

AULA 6

MECÂNICA QUÂNTICA II

AULA 6

II - Teoria de Espalhamento

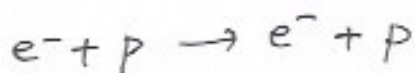
1.0) Ideias Gerais

Possivelmente a técnica experimental mais importante em Física Quântica sejam os experimentos de espalhamento. A descoberta do núcleo atômico por Rutherford espalhando partículas α em uma lâmina fina de Au ou o experimento de Franck-Hertz que estabeleceu a existência de níveis atômicos de energia através do espalhamento de elétrons por átomos de Hg são alguns dos exemplos históricos do uso dessa técnica. No estudo de partículas elementares, experimentos de espalhamento são hoje a forma principal de criação de partículas e já levaram desde o século passado a inúmeras descobertas importantes. Na análise ^{caracterização} de materiais, experimentos de espalhamento, são uma ferramenta muito poderosa. Esse é uma das razões que normalmente nos grandes complexos de aceleradores do mundo há simultaneamente programas de estudo de Física Fundamental e de Física Aplicada.

A teoria que ~~estuda~~ ^{descreve} todos esses processos é a teoria de espalhamento. Há várias divisões possíveis do assunto. Podemos classificar, de acordo com o regime energético, espalhamentos em:

não-relativísticos ou relativísticos
canal único ou múltiplos canais

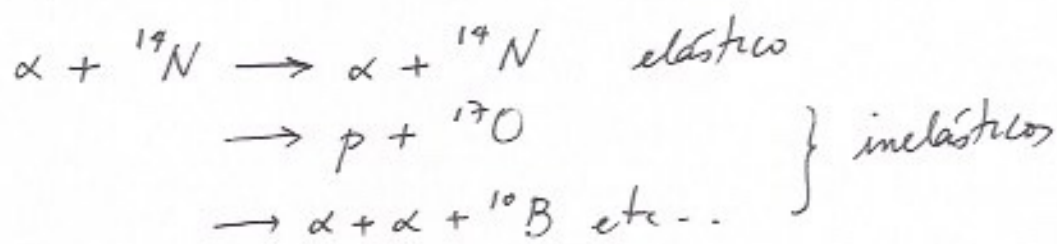
Por exemplo, o processo de canal único



pode ser visto como um processo elástico à baixa energia. Isso é de fato uma idealização, independente da energia incidente e sempre possível produzir T's de baixa energia nesse processo. Logo esse processo não é realmente de canal único, mesmo à baixa energia. Mas em determinadas condições pode ser aproximado como sendo um espalhamento de um único canal. Há vários processos assim.

Na mecânica quântica não-relativística, o espalhamento de uma partícula por um potencial fixo ou o espalhamento de 2 partículas podem fornecer um modelo consistente de espalhamento de um único canal.

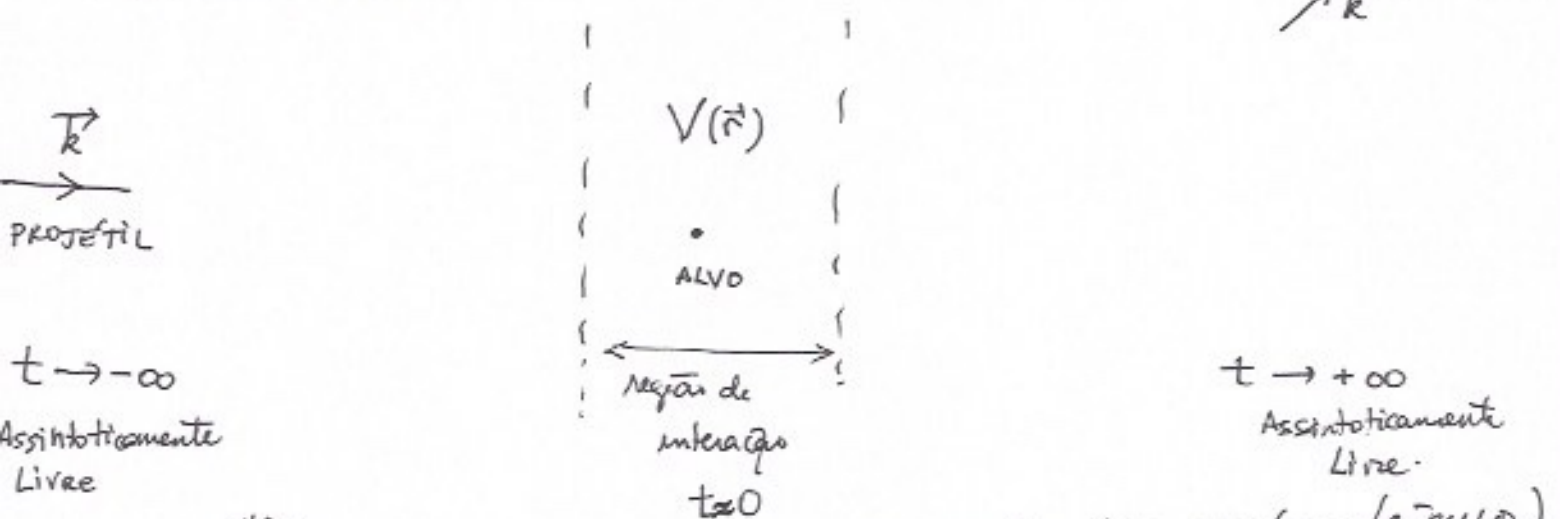
Há também situações em que vários canais sejam significativos, por exemplo,



Vamos começar nosso estudo pela teoria de espalhamento elástico de uma partícula não-relativística por um potencial local. Mas certamente, como já discutimos, espalhamentos podem produzir partículas adicionais, algumas das partículas podem estar se movendo com velocidades relativísticas, o estado inicial pode conter mais de 2 partículas etc. Assim depois de tratar o caso mais simples de espalhamento elástico, vamos apresentar a teoria de espalhamento mais geral que pode tratar todas essas possibilidades. Mesmo que para tratar problemas relativísticos ^{de fato} seja necessário o formalismo de TQC., do ponto de vista de princípios (2)

gerais mecânica quântica dita grande parte do que acontece tanto em espalhamento relativístico como não-relativístico.

2.0) Espalhamento Elástico



Note: ~~na prática~~ mesmo no caso de projéteis muito lentos (ex. neutrons térmicos) incidindo sobre um alvo grande (ex: uma molécula grande) o tempo total de colisão $\lesssim 10^{-10}$ s, isso significa que se centralizarmos a colisão em $t=0$, então $t \rightarrow -\infty \approx -10^{-10}$ s e $t \rightarrow +\infty \approx 10^{-10}$ s.

Obs: Os resultados que discutiremos não são válidos para todos os potenciais $V(\vec{r})$. Claramente se $V(\vec{r}) \rightarrow 0$, $r \rightarrow \infty$ não cai suficientemente rápido a partícula não se comportará como livre à medida que nos afastamos da região de interação. Infelizmente as condições para as quais os resultados principais foram provados são bastante complicadas. Um conjunto de condições que sejam necessárias e suficientes para todos os resultados não é conhecido. Vamos listar aqui um conjunto de condições simples ~~para~~ ^{para as} quais todos os resultados principais valem para um potencial central:

- 1) $V(r)$ cai mais rapidamente que r^{-3} , $r \rightarrow \infty$
- 2) $V(r)$ é menos singular na origem que r^{-2}
- 3) $V(r)$ é contínuo para $0 < r < \infty$ exceto por um

número finito de discontinuidades finitas

No entanto nossos resultados podem ser provados para potenciais mais genéricos que os que obedecem 1) - 3), podemos ver essas condições como um guia indicativo apenas do tipo de potencial em que a teoria funciona.

Considere uma partícula não-relativística de massa μ submetida a um potencial $V(\vec{x})$. O Hamiltoniano

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{x}) = H_0 + V \quad (1)$$

onde H_0 é o operador de energia cinética e $\vec{x}$ é o operador de posição. Vamos admitir de $V(\vec{x}) \rightarrow 0$, $|\vec{x}| \rightarrow \infty$ seja um potencial de curto alcance, i.e. valendo condições 1) - 3)

Estamos interessados em problemas em que uma partícula de momento $\hbar \vec{k}$ vinde de longe da região do alcance do potencial é espalhada e volta para uma região longe do potencial, em geral, mudando de direção.

Na descrição de Heisenberg, essa situação é representada pelo vetor $|\psi_{\vec{k}}^+\rangle$ indicando que o estado consiste de uma partícula de momento $\hbar \vec{k}$ longe da região de espalhamento. Para $t \rightarrow -\infty$ a partícula encontra-se em uma região onde o potencial é desprezível, de forma que tem energia $\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2\mu}$:

$$H |\psi_{\vec{k}}^+\rangle = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2\mu} |\psi_{\vec{k}}^+\rangle \quad (2)$$

Na descrição de Schrödinger o estado depende do tempo

$$e^{-i \frac{Ht}{\hbar}} |\psi_k^+\rangle = e^{-i \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} t} |\psi_k^+\rangle$$

Para interpretar essa definição de $|\psi_k^+\rangle$ precisamos considerar a superposição dependente do tempo dos estados com energia em torno de $E(|k|) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, isto é:

$$|\psi_g; t\rangle = \int d^3k g(k) e^{-i \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} t} |\psi_k^+\rangle \quad (3)$$

onde $g(k)$ é uma função suave picada em algum valor k_0 .
 O estado $|\psi_k^+\rangle$ é definido como uma solução particular de (2) que satisfaz a condição suplementar que para sempre $g(k)$ suficientemente suaves

$$|\psi_g; t\rangle \xrightarrow{t \rightarrow -\infty} \int d^3k g(k) e^{-i \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} t} |\phi_k\rangle \quad (4)$$

ou seja

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} |\psi_g; t\rangle = \int d^3k g(k) e^{-i \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} t} |\phi_k\rangle \quad (4')$$

onde $|\phi_k\rangle$ são autovetores ortogonais do operador momento $\vec{p}$

$$\vec{p} |\phi_k\rangle = \hbar \vec{k} |\phi_k\rangle \quad (5a)$$

$$\langle \phi_k | \phi_{k'} \rangle = \delta(\hbar k - \hbar k') \quad (5b)$$

logo autovetor de H_0 (não de H !) com autovalores (5)

$$E(|\mathbf{k}|) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu}$$

$$H_0 |\phi_{\mathbf{k}}\rangle = E(|\mathbf{k}|) |\phi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (6)$$

a condição de normalização $\langle \psi_g | \psi_g \rangle = 1 \Rightarrow$

$$\frac{1}{h^3} \int d^3k |g(\mathbf{k})|^2 = 1. \quad (7)$$

A equação de Schrödinger (2) com a condição (4') pode ser escrita como

$$(E(|\mathbf{k}|) - H_0) |\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = V |\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle \quad (8)$$

cujas soluções forma é

$$|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle = |\phi_{\mathbf{k}}\rangle + \frac{1}{E(|\mathbf{k}|) - H_0 + i\epsilon} V |\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle \quad (9)$$

solução particular (pointing to $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$)
condição de contorno (pointing to $i\epsilon$)
onda esférica emergente (pointing to $|\psi_{\mathbf{k}}^+\rangle$)

2.1) Equação de Lippmann-Schwinger

Em (9) ϵ é uma parte infinitesimal positiva, essa expressão deve ser compreendida como $\lim_{\epsilon \rightarrow 0}$ deve ser tomado no final do cálculo.

$$\begin{aligned} \langle \vec{x} | \psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle &= \langle \vec{x} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \vec{x} | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V | \psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle \\ &= \langle \vec{x} | \phi_{\mathbf{k}} \rangle + \int d^3x' \langle \vec{x} | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \vec{x}' \rangle \langle \vec{x}' | V | \psi_{\mathbf{k}}^+ \rangle \quad (10) \end{aligned}$$

agora definimos a função de Green

$$G^+(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{\hbar^2}{2\mu} \langle \vec{x} | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \vec{x}' \rangle \quad (11)$$

$$G^+(\vec{x}, \vec{x}') = \frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3p \langle \vec{x} | \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{x}' \rangle$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int d^3p \frac{e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{1}{E - \frac{p^2}{2\mu} + i\epsilon} \frac{e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x}'}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{+ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \quad (12)$$

subs. (12) em (10)

$$\langle \vec{x} | \psi_k^+ \rangle = \langle \vec{x} | \phi_k \rangle - \frac{2\mu}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \int d^3x'' \langle \vec{x}' | V | \vec{x}'' \rangle \psi_k^+(\vec{x}'') \quad (13)$$

$$\langle \vec{x}'' | \psi_k^+ \rangle = \langle \vec{x}'' | \phi_k \rangle - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}') \langle \vec{x}' | \psi_k^+ \rangle \quad (13)$$

$$\vec{k} = k \hat{z}$$

$$\psi_k^+(\vec{x}) = \frac{e^{ikz}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi_k^+(\vec{x}') \quad (14)$$

para $|\vec{x}| \rightarrow \infty$, longe da região de interação

$$|\vec{x}-\vec{x}'| \approx |\vec{x}| - \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{|\vec{x}|}$$

(7)

$$\begin{aligned}
 \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}) &\simeq \frac{e^{i\vec{k}\vec{z}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{i\vec{k}|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}') e^{-i\vec{k}\frac{\vec{x}\cdot\vec{x}'}{|\vec{x}|}} \\
 &= \frac{e^{i\vec{k}\vec{z}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\vec{k}\frac{\vec{x}\cdot\vec{x}'}{|\vec{x}|}} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}') \frac{e^{i\vec{k}|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left\{ \underbrace{e^{i\vec{k}\vec{z}}}_{\text{onda incidente}} + \underbrace{\frac{e^{i\vec{k}|\vec{x}|}}{|\vec{x}|}}_{\text{onda esférica emergente}} \left[\underbrace{-\frac{\mu(2\pi)^{3/2}}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-i\vec{k}\frac{\vec{x}\cdot\vec{x}'}{|\vec{x}|}} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^+(\vec{x}')}_{f_E(\theta, \varphi)} \right] \right\} \quad (14')
 \end{aligned}$$

$$\vec{k}' = k \frac{\vec{x}}{|\vec{x}|} = k \vec{u} \quad e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} = (2\pi)^{3/2} \langle \vec{x}' | \vec{k}' \rangle$$

Assim podemos definir a amplitude de espalhamento:

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{\mu}{\hbar^2} 4\pi^2 \langle \vec{k}' | V | \psi_{\vec{k}}^+ \rangle \quad (15)$$

Vamos denotar $|\psi_{\vec{k}}^+\rangle \equiv |\vec{k}^+\rangle$ e assim podemos reescrever (9) como

$$|\vec{k}^+\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V |\vec{k}^+\rangle \quad (16)$$

Neste ponto é conveniente definir o chamado operador T (operador de transição), tal que

$$T|k\rangle \equiv V|k^+\rangle \quad (17)$$

$$V|k^+\rangle = T|k\rangle \stackrel{(16)}{=} V|k\rangle + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} \overbrace{V|k^+\rangle}^{T|k\rangle}$$

Como $|k\rangle$ é arbitrário, então

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T \quad (18)$$

Dada a definição (15) e usando (17)

$$f(k', k) = -\frac{4\pi^2\mu}{\hbar^2} \langle k' | T | k \rangle \quad (19)$$

← amplitude de espalhamento

É interessante obter uma forma alternativa para (18)

$$(E - H_0)|k\rangle = 0 \Rightarrow (E - H)|k\rangle = -V|k\rangle$$

cuja solução formal é

$$|k\rangle = \underbrace{|k^+\rangle}_{\text{auto estados de } H} - \frac{1}{E - H + i\epsilon} V|k\rangle$$

$$\Rightarrow |k^+\rangle = |k\rangle + \frac{1}{E - H + i\epsilon} V|k\rangle$$

logo

$$T|k\rangle = V|k^+\rangle = \left[V + V \frac{1}{E - H + i\epsilon} V \right] |k\rangle$$

$$\Rightarrow T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \quad (20)$$

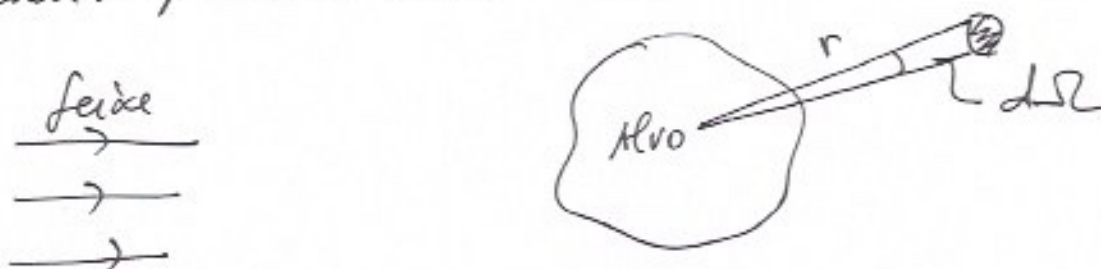
Observação: até aqui trabalhamos com a hipótese que a partícula não tem spin, todavia todo o desenvolvimento formal inclui spin, bastando adicioná-lo ao estado como veremos mais adiante. Note que (18) permite escrever

$$T = V \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} V \right)^j \quad (21)$$

truncando a série em um dado ordem obtemos a amplitude de espalhamento usando (19).
[Veja E. Merzbacher, Quantum Mechanics pg. 219-223 para a dedução com pacotes de ondas]

2.2) Seção de Choque Diferencial

Considere um feixe de partículas não interagentes entre si ou a densidade do feixe baixa o suficiente para não precisar tratar o problema como um problema de muitos corpos



fluxo incidente

O número de partículas espalhadas no ângulo sólido $d\Omega$ por unidade de tempo $\dot{N}_{\text{espalhadas}}$ satisfaz

- (i) $\dot{N}_{\text{esp}}$ é proporcional ao ângulo sólido $d\Omega$ a grandes distâncias
- (ii) $\dot{N}_{\text{esp}}$ é proporcional ao fluxo incidente F_{inc}

A seção de choque diferencial é definida por.

$$\dot{N}_{\text{esp}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega F_{\text{inc}} \quad (22)$$

Utilizemos a corrente de probabilidade para calcular $\dot{N}_{\text{esp}}$ e F_{inc}

$$F_{\text{inc}} = J_z = \frac{\hbar}{2\mu i} \left(\psi_{\text{inc}}^* \vec{\nabla} \psi_{\text{inc}} - \psi_{\text{inc}} \vec{\nabla} \psi_{\text{inc}}^* \right) \Big|_z = \frac{\hbar k}{\mu}$$

$$\vec{J}_{\text{esp}} = \frac{\hbar}{2\mu i} \left(\psi_{\text{esp}} \vec{\nabla} \psi_{\text{esp}}^* - \psi_{\text{esp}}^* \vec{\nabla} \psi_{\text{esp}} \right) = \frac{\hbar k}{\mu} \frac{|f_k|^2}{r^2} \vec{e}_r + \dots + \vec{e}_\varphi$$

↑ termo dominante
p/ $r \rightarrow \infty$

onde usamos

$$\begin{cases} \psi_{\text{inc}} = e^{ikz} \\ \psi_{\text{esp}} = f_k(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r} \end{cases}$$

Logo

$$\dot{N}_{\text{esp}} = \vec{J}_{\text{esp}} \cdot d\vec{S} = r^2 d\Omega \vec{e}_r \cdot \vec{J}_{\text{esp}} = \left(\frac{\hbar k}{\mu} \right) |f_k|^2 d\Omega F_{\text{inc}}$$

$$\frac{\dot{N}_{\text{esp}}}{d\Omega F_{\text{inc}}} = \boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k|^2} \quad (23)$$

amplitude de espalhamento

Note que (23) não se altera se multiplicarmos $\psi_k^+(\vec{x})$ por uma constante N (ex: $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}$). Desprezamos a interferência entre ψ_{inc} e ψ_{esp} no cálculo de $\vec{J}$. Devanemos isso em conta quando formos discutir o teorema ótico.

2.3) Aproximação de Born

Nosso ponto de partida são as equações

$$\psi_k^+(\vec{x}) = e^{ikz} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' \frac{e^{ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} V(\vec{x}') \psi_k^+(\vec{x}') \quad (24)$$

$$e^{ikz} + f_k(\theta, \varphi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{-ik \frac{\vec{x} \cdot \vec{x}'}{|\vec{x}|}} V(\vec{x}') \psi_k^+(\vec{x}') \quad (25)$$

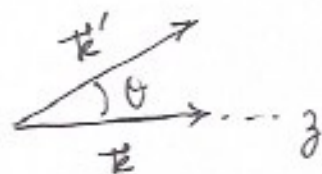
em ordem mais baixa de "perturbação" em V podemos tomar

$$\psi_k^+(\vec{x}) \simeq e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad \text{com } \vec{k} = k \hat{z}$$

desprezando o 2º termo de (24). Assim obtemos a aproximação de Born

$$f_B = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3x' e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{x}'} V(\vec{x}') \quad (26)$$

$$\vec{k}' = \frac{k\vec{x}}{|\vec{x}|} = k\hat{u}$$



que para potenciais esfericamente simétricos $V(r)$

$$f_B = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 d(\cos\theta') \int dr' r'^2 e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}'} V(r')$$

onde $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ $q^2 = k^2 - 2\vec{k}\cdot\vec{k}' + k'^2 = 2k^2 - 2k^2\cos\theta = 2k^2(1 - \cos\theta) = 4k^2\sin^2(\theta/2)$

Tomando o eixo z' como direção de $\vec{q}$

$$f_B = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} 2\pi \int_0^\infty r'^2 V(r') dr' \int_{-1}^1 d(\cos\theta') e^{iqr'\cos\theta'}$$

$$\boxed{f_B(\theta) = -\frac{2\mu}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' V(r') \sin(qr')} \quad (27)$$

Observação:

- (1) $f_B(\theta)$ é função de q ($q^2 = 4k^2\sin^2(\theta/2)$)
- (2) $f_B(\theta)$ é sempre real
- (3) $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ independe do sinal de V
- (4) no limite de baixas energias ($k \rightarrow 0$) $\Rightarrow q \rightarrow 0$, f_B é independente de θ , i.e.

$$f_B \rightarrow -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 V(r')$$