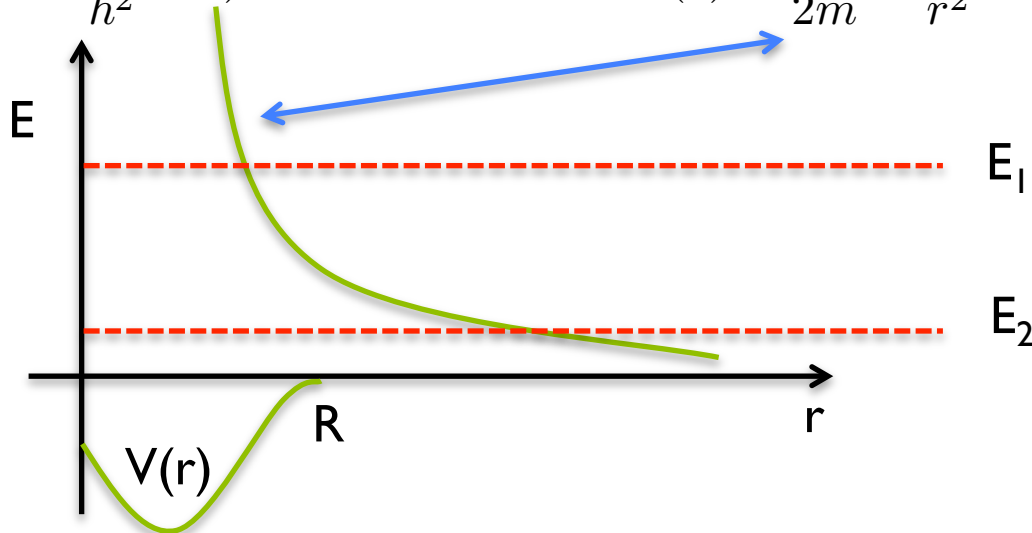


Espalhamento de baixa energia e estados ligados

Baixa energia $\Rightarrow \lambda = \frac{1}{k} \gtrsim R$. Já vimos que ℓ 's grandes não serão importantes.

O argumento clássico para isso é que a partícula passa acima da barreira de potencial. Como fica o argumento quântico? Para desenvolvê-lo, considere a equação radial que a função de onda precisa satisfazer:

$$\frac{d^2 u_\ell}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V_{\text{eff}} \right) u_\ell = 0 \text{ com } V_{\text{eff}} = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}.$$



Suponha V como alcance R , como na figura. Note que uma partícula que chega com energia E_1 vê o potencial, mas com energia E_2 pode não vê-lo, mesmo com efeito túnel. Se não vê o potencial, δ_ℓ correspondente é zero. Aumentar ℓ , empurra a barreira de momento angular para direita e garante que o restante dos δ_ℓ também serão nulos.

Espalhamento de baixa energia e estados ligados

Suponha que V_{eff} não pode acomodar um estado ligado para $\ell \neq 0$. Nestas condições, V_{eff} é dominado por $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$. Como seria a dependência de δ_ℓ com k para baixas energias? O Exercício 6.9 da lista 3 nos ensinou que:

$$f_\ell(k) = \frac{e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell}{k} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty j_\ell(kr) A_\ell(k; r) V(r) r^2 dr \quad \text{lousa}$$

Se o potencial é “quase” o termo centrífugo, é esperado que

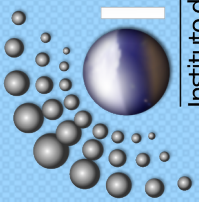
$A_\ell(k; r) \rightarrow j_\ell(kr)$ (solução da equação para o termo centrífugo $= V_{\text{eff}}$). Assim,

$$f_\ell(k) = \frac{e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell}{k} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty j_\ell^2(kr) V(r) r^2 dr, \quad \text{mas} \quad \lim_{kr \ll 1} j_\ell(kr) \approx \frac{(kr)^\ell}{(2\ell+1)!!}$$

e $\therefore j_\ell^2(kr) \sim k^{2\ell} \Rightarrow f_\ell(k) = \frac{e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell}{k} \sim k^{2\ell}$. Ou seja $\lim_{k \rightarrow 0} f_\ell(k) = 0$ para $\ell \neq 0$.

Note que $\lim_{k \rightarrow 0} \delta_\ell(k) \propto k^{2\ell+1} \left\{ \begin{array}{l} \text{Quanto maior } \ell, \text{ mais rapidamente } \delta_\ell \text{ vai à zero} \\ \text{Para } \ell = 0, \delta_0 \propto k \text{ vai à zero com } k \text{ indo à zero} \end{array} \right.$

Assim, confirmamos nosso argumento intuitivo: para baixas energias, os ℓ 's grandes não serão importantes.



Espalhamento de baixa energia e estados ligados

Poço e Barreira retangular (esfera mole)

$$V = \begin{cases} V_0 = \text{cte para } r < R \text{ dois casos: } \begin{cases} V_0 > 0 \text{ (repulsivo)} \\ V_0 < 0 \text{ (atrativo)} \end{cases} \\ 0 \text{ para } r \geq R. \end{cases}$$

Solução

- Já sabemos a forma da solução para $r \geq R$

$$\ell = 0 \Rightarrow e^{i\delta_0} [j_0(kr) \cos \delta_0 - \eta_0(kr) \sin \delta_0] = e^{i\delta_0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}$$

$$\text{onde usamos que } \begin{cases} j_0 = \frac{\sin(kr)}{kr} \\ \eta_0 = -\frac{\cos(kr)}{kr} \end{cases}$$

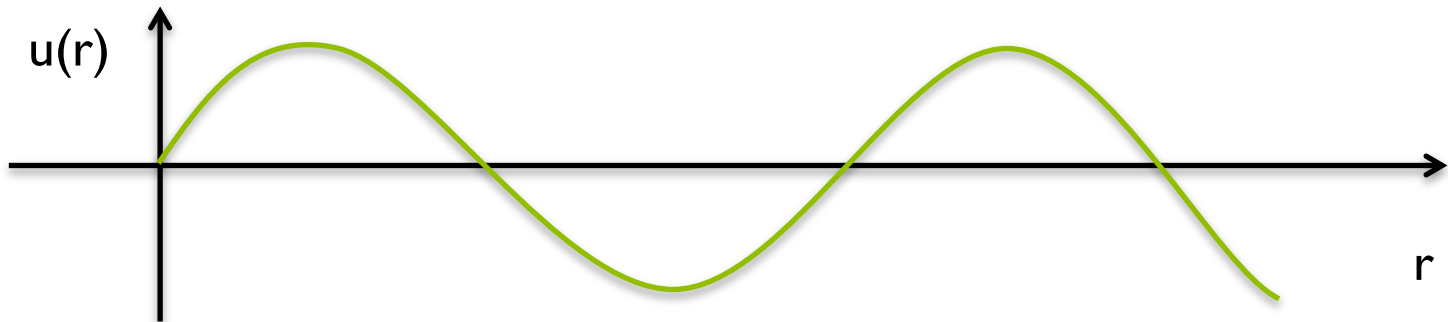
- A solução para $r < R$ também é simples quando V_0 é constante.

$u_0(r) \equiv r A_0(r) \propto \sin k' r$ (é seno porque $u(0) = 0$), onde k' é definido

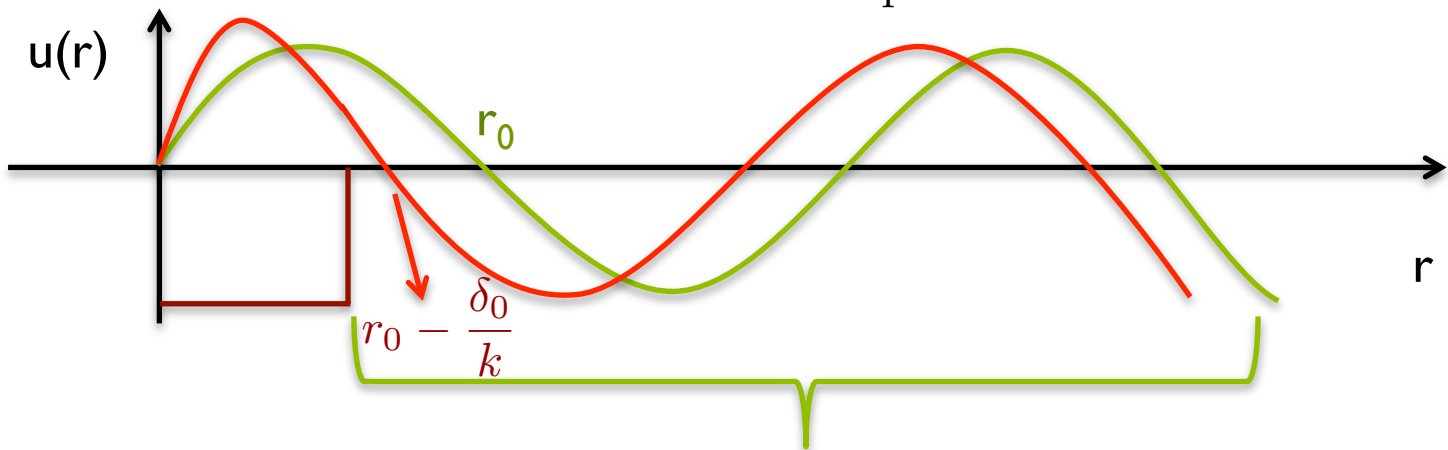
pela relação $E - V_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}$.

- A função $u_0(r)$ para $r > R$ fica $u_0(r) = e^{i\delta_0} \sin(kr + \delta_0)$

Poço e barreira de potencial retangular (esfera mole)



Na região do potencial, onde $k' > k$ a curva vermelha tem curvatura mais acentuada que a verde $\lambda' < \lambda$



Nesta região as curvas verde e vermelhas são iguais. Elas estão apenas deslocadas em δ_0/k

Se o zero do caso “sem potencial” (curva verde) ocorre em r_0 , o “com

potencial” (curva vermelha) ocorrerá em $kr + \delta_0 = kr_0 \Rightarrow r = r_0 - \frac{\delta_0}{k}$

A curva está deslocada para esquerda. Potencial atrativo $\rightarrow \delta_0 > 0$.

Espalhamento de baixa energia e estados ligados

Se o δ_0 fosse negativo, a função seria esticada. Isso acontece para V_0 positivo. Neste caso $E - V_0 < E$ o argumento $k'r$ demora mais para mudar que kr ($\lambda' > \lambda$). Se $\delta_0/k < 0 \rightarrow r > r_0$. Nada muda muito se $V_0 > E$ (basta trocar o seno (sin) por seno hiperbólico (sinh)).

- Olhemos com um pouco mais de cuidado o caso $V_0 < 0$. Quanto mais negativo for o V_0 , maior é a curvatura de $\sin k'r$. O δ_0 , que começa em zero para $V_0 = 0$ cresce para um número positivo a medida que V_0 vai ficando mais negativo. Chega uma hora que atinge o valor $\pi/2$ e essa é a máxima contribuição que um δ_0 pode dar para a seção de choque, pois $\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \sin^2 \delta_0$.

- Se continuarmos a diminuir o V_0 , δ_0 eventualmente alcança π , ou seja a função de onda fora da região do potencial está em fase com respeito a função livre (lembre que $S_\ell = e^{2i\delta_\ell}$, slide 12, aula 14). Nestas condições, $\sin^2 \delta_0 = 0$, contribuindo com zero para a seção de choque!!

Mostre isso, trocando δ_0 por π em $u_0(r)$ no slide 3

Esse fenômeno é muito comum e é conhecido por efeito Ramsauer-Townsend

Espalhamento de energia zero e estados ligados

Considere energia extremamente baixa, $k \approx 0$. Qual é a equação diferencial de

$u_\ell(r)$ para $\ell = 0$ e $r > R$? Nestas condições $V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} = 0$,

e a equação fica: $\frac{d^2}{dr^2} u_\ell(r) + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2} V - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2}\right) u_\ell(r) = 0 \rightarrow \frac{d^2}{dr^2} u_\ell(r) = 0$

Uma solução óbvia disto: $u_0(r) = \text{constante} \times (r - a) \Rightarrow$ comprimento de onda infinito. Lembrem que

$$A_0(r) = \frac{e^{i\delta_0}}{kr} \sin(kr + \delta_0) \Rightarrow u_0(r) = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \sin(kr + \delta_0) = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \sin\left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right)$$

Quanto vale $\lim_{k \rightarrow 0} \frac{e^{i\delta_0}}{k} \sin\left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right)$, sabendo que neste limite $\frac{\delta_0}{k}$ vai à uma

constante - ver slide 2? Nestas condições temos: $u_0(r) = \frac{e^{i\delta_0}}{k} \left(k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right)$ ou

$$u_0(r) = e^{i\delta_0} \left(r + \frac{\delta_0}{k}\right) \Rightarrow \text{forma proposta constante}(r - a) \rightarrow a = - \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0}{k}.$$

a também conhecido como comprimento de espalhamento. Poderia ter sido obtido também da seguinte maneira:

$$\text{Calcule } \begin{cases} \frac{u'_0(r)}{u_0(r)} = k \frac{\cos(kr + \delta_0)}{\sin(kr + \delta_0)} = k \cot[kr + \delta_0] = k \cot\left[k\left(r + \frac{\delta_0}{k}\right)\right] \\ \text{No limite } \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{\text{cte}}{\text{cte}(r-a)} = \frac{1}{r-a} \end{cases}$$

e iguale as expressões em $r = 0$ no limite de $k \rightarrow 0$.

Espalhamento de baixa energia e estados ligados

Assim, em $r = 0$, $\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a}$ (esta é dedução do livro texto). *Mostre que, se $\lim_{k \rightarrow 0} \delta_0 = 0$, os resultados são equivalentes.* O importante é que a é igual ao valor de r para $u(r) = 0$. Antes de analisar isso, lembre da relação entre $f_\ell(k)$

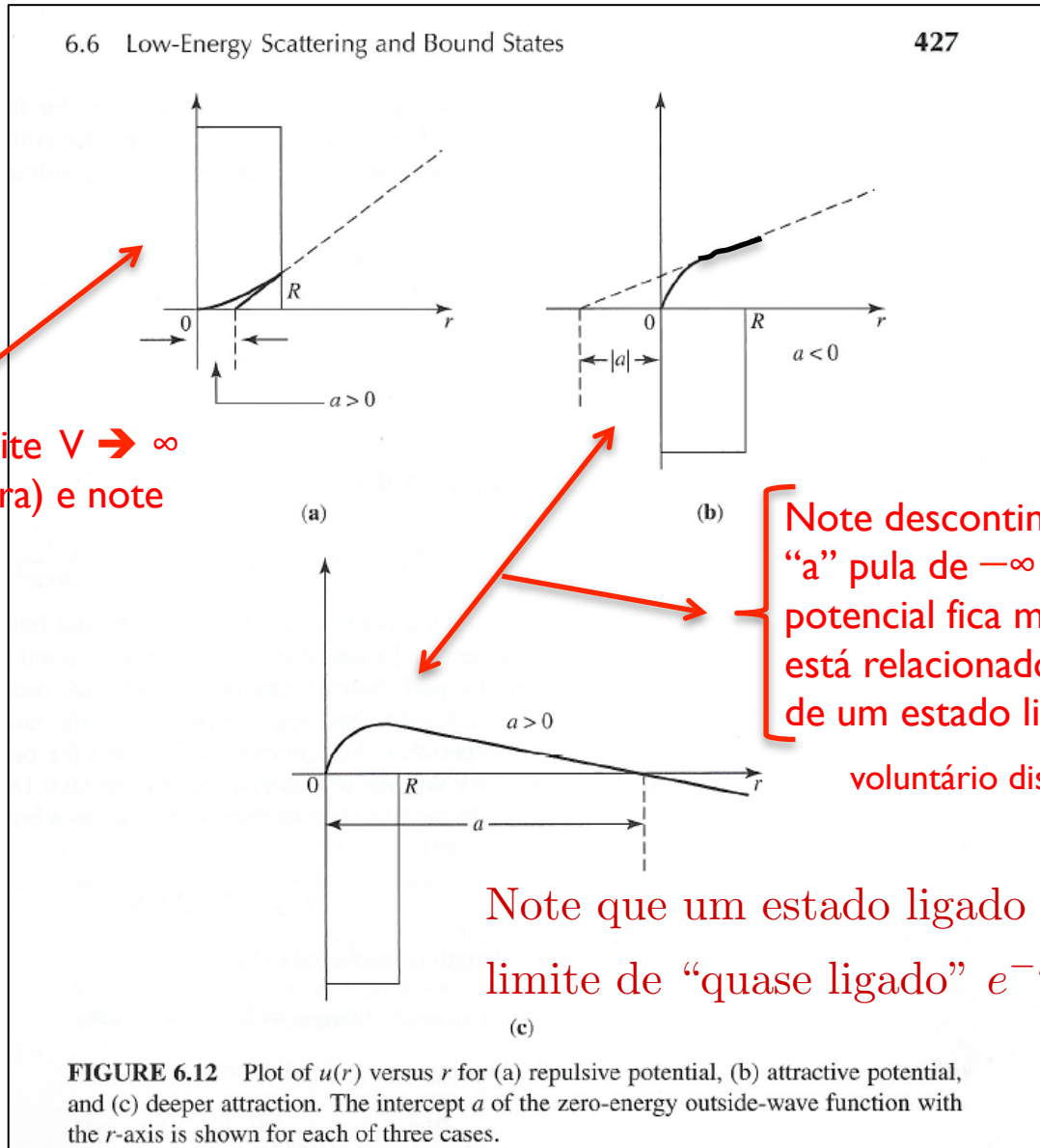
e δ_ℓ , dada no slide 11 aula 14: $f_\ell = \frac{1}{k(\cot \delta_\ell - i)} = \frac{1}{k \cot \delta_\ell - ik}$. Ou seja,

$$\lim_{k \rightarrow 0} f_0 = \frac{1}{-1/a - 0} = -a \quad \therefore \quad \sigma_{\text{total}} = 4\pi \sum_{\ell} (2\ell + 1) |f_\ell|^2 \approx 4\pi |f_0|^2 = 4\pi a^2$$

“ a ” tem a mesma dimensão que “ R ” da esfera dura, mas eles podem ser muito diferentes.

Como obter a ? Que tal passar uma reta tangente a função em $r = R$ (início da solução externa) e tomar a interseção com o eixo r ? Isto é, impor que para $k \sim 0$, a solução externa é do tipo $\text{cte}(r - a)$. Assim, nestas condições quando tomamos $\text{cte}(r - a) = 0$ (intersecção), definimos a .

Espalhamento de baixa energia e estados ligados



Faça o limite $V \rightarrow \infty$
(esfera dura) e note
 $a=R$

Note descontinuidade no "a"! "a" pula de $-\infty$ para $+\infty$ quando potencial fica mais negativo. Isto está relacionado ao aparecimento de um estado ligado

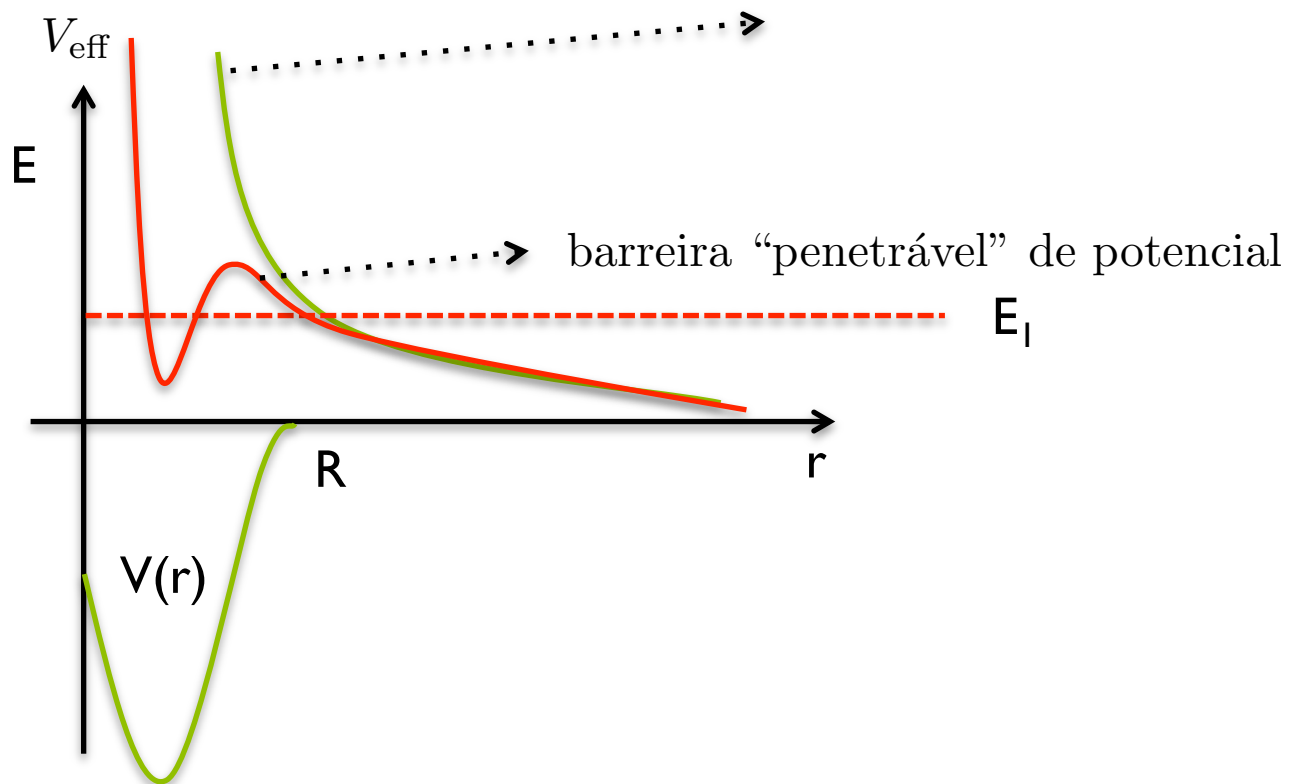
voluntário discutindo essa inversão?

Note que um estado ligado é do tipo $e^{-\kappa r}$ e no limite de "quase ligado" $e^{-\kappa r} \approx 1 - \kappa r, \therefore a = \frac{1}{\kappa}$

Figura do livro texto: J.J.Sakurai & Jim Napolitano

Espalhamento Ressonante

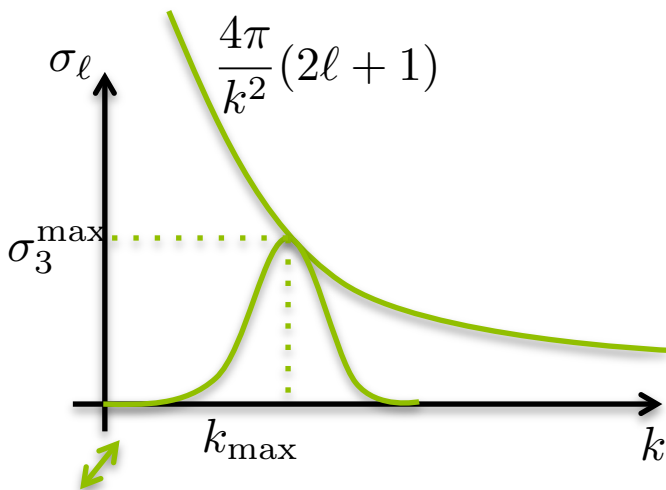
Suponha $V(r)$ atrativo e para desenhar V_{eff} , lembre que $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}$ é repulsivo.



Se ela fosse infinitamente alta, existiriam estados ligados para $E > 0$ (estados estacionários com tempo de vida infinito). No caso mais realista (barreira finita), a partícula é presa no vale de potencial, mas não para sempre. Chamaremos este estado de "quase" ligado (causador de uma ressonância).

Espalhamento Ressonante

Exemplo: $V(r)$ da caixa com $\frac{2m}{\hbar^2} V_0 R^2 = 5,5$ tem uma ressonância para $\ell = 3$, conforme a figura.



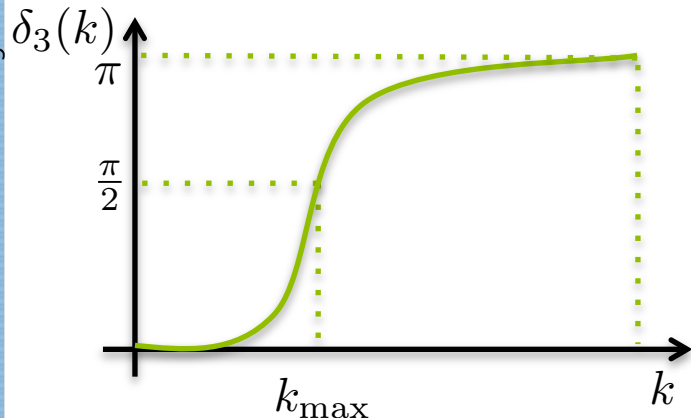
Lembre que a contribuição de ℓ para

seção de choque é: $\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell$.

O máximo é em $\delta_\ell = \frac{\pi}{2} \therefore \sigma_\ell^{\max} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1)$.

Para $\ell = 3 \rightarrow \sigma_\ell^{\max} = \frac{28\pi}{k_{\max}^2}$.

$$\lim_{k \rightarrow 0} \delta_\ell \rightarrow k^{2\ell+1} \quad k_{\max} = \frac{1,3}{R}$$



O deslocamento de fase exibe a curva do tipo ao lado (um comportamento ressonante)

sempre que $E_{\text{incidente}} \approx E_{\text{quase ligado}}$.

A amplitude $f_\ell^{\max} = \frac{1}{k(\cot \delta_\ell - i)} = \frac{1}{-ik_{\max}}$.

Em seguida, vamos explorar mais esta fórmula.

verifique se as figuras estão corretas!

Espalhamento Ressonante

A amplitude $f_\ell(k) = \frac{1}{k(\cot \delta_\ell - i)}$ pode ser expandida, considerando uma expansão de $\cot \delta_\ell$ ao redor de $E = E_r$.

$$\cot \delta_\ell = \underbrace{\cot \delta_\ell|_{E=E_r}}_{\text{zero}} - c(E - E_r) + \mathcal{O}(E - E_r)^2$$

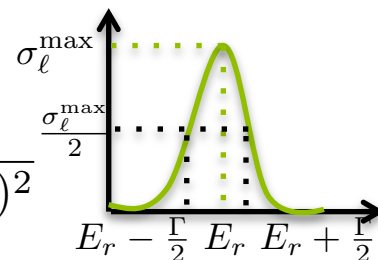
↙
convenção

Isso permite escrever $f_\ell(k) = \frac{1}{k} \left(\frac{1}{-c(E - E_r) - i} \right)$. Se agora definimos

$c = \frac{2}{\Gamma}$, podemos escrever $f_\ell(k) = -\frac{1}{k} \left(\frac{\Gamma/2}{(E - E_r) + i\Gamma/2} \right)$ e isso leva à

uma contribuição para a seção de choque igual à:

$$\sigma_\ell = 4\pi(2\ell + 1)|f_\ell|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(2\ell + 1)(\Gamma/2)^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}$$



$\sigma_\ell^{\max} = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell + 1)$, em acordo com que vimos antes. Para que energia

$$E_{1/2} \text{ temos } \sigma_\ell(E_{1/2}) = \frac{\sigma_\ell^{\max}}{2} \quad ? \quad \frac{1}{2} \frac{4\pi}{k^2}(2\ell + 1) = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(2\ell + 1)(\Gamma/2)^2}{(E_{1/2} - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

$$(E_{1/2} - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2 = 2(\Gamma/2)^2 \Rightarrow E_{1/2} = E_r \pm \Gamma/2$$

Por essa razão, Γ é chamada de "largura da ressonância"

Lembre que começamos com $f(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}_f | V | \Psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} \rangle$, onde a função de onda de espalhamento é solução de $|\Psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}\rangle = |\mathbf{k}_i\rangle + G_0^{(+)} V |\Psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}\rangle$. Ao escolher \mathbf{k}_i na direção $\hat{\mathbf{z}}$, temos $\mathbf{k}_f = (k, \theta_{esp}, \phi_{esp})$ e $f(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = f(\theta_{esp}, \phi_{esp})$. Em seguida, consideramos potenciais esfericamente simétricos e a amplitude ficou independente de ϕ , isto é $f(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = f(\theta_{esp})$. Nestas condições obtivemos

$$\text{as funções na forma } \begin{cases} \langle \mathbf{x} | \Psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} (2\ell + 1) i^{\ell} A_{\ell}(k; r) P_{\ell}(\cos \theta) \\ \langle \mathbf{x} | \mathbf{k}_f \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} (2\ell + 1) i^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\hat{\mathbf{k}}_f \cdot \hat{\mathbf{r}}) \end{cases}$$

$$\text{Usando } P_{\ell}(\hat{\mathbf{k}}_f \cdot \hat{\mathbf{r}}) = \frac{4\pi}{(2\ell + 1)} \sum_m Y_{\ell}^m(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell}^{m*}(\hat{\mathbf{k}}_f) \Rightarrow \begin{cases} \hat{\mathbf{k}}_f = (k, \theta_{esp}, \phi_{esp}) \\ \hat{\mathbf{r}} = (r, \theta, \phi) \end{cases} \quad \text{e}$$

$$\begin{aligned} P_{\ell}(\cos \theta) &= \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell + 1}} Y_{\ell}^0(\hat{\mathbf{r}}), \text{ temos } f(\mathbf{k}_f, \mathbf{k}_i) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \langle \mathbf{k}_f | V | \Psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)} \rangle = \\ &= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \int r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \left(\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell} (2\ell + 1) (-i)^{\ell} j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\hat{\mathbf{k}}_f \cdot \hat{\mathbf{r}}) \right) V(r) \times \\ &\times \left(\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\ell'} i^{\ell'} (2\ell' + 1) A_{\ell'}(k; r) P_{\ell'}(\cos \theta) \right) \end{aligned}$$

$$f(\theta_{esp}, \phi_{esp}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\ell\ell'} \left((2\ell + 1)(2\ell' + 1) i^{\ell'} (-i)^\ell \int r^2 dr j_\ell(kr) V(r) A_{\ell'}(k; r) \int \sin \theta d\theta \int d\phi P_\ell(\hat{\mathbf{k}}_f \cdot \hat{\mathbf{r}}) P_{\ell'}(\cos \theta) \right) =$$

$$= -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\ell\ell'} \left((2\ell + 1)(2\ell' + 1) i^{\ell'} (-i)^\ell \int r^2 dr j_\ell(kr) V(r) A_{\ell'}(k; r) \times \right.$$

$$\left. \times \int \sin \theta d\theta \int d\phi P_\ell(\hat{\mathbf{k}}_f \cdot \hat{\mathbf{r}}) P_{\ell'}(\cos \theta) \right)$$

Usando $P_\ell(\hat{\mathbf{k}}_f \cdot \hat{\mathbf{r}}) = \frac{4\pi}{(2\ell + 1)} \sum_m Y_\ell^{m*}(\hat{\mathbf{r}}) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}}_f)$ com $\begin{cases} \hat{\mathbf{k}}_f = (k, \theta_{esp}, \phi_{esp}) \\ \hat{\mathbf{r}} = (r, \theta, \phi) \end{cases}$ e

$P_{\ell'}(\cos \theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell' + 1}} Y_{\ell'}^0(\hat{\mathbf{r}})$, temos que a última linha fica:

$$\int \sin \theta d\theta \int d\phi \left(\frac{4\pi}{(2\ell + 1)} \sum_m Y_\ell^{m*}(\hat{\mathbf{r}}) Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}}_f) \right) \cdot \hat{\mathbf{r}} \left(\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell' + 1}} Y_{\ell'}^0(\hat{\mathbf{r}}) \right) =$$

$$= \frac{4\pi}{(2\ell + 1)} \sum_m \underbrace{\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell' + 1}} Y_\ell^m(\hat{\mathbf{k}}_f) \int \sin \theta d\theta \int d\phi Y_\ell^{m*}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{\ell'}^0(\hat{\mathbf{r}})}_{\delta_{\ell\ell'} \delta_{m0}}$$

\nearrow Não depende de Φ_{esp}

$$= \frac{4\pi}{(2\ell + 1)} \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell' + 1}} Y_\ell^0(\hat{\mathbf{k}}_f) \delta_{\ell\ell'} = \frac{4\pi}{(2\ell + 1)} P_\ell(\cos \theta_{esp}) \delta_{\ell\ell'}$$

Devolvendo isso na expressão, temos $f(\theta_{esp}, \phi_{esp}) =$

$$f(\theta_{esp}) = -\frac{4\pi^2 m}{\hbar^2} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\ell\ell'} \left((2\ell + 1)(2\ell' + 1) i^{\ell'} (-i)^\ell \int r^2 dr j_\ell(kr) V(r) A_{\ell'}(k; r) \times \right. \\ \left. \times \frac{4\pi}{(2\ell + 1)} P_\ell(\cos \theta_{esp}) \delta_{\ell\ell'} \right) \text{ ou seja}$$

$$f(\theta_{esp}) = -\frac{2m}{\hbar^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \left(\int r^2 dr j_\ell(kr) V(r) A_\ell(k; r) \right) P_\ell(\cos \theta_{esp}) \text{ para ser}$$

comparada com (slide 1 da aula 15) $f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \theta)$.

Isso fornece a expressão desejada $\frac{e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell}{k} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int r^2 dr j_\ell(kr) V(r) A_\ell(k; r)$