Medida fraca e espalhamento - Parte 4: a amplitude de espalhamento

Em uma série de postagens, Medida fraca e espalhamento Parte 1: o estado inicial , Medida fraca e espalhamento Parte 2: a hamiltoniana de interação e Medida fraca e espalhamento Parte 3: a função de Green para a equação de Schrödinger, tenho começado a descrever o espalhamento de um átomo por um campo indução magnética. Na Parte 3 apresentei os estados "in" e "out". Nesta postagem, vou mostrar como, tomando a forma assintótica de um estado tipo "in", definimos a chamada amplitude de espalhamento. É através dessa quantidade que a seção de choque diferencial de espalhamento é obtida. A seção de choque é a quantidade usualmente medida em experimentos colisionais.

No formalismo independente do tempo, precisamos tomar o ponto de observação ou detecção muito distante da região em que o potencial de interação é apreciável. Dessa forma, precisamos expandir a distância $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ e sua inversa, $1/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$, em séries de potências do quociente r'/r, já que estaremos olhando a situação em que $r \gg r'$. Essas expansões estão feitas, em detalhes, na postagem, Radiação de fontes localizadas harmonicamente oscilantes, e os resultados são

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = r - \hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}' + r'\left[\frac{1-(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{r}}')^2}{2}\left(\frac{r'}{r}\right)+\ldots\right] \tag{1}$$

e

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{1}{r}+\frac{\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}{r^3}-\frac{1}{2}\frac{(r')^2}{r^3}+\frac{3}{2}\frac{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}')^2}{r^5}+\ldots \tag{2}$$

Como vimos na Parte 3, o estado "in" é dado por

$$\begin{pmatrix}\psi^{\uparrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r})\\ \psi^{\downarrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r})\end{pmatrix} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right)\begin{pmatrix}\delta_{\uparrow,s}\\ \delta_{\downarrow,s}\end{pmatrix}$$
$$-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int_{V\infty} d^3r'\,\frac{\exp(ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}')\begin{pmatrix}\psi^{\uparrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}')\\ \psi^{\downarrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}')\end{pmatrix}. \tag{3}$$

Podemos usar as expansões das Eqs. (1) e (2) na função de Green da Eq. (3) e obtemos, desprezando todos os termos proporcionais a r'/r,

$$\frac{\exp(ik_0|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx \frac{\exp[ik_0(r-\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}')]}{r}. \tag{4}$$

Os termos desprezados podem ser feitos tão pequenos quanto quisermos, bastando tomar r suficientemente grande. Veja que o máximo valor de r' é dado pelo máximo alcance do potencial $V(\mathbf{r}')$ aparecendo dentro da integral da Eq. (3). Então, para a Eq. (4) valer, basta instalarmos o detetor a uma distância suficientemente maior do que as dimensões do aparato de Stern e Gerlach.

Com a substituição da Eq. (4) na Eq. (3), obtemos

$$\begin{pmatrix} \psi^{\uparrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}) \\ \psi^{\downarrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \to \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right) \begin{pmatrix} \delta_{\uparrow,s} \\ \delta_{\downarrow,s} \end{pmatrix}$$
$$-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\exp(ik_0 r)}{r}\int_{V\infty} d^3r' \exp(-ik_0\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}')\, V(\mathbf{r}') \begin{pmatrix} \psi^{\uparrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}') \\ \psi^{\downarrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}') \end{pmatrix}. \qquad (5)$$

A integral da Eq. (5) tem a estrutura de um elemento de matriz do operador potencial entre um bra e um ket. Para ver isso, basta introduzir o operador identidade do espaço de spin,

$$\mathbb{I}_{2\times 2} = \sum_{s'=\uparrow}^{\downarrow} |s'\rangle\langle s'|, \qquad (6)$$

à esquerda da integral. Como, da Parte 3, sabemos que

$$\langle \hbar k_0\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp(-ik_0\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}') \qquad (7)$$

e que

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}'|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle &= \psi^{\uparrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}')|\uparrow\rangle + \psi^{\downarrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}')|\downarrow\rangle \\ &= \begin{pmatrix} \psi^{\uparrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}') \\ \psi^{\downarrow}_{\mathbf{p},s}(\mathbf{r}') \end{pmatrix}, \qquad (8)\end{aligned}$$

podemos introduzir a Eq. (6) e substituir as Eqs. (7) e (8) na Eq. (5), obtendo

$$\langle \mathbf{r}|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle \to \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}\right)|s\rangle$$
$$-\frac{m(2\pi\hbar)^{3/2}}{2\pi\hbar^2}\frac{\exp(ik_0 r)}{r}$$
$$\times\sum_{s'=\uparrow}^{\downarrow}|s'\rangle\int_{V\infty} d^3r'\ \langle \hbar k_0\hat{\mathbf{r}}, s'|\mathbf{r}'\rangle V(\mathbf{r}')\langle \mathbf{r}'|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle, \qquad (9)$$

onde

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}. \qquad (10)$$

Da Parte 2 e da Parte 3, vemos que

$$H_{int} = \mu \left.\frac{\partial B_z}{\partial z}\right|_{\mathbf{r}=\mathbf{0}} (-\sigma_y y + \sigma_z z)\, g(r) = V(\mathbf{r}). \qquad (11)$$

Com a Eq. (11), vem

$$V(\mathbf{r}')\langle \mathbf{r}'|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle = \langle \mathbf{r}'|H_{int}|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle. \qquad (12)$$

Usando a Eq. (12) e a completeza da base de posição, isto é,

$$\mathbb{I}_{\mathbf{r}} = \int_{V_{r'}^{\infty}} d^3r' \, |\mathbf{r}'\rangle \langle \mathbf{r}'| \,, \qquad (13)$$

é possível compactar a notação da integral da Eq. (9) assim:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle &\rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar} \right) |s\rangle \right. \\ &- \left. \frac{m(2\pi\hbar)^3}{2\pi\hbar^2} \frac{\exp(ik_0 r)}{r} \sum_{s'=\uparrow}^{\downarrow} |s'\rangle \langle \hbar k_0 \hat{\mathbf{r}}, s'|H_{int}|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle \right] . \qquad (14) \end{aligned}$$

Definimos, da maneira convencional, a amplitude de espalhamento como sendo

$$\begin{aligned} f_s^{s'}(E, \hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) &\equiv -\frac{m(2\pi\hbar)^3}{2\pi\hbar^2} \langle \hbar k_0 \hat{\mathbf{r}}, s'|H_{int}|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle \\ &= -4\pi^2 m\hbar \langle \hbar k_0 \hat{\mathbf{r}}, s'|H_{int}|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle . \qquad (15) \end{aligned}$$

Com a Eq. (15) definindo a amplitude de espalhamento, podemos reescrever a forma usual do estado de espalhamento assintótico, Eq. (14), assim:

$$\langle \mathbf{r}|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle \rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[\exp\left(i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar} \right) |s\rangle + \frac{\exp(ik_0 r)}{r} \sum_{s'=\uparrow}^{\downarrow} |s'\rangle f_s^{s'}(E, \hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) \right] . \qquad (16)$$

Veja que a amplitude de espalhamento é uma função que depende da energia, que é conservada na colisão, dos estados inicial e final de spin, da direção do feixe incidente, $\hat{\mathbf{p}}$, e da posição angular do detetor, $\hat{\mathbf{r}}$. Também é digno de nota o fato de que, na Eq. (15), para calcular a amplitude de espalhamento, devemos conhecer o estado de espalhamento, $\langle \mathbf{r}|\Psi_{\hat{\mathbf{p}},s}(E)\rangle$.