

Estados ligados como polos de $S_\ell(k)$

Ainda com respeito a estados ligados, vamos olhar algumas propriedades analíticas de $S_\ell(k)$ para $\ell = 0$. Para $r \rightarrow \infty$, lembre que a parte radial

da função de onda é dada por $S_0(k) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r}$. Compare isso com a

função de onda para um estado ligado à grandes distâncias $\frac{e^{-\kappa r}}{r}$. Note

que a existência de um estado ligado (na prática um “encaixamento” da onda no potencial), implica que soluções não triviais existem apenas para

determinados valores de κ ($E < 0$). Pode-se argumentar que $\frac{e^{-\kappa r}}{r}$ é o $\frac{e^{ikr}}{r}$

com $k = i\kappa$ imaginário puro. Se fizermos uma continuação analítica de $S_0(k)$ no plano complexo, esperaríamos que $S_0(i\kappa)$ fosse tão grande que a onda

incidente $\frac{e^{-ikr}}{r}$ ficasse insignificante (faz sentido, pois estado ligado não tem

onda esférica incidente). $S_0(i\kappa) \rightarrow \infty$ é o mesmo que pedir que no plano

complexo S_0 tenha um polo em $i\kappa$. Algo do tipo $S_0 = \frac{g(k)}{k - i\kappa}$ com $g(i\kappa) \neq 0$.

Como $|S_0| = 1 \forall k, \Rightarrow |g|^2 = k^2 + \kappa^2$ que tal $g(k) = \begin{cases} e^{i\phi_1(k)}(k - i\kappa) & (\text{não serve}) \\ e^{i\phi_2(k)}(k + i\kappa) \end{cases}$

Estados ligados como polos de $S_\ell(k)$

Assim, temos $S_0 = \frac{e^{i\phi_2(k)}(k + i\kappa)}{k - i\kappa}$ satisfazendo

$$\begin{cases} (1) \text{ polo simples em } i\kappa \\ (2) |S_0| = 1 \end{cases}$$

Temos ainda duas condições a serem satisfeitas

$$\begin{cases} (3) \lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} \\ (4) \lim_{k \rightarrow \infty} \delta_0(k) = 0 \end{cases}$$

A condição (3) diz que $\lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k)$ não pode ser qualquer número, pois se

$\lim_{k \rightarrow 0} \cot \delta_0 = c$ (número) $\Rightarrow \lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = 0$ e não $-\frac{1}{a}$. Assim exige-se que

$\lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k) = 0, \pm\pi, \dots \Rightarrow \lim_{k \rightarrow 0} S_0(k) = \lim_{k \rightarrow 0} e^{2i\delta_0} = 1 \therefore \lim_{k \rightarrow 0} e^{i\phi_2(k)} = -1$

O livro texto escolhe esta solução $S_0 = -\frac{(k + i\kappa)}{k - i\kappa}$ e reclama do fato que

$\lim_{k \rightarrow \infty} S_0(k) = -1$ e não 1 ($\lim_{k \rightarrow \infty} \delta_0 = 0$). Para evitar isso, basta fazer

$\lim_{k \rightarrow \infty} e^{i\phi_2(k)} = +1 \rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} S_0(k) = +1$. A solução do livro na região $k \approx 0$

é suficientemente geral. Podemos calcular $f_0 = \frac{S_0 - 1}{2ik} = \frac{1}{-\kappa - ik}$ e

comparar com $f_0 = \frac{1}{k \cot \delta_0 - ik}$ ambas com $k \rightarrow 0$. Isso fornece

(3) $\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\kappa = -\frac{1}{a} \rightarrow \begin{cases} \kappa (> 0) \text{ é o inverso do comprimento} \\ \text{de espalhamento. } \lim_{k \rightarrow 0} \delta_0(k) = \pi \end{cases}$

estude o
sinal de
 $k \cot \delta_0$



Espalhamento e Princípio da Causalidade

Vamos construir novamente um pacote de ondas espalhadas e analisar o princípio de causalidade (o pacote para ser espalhado, precisa primeiro encontrar o potencial). Vimos que as componentes do pacote são do tipo:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \langle \mathbf{x} | \Psi_k^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left(e^{ik \cdot z} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \right)$$

e em ondas esféricas do tipo (potencial esfericamente simétrico):

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \langle \mathbf{x} | \Psi_k^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \frac{P_{\ell}(\cos \theta)}{2ik} \left(\underbrace{[1 + 2ik f_{\ell}(k)]}_{e^{2i\delta_{\ell}}} \frac{e^{+ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr - \ell\pi)}}{r} \right)$$

$e^{2i\delta_{\ell}}$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{o potencial só afeta a} \\ \text{onda esférica que sai} \end{array} \right.$

Construindo o pacote (unidimensional para facilitar)

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \int dk g(k) \Psi_k^{(+)}(\mathbf{x}) e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \text{ onde } g(k) = e^{i\alpha(k)} |g(k)| \rightarrow \begin{cases} |g| \text{ centrada} \\ \text{em } k_0. \end{cases}$$

Vamos supor que o espalhamento é dominado por um dado ℓ , e analisar as fases das ondas incidente e emergente.

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{r}, t) = \frac{(2\ell + 1)}{(2\pi)^{3/2}} \int dk \frac{P_{\ell}}{2k} e^{i(\alpha(k) - \pi/2 - \frac{E}{\hbar}t)} |g(k)| \left(\frac{e^{+i(kr + 2\delta_{\ell})}}{r} - \frac{e^{-i(kr - \ell\pi)}}{r} \right)$$

Espalhamento e Princípio da Causalidade

A condição de sobrevivência do pacote é garantir que a derivada com respeito à k das fases, calculada em k_0 (centro do pacote com respeito aos momentos) seja nula. Isto faz a integração em k “construtiva”. Assim, temos para a

onda que

$$\begin{cases} \text{sai:} & \frac{d}{dk}[kr + 2\delta_\ell + \alpha - \frac{\hbar k^2}{2m}t]_{k=k_0} = 0 \rightarrow r = \frac{\hbar k_0}{m}t - \frac{d\alpha}{dk}\Big|_{k_0} - 2\frac{d\delta_\ell}{dk}\Big|_{k_0} \\ \text{chega:} & \frac{d}{dk}[kr - \ell\pi - \alpha + \frac{\hbar k^2}{2m}t]_{k=k_0} = 0 \rightarrow r = -\frac{\hbar k_0}{m}t + \frac{d\alpha}{dk}\Big|_{k_0} \end{cases}$$

Considere agora dois eventos acontecendo em r_c e r_s nos instantes, t_c e t_s , respectivamente. Suponha que trata-se do pacote de onda cruzando uma casca esférica (raio a) onde V já é nulo. Primeiro o pacote chegando e depois o pacote saindo. Lembre que a condição acima, define o centro do pacote.

Que tal?

$$\begin{cases} (1) & r_c = -\frac{\hbar k_0}{m}t_c + \frac{d\alpha}{dk}\Big|_{k_0} \text{ onde } r_c \rightarrow \text{pacote chegando em } t_c < 0. \\ (2) & r_s = \frac{\hbar k_0}{m}t_s - \frac{d\alpha}{dk}\Big|_{k_0} - 2\frac{d\delta_\ell}{dk}\Big|_{k_0} \text{ onde } r_s \rightarrow \text{pacote saindo, em } t_s > 0. \end{cases}$$

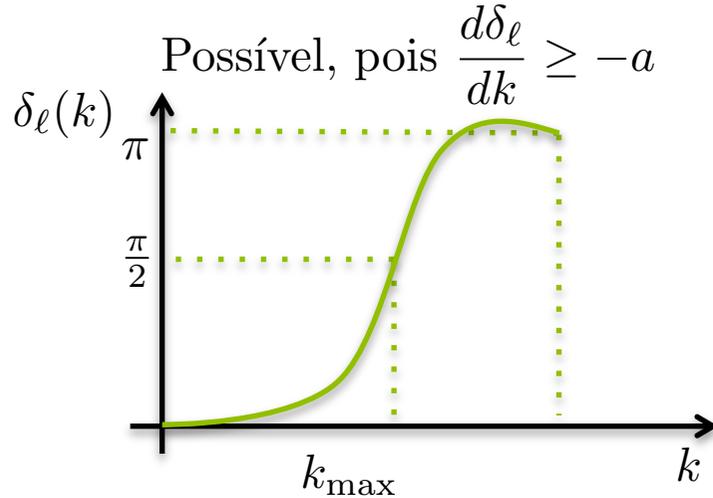
Some as equações (1) + (2) $\Rightarrow r_s + r_c = v(t_s - t_c) - 2\frac{d\delta_\ell}{dk}\Big|_{k_0}$

onde

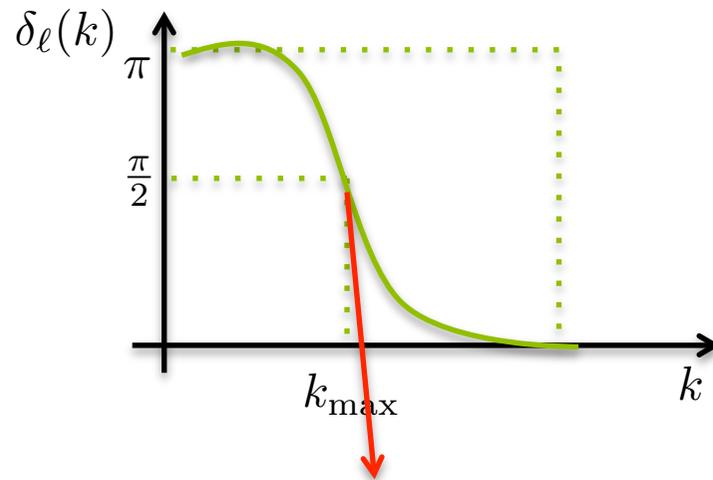
$$\begin{cases} (t_s - t_c) = \text{intervalo de tempo} \\ \text{entre chegar e sair.} \\ v = \frac{\hbar k_0}{m} = \text{velocidade do pacote.} \end{cases} \quad \text{Olharemos} \begin{cases} r_c = r_s = a \\ \text{eventos sobre} \\ \text{a casca} \end{cases}$$

Espalhamento e Princípio da Causalidade

Nestas condições $2a + 2\frac{d\delta_\ell}{dk} = v\Delta t \geq 0$. Ou seja $\frac{d\delta_\ell}{dk} \geq -a$ $\left\{ \begin{array}{l} \text{Princípio da} \\ \text{casualidade} \\ \text{de Wigner} \end{array} \right.$



Não possível, pois $\frac{d\delta_\ell}{dk} \leq -a$



1) Suponha $\frac{d\delta_\ell}{dk} \Big|_{k=k_0} > 0$

Quanto mais positivo for $\frac{d\delta_\ell}{dk}$, maior será Δt , pois assim $v\Delta t - 2\frac{d\delta_\ell}{dk}$ permanece constante e igual à $2a$. Δt grande \rightarrow atraso.

2) Suponha $\frac{d\delta_\ell}{dk} \Big|_{k=k_0} < 0$

Quanto mais negativo for $\frac{d\delta_\ell}{dk}$, menor será Δt , pois assim $v\Delta t - 2\frac{d\delta_\ell}{dk}$ permanece constante e igual à $2a$. Δt pequeno \rightarrow adiantamento.

Derivada aqui é muito negativa: $\Delta t < 0$ viola causalidade!

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

Até aqui, resolvemos o problema a partir de $|\Psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V |\Psi^{(\pm)}\rangle$

No formalismo dependente do tempo, temos $|\phi\rangle \xrightarrow{t} |\Psi\rangle$. O que comanda esta

mudança é $\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) |\Psi, t\rangle = V |\Psi, t\rangle \rightarrow$ ket depende do tempo na presença de V . Condição de contorno? $t \rightarrow -\infty$ a partícula era livre. Que tal o artifício, já usado antes: $V \rightarrow \lim_{\eta \rightarrow 0} V e^{+\eta t}$. No curso de Física/Matemática, aprendemos

que se soubermos a solução do problema: $\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t, t') = \delta(t - t')$

a equação diferencial completa tem uma equivalente integral dada por:

$$|\Psi^{(+)}; t\rangle = |\phi; t\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t, t') V |\Psi^{(+)}; t'\rangle dt'$$

Para verificar isso, aplique $\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)$ nos dois lados e obtenha:

$$\begin{aligned} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) |\Psi^{(+)}; t\rangle &= \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) |\phi; t\rangle}_{\rightarrow 0} + \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t, t') V}_{\delta(t - t')} |\Psi^{(+)}; t'\rangle dt' = V |\Psi^{(+)}; t\rangle \end{aligned}$$

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

Para obter a solução de $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t, t') = \delta(t - t')$ exigimos primeiro que $G_+(t, t')$ só é diferente de zero, se $t > t'$, isto é, impomos a condição de contorno retardada $G_+(t, t') = 0$ se $t < t'$. Para $t > t'$, queremos a solução da equação $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t, t') = 0 \xrightarrow{\text{direta}} G_+(t, t') = A(t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$. Em $t = t'$, ela precisa satisfazer $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t, t') = \delta(t - t')$. Lembrando que $\frac{\partial}{\partial t}\Theta(t - t') = \delta(t - t')$, sugerimos um G_+ dado por:

$$G_+(t, t') = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t - t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}$$

Para verificar a sugestão, substitua $G_+(t, t')$ no lado esquerdo da equação do topo e obtenha

$$\begin{aligned} \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) G_+(t, t') &= \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right) \left[-\frac{i}{\hbar}\Theta(t - t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')}\right] = \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial t}\Theta(t - t')\right]e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} + \Theta(t - t')\cdot\frac{-i}{\hbar}H_0e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} + \\ &+ \frac{i}{\hbar}H_0\cdot\Theta(t - t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} = \delta(t - t')e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} = \delta(t - t') \text{ c.q.d.} \end{aligned}$$

usamos na última passagem que $f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)\delta(x - x_0)$

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

Assim $|\Psi^{(+)}; t\rangle = |\phi; t\rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} G_+(t, t') V |\Psi^{(+)}; t'\rangle dt'$, com

$$G_+(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t - t') e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(t-t')}$$

- Note que o $+\infty$ pode ser trocado por t (devido a função degrau);
- Note também que a exponencial é o operador de evolução temporal.
- Será que a condição de contorno está correta?

Quanto vale $|\Psi^{(+)}; t\rangle$ quando $t \rightarrow -\infty$? $|\Psi^{(+)}; t\rangle = |\phi; t\rangle$, pois $t < t'$ e a função degrau zera a contribuição da integral.

- Como relacionar esta equação com a equação de Lippmann-Schwinger independente do tempo?

Suponha que $\begin{cases} |\Psi^{(+)}; t\rangle \text{ é solução estacionária de } H \\ |\phi; t\rangle \text{ é solução estacionária de } H_0 \end{cases}$

O que equivale à $\begin{cases} |\Psi^{(+)}; t\rangle = |\Psi^{(+)}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \\ |\phi; t\rangle = |\phi\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \end{cases} \implies$ note o mesmo E .

Como já havíamos discutido a energia é a mesma, independente se o potencial está ligado ou não. Coloque isso na equação do topo.

Formulação dependente do tempo do Espalhamento

$$|\Psi^{(+)}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et} = |\phi\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et} + \int_{-\infty}^t -\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-t')} V |\Psi^{(+)}\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}Et'} dt',$$

que em $t = 0$, temos

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \int_{-\infty}^0 -\frac{i}{\hbar} \underbrace{\Theta(-t')} e^{+\frac{i}{\hbar}(H_0-E)t'} V |\Psi^{(+)}\rangle dt'.$$

1, porque $-t'$ é sempre positivo

Lembrando que $V(t) = e^{\eta t} V$, podemos escrever:

$$\begin{aligned} |\Psi^{(+)}\rangle &= |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{t'' \rightarrow -\infty} \int_{t''}^0 e^{+\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t'} V |\Psi^{(+)}\rangle dt' = \\ &= |\phi\rangle - \frac{i}{\hbar} \lim_{t'' \rightarrow -\infty} \frac{\hbar}{i(H_0-E-i\eta\hbar)} e^{+\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t'} \Big|_{t''}^0 V |\Psi^{(+)}\rangle \\ &= |\phi\rangle + \frac{1}{(E-H_0+i\eta\hbar)} \underbrace{\left(1 - \lim_{t'' \rightarrow -\infty} e^{+\frac{i}{\hbar}(H_0-E-i\eta\hbar)t''} \right)}_0 V |\Psi^{(+)}\rangle \end{aligned}$$

0, pois $\lim_{t'' \rightarrow -\infty} e^{\eta\hbar t''} = 0$

E assim, obtemos a Eq. de Lippmann-Schwinger (independente do tempo)

$$|\Psi^{(+)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\eta\hbar} V |\Psi^{(+)}\rangle$$