

O método de ondas parciais para o problema de espalhamento

Na aula passada, escrevemos a amplitude de espalhamento da seguinte forma:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta)$$

Para obter a seção de choque diferencial basta calcular $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$. Vamos calcular a seção de choque integral, também chamada de seção de choque total, se espalhamento de potenciais que não carregam a estrutura interna do alvo. Em geral, se integrarmos apenas nos ângulos, ela chamará *seção de choque integral*. Mas, se integrarmos nos ângulos e somarmos sobre todos os processos possíveis, ela será denominada *seção de choque total*. A seção de choque integral pode ser para um determinado processo, por exemplo, *seção de choque integral elástica*, ou *seção de choque integral da excitação $X \rightarrow A$, do alvo Z* . No caso presente, de potencial Hermiteano de um corpo só, a seção de choque integral é elástica e igual à total, pois só o processo elástico é permitido. Ela é definida

$$\begin{aligned} \text{por: } \sigma_{total} &= \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = \int d\Omega |f(\theta)|^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta |f(\theta)|^2 = \\ &= \frac{2\pi}{k^2} \int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) e^{i(\delta_{\ell} - \delta_{\ell'})} \sin \delta_{\ell} \sin \delta_{\ell'} P_{\ell'}(\cos \theta) P_{\ell}(\cos \theta) \end{aligned}$$

O método de ondas parciais para o problema de espalhamento

Mas, $\int_{-1}^{+1} d(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta) P_{\ell}(\cos \theta) = \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'}$ (mostre!) e assim :

$$\sigma_{total} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) e^{i(\delta_{\ell} - \delta_{\ell'})} \sin \delta_{\ell} \sin \delta_{\ell'} \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell\ell'}$$

deduzido em disciplinas de física-matemática

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}$$

Note que existe uma contribuição máxima de cada onda parcial!

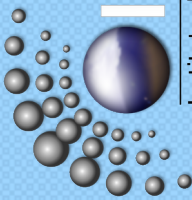
Como fica o teorema óptico, $\text{Im}f(\theta = 0) = \frac{k\sigma_{total}}{4\pi}$? Isso pode ser obtido de

$$\text{Im}f(\theta = 0) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \underbrace{\text{Im}e^{i\delta_{\ell}}}_{\sin \delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} \underbrace{P_{\ell}(\cos(\theta = 0))}_{1} = \frac{k}{4\pi} \underbrace{\frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_{\ell}}_{\sigma_{total}}$$

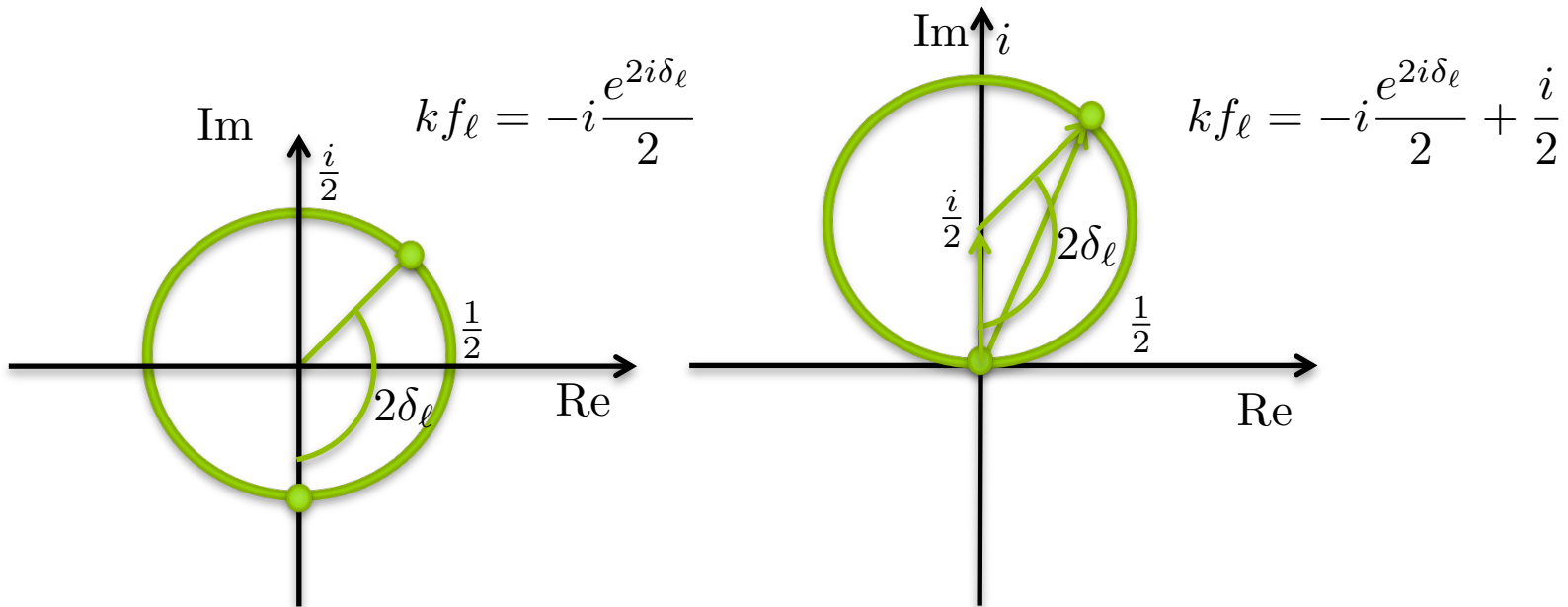
De volta para a relação entre f_{ℓ} e δ_{ℓ} . Quando mudamos a energia, δ_{ℓ} muda, e por conseguinte muda f_{ℓ} . Note que f_{ℓ} , entretanto, não muda de qualquer maneira,

$$f_{\ell} = \frac{e^{2i\delta_{\ell}} - 1}{2ik} \implies kf_{\ell} = -i \frac{e^{2i\delta_{\ell}}}{2} + \frac{i}{2}$$

Como fica essa dependência no plano complexo? Próximo slide.



O método de ondas parciais para o problema de espalhamento



Comentários

- kf_ℓ precisa cair sobre a circunferência.
- Se $\delta_\ell \ll 1 \rightarrow kf_\ell$ fica na parte debaixo do círculo da direita e é quase real.
- $|kf_\ell|$ é máximo quando $2\delta_\ell = \pi \therefore \delta_\ell = \pi/2$. Isso faz sentido, pois, lembre que $\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell$.

Próxima tarefa: determinar os δ_ℓ

Determinação dos deslocamentos de fase

Suponha $V(r) = 0$ se $r > R$ (alcance do potencial). Para $r > R$ a função de onda é combinação de ondas esféricas. De fato, é solução da equação de Schrödinger da partícula livre, cuja forma geral é uma combinação de funções

de $\left\{ \begin{array}{l} \text{Newman, } \eta_\ell(kr), \text{ que não se comporta bem na origem.} \\ \text{e} \\ \text{Bessell, } j_\ell(kr), \text{ que se comporta bem na origem.} \end{array} \right.$

deduzidas em disciplinas de física-
matemática - ver apêndice B.5

[lousa](#)

Assim, para $r > R$, onde o potencial é zero, a função de onda deve ser uma combinação de $\eta_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)$ e $j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)$. Ou se quisermos trabalhar

com funções de Hankel $\left\{ \begin{array}{l} h^{(1)} = j_\ell + i\eta_\ell \Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} h^{(1)} = \frac{e^{i(kr - \ell\pi/2)}}{ikr} \\ \text{deduzidas em disciplinas de física-} \\ \text{matemática- ver apêndice B.5} \\ h^{(2)} = j_\ell - i\eta_\ell \Rightarrow \lim_{r \rightarrow \infty} h^{(2)} = -\frac{e^{-i(kr - \ell\pi/2)}}{ikr} \end{array} \right.$

A função de onda pode ser escrita como

$$\langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) A_{\ell} P_{\ell}(\cos\theta) \text{ para } r > R, \text{ onde}$$

[lousa](#)

$A_{\ell}(kr) = c_{\ell}^{(1)} h_{\ell}^{(1)}(kr) + c_{\ell}^{(2)} h_{\ell}^{(2)}(kr)$. Os coeficientes que multiplicam as funções de Hankel são escolhidos de tal forma que se $V = 0$, $A_{\ell}(kr)$ fica $j_{\ell}(kr)$ em todos os pontos.

Determinação dos deslocamentos de fase

Para $r > R$ e R muito grande, vimos que

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

que precisa ser comparado com

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} \langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \lim_{r \rightarrow \infty} A_{\ell}(kr) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \lim_{r \rightarrow \infty} \left(c_{\ell}^{(1)} h_{\ell}^{(1)}(kr) + c_{\ell}^{(2)} h_{\ell}^{(2)}(kr) \right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos \theta) \left(c_{\ell}^{(1)} \frac{e^{i(kr - \ell\pi/2)}}{ikr} - c_{\ell}^{(2)} \frac{e^{-i(kr - \ell\pi/2)}}{ikr} \right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \frac{P_{\ell}(\cos \theta)}{2ik} \left(2c_{\ell}^{(1)} \frac{e^{ikr}}{r} - 2c_{\ell}^{(2)} \frac{e^{-i(kr - \ell\pi)}}{r} \right) \end{aligned}$$

(usei que $i^{\ell} = e^{i\pi\ell/2}$). Comparação direta fornece:

$$c_{\ell}^{(1)} = \frac{1}{2} S_{\ell} = \frac{1}{2} e^{i2\delta_{\ell}} \quad \text{e} \quad c_{\ell}^{(2)} = \frac{1}{2}$$

Devolvendo isso em A_{ℓ} , temos $A_{\ell} = \frac{1}{2} e^{i2\delta_{\ell}} h^{(1)} + \frac{1}{2} h^{(2)}$. *Mostre que*

$$\text{(para } r > R) \quad A_{\ell}(kr) = e^{i\delta_{\ell}} (\cos \delta_{\ell} j_{\ell}(kr) - \sin \delta_{\ell} \eta_{\ell}(kr))$$

↗ basta inserir as definições de $h^{(1)}$ e $h^{(2)}$ do slide 4

Determinação dos deslocamentos de fase

A partir de $A_\ell(kr) = e^{i\delta_\ell} (\cos \delta_\ell j_\ell(kr) - \sin \delta_\ell \eta_\ell(kr))$ podemos

calcular $\beta_\ell \equiv \left(\frac{r}{A_\ell} \frac{dA_\ell}{dr} \right) \Big|_{r=R} = kR \left(\frac{j'_\ell(kR) \cos \delta_\ell - \eta'_\ell(kR) \sin \delta_\ell}{j_\ell(kR) \cos \delta_\ell - \eta_\ell(kR) \sin \delta_\ell} \right)$

onde j'_ℓ e η'_ℓ são derivadas com respeito a kr . Se aprendermos como obter β_ℓ , podemos inverter esta equação e calcular δ_ℓ . A inversão é relativamente simples. Basta agrupar os coeficientes dos $\sin \delta_\ell$ e $\cos \delta_\ell$.

$\frac{\beta_\ell}{kR} (j_\ell(kR) \cos \delta_\ell - \eta_\ell(kR) \sin \delta_\ell) = j'_\ell(kR) \cos \delta_\ell - \eta'_\ell(kR) \sin \delta_\ell$ ou ainda

$$\left(\frac{\beta_\ell}{kR} j_\ell - j'_\ell \right) \cos \delta_\ell = \left(\frac{\beta_\ell}{kR} \eta_\ell - \eta'_\ell \right) \sin \delta_\ell \text{ que fornece:}$$

$$\tan \delta_\ell = \frac{kR j'_\ell(kR) - \beta_\ell j_\ell(kR)}{kR \eta'_\ell(kR) - \beta_\ell \eta_\ell(kR)} \quad \therefore \begin{cases} \text{Se acharmos } \beta_\ell \\ \text{teremos achado } \delta_\ell. \end{cases}$$

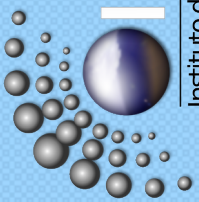
Para determinar β_ℓ , precisamos resolver a equação de Schrödinger na região do potencial,

$$\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) u_\ell = 0 \text{ onde } u_\ell = r A_\ell(r) \text{ e } u_\ell(r)|_{r=0} = 0$$

Integre esta equação até $r = R$, calcule $\beta_\ell \Big|_{\text{solução interna}}$ e iguale à $\beta_\ell \Big|_{\text{solução externa}}$

Note que β_ℓ é um número real. Tendo ele, calcule $\tan \delta_\ell$.

Note que β é calculado onde o potencial é zero (solução externa)



Aplicação: Espalhamento da esfera dura

O problema tridimensional de barreira infinita ou esfera dura é definido pelo

$$\text{potencial } V \begin{cases} \infty & \text{para } r \leq R \\ 0 & \text{para } r > R \end{cases}$$

Como a esfera é impenetrável, a função de onda precisa se anular em $r = R$. Isto já é suficiente para achar δ_ℓ (não é preciso calcular β_ℓ neste caso).

$$A_\ell(kr)|_{r=R} = e^{i\delta_\ell} (\cos \delta_\ell j_\ell(kR) - \sin \delta_\ell \eta_\ell(kR)) = 0 \Rightarrow \tan \delta_\ell = \frac{j_\ell(kR)}{\eta_\ell(kR)}$$

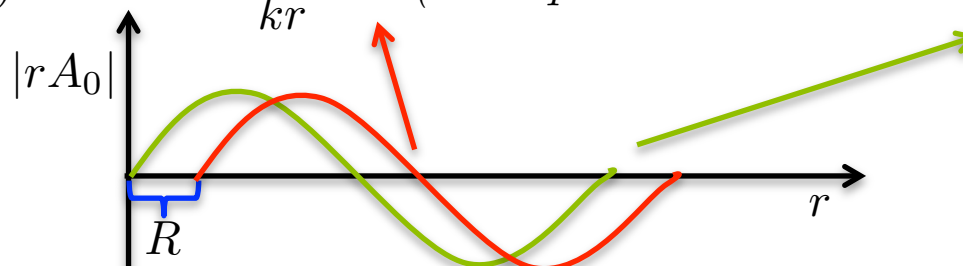
$$\text{Caso } \ell = 0 \begin{cases} j_0(kR) = \frac{\sin kR}{kR} \\ \eta_0(kR) = -\frac{\cos kR}{kR} \end{cases} \Rightarrow \tan \delta_0 = -\tan kR \therefore \delta_0 = -kR$$

deduzidas em disciplinas de física-matemática - ver apêndice B.5

A parte radial da função de onda varia da seguinte forma:

$$A_0(kr) = e^{i\delta_0} \left(\frac{\cos \delta_0 \sin kr}{kr} + \frac{\sin \delta_0 \cos kr}{kr} \right) = e^{i\delta_0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr} \text{ ou}$$

$$A_0(kr) = e^{i\delta_0} \frac{\sin k(r - R)}{kr} \text{ (note que se não houvesse } V, A_0 = j_0 = \frac{\sin kr}{kr} \text{)}$$



Aplicação: Espalhamento da esfera dura

Ainda para a esfera dura, estudaremos $\tan \delta_\ell$ para altas ($kR \gg 1$) e baixas ($kR \ll 1$) energias.

Baixa energia

$$\text{Para } kR \ll 1 \begin{cases} j_\ell(kr) = \frac{(kr)^\ell}{(2\ell+1)!!} \\ \eta_\ell(kr) = -\frac{(2\ell-1)!!}{(kr)^{\ell+1}} \end{cases} \implies \tan \delta_\ell = -\frac{(kR)^{2\ell+1}}{(2\ell+1)!!(2\ell-1)!!}$$

deduzidas em disciplinas de física-matemática - ver apêndice B.5

Para $\ell = 0 \rightarrow \tan \delta_0 = -kR \approx \delta_0$ mesmo resultado que antes que era exato.

Note que é justo desprezar os δ_ℓ para $\ell > 0$, pois $\tan \delta_\ell \propto (kR)^{2\ell+1}$.

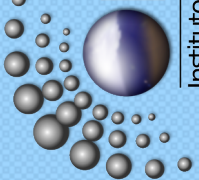
$$\text{Se } \delta_0 = -kR \implies \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \text{ com } f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell} (2\ell+1) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \theta)$$

Truncando a soma, em $\ell = 0$, temos $f(\theta) \approx \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \rightarrow |f(\theta)|^2 = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2}$

$$\text{E } \therefore \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k^2 R^2}{k^2} = R^2 \implies \sigma_{total} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = R^2 \int d\Omega = 4\pi R^2$$

A seção de choque é quatro vezes maior que a seção de choque geométrica.

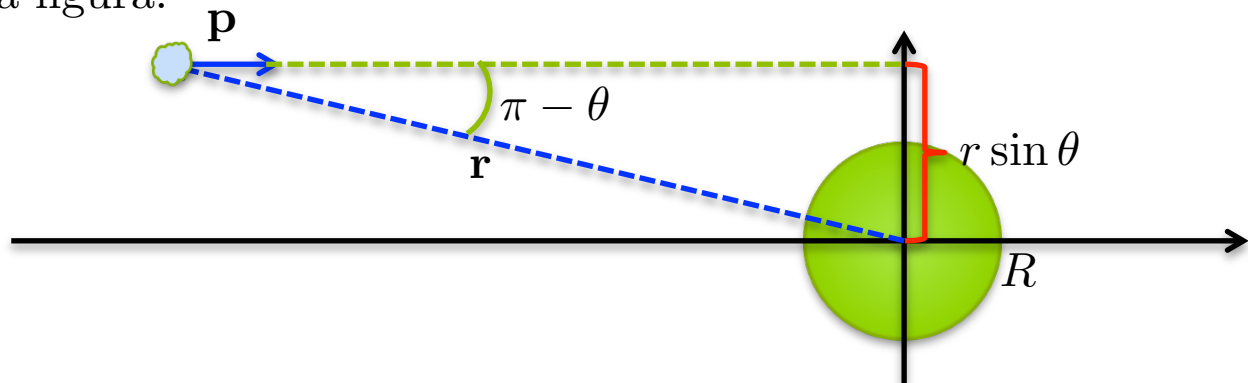
Baixa energia, comprimento de onda grande, mecânica quântica difere da mecânica clássica. Será que para altas energias teremos $\sigma_{total} = \pi R^2$?



Aplicação: Espalhamento da esfera dura

Alta energia

Para $kR \gg 1$ precisamos somar as contribuições de δ_ℓ que diferem de zero. Lembre que soma em ℓ vai até infinito, mas a partir de um dado ℓ , $\delta_\ell \approx 0$ e a soma pode ser truncada. ℓ está associado momento angular. Classicamente $L = |\mathbf{r} \times \mathbf{p}| = rp \sin \theta$ onde $r \sin \theta$ é o “braço de alavanca”, indicado na figura.



Note que classicamente quando $r \sin \theta > R$, a partícula, com momento angular superior a Rp , deixa de colidir com a esfera rígida. Com isso em mente, somaremos em ℓ até $\ell_{max} = kR$. Desta forma, a seção de choque total pode ser escrita por

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell=kR} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell$$

Aplicação: Espalhamento da esfera dura

Considerando $\sin^2 \delta_\ell = \frac{\tan^2 \delta_\ell}{1 + \tan^2 \delta_\ell}$ e que $\tan \delta_\ell = \frac{j_\ell(kR)}{\eta_\ell(kR)}$, temos:

$$\sin^2 \delta_\ell = \frac{j_\ell^2(kR)}{j_\ell^2(kR) + \eta_\ell^2(kR)}. \text{ Para } kR \gg 1 \begin{cases} j_\ell(kR) = \frac{1}{kR} \sin(kR - \ell\pi/2) \\ \eta_\ell(kR) = -\frac{1}{kR} \cos(kR - \ell\pi/2) \end{cases}$$

deduzidas em disciplinas de física-matemática - ver apêndice B.5

e assim $\sin^2 \delta_\ell = \frac{\sin^2(kR - \ell\pi/2)}{\sin^2(kR - \ell\pi/2) + \cos^2(kR - \ell\pi/2)} = \sin^2(kR - \ell\pi/2)$

Agora basta realizar a soma: $\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell=kR} (2\ell + 1) \sin^2(kR - \ell\pi/2)$

Para realizar esta soma, considere dois termos consecutivos da série

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell=kR} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell, \text{ isto é } \begin{cases} \ell \rightarrow (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell \\ \text{e} \\ \ell' = \ell + 1 \rightarrow (2(\ell + 1) + 1) \sin^2 \delta_{\ell+1} \end{cases}$$

some-os para obter $\underbrace{(2\ell + 1) (\sin^2 \delta_\ell + \sin^2 \delta_{\ell+1})}_{1 \text{ devido ao } \ell\pi/2} + 2 \underbrace{\sin^2 \delta_{\ell+1}}_{< 1}$

Para finalmente obter $\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \left(\sum_{\substack{\ell=0 \\ 2 \text{ em } 2}}^{\ell=kR} (2\ell + 1) + \sum_{\substack{\ell=0 \\ 2 \text{ em } 2}}^{\ell=kR} 2 \sin^2 \delta_{\ell+1} \right)$

Aula 15 Note agora que a primeira soma é de uma progressão aritmética e a segunda é uma soma de números menores do que um

$$\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \left(\underbrace{\sum_{\substack{\ell=0 \\ 2 \text{ em } 2}}^{\ell=kR} (2\ell + 1)}_{\text{número de termos}} + 2 \underbrace{\sum_{\substack{\ell=0 \\ 2 \text{ em } 2}}^{\ell=kR} \sin^2 \delta_{\ell+1}}_{\text{valor médio}} \right)$$

este vai com kR

Soma de termos da progressão aritmética é igual à $\frac{kR}{2} \times \frac{1 + 2kR + 1}{2} \propto \frac{(kR)^2}{2}$.

A segunda soma é linear em kR e pode ser desprezada para kR , suficientemente grande. Note que se trocássemos todos os $\sin^2 \delta_{\ell+1}$ por 1 a soma seria $kR/2$.

A seção de choque total, é, portanto $\sigma_{total} = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(kR)^2}{2} \approx 2\pi R^2!!$ Isso é o dobro da geométrica. Surpreso?

- *Um potencial com uma descontinuidade é sempre quântico!*
- *Mesmo comprimentos de onda minúsculos percebem a descontinuidade.*
- *Uma explicação mais detalhada sobre este resultado pode ser visto na aproximação Eikonal - Seção 6.5, leitura suplementar.*

faça!

O Apêndice B.5 traz as soluções de problemas centrais (potenciais esfericamente simétricos $V = V(r)$). Em especial as soluções para o caso $V(r) = 0$ da equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_E}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi_E}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial \phi^2} \right] + V(r) \psi_E = E \psi_E$$

com $\psi_E(\mathbf{r}) = R(r)Y_m^\ell(\theta, \phi)$ e $R(r)$ podendo ser combinações de j_ℓ , n_ℓ , $h_\ell^{(1)}$, e $h_\ell^{(2)}$, dependendo do caso.

slide 4

A forma da função de onda

$$\langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) A_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta)$$

foi inspirada no slide 6 da aula 14, onde (\mathbf{k} na direção z)

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = e^{ikr \cos \theta} = e^{ikz} = \sum_{\ell} i^{\ell} (2\ell + 1) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\underbrace{\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}}_{\downarrow \cos \theta})$$