

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE - UFF
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
FÍSICA

Operador de transição em espalhamento múltiplo e métodos de equações integrais para o espalhamento por fendas múltiplas.

Rafael Magioli Fortiny

Volta Redonda, 3 de abril de 2025

**UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE - UFF
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
FÍSICA**

Rafael Magioli Fortiny

Operador de transição em espalhamento múltiplo e métodos de equações integrais para o espalhamento por fendas múltiplas.

Dissertação submetida ao curso de pós-graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt UFF

**3 de abril de 2025
Volta Redonda**

Ficha catalográfica automática - SDC/BIF
Gerada com informações fornecidas pelo autor

F742o Fortiny, Rafael Magioli
Operador de transição em espalhamento múltiplo e métodos
de equações integrais para o espalhamento por fendas
múltiplas / Rafael Magioli Fortiny. - 2025.
74 f.: il.

Orientador: Alexandre Grezzi de Miranda Schmidt.
Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense,
Instituto de Física, Niterói, 2025.

1. Espalhamento. 2. Equações integrais. 3. Operador T. 4.
Fendas múltiplas. 5. Produção intelectual. I. Schmidt,
Alexandre Grezzi de Miranda, orientador. II. Universidade
Federal Fluminense. Instituto de Física. III. Título.

CDD - XXX

Rafael Magioli Fortiny

Operador de transição em espalhamento múltiplo e métodos de equações integrais para o espalhamento por fendas múltiplas

Dissertação submetida ao curso de pós-graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Física.

Aprovado em: 31 de Abril de 2025:

**Prof. Dr. Alexandre Grezzi de
Miranda Schmidt UFF**
Orientador

**Prof. Dr. Wagner Franklin Balthazar
IFRJ**

**Prof. Dr. Fernando Iemini de Rezende
Aguiar UFF**

Agradecimentos

Agradeço a todos que tiveram participação neste trabalho, assim como a todos que o impulsionaram de forma direta ou indireta.

"We sit together, the mountain and me, until only the mountain remains."
(Li Bai)

Resumo

Este trabalho apresenta um estudo do fenômeno de espalhamento quântico por barreiras de potencial onde as funções de onda são calculadas com a metodologia do operador T e com a equação de Lippmann-Schwinger. Investigamos como o uso do operador T para o cálculo da função de onda espalhada é equivalente àquela calculada com a formulação da equação de Lippmann-Schwinger, e mostramos aplicações em duas dimensões para o espalhamento simples e múltiplo. Estudamos os casos em que as equações integrais de Volterra apesar de possuírem o núcleo separável, devem ser resolvidas em um domínio que exige uma descrição mais complicada, o que ocorre em certas parametrizações da barreira de potencial e obtemos um sistema de equações acopladas. Por fim, aplicamos este método para o espalhamento por fendas simples, dupla e múltiplas.

Palavras-chaves: Lippmann-Schwinger; operador T ; equações integrais; espalhamento por fendas.

Abstract

This work presents a study of the quantum scattering through potential barriers where the wave functions are calculated using the T operator methodology and the Lippmann-Schwinger equation. We investigate how the use of the T operator to calculate the scattered wave function is equivalent to the formulation of the Lippmann-Schwinger proposal, we also show applications in two dimensions for single and multiple scattering. We study the cases in which the Volterra integral equations despite having a separable kernel, must be solved within a domain that demands a more cumbersome description, that occurs in certain parametrizations of the potential barrier, further we obtain a system of coupled equations. Finally, we apply this method to the scattering through single, double and multiple slits.

Key-words: Lippmann-Schwinger; T operator; integral equations; scattering by multiple slits.

Listas de ilustrações

Figura 1 – Barreira circular no plano	37
Figura 2 – Espalhamento pela barreira circular na presença de um campo magnético uniforme	45
Figura 3 – Barreira como segmento de reta secante no ponto $x = x_0$, início em $-\theta_0$ e fim em θ_0 . Domínio dividido em três regiões, (1) interior, (2) anelar e (3) exterior.	51
Figura 4 – Gráficos da densidade de probabilidade $r \Psi ^2$ para o espalhamento de uma onda plana por um segmento finito com constante de acoplamento $\gamma = 100$. O segmento começa a uma distância $x_0 = 1/2$ da origem no ângulo $\theta = \pi/4$ até $\theta = -\pi/4$. Em ambas as imagens superiores, o número de onda da onda incidente é $k = 2\pi$. Nas imagens inferiores, o número da onda incidente é $k = 12\pi$ (esquerda) e $k = 16\pi$ (direita). O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os problemas. Segmentos verticais pretos representam as paredes limite.	56
Figura 5 – Gráficos da seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para o espalhamento de uma onda plana por um segmento finito para três momentos de onda diferentes, $k = \{2\pi, 12\pi, 16\pi\}$. A constante de acoplamento é $\gamma = 100$ e o ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.	58
Figura 6 – Gráficos da seção de choque total σ_T para o espalhamento de uma onda plana por um segmento finito como função do momento k e da constante de acoplamento γ . O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.	59
Figura 7 – Segmento de reta em $x = x_0$ com uma fenda simples, início em $-\theta_0$ e fim em θ_0 . Domínio dividido em três regiões, (1) interior, (2) anelar e (3) exterior.	60

Figura 8 – Gráficos da densidade de probabilidade $r \Psi ^2$ para o espalhamento de uma onda plana por uma única fenda com constante de acoplamento $\gamma = 100$. O segmento começa a uma distância $x_0 = 1/2$ da origem no ângulo $\theta = \pi/4$ até $\theta = -\pi/4$. Na imagem superior esquerda, o número da onda incidente é $k = 4\pi$; no canto superior direito, $k = 11\pi$; e na terceira e quarta, os números de onda são $k = 8\pi$ e $k = 10\pi$, respectivamente, as imagens inferiores esquerda e direita. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos esses casos. Segmentos verticais pretos representam as paredes limite.	60
Figura 9 – Gráficos da seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para o espalhamento de uma onda plana por uma fenda simples para quatro momentos de onda diferentes, $k = \{4\pi, 8\pi, 10\pi, 11\pi\}$. A constante de acoplamento é $\gamma = 100$ e o ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.	61
Figura 10 – Gráficos da seção de choque total σ_T para o espalhamento de uma onda plana por uma fenda simples como função do momento k e da constante de acoplamento γ . O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.	62
Figura 11 – Segmento de reta em $x = x_0$ com duas fendas, início em $-\theta_0$ e fim em θ_0 . Domínio dividido em três regiões, (1) interior, (2) anelar e (3) exterior.	63
Figura 12 – Gráficos da densidade de probabilidade $r \Psi ^2$ para o espalhamento de uma onda plana por um potencial de fenda dupla com constante de acoplamento $\gamma = 100$. O segmento começa a uma distância $x_0 = 1/2$ da origem no ângulo $\theta = \pi/4$ até $\theta = -\pi/4$. A imagem superior esquerda mostra uma onda incidente com número de onda $k = 8\pi$, a imagem superior direita tem o número de onda incidente $k = 10\pi$, enquanto a terceira e a quarta têm número de onda $k = 14\pi, 18\pi$, respectivamente inferior esquerdo e direito. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ para todos os problemas. Segmentos verticais pretos representam as paredes limite.	64

Figura 13 – Gráficos da seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para o espalhamento de uma onda plana por duas fendas para quatro momentos de onda diferentes, $k = \{8\pi, 10\pi, 14\pi, 18\pi\}$. A constante de acoplamento é $\gamma = 100$ e o ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.	65
Figura 14 – Gráficos da seção total σ_T para o espalhamento de uma onda plana por uma fenda dupla como função do momento k e da constante de acoplamento γ . O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.	66
Figura 15 – Gráficos da densidade de probabilidade $r \Psi ^2$ para o espalhamento de uma onda plana por múltiplas fendas, todas com constante de acoplamento $\gamma = 100$. O segmento começa a uma distância $x_0 = 1/2$ da origem no ângulo $\theta = \pi/4$ até $\theta = -\pi/4$. A primeira imagem (canto superior esquerdo) mostra uma onda incidente com número de onda $k = 4\pi$, a segunda (canto superior direito), terceira (canto inferior esquerdo) e quarta (canto inferior direito) com números de onda incidente $k = 11\pi, 8\pi$ e $k = 24\pi$, respectivamente. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os quatro problemas. Segmentos verticais pretos representam as paredes limite.	67
Figura 16 – Gráficos da seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para o espalhamento de uma onda plana por múltiplas fendas para quatro momentos de onda diferentes, $k = \{4\pi, 8\pi, 11\pi, 24\pi\}$. A constante de acoplamento é $\gamma = 100$ e o ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.	68
Figura 17 – Gráficos da seção total σ_T para o espalhamento de uma onda plana por múltiplas fendas definidas a partir do conjunto de Cantor como função do momento k e da constante de acoplamento γ . O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.	69

Sumário

1	INTRODUÇÃO	14
2	METODOLOGIA	18
2.1	Distribuições	18
2.1.1	Delta de Dirac	18
2.1.2	Distribuições ao longo de superfícies	19
2.2	Equações integrais	20
2.2.1	Equações integrais de núcleo separável	20
2.2.2	Domínio de interação	22
2.2.3	Cálculo dos coeficientes α e β	23
2.2.4	Coeficientes como funções reais	24
2.3	Funções de Green e a equação de Lippmann-Schwinger	26
2.3.1	O operador de Green	27
2.3.2	Equação para o espalhamento	28
2.3.3	Grandezas físicas	29
3	OPERADOR T	31
3.1	Operador T	31
3.1.1	Definição de T	31
3.1.2	Equação integral para o operador T	32
3.1.3	Formulação do problema de espalhamento com operador T	32
3.2	Espalhamento múltiplo	34
3.2.1	Cálculo para dois potenciais	34
4	APLICAÇÕES OPERADOR T	37
4.1	Operador T para barreira circular em duas dimensões	37
4.1.1	O operador T	38
4.1.2	Onda espalhada pela a barreira circular 2D	43

4.2	Operador T para a barreira circular na presença de um campo externo	45
4.2.1	Operador T para barreira na presença do campo	45
4.2.2	Onda espalhada pela barreira na presença do campo externo	48
5	APLICAÇÕES NO ESPALHAMENTO POR MÚLTIPLAS FEN- DAS	50
5.1	Segmento de reta	50
5.1.1	Região interior	51
5.1.2	Região exterior	52
5.1.3	Região anelar	53
5.1.4	Solução completa	55
5.1.5	Seções de choque	57
5.2	Fenda simples	59
5.3	Fenda dupla	62
5.4	Fendas múltiplas definidas pelo conjunto de Cantor	66
6	CONCLUSÃO	70
	REFERÊNCIAS	72

1 Introdução

Existe uma profusão de problemas na natureza que são explicados pela teoria do espalhamento, como por exemplo nas áreas de física atômica e nuclear, diversos problemas da engenharia naval [CHATJIGEORGIOU, 2011] engenharia oceânica e civil [YUAN et al., 2019], usos na medicina como imagens por raios x, entre várias outras aplicações. Inúmeros avanços na ciência foram devidos a resultados dos experimentos de espalhamento, como a dispersão de ondas eletromagnéticas por [RAYLEIGH, 1892], a melhor compreensão da natureza do átomo por Rutherford [RUTHERFORD, 1911], extraíndo resultados do espalhamento de partículas alfa, ou ainda a comprovação de que os elétrons ocupam níveis quantizados de energia pelo experimento de Franck e Hertz que consistia no espalhamento de elétrons por vapor de mercúrio [FRANCK; HERTZ, 1967].

Os experimentos de espalhamento consistem em incidir partículas livres, ou projéteis, em um alvo que pode ser qualquer tipo de objeto, macroscópico ou microscópico, seja um campo externo, outra partícula, ou, como nos experimentos citados, uma chapa de ouro e vapor de mercúrio. No contexto de espalhamento não relativístico com o qual iremos trabalhar o centro espalhador é comumente representado por um potencial [BELKIC, 2020; TAYLOR, 2012]. Após a interação, a partícula incidente é espalhada para um estado livre, agora carregando novas informações, isto é, novo momento angular ou nova energia, entre outros, e isto nos permite inferir as características do alvo com o qual ela interagiu, como por exemplo sua estrutura interna, posição e como transfere energia, características que usualmente não poderiam ser medidas diretamente. Esta análise pode ser feita a partir do conhecimento de grandezas como seção de choque, amplitude de espalhamento, ou da própria função de onda.

Estes problemas são descritos matematicamente por equações diferenciais, a equação de onda para cenários macroscópicos como na área de eletromagnetismo ou em acústica, e as equações de Dirac, Pauli ou Schrödinger em mecânica quântica,

dependendo do que é considerado ao se formular o problema, como a escala de energia e presença ou ausência de spin. No caso da mecânica quântica as soluções nas quais estamos interessados são os estados físicos das partículas, que são representados pelas funções de onda.

Iremos investigar, no decorrer desta dissertação, as características do espalhamento não relativístico de partículas escalares, para isto, devemos resolver a equação de Schrödinger ou sua forma integral, a equação de Lippmann-Schwinger [LIPP-MANN; SCHWINGER, 1950], introduzida em 1950 por Bernard Lippmann e Julian Schwinger, uma descrição do espalhamento que carrega interesse teórico no estudo de funções especiais e métodos para equações integrais, além de aplicações como em [MAIOLI; SCHMIDT, 2018; MAIOLI; SCHMIDT, 2019] e [RUIZ-BIESTRO; GUTIÉRREZ-VEGA, 2024]. Ao contrário das equações de Dirac, Pauli e Schrödinger, a equação de Lippmann-Schwinger traz uma descrição global do sistema físico e, tratando-se de uma equação integral de Fredholm de segunda espécie, composta pelo potencial, a função de Green e a partícula livre, onde o núcleo consiste no produto da função de Green pelo potencial, é preciso definir bem as condições de contorno e estudar os métodos apropriados de resolução, os quais apresentaremos.

Tratando-se de uma equação integral que depende da forma do potencial, da função de Green e da parametrização no sistema de coordenadas, é natural que se espere que certos problemas não apresentem soluções exatas. Para problemas sem solução exata, existem técnicas bem conhecidas como expansão em ondas parciais, adequada para baixas energias, ou a expansão de Born que se aplica melhor para altas energias. No nosso caso, quando não for possível obter a solução analítica, resolveremos esta equação numericamente utilizando o software Mathematica.

No presente trabalho, apresentaremos as soluções do problema de espalhamento, resolvendo a equação de Lippmann-Schwinger para um tipo específico de potencial, conhecido como barreiras delta de potencial, ou “boundary walls”, definido por funções delta de Dirac vinculadas a uma superfície, que é o tipo de potencial mais utilizado ao se tratar de espalhamento não relativístico. Sendo introduzido por da Luz [LUZ; LUPU-SAX; HELLER, 1997] e posteriormente estudado por Zanetti [ZANETTI; VICENTINI; da Luz, 2008], este tipo de barreira nos permite estudar

e extrair interpretações de sistemas físicos como [KOSZTIN; SCHULTEN, 1997] e [AZEVEDO et al., 2024]. A utilização de um potencial definido por deltas de Dirac simplifica o cálculo algébrico de resolver a equação de Lippmann-Schwinger, uma vez que as distribuições estão definidas dentro de integrais. Isto, sem que se perca na descrição física do problema, podemos notar isso em algumas aplicações como no efeito Casimir em [CAVERO-PELÁEZ; MUÑOZ-CASTANEDA; ROMANIEGA, 2021] e [CAVERO-PELÁEZ; MILTON, 2005] sendo possivelmente uma das formas mais simples de estudar este tipo de problema preservando a Física do problema. Este método nos permitiu resolver diversos problemas em uma, até n dimensões como em [PEREIRA; CUNHA; SCHMIDT, 2024], [SCHMIDT; PEREIRA, 2023], [SCHMIDT; JESUS, 2022], [PEREIRA; SCHMIDT, 2022], [AZADO; MAIOLI; SCHMIDT, 2021] e [MAIOLI; SCHMIDT; AZADO, 2022] e também com aplicações em física experimental [OLIVEIRA et al., 2024], ou em problemas não euclidianos como em [JESUS; MAIOLI; SCHMIDT, 2021a] e [JESUS; MAIOLI; SCHMIDT, 2021b].

Outra forma de trabalhar com espalhamento é a descrição a partir do operador T [GONIS; BUTLER, 1999; GOLDBERGER; WATSON, 1964]. No devido capítulo, explicitamos a teoria por trás do método e mostramos como o método do operador T é válido e a partir dele podemos calcular a função de onda espalhada, o método nos fornece os mesmos resultados que seriam encontrados ao se resolver a equação de Lippmann-Schwinger. Aplicamos isso para dois problemas em duas dimensões que já conhecíamos a solução e apresentamos os resultados, que se mostraram compatíveis. Escolhemos posteriormente, o experimento bem conhecido de difração por fendas que possui resultados experimentais, porém sem uma formulação matemática e resultados analíticos. Modelamos as fendas como “boundary walls” e resolvemos a equação de Lippmann-Schwinger para o problema, com essa construção, encontramos as soluções e as apresentamos.

No decorrer dos capítulos a seguir, apresentaremos como metodologia no capítulo 2 a teoria de distribuições e como escrevê-las sobre curvas ou superfícies, o que será necessário para a construção dos potenciais do tipo barreira. Mostraremos os tipos de equações integrais existentes e o método de solução para o tipo de equação que descreve os problemas de espalhamento. Será mostrado também o método desen-

volvido para o caso em que a equação não é completamente separável. Em seguida, exporemos a teoria das funções de Green como embasamento para a construção da equação de Lippmann-Schwinger. No capítulo 3 discorreremos sobre a metodologia do operador T ou matriz de transição T , apresentaremos as definições e as equações necessárias para calcular o operador. Formularemos os problemas de espalhamento, agora com este método, e mostraremos a equivalência com a equação de Lippmann-Schwinger. Logo após isso, explicaremos a teoria de espalhamento múltiplo, usando as técnicas já apresentadas com a equação de Lippmann-Schwinger e com o operador T , mostrando o cálculo para dois potenciais. No capítulo 4 teremos as aplicações do operador T , mostraremos como calculá-lo para a barreira circular no plano e calcularemos a onda espalhada pela barreira utilizando o operador obtido. Faremos também uma aplicação de espalhamento múltiplo onde escreveremos a barreira circular imersa em um campo magnético uniforme, para este problema também calcularemos o operador T e a onda espalhada. O capítulo 5 será a aplicação do espalhamento com a equação de Lippmann-Schwinger por um segmento vertical, que em seguida é usado para descrever o espalhamento por fendas simples, duplas e por fim para múltiplas fendas. Neste último caso calculamos o espalhamento por um conjunto de fendas inspiradas no conjunto de Cantor. Por fim, no capítulo 6, apresentaremos nossas conclusões e perspectivas futuras.

2 Metodologia

Neste capítulo apresentaremos e explicaremos as principais teorias e metodologias que serão usadas no decorrer do presente trabalho, mostraremos os conceitos e definições sobre teoria das distribuições, explicaremos sobre o tipo de equações que estamos lidando, isto é, equações integrais e o método desenvolvido para investigar os problemas que serão apresentados. Discorreremos também sobre a formulação dos problemas de espalhamento, a utilidade das funções de Green e a equação de Lippmann-Schwinger.

2.1 Distribuições

A teoria das distribuições surge na física, da necessidade de conceitos matemáticos que não eram bem definidos na análise de funções. Um exemplo disso, é a distribuição que usaremos para descrever nossos problemas, é a função delta de Dirac

2.1.1 Delta de Dirac

A função delta de Dirac é obtida por um processo de limite de uma sequência de funções [BYRON; FULLER, 1992] e que satisfaz a propriedade

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0), \quad (2.1)$$

onde f é uma função com suporte compacto. Há um ponto singular x_0 em que a $\delta(x - x_0)$ não é definida, enquanto que nos demais pontos a δ vale zero. Como a integral de uma função real nula em todo o espaço, exceto em um ponto deve ser zero, é claro que o caso especial $f = 1$ viola este resultado, pois

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1, \quad (2.2)$$

logo δ não pode ser chamada de função, porém tem significado quando aparece dentro de uma integral e simplifica os cálculos. Em mais dimensões podemos escrever a delta

como

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \frac{1}{|J|} \delta(u - u_0) \delta(v - v_0) \delta(w - w_0), \quad (2.3)$$

onde J é o jacobiano do sistema de coordenadas.

2.1.2 Distribuições ao longo de superfícies

O objetivo de escrever a distribuição δ sobre uma curva ou superfície é modelar matematicamente um problema de barreira, no caso das aplicações presentes será como escrevemos o potencial alvo da interação. Para isso, considere uma curva arbitrária C com elemento dx que está contida em \mathbb{R}^n [FOLLAND, 2009]. Podemos definir a distribuição F que da propriedade (2.1) integrando juntamente com uma função $\phi(x)$ que seleciona os valores de ϕ para os pontos sobre a curva e é zero para pontos fora da curva.

$$F = \int_C \phi(x) \delta(x - x_0) dx. \quad (2.4)$$

Tomemos como exemplo o círculo de raio R constante e elemento de linha ds , assim

$$F = \int_C \phi(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}(s)) ds, \quad (2.5)$$

usando coordenadas polares

$$F = R \int_{-\pi}^{\pi} \phi(s) \frac{\delta(r - R) \delta(\theta - s)}{|J|} ds. \quad (2.6)$$

Assim, todos os pontos do círculo terão o valor da função ϕ , enquanto F será zero em todos os outros pontos. Podemos da mesma forma escrever a distribuição sobre uma superfície

$$F = \int_S \phi(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}(s)) ds, \quad (2.7)$$

como por exemplo a superfície esférica

$$F = R^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \phi(s) \frac{\delta(r - R) \delta(\theta - s) \delta(\phi - v)}{|J|} \sin(s) ds dv, \quad (2.8)$$

onde $\phi(s)$ é uma função de acoplamento e existirão valores para F apenas nos pontos da superfície da esfera. Essa forma de se escrever a distribuição sobre curvas nos permitirá construir o que chamamos de barreiras delta de potencial, "boundary walls", nas construções dos problemas.

2.2 Equações integrais

Uma equação que envolva uma função f e integrais desta função é chamada de equação integral. Equações integrais são classificadas por sua linearidade, homogeneidade, ordem e seus limites. Se seus limites são fixos a equação é chamada de equação integral de Fredholm, caso um limite seja variável ela é chamada equação integral de Volterra. Sejam g uma função conhecida e k chamado de núcleo da equação integral, também conhecido. Se a função f não aparece fora da integral, então a equação é conhecida como uma equação de primeira espécie.

$$g(x) = \int_a^b k(x, y)f(y)dy. \quad (2.9)$$

Caso a função f apareça tanto integrada quanto fora, então é uma equação de segunda espécie

$$f(x) = g(x) + \int_a^b k(x, y)f(y)dy, \quad (2.10)$$

ambas (2.9) e (2.10) sendo equações de Fredholm. No caso em que um dos limites da integral é uma variável ou função, $b = b(x)$ ou $a = a(x)$, então ambas serão equações integrais de Volterra, de primeira espécie,

$$g(x) = \int_a^{b(x)} k(x, y)f(y)dy, \quad (2.11)$$

e de segunda espécie

$$f(x) = g(x) + \int_a^{b(x)} k(x, y)f(y)dy. \quad (2.12)$$

2.2.1 Equações integrais de núcleo separável

Equações integrais podem ser resolvidas de maneira exata se a equação puder ser escrita de forma separável [BYRON; FULLER, 1992; ARFKEN, 1985], estando interessados nas soluções exatas dos problemas de espalhamento que desenvolveremos no capítulo de aplicações, iremos buscar uma forma de separar as equações em cada problema. As equações integrais serão separáveis quando o núcleo $k(x, y)$ da equação puder ser escrito da forma de uma soma finita de produtos de funções de uma variável,

$$k(x, y) = \lambda \sum_{j=1}^n \phi_j(x)\varphi_j(y), \quad (2.13)$$

com λ constante. Para mostrar que é possível resolver uma equação integral se seu núcleo for separável, consideraremos uma equação, seja de Fredholm ou Volterra, de segunda espécie. O processo para resolver a de primeira espécie é exatamente o mesmo, basta simplesmente substituir $g = 0$ e o resultado é obtido. Seja a equação da forma

$$f(x) = g(x) + \int k(x, y)f(y)dy, \quad (2.14)$$

substituindo $k(x, y)$ como em (2.13)

$$\begin{aligned} f(x) &= g(x) + \int \lambda \sum_{j=1}^n \phi_j(x)\varphi_j(y)f(y)dy \\ &= g(x) + \lambda \sum_{j=1}^n \phi_j(x) \int \varphi_j(y)f(y)dy. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Podemos notar que a integral em y , para cada j , será uma constante se a equação integral for uma equação de Fredholm, ou será uma função de x para o caso em que seja uma equação de Volterra, isto é

$$\int_a^b \varphi_j(y)f(y)dy = \alpha_j, \quad (2.16)$$

com α_j constante, ou

$$\int_a^{b(x)} \varphi_j(y)f(y)dy = \alpha_j(x), \quad (2.17)$$

para uma equação de Volterra. Assim

$$f(x) = g(x) + \lambda \sum_{j=1}^n \phi_j(x)\alpha_j(x). \quad (2.18)$$

Encontrando $\alpha_j(x)$, obteremos a solução $f(x)$ para a equação integral como g mais uma combinação linear das funções ϕ_j e α_j . Podemos encontrar $\alpha_j(x)$ simplesmente multiplicando o fator necessário, isto é, $\varphi_{j'}(x)$ no lado esquerdo e integrar de forma a obter uma equação para $\alpha_{j'}(x)$,

$$\int_a^{b(x)} \varphi_{j'}(x)f(x)dx = \int_a^{b(x)} \varphi_{j'}(x)g(x)dx + \lambda \int_a^{b(x)} \varphi_{j'}(x) \sum_{j=1}^n \phi_j(x)\alpha_j(x)dx, \quad (2.19)$$

logo, no caso da equação de Volterra, teremos

$$\alpha_{j'}(x) = c_{j'}(x) + \lambda \sum_{j=1}^n \int_a^{b(x)} \varphi_{j'}(x) \phi_j(x) \alpha(x) dx, \quad (2.20)$$

onde

$$c_{j'}(x) = \int_a^{b(x)} \varphi_{j'}(x) g(x) dx, \quad (2.21)$$

e para o caso da equação de Fredholm, teremos

$$\alpha_{j'} = c_{j'} + \lambda \sum_{j=1}^n \alpha_j \int_a^b \varphi_{j'}(x) \phi_j(x) dx, \quad (2.22)$$

que é equivalente à um conjunto de equações lineares para serem resolvidas.

2.2.2 Domínio de interação

Em muitos casos teremos que resolver uma equação integral tal que o seu núcleo tenha a forma

$$k(x, y) = \lambda \phi_j(x_>) \varphi_j(x_<), \quad (2.23)$$

onde $x_>$ e $x_<$ serão definidos como um ponto na fonte x' e um ponto no espaço x .

$$x_> = \max(x, x') \quad (2.24)$$

$$x_< = \min(x, x'). \quad (2.25)$$

E teremos uma equação integral para cada um dos domínios definidos por (2.24) e (2.25), como consequência o domínio será dividido em duas regiões e as equações integrais em cada uma delas podem ser resolvidas separadamente como mostrado nas seções anteriores. Porém em certas regiões do domínio pode não haver uma divisão tão direta, como iremos apresentar no caso das fendas neste trabalho. Para isso precisamos desenvolver um método que seja um pouco mais aprimorado e que considere a contribuição de ambas as funções da forma

$$\phi_j(x) \varphi_j(x') + \phi_j(x') \varphi_j(x), \quad (2.26)$$

que caracteriza casos em que queremos resolver a equação em uma região em que há um potencial, neste caso a equação integral possuirá ambos os termos $x_> = x$ e $x_> = x'$, e o mesmo para $x_<$, $x_< = x$ e $x_< = x'$, assim a equação integral, considerando uma equação de Fredholm de segunda espécie, será

$$\begin{aligned} f(x) &= g(x) + \lambda \int_a^b \phi_j(x_>) \varphi_j(x_<) f(x') dx' \\ &= g(x) + \lambda \left[\phi_j(x) \int_a^x \varphi_j(x') f(x') dx' + \varphi_j(x) \int_x^b \phi_j(x') f(x') dx' \right], \end{aligned} \quad (2.27)$$

e definindo

$$\alpha_j(x) = \int_a^x \varphi_j(x') f(x') dx' \quad (2.28)$$

e

$$\beta_j(x) = \int_x^b \phi_j(x') f(x') dx' \quad (2.29)$$

obtemos a solução da equação integral, com α e β a determinar.

$$f(x) = g(x) + \lambda [\phi_j(x)\alpha_j(x) + \varphi_j(x)\beta_j(x)]. \quad (2.30)$$

2.2.3 Cálculo dos coeficientes α e β

Para determinar α e β , repetiremos o processo anterior de multiplicar o termo que falta no lado esquerdo e integrar para obter uma equação para cada coeficiente. Multiplicando a equação em x' por $\varphi_{j'}(x')$ e integrando em x'

$$\begin{aligned} \int_a^x \varphi_{j'}(x') f(x') dx' &= \int_a^x \varphi_{j'}(x') g(x') dx' \\ &+ \lambda \int_a^x \varphi_{j'}(x') [\phi_j(x')\alpha_j(x') + \varphi_j(x')\beta_j(x')] dx, \end{aligned} \quad (2.31)$$

obtemos a equação na qual identificamos $\alpha_{j'}(x)$ no lado esquerdo

$$\alpha_{j'}(x) = c_{j'}(x) + \lambda \int_a^x \varphi_{j'}(x') [\phi_j(x')\alpha_j(x') + \varphi_j(x')\beta_j(x')] dx', \quad (2.32)$$

onde

$$c_{j'}(x) = \int_a^x \varphi_{j'}(x') g(x') dx'. \quad (2.33)$$

Esta é uma equação de Volterra que devemos resolver para encontrar α . Da regra de Leibniz

$$\frac{d}{dz} \int_{f_1(z)}^{f_2(z)} g(x) dx = g(f_2(z)) \frac{df_2(z)}{dz} - g(f_1(z)) \frac{df_1(z)}{dz}, \quad (2.34)$$

derivando em x

$$\frac{d}{dx} \alpha_{j'}(x) = \frac{d}{dx} c_{j'}(x) + \lambda \varphi_{j'}(x) [\phi_j(x)\alpha_j(x) + \varphi_j(x)\beta_j(x)]. \quad (2.35)$$

Para encontrar a equação para β , basta multiplicar a equação em x' por $\phi_{j'}(x')$ e integrar em x'

$$\begin{aligned} \int_x^b \phi_{j'}(x') f(x') dx' &= \int_x^b \phi_{j'}(x') g(x') dx' \\ &+ \lambda \int_x^b \phi_{j'}(x') [\phi_j(x')\alpha_j(x') + \varphi_j(x')\beta_j(x')] dx', \end{aligned} \quad (2.36)$$

obtemos a equação na qual identificamos $\beta_{j'}(x)$ no lado esquerdo

$$\beta_{j'}(x) = d_{j'}(x) + \lambda \int_x^b \varphi_{j'}(x') [\phi_j(x')\alpha_j(x') + \varphi_j(x')\beta_j(x')] dx', \quad (2.37)$$

onde

$$d_{j'}(x) = \int_x^b \phi_{j'}(x') g(x') dx'. \quad (2.38)$$

Novamente de (2.34), iremos derivar em x

$$\frac{d}{dx} \beta_{j'}(x) = \frac{d}{dx} d_{j'}(x) - \lambda \phi_{j'}(x) [\phi_j(x)\alpha_j(x) + \varphi_j(x)\beta_j(x)]. \quad (2.39)$$

Tanto as equações (2.32) e (2.37) quanto (2.35) e (2.39) podem ser utilizadas para o cálculo dos coeficientes α e β .

2.2.4 Coeficientes como funções reais

As equações (2.35) e (2.39) estão acopladas, porém, multiplicando a primeira por $\varphi_{j'}(x)$ e a segunda por $\phi_{j'}(x)$ e somando

$$\begin{aligned} \phi_{j'}(x) \frac{d}{dx} \alpha_{j'}(x) + \varphi_{j'}(x) \phi_{j'}(x) \frac{d}{dx} \beta_{j'}(x) &= \phi_{j'}(x) \frac{d}{dx} c_{j'}(x) + \varphi_{j'}(x) \frac{d}{dx} d_{j'}(x) \\ &+ \lambda \phi_{j'}(x) \varphi_{j'}(x) ([\phi_j(x)\alpha_j(x) + \varphi_j(x)\beta_j(x)] - [\phi_j(x)\alpha_j(x) + \varphi_j(x)\beta_j(x)]), \end{aligned} \quad (2.40)$$

logo

$$\phi_j(x) \frac{d}{dx} \alpha_j(x) + \varphi_j(x) \phi_j(x) \frac{d}{dx} \beta_j(x) = \phi_j(x) \frac{d}{dx} c_j(x) + \varphi_j(x) \frac{d}{dx} d_j(x). \quad (2.41)$$

Das equações (2.33) e (2.38) e da regra de Leibniz (2.34), podemos calcular as derivadas do lado direito, a derivada de $c_j(x)$ será

$$\frac{d}{dx} c_j(x) = \frac{d}{dx} \int_a^x \varphi_j(x') g(x') dx' = \varphi_j(x) g(x), \quad (2.42)$$

enquanto que para $d_j(x)$

$$\frac{d}{dx} d_j(x) = \frac{d}{dx} \int_x^b \phi_j(x') g(x') dx' = -\phi_j(x) g(x), \quad (2.43)$$

substituindo estes resultados, a equação (2.41) será

$$\phi_j(x) \frac{d}{dx} \alpha_j(x) + \varphi_j(x) \frac{d}{dx} \beta_j(x) = \phi_j(x) \varphi_j(x) g(x) - \varphi_j(x) \phi_j(x) g(x), \quad (2.44)$$

e portanto, obtemos a equação

$$\phi_j(x) \frac{d}{dx} \alpha_j(x) + \varphi_j(x) \frac{d}{dx} \beta_j(x) = 0, \quad (2.45)$$

que juntamente com (2.35) e (2.39), permitirá encontrar $\alpha_j(x)$ e $\beta_j(x)$. Exigindo ainda que

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (2.46)$$

Para $\alpha_j(x)$ e $\beta_j(x)$, reais, podemos derivar esta expressão da seguinte forma

$$\alpha_j(x) \frac{d}{dx} \alpha_j(x) + \beta_j(x) \frac{d}{dx} \beta_j(x) = 0 \quad (2.47)$$

e teremos

$$\frac{d}{dx} \alpha_j(x) = -\frac{\beta_j(x) \frac{d}{dx} \beta_j(x)}{\alpha_j(x)}, \quad (2.48)$$

usando a equação (2.45) temos a relação entre as derivadas

$$\frac{d}{dx} \alpha_j(x) = -\frac{\varphi_j(x)}{\phi_j(x)} \frac{d}{dx} \beta_j(x) \quad (2.49)$$

e substituindo em (2.47)

$$-\alpha_j(x) \frac{\varphi_j(x)}{\phi_j(x)} \frac{d}{dx} \beta_j(x) + \beta_j(x) \frac{d}{dx} \beta_j(x) = 0, \quad (2.50)$$

logo

$$-\alpha_j(x) \frac{\varphi_j(x)}{\phi_j(x)} + \beta_j(x) = 0, \quad (2.51)$$

assim obtemos os coeficientes α e β um em função do outro.

$$\alpha_j(x) = \frac{\phi_j(x)}{\varphi_j(x)} \beta_j(x) \quad \text{ou} \quad \beta_j(x) = \frac{\varphi_j(x)}{\phi_j(x)} \alpha_j(x). \quad (2.52)$$

Com isso, as equações (2.35) e (2.39), ficam

$$\frac{d}{dx} \alpha_{j'}(x) = \frac{d}{dx} c_{j'}(x) + \lambda \varphi_{j'}(x) \left[\phi_j(x) \alpha_j(x) + \varphi_j(x) \frac{\varphi_j(x)}{\phi_j(x)} \alpha_j(x) \right] \quad (2.53)$$

e

$$\frac{d}{dx} \beta_{j'}(x) = \frac{d}{dx} d_{j'}(x) - \lambda \phi_{j'}(x) \left[\phi_j(x) \frac{\phi_j(x)}{\varphi_j(x)} \beta_j(x) + \varphi_j(x) \beta_j(x) \right] \quad (2.54)$$

que são equações diferenciais que podem ser resolvidas tanto numericamente quanto exatamente, dependendo das condições de contorno exigidas no problema.

2.3 Funções de Green e a equação de Lippmann-Schwinger

Nesta seção mostraremos como utilizar as funções de Green para descrever o fenômeno de espalhamento com a equação de Lippmann-Schwinger. O método da função de Green nos permite escrever a solução de uma equação diferencial do tipo [FOLLAND, 2009]

$$Lu(x) = f(x), \quad (2.55)$$

onde L é um operador diferencial linear. O método da função de Green consiste em resolver a equação para G em que a fonte é uma função delta de Dirac, isto é

$$LG(x, x') = \delta(x - x'), \quad (2.56)$$

como

$$Lu(x) = \int LG(x, x')f(x')dx' = \int \delta(x - x')f(x') = f(x), \quad (2.57)$$

como o operador L atua somente em x e não em x' , então, a solução da equação diferencial (2.55) será

$$u(x) = \int G(x, x')f(x')dx' \quad (2.58)$$

2.3.1 O operador de Green

Iremos definir os operadores G e G_0 que estão relacionados com a energia da partícula descrita pela equação de Schrödinger. Consideraremos os operadores Hamiltonianos da partícula livre H_0 e completo H

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} \quad (2.59)$$

$$H = H_0 + V \quad (2.60)$$

Os operadores de Green correspondentes conhecidos como operadores função de Green livre G_0 e completo G são definidos

$$G_0(z) = (z - H_0)^{-1} \quad (2.61)$$

$$G(z) = (z - H)^{-1}, \quad (2.62)$$

[GOLDBERGER; WATSON, 1964; GONIS; BUTLER, 1999]. O operador $G(z)$ será uma função analítica da variável complexa z , se a grandeza $\langle \chi | G(z) | \psi \rangle$ for analítica para todo $|\chi\rangle$ e $|\psi\rangle$.

Podemos ver que este operador não existirá para todos os valores de z , este é o caso em que ele assume um dos autovalores E_n de H , com isso teremos $(E_n - H) = 0$ e, consequentemente, não existirá $(E_n - H)^{-1}$. Como estamos estudando problemas de espalhamento H , sempre possui um espectro contínuo, consideremos uma expansão em termos dos autovetores do momento angular.

$$G(z) = (z - H)^{-1}\mathbf{1} = \int_0^\infty dE \sum_{l,m} \frac{|E, l, m\rangle \langle E, l, m|}{z - E}, \quad (2.63)$$

onde $\mathbf{1} = \int_0^\infty dE \sum_{l,m} |E, l, m\rangle \langle E, l, m|$, onde E , l e m são os números quânticos principal, azimutal e magnético. Assim, o elemento de matriz

$$\langle \chi | G(z) | \psi \rangle = \int_0^\infty dE \sum_{l,m} \frac{\langle \chi | E, l, m \rangle \langle E, l, m | \psi \rangle}{z - E}, \quad (2.64)$$

com $|\chi\rangle$ a onda incidente e $|\psi\rangle$ a onda espalhada, será analítico, exceto nos pontos do eixo real em que z assume um dos valores E_n , onde possuirá um polo simples com resíduo $\sum_{l,m} \langle \chi | E, l, m \rangle \langle E, l, m | \psi \rangle$. Podemos também escrever as expressões para os operadores acima (+) e abaixo (-) do eixo real

$$G_0^\pm(E) = (E - H_0 \pm i\epsilon)^{-1} \quad (2.65)$$

$$G^\pm(E) = (E - H_0 - V \pm i\epsilon)^{-1}. \quad (2.66)$$

Não é possível em muitos casos, encontrar o operador $G(z)$, porém nos casos em que é possível, G e G_0 são relacionados pela equação integral.

$$G = G_0 + G_0 V G. \quad (2.67)$$

Conhecida como equação de Dyson para G . A função de Green nos permitirá definir o operador T e encontrar soluções dos problemas de espalhamento.

2.3.2 Equação para o espalhamento

Para modelar a interação da função de onda incidente com a barreira de potencial, utiliza-se a equação de Schrödinger independente do tempo, onde o potencial $V_0(\vec{r})$ possui um alcance finito, isto é, existe uma região limitada, a partir da qual não há interação entre função de onda e potencial. Seja a equação de Schrödinger

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (2.68)$$

cujas soluções associadas com uma energia bem definida são

$$\Psi = \phi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar},$$

sendo $\phi(\vec{r})$ uma solução da equação (2.68), e suporemos que longe do potencial as soluções são ondas planas com um momento bem definido e energia constante, a qual definimos como

$$E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

e definindo

$$V_0(\vec{r}) \equiv \frac{\hbar^2}{2m} U(\vec{r})$$

podemos reescrevê-la como

$$[(\nabla^2 + k^2) - U(\vec{r})] \psi(k, \vec{r}) = 0, \quad (2.69)$$

que pelo método da função de Green, podemos escrever sua solução como

$$\psi(k, \vec{r}) = \phi(k, \vec{r}) + \int G_0(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3 r', \quad (2.70)$$

onde $\phi(k, \vec{r})$ é a solução para $U = 0$ [JOACHAIN, 1975]. Esta é conhecida como a equação de Lippmann-Schwinger [LIPPmann; SCHWINGER, 1950], equação que usaremos mais adiante na formulação de alguns problemas. Ela descreve o espalhamento do estado de onda $\phi(k, \vec{r})$ que interage com o potencial U para o estado $\psi(k, \vec{r})$ e se trata de uma equação integral já discutida na seção 2.2.

2.3.3 Grandezas físicas

Uma solução particular da equação de Schrödinger irá satisfazer assintoticamente em três dimensões

$$\psi(\vec{r}) \rightarrow A \left[\chi(\vec{r}) + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \right]. \quad (2.71)$$

Os termos nos colchetes representam uma onda plana $\chi(\vec{r})$ mais a uma contribuição de onda espalhada, A é uma constante e $f(\theta, \phi)$, uma função unicamente angular, é conhecida como amplitude de espalhamento. A partir da amplitude de espalhamento podemos definir as seções de choque diferencial e total. A seção de choque diferencial é definida como

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \varphi)|^2, \quad (2.72)$$

e a partir dela obtemos a seção de choque total integrando em todos os ângulos sólidos

$$\sigma_T = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega. \quad (2.73)$$

No próximo capítulo, reformularemos a construção do problema de espalhamento, desta vez introduzindo o operador T , ou matriz de transição. Nesta abordagem, iremos aproveitar o conhecimento de um problema mais simples, já resolvido analiticamente, para investigar o espalhamento por um potencial simples e, no caso de espalhamento múltiplo, por um potencial composto.

3 Operador T

Aqui definiremos o operador de transição, que também é conhecido como matriz T , e mostraremos quais equações este obedece e como encontrar uma expressão analítica para o mesmo. Apresentaremos também a formulação do espalhamento múltiplo e o operador de transição no caso de dois potenciais.

3.1 Operador T

Quando se estuda espalhamento, pode-se definir o operador T ou matriz de transição T , este operador é útil, pois relaciona a função de onda incidente com a função de onda que resulta da interação com o potencial, ou centro espalhador, isto é, ele conecta os estados livre e espalhado.

3.1.1 Definição de T

Introduziremos o operador T definido em termos da função de Green vista no capítulo 2, logo sua importância será a mesma que a do operador G e nos dará uma forma equivalente de formular e resolver as equações integrais dos problemas de espalhamento. Os operadores T e G são relacionados pela equação

$$T = V + VGV, \quad (3.1)$$

[GONIS; BUTLER, 1999; GOLDBERGER; WATSON, 1964; RODBERG; THALER; THALER, 1967], e o operador T terá as mesmas propriedades de G . Multiplicando o lado esquerdo por G_0 obteremos a seguinte identidade

$$\begin{aligned} G_0 T &= G_0 V + G_0 VGV \\ &= (G_0 + G_0 VG)V. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Usando a equação (2.67)

$$G_0 T = GV, \quad (3.3)$$

e se usarmos esta relação na equação para T (3.1), obteremos a equação de Dyson,

$$T = V + VG_0T, \quad (3.4)$$

que é uma equação integral para T , onde agora não se faz necessário encontrar a função de Green completa G e ao invés disso usaremos a função de Green livre G_0 e resolvendo a equação integral encontramos o operador T .

3.1.2 Equação integral para o operador T

O operador T possui representação na forma integral, tomando a equação (3.4) e a projetando no espaço de posição,

$$\langle \vec{r}|T|\vec{r}'\rangle = \langle \vec{r}|V|\vec{r}'\rangle + \langle \vec{r}|VG_0T|\vec{r}'\rangle. \quad (3.5)$$

Utilizando relações de completeza obtemos

$$\langle \vec{r}|T|\vec{r}'\rangle = \langle \vec{r}|V|\vec{r}'\rangle + \int d\vec{r}'' d\vec{r}''' \langle \vec{r}|V|\vec{r}''\rangle \langle \vec{r}''|G_0|\vec{r}'''\rangle \langle \vec{r}'''|T|\vec{r}'\rangle, \quad (3.6)$$

equivalente à

$$T(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}') + \int d\vec{r}'' d\vec{r}''' V(\vec{r}'')\delta(\vec{r} - \vec{r}'')G_0(\vec{r}'', \vec{r}''')T(\vec{r}''', \vec{r}'), \quad (3.7)$$

e integrando em r'' com a δ

$$\begin{aligned} T(\vec{r}, \vec{r}') &= V(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}') + \int d\vec{r}''' V(\vec{r})G_0(\vec{r}, \vec{r}''')T(\vec{r}''', \vec{r}') \\ &= V(\vec{r}) \left[\delta(\vec{r} - \vec{r}') + \int d\vec{r}''' G_0(\vec{r}, \vec{r}''')T(\vec{r}''', \vec{r}') \right], \end{aligned} \quad (3.8)$$

que é uma equação integral para T . Resolver esta equação nos dará a forma explícita do operador com o qual poderemos calcular os estados de espalhamento pelo potencial $V(\vec{r})$ em cada problema.

3.1.3 Formulação do problema de espalhamento com operador T

A equação que descreve o espalhamento é a equação de Lippmann-Schwinger,

$$|\Psi\rangle = |\chi\rangle + G_0V|\Psi\rangle, \quad (3.9)$$

onde $|\chi\rangle$ representa uma onda plana. Esta equação pode ser escrita em termos da função de Green completa, isto é

$$|\Psi\rangle = |\chi\rangle + GV|\chi\rangle, \quad (3.10)$$

substituindo a equação (3.3) encontramos a equação em termos do operador T

$$|\Psi\rangle = |\chi\rangle + G_0T|\chi\rangle. \quad (3.11)$$

Portanto vale a relação

$$T|\chi\rangle = V|\Psi\rangle, \quad (3.12)$$

bastando aplicar o operador T na função de onda que incide no potencial e será obtida a onda espalhada. Projetando a equação (3.11) no espaço de posição teremos

$$\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \langle \vec{r} | \chi \rangle + \langle \vec{r} | G_0 T | \chi \rangle, \quad (3.13)$$

utilizando relações de completeza

$$\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \langle \vec{r} | \chi \rangle + \int \int \langle \vec{r} | G_0 | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | T | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \chi \rangle d\vec{r}' d\vec{r}'', \quad (3.14)$$

sendo $\langle \vec{r} | \Psi \rangle = \Psi(\vec{r})$ a função de onda, obtemos a seguinte equação

$$\Psi(\vec{r}) = \chi(\vec{r}) + \int \int G_0(\vec{r}, \vec{r}') T(\vec{r}', \vec{r}'') \chi(\vec{r}'') d\vec{r}' d\vec{r}''. \quad (3.15)$$

Comparando com a forma integral de Lippmann-Schwinger, vemos que

$$\Psi(\vec{r}) = \chi(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') \quad (3.16)$$

$$= \chi(\vec{r}) + \int \int G_0(\vec{r}, \vec{r}') T(\vec{r}', \vec{r}'') \chi(\vec{r}'') d\vec{r}' d\vec{r}'', \quad (3.17)$$

logo

$$V(\vec{r}') \Psi(\vec{r}') = \int T(\vec{r}', \vec{r}'') \chi(\vec{r}'') d\vec{r}''. \quad (3.18)$$

Portanto se possuirmos as expressões do operador T e da onda incidente $\chi(\vec{r}'')$, então conseguimos calcular a onda espalhada pelo potencial da forma

$$\Psi(\vec{r}) = V(\vec{r})^{-1} \int T(\vec{r}, \vec{r}') \chi(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (3.19)$$

3.2 Espalhamento múltiplo

Nos capítulos anteriores mostramos como construir e calcular a interação partícula-potencial no problema de espalhamento, obtendo a função de onda espalhada elasticamente. Segue desta linha de pensamento questionar como o problema é modificado na presença de mais de um potencial.

3.2.1 Cálculo para dois potenciais

Ao introduzir um segundo potencial na interação, modificaremos a equação de Lippmann-Schwinger. Para apenas um potencial U , na notação de bras e kets a equação é

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + G_0^\pm U |\psi^\pm\rangle, \quad (3.20)$$

em que os vetores de estado $|\psi^\pm\rangle$ que são soluções de Lippmann-Schwinger são os estados do sistema após o espalhamento pelo potencial U e $|\phi\rangle$ é o vetor de estado associado ao estado não perturbado, que na representação de posição, é descrito por uma onda plana e G_0^\pm é a função de Green livre para o Hamiltoniano H_0 . No decorrer das próximas etapas, como é válido para ambos, omitiremos o sobrescrito \pm . Introduzindo um segundo potencial V , que assim como U tem uma região limitada de efeito, escrevemos

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + G_0(U + V) |\Psi\rangle, \quad (3.21)$$

onde $|\Psi\rangle$ é a solução completa para a onda incidente que interage com os dois potenciais simultaneamente. Se utilizarmos as funções de Green livre G_0 e completa G [GOLDBERGER; WATSON, 1964; GONIS; BUTLER, 1999; ZUBAREV; MOROZOV; ROPKE, 1996; RODBERG; THALER; THALER, 1967]

$$G_0^\pm = (E - H_0 \pm i\epsilon)^{-1} \quad e \quad G^\pm = (E - H_0 - U \pm i\epsilon)^{-1} \quad (3.22)$$

no limite em que $\epsilon \rightarrow 0$, onde $H = H_0 + U$ corresponde ao hamiltoniano da onda que interagiu apenas com o potencial U e G é a função de Green correspondente à função de onda interagente com U , da relação [GOLDBERGER; WATSON, 1964; GONIS; BUTLER, 1999],

$$G_0 = G + G(-U)G_0 \quad (3.23)$$

e da equação para a onda interagente com apenas o potencial U $|\psi\rangle$ em termos da função de Green completa,

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + GU|\phi\rangle, \quad (3.24)$$

podemos reescrever a equação de Lippmann-Schwinger para os dois potenciais. Partindo de (3.21)

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + G_0(U + V)|\Psi\rangle, \quad (3.25)$$

substituindo (3.23)

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + G(U + V)|\Psi\rangle - GUG_0(U + V)|\Psi\rangle, \quad (3.26)$$

de (3.21) no último termo escrevemos

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + G(U + V)|\Psi\rangle - GU(|\Psi\rangle - |\phi\rangle), \quad (3.27)$$

organizando

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\phi\rangle + G(U + V)|\Psi\rangle - GU(|\Psi\rangle - |\phi\rangle) \\ &= |\phi\rangle + GU|\Psi\rangle + GV|\Psi\rangle - GU|\Psi\rangle + GU|\phi\rangle) \\ &= |\phi\rangle + GV|\Psi\rangle + GU|\phi\rangle, \end{aligned} \quad (3.28)$$

e por fim, da equação (3.24)

$$|\Psi\rangle = |\psi\rangle + GV|\Psi\rangle. \quad (3.29)$$

Isto mostra que a onda espalhada por ambos os potenciais pode ser escrita da mesma forma que foi feito para um único potencial, onde agora o primeiro termo é, não mais a contribuição de uma onda plana, mas a primeira solução obtida.

Da mesma forma, quando se tratando do operador T iremos estender para o caso de espalhamento múltiplo. Considere o operador que relaciona a onda espalhada pelo primeiro potencial U apenas, com a onda que é espalhada por U e V , este obedece à equação de Dyson (3.1)

$$T = V + VGV, \quad (3.30)$$

onde G a função de Green completa, agora compondo o espalhamento por todos os potenciais existentes no problema, $(U + V)$, e seja G_u a função de Green relacionada à onda espalhada pelo potencial U apenas, ambas estão relacionadas por

$$G = G_u + G_u V G, \quad (3.31)$$

portanto, deduz-se que

$$G_u T = G V, \quad (3.32)$$

e assim a equação (3.29) fica

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\psi\rangle + G_u V |\Psi\rangle \\ &= |\psi\rangle + G V |\psi\rangle \\ &= |\psi\rangle + G_u T |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Observa-se que

$$T |\psi\rangle = V |\Psi\rangle. \quad (3.34)$$

Consequentemente, concluímos que podemos empregar o mesmo método desenvolvido para a teoria de espalhamento por potencial único, aplicando o operador T na onda incidente. Conhecendo este resultado do espalhamento por uma potencial simples U , podemos investigar mais facilmente o caso de espalhamento múltiplo, introduzindo um potencial composto por $U + V$.

4 Aplicações operador T

Apresentaremos no decorrer deste capítulo a solução de dois problemas de espalhamento envolvendo o cálculo e a aplicação do operador T para encontrar a expressão analítica da onda espalhada, um caso onde utilizamos o método para o espalhamento por um potencial e o outro um caso de espalhamento múltiplo na presença de um campo externo.

4.1 Operador T para barreira circular em duas dimensões

A primeira e mais simples das aplicações que serão mostradas, será o caso da barreira circular que é atingida por uma onda plana. Calcularemos o operador T e usaremos para encontrar a função de onda espalhada, comparando com o resultado conhecido.

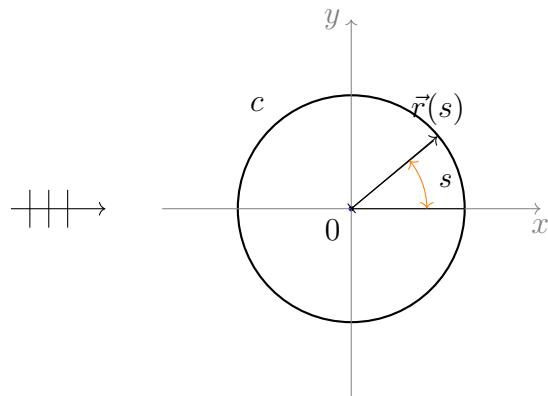


Figura 1 – Barreira circular no plano

Para o cálculo escreveremos o potencial como uma distribuição sobre a curva c , como visto no capítulo 2.1, a sua expressão será

$$V(\vec{r}') = \int_c \gamma(s) \delta(\vec{r}' - \vec{r}(s)) ds, \quad (4.1)$$

sendo $\gamma(s)$, chamada função de acoplamento, é uma densidade de potencial que define como a onda interage com a barreira. Em coordenadas polares

$$V(r', \theta') = R \int_{-\pi}^{\pi} \gamma(s') \frac{\delta(r' - R)\delta(\theta' - s')}{|J|} ds', \quad (4.2)$$

onde adotaremos $\gamma(s') = \gamma$ como constante, representando que a dureza da barreira é uniforme. Calcularemos o operador T e mostraremos a função de onda espalhada como resultado.

4.1.1 O operador T

Para obter a forma exata do operador, devemos resolver a equação (3.4), isto é,

$$T = V + VG_0T. \quad (4.3)$$

Partindo de sua representação integral que explicitamos na seção 3.1

$$T(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r}) \left[\delta(\vec{r} - \vec{r}') + \int dr'' G(\vec{r}, \vec{r}'') T(\vec{r}'', \vec{r}') \right], \quad (4.4)$$

e considerando a expansão da função de Green para a partícula livre

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr_<) H_l^{(1)}(kr_>) e^{il(\theta-\theta')}, \quad (4.5)$$

podemos substituir em (4.4) e obter

$$\begin{aligned} T(\vec{r}, \vec{r}') &= V(r, \theta) \delta(\vec{r} - \vec{r}') + V(r, \theta) \int r''' dr''' d\theta''' \left(-\frac{i}{4} \right) \\ &\times \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr_<) H_l^{(1)}(kr_>) e^{il(\theta-\theta')} T(r''', \theta'''; r', \theta'), \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde $r_>$ e $r_<$ são

$$\begin{aligned} r_> &= \max(r, r''') \\ r_< &= \min(r, r'''), \end{aligned} \quad (4.7)$$

sendo r um ponto no espaço e r''' um ponto na fonte.

Definindo a região no interior da barreira como região I onde $r_< = r$ e $r_> = r'''$ e escrevendo a função delta de Dirac em coordenadas polares, teremos

$$\begin{aligned} T(r, \theta; r', \theta') &= V(r, \theta) \frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} - \frac{i}{4} V(r, \theta) \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr) e^{il\theta} \\ &\times \int r''' dr''' d\theta''' H_l^{(1)}(kr''') e^{-il\theta'''} T(r''', \theta'''; r', \theta'), \end{aligned} \quad (4.8)$$

e chamando a integral de $\alpha_l(r', \theta')$

$$\alpha_l(r', \theta') = \int r''' dr''' d\theta''' H_l^{(1)}(kr''') e^{-il\theta'''} T(r''', \theta'''; r', \theta'), \quad (4.9)$$

obtemos

$$T(r, \theta; r', \theta') = V(r, \theta) \left[\frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr) e^{il\theta} \alpha_l(r', \theta') \right]. \quad (4.10)$$

Ou seja, obtendo $\alpha_l(r', \theta')$ basta substitui-lo na equação acima e determinamos a expressão exata do operador T . Multiplicando por $H_{l'}^{(1)}(kr) e^{-il'\theta}$ e integrando em d^2r

$$\begin{aligned} \int d^2r H_{l'}^{(1)}(kr) e^{-il'\theta} T(r, \theta; r', \theta') &= \int d^2r H_{l'}^{(1)}(kr) e^{-il'\theta} V(r, \theta) \frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} \\ &- \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') \int d^2r V(r, \theta) J_l(kr) e^{i(l-l')\theta} H_{l'}^{(1)}(kr), \end{aligned} \quad (4.11)$$

identificamos $\alpha_{l'}(r', \theta')$ no lado esquerdo

$$\begin{aligned} \alpha_{l'}(r', \theta') &= \int d^2r H_{l'}^{(1)}(kr) e^{-il'\theta} V(r, \theta) \frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} \\ &- \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') \int d^2r V(r, \theta) J_l(kr) e^{i(l-l')\theta} H_{l'}^{(1)}(kr). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Resolvendo separadamente a primeira integral, juntamente com as funções deltas, temos

$$\begin{aligned} I_1 &= \int r dr d\theta H_{l'}^{(1)}(kr) e^{-il'\theta} V(r, \theta) \frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} \\ &= H_{l'}^{(1)}(kr') e^{-il'\theta'} V(r', \theta'), \end{aligned} \quad (4.13)$$

substituindo a expressão (4.2) para o potencial

$$\begin{aligned} I_1 &= H_{l'}^{(1)}(kr')e^{-il'\theta'}R \int_{-\pi}^{\pi} \gamma \frac{\delta(r' - R)\delta(\theta' - s')}{|J|} ds' \\ &= \gamma R H_{l'}^{(1)}(kr')e^{-il'\theta'} \frac{\delta(r' - R)}{r'} \int_{-\pi}^{\pi} \delta(\theta' - s') ds' \\ &= \frac{\gamma R}{r'} \delta(r' - R) H_{l'}^{(1)}(kr')e^{-il'\theta'}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Enquanto que a segunda integral

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') \int r dr d\theta V(r, \theta) J_l(kr) e^{i(l-l')\theta} H_{l'}^{(1)}(kr) \\ &= -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') \int r dr d\theta \left[R \int_{-\pi}^{\pi} \gamma \frac{\delta(r - R)\delta(\theta - s)}{r} ds \right] \\ &\quad \times J_l(kr) e^{i(l-l')\theta} H_{l'}^{(1)}(kr), \end{aligned} \quad (4.15)$$

integrando em r e θ e usufruindo da propriedade das funções delta, teremos

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') R \gamma J_l(kR) H_{l'}^{(1)}(kR) \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(l-l')s} ds \\ &= -\frac{iR\gamma\pi}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') J_l(kR) H_{l'}^{(1)}(kR) \delta_{l,l'} \\ &= -\frac{iR\gamma\pi}{2} \alpha_l(r', \theta') J_{l'}(kR) H_{l'}^{(1)}(kR), \end{aligned} \quad (4.16)$$

e substituindo os resultados das integrais I_1 e I_2 em (4.12) encontramos uma equação para α ,

$$\begin{aligned} \alpha_{l'}(r', \theta') &= \frac{\gamma R}{r'} \delta(r' - R) H_{l'}^{(1)}(kr') e^{-il'\theta'} \\ &\quad - \frac{iR\gamma\pi}{2} \alpha_l(r', \theta') J_{l'}(kR) H_{l'}^{(1)}(kR), \end{aligned} \quad (4.17)$$

cuja solução para α é

$$\alpha_{l'}(r', \theta') = \frac{\gamma R \delta(r' - R) H_{l'}^{(1)}(kr') e^{-il'\theta'}}{r' \left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_{l'}(kR) H_{l'}^{(1)}(kR) \right]}. \quad (4.18)$$

Substituindo o resultado encontrado na equação (4.10) obtemos a expressão final do operador T na região I

$$\begin{aligned} T(r, \theta; r', \theta') &= V(r, \theta) \left[\frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr)e^{il\theta} \frac{\gamma R \delta(r' - R) H_l^{(1)}(kr') e^{-il\theta'}}{r' \left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]} \right] \end{aligned} \quad (4.19)$$

Para calcular o operador na outra parte do domínio, definiremos a região II como sendo a região onde $r_< = r'''$ e $r_> = r$, calcularemos da mesma forma que fizemos anteriormente. A equação para o operador T , juntamente com a função de Green livre e da delta em coordenadas polares é

$$\begin{aligned} T(r, \theta; r', \theta') &= V(r, \theta) \frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} - \frac{i}{4} V(r, \theta) \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr) e^{il\theta} \\ &\quad \times \int r''' dr''' d\theta''' J_l(kr''') e^{-il\theta'''} T(r''', \theta'''; r', \theta'). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Agora teremos o novo termo $\alpha_l(r', \theta')$ como sendo a integral

$$\alpha_l(r', \theta') = \int r''' dr''' d\theta''' J_l(kr''') e^{-il\theta'''} T(r''', \theta'''; r', \theta'), \quad (4.21)$$

onde diferentemente do caso anterior, temos a função de Bessel sendo integrada no lugar da função de Hankel. Com isso

$$T(r, \theta; r', \theta') = V(r, \theta) \left[\frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr) e^{il\theta} \alpha_l(r', \theta') \right]. \quad (4.22)$$

Multiplicando por $J_{l'}(kr) e^{-il'\theta}$ e integrando em d^2r

$$\begin{aligned} \int d^2r J_{l'}(kr) e^{-il'\theta} T(r, \theta; r', \theta') &= \int d^2r J_{l'}(kr) e^{-il'\theta} V(r, \theta) \frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} \\ &\quad - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') \int d^2r V(r, \theta) H_l^{(1)}(kr) J_{l'}(kr) e^{i(l-l')\theta}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

onde identificamos $\alpha_{l'}(r', \theta')$ no lado esquerdo

$$\begin{aligned} \alpha_{l'}(r', \theta') &= \int d^2r J_{l'}(kr) e^{-il'\theta} V(r, \theta) \frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} \\ &\quad - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') \int d^2r V(r, \theta) H_l^{(1)}(kr) J_{l'}(kr) e^{i(l-l')\theta}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Resolvendo a primeira integral com as deltas

$$\begin{aligned} I_1 &= \int r dr d\theta J_{l'}(kr) e^{-il'\theta} V(r, \theta) \frac{\delta(r - r') \delta(\theta - \theta')}{r} \\ &= J_{l'}(kr') e^{-il'\theta'} V(r', \theta'), \end{aligned} \quad (4.25)$$

e substituindo a expressão para o potencial, temos

$$\begin{aligned} I_1 &= J_{l'}(kr') e^{-il'\theta'} R \int_{-\pi}^{\pi} \gamma \frac{\delta(r' - R) \delta(\theta' - s')}{|J|} ds' \\ &= \gamma R J_{l'}(kr') e^{-il'\theta'} \frac{\delta(r' - R)}{r'} \int_{-\pi}^{\pi} \delta(\theta' - s') ds' \\ &= \frac{\gamma R}{r'} \delta(r' - R) J_{l'}(kr') e^{-il'\theta'}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Enquanto que para a segunda integral, fazemos

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') \int r dr d\theta V(r, \theta) H_l^{(1)}(kr) J_{l'}(kr) e^{i(l-l')\theta} \\ &= -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') \int r dr d\theta \left[R \int_{-\pi}^{\pi} \gamma \frac{\delta(r - R) \delta(\theta - s)}{r} ds \right] \\ &\times H_l^{(1)}(kr) J_{l'}(kr) e^{i(l-l')\theta}, \end{aligned} \quad (4.27)$$

integrando em r e θ e utilizando a propriedade das funções delta

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') R \gamma H_l^{(1)}(kR) J_{l'}(kR) \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(l-l')s} ds \\ &= -\frac{iR\gamma\pi}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l(r', \theta') H_l^{(1)}(kR) J_{l'}(kR) \delta_{l,l'} \\ &= -\frac{iR\gamma\pi}{2} \alpha_l(r', \theta') H_{l'}^{(1)}(kR) J_{l'}(kR), \end{aligned} \quad (4.28)$$

substituindo I_1 e I_2 em (4.24) obtemos

$$\begin{aligned} \alpha_{l'}(r', \theta') &= \frac{\gamma R}{r'} \delta(r' - R) J_{l'}(kr') e^{-il'\theta'} \\ &- \frac{iR\gamma\pi}{2} \alpha_l(r', \theta') J_{l'}(kR) H_{l'}^{(1)}(kR). \end{aligned} \quad (4.29)$$

Resolvendo para α

$$\alpha_{l'}(r', \theta') = \frac{\gamma R \delta(r' - R) J_{l'}(kr') e^{-il'\theta'}}{r' \left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_{l'}(kR) H_{l'}^{(1)}(kR) \right]}. \quad (4.30)$$

Por fim, substituindo na equação (4.22) obtemos a expressão do operador T referente à região II

$$\begin{aligned} T(r, \theta; r', \theta') &= V(r, \theta) \left[\frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr) e^{il\theta} \frac{\gamma R \delta(r' - R) J_l(kr') e^{-il\theta'}}{r' \left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]} \right]. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Tendo ambas as expressões explícitas do operador T nas regiões I e II, podemos calcular as funções de onda espalhadas em suas respectivas regiões.

4.1.2 Onda espalhada pela a barreira circular 2D

Usando uma das equações (3.18) ou (3.19) do capítulo (3.1), poderemos calcular $\Psi(\vec{r})$

$$\Psi(\vec{r}) = V^{-1}(\vec{r}) \int T(\vec{r}, \vec{r}') \chi(\vec{r}') d\vec{r}'. \quad (4.32)$$

Substituindo a expressão para o operador T calculado para a barreira circular (4.31) e a expansão para a onda plana

$$\chi(\vec{r}') = \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^l J_l(kr') e^{il(\theta' - \theta_0)}, \quad (4.33)$$

escrevemos a integral em duas dimensões para a região I, como

$$\begin{aligned} V^{-1}(\vec{r}) \int d^2 r' T(\vec{r}, \vec{r}') \chi(\vec{r}') &= V^{-1}(r, \theta) \int V(r, \theta) \left[\frac{\delta(r - r')\delta(\theta - \theta')}{r} \right. \\ &\quad \left. - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr) e^{il\theta} \frac{\gamma R \delta(r' - R) H_l^{(1)}(kr') e^{-il\theta'}}{r' \left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]} \right] \\ &\times \sum_{l'=-\infty}^{\infty} i^{l'} J_{l'}(kr') e^{il'(\theta' - \theta_0)} r' dr' d\theta', \end{aligned} \quad (4.34)$$

integrando em r' e θ' , o primeiro termo $r' \rightarrow r$ e $\theta' \rightarrow \theta$, no segundo $r' \rightarrow R$

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta) &= \left[\chi(\vec{r}) - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{J_l(kr) e^{il\theta} \gamma H_l^{(1)}(kR)}{\left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]} \right. \\ &\quad \times \left. \sum_{l'=-\infty}^{\infty} i^{l'} J_{l'}(kr') e^{-il'\theta_0} \int e^{i(l'-l)\theta'} d\theta' \right] \\ &= \left[\chi(\vec{r}) - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{J_l(kr) e^{il\theta} \gamma H_l^{(1)}(kR)}{\left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]} \right. \\ &\quad \times \left. \sum_{l'=-\infty}^{\infty} i^{l'} J_{l'}(kR) e^{-il'\theta_0} 2\pi \delta_{l,l'} \right], \end{aligned} \quad (4.35)$$

com o $\delta_{l,l'}$ uma das somas vai embora, e assim encontramos a solução na região I para a onda espalhada

$$\Psi(\vec{r}) = \chi(\vec{r}) - \frac{i\gamma R\pi}{2} \sum_{l'=-\infty}^{\infty} \frac{i^l J_l(kR) e^{il(\theta-\theta_0)} H_l^{(1)}(kR) J_l(kr)}{\left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]}. \quad (4.36)$$

Da mesma forma, para a região II

$$\begin{aligned} V^{-1}(\vec{r}) \int d^2 r' T(\vec{r}, \vec{r}') \chi(\vec{r}') &= V^{-1}(r, \theta) \int V(r, \theta) \left[\frac{\delta(r-r') \delta(\theta-\theta')}{r} \right. \\ &\quad - \left. \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr) e^{il\theta} \frac{\gamma R \delta(r'-R) J_l(kr') e^{-il\theta'}}{r' \left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]} \right] \\ &\quad \times \sum_{l'=-\infty}^{\infty} i^{l'} J_{l'}(kr') e^{il'(\theta'-\theta_0)} r' dr' d\theta', \end{aligned} \quad (4.37)$$

integrando obtemos

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta) &= \left[\chi(\vec{r}) - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{H_l^{(1)}(kr) e^{il\theta} \gamma J_l(kR)}{\left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]} \right. \\ &\quad \times \left. \sum_{l'=-\infty}^{\infty} i^{l'} J_{l'}(kr') e^{-il'\theta_0} \int e^{i(l'-l)\theta'} d\theta' \right] \\ &= \left[\chi(\vec{r}) - \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{H_l^{(1)}(kr) e^{il\theta'} \gamma J_l(kR)}{\left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kR) \right]} \right. \\ &\quad \times \left. \sum_{l'=-\infty}^{\infty} i^{l'} J_{l'}(kR) e^{-il'\theta_0} 2\pi \delta_{l,l'} \right]. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Assim, a solução para a onda espalhada na região II é

$$\Psi(\vec{r}) = \chi(\vec{r}) - \frac{i\gamma R\pi}{2} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{i^l J_l(kR) e^{il(\theta-\theta_0)} J_l(kR) H_l^{(1)}(kr)}{\left[1 + \frac{iR\gamma\pi}{2} J_l(kR) H_l^{(1)}(kr)\right]}. \quad (4.39)$$

As equações, (4.36) e (4.39), são exatamente as mesmas soluções que se obtém para cada região resolvendo a equação de Lippmann-Schwinger, podemos verificar a solução deste tipo de problema em [MAIOLI; SCHMIDT, 2018]. Esta aplicação exemplifica o uso do operador T mostrando a equivalência do método.

4.2 Operador T para a barreira circular na presença de um campo externo

Para ilustrar o uso do operador de transição T no caso do espalhamento múltiplo, estudaremos o cenário de dois potenciais, onde calcularemos o operador T e em seguida o usaremos para encontrar a função de onda espalhada assim como no caso anterior.

4.2.1 Operador T para barreira na presença do campo

Consideremos nesta segunda aplicação, um outro caso conhecido. Seja um campo magnético uniforme \vec{B} na direção de \hat{z} e um potencial sobre uma barreira circular no plano, compõem o alvo deste problema.

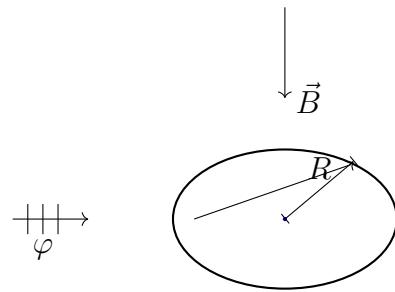


Figura 2 – Espalhamento pela barreira circular na presença de um campo magnético uniforme

Utilizaremos a equação (3.8) para T e a metodologia da seção 3.1 para calcular a onda que é espalhada pela barreira circular no campo de \vec{B} . Para isso, usaremos as expressões da função de onda incidente interagente com o campo magnético e a função de Green que corresponde a ela. A onda incidente tem a forma

$$\varphi_{n,\nu}(r, \theta) = \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \frac{n!}{(n+|\nu|)!} \right]^{1/2} \left(\frac{m\omega r^2}{2\hbar} \right)^{|\nu|/2} \exp\left(i\nu\theta - \frac{m\omega}{4\hbar}r^2\right) L_n^{(|\nu|)}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right), \quad (4.40)$$

com as suas energias permitidas sendo $E_n = \omega\hbar(n + 1/2)$ e $\omega = \frac{eB}{mc}$, e a função de Green será

$$G_M(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} \frac{e^{i\nu(\theta' - \theta)}}{\pi} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\hbar\omega rr'|\nu|!} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_>^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_<^2\right), \quad (4.41)$$

[GROSCH; STEINER, 1998], onde $W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}$ e $M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}$ são as funções de Whittaker [OLVER, 1974; RAINVILLE, 1943]. Usando o potencial da barreira circular (4.2) em conjunto com $\gamma(s)$ constante, substituiremos a $\varphi_{n,\nu}(r, \theta)$ na equação (3.8) obtendo para o operador T

$$T(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r}) \left[\delta(\vec{r} - \vec{r}') + \int dr'' d\theta'' r'' \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} e^{i\nu(\theta'' - \theta)} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi\hbar\omega rr''|\nu|!} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_>^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_<^2\right) T(r'', \vec{r}') \right], \quad (4.42)$$

onde separaremos em duas partes. Definindo as regiões, I $r_< = r$, $r_> = r''$ e II $r_< = r'$, $r_> = r$. Faremos primeiro o caso da região I, chamando a integral de

$$\alpha_\nu(r', \theta') = \int dr'' d\theta'' e^{i\nu\theta''} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r''^2\right) T(r'', \vec{r}'), \quad (4.43)$$

assim

$$T(\vec{r}, \vec{r}') = V(\vec{r}) \left[\delta(\vec{r} - \vec{r}') + \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} e^{-i\nu\theta} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi\hbar\omega r|\nu|!} M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right) \alpha_\nu(r', \theta') \right] \quad (4.44)$$

Multiplicando por $e^{i\nu'\theta} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu'|}{2}, \frac{|\nu'|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right)$ e integrando, teremos $\alpha_{\nu'}(r', \theta')$ no lado

esquerdo

$$\begin{aligned}
\alpha_{\nu'}(r', \theta') &= \int dr d\theta e^{i\nu' \theta} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu'|}{2}, \frac{|\nu'|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) T(\vec{r}, \vec{r}') \\
&= \int dr d\theta e^{i\nu' \theta} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu'|}{2}, \frac{|\nu'|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) V(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\
&+ \int dr d\theta e^{i\nu' \theta} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu'|}{2}, \frac{|\nu'|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) V(\vec{r}) \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} e^{-i\nu \theta} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi \hbar \omega r |\nu|!} \\
&\times M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) \alpha_\nu(r', \theta'), \tag{4.45}
\end{aligned}$$

integrando em r e θ e usando a expressão para o potencial, integramos junto com as deltas de Dirac para obter

$$\begin{aligned}
\alpha_{\nu'}(r', \theta') &= e^{i\nu' \theta'} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu'|}{2}, \frac{|\nu'|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} r'^2 \right) \frac{R\gamma}{r'} \delta(r' - R) \\
&+ \gamma W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu'|}{2}, \frac{|\nu'|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} R^2 \right) \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} e^{-i\nu s} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi \hbar \omega R |\nu|!} \\
&\times M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} R^2 \right) \alpha_\nu(r', \theta') \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(\nu' - \nu)s} ds, \tag{4.46}
\end{aligned}$$

onde a integral $\int_{-\pi}^{\pi} e^{i(\nu' - \nu)s} ds = 2\pi \delta_{\nu, \nu'}$ e com isso eliminamos o somatório. Resolvendo a equação algébrica para $\alpha_\nu(r', \theta')$, obtemos

$$\alpha_\nu(r', \theta') = \frac{R\gamma e^{i\nu \theta'} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} r'^2 \right) \delta(r' - R)}{r' \left[1 - \frac{2\gamma}{\hbar\omega R |\nu|!} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} R^2 \right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} R^2 \right) \right]}, \tag{4.47}$$

logo, a expressão exata para T na região I que encontramos é

$$\begin{aligned}
T(\vec{r}, \vec{r}') &= V(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') + V(\vec{r}) \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} e^{-i\nu \theta} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi \hbar \omega r |\nu|!} M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) \\
&\times \frac{R\gamma e^{i\nu \theta'} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} r'^2 \right) \delta(r' - R)}{r' \left[1 - \frac{2\gamma}{\hbar\omega R |\nu|!} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} R^2 \right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} R^2 \right) \right]}. \tag{4.48}
\end{aligned}$$

Analogamente na região II obteremos

$$\begin{aligned} T(\vec{r}, \vec{r}') &= V(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}') + V(\vec{r}) \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} e^{-i\nu\theta} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi\hbar\omega r|\nu|!} W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right) \\ &\times \frac{R\gamma e^{i\nu'\theta'} M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r'^2\right) \delta(r' - R)}{r' \left[1 - \frac{2\gamma}{\hbar\omega R|\nu|!} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) \right]}, \end{aligned} \quad (4.49)$$

ou ainda, podemos escrever de forma geral

$$\begin{aligned} T(\vec{r}, \vec{r}') &= V(\vec{r})\delta(\vec{r} - \vec{r}') + V(\vec{r}) \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} R\gamma e^{i\nu(\theta' - \theta)} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi\hbar\omega r|\nu|!} \\ &\times \frac{W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_>^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_<^2\right) \delta(r' - R)}{r' \left[1 - \frac{2\gamma}{\hbar\omega R|\nu|!} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) \right]}, \end{aligned} \quad (4.50)$$

onde

$$\begin{aligned} r_> &= \max(r, r') \\ r_< &= \min(r, r'), \end{aligned} \quad (4.51)$$

Esta expressão nos permite calcular a função de onda espalhada pela barreira circular no campo de \vec{B} .

4.2.2 Onda espalhada pela barreira na presença do campo externo

Podemos verificar a onda espalhada usando a onda incidente, da mesma forma que anteriormente ao aplicarmos o operador T na onda incidente no campo de \vec{B} como

desenvolvido na seção 3.1

$$\begin{aligned}
V(\vec{r})\Psi(\vec{r}) &= \int d^2r' T(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{n,\nu'}(r', \theta') = \int d^2r' V(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_{n,\nu'}(r', \theta') \\
&+ \int d^2r' V(\vec{r}) \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} R\gamma e^{i\nu(\theta' - \theta)} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi\hbar\omega r|\nu|!} \\
&\times \frac{W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_>^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_<^2\right) \delta(r' - R)}{r' \left[1 - \frac{2\gamma}{\hbar\omega R|\nu|!} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right)\right]} \\
&\times \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \frac{n!}{(n + |\nu'|)!}\right]^{1/2} \left(\frac{m\omega}{2\hbar}r'^2\right)^{|\nu'|/2} \\
&\times \exp\left(i\nu'\theta' - \frac{m\omega}{4\hbar}r'^2\right) L_n^{(|\nu'|)}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r'^2\right), \tag{4.52}
\end{aligned}$$

multiplicando por $V^{-1}(\vec{r})$ e resolvendo as integrais

$$\begin{aligned}
\Psi(\vec{r}) &= \varphi_{n,\nu'}(r, \theta) + \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} R\gamma e^{-i\nu\theta} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{\pi\hbar\omega r|\nu|!} \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \frac{n!}{(n + |\nu'|)!}\right]^{1/2} \left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right)^{|\nu'|/2} \\
&\times \frac{\exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}R^2\right) L_n^{(|\nu'|)}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_>^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_<^2\right)}{\left[1 - \frac{2\gamma}{\hbar\omega R|\nu|!} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right)\right]} \\
&\times \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(\nu+\nu')\theta'} d\theta', \tag{4.53}
\end{aligned}$$

onde a integral $\int_{-\pi}^{\pi} e^{i(\nu+\nu')\theta'} d\theta' = 2\pi\delta_{\nu, -\nu'}$, portanto

$$\begin{aligned}
\Psi(\vec{r}) &= \varphi_{n,\nu}(r, \theta) + \frac{2R\gamma}{\hbar\omega} \sum_{\nu \in \mathbb{Z}} e^{-i\nu\theta} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)}{r|\nu|!} \left[\frac{m\omega}{2\pi\hbar} \frac{n!}{(n + |\nu'|)!}\right]^{1/2} \left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right)^{|\nu|/2} \\
&\times \frac{\exp\left(-\frac{m\omega}{4\hbar}R^2\right) L_n^{(|\nu|)}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_>^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}r_<^2\right)}{\left[1 - \frac{2\gamma}{\hbar\omega R|\nu|!} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right) W_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right) M_{\frac{E}{\hbar\omega} + \frac{|\nu|}{2}, \frac{|\nu|}{2}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}R^2\right)\right]} \tag{4.54}
\end{aligned}$$

Esta é a expressão exata da onda espalhada por ambos os potenciais e o mesmo resultado obtido pelo autor em [FORTINY, 2022] ao se resolver a equação de Lippmann-Schwinger.

5 Aplicações no espalhamento por múltiplas fendas

Neste capítulo modelaremos um problema que, diferente dos anteriores, não possui as simetrias no plano. Aplicaremos o método desenvolvido no cálculo de espalhamento por um segmento de reta parametrizado por uma secante, e a partir disso implementaremos o espalhamento por uma fenda e por fendas múltiplas e, por fim, construiremos um segmento que obedece a definição do conjunto de Cantor. Para todos os casos, extrairemos os resultados da onda espalhada.

5.1 Segmento de reta

Iremos agora modelar um segmento de reta vertical que passa em x_0 no eixo Ox e calcular o espalhamento de uma onda plana incidente. Em coordenadas polares, o segmento vertical é escrito da seguinte forma, $r(\theta) = x_0 \sec(\theta)$ e o elemento de linha $ds = x_0 \sec^2(\theta)d\theta$.

Para modelar este problema particionaremos o domínio para o cálculo em três regiões, duas onde não existe barreira, sendo o interior e o exterior, e uma intermediária onde há interação da onda plana que incide com o potencial. Escrevemos o potencial como uma distribuição sobre a curva

$$V(r', \theta') = R \int_{-\theta_0}^{\theta_0} \gamma(s') \frac{\delta(\theta' - s') \delta(r' - x_0 \sec(s'))}{|J|} x_0 \sec^2(s') ds', \quad (5.1)$$

onde $\theta = \arccos(\frac{x_0}{r})$ e θ_0 define o inicio e fim do segmento, com isso escrevemos a equação de Lippmann-Schwinger utilizando a expansão para a função de Green e integrando com as deltas no potencial para obter,

$$\begin{aligned} \Psi(r, \theta) = \chi(r, \theta) & - \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\theta} \int_{-\theta_0}^{\theta_0} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) \\ & \times J_l(kr_<) H_l^{(1)}(kr_>) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s), \end{aligned} \quad (5.2)$$

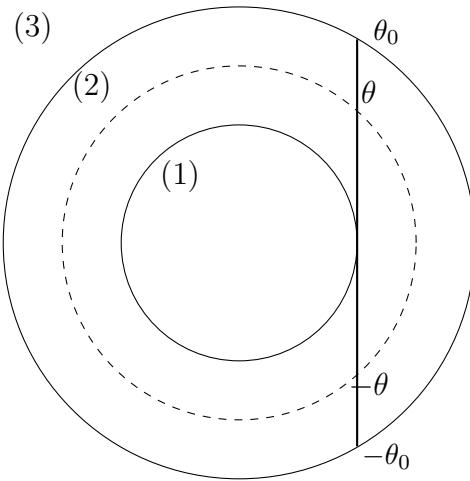


Figura 3 – Barreira como segmento de reta secante no ponto $x = x_0$, início em $-\theta_0$ e fim em θ_0 . Domínio dividido em três regiões, (1) interior, (2) anelar e (3) exterior.

onde $r_< = \min(r, x_0 \sec(\theta))$ e $r_> = \max(r, x_0 \sec(\theta))$. A equação (5.2) define as três regiões ilustradas na figura 3, onde em (1) $0 \leq r \leq x_0$, em (2) $x_0 \leq r \leq R$ e em (3) $r > R$.

5.1.1 Região interior

Na região (1) teremos $r_< = r$ e $r_> = x_0 \sec(\theta)$, assim a equação de Lippmann-Schwinger terá a seguinte forma

$$\begin{aligned} \Psi_{in}(r, \theta) = \chi(r, \theta) - & \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr) e^{il\theta} \int_{-\theta_0}^{\theta_0} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) \\ & \times H_l^{(1)}(kx_0 \sec(s)) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Definindo o coeficiente α_l como sendo

$$\alpha_l = \int_{-\theta_0}^{\theta_0} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) H_l^{(1)}(kx_0 \sec(s)) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s), \quad (5.4)$$

reescrevemos a equação de forma mais simples

$$\Psi_{in}(r, \theta) = \chi(r, \theta) - \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kr) e^{il\theta} \alpha_l, \quad (5.5)$$

agora seguimos com o método usual, assim como feito nos exemplos anteriores. Avaliando sobre a barreira $r = x_0 \sec(\theta)$

$$\Psi_{in}(x_0 \sec(\theta), \theta) = \chi(x_0 \sec(\theta), \theta) - \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(kx_0 \sec(\theta)) e^{il\theta} \alpha_l, \quad (5.6)$$

multiplicando por $x_0 \sec^2(\theta) H_{l'}^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) e^{-il'\theta} \gamma(\theta)$ e integrando, obtemos uma equação para $\alpha_{l'}$

$$\begin{aligned} \alpha_{l'} &= \int_{-\theta_0}^{\theta_0} d\theta x_0 \sec^2(\theta) H_{l'}^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) e^{-il'\theta} \gamma(\theta) \chi(x_0 \sec(\theta), \theta) \\ &- \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \alpha_l \int_{-\theta_0}^{\theta_0} d\theta x_0 \sec^2(\theta) H_{l'}^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) e^{i(l-l')\theta} \gamma(\theta) J_l(kx_0 \sec(\theta)) \end{aligned} \quad (5.7)$$

encontrando os coeficientes α_l e substituindo em (5.5), temos a solução para a função de onda espalhada no interior.

5.1.2 Região exterior

Na região de fora o método é exatamente o mesmo, onde agora $r_< = x_0 \sec(\theta)$ e $r_> = r$, novamente escrevemos a equação de Lippmann-Schwinger, agora com a forma

$$\begin{aligned} \Psi_{ex}(r, \theta) &= \chi(r, \theta) - \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr) e^{il\theta} \int_{-\theta_0}^{\theta_0} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) \\ &\times J_l(kx_0 \sec(s)) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s), \end{aligned} \quad (5.8)$$

e definindo o coeficiente

$$\beta_l = \int_{-\theta_0}^{\theta_0} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) J_l(kx_0 \sec(s)) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s), \quad (5.9)$$

temos a equação

$$\Psi_{ex}(r, \theta) = \chi(r, \theta) - \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} H_l^{(1)}(kr) e^{il\theta} \beta_l. \quad (5.10)$$

Avaliando sobre a barreira, multiplicando $x_0 \sec^2(\theta) J_{l'}(kx_0 \sec(\theta)) e^{-il'\theta} \gamma(\theta)$ e integrando, encontramos a equação para $\beta_{l'}$

$$\begin{aligned}\beta_{l'} &= \int_{-\theta_0}^{\theta_0} d\theta x_0 \sec^2(\theta) J_{l'}(kx_0 \sec(\theta)) e^{-il'\theta} \gamma(\theta) \chi(x_0 \sec(\theta), \theta) \\ &- \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \beta_l \int_{-\theta_0}^{\theta_0} d\theta x_0 \sec^2(\theta) J_{l'}(kx_0 \sec(\theta)) e^{i(l-l')\theta} \\ &\times \gamma(\theta) H_l^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)),\end{aligned}\quad (5.11)$$

que é necessária para obter os coeficientes β_l e substituindo em (5.10) encontramos a função de onda na região exterior.

5.1.3 Região anelar

Na região anelar, a linha pontilhada na figura 3 define duas sub-regiões, antes e depois do potencial, portanto teremos tanto a contribuição de $r_< = r$ e $r_> = x_0 \sec(\theta)$, quanto a de $r_< = x_0 \sec(\theta)$ e $r_> = r$, assim, a equação de Lippmann-Schwinger produz para o potencial (5.1)

$$\begin{aligned}\Psi_{an}(r, \theta) &= \chi(r, \theta) - \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\theta} \\ &\times \left(\left[\left\{ \int_{-\theta_0}^{-\theta} + \int_{\theta}^{\theta_0} \right\} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) H_l^{(1)}(kx_0 \sec(s)) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s) \right] J_l(kr) \right. \\ &\left. + \left[\int_{-\theta}^{\theta} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) J_l(kx_0 \sec(s)) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s) \right] H_l^{(1)}(kr) \right),\end{aligned}\quad (5.12)$$

e como para o potencial que definimos em 5.1 $\theta = \arccos(\frac{x_0}{r})$, definimos as integrais como sendo

$$R_l(r) = \left\{ \int_{-\theta_0}^{-\theta} + \int_{\theta}^{\theta_0} \right\} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) H_l^{(1)}(kx_0 \sec(s)) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s) \quad (5.13)$$

e a outra integral

$$T_l(r) = \int_{-\theta}^{\theta} ds x_0 \sec^2(s) \gamma(s) J_l(kx_0 \sec(s)) e^{-ils} \Psi(x_0 \sec(s), s), \quad (5.14)$$

assim, a equação que devemos resolver para a região anelar é

$$\Psi_{an}(r, \theta) = \chi(r, \theta) - \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\theta} [R_l(r) J_l(kr) + T_l(r) H_l^{(1)}(kr)]. \quad (5.15)$$

Esta equação define a função de onda espalhada na região anelar e os coeficientes $R_l(r)$ e $T_l(r)$ definem respectivamente amplitudes de reflexão e de transmissão, dependentes da posição, da onda que colide com a barreira. Com o intuito de encontrar as expressões para R_l e T_l , avaliaremos sobre a barreira e integraremos com $x_0 \sec^2(\theta) \gamma(\theta) H_{l'}^{(1)}(kx_0 \sec(s)) e^{il'\theta}$, iremos encontrar $R_{l'}(r)$ no lado esquerdo

$$\begin{aligned} R_{l'}(r) &= \left\{ \int_{-\theta_0}^{-\theta} + \int_{\theta}^{\theta_0} \right\} d\theta x_0 \sec^2(\theta) \gamma(\theta) H_{l'}^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) e^{-il's} \chi(x_0 \sec(\theta), \theta) \\ &- \frac{iA}{4} \left\{ \int_{-\theta_0}^{-\theta} + \int_{\theta}^{\theta_0} \right\} d\theta x_0 \sec^2(\theta) \gamma(\theta) H_{l'}^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) e^{-il'\theta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\theta} \\ &\times \left[R_l(x_0 \sec(\theta)) J_l(kx_0 \sec(\theta)) + T_l(x_0 \sec(\theta)) H_l^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) \right], \end{aligned} \quad (5.16)$$

derivando a equação com a regra de Leibniz (2.34), encontramos para $R_{l'}(r)$

$$\begin{aligned} R'_{l'}(r) &= -x_0 \sec^2(\theta) \frac{d\theta}{dr} H_{l'}^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) \\ &\times \left[\gamma(-\theta) e^{il'\theta} \chi(x_0 \sec(\theta), -\theta) + \gamma(\theta) e^{-il'\theta} \chi(x_0 \sec(\theta), \theta) \right] \\ &+ \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} x_0 \sec^2(\theta) H_{l'}^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) \left[\gamma(-\theta) e^{-i(l-l')\theta} + \gamma(\theta) e^{i(l-l')\theta} \right] \\ &\left[R_l(x_0 \sec(\theta)) J_l(kx_0 \sec(\theta)) + T_l(x_0 \sec(\theta)) H_l^{(1)}(kx_0 \sec(\theta)) \right] \frac{d\theta}{dr}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

ou em função de r, onde $\frac{d\theta}{dr} = \frac{x_0}{r\sqrt{r^2-x_0^2}}$, escrevemos

$$\begin{aligned} R'_{l'}(r) &= -\frac{r H_{l'}^{(1)}(kr)}{\sqrt{r^2-x_0^2}} \left\{ \left[\gamma \left(-\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) e^{il' \arccos(\frac{x_0}{r})} \chi \left(r, -\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) \right. \right. \\ &+ \gamma \left(\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) e^{-il' \arccos(\frac{x_0}{r})} \chi \left(r, \arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) \left. \right] \\ &+ \frac{i}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\gamma \left(-\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) e^{-i(l-l') \arccos(\frac{x_0}{r})} \right. \\ &+ \gamma \left(\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) e^{i(l-l') \arccos(\frac{x_0}{r})} \left. \right] \\ &\left. \left[R_l(r) J_l(kr) + T_l(r) H_l^{(1)}(kr) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (5.18)$$

que é uma equação diferencial de primeira ordem não linear para $R_{l'}(r)$ que deve ser resolvida. Da mesma forma podemos encontrar uma equação para $T_l(r)$, avaliando sobre a barreira e desta vez integrando juntamente com $x_0 \sec^2(\theta) \gamma(\theta) J_{l'}(kx_0 \sec(s)) e^{il'\theta}$,

iremos encontrar a definição de $T_{l'}(r)$ no lado esquerdo da equação,

$$\begin{aligned} T_{l'}(r) &= \int_{-\theta}^{\theta} d\theta x_0 \sec^2(\theta) \gamma(\theta) J_{l'}(kx_0 \sec(\theta)) e^{-il's} \varphi(x_0 \sec(\theta), \theta) \\ &- \frac{iA}{4} \int_{-\theta}^{\theta} d\theta x_0 \sec^2(\theta) \gamma(\theta) J_{l'}(kx_0 \sec(\theta)) e^{-il'\theta} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il\theta} \\ &\times [R_l(x_0 \sec(\theta)) J_l(kx_0 \sec(\theta)) + T_l(x_0 \sec(\theta)) H_l^{(1)}(kx_0 \sec(\theta))] , \end{aligned} \quad (5.19)$$

e derivando, obtemos

$$\begin{aligned} T'_{l'}(r) &= x_0 \sec^2(\theta) \frac{d\theta}{dr} J_{l'}(kx_0 \sec(\theta)) \\ &\times [\gamma(-\theta) e^{il'\theta} \varphi(x_0 \sec(\theta), -\theta) + \gamma(\theta) e^{-il'\theta} \varphi(x_0 \sec(\theta), \theta)] \\ &- \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} x_0 \sec^2(\theta) J_{l'}(kx_0 \sec(\theta)) [\gamma(-\theta) e^{-i(l-l')\theta} + \gamma(\theta) e^{i(l-l')\theta}] \\ &\quad [R_l(x_0 \sec(\theta)) J_l(kx_0 \sec(\theta)) + T_l(x_0 \sec(\theta)) H_l^{(1)}(kx_0 \sec(\theta))] \frac{d\theta}{dr} , \end{aligned} \quad (5.20)$$

ou, escrevendo em termos de r

$$\begin{aligned} T'_{l'}(r) &= -\frac{r J_{l'}(kr)}{\sqrt{r^2 - x_0^2}} \left\{ \left[\gamma \left(-\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) e^{-il' \arccos(\frac{x_0}{r})} \chi \left(r, -\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) \right. \right. \\ &+ \left. \gamma \left(-\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) e^{-il' \arccos(\frac{x_0}{r})} \chi \left(r, -\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) \right] \\ &+ \frac{iA}{4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\gamma \left(-\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) e^{-i(l-l') \arccos(\frac{x_0}{r})} \right. \\ &+ \left. \left. \gamma \left(\arccos \left(\frac{x_0}{r} \right) \right) e^{i(l-l') \arccos(\frac{x_0}{r})} \right] \\ &\quad [R_l(r) J_l(kr) + T_l(r) H_l^{(1)}(kr)] \right\} , \end{aligned} \quad (5.21)$$

que também é uma equação diferencial a ser resolvida. Com ambas as equações (5.18) e (5.21) resolvidas, teremos a solução ao substituí-las em (5.12).

5.1.4 Solução completa

As equações (5.5), (5.10) e (5.12), condensadas da seguinte forma

$$\Psi(r, \theta) = \begin{cases} \Psi_{in}(r, \theta), & \text{se } r \leq x_0 \\ \Psi_{an}(r, \theta), & \text{se } x_0 \leq r \leq R \\ \Psi_{ex}(r, \theta), & \text{se } r \geq R \end{cases} , \quad (5.22)$$

formam a função de onda solução da equação de Lippmann-Schwinger em todo o espaço. Podemos resolver as integrais em (5.7) e (5.11) e o sistema formado por (5.18) e (5.21) que resolvemos numéricamente, para plotar os gráficos de densidade das densidades de probabilidade da função de onda. Para o cálculo numérico, devemos truncar a série infinita em algum termo, porém garantimos a convergência das séries, uma vez que as funções especiais de Bessel convergem quando se aumenta seu índice l para um argumento que seja menor que o índice. Usando o software Mathematica

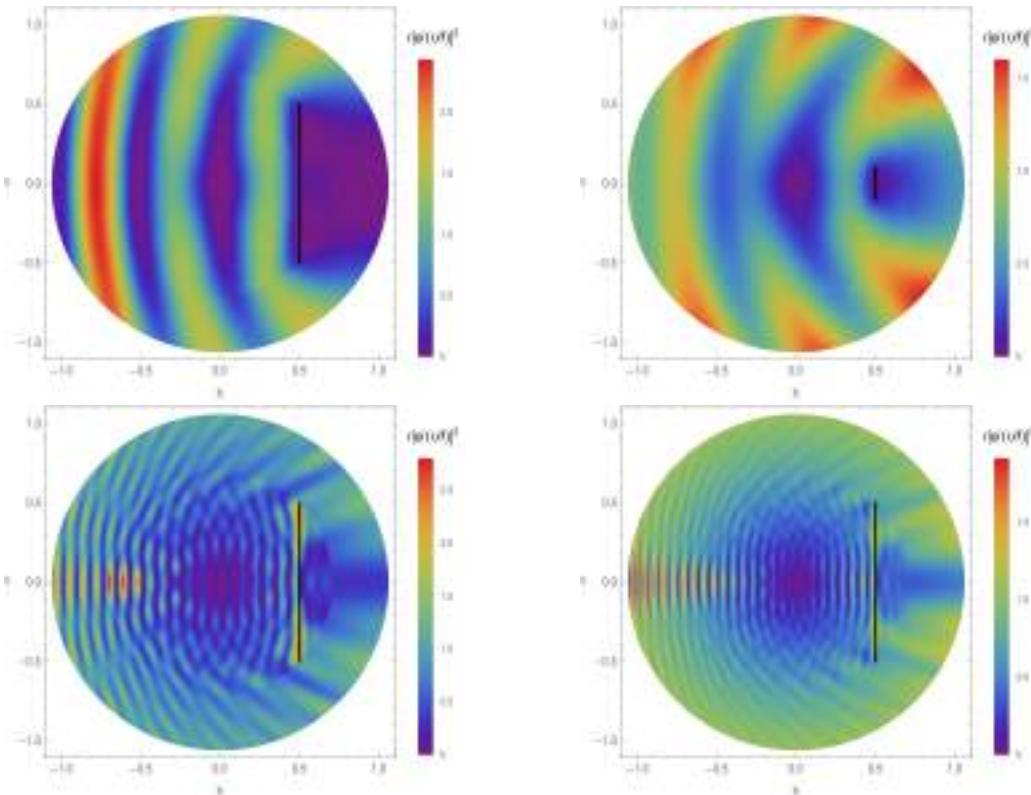


Figura 4 – Gráficos da densidade de probabilidade $r|\Psi|^2$ para o espalhamento de uma onda plana por um segmento finito com constante de acoplamento $\gamma = 100$. O segmento começa a uma distância $x_0 = 1/2$ da origem no ângulo $\theta = \pi/4$ até $\theta = -\pi/4$. Em ambas as imagens superiores, o número de onda da onda incidente é $k = 2\pi$. Nas imagens inferiores, o número da onda incidente é $k = 12\pi$ (esquerda) e $k = 16\pi$ (direita). O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os problemas. Segmentos verticais pretos representam as paredes limite.

Na figura 4 é possível observar que há simetria para a onda que incide sobre a barreira perpendicularmente. Observamos também a reflexão que ocorre devido à barreira, no lado esquerdo das imagens que interage com a onda incidente. Além disso, nos extremos do segmento, vemos que ocorre a difração com a onda contornando o obstáculo. Também se nota que, dependendo da magnitude do momento inicial k , existe certa probabilidade logo após a barreira, observável para valores mais altos além de que para um momento baixo existem faixas largas e conforme k aumenta essas faixas ficam estreitas. Na origem das imagens podemos notar a presença de um ponto, este é devido há forma de desenhar a barreira e não interfere no cálculo. Podemos voltar nossa atenção para outros casos e gerar gráficos de densidade para ângulos de incidência diferentes que apresentariam padrões distintos.

5.1.5 Seções de choque

A partir da equação (5.10) podemos calcular a amplitude de espalhamento. Usando o comportamento assintótico da função de Hankel [OLVER, 1974],

$$H_l^{(1)}(z) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp \left[i \left(z - \frac{l\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \right] \quad (5.23)$$

e substituindo em (5.10)

$$\Psi_{ex}(r, \theta) = \chi(r, \theta) - \frac{iA}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{-i/4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{\frac{l\pi}{2}} e^{il\theta} \beta_l \frac{e^{ikr}}{\sqrt{r}}. \quad (5.24)$$

de onde, comparando com (2.71) é possível encontrar a expressão para a amplitude de espalhamento

$$f(\theta) = -\frac{iA}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} e^{-i/4} \sum_{l=-\infty}^{\infty} i^{-l} e^{il\theta} \beta_l. \quad (5.25)$$

de onde é possível calcular a seção de choque diferencial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2. \quad (5.26)$$

Da equação (2.73), a seção de total será

$$\sigma_T = \frac{A^2}{4k} \sum_{l=-\infty}^{\infty} |\beta_l|^2. \quad (5.27)$$

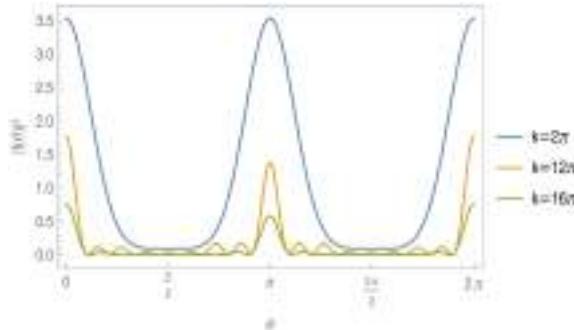


Figura 5 – Gráficos da seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para o espalhamento de uma onda plana por um segmento finito para três momentos de onda diferentes, $k = \{2\pi, 12\pi, 16\pi\}$. A constante de acoplamento é $\gamma = 100$ e o ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.

Esta seção de choque diferencial diz respeito à figura 4. Nota-se que nas direções perpendiculares à de incidência, os gráficos apresentam seus valores mais baixos, mostrando que o espalhamento é mínimo nestas direções. Os máximos que se encontram em zero e 2π representam a onda que é transmitida pela barreira, enquanto que os picos em π representam a onda refletida pela barreira. É importante também notar que o número de ondulações aumenta com a magnitude de k , indicando que há mais transmissão pela barreira.

Obtida a seção de choque diferencial, basta integrar sobre os ângulos, alcançando assim a seção de choque total σ_T , que plotamos abaixo na figura 6.

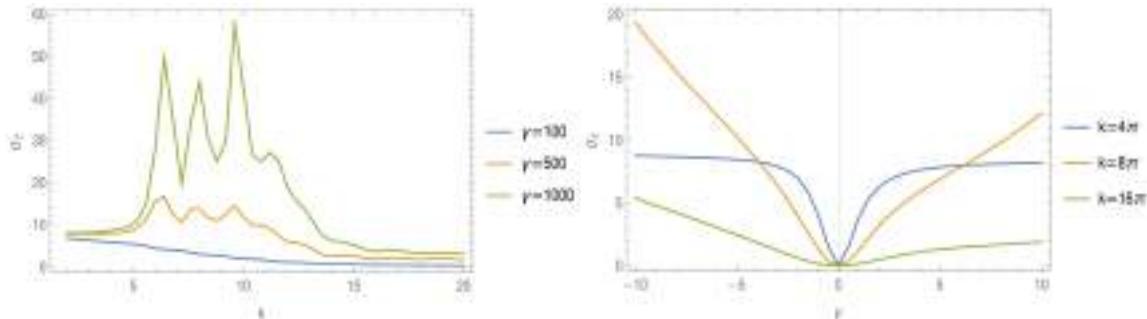


Figura 6 – Gráficos da seção de choque total σ_T para o espalhamento de uma onda plana por um segmento finito como função do momento k e da constante de acoplamento γ . O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.

Na imagem da esquerda traçamos a seção de choque total em função do número de onda incidente k . Observe que σ_T aumenta para uma barreira mais dura (curva verde) mostrando três picos agudos, relacionados com os zeros das funções de Bessel. A partir de certo valor do momento, como $k > 15\pi$ todas as três curvas tendem a um comportamento semelhante. Na imagem da direita traçamos a seção de choque total em função da constante de acoplamento. Para $k = 4\pi$ o gráfico se assemelha a uma função par, enquanto para um número de onda maior a seção de choque total aumenta para a barreira atrativa.

5.2 Fenda simples

Considerando um potencial no qual a função de acoplamento é definida por partes da forma

$$\gamma(\theta) = \begin{cases} 1, & \text{se } -\theta_0 \leq \theta \leq -\theta_1 \\ 0, & \text{se } -\theta_1 \leq \theta \leq \theta_1 \\ 1, & \text{se } \theta_1 \leq \theta \leq \theta_0 \end{cases}, \quad (5.28)$$

em que $\theta_1 < \theta_0$, a equação de Lippmann-Schwinger define as regiões (1), (2) e (3), assim como no caso anterior

Resolvendo o sistema de equações, agora para este potencial definido por partes, produzimos os gráficos de densidades de probabilidade para a função de onda espalhada por uma fenda simples.

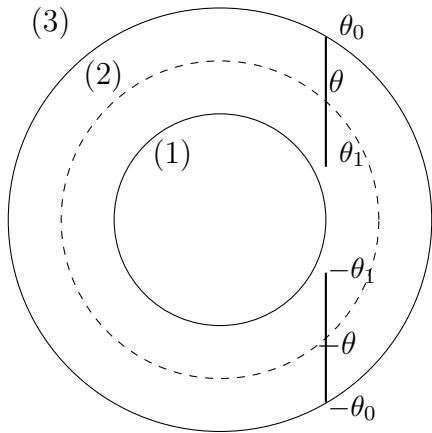


Figura 7 – Segmento de reta em $x = x_0$ com uma fenda simples, início em $-\theta_0$ e fim em θ_0 . Domínio dividido em três regiões, (1) interior, (2) anelar e (3) exterior.

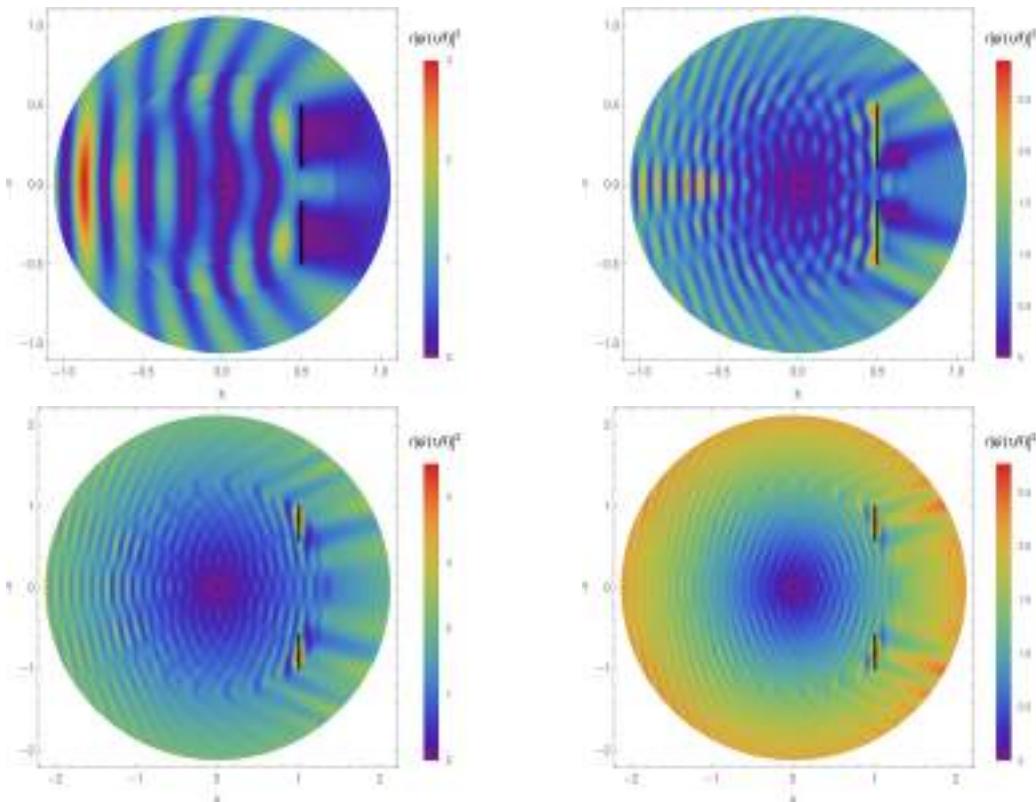


Figura 8 – Gráficos da densidade de probabilidade $r|\Psi|^2$ para o espalhamento de uma onda plana por uma única fenda com constante de acoplamento $\gamma = 100$. O segmento começa a uma distância $x_0 = 1/2$ da origem no ângulo $\theta = \pi/4$ até $\theta = -\pi/4$. Na imagem superior esquerda, o número da onda incidente é $k = 4\pi$; no canto superior direito, $k = 11\pi$; e na terceira e quarta, os números de onda são $k = 8\pi$ e $k = 10\pi$, respectivamente, as imagens inferiores esquerda e direita. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos esses casos. Segmentos verticais pretos representam as paredes limite.

Na figura 8 definimos nas duas primeiras imagens, uma fenda com início em $\theta = -\pi/15$ e fim em $\theta = \pi/15$, já nas duas segundas imagens, a fenda tem início em $\theta = -\pi/6$ e fim em $\theta = \pi/6$. Podemos ver a onda que atravessa a fenda e produz um certo padrão de difração nas imagens após a barreira que depende da abertura da fenda e do valor de k , para um valor menor do momento incidente a barreira impede completamente a passagem, com a onda atravessando somente a fenda, o que se mostra diferente para um valor maior do momento. Notamos também a onda que é refletida pela barreira no lado esquerdo. Nas imagens de cima, mostramos uma fenda menor, enquanto que nas de baixo temos uma fenda um pouco maior para comparação, e notamos que produz os mesmos efeitos. Neste exemplo é mais fácil notar a dualidade onda partícula com o padrão de difração após a fenda.

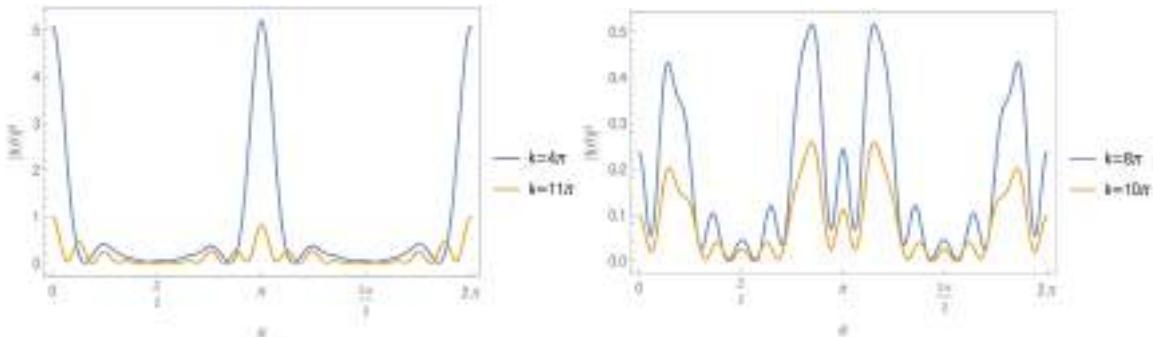


Figura 9 – Gráficos da seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para o espalhamento de uma onda plana por uma fenda simples para quatro momentos de onda diferentes, $k = \{4\pi, 8\pi, 10\pi, 11\pi\}$. A constante de acoplamento é $\gamma = 100$ e o ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.

Na figura 9 nós apresentamos duas imagens, a primeira retrata a fenda menor na figura 8 enquanto que a segunda representa a fenda maior. Vemos assim como no caso do segmento, que nas direções perpendiculares à de incidência, os gráficos apresentam valores mais baixos. A partir do ângulo $\pi/4$ notamos o aumento do módulo da amplitude, onde se encontram picos secundários, estes estão presentes devido à existência da fenda. Vemos que os máximos se encontram na direção de incidência em 0 e 2π pela onda transmitida e em π pela onda que é refletida.

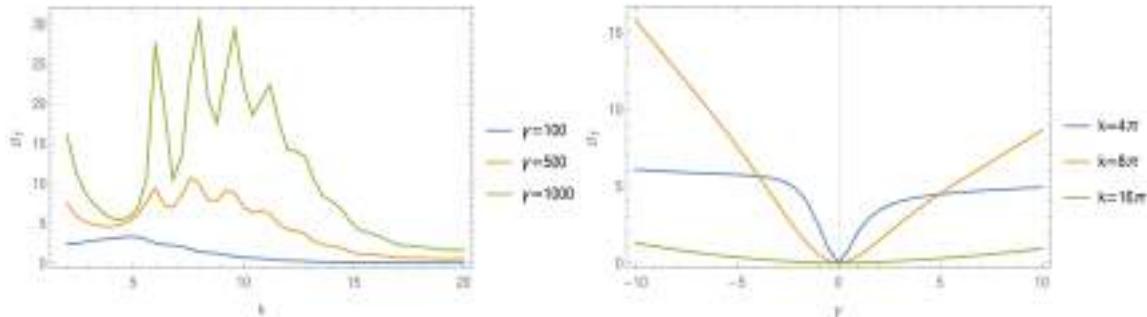


Figura 10 – Gráficos da seção de choque total σ_T para o espalhamento de uma onda plana por uma fenda simples como função do momento k e da constante de acoplamento γ . O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.

Na figura 10 traçamos a seção de choque total para o espalhamento de uma onda plana por uma única fenda. Na imagem da esquerda traçamos a seção de choque total σ_T em função de k . Tal como no caso anterior, a seção de choque apresenta uma série de picos agudos para uma barreira mais dura. A partir de certo valor, como $k > 18$, todas as três curvas têm um comportamento semelhante. Na imagem da direita, traçamos a seção transversal total em função de γ . A assimetria para $k = 4\pi$ é mais pronunciada neste caso, e para $k = 8\pi$ vemos, para casos repulsivos e atrativos, um comportamento quase linear (com inclinação negativa para $\gamma < 0$ e inclinação positiva para $\gamma > 0$) da seção transversal total.

5.3 Fenda dupla

Com a função γ definida por partes, podemos criar outros conjuntos de fendas, consideremos a fenda dupla

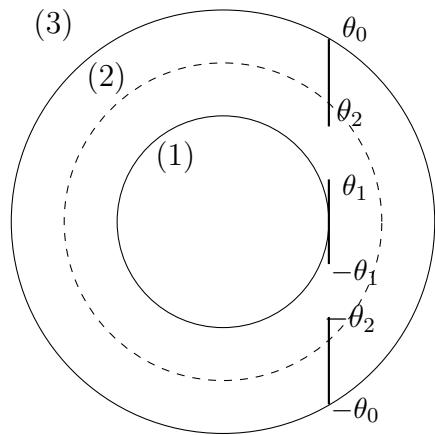


Figura 11 – Segmento de reta em $x = x_0$ com duas fendas, início em $-\theta_0$ e fim em θ_0 . Domínio dividido em três regiões, (1) interior, (2) anelar e (3) exterior.

Onde novamente γ é definido como $\gamma = 1$ nos intervalos de barreira e $\gamma = 0$ nos intervalos de fendas. A solução do sistema de equações nos permite produzir os gráficos de densidade a seguir

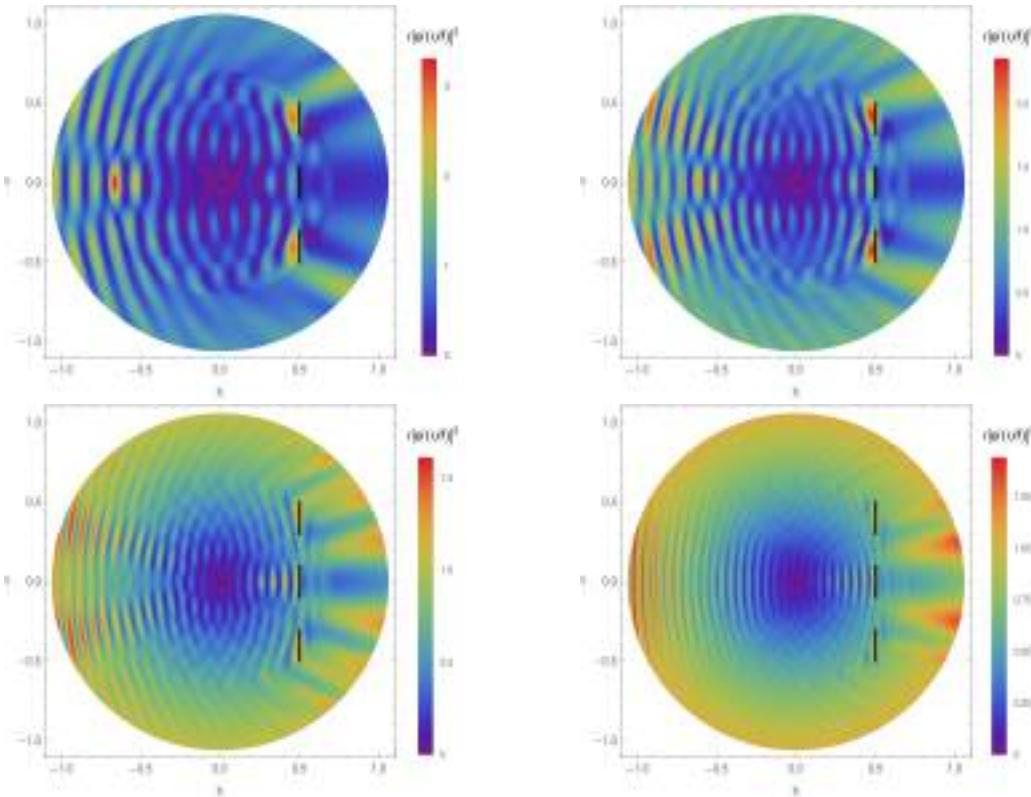


Figura 12 – Gráficos da densidade de probabilidade $r|\Psi|^2$ para o espalhamento de uma onda plana por um potencial de fenda dupla com constante de acoplamento $\gamma = 100$. O segmento começa a uma distância $x_0 = 1/2$ da origem no ângulo $\theta = \pi/4$ até $\theta = -\pi/4$. A imagem superior esquerda mostra uma onda incidente com número de onda $k = 8\pi$, a imagem superior direita tem o número de onda incidente $k = 10\pi$, enquanto a terceira e a quarta têm número de onda $k = 14\pi, 18\pi$, respectivamente inferior esquerdo e direito. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ para todos os problemas. Segmentos verticais pretos representam as paredes limite.

Na figura 12 as fendas duplas são definidas com $\theta_1 = \pi/16$ e $\theta_2 = \pi/5.8$. Os valores do momento incidente k variam de 8π até 10π . Todas as figuras ilustram bem o espalhamento da onda plana pela fenda dupla, é possível ver como a onda atravessa ambas as fendas e se propaga. Aqui observamos a reflexão da onda pela barreira no lado esquerdo, em padrões diferentes daqueles da fenda simples, vemos também a difração pelas fendas com a onda atravessando no meio e contornando nos extremos

da barreira, dependendo do valor de k , notamos uma maior ou menor intensidade da onda que atravessa a barreira. Vemos agora mais evidentemente o padrão que se forma após a barreira, o que evidencia a dualidade da onda, algo que pode ser notado também na seção de choque.

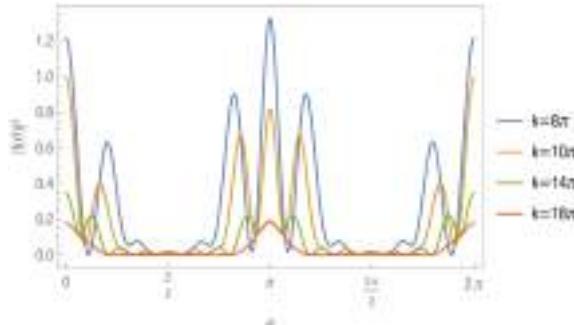


Figura 13 – Gráficos da seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para o espalhamento de uma onda plana por duas fendas para quatro momentos de onda diferentes, $k = \{8\pi, 10\pi, 14\pi, 18\pi\}$. A constante de acoplamento é $\gamma = 100$ e o ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.

Novamente, nas direções perpendiculares à de incidência, os gráficos apresentam valores mais baixos. Podemos notar que há picos secundários devido a presença das fendas, o que também indica a dualidade onda partícula. Notamos também como nos outros casos, que os picos maiores estão nas direções de incidência das ondas, em 0 e 2π representam a onda que é transmitida enquanto que em π , representa a onda que é refletida.

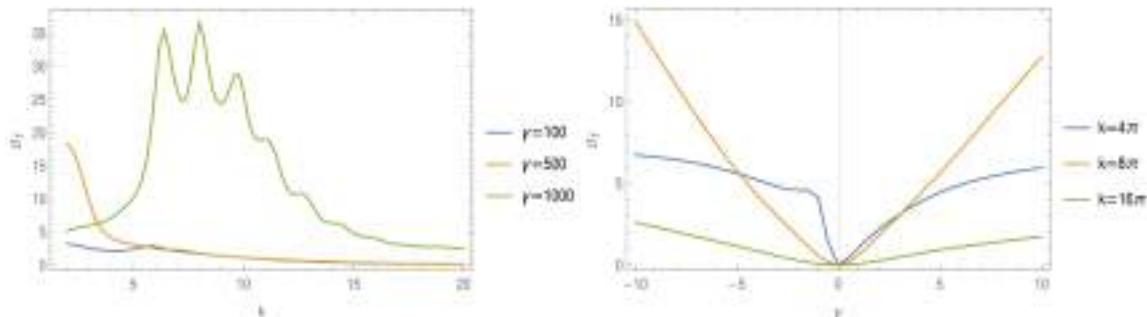


Figura 14 – Gráficos da seção de choque total σ_T para o espalhamento de uma onda plana por uma fenda dupla como função do momento k e da constante de acoplamento γ . O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.

Na figura 14 traçamos a seção de choque total para o espalhamento de uma onda plana por uma fenda dupla em função do número de onda k (esquerda) e da força de acoplamento γ (direita). Podemos notar que quanto mais rígida for a barreira, maior será a seção de choque para $6 < k < 12$. Em função de γ observamos duas curvas que se assemelham a um comportamento simétrico em torno do eixo $\gamma = 0$, enquanto a curva azul é completamente assimétrica em torno de $\gamma = 0$.

5.4 Fendas múltiplas definidas pelo conjunto de Cantor

Para uma aplicação de fendas múltiplas, podemos escolher os intervalos e defini-las da forma que for conveniente. O que faremos é definir um conjunto de múltiplas fendas nos baseando no conjunto de Cantor. A definição do conjunto de Cantor foi formulada originalmente de maneira abstrata pelo matemático George Cantor (1845-1918) estudando teoria dos conjuntos [LIMA; (BRASIL), 1989],[NELSON, 2007]. A definição que usaremos será a de conjunto ternário, que se constrói em um intervalo por um processo iterativo no qual se remove o terço do meio de dado intervalo e se repete o processo em cada subintervalo restante, o que, para o nosso problema, produzirá fendas cada vez menores.

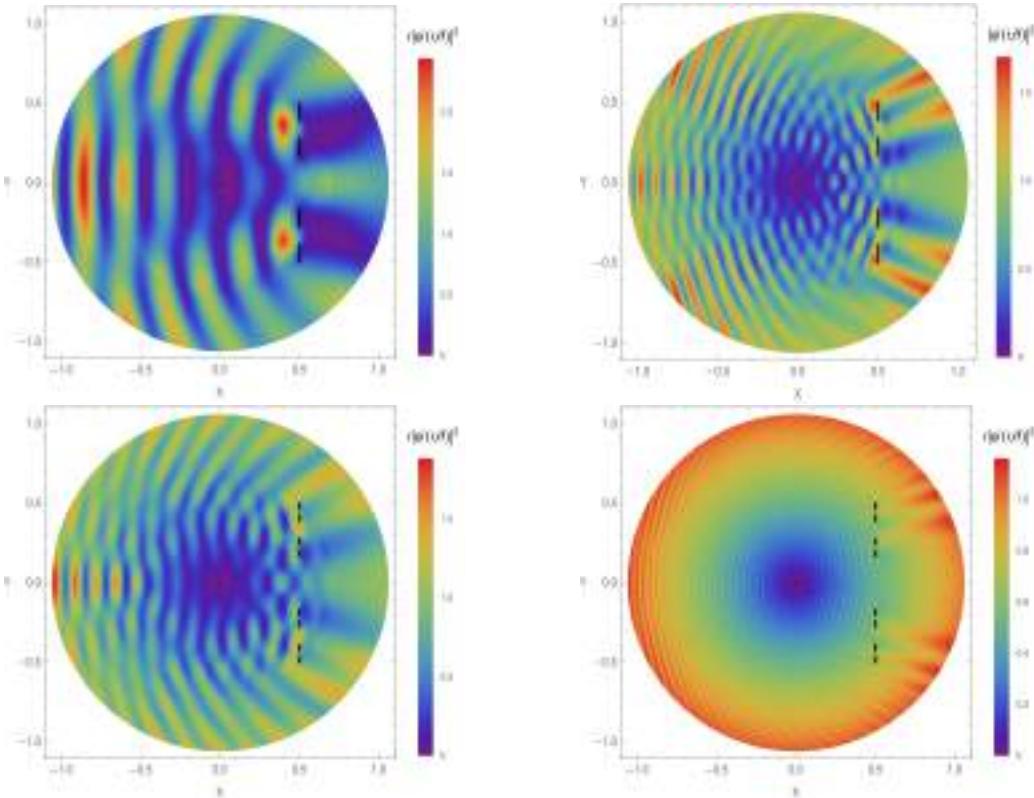


Figura 15 – Gráficos da densidade de probabilidade $r|\Psi|^2$ para o espalhamento de uma onda plana por múltiplas fendas, todas com constante de acoplamento $\gamma = 100$. O segmento começa a uma distância $x_0 = 1/2$ da origem no ângulo $\theta = \pi/4$ até $\theta = -\pi/4$. A primeira imagem (canto superior esquerdo) mostra uma onda incidente com número de onda $k = 4\pi$, a segunda (canto superior direito), terceira (canto inferior esquerdo) e quarta (canto inferior direito) com números de onda incidente $k = 11\pi, 8\pi$ e $k = 24\pi$, respectivamente. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os quatro problemas. Segmentos verticais pretos representam as paredes limite.

Para estas fendas definidas pelo conjunto de Cantor, podemos observar que a reflexão e a transmissão da onda que incide, ocorre de maneiras diferentes em cada figura. Ao lado direito podemos ver a difração que ocorre com a onda que atravessa as fendas, ou que contorna a barreira nos extremos. Vemos também como uma onda de momento k baixo não é capaz de atravessar as fendas menores, como mostram as imagens da esquerda em 15, é preciso que a própria chegue com mais energia na

barreira para que possa atravessar estas fendas pequenas, como mostram as imagens da direita, onde podemos ver uma onda de maior momento k que é capaz de atravessar as fendas pequenas.

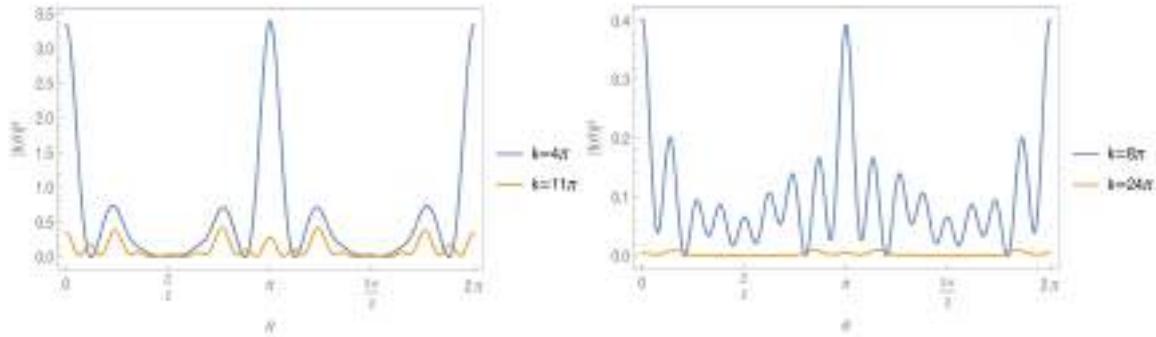


Figura 16 – Gráficos da seção de choque diferencial $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ para o espalhamento de uma onda plana por múltiplas fendas para quatro momentos de onda diferentes, $k = \{4\pi, 8\pi, 11\pi, 24\pi\}$. A constante de acoplamento é $\gamma = 100$ e o ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos. O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.

Para as fendas definidas pelo conjunto de Cantor, notamos os valores mais baixos nas direções perpendiculares. Os valores maiores do modulo da amplitude estão novamente em 0 e 2π representando a onda que é transmitida e em π , representando a onda que é refletida. Para o conjunto de Cantor de ordem mais baixa notamos menos cristas do que no de ordem mais alta, ilustrando como as fendas menores influenciam o padrão de espalhamento.

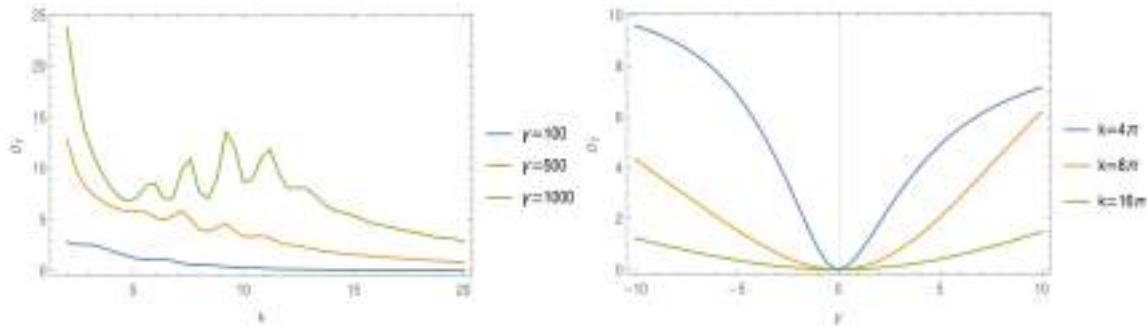


Figura 17 – Gráficos da seção de choque total σ_T para o espalhamento de uma onda plana por múltiplas fendas definidas a partir do conjunto de Cantor como função do momento k e da constante de acoplamento γ . O ângulo de incidência é $\theta_0 = 0$ em todos os casos.

Na figura 17 observamos, na imagem da esquerda, que a seção de choque total é maior quando a barreira tem uma força de acoplamento maior. Quando estudamos a seção de choque total em função de γ , mantendo o número de onda fixo, ele aumenta tanto para barreiras atrativas quanto para barreiras repulsivas.

6 Conclusão

Nesta dissertação estudamos e explicamos as teorias base para se modelar, calcular e extrair inferências nos cenários de espalhamento, seja por uma ou mais barreiras, de ondas planas que obedecem à equação de Lippmann-Schwinger e desenvolvemos metodologias referentes a problemas de menor simetria para resolver a mesma equação. No capítulo 2 explicamos toda a metodologia para formular esses processos físicos, começando pela teoria das distribuições e como escrevê-las sobre curvas. Definimos e classificamos equações integrais e desenvolvemos os cálculos com o tipo de equação que mais tarde surgiria nas aplicações. Mostramos a teoria das funções de Green e definimos a equação de Lippmann-Schwinger, que trata de espalhamento. No capítulo 3 estudamos o operador T , ou matriz de transição, definindo as equações e como calcular a expressão explícita do operador, com isso mostramos como formular as aplicações com essa metodologia e calcular a onda espalhada a partir do operador T . Além disso, explicamos também a técnica de espalhamento múltiplo tanto com o formalismo da equação de Lippmann-Schwinger quanto o do operador de transição, a qual mais tarde aplicaríamos nos problemas. O capítulo 4 contém duas aplicações de espalhamento utilizando o formalismo do operador de transição, a primeira aplicação é para o caso da barreira circular no plano onde é calculada explicitamente a expressão do operador T e este por sua vez nos permite obter a expressão exata da onda espalhada, que é corroborada por resultados previamente conhecidos. O segundo caso é um exemplo de espalhamento múltiplo onde utilizamos a mesma barreira circular no plano, porém agora na presença de um campo magnético. Nesta segunda aplicação também calculamos exatamente a onda espalhada por meio do operador T utilizando a teoria de espalhamento múltiplo, também aqui, obtivemos o resultado esperado comparando com o resultado que já conhecido. Com isso, concluímos e mostramos a eficácia e equivalência da resolução com esta metodologia para os problemas do tipo. Por fim, no último capítulo, 5, mostramos como aplicação do método de solução de equações integrais um problema sem simetria angular ou radial, o espalhamento por um segmento de reta do qual obtemos integrais e sist-

mas de equações que foram resolvidos numericamente pelo software Mathematica e os resultados foram mostrados em gráficos de densidade. Após o cálculo do segmento, implementamos um potencial definido por partes com a intenção de produzir fendas no segmento, também obtivemos os resultados para os casos da fenda simples, fenda dupla e múltiplas fendas definidas pelo conjunto de Cantor e mostramos os gráficos de densidade para constatar a validade do método.

Tendo estudado e aprendido a utilizar a metodologia do operador T , podemos aplicá-la para diversas situações e para potenciais que possam ser escritos como uma soma de potenciais. Quanto ao desenvolvimento utilizado no problema da reta, podemos produzir tantos tipos de fendas quanto se queira, ou aplicá-lo para geometrias diferentes em parametrizações que apresentem uma região de interação no domínio. É possível obter resultados mais próximos da solução exata com o desenvolvimento do método, ao se exigir as condições de contorno necessárias, o que será feito em trabalhos futuros.

Referências

ARFKEN, G. *Mathematical Methods for Physicists*. Third. San Diego: Academic Press, Inc., 1985. Citado na página 20.

AZADO, P. C.; MAIOLI, A. C.; SCHMIDT, A. G. M. Quantum scattering by a spherical barrier with an arbitrary coupling strength. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 96, n. 8, p. 085205, may 2021. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/abfde4>>. Citado na página 16.

AZEVEDO, A. L. et al. Wave amplitude gain within wedge waveguides through scattering by simple obstacles. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 109, p. 025303, Feb 2024. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.109.025303>>. Citado na página 16.

BELKIC, D. *Principles of Quantum Scattering Theory*. CRC Press, 2020. (Series in Atomic Molecular Physics). ISBN 9781420033649. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=V9YY6Bmg6ngC>>. Citado na página 14.

BYRON, F.; FULLER, R. *Mathematics of Classical and Quantum Physics*. Dover Publications, 1992. (Dover books on physics and chemistry, v. 1-2). ISBN 9780486671642. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=pndBQOYzlP8C>>. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 20.

CAVERO-PELÁEZ, I.; MUÑOZ-CASTANEDA, J. M.; ROMANIEGA, C. Casimir energy for concentric $\delta-\delta'$ spheres. *Phys. Rev. D*, American Physical Society, v. 103, p. 045005, Feb 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevD.103.045005>>. Citado na página 16.

CAVERO-PELÁEZ, I.; MILTON, K. A. Casimir energy for a dielectric cylinder. *Annals of Physics*, v. 320, n. 1, p. 108–134, 2005. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491605000977>>. Citado na página 16.

CHATJIGEORGIOU, I. K. Three dimensional wave scattering by arrays of elliptical and circular cylinders. *Ocean Engineering*, v. 38, n. 13, p. 1480–1494, 2011. ISSN 0029-8018. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0029801811001375>>. Citado na página 14.

FOLLAND, G. B. *Fourier analysis and its applications*. [S.l.]: American Mathematical Soc., 2009. v. 4. Citado 2 vezes nas páginas 19 e 26.

FORTINY, R. M. *Espalhamento múltiplo com a equação de Lippmann-Schwinger para o caso de dois potenciais.* 51 f. Monografia (Física) — Universidade Federal Fluminense, Rio de janeiro, 2022. Citado na página 49.

FRANCK, J.; HERTZ, G. Über zusammenstöße zwischen elektronen und den molekülen des quecksilberdampfes und die ionisierungsspannung desselben. *Physikalische Blätter*, Wiley Online Library, v. 23, n. 7, p. 294–301, 1967. Citado na página 14.

GOLDBERGER, M. L.; WATSON, K. M. *Collision theory.* [S.l.]: Courier Corporation, 1964. Citado 4 vezes nas páginas 16, 27, 31 e 34.

GONIS, A.; BUTLER, W. H. *Multiple scattering in solids.* [S.l.]: Springer Science & Business Media, 1999. Citado 4 vezes nas páginas 16, 27, 31 e 34.

GROSCHÉ, C.; STEINER, F. *Handbook of Feynman path integrals.* [S.l.]: Springer, 1998. v. 140. Citado na página 46.

JESUS, A. L. de; MAIOLI, A. C.; SCHMIDT, A. G. M. Scattering in the poincaré disk and in the poincaré upper half-plane. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 96, n. 12, p. 125264, dec 2021. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/ac3d4c>>. Citado na página 16.

JESUS, A. L. de; MAIOLI, A. C.; SCHMIDT, A. G. M. Scattering in the poincaré disk and in the poincaré upper half-plane. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 96, n. 12, p. 125264, dec 2021. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/ac3d4c>>. Citado na página 16.

JOACHAIN, C. J. *Quantum collision theory.* [S.l.: s.n.], 1975. Citado na página 29.

KOSZTIN, I.; SCHULTEN, K. Boundary integral method for stationary states of two-dimensional quantum systems. *International Journal of Modern Physics C*, v. 08, n. 02, p. 293–325, 1997. Disponível em: <<https://doi.org/10.1142/S0129183197000278>>. Citado na página 16.

LIMA, E.; (BRASIL), I. de Matematica Pura e A. *Análise real.* IMPA, 1989. (Análise real, v. 1). ISBN 9788524400483. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=U6NAPwAACAAJ>>. Citado na página 66.

LIPPmann, B. A.; SCHWINGER, J. Variational principles for scattering processes. i. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 79, p. 469–480, Aug 1950. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.79.469>>. Citado 2 vezes nas páginas 15 e 29.

LUZ, M. G. E. da; LUPU-SAX, A. S.; HELLER, E. J. Quantum scattering from arbitrary boundaries. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 56, p. 2496–2507, Sep 1997. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.56.2496>>. Citado na página 15.

MAIOLI, A.; SCHMIDT, A. G. Exact solution to lippmann-schwinger equation for a circular billiard. *Journal of Mathematical Physics*, AIP Publishing, v. 59, n. 12, 2018. Citado na página 15.

MAIOLI, A. C.; SCHMIDT, A. G. Exact solution to the lippmann-schwinger equation for an elliptical billiard. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Elsevier, v. 111, p. 51–62, 2019. Citado na página 15.

MAIOLI, A. C.; SCHMIDT, A. G. M. Exact solution to lippmann-schwinger equation for a circular billiard. *Journal of Mathematical Physics*, v. 59, n. 12, p. 122102, 12 2018. ISSN 0022-2488. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.5056259>>. Citado na página 45.

MAIOLI, A. C.; SCHMIDT, A. G. M.; AZADO, P. C. Quantum scattering by a viviani's curve. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, v. 73, n. 3, p. 115, maio 2022. Citado na página 16.

NELSON, D. R. The cantor set-a brief introduction. *uwaterloo. ca*, 2007. Citado na página 66.

OLIVEIRA, L. et al. Experimental study of the solutions of the lippmann-schwinger equation for an elliptical billiard with an intense laser beam. *Physics Letters A*, v. 521, p. 129738, 2024. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960124004328>>. Citado na página 16.

OLVER, F. *Asymptotics and Special Functions*. Academic Press, 1974. (Computer science and applied mathematics : a series of monographs and textbooks). ISBN 9780125258500. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=3jvvAAAAMAAJ>>. Citado 2 vezes nas páginas 46 e 57.

PEREIRA, M. E.; CUNHA, P. H.; SCHMIDT, A. G. Quantum scattering in a wavy circle. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, v. 161, p. 115965, 2024. ISSN 1386-9477. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1386947724000699>>. Citado na página 16.

PEREIRA, M. E.; SCHMIDT, A. G. Exact solutions for lippmann-schwinger equation for the scattering by hyper-spherical potentials. *Few-Body Systems*, Springer, v. 63, n. 1, p. 1–24, 2022. Citado na página 16.

RAINVILLE, E. D. Intermediate course in differential equations. (*No Title*), 1943. Citado na página 46.

RAYLEIGH, L. The Theory of Sound, 2nd Ed. *Philos. Mag. 34, 481 (1892); reprinted by Dover Publications, New York (1976)*), v. 2, p. p. 328, 1892. Citado na página 14.

RODBERG, L. S.; THALER, R. M.; THALER, R. M. *Introduction to the quantum theory of scattering*. [S.l.]: Academic Press, 1967. v. 26. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 34.

RUIZ-BIESTRO, A.; GUTIÉRREZ-VEGA, J. C. Solutions of the lippmann-schwinger equation for confocal parabolic billiards. *Physical Review E*, APS, v. 109, n. 3, p. 034203, 2024. Citado na página 15.

RUTHERFORD, E. The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom. *Philosophical Magazine, series 6*, v. 21, 1911. Citado na página 14.

SCHMIDT, A. G.; PEREIRA, M. E. Quantum refractive index for two- and three-dimensional systems. *Annals of Physics*, v. 452, p. 169273, 2023. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491623000581>>. Citado na página 16.

SCHMIDT, A. G. M.; JESUS, A. L. de. Non-relativistic scattering by a shield barrier and by an elliptical aperture. *Physica Scripta*, IOP Publishing, v. 97, n. 9, p. 095001, aug 2022. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1402-4896/ac7e7e>>. Citado na página 16.

TAYLOR, J. *Scattering Theory: The Quantum Theory of Nonrelativistic Collisions*. Dover Publications, 2012. (Dover Books on Engineering). ISBN 9780486142074. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=OJaXvuwZMLQC>>. Citado na página 14.

YUAN, Z. et al. Analytical solution for calculating vibrations from twin circular tunnels. *Soil Dynamics and Earthquake Engineering*, v. 117, p. 312–327, 2019. ISSN 0267-7261. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0267726118308984>>. Citado na página 14.

ZANETTI, F.; VICENTINI, E.; da Luz, M. Eigenstates and scattering solutions for billiard problems: A boundary wall approach. *Annals of Physics*, v. 323, n. 7, p. 1644–1676, 2008. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000349160800016X>>. Citado na página 15.

ZUBAREV, D. N.; MOROZOV, V.; ROPKE, G. *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes, Volume 1 (See 3527400834): Basic Concepts, Kinetic Theory.* [S.l.]: Wiley-VCH, 1996. v. 1. Citado na página 34.