

AULA 10

MECÂNICA QUÂNTICA II

Espalhamento Elástico ($\mu=0$)

Definimos $F_0(\vec{q}) = \frac{1}{Z} \langle \chi_0 | \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_j} | \chi_0 \rangle$ (3.71a)

Fatores de Forma

e $F_N(\vec{q}) = \int d^3x e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} \rho_N(\vec{x})$ (3.71b)

* Note que $F_0(0) = F_N(0) = 1$ por construção
 Temos de (3.71), (3.70) e (3.67) que ($k_i = k_f$)

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega_f} = \left(\frac{(4\pi)^2 e^4 Z^2}{q^4} \frac{M^2}{4\pi^2 \hbar^4} \right) |F_0(\vec{q}) - F_N(\vec{q})|^2 \quad (3.72)$$

seção de choque de Rutherford p/ cargas pontuais.

Vemos que os fatores de Forma no lim $(F_0(\vec{q}) - F_N(\vec{q})) \rightarrow 0$
 $q \rightarrow 0$
 regularizando a divergência $1/q^2$ na direção frontal. Esse
 é uma consequência do fato de termos assumido que o átomo
 é eletricamente neutro e não funciona para um iôn.

Espalhamento Inelástico ($\mu \neq 0$)

$$\frac{d\sigma_{inel}^\mu}{d\Omega_f} = \frac{(4\pi)^2 e^4 Z^2}{q^4} \frac{M^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{k_f}{k_i} \left| \langle \chi_f | \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_j} | \chi_0 \rangle \right|^2 \quad (3.73)$$

$\frac{d\sigma_R}{d\Omega_f} =$ seção de choque de Rutherford
 p/ cargas pontuais

$$= \frac{d\sigma_R}{d\Omega_f} \frac{k_f}{k_i} |\langle \chi_\mu | \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j} | \chi_0 \rangle|^2 \quad (3.74)$$

$$k_i^2 = k_f^2 + 2M\Delta\mu \quad : \quad \Delta\mu \text{ é a energia de excitação do estado atômico } |\chi_\mu\rangle$$

$$\begin{aligned} q^2 &= (\vec{k}_f - \vec{k}_i)^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos\theta \\ &= k_i^2 + k_i^2 - 2M\Delta\mu - 2k_i (k_i^2 - 2M\Delta\mu)^{1/2} \cos\theta \\ &= 2k_i^2 (1 - \cos\theta + \cos\theta) - 2k_i (k_i^2 - 2M\Delta\mu)^{1/2} \cos\theta - 2M\Delta\mu \\ &= 4k_i^2 \frac{\sin^2\theta}{2} - 2k_i [(k_i^2 - 2M\Delta\mu)^{1/2} - k_i] \cos\theta - 2M\Delta\mu \end{aligned}$$

Definimos o fator de forma inelástico

$$F_\mu(\vec{q}) = \frac{1}{Z} \langle \chi_\mu | \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j} | \chi_0 \rangle \quad (3.75)$$

por exemplo, para um átomo de hidrogênio $|\chi_\mu\rangle = |nlm\rangle$

$$\begin{aligned} F_{nlm} &= \langle nlm | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | 100 \rangle \\ &= \int dr r^2 \int d\Omega \frac{u_{nl}^*(r)}{r} Y_{lm}(\hat{r}) \left[\sum_{l'm'} i^{l'} j_{l'}(qr) 4\pi Y_{l'm'}(\hat{r}) \right. \\ &\quad \left. Y_{l'm'}(\hat{q}) \right] Y_{00} \frac{u_{10}(r)}{r} = \sqrt{4\pi} i^l Y_{lm}^*(\hat{q}) \underbrace{\left[\int_0^\infty dr j_l(qr) u_{10}(r) u_{nl}^*(r) \right]}_{I_{nl}(q)} \quad (3.76) \end{aligned}$$

direção $\vec{r}: (\theta, \phi)$

Nos experimentos dificilmente determinamos $m \Rightarrow$ medi-

(51)

vamos somar sobre m

$$\sum_{m=-l}^l |F_{nlm}|^2 = 4\pi |I_{nl}|^2 \sum_m |Y_{lm}^*(\hat{q})|^2$$

$$= 4\pi |I_{nl}|^2 \frac{(2l+1)}{4\pi} P_l(1) = (2l+1) |I_{nl}|^2 \quad (3.77)$$

onde usamos o Teorema de Adição

$$P_l(\hat{n}_1 \cdot \hat{n}_2) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\hat{n}_1) Y_{lm}^*(\hat{n}_2)$$

Assim temos que:

$$\left[\frac{d\sigma_{inel}^{\mu}}{d\Omega_f} = \frac{d\sigma_{inel}^{nl}}{d\Omega_f} = (2l+1) \frac{d\sigma_R}{d\Omega_f} \frac{k_f}{k_i} |I_{nl}(q)|^2 \right] \quad (3.78)$$

no limite $q \rightarrow 0$ (pequenas trocas de momento p/o átomo)

$$f_l(x) \sim x^l, x \rightarrow 0 \Rightarrow f_l(qr) \sim q^l r^l \Rightarrow I_{nl} \propto q^l$$

$$\Rightarrow \frac{d\sigma^{nl}}{d\Omega_f} \sim q^{2l-4} \Rightarrow \text{distribuição angular depende de } l$$

o momento angular do estado atômico excitado

$$q^2 = 4k_i^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} - 2k_i \left[(k_i^2 - 2M\Delta\mu)^{1/2} - k_i \right] \cos \theta - 2M\Delta\mu$$

3.8) Teorema Otus Resultado



Vimos que

$$\sigma_{el} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_{el}(0) = -\frac{4\pi}{k} \left(\frac{4\pi^2 \mu}{\hbar^2} \operatorname{Im} T_{ii} \right)$$

mas

$$-\operatorname{Im} T_{ii} \stackrel{(3.54)}{=} \pi \int da \delta(E_i - E_a) |T_{ia}|^2$$

$$\stackrel{(3.61)}{=} \frac{1}{2} \int da \Gamma_{i \rightarrow a} \stackrel{(3.63)}{=} \frac{1}{2} \frac{v_i}{\Omega} \sigma_{TOT} = \frac{v_i}{16\pi^3 \hbar^2} \sigma_{TOT}$$

$$\sigma_{TOT} = -\frac{16\pi^3 \hbar^2}{\hbar k} \mu \operatorname{Im} T_{ii} = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f_{el}(0) \quad (3.79)$$

↑
seção de choque
total

↑
amplitude de espalhamento
elástico p/ frente

Esse é o resultado devido ao teorema de interferência (veja
Gottfried p. 340-343). Mas apenas os estados espalhados elasti-
camente na direção frontal tem a mesma energia e momento
do estado incidente, que é uma condição p/ que a interferência
entre eles sobreviva em $r \rightarrow \infty$. Essa interferência resulta em
um fluxo menor que o incidente nessa região frontal (devido às colisões) o que deve levar em conta todos os
processos de colisão (elásticos e inelásticos) $\Rightarrow$ espalhamento
inelásticos sempre são acompanhados de espalhamento elástico!

3.9) Ionização: para grandes transferências de momento ter uma probabilidade do átomo ser ionizado. Vejamos o que acontece nesse caso.

$$ZF_\mu = \langle \chi_\mu | \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_j} | \chi_0 \rangle$$

$$\mathbb{1} = \int d^3\vec{p}_1 \dots d^3\vec{p}_Z |\vec{p}_1 \dots \vec{p}_Z\rangle \langle \vec{p}_1 \dots \vec{p}_Z|$$

$$= \int d^3\vec{p}_1 \dots d^3\vec{p}_Z \int d^3\vec{p}'_1 \dots d^3\vec{p}'_Z \langle \chi_\mu | \vec{p}_1 \dots \vec{p}_Z \rangle \langle \vec{p}_1 \dots \vec{p}_Z | \sum_{j=1}^Z e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_j} | \vec{p}'_1 \dots \vec{p}'_Z \rangle$$

$$\langle \vec{p}'_1 \dots \vec{p}'_Z | \chi_0 \rangle \quad (3.80) \quad \uparrow \quad \text{funções de onda no espaço dos momentos}$$

Usando o operador deslocamento no espaço dos momentos

$$\langle \vec{p}_j | e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}_j} | \vec{p}'_j \rangle = \langle \vec{p}_j | \vec{p}'_j + \vec{q}\hbar \rangle = \delta(\vec{p}_j - \vec{p}'_j - \hbar \vec{q})$$

assim escrevemos (3.80) como

$$ZF_\mu = \sum_{j=1}^Z \int d^3\vec{p}_1 \dots d^3\vec{p}_Z \phi_\mu^*(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_j - \hbar \vec{q}, \dots, \vec{p}_Z) \phi_0(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_j, \vec{p}_Z)$$

em geral esse overlap é pequeno para $\vec{q}$ grande se $|\chi_\mu\rangle$ for um estado ligado.

Vejamos o que acontece quando 1 elétron é arrancado do átomo. Para exemplificar tomemos $Z=1$ (átomo de hidrógênio). Nesse caso:

$$\vec{F}_{\vec{p}_f} = \langle \vec{p}_f | e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} | \chi_0 \rangle = \langle \vec{p}_f - \vec{q} \hbar | \chi_0 \rangle = \Phi_0(\underbrace{\vec{p}_f + \hbar(\vec{k}_f - \vec{k}_i)}_{\vec{p}_i})$$

Note a conservação de momento

$$\vec{p}_i = \vec{p}_f + \hbar \vec{k}_f - \hbar \vec{k}_i$$

Lembramos que agora devemos somar sobre os estados finais do e^- ejetado

$$\rho_f = \frac{d^3 k_f}{d^3 E_f} \frac{d^3 p_f}{d^3 E_f} = \frac{d^3 k_f}{d^3 E_f} \frac{1}{11} \frac{d^3 p_f}{d^3 E_f} \text{ usando em (3.74)}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f d^3 p_f} = \frac{d\sigma_R}{d\Omega_f} \frac{k_f}{k_i} |\Phi_0(\vec{p}_f + \hbar \vec{k}_f - \hbar \vec{k}_i)|^2$$

$\left\{ \begin{array}{l} \rightarrow \text{elctron ejetado} \\ \rightarrow \text{feixe espalhado} \end{array} \right.$

3.10) Espalhamento de Partículas com Spin (Elastico)

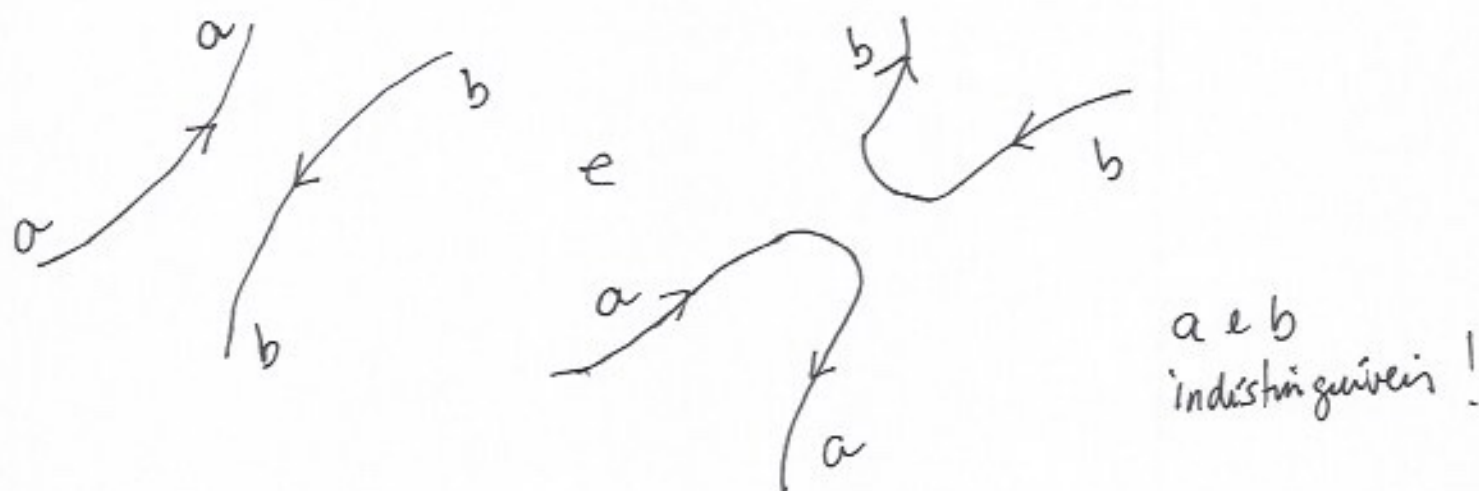
3.10 a) Espalhamento de Partículas Idênticas

Heurístico: No C.M. a troca de partículas idênticas de spin $\uparrow$ corresponde a fazer $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$. Como a função de onda deve ser simétrica neste caso é razoável exigir que para o espalhamento elástico devemos também ter uma simetria, i.e.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2$$

$$= |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 + 2 \operatorname{Re} [f(\theta) f^*(\pi-\theta)]$$

Esta expressão leva em conta 2 processos indistinguíveis



Se as partículas forem distinguíveis os 2 primeiros termos ~~descrevem~~ a $\pi\pi$ de choque. Porém para partículas indistinguíveis temos também o termo de interferência. Note que a interferência é construtiva para $\theta = \pi/2$

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{ind.}} (\theta = \pi/2) = 4 |f(\theta = \pi/2)|^2$$

enquanto que

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{dist}} (\theta = \pi/2) = 2 |f(\theta = \pi/2)|^2$$

No caso de espalhamento de partículas de spin $1/2$, o estado total é da forma

$$\psi(1,2) = \underbrace{e^{i \vec{p} \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/\hbar}}_{\text{mov. da CM}} \underbrace{\varphi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}_{\text{no CM}} \underbrace{\chi(s_1, s_2)}_{\text{Spin}}$$

A simetria de troca implica que:

- (i) se o spin total é zero $\Rightarrow \psi$ é simétrica
- (ii) se o spin total é 1 $\Rightarrow \psi$ é antissimétrica

O caso (i) é como o caso de partículas de spin 0

No caso (ii)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2 - 2\text{Re}[f^*(\theta)f(\pi-\theta)]$$

para $\theta = \pi/2$ $\frac{d\sigma}{d\Omega} = 0$

No caso do alvo e do feixe serem polarizados, todas as configurações de spin têm a mesma probabilidade e a seção de choque é

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4} \underbrace{|f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2}_{\text{spin } 0} + \frac{3}{4} \underbrace{|f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2}_{\text{spin } 1}$$

No caso de partículas idênticas a seção de choque total é

$$\sigma_{TOT} = \frac{1}{2} \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}$$

O fator $1/2$ é devido ao fato que as direções $\vec{n}$ e $-\vec{n}$ serem indistinguíveis pois as partículas são idênticas!

Mostre: na expansão de ondas parciais a parte espacial (57)

for simétrica (antisimétrica) l é par (ímpar)!

Vamos agora analisar, de modo geral, o espalhamento de 2 partículas de massa m_1 e m_2 e spin S_1 e S_2 . No CM o estado inicial é

$$|\vec{k}_i, s_1^i, s_2^i\rangle \equiv |\vec{k}_i, \nu_i\rangle \equiv |i\rangle$$

representa o estado de spin de 2 partículas

e o estado final é

$$|\vec{k}_f, s_1^f, s_2^f\rangle \equiv |\vec{k}_f, \nu_f\rangle \equiv |f\rangle$$

b) Seção de Choque e Polarização

Descreveremos o estado de spin inicial através de uma matriz densidade

$$\rho_i = \sum_n |\nu_n\rangle p_{i,n} \langle \nu_n| \quad (3.81)$$

onde $p_{i,n}$ é a probabilidade do sistema estar no estado $|\nu_n\rangle$.
Caso o alvo e o feixe não estejam polarizados $p_{i,n} = \frac{1}{N_S}$
i.e. todos os estados de spin são igualmente prováveis.

$$\langle \nu_f | M(\vec{k}_f, \vec{k}_i) | \nu_i \rangle \equiv -\frac{4\pi^2 \mu}{\hbar^2} \langle \vec{k}_f, \nu_f | T | \vec{k}_i, \nu_i \rangle \quad (3.82)$$

Note que há $N_S = (2S_1+1)(2S_2+1)$ estados de spin no processo.
Se o estado inicial é dado por uma matriz densidade ρ_i
no espaço dos spins, o final está associado à matriz
densidade ρ_f nesse espaço; $\vec{k}_i$ e $\vec{k}_f$ estão fixos!

Como a Equação de Schrödinger é linear há uma relação linear entre ρ_i e ρ_f

INICIAL		FINAL
$ v_i\rangle$	$\longrightarrow$	$M(\vec{k}_f, \vec{k}_i) v_i\rangle$
$\Downarrow$		$\Downarrow$
$\sum_n v_n\rangle \langle v_n \rho_{i,n}$	$\longrightarrow$	$\sum_n M v_n\rangle \langle v_n M^\dagger \rho_{i,n}$

logo

$$\rho_f = N_f M \rho_i M^\dagger \quad (3.83)$$

$\hookrightarrow$ normalização

$$\text{Tr}[\rho_f] = 1 \implies N_f = [\text{Tr}[M \rho_i M^\dagger]]^{-1} \quad (3.84)$$

dado o estado ρ_i a prob. de choque somada sobre todos os spins finais e iniciais é

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{n,m} \underbrace{|\langle v_m | M(\vec{k}_f, \vec{k}_i) | v_n \rangle|^2}_{\frac{d\sigma}{d\Omega} \text{ p/cada configuração de spin}} \rho_{i,n}$$

prot. da configuração inicial

$$= \sum_{n,m} \underbrace{\langle v_m | M | v_n \rangle \rho_{i,n}}_{\rho_i} \langle v_n | M^\dagger | v_m \rangle = \text{Tr}[M \rho_i M^\dagger] \quad (3.85)$$

(i) Espalhamento spin 0 $\otimes$ spin 1/2

$N_s = 2$. Vamos admitir que o alvo tenha spin 0 e o feixe spin 1/2. A forma mais geral para M para uma interação invariante por rotações é

$$M = g_1 \mathbb{1} + g_2 (\vec{k}_i \times \vec{k}_f) \cdot \vec{\sigma} + g_3 (\vec{k}_i + \vec{k}_f) \cdot \vec{\sigma} + g_4 (\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{\sigma}$$

g_i são funções de $k = |\vec{k}_i| = |\vec{k}_f|$ e do ângulo θ entre $\vec{k}_i$ e $\vec{k}_f$.

Admitindo que a interação seja invariante por paridade $\Rightarrow$ M também deve ser invariante por paridade

$$\begin{array}{lcl} \vec{k}_i & \longrightarrow & -\vec{k}_i \\ \vec{\sigma} & \longrightarrow & \vec{\sigma} \end{array} \quad \Rightarrow \quad g_3 = g_4 = 0$$

Note que

$$\Pi |\nu\rangle = |\nu\rangle \Rightarrow \Pi M |\nu\rangle = M |\nu\rangle = \Pi M \Pi |\nu\rangle$$

$$\Rightarrow M = \Pi M \Pi$$

Logo podemos escrever

$$\boxed{M = g(k, \theta) + h(k, \theta) \hat{n} \cdot \vec{\sigma}} \quad (3.86) \quad \boxed{\hat{n} = \frac{\vec{k}_i \times \vec{k}_f}{|\vec{k}_i \times \vec{k}_f|}}$$

A interação mais geral compatível com conservação de paridade é

$$V = V_0(r) + \vec{\sigma} \cdot \vec{L} V_1(r) \quad (3.87) \quad (60)$$

caso o feixe seja não polarizado, i.e. $S_i = 1/2$ a expressão de choque diferencial é dada por:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{Tr} \left[(g + h \hat{n} \cdot \vec{\sigma}) \frac{1}{2} (g^* + h^* \vec{\sigma} \cdot \hat{n}) \right] = |g|^2 + |h|^2 \quad (3.88)$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \hat{n}) = \hat{n} \cdot \hat{n} = 1 \quad \text{não depende de } \phi$$

É possível calcular a polarização das partículas espalhadas. Definimos a polarização do feixe espalhado por

$$\text{Tr} [S_f \vec{\sigma}] \equiv \vec{P}_f \quad (3.89)$$

Usando (3.85), (3.86), (3.88)

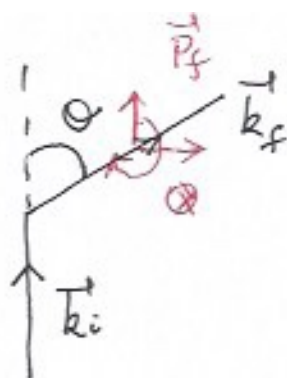
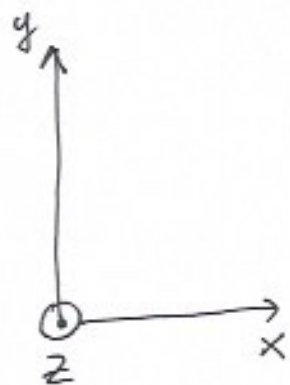
$$S_f = \frac{M S_i M^\dagger}{\text{Tr} [M S_i M^\dagger]} = \frac{M S_i M^\dagger}{\frac{d\sigma}{d\Omega}} = \frac{M S_i M^\dagger}{|g|^2 + |h|^2} = \frac{1}{2} \frac{(g + h \hat{n} \cdot \vec{\sigma})(g^* + h^* \vec{\sigma} \cdot \hat{n})}{|g|^2 + |h|^2}$$

$$= \frac{|g|^2 + |h|^2 + \vec{\sigma} \cdot \hat{n} (g^* h + h^* g)}{2(|g|^2 + |h|^2)}$$

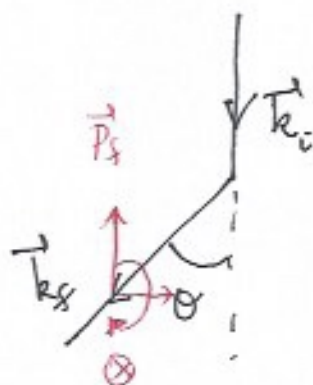
logo

$$\vec{P}_f = \text{Tr} \left[\vec{\sigma} \frac{|g|^2 + |h|^2 + \vec{\sigma} \cdot \hat{n} (g^* h + h^* g)}{2(|g|^2 + |h|^2)} \right] = \hat{n} \frac{g^* h + h^* g}{|g|^2 + |h|^2} \quad (3.90)$$

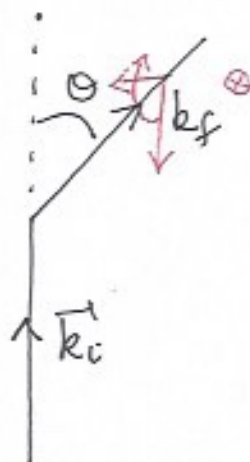
Note que $\vec{P}_f$ é $\perp$ ao plano de espalhamento. Vamos entender a razão desse fato. Seja xy o plano de espalhamento



Reflexão (Paridade)
 $y \rightarrow -y, x \rightarrow -x$



Rotação de
 π em torno de z



se invariância por rotação e reflexão são observadas, pela interação
então as probabilidades de espalhamento mostradas nessas
figuras devem ser iguais. Observe que as componentes de $\vec{P}_f$
no plano de espalhamento mudaram de sinal depois dessas
operações $\Rightarrow P_{fx} = P_{fy} = 0$, enquanto que a componente $\perp$ ao plano
não mudou! Quando um feixe não polarizado de spin
arbitrário é espalhado de um alvo não polarizado de spin (6.2)

arbitrário, as polarizações do spin final dos projéteis são normais ao plano de espalhamento se a interação for invariante por reflexão espacial (resultado geral!)

No caso de feixes polarizados

$$P_i = \frac{1}{2} (1 + \vec{P}_i \cdot \vec{\sigma}) \quad (3.91)$$

temos que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \text{Tr} [(g + h \vec{\sigma} \cdot \hat{n}) (1 + \vec{P}_i \cdot \vec{\sigma}) (g^* + h^* \vec{\sigma} \cdot \hat{n})]$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{a})(\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \text{Tr} [|g|^2 + |h|^2 + hg^* (\hat{n} \cdot \vec{P}_i + i(\hat{n} \times \vec{P}_i) \cdot \vec{\sigma}) +$$

$$gh^* (\hat{n} \cdot \vec{P}_i + i(\vec{P}_i \times \hat{n}) \cdot \vec{\sigma}) + |g|^2 \vec{P}_i \cdot \vec{\sigma} + |h|^2 ((\hat{n} \cdot \vec{P}_i + i(\hat{n} \times \vec{P}_i) \cdot \vec{\sigma}) \vec{\sigma} \cdot \hat{n} +$$

$$(\hat{n} \cdot \vec{P}_i) \vec{\sigma} \cdot \hat{n} + i^2 ((\hat{n} \times \vec{P}_i) \times \hat{n}) \cdot \vec{\sigma}]$$

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} = |g|^2 + |h|^2 + \hat{n} \cdot \vec{P}_i (hg^* + gh^*) \right| \quad (3.92)$$

Note que neste caso a seção de choque pode depender de ϕ !