante a solução da equação (7.1) pode ficar mais complicada, e neste caso é útil termos alguns métodos para se obter soluções aproximadas. Um desses métodos é a aproximação WKB, descrita a seguir. A solução $\psi(x)$ pode ser escrita na forma

$$\psi(x) = e^{if(x)/\hbar} \tag{7.3}$$

o que não leva a perda de generalidade, pois qualquer função complexa não-nula pode ser escrita nessa forma, com f(x) uma função finita. A partir de (7.3) temos

$$\frac{d\psi}{dx}(x) = \frac{if'}{\hbar} \ e^{if/\hbar},$$

onde $f\equiv f(x)$ e $f'\equiv \frac{df}{dx}(x),$ e

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(\frac{if''}{\hbar} - \frac{(f')^2}{\hbar^2}\right) e^{if/\hbar}$$

Substituindo a expressão acima na equação de Schrödinger, obtem-se

$$i\hbar f'' - (f')^2 + p^2(x) = 0, (7.4)$$

 $\operatorname{com} p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$

A função f(x) pode ser expandida na série

$$f(x) = f_0(x) + \hbar f_1(x) + \hbar^2 f_2(x) + \ldots + \hbar^n f_n(x) + \ldots$$
(7.5)

Substituindo (7.5) em (7.4) e separando os termos de mesma ordem em \hbar resulta em

$$\left[-(f_0^{'})^2 + p^2(x)\right] + \hbar \left[if_0^{''} - 2f_0^{'}f_1^{'}\right] + \dots = 0$$
(7.6)

e como $\hbar<<1$ podemos inicialmente (aproximação de primeira ordem) fazer $\hbar\approx 0$ resultando

$$-(f_0')^2 + p^2(x) = 0 \Rightarrow f_0'(x) = \pm p(x),$$
(7.7)

e então $f(x) \approx \pm \int p(x) dx + c$, e a função de onda resultante é

$$\psi_1(x) = A \ e^{\pm \frac{1}{h}} \int |p(x)| \ dx$$

A aproximação de segunda ordem é obtida levando-se em conta o termo proporcional a \hbar , e ignorando termos de ordem superior ($\hbar^2 \approx 0$), então obtem-se, usando (7.7),

$$ip'(x) - 2p(x)f'_1 = 0 \Rightarrow f'_1(x)dx = i \frac{dp'}{2p}.$$

Observe que não importa o sinal escolhido na equação (7.7), pois obtém-se o mesmo resultado. Segue imediatamente que

$$f_1(x) = \frac{i}{2} ln[p(x)] + C$$

$$f(x) = \pm p(x) + \frac{i}{2} ln[p(x)] + C$$
(7.3)

e

$$f(x) = \pm p(x) + \frac{i}{2} ln[p(x)] + C$$
(7.8)

logo a função de onda, na aproximação de segunda ordem, fica

$$\psi_2(x) = \frac{B}{\sqrt{p(x)}} e^{i\frac{i}{\hbar} \int |p(x)| \, dx}$$
(7.9)

Como exemplo de aplicação da aproximação WKB, vamos obter a função de onda de um corpo de massa m e energia E sob a ação do potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ se \ x < 0, \\ V_0 \ sex \ge 0 \end{cases}$$

Resolver exatamente a equação de Shrödinger não oferece grandes dificuldades aqui, mas este problema será útil para verificarmos a eficácia do método, supondo $E < V_0$.

Sabemos que $p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}$, então

$$p(x) = \begin{cases} p_1 = \sqrt{2mE}, x < 0\\ p_2 = i\sqrt{2m(V_0E)}, x \ge 0 \end{cases}$$

e a função de onda (8) fica

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = \frac{A+}{\sqrt{p_1}} e^{i p_1 x/\hbar} + \frac{A-}{\sqrt{p_1}} e^{-i p_1 x/\hbar} & x < 0\\ \psi_2(x) = \frac{B}{\sqrt{p_2}} e^{i p_2 x/\hbar} \end{cases}$$
(7.10)

A continuidade da função de onda e de sua primeira derivada em x = 0 implica nas relações $\psi_1(0) =$ $\psi_2(0) \in \psi'_1(0) = \psi'_2(0), \log 0$

$$\frac{1}{\sqrt{p_1}} (A_+ + A_-) = \frac{B}{\sqrt{p_2}} \Rightarrow B = \sqrt{\frac{p_2}{p_1}} (A_+ + A_-)$$

е

$$\frac{i\sqrt{p_1}}{\hbar}(A_+ - A_-) = \frac{i\sqrt{p_2}}{\hbar}B = \frac{ip_2}{\hbar\sqrt{p_1}} \ (A_+ + A_-),$$

de onde resulta

$$A_{-} = \frac{p_{1} - p_{2}}{p_{1} + p_{2}} A_{+} e B = \frac{2\sqrt{p_{1}p_{2}}}{p_{1} + p_{2}} A_{+}$$

A função de onda, na aproximação WKB, fica então

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{p_1}} \left(e^{i \ p_1 x/\hbar} + \frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2} \ e^{-i \ p_1 x/\hbar} \right) & x < 0 \\ \frac{2\sqrt{p_1 A}}{p_1 + p_2} \ e^{i \ p_1 x/\hbar} \end{cases}$$

Sendo A uma constante que pode ser determinada pela condição de normalização da função de onda, $\langle \psi(x)/\psi(x) \rangle = 1$

Exercícios

7.1 Ache a solução exata da equação de Schrödinger para o potencial V(x) dado no exemplo acima, e compare-a à solução aproximada.

7.2 Considere um corpo de massa m e energia E sob a reação do potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ se \ x < -a \\ V_0 \ se \ -a \le x \le a \\ 0 \ se \ x > a \end{cases}$$

onde V_0 é constante e $V_0 > E.(a)$ Use a aproximação WKB para obter a função de onda. (b) Obtenha a solução exta e compare com aquela obtida em (a). Calcule a probabilidade de transmissão para uma onda inicialmente vindo de $x = -\infty$ para $x = \infty$.

7.3 Um próton ligado a um núcleo atômico está sujeito a um potencial que é descrito por

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 \quad para \quad 0 < r < r_0 \\ \frac{Z \quad e^2}{r} \quad para \quad r \ge r_0 \end{cases}$$

onde Z é o número atômico do núcleo e r_0 o seu raio. Se E é a energia do próton, com $E > V_0$ e $E < \frac{Z e^2}{r_0}$, determine a probabilidade de transmissão do próton através da barreira coulombiana.

Capítulo 8

Teoria de Espalhamento

A teoria do espalhamento procura resolver o problema quântico de espalhamento de partículas por um potencial. Neste caso, queremos saber qual o estado final das partículas espalhadas. Inicialmente nos retringiremos às soluções estacionárias, isto é, às soluções da equação de Schrödinger independente do tempo. Neste caso, a equação a ser resolvida é

$$H\Psi = E\Psi, \qquad (8.1)$$

onde H é a Hamiltoniana do sistema. Esta pode ser dividida em parte cinética, H_o , e parte de interação, V, isto é,

$$H = H_o + V \,, \tag{8.2}$$

 $\operatorname{com} H_o = \overrightarrow{p}^2 / (2m).$

Se a região de interação for limitada, a função de onda longe desta região deve ser um auto-estado de H_o ,

$$H_o|\phi\rangle = E|\phi\rangle. \tag{8.3}$$

Sendo $|\Psi\rangle$ a solução completa, temos

$$H\Psi = E\Psi, \qquad (8.4)$$

que deve ser composta pela superposição do estado inicial $|\phi\rangle$ e de estados espalhados, isto é,

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o} V |\Psi\rangle \,. \tag{8.5}$$

Como os espectros de H_o e H são contínuos, a equação acima apresenta uma singularidade, que é eliminada introduzindo-se um termo no denominador,

$$|\Psi^{\pm}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} V |\Psi^{\pm}\rangle.$$
(8.6)

Na representação das coordenadas espaciais, temos

$$\langle \vec{x} | \Psi^{\pm} \rangle = \langle \vec{x} | \phi \rangle + \int d^3 x' \langle \vec{x} | \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} | \vec{x'} \rangle \langle \vec{x'} | V | \Psi^{\pm} \rangle.$$
(8.7)

Se $|\phi\rangle$ representa um estado de onda plana com momento \overrightarrow{p} , temos

$$\langle \vec{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i \vec{p} \cdot \vec{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \qquad (8.8)$$

que não é um estado normalizável. A condição de normalização é realizada através da relação

$$\int d^3x \langle \overrightarrow{p'} | \overrightarrow{x'} \rangle \langle \overrightarrow{x} | \overrightarrow{p} \rangle = \delta^3 (\overrightarrow{p} - \overrightarrow{p'}).$$
(8.9)

Na representação dos momentos, por outro lado, temos

$$\langle \overrightarrow{p} | \Psi^{\pm} \rangle = \langle \overrightarrow{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - \frac{p^2}{2m} \pm i\epsilon} \langle \overrightarrow{p} | V | \Psi^{\pm} \rangle.$$
(8.10)

Vamos, por ora, restringirmo-nos à representação das coordenadas. Analisando o kernel do integrando, temos

$$G_{\pm}(\overrightarrow{x}, \overrightarrow{x'}) = \frac{\hbar^2}{2m} \langle \overrightarrow{x} | \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} | \overrightarrow{x'} \rangle = = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 p' \int d^3 p'' \langle \overrightarrow{x} | \overrightarrow{p'} \rangle \langle \overrightarrow{p'} | \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} | \overrightarrow{p''} \rangle \langle \overrightarrow{p''} | x' \rangle , \qquad (8.11)$$

onde o temo $\hbar^2/(2m)$ foi introduzido por conveniência, e será compensado na equação 8.22 Como

$$\langle \overrightarrow{p'} | H_o = \langle \overrightarrow{p'} | \frac{1}{p'^2/(2m)} , \qquad (8.12)$$

 temos

$$G_{\pm}(\overrightarrow{x},\overrightarrow{x'}) = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \langle \overrightarrow{x} | \overrightarrow{p'} \rangle \frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} \langle \overrightarrow{p'} | \overrightarrow{p''} \rangle \langle \overrightarrow{p''} | x' \rangle , \qquad (8.13)$$

onde $\langle \vec{p'} | \vec{p''} \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p'}) e \langle \vec{x'} | \vec{p'} \rangle = e^{i\vec{p'} \cdot \vec{x'}} / (2\pi\hbar)^{3/2}$. Daqui segue que

$$G_{\pm}(\vec{x}, \vec{x'}) = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3 p' \frac{e^{i\vec{p'} \cdot (\vec{x} - \vec{x'})}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{E - \frac{p'^2}{2m} \pm i\epsilon}.$$
(8.14)

Fazendo $E = k^2 \frac{\hbar^2}{2m} e \overrightarrow{p'} = \hbar \overrightarrow{q}$, segue

$$G_{\pm} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q e^{i\hbar \vec{q} \cdot (\vec{x} - \vec{x'})} \frac{1}{E - \frac{p'^2}{(2m)} \pm i\epsilon}, \qquad (8.15)$$

e integrando-se nas variáveis angulares (em coordenadas esféricas), temos

$$G_{\pm} = \frac{-1}{4\pi^2} \frac{1}{i|\vec{x} - \vec{x'}|} \left[\int_{-\infty}^{\infty} q \, dq \, \frac{e^{iq|\vec{x} - \vec{x'}|}}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon} - \int_{-\infty}^{\infty} q \, dq \, \frac{e^{-iq|\vec{x} - \vec{x'}|}}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon} \right]$$
(8.16)



Figura 8.1: Plano complexo, caso $-i\epsilon$.

Para fazermos a integração em q, passamos para o campo complexo fazendo $q \to z,$ com z=x+iye ficamos com

$$I_{1} = \int_{-\infty}^{\infty} z \, dz \, \frac{e^{iz|\vec{x} - \vec{x'}|}}{z^{2} - k^{2} + i\epsilon}$$

$$I_{2} = \int_{-\infty}^{\infty} z \, dz \, \frac{e^{-iz|\vec{x} - \vec{x'}|}}{z^{2} - k^{2} - i\epsilon}$$
(8.17)

As integrais são resolvidas facilmente usando o método dos resíduos. Nas figuras 8.1 e 8.2 mostramos os caminhos utilizados nas integrações I_1 e I_2 nos casos $-i\epsilon$ e $+i\epsilon$. No primeiro caso temos $I_1 = 0$, pois não existem polos na região delimitada pelo caminho escolhido, enquanto que

$$I_2 = -i\pi e^{-ik|\vec{x} - x'|} \,. \tag{8.18}$$



Figura 8.2: Plano complexo, caso $+i\epsilon$.

No segundo caso, temos

$$I_1 = i\pi e^{-ik|\vec{x} - \vec{x'}|}, \qquad (8.19)$$

enqu
nato que ${\cal I}_2=0$ pelo mesmo motivo que ${\cal I}_1$ no caso anterior.

Destes resultados, segue que

$$G_{\pm}(\overrightarrow{x}, \overrightarrow{x'}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\overrightarrow{x} - x'|}}{|\overrightarrow{x} - \overrightarrow{x'}|}, \qquad (8.20)$$

que é a solução da equação de Helmholtz,

$$(\nabla^2 + k^2)G_{\pm}(\overrightarrow{x}, \overrightarrow{x'}) = \delta^3(\overrightarrow{x} - \overrightarrow{x'}).$$
(8.21)

Substituindo 8.20 em 8.7, temos finalmente que

$$\langle \overrightarrow{x} | \Psi^{\pm} \rangle = \langle \overrightarrow{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{\pm ik |\overrightarrow{x} - \overrightarrow{x'}|}}{4\pi |\overrightarrow{x} - \overrightarrow{x'}|} \langle \overrightarrow{x'} | V | \Psi^{\pm} \rangle.$$
(8.22)

Vamos agora considerar um tipo particular, mas muito frequente, de potencial V: o potencial local, definido por

$$\langle \overrightarrow{x'} | V | \overrightarrow{x''} \rangle = V(\overrightarrow{x'}) \delta^3(\overrightarrow{x'} - \overrightarrow{x''}).$$
(8.23)

segue então que

$$\langle \overrightarrow{x'} | V | \Psi^{\pm} \rangle = \int d^3 x'' \langle \overrightarrow{x'} | V | \overrightarrow{x''} \rangle \langle \overrightarrow{x''} | \Psi^{\pm} \rangle = V(\overrightarrow{x'}) \langle \overrightarrow{x'} | \Psi^{\pm} \rangle, \qquad (8.24)$$

e portanto

$$\langle \overrightarrow{x} | \Psi^{\pm} \rangle = \langle \overrightarrow{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{\pm ik |\overrightarrow{x} - x'|}}{4\pi |\overrightarrow{x} - \overrightarrow{x'}|} V(\overrightarrow{x'}) \langle \overrightarrow{x'} | \Psi^{\pm} \rangle .$$
(8.25)

Na prática, esta função de onda é medida apenas em pontos \vec{x} distantes da região de interação, se o potencial $V(\vec{x})$ é limitado no espaço. Este é o caso da interação nuclear, e da observação de processos nucleares através de detectores cuja distância do núcleo é várias ordens de grandeza superior às dimensões nucleares.

Para compreendermos o significado físico contido na expresão 8.25,
vamos analisar a sua forma quando $|\vec{x}| = r >> r' = |\vec{x'}|$. Neste caso temos

$$|\vec{x} - \vec{x'}| = [r^2 - 2rr'\cos\alpha + r'^2]^{1/2} = r[1 - 2r'\cos\alpha + (r'/r)^2]^{1/2}, \qquad (8.26)$$

onde α é o ângulo entre os vetores \overrightarrow{x} e $\overrightarrow{x'}$, conforme mostrado na Figura 8.3. Como $(r'/r)^2 \approx 0$ e $(1-z)^{1/2} \approx 1-z/2$, segue que

$$|\overrightarrow{x} - \overrightarrow{x'}| \approx r(1 - \hat{r}.\overrightarrow{x'}), \qquad (8.27)$$

onde $\hat{r} = \vec{x} / |\vec{x}|$.



Figura 8.3: Geometria do problema.

Com isso, a expressão 8.25 fica

$$\langle \vec{x} | \Psi^{\pm} \rangle = \langle \vec{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' \frac{e^{\pm ik(r - \hat{r} \cdot \vec{x'})}}{4\pi (r - \hat{r} \cdot \vec{x'})} V(\vec{x'}) \langle \vec{x'} | \Psi^{\pm} \rangle \,. \tag{8.28}$$

Podemos ainda simplificar o denominador do lado direito fazendo $(r - \hat{r}.\vec{x'}) \approx r$, e assim ficamos com

$$\langle \overrightarrow{x} | \Psi^{\pm} \rangle = \langle \overrightarrow{x} | \phi \rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{\mp ikr}}{4\pi r} \int d^3 x' e^{\mp i \overrightarrow{k} \cdot \overrightarrow{x'}} V(\overrightarrow{x'}) \langle \overrightarrow{x'} | \Psi^{\pm} \rangle , \qquad (8.29)$$

onde $\overrightarrow{k} = k\hat{r}$. Em geral essa expressão é usada em termos de $\overrightarrow{k} = \overrightarrow{p}/\hbar$. Neste caso

$$\langle \vec{x} | \vec{k} \rangle = \frac{e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}}, \qquad (8.30)$$

e então, finalmente, para $r>>r^{\prime},$

$$\langle \overrightarrow{x} | \Psi^+ \rangle = \langle \overrightarrow{x} | \overrightarrow{k} \rangle = \langle \overrightarrow{x} | \overrightarrow{k} \rangle - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{+ikr}}{r} \int d^3 x' e^{-i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{x'}} V(\overrightarrow{x'}) \langle \overrightarrow{x'} | \Psi^+ \rangle =$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\frac{e^{+ikr}}{r} f(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k}) + e^{i\overrightarrow{k}.\overrightarrow{x}} \right],$$

$$(8.31)$$

onde

$$f(\vec{k'}, \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \int d^3 x' \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x'}}}{(2\pi)^{3/2}} V(\vec{x'}) \langle \vec{x'} | \Psi^+ \rangle = = -\frac{1}{4\pi} (2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k'} | V | \Psi^+ \rangle .$$
(8.32)

Na equação 8.32 já usamos apenas Ψ^+ , já que os sinais (+) e (-) representam funções de onda saindo e entrando na região de interação, respectivamente. No caso de espalhamento, estamos interessados na onda espalhada para fora do alvo. De fato, percebemos na equação 8.32 a soma de uma onda incidente (proporcional a $e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}}$) e de uma onda esférica espalhada que se propaga para fora da região de interação. Normalmente a onda espalhada que se propaga para dentro da região de interação (Ψ^-) é nula, pois

dificilmente se construiria um sistema com as condições de contorno necessárias.

A partir de 8.32 podemos calcular a seção de choque diferencial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \frac{r^2 |\Psi_{esp}| d\Omega}{|\Psi_{inc}|} = |f(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k})|^2 d\Omega, \qquad (8.33)$$

então

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k'}, \vec{k})|^2 \,. \tag{8.34}$$

8.1. APROXIMAÇÃO DE BORN

A teoria de espalhamento independente do tempo, que desenvolvemos aqui, é útil para descrever espalhamentos nos quais o pacote de ondas que descreve a partícula é muito maior do que o centro espalhador. É possível desenvolver uma teoria em termos de pacotes de ondas, e este tratamento pode ser visto no livro do Merzbacher.

8.1 Aproximação de Born

Na fórmula 8.32 ainda aparece o ket $|\Psi^+\rangle$, que é desconhecido. Porém, se o potencial não for muito forte, podemos supor que uma boa aproximação é substituir $|\Psi^+\rangle$ por $|\phi\rangle$. Neste caso



Figura 8.4: Relação entre $\vec{k} \in \vec{k'}$

Esta aproximação é conhecida como Aproximação de Born em primeira ordem. Desta aproximação resulta

$$f^{(1)}(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\overrightarrow{k} - \overrightarrow{k'}) \cdot \overrightarrow{x'}} V(\overrightarrow{x'}) \,. \tag{8.36}$$

Pata $\overrightarrow{k'}$ fixo, $\overrightarrow{q} = \overrightarrow{k} - \overrightarrow{k'}$ também é fixo e, como pode ser facilmente compreendido através da figura 8.4, $q = 2ksen(\theta/2)$, já que, por conservação de energia, $|\overrightarrow{k'}| = |\overrightarrow{k'}|$. Além disso, $\overrightarrow{q} \cdot \overrightarrow{x'} = qx'cos\delta$, onde δ é o ângulo entre $\overrightarrow{x'}$ e $\overrightarrow{q'}$. Como devemos integrar $\overrightarrow{x'}$ em todo o espaço, segue, fazendo a restrição $V(\overrightarrow{x'}) = V(r)$,

$$\int d^3x' e^{i(\overrightarrow{k}-\overrightarrow{k'})\cdot\overrightarrow{x'}}V(\overrightarrow{x'}) = \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} r d\phi \int_{-\pi}^{\pi} r \, sen\theta e^{iqr\cos\theta}V(r)d\theta =$$

$$= \int_0^\infty r^2 dr \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 (d\cos\theta) e^{iqr\cos\theta}V(r) =$$

$$= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \frac{1}{iqr} \left(e^{iqr} - e^{iqr}\right)V(r) =$$

$$= \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} r dr V(r) sen(qr) \,. \tag{8.37}$$

Assim, ficamos com

$$f^{1}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^{2}} \frac{1}{q} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} r dr V(r) sen(qr) dr, \qquad (8.38)$$

onde já escrevemos a amplitude de espalhamento em função de θ , já que, sendo k = k', a única variável é o ângulo de espalhamento.

8.2 Operador de Transição - Aproximação de Born em Ordens Superiores

A equação de Lippman-Schwinger é

$$|\Psi^{+}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o + i\epsilon} V |\Psi^{+}\rangle.$$
(8.39)

Definimos o operador de transição T, como

$$T|\phi\rangle = V|\Psi^{\pm}\rangle. \tag{8.40}$$

Multiplicando a equação 8.39 por $V,\,{\rm pela}$ esquerda, temos

$$V|\Psi^{\pm}\rangle = V|\phi\rangle + V\frac{1}{E - H_o + i\epsilon}V|\Psi^{+}\rangle, \qquad (8.41)$$

e substituíndo nesta a equação 8.40, resulta

$$T|\phi\rangle = \left[V + V\frac{1}{E - H_o + i\epsilon}T\right]|\phi\rangle, \qquad (8.42)$$

de onde concluimos que

$$T = V + V \frac{1}{E - H_o + i\epsilon} T.$$
(8.43)

A equação acima pode ser resolvida de forma iterativa, obtendo-se a seguinte expansão para o operador T,

$$T = V + V \frac{1}{E - H_o + i\epsilon} V + V \frac{1}{E - H_o + i\epsilon} V \frac{1}{E - H_o + i\epsilon} V + \dots$$
(8.44)

Expressando ϕ em auto-estados do momentum, podemos escrever

$$f(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k}), \qquad (8.45)$$

onde

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

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

$$. \tag{8.46}$$

O significado físico da expansão em série do operador transição e da amplitude de transição é ilustrado na Figura 8.5.



Figura 8.5: Interpretação geométrica da expansão em série do operador de transição e da amplitude de transição.

É instrutivo observar o significado do operador T. A equação de Lippman-Schwinger foi derivada partindo da equação de Schrödinger independente do tempo. Com isto, ficamos restritos a tratar de problemas com potencial $V(\vec{r})$ que não dependa do tempo, o que raramente é observado na prática. Se a partícula incidente interage com o núcleo-alvo, alterando o seu estado, o potencial pode ser modificado; se o núcleo alvo recua, o potencial em cada ponto do espaço se altera no tempo, etc.

Uma possível alternativa é usar pacotes de onda incidentes sobre o alvo (Merzbacher), outra solução é escrever a função de onda como uma combinação linear dos auto-estados de $H_o = H - V$, isto é

$$|\Psi^+\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle, \qquad (8.47)$$

onde $|\phi_n\rangle$ são auto-estados de H_o , isto é,

$$H_o|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle, \qquad (8.48)$$

e agora $|\Psi^+\rangle$ é solução da equação de Schrödinger dependente do tempo, ou seja,

$$H|\Psi^{+}\rangle = i\hbar \frac{\partial|\Psi^{+}\rangle}{\partial t}, \qquad (8.49)$$

sendo que para tempos muito anteriores ao instante de interação, $|\Psi^+\rangle$ era igual a um dos auto-estados de H_o , isto é, $|\Psi^+\rangle = |\phi_s\rangle$ pata $t \to \infty$.

À medida que se aproxima da região de interação, $|\Psi^+\rangle$ se transforma, isto é, os coeficientes $c_n(t)$ variam com o tempo. A escolha do operador $T|\phi_s\rangle = V|\Psi^+\rangle$ resulta em

$$T|\phi_{s}\rangle = V|\phi_{s}\rangle + V \frac{1}{E - H_{o} + i\hbar\alpha} T|\phi_{s}\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow T|\phi_{s}\rangle = V|\phi_{s}\rangle + V \frac{1}{E - H_{o} + i\hbar\alpha} \sum_{n} |\phi_{n}\rangle \langle \phi_{n}|T|\phi_{s}\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow T|\phi_{s}\rangle = V|\phi_{s}\rangle + V|\phi_{n}\rangle \frac{1}{E - H_{o} + i\hbar\alpha} \langle \phi_{n}|T|\phi_{s}\rangle \Rightarrow$$

$$\Rightarrow V|\Psi^{+}\rangle = V|\phi_{s}\rangle + V|\phi_{n}\rangle \frac{1}{E - H_{o} + i\hbar\alpha} \langle \phi_{n}|T|\phi_{s}\rangle \Rightarrow$$

$$|\Psi^{+}\rangle = |\phi_{s}\rangle + |\phi_{n}\rangle \frac{1}{E - H_{o} + i\hbar\alpha} \langle \phi_{n}|T|\phi_{s}\rangle,$$
(8.50)

ou seja, para um dado instante t, os coeficientes são

$$c_n(t) = |\phi_s\rangle + |\phi_n\rangle \frac{1}{E - H_o + i\hbar\alpha} \langle \phi_n | T | \phi_s \rangle \,. \tag{8.51}$$

Como os estados $|\phi_n\rangle$ evoluem no tempo de acordo com a equação

$$|\phi_n\rangle = |\phi_n(0)\rangle e^{iE_n t/\hbar}, \qquad (8.52)$$

temos,

$$c_n(t) = \frac{\langle \phi_n(0) | T | \phi_s(0) \rangle e^{i(\frac{E_s - E_n}{\hbar})t}}{\hbar \left(\frac{E_s - E_n}{\hbar} + i\alpha\right)} = \frac{T_{sn} e^{i\omega_{sn}t}}{\hbar (\omega_{sn} + i\alpha)}.$$
(8.53)

O operador T está relacionado à transição entre os diferentes estados $|\phi_n\rangle$. Porém, para garantirmos que $c_n(-\infty) = 0$, devemos introduzir o fator $e^{\alpha t}$, resultando

$$c_n(t) = \frac{T_{sn}e^{i(\omega_{sn}-i\alpha)t}}{\hbar(\omega_{sn}+i\alpha)}.$$
(8.54)

8.3 Matriz de Espalhamento S

Muitas vezes é possível expressar transição entre os estados inicial e final numa colisão através das soluções completas, que são auto-estados da Hamiltoniana H. Para isso defini-se a matriz de espalhamento

$$S_{\beta\alpha} = \langle \Psi_{\beta}^{-} | \Psi_{\alpha}^{+} \rangle \,. \tag{8.55}$$

Obviamente as matriz
sS e Testão relacionadas, e é esta relação que mos
traremos a seguir. Para isso, partimos da equação de Lippman-Schwinger

$$|\Psi_{\alpha}^{\pm}\rangle = |\chi_{\alpha}\rangle + \frac{1}{E - H \pm i\epsilon}T|\chi_{\alpha}\rangle.$$
(8.56)

Da equação (-) segue

$$\chi_{\alpha} = \Psi_{\alpha}^{-} - \frac{1}{E - H - i\epsilon} T \chi_{\alpha} , \qquad (8.57)$$

que, substituída na equação (+), dá

$$\Psi_{\alpha}^{+} = \Psi_{\alpha}^{-} + \left(\frac{1}{E_{\alpha} - H_{o} + i\epsilon} - \frac{1}{E_{\alpha} - H_{o} - i\epsilon}\right) T\chi_{\alpha}, \qquad (8.58)$$

e portanto podemos escrever a matriz de espalhamento definida em (8.55) como

$$S_{\beta\alpha} = \langle \Psi_{\beta}^{-} | \Psi_{\alpha}^{-} \rangle + \left(\frac{1}{E_{\alpha} - H_{o} + i\epsilon} - \frac{1}{E_{\alpha} - H_{o} - i\epsilon} \right) T \chi_{\alpha} \,. \tag{8.59}$$

Mas

$$\frac{1}{E - H_o \pm i\epsilon} = P\left(\frac{1}{E - H_o}\right) \mp \pi i \delta(E - H_o), \qquad (8.60)$$

e portanto

$$S_{\beta\alpha} = \langle \Psi_{\beta}^{-} | \Psi_{\alpha}^{-} \rangle + \langle \Psi_{\beta}^{-} | (-2\pi i) \delta(E_{\alpha} - E_{\beta}) T | \chi_{\alpha} \rangle =$$

= $\delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \delta(E_{\alpha} - E_{\beta}) \langle \Psi_{\beta}^{-} | T | \chi_{\alpha} \rangle =$
= $\delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \delta(E_{\alpha} - E_{\beta}) \langle \Psi_{\beta}^{-} | V | \Psi_{\alpha}^{+} \rangle.$ (8.61)

O termo $\delta(E_{\alpha} - E_{\beta})$ implica em estados $|\beta\rangle \in |\alpha\rangle$ com a mesma energia, portanto podemos fazer

$$\langle \Psi_{\beta}^{-} | V | \Psi_{\alpha}^{+} \rangle = \langle \chi_{\beta} | T | \Psi_{\alpha}^{+} \rangle, \qquad (8.62)$$

e então ficamos com

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \delta (E_{\alpha} - E_{\beta}) T_{\beta\alpha} , \qquad (8.63)$$

ou

$$S = 1 - 2\pi \, iT \,. \tag{8.64}$$

8.4 Método de Ondas Parciais

No caso de um potencial de espalhamento esfericamente simétrico, o operador de transição comuta com \vec{L}^2 e com L_3 , isto é, T é um escalar. Então T é diagonal em l e em m, ou seja

$$\langle E', l', m' | T | E, l, m \rangle = T_l(E) \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$
(8.65)

Além disso, os elementos diagonais não-nulos dependem apenas de E e de l, e não de m, o que traz grandes simplificações matemáticas.

A amplitude de espalhamento fica

$$f(\vec{k'}, \vec{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar} (2\pi)^3 \langle \vec{k'} | T | \vec{k} \rangle$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar} (2\pi)^3 \sum_l \sum_m \sum_{l'} \sum_{m'} \int dE \int dE' \langle \vec{k'} | E'l'm' \rangle \langle E'l'm' | T | Elm \rangle \langle Elm | \vec{k}$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar} (2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{mk} \sum_l \sum_m T_l(E) Y_{lm}(\hat{k'}) Y_{lm}^*(\hat{k})$$

$$= -\frac{4\pi^2 \hbar}{k} \sum_l \sum_m T_l(E) Y_{lm}(\hat{k'}) Y_{lm}^*(\hat{k}).$$
(8.66)

Para uma onda se propagando na direção $\hat{z},$ temos

$$Y_{lm}(\hat{k}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{m0} \,. \tag{8.67}$$

8.4. MÉTODO DE ONDAS PARCIAIS

Agora definimos a amplitude de onda parcial como

$$F_l(k) = -\frac{\pi T_l(E)}{k},$$
(8.68)

que substituída em (8.66) resulta em

$$f(\overrightarrow{k'}\overrightarrow{k}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)f_l(k)P_l(\cos\theta).$$
(8.69)

Vamos estudar com mais detalhes o significado da amplitude parcial, $f_l(k)$. Notemos que uma onda plana incidente ao longo do eixo \hat{z} é dada por

$$\frac{e^{i\,\vec{k}\cdot\vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{l} (2l+1)i^{l}j_{l}(kr)P_{l}(\hat{k}\cdot\hat{r}), \qquad (8.70)$$

e que para r suficientemente grande

$$j_l(kr) \to \frac{e^{i(kr - \frac{\pi}{2}l)} - e^{-i(kr - \frac{\pi}{2}l)}}{2ikr}.$$
 (8.71)

Por outro lado, usando $f(\theta)=f(\overrightarrow{k'},\overrightarrow{k})$ na equação (8.69), temos

$$\langle \vec{x}' | \psi^+ \rangle \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i \vec{k} \cdot \vec{z}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right] = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[\sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \left(\frac{e^{i(kr-\frac{\pi}{2}l)} - e^{-i(kr-\frac{\pi}{2}l)}}{2ikr} \right) + \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) \frac{P_l}{2ik} \left[(1+2ikf_l(k)) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right].$$

$$(8.72)$$

Este resultado mostra que apenas a função de onda esférica que se afasta do centro espalhador (onda emergente) é modificada pelo potencial, mudando o coeficiente de 1 para $1 + 2ikf_l(k)$. A função de onda que se aproxima do centro espalhador (onda imergente) não é afetada.

8.4.1 Unitariedade e Defasagem

A conservação de probabilidade é dada, na formulação independente do tempo, pela equação

$$\overrightarrow{\nabla}.\overrightarrow{j} = -\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2, \qquad (8.73)$$

onde \overrightarrow{j} é a densidade de corrente de probabilidade.

Isto significa que não há "produção" ou "aniquilação" de partículas, e o fluxo de saída deve ser igual ao de etrada. Como vimos acima, a função de onda pode ser decomposta em termos de momento angular bem definidos, e devido à conservação de momento angular, a unitariedade deve ser satisfeita por cada termo desta expansão. Isto significa que a probabilidade relativa ao termo e^{ikr}/r deve ser igual àquela do termo e^{-ikr}/r .

Então o fator

$$S_l(k) = 1 + 2ikf_l(k) \tag{8.74}$$

deve obedecer a relação $|S_l(k)| = 1$. Esta expressão é conhecida como relação de unitariedade, e implica que

$$S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}$$
. (8.75)

Da equação (8.74) segue

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l}}{2ik} = \frac{1}{k \cot g \delta_l - ik} = \frac{e^{i\delta_l} \operatorname{sen} \delta_l}{k}, \qquad (8.76)$$

e a amplitude de espalhamento fica

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left(\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik}\right) P_l(\cos\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} e^{i\delta_l} \operatorname{sen} \delta_l P_l(\cos\theta) \,, \tag{8.77}$$

e a seção de choque total

$$\sigma_{t}(k) = \int |f(\theta)|^{2} d\Omega$$

= $\frac{1}{k^{2}} \int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \sum_{l} \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1)e^{i\delta_{l}} sen\delta_{l}e^{-i\delta_{l'}} sen\delta_{l'}P_{l}P_{l'}$
 $\Rightarrow \sigma_{t}(k) = \frac{4\pi}{k^{2}} \sum_{l} (2l+1)sen^{2}\delta_{l}.$ (8.78)

8.4.2 Espalhamento a Energia Nula e Estados Ligados

O espalhamento a energias extremamente baixas ($k \approx 0$) apresenta algumas simplificações adicionais. De fato, para ondas com l = 0, e para r > R, a função de onda emergente tem sua parte radial determinada pela equação

$$\frac{d^2u}{dr^2} = 0\,, (8.79)$$

que tem solução dada por

$$u(r) = C(r-a).$$
 (8.80)

Com isso obtemos

$$\frac{u'}{u} = k \cot g \left[k \left(r + \frac{\delta o}{k} \right) \right] \rightarrow \frac{1}{r - a}$$
(8.81)

para $k \to 0$. Extrapolando esta aproximação para r = 0, temos

$$\lim_{k \to 0} k \cot g \delta_o = -\frac{1}{a} \,. \tag{8.82}$$

O termo a é chamado comprimento de espalhamento, e é interessante observar que a seção de choque total, nessas condições, é

$$\sigma_t^{(l=0)} = 4\pi \lim_{k \to 0} |\frac{1}{k \cot g \delta_o - ik}|^2 = 4\pi a^2, \qquad (8.83)$$

ou seja, este espalhamento é parecido com o caso clássico quando o alvo tem raio R = a.

Outro resultado interessante é a energia cinética do estado ligado (supondo que haja), que pode ser calculado como

$$\frac{\hbar^2 \kappa'^2}{2m} = E - V_o \approx |V_o|.$$
(8.84)

Como $u \sim e^{-\kappa' r}$, segue

$$\frac{u'}{u} = \frac{-\kappa' e^{-\kappa' r}}{e^{-\kappa' r}} \bigg|_{r=R} = \frac{1}{r-a} \bigg|_{r=R},$$
(8.85)

que no caso de R << a resulta em

$$\kappa' \approx \frac{1}{a} \,, \tag{8.86}$$

e portanto a energia do estado ligado é

$$-E = \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2ma^2} \,. \tag{8.87}$$

8.4.3 Alcance Efetivo e Função de Onda do Dêuteron

Neste caso de espalhamento de baixa energia, onde apenas a componente com l = 0 é importante, pouca informação podemos obter a respeito do potencial espalhador. De fato, é possível mostrar (Breit et al. P.R. 56 (1939) 884) que apenas dois parâmetros podem ser obtidos, como por exemplo o potencial efetivo e o alcance efetivo. Assim, várias formas de potencial podem ser utilizadas para se reproduzir os resultados experimentais nessas condições.

Vamos verificar por que isso ocorre. Uma partícula com energia E_1 é espalhada por um potencial central $U(r) \gg E_1$. Neste caso podemos escrever

$$\frac{d^2u_1}{dr^2} + k_1^2 u_1 - V(r)u_1 = 0, \qquad (8.88)$$

onde $u_1(r) = r\Psi_1(r)$, com Ψ_1 sendo a função de onda para l = 0, $V(r) = mU(r)/\hbar$, sendo m a massa da partícula, e $k_1^2 = mE_1/2\hbar^2$.

Para uma energia E_2 próxima de E_1 teremos uma equação semelhante para $u_2(r)$, isto é,

$$\frac{d^2 u_2}{dr^2} + k_2^2 u_l - V(r)u_2 = 0.$$
(8.89)

Multiplicando-se a primeira por u_2 , a segunda por u_1 , e subtraíndo-se, obtemos

$$u_{2}\frac{d^{2}u_{1}}{dr^{2}} - u_{1}\frac{d^{2}u_{2}}{dr^{2}} + k_{1}^{2}u_{1}u_{2} - k_{2}^{2}u_{1}u_{2} = 0 \rightarrow$$

$$\rightarrow u_{2}\frac{d^{2}u_{1}}{dr^{2}} - u_{1}\frac{d^{2}u_{2}}{dr^{2}} = (k_{2}^{2} - k_{1}^{2})u_{1}u_{2}$$
(8.90)

Integrando-se a equação acima entre 0 e R, onde R é uma distância suficientemente grande comparado ao alcance do potencial U(r), temos

$$\int_{0}^{R} \left[u_{2} \frac{d^{2} u_{1}}{dr^{2}} - u_{1} \frac{d^{2} u_{2}}{dr^{2}} \right] dr = (k_{2}^{2} - k_{1}^{2}) \int_{0}^{R} u_{1} u_{2} dr$$

$$\int_{0}^{R} \left[\frac{du_{1}}{dr} \left(u_{2} \frac{d}{dr} \right) - \frac{du_{1}}{dr} \frac{du_{2}}{dr} - \frac{d}{dr} \left(u_{1} \frac{du_{2}}{dr} \right) + \frac{du_{1}}{dr} \frac{du_{2}}{dr} \right] dr = (k_{2}^{2} - k_{1}^{2}) \int_{0}^{R} u_{1} u_{2} dr$$

$$\left[u_{2} \frac{du_{1}}{dr} - u_{1} \frac{du_{2}}{dr} \right]_{0}^{R} = (k_{2}^{2} - k_{1}^{2}) \int_{0}^{R} u_{1} u_{2} dr$$
(8.91)

Assintoticamente, u(r) é uma função senoidal, já que representa uma partícula "livre", considerando que o potencial nuclear é de curto alcance. Vamos então comparar $u_1(r) \operatorname{com} \psi_1(r) = A_1 \operatorname{sen}(k_1 r + \delta_1)$. Para isso, normalizaremos esta última função de modo que seja igual à unidade, portanto $A = 1/\operatorname{sen}\delta_1$. Da mesma forma, podemos obter ψ_2 correspondente a u_2 . Estas duas funções satisfazem a equação de Schrödinger com U(r) = 0, e portanto também podemos escrever

$$\left[\psi_2 \frac{d\psi_1}{dr} - \psi_1 \frac{d\psi_2}{dr}\right]_0^R = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^R \psi_1 \psi_2 dr \,. \tag{8.92}$$

Subtraindo-se da equação (8.92) a equação (8.91), vem

$$(\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2')(R) - (\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2')(0) - (u_2u_1u_1u_2)(R) + (u_2u_1u_1u_2)(0)$$

= $(k_2^2 - k_1^2) \int_0^R (\psi_1\psi_2 - u_1u_2)dr$. (8.93)

como $u_1 = u_2 = 0$ na origem (pois R(r) = u/r deve ser finita na origem) e tomando r suficientemente grande em relação ao alcance do potencial, de forma que $\psi_1 \approx u_1$ e $\psi_2 \approx u_2$, temos

$$(\psi_2\psi_1' - \psi_1\psi_2') = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^\infty (\psi_1\psi_2 - u_1u_2)dr.$$
(8.94)

O termo do lado esquerdo pode ser facilmente calculado, resultando

$$\psi' = kA\cos(kr + \delta) = k\frac{\cos(kr + \delta)}{\operatorname{sen}\delta}.$$
(8.95)

Com $\psi_1(0) = \psi_2(0) = 1$ devido à normalização escolhida, temos

$$\psi'(0) = k \cot g \delta \,. \tag{8.96}$$

Portanto, temos,

$$k_2 \cot g \delta_2 - k_1 \cot g \delta_1 = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^R (\psi_1 \psi_2 - u_1 u_2) dr \,. \tag{8.97}$$

No caso especial em que $E_1 \approx 0$, de acordo com o formalismo do comprimento de espalhamento, temos

$$k_2 cotg \delta_2 + \alpha = k_2 \int_0^\infty (\psi_1 \psi_2 - u_1 u_2) dr \,, \tag{8.98}$$

onde α é o inverso do comprimento de espalhamento.

A partir daqui usaremos o índice 0 para o caso correspondente a energia nula e suprimiremos o índice 2. Assim temos a relação

$$k \cot g \delta = -\alpha + k \int_0^\infty (\psi_0 \psi - u_0 u) dr \,. \tag{8.99}$$

Este resultado é exato. As funções $\psi e u$ diferem somente na região do potencial. Por outro lado, como na região do potencial $U \gg E$, as funções de onda nessa região são pouco dependentes da energia. Portanto fazemos a aproximação

$$\int_{0}^{\infty} (\psi_0 \psi - u_0 u) dr \approx \int_{0}^{\infty} (\psi_0^2 - u_0^2) dr = \frac{1}{2} r_o , \qquad (8.100)$$

onde definimos o alcance efetivo, r_o . Finalmente, obtemos o resultado

$$kcotg\delta = -\alpha + \frac{k^2}{2}r_o\,. \tag{8.101}$$

O resultado mostrado acima foi obtido por Bethe, e foi muito utilizado para estudar o dêuteron e o espalhamento próton-nêutron. Resultado semelhante foi obtido por Schwinger através de método bem diferente. Podemos chegar ao mesmo resultado através do método de Bethe se usarmos a função de onda do estado ligado do dêuteron, ao invés da função para o estado de energia nula, na equação (8.99), obtendo

$$kcotg\delta = -\gamma - k^2 \int_0^\infty (\psi_g^2 - u_g^2) dr , \qquad (8.102)$$

onde o índice g indica o uso da função do estado fundamental, e

$$\psi_g(r) = e^{-\gamma r} \,, \tag{8.103}$$

 $\operatorname{com} \gamma = \sqrt{mE/\hbar^2}.$

Podemos relacionar os dois resultados, já que a função de onda é pouco dependente da energia na região do potencial, se usarmos o resultado $k cotg\delta = -\alpha$, válido para o estado de energia nula. Com isso temos

$$-\gamma = k \cot g \delta + \frac{k^2}{2} \Rightarrow \alpha = \gamma (1 + \gamma r_o), \qquad (8.104)$$

sendo que neste caso

$$\frac{r_o}{2} = \int_0^\infty (\psi_g^2 - u_g^2) dr \,. \tag{8.105}$$

Como

$$\int_0^\infty \psi_g^2 dr = \frac{1}{2\gamma} \,, \tag{8.106}$$

$$\int_{0}^{\infty} u_{g}^{2} dr = \frac{1}{2\gamma} - \frac{r_{o}}{2} \,. \tag{8.107}$$

temos

Introduzindo um fator de normalização para a função de onda do dêuteron ligado, N_g , obtemos

$$N_g = \left[\frac{2\gamma}{1 - \gamma r_o}\right]^{1/2}.$$
(8.108)

Portanto, podemos escrever a função para o estado ligado como

$$u_g = \left[\frac{2\gamma}{1-\gamma r_o}\right]^{1/2} (e^{-\gamma r} - \chi), \qquad (8.109)$$

onde χ é uma função de r que depende da forma do potencial nuclear.

Aproximação de Hultén

Agora vamos derivar uma outra aproximação para o espalhamento próton-nêutron em baixas energias. Sabemos que uma partícula livre com momento angular nulo obedece à equação

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Psi}{dr}\right) + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi = 0, \qquad (8.110)$$

cuja solução normalizada é a função de Bessel esférica

$$j_o(kr) = \frac{sen(kr)}{kr} \,. \tag{8.111}$$

Como o potencial nuclear é de curto alcance, podemos aproximar a função de onda do sistema prótonnêutron para distâncas relativas grandes em relação ao alcance do potencial, por

$$\Psi(r) = \frac{u(r)}{r} \approx \frac{sen(kr)}{kr} \Rightarrow u(r) \approx \frac{sen(kr)}{k}.$$
(8.112)

Por outro lado, vimos que nas mesmas condições u(r) pode ser aproximado pela função

$$\psi(r) = \frac{sen(kr+\delta)}{sen\delta}, \qquad (8.113)$$

que está normalizada de forma que $\psi(0) = 1$, sendo que podemos escrever

$$u(r) = A\left(\frac{sen(kr+\delta)}{sen\delta} - \chi\right),\tag{8.114}$$

onde $\chi \approx 0$ fora da região do potencial nuclear, e A é uma constante de normalização determinada de modo que $\int_0^\infty u^2 dr = 1$. Esta constante também (re)normaliza $\psi(r)$, isto é $A \int_0^\infty \psi^2 dr = 1$. Mas de acordo com 8.112, uma vez normalizada, $\psi(r)$ deve ser igual a $rj_o(kr)$. Assim podemos determinar a constante de normalização A, já que

$$A\frac{sen(kr+\delta)}{sen\delta} = Asen(kr+\delta)\frac{\sqrt{\alpha^2 + k^2}}{k} = \frac{sen(kr)}{k}.$$
(8.115)

Na expressão acima, utilizamos $\cot g \delta = -\alpha/k \Rightarrow 1/\operatorname{sen} \delta = \sqrt{\alpha^2 + k^2}/k$. Da última igualdade, considerando o limite $\delta \to 0$, obtemos $A = 1/\sqrt{\alpha^2 + k^2}$ e assim a solução para o espalhamento de prótonnêutron fica

$$u(r) = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2 + k^2}} \left(\frac{sen(kr+\delta)}{sen\delta} - \chi \right).$$
(8.116)

Este resultado é conhecido como aproximação de Hulthén.



Figura 8.6: Potencial efetivo.

8.4.4 Espalhamento Ressonante

Devido ao termo centrífugo,

$$V_{cf} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \,, \tag{8.117}$$

podemos escrever o potencial efetivo

$$V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}, \qquad (8.118)$$

que é esquematicamente mostrado na Figura 8.6.

Quando a energia E da partícula incidente se aproxima da energia de um estado quase-ligado, podemos esperar que a seção de choque aumente, e quando ela se afasta, a seção de choque deve diminuir novamente. Assim, a seção de choque deve apresentar um máximo para $E = E_r$, ou seja, δ_l deve ser nulo (para que $|f_l|$ seja máximo) nessas condições.

Com a expansão

$$\cot g \delta_l = \cot g \delta_l|_{E=E_r} - c(E - E_r) + \dots \cong -c(E - E_r), \qquad (8.119)$$

e mantendo apenas o termo de primeira ordem, ficamos com

$$f_l(k) = \frac{1}{k \cot g \delta_l - ik} = \frac{1}{k} \frac{1}{\left[-c(e - E_r) - i\right]} = -\frac{\Gamma/2}{k\left[(E - E_r) + i\Gamma/2\right]},$$
(8.120)

onde

$$-\frac{2}{\Gamma} = -c = \frac{d}{dE} cotg\delta_l \,. \tag{8.121}$$

Daqui obtemos facilmente a contribuição para a seção de choque devido a uma ressonância (isolada) no canal de momento angular l, que é dada pela fórmula de Breit-Wigner,

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}{(E-E_r)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}.$$
(8.122)

Para ressonâncias estreitas, de tal modo que $(1/k^2)$ pode ser considerado aproximadamente constante, Γ pode ser considerada como sendo a largura da curva $\sigma_l(E)$ à metade da altura.

8.5 Teorema Óptico

O teorema óptico relaciona a seção de choque total de espalhamento, σ_t , com a parte imaginária da amplitude de espalhamento elástico frontal. Este resultado tem inúmeras aplicações em física nuclear e em física de partículas.

A amplitude de espalhamento elástica é dada pela função

$$f(\theta) = f(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \overrightarrow{k'} | T | \overrightarrow{k} \rangle.$$
(8.123)

Para $\theta=0,$ temos $\overrightarrow{k'}=\overrightarrow{k},$ e então

$$f(\theta) = f(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k}) = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \langle \overrightarrow{k} | T | \overrightarrow{k} \rangle.$$
(8.124)

Vamos agora calcular a parte imaginária do termo $T_{kk} = \langle \overrightarrow{k} | T | \overrightarrow{k} \rangle$. Inicialmente, temos

$$T_{kk} = \langle \vec{k} | V | \Psi^+ \rangle, \qquad (8.125)$$

mas

$$|\Psi^{+}\rangle = |\overrightarrow{k}\rangle + \frac{1}{E - H + i\eta} V |\Psi^{+}\rangle, \qquad (8.126)$$

 ${
m ent}$ ão

$$|\overrightarrow{k}\rangle = |\Psi^+\rangle - \frac{1}{E - H + i\eta}V|\Psi^+\rangle \rightarrow \langle \overrightarrow{k}| = \langle \Psi^+| - \langle \Psi^+|V\frac{1}{E - H - i\eta}.$$
(8.127)

Substituindo $8.127~\mathrm{em}$
8.125, segue que

$$ImT_{kk} = Im\left[\langle \Psi^+|V|\Psi^+\rangle - \langle \Psi^+|V\frac{1}{E-H-i\eta}V|\Psi^+\rangle\right].$$
(8.128)

Da análise de resíduos, sabemos que

$$\frac{1}{E-H-i\eta} = P\left(\frac{1}{E-H}\right) + i\pi\delta(E-H), \qquad (8.129)$$

então

$$ImT_{kk} = Im\left[\langle \Psi^+|V|\Psi^+\rangle - \langle \Psi^+|V\left(\frac{1}{E-H}\right)V|\Psi^+\rangle + \langle \Psi^+|Vi\pi\delta(E-H)V|\Psi^+\rangle\right].$$
(8.130)

Devido à hemiticidade de V e de P[1/(E-H)], a parte imaginária destes termos é nula, e então

$$ImT_{kk} = -\pi Im\left[\langle \Psi^+ | Vi\pi\delta(E-H)V | \Psi^+ \rangle\right] = -\pi \langle \overrightarrow{k} | T^\dagger\delta(E-H)T | \overrightarrow{k} \rangle, \qquad (8.131)$$

e portanto ficamos com

$$ImT_{kk} = -\pi \int d^3k' \langle \overrightarrow{k} | T^{\dagger} | \overrightarrow{k'} \rangle \langle \overrightarrow{k'} | T | \overrightarrow{k} \rangle \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right).$$
(8.132)

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

$$ImT_{kk} = -\pi \int d\Omega' \int k'^2 dk' |\langle \overrightarrow{k} | T | \overrightarrow{k} \rangle|^2 \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right)$$

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

$$= -\frac{\pi 2mk}{\hbar^2} \int d\Omega' |\langle \overrightarrow{k} | T | \overrightarrow{k} \rangle|^2.$$

(8.133)

Portanto, temos

$$ImT_{kk} = -k\pi \frac{2m}{\hbar^2} \int d\Omega' |\langle \overrightarrow{k} | T | \overrightarrow{k} \rangle|^2, \qquad (8.134)$$

e assim

$$Imf(0) = \left(-\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2}\right) \left(-\pi \frac{mk}{\hbar^2}\right) \int d\Omega' |\langle \overrightarrow{k} | T | \overrightarrow{k} \rangle|^2 \,. \tag{8.135}$$

Por outro lado,

$$|f(\vec{k'},\vec{k})|^2 = \left(-\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 |\langle \vec{k} | T | \vec{k} \rangle|^2 = \frac{d\sigma}{d\Omega}, \qquad (8.136)$$

 ${\rm e}$ então

$$\sigma_t = \left(-\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \int d\Omega' |\langle \overrightarrow{k} | T | \overrightarrow{k} \rangle|^2 \,. \tag{8.137}$$

Dividindo-se a expressão 8.137 pela expressão 8.135, segue que

$$\frac{\sigma_t}{Imf(0)} = \left(-\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3 \frac{2m}{\hbar^2}\right) \left(-\pi \frac{mk}{\hbar^2}\right) = \frac{4\pi}{k}.$$
(8.138)

Assim, resulta finalmente que

$$Imf(0) = \frac{k}{4\pi}\sigma_t \,. \tag{8.139}$$

8.6 Espalhamento por Dois Potenciais

Muitos problemas (se não todos!) da Física Nuclear apresentam interações entre duas partículas enquanto ambas se encontram sob a ação de um outro potencial. Por exemplo, para explicar a emissão ou absorção de um méson por um nucleon ligado ao núcleo atômico temos de levar em conta o potencial de interação, V, para a interação meson-núcleo, mas também o potencial U que descreve a interação do nucleon com o campo nuclear. Há um formalismo, desenvolvido por Gell-Mann e Goldberger, em que esses dois potenciais podem ser levados em conta separadamente.

Vimos que todo problema de espalhamento acaba sendo reduzido ao cálculo dos coeficientes do operador de transição, T. Estes coeficientes são

$$T_{\alpha\beta} = \langle \phi_{\beta} | T | \phi \alpha \rangle = \langle \phi_{\beta} | V | \Psi_{\alpha}^{+} \rangle, \qquad (8.140)$$

já que $V|\Psi_{\alpha}^{+}\rangle = T|\phi_{\alpha}\rangle$, por definição. Quando existem dois potenciais atuando sobre o sistema, podemos escrever a Hamiltoniana como H = K + U + V, onde K leva em conta a parte cinética. Neste caso podemos lidar com três bases para a função de onda:

$$H_{o} = K \rightarrow K\chi_{\alpha} = E_{\alpha}^{(o)}\chi_{\alpha};$$

$$H_{1} = K + U \rightarrow (K + U)\phi_{\alpha} = E_{\alpha}^{(1)}\phi_{\alpha};$$

$$H = K + U + V \rightarrow (K + U + V)\psi_{\alpha}^{+} = E_{\alpha}\psi_{\alpha}^{+}.$$

(8.141)

De acordo com o formalismo que estamos desenvolvendo, podemos escrever duas equações de Lippman-Schwinger,

$$\psi_{\alpha}^{\pm} = \chi_{\alpha} + \frac{1}{E - K \pm i\eta} (U + V) \psi_{\alpha}^{\pm},$$
 (8.142)

 \mathbf{e}

$$\phi_{\alpha}^{\pm} = \chi_{\alpha} + \frac{1}{E - K \pm i\eta} U \phi_{\alpha}^{\pm} \,. \tag{8.143}$$

Da segunda equação, usando a solução ϕ_{α}^{-} , temos

$$\chi_{\alpha} = \phi_{\alpha}^{-} - \frac{1}{E - K - i\eta} U \phi_{\alpha}^{-}, \qquad (8.144)$$

e de 8.141 temos

$$T_{\alpha\beta} = \langle \chi_{\beta} | (U+V) | \psi_{\alpha}^{+} \rangle, \qquad (8.145)$$

8.7. FORMALISMO DE FESHBACH

e agora, usando 8.144e8.145, segue

$$T_{\alpha\beta} = \langle \phi_{\beta}^{-} | (U+V) | \psi_{\alpha}^{+} \rangle - \langle \frac{1}{E-K-i\eta} U \phi_{\beta}^{-} | (U+V) | \psi_{\alpha}^{+} \rangle$$

$$= \langle \phi_{\beta}^{-} | (U+V) | \psi_{\alpha}^{+} \rangle - \langle \phi_{\beta}^{-} | U \left(\frac{1}{E-K+i\eta} (U+V) \right) | \psi_{\alpha}^{+} \rangle .$$
(8.146)

Usando a equação 8.142, temos

$$\frac{1}{E - K + i\eta} (U + V)\psi_{\alpha}^{+} = \psi_{\alpha}^{+} - \chi_{\alpha} , \qquad (8.147)$$

então

$$T_{\alpha\beta} = \langle \phi_{\beta}^{-} | U | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \phi_{\beta}^{-} | V | \psi_{\alpha}^{+} \rangle - \langle \phi_{\beta}^{-} | U | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \phi_{\beta}^{-} | U | \chi_{\alpha} \rangle , \qquad (8.148)$$

portanto

$$T_{\alpha\beta} = \langle \phi_{\beta}^{-} | V | \psi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \phi_{\beta}^{-} | U | \chi_{\alpha} \rangle.$$
(8.149)

Muito cuidado deve ser tomado na avaliação de $T_{\alpha\beta}$ neste caso, pois ϕ_{β}^{-} , e não ϕ_{β}^{+} , deve ser usado. Veja Mott e Massey ou Goldberger e Watson para uma discussão mais aprofundada.

8.7 Formalismo de Feshbach

Já sabemos como separar o potencial nuclear (central) do potencial de interação com os nucleos individuais (interação residual). Agora devemos também separar os pssíveis canais de reação. Existem canais que são fechados ou que simplesmente não nos interessam, e portanto podemos nos concentrar apenas naqueles abertos e que nos interessam em determinado problema.

Os canais que nos interessam são determinados pelo operador de projeção P. Os demais canais estão relacionados ao operador de projeção Q. As relações básicas envolvendo estes operadores são

$$P + Q = 1;$$

$$P^{2} = P;$$

$$Q^{2} = Q;$$

$$PQ = QP = 0.$$

$$(8.150)$$

A Hamiltoniana, então, pode ser escrita como

$$(E - H)\psi = 0 \rightarrow [E - H(P + Q)]\psi = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (E - HP - HQ)\psi = 0 \rightarrow$$

$$\rightarrow (EP - PHP - PHQ)\psi = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (EP - PHPP - PHQQ)\psi = 0,$$
(8.151)

de onde segue que

$$(E - PHP)(P\psi) = PHQ(Q\psi).$$
(8.152)

Os termos PHP e QHQ representam a Hamiltoniana total nos espaços P e Q, respectivamente. Temos, portanto, o seguinte sistemas de equações acopladas:

emos, portanto, o segunite sistemas de equações acopiadas.

$$(E - PHP)P\psi = PHQ Q\psi (a)$$

(E - QHQ)Q\psi = QHP P\psi (b). (8.153)

Da equação 8.153(b), seque

$$Q\psi = \frac{1}{E - QHQ} QHP P\psi \rightarrow Q\psi = \frac{1}{E - QHQ + i\eta} QHP P\psi, \qquad (8.154)$$

e substituíndo-se $Q\psi$ na equação 8.153(a), obtemos

$$(E + PHP)P\psi = PHQ\frac{1}{E - QHQ + i\eta}QHPP\psi, \qquad (8.155)$$

que envolve apenas a componente $P\psi$, resultando

$$\left[PHP + PHQ\frac{1}{E - QHQ + i\eta}QHP\right]P\psi = EP\psi.$$
(8.156)

Se a função ϕ , supostamente conhecida, é solução da equação $(E - PHP)\phi = 0$, então podemos escrever $H_P = H_o + V$, sendo $H_o = PHP$ e

$$V = PHQ \frac{1}{E - QHQ + i\eta} QHP, \qquad (8.157)$$

sendo $H_P P \psi = E P \psi$.

Da equação de Lippman-Schwinger, resulta

$$P\psi = \phi + \frac{1}{E - H_o + i\eta} V P\psi, \qquad (8.158)$$

então

$$P\psi = \phi + \frac{1}{E - PHP + i\eta} PHQ \frac{1}{E - QHQ + i\eta} QHP P\psi.$$
(8.159)

Nesta expressão, ϕ representa o espalhamento elástico pelo potencial U, e o segundo termo do lado direito representa os estados mais complicados que podem ser alcançados quando se considera a interação residual.

O potencial nuclear pode ser escrito na forma U + V, onde U é o potencial nuclear médio e V o potencial residual. Dessa forma, a Hamiltoniana nuclear é H = K + U + V, sendo um caso típico para aplicação do método de potencial duplo que vimos anteriormente.

Seja χ o conjunto dos auto-vetores de K. Pelo resultado obtido para o potencial duplo, temos

$$T_{\beta\alpha} = \langle \phi_{\beta}^{-} | U | \chi_{\alpha} \rangle + \langle \phi_{\beta}^{-} | V | \psi_{\alpha}^{+} \rangle, \qquad (8.160)$$

onde ψ_{α}^+ é solução da equação $(E - H)\psi = 0$.

Se restringirmos o operador de projeção P àquele que projeta apenas sobre os canais de espalhamento pelo potencial U (e também restringirmos a contribuição de V apenas aos estados que não apresentam contínuo), teremos

$$PHP = K + U, \tag{8.161}$$

e, consequentemente,

$$QHQ = V. (8.162)$$

Assim, o primeiro termo de $T_{\beta\alpha}$ representa o espalhamento direto, enquanto que no segundo se encontram os mecanismos de reação mais complexos, onde o núcleo pode atingir configurações complicadas. Neste caso, temos que

$$V = PHQ \frac{1}{E - QHQ + i\eta} QHP, \qquad (8.163)$$

e, devido à definição de U, temos que as soluções para $(K + U)\phi = E\phi$ são tais que $\phi = P\psi^+$, que por sua vez substituído por χ na equação 8.160. Então temos

$$T_{\beta\alpha} = \langle \chi_{\beta}^{-} | U | \chi_{\alpha}^{+} \rangle + \langle \chi_{\beta}^{-} | V | \psi_{\alpha}^{+} \rangle, \qquad (8.164)$$

onde chamamos $T^{(1)}_{\beta\alpha}$ o primeiro termo e $T^{(2)}_{\beta\alpha}$ o segundo. Para este último temos

$$T^{(2)}_{\beta\alpha} = \langle \chi^{-}_{\beta} | PHQ \frac{1}{E - QHQ} QHP | \psi^{+}_{\alpha} \rangle , \qquad (8.165)$$

onde o termo $i\eta$ no denominador do propagador foi eliminado, já que não existem canais abertos para o espalhamento no espaço projetado Q.

Da equação 8.153(b), temos

$$Q\psi = \frac{1}{E - QHQ} QHP\psi, \qquad (8.166)$$

então, substituíndo em 8.165, resulta

$$T_{\beta\alpha}^{(2)} = \langle \chi_{\beta}^{-} | PHQ | Q\psi \rangle.$$
(8.167)

Temos, portanto, de calcular $Q\psi$, o que pode ser facilmente obtido substituíndo-se $P\psi$ na equação 8.153(b), de onde segue

$$(E - QHQ)Q\psi = QHPQ\psi, \qquad (8.168)$$

então

$$(E - QHQ)Q\psi = QHP\chi + QHP\frac{1}{E - PHP + i\eta}PHQQ\psi.$$
(8.169)

Daqui segue que

$$[E - QHQ - QHP[E - PHP + i\eta]^{-1}PHQ]Q\psi = QHP\chi, \qquad (8.170)$$

e finalmente obtemos

$$Q\psi = \frac{1}{E - QHQ - QHP[E - PHP + i\eta]^{-1}PHQ}QHP\chi.$$
(8.171)

Portanto

$$T^{(2)}_{\beta\alpha} = \langle \chi^{-}_{\beta} | PHQ \frac{1}{E - QHQ - QHP \frac{1}{E - PHP + i\eta} PHQ} QHP | \chi^{+}_{\alpha} \rangle.$$

$$(8.172)$$

Este resultado pode ser mais facilmente compreendido se escrevermos, simbolicamente,

$$T_{fi} = T_{fi}^{(D)} + T_{fi}^{(R)}, (8.173)$$

onde $T^{(D)}_{fi}$ corresponde ao termo direto $(T^{(1)}_{\beta\alpha}$ definido acima), e

$$T_{fi}^{(R)} = \langle \chi_f^- | H_{PQ} \frac{1}{E - H_{QQ} - W_{QQ}} H_{QP} | \chi_i^+ \rangle , \qquad (8.174)$$

onde $H_{PQ} = PHQ, H_{QQ} = QHQ$, e

$$W_{QQ} = QHP \frac{1}{E - PHP + i\eta} PHQ.$$
(8.175)

Vamos mostrar que esta expressão leva à fórmula de Breit-Wigner. Para isso, vamos inicialmente escrever a matriz de espalhamento

$$S_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i T_{fi}^{(D)} - 2\pi i T_{fi}^{(R)} \,. \tag{8.176}$$

Para simplificar, vamos supor que só exista um estado no espaço Q pode ser excitado, então $Q = |\phi_q\rangle\langle\phi_q|$. Então

$$H_{QQ} = QHQ = |\phi_q\rangle\langle\phi_q|H|\phi_q\rangle\langle\phi_q|, \qquad (8.177)$$

 \mathbf{e}

$$W_{QQ} = |\phi_q\rangle \langle \phi_q | W | \phi_q \rangle \langle \phi_q | , \qquad (8.178)$$

e portanto segue

$$T_{fi}^{(R)} = \langle \chi_f^- | H_{PQ} | \phi_q \rangle \frac{1}{E - \langle \phi_q | H | \phi_q \rangle - \langle \phi_q | W | \phi_q \rangle} \langle \phi_q | H_{QP} | \chi_i^+ \rangle, \qquad (8.179)$$

onde

$$\langle \phi_q | W | \phi_q \rangle = \langle \phi_q | H_{QP} \frac{1}{E - H_{PP} + i\eta} H_{PQ} | \phi_q \rangle$$

$$= \langle \phi_q | H_{QP} P \left(\frac{1}{E - H_{PP}} \right) H_{PQ} | \phi_q \rangle - i\pi \langle \phi_q | H_{QP} \delta(E - H_{PP}) H_{PQ} | \phi_q \rangle$$

$$(8.180)$$

Então podemos escrever

$$T_{fi}^{(R)} = \frac{\langle \chi_f^- | H_{PQ} | \phi_q \rangle \langle \phi_q | H_{QP} | \chi_i^+ \rangle}{E - E_q + i \frac{\Gamma_q}{2}}, \qquad (8.181)$$

onde

$$E_q = \langle \phi_q | H_{QQ} | \phi_q \rangle + \langle \phi_q | H_{QP} \frac{P}{E - H_{PP}} H_{QP} | \phi_q \rangle , \qquad (8.182)$$

е

$$\Gamma_q = 2\pi \langle \phi_q | H_{PQ} \delta(E - H_{PP}) H_{PQ} | \phi_q \rangle.$$
(8.183)

Na expressão para E_q , o primeiro termo depende exclusivamente da Hamiltoniana nuclear, enquanto que o segundo termo depende também do acoplamento dos estados ligados com o contínuo.

Na expressão de Γ_q , podemos escrever

$$\delta(E - H_{PP}) = \int |\chi_k^+(E_k)\rangle \langle \chi_k^+(E_k)|\delta(E - E_k)dE_k, \qquad (8.184)$$

e então temos

$$\Gamma_q = 2\pi \sum_k \langle \phi_q | H_{PQ} | \chi_k^+(E_k) \rangle \langle \chi_k^+(E_k) | H_{PQ} | \phi_q \rangle , \qquad (8.185)$$

e, se H_{PQ} for hermitiano, obtemos

$$\Gamma_q = 2\pi \sum_k |\langle phi_q | H_{QP} | \chi_k^+ \rangle|^2 \,. \tag{8.186}$$

8.8 Espalhamento Rutherford Quântico

Na mecânica quânica, é muito importante as transições quânicas influenciadas por preturbação externa, enquanto a maioria dos problemas da física estão asociadas a uma transição deste tipo.

Nesse esquema considere um estado num certo momento do tempo $t_0 = 0$. O operador do Hamilton que opera sobre ele tem um parte independente do tempo H_0 e otra parte dependente do tempo, que pode ser considerada uma perturbação V_0 :

o Hamiltoneano completo é:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V(t)} \tag{8.187}$$

onde:

$$V(t) = \begin{cases} \hat{W}(t) & \text{para } 0 \le t \le \tau, \\ 0 & \text{para } t < 0 \text{ ou } t > \tau, \end{cases}$$

$$(8.188)$$

Agora o hamiltoniano é dependente do tempo e não têm estados estacionários que são o resultado da equação de Schrödinger.

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (\hat{H_0} + \hat{V(t)})\psi \tag{8.189}$$

Como na mecânica quânica ordinaria o tempo é um parâmetro, então podemos expandir as funcções das ondas inicial e final:

$$\psi = \sum_{n} a_n(t)\varphi_n \exp\left(-iE_n t/\hbar\right)$$
(8.190)

onde E_n y φ_n são os autoestado e autovalores de H_0 Dando um tratamento perturbativo ao problema de primeira ordem, e aplicando as condiciões de orthogonalidade, a probabilidade de transicção do estado i ao j depois de passado um tempo $\tau \acute{e}$:

$$P_{m \to n} = |a_{nm}|^2 \tag{8.191}$$

onde para a primeira ordem da teoria do perturbações

$$a_{nm}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle n | \hat{W}(t') | m \rangle \exp\left(i\omega_{nm}t'\right) dt'$$
(8.192)

onde $\omega_{nm}t'$ é a freqüência de Bohr associada à diferença de energía entre os estados estacionários inicial e final.

104

Se a perturbação é independente do tempo, então a probabilidade de transição para o sistema de um estado m ao n é simples porque o elemento matricial não depende do tempo e é igual a:

$$P_{mn}(\tau) = \frac{2\pi}{\hbar} \langle n | \hat{W} | m \rangle^2 \tau \delta(E_n - E_m)$$
(8.193)

Nessa equação é assumido que o tempo τ é muito grande em comparação con o periodo caracteístico da trancição $\hbar/(E_n - E_m)$ Em practicamente todos os sistemas físicos, os estados são parte de um grupo de estados contínuos, então a probabilidade de transição para o sistema de um estado m ao um grupo do estado n com a mesma energia por unidade de tempo é:

$$\tilde{P}_{nm} = \int P_{m \to n} \varrho(E_n) dE_n = \frac{2\pi}{\hbar} \langle n | \hat{W} | m \rangle^2 \varrho(E_n)$$
(8.194)

Onde $E_n = E_m$. Esta equação é uma das formas da Regra Áurea de Fermi.

8.8.1 Espalhamento por um Potencial Externo (Aproximação de Born)

A ação de um potencial externo sobre uma partícula cujo momento inicial é suficientemente grande pode ser tratado como método perturbativo. Faremos aproximações sucesivas e como hamiltoniano não perturbado consideraremos o hamiltoniano da partícula livre. Por isso os estado não perturbados são as ondas planas dos elementos da matriz de transição para os estados finais:

$$\langle \vec{k} | W | \vec{k}_0 \rangle = \frac{1}{L^3} \int d^3 r e^{i(\vec{k} - \vec{k}_0)} \tilde{V}$$
 (8.195)

A probabilidade de transição por unidade de tempo do estado inicial \vec{k}_0 para os estados finais \vec{k} são a soma sobre os estados finais. A distribução angular sobre os ângulos que definem a direção do momento final é:

$$\frac{dW}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{L^3} \int_0^\infty dk k^2 |\tilde{V}(\vec{k} - \vec{k}_0)|^2 \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}\right)$$
(8.196)

Essa expressção tem o termo L^3 , então é reporte se a probablidade de transição por unidade de fluxo incidente o que corresponde à seção de choque diferencial $d\sigma/d\Omega_k$

$$d\sigma/d\Omega_{\hat{k}} = \frac{2\pi m^2}{\hbar^4} |\tilde{V}(\vec{k} - \vec{k}_0)|^2_{\vec{k} = k_0 \hat{k}}$$
(8.197)

Por exemplo para o potencial coulombiano blindado:

$$\tilde{V}(\vec{k}) = \pm \frac{Ze^2}{r} e^{\mu r} \tag{8.198}$$

que leva finalmente a

$$d\sigma/d\Omega_{\hat{k}} = \frac{Z^2}{4} \left(\frac{me^2}{\hbar^2 k_0^2}\right)^2 \left(\frac{1}{\sin^2(\frac{\theta}{2}) + \mu^2 4k_0^2}\right)$$
(8.199)

No limite $\mu \to 1,$ essa expressão se reduz à seção de choque de Rutherford.

Exercícios

8.1 Usando $\delta_l = \Delta(b)|_{b=l/k}$, onde $\Delta(b) = -\frac{m}{2k\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{b^2 + z^2}) dz$, mostre que $\delta_l \to 0$ rapidamente quando l aumenta e k permanece fixo. Use o potencial gaussiano

$$V(r) = V_0 exp\left(-\frac{r^2}{a^2}\right) \tag{8.200}$$

8.2 Considere um espalhamento por um potencial repulsivo de casca esférica dado por

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(r) = \gamma\delta(r-R), \ (\gamma > 0) \tag{8.201}$$

- a) Determine uma equação para o deslocamento de fase δ_0 da onda S em função de k $(E = \hbar^2 k^2/2m)$
- b) Considere γ muito grande, $\gamma \gg \frac{1}{R}$, k. Mostre que se tan kR é próxima de zero, o deslocamento de fase da onda S se assemelha ao de um espalhamento por uma esfera rígida. Mostre ainda que se tan kR não é próxima de zero, há ressonância, o que significa que cotg δ_0 vai a zero com valores positivos à medida que k aumenta. Determine aproximadamente as posições das ressonâncias mantendo termos de ordem $1/\gamma$ e compare-as com as energias dos estados ligados para uma partícula confinada no interior da casca esférica de mesmo raio,

$$V = 0, r < R; \quad V = \infty, r > R.$$
 (8.202)

c) Obtenha ainda uma expressão aproximada para a largura de ressonância Γ , definida por

$$\Gamma = \frac{-2}{\left[d(\cot g\delta_0)/dE\right]|_{E=E_r}}$$
(8.203)

Note que as ressonâncias se tornam extremamente estreitas à medida que γ aumenta.

8.3 Considere o potencial dependente do tempo, $V(t) = V_0 e^{-i\omega_0 t}$. Mostre que em aproximação de Born de primeira ordem tem-se a matriz de transição

$$\langle k'|V(t)|k\rangle = 2\pi \langle k'|V_0|k\rangle \delta(\omega_{k'k} - \omega_0)$$
(8.204)

Capítulo 9

Espalhamento Múltiplo por um Sistema de Partículas Ligadas

Quando o comprimento de onda da partícula incidente é comparável às dimensoes dos nucleons, é necessário incluir espalhamentos múltiplos sucessivos entre a partícula incidente e os nucleons alvo.

Vamos inicialmente considerar que a partícula incidente é distinta dos Nnucleons que formam o alvo. A Hamiltoniana do alvo é

$$h = \sum_{\alpha=1}^{N} k_{\alpha} + U, \qquad (9.1)$$

e a equação de onda que descreve o evento é

$$\psi_a^+ = \chi_a + \frac{1}{d} V \psi_a^+ \,, \tag{9.2}$$

onde $d = E_{\alpha} - k + i\eta$, e V representa a soma das interações V_{α} entre a partícula incidente, *i*, e cada um dos alvos α . O termo K na definição de *d* inclui a energia cinética de *i* e das N partículas alvo designadas pelo índice α .

Seja agora t_{α} o operador de transição que descreve o espalhamento de *i* num nucleon α ,

$$t_{\alpha} = V_{\alpha} + V_{\alpha} \frac{1}{d} t_{\alpha} , \qquad (9.3)$$

 com

$$t_{\alpha} = V_{\alpha} + V_{\alpha} \frac{1}{E_a - K - V_{\alpha} + i\eta} V_{\alpha} \,. \tag{9.4}$$

A solução para a equação 9.2 é

$$\psi_a^+ = \chi_a + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d} t_\alpha \psi_\alpha \,, \tag{9.5}$$

com

$$\psi_{\alpha} = \chi_{\alpha} + \sum_{\beta=1,\beta\neq\alpha}^{N} \frac{1}{a} t_{\beta} \psi_{\beta} , \qquad (9.6)$$

Para mostrar 9.5 e 9.6 são solução da equação 9.2, fazemos a substituição diretamente na equação. Primeiro substituímos 9.5 em 9.2, e obtemos

$$\chi_a + \frac{1}{d}V\psi_a^+ = \chi_a + \frac{1}{d}V\left(\chi_a + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}t_\alpha\psi_\alpha\right)$$

$$= \chi_a + \frac{1}{d}t_\alpha V\chi_a + \frac{1}{d}t_\alpha V\sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}t_\alpha\psi_\alpha.$$
(9.7)

Como

$$V = \sum_{\beta=1}^{N} V_{\beta} , \qquad (9.8)$$

temos

$$V\frac{1}{d}t_{\alpha} = V_{\alpha}\frac{1}{d}t_{\alpha} + \sum_{\beta=1,\beta\neq\alpha}^{N} V_{\beta}\frac{1}{d}t_{\alpha} = t_{\alpha} - V_{\alpha} + \sum_{\beta=1,\beta\neq\alpha}^{N} V_{\beta}\frac{1}{d}t_{\alpha}, \qquad (9.9)$$

onde foi usada a equação 9.3. Substituíndo este resultado em 9.7, temos

$$\chi_a + \frac{1}{d}V\psi_a^+ = \chi_a + \frac{1}{d}t_\alpha V\chi_a + \frac{1}{d}\sum_{\alpha=1}^N \left(t_\alpha - V_\alpha + \sum_{\beta=1,\beta\neq\alpha}^N V_\beta \frac{1}{d}t_\alpha\right)\psi_\alpha$$

$$= \chi_a + \frac{1}{d}V\chi_a + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}t_\alpha\psi_\alpha - \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}V_\alpha\psi_\alpha + \sum_{\beta=1,\beta\neq\alpha}^N \frac{1}{d}V_\beta\sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}t_\alpha\psi_\alpha.$$
(9.10)

Usando a equação 9.6 para modificar o último termo, resulta

$$\chi_a + \frac{1}{d}V\psi_a^+ = \chi_a + \frac{1}{d}V\chi_a + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}t_\alpha\psi_\alpha - \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}V_\alpha\psi_\alpha + \sum_{\beta=1,\beta\neq\alpha}^N \frac{1}{d}V_\beta(\psi_\beta - \chi_\alpha)$$

$$= \left(\chi_a + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}t_\alpha\psi_\alpha\right) + \frac{1}{d}V\chi_a - \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d}V_\alpha\psi_\alpha + \sum_{\beta=1,\beta\neq\alpha}^N \frac{1}{d}V_\beta(\psi_\beta - \chi_\alpha) = \psi_\alpha^+,$$
(9.11)

onde o termo entre parênteses é igual a ψ_{α}^+ . Com isso, verificamos que a função definida na expressão 9.5 é solução da equação 9.2.

Notemos que

$$\psi_a^+ = \chi_\alpha + \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{d} t_\alpha \psi_\alpha , \qquad (9.12)$$

 com

$$\psi_{\alpha} = \chi_{\alpha} + \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{1}{d} t_{\beta} \psi_{\beta} , \qquad (9.13)$$

sendo que a última equação pode ser resolvida por uma expansão, resultando

$$\psi_{a}^{+} = \chi_{\alpha} + \frac{1}{d} \left(\sum_{\alpha}' \frac{1}{d} t_{\beta} + \sum_{\alpha}' \sum_{\beta}' \frac{1}{d} t_{\beta} \frac{1}{d} t_{\gamma} + \dots \right) \chi_{\alpha} \,. \tag{9.14}$$

Assim, temos

$$\psi_{\alpha} = \chi_{\alpha} + \frac{1}{d} T \chi_{\alpha} , \qquad (9.15)$$

 com

$$T = \frac{1}{d} \sum_{\alpha}' \frac{1}{d} t_{\beta} + \sum_{\alpha}' \sum_{\beta}' \frac{1}{d} t_{\beta} \frac{1}{d} t_{\gamma} + \dots, .$$
(9.16)

Esta expansão para o operador de transição T é conhecida como série de Watson.

9.1 Aproximação Eikonal

Partículas altamento energéticas, que têm comprimento de onda λ pequeno o suficiente para que o potencial $V(\vec{x})$ tenha variações desprezíveis num intervalo de distância comparável a λ , então uma aproximação semi-clássica - na qual se considera que a partícula descreve uma trajetória, no mesmo sentido que aplicamos para um objeto clássico - pode ser utilizada. Esta aproximação não impede que o potencial $V(\vec{x})$ seja forte, e portanto é diferente da aproximação de Born.

108
9.1. APROXIMAÇÃO EIKONAL

Vamos escrever $\Psi \sim e^{iS(x)/\hbar}$. substituíndo esta função de Schrödinger, obtemos a equação de Hamilton-Jacobi para a ação S,

$$\frac{(\vec{\nabla}S)^2}{2m} + V = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$
(9.17)

Para resolvermos esta equação, adotamos uma trajetória clássica. Além disso, como a partícula deve ter energia relativament alta, sua trajetória será considerada retilínea (já que as deflexões na trajetória são pequenas devido à alta velocidade da partícula). Com essas aproximações, a solução da equação 9.17 se torn muito mais simples. Considerando-se z a direção do movimento da partícula, temos

$$\frac{|\vec{\nabla}S|}{\hbar} = \sqrt{k^2 - V(r)} \to \frac{1}{\hbar} \frac{dS}{dz} = \left[k^2 - \frac{2mV(\sqrt{b^2 + z^2})}{\hbar^2}\right]^{1/2},\tag{9.18}$$

onde b é a distância entre a trajetória da partícula e o eixo z do sistema de coordenadas, comumente chamado de parâmetro de impacto, como ilustrado na Figura 9.1.



Figura 9.1: Geometria da interação.

Então

$$\frac{S}{\hbar} = \int_{-\infty}^{z} k \left[1 - \frac{2m}{\hbar^2 k^2} V(\sqrt{b^2 + z'^2}) \right]^{1/2} dz'.$$
(9.19)

Além disso, como

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} >> V \,, \tag{9.20}$$

pois as partículas são altamente energéticas, temos

$$\frac{S}{\hbar} = kz - \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{z} V(\sqrt{b^2 + z'^2}) dz'.$$
(9.21)

Então

$$\Psi^{+}(\overrightarrow{b} + z\hat{z}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ikz} exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{z} V(\sqrt{b^2 + z'^2}) dz'\right],$$
(9.22)

onde $V=V((\sqrt{b^2+z'^2}).$

Podemos usar Ψ^+ obtido acima para calcular $f(\vec{k'}, \vec{k})$, lembrando que neste caso \vec{k} está na direção de \hat{z} , da seguinte forma

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

$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 x' e^{-i\vec{k'} \cdot \vec{x'}} V e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} exp \left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-infty}^z V dz' \right]$$
(9.23)

Notemos que a única diferença entre esta expresão e aquela da primeira aproximação de Born está no fator

$$exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z}V(\sqrt{b^2+z'^2})dz'\right].$$
 (9.24)

Usando coordenadas cilíndricas para efetuar a integração, temos

$$d^3x' = db \, b \, d\phi \, dz' \,, \tag{9.25}$$

e considerando que

$$(\overrightarrow{k'} - \overrightarrow{k}).\overrightarrow{x} = (\overrightarrow{k'} - \overrightarrow{k}).(\overrightarrow{b} + z\hat{z}), \qquad (9.26)$$

e que $\overrightarrow{k} \perp \overrightarrow{b}$, e também que $(\overrightarrow{k'} - \overrightarrow{k}) \cdot \hat{z} \approx 0$, pois a deflexão θ é pequena (partícula incidente tem alta energia), segue

$$(\overrightarrow{k'} - \overrightarrow{k}) . \overrightarrow{x} = \overrightarrow{k'} . \overrightarrow{b} .$$
 (9.27)

Podemos, sem perda de generalidade (já estamos usando potencial central) nos restringir a espalhamento no plano xz, e neste caso podemos escrever

$$\vec{k'} \cdot \vec{b} = k' bsen\theta cos\phi \cong k' b\theta cos\phi , \qquad (9.28)$$

levando que $sen\theta \sim \theta$ para pequenos ângulos. Então teremos

$$\int_0^\infty b\,db\,\int_0^{2\pi} d\phi\,\int_{-\infty}^\infty dz' e^{-ik'b\theta\cos\phi} V\,exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z'} V\,dz''\right],\tag{9.29}$$

Notando que

$$V \exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{z'} V \, dz''\right] = -\frac{\hbar^2 k}{im} \frac{d}{dz'} \left\{ \exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{z'} V \, dz''\right] \right\},\tag{9.30}$$

segue que

$$\int_{0}^{\infty} b \, db \, \int_{0}^{2\pi} d\phi \, \int_{-\infty}^{\infty} dz' e^{-ik'b\theta\cos\phi} \frac{i\hbar^{2}k}{m} exp \left[-\frac{im}{\hbar^{2}k} \int_{-\infty}^{z'} V \, dz'' \right]_{z'=-\infty}^{z'=-\infty}$$

$$= \int_{0}^{\infty} b \, db \, \int_{0}^{2\pi} d\phi \, e^{-ik'b\theta\cos\phi} \frac{i\hbar^{2}k}{m} \left\{ exp \left[-\frac{im}{\hbar^{2}k} \int_{-\infty}^{\infty} V \, dz'' \right] - 1 \right\}$$

$$= \int_{0}^{\infty} b \, db \, 2\pi J_{o}(kb\theta) \frac{i\hbar^{2}k}{m} \left[e^{2i\Delta(b)} - 1 \right], \qquad (9.31)$$

onde usamos $k\approx k'$ e

$$\int_{0}^{2\pi} d\phi \, e^{-ik'b\theta\cos\phi} = 2\pi J_o(kb\theta) \,, \tag{9.32}$$

onde $J_o(z)$ é a função de Bessel, e

$$\Delta(b) = -\frac{m}{2\hbar^2 k} \int_0^\infty V \, dz \tag{9.33}$$

 $\operatorname{com} V = V(\sqrt{b^2 + z^2}).$

Então obtemos,

$$f(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k}) = -ik \int_0^\infty db \, b \, J_o(kb\theta) \left[e^{2i\Delta(b)} - 1 \right]. \tag{9.34}$$

9.2 Aproximação de Glauber

A aproximação de Glauber permite estudar problemas de espalhamentos múltiplos, onde o alvo é formado por vários centros espalhadores. Obviamente esta aproximação é de grande interesse para a Física Nuclear.

Para chegarmos a esta aproximação por uma via informal, vamos considerar a propagação da luz num mieo com índice de refração η . O vetor campo elétrico, neste caso, é dado por

$$\vec{E} = \vec{E_o} e^{ik(1-\eta)d} = E_o e^{i\eta} , \qquad (9.35)$$

onde \vec{k} é o momento do fóton incidente e d é a espessura do meio atravessado pela luz. O índice η pode ser complexo, sendo neste caso a parte imaginária aquela responsável pela absorção da luz.



Figura 9.2: Comportamento dos nucleons no interior do núcleo durante a interação.

Se houverem vários absorvedores colocados sucessivamente na direção de propagação da onda eletromagnética, o campo será dado por

$$\overrightarrow{E} = \overrightarrow{E_o} e^{i\eta_1} e^{i\eta_2} \dots e^{i\eta_N} = \overrightarrow{E_o} e^{i(\eta_1 + \eta_2 + \dots + \eta_N)}.$$
(9.36)

Na aproximação de Glauber, os nucleons que compõem o núcleo formam os diferentes absorvedores, como indicado na figura 9.2, sendo que, da aproximação eikonal, concluímos que cada um deles contribuirá para a fase final da onda incidente com

$$e^{i\eta_i} = 1 - \Gamma_i(b - s_i), \tag{9.37}$$

onde $\Gamma(b) = 1 - e^{2i\Delta(b)}$ é a chamada função perfil. Agora, como no caso do campo elétrico, fazemos

$$e^{i\eta_t} = \prod_j e^{i\eta_i} = \prod_j [1 - \Gamma_j(b - s_j)] = 1 - \Gamma_t(b), \qquad (9.38)$$

de onda segue que

$$\Gamma_t(b) = 1 - \prod_j [1 - \Gamma_j(b - s_j)].$$
(9.39)

Como os nucleons não ocupam uma posição determinada dentro do núcleo, mas obedecem uma função de onda nuclear, $\Gamma(b)$ deve ser dado por

$$\langle \psi | \Gamma(b) | \psi \rangle = \int d^3 x_1 d^3 x_2 \dots d^3 x_N \psi^*(\overrightarrow{x_1}, \overrightarrow{x_2} \dots \overrightarrow{x_N}) \Gamma(b) \psi(\overrightarrow{x_1}, \overrightarrow{x_2} \dots \overrightarrow{x_N}) , \qquad (9.40)$$

e então temos

$$f(\overrightarrow{k'}, \overrightarrow{k}) = ik \int_0^\infty db \, b J_o(kb\theta) \langle \psi_A | \Gamma(b) | \psi_A \rangle \,. \tag{9.41}$$

9.3 Potencial Óptico

Consideremos o operador de projeção sobre o estado fundamental do núcleo, P_o , definido como

$$P_o|\psi\rangle = |\phi_o\rangle\langle\phi_o|\psi \equiv |\psi_c\rangle. \tag{9.42}$$

O potencial óptico é definido como

$$P_o V |\psi\rangle = \mathcal{V} |\psi_c\rangle \,. \tag{9.43}$$

 Como

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o + i\eta} V |\psi\rangle, \qquad (9.44)$$

segue que, se aplicarmos ${\cal P}_o$ pela esquerda, obtemos

$$|\psi_c\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o + i\eta} \mathcal{V}|\psi_c\rangle.$$
(9.45)

Vamos procurar um operador ${\cal F}$ tal que

$$F|\psi_c\rangle = |\psi\rangle \,. \tag{9.46}$$

Verificamos que

$$F = 1 + \frac{1}{E - H_o + i\eta} (1 - P_o) VF$$
(9.47)

é esse operador, já que

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o + i\eta} V |\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o + i\eta} V F |\psi_c\rangle \\ &= |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_o + i\eta} (1 - P_o) V F |\psi_c\rangle + \frac{1}{E - H_o + i\eta} P_o V F |\psi_c\rangle \end{aligned}$$
(9.48)
$$&= |\phi\rangle + (F - 1) |\psi_c\rangle + \frac{1}{E - H_o + i\eta} \mathcal{V} |\psi_c\rangle = |\psi\rangle \,,$$

onde foram usadas as relações ?? e ??.

Agora fazemos

$$VF = \sum_{i} t_i f_i \,, \tag{9.49}$$

 com

$$t_i = v_i + v_i \frac{1}{E - H_o + i(1 - P_o)t_i}, \qquad (9.50)$$

 \mathbf{e}

$$\psi_{\alpha} = 1 + \frac{1}{E - H_o + i\eta} (1 - P_o) \sum_{\beta \neq \alpha} t_{\beta} \psi_{\beta} .$$

$$(9.51)$$

Com isto temos, da mesma forma como foi obtida a série de Watson,

$$VF = \chi_{\alpha} + \frac{1}{d}(1 - P_o)VF + \frac{1}{d}(1 - P_o)VF\frac{1}{d}(1 - P_o)VF + \dots, \qquad (9.52)$$

e então segue

$$\mathcal{V} = \langle \phi_o | VF | \phi_o \rangle = 1 + \frac{1}{d} (1 - P_o) \mathcal{V} \,. \tag{9.53}$$

Esta expressão nos permite calcular o potencial óptico a partir de uma expansão em série.

112

Referências Bibliográficas

- [1] Chung, K. C., Introdução à Física Nuclear. Rio de Janeiro: EdUERJ, 2001.
- [2] Theo, Mayer-Kuckuk, Física Nuclear: uma introdução. Fundação Calouste Gulbenkian, 1993.
- [3] Rutherford, E., Phil. Mag. 21 (1911) 669. Fac-simile in "Foundations of Nuclear Physics" (Hrsg. R. Beyer), New York 1949.
- [4] Geiger, H., Marsden, E., Phil. Mag. 25 (1913) 604.
- [5] Rutherford, E., Phil. Mag. 37 (1919) 537.
- [6] Symon, K. R., Mecânica. Tradução de Gilson Brand Batista. 2 ed. Rio de Janeiro: Campus, 1988.
- [7] Pollard, E. C., Phys. Rev. 47 (1935) 611.
- [8] Farwell, G W e Wegner, H E. Phys. Rev. 95 (1954) 1212.
- [9] Blair, J S. Phys. Rev. 95 (1954) 1218.
- [10] Pessoa, E. F., Coutinho, F. A. B., Sala, O. Introdução à Física Nuclear. São Paulo: McGraw-Hill do Brasil: Ed. da Universidade de São Paulo, 1978.
- [11] Kaplan, I. Física Nuclear. Tradução de José Goldemberg. 2 ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1978.
- [12] Meyrhof, W. Elements of Nuclear Physics. McGraw-Hill Series in Fundamentals of Physics. McGraw-Hill, 1967.