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 a qual é espalhada pelo potencial V, resultando a onda emergente descrita pelo segundo termo em (9.2). Note que para isto 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 $1/r$.

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 próxima figura.

.

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

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

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 (N_{esp}) 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

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

Agora vamos utilizar a corrente de probabilidade

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{i2\mu}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) \ , \tag{9.6}$$

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

$$F = |\mathbf{J}_{\rm inc}| \ , \tag{9.7}$$

$$N_{\rm esp} = \mathbf{J}_{\rm esp}\cdot\mathbf{e}_r r^2\Delta\Omega \ , \tag{9.8}$$

onde $\mathbf{J}_{\rm inc}$ ($\mathbf{J}_{\rm esp}$) é a corrente de probabilidade incidente (espalhada). Substituindo (9.2) em (9.6) obtemos que a corrente incidente é dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\rm inc} &= \frac{\hbar}{i2\mu}\left(e^{-ikz}\nabla e^{ikz} - e^{ikz}\nabla e^{-ikz}\right) \ , \\ &= \frac{\hbar k}{\mu}\mathbf{e}_z \ , \end{aligned} \tag{9.9}$$

ao passo que a corrente de probabilidade espalhada é

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{\rm esp} &= \frac{\hbar}{i2\mu}\left(f^*\frac{e^{-ikr}}{r}\nabla f\frac{e^{ikr}}{r} - \text{c.c.}\right) \ , \\ &= \frac{\hbar k}{\mu}\frac{|f|^2}{r^2}\mathbf{e}_r \ , \end{aligned} \tag{9.10}$$

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

Portanto, temos que

$$F = \frac{\hbar k}{\mu} \ , \tag{9.11}$$

e também

$$N_{\text{esp}} = \frac{\hbar k}{\mu} |f|^2 \Delta\Omega \ . \tag{9.12}$$

Isto permite-nos obter seção de choque diferencial deste processo, a qual é dada por por[1]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \ . \tag{9.13}$$

Logo 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

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left(V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) u_l = E u_l \ , \tag{9.14}$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2 u_l}{dr^2} \cong E u_l \ , \tag{9.15}$$

[1] Mostre que este resultado independe da normalização adotada em (9.2), *i.e.* se multiplicarmos esta por uma constante A não alteraremos o resultado (9.13).

cuja solução geral é

$$u_l(r) \cong A_l \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l) \ , \tag{9.16}$$

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 (9.16) é que este comportamento acarreta que $\Psi = u_l/rY_{lm}$ não satisfaz a condição de contorno de espalhamento (9.2)! Isto ocorre porque o seno em (9.16) 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 uma constante de movimento.

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.[2] Logo escrevemos

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{lm} \frac{u_l(kr)}{kr} Y_{lm}(\theta, \phi) \ , \tag{9.17}$$

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

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} B_l (2l+1) i^l \frac{u_l(kr)}{kr} P_l(\cos\theta) \ , \tag{9.18}$$

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

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \ , \tag{9.19}$$

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

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

$$\begin{aligned}\Psi - e^{ikz} \to \quad & \frac{1}{i2k}\frac{e^{ikr}}{r}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(B_l e^{i\delta_l} - 1\right)P_l(\cos\theta) \\ + \quad & \frac{1}{i2k}\frac{e^{-ikr}}{r}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(-B_l e^{-i\delta_l} + 1\right)P_l(\cos\theta) \quad (9.20)\end{aligned}$$

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

$$B_l = e^{i\delta_l} \; . \tag{9.21}$$

Examinando (9.20) podemos obter a amplitude de espalhamento $f(\theta)$.

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \frac{1}{i2k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left(e^{i2\delta_l} - 1\right)P_l(\cos\theta) & (9.22)\\ &= \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) & (9.23)\end{aligned}$$

Portanto a seção de choque diferencial é dada por

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2}\sum_{l,l'=0}^{\infty}(2l+1)(2l'+1)e^{i(\delta_l - \delta_{l'})}\sin\delta_l \sin\delta_{l'} P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) \; , \tag{9.24}$$

ao passo que a seção de choque total toma a forma

$$\sigma \equiv \int d\Omega \; \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \; , \tag{9.25}$$

onde utilizamos que

$$\int d\Omega \; P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\delta_{ll'} \; . \tag{9.26}$$

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

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

$$u_l(r) = r j_l(kr) \;, \tag{9.27}$$

o que implica que $\delta_l = 0$. Logo, usando (9.25) 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 abaixo. 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 $P_{l=0}(\cos\theta) = 1$. Além disso, a seção de choque total é dada por $\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0$.

9.3 Teorema ótico

Uma propriedade importante da amplitude de espalhamento é que $f(0)$ está relacionada com a seção de choque total do processo. Para tornar evidente este fato calculemos $f(0)$. Uma vez que os polinômios de Legendre satisfazem $P_l(1) = 1$ temos, a partir de (9.23) que

$$\begin{aligned} f(0) &= \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l \;, \\ &= \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(\cos\delta_l\sin\delta_l + i\sin^2\delta_l) \;. \end{aligned} \tag{9.28}$$

Comparando esta expressão com (9.25) podemos notar que

$$\sigma = \frac{4\pi}{k}\Im f(0) \;, \tag{9.29}$$

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 ($\theta \simeq 0$) deve ser reduzida, sendo este fato caracterizado por $f(0)$. Para vermos isto 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 permiteria-nos mostrar que a relação (9.29) é geral, valendo até para situações em que o potencial não é central, ou seja, quando f depende também do ângulo azimutal ϕ.

9.4 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.

9.4.1 Poço quadrado

Consideremos um potencial dado por

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{se} \quad r < a \\ 0 & \text{se} \quad r > a \end{cases} . \tag{9.30}$$

A equação radial é então dada por

$$\begin{array}{ll} \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_l) + k'^2 R_l - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l = 0 & \text{para} \quad r < a \ , \\ \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rR_l) + k^2 R_l - \frac{l(l+1)}{r^2}R_l = 0 & \text{para} \quad r > a \ , \end{array} \tag{9.31}$$

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

$$R_l(r) = \begin{cases} A_l j_l(k'r) + B_l \eta_l(k'r) & \text{para} \quad r < a \\ C_l j_l(kr) + D_l \eta_l(kr) & \text{para} \quad r > a \end{cases} . \tag{9.32}$$

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

$$A_l j_l(k'a) = C_l j_l(ka) + D_l \eta_l(ka) \ , \tag{9.33}$$

$$A_l k' j_l'(k'a) = C_l k j_l'(ka) + D_l k \eta_l'(ka) \ , \tag{9.34}$$

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

$$a\gamma_l(k) \equiv \frac{R_l(a)}{\frac{dR_l}{dr}(a)} = \frac{j_l(k'a)}{k' j_l'(k'a)} \ , \tag{9.35}$$

podemos obter, a partir de (9.33) e (9.34), uma expressão simples para δ_l desde que notemos que $D_l/C_l = -\tan\delta_l$.

$$\tan\delta_l = \frac{ka\gamma_l j_l'(ka) - j_l(ka)}{ka\gamma_l \eta_l'(ka) - \eta_l(ka)} \tag{9.36}$$

A partir desta expressão podemos constatar que os *phase shifts* δ_l são funções de k, ou seja da energia da partícula incidente. Note também que esta última expressão é válida para qualquer potencial de alcance a desde que avaliemos (9.35) usando a correspondente solução R_l para $r < a$![3]

Exercicio

Partindo de (9.36) demonstre que no limite de baixas energias ($k \to 0$) temos

$$\sigma \simeq 4\pi a^2 \left(1 - \frac{\tan k'a}{k'a}\right)^2 . \tag{9.37}$$

9.4.2 Esfera dura

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

$$V(r) = \begin{cases} \infty & \text{se} \quad r < a \\ 0 & \text{se} \quad r > a \end{cases} . \tag{9.38}$$

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

$$\tan\delta_l = \frac{j_l(ka)}{\eta_l(ka)} . \tag{9.39}$$

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

[3]Exercício: Mostre este fato.

$$j_l(ka) \simeq \frac{(ka)^l}{(2l+1)!!} \quad \text{e} \quad \eta_l(ka) \simeq -\frac{(2l-1)!!}{(ka)^{l+1}} \; . \tag{9.40}$$

Logo, podemos concluir que

$$\tan \delta_l \simeq -\frac{(ka)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!} \simeq \sin \delta_l \simeq \delta_l \; . \tag{9.41}$$

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

$$\sigma \simeq \frac{4\pi}{k^2}(2 \times 0 + 1)\delta_0^2 = 4\pi a^2 \; . \tag{9.42}$$

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*![4]

9.5 Espalhamento ressonante

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

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l \; , \tag{9.43}$$

com

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2 \delta_l \; , \tag{9.44}$$

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

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

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 $\delta_l(E_R) = \pm\pi/2$, 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

$$\begin{aligned} \cot\delta_l(E) &= \cot\delta_l(E_R) + (E - E_R)\frac{d}{dE}\cot\delta_l(E)\Big|_{E=E_R} + ... \\ &\simeq -\frac{2}{\Gamma}(E - E_R)\,, \end{aligned} \tag{9.45}$$

onde definimos $-2/\Gamma = d\cot\delta_l/dE$ avaliada em $E = E_R$. Substituindo esta expressão em (9.44) resulta que

$$\sigma_l(E) \simeq \frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\frac{\Gamma^2/4}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4}\,. \tag{9.46}$$

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

9.5.1 Exemplo: potencial delta de casca

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

$$V(r) = \lambda\delta(r - a) \ . \tag{9.47}$$

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

$$\frac{d^2u_0}{dr^2} + \left[k^2 - \alpha\delta(r - a)\right] u_o = 0 \ , \tag{9.48}$$

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

$$u_0(r) = \begin{cases} A\sin(kr) & \text{para} \quad r < a \\ B\sin(kr + \delta_0) & \text{para} \quad r > a \end{cases} \ , \tag{9.49}$$

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

$$A\sin(ka) = B\sin(ka + \delta_0) \ , \tag{9.50}$$

enquanto que o salto da derivada de u_0 conduz a

$$kB\cos(ka + \delta_0) - kA\cos(ka) = \alpha A\sin(ka) \ . \tag{9.51}$$

A partir das duas últimas equações podemos concluir que

$$\tan\delta_0 = -\frac{\alpha}{k} \ \frac{\sin^2(ka)}{1 + \frac{\alpha}{2k}\sin(2ka)} \ . \tag{9.52}$$

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

$$\sin(2ka) = -\frac{2k}{\alpha} \ . \tag{9.53}$$

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

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\Psi = \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\mathbf{x})\Psi \ , \tag{9.54}$$

sujeita a condição de contorno (9.2), onde $k^2 = 2\mu E/\hbar^2$. Em algumas aplicações é interessante substituir (9.54) 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

$$\left(\nabla^2_{\mathbf{x}} + k^2\right) G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \ , \tag{9.55}$$

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

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \to e^{ik\mathbf{x}|}/|\mathbf{x}| \ . \tag{9.56}$$

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

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Psi_0(\mathbf{x}) + \int d^3\mathbf{x}' \ G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \ \frac{2\mu}{\hbar^2}V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}') \tag{9.57}$$

é solução de (9.54), caso Ψ_0 seja uma solução da equação honomogênea $(\nabla^2 + k^2)\Psi_0 = 0$. A expressão (9.57) é uma solução formal do problema de espalhamento uma vez que Ψ comparece ao lado direito desta equação, ou seja, (9.57) é uma *equação integral* para Ψ! (9.57) é a equação integral associada a (9.54), 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 (9.55). 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 (9.55) vamos expressar G na forma de uma transformada de Fourier

$$G(\mathbf{R}) = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \ \tilde{G}(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}} \ , \tag{9.58}$$

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 (9.55) e utilizamos que

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}}\ , \tag{9.59}$$

o que conduz a

$$\tilde{G}(\mathbf{p}) = -\frac{1}{\mathbf{p}^2 - k^2}\ . \tag{9.60}$$

Portanto, substituindo $\tilde{G}$ em (9.58), temos que

$$G(\mathbf{R}) = -\int \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\ \frac{1}{\mathbf{p}^2 - k^2}\ e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{R}}\ . \tag{9.61}$$

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

$$G(\mathbf{R}) = -\int_0^\infty \frac{dp}{(2\pi)^3}\ p^2 \int_0^{2\pi} d\phi\ \int_{-1}^{1} d\cos\theta\ \frac{1}{p^2 - k^2} e^{ipR\cos\theta}\ . \tag{9.62}$$

As integrações angulares são fáceis e conduzem a

$$G(\mathbf{R}) = -\frac{1}{2\pi^2 R}\int_0^\infty dp\ \frac{p}{p^2 - k^2}\ \frac{e^{ipR} - e^{-ipR}}{2i}\ . \tag{9.63}$$

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

$$G(\mathbf{R}) = \frac{i}{8\pi^2 R}\int_{-\infty}^\infty dp\ \frac{p}{p^2 - k^2}(e^{ipR} - e^{-ipR}) \tag{9.64}$$

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 abaixo.[5]

[5]Mostre que apesar da mudança do caminho de integração (9.64) ainda é uma solução de (9.55).

.

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

$$G(\mathbf{R}) = G^{+}(\mathbf{R}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikR}}{R} \ . \tag{9.65}$$

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

$$G(\mathbf{R}) = G^{-}(\mathbf{R}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ikR}}{R} \ . \tag{9.66}$$

A solução G^{+} (G^{-}) representa uma onda esférica emergente (incidente) devido a fonte pontual (tipo δ) que aparece no lado da equação de ondas (9.55). Visando que as soluções Ψ de (9.57) satisfaçam a condição de contorno de espalhamento (9.2) escolheremos G^{+} e $\Psi_0 = e^{ikz}$, o que nos leva a

$$\Psi(\mathbf{x}) = e^{ikz} - \frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}' \ \frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \ V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}') \ . \tag{9.67}$$

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

$$|\mathbf{x}-\mathbf{x}'| = \sqrt{\mathbf{x}^2 + \mathbf{x}'^2 - 2\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}'} \simeq |\mathbf{x}| - \frac{\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}'}{|\mathbf{x}|} \ , \tag{9.68}$$

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

$$\Psi(\mathbf{x}) \to e^{ikz} - \left[\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}'\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}\ V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}')\right]\frac{e^{ik|\mathbf{x}|}}{|\mathbf{x}|}\ , \tag{9.69}$$

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

$$f(\theta,\phi) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}'\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}')\ . \tag{9.70}$$

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 (9.67), 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 (9.67) iterativamente. Neste caso, (9.70) fornece que

$$f_B(\theta,\phi) \cong -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}'\ e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}'}V(\mathbf{x}')\ , \tag{9.71}$$

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 (9.70) deve ser desprezível, *i.e.*

$$|\Psi(\mathbf{x}) - e^{ikz}| = \left|-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int d^3\mathbf{x}'\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}')\right| \ll |\Psi_0| = 1\ . \tag{9.72}$$

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

$$\left| \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{x}' \frac{e^{ik|\mathbf{x}'|}}{|\mathbf{x}'|} V(\mathbf{x}')\Psi(\mathbf{x}') \right| \ll 1 \,. \tag{9.73}$$

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

$$\frac{2\mu}{\hbar^2 k} \left| \int dr'\; e^{ikr'} \sin(kr') V(r') \right| \ll 1 \,. \tag{9.74}$$

Podemos mostrar, a partir desta última condição, que esta aproximação é boa em duas situações[6]:

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

$$V_0 a^2 \ll \frac{\hbar^2}{\mu} \tag{9.75}$$

2. Para partículas bastante energéticas, *i.e.* k grande. Isto será verdade se

$$\frac{\mu a V_0}{\hbar^2 k} \ll 1 \,. \tag{9.76}$$

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

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} e^{-\chi r} \,, \tag{9.77}$$

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

[6]Mostre as duas condições a seguir.

$$f_B(\theta) = \frac{2\mu Z e^2}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \ \sin(qr) e^{-\chi r} = \frac{2\mu Z e^2}{\hbar^2 (q^2 + \chi^2)} \ . \tag{9.78}$$

Logo

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\mu^2 Z^2 e^4}{\hbar^4 (4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \chi^2)^2} \ . \tag{9.79}$$

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

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\mu^2 Z^2 e^4}{4p^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \ . \tag{9.80}$$

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 (9.74) 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 $-e\rho(\mathbf{r})$.[7] 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

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N} \int d^3\mathbf{r}_1 ... d^3\mathbf{r}_N \ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) |\Psi|^2 \ . \tag{9.81}$$

Portanto, o potencial de interação neste problema será dado por

$$V(\mathbf{r}) = Z' e^2 \left[\frac{Z}{r} - \int d^3\mathbf{r}' \ \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \ , \tag{9.82}$$

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

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

Neste ponto é óbvio que não podemos resolver exatamente este problema, logo utilizaremos a aproximação de Born. A partir de (9.76) podemos concluir (mostre) que esta aproximação é válida se

$$\frac{v}{c} \gg \frac{ZZ'}{137} \ , \tag{9.83}$$

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

$$\begin{aligned} f_b &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \int d^2\mathbf{r} \ e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\mu}{2\pi\hbar^2 \mathbf{q}^2} \int d^3\mathbf{r} \ \nabla^2 \left(e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \right) V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\mu}{2\pi\hbar^2 \mathbf{q}^2} \int d^3\mathbf{r} \ e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \nabla^2 V(\mathbf{r}) \ , \end{aligned} \tag{9.84}$$

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

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = -4\pi Z' e^2 \left(Z\delta(\mathbf{r}) - \rho(\mathbf{r}) \right) \ , \tag{9.85}$$

obtemos que

$$f_b = -\frac{2\mu Z' e^2}{\hbar^2 \mathbf{q}^2} \left(Z - F(\mathbf{q}) \right) \ , \tag{9.86}$$

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

$$F(\mathbf{q}) = \int d^3 \ \mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \rho(\mathbf{r}) \tag{9.87}$$

Logo a seção de choque diferencial deste processo é

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4Z'^2}{a_0^2 \mathbf{q}^4} \left| Z - F(\mathbf{q}) \right|^2 \ , \tag{9.88}$$

onde a_0 é o raio de Bohr.

Exercicio

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.