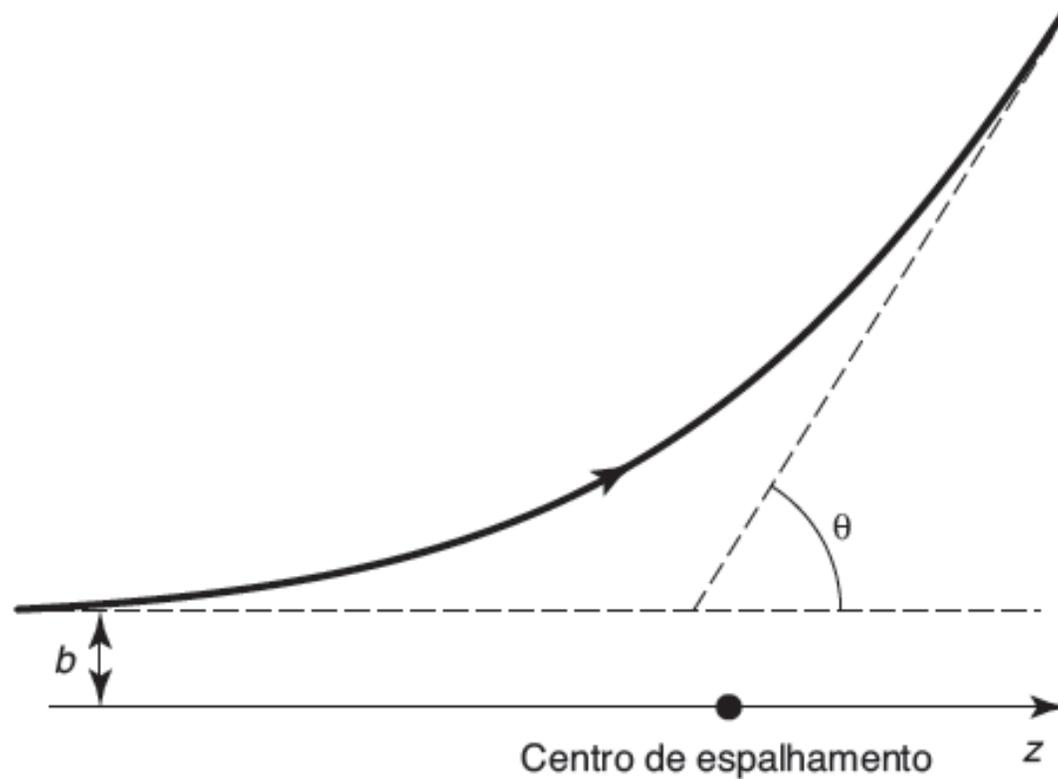


# Introdução à Teoria Quântica de Espalhamento

SFI5905 – IFSC/USP

(2021)

## Teoria do espalhamento clássico



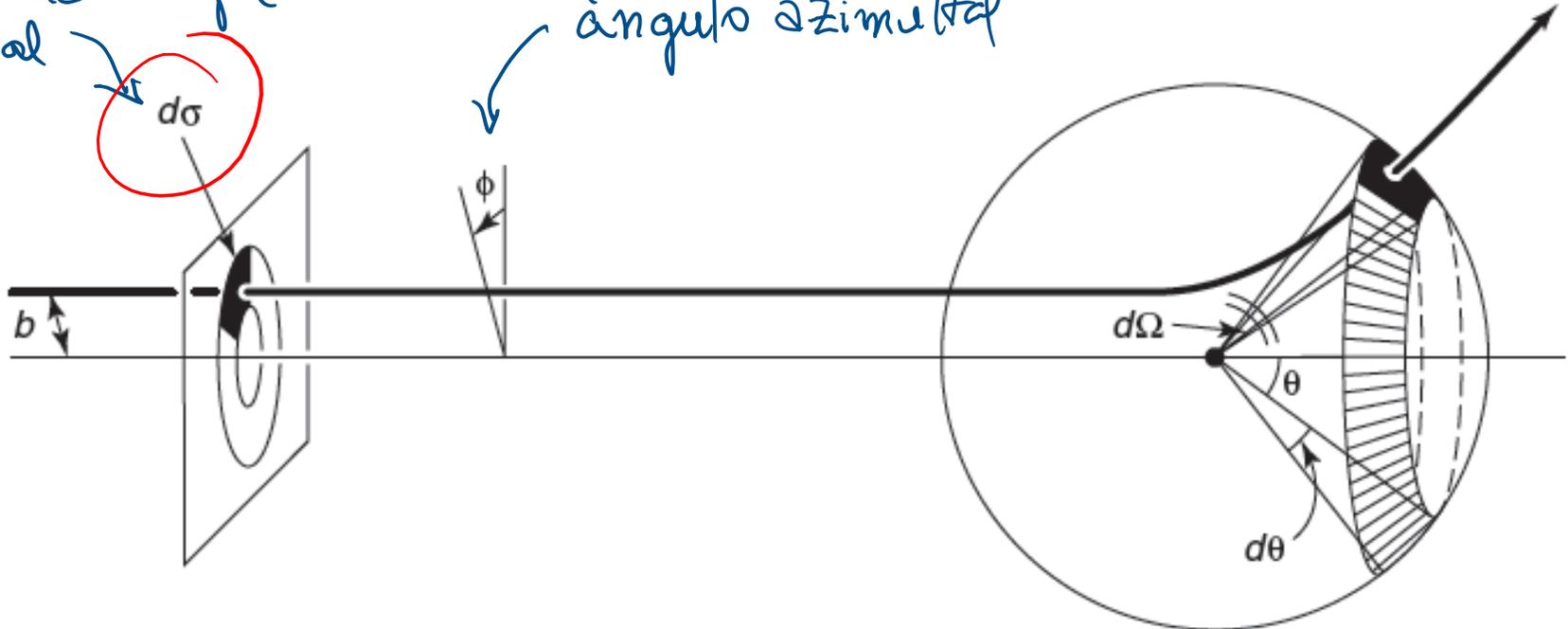
Problema clássico de espalhamento mostra o *parâmetro de impacto*  $\underline{b}$  e o *ângulo de espalhamento*  $\underline{\theta}$

O principal problema da teoria do espalhamento clássico é:  
*Calcular o ângulo de espalhamento com base no parâmetro de impacto dado.*

# Teoria do espalhamento clássico

Seções de choque diferencial

ângulo azimutal



$$D(\theta) \equiv \frac{d\sigma}{d\Omega}$$



$$D(\theta) = \frac{b}{\text{Sen}\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|$$

$$d\sigma = D(\theta) d\Omega$$

$$\sigma \equiv \int D(\theta) d\Omega$$

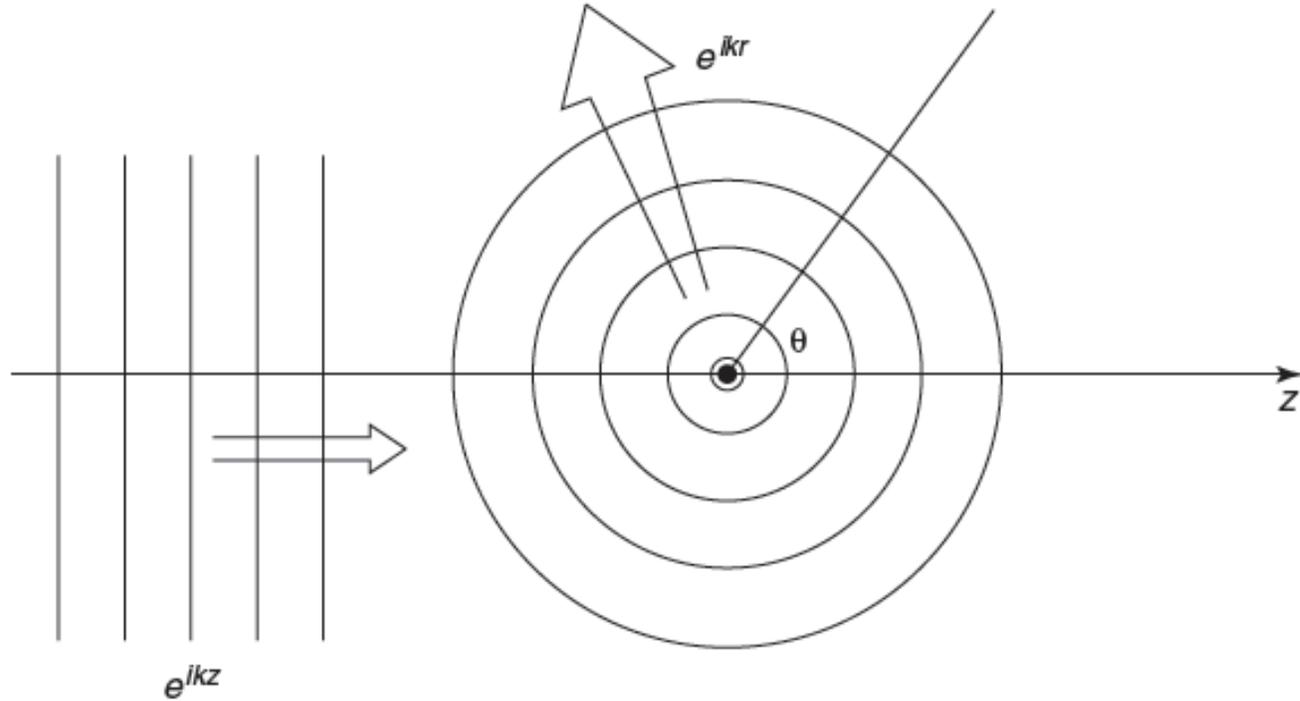
Seções de choque total

fator de proporcionalidade

Exemplo:

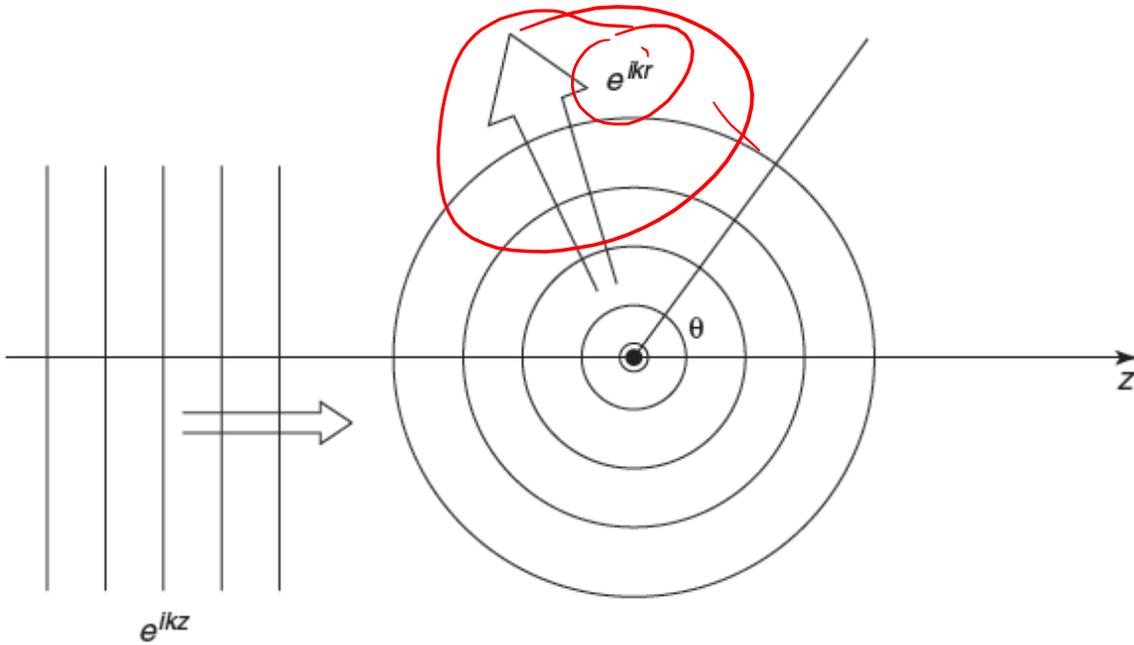
$$\sigma = \frac{R^2}{4} \int d\Omega = \pi R^2 \text{ (esfera compacta)}$$

# Teoria do espalhamento quântico



Espalhamento de ondas: onda plana de entrada gera uma onda esférica de saída.

# Teoria do espalhamento quântico



O **número de onda**  $k$  está relacionado à energia das partículas incidentes de modo usual:

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

No espalhamento quântico, buscamos **soluções para eq. de Schroedinger na forma:**

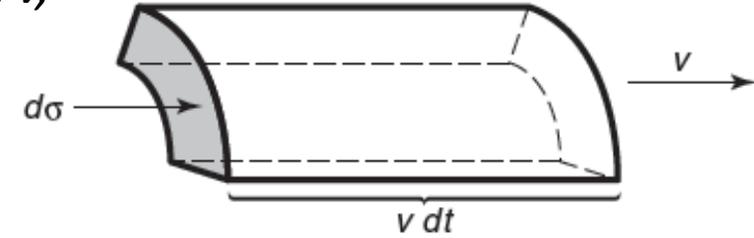
$$\psi(r, \theta) \approx A \left[ e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

↑  
 $r \gg \lambda$  (grandes valores de  $r$ )

Problema resume-se a *determinar a amplitude de espalhamento*

$$\underline{\underline{f(\theta)}}$$

A probabilidade de que a partícula incidente, que se move em uma velocidade  $v$ , passe por meio da área infinitesimal  $d\sigma$  em tempo  $dt$  é dada por



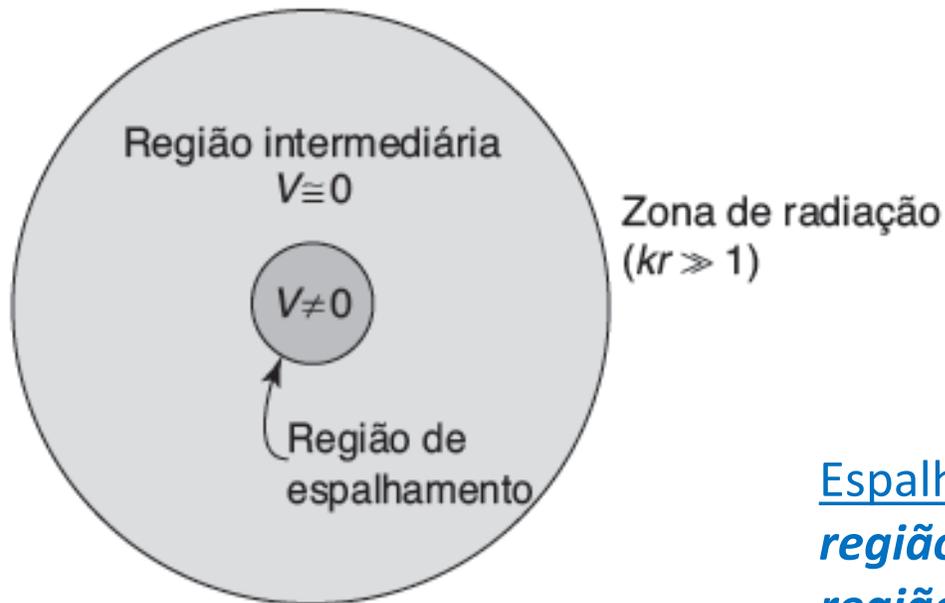
$$d\mathcal{P} = |\psi_{inc}|^2 dV = |A|^2 (v dt) d\sigma$$

isso é igual à probabilidade de que a partícula se espalhe no ângulo sólido correspondente  $d\Omega$   
... portanto:

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

# Análise de ondas parciais

Na teoria de espalhamento unidimensional, estabelecemos que o potencial está 'localizado', de modo que, externamente a uma região de espalhamento finita, é essencialmente zero.



Espalhamento por um potencial localizado:  
*região de espalhamento* (sombreado mais escuro),  
*região intermediária* (sombreado mais claro) e  
*zona de radiação* (em que  $kr \gg 1$ ).

# Análise de ondas parciais: formalismo

Na região intermediária, a equação radial vem a ser

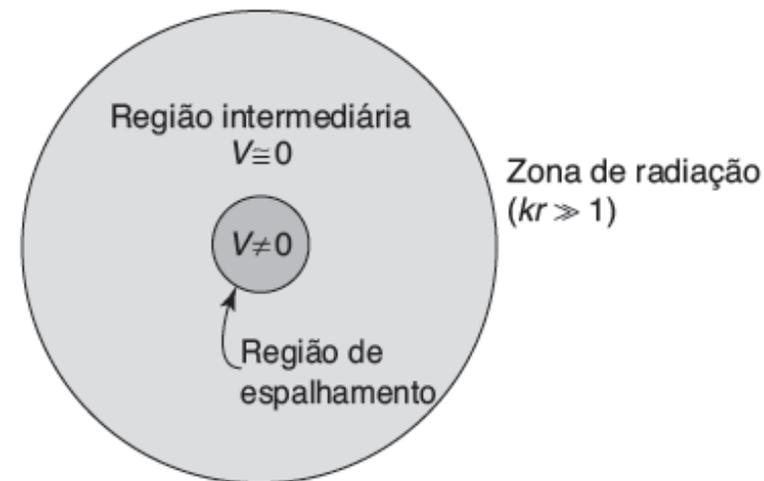
$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} u = -k^2 u,$$

e a solução geral é uma combinação linear de funções esféricas de Bessel:

$$u(r) = A r j_l(kr) + B r n_l(kr).$$

Precisamos das combinações lineares equivalentes a  $e^{ikr}$  e  $e^{-ikr}$ ; elas são conhecidas como **funções esféricas de Hankel**:

$$h_l^{(1)}(x) \equiv j_l(x) + i n_l(x); \quad h_l^{(2)}(x) \equiv j_l(x) - i n_l(x);$$



# Análise de ondas parciais: formalismo

Para ondas de saída, precisamos de *funções esféricas de Hankel do primeiro tipo*:

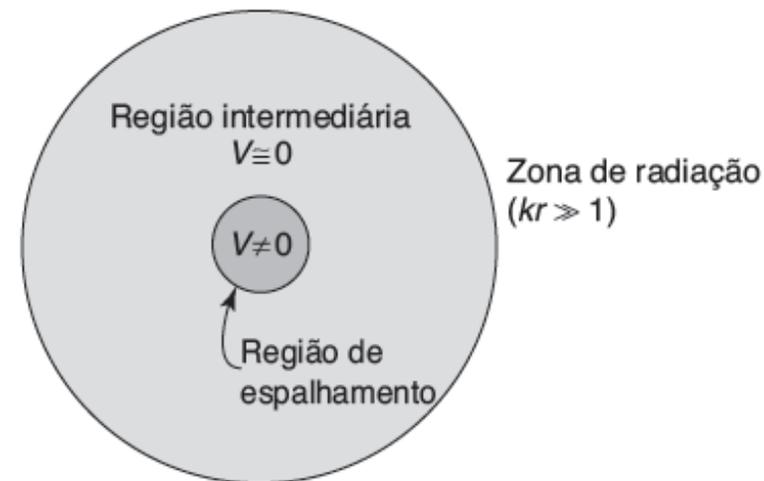
$$\mathcal{R}(r) \sim h_l^{(1)}(kr)$$

Assim, a função de onda exata, fora da região de espalhamento, é

$$\psi(r, \theta, \phi) = A \left\{ e^{ikz} + \sum_{l,m} C_{l,m} h_l^{(1)}(kr) Y_l^m(\theta, \phi) \right\}.$$

Onde usamos os harmônicos esféricos

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta),$$



# Análise de ondas parciais: formalismo

É comum redefinir os coeficientes de expansão,

$$\psi(r, \theta) = A \left\{ e^{ikz} + k \sum_{l=0}^{\infty} i^{l+1} (2l+1) a_l h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos \theta) \right\}.$$

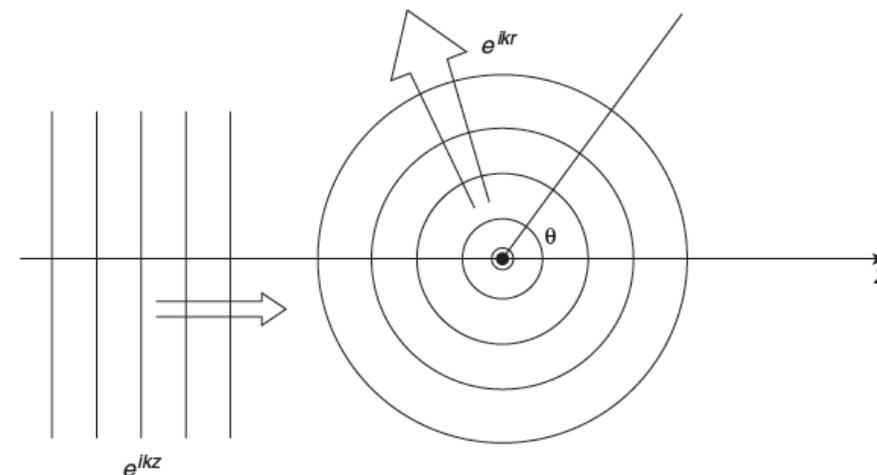
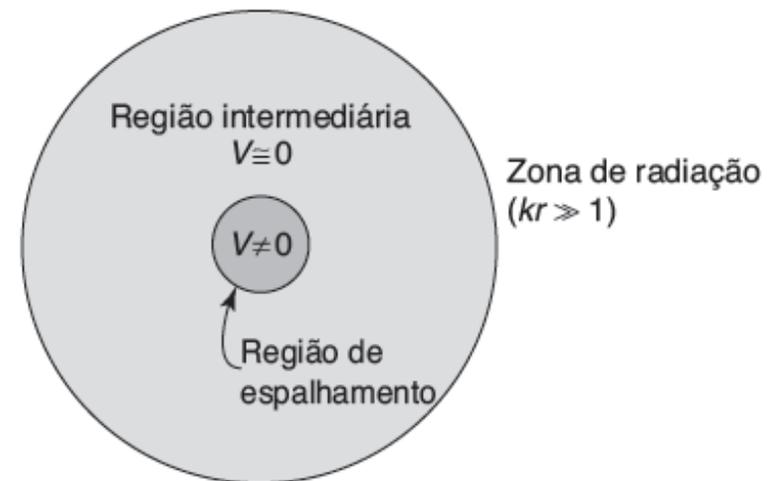
$a_l$  é chamada de  $l$ -ésima **amplitude de onda parcial**.

Para  $r$  muito amplo, então,

$$\psi(r, \theta) \approx A \left\{ e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right\},$$

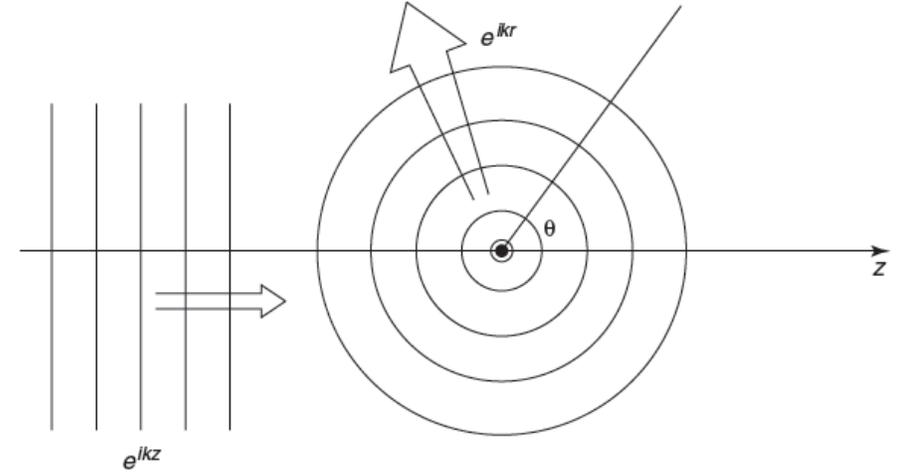
em que

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta)$$



# Análise de ondas parciais: formalismo

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos\theta)$$



A seção de choque diferencial é

$$D(\theta) = |f(\theta)|^2 = \sum_l \sum_{l'} (2l+1)(2l'+1) a_l^* a_{l'} P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta),$$

e a seção de choque total é

$$\sigma = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2.$$

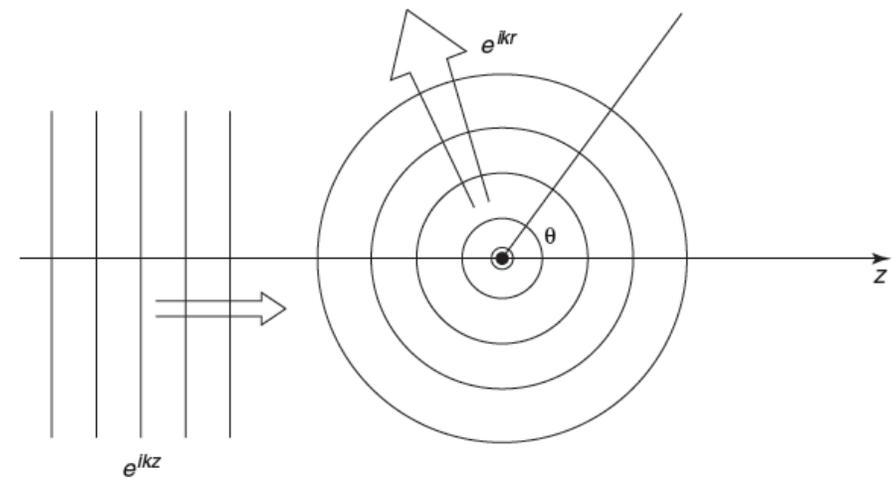
## Análise de ondas parciais: estratégia

A expansão explícita de uma onda plana em termos de ondas esféricas é conhecida como **fórmula de Rayleigh**:

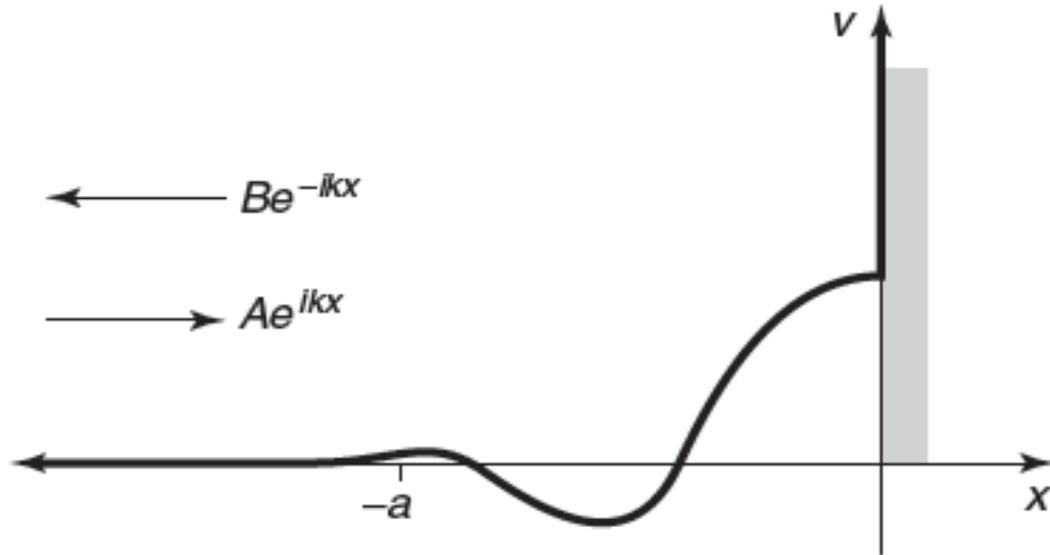
$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta).$$

Utilizando essa equação, a função de onda na região exterior pode ser expressa inteiramente em termos de  $r$  e  $\theta$  :

$$\psi(r, \theta) = A \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \left[ j_l(kr) + ik a_l h_l^{(l)}(kr) \right] P_l(\cos \theta).$$



# Mudança de fase



*Espalhamento unidimensional a partir de um potencial localizado limitado à direita por uma parede infinita.*

Uma 'parede de tijolos' em  $x = 0$   
Onda incidente da esquerda

$$\psi_i(x) = Ae^{ikx} \quad (x < -a),$$

é inteiramente refletida

$$\psi_r(x) = Be^{-ikx} \quad (x < -a).$$

Se não houver nenhum potencial, então  $B = -A$ , pois a função de onda total deve desaparecer na origem:

$$\psi_0(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) \quad (V(x) = 0).$$

Se o potencial *não* é zero, a função de onda toma a seguinte forma:

$$\psi(x) = A(e^{ikx} - e^{i(2\delta - kx)}) \quad (V(x) \neq 0).$$

Toda a teoria do espalhamento se reduz ao problema do cálculo da **mudança de fase  $\delta$** , para um potencial especificado.

# Mudança de fase

Toda a teoria do espalhamento se reduz ao problema do cálculo da **mudança de fase  $\delta$** , para um potencial especificado.

No caso tridimensional, como o momento angular é conservado, as **ondas parciais** se espalham independentemente, sem mudança na amplitude, somente na fase.

Se não houver nenhum potencial, a ( $l$ -ésima) onda parcial é

$$\psi_0^{(l)} = A i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta) \quad (V(r)=0).$$

Mas

$$j_l(x) = \frac{1}{2} [h_l^{(1)}(x) + h_l^{(2)}(x)] \approx \frac{1}{2x} [(-i)^{l+1} e^{ix} + i^{l+1} e^{-ix}] \quad (x \gg 1).$$

Assim, **para  $r$  grande**: 
$$\psi_0^{(l)} \approx A \frac{(2l+1)}{2ikr} [e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr}] P_l(\cos\theta) \quad (V(r)=0).$$

# Mudança de fase

Toda a teoria do espalhamento se reduz ao problema do cálculo da **mudança de fase  $\delta$** , para um potencial especificado.

Assim, para  $r$  grande: 
$$\psi_0^{(l)} \approx A \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[ e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right] P_l(\cos\theta) \quad (V(r) = 0).$$

O primeiro termo é a onda de saída e terá uma mudança de fase  $\delta_l$  :

$$\psi^{(l)} \approx A \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[ e^{i(kr+2\delta_l)} - (-1)^l e^{-ikr} \right] P_l(\cos\theta) \quad (V(r) \neq 0).$$

De fato, comparando a forma assintótica 
$$\psi^{(l)} \approx A \left\{ \frac{(2l+1)}{2ikr} \left[ e^{ikr} - (-1)^l e^{-ikr} \right] + \frac{(2l+1)}{r} a_l e^{ikr} \right\} P_l(\cos\theta)$$

encontramos

$$a_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \text{sen}(\delta_l).$$

## Análise em termos de ondas parciais

$$\psi(r, \theta) = A \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \left[ j_l(kr) + ik a_l h_l^{(1)}(kr) \right] P_l(\cos \theta).$$

Toda a teoria do espalhamento se reduz ao problema do cálculo da **mudança de fase  $\delta$** , para um potencial especificado.

$$a_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{1}{k} e^{i\delta_l} \text{sen}(\delta_l).$$

Segue-se que:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \text{sen}(\delta_l) P_l(\cos \theta)$$

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta)$$

e

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \text{sen}^2(\delta_l).$$

$$\sigma = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2.$$

# Espalhamento: Aproximação de Born

## Forma integral da equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger independente do tempo pode ser escrita mais sucintamente como  $(\nabla^2 + k^2)\psi = Q$ ,

em que  $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$  e  $Q \equiv \frac{2m}{\hbar^2}V\psi$ .

Essa notação tem a forma superficial da **equação de Helmholtz**.

# Espalhamento: Aproximação de Born

## Forma integral da equação de Schrödinger

Suponha que possamos encontrar uma função  $G(\mathbf{r})$  que resolva a equação de Helmholtz com uma 'fonte' *função delta*:  $(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r})$ .

Então, poderemos expressar  $\psi$  como uma integral:  $\psi(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) Q(\mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0$ .

$G(\mathbf{r})$  é chamada de **função de Green** para a equação de Helmholtz.

A primeira tarefa é resolver essa equação para  $G(\mathbf{r})$ . Seja

$$G(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}} g(\mathbf{s}) d^3\mathbf{s}.$$

# Espalhamento: Aproximação de Born

## Forma integral da equação de Schrödinger

*Após uma série de considerações e cálculos... obtém-se:*

$$G(\mathbf{r}) = \frac{i}{8\pi^2 r} \left[ \left( i\pi e^{ikr} \right) - \left( -i\pi e^{ikr} \right) \right] = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}.$$

*Essa é a função de Green para a equação de Helmholtz.*

Ou melhor, é *uma* função de Green para a equação de Helmholtz, pois podemos acrescentar ao  $G(\mathbf{r})$  qualquer função  $G_0(\mathbf{r})$  que satisfaça a equação *homogênea*:  $(\nabla^2 + k^2)G_0(\mathbf{r}) = 0$ ;

a solução geral para a equação de Schrödinger tem a forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} V(\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r}_0)d^3\mathbf{r}_0,$$

em que  $\psi_0$  satisfaz a equação de Schrödinger de partícula *livre*,  $(\nabla^2 + k^2)\psi_0 = 0$ .

# Aproximação de Born

## A primeira aproximação de Born

Suponha que  $V(\mathbf{r}_0)$  esteja localizado em torno de  $\mathbf{r}_0 = 0$  e queiramos calcular  $\psi(\mathbf{r})$  em pontos *bem distantes* do centro de espalhamento

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2 = r^2 + r_0^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_0 \cong r^2 \left( 1 - 2 \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}_0}{r^2} \right),$$

e, portanto,  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \cong r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}_0$ .      Seja  $\mathbf{k} \equiv k\hat{\mathbf{r}}$ ;

então,  $e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \cong e^{ikr} e^{-ik \cdot \mathbf{r}_0}$ ,      logo  $\frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} \cong \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik \cdot \mathbf{r}_0}$ .

# Aproximação de Born

## A primeira aproximação de Born

No caso do espalhamento, queremos  $\psi_0(\mathbf{r}) = Ae^{ikz}$ ,

Para  $r$  grande, então,  $\psi(\mathbf{r}) \cong Ae^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ik \cdot \mathbf{r}_0} V(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0$ .

Podemos observar a amplitude de espalhamento:

$$f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 A} \int e^{-ik \cdot \mathbf{r}_0} V(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0.$$

# Aproximação de Born

## A primeira aproximação de Born

Agora, invocaremos a **aproximação de Born**: suponha que a onda plana de entrada *não seja muito alterada pelo potencial*; então, faz sentido usar

$$\psi(\mathbf{r}_0) \approx \psi_0(\mathbf{r}_0) = Ae^{ikz_0} = Ae^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_0},$$

em que  $\mathbf{k}' \equiv k\hat{z}$ ,

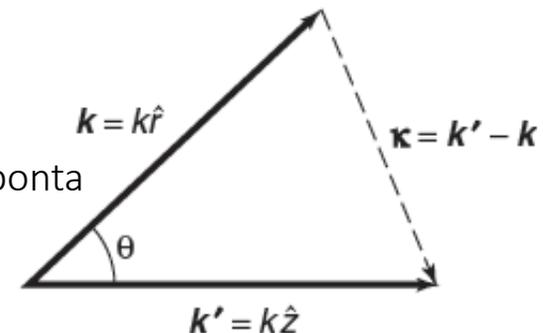
Na aproximação de Born, então,

$$f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_0} V(\mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0.$$

Em especial, no caso do **espalhamento de baixa energia**, o fator exponencial é essencialmente constante na região de espalhamento, e a aproximação de Born é simplificada para

$$f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (\text{baixa energia}).$$

Dois vetores de onda na aproximação de Born:  $\mathbf{k}'$  aponta na direção incidente, e  $\mathbf{k}$  na direção espalhada.



# Aproximação de Born

## A primeira aproximação de Born

Para um **potencial esfericamente simétrico**, a aproximação de Born é reduzida novamente a uma forma mais simples. Ela define  $\kappa \equiv \mathbf{k}' - \mathbf{k}$

e permite que o eixo polar para a integral  $\mathbf{r}_0$  fique junto a  $\mathbf{\kappa}$ , de modo que  $(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_0 = \kappa r_0 \cos \theta_0$ .

Então, 
$$f(\theta) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\kappa r_0 \cos \theta_0} V(r_0) r_0^2 \sin \theta_0 dr_0 d\theta_0 d\phi_0.$$

Descartando o subscrito em  $r$ , resta-nos

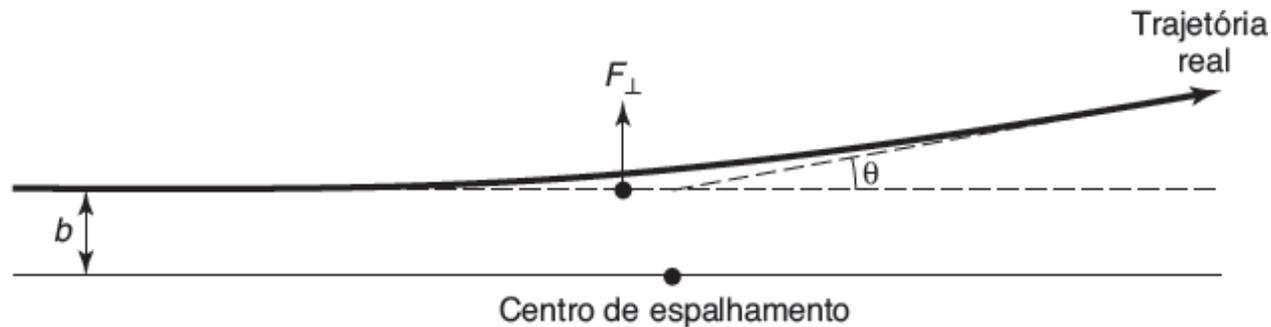
$$f(\theta) \cong -\frac{2m}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty r V(r) \text{sen}(\kappa r) dr \quad (\text{simetria esférica}).$$

# Aproximação de Born

## A série de Born

A aproximação de Born é similar, em princípio, à **aproximação de impulso** na teoria do espalhamento clássico.

Na aproximação de impulso, começamos com a simulação de uma linha reta sobre a qual a partícula se mantém

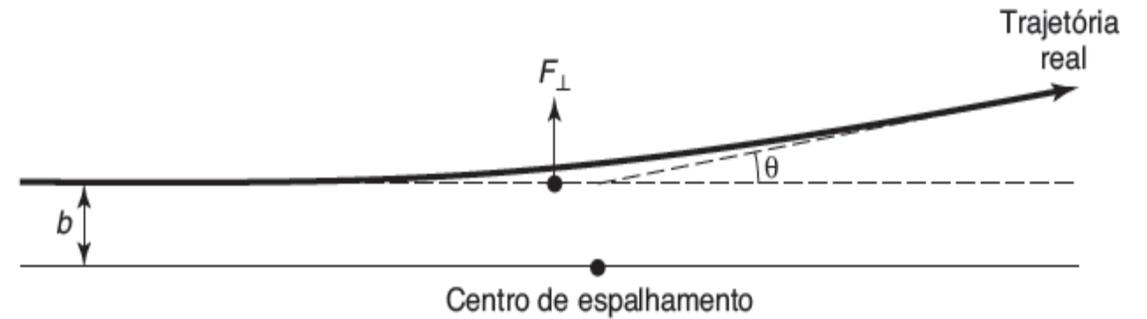


*A aproximação de impulso supõe que a partícula não seja desviada e calcula o momento transversal que lhe é dado.*

E calculamos o impulso transversal que deveria lhe ser dado nesse caso: 
$$I = \int F_{\perp} dt.$$

# Aproximação de Born

## A série de Born



O ângulo de espalhamento será  $\theta \cong \text{tg}^{-1}(I / p),$

A forma integral da equação de Schrödinger é  $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) + \int g(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) V(\mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) d^3 \mathbf{r}_0,$

em que  $\psi_0$  é a onda incidente,  $g(\mathbf{r}) \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r}$

# Aproximação de Born

## A série de Born

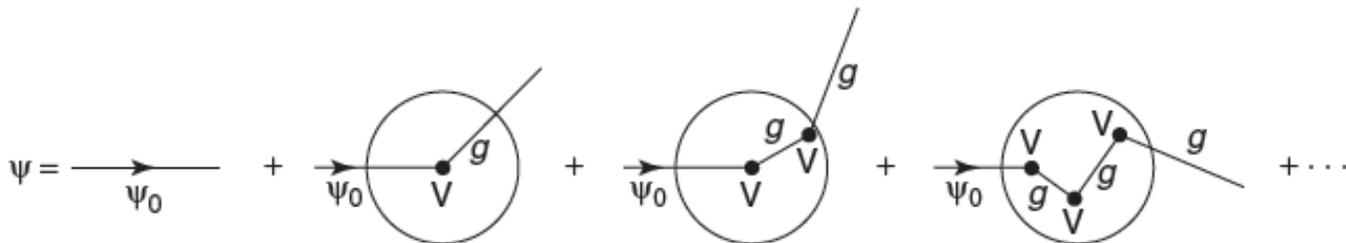
Esquemáticamente,  $\psi = \psi_0 + \int gV\psi$ .

Imagine que tomemos essa expressão para  $\psi$  e a inserimos sob o sinal da integral:

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \iint gVgV\psi.$$

Obteremos uma série formal para  $\psi$ :

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \iint gVgV\psi_0 + \iiint gVgVgV\psi_0 + \dots$$



Interpretação diagramática da série de Born.

Mais detalhes ver Cap. 11  
do livro do Griffiths

