

Universidade Federal da Bahia
Instituto de Física
Programa de Pós-graduação em Física

Andréia dos Santos Simões

**Espalhamento de Elétrons e Póstrons
Relativísticos por Átomos usando a
Dinâmica de Campos Térmicos**

Salvador

2021

Andréia dos Santos Simões

Espalhamento de Elétrons e Póstrons Relativísticos por Átomos usando a Dinâmica de Campos Térmicos

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal da Bahia como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. José David Manguera Viana

Coorientadora: Prof^a. Dra Maria das Graças Reis Martins

Salvador

2021

A meus pais, base de amor e carinho.

Agradecimentos

Este trabalho só foi possível graças à contribuição de várias pessoas e instituições, às quais sou imensamente grata e faço aqui meus agradecimentos.

À minha definição de Deus.

À minha família pelo apoio incondicional.

Aos meus orientadores professora Maria das Graças Reis Martins e professor José David Manguera Viana que me acompanham desde a iniciação científica, por todas as contribuições relevantes para minha formação, pelo apoio no desenvolvimento dos trabalhos acadêmicos, na vida profissional e estímulo ao meu crescimento. Obrigada pelos ensinamentos e experiência compartilhada.

A Caio, pela paciência em me ensinar, pelas discussões, pelo companheirismo, amizade e incentivo; sem você essa tese não seria possível.

A professora Hebe pela generosidade e colaboração no início das discussões do trabalho.

Ao grupo de amigos da Graduação, Társio, Eli, Ismael, Vinicius, em especial a Mônica, sempre prestativa e companheira, e a Cândida (Roli) que, mesmo longe, sempre esteve torcendo por mim.

Às Amigas que construí ao longo do doutorado. Mariana (gordinha) pelo incentivo, companheirismo, por compartilhar experiências, e Rosa pela solicitude, pelos primeiros passos no LaTeX e pelas nossas loucas interpretações de sonhos. Obrigada meninas pelos momentos de aprendizado e descontração.

A Leonardo, pela imensa ajuda na digitação, uso do LaTeX e por me fazer rir.

Ao Instituto de Física da UFBA, essa instituição que me acolheu desde a graduação e por qual nutro grande carinho, meus agradecimentos vão para todos os professores que contribuíram para minha formação, em especial o professor Arthur por quem nutri grande

carinho e admiração.

A todos técnicos administrativos, técnicos de laboratório e terceirizados da limpeza, em especial aos funcionários da antiga biblioteca de Física, Dona Eraldina, seu Canuto, seu Valtério, Elcio e Jô, ao síndico seu Nelson, sempre disposto a ajudar e “arrumar a casa” e aos funcionários antigos e atuais do CEAPG, Geraldo, João Paulo, Marli, Lúcia Helena, Priscila, Marcos Paulo, Ana, Dona Diva e Anderson. O trabalho de vocês sempre foi muito importante.

A UFRB, ao CETENS e a todos os meus companheiros da área de Física.

A Luana, que me ajudou a vencer essa etapa com seu profissionalismo, inteligência e cuidado.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

A todos, o meu mais profundo obrigada!

Resumo

Neste trabalho, usamos a estrutura do espaço de Fock para aplicar a dinâmica de campos térmicos (TFD - Thermofield Dynamics) na teoria relativística de espalhamento. Partimos da equação de Dirac como descrevendo um campo de matéria relativística; a estrutura do espaço de Fock foi aplicada ao sistema original e ao seu dual; a transformação de Bogoliubov é usada para determinar a matriz de espalhamento à temperatura finita. Com esta formulação determinamos expressões para as seções de choque diferenciais (DCS – Differential Cross Section) dos processos de espalhamento elástico de elétron e de pósitron relativísticos por átomos à temperatura finita, e realizamos cálculos utilizando essas expressões. Para a correção do potencial eletrostático usamos uma função de blindagem analítica baseada na superposição de potenciais do tipo Yukawa. Obtivemos que a influência da temperatura se apresenta como uma correção a descrição à temperatura zero. Essa correção tem valor um para temperatura igual a zero e tende para um valor constante (0,0625) quando a temperatura tende a infinito; neste limite a DCS térmica é 16 vezes menor que a DCS à temperatura zero, resultado compatível com dados obtidos por outros autores na análise de outros sistemas.

Palavras Chaves: Temperatura, Dinâmica de Campos Térmicos, Espalhamento, Seção de Choque Diferencial.

Abstract

In this work, we connected the Fock space structure in order to apply the Thermo-field dynamics (TFD) procedure in relativistic scattering theory. We begin from Dirac's equation as description of relativistic matter field; a Fock space structure was applied to the original system and to its dual; Bogoliubov transformation was used to determine the scattering matrix at finite temperature. With this information, we have determined expressions for the differential cross section (DCS) derivations of the relativistic electron and relativistic positron elastic scattering processes by atoms at finite temperature, and we have performed calculations using these expressions. For an electrostatic potential correction, we have used an analytical shielding function based on the superposition of Yukawa-type potentials. We have obtained that the influence of the temperature presents itself as a correction to the description at zero temperature. This correction has a value of unity for zero temperature and tends to a constant value (0.0625) when the temperature tends to infinity; in this limit the thermal DCS is 16 times smaller than the zero temperature DCS, result compatible with data obtained by other authors in the analysis of other systems.

Keywords: Temperature, Thermofield Dynamics, Scattering, Differential Cross Section.

Lista de Figuras

- 4.1 Fator térmico $(1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta))^2$ em função da temperatura $T(K)$ para a energia do elétron incidente de 10 eV, 1.000 eV, 10.000 eV e 100.000 eV. 100
- 4.2 Fator $\Gamma_{\mathbf{p}(\beta)}$ em função da temperatura $T(K)$ para a energia do elétron incidente de 10 eV, 1.000 eV, 10.000 eV e 100.000 eV. 100
- 4.3 Perfis do gráfico do fator térmico $(1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta))^2$ em função da temperatura $T(K)$ e da energia do elétron incidente $E(eV)$ 101
- 4.4 DCS de Mott térmica (m^2/sr) para o espalhamento de elétrons com energia incidente 5.000 eV, 10.000 eV e 100.000 eV. 102
- 4.5 DCS de Mott-Yukawa térmica e DCS de Mott-Salvat térmica para o espalhamento de elétrons com energia incidente de 5keV. 105
- 4.6 DCS de Mott-Yukawa térmica (m^2/sr) em função da temperatura $T(K)$ e do ângulo de espalhamento $\theta(radianos)$ para os processos $e^- - Ar$ e $e^- - Xe$ e energia de 5.000 eV e 10.000 eV 107
- 4.7 Superposição de ondas planas monoenergéticas ($p=cte$) formando um ângulo fixo θ_0 com o eixo z [66]. 109

Lista de Tabelas

4.1	DCS de Mott-Yukawa e de Mott-Salvat para e^- -H, e^- -Ar e e^- -Xe para T=0K e energia de 5.000 eV.	106
4.2	Parâmetros usados na determinação das DCS de Mott-Yukawa térmica. . .	108
E.1	Parâmetros da função de blindagem analítica $\phi_a(r)$,	147

Sumário

1. <i>Introdução</i>	11
2. <i>Dinâmica de Campos Térmicos</i>	15
2.1 Teoria de Campos à Temperatura Finita	15
2.2 Dinâmica de Campos Térmicos - Formalismo Geral	16
2.3 Oscilador Harmônico em DCT	18
2.3.1 Oscilador Fermiônico	18
2.3.2 Oscilador Bosônico	23
2.3.3 Notação Matricial	25
2.4 Campo Livre de Dirac Térmico	26
3. <i>Operador de Espalhamento no Espaço de Fock</i>	30
3.1 Segunda Quantização no Espaço de Fock	30
3.1.1 Espaço de Fock Direto	31
3.1.2 Espaço de Fock Dual	36
3.2 Segunda Quantização do Campo de Dirac	40
3.2.1 Segunda Quantização do Campo de Dirac Direto	40
3.2.2 Segunda Quantização do Campo de Dirac Dual	49
3.3 Operador Espalhamento no Espaço de Fock	55
3.3.1 Operador Espalhamento no Espaço de Fock Direto	56
3.3.2 Operador Espalhamento no Espaço de Fock Dual	64
3.4 Teoria de Perturbação	72
3.4.1 Teoria de Perturbação - S em \mathcal{H} Direto	72
3.4.2 Teoria de Perturbação - \tilde{S} em $\tilde{\mathcal{H}}$ Dual	76

4. <i>Espalhamento à Temperatura Finita</i>	80
4.1 Espaço de Fock Duplicado	80
4.2 Operador Espalhamento no Espaço de Fock Duplicado	81
4.3 Seção de Choque Diferencial Térmica	86
4.3.1 Espalhamento de Elétron Relativístico por Átomo	86
4.3.2 Espalhamento de Pósitron por Átomo	110
5. <i>Conclusões e Perspectivas</i>	115
<i>Referências</i>	117
 <i>Apêndice</i>	 123
A. <i>Campo de Dirac</i>	124
A.1 Campo de Dirac Livre	124
A.2 Campo de Dirac Livre Dual	129
B. <i>Operador Espalhamento</i>	131
B.1 Operador Espalhamento: Espaço Direto	131
B.2 Operador Espalhamento: Sistema Dual	135
C. <i>As Fases Causais das Matrizes \mathbf{S} e $\hat{\mathbf{S}}$</i>	137
D. <i>Cálculos de A_2, \tilde{A}_2, A_3 e \tilde{A}_3</i>	140
E. <i>Potencial de Yukawa</i>	145

Introdução

A teoria de espalhamento é utilizada para o estudo de sistemas em diferentes áreas da Física. A maior parte de nosso conhecimento sobre a estrutura da matéria, desde os cristais, átomos, núcleos até as partículas elementares, se origina de estudos sobre espalhamento. Em particular, na física da matéria condensada, que tem sob seu foco de investigação uma grande variedade de sistemas e materiais, a maior parte do entendimento microscópico da matéria vem do espalhamento de nêutrons, fótons, elétrons, e mais recentemente, pósitrons. Os nêutrons são usados para determinar estruturas cristalinas e investigar as propriedades dos sólidos e as técnicas de espalhamento dessas partículas complementam outras técnicas de espectroscopia, como a de espalhamento por raio X [1, 2,3]; fótons são utilizados em espectroscopia para elucidar os detalhes da estrutura eletrônica e magnética [4, 5]; elétrons podem ser usados para observar as transições eletrônicas; as seções de choque originadas dos processos colisionais envolvendo elétrons por átomos ou moléculas podem ser empregadas em pesquisas em plasmas frios, lasers, identificação de moléculas isômeras, etc [6-8]; os pósitrons, por sua vez, são usados na caracterização de superfícies sólidas, espectroscopia de massa, e sua interação com os elétrons pode fornecer informações valiosas sobre propriedades físico-químicas dos materiais [9, 10, 11]. Por essas e muitas outras razões, a teoria quântica de espalhamento, relativística ou não, é de importância fundamental para a física [12].

O processo de espalhamento de elétrons e pósitrons por átomos ou moléculas é uma linha de investigação atual da física da matéria condensada e da física atômica e molecular. Diversos experimentos de espalhamento de elétrons e pósitrons foram realizados nos últimos anos; em consequência, estudos teóricos de seção de choque diferencial e total foram realizados usando diferentes procedimentos [13-18].

No que se refere a experiências, desde a década de vinte do século passado encontram-se resultados referentes à medida de seções de choque de espalhamento de elétrons por átomos e moléculas [19] embora, para algumas moléculas, como por exemplo as de interesse na indústria microeletrônica e no estudo ambiental, ainda hoje haja escassez de resultados para algumas energias. Isso se deve, entre outros fatores, ao fato que a obtenção destes dados experimentais é em geral difícil, seja pela instabilidade de certas espécies químicas, seja pelo complexo processo de calibração dos aparelhos [20]. Com relação às propostas teóricas, o desenvolvimento apresentado pela indústria de computadores no final do século XX propiciou o aparecimento e extensões de métodos teóricos, sendo hoje de larga aplicação métodos como a teoria multicanal que, desde 1985, vem apresentando bons resultados [21,22], o método variacional de Schwinger em sua versão iterativa combinada com o método das ondas distorcidas, com o método CI (interação de configurações)[13-15, 23, 24] e com a DFT [25], e o método das frações continuadas (MCF)[17], por exemplo. Geralmente esses estudos são não-relativísticos e não consideram a influência da temperatura; entretanto, essas duas características, altas velocidades e temperatura, podem ser fatores importantes na determinação de algumas propriedades de interesse.

Apesar dos métodos teóricos em sua maioria empregarem a Teoria Quântica Não-Relativística, estudos apontam que o tratamento cuidadoso dos efeitos relativísticos em grande parte dos fenômenos físicos e químicos é inevitável podendo-se, em particular, citar a química dos elementos mais pesados da tabela periódica e seus compostos que, para sua compreensão, exige a Teoria Quântica Relativística [26]. Na realidade, os efeitos relativísticos estão em todos os elementos e, dependendo da precisão desejada para um cálculo, esses efeitos podem ser necessários mesmo para elementos leves (H, C, N, O, etc) [27], como na previsão da estrutura fina do átomo de hidrogênio [28], e na descrição precisa das propriedades da molécula de hidrogênio[29].

Tratando-se de colisões, estudos apontam que os efeitos relativísticos no espalhamento de elétrons de baixa energia por átomos pesados podem ser significativos. A razão para isso parece resultar do fato de que o elétron pode penetrar no átomo de modo a ser acelerado pela carga nuclear, atingindo altas velocidades. Sob tais circunstâncias, pode-se esperar alguma modificação da seção de choque [31]. Além disso, uma descrição precisa do espalhamento elástico de elétrons e pósitrons relativísticos por átomos é necessária em um número grande de domínios (por exemplo, teoria do chuvaire de raios- γ , a microscopia

eletrônica, a microanálise de sonda de elétrons). Na literatura há trabalhos importantes neste assunto podendo-se citar Walker [31], que fez uma revisão geral do tema no final do século passado, Salvat [32,33] que estudou a aplicabilidade da aproximação do potencial estático no espalhamento de elétrons e pósitrons de alta energia, e Serbo et al [34] que recentemente estudaram o espalhamento de elétrons de vórtices (twisted) relativísticos.

Nesses estudos constata-se que: (i) para energias do projétil maiores que alguns keV as correções devido ao potencial de troca e à polarização da nuvem de carga do alvo são insignificantes sendo possível determinar, com boa precisão, na aproximação do campo estático incluindo correções relativas à blindagem, a seção de choque diferencial (DCS); (ii) nos trabalhos de Walker e Salvat é utilizada a equação de Dirac e sua expansão em ondas parciais nos moldes do que ocorre com a teoria não-relativística baseada na equação de Schrödinger e seus desdobramentos e (iii) os trabalhos não envolvem a temperatura.

Uma forma de incluir os efeitos relativísticos e de temperatura nos processos de espalhamento de elétrons e pósitrons por átomos e moléculas é utilizar a teoria quântica relativística de campos, uma vez que a mesma possui características que são convenientes para analisar sistemas de muitos corpos.

A proposta da teoria quântica de campos é escrever os observáveis em termos de operadores que aumentam ou diminuem o número de quanta de excitação do sistema, identificados como partículas elementares cujas características como massa, carga elétrica e spin se refletem nas propriedades do campo. Sendo assim sistemas de muitos corpos, tratados em física da matéria condensada e física atômica e molecular, podem ser analisados via formalismo de campos, já que toda a informação sobre o número e estado das partículas pode ser resumida na descrição do estado do campo. Além disso, em um tratamento relativístico, com possibilidade de criação e aniquilação de partículas, a função de onda da mecânica quântica usual (primeira quantização) perde o significado, e o formalismo de campos torna-se essencial [35-36].

Desta forma, para tratar da influência da temperatura em processos de espalhamento de elétrons e pósitrons por átomos ou moléculas, uma das possibilidades é o uso de desenvolvimentos da teoria quântica de campos, especificamente da teoria de campos a temperatura finita, a Thermofield Dynamics (Dinâmica dos Campos Térmicos - DCT), proposta para fornecer uma descrição estatística de sistemas físicos através de técnicas da teoria de campos convencional, estabelecida em temperatura zero. A DCT é uma teoria quântica de

campos a tempo real desenvolvida por Umezawa e Takahashi [37-39]; essa teoria considera uma duplicação do espaço de Hilbert e a transformação de Bogoliubov a partir da qual operadores térmicos são introduzidos. Atualmente, a DCT é utilizada em diversas áreas da física, podendo-se citar a matéria condensada, física nuclear, física de partículas, óptica quântica, cosmologia, informação quântica, etc [40-44].

Para o desenvolvimento relativístico utilizaremos a proposta de Scharf [45]. Neste desenvolvimento da teoria de campos o autor, ao considerar a teoria de Dirac de elétrons e pósitrons quantizada em campos eletromagnéticos dependentes do tempo, abandona a abordagem usual lagrangiana e parte diretamente para a teoria de espalhamento construindo a matriz S (na segunda quantização) para o problema de campo externo, a menos de uma fase. Para a ligação entre a Dinâmica de Campos Térmicos e a formulação de Scharf para a matriz S , seguimos a proposta de Plácido [46]. Neste contexto o espaço de Fock é construído para o campo de Dirac e para o campo Dual, o espaço de Fock duplicado é construído bem como a matriz S obtendo-se, então, a matriz S térmica e daí a seção de choque diferencial (DCS- Differential Cross Section) dependente da temperatura.

No presente trabalho apresentamos um desenvolvimento da teoria de espalhamento elástico de elétrons e pósitrons com energia superior a 5keV, por átomos, o que vai além das limitações citadas acima em (ii) e (iii), uma vez que usamos a Teoria Quântica de Campos Relativística e introduzimos a temperatura. Para a determinação do potencial eletrostático correspondente aos vários átomos, consideramos a superposição de potenciais de Yukawa com função de blindagem determinada por Salvat et al [32].

Visto que a inclusão da temperatura será realizada por intermédio da DCT, no capítulo 2 expomos os principais aspectos da Dinâmica de Campos Térmicos e apresentamos a termalização do campo livre de Dirac, tendo em vista que elétrons e pósitrons, partículas de interesse deste trabalho, são férmions descritos pelo campo de Dirac. No terceiro capítulo, seguindo as referências [45, 46], construímos o espaço de Fock, assim como o operador de espalhamento para os sistemas original e dual. No capítulo 4, apresentamos a construção do operador espalhamento no espaço de Fock duplicado e o utilizamos para determinar a seção de choque diferencial (DCS) dos processos de espalhamento de elétrons e pósitrons por um potencial estático à temperatura finita. Por fim, no capítulo 5 expomos nossas conclusões e perspectivas, seguidas das referências e de cinco apêndices.

Dinâmica de Campos Térmicos

A teoria quântica de campos à temperatura finita pode ser considerada uma combinação de três ramos da física: mecânica quântica, relatividade e física estatística [47]. Dentre os formalismos usados nessa teoria para introduzir temperatura em teoria de campos, empregaremos neste trabalho a Dinâmica de Campos Térmicos - DCT, cujos aspectos gerais serão apresentados neste capítulo. A maioria dos tópicos aqui abordados são cobertos de maneira mais ampla em vários livros didáticos [38] [39] [48].

2.1 Teoria de Campos à Temperatura Finita

A teoria quântica de campos usual é formalizada na temperatura zero, e muitas das previsões teóricas baseadas nessa teoria como, por exemplo, as seções de choque de colisões de partículas em aceleradores, são consistentes com os dados experimentais; porém, a temperatura é um fator importante no mundo físico (real), que é um mundo de temperatura diferente de zero. Portanto, é pertinente nos questionarmos quando as contribuições da temperatura passam a ser relevantes; que novos fenômenos ausentes à temperatura zero poderiam surgir em um ambiente térmico; o que ocorre quando a matéria é aquecida a temperatura suficientemente alta, como nas colisões nucleares em que a matéria nuclear é aquecida ao ponto dos nucleons e os íons “derreterem” em quarks e glúons, ou mesmo o que acontece no interior de uma estrela de nêutrons, onde há a fusão da matéria nuclear [49]. Para responder a esses e outros questionamentos, e estudar fenômenos sob influência da temperatura, é necessário uma teoria que formalmente leve em consideração a temperatura, e a teoria de campos à temperatura finita é uma possibilidade.

O primeiro formalismo para estudar teoria de campos a temperatura finita foi apre-

sentado por Matsubara na década de 1950 [50], sendo adequado para tratar fenômenos em equilíbrio. Este formalismo permitiu a generalização dos diversos métodos e técnicas desenvolvidos na teoria de campos a temperatura zero, para o caso de temperatura finita [51]. No entanto, ao longo dos anos, surgiram formalismos alternativos para realizar cálculos dentro da teoria de campos térmicos e atualmente podemos classificá-los em dois grupos: formalismo de tempo imaginário e formalismo de tempo real. Dentro do formalismo de tempo real temos a Dinâmica de Campos Térmicos (DCT), desenvolvida por Umezawa e Takahashi[37], cujos elementos básicos são a duplicação do espaço de Hilbert e uma transformação unitária denominada transformação de Bogoliubov que, associada à duplicação conduz à termalização. Neste trabalho, utilizaremos a DCT para termalizar o operador espalhamento.

2.2 Dinâmica de Campos Térmicos - Formalismo Geral

Segundo a mecânica estatística, a média de qualquer observável em equilíbrio térmico no ensemble canônico é definida como:

$$\langle A \rangle = Z^{-1}(\beta) \text{Tr} A e^{-\beta H} \quad (2.1)$$

sendo que Tr indica o traço, H o hamiltoniano do sistema e $Z(\beta)$ a função de partição

$$Z(\beta) = \text{Tr} e^{-\beta H}, \quad (2.2)$$

em que $\beta = \hbar/k_B T$ especifica a temperatura T , e k_B é a constante de Boltzman.

Assumindo que os autovalores de H são discretos e que $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, com $\langle n|m\rangle = \delta_{mn}$, podemos reescrever a expressão (2.1)

$$\langle A \rangle = Z^{-1}(\beta) \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n|A|n\rangle. \quad (2.3)$$

A ideia da DCT é escrever as médias estatísticas dos operadores em termos dos valores esperados em estados térmicos $|0(\beta)\rangle$, de modo que

$$\langle A \rangle = \langle 0(\beta)|A|0(\beta)\rangle = Z^{-1}(\beta) \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n|A|n\rangle. \quad (2.4)$$

Admitindo que podemos expressar $|0(\beta)\rangle$ como uma combinação linear de vetores no espaço de Hilbert, ou seja:

$$|0(\beta)\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|0(\beta)\rangle = \sum_n f_n(\beta) |n\rangle \quad (2.5)$$

temos

$$\langle 0(\beta)|A|0(\beta)\rangle = \sum_{mn} f_n^*(\beta)f_m(\beta)\langle n|A|m\rangle \quad (2.6)$$

que concorda com a equação (2.4), desde que

$$f_n^*(\beta)f_m(\beta) = Z^{-1}(\beta)e^{-\beta E_n}\delta_{nm}. \quad (2.7)$$

A relação anterior assemelha-se à condição de ortogonalidade para vetores de estado, e não pode ser satisfeita por números. Isso sugere que $f_m(\beta)$ deve ser um elemento de um espaço vetorial e que, enquanto nos restringirmos ao espaço de Hilbert original, não poderemos definir um estado térmico que satisfaça a equação (2.4). Portanto, devemos duplicar o espaço físico original introduzindo o espaço $\tilde{\mathcal{H}}$, cópia idêntica do espaço de Hilbert original \mathcal{H} , tal que

$$\tilde{H}|\tilde{n}\rangle = E_n|\tilde{n}\rangle \quad (2.8)$$

e

$$\langle \tilde{m}|\tilde{n}\rangle = \delta_{mn}, \quad (2.9)$$

em que \tilde{H} é o hamiltoniano que junto com seus autovetores $|\tilde{n}\rangle$ descrevem o sistema dual e E_n são, por definição, iguais aos autovalores do hamiltoniano H definido em \mathcal{H} .

Sendo assim, podemos considerar que $f_n(\beta)$ é um vetor do espaço de Hilbert dual, ou seja, $f_n(\beta) = g_n(\beta)|\tilde{n}\rangle$, de modo que o estado $|0(\beta)\rangle$ torna-se

$$|0(\beta)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(\beta)|n, \tilde{n}\rangle, \quad (2.10)$$

com $|n, \tilde{n}\rangle = |n\rangle \otimes |\tilde{n}\rangle$ sendo uma base do espaço de Hilbert duplicado $\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H} \otimes \tilde{\mathcal{H}}$.

Calculando (2.4) com (2.10), tem-se

$$g_n(\beta) = Z(\beta)^{-1/2}e^{-\beta \frac{E_n}{2}} \quad (2.11)$$

e, conseqüentemente, o estado $|0(\beta)\rangle$, chamado de vácuo térmico, é reescrito da forma

$$|0(\beta)\rangle = Z(\beta)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \frac{E_n}{2}} |n, \tilde{n}\rangle, \quad (2.12)$$

onde assumimos que o operador do espaço original A não atua no espaço de Hilbert til, isto é:

$$\langle \tilde{m}', n'|A|n, \tilde{m}\rangle = \langle n'|A|n\rangle\delta_{m'm}, \quad (2.13)$$

o que indica a independência dos sistemas, de modo que podemos introduzir os operadores \tilde{A} associados ao sistema dual da seguinte forma:

$$\langle \tilde{m}', n' | \tilde{A} | n, \tilde{m} \rangle = \langle \tilde{m}' | \tilde{A} | \tilde{m} \rangle \delta_{n'n}. \quad (2.14)$$

A relação entre os observáveis no espaço de Hilbert original e no espaço de Hilbert dual é dada através das regras de conjugação til [39]

$$\begin{aligned} (\widetilde{\widetilde{A_i A_j}}) &= (\widetilde{A_i A_j}) \\ (\widetilde{c A_i + A_j}) &= c^* \widetilde{A_i} + \widetilde{A_j} \\ (\widetilde{A_i^+}) &= (\widetilde{A_i})^+ \\ (\widetilde{\widetilde{A_i}}) &= A_i \\ [A_i, \widetilde{A_j}]_- &= 0, \end{aligned} \quad (2.15)$$

sendo $[A, B]_- = AB - BA$ o comutador dos operadores A e B .

2.3 Oscilador Harmônico em DCT

Nesta seção aplicaremos o formalismo da DCT ao oscilador fermiônico e estenderemos o procedimento ao oscilador bosônico, apresentando os principais resultados.

2.3.1 Oscilador Fermiônico

Um oscilador fermiônico é um sistema definido pelo hamiltoniano ($\hbar = 1$)

$$H = w a^\dagger a, \quad (2.16)$$

onde w é a frequência, e os operadores de criação a^{dag} e destruição a satisfazem as seguintes relações de anticomutação:

$$[a, a^\dagger]_+ = 1 \quad (2.17)$$

$$[a, a]_+ = [a^\dagger, a^\dagger]_+ = 0 \quad (2.18)$$

sendo $[,]_+$ o anticomutador definido por $[A, B]_+ = AB + BA$, com A e B operadores.

Neste caso o espaço de Hilbert é bidimensional, com os estados dados pelo vácuo $|0\rangle$ e por $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$, uma vez que $a|0\rangle = 0$ e o princípio de exclusão de Pauli proíbe a existência de estados com $n \geq 2$,

$$(a^\dagger)^2|0\rangle = a^\dagger|1\rangle = 0. \quad (2.19)$$

Desta forma, as equações de autovalor para o hamiltoniano são dadas por

$$H|0\rangle = 0 \quad (2.20)$$

e

$$H|1\rangle = w|1\rangle. \quad (2.21)$$

Pelas discussões precedentes, para introduzir a temperatura via DCT, devemos introduzir um sistema dual. Através das regras de conjugação til obtemos o hamiltoniano associado ao sistema dual

$$\tilde{H} = w\tilde{a}^\dagger\tilde{a} \quad (2.22)$$

com

$$[\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger]_+ = 1 \quad (2.23)$$

$$[\tilde{a}, \tilde{a}]_+ = [\tilde{a}^\dagger, \tilde{a}^\dagger]_+ = 0, \quad (2.24)$$

além disso, as relações de anticomutação entre operadores dos diferentes espaços são dados por

$$[a, \tilde{a}]_+ = [a, \tilde{a}^\dagger]_+ = [a^\dagger, \tilde{a}^\dagger]_+ = [a^\dagger, \tilde{a}]_+ = 0. \quad (2.25)$$

De acordo com a equação (2.12), o estado térmico $|0(\beta)\rangle$ pode ser escrito como

$$\begin{aligned} |0(\beta)\rangle &= Z(\beta)^{-1/2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta \frac{nw}{2}} |n, \tilde{n}\rangle \\ &= Z(\beta)^{-1/2} (1 + e^{-\beta \frac{w}{2}} a^\dagger \tilde{a}^\dagger) |0, \tilde{0}\rangle. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Da condição de normalização imposta ao estado térmico $\langle 0(\beta)|0(\beta)\rangle = 1$ e com o uso da expansão $\sum_n x^n = \frac{1}{1-x}$, temos que

$$Z(\beta) = 1 + e^{-\beta w}, \quad (2.27)$$

resultando em

$$|0(\beta)\rangle = (1 + e^{-\beta w})^{-1/2} (1 + e^{-\beta \frac{w}{2}} a^\dagger \tilde{a}^\dagger) |0, \tilde{0}\rangle. \quad (2.28)$$

Definindo as funções

$$\cos \theta(\beta) = (1 + e^{-\beta w})^{-1/2} = u(\beta) \quad (2.29)$$

e

$$\text{sen}\theta(\beta) = (1 + e^{\beta w})^{-1/2} = v(\beta) \quad (2.30)$$

o vácuo térmico pode ser escrito como:

$$|0(\beta)\rangle = \{ \cos \theta(\beta) + \sin \theta(\beta) a^\dagger \tilde{a}^\dagger \} |0, \tilde{0}\rangle. \quad (2.31)$$

Expandindo as funções $\cos \theta(\beta)$ e $\sin \theta(\beta)$ na equação anterior, obtém-se:

$$\begin{aligned} |0(\beta)\rangle &= \left\{ \left[1 - \frac{1}{2!}\theta^2(\beta) + \frac{1}{4!}\theta^4(\beta) - \dots \right] + \right. \\ &\quad \left. \left[\frac{1}{1!}\theta(\beta) - \frac{1}{3!}\theta^3(\beta) + \frac{1}{5!}\theta^5(\beta) - \dots \right] a^\dagger \tilde{a}^\dagger \right\} |0, \tilde{0}\rangle \\ &= |0, \tilde{0}\rangle + \frac{1}{1!}\theta(\beta)|1, \tilde{1}\rangle - \frac{1}{2!}\theta^2(\beta)|0, \tilde{0}\rangle - \frac{1}{3!}\theta^3(\beta)|1, \tilde{1}\rangle + \frac{1}{4!}\theta^4(\beta)|0, \tilde{0}\rangle + \\ &\quad + \frac{1}{5!}\theta^5(\beta)|1, \tilde{1}\rangle - \frac{1}{6!}\theta^6(\beta)|0, \tilde{0}\rangle - \dots \end{aligned} \quad (2.32)$$

e usando as propriedades que decorrem das relações de anticomutação dos operadores,

$$(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)^{2n} |0, \tilde{0}\rangle = (-1)^n |0, \tilde{0}\rangle \quad (2.33)$$

$$(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)^{2n+1} |0, \tilde{0}\rangle = (-1)^{n+1} |1, \tilde{1}\rangle \quad (2.34)$$

obtemos:

$$\begin{aligned} |0(\beta)\rangle &= \left\{ 1 - \frac{1}{1!}\theta(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger) + \frac{1}{2!}\theta^2(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)^2 - \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{3!}\theta^3(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)^3 + \frac{1}{4!}\theta^4(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)^4 - \dots \right\} |0, \tilde{0}\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [-\theta(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)]^n |0, \tilde{0}\rangle \\ &= e^{-\theta(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger)} |0, \tilde{0}\rangle, \end{aligned} \quad (2.35)$$

que pode ser reescrita na forma

$$|0(\beta)\rangle = \mathbb{U}(\beta)|0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.36)$$

sendo

$$\mathbb{U}(\beta) = e^{-iG(\beta)}, \quad (2.37)$$

com

$$G(\beta) = -i\theta(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger). \quad (2.38)$$

Assim, concluímos que o vácuo térmico está relacionado com o vácuo duplicado não térmico por uma transformação dada pela equação (2.37), denominada transformação de

Bogoliubov, cujo gerador $G(\beta)$ mistura os elementos do espaço físico com os do espaço fictício, introduzindo no espaço transformado uma dependência com o parâmetro da transformação que, neste caso, está associado com a temperatura [52].

Dado um operador A , define-se o correspondente operador termalizado $A(\beta)$ através da transformação de similaridade [38]:

$$A(\beta) = \mathbb{U}(\beta)A\mathbb{U}^\dagger(\beta). \quad (2.39)$$

Desta forma, os operadores de criação e aniquilação térmicos podem ser escritos como:

$$\begin{aligned} a(\beta) &= \mathbb{U}(\beta)a\mathbb{U}^\dagger(\beta) \\ a^\dagger(\beta) &= \mathbb{U}(\beta)a^\dagger\mathbb{U}^\dagger(\beta) \\ \tilde{a}(\beta) &= \mathbb{U}(\beta)\tilde{a}\mathbb{U}^\dagger(\beta) \\ \tilde{a}^\dagger(\beta) &= \mathbb{U}(\beta)\tilde{a}^\dagger\mathbb{U}^\dagger(\beta). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Consequentemente:

$$\begin{aligned} a(\beta)|0(\beta)\rangle &= \mathbb{U}(\beta)a\mathbb{U}^\dagger(\beta)\mathbb{U}(\beta)|0, \tilde{0}\rangle \\ &= \mathbb{U}(\beta)a|0, \tilde{0}\rangle = 0 \end{aligned} \quad (2.41)$$

e

$$\tilde{a}(\beta)|0(\beta)\rangle = 0, \quad (2.42)$$

o que mostra que $|0(\beta)\rangle$ é o estado de vácuo térmico dos operadores $a(\beta)$ e $\tilde{a}(\beta)$, mas não é o vácuo para a e \tilde{a} .

Notando que $G^\dagger(\beta) = G(\beta)$, temos que a transformação de Bogoliubov é unitária:

$$\mathbb{U}^\dagger(\beta)\mathbb{U}(\beta) = e^{iG(\beta)}e^{-iG(\beta)} = \mathbb{I}, \quad (2.43)$$

e portanto a álgebra dos operadores a e \tilde{a} se mantém invariante, ou seja, os operadores $a(\beta)$ e $\tilde{a}(\beta)$ obedecem a mesma álgebra dada pelas equações (2.17-2.18) e (2.23-2.24) [48].

Usando para cada operador de criação ou aniquilação a identidade:

$$e^{-iB}Ae^{iB} = A + (-i)[B, A]_- + \frac{(-i)^2}{2!}[B, [B, A]_-]_- + \dots, \quad (2.44)$$

com $B = G$ tem-se entre os comutadores,

$$[G, a]_- = -i\theta(\beta)\tilde{a}^\dagger \quad (2.45)$$

$$[G, \tilde{a}]_- = i\theta(\beta)a^\dagger \quad (2.46)$$

$$[G, a^\dagger]_- = -i\theta(\beta)\tilde{a} \quad (2.47)$$

$$[G, \tilde{a}^\dagger]_- = i\theta(\beta)a, \quad (2.48)$$

que possibilita reescrever as equações (2.40) como

$$a(\beta) = u(\beta)a - v(\beta)\tilde{a}^\dagger \quad (2.49)$$

$$a^\dagger(\beta) = u(\beta)a^\dagger - v(\beta)\tilde{a} \quad (2.50)$$

$$\tilde{a}(\beta) = u(\beta)\tilde{a} + v(\beta)a^\dagger \quad (2.51)$$

$$\tilde{a}^\dagger(\beta) = u(\beta)\tilde{a}^\dagger + v(\beta)a, \quad (2.52)$$

com suas inversas:

$$a = u(\beta)a(\beta) + v(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta) \quad (2.53)$$

$$a^\dagger = u(\beta)a^\dagger(\beta) + v(\beta)\tilde{a}(\beta) \quad (2.54)$$

$$\tilde{a} = u(\beta)\tilde{a}(\beta) - v(\beta)a^\dagger(\beta) \quad (2.55)$$

$$\tilde{a}^\dagger = u(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta) - v(\beta)a(\beta). \quad (2.56)$$

É importante observar que os estados térmicos no espaço de Hilbert duplicado

$$|0(\beta)\rangle, a^\dagger(\beta)|0(\beta)\rangle, \tilde{a}^\dagger(\beta)|0(\beta)\rangle \cdots [a^\dagger(\beta)]^n [\tilde{a}^\dagger(\beta)]^n |0(\beta)\rangle \cdots \quad (2.57)$$

não são autoestados de H ou \tilde{H} ; contudo, das equações (2.49) - (2.52), tem-se que:

$$a^\dagger(\beta)a(\beta) - \tilde{a}^\dagger(\beta)\tilde{a}(\beta) = a^\dagger a - \tilde{a}^\dagger \tilde{a}, \quad (2.58)$$

o que nos leva a definir o hamiltoniano total \hat{H} como

$$\hat{H} = H - \tilde{H} = w(a^\dagger a - \tilde{a}^\dagger \tilde{a}), \quad (2.59)$$

cujos autoestados são os estados térmicos.

Devemos notar ainda que o valor médio do operador número,

$$N = a^\dagger a, \quad (2.60)$$

calculado no vácuo térmico, é exatamente a função distribuição de Fermi-Dirac para um sistema em equilíbrio térmico e potencial químico nulo ($\mu = 0$), ou seja:

$$\begin{aligned}
\langle N \rangle_\beta &= \langle 0(\beta) | a^\dagger a | 0(\beta) \rangle \\
&= \langle 0(\beta) | [u(\beta)a^\dagger(\beta) + v(\beta)\tilde{a}(\beta)] [u(\beta)a(\beta) + v(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta)] | 0(\beta) \rangle \\
&= v^2(\beta) \\
\langle N \rangle_\beta &= \frac{1}{1 + e^{\beta w}}.
\end{aligned} \tag{2.61}$$

2.3.2 Oscilador Bosônico

Aqui iremos sumarizar, sem muitos detalhes, os resultados da DCT quando aplicada ao oscilador bosônico. O hamiltoniano neste caso tem a mesma forma do fermiônico, equação (2.16), exceto que os operadores de criação e aniquilação satisfazem relação de comutação

$$[a, a^\dagger]_- = 1 \tag{2.62}$$

$$[a, a]_- = [a^\dagger, a^\dagger]_- = 0, \tag{2.63}$$

o espaço de Hilbert possui dimensão infinita e os autovetores do hamiltoniano

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle \tag{2.64}$$

satisfazem a

$$H|n\rangle = nw|n\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots \tag{2.65}$$

Seguindo o formalismo da DCT, introduzimos o sistema til descrito pelo hamiltoniano

$$\tilde{H} = \omega \tilde{a}^\dagger \tilde{a}, \tag{2.66}$$

sendo que os operadores de criação e aniquilação satisfazem relações de comutação idênticas às (2.62 - 2.63) e comutam com os operadores do sistema original.

Seguindo passos similares ao caso fermiônico, o estado térmico pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
|0(\beta)\rangle &= \sqrt{1 - e^{-\beta w}} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\beta w/2} |n, \tilde{n}\rangle \\
&= \sqrt{1 - e^{-\beta w}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{-n\beta w/2}}{n!} (a^\dagger)^n (\tilde{a}^\dagger)^n |0, \tilde{0}\rangle.
\end{aligned} \tag{2.67}$$

Definindo as funções hiperbólicas como:

$$\cosh \theta(\beta) = \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-\beta w}}} \equiv u(\beta) \quad (2.68)$$

e

$$\sinh \theta(\beta) = \frac{e^{-\frac{\beta w}{2}}}{\sqrt{1 - e^{-\beta w}}} \equiv v(\beta) \quad (2.69)$$

tem-se:

$$|0(\beta)\rangle = (\cosh \theta(\beta))^{-1} e^{\tanh \theta(\beta) a^\dagger \tilde{a}^\dagger} |0, \tilde{0}\rangle. \quad (2.70)$$

Usando $[\tilde{a}, \tilde{a}^\dagger]_- = 1$, o fato que

$$e^{f(\theta) \tilde{a}^\dagger a} |0, \tilde{0}\rangle = |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.71)$$

onde $f(\theta)$ é uma função qualquer, e com o auxílio da identidade de Baker-Campbell-Hausdoff [41]

$$e^{\theta(B)(A+B)} = e^{\tanh \theta(\beta) B} e^{\ln \cosh \theta(\beta) [A, B]_-} e^{\tanh \theta(\beta) A}, \quad (2.72)$$

sendo A e B operadores, o vácuo térmico pode ser obtido em termos da transformação de Bogoliubov, como

$$|0(\beta)\rangle = \mathbb{U}(\beta) |0, \tilde{0}\rangle, \quad (2.73)$$

em que

$$\mathbb{U}(\beta) = e^{-iG(\beta)} \quad (2.74)$$

com

$$G(\beta) = -i\theta(\beta)(\tilde{a}a - \tilde{a}^\dagger a^\dagger). \quad (2.75)$$

Os operadores térmicos são definidos por relações idênticas às (2.40):

$$a(\beta) = \mathbb{U}a\mathbb{U}^\dagger = u(\beta)a - v(\beta)\tilde{a}^\dagger \quad (2.76)$$

$$a^\dagger(\beta) = \mathbb{U}a^\dagger\mathbb{U}^\dagger = u(\beta)a^\dagger - v(\beta)\tilde{a} \quad (2.77)$$

$$\tilde{a}(\beta) = \mathbb{U}\tilde{a}\mathbb{U}^\dagger = u(\beta)\tilde{a} - v(\beta)a^\dagger \quad (2.78)$$

$$\tilde{a}^\dagger(\beta) = \mathbb{U}\tilde{a}^\dagger\mathbb{U}^\dagger = u(\beta)\tilde{a}^\dagger - v(\beta)a \quad (2.79)$$

e as inversas

$$a = u(\beta)a(\beta) + v(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta) \quad (2.80)$$

$$a^\dagger = u(\beta)a^\dagger(\beta) + v(\beta)\tilde{a}(\beta) \quad (2.81)$$

$$\tilde{a} = u(\beta)\tilde{a}(\beta) + v(\beta)a^\dagger(\beta) \quad (2.82)$$

$$\tilde{a}^\dagger = u(\beta)\tilde{a}^\dagger(\beta) + v(\beta)a(\beta). \quad (2.83)$$

Neste caso o valor esperado do operador número, em termos do vácuo térmico, nos dá a distribuição de Bose-Einstein

$$\begin{aligned} \langle N \rangle_\beta &= \langle 0(\beta) | a^\dagger a | 0(\beta) \rangle \\ &= v^2(\beta) \\ &= \frac{1}{e^{\beta w} - 1}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

2.3.3 Notação Matricial

As equações (2.49-2.52) e (2.76-2.79) podem ser escritas em notação matricial introduzindo-se uma notação de dubleto [38,39]. Dado um operador arbitrário A , podemos definir o dubleto como:

$$A^a = \begin{pmatrix} A^1 \\ A^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ \tilde{A}^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.85)$$

e sua transposição til por:

$$\bar{A}^a = (\bar{A}^1 \bar{A}^2) = (A - \sigma \tilde{A}^\dagger), \quad (2.86)$$

onde $\sigma = 1$, no caso de bósons e $\sigma = -1$ no caso de férmions.

Com esta notação as equações que relacionam os operadores de criação e aniquilação térmicos com os não térmicos, podem ser escritas como:

$$\begin{pmatrix} a(\beta) \\ \tilde{a}^\dagger(\beta) \end{pmatrix} = \mathbb{B}(\beta) \begin{pmatrix} a \\ \tilde{a}^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

e

$$\begin{pmatrix} a^\dagger(\beta) \\ \tilde{a}(\beta) \end{pmatrix} = \mathbb{B}(\beta) \begin{pmatrix} a^\dagger \\ \tilde{a} \end{pmatrix}, \quad (2.88)$$

em que $\mathbb{B}(\beta)$ é a matriz de Bogoliubov

$$\mathbb{B}(\beta) = \begin{pmatrix} u(\beta) & -v(\beta) \\ -\sigma v(\beta) & u(\beta) \end{pmatrix} \quad (2.89)$$

com a inversa

$$\mathbb{B}^{-1}(\beta) = \begin{pmatrix} u(\beta) & v(\beta) \\ \sigma v(\beta) & u(\beta) \end{pmatrix}. \quad (2.90)$$

2.4 Campo Livre de Dirac Térmico

Nesta seção, apresentaremos o formalismo da DCT para campos de Dirac, uma vez que as partículas de interesse deste trabalho são férmions e podemos expandir os campos livres em termos dos operadores de criação e aniquilação. Usaremos como métrica no espaço de Minkowski, $g_{00} = 1, g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1$.

A densidade lagrangiana associada ao campo de Dirac livre é dada por:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \bar{\psi}(x) [i\gamma^\mu \overleftrightarrow{\partial}_\mu \psi(x) - m] \psi(x) \quad (2.91)$$

onde $\psi(x)$ é o campo de Dirac, $\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x)\gamma^0$ é seu conjugado, $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$, γ^μ são as matrizes de Dirac, m é a massa do férmion e $\overleftrightarrow{\partial} = \overrightarrow{\partial} - \overleftarrow{\partial}$ (Apêndice A).

O campo de Dirac, escrito como uma expansão de Fourier, dado em termos de operadores de criação e aniquilação é:

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_s \int d^3p \left(\frac{m}{E_p}\right)^{1/2} [b_s(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p})e^{-ipx} + d_s^\dagger(\mathbf{p})v_s(\mathbf{p})e^{ipx}] \quad (2.92)$$

com seu operador de campo conjugado:

$$\psi^\dagger(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_s \int d^3p \left(\frac{m}{E_p}\right)^{1/2} [b_s^\dagger(\mathbf{p})u_s^\dagger(\mathbf{p})e^{ipx} + d_s(\mathbf{p})v_s^\dagger(\mathbf{p})e^{-ipx}] \quad (2.93)$$

onde $u_s(\mathbf{p})(v_s(\mathbf{p}))$ é um espinor de Dirac de energia positiva(negativa), s é o índice que representa os estados de spin, $E_p = (\mathbf{p}^2 + m^2)^{1/2}$ e $px = E_p x^0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}$, em que \mathbf{p} é o trimomento dos modos criados por $b_s^\dagger(\mathbf{p})$. Os operadores $b_s(\mathbf{p})$ e $b_s^\dagger(\mathbf{p})$ estão associados ao espectro de frequência positiva (partículas) e os operadores $d_s(\mathbf{p})$, $d_s^\dagger(\mathbf{p})$, estão associados ao estado de frequência negativa (antipartícula). Esses operadores obedecem as relações de anticomutação

$$\left[b_s(\mathbf{p}), b_{s'}^\dagger(\mathbf{p}') \right]_+ = \left[d_s(\mathbf{p}), d_{s'}^\dagger(\mathbf{p}') \right]_+ = \delta_{ss'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (2.94)$$

com os demais anticomutadores nulos, e os operadores de campo satisfazem à [36,46]:

$$\left[\psi(x), \psi^\dagger(x') \right]_+ = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'); \quad x = (t, \mathbf{x}), x' = (t, \mathbf{x}') \quad (2.95)$$

Pelo formalismo da DCT devemos criar o sistema dual; então, das regras de conjugação til temos:

$$\tilde{\mathcal{L}} = \mathcal{L}(\widetilde{\psi}, \widetilde{\partial\psi}) = \mathcal{L}^*(\tilde{\psi}, \partial\tilde{\psi}), \quad (2.96)$$

o que resulta:

$$\tilde{\mathcal{L}} = \frac{1}{2} \tilde{\psi}(x) [i\gamma^\mu \overleftrightarrow{\partial}_\mu - m] \tilde{\psi}^\dagger(x), \quad (2.97)$$

com o campo de Dirac dual dado por

$$\tilde{\psi}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_s \int d^3p \left(\frac{m}{E_{\mathbf{p}}} \right)^{1/2} \left[\tilde{b}_s(\mathbf{p}) u_s^\dagger(\mathbf{p}) e^{ipx} + \tilde{d}_s^\dagger(\mathbf{p}) v_s^\dagger(\mathbf{p}) e^{-ipx} \right] \quad (2.98)$$

e seu operador de campo conjugado

$$\tilde{\psi}^\dagger(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_s \int d^3p \left(\frac{m}{E_{\mathbf{p}}} \right)^{1/2} \left[\tilde{b}_s^\dagger(\mathbf{p}) u_s^\dagger(\mathbf{p}) e^{-px} + \tilde{d}_s(\mathbf{p}) v_s(\mathbf{p}) e^{ipx} \right] \quad (2.99)$$

Os operadores de campos duais obedecem as relações de anticomutação [46]

$$\left[\tilde{\psi}(x), \tilde{\psi}^\dagger(x') \right]_+ = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.100)$$

$$\left[\psi(x), \tilde{\psi}^\dagger(x') \right]_+ = 0 \quad (2.101)$$

e os operadores de criação e aniquilação duais satisfazem a:

$$\left[\tilde{b}_s(\mathbf{p}), \tilde{b}_{s'}^\dagger(\mathbf{p}') \right]_+ = \left[\tilde{d}_s(\mathbf{p}), \tilde{d}_{s'}^\dagger(\mathbf{p}') \right]_+ = \delta_{ss'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \quad (2.102)$$

com os demais anticomutadores nulos.

Os efeitos de temperatura serão incorporados através da transformação de Bogoliubov

$$\mathbb{U}(\beta) = e^{iG_F(\beta)} = e^{i[G^+(\beta) + G^-(\beta)]} \quad (2.103)$$

entre os campos original e seu dual, com

$$G^+(\beta) = i \sum_s \int d^3p \theta_{\mathbf{p}}^+(\beta) \left[\tilde{b}_s(\mathbf{p}) b_s(\mathbf{p}) - b_s^\dagger(\mathbf{p}) \tilde{b}_s^\dagger(\mathbf{p}) \right], \quad (2.104)$$

e

$$G^-(\beta) = i \sum_s \int d^3p \theta_{\mathbf{p}}^-(\beta) \left[\tilde{d}_s(\mathbf{p}) d_s(\mathbf{p}) - d_s^\dagger(\mathbf{p}) \tilde{d}_s^\dagger(\mathbf{p}) \right]. \quad (2.105)$$

Desta forma, o vácuo térmico pode ser escrito pela transformação de Bogoliubov no vácuo duplicado:

$$|0(\beta)\rangle = e^{iG_F(\beta)} |0\rangle, \quad (2.106)$$

em que $|0\rangle = |0, \tilde{0}\rangle$ é anulado pelos operadores de aniquilação $b_s(\vec{p})$, $d_s(\vec{p})$, $\tilde{b}_s(\vec{p})$ e $\tilde{d}_s(\vec{p})$ e $|0(\beta)\rangle$ é aniquilado pelos operadores de aniquilação térmicos dados por [39]

$$\begin{aligned}
b_s(\mathbf{p}; \beta) &= e^{iG_F(\beta)} b_s(\mathbf{p}) e^{-iG_F(\beta)} = e^{iG^{(+)}(\beta)} b_s(\mathbf{p}) e^{-iG^{(+)}(\beta)} \\
&= \cos \theta_{\mathbf{p}}^{(+)}(\beta) b(\mathbf{p}) - \sin \theta_{\mathbf{p}}^{(+)}(\beta) \tilde{b}^\dagger(\mathbf{p}) \\
d_s(\mathbf{p}; \beta) &= e^{iG_F(\beta)} d_s(\mathbf{p}) e^{-iG_F(\beta)} = e^{iG^{(-)}(\beta)} d_s(\mathbf{p}) e^{-iG^{(-)}(\beta)} \\
&= \cos \theta_{\mathbf{p}}^{(-)}(\beta) d(\mathbf{p}) - \sin \theta_{\mathbf{p}}^{(-)}(\beta) \tilde{d}^\dagger(\mathbf{p}) \\
\tilde{b}_s(\mathbf{p}; \beta) &= e^{iG_F(\beta)} \tilde{b}_s(\mathbf{p}) e^{-iG_F(\beta)} = e^{iG^{(+)}(\beta)} \tilde{b}_s(\mathbf{p}) e^{-iG^{(+)}(\beta)} \\
&= \cos \theta_{\mathbf{p}}^{(+)}(\beta) \tilde{b}(\mathbf{p}) + \sin \theta_{\mathbf{p}}^{(+)}(\beta) b^\dagger(\mathbf{p}) \\
\tilde{d}_s(\mathbf{p}; \beta) &= e^{iG_F(\beta)} \tilde{d}_s(\mathbf{p}) e^{-iG_F(\beta)} = e^{iG^{(-)}(\beta)} \tilde{d}_s(\mathbf{p}) e^{-iG^{(-)}(\beta)} \\
&= \cos \theta_{\mathbf{p}}^{(-)}(\beta) \tilde{d}(\mathbf{p}) + \sin \theta_{\mathbf{p}}^{(-)}(\beta) d^\dagger(\mathbf{p}),
\end{aligned} \tag{2.107}$$

que podem ser escritos como:

$$\begin{pmatrix} b_s(\mathbf{p}; \beta) \\ \sigma_F \tilde{b}_s^\dagger(\mathbf{p}; \beta) \end{pmatrix} = \mathbb{B}_{\mathbf{p}}^{(+)}(\beta) \begin{pmatrix} b_s(\mathbf{p}) \\ \sigma_F \tilde{b}_s^\dagger(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \tag{2.108}$$

$$\begin{pmatrix} d_s(\mathbf{p}; \beta) \\ \sigma_F \tilde{d}_s^\dagger(\mathbf{p}; \beta) \end{pmatrix} = \mathbb{B}_{\mathbf{p}}^{(-)}(\beta) \begin{pmatrix} d_s(\mathbf{p}) \\ \sigma_F \tilde{d}_s^\dagger(\mathbf{p}) \end{pmatrix} \tag{2.109}$$

sendo as matrizes de Bogoliubov

$$\mathbb{B}_{\mathbf{p}}^{(\pm)}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \theta_{\mathbf{p}}^{\pm}(\beta) & -\sin \theta_{\mathbf{p}}^{\pm}(\beta) \\ \sin \theta_{\mathbf{p}}^{\pm}(\beta) & \cos \theta_{\mathbf{p}}^{\pm}(\beta) \end{pmatrix} \tag{2.110}$$

dependentes da energia positiva $E_{\mathbf{p}}$. O parâmetro $\theta_{\mathbf{p}}^{+}(\beta)$ é definido por $\cos \theta_{\mathbf{p}}^{+}(\beta) = v_b(\mathbf{p}, \beta)$ e $\theta_{\mathbf{p}}^{-}(\beta)$ por $\cos \theta_{\mathbf{p}}^{-}(\beta) = v_d(\mathbf{p}, \beta)$, onde

$$v_b^2(\mathbf{p}, \beta) = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{p}} - \mu_b)} + 1} \tag{2.111}$$

$$v_d^2(\mathbf{p}, \beta) = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{p}} + \mu_d)} + 1} \tag{2.112}$$

resultam, respectivamente, na distribuição de Fermi-Dirac para partículas e antipartículas, com $\mu_{b,d}$ sendo o potencial químico. O fator σ_F em (2.108) e (2.109) será investigado

durante a construção da matriz de espalhamento para o campo de Dirac sujeito a um campo externo à temperatura finita.

A densidade lagrangiana total que descreve o sistema duplicado é dada por:

$$\widehat{\mathcal{L}} = \mathcal{L} - \widetilde{\mathcal{L}}, \quad (2.113)$$

e a evolução temporal do sistema duplicado é dado pelo hamiltoniano total:

$$\widehat{H} = H - \widetilde{H}. \quad (2.114)$$

Operador de Espalhamento no Espaço de Fock

Estamos interessados em uma abordagem relativística dos processos de espalhamento, que envolvem a possibilidade de aniquilação e criação de férmions; portanto, o espaço que possibilita a descrição de sistemas com um número variável de partículas - espaço de Fock - e os operadores de criação e aniquilação de partículas (formalismo de segunda quantização) são essenciais. Desta forma, neste capítulo faremos uma revisão do método de segunda quantização no espaço de Fock e aplicaremos ao campo de Dirac em um campo eletromagnético externo; logo após, o operador espalhamento no espaço de Fock será construído e apresentaremos a série perturbativa para a matriz S . Tendo em vista que o objetivo deste trabalho é introduzir temperatura na descrição de processos de espalhamento via DCT, que exige a duplicação do sistema, cada tópico citado acima será apresentado inicialmente para o sistema original e, em seguida, de forma mais resumida, será apresentado para o sistema dual. Algumas passagens algébricas que são similares e até certo ponto iguais serão suprimidas, mas exporemos as diferenças e as peculiaridades de cada sistema. Esse capítulo é baseado na formulação de segunda quantização proposta por Scharf [45] e na construção do sistema dual proposta por Plácido[46].

3.1 Segunda Quantização no Espaço de Fock

Nesta seção, apresentaremos os principais aspectos do método de segunda quantização no espaço de Fock direto e dual. Esse método permite desenvolver a teoria quântica de muitas partículas.

3.1.1 Espaço de Fock Direto

Fisicamente, o espaço de Fock representa um espaço vetorial capaz de descrever os estados de sistemas contendo qualquer quantidade de partículas, que podem ser aniquiladas ou criadas. Ele é definido como uma soma direta de espaços de Hilbert com um número fixo de partículas

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n \\ &= (\mathcal{H}_0) \oplus (\mathcal{H}_1) \oplus (\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1)_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_n \oplus \dots,\end{aligned}\quad (3.1)$$

em que $\mathcal{H}_0 = \{\alpha\Omega\}, (\alpha \in \mathbb{C})$ é um espaço unidimensional que descreve o estado sem partículas Ω (vácuo), e $\mathcal{H}^{\otimes n}$ representa o espaço de Hilbert de n partículas construído através do produto direto de n espaços de Hilbert de uma partícula

$$\mathcal{H}_n = \underbrace{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1 \dots \otimes \mathcal{H}_1}_n. \quad (3.2)$$

Devido ao caráter exclusivamente bosônico ou fermiônico de estados de partículas idênticas, os espaços físicos de n partículas devem ser representados pelos espaços de Hilbert simétrico \mathcal{H}^+ e antissimétrico \mathcal{H}^-

$$\mathcal{H}_n^{\pm} = S_n^{\pm} \mathcal{H}_n, \quad (3.3)$$

onde S_n^{\pm} são operadores de projeção no espaço simétrico \mathcal{H}_n^+

$$S_n^+ \phi_n = \frac{1}{n!} \sum_r \phi_n(\mathbf{x}_{r_1}, \dots, \mathbf{x}_{r_n}); \quad \phi_n \in \mathcal{H}_n \quad (3.4)$$

ou antissimétrico \mathcal{H}_n^-

$$S_n^- \phi_n = \frac{1}{n!} \sum_r (-1)^r \phi_n(\mathbf{x}_{r_1}, \dots, \mathbf{x}_{r_n}); \quad \phi_n \in \mathcal{H}_n \quad (3.5)$$

As somas em (3.4) e (3.5) correm sobre todas as $n!$ permutações r das n partículas, $(-1)^r$ é igual a (1) se r é uma permutação par de $1, 2, \dots, n$ ou (-1) se r for ímpar. Os operadores de simetrização e antissimetrização possuem as propriedades

$$\begin{aligned}(S_n^{\pm})^2 &= S_n^{\pm} \\ (\psi_n, S_n^{\pm} \phi_n) &= (S_n^{\pm} \psi_n, \phi_n).\end{aligned}$$

Desta forma, os chamados espaços de Fock simétrico \mathcal{F}^+ e antissimétrico \mathcal{F}^- , gerados pelos espaços \mathcal{H}^\pm , são definidos por:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}^\pm &= \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}_n^\pm \\ &= (\mathcal{H}_0) \oplus (\mathcal{H}_1) \oplus (\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_1)_2^\pm \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_n^\pm \oplus \dots\end{aligned}\quad (3.6)$$

O espaço de Fock descreve todos os estados de muitas partículas simultaneamente. Seus vetores são uma sequência infinita de estados

$$\Phi = (\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots) \in \mathcal{F}, \quad (3.7)$$

com

$$\phi_0 = \alpha\Omega \in \mathcal{H}_0 \quad e \quad \phi_n \in \mathcal{H}_n^\pm,$$

satisfazendo

$$(\Phi, \Phi) = \sum_{n=0}^{\infty} (\phi_n, \phi_n) < \infty, \quad (3.8)$$

onde definimos o produto escalar de dois de seus elementos como:

$$(\Psi, \Phi) = (\psi_0, \phi_0) + \sum_{n=1}^{\infty} (\psi_n, \phi_n) = \sum_{n=0}^{\infty} (\psi_n, \phi_n), \quad (3.9)$$

uma vez que

$$\Psi = (\psi_0, \psi_1, \psi_2, \dots) \quad e \quad \Phi = (\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots).$$

(,) no lado direito de (3.9) denota o produto escalar em \mathcal{H}_n .

Como os vetores do espaço de Fock são capazes de representar os estados de sistemas contendo um número indefinido e variável de partículas, é conveniente definir operadores que sejam capazes de mudar o número de partículas do estado. Tais operadores são chamados de operadores de criação e aniquilação.

Os operadores de criação $a^\dagger(h)$ atuam no espaço de Fock criando uma partícula com “função de onda” $h \in \mathcal{H}_1$. Eles são definidos por:

$$a^\dagger(h)\Omega = h, \quad (3.10)$$

$$(a^\dagger(h)\Phi)_n = \sqrt{n}S_n^\pm(h \otimes \phi_{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.11)$$

Junto com o operador de criação, podemos definir os “operadores” de campo $a^\dagger(\mathbf{x})$ e $a^\dagger(\mathbf{k})$ no espaço dos momentos. Eles não são operadores em \mathcal{F} , mas funções de valor operador que expressam o mapeamento $h \rightarrow a^\dagger(h)$, como segue

$$a^\dagger(h) = \int d^3x a^\dagger(\mathbf{x})h(\mathbf{x}) = \int d^3k \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\hat{h}(\mathbf{k}), \quad (3.12)$$

onde o sinal de circunflexo denota a transformada de Fourier.

Considerando os vetores h_j e seus complexos conjugados h_j^* bases completas ortonormais, essa última expressão pode ser reescrita como um produto escalar complexo formal,

$$a^\dagger(h) = (h_j^*(\mathbf{x}), a^\dagger(\mathbf{x})) = (\hat{h}_j^*(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k})), \quad (3.13)$$

o que possibilita representar os operadores de campo pelas somas

$$a^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j a^\dagger(h_j)h_j^*(\mathbf{x}) = \sum_j a^\dagger(h_j^*)h_j(\mathbf{x}), \quad (3.14)$$

e

$$\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}) = \sum_j \hat{a}^\dagger(\hat{h}_j)\hat{h}_j^*(\mathbf{k}) = \sum_j \hat{a}^\dagger(\hat{h}_j^*)\hat{h}_j(\mathbf{k}), \quad (3.15)$$

que são independentes da base h_j .

Tratando agora dos operadores aniquilação, eles atuam no espaço de Fock destruindo uma partícula com “função de onda” $h \in \mathcal{H}_1$. Eles são definidos como

$$a(h) = (a^\dagger(h))^\dagger, \quad (3.16)$$

com

$$a(h)\Omega = 0, \quad (3.17)$$

e

$$(a(h)\Phi)_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \sqrt{n+1} \int d^3x h^\dagger(\mathbf{x})\phi_{n+1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n), \quad (3.18)$$

onde $n = 1, 2, \dots$ e $h \in \mathcal{H}_1$. Podemos notar por (3.18) que $a(h)$ é antilinear em h . Os operadores de campo correspondentes ao operador aniquilação são definidos como

$$a(h) = \int d^3x h^*(\mathbf{x})a(\mathbf{x}) = \int d^3k \hat{h}^*(\mathbf{k})\hat{a}(\mathbf{k}), \quad (3.19)$$

$$a(\mathbf{x}) = \sum_j a(h_j)h_j(\mathbf{x}) \quad (3.20)$$

$$\hat{a}(\mathbf{k}) = \sum_j \hat{a}(\hat{h}_j)\hat{h}_j(\mathbf{k}). \quad (3.21)$$

A partir das definições (3.11) e (3.18), obtemos para os operadores de criação e aniquilação suas relações de comutação no caso dos bósons, ou relações de anticomutação no caso de férmions

$$[a(h), a^\dagger(h')]_{\pm} \Phi = (h, h') \Phi, \quad (3.22)$$

$$[a(h), a(h')]_{\pm} \Phi = 0 = [a^\dagger(h), a^\dagger(h')]_{\pm} \Phi. \quad (3.23)$$

No caso da anticomutação a relação (3.23) implica em:

$$a^\dagger(h)a^\dagger(h) = 0; \quad (3.24)$$

isso significa a impossibilidade de criar duas partículas no mesmo estado, o que está de acordo com o princípio de exclusão de Pauli para os férmions. Assim, anticomutadores levam à estatística de Fermi e a estatística de Bose requer comutadores.

A relação (3.22) é equivalente às seguintes relações para os operadores de campo

$$[a(\mathbf{x}_1), a^\dagger(\mathbf{x}_2)]_{\pm} = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2), \quad (3.25)$$

$$[\hat{a}(\mathbf{k}_1), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2)]_{\pm} = \delta(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2). \quad (3.26)$$

É possível mostrar que qualquer operador (limitado) que atua no espaço de Fock pode ser expresso em termos dos operadores de criação e aniquilação [45]. Aqui representaremos operadores no espaço de Fock com uma letra maiúscula em negrito e os operadores no espaço de Hilbert apenas com uma letra maiúscula. O operador número de partículas \mathbf{N} pode ser definido em termos dos operadores de criação e aniquilação como

$$\mathbf{N} = \int d^3x a^\dagger(\mathbf{x})a(\mathbf{x}) = \sum_j a^\dagger(h_j)a(h_j), \quad (3.27)$$

de modo que

$$(\mathbf{N}\Phi)_n = nS_n^\pm \phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = n(\Phi)_n, \quad (3.28)$$

não muda o número de partículas quando aplicadas a um estado de Fock, e todos os operadores \mathbf{A} que comutam com ele, i.e $[\mathbf{A}, \mathbf{N}] = 0$, não mudam o número de partículas dos estados.

Analogamente, qualquer operador de uma partícula $A(\mathbf{x})$, limitado no espaço de Hilbert, é promovido para o espaço de Fock da forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \int d^3x a^\dagger(\mathbf{x})A(\mathbf{x})a(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{jk} (h_j, A(\mathbf{x})h_k) a^\dagger(h_j)a(h_k), \end{aligned} \quad (3.29)$$

onde $(,)$ representa o produto escalar em \mathcal{H}_1 , e tem-se que

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}\Phi)_n &= nS_n^\pm A(\mathbf{x}_1)\phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \\ &= \sum_{m=1}^n A(\mathbf{x}_m)\phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Estendendo essas definições para os operadores de duas partículas $V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, obtemos

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \int d^3x d^3x' a^\dagger(\mathbf{x}')a^\dagger(\mathbf{x})V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')a(\mathbf{x})a(\mathbf{x}') \\ &= \sum_{jkj'k'} (h_j h_k, V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') h_{k'} h_{j'}) a^\dagger(h_j) a^\dagger(h_k) a(h_{k'}) a(h_{j'}), \end{aligned} \quad (3.31)$$

em que

$$(\mathbf{V}\Phi)_n = \sum_{j < k} V(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) \phi_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n). \quad (3.32)$$

As expressões (3.29) e (3.31) se apresentam na forma normalmente ordenada, na qual os operadores de aniquilação aparecem à direita dos operadores de criação.

Temos que os operadores de campo evoluem com o tempo segundo as equações de movimento de Heisenberg ($\hbar = 1$)

$$i \frac{d}{dt} a^\dagger(Uh) = [\mathbf{H}, a^\dagger(Uh)]_-, \quad (3.33)$$

onde

$$Uh \hat{=} e^{-iHt} h(0) = h(t), \quad h \in \mathcal{H}_1 \quad (3.34)$$

é a transformação unitária solução da equação de Schrödinger

$$i \frac{d}{dt} h = Hh \quad (3.35)$$

e

$$\mathbf{H} = \sum_{jk} (h_j, H(\mathbf{x}) h_k) a^\dagger(h_j) a(h_k), \quad (3.36)$$

é o hamiltoniano do campo no espaço de Fock, representação em segunda quantização do operador hamiltoniano $H(\mathbf{x})$. Como \mathbf{H} está escrito na forma de um produto normal, ou seja, os operadores de criação à esquerda de todos os operadores de aniquilação, seu valor esperado no vácuo é zero, o que significa que a energia do vácuo Ω não é considerada.

A solução da equação (3.33) é dada por

$$a_t^\dagger(h) \hat{=} a^\dagger(Uh) = \mathbf{U} a^\dagger(h) \mathbf{U}^{-1}, \quad (3.37)$$

com adjunta

$$a_t(h) \hat{=} a(Uh) = \mathbf{U}a(h)\mathbf{U}^{-1}, \quad (3.38)$$

em que a transformação unitária no espaço de Fock

$$\mathbf{U} = e^{-i\mathbf{H}t} \quad (3.39)$$

é chamada de segunda quantização do operador \mathbf{U} no espaço de Hilbert.

Nesta formulação, a conexão com os resultados experimentais é dada através do valor esperado dos operadores (observáveis) no espaço de Fock, ou seja,

$$\langle \mathbf{A} \rangle_{\Phi} = (\Phi, \mathbf{A}\Phi). \quad (3.40)$$

3.1.2 Espaço de Fock Dual

O espaço de Fock correspondente ao sistema dual é definido como uma soma direta de espaços de Hilbert duais $\tilde{\mathcal{H}}_n$ com um número fixo de partículas

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}} &= \bigoplus_{n=0}^{\infty} \tilde{\mathcal{H}}^{\otimes n} \\ &= (\tilde{\mathcal{H}}_0) \oplus (\tilde{\mathcal{H}}_1) \oplus (\tilde{\mathcal{H}}_1 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_1)_2^{\pm} \oplus \dots \oplus \tilde{\mathcal{H}}_n^{\pm} \oplus \dots, \end{aligned} \quad (3.41)$$

em que $\tilde{\mathcal{H}}_0 = \{\alpha\tilde{\Omega}\}$, ($\alpha \in \mathbb{C}$) é um espaço unidimensional que descreve o estado sem partículas Ω (vácuo), e $\tilde{\mathcal{H}}^{\otimes n}$ representa o espaço de Hilbert de n partículas.

Devido ao caráter exclusivamente bosônico ou fermiônico de estados de partículas idênticas, definimos os chamados espaços duais de Fock simétrico $\tilde{\mathcal{F}}^+$ e antissimétrico $\tilde{\mathcal{F}}^-$, gerados pelos espaços $\tilde{\mathcal{H}}^{\pm}$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}}^{\pm} &= \bigoplus_{n=0}^{\infty} \tilde{\mathcal{H}}_i^{\pm} \\ &= (\tilde{\mathcal{H}}_0) \oplus (\tilde{\mathcal{H}}_1) \oplus (\tilde{\mathcal{H}}_1 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_1)_2^{\pm} \oplus \dots \oplus \tilde{\mathcal{H}}_n^{\pm} \oplus \dots, \end{aligned} \quad (3.42)$$

em que

$$\tilde{\mathcal{H}}_n^{\pm} = S_n^{\pm} \tilde{\mathcal{H}}^{\otimes n}, \quad (3.43)$$

onde S_n^{\pm} são operadores de projeção no espaço simétrico $\tilde{\mathcal{H}}_n^+$ e antissimétrico $\tilde{\mathcal{H}}_n^-$. Estes operadores são os mesmos da seção anterior.

Os vetores do espaço de Fock dual são uma sequência infinita de estados

$$\tilde{\Phi} = (\tilde{\phi}_0, \tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2 \dots) \in \tilde{\mathcal{F}}, \quad (3.44)$$

com

$$\tilde{\phi}_0 = \alpha\tilde{\Omega} \in \tilde{\mathcal{H}}_0 \quad e \quad \tilde{\phi}_n \in \tilde{\mathcal{H}}_n^\pm,$$

satisfazendo

$$(\tilde{\Phi}, \tilde{\Phi}) = \sum_{n=0}^{\infty} (\tilde{\phi}_n, \tilde{\phi}_n) < \infty \quad (3.45)$$

onde definimos o produto escalar de dois de seus elementos como:

$$(\tilde{\Psi}, \tilde{\Phi}) = (\tilde{\psi}_0, \tilde{\phi}_0) + \sum_{n=1}^{\infty} (\tilde{\psi}_n, \tilde{\phi}_n) = \sum_{n=0}^{\infty} (\tilde{\psi}_n, \tilde{\phi}_n). \quad (3.46)$$

$(\cdot)_n$ em (3.46) denota o produto escalar em $\tilde{\mathcal{H}}_n$. Sendo Φ um vetor do espaço de Fock direto e $\tilde{\Psi}$ um vetor do espaço de Fock dual, temos:

$$(\Phi, \tilde{\Psi}) = 0. \quad (3.47)$$

Os operadores de criação $\tilde{a}^\dagger(\tilde{h})$ atuam no espaço de Fock dual criando uma partícula com “função de onda” $\tilde{h} \in \tilde{\mathcal{H}}_1$. Eles são definidos por:

$$\tilde{a}^\dagger(\tilde{h})\tilde{\Omega} = \tilde{h}, \quad (3.48)$$

$$(\tilde{a}^\dagger(\tilde{h})\tilde{\Phi})_n = \sqrt{n}S_n^\pm(\tilde{h} \otimes \tilde{\phi}_{n-1}), \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.49)$$

Junto com o operador de criação, podemos definir os “operadores” de campo $\tilde{a}^\dagger(\mathbf{x})$ e $\tilde{a}^\dagger(\mathbf{k})$. Eles expressam o mapeamento $\tilde{h} \rightarrow \tilde{a}^\dagger(\tilde{h})$ como segue

$$\tilde{a}^\dagger(\tilde{h}) = \int d^3x \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x})\tilde{h}(\mathbf{x}) = \int d^3k \hat{\tilde{a}}^\dagger(\mathbf{k})\hat{\tilde{h}}(\mathbf{k}), \quad (3.50)$$

onde $\hat{\tilde{a}}^\dagger$ e $\hat{\tilde{h}}$ denotam a transformada de Fourier. Considerando os vetores \tilde{h}_j e seus complexos conjugados \tilde{h}_j^* bases completas ortonormais, podemos representar os operadores de campo pelas somas

$$\tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}_j)\tilde{h}_j^*(\mathbf{x}) = \sum_j \hat{\tilde{a}}^\dagger(\tilde{h}_j^*)\tilde{h}_j(\mathbf{x}), \quad (3.51)$$

e

$$\hat{\tilde{a}}^\dagger(\mathbf{k}) = \sum_j \hat{\tilde{a}}^\dagger(\tilde{h}_j)\hat{\tilde{h}}_j^*(\mathbf{k}) = \sum_j \hat{\tilde{a}}^\dagger(\tilde{h}_j^*)\hat{\tilde{h}}_j(\mathbf{k}) \quad (3.52)$$

que são independentes da base \tilde{h}_j .

Tratando agora dos operadores aniquilação, eles atuam no espaço de Fock dual destruindo uma partícula com função de onda $\tilde{h} \in \tilde{\mathcal{H}}_1$. Eles são definidos como

$$\tilde{a}(\tilde{h}) = (\tilde{a}^\dagger(\tilde{h}))^\dagger \quad (3.53)$$

com

$$\tilde{a}(\tilde{h})\tilde{\Omega} = 0, \quad (3.54)$$

e

$$(\tilde{a}(\tilde{h})\tilde{\Phi})_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n) = \sqrt{n+1} \int d^3x \tilde{h}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{\phi}_{n+1}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n), \quad (3.55)$$

onde $n = 1, 2, \dots$ e $\tilde{\phi} \in \tilde{\mathcal{H}}_1$. Os operadores de campo correspondentes ao operador aniquilação são definidos como

$$\tilde{a}(\tilde{h}) = \int d^3x \tilde{h}^*(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}) = \int d^3k \hat{h}^*(\mathbf{k}) \hat{a}(\mathbf{k}), \quad (3.56)$$

$$\tilde{a}(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{a}(\tilde{h}_j) \tilde{h}_j(\mathbf{x}) \quad (3.57)$$

$$\hat{a}(\mathbf{k}) = \sum_j \hat{a}(\hat{h}_j) \hat{h}_j(\mathbf{k}). \quad (3.58)$$

A partir das definições (3.49) e (3.55) obtemos, para os operadores de criação e aniquilação, suas relações de comutação no caso dos bósons ou relações de anticomutação no caso de férmions

$$[\tilde{a}(\tilde{h}), \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}')]_{\pm} \tilde{\Phi} = (\tilde{h}, \tilde{h}') \tilde{\Phi}, \quad (3.59)$$

$$[\tilde{a}(\tilde{h}), \tilde{a}(\tilde{h}')]_{\pm} \tilde{\Phi} = 0 = [\tilde{a}^\dagger(\tilde{h}), \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}')]_{\pm} \tilde{\Phi}, \quad (3.60)$$

que são equivalentes às seguintes relações para os operadores de campo

$$[\tilde{a}(\mathbf{x}_1), \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}_2)]_{\pm} = \delta(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad (3.61)$$

$$[\hat{a}(\mathbf{k}_1), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}_2)]_{\pm} = \delta(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2). \quad (3.62)$$

Um operador (limitado) que atua no espaço de Fock dual pode ser expresso em termos dos operadores de criação e aniquilação [46]. Aqui representaremos operadores no espaço de Fock dual com uma letra maiúscula em negrito com um til. O operador número de partículas $\tilde{\mathbf{N}}$ pode ser definido em termos dos operadores de criação e aniquilação como

$$\tilde{\mathbf{N}} = \int d^3x \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}_j) \tilde{a}(\tilde{h}_j), \quad (3.63)$$

de modo que

$$(\tilde{\mathbf{N}}\tilde{\Phi})_n = nS_n^\pm \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) = n(\tilde{\Phi})_n, \quad (3.64)$$

não muda o número de partículas quando aplicadas a um estado de Fock, e todos os operadores $\tilde{\mathbf{A}}$ que comutam com ele, i.e. $[\tilde{\mathbf{A}}, \tilde{\mathbf{N}}] = 0$, não mudam o número de partículas dos estados.

Analogamente, qualquer operador de uma partícula $\tilde{A}(\mathbf{x})$, limitado no espaço de Hilbert dual, é promovido para o espaço de Fock dual da forma:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{A}} &= \int d^3x \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{A}(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{jk} (\tilde{h}_j, \tilde{A}(\mathbf{x}) \tilde{h}_k) \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}_j) \tilde{a}(\tilde{h}_k), \end{aligned} \quad (3.65)$$

onde $(,)$ representa o produto escalar em $\tilde{\mathcal{H}}_1$, e tem-se que

$$\begin{aligned} (\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\Phi})_n &= nS_n^\pm \tilde{A}(\mathbf{x}_1) \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \\ &= \sum_{m=1}^n \tilde{A}(\mathbf{x}_m) \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Estendendo essas definições para os operadores de duas partículas $\tilde{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{V}} &= \int d^3x d^3x' \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}') \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \tilde{a}(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}') \\ &= \sum_{jkj'k'} (\tilde{h}_j \tilde{h}_k, \tilde{V}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \tilde{h}_{k'} \tilde{h}_{j'}) \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}_j) \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}_k) \tilde{a}(\tilde{h}_{k'}) \tilde{a}(\tilde{h}_{j'}), \end{aligned} \quad (3.67)$$

em que

$$(\tilde{\mathbf{V}}\tilde{\Phi})_n = \sum_{j < k} \tilde{V}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) \tilde{\phi}_n(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n). \quad (3.68)$$

As expressões (3.65) e (3.67) se apresentam na forma normalmente ordenada.

Os operadores de campo evoluem com o tempo segundo as equações de movimento de Heisenberg ($\hbar = 1$)

$$\frac{d}{dt} \tilde{a}^\dagger(\tilde{U}\tilde{h}) = i[\tilde{\mathbf{H}}, \tilde{a}^\dagger(\tilde{U}\tilde{h})]_-, \quad (3.69)$$

onde

$$\tilde{U}\tilde{h} \hat{=} e^{iHt} \tilde{h}(0) = \tilde{h}(t), \quad \tilde{h} \in \tilde{\mathcal{H}}_1 \quad (3.70)$$

é a transformação unitária solução da equação de Schrödinger

$$i \frac{d}{dt} \tilde{h} = -\tilde{H}\tilde{h} \quad (3.71)$$

e

$$\tilde{\mathbf{H}} = \sum_{jk} (\tilde{h}_j, \tilde{H}(\mathbf{x})\tilde{h}_k) \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}_j) \tilde{a}(\tilde{h}_k), \quad (3.72)$$

é o hamiltoniano do campo no espaço de Fock dual, que está escrito na forma de um produto normal. A equação (3.71) é obtida da equação de Schrödinger do sistema original pela aplicação das regras de conjugação til (2.15). Percebemos por (3.70), em comparação com (3.34), que a evolução temporal de \tilde{h} se dá no sentido inverso da evolução de h .

A solução da equação (3.69) é dada por

$$\tilde{a}_t^\dagger(\tilde{h}) \doteq \tilde{a}^\dagger(\tilde{U}\tilde{h}) = \tilde{\mathbf{U}}\tilde{a}^\dagger(\tilde{h})\tilde{\mathbf{U}}^{-1}, \quad (3.73)$$

com adjunta

$$\tilde{a}_t(\tilde{h}) \doteq \tilde{a}(\tilde{U}\tilde{h}) = \tilde{\mathbf{U}}\tilde{a}(\tilde{h})\tilde{\mathbf{U}}^{-1}, \quad (3.74)$$

onde a transformação unitária no espaço de Fock dual

$$\tilde{\mathbf{U}} = e^{i\tilde{\mathbf{H}}t} \quad (3.75)$$

é chamada de segunda quantização do operador \tilde{U} no espaço de Hilbert.

3.2 Segunda Quantização do Campo de Dirac

Como as partículas de interesse neste trabalho são partículas de Dirac, aplicaremos nesta seção o método de segunda quantização ao campo de Dirac.

3.2.1 Segunda Quantização do Campo de Dirac Direto

O campo de Dirac, depois de quantizado, descreve partículas fermiônicas; ele é um espinor de quatro componentes, que é frequentemente representado por uma matriz coluna

$$h = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ h_4 \end{pmatrix} \in \mathcal{H}_1 = (L^2(\mathbb{R}^3))^4, \quad (3.76)$$

onde cada componente h_i é uma função complexa da variável espacial \mathbf{x} , e $(L^2(\mathbb{R}^3))^4 = L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3) \oplus L^2(\mathbb{R}^3)$. O produto escalar é dado por

$$\begin{aligned} (h, h') &= \int d^3x h^\dagger(\mathbf{x}) h'(\mathbf{x}) = \sum_i \int d^3x h_i^*(\mathbf{x}) h'_i(\mathbf{x}) \quad (i = 1, \dots, 4) \\ &= (h'^\dagger, h^\dagger) \end{aligned} \quad (3.77)$$

onde $h^\dagger = \begin{pmatrix} h_1^* & h_2^* & h_3^* & h_4^* \end{pmatrix}$

De acordo com (3.12) e (3.19) os operadores aniquilação e criação são dados, respectivamente, por:

$$a(h) = \int d^3x h^\dagger(\mathbf{x})a(\mathbf{x}) \quad (3.78)$$

$$a^\dagger(h) = \int d^3x a^\dagger(\mathbf{x})h(\mathbf{x}), \quad (3.79)$$

onde os operadores de campo espinorial $a(\mathbf{x})$ são matrizes coluna 4x1. Como pode-se observar, $a^\dagger(h)$ depende linearmente de $h(\mathbf{x})$, enquanto $a(h)$ é antilinear em h .

A dinâmica de uma partícula em um campo eletromagnético externo, independente do tempo, é dada pelo operador Hamiltoniano

$$H = H_0 + H_1 = (\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m) + e(V(\mathbf{x}) - \vec{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x})), \quad \hbar = c = 1, \quad (3.80)$$

cujo domínio $(-\infty, \infty)$ pode ser decomposto em um subespaço de energia positiva e outro de energia negativa. A projeção em cada subespaço, $\mathcal{H}_\pm = P_\pm \mathcal{H}_1$, é realizada pelos operadores de projeção P_\pm ,

$$\begin{aligned} (P_+) + (P_-) &= 1, & P_+P_- &= 0 \\ \mathcal{H}_1 &= P_+\mathcal{H}_1 \oplus P_-\mathcal{H}_1. \end{aligned} \quad (3.81)$$

Diante disto, os operadores de criação e aniquilação podem ser decompostos como

$$a(h) = b(P_+h) + d(P_-h) = b(h_+) + d(h_-) \quad (3.82)$$

$$a^\dagger(h) = b^\dagger(P_+h) + d^\dagger(P_-h) = b^\dagger(h_+) + d^\dagger(h_-), \quad (3.83)$$

onde b e b^\dagger estão associados ao espectro positivo de H , d e d^\dagger ao espectro negativo, $h_\pm = P_\pm h \in \mathcal{H}_\pm$, e estamos assumindo

$$b(h_-) = 0 = d(h_+). \quad (3.84)$$

De acordo com (3.22) os operadores fermiônicos cumprem as seguintes relações de anticomutação

$$\begin{aligned} [b(h), b^\dagger(h')]_+ &= (h_+, h'_+), \\ [d(h), d^\dagger(h')]_+ &= (h_-, h'_-), \end{aligned} \quad (3.85)$$

com os demais anticomutadores nulos.

Como \mathcal{H}_\pm são subespaços invariantes com respeito a \mathcal{H} , o operador hamiltoniano no espaço de Fock (3.36)

$$\mathbf{H} = \sum_{jk} (h_j, H(\mathbf{x})h_k) a^\dagger(h_j) a(h_k),$$

pode ser escrito como

$$\mathbf{H}' = \sum_{jk} (f_j, H(\mathbf{x})f_k) b^\dagger(f_j) b(f_k) + (g_j, H(\mathbf{x})g_k) d^\dagger(g_j) d(g_k), \quad (3.86)$$

onde f_j é uma base de \mathcal{H}_+ e g_j uma base de \mathcal{H}_- . No entanto, essa construção leva a um operador hamiltoniano no espaço de Fock não limitado inferiormente, e o segundo termo em (3.86) é o responsável por isso, uma vez que ao escolhermos, por exemplo, um estado com o número de partículas de energia positiva zero, o primeiro termo do lado direito de (3.86) desapareceria e poderíamos com d^\dagger criar cada vez mais partículas de energia negativa e diminuir a energia indefinidamente. Em outras palavras, os férmions de Dirac não teriam um estado fundamental, uma vez que poderíamos colocar quantos férmions quiséssemos em estados com energia arbitrariamente grande e negativa. Assim, para sanar essa deficiência e tornar o hamiltoniano no espaço de Fock fisicamente consistente (limitado), trocamos os papéis dos operadores d^\dagger e d , o que produz um sinal negativo, pois $dd^\dagger = -d^\dagger d$.

Portanto, nesse novo contexto, ao invés de (3.82) e (3.83), devemos considerar

$$\psi^\dagger(h) = b^\dagger(h_+) + d(h_-^\dagger), \quad (3.87)$$

$$\psi(h) = b(h_+) + d^\dagger(h_-^\dagger), \quad (3.88)$$

onde em lugar de a estamos usando ψ e o adjunto da função teste de d é necessário para que tenhamos uma dependência antilinear em h para $\psi(h)$ e linearidade em $\psi^\dagger(h)$. Pelas definições (3.12) e (3.19) temos

$$d^\dagger(h_-^\dagger) = \int d^3x d^\dagger(\mathbf{x}) h_-^\dagger(\mathbf{x}), \quad (3.89)$$

$$d(h_-^\dagger) = \int d^3x h_-(\mathbf{x}) d(\mathbf{x}), \quad (3.90)$$

e

$$b^\dagger(h_+) = \int d^3x b^\dagger(\mathbf{x}) h_+(\mathbf{x}), \quad (3.91)$$

$$b(h_+) = \int d^3x h_+(\mathbf{x}) b(\mathbf{x}), \quad (3.92)$$

Para simplificar a notação, omitiremos o adjunto da função h dos operadores d e d^\dagger , assumindo que na nova notação $d^\dagger(h_-)$ é antilinear em h , e $d(h_-)$ é linear. Os campos de Dirac na formulação de segunda quantização ficam, então,

$$\psi^\dagger(h) = b^\dagger(h_+) + d(h_-), \quad (3.93)$$

$$\psi(h) = b(h_+) + d^\dagger(h_-). \quad (3.94)$$

Em concordância com (3.22) e (3.23) as relações de anticomutação são

$$\begin{aligned} [\psi(h), \psi^\dagger(h')]_+ &= (h, h'), \\ [\psi(h), \psi(h')]_+ &= 0 = \psi^\dagger(h), \psi^\dagger(h'). \end{aligned} \quad (3.95)$$

Analogamente a (3.12) e (3.19), introduzimos os operadores de campo

$$\psi(h) = \int d^3x \psi(\mathbf{x}) h^\dagger(\mathbf{x}), \quad (3.96)$$

$$\psi^\dagger(h) = \int d^3x h(\mathbf{x}) \psi^\dagger(\mathbf{x}). \quad (3.97)$$

cujos evoluções temporais, em vista de (3.37), é definida como

$$\psi_t^\dagger(h) \hat{=} \psi^\dagger(e^{iHt}h) = e^{i\mathbf{H}t} \psi^\dagger(h) e^{-i\mathbf{H}t}, \quad (3.98)$$

onde mudamos ligeiramente (3.37), a fim de obter concordância com a teoria de campos usual.

O hamiltoniano \mathbf{H} tem a mesma forma de (3.86) mas trocando as definições (3.82) e (3.83) por (3.93) e (3.94), ou seja,

$$\mathbf{H} = \sum_{jk} (f_j, H(\mathbf{x}) f_k) b^\dagger(f_j) b(f_k) - (g_j, H(\mathbf{x}) g_k) d^\dagger(g_j) d(g_k), \quad (3.99)$$

a menos de uma constante aditiva que pôde ser desconsiderada, pois esta não contribui na evolução temporal de $\psi_t^\dagger(h)$. Este operador é limitado inferiormente e se apresenta na forma de um produto normalmente ordenado

$$\mathbf{H} = \int d^3x : \psi^\dagger(\mathbf{x}) H \psi(\mathbf{x}) : , \quad (3.100)$$

que estamos denotando por “: :”, ou seja, os operadores de aniquilação aparecem à direita dos operadores de criação. Além da troca de papéis entre os operadores d e d^\dagger , que resultou

em (3.99), também teremos que abandonar nossa definição do vácuo como o estado que é aniquilado por todo b e d ,

$$b(h)\Omega = d(h)\Omega = 0, \quad \forall h \in \mathcal{H}_1, \quad (3.101)$$

e passar a defini-lo por

$$\mathbf{H}\Omega = 0. \quad (3.102)$$

Tomando a carga do elétron igual a $e = -1,6 \times 10^{-19}C$ e definindo o operador carga no espaço de Fock como

$$\mathbf{Q} = e \int d^3x : \psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) : , \quad (3.103)$$

encontramos,

$$\mathbf{Q} = e \sum_j [b^\dagger(f_j)b(f_j) - d^\dagger(g_j)d(g_j)] , \quad (3.104)$$

o que indica, observando o sinal negativo no segundo termo desta expressão, que os operadores b e d estão associados, respectivamente, ao elétron (partícula) e ao pósitron (antipartícula).

Para o caso particular do campo de Dirac livre, a função de onda de uma partícula é

$$h(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3p [h_{s+}(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + h_{s-}(\mathbf{p})v_s(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}]. \quad (3.105)$$

em que

$$\begin{aligned} h_{s+}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2}u_s^\dagger(\mathbf{p})\hat{h}(\mathbf{p}), \\ h_{s-}(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2}v_s^\dagger(\mathbf{p})\hat{h}(-\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (3.106)$$

onde o sinal circunflexo denota a transformada de Fourier ordinária, e os espinores $u(\mathbf{p})$ e $v(-\mathbf{p})$ satisfazem as relações de ortogonalidade:

$$\begin{aligned} u_s^\dagger(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p}) &= 1 = v_s^\dagger(-\mathbf{p})v_s(-\mathbf{p}) \\ u_s^\dagger(\mathbf{p})v_s(-\mathbf{p}) &= 0. \end{aligned} \quad (3.107)$$

Pela definição dos operadores de campo no espaço das coordenadas (3.20) e a decomposição (3.94), o campo de Dirac livre é dado por

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}) &= \sum_j [\psi(f_j)f_j(\mathbf{x}) + \psi(g_j)g_j(\mathbf{x})] \\ &= \sum_j [b(f_j)f_j(\mathbf{x}) + d^\dagger(g_j)g_j(\mathbf{x})], \end{aligned} \quad (3.108)$$

sendo f_j e g_j elementos de um conjunto ortogonal completo que forma uma base de $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_+ \oplus \mathcal{H}_-$.

Para obter os operadores de campo na representação dos momentos, usamos as definições (3.106) e chegamos a

$$\begin{aligned} \sum_j f_{sj}(\mathbf{p})b(f_j) &= \sum_j \frac{1}{2}u_s^\dagger(\mathbf{p})\hat{f}_j(\mathbf{p})b(f_j) \\ &\hat{=} u_s^\dagger(\mathbf{p})\hat{b}(\mathbf{p})\hat{=} b_s(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad (3.109)$$

e similarmente a

$$\begin{aligned} \sum_j d^\dagger(g_j)g_{sj}(\mathbf{p}) &= \sum_j \frac{1}{2}d^\dagger(g_j)v_s^\dagger(\mathbf{p})\hat{g}_j(-\mathbf{p}) \\ &\hat{=} v_s^\dagger(\mathbf{p})\hat{d}^\dagger(-\mathbf{p})\hat{=} d_s^\dagger(\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (3.110)$$

que obedecem as relações de anticomutação

$$\begin{aligned} [b_s(\mathbf{p}), b_{s'}^\dagger(\mathbf{p}')]_+ &= \sum_{jk} (f_j, f_k) f_{sj}(\mathbf{p}) f_{s'k}^*(\mathbf{p}') \\ &= \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{ss'} \end{aligned} \quad (3.111)$$

$$[d_s(\mathbf{p}), d_{s'}^\dagger(\mathbf{p}')]_+ = \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{ss'} \quad (3.112)$$

com as demais relações de anticomutação nulas.

Por (3.98) a evolução temporal do campo de Dirac $\psi(x) = \psi_t(\mathbf{x})$, descrito por H_0 em (3.80), é dada por

$$\begin{aligned} \psi_t(\mathbf{x}) &\hat{=} \psi(x) \hat{=} \psi^-(x) + \psi^+(x) \\ &= \sum_j [\psi_t(f_j)f_j(\mathbf{x}) + \psi_t(g_j)g_j(\mathbf{x})] \\ &= \sum_j [b(P_+e^{iH_0t}f_j)f_j(\mathbf{x}) + d^\dagger(P_-e^{iH_0t}g_j)g_j(\mathbf{x})] \\ &= \sum_j [\psi_t^-(f_j)f_j(\mathbf{x}) + \psi_t^+(g_j)g_j(\mathbf{x})] \end{aligned} \quad (3.113)$$

em que

$$\begin{aligned} \psi_t^-(f_j) &\hat{=} b(P_+e^{iH_0t}f_j)f_j(\mathbf{x}) = \sum_s \int d^3p (P_+e^{iH_0t}f_j)_s^* b_s(\mathbf{p}) \\ &= \sum_s \int d^3p (e^{-iEt}) \hat{f}_j^\dagger(\mathbf{p}) u_s(\mathbf{p}) b_s(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad (3.114)$$

e

$$\begin{aligned}\psi_t^\dagger(g_j) &\hat{=} d^\dagger(P_- e^{iH_0 t} g_j) = \sum_s \int d^3 p (P_- e^{iH_0 t} g_j)_s^* d_s^\dagger(\mathbf{p}) \\ &= \sum_s \int d^3 p (e^{iEt}) \hat{g}_j^\dagger(-\mathbf{p}) v_s(\mathbf{p}) d_s^\dagger(\mathbf{p}),\end{aligned}\quad (3.115)$$

que, com o auxílio de

$$f_j(\mathbf{x}) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} \int d^3 p' \hat{g}_j(-\mathbf{p}') e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}}$$

e

$$g_j(\mathbf{x}) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} \int d^3 p' \hat{f}_j(\mathbf{p}') e^{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}},\quad (3.116)$$

nos leva a

$$\psi(x) = (2\pi)^{\frac{-3}{2}} \sum_s \int d^3 p [e^{-ipx} u_s(\mathbf{p}) b_s(\mathbf{p}) + e^{ipx} v_s(\mathbf{p}) d_s^\dagger(\mathbf{p})].\quad (3.117)$$

Este resultado tem a mesma forma da solução geral da equação de Dirac. O primeiro termo contém o operador aniquilação do elétron, e o segundo termo contém o operador criação do pósitron. O campo de Dirac adjunto é obtido de (3.117)

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(x) &= \psi^\dagger(x) \gamma^0 = \bar{\psi}^+(x) + \bar{\psi}^-(x) \\ &= (2\pi)^{\frac{-3}{2}} \sum_s \int d^3 p [b_s^\dagger(\mathbf{p}) \bar{u}_s(\mathbf{p}) e^{ipx} + d_s(\mathbf{p}) \bar{v}_s(\mathbf{p}) e^{-ipx}],\end{aligned}\quad (3.118)$$

onde $\bar{u}(\mathbf{p}) = u^\dagger(\mathbf{p}) \gamma^0$ e $\bar{v}(\mathbf{p}) = v^\dagger(\mathbf{p}) \gamma^0$.

As relações de anticomutação para o campo de Dirac livre, para tempos arbitrários, podem ser calculadas a partir de (3.117) e (3.118) usando as relações de anticomutação (3.111) e (3.112). Sendo assim,

$$[\psi(x), \bar{\psi}(y)]_+ = [\psi^+(x), \bar{\psi}^-(y)]_+ + [\psi^-(x), \bar{\psi}^+(y)]_+.\quad (3.119)$$

Com ajuda de (3.111) e (3.112), encontramos

$$[\psi_a^-(x), \bar{\psi}_b^+(y)]_+ = (2\pi)^{-3} \sum_s \int d^3 p u_{sa}(\mathbf{p}) \bar{u}_{sb}(\mathbf{p}) e^{-ip(x-y)},\quad (3.120)$$

que é uma transformada de Fourier distribucional. Usando o operador projeção espectral positivo covariante

$$\sum_s u_s(\mathbf{p}) \bar{u}_s(\mathbf{p}) = \frac{\not{p} + m}{2E}, \quad \not{p} = p^0 \gamma^0 - \mathbf{p} \cdot \vec{\gamma} = p_\mu \gamma^\mu\quad (3.121)$$

chegamos a

$$[\psi^-(x), \bar{\psi}^+(y)]_+ = (2\pi)^{-3} \int \frac{d^3p}{2E} (\not{p} + m) e^{-ip(x-y)} \hat{=} \frac{1}{i} \mathcal{S}^+(x-y), \quad (3.122)$$

com a função $\mathcal{S}^+(x)$ definida como a transformada de Fourier distribucional

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^+(x) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2E} (\not{p} + m) e^{-ipx} \\ &= \frac{i}{(2\pi)^3} (i \not{\partial}_x + m) \int \frac{d^3p}{2E} e^{-ipx} \\ &\hat{=} (i \not{\partial}_x + m) D^+(x). \end{aligned} \quad (3.123)$$

onde $\not{\partial}_x = \gamma^\mu \partial_\mu$. A distribuição escalar

$$\begin{aligned} D^+(x) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2E} e^{-ipx} \\ &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int d^4p \delta(p^2 - m^2) \Theta(p^0) e^{-ip \cdot x} \end{aligned} \quad (3.124)$$

é uma invariante de Lorentz, sendo

$$\delta(p^2 - m^2) = \frac{\delta(p^0 - E)}{2E} + \frac{\delta(p^0 + E)}{2E} \quad (3.125)$$

e

$$\Theta(p^0) = \Theta(p^0 - 0) = \begin{cases} 1, & \text{para } p^0 = E > 0 \\ 0, & \text{para } p^0 = E < 0 \end{cases}, \quad (3.126)$$

a função de Heaviside.

Similarmente, obtemos o outro anticomutador não nulo

$$[\psi^+(x), \bar{\psi}^-(y)]_+ = (2\pi)^{-3} \int \frac{d^3p}{2E} (\not{p} - m) e^{-ip(x-y)} \hat{=} \frac{1}{i} \mathcal{S}^-(x-y), \quad (3.127)$$

onde foi usado

$$\sum_s v_s(\mathbf{p}) \bar{v}_s(\mathbf{p}) = \frac{\not{p} - m}{2E}, \quad (3.128)$$

e em que

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^-(x-y) &= \frac{i}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2E} (\not{p} + m) e^{ip(x-y)} \\ &= -\frac{i}{(2\pi)^3} (i \not{\partial}_x + m) \int \frac{d^3p}{2E} e^{ip(x)} \\ &\hat{=} (i \not{\partial}_x + m) D^-(x), \end{aligned} \quad (3.129)$$

com a nova distribuição escalar de Lorentz D^- escrita como

$$\begin{aligned} D^-(x) &= -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d^4p \delta(p^2 - m^2) \Theta(p^0) e^{ip \cdot x} \\ &= -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d^4p \delta(p^2 - m^2) \Theta(-p^0) e^{-ip \cdot x}, \end{aligned} \quad (3.130)$$

com

$$\Theta(-p^0) = \begin{cases} 0, & \text{para } p^0 = E > 0 \\ 1, & \text{para } p^0 = E < 0 \end{cases} \quad (3.131)$$

Desta forma, a relação de anticomutação para o campo total de Dirac fica dada por

$$[\psi(x), \bar{\psi}(y)]_+ = \frac{1}{i} [\mathcal{S}^-(x-y) + \mathcal{S}^+(x-y)] = \frac{1}{i} \mathcal{S}(x-y), \quad (3.132)$$

com

$$\begin{aligned} \mathcal{S}(x) &= \mathcal{S}^-(x) + \mathcal{S}^+(x) \\ &\hat{=} (i \not{\partial}_x + m) D(x), \end{aligned} \quad (3.133)$$

onde a função de Pauli-Jordan

$$D(x) = D^- + D^+ = \frac{i}{(2\pi)^3} \int d^4p \delta(p^2 - m^2) \text{sgn}(p^0) e^{-ip \cdot x}, \quad (3.134)$$

com $\text{sgn}(p^0) = \Theta(p^0) - \Theta(-p^0)$, possui decomposição causal em funções retardada e avançada

$$D(x) = D^{ret}(x) - D^{av}(x), \quad (3.135)$$

com

$$D^{ret}(x) = \Theta(x^0) D(x), \quad (3.136)$$

$$D^{av}(x) = \Theta(-x^0) D(x). \quad (3.137)$$

Essas funções podem ser expressas como transformadas de Fourier distribucionais quadri-dimensionais, ou seja,

$$D^{ret}(x) = (2\pi)^{-4} \int d^4p \frac{e^{-ipx}}{m^2 - p^2 - ip^0} \quad (3.138)$$

e

$$D^{av}(x) = (2\pi)^{-4} \int d^4p \frac{e^{-ipx}}{m^2 - p^2 + ip^0}, \quad (3.139)$$

cujas transformadas de Fourier são

$$\hat{D}^{ret}(p) = (2\pi)^{-2} \frac{1}{m^2 - p^2 - ip^0 0} \quad (3.140)$$

e

$$\hat{D}^{av}(p) = (2\pi)^{-2} \frac{1}{m^2 - p^2 + ip^0 0}, \quad (3.141)$$

onde estamos usando $\pm ip^0$ para indicar como contornamos os polos.

Similarmente, introduzimos as distribuições retardada e avançada para o campo de Dirac

$$\mathcal{S}^{ret}(x) \hat{=} (i \not{\partial}_x + m) D^{ret}(x) = -(2\pi)^{-4} \int d^4 p \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + ip^0 0} e^{-ipx}, \quad (3.142)$$

$$\mathcal{S}^{av}(x) \hat{=} (i \not{\partial}_x + m) D^{av}(x) = -(2\pi)^{-4} \int d^4 p \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 - ip^0 0} e^{-ipx}, \quad (3.143)$$

que, no espaço dos momentos, são expressas como:

$$\hat{\mathcal{S}}^{ret}(p) = -(2\pi)^{-2} \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + ip^0 0}, \quad (3.144)$$

$$\hat{\mathcal{S}}^{av}(p) = -(2\pi)^{-2} \frac{\not{p} + m}{(p^2 - m^2 - ip^0 0)}. \quad (3.145)$$

Os chamados propagadores de Feynman são definidos através das expressões

$$D^F(x) = D^{av}(x) + D^+(x) = (2\pi)^{-4} \int d^4 p \frac{e^{-ipx}}{m^2 - p^2 - i0}, \quad (3.146)$$

$$\mathcal{S}^F(x) = -(i \not{\partial}_x + m) D^F(x) = (2\pi)^{-4} \int d^4 p \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + i0} e^{-ipx}, \quad (3.147)$$

com a seguinte representação no espaço do momento:

$$\hat{D}^F(p) = (2\pi)^{-2} \frac{1}{m^2 - p^2 - i0}. \quad (3.148)$$

$$\hat{\mathcal{S}}^F(p) = (2\pi)^{-2} \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + i0}, \quad (3.149)$$

3.2.2 Segunda Quantização do Campo de Dirac Dual

O espinor de Dirac dual é representado por um vetor linha

$$\tilde{h} = \left(\tilde{h}_1 \quad \tilde{h}_2 \quad \tilde{h}_3 \quad \tilde{h}_4 \right) \in \tilde{\mathcal{H}}_1 = (L^2(\mathbb{R}^3))^4 \quad (3.150)$$

com produto escalar

$$\begin{aligned} (\tilde{h}, \tilde{h}') &= \int d^3 x \tilde{h}'^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{h}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_i \int d^3 x \tilde{h}'_i(\mathbf{x}) \tilde{h}_i^*(\mathbf{x}) \\ &= (\tilde{h}'^\dagger, \tilde{h}^\dagger), \quad i = 1, \dots, 4 \end{aligned} \quad (3.151)$$

De acordo com (3.50) e (3.56) os operadores aniquilação e criação são dados, respectivamente, por:

$$\tilde{a}(\tilde{h}) = \int d^3x \tilde{h}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{a}(\mathbf{x}) \quad (3.152)$$

$$\tilde{a}^\dagger(\tilde{h}) = \int d^3x \tilde{a}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{h}(\mathbf{x}). \quad (3.153)$$

Como pode-se observar, $a^\dagger(h)$ depende linearmente de $h(\mathbf{x})$, enquanto $a(h)$ é antilinear em \tilde{h} .

O operador hamiltoniano

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_1 \quad (3.154)$$

com

$$\tilde{H}_1 = e(V(\mathbf{x}) - \vec{\alpha} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x})) \quad (3.155)$$

fornece a dinâmica do campo de Dirac dual em um campo eletromagnético externo independente do tempo. O espaço de Hilbert pode ser dividido em um subespaço de energia positiva e outro de energia negativa com o auxílio de operadores de projeção P_\pm , também usados na decomposição do espaço de Hilbert direto. Portanto, o espaço $\tilde{\mathcal{H}}_1$ pode ser decomposto da seguinte forma:

$$\tilde{\mathcal{H}}_1 = \tilde{\mathcal{H}}_+ + \tilde{\mathcal{H}}_- = P_+ \tilde{\mathcal{H}}_1 \oplus P_- \tilde{\mathcal{H}}_1. \quad (3.156)$$

Esta decomposição espectral pode ser estendida aos operadores de criação e aniquilação, resultando em

$$\begin{aligned} \tilde{a}^\dagger(\tilde{h}) &= \tilde{b}^\dagger(P_- \tilde{h}) + \tilde{d}^\dagger(P_+ \tilde{h}), \\ \tilde{a}(\tilde{h}) &= \tilde{b}(P_- \tilde{h}) + \tilde{d}(P_+ \tilde{h}), \end{aligned} \quad (3.157)$$

estando \tilde{d} e \tilde{d}^\dagger associados aos estados de energia positiva, e \tilde{b} e \tilde{b}^\dagger associados aos estados de energia negativa, uma vez que o sinal negativo em (3.71) sugere uma inversão no espectro de energia (ou inversão temporal) em relação ao sistema original (espaço direto). Estamos assumindo ainda

$$\tilde{b}(\tilde{h}_+) = 0 = \tilde{d}(\tilde{h}_-), \quad (3.158)$$

com $\tilde{h}_\pm = P_\pm \tilde{h} \in \mathcal{H}_\pm$. Da equação (3.72), o operador hamiltoniano no espaço de Fock dual pode ser escrito em função dos operadores $\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger, \tilde{d}, \tilde{d}^\dagger$ como

$$\tilde{\mathbf{H}}' = \sum_{jk} [(\tilde{g}_j, \tilde{H}(\mathbf{x})\tilde{g}_k)\tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_j)\tilde{b}(\tilde{g}_k)] + \sum_{jk} [(\tilde{f}_j, \tilde{H}(\mathbf{x})\tilde{f}_k)\tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_j)\tilde{d}(\tilde{f}_k)], \quad (3.159)$$

com \tilde{f}_j uma base de $\tilde{\mathcal{H}}_+$, \tilde{g}_j uma base de $\tilde{\mathcal{H}}_-$; temos que esse operador não é limitado, porém deve ser limitado superiormente uma vez que o hamiltoniano \mathbf{H} , no espaço direto, é limitado inferiormente e eles possuem espectros de energia invertidos. Para tornar $\tilde{\mathbf{H}}$ limitado superiormente trocaremos os papéis dos operadores \tilde{d}^\dagger e \tilde{d} , trocando a dependência em \tilde{h} , uma vez que o adjunto da função teste de \tilde{d}^\dagger é necessário para não alterar a linearidade de \tilde{a}^\dagger e a antilinearidade de \tilde{a} com respeito a \tilde{h} . Assim, os operadores de criação e aniquilação de Dirac dual ficam

$$\tilde{\psi}^\dagger(\tilde{h}) = \tilde{b}^\dagger(\tilde{h}_-) + \tilde{d}(\tilde{h}_+^\dagger), \quad (3.160)$$

$$\tilde{\psi}(\tilde{h}) = \tilde{b}(\tilde{h}_-) + \tilde{d}^\dagger(\tilde{h}_+^\dagger). \quad (3.161)$$

Daqui por diante omitiremos o adjunto na função teste de \tilde{d}^\dagger e assumiremos a convenção de que $\tilde{d}^\dagger(\tilde{h})$ é linear em \tilde{h} , e $\tilde{d}(\tilde{h})$ é antilinear.

De acordo com as relações de anticomutação, temos

$$\begin{aligned} [\tilde{\psi}(\tilde{h}), \tilde{\psi}^\dagger(\tilde{h}')]_+ &= (\tilde{h}, \tilde{h}'), \\ [\tilde{\psi}(\tilde{h}), \tilde{\Psi}(\tilde{h}')]_+ &= 0 = [\tilde{\psi}^\dagger(\tilde{h}), \tilde{\psi}^\dagger(\tilde{h}')]_+. \end{aligned} \quad (3.162)$$

e conseqüentemente

$$\begin{aligned} [\tilde{b}(\tilde{h}), \tilde{b}^\dagger(\tilde{h}')]_+ &= (\tilde{h}_-, \tilde{h}'_-), \\ [\tilde{d}(\tilde{h}), \tilde{d}^\dagger(\tilde{h}')]_+ &= (\tilde{h}_+, \tilde{h}'_-) \end{aligned} \quad (3.163)$$

Usando (3.50), (3.51), (3.56) e (3.57) podemos introduzir os operadores de campo dual

$$\tilde{\psi}^\dagger(\tilde{h}) = \int d^3x \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{h}(\mathbf{x}), \quad (3.164)$$

$$\tilde{\psi}(\tilde{h}) = \int d^3x \tilde{h}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{\psi}(\mathbf{x}). \quad (3.165)$$

e

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) &= \sum_j \tilde{\psi}(f_j) \tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{\psi}(\tilde{f}_j^\dagger) \tilde{f}_j(\mathbf{x}) \\ &= \sum_j [\tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_j^\dagger) \tilde{g}_j(\mathbf{x}) + \tilde{d}(\tilde{f}_j^\dagger) \tilde{f}_j(\mathbf{x})],\end{aligned}\quad (3.166)$$

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(\mathbf{x}) &= \sum_j \tilde{f}_j(\mathbf{x}) \tilde{\psi}(f_j) = \sum_j \tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{\psi}(\tilde{f}_j^\dagger) \\ &= \sum_j [\tilde{b}(\tilde{g}_j^\dagger) \tilde{g}_j^\dagger(\mathbf{x}) + \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_j^\dagger) \tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x})],\end{aligned}\quad (3.167)$$

onde usamos a separação $\{\tilde{h}_j\} = \{\tilde{f}_j, \tilde{g}_j\}$ do vetor da base de $\tilde{\mathcal{H}}_1$, com $\tilde{f}_j \in \tilde{\mathcal{H}}_+$ e $\tilde{g}_j \in \tilde{\mathcal{H}}_-$.

Das expressões (3.164) e (3.165) temos que

$$\begin{aligned}\tilde{b}^\dagger(\tilde{h}) &= \int d^3x \tilde{b}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{h}(\mathbf{x}) = \int d^3p \tilde{b}^\dagger(\mathbf{p}) \tilde{h}(\mathbf{p}), \\ \tilde{b}(\tilde{h}) &= \int d^3x \tilde{h}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{b}(\mathbf{x}) = \int d^3p \tilde{h}^\dagger(\mathbf{p}) \tilde{b}(\mathbf{p}).\end{aligned}\quad (3.168)$$

$$\begin{aligned}\tilde{d}^\dagger(\tilde{h}) &= \int d^3x \tilde{d}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{h}^\dagger(\mathbf{x}) = \int d^3p \tilde{d}^\dagger(\mathbf{p}) \tilde{h}^\dagger(\mathbf{p}), \\ \tilde{d}(\tilde{h}) &= \int d^3x \tilde{h}(\mathbf{x}) \tilde{d}(\mathbf{x}) = \int d^3p \tilde{h}(\mathbf{p}) \tilde{d}(\mathbf{p}).\end{aligned}\quad (3.169)$$

e, de (3.166) e (3.167), obtemos

$$\begin{aligned}\tilde{b}^\dagger(\mathbf{x}) &= \sum_j \tilde{b}^\dagger(f_j) \tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{b}^\dagger(\tilde{f}_j^\dagger) \tilde{f}_j(\mathbf{x}), \\ \tilde{b}(\mathbf{x}) &= \sum_j \tilde{b}(f_j) \tilde{f}_j(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{b}(\tilde{f}_j^\dagger) \tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x}),\end{aligned}\quad (3.170)$$

$$\begin{aligned}\tilde{d}^\dagger(\mathbf{x}) &= \sum_j \tilde{d}^\dagger(f_j) \tilde{f}_j(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_j^\dagger) \tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x}), \\ \tilde{d}(\mathbf{x}) &= \sum_j \tilde{d}(f_j) \tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_j \tilde{d}(\tilde{f}_j^\dagger) \tilde{f}_j(\mathbf{x}).\end{aligned}\quad (3.171)$$

O operador $\tilde{\mathbf{H}}'$, com a troca de papéis entre \tilde{d}^\dagger e \tilde{d} , torna-se:

$$\tilde{\mathbf{H}} = \sum_{jk} (\tilde{g}_j, \tilde{H}(\mathbf{x}) \tilde{g}_k) \tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_j) \tilde{b}(\tilde{g}_k) - \sum_{jk} (\tilde{f}_j, \tilde{H}(\mathbf{x}) \tilde{f}_k) \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_k) \tilde{d}(\tilde{f}_j),\quad (3.172)$$

a menos de uma constante aditiva que pode ser desprezada. Ele pode ser apresentado na forma de um produto normalmente ordenado, ou seja:

$$\tilde{\mathbf{H}} = \int d^3(x) : \tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \tilde{H} \tilde{\psi}(\mathbf{x}) : \quad .\quad (3.173)$$

Esse operador é limitado superiormente, com um máximo correspondendo ao vácuo. Os operadores $\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger$ referem-se a estados associados à partícula dual, e $\tilde{d}, \tilde{d}^\dagger$ à antipartícula dual.

Além da troca de papéis entre os operadores d e d^\dagger , que resultou em (3.172), devemos definir o vácuo tal que

$$\tilde{\mathbf{H}}\Omega = 0. \quad (3.174)$$

Para o caso particular do campo de Dirac dual livre, a função de onda de uma partícula é

$$\tilde{h}^\dagger(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_s \int d^3p [\tilde{h}_{s+}^\dagger(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + \tilde{h}_{s-}^\dagger(\mathbf{p})v_s(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}] \quad (3.175)$$

em que

$$\begin{aligned} \tilde{h}_{s+}^\dagger(\mathbf{p}) &= v_s^\dagger(\mathbf{p})\hat{h}(\mathbf{p}), \\ \tilde{f}_{s-}^\dagger(\mathbf{p}) &= u_s^\dagger(\mathbf{p})\hat{h}(-\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (3.176)$$

e sua conjugada

$$\tilde{h}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_s \int d^3p [u_s^\dagger(\mathbf{p})\tilde{h}_{s+}^\dagger(\mathbf{p})e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} + v_s^\dagger(\mathbf{p})\tilde{h}_{s-}^\dagger(\mathbf{p})e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}]. \quad (3.177)$$

A evolução temporal dos operadores de campo dependentes do tempo, de acordo com (3.69), é dada pela equação de Heisenberg

$$\frac{d}{dt}\tilde{\psi}_t^\dagger(\tilde{h}) = i[\tilde{\psi}_t^\dagger(\tilde{h}), \tilde{\mathbf{H}}]_-,$$

em que

$$\tilde{\psi}_t^\dagger(\tilde{h}) \hat{=} \tilde{\psi}^\dagger(e^{-i\tilde{\mathbf{H}}t}h) = e^{-i\tilde{\mathbf{H}}t}\tilde{\psi}^\dagger e^{i\tilde{\mathbf{H}}t}.$$

Aqui, assim como em (3.98), mudamos ligeiramente (3.73). Associado ao operador dependente do tempo $\tilde{\psi}_t^\dagger(\tilde{h})$, teremos o operador de campo no espaço das coordenadas $\tilde{\psi}^\dagger(x) = \tilde{\psi}_t^\dagger(\mathbf{x})$ que, definido de forma análoga a (3.176), fica

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_t^\dagger(\mathbf{x}) &\hat{=} \tilde{\psi}^\dagger(x) \\ &= \sum_j [\tilde{\psi}_t^\dagger(\tilde{g}_j)\tilde{g}_j^\dagger(\mathbf{x}) + \tilde{\psi}_t^\dagger(\tilde{f}_j)\tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x})] \\ &= \sum_j [\tilde{b}^\dagger(e^{-iH_0t}\tilde{g}_j)\tilde{g}_j^\dagger(\mathbf{x}) + \tilde{d}(e^{-iH_0t}\tilde{f}_j)\tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x})] \\ &= \tilde{\psi}^\dagger(x)^- + \tilde{\psi}^\dagger(x)^+, \end{aligned} \quad (3.178)$$

onde os índices + e – estão associados, respectivamente, ao subespaço positivo e negativo do espectro de \tilde{H}_0 . Usando (3.176) e as definições dos operadores de campo (3.168) e (3.169), temos que:

$$\begin{aligned}\tilde{d}(e^{-iH_0t}\tilde{f}_j) &= \sum_s \int d^3p \tilde{d}_s(\mathbf{p})(e^{-i\tilde{H}_0t}\tilde{f}_j(\mathbf{p})) \\ &= \sum_s \int d^3p \tilde{d}_s(\mathbf{p})e^{-i\tilde{H}_0t}v_s(\mathbf{p})\tilde{f}_j(-\mathbf{p}) \\ &= \sum_s \int d^3p e^{-iE_{\mathbf{p}}t}v_s(\mathbf{p})\tilde{f}_j(-\mathbf{p})\tilde{d}_s(\mathbf{p})\end{aligned}\quad (3.179)$$

e

$$\begin{aligned}\tilde{b}^\dagger(e^{-iH_0t}\tilde{g}_j) &= \sum_s \int d^3p \tilde{b}_s^\dagger(\mathbf{p})(e^{-i\tilde{H}_0t}\tilde{g}_j(\mathbf{p})) \\ &= \sum_s \int d^3p \tilde{b}_s^\dagger(\mathbf{p})e^{-i\tilde{H}_0t}u_s(\mathbf{p})\tilde{g}_j(\mathbf{p}) \\ &= \sum_s \int d^3p e^{-iE_{\mathbf{p}}t}u_s(\mathbf{p})\tilde{g}_j(\mathbf{p})\tilde{b}_s^\dagger(\mathbf{p}).\end{aligned}\quad (3.180)$$

que, com o auxílio de

$$\tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3p' \tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{p}')e^{i\mathbf{p}'\cdot\mathbf{x}}$$

e

$$\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = \sum_j \tilde{f}_j(\mathbf{p})\tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{p}'),$$

nos leva a

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}^\dagger(x) &= \sum_j \sum_s d^3p [e^{-iE_{\mathbf{p}}t}v_s(\mathbf{p})\tilde{f}_j(-\mathbf{p})\tilde{d}_s(\mathbf{p})\tilde{f}_j^\dagger(\mathbf{x}) + \\ &\quad + e^{-iE_{\mathbf{p}}t}u_s(\mathbf{p})\tilde{g}_j(\mathbf{p})\tilde{b}_s^\dagger(\mathbf{p})\tilde{g}_j^\dagger(\mathbf{x})] \\ &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_j \int d^3p [\tilde{d}_s(\mathbf{p})v_s(\mathbf{p})e^{ip\cdot x} + \tilde{b}_s(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p})e^{-ip\cdot x}] \\ &= \tilde{\psi}^\dagger(x)^+ + \tilde{\psi}^\dagger(x)^-.\end{aligned}\quad (3.181)$$

O operador adjunto é obtido de (3.181)

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(x) &= \tilde{\psi}^\dagger(x)\gamma^0 = \tilde{\psi}^+(x) + \tilde{\psi}^-(x) \\ &= (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_s \int d^3p [\tilde{d}_s^\dagger(\mathbf{p})\tilde{v}_s(\mathbf{p})e^{-ip\cdot x} + \tilde{b}_s(\mathbf{p})\tilde{u}_s(\mathbf{p})e^{ip\cdot x}],\end{aligned}\quad (3.182)$$

onde $\bar{u}_s(\mathbf{p}) \hat{=} u_s^\dagger(\mathbf{p})\gamma^0$ e $\bar{v}_s(\mathbf{p}) \hat{=} v_s^\dagger(\mathbf{p})\gamma^0$.

As relações de anticomutação para o campo de Dirac dual livre, para tempos arbitrários, podem ser calculadas a partir de (3.181) e (3.182):

$$\begin{aligned} [\tilde{\psi}^\dagger(x), \tilde{\psi}(y)]_+ &= [\tilde{\psi}^\dagger(x)^+, \tilde{\psi}(y)^+]_+ + [\tilde{\psi}^\dagger(x)^+, \tilde{\psi}(y)^-]_+ + [\tilde{\psi}^\dagger(x)^-, \tilde{\psi}(y)^+]_+ + [\tilde{\psi}^\dagger(x)^-, \tilde{\psi}(y)^-]_+ \\ &= [\tilde{\psi}^\dagger(x)^+, \tilde{\psi}(y)^-]_+ + [\tilde{\psi}^\dagger(x)^-, \tilde{\psi}(y)^+]_+. \end{aligned} \quad (3.183)$$

Nessa expressão os outros dois anticomutadores são nulos pois envolvem os operadores \tilde{b} e \tilde{d} . Usando as relações de anticomutação

$$\begin{aligned} [\tilde{b}_s(\mathbf{p}), \tilde{b}_{s'}^\dagger(\mathbf{p}')]_+ &= \sum_{jk} (\tilde{g}_j, \tilde{g}_k) \tilde{g}_{sj}(\mathbf{p}) \tilde{g}_{s'k}^*(\mathbf{p}') \\ &= \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{ss'} \end{aligned} \quad (3.184)$$

e

$$\begin{aligned} [\tilde{d}_s(\mathbf{p}), \tilde{d}_{s'}^\dagger(\mathbf{p}')]_+ &= \sum_{jk} (\tilde{f}_k, \tilde{f}_j) \tilde{f}_{sj}(\mathbf{p}) \tilde{f}_{s'k}^*(\mathbf{p}') \\ &= \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{ss'} \end{aligned} \quad (3.185)$$

chegamos a

$$[\tilde{\psi}^\dagger(x)^-, \tilde{\psi}(y)^+]_+ = (2\pi)^{-3} \int \frac{d^3p}{2E} (\not{p} + m) e^{-ip(x-y)} \hat{=} \frac{1}{i} \mathcal{S}^+(x-y), \quad (3.186)$$

$$[\tilde{\psi}^\dagger(x)^+, \tilde{\psi}(y)^-]_+ = (2\pi)^{-3} \int \frac{d^3p}{2E} (\not{p} - m) e^{ip(x-y)} \hat{=} \frac{1}{i} \mathcal{S}^-(x-y). \quad (3.187)$$

Desta forma, a relação de anticomutação para o campo total de Dirac dual fica dada por

$$[\tilde{\psi}^\dagger(x), \tilde{\psi}(y)]_+ = \frac{1}{i} [\mathcal{S}^-(x-y) + \mathcal{S}^+(x-y)] = \frac{1}{i} \mathcal{S}(x-y). \quad (3.188)$$

Esses resultados (3.186-3.188) são os mesmos encontrados para o sistema original (3.122), (3.127) e (3.132). Sendo assim, a distribuição retardada $\mathcal{S}^{ret}(p)$, a distribuição avançada $\mathcal{S}^{av}(p)$ e o propagador de Feynman $\mathcal{S}^F(p)$, definidos na seção anterior, serão também utilizados na construção da matriz espalhamento para o sistema dual [46].

3.3 Operador Espalhamento no Espaço de Fock

Nesta seção construiremos, a partir dos operadores espalhamento nos espaço de Hilbert direto \mathbf{S} e no espaço de Hilbert dual $\tilde{\mathbf{S}}$, os operadores espalhamento no espaço de Fock direto \mathbf{S} e no espaço de Fock dual $\tilde{\mathbf{S}}$.

3.3.1 Operador Espalhamento no Espaço de Fock Direto

A matriz de espalhamento é um elemento central na teoria quântica de campos, bem como na mecânica quântica usual. Ela descreve a amplitude de probabilidade para que um sistema físico faça a transição de um estado inicial para um final, sob a influência de um potencial de interação. Ela foi introduzida por Wheeler em 1937 [53] em estudos de reações nucleares, e revista em 1943 por Heisenberg [54].

Seja $|h(t)\rangle$ o vetor de estado dependente do tempo em \mathcal{H}_1 . Tem-se que a solução geral da equação (3.35) é

$$|h(t)\rangle = e^{-iHt}|h(0)\rangle = U(t)|h\rangle, \quad (3.189)$$

onde $H = H_0 + H_1$ e $U(t)$ é o operador denominado evolução temporal.

No caso de $U(t)$ descrever a evolução de algum processo de espalhamento tem-se que bem antes do instante da colisão (ação do centro de espalhamento) $U(t)|h\rangle$ representa o estado de uma partícula livre descrito pelo Hamiltoniano H_0 ; seu movimento é então determinado pelo operador de evolução temporal $U^0(t) = e^{-iH_0t}$. Nessas condições espera-se que para $t \rightarrow -\infty$ se tenha para algum $|h_i\rangle \in \mathcal{H}_1$

$$U(t)|h\rangle \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} U^0(t)|h_i\rangle, \quad (3.190)$$

ou seja,

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} U(t)|h\rangle = U^0(t)|h_i\rangle. \quad (3.191)$$

O que significa que para $t \rightarrow -\infty$ os estados $U(t)|h\rangle$ e $U^0(t)|h_i\rangle$ são fisicamente indistinguíveis.

De forma similar, depois da colisão (efeito do potencial) a partícula move-se para distante do centro espalhador e espera-se que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} U(t)|h\rangle = U^0(t)|h_f\rangle \quad (3.192)$$

para algum $|h_f\rangle$ em \mathcal{H}_1 .

Se o potencial tiver alcance finito, o teorema da condição assintótica [55] assegura que para todo $|h_i\rangle$ em \mathcal{H}_1 há um vetor de estado $|h\rangle$ em \mathcal{H}_1 tal que

$$U(t)|h\rangle - U^0(t)|h_i\rangle \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} 0, \quad (3.193)$$

de modo que

$$|h\rangle - \lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U^0(t)|h_i\rangle = 0, \quad (3.194)$$

ou seja,

$$|h\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} U^\dagger(t)U^0(t)|h_i\rangle \hat{=} \Omega_+ |h_i\rangle. \quad (3.195)$$

De forma similar, para todo $|h_f\rangle$ em \mathcal{H}_1 tem-se

$$U(t)|h\rangle - U^0(t)|h_f\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0, \quad (3.196)$$

de forma que

$$|h\rangle - \lim_{t \rightarrow +\infty} U^\dagger(t)U^0(t)|h_f\rangle = 0, \quad (3.197)$$

ou seja,

$$|h\rangle = \lim_{t \rightarrow +\infty} U^\dagger(t)U^0(t)|h_f\rangle \hat{=} \Omega_- |h_f\rangle. \quad (3.198)$$

Os operadores em (3.195) e (3.198) são denominados operadores de Möller e relacionam os estados $|h_i\rangle$ e $|h_f\rangle$ com o estado efetivo (na região de espalhamento) aqui considerado em $t = 0$.

Usando (3.195) e (3.198) segue então que

$$|h_f\rangle = \Omega_- |h\rangle = \Omega_- \Omega_+ |h_i\rangle \quad (3.199)$$

o que permite definir o operador

$$S = \Omega_- \Omega_+ \quad (3.200)$$

denominado operador de espalhamento e que estabelece a transição de um estado assintótico inicial $|h_i\rangle$ para um estado assintótico final $|h_f\rangle$, ou seja,

$$|h_f\rangle = S|h_i\rangle. \quad (3.201)$$

Lembrando que $U^0(t) = e^{-iH_0 t}$ e $U(t) = e^{-iHt} = U(t, 0)$, tem-se de (3.195) e (3.198)

$$\Omega_+ = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{iHt} e^{-iH_0 t} = \lim_{t \rightarrow -\infty} U(0, t) e^{-iH_0 t} \quad (3.202)$$

e

$$\Omega_- = \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{iHt} e^{-iH_0 t} = \lim_{t \rightarrow +\infty} U(0, t) e^{-iH_0 t}. \quad (3.203)$$

Usando para $t \rightarrow -\infty$, a notação $t_0 \rightarrow -\infty$, segue que

$$S = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{iH_0 t} U(t, 0) U(0, t_0) e^{-iH_0 t_0} \quad (3.204)$$

ou

$$\begin{aligned} S &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{iH_0 t} U(t, t_0) e^{-iH_0 t_0} \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{iH_0 t} e^{-iH(t-t_0)} e^{-iH_0 t_0}, \end{aligned} \quad (3.205)$$

que expresso em termos do operador evolução temporal na representação de interação $U^I(t, t_0)$ (Vide Âpêndice B), fica

$$\begin{aligned} S &= \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} U^I(t, t_0) \\ &= \hat{U}(\infty, -\infty) \end{aligned} \quad (3.206)$$

cuja série de perturbação (série de Dyson para o operador S) é

$$S = \sum_n (-i)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) \dots H_1^I(t_n) \quad (3.207)$$

$$= \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n \hat{T}(H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) \dots H_1^I(t_n)) \quad (3.208)$$

$$= \hat{T} \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} dt H_1^I(t) \right] \quad (3.209)$$

em que \hat{T} é o operador de ordenamento temporal e H_1^I é o hamiltoniano da interação na descrição de interação (vide Apêndice B).

Sendo S um tipo de operador evolução temporal, ele é unitário

$$\hat{S}^\dagger \hat{S} = \mathbb{I}. \quad (3.210)$$

Conhecido o elemento de matriz do operador S, podemos calcular seções de choque de espalhamento e taxas de decaimento [54] uma vez que, o quadrado do módulo de S_{fi} representa a probabilidade de transição entre o estado inicial h_i e o final h_f , ou seja:

$$p_{fi} = |\langle h_f | S | h_i \rangle|^2 = |S_{fi}|^2. \quad (3.211)$$

Como dito, o operador espalhamento \mathbf{S} no espaço de Hilbert faz a transição entre um estado assintótico inicial e um estado assintótico final. Como, por hipótese, somente o movimento assintoticamente livre é observável na prática, a formulação de segunda quantização para o operador de espalhamento será construída baseada na representação de Fock do campo de Dirac livre, dado por

$$\psi(h) = b(P_+^0 h) + d^\dagger(P_-^0 h) \hat{=} b(f) + d^\dagger(g), \quad (3.212)$$

onde denotamos

$$f = P_+^0 h \in \mathcal{H}_+ \quad e \quad g = P_-^0 h \in \mathcal{H}_- \quad (3.213)$$

em que P_\pm^0 são os operadores de projeção sobre os subespaços do hamiltoniano de Dirac livre H_0 (3.80). Daqui por diante o índice zero em H_0 será omitido.

O operador espalhamento em segunda quantização \mathbf{S} no espaço de Fock, caso exista, é definido como [45]

$$\psi(S^\dagger h) = \mathbf{S}^{-1} \psi(h) \mathbf{S}, \quad (3.214)$$

$$\psi^\dagger(S^\dagger h) = \mathbf{S}^{-1} \psi^\dagger(h) \mathbf{S}, \quad \forall h \in \mathcal{H}_1. \quad (3.215)$$

As definições acima implicam que \mathbf{S} é unitário e determinado univocamente a menos de uma fase $e^{i\lambda}$. Esta fase depende do potencial externo e não pode ser negligenciada; ela é definida ao se exigir que \mathbf{S} satisfaça a condição de causalidade local [43]

$$\frac{\delta}{\delta A_\nu(y)} (\mathbf{S} \Omega, \frac{\delta \mathbf{S}}{\delta A_\mu(x)} \Omega) = 0, \quad x^0 < y^0 \quad (3.216)$$

Com a ajuda de (3.81) temos que $S^\dagger h$ no lado esquerdo das equações (3.214) e (3.215), pode ser decomposta

$$\begin{aligned} S^\dagger h &= P_+ S^\dagger h + P_- S^\dagger h \\ &= P_+ S^\dagger P_+ h + P_+ S^\dagger P_- h + P_- S^\dagger P_+ h + P_- S^\dagger P_- h \\ &= S_{++}^\dagger h + S_{+-}^\dagger h + S_{-+}^\dagger h + S_{--}^\dagger h \end{aligned} \quad (3.217)$$

e se divide, após a decomposição da função h em funções do tipo $f = P_+ h \in \mathcal{H}_+$ e $g = P_- h \in \mathcal{H}_-$, em

$$S^\dagger f = S_{++}^\dagger f + S_{-+}^\dagger f, \quad (3.218)$$

$$S^\dagger g = S_{+-}^\dagger g + S_{--}^\dagger g, \quad (3.219)$$

que, com a ajuda de (3.93-3.94), levam as expressões (3.214) e (3.215) em quatro novas expressões

$$b^\dagger(f)\mathbf{S} = \mathbf{S}[b^\dagger(S_{++}^\dagger f) + d(S_{-+}^\dagger f)] \quad (3.220)$$

$$b(f)\mathbf{S} = \mathbf{S}[b(S_{++}^\dagger f) + d^\dagger(S_{-+}^\dagger f)], \quad (3.221)$$

$$d^\dagger(g)\mathbf{S} = \mathbf{S}[b(S_{+-}^\dagger g) + d^\dagger(S_{--}^\dagger g)], \quad (3.222)$$

$$d(g)\mathbf{S} = \mathbf{S}[b^\dagger(S_{+-}^\dagger g) + d(S_{--}^\dagger g)], \quad (3.223)$$

onde definimos $S_{\pm\pm}^\dagger = P_\pm S^\dagger P_\pm$.

Como \mathbf{S} é essencialmente única, a construiremos explicitamente e determinaremos os parâmetros desconhecidos de tal forma que as expressões (3.220) a (3.223) sejam satisfeitas. A matriz de espalhamento na formulação da segunda quantização no espaço de Fock deverá conter todos os processos de espalhamento possíveis envolvendo partículas e antipartículas de Dirac. Desta forma, propõe-se:

$$\mathbf{S} = C e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} : e^{\bar{A}_2 b^\dagger b} :: e^{\bar{A}_3 d d^\dagger} : e^{A_4 d b}, \quad (3.224)$$

onde C é o fator de normalização e $(: :)$ é o operador ordenador normal. As exponenciais dão conta de qualquer número de processos de espalhamento acontecendo simultaneamente no sistema. Os fatores A_1, \dots, A_4 , como já mencionado, são determinados de forma a respeitar as relações de comutação, estabelecidas através de (3.220 - 3.223); o termo envolvendo $b^\dagger d^\dagger$ corresponde à produção de pares, o termo $b^\dagger b$ corresponde ao espalhamento de elétrons pelo campo externo, o termo $d^\dagger d$ ao espalhamento de pósitrons pelo campo externo e o termo $d b$ à aniquilação de pares.

Para calcularmos as relações de comutação usando a definição (3.224) para a matriz \mathbf{S} , teremos que desenvolver alguma álgebra. Seja A um operador limitado em \mathcal{H}_1 , f_j uma base de \mathcal{H}_+ , e g_j uma base de \mathcal{H}_- , definimos os operadores

$$A_1 b^\dagger d^\dagger = \sum_{j,k} (f_j, A_1 g_k) b^\dagger(f_j) d^\dagger(g_k), \quad (3.225)$$

$$\bar{A}_2 b^\dagger b = \sum_{j,k} (f_j, \bar{A}_2 f_k) b^\dagger(f_j) b(f_k), \quad (3.226)$$

$$\bar{A}_3 d d^\dagger = \sum_{j,k} (g_j, \bar{A}_3 g_k) d(g_j) d^\dagger(g_k), \quad (3.227)$$

$$A_4 d b = \sum_{j,k} (g_j, A_4 f_k) d(g_j) b(f_k). \quad (3.228)$$

Em consequência, as exponenciais em (3.224), ficam

$$\begin{aligned}
e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (A_1 b^\dagger d^\dagger)^n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (f_{j_1}, A_1 g_{k_1}) \dots (f_{j_n}, A_1 g_{k_n}) b^\dagger(f_{j_1}) d^\dagger(g_{k_1}) \\
&\quad \times \dots b^\dagger(f_{j_n}) d^\dagger(g_{k_n}) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (f_{j_1}, A_1 g_{k_1}) \dots (f_{j_n}, A_1 g_{k_n}) b^\dagger(f_{j_1}) \dots b^\dagger(f_{j_n}) \\
&\quad \times d^\dagger(g_{k_n}) \dots d^\dagger(g_{k_1}).
\end{aligned} \tag{3.229}$$

Analogamente,

$$\begin{aligned}
:e^{\bar{A}_2 b^\dagger b}: &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (f_{j_1}, \bar{A}_2 f_{k_1}) \dots (f_{j_n}, \bar{A}_2 f_{k_n}) b^\dagger(f_{j_1}) \dots b^\dagger(f_{j_n}) \\
&\quad \times b(f_{k_n}) \dots b(f_{k_1}),
\end{aligned} \tag{3.230}$$

$$\begin{aligned}
:e^{\bar{A}_3 d d^\dagger}: &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (-1)^n (g_{j_1}, \bar{A}_3 g_{k_1}) \dots (g_{j_n}, \bar{A}_3 g_{k_n}) d^\dagger(g_{j_1}) \dots d^\dagger(g_{j_n}) \\
&\quad \times d(g_{k_n}) \dots d(g_{k_1}),
\end{aligned} \tag{3.231}$$

$$\begin{aligned}
e^{A_4 d b} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (g_{j_1}, A_4 f_{k_1}) \dots (g_{j_n}, A_4 f_{k_n}) d(g_{j_1}) \dots d(g_{j_n}) \\
&\quad \times b(f_{k_n}) \dots b(f_{k_1}).
\end{aligned} \tag{3.232}$$

A expressão (3.230) não mudou de sinal pois, ao reordenar os operadores de Fermi, realizamos um número par de transposições, a expressão (3.232) também não mudou de sinal devido ao número par de transposições; realizadas no ordenador normal e o termo $(-1)^n$ em (3.231) é devido justamente ao número de transposições realizadas no ordenador normal, que pode ser par ou não. Daqui por diante usaremos a notação condensada

$$\begin{aligned}
(A)_i &= (f_{j_i}, A f'_{k_i}) \\
b_{k_1} &= b(f_{k_1}), \\
d_{k_1} &= d(g_{k_1}).
\end{aligned} \tag{3.233}$$

Com o auxílio das relações de anticomutação (3.85), calcularemos as relações de comutação entre os operadores de criação e aniquilação de partículas e antipartículas com

cada exponencial. Para calcular o comutador de $b(f)$ com $e^{A_1 b^\dagger d^\dagger}$, temos

$$\begin{aligned}
b(f)e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (A_1)_1 \dots (A_1)_n b(f) b_{j_1}^\dagger \dots b_{j_n}^\dagger d_{k_n}^\dagger \dots d_{k_1}^\dagger \\
&= e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} b(f) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (A_1)_1 \dots (A_1)_n \sum_{m=1}^n (-1)^{m-1} (f, f_{j_m}) \\
&\quad \times b_{j_1}^\dagger \dots \cancel{b_{j_m}^\dagger} \dots b_{j_n}^\dagger d_{k_n}^\dagger \dots d_{k_1}^\dagger \\
&= e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} b(f) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\substack{j_1 \dots (j_m) \dots j_n \\ k_1 \dots (k_m) \dots k_n}} (A_1)_1 \dots \cancel{(A_1)_m} \dots (A_1)_n \\
&\quad \times b_{j_1}^\dagger \dots \cancel{b_{j_m}^\dagger} \dots b_{j_n}^\dagger d_{k_n}^\dagger \dots \cancel{d_{k_m}^\dagger} \dots d_{k_1}^\dagger \sum_{j_m, k_m} (A_1)_m (f, f_{j_m}) d_{k_m}^\dagger, \tag{3.234}
\end{aligned}$$

onde $\cancel{(A_1)_m}$, $\cancel{b_{j_m}^\dagger}$ e $\cancel{d_{k_m}^\dagger}$ denotam fatores que não aparecem no produto, e (j_m) , (k_m) as somas que não estão sendo realizadas. A última soma em (3.234) pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
\sum_{j_m, k_m} (f_{j_m}, A_1 g_{k_m})(f, f_{j_m}) d_{k_m}^\dagger(g_{k_m}) &= \sum_{k_m} (f, A_1 g_{k_m}) d_{k_m}^\dagger(g_{k_m}) \\
&= d_{k_m}^\dagger(A_1^\dagger f). \tag{3.235}
\end{aligned}$$

Existem n destes termos em (3.234), ao mudar o fator $\frac{1}{n!}$ por $\frac{1}{(n-1)!}$ a exponencial é recuperada e (3.234) fica

$$b(f)e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} = e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} [b(f) + d^\dagger(A_1^\dagger f)],$$

onde substituindo $P_- A P_+ f = f'$ ou $f = A_{-+}^{-1} f'$, tem-se com $A_{-+}^{-1} = P_- A^{-1} P_+$,

$$b(f)e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} = e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} [b(f) + d^\dagger(A_{1-+}^\dagger f)], \tag{3.236}$$

em que $A_{1\pm\pm} = P_\pm A_1 P_\pm$. Por um procedimento similar, chamando $\bar{A}_2 = A_2 - 1$ e $\bar{A}_3 = 1 - A_3$, encontramos

$$d(g)e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} = e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} [d(g) - b^\dagger(A_{1+-} g)], \tag{3.237}$$

$$b(f) : e^{(A_2-1)b^\dagger b} : = : e^{(A_2-1)b^\dagger b} : b(A_{2++}^\dagger f), \tag{3.238}$$

$$b^\dagger(f) : e^{(A_2-1)b^\dagger b} : = : e^{(A_2-1)b^\dagger b} [b^\dagger(A_{2++}^{-1} f)], \tag{3.239}$$

$$\tag{3.240}$$

$$d(g) : e^{(1-A_3)dd^\dagger} : = : e^{(1-A_3)dd^\dagger}]d(A_{3--}g), \quad (3.241)$$

$$d^\dagger(g) : e^{(1-A_3)dd^\dagger} : = : e^{(1-A_3)dd^\dagger} : d^\dagger(A_{3--}^{\dagger-1}g), \quad (3.242)$$

$$b^\dagger(f)e^{A_4db} = e^{A_4db}[b^\dagger(f) - d(A_{4-+}f)], \quad (3.243)$$

$$d^\dagger(g)e^{A_4db} = e^{A_4db}[d^\dagger(g) + b(A_{4-+}^\dagger g)]. \quad (3.244)$$

Agora podemos calcular as relações de comutação entre os operadores $b, b^\dagger, d, d^\dagger$ e a matriz \mathbf{S} , e assim determinar os parâmetros desconhecidos. Em consequência, temos

$$d^\dagger(g)\mathbf{S} = d^\dagger(g)C e^{A_1b^\dagger d^\dagger} : e^{\bar{A}_2b^\dagger b} :: e^{\bar{A}_3dd^\dagger} : e^{A_4db}$$

$$d^\dagger(g)\mathbf{S} = C e^{A_1b^\dagger d^\dagger} : e^{\bar{A}_2b^\dagger b} : d^\dagger(g) : e^{\bar{A}_3dd^\dagger} : e^{A_4db}$$

onde usando (3.242) e (3.244), e comparando o resultado com (3.222) tem-se

$$\begin{aligned} d^\dagger(g)\mathbf{S} &= C e^{A_1b^\dagger d^\dagger} : e^{\bar{A}_2b^\dagger b} :: e^{\bar{A}_3dd^\dagger} : d^\dagger(A_{3--}^{\dagger-1}g)e^{A_4db} \\ &= \mathbf{S}[d^\dagger(A_{3--}^{\dagger-1}g) + b(A_{4-+}^\dagger A_{3--}^{\dagger-1}g)] \\ &= \mathbf{S}[\hat{b}(S_{+-}^\dagger g) + d^\dagger(S_{--}^\dagger g)], \end{aligned} \quad (3.245)$$

que nos dá

$$A_3 = S_{--}^{-1}, \quad (3.246)$$

$$A_4 = S_{--}^{-1}S_{-+}. \quad (3.247)$$

Similarmente, com o auxílio das equações (3.239) e (3.243), a relação (3.220) fica escrita como

$$\begin{aligned} b^\dagger(f)\mathbf{S} &= \mathbf{S}[b^\dagger(A_{2++}^{-1}f) - d(A_{4-+}A_{2++}^{-1}f)] \\ &= \mathbf{S}[b^\dagger(S_{++}^\dagger f) + d(S_{-+}^\dagger f)] \end{aligned} \quad (3.248)$$

logo

$$A_2 = S_{++}^{\dagger-1}, \quad (3.249)$$

$$A_4 = -S_{-+}^\dagger S_{++}^{-1\dagger}. \quad (3.250)$$

A relação (3.221) resulta em

$$\begin{aligned} b(f)\mathbf{S} &= \mathbf{S}[b(A_{2++}^{-1}f + A_{4-+}^\dagger A_{3--}^{\dagger-1} A_{1-+}^\dagger f) + d^\dagger(A_{3--}^{\dagger-1} A_{1-+}^\dagger f)] \\ &= \mathbf{S}[b(S_{++}^\dagger f) + d^\dagger(S_{-+}^\dagger f)], \end{aligned} \quad (3.251)$$

levando a

$$A_1 = S_{+-}S_{--}^{-1}, \quad (3.252)$$

e a equação (3.223) nos dá

$$A_1 = -S_{++}^{\dagger-1}S_{+-}^{\dagger}. \quad (3.253)$$

Os índices $(\pm\pm)$ em A_i foram omitidos por simplicidade de notação.

O resultado (3.247) deve concordar com (3.250), assim como o resultado (3.252) deve concordar com (3.253); isto é verdade em virtude da unitariedade da matriz S . Expressando S e S^\dagger na forma matricial

$$S = \begin{pmatrix} S_{++} & S_{+-} \\ S_{-+} & S_{--} \end{pmatrix}, \quad S^\dagger = \begin{pmatrix} S_{++}^\dagger & S_{+-}^\dagger \\ S_{-+}^\dagger & S_{--}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.254)$$

a propriedade de unitariedade $SS^\dagger = S^\dagger S = 1$ pode ser representada na forma

$$S_{++}S_{++}^\dagger + S_{+-}S_{-+}^\dagger = S_{++}^\dagger S_{++} + S_{+-}^\dagger S_{-+} = 1, \quad (3.255)$$

$$S_{++}S_{+-}^\dagger + S_{+-}S_{--}^\dagger = S_{++}^\dagger S_{+-} + S_{+-}^\dagger S_{--} = 0, \quad (3.256)$$

$$S_{-+}S_{++}^\dagger + S_{--}S_{-+}^\dagger = S_{-+}^\dagger S_{++} + S_{-+}^\dagger S_{--} = 0, \quad (3.257)$$

$$S_{-+}S_{+-}^\dagger + S_{--}S_{--}^\dagger = S_{-+}^\dagger S_{+-} + S_{--}^\dagger S_{--} = 1. \quad (3.258)$$

Através das relações (3.256) e (3.257) percebemos que os resultados encontrados para A_1 estão em acordo, assim como os resultados encontrados para A_4 . Desta forma, determinamos todos os fatores A_1, \dots, A_4 , mas o fator de normalização permaneceu indeterminado; porém pode-se mostrar que o operador espalhamento \mathbf{S} , no espaço de Fock, existe se e somente se P_+SP_- é um operador de Hilbert-Schmidt [45,46]. Neste caso, ela fica dada por

$$\mathbf{S} = C e^{S_{+-}S_{--}^{-1}b^\dagger d^\dagger} : e^{(S_{++}^{\dagger-1}-1)b^\dagger b} :: e^{(1-S_{--}^{-1})dd^\dagger} : e^{S_{--}^{-1}S_{-+}db}, \quad (3.259)$$

com

$$|C|^2 = \frac{1}{\det(1 - S_{+-}S_{-+}^\dagger)}. \quad (3.260)$$

3.3.2 Operador Espalhamento no Espaço de Fock Dual

Nesta seção construiremos o operador espalhamento no espaço de Fock dual, que estabelece a transição entre estados de um sistema descrito pelo operador hamiltoniano $\tilde{H}(t)$

dependente do tempo. O operador $\tilde{\mathbf{S}}$ pode ser escrito em termos da matriz \tilde{S} no espaço de Hilbert de uma partícula, $\tilde{\mathcal{H}}_1$.

Seja $|\tilde{h}(t)\rangle >$ o vetor de estado dependente do tempo em $\tilde{\mathcal{H}}_1$. Tem-se que a solução geral da equação (3.71) é

$$|\tilde{h}(t)\rangle = e^{-i\tilde{H}t}|\tilde{h}(0)\rangle = \tilde{U}(t)|\tilde{h}\rangle, \quad (3.261)$$

onde $\tilde{H} = \tilde{H}_0 + H_1$ e $\tilde{U}(t)$ é o operador denominado evolução temporal.

No caso de $\tilde{U}(t)$ descrever a evolução de algum processo de espalhamento tem-se que longe da ação do centro de espalhamento (antes da colisão) $\tilde{U}(t)|\tilde{h}\rangle >$ representa o estado de uma partícula livre descrito pelo Hamiltoniano \tilde{H}_0 ; seu movimento é então determinado pelo operador de evolução temporal $\tilde{U}^0(t) = e^{i\tilde{H}_0 t}$. Nessas condições espera-se para $t \rightarrow +\infty$, uma vez que a evolução temporal de $|\tilde{h}\rangle >$ no espaço dual se dá no sentido inverso de $|h\rangle >$ no espaço direto, que se tenha para algum $|\tilde{h}_i\rangle > \in \tilde{\mathcal{H}}_1$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{U}(t)|h\rangle = \tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_i\rangle, \quad (3.262)$$

o que significa que para $t \rightarrow +\infty$ os estados $\tilde{U}(t)|\tilde{h}\rangle >$ e $\tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_i\rangle >$ são fisicamente indistinguíveis.

De forma similar, após a colisão (efeito do potencial) a partícula move-se para distante do centro espalhador e espera-se

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \tilde{U}(t)|\tilde{h}\rangle = \tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_f\rangle \quad (3.263)$$

para algum $|\tilde{h}_f\rangle >$ em $\tilde{\mathcal{H}}_1$.

Se o potencial tiver alcance finito, o teorema da condição assintótica [55] assegura que para todo $|\tilde{h}_i\rangle >$ em $\tilde{\mathcal{H}}_1$ há um vetor de estado $|\tilde{h}\rangle >$ em $\tilde{\mathcal{H}}_1$ tal que

$$\tilde{U}(t)|\tilde{h}\rangle - \tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_i\rangle \xrightarrow{t \rightarrow +\infty} 0, \quad (3.264)$$

logo

$$|\tilde{h}\rangle - \lim_{t \rightarrow +\infty} \tilde{U}^\dagger(t)\tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_i\rangle = 0, \quad (3.265)$$

ou seja,

$$|\tilde{h}\rangle = \lim_{t \rightarrow +\infty} \tilde{U}^\dagger(t)\tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_i\rangle \hat{=} \tilde{\Omega}_+|\tilde{h}_i\rangle. \quad (3.266)$$

De forma análoga para todo $|\tilde{h}_f\rangle$ em $\tilde{\mathcal{H}}_1$, tem-se

$$\tilde{U}(t)|\tilde{h}\rangle - \tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_f\rangle \xrightarrow[t \rightarrow -\infty]{} 0, \quad (3.267)$$

de modo que

$$|\tilde{h}\rangle - \lim_{t \rightarrow -\infty} \tilde{U}^\dagger(t)\tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_f\rangle = 0, \quad (3.268)$$

ou seja,

$$|\tilde{h}\rangle = \lim_{t \rightarrow -\infty} \tilde{U}^\dagger(t)\tilde{U}^0(t)|\tilde{h}_f\rangle \hat{=} \tilde{\Omega}_-|\tilde{h}_f\rangle. \quad (3.269)$$

Os operadores em (3.266) e (3.269) correspondem aos operadores de Möller para o espaço dual e relacionam os estados $|\tilde{h}_i\rangle$ e $|\tilde{h}_f\rangle$ como o estado efetivo (na região de espalhamento) aqui considerado em $t = 0$.

Usando (3.266) e (3.269) segue então que

$$|\tilde{h}_f\rangle = \tilde{\Omega}_-^\dagger|\tilde{h}\rangle = \tilde{\Omega}_-^\dagger\tilde{\Omega}_+|\tilde{h}_i\rangle \quad (3.270)$$

o que permite definir o operador

$$\tilde{S} = \tilde{\Omega}_-^\dagger\tilde{\Omega}_+ \quad (3.271)$$

denominado operador de espalhamento e que estabelece a transição de um estado assintótico inicial $|\tilde{h}_i\rangle$ para um estado assintótico final $|\tilde{h}_f\rangle$, ou seja,

$$|\tilde{h}_f\rangle = \tilde{S}|\tilde{h}_i\rangle. \quad (3.272)$$

Lembrando que $\tilde{U}^0(t) = e^{i\tilde{H}_0 t}$ e $\tilde{U}(t) = e^{i\tilde{H}t} = \tilde{U}(t, 0)$, tem-se de (3.266) e (3.269)

$$\tilde{\Omega}_+ = \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-i\tilde{H}t} e^{i\tilde{H}_0 t} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \tilde{U}(0, t) e^{i\tilde{H}_0 t} \quad (3.273)$$

e

$$\tilde{\Omega}_- = \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{-i\tilde{H}t} e^{i\tilde{H}_0 t} = \lim_{t \rightarrow -\infty} \tilde{U}(0, t) e^{i\tilde{H}_0 t}. \quad (3.274)$$

Usando para $t \rightarrow \infty$, a notação $t_0 \rightarrow \infty$, segue que

$$\begin{aligned} \tilde{S} &= \lim_{t_0 \rightarrow +\infty} \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{-i\tilde{H}t} \tilde{U}(t, 0) \tilde{U}(0, t_0) e^{i\tilde{H}_0 t_0} \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow +\infty} \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{-i\tilde{H}t} \tilde{U}(t, t_0) e^{i\tilde{H}_0 t_0} \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow +\infty} \lim_{t \rightarrow -\infty} e^{-i\tilde{H}t} e^{i\tilde{H}(t-t_0)} e^{i\tilde{H}_0 t_0}, \end{aligned} \quad (3.275)$$

que expresso em termos do operador evolução temporal na representação de interação $\tilde{U}^I(t, t_0)$ (Vide Âpêndice B), fica

$$\begin{aligned}\tilde{S} &= \lim_{t_0 \rightarrow \infty} \lim_{t \rightarrow -\infty} U^I(t, t_0) \\ &= \tilde{U}(\infty, -\infty)\end{aligned}\quad (3.276)$$

cuja série de perturbação (série de Dyson para o operador \tilde{S}) é

$$\tilde{S} = \sum_n (-i)^n \int_{-\infty}^{-\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \tilde{H}_1^I(t_1) \tilde{H}_1^I(t_2) \dots \tilde{H}_1^I(t_n) \quad (3.277)$$

$$= \sum_n \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{-\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{-\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{-\infty} dt_n T(\tilde{H}_1^I(t_1) \tilde{H}_1^I(t_2) \dots \tilde{H}_1^I(t_n)) \quad (3.278)$$

$$= T \exp \left[-i \int_{-\infty}^{\infty} dt \tilde{H}_1^I(t) \right] \quad (3.279)$$

em que T é o operador de ordenamento temporal e \tilde{H}_1^I é o hamiltoniano da interação na descrição de interação (Apêndice A). Percebe-se que a série de Dyson para a matriz \tilde{S} no espaço dual é semelhante para o espaço original (3.207-3.209); difere nos limites de integração invertidos, uma vez que no sistema dual a evolução temporal se apresenta em sentido invertido com relação à evolução do sistema original e pela troca de H, H_0 por \tilde{H}, \tilde{H}_0 . A matriz \tilde{S} , assim como S , também é unitária.

Como no processo de espalhamento, por hipótese, somente o movimento assintoticamente livre é observável na prática, a formulação de segunda quantização para o operador de espalhamento é construída baseada na representação de Fock do campo de Dirac dual livre, representado por:

$$\tilde{\psi}(\tilde{h}) = b(P_+^0 \tilde{h}) + d^\dagger(P_-^0 \tilde{h}) \hat{=} b(\tilde{f}) + d^\dagger(\tilde{g}) \quad (3.280)$$

onde denotamos

$$\tilde{f} = P_+^0 \tilde{h} \in \tilde{\mathcal{H}}_+ \quad e \quad \tilde{g} = P_-^0 \tilde{h} \in \tilde{\mathcal{H}}_- \quad (3.281)$$

em que P_\pm^0 são os operadores de projeção sobre os subespaços do hamiltoniano de Dirac livre \tilde{H}_0 . Daqui por diante o zero será omitido.

O operador espalhamento em segunda quantização no espaço de Fock $\tilde{\mathcal{S}}$, caso exista, é definido como

$$\tilde{\psi}(\tilde{S}^\dagger \tilde{h}) = \tilde{\mathcal{S}}^{-1} \tilde{\psi}(\tilde{h}) \tilde{\mathcal{S}}, \quad (3.282)$$

$$\tilde{\psi}^\dagger(\tilde{S}^\dagger \tilde{h}) = \tilde{\mathcal{S}}^{-1} \tilde{\psi}^\dagger(\tilde{h}) \tilde{\mathcal{S}}, \quad \forall \tilde{f} \in \tilde{\mathcal{H}}_1 \quad (3.283)$$

As definições acima implicam que $\tilde{\mathbf{S}}$ é unitária e determinada univocamente a menos de uma fase que depende do potencial externo.

Com a ajuda de (3.81) temos que $\tilde{S}^\dagger h$ no lado esquerdo das equações (3.282) e (3.283) pode ser decomposta

$$\begin{aligned}\tilde{S}^\dagger \tilde{h} &= P_+ \tilde{S}^\dagger \tilde{h} + P_- \tilde{S}^\dagger \tilde{h} \\ &= P_+ \tilde{S}^\dagger P_+ \tilde{h} + P_+ \tilde{S}^\dagger P_- \tilde{h} + P_- \tilde{S}^\dagger P_+ \tilde{h} + P_- \tilde{S}^\dagger P_- \tilde{h} \\ &= S_{++}^\dagger \tilde{h} + S_{+-}^\dagger \tilde{h} + \tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{h} + \tilde{S}_{--}^\dagger \tilde{h}\end{aligned}\quad (3.284)$$

e se divide, após a decomposição da função \tilde{h} , em funções do tipo $\tilde{f} = P_+ \tilde{h} \in \tilde{\mathcal{H}}_+$ e $\tilde{g} = P_- \tilde{h} \in \tilde{\mathcal{H}}_-$, em

$$\tilde{S}^\dagger \tilde{f} = \tilde{S}_{++}^\dagger \tilde{f} + \tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{f}, \quad (3.285)$$

$$\tilde{S}^\dagger \tilde{g} = \tilde{S}_{+-}^\dagger \tilde{g} + \tilde{S}_{--}^\dagger \tilde{g}, \quad (3.286)$$

que, com o auxílio de (3.160) e (3.161), levam as expressões (3.282) e (3.283) em quatro novas expressões

$$\tilde{b}^\dagger(\tilde{g})\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{\mathbf{S}}[\tilde{b}^\dagger(\tilde{S}_{++}^\dagger \tilde{g}) + \tilde{d}(\tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{g})] \quad (3.287)$$

$$\tilde{b}(\tilde{g})\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{\mathbf{S}}[\tilde{b}(\tilde{S}_{++}^\dagger \tilde{g}) + \tilde{d}^\dagger(\tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{g})], \quad (3.288)$$

$$\tilde{d}^\dagger(\tilde{f})\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{\mathbf{S}}[\tilde{b}(\tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{f}) + \tilde{d}^\dagger(\tilde{S}_{--}^\dagger \tilde{f})], \quad (3.289)$$

$$\tilde{d}(\tilde{f})\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{\mathbf{S}}[\tilde{b}^\dagger(\tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{f}) + \tilde{d}(\tilde{S}_{--}^\dagger \tilde{f})], \quad (3.290)$$

onde definimos $\tilde{S}_{\pm\pm}^\dagger = P_\pm \tilde{S}^\dagger P_\pm$.

Sendo $\tilde{\mathbf{S}}$ essencialmente única, como no caso do espaço do Fock direto, a construiremos explicitamente e ela deverá conter todos os processos de espalhamento possíveis envolvendo o campo de Dirac dual, como aniquilação de pares elétron-pósitron, espalhamento de elétrons, espalhamento de pósitrons, e criação de pares elétron-pósitron. Desta forma, propõe-se:

$$\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{C} e^{\tilde{A}_1 \tilde{b} \tilde{d}} : e^{\tilde{A}_2 \tilde{b} \tilde{b}^\dagger} :: e^{\tilde{A}_3 \tilde{d}^\dagger \tilde{d}} : e^{\tilde{A}_4 \tilde{d}^\dagger \tilde{b}^\dagger}, \quad (3.291)$$

onde \tilde{C} é o fator de normalização e $(: :)$ é o operador ordenador normal. As exponenciais dão conta de qualquer número de processos de espalhamento acontecendo simultaneamente no sistema. Os fatores $\tilde{A}_1, \dots, \tilde{A}_4$, são determinados de forma a respeitar as relações de comutação, estabelecidas através de (3.287) - (3.290). Inicialmente estabeleceremos as relações

de comutação entre os operadores de criação e aniquilação e cada uma das exponenciais que aparecem em (3.291), para então compor as relações de comutação desses operadores com a expressão completa de $\tilde{\mathbf{S}}$. Como a álgebra envolvida nos cálculos é análoga à desenvolvida para a determinação dos parâmetros da matriz de espalhamento no espaço de Fock direto, seção anterior, aqui apresentaremos os resultados principais.

Seja \tilde{A} um operador limitado em $\tilde{\mathcal{H}}_1$, \tilde{f}_j uma base de $\tilde{\mathcal{H}}_+$ e \tilde{g}_j uma base de $\tilde{\mathcal{H}}_-$; definimos os operadores

$$\tilde{A}_1 \tilde{b} \tilde{d} = \sum_{j,k} (\tilde{f}_k, \tilde{A}_1 \tilde{g}_j) \tilde{b}(\tilde{g}_j) \tilde{d}(\tilde{f}_k), \quad (3.292)$$

$$\tilde{A}_2 \tilde{b} \tilde{b}^\dagger = \sum_{j,k} (\tilde{g}_k, \tilde{A}_2 \tilde{g}_j) \tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_j) \tilde{b}(\tilde{g}_k), \quad (3.293)$$

$$\tilde{A}_3 \tilde{d}^\dagger \tilde{d} = \sum_{j,k} (\tilde{f}_k, \tilde{A}_3 \tilde{f}_j) \tilde{d}(\tilde{f}_j) \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_k), \quad (3.294)$$

$$\tilde{A}_4 \tilde{d}^\dagger \tilde{b}^\dagger = \sum_{j,k} (\tilde{g}_k, \tilde{A}_4 \tilde{f}_j) \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_j) \tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_k). \quad (3.295)$$

onde $(,)$ denota o produto escalar em $\tilde{\mathcal{H}}_1$. Em consequência, as exponenciais em (3.291), ficam

$$\begin{aligned} e^{\tilde{A}_1 \tilde{b} \tilde{d}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\tilde{A}_1 \tilde{b} \tilde{d})^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (-)^n (\tilde{f}_{k_1}, \tilde{A}_1 \tilde{g}_{j_1}) \dots (\tilde{f}_{k_n}, \tilde{A}_1 \tilde{g}_{j_n}) \tilde{d}(\tilde{f}_{j_1}) \dots \tilde{d}(\tilde{f}_{k_n}) \\ &\quad \times \tilde{b}(\tilde{g}_{j_n}) \dots \tilde{b}(\tilde{g}_{j_1}). \end{aligned} \quad (3.296)$$

$$\begin{aligned} : e^{\tilde{A}_2 \tilde{b} \tilde{b}^\dagger} : &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (-)^n (\tilde{g}_{k_1}, \tilde{A}_2 \tilde{g}_{j_1}) \dots (\tilde{g}_{k_n}, \tilde{A}_2 \tilde{g}_{j_n}) \tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_{k_1}) \dots \tilde{b}^\dagger(\tilde{g}_{k_n}) \\ &\quad \times \tilde{b}(\tilde{g}_{j_n}) \dots \tilde{b}(\tilde{g}_{j_1}), \end{aligned} \quad (3.297)$$

$$\begin{aligned} : e^{\tilde{A}_3 \tilde{d}^\dagger \tilde{d}} : &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{j_1 \dots j_n \\ k_1 \dots k_n}} (\tilde{f}_{k_1}, \tilde{A}_3 \tilde{f}_{j_1}) \dots (\tilde{f}_{k_n}, \tilde{A}_3 \tilde{f}_{j_n}) \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_{j_1}) \dots \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}_{j_n}) \\ &\quad \times \tilde{d}(\tilde{f}_{k_n}) \dots \tilde{d}(\tilde{f}_{k_1}), \end{aligned} \quad (3.298)$$

As relações referentes à última exponencial em (3.291) serão determinadas tomando o hermitiano conjugado das relações correspondentes à primeira exponencial. Daqui por

diante usaremos a notação condensada:

$$\begin{aligned}(\tilde{A})_i &= (\tilde{f}_{k_i}, \tilde{A}\tilde{f}'_{j_i}) \\ \tilde{b}_{j_i} &= \tilde{b}(\tilde{g}_{j_i}), \\ \tilde{d}_{k_i} &= \tilde{d}(\tilde{f}_{k_i}).\end{aligned}\tag{3.299}$$

Com o auxílio das relações de anticomutação (3.163), calcularemos as relações de comutação entre os operadores de criação e aniquilação de partículas e antipartículas, com cada exponencial. Os operadores \tilde{b}, \tilde{d} comutam com $e^{\tilde{A}_1\tilde{b}\tilde{d}}$, os operadores $\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger$ comutam com $:e^{\tilde{A}_3\tilde{d}^\dagger\tilde{d}}:$, assim como os operadores $\tilde{d}, \tilde{d}^\dagger$ comutam com $:e^{\tilde{A}_2\tilde{b}\tilde{b}^\dagger}:$, uma vez que todas essas situações correspondem a números pares de anticomutação. Utilizando as relações de comutação (3.163) e as definições (3.296-3.298), temos:

$$\tilde{b}^\dagger(\tilde{g})e^{\tilde{A}_1\tilde{b}\tilde{d}} = e^{\tilde{A}_1\tilde{b}\tilde{d}}[\tilde{b}^\dagger(\tilde{g}) + \tilde{d}(\tilde{A}_{1+-}\tilde{g})],\tag{3.300}$$

$$\tilde{d}^\dagger(\tilde{f})e^{\tilde{A}_1\tilde{b}\tilde{d}} = e^{\tilde{A}_1\tilde{b}\tilde{d}}[\tilde{d}^\dagger(\tilde{f}) - \tilde{b}(\tilde{A}_{1-+}^\dagger\tilde{f})],\tag{3.301}$$

$$\tilde{b}(\tilde{g}) : e^{(1-\tilde{A}_2)\tilde{b}\tilde{b}^\dagger} := e^{(1-\tilde{A}_2)\tilde{b}\tilde{b}^\dagger} : \tilde{b}(\tilde{A}_{2--}^\dagger\tilde{g}),\tag{3.302}$$

$$\tilde{b}^\dagger(\tilde{g}) : e^{(1-\tilde{A}_2)\tilde{b}\tilde{b}^\dagger} := e^{(1-\tilde{A}_2)\tilde{b}\tilde{b}^\dagger} : \tilde{b}^\dagger(\tilde{A}_{2--}^{-1}\tilde{g}),\tag{3.303}$$

$$\tilde{d}(\tilde{f}) : e^{(\tilde{A}_3-1)\tilde{d}^\dagger\tilde{d}} := e^{(\tilde{A}_3-1)\tilde{d}^\dagger\tilde{d}} : \tilde{d}(\tilde{A}_{3++}\tilde{f}),\tag{3.304}$$

$$\tilde{d}^\dagger(\tilde{f}) : e^{(\tilde{A}_3-1)\tilde{d}^\dagger\tilde{d}} := e^{(\tilde{A}_3-1)\tilde{d}^\dagger\tilde{d}} : \tilde{d}^\dagger(\tilde{A}_{3++}^{\dagger-1}\tilde{f}),\tag{3.305}$$

onde denotamos $\tilde{A}_{i\pm\pm} = P_\pm\tilde{A}_iP_\pm$ e foram feitas as substituições $(1-\tilde{A}_2) = \tilde{A}_2$ e $(1+\tilde{A}_3) = \tilde{A}_3$.

As relações de comutação para a última exponencial de (3.291) são as hermitianas conjugadas da expressão (3.300) e da expressão (3.301):

$$\tilde{b}(\tilde{g})e^{\tilde{A}_4\tilde{d}^\dagger\tilde{b}^\dagger} = e^{\tilde{A}_4\tilde{d}^\dagger\tilde{b}^\dagger}\tilde{b}^\dagger[\tilde{b}(\tilde{g}) - \tilde{d}^\dagger(\tilde{A}_{4+-}^\dagger\tilde{g})],\tag{3.306}$$

e

$$\tilde{d}(\tilde{f})e^{\tilde{A}_4\tilde{d}^\dagger\tilde{b}^\dagger} = e^{\tilde{A}_4\tilde{d}^\dagger\tilde{b}^\dagger}\tilde{b}^\dagger[\tilde{d}(\tilde{f}) - \tilde{b}^\dagger(\tilde{A}_{4-+}^\dagger\tilde{f})].\tag{3.307}$$

Agora podemos calcular as relações de comutação entre os operadores $\tilde{b}, \tilde{b}^\dagger, \tilde{d}, \tilde{d}^\dagger$ e a matriz $\tilde{\mathbf{S}}$, e assim determinar os parâmetros desconhecidos. Levando em conta as novas definições das exponenciais que correspondem ao espalhamento de partículas, (3.303), e de antipartículas, (3.304), a expressão para a matriz espalhamento, definida em (3.291), fica escrita como

$$\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{C} e^{\tilde{A}_1 \tilde{b} \tilde{d}} : e^{(1-\tilde{A}_2) \tilde{b} \tilde{b}^\dagger} :: e^{(\tilde{A}_3-1) \tilde{d}^\dagger \tilde{d}} : e^{\tilde{A}_4 \tilde{d}^\dagger \tilde{b}^\dagger}. \quad (3.308)$$

Assim, temos

$$\begin{aligned} \tilde{b}(\tilde{g}) \tilde{\mathbf{S}} &= \tilde{\mathbf{S}} [\tilde{b}(\tilde{A}_2^\dagger \tilde{g}) + \tilde{d}^\dagger(-\tilde{A}_{4+-}^\dagger \tilde{A}_{2--}^\dagger \tilde{g})] \\ &= \tilde{\mathbf{S}} [\tilde{b}(\tilde{S}_{--}^\dagger \tilde{g}) + \tilde{d}^\dagger(\tilde{S}_{+-}^\dagger \tilde{g})], \end{aligned} \quad (3.309)$$

$$\begin{aligned} \tilde{d}(\tilde{f}) \tilde{\mathbf{S}} &= \tilde{\mathbf{S}} [\tilde{d}(\tilde{A}_{3++} \tilde{f}) + \tilde{b}^\dagger(\tilde{A}_{4--} \tilde{A}_{3++} \tilde{f})] \\ &= \tilde{\mathbf{S}} [\tilde{d}(\tilde{S}_{++}^\dagger \tilde{f}) + \tilde{b}^\dagger(\tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{f})], \end{aligned} \quad (3.310)$$

$$\begin{aligned} \tilde{b}^\dagger(\tilde{g}) \tilde{\mathbf{S}} &= \tilde{\mathbf{S}} [\tilde{b}^\dagger([\tilde{A}_{2--}^{-1} + \tilde{A}_{4--} \tilde{A}_{3++} \tilde{A}_{1+-}] \tilde{g}) + \tilde{d}(\tilde{A}_{3++} \tilde{A}_{1+-} \tilde{g})] \\ &= \tilde{\mathbf{S}} [\tilde{b}^\dagger(\tilde{S}_{--}^\dagger \tilde{g}) + \tilde{d}(\tilde{S}_{+-}^\dagger \tilde{g})] \end{aligned} \quad (3.311)$$

$$\begin{aligned} \tilde{d}^\dagger(\tilde{f}) \tilde{\mathbf{S}} &= \tilde{\mathbf{S}} [\tilde{b}(-\tilde{A}_{2--}^\dagger \tilde{A}_{1+-}^\dagger \tilde{f}) + \tilde{d}^\dagger([\tilde{A}_{3++}^{\dagger-1} + \tilde{A}_{4+-}^\dagger \tilde{A}_{2--}^\dagger \tilde{A}_{1+-}^\dagger] \tilde{f})] \\ &= \tilde{\mathbf{S}} [\tilde{b}(\tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{f}) + \tilde{d}^\dagger(\tilde{S}_{++}^\dagger \tilde{f})]. \end{aligned} \quad (3.312)$$

Comparando as duas relações de (3.309), concluímos que

$$\tilde{A}_2 = \tilde{S}_{--}, \quad (3.313)$$

$$\tilde{A}_4 = -\tilde{S}_{--}^{-1} \tilde{S}_{-+}. \quad (3.314)$$

De (3.310), temos

$$\tilde{A}_3 = \tilde{S}_{++}^\dagger, \quad (3.315)$$

$$\tilde{A}_4 = \tilde{S}_{-+}^\dagger \tilde{S}_{++}^{\dagger-1}, \quad (3.316)$$

e as expressões (3.311) e (3.312) dão

$$\tilde{A}_1 = \tilde{S}_{++}^{\dagger-1} \tilde{S}_{+-}^\dagger, \quad (3.317)$$

$$\tilde{A}_1 = -\tilde{S}_{+-} \tilde{S}_{--}^{-1}. \quad (3.318)$$

onde substituímos (3.314) e (3.315). Os índices ($\pm\pm$) em \tilde{A}_i foram omitidos por simplicidade de notação. Na realidade em (3.317) e (3.318) temos \tilde{A}_{1+-} , por exemplo.

O resultado (3.314) deve concordar com (3.316), assim como o resultado (3.317) deve concordar com (3.318). Isto é verdade em virtude da unitariedade da matriz \tilde{S} . Expressando \tilde{S} e \tilde{S}^\dagger na forma matricial

$$\tilde{S} = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{++} & \tilde{S}_{+-} \\ \tilde{S}_{-+} & \tilde{S}_{--} \end{pmatrix}, \quad \tilde{S}^\dagger = \begin{pmatrix} \tilde{S}_{++}^\dagger & \tilde{S}_{+-}^\dagger \\ \tilde{S}_{-+}^\dagger & \tilde{S}_{--}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.319)$$

a propriedade de unitariedade $\tilde{S}\tilde{S}^\dagger = \tilde{S}^\dagger\tilde{S} = 1$ estabelece as relações

$$\tilde{S}_{++}\tilde{S}_{++}^\dagger + \tilde{S}_{+-}\tilde{S}_{-+}^\dagger = \tilde{S}_{++}^\dagger\tilde{S}_{++} + \tilde{S}_{+-}^\dagger\tilde{S}_{-+} = 1, \quad (3.320)$$

$$\tilde{S}_{++}\tilde{S}_{+-}^\dagger + \tilde{S}_{+-}\tilde{S}_{--}^\dagger = \tilde{S}_{++}^\dagger\tilde{S}_{+-} + \tilde{S}_{+-}^\dagger\tilde{S}_{--} = 0, \quad (3.321)$$

$$\tilde{S}_{-+}\tilde{S}_{++}^\dagger + \tilde{S}_{--}\tilde{S}_{-+}^\dagger = \tilde{S}_{-+}^\dagger\tilde{S}_{++} + \tilde{S}_{--}^\dagger\tilde{S}_{-+} = 0, \quad (3.322)$$

$$\tilde{S}_{-+}\tilde{S}_{+-}^\dagger + \tilde{S}_{--}\tilde{S}_{--}^\dagger = \tilde{S}_{-+}^\dagger\tilde{S}_{+-} + \tilde{S}_{--}^\dagger\tilde{S}_{--} = 1. \quad (3.323)$$

Portanto, através das relações (3.321) e (3.322) percebemos que os resultados encontrados para \tilde{A}_1 estão em acordo, assim como os resultados encontrados para \tilde{A}_4 . Desta forma, determinamos todos os fatores $\tilde{A}_1, \dots, \tilde{A}_4$, mas o fator de normalização \tilde{C} permaneceu indeterminado; ele comporá a definição da constante de normalização \hat{C} do operador duplicado \hat{S} , que será construído no próximo capítulo. Sendo assim, a matriz \tilde{S} fica dada por:

$$\tilde{S} = \tilde{C} e^{-\tilde{S}_{+-}\tilde{S}_{--}^{-1}\tilde{b}\tilde{d}} : e^{(1-\tilde{S}_{--})\tilde{b}\tilde{b}^\dagger} :: e^{(\tilde{S}_{++}^\dagger-1)\tilde{d}^\dagger\tilde{d}} : e^{-\tilde{S}_{--}^{-1}\tilde{S}_{-+}\tilde{d}\tilde{b}}. \quad (3.324)$$

3.4 Teoria de Perturbação

Nesta seção obteremos os elementos da série perturbativa para a matriz S e \tilde{S} .

3.4.1 Teoria de Perturbação - S em \mathcal{H} Direto

Como visto na equação (3.207), a série perturbativa para a matriz S , considerando o hamiltoniano dependente do tempo $H(t) = H_0 + H_1(t)$, é dada por:

$$S = \sum_n (-i)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) \dots H_1^I(t_n) \hat{=} \sum_{n=0}^{\infty} S^{(n)} \quad (3.325)$$

onde há ordenação no tempo, $t_1 > t_2 > t_3 \dots > t_n$,

$$H_1^I(t) = e^{iH_0 t} H_1(t) e^{-iH_0 t} \quad (3.326)$$

é o hamiltoniano na descrição de interação, em que

$$H_1(t) = e(V - \vec{\alpha} \cdot \mathbf{A})(t, \mathbf{x}) \quad (3.327)$$

e $S^{(0)} = 1$.

Escrevendo os hamiltonianos livre H_0 e de interação $H_1(t)$ no espaço dos momentos

$$H_0(\mathbf{p}) = \vec{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m \quad (3.328)$$

$$[H_1(t)f](\mathbf{p}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \int d^3p' H_1(t, \mathbf{p} - \mathbf{p}') f(\mathbf{p}'), \quad (3.329)$$

em que $H_1(t)$ é uma convolução, podemos escrever a matriz S no espaço dos momentos, seu n -ésimo termo $S^{(n)}$ pode ser escrito como

$$\begin{aligned} S^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \int d^3p_1 \dots \int d^3p_{n-1} \times \\ &\quad \times e^{it_1 H_0(\mathbf{p})} H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) e^{-i(t_1 - t_2) H_0(\mathbf{p}_1)} \dots \\ &\quad \dots e^{-i(t_{n-1} - t_n) H_0(\mathbf{p}_{n-1})} H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) e^{-it_n H_0(\mathbf{q})} \end{aligned} \quad (3.330)$$

Como a matriz de espalhamento no espaço de Fock é escrita em termos dos elementos de matriz $S_{\pm\pm} = P_{\pm} S P_{\pm}$, obteremos os elementos $S_{\pm\pm}^n = P_{\pm} S^{(n)} P_{\pm}$ usando os operadores de projeção no espaço dos momentos [45]:

$$\begin{aligned} P_+(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2E} (E + \vec{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m) \\ P_-(\mathbf{p}) &= \frac{1}{2E} (E - \vec{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m), \end{aligned} \quad (3.331)$$

de modo que

$$\begin{aligned} P_{\pm}(\mathbf{p}) H_0(\mathbf{p}) &= \pm E(\mathbf{p}) P_{\pm}(\mathbf{p}) \\ P_{\pm}(\mathbf{p}) e^{iH_0(\mathbf{p})} &= e^{\pm iE(\mathbf{p})} P_{\pm}(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (3.332)$$

Logo,

$$\begin{aligned} S_{+-}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n e^{it_1 E(\mathbf{p}) + it_n E(\mathbf{q})} \int d^3p_1 \dots \int d^3p_{n-1} \times \\ &\quad \times P_+(\mathbf{p}) H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) e^{-i(t_1 - t_2) H_0(\mathbf{p}_1)} H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \dots \\ &\quad \dots e^{-i(t_{n-1} - t_n) H_0(\mathbf{p}_{n-1})} H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.333)$$

em que estamos denotando $p^0 = \pm E(\mathbf{p})$ e $q^0 = \pm E(\mathbf{q})$.

As integrais temporais em (3.333) terão seus limites de integração estendidos de $-\infty$ a ∞ , com o uso da função retardada:

$$S_R(t_{j-1} - t_j, \mathbf{p}) \hat{=} \Theta(t_{j-1} - t_j) e^{-i(t_{j-1} - t_j)H_0(\mathbf{p})} \quad (3.334)$$

com

$$\Theta(t_{j-1} - t_j) = \begin{cases} 1, & \text{para } t_{j-1} > t_j \\ 0, & \text{para } t_{j-1} < t_j \end{cases}. \quad (3.335)$$

Portanto, (3.333) fica

$$\begin{aligned} S_{+-}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n e^{it_1 E(\mathbf{p}) + it_n E(\mathbf{q})} \int d^3 p_1 \dots \int d^3 p_{n-1} \times \\ &\times P_+(\mathbf{p}) H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \Theta(t_1 - t_2) e^{-i(t_1 - t_2)H_0(\mathbf{p}_1)} H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \dots \\ &\dots \Theta(t_{n-1} - t_n) e^{-i(t_{n-1} - t_n)H_0(\mathbf{p}_{n-1})} H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}) \\ &= \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n e^{it_1 E(\mathbf{p}) + it_n E(\mathbf{q})} \int d^3 p_1 \dots \int d^3 p_{n-1} \times \\ &\times P_+(\mathbf{p}) H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S_R(t_1 - t_2) H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \dots \\ &\dots S_R(t_{n-1} - t_n) H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (3.336)$$

de modo que as integrais temporais podem ser calculadas por meio da transformada de Fourier distribucional

$$\hat{S}_R(p_0, \mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} dt e^{ip_0 t - \varepsilon t} e^{-itH_0(\mathbf{p})} \quad (3.337)$$

sendo que

$$S_R(t; \mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp_0 \hat{S}_R(p_0, \mathbf{p}) e^{-ip_0 t}. \quad (3.338)$$

Introduzindo a decomposição $P_+ + P_- = 1$ em (3.337), e usando as expressões (3.331), temos

$$\begin{aligned} \hat{S}_R(p_0, \mathbf{p}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{\infty} dt [P_+ e^{ip_0 t - \varepsilon t} e^{-itH_0(\mathbf{p})} + P_- e^{ip_0 t - \varepsilon t} e^{-itH_0(\mathbf{p})}] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \left\{ \frac{P_+ e^{[i(p_0 - E(\mathbf{p})) - \varepsilon]t}}{i(p_0 - E(\mathbf{p})) - \varepsilon} + \frac{P_- e^{[i(p_0 + E(\mathbf{p})) - \varepsilon]t}}{i(p_0 + E(\mathbf{p})) - \varepsilon} \right\} \\ &= \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{P_+(\mathbf{p})}{p_0 - E(\mathbf{p}) + i0} + \frac{P_-(\mathbf{p})}{p_0 + E(\mathbf{p}) + i0} \right] \\ &= \frac{i}{\sqrt{2\pi} 2E} \left[\frac{E\gamma^0 - \gamma \cdot \mathbf{p} + m}{p_0 - E(\mathbf{p}) + i0} + \frac{E\gamma^0 + \gamma \cdot \mathbf{p} - m}{p_0 + E(\mathbf{p}) + i0} \right] \\ &= \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \frac{p_0 \gamma^0 - \gamma \cdot \mathbf{p} + m}{p_0^2 - E^2(\mathbf{p}) + ip_0 0} \right\} \gamma^0 \end{aligned} \quad (3.339)$$

que pode ser escrita na forma covariante, após as substituições

$$p_0 = E(\mathbf{p}), \quad p^2 = p_0^2 - \mathbf{p}^2, \quad \not{p} = \gamma^0 p_0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}. \quad (3.340)$$

tornando-se

$$\begin{aligned} \hat{S}_R &= \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + ip_0 0} \right] \gamma^0 \\ &= \frac{i}{\sqrt{2\pi}} S^{ret}(p) \gamma^0, \end{aligned} \quad (3.341)$$

com

$$S^{ret}(p) = \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + ip_0 0},$$

onde estamos denotando $p = (p^0, \mathbf{p})$.

Desta maneira, (3.338) fica

$$S_R(t; \mathbf{p}) = \frac{i}{2\pi} \int dp_0 S^{ret}(p) e^{-ip_0 t} \gamma^0, \quad (3.342)$$

que leva o elemento de matriz $S_{+-}^{(n)}$ (3.336) a ser escrito como:

$$\begin{aligned} S_{+-}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{\frac{5n}{2}-1}} \int d^4 p_1 \dots \int d^4 p_{n-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n e^{it_1 E(\mathbf{p}) + it_n E(\mathbf{q})} \times \\ &\times P_+(\mathbf{p}) H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S^{ret}(p_1) e^{-i(t_1-t_2)(p_1)_0} \gamma^0 H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \dots \\ &\dots S^{ret}(p_{n-1}) e^{-i(t_{n-1}-t_n)(p_{n-1})_0} \gamma^0 H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (3.343)$$

Na expressão anterior, γ^0 combina com o potencial, que aparece em H_1 , resultando na expressão covariante

$$\gamma^0 H_1(t_j; \mathbf{p}_{j-1} - \mathbf{p}_j) = e^{(\gamma^0 V - \vec{\gamma} \cdot \mathbf{A})(t_j; \mathbf{p}_{j-1} - \mathbf{p}_j)} = e \not{A}(t_j; \mathbf{p}_{j-1} - \mathbf{p}_j). \quad (3.344)$$

Usando a transformada de Fourier do campo eletromagnético externo

$$\not{A}(t_j; \mathbf{p}_{j-1} - \mathbf{p}_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk_j \not{A}(k_j; \mathbf{p}_{j-1} - \mathbf{p}_j) e^{-ik_j t_j}, \quad (3.345)$$

realizamos as integrações em t_1, \dots, t_n

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_j e^{it_j p_{j-1}^0} e^{-ik_j t_j} e^{-ip_j^0(t_j-t_{j+1})} = 2\pi \delta(p_{j-1}^0 - p_j^0 - k_j) e^{ip_j^0 t_{j+1}} \quad (3.346)$$

e, depois em k_1, \dots, k_n , resultando em:

$$\begin{aligned}
S_{+-}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(-i)}{(2\pi)^{2n-1}} e^n \int d^4 p_1 \dots \int d^4 p_{n-1} \int dk_1 \dots \int dk_n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \delta(p^0 - p_1^0 - k_1) \\
&\times \mathbf{A}(k_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S^{ret}(p_1) \delta(p_1^0 - p_2^0 - k_2) \mathbf{A}(k_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \dots \\
&\dots \delta(p_{n-1}^0 - q^0 - k_n) \mathbf{A}(k_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}) \\
&= \frac{(-i)}{(2\pi)^{2n-1}} e^n \int d^4 p_1 \dots \int d^4 p_{n-1} P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \mathbf{A}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S^{ret}(p_1) \mathbf{A}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \times \\
&\times S^{ret}(p_2) \dots S^{ret}(p_{n-1}) \mathbf{A}(\mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}). \tag{3.347}
\end{aligned}$$

As outras três projeções

$$S_{++}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = P_+(\mathbf{p}) S^{(n)} P_+, \tag{3.348}$$

$$S_{-+}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = P_-(\mathbf{p}) S^{(n)} P_+, \tag{3.349}$$

$$S_{--}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = P_-(\mathbf{p}) S^{(n)} P_-, \tag{3.350}$$

são obtidas por um procedimento similar, e todas as quatro podem ser resumidas como

$$\begin{aligned}
S_{\pm\pm}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(-i)}{(2\pi)^{2n-1}} e^n \int d^4 p_1 \dots \int d^4 p_{n-1} P_{\pm}(\mathbf{p}) \gamma^0 \mathbf{A}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S^{ret}(p_1) \mathbf{A}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \times \\
&\times S^{ret}(p_2) \dots S^{ret}(p_{n-1}) \mathbf{A}(\mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_{\pm}(\mathbf{q}) \tag{3.351}
\end{aligned}$$

Esse resultado é importante, pois ele nos dá o n-ésimo termo das projeções $S_{\pm\pm}$, que estão envolvidas no cálculo do elemento de matriz \mathbf{S}_{fi} , que será usado para avaliar os processos de espalhamento através da probabilidade de transição

$$P_{fi} = |\mathbf{S}_{fi}|^2 = | \langle \Phi | \mathbf{S} | \Psi \rangle |^2 \tag{3.352}$$

onde Φ e Ψ são estados assintóticos no espaço de Fock.

3.4.2 Teoria de Perturbação - \tilde{S} em $\tilde{\mathcal{H}}$ Dual

Como visto na equação (3.277), a série perturbativa para a matriz \tilde{S} , considerando o hamiltoniano dependente do tempo $\tilde{H}(t) = \tilde{H}_0 + H_1(t)$, é análoga à série para o sistema original. Assim, o n-ésimo termo de \tilde{S} , correspondente a $S^{(n)}$, pode ser escrito como:

$$\begin{aligned}
\tilde{S}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{-\infty}^{-\infty} dt_1 \int_{\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{\infty}^{t_{n-1}} dt_n \int d^3 p_1 \dots \int d^3 p_{n-1} \times \\
&\times e^{it_1 \tilde{H}_0(\mathbf{p})} H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) e^{-i(t_1 - t_2) \tilde{H}_0(p_1)} \dots \\
&\dots e^{-i(t_{n-1} - t_n) \tilde{H}_0(\mathbf{p}_{n-1})} H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) e^{-it_n \tilde{H}_0(q)}, \tag{3.353}
\end{aligned}$$

com $\tilde{S}^{(0)} = 1$. Dessa expressão podemos obter $\tilde{S}_{\pm\pm}^n = P_{\pm}\tilde{S}^{(n)}P_{\pm}$, usando os operadores de projeção no espaço dos momentos definidos em (3.331), de modo que

$$\begin{aligned} P_{\pm}(\mathbf{p})\tilde{H}_0(\mathbf{p}) &= \pm E(\mathbf{p})P_{\pm}(\mathbf{p}) = \tilde{H}_0(\mathbf{p})P_{\pm}(\mathbf{p}) \\ P_{\pm}(\mathbf{p})e^{-it\tilde{H}_0(\mathbf{p})} &= e^{-it[\pm E(\mathbf{p})]}P_{\pm}(\mathbf{p}) = e^{-it\tilde{H}_0(\mathbf{p})}P_{\pm}(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (3.354)$$

Logo

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{+-}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{\infty}^{-\infty} dt_1 \int_{\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{\infty}^{t_{n-1}} dt_n \int d^3p_1 \dots \int d^3p_{n-1} \times \\ &\times P_+(\mathbf{p})e^{it_1\tilde{H}_0(\mathbf{p})}H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)e^{-i(t_1-t_2)H_0(\mathbf{p}_1)}H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\dots \\ &\dots e^{-i(t_{n-1}-t_n)H_0(\mathbf{p}_{n-1})}H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q})e^{-it_n\tilde{H}_0(\mathbf{p})}P_-(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.355)$$

Podemos ainda estender os limites das integrais temporais de $-\infty$ a ∞ com o uso da função

$$\tilde{S}_A(t_j - t_{j-1}, \mathbf{p}) \hat{=} \Theta(t_j - t_{j-1})e^{-i(t_j-t_{j-1})\tilde{H}_0(\mathbf{p})} \quad (3.356)$$

com

$$\Theta(t_j - t_{j-1}) = \begin{cases} 1, & \text{para } t_j > t_{j-1}, \\ 0, & \text{para } t_j < t_{j-1} \end{cases}, \quad (3.357)$$

portanto:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{+-}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{\infty}^{-\infty} dt_1 \int_{\infty}^{-\infty} dt_2 \dots \int_{\infty}^{-\infty} dt_n \int d^3p_1 \dots \int d^3p_{n-1} \times \\ &\times P_+(\mathbf{p})e^{it_1\tilde{H}_0(\mathbf{p})}H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)\Theta(t_2 - t_1)e^{-i(t_1-t_2)H_0(\mathbf{p}_1)}H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\dots \\ &\dots \Theta(t_n - t_{n-1})e^{-i(t_{n-1}-t_n)\tilde{H}_0(\mathbf{p}_{n-1})}H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q})e^{-it_n\tilde{H}_0(\mathbf{p})}P_-(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.358)$$

onde usamos

$$\int_{\infty}^{-\infty} dt_j \Theta(t_j - t_{j-1})e^{-i(t_j-t_{j-1})\tilde{H}_0(\mathbf{p})} = \int_{\infty}^{t_{j-1}} dt_j e^{-i(t_j-t_{j-1})\tilde{H}_0(\mathbf{p})}. \quad (3.359)$$

Percebe-se que a matriz \tilde{S} tem os fatores do integrando dispostos na ordem antitemporal, isto é, $t_n > t_{n-1} > \dots > t_2 > t_1$ [46]. Assim, invertendo os limites de integração temporal e substituindo os resultados (3.354), temos

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{+-}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n e^{it_1E(\mathbf{p})+it_nE(\mathbf{q})} \int d^3p_1 \dots \int d^3p_{n-1} \times \\ &\times P_+(\mathbf{p})H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1)\Theta(t_2 - t_1)e^{-i(t_1-t_2)\tilde{H}_0(\mathbf{p}_1)}H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2)\dots \\ &\dots \Theta(t_n - t_{n-1})e^{-i(t_{n-1}-t_n)\tilde{H}_0(\mathbf{p}_{n-1})}H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q})P_-(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (3.360)$$

onde o fator $(-1)^n$ é devido à inversão de limites das integrais temporais. As integrais temporais podem ser calculadas por meio da transformada de Fourier distribucional de

$$\tilde{S}_A(p_0; \mathbf{p}) = \Theta(-t)e^{-it\tilde{H}_0(\mathbf{p})} \quad (3.361)$$

definida por

$$\tilde{S}_A(p_0, \mathbf{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dt e^{-itH_0(\mathbf{p})} e^{-ip_0t - \varepsilon t}, \quad (3.362)$$

que pode ser reescrita introduzindo a decomposição nos subespaços espectrais de \tilde{H}_0 , $P_+ + P_- = 1$ e usando as expressões (3.331):

$$\begin{aligned} \tilde{S}_A(p_0, \mathbf{p}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dt e^{ip_0t - \varepsilon t} [P_+ e^{-it\tilde{H}_0(\mathbf{p})} + P_- e^{-it\tilde{H}_0(\mathbf{p})}] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^0 dt [P_+ e^{[i(p_0 - E_{\mathbf{p}}) - \varepsilon]t} + P_- e^{[i(p_0 + E_{\mathbf{p}}) - \varepsilon]t}] \\ &= \frac{-i}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{P_+(\mathbf{p})}{p_0 - E(\mathbf{p}) - i0} + \frac{P_-(\mathbf{p})}{p_0 + E(\mathbf{p}) - i0} \right] \\ &= \frac{-i}{\sqrt{2\pi} 2E} \left[\frac{E\gamma^0 - \gamma \cdot \mathbf{p} + m}{p_0 - E(\mathbf{p}) - i0} + \frac{E\gamma^0 + \gamma \cdot \mathbf{p} - m}{p_0 + E(\mathbf{p}) - i0} \right] \\ &= \frac{-i}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{p_0\gamma^0 - \gamma \cdot \mathbf{p} + m}{p_0^2 - E_{\mathbf{p}}^2 - ip_0 0} \right] \gamma^0. \end{aligned} \quad (3.363)$$

Escrita na forma covariante a expressão acima fica

$$\begin{aligned} \tilde{S}_A &= \frac{-i}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 - ip_0 0} \right] \gamma^0 \\ &= \frac{-i}{\sqrt{2\pi}} S^{av}(p) \gamma^0, \end{aligned} \quad (3.364)$$

e tem como transformada inversa

$$\begin{aligned} \tilde{S}_A(t; \mathbf{p}) &\doteq \frac{1}{2\pi} \int dp_0 \tilde{S}_A(p_0; \mathbf{p}) e^{-ip_0t} \\ &= \frac{-i}{2\pi} \int dp_0 S^{av}(p) e^{-ip_0t} \gamma^0, \end{aligned} \quad (3.365)$$

que leva o elemento de matriz $S_{+-}^{(n)}$ a ser escrito como:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{+-}^m(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \dots dt_n e^{it_1 E(\mathbf{p}) + it_n E(\mathbf{q})} \int d^3 p_1 \dots d^3 p_{n-1} \times \\ &\times P_+(\mathbf{p}) H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \tilde{S}_A(t_1 - t_2; \mathbf{p}_1) H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \dots \\ &\dots \tilde{S}_A(t_{n-1} - t_n; \mathbf{p}_{n-1}) H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}) \\ &= \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{\frac{3n}{2} - 1}} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 dt_2 \dots dt_n \int d^4 p_1 \dots d^4 p_{n-1} e^{it_1 E(\mathbf{p}) + it_n E(\mathbf{q})} \times \\ &\times P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 H_1(t_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S^{av}(p_1) e^{-i(t_1 - t_2)(p_1)_0} \gamma^0 H_1(t_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \dots \\ &\dots S^{av}(p_{n-1}) e^{-i(t_{n-1} - t_n)(p_{n-1})_0} \gamma^0 H_1(t_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (3.366)$$

Na expressão anterior, γ^0 "combina" com o potencial, que aparece em H_1 , resultando na expressão covariante (3.344); introduzindo a transformada de Fourier na coordenada temporal dos potenciais (3.345), realizamos as integrações em t_1, \dots, t_n e depois em k_1, \dots, k_n , resultando em

$$\begin{aligned}
\tilde{S}_{+-}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{-i(e^n)}{(2\pi)^{2n-1}} \int d^4 p_1 \dots \int d^4 p_{n-1} \int dk_1 \dots \int dk_n P_+ \gamma^0 \delta(p^0 - p_1^0 - k_1) \\
&\times \mathcal{A}(k_1; \mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S^{av}(p_1) \delta(p_1^0 - p_2^0 - k_2) \mathcal{A}(k_2; \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \dots \\
&\dots \delta(p_{n-1}^0 - q^0 - k_n) \mathcal{A}(k_n; \mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}) \\
&= \frac{-i(e^n)}{(2\pi)^{2n-1}} \int d^4 p_1 \dots \int d^4 p_{n-1} P_+ \gamma^0 \mathcal{A}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S^{av}(p_1) \mathcal{A}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \times \\
&\times S^{av}(p_2) \dots S^{av}(p_{n-1}) \mathcal{A}(\mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_-(\mathbf{q}). \tag{3.367}
\end{aligned}$$

As outras três projeções

$$\tilde{S}_{++}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = P_+(\mathbf{p}) \tilde{S}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) P_+, \tag{3.368}$$

$$\tilde{S}_{-+}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = P_-(\mathbf{p}) \tilde{S}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) P_+, \tag{3.369}$$

$$\tilde{S}_{--}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = P_-(\mathbf{p}) \tilde{S}^{(n)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) P_-, \tag{3.370}$$

são obtidas por um procedimento similar, e todas as quatro podem ser resumidas como

$$\begin{aligned}
\tilde{S}_{\pm\pm}^n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= \frac{-i(e)^n}{(2\pi)^{2n-1}} \int d^4 p_1 \dots \int d^4 p_{n-1} P_{\pm}(\mathbf{p}) \gamma^0 \mathcal{A}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) S^{av}(p_1) \mathcal{A}(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2) \times \\
&\times S^{av}(p_2) \dots S^{av}(p_{n-1}) \mathcal{A}(\mathbf{p}_{n-1} - \mathbf{q}) P_{\pm}(\mathbf{q}). \tag{3.371}
\end{aligned}$$

Essas expressões, junto com as correspondentes no sistema original, (3.351), comporão a descrição do sistema duplicado $\hat{\mathbf{S}}$, que será construída no próximo capítulo.

Espalhamento à Temperatura Finita

Após termos introduzido o formalismo da Dinâmica de Campos Térmicos (DCT) e o espaço de Fock direto e dual, neste capítulo utilizaremos a DCT na construção da matriz de espalhamento à temperatura finita para extrair as seções de choque térmicas associadas aos processos de espalhamento por um potencial, visando o espalhamento de elétrons e pósitron por átomos.

4.1 Espaço de Fock Duplicado

Pela DCT, a introdução dos efeitos de temperatura em sistemas de campos quânticos é feita através de uma transformação de Bogoliubov realizada sobre um espaço duplicado, formado pela soma direta do espaço original e seu dual. Como estamos trabalhando com a representação de Fock para o formalismo de matriz de espalhamento para tratar de processos a temperatura finita, trabalharemos com o espaço de Fock duplicado ($\hat{\mathcal{F}}$). Este espaço pode ser escrito como soma direta de espaços de Hilbert $\hat{\mathcal{H}}$,

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{F}}^\pm &= \bigoplus_{n=0}^{\infty} (\mathcal{H}_n^\pm \otimes \tilde{\mathcal{H}}_n^\pm) \\ &= \underbrace{[\mathcal{H}_0 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_0]}_{\hat{\mathcal{H}}_0} \oplus \underbrace{[\mathcal{H}_1 \otimes \tilde{\mathcal{H}}_1]}_{\hat{\mathcal{H}}_1} \oplus \dots \oplus \underbrace{[\mathcal{H}_n \otimes \tilde{\mathcal{H}}_n]}_{\hat{\mathcal{H}}_n} \oplus \dots,\end{aligned}\quad (4.1)$$

com os vetores do espaço de Hilbert $\hat{\mathcal{H}}_n$ definidos como

$$(\hat{\phi})_n = (\phi\tilde{\phi})_n = (\phi(x_1, \dots, x_n) \otimes \tilde{\phi}(x_1, \dots, x_n)) \in [\mathcal{H}_n^\pm \otimes \tilde{\mathcal{H}}_n^\pm]. \quad (4.2)$$

Como na construção do formalismo da DCT, capítulo dois, os vetores de estado que expandem o vácuo térmico são aqueles que resultam do produto direto de vetores do espaço original e dual com o mesmo autovalor de energia, os vetores do estado do espaço de Fock

da DCT que notaremos por $|\Phi\rangle\rangle$ serão compostos por produtos de vetores de estado de mesmo número de partículas [46]

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle\rangle &= |\phi_0\rangle\rangle \oplus |\phi_1\rangle\rangle \oplus \dots \oplus |\phi_n\rangle\rangle \oplus \dots \\ &= (|\phi_0\rangle \otimes |\tilde{\phi}_0\rangle) \oplus (|\phi_1\rangle \otimes |\tilde{\phi}_1\rangle) \oplus \dots \oplus (|\phi_n\rangle \otimes |\tilde{\phi}_n\rangle) \oplus \dots \\ &= |\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n, \dots; \tilde{\phi}_0, \tilde{\phi}_1, \dots, \tilde{\phi}_n, \dots\rangle \in \hat{\mathcal{F}}^\pm. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Caso o sistema tenha n partículas, o estado será definido da forma

$$|\Psi\rangle\rangle_n = |0, 0, \dots, \phi_n, \dots; \tilde{0}, \tilde{0}, \dots, \tilde{\phi}_n, \dots\rangle, \quad (4.4)$$

e o vácuo do espaço de Fock duplicado é escrito como:

$$|\Psi\rangle\rangle_0 = |\phi_0, 0, \dots; \tilde{\phi}_0, \tilde{0}, \dots\rangle. \quad (4.5)$$

Um estado qualquer em DCT pode ser obtido pela transformação de Bogoliubov aplicada a um estado qualquer duplicado, ou seja:

$$|\Psi(\beta)\rangle\rangle = \mathbb{U}(\beta)|\Psi\rangle\rangle, \quad (4.6)$$

em que $\mathbb{U}(\beta)$ é a transformação de Bogoliubov definida em (2.37). As quantidades físicas de sistemas a $T \neq 0$ que designaremos por \hat{A} , como a matriz de espalhamento, são calculadas por [46]

$$\langle \hat{A} \rangle_{\Psi_\beta} \hat{=} \langle \Psi(\beta) | \hat{A} | \Psi(\beta) \rangle. \quad (4.7)$$

4.2 Operador Espalhamento no Espaço de Fock Duplicado

O operador espalhamento no espaço de Fock duplicado $\hat{\mathcal{F}}$ pode ser definido como [38]:

$$\hat{\mathbf{S}} = \mathbf{S}\tilde{\mathbf{S}}. \quad (4.8)$$

A unitariedade de \mathbf{S} e $\tilde{\mathbf{S}}$ garante a unitariedade de $\hat{\mathbf{S}}$. Usando a matriz de espalhamento para o campo de Dirac num campo externo dependente do tempo $A^\mu(x)$ no espaço de Fock original (3.259),

$$\mathbf{S} = C e^{(S_{+-} - S_{-+}^{-1})b^\dagger d^\dagger} : e^{(S_{++}^{\dagger-1} - 1)b^\dagger b} :: e^{(1 - S_{--}^{-1})dd^\dagger} : e^{(S_{--}^{-1} - S_{-+})db}, \quad (4.9)$$

e no espaço dual (3.324)

$$\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{C} e^{-(\tilde{S}_{+-}\tilde{S}_{-}^{-1})\tilde{b}\tilde{d}} : e^{-(\tilde{S}_{--}-1)\tilde{b}\tilde{b}^\dagger} :: e^{-(1-\tilde{S}_{++}^\dagger)\tilde{d}^\dagger\tilde{d}} : e^{-(\tilde{S}_{-}^{-1}\tilde{S}_{-+})\tilde{d}^\dagger\tilde{b}^\dagger}. \quad (4.10)$$

o operador $\hat{\mathbf{S}}$ fica

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}} &= \hat{C} e^{b^\dagger(S_{+-}S_{-}^{-1})d^\dagger - \tilde{b}(\tilde{S}_{+-}\tilde{S}_{-}^{-1})\tilde{d}} : e^{b^\dagger(S_{++}^\dagger-1)b - \tilde{b}(\tilde{S}_{--}-1)\tilde{b}^\dagger} : \\ &\times : e^{d(1-S_{-}^{-1})d^\dagger - \tilde{d}^\dagger(1-\tilde{S}_{++}^\dagger)\tilde{d}} : e^{d(S_{-}^{-1}S_{-+})b - \tilde{d}^\dagger(\tilde{S}_{-}^{-1}\tilde{S}_{-+})\tilde{b}^\dagger}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Esse operador fará a transição entre estados de Fock duplicados, que são criados pela atuação dos dubletos de criação e aniquilação sobre o vácuo, definidos por:

$$\begin{aligned} B &= \begin{pmatrix} b \\ \sigma\tilde{b}^\dagger \end{pmatrix}, & D &= \begin{pmatrix} d \\ \sigma\tilde{d}^\dagger \end{pmatrix}, \\ B^\dagger &= \begin{pmatrix} b^\dagger & \sigma\tilde{b} \end{pmatrix}, & D^\dagger &= \begin{pmatrix} d^\dagger & \sigma^*\tilde{d} \end{pmatrix}, \\ \bar{B} &= \begin{pmatrix} b & \sigma\tilde{b}^\dagger \end{pmatrix}, & \bar{D} &= \begin{pmatrix} d & \sigma\tilde{d}^\dagger \end{pmatrix}, \\ \bar{B}^\dagger &= \begin{pmatrix} b^\dagger \\ \tilde{b} \end{pmatrix}, & \bar{D}^\dagger &= \begin{pmatrix} d^\dagger \\ \sigma^*\tilde{d} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

com $\sigma \in \mathbb{C}$ (campo dos complexos). Seguindo as estruturas de \mathbf{S} e $\tilde{\mathbf{S}}$, o operador espalhamento $\hat{\mathbf{S}}$ pode ser escrito na forma matricial como [46]

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}} &= \hat{C} e^{B^\dagger \mathbf{A}_1 \bar{D}^\dagger} : e^{B^\dagger (\mathbf{A}_2 - \lambda) B} : e^{\bar{D} (\gamma - \mathbf{A}_3) \bar{D}^\dagger} : e^{\bar{D} \mathbf{A}_4 B} \\ &= C \tilde{C} e^{b^\dagger A_1 d^\dagger + \tilde{b} (\sigma^*)^2 \tilde{A}_1 \tilde{d}} : e^{b^\dagger (A_2 - \lambda_{11}) b + \tilde{b} |\sigma|^2 (\tilde{A}_2 - \lambda_{11}) \tilde{b}^\dagger} : \times \\ &\times : e^{d(\gamma_{11} - A_3) d^\dagger + \tilde{d}^\dagger |\sigma|^2 (\gamma_{22} - \tilde{A}_3) \tilde{d}} : e^{d A_4 b + \tilde{d}^\dagger \sigma^2 \tilde{A}_4 \tilde{b}^\dagger}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

onde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & \tilde{A} \end{pmatrix}, \quad \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_{11} & 0 \\ 0 & \lambda_{22} \end{pmatrix}, \quad \gamma = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & 0 \\ 0 & \gamma_{22} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

Comparando (4.12) com (4.14), obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 &= \begin{pmatrix} S_{+-}S_{--}^{-1} & 0 \\ 0 & -(\sigma^*)^{-2}\tilde{S}_{+-}\tilde{S}_{--}^{-1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} S_{+-} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{+-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{--}^{-1} & 0 \\ 0 & -(\sigma^*)^{-2}\tilde{S}_{--}^{-1} \end{pmatrix} = \hat{S}_{+-}\hat{S}_{--}^{-1} \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned} &= - \begin{pmatrix} -S_{++}^{\dagger-1}S_{+-}^{\dagger} & 0 \\ 0 & (\sigma^*)^{-2}\tilde{S}_{++}^{\dagger-1}\tilde{S}_{+-}^{\dagger} \end{pmatrix} \\ &= - \begin{pmatrix} S_{++}^{\dagger-1} & 0 \\ 0 & -(\sigma^*)^{-2}\tilde{S}_{++}^{\dagger-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{+-}^{\dagger} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{+-}^{\dagger} \end{pmatrix} = -\hat{S}_{++}^{\dagger-1}\hat{S}_{+-}^{\dagger} \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} S_{++}^{\dagger-1} & 0 \\ 0 & -|\sigma^*|^{-2}\tilde{S}_{--} \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

$$\mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} S_{--}^{-1} & 0 \\ 0 & -|\sigma^*|^{-2}\tilde{S}_{++}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_4 &= \begin{pmatrix} S_{--}^{-1}S_{-+} & 0 \\ 0 & -\sigma^{-2}\tilde{S}_{--}^{-1}\tilde{S}_{-+} \end{pmatrix}, \\ &= \begin{pmatrix} S_{--}^{-1} & 0 \\ 0 & -\sigma^{-2}\tilde{S}_{--}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{-+} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{-+} \end{pmatrix} = \hat{S}_{--}^{-1}\hat{S}_{-+} \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} -S_{-+}^{\dagger}S_{++}^{\dagger-1} & 0 \\ 0 & \sigma^{-2}\tilde{S}_{-+}^{\dagger}\tilde{S}_{++}^{\dagger-1} \end{pmatrix}, \\ &= \begin{pmatrix} S_{-+}^{\dagger} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{-+}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{++}^{\dagger-1} & 0 \\ 0 & -\sigma^{-2}\tilde{S}_{++}^{\dagger-1} \end{pmatrix} = -\hat{S}_{-+}^{\dagger}\hat{S}_{++}^{\dagger-1}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\lambda = \gamma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -|\sigma|^{-2} \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

e concluímos que ou σ é real ou σ é imaginário puro. Desta forma, os elementos de matriz $\hat{S}_{\pm\pm}$ são escritos como

$$\hat{S}_{+-} = \begin{pmatrix} S_{+-} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{+-} \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

$$\hat{S}_{--}^{-1} = \begin{pmatrix} S_{--}^{-1} & 0 \\ 0 & -\sigma^{-2}\tilde{S}_{--}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (4.23)$$

$$\hat{S}_{++}^{\dagger-1} = - \begin{pmatrix} S_{++}^{\dagger-1} & 0 \\ 0 & -\sigma^{-2}\tilde{S}_{++}^{\dagger-1} \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

$$\hat{S}_{+-}^{\dagger} = \begin{pmatrix} S_{+-}^{\dagger} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{+-}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad (4.25)$$

$$\hat{S}_{-+} = \begin{pmatrix} S_{-+} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{-+} \end{pmatrix}, \quad (4.26)$$

$$\hat{S}_{-+}^{\dagger} = \begin{pmatrix} S_{-+}^{\dagger} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{-+}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

os quais satisfazem a relação de unitariedade $\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{S}}^{\dagger} = \hat{\mathbf{S}}^{\dagger}\hat{\mathbf{S}} = 1$ para a matriz espalhamento no espaço de Fock duplicado, dada por:

$$\hat{\mathbf{S}} = \begin{pmatrix} \hat{S}_{++} & \hat{S}_{+-} \\ \hat{S}_{-+} & \hat{S}_{--} \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{S}}^{\dagger} = \begin{pmatrix} \hat{S}_{++}^{\dagger} & \hat{S}_{+-}^{\dagger} \\ \hat{S}_{-+}^{\dagger} & \hat{S}_{--}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

ou seja:

$$\hat{S}_{++}\hat{S}_{++}^{\dagger} + \hat{S}_{+-}\hat{S}_{-+}^{\dagger} = \hat{S}_{++}^{\dagger}\hat{S}_{++} + \hat{S}_{+-}^{\dagger}\hat{S}_{-+} = 1, \quad (4.29)$$

$$\hat{S}_{++}\hat{S}_{+-}^{\dagger} + \hat{S}_{+-}\hat{S}_{--}^{\dagger} = \hat{S}_{++}^{\dagger}\hat{S}_{+-} + \hat{S}_{+-}^{\dagger}\hat{S}_{--} = 0, \quad (4.30)$$

$$\hat{S}_{-+}\hat{S}_{++}^{\dagger} + \hat{S}_{--}\hat{S}_{-+}^{\dagger} = \hat{S}_{-+}^{\dagger}\hat{S}_{++} + \hat{S}_{--}^{\dagger}\hat{S}_{-+} = 0, \quad (4.31)$$

$$\hat{S}_{-+}\hat{S}_{+-}^{\dagger} + \hat{S}_{--}\hat{S}_{--}^{\dagger} = \hat{S}_{-+}^{\dagger}\hat{S}_{+-} + \hat{S}_{--}^{\dagger}\hat{S}_{--} = 1. \quad (4.32)$$

Substituindo as definições para os elementos de matriz nas relações acima, considerando

$$\hat{S}_{\pm\pm}^{-1\dagger} = (\hat{S}_{\pm\pm}^{-1})^{\dagger}, \quad (4.33)$$

verificamos a propriedade de unitariedade e encontramos que:

$$\sigma = \begin{cases} \pm i \\ \pm 1 \end{cases}, \quad (4.34)$$

$$\lambda = \gamma = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -|\sigma|^{-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \tau \quad (4.35)$$

e

$$\tilde{S}_{--}^{-1} = \pm \tilde{S}_{--}^\dagger. \quad (4.36)$$

Esses resultados possibilitam reescrever as expressões (4.22) - (4.27), como:

$$\hat{S}_{+-} = \begin{pmatrix} S_{+-} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{+-} \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

$$\hat{S}_{--}^{-1} = \begin{pmatrix} S_{--}^{-1} & 0 \\ 0 & \pm \tilde{S}_{--}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

$$\hat{S}_{++}^{\dagger-1} = \begin{pmatrix} S_{++}^{\dagger-1} & 0 \\ 0 & \pm \tilde{S}_{++}^{\dagger-1} \end{pmatrix}, \quad (4.39)$$

$$\hat{S}_{+-}^\dagger = \begin{pmatrix} S_{+-}^\dagger & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{+-}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (4.40)$$

$$\hat{S}_{-+} = \begin{pmatrix} S_{-+} & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{-+} \end{pmatrix}, \quad (4.41)$$

$$\hat{S}_{-+}^\dagger = \begin{pmatrix} S_{-+}^\dagger & 0 \\ 0 & \tilde{S}_{-+}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (4.42)$$

e as definições de \mathbf{A}_2 e \mathbf{A}_3 como

$$\mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} S_{++}^{\dagger-1} & 0 \\ 0 & -\tilde{S}_{--} \end{pmatrix}, \quad (4.43)$$

$$\mathbf{A}_3 = \begin{pmatrix} S_{--}^{-1} & 0 \\ 0 & -\tilde{S}_{++}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.44)$$

Finalmente, pode-se escrever a matriz de espalhamento para o sistema duplicado como:

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{C} e^{B^\dagger \mathbf{A}_1 \bar{D}^\dagger} : e^{B^\dagger (\mathbf{A}_2 - \tau) B} : e^{\bar{D} (\tau - \mathbf{A}_3) \bar{D}^\dagger} : e^{\bar{D} \mathbf{A}_4 B}, \quad (4.45)$$

que será usada para avaliar o processo de espalhamento de um elétron (pósitron) por um potencial à temperatura finita.

4.3 Seção de Choque Diferencial Térmica

Nesta seção, estudaremos o espalhamento elástico de elétron (pósitron) relativísticos por um potencial à temperatura finita, através do formalismo apresentado na seção anterior; apresentaremos a seção de choque diferencial térmica obtida para o potencial de Coulomb, gerado por uma carga pontual, e estenderemos os resultados para o potencial atômico descrito por potencial tipo Yukawa.

4.3.1 Espalhamento de Elétron Relativístico por Átomo

Como primeira aplicação do formalismo, trataremos o espalhamento de um elétron por um potencial externo, à temperatura finita. A função de estado do elétron incidente Φ é descrito pelo estado de Fock:

$$\bar{B}^\dagger(\Phi)|0(\beta)\rangle = \bar{B}_1^\dagger|0(\beta)\rangle \quad (4.46)$$

e a função de estado final Ψ por:

$$\langle 0(\beta)|\bar{B}_2 = \langle 0(\beta)|\bar{B}(\Psi), \quad (4.47)$$

em que $\langle 0(\beta)|$ é o vácuo térmico, e \bar{B}^\dagger e \bar{B} são dubletos definidos em (4.12), ou seja:

$$\bar{B}^\dagger \cong \begin{pmatrix} b^\dagger \\ \sigma^* \tilde{b} \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

$$\bar{B} \cong \begin{pmatrix} b & \sigma \tilde{b}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (4.49)$$

onde usou-se a notação condensada:

$$b^\dagger \cong b^\dagger(\Phi); \quad b = b(\Phi); \quad \tilde{b} = \tilde{b}(\tilde{\Phi}); \quad \tilde{b}^\dagger = \tilde{b}^\dagger(\tilde{\Phi}).$$

Para o estudo do processo de espalhamento do elétron por um potencial à temperatura finita, devemos calcular o elemento de matriz $\hat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta)$ considerando os estados (4.46) e (4.47), ou seja,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta) &= \langle 0(\beta)|\bar{B}_2 \hat{\mathbf{S}} \bar{B}_1^\dagger|0(\beta)\rangle \\ &= \hat{C} \langle 0(\beta)|\bar{B}_2 e^{B^\dagger(\mathbf{A}_2 - \tau)B} \bar{B}_1^\dagger|0(\beta)\rangle, \end{aligned} \quad (4.50)$$

o subscrito *fi* significa final e inicial, $\widehat{\mathbf{S}}$ é o operador espalhamento no espaço de Fock em notação de dubletos (4.45), com

$$\tau = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{A}_2 = \begin{pmatrix} A_2 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_2 \end{pmatrix}. \quad (4.51)$$

Temos que o vácuo térmico $|0(\beta)\rangle$ é obtido do vácuo duplicado $|0\rangle \gg \hat{=} |0, \tilde{0}\rangle$ pela transformação de Bogoliubov (TB),

$$|0(\beta)\rangle = \mathbb{U}(\beta)|0\rangle \gg = e^{iG(\theta)}|0\rangle \gg, \quad (4.52)$$

onde o gerador $G(\theta)$ conforme (2.103) é descrito por

$$G(\theta) = G^+(\theta) + G^-(\theta) \quad (4.53)$$

com

$$\begin{aligned} G^+(\theta) &= i \sum_s \int d^3p \theta_{\mathbf{p}}^+ [b_{\mathbf{p}s} \tilde{b}_{\mathbf{p}s} - \tilde{b}_{\mathbf{p}s}^\dagger b_{\mathbf{p}s}^\dagger] \\ G^-(\theta) &= i \sum_s \int d^3p \theta_{\mathbf{p}}^- [d_{\mathbf{p}s} \tilde{d}_{\mathbf{p}s} - \tilde{d}_{\mathbf{p}s}^\dagger d_{\mathbf{p}s}^\dagger] \end{aligned} \quad (4.54)$$

em que se usou a notação condensada $b_{\mathbf{p}s} = b_s(\mathbf{p})$, $d_{\mathbf{p}s} = d_s(\mathbf{p})$ e $\theta_{\mathbf{p}}^\pm = \theta_{\mathbf{p}}^\pm(\beta)$ são parâmetros determinados de forma que a média estatística dos operadores número de partícula e antipartícula resultem na distribuição de Fermi-Dirac para cada caso, ou seja,

$$n^\pm(\mathbf{p}) = \sin^2 \theta_{\mathbf{p}}^\pm(\beta) = [e^{\beta(E_{\mathbf{p}} \mp \mu)} + 1]^{-1} \quad (4.55)$$

com

$$\cos^2 \theta_{\mathbf{p}}^\pm(\beta) = [e^{-\beta(E_{\mathbf{p}} \mp \mu)} + 1]^{-1}. \quad (4.56)$$

Aqui assumiremos $\mu = 0$.

Segue, então, que a expressão (4.50) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta) &= \widehat{C} \langle 0(\beta) | \bar{B}_2 \widehat{\mathbf{S}} \bar{B}_1^\dagger | 0(\beta) \rangle \\ &= \widehat{C} \langle \langle 0 | e^{-iG(\theta)} \bar{B}_2 e^{iG(\theta)} e^{-iG(\theta)} e^{B^\dagger(\mathbf{A} - \tau_3)B} e^{iG(\theta)} e^{-iG(\theta)} \bar{B}_1^\dagger e^{iG(\theta)} | 0 \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Calcularemos agora a TB para cada operador no valor esperado acima. Assim,

$$\begin{aligned}
e^{-iG(\theta)} \bar{B}(\Psi) e^{iG(\theta)} &= e^{-iG(\theta)} \begin{pmatrix} b(\Psi) & \sigma \tilde{b}^\dagger(\tilde{\Psi}) \end{pmatrix} e^{iG(\theta)} \\
&= \int d^3p \begin{pmatrix} e^{-iG^+(\theta)} b_{\mathbf{p}} e^{iG^+(\theta)} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \\ \sigma e^{-iG^+(\theta)} \tilde{b}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{iG^+(\theta)} \tilde{\Psi}_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}^t \\
&= \int d^3p \begin{pmatrix} e^{iG^+(-\theta)} b_{\mathbf{p}} e^{-iG^+(-\theta)} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \\ \sigma e^{iG^+(-\theta)} \tilde{b}_{\mathbf{p}}^\dagger e^{-iG^+(-\theta)} \tilde{\Psi}_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}^t \\
&= \int d^3p \begin{pmatrix} b_{\mathbf{p}}(\beta) \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \\ \sigma \tilde{b}_{\mathbf{p}}^\dagger(\beta) \tilde{\Psi}_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}^t \tag{4.58}
\end{aligned}$$

onde adotamos a notação $\Psi(\mathbf{p}) = \Psi_{\mathbf{p}}$, e usamos as definições (3.92) e (3.168) para os operadores de aniquilação e criação. Os operadores de criação e aniquilação dependentes da temperatura, $b_{\mathbf{p}}(\beta)$ e $\tilde{b}_{\mathbf{p}}(\beta)$, são definidos pelas TB (2.107). Com isso, temos:

$$\begin{aligned}
e^{-iG(\theta)} \bar{B}(\Psi) e^{iG(\theta)} &= \int d^3p \begin{pmatrix} \cos \theta_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger + \sigma \sin \theta_{\mathbf{p}} \tilde{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \Psi_{\mathbf{p}}^\dagger \\ \sigma \cos \theta_{\mathbf{p}} \tilde{b}_{\mathbf{p}}^\dagger \tilde{\Psi}_{\mathbf{p}} - \sin \theta_{\mathbf{p}} b_{\mathbf{p}} \tilde{\Psi}_{\mathbf{p}} \end{pmatrix}^t \\
&= \begin{pmatrix} b(\cos \theta^b \Psi) + \sigma \tilde{b}^\dagger(\sin \theta^b \Psi^\dagger) \\ \sigma \tilde{b}^\dagger(\cos \theta^b \tilde{\Psi}) - b(\sin \theta^b \tilde{\Psi}) \end{pmatrix}^t, \tag{4.59}
\end{aligned}$$

em que omitimos o índice de spin. Como Ψ corresponde a partícula com energia positiva e $\tilde{\Psi}$ a partícula com energia negativa, temos que:

$$\begin{aligned}
b(\tilde{\Psi}) &= 0 \Rightarrow b(\sin \theta^b \tilde{\Psi}) = 0 \\
\tilde{b}(\Psi) &= 0 \Rightarrow \tilde{b}(\sin \theta^b \Psi^\dagger) = 0.
\end{aligned}$$

Portanto,

$$e^{-iG(\theta)} \bar{B} e^{iG(\theta)} = \begin{pmatrix} b(\cos \theta^b \Psi) & \sigma \tilde{b}^\dagger(\cos \theta^b \tilde{\Psi}) \end{pmatrix}, \tag{4.60}$$

o que nos possibilita escrever

$$\begin{aligned}
e^{-iG(\theta)} \bar{B}_2 e^{iG(\theta)} &= \begin{pmatrix} b_2(\cos \theta^{b_2} \Psi) & \sigma \tilde{b}_2^\dagger(\cos \theta^{b_2} \tilde{\Psi}) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} b_\theta & \sigma \tilde{b}_\theta^\dagger \end{pmatrix} \hat{=} \bar{B}_\theta. \tag{4.61}
\end{aligned}$$

De forma similar, para o dubleto \bar{B}^\dagger , teremos

$$\begin{aligned} e^{-iG(\theta)} \bar{B}^\dagger e^{iG(\theta)} &= e^{-iG(\theta)} \begin{pmatrix} b^\dagger(\Phi) \\ \sigma^* \tilde{b}(\tilde{\Phi}) \end{pmatrix} e^{iG(\theta)} \\ &= \begin{pmatrix} b^\dagger(\cos \theta^b \Phi) \\ \sigma^* \tilde{b}(\cos \theta^b \tilde{\Phi}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.62)$$

de modo que

$$e^{-iG(\theta)} \bar{B}_1^\dagger e^{iG(\theta)} = \begin{pmatrix} b_1^\dagger(\cos \theta^{b_1} \Phi) \\ \sigma^* \tilde{b}_1(\cos \theta^{b_1} \tilde{\Phi}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_\theta^\dagger \\ \sigma^* \tilde{b}_\theta \end{pmatrix} \hat{=} \bar{B}_\theta^\dagger \quad (4.63)$$

Para a transformação envolvendo o operador de espalhamento, temos

$$\begin{aligned} e^{-iG(\theta)} : e^{B^\dagger(\mathbf{A}_2 - \tau)B} : e^{iG(\theta)} &= e^{-iG(\theta)} : e^{b^\dagger(A_2 - 1)b} e^{\tilde{b}(\bar{A}_2 + 1)\tilde{b}^\dagger} : e^{iG(\theta)} \\ &= e^{-iG(\theta)} : e^{\bar{A}_2 b^\dagger b} e^{\bar{\bar{A}}_2 \tilde{b} \tilde{b}^\dagger} : e^{iG(\theta)} \\ &= : e^{\bar{A}_2 b^\dagger(\beta)b(\beta)} e^{\bar{\bar{A}}_2 \tilde{b}(\beta)\tilde{b}^\dagger(\beta)} : \\ &= : e^{e^{-iG(\theta)} \bar{A}_2 b_2^\dagger b_1 e^{iG(\theta)}} e^{e^{-iG(\theta)} \bar{\bar{A}}_2 \tilde{b} \tilde{b}^\dagger e^{iG(\theta)}} : \end{aligned} \quad (4.64)$$

com

$$\bar{A}_2 = (A_2 - 1) \quad e \quad \bar{\bar{A}}_2 = (\bar{A}_2 + 1). \quad (4.65)$$

Para a transformação envolvendo $\bar{A}_2 b^\dagger b$, temos

$$\begin{aligned} e^{-iG(\theta)} \bar{A}_2 b^\dagger b e^{iG(\theta)} &= \int d^3 q d^3 p e^{iG(-\theta)} b_{\mathbf{p}}^\dagger e^{-iG(-\theta)} \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) e^{iG(-\theta)} b_{\mathbf{q}} e^{-iG(-\theta)} \\ &= \int d^3 q d^3 p \left[\cos(\theta_{\mathbf{p}}) b_{\mathbf{p}}^\dagger + \sigma^* \sin(\theta_{\mathbf{p}}) \tilde{b}_{\mathbf{p}} \right] \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \left[\cos(\theta_{\mathbf{q}}) b_{\mathbf{q}} + \sigma \sin(\theta_{\mathbf{q}}) \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \right] \\ &= \int d^3 q d^3 p \left[\cos(\theta_{\mathbf{p}}) b_{\mathbf{p}}^\dagger \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos(\theta_{\mathbf{q}}) b_{\mathbf{q}} + \sigma \cos(\theta_{\mathbf{p}}) b_{\mathbf{p}}^\dagger \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \sin(\theta_{\mathbf{q}}) \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \right. \\ &\quad \left. + \sigma^* \sin(\theta_{\mathbf{p}}) \tilde{b}_{\mathbf{p}} \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos(\theta_{\mathbf{q}}) b_{\mathbf{q}} + \sin(\theta_{\mathbf{p}}) \tilde{b}_{\mathbf{p}} \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \sin(\theta_{\mathbf{q}}) \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger \right] \end{aligned} \quad (4.66)$$

onde usamos

$$\bar{A}_2 b^\dagger b = \sum_{jk} (\Psi_j, \bar{A}_2 \Psi_k) b^\dagger(\Psi_j) b(\Psi_k), \quad (4.67)$$

com

$$(\Psi_j, \bar{A}_2 \Psi_k) = \int d^3 q d^3 p \Psi_j^\dagger(\mathbf{p}) \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \Psi_k(\mathbf{q}). \quad (4.68)$$

Temos que a segunda e a terceira parcelas em (4.66) são zero, uma vez que estas parcelas podem ser escritas como um produto escalar entre as funções de estado correspondentes aos operadores que aparecem no produto, e o espaço direto é independente do dual. Portanto:

$$\begin{aligned}
e^{iG(-\theta)} \bar{A}_2 b^\dagger b e^{-iG(-\theta)} &= \int d^3 q d^3 p [b_{\mathbf{p}}^\dagger (\cos(\theta_{\mathbf{p}}) \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos(\theta_{\mathbf{q}})) b_{\mathbf{q}} \\
&+ \tilde{b}_{\mathbf{p}} (\sin(\theta_{\mathbf{p}}) \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \sin(\theta_{\mathbf{q}})) \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger] \\
&= \int d^3 q d^3 p [b_{\mathbf{p}}^\dagger (\bar{A}_2)_{\theta_1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) b_{\mathbf{q}} + \tilde{b}_{\mathbf{p}} (\bar{A}_2)_{\theta_2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger] \\
&= b^\dagger [(\bar{A}_2)_{\theta_1}] b + \tilde{b} [(\bar{A}_2)_{\theta_2}] \tilde{b}^\dagger
\end{aligned} \tag{4.69}$$

em que

$$(\bar{A}_2)_{\theta_1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \cos(\theta_{\mathbf{p}}) \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos(\theta_{\mathbf{q}}) \tag{4.70}$$

e

$$(\bar{A}_2)_{\theta_2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sin(\theta_{\mathbf{p}}) \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \sin(\theta_{\mathbf{q}}), \tag{4.71}$$

onde θ_1 refere-se à parcela com $\cos \theta$, e θ_2 com $\sin \theta$.

Procedendo de maneira similar para a outra transformação em (4.64), temos

$$\begin{aligned}
e^{-iG(\theta)} \bar{\bar{A}}_2 \tilde{b} \tilde{b}^\dagger e^{iG(\theta)} &= \int d^3 q d^3 p [b_{\mathbf{p}}^\dagger (\sin \theta_{\mathbf{p}} \bar{\bar{A}}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \sin \theta_{\mathbf{q}}) b_{\mathbf{q}} + \tilde{b}_{\mathbf{p}} (\cos \theta_{\mathbf{p}} \bar{\bar{A}}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos \theta_{\mathbf{q}}) \tilde{b}_{\mathbf{q}}^\dagger] \\
&= b^\dagger (\bar{\bar{A}}_2)_{\theta_2} b + \tilde{b} (\bar{\bar{A}}_2)_{\theta_1} \tilde{b}^\dagger
\end{aligned} \tag{4.72}$$

em que denotamos

$$(\bar{\bar{A}}_2)_{\theta_1} = \cos \theta_{\mathbf{p}} \bar{\bar{A}}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos \theta_{\mathbf{q}} \tag{4.73}$$

e

$$(\bar{\bar{A}}_2)_{\theta_2} = \sin \theta_{\mathbf{p}} \bar{\bar{A}}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \sin \theta_{\mathbf{q}} \tag{4.74}$$

Desta forma, a transformação envolvendo o operador espalhamento (4.64), fica

$$\begin{aligned}
e^{-iG(\theta)} : e^{B^\dagger(\mathbf{A}_2 - \tau)B} : e^{iG(\theta)} &= : e^{b^\dagger [(\bar{A}_2)_{\theta_1} + (\bar{\bar{A}}_2)_{\theta_2}] b} e^{\tilde{b} [(\bar{A}_2)_{\theta_2} + (\bar{\bar{A}}_2)_{\theta_1}] \tilde{b}^\dagger} : \\
&= : e^{b^\dagger (A_2)_{\theta} b} e^{\tilde{b} (\bar{A}_2)_{\theta} \tilde{b}^\dagger}
\end{aligned} \tag{4.75}$$

com

$$(A_2)_{\theta}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\bar{A}_2)_{\theta_1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + (\bar{\bar{A}}_2)_{\theta_2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \tag{4.76}$$

e

$$(\bar{A}_2)_{\theta}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\bar{A}_2)_{\theta_2}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + (\bar{\bar{A}}_2)_{\theta_1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \tag{4.77}$$

Logo,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta) &= \hat{C} \ll 0 | \bar{B}_\theta : e^{b^\dagger (A_2)_\theta b} e^{\bar{b}(\bar{A}_2)_\theta \bar{b}^\dagger} : \bar{B}_\theta^\dagger | 0 \gg \\ &= \hat{C} \ll 0 | b_\theta : e^{b^\dagger (A_2)_\theta b} e^{\bar{b}(\bar{A}_2)_\theta \bar{b}^\dagger} : b_\theta^\dagger | 0 \gg .\end{aligned}\quad (4.78)$$

onde substituímos (4.61), (4.63) e (4.75) em (4.57).

Como

$$\begin{aligned}: e^{\bar{A}_2 b^\dagger b} e^{\bar{A}_2 \bar{b} \bar{b}^\dagger} : &= : \sum_{nn'} \frac{(\bar{A}_2)^{n'}}{n'!} \frac{(\bar{A}_2)^n}{n!} (b^\dagger b)^{n'} (\bar{b} \bar{b}^\dagger)^n : \\ &= \sum_{nn'} \frac{(\bar{A}_2)^{n'}}{n'!} \frac{(\bar{A}_2)^n}{n!} : (b^\dagger b)^{n'} (\bar{b} \bar{b}^\dagger)^n : \\ &= \sum_{nn'} \frac{(A_2)_\theta^{n'}}{n'!} \frac{(\tilde{A}_2)_\theta^n}{n!} (-1)^{P_{nn'}} b^{\dagger n'} \tilde{b}^{\dagger n} b^{n'} \tilde{b}^n,\end{aligned}\quad (4.79)$$

onde o fator $(-1)^{P_{nn'}}$ aparece em consequência do ordenamento normal dos operadores, já que os operadores de aniquilação devem estar a direita dos operadores de criação, e para férmions tem-se que $aa^\dagger = -a^\dagger a$. A expressão (4.79) é aplicada à $\ll 0 | b_\theta$ em (4.78), e para todo $n \neq 0$ o resultado será zero, uma vez que $\ll \tilde{0} | \tilde{b}^\dagger = 0$ e portanto só restará o termo para $n = 0$. Assim

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta) &= \hat{C} \ll 0 | b_\theta : e^{b^\dagger (A_2)_\theta b} : b_\theta^\dagger | 0 \gg \\ &= \hat{C} \langle 0 | b_\theta : e^{b^\dagger (A_2)_\theta b} : b_\theta^\dagger | 0 \rangle,\end{aligned}\quad (4.80)$$

uma vez que $|0 \gg = |0, \tilde{0} \rangle e \langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle = 1$.

Por outro lado, de acordo com (3.238), temos

$$b_\theta : e^{b^\dagger (A_2)_\theta b} := e^{b^\dagger (A_2)_\theta b} : b[(1 + (A_2)_\theta^\dagger) \cos \theta^{b_2} \Psi]. \quad (4.81)$$

Logo,

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta) &= \hat{C} \langle 0 | : e^{b^\dagger (A_2)_\theta b} : b[(1 + (A_2)_\theta^\dagger) \cos \theta^{b_2} \Psi] b_\theta^\dagger | 0 \rangle \\ &= \hat{C} \langle 0 | b[(1 + (A_2)_\theta^\dagger) \cos \theta^{b_2} \Psi] b_\theta^\dagger | 0 \rangle \\ &= \hat{C} \langle (1 + (A_2)_\theta^\dagger) \cos \theta^{b_2} \Psi | \cos \theta^{b_1} \Phi \rangle \\ &= \hat{C} (\Psi, \cos \theta^{b_2} [1 + (A_2)_\theta^\dagger] \cos \theta^{b_1} \Phi) \\ &= \hat{C} \int d^3 x \Psi^\dagger(\mathbf{x}) [\cos \theta^{b_2} [1 + (A_2)_\theta^\dagger] \cos \theta^{b_1}] (\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}).\end{aligned}\quad (4.82)$$

O estado inicial Φ e o final Ψ do elétron são dados por

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_s \int d^3p \Phi_s(\mathbf{p}) u_s(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\mathbf{x}} \in \mathcal{H}_+. \quad (4.83)$$

Desta maneira, (4.82) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \hat{S}_{fi} &= \sum_{s\sigma} \hat{C} \int d^3p d^3q \Psi_s^*(\mathbf{p}) \left\{ u_s^\dagger(\mathbf{p}) (2\pi)^{-3} \int d^3x [\cos \theta^{b_2} (1 + (A_2)_\theta) \right. \\ &\quad \left. \times \cos \theta^{b_1}] (\mathbf{x}) e^{-i(\mathbf{p}-\mathbf{q})\mathbf{x}} u_\sigma(\mathbf{q}) \right\} \Phi_\sigma(\mathbf{q}) \\ &= \sum_{s\sigma} \int d^3p d^3q \Psi_s^*(\mathbf{p}) S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) \Phi_\sigma(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (4.84)$$

com

$$S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \hat{C} u_s^\dagger(\mathbf{p}) \Lambda(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) u_\sigma(\mathbf{q}) \quad (4.85)$$

em que

$$\Lambda(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = [\cos \theta^{b_2} (1 + (A_2)_\theta) \cos \theta^{b_1}] (\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (4.86)$$

Essa última expressão pode ser reescrita usando a expressão para $(A_2)_\theta$, (4.76),

$$(A_2)_\theta(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \cos \theta_{\mathbf{p}} \bar{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos \theta_{\mathbf{q}} + \sin \theta_{\mathbf{p}} \bar{\bar{A}}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \sin \theta_{\mathbf{q}} \quad (4.87)$$

e

$$\eta_{\mathbf{p}} = \eta_{\mathbf{p}}^\pm(\beta) = \sin^2 \theta_{\mathbf{p}}(\beta) = [e^{\beta E_{\mathbf{p}}} + 1]^{-1}. \quad (4.88)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \Lambda(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) &= A_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos^2 \theta_{\mathbf{p}} \cos^2 \theta_{\mathbf{q}} + \tilde{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos \theta_{\mathbf{p}} \sin \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} \sin \theta_{\mathbf{q}} + \\ &\quad + [\cos \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} - \cos^2 \theta_{\mathbf{p}} \cos^2 \theta_{\mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{p}} \sin \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} \sin \theta_{\mathbf{q}}] \\ &= A_2 \{1 - [\eta_{\mathbf{q}} + \eta_{\mathbf{p}}(1 - \eta_{\mathbf{q}})]\} + \tilde{A}_2 \left\{ [\eta_{\mathbf{p}}(1 - \eta_{\mathbf{p}})]^{\frac{1}{2}} \eta_{\mathbf{q}}(1 - \eta_{\mathbf{q}}) \right\} + \\ &\quad + \left\{ (1 - \eta_{\mathbf{p}})^{\frac{1}{2}} (1 - \eta_{\mathbf{q}})^{\frac{1}{2}} - (1 - \eta_{\mathbf{p}})(1 - \eta_{\mathbf{q}}) + [\eta_{\mathbf{p}}(1 - \eta_{\mathbf{p}})]^{\frac{1}{2}} [\eta_{\mathbf{q}}(1 - \eta_{\mathbf{q}})]^{\frac{1}{2}} \right\} \\ &= A_2 \{1 - \Gamma_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta)\} + \tilde{A}_2 \Gamma'_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta) + \Gamma''_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta), \end{aligned} \quad (4.89)$$

onde

$$\Gamma_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta) = \eta_{\mathbf{q}} + \eta_{\mathbf{p}}(1 - \eta_{\mathbf{q}}) = \sin^{\frac{1}{2}} \theta_{\mathbf{q}} + \sin^{\frac{1}{2}} \theta_{\mathbf{p}} (1 - \sin^{\frac{1}{2}} \theta_{\mathbf{q}}), \quad (4.90)$$

$$\Gamma'_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta) = [\eta_{\mathbf{p}}(1 - \eta_{\mathbf{p}})]^{\frac{1}{2}} \eta_{\mathbf{q}}(1 - \eta_{\mathbf{q}}) \right]^{\frac{1}{2}} = \cos \theta_{\mathbf{p}} \sin \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} \sin \theta_{\mathbf{q}} \quad (4.91)$$

e

$$\begin{aligned} \Gamma''_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta) &= (1 - \eta_{\mathbf{p}})^{\frac{1}{2}} (1 - \eta_{\mathbf{q}})^{\frac{1}{2}} - (1 - \eta_{\mathbf{p}})(1 - \eta_{\mathbf{q}}) + [\eta_{\mathbf{p}}(1 - \eta_{\mathbf{p}})]^{\frac{1}{2}} [\eta_{\mathbf{q}}(1 - \eta_{\mathbf{q}})]^{\frac{1}{2}} \\ &= \cos \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} - \cos^2 \theta_{\mathbf{p}} \cos^2 \theta_{\mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{p}} \sin \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} \sin \theta_{\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (4.92)$$

Para o caso em que $E_{\mathbf{p}} = E_{\mathbf{q}}$, teremos $\eta_{\mathbf{p}} = \eta_{\mathbf{q}}$, e assim:

$$\Lambda(\beta; \mathbf{p}) = A_2[1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)] + \tilde{A}_2\Gamma'_{\mathbf{p}}(\beta) + \Gamma''_{\mathbf{p}}(\beta), \quad (4.93)$$

com

$$\Gamma_{\mathbf{p}}(\beta) = 2\eta_{\mathbf{p}} - \eta_{\mathbf{p}}^2 \quad (4.94)$$

$$\Gamma'_{\mathbf{p}}(\beta) = \eta_{\mathbf{p}}(1 - \eta_{\mathbf{p}}) \quad (4.95)$$

e

$$\Gamma''_{\mathbf{p}}(\beta) = 2\eta_{\mathbf{p}}(1 - \eta_{\mathbf{p}}) = 2\Gamma'_{\mathbf{p}}(\beta). \quad (4.96)$$

Substituindo (4.93) em (4.85), temos:

$$S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \hat{C}u_s^\dagger(\mathbf{p}) \left\{ A_2[1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)] + \tilde{A}_2\Gamma'_{\mathbf{p}}(\beta) + \Gamma''_{\mathbf{p}}(\beta) \right\} u_\sigma(\mathbf{q}), \quad (4.97)$$

em que (Vide Apêndice D),

$$\begin{aligned} A_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= -2\pi i \sum_n (2\pi)^{-2n} P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \dots d^4 p_{n-1} \times \\ &\times e\mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^F(p_1) \dots \mathcal{S}^F(p_{n-1}) e\mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (4.98)$$

e

$$\begin{aligned} \tilde{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= 2\pi i \sum_n (2\pi)^{-2n} P_-(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \dots d^4 p_{n-1} \times \\ &\times e\mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^{av}(p_1) \dots \mathcal{S}^{av}(p_{n-1}) e\mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_-(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (4.99)$$

que, para mais baixa ordem da teoria de perturbação, ficam:

$$A_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = -2\pi i (2\pi)^{-2} P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 e\mathcal{A}(p - q) P_+(\mathbf{q}) \quad (4.100)$$

e

$$\tilde{A}_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 2\pi i (2\pi)^{-2} P_-(\mathbf{p}) \gamma^0 e\mathcal{A}(p - q) P_-(\mathbf{q}) \quad (4.101)$$

Como $P_-(\mathbf{q})u_\sigma(\mathbf{q}) = 0$, ao substituirmos (4.100) e (4.101) em (4.97), o termo envolvendo \tilde{A}_2 será zero e temos ainda que o último termo em (4.97) não envolve a interação.

Considerando $\hat{C} = 1 + O(e^2 A^2) \simeq 1$ temos, em primeira ordem:

$$\begin{aligned} S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) &= u_s^\dagger(\mathbf{p}) A_2(\mathbf{p}, \mathbf{q}) [1 - \Gamma_p(\beta)] u_\sigma(\mathbf{q}) \\ &= -\frac{ie}{2\pi} u_s^\dagger(\mathbf{p}) \gamma_\mu u_\sigma(\mathbf{q}) A^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{q}) [1 - \Gamma_p(\beta)], \end{aligned} \quad (4.102)$$

onde usou-se (4.100) e $P_+ = \sum_s u_s(\mathbf{p})u_s^\dagger(\mathbf{p})$.

Para o caso de um potencial estático,

$$\begin{aligned} A^\mu(p) &= (2\pi)^{-2} \int d^4x e^{i(p^0t - \mathbf{p}\cdot\mathbf{x})} A^\mu(\mathbf{x}) \\ &= (2\pi)^{-2} \int dt e^{ip^0t} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} A^\mu(\mathbf{x}) \\ &= (2\pi)^{\frac{1}{2}} \hat{A}^\mu(\mathbf{p}) \delta(p^0), \end{aligned} \quad (4.103)$$

encontramos

$$\begin{aligned} S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) &= -\frac{ie}{\sqrt{2\pi}} u_s^\dagger(\mathbf{p}) \gamma_\mu u_\sigma(\mathbf{q}) A^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{q}) [1 - \Gamma_p(\beta)] \delta(E_p - E_q) \\ &= M_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) \delta(E_p - E_q), \end{aligned} \quad (4.104)$$

onde denominamos

$$M_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = -\frac{ie}{\sqrt{2\pi}} u_s^\dagger(\mathbf{p}) \gamma_\mu u_\sigma(\mathbf{q}) \hat{A}^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{q}) [1 - \Gamma_p(\beta)]. \quad (4.105)$$

com $\hat{A}^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ a notação para a transformada de Fourier. Com o objetivo de determinar a DCS, calcularemos agora a probabilidade de transição $p_{fi}(\beta)$ entre o estado inicial e o estado final do elétron,

$$\begin{aligned} p_{fi}(\beta) &= \left| \hat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta) \right|^2 \\ &= \sum_{s_1 s_2 \sigma_1 \sigma_2} \int d^3p d^3q d^3p' d^3q' \Phi_{\sigma_1}^*(\mathbf{p}) S_{\sigma_1 s_1}^*(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) \Psi_{s_1}(\mathbf{q}) \times \\ &\quad \times \Phi_{\sigma_2}(\mathbf{p}') S_{s_2 \sigma_2}(\beta; \mathbf{p}', \mathbf{q}') \Psi_{s_2}^*(\mathbf{q}'), \end{aligned} \quad (4.106)$$

que, somada sobre um conjunto completo de estados finais, usando a relação de completeza dos estados finais

$$\sum_f \Psi_{s_1}^f(\mathbf{p}) \Psi_{s_2}^{*f}(\mathbf{p}') = \delta_{s_1 s_2} \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (4.107)$$

fica

$$\begin{aligned} \sum_f p_{fi} &= \sum_{s_1, \sigma_1, \sigma_2} \int d^3p d^3q d^3p' d^3q' S_{\sigma_1 s_1}^*(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) S_{s_1 \sigma_2}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) \Phi_{\sigma_1}^*(\mathbf{q}) \Phi_{\sigma_2}(\mathbf{q}') \\ &= \sum_{s_1, \sigma_1, \sigma_2} \int d^3p d^3q d^3p' d^3q' \left[M_{\sigma_1 s_1}^*(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) \delta(E_p - E_q) \right] \times \\ &\quad \left[M_{s_1 \sigma_2}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}') \delta(E_p - E_{q'}) \right] \Phi_{\sigma_1}^*(\mathbf{q}) \Phi_{\sigma_2}(\mathbf{q}'). \end{aligned} \quad (4.108)$$

Experimentalmente podemos preparar o estado do elétron incidente assumindo que:

$$\Phi_{\sigma_1}(\mathbf{q}) = \delta_{\sigma_1 s_i} \varphi(\mathbf{q}), \quad (4.109)$$

onde s_i é o spin inicial e, supondo que $\varphi(\mathbf{q})$ tem um pico concentrado no momento inicial \mathbf{p}_i , tem-se:

$$\begin{aligned} \sum_f p_{fi} &= \sum_{s_1} \int d^3 p |M_{s_1 s_i}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{p}_i)|^2 \int d^3 q d^3 q' \\ &\times \delta(E_p - E_q) \delta(E_p - E_{q'}) \varphi^*(\mathbf{q}) \varphi(\mathbf{q}'). \end{aligned} \quad (4.110)$$

A integral em p será calculada em coordenadas esféricas. Como a segunda integral em (4.110) depende somente do estado inicial, a chamaremos de $F(|\mathbf{p}|)$. Escrevendo

$$\sum_{s_1} |M_{s_1 s_i}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{p}_i)|^2 \hat{=} f(\beta; \mathbf{p}) = f(\beta; |\mathbf{p}|, \Theta, \varphi), \quad (4.111)$$

temos que

$$\begin{aligned} \int d^3 p f(\mathbf{p}) F(|\mathbf{p}|) &= \int d^2 \Omega f(\beta; |\mathbf{p}_i|, \Theta, \varphi) \times \\ &\int d^3 q d^3 q' d|\mathbf{p}| p^2 \delta(E_p - E_q) \delta(E_p - E_{q'}) \varphi^*(\mathbf{q}) \varphi(\mathbf{q}'). \end{aligned} \quad (4.112)$$

Usando $|\mathbf{p}| d\mathbf{p} = E_p dE_p$, a integral em $|\mathbf{p}|$ pode ser realizada, o que leva a $E_p = E_q \approx E_i$.

Logo,

$$\begin{aligned} \sum_f p_{fi} &= \sum_{s_1} \int d^2 \Omega |M_{s_1 s_i}(\beta; |\mathbf{p}_i|, \Theta, \varphi, \mathbf{p}_i)|^2 E_i |\mathbf{p}_i| \times \\ &\int d^3 q d^3 q' \varphi(\mathbf{q}) \varphi^*(\mathbf{q}) \delta(E_q - E_{q'}). \end{aligned} \quad (4.113)$$

Por meio da representação de Fourier da distribuição δ , ou seja:

$$\delta(E_q - E_{q'}) = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i(E_q - E_{q'})t} dt \quad (4.114)$$

e uso do pacote de onda livre no espaço de configurações

$$\varphi(t, \mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3 q e^{-i(E_q t - \mathbf{q} \cdot \mathbf{x})} \varphi(\mathbf{q}), \quad (4.115)$$

tem-se:

$$\sum_f p_{fi} = (2\pi)^2 E_i |\mathbf{p}_i| \sum_{s_1} \int d^2 \Omega |M_{s_1 s_i}(\beta; |\mathbf{p}_i|, \theta, \varphi, \mathbf{p}_i)|^2 \int |\varphi(t, \mathbf{0})|^2 dt. \quad (4.116)$$

Como o pacote de onda tem momento concentrado no momento inicial, a dispersão no espaço de configurações no decorrer do tempo pode ser negligenciada. O pacote de onda se desloca com velocidade \mathbf{v} sem alterar a sua forma com o tempo

$$\varphi(t, \mathbf{x}) = \varphi_0(\mathbf{x} + \mathbf{v}t). \quad (4.117)$$

Experimentalmente, no processo de espalhamento, não se tem apenas uma partícula incidente mas um feixe de partículas. Sendo assim, é razoável considerar uma média de (4.116) sobre um cilindro de raio R perpendicular a direção do feixe. Daí,

$$\sum_f p_{fi} = \frac{(2\pi)^2}{\pi R^2} E_i |\mathbf{p}_i| \sum_{s_1} \int d^2\Omega |M_{s_1 s_i}|^2 \int_{|x_\perp| \leq R} d^2 x_\perp \int |\varphi_0(\mathbf{x} + \mathbf{v}t)|^2 dt. \quad (4.118)$$

Por sua vez, a seção de choque é definida por

$$\sigma = \lim_{R \rightarrow \infty} \pi R^2 \sum_f p_{fi}(R). \quad (4.119)$$

No limite $R \rightarrow \infty$ e supondo os pacotes de onda φ_0 normalizados, as integrais em (4.118) podem ser realizadas:

$$\int d^2 x_\perp \int |\varphi_0(\mathbf{x} + \mathbf{v}t)|^2 dt = \frac{1}{|\mathbf{v}|} \int d^3 x |\varphi_0|^2 = \frac{1}{|\mathbf{v}|}. \quad (4.120)$$

Sendo a velocidade do elétron incidente dada por:

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{E_i} \Rightarrow |\mathbf{v}| = \frac{|\mathbf{p}_i|}{E_i}, \quad (4.121)$$

e escrevendo $E_i = E = E_f$, tem-se

$$\sigma = (2\pi)^2 E^2 \sum_{s_1} \int d^2\Omega |M_{s_f s_i}(\beta; |\mathbf{p}_f|, \Theta, \varphi, \mathbf{p}_i)|^2, \quad (4.122)$$

que, sem a integração sobre os ângulos, é a seção de choque diferencial

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^2 E^2 |M_{s_f s_i}(\beta; \mathbf{p}_f, \mathbf{p}_i)|^2, \quad (4.123)$$

que, após a substituição de (4.105), fica:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi E^2 \bar{u}_s(\mathbf{p}) \gamma_\mu u_\sigma(\mathbf{q}) \bar{u}_\sigma(\mathbf{q}) \gamma_\nu u_s(\mathbf{p}) e^2 \hat{A}^\mu(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^\nu(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2. \quad (4.124)$$

Assumindo que a polarização de spin não é observada, faremos uma média da seção de choque sobre todos os estados de polarização inicial σ e uma soma sobre os estados finais s . Usando

$$\sum_s u_s(\mathbf{p}) \bar{u}_s(\mathbf{p}) = \frac{\not{p} + m}{2E}, \quad (4.125)$$

a soma sobre os spins podem ser expressas como um traço:

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= 2\pi E^2 \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_s \bar{u}_s(\mathbf{p}) \gamma_{\mu} u_{\sigma}(\mathbf{q}) \bar{u}_{\sigma}(\mathbf{q}) \gamma_{\nu} u_s(\mathbf{p}) e^2 \hat{A}^{\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^{\nu}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2 \\
&= \frac{\pi E}{2} \sum_s \bar{u}_s(\mathbf{p}) \gamma_{\mu} (\not{q} + m) \gamma_{\nu} u_s(\mathbf{p}) e^2 \hat{A}^{\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^{\nu}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2 \\
&= \frac{\pi E}{2} \sum_{\sigma, \theta} \sum_s \Gamma_{\alpha\theta} [u_s(\mathbf{p}) \bar{u}_s(\mathbf{p})]_{\theta\alpha} e^2 \hat{A}^{\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^{\nu}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2 \\
&= \frac{\pi E}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{2E} [\Gamma \cdot (\not{p} + m)]_{\alpha\alpha} e^2 \hat{A}^{\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^{\nu}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2 \\
&= \frac{\pi}{4} Tr[\gamma_{\mu} (\not{q} + m) \gamma_{\nu} (\not{p} + m)] e^2 \hat{A}^{\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^{\nu}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2. \tag{4.126}
\end{aligned}$$

O traço pode ser calculado com o uso das identidades

$$\begin{aligned}
Tr(\gamma_{\mu} \gamma_{\nu}) &= 4g_{\mu\nu} \\
Tr(\gamma_{\mu} \gamma_{\alpha} \gamma_{\nu} \gamma_{\beta}) &= 4(g_{\mu\alpha} g_{\nu\beta} + g_{\alpha\nu} g_{\beta\mu} - g_{\mu\nu} g_{\alpha\beta}), \tag{4.127}
\end{aligned}$$

onde $g_{\mu\nu}$ denota o tensor métrico de Minkowski. Assim,

$$\begin{aligned}
Tr[\gamma_{\mu} (\not{q} + m) \gamma_{\nu} (\not{p} + m)] &= \frac{\pi}{4} Tr[\gamma_{\mu} \not{q} \gamma_{\nu} \not{p} + \gamma_{\mu} \not{q} \gamma_{\nu} m + m \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} \not{p} + \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} m^2] \\
&= \frac{\pi}{4} Tr[\gamma_{\mu} \gamma_{\nu} q^{\alpha} \gamma_{\nu} \gamma_{\beta} p^{\beta} + \gamma_{\mu} \gamma_{\alpha} q^{\alpha} \gamma_{\nu} m + m \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} \gamma_{\alpha} p^{\alpha} + \gamma_{\mu} \gamma_{\nu} m^2] \\
&= \frac{\pi}{4} [4(g_{\mu\alpha} g_{\nu\beta} + g_{\alpha\nu} g_{\beta\mu} - g_{\mu\nu} g_{\alpha\beta}) q^{\alpha} p^{\beta} + 4g_{\mu\nu} m^2] \\
&= \pi [q^{\mu} p^{\nu} + q^{\nu} p^{\mu} - g^{\mu\nu} (q \cdot p - m^2)], \tag{4.128}
\end{aligned}$$

que nos leva a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \pi [q^{\mu} p^{\nu} + q^{\nu} p^{\mu} - g^{\mu\nu} (q \cdot p - m^2)] e^2 \hat{A}^{\mu}(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^{\nu}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2. \tag{4.129}$$

Considerando o potencial coulombiano $\hat{A}^{\mu} = (A^0, \mathbf{0})$,

$$A^0(\mathbf{x}) = -\frac{Ze}{|\mathbf{x}|} \tag{4.130}$$

$$\hat{A}^0(\mathbf{p}) = -\frac{\sqrt{2} Ze}{\pi \mathbf{p}^2}, \tag{4.131}$$

temos

$$\begin{aligned}
\frac{d\sigma}{d\Omega} &= 2Z^2 e^4 [q^0 p^0 + q^0 p^0 - g^{00} (q \cdot p - m^2)] \frac{1}{(\mathbf{q} - \mathbf{p})^2} \frac{1}{(\mathbf{p} - \mathbf{q})^2} [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2 \\
&= 2Z^2 e^4 [E^2 + m^2 + \mathbf{q} \cdot \mathbf{p}] \frac{1}{(\mathbf{q} - \mathbf{p})^4} [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2. \tag{4.132}
\end{aligned}$$

Seja α o ângulo entre \mathbf{q} e \mathbf{p} ; em virtude de $|\mathbf{q}| = |\mathbf{p}|$, encontramos:

$$\begin{aligned} (\mathbf{q} - \mathbf{p})^2 &= \mathbf{q}^2 + \mathbf{p}^2 - 2\mathbf{q}\cdot\mathbf{p} \\ &= 2|\mathbf{p}|^2(1 - \cos \alpha) \\ &= 4|\mathbf{p}|^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}. \end{aligned} \quad (4.133)$$

Por outro lado, substituindo

$$E^2 = |\mathbf{p}|^2 + m^2 \quad e \quad \mathbf{q}\cdot\mathbf{p} = |\mathbf{p}|^2 \cos \alpha \quad (4.134)$$

no numerador da expressão para a DCS, vem

$$\begin{aligned} 2Z^2 e^4 (E^2 + m^2 + \mathbf{q}\cdot\mathbf{p}) &= 2Z^2 e^4 (E^2 + E^2 - |\mathbf{p}|^2 + |\mathbf{p}|^2 \cos \alpha) \\ &= 4Z^2 e^4 E^2 \left(1 - \frac{|\mathbf{p}|^2}{E^2} \sin^2 \frac{\alpha}{2}\right). \end{aligned} \quad (4.135)$$

Então, após a substituição de (4.133) e (4.135) em (4.132), temos

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2})}{4\gamma^4 E^2 \text{sen}^4 \frac{\alpha}{2}} [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2, \quad (4.136)$$

onde $\gamma^2 = \frac{|\mathbf{p}|^2}{E^2} = \mathbf{v}^2$ (para $c=1$). Temos que, à temperatura zero $\Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)$ também é zero, e a DCS (4.136) se reduz a

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2})}{4\gamma^4 E^2 \text{sen}^4 \frac{\alpha}{2}}, \quad (4.137)$$

que é a seção de choque de Mott. Portanto à DCS (4.136) corresponde a seção de choque de Mott à temperatura finita (térmica); nós a denominamos Mott térmica.

No limite não relativístico, $\gamma \ll 1$, (4.136) torna-se

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4m^2 v^4 \text{sen}^4 \frac{\alpha}{2}} [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2, \quad (4.138)$$

para $\Gamma_{\mathbf{p}}(\beta) = 0$ recuperamos a seção de choque de Rutherford. Desta forma, a DCS (4.138) pode ser considerada seção de choque de Rutherford à temperatura finita.

Por outro lado, se consideramos em lugar de (4.130), a expressão

$$A^0(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}), \quad (4.139)$$

onde

$$\nabla^2 \varphi = 4\pi \rho(\mathbf{x}), \quad (4.140)$$

ou seja,

$$\varphi(\mathbf{x}) = - \int d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (4.141)$$

com a densidade de carga satisfazendo a

$$\int d^3x \rho(\mathbf{x}) = 1 \quad (4.142)$$

teremos, em (4.131)

$$\hat{A}^0(\mathbf{p}) = - \frac{\sqrt{2} f(\mathbf{p})}{\pi \mathbf{p}^2} \quad (4.143)$$

onde

$$f(\mathbf{p}) \hat{=} \int d^3x e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \rho(\mathbf{x}), \quad (4.144)$$

é o fator de forma que caracteriza a distribuição de carga. Segue então de (4.129), com os desenvolvimentos acima apresentados que, em lugar de (4.132), teremos:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2Z^2 e^4 [E^2 + m^2 + \mathbf{q}\cdot\mathbf{p}] \frac{|f(\mathbf{p} - \mathbf{q})|^2}{(\mathbf{q} - \mathbf{p})^4} [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2. \quad (4.145)$$

e daí

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2})}{4\gamma^4 E^2 \text{sen}^4 \frac{\alpha}{2}} |f(\mathbf{p} - \mathbf{q})|^2 [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2, \quad (4.146)$$

que é a seção de choque diferencial incluindo o fator de forma relativo à distribuição de carga e o fator térmico. Nota-se dessa expressão que o fator de forma depende da distribuição adotada sendo, para uma fonte puntiforme, substituído por $q\delta(x - x')$, em que para um núcleo atômico $q = Ze$.

Nossos resultados (4.136) e (4.146) mostram que a DCS térmica contém um fator multiplicativo dependente da temperatura, que aqui denominamos de fator térmico, dado por:

$$[1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2 = \left[1 - 2(e^{\frac{1}{k_B T} E} + 1)^{-1} + (e^{\frac{1}{k_B T} E} + 1)^{-2} \right]^2. \quad (4.147)$$

Nas figuras (4.1) e (4.2) encontram-se os gráficos do fator térmico $[1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2$ e do fator $\Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)$ em função da temperatura (T(K)) para a energia do elétron incidente de 10 eV, 1.000 eV, 10.000 eV e 100.000 eV.

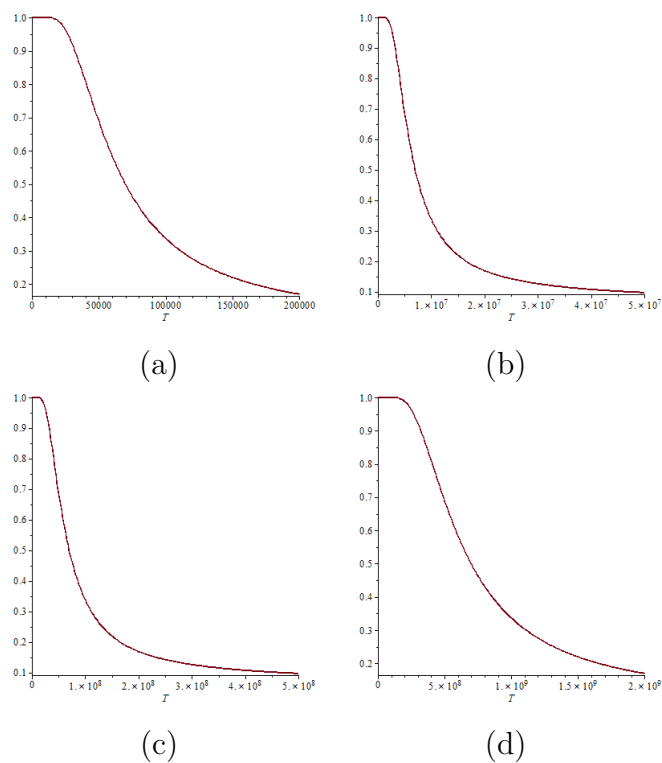


Figura 4.1: Fator térmico $[1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2$ em função da temperatura ($T(K)$) para a energia do elétron incidente de (a) 10 eV, (b) 1.000 eV, (c) 10.000 eV e (d) 100.000 eV

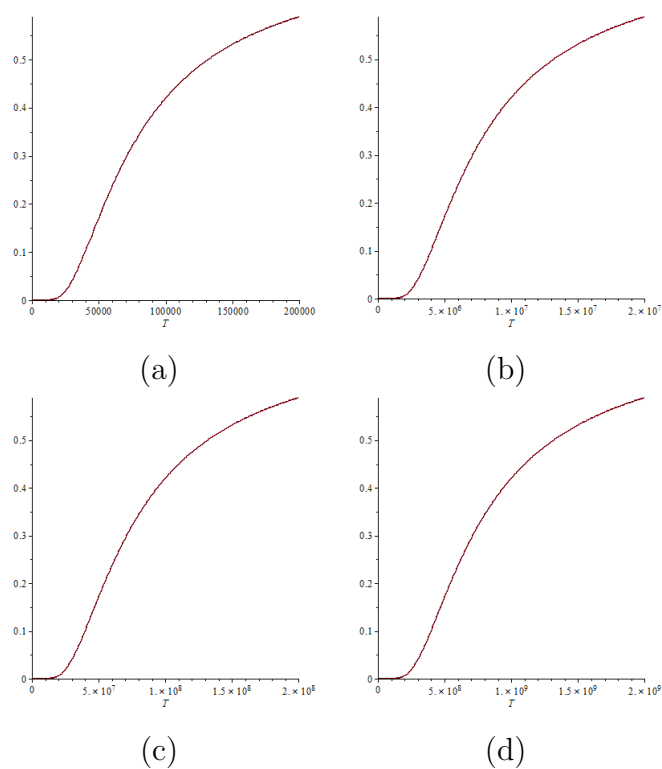


Figura 4.2: Fator $\Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)$ em função da temperatura ($T(K)$) para a energia do elétron incidente de (a) 10 eV, (b) 1.000 eV, (c) 10.000 eV e (d) 100.000 eV

Nos gráficos (4.1), nota-se que para baixas temperaturas o fator térmico possui um comportamento praticamente constante (próximo de 1) e, com o crescimento da temperatura, ele decai exponencialmente tendendo para um valor constante de 0,0625 (1/16), que independe da energia do elétron incidente; pela expressão (4.147) esse é o comportamento esperado. Além disso, para T igual a 0K o fator térmico é igual a um e recaímos na DCS sem temperatura. Notamos ainda, que a influência da temperatura será mais significativa (percebida) para valores muito elevados de temperatura (4.2). Para baixas energias do elétron incidente, os efeitos da temperatura serão perceptíveis para valores menores de temperatura, quando comparado ao caso de energias mais altas; porém, esses valores ainda serão elevados, devido à presença da constante de Boltzmann que é da ordem de 10^{-5} eV/K.

Na figura (4.3), temos dois perfis do gráfico do fator térmico, em função da temperatura e da energia do elétron incidente, em que consideramos a constante de Boltzmann igual a um para avaliarmos o comportamento qualitativo da evolução do fator térmico e, conseqüentemente da DCS quando a temperatura for tal que influencie nos resultados.

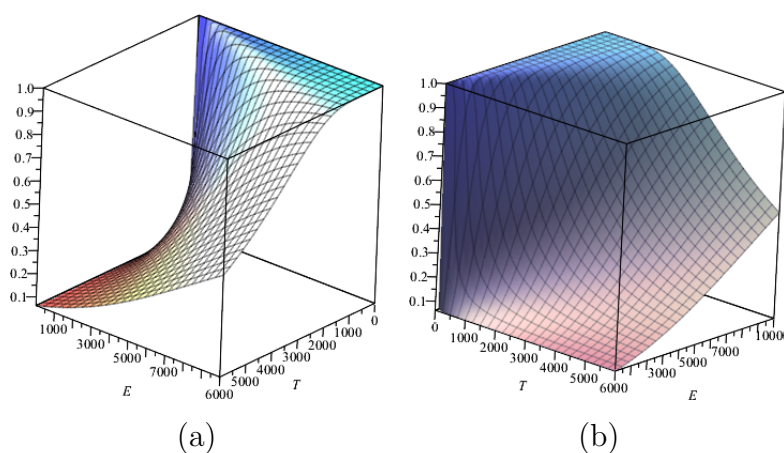


Figura 4.3: Perfis do gráfico do fator térmico $[1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2$ em função da temperatura T(K) e da energia do elétron incidente E(eV).

Na figura (4.4), temos gráficos para a DCS de Mott térmica para $Z = 1$ (Hidrogênio), $Z=18$ (Argônio) e $Z=54$ (Xenônio) e o elétron incidente com energia de 5.000 eV, 10.000 eV e 100.000 eV, o que corresponde aproximadamente às velocidades de 13, 9%, 20% e 50% da velocidade da luz , respectivamente.

Notamos que, para todos os casos e todas as energias, a DCS Mott térmica decai com o aumento da temperatura, acompanhando o perfil do fator térmico. Nesta aproximação, a

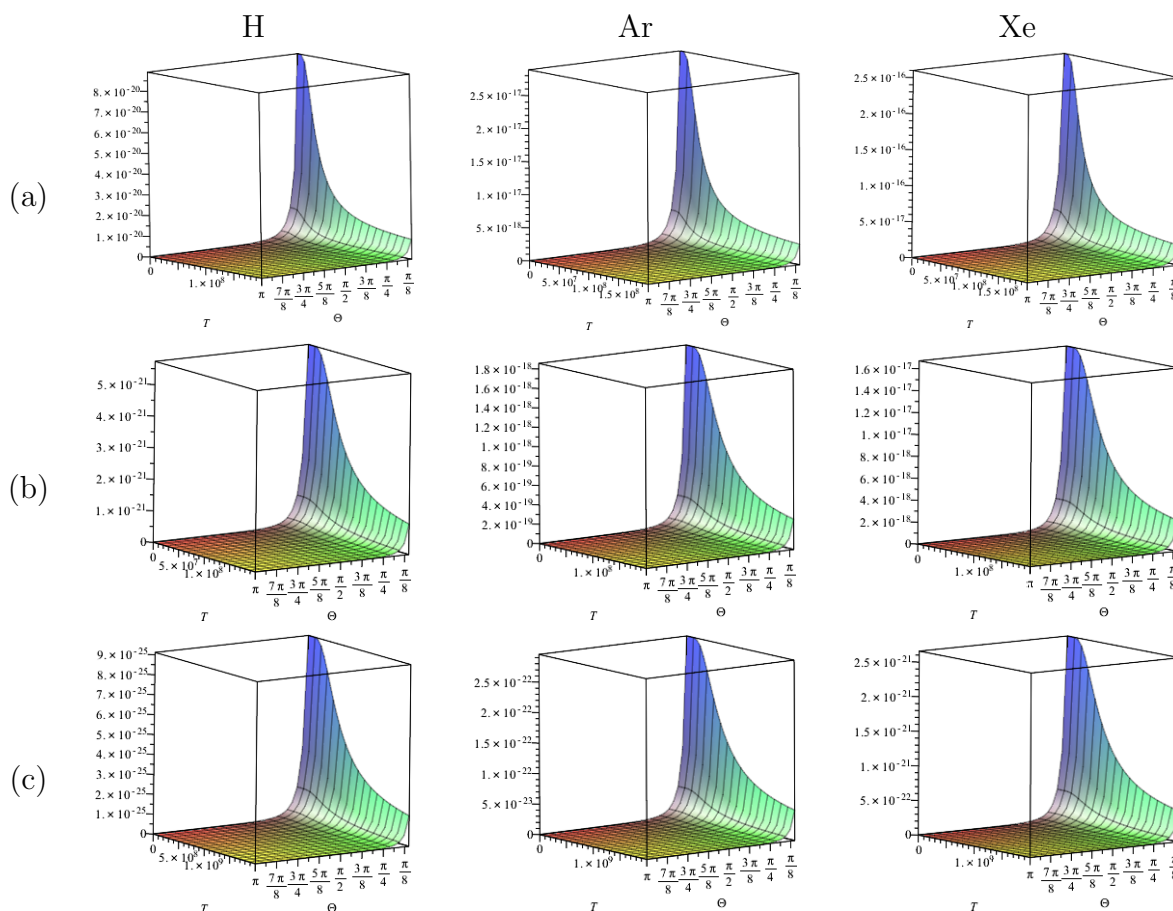


Figura 4.4: DCS de Mott térmica (m^2/sr) em função da temperatura $T(K)$ e do ângulo de espalhamento $\theta(\text{radianos})$ para o espalhamento elétron com energia incidente de (a) 5.000 eV, (b) 10.000 eV e (c) 100.000 eV pelos átomos de H, Ar e Xe.

influência da temperatura é a mesma para qualquer átomo, até porque o fator de correção independe do número atômico Z . A mudança na DCS para uma mesma energia e diferentes números atômicos é que ela aumenta de acordo com o Z ; isso também pode ser visto notando que, na expressão (4.136), temos o fator Z^2 . Verificamos ainda, que o perfil da curva não muda com a mudança de energia; qualitativamente se mantém no mesmo formato.

A DCS de Mott térmica que obtivemos em (4.137) é para o espalhamento do elétron incidente sem polarização por um núcleo pontual (sem estrutura) de carga Ze .

Com o objetivo de tratar o espalhamento de elétrons por um átomo com uma melhor descrição da carga atômica uma das propostas na literatura [28, 56] é substituir o potencial coulombiano (4.131) pelo potencial de Yukawa (Apêndice E); neste caso em lugar de (4.130)

e (4.131) temos:

$$A^0(\mathbf{x}) = -\frac{Ze}{|\mathbf{x}|}e^{-\mu|\mathbf{x}|} \quad (4.148)$$

$$\hat{A}^0(\mathbf{p}) = -\frac{4\pi}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{Ze}{(\mu^2 + \mathbf{p}^2)}, \quad (4.149)$$

onde μ é um parâmetro relacionado ao alcance do potencial. Com essa mudança nós obtemos, seguindo de (4.132) a (4.135), que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4Z^2e^4E^2(1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2})}{[4\gamma^2E^2 \text{sen}^2 \frac{\alpha}{2} + \mu^2]^2} [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2. \quad (4.150)$$

Podemos notar, que para $\mu = 0$ a expressão (4.150) coincide com (4.136), o que era esperado, uma vez que para $\mu = 0$, o potencial de Yukawa reduz-se ao potencial de Coulomb.

Uma descrição usada recentemente por Serbo et al [34], para o potencial gerado por um átomo, é aproximá-lo por uma soma de termos de potencial de Yukawa, ou seja, considerar [32,33]:

$$U_{at} = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{x}|} \sum_{i=1}^3 A_i e^{-\mu_i |\mathbf{x}|}, \quad (4.151)$$

em que A_i e μ_i são parâmetros determinados por um ajuste da função de blindagem proposta por Salvat et al [32],

$$\phi(r) = \sum_{i=1}^3 A_i e^{-\mu_i r} \quad (4.152)$$

considerando cálculos auto-consistentes de Dirac-Hartree-Fock-Slater (DHFS) realizados a partir da equação de Dirac. Em consequência, essa função de blindagem inclui efeitos relativísticos que distorcem a nuvem eletrônica do átomo e também inclui o potencial nuclear blindado, através do modelo DHFS. A partir desta função Salvat et al determinam o potencial atômico,

$$U_{at} = -\frac{Ze}{r} + \int_{r>} \frac{\rho(r')}{r_{>}} d^3r = -\frac{Ze}{r} \varphi(r) \quad (4.153)$$

em que Ze é a carga nuclear e $r_{>}$ é maior que r e r' ; a densidade de carga eletrônica

$$\rho(r) = -\frac{Ze}{4\pi} \nabla^2 \varphi'' = \frac{Ze}{r} \sum_1^3 A_i \mu_i^2 e^{-\mu_i r} \quad (4.154)$$

e o fator de forma

$$\begin{aligned} F(q) &= \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{qr} \rho(r) 4\pi r^2 dr \\ &= \sum_{i=1}^3 A_i \frac{\mu_i^2}{\mu_i^2 + q^2}, \end{aligned} \quad (4.155)$$

em que $q = 2psen(\frac{\alpha}{2})$.

Usando a equação (4.151) em substituição ao potencial de Coulomb (4.130) e seguindo o desenvolvimento de (4.131) a (4.135), nós obtemos o seguinte resultado para a DCS

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{ik} \frac{4Z^2 e^4 E^2 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}) A_i A_k}{[4\gamma^2 E^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} + \mu_i^2][4\gamma^2 E^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} + \mu_k^2]} [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2, \quad (4.156)$$

que é a nossa DCS e a denominamos de Mott-Yukawa térmica.

Um fato a notar é que nossa expressão (4.156) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= 4Z^2 e^4 E^2 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}) \left[\sum_i \frac{A_i}{(2\gamma E \sin \frac{\alpha}{2})^2 + \mu_i^2} \right]^2 [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2 \\ &= 4Z^2 e^4 E^2 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}) \left[\sum_i \frac{A_i}{q^2 + \mu_i^2} \right]^2 [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2. \end{aligned} \quad (4.157)$$

Considerando então o resultado citado por Motz, Olsen e Koch [57], ou seja, que para o potencial (4.151), a expressão $\sum_{i=1}^3 \frac{A_i}{\mu_i^2 + q^2}$ corresponde ao termo $\frac{1 - F_0(q)}{q^2}$ com $F_0(q)$ um fator a determinar, a expressão (4.157) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= 4Z^2 e^4 E^2 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2}) \left[\frac{1 - F_0(q)}{q^2} \right]^2 [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2 \\ &= \frac{4Z^2 e^4 E^2 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2})}{q^4} [1 - F_0(q)]^2 [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2, \end{aligned} \quad (4.158)$$

que é nossa expressão da seção de choque diferencial térmica com fator de forma.

A relação (4.158) com o fator $F_0(q)$ sendo dado pela expressão de Salvat (4.155) resulta em:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{4Z^2 e^4 E^2 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2})}{q^4} \left[1 - \sum_1^3 A_i \frac{\mu_i^2}{\mu_i^2 + q^2} \right]^2 [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2 \\ &= \frac{Z^2 e^4 (1 - \gamma^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2})}{4\gamma^4 E^2 \sin^4 \frac{\alpha}{2}} \left[1 - \sum_1^3 A_i \frac{\mu_i^2}{\mu_i^2 + q^2} \right]^2 [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)]^2; \end{aligned} \quad (4.159)$$

nós a denominamos de DCS de Mott-Salvat térmica.

Nossa expressão (4.156) e a expressão da DCS de Mott-Salvat- térmica permitem determinar, dada uma temperatura, a seção de choque diferencial do espalhamento de elétrons de determinada energia por átomos. Neste contexto, a figura (4.5) e a tabela (4.1) mostram para a temperatura de 0K as DCS para o espalhamento do elétron incidente de energia de 5.000 eV para átomos Ar e Xe cujos parâmetros são dados no Apêndice E.

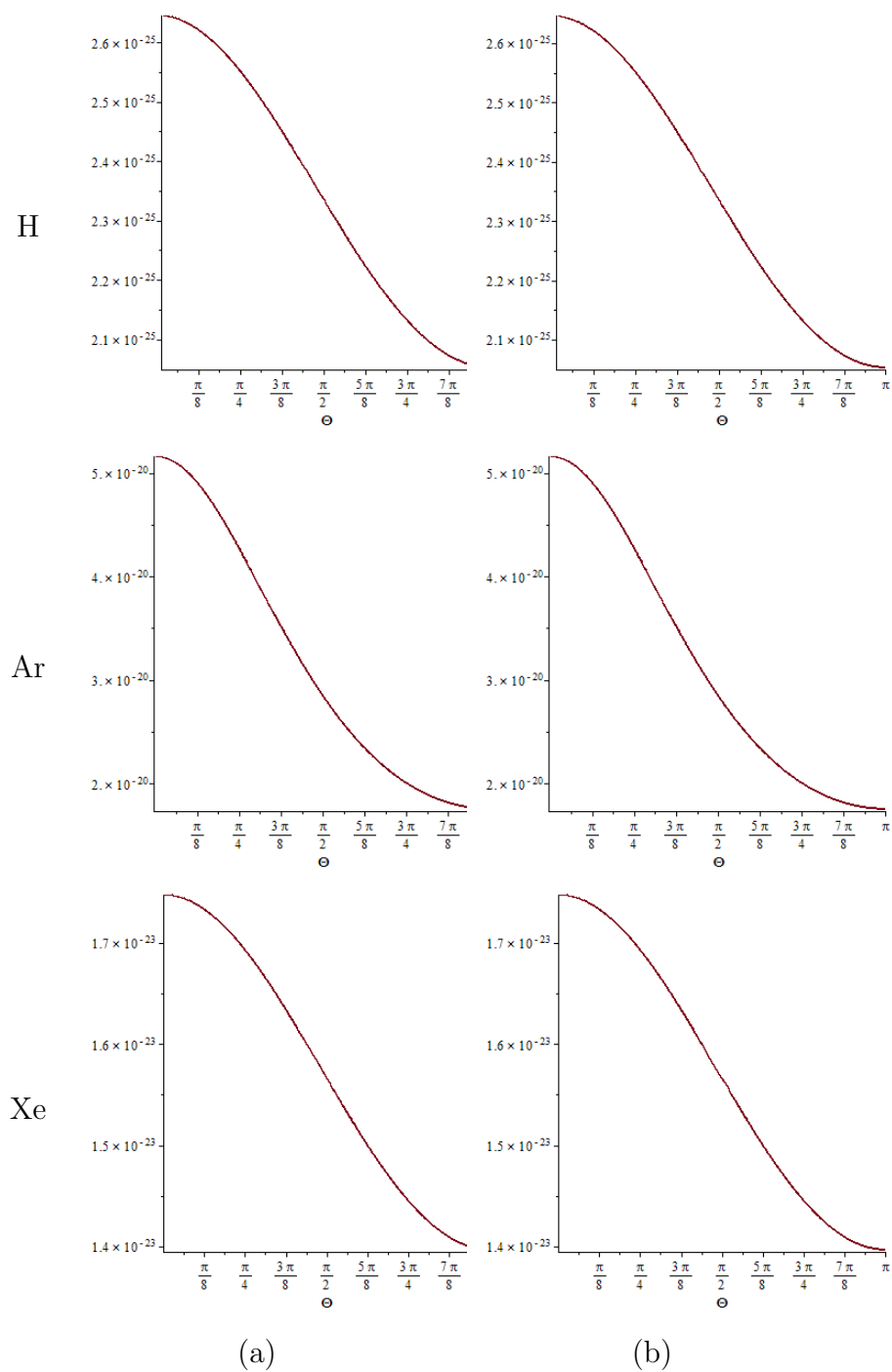


Figura 4.5: (a) DCS de Mott-Yukawa térmica (m^2/sr) e (b) DCS de Mott-Salvat térmica (m^2/sr) para o espalhamento elétron com energia incidente de 5.000 eV pelos átomos de H, Ar e Xe para $T=0K$.

	DCS Mott-Yukawa	DCS Mott-Yukawa	DCS Mott-Yukawa	DCS Mott-Salvat	DCS Mott-Salvat	DCS Mott-Salvat
	$m^2/sr(10^{-25})$	$m^2/sr(10^{-23})$	$m^2/sr(10^{-20})$	$m^2/sr(10^{-25})$	$m^2/sr(10^{-23})$	$m^2/sr(10^{-20})$
Ângulo (°)	H	Ar	Xe	H	Ar	Xe
5	2,42082	1,616462643	3,3266003362	2,420845472	1,616462703	3,326600346
10	2,09674	1,423160264	1,883894273	2,096753298	1,423160284	1,883894276
20	2,45882	1,638800688	3,571460153	2,458841060	1,638800710	3,571460170
30	2,38174	1,593427554	3,095923849	2,381773810	1,593427574	3,095923851
40	2,14432	1,451856550	2,041165846	2,144315195	1,451856618	2,041165847
50	2,63430	1,741129765	5,044478512	2,634251885	1,741124402	5,044478516
60	2,06582	1,404445257	1,789024947	2,065827760	1,404445218	1,789024950
70	2,52873	1,679722300	4,083043162	2,528746765	1,679722050	4,083043180
80	2,30331	1,546945276	2,688312680	2,303307056	1,546945347	2,688312683
90	2,20588	1,488825804	2,267522476	2,205893318	1,488825831	2,267522475
100	2,60130	1,721975200	4,715412555	2,601278217	1,721975304	4,715412594
110	2,05321	1,396790488	1,751844450	2,053202247	1,396790461	1,751844450
120	2,58589	1,713038453	4,571528624	2,585944696	1,713038802	4,571528637
130	2,22890	1,502609184	2,359586648	2,228916411	1,502609054	2,359586654
140	2,27780	1,531771066	2,569832908	2,277798779	1,531771090	2,569832911
150	2,54944	1,691819938	4,252186473	2,549452856	1,691819914	4,252186488
160	2,05954	1,400629272	1,770375877	2,059531297	1,400629336	1,770375877
170	2,62559	1,736083771	4,954925644	2,625728570	1,736085644	4,954925678

Tabela 4.1 - DCS de Mott-Yukawa e de Mott-Salvat para e^- -H, e^- -Ar e e^- -Xe para T=0K e energia de 5.000 eV.

Como se observa os resultados obtidos pela nossa expressão (4.156) para a faixa angular estudada, concordam até as primeiras casas decimais com os resultados determinados usando a DCS de Mott-Salvat-térmica (4.159), mostrando a coerência de nosso desenvolvimento.

Com o objetivo de comparar os gráficos (4.4) com os determinados usando nossa expressão (4.156), apresentamos na figura (4.6) os gráficos dessa DCS para as energias do elétron incidente de 5.000 eV e 10.000 eV para os átomos de Ar e Xe, sendo os parâmetros utilizados os dispostos na tabela (4.2).

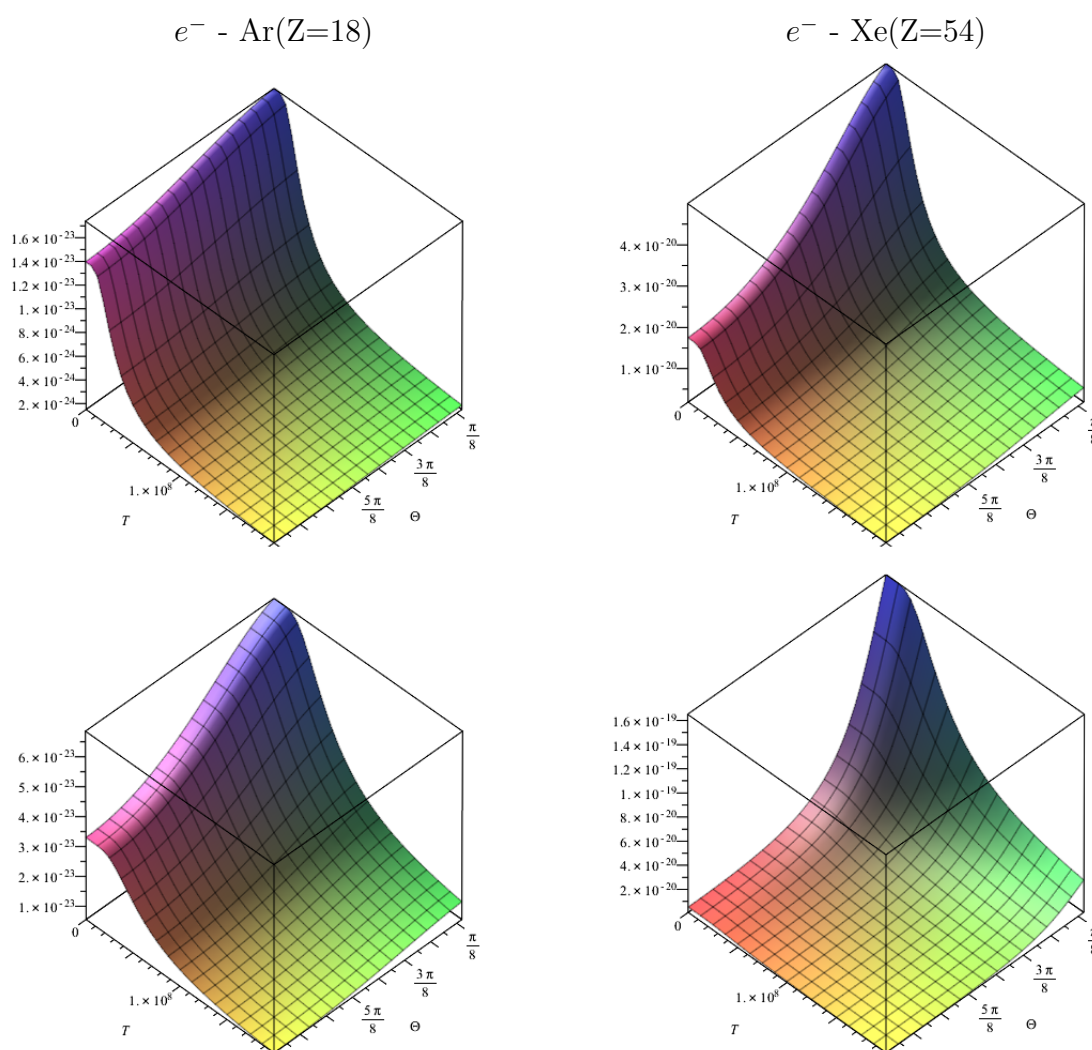


Figura 4.6: DCS de Mott-Yukawa térmica (m^2/sr) em função da temperatura $T(K)$ e do ângulo de espalhamento $\theta(radianos)$ para os processos $e^- - Ar$ e $e^- - Xe$ e energia de 5.000 eV e 10.000 eV

Observamos pelas figuras (4.6) e (4.4) que, qualitativamente e quantitativamente, a DCS sofreu mudanças com o uso do potencial do tipo Yukawa e inclusão do fator de forma; nos resultados da figura (4.4) tínhamos DCS de um elétron espalhado por um núcleo “nu”,

Elemento	A_1	A_2	A_3	$\mu_1(a_0^{-1})$	$\mu_2(a_0^{-1})$	$\mu_3(a_0^{-1})$
Ar	2,1912	-2,2852	1.094	$1,675 \times 10^{-24}$	$1,380 \times 10^{-24}$	$6,175 \times 10^{-25}$
Xe	0.4451	0.5549	0	$1,344 \times 10^{-25}$	$1,676 \times 10^{-25}$	0

Tabela 4.2 - Parâmetros usados na determinação das DCS de Mott-Yukawa térmica.

agora temos um elétron espalhado por um átomo caracterizado pela sua carga nuclear e pela distribuição eletrônica de carga. Aqui, como dito, utilizamos potenciais do tipo estático, ou seja, a distribuição de carga do átomo é considerada congelada. Sabe-se [58] que, para projéteis com energia cinética maior do que 5 keV, em geral as colisões podem ser descritas por meio da aproximação estática; porém, no caso da partícula incidente ser um elétron, a inclusão de um potencial de troca pode aprimorar os resultados obtidos com a interação eletrostática. As DCS calculadas a partir do campo estático ou da aproximação estático-troca em geral concordam bem com os dados experimentais disponíveis nesta faixa de energia [58]. Quando a energia cinética da partícula incidente diminui abaixo de 5 keV, a precisão das aproximações estático e estático-troca diminui progressivamente, sendo necessária a inclusão de efeitos de correlação e polarização, principalmente para átomos mais pesados. Quanto à temperatura temos, analisando o perfil das curvas no plano DCS x T que a influência da temperatura permanece a mesma; isso era esperado pois modificamos o modelo de descrição do potencial, e este modelo independe da temperatura.

O potencial (4.151) também foi utilizado por Serbo et al [34] para determinar a seção de choque de Mott para elétrons de vórtices relativísticos por átomos. Feixes de elétrons de vórtices (torcidos) são feixes de elétrons carregando um momento angular orbital (OAM-orbital angular momentum), cuja projeção sobre sua direção de propagação é diferente de zero; esses elétrons foram previstos teoricamente por Bliokh et al em 2007 [59] e produzidos experimentalmente a partir de 2010 [60, 61, 62]. Atualmente os feixes de elétrons de vórtices atraem um interesse considerável tanto do lado experimental quanto do lado teórico [63, 64, 65], pois esses feixes abrem novas possibilidades na investigação de propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas da matéria.

No trabalho de Serbo et al. a análise é feita considerando a estrutura relativística de espalhamento. Assim a seção de choque de Mott é expressa em termos de amplitude de espalhamento,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2p}{j} \left| f_{\lambda\lambda'}(p, p') \right|^2, \quad (4.160)$$

em que j é a densidade de corrente e $f_{\lambda\lambda'}(p, p')$ é a amplitude de espalhamento,

$$f_{\lambda\lambda'}(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = -\frac{1}{4\pi} \int \psi_{\mathbf{p}'\lambda'}^\dagger(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{p}\lambda}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (4.161)$$

Assumindo que os elétrons torcidos incidentes se propagam ao longo do eixo de quantização (z) e têm valores bem definidos de (i) momento linear longitudinal p_z , (ii) módulo do momento transversal $|\mathbf{p}_\perp| = \tau$, e (iii) módulo da projeção do momento angular total, $J_z = m$, a função de onda desses elétrons é descrita como

$$\psi_{\tau m p_z \lambda} = \int \frac{d^2\mathbf{p}_\perp}{(2\pi)^2} a_{\tau m}(\mathbf{p}_\perp) u_{\mathbf{p}\lambda} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}; \quad (4.162)$$

esse estado de Bessel tem energia definida $\epsilon = (\tau^2 + p_z^2 + m^2)^{1/2}$, helicidade λ e pode ser considerado como uma superposição coerente das ondas planas $u_{\mathbf{p}\lambda} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}$, ponderadas com a amplitude

$$a_{\tau m}(\mathbf{p}_\perp) = (-i)^m e^{im\varphi_p} \sqrt{\frac{2\pi}{\tau}} \delta(|\mathbf{p}_\perp - \tau|), \quad (4.163)$$

onde os momentos lineares dessas componentes de onda plana $p = (p_\perp, p_z) = (\cos\varphi_p, \sin\varphi_p, p_z)$, formam a superfície de um cone com o ângulo de abertura θ_p , figura (4.7), onde $\theta_p = \theta_0$.

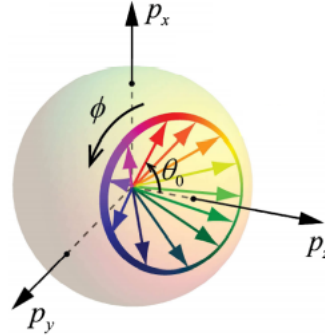


Figura 4.7: Superposição de ondas planas monoenergéticas ($p=\text{cte}$) formando um ângulo fixo θ_0 com o eixo z [66].

Até o presente momento os estudos envolvendo elétrons torcidos, relativísticos ou não, não levaram em consideração a temperatura. Contudo, a seção de choque térmica para feixe de elétrons de vórtices relativísticos, seguindo o nosso desenvolvimento, pode ser obtida substituindo em (4.82) a expressão (4.162) para as funções de estado dos elétrons incidentes e emergentes, e utilizando (4.151) como potencial de interação, sendo esse um tema que pretendemos abordar posteriormente.

De maneira geral, pelos nossos resultados nota-se que, para temperatura tendendo a infinito, a DCS térmica obtida através do formalismo da DCT é menor que a DCS a temperatura zero:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\beta} = \frac{1}{16} \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{T=0} \quad (4.164)$$

Como a seção de choque total é a integral da DCS sobre o ângulo sólido, e o fator térmico não depende do ângulo de espalhamento para essa seção de choque, o mesmo comportamento é esperado quando a temperatura tende a infinito, ou seja, a seção de choque total térmica será menor que a seção de choque total à temperatura zero, resultado que concorda com o obtido por Araujo [67] na análise do espalhamento elétron - múon na Eletrodinâmica Quântica com temperatura finita.

4.3.2 Espalhamento de Pósitron por Átomo

Para o espalhamento de um pósitron por um potencial externo, à temperatura finita, procederemos de forma similar ao caso do elétron. Portanto, devemos calcular o elemento de matriz de espalhamento

$$\widehat{\mathbf{S}}_{f_i}(\beta) = \widehat{C} \langle 0(\beta) | \bar{D}_2 e^{\bar{D}(\tau - \mathbf{A}_2) \bar{D}^\dagger} \bar{D}_1^\dagger | 0(\beta) \rangle, \quad (4.165)$$

em que,

$$\bar{D}^\dagger \hat{=} \begin{pmatrix} d^\dagger \\ \sigma^* \tilde{d} \end{pmatrix} \quad ; \quad \bar{B} \hat{=} \begin{pmatrix} d & \sigma \tilde{d}^\dagger \end{pmatrix} \quad (4.166)$$

e

$$A_2 = \begin{pmatrix} A_3 & 0 \\ 0 & \tilde{A}_3 \end{pmatrix}. \quad (4.167)$$

Escrevendo o vácuo térmico em termos do vácuo duplicado, com o auxílio da TB, temos

$$\widehat{\mathbf{S}}_{f_i}(\beta) = \widehat{C} \langle\langle 0 | e^{-iG(\theta)} \bar{D}_2 e^{iG(\theta)} e^{-iG(\theta)} e^{\bar{D}(\tau_3 - A_3) \bar{D}^\dagger} e^{iG(\theta)} e^{-iG(\theta)} \bar{D}_1^\dagger e^{iG(\theta)} | 0 \rangle\rangle. \quad (4.168)$$

A TB para cada operador em (4.168) é calculada, obtendo-se

$$\begin{aligned} e^{-iG(\theta)} \bar{D}_2 e^{iG(\theta)} &= \begin{pmatrix} d_2(\cos \theta^{d_2} \Psi) & \sigma \tilde{d}_2^\dagger(\cos \theta^{d_2} \tilde{\Psi}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} d_\theta & \sigma \tilde{d}_\theta^\dagger \end{pmatrix} \hat{=} \bar{D}_\theta, \end{aligned} \quad (4.169)$$

$$e^{-iG(\theta)} \bar{D}_1^\dagger e^{iG(\theta)} = \begin{pmatrix} d_1^\dagger(\cos \theta^{d_1} \Phi) \\ \sigma^* \tilde{d}_1(\cos \theta^{d_1} \tilde{\Phi}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_\theta^\dagger \\ \sigma^* \tilde{d}_\theta \end{pmatrix} \hat{=} \bar{D}_\theta^\dagger \quad (4.170)$$

e

$$e^{-iG(\theta)} : e^{\bar{D}^\dagger(\tau_3 - A_3)\bar{D}} : e^{iG(\theta)} =: e^{d(A_3)_\theta d^\dagger} e^{\bar{d}^\dagger(\bar{A}_3)_\theta \bar{d}} \quad (4.171)$$

com

$$(A_3)_\theta = (\bar{A}_3)_{\theta_1} + (\bar{\bar{A}}_3)_{\theta_2} = \cos(\theta_{\mathbf{p}})\bar{A}_3(\mathbf{p}, \mathbf{q})\cos(\theta_{\mathbf{q}}) + \sin\theta_{\mathbf{p}}\bar{\bar{A}}_3(\mathbf{p}, \mathbf{q})\sin\theta_{\mathbf{q}} \quad (4.172)$$

e

$$(\bar{\bar{A}}_3)_\theta = (\bar{A}_3)_{\theta_2} + (\bar{\bar{A}}_1)_{\theta_1} = \sin(\theta_{\mathbf{p}})\bar{A}_3(\mathbf{p}, \mathbf{q})\sin(\theta_{\mathbf{q}}) + \cos\theta_{\mathbf{p}}\bar{\bar{A}}_3(\mathbf{p}, \mathbf{q})\cos\theta_{\mathbf{q}} \quad (4.173)$$

sendo

$$\bar{A}_3 = 1 - A_3 \quad (4.174)$$

e

$$\bar{\bar{A}}_3 = -1 - \bar{A}_3. \quad (4.175)$$

Desta forma,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta) &= \hat{C} \ll 0 | \bar{D}_\theta : e^{d(A_3)_\theta d^\dagger} e^{\bar{d}^\dagger(\bar{A}_3)_\theta \bar{d}} : \bar{D}_\theta^\dagger | 0 \gg \\ &= \hat{C} \ll 0 | d_\theta : e^{d(A_3)_\theta d^\dagger} e^{\bar{d}^\dagger(\bar{A}_3)_\theta \bar{d}} : d_\theta^\dagger | 0 \gg \\ &= \hat{C} \ll 0 | d_\theta : e^{d(A_3)_\theta d^\dagger} : d_\theta^\dagger | 0 \gg \\ &= \hat{C} \langle 0 | d_\theta : e^{d(A_3)_\theta d^\dagger} : d_\theta^\dagger | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.176)$$

Por outro lado,

$$d_\theta : e^{d(A_3)_\theta d^\dagger} := e^{d(A_3)_\theta d^\dagger} : d[(1 - (A_3)_\theta) \cos \theta^{d_2} \Psi], \quad (4.177)$$

e portanto:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}_{fi}(\beta) &= \hat{C} \langle 0 | : e^{d(A_3)_\theta d^\dagger} : d[(1 - (A_3)_\theta) \cos \theta^{d_2} \Psi] d_\theta^\dagger | 0 \rangle \\ &= \hat{C} \langle 0 | d[(1 - (A_3)_\theta) \cos \theta^{d_2} \Psi] d_\theta^\dagger | 0 \rangle \\ &= \hat{C} \langle (1 - (A_3)_\theta) \cos \theta^{d_2} \Psi | \cos \theta^{d_1} | \Phi \rangle \\ &= \hat{C}(\Psi, \cos \theta^{d_2} [1 - (A_3)_\theta] \cos \theta^{d_1} \Phi) \\ &= \hat{C} \int d^3x \Psi^\dagger(\mathbf{x}) [\cos \theta^{d_2} (1 - (A_3)_\theta) \cos \theta^{d_1}] (\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (4.178)$$

Os estados inicial Φ e final Ψ do pósitron são dados por:

$$\Psi(\mathbf{x}) = \Phi(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \sum_s \int d^3p \Phi_s(\mathbf{p}) v_s(\mathbf{p}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{x}} \in \mathcal{H}_-. \quad (4.179)$$

Logo,

$$\hat{S}_{fi} = \sum_{s\sigma} \int d^3p d^3q \Psi_s^*(\mathbf{p}) S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) \Phi_\sigma(\mathbf{q}) \quad (4.180)$$

onde denominamos

$$S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \hat{C}v_s^\dagger(\mathbf{p}) \Lambda(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) v_\sigma(\mathbf{q}) \quad (4.181)$$

com

$$\Lambda(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = [\cos \theta^{d_2} (1 - (A_3)_\theta) \cos \theta^{d_1}] (\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (4.182)$$

Essa última expressão pode ser reescrita, usando a expressão para $(A_3)_\theta$, (4.165), como:

$$\begin{aligned} \Lambda(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) &= A_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos^2(\theta_{\mathbf{p}}) \cos^2(\theta_{\mathbf{q}}) + \tilde{A}_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cos \theta_{\mathbf{p}} \sin \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} \sin \theta_{\mathbf{q}} + \\ &+ [\cos \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} - \cos^2 \theta_{\mathbf{p}} \cos^2 \theta_{\mathbf{q}} + \cos \theta_{\mathbf{p}} \sin \theta_{\mathbf{p}} \cos \theta_{\mathbf{q}} \sin \theta_{\mathbf{q}}] \\ &= A_3 \{1 - \Gamma_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta)\} + \tilde{A}_3 \Gamma'_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta) + \Gamma''_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta), \end{aligned} \quad (4.183)$$

em que as expressões para $\Gamma_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta)$, $\Gamma'_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta)$ e $\Gamma''_{\mathbf{p}\mathbf{q}}(\beta)$ são as mesmas encontradas para o caso do espalhamento de elétrons por um potencial à temperatura finita, descritas na seção anterior pelas expressões (4.90), (4.91) e (4.92) que, para o caso de espalhamento elástico ($E_{\mathbf{p}} = E_{\mathbf{q}}$), reduzem-se às expressões (4.94), (4.95) e (4.96), respectivamente.

Segue, então, que:

$$S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \hat{c}v_s^\dagger(\mathbf{p}) \left\{ A_2 [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}(\beta)] + \tilde{A}_2 \Gamma'_{\mathbf{p}}(\beta) + \Gamma''_{\mathbf{p}}(\beta) \right\} v_\sigma(\mathbf{q}), \quad (4.184)$$

em que (Vide Apêndice D),

$$\begin{aligned} A_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= 2\pi i \sum_n (2\pi)^{-2n} P_-(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4p_1 \dots d^4p_{n-1} \times \\ &\times e\mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^F(p_1) \dots \mathcal{S}^F(p_{n-1}) e\mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_-(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (4.185)$$

e

$$\begin{aligned} \tilde{A}_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= 2\pi i \sum_n (2\pi)^{-2n} P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4p_1 \dots d^4p_{n-1} \times \\ &\times e\mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^{ret}(p_1) \dots \mathcal{S}^{ret}(p_{n-1}) e\mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (4.186)$$

que, para mais baixa ordem da teoria de perturbação, ficam:

$$A_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 2\pi i \sum_n (2\pi)^{-2} P_-(\mathbf{p}) \gamma^0 e\mathcal{A}(p - q) P_-(\mathbf{q}) \quad (4.187)$$

e

$$\tilde{A}_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 2\pi i \sum_n (2\pi)^{-2} P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 e^{\mathcal{A}(p-q)} P_+(\mathbf{q}). \quad (4.188)$$

Como $P_+(\mathbf{q})v_\sigma(\mathbf{q}) = 0$, o termo envolvendo \tilde{A}_3 em $S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q})$ será zero. Considerando $\hat{C} = 1 + O(e^2 A^2) \cong 1$ temos, em primeira ordem:

$$\begin{aligned} S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) &= v_s^\dagger(\mathbf{p}) A_3(\mathbf{p}, \mathbf{q}) [1 - \Gamma_p(\beta)] v_\sigma(\mathbf{q}) \\ &= \frac{ie}{2\pi} v_s^\dagger(\mathbf{p}) \gamma_\mu v_\sigma(\mathbf{q}) A^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{q}) [1 - \Gamma_p(\beta)], \end{aligned} \quad (4.189)$$

onde usou-se (4.187) e $P_- = \sum_s v_s(\mathbf{p}) v_s^\dagger(\mathbf{p})$. Para o caso de um potencial estático, vem:

$$S_{s\sigma}(\beta; \mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{ie}{\sqrt{2\pi}} \bar{v}_s(\mathbf{p}) \gamma_\mu v_\sigma(\mathbf{q}) \hat{A}^\mu(\mathbf{p}, \mathbf{q}) [1 - \Gamma_p(\beta)] \delta(E_{\mathbf{p}} - E_{\mathbf{q}}), \quad (4.190)$$

o que leva a uma DCS escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= 2\pi E^2 \bar{v}_s(\mathbf{p}) \gamma_\mu v_\sigma(\mathbf{q}) \bar{v}_\sigma(\mathbf{q}) \gamma_\nu v_s(\mathbf{p}) e^2 \hat{A}^\mu(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^\nu(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2 \\ &= \frac{\pi}{4} Tr[\gamma_\mu (\not{q} - m) \gamma_\nu (\not{p} - m)] e^2 \hat{A}^\mu(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^\nu(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2 \\ &= \pi [q^\mu p^\nu + q^\nu p^\mu - g^{\mu\nu} (q \cdot p - m^2)] e^2 \hat{A}^\mu(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \hat{A}^\nu(\mathbf{p} - \mathbf{q}) [1 - \Gamma_{\mathbf{p}}]^2. \end{aligned} \quad (4.191)$$

Este resultado é idêntico ao obtido para o elétron e resultará em uma mesma DCS para o potencial de Coulomb e para os demais potenciais usados na seção anterior. No entanto, é importante observar que, nos nossos cálculos, não consideramos os termos de ordens mais elevadas da expansão da matriz de espalhamento o que, para os potenciais usados, resultou em seções de choque diferencial independentes do sinal da carga.

Assim como no caso do elétron, sabe-se [58] que, para projéteis com energia cinética maior do que 5 keV, em geral as colisões podem ser descritas por meio da aproximação estática; porém, no caso do pósitron como partícula incidente, diferente do que ocorre para o elétron, não é necessário adicionar o termo de troca ao potencial estático, pois podemos distinguir o pósitron incidente dos elétrons do átomo. Contudo, as conseqüências mais interessantes da interação eletromagnética entre elétrons e pósitrons são a aniquilação de pares e a formação de estados ligados, que dão origem a um pseudoátomo formado por um pósitron e um elétron (positrônio); esses fenômenos interferem nos valores das DCS.

A energia do pósitron necessária para que possa ocorrer a formação de um positrônio na colisão com um átomo ou molécula é denominada limiar de formação do positrônio; este

limiar depende do alvo, e está em 6,8 eV para o hidrogênio atômico e 17,8 eV para o hélio, o valor mais alto para qualquer átomo [68]. Por sua vez, a aniquilação ocorre sempre que a função de estado de um pósitron apresentar superposição apreciável com a de um elétron [69]; no entanto, à medida que a velocidade do pósitron incidente aumenta, os elétrons têm menos tempo para reagir ao campo perturbador do pósitron, e o parâmetro de aniquilação Z_{eff} , que é uma medida da probabilidade de que o pósitron esteja essencialmente na mesma posição que qualquer um dos elétrons no alvo, diminui [68]; conseqüentemente a taxa de aniquilação também diminui, uma vez que essas grandezas são proporcionais. Sendo assim, é esperado que as DCS calculadas a partir do campo estático em geral concordem bem com os dados experimentais disponíveis para pósitrons com energia cinética maior do que 5 keV [58]. Quando a energia cinética da partícula incidente diminui abaixo de 5 keV, a precisão da aproximação estático diminui progressivamente, pois na prática o pósitron influencia a distribuição de carga no átomo, mas a distorção do átomo só é particularmente pronunciada para velocidades do pósitron muito baixas [68].

Conclusões e Perspectivas

Com o propósito de descrever a influência da temperatura para o espalhamento de elétron e pósitron relativísticos por átomos, usamos a estrutura do espaço de Fock para aplicar a dinâmica de campos térmicos na teoria relativística de espalhamento. Especificamente, partimos da equação de Dirac descrevendo um campo de matéria relativística; então, construímos o espaço de Fock para o campo de Dirac original e seu dual e o espaço de Fock duplicado foi construído assim como a matriz de espalhamento. A transformação de Bogoliubov foi usada no processo de termalização e determinamos a matriz de espalhamento térmica. A partir desta formulação, obtivemos a seção de choque diferencial dependente da temperatura para o espalhamento elástico de elétrons e pósitrons por potenciais atômicos, inicialmente descrito por um potencial coulombiano e depois descritos por somas de termos de Yukawa com parâmetros determinados por Salvat et al[33].

Observamos, através de nossos resultados, que a influência da temperatura se apresenta como uma correção à descrição à temperatura zero, que denominamos de fator térmico. O fator térmico independe do número atômico e do tipo de potencial utilizado; ele é igual a um para temperatura zero e tende para um valor constante (0,0625) quando a temperatura tende a infinito e conseqüentemente, nesse limite, a DCS térmica é 16 vezes menor que a DCS à temperatura zero, resultado que concorda com outros autores na análise do espalhamento de elétron-múon e no processo de criação de par elétron-pósitron usando a DCT [46, 67]. Nota-se ainda, que seguindo o formalismo proposto com a DCT a influência da temperatura só é percebida para valores muito elevados de temperatura, mesmo para baixas energias da partícula incidente.

Pelo nosso desenvolvimento, o uso da superposição de potenciais de Yukawa para descrever o potencial atômico levou a uma DCS térmica que incorpora o fator de forma

relativo à distribuição de carga, uma vez que o átomo deixou de ser tratado como uma carga puntiforme de carga Ze (um núcleo “nu”), e passou a ser caracterizado pela sua carga nuclear e pela distribuição eletrônica de carga. Desta forma, determinamos a DCS levando em consideração o potencial nuclear blindado pelos elétrons que constituem o átomo e os efeitos relativísticos. Pelos gráficos obtidos percebe-se uma mudança nos comportamentos qualitativos e quantitativos das DCS quando comparadas às DCS obtidas com o potencial coulombiano (núcleo nu) porém, como esperado, a influência da temperatura permaneceu a mesma, tendo em vista que o modelo de potencial usado independe da temperatura.

Nosso desenvolvimento possibilita explorar a influência da temperatura em outros tipos de processos, como espalhamento de elétron de vórtice relativístico por átomos, espalhamento de elétron por pósitron, etc. Neste sentido, nossas perspectivas são estender o formalismo a outros tipos de processos, aprimorar a descrição da interação entre o elétron (pósitron) e o átomo e posteriormente tratar a influência da temperatura na interação dos férmions com moléculas. Além disso, coloca-se a possibilidade de utilizar termos de ordem mais elevada da expansão da matriz de espalhamento, de forma a possibilitar a distinção entre o espalhamento de elétron por um potencial e o espalhamento de pósitron por um potencial externo.

Concluimos enfatizando a importância de explorar diferentes maneiras de olhar um problema, favorecendo melhor compreensão do mesmo e contribuindo na busca de uma visão mais ampla da física.

Referências

- [1] HERDADE, S.B. Rev. Bras. Ens. Fís, v. 16, p. 132, 1995.
- [2] ERICH H.; KISI, C. J. H. **Applications of neutron powder diffraction**. 1. ed. Oxford University Press, v. 1, Oxford, 2008.
- [3] FERNANDO, H. M. *et al.* The Journal of Physical Chemistry C, v. 16, n. 121, p. 8982-8991, 2017.
- [4] LOPES, M.C.A. *et al.* Quím. Nova, v.29, n.1, p.156-159, 2006.
- [5] XIANGYU, K. ; HONG-GUANG, X.; WEIJUN, Z. J. Chem. Phys. v.137, n. 6. p.064307, 2012.
- [6] CHRISTOPHOROU, L. G. **Electron-Molecule Interactions and Their Applications**, Academic Press, New York, 1984.
- [7] WINSTEAD, C. ; MCKOY, V. Adv. At. Mol. Opt. Phys. v.43, p.111 ,2000.
- [8] LOPES, A. R. *et al.* J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys, v. 37, n. 5, p. 997, 2004.
- [9] GOWOREK, T. Phys. Stat. Solid. v.102, p.511-523, 1987.
- [10] MOGENSEN, O. E. Electrochimica Acta. v.33, n.9, p.1203-1210, 1988.
- [11] BORGES, A.S. *et al.* J. Lumin. v.205, p. 72-81, 2019.
- [12] STRANGE, P. **Relativistic Quantum Mechanics: With Applications in Condensed Matter and Atomic Physics**. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [13] VIANNA, J. D. M . *et al.* J. Phys. B. : At. Mol. Opt. Phys. v 34, p. L617-L624, 2001.

-
- [14] MARTINS, M. GRAÇAS. R. *et al*, Brazilian J. Phys. v.35, p. 945, 2005.
- [15] MARTINS, M. GRAÇAS. R. *et al*. Chemical Physics. v. 320, p. 239–246, 2006.
- [16] THÜMMEL, H. T.; NESBET, R. K.; PEYERIMHOFF, S. D. J. Phys. B. :
At. Mol. Opt. Phys. v.25, n.21, p.4553, 1992.
- [17] HORACEK, J.; SASAKAVA, T. Phys. Rev. A, v. 28, n. 4, p. 2151-2156, 1983.
- [18] MAZON, K. T. *et al*. Phys. Rev. A, v. 82, p. 032704, 2010.
- [19] RAMSAUER, C. W. Annalen der Physik, v. 64, p. 513, 1921.
- [20] HOMEM, M. G. P. **Seções de Choque Diferenciais Absolutas para Espalhamento Elástico de Elétrons de Energia Baixas e Intermediárias por Moléculas Poliatômicas em Fase Gasosa**, Tese de Doutorado-Departamento de Física-UFSCar, 2002.
- [21] BAJULA, K. L.; NOBLE, C. J e TENNYSON, J.J. Phys. B: At. Mol. Phys. v.18, p. L851-L855, 1985.
- [22] BRANCHETT, S. E.; TENNYSON, J. e MORGAN L. A.J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. v.23, p. 4625-4639, 1990.
- [23] MACHADO, L. E. *et al*. Phys. Rev. A v.60, n.2, p. 1199-1205, 1999.
- [24] IGA, I *et al*. Phys. Rev. A, v. 61, n.2, p. 22708, 2000.
- [25] SIMÕES, ANDRÉIA S. **Espalhamento Elástico Elétron-Molécula: um Estudo usando o Método Interação de Configuração e a Teoria do Funcional da Densidade**. Dissertação de Mestrado, Instituto de Física-UFBA, 2013.
- [26] PITZER, K. S. Acc. Chem. Res., v. 12, n. 8, p. 271-276, 1979.
- [27] ILIAŠ, M; KELLOE, V; URBAN, M. Acta Phys. Slovaca, v. 60, n. 3, p. 259-391, 2010.
- [28] BJORKEN, J. D; DRELL, S. D. **Relativistic Quantum Mechanics**, McGraw-Hill College, New York, 1965.
- [29] KOLOS, W.; WOLNIEWICZ, L. J.Chem. Phys, v. 41, n. 12, p. 3663-3673, 1964.
- [30] DAWSON, J. F. Phys. Rev., v. 163, n. 1, p. 71, 1967.

-
- [31] WALKER, D. W. *Advances in Physics*, v. 20, n. 85, p. 257-323, 1971.
- [32] SALVAT, F. *et al*, *Phys. Rev. A*, v.36, p. 467, 1987.
- [33] SALVAT, F. *Phys. Rev. A*, v.43, p.578, 1991.
- [34] SERBO, V *et al*. *Phys. Rev. A*, v. 92, n. 1, p. 012705, 2015.
- [35] PEREIRA, R. G.; MIRANDA, E. *Rev. Bras. Ens. Fís.*, v. 24, n.2, p. 237, 2002.
- [36] BOGOLIUBOV, N. N; SHIRKOV, D. V. **Quantum Fields**, The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1983.
- [37] TAKAHASHI, Y.; UMEZAWA, H., *Int. J. Mod. Phys., B*, v.10, p.1755-1805, 1996.
- [38] DAS, A., **Finite Temperature Field Theory**. World Scientific, Singapore, 1997.
- [39] KHANNA, F. C., MALBOUISSON, A. P. C., MALBOUISSON, J. M. C., SANTANA, A. E., **Thermal Quantum Field Theory: Algebraic Aspects and Applications**. World Scientific, Singapore, 2009.
- [40] TRINDADE, M. A. **Estruturas Algébricas em Informação Quântica e Dinâmica de Campos Térmicos**. Tese de Doutorado, Instituto de Física - UFBA, 2010.
- [41] RESSUREIÇÃO, C.G. **Espaço de Fock e Dinâmica de Campos Térmicos: Um Desenvolvimento para Átomos, Moléculas e Sólidos**. Dissertação de Mestrado, Instituto de Física - UFBA, 2016.
- [42] CAPOLUPO, A; LAMBIASE, G. ; VITIELLO, G. *Adv. High Energy Phys.* , v. 2016 , p.1-6, 2016.
- [43] DOS SANTOS, A.F. ; KHANNA, F.C. *Eur. Phys. J.C*, v. 80, p. 703, 2020.
- [44] LULA-ROCHA, V. N.*et al*. *J. Phys A: Math. Theor*, v. 53, n. 41, p. 415302, 2020.
- [45] SCHARF, G., **Finite Quantum Electrodynamics**, Springer-Verlag, Berlin 1995.

-
- [46] PLÁCIDO, HEBE Q., **O Operador Espalhamento para Férmions num Campo Externo em Thermofield Dynamics**. Tese de Doutorado, Instituto de Física Teórica - UNESP, 2002.
- [47] RANGARAJAN, R., SIVAKUMAR, M. **Surveys in Theoretical High Energy Physics – 2**. Springer e Hindustan Book Agency, Singapore, 2014.
- [48] UMEZAWA, H., MATSUMOTO, H., TACHIKI, M., **Thermo Field Dynamics and Condensed States**. North-Holland, Netherlands, 1982.
- [49] KAPUSTA, J; MÜLLER, B.; RAFELSKI, J. **Quark-gluon plasma: theoretical foundations: an annotated reprint collection**. Gulf Professional Publishing, New York, 2003.
- [50] MATSUBARA, T., Prog. Theor. Phys., v.14, p. 351, 1955.
- [51] SANTANA, A. E.; SIMON, S. Rev. Bras. Ens.Fis., v. 41, n. 3, 2019.
- [52] GADELHA, A. L. **Dp-branas à Temperatura Finita**. Tese de Doutorado, Instituto de Física Teórica - UNESP, 2002.
- [53] WHEELER, J. A. Phys.Rev., v.53, p. 1107-1112, 1937.
- [54] BASSALO, J.M.F. **Eletrodinâmica Quântica**, Livraria da Física, São Paulo, 2006.
- [55] VIANNA, J. DAVID. M ; MARTINS, M. GRAÇAS R. **Notas de curso: Tópicos da Teoria de Espalhamento**. Instituto de Física- UFBA - Semestre Letivo Suplementar, 2020.
- [56] JOST, R; PAIS, A. Phys. Rev., v. 82, n. 6, p. 840, 1951.
- [57] MOTZ, J. W.; OLSEN, H; KOCH, H. W. Rev. Mod. Phys, v. 36, n. 4, p. 881, 1964.
- [58] SALVAT, F.Phys. Rev. A, v.68, p.012708, 2003.
- [59] BLOKH, K. Y. *et al.* Phys. Rev. Lett, v. 99, n. 19, p. 190404, 2007.
- [60] UCHIDA, M.; TONOMURA, A. Nature, v. 464, n. 7289, p. 737-739, 2010.
- [61] VERBEECK, J; TIAN, H; SCHATTSCHNEIDER, P. Nature, v. 467, n. 7313, p. 301-304, 2010.

-
- [62] MCMORRAN, B. J. *et al.* Science, v. 331, n. 6014, p. 192-195, 2011.
- [63] BLOKH, K. Y. *et al.* Physics Reports, v. 690, p. 1-70, 2017.
- [64] LLOYD, S. M. *et al.* Rev. Mod. Phys, v. 89, n. 3, p. 035004, 2017.
- [65] CAMPOS, A. G.; HATSAGORTSYAN, K. Z.; KEITEL, C. H. Phys. Rev. Research, v. 3, n. 1, p. 013245, 2021.
- [66] BLOKH, K. Y.; DENNIS, M. R.; NORI, F. Phys. Rev. Lett, v. 107, n. 17, p. 174802, 2011.
- [67] ARAUJO, M. C. F. S. C. **Espalhamento Elétron - Múon na Eletrodinâmica Quântica com Temperatura Finita.** Dissertação de Mestrado, Departamento de Física Teórica - UFCE, 2019.
- [68] CHARLTON, M; HUMBERSTON, JOHN, W. **Positron Physics.** Cambridge University Press, New York, 2001.
- [69] VARELLA, M. T.N. **Densidade de probabilidade de aniquilação e outras aplicações do método multicanal de Schwinger ao espalhamento de pósitrons e elétrons.** Instituto de Física Gleb–Wataghin - UNICAMP, 2002.
- [70] MANDL, F., **Quantum Field Theory**, John Wiley and Sons Ltd, New York, 1986.
- [71] GREINER, W. ; REINHARDT, J. M., **Field Quantization**, Springer, New York, 1996.
- [72] YUKAWA, H. Proc. Phys. Math. Soc. Jap, v.17, p.48-57, 1935.
- [73] DEBYE, P ; HÜCKEL, E. Phys Z, v. 24, p. 185, 1923.
- [74] OYEWUMI, K ; OLUWADARE, O. Eur. Phys. J. Plus. v.131, n. 9, p. 1-10, 2016.
- [75] LEVIN, Y..Rep. Prog. Phys. v.65, p. 1577–1632, 2002.
- [76] HOLTZMANN, M *et al.* Phys Rev E, v.68, p.046707, 2003.
- [77] LAM, C. S; VARSHNI, Y. P. Phys Rev A, v.27, p.418, 1983.
- [78] DINIZ, J.B. *et al.* Solid State Comm, v. 146, p.169-174, 2008.

-
- [79] DINIZ, J.B. **Quebra de Simetria de Cargas em Estruturas Eletrônicas Blindadas**. Tese de Doutorado, Instituto de Física - UnB, 2008.
- [80] YAHYA, W.A. et al. Int. J. Mod. Phys. E, v.22, p.1350062, 2013.
- [81] YONGYAO, L. ; XIANGQIAN, L.; KROGER, H. Science in China: Series G Physics, Mechanics and Astronomy, v. 49, n.1, p. 60-71, 2006.
- [82] SANTOS, L C., MARTINS, M. GRAÇAS, R. VIANNA, J. DAVID, M. Int. J. Quantum Chem., v. 111, p. 1671-1679, 2011.
- [83] KHRAPAK, S. A. ; IVLEV, A.V. ; MORFILL, G. E. Phys. Rev. Lett , v.90, n.22, p.225002, 2003.
- [84] HARRIS, F. E.. Phys. Rev. Lett. , v.19,n.4, p. 173-175, 1967.
- [85] GAVRILA, M. ; OFFERHAUS , M.J.; KAMINSKI, J.Z. Phys. Lett. A, v. 118, n.7, p331-335, 1986.
- [86] RABADAN, I, ; MENDEZ, L. ; DICKINSON, A.S. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. v.27, p.2089-2102, 1994.
- [87] KATASE, A. et al. J. Phys. B: At. Mol. Phys. v19, p.2715, 1986.

Apêndices

Campo de Dirac

A descrição quântica-relativística de uma partícula de spin 1/2 (férmion) é feita pela equação de Dirac, proposta em 1928, que incorpora naturalmente a característica espinorial dos férmions. Pode-se interpretar a equação de Dirac como uma equação de campo. Aqui trataremos o caso do campo de Dirac livre nos espaços original (direto) e dual.

A.1 Campo de Dirac Livre

A equação de Dirac para partículas livres massivas, assumindo $\hbar = c = 1$, é dada por

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi(x) = 0, \quad (\text{A.1})$$

onde m é a massa da partícula,

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}, \quad x^\mu = (t, \mathbf{x}), \quad (\text{A.2})$$

e

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta \alpha^i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{A.3})$$

são matrizes que satisfazem as relações de anticomutação

$$[\gamma^\mu, \gamma^\nu]_+ = 2g^{\mu\nu}, \quad (\text{A.4})$$

onde $g^{\mu\nu}$ é a métrica do espaço de Minkowski que, em forma matricial, é dada por

$$g^{\mu\nu} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

As matrizes gama também satisfazem a condição de hermiticidade

$$\gamma^{0+} = \gamma^0 \quad \gamma^{i+} = -\gamma^i \quad (\text{A.6})$$

que, na representação de Dirac-Pauli, são definidas como

$$\gamma^0 = \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.7})$$

em que \mathbb{I} representa uma matriz identidade 2×2 , e σ_i são as matrizes de Pauli [70].

Por sua vez, $\psi(x)$ é uma função de onda espinor de uma partícula, com quatro componentes

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

cuja adjunta $\bar{\psi}(x)$, que é definida por

$$\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x)\gamma^0, \quad (\text{A.9})$$

satisfaz a equação de Dirac adjunta

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu + m)\bar{\psi}(x) = 0. \quad (\text{A.10})$$

sendo

$$\psi^\dagger(x) = (\psi_1^*(x) \ \psi_2^*(x) \ \psi_3^*(x) \ \psi_4^*(x)). \quad (\text{A.11})$$

As equações de Dirac [A.1](#) e [A.10](#), podem ser derivadas da densidade lagrangiana

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\bar{\psi}(x) \left[i\gamma^\mu \overleftrightarrow{\partial}_\mu - m \right] \psi(x), \quad (\text{A.12})$$

onde $\overleftrightarrow{\partial}_\mu = \overrightarrow{\partial}_\mu - \overleftarrow{\partial}_\mu$. A densidade hamiltoniana, por sua vez, é obtida através da transformação de Legendre [71]

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \pi_\psi \dot{\psi} + \pi_{\psi^\dagger} \dot{\psi}^\dagger - \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \dot{\psi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}^\dagger} \dot{\psi}^\dagger - \mathcal{L} \\ &= \psi^\dagger \left(-i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m \right) \psi,\end{aligned}\tag{A.13}$$

onde $\alpha_i = \gamma^0 \gamma^i$ e $\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x^i}$.

Podemos escrever a equação de Dirac (A.1) na forma hamiltoniana (forma de Schrödinger)

$$\begin{aligned}i \frac{\partial \psi(x)}{\partial t} &= \left[-\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + m\beta \right] \psi(x) \\ &\hat{=} H_0(\mathbf{x}) \psi(x),\end{aligned}\tag{A.14}$$

em que o operador hamiltoniano H_0 é autoadjunto nos espaço de Hilbert $\mathcal{H} = (L^2(\mathbb{R}^3))^4$, e nos espaços dos momentos é dado por

$$H_0(\mathbf{p}) = \beta m + \vec{\alpha} \cdot \mathbf{p},\tag{A.15}$$

de forma que

$$H_0(\mathbf{p})\psi(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p})\psi(\mathbf{p})\tag{A.16}$$

com

$$\psi(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3x \psi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}\tag{A.17}$$

e $E(\mathbf{p})$ dada por

$$E(\mathbf{p}) = \pm \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}.\tag{A.18}$$

A equação (A.14) admite como solução ondas planas, sendo duas soluções de energia positiva e duas de energia negativa dadas, respectivamente, por

$$u_s(\mathbf{p}) \frac{e^{-ipx}}{(2\pi)^{3/2}}\tag{A.19}$$

e

$$v_p(\mathbf{p}) \frac{e^{ipx}}{(2\pi)^{3/2}},\tag{A.20}$$

onde $u_s(\mathbf{p})$ e $v_p(\mathbf{p})$ satisfazem

$$H_0(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p})\tag{A.21}$$

$$H_0(\mathbf{p})v_s(-\mathbf{p}) = -E(\mathbf{p})v_s(-\mathbf{p})\tag{A.22}$$

e são definidos como

$$u_s(\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{E+m}{2E}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E+m} \end{pmatrix} \chi_s, \quad (\text{A.23})$$

$$v_s(-\mathbf{p}) = \sqrt{\frac{E+m}{2E}} \begin{pmatrix} -\frac{\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E+m} \\ 1 \end{pmatrix} \chi_s, \quad (\text{A.24})$$

com $s = \pm 1$, $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ e

$$\chi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \chi_{-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.25})$$

caso se escolha quantizar o spin na direção z [45].

Os estados $u_s(\mathbf{p})$ e $v_s(-\mathbf{p})$ são normalizados

$$u_s^\dagger(\mathbf{p})u_{s'}(\mathbf{p}) = v_s^\dagger(-\mathbf{p})v_{s'}(-\mathbf{p}) = \delta_{ss'} \quad (\text{A.26})$$

e ortogonais

$$u_s^\dagger(\mathbf{p})v_{s'}(-\mathbf{p}) = 0. \quad (\text{A.27})$$

A solução geral da equação de Dirac pode ser escrita como combinação da solução (A.19) e (A.20)

$$\psi(x) = (2\pi)^{-3/2} \sum_s \int d^3p [\psi_{s+}(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p})e^{-ipx} + \psi_{s-}(\mathbf{p})v_s(\mathbf{p})e^{ipx}], \quad (\text{A.28})$$

em que $\psi_{s+}(\mathbf{p})$ e $\psi_{s-}(\mathbf{p})$ são amplitudes, e os índices $+$ e $-$ correspondem, respectivamente, às soluções de energia positiva e negativa.

Na formulação de segunda quantização, o campo de Dirac livre também é expandido em ondas planas

$$\begin{aligned} \psi(x) &= (2\pi)^{-3/2} \sum_s \int d^3p [b_s(\mathbf{p})u_s(\mathbf{p})e^{-ipx} + d_{s-}^\dagger(\mathbf{p})v_s(\mathbf{p})e^{ipx}] \\ &\hat{=} \psi^+(x) + \psi^-(x), \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

de forma que o campo espinor de Dirac adjunto é

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(x) &= \psi^\dagger(x)\gamma^0 \\ &= (2\pi)^{-3/2} \sum_s \int d^3p [b_s^\dagger(\mathbf{p})\bar{u}_s(\mathbf{p})e^{-ipx} + d_s(\mathbf{p})\bar{v}_s(\mathbf{p})e^{-ipx}] \\ &\hat{=} \bar{\psi}^+(x) + \bar{\psi}^-(x), \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

onde $b_s(\mathbf{p})$ e $d_s(\mathbf{p})$ invés de amplitudes são operadores, assim como o campo $\psi(x)$. Os sinais (+) e (-) significam que as quantidades estão associadas, respectivamente, às soluções de energia positiva e negativa.

As relações de anticomutação a tempo igual entre os campos, implicam em

$$\left[b_s(\mathbf{p}), b_{s'}^\dagger(\mathbf{p}') \right]_+ = \left[d_s(\mathbf{p}), d_{s'}^\dagger(\mathbf{p}') \right]_+ = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{ss'}, \quad (\text{A.31})$$

sendo todos os demais anticomutadores nulos.

Para selecionar as soluções de energia positiva e negativa em (A.28) e (A.29) usamos os operadores de projeção definidos como [45]

$$\begin{aligned} P_+(\mathbf{p}) &= \sum_s u_s(\mathbf{p}) u_s^\dagger(\mathbf{p}) \\ &= \frac{1}{2E} (E + \vec{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m) \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

e

$$\begin{aligned} P_-(\mathbf{p}) &= \sum_s v_s(-\mathbf{p}) v_s^\dagger(-\mathbf{p}) \\ &= \frac{1}{2E} (E - \vec{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \beta m) \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

que, na forma covariante, são expressos por

$$P_+ = \sum_s u_s(\mathbf{p}) \bar{u}_s(\mathbf{p}) = \frac{\not{p} + m}{2E} \quad (\text{A.34})$$

e

$$P_- = \sum_s v_s(\mathbf{p}) \bar{v}_s(\mathbf{p}) = \frac{\not{p} - m}{2E}, \quad (\text{A.35})$$

onde $\not{p} = p_0 \gamma^0 - \mathbf{p} \cdot \vec{\gamma} = p_\mu \gamma^\mu$. Esses operadores são operadores de projeção ortogonais, que satisfazem

$$\begin{aligned} P_+(\mathbf{p}) + P_-(\mathbf{p}) &= 1 \\ P_+(\mathbf{p}) P_-(\mathbf{p}) &= 0 \\ [P_\pm(\mathbf{p})]^2 &= P_\pm(\mathbf{p}) \\ [P_\pm(\mathbf{p})]^\dagger &= P_\pm(\mathbf{p}) \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

A.2 Campo de Dirac Livre Dual

Para construir o campo de Dirac dual, usamos as regras de conjugação til, definidas no capítulo 2. Pela regra

$$\left(\widetilde{cAB}\right) \doteq c^* \widetilde{B} \widetilde{A} \quad (\text{A.37})$$

a densidade lagrangiana $\widetilde{\mathcal{L}}$, correspondente a (A.12), é dada por [46]

$$\widetilde{\mathcal{L}}(x) = \frac{1}{2} \widetilde{\bar{\psi}}(x) \left[i\gamma^\mu \overleftrightarrow{\partial}_\mu - m \right] \widetilde{\psi}^\dagger(x), \quad (\text{A.38})$$

que, através da equação de Euler-Lagrange, leva à equação de Dirac dual

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \widetilde{\psi}^\dagger(x) = 0 \quad (\text{A.39})$$

e sua adjunta

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu + m) \widetilde{\bar{\psi}}(x) = 0, \quad (\text{A.40})$$

com

$$\widetilde{\psi}^\dagger(x) = \begin{pmatrix} \widetilde{\psi}_1^*(x) \\ \widetilde{\psi}_2^*(x) \\ \widetilde{\psi}_3^*(x) \\ \widetilde{\psi}_4^*(x) \end{pmatrix} \quad (\text{A.41})$$

e

$$\widetilde{\bar{\psi}}(x) \cong \widetilde{\psi}(x) \gamma^0, \quad (\text{A.42})$$

sendo

$$\widetilde{\psi}(x) = \left(\widetilde{\psi}_1(x) \quad \widetilde{\psi}_2(x) \quad \widetilde{\psi}_3(x) \quad \widetilde{\psi}_4(x) \right). \quad (\text{A.43})$$

A equação (A.39) pode ser escrita na forma hamiltoniana com

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \widetilde{\psi}^\dagger(x)}{\partial t} &= [m\beta - i\vec{\alpha} \cdot \nabla] \widetilde{\psi}^\dagger(x) \\ &= \widetilde{H}_0(x) \widetilde{\psi}^\dagger(x), \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

onde \widetilde{H}_0 é um operador autoadjunto no espaço de Hilbert $\mathcal{H} = (L^2(\mathbb{R}^3))^4$, e no espaço dos momentos é dado por

$$\widetilde{H}_0(\mathbf{p}) = \beta m + \vec{\alpha} \cdot \mathbf{p}, \quad (\text{A.45})$$

de forma que

$$\widetilde{H}_0(\mathbf{p}) \widetilde{\psi}^\dagger(\mathbf{p}) = E(\mathbf{p}) \widetilde{\psi}^\dagger(\mathbf{p}), \quad (\text{A.46})$$

com

$$\tilde{\psi}^\dagger(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3x \tilde{\psi}(\mathbf{x})^\dagger e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}. \quad (\text{A.47})$$

Procedendo de forma análoga ao sistema original, a solução geral da equação de Dirac dual pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}^\dagger(x) &= (2\pi)^{-3/2} \sum_s \int d^3p \left[\tilde{\psi}_{s+}^\dagger(\mathbf{p}) u_p(\mathbf{p}) e^{-ipx} + \tilde{\psi}_{s-}^\dagger(\mathbf{p}) v_p(\mathbf{p}) e^{ipx} \right] \\ &\cong \tilde{\psi}^\dagger(x)^+ + \tilde{\psi}^\dagger(x)^{-}, \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

e sua conjugada

$$\tilde{\psi}(x) = (2\pi)^{-3/2} \sum_s \int d^3p \left[\tilde{\psi}_{s-}^\dagger(\mathbf{p}) u_p(\mathbf{p}) e^{ipx} + \tilde{\psi}_{s+}^\dagger(\mathbf{p}) v_s^\dagger(\mathbf{p}) e^{-ipx} \right] \cong \tilde{\psi}^{(-)}(x) + \tilde{\psi}^\dagger(x)^{(+)}. \quad (\text{A.49})$$

Como as equações para o campo original $\psi(x)$ são idênticas às equações para o campo dual $\tilde{\psi}^\dagger(x)$, as definições dos espinores $u_s(\mathbf{p})$ e $v_s(\mathbf{p})$, a estrutura algébrica das matrizes gama e as definições dos operadores de projeção $P_+(\mathbf{p})$ e $P_-(\mathbf{p})$ são aplicáveis ao campo de Dirac dual [46].

Operador Espalhamento

B.1 Operador Espalhamento: Espaço Direto

A evolução de um sistema físico é determinada pelo hamiltoniano H ; portanto, é de se esperar que o mesmo esteja relacionado com a matriz S . Usaremos aqui o método perturbativo, que tem como base a descrição de interação para determinar essa relação.

A Representação de Interação, RI, é utilizada para estudar sistemas físicos em interação, cujos estados quânticos têm uma dependência temporal que deriva apenas da interação.

Na Representação de Schrödinger, RS - operadores constantes, vetor de estado dependente do tempo - a equação de movimento de um sistema é dada por ($\hbar = 1$)

$$i \frac{\partial}{\partial t} h_S(t) = H_s h_S(t), \quad (\text{B.1})$$

onde os subíndices s se referem a RS, e H_s é o hamiltoniano total dado por:

$$H = H_0 + H_1, \quad (\text{B.2})$$

em que H_0 é o hamiltoniano livre e H_1 é o hamiltoniano da interação.

A conexão entre a RS e RI é dada pelas seguintes relações:

$$h_S(t) = e^{-iH_0 t} h_I(t) \quad (\text{B.3})$$

e

$$O_I = e^{iH_0 t} O_S e^{-iH_0 t}, \quad (\text{B.4})$$

o que leva a

$$H_I = e^{iH_0 t} H_S e^{-iH_0 t}, \quad (\text{B.5})$$

que representa o hamiltoniano total na RI.

A equação de Schrödinger (B.1), para evolução temporal dos vetores de estados na RI, assume a forma [71]

$$\begin{aligned}
 i\partial_t h_I(t) &= -H_0 e^{iH_0 t} h_S(t) + e^{iH_0 t} i\partial_t h_S(t) \\
 &= -H_0 h_I(t) + e^{iH_0 t} H e^{-iH_0 t} e^{iH_0 t} h_S(t) \\
 &= -H_0 h_I(t) + H^I h_I(t) \\
 &= (-H_0 + H^I) h_I(t)
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

e, portanto,

$$i\partial_t h_I(t) = H_1^I h_I(t), \tag{B.7}$$

onde temos usado

$$H_0^I = H_0^S. \tag{B.8}$$

A equação B.7 contém somente o operador de perturbação H_1 .

Definindo o operador evolução temporal $U(t_0, t_1)$, que descreve a conexão entre os vetores de estado $h_I(t)$ nos tempos t_0 e t_1 , como

$$h_I(t_1) = U(t_1, t_0) h_I(t_0) \tag{B.9}$$

e com a ajuda de $h_I(t_1) = e^{iH_0 t_1} h_S(t_1)$ temos

$$\begin{aligned}
 h_I(t_1) &= e^{iH_0 t_1} h_S(t_1) = e^{iH_0 t_1} e^{iH(t_1-t_0)} h_S(t_0) \\
 &= e^{iH_0 t_1} e^{-iH(t_1-t_0)} e^{-iH_0 t_0} h_I(t_0)
 \end{aligned} \tag{B.10}$$

onde usamos $h_S(t_1) = e^{-iH(t_1-t_0)} h_S(t_0)$. Logo,

$$U(t_1, t_0) = e^{iH_0 t_1} e^{-iH(t_1-t_0)} e^{-iH_0 t_0}. \tag{B.11}$$

Uma vez que H_1 e H_0 não comutam, a ordem dos fatores acima é muito importante.

O operador evolução temporal satisfaz um número de relações fundamentais, que resumiremos aqui. Uma propriedade trivial é que

$$U(t_0, t_0) = \mathbb{I}. \tag{B.12}$$

Além disso, quando dois operadores são aplicados consecutivamente tem-se a seguinte propriedade de grupo:

$$U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0). \quad (\text{B.13})$$

Para o caso especial em que $t_2 = t_0$, tem-se a expressão para o inverso do operador

$$\begin{aligned} U(t_0, t_1)U(t_1, t_0) &= U(t_0, t_0) = \mathbb{I} \\ U^{-1}(t_0, t_1) &= U(t_1, t_0). \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

Finalmente, U acaba por ser um operador unitário

$$U^\dagger(t_1, t_0) = U^{-1}(t_1, t_0). \quad (\text{B.15})$$

Uma vez que o operador $U(t, t_0)$ determina a evolução temporal do estado $h_I(t_0)$, ele satisfaz a equação [\(B.7\)](#)

$$i\partial_t U(t, t_0) = H_1^I(t)U(t, t_0), \quad (\text{B.16})$$

e integrando-a de t_0 até t_1 , tem-se

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t dt' H_1^I(t')U(t', t_0). \quad (\text{B.17})$$

Por integração sucessiva tem-se a série de Neumann

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t dt_1 H_1^I(t_1) \left\{ \mathbb{I} - i \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_2) \{ \dots \} \right\} \\ &= \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t dt_1 H_1^I(t_1) + (-i)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) + \dots \\ &\quad + (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) \dots H_1^I(t_n) + \dots \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Podemos reescrever as integrais em [\(B.18\)](#) usando o operador de ordenamento temporal T , introduzido em 1949 pelo físico Freeman John Dyson para estender as integrais indicadas para a região de integração de $[t_0, t]$. O operador ordenador temporal é definido de modo que, para dois fatores, teremos [54]:

$$\begin{aligned} T[A(t_1)B(t_2)] &\equiv A(t_1)B(t_2), t_1 > t_2 \\ T[A(t_1)B(t_2)] &\equiv B(t_2)A(t_1), t_2 > t_1. \end{aligned}$$

Observa-se que o terceiro termo da expressão [\(B.18\)](#) pode ser escrito como [72]

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) + \\ &+ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_2}^t dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2). \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

Trocando t_1 por t_2 no último termo à direita, com $\theta(t - t') = 1$ para $t > t'$, e $\theta(t - t') = 0$ para $t < t'$, temos

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) + \\ &+ \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 H_1^I(t_2) H_1^I(t_1) \\ &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 \left[H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) \theta(t_1 - t_2) + \right. \\ &\quad \left. H_1^I(t_2) H_1^I(t_1) \theta(t_2 - t_1) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

ou

$$\int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^t dt_2 T \left[H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) \right]. \quad (\text{B.21})$$

Assim, o uso do operador temporal T tornou possível estender ambas integrações ao intervalo completo $[t_0, t]$. O mesmo procedimento pode ser estendido para todas as integrais múltiplas em (B.18). Portanto, a expansão para U torna-se:

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_n T \left[H_1^I(t_1) \cdots \widehat{H}_n^I(t_n) \right]. \quad (\text{B.22})$$

O principal uso do operador evolução temporal está em sua aplicação em processos de espalhamento. Tomando o limite $t_0 \rightarrow -\infty$ e $t \rightarrow \infty$, e usando o operador espalhamento definido por $S \equiv U(-\infty, \infty)$ temos, por (B.18),

$$\begin{aligned} S &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n H_1^I(t_1) H_1^I(t_2) \cdots H_1^I(t_n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \cdots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n T \left[H_1^I(t_n) \cdots H_1^I(t_1) \right] \\ &= T \exp \left[-i \int_{-\infty}^{+\infty} dt H_1^I(t) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

com $n = 0$ sendo $S = 1$

B.2 Operador Espalhamento: Sistema Dual

Usando as regras de conjugação til, obteremos a série de Dyson para a matriz espalhamento no espaço dual a partir da construção utilizada para obter a série de Dyson para a matriz espalhamento no espaço direto (sistema original).

A dinâmica de uma partícula de um sistema dada por [B.1](#), pela evolução da função de estado $h_s(t)$, corresponderá a um sistema dual com dinâmica dada pela equação

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{h}_s(t) = -\tilde{H}^S \tilde{h}_s(t) \quad (\text{B.24})$$

onde o sinal negativo sugere uma inversão temporal com respeito à evolução do sistema original, o subíndice S se refere a RS, e \tilde{H}^S é o hamiltoniano total dado por

$$\tilde{H}^S = \tilde{H}_0^S + \tilde{H}_1^S = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_1^S \quad (\text{B.25})$$

em que $\tilde{H}_0 = \frac{\tilde{p}^2}{2m}$ é o hamiltoniano livre e H_1 é o hamiltoniano de interação.

A conexão entre a RS e RI nesta caso será dada por

$$\tilde{h}_s(t) = e^{i\tilde{H}_0 t} \tilde{h}_I(t) \quad (\text{B.26})$$

e

$$\tilde{O}^I = e^{-i\tilde{H}_0 t} \tilde{O}^S e^{i\tilde{H}_0 t} \quad (\text{B.27})$$

o que leva a

$$\tilde{H}^I = e^{-i\tilde{H}_0 t} \tilde{H}^S e^{i\tilde{H}_0 t}, \quad (\text{B.28})$$

que representa o hamiltoniano total na RI.

Assim, a equação de Schrödinger [B.24](#), para evolução temporal dos vetores de estados na RI, assume a forma

$$\begin{aligned} i\partial_t \tilde{h}_I(t) &= (\tilde{H}_0 - \tilde{H}^I) \tilde{h}_I(t) \\ i\partial_t \tilde{h}_I(t) &= -\tilde{H}_1^I \tilde{h}_I(t), \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

com $\tilde{H}_0^I = \tilde{H}_0^S = H_0$.

Por sua vez, o operador evolução temporal na RI pode ser definido como

$$\tilde{h}_I(t) = \tilde{U}(t, t_0) \tilde{h}_I(t_0), \quad (\text{B.30})$$

e, com ajuda de [B.26](#), temos:

$$\begin{aligned}\tilde{h}_I(t) &= e^{-i\tilde{H}_0 t} \tilde{h}_s(t) = e^{-i\tilde{H}_0 t} e^{i\tilde{H}^S(t-t_0)} \tilde{h}_s(t_0) \\ &= e^{-i\tilde{H}_0 t} e^{i\tilde{H}^S(t-t_0)} e^{i\tilde{H}_0 t_0} \tilde{h}_I(t_0),\end{aligned}\tag{B.31}$$

onde usamos

$$\tilde{h}_S(t) = e^{i\tilde{H}^S(t_1-t_0)} \tilde{h}_S(t_0).\tag{B.32}$$

Logo,

$$\tilde{U}(t, t_0) = e^{-i\tilde{H}_0 t} e^{i\tilde{H}^S(t-t_0)} e^{i\tilde{H}_0 t_0},\tag{B.33}$$

em que $\tilde{H}^S = \tilde{H}$. Assim como o operador $U(t, t_0)$ no sistema original, $\tilde{U}(t, t_0)$ satisfaz as relações fundamentais [\(B.12\)](#) - [\(B.15\)](#). A série de Neumann para esse operador é

$$\tilde{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \tilde{H}_1^I(t_1) \tilde{H}_1^I(t_2) \cdots \tilde{H}_1^I(t_n),\tag{B.34}$$

que, com o auxílio do operador ordenador temporal T , pode ser reescrita como

$$\tilde{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^t dt_n T \left[\tilde{H}_1^I(t_1) \cdots \tilde{H}_1^I(t_n) \right].\tag{B.35}$$

Como para o sistema dual a evolução temporal se apresenta em sentido inverso com relação à evolução do sistema original, podemos definir o operador espalhamento para o sistema original como $\tilde{S} \equiv \tilde{U}(\infty, -\infty)$. Desta forma, tomando o limite $t_0 \rightarrow +\infty$ e $t \rightarrow -\infty$ em [B.35](#), temos

$$\begin{aligned}\tilde{S} &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^{\infty} dt_1 \int_{\infty}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{\infty}^{t_{n-1}} dt_n \tilde{H}_1^I(t_1) \tilde{H}_1^I(t_2) \cdots \tilde{H}_1^I(t_n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{+\infty}^{-\infty} dt_1 \cdots \int_{\infty}^{-\infty} dt_n T \left[\tilde{H}_1^I(t_1) \cdots \tilde{H}_1^I(t_n) \right] \\ &\hat{=} T \exp \left[i \int_{\infty}^{-\infty} dt \tilde{H}_1^I(t) \right], \quad \text{com } n=0 \text{ sendo } \tilde{S} = 1,\end{aligned}\tag{B.36}$$

que é similar a série de Dyson para a matriz S , [B.23](#), com os limites de integração temporal invertidos e com H e H_0 substituídos por \tilde{H} e \tilde{H}_0 .

As Fases Causais das Matrizes \mathbf{S} e $\hat{\mathbf{S}}$

O operador espalhamento no espaço de Fock foi definido no capítulo 3, a menos de uma fase $e^{i\lambda}$. Como \mathbf{S} descreve processos de espalhamento, produção e aniquilação de par em um campo eletromagnético externo A , a fase λ deve depender de A . Para determinar a fase, devemos garantir que a condição de causalidade seja satisfeita, isto é, requerer que mudança na lei de interação, em qualquer região do espaço-tempo, influencie a evolução do sistema somente em tempos subseqüentes [36]. Em outras palavras, o operador \mathbf{S} , para ser fisicamente aceitável, tem que depender de $A(x)$ de forma causal.

Para formular a condição de causalidade explicitamente devemos considerar que o potencial $A^\mu(x)$ pode ser representado como uma soma

$$A^\mu(x) = A_1^\mu(x) + A_2^\mu(x), \quad (\text{C.1})$$

em que, sendo r um instante de tempo qualquer, A_1 desaparece para $t > r$ e A_2 para $t < r$, de modo que a matriz de espalhamento S de uma partícula pode ser fatorizada como:

$$S[A] = S_2 S_1, \quad S_j \stackrel{def}{=} S[A_j]; \quad (\text{C.2})$$

A partir da relação (3.214) aplicada a S_1 , S_2 e S , concluímos que uma fatorização semelhante a \mathbf{S} ocorre para o operador \mathbf{S} no espaço de Fock,

$$(\Omega, \mathbf{S}\Omega) = (\Omega, \mathbf{S}_2 \mathbf{S}_1 \Omega). \quad (\text{C.3})$$

Esta condição é denominada condição de causalidade global para o operador espalhamento no espaço de Fock, e implica em [45]

$$\mathbf{S}[A_1 + A_2] = \mathbf{S}[A_2] \mathbf{S}[A_1]. \quad (\text{C.4})$$

Com auxílio desta equação podemos derivar a condição de causalidade local ou diferencial para o operador espalhamento no espaço de Fock:

$$\frac{\delta}{\delta A_\nu(y)} \left(\Omega, \mathbf{S}^+ \frac{\delta \mathbf{S}}{\delta A_\mu(x)} \Omega \right) = 0, \quad \text{para } x^0 < y^0. \quad (\text{C.5})$$

Escrevendo

$$\mathbf{S} = e^{i\varphi} \bar{\mathbf{S}}, \quad (\text{C.6})$$

onde \mathbf{S} é unitária e dada pela expressão (3.224); substituindo esta expressão na equação anterior (condição de causalidade local), obtemos

$$\frac{\delta}{\delta A_\nu(y)} \left(\mathbf{S} \Omega, \frac{\delta \mathbf{S}}{\delta A_\mu(x)} \Omega \right) = i \frac{\delta^2 \varphi}{\delta A_\nu(y) \delta A_\mu(x)} + \frac{\delta}{\delta A_\nu(y)} \left(\bar{\mathbf{S}} \Omega, \frac{\delta \bar{\mathbf{S}}}{\delta A_\mu(x)} \Omega \right). \quad (\text{C.7})$$

Pode-se mostrar, tendo em conta a unitariedade de \mathbf{S} , que o último termo na equação anterior é um imaginário puro [45]; conseqüentemente, a parte real da condição de causalidade local é automaticamente satisfeita enquanto que, para a parte imaginária, podemos escolher convenientemente φ tal que a condição de causalidade local seja alcançada. Assim, a equação que define φ é dada por

$$\frac{\delta^2 \varphi}{\delta A_\nu(y) \delta A_\mu(x)} = i \frac{\delta}{\delta A_\nu(y)} \left(\bar{\mathbf{S}} \Omega, \frac{\delta \bar{\mathbf{S}}}{\delta A_\mu(x)} \Omega \right). \quad (\text{C.8})$$

Em ordem mais baixa na teoria de perturbação, esta fase causal fica dada por [45]:

$$\varphi[A] = -\frac{e^2}{4} (2\pi)^{-2} \int d^4 k A_\mu^*(k) \left(\frac{k^\mu k^\nu}{k^2} - g^{\mu\nu} \right) Q(k) A_\nu(k), \quad (\text{C.9})$$

com

$$Q(k) = -\frac{2}{3} k^4 P \int_{4m^2}^{\infty} ds \frac{s + 2m^2}{s^2(s - k^2)} \sqrt{1 - \frac{4m^2}{s}} \quad (\text{C.10})$$

em que P indica que deve ser tomado o valor principal da integral em (C.10). Desta forma, o operador \mathbf{S} no espaço de Fock, definido por (3.214) e (C.6), fica completamente determinado

$$\mathbf{S} = C e^{i\varphi} e^{A_1 b^\dagger d^\dagger} : e^{(A_2 - 1) b^\dagger b} :: e^{(1 - A_3) d d^\dagger} : e^{A_4 d b}. \quad (\text{C.11})$$

Para os processos de espalhamento à temperatura finita, descritos pelo operador $\hat{\mathbf{S}}$ no espaço duplicado, tem-se que as condições de causalidade global e local são dadas, respectivamente, por [44]

$$(\Omega(\beta), \hat{\mathbf{S}} \Omega(\beta)) = (\Omega(\beta), \hat{\mathbf{S}}_2 \hat{\mathbf{S}}_1 \Omega(\beta)), \quad (\text{C.12})$$

e

$$\frac{\delta}{\delta A_\nu(y)} \left(\Omega(\beta), \hat{\mathbf{S}}^+ \frac{\delta \hat{\mathbf{S}}}{\delta A_\mu(x)} \Omega(\beta) \right) = 0, \quad \text{para } x^0 < y^0 \quad (\text{C.13})$$

de forma que a fase causal φ associada a processos à temperatura finita, fica defnida por:

$$\frac{\delta^2 \varphi}{\delta A_\nu(y) \delta A_\mu(x)} = i \frac{\delta}{\delta A_\nu(y)} \left(\hat{\mathbf{S}} \Omega(\beta), \frac{\delta \hat{\mathbf{S}}}{\delta A_\mu(x)} \Omega(\beta) \right), \quad (\text{C.14})$$

em que

$$\hat{\mathbf{S}} = e^{i\varphi} \hat{\mathbf{S}} = C \tilde{C} e^{i\varphi} e^{B^\dagger \mathbf{A}_1 \bar{D}^\dagger} : e^{B^\dagger (\mathbf{A}_2 - \tau) B} : e^{\bar{D}(\tau - \mathbf{A}_3) \bar{D}^\dagger} : e^{\bar{D} \mathbf{A}_4 B}, \quad (\text{C.15})$$

onde $\hat{\mathbf{S}}$ é o operador unitário (4.45).

Apêndice D

Cálculos de A_2 , \tilde{A}_2 , A_3 e \tilde{A}_3

Por (3.247), temos:

$$A_2 = S_{++}^{\dagger^{-1}} = (S_{++}^{-1})^\dagger. \quad (\text{D.1})$$

O inverso de S_{++} , pela teoria de perturbação, pode ser determinado pela seguinte fórmula geral

$$\begin{aligned} S^{-1} &= \left(1 + \sum_{n=1}^{\infty} S_n\right)^{-1} \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\sum_{n_1+n_2+\dots+n_j=n} (-1)^j S_{n_1} S_{n_2} \cdots S_{n_j} \right], \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

cujo termo de n -ésima ordem é dado por

$$\begin{aligned} (S^{-1})_n &= -S_n - S_{n-1}S_1 + S_{n-2}(S_2 - S_1S_1) + \\ &\quad S_{n-3}(S_3 - S_2S_1 - S_1S_2 + S_1S_1S_1) + \cdots \\ &= S_n^1 + S_n^2 + S_n^3 + S_n^4 + \cdots \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

O primeiro termo $S_n^1 = -S_n$ é dado pela expressão (3.322)

$$\begin{aligned} S_n^1 &= (2\pi i)(2\pi)^{-2n} e^n \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \mathcal{A}(p - p_1) \times \\ &\quad \mathcal{S}^{ret}(p_1) \mathcal{A}(p_1 - p_2) \mathcal{S}^{ret}(\mathbf{p}_2) \cdots \mathcal{S}^{ret}(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

O segundo termo será:

$$\begin{aligned} S_n^2 &= (S_{n-1}S_1)_{++}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \int d^3 q' (S_{++})_{n-1}(\mathbf{p}, \mathbf{q}') (S_{++})_1(\mathbf{q}', \mathbf{q}) \\ &= 2\pi i (2\pi)^{-2n} e^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \times \\ &\quad \mathcal{S}^{ret}(p_1) \mathcal{A}(p_1 - p_2) \mathcal{S}^{ret}(p_2) \cdots \mathcal{S}^{ret}(p_{n-2}) \mathcal{A}(p_{n-2} - p_{n-1}) \times \\ &\quad [2\pi i P_+(\mathbf{p}_{n-1}) \gamma^0 \delta(p_{n-1}^0 - E_{p_{n-1}})] \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

onde usamos

$$\int d^3 p_{n-1} P_+(\mathbf{p}_{n-1}) = \int d^4 p_{n-1} \delta^1(p_{n-1}^0 - E_{p_{n-1}}) P_+(\mathbf{p}_{n-1}). \quad (\text{D.6})$$

Somando os dois primeiros termos de [D.3](#), temos

$$\begin{aligned} S_n^1 + S_n^2 &= 2\pi i (2\pi)^{2n} (e)^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \times \\ &\quad \mathcal{S}^{ret}(p_1) \mathcal{A}(p_1 - p_2) \mathcal{S}^{ret}(p_2) \cdots \mathcal{S}^{ret}(p_{n-2}) \mathcal{A}(p_{n-2} - p_{n-1}) \times \\ &\quad [\mathcal{S}^{ret}(p_{n-1}) + 2\pi i P_+(p_{n-1}) \gamma^0 \delta(p_{n-1} - E_{p_{n-1}})] \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

De acordo com (3.310) e (3.312) temos que:

$$\hat{S}_R(\mathbf{p}) \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{P_+}{p_0 - E(\mathbf{p}) + i0} + \frac{P_-}{p_0 + E(\mathbf{p}) + i0} \right] = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{S}^{ret}(\mathbf{p}) \gamma^0, \quad (\text{D.8})$$

o que leva a expressão entre colchetes em [D.5](#) a ser escrita com

$$\begin{aligned} [\cdots] &= [\mathcal{S}^{ret}(p) \gamma^0 + 2\pi i P_+(\mathbf{p}) \delta(p_{n-1}^0 - E_{p_{n-1}})] \gamma^0 \\ &\quad \left[\left(\frac{1}{p_0 - E_p + i0} + 2\pi i \delta(p^0 - E_p) \right) P_+(\mathbf{p}) + \frac{P_-(\mathbf{p})}{p^0 + E_p + i0} \right] \gamma^0 \\ &\quad \left[\left(V P \frac{1}{p_0 - E_p} + \pi i \delta(p^0 - E_p) \right) P_+(\mathbf{p}) + \frac{P_-(\mathbf{p})}{p^0 + E_p + i0} \right] \gamma^0 \\ &= \left[\frac{P_+(\mathbf{p})}{p^0 - E_p - i0} + \frac{P_-(\mathbf{p})}{p^0 + E_p + i0} \right] \gamma^0 \\ &= \frac{1}{2E} \left[\frac{E\gamma^0 - \gamma \cdot \mathbf{p} + m}{p^0 + E + i0} + \frac{E\gamma^0 + \gamma \cdot \mathbf{p} - m}{p^0 + E + i0} \right] \\ &= \frac{\not{p} + m}{p^0 - m - i0} \hat{=} \mathcal{S}^{AF}(p). \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Essa distribuição difere do propagador de Feynman

$$\mathcal{S}^F(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-2} \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 + i0}, \quad (\text{D.10})$$

pelo sinal em [D.9](#) e pelo fator $(2\pi)^{-2}$. Assim,

$$\begin{aligned} S_n^1 + S_n^2 &= 2\pi i (2\pi)^{-2n} e^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \times \\ &\quad \mathcal{S}^{ret}(p_1) \mathcal{A}(p_1 - p_2) \mathcal{S}^{ret}(p_2) \cdots \mathcal{S}^{ret}(p_{n-2}) \mathcal{A}(p_{n-2} - p_{n-1}) \times \\ &\quad \mathcal{S}^{AF}(P_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}) \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

O terceiro termo da expressão [D.3](#) será

$$\begin{aligned}
 S_n^3 &= [S_{n-2}(S_2 - S_1 S_1)]_{++}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \\
 &= 2\pi i (2\pi)^{2n} e^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \times \\
 &\quad \mathcal{S}^{ret}(p_1) \cdots \mathcal{S}^{ret}(p_{n-3}) \mathcal{A}(p_{n-3} - p_{n-2}) [2\pi i \gamma^0 P_+(p_{n-2}) \times \\
 &\quad \delta(p^0 - E_{n-2})] \mathcal{A}(p_{n-2} - p_{n-1}) \mathcal{S}^{AF}(P_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}). \tag{D.12}
 \end{aligned}$$

Desta forma, a soma dos três primeiros termos de [D.3](#) fica

$$\begin{aligned}
 S_n^1 + S_n^2 + S_n^3 &= 2\pi i (2\pi)^{-2n} e^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \times \\
 &\quad \mathcal{S}^{ret}(p_1) \cdots \mathcal{S}^{ret} \mathcal{A}(p_{n-3} - p_{n-2}) [\mathcal{S}^{ret}(p_{n-2}) + 2\pi i P_+(\mathbf{p}_{n+2}) \times \\
 &\quad \delta(p_{n-2}^0 - E_{p_{n-2}})] \mathcal{A}(p_{n-2} - p_{n-1}) \mathcal{S}^{AF}(P_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}) \\
 &= 2\pi i (2\pi)^{-2n} e^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \times \\
 &\quad \mathcal{S}^{ret}(p_1) \cdots \mathcal{A}(p_{n-3} - p_{n-2}) \mathcal{S}^{AF}(p_{n-2}) \mathcal{A}(p_{n-2} - p_{n-1}) \mathcal{S}^{AF}(p_{n-1}) \times \\
 &\quad \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}). \tag{D.13}
 \end{aligned}$$

De forma análoga, após somar todos os termos da série [D.3](#), todos os \mathcal{S}^{ret} serão transformados em \mathcal{S}^{AF} e a expressão final para o n -ésimo termo da inversa S_{++}^{-1} , fica

$$\begin{aligned}
 (S_{++}^{-1})_n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= 2\pi i (2\pi)^{-2n} e^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^3 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \times \\
 &\quad \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^{AF}(p_1) \cdots \mathcal{S}^{AF}(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}). \tag{D.14}
 \end{aligned}$$

Tomando a adjunta dessa expressão, usando $\mathcal{A}^+ = \gamma^0 \mathcal{A} \gamma^0$, e definindo [46]

$$\gamma^0 [\mathcal{S}^F(p)]^\dagger = \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 - i0} \gamma^0 = \mathcal{S}^{AF}(p) \gamma^0, \tag{D.15}$$

temos

$$\begin{aligned}
 (S_{++}^{-1})_n^+ &= -2\pi i (2\pi)^{-2n} e^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \times \\
 &\quad \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^F(p_1) \cdots \mathcal{S}^F(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}). \tag{D.16}
 \end{aligned}$$

Portanto, a expressão anterior leva a série [D.1](#) a ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 A_2 &= (S_{++}^{-1})_n^+(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \\
 &= -2\pi i \sum_{n=1} (2\pi)^{-2n} e^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \times \\
 &\quad \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^F(p_1) \cdots \mathcal{S}^F(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}), \tag{D.17}
 \end{aligned}$$

com $(A_2)_0 = 1$.

De acordo com (3.284), temos

$$\tilde{A}_2 = -\tilde{S}_{--}. \quad (\text{D.18})$$

Por sua vez, conforme (3.341)

$$\begin{aligned} (S_{++}^{-1})_n^+(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= 2\pi i (2\pi)^{-2n} (-e)^n P_-(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^{av}(p_1) \times \\ &\quad \mathcal{A}(p_1 - p_2) \mathcal{S}^{av}(p_2) \cdots \mathcal{S}^{av}(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_-(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

Logo

$$\begin{aligned} \tilde{A}_2 &= 2\pi i \sum_{n=1}^{\infty} (2\pi)^{-2n} (-e)^n P_-(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^{av}(p_1) \times \\ &\quad \mathcal{A}(p_1 - p_2) \mathcal{S}^{av}(p_2) \cdots \mathcal{S}^{av}(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_-(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (\text{D.20})$$

com

$$\mathcal{S}^{av} = \frac{\not{p} + m}{p^2 - m^2 - ip^0 0}. \quad (\text{D.21})$$

Por (3.230), temos que

$$A_3 = S_{--}^{-1}, \quad (\text{D.22})$$

em que

$$S_{--}^{-1} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left[\sum_{n_1 + \cdots + n_j = n} (-1)^j S_{n_1} S_{n_2} \cdots S_{n_j} \right]. \quad (\text{D.23})$$

Por um procedimento similar ao desenvolvimento para A_2 , podemos obter a expressão (D.23), cujo termo de n -ésima ordem é dado por

$$\begin{aligned} (S_{++}^{-1})_n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= 2\pi i (2\pi)^{-2n} (e)^n P_-(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \times \\ &\quad \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^F(p_1) \cdots \mathcal{S}^F(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_-(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (\text{D.24})$$

de modo que

$$\begin{aligned} A_3 &= 2\pi i \sum_{n=1}^{\infty} (2\pi)^{-2n} (e)^n P_-(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \times \\ &\quad \mathcal{S}^F(p_1) \cdots \mathcal{S}^F(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_-(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

com $(A_3)_0 = 1$.

Por sua vez, conforme (3.286), temos

$$\tilde{A}_3 = \tilde{S}_{++}^\dagger, \quad (\text{D.26})$$

em que (3.341),

$$\begin{aligned} (S_{++}^{-1})_n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= -2\pi i (2\pi)^{-2n} (e)^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^{av}(p_1) \times \\ &\quad \mathcal{A}(p_1 - p_2) \mathcal{S}^{av}(p_2) \cdots \mathcal{S}^{av}(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (\text{D.27})$$

Assim

$$\begin{aligned} (S_{++}^{-1})_n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) &= +2\pi i (2\pi)^{-2n} (e)^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^{ret}(p_1) \times \\ &\quad \mathcal{A}(p_1 - p_2) \cdots \mathcal{S}^{ret}(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

em que usamos

$$\mathcal{S}^{ret}(p) = \gamma^0 \mathcal{S}^{ret}(p) \gamma^0. \quad (\text{D.29})$$

A expressão (D.28) leva a

$$\begin{aligned} \tilde{A}_3 &= 2\pi i (2\pi)^{-2n} (e)^n P_+(\mathbf{p}) \gamma^0 \int d^4 p_1 \cdots d^4 p_{n-1} \mathcal{A}(p - p_1) \mathcal{S}^{ret}(p_1) \times \\ &\quad \mathcal{A}(p_1 - p_2) \cdots \mathcal{S}^{ret}(p_{n-1}) \mathcal{A}(p_{n-1} - q) P_+(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (\text{D.30})$$

com $(\tilde{A}_3)_0 = 1$.

Potencial de Yukawa

Baseado nas idéias de Heisenberg e Fermi sobre interação de partículas elementares e com a introdução de uma nova interpretação sobre o decaimento beta, em 1935, em analogia com o potencial escalar do eletromagnetismo, Hideki Yukawa introduziu um potencial para descrever o campo de interação entre um nêutron e um próton [72]; este potencial satisfaz uma equação similar à equação de onda para o potencial eletromagnético. Contudo, não sendo do tipo coulombiano, ele decai mais rapidamente com a distância e pode ser expresso como:

$$V(r) = g^2 \frac{e^{-\mu r}}{r}, \quad (\text{E.1})$$

em que g é uma constante com dimensão da carga elétrica e μ é uma constante relacionada ao alcance do potencial. Nota-se, que para $\mu \rightarrow 0$ o potencial de Yukawa dá lugar ao potencial de Coulomb; para $\mu \rightarrow \infty$ o termo exponencial anula-se, representando o sistema em um estado sem interação. Este é um modelo de potencial de curto alcance e é também descrito como um potencial coulombiano blindado. Em Física de Plasmas é conhecido como potencial de Debye-Huckel [73,74], e em Física da Matéria Condensada é conhecido como potencial de Thomas-Fermi.

Esse modelo de potencial tem sido utilizado no estudo de diversos sistemas, em diferentes ramos da física. Entre sua extensa aplicabilidade estão suspensões coloidais, caracterização de partículas em torno de plasma[75], estudos de problemas de transição de fase metal-isolante [76], estabilidade de sistemas atômicos e moleculares, processos de ionização [77], quebra espontânea de simetria das cargas [78, 79], cálculo dos níveis de energia de átomos neutros [80], estados ligados e comportamento crítico [81], estudo de sistemas confinados [82] e processos de espalhamento [34].

Em espalhamento, em geral, o potencial de Yukawa é usado para descrever a interação

interpartícula, simulando o potencial de interação entre a partícula incidente e a partícula alvo, como por exemplo, (i) em abordagem analítica para obter a seção de choque de transferência de momento para colisões de pares de partículas interagindo através do potencial atraente de Yukawa[83] ; (ii) em conjunto com outros potenciais para calcular a função de espalhamento e deslocamento de fase (phase shift)[74,84]; (iii) para simular a interação elétron-átomo [34, 85, 86] e a interação elétron-molécula, como a molécula da água [87]; aparecendo em vários outros casos tanto em nível relativístico, como semi relativístico.

No que se refere ao tema deste trabalho são de interesse os trabalhos de Serbo [34] em que utiliza o potencial de Yukawa para simular o potencial do átomo no estudo do espalhamento de Mott de elétrons de vórtices de alta energia por átomos e a proposta de Salvat [33, 34] no estudo do espalhamento elástico de partículas rápidas carregadas por átomos.

Nesses trabalhos não só é utilizado o potencial esférico de Yukawa

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}e^{-\mu r} \quad (\text{E.2})$$

como também a soma de três termos de Yukawa (também esférico)

$$U_{at}(r) = -\frac{Ze^2}{r} \sum_{i=1}^3 A_i e^{-\mu_i r} \quad , \quad A_1 + A_2 + A_3 = 1 \quad (\text{E.3})$$

em que os parâmetros A_i e μ_i são determinados por um ajuste aos resultados de cálculos auto-consistentes de Dirac-Hartree-Fock-Slater (DHFS). Como mostrado por Salvat, os resultados numéricos da seção de choque diferencial (DCS) do espalhamento de elétrons e pósitrons relativísticos por átomo obtidas a partir do potencial (E.3) por meio da fórmula de Mott blindada estão, para energias acima de alguns keV, em excelente acordo com as determinadas via processo usual DHFS com a equação de onda de Dirac. Neste contexto, considerando que uma de nossas expressões para DCS térmica usa o potencial (E.3), apresentamos na tabela (E.1) valores de A_i e μ_i , em unidades atômicas, existentes na literatura para átomos de Hélio a Urânio.

Tabela E.1 - Parâmetros da função de blindagem analítica $\phi_a(r)$, Os elementos indicados com um asterisco têm seus parâmetros determinados impondo $A_3 = 0$, para manter a consistência nos cálculos

Elementos	A_1	A_2	μ_1	μ_2	μ_3
He 1*	-184,39	185,39	2,0027	1,9973	
He 2*	- 0,2259	1,2259	5,5272	2,3992	
Li 3*	0,6045	0,3955	2,8174	0,6625	
Be 4*	0,3278	0,6722	4,5430	0,9852	
B 5*	0,2327	0,7673	5,9900	1,2135	
C 6*	0,1537	0,8463	8,0404	1,4913	
N 7*	0,0996	0,9004	10,812	1,7687	
O 8*	0,0625	0,9375	14,823	2,0403	
F 9*	0,0368	0,9632	21,400	2,3060	
Ne 10*	0,0188	0,9812	34,999	2,5662	
Na 11*	0,7444	0,2556	4,1205	0,8718	
Mg 12	0,6423	0,3577	4,7266	1,0025	
Al 13*	0,6002	0,3998	5,1405	1,0153	
Si 14*	0,5160	0,4840	5,8492	1,1732	
P 15*	0,4387	0,5613	6,6707	1,3410	
S 16	0,5459	- 0,5333	6,3703	2,5517	1,6753
Cl 17	0,7249	- 0,7548	6,2118	3,3883	1,8596
Ar 18	2,1912	- 2,2852	5,5470	4,5687	2,0446
K 19	0,0486	0,7759	30,260	3,1243	0,7326
Ca 20*	0,5800	0,4200	6,3218	1,0094	
Sc 21*	0,5543	0,4457	6,6328	1,1023	
Tl 22	0,0112	0,6832	99,757	4,1286	1,0090
V 23	0,0318	0,6753	42,533	3,9404	1,0533
Cr 24	0,1075	0,7162	18,959	3,0638	1,0014
Mn 25	0,0498	0,6866	31,864	3,7811	1,1279
Fe 26	0,0512	0,6995	31,825	3,7716	1,1606
Co 27	0,0500	0,7142	32,915	3,7908	1,1915

Elementos	A_1	A_2	μ_1	μ_2	μ_3
Ni 28	0,0474	0,7294	34,758	3,8299	1,2209
CU 29	0,0771	0,7951	25,326	3,3928	1,1426
Zn 30	0,0400	0,7590	40,343	3,9465	1,2759
Ga 31	0,1083	0,7489	20,192	3,4733	1,0064
Cse 32	0,0610	0,7157	29,200	4,1252	1,1845
As 33	0,0212	0,6709	62,487	4,9502	1,3582
Se 34*	0,4836	0,5164	8,7824	1,6967	
Br 35*	0,4504	0,5496	9,3348	1,7900	
Kr 36*	0,4190	0,5810	9,9142	1,8835	
Rb 37	0,1734	0,7253	17,166	3,1103	0,7177
Sr 38	0,0336	0,7816	55,208	4,2842	0,8578
Y 39	0,0689	0,7202	31,366	4,2412	0,9472
Zr 40	0,1176	0,6581	22,054	4,0325	1,0181
Nb 41	0,2257	0,5821	14,240	2,9702	1,0170
Mo 42	0,2693	0,5763	14,044	2,8611	1,0591
Tc 43	0,2201	0,5618	15,918	3,3672	1,1548
Ru 44	0,2751	0,5943	14,314	2,7370	1,1092
Rh 45	0,2711	0,6119	14,654	2,7183	1,1234
Pd 46	0,2784	0,6067	14,645	2,6155	1,4318
Ag 47	0,2562	0,6505	15,588	2,7412	1,1408
Cd 48	0,2271	0,6155	16,914	3,0841	1,2619
In 49	0,2492	0,6440	16,155	2,8819	0,9942
Sn 50	0,2153	0,6115	17,793	3,2937	1,1478
Sb 51	0,1806	0,5767	19,875	3,8092	1,2829
Te 52	0,1308	0,5504	24,154	4,6119	1,4195
I 53	0,0588	0,5482	39,996	5,9132	1,5471
Xe 54*	0,4451	0,5549	11,805	1,7967	
Cs 55	0,2708	0,6524	16,591	2,6964	0,6814
Ba 56	0,1728	0,6845	22,397	3,4595	0,8073
La 57	0,1947	0,6384	20,764	3,4657	0,8911

Elementos	A_1	A_2	μ_1	μ_2	μ_3
Ce 58	0,1913	0,6467	21,235	3,4819	0,9011
Pr 59	0,1868	0,6558	21,803	3,509	0,9106
Nd 60	0,1665	0,7057	23,949	3,5199	0,8486
Pm 61	0,1624	0,7133	24,598	3,5560	0,8569
Sm 62	0,1580	0,7210	25,297	3,5963	0,8650
Eu 63	0,1538	0,7284	26,017	3,6383	0,8731
Gd 64	0,1587	0,7024	25,497	3,7364	0,9550
Tb 65	0,1453	0,7426	27,547	3,7288	0,8890
Dy 66	0,1413	0,7494	28,346	3,7763	0,8969
Ho 67	0,1374	0,7558	29,160	3 8244	0,9048
Er 68	0,1336	0,7619	29,990	3,8734	0,9128
Tm 69	0,1299	0,7680	30,835	3,9233	0,9203
Yb 70	0,1267	0,7734	31,681	3,9727	0,9288
LU 71	0,1288	0,7528	31,353	4,0904	1,0072
Hf 72	0,1303	0,7324	31,217	4,2049	1,0946
Ta 73	0,1384	0,7096	30,077	4,2492	1,1697
W 74	0,1500	0,6871	28,630	4,2426	1,2340
Re 75	0,1608	0,6659	27,568	4,2341	1,2970
Os 76	0,1722	0,6468	26,586	4,1999	1,3535
Ir 77	0,1834	0,6306	25,734	4,1462	1,4037
Pt 78	0,2230	0,6176	22,994	3,7346	1,4428
Au 79	0,2289	0,6114	22,864	3,6914	1,4886
Hg 80	0,2098	0,6004	24,408	3,9643	1,5343
Tl 81	0,2708	0,6428	20,941	3,2456	1,1121
Pb 82	0,2380	0,6308	22,987	3,6217	1,2373
Bi 83	0,2288	0,6220	23,792	3,7796	1,2534
Po 84	0,1941	0,6105	26,695	4,2582	1,3577
At 85	0,1500	0,6031	31,840	4,9285	1,4683
Rn 86	0,0955	0,6060	43,489	5 8520	1,5736
Fr 87	0,3192	0,6233	20,015	2,9091	0,7207

Elementos	A_1	A_2	μ_1	μ_2	μ_3
Ra 88	0,2404	0,6567	24,501	3,5524	0,8376
Ac 89	0,2266	0,6422	25,684	3,7922	0,9335
Th 90	0,2176	0,6240	26,554	4,0044	1,0238
Pa 91	0,2413	0,6304	25,193	3,6780	0,9699
U 92	0,2448	0,6298	25,252	3,6397	0,9825