A outra função de Green

Na aula passada obtivemos:

$$G_{\pm}(\mathbf{x},\mathbf{x}') = -\frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{i|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\int_{-\infty}^{\infty} dq \frac{q}{q^2-k^2 \mp i\varepsilon}\left(e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{-iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\right) \tag{1}$$

Esta expressão tem polos em:

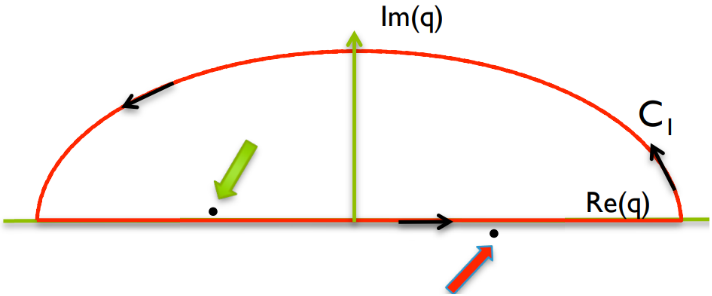
$$q^2 = k^2 \pm i\varepsilon \implies q = \pm\sqrt{k^2 \pm i\varepsilon} = \pm k(1 \pm i\varepsilon) \tag{2}$$

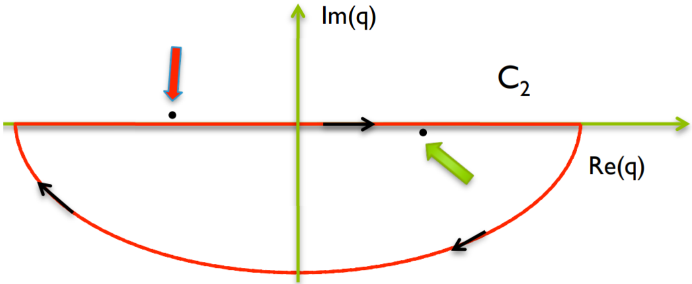
a integral já foi feita o caso $+i\varepsilon$ em que:

$$q = k + i\varepsilon \qquad\qquad q = -k - i\varepsilon$$

faremos o caso $-i\varepsilon$, em que:

$$q = k - i\varepsilon \qquad\qquad q = -k + i\varepsilon$$


Im(q)
C_1
Re(q)


Im(q)
C_2
Re(q)

Definimos

$$f(q) = \frac{q}{q^2 - k^2 + i\varepsilon}\left(e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - e^{-iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\right)$$

E para integrarmos no plano fazemos:

$$\int_\gamma f(q)dq \longmapsto \int f(\gamma(t))\gamma'(t)dt \tag{3}$$

Para a porção na reta real temos:

$$\gamma(t) = t \qquad\qquad t \in (-R, R) \tag{4}$$

Para o semicírculo temos:

$$\gamma(t) = Re^{it}\begin{cases} t \in (0, \quad \pi) \text{ if } & C_1 \\ t \in (0, -\pi) \text{ if } & C_2 \end{cases} \tag{5}$$

A forma geral da integração será

$$\int_{C} = \int_{\text{s. Circulo}} + \int_{-R}^{R}$$

Sabemos que o resultado da integral em C será igual ao resíduo do polo fechado no caminho.
Cada uma das exponenciais seleciona um polo diferente

Substituiremos Re^{it} em $f(q)$. Usando $Re^{it} = R\cos(t) + iR\sin(t)$ estamos interessados na exponencial:

$$e^{+iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \mapsto \exp\left\{iRe^{it}|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\right\} = \exp\left\{(Ri\cos(t) - R\sin(t))|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\right\}$$

Quando $R \mapsto \infty$, precisamos que $\sin(t) > 0$, do contrário o resultado diverge. Asseguramos isto integrando apenas esta exponencial por C_1 (o caminho superior).

O polo selecionado neste caminho é $-k + i\varepsilon$. O resíduo é então:

$$\lim_{q \mapsto -(k-i\varepsilon)} (q + k - i\varepsilon) \frac{q}{(q - (k - i\varepsilon))\,(q + (k - i\varepsilon))} e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} = \frac{(-k + i\varepsilon)}{2\,(-k + i\varepsilon)} e^{i(-k+i\varepsilon)|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} = \frac{1}{2} e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

Daí:

$$\int_{C_1} \frac{q}{q^2 - k^2 + i\varepsilon} e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} dq = 2\pi i \frac{1}{2} e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} =$$

$$\int_0^{\pi} \frac{(Re^{it})}{(Re^{it})^2 - k^2 + i\varepsilon} e^{i(Re^{it})|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} dt + \int_{-R}^{R} \frac{t}{t^2 - k^2 + i\varepsilon} e^{it|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} dt$$

já vimos que no limite $R \mapsto \infty$ a segunda integral se anula, temos então:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{q}{q^2 - k^2 + i\varepsilon} e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} dq = \pi i e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

Prosseguimos da mesma maneira para a outra exponencial:

$$e^{-iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \mapsto \exp\left\{-iRe^{it}|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\right\} = \exp\left\{(-Ri\cos(t) + R\sin(t))|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|\right\}$$

Agora devemos ter $\sin(t) < 0$ então integramos pelo contorno de baixo. O polo é $k - i\varepsilon$. O resíduo:

$$\lim_{q \mapsto k-i\varepsilon} (q-(k-i\varepsilon)) \frac{q}{(q-(k-i\varepsilon))\,(q+(k-i\varepsilon))} e^{iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} = \frac{(k-i\varepsilon)}{2\,(k-i\varepsilon)} e^{-i(k-i\varepsilon)|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} = \frac{1}{2} e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

No limite de R a integral no semi-círculo se anula. Notando que pela direção do caminho temos um sinal de menos, o resultado é:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{q}{q^2 - k^2 + i\varepsilon} e^{-iq|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} dq = -\pi i e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

Substituindo na equação (1) para $G_{-}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ temos:

$$G_{-}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{1}{8\pi^2} \frac{1}{i|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \left(\pi i e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} - \left(-\pi i e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \right) \right)$$
$$= -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} e^{-ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} \tag{6}$$

Solução assimptótica

Agora para mostrar que

$$\mathbf{\Psi}^{(+)}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{2}{3}}} \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{e^{ikx}}{x} \right)$$

satisfaz a equação de Schrödinger para partícula livre no limite $x \mapsto \infty$, isto é, quando a função de onda está longe do potencial.
A equação para partícula livre é:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \mathbf{\Psi}^{(+)}(x) = E \mathbf{\Psi}^{(+)}(x)$$

fazendo $E = \frac{\mathbf{k}^2 \hbar^2}{2m}$ reescrevemos na forma:

$$\left(\nabla^2 + \mathbf{k}^2 \right) \mathbf{\Psi}^{(+)}(x) = 0$$

Começamos com $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$, ao aplicar o Laplaciano temos:

$$\nabla^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} = (\partial_{xx} + \partial_{yy} + \partial_{zz})\, e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = -\mathbf{k}^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \tag{7}$$

Agora para o segundo termo, precisamos escrever o Laplaciano como: $\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla$ Assim:

$$\nabla^2 \frac{e^{ikx}}{x} = \nabla \left(\frac{1}{x} \nabla e^{ikx} + e^{ikx} \nabla \frac{1}{x} \right) = \frac{1}{x} \nabla^2 e^{ikx} + e^{ikx} \nabla^2 \frac{1}{x} + 2 \nabla \frac{1}{x} \cdot \nabla e^{ikx}$$

precisamos agora de:

$$\nabla f(x) = \frac{df}{dx} \hat{\mathbf{x}}$$

para f dependente apenas de x

Assim:

$$\nabla \frac{1}{x} \cdot \nabla e^{ikx} = \left(-\frac{1}{x^2}\hat{\mathbf{x}}\right)\left(ike^{ikx}\hat{\mathbf{x}}\right) = \frac{-ik}{x^2}e^{ikx} \tag{8}$$

Similarmente:

$$\nabla^2 e^{ikx} = \nabla\left(ike^{ikx}\frac{\mathbf{x}}{x}\right) = \nabla\left(\frac{ik}{x}e^{ikx}\right)\cdot\mathbf{x} + \frac{ik}{x}e^{ikx}\nabla\mathbf{x} \tag{9}$$

note que $\nabla\mathbf{x} = 3$. Portanto:

$$\left(-\frac{ik}{x^2}e^{ikx} - \frac{k^2}{x}e^{ikx}\right)x + 3\frac{ik}{x}e^{ikx} = 2\frac{ik}{x}e^{ikx} - k^2e^{ikx} \tag{10}$$

finalmente usando:

$$\nabla^2\frac{1}{x} = -4\pi\delta(\mathbf{x})$$

Substituímos:

$$\nabla^2 \frac{e^{ikx}}{x} = \left(-4\pi\delta(\mathbf{x})e^{ikx}\right) + \left(2\frac{ik}{x^2}e^{ikx} - \frac{k^2}{x}e^{ikx}\right) + \left(\frac{-2ik}{x^2}e^{ikx}\right)$$

Depois de reescrevermos:

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\frac{e^{ikx}}{x} = -4\pi\delta(\mathbf{x})$$

Note que a funções de Green $G_{\pm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ são também soluções.

Adicionado

Precisamos ainda tomar cuidado com o $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Percebemos que $\mathbf{k}'$ aponta na direção de $\mathbf{x}$, e assim tem dependência nos ângulos θ e ϕ de $\mathbf{x}$ em coordenadas esféricas. Temos então de fato que avaliar:

$$\nabla^2 f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{1}{x} e^{ikx} = \nabla^2 f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + 2\nabla \left(f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \right) \cdot \nabla \left(\frac{e^{ikx}}{x} \right) + \nabla^2 \frac{e^{ikx}}{x}$$

lembramos agora que:

$$\nabla f(\theta, \phi) = \left(\frac{\hat{\theta}}{x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\hat{\phi}}{x \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) f(\theta, \phi)$$

$$\nabla^2 f(\theta, \phi) = \frac{1}{x^2 \sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin(\theta) \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{x^2 \sin^2(\theta)} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}$$

Como $f(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ não depende de x, as expressões anteriores valem. Como as derivadas nos ângulos não podem trazer nenhum termo da ordem de x, é certo que $\nabla f(\mathbf{k},\mathbf{k}') \sim \frac{1}{x}$, de maneira que

$$\nabla \left(f(\mathbf{k},\mathbf{k}')\right) \cdot \nabla \left(\frac{e^{ikx}}{x}\right) \sim \frac{1}{x^2}$$

E $\nabla^2 f(\mathbf{k},\mathbf{k}') \sim \frac{1}{x^2}$. Vemos então que estes termos estão suprimidos em relação a $\nabla^2 \frac{e^{ikx}}{x}$ (que como vimos é da ordem de $\sim \frac{1}{x}$) por um fator de pelo menos $\frac{1}{x}$.

Considerando então apenas termos $\sim \frac{1}{x}$, concluímos que no limite $x \mapsto \infty$, a função $\mathbf{\Psi}^{(+)}(x)$ é solução da equação de Schrödinger para partícula livre em primeira ordem de $\frac{1}{x}$, assumindo que o potencial tende a zero mais rápido que $\frac{1}{x}$ para poder ser ignorado.