FISC-7048 - TÓPICOS ESPECIAIS DE FÍSICA TEÓRICA
(Introdução à Teoria Quântica do Espalhamento)

Márcio H. F. Bettega

Departamento de Física

Universidade Federal do Paraná

bettega@fisica.ufpr.br

Espalhamento por um potencial

- Tópicos:

  ✓ Definições básicas: descrição do espalhamento; tipos de colisões; canais; seção de choque.

  ✓ Espalhamento por um potencial: equação de Schrödinger independente do tempo; condição de contorno para a função de onda de espalhamento; densidade de corrente de probabilidade; relação entre seção de choque diferencial (experimento) e amplitude de espalhamento (teoria); o teorema ótico.

  ✓ Equação de Lippmann-Schwinger; a função de Green da partícula livre; expressão para a amplitude de espalhamento; aproximação de Born; potencial complexo.

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- Equação de Schrödinger (dependente do tempo):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t)+V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

tomando o complexo conjugado desta equação temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*(\mathbf{r},t)+V(\mathbf{r})\Psi^*(\mathbf{r},t)=-i\hbar\frac{\partial\Psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

multiplicando a primeira por Ψ^* e a segunda por Ψ e subtraindo temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*\right]=i\hbar\frac{\partial[\Psi^*\Psi]}{\partial t}$$

Usando $\boldsymbol{\nabla}\cdot(\varphi\boldsymbol{\nabla}\chi)=\boldsymbol{\nabla}\varphi\cdot\boldsymbol{\nabla}\chi+\varphi\nabla^2\chi$ temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{\nabla}\cdot\left[\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi-\Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\right]=i\hbar\frac{\partial[\Psi^*\Psi]}{\partial t}$$

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- Equação da continuidade:
  Definindo

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\right];\ \rho(\mathbf{r},t) = |\Psi|^2$$

  temos

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla}\cdot\mathbf{j} = 0$$

  Note que:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi - \Psi\boldsymbol{\nabla}\Psi^*\right] = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left[\Psi^*\boldsymbol{\nabla}\Psi\right] = \frac{1}{m}\mathrm{Re}\left[\Psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}\Psi\right)\right]$$

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- Associada à equação de Schrödinger (dependente do tempo), temos uma equação de continuidade dada por

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = 0$$

onde $\rho(\mathbf{r},t)$ é a densidade de probabilidade e $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ é a densidade de corrente de probabilidade. $\rho(\mathbf{r},t)$ e $\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$ são definidos como

$$\rho(\mathbf{r},t) = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2;\ \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{\Psi^*(\mathbf{r},t)\boldsymbol{\nabla}\Psi(\mathbf{r},t)\right\}$$

- No caso estacionário ($V = V(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})\exp(-i\omega t);\ \omega = E/\hbar$)

$$\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2;\ \frac{\partial \rho(\mathbf{r})}{\partial t} = 0;\ \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0;\ \mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{\psi^*(\mathbf{r})\boldsymbol{\nabla}\psi(\mathbf{r})\right\}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} = 0 \rightarrow \int dV \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} = \oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j} = 0$$

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- Considerando a condição assintótica de $\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})$ e lembrando que

$$\boldsymbol{\nabla} = \hat{\mathbf{r}}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial \phi}$$

e que

$$e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} = e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$$

temos (para o fluxo "outgoing" através de uma superfície unitária perpendicular à $\hat{\mathbf{r}}$)

$$\begin{aligned}
\mathbf{j}(\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{r}} &= \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{\psi^{(+)*}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})\frac{\partial\psi^{(+)}_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})}{\partial r}\right\} \\
&= \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{N^*N\left[e^{-ikr\cos\theta} + f^*_k(\theta,\phi)\frac{e^{-ikr}}{r}\right]\times\right. \\
&\quad \left.\times\frac{\partial}{\partial r}\left[e^{ikr\cos\theta} + f_k(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\right]\right\}
\end{aligned}$$

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- Temos então 3 termos: o termo incidente, associado à onda plana incidente, o espalhado, associado à onda esférica modulada pela amplitude de espalhamento, e o de interferência, envolvendo os termos cruzados entre as ondas plana e esférica.

✓ termo de incidência: $\mathbf{j}_{inc}(\mathbf{r},t)\cdot\hat{\mathbf{z}}$, onde

$$Ne^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}} = Ne^{ikz};\ \boldsymbol{\nabla} = \hat{\mathbf{x}}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{\mathbf{y}}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{\mathbf{z}}\frac{\partial}{\partial z}$$

O fluxo através de uma área unitária perpendicular à direção de incidência $\hat{\mathbf{k}}_i$ é

$$\mathbf{j}_{inc}(\mathbf{r},t)\cdot\hat{\mathbf{z}} = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{N^* e^{-ikz}\frac{d[Ne^{(ikz)}]}{dz}\right\} = N^*N\frac{\hbar k}{m}$$

✓ termo espalhado (considerando apenas o termo da onda esférica)

$$\begin{aligned}\mathbf{j}_{out}(\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{r}} &= \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{N^* f_k^*(\theta,\phi)\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left[Nf_k(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\right]\right\}\\ &= N^*N\frac{\hbar k}{m}\frac{1}{r^2}|f_k(\theta,\phi)|^2\end{aligned}$$

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- Por último, vamos considerar o termo de interferência $\mathbf{j}_{int}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{r}}$

$$
\begin{aligned}
\mathbf{j}_{int}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{r}} &= \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im} \left\{ N^* e^{-ikr\cos\theta} \frac{\partial}{\partial r} \left[N f_k(\theta,\phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right] + \right. \\
&+ \left. N^* f_k^*(\theta,\phi) \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[N e^{ikr\cos\theta} \right] \right\} = \\
&= N^* N \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im} \left\{ ik \frac{1}{r} f_k(\theta,\phi) e^{[ikr(1-\cos\theta)]} + \right. \\
&+ \left. ik\cos\theta \frac{1}{r} f_k^*(\theta,\phi) e^{[-ikr(1-\cos\theta)]} \right\} + \ldots
\end{aligned}
$$

onde termos de ordem superior a $1/r$ foram desprezados.
✓ pode-se mostrar que os termos $\mathbf{j}_{int}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}}$ e $\mathbf{j}_{int}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\phi}}$ são de ordem $1/r^3$ e portanto podem ser desprezados no limite $|\mathbf{r}| \to \infty$.

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- Note que $\mathbf{j}_{int}(\mathbf{r})$ difere dos dois termos anteriores (inc e out), contribuindo apenas quando $\theta \neq 0$ (onde ocorre a interferência da onda plana com a onda esférica). Isso pode ser visto analisando a seguinte integral, onde consideramos uma superposição de ondas planas com vetores de onda em um intervalo $\Delta\mathbf{k}$ em torno de $\mathbf{k}_i$.

$$\int_k^{k+\Delta k} dk e^{[ikr(1-\cos\theta)]} = \left\{ \frac{1}{ir(1-\cos\theta)} e^{[ikr(1-\cos\theta)]} \right\}_k^{k+\Delta k}$$

Para $\theta \neq 0$ a integral acima oscila, e neste caso

$$\lim_{r\to\infty} \int_k^{k+\Delta k} dk e^{[ikr(1-\cos\theta)]} = 0$$

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- A seção de choque diferencial pode ser escrita como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k;\theta,\phi) = \frac{|\mathbf{j}_{out}|r^2 d\Omega}{|\mathbf{j}_{inc}|} = |f_k(\theta,\phi)|^2 d\Omega$$

ou

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(k;\theta,\phi) = |f_k(\theta,\phi)|^2$$

Temos portanto uma relação entre a seção de choque diferencial (medida em laboratório) e a amplitude de espalhamento (calculada, e que deve ser obtida a partir do comportamento assintótico da função de onda de espalhamento). A partir da seção de choque diferencial obtemos

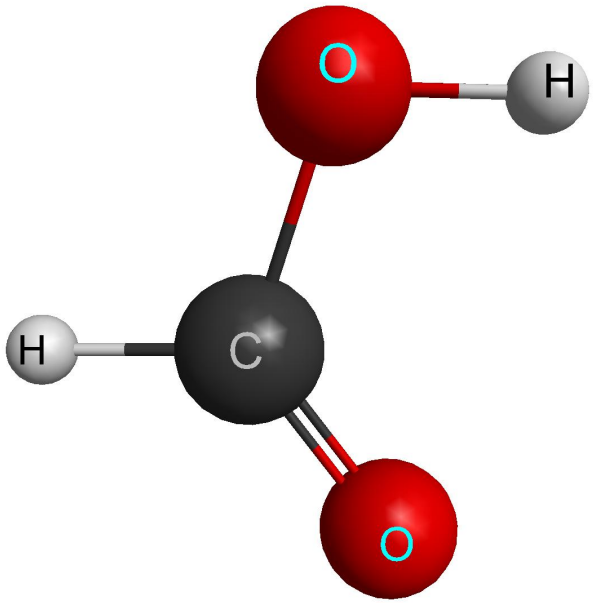
✓ seção de choque total:

$$\sigma_{tot}(k) = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}(k;\theta,\phi) = \int d\Omega |f_k(\theta,\phi)|^2$$

✓ seção de choque de transferência de momentum:

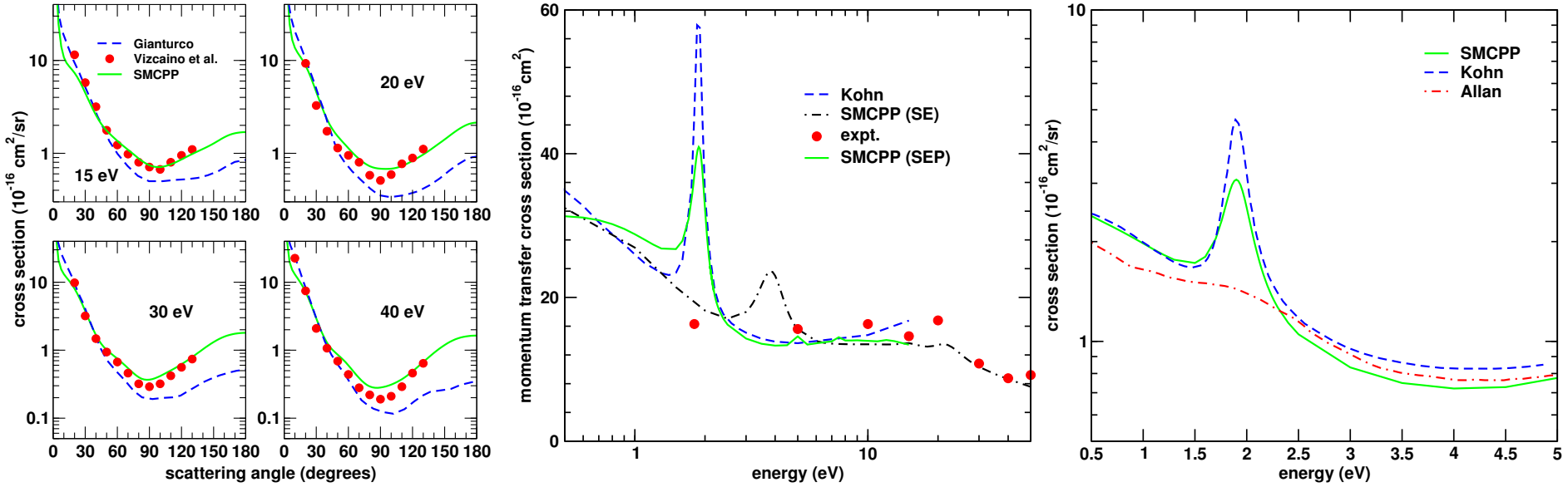
$$\sigma_{mt}(k) = \int d\Omega (1-\cos\theta)\frac{d\sigma}{d\Omega}(k;\theta,\phi) = \int d\Omega (1-\cos\theta)|f_k(\theta,\phi)|^2$$

Ilustração: Colisões e^-–HCOOH



Estrutura do ácido fórmico.

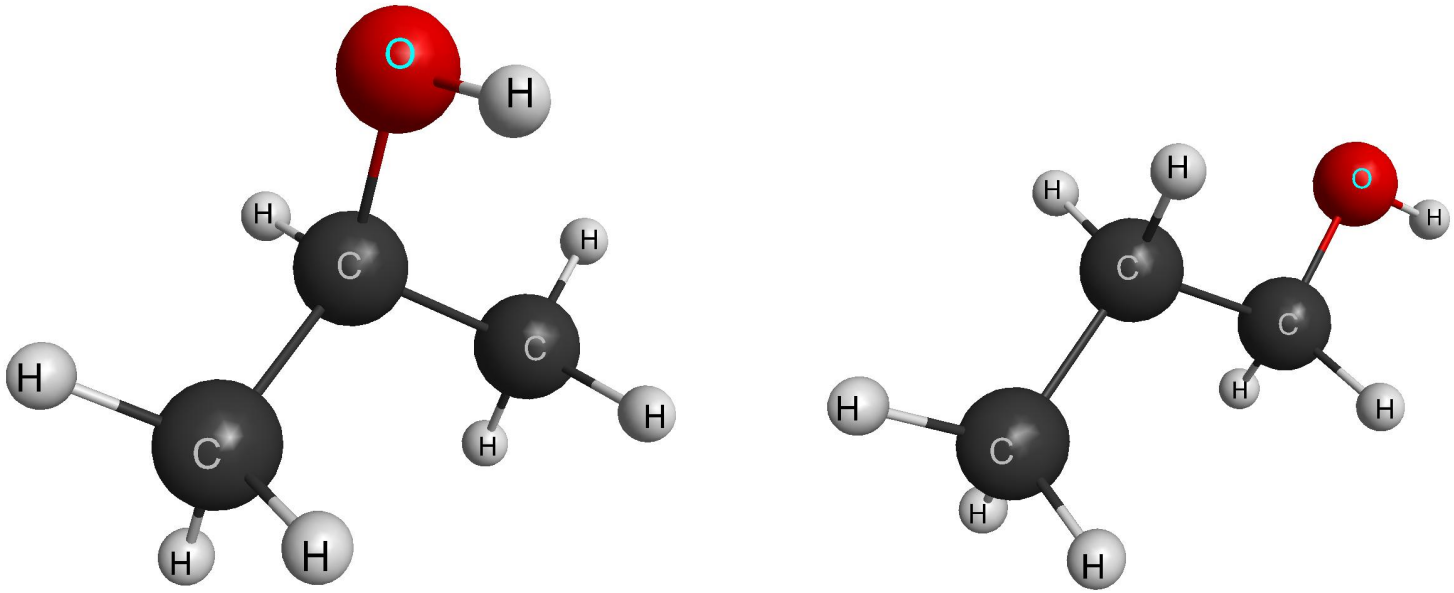
Ilustração: Colisões e^-–HCOOH



Seções de choque diferenciais (esquerda), de transferência de momentum (centro), e diferencial a 130° (direita).

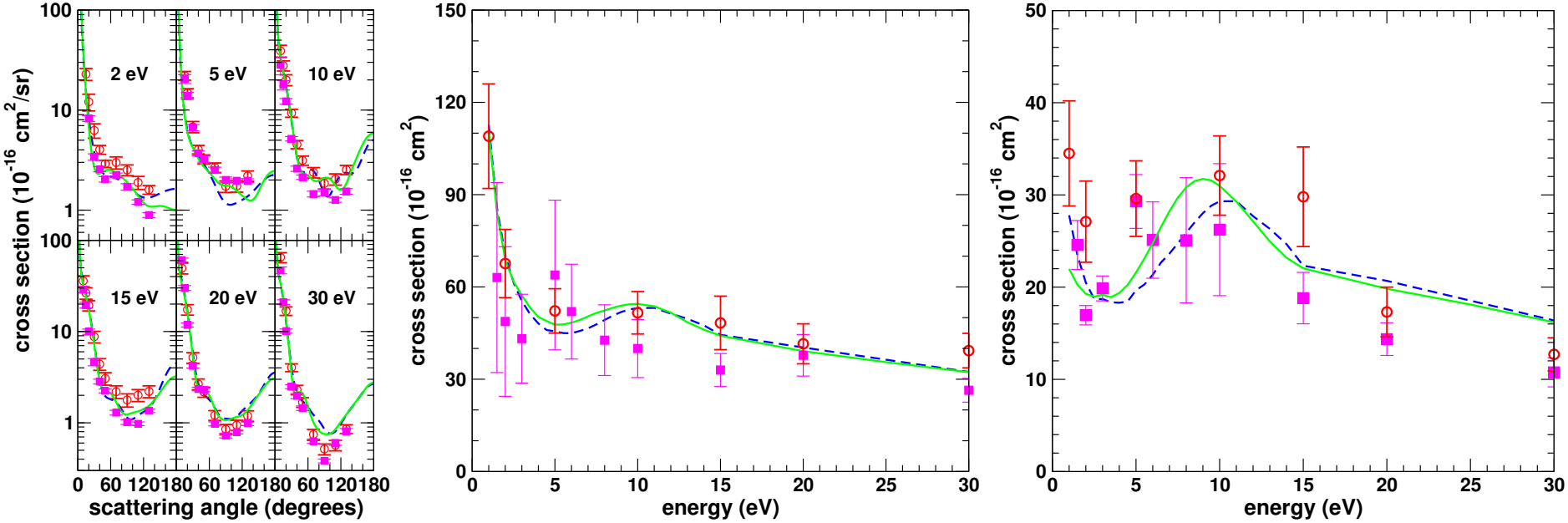
✓ M. H. F. Bettega, Phys. Rev. A 74, 054701 (2006)

Ilustração: Colisões e^-–C_3H_7OH



Estrutura do isopropanol (direita), n-propanol (esquerda).

Ilustração: Colisões e^-–C_3H_7OH



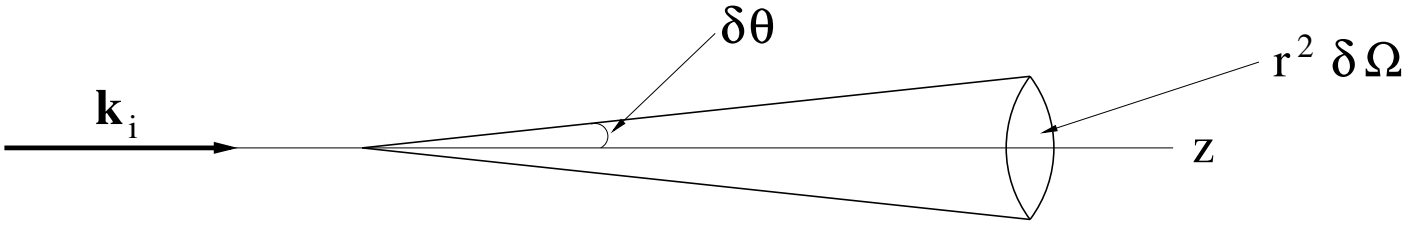
✓ M. H. F. Bettega, C. Winstead, V. McKoy, A. Jo, A. Gauf, J. Tanner, L. R. Hargreaves, M. A. Khakoo, Phys. Rev. A **84**, 042702 (2011)

Espalhamento por um Potencial: O Teorema Ótico

- O teorema ótico diz que

$$\sigma_{tot} = \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im} f_k(\theta = 0)$$

- Para demonstrar este teorema vamos considerar o arranjo ilustrado abaixo



Integrando o termo de interferência entre $\theta = 0$ e $\delta\theta$ temos

$$\int_{\cos\delta\theta}^{1} d(\cos\theta) e^{[ikr(1-\cos\theta)]} = \frac{e^{ikr}}{-ikr}\left\{e^{-ikr} - e^{(-ikr\cos\delta\theta)}\right\} = \frac{i}{kr} + \text{temos oscilantes}$$

e portanto

$$\int_{\delta\Omega} d\Omega r^2 \mathbf{j}_{int} \cdot \hat{\mathbf{r}} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{\cos\delta\theta}^{1} d(\cos\theta) r^2 \mathbf{j}_{int} \cdot \hat{\mathbf{r}} = -4\pi N^* N \frac{\hbar}{m} \mathrm{Im} f_k(\theta = 0)$$

onde f_k independe de ϕ na direção de incidência.

Espalhamento por um Potencial: Amplitude de Espalhamento

- Lembrando que

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{j} = 0 \rightarrow \oint d\mathbf{S} \cdot \mathbf{j} = \int d\Omega r^2 \mathbf{j} \cdot \hat{\mathbf{r}} = 0$$

que é a relação que expressa a conservação do número de partículas (como V é real, não há fontes nem sumidouros). Fazendo $\mathbf{j} = \mathbf{j}_{inc} + \mathbf{j}_{out} + \mathbf{j}_{int}$, integrando e considerando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ e $\int d\Omega \mathbf{j}_{int} \cdot \hat{\mathbf{r}} = 0$ temos

$$N^* N \frac{\hbar}{m} \left\{ k \int d\Omega |f_k(\theta, \phi)|^2 - 4\pi \mathrm{Im} f_k(\theta = 0) \right\} = 0$$

ou, colocando em outra forma

$$\sigma_{tot} = \int d\Omega |f_k(\theta, \phi)|^2 = \frac{4\pi}{k} \mathrm{Im} f_k(\theta = 0)$$

que é a expressão desejada.