Capítulo 9

Problemas Tridimensionais II

Consideremos uma hamiltoniana cujo potencial satisfaz

$$\lim_{r\to\infty} V(r) = 0 \ . \tag{9.1}$$

O espectro desta hamiltoniana possui duas partes distintas:

1. *Espectro discreto* ($E < 0$), o qual é caracterizado pelos valores discretos que os autovalores E assumem e também por seus autoestados serem normalizáveis ($\int d^3\mathbf{x}\ |\Psi|^2 < \infty$). Estes estados representam partículas ligadas ao potencial V, e foram analisados no capítulo anterior.

2. *Espectro contínuo* ($E \geq 0$), cujas autofunções são não localizadas e descrevem o espalhamento de partículas pelo potencial V.

As condições de contorno empregadas nestes dois casos são muito distintas tendo em vista que

1. Para o espectro discreto requeremos que a função de onda Ψ seja de quadrado integrável ($\int d^3\mathbf{x}\ |\Psi|^2 < \infty$), e consequentemente esta deve ir a zero suficientemente rápido no limite $r \to \infty$. Lembre-se que na resolução de problemas unidimensionais empregamos o mesmo critério (normalizabilidade) para inferir qual a condição de contorno que deveríamos usar.

2. Para o espectro contínuo, a exemplo do que foi feito nos problemas unidimensionais, a condição de contorno depende do problema físico que desejamos analisar. A nossa escolha será que Ψ deve representar um espalhamento e portanto, deve conter uma onda livre incidente bem como uma onda emergente a grandes distâncias do potencial espalhador V.

No estudo do espectro contínuo imporemos que os autoestados da hamiltoniana do sistema satisfazem a

$$\Psi \to e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r} \ , \tag{9.2}$$

no limite $r \to \infty$. O primeiro termo desta expressão representa uma partícula livre incidente de momento linear bem definido a qual é espalhada pelo potencial V, resultando a onda emergente descrita pelo segundo termo em (9.2). A amplitude de espalhamento f é obtida a partir da autofunção que satisfaz o comportamento (9.2). Note que para (9.2) poder ocorrer o potencial V deve ser de curto alcance, uma vez que tanto $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ como $\exp(ikr)/r$ representam partículas livres no limite $r \to \infty$. Na realidade, esta condição de contorno só pode ser utilizada para potenciais que se anulem no infinito mais rapidamente que $1/r$. Por exemplo, no espalhamento por um potencial coulombiano há o aparecimento de uma fase adicional proporcional a $\ln(2kr)$.

9.1 Cinemática: seção de choque diferencial

Vamos agora definir seção de choque diferencial, a qual descreve a distribuição angular das partículas espalhadas por um centro de forças, bem como mostrar a sua relação com a forma assintótica (9.2) dos autoestados da hamiltoniana. Para tanto vamos considerar que o fluxo de partículas incidentes é paralelo ao eixo z e que o centro espalhador encontra-se em $r = 0$, como mostra a figura 9.1.

Em geral, o número de partículas espalhadas por unidade de tempo (N_{esp}) que atravessam um pequeno ângulo sólido $\Delta\Omega$ é proporcional a $\Delta\Omega$ e ao fluxo incidente F. Logo, podemos escrever

$$N_{\text{esp}} = \frac{d\sigma}{d\Omega}\ \Delta\Omega\ F \ , \tag{9.3}$$

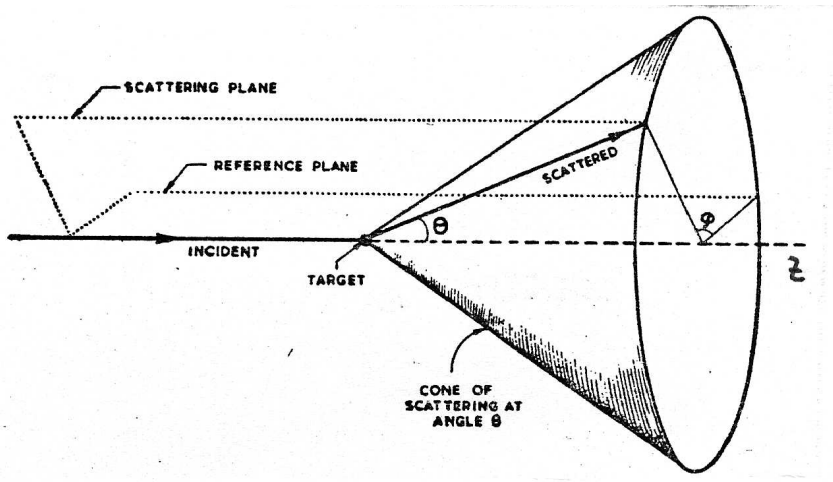

Figure 9.1: Definição da geometria considerada num espalhamento.

onde a constante de proporcionalidade $d\sigma/d\Omega$ é a seção de choque diferencial deste processo, a qual possui dimensão de área. A seção de choque total é então definida por

$$\sigma = \int d\Omega \, \frac{d\sigma}{d\Omega} \, . \tag{9.4}$$

Para que $d\sigma/d\Omega$ independa das condições experimentais é necessário assumir que a densidade do feixe incidente seja suficientemente baixa para podermos desprezar as interações entre as partículas incidentes e também para que estas não interajam simultaneamente com o centro espalhador. Se isto não for satisfeito, deveremos resolver um problema de muitos corpos interagindo entre si e com o potencial espalhador V.

Da definição acima temos que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{N_{\rm esp}\Delta\Omega}{F} \, . \tag{9.5}$$

Para obter F e $N_{\rm esp}$ é conveniente escrever a condição de contorno (9.2) na forma

$$\Psi \to \Psi_{\rm inc} + \Psi_{\rm esp} \tag{9.6}$$

onde

$$\Psi_{\rm inc} = e^{ikz} \quad \text{e} \quad \Psi_{\rm esp} = f\frac{e^{ikr}}{r} \, . \tag{9.7}$$

Agora basta utilizar a corrente de probabilidade

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{i2\mu}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) \ , \tag{9.8}$$

para calcular $N_{\rm esp}$ e F. Devido ao significado físico de $\mathbf{J}$, estas quantidades podem ser escritas como

$$F = |\mathbf{J}_{\rm inc}| \ , \tag{9.9}$$

$$N_{\rm esp} = \mathbf{J}_{\rm esp}\cdot\mathbf{e}_r r^2\Delta\Omega \ , \tag{9.10}$$

onde $\mathbf{J}_{\rm inc}$ ($\mathbf{J}_{\rm esp}$) é a corrente de probabilidade incidente (espalhada) obtida substituindo-se Ψ em (9.8) por $\Psi_{\rm inc}$ ($\Psi_{\rm esp}$). Logo, temos que a corrente incidente é dada por

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_{\rm inc} &= \frac{\hbar}{i2\mu}\left(e^{-ikz}\nabla e^{ikz} - e^{ikz}\nabla e^{-ikz}\right) \ , \\ &= \frac{\hbar k}{\mu}\,\mathbf{e}_z \ ,\end{aligned} \tag{9.11}$$

ao passo que a corrente de probabilidade espalhada é

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_{\rm esp} &= \frac{\hbar}{i2\mu}\left(f^*\frac{e^{-ikr}}{r}\nabla f\frac{e^{ikr}}{r} - \text{c.c.}\right) \ , \\ &= \frac{\hbar k}{\mu}\frac{|f|^2}{r^2}\,\mathbf{e}_r \ ,\end{aligned} \tag{9.12}$$

onde preservamos apenas os termos mais importantes no limite $r\to\infty$.

Portanto, temos que

$$F = \frac{\hbar k}{\mu} \ , \tag{9.13}$$

e também

$$N_{\rm esp} = \frac{\hbar k}{\mu}|f|^2\Delta\Omega \ . \tag{9.14}$$

Isto permite-nos obter a seção de choque diferencial deste processo, a qual é dada por por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta,\phi)|^2 \ . \tag{9.15}$$

Exercício:

Mostre que este resultado independe da normalização adotada em (9.2), *i.e.* se multiplicarmos esta por uma constante A não alteraremos o resultado (9.15).

Resumindo, o programa que devemos seguir para obter a seção de choque diferencial de um dado processo é resolver a equação de Schrödinger independente do tempo sujeita à condição de contorno de espalhamento (9.2). Feito isto extraímos f da solução obtida, e assim obtemos $d\sigma/d\Omega$. A seguir faremos estes passos formalmente, visando encontrar uma expressão para f, a qual dependerá do comportamento dos autoestados da halmiltoniana no limite $r \to \infty$.

9.2 Potenciais centrais: ondas parciais

Quando o potencial $V(r)$ responsável pelo espalhamento é esfericamente simétrico, o momento angular é uma quantidade conservada visto que comuta com a hamiltoniana. Portanto, autoestados correpondendo a diferentes valores do momento angular são espalhados independentemente. Este fato acarreta que é conveniente trabalhar-se na base em que o momento angular é diagonal. No que segue escreveremos os autoestados da hamiltoniana na forma $\frac{u_l(r)}{r}Y_{lm}$, o permite reduzir o problema de autovalores de H à seguinte equação radial

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right)u_l = Eu_l \ , \tag{9.16}$$

onde E é o autovalor associado a este autoestado. No limite $r \to \infty$ esta equação toma a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u_l}{dr^2} \cong Eu_l \ , \tag{9.17}$$

cuja solução geral é

$$u_l(r) \cong A_l \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right) \ , \tag{9.18}$$

onde $E = \hbar^2 k^2/2\mu$, e A_l e δ_l são constantes. Uma vez que A_l é uma constante multiplicativa (este é um problema de autovalores), podemos determinar a fase δ_l impondo apenas uma condição de contorno, a qual deve ser $u_l(0) = 0$.

Um fato importante acerca de (9.18) é que este comportamento acarreta que $\Psi = \frac{u_l}{r} Y_{lm}$ não satisfaz a condição de contorno de espalhamento (9.2)! Isto ocorre porque o seno em (9.18) contém uma onda espalhada (e^{ikr}) bem como uma onda incidente (e^{-ikr}). Logo, esta solução descreve uma onda incidente de momento angular bem definido que é espalhada pelo potencial V. Neste caso a onda espalhada possui o mesmo momento angular da incidente, uma vez que este é conservado.

Tendo em vista que os autoestados com energia E são degenerados, é natural fazer uma superposição linear destes visando que esta obedeça a condição de contorno deste problema.[1] Logo, escrevemos

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} \frac{u_l(r)}{kr} Y_{lm}(\theta, \phi) \ , \tag{9.19}$$

onde desejamos obter os C_{lm} de modo que (9.2) seja satisfeita. Uma vez que o potencial é central e que $\Psi_{\text{inc}} = e^{ikz}$, temos que Ψ não depende de ϕ, por causa da simetria de rotação em torno do eixo z que este processo exibe. Logo, $C_{lm} = 0$ para $m \neq 0$. Portanto temos que

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} B_l (2l+1) i^l \frac{u_l(r)}{kr} P_l(\cos\theta) \ , \tag{9.20}$$

onde os coeficientes da expansão foram escritos de maneira conveniente, e também usamos que $Y_{l0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos\theta)$. Lembrando que [2]

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \ , \tag{9.21}$$

temos, no limite $r \to \infty$, que

[1] Lembre-se que a suporposição de autovetores com o mesmo autovalor também é um autovetor.

[2] Esta relação possui uma interpretação simples: uma partícula livre em um autoestado da energia e momento linear (lado esquerdo) está sendo expresso em termos de autoestados da energia e momento angular (lado direito).

$$\Psi - e^{ikz} \rightarrow \quad \frac{1}{i2k}\frac{e^{ikr}}{r}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(B_l e^{i\delta_l}-1\right)P_l(\cos\theta)$$
$$+ \quad \frac{1}{i2k}\frac{e^{-ikr}}{r}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(-B_l e^{-i\delta_l}+1\right)P_l(\cos\theta) \quad (9.22)$$

Para satisfazer (9.2) devemos impor que o coeficiente de e^{-ikr} seja nulo, acarretando que

$$B_l = e^{i\delta_l} \ . \quad (9.23)$$

Examinando (9.22) podemos obter a amplitude de espalhamento $f(\theta)$.

$$f(\theta) = \frac{1}{i2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{i2\delta_l}-1\right)P_l(\cos\theta) \ , \quad (9.24)$$
$$= \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \ . \quad (9.25)$$

Portanto a seção de choque diferencial é dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\sum_{l,l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)e^{i(\delta_l-\delta_{l'})}\sin\delta_l\sin\delta_{l'}P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) \ , \quad (9.26)$$

ao passo que a seção de choque total toma a forma

$$\sigma \equiv \int d\Omega \ \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \ , \quad (9.27)$$

onde utilizamos que

$$\int d\Omega \ P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\delta_{ll'} \ . \quad (9.28)$$

9.2.1 Comentários

Antes de passar a resolução de alguns exemplos, é importante frisar os seguintes pontos:

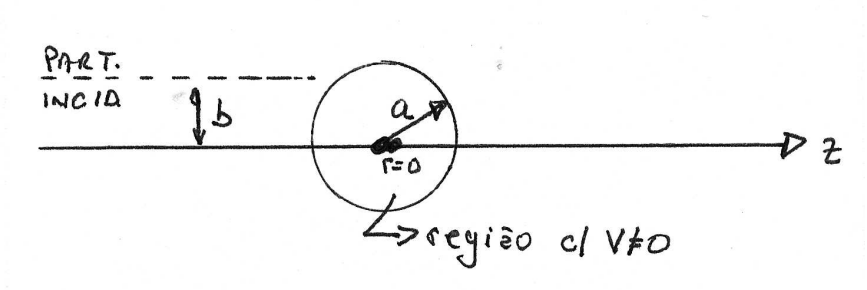

Figure 9.2: Visão clássica do espalhamento por um potencial de curto alcance.

• Quando $V(r) \equiv 0$, a solução da equação radial satisfazendo $u(0) = 0$ é dada por

$$u_l(r) = r j_l(kr) \,, \tag{9.29}$$

o que implica que $\delta_l = 0$. Logo, usando (9.27) obtemos $\sigma = 0$, como era de se esperar já que uma partícula livre não deve sofrer espalhamento.

• Note que a seção de choque total do processo é dada pela soma incoerente das contribuições das ondas parciais l.

• A expressão para $d\sigma/d\Omega$ contém uma série sobre todas as ondas parciais l. Somos então levados naturalmente a perguntar quais as ondas parciais que mais contribuem para a seção de choque diferencial. Para responder esta questão, consideremos um potencial com alcance a, *i.e.* $V(r) \cong 0$ para $r > a$. Argumentaremos que apenas as ondas parciais satisfazendo $l \leq ka$ contribuem significativamente para $d\sigma/d\Omega$.

Classicamente esperamos que as partículas incidindo com um parâmetro de impacto (b) maior que a não vão interagir com o potencial V, vide a figura 9.3. Logo, o momento angular máximo que uma partícula pode ter para ser espalhada é $\hbar k \times a$. Consequentemente apenas as ondas satisfazendo $l \leq ka$ serão espalhadas.

O argumento de Mecânica Quântica para obtermos esta conclusão é o seguinte: a função de onda do sistema para r pequeno é da forma $R_l \simeq j_l(kr)$, acarretando que o primeiro máximo desta dá-se para $kr \simeq l$. Logo, se $l > ka$ a função de onda será pequena na região onde o potencial espalhador é maior, acarretando que estas ondas parciais não

sentirão o efeito de V. Por conseguinte as ondas mais espalhadas são aquelas que satisfazem $l \leq ka$.

Uma consequência interessante deste argumento é que no limite de baixas energias ($ka \ll 1$) apenas a onda s ($l = 0$) contribui para σ. Neste caso a seção de choque diferencial é isotrópica já que $P_0(\cos\theta) = 1$. Além disso, a seção de choque total é dada por $\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0$.

• Para potenciais puramente atrativos ($V \leq 0$) temos que $\delta_l > 0$. Isto ocorre pois a função de onda oscila mais rapidamente na região em que o potencial é não nulo, levando a um avanço na fase com respeito ao caso livre ($V = 0$). Analogamente, potenciais puramente repulsivos ($V \geq 0$) conduzem a $\delta_l < 0$. Isto também pode ser visto a partir da seguinte relação entre o deslocamento de fase e o potencial e o autoestado da energia u_l:

$$\sin\delta_l = -\frac{2\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\; r j_l(kr) u_l(r) V(r)\;, \tag{9.30}$$

onde a normalização que adotamos é tal que $u_l(r) \to \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$ no limite $r \to \infty$.

Exercício:

Demonstre a relação acima.

Esta relação em si não é muito útil pois para obtermos δ_l precisamos conhecer u_l, sendo portanto um método complicado de calcular o deslocamento de fase! Contudo, ela permite-nos fazer aproximações. Supondo que o potencial seja fraco, podemos aproximar o autoestado pela função de onda livre, *i.e.* $u_l(r) \simeq kr j_l(kr)$ que nos leva a

$$\sin\delta_l \simeq -\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\; r j_l^2(kr) V(r)\;. \tag{9.31}$$

Com isso podemos ver que o sinal de δ_l é oposto ao do potencial.

9.3 Aplicações simples

Visando demonstrar o procedimento para o cálculo da seção de choque de um problema de espalhamento vamos resolver dois exemplos: poço quadrado e esfera dura.

9.3.1 Poço quadrado

Consideremos um potencial dado por

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{se} \quad r < a \\ 0 & \text{se} \quad r > a \end{cases} , \tag{9.32}$$

onde $V_0 > 0$. A equação radial é então dada por

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_l) + k'^2 R_l - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l = 0 \quad \text{para} \quad r < a \, , \tag{9.33}$$

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_l) + k^2 R_l - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l = 0 \quad \text{para} \quad r > a \, , \tag{9.34}$$

onde definimos $k'^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}(E + V_0)$. Portanto, temos que a solução geral para R_l é

$$R_l(r) = \begin{cases} A_l j_l(k'r) + B_l \eta_l(k'r) & \text{para} \quad r < a \\ C_l j_l(kr) + D_l \eta_l(kr) & \text{para} \quad r > a \end{cases} . \tag{9.35}$$

Para obter os δ_l, iniciamos impondo a condição de contorno $u_l(0) = 0$, a qual implica que $B_l = 0$. Uma vez que a expressão para R_l possui duas formas, devemos requerer que R_l e dR_l/dr sejam contínuas em $r = a$, acarretando que

$$A_l j_l(k'a) = C_l j_l(ka) + D_l \eta_l(ka) \, , \tag{9.36}$$

$$A_l k' j_l'(k'a) = C_l k j_l'(ka) + D_l k \eta_l'(ka) \, , \tag{9.37}$$

com a linha ($'$) representando a derivação com respeito ao argumento da função. Definindo a quantidade

$$a\gamma_l(k) \equiv \frac{R_l(a)}{\frac{dR_l}{dr}(a)} = \frac{j_l(k'a)}{k' j_l'(k'a)} \, , \tag{9.38}$$

podemos obter, a partir de (9.36) e (9.37), uma expressão simples para δ_l desde que notemos que $D_l/C_l = -\tan\delta_l$.

$$\tan\delta_l = \frac{ka\gamma_l j_l'(ka) - j_l(ka)}{ka\gamma_l \eta_l'(ka) - \eta_l(ka)} \tag{9.39}$$

A partir desta expressão podemos constatar que os deslocamentos de fase δ_l são funções de k, ou seja da energia da partícula incidente.

Exercício

Mostre que que esta última expressão é válida para qualquer potencial de alcance a, desde que avaliemos (9.38) usando a correspondente solução R_l para $r < a$.

Exercício

Partindo de (9.39), demonstre que no limite de baixas energias ($k \to 0$) temos

$$\sigma \simeq 4\pi a^2 \left(1 - \frac{\tan k'a}{k'a}\right)^2 \tag{9.40}$$

Exercício

Para o caso $V_0 < 0$ (potencial atrativo), mostre que a seção de choque total no limites de baixas energias é dada por

$$\sigma \simeq 4\pi a^2 \left(1 - \frac{\tanh\ \kappa'a}{\kappa'a}\right)^2 \tag{9.41}$$

onde $\kappa^2 = -\frac{2\mu}{\hbar^2}(E + V_0) > 0$ no limite de baixas energias.

9.3.2 Esfera dura

Analisemos agora o espalhamento de partículas por uma esfera dura, a qual é descrita pelo potencial

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{se} \quad r < a \\ 0 & \text{se} \quad r > a \end{cases} . \tag{9.42}$$

A condição de contorno que deve ser imposta é $R_l(a) = 0$, uma vez que R_l se anula para $r < a$. Logo, utilizando que R_l é uma partícula livre para $r > a$, podemos concluir que

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(ka)}{\eta_l(ka)} . \tag{9.43}$$

Analisemos o limite de baixas energias da seção de choque deste caso. Para $E \to 0$, *i.e.* $ka \to 0$, temos que

$$j_l(ka) \simeq \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} \quad \text{e} \quad \eta_l(ka) \simeq -\frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \ . \tag{9.44}$$

Logo, podemos concluir que

$$\tan\delta_l \simeq -\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \simeq \sin\delta_l \simeq \delta_l \ . \tag{9.45}$$

Portanto temos que $|\delta_l| \ll |\delta_0|$ $(l \neq 0)$ no limite acima, o que significa que apenas a onda parcial $l = 0$ contribui significativamente. Isto já era esperado tendo em vista a análise feita na seção anterior. Consequentemente neste limite

$$\sigma \simeq \frac{4\pi}{k^2}\ (2 \times 0 + 1)\ \delta_0^2 \ = \ 4\pi a^2 \ . \tag{9.46}$$

Este resultado é quatro vezes a área clássica da esfera! Explique-o!

Exercício

Analise o limite de altas energias deste problema e mostre que o resultado é $\sigma = 2\pi a^2$. Explique o porquê deste limite fornecer uma resposta diferente da clássica, apesar de estarmos no limite de *ótica geométrica*![3]

9.4 Teorema óptico

Uma propriedade importante da amplitude de espalhamento é que a parte imaginária de $f(0)$ está relacionada com a seção de choque total do processo. Para tornar evidente este fato, calculemos $f(0)$ a partir de (9.25)

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l \ , \\ &= \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(\cos\delta_l\sin\delta_l + i\sin^2\delta_l) \ , \end{aligned} \tag{9.47}$$

[3]Para maiores detalhes vide o livro R. Pierls, *Surprises in Theoretical Physics*, Princeton University Press, 1979.

onde utilizamos que os polinômios de Legendre satisfazem $P_l(1) = 1$. Comparando esta expressão com (9.27) podemos notar que

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\Im f(0) \ , \tag{9.48}$$

onde o símbolo $\Im$ representa a parte imaginária da expressão que o segue.

A razão física para a existência desta relação é a conservação de probabilidade: as partículas espalhadas devem ser retiradas do feixe incidente e com isso a intensidade deste na direção frontal ($\theta \simeq 0$) é reduzida, sendo este fato codificado por $\Im f(0)$. Para compreendermos os detalhes desta relação, deveríamos estudar meticulosamente a conservação de probabilidade num espalhamento, o que não faremos por isto fugir aos nossos objetivos.

Uma análise cuidadosa do processo de espalhamento permiter-nos-ia mostrar que a relação (9.48) é geral, valendo até para situações em que o potencial não é central, ou seja, quando f depende também do ângulo azimutal ϕ.

9.5 Espalhamento ressonante

Podemos escrever a expressão para a seção de choque total na forma,

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \ , \tag{9.49}$$

com

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l \ , \tag{9.50}$$

onde explicitamos a contribuição de cada onda parcial. Note que a contribuição máxima que a onda parcial l pode dar ocorre para $\sin^2\delta_l = 1$, ou seja, quando $\delta_l(k) = \pm\pi/2$. Quando temos a ocorrência de σ_l máximo dizemos que o *espalhamento é ressonante* para uma dada energia.

Existindo o espalhamento ressonante para a onda parcial l com uma energia E_R, podemos obter uma expressão aproximada para a seção de choque como uma função da energia. Nosso ponto de partida será que

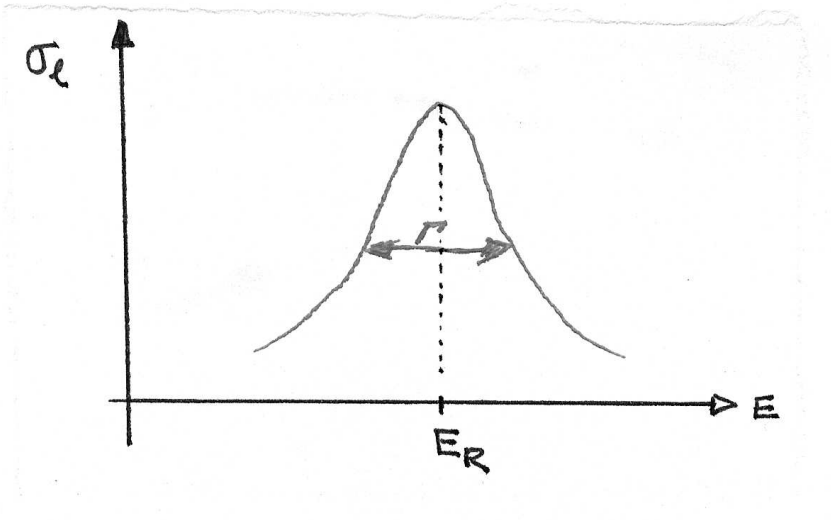

Figure 9.3: Dependência da seção de choque parcial σ_l com a energia próximo a uma ressonância.

$\delta_l(E_R) = \pm\pi/2$, o que implica em $\cot\delta_l(E_R) = 0$. Portanto, expandindo $\cot\delta_l(E)$ em série de Taylor em torno de E_R temos que

$$\begin{aligned} \cot\delta_l(E) &= \cot\delta_l(E_R) + (E-E_R)\frac{d}{dE}\cot\delta_l(E)\Big|_{E=E_R} + ... \\ &\simeq -\frac{2}{\Gamma}(E-E_R)\ , \end{aligned} \tag{9.51}$$

onde definimos $-2/\Gamma = d\cot\delta_l/dE$ avaliada em $E = E_R$. Substituindo esta expressão em (9.50) resulta que

$$\sigma_l(E) \simeq \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\frac{\Gamma^2/4}{(E-E_R)^2+\Gamma^2/4}\ . \tag{9.52}$$

Esta á a fórmula de Breit-Wigner, cujo comportamento com a energia é dado pela figura 9.3.

9.5.1 Exemplo: potencial delta de casca

Analisemos o espalhamento da onda s ($l = 0$) por um potencial delta de casca, o qual é dado por

$$V(r) = \lambda\delta(r - a) \; . \tag{9.53}$$

Este potencial é repulsivo ou atrativo se $\lambda > 0$ ou $\lambda < 0$, respectivamente. A equação radial satisfeita por $u_0(r)$ é

$$\frac{d^2u_0}{dr^2} + \Big[k^2 - \alpha\delta(r - a)\Big]\, u_o = 0 \; , \tag{9.54}$$

onde definimos $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$ e $\alpha = 2\mu\lambda/\hbar^2$. Para $r \neq a$ a função delta é nula e u_0 satisfaz a equação radial de uma partícula livre. Portanto a solução desejada possui a forma

$$u_0(r) = \begin{cases} A\sin(kr) & \text{para} \quad r < a \\ B\sin(kr + \delta_0) & \text{para} \quad r > a \end{cases} \; , \tag{9.55}$$

onde já impusemos que $u_0(0) = 0$. A continuidade de u_0 para r=a implica que

$$A\sin(ka) = B\sin(ka + \delta_0) \; , \tag{9.56}$$

enquanto que o salto da derivada de u_0 conduz a

$$kB\cos(ka + \delta_0) - kA\cos(ka) = \alpha A\sin(ka) \; . \tag{9.57}$$

A partir das duas últimas equações podemos concluir que

$$\tan\delta_0 = -\frac{\alpha}{k}\, \frac{\sin^2(ka)}{1 + \frac{\alpha}{2k}\sin(2ka)} \; . \tag{9.58}$$

O espalhamento da onda s por este potencial é ressonante para valores da energia que conduzam a $|\delta_0| = \pi/2$, *i.e.* $|\tan\delta_0| = \infty$. Logo, a condição para a existência de espalhamento ressonante é

$$\sin(2ka) = -\frac{2k}{\alpha} \; . \tag{9.59}$$

9.6 Equação integral para o espalhamento

A resolução do problema de autovalores da hamiltoniana para uma situação de espalhamento requer que estudemos a equação

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\Psi = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\mathbf{x})\Psi \ , \tag{9.60}$$

sujeita a condição de contorno (9.2), onde $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$. Em algumas aplicações é interessante substituir (9.60) por uma equação integral, a qual já incorpore naturalmente a condição de contorno (9.2). Para tanto utilizaremos a função de Green $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ deste problema, a qual é a solução de

$$\left(\nabla^2_{\mathbf{x}} + k^2\right) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \ , \tag{9.61}$$

cujo comportamento assintótico para $|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$ é

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \to e^{ik\mathbf{x}|}/|\mathbf{x}| \ . \tag{9.62}$$

Note que $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ nada mais é do que a onda gerada por uma fonte pontual localizada em $\mathbf{x}'$. Conhecendo-se G é fácil verificar que

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi_0(\mathbf{x}) + \int d^3\mathbf{x}' \ G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \ \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}') \tag{9.63}$$

é solução de (9.60), caso Ψ_0 seja uma solução da equação honomogênea $(\nabla^2 + k^2)\Psi_0 = 0$. A expressão (9.63) é uma solução formal do problema de espalhamento uma vez que Ψ comparece ao lado direito desta equação, ou seja, (9.63) é uma *equação integral* para Ψ! (9.63) é a equação integral associada a (9.60), a qual pode acomodar a condição de contorno (9.2) caso façamos uma escolha conveniente para Ψ_0.

Obtenhamos agora G. Para tanto devemos notar que $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ por causa da simetria de translação de (9.61). Mais ainda, a simetria de rotação do problema permite escrever que $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = G(|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|)$. Visando obter uma solução de (9.61) vamos expressar G na forma de uma transformada de Fourier

$$G(\mathbf{R}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \ \tilde{G}(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}} \ , \tag{9.64}$$

onde denotamos $\mathbf{x}-\mathbf{x}' = \mathbf{R}$ com o intuito de simplificar a notação. Para obter $\tilde{G}(\mathbf{p})$ substituimos a última expressão em (9.61) e utilizamos que

$$\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}}\ , \tag{9.65}$$

o que conduz a

$$\tilde{G}(\mathbf{p}) = -\frac{1}{\mathbf{p}^2-k^2}\ . \tag{9.66}$$

Portanto, substituindo $\tilde{G}$ em (9.64), temos que

$$G(\mathbf{R}) = -\int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\ \frac{1}{\mathbf{p}^2-k^2}\ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}}\ . \tag{9.67}$$

Usando coordenadas esféricas no espaço dos momentos com o eixo z escolhido na direção de $\mathbf{R}$ escrevemos

$$G(\mathbf{R}) = -\int_0^\infty \frac{dp}{(2\pi)^3}\ p^2 \int_0^{2\pi} d\phi\ \int_{-1}^{1} d\cos\theta\ \frac{1}{p^2-k^2} e^{ipR\cos\theta}\ . \tag{9.68}$$

As integrações angulares são fáceis e conduzem a

$$G(\mathbf{R}) = -\frac{1}{2\pi^2 R}\int_0^\infty dp\ \frac{p}{p^2-k^2}\ \frac{e^{ipR}-e^{-ipR}}{2i}\ . \tag{9.69}$$

Uma vez que o integrando em p é par podemos integrar de $-\infty$ até $+\infty$ desde que dividamos o resultado por 2.

$$G(\mathbf{R}) = \frac{i}{8\pi^2 R}\int_{-\infty}^\infty dp\ \frac{p}{p^2-k^2}(e^{ipR}-e^{-ipR}) \tag{9.70}$$

A integral acima apresenta polos ao longo do eixo real de p em $p=\pm k$, o que indica que devamos prosseguir com cautela. Para evitar estas singularidades vamos deformar o contorno de integração para o percurso I da figura 9.4.[4]

Utilizando o teorema dos resíduos para avaliar esta integral finalmente obtemos que

$$G(\mathbf{R}) = G^+(\mathbf{R}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikR}}{R}\ . \tag{9.71}$$

[4]Mostre que apesar da mudança do caminho de integração (9.70) ainda é uma solução de (9.61).

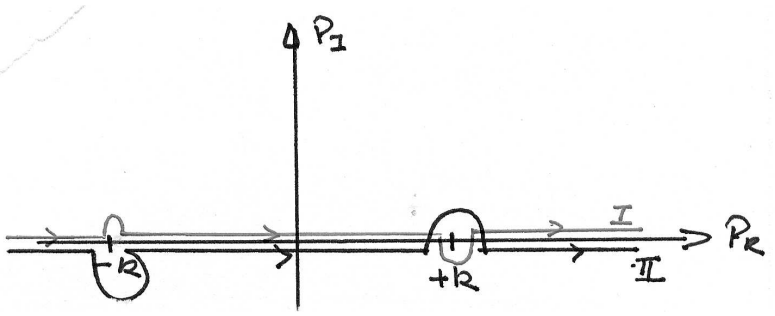

Figure 9.4: Contornos de integração no plano complexo.

Poderíamos também haver escolhido o circuito II da figura acima , o que conduziria a solução

$$G(\mathbf{R}) = G^-(\mathbf{R}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ikR}}{R} \ . \tag{9.72}$$

A solução G^+ (G^-) representa uma onda esférica emergente (incidente) devido a fonte pontual (tipo δ) que aparece no lado da equação de ondas (9.61). Visando que as soluções Ψ de (9.63) satisfaçam a condição de contorno de espalhamento (9.2) escolheremos G^+ e $\Psi_0 = e^{ikz}$, o que nos leva a

$$\Psi(\mathbf{x}) = e^{ikz} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}' \ \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\ V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}') \ . \tag{9.73}$$

A escolha acima de Ψ_0 foi motivada pelo fato de que para $V = 0$ a solução deve descrever uma partícula livre.

Analisemos agora a forma que Ψ assume a grandes distâncias do potencial espalhador V, *i.e.* para $|\mathbf{x}| \gg |\mathbf{x}'|$. Neste limite temos que

$$|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| = \sqrt{\mathbf{x}^2 + \mathbf{x}'^2 - 2\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}'} \simeq |\mathbf{x}| - \frac{\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|} \ , \tag{9.74}$$

o que permite concluir que no limite $\mathbf{x} \to \infty$

$$\Psi(\mathbf{x}) \to e^{ikz} - \left[\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}' \ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}\ V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}')\right]\frac{e^{ik|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|} \ , \tag{9.75}$$

onde definimos $\mathbf{k} = k\mathbf{x}/|\mathbf{x}|$. Portanto, as escolhas para G e Ψ_0 foram acertadas, já que Ψ satisfaz (9.2). Além disso, desta última expressão também inferimos que

$$f(\theta,\phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}'\; e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}')\;. \tag{9.76}$$

A última expressão, apesar de elegante, na prática é inútil, uma vez que para a utilizarmos devemos conhecer Ψ em todo o espaço. Todavia, ela é utilizada para cálculos aproximados, como veremos na próxima seção.

9.7 Aproximação de Born

Intuitivamente esperamos que a função de onda de uma partícula muito energética difira pouco da de uma partícula livre. Com isto em mente, podemos desprezar o último termo em (9.73), obtendo que $\Psi \simeq \Psi_0$. Esta aproximação é chamada de aproximação de Born, a qual nada mais é do que o primeiro termo da solução de (9.73) iterativamente. Neste caso, (9.76) fornece que

$$f_B(\theta,\phi) \cong -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}'\; e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'}V(\mathbf{x}')\;, \tag{9.77}$$

onde $\mathbf{q} = \mathbf{k} - k\mathbf{e}_z$ é proporcional ao momento transferido à partícula incidente. Portanto, nesta aproximação, a amplitude de espalhamento é proporcional à transformada de Fourier do potencial espalhador.

Para esta aproximação ser válida o último termo de (9.76) deve ser desprezível, *i.e.*

$$|\Psi(\mathbf{x}) - e^{ikz}| = \left|-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}'\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}')\right| \ll |\Psi_0| = 1\;. \tag{9.78}$$

Levando-se em consideração que a maior distorção de Ψ_0 ocorre em $\mathbf{x} = 0$, devemos então ter que

$$\left|\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}'\frac{e^{ik|\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}'|}V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}')\right| \ll 1\;. \tag{9.79}$$

No caso de V depender apenas de r esta condição reduz-se a

$$\frac{2\mu}{\hbar^2 k}\left|\int dr'\; e^{ikr'}\sin(kr')V(r')\right| \ll 1\;. \tag{9.80}$$

Podemos mostrar, a partir desta última condição, que esta aproximação é boa em duas situações[5]:

1. Para potenciais fracos, *i.e.* $V_0 a$ pequeno. Neste caso a condição que deve ser satisfeita independe da energia da partícula incidente é
$$V_0 a^2 \ll \frac{\hbar^2}{\mu} \tag{9.81}$$

2. Para partículas bastante energéticas, *i.e.* k grande. Isto será verdade se
$$\frac{\mu a V_0}{\hbar^2 k} \ll 1\;. \tag{9.82}$$

Fisicamente estas condições significam apenas que a partícula encontra-se aproximadamente livre. Isto não deveria ser uma surpresa, já que este foi o nosso ponto de partida.

9.7.1 Exemplo: potencial coulombiano blindado

Nosso primeiro exemplo será o espalhamento por um potencial esfericamente simétrico dado por

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}e^{-\chi r}\;, \tag{9.83}$$

o qual representa o potencial de uma carga Ze que se encontra blindada (cercada) por uma outra distribuição de cargas. Neste caso

$$f_B(\theta) = \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 q}\int_0^\infty dr\;\sin(qr)e^{-\chi r} = \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2(q^2+\chi^2)}\;. \tag{9.84}$$

Logo

[5]Mostre as duas condições a seguir.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\mu^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 (4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \chi^2)^2} \ . \tag{9.85}$$

Formalmente podemos obter a seção de choque para o espalhamento coulombiano tomando o limite $\chi \to 0$, o que permite obter

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu^2 Z^2 e^4}{4p^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \ . \tag{9.86}$$

Curiosamente, esta resposta coincide com a resposta quântica e a clássica, apesar da aproximação de Born não poder ser aplicada ao espalhamento coulombiano, visto que a condição de validade (9.80) não é satisfeita.

9.7.2 Exemplo: espalhamento por um átomo

Consideremos o espalhamento de um elétron por um átomo, o qual será representado por sua densidade de carga elétrica $-e\rho(\mathbf{r})$.[6] Podemos associar uma densidade de carga $-e\rho$ a um sistema de N elétrons no estado $\Psi(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N)$ através de

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} \int d^3\mathbf{r}_1 ... d^3\mathbf{r}_N \ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) |\Psi|^2 \ . \tag{9.87}$$

Portanto, o potencial de interação neste problema será dado por

$$V(\mathbf{r}) = Z' e^2 \left[\frac{Z}{r} - \int d^3\mathbf{r}' \ \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \ , \tag{9.88}$$

onde Z é a carga do núcleo e $Z' = -1$ para o espalhamento de elétrons.

Neste ponto é óbvio que não podemos resolver exatamente este problema, logo utilizaremos a aproximação de Born. A partir de (9.82) podemos concluir (mostre) que esta aproximação é válida se

$$\frac{v}{c} \gg \frac{ZZ'}{137} \ , \tag{9.89}$$

[6] Estamos aqui simplificando o problema, já que não consideramos o problema de muitos corpos envolvendo o elétron incidente e os atômicos.

onde v (c) é a velocidade do elétron (luz). Note que v não pode ser arbitrária já que a Mecânica Quântica é uma teoria não relativística, e portanto deve ser menor que c.

Na aproximação de Born temos que

$$\begin{aligned} f_b &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^2\mathbf{r}\; e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\mu}{2\pi\hbar^2\mathbf{q}^2}\int d^3\mathbf{r}\; \nabla^2\left(e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\right)V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\mu}{2\pi\hbar^2\mathbf{q}^2}\int d^3\mathbf{r}\; e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\nabla^2 V(\mathbf{r})\;, \end{aligned} \tag{9.90}$$

onde integramos por partes e $\mathbf{q}^2 = 4k^2\sin^2\frac{\theta}{2}$. Agora utilizando a equação de Poisson

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = -4\pi Z' e^2\left(Z\delta(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r})\right)\;, \tag{9.91}$$

obtemos que

$$f_b = -\frac{2\mu Z' e^2}{\hbar^2\mathbf{q}^2}\left(Z - F(\mathbf{q})\right)\;, \tag{9.92}$$

onde o fator de forma F nada mais é do que a transformada de Fourier de ρ.

$$F(\mathbf{q}) = \int d^3\;\mathbf{r}e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\rho(\mathbf{r}) \tag{9.93}$$

Logo, a seção de choque diferencial deste processo é

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4Z'^2}{a_0^2\mathbf{q}^4}\left|Z - F(\mathbf{q})\right|^2\;, \tag{9.94}$$

onde a_0 é o raio de Bohr.

Exercício

Analise esta expressão nos limites $\mathbf{q}\to 0$ e $\mathbf{q}\to\infty$. Mostre que no último limite $d\sigma/d\Omega$ é dado apenas pelo espalhamento pelo núcleo. Interprete fisicamente os seus resultados.