



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ**  
**PRO-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL**  
**EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA**

**PEDRO HENRIQUE SALES GIROTTO**

**IMPLEMENTAÇÃO DE ALGORITMOS NA EQUAÇÃO INTEGRAL DO**  
**ESPALHAMENTO QUÂNTICO NÃO RELATIVÍSTICO**

**ILHÉUS-BA**  
**2019**

**PEDRO HENRIQUE SALES GIROTTO**

**IMPLEMENTAÇÃO DE ALGORITMOS NA  
EQUAÇÃO INTEGRAL DO ESPALHAMENTO  
QUÂNTICO NÃO RELATIVÍSTICO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Estadual de Santa Cruz, como parte das exigências para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.

Orientador: Prof. Dr. Jorge Henrique de Oliveira Sales

ILHÉUS-BA  
2019

G527

Giroto, Pedro Henrique Sales.

Implementação de algoritmos na equação integral do espalhamento quântico não relativístico / Pedro Henrique Sales Giroto. – Ilhéus, BA: UESC, 2019. 68f. : il.; anexos.

Orientador: Jorge Henrique de Oliveira

Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Santa Cruz. Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia  
Inclui referências e apêndices.

1. Fótons – Espalhamento. 2. Kernel, funções. 3. Equações integrais Fredholm. 4. Von Neumann, John, 1903-1957. 5. Wolfran Mathematics. I. Título.

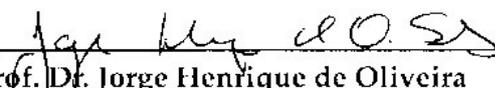
CDD 539.721

PEDRO HENRIQUE SALES GIROTTO

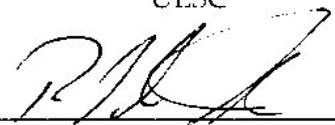
**IMPLEMENTAÇÃO DE ALGORITMOS NA  
EQUAÇÃO INTEGRAL DO ESPALHAMENTO  
QUÂNTICO NÃO RELATIVÍSTICO**

Ilhéus-BA, 05/08/2019

Comissão Examinadora

  
Prof. Dr. Jorge Henrique de Oliveira  
Sales  
UESC  
(Orientador)

  
Prof. Dr. Gildson Queiroz de Jesus  
UESC

  
Prof. Dr. Ronaldo Silva Thibes  
Universidade Estadual do Sudoeste da  
Bahia - UESB

Dedico essa dissertação aos meus pais.

## Agradecimentos

- Agradeço meus pais, Vanderlei e Alcina, pelo grande amor que sempre me deram, pela paciência que sempre tiveram e pela educação que me deram, os quais me fizeram ser a pessoa na qual sou hoje. Por serem uma fonte de inspiração para mim, ao qual me dá forças para seguir em frente, não importa o quão difícil seja o caminho.
- Agradeço meu orientador, Jorge Sales, por ter me apresentado essa oportunidade e pelos seus conselhos como professor.
- Agradeço a todos os professores pelo conhecimento passado e pela paciência com a turma.
- Agradeço a Ellen Pitombo por sempre estar disponível a ajudar
- Agradeço os colegas do mestrado pelas boas memórias e piadas.
- Agradeço minha tia Fernanda Vargas e meu primo Victor Sales pelo apoio e carinho.
- Agradeço os meus irmão, Afonso e Gustavo Giroto, pelo apoio e por acreditar em mim.
- Agradeço os meus grandes amigos de Belém.

*“Do or do not, there is no try”*

Mestre Yoda

# IMPLEMENTAÇÃO DE ALGORITMOS NA EQUAÇÃO INTEGRAL DO ESPALHAMENTO QUÂNTICO NÃO RELATIVÍSTICO

## Resumo

No espalhamento a baixa energia na Mecânica Quântica não relativística, usa-se a equação de Schödinger na forma integral. Na teoria do espalhamento quântico a autofunção de onda é dividida em duas partes, uma para a onda livre associada a partícula incidente a um centro espalhador, e a onda emergente que sai depois da partícula colidir com o centro espalhador. Com condições especiais e energia potencial definida, a solução da equação integral para a onda é obtida com uso da técnica conhecida como aproximação de Born. Neste trabalho apresenta-se duas técnicas alternativas para solução de equação integral para o potencial de Coulomb e Yukawa. Os métodos são vias Kernéis arbitrários e a série de Neumann. Os resultados, com a ajuda de códigos computacionais, mostram que as duas técnicas são boas comparadas com o método tradicional. A vantagem é que são soluções finitas.

**Palavras-chave:** Espalhamento Quântico. Fredholm. Neumann. Wolfram Mathematica.

# IMPLEMENTATION OF ALGORITHMS IN THE INTEGRAL EQUATION OF NON-RELATIVISTIC QUANTUM SCATTERING

## **Abstract**

In the low energy scattering in non-relativistic quantum mechanics, we use the Schrödinger equation in the integral form. In the theory of quantum scattering the wave autofunction is divided into two parts, one for the free wave associated with a particle incident to a scattering center, and the other for the emerging wave that leaves after the particle collides with the scattering center. With special conditions and potential energy defined, the solution of the integral equation for the wave is obtained using the technique known as the Born approximation. This paper presents two alternative techniques for solving the integral equation for the potential of Coulomb and Yukawa. The methods are arbitrary Kernels and the Neumann series. The results, with the help of computational codes, show that the two techniques are good compared to the traditional method. The advantage is that they are finite solutions.

**Keywords:** Quantum Scattering. Fredholm. Neumann. Wolfram Mathematica

## Lista de figuras

Figura 1 – Polos no caso $+i\epsilon$ . . . . .	6
Figura 2 – Representação da integral $e^{iq r-r' }$ . . . . .	6
Figura 3 – Representação da integral $e^{-iq r-r' }$ . . . . .	7
Figura 4 – Observador longe do alvo. . . . .	9
Figura 5 – No triângulo isósceles tem-se $\sin(\theta_e/2) = \frac{q}{2k}$ . . . . .	12
Figura 6 – Curva teórica de Born e os dados experimentais de Geiger-Marsden. . . . .	16
Figura 7 – Função <i>MatrizDn</i> . . . . .	25
Figura 8 – Função <i>MatrizDnx</i> do algoritmo do método kernéis arbitrários. . . . .	26
Figura 9 – Função <i>Determinantes</i> do algoritmo do método kernéis arbitrários. . . . .	27
Figura 10 – Função <i>Dn</i> do algoritmo do método kernéis arbitrários. . . . .	27
Figura 11 – Função <i>Dnx</i> do algoritmo do método kernéis arbitrários. . . . .	28
Figura 12 – Função <i>KernArbi</i> do algoritmo do método kernéis arbitrários. . . . .	29
Figura 13 – Primeira parte da implementação do método de Neumann. . . . .	30
Figura 14 – Segunda parte da implementação do método de Neumann. . . . .	30
Figura 15 – Terceira parte da implementação do método de Neumann. . . . .	31
Figura 16 – Plot 3D do espalhamento de Fredholm e Born . . . . .	37
Figura 17 – Espalhamento Fredholm e Born . . . . .	38
Figura 18 – Espalhamento de Fredholm em Yukawa e Born em Coulomb com variação em $\theta$ . . . . .	43
Figura 19 – Espalhamento de Born em Coulomb e espalhamentos de Fredholm em yukawa com $\mu$ iguais a 0,1; 0,01 e 0,001. . . . .	44
Figura 20 – Espalhamento de Neumann e Born no potencial de Coulomb com variação em $\theta$ . . . . .	47
Figura 21 – Espalhamento de Neumann de 1° ordem, 5° ordem e 9° ordem e espalhamento de Born no potencial de Coulomb com variação em $\theta$ . . . . .	48
Figura 22 – Espalhamento de Neumann em Yukawa e Born em Coulomb com variação em $\theta$ . . . . .	51
Figura 23 – Espalhamento de Neumann de 1°, 5° e 9° ordem em Yukawa e espal- lhamento de Born em Coulomb com variação em $\theta$ . . . . .	52
Figura 24 – Espalhamento de Born Em Coulomb e espalhamento de Neumann em Yukawa com $\mu$ igual a 0,1; 0,01 e 0,001. . . . .	52
Figura 25 – Comparação do espalhamento dos métodos de kernéis arbitrários e Neumann para o potencial de Coulomb. . . . .	53
Figura 26 – Comparação do espalhamento dos métodos de kernéis arbitrários e Neumann para o potencial de Yukawa. . . . .	54

Figura 27 – Erro absoluto utilizando como base a aproximação de Born no potencial de Coulomb. . . . .	55
Figura 28 – Erro absoluto utilizando como base a aproximação de Born no potencial de Yukawa. . . . .	56
Figura 29 – Comparação do tempo de processamento do método de kernéis arbitrários e do método de Neumann em Coulomb. . . . .	57
Figura 30 – Comparação do tempo de processamento do método de kernéis arbitrários e do método de Neumann em Yukawa. . . . .	57
Figura 31 – Efeito do termo $\Delta_{\kappa'}$ para o espalhamento de Born. . . . .	60
Figura 32 – Seção de choque. . . . .	65

## Lista de tabelas

Tabela 1 – Valores de entrada para kernéis arbitrários em Coulomb. . . . .	34
Tabela 2 – Valores numéricos Fredholm Coulomb. . . . .	38
Tabela 3 – Valores de entrada para kernéis arbitrários em Yukawa. . . . .	39
Tabela 4 – Valores numéricos Fredholm Yukawa. . . . .	43
Tabela 5 – Valores de entrada para Neumann em Coulomb. . . . .	44
Tabela 6 – Valores numéricos Neumann Coulomb. . . . .	47
Tabela 7 – Valores de entrada para Neumann em Yukawa. . . . .	48
Tabela 8 – Valores numéricos Neumanm Yukawa. . . . .	51
Tabela 9 – Comparação dos métodos potencial coulombiano. . . . .	53
Tabela 10 – Comparação dos métodos potencial Yukawa. . . . .	54
Tabela 11 – Erro Absoluto no potencial coulombiano. . . . .	55
Tabela 12 – Erro Absoluto no potencial Yukawa. . . . .	56
Tabela 13 – Gaussian Conversion Factors. "3" $\equiv$ 2.9979 . . . . .	68

# Sumário

<b>1 – INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>2 – BASE TEÓRICA</b> . . . . .	<b>3</b>
2.1 Teoria de Espalhamento Quântico . . . . .	3
2.2 Amplitude de Espalhamento . . . . .	8
2.3 Aproximação de Born . . . . .	11
2.4 Aproximação de Born: Potencial de Yukawa . . . . .	12
2.5 Condição de Validade da Aproximação de Born . . . . .	14
2.6 Experimento de Geiger-Marsden . . . . .	15
<b>3 – MÉTODOS PARA SOLUCIONAR EQUAÇÕES INTEGRAIS</b> . . . . .	<b>17</b>
3.1 Método Kernéis Arbitrários de Fredholm . . . . .	17
3.2 Série de Neumann . . . . .	22
<b>4 – IMPLEMENTAÇÃO DOS ALGORITMOS PARA CALCULAR EQUAÇÃO INTEGRAL</b> . . . . .	<b>25</b>
4.1 Implementação do Método de Kernéis Arbitrários . . . . .	25
4.2 Implementação do Método Série de Neumann . . . . .	29
<b>5 – RESULTADOS</b> . . . . .	<b>32</b>
5.1 Espalhamento Quântico Utilizando Método de Kernéis Arbitrários . . . . .	32
5.1.1 Potencial de Coulomb . . . . .	32
5.1.2 Potencial de Yukawa . . . . .	38
5.2 Espalhamento Quântico Utilizando Série de Neumann . . . . .	44
5.2.1 Potencial de Coulomb . . . . .	44
5.2.2 Potencial de Yukawa . . . . .	48
5.3 Comparação Entre os Métodos . . . . .	53
5.4 Convergência . . . . .	58
<b>6 – CONCLUSÃO</b> . . . . .	<b>61</b>
<b>Referências</b> . . . . .	<b>62</b>
<b>Apêndices</b>	<b>64</b>
<b>APÊNDICE A – Cálculo da Seção de Choque</b> . . . . .	<b>65</b>

<b>Anexos</b>	<b>67</b>
<b>ANEXO A – Unidade Gaussiana C.G.S</b> . . . . .	<b>68</b>

# 1 INTRODUÇÃO

A física nuclear estuda colisões em que um determinado núcleo é acelerado e lançado contra um núcleo alvo, em repouso no referencial do laboratório. A colisão é descrita em função vetor entre os centros de massa do projétil e do alvo,  $\mathbf{r}$ , e coordenadas intrínsecas dos núcleos, representadas genericamente por  $\xi$ . (CORTES, 2016)

A colisão se inicia com os núcleos no estado fundamental, representado por  $\varphi_\alpha$ , e após a colisão eles podem permanecer no estado  $\varphi_\alpha$  ou passar para um outro estado intrínseco,  $\varphi_{\alpha \neq 0}$ . A população final destes estados depende de vários fatores, como a energia de colisão, a natureza dos estados intrínsecos e a interação entre os participantes da colisão. A cada estado intrínseco,  $\varphi_\alpha$ , corresponde um estado do movimento relativo projétil-alvo,  $\psi_\alpha$ . Estes estados são rotulados pelo índice  $\alpha$ , que representa o conjunto de números quânticos necessários para a sua caracterização. Eles são chamados de canais. Os principais canais considerados em colisões nucleares são descritos abaixo.

- *Canal Elástico*: Corresponde ao estado intrínseco fundamental,  $\varphi_\alpha$ . Quando o estado final é o mesmo, temos um evento de espalhamento elástico.
- *Canais Inelásticos*: Correspondem aos estados excitados do projétil e/ou do alvo, em que estes mantêm suas identidades. Isto é, os números atômicos e de massa do projétil e do alvo não se alteram durante a colisão. Nestes processos, uma parte da energia do movimento relativo é transferida para os graus de liberdade internos do núcleos. Colisões que terminam nestes canais são chamadas de colisões inelásticas
- *Canais de Transferência*: são aqueles em que os parceiros na colisão trocam núcleos entre si. Desse modo, as composições finais do projétil e do alvo são diferentes das iniciais. Temos então reação de transferência.

Os estados finais em uma colisão tem que ser compatível com as simetrias do sistema. Assim grandezas como a energia total, a carga elétrica total do sistema, o número bariônico, o leptônicos, entre outros, devem ser conservados.

No espalhamento quântico, utiliza a equação de Schrödinger na forma integral, conhecida como equação de Lippmann-Schwinger. A equação integral ocorre em uma variedade de aplicações. O motivo de sua utilização é na facilidade que ela provém de provar resultados fundamentais na existência e na singularidade da solução.

Indicando uma função desconhecida pelo símbolo  $\Psi$ , equação integral linear envolve integrais com a seguinte estrutura:

$$\int_a^b K(x, t)\Psi(t)dt \quad (1)$$

$$\int_a^x K(x, t)\Psi(t)dt \quad (2)$$

o tipo de integral com um intervalo fixo (1) é chamada de equação integral de Fredholm, enquanto a integral que possui uma variável como limite superior (2) é chamada de equação integral de Volterra.

As equações integrais podem ser divididas entre primeira espécie e segunda espécie, onde, respectivamente, apresentam a seguinte estrutura:

$$f(x) = \int_a^{b|x} K(x, t)\Psi(t)dt \quad (3)$$

$$\Psi(x) = \phi(x) + \lambda \int_a^{b|x} K(x, t)\Psi(t)dt \quad (4)$$

sendo o limite superior  $b$  para Fredholm e o limite superior  $x$  para Volterra.

Sabendo das estruturas das equações integrais utilizadas no espalhamento, houve a motivação de aplicar métodos matemáticos para solucionar essas equações e estudar o quão próximo esses métodos estão em relação a técnica usual utilizada no espalhamento quântico e com ajuda do software *Wolfram Mathematica* para auxiliar nos cálculos.

Essa dissertação está dividido em seis capítulos. Após este capítulo introdutório segue o capítulo 2 onde é apresentada a base teórica do espalhamento quântico. O capítulo 3 apresenta os métodos matemáticos para solucionar equações integrais. O capítulo 4 mostra como foi feito a implementação dos métodos matemáticos em um algoritmo no software *Wolfram Mathematica*. O capítulo 5 mostra os resultados obtidos através do *Wolfram Mathematica* e comparamo-os com a técnica padrão. O capítulo 6 expõe a conclusão e propostas futuras.

## 2 BASE TEÓRICA

Esse capítulo faz uma revisão da teoria do espalhamento quântico, tendo como foco o desenvolvimento da equação de Lippmann-Schwinger na forma integral, o cálculo da amplitude de espalhamento e da seção de choque sendo utilizado a aproximação de Born e o potencial de Yukawa, e por fim, o experimento de Geiger-Marsden para validação da aproximação de Born.

### 2.1 Teoria de Espalhamento Quântico

Para estudar o problema de espalhamento de uma partícula por um potencial, utiliza-se a forma integral da Equação de Schrödinger, conhecida por Equação de Lippmann-Schwinger (SAKURAI; NAPOLITANO, 2017).

Para obter tal equação defini-se:

$$H = H_0 + V \quad (5)$$

onde  $H_0 = p^2/2m$  é a Hamiltoniana da partícula livre e  $V(\vec{r}')$  é o potencial espalhador.

Onde as soluções na ausência de  $V(\vec{r}')$ :

$$H_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (6)$$

sendo:

$$|\phi\rangle = |k'\rangle \rightarrow \langle r'|k'\rangle = \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (7)$$

$$\langle k'|k\rangle = \delta(k' - k) \quad (8)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \quad (9)$$

Quando  $V(\vec{r}') \neq 0$ , calcula-se a solução de:

$$(H_0 + V(\vec{r}')) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (10)$$

Para obter uma equação para  $|\Psi\rangle$  que tenha a condição de contorno embutida se inverte  $(E - H_0)$ . Para tanto, primeiro se escreve:

$$(E - H_0) |\Psi\rangle = V(\vec{r}') |\Psi\rangle \quad (11)$$

que quando invertida fornece:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V(\vec{r}') |\Psi\rangle \quad (12)$$

Porém se tem  $V(\vec{r}') = 0 \Rightarrow |\Psi\rangle = 0$ , por isso antes de inverter, precisa acrescentar a solução da partícula livre em  $|\Psi\rangle$ , isto é:

$$(E - H_0) (|\Psi\rangle - |\phi\rangle) = V(\vec{r}') |\Psi\rangle \quad (13)$$

isso vale, pois  $|\phi\rangle$  é solução de  $(E - H_0) |\phi\rangle = 0$ . Com isso, a inversão fornece:

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0} V(\vec{r}') |\Psi\rangle \quad (14)$$

Agora, quando  $V(\vec{r}') = 0$ , se tem  $|\Psi\rangle = |\phi\rangle$  e isso pode ser entendido como a condição de contorno do problema: na ausência de  $V(\vec{r}')$  a partícula é livre e é descrita por uma onda plana com momento linear  $\vec{p}' = \hbar \vec{k}'$ . Porém há um problema, como a energia  $E$  é a mesma, com e sem potencial, há um infinito devido ao zero no denominador. Para ser removido se faz  $E$  levemente complexo,  $E \rightarrow E \pm i\epsilon$  para  $\epsilon \in \Re$ . Assim a equação de Lippmann-Schwinger fica:

$$|\Psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V(\vec{r}') |\Psi^{(\pm)}\rangle \quad (15)$$

Obseva-se, a seguir, que a presença de  $\epsilon$ , além de remover o infinito, permite definir as condições assintóticas adequadas do problema de espalhamento.

Na representação das coordenadas a equação de Lippmann-Schwinger fica:

$$\langle r|\Psi\rangle = \langle r|\phi\rangle + \int d^3r' \left\langle r \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| r' \right\rangle \langle r'|V(\vec{r}')|\Psi\rangle \quad (16)$$

onde  $\langle r'|k'\rangle = e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} / (2\pi)^{3/2}$ .

O objetivo agora é obter a função de Green  $G$ :

$$G^{(\pm)}(r, r') = \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle r \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| r' \right\rangle \quad (17)$$

que pode ser reescrito como auxílio do operador unidade, como:

$$G^{(\pm)}(r, r') = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3k \int d^3k' \langle r|k \rangle \left\langle k \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| k' \right\rangle \langle k'|r' \rangle \quad (18)$$

Usando:

$$\left\langle k \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| k' \right\rangle = \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm i\epsilon} \langle k|k' \rangle = \frac{\delta(k - k')}{E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm i\epsilon} \quad (19)$$

pode ser escrito como:

$$G^{(\pm)}(r, r') = \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}' \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|}}{E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \pm i\epsilon} \quad (20)$$

Se  $E = \hbar^2 k^2/2m$  e  $k' \equiv q$ , obtêm-se:

$$G^{(\pm)}(r, r') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\vec{q} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|}}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} d^3q \quad (21)$$

Para fazer esta integral, escolhendo  $|r - r'|$  na direção  $\hat{z}$  e tomando  $d^3q = q^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi dq$ , e assim:

$$\begin{aligned} G^{(\pm)}(r, r') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty q^2 dq \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) \frac{i|\vec{q}| \cdot |\vec{r} - \vec{r}'| \cos \theta}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} \int_{-1}^1 d\zeta e^{iq|r-r'|\zeta} = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty dq \frac{q^2}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} \frac{e^{iq|r-r'|\zeta}}{iq|r-r'|} \Big|_{-1}^1 = \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{i|r-r'|} \int_0^\infty dq \frac{q}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon} \left( e^{iq|r-r'|} - e^{-iq|r-r'|} \right) \end{aligned} \quad (22)$$

O integrando é par, pois  $\frac{q}{k^2 - q^2 \pm i\epsilon}$  e  $(e^{iq|r-r'|} - e^{-iq|r-r'|})$  são ímpares em  $q$  e assim pode-se trocar  $\int_0^\infty$  por  $\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty}$  e com isso obter:

$$G^{(\pm)}(r, r') = -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|r-r'|} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{q}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon} \left( e^{+iq|r-r'|} - e^{-iq|r-r'|} \right) \quad (23)$$

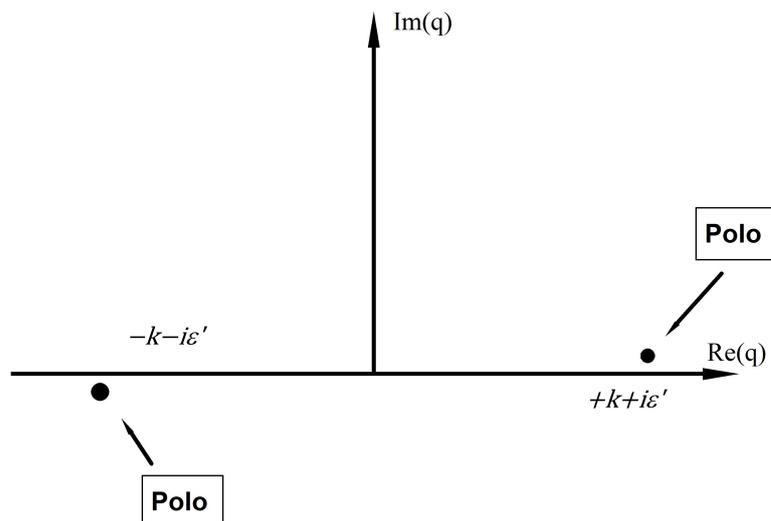
onde o integrando possui polos no  $q$ -plano complexo em:

$$q = \pm k \sqrt{1 \pm \frac{i\epsilon}{k^2}} \simeq \pm k \pm i\epsilon' \quad (24)$$

note que o  $i\epsilon$  original corresponde à  $\begin{cases} +k + i\epsilon' \\ -k - i\epsilon' \end{cases}$  e  $-i\epsilon$  corresponde à  $\begin{cases} +k - i\epsilon' \\ -k + i\epsilon' \end{cases}$ .

Os pontos na Figura (1) representam os polos no caso  $+i\epsilon$ :

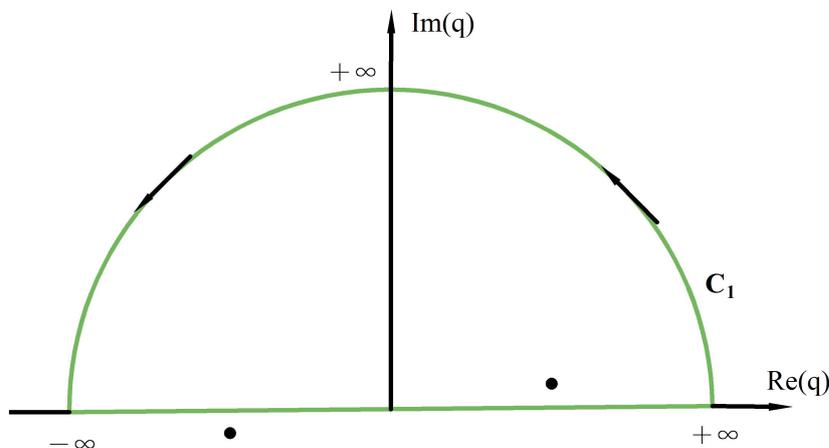
Figura 1 – Polos no caso  $+i\epsilon$ .



Fonte: autor

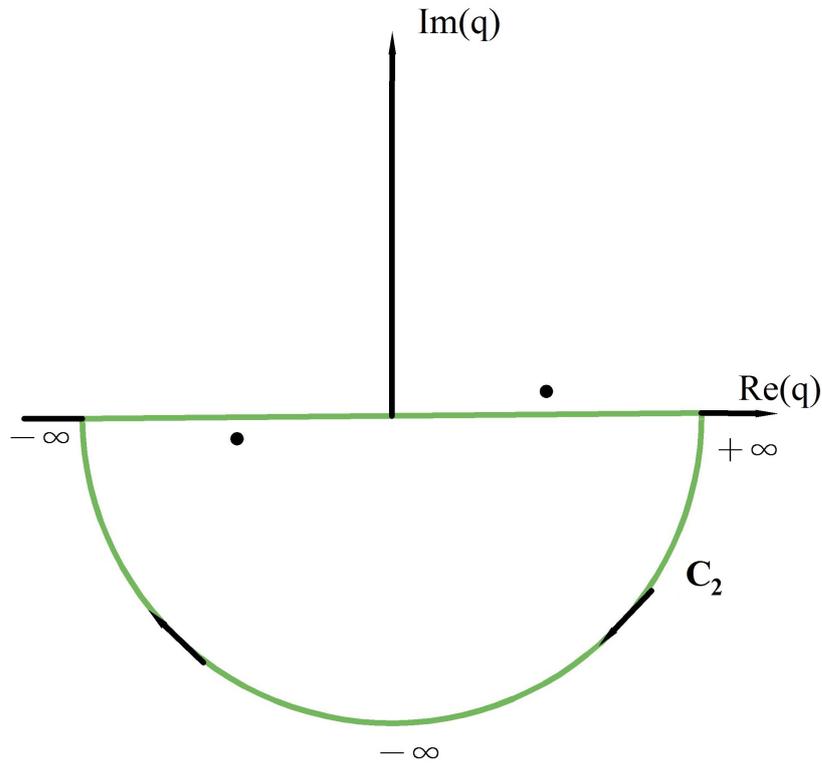
A integral  $e^{+iq|r-r'|} = e^{+i\text{Re}(q)|r-r'|}e^{-\text{Im}(q)|r-r'|}$  deve ser fechada por cima, Figura (2), pois a exponencial com  $\text{Im}(q)$  garante contribuição zero e isso permite fechar o circuito e obter a mesma integral que antes. Argumento semelhante sugere que  $e^{-iq|r-r'|} = e^{-i\text{Re}(q)|r-r'|}e^{+\text{Im}(q)|r-r'|}$  deve ser fechado por baixo, Figura (3). O fator  $\frac{q}{q^2 - k^2 \mp i\epsilon}$  fornece integrando zero para  $\text{Re}(q) = \pm\infty$ .

Figura 2 – Representação da integral  $e^{iq|r-r'|}$ .



Fonte: autor

Figura 3 – Representação da integral  $e^{-iq|r-r'|}$ .



Fonte: autor

Assim, se obtém:

$$\begin{aligned}
 G^{(+)}(r, r') &= -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|r-r'|} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} \left( e^{+iq|r-r'|} - e^{-iq|r-r'|} \right) = \\
 &= -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|r-r'|} \left[ \oint_{c_1} dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{+iq|r-r'|} - \oint_{c_2} dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{-iq|r-r'|} \right]
 \end{aligned} \tag{25}$$

Para aplicar o teorema de Cauchy (ARFKEN; WEBER, 2007):

$$\oint \frac{f(z)}{z - z_i} dz = 2\pi i f(z_i) \tag{26}$$

onde  $z_i$  é um polo no plano complexo e a integração fechada (que circula  $z_i$ ) corre no sentido anti-horário do circuito, é necessário fazer uma modificação na expressão de  $G$ .

Usando:

$$\frac{1}{q^2 - k^2} = \frac{1}{(q - k)(q + k)} = \left( \frac{1}{q - k} + \frac{1}{q + k} \right) \frac{1}{2q} \tag{27}$$

para escrever:

$$\begin{aligned}
G^{(+)}(r, r') &= -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|r-r'|} \oint_{c_1} dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{+iq|r-r'|} + \\
&\quad + \frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|r-r'|} \oint_{c_2} dq \frac{q}{q^2 - k^2 - i\epsilon} e^{-iq|r-r'|} = \\
&= -\frac{1}{16\pi^2} \frac{1}{i|r-r'|} \left( \oint_{c_1} dq \frac{e^{+iq|r-r'|}}{q-k} + \oint_{c_1} dq \frac{e^{+iq|r-r'|}}{q+k} \right) + \\
&\quad + \frac{1}{16\pi^2} \frac{1}{i|r-r'|} \left( \oint_{c_2} dq \frac{e^{-iq|r-r'|}}{q-k} + \oint_{c_2} dq \frac{e^{-iq|r-r'|}}{q+k} \right)
\end{aligned} \tag{28}$$

assim, a função de Green  $G$  para o caso  $+i\epsilon$  fica:

$$G^{(+)}(r, r') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{+ik|r-r'|}}{|r-r'|} \tag{29}$$

Se repetir todo o procedimento para  $-i\epsilon$  se obtém:

$$G^{(-)}(r, r') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ik|r-r'|}}{|r-r'|} \tag{30}$$

Assim, a equação de Lippman-Schwinger pode ser escrita por:

$$\langle r|\Psi^{(\pm)}\rangle = \langle r|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|r-r'|}}{|r-r'|} \langle r'|V(\vec{r}')|\Psi^{(\pm)}\rangle \tag{31}$$

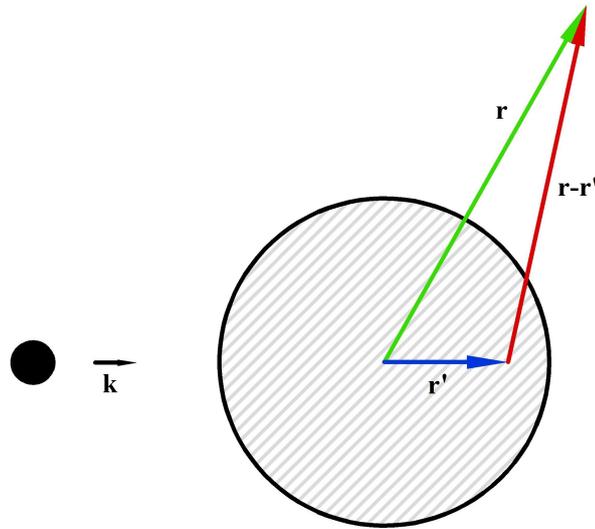
Se  $\langle r|V(\vec{r}')|r'\rangle = V(r')\delta^{(3)}(r-r')$ , para potencial local, tem-se:

$$\langle r|\Psi^{(\pm)}\rangle = \langle r|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3r' \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|r-r'|}}{|r-r'|} V(r') \langle r'|\Psi^{(\pm)}\rangle \tag{32}$$

## 2.2 Amplitude de Espalhamento

Suponha um observador longe do alvo. Observando como seria a função de onda em  $r$ :

Figura 4 – Observador longe do alvo.



Fonte: autor

A região hachurada da Figura (4) é a região onde  $V(r') \neq 0$ . Note que a equação de Lippmann-Schwinger (32) informa que só essa região interessa na integração. Se o observador estiver longe o suficiente, tem-se  $|r| \gg |r'|$  e pode expandir  $|\vec{r} - \vec{r}'|$  (GRIFFITHS, 2011):

$$\begin{aligned} |\vec{r} - \vec{r}'| &= \sqrt{(\vec{r} - \vec{r}')^2} = \sqrt{r^2 - 2\vec{r} \cdot \vec{r}' + r'^2} = \\ &= r \sqrt{1 - 2\hat{r} \cdot \left(\frac{\vec{r}'}{r}\right) + \left(\frac{r'}{r}\right)^2} \approx r \left[1 - \hat{r} \cdot \left(\frac{\vec{r}'}{r}\right)\right] \end{aligned} \quad (33)$$

Usando:

$$e^{\pm ik|\vec{r} - \vec{r}'|} \approx e^{\pm ikr} e^{\mp ikr \cdot \hat{r} \cdot \vec{r}'} \quad (34)$$

e no denominador:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r - r'} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{r \left(1 - \frac{r'}{r}\right)} \approx \frac{1}{r} \left(1 + \frac{r'}{r}\right) \approx \frac{1}{r} \quad (35)$$

Definindo  $\vec{k}' = k\hat{r}$ , a equação de Lippmann-Schwinger fica:

$$\begin{aligned}
\langle r|\Psi^{(+)}\rangle &\stackrel{r\rightarrow\infty}{\cong} \langle r|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{+ikr}}{4\pi r} (2\pi)^{3/2} \int d^3r' \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(r') \langle r'|\Psi^{(+)}\rangle = \\
&= \frac{e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{(2\pi)^{3/2}} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{+ikr}}{4\pi r} (2\pi)^{3/2} \int d^3r' \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(r') \langle r'|\Psi^{(+)}\rangle = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{+ikr}}{4\pi r} (2\pi)^3 \int d^3r' \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(r') \langle r'|\Psi^{(+)}\rangle \right] = \quad (36) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{e^{+ikr}}{r} \left( -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(r') \langle r'|\Psi^{(+)}\rangle \right) \right] = \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(k', k) \frac{e^{+ikr}}{r} \right]
\end{aligned}$$

onde  $f(k', k) \equiv -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int d^3r' \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(r') \langle r'|\Psi^{(+)}\rangle$  é a amplitude de espalhamento. Outra representação pode ser feita no espaço do momento com ajuda do operador unitário  $\int d^3p |p\rangle \langle p| = 1$ , resultando:

$$f(k', k) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle k'|V(r')|\Psi_k^{(+)}\rangle \quad (37)$$

Note que  $|\phi_{k'}\rangle = |k'\rangle$  (onda plana na direção  $k'$ , que "leva" a partícula até o observador).

A amplitude de espalhamento pode ser escrita de outras formas. Para ver isso, considere a equação de Lippmann-Schwinger na sua forma geral:

$$|\Psi_k^{(\pm)}\rangle = |k\rangle + G^{(\pm)}V|\Psi_k^{(\pm)}\rangle \quad (38)$$

onde  $G^{(\pm)}$  é a função de Green dado pelas equações (29) e (30).

Multiplicando a equação para  $|\Psi_k^{(-)}\rangle$  por  $V(\vec{r}')$  e tomando o adjunto Hermitiano:

$$\begin{aligned}
\left( V|\Psi_k^{(-)}\rangle \right)^\dagger &= \left( V|k'\rangle + VG^{(-)}V|\Psi_k^{(-)}\rangle \right)^\dagger \\
\langle \Psi_k^{(-)}|V &= \langle k'|V + \langle \Psi_k^{(-)}|VG^{(+)}V \\
\langle k'|V &= \langle \Psi_k^{(-)}|(V - VG^{(+)}V)
\end{aligned} \quad (39)$$

isto permite reescrever a amplitude de espalhamento:

$$f(k', k) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle k'|V|\Psi_k^{(+)}\rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \Psi_k^{(-)}|(V - VG^{(+)}V)|\Psi_k^{(+)}\rangle \quad (40)$$

mas  $(V - VG^+V)|\Psi_k^{(+)}\rangle = V|k\rangle$ , no que resulta em:

$$f(k', k) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \Psi_{k'}^{(-)} | V | k \rangle \quad (41)$$

Algumas observações importantes:

- Se  $V(r') = 0 \Rightarrow f(k', k) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle k' | V | \Psi_k^{(+)} \rangle = 0$ . Dependendo do ângulo do observador distante,  $f$  pode dar um resultado diferente. Trata-se da amplitude de probabilidade da partícula entrar na direção  $\vec{k}$  e, devido ao potencial, sair na direção  $\vec{k}'$ , com  $|\vec{k}'| = |\vec{k}|$ .
- A solução assintótica  $\langle r | \Psi^{(+)} \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left( e^{+i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(k', k) \frac{e^{+ikr}}{r} \right)$  é solução da equação de Schrödinger na região onde a partícula é livre,  $V(r') = 0$ .
- A onda livre deve estar associada a tempos "infinitamente" negativos (antes da colisão) e "infinitamente" positivos (depois da colisão). A onda esférica só para tempos "infinitamente" positivos (depois da colisão).

## 2.3 Aproximação de Born

Se o espalhamento é fraco:

$$|\Psi_k^{(+)}\rangle \approx |k\rangle \rightarrow \langle r' | \Psi_k^{(+)} \rangle \approx \langle r' | k \rangle = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} \quad (42)$$

nestas condições, obtém-se a amplitude de Born em primeira ordem ([HECHT, 2000](#)):

$$f(k', k) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle k' | V | k \rangle = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 r' V(r') e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}'} \quad (43)$$

onde  $\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 r' V(r') e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}'}$  é a transformada de Fourier do potencial calculada em  $q = \vec{k} - \vec{k}'$ .

Se o potencial for esfericamente simétrico, fica mais simples calcular a integral em coordenadas esféricas. Antes, escolhendo ângulo de espalhamento  $\theta_e$  da seguinte forma:

$$|\vec{k} - \vec{k}'| \equiv q = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{k}'} = k\sqrt{2(1 - \cos \theta_e)} \quad (44)$$

lembrando da relação trigonométrica.

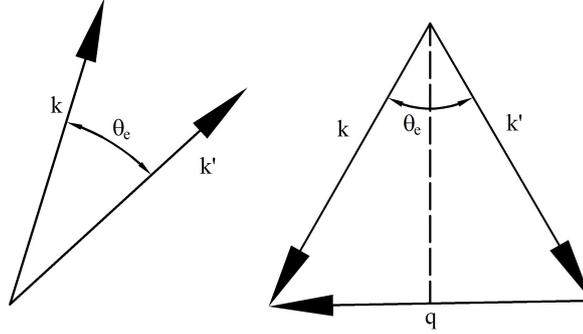
$$\cos 2\theta_e = \cos^2 \theta_e - \sin^2(\theta_e) = 1 - 2\sin^2(\theta_e) \quad (45)$$

assim sendo:

$$\cos \theta_e = 1 - 2\text{sen}^2(\theta_e/2) \rightarrow q = k\sqrt{2[1 - 1 + 2\text{sen}^2(\theta_e/2)]} = 2k\text{sen}(\theta_e/2) \quad (46)$$

sendo essa relação representada na Figura (5).

Figura 5 – No triângulo isósceles tem-se  $\text{sen}(\theta_e/2) = \frac{q}{2k}$ .



Fonte: autor

Com  $q$  na direção  $\hat{z}$ :

$$\begin{aligned} f(k', k) &= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 r' V(r') e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}'} = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \iiint \text{sen}(\theta) dr' d\theta d\varphi r'^2 e^{iq \cdot \vec{r}'} V(r') = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \iiint \text{sen}(\theta) dr' d\theta d\varphi r'^2 e^{iqr' \cos \theta} V(r') = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 V(r') 2\pi \int_0^\pi \text{sen}(\theta) e^{iqr' \cos \theta} d\theta = \\ &= -\frac{1}{2} \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 V(r') \left[ \frac{e^{iqr' x}}{iqr'} \Big|_{-1}^{+1} \right] = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' V(r') \frac{e^{iqr'} - e^{-iqr'}}{2i} = \\ &= -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' V(r') \text{sen}(qr') \\ &= -\frac{2m}{2k\hbar^2 \text{sen}(\theta_e/2)} \int_0^\infty dr' r' V(r') \text{sen}(2kr' \text{sen}(\theta_e/2)) \end{aligned} \quad (47)$$

onde  $f(k, k')$  passa a depender do ângulo de espalhamento  $\theta_e$ , então  $f(k, k') \equiv f(\theta_e)$ .

## 2.4 Aproximação de Born: Potencial de Yukawa

[Yukawa \(1935\)](#) propôs a existência, em associação com esse sistema, de um campo que descreve a interação e que o mecanismo pelo qual a interação ocorre envolve

a troca de uma partícula desse campo entre os dois núcleos. Em tal interação, o momento carregado pela partícula é transferido de um núcleo para o outro, sendo esta a origem da força que age entre os núcleos.

Ao propor de que este seria o mecanismo gerador das forças nucleares, Yukawa guiou-se pela analogia com a interação coulombiana entre um sistema de duas partículas carregadas. De acordo com a altamente bem-sucedida e desenvolvida teoria da eletrodinâmica quântica, associado a esse sistema existe um campo eletromagnético descrevendo a interação, que ocorre como decorrência da troca de um quantum desse campo entre as duas partículas carregadas. Os quanta do campo eletromagnético são partículas de massa de repouso nula.

A eletrodinâmica quântica mostra que o longo alcance da interação coulombiana é o resultado da massa de repouso nula dos quanta trocados na interação e que esse alcance não seria longo se a massa dos quanta fosse diferente de zero. Yukawa adaptou a teoria ao caso de um sistema de núcleos, interagindo por meio de uma força de curto alcance, supondo que as partículas do campo que descreve a interação têm massa não-zero. Essas partículas são chamados de mésons e o campo é chamado de campo mesônico.

O potencial de Yukawa (MAIOROVA et al., 2018) é dado por:

$$V(r') = \frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'} \quad (48)$$

onde o fator  $\frac{1}{\mu}$  pode ser visto como alcance do potencial, pois quando  $r \gg \frac{1}{\mu} \Rightarrow V(r') \rightarrow 0$ .

Usando  $\text{sen}(qr') = \text{Im}(e^{iqr'})$  para facilitar a realização da integral, ou seja:

$$f(k', k) = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' V(r') \text{sen}(qr') = -\frac{2m}{q\hbar^2} \int_0^\infty dr' r' \frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'} \text{Im}(e^{iqr'}) \quad (49)$$

Assim,

$$\begin{aligned} f(\theta_e) &= -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \text{Im} \int_0^\infty dr' e^{(-\mu+iq)r'} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \text{Im} \left. \frac{e^{(-\mu+iq)r'}}{-\mu+iq} \right|_0^\infty = \\ &= -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \text{Im} \frac{1}{\mu-iq} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \text{Im} \frac{\mu+iq}{\mu^2+q^2} = -\frac{2mV_0}{q\mu\hbar^2} \frac{q}{\mu^2+q^2} \end{aligned} \quad (50)$$

ou seja:

$$f(\theta_e) = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{\mu^2+q^2} \quad (51)$$

lembrando que  $q = 2k\text{sen}(\theta_e/2)$  a amplitude fica:

$$f(\theta_e) = -\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2} \frac{1}{\mu^2 + 4k^2\text{sen}^2(\theta_e/2)} \quad (52)$$

e isso fornece a seção de choque diferencial:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{[\mu^2 + 4k^2\text{sen}^2(\theta_e/2)]^2} \quad (53)$$

Note que se  $\mu \rightarrow 0$ , mantendo  $\frac{V_0}{\mu}$  constante e igual a  $\frac{V_0}{\mu} = -ZZ'e^2$ , o potencial de Yukawa fica:

$$\lim_{\mu \rightarrow 0} V_0 \frac{e^{-\mu r'}}{\mu r'} = -\frac{ZZ'e^2}{r'} \quad (54)$$

esse é o potencial Coulombiano de uma partícula de carga  $Z'e$ , sendo espalhada por uma com carga  $Ze$ . Com isso a seção de choque fica (com  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{16} \left(\frac{ZZ'e^2}{E}\right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4(\theta_e/2)} \quad (55)$$

este é resultado clássico do espalhamento de Rutherford ([ALTLAND, 2005](#)).

## 2.5 Condição de Validade da Aproximação de Born

Considere o potencial de Yukawa (48), Para  $k$  pequeno: tome  $kr' \ll 1$  e  $k.r' \ll 1$ . Isso é possível se  $\frac{1}{\mu} \div \frac{\lambda}{2\pi} \ll 1$ , com  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , ou seja  $k \ll \mu$ , pois se  $\mu$  for grande,  $kr'$  e  $k.r'$  são pequenos na região do potencial. Com isso, se escrever a condição de validade por:

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int d^3x' \frac{1}{r'} \frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'} \right| \ll 1 \quad (56)$$

Ou ainda:

$$\left| \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty r'^2 \frac{1}{r'} \frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'} \right| \ll 1 \Rightarrow \left| \frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu} \right| \left| \int_0^\infty e^{-\mu r'} \right| \ll 1 \quad (57)$$

e assim, finalmente obter, para energias baixas, a condição de validade do primeiro termo de Born para o potencial Yukawa:

$$\left| \frac{2mV_0}{\hbar^2 \mu^2} \right| \ll 1 \quad (58)$$

Para entender o significado desta expressão, estudar-se em que condições o potencial  $\frac{V_0 e^{-\mu r'}}{\mu r'}$  fornece um estado ligado. Que tal  $\frac{1}{\mu} \div \frac{\lambda}{2\pi} > 1$ , isto é,  $\mu\lambda < 2\pi$  (pelo menos uma oscilada dentro do alcance do potencial)  $\therefore \frac{2\pi}{\lambda} > \mu$ . Ou seja, para o potencial de Yukawa ter um estado ligado, é preciso que  $k > \mu$ . Isto implica em  $k^2 > \mu^2 \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > \frac{\hbar^2 \mu^2}{2m}$ . A energia  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V \approx 0$  (quase ligado) e  $\therefore$  no alcance de  $V \approx V_0 e^{-1}$ , tem-se  $-\frac{V_0}{e} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > \frac{\hbar^2 \mu^2}{2m}$ , ou seja,  $\frac{2m}{\hbar^2 \mu^2} |V_0| > e \sim 2,7$  (se o potencial permite um estado ligado, o primeiro termo de Born não funciona).

Para  $k$  grande, aproximação de Born para o potencial de Yukawa funciona se:

$$\frac{2m|V_0|}{\hbar^2 \mu k} \ln \frac{k}{\mu} \ll 1 \quad (59)$$

## 2.6 Experimento de Geiger-Marsden

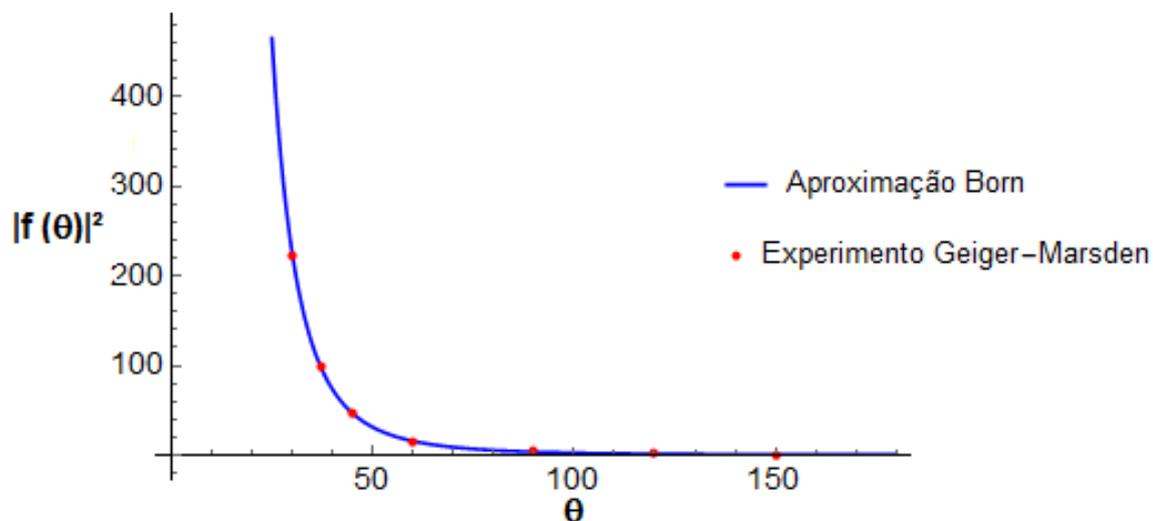
O experimento de [Geiger e Marsden \(1913\)](#) consistiu em disparar partículas alfa, geradas pelo decaimento radioativo do radônio, em direção a uma folha de ouro muito fina. O experimento tinha como objetivo investigar a estrutura do átomo através do desvio que a partícula alfa sofria ao colidir com a folha de ouro. Os resultados demonstraram pela primeira vez a existência do núcleo atômico.

Os dados experimentais de Geiger-Marsden serão utilizados para a validação da aproximação de Born. Para o espalhamento teórico reproduzir os dados experimentais, é utilizado a equação (55) na unidade C.G.S., onde  $Z$  é o número atômico do ouro ( $Z = 79$ ),  $Z'$  é o número atômico da partícula alfa ( $Z' = 2$ ),  $e$  é a carga do próton ( $e = 4,8032 \times 10^{-10}$ ) e a energia sendo igual a 5,69 MeV ( $5,69 \times 1,602 \times 10^{-6}$ ).

$$|f(\theta_e)|^2 = \frac{1}{16} \left( \frac{ZZ'e^2}{E} \right)^2 \frac{1}{\text{sen}^4(\theta_e/2)} \quad (60)$$

A Figura (6) é o plot do espalhamento teórico de Born e os dados experimentais de Geiger.

Figura 6 – Curva teórica de Born e os dados experimentais de Geiger-Marsden.



Fonte: autor

Observa-se que a curva teórica da aproximação de Born, em azul, está de acordo com os dados experimentais, em vermelho, assim validando a utilização da aproximação de Born e com isso será utilizado como parâmetro de validação para os resultados presentes no capítulo 5.

### 3 MÉTODOS PARA SOLUCIONAR EQUAÇÕES INTEGRAIS

Esse capítulo é uma revisão de dois métodos utilizados para resolver equações integrais de Fredholm de segunda espécie, definida no capítulo 1, o método de kernéis arbitrários de Fredholm e a série de Neumann.

#### 3.1 Método Kernéis Arbitrários de Fredholm

O método de kernéis arbitrários foi desenvolvido por [Fredholm \(1900\)](#), onde ele fez a substituição do sinal de integral da equação integral por um somatório correspondente de Riemann.

$$\Psi(x) = \phi(x) + \lambda \int_a^b K(x, t)\Psi(t)dt \quad (61)$$

onde  $K(x, t)$  e  $\phi(x)$  são funções conhecidas para  $a \leq x \leq b$  e  $a \leq t \leq b$  e  $\lambda$  é uma constante.

Desse modo, substituindo a integral de (61) por um somatório:

$$\Psi(x) = \phi(x) + \lambda \sum_{q=1}^n K(x, t_q)\Psi_q \Delta t \quad (62)$$

onde  $\Delta t$  é o valor das distâncias, sendo calculada pela expressão  $\frac{b-a}{n} = \Delta t$  para  $n \in \mathbb{N}$  ([GIROTTI; SALES, 2018](#)).

Substituindo na equação acima a variável  $x$  por  $x_p$ , obtém-se um sistema de  $n$  equações lineares do primeiro grau das funções desconhecidas  $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ . Portanto:

$$\Psi_p = \phi_p + \lambda \sum_{q=1}^n K_{pq}\Psi_q \Delta t \quad (63)$$

para se obter a solução do sistema dado pela equação (63) é posto:

$$\Psi_p = \sum_{q=1}^n \delta_{pq}\Psi_q \quad (64)$$

que, levada na equação (63),

$$\sum_{q=1}^n [\delta_{pq} - \lambda K_{pq}\Delta t] \Psi_q = \phi_p \quad (65)$$

que é um sistema de equações para  $p = 1, 2, \dots, n$  e  $q = 1, 2, \dots, n$ .

Usando a regra de Cramer (HOFFMAN; KUNZE, 1971) para resolver esse sistema:

$$\Psi_q = \frac{\Delta_{nq}(\lambda)}{\Delta_n(\lambda)} \quad (66)$$

onde  $\Delta_n(\lambda)$  é o determinante dos coeficientes das incógnitas e  $\Delta_{nq}(\lambda)$  é o determinante obtido a partir desde, no qual se substitui a coluna dos coeficientes de  $\Psi_q$  pela coluna dos termos independentes  $\phi_p$ .

O determinante  $\Delta_n(\lambda)$  é dado por:

$$\Delta_n(\lambda) = \begin{bmatrix} 1 - \lambda K_{11}\Delta t & -\lambda K_{12}\Delta t & \dots & -\lambda K_{1n}\Delta t \\ -\lambda K_{21}\Delta t & 1 - \lambda K_{22}\Delta t & \dots & -\lambda K_{2n}\Delta t \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\lambda K_{n1}\Delta t & -\lambda K_{n2}\Delta t & \dots & 1 - \lambda K_{nn}\Delta t \end{bmatrix} \quad (67)$$

onde  $k_{ij}$  corresponde a  $i$ -linha ( $i = 1, 2, \dots, n$ ) e  $j$ -coluna ( $j = 1, 2, \dots, n$ ). Na diagonal principal,  $\delta_{pq} = 1$  para  $p = q$  e  $\delta_{pq} = 0$  para  $p \neq q$ .

Aplicando-se à expressão (67) a fórmula de decomposição de um determinante (SMIRNOV, 1975):

$$\begin{aligned} \Delta_n(\lambda) = & 1 - \frac{\lambda}{1!} \sum_{p_1=1}^n K_{p_1 p_1} \Delta t + \frac{\lambda^2}{2!} \sum_{p_1=1}^n \sum_{p_2=1}^n \begin{bmatrix} K_{p_1 p_1} & K_{p_1 p_2} \\ K_{p_2 p_1} & k_{p_2 p_2} \end{bmatrix} (\Delta t)^2 + \dots \\ & + (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} \sum_{p_1=1}^n \sum_{p_2=1}^n \dots \sum_{p_n=1}^n \begin{bmatrix} K_{p_1 p_1} & K_{p_1 p_2} & \dots & K_{p_1 p_n} \\ K_{p_2 p_1} & K_{p_2 p_2} & \dots & K_{p_2 p_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{p_n p_1} & K_{p_n p_2} & \dots & K_{p_n p_n} \end{bmatrix} (\Delta t)^n \end{aligned} \quad (68)$$

os somatórios de Riemann dessa equação podem ser substituídos por integrais no limite  $n \rightarrow \infty$ . Então, tem-se para o segundo termo e para o terceiro termo, respectivamente:

$$\sum_{p_1=1}^n K_{p_1 p_1} \Delta t = \sum_{t=1}^n K(t_1, t_1) \Delta t = \int_a^b K(t_1, t_1) dt \quad (69)$$

$$\sum_{p_1=1}^n \sum_{p_2=1}^n \begin{bmatrix} K_{p_1 p_1} & K_{p_1 p_2} \\ K_{p_2 p_1} & K_{p_2 p_2} \end{bmatrix} (\Delta t)^2 = \int_a^b \int_a^b \begin{bmatrix} K(t_1, t_1) & K(t_1, t_2) \\ K(t_2, t_1) & K(t_2, t_2) \end{bmatrix} dt_1 dt_2 \quad (70)$$

e assim sucessivamente. Desse modo, a equação (68) fica:

$$\Delta_n(\lambda) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} d_n \quad (71)$$

onde:

$$d_n = \int_a^b \int_a^b \dots \int_a^b \begin{bmatrix} K(t_1, t_1) & K(t_1, t_2) & \dots & K(t_1, t_n) \\ K(t_2, t_1) & K(t_2, t_2) & \dots & K(t_2, t_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K(t_n, t_1) & K(t_n, t_2) & \dots & K(t_n, t_n) \end{bmatrix} dt_1 dt_2 \dots dt_n \quad (72)$$

O valor do determinante  $\Delta_{nq}(\lambda)$  da equação (66) foi obtido por Fredholm, com um cálculo que envolve muita manipulação algébrica, razão pela qual é apresentado apenas o resultado (KRASNOV, 1981). Assim:

$$\Delta_{nq}(\lambda) \equiv \Delta(x, t; \lambda) = K(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} d_n(x, t) \quad (73)$$

onde:

$$d_n(x, t) = \int_a^b \int_a^b \dots \int_a^b \begin{bmatrix} K(x, t) & K(x, t_1) & K(x, t_2) & \dots & K(x, t_n) \\ K(t_1, t) & K(t_1, t_1) & K(t_1, t_2) & \dots & K(t_1, t_n) \\ K(t_2, t) & K(t_2, t_1) & K(t_2, t_2) & \dots & K(t_2, t_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K(t_n, t) & K(t_n, t_1) & K(t_n, t_2) & \dots & K(t_n, t_n) \end{bmatrix} dt_1 dt_2 \dots dt_n \quad (74)$$

Desse modo, segundo Fredholm, a solução da equação (61) é dada por:

$$\Psi(x) = \phi(x) + \lambda \int_a^b \frac{\Delta(x, t; \lambda)}{\Delta(\lambda)} \phi(t) dt \quad (75)$$

onde  $\Delta(x, t; \lambda)$  e  $\Delta(\lambda)$  são dados, respectivamente, pelas equações (71, 72) e (73, 74)

Para ajudar a compreender o método de kernels arbitrários, é resolvido a seguinte equação integral:

$$u(x) = e^{-x} + \lambda \int_0^1 x e^t u(t) dt \quad (76)$$

onde:

$$K(x, t) = x e^t \quad f(x) = e^{-x} \quad (77)$$

Calculando os determinantes  $d_n$  (72):

Para o determinante  $d_1$ :

$$d_1 = \int_0^1 K(t_1, t_1) dt_1 = \int_0^1 t_1 e^{t_1} dt_1 = 1 \quad (78)$$

Para o determinante  $d_2$ :

$$\begin{aligned} d_2 &= \iint_0^1 \begin{vmatrix} K(t_1, t_1) & K(t_1, t_2) \\ K(t_2, t_1) & K(t_2, t_2) \end{vmatrix} dt_1 dt_2 = \begin{vmatrix} t_1 e^{t_1} & t_1 e^{t_2} \\ t_2 e^{t_1} & t_2 e^{t_2} \end{vmatrix} dt_1 dt_2 \\ &= \iint_0^1 [t_1 t_2 e^{t_1+t_2} - t_1 t_2 e^{t_1+t_2}] dt_1 dt_2 = 0 \end{aligned} \quad (79)$$

Para o determinante  $d_3$ :

$$\begin{aligned} d_3 &= \iiint_0^1 \begin{vmatrix} K(t_1, t_1) & K(t_1, t_2) & K(t_1, t_3) \\ K(t_2, t_1) & K(t_2, t_2) & K(t_2, t_3) \\ K(t_3, t_1) & K(t_3, t_2) & K(t_3, t_3) \end{vmatrix} dt_1 dt_2 dt_3 \\ &= \iiint_0^1 \begin{vmatrix} t_1 e^{t_1} & t_1 e^{t_2} & t_1 e^{t_3} \\ t_2 e^{t_1} & t_2 e^{t_2} & t_2 e^{t_3} \\ t_3 e^{t_1} & t_3 e^{t_2} & t_3 e^{t_3} \end{vmatrix} dt_1 dt_2 dt_3 \\ &= \iiint_0^1 [3t_1 t_2 t_3 e^{t_1+t_2+t_3} - 3t_1 t_2 t_3 e^{t_1+t_2+t_3}] dt_1 dt_2 dt_3 = 0 \end{aligned} \quad (80)$$

Os valores para os determinantes restantes:

$$d_4 = d_5 = d_6 = \dots = d_n = 0 \quad (81)$$

o motivo dos determinantes serem iguais a zero é por que o kernel  $K(x, t)$  é do tipo separável:

$$K(x, t) = X(x)T(t) \quad (82)$$

logo o determinante da matriz quadrada de ordem 2 e 3 são iguais a zero.

$$\begin{vmatrix} X(a)T(a) & X(a)T(b) \\ X(b)T(a) & X(b)T(b) \end{vmatrix} = [X(a)X(b)T(a)T(b) - X(a)X(b)T(a)T(b)] = 0 \quad (83)$$

$$\begin{aligned} &\begin{vmatrix} X(a)T(a) & X(a)T(b) & X(a)T(c) \\ X(b)T(a) & X(b)T(b) & X(b)T(c) \\ X(c)T(a) & X(c)T(b) & X(c)T(c) \end{vmatrix} = \\ &= [3X(a)X(b)X(c)T(a)T(b)T(c) - 3X(a)X(b)X(c)T(a)T(b)T(c)] = 0 \end{aligned} \quad (84)$$

Para matriz quadrada de ordem 4 ou superior, utiliza-se o teorema de Laplace (CALLIOLI et al., 1990):

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \dots & a_{n-1,n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} \quad (85)$$

$$\det(A) = \sum_{j=1}^n a_{ij}(-1)^{i+j} \cdot \det(A_{-i,-j})$$

sendo  $A_{-i,-j}$  a matriz  $A$  removendo a  $i$ -ésima linha e  $j$ -ésima coluna.

Então pode-se pegar uma matriz quadrada de ordem  $n$  e reduzir até uma matriz quadrada de ordem 2 ou 3 e como foi visto nas equações (83) e (84) que a determinante é igual a zero, logo a determinante da matriz quadrada de ordem  $n$  é igual a zero.

Com os valores dos determinantes  $d_n$ , se calcula  $\Delta(\lambda)$  (71):

$$\Delta(\lambda) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} d_n = 1 - \lambda \quad (86)$$

Agora calculando os determinantes  $d_n(x, t)$  (74):

Para o determinante  $d_1(x, t)$ :

$$\begin{aligned} d_1(x, t) &= \int_0^1 \begin{vmatrix} K(x, t) & K(x, t_1) \\ K(t_1, t) & K(t_1, t_1) \end{vmatrix} dt_1 = \int_0^1 \begin{vmatrix} xe^t & xe^{t_1} \\ t_1 e^t & t_1 e^{t_1} \end{vmatrix} dt_1 = \\ &= \int_0^1 [xt_1 e^{t+t_1} - xt_1 e^{t+t_1}] dt_1 = 0 \end{aligned} \quad (87)$$

Para o determinante  $d_2(x, t)$ :

$$\begin{aligned} d_2(x, t) &= \iint_0^1 \begin{vmatrix} K(x, t) & K(x, t_1) & K(x, t_2) \\ K(t_1, t) & K(t_1, t_1) & K(t_1, t_2) \\ K(t_2, t) & K(t_2, t_1) & K(t_2, t_2) \end{vmatrix} dt_1 dt_2 = \iint_0^1 \begin{vmatrix} xe^t & xe^{t_1} & xe^{t_2} \\ t_1 e^t & t_1 e^{t_1} & t_1 e^{t_2} \\ t_2 e^t & t_2 e^{t_1} & t_2 e^{t_2} \end{vmatrix} dt_1 dt_2 = \\ &= \iint_0^1 [3xt_1 t_2 e^{t+t_1+t_2} - 3xt_1 t_2 e^{t+t_1+t_2}] dt_1 dt_2 = 0 \end{aligned} \quad (88)$$

Os valores para os determinantes restantes:

$$d_3(x, t) = d_4(x, t) = \cdots = d_n(x, t) = 0 \quad (89)$$

os determinantes  $d_n(x, t)$  são iguais a zero pelo mesmo motivo dos determinantes  $d_n$ .

Com os valores dos determinantes  $d_n(x, t)$  se calcula  $\Delta(x, t; \lambda)$  (73):

$$\Delta(x, t; \lambda) = K(x, t) + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} d_n(x, t) = xe^t \quad (90)$$

Com o valor de  $\Delta(\lambda)$  (86) e de  $\Delta(x, t; \lambda)$  (90), calcula-se o resultado da equação (76) utilizando (75):

$$u(x) = f(x) + \lambda \int_0^1 \frac{\Delta(x, t; \lambda)}{\Delta(\lambda)} f(t) dt = e^{-x} + \lambda \int_0^1 \frac{xe^t}{1-\lambda} e^{-t} dt = e^{-x} + \frac{x\lambda}{1-\lambda} \quad (91)$$

Com isso, utilizou-se o método de kernéis arbitrários de Fredholm para resolver a equação integral (76).

## 3.2 Série de Neumann

A série de Neumann é outro método para resolver equações integrais de Fredholm, na qual utiliza aproximações sucessivas. Portanto a estrutura da solução da equação (61) é:

$$\Psi_n(x) = \phi(x) + \lambda \int_a^b K(x, t) \Psi_{n-1}(t) dt \quad (92)$$

Usando a equação (92) sucessivamente (HILDEBRAND, 1968):

$$\Psi_1(x) = \phi(x) + \lambda \int_a^b K(x, t) \Psi_0(t) dt \quad (93)$$

$$\Psi_2(x) = \phi(x) + \lambda \int_a^b K(x, t) \Psi_1(t) dt \quad (94)$$

Substituindo a equação (93) na equação (94):

$$\Psi_2(x) = \phi(x) + \lambda \int_a^b K(x, t) \left[ \phi(t) + \lambda \int_a^b K(t, t_1) \Psi_0(t_1) dt_1 \right] dt$$

$$\Psi_2(x) = \phi(x) + \lambda \int_a^b K(x, t)\phi(t)dt + \lambda^2 \int_a^b K(x, t) \int_a^b K(t, t_1)\Psi_0(t_1)dt_1dt \quad (95)$$

e assim sucessivamente para  $\Psi_3, \Psi_4, \dots, \Psi_{n-1}$ .

Introduzindo o operador integral linear (BASSALO; CATTANI, 2012)

$$\kappa g(x) \equiv \int_a^b K(x, t)g(t)dt \quad (96)$$

assim, as equações (93) e (95) podem ser reescritas:

$$\Psi_1(x) = \phi(x) + \lambda\kappa\Psi_0(x) \quad (97)$$

$$\Psi_2(x) = \phi(x) + \lambda\kappa\phi(x) + \lambda^2\kappa^2\Psi_0(x) \quad (98)$$

Reescrevendo de uma forma geral:

$$\Psi(x) = \phi(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^n \kappa^n \phi(x) \quad (99)$$

Para ajudar a compreender a série de Neumann, resolve-se a seguinte equação integral:

$$u(x) = x + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 (x+t)u(t)dt \quad (100)$$

como a solução da equação é obtida através da série (99). Calculando a primeira iteração:

$$\kappa f(x) = \int_{-1}^1 K(x, t)f(t)dt = \int_{-1}^1 (x+t)t dt = \frac{2}{3} \quad (101)$$

Calculando a segunda iteração:

$$\kappa^2 f(x) = \kappa[\kappa f(x)] = \int_{-1}^1 K(x, t)\kappa f(x)dt = \frac{2}{3} \int_{-1}^1 (x+t)dt = \frac{4x}{3} \quad (102)$$

Calculando a terceira iteração:

$$\kappa^3 f(x) = \kappa[\kappa^2 f(x)] = \int_{-1}^1 K(x, t)\kappa^2 f(x)dt = \int_{-1}^1 (x+t)\frac{4t}{3}dt = \frac{8}{9} \quad (103)$$

Calculando a quarta iteração:

$$\kappa^4 f(x) = \kappa[\kappa^3 f(x)] = \int_{-1}^1 K(x, t) \kappa^3 f(x) dt = \int_{-1}^1 \frac{8}{9} (x + t) dt = \frac{16x}{9} \quad (104)$$

Calculando a quinta iteração:

$$\kappa^5 f(x) = \kappa[\kappa^4 f(x)] = \int_{-1}^1 K(x, t) \kappa^4 f(x) dt = \int_{-1}^1 (x + t) \frac{16t}{9} dt = \frac{32}{27} \quad (105)$$

Calculando a sexta iteração:

$$\kappa^6 f(x) = \kappa[\kappa^5 f(x)] = \int_{-1}^1 K(x, t) \kappa^5 f(x) dt = \int_{-1}^1 \frac{32}{27} (x + t) dt = \frac{64x}{27} \quad (106)$$

Portanto:

$$u(x) = x + \frac{2}{3}\lambda + \frac{4x}{3}\lambda^2 + \frac{8}{9}\lambda^3 + \frac{16x}{9}\lambda^4 + \frac{32}{27}\lambda^5 + \frac{64x}{27}\lambda^6 + \dots \quad (107)$$

Separando os termos que multiplicam por  $x$ :

$$\begin{aligned} u(x) &= \left[ x + \frac{4x}{3}\lambda^2 + \frac{16x}{9}\lambda^4 + \frac{64x}{27}\lambda^6 + \dots \right] + \left[ \frac{2}{3}\lambda + \frac{8}{9}\lambda^3 + \frac{32}{27}\lambda^5 + \dots \right] = \\ &= x \left[ 1 + \frac{4}{3}\lambda^2 + \frac{16}{9}\lambda^4 + \frac{64}{27}\lambda^6 + \dots \right] + \frac{2\lambda}{3} \left[ 1 + \frac{4}{3}\lambda^2 + \frac{16}{9}\lambda^4 + \dots \right] \end{aligned} \quad (108)$$

onde obtém-se a seguinte somatória:

$$u(x) = \left[ x + \frac{2\lambda}{3} \right] \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{4}{3} \right)^n \lambda^{2n} \quad (109)$$

sendo o valor do somatório:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{4}{3} \right)^n \lambda^{2n} = \frac{-3}{-3 + 4\lambda^2} \quad (110)$$

Logo:

$$u(x) = \left[ x + \frac{2\lambda}{3} \right] \frac{-3}{-3 + 4\lambda^2} = \frac{-3x - 2\lambda}{-3 + 4\lambda^2} \quad (111)$$

sendo o valor de  $\lambda$  o termo que multiplica a integral, então pela equação (100)  $\lambda = 1/2$ .

$$u(x) = \frac{-3x - 1}{-3 + 1} \quad (112)$$

com isso a série de Neumann foi utilizado para resolver a equação integral (100).

## 4 IMPLEMENTAÇÃO DOS ALGORITMOS PARA CALCULAR EQUAÇÃO INTEGRAL

Esse capítulo mostra a implementação do método de kernéis arbitrários e da série de Neumann no *Wolfram Mathematica* (HASTINGS et al., 2016) para aplicação na mecânica quântica (FEAGIN, 1993).

### 4.1 Implementação do Método de Kernéis Arbitrários

Os cálculos para resolver a equação (61) são longos por causa da presença dos determinantes que estão inseridos nas integrais (72) e (74). Por isso foi desenvolvido um código no *Wolfram Mathematica* para resolver as equações integrais de Fredholm através do método de kerneis arbitrários.

A função definida como *MatrizDn*, Figura (7), tem como parâmetros de entrada *tam\_* (tamanho  $n$  da matriz) e *ker\_* ( expressão do kernel  $K(x, t)$ ) e com isso constrói a matriz que é utilizada para calcular as determinantes de  $d_n$  nas equação (71) e (72).

Figura 7 – Função *MatrizDn*.

```
MatrizDn[tam_, ker_] := Block[{tamanho = tam, Kl = ker, Mat},
  Mat = Table[Kl[Symbol["t" <> ToString[i]], Symbol["t" <> ToString[j]]],
    {i, 1, tamanho}, {j, 1, tamanho}];
  Return[Mat];
]
```

Fonte: autor

A função definida como *MatrizDnx*, Figura (8), tem como parâmetros de entrada *tam\_* (tamanho  $n$  da matriz) e *ker\_* (expressão do kernel  $K(x, t)$ ) e com isso constrói a matriz que é utilizada para calcular as determinantes de  $d_n(x, t)$  nas equação (73) e (74).

Figura 8 – Função *MatrizDnx* do algoritmo do método kernels arbitrários.

```

MatrizDnx[tam_, ker_] := Block[{tamanho = tam, Kl = ker, Matx},
  Matx = Table[Kl[Symbol["t" <> TextString[i]], Symbol["t" <> TextString[j]]],
    {i, 1, tamanho}, {j, 1, tamanho}];
  For[i = 1, i ≤ Length[Matx], i++,
    {Matx[[i]] = Insert[Matx[[i]], Kl[Symbol["t" <> TextString[i]], Symbol["t"]], 1]}
  ];
  Matx = Transpose[Matx];
  Matx[[1]] = Insert[Matx[[1]], Kl[Symbol["x"], Symbol["t"]], 1];
  For[i = 2, i ≤ Length[Matx], i++,
    {Matx[[i]] = Insert[Matx[[i]], Kl[Symbol["x"], Symbol["t" <> TextString[i - 1]]], 1]}
  ];
  Matx = Transpose[Matx];
  Return[Matx];
]

```

Fonte: autor

A função definida como *Determinantes*, Figura (9), tem como parâmetros de entrada *Matriz\_* (matriz gerada pelas funções *MatrizDn* e *MatrizDnx*), *tamanho\_* (menor tamanho para a submatriz), *superior\_* e *inferior\_* (valor do limite superior e inferior da integral), com isso a função calcula a determinante da matriz inserida, começando com a determinante da matriz original e em seguida calculando a determinante das submatrizes até o tamanho selecionado, sendo as submatrizes construídas a partir da remoção da última linha e coluna. Com as determinantes calculadas o bloco resolve as integrações e assim obtém-se os valores de  $d_n$  ou  $d_n(x, t)$  das equações (72) e (74).

Figura 9 – Função *Determinantes* do algoritmo do método kernels arbitrários.

```

Determinantes[Matriz_, tamanho_, superior_, inferior_] := Block[{Mat = Matriz,
  tam = Length[Matriz] - tamanho, ListaDet, ListaInter, ListaTs, ListaDepois,
  ant, dep, sup = superior, inf = inferior},
  ListaDet = List[];
  ListaDet = Insert[ListaDet, Det[Mat], 1];
  ListaInter = List[]; ListaTs = List[]; ListaDepois = List[];
  For[i = 1, i <= tam, i++,
    {Mat = Delete[Mat, -1];
     Mat = Transpose[Mat];
     Mat = Delete[Mat, -1];
     Mat = Transpose[Mat];
     ListaDet = Insert[ListaDet, Det[Mat], 1]}
  ];
  For[i = 1, i <= Length[ListaDet], i++,
    {ListaTs = Insert[ListaTs, "t" <> ToString[i], i]}
  ];
  For[i = 1, i <= Length[ListaTs], i++,
    {ListaDepois = Insert[ListaDepois, "{" <> ToString[ListaTs[[i]]] <>
      ", " <> inf <> ", " <> sup <> "}", i]}
  ];
  ant = "";
  dep = "";
  For[i = 1, i <= Length[ListaDet], i++,
    {ant = ant <> "Integrate[";
     dep = dep <> ListaDepois[[i]];
     ListaInter = Insert[ListaInter, ant <> ToString[ListaDet[[i]], InputForm] <>
       dep, i];
     ListaInter[[i]] = ToExpression[ListaInter[[i]]]}
  ];
  Return[ListaInter];
]

```

Fonte: autor

A função definida como  $D_n$ , Figura (10), tem como parâmetro de entrada *ListaDeterminantes\_* (lista contendo os valores de  $d_n$ ) e com isso calcula o valor de  $\Delta(\lambda)$  a partir da equação (71).

Figura 10 – Função  $D_n$  do algoritmo do método kernels arbitrários.

```

Dn[ListaDeterminantes_] := Block[{lista = ListaDeterminantes,
  n = Length[ListaDeterminantes], Dn, λ},
  Dn = 1 + Sum[(-1^i) * ((λ^i) / (i!)) * lista[[i]], {i, 1, n}];
  Return[Dn];
]

```

Fonte: autor

A função definida como  $D_{nx}$ , Figura (11), tem como parâmetros de entrada

*ListaDeterminantes\_* (lista contendo os valores de  $d_n(x, t)$ ) e *ker\_* (expressão do kernel  $K(x, t)$ ) e com isso calcula o valor de  $\Delta(x, t; \lambda)$  a partir da equação (73).

Figura 11 – Função *Dnx* do algoritmo do método kernels arbitrários.

```
Dnx[ListaDeterminantes_ , ker_] := Block[{lista = ListaDeterminantes,
  Kl = ker, n = Length[ListaDeterminantes], Dnx, x, t, λ},
  Dnx = Kl[x, t] + Sum[(-1^i) * ((λ^i) / (i!)) * lista[[i]], {i, 1, n}];
  Return[Dnx];
]
```

Fonte: autor

A função definida como *KernArbi* tem como objetivo de juntar as cinco funções anteriores na sequência para se calcular a solução da equação integral.

Ao utilizar a função *KernArbi* seis janelas de *input* iram aparecer, uma de cada vez, onde o usuário irá colocar as informações que as cinco funções anteriores precisaram. A primeira janela é a expressão do kernel  $K(x, t)$ , a segunda janela é a função de onda incidente  $\phi(x)$ , terceira janela é o limite superior da integral, a quarta janela é o limite inferior da integral, a quinta janela é o tamanho da matriz e a sexta janela pergunta se o usuário deseja imprimir os resultados interno de cada função.

Figura 12 – Função *KernArbi* do algoritmo do método kernels arbitrários.

```

KernArbi[] := Block[{kernel, funcao, tamanho, MDn, DeMDn, dn, MDnx,
  DeMDnx, dnx, u, mostrar, maxi, mini, t, x, λ},
  kernel[x_, t_] = Input["Digite a expressão do Kernel K(x,t)"];
  funcao[x_] = Input["Digite a expressão da Função F(x)"];
  maxi = ToString[Input["Limite superior da integral"]];
  mini = ToString[Input["Limite inferior da integral"]];
  tamanho = Input["Digite o inteiro correspondente ao tamanho da
matriz quadrada"];
  mostrar = ToString[Input["Dejesa que as operações internas
sejam imprimidas? [s ou n]"]];

  MDn = MatrizDn[tamanho, kernel];
  DeMDn = Determinantes[MDn, 1, maxi, mini];
  dn = Dn[DeMDn];
  MDnx = MatrizDnx[tamanho, kernel];
  DeMDnx = Determinantes[MDnx, 2, maxi, mini];
  dnx = Dnx[DeMDnx, kernel];
  If[mostrar == "s",
    {Print["Matriz  $\Delta(\lambda)$ "];
    Print[MatrixForm[MDn]];
    Print["Valores das determinantes  $d_n$ "];
    Print[DeMDn];
    Print["Expressão  $\Delta(\lambda)$ "];
    Print[dn];
    Print["Matriz  $\Delta(x,t;\lambda)$ "];
    Print[MatrixForm[MDnx]];
    Print["Valores das determinantes  $d_n(x,t)$ "];
    Print[DeMDnx];
    Print["Expressão  $\Delta(x,t;\lambda)$ "];
    Print[dnx];
    };
  ];

  u = funcao[x] + λ * Integrate[(dnx / dn) * funcao[t], {t, ToExpression[mini],
    ToExpression[maxi]};
  Print["Solução da Equação Integral"];
  Print[u];
  Return[u];
]

```

Fonte: autor

## 4.2 Implementação do Método Série de Neumann

A dificuldade encontrada para resolver a equação (61) são as ordem da série, que se tornam cada vez mais difíceis por causa das integrais iteradas. Portanto foi desenvolvido um outro código no *Wolfram Mathematica* para resolver as equações

integrais de Fredholm utilizando o método da série de Neumann.

A Figura (13) é a primeira parte do código e tem o objetivo de receber os *inputs* do usuário, que consiste na expressão do kernel, expressão da função de onda incidente, o limite superior e inferior da integral, qual a ordem do polinômio em  $\lambda$ , se os coeficientes do polinômios devem ser imprimidos na tela e por final se a função deve calcular um expressão geral para o polinômio.

Figura 13 – Primeira parte da implementação do método de Neumann.

```
kernel[x_, t_] = Input["Digite a expressão do Kernel K(x,t):"];
funcao[x_] = Input["Digite a expressão da Função F(x):"];
max = Input["Limite Superior da Integral:"];
mini = Input["Limite Inferior da Integral:"];
quant = Input["Ordem de  $\lambda$ "];
mostrar =
  ToString[
    Input[
      "Mostrar os coeficientes da Série de potência de  $\lambda$ ? [s
      ou n]"];
  ];
geral = ToString[Input["Calcular a solução completa? [s ou n]"]];
```

Fonte: autor

A Figura (14) é a segunda parte do código que consiste no cálculo, onde a variável *polinomio* armazena o polinômio em forma de string. O laço de repetição *For* é onde ocorrem as aproximações sucessivas, onde o valor da variável *funcao* é atualizado com o calculo da integração da multiplicação entre o *kernel* e o antigo valor da *funcao*, assim, o novo valor de *funcao* é multiplicado com  $\lambda$  da ordem da iteração e transformado para string, fazendo a concatenação com a string do *polinomio*.

Figura 14 – Segunda parte da implementação do método de Neumann.

```
polinomio = ToString[funcao[x], InputForm];

For[i = 1, i < (quant + 1), i++, {
  funcao[x_] = Integrate[kernel[x, t] * funcao[t], {t, mini, max},
    GenerateConditions -> False];
  polinomio = polinomio <> "+" <>
    ToString[funcao[x] * ( $\lambda^i$ ), InputForm];
}];
coeficientes = CoefficientList[ToExpression[polinomio],  $\lambda$ ];
```

Fonte: autor

A Figura (15) é a parte final do código que é responsável em imprimir os resultados, destacando o comando *FindGeneratingFunction* do *Wolfram Mathematica*, que é um comando que recebe uma série e calcular a expressão que gera a série, quando possível.

Figura 15 – Terceira parte da implementação do método de Neumann.

```
If[mostrar == "s",  
  {Print["Coeficientes"];  
   Print[coeficientes]};  
  
If[geral == "s",  
  {Print["Solução Geral"];  
   Print[FindGeneratingFunction[coeficientes, λ]]};  
  
Print["Solução em forma de Série"];  
Print[ToExpression[polinomio]];  
Return[ToExpression[polinomio]];  
]
```

Fonte: autor

## 5 RESULTADOS

Esse capítulo tem como objetivo mostrar a utilização dos códigos para resolver a equação integral de Lippmann-Schwinger nos potenciais de Coulomb e Yukawa, sendo utilizado uma hipótese geral da aproximação de Born. Os resultados encontrados foram comparados com o método da aproximação de Born, capítulo 2,

### 5.1 Espalhamento Quântico Utilizando Método de Kernéis Arbitrários

#### 5.1.1 Potencial de Coulomb

Utilizando o potencial de Coulomb (54):

$$V(r') = \frac{1}{4\pi} \frac{Q^2}{r'} \quad (113)$$

na solução geral da equação (32) com as aproximações (34) e (35):

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{8\pi^2\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{r'} \Psi(\vec{r}') d^3r' \quad (114)$$

onde  $Q$  é a carga das partículas,  $m$  é a massa da partícula disparada em direção ao centro espalhador,  $r'$  é a distância de atuação do potencial e  $r$  é a distância do centro espalhador até o sensor.

Em vez de utilizar aproximação de Born, apresenta-se uma hipótese alternativa, onde o número de ondas espalhadas tem uma pequena perturbação, ou seja:

$$\Psi(\vec{r}') \approx e^{i\vec{r}' \cdot (\vec{k}' + \Delta\vec{k}')} \approx e^{i\vec{r}' \cdot \vec{k}'} e^{i\vec{r}' \cdot \Delta\vec{k}'} \quad (115)$$

onde  $\Delta\vec{k}'$  é a variação que  $k$  sofre diante da colisão da partícula com a energia potencial eletrostático.

Definindo:

$$\Psi'(\vec{r}') \equiv e^{i\Delta\vec{k}' \cdot \vec{r}'} \quad (116)$$

então

$$\Psi(\vec{r}') \approx e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} \Psi'(\vec{r}') \quad (117)$$

Essa hipótese apresenta um caso particular, onde a perturbação  $\Delta \vec{k}'$  tendendo à zero implica na aproximação de Born.

Utilizando a hipótese (117) na equação (114):

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{8\pi^2\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{r'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} \Psi'(\vec{r}') d^3r' = \\ &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{8\pi^2\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{i\vec{r}' \cdot \Delta \vec{k}}}{r'} \Psi'(\vec{r}') d^3r'\end{aligned}\quad (118)$$

onde  $\Delta \vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$ .

Convertendo o volume  $d^3r'$  para o volume esférico.

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{8\pi^2\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{i\vec{r}' \cdot \Delta \vec{k}}}{r'} 2\pi r'^2 \sin(\varphi) \Psi'(\vec{r}') d\varphi dr' = \\ &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{i\vec{r}' \cdot \Delta \vec{k}} r' \sin(\varphi) \Psi'(\vec{r}') d\varphi dr'\end{aligned}\quad (119)$$

fazendo o calculo da integral em  $d\varphi$ :

$$\int_0^\pi e^{i\vec{r}' \cdot \Delta \vec{k}} \sin(\varphi) d\varphi = \int_0^\pi e^{i\Delta kr' \cos(\varphi)} \sin(\varphi) d\varphi = -\frac{e^{i\Delta kr' \cos(\varphi)}}{i\Delta kr'} \Big|_0^\pi = \frac{2 \sin(\Delta kr')}{\Delta kr'} \quad (120)$$

sendo  $\Delta k = 2k \sin(\theta/2)$ .

Obtém como resultado a equação:

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= e^{ik'r'} - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{2\sin(\Delta kr')}{\Delta kr'} r' \Psi'(\vec{r}') dr' \\ &= e^{ik'r'} - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2 k \sin(\theta/2)} \int \frac{e^{ikr}}{r} \sin[2kr' \sin(\theta/2)] \Psi'(\vec{r}') dr'\end{aligned}\quad (121)$$

lembrando que  $\vec{k}'$  e  $\vec{r}'$  são vetores e fazendo a multiplicação escalar de vetores  $\vec{k}' \cdot \vec{r}' = kr'$ , onde o modulo do  $\vec{k}'$  é igual ao de  $\vec{k}$ .

A equação (121) apresenta a estrutura de uma equação integral de segunda espécie de Fredholm (61) e com isso pode-se utilizar o método de kernéis arbitrários de Fredholm, que faz a substituição da integral por uma soma correspondente de Riemann e a partir disso criar um sistema de  $n$  equações lineares das funções desconhecidas  $\Psi(r')$ , dando como resultado a equação (75). Com isso, a equação (121) pode ser utilizado para alimentar o código do método de kerneis arbitrários, que recebe os parâmetros de entrada da tabela (1):

Tabela 1 – Valores dos parâmetros de entrada para o método kernéis arbitrários no potencial de Coulomb.

Parâmetro de entrada	Valor
Expressão Kernel:	$e^{ikx} \text{Sin}[2kt \text{Sin}[\theta/2]]/x$
Expressão Onda incidente:	$e^{ikx}$
Limite superior da integral:	10
Limite inferior da integral:	0
Tamanho da matriz:	5
Imprimir operações:	s

Fonte: autor

Tanto ambos os códigos, kernéis arbitrários e Neumann, utilizam  $x$  no lugar de  $r$  e  $t$  no lugar de  $r'$ .

Calculando os valores dos determinantes  $d_n$ , equação (72), onde as integrais têm o limite inferior igual a zero e o limite superior igual a dez.

Para o determinante  $d_1$ :

$$\begin{aligned}
 d_1 &= \int_0^{10} \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\theta/2)] dr'_1 = \\
 &= \frac{i}{4} \left\{ 2\text{Ei} \left[ -10ik \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) - 1 \right) \right] - 2\text{Ei} \left[ 10i \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) k + k \right) \right] + \right. \\
 &\quad + \log \left[ ik \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + 1 \right) \right] - \log \left[ ik \left( 1 - 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right) \right] + \\
 &\quad \left. - \log \left[ -\frac{i}{2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k} \right] + \log \left[ -\frac{i}{k - 2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right)} \right] \right\} \quad (122)
 \end{aligned}$$

onde Ei é a função exponencial integral,  $\text{Ei}(z) = -\int_{-z}^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt$ .

Para o determinante  $d_2$ :

$$\begin{aligned}
 d_2 &= \iint_0^{10} \left| \begin{array}{cc} \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\theta/2)] \\ \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\theta/2)] \end{array} \right| dr'_1 dr'_2 = \\
 &= \iint_0^{10} \left\{ \frac{e^{ik(r'_1+r'_2)}}{r'_1 r'_2} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\theta/2)] \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\theta/2)] + \right. \\
 &\quad \left. - \frac{e^{ik(r'_1+r'_2)}}{r'_1 r'_2} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\theta/2)] \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\theta/2)] \right\} dr'_1 dr'_2 = 0 \quad (123)
 \end{aligned}$$

Para o determinante  $d_3$ :

$$\begin{aligned}
d_3 &= \iiint_0^{10} \begin{vmatrix} \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_3 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \\ \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} \text{sen}[2kr'_3 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \\ \frac{e^{ikr'_3}}{r'_3} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_3}}{r'_3} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_3}}{r'_3} \text{sen}[2kr'_3 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \end{vmatrix} dr'_1 dr'_2 dr'_3 = \\
&= \iiint_0^{10} \left\{ 3 \frac{e^{ik(r'_1+r'_2+r'_3)}}{r'_1 r'_2 r'_3} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_3 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] + \right. \\
&\quad \left. - 3 \frac{e^{ik(r'_1+r'_2+r'_3)}}{r'_1 r'_2 r'_3} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_3 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \right\} dr'_1 dr'_2 dr'_3 = 0
\end{aligned} \tag{124}$$

O *Wolfram Mathematica* dá como resultado dos determinantes restantes:

$$d_4 = d_5 = \dots = d_n = 0 \tag{125}$$

Sabendo os valores de  $d_n$ , calcula-se  $\Delta(\lambda)$  dado pela equação (71):

$$\begin{aligned}
\Delta(\lambda) &= 1 - \lambda d_1 + \frac{\lambda^2}{2} d_2 + \sum_{n=3}^5 (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} d_n = \\
&= 1 - \frac{i\lambda}{4} \left\{ 2\text{Ei} \left[ -10ik \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) - 1 \right) \right] - 2\text{Ei} \left[ 10i \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) k + k \right) \right] + \right. \\
&\quad + \log \left[ ik \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + 1 \right) \right] - \log \left[ ik \left( 1 - 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right) \right] + \\
&\quad \left. - \log \left[ -\frac{i}{2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k} \right] + \log \left[ -\frac{i}{k - 2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right)} \right] \right\}
\end{aligned} \tag{126}$$

Agora calculando os valores dos determinantes  $d_n(r, r')$ , equação (74), onde as integrais têm o limite inferior igual a zero e o limite superior igual a dez.

Para o determinante  $d_1(r, r')$ :

$$\begin{aligned}
d_1(r, r') &= \int_0^{10} \begin{vmatrix} \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \\ \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \end{vmatrix} dr'_1 = \\
&= \int_0^{10} \left\{ \frac{e^{ik(r+r'_1)}}{rr'_1} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] + \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^{ik(r+r'_1)}}{rr'_1} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \right\} dr'_1 = 0
\end{aligned} \tag{127}$$

Para o determinante  $d_2(r, r')$ :

$$\begin{aligned}
 d_2(r, r') &= \iint_0^{10} \begin{vmatrix} \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \\ \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \\ \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \end{vmatrix} dr'_1 dr'_2 = \\
 &= \iint_0^{10} \left\{ 3 \frac{e^{ik(r+r'_1+r'_2)}}{rr'_1 r'_2} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] + \right. \\
 &\quad \left. - 3 \frac{e^{ik(r+r'_1+r'_2)}}{rr'_1 r'_2} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_1 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \text{sen}[2kr'_2 \text{sen}(\frac{\theta}{2})] \right\} dr'_1 dr'_2 = 0
 \end{aligned} \tag{128}$$

O *Wolfram Mathematica* dá como resultado dos determinantes restantes:

$$d_3(r, r') = d_4(r, r') = \dots = d_n(r, r') = 0 \tag{129}$$

Sabendo os valores de  $d_n(r, r')$ , calcula-se  $\Delta(r, r')$ , dada pela equação (73):

$$\Delta(r, r') = K(r, r') + \sum_{n=1}^5 (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} d_n(r, r') = \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen} \left[ 2kr' \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \tag{130}$$

Com os valores de  $\Delta(\lambda)$  e  $\Delta(r, r')$ , equações equação (126) e (130), e da solução (75) o código retorna o resultado da equação (121):

$$\begin{aligned}
 \Psi(\vec{r}') &= e^{ikr'} + \lambda \int_0^{10} \frac{\Delta(r, r')}{\Delta(\lambda)} e^{ikr'} dr' = e^{ikr'} + \frac{e^{ikr}}{r} \times \\
 &\quad \times \left\{ \frac{4\lambda \left\{ 2i \left[ -1 + e^{10ik} \cos \left[ 20k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \right] \text{sen} \left[ \frac{\theta}{2} \right] + e^{10ik} \text{sen} \left[ 20k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \right\}}{k \left[ -1 + 2 \cos(\theta) \right] \left[ 4i + \lambda \mathbf{A} \right]} \right\}
 \end{aligned} \tag{131}$$

onde

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} &= \left\{ 2\text{Ei} \left[ -10ik \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) - 1 \right) \right] - 2\text{Ei} \left[ 10i \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) k + k \right) \right] + \right. \\
 &\quad + \log \left[ ik \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + 1 \right) \right] - \log \left[ -\frac{i}{2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k} \right] + \\
 &\quad \left. - \log \left[ ik \left( 1 - 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right) \right] + \log \left[ -\frac{i}{k - 2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right)} \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{132}$$

sendo o valor de  $\lambda$  os termos que multiplicam a integral (121).

$$\lambda = -\frac{mQ^2}{4k\pi\hbar^2 \sin(\theta/2)} \quad (133)$$

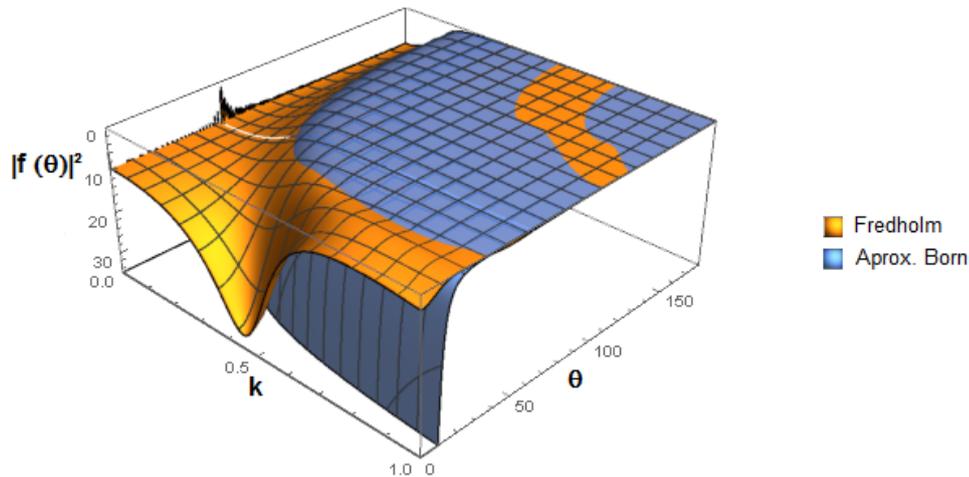
Comparando o resultado da equação (131) com a solução geral da equação de Schrödinger (36) se tem o valor da amplitude de espalhamento:

$$f(\theta) = \frac{4\lambda \left\{ 2i \left[ -1 + e^{10ik} \cos \left[ 20k \sin \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \right] \sin \left[ \frac{\theta}{2} \right] + e^{10ik} \sin \left[ 20k \sin \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \right\}}{k[-1 + 2 \cos(\theta)] [4i + \lambda \mathbf{A}]} \quad (134)$$

Para um estudo inicial, considera-se que a massa  $m$  seja igual a 1, a carga  $Q$  seja igual a 1 e que a constante de Planck  $\hbar$  seja igual a 1. Com esses valores se tem  $\lambda = -\frac{1}{4k\pi \sin(\theta/2)}$  e um limite não relativístico posto para  $k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}$ , pois para energia relativística  $E = mc^2 = 1$ , o que implica em  $k \approx 1,4$ . Portanto, para valores não relativísticos  $k$  deve variar entre 0 e 1,4.

A Figura (16) mostra o espalhamento em função do ângulo  $\theta$  de  $0^\circ$  até  $180^\circ$  e do número de onda  $k$  de 0 até 1.

Figura 16 – Espalhamento de Fredholm e Born com variação no número de onda  $k$  e no ângulo  $\theta$ .



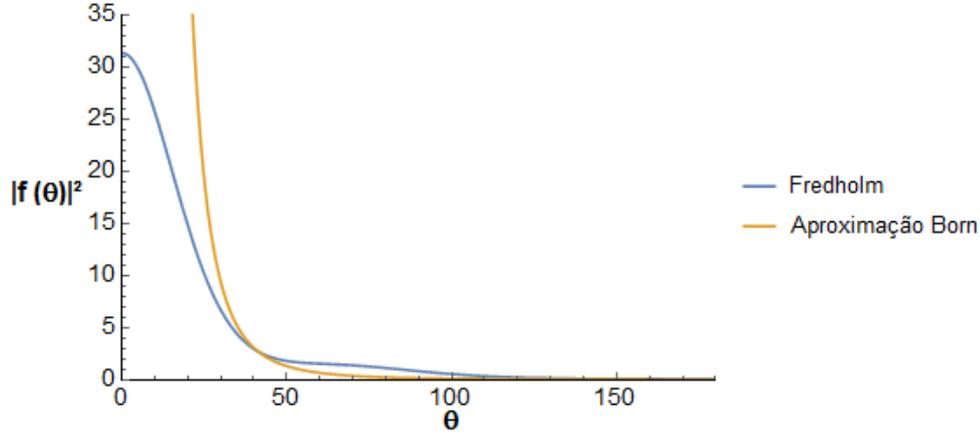
Fonte: autor

Os valores de  $k$  entre 0,4 e 0,5 para Fredholm são os que mais se aproximam de Born para ângulos pequenos, então defini-se  $k = 0,44$  para os métodos descreverem um bom comportamento em relação a Born.

A Figura (17) é o espalhamento do método de Fredholm e do método de Born, o ângulo de espalhamento  $\theta$  está variando de  $0^\circ$  a  $180^\circ$  e  $k$  foi definido com o valor de

0,44. A tabela (2) mostra os valores numéricos do espalhamento da Figura (17) para  $\theta$  igual a 30, 40, 60, 80, 100, 120 e 150 graus.

Figura 17 – Espalhamento de Fredholm e Born com variação no ângulo  $\theta$ .



Fonte: autor

Tabela 2 – Valores numéricos para Born e Fredholm no potencial de Coulomb.

$\theta^\circ$	Métodos	
	Born	Fredholm
30	9,41293	6,70914
40	3,08676	2,97956
60	0,675818	1,55511
80	0,247423	1,1416
100	0,122657	0,56023
120	0,075091	0,23623
150	0,048521	0,103498

Fonte: autor

O espalhamento via Fredholm não tem singularidades para ângulos próximos de zero, diferente de Born que tende ao infinito.

### 5.1.2 Potencial de Yukawa

Utilizando o potencial de Yukawa (48):

$$V(r') = \frac{Q^2}{4\pi} \frac{e^{-\mu r'}}{r'} \quad (135)$$

na solução geral da equação (32) com as aproximações (34) e (35):

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{8\pi^2 \hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{r'} e^{-\mu r'} \Psi(\vec{r}') d^3 r' \quad (136)$$

onde  $Q$  é a carga das partículas,  $m$  é a massa da partícula disparada em direção ao centro espalhador,  $\mu$  é a massa da partícula trocada durante a interação de colisão,  $r'$  é a distância de alcance do potencial e  $r$  é a distância do centro espalhador até o sensor.

Utilizando a hipótese (117) na equação (136):

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{8\pi^2\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{i\vec{r}' \cdot \vec{k}}}{r'} e^{-\mu r'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} \Psi'(\vec{r}') d^3 r' = \\ &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{8\pi^2\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{i\vec{r}' \cdot \Delta \vec{k}}}{r'} e^{-\mu r'} \Psi'(\vec{r}') d^3 r'\end{aligned}\quad (137)$$

e convertendo o volume  $d^3 r'$  para o volume esférico:

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{8\pi^2\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int \frac{e^{i\vec{r}' \cdot \Delta \vec{k}}}{r'} e^{-\mu r'} 2\pi r'^2 \sin(\varphi) \Psi'(\vec{r}') d\varphi dr' = \\ &= e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{i\vec{r}' \cdot \Delta \vec{k}} e^{-\mu r'} r' \sin(\varphi) \Psi'(\vec{r}') d\varphi dr'\end{aligned}\quad (138)$$

Calculando a integral em  $d\varphi$  (120) obtém-se:

$$\Psi(\vec{r}) = e^{ik'r'} - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2 k \sin(\theta/2)} \int \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \text{sen}[2kr' \text{sen}(\theta/2)] \Psi'(\vec{r}') dr' \quad (139)$$

A equação (139) apresenta a estrutura de uma equação integral de segunda espécie de Fredholm e pode ser utilizado o método de kernéis arbitrários, então utilizando a equação (139) para alimentar o código que recebe os parametros de entrada da tabela (3):

Tabela 3 – Valores dos parâmetros de entrada para o método kernéis arbitrários no potencial de Yukawa.

Parâmetro de entrada	Valor
Expressão Kernel:	$e^{ikx} e^{-\mu t} \text{Sin}[2kt \text{Sin}[\theta/2]]/x$
Expressão Onda incidente:	$e^{ikx}$
Limite superior da integral:	10
Limite inferior da integral:	0
Tamanho da matriz:	5
Imprimir operações:	s

Fonte: autor

Calculando os valores dos determinantes  $d_n$ , equação (72).

Para o determinante  $d_1$ :

$$\begin{aligned}
 d_1 &= \int_0^{10} \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} e^{\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] dr'_1 \\
 &= \frac{i}{4} \left\{ -2\operatorname{Ei} \left[ 10i \left( 2 \operatorname{sen} \left[ \frac{\theta}{2} \right] k + k + i\mu \right) \right] + 2\operatorname{Ei} \left[ 10ik - 20i \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) k - 10\mu \right] + \right. \\
 &\quad - \log \left[ -\frac{i}{2k \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu} \right] + \log \left[ i \left( 2k \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu \right) \right] + \\
 &\quad \left. + \log \left[ -\frac{i}{-2k \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu} \right] - \log \left[ -2ik \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + ik - \mu \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{140}$$

Para o determinante  $d_2$ :

$$\begin{aligned}
 d_2 &= \iint_0^{10} \left| \begin{array}{cc} \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_2} \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \\ \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_2} \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \end{array} \right| dr'_1 dr'_2 = \\
 &= \iint_0^{10} \left\{ \frac{e^{ik(r'_1+r'_2)}}{r'_1 r'_2} e^{-\mu(r'_1+r'_2)} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] + \right. \\
 &\quad \left. - \frac{e^{ik(r'_1+r'_2)}}{r'_1 r'_2} e^{-\mu(r'_1+r'_2)} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \right\} dr'_1 dr'_2 = 0
 \end{aligned} \tag{141}$$

Para o determinante  $d_3$ :

$$\begin{aligned}
 d_3 &= \iiint_0^{10} \left| \begin{array}{ccc} \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_2} \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_3}}{r'_3} e^{-\mu r'_3} \operatorname{sen} [2kr'_3 \operatorname{sen} (\theta/2)] \\ \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_2} \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_3} \operatorname{sen} [2kr'_3 \operatorname{sen} (\theta/2)] \\ \frac{e^{ikr'_3}}{r'_3} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_3}}{r'_3} e^{-\mu r'_2} \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_3}}{r'_3} e^{-\mu r'_3} \operatorname{sen} [2kr'_3 \operatorname{sen} (\theta/2)] \end{array} \right| \\
 &\quad dr'_1 dr'_2 dr'_3 = \\
 &= \iiint_0^{10} \left\{ 3 \frac{e^{ik(r'_1+r'_2+r'_3)}}{r'_1 r'_2 r'_3} e^{-\mu(r'_1+r'_2+r'_3)} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_3 \operatorname{sen} (\theta/2)] + \right. \\
 &\quad \left. - 3 \frac{e^{ik(r'_1+r'_2+r'_3)}}{r'_1 r'_2 r'_3} e^{-\mu(r'_1+r'_2+r'_3)} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_3 \operatorname{sen} (\theta/2)] \right\} dr'_1 dr'_2 dr'_3 \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{142}$$

O *Wolfram Mathematica* dá como resultado dos determinantes restantes:

$$d_4 = d_5 = \dots = d_n = 0 \tag{143}$$

Com os valores de  $d_n$ , calcula-se  $\Delta(\lambda)$ , dado pela equação (71):

$$\begin{aligned}
\Delta(\lambda) &= 1 - \lambda d_1 + \frac{\lambda^2}{2} d_2 + \sum_{n=3}^5 (-1)^n \frac{\lambda^n}{n} d_n = \\
&= 1 - \frac{i\lambda}{4} \left\{ -2\text{Ei} \left[ 10i \left( 2 \operatorname{sen} \left[ \frac{\theta}{2} \right] k + k + i\mu \right) \right] + 2\text{Ei} \left[ 10ik - 20i \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) k - 10\mu \right] + \right. \\
&\quad - \log \left[ -\frac{i}{2k \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu} \right] + \log \left[ i \left( 2k \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu \right) \right] + \\
&\quad \left. + \log \left[ -\frac{i}{-2k \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu} \right] - \log \left[ -2ik \operatorname{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + ik - \mu \right] \right\}
\end{aligned} \tag{144}$$

Calculando os valores dos determinantes  $d_n(r, r')$ , equação (74).

Para o determinante  $d_1(r, r')$ :

$$\begin{aligned}
d_1(r, r') &= \int_0^{10} \begin{vmatrix} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \\ \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} e^{-\mu r'} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \end{vmatrix} dr'_1 = \\
&= \int_0^{10} \left\{ \frac{e^{ik(r+r'_1)}}{rr'_1} e^{-\mu(r'+r'_1)} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] + \right. \\
&\quad \left. - \frac{e^{ik(r+r'_1)}}{rr'_1} e^{-\mu(r'+r'_1)} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \right\} dr'_1 = 0
\end{aligned} \tag{145}$$

Para o determinante  $d_2(r, r')$ :

$$\begin{aligned}
d_2(r, r') &= \iint_0^{10} \begin{vmatrix} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'_2} \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \\ \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} e^{-\mu r'} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_1}}{r'_1} e^{-\mu r'_2} \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \\ \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_1} \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] & \frac{e^{ikr'_2}}{r'_2} e^{-\mu r'_2} \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \end{vmatrix} \\
&\quad dr'_1 dr'_2 = \\
&\quad \iint_0^{10} \left\{ 3 \frac{e^{ik(r+r'_1+r'_2)}}{rr'_1 r'_2} e^{-\mu(r'+r'_1+r'_2)} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] + \right. \\
&\quad \left. - 3 \frac{e^{ik(r+r'_1+r'_2)}}{rr'_1 r'_2} e^{-\mu(r'+r'_1+r'_2)} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_1 \operatorname{sen} (\theta/2)] \operatorname{sen} [2kr'_2 \operatorname{sen} (\theta/2)] \right\} \\
&\quad . dr'_1 dr'_2 = 0
\end{aligned} \tag{146}$$

O *Wolfram Mathematica* dá como resultado dos determinantes restantes:

$$d_3(r, r') = d_4(r, r') = \dots = d_n(r, r') = 0 \quad (147)$$

Sabendo os valores de  $d_n(r, r')$  se calcula  $\Delta(r, r')$ , pela equação (73):

$$\Delta(r, r') = K(r, r') + \sum_{n=1}^5 (-1)^n \frac{\lambda^n}{n!} d_n(r, r') = \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \text{sen} [2kr' \text{sen} (\theta/2)] \quad (148)$$

Com os valores de  $\Delta(\lambda)$  e  $\Delta(r, r')$ , equações (144) e (148), e da solução (75) o código retorna o resultado da equação (139):

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= e^{ikr'} + \lambda \int_0^{10} \frac{\Delta(r, r')}{\Delta(\lambda)} e^{ikr'} dr' = \\ &= e^{ikr'} + \frac{e^{ikr}}{r} \frac{e^{-10\mu\lambda} \times \mathbf{B}_0}{[k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)] [1 - \frac{i\lambda}{4} \times \mathbf{B}_1]} \end{aligned} \quad (149)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_0 &= 2k \text{sen} \left[ \frac{\theta}{2} \right] \left[ e^{10\mu} - e^{10ik} \cos \left( 20k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right) \right] + \\ &+ ie^{10ik} (k + i\mu) \text{sen} \left[ 20k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (150)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_1 &= \left\{ -2\text{Ei} \left[ 10i \left( 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) k + k + i\mu \right) \right] + 2\text{Ei} \left[ 10ik - 20i \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) k - 10\mu \right] + \right. \\ &- \log \left[ -\frac{i}{2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu} \right] + \log \left[ i \left( 2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu \right) \right] + \\ &\left. + \log \left[ -\frac{i}{-2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k + i\mu} \right] - \log \left[ -2ik \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + ik - \mu \right] \right\} \end{aligned} \quad (151)$$

sendo o valor de  $\lambda$  descrito em (133).

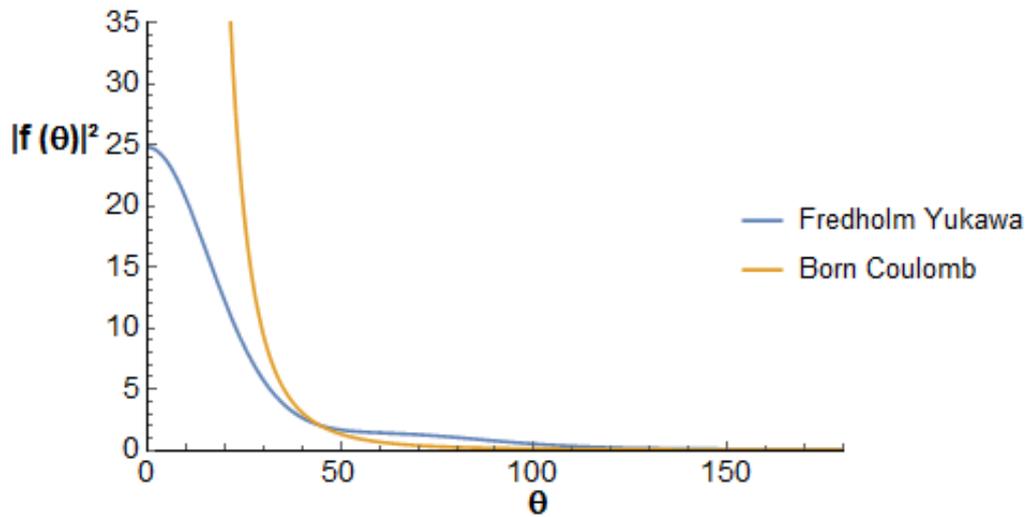
Comparando o resultado da equação (149) com a solução geral da equação de Schrödinger (36), o valor da amplitude de espalhamento é:

$$f(\theta) = \frac{e^{-10\mu\lambda} \left\{ 2k \text{sen} \left[ \frac{\theta}{2} \right] \left[ e^{10\mu} - e^{10ik} \cos \left( 20k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right) \right] + ie^{10ik} (k + i\mu) \text{sen} \left[ 20k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \right\}}{[k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)] [1 - \frac{i\lambda}{4} \times \mathbf{B}_1]} \quad (152)$$

Para uma análise consistente utiliza-se os mesmos valores para a massa  $m = 1$ , a carga  $Q = 1$  e a constante de Planck  $\hbar = 1$ .

A Figura (18) mostra os espalhamentos dado pelo kernél arbitrário no potencial de Yukawa e o espalhamento pela aproximação de Born em Coulomb, onde o número de onda  $k$  é igual a 0,44,  $\mu$  igual a 0,01 e o ângulo de espalhamento  $\theta$  variando de  $0^\circ$  a  $180^\circ$ . A tabela (4) mostra os valores numéricos do espalhamento da Figura (18) para  $\theta$  igual a 30, 40, 60, 80, 100, 120 e 150 graus.

Figura 18 – Espalhamento de Fredholm em Yukawa e Born em Coulomb com variação em  $\theta$ .



Fonte: autor

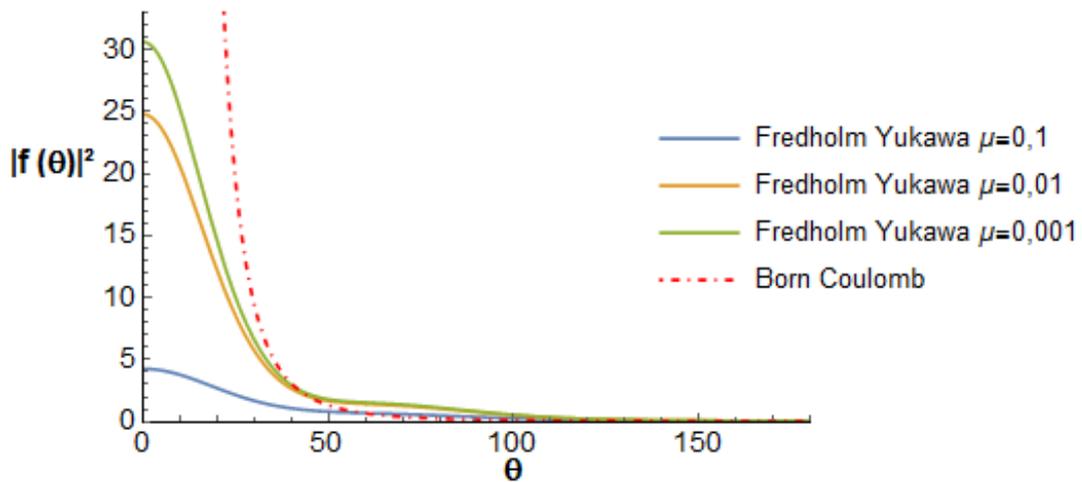
Tabela 4 – Valores numéricos para Born em Coulomb e Fredholm no potencial de Yukawa.

$\theta^\circ$	Métodos	
	Born	Fredholm
30	9,41293	5,7336
40	3,08676	2,66401
60	0,675818	1,42996
80	0,247423	1,04532
100	0,122657	0,519188
120	0,075091	0,222548
150	0,048521	0,096503

Fonte: autor

A Figura (19) compara os espalhamentos de Fredholm em Yukawa com o espalhamento de Born em Coulomb, sendo os valores de  $\mu$  iguais a 0,1; 0,01 e 0,001.

Figura 19 – Espalhamento de Born em Coulomb e espalhamentos de Fredholm em yukawa com  $\mu$  iguais a 0,1; 0,01 e 0,001.



Fonte: autor

Para  $\mu$  tendendo a zero, o espalhamento de Fredholm em yukawa tende ao de Fredholm em Coulomb.

## 5.2 Espalhamento Quântico Utilizando Série de Neumann

### 5.2.1 Potencial de Coulomb

A equação (121) apresenta a estrutura de uma equação integral de segunda espécie de Fredholm (61) e pode utilizar a série de Neumann, que utiliza o operador linear (96) nas aproximações sucessivas e obtém a equação (99) como resultado, com isso, a equação(121) pode alimentar o código do método de Neumann, que recebe os parâmetro de entrada da tabela (5):

Tabela 5 – Valores dos parâmetros de entrada para o método Neumann no potencial de Coulomb.

Parâmetro de entrada	Valor
Expressão Kernel:	$e^{ikx}\text{Sin}[2kt\text{Sin}(\theta/2)]/x$
Expressão Onda incidente:	$e^{ikx}$
Limite superior da integral:	10
Limite inferior da integral:	0
Grau da série $\lambda$ :	5
Imprimir coeficientes:	n
Função Geradora:	n

Fonte: autor

Pela tabela (5), a série gerada é de quinta ordem, ou seja, o código irá fazer 5 iterações, onde o limite inferior da integral é igual a zero e o limite superior é igual a dez. A primeira iteração é igual:

$$\begin{aligned}\kappa\phi(r) &= \int_0^{10} K(r, r')\phi(r')dr' = \\ &= \int_0^{10} \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen} [2kr' \text{sen} (\theta/2)] e^{ikr'} dr' = \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\mathbf{C}_0}{k[2 \cos(\theta) - 1]}\end{aligned}\quad (153)$$

onde

$$\mathbf{C}_0 = 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \left[ -1 + e^{10ik} \cos \left[ 20k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \right] - ie^{10ik} \text{sen} \left[ 20k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \quad (154)$$

Com a primeira iteração, pode-se calcular a segunda iteração:

$$\begin{aligned}\kappa^2\phi(r) = \kappa[\kappa\phi(r)] &= \int_0^{10} \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen} [2kr' \text{sen} (\theta/2)] \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{\mathbf{C}_0}{k[2 \cos(\theta) - 1]} dr' = \\ &= \frac{e^{ikr}}{r} \frac{i \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1}{2k[2 \cos(\theta) - 1]}\end{aligned}\quad (155)$$

onde

$$\begin{aligned}\mathbf{C}_1 &= \left\{ -\text{Ci} \left[ 10k \left[ 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + 1 \right] \right] + \text{Ci} \left[ 10k \left[ 1 - 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \right] \right\} + \\ &\quad - i\text{Si} \left[ 10k \left[ 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + 1 \right] \right] + i\text{Si} \left[ 10k \left[ 1 - 2 \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \right] + \\ &\quad + \log \left[ 2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) + k \right] - \log \left[ k - 2k \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \left\} \end{aligned}\quad (156)$$

sendo Ci a função cosseno integral,  $\text{Ci}(z) = -\int_z^\infty \frac{\cos(t)}{t} dt$ , e Si a função seno integral,  $\text{Si}(z) = \int_z^\infty \frac{\sin(t)}{t} dt$ .

Com a segunda iteração, pode-se calcular a terceira iteração:

$$\begin{aligned}\kappa^3\phi(r) = \kappa[\kappa^2\phi(r)] &= \int_0^{10} \frac{e^{ikr}}{r} \text{sen} [2kr' \text{sen} (\theta/2)] \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{i \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1}{2k[2 \cos(\theta) - 1]} dr' = \\ &= -\frac{e^{ikr}}{r} \frac{\mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^2}{4k[2 \cos(\theta) - 1]}\end{aligned}\quad (157)$$

Calculando a quarta iteração:

$$\begin{aligned}\kappa^4\phi(r) &= \kappa[\kappa^3\phi(r)] = \int_0^{10} -\frac{e^{ikr}}{r} \operatorname{sen}[2kr' \operatorname{sen}(\theta/2)] \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{\mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^2}{4k[2\cos(\theta) - 1]} dr' = \\ &= -\frac{e^{ikr}}{r} \frac{i \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^3}{8k[2\cos(\theta) - 1]}\end{aligned}\quad (158)$$

Calculando a quinta e ultima iteração:

$$\begin{aligned}\kappa^5\phi(r) &= \kappa[\kappa^4\phi(r)] = \int_0^{10} -\frac{e^{ikr}}{r} \operatorname{sen}[2kr' \operatorname{sen}(\theta/2)] \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{i \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^3}{8k[2\cos(\theta) - 1]} dr' = \\ &= \frac{e^{ikr}}{r} \frac{\mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^4}{16k[2\cos(\theta) - 1]}\end{aligned}\quad (159)$$

Com o valor das cinco iterações e utilizando a equação (99), o código retorna como resultado da equação (121):

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= e^{ikr} + \sum_{n=1}^5 \lambda^n \kappa^n \phi(r') = \\ &= e^{ikr} + \frac{e^{ikr}}{r} \frac{1}{k[\cos(\theta) - 1]} \left\{ \lambda \times \mathbf{C}_0 + \frac{i\lambda^2 \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1}{2} + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\lambda^3 \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^2}{4} - \frac{i\lambda^4 \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^3}{8} + \frac{\lambda^5 \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^4}{16} \right\}\end{aligned}\quad (160)$$

sendo o valor de  $\lambda$  descrito em (133).

Comparando o resultado da equação (160) com a solução geral da equação de Schrödinger (36), o valor da amplitude de espalhamento é:

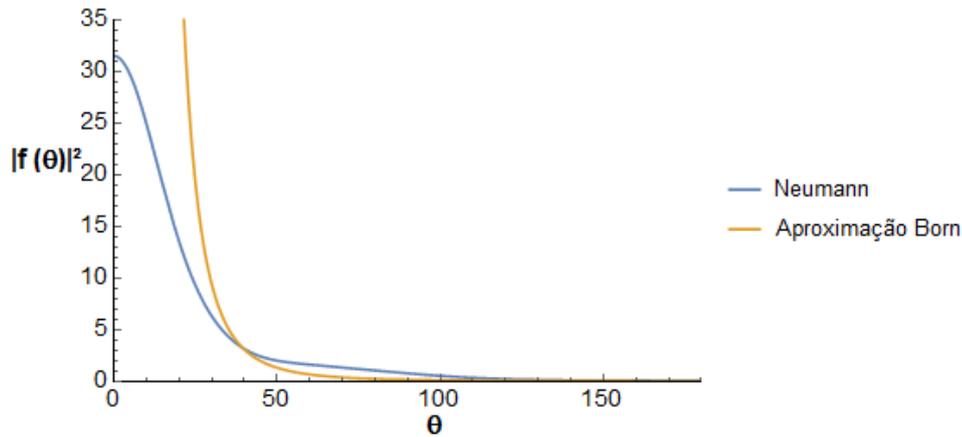
$$\begin{aligned}f(\theta) &= \frac{1}{k[\cos(\theta) - 1]} \left\{ \lambda \times \mathbf{C}_0 + \frac{i\lambda^2 \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1}{2} + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\lambda^3 \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^2}{4} - \frac{i\lambda^4 \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^3}{8} + \frac{\lambda^5 \times \mathbf{C}_0 \times \mathbf{C}_1^4}{16} \right\}\end{aligned}\quad (161)$$

Para uma análise consistente utiliza-se os mesmos valores para a massa  $m = 1$ , a carga  $Q = 1$  e a constante de Planck  $\hbar = 1$ .

A Figura (20) mostra o espalhamento dado pela aproximação de Born e via método de Neumann, com o potencial de Coulomb, onde o número de onda  $k$  é igual a 0,44 e o ângulo de espalhamento  $\theta$  está variando de  $0^\circ$  a  $180^\circ$ . A tabela (6) mostra os

valores numéricos do espalhamento da Figura (20) para  $\theta$  igual a 30, 40, 60, 80, 100, 120 e 150 graus.

Figura 20 – Espalhamento de Neumann e Born no potencial de Coulomb com variação em  $\theta$ .



Fonte: autor

Tabela 6 – Valores numéricos para Born e Neumann no potencial de Coulomb.

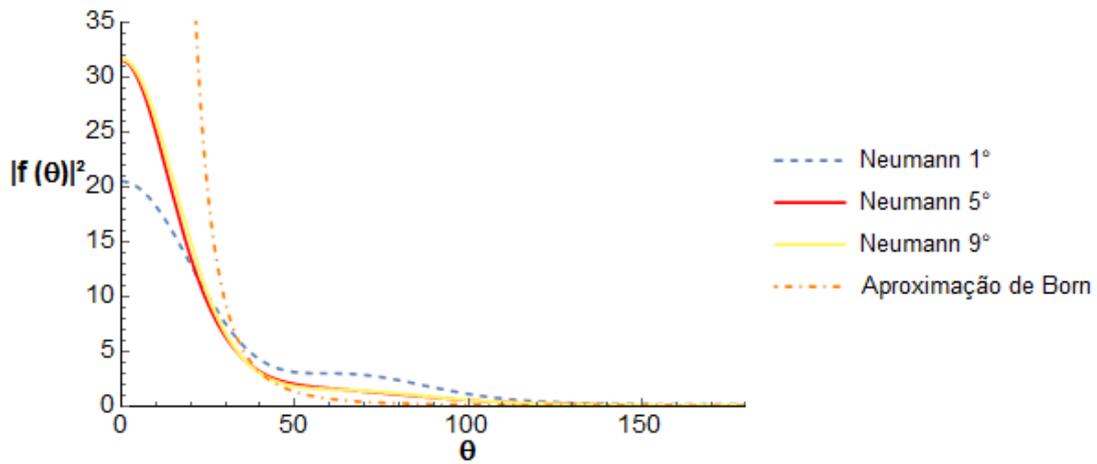
$\theta^\circ$	Métodos	
	Born	Neumann
30	9,41293	6,33203
40	3,08676	3,14218
60	0,675818	1,62866
80	0,247423	1,05911
100	0,122657	0,540723
120	0,075091	0,234703
150	0,048521	0,103573

Fonte: autor

O espalhamento via Neumann, igual a Fredholm, não tem singularidades para ângulos próximo de zero.

A Figura (21) mostra o espalhamento da aproximação de Born e o espalhamento de três séries do método de Neumann, onde as ordens são de 1°, 5° e 9°, o número de onda  $k$  é igual a 0,44 e o ângulo de espalhamento  $\theta$  está variando de 0° a 180°.

Figura 21 – Espalhamento de Neumann de 1° ordem, 5° ordem e 9° ordem e espalhamento de Born no potencial de Coulomb com variação em  $\theta$ .



Fonte: autor

Observa-se que a diferença entre as séries de primeira e quinta ordem é maior que a quinta e nona ordem.

### 5.2.2 Potencial de Yukawa

A equação (139) apresenta a estrutura de uma equação integral de Fredholm e com isso utiliza-se a série de Neumann. Assim alimentando o código com os parâmetros de entrada da tabela (7):

Tabela 7 – Valores dos parâmetros de entrada para o método Neumann no potencial de Yukawa.

Parâmetro de entrada	Valor
Expressão Kernel:	$e^{ikx} e^{-\mu t} \text{Sin}[2kt \text{Sin}(\theta/2)]/x$
Expressão Onda incidente:	$e^{ikx}$
Limite superior da integral:	10
Limite inferior da integral:	0
Grau da série $\lambda$ :	5
Imprimir coeficientes:	n
Função Geradora:	n

Fonte: autor

Pela tabela (7) a série gerada é de quinta ordem, onde o limite inferior da integral

é igual a zero e o limite superior é igual a dez. Calculando a primeira iteração:

$$\begin{aligned}
 \kappa\phi(r) &= \int_0^{10K(r,r')\phi(r')} dr' = \\
 &= \int_0^{10} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \text{sen} [2kr' \text{sen} (\theta/2)] e^{ikr'} dr' = \\
 &= \frac{e^{ikr}}{r} \frac{e^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0}{k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)}
 \end{aligned} \tag{162}$$

sendo  $\mathbf{B}_0$  descrito em (150).

Com a primeira iteração, pode-se calcular a segunda iteração:

$$\begin{aligned}
 \kappa^2\phi(r) &= \kappa[\kappa\phi(r)] = \\
 &= \int_0^{10} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \text{sen} [2kr' \text{sen} (\theta/2)] \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{e^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0}{k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)} dr' = \\
 &= \frac{e^{ikr}}{r} \frac{ie^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1}{4 [k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)]}
 \end{aligned} \tag{163}$$

sendo  $\mathbf{B}_1$  descrito em (151).

Calculando a terceira iteração:

$$\begin{aligned}
 \kappa^3\phi(r) &= \kappa[\kappa^2\phi(r)] = \\
 &= \int_0^{10} \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \text{sen} [2kr' \text{sen} (\theta/2)] \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{ie^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1}{4 [k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)]} dr' = \\
 &= - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{e^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^2}{16 [k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)]}
 \end{aligned} \tag{164}$$

Calculando a quarta iteração:

$$\begin{aligned}
 \kappa^4\phi(r) &= \kappa[\kappa^3\phi(r)] = \\
 &= \int_0^{10} - \frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \text{sen} [2kr' \text{sen} (\theta/2)] \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{e^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^2}{16 [k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)]} dr' = \\
 &= - \frac{e^{ikr}}{r} \frac{ie^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^3}{64 [k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)]}
 \end{aligned} \tag{165}$$

Calculando a quinta iteração:

$$\begin{aligned}
\kappa^5 \phi(r) &= \kappa[\kappa^4 \phi(r)] = \\
&= \int_0^{10} -\frac{e^{ikr}}{r} e^{-\mu r'} \operatorname{sen} [2kr' \operatorname{sen} (\theta/2)] \frac{e^{ikr'}}{r'} \frac{ie^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^3}{64 [k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)]} dr' = \\
&= \frac{e^{ikr}}{r} \frac{e^{-10\mu} \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^4}{256 [k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)]}
\end{aligned} \tag{166}$$

Com os valores das iterações calcula-se os resultado através da equação (99):

$$\begin{aligned}
\Psi(\vec{r}) &= e^{ikr} + \sum_{n=1}^5 \lambda^n \kappa^n \phi(r') = \\
&= e^{ikr} + \frac{e^{ikr}}{r} \frac{e^{-10\mu}}{k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)} \cdot \\
&= \left\{ \lambda \mathbf{B}_0 + \frac{i\lambda^2 \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1}{4} - \frac{\lambda^3 \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^2}{16} - \frac{i\lambda^4 \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^3}{64} + \frac{\lambda^5 \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^4}{256} \right\}
\end{aligned} \tag{167}$$

sendo  $\lambda$  descrito em (133).

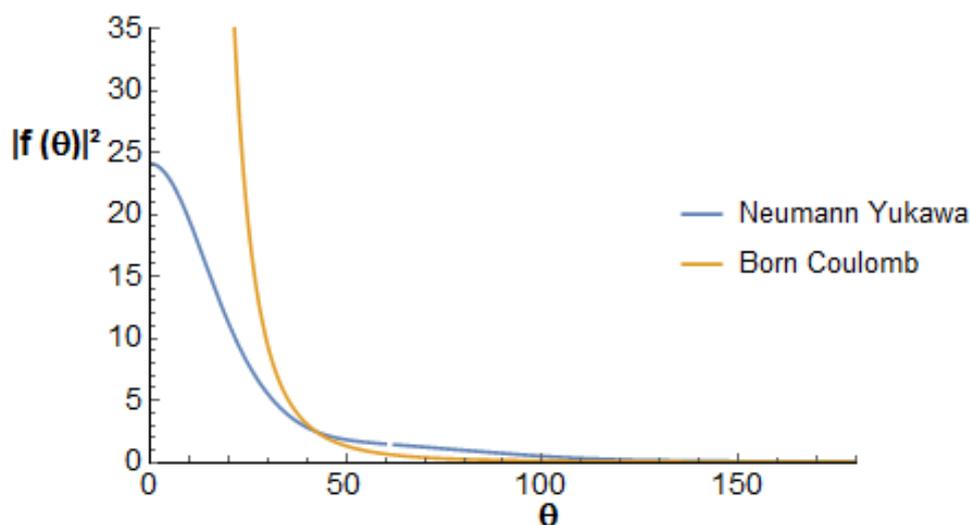
Comparando a solução (167) com a equação de Schrödinger (36), o valor da amplitude de espalhamento:

$$\begin{aligned}
f(\theta) &= \frac{e^{-10\mu}}{k^2 - 2ik\mu + \mu^2 - 2k^2 \cos(\theta)} \left\{ \lambda \mathbf{B}_0 + \right. \\
&\quad \left. + \frac{i\lambda^2 \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1}{4} - \frac{\lambda^3 \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^2}{16} - \frac{i\lambda^4 \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^3}{64} + \frac{\lambda^5 \times \mathbf{B}_0 \times \mathbf{B}_1^4}{256} \right\}
\end{aligned} \tag{168}$$

Considerando os valores para a massa  $m = 1$ , carga  $Q = 1$  e a constante de Planck  $\hbar = 1$ .

A Figura (22) mostra os espalhamentos dado pela aproximação de Born em Coulomb e pelo método de Neumann no potencial de Yukawa, onde o número de onda  $k$  é igual a 0,44,  $\mu$  igual a 0,01 e o ângulo  $\theta$  variando de  $0^\circ$  a  $180^\circ$ . A tabela (8) mostra os valores numéricos do espalhamento da Figura (22) para  $\theta$  igual a 30, 40, 60, 80, 100, 120 e 150 graus.

Figura 22 – Espalhamento de Neumann em Yukawa e Born em Coulomb com variação em  $\theta$ .



Fonte: autor

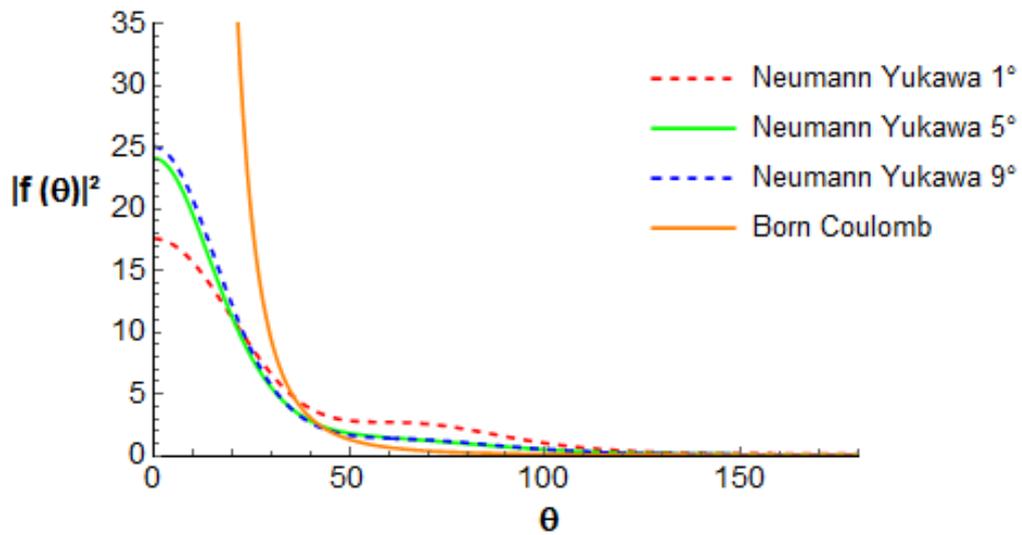
Tabela 8 – Valores numéricos para Born em Coulomb e Neumann no potencial de Yukawa.

$\theta^\circ$	Métodos	
	Born	Neumann
30	9,41293	5,5235
40	3,08676	2,815
60	0,675818	1,48107
80	0,247423	0,978898
100	0,122657	0,502976
120	0,075091	0,221131
150	0,048521	0,0965425

Fonte: autor

A Figura (23) mostra o espalhamento da aproximação de Born em Coulomb e o espalhamento de três séries geradas pelo método de Neumann em Yukawa, onde as ordens das séries são de  $1^\circ$ ,  $5^\circ$  e  $9^\circ$ .

Figura 23 – Espalhamento de Neumann de 1°, 5° e 9° ordem em Yukawa e espalhamento de Born em Coulomb com variação em  $\theta$ .

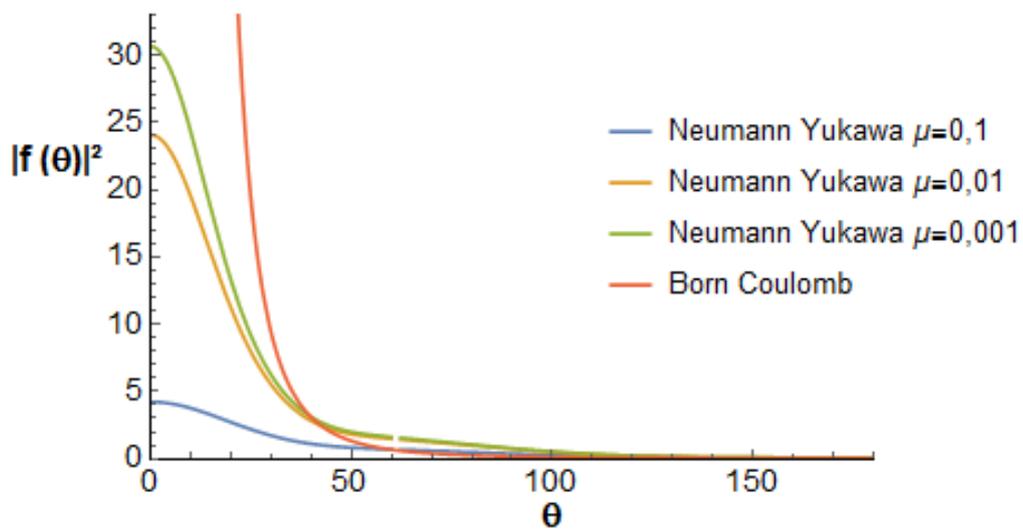


Fonte: autor

Observa-se que a diferença entre as séries de primeira e quinta ordem é maior que a quinta e nona ordem.

A Figura (24) compara os espalhamentos de Neumann em Yukawa com o espalhamento de born em Coulomb, sendo os valores de  $\mu$  iguais a 0,1; 0,01 e 0,001.

Figura 24 – Espalhamento de Born Em Coulomb e espalhamento de Neumann em Yukawa com  $\mu$  igual a 0,1; 0,01 e 0,001.



Fonte: autor

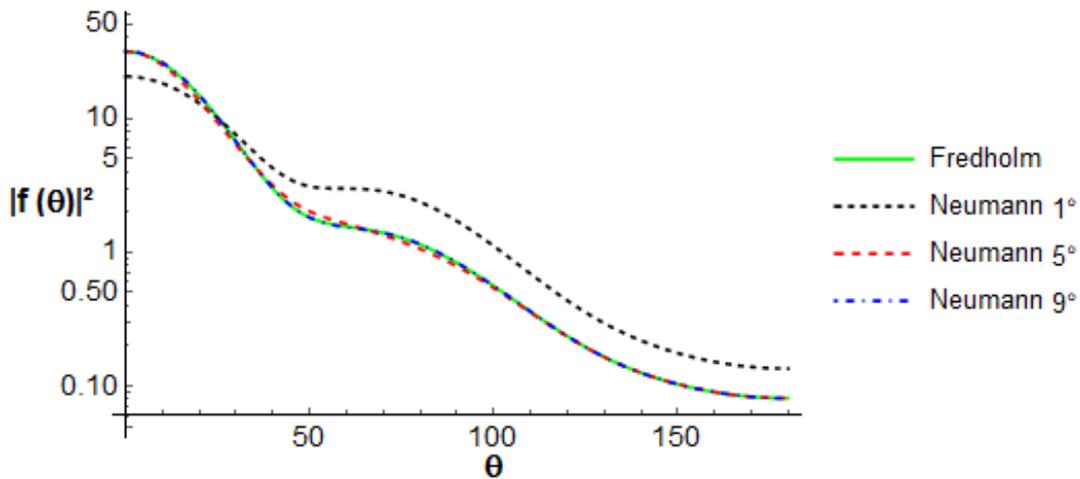
Para  $\mu$  tendendo a zero, o espalhamento de Neumann em Yukawa tende ao de Neumann no potencial de Coulomb.

### 5.3 Comparação Entre os Métodos

A Figura (25) é o plot em monolog do espalhamento no potencial coulombiano do método de kernéis arbitrários e da série de Neumann, onde as condições utilizadas são as mesmas anteriores, massa  $m = 1$ , carga  $Q = 1$  e a constante de Planck  $\hbar = 1$ . O método de Neumann foi usado para gerar três séries, uma de primeira ordem, uma de quinta ordem e uma de nona ordem.

A tabela (9) mostra os valores numéricos para Born e para os métodos de kernéis e Neumann, onde  $\theta$  é igual a 30, 40, 60, 80, 100, 120 e 150 graus.

Figura 25 – Comparação do espalhamento dos métodos de kernéis arbitrários e Neumann para o potencial de Coulomb.



Fonte: autor

Tabela 9 – Comparação dos valores dos métodos de k rn is arbitr rios e Neumann no potencial de Coulomb.

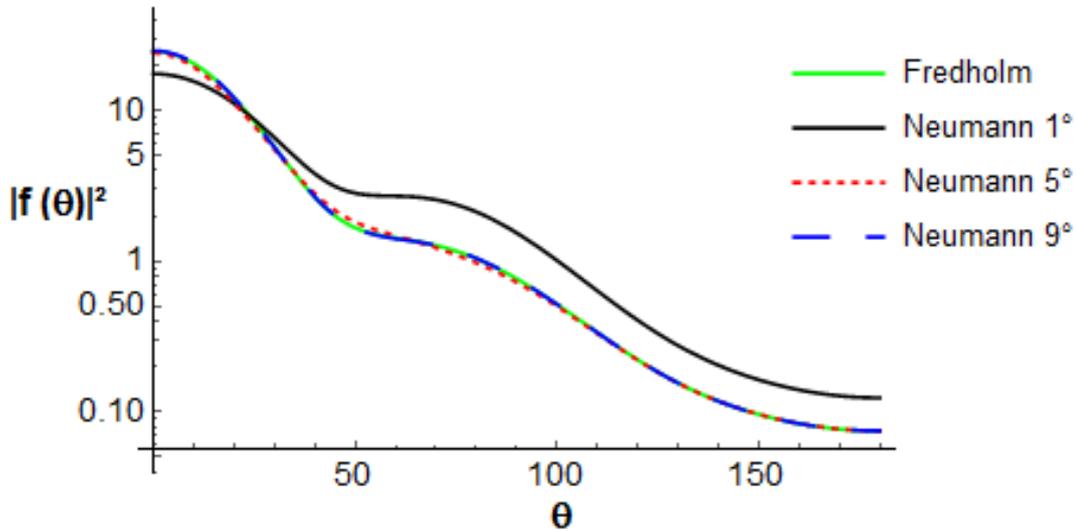
$\theta^\circ$	M�todos				
	Born	Fredholm	Neumann 1�	Neumann 5�	Neumann 9�
30	9,41293	6,70914	7,53702	6,33203	6,66476
40	3,08676	2,97956	4,2394	3,14218	3,00007
60	0,675818	1,55512	2,98912	1,62866	1,5364
80	0,247423	1,1416	2,3698	1,05911	1,14922
100	0,122657	0,560231	1,11259	0,540723	0,560378
120	0,075091	0,23623	0,435885	0,234703	0,23616
150	0,048521	0,103498	0,176541	0,103573	0,103492

Fonte: autor

  observador na Figura (25) e na tabela (9) que aumentando a ordem da s rie Neumann, o valor da s rie tende ao mesmo valor de Fredholm.

A Figura (26) é o plot em monolog do espalhamento no potencial de Yukawa do método de kernels arbitrários e da série de Neumann. A tabela (10) mostra os valores numéricos para Born e para os métodos de kernels e Neumann, onde  $\theta$  é igual a 30, 40, 60, 80, 100, 120 e 150 graus.

Figura 26 – Comparação do espalhamento dos métodos de kernels arbitrários e Neumann para o potencial de Yukawa.



Fonte: autor

Tabela 10 – Comparação dos valores dos métodos de kernels arbitrários e Neumann no potencial de Yukawa.

$\theta^\circ$	Métodos				
	Born	Fredholm	Neumann 1°	Neumann 5°	Neumann 9°
30	9,41293	5,7336	6,62325	5,5235	5,70871
40	3,08676	2,66401	3,82198	2,815	2,68
60	0,675818	1,42998	2,71265	1,48107	1,41701
80	0,247423	1,04532	2,13266	0,978898	1,05079
100	0,122657	0,519188	1,01671	0,502976	0,519309
120	0,075091	0,222548	0,406734	0,221131	0,222492
150	0,048521	0,096503	0,163732	0,096542	0,0964974

Fonte: autor

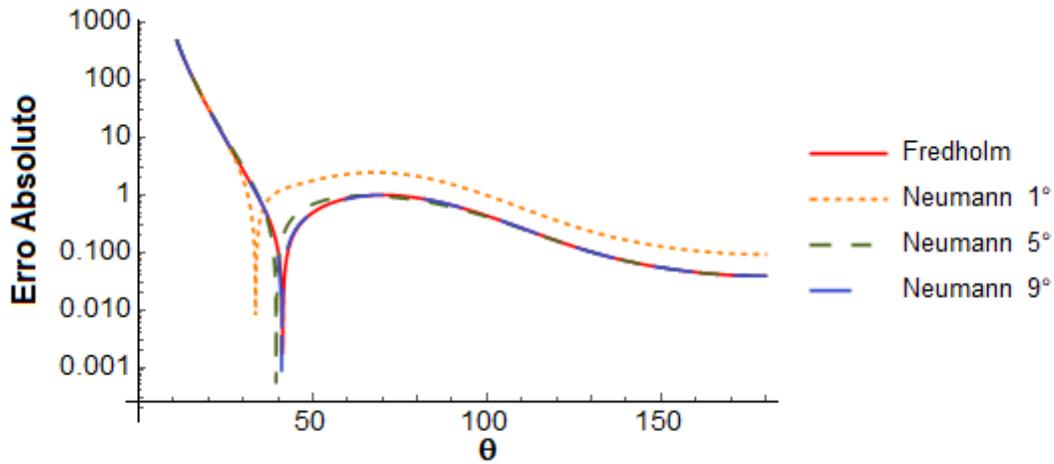
As figuras (27) e (28) são os plots em monolog dos erros absolutos, dada pela equação (BURDEN; FAIRES, 2015):

$$|y - y^*| \tag{169}$$

onde  $y$  é o valor base e  $y^*$  é valor da aproximação, considerando o valor base  $y$  para a aproximação de Born e os valores de aproximações  $y^*$  para o método de kernéis arbitrários e serie de Neumann.

As tabelas (11) e (12) mostram os valores numéricos dos erros absolutos para os métodos de kernéis e Neumann para  $\theta$  igual a 30, 40, 60, 80, 100, 120 e 150 graus.

Figura 27 – Erro absoluto utilizando como base a aproximação de Born no potencial de Coulomb.



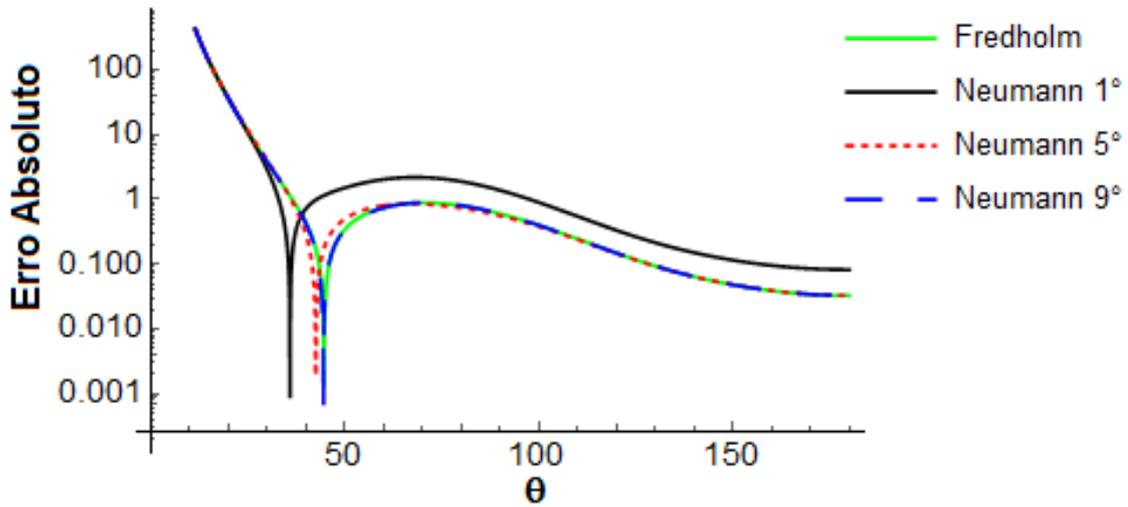
Fonte: autor

Tabela 11 – Erro Absoluto para os métodos de kernéis arbitrários e Neumann no potencial Coulombiano.

$\theta^\circ$	Métodos			
	Fredholm	Neuman1°	Neumann5°	Neumann9°
30	2,70378	1,87591	3,08089	2,74817
40	0,107203	1,15264	0,055424	0,0866914
60	0,879338	2,3133	0,952858	0,86061
80	0,894176	2,12238	0,811687	0,901794
100	0,437574	0,989937	0,418066	0,43772
120	0,161139	0,360794	0,159612	0,161069
150	0,054977	0,128019	0,055052	0,054971

Fonte: autor

Figura 28 – Erro absoluto utilizando como base a aproximação de Born no potencial de Yukawa.



Fonte: autor

Tabela 12 – Erro Absoluto para os métodos de kernéis arbitrários e Neumann no potencial Yukawa.

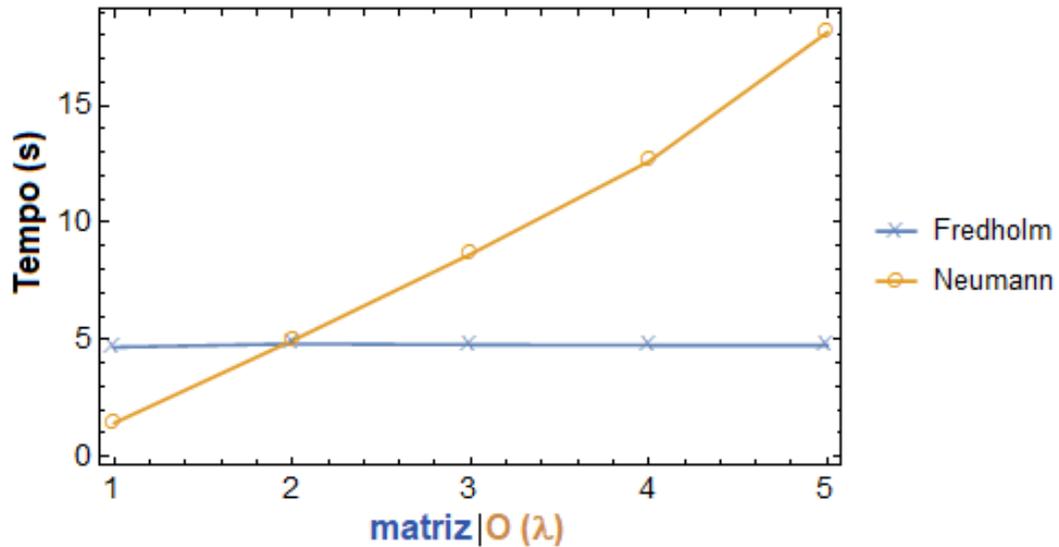
$\theta^\circ$	Métodos			
	Fredholm	Neumann 1º	Neumann 5º	Neumann 9º
30	3,67933	2,78968	3,88942	3,70422
40	0,42275	0,73522	0,27176	0,40676
60	0,75416	2,03683	0,80525	0,74119
80	0,7979	1,88524	0,73147	0,80336
100	0,39653	0,89405	0,38032	0,39665
120	0,14746	0,33164	0,14604	0,1474
150	0,04798	0,11521	0,04802	0,04798

Fonte: autor

Percebe-se pelas figuras (27) e (28) que o método de Neumann tende ao método de kernéis arbitrários a medida que a ordem da série aumenta.

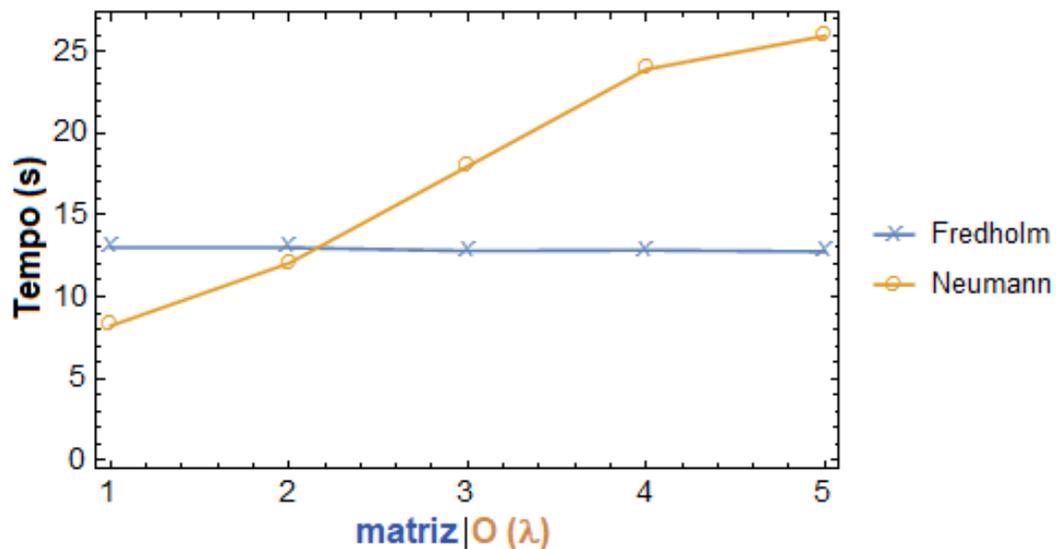
As Figuras (29) e (30) mostram os tempos de processamento para o método de kernéis arbitrários e para o método de Neumann no potencial de Coulomb e Yukawa em um computador com processador Intel Core i5 3337U 1.8 GHz e 8 GBytes de memória RAM com frequência de 800 MHz. Para o método de kernéis arbitrários foram utilizados matrizes de tamanho  $1 \times 1$  até  $5 \times 5$  e para Neumann foram geradas séries de 1º até 5º ordem, sendo que para cada caso o tempo de processamento foi calculado pela média de dez repetições.

Figura 29 – Comparação do tempo de processamento do método de kernels arbitrários e do método de Neumann em Coulomb.



Fonte: autor

Figura 30 – Comparação do tempo de processamento do método de kernels arbitrários e do método de Neumann em Yukawa.



Fonte: autor

Em ambas figuras o método de Neumann apresenta um crescimento linear e o método de kernels arbitrários apresenta pequenas variações. O motivo do kernels arbitrários não apresentar um crescimento no tempo de processamento é por causa dos valores das determinantes das matrizes  $2 \times 2$  e superiores serem iguais a zero.

Assim, considera-se que o método de kernels arbitrários é melhor que a série de Neumann pois ele não apresenta um crescimento significativo no tempo de proces-

samento e como é visto nas figuras (25) e (26), a série de Neumann-Born tende a ter os mesmos resultados que os kernels arbitrários.

## 5.4 Convergência

A hipótese apresentada na equação (115) possui o termo  $\Delta \vec{k}'$  que é a variação que  $k$  sofre diante da colisão. Para analisar o efeito de  $\Delta \vec{k}'$  utiliza-se a série de Maclaurin:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!} \quad (170)$$

para  $n = 1, 2, 3, 4, \dots$

Aplicando a série de Maclaurin (170) no termo  $\Psi'(\vec{r}')$ , onde foi definido na equação (116):

$$\begin{aligned} \Psi'(\vec{r}') &= e^{i\Delta \vec{k}' \cdot \vec{r}'} = 1 + i\Delta \vec{k}' \cdot \vec{r}' + \frac{i^2 \Delta \vec{k}'^2 \cdot \vec{r}'^2}{2!} + \frac{i^3 \Delta \vec{k}'^3 \cdot \vec{r}'^3}{3!} + \dots + \frac{i^n \Delta \vec{k}'^n \cdot \vec{r}'^n}{n!} \\ &= 1 + i\Delta \vec{k}' \cdot \vec{r}' - \frac{\Delta \vec{k}'^2 \cdot \vec{r}'^2}{2!} - \frac{i\Delta \vec{k}'^3 \cdot \vec{r}'^3}{3!} + \frac{\Delta \vec{k}'^4 \cdot \vec{r}'^4}{4!} + \dots + \frac{i^n \Delta \vec{k}'^n \cdot \vec{r}'^n}{n!} \end{aligned} \quad (171)$$

Substituindo  $\Psi'(\vec{r}')$  na equação (121):

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}) &= e^{ik'r'} - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2 k \text{sen}(\theta/2)} \frac{e^{ikr}}{r} \int \text{sen}[2kr' \text{sen}(\theta/2)] \Psi'(\vec{r}') dr' = \\ &= e^{ik'r'} - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2 k \text{sen}(\theta/2)} \frac{e^{ikr}}{r} \int \text{sen}[2kr' \text{sen}(\theta/2)] \left[ 1 + i\Delta \vec{k}' \cdot \vec{r}' + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Delta \vec{k}'^2 \cdot \vec{r}'^2}{2!} - \frac{i\Delta \vec{k}'^3 \cdot \vec{r}'^3}{3!} + \dots + \frac{i^n \Delta \vec{k}'^n \cdot \vec{r}'^n}{n!} \right] dr' \end{aligned} \quad (172)$$

Pode ser obtido a amplitude de espalhamento da equação (172) tendo como base a equação (36):

$$\begin{aligned} f(\theta)_{F|N} &= - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2 k \text{sen}(\frac{\theta}{2})} \int \text{sen} \left[ 2kr' \text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] \left[ 1 + i\Delta \vec{k}' \cdot \vec{r}' + \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Delta \vec{k}'^2 \cdot \vec{r}'^2}{2!} - \frac{i\Delta \vec{k}'^3 \cdot \vec{r}'^3}{3!} + \dots + \frac{i^n \Delta \vec{k}'^n \cdot \vec{r}'^n}{n!} \right] dr' = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f(\theta)_{F|N} = & -\frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2k\text{sen}(\theta/2)} \left[ \int \text{sen}[2kr'\text{sen}(\frac{\theta}{2})] dr' + \right. \\
& + \int i\Delta\vec{k}' \cdot \vec{r}' \text{sen} \left[ 2kr'\text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] dr' - \int \frac{\Delta\vec{k}'^2 \cdot \vec{r}'^2}{2} \text{sen} \left[ 2kr'\text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] dr' + \\
& - \int \frac{i\Delta\vec{k}'^3 \cdot \vec{r}'^3}{6} \text{sen} \left[ 2kr'\text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] dr' + \dots + \\
& \left. + \int \frac{i^n \Delta\vec{k}'^n \cdot \vec{r}'^n}{n!} \text{sen} \left[ 2kr'\text{sen} \left( \frac{\theta}{2} \right) \right] dr' \right] = \\
f(\theta)_{F|N} = & -\frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})} \left[ \frac{1}{2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})} + \frac{\Delta\vec{k}'^2}{8k^3\text{sen}^3(\frac{\theta}{2})} + \frac{\Delta\vec{k}'^4}{32k^5\text{sen}^5(\frac{\theta}{2})} + \dots \right] \quad (173)
\end{aligned}$$

sendo a amplitude de espalhamento  $f(\theta)_{F|N}$  a amplitude tanto de Fredholm tanto de Neumann, já que ambos os métodos utilizam a mesma equação (121), e os termos da série para  $n$  ímpar é igual a zero.

Calculando o limite da amplitude (173) para  $\Delta\vec{k}'$  tendendo à zero:

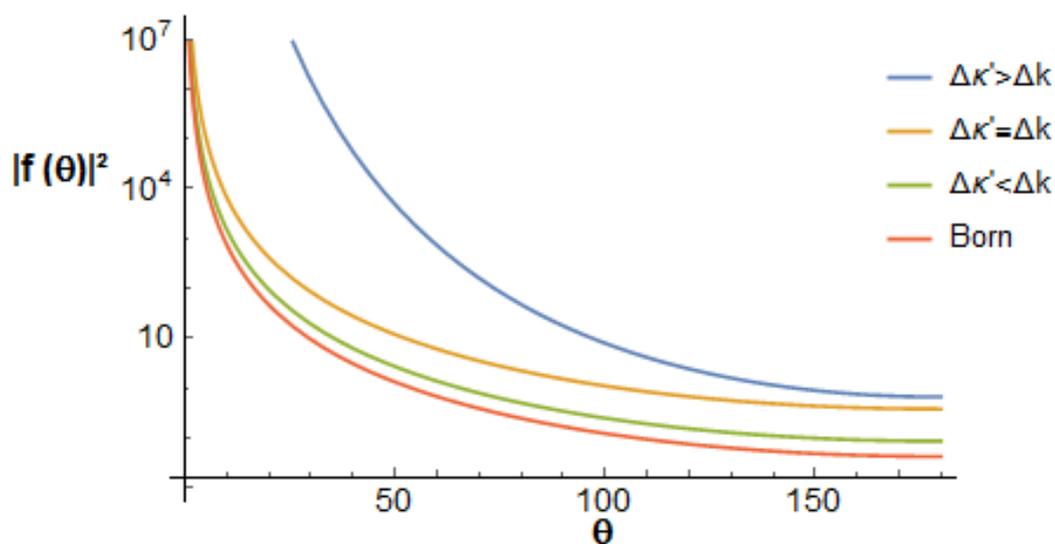
$$\begin{aligned}
\lim_{\Delta\vec{k}' \rightarrow 0} \left\{ -\frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})} \left[ \frac{1}{2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})} + \frac{\Delta\vec{k}'^2}{8k^3\text{sen}^3(\frac{\theta}{2})} + \frac{\Delta\vec{k}'^4}{32k^5\text{sen}^5(\frac{\theta}{2})} + \dots + \right. \right. \\
\left. \left. + \frac{\Delta\vec{k}'^n}{2^{n+1}k^{n+1}\text{sen}^{n+1}(\frac{\theta}{2})} \right] \right\} = -\frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})} \frac{1}{2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})} \quad (174)
\end{aligned}$$

o limite da amplitude leva ao mesmo valor da amplitude de espalhamento da aproximação de Born no potencial de Coulomb, no qual chamaremos de  $f(\theta)_B$ .

Então a amplitude  $f(\theta)_{F|N}$ :

$$f(\theta)_{F|N} = f(\theta)_B - \frac{mQ^2}{4\pi\hbar^2k\text{sen}(\frac{\theta}{2})} \left[ \frac{\Delta\vec{k}'^2}{8k^3\text{sen}^3(\frac{\theta}{2})} + \frac{\Delta\vec{k}'^4}{32k^5\text{sen}^5(\frac{\theta}{2})} + \dots \right] \quad (175)$$

$\Delta\vec{k}'$  é o fator perturbação que a onda sofre ao interagir com o potencial. A Figura (31) considera valores para  $\Delta\vec{k}'$ ,  $\Delta\vec{k}' > \Delta k$ ,  $\Delta\vec{k}' = \Delta k = 2k\text{sen}(\theta/2)$  e  $\Delta\vec{k}' < \Delta k$ , e compara-los com o espalhamento de Born:

Figura 31 – Efeito do termo  $\Delta\kappa'$  para o espalhamento de Born.

Fonte: autor

O valor de  $\Delta\vec{\kappa}'$  é o responsável em causar a diferença da sessão de choque do método de Fredholm e Neumann ao de Born, como visto na Figura (31). Porém, a utilização da hipótese (115) é importante pois sem ela o resultado da amplitude de espalhamento do método de Fredholm e da série de Neumann não fica dependente do ângulo de espalhamento  $\theta$ .

## 6 CONCLUSÃO

Nesta dissertação foi investigado o espalhamento de uma partícula no potencial de Coulomb e de Yukawa. Sendo implementado dois códigos para calcular a amplitude de espalhamento da equação integral de Schrödinger além da utilização de uma hipótese geral da aproximação de Born.

Os resultados para Coulomb mostram que os métodos geram espalhamentos com comportamento semelhante ao da aproximação de Born, porém sem a singularidade próximo do ângulo nulo e a diferença entre os métodos para a aproximação de Born fica entre 0,1 e 1 para  $\theta \geq 40$ .

Os resultados para Yukawa mostram que os métodos geram espalhamentos com comportamento semelhante ao da aproximação de Born, a diferença entre os métodos para a aproximação de Born fica entre 0,01 e 1 para  $\theta \geq 40$ . Em Yukawa, para  $\mu$  tendendo a zero, o resultado do espalhamento tende ao de Coulomb.

Ao comparar os resultados do método de Fredholm com a série de Neumann, chegou a conclusão que Fredholm tende a ser melhor, pois o tempo de processamento de Fredholm é menor do que o tempo de Neumann para série de segunda ordem e superiores além de o resultado do espalhamento para Neumann não possui uma grande diferença dos resultados de Fredholm.

Ao analisar o termo  $\Delta \vec{k}'$  da hipótese, chegou-se a conclusão que ele é o responsável em causar uma diferença do espalhamento de Fredholm e Neumann em relação a Born.

Como proposta futura, o estudo da equação integral de Bethe-Salpeter na frente de luz (SALES et al., 2000) utilizando o método de Fredholm e a série de Neumann.

## Referências

- ALTLAND, A. **Advanced Quantum Mechanics**. 2005. <[http://www.thp.uni-koeln.de/Documents/altland\\_advqm\\_2012.pdf](http://www.thp.uni-koeln.de/Documents/altland_advqm_2012.pdf)>. Acessado: 21/08/2019.
- ARFKEN, G. B.; WEBER, H. J. **Física matemática: Métodos matemáticos para engenharia e física**. [S.l.]: Campus/Elsevier, 2007.
- BASSALO, J. M. F.; CATTANI, M. S. D. **Elementos de Física Matemática**. 3. ed. São Paulo, Brasil: Livraria da Física, 2012.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Numerical Analysis**. 10. ed. Boston, USA: Cengage Learning, 2015.
- CALLIOLI, C.; HYGINO, H.; ROBERTO, C. **Álgebra Linear e Aplicações**. São Paulo: Atual Editora, 1990.
- CIANYL, K. Y. **Analyzing Power in Elastic Scattering of Nucleons off Nuclei**. Dissertação (Mestrado) — African Institute for Mathematical Sciences, 2017.
- CORTES, M. R. **Estudo teórico de efeitos de canais acoplados em colisões de núcleos fortemente e fracamente ligados**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal Fluminense, 2016.
- FEAGIN, J. M. **Quantum Methods with Mathematica**. [S.l.]: TELOS, The Eletronic Library of Science, 1993.
- FREDHOLM, I. Sur une nouvelle méthode pour la résolution du problème de dirichlet. **Vetenskaps-Akademiens Förk. Stockholm 39-46**, 1900.
- GEIGER, H.; MARSDEN, E. The law of deflexion of  $\alpha$  particles through large angles. **The London, Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, 1913.
- GIROTTO, P. H.; SALES, J. H. O. Método fredholm para função de onda quântica de podolsky. **XXI Encontro de modelagem computacional**, 2018.
- GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. 2. ed. [S.l.]: Pearson Education, 2011.
- HASTINGS, C.; MISCHO, K.; MORRISON, M. **Hands-on Start to Wolfram Mathematica and Programming with the Wolfram Language**. [S.l.]: Wolfram Media, 2016.
- HECHT, K. T. **Quantum Mechanics**. [S.l.]: Springer, 2000.
- HILDEBRAND, F. B. **Methods of Applied Mathematics**. [S.l.]: Prentice-Hall of India Private Limited, 1968.
- HOFFMAN, K.; KUNZE, R. **Linear Algebra**. 2. ed. [S.l.]: Prentice-Hall, Inc., 1971.
- KRASNOV, M. I. **Integral Equations**. Moscow, Russia: Mir, 1981.

MAIOROVA, A. V.; FRITZSCHE, S.; MUELLER, R. A.; SURZHYKOV, A. Elastic scattering of twisted electrons by diatomic molecules. **Phys. Rev.**, A98, n. 4, p. 042701, 2018.

SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. **Modern Quantum Mechanics**. 2. ed. [S.l.]: Cambridge University, 2017.

SALES, J. H. O.; FREDERICO, T.; CARLSON, B. V.; SAUER, P. U. Light-front bethe-salpeter equation. **Physical Review. C. Nuclear Physics**, 61, 2000.

SMIRNOV, V. **Cours de Mathématiques Supérieures. Tome IV**. Moscow, Russia: Mir, 1975.

TALMAN, R. M.k.s./gaussian unit conversion. **Laboratory of Nuclear Studies, Cornell University**, 2002.

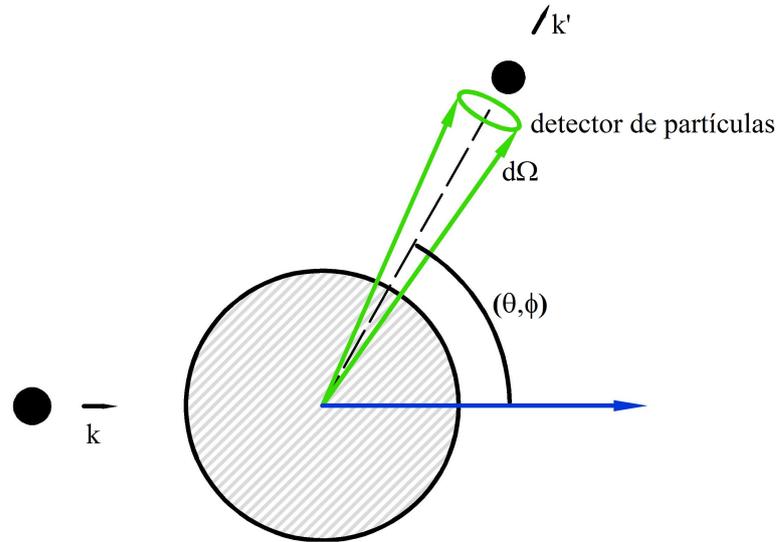
YUKAWA, H. On the interaction of elementary particles. i. **Proceedings of the Physico-Mathematical Society of Japan. 3rd Series**, v. 17, p. 48–57, 1935.

## Apêndices

## APÊNDICE A – Cálculo da Seção de Choque

Para definir a seção de choque (CIANYL, 2017):

Figura 32 – Seção de choque.



Fonte: autor

$$dn \equiv \frac{\text{número de partículas detectadas}}{\text{unidade de tempo}} \propto \begin{cases} \text{fluxo de partículas incidentes } F_i \\ \text{ângulo sólido } d\Omega \end{cases} \quad (176)$$

A constante de proporcionalidade é a chamada seção de choque diferencial:

$$dn = \sigma(\theta, \varphi) F_i d\Omega \quad (177)$$

onde  $dn = \frac{\text{partículas}}{\text{tempo}}$ ;  $\sigma(\theta, \varphi) = \frac{\text{área}}{\text{ângulo sólido}}$ ;  $F_i = \frac{\text{partículas}}{\text{tempo} \cdot \text{área}}$  e  $d\Omega = \text{ângulo sólido}$

A seção de choque pode ser escrita por:  $\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dn}{F_i d\Omega}$

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{F_f \cdot dS}{F_i d\Omega} = \frac{J_f r^2 d\Omega}{J_i d\Omega} = \frac{J_f r^2}{J_i} \quad (178)$$

onde  $F_i \propto J_i$  é o fluxo de probabilidade e  $dn = F_f \cdot dS \propto J_f \cdot dS$ .

Para  $J = \frac{1}{m} \text{Re} (\Psi^* \frac{\hbar}{i} \nabla \Psi)$ , onde para se obter  $J_i$  usa  $\Psi = e^{ikz}$  e para  $J_f$  usa  $\Psi = f(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$ . Assim:

$$J_i = \frac{1}{m} \left[ e^{-ikz} \frac{\hbar}{i} i k \hat{z} e^{ikz} \right] = \frac{\hbar k}{m} \hat{z} \quad (179)$$

e  $J_f$  é obtido, usando  $\nabla$  em coordenadas esféricas:

$$\nabla = \hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\varphi} \frac{1}{r \text{sen}(\theta)} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (180)$$

Os componentes de  $J_f$  são:

$$(J_f)_r = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^2} |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (181)$$

$$(J_f)_\theta = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^3} \left[ \frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} f(\theta, \varphi) \right] \quad (182)$$

$$(J_f)_\varphi = \frac{\hbar k}{m} \frac{1}{r^3 \text{sen}(\theta)} \left[ \frac{1}{i} f^*(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi} f(\theta, \varphi) \right] \quad (183)$$

Note que  $r \rightarrow \infty \Rightarrow (J_f)_r \gg (J_f)_\theta$  e  $(J_f)_\varphi$ , isso permite obter:

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2 \quad (184)$$

onde a partícula chega na direção  $z$  e sai na direção  $(\theta, \varphi)$ .

## Anexos

## ANEXO A – Unidade Gaussiana C.G.S

Atualmente a maioria das pesquisas sobre aceleradores de partículas usam unidades S.I., que na teoria eletromagnética são referidos como unidades M.K.S. Isso causa uma dificuldade significativa quando análises na física fundamental utilizam unidades gaussianas (TALMAN, 2002). A tabela (13) dá o fator de conversão das unidades.

Tabela 13 – Gaussian Conversion Factors. "3"  $\equiv$  2.9979

Quantity	Symbol	S.I. Unit	Factor	Gaussian Unit
Length	$l$	m	$10^2$	cm
Mass	$m$	kg	$10^3$	gm
Time	$t$	sec	1	sec
Frequency	$\nu$	hertz (Hz)	1	1/s
Force	$F$	(N)ewton	$10^5$	dyne
Energy (work)	$W$	(J)oule	$10^7$	erg
Power	$P$	(W)att	$10^7$	erg-sec <sup>-1</sup>
Charge	$q$	(C)oulomb	"3" $\times$ $10^9$	statcoul
Charge density	$\rho$	C.m <sup>-3</sup>	"3" $\times$ $10^3$	statcoul-cm <sup>-3</sup>
Current	$I$	(A)mp	"3" $\times$ $10^9$	statamp
Current density	$J$	A.m <sup>-2</sup>	"3" $\times$ $10^5$	statamp-cm <sup>-2</sup>
Electric field	$E$	V.m <sup>-1</sup>	$10^{-4}/$ "3"	statvolt-cm <sup>-1</sup>
Electric potential	$V$	(V)olt	$10^{-2}/$ "3"	statvolt
Polarization	$P$	C.m <sup>-2</sup>	"3" $\times$ $10^5$	dip.mom-cm <sup>-3</sup>
Electric Displacement	$D$	c.m <sup>-2</sup>	$4\pi \times$ "3" $\times$ $10^5$	statvolt-cm <sup>-1</sup>
Conductivity	$\sigma$	mho.m <sup>-1</sup>	"3" $\times$ "3" $\times$ $10^9$	sec-cm <sup>-1</sup>
Resistance	$R$	ohm $\Omega$	$10^{-11}/$ ("3" $\times$ "3")	sec-cm-1
Capacitance	$C$	(F)arad	"3" $\times$ "3" $\times$ $10^{11}$	cm
Magnetic Flux	$\phi$	weber (Wb)	$10^8$	gauss-cm <sup>2</sup>
Magnetic Indction	$B$	(T)esla	$10^4$	gauss
Magnetic field	$H$	A.turn.m <sup>-1</sup>	$4\pi \times 10^{-3}$	oersted
Magnetization	$M$	A.m <sup>-1</sup>	$10^{-3}$	mag.mom-cm <sup>-3</sup>
Inductance	$L$	(H)enry	$10^{-11}/$ ("3" $\times$ "3")	Gaussian e.s.u.

Fonte: Richard Talman